論　文

量子格子ガス法による二重障壁構造の共鳴トンネル効果の動特性の計算

Dynamics of resonant tunneling in double-barrier structures using quantum lattice gas method

石川県立大学　教養教育センター　稲葉 宏和

Abstract

We calculated the resonant tunneling through double-barrier structures. The resonant tunneling is numerically computed using the quantum lattice gas method.

Keywords: resonant tunneling; quantum cellular automata; quantum lattice gas ; double-barrier; time-dependent Schrödinger equation

1．はじめに

ナノメートル(10^{-9}m)以下の微視的領域では、日常の物理(古典物理)では現われない物理現象が現われる。これは、微視的領域では、粒子（量子）の性質に粒子性以外に波動性が現われることによる。このように古典力学では説明のつかない現象がいくつかある。

たとえば、時間発展後の粒子の位置が確率的にしか予測できないこと、粒子の位置と運動量を同時に正確に測定できないこと（不確定性原理）やポテンシャル障壁のエネルギー以下の粒子でも障壁を透過すること（量子トンネル効果）などがある。

微視的領域では、日常の力学（古典力学）にはない力学が必要となる。古典力学では説明できないこれらの微視領域の物理現象（量子現象）の説明をするのが量子力学である。

古典力学においては、粒子はポテンシャル障壁高より低い入射エネルギーではすべて反射し、障壁高より高い入射エネルギーになるとすべて透過する。しかし、量子力学においては、粒子の持つ入射エネルギーがポテンシャル障壁高より低いときでも透過する確率が 0 とはならず、透過する確率が存在する場合がある。これを量子トンネル効果という。

そのため、量子力学では、ポテンシャル障壁高より低いエネルギーの粒子がある確率で透過する場合がある。このような量子トンネル効果は古典力学では起こりえない純粋な量子力学的な現象である。

ダイオードやトランジスターなどの半導体素子が極微細化されると量子トンネル効果が現われてくる。従来の半導体素子設計では量子効果は悪影響を与えると考えられている。しかし、微細化により量子効果の発現は不可避である。そこで、近年、半導体ナノ構造において量子トンネル効果を積極的に利用して新機能素子を開発する試みがなされている。

その中でも、二重障壁量子井戸構造では、単一なポテンシャル障壁とは異なり、透過する確率に共鳴的なピークを持つ共鳴トンネル効果が起こる。量子井戸内の共鳴準位に対応する入射エネルギー（共鳴エネルギー）の場合に透過係数（トンネル確率）は１となり、100%の確率で透過する。しかし、その共鳴エネルギーより少しでもエネルギーが異なると透過係数は非常に小さくなり、ほとんど透過せず反射する。

この共鳴トンネル効果を利用した共鳴トンネルダイオードや共鳴トンネルトランジスターなどの量子効果素子の開発が試みられている。

我々は、今まで二重障壁構造での共鳴トンネル効果について研究を行ってきた。(Inaba, Kurosawa, Okuda, 1989; 稲葉・ 奥田, 1996) ポテンシャル障壁構造の共鳴トンネル効果への影響をコンピューター・シミュレーションにより調べた。さらに、ポテンシャル障壁の非対称性の影響についても検討した。

共鳴トンネル効果を量子効果素子として応用する場合、トンネル効果を利用するため今までより高速で動

作できることが期待される。そのため、共鳴トンネル効果の動特性の解析が重要である。

共鳴トンネル効果の動特性の計算には、様々なシミュレーション方法が提案されている。主として、基本方程式（支配方程式）である時間に依存するシュレーディンガー方程式を解く方法が用いられる。

この方法のコンピューター・シミュレーションでは、差分法による時間に依存するシュレーディンガー方程式の解法が利用される。(Goldberg, Schey, Schwartz, 1967) 粒子を表す波束の時間発展を時間に依存シュレーディンガー方程式により計算する。波束の運動を計算することにより、共鳴トンネル効果の動特性が調べることができる。

このような差分法のアプローチに対し、解析困難な工学的現象に対して、支配方程式から出発せず、構成要素間の相互作用に注目してモデル化する方法が試みられている。このような方法は複雑系アプローチと呼ばれている。

複雑系に用いられているセル・オートマトンは、隣接セル間の相互作用に単純なルールを設定することで自動的に物理系の時間発展を計算する方法である。

セル・オートマトンでは、簡単なセル間の局所的相互作用から複雑な現象を再現できる。複雑な構造の系に対して隣接セル間に単純なルールを設定することで計算できるため、系の多次元化や多体問題への対応などが支配方程式を解く方法に比べて容易になる。

格子ガス法はセル・オートマトンの一種である。流体の運動、拡散や伝播などの現象の解析に用いられている。特に、複雑な系の解析手法の一つとして注目を集めている。(加藤・光成・築山, 1998) さらに、格子ガス法は複雑な流体の解析に用いられ始めている。(蔦原・高田・片岡, 1999)

量子格子ガス法は、格子ガス法を量子力学に活用しようという試みであり、いくつかの計算報告がある。(Boghosian, Taylor IV, ,1998; Yepez, Boghosian, 2002) さらに、量子波のシミュレーションに利用しようという試みもなされている。(酒井・鎌倉・谷口, 2004 ; Sakai, Kamakura, Taniguchi, 2004)

隣接セル間の相互作用の単純なルールにより計算が行われるため、量子格子ガス法では大規模な計算プログラムの並列化が容易である計算方法である。将来、量子コンピューター上で計算する場合、多体問題などでは計算時間が粒子数に依存しないため効率的に行うことができる可能性が指摘されている。(Boghosian, Taylor IV, 1997, 1998; Yepez, Boghosian, 2002)

本論文では、Yepez らや酒井らにより提案された量子格子ガス法により、時間に依存するシュレーディンガー方程式を解くことと同等の計算を行う。いくつかの二重障壁構造についてシミュレーションを行い、共鳴トンネル効果の動特性について検討する。

本論文の構成は以下の通りである。第２節では、時間に依存するシュレーディンガー方程式の計算法について述べる。第３節では、量子格子ガス法の計算方法について説明する。量子格子ガス法による解法とシュレーディンガー方程式の差分法による解法の同等性について述べる。同等性の詳細な計算は付録に示す。第４節では、共鳴トンネル効果の動特性の解析法について述べる。さらに、非対称二重障壁構造における量子格子ガス法による計算結果を示す。

２．時間に依存するシュレーディンガー方程式の計算法

共鳴トンネル効果の動特性の計算には、様々なシミュレーション方法が提案されている。主として、基本方程式（支配方程式）である時間に依存するシュレーディンガー方程式を解く方法が用いられている。

ここでは、シミュレーションのための数値計算方法として最もよく用いられている差分法について述べる。

時間に依存する１次元シュレーディンガー方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\varphi(x,t) \quad \cdots（1）$$

である。ここで、$\varphi(x,t)$ は粒子の波動関数、m は粒子の質量、$\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割ったものである。

（1）式を、空間ステップ Δx 、時間ステップを Δt として、空間微分と時間微分を差分化すると、

$$\frac{\partial^2 \varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2} = \frac{\varphi(x_l+\Delta x,t_n) - 2\varphi(x_l,t_n) + \varphi(x_l-\Delta x,t_n)}{(\Delta x)^2}$$

$$\frac{\partial \varphi(x_l,t_n)}{\partial t} = \frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t) - \varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}$$

であるから、差分化されたシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t) - \varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi(x_l+\Delta x,t_n) - 2\varphi(x_l,t_n) + \varphi(x_l-\Delta x,t_n)}{(\Delta x)^2} + V(x_l)\varphi(x_l,t_n)$$

となる。

この差分化されたシュレーディンガー方程式を、クランク・ニコルソンの陰解法を用いて数値計算を行う。クランク・ニコルソンの陰解法は、陽解法に比べ数値計算では解が安定していることで知られているため、よく用いられる。

このように、コンピューター・シミュレーション方法として、粒子を表す波束の時間発展を時間に依存する差分化されたシュレーディンガー方程式を数値計算する方法がよく用いられる。波束の運動を計算することにより、トンネル効果の動特性が調べられている。(Goldberg, Schey, Schwartz, 1967)

我々は、今まで二重障壁構造でのトンネル効果の動特性について研究を行ってきた。(Inaba, Kurosawa, Okuda, 1991; Inaba, Nakagawa, Kurosawa, Okuda, 1991) 本節で述べたように、時間に依存するシュレーディンガー方程式を差分法を用いて解いている。

３．量子格子ガス法による時間に依存するシュレーディンガー方程式の計算方法

第２節では、時間に依存するシュレーディンガー方程式を差分化することにより数値計算することを述べた。本節では、支配方程式ではなく、単純な近接格子（セル）間の遷移関係（伝播則）の繰り返しにより計算を行うセル・オートマトンを利用する方法を述べる。

前節で述べたように、一般に物理現象の解析には、支配方程式によりモデル化し、解析を行う方法が用いられる。しかし、複雑な系の解を求めるには非常に多くの計算が必要となる。そのため、計算機の資源が膨大に必要となる。

そのような問題に対処するため、複雑系とよばれる解析困難な複雑な現象に対して構成要素間の相互作用に注目してモデル化する方法が用いられ始めている。

そのひとつの方法として、セル・オートマトン法がある。そこでは、構成要素間同士の相互作用に注目して、モデル化をする。単純な相互作用によって、複雑な現象を創発する方法である。

セル・オートマトン法では、簡単なセル間の局所的相互作用から複雑な現象を再現できる特徴がある。さらに、セル・オートマトン法では単純なセル間の伝播則で計算ができることにより、シミュレーション・プログラムの並列化が容易になると考えられる。さらに、多粒子系へ拡張しても、計算時間が粒子数に依存しないため、計算量があまり増えないと考えられる。

ここでは、セル・オートマトン法の一つである量子格子ガス法を用いる。量子格子ガス法では、隣接相互作用の組み合わせにより現象を創発する。単純なルールの組み合わせにより、自発的に系の時間発展を追跡することができる。

量子格子ガス法で計算される１次元の波束の伝播則が Yepez らにより提案され(Yepez, Boghosian, 2002)、酒井らにより半導体量子構造への活用が試みられた。(酒井・鎌倉・谷口, 2004)

そのアルゴリズムに従い、系の波動関数$\varphi(x,t)$の時間発展を計算する。

空間方向の$+x$方向に進行する波動関数を$\varphi_1(x,t)$、$-x$方向に進行する波動関数を$\varphi_2(x,t)$とする。全体の波動関数は$\varphi(x,t) = \varphi_1(x,t) + \varphi_2(x,t)$である。また、１次元空間を$L$個の格子点に分割する。空間ステップ間隔$\delta x$と時間ステップ間隔$\delta t$とすると、$x_l = l \cdot \delta x$、$t_n = n \cdot \delta t$である。

量子格子ガス法で計算される波束の伝播則は以下の 8 ステップで表される。これらのステップを繰り返すことにより、波束の運動を計算することができる。

Step 1

$$\varphi_1(x_l,t_{n+1}) = A^*\varphi_1(x_l,t_n) + A\varphi_2(x_l,t_n)$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+1}) = A\varphi_1(x_l,t_n) + A^*\varphi_2(x_l,t_n)$$

Step 2

$$\varphi_1(x_l,t_{n+2})=\varphi_1(x_{l-1},t_{n+1})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+2})=\varphi_2(x_l,t_{n+1})$$

Step 3

$$\varphi_1(x_l,t_{n+3})=A^*\varphi_1(x_l,t_{n+2})+A\varphi_2(x_l,t_{n+2})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+3})=A\varphi_1(x_l,t_{n+2})+A^*\varphi_2(x_l,t_{n+2})$$

Step 4

$$\varphi_1(x_l,t_{n+4})=\varphi_1(x_{l+1},t_{n+3})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+4})=\varphi_2(x_l,t_{n+3})$$

Step 5

$$\varphi_1(x_l,t_{n+5})=A^*\varphi_1(x_l,t_{n+4})+A\varphi_2(x_l,t_{n+4})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+5})=A\varphi_1(x_l,t_{n+4})+A^*\varphi_2(x_l,t_{n+4})$$

Step 6

$$\varphi_1(x_l,t_{n+6})=\varphi_1(x_l,t_{n+5})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+6})=\varphi_2(x_{l+1},t_{n+5})$$

Step 7

$$\varphi_1(x_l,t_{n+7})=A^*\varphi_1(x_l,t_{n+6})+A\varphi_2(x_l,t_{n+6})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+7})=A\varphi_1(x_l,t_{n+6})+A^*\varphi_2(x_l,t_{n+6})$$

Step 8

$$\varphi_1(x_l,t_{n+8})=\varphi_1(x_l,t_{n+7})$$
$$\varphi_2(x_l,t_{n+8})=\varphi_2(x_{l-1},t_{n+7})$$

ここで、$A=\dfrac{1}{2}+\dfrac{1}{2}i$ である。

計算の際の空間ステップ間隔δx と時間ステップ間隔δt の間には、$(\delta x)^2/\delta t=\hbar/m$ の関係がある。

付録で詳しく述べるように、この伝搬則から得られる差分方程式は、空間ステップ間隔と時間ステップ間隔の無限小極限をとると偏微分方程式の形に表すことができる。この偏微分方程式は時間に依存するシュレーディンガー方程式（1）式に一致している。(Yepez, Boghosian, 2002; 酒井・鎌倉・谷口, 2004)

また、外場ポテンシャル$V(x)$が存在するとき、その影響は$\varphi(x,t)\to e^{-iV(x)\Delta t}\varphi(x,t)$とすることで取り入れることができる。ここで、$\Delta t=t_{n+8}-t_n$ である。これについても付録で詳しく述べる。

４．量子格子ガス法による共鳴トンネル効果の動特性の計算結果

トンネル効果の動特性を検討するため、粒子の初期状態での波動関数をガウス型波束とする。粒子の存在は確率的であるため、波束の存在確率は、中心が最も高く、広がりを持つガウス型分布をしていると考える。

共鳴トンネル効果の動特性を検討するため、粒子を表すガウス型波束を二重障壁構造へ入射させ、その波束の時間発展を計算することにより、共鳴トンネル効果の動特性をシミュレーションする。

波束はポテンシャル障壁の左側から入射する。そして、右側に一部が透過し、残りが左側に反射する。

図１に、計算に用いた１次元二重障壁構造を示す。

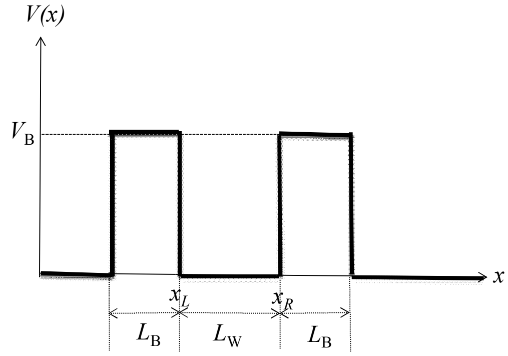

図1.　二重障壁構造ポテンシャル・プロファイル

L_B はポテンシャル障壁の幅、L_W は井戸幅である。ポテンシャル障壁の高さは、V_B であり、量子井戸内のポテンシャルエネルギーは 0 である。x_L と x_L はそれぞれ量子井戸の左端と右端の位置である。

量子格子ガス法で計算される１次元の波束の伝播則は、前節および付録に詳しく示してある。そのアルゴリズムに従い、粒子を表す波束の波動関数$\varphi(x,t)$の時間発展を計算する。

入射粒子を表すガウス型波束を

$$\varphi(x,0)=\frac{1}{\pi^{1/4}\sigma^{1/4}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2\right]\exp[ipx] \quad \cdot\cdot（2）$$

とする。波束は初期値として $x=x_0$ を中心とし、分散 σ のガウス型分布を持っている。この波束は、運動量 p で$+x$ 方向に運動している。

前節で述べた量子格子ガス法を用いて、波束の運動を計算した。波束の運動のシミュレーション結果の例を図２に示す。波束の存在確率$|\varphi(x,t)|^2$ を表している。

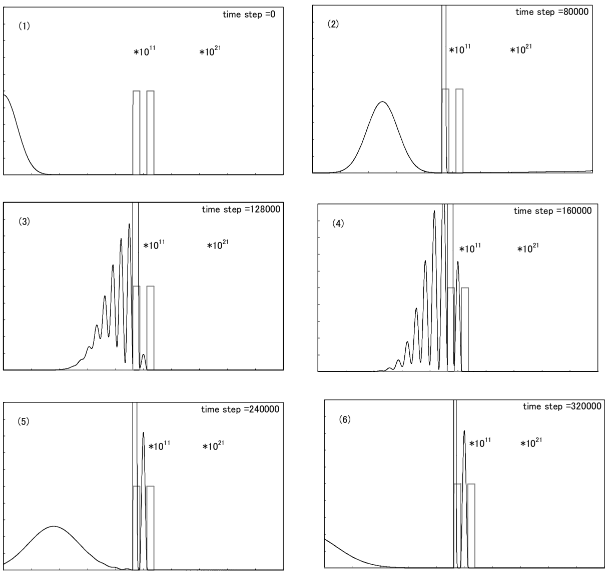

図２．波束の運動

波束の存在確率の分布の時間変化を表す。ポテンシャル障壁内の領域を 10^{11} 倍、障壁の右側を 10^{21} 倍で表している。今回の計算では、ポテンシャルの中心を x=0 としたとき、初期波束は中心 x_0=－1000、分散 σ=140、基底状態に対応した入射エネルギーになる運動量 p としたガウス型分布で計算を行った。

入射波束は障壁の左側より入射を始める。(図２(1))障壁の左側では、入射波と反射波の干渉により、大きな空間的振動がみられる。(図２(2)、(3)、(4))

さらに、入射波束の大部分は反射し、残りが量子井戸内にトンネルすることにより、量子井戸内に準安定な状態が形成される。(図２(3)、(4)、(5))

入射エネルギーが量子井戸の基底準位に対応する場合には、量子井戸内での準安定な状態の波束の存在確率分布が１個の腹を、ｎ番目の量子準位に対応する場合にはｎ個の腹を持つ。図２の入射エネルギーは量子井戸の基底準位に対応している。今回の計算では基底準位に対応する入射エネルギーで計算を行っている。

共鳴トンネル効果によるこの準安定な状態は大きくなる。(図２(4)　、(5))その後、量子井戸から障壁の両側へトンネルすることにより、ゆっくりと減衰することがわかる。(図２　(5)、(6))

量子格子ガス法で計算したこれらの結果は、差分法で得られた計算結果と全く同等である。

そのようなトンネル過程を評価するため、量子井戸内の粒子の存在確率の総和を

$$S(t)=\int_{x_L}^{x_R}\left|\varphi(x,t)\right|^2 dx \qquad \cdot\cdot\cdot(2)$$

と定義する。(Inaba,　Nakagawa, Kurosawa, Okuda, 1991)この量子井戸内の存在確率の変化で、トンネル過程を検討する。

$S(t)$ の計算例を図３に示す。

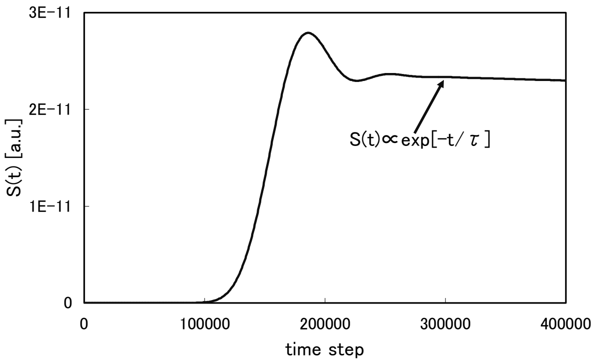

図３．$S(t)$の時間変化

波束の時間発展では、量子井戸内の粒子の存在確率の総和 $S(t)$ は上昇を始める。これは図２で示されているように、障壁に波束が入射し始めていることを表している。入射波は障壁の界面で反射するが、その一部が量子井戸内にトンネルし始めていると考えられる。

その後、$S(t)$ は急速に増加する。量子井戸内に波束の一部がトンネルするので、量子井戸内の存在確率が増加する。これにより準安定な状態の形成に対応する。

さらに時間が進むと $S(t)$ は増加を止め、減少を始める。障壁の左側からの波束の入射がなくなり、トンネル効果により量子井戸から左右にトンネルし、量子井戸内の存在確率が減少する。準安定な状態が減衰している。この減少は指数関数的であり、

$$S(t)\propto \exp(-t/\tau) \qquad \cdot\cdot\cdot(3)$$

の関係にある。このときの時定数 τ を準安定な状態の寿命と定義する。これは量子井戸内から粒子がトンネルする時間の目安になる。(Inaba,　Nakagawa, Kurosawa, Okuda, 1991)

いくつかの二重障壁構造における準安定な状態の寿命 τ の計算結果を表１に示す。障壁幅 L_B を 50、壁高 V_B を 0.005 とした場合、井戸幅(L_W)を 30～70 に変化させた場合の $S(t)$ の時間変化を計算した。その結果から（３）式を用いて寿命 τ を求めた。

表１　二重障壁構造と寿命 τ の関係(井戸幅 L_W 依存性)

障壁幅 L_B	井戸幅 L_W	障壁高 V_B	寿命 τ
50	30	0.005	1.77×10^6
50	40	0.005	3.66×10^6
50	50	0.005	6.53×10^6
50	60	0.005	1.08×10^7
50	70	0.005	1.62×10^7

表１から、井戸幅 L_W が大きくなるに従い、寿命 τ は増加することがわかった。

トンネルによる準安定状態の寿命は実効的なポテンシャル障壁の大きさに影響を受けると考えられている。

量子井戸内に一旦形成された準安定な状態はトンネルによって減衰する。井戸幅 L_W が大きくなると、量子井戸内の基底準位がわずかに低くなる。それに対応する入射エネルギーがわずかに小さくなる。入射エネルギーが小さくなることで、その入射エネルギーに対する実効的なポテンシャル障壁は大きくなり、トンネルしにくくなるため寿命が増加すると考えられる。

５．おわりに

セル・オートマトンの一種である格子ガス法を量子力学的に拡張した量子格子ガス法により、共鳴トンネル効果の動特性の計算を行った。量子格子ガス法の計算は、時間に依存するシュレーディンガー方程式の計算と同等であることから、量子力学の計算法の一つとして量子格子ガス法を用いることができる。

量子格子ガス法は並列計算化が容易である。さらに、多体問題などでは計算時間が粒子数に依存しないため効率的に行うことができる可能性が指摘されている。そのため、大規模計算を行う際のひとつの候補となりうる。特に、将来量子コンピューターが実現した際に、量子コンピューターによる大規模計算の有効な方法の一つの候補である。

本論文では、この量子格子ガス法を用いて、二重障壁構造についてシミュレーションを行い、共鳴トンネル効果の動特性について検討を行った。

参考文献

加藤恭義・光成友孝・築山洋. 1998. セルオートマトン法―複雑系の自己組織化と超並列処理―. *森北出版*.

酒井敦・鎌倉良成・谷口研二. 2004. 量子格子気体法によるデバイス内部の電子波解析. *信学技報*. SDM104(324): 39-44.

蔦原道久・高田尚樹・片岡武. 1999. 格子気体法・格子ボルツマン法―新しい数値流体力学の手法―. *コロナ社*.

Bruce M. Boghosian, Washington Taylor IV. 1998. A Quantum Lattice-Gas Models for the Many-Particle Schroedinger Equation in d Dimension. *Phys. Rev.*. E57: 54-716.

A. Goldberg, H. M. Schey, J. L. Schwartz. 1967. Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena. *Am. J. Phys.*. 35(3): 177-186.

H. Inaba, K. Kurosawa, M. Okuda. 1991. Tunneling Time Calculation for Double-Barrier Quantum Well with Trapezoidal Potential Profile. *ICICE Trans.*. E74(5): 1310-1313.

H. Inaba, J. Nakagawa, K. Kurosawa, M. Okuda. 1991. Dynamics of Resonant Tunneling in Double-Barrier with Trapezoidal Potential Profile. *Jpn. J. Appl. Phys.*. 30(4A): L544-L546.

Atsushi Sakai, Yoshinari Kamakura, Kenji Taniguchi. 2004. Quantum Lattice-Gas Automata Simulation of Electronic Wave Propagation in Nanostructure. *J. Comput. Electron.* 3: 449-452.

Jeffrey Yepez, Bruce Boghosian. 2002. An efficient and accurate quantum lattice-gas model for the many-body Schroedinger wave equation. *Comput. Phys. Commun.* 146: 280-294.

付録

ここでは、第３節で述べた量子格子ガス法の計算手法に従い、実際の計算を行う。実際に、Step1～Step8 までの計算を行い、量子格子ガス法の計算と差分法の計算が同等であることを示す。

Step 1

$$\varphi_1(x_l,t_{n+1}) = A^*\varphi_1(x_l,t_n) + A\varphi_2(x_l,t_n), \qquad \varphi_2(x_l,t_{n+1}) = A\varphi_1(x_l,t_n) + A^*\varphi_2(x_l,t_n)$$

Step 2

$$\varphi_1(x_l,t_{n+2}) = \varphi_1(x_{l-1},t_{n+1}) = A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A\varphi_2(x_{l-1},t_n)$$

$$\varphi_2(x_l,t_{n+2}) = \varphi_2(x_l,t_{n+1}) = A\varphi_1(x_l,t_n) + A^*\varphi_2(x_l,t_n)$$

Step 3

$$\begin{aligned}\varphi_1(x_l,t_{n+3}) &= A^*\varphi_1(x_l,t_{n+2}) + A\varphi_2(x_l,t_{n+2}) = A^*\{A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A\varphi_2(x_{l-1},t_n)\} + A\{A\varphi_1(x_l,t_n) + A^*\varphi_2(x_l,t_n)\}\\ &= (A^*)^2\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^*A\varphi_2(x_{l-1},t_n) + A^2\varphi_1(x_l,t_n) + AA^*\varphi_2(x_l,t_n)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varphi_2(x_l,t_{n+3}) &= A\varphi_1(x_l,t_{n+2}) + A^*\varphi_2(x_l,t_{n+2}) = A\{A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A\varphi_2(x_{l-1},t_n)\} + A^*\{A\varphi_1(x_l,t_n) + A^*\varphi_2(x_l,t_n)\}\\ &= AA^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^2\varphi_2(x_{l-1},t_n) + A^*A\varphi_1(x_l,t_n) + (A^*)^2\varphi_2(x_l,t_n)\end{aligned}$$

Step 4

$$\varphi_1(x_l,t_{n+4}) = \varphi_1(x_{l+1},t_{n+3}) = (A^*)^2\varphi_1(x_l,t_n) + A^*A\varphi_2(x_l,t_n) + A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n) + AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)$$

$$\varphi_2(x_l,t_{n+4}) = \varphi_2(x_l,t_{n+3}) = AA^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^2\varphi_2(x_{l-1},t_n) + A^*A\varphi_1(x_l,t_n) + (A^*)^2\varphi_2(x_l,t_n)$$

Step 5

$$\begin{aligned}\varphi_1(x_l,t_{n+5}) &= A^*\{(A^*)^2\varphi_1(x_l,t_n) + A^*A\varphi_2(x_l,t_n) + A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n) + AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)\}\\ &\quad + A\{AA^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^2\varphi_2(x_{l-1},t_n) + A^*A\varphi_1(x_l,t_n) + (A^*)^2\varphi_2(x_l,t_n)\}\\ &= (A^*)^3\varphi_1(x_l,t_n) + (A^*)^2A\varphi_2(x_l,t_n) + A^*A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n) + A^*AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n))(x_l,t_n)\\ &\quad + A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n) + AA^*A\varphi_1(x_l,t_n) + A(A^*)^2\varphi_2(x_l,t_n)_1\\ &= \{(A^*)^3 + AA^*A\}\varphi_1(x_l,t_n) + \{(A^*)^2A + A(A^*)^2\}\varphi_2(x_l,t_n) + A^*A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n) + A^*AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)\\ &\quad + A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varphi_2(x_l,t_{n+5}) &= A\varphi_1(x_l,t_{n+4}) + A^*\varphi_2(x_l,t_{n+4})\\ &= A\{(A^*)^2\varphi_1(x_l,t_n) + A^*A\varphi_2(x_l,t_n) + A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n) + AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)\}\\ &\quad + A^*\{AA^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^2\varphi_2(x_{l-1},t_n) + A^*A\varphi_1(x_l,t_n) + (A^*)^2\varphi_2(x_l,t_n)\}\\ &= A(A^*)^2\varphi_1(x_l,t_n) + AA^*A\varphi_2(x_l,t_n) + A^3\varphi_1(x_{l+1},t_n) + A^2A^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)\\ &\quad + A^*AA^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^*A^2\varphi_2(x_{l-1},t_n) + (A^*)^2A\varphi_1(x_l,t_n) + (A^*)^3\varphi_2(x_l,t_n)\\ &= \{A(A^*)^2 + (A^*)^2A\}\varphi_1(x_l,t_n) + \{AA^*A + (A^*)^3\}\varphi_2(x_l,t_n) + A^3\varphi_1(x_{l+1},t_n) + A^2A^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)\\ &\quad + A^*AA^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^*A^2\varphi_2(x_{l-1},t_n)\end{aligned}$$

Step 6

$$\begin{aligned}\varphi_1(x_l,t_{n+6}) &= \varphi_1(x_l,t_{n+5})\\ &= \{(A^*)^3 + AA^*A\}\varphi_1(x_l,t_n) + \{(A^*)^2A + A(A^*)^2\}\varphi_2(x_l,t_n) + A^*A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n) + A^*AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)\\ &\quad + A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n) + A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\varphi_2(x_l,t_{n+6}) &= \varphi_2(x_{l+1},t_{n+5}) \\
&= \left\{A(A^*)^2+(A^*)^2A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{AA^*A+(A^*)^3\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n)+A^3\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^2A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n) \\
&\quad +A^*AA^*\varphi_1(x_l,t_n)+A^*A^2\varphi_2(x_l,t_n)
\end{aligned}
$$

Step 7

$$
\begin{aligned}
\varphi_1(x_l,t_{n+7}) &= A^*\varphi_1(x_l,t_{n+6})+A\varphi_2(x_l,t_{n+6}) \\
&= A^*\Big[\left\{(A^*)^3+AA^*A\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{(A^*)^2A+A(A^*)^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n)+A^*A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n)+A^*AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)\Big] \\
&\quad +A\Big[\left\{A(A^*)^2+(A^*)^2A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{AA^*A+(A^*)^3\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n)+A^3\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^2A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n) \\
&\quad +A^*AA^*\varphi_1(x_l,t_n)+A^*A^2\varphi_2(x_l,t_n)\Big] \\
&= \left\{(A^*)^4+A^*AA^*A\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{(A^*)^3A+A^*A(A^*)^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n)+(A^*)^2A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n)+(A^*)^2AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^*A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^*A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)+\left\{A^2(A^*)^2+A(A^*)^2A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{A^2A^*A+A(A^*)^3\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^4\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^3A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n)+AA^*AA^*\varphi_1(x_l,t_n)+AA^*A^2\varphi_2(x_l,t_n) \\
&= \left\{(A^*)^4+A^*AA^*A+AA^*AA^*\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{(A^*)^3A+A^*A(A^*)^2+AA^*A^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n) \\
&\quad +\left\{(A^*)^2A^2+A^2(A^*)^2+A(A^*)^2A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{(A^*)^2AA^*+A^2A^*A+A(A^*)^3\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^*A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^*A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)+A^4\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^3A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\varphi_2(x_l,t_{n+7}) &= A\varphi_1(x_l,t_{n+6})+A^*\varphi_2(x_l,t_{n+6}) \\
&= A\Big[\left\{(A^*)^3+AA^*A\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{(A^*)^2A+A(A^*)^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n)+A^*A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n)+A^*AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)\Big] \\
&\quad +A^*\Big[\left\{A(A^*)^2+(A^*)^2A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{AA^*A+(A^*)^3\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n)+A^3\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^2A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n) \\
&\quad +A^*AA^*\varphi_1(x_l,t_n)+A^*A^2\varphi_2(x_l,t_n)\Big] \\
&= \left\{A(A^*)^3+A^2A^*A\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{A(A^*)^2A+A^2(A^*)^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n)+AA^*A^2\varphi_1(x_{l+1},t_n)+AA^*AA^*\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^3A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^4\varphi_2(x_{l-1},t_n)+\left\{A^*A(A^*)^2+(A^*)^3A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{A^*AA^*A+(A^*)^4\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^*A^3\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^*A^2A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n)+(A^*)^2AA^*\varphi_1(x_l,t_n)+(A^*)^2A^2\varphi_2(x_l,t_n) \\
&= \left\{A(A^*)^3+A^2A^*A+(A^*)^2AA^*\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{A(A^*)^2A+A^2(A^*)^2+(A^*)^2A^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n) \\
&\quad +\left\{AA^*A^2+A^*A(A^*)^2+(A^*)^3A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{AA^*AA^*+A^*AA^*A+(A^*)^4\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^3A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^4\varphi_2(x_{l-1},t_n)+A^*A^3\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^*A^2A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n)
\end{aligned}
$$

Step 8

$$
\begin{aligned}
\varphi_1(x_l,t_{n+8}) &= \varphi_1(x_l,t_{n+7}) \\
&= \left\{(A^*)^4+A^*AA^*A+AA^*AA^*\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{(A^*)^3A+A^*A(A^*)^2+AA^*A^2\right\}\varphi_2(x_l,t_n) \\
&\quad +\left\{(A^*)^2A^2+A^2(A^*)^2+A(A^*)^2A\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{(A^*)^2AA^*+A^2A^*A+A(A^*)^3\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n) \\
&\quad +A^*A^2A^*\varphi_1(x_{l-1},t_n)+A^*A^3\varphi_2(x_{l-1},t_n)+A^4\varphi_1(x_{l+2},t_n)+A^3A^*\varphi_2(x_{l+2},t_n)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\varphi_2(x_l,t_{n+8}) &= \varphi_2(x_{l-1},t_{n+7}) \\
&= \left\{A(A^*)^3+A^2A^*A+(A^*)^2AA^*\right\}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\left\{A(A^*)^2A+A^2(A^*)^2+(A^*)^2A^2\right\}\varphi_2(x_{l-1},t_n) \\
&\quad +\left\{AA^*A^2+A^*A(A^*)^2+(A^*)^3A\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{AA^*AA^*+A^*AA^*A+(A^*)^4\right\}\varphi_2(x_l,t_n) \\
&\quad +A^3A^*\varphi_1(x_{l-2},t_n)+A^4\varphi_2(x_{l-2},t_n)+A^*A^3\varphi_1(x_{l+1},t_n)+A^*A^2A^*\varphi_2(x_{l+1},t_n)
\end{aligned}
$$

ここで、$A=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}i$ より、$(A^*)^4=-\frac{1}{4}$、$(A^*)^3A=(A^*)^2AA^*=A^*A(A^*)^2=A(A^*)^3=-\frac{i}{4}$、

$(A^*)^2A^2=A^*AA^*A=A^*A^2A^*=AA^*AA^*=A^2(A^*)^2=\frac{1}{4}$、$A^*A^3=AA^*A^2=A^2A^*A=A^3A^*=\frac{i}{4}$、$A^4=-\frac{1}{4}$ であるから、

$$\varphi_1(x_l,t_{n+8})=\left\{-\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{-\frac{i}{4}-\frac{i}{4}+\frac{i}{4}\right\}\varphi_2(x_l,t_n)+\left\{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\right\}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\left\{-\frac{i}{4}+\frac{i}{4}-\frac{i}{4}\right\}\varphi_2(x_{l+1},t_n)$$
$$+\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l-1},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l+2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l+2},t_n)$$
$$=\frac{1}{4}\varphi_1(x_l,t_n)-\frac{i}{4}\varphi_2(x_l,t_n)+\frac{3}{4}\varphi_1(x_{l+1},t_n)-\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l-1},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l+2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l+2},t_n)$$

$$\varphi_2(x_l,t_{n+8})=\left\{-\frac{i}{4}+\frac{i}{4}-\frac{i}{4}\right\}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\left\{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\right\}\varphi_2(x_{l-1},t_n)+\left\{\frac{i}{4}-\frac{i}{4}-\frac{i}{4}\right\}\varphi_1(x_l,t_n)+\left\{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}-\frac{1}{4}\right\}\varphi_2(x_l,t_n)$$
$$+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l-2},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l-2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l+1},t_n)$$
$$=-\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\frac{3}{4}\varphi_2(x_{l-1},t_n)-\frac{i}{4}\varphi_1(x_l,t_n)+\frac{1}{4}\varphi_2(x_l,t_n)+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l-2},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l-2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l+1},t_n)$$

である。よって、Step 1 ～ Step 8 の結果より、求める t_{n+8} での波動関数は

$$\varphi(x_l,t_{n+8})=\varphi_1(x_l,t_{n+8})+\varphi_2(x_l,t_{n+8})$$
$$=\frac{1}{4}\varphi_1(x_l,t_n)-\frac{i}{4}\varphi_2(x_l,t_n)+\frac{3}{4}\varphi_1(x_{l+1},t_n)-\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l-1},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l+2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l+2},t_n)$$
$$-\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\frac{3}{4}\varphi_2(x_{l-1},t_n)-\frac{i}{4}\varphi_1(x_l,t_n)+\frac{1}{4}\varphi_2(x_l,t_n)+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l-2},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l-2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l+1},t_n)$$
$$=\frac{1-i}{4}\varphi_1(x_l,t_n)+\frac{1-i}{4}\varphi_2(x_l,t_n)+\frac{3+i}{4}\varphi_1(x_{l+1},t_n)+\frac{1-i}{4}\varphi_2(x_{l+1},t_n)+\frac{1-i}{4}\varphi_1(x_{l-1},t_n)+\frac{3+i}{4}\varphi_2(x_{l-1},t_n)$$
$$-\frac{1}{4}\varphi_1(x_{l+2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_2(x_{l+2},t_n)+\frac{i}{4}\varphi_1(x_{l-2},t_n)-\frac{1}{4}\varphi_2(x_{l-2},t_n)$$

となる。

平衡状態では　$\varphi_1(x_l,t_{n+8})=\varphi_2(x_l,t_{n+8})=\frac{1}{2}\varphi(x_l,t_{n+8})$　であるから、

$$\varphi(x_l,t_{n+8})=\frac{1-i}{4}\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l+2},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l-2},t_n) \quad \cdots(\mathrm{A})$$

となる。$\Delta t=t_{n+8}-t_n$　より　$t_{n+8}=t_n+\Delta t$ であるから、

$$\varphi(x_l,t_{n+8})-\varphi(x_l,t_n)=\frac{1}{2}\varphi(x_{l+1},t_n)-\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l+2},t_n)+\frac{1-i}{4}\varphi(x_l,t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l-2},t_n)$$

$$\frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t)-\varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}\Delta t=\frac{1}{2}\frac{\varphi(x_{l+1},t_n)-2\varphi(x_l,t_n)+\varphi(x_{l-1},t_n)}{(\Delta x)^2}(\Delta x)^2-\frac{1-i}{8}\frac{\varphi(x_{l+2},t_n)+2\varphi(x_l,t_n)-\varphi(x_{l-2},t_n)}{(\Delta x)^2}(\Delta x)^2$$

$x_{n+1}=x_n+\Delta x$ 、$x_{n-1}=x_n-\Delta x$ 、$x_{n+2}=x_n+2\Delta x$ 、$x_{n-2}=x_n-2\Delta x$　であるから、

$$\frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t)-\varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}\Delta t=\frac{1}{2}\frac{\varphi(x_l+\Delta x,t_n)-2\varphi(x_l,t_n)+\varphi(x_l-\Delta x,t_n)}{(\Delta x)^2}(\Delta x)^2-\frac{1-i}{2}\frac{\varphi(x_l+2\Delta x,t_n)+2\varphi(x_l,t_n)-\varphi(x_l-2\Delta x,t_n)}{(2\Delta x)^2}(\Delta x)^2$$

$$\frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t)-\varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}=\frac{1}{2}\frac{\varphi(x_l+\Delta x,t_n)-2\varphi(x_l,t_n)+\varphi(x_l-\Delta x,t_n)}{(\Delta x)^2}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}-\frac{1-i}{2}\frac{\varphi(x_l+2\Delta x,t_n)+2\varphi(x_l,t_n)-\varphi(x_l-2\Delta x,t_n)}{(2\Delta x)^2}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}$$

$(\Delta x)^2/\Delta t=\hbar/m$　と考えられるから、

$$\frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t)-\varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m}\frac{\varphi(x_l+\Delta x,t_n)-2\varphi(x_l,t_n)+\varphi(x_l-\Delta x,t_n)}{(\Delta x)^2}-\frac{1-i}{2}\frac{\hbar}{m}\frac{\varphi(x_l+2\Delta x,t_n)+2\varphi(x_l,t_n)-\varphi(x_l-2\Delta x,t_n)}{(2\Delta x)^2}$$

$\Delta x\to 0$ 、$2\Delta x\to 0$ 、$\Delta t\to 0$ の無限小極限をとると、

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{\varphi(x_l+\Delta x,t_n)-2\varphi(x_l,t_n)+\varphi(x_l-\Delta x,t_n)}{(\Delta x)^2}=\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}、\lim_{2\Delta x \to 0} \frac{\varphi(x_l+2\Delta x,t_n)-2\varphi(x_l,t_n)+\varphi(x_l-2\Delta x,t_n)}{(2\Delta x)^2}=\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}、$$

$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\varphi(x_l,t_n+\Delta t)-\varphi(x_l,t_n)}{\Delta t}=\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}$ であるから、差分方程式（A）は次の微分方程式に近似できる。

$\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}-\frac{1-i}{2}\frac{\hbar}{m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}$ より、$\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}$、よって、$i\hbar\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}$

となり、時間に依存するシュレーディンガー方程式（1）のポテンシャルエネルギーのない形と一致する。得られた差分方程式（A）は、無限小極限で時間に依存するシュレーディンガー方程式に一致する。つまり、量子格子ガス法の計算アルゴリズム Step 1～Step 8 は、シュレーディンガー方程式と同じ計算をしていることになる。

量子系に、ポテンシャルエネルギー$V(x)$が存在する場合には、

$\varphi(x,t)\to e^{-i\frac{V(x)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x,t)$ とすればよいので、$\varphi(x_l,t_n)\to e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_l,t_n)$である。したがって、（A）式は、

$$\varphi(x_l,t_{n+8})=\frac{1-i}{4}e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}e^{-i\frac{V(x_{+1l})}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{2}e^{-i\frac{V(x_{l-1})}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}e^{-i\frac{V(x_{l+2})}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l+2},t_n)-\frac{1-i}{8}e^{-i\frac{V(x_{l-2})}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l-2},t_n)$$

ここで、$V(x_{l+1})\Delta t=V(x_l)\Delta t+\Delta t\Delta x\left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x=x_l}+O(\Delta t\Delta x^2)$ である。

第２項のオーダーは、$\Delta t\Delta x\approx\Delta x^3$ であるから、Δx^2 以上のオーダーの項を無視するから、$V(x_{l+1})\Delta t=V(x_l)\Delta t$ とおける。同様に、$V(x_{l-1})\Delta t=V(x_l)\Delta t$、$V(x_{l+2})\Delta t=V(x_l)\Delta t$、$V(x_{l-2})\Delta t=V(x_l)\Delta t$ とおけるから、

$$\varphi(x_l,t_{n+8})=\frac{1-i}{4}e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{2}e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_{l+2},t_n)-\frac{1-i}{8}e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\hbar\Delta t}\varphi(x_{l-2},t_n)$$

よって、$e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\varphi(x_l,t_{n+8})=\frac{1-i}{4}\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l+2},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l-2},t_n)$

$e^{-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}\hbar$ をΔtのべき級数に展開し、Δt^2以上のオーダーの項を無視すると、$e^{i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t}=1+i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t$ であるから、

$$\left(1+i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t\right)\varphi(x_l,t_{n+8})=\frac{1-i}{4}\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l+2},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l-2},t_n)$$

$$\varphi(x_l,t_{n+8})+i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t\varphi(x_l,t_{n+8})=\frac{1-i}{4}\varphi(x_l,t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l+1},t_n)+\frac{1}{2}\varphi(x_{l-1},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l+2},t_n)-\frac{1-i}{8}\varphi(x_{l-2},t_n) \quad \cdot\cdot\cdot (\mathrm{B})$$

となり、（B）式は（A）式の左辺に $i\frac{V(x_l)}{\hbar}\Delta t\varphi(x_l,t_{n+8})$ の項が加わった形である。

（B）式において無限小極限をとると、$i\frac{V(x_l)}{\hbar}\varphi(x_l,t_n)+\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}$ となるから、

$\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}-i\frac{V(x_l)}{\hbar}\varphi(x_l,t_n)$、よって、$i\hbar\frac{\partial\varphi(x_l,t_n)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x_l,t_n)}{\partial x^2}+V(x_l)\varphi(x_l,t_n)$ となり、（B）式は、無限小極限でポテンシャルが存在する場合のシュレーディンガー方程式（1）と一致する。

以上のことから量子格子ガス法において、ポテンシャルエネルギー $V(x)$ は、波動関数$\varphi(x,t)$に $\exp\left(-i\frac{V(x)}{\hbar}\Delta t\right)$ を掛けることで導入できる。