

卒業論文発表会

2012年1月31日 福井大学工学部物理工学科

調和振動子基底展開による  
時間依存シュレディンガー方程式の  
数値解法

物理工学科 台亮嗣

## 研究内容

- 目的  
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 $|\psi\rangle$ の時間発展を時間に依存する **Schrödinger** 方程式を解いて求める.
- 手法  
状態ベクトルを調和振動子基底で展開し, 展開係数の時間発展を **Runge・Kutta** 法で数値的に解く.

### 「教育的意義」

原子・原子核等の有限量子系を扱うための基本的手法である調和振動子基底展開について実践を通して学ぶ.

### 「研究上の意義」

実空間表示や平面波展開など, 他の手法で扱われることの多い一次元量子系を巨大な次元の調和振動子基底で実際に扱うことができるかどうか調べる.

## 基底による展開とは

### 正規直交基底

以下を満たす基底  $\{|n\rangle\}$  を正規直交基底と呼ぶ。

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}$$

自己共役(エルミート)演算子の固有ベクトルの全体は正規直交基底をなす。  
本研究では調和振動子ハミルトニアン固有ベクトルの集合を用いる。

### 完全(complete)性

任意の状態ベクトル  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  は、適当な係数  $\psi_n \in \mathbb{C}$  で展開可能。

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n |n\rangle \quad |n\rangle : \text{自己共役演算子の固有ベクトル}$$

## ユニタリー変換

ノルムを変えない線形写像.

→ 時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

( $t$ に関する1階微分方程式.  $\hat{H}$ はハミルトン演算子)

の解は

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$$

$\hat{U}(t)$  : 時間発展演算子 (ユニタリー演算子)

状態ベクトルは, 時間とともに連続的にユニタリー変換される.

## 調和振動子基底

ハミルトニアン 
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

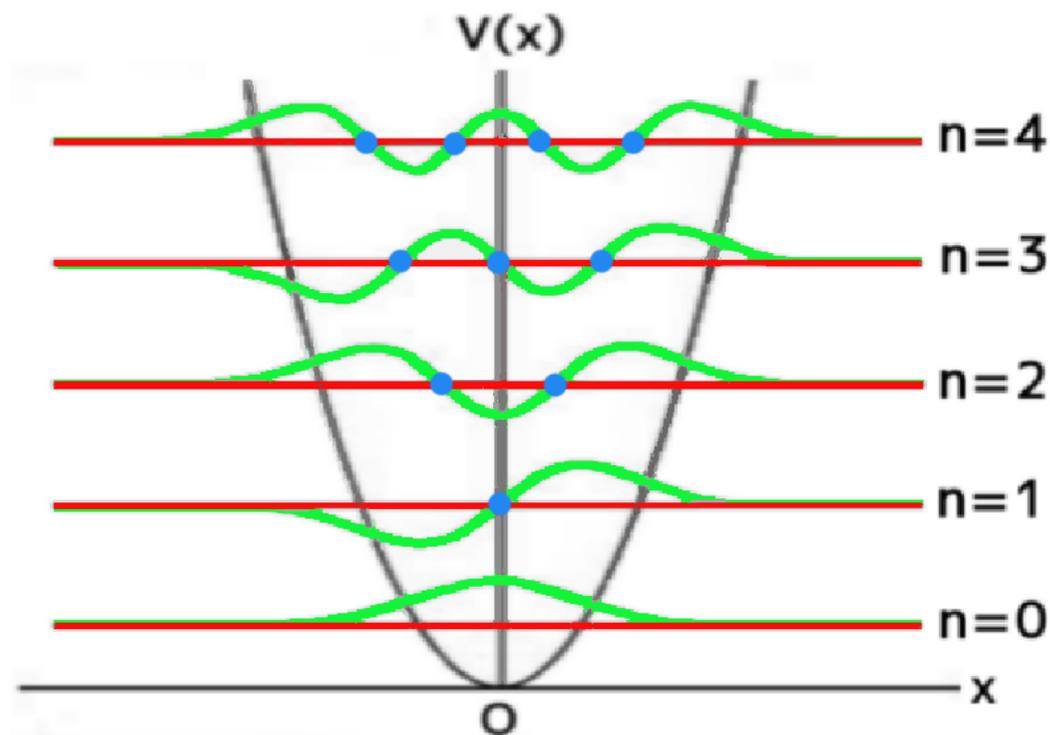
波動関数 
$$\psi_n(x) = \left( \frac{\sqrt{2m\omega/\hbar}}{2^n n!} \right)^{1/2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \quad (H_n(x) : \text{エルミート多項式})$$

エネルギー固有値 
$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

原点  $x = 0$  まわりに局在.

↓

原子・原子核などの有限系の記述に適する.



## 行列表示

$\xi = \frac{x}{b}$  ( $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  は調和振動子長) とおくと, ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right)$$

ここで「上昇演算子」 $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)$  「下降演算子」 $a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right)$  を使うと

$$\begin{cases} \xi = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \rightarrow x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \\ \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger) \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (a - a^\dagger) \end{cases}$$

$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ ,  $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$  により  $|n\rangle$  は構成できることを利用して  $x$  および  $\frac{\partial}{\partial x}$  の行列要素  $\langle i|x|j\rangle$ ,  $\langle i|\frac{\partial}{\partial x}|j\rangle$  が求まる。

## 行列表示

$$x \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \quad \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix}$$

↓

$x^n$  の行列が簡単な疎行列として表される.

$x^n$  の行列要素  $\langle i|x^n|j\rangle$  は, 完全系  $\sum_{k_n} |k_n\rangle\langle k_n| = 1$  で展開が可能.

$$\langle i|x^n|j\rangle = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_{n-1}} \langle i|x|k_1\rangle\langle k_1|x|k_2\rangle\langle k_2|x|\cdots|k_{n-1}\rangle\langle k_{n-1}|x|j\rangle$$

## 行列要素

$$\langle i | \frac{\partial^2}{\partial x^2} | j \rangle = \frac{m\omega}{\hbar} \left( \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2} \delta_{i,j-2} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{i,j} + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2} \delta_{i,j+2} \right)$$

$$\langle i | 1 | j \rangle = \delta_{i,j}$$

$$\langle i | x | j \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \left( \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{i,j-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{i,j+1} \right)$$

$$\langle i | x^2 | j \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{2/2} \left( \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2} \delta_{i,j-2} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{i,j} + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2} \delta_{i,j+2} \right)$$

$$\langle i | x^3 | j \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{2}} \delta_{i,j-3} + \frac{3n}{2} \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{i,j-1} + \frac{3(n+1)}{2} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{i,j+1} + \dots \right)$$

$$\langle i | x^4 | j \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{4/2} \left( \frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}}{4} \delta_{i,j-4} + \left(n - \frac{1}{2}\right) \sqrt{n(n-1)} \delta_{i,j-2} + \dots \right)$$

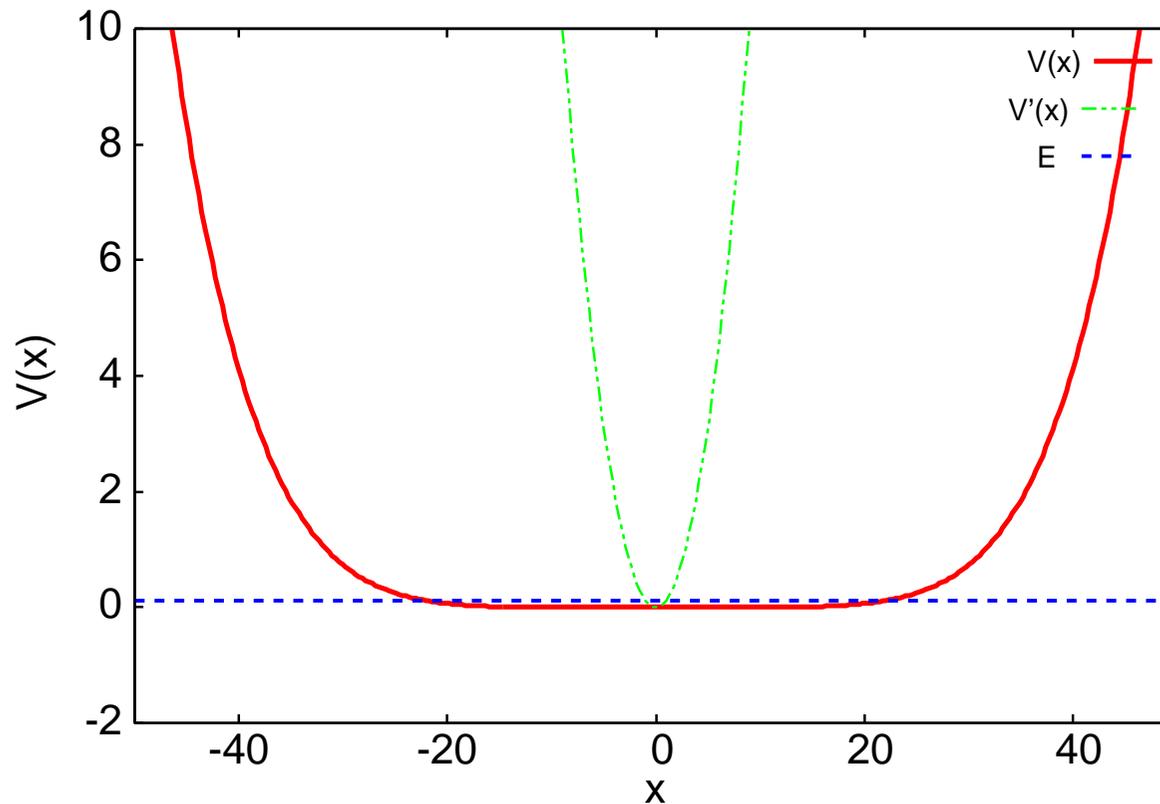
$$\langle i | x^5 | j \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{5/2} \left( \frac{1}{4} \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}{2}} \delta_{i,j-5} + \frac{5(n-1)}{4} \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{2}} \delta_{i,j-3} + \dots \right)$$

$$\langle i | x^6 | j \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{6/2} \left( \frac{1}{8} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)(n-5)} \delta_{i,j-6} + \dots \right)$$

## 応用例1 ~ 拡散 ~

実時間でのポテンシャル :  $V(x) = \left(\frac{x}{31.6}\right)^6$

虚時間発展で初期状態を準備するポテンシャル :  $V'(x) = \left(\frac{x}{\sqrt{8}}\right)^2$



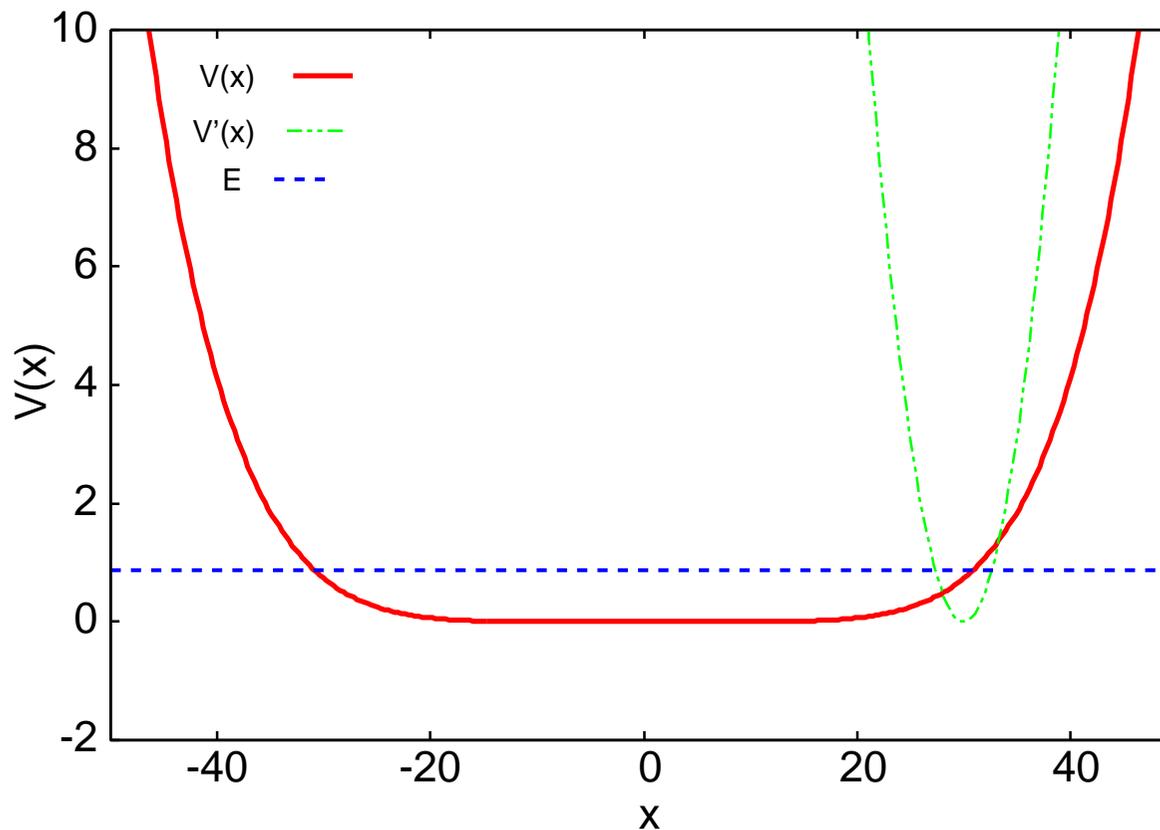
$(n_{\max} = 1000, m = 1.0, b = 1.0)$

虚時間発展で準備した波束を実時間発展させる。

## 応用例2 ~ 非調和振動 ~

実時間でのポテンシャル： $V(x) = \left(\frac{x}{31.6}\right)^6$

虚時間発展で初期状態を準備するポテンシャル： $V'(x) = \frac{1}{8}(x - 30)^2$



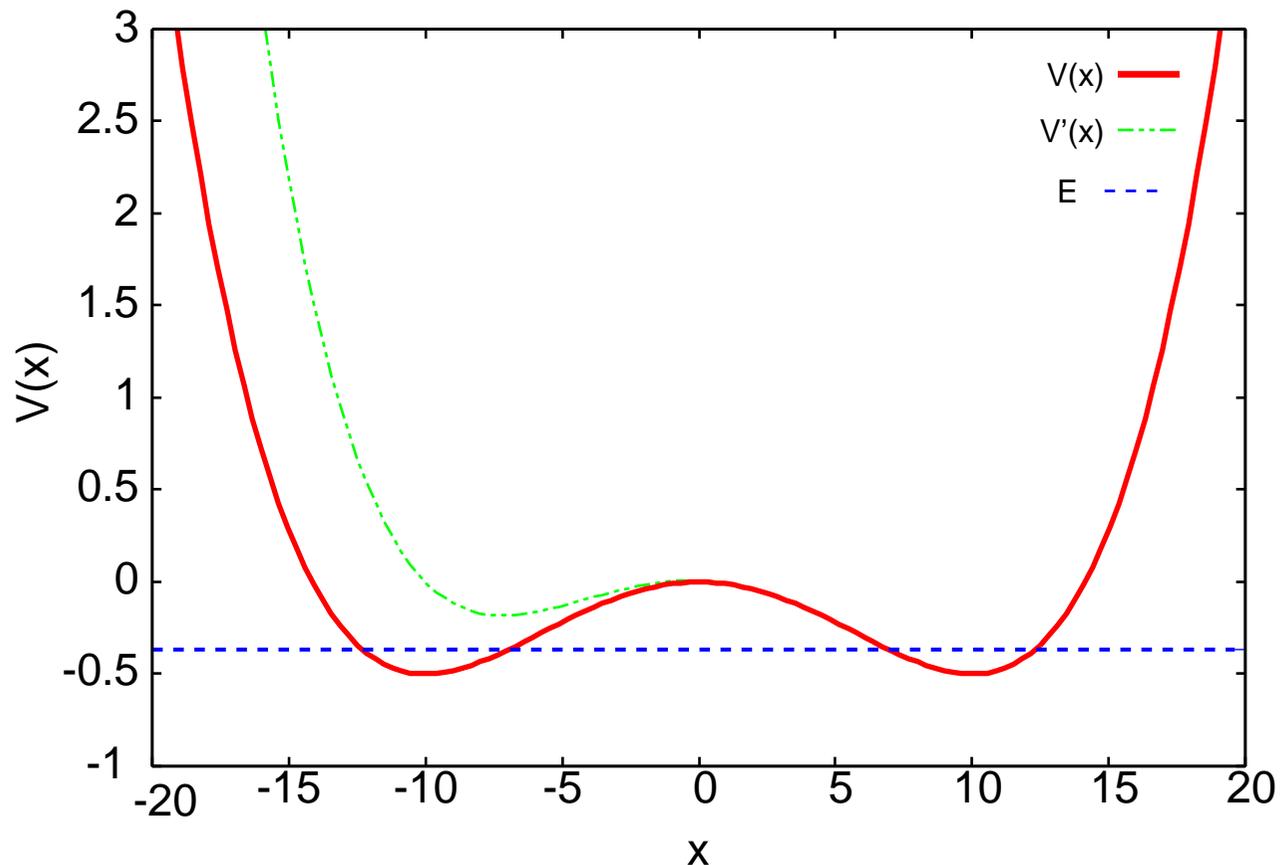
$(n_{\max} = 1000, m = 1.0, b = 1.0)$

虚時間発展で準備した波束を実時間発展させる。

### 応用例3 ~トンネリング~

実時間でのポテンシャル： $V(x) = -\frac{1}{10}x^2 + \frac{1}{200}x^4$

虚時間発展で初期状態を準備するポテンシャル： $V'(x) = V(x) + \left(\frac{x-10}{24.4}\right)^6$



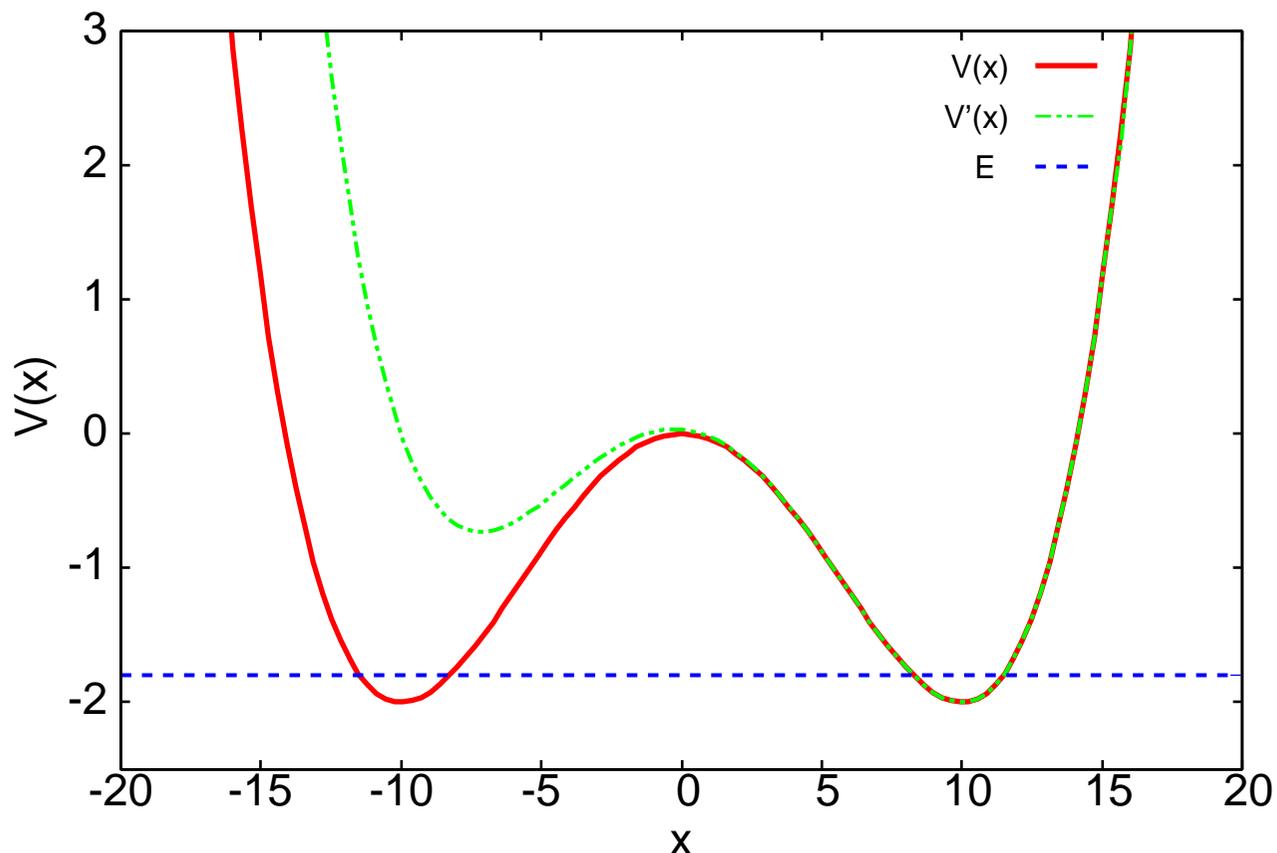
( $n_{\max} = 1000$ ,  $m = 1.0$ ,  $b = 1.0$ , 極小の位置  $x_0 = 10.0$ , 障壁高  $h = 0.5$ )

虚時間発展で準備した波束を実時間発展させる.

## 応用例4 ~ 障壁 ~

実時間でのポテンシャル :  $V(x) = -\frac{2}{5}x^2 + \frac{1}{50}x^4$

虚時間発展で初期状態を準備するポテンシャル :  $V'(x) = V(x) + \left(\frac{x-10}{17.8}\right)^6$



( $n_{\max} = 1000$ ,  $m = 1.0$ ,  $b = 1.0$ , 極小の位置  $x_0 = 10.0$ , 障壁高  $h = 2.0$ )

虚時間発展で準備した波束を実時間発展させる.

## まとめ

- 時間に依存する **Schrödinger** 方程式の調和振動子基底展開での表現を求め,それを数値的に解く **C** 言語プログラムを自作した.
- 応用として波束の実時間発展の,量子力学的な側面(拡散の例,二重井戸のトンネリング現象の例)と古典力学と類似性のある側面(ポテンシャル井戸中の振動の例)を動画として示した.
- そのための準備として量子力学の基礎を系統立てて学び直した.

## 展望

- 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.