

## 2E03

### QED の下での量子状態の時間発展と誘電応答

(京大院工) 瀬波 大土, 立花 明知

#### [背景]

Rigged-QED (quantum electrodynamics)に基づいて系の時間発展を調べる計算コードの開発を行っている。これまで、物理学の領域では QED は摂動計算により自由粒子の散乱過程や磁気双極子の予言等で非常に大きな成功をもたらしている。ただし、それらの成功は自由粒子が漸近場として存在するとの仮定が非常に良い場合に限られている。しかし、原子や分子中の電子や原子核は束縛状態としてしか記述できない。束縛状態の記述については、これまでベータ・サルピーターの方法や NRQED[1]による記述等があり一定の成果を上げているが、まだまだ満足のいく段階に達していない。また、理論化学においては QED 補正が議論されており、精密科学としての進歩は遂げているものの、光子を光子として取り扱うというよりもポテンシャルに対する補正として定常状態の取り扱いに重きが置かれている。

このような状況を踏まえて、我々は場の理論の枠組みで束縛状態の電子・原子核に加えて光子も実粒子として共に生成消滅演算子で記述して、QED としての正しい動的効果を取り扱う量子系の時間発展の計算コードの開発に取り組んでいる。これにより光子を媒介とした相互作用が正しく記述され、運動量交換や運動量放出などの動的相互作用も正しく取りこまれる。特に、ハフニウム酸化物などの高誘電率材料では材料の誘電率に対する電子の寄与よりも原子核の寄与の方が非常に大きいことが知られており、原子核の動的運動を正しく記述することにより物理現象の真実に迫れると考えている。

#### [研究内容]

本研究では電子と原子核はシュレディンガー場として記述することとする。電子場は電子の消滅演算子  $\hat{e}$  及び電子に対する基底関数  $\psi$  を用いて

$$\hat{\Psi}(t, \vec{x}) = \sum_p \hat{e}_p(t) \psi_p(E_p, \vec{x})$$

と展開する。シュレディンガー方程式の変分解をその展開に用いる。原子核についても消滅演算子と基底関数系を用いて、

$$\hat{\chi}_a(t, \vec{x}) = \sum_m \hat{f}_{am}(t) \chi_{am}(E_{am}, \vec{x})$$

とする。原子核の基底関数系については動的効果を適切に表現できるように試行錯誤して決定すべきであり、最小波束をはじめとっていくつかの基底関数を検討している。

電子場の時間発展の式は以下の式となる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi} = \left[ \frac{1}{2m_e} \left( -i\hbar \partial_i - \frac{Z_e e}{c} \hat{A}^i \right)^2 + Z_e e \hat{A}_0 \right] \hat{\Psi}$$

原子核の時間発展についても同様の式に基づいて時間発展する。式変形から容易にわかるように電子と原子核の場の時間発展は生成・消滅演算子の時間発展として記述される。光子場  $\hat{A}$  は実粒子的光子場  $\hat{A}_{rad}$  と仮想光子を含む電磁気相互作用を記述する光子場  $\hat{A}_A$  の両方を含む。

これらの効果は量子力学との大きな違いであり、特に束縛状態にある系の長波長光子の放出・救出の効果がどのような影響を及ぼすかは重要であると考えている。この時間発展の演算子中では相互作用項の展開を低次で止めているが、今後 NRQED[1]の展開を参考にスピン依存項や高次の項を順に導入して十分な精度での評価が行えるよう改良していく。

この時間発展の式は一見簡単に解けそうに見えるが、実は正しく計算することは容易ではない。時間発展を数ステップ行くと、演算子の積の次数が上がり交換関係の代数的演算に膨大な時間を必要とすることと、そのときの演算子の種類が指数関数的に増えるのでそれらを記録するデータ自体も巨大となる。そのうえ場の理論においては粒子の生成消滅による自己エネルギーへの補正の効果等のループダイアグラムの寄与があり、その補正の中には発散するものがある。これらの発散はくりこまれなくてはならないが、通常のくりこみの議論は漸近場として自由粒子を仮定しており、本研究のような束縛状態での各時間ステップでどのようにくりこまれなくてはならないかは今後も注意深く検討していく必要がある。そのため効率良く計算を行う方法を開発することが重要である。特に QED としての本質が表現されるような近似を採用することは必須である。本研究ではコードを作成するにあたり、どのような近似が重要となるかも確認・検討しながら計算のコーディングを進めている。

本発表では現段階のコーディングの結果として光子の入射に対してどのような分極が現れるのかの結果を示す。特に文献[2]に定義される局所的な分極密度の観点から時間発展に伴い分極密度がどのように変化するかを示す。下図は HF 分子の場合の分極の時間発展である。入射光子の位相の変化に伴い分極方向が変化していることが分かる。また、QED において初めて記述される動的な相互作用の効果についても議論する。

[参考文献]

- [1] W. E. Caswell and G. P. Lepage, Phys. Lett. 167B, 437 (1986).
- [2] A. Tachibana, J. Mol. Modelling 11, 301 (2005); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 943, 138 (2010).

