

## The calculation method of thermalization in Primary Rigged QED simulation

(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 QED<sup>1</sup>に基づいた計算コードであるQEDynamics<sup>2</sup>の開発を進めている。

本研究で用いる Primary Rigged QED<sup>3</sup>は、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。  $\hat{A}_{0A,M}$  はスカラー部分、  $\hat{A}_{A,M}^i$  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。

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

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

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  $\hat{A}^\mu$  を用意し、また相互作用を表す光子場  $\hat{A}_{A,M}^\mu$  と電流  $\hat{j}$  がMaxwell方程式に従って無矛盾となるようにするための手続きである thermalization を行い、QED的なハミルトニアンの導入を目指している。

これまでに、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配置を作り、その初期配置に対してQEDynamicsを用いて時間発展計算を行って thermalization の完了を目指す方法を試みた。この計算においては、  $\hat{A}_0$  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い、  $\hat{A}_A$  は値が0の状態から摂動的な相互作用を繰り返して thermalize を行っているが、この  $\hat{A}_A$  の取り扱いでは計算効率が低いため、計算を完了することができなかった。よって、より効率的な thermalization の計算手法の確立が必要であることが課題として浮かび上がってきた。

図1に、QEDynamicsを用いて外部光子存在下での非定常状態水素原子について計算した電流  $\hat{j}$  と電流の縦波成分  $\hat{j}_L$  を示す。この計算結果において、  $\hat{j}_L$  が  $\hat{j}$  に含まれていない。静電ハミルトニアンに基づく量子状態計算を採用した問題点の1つとして、  $\hat{j}$  を  $\hat{A}_A$  から、  $j_L$  を  $\hat{A}_0$  から計算していることにより  $\hat{j}$  と  $\hat{j}_L$  が矛盾し、Maxwell方程式と矛盾した電流しか得られないことが挙げられる。この問題を、thermalization過程の中で正しい  $\hat{A}_A$  を得ることにより解消するという方針に基づき、  $\hat{A}_A$  の効率的な計算の具体的な手順を確立することを目指している。

過去には、  $\hat{j}$  と  $\hat{j}_L$  の間の矛盾を  $\hat{A}_A$  の存在が解消するという仮定を置いて試行を繰り返したが、

この方法では  $\hat{A}_A$  の発散が生じてしまい、無矛盾な電磁場が作り出されなかった。この計算では、 $\hat{A}_A$  の値のみを発展させるという制限を課したことが問題であった。本研究では、 $\hat{A}_A$  だけでなく  $\hat{j}$  も反復計算中で発展させる方法を提案する。この方法は、 $\hat{j}$  を  $\hat{A}_A$  とともに変化させることで SCF 的な計算を実現し、無矛盾な  $\hat{A}^\mu$  と  $\hat{j}$  を得ることを目的とする。 $\hat{A}_A$  を値のみを変化させる方法を用いると計算コストを小さくすることができるが、本来は  $\hat{A}_A$  と  $\hat{j}$  の双方を変化させることが自然である。

また、Thermalization 計算のコーディングを検討する上で、ガウス型関数による演算子・波動関数の展開が電流  $\hat{j}$  をどの程度再現できるのかという基底関数系に対する依存性を調べている。十分に大きな基底関数系でなければ電流中の微分項によって記述される成分を正しく表現できず、計算量と効率についての系統的理解を進めている。本研究では、種々の基底関数系を用いて非定常状態水素原子の電流を計算し、各基底関数系の持つ自由度と、算出される電流の各成分の関係について議論する。

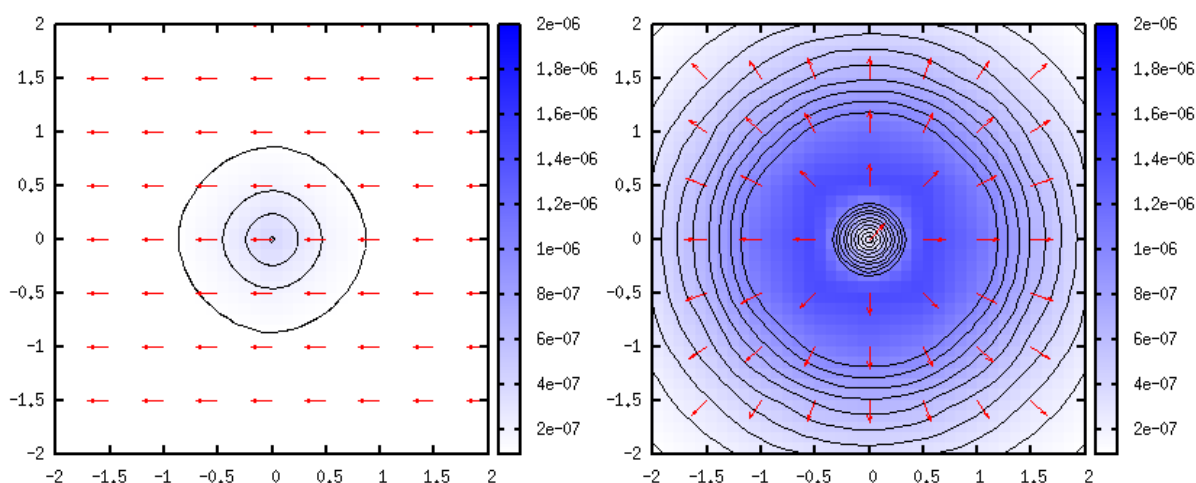


図 1 非定常状態水素原子における  $j$ (左)と  $j_L$ (右)の向き(ベクトル)とノルム(濃淡)の比較

#### 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