SkyAx の実装についての流れ

20B01392 松本侑真

2023年12月11日



目次

1-1	ハミルトニアンの計算	2
1.1	Poisson 方程式	2
1.2	境界条件	3

ハミルトニアンの計算

波動関数を

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

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

となっている。ここで、

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla)_{r} \psi_{\alpha} = (\sigma_{\phi} \nabla_{z} - \sigma_{z} \nabla_{\phi}) \psi_{\alpha} = \begin{pmatrix} -ie_{-} \nabla_{z} \psi_{-} - \nabla_{\phi} \psi_{+} \\ ie_{-} \nabla_{z} \psi_{+} + \nabla_{\phi} \psi_{-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\partial_{z} f_{-} - i\frac{m}{r} f_{+} \\ +i\partial_{z} f_{+} + i\frac{m+1}{r} f_{-} \end{pmatrix}$$

$$(\sigma \times \nabla)_{\phi} \psi_{\alpha} = (\sigma_{z} \nabla_{r} - \sigma_{r} \nabla_{z}) \psi_{\alpha} = \begin{pmatrix} \nabla_{r} \psi_{+} - e_{-} \nabla_{z} \psi_{-} \\ -\nabla_{r} \psi_{-} - e_{+} \nabla_{z} \psi_{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{r} f_{+} - \partial_{z} f_{-} \\ -\partial_{r} f_{-} - \partial_{z} f_{+} \end{pmatrix}$$

$$(1-1.5)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla)_{\phi} \psi_{\alpha} = (\sigma_{z} \nabla_{r} - \sigma_{r} \nabla_{z}) \psi_{\alpha} = \begin{pmatrix} \nabla_{r} \psi_{+} - e_{-} \nabla_{z} \psi_{-} \\ -\nabla_{r} \psi_{-} - e_{+} \nabla_{z} \psi_{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{r} f_{+} - \partial_{z} f_{-} \\ -\partial_{r} f_{-} - \partial_{z} f_{+} \end{pmatrix}$$
(1-1.5)

$$(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla)_z \psi_{\alpha} = (\sigma_r \nabla_{\phi} - \sigma_{\phi} \nabla_z) \psi_{\alpha} = \begin{pmatrix} e_- \nabla_{\phi} \psi_- + i e_- \nabla_r \psi_- \\ e_+ \nabla_{\phi} \psi_+ - i e_+ \nabla_r \psi_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \frac{m+1}{r} f_- + i \partial_r f_- \\ i \frac{m}{r} f_+ - i \partial_r f_+ \end{pmatrix}$$
(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

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

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

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

となる。よって、

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

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

となり、これは

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

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

$$i = \text{mod}(k - 1, N) + 1 \tag{1-1.15}$$

$$j = [k/N] + 1 \tag{1-1.16}$$

と置くことができる。また、(i,j) が与えられると

$$k = (j-1)N + i (1-1.17)$$

と与えられる。

1.2 境界条件

r=0 の境界条件として、偶関数であることを要求する。また、原点の値は、U(1,j) と同じものとする。 r=Nr*dr の境界条件は固定端境界条件とする。つまり、

$$U(-i,j) = U(i,j)$$
 (1-1.18)

$$U(0,j) = U(1,j) \tag{1-1.19}$$

$$U(Nr, j) = 0 (1-1.20)$$

とすればよい。また、z=0 の境界条件は固定端である:

$$U(i,0) = 0 (1-1.21)$$

$$U(i, Nz) = 0 (1-1.22)$$