

1P103

Rigged QED に基づく数値シミュレーションにおける光子の相互作用の効率的な計算法についての研究

(京大院工) 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知*

Efficient method for the calculation of photon interaction in numerical simulation based on Rigged QED

(Department of Micro Engineering, Kyoto University) Sojiro Takada, Masato Senami, Akitomo Tachibana

【研究の背景・目的】

QED(Quantum electro dynamics)では量子力学では説明する事のできない現象の説明が可能である。本研究グループでは、原子核をも場の演算子として取り扱えるように拡張された Rigged QED[1,2]に基づいた物性の解明を目指している。特に低エネルギーでの物性にはフォノンの効果が重要であり原子核を取り入れた Rigged QED により物質内の相互作用が記述できる[3]。

これまでに本研究グループで Rigged QED に基づく束縛状態系の計算を行うための QEDynamics[4]というプログラムコードを開発してきた。QED では光子の相互作用が最も重要である。そこで、本研究では光子による相互作用を数値計算上でどのように取り扱うことでより正確に取り入れられるか議論する。今回は特に、光子場のベクトル成分 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の計算における格子点間隔や計算領域の大きさに対する依存性について研究を行った。

【理論・計算方法】

Rigged QED の中でも電子を二成分場として記述するものを Primary Rigged QED[5]と呼び、本研究では Primary Rigged QED の範囲内での議論を行う。クーロンゲージを採用すると、光子場 $\hat{A}_{A,M}^\mu(t, \vec{x})$ のスカラー成分とベクトル成分はそれぞれ次のように表せる。

$$\hat{A}_{0,A,M}(t, \vec{x}) = Z_e e \int_{A,M} d^3 \vec{s} \frac{\hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\Psi}(t, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|} + \sum_a Z_a e \int_{A,M} d^3 \vec{s} \frac{\hat{\chi}_a^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\chi}_a(t, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|}. \quad (1)$$

$$\hat{A}_{A,M}(t, \vec{x}) = \frac{1}{c} \int_{A,M} d^3 \vec{s} \frac{\hat{j}_{eT}(u, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|} + \frac{1}{c} \int_{A,M} d^3 \vec{s} \frac{\hat{j}_{NT}(u, \vec{s})}{|\vec{x} - \vec{s}|}. \quad (2)$$

$$u = t - |\vec{x} - \vec{s}|/c. \quad (3)$$

(2)式右辺第一項は電子の電流の横波成分からの寄与を、(2)式右辺第二項は原子核の電流の横波からの寄与を表す。添字の A は対象とする領域を、添字の M はそれ以外の領域を表す。

ある時刻 t における $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の計算には時刻 t よりも過去の時間の $\hat{j}_{eT}(u, \vec{s})$ 、 $\hat{j}_{NT}(u, \vec{s})$ の値が必要であるため、時間が経過するにつれて計算機上で保存しておくべき値の数が膨大になってしまう。そのため、 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の計算には近似が必要となってくる。そこで、 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の計算には計算資源の節約のために、図 1 のように領域 A を直方体状の格子点に分割し、その格子点のデータを用いて積分する近似をしている。また、格子点間隔、 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の更新間隔を無限に小さくすることによって連続極限として正確な計算を行う事が可能である。

本研究では $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の格子点間隔、領域 A の大きさ、領域 M の環境に対する依存性を調べ、 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の計算に対して有用な計算条件を検討する。

【結果及び考察】

本研究では ^1H 原子および ^3He 原子について計算を行った。 ^1H 原子および ^3He 原子の初期状態

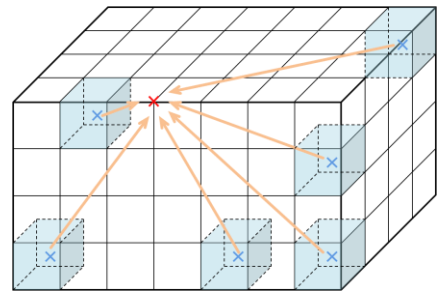


図 1. (2)式右辺における積分の概念図。微小直方体の中心における $\hat{j}_{eT}(u, \vec{s})$ 、 $\hat{j}_{NT}(u, \vec{s})$ の値を代表点として積分を行う。

は Hartree-Fock 計算により求めた。その際の基底関数として電子に対しては cc-pvdz[6]を用い、原子核に対して(2s1p)のガウス型基底関数を用いた。ガウス型基底関数の軌道指数としては文献[7]を参考にした。また、領域 M としては \hat{A}_{0M} が z 方向の $\vec{E} = (0, 0, \cos(\omega t))$ のような電場で表されるような状況を考える。ここで、 $\omega = 5.0$ [a.u.]である。

以上の計算条件の下、計算した結果を表 1 に示した。計算結果から計算領域が大きい方が $\langle \hat{A}_A \rangle$ の値は小さくなっている事が分かる。格子点間隔が等しいが計算領域の大きさの異なる条件 1 と条件 6 の結果を比較すると、条件 6 の方が $\langle \hat{A}_A \rangle$ の値が小さくなっている事が分かる。このことから、原子中心から遠い所では近い所に比べて $\langle \hat{A}_A \rangle$ の大きさが小さい事が分かる。微小直方体の一辺の長さが 0.3[Bhor]以上ある場合は $\langle \hat{A}_A \rangle$ の値は微小直方体の大きさに依存する事が分かる。この傾向は粒子数が多い程顕著に現れる事が分かった。また、 \hat{A}_{0M} を計算に含めると $\langle \hat{A}_A \rangle$ の値が大きく増加する事が分かった。これらの結果は、 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ の計算に対する基礎的なデータとして重要である。

H原子	1	2	3	4	5	6
計算領域の大きさ [Bohr ³]	4.0 ³	4.0 ³	4.0 ³	8.0 ³	8.0 ³	8.0 ³
分割数	10 ³	15 ³	20 ³	10 ³	15 ³	20 ³
$\langle \hat{A}_A \rangle$ (without \hat{A}_{0M})	3.574×10^{-9}	3.946×10^{-9}	4.080×10^{-9}	8.466×10^{-10}	9.937×10^{-10}	1.022×10^{-9}
$\langle \hat{A}_A \rangle$ (with \hat{A}_{0M})	3.011×10^{-7}	2.220×10^{-7}	2.125×10^{-7}	1.786×10^{-7}	8.922×10^{-8}	7.341×10^{-8}

He原子	1	2	3	4	5	6
計算領域の大きさ [Bohr ³]	4.0 ³	4.0 ³	4.0 ³	8.0 ³	8.0 ³	8.0 ³
分割数	10 ³	15 ³	20 ³	10 ³	15 ³	20 ³
$\langle \hat{A}_A \rangle$ (without \hat{A}_{0M})	2.413×10^{-8}	2.530×10^{-8}	2.627×10^{-8}	6.645×10^{-9}	7.399×10^{-9}	7.443×10^{-9}
$\langle \hat{A}_A \rangle$ (with \hat{A}_{0M})	2.930×10^{-6}	1.855×10^{-6}	1.538×10^{-6}	2.726×10^{-6}	1.073×10^{-6}	6.631×10^{-7}

表 1. $\langle \hat{A}_A \rangle$ は三次元空間各点と各時間における $\langle \hat{A}_A \rangle$ の値について平均をとったものを表す。計算領域の大きさと領域 A として考える領域の大きさを表し、分割数とは領域 A をいくつの微小直方体に分割して計算したかを表す。 $\langle \hat{A}_A \rangle$ の単位は原子単位系を用いた。

【今後の計画】

今後は、格子点間隔や領域の大きさ等の計算条件による効果をさらに調べるとともに、積分計算の効率的なルーチンの導入を行い、問題設定に対して最適化した計算方法を模索する。

また、場の量子論においては繰り込みが不可欠であるが、現在用いている繰り込みは、全粒子数保存による波動関数繰り込みなどに限られている。今後、繰り込みを行う際に $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ をどのように計算するかという事に加えて、 $\hat{A}_A(t, \vec{x})$ に対する繰り込みそのものも非常に重要である。時間発展していく系に対してどのような繰り込みが良いか検討する。

【文献】

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Struct.: THEOCHEM **943**, 138 (2010) ; J. Mol. Modeling **11**, 301 (2005).
- [2] A. Tachibana, in Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin, ed. by E. J. Brändas and E. S. Kryachko, (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003) Vol. 2, 211.
- [3] A. Tachibana, Phys. Rev. A, **35**, 18 (1987).
- [4] M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, <http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>
- [5] 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.
- [6] T. H. Dunning, Jr., J. Chem. Phys. **90** (1989) 1007.
- [7] H. Nakai, Int. J. Quant. Chem. **86** (2002) 511.

E-mail address: akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp*