

Primary Rigged QED シミュレーションにおける thermalization 過程の 効率的な計算方法についての研究

(京都大学) ○田中 友貴, 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知

Efficient calculations of thermalization process in Primary Rigged QED simulation

(Kyoto University)○Yuuki Tanaka, Sojiro Takada, Masato Senami, Akitomo Tachibana

近年, ミクロな対象に対する正確な解析手法の必要性が高まっている. 現在, 実用上最も正しく原理的な描像から粒子の振る舞いを記述するのは QED(Quantum ElectroDynamics) である. 我々の研究グループでは, 立花の提唱する Rigged QED^{1,2} に基づいた計算コード QEDynamics³ の開発を進めてきた.

この計算コードを用いた QED に基づいた時間発展の計算は, 一定の成功を収めている³. この計算においては, QED により記述されるハミルトニアンが必要である. そこで我々は, thermalization により QED 的なハミルトニアンと初期状態の導入を行う手法を採用してきた. その結果, いくつかの thermalization の問題点が浮かび上がってきた. 本研究では thermalization 過程の新たな計算方法を提案しその検討を行う.

本研究で用いる Primary Rigged QED⁴ は, 原子核を Schrödinger 場として導入し, また電子場を Dirac 場の Primary 成分 2 つを用いて表示するものである.

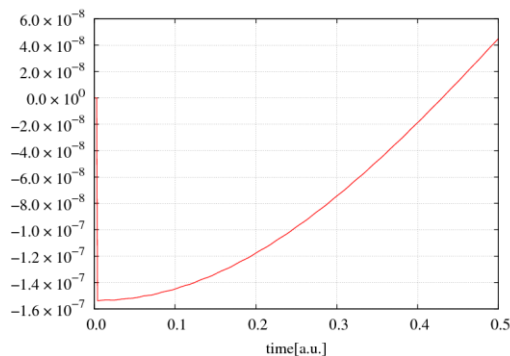
これまで, thermalization として以下の手法を用いてきた. 量子力学的な変分計算を用いて物質場の初期状態を作り, その状態の下で QEDynamics を用いて光子場を發展させ QED の光子場を作り出すとするという手法である. このとき, Thermalization が完了したかどうかを判定するために, 下式で表される光子場と電子場の相互作用エネルギー期待値を指標として用いてきた.

$$\left\langle \int d^3\vec{x} \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{x}) \left(\frac{iZ_e}{m_e c} \hat{A}_A \cdot \vec{\nabla} + \frac{Z_e^2}{2m_e c^2} \hat{A}_A^2 \right) \hat{\Psi}(t, \vec{x}) \right\rangle$$

ここで光子場のベクトル成分は

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

の式で与えられている. \hat{j}_T は電流の横波成分である. 光子の發展に伴いこのエネルギーが十分に成長して変化しなくなれば, thermalize されたとみなすのである. 下の図は水素原子に対する thermalization 計算の経過である. この期待値の時間変化をみると 0.5 [a.u.] 経過した後も単調に増加を続けていたことがわかる.



この結果は, 0.5 [a.u.] の時点では thermalization は完了していないことを意味している.

そこで, どの程度の計算時間を必要とするのか調べるために, 共変性の観点から thermalization の完了を考える. Thermalization が完了した状態では, 光子場のベクトル成分はスカラー成分と同程度まで成長するはずであると考えられる. スカラー成分の定義は下式で表される.

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

現状の thermalization のもとでは、スカラー部分とベクトル部分の相互作用エネルギーを計算すると、スカラー部分の方が数桁大きい結果となった。この理由のひとつとして、 \hat{A}_0 は無限の光子交換を行って平均化された(すなわち thermalize された)ポテンシャルとして計算しているが、ベクトル部分は $\hat{A}_A^i = 0$ から摂動的な相互作用を繰り返して thermalize を行う。このような取り扱いのため、thermalization に膨大な時間が必要となっていると考えられる。

Thermalization を現実的な計算時間で完了させるためには、現状の thermalization 計算における問題点を解決することがまず挙げられる。その方法のひとつとして、 \hat{A}_A^i 項の計算方法を効率化すること、電流を表現する基底関数系の採用、放射光子の自由度を十分含めることによる電流自由度の増加などにより \hat{A}_A^i の計算を改善することができる。これらの効果は QED が描く束縛状態を表現するために絶対に必要なものであるが、しかし、thermalization を行うには非効率的な点がある。そこで本研究では、thermalization の計算方法として非摂動的な手法に変更することを検討する。

本研究ではまず、電流 \hat{j} の縦波成分 \hat{j}_L と横波成分 \hat{j}_T の確認を行った。電子状態の時間変化が大きい状況で \hat{j}_L の値は大きくなるが、現在の計算コードで算出される \hat{j} には \hat{j}_L が含まれていないという問題があった。これは、 \hat{j}_L の計算は \hat{A}_{0A} から計算するが、 \hat{j} の計算は \hat{A}_A^i を用いており、上述のようにこの 2 つの間の非共変的取り扱いが問題を作り出しており、 \hat{A}_A^i が大きな \hat{j}_L と矛盾のないものとなるまでに膨大な時間がかかる。

そこで、本研究での新たな thermalization 過程として、 $\hat{j} = \hat{j}_T + \hat{j}_L$ が正しく再現される方法を考える。摂動的に光子を用意する方法の問題点を克服するために、大きな \hat{j}_L の存在下で矛盾の無い \hat{A}_A^i を thermalization された光子場とする方針を提案する。 \hat{j}_L の存在下で \hat{j} が矛盾しないように \hat{A}_A^i を用意する。その \hat{A}_A^i を作り出すような電子場・光子場を設定して \hat{j}_T と \hat{A}_A^i を再度決定する。その新たな \hat{A}_A^i と矛盾の無いように \hat{j}_T と \hat{A}_A^i を再度計算し全て矛盾がなくなったら thermalization 完了とするのである。

文献

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Modeling 11, 301 (2005); J. Mol. Struct.:THEOCHEM 943, 138 (2010).
- [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] K. Ichikawa, M. Fukuda, A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. 113, 190 (2013). 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, A. Tachibana (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>)
- [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.