超流体と超伝導体における量子渦および量子渦ダイナミクスのための幾何学的数値積分法 (web掲載簡略化版)

有明高専　創造工学科　松野哲也

2018/08/21-22 大分　湯布院FIT セミナーハウス

超流体の現象論的基礎方程式としての時間依存Gross-Pitaevskii 方程式

$$
\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi + \underline{g|\psi|^2\psi}}
$$

相互作用
g > 0 : 反発的
g < 0 : 引力的

座標変換⇔有効電磁ポテンシャル

$$A^\mu = (-\phi, \boldsymbol{A}) = (-\phi, A_x, A_y, A_z)$$

ガリレイ変換

$$A^\mu = (-\frac{1}{2}v^2, \boldsymbol{v})$$

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t} &\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}mv^2 \\ -i\hbar\nabla &\longrightarrow -i\hbar\nabla - m\boldsymbol{v} \end{aligned}$$

回転座標系へ

$$A^\mu = (-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2, \boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})$$

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t} &\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}m(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2 \\ -i\hbar\nabla &\longrightarrow -i\hbar\nabla - m\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r} \end{aligned}$$

座標変換⇔有効電磁ポテンシャル（つづき）

ガリレイ変換

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - m\boldsymbol{v})^2 - \frac{1}{2}mv^2 + V + g|\psi|^2$$

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi + g|\psi|^2\psi + \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi}$$

回転座標系へ

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - m\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2 - \frac{1}{2}m(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2 + V + g|\psi|^2$$

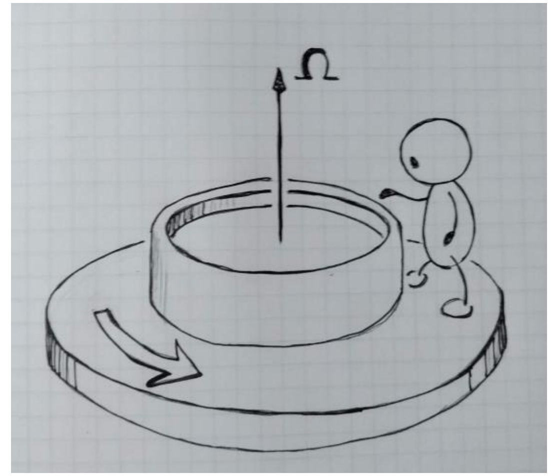
$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi + g|\psi|^2\psi - \Omega L_z\psi}$$

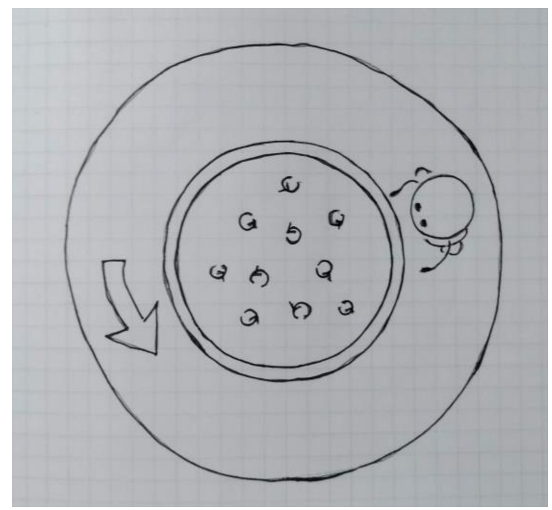
$$L_z = -\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

回転効果と磁場効果のアナロジー

$$-\mathrm{i}\hbar\nabla \longrightarrow -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}$$
$$-\mathrm{i}\hbar\nabla \longrightarrow -\mathrm{i}\hbar\nabla - m\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r}$$

$$2m\Omega \longleftrightarrow qB$$





磁場は空間を「回転」させている．
磁束密度は回転角速度に対応する．

散逸効果

$$(\mathrm{i}-\gamma)\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla-m\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2\psi+V_{\mathrm{eff}}\psi+g|\psi|^2\psi$$

$$V_{\mathrm{eff}}=V-\frac{1}{2}m(\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2$$

$\gamma>0$ は散逸の強さを表す実数パラメータ

TDGP方程式からTDGL 方程式へ

$$(\mathrm{i}-\gamma)\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla-m\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r})^2\psi+V_{\mathrm{eff}}\psi+g|\psi|^2\psi$$

$$\begin{aligned} m\boldsymbol{\Omega}\times\boldsymbol{r} &\longrightarrow q\boldsymbol{A} \\ V_{\mathrm{eff}} &\longrightarrow -\alpha \\ g &\longrightarrow -\beta \end{aligned}$$

$$\gamma\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla-\mathrm{i}q\boldsymbol{A}/\hbar)^2\psi+\alpha\psi+\beta|\psi|^2\psi$$

TDGL方程式

$$\gamma\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}q\phi\right)\psi = (\nabla-\mathrm{i}q\boldsymbol{A})^2\psi+\alpha\psi+\beta|\psi|^2\psi$$

$$\tau_{\mathrm{B}}\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right) = q\mathrm{Im}[\bar{\psi}(\nabla-\mathrm{i}q\boldsymbol{A})\psi]-\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A}$$

$$\epsilon_{\mathrm{GL}}=\epsilon_{\mathrm{K}}+\epsilon_{\mathrm{P}}+\epsilon_{\mathrm{B}}$$

$$\epsilon_{\mathrm{K}}=|\nabla-\mathrm{i}q\boldsymbol{A}|^2,\quad \epsilon_{\mathrm{P}}=-\alpha|\psi|^2-\frac{1}{2}\beta|\psi|^4,\quad \epsilon_{\mathrm{B}}=\frac{1}{2}|\nabla\times\boldsymbol{A}|^2$$

$$\gamma\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}q\phi\right)\psi=-\frac{\delta\epsilon_{\mathrm{GL}}}{\delta\bar{\psi}}$$

$$\tau_{\mathrm{B}}\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)=-\frac{\delta\epsilon_{\mathrm{GL}}}{\delta\boldsymbol{A}}$$

ゲージ対称性

$$\boldsymbol{A}\longrightarrow\boldsymbol{A}+\nabla\chi,\quad \phi\longrightarrow\phi-\frac{\partial\chi}{\partial t},\quad \psi\longrightarrow\psi\exp(\mathrm{i}q\chi)$$

TDGL 方程式からTDGP方程式へ

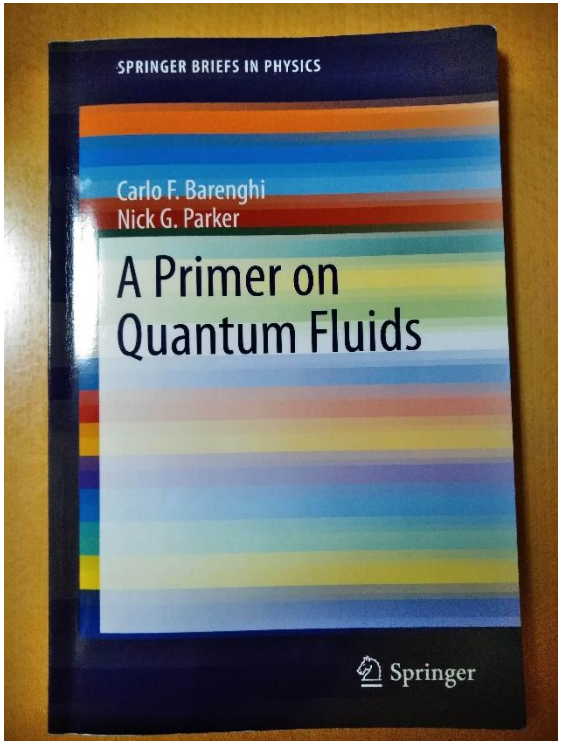
$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - \mathrm{i}q\boldsymbol{A})^2 \psi + \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi$$

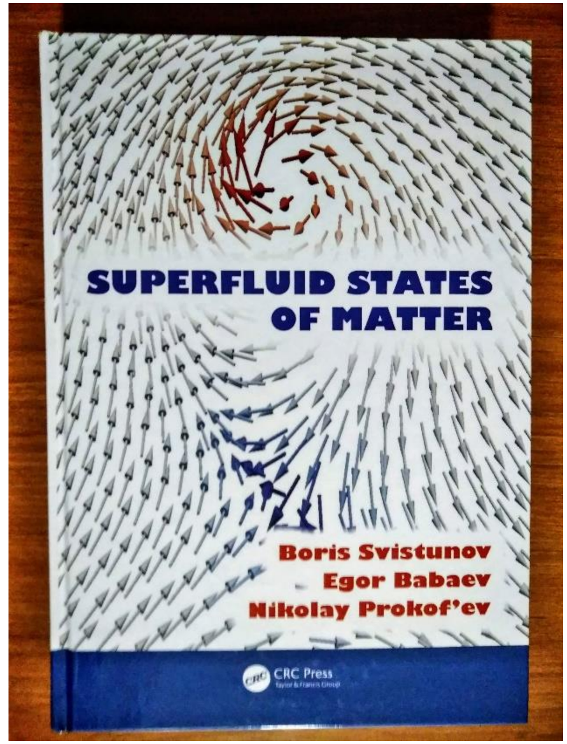
$$\gamma = 1/\mathrm{i}$$

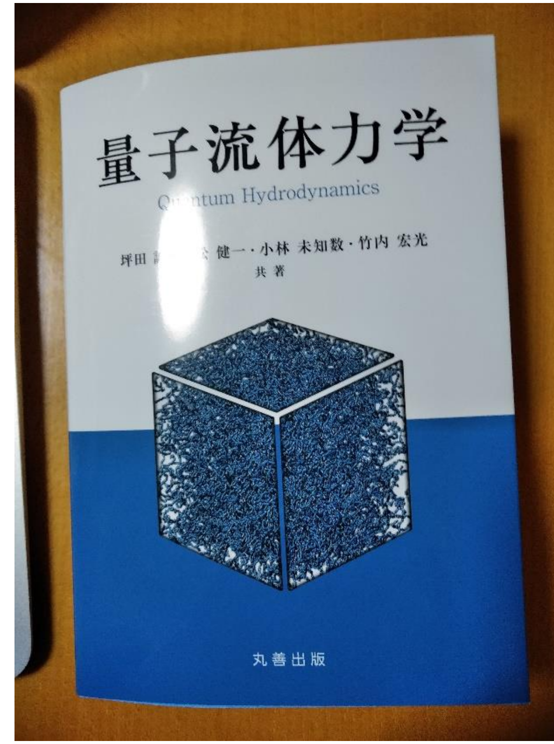
実時間微分から虚時間微分への変換 $(t \longrightarrow \mathrm{i}t)$

$$\mathrm{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -(\nabla - \mathrm{i}q\boldsymbol{A})^2 \psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi$$

参考文献





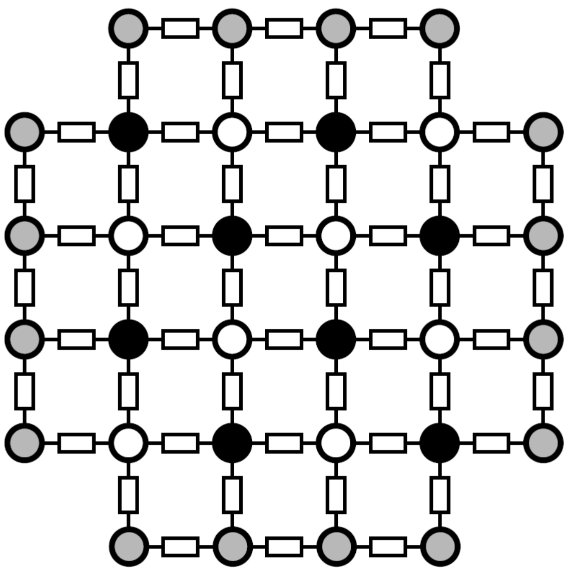


[1] C. F. Barenghi and N. G. Parker: "A Primer on Quantum Fluids," Springer 2016.

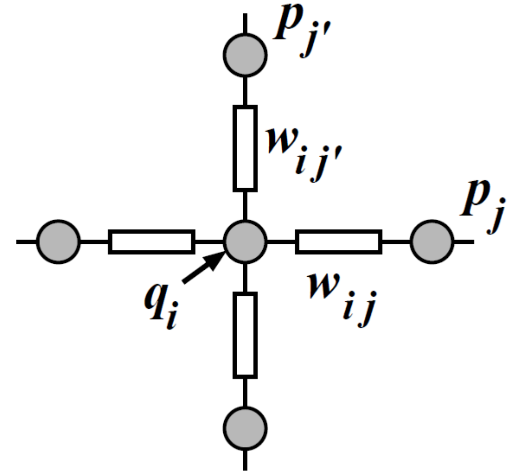
[2] B. Svistunov, E. Babaev, N. Prokof'ev: "Superfluid states of matter," CRC Press 2014.

[3] 坪田，笠松，小林，竹内 :「量子流体力学」，丸善出版 2018.

量子系のための幾何学的数値積分法



$$\psi_t(t) = \begin{cases} q_i(t), & i \in Q, \\ p_i(t), & i \in P. \end{cases}$$



$$\boldsymbol{A}_{ij} = \boldsymbol{A}((\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{r}_j)/2)$$

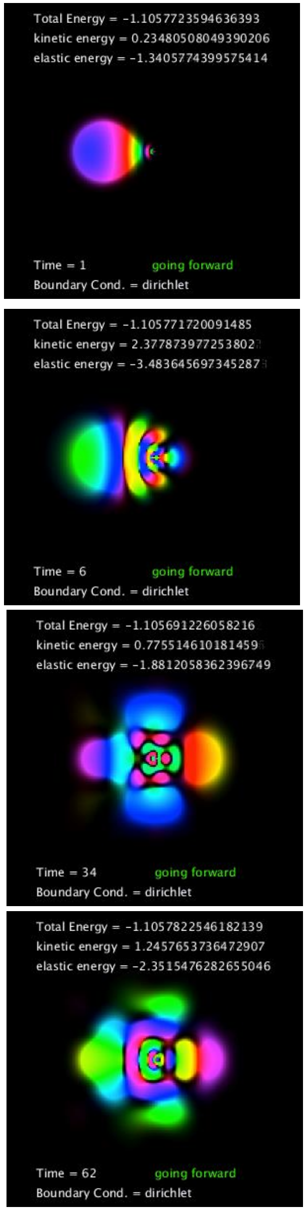
$$w_{ij} = \exp(-\mathrm{i}(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) \cdot \boldsymbol{A}_{ij})$$

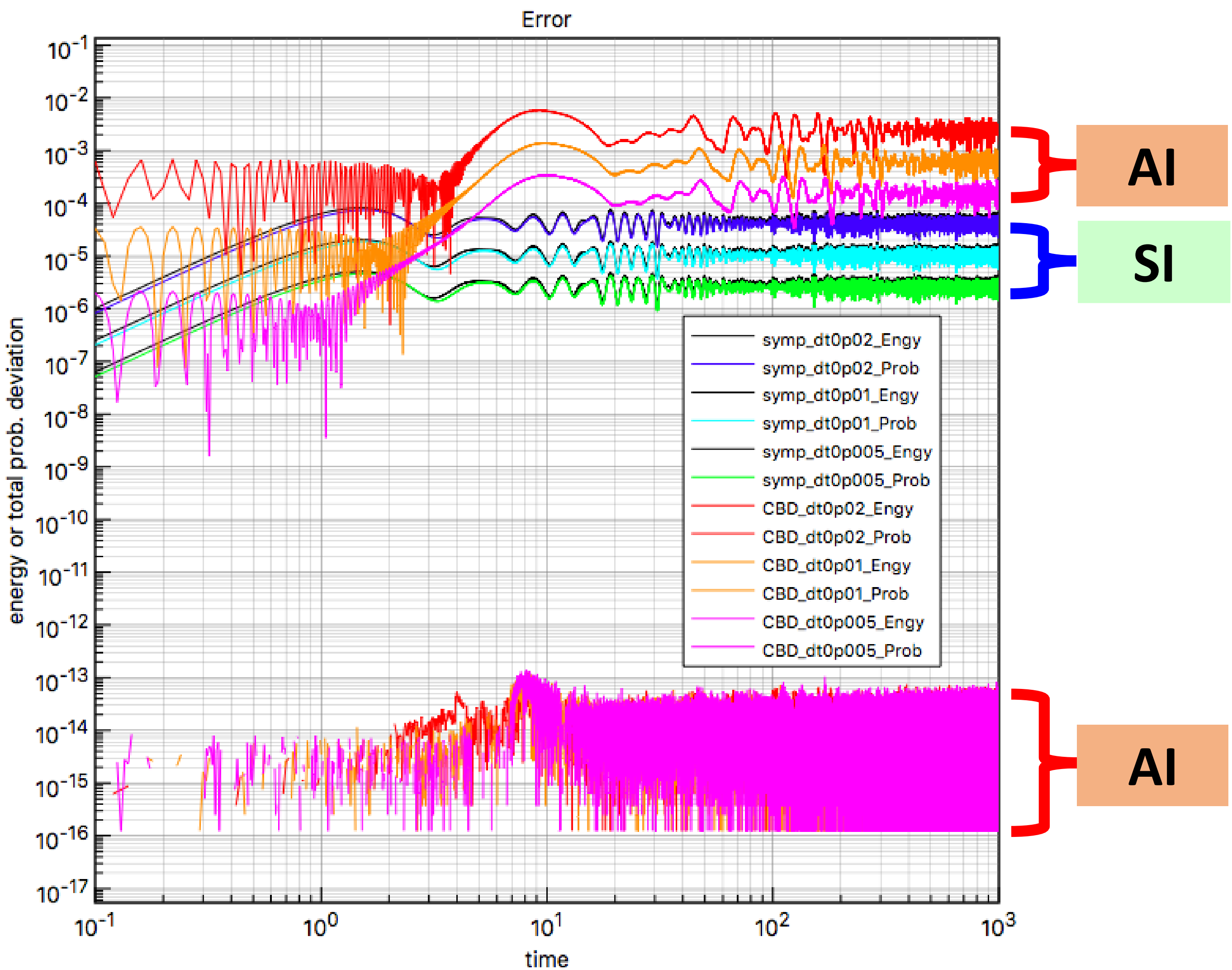
拡張複素アフィン変換群

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \boldsymbol{q}' & = & A\boldsymbol{q} + B\boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{p}' & = & \boldsymbol{p} \end{array} \right. \qquad \left(\begin{array}{cc} A & B \\ 0 & I \end{array} \right)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \boldsymbol{q}' & = & \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}' & = & A\boldsymbol{p} + B\boldsymbol{q} \end{array} \right. \qquad \left(\begin{array}{cc} I & 0 \\ B & A \end{array} \right)$$

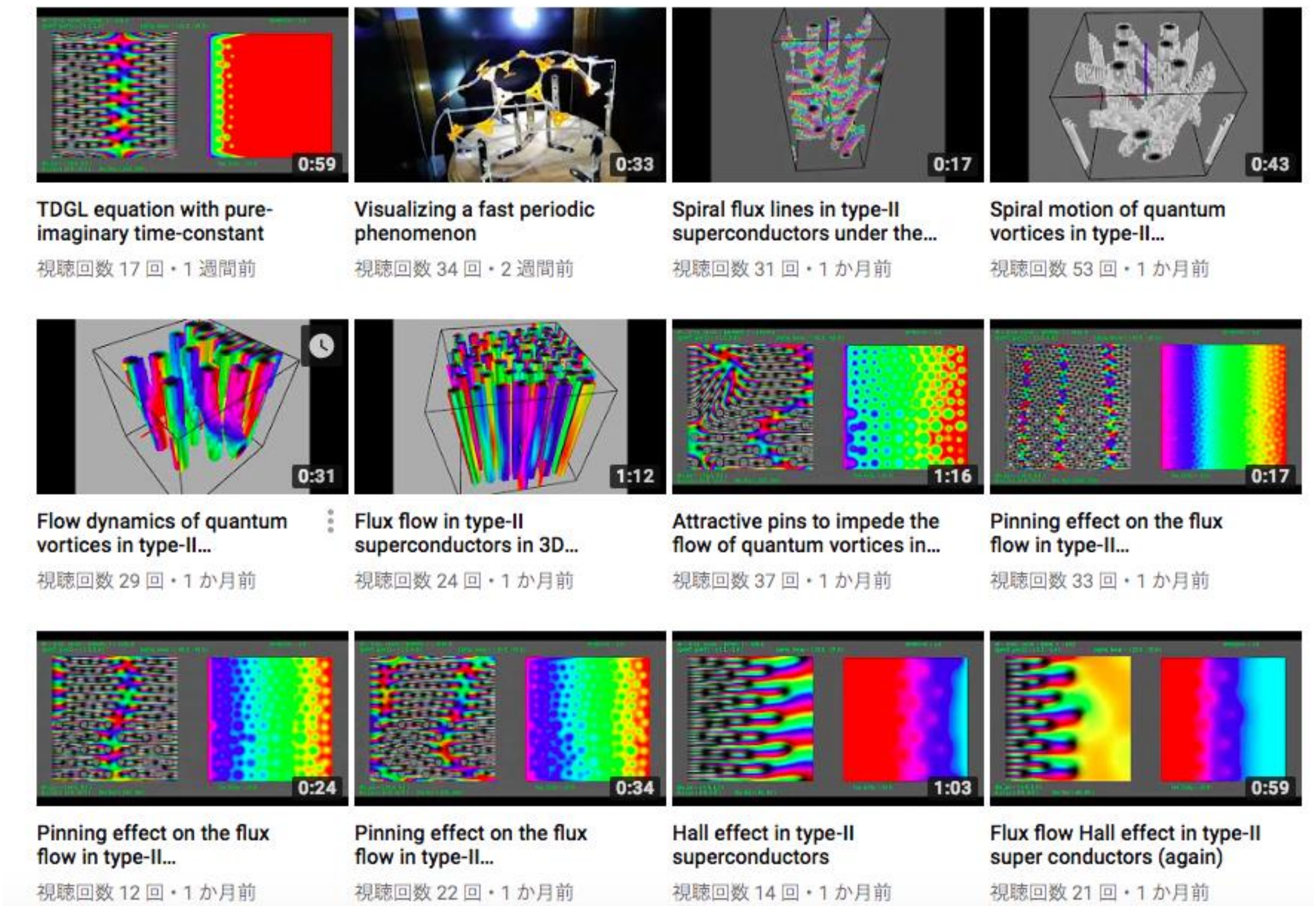
「虚時間拡散方程式」におけるエネルギー厳密保存





TDGL方程式ベースのシミュレーション

https://www.youtube.com/user/pftetsuyaGPU/videos



課題

- 安定性解析
  実時間拡散 → 無条件安定
  虚時間拡散 → 条件安定
- Consistency
  極限 (τ, h) → (0, 0) において,
  離散的スキームは連続方程式に収束するか？
- 誤差解析
  解の正確性
  エネルギー保存の正確性（虚時間拡散）