SkyAx の実装についての流れ

20B01392 松本侑真

2023 年 12 月 11 日

概要

目次

1-1 ハミルトニアンの計算

波動関数を

$$\psi_\alpha = \begin{pmatrix} \psi_\alpha^+ \\ \psi_\alpha^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_\alpha^+ e^{im\phi} \\ f_\alpha^- e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \tag{1-1.1}$$

とおく。ポテンシャル

$$U, \quad \boldsymbol{W}, \quad B \tag{1-1.2}$$

が計算できれば、ハミルトニアンが求まる。W に関係する項（W_term）は

$$i\boldsymbol{W} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla) \tag{1-1.3}$$

となっている。ここで、

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla)_r \psi_\alpha = (\sigma_\phi \boldsymbol{\nabla}_z - \sigma_z \boldsymbol{\nabla}_\phi)\psi_\alpha = \begin{pmatrix} -ie_- \boldsymbol{\nabla}_z \psi_- - \boldsymbol{\nabla}_\phi \psi_+ \\ ie_- \boldsymbol{\nabla}_z \psi_+ + \boldsymbol{\nabla}_\phi \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\partial_z f_- - i\frac{m}{r} f_+ \\ +i\partial_z f_+ + i\frac{m+1}{r} f_- \end{pmatrix} \tag{1-1.4}$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla)_\phi \psi_\alpha = (\sigma_z \boldsymbol{\nabla}_r - \sigma_r \boldsymbol{\nabla}_z)\psi_\alpha = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\nabla}_r \psi_+ - e_- \boldsymbol{\nabla}_z \psi_- \\ -\boldsymbol{\nabla}_r \psi_- - e_+ \boldsymbol{\nabla}_z \psi_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_r f_+ - \partial_z f_- \\ -\partial_r f_- - \partial_z f_+ \end{pmatrix} \tag{1-1.5}$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla)_z \psi_\alpha = (\sigma_r \boldsymbol{\nabla}_\phi - \sigma_\phi \boldsymbol{\nabla}_z)\psi_\alpha = \begin{pmatrix} e_- \boldsymbol{\nabla}_\phi \psi_- + ie_- \boldsymbol{\nabla}_r \psi_- \\ e_+ \boldsymbol{\nabla}_\phi \psi_+ - ie_+ \boldsymbol{\nabla}_r \psi_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\frac{m+1}{r} f_- + i\partial_r f_- \\ i\frac{m}{r} f_+ - i\partial_r f_+ \end{pmatrix} \tag{1-1.6}$$

1.1 Poisson 方程式

ときたいものは

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = \rho \tag{1-1.7}$$

つまり

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = 0 \tag{1-1.8}$$

中心差分でやると

$$\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2r\Delta r} \tag{1-1.9}$$

$$\frac{\partial^2 f_{ij}}{\partial r^2} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta r)^2} \tag{1-1.10}$$

$$\frac{\partial^2 f_{ij}}{\partial z^2} = \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} \tag{1-1.11}$$

となる。よって、

$$\frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta r)^2} + \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2r\Delta r} + \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} = \rho_{ij} \tag{1-1.12}$$

となる。

$$\left[\frac{1}{(\Delta z)^2}\right] f_{i,j-1} + \left[\frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{2r\Delta r}\right] f_{i-1,j} + \left[\frac{-2}{(\mathit{\Delta} r)^2} + \frac{-2}{(\mathit{\Delta} z)^2}\right] f_{i,j} + \left[\frac{1}{(\mathit{\Delta} r)^2} + \frac{1}{2r(\mathit{\Delta} r)}\right] f_{i+1,j} + \left[\frac{1}{(\mathit{\Delta} z)^2}\right] f_{i,j+1} = \rho_{ij} \tag{1-1.13}$$

となり、これは

$$A_2 f_{i,j-1} + A_1^- f_{i-1,j} + A_0 f_{i,j} + A_1^+ f_{i+1,j} + A_2 f_{i,j+1} = \rho_{ij} \tag{1-1.14}$$

となる。また、$i,j \to k$ にマッピングするとき、k が与えられると

$$i = \mathrm{mod}\,(k-1, N) + 1 \tag{1-1.15}$$
$$j = [k/N] + 1 \tag{1-1.16}$$

と置くことができる。また、(i,j) が与えられると

$$k = (j-1)N + i \tag{1-1.17}$$

と与えられる。