

4成分 Rigged QED における電子質量のくりこみについて

(京大院工) 市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知

On the mass renormalization in the 4-component Rigged QED

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

4成分 Rigged QED (Quantum Electrodynamics, 量子電磁力学) 理論 [1, 2] においては、物質場としては4成分のディラック場である電子場とシュレーディンガー場である原子核場が存在し、それらの間の相互作用は光子場で表されるが、われわれはこの理論に基づいた原子分子系の時間空間分解シミュレーションの計算手法を研究している [3]。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 [4]。また、電子が光子を放出したのちそれを再吸収するという自己エネルギー過程を時間発展方程式に取り入れることで、電子の質量が増加するよう見えるという結果を得ている (図1) [5]。このような自己エネルギーの電子質量への寄与は観測される質量にくりこまれるべきであるが、従来の QED のくりこみの方法をそのまま適用することはできない。特に、くりこみが時間に依存して行われる必要があると予想される。本発表ではわれわれの試みについて議論する。

われわれの計算の設定を以下のようなものである。電子が束縛状態にあることを反映させるために、電子場を局在した束縛基底で展開して生成消滅演算子を定義する。また、それらの生成消滅演算子をハイゼンベルク表示の演算子と考え、その時間発展を計算する。具体的には、電子陽電子を表すディラック場を $\hat{\psi}(ct, \vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \hat{e}_{na}(t) \psi_{na}(\vec{r})$ と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。ここで、 $\psi_{na}(\vec{r})$ は原子核ポテンシャル存在下での Dirac 方程式の規格化された解 ($a = +, -$ がそれぞれ n 番目の電子、陽電子軌道を表す) である。光子場 $\hat{A}(ct, \vec{r})$ については、クーロンゲージでの正準量子化を採用し、自由な輻射場が量子化された部分 $\hat{A}_{\text{rad}}(ct, \vec{r})$ と相互作用している物質場からの寄与の部分 $\hat{A}_A(ct, \vec{r})$ の和で表す $\hat{A}(ct, \vec{r}) = \hat{A}_{\text{rad}}(ct, \vec{r}) + \hat{A}_A(ct, \vec{r})$ 。それぞれの定義は、

$$\hat{A}_{\text{rad}}^k(\vec{r}) = \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\hat{a}_{\vec{p},\sigma} e^{k(\vec{p}, \sigma)} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} + \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger e^{*k(\vec{p}, \sigma)} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \right]$$

$$\hat{A}_A(ct, \vec{r}) = \frac{1}{c} \int d^3\vec{s} \frac{\hat{j}_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}, \quad u = t - \frac{|\vec{r} - \vec{s}|}{c}$$

である。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 ($\text{div} \hat{j}_T(\vec{r}) = 0$) であり、その引数 u は遅延時間であるが、これは相対論的因果律と矛盾しないように過去からの影響を集約する効果を表している。

物理量の演算子は以下の励起演算子 $\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} \equiv \hat{e}_{p^c}^\dagger \hat{e}_{q^d}$ で表されるため (例えば電子電荷密度演算子は $\hat{\rho}_e(x) = \sum_{n,m=1}^{N_D} \sum_{a,b=\pm} \rho_{n^a m^b}(\vec{r}) \hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b}(t)$ 、ここで $\rho_{n^a m^b}(\vec{r}) \equiv (Ze e) \psi_{n^a}^\dagger(\vec{r}) \psi_{m^b}(\vec{r})$)、この励起演算子についての時間発展が必要である。[4, 5] では励起演算子を初期状態 $|\Phi\rangle$ で期待値を

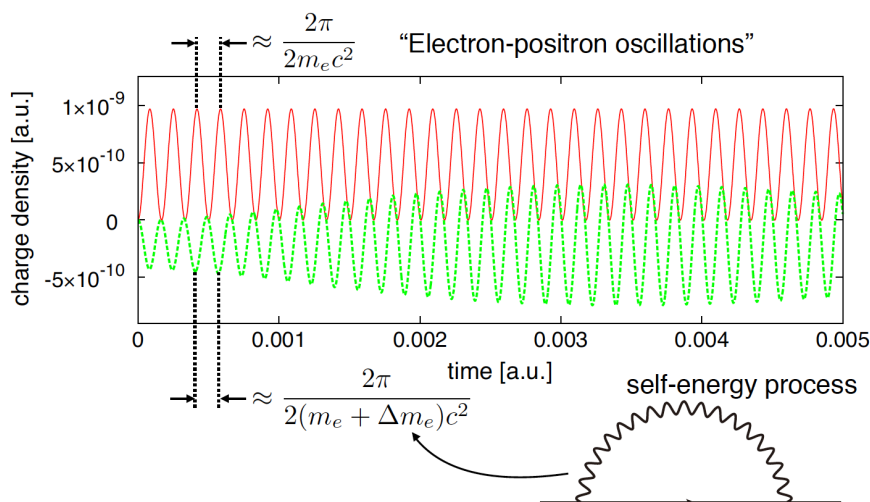


図 1: 水素原子の $(x, y, z) = (0, 0, 1)$ における電子電荷密度の時間発展を、自己エネルギープロセスを考慮しない場合（赤実線）と考慮する場合（緑破線）で比較したもの。見易さのため、考慮しない場合の値は、 10^4 倍されている。

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く、ということを行ったが、演算子の時間発展と特定の物理現象の設定との分離を明確にするため、演算子の行列表示の時間発展をまず追跡するという方法を検討する。ここでいう行列表示は、 $|\Phi_i\rangle = C_i [\hat{e}_{n^+}^\dagger, \hat{e}_{n^-}, \hat{a}_{p\sigma}^\dagger] |0\rangle$ (C_i は $t = 0$ での電子陽電子・光子の生成演算子のあらゆる組み合わせの一つを表す) としたとき、 $\langle \Phi_i | \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(t) | \Phi_j \rangle$ というものである。

参考文献

- [1] A. Tachibana, Field Energy Density In Chemical Reaction Systems. In *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, E. J. Brändas and E. S. Kryachko Eds., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2003), Vol. II, pp 211-239.
- [2] A. Tachibana, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).
- [3] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [4] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013)
- [5] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. *published online*
 DOI: 10.1002/qua.24726.