

## Rigged QED に基づく原子核・電子の量子状態の時間発展

(京大院・工) 瀬波 大土, 宮里 敏秀, 高田 崇二郎, 池田 裕治, 立花 明知

## Evolution of electron and nucleus fields based on Rigged QED

(Kyoto Univ.) Masato Senami, Toshihide Miyazato, Sojiro Takada, Yuji Ikeda, Akitomo Tachibana

QED にゲージ不変性を保った形で原子核を追加した Rigged QED[2] に基づいて系の時間発展を調べる計算コード QEDynamics[1] の開発を行っている。これまで、QED は摂動計算を用いた自由粒子の散乱過程や磁気双極子の予言等で非常に大きな成功をもたらしている。ただし、それらの成功は自由粒子が漸近場として存在するとの仮定が非常に良い場合に限定されている。しかし、原子や分子中の電子や原子核は束縛状態としてしか記述できない。束縛状態の記述については、これまでベータ・サルピーターの方法や NRQED[3] による記述等があり一定の成果を上げているが、まだまだ満足のいく段階に達していない。

そのような状況を踏まえて、我々は場の理論の枠組みで束縛状態の電子・原子核に加えて光子も共に生成消滅演算子で記述して時間発展を取り扱う計算コードの開発に取り組んでいる。本研究では電子と原子核は 2 成分シュレディンガー場として記述することとする、この枠組みは Primary Rigged QED と呼ばれている。ローレンツ対称性は用いる Lagrangian の展開項を無限に取り入れることにより回復できる。電子・原子核場の時間発展は Heisenberg 描像に基づいて生成・消滅演算子の時間発展として記述される。それぞれ、 $\hat{\Psi}$ ,  $\hat{\chi}$  として以下のようにあらわす。

$$\hat{\Psi}(t, \vec{x}) = \sum_m \hat{e}_m(t) \psi_m(\vec{x}), \quad (1)$$

$$\hat{\chi}_a(t, \vec{x}) = \sum_m \hat{f}_{am}(t) \chi_{am}(\vec{x}), \quad (2)$$

このとき、 $\hat{e}_m$ ,  $\hat{f}_{am}$  が電子・原子核の消滅演算子である。すなわち、電子・原子核の時間発展は生成消滅演算子の時間発展として記述される。光子の生成消滅演算子は、

$$\hat{A}^\mu(t, \vec{x}) = \hat{A}_{\text{rad}}^\mu(t, \vec{x}) + \hat{A}_A^\mu(t, \vec{x}) + \hat{A}_M^\mu(t, \vec{x}), \quad (3)$$

ここで  $\hat{A}_{\text{rad}}^\mu$  は輻射光子を、 $\hat{A}_{A,M}^\mu$  は系と外部環境の相互作用光子を表す。輻射光子は光子の生成消滅演算子  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  を用いて、

$$\hat{A}_{\text{rad}}^\mu(t, \vec{x}) = \frac{\sqrt{c}}{\pi\sqrt{2\hbar}} \sum_\sigma \int_k d^3\vec{k} \frac{1}{\sqrt{2k_0}} (\hat{a}(\vec{k}, \sigma) \epsilon^{\mu\nu} e^{-ik_\nu x^\nu/\hbar} + \hat{a}^\dagger(\vec{k}, \sigma) \epsilon^{*\mu\nu} e^{ik_\nu x^\nu/\hbar}), \quad (4)$$

とあらわされる。一方で  $\hat{A}_{A,M}^\mu$  は電子・原子核の生成消滅演算子により展開される。

$$\hat{A}_{0A,M}(t, \vec{x}) = Z_e e \int_{A,M} d^3\vec{s} \frac{\hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\Psi}(t, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|} + \sum_a Z_a e \int_{A,M} d^3\vec{s} \frac{\hat{\chi}_a^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\chi}_a(t, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|}, \quad (5)$$

$$\hat{A}_{A,M}(t, \vec{x}) = \frac{1}{c} \int_{A,M} d^3\vec{s} \frac{\vec{j}_{eT}(u, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|} + \frac{1}{c} \int_{A,M} d^3\vec{s} \frac{\vec{j}_{NT}(u, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|}, \quad (6)$$

ここで  $u = t - |\vec{r} - \vec{s}|/c$  は遅延効果を表している。

電子・原子核場の時間発展は、以下の運動方程式に従って発展する。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{e}_m(t) = \sum_n \int d^3\vec{x} \psi_m^\dagger(\vec{x}) \left[ \frac{1}{2m_e} \left( -i\hbar \partial_i - \frac{Z_e e}{c} \hat{A}^i \right)^2 + Z_e e \hat{A}_0 \right] \psi_n(\vec{x}) \hat{e}_n(t), \quad (7)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{f}_{am}(t) = \sum_n \int d^3\vec{x} \chi_{am}^\dagger(\vec{x}) \left[ \frac{1}{2m_a} \left( -i\hbar \partial_i - \frac{Z_a e}{c} \hat{A}^i \right)^2 + Z_a e \hat{A}_0 \right] \chi_{an}(\vec{x}) \hat{f}_{an}(t). \quad (8)$$

この式は演算子を含む式であり、数値計算に取り入れるためには一工夫必要である。具体的には  $t = 0$  における演算子の多項式を用いて時刻  $t$  の演算子を展開し、その多項式の係数を各時刻で計算するという手法を用いる。それでも、実はこの時間発展を正しく計算することは容易ではない。時間発展のステップ数に応じて、多項式中の高次の項の組合せの寄与が入ってくるため、展開に用いなくてはならない多項式の種類が急速に増える。このため、1ステップを計算する際に要する演算時間も増大するし、それらの情報を記録するデータ自体も巨大に膨れ上がる。そのため本研究では同種粒子の演算子を3次まで、これより高次の項や異種粒子の演算子は期待値を取って定数によって置き換えるか無視するかして計算を行う。同種粒子の演算子を3次まで取り入れることによって交換相関の効果をシンプルな形で取り入れている。

相互作用がある系の時間発展の計算はある意味では、くりこみ定数を計算している側面がある。QEDでは漸近場を仮定してくりこみを行っていたが、本研究が対象とするような束縛状態に対する漸近場を先に定義することは不可能である。本研究では、くりこみとしてNRQEDと同じ方針を採用している[4]。具体的には、電子の質量より上のエネルギースケールでは、展開を打ち切ったNRQEDのLagrangianは有効ではないので、エネルギースケールにカットオフを用意する。そして、それ以上のスケールでは束縛状態を作る相互作用の効果は相対的に小さいとみなせるので、自由場に対するくりこみを使用するというものである。それに加えて、保存する物理量が保存されるように演算子を計算の各ステップで再定義するというを行っている。具体的には現段階の計算コードでは粒子数保存に基づいて波動関数くりこみを行っている。しかし、課題として場の演算子の交換・反交換関係が十分に保存せず、相互作用により乱れていくことがあげられる。今後、質量くりこみと結合定数くりこみを適切に取り込んで実行できる手法を開発して場の演算子がよく定義されたものとしていくことが急務である。

本発表では、水素やリチウムからなる簡単な原子や分子の系の時間発展計算についての計算結果について紹介する。光子との相互作用による電子・原子核の密度変化と展開に用いる基底関数への依存性、また特に原子核の質量数の違いにより、原子核はボーズ粒子であるかフェルミ粒子であるかが異なることによる時間発展の違いについても結果を示す。また密度変化の周波数成分について議論を行い、演算子の交換関係のずれの時間発展と相互作用の強さについての結果を示す。また、これらの結果を通じて、どのような近似が有効であるか議論する。特に電子・原子核の発展に伴う仮想光子の計算に用いる近似について紹介する。また、このような計算は非常に計算量や途中で蓄えるデータが多いものであるので、どのような取舍選択を行うかに注意が必要である。

## 参考文献

- [1] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, and A. Tachibana, (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>)
- [2] A. Tachibana, J. Mol. Modelling **11**, 301 (2005); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010); J. Math. Chem. **50**, 669 (2012).
- [3] W. E. Caswell and G. P. Lepage, Phys. Lett. **167B**, 437 (1986).
- [4] U. D. Jentschura and I. Nandori, Phys. Rev. A, **66**, 022114 (2002).