

2017年度 第2回 原子分子科学セミナー

皆さまのご参加をお待ちします

「分子の量子波束ダイナミクスの追跡に向けて」

講演者 : 高橋聡博士 (相関基礎科学系 助教)

Speaker : Dr. S. Takahashi (Dept. of Basic Science)

日時 : 7月13日 (木) 14:50--16:40

Date & Time : Thursday 13th July, 14:50--16:40

場所 : 16号館 827号室

Place : Room 827, Bldg. 16

Abstract

化学反応における原子核の量子効果を理解するために、そして核の自由度 (原子数) が増大することによって分子の量子波束ダイナミクス計算が困難になる状況を克服するために、我々は、Action Decomposed Function (ADF) と呼ばれる波束動力学理論に立脚した研究を行っている[1,2]。ADF 手法では、量子波束は、古典軌道集合の時間発展に沿って計算される情報を用いて近似される。取り扱いの容易な線形な基本方程式から出発し、我々は現在までに、ダイナミクスが2つの項を用いて表現されることを見つけた：一つは、その上に波束成分を運ぶ古典軌道の周りの、微小な空間領域の幾何学的な変化を記述し、他方はPlanck 定数に比例する純虚数の拡散定数を伴う拡散項である。両者を適切に考慮することによって、既存のWentzel-Kramers-Brillouin (WKB) レベルの半古典的手法を越える波束の記述を可能にした。本セミナーでは、ADF 手法に基づく多次元量子波束ダイナミクスの記述の試みと、現在までの研究におけるいくつかのトピックを紹介する。

[1] S. Takahashi and K. Takatsuka, Phys. Rev. A 89, 012108 (2014).

[2] K. Takatsuka and S. Takahashi, Phys. Rev. A 89, 012109 (2014).