

## 1E20

Rigged QEDに基づくシミュレーションにおける効率的な光子相互作用の記述

(京大院・工) 瀬波 大土, 立花 明知

Efficient computation of interaction with photon in simulation based on Rigged QED

(Kyoto Univ.) Masato Senami, 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[1]に基づいて系の時間発展を調べる計算コードQEDynamics[2]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られている。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[4]と呼ばれている。ローレンツ対称性を用いる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。電子場・原子核場はそれぞれ、 $\hat{\Psi}$ ,  $\hat{\chi}$ 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。展開関数としては、平面波ではなくFurry描像で用いられる方法に習って束縛状態の固有関数を用いる。

光子場は次のように分解して表現する、

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

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。本研究ではクーロンゲージを用いて光子場を表現することにする。輻射光子は光子の生成消滅演算子 $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$ を用いて、

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

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。

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

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

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  $t = 0$  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。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て計算を行う。

本研究では相互作用する光子特に  $\hat{A}_A^i$  をどのように計算するべきかを報告する。 $\hat{A}_A^i$  の計算には過去の演算子の情報も必要なため正確な計算のためには膨大な計算量が必要となる。そのため近似を用いて効率的に計算を行う。具体的には  $\hat{A}_A^i$  の計算は期待値として行う、またその期待値も空間を離散化した点上で行う。時間的にも各計算ステップごとに  $\hat{A}_A^i$  の計算を行わずに、数ステップに一度計算を行い、その間は同じ値を使用して計算量を減らすこととする。この方法の利点は計算量を上げて、計算間隔を無限に小さくすることによって正確な計算が行える点である。

QED としての計算を行うには、QED に対して定義されたハミルトニアンを作るための thermalization 過程が必要である。これまでの研究の結果として、現行の thermalization 過程には膨大な計算時間が必要であることがわかった。この原因の一つとして、 $\hat{A}_0$  は無限の光子交換により平均化され thermalize されたポテンシャルであるが、 $\hat{A}^i$  は  $\langle \hat{A}^i \rangle = 0$  から摂動的な相互作用を繰り返して thermalize を行うものである。この摂動的相互作用を無限回繰り返すことが thermalization であり、現行の計算方法では非常に長時間の計算が必要であり、現実的には thermalization を完了できない。これは、非摂動系である束縛状態に対して、 $\hat{A}_A^i$  の計算に摂動的手法を用いているのが原因と言える。このため  $\hat{j}^i$  を  $\hat{A}^i$  から、 $\hat{j}_L^i$  を  $\hat{A}_0$  から計算すると、現状の計算では  $\hat{j}^i$  の中に、 $\hat{j}_L^i$  が含まれていないという矛盾した結果となってしまっている。この問題を解決するために摂動的な thermalization ではなく新たな非摂動手法を用いる。その方法では  $\hat{j}^i = \hat{j}_L^i + \hat{j}_T^i$  の関係式が正しく再現されることを目的とする。本講演ではこの新たな thermalization 方法について報告する。

## 参考文献

- [1] A. Tachibana, in *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Lödin*, ed. by E. J. Brändas and E. S. Kryachko, (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003) Vol. 2, 211; *J. Mol. Modelling* **11**, 301 (2005); *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, **943**, 138 (2010); *J. Math. Chem.* **50**, 669 (2012).
- [2] K. Ichikawa, M. Fukuda, A. Tachibana, *Int. J. Quant. Chem.* **113** (2013) 190; M. Senami, T. Miyazato, S. Takada, Y. Ikeda, and A. Tachibana, to be published in *J. Phys. Conf. Ser.*; M. Senami, Y. Ogiso, T. Miyazato, F. Yoshino, Y. Ikeda, and A. Tachibana, to be published in *Trans. Mat. Res. Soc. Jpn.*; QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, and A. Tachibana, (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/>)
- [3] W. E. Caswell and G. P. Lepage, *Phys. Lett.* **167B**, 437 (1986).
- [4] A. Tachibana, “Electronic Stress with Spin Vorticity”, In *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity (Atoms, Molecules, and Clusters)*, CRC Press (2013) 235.