

外場中に置かれた原子系の Rigged QED シミュレーション

(京大院・工) 宮里敏秀, 瀬波大土, 池田裕治, 高田崇二郎, 立花明知

Rigged QED Simulation of Atomic Systems in an External Field

(Dept. of Micro Eng., Kyoto Univ.) Toshihide Miyazato, Masato Senami, Yuji Ikeda, Sojiro Takada, Akitomo Tachibana

序

量子的な現象の解明に多くの成果を挙げてきた量子電磁力学 (QED) であるが、ここでは電子と光子のみが量子化され、原子核を含む束縛系の扱いには十分でない。一方で、近年半導体分野に於いて注目されている high-k 材料などでは原子核が大きな寄与を持つことが分かっており、原子核をも統一的に扱える理論に基づく研究が望まれている。そこで本研究室では、これまで立花の提唱する Rigged QED[1] に基づいて、静的な局所誘電物性について研究を行って来た [2]。

本研究では、Rigged QED に基づき、量子化された電子場、原子核の場、光子場の時間発展をシミュレートするために開発した計算コード・QEDynamics[3] を用いて、電子場、原子核場と光子場との相互作用を時々刻々計算することで、それらの時間発展の様子を視覚化し、動的な局所誘電物性について議論を行う。今回は、特に対象とする系を取り囲む環境の作り出すスカラーポテンシャルに対する系の応答についてシミュレーションを行った。

理論と計算方法

本研究では、輻射光子場は無いものとして相互作用光子場のみを扱う。また、ベクトルポテンシャルの影響は微小であるものとして無視する。以下ではこれらの仮定の下での式を示す。

電子場の演算子 $\hat{\Psi}$ 、原子核 a の場の演算子 $\hat{\chi}_a$ 、光子場の演算子 \hat{A}_0 を、電子の生成・消滅演算子 \hat{e}_n 、原子核の生成・消滅演算子 \hat{f}_{an} を用いて次のように表現する。

$$\hat{\Psi}(t, \vec{r}) = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \hat{e}_n(t), \quad \hat{\chi}_a(t, \vec{r}) = \sum_n \chi_{an}(\vec{r}) \hat{f}_{an}(t), \quad \hat{A}_0(t, \vec{r}) = \hat{A}_{0A}(t, \vec{r}) + \hat{A}_{0M}(t, \vec{r}).$$

但し系の内部でやり取りされる光子場を表す \hat{A}_{0A} は電子・原子核の生成・消滅演算子により、系と周囲環境の間でやり取りされる光子場を表す \hat{A}_{0M} は環境の電荷密度演算子 $\hat{\rho}_{\text{ext}}$ により展開される。(Z_a : 原子核 a の電荷)

$$\hat{A}_{0A}(t, \vec{r}) = - \int d^3 \vec{s} \frac{\hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\Psi}(t, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|} + \sum_a Z_a \int d^3 \vec{s} \frac{\hat{\chi}_a^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\chi}_a(t, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|},$$

$$\hat{A}_{0M}(t, \vec{r}) = \int d^3 \vec{s} \frac{\hat{\rho}_{\text{ext}}(t, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}.$$

特に本研究では、環境のケットベクトル $|M\rangle$ に対し

$$\hat{\rho}_{\text{ext}}(t, \vec{r}) = -\hat{\sigma}(t)\delta(z-d) + \hat{\sigma}(t)\delta(z+d), \quad \hat{\sigma}(t)|M\rangle = \sigma(t)|M\rangle.$$

とする。これは、系が空間的に一様な z 軸方向を向いた外部電場中に置かれていることに相当する。

電子場、原子核場の演算子は以下の方程式を満たす。(m_a : 原子核 a の質量)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi} = \left[\frac{1}{2} (-i\partial_i)^2 - \hat{A}_0 \right] \hat{\Psi}, \quad i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\chi}_a = \left[\frac{1}{2m_a} (-i\partial_i)^2 + Z_a \hat{A}_0 \right] \hat{\chi}_a.$$

尚本研究では、環境の電荷密度分布は系の状態に影響されないとしている。

この方程式を解くことにより、電子場・原子核場の時間発展を追うことが出来る。本研究では特に、電子密度と、環境との相互作用によって変化した電子分布によって作られる局所分極ベクトルの振舞いについて議論する。

$$\langle \hat{\rho}_e \rangle = \langle \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \rangle, \quad \langle \hat{P}_e \rangle = -\frac{1}{4\pi} \text{grad} \int d^3 \vec{s} \frac{\langle \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{s}) \hat{\Psi}(t, \vec{s}) \rangle}{|\vec{r} - \vec{s}|}.$$

結果と考察

環境の電荷密度分布が時間的に一定である場合の、水素原子についてのシミュレーション結果を示す。図1は、電子密度の初期状態からの変化を表す。図1(b)を見ると、静電場中に置かれた場合でも電子密度が振動していることが分かる。その振動周期は、遷移の起こっている準位間のエネルギー差に相当している。

また、環境との相互作用によって変化した電子分布によって作られる局所分極ベクトルの分布の様子を図2に示す。従来の巨視的な誘電物性論では得られない、原子内部での局所的な分極の様子が可視化できた。

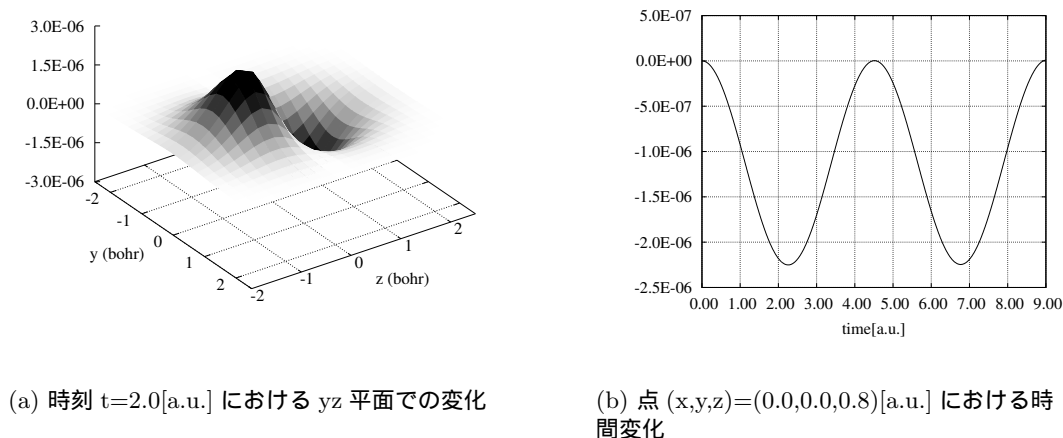
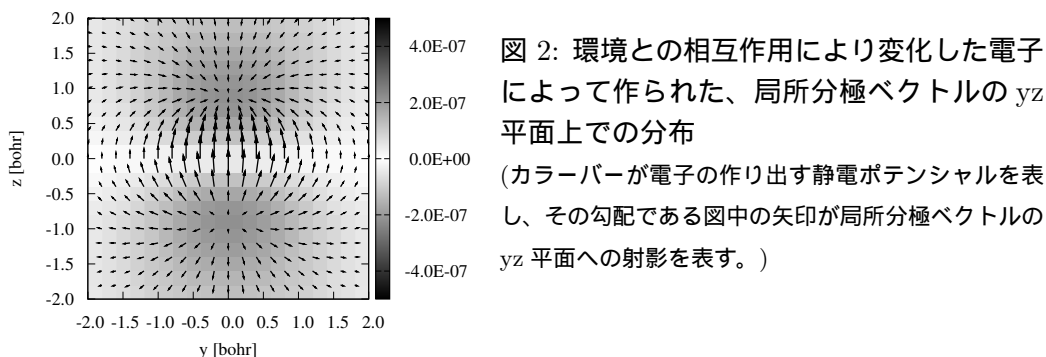


図 1: 電子密度の初期状態からの変化



以上の結果に加えて発表では、環境の電荷密度分布が時間に対し振動的であった場合、及び対象となる系が 2 原子系の場合についても報告する。

結論

Rigged QED によって、場の時間発展の様子を時々刻々追えることが確認された。また局所的に定義された物理量を計算することで、従来の巨視的な誘電物性論では見ることのできなかつた、より局所的で詳細な応答が見られることが分かった。今後は対象とする系や環境を拡大し、より様々な状況における動的で局所的な誘電物性について調べる予定である。

参考

- ¹ A. Tachibana, J. Mol. Mol. THEOCHEM. **943**, 138 (2010); A. Tachibana, J. Mol. Modelling **11**, 301 (2005)
- ² K. Doi et al., Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 205 (2008); A. Fukushima et al., Jpn. J. Appl. Phys. **49**, 121504 (2010); A. Fukushima et al., Jpn. J. Appl. Phys. **49**, 111504 (2010); M. Senami et al., Jpn. J. Appl. Phys. **51**, 031101 (2012)
- ³ QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>)