4P105

Rigged QED に基づく外部電磁場下における局所物理量の時間発展

（京大院工）◯ 谷内 公紀, 福田 将大, 市川 和秀, 立花 明知

Time Evolution of Local Quantities in External Electromagnetic Field Based on Rigged QED

（Kyoto Univ.）◯ Koki Taniuchi, Masahiro Fukuda, Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana

局所物性を評価するためには場の量子論に基づいて厳密に定義された力学的な局所物理量 [1, 2, 3]（スピン角運動量密度、スピントルク密度、ツェータ力密度など）の時間発展を計算する必要がある。そこで本研究では電子をディラック場として、光子を輻射場として、更には原子核をシュレーディンガー場として場の量子論的に扱う Rigged QED(Quantum ElectroDynamics) [1, 2] に基づいた時間発展シミュレーション [4, 5, 6] を行う。今回は外部電磁場下において Rigged QED に基づいた数値シミュレーションにより局所物理量の時間発展を計算し、その結果について考察する。

本研究では、外部電場や外部磁場もしくは核磁気モーメントが加わる状況下における原子・分子系について考える。Rigged QED に基づいた場合ゲージポテンシャルは、原子・分子系 A と外部環境としての媒質 M に領域を分割しそれぞれの領域において電荷密度と電流密度の横波成分に関する式を積分することで得られる [2]。これらは以下のように表される。

$$\hat{A}^{\mu}(ct,\vec{r}) = \hat{A}^{\mu}_{\mathrm{rad}}(ct,\vec{r}) + \hat{A}^{\mu}_{A}(ct,\vec{r}) + \hat{A}^{\mu}_{M}(ct,\vec{r}), \tag{1}$$

$$\hat{A}^{0}_{X}(ct,\vec{r}) = \int_X d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(ct,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, \quad (X = A, M), \tag{2}$$

$$\hat{\vec{A}}_{X}(ct,\vec{r}) = \frac{1}{c}\int_X d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, \quad u = t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}, \quad (X = A, M). \tag{3}$$

ここで、$\hat{A}^0_A(x), \hat{A}^0_M(x)$ は、それぞれ内部電場および外部電場に対応するスカラーポテンシャルである。$\hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}}(x), \hat{\vec{A}}_A(x), \hat{\vec{A}}_M(x)$ はそれぞれ自由輻射場、遅延ポテンシャル、外部環境をつくるポテンシャルに対応する。$\hat{\rho}, \hat{\vec{j}}_T$ はそれぞれ電荷密度および電流密度の横波成分を表し、c は真空での光速である。

外部環境の設定方法としては、例えば対象となる原子・分子系に対して十分大きい半径 R のリングに定常電流 $\vec{j}_M(\vec{s})(|\vec{j}_M(\vec{s})| = j)$ を流し、そのリング内に定常な磁場をつく

ることを仮定する。この場合は、以下のように表される $\hat{\vec{A}}_M(x)$ を用いればよい。

$$\vec{A}_M(\vec{r}) = \int_M \frac{\vec{j}_M(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} d^3\vec{s} \approx \left(0,\ -\frac{\pi j}{R}z,\ \frac{\pi j}{R}y\right). \tag{4}$$

このときリングは yz 平面上にあり、x 方向に磁場をかける場合に対応している。

次に別の外部環境として核磁気モーメントを考える。核スピンを QED の枠組みで扱うために原子核内部に仮想的な環電流 $\vec{J}(ct,\vec{r})$ を考える。すると核磁気モーメントは、

$$\vec{\mu}_K(t) = \frac{1}{2}\int \vec{r}\times\vec{J}(ct,\vec{r})d^3\vec{r}, \tag{5}$$

と表すことができ、このときベクトルポテンシャルは、

$$\vec{A}_{M_K}(x) = \frac{\vec{\mu}_K(t)\times(\vec{r}-\vec{R}_a)}{|\vec{r}-\vec{R}_a|^3} \tag{6}$$

となる。この $\vec{A}_{M_K}(x)$ を採用することにより、核磁気モーメントの影響を取り入れることができる。

発表では原子・分子系の電子状態が外部環境をつくるポテンシャル $\hat{\vec{A}}_M(x)$ により及ぼされる影響を局所的な物性の観点から議論していく予定である。

参考文献

[1] A. Tachibana, 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.

[2] A. Tachibana, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).

[3] A. Tachibana, J. Comput. Chem. Jpn., **13**, 18 (2014).

[4] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. 113, 3, 190-202 (2013).

[5] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem., published online, DOI: 10.1002/qua.24726.

[6] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana
http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html