

## QED の実時間シミュレーションにおける演算子期待値の時間発展と thermalization

(京大院工) ○市川 和秀, 立花 明知

### Time evolution of the expectation value of the operators and thermalization in the real-time simulation of QED

(Kyoto University) ○Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana

原子・分子系を従来の量子力学の枠内で扱う方法によると、波動関数の確率解釈を必要とし、時間平均された描像しか得ることができない。時間および空間分解されたクリアな描像を得るためには、場の量子論に基づいて、場の演算子の時間発展を時々刻々と求める必要がある。原子・分子系を扱うために必要な場の量子論は Rigged QED (Quantum Electrodynamics, 量子電磁力学) [1] であり、電子と原子核がそれぞれ Dirac 場と Schrödinger 場の演算子で表され、それら荷電粒子間の相互作用は  $U(1)$  ゲージ場である光子が媒介している。相互作用の形はゲージ不変性から決められている。

場の量子論である QED は、従来より共変摂動論による解法が完成しているが、これは無限の過去 (in 状態) と無限の未来 (out 状態) の間の遷移しか知ることができず、演算子期待値の時間発展を時々刻々と求めるには不十分で、非摂動的な方法の開発が必要である。特に、場の理論である QED のハミルトニアンは時間に依存し、演算子と状態ケット (波動関数) のそれぞれの時間発展を考慮する手法が必要である。このような QED における「双対コーシー問題」[2,3] を扱うには、QED の正準変数から構成されるある物理量演算子  $\hat{F}(t)$  の期待値の時間発展を

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

と計算する必要がある [3]。ここで、 $\alpha_i, t_i$  は、状態ケットが時刻  $t_i$  において設定されたある事象  $\alpha_i$  についてのものであることを示している。チルダは、状態ケットが時間に依存して繰り込まれた場の演算子で構成されたものであることを示している。添え字  $H$  は、ハイゼンベルク描像であることを示し、 $t_i$  から  $t$  への時間推進演算子  $\hat{U}(t, t_i)$  を用いて  $\hat{F}^{(H)}(t, t_i) = \hat{U}(t, t_i) \hat{F}(t) \hat{U}(t, t_i)$  である。この  $\hat{U}(t, t_i)$  は、演算子の時間順序積を表す  $T$  を用いて  $\hat{U}(t, t_i) = T e^{\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^t dt' \hat{H}_{\text{QED}}(t')}$  と表され、ここで  $\hat{H}_{\text{QED}}(t)$  は QED のハミルトニアン演算子であり、上で述べたように時間に依存する。状態ケットについては、 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t)\rangle_H = 0$  であり、波動関数と基底ケットの時間変化が互いに打ち消し合う描像である。QED のような相互作用する場の量子論において、well-defined な基底ケットを定義し、時間依存する繰り込みの処方を与えることは容易ではないが、文献 [3] において「 $\alpha$  振動子」を用いた理論が提案されている。この方法は現段階ではそのまま数値計算に適用することが難しいため、本発表では先行研究 [1,4-7] に引き続き、場の演算子に基づいて定式化を行う。特に、QED 演算子を場の方程式と矛盾がないように構成する操作である thermalization、QED ハミルトニアン演算子の時間発展、QED の演算子期待値の時間発展がどのように計算されるかを現状採用している仮定とともに述べる。

QED では電子と陽電子は 4 成分ディラック場演算子  $\hat{\psi}(ct, \vec{r})$ 、光子はゲージ対称性を持つベクトル場演算子  $\hat{A}(ct, \vec{r})$  で表される (クーロゲージ  $\vec{\nabla} \cdot \hat{A}(x) = 0$  を用いる)。以下、時空座標を  $x = (ct, \vec{r})$  と表す。電磁気学の単位系はガウス単位系を用い、 $\hbar$  は換算プランク定数、 $c$  は真空中の光速、 $e$  は電子電荷の大きさ ( $e$  は正)、 $m_e$  は電子質量を表す。 $\gamma^\mu$  はガンマ行列である。QED のハミルトニアン演算子は、 $\hat{H}_{\text{QED}} = \int d^3\vec{r} : \hat{H}_{\text{QED}}(x) :$  と書けるが、ここで、 $::$  は  $c$  数の無限大を無視するという正規積を表し、ハミルトニアン密度演算子は、

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{QED}}(x) = & \frac{1}{8\pi} \hat{E}_T^2(x) + \frac{1}{8\pi} (\vec{\nabla} \times \hat{A}(x))^2 - \frac{1}{c} \hat{j}_e(x) \cdot \hat{A}(x) + \frac{1}{2c} \hat{j}_{e0}(x) \hat{A}_0(x) \\ & - i\hbar c \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^k \partial_k \hat{\psi}(x) + m_e c^2 \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \hat{\psi}(x) \end{aligned} \quad (2)$$

である。ここで電子電荷密度演算子  $\hat{\rho}_e(x) = \hat{j}_{e0}(x)/c = Z_e e \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \hat{\psi}(x)$  および電子電流密度演算子  $\hat{j}_e(x) = Z_e e c \hat{\psi}^\dagger(x) \vec{\gamma} \hat{\psi}(x)$  で、 $Z_e = -1$  である。電場横成分は  $\hat{E}_T(x) = -\frac{1}{c} \hat{A}(x) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{A}(x)}{\partial t}$  である。

本発表では、光子場を積分形で表すことにする [5, 7]。具体的な形は、 $\hat{A}(ct, \vec{r}) = \hat{A}_{\text{rad}}(ct, \vec{r}) + \hat{A}_A(ct, \vec{r})$  のように自由輻射場と遅延ポテンシャル項に分けられ、それぞれ

$$\begin{aligned} \hat{A}_{\text{rad}}^k(\vec{r}) &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[ \hat{a}_{\vec{p},\sigma} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} e^{-icp^0 t/\hbar} + \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger e^{*i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} e^{icp^0 t/\hbar} \right] \\ \hat{A}_A(ct, \vec{r}) &= \frac{1}{c^2\pi} \int_{t_0}^t du' \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \int d^3\vec{s} \hat{j}_T(cu', \vec{s}) \exp\left(i\alpha \left( (u' - t)^2 - \frac{(\vec{r} - \vec{s})^2}{c^2} \right)\right) \end{aligned} \quad (3)$$

と表される。ここで、 $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}$  は光子の消滅演算子、 $\vec{p}$  は光子運動量、 $\sigma$  は左右の円偏光を表し、 $e^k$  は偏光ベクトル、 $\hat{j}_T$  は電流演算子の横成分 ( $\text{div} \hat{j}_T(\vec{r}) = 0$ ) である。 $\hat{A}(ct, \vec{r})$  および  $\hat{j}_e(x)$  の時間発展を計算し、thermalization の指標とする。

## 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. Math. Chem. **53**, 1943 (2015).
- [3] A. Tachibana, J. Math. Chem. **54**, 661 (2016).
- [4] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana  
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [5] 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
- [6] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013); **114**, 1567 (2014).
- [7] M. Fukuda, K. Naito, K. Ichikawa, and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **116**, 932 (2016).