

Thermalization process in the quantum state simulation based on Primary Rigged QED
(Kyoto University)○Yuuki Tanaka, Masato Senami, Akitomo Tachibana

QED (Quantum ElectroDynamics) は, 量子力学では説明することのできない多くの現象の説明が可能であり, より根源的な基礎理論であることが知られている. このQEDを用いたシミュレーションを行うことを目的とし, 我々の研究グループでは, 原子核をもSchrödinger場として扱うRigged QED¹に基づいた計算コードであるQEDynamics²の開発を進めている.

本研究で用いる Primary Rigged QED³ は, Schrödinger 場を用いて表し, Rigged QED において電子場を Dirac 場の Primary 成分 2 つを用いて表すものである. 光子場はクーロンゲージを採用し, 輻射光子場を除いた相互作用のみを表す光子場 $\hat{A}_{A,M}^\mu$ (添字 A は対象とする系を, M はそれ以外の領域を表す. $\hat{A}_{0,A,M}$ はスカラー部分, $\hat{A}_{i,A,M}$ はベクトル部分.) および電流 $\hat{j}$ (縦波成分 $\hat{j}_L$) の定義式を以下に示す. 原子核の電流の式は, $(\hat{\Psi}, Z_e)$ を $(\hat{\chi}_a, Z_a)$ に変更することにより得られる.

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

$$\hat{j}_e(u, \vec{s}) \equiv \frac{Z_e e}{2m_e} \left[\hat{\Psi}^\dagger \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{Z_e e}{c} \hat{A} \right) \hat{\Psi} + h.c. \right] \quad \hat{j}_{eL,A,M}(u, \vec{s}) = -\frac{1}{4\pi} \text{grad} \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_{0,A,M}(u, \vec{s})$$

このシミュレーションにおいては, QED により記述されるハミルトニアンが必要である. 我々は, Lorentz 共変な光子場 $\hat{A}^\mu$ を用意する手続きである thermalization を行い, QED 的なハミルトニアンの導入を目指している.

これまで, thermalization として, 静電ハミルトニアンに基づく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 を用いて光子場を発展させ, QED の光子場を作り出すとするという手法を用いてきた. この手法においては, $\hat{A}_0$ は無限の光子交換を行って平均化されたポテンシャルとして扱っている一方, $\hat{A}_i$ は値が 0 の状態から摂動的な相互作用を繰り返して thermalize を行っている. $\hat{A}_i$ をこの方法で計算すると, $\hat{A}_i$ が $\hat{A}_{0A}$ と共変となるまで膨大な時間を要し, 現実的な時間では thermalization を完了することができないという問題があることがわかった.

Thermalization が不完全な状態における $\hat{A}^\mu$ を用いて計算した電流 $\hat{j}$ と, その縦波成分 $\hat{j}_L$ の関係を図 1 に示す. 図 1 は水素原子について計算した結果であるが, $\hat{j}$ の縦波成分である $\hat{j}_L$ が $\hat{j}$ に包含されないほど大きく, 矛盾した結果となってしまう. これは, $\hat{j}_L$ は $\hat{A}_{0A}$ から計算するが, $\hat{j}$ の計算には $\hat{A}_i$ を用いていることに原因があり, Lorentz 共変でない $\hat{A}^\mu$ の取り扱いにより, 物理量が正しく計算されないと推測される.

したがって, 静電ハミルトニアンや, 単にベクトルポテンシャルを入れただけのハミルトニアンで量子状態の時間発展を計算する方法では正しい物理量計算ができないので, 我々は thermali-

zation を行って正しい QED ハミルトニアンを得ることを目指している。

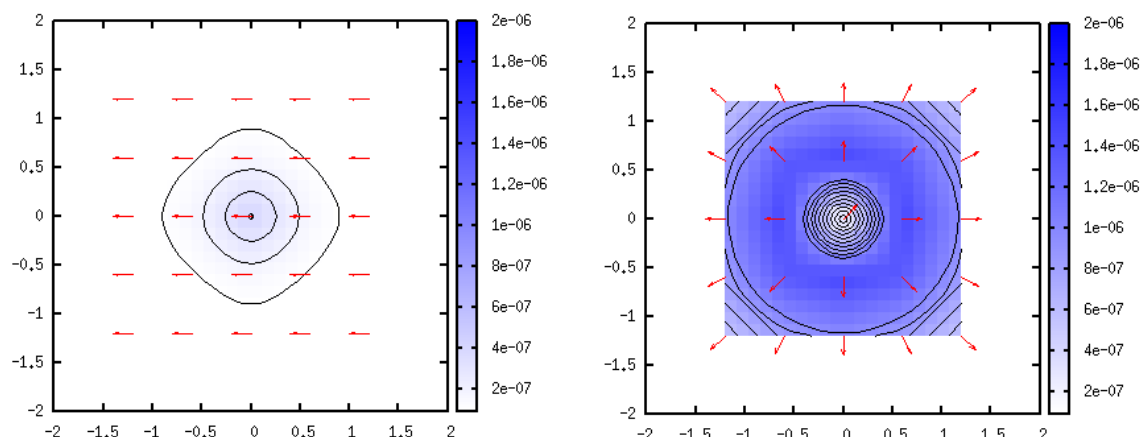


図 1 水素原子における $\vec{j}$ (左)と $\vec{j}_L$ (右)の向き(ベクトル)とノルム(濃淡)の比較

そこで、本研究での新たな thermalization 過程として、現実的な時間で Lorentz 共変な $\hat{A}^\mu$ を得る方法を考える。我々はクーロンゲージを採用しているため見かけ上非共変な $\hat{A}^\mu$ を用いており、そのため共変な $\hat{A}^\mu$ をどのように決定するかということが問題となる。

上記の $\vec{j}$ と $\vec{j}_L$ の矛盾は Lorentz 共変でない $\hat{A}^\mu$ が原因で生じていると考えられるため、この矛盾を解消する $\hat{A}^\mu$ を Lorentz 共変であると考え、そこで、大きな $\vec{j}_L$ の存在下で矛盾の無い $\hat{A}^\mu$ を、thermalize された光子場とする方針を提案する。

この方針に基づき、はじめに全電流がこの $\vec{j}_L$ のみであるときの $\hat{A}_A^i$ を計算する ($\hat{A}_{A(jL)}^i$)。そして $\hat{A}_{A(jL)}^i$ を作る $\vec{j}_T$ と $\hat{A}_A^i(\hat{A}_{A(jT)}^{i(n)})$ を反復的に計算し、互いに無矛盾である状況となる $\hat{A}_A^i$ を作ることを目標とする。こうして得られた $\hat{A}_{A(jT)}^{i(n)}$ は、大きな $\vec{j}_L$ に対応する Lorentz 共変な $\hat{A}^\mu$ の一部として用いることができる。本講演においては、この計算方針に関する議論と計算結果の検証を行う。

文献等

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Modeling 11, 301 (2005); J. Mol. Struct.:THEOCHEM 943, 138 (2010).
- [2] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>).
- [3] A. Tachibana, “Electronic Stress with Spin Vorticity,” Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity (Atoms, Molecules, and Clusters); Eds. by Swapan K. Ghosh and Pratim K. Chattaraj; Taylor & Francis / CRC Press, 2013; Chapter 12, pp.235-251