

Primary Rigged QED 理論に基づいた誘電応答に関する研究

○築島 千馬¹, 瀬波 大士¹, 立花 明知¹¹京大院工

tsukishima.kazuma.55v@st.kyoto-u.ac.jp

Quantum Electrodynamics (量子電磁力学, QED)は場の量子論のひとつであり、ミクロの世界を精密に描像できる。例えば電子の二重スリットについて、スクリーン上における電子の到達位置は量子力学では確率解釈でしか与えられないが、QEDの場合、時々刻々と到達位置を予言できる。これがQEDに基づいた計算を行う動機のひとつである。また、近年集積回路の微細化が進んでおり、現在MOSFET(Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor)のゲート絶縁膜厚が2nm以下までに薄い製品が存在している。このような数nmの領域での誘電特性は原子・分子レベルのミクロな観点からの議論が必要であり、場の量子論による局所的な物理量が適している。

本研究ではPrimary Rigged QED理論[1,2]と呼ばれる電子を2成分スピノルとして記述する理論に基づくシミュレーションを行う。シミュレーションに際して物理量計算には我々が開発しているプログラムパッケージQEDynamics[3]を用いる。計算対象としてポジトロニウムを扱う。

本研究では演算子の時間発展に加えて波動関数の時間発展を計算できるようコードの拡張を行う。ポジトロニウムの波動関数の時間発展式は以下のように近似を取り入れて扱う。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi^X = \sum H_{XY} \Phi^Y, \quad (1)$$

$$X, Y = 1_m 1_n 0, 1_m 1_n 1_l, 1_m 1_n 2_{l_1 l_2}, \quad (2)$$

$$H_{XY} = \langle X | \hat{H} | Y \rangle, \quad (3)$$

$$|X, Y\rangle = |1_{e_m^-} 1_{e_n^+} 0_\gamma\rangle, |1_{e_m^-} 1_{e_n^+} 1_{\gamma l}\rangle, |1_{e_m^-} 1_{e_n^+} 2_{\gamma l_1 l_2}\rangle. \quad (4)$$

H_{XY} の計算は計算コストを抑えるためにハミルトニアン内の大きな寄与を与える項のみを計算し、波動関数 Φ の時間発展計算は差分法によって計算している。また時間発展計算にはハミルトニアンを要するが、QEDに基づくハミルトニアンの導入にはthermalizationを用いる。波動関数の時間発展を考慮するにあたり物理量計算を開始する時刻での状態ベクトルを自由に設定することができるようになり、この設定時刻の違いによる状態ベクトルの違いがQEDにおけるハミルトニアンの時間依存性を通じて物理量の違いとして現れることが予想される。

今回物理量としてポジトロニウムの誘電応答に着目する。過去にポジトロニウムを対象としてQEDynamicsを用いた誘電応答の計算は報告されていないため、水素原子の誘電応答と比較することで対象をポジトロニウムとした計算の妥当性を検証する。そして得られた計算結果から正しくコーディングされているかを確認する。

- [1] A. Tachibana, "Electronic Stress with Spin Vorticity", Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity (Atoms, Molecules, and Clusters); Eds. by S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj; Taylor & Francis / CRC Press, Chapter 12, pp. 235-251 (2013).
- [2] A. Tachibana, J. Mol. Modeling 11, 301 (2005); J. Mol. Struct.: THEOCHEM 943, 138 (2010).
- [3] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, and A. Tachibana, (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>).