

調和振動子基底展開による 時間依存 Schrödinger 方程式の数値解法

平成 25 年 2 月

台 亮 嗣

(学籍番号 09380337)

19 世紀まで、ニュートンにより始められた力学と、マクスウェルが確立した電磁気学をはじめとする、古典物理学により宇宙の森羅万象はすべて説明できると考えられていた。これを根本から覆したのが、19 世紀の最後の年に登場した量子力学である。量子力学は、非相対論的な範囲に話を限れば、理論体系は完成されており、電子工学や化学その他の様々な分野に応用され、今日ではもはや物理学の新理論ではなくなっている。

量子力学はその解釈の難しさはあるが、ニュートン力学で登場するニュートンの運動方程式と同様に、基本的には微分方程式を扱うことで、系の状態を理解することができる。1 階の微分方程式である Schrödinger 方程式を数値的に解き、系の状態の時間発展を求めていく過程で、量子力学の基礎を学び直すことを本研究のひとつの目的としている。

本研究では、一次元ポテンシャル内の一粒子の量子力学的状態ベクトルの時間発展を、時間に依存する Schrödinger 方程式を解くことで求める。その手法として、まず状態ベクトルを調和振動子基底で展開する。基底で状態を展開することで時間に関わる部分は展開係数のみになるため、この展開係数の時間発展を Runge-Kutta 法で数値的に解けば状態ベクトルの時間発展も求まる。一次元量子系は実空間表示や平面波展開などの手法で扱われることが多いのだが、本研究では巨大な次元の調和振動子基底で一次元量子系を扱うことができるかどうかを調べた。

まず、時間に依存する Schrödinger 方程式の調和振動子基底展開による表現を求め、それを数値的に解く C 言語プログラムを作製した。その応用として、波束の実時間発展の量子力学的な側面と、古典力学と類似性のある側面を示した。

まず、箱型のポテンシャルでの実時間発展について、 $x = 0$ 付近に初期状態の波束を準備する例では、実時間発展により波束が拡散していく様子を確認した。これは明らかに量子力学的な振る舞いを示している。

$x = 0$ からずらしたところ ($x = 30$) に初期状態の波束を準備する例では、実時間発展により波束が拡散しながらも、ポテンシャルにそって振動を繰り返した。量子力学的な振る舞いと古典力学と類似性のある振る舞いが混在した様子を確認した。

実時間発展によるトンネル効果について、二重井戸のポテンシャルの障壁高が低い場合には、波動関数のすそが $x < 0$ までのびているため、実時間発展ですぐに $x < 0$ の井戸の成分が混ざった。ここでは量子力学特有の現象であるトンネル効果の様子が確認された。

障壁高をある程度高くすると、波動関数のすそが $x < 0$ までのびることができず、トンネル効果は見られない。波束は $x > 0$ の井戸に局在し、実時間発展で固有状態のように全体が同位相 $e^{i\omega t}$ で振動しているように見える。ただし、 $x < 0$ の井戸へのトンネリングが起こりにくいため、固有状態ではなく準定常状態といえる。これらは、4 本の動画として web で公開してある。

本研究では、巨大な次元の調和振動子基底で、一次元量子系を数値的に扱うことができるということがわかった。今後は、量子複雑系の例として、高次元空間の振動運動に拡張することが発展課題として考えられる。