基礎物理学研究所研究会「熱場の量子論とその応用」

量子電磁力学に基づく時間空間分解シミュレーション方法の研究

市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知, 京大院工マイクロエンジニアリング

① 概要

QEDハミルトニアン ②③

$$\hat{H}_{\rm QED}=\int d^3\vec{r}\hat{H}_{\rm QED}(ct,\vec{r}):$$

$$\hat{H}_{\rm QED}(ct,\vec{r})=\frac{1}{8\pi}\left(\hat{\vec{E}}^2(x)+\hat{\vec{B}}^2(x)\right)+c\hat{\bar{\psi}}(x)\left(-i\hbar\gamma^k\hat{D}_{ek}(x)+m_ec\right)\hat{\psi}(x)$$

時間発展の二元性

③〜⑨ 演算子の時間発展

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{X}(ct,\vec{r})=\left[\hat{X}(ct,\vec{r}),\hat{H}_{\rm QED}\right]$$

$\hat{\psi}(ct,\vec{r})$ Dirac方程式 $\hat{\vec{A}}(ct,\vec{r})$ Maxwell方程式

※理論で決まって しまう。

⑩〜⑫ 波動関数の時間発展

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\rm QED}(t)\rangle_S=\hat{H}_{\rm QED}|\Psi_{\rm QED}(t)\rangle_S$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi_{N'}(\omega')=\sum_{N=0}^{\infty}\int d\omega\, H_{N'N}(\omega',\omega)\Phi_N(\omega)$$

※実験の設定など が反映される。

物理量期待値の時間発展 ⑬

$$|\Psi_{\rm QED}\rangle_H=\sum_{N=0}^{\infty}\int d\omega\,\Phi_N(\omega;t)|\omega;t\rangle\quad|\omega;t\rangle=\hat{X}^{+}(\omega;t)|0\rangle$$

$${}_H\langle\Psi_{\rm QED}|\hat{O}(ct,\vec{r})|\Psi_{\rm QED}\rangle_H$$

②

QED (Quantum ElectroDynamics, 量子電磁力学)

→ 荷電粒子と光子(電磁場)の相互作用を表す場の量子論

電子：ディラック場演算子 $\hat{\psi}(ct,\vec{r})$

光子：ゲージ対称性を持つベクトル場演算子 $\hat{\vec{A}}(ct,\vec{r})$

これらは時空の各点各点 $(t,\vec{r})$ に存在し（非可算無限個あるということ）、次のような同時刻（反）交換関係に従う量子的な場（場の演算子）である。

$$\left\{\hat{\psi}_\alpha(ct,\vec{r}),\hat{\psi}^\dagger_\beta(ct,\vec{s})\right\}=\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{s})\delta_{\alpha\beta}$$
$$\left\{\hat{\psi}_\alpha(ct,\vec{r}),\hat{\psi}_\beta(ct,\vec{s})\right\}=0$$
$$\left\{\hat{\psi}^\dagger_\alpha(ct,\vec{r}),\hat{\psi}^\dagger_\beta(ct,\vec{s})\right\}=0$$

{A, B} = AB + BA
[A, B] = AB - BA

c : 光速
ℏ : 換算プランク定数

クーロンゲージを採用： ${\rm div}\hat{\vec{A}}(x)=0$

$$\left[\hat{A}^i(ct,\vec{r}),\hat{A}^j(ct,\vec{s})\right]=0,\qquad \hat{\vec{E}}_T(x)=-\frac{1}{c}\frac{\partial\hat{\vec{A}}(x)}{\partial t}$$
$$\left[\hat{E}^i_T(ct,\vec{r}),\hat{E}^j_T(ct,\vec{s})\right]=0,$$
$$\frac{1}{4\pi c}\left[\hat{A}^i(ct,\vec{r}),\hat{E}^j_T(ct,\vec{s})\right]=i\hbar\eta^{ij}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{s})+i\hbar\frac{\partial}{\partial r^i}\frac{\partial}{\partial r^j}\left(-\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\right)$$

③

QEDのハミルトニアン $\hat{H}_{\rm QED}=\int d^3\vec{r}\hat{H}_{\rm QED}(ct,\vec{r}):$

$$\hat{H}_{\rm QED}(ct,\vec{r})=\frac{1}{8\pi}\left(\hat{\vec{E}}^2(x)+\hat{\vec{B}}^2(x)\right)+c\hat{\bar{\psi}}(x)\left(-i\hbar\gamma^k\hat{D}_{ek}(x)+m_ec\right)\hat{\psi}(x)$$

γ^μ : ガンマ行列
e: 電子電荷の大きさ（正）
m_e : 電子質量

電場演算子
$$\hat{\vec{E}}(x)=-{\rm grad}\hat{A}_0(x)-\frac{1}{c}\frac{\partial\hat{\vec{A}}(x)}{\partial t}$$
$$\hat{\bar{\psi}}(x)\equiv\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0$$

磁場演算子
$$\hat{\vec{B}}(x)={\rm rot}\hat{\vec{A}}(x)$$

ゲージ共変微分
$$\hat{D}_{e\mu}(x)=\partial_\mu+i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_\mu(x),\qquad Z_e=-1,$$

量子場の運動方程式

Dirac方程式
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(x)=\left\{-i\hbar c\gamma^0\gamma^k\partial_k-(Z_ee)\sum_{k=1}^{3}\gamma^0\gamma^k\hat{A}^k(x)+m_ec^2\gamma^0+(Z_ee)\hat{A}_0(x)\right\}\hat{\psi}(x)$$

Maxwell方程式
$$-\nabla^2\hat{A}_0(x)=4\pi\hat{\rho}_e(x),$$
$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\hat{A}_0(x)+\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2\right)\hat{\vec{A}}(x)=\frac{4\pi}{c}\hat{\vec{j}}_e(x),$$

電荷密度演算子
$$\hat{\rho}_e(x)=Z_ee\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x)$$
電流密度演算子
$$\hat{\vec{j}}_e(x)=Z_e\,e\,c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x)$$

④

計算したいもの

電荷密度演算子 $\hat{\rho}_e(x)=Z_ee\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x)$

電流密度演算子 $\hat{\vec{j}}_e(x)=Z_e\,e\,c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x)$

電場演算子 $\hat{\vec{E}}(x)=-{\rm grad}\hat{A}_0(x)-\frac{1}{c}\frac{\partial\hat{\vec{A}}(x)}{\partial t}$

磁場演算子 $\hat{\vec{B}}(x)={\rm rot}\hat{\vec{A}}(x)$

ストレステンソル密度演算子 $\hat{\tau}^{\Pi kl}_e(x)=\frac{i\hbar c}{2}\left[\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^l\hat{D}_{ek}(x)\hat{\psi}(x)-\left(\hat{D}_{ek}(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right]$

スピントルク密度演算子 $\hat{t}^k_e(x)=-\varepsilon_{lnk}\hat{\tau}^{\Pi ln}_e(x)\qquad\Sigma^k=\begin{pmatrix}\sigma^k&0\\0&\sigma^k\end{pmatrix}$

ツェータ力密度演算子 $\hat{\zeta}^k_e(x)=-c\partial_k\left(\hat{\psi}(x)\gamma^k\frac{1}{2}\hbar\Sigma^k\hat{\psi}(x)\right);\quad(\text{no sum over }k)$

etc ...

といった物理量演算子 $\hat{O}[\hat{\psi},\hat{\vec{A}}](ct,\vec{r})$ の**時刻々々の時間発展**とその期待値。→ 従来からある摂動論では不十分

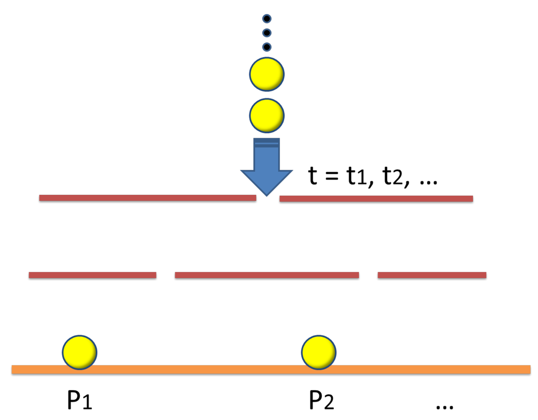
⑤

従来からある摂動論では、$t\to\pm\infty$ で相互作用が無い理論（漸近場）を想定して、無限の過去(in状態)と未来(out状態)の差を近似的に計算する。

→ 時々刻々の時間発展は計算できない。

われわれのアプローチでは、初期時刻 $t=t_0$ を想定し、全ての時刻にわたって場は相互作用していると考える。それより前の時刻のことは考えないという立場であり、$t<t_0$ では場が存在しないという境界条件を用いることになる。

Tachibana, In Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity, Chap 12 (2013)



以下、この境界条件を用いて光子場を積分形で書く。（→数値計算に便利と思われる）

⑥

光子場はMaxwell方程式の解として

$$\hat{\vec{A}}(ct,\vec{r})=\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(ct,\vec{r})+\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r})$$

$$\hat{A}^k_{\rm rad}(ct,\vec{r})=\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\left[\hat{a}_{\vec{p}\sigma}e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}+\hat{a}^\dagger_{\vec{p}\sigma}e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right]$$

$e^\mu(\vec{p},\sigma)$: 偏極ベクトル
$$\left[\hat{a}_{\vec{p}\sigma},\hat{a}^\dagger_{\vec{q}\tau}\right]=\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})\delta_{\sigma\tau}$$
$$\left[\hat{a}_{\vec{p}\sigma},\hat{a}_{\vec{q}\tau}\right]=0$$
$$\left[\hat{a}^\dagger_{\vec{p}\sigma},\hat{a}^\dagger_{\vec{q}\tau}\right]=0$$

$$\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r})=\frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}$$

$u=t-\frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}$: 遅延時間

$\hat{\vec{j}}_T(x)$: 電流の横成分 $\vec{\nabla}\cdot\hat{\vec{j}}_T(x)=0$ と表されるが、

$$=\frac{1}{c^2\pi}\int_{t_0}^{t}du'\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\int d^3\vec{s}\,\hat{\vec{j}}_T(cu',\vec{s})\exp\left(i\alpha\left((u'-t)^2-\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)\right)$$

境界条件： $\hat{\vec{j}}_T(u,\vec{s})=\hat{\vec{j}}(u,\vec{s})=0,\quad u<t_0$
因果律： $\hat{\vec{j}}_T(u,\vec{s})=\hat{\vec{j}}(u,\vec{s})=0,\quad u>t$

という積分表示になる。

Tachibana, In Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity, Chap 12 (2013)

これとDirac場の方程式とをcoupleさせて解く。→演算子の時間発展

⑦

KI, Fukuda,Tachibana, Int. J. Quant. Chem. 113, 190 (2013); 114, 1567 (2014)

ディラック場

４成分の規格化された直交関数系で展開し、生成消滅演算子を定義する。

$$\hat{\psi}_\alpha(x)=\sum_{n=1}^{N_D}\sum_{a=\pm}[\psi_{n^a}(\vec{r})]_\alpha\hat{e}_{n^a}(t)$$

$\hat{e}_{n+}(t)$:電子の消滅演算子
$\hat{e}_{n-}(t)$:陽電子の生成演算子

それらが完全系を成すとすると、

$$\left\{\hat{\psi}_\alpha(ct,\vec{r}),\hat{\psi}^\dagger_\beta(ct,\vec{s})\right\}=\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{s})\delta_{\alpha\beta}\qquad\left\{\hat{e}_{m^b}(t),\hat{e}^\dagger_{n^a}(t)\right\}=\delta_{mn}\delta_{ab}$$
$$\left\{\hat{\psi}_\alpha(ct,\vec{r}),\hat{\psi}_\beta(ct,\vec{s})\right\}=0\qquad\left\{\hat{e}_{m^b}(t),\hat{e}_{n^a}(t)\right\}=0$$
$$\left\{\hat{\psi}^\dagger_\alpha(ct,\vec{r}),\hat{\psi}^\dagger_\beta(ct,\vec{s})\right\}=0\qquad\left\{\hat{e}^\dagger_{m^b}(t),\hat{e}^\dagger_{n^a}(t)\right\}=0$$

（電子と光子の生成消滅演算子の間には簡単な交換関係は成り立たない。）

$\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}(t)\equiv\hat{e}^\dagger_{p^c}(t)\hat{e}_{q^d}(t)$:励起演算子

を記法の簡単のため導入する。

⑧

この展開により、

$$\hat{A}^k_A(ct,\vec{r})=\frac{1}{c^2\pi}\int_{t_0}^{t}du'\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\int d^3\vec{s}\,\hat{j}^k_T(cu',\vec{s})\exp\left(i\alpha\left((u'-t)^2-\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)\right)$$

$$=\frac{1}{c^2\pi}\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm}\int_{t_0}^{t}du'\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\exp\left(i\alpha(t-u')^2\right)\left\{I^k_{j,p^cq^d}(\vec{r};\alpha)\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}(u')+I^k_{E,p^cq^d}(\vec{r};\alpha)\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}}{dt}(u')\right\}$$

$\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}(t)\equiv\hat{e}^\dagger_{p^c}(t)\hat{e}_{q^d}(t)$:励起演算子

$$I^k_{j,p^cq^d}(\vec{r};\alpha)=(Z_eec)\int d^3\vec{s}\,\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^d}(\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$$

$$I^k_{E,p^cq^d}(\vec{r};\alpha)=\frac{Z_ee}{4\pi}\int d^3\vec{s}\,d^3\vec{s}'\frac{(s^k-s'^k)}{|\vec{s}-\vec{s}'|^3}\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s}')\psi_{q^d}(\vec{s}')\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$$

※ I_E は α=0 で(のみ)発散

これらの積分I_j, I_E は、展開関数がガウス型関数なら解析的に行うことができる。

t : 現在時刻
u' : 過去の時刻

これらの差の二乗 $(t-u')^2$ の周波数で振動する関数を掛けてαで積分

さらに u' で積分して、過去の電流(の横成分)からの寄与を積算する。

⑨

Dirac方程式
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(x)=\left\{-i\hbar c\gamma^0\gamma^k\partial_k-(Z_ee)\sum_{k=1}^{3}\gamma^0\gamma^k\hat{A}^k(x)+m_ec^2\gamma^0+(Z_ee)\hat{A}_0(x)\right\}\hat{\psi}(x)$$

$\hat{A}_{\rm rad}(ct,\vec{r})+\hat{A}_A(ct,\vec{r})$

運動エネルギー項　質量エネルギー項　二電子積分

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

電流密度のフーリエ変換で定義される積分

$$K_{jj,n^am^bp^cq^d}(t-u')\ (jE)=\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\,I_{jj,n^am^bp^cq^d}(\alpha)\ (jE)\exp\left(i\alpha(t-u')^2\right)$$

※ I_{jE} は α=0 で(のみ)発散

$$I_{jj,n^am^bp^cq^d}(\alpha)=(Z_eec)^2\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}d^3\vec{s}\left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})\right]\left[\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^d}(\vec{s})\right]\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$$

$$I_{jE,n^am^bp^cq^d}(\alpha)=-\frac{(Z_ee)^2c}{4\pi}\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}d^3\vec{s}d^3\vec{t}\left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})\right]\left[\psi^\dagger_{p^c}(\vec{t})\psi_{q^d}(\vec{t})\right]\frac{(\vec{t}-\vec{s})^k}{|\vec{t}-\vec{s}|^3}\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$$

これらの積分I_{jj}, I_{jE} は、展開関数がガウス型関数なら解析的に行うことができる。（後で数値計算の結果を例示する。）

⑩

状態ベクトル $|\Psi\rangle$　　波動関数(波束)の時間発展の話

物理量演算子 $\hat{O}(ct,\vec{r})$ の期待値は、${}_H\langle\Psi_{\rm QED}|\hat{O}(ct,\vec{r})|\Psi_{\rm QED}\rangle_H$

ハイゼンベルク表示の状態ベクトルは

$$|\Psi_{\rm QED}\rangle_H=\sum_{N,L,M=0}^{\infty}\int d^4\omega^e_1\cdots d^4\omega^e_Nd^4\omega^p_1\cdots d^4\omega^p_Md^4\omega^a_1\cdots d^4\omega^a_L$$
$$|\omega^e_1,...,\omega^e_N;\omega^p_1,...,\omega^p_M;\omega^a_1,...,\omega^a_L;t\rangle\Phi^e_N(\omega^e_1,...,\omega^e_N;t)\Phi^p_M(\omega^p_1,...,\omega^p_M;t)\Phi^a_L(\omega^a_1,...,\omega^a_L;t)$$

基底ケットベクトル　　波動関数（波束）

$\Phi^e_N(\omega^e_1,...,\omega^e_N;t)$:N電子波動関数(反対称)
$\Phi^p_M(\omega^p_1,...,\omega^p_M;t)$:M陽電子波動関数(反対称)　$\omega^{e,p}=(\vec{r},\alpha),\alpha=1\sim4$
$\Phi^a_L(\omega^a_1,...,\omega^a_L;t)$:L光子波動関数(対称)　$\omega^a=(\vec{r},\sigma),\sigma=\pm1$

直交性

$$\langle\omega^e_1,...;\omega^p_1,...;\omega^a_1,...;t|\omega'^e_1,...;\omega'^p_1,...;\omega'^a_1,...;t\rangle$$
$$=\delta_{NN'}\delta_{MM'}\delta_{LL'}\frac{1}{N!M!L!}\sum_\sigma(-)^\sigma\delta(\omega^e_1-\omega'^e_{\sigma(1)})\cdots\delta(\omega^e_N-\omega'^e_{\sigma(N)})\sum_\tau(-)^\tau\delta(\omega^p_1-\omega'^p_{\tau(1)})\cdots\delta(\omega^p_M-\omega'^p_{\tau(M)})\times\sum_\rho\delta(\omega^a_1-\omega'^a_{\rho(1)})\cdots\delta(\omega^a_L-\omega'^a_{\rho(L)})$$

σ, τ, ρ :N, M, L個の置換　(-)σ :置換σの符号

⑪

基底ケットベクトル　※これ以外のchoiceはあり得る。

直交性と整合するために、次のようなものを基底ケットとする。

$$|\omega^e_1,...,\omega^e_N;\omega^p_1,...,\omega^p_M;\omega^a_1,...,\omega^a_L;t\rangle$$
$$=\frac{1}{\sqrt{N!M!L!}}\hat{\psi}^{+\dagger}(\omega^e_1;t)\cdots\hat{\psi}^{+\dagger}(\omega^e_N;t)\hat{\psi}^{-}(\omega^p_1;t)\cdots\hat{\psi}^{-}(\omega^p_M;t)\hat{\vec{A}}^\dagger(\omega^a_1;t)\cdots\hat{\vec{A}}^\dagger(\omega^a_L;t)|0\rangle$$

電子　陽電子　光子

真空に電子・陽電子場の生成演算子部分と、相互作用しない光子場（相互作用する光子場と区別するためにチルダをつけている）の生成演算子部分を真空に掛けたもの。

$$\hat{\psi}^+(\omega^e;t)\equiv\sum_{n=1}^{N_D}[\psi_{n+}(\vec{r})]_\alpha\hat{e}_{n+}(t)\qquad\hat{\tilde{A}}(\omega^a;t)\equiv\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3\vec{p}\,e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\hat{a}_{\vec{p}_\sigma}$$
$$\hat{\psi}^-(\omega^p;t)\equiv\sum_{n=1}^{N_D}[\psi_{n-}(\vec{r})]_\alpha\hat{e}_{n-}(t)$$

$$\left\{\hat{\psi}^+(\omega^e),\hat{\psi}^{+\dagger}(\omega'^e)\right\}=\delta(\omega^e-\omega'^e)$$
$$\left\{\hat{\psi}^-(\omega^p),\hat{\psi}^{-\dagger}(\omega'^p)\right\}=\delta(\omega^p-\omega'^p)$$
$$\left[\hat{\tilde{A}}(\omega^a),\hat{\tilde{A}}^\dagger(\omega'^a)\right]=\delta(\omega^a-\omega'^a)$$

その他の(反)交換関係はゼロとなる。

⑫

波動関数の時間発展

シュレディンガー方程式： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\rm QED}(t)\rangle_S=\hat{H}_{\rm QED}|\Psi_{\rm QED}(t)\rangle_S$

$|\Psi_{\rm QED}(t_1)\rangle_S=|\Psi_{\rm QED}\rangle_H$ となるreference timeを $t=t_1(\geq t_0)$ とすると、

$$|\Psi_{\rm QED}(t)\rangle_S=\sum_{N,L,M=0}^{\infty}\int d^4\omega^e_1\cdots d^4\omega^e_Nd^4\omega^p_1\cdots d^4\omega^p_Md^4\omega^a_1\cdots d^4\omega^a_L$$
$$|\omega^e_1,...,\omega^e_N;\omega^p_1,...,\omega^p_M;\omega^a_1,...,\omega^a_L;t_1\rangle\Phi^e_N(\omega^e_1,...,\omega^e_N;t)\Phi^p_M(\omega^p_1,...,\omega^p_M;t)\Phi^a_L(\omega^a_1,...,\omega^a_L;t)$$

より、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\{\Phi^e_{N'}(\omega'^e_1,...,\omega'^e_{N'};t)\Phi^p_{M'}(\omega'^p_1,...,\omega'^p_{M'};t)\Phi^a_{L'}(\omega'^a_1,...,\omega'^a_{L'};t)\right\}$$
$$=\sum_{N,L,M=0}^{\infty}\int d^4\omega^e_1\cdots d^4\omega^e_Nd^4\omega^p_1\cdots d^4\omega^p_Md^4\omega^a_1\cdots d^4\omega^a_L$$
$$\langle\omega'^e_1,...,\omega'^e_{N'};\omega'^p_1,...,\omega'^p_{M'};\omega'^a_1,...,\omega'^a_{L'};t_1|\hat{H}_{\rm QED}|\omega^e_1,...,\omega^e_N;\omega^p_1,...,\omega^p_M;\omega^a_1,...,\omega^a_L;t_1\rangle$$
$$\Phi^e_N(\omega^e_1,...,\omega^e_N;t)\Phi^p_M(\omega^p_1,...,\omega^p_M;t)\Phi^a_L(\omega^a_1,...,\omega^a_L;t),$$

という波動関数の時間発展方程式を得る。

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\rm QED}\rangle_H=0$ からも導くことができる。

模式的には、 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi_{N'}(\omega')=\sum_{N=0}^{\infty}\int d\omega\,H_{N'N}(\omega',\omega)\Phi_N(\omega)$

⑬

物理量演算子の期待値は、 ${}_H\langle\Psi_{\rm QED}|\hat{O}(ct,\vec{r})|\Psi_{\rm QED}\rangle_H$

$$|\Psi_{\rm QED}\rangle_H=\sum_{N,L,M=0}^{\infty}\int d^4\omega^e_1\cdots d^4\omega^e_Nd^4\omega^p_1\cdots d^4\omega^p_Md^4\omega^a_1\cdots d^4\omega^a_L$$
$$|\omega^e_1,...,\omega^e_N;\omega^p_1,...,\omega^p_M;\omega^a_1,...,\omega^a_L;t\rangle\Phi^e_N(\omega^e_1,...,\omega^e_N;t)\Phi^p_M(\omega^p_1,...,\omega^p_M;t)\Phi^a_L(\omega^a_1,...,\omega^a_L;t)$$

基底ケットベクトル　　波動関数（波束）

$$|\omega^e_1,...,\omega^e_N;\omega^p_1,...,\omega^p_M;\omega^a_1,...,\omega^a_L;t\rangle$$
$$=\frac{1}{\sqrt{N!M!L!}}\hat{\psi}^{+\dagger}(\omega^e_1;t)\cdots\hat{\psi}^{+\dagger}(\omega^e_N;t)\hat{\psi}^{-}(\omega^p_1;t)\cdots\hat{\psi}^{-}(\omega^p_M;t)\hat{\tilde{A}}^\dagger(\omega^a_1;t)\cdots\hat{\tilde{A}}^\dagger(\omega^a_L;t)|0\rangle$$

$$\hat{\psi}^+(\omega^e;t)\equiv\sum_{n=1}^{N_D}[\psi_{n+}(\vec{r})]_\alpha\hat{e}_{n+}(t)\qquad\hat{\tilde{A}}(\omega^a;t)\equiv\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3\vec{p}\,e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\hat{a}_{\vec{p}_\sigma}$$
$$\hat{\psi}^-(\omega^p;t)\equiv\sum_{n=1}^{N_D}[\psi_{n-}(\vec{r})]_\alpha\hat{e}_{n-}(t)$$

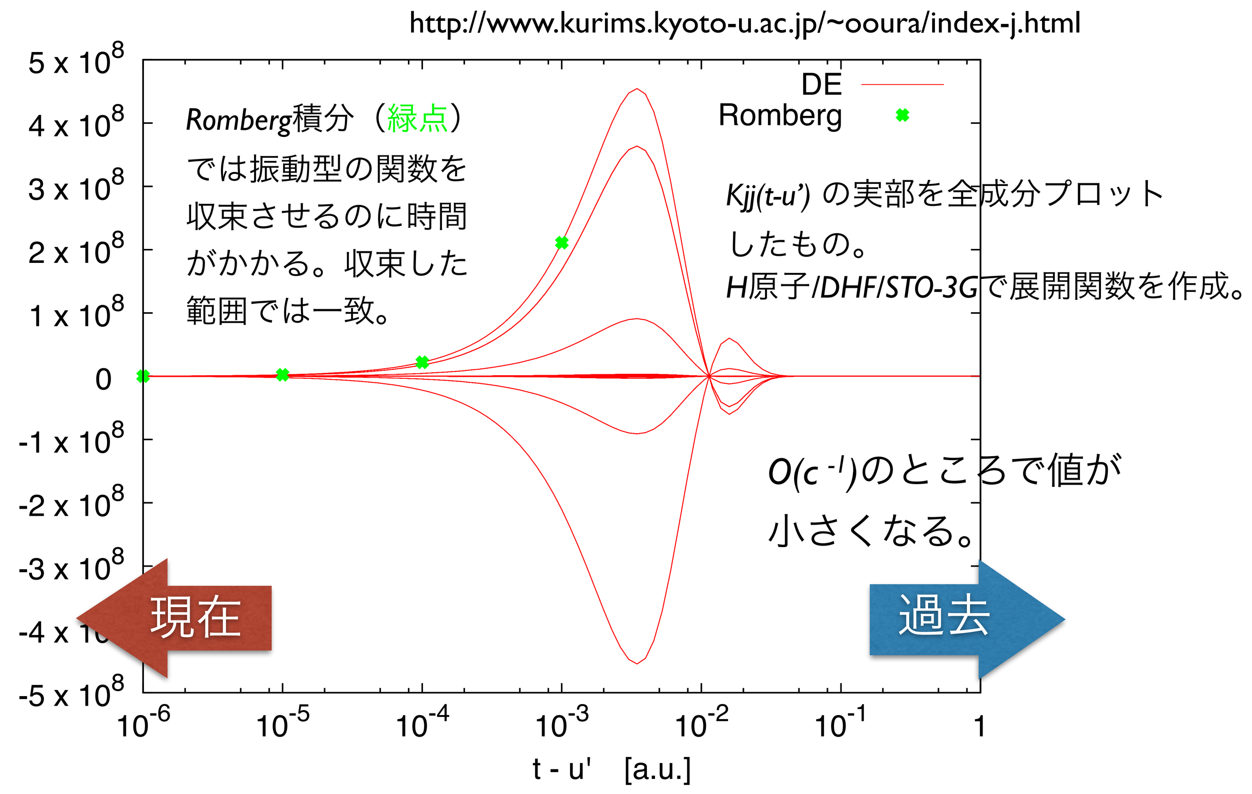
場の演算子の時間発展と波動関数の時間発展の両方を合わせることで、知ることができる。（場の理論における時間発展の二元性）

⑭

遅延ポテンシャル項にでてくる積分（⑧参照）

振動型無限区間積分 → 二重指数関数型数値積分公式（DE(double exponential)公式）の振動型用を使うのが効率的。 Ooura, Mori, J. Comput. Appl. Math. 112, 229 (1999)

今回は大浦により公開されているコードを用いた。
http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~ooura/index-j.html



⑮

まとめ

- QED（場の量子論）における時間発展の二元性
  - 場の演算子の時間発展
  - 波動関数の時間発展
- 遅延ポテンシャル項に現れる積分については、二重指数関数型数値積分公式（DE(double exponential)公式）を使うのが効率的。

今後の課題

- 場の演算子の時間発展の数値計算、特に初期条件
- 波動関数の時間発展に必要なハミルトニアン行列の構成