

QED の実時間シミュレーションにおける時間発展の二元性に関する研究

○伊藤 圭人¹, 福田 将大¹, 市川 和秀¹, 立花 明知¹¹京大院工

ito.keito.68c@st.kyoto-u.ac.jp

QED (Quantum Electrodynamics, 量子電磁力学) とは電子や陽電子といった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方法の開発を行っている[1,2]。場の量子論において物理量は物理量演算子を状態ケットで挟んだ期待値で与えられる。状態ケットは波動関数を係数として基底ケットの線形結合で展開する。したがって、量子場の実時間シミュレーションでは、演算子と波動関数両方の時間発展を知る必要がある (時間発展の二元性)。演算子の時間発展については過去の研究で扱ってきたため、今回は波動関数の時間発展を計算した。

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定義する。ディラック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、 $\hat{\psi}(x) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \psi_{n^a}(\vec{r}) \hat{e}_{n^a}(t)$ のように局在した展開関数 $\psi_{n^a}(\vec{r})$ (Dirac-Hartree-Fock 方程式の解) で展開する。

相互作用する理論では通常の場合の演算子で Fock 空間を構成することはできない。そこで、くりこまれた場の演算子を用いて基底ケット $|\tilde{\Psi}_N\rangle$ を定義する。

波動関数は場の演算子と同じ展開関数で展開する。シュレーディンガー方程式に代入することで、その展開係数 $c_N(t)$ の時間発展方程式が以下のように得られる。

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

ここで $H_{NM} = \langle \tilde{\Psi}_N | \hat{H}_{QED}(t) | \tilde{\Psi}_M \rangle$ は QED ハミルトニアン演算子の行列要素である。したがって、ハミルトニアン演算子の時間発展がわかれば波動関数の時間発展が計算できる。

ハミルトニアン演算子は励起演算子 $\hat{E}_{p^c q^a}(t) = \hat{e}_{p^c}^\dagger(t) \hat{e}_{q^a}(t)$ を用いて表すことができる。励起演算子の行列要素の時間発展方程式は $d\mathcal{E}_{n^a m^b NM}(t)/dt = \mathcal{O}_{m^b n^a MN}^*(t) + \mathcal{O}_{n^a m^b NM}(t)$ と書け、 $\mathcal{O}_{n^a m^b NM}(t)$ の時間発展は従来用いてきた場の方程式を変形して求めることができる。

本来、波動関数は電子・陽電子・光子の組み合わせについて 1 つずつ存在し、その無限の組み合わせを考えなければならない。しかし、場の量子論における数値計算では少し粒子を加えるだけでも自由度が格段に増える。今回は、電子 1 個と光子 1 個による基底ケットではられた部分空間において波動関数の時間発展を計算した。

参考文献

- [1] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013); **114**, 1567 (2014); DOI: 10.1002/qua.25103.
 [2] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>