

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、本研究の目的において具体的には QED は、量子力学では説明のできない現象、例えばラムシフトや磁気双極子能率の値など様々な現象を説明することができ、より根源的な基礎理論として受け入れられている。量子現象を真に正しい理論の下で解析するには、QED に基づいたシミュレーションを行うべきである。これは値としては小さな補正として QED の効果を取り入れるのではなく、真に正しい物理的描像の下で量子現象を正しく理解するためである。言い換えると、量子力学では 0 と予言するものが QED では有限な値を持って予言するのであり、数値の大きさの問題ではなく現象を記述する能力の有無が異なるのである。これは、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ためである。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。

場の量子論を用いた、原子や分子などの束縛状態の記述は、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スペクトラムの計算などで一定の成果をあげている。しかし、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。

このような状況の中、本研究グループでは 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、QEDynamics[3, 5, 4] を開発している。QEDynamics は電子スピノルの記述方法により 2 つに分けられる。1 つは一般的な Dirac 方程式の記述による 4 成分スピノルによるものであり [4]、もう一つが本研究で取り扱う 2 成分スピノルによる取扱いである [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。スピン 1/2 粒子のローレンツ群による最小表現は 2 次元表現であり、本来この理論はローレンツ不変に定義することができる。しかし、効果的に非相対論的粒子を記述するためにハミルトニアンを級数展開を利用して必要に応じた次数で計算を行うことを念頭にコーディングを進めている。

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？ということと、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 の確立しているくりこみは $t \rightarrow -\infty, \infty$ に対する漸近場を仮定するものであり、初期状態から相互作用を含んでいる量子状態に対して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確立していない。ある時刻で束縛系の定常状態に対してくりこめば、その後の発展において無限大は生じないという議論があるが、その束縛系の定常状態が場の量子論で適切に記述する方法は確立していない。そこで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方針を採用して

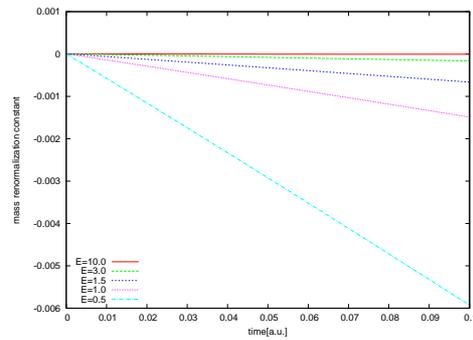


図 1: 質量くりこみ定数の時間発展

いる。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。この方法では原子核種の多い系に対しては保存則が不足するため、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を仮定している。図1にはパラポジトロニウムにおける質量くりこみ定数の時間発展を示している。今後多くの保存量をコーディングし適切にくりこみを取り扱えるように拡張していく。また、現在はくりこみ定数を用いてくりこみを行っているが、本来は時間発展する相互作用系ではくりこみ定数ではなく、空間座標にも依存したくりこみ演算子を用いるべきであり、その方向での拡張も進めていく。

場の演算子の展開関数としては、静電ハミルトニアンに基づく量子状態計算の波動関数を用いる。このように用意した物質場に対して単に光子場のベクトル成分を作ったハミルトニアンを用いることは不適切である。そのような光子場のベクトル成分はMaxwell方程式と無矛盾には作られておらず、Thermalizationと呼ぶ手続きを行ってMaxwell方程式と一致した光子場・物質場の記述を行う必要がある。これまでの研究でThermalizationが不十分な静電ハミルトニアンと量子力学的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では、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が矛盾した結果が得られることを示した。そのためthermalization計算を行い、Maxwell方程式と無矛盾で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。これまでの研究で、摂動的に \hat{A}^i を計算し時間発展させるだけでは効率が悪く十分にthermalizeできないことがわかった。そこで、摂動的な相互作用を繰り返してthermalizationする方法に代わり、SCF的手順により \hat{A}^i を新たな非摂動的な方法により決定し、効率的に \hat{j}^i と \hat{A}^i を無矛盾に決定する方法によりこの矛盾を解消する方法を研究している。

本研究ではポジトロニウムの系でのくりこみ定数の変化について結果を示す。また、場の量子論における演算子の時間変化とともに、状態ベクトルの時間発展を別個に計算する具体的手順についての議論を行う。

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).