非一様電磁場中の単一荷電粒子に対する量子論的数値解析

小坂 亘　及川 俊一　Poh Kam CHAN　亀井 恵斗

北海道大学大学院工学院

1　はじめに

電磁場中を運動する荷電粒子は、印加されている磁場と垂直な面内で回転運動（サイクロトロン運動）を行い、磁場の勾配や電場によってその回転中心が徐々にずれていく。このような荷電粒子について量子力学の観点から考える。すなわち、このサイクロトロン運動する荷電粒子について、非定常 Schrödinger 方程式を解くことを考える。一様磁場中や一様電磁場中の単一荷電粒子については解析的に解くことができている [1, 2]。しかし、一般的に、電磁場がある場合について、解析的に解くことは困難であることが多い。このようなとき、数値解析を用いて方程式を近似的に解くことが有効である。我々はすでに、一様電場 $\boldsymbol{E} = (0, E_0, 0)$ および非一様磁場 $\boldsymbol{B} = [0, B_0 y (1 - y/L_B)]$ 中の単一荷電粒子について、二次元非定常 Schrödinger 方程式を数値的に解き、荷電粒子の位置の分散 σ_r^2、力学的運動量の分散 σ_p^2 が次式に従って時間発展することを得ている [2]。

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_r^2}{\mathrm{d}t} = 4.014 \times \frac{\hbar v_0}{q B_0 L_B} \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_p^2}{\mathrm{d}t} = 0.995 \times \frac{\hbar q B v_0}{L_B} \tag{2}$$

ここで、y はデカルト座標系 (x, y, z) の y 座標、t は時間、q は荷電粒子の電荷、B_0 は原点における磁場、L_B は磁場の勾配長、E_0 は電場、v_0 は初期に粒子が持つ古典的な速さを示している。また、$\mathrm{d}\sigma_r^2/\mathrm{d}t$ は荷電粒子の位置の分散の増加率であり、以下で位置の膨張率と呼ぶ。同様に、$\mathrm{d}\sigma_p^2/\mathrm{d}t$ を力学的運動量の膨張率と呼ぶ。この 2 式によって、磁場の勾配がある場合、時間とともに粒子の存在位置や運動の不確定性が増加していくことがわかる。また、磁場の勾配がない場合、すなわち $L_B \to \infty$ の場合はこれらの不確定性は時間とともに増加しないこともわかる。これは、電場と磁場がともに一様の場合の解析解からも同じ結論が得られる。さらに、電場が含まれていないことから、一様電場では分散は時間発展しないことがわかる。しかしながら、一般には電場が一様であるというのは非常に限られた条件であり、非一様になった場合を考えることが必要である。本研究では、一次の勾配を持つ非一様な電場に対し、その荷電粒子の位置の膨張率、力学的運動量の膨張率はどのように時間発展するのかを調べた。

2　数値解析手法

電磁場中の単一荷電粒子についての非定常 Schrödinger 方程式は次式で与えられる。

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + qV \right] \psi \tag{3}$$

ここで、$\psi = \psi(\boldsymbol{r}, t)$ は位置 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ および時間 t を変数に持つ荷電粒子の波動関数、$\hbar$ は換算プランク定数、m は荷電粒子の質量、$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ はベクトルポテンシャル、$V = V(\boldsymbol{r})$ はスカラーポテンシャルである。非一様電場および非一様磁場を与える、$\boldsymbol{A}$ と V を次のように与えた。

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \left[0, 0, -B_0 y \left(1 - \frac{y}{2L_B} \right) \right] \tag{4}$$

$$V(\boldsymbol{r}) = -E_0 y\left(1-\frac{y}{2L_E}\right) \tag{5}$$

ここで、L_B、L_E はそれぞれ磁場の勾配長、電場の勾配長と呼ばれる量であり、勾配の緩やかさを表現している。

初期の波動関数は次のようなガウス分布を仮定した。

$$\psi(\boldsymbol{r},0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\ell_B}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)^2}{2\ell_B^2}+\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}\right] \tag{6}$$

ここで、ℓ_B は磁気長と呼ばれる量で、一様磁場中の荷電粒子に対する位置の標準偏差である。$\boldsymbol{r}_0$ は初期における荷電粒子の古典的な位置であり、$\boldsymbol{k}_0 = m\boldsymbol{v}_0/\hbar$ は初期波数である。

式 (3) を数値計算で解くにあたって、方程式内で用いられる変数について表 1 にある値で無次元化を行った。また、空間微分に関して中央差分法、時間積分に関して Crank-Nicolson 法を用いた。

得られた波動関数から位置の分散 $\sigma_r^2 = \left\langle \boldsymbol{r}^2\right\rangle - \langle \boldsymbol{r}\rangle^2$、力学的運動量の分散 $\sigma_p^2 = \left\langle \boldsymbol{p}^2\right\rangle - \langle \boldsymbol{p}\rangle^2$ を計算した。ただし、この力学的運動量の $\boldsymbol{p}$ とは $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}$ である。ここで、$\langle\cdot\rangle$ は期待値の計算を示し、たとえば位置 $\boldsymbol{r}$ については、

$$\langle \boldsymbol{r}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\boldsymbol{r}\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{7}$$

で得られる。ただし、ψ^* は ψ の複素共役を示す。

位置と力学的運動量の分散の時間発展を図 1、図 2 に示す。それぞれの図には、B_0 や E_0 などの物理量の条件が同じで、$L_B \to \infty$ すなわち一様磁場であるか、$L_B = 10^4$ すなわち非一様磁場であるかのみ異なる、2 つの曲線がプロットされている。この両者はともに時間とともに振動している。ここで、最も分散が広がっているときが重要であると考え、この波のピークに注目する。磁場が一様でも非一様でも、その位置および力学的運動量の分散のピークは時間とともにわずかだが増加している。しかし、電場と磁場がともに一様のとき、どちらの分散も時間とともに変化しないことが解析的にわかっている。したがって、この増加は数値誤差である。この数値誤差は非一様磁場かつ一様電場の場合にも、同程度含まれていると考えられる。この数値誤差を打ち消すため、式 (8) のように非一様磁場かつ一様電場の場合の分散と、一様磁場かつ一様電場の場合との分散の差 $\Delta\sigma_{\mathrm{peak}}^2$ を取る。

$$\Delta\sigma_{\mathrm{peak}}^2 = \sigma_{\mathrm{peak.non-uniform}}^2 - \sigma_{\mathrm{peak.uniform}}^2 \tag{8}$$

$\Delta\sigma_{\mathrm{peak}}^2$ は時間に比例して増加し、その傾きが膨張率 $\mathrm{d}\sigma_r^2/\mathrm{d}t$、$\mathrm{d}\sigma_p^2/\mathrm{d}t$ である。以上のように膨張率を得る操作を、非一様電場に対しても同様に行った。L_E の値を 10^6、10^5、10^4 の 3 パターンについて、それぞれ B_0 や v_0 などの物理量が異なる場合の膨張率を計算し、式 (1)、式 (2) と比較した。

表 1: 規格化定数一覧

変数		規格化定数	単位
質量	m	1.6722×10^{-27}	kg
電荷	q	1.602×10^{-19}	C
速度	$\boldsymbol{v}$	10	ms^{-1}
磁束密度	$\boldsymbol{B}$	10	T
電場	$\boldsymbol{E}$	100	Vm^{-1}
位置	$\boldsymbol{r}$	1.0438×10^{-8}	m
時間	t	1.0438×10^{-9}	s
換算プランク定数	$\hbar$	1.7454×10^{-34}	Js

3 結果

図 3 および図 4 のそれぞれに、E_0、B_0、L_E、L_B、v_0 の値が異なる場合の位置の膨張率 $\mathrm{d}\sigma_r^2/\mathrm{d}t$、力学的運動量の膨張率 $\mathrm{d}\sigma_p^2/\mathrm{d}t$ の計算結果をまとめた。いずれの条件の場合でも、膨張率の値は式 (1) および式 (2) にのるように整理された。図中において、シンボルの違いは L_E の値の違いに相当し、L_E の値のみが異なる条件同士ではすべて重なっている。L_E が分散の時間発展に寄与するならば、式 (1) および式 (2) で示される直線から外れてプロットされるはずである。したがって、どちらの分散の時間発展も L_E に依存しないことが示された。

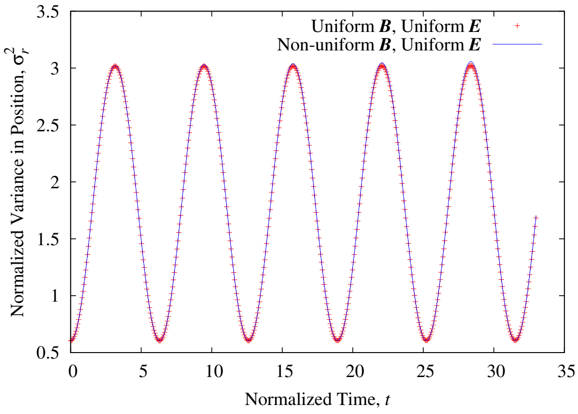

図 1: 位置の分散の時間発展。このとき、$q = 1$、$m = 1$、$v_0 = 5$、$E_0 = 10^{-4}$、$B_0 = 1$ であり、Uniform $\boldsymbol{B}$ の場合は $L_B \to \infty$、Non-uniform $\boldsymbol{B}$ の場合は $L_B = 10^4$ である。

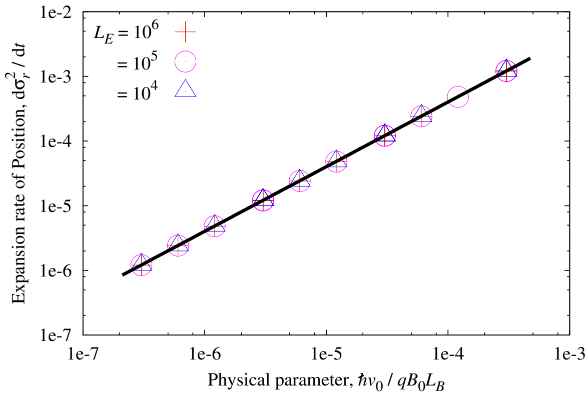

図 3: 位置の膨張率と物理量の組み合わせ $\hbar v_0/qB_0L_B$ の関係。図中の黒い実線は式 (1) を示し、3 パターンのシンボルの違いは L_E の値の違いに対応している。

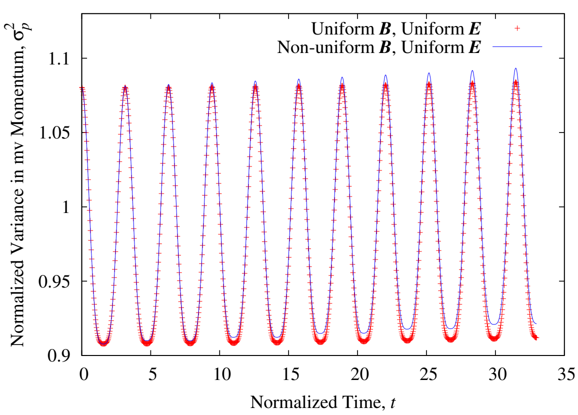

図 2: 力学的運動量の分散の時間発展。このとき、$q = 1$、$m = 1$、$v_0 = 5$、$E_0 = 10^{-4}$、$B_0 = 1$ であり、Uniform $\boldsymbol{B}$ の場合は $L_B \to \infty$、Non-uniform $\boldsymbol{B}$ の場合は $L_B = 10^4$ である。

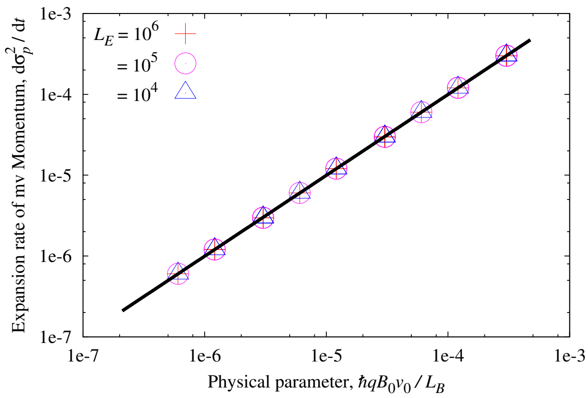

図 4: 力学的運動量の膨張率と物理量の組み合わせ $\hbar qB_0v_0/L_B$ の関係。図中の黒い実線は式 (2) を示し、3 パターンのシンボルの違いは L_E の値の違いに対応している。

4　まとめ

非一様な電磁場中を運動する単一荷電粒子について、二次元非定常 Schrödinger 方程式を数値的に解いた。そして、その荷電粒子の、位置および力学的運動量の分散の時間発展と電場の非一様性の関係を調べた。その結果、一次の傾きを持つ電場の場合、どちらの分散の時間発展においても、依存性はないことがわかった。

参考文献

[1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*: *Non-relativistic Theory*, 3rd ed., translated from the Russian by J. B. Sykes and J. S. Bell (Pergamon Press, Oxford, 1977).

[2] S. Oikawa, W. Kosaka and P. K. Chan, Plasma Fusion Res, **9**, 3401033 (2014).