

Rigged QED による時間発展シミュレーションにおける ベクトルポテンシャルの効果について

(京大院工) ○市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知

Effect of vector potential in time evolution simulation of Rigged QED

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

われわれは原子分子系と光の相互作用の時間発展を量子電磁力学 (QED: Quantum Electrodynamics) に基づいて場の量子論的に計算するための定式化と数値計算法を研究している。Rigged QED とは電子場・光子場に加えて原子核場を量子場として取り入れたものである [1]。これまでに、この理論のもとで電子や原子核の生成消滅演算子の時間発展の式を密度行列の時間発展で近似するという定式化および数値計算を行っており、電荷密度に、仮想電子陽電子対生成と対消滅に起因していると考えられる「電子陽電子振動」という高速の振動が見られることを見いだした [2, 3]。

通常の QED と異なる点として、電子が束縛状態にある設定で時々刻々物理量の時間発展を計算したいということがある。われわれはこれらの問題を、電子場を束縛基底で展開して生成消滅演算子を定義し、ハイゼンベルク表示で時間発展を計算することで対処している。具体的には、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、外場中での Dirac 方程式の規格化された解 $\psi_{n^a}(\vec{r})$ ($a = +, -$ がそれぞれ n 番目の電子、陽電子軌道を表す) で展開して電子の消滅演算子 $\hat{e}_{n^+}(t)$ と陽電子の生成演算子 $\hat{e}_{n^-}(t)$ を定義する。これらを用いて励起演算子 $\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} \equiv \hat{e}_{p^c}^\dagger \hat{e}_{q^d}$ を定義すると、電荷密度演算子など物理量の演算子は励起演算子で表されるが、この励起演算子について、時間発展をハイゼンベルク表示で計算する。実際には、励起演算子を初期状態 $|\Phi\rangle$ で期待値をとった密度行列 $\mathcal{E}_{p^c q^d}(t) \equiv \langle \Phi | \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(t) | \Phi \rangle$ の時間発展の式を解いて、物理量演算子の期待値の時間発展を計算している。

光子場については、われわれはクーロンゲージでの正準量子化を採用している。ハイゼンベルク表示では、光子場のベクトルポテンシャル部分は自由な輻射場が量子化された部分と相互作用している物質場からの寄与の部分の遅延ポテンシャルの和で表される。静電場極限のハミルトニアンはこのベクトルポテンシャルを落としたもので、実在系を表現するためにはこの寄与を取り入れることが必要である。具体的には以下のようになる。

$$\begin{aligned} \hat{A}(ct, \vec{r}) &= \hat{A}_{\text{rad}}(ct, \vec{r}) + \hat{A}_A(ct, \vec{r}) \\ \hat{A}_{\text{rad}}^k(\vec{r}) &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\hat{a}(\vec{p}, \sigma) e^k(\vec{p}, \sigma) e^{-icp^0 t/\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} + \hat{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) e^{*k}(\vec{p}, \sigma) e^{icp^0 t/\hbar} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \right] \\ \hat{A}_A(ct, \vec{r}) &= \frac{1}{c} \int d^3\vec{s} \frac{\hat{j}_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}, \quad u = t - \frac{|\vec{r} - \vec{s}|}{c} \end{aligned}$$

ここで $\hat{a}(\vec{p}, \sigma)$ は光子の消滅演算子で、 \vec{p} は光子運動量、 σ は左右の円偏光を表し、 e^k は偏光ベクトルである。 \hat{j}_T は電流演算子の横波成分 ($\text{div} \hat{j}_T(\vec{r}) = 0$) である。遅延時間 u については、物質場が $t < 0$ でゼロであるとして、次のように変形して扱う [4]。

$$\hat{A}_A(ct, \vec{r}) = \frac{1}{c^2\pi} \int_0^t du \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp(i\alpha(u-t)^2) \int d^3\vec{s} \hat{j}_T(cu, \vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r} - \vec{s})^2}{c^2}\right)$$

また、以下では \hat{A}_A や \hat{j}_T の演算子を、 $|\Phi\rangle$ で期待値をとったものとして近似的に扱う。

これにより、電子の密度行列の時間発展方程式は、ボルンオッペンハイマー近似のもとで、自由輻射場の寄与を省略して書くと次のようになる。

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{E}_{n^a m^b}}{dt} &= \mathcal{O}_{n^a m^b} + \mathcal{O}_{n^a m^b}^\dagger \\ i\hbar\mathcal{O}_{n^a m^b} &= \sum_{r=1}^{N_D} \sum_{e=\pm} h_{m^b r^e} \mathcal{E}_{n^a r^e} + \sum_{r,p,q=1}^{N_D} \sum_{e,c,d=\pm} (m^b r^e | p^c q^d) (\mathcal{E}_{n^a r^e} \mathcal{E}_{p^c q^d} - \mathcal{E}_{n^a q^d} \mathcal{E}_{p^c r^e}) \\ &\quad + \sum_{r=1}^{N_D} \sum_{e=\pm} I_{j_T m^b r^e}(t) \mathcal{E}_{n^a r^e}\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}h_{n^a m^b} &= T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b} + \sum_{a=1}^{N_n} (Z_a e) V_{n^a m^b}(\vec{R}_a), \\ T_{n^a m^b} &= -i\hbar c \int d^3\vec{r} \psi_{n^a}^\dagger(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^i \partial_i \psi_{m^b}(\vec{r}), \quad M_{n^a m^b} = m_e c^2 \int d^3\vec{r} \psi_{n^a}^\dagger(\vec{r}) \gamma^0 \psi_{m^b}(\vec{r}) \\ V_{n^a m^b}(\vec{R}) &= (Z_e e) \int d^3\vec{s} \frac{\psi_{n^a}^\dagger(\vec{s}) \psi_{m^b}(\vec{s})}{|\vec{s} - \vec{R}|} \\ (n^a m^b | p^c q^d) &= (Z_e e)^2 \int d^3\vec{r} d^3\vec{s} \psi_{n^a}^\dagger(\vec{r}) \psi_{m^b}(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \psi_{p^c}^\dagger(\vec{s}) \psi_{q^d}(\vec{s}) \\ I_{j_T m^b r^e}(t) &= -\frac{1}{c^3 \pi} \sum_{p,q=1}^{N_D} \sum_{c,d=\pm} \int_0^t du \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp(i\alpha(u-t)^2) \\ &\quad \times \left\{ I_{jj,m^b r^e p^c q^d} \mathcal{E}_{p^c q^d}(u) + I_{jE,m^b r^e p^c q^d} \frac{d\mathcal{E}_{p^c q^d}}{dt}(u) \right\} \\ I_{jj,m^b r^e p^c q^d} &= \sum_{k=1}^3 \int d^3\vec{r} d^3\vec{s} j_{m^b r^e}^k(\vec{r}) j_{p^c q^d}^k(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r} - \vec{s})^2}{c^2}\right) \\ I_{jE,m^b r^e p^c q^d} &= \sum_{k=1}^3 \int d^3\vec{r} d^3\vec{s} j_{m^b r^e}^k(\vec{r}) E_{p^c q^d}^k(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r} - \vec{s})^2}{c^2}\right) \\ j_{p^a q^b}^k(\vec{r}) &= Z_e e c \left[\psi_{p^a}^\dagger(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{q^b}(\vec{r}) \right], \quad E_{p^c q^d}^k(\vec{s}) = -\frac{Z_e e}{4\pi} \int d^3\vec{t} \psi_{p^c}^\dagger(\vec{t}) \psi_{q^d}(\vec{t}) \frac{(\vec{t} - \vec{s})^k}{|\vec{t} - \vec{s}|^3}\end{aligned}$$

本発表では光子場のうちでベクトルポテンシャル、特に遅延ポテンシャルの寄与を計算するための方法を議論する。近似方法や数値計算方法を説明し、初期値でゼロと置いたベクトルポテンシャルがどのように時間発展し、電子場から構成される電流密度と自己無撞着になるかを議論する。また、電子電荷密度などの物理量の時間発展にどのように影響するかを議論する。

参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001); in *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, ed. by E. J. Brändas and E. S. Kryachko, (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003), Vol. 2, p. 211; J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).
- [2] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013)
- [3] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [4] “Electronic Stress with Spin Vorticity,” A. Tachibana, In *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity (Atoms, Molecules, and Clusters)*: CRC Press, Chap. 12, pp. 235-251 (2013).