4P088

QEDによる時間発展シミュレーションにおける 遅延ポテンシャル項の数値積分について

（京大院工）○稲田 健，福田 将大，内藤 健人，市川 和秀，立花 明知

Numerical integration of the retarded potential term in time evolution simulation based on QED

(Kyoto University) ○ Ken Inada, Masahiro Fukuda, Kento Naito,
Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana

我々は4成分 Rigged QED(Quantum ElectroDynamics, 量子電磁力学) [1] に基づいた原子・分子系の時間発展シミュレーション方法の開発を行っている [2,3]。Rigged QED は電子・光子・原子核を全て量子場として扱う理論であり、電磁相互作用は光子の受け渡しであるとみなされる。光子の伝播速度は厳密には有限であるため、離れた位置での電流の影響は一瞬では伝わらずに遅れて到達する。この時間遅れを遅延時間と呼び、遅延ポテンシャルとはその過去の電流の効果を表す。

QED に基づいて場の量子論としての計算を行うためには QED ハミルトニアンの準備が必要である。我々はこの準備を thermalization と呼び、その一つに遅延ポテンシャルの影響を考慮するということがある。系の時間発展を追うにあたって演算子の時間発展方程式を導出すると、遅延ポテンシャルに起因する積分項が現れるが、この項は解析的には計算できない。そのため数値積分を用いて計算する必要があるが、被積分関数が激しく振動するため、通常の数値積分法では計算の収束が困難となる。そこで本研究では、二重指数関数型変換を用いて遅延ポテンシャル項の数値積分を効率的に行う手法を述べる。特に、電流の横成分からの寄与を得るために、縦成分の寄与を計算して全体から引き去るという方法とその数値計算結果を述べる。

時間発展シミュレーションに際して、ハイゼンベルク描像のもとで以下のような定式化を行った。光子場についてはクーロンゲージでの正準量子化を採用する。また原子核場については BO 近似を適用する。電子場は $\hat{\psi}(ct,\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D}\sum_{a=\pm}\hat{e}_{n^a}(t)\psi_{n^a}(\vec{r})$ のように、原子核が作る外場中での Dirac 方程式の解 $\psi_{n^a}(\vec{r})$ で展開し、ここで電子の消滅演算子 $\hat{e}_{n^+}(t)$ と陽電子の生成演算子 $\hat{e}_{n^-}(t)$ を定義する。また、これらを用いて電子の励起演算子 $\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d} \equiv \hat{e}^\dagger_{p^c}\hat{e}_{q^d}$ を定義する。Dirac 方程式に電子場の解を代入することで、電子の生成消滅演算子の時間発展方程式が導かれる。ここで、初期時刻 t_0 以前に物質場はないという初期条件と、未来の物質場は現在に影響しないという因果律を設定することで、以下の時間発展方程式が導出される。

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{d\hat{e}_{n^a}}{dt}(t)\\
=\;& \sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}(T_{n^am^b}+M_{n^am^b})\hat{e}_{m^b}(t) + \sum_{m,p,q=1}^{N_D}\sum_{b,c,d=\pm}(n^am^b|p^cq^d)\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}(t)\hat{e}_{m^b}(t)\\
-\;& \frac{1}{c^3\pi}\sum_{m,p,q=1}^{N_D}\sum_{b,c,d=\pm}\int_{t_0}^{t}du'\left\{K_{jj,n^am^bp^cq^d}(t-u')\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}(u') + K_{jE,n^am^bp^cq^d}(t-u')\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}}{dt}(u')\right\}\hat{e}_{m^b}(t)\\
-\;& \sqrt{\frac{1}{2\pi^2\hbar c}}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\left[\mathcal{F}_{n^am^b\vec{p}_\sigma}(t)\hat{a}_{\vec{p}_\sigma} + \mathcal{F}^*_{m^bn^a\vec{p}_\sigma}(t)\hat{a}^\dagger_{\vec{p}_\sigma}\right]\hat{e}_{m^b}(t)
\end{aligned}$$

この中に現れる 2 つの遅延ポテンシャル項は以下のように定義される。

$$K_{jj,n^a m^b p^c q^d}(t-u') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha\, I_{jj,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \exp\left(i\alpha(t-u')^2\right)$$
$$K_{jE,n^a m^b p^c q^d}(t-u') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha\, I_{jE,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \exp\left(i\alpha(t-u')^2\right)$$

ここで、

$$I_{jj,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \equiv \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) j^k_{p^c q^d}(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$$
$$I_{jE,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \equiv \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) E^k_{p^c q^d}(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$$

$$j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) = Z_e ec[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})], Z_e = -1 \qquad \text{(電流密度関数)}$$

$$E^k_{n^a m^b}(\vec{R}) = -\frac{Z_e e}{4\pi}\int d^3\vec{s}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{s})\psi_{m^b}(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{R})^k}{|\vec{s}-\vec{R}|^3} \qquad \text{(電場積分)}$$

$$T_{n^a m^b} = -i\hbar c\int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\partial_k\psi_{m^b}(\vec{r}) \qquad \text{(運動エネルギー積分)}$$

$$M_{n^a m^b} = m_e c^2\int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\psi_{m^b}(\vec{r}) \qquad \text{(質量エネルギー積分)}$$

$$(n^a m^b|p^c q^d) = (Z_e e)^2\int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\psi_{q^d}(\vec{s}) \qquad \text{(二電子積分)}$$

$$\mathcal{F}_{n^a m^b \vec{p}_\sigma}(t) = \sum_{k=1}^{3} e^k(\vec{p},\sigma)^a e^{-icp^0 t/\hbar} F^k_{n^a m^b}(\vec{p})$$

$$F^k_{n^a m^b}(\vec{p}) = \int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

であり、これらの項は展開関数にガウス型関数を用いれば解析的に計算することができる。電子場の演算子の展開においては、原点においた水素原子の波動関数を用いて展開関数系を作る。また電流は、

$$\hat{\vec{j}}(x) = \hat{\vec{j}}_T(x) + \hat{\vec{j}}_L(x)$$

のように電流を横成分と縦成分に分けており、$K_{jE,n^a m^b p^c q^d}(t-u')$ は電流の横成分からの寄与を表す。今回は $K_{jE,n^a m^b p^c q^d}(t-u')$ について二重指数関数型変換を用いて計算を行い、積分項の振る舞いを調べる。

参考文献

[1] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010); J. Math. Chem. published online (2015).

[2] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013); **114**, 1567(2014).

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