

研究成果報告書

(国立情報学研究所民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		単純量子流体の実時間相関関数の数値的厳密解			
研究テーマ (欧文) AZ		Time correlation function for simple quantum fluids			
研究氏 代 表 名 者	カカナ CC	姓) ナカヤマ	名) アキラ	研究期間 B	2008 ~ 2010 年
	漢字 CB	中山	哲	報告年度 Y	2009
	ローマ字 CZ	NAKAYAMA	AKIRA	研究機関名	北海道大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		北海道大学大学院理学研究院・助教			
概要 EA (600 字 ~ 800 字程度にまとめてください)					
<p>本研究は、クラスター展開法を基にした原子核の量子多体系ダイナミクスの新手法を開発し、量子液体に対して数値的に厳密な時間相関関数を求めることを目的としている。最近、様々な量子ダイナミクスの近似計算手法が提案されたが、等方ポテンシャルからなる単純量子液体の系でも速度自己相関関数の計算結果には手法間で大きな食い違いが見られている。そこで本研究では、この量子液体の時間相関関数の数値的厳密解をターゲットとした手法の開発を行い、既存の近似手法の精度を詳細に検証し、そのモデルの妥当性、適用性等を議論する。さらに、同種粒子(ボーズ、フェルミ粒子)系の量子液体にも拡張し、同種粒子対称性が時間相関関数に及ぼす影響の定量的理解も深める。</p> <p>本助成により、三体効果を取り入れるプログラム開発を行った。三体の遷移要素は短時間の二体遷移要素を用いて、数値積分を繰り返すことにより得た。九次元のデータとなるため多項式フィットを行い、モンテカルロ計算で簡単に数値評価できるようにした。また、多項式フィットが困難な領域では参照点を利用する重み付き最小二乗法による内挿法で評価できるようにした。結果、三体相関の導入により、精度が大幅に上がることを確認した。二体相関のみの計算と同様に、時間依存しない物理量の変化を求めることで遷移要素の精度を評価した。長時間では多体効果の影響が顕著になってくるため精度は落ちるが、二体と三体の比較を行うことにより、短時間で一致している時間領域では数値的に正確な解が得られたと言える。</p>					
キーワード FA	量子ダイナミクス	量子流体	時間相関関数	クラスター展開法	

(以下は記入しないでください)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入して下さい）									
雑誌	論文標題 GB								
	著者名GA		雑誌名GC						
	ページGF	~	発行年GE					巻号 GD	
雑誌	論文標題 GB								
	著者名GA		雑誌名GC						
	ページGF	~	発行年GE					巻号 GD	
雑誌	論文標題 GB								
	著者名GA		雑誌名GC						
	ページGF	~	発行年GE					巻号 GD	
図書	著者名HA								
	書名HC								
	出版者HB		発行年HD					総ページ HE	
図書	著者名HA								
	書名HC								
	出版者HB		発行年HD					総ページ HE	

欧文概要EZ

The development of simulation methods for following the quantum dynamics of many-body systems remains at the forefront of chemical and condensed matter physics research. Over the last several years, various approximate and practical methodologies have been developed for simulating the quantum dynamics of fluids. These methods have been applied to calculate time correlation functions in fluids that exhibit moderate to very large quantum mechanical effects. Liquid para-hydrogen has served as a convenient but challenging benchmark for these approximate methods. Interestingly, all the dynamical approximations mentioned above have reported diffusion constants in good agreement with one another and with the experimental values, even though the corresponding time correlation functions show significant differences. The lack of numerically exact results for the velocity autocorrelation function of this system is thus disturbing.

We present a simple and efficient method for calculating symmetrized time correlation functions of neat quantum fluids. Using the idea of the cluster expansion approach to complex-time quantum mechanical propagator, symmetrized correlation functions are written in terms of a double integral for each degree of freedom with a purely positive integrand. The method is tested extensively on liquid para-hydrogen and used to obtain accurate quantum mechanical results for the initial segment of the symmetrized velocity autocorrelation function of this system, as well as the incoherent dynamic structure factor at certain values of momentum transfer values. So far, we have extended this methodology to include up to three-body terms and significant improvement is achieved. A detailed comparison with other calculations and experimental results are also made in this project.