

Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法による単一電子の状態制御シミュレーション
Simulation for State Control of a Single Electron by Coupled Analysis of Maxwell-Schrödinger Equations

○竹内嵩¹, 大貫進一郎², 佐甲徳栄³, 芦澤好人⁴, 中川活二⁴

* Takashi Takeuchi¹, Shinichiro Ohnuki², Sako Tokuei³, Yoshito Ashizawa⁴, Katsuji Nakagawa⁴

Abstract: Recently, it has been attracted great interest to design a light control pulse which changes electron- or molecular-states to arbitrary objective states. Various methods have been proposed to numerically design the pulse. However, all the methods, to our best knowledge, are based on the approximation which neglects electromagnetic fields radiated from electrons or molecules. In this paper, the coupled analysis of Maxwell-Schrodinger equations are performed to simulate the interaction between the light control pulse and a single electron constrained in a thin tube. From the numerical results we represent that the control of the electron-state is disordered due to the strong field generated by the electron.

1. はじめに

近年、波動関数を自在に制御するための光パルスならびにその設計法が、実験・数値解析双方の領域で注目を集めている^[1,2]。先行研究では光制御パルスを数値設計する際に、対象粒子の生成する放射界を無視する近似を適用していた。本稿では Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法^[3]により、放射界を考慮した単一電子の状態制御シミュレーションを行う。そしてその解析結果から、単一電子の場合でも強い放射界が形成され、電子状態の制御が出来ないことを示す。

2. 解析方法

2. 1. Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法
 分極電流密度 \mathbf{J} を伴う Maxwell 方程式は

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}, \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (1)$$

で与えられる。ここで、単一電子が生成する分極電流密度 \mathbf{J} は以下の式で評価を行う。

$$\mathbf{J} = q \left\{ \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{q}{m} |\psi|^2 \mathbf{A} \right\} \quad (2)$$

電磁場中の単一電子に対する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_A \psi = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 \psi + q\phi\psi + V\psi \quad (3)$$

として与えられる。

Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析は、式(1)から(3)を同時に解くことにより行う^[3]。

2. 2. 光制御パルス設計法

光制御パルスの設計法は

$$E_z^{(i)} = -2 \frac{A}{m} \text{Im} \langle \tilde{\psi} | W q z | \tilde{\psi} \rangle \quad (4)$$

として与えられる^[1]。ここで式中の $\tilde{\psi}$ は、長さゲージ^[3]

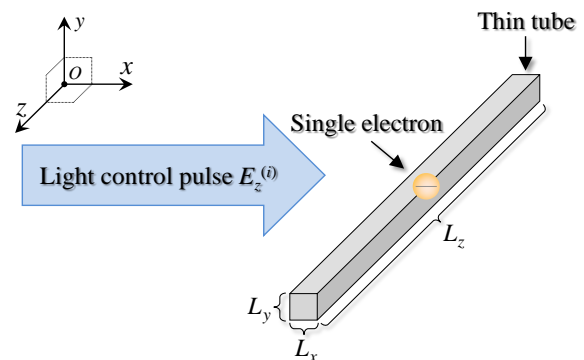


Figure 1. Geometry and coordinate system

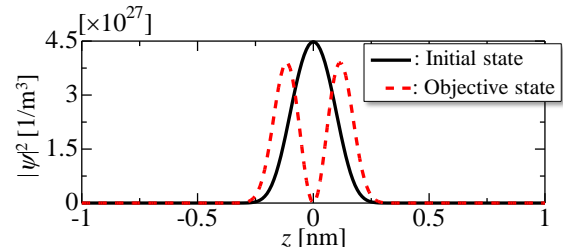


Figure 2. Distribution of probability density in the thin tube

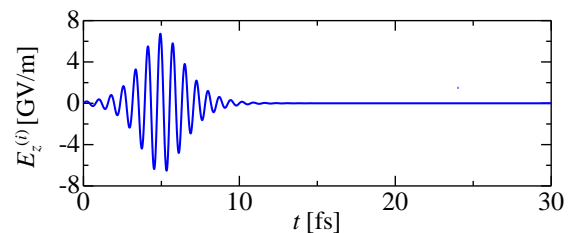


Figure 3. Wave shape of light control pulse in time domain

を適用した以下の Schrödinger 方程式から求める。

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \hat{H}_L \tilde{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{\psi} + V\tilde{\psi} - qE_z^{(i)} z \tilde{\psi} \quad (5)$$

この式(5)中において、電界 \mathbf{E} を光制御パルス $E_z^{(i)}$ のみで表すことが、対象粒子からの放射界を無視する近似である。

光制御パルスの設計は、式(4)と(5)の逐次計算により行う^[1]。

3. 解析結果

Fig. 1 に示すチューブ内に拘束された単一電子に対して、状態制御シミュレーションを行う。電子の初期状態と目的状態は Fig. 2 の様に設定した。以上の条件より設計した光制御パルスを Fig. 3 に示す。

設計した光制御パルスの性能を確認するため、放射界を無視する近似を適用した Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法（以下、非混合数値解析と表記）にてシミュレーションを行う。

Fig. 4 (a) はチューブ内における電界 z 成分 E_z の時間応答、(b) は存在確率密度 $|\psi|^2$ の時間応答を表す。また、(b) の右端に目的状態の分布を示した。この結果より、非混合数値解析によるシミュレーションでは光制御パルスが乱されず、電子状態を制御出来ていることが分かる。従って、放射界を無視する近似の下では、設計した光制御パルスの性能は十分であることが確認出来た。

次に放射界を無視する近似の妥当性を検証するため、通常の Maxwell-Schrödinger 混合数値解析法（以下、混合数値解析と表記）にてシミュレーションを行う。

Fig. 5 は Fig. 4 と同様に、チューブ内における各分布の時間応答を示す。この結果より、混合数値解析では単一電子が強い放射界を生成し、光制御パルスが波動関数近傍で大きく乱されていることが分かる。そのため、電子状態が十分に制御出来ず、存在確率密度 $|\psi|^2$ は目的状態と異なる分布になる。

以上の検討より、最小電荷しか持たない単一電子の場合でも、放射界は強い影響を持つことを確認した。また、放射界の影響により光制御パルスが乱され、電子状態の制御が出来ないことを示した。

4. まとめ

本報告では Maxwell-Schrödinger 混合数値解析法を用い、光制御パルスによる単一電子の状態制御シミュレーションを行った。その結果、最小電荷である単一電子の場合でも、強い放射界が形成されることを確認した。また、放射界の影響により、光制御パルスの波形が波動関数近傍で大きく乱され、電子状態の制御が出来ないことを示した。

5. 謝辞

本研究の一部は、日本大学学術研究戦略プロジェクト及び私立大学戦略的研究基盤形成支援事業の援助を受けて行われた。

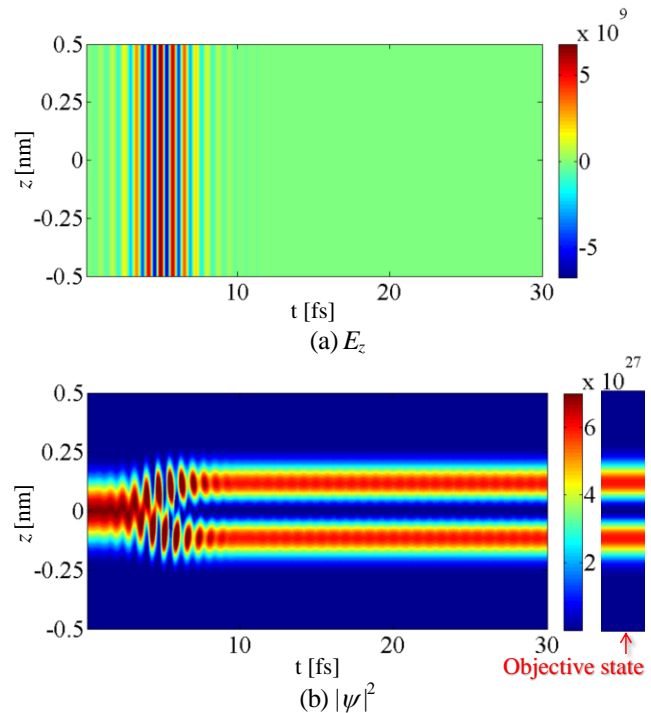


Figure 4. Time response of the electric field and probability density distributions in the thin tube by *non-coupled* analysis

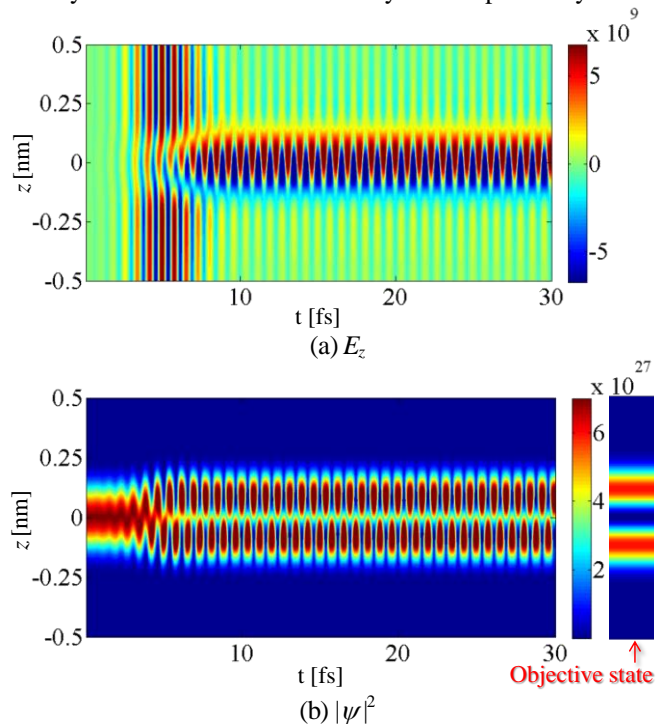


Figure 5. Time response of the electric field and probability density distributions in the thin tube by *coupled* analysis

6. 参考文献

- [1] Y. Ohtsuki, et al., : “Quantum control of nuclear wave packets by locally designed optimal pulses”, J. Chem. Phys., Vol.109, No.21, pp.9318-9331, 1998.
- [2] Chantal Daniel, et al., : “Deciphering the Reaction Dynamics Underlying Optimal Control Laser Fields”, Science, Vol. 299, pp.536-539, 2003.
- [3] S. Ohnuki, T. Takeuchi, T. Sako, Y. Ashizawa, K. Nakagawa and M. Tanaka, Int. J. Numer. Model., DOI:10.1002/jnm.1896.