

1B2b

量子トラジェクトリ法を用いた2次元波束ダイナミクスシミュレーション

(金沢大院・自然) 松本大輔、林幸一郎、井田朋智、遠藤一央

shibutaka@wiron1.s.kanazawa-u.ac.jp

【序】量子波束ダイナミクスは光化学反応やプロトン移動反応のように量子効果が重要な役割を果たす系のダイナミクスをシミュレートする有効な方法である。この方法の利点は、系のダイナミクスを波束の動きで可視化できること、結果を準古典的に描写するため解析が容易であることである。一方、従来の波束ダイナミクスでは空間固定のグリッドや基底関数を用いるため、多次元、多準位系への応用は膨大な次元の対角化を要求するといった欠点があった。最近、Wyattらにより量子トラジェクトリを用いた波束ダイナミクス (Quantum Trajectory Method; QTM) が提案された [1,2]。この方法は対象とする空間を任意に制限する (Regriidding Algorithm) ことができるので、従来の方法に比べ計算コストが低く、多次元、多準位系に適用可能な方法として期待されている。本研究では2次元トンネリングのモデルポテンシャル上で波束シミュレーションを行い、系の固有関数を基底関数として用いる従来の方法との比較からその有効性を検討する。

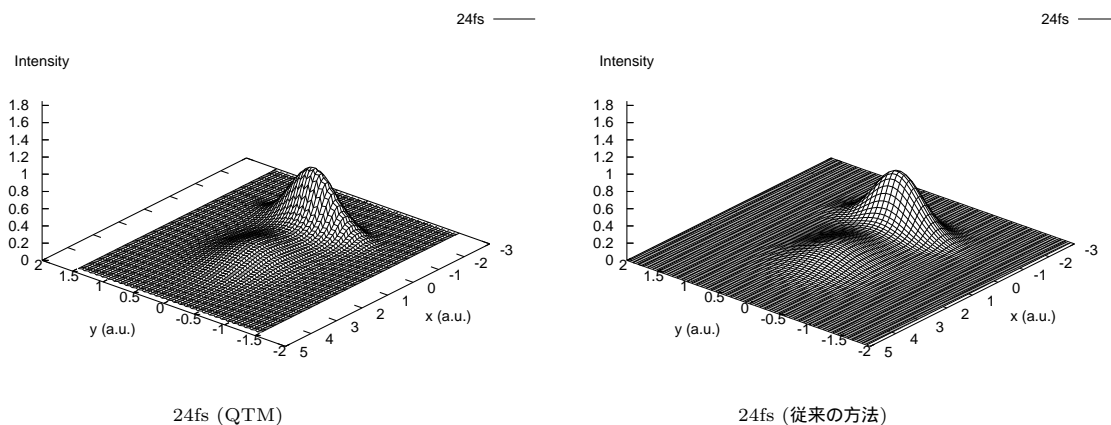
【計算結果】計算に用いたモデルポテンシャル関数は障壁型 Eckart ポテンシャルと調和ポテンシャルの単純な和である。

$$V(x, y) = V_a \operatorname{sech}^2[2x] + \frac{1}{2} V_b y^2 \quad (1)$$

ここで、障壁の高さ; $V_a = 0.00625$ [a.u.]、振動の力の定数; $V_b = 0.01$ [a.u.] とした。初期波束は中心が $x = -1$ [a.u.]、 $y = 0$ [a.u.] にある次のようなガウス波束で進行波が乗ぜられている。

$$\Psi(x, y) = \left(\frac{4\beta_x\beta_y}{\pi^2} \right)^{\frac{1}{4}} \exp[-\beta_x(x+1)^2 - \beta_y y^2] \exp[ik_x(x+1)] \quad (2)$$

波束の幅は $\beta_x = \beta_y = 4.0$ [a.u.]、波数は $k_x = 4.0$ [a.u.] とした。下図にシミュレーション開始から 24fs 後の波束を示す。左図、右図はそれぞれ QTM、従来の方法による結果である。



波束が障壁により反射波と透過波に分かれている。QTM が従来の方法と同等な結果を与えたことが分かる。当日は異なるポテンシャルに対する結果も含め詳細を報告する。

[1] R. E. Wyatt, Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics (Springer, New York, 2005).

[2] C. L. Lopreore and R. E. Wyatt, Phys. Rev. Lett. **82**, 5190 (1999).