

## Rigged QED による各種物理量の時間発展

(京大院工) 市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知

## Time evolution of physical quantities in Rigged QED

(Kyoto University) Kazuhide Ichikawa, Masahiro Fukuda, Akitomo Tachibana

光と物質の相互作用を記述する理論で最も正確と考えられているのは量子電磁力学 (Quantum Electrodynamics, QED) であり、それに基づいて量子系における物理量の時間変化をシミュレートすることがわれわれは重要であると考え、計算方法の研究を行ってきた。この方法は Rigged QED [1] という原子核をシュレディンガー場として含む理論に基づいており、特に、原子分子系への適用を念頭において、束縛状態に則して場の演算子を展開することと、時間変化を非摂動的に数値計算するというを行っている。

このために以下のような方法を用いている [2]。電子陽電子を表すディラック場を  $\hat{\psi}(ct, \vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \hat{e}_{n^a}(t) \psi_{n^a}(\vec{r})$  のように電子の消滅演算子  $\hat{e}_{n^+}(t)$  と陽電子の生成演算子  $\hat{e}_{n^-}(t)$  で展開し、原子核を表すシュレディンガー場を  $\hat{\chi}_a(ct, \vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_S} \hat{c}_{ai}(t) \chi_{ai}(\vec{r})$  のように原子核  $a$  の消滅演算子  $\hat{c}_{ai}(t)$  で展開する。それぞれの生成消滅演算子を用いて励起演算子  $\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} \equiv \hat{e}_{p^c}^\dagger \hat{e}_{q^d}$  と  $\hat{\mathcal{C}}_{aij} \equiv \hat{c}_{ai}^\dagger \hat{c}_{aj}$  を定義する。電荷密度演算子など物理量の演算子はこれら励起演算子で表され、ハイゼンベルグ形式で時間発展を計算する。しかし、演算子の時間発展を計算してから初期状態  $|\Phi\rangle$  で期待値をとることを数値的に行う事は計算量が大きくなりすぎてしまうため、演算子の時間発展の式を次のような密度行列  $\mathcal{E}_{p^c q^d}(t) \equiv \langle \Phi | : \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(t) : | \Phi \rangle$  と  $\mathcal{C}_{aij}(t) \equiv \langle \Phi | : \hat{\mathcal{C}}_{aij}(t) : | \Phi \rangle$  の時間発展の式に近似することを行う。

密度行列の時間発展の式は次のようになる。電子陽電子の方は

$$i\hbar \frac{d\mathcal{E}_{p^c q^d}}{dt} = \sum_{r=1}^{N_D} \sum_{e=\pm} (-\mathcal{I}_{r^e p^c} \mathcal{E}_{r^e q^d} + \mathcal{I}_{q^d r^e} \mathcal{E}_{p^c r^e}), \quad (1)$$

ここで、 $\mathcal{I}_{p^c q^d} \equiv \mathcal{I}_{1p^c q^d} + \mathcal{I}_{2p^c q^d} + \mathcal{I}_{3p^c q^d} + \mathcal{I}_{4p^c q^d}$  で

$$\mathcal{I}_{1p^c q^d} = T_{p^c q^d}, \quad (2)$$

$$\mathcal{I}_{2p^c q^d} = -\frac{1}{c} \int d^3\vec{r} \vec{j}_{p^c q^d}(\vec{r}) \cdot \left( \langle \hat{\vec{A}}_{\text{rad}}(x) \rangle + \vec{\mathcal{A}}_A(x) \right), \quad (3)$$

$$\mathcal{I}_{3p^c q^d} = M_{p^c q^d}, \quad (4)$$

$$\mathcal{I}_{4p^c q^d} = \sum_{r,s=1}^{N_D} \sum_{e,f=\pm} (p^c q^d | r^e s^f) \mathcal{E}_{r^e s^f} + \sum_{a=1}^{N_n} \sum_{i,j=1}^{N_S} (p^c q^d | i_a j_a) \mathcal{C}_{aij}. \quad (5)$$

である。原子核の方は、

$$i\hbar \frac{d\mathcal{C}_{aij}}{dt} = \sum_{k=1}^{N_S} (-\mathcal{I}_{aki} \mathcal{C}_{akj} + \mathcal{I}_{ajk} \mathcal{C}_{aik}) \quad (6)$$

ここで、 $\mathcal{I}_{aij} \equiv \mathcal{I}_{1aij} + \mathcal{I}_{2aij} + \mathcal{I}_{3aij} + \mathcal{I}_{4aij}$  と

$$\mathcal{I}_{1aij} = T_{aij}, \quad (7)$$

$$\mathcal{I}_{2aij} = -\frac{1}{c} \int d^3\vec{r} \vec{j}_{aij}(\vec{r}) \cdot \left( \langle \hat{A}_{\text{rad}}(x) \rangle + \vec{A}_A(x) \right), \quad (8)$$

$$\mathcal{I}_{3aij} = \frac{Z_a e}{2m_a c^2} \int d^3\vec{r} \left( \langle \hat{A}_{\text{rad}} \cdot \hat{A}_{\text{rad}} \rangle + 2\langle \hat{A}_{\text{rad}} \rangle \cdot \vec{A}_A + \vec{A}_A \cdot \vec{A}_A \right) \rho_{aij}(\vec{r}), \quad (9)$$

$$\mathcal{I}_{4aij} = \sum_{p,q=1}^{N_D} \sum_{c,d=\pm} (p^c q^d | i_a j_a ) \mathcal{E}_{p^c q^d} + \sum_{b=1}^{N_n} \sum_{k,l=1}^{N_S} (i_a j_a | k_b l_b ) \mathcal{C}_{bkl}. \quad (10)$$

である。上の式で、 $\vec{A}_A \equiv \langle \Phi | : \hat{A}_A : | \Phi \rangle$  である。光子場のベクトル部分の演算子は  $\hat{A} = \hat{A}_{\text{rad}} + \hat{A}_A$  と、自由な Maxwell 方程式の解  $\hat{A}_{\text{rad}}$  と電流がある場合の特殊解  $\hat{A}_A$  の和で表されるが、詳しい表式は [2] を参照されたい。

上の式で現れる微分方程式の係数は次のような積分である。

$$T_{p^c q^d} \equiv -i\hbar c \int d^3\vec{r} \psi_{p^c}^\dagger(\vec{r}) \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} \psi_{q^d}(\vec{r}), \quad (11)$$

$$M_{p^c q^d} \equiv m_e c^2 \int d^3\vec{r} \psi_{p^c}^\dagger(\vec{r}) \gamma^0 \psi_{q^d}(\vec{r}). \quad (12)$$

$$(p^c q^d | r^e s^f) \equiv (Z_e e)^2 \int d^3\vec{r} d^3\vec{s} \psi_{p^c}^\dagger(\vec{r}) \psi_{q^d}(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \psi_{r^e}^\dagger(\vec{s}) \psi_{s^f}(\vec{s}), \quad (13)$$

$$(p^c q^d | i_a j_a) \equiv (Z_e e)(Z_a e) \int d^3\vec{r} d^3\vec{s} \psi_{p^c}^\dagger(\vec{r}) \psi_{q^d}(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \chi_{ai}^\dagger(\vec{s}) \chi_{aj}(\vec{s}). \quad (14)$$

$$T_{aij} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_a} \int d^3\vec{r} \chi_{ai}^*(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \chi_{aj}(\vec{r}), \quad (15)$$

$$(i_a j_a | k_b l_b) \equiv (Z_a e)(Z_b e) \int d^3\vec{r} d^3\vec{s} \chi_{ai}^*(\vec{r}) \chi_{aj}(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \chi_{bk}^*(\vec{s}) \chi_{bl}(\vec{s}). \quad (16)$$

また、

$$j_{p^c q^d}^k(\vec{r}) \equiv Z_e e c \left[ \psi_{p^c}^\dagger(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{q^d}(\vec{r}) \right]. \quad (17)$$

$$\rho_{aij}(\vec{r}) \equiv (Z_a e) \chi_{ai}^\dagger(\vec{r}) \chi_{aj}(\vec{r}). \quad (18)$$

$$j_{aij}^k(\vec{r}) \equiv -(Z_a e) \frac{i\hbar}{2m_a} \left\{ \chi_{ai}^\dagger(\vec{r}) \nabla^k \chi_{aj}(\vec{r}) - \left( \nabla^k \chi_{ai}^\dagger(\vec{r}) \right) \chi_{aj}(\vec{r}) \right\}. \quad (19)$$

のような関数とベクトルポテンシャルとの積分を含む。

この方程式をもとに、電荷密度演算子やストレステンソル密度演算子の期待値の時間発展を議論する。

## 参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).
- [2] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem., published online. [ DOI: 10.1002/qua.24087 ]