

2B1a

複素型双直行スプラインウェーブレット基底による時間依存シュレーディンガー方程式解法
(豊橋技術科学大学・JST-CREST*) ○関野秀男* 佐野直樹

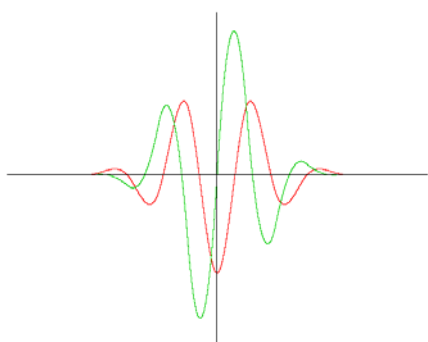
sekino@tutkie.tut.ac.jp

【序】

ナノサイエンスといわれる分野が展開し、ミクロスケールを支配する量子論に基づいたシミュレーションが一般的になってきた。しかし量子化学計算の応用対象が数原子分子の基底状態から巨大分子や結晶、ポリマーの物性値直接予測へと拡大するにつれ理論や近似の精度や信頼性に対するクライテリアの見直しがせまられてきている。量子化学計算においてここ40年近く使われてきた便利な道具であるガウシアン基底関数もその例外ではない。近年信号処理の分野で急速に発展している多重解像度解析によるシステムティックな情報処理はマクロな信号に限らず量子信号を含む一般的な信号情報の解析、処理に有効であり、波動関数という空間分散型量子信号の表現にも適しているはずである。我々は空間を階層的にスケール分割して得られる領域を多項式の完全系で展開する多重ウェーブレット基底による分子基底電子状態やその応答を算定し、その有効性や効率においてガウシアン基底に置き換わるものであることを示唆してきた[1,2,3]。然し励起状態やダイナミクスなど電子表現の非局在性がより重要になるような応用においては、基底関数の非連続性の問題が技術的な困難をもたらすことを見出した。本研究ではそうした困難に対処するために連続性や微分可能性の保障があるスプライン関数を用いた量子波束の時間発展について理論展開と応用を行ったので報告する。

【理論】

スプライン関数は図のように数点をとおり接合点で連続なめらかな関数であり、微分演算子として表現されるモメンタムの有限解像度表現の基底に向いている。



$$\psi^m(x) = \sum_{k=0}^{3m-2} q_k \phi^m(2x-k)$$

$$q_k = \frac{(-1)^k}{2^{m-1}} \sum_{l=0}^m \binom{m}{l} \phi^{2m}(k+1-l)$$

こうしたスプライン関数により上のようにウェーブレットを形成するが、信号の位相に対して不変であるという要請をみたすため、我々は双対の複素多重解像度解析ウェーブレット基底を用いた。簡単な波速の時間発展についての実例や考察を講演にて発表する。

謝辞 本研究は部分的に JST-CREST のサポートによって実現した。

複素ウェーブレットについて章忠先生、戸田浩博士の貴重な助言をいただいた。

[1] 関野秀男 PACHEM 2005 (Hawaii), 分子構造総合討論会(2006年、静岡)

[2] 柳井毅 ICQC (2006, Kyoto)

[3] H. Sekino, Y. Maeda, T. Yanai and R.J. Harisson,, to be published.