

Rigged QED のシミュレーションにおける光子場の thermalization とくりこみについて

(京大院・工) 瀬波 大土, 田中 友貴, 立花 明知

Thermalization of photon field and renormalization in Rigged QED simulation

(Kyoto Univ.) Masato Senami, Yuuki Tanaka, Akitomo Tachibana

場の量子論、特に、QED は量子力学では説明のできない現象を多数説明することができ、より根源的な基礎理論であると広く知られている。そのため、量子現象を真に正しい理論の下で解析するためには QED に基づいた量子シミュレーションが不可欠である。これは小さな補正と軽視されている QED の効果を取り入れようという方針ではなく、真に正しい理論の下で量子現象を正しく理解しようという目的のためである。例えば、電子に対してポテンシャルを用いる量子力学などでは、量子的光子と電子の作り出す複雑な現象を平均化し粗視化して情報を捨てている。我々はその粗視化前の光子も含めた真に正しい理論の下で量子現象を理解する道具を用意したいと考えている。

場の量子論による、分子の様な束縛系の記述というのは、これまでベータ・サルピーターの方法や NRQED[1]、または Lattice QCD による試みなどがあり一定の成果をあげているが、満足のいく段階に達していない。特に量子状態の時間発展計算となると、どのように取り扱うべきかという理論面においてすら一定の枠組みにまとまっていない。Thermo-field dynamics、2 粒子既約作用や closed time path formalism を用いる方法などいくつかの試みが行われているが、まだまだ十分な状況にはなっていない。

そのような状況を踏まえて、我々は Rigged QED[2] に基づく量子現象の時間発展を計算するシミュレーションプログラムパッケージである QEDynamics[3, 5, 4] を開発している。QEDynamics は電子の記述により 2 つのプログラム群に分けられる。1 つは一般的な Dirac 方程式の記述にしたがう 4 成分スピノルによる記述によるものであり [4]、もう一つが本研究の対象である 2 成分スピノルによる取扱いを行うものである [5]。フェルミオンを 2 成分スピノルとして記述する表式としては、Primary Rigged QED に基づいた定式化を採用している。ローレンツ群のスピノル 1/2 粒子の最小表現は 2 次元表現であるので、この理論はローレンツ不変に定義されるが、非相対論的粒子の記述を効率的に行うためにハミルトニアンを級数展開を利用して必要な項を用いて計算することとする。

2 成分記述の QEDynamics では、演算子を Furry 表示で記述した $t = 0$ の演算子の組で展開し、その係数を数値計算で計算する。この展開には相互作用のため演算子の高次の展開が入っており、時間発展計算を行うとすぐに膨大な数の展開項が現れてしまい取り扱えなくなるので、高次の演算子については打ち切りを行い、それ以上の次数の相互作用は期待値として取り入れることとしている。これまでのところ、初期計算として外部電場への応答の周波数依存性や遅延効果を含む相互作用光子場の記述方法等について報告を行ってきた [5]。その上で現在最も解決すべき問題は、1) 時間に依存したくりこみをどのように行うのか? という事と、2) QED ハミルトニアンの thermalization をどのように行うのかの 2 点である。

QED のくりこみは通常は、 $t = -\infty, \infty$ に対して漸近場があるとして行うものであり、時々刻々と相互作用も変わる状況に対しての、時間に依存したくりこみというものをどのように行うのかの議論は十分ではない。この問題に対して、我々は系が持つべき保存量が保存するように、波動関数、結合定数、質量をくりこむという処方を採用することとした。保存量としては、粒子電荷、エネルギー、運動量、角運動量などがある。しかし、この方法では原子核種の多い系の計算を行うと、原子核種が 1 つ増えるごとに質量と波動関数の 2 つ新しいくりこみ定数が導入されるのに対し、保存則は粒子電荷保存しか増えずくりこめなくなることが明白である。そこで我々は質量のくりこみに対しては粒子の静止質量を用いることとした。これまでのところ粒子電荷による波動関数くりこみと質量くりこみについてのコーディングが完成している。図 1 には水素原子系の質量くりこみ定数の時間発展を示した。今後多くの保存量をコーディングしくりこみの信頼度を高めていく。

また我々は静電ハミルトニアンに基づく量子状態計算から得られた波動関数を場の演算子の展開関数として用いる。このようにして用意した物質場の記述から始めて、光子場の

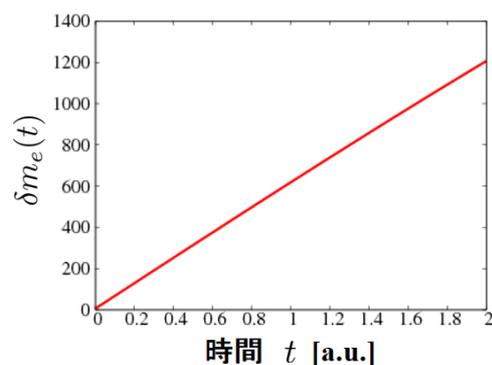


図 1: 質量くりこみ定数の時間発展

ベクトル成分を単に作ったハミルトニアンを用いて計算を行うと大きな問題がある。ベクトル成分を用いて計算される全電流とスカラー成分を用いて計算される電流の縦波成分とを比較すると、縦波成分の電流の方が大きくなり矛盾した結果が得られてしまうのである。これは静電ハミルトニアンや量子力学に基づくベクトルポテンシャルを加えただけのハミルトニアンに基づく時間発展計算をするだけでは正しい量子状態の時間発展を得られないことを示している。そのため我々は QED のハミルトニアンを作成する thermalization 計算を行い、Lorentz 共変な性質を持つ \hat{A}^μ を用意することを目指している。しかし、我々はクーロンゲージを採用しており、そこでは Lorentz 共変性は明白ではない。そのため、背景にある Lorentz 共変性を持つ \hat{A}^μ とは何かを定義しなくてはならない、今回我々は共変な \hat{A}^μ とは、矛盾のない全電流と電流の縦波成分を与える \hat{A}^μ であると定義することとした。過去の研究で、摂動的に \hat{A}^i を計算し時間発展させていく方法では十分に thermalize させることができないことがわかったため、新たな非摂動的な方法を用いて矛盾のない電流を作り出す方法を模索している。

具体的には、 \hat{A}^i を \hat{j}^i と \hat{j}_L^i が無矛盾となるように決定するだけである。まず、 \hat{j}^i における \hat{j}_L^i の不足分を作り出す \hat{A}^i を用意し、それを作り出す \hat{j}_T^i を作るように \hat{A}^i を計算し、互いに無矛盾となるように決定するのである。

本講演では、くりこみのコーディングと Thermalization 計算の現状について報告する予定である。

参考文献

- [1] W. E. Caswell, G. P. Lepage, Phys. Lett. **167B**, 437 (1986).
- [2] A. Tachibana, J. Mol. Modelling **11**, 301 (2005); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010); J. Math. Chem. **50**, 669 (2012).
- [3] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>)
- [4] K. Ichikawa, M. Fukuda, A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013).
- [5] M. Senami, T. Miyazato, S. Takada, Y. Ikeda, A. Tachibana, J. Phys. Conf. Ser. **454**, 012052 (2013); M. Senami, Y. Ogiso, T. Miyazato, F. Yoshino, Y. Ikeda, A. Tachibana, Trans. Mat. Res. Soc. Jpn **38**[4], 535 (2013); M. Senami, S. Takada, A. Tachibana, JPS Conf. Proc. **1**, 016014 (2014).