

## QED の実時間シミュレーションにおける双対コーシー問題と thermalization に関する研究

(京大院工) ○伊藤 圭人, 市川 和秀, 立花 明知

### Study on the dual Cauchy problem and thermalization in the real-time simulation of Quantum ElectroDynamics

(Kyoto University) ○Keito Ito, Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana

QED(Quantum ElectroDynamics, 量子電磁力学) とは、電子や陽電子などの荷電粒子と光子の相互作用を記述する場の量子論である。我々はこの理論を用いて原子・分子系の時々刻々とした時間発展を追う実時間シミュレーションを行う手法を開発している [1, 2]。

場の量子論において、物理量はハイゼンベルク表示の物理量演算子  $\hat{F}^{(H)}(t, t_i)$  をハイゼンベルク表示の状態ケット  $|\tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t)\rangle_H$  で挟んだ期待値の形で表される。

$$\langle \tilde{F}(t) \rangle_{\alpha_i, t_i} = \frac{{}_H \langle \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) | \hat{F}^{(H)}(t, t_i) | \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) \rangle_H}{{}_H \langle \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) | \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) \rangle_H} \quad (1)$$

引数  $\alpha_i, t_i$  は事象  $\alpha_i$  が時刻  $t_i$  に開始したことを表す。状態ケットは波動関数  $\tilde{\Phi}_N(\alpha_i, t_i; \omega_1, \dots, \omega_N, t)$  を係数として基底ケットで展開する。シュレーディンガー表示では以下のように書ける。

$$|\tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t)\rangle_S = \sum_{N=0}^{\infty} \int d\omega_1 \cdots d\omega_N |t_i; \omega_1, \dots, \omega_N, t_i\rangle_S \tilde{\Phi}_N(\alpha_i, t_i; \omega_1, \dots, \omega_N, t) \quad (2)$$

引数  $\omega_1, \dots, \omega_N$  は電子、陽電子または光子を表す。したがって、物理量の時間発展を知るためには、演算子と波動関数両方の時間発展を知る必要がある [3]。これを双対コーシー問題と呼ぶ。

QED に基づいた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。この準備作業を thermalization と呼ぶ。thermalization 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。本研究では、QED ハミルトニアン に現れる励起演算子の計算に遅延ポテンシャルに由来する項を加えて波動関数の時間発展を計算し、thermalization の効果を検証した。

計算に際し、ハイゼンベルク描像のもとで電子場・光子場の正準量子化を行う。光子場はマクスウェル方程式からクーロンゲージを用いて生成消滅演算子  $\hat{a}_{\vec{p}\sigma}$  を使って定義する。電子場は電子の生成演算子  $\hat{e}_{n+}(t)$  と陽電子の消滅演算子  $\hat{e}_{n-}(t)$  を用いて、 $\hat{\psi}(x) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \psi_{na}(\vec{r}) \hat{e}_{na}(t)$  のように局在した展開関数  $\psi_{na}(\vec{r})$  (Dirac-Hartree-Fock 方程式の解) で展開する。

波動関数は場の演算子と同じ展開関数で展開する。波動関数の時間発展方程式はシュレーディンガー方程式から導くことができ、波動関数の展開係数を  $c_N$  とおくと、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_N(t) = \sum_M H_{NM}(t) c_M(t) \quad (3)$$

と書ける。ここで  $H_{NM}(t; t)$  は QED ハミルトニアン演算子を数表示の基底ケットで挟んで行列表示したものである。

ハミルトニアン演算子を電子と光子の生成消滅演算子で展開し整理すると、励起演算子  $\hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b} = \hat{e}_{n^a}^\dagger \hat{e}_{m^b}$  で表すことができる。励起演算子の時間発展は  $\hat{\mathcal{O}}_{n^a m^b} = \hat{e}_{n^a}^\dagger \frac{d\hat{e}_{m^b}}{dt}$  を定義して

$$\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b}(t)}{dt} = (\hat{\mathcal{O}}_{m^b n^a}(t))^\dagger + \hat{\mathcal{O}}_{n^a m^b}(t) \quad (4)$$

と書ける。 $\hat{O}_{n^a m^b}$  は従来用いてきた場の方程式を変形し、以下のように書ける。

$$\begin{aligned}
i\hbar\hat{O}_{n^a m^b} &= \sum_{r=1}^{N_D} \sum_{e=\pm} \left\{ T_{m^b r^e} + M_{m^b r^e} + \sum_{p=1}^{N_D} \sum_{c=\pm} (m^b r^e | p^c p^c) \right\} \hat{\mathcal{E}}_{n^a r^e}(t) \\
&\quad - \sum_{r,p,q=1}^{N_D} \sum_{e,c,d=\pm} (m^b r^e | p^c q^d) \hat{\mathcal{E}}_{n^a q^d}(t) \hat{\mathcal{E}}_{p^c r^e}(t) \\
&\quad - \frac{1}{c^3 \pi} \sum_{r,p,q=1}^{N_D} \sum_{e,c,d=\pm} \int_{t_0}^t du' \left\{ K_{jj,m^b r^e p^c q^d}(t-u') \hat{\mathcal{E}}_{n^a r^e}(t) \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(u') \right. \\
&\quad \left. + K_{jE,m^b r^e p^c q^d}(t-u') \hat{\mathcal{E}}_{n^a r^e}(t) \frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}}{dt}(u') \right\} \\
&\quad - \sqrt{\frac{1}{2\pi^2 \hbar c}} \sum_{r=1}^{N_D} \sum_{e=\pm} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3 \vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[ \mathcal{F}_{m^b r^e \vec{p} \sigma}(t) \hat{\mathcal{E}}_{n^a r^e}(t) \hat{a}_{\vec{p} \sigma} + \mathcal{F}_{r^e m^b \vec{p} \sigma}^*(t) \hat{\mathcal{E}}_{n^a r^e}(t) \hat{a}_{\vec{p} \sigma}^\dagger \right]
\end{aligned} \tag{5}$$

ここで、 $T_{m^b r^e}$  は運動エネルギー積分、 $M_{m^b r^e}$  は質量エネルギー積分、 $(m^b r^e | p^c q^d)$  は二電子積分、 $\mathcal{F}_{m^b r^e \vec{p} \sigma}(t)$  は輻射光子場由来の積分である。右辺第3項が遅延ポテンシャル由来の項 [1, 4] で、

$$K_{jj,n^a m^b p^c q^d}(t-u') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha I_{jj,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \exp(i\alpha(t-u')^2) \tag{6}$$

$$K_{jE,n^a m^b p^c q^d}(t-u') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha I_{jE,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \exp(i\alpha(t-u')^2) \tag{7}$$

および、

$$I_{jj,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \equiv \sum_{k=1}^3 \int d^3 \vec{r} d^3 \vec{s} j_{n^a m^b}^k(\vec{r}) j_{p^c q^d}^k(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{8}$$

$$I_{jE,n^a m^b p^c q^d}(\alpha) \equiv \sum_{k=1}^3 \int d^3 \vec{r} d^3 \vec{s} j_{n^a m^b}^k(\vec{r}) E_{p^c q^d}^k(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{9}$$

である。 $j_{n^a m^b}^k(\vec{r})$  は電流密度関数、 $E_{p^c q^d}^k(\vec{s})$  は電場積分である。遅延ポテンシャルは光子の伝播速度が有限であることから生じる過去の影響の到達の遅れを表す。

Thermalization を行うには、遅延ポテンシャルを計算するだけではなく、初期値を適切に選ぶ必要もある。現状では初期値に量子力学波動関数のみを代入しており、transversal current が物理的に完全に欠落している。これは、量子力学は荷電粒子の力学に関して物理的に無内容であるためである。適切な初期値の選択方法が今後の課題である。

## 参考文献

- [1] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. 113, 190 (2013); 114, 1567 (2014); M. Fukuda, K. Naito, K. Ichikawa and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. 116, 932 (2016).
- [2] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana <http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [3] A. Tachibana, J. Math. Chem. 53, 1943 (2015); 54, 661 (2016).
- [4] A. Tachibana, Electronic Stress with Spin Vorticity. In *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry*, S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj Eds., CRC Press, Florida (2013), pp 235-251.