

4P130

Rigged QED に基づいた原子核場の量子統計性とその挙動の関係の理論的研究

(京大院工) 高田 崇二郎, 宮里 敏秀, 池田 裕治, 瀬波 大土, 立花 明知¹

Theoretical study of the relation between the statistics of nucleus fields and their behavior based on Rigged QED

(Department of Micro Engineering, Kyoto University) Sojiro Takada, Toshihide Miyazato, Yuji Ikeda, Masato Senami, Akitomo Tachibana

【研究の背景・目的】

近年、量子力学的現象が巨視的なスケールで観測できる Bose-Einstein 凝縮 (BEC) が脚光を浴びている。BEC は電子数が同じ原子であっても原子核がボソンかフェルミオンかにより、BEC を起こすかどうかが決まる。

また、QED (quantum electrodynamics) に基づく研究は自由粒子に対しては完成度の高いものとなっているが、束縛状態に対しては満足のいくものとなっていない。

本研究では、光子の放出・吸収が相互作用の本質的役割を果たすという立場に立ち、原子核も場の演算子として取り入れた立花の提唱する Rigged QED[1],[2] に基づき、束縛状態系の時間発展を計算するコードを開発し、原子核の統計性による影響を調べる。

【理論】

Rigged QED の中でも電子を 2 成分場で表したものを Primary Rigged QED と呼ぶ。本研究では非相対論の範囲内での議論を行う。非常に重い原子や非常にエネルギー状態の高い状況を考えない限りは非相対論の範囲内の議論で十分であるが、ラグランジアンの中に全ての展開項を用いればローレンツ対称性を回復することが知られている。また、電子・原子核について以下のようなハミルトニアンを用いた。

$$\begin{aligned} \text{電子: } \hat{H}_e &= \frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar\partial_i - \frac{Z_e e}{c} \hat{A}^i \right)^2 + Z_e e \hat{A}_0 \\ \text{原子核: } \hat{H}_a &= \frac{1}{2m_a} \left(-i\hbar\partial_i - \frac{Z_a e}{c} \hat{A}^i \right)^2 + Z_a e \hat{A}_0 \end{aligned}$$

実際の計算には Heisenberg 描像に基づき計算を行っており、任意の時間における演算子を、初期状態における演算子で展開している。種々の演算子は時間発展に伴い、展開に用いた演算子の次数が爆発的に増大するため、高次の演算子に対しては期待値を取ることで対処した。

また、原子核がボソンかフェルミオンかでそれが満たす交換関係・反交換関係は異なり、種々の物理量においてその統計性による違いを調べる。

【結果及び考察】

初期状態の原子の中心を点(x,y,z) = (0,0,±2.55) [bohr]に置いた 2 つのリチウム原子に対して、計算を行った。図 1、2 に原子核がボソン、フェルミオンそれぞれの場合についての結果をまとめ、それぞれについて初期状態における原子核密度と時刻 0.024、0.06、0.12[a.u.]における原子核密度の変化量を示した。

原子核がボソンの場合は図 1 (b)~(d)から、原子核の中心から外側へと密度が流れていく傾向が見て取れる。逆に、原子核がフェルミオンの場合は図 2 (b)~(d)から、原子核の中心へと密度が流れていく傾向が見てとれる。このように丁度反対方向への運動を引き起こす効果は交換相互作用によって作りだされたものと考えられる。

【今後の計画】

本研究では Rigged QED に基づき原子核がボソンかフェルミオンかの違いによりその挙動の違いを確認する事ができた。今後は、原子核を展開する際に用いる基底関数として、どのような関

数系を用いるべきか考察する。

また、現段階では交換関係・反交換関係が時間発展するにつれて、初期状態で満たしていた関係からずれを生じてしまっている。この事はどのように再規格化を行って行くべきかという議論と密接に関係している。

現在行っているのは全電子数・全原子核数の保存に基づいた再規格化であり、今後、物理量の再規格化をさらに改良する方法について模索する。

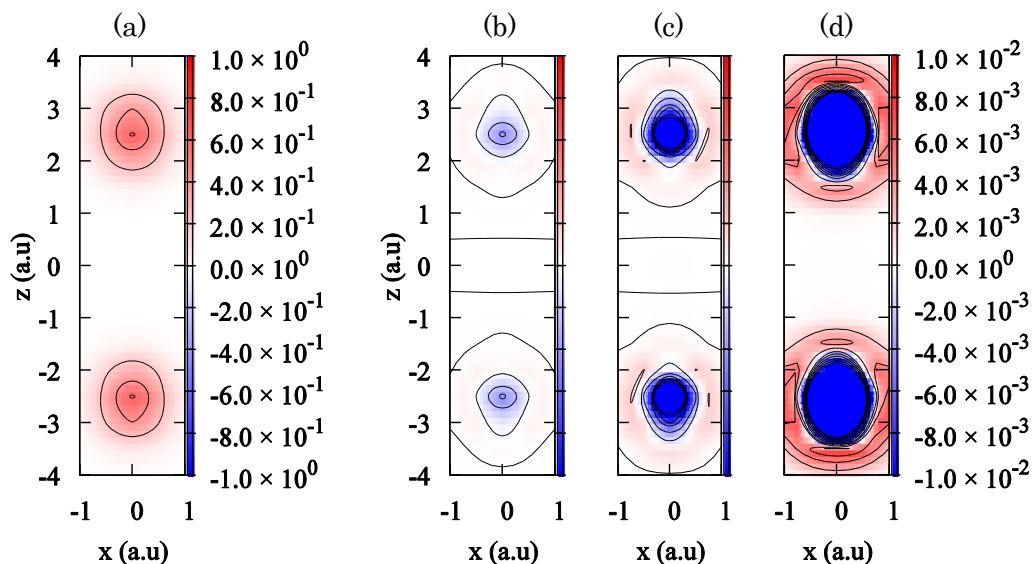


図1 原子核がボソンの場合

(a) 原子核密度の初期状態

(b)~(d) 左から時刻 0.024, 0.06, 0.12[a.u.]における原子核密度の初期状態からの変化量

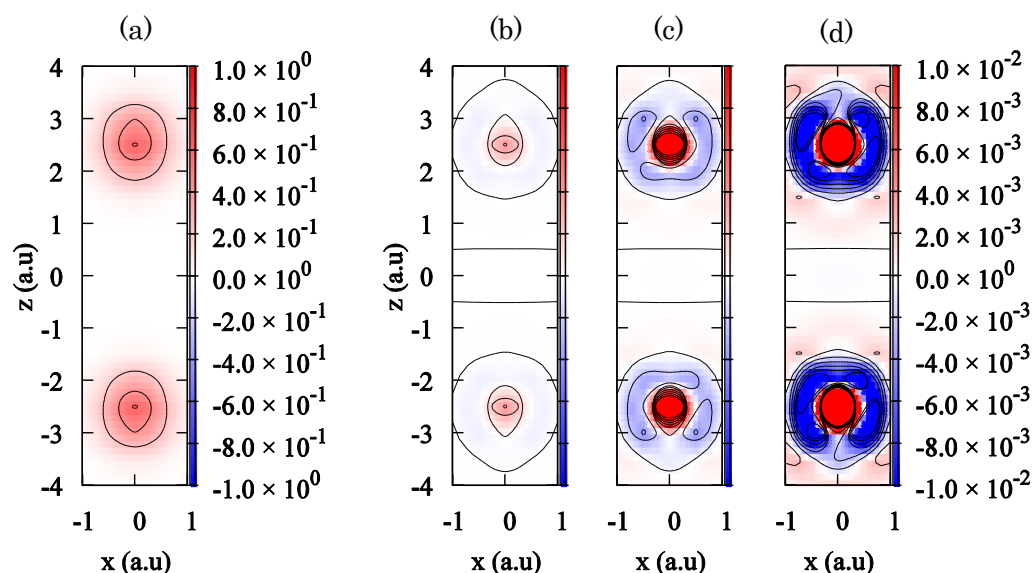


図2 原子核がフェルミオンの場合

(a) 原子核密度の初期状態

(b)~(d) 左から時刻 0.024, 0.06, 0.12[a.u.]における原子核密度の初期状態からの変化量

【文献】

[1] A. Tachibana, J. Mol. Struct. : THEOCHEM **943**, 138 (2010).

[2] A. Tachibana, J. Mol. Modeling **11**, 301 (2005).

akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp¹