Simulation of Rigged QED

市川和秀

平成 25 年 3 月 28 日

目 次

1 Introduction

物理現象や化学現象を基本過程まで追求すると、ほとんどの場合、電子・原子核・光子からなる系が相互作用して時間変化していることに還元できる。そのような系を記述する基礎法則は量子力学と電磁気学であり、それらの統一的な理論は量子電磁力学 (Quantum ElectroDynamics, QED) として前世紀の中頃には既に完成していた。この QED は特に素粒子分野でその正確さが検証されており、現在最も成功し、信頼ができる物理理論であるといえるだろう。本研究の目的は、そのようないわば物質と光を記述する究極理論である QED に基づいて系の時間発展を計算機上で第一原理的にシミュレートする方法を確立し、物性や化学の研究に応用することである。

近年のナノテクノロジー・アトムテクノロジーの発展は著しく、原子・分子レベルで構造を測定・作成・制御することが可能となった。また、光や電子スピンを扱う技術も格段の進歩をとげており、単一光子・単一電子を生成・測定し、スピンを操ることも可能となりつつある。さらに、レーザー科学の発展によりフェムト秒やアト秒という時間スケールで物理現象を観測することができるようになってきている。つまり時間方向と空間方向とそして粒子の属性という意味でもより基本的な領域での実験・観測が可能となってきている。このような実験分野での展開をうけて、理論側としてもより基礎的で統一的なミクロ法則、つまり QED に基づくシミュレーションを行うことが必要であると考える。QED に基づいた新たな手法で理論予言や実験の意味付けを行うことは、物理現象への理解を深め、上に挙げたような実験の応用の先にある超微細素子や量子コンピューターなどの研究開発にブレイクスルーをもたらすことが期待できる。

しかし、QED が物性分野や量子化学分野で使用されることは今まで非常に限定的であった。これまでの光と物質の系の時間発展シミュレーションにおいては、シュレディンガー方程式またはディラック方程式に古典的な電磁場を組み合わせた方法（半古典近似）や、電磁場は量子化して扱うものの物質側が簡単にモデル化されたハミルトニアンを使う方法が用いられていた。もちろんこのような近似は知られている広い範囲で有効で、多くの現象が理解・予言されてきたものであるが、上述のような実験分野の進展を受けて、より基本的な法則に基づく理論計算が重要であると思われる。現在、物性や化学の分野では、いろいろな近似を用いたモデルハミルトニアンを数値計算で解くことが盛んに行われており、「第一原理計算」と呼ばれているが、本研究の目的は、未だ他では試みられていない「QED に基づいた第一原理計算」を行うことであるとも言える。

また、このようなシミュレーションは量子場つまり量子連続系の時間発展シミュレーションであり、計算科学の分野としても萌芽的なものである。この方法を確立し、強相関系や非平衡現象といった現代物理の重要な課題に新たな視点で取り組むとともに、次世代の計算科学の主要テーマとしても開拓していくことが必要であると考えている。

さて、「QED に基づいた第一原理計算」を原子・分子について行うためには、素粒子物理分野で計算方法が確立している従来の QED では現れなかった問題が生じる。これは主として次の三点に関するものである。(i) 原子・分子系における物質粒子は束縛状態にある、(ii) 原子核が存在する、(iii) 系の時間変化を時々刻々追跡する、すなわち、非平衡系を扱う、ことである。しかも、これらの要素を場の量子論的に扱う必要がある。ここで計算方法が確立している従来の QED といった時には、無限の過去 (in 状態) と無限の未来 (out 状態) の間の変化を計算することで散乱断面積やエネルギーの補正などを計算する方法を指している。そのような現象を扱うには、漸近状態 (in 状態と out 状態) を摂動のゼロ次とみなして相互作用表示を用いた摂動論によって計算を行うことが有効であり、系統的な計算方法が確立しているのである。この摂動論は相対論的（ローレンツ不変性が明白）な形式で行われ、輻射補正（紫外発散のくりこみ）についてもローレンツ共変に系統的に行うことができる。しかし、上で挙げた三つの要素を取り入れようとすると、この従来の方法では対応できない。

実は場の理論の枠内で上に挙げた三つの要素を部分的に考慮する手法は存在する。(i) については、例えば、場の理論で束縛状態を扱う方法としてベーテ・サルピータ法がある。これは、交差しない梯子ダイアグラムをベーテ・サルピータ方程式として知られている積分方程式を解くことによって足し上げるものだが、両方の粒子がともに非相対論的でなければダイアグラムのこの部分集合を選び出す理論的根拠はない。ワインバーグの言葉を借りると、「束縛状態における相対論的な効果と輻射補正の理論はいまだ完全に満足のいく形にはなっていないと言わねばならない。」[1] のである。(ii) に関しては、原子核や核力を場の理論的に扱う方法は有効場の理論として使用されているが、適用例は散乱理論に限られているようである。もちろん核子をクォークとグルーオンからなるものとすれば場の量子論的な取り扱いが可能であり、その相互作用はローレンツ不変な $SU(3)$ ゲージ理論である量子色力学 (Quantum ChromoDynamics, QCD) として確立しており、素粒子の標準理論に組み込まれている。また、その非摂動的な計算は格子 QCD 計算として研究が進んでいる。しかし、束縛状態としての核子を実現する計算だけで大型計算機の資源を長時間必要とするような計算であり、

それをもとに QED を追加して原子・分子を記述するのはあまりに現実的ではない。また、現在行われている格子計算は平衡状態を記述するもので、非平衡状態の計算はないようである。(その他にも格子 QED は格子 QCD と違って連続極限がとれないという問題もある。) (iii) については、物理量の有限の時間経過を場の量子論的に扱う手法として、閉時間 (Closed Time Path, CTP) 形式がよく知られている。これは通常の摂動論での時間順序積を経路順序積に拡張してから有限の時間における変化を取り出す手法であるが、やはり相互作用表示に基づく系統的な摂動展開を行うことには変わりはないため、束縛状態を QED で扱うことには上で (i) について述べたのと同じ問題があり、試みられていないようである。

このように、われわれの目的である QED に基づいた第一原理時間発展計算を原子・分子について行うためには、上で述べたようなこれまでに各方面で開発されてきた手法を流用するだけでは難しいと思われ、それらを参考にしつつ別のアプローチをとることが必要と考えられる。以下ではわれわれの提案について簡単に述べる。

まず (ii) の原子核を含めることについて述べるが、本研究では [2] に従い原子核の自由度をシュレディンガー場として取り入れる (この理論を従来の QED と区別するために rigged QED と呼んでいる。"rigged" というのは「追加された」という意味合いである)。電子と光子については従来の QED の通りそれぞれディラック場と輻射場として扱う。U(1) ゲージ対称性に従って相互作用の形を決めるのも従来通りである。シュレディンガー場の導入によってローレンツ対称性を持たないことになるが、本研究では後述のように時間変化の計算を実行するため、特に問題は生じない。シュレディンガー場にはスピンの自由度が無いが、これについては核磁気モーメント (これが核スピンに比例すると仮定する) を生成する「電流」なるものが通常の電磁気学的な電流と同様なレベルで取り扱うことができると仮定することにより、ゲージ不変性を保ったまま現象論的に追加することができる。[1]

(i) の束縛状態の扱いに関しては、物質場 (電子場・原子核場) の演算子を、従来の QED や多くの場の理論で行われているような平面波 (場の運動方程式の自由解) による展開をして生成消滅演算子を定義するのではなく、外場存在下での量子力学の定常解で展開して生成消滅演算子を定義することで対応する。これは、いわゆるファリー表示として知られているもの [3] と同様であるが、生成消滅演算子の時間発展がエネルギー固有値に依存するということは用いない (時間発展の方法については以下参照のこと)。

(iii) の時間発展については、場の演算子をハイゼンベルク表示の演算子として扱い、場の運動方程式 (ハイゼンベルクの運動方程式) に従って時間発展を追う。場の演算子の時間依存性は上で定義した生成消滅演算子に押し付けて、その時間発展を計算する。電荷密度演算子を初め典型的な物理量演算子は励起演算子と呼ばれる一つの生成演算子と一つ消滅演算子の積 (2次の演算子) で表される。物理量を得るためには、この励起演算子の時間発展を計算した後で初期状態 (これは真空に生成消滅演算子を掛けて得る) について期待値を取るという通常の手続きで行う。つまり、励起演算子の期待値 (これは一般に密度行列やグリーン関数やプロパゲーターと呼ばれているものである) の時間発展方程式を導出すれば物理量の時間発展を得ることができるのだが、一つの生成消滅演算子の時間微分からは複数の生成消滅演算子の組が現れてしまうため、励起演算子の期待値の式として微分方程式が閉じない。2次である励起演算子を微分すると3次以上の演算子が現れてしまうのである。通常の摂動論や CTP 形式では相互作用表示が可能なことを生かし、Wick の定理によって期待値を因子分解して閉じた方程式を得るということが行われている。われわれの設定の場合は上に述べた様に、無摂動ハミルトニアン、つまり相互作用表示が自明でないため、この技術を使うことができない。われわれの方針は、励起演算子の微分から現れる高次の項の期待値の時間発展も励起演算子の期待値のそれとともに連立して解くというものである。もちろん、その高次の項の微分はより高次の項で表されるため、このような手続きを行うと、どんどん高次の演算子の期待値の微分方程式を連立させなければならず、このヒエラルキーは無限に続く。数値計算を遂行するためにはどこかで打ち切る必要があるが、それにより物理量が収束するか、また、正しい物理を表すことができるかは、現段階では実際に計算を行ってみなければわからない。このようにどちらかというと愚直で力づくの方法であるが、計算機が発達していたかった過去には試みることができなかったと思われる手法であり、現在の計算科学の進展をうけて検討する価値のある方法であると考えている。

このような計算科学の手法が成功をおさめてきたことはいうまでもないが、例えば分子動力学計算によるタンパク質

[1] 電子・光子だけの QED に原子核場のダイナミクスを追加して拡張するのにはより積極的な意味がある。従来の QED では赤外発散、すなわち軟光子 (運動量がゼロの極限の光子) が電子から無限にでることによる発散、が生じることが知られている。これは伝統的にはこの発散は存在する (紫外発散のようにくりこみで除去できない) が観測しないと解釈して、理論と実験を比べるのに問題はないとしている。つまり、QED の枠内で発散から逃れる方法はなく、枠外の論理を持ち込んで処理している。Rigged QED では軟光子も含めすべての光子が原子核場に終端するように計算すれば実軟光子による発散を仮想軟光子にして吸収できるため、赤外発散を Rigged QED の論理枠内で処理することができると考えられる。さらに、ある種の高誘電率材料においては誘電率への原子核の寄与が電子の寄与より大きいことが知られているが、軟光子による赤外発散を原子核場の運動にくりこむことで説明できるかもしれない。

フォールディング、数値相対論によるブラックホール合体、初期宇宙における初代星形成など、多くの分野で複雑な時間発展シミュレーションが行われるようになっている。われわれの QED に基づいた原子分子系の第一原理計算による時間発展シミュレーションは、上に述べたようににまだ明確になっていないことも多いが、新たな物理現象の予測・理解を行うことが期待できる重要なものであると考えている。

2 Conventions

基本的に Tachibana (2010) と同じ。

2.1 単位系

ガウス単位系を用いる。

$$4\pi\epsilon_0 = 1 \tag{1}$$

原子単位系は、

$$\begin{aligned} e &= 1, \quad m_e = 1, \quad \hbar = 1 && (2)\\ c &= 137.035\,999\,679\,\mathrm{a.u.} \quad \mathrm{PDG2010} && (3)\\ \alpha &= 1/c && (4) \end{aligned}$$

(relvstr3.f の値は、$c = 137.035\,999\,809\,442$)
(DIRAC が使ってるのは $c = 137.035\,999\,8$)
SI 単位系での値は、

$$\begin{aligned} 1\,\mathrm{a.u.}(\text{時間}) &= 2.419\times 10^{-17}\,\mathrm{s} && (5)\\ &= 24.19\,\mathrm{as} && (6)\\ 1\,\mathrm{a.u.}(\text{長さ}) &= 5.292\times 10^{-11}\,\mathrm{m} && (7)\\ &= 5.292\times 10^{4}\,\mathrm{fm} && (8)\\ &= 0.5292\,\text{Å} && (9)\\ 1\,\mathrm{a.u.}(\text{エネルギー}) &= 4.360\times 10^{-18}\,\mathrm{J} && (10)\\ &= 27.21\,\mathrm{eV} && (11) \end{aligned}$$

2.2 相対論

2.2.1 ４元ベクトル

時空座標は

$$x = (x^\mu) = (x^0, x^k) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) = (ct, \vec{r}) = (ct, \vec{x}). \tag{12}$$

４元ベクトルは

$$A = (A^\mu) = (A^0, A^k) = (A^0, A^1, A^2, A^3) = (A^0, A_x, A_y, A_z) = (A^0, \vec{A}). \tag{13}$$

(３次元ベクトルは、その成分を $\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$ のように下に x, y, z をつけて表すことがある。)
微分は、

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \mathrm{grad}\right) \tag{14}$$

計量は、

$$\eta_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1,-1,-1,-1) = \eta^{\mu\nu} \tag{15}$$

よって、

$$\begin{aligned}
x_\mu &= (x_0, x_k) = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -x, -y, -z) = (ct, -\vec{r}) = (ct, -\vec{x}), &(16)\\
A_\mu &= (A_0, -\vec{A}), &(17)\\
\partial^\mu &= \eta^{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla}\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\mathrm{grad}\right) &(18)
\end{aligned}$$

特にベクトルポテンシャルは、$A^\mu = (\phi, \vec{A}), A_\mu = (\phi, -\vec{A})$ である。

共変微分は（下付き A_μ の空間部分の符号に注意）、

$$D_\mu(x) = \partial_\mu + i\frac{q}{\hbar c}A_\mu(x) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar c}\phi(x), \vec{\nabla} - i\frac{q}{\hbar c}\vec{A}(x)\right) \tag{19}$$

である。

$$\begin{aligned}
D^\mu(x) = \partial^\mu + i\frac{q}{\hbar c}A^\mu(x) &= \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar c}\phi(x), -\vec{\nabla} + i\frac{q}{\hbar c}\vec{A}(x)\right) &(20)\\
&= (D^0(x), \vec{D}(x)) &(21)
\end{aligned}$$

なので、特に

$$\vec{D}(x) = -\vec{\nabla} + i\frac{q}{\hbar c}\vec{A}(x) \tag{22}$$

であることに注意。

2.2.2 ガンマ行列

パウリ行列は

$$\sigma^1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{23}$$

ガンマ行列は

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \tag{24}$$

$$\gamma^5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = -\gamma_5 \tag{25}$$

スピノルの共役 (バー) は、

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0 \tag{26}$$

ガンマ行列のカイラル表示は次のものを用いる (LL:RQT(21.3)(22.18), “spinor representation”)。

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -\vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{27}$$

明示的に書くと、

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{28}$$

ガンマ行列のディラック表示 (LL:RQT(21.20)(22.18), "standard representation") は、

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \gamma^0\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{29}$$

明示的に書くと、

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{30}$$

これらを使う時は、`module` `Constants` を用いる。(値は、`set_GammaMatrix` で代入している。)

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0 \tag{31}$$
$$\gamma^{k\dagger} = -\gamma^k \tag{32}$$
$$\gamma^0\gamma^k = -\gamma^k\gamma^0 \tag{33}$$

Dyall も同じ standard representation を使っている (4.33)。

2.3 相対論的量子化学

4 成分スピノルの成分を

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^L \\ \psi^S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^{L\alpha} \\ \psi^{L\beta} \\ \psi^{S\alpha} \\ \psi^{S\beta} \end{pmatrix} \tag{34}$$

のように書く。

これらを、実の原始ガウシアン関数 ($g(\vec{r})$) で展開する。係数は複素数にする。Large と Small では異なる基底の数 (N_L 個、N_S 個) を使う (α と β では共通)。つまり、i 番目の分子軌道 $\psi_i(\vec{r})$ に対して、

$$\psi_i^{L\alpha}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_L} c_{ij}^{L\alpha} g_j^L(\vec{r}) \tag{35}$$
$$\psi_i^{L\beta}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_L} c_{ij}^{L\beta} g_j^L(\vec{r}) \tag{36}$$
$$\psi_i^{S\alpha}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_S} c_{ij}^{S\alpha} g_j^S(\vec{r}) \tag{37}$$
$$\psi_i^{S\beta}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_S} c_{ij}^{S\beta} g_j^S(\vec{r}) \tag{38}$$

$c_{ij}^{L\alpha}, c_{ij}^{L\beta}, c_{ij}^{S\alpha}, c_{ij}^{S\beta}$ は複素数で、2 つの原始ガウシアン関数のセット $g_j^L(\vec{r}), (j = 1 \cdots N_L)$ と $g_j^S(\vec{r}), (j = 1 \cdots N_S)$ がある。

Kramers pair の係数は、Dyall (11.99)

$$c_{\bar{i}j}^{X\beta} = (c_{ij}^{X\alpha})^* \tag{39}$$
$$c_{\bar{i}j}^{X\alpha} = -(c_{ij}^{X\beta})^* \tag{40}$$

これは、

$$\psi_{\bar{i}} = -i\Sigma^2\psi_i^* \tag{41}$$

と書ける。

3 Rigged QED

3.1 ラグランジアンと運動方程式

通常の QED のラグランジアン密度演算子は、

$$\hat{L}_{\mathrm{QED}}(x) = -\frac{1}{16\pi}\hat{F}_{\mu\nu}(x)\hat{F}^{\mu\nu}(x) + \hat{L}_e\left(\left\{\hat{\psi}, \hat{D}_{e\mu}\hat{\psi}\right\}; x\right), \tag{42}$$

である。ここで、$\hat{A}_\mu(x)$ はベクトルポテンシャルで、$\hat{F}_{\mu\nu}(x)$ は電磁場のテンソル

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\mu\nu}(x) &= \partial_\mu \hat{A}_\nu(x) - \partial_\nu \hat{A}_\mu(x) & (43)\\ &= \begin{pmatrix} 0 & \hat{E}_x(x) & \hat{E}_y(x) & \hat{E}_z(x) \\ -\hat{E}_x(x) & 0 & -\hat{B}_z(x) & \hat{B}_y(x) \\ -\hat{E}_y(x) & \hat{B}_z(x) & 0 & -\hat{B}_x(x) \\ -\hat{E}_z(x) & -\hat{B}_y(x) & \hat{B}_x(x) & 0 \end{pmatrix}, & (44) \end{aligned}$$

である。$\hat{L}_e$ は電子のラグランジアン密度演算子

$$\hat{L}_e\left(\left\{\hat{\psi}, \hat{D}_{e\mu}\hat{\psi}\right\}; x\right) = c\hat{\bar{\psi}}(x)\left(i\hbar\gamma^\mu \hat{D}_{e\mu}(x) - m_e c\right)\hat{\psi}(x) \tag{45}$$

であり、ディラック場の共役は $\hat{\bar{\psi}}(x) \equiv \hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0$、共変微分は

$$\hat{D}_{e\mu}(x) = \partial_\mu + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_\mu(x), \quad Z_e = -1, \tag{46}$$

と定義される。

場の運動方程式は、それぞれの場に関する作用（ラグランジアン密度演算子の積分）の変分がゼロ、ということから導かれる（オイラー・ラグランジュ方程式）。$\hat{\psi}^\dagger(x)$ での変分からは、

$$i\hbar\gamma^\mu \hat{D}_{e\mu}(x)\hat{\psi}(x) = m_e c\hat{\psi}(x) \tag{47}$$

が得られる。

$\hat{A}_\mu(x)$ での変分からは、マクスウェル方程式の非斉次の方が得られる（斉次の方は $\hat{F}_{\mu\nu}$ の定義から自動的に成り立つ）が、クーロンゲージ $\partial_k \hat{A}^k(x) = 0$ を採用すると、

$$-\nabla^2 \hat{A}_0(x) = 4\pi\hat{\rho}_e(x), \tag{48}$$

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\hat{A}_0(x) + \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)\hat{\vec{A}}(x) = \frac{4\pi}{c}\hat{\vec{j}}_e(x), \tag{49}$$

である。ここで電子陽電子の charge density operator $\hat{\rho}_e(x)$ は、

$$\hat{\rho}_e(x) = Z_e e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x), \tag{50}$$

で、electronic charge current density は

$$\hat{\vec{j}}_e(x) = Z_e\, e\, c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x). \tag{51}$$

で、連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_e(x) + \mathrm{div}\hat{\vec{j}}_e(x) = 0 \tag{52}$$

を満たす。（このような保存 current が存在することは、ラグランジアンが global $U(1)$ 対称なことから保証されている。）保存する current なので、電流と解釈することができる、とも言える。

普通の QED では、

$$\hat{L}_{\rm QED}(x) = \hat{L}_{\rm Maxwell} + \hat{L}_{\rm Dirac} + \hat{L}_{\rm int} \tag{53}$$

$$= -\frac{1}{16\pi}\hat{F}_{\mu\nu}(x)\hat{F}^{\mu\nu}(x) + c\hat{\bar{\psi}}(x)\left(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - m_e c\right)\hat{\psi}(x) - \frac{1}{c}\hat{j}_e^\mu(x)\hat{A}_\mu(x) \tag{54}$$

として、$\hat{L}_{\rm int}$ を摂動として計算する。なので、$\hat{j}_e^\mu(x)=0$ としたものを量子化することを行うが、その時の（非斉次）マクスウェル方程式の解を $\hat{A}_{{\rm rad},\mu}$ と書く。このような自由場をクーロンゲージで量子化（*i.e.* 生成消滅演算子で表す）する方法はよく知られていて、

$$\hat{A}^\mu_{\rm rad}(x) = \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\left[\hat{a}(\vec{p},\sigma)e^\mu(\vec{p},\sigma)e^{-ix_\mu p^\mu/\hbar} + \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)e^{*\mu}(\vec{p},\sigma)e^{+ix_\mu p^\mu/\hbar}\right] \tag{55}$$

ここで Polarization vector $e^\mu(\vec{p},\sigma)$ は、

$$e^0(\vec{p},\sigma) = 0, \tag{56}$$

$$p^\mu e_\mu(\vec{p},\sigma) = 0, \tag{57}$$

$$\sum_{\sigma=\pm1} e^i(\vec{p},\sigma)e^{*j}(\vec{p},\sigma) = \delta_{ij} - \frac{p^i p^j}{|\vec{p}|^2}, \tag{58}$$

$$e^k(\vec{p},\bar{\sigma})e^{*k}(\vec{p},\sigma) = \delta_{\sigma\bar{\sigma}}, \tag{59}$$

$$e^k(-\vec{p},\bar{\sigma})e^k(\vec{p},\sigma) = \delta_{\bar{\sigma}\sigma} \tag{60}$$

である。特に、$\hat{A}^0_{\rm rad}=0$ となっている。

以上は光と電子のみの理論だが、これに原子核を追加 (“rig”) する。N 番目の原子核のラグランジアン密度演算子は、

$$\hat{L}_a\left(\left\{\hat{\chi}_a, \hat{D}_{a0}\hat{\chi}_a, \hat{\vec{D}}_a^2\hat{\chi}_a\right\};x\right) = \hat{\chi}_a^\dagger(x)\left(i\hbar c\hat{D}_{a0}(x) + \frac{\hbar^2}{2m_a}\hat{\vec{D}}_a^2(x)\right)\hat{\chi}_a(x), \tag{61}$$

で、ここで原子核の共変微分は

$$\hat{D}_{a\mu}(x) = \partial_\mu + i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{A}_\mu(x), \tag{62}$$

Z_a は N 番目の原子核の電荷数である (正の値)。$\hat{\chi}_a$ はシュレディンガー場で、Boson か Fermion かに応じて、交換か反交換関係に従う。これを用いて、Rigged QED のラグランジアン密度演算子は、

$$\hat{L}_{\rm RiggedQED}(x) = -\frac{1}{16\pi}\hat{F}_{\mu\nu}(x)\hat{F}^{\mu\nu}(x) + \hat{L}_e\left(\left\{\hat{\psi}, \hat{D}_{e\mu}\hat{\psi}\right\};x\right) + \sum_a \hat{L}_a\left(\left\{\hat{\chi}_a, \hat{D}_{a0}\hat{\chi}_a, \hat{\vec{D}}_a^2\hat{\chi}_a\right\};x\right), \tag{63}$$

である。電子と原子核の間に直接の相互作用はなく、$\hat{A}_\mu(x)$ を介している。$\hat{L}_a$ は $U(1)$ ゲージ対称性を持つが、ローレンツ対称性は持っていない（別に持ってなくてもいい)。シュレディンガー場の変分からは、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\chi}_a(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_a}\hat{\vec{D}}_a^2(x)\hat{\chi}_a(x) + Z_a e\hat{A}_0(x)\hat{\chi}_a(x), \tag{64}$$

という運動方程式が得られる。

Charge density operator $\hat{\rho}(x)$ には、原子核 (N_a 個ある) の寄与が足される。

$$\hat{\rho}(x) = \hat{\rho}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a}\hat{\rho}_a(x) = \sum_\alpha \hat{\rho}_\alpha(x) \tag{65}$$

α は電子 ($\alpha=e$) と原子核 ($\alpha=a$) をまとめて表すための添字である。$\hat{\rho}_\alpha(x)$ は position probability density operator $\hat{N}_\alpha$ を用いて

$$\hat{\rho}_\alpha(x) = Z_\alpha e\hat{N}_\alpha(x), \tag{66}$$

のように書け、$Z_e = -1$ で Z_a は原子核 N の電荷数で、

$$\begin{aligned} \hat{N}_e(x) &= \hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x), &(67)\\ \hat{N}_a(x) &= \hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\chi}_a(x), &(68)\end{aligned}$$

である。これらについて成分ごとに連続の式が成り立っている。その際の current は以下の様になっている。

Charge current density operator $\hat{\vec{j}}(\vec{r})$ は

$$\hat{\vec{j}}(x) = \hat{\vec{j}}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a} \hat{\vec{j}}_a(x) = \sum_\alpha \hat{\vec{j}}_\alpha(x) \tag{69}$$

α は電子 ($\alpha = e$) と原子核 ($\alpha = a$) をまとめて表すための添字である。$\hat{\vec{j}}_\alpha(x)$ は velocity density operator $\hat{\vec{v}}_\alpha$ を用いて

$$\hat{\vec{j}}_\alpha(x) = Z_\alpha e \hat{\vec{v}}_\alpha(x), \tag{70}$$

のように書け、$Z_e = -1$ で Z_a は原子核 N の電荷で、

$$\begin{aligned} \hat{\vec{v}}_e(x) &= c\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x), &(71)\\ \hat{\vec{v}}_a(x) &= \frac{1}{2m_a}\left(i\hbar\hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x) - i\hbar\left(\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x)\right)^\dagger \cdot \hat{\chi}_a(x)\right) &(72)\end{aligned}$$

まとめると、“rigged 電荷” と “rigged 電流” は、

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(x) &= Z_e e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x) + \sum_a^{N_a} Z_a e \hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\chi}_a(x) &(73)\\ \hat{\vec{j}}(x) &= Z_e\, e\, c\, \hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x) + \sum_a^{N_a} Z_a e \frac{1}{2m_a}\left(i\hbar\hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x) - i\hbar\left(\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x)\right)^\dagger \cdot \hat{\chi}_a(x)\right) &(74)\end{aligned}$$

非斉次マクスウェル方程式も、rigged 電荷・電流を用いたものになる。

$$\begin{aligned} &-\nabla^2 \hat{A}_0(x) = 4\pi\hat{\rho}(x), &(75)\\ &\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\hat{A}_0(x) + \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)\hat{\vec{A}}(x) = \frac{4\pi}{c}\hat{\vec{j}}(x), &(76)\end{aligned}$$

3.2 光子場 $\hat{A}_\mu(x)$ の取り扱い

この Rigged QED は、（よくやられるように）解ける部分と相互作用に分けて、後者を摂動として計算するような方法を用いても解法が簡単になるわけではない。われわれは電子と原子核が束縛状態にあるような状況に興味があるが、相互作用を摂動的に入れるだけではそのような状況を再現することができないことを知っているからである。ここでは、$\hat{A}_\mu(x)$ を古典的な電磁気学のクーロンゲージでの解の求め方と同じ方法で電子や原子核の場で表してしまうという方法を用いる。(形式的な解が書ける部分は書いてしまう。)

まず、非斉次マクスウェル方程式の 1 つ目の式はスカラーポテンシャル (第ゼロ成分) だけで書けているので、右辺をゼロとした式の解と、右辺を持つ式の特殊解を求めればそれらの和で書ける。前者は通常の QED のところで述べたようにゼロで、後者はポワソン方程式なので解が知られている。つまり、

$$\hat{A}_0(ct, \vec{r}) = \int d^3\vec{s}\, \frac{\hat{\rho}(ct, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}, \tag{77}$$

である。時間と空間の依存性を明示したが、クーロンゲージにおけるスカラーポテンシャルは、空間の至る所で瞬間的な電荷密度がすべてわかっているかのような形になっているが、スカラーポテンシャルが観測されるわけではないのでこれはかまわない。

次に２つ目の非斉次マクスウェル方程式を簡単にするため、電流の縦成分と横成分に分ける。

$$\hat{\vec{j}}(x) = \hat{\vec{j}}_T(x) + \hat{\vec{j}}_L(x), \tag{78}$$
$$\vec{\nabla} \cdot \hat{\vec{j}}_T(x) = 0, \tag{79}$$
$$\vec{\nabla} \times \hat{\vec{j}}_L(x) = 0. \tag{80}$$

すると、

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)\hat{\vec{A}}(x) = \frac{4\pi}{c}\hat{\vec{j}}_T(x), \tag{81}$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\hat{A}_0(x) = 4\pi\hat{\vec{j}}_L(x), \tag{82}$$

と分離する。上で $\hat{A}_0(ct, \vec{r})$ が分かっているので、２つ目の式から、$\hat{\vec{j}}_L(x)$ が分かり、$\hat{\vec{j}}_T(x)$ は

$$\begin{aligned}\hat{\vec{j}}_T(\vec{r}) &= \hat{\vec{j}}(\vec{r}) - \hat{\vec{j}}_L(\vec{r}) && (83)\\ &= \hat{\vec{j}}(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi}\mathrm{grad}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_0(x) && (84)\end{aligned}$$

と計算される。１つ目の式はベクトルポテンシャルだけで書けているので、右辺をゼロとした式の解と、右辺を持つ式の特殊解を求めればそれらの和で書ける。前者は通常の QED のところで述べたように光子の生成消滅演算子で書け、後者は古典電磁気学で知られている。つまり

$$\hat{\vec{A}}(ct, \vec{r}) = \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}}(ct, \vec{r}) + \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}, \tag{85}$$

で、

$$u = t - \frac{|\vec{r} - \vec{s}|}{c} \tag{86}$$

である。ベクトルポテンシャルは $\vec{s}$ における電流の影響が $\vec{r}$ に遅れて到着するという、光速度が有限であることの効果をあらわに含んでいる。

$\hat{A}_0(ct, \vec{r})$ と $\hat{\vec{A}}(ct, \vec{r})$（の２項目）は全空間の積分で書かれているが、これを２つの領域 A と M に分けて考えると便利なことがある。ある注目している系（A）と、それを囲んでいる媒質（M）に分けると、電場や磁場応答が考えやすい (electric displacement は M だけ、polarization は A だけから計算する)。この分割は次のようになる。

$$\begin{aligned}\hat{A}_0(ct, \vec{r}) &= \hat{A}_{A0}(ct, \vec{r}) + \hat{A}_{M0}(ct, \vec{r}) && (87)\\ &= \int_A d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(ct, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|} + \int_M d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(ct, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}, && (88)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\vec{A}}(ct, \vec{r}) &= \hat{\vec{A}}_A(ct, \vec{r}) + \hat{\vec{A}}_M(ct, \vec{r}) && (89)\\ &= \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}}(ct, \vec{r}) + \frac{1}{c}\int_A d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|} + \frac{1}{c}\int_M d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|}, && (90)\end{aligned}$$

4 Rigged QED （Born-Oppenheimer 近似）

ここでは Born-Oppenheimer 近似を用いた時の、電子陽電子の生成消滅演算子が従う時間発展の式を導く。(原子核は瞬間瞬間には静止して、外場としてスカラーポテンシャルに影響を与えるのみ。) Born-Oppenheimer 近似を外した時にも用いる量の定義なども行われる。

4.1 ディラック場: $\hat{\psi}$

電子と陽電子を表す。いま、電子や陽電子は分子に束縛されているような状況を考える (連続スペクトルはとりあえず無視して、離散スペクトル ($n = 1 \sim N_D$) のみ考える) ので、平面波で展開するのではなく、外場中でのディラック方程式の解で展開する (LL:RQT, Sec 32))。

つまり、通常の

$$\hat{\psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \int d^3\vec{p} \left[u(\vec{p},\sigma)\hat{e}(\vec{p},\sigma)e^{-ix_\mu p^\mu/\hbar} + v(\vec{p},\sigma)\hat{f}^\dagger(\vec{p},\sigma)e^{ix_\mu p^\mu/\hbar} \right]. \tag{91}$$

ではなく次の展開を用いる (Furry 表示の一種)。

$$\hat{\psi}(ct,\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \left[\hat{e}_n(t)\psi_n^{(+)}(\vec{r}) + \hat{f}_n^\dagger(t)\psi_n^{(-)}(\vec{r}) \right], \tag{92}$$

$$\hat{\psi}^\dagger(ct,\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \left[\hat{e}_n^\dagger(t)\psi_n^{\dagger(+)}(\vec{r}) + \hat{f}_n(t)\psi_n^{\dagger(-)}(\vec{r}) \right], \tag{93}$$

ここで、$\hat{e}_n(t)$ は電子の消滅演算子で、$\hat{f}_n(t)$ は陽電子の消滅演算子。

$\psi_n^{(+)}(\vec{r})$ と $\psi_n^{(-)}(\vec{r})$ は外場中での Dirac 方程式の規格化された解 (n 番目の分子軌道)。とりあえず、Dirac-Coulomb 方程式の解を用いる。DIRAC10 の DHF 計算は、Kramers-restricted 計算だが、一般に N_D は Kramers pair を別々にカウントしたものと考える。

規格化は、

$$\int d^3\vec{r}\, \psi_n^{(a)\dagger}(\vec{r})\psi_m^{(b)}(\vec{r}) = \delta_{nm}\delta_{ab} \tag{94}$$

(a, b は $+$ または $-$。)

Notation を簡単にするために、

$$\hat{e}_{n^+} \equiv \hat{e}_n, \tag{95}$$

$$\hat{e}_{n^-} \equiv \hat{f}_n^\dagger, \tag{96}$$

$$\psi_{n^+} \equiv \psi_n^{(+)}, \tag{97}$$

$$\psi_{n^-} \equiv \psi_n^{(-)}, \tag{98}$$

と定義すると、

$$\hat{\psi}(ct,\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \hat{e}_{n^a}(t)\psi_{n^a}(\vec{r}) \tag{99}$$

と書け、規格化は

$$\int d^3\vec{r}\, \psi_{n^a}^\dagger(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r}) = \delta_{nm}\delta_{ab} \tag{100}$$

となる。この積分を計算する `function` は `intN_mat(n,a,m,b)`。

後で使うために、

$$\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} \equiv \hat{e}_{p^a}^\dagger \hat{e}_{q^b} \tag{101}$$

と定義しておく。

$\hat{\psi}(ct,\vec{r})$ の時間発展を記述する式 (運動方程式) は Tachibana(2010) の式 (2.20)。

$$i\hbar\gamma^\mu \hat{D}_{e\mu}(x)\hat{\psi}(x) = m_e c\hat{\psi}(x) \tag{102}$$

共変微分 (Tachibana2010 式 (1.12))

$$\hat{D}_{e\mu}(x) = \partial_\mu + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_\mu(x), \quad Z_e = -1, \tag{103}$$

を用いて書き直すと、

$$i\hbar\gamma^0\hat{D}_{e0}(x)\hat{\psi}(x) + i\hbar\gamma^i\hat{D}_{ei}(x)\hat{\psi}(x) = m_e c\hat{\psi}(x) \tag{104}$$

$$i\hbar\gamma^0\left\{\partial_0 + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_0(x)\right\}\hat{\psi}(x) + i\hbar\gamma^i\left\{\partial_i + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_i(x)\right\}\hat{\psi}(x) = m_e c\hat{\psi}(x). \tag{105}$$

ここで、$\partial_0 = \partial/\partial(ct)$ より

$$i\hbar\gamma^0\frac{1}{c}\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} - \frac{Z_e e}{c}\hat{A}_0(x)\gamma^0\hat{\psi}(x) + i\hbar\gamma^i\partial_i\hat{\psi}(x) - \frac{Z_e e}{c}\hat{A}_i(x)\gamma^i\hat{\psi}(x) = m_e c\hat{\psi}(x), \tag{106}$$

$$i\hbar\gamma^0\frac{1}{c}\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} = \frac{Z_e e}{c}\hat{A}_0(x)\gamma^0\hat{\psi}(x) - i\hbar\gamma^i\partial_i\hat{\psi}(x) + \frac{Z_e e}{c}\hat{A}_i(x)\gamma^i\hat{\psi}(x) + m_e c\hat{\psi}(x). \tag{107}$$

$\gamma^0\gamma^0 = 1$ より

$$\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} = \frac{Z_e e}{i\hbar}\hat{A}_0(x)\hat{\psi}(x) - c\gamma^0\gamma^i\partial_i\hat{\psi}(x) + \frac{Z_e e}{i\hbar}\hat{A}_i(x)\gamma^0\gamma^i\hat{\psi}(x) + \frac{m_e c^2}{i\hbar}\gamma^0\hat{\psi}(x). \tag{108}$$

$\hat{A}_i(x) = -\hat{A}^i(x)$ に注意し、$\hat{A}$ とガンマ行列は入れ替えてもよいので、

$$\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} = \frac{Z_e e}{i\hbar}\left\{\hat{A}_0(x) - \gamma^0\vec{\gamma}\cdot\hat{\vec{A}}(x)\right\}\hat{\psi}(x) - c\gamma^0\gamma^i\partial_i\hat{\psi}(x) + \frac{m_e c^2}{i\hbar}\gamma^0\hat{\psi}(x). \tag{109}$$

$\hat{A}_0(x)$ は Tachibana2010 式 (5.5) だが、今 system と medium の区別はしないので、Tachibana2010 式 (5.1) である。$\hat{\vec{A}}(x)$ は Tachibana2010 式 (5.6) にあるように、system と radiation の寄与がある: $\hat{\vec{A}}(x) = \hat{\vec{A}}_A(x) + \hat{\vec{A}}_{\rm rad}(x)$。$\hat{\vec{A}}_A(x)$ は Tachibana2010 式 (5.3) で、$\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(x)$ は光子場のうちの radiation 場である。

この式は整理すると、($\partial_i = \nabla^i$ に注意)

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} = \left\{(Z_e e)\hat{A}_0(x) + \alpha^i\left(-i\hbar c\nabla^i - (Z_e e)\hat{A}^i(x)\right) + m_e c^2\beta\right\}\hat{\psi}(x), \tag{110}$$

とも書け、ハミルトニアン形式の Dirac 方程式になっている。(サクライの式 (3.201))

生成消滅演算子の時間発展は、この式から

$$\frac{\partial\hat{e}_{n^a}}{\partial t} = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t} \tag{111}$$

により得られる。

それぞれの項からの寄与を以下で計算するが、その前にいくつか演算子を定義する。

4.2 電荷密度: $\hat{\rho}_e(x)$

電子陽電子の charge density operator $\hat{\rho}_e(x)$ は、

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_e(x) &= Z_e e\hat{N}_e(x) = Z_e e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x)\left(= Z_e e\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\right) &(112)\\
&= Z_e e\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\left(\hat{e}^\dagger_{p^a}\psi^\dagger_{p^a}\right)\left(\hat{e}_{q^b}\psi_{q^b}\right) &(113)\\
&= Z_e e\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} n_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\rho_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} &(114)
\end{aligned}$$

ここで、

$$n_{p^a q^b}(\vec{r}) = \psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\psi_{q^b}(\vec{r}) \tag{115}$$

$(a, b = + \text{ or } -)$ とした。この関数は `density_mat(x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。また、

$$\rho_{p^a q^b}(\vec{r}) = (Z_e e)\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\psi_{q^b}(\vec{r}) \tag{116}$$

と定義した。この関数は `rho_mat(x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。

$\hat{N}_e(x)$ は電子の位置確率密度 (electronic position probability density) 演算子で、

$$\hat{N}_e(x) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} n_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} \tag{117}$$

これを空間積分すると全位置確率演算子 $\hat{N}_{e,\mathrm{tot}}$ が得られる。$\psi_{p^a}(\vec{r})$ の規格直交性を用いると、

$$\begin{aligned}
\hat{N}_{e,\mathrm{tot}}(t) &= \int d^3\vec{r}\,\hat{N}_e(x) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\int d^3\vec{r}\, n_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\delta_{p^a q^b}\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} && (118)\\
&= \sum_{p=1}^{N_D}\sum_{a=\pm}\hat{\mathcal{E}}_{p^a p^a}(t) && (119)
\end{aligned}$$

となる。つまり、$\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}$ のトレースとして計算される。

$$\hat{\rho}_{e,\mathrm{tot}}(t) = \int d^3\vec{r}\,\hat{\rho}_e(x) = (Z_e e)\sum_{p=1}^{N_D}\sum_{a=\pm}\hat{\mathcal{E}}_{p^a p^a}(t) \tag{120}$$

4.3 電流密度: $\hat{j}_e(x)$

electronic charge current density は

$$\hat{\vec{j}}_e(x) = Z_e\, e\, c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x). \tag{121}$$

で、連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_e(x) + \mathrm{div}\hat{\vec{j}}_e(x) = 0 \tag{122}$$

を満たす。

$$\begin{aligned}
\hat{j}^k_e(x) &= Z_e\, e\, c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^k\hat{\psi}(x) && (123)\\
&= Z_e\, e\, c\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\left(\hat{e}^\dagger_{p^a}\psi^\dagger_{p^a}\right)\gamma^0\gamma^k\left(\hat{e}_{q^b}\psi_{q^b}\right) && (124)\\
&= \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} j^k_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} && (125)
\end{aligned}$$

ここで、

$$j^k_{p^a q^b}(\vec{r}) = Z_e\, e\, c\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^b}(\vec{r})\right] \tag{126}$$

$(a, b = + \text{ or } -)$ である。この関数は `j_mat(x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。

$$\begin{aligned}
\mathrm{div}\vec{j}_{p^a q^b}(\vec{r})/(Z_e\, e\, c) &= \partial_k\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^b}(\vec{r})\right] && (127)\\
&= \left(\partial_k\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\right)\gamma^0\gamma^k\psi_{q^b}(\vec{r}) + \psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\partial_k\psi_{q^b}(\vec{r}) && (128)
\end{aligned}$$

この関数は `divj_mat(x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。

4.4 スカラーポテンシャル: $\hat{A}_0$

今 system と medium の区別はしないので A の添字を略する。

クーロンゲージでは、Tachibana2010 式 (5.1)

$$\hat{A}_0(ct,\vec{r}) = \int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(ct,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, \tag{129}$$

である。

ここで、charge density operator $\hat{\rho}(x)$ は、電子と原子核 (N_a 個ある) の寄与がある。(Tachibana2010 式 (2.4)∼(2.7) 参照)

$$\hat{\rho}(x) = \hat{\rho}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a}\hat{\rho}_a(x) = \sum_{\alpha}\hat{\rho}_\alpha(x) \tag{130}$$

α は電子 ($\alpha = e$) と原子核 ($\alpha = a$) をまとめて表すための添字である。$\hat{\rho}_\alpha(x)$ は position probability density operator $\hat{N}_\alpha$ を用いて

$$\hat{\rho}_\alpha(x) = Z_\alpha e \hat{N}_\alpha(x), \tag{131}$$

のように書け、$Z_e = -1$ で Z_a は原子核 N の電荷数で、

$$\hat{N}_e(x) = \hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x), \tag{132}$$

$$\hat{N}_a(x) = \hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\chi}_a(x), \tag{133}$$

である。Born-Oppenheimer 近似では、$\hat{N}_a(x) = \delta(\vec{r}-\vec{R}_a)$ ($\vec{R}_a$ は原子核の位置) となる。

これらを用いると、

$$\begin{aligned}
\hat{A}_0(ct,\vec{r}) &= \int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(ct,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, && (134)\\
&= Z_e e\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\bar{\psi}}(ct,\vec{s})\gamma^0\hat{\psi}(ct,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} + \sum_{a=1}^{N_a} Z_a e\int d^3\vec{s}\,\frac{\delta(\vec{s}-\vec{R}_a)}{|\vec{r}-\vec{s}|}, && (135)\\
&= Z_e e\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\psi}^\dagger(ct,\vec{s})\hat{\psi}(ct,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} + \sum_{a=1}^{N_a}\frac{Z_a e}{|\vec{r}-\vec{R}_a|} && (136)
\end{aligned}$$

である。これに対してディラック場の展開を行うと、

$$\hat{A}_0(ct,\vec{r}) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} V_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} + \sum_{a=1}^{N_a}\frac{Z_a e}{|\vec{r}-\vec{R}_a|} \tag{137}$$

ここで核引力積分を

$$V_{n^a m^b}(\vec{R}) = (Z_e e)\int d^3\vec{s}\,\frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{s})\psi_{m^b}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{R}|} = \int d^3\vec{s}\,\frac{\rho_{n^a m^b}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{R}|} \tag{138}$$

($a, b = +$ or $-$) と表記した。(計算プログラム中では、($Z_e e$) の因子を除いた部分の、スピノルの足を残したものが、`calc_intV_pq(ip,iq,posRA,NL,NS,pg,c_p,c_q,intV_pq)` で計算される。)

時間発展の $\hat{A}_0$ が関係する部分を求める。

$$\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} \ni \frac{Z_e e}{i\hbar}\hat{A}_0(x)\hat{\psi}(x) \tag{139}$$

にディラック場の展開を行うと、

$$\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\frac{\partial\hat{e}_{m^b}}{\partial t}\psi_{m^b}(\vec{r}) \ni \frac{Z_e e}{i\hbar}\hat{A}_0(x)\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\hat{e}_{m^b}\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{140}$$

左から $\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})$ を行うと、

$$\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{Z_e e}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\hat{A}_0(x)\hat{e}_{m^b}\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{141}$$

$$= \frac{Z_e e}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\left[\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm} V_{p^c q^d}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} + \sum_{a=1}^{N_a}\frac{Z_a e}{|\vec{r}-\vec{R}_a|}\right][\hat{e}_{m^b}\psi_{m^b}(\vec{r})] \tag{142}$$

原子核の寄与の項は、

$$\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{Z_e e}{i\hbar}\sum_{a=1}^{N_a}(Z_a e)\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_a|}[\hat{e}_{m^b}\psi_{m^b}(\vec{r})], \tag{143}$$

$$= \frac{Z_e e}{i\hbar}\sum_{a=1}^{N_a}(Z_a e)\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{R}_a|}\hat{e}_{m^b}, \tag{144}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{a=1}^{N_a}(Z_a e)V_{n^a m^b}(\vec{R}_a)\,\hat{e}_{m^b}, \tag{145}$$

と核引力積分 (138) で書くことができる。$\sum_{a=1}^{N_a}(Z_a e)V_{n^a m^b}(\vec{R}_a)$ は `intV_mat(n,a,m,b)` で計算できる。

電子分布の寄与は、

$$\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{(Z_e e)}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\left[\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm} V_{p^c q^d}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}\right][\hat{e}_{m^b}\psi_{m^b}(\vec{r})] \tag{146}$$

$$= \frac{(Z_e e)}{i\hbar}\sum_{m,p,q=1}^{N_D}\sum_{b,c,d=\pm}\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})V_{p^c q^d}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}\hat{e}_{m^b} \tag{147}$$

なので、２電子積分を

$$(n^a m^b|p^c q^d) \equiv (Z_e e)^2\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\psi_{q^d}(\vec{s}) = \int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,\frac{\rho_{n^a m^b}(\vec{r})\rho_{p^c q^d}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{148}$$

$$= (Z_e e)\int d^3\vec{s}\,V_{n^a m^b}(\vec{s})\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\psi_{q^d}(\vec{s}) = \int d^3\vec{s}\,V_{n^a m^b}(\vec{s})\rho_{p^c q^d}(\vec{s}) \tag{149}$$

$$= (Z_e e)\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})V_{p^c q^d}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\,\rho_{n^a m^b}(\vec{r})V_{p^c q^d}(\vec{r}) \tag{150}$$

$(a,b,c,d = +\text{ or }-)$ と書くことにすると、

$$\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{1}{i\hbar}\sum_{m,p,q=1}^{N_D}\sum_{b,c,d=\pm}(n^a m^b|p^c q^d)\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}\hat{e}_{m^b} \tag{151}$$

$(n^a m^b|p^c q^d)$ は `inttwoele_mat(n,a,m,b,p,c,q,d)` で計算できる。

まとめると、$\hat{A}_0$ から来るのは、式 (145) + 式 (151) 。

4.5 ベクトルポテンシャル: $\hat{\vec{A}}_A$

単にベクトルポテンシャルといったら system のものを指すことにする。

クーロンゲージで計算する。Tachibana2010 式 (5.3)

$$\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r}) = \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, \tag{152}$$

で、

$$u = t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c} \tag{153}$$

という遅延ポテンシャルである。

$$\hat{\vec{j}}(\vec{r}) = \hat{\vec{j}}_T(\vec{r}) + \hat{\vec{j}}_L(\vec{r}) \tag{154}$$

で、$\mathrm{div}\hat{\vec{j}}_T(\vec{r}) = 0$, $\mathrm{rot}\hat{\vec{j}}_L(\vec{r}) = 0$ である。

$$\begin{aligned} \hat{\vec{j}}_T(\vec{r}) &= \hat{\vec{j}}(\vec{r}) - \hat{\vec{j}}_L(\vec{r}) &(155)\\ &= \hat{\vec{j}}(\vec{r}) - \frac{c}{4\pi}\cdot\frac{1}{c}\mathrm{grad}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_0(x) &(156)\end{aligned}$$

ここには $\hat{A}_0$ の時間微分がでてくるが、この量は遅延ポテンシャルとして前の時間の値だけが必要となることに注意。

Charge current density operator $\hat{\vec{j}}(\vec{r})$ は Tachibana2010 (2.8)∼(2.11) にあるように、

$$\hat{\vec{j}}(x) = \hat{\vec{j}}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a}\hat{\vec{j}}_a(x) = \sum_{\alpha}\hat{\vec{j}}_\alpha(x) \tag{157}$$

α は電子 ($\alpha = e$) と原子核 ($\alpha = a$) をまとめて表すための添字である。$\hat{\vec{j}}_\alpha(x)$ は velocity density operator $\hat{\vec{v}}_\alpha$ を用いて

$$\hat{\vec{j}}_\alpha(x) = Z_\alpha e\hat{\vec{v}}_\alpha(x), \tag{158}$$

のように書け、$Z_e = -1$ で Z_a は原子核 N の電荷で、

$$\hat{\vec{v}}_e(x) = c\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x). \tag{159}$$

Born-Oppenheimer 近似では、$\hat{\vec{v}}_a(x) = 0$ とする。つまり、今の場合

$$\hat{\vec{j}}(x) = \hat{\vec{j}}_e(x) = Z_e\, e\, c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x). \tag{160}$$

これにディラック場の展開を行うと、(125) のように、

$$\hat{j}^k(x) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} j^k_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} \tag{161}$$

縦波成分は、

$$\hat{j}^k_L(x) = \frac{1}{4\pi}\frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_0(x) \tag{162}$$

と (137) から計算できる。時間によらない原子核からの寄与はなくなる。電場積分 (電場は $-\mathrm{grad}\ V$ みたいなものなので)

$$\begin{aligned} E^k_{n^a m^b}(\vec{R}) &\equiv -\frac{1}{4\pi}\frac{\partial}{\partial R^k}V_{n^a m^b}(\vec{R}) &(163)\\ &= -\frac{Z_e e}{4\pi}\int d^3\vec{s}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{s})\psi_{m^b}(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{R})^k}{|\vec{s}-\vec{R}|^3} &(164)\end{aligned}$$

$(a, b = +\ \mathrm{or}\ -)$ とすると、

$$\hat{j}^k_L(\vec{r}) = -\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} E^k_{p^a q^b}(\vec{r})\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}}{dt} \tag{165}$$

である。(164) の $-\frac{Z_e e}{4\pi}$ の因子が無くスピノルの足が残っている積分が `calc_intE_pq(ip,iq,posR,NL,NS,pg,c_p,c_q,intE_pq)` で計算される。(164) を計算する `subroutine` は、`calc_intE_mat(posR,p,a,q,b,intE_mat)`。これらは `sub_int.f90` 中で定義されている。

これらを用いると、ベクトルポテンシャル (152) は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \hat{A}^k_A(ct,\vec{r}) &= \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{j}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} = \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{j}^k(cu,\vec{s}) - \hat{j}^k_L(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} &(166)\\ &= \frac{1}{c}\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\int d^3\vec{s}\left\{\frac{j^k_{p^a q^b}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}(u) + \frac{E^k_{p^a q^b}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}}{dt}(u)\right\} &(167)\end{aligned}$$

時間発展の $\hat{\vec{A}}_A$ が関係する部分を求める。

$$\frac{\partial \hat{\psi}(x)}{\partial t} \ni \frac{Z_e e}{i\hbar} \left\{ -\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{A}}_A(x) \right\} \hat{\psi}(x) \tag{168}$$

にディラック場の展開を行うと、

$$\sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t} \psi_{m^b}(\vec{r}) \ni \frac{Z_e e}{i\hbar} \left\{ -\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{A}}_A(\vec{r}) \right\} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \hat{e}_{m^b} \psi_{m^b}(\vec{r}). \tag{169}$$

左から $\int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})$ を行うと、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} &\ni \frac{Z_e e}{i\hbar} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \left\{ -\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{A}}_A(\vec{r}) \right\} \hat{e}_{m^b} \psi_{m^b}(\vec{r}), & (170)\\
&= -\frac{Z_e e}{i\hbar} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{m^b}(\vec{r}) \hat{A}^k_A(\vec{r}) \hat{e}_{m^b} & (171)\\
&= -\frac{1}{i\hbar c} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) \hat{A}^k_A(\vec{r}) \hat{e}_{m^b} & (172)
\end{aligned}$$

ここで、ψ_{n^a}(ただの数) は $\hat{A}$ と交換することを用いた。式 (152) を代入すると、

$$= -\frac{1}{i\hbar c^2} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) \frac{\hat{j}^k_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|} \hat{e}_{m^b} \tag{173}$$

まとめると、時間発展は、式 (173) で $\hat{j}_T = \hat{j} - \hat{j}_L$ として、式 (161) と式 (165) を用いることにする。

4.6 Radiation 場: $\hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}}$

Tachibana2003 式 (A1) を用いる。$\hat{A}^0_{\mathrm{rad}} = 0$ なゲージ。
Tachibana2003 式 (A1)

$$\hat{A}^\mu_{\mathrm{rad}}(x) = \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\hat{a}(\vec{p},\sigma) e^\mu(\vec{p},\sigma) e^{-ix_\mu p^\mu/\hbar} + \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma) e^{*\mu}(\vec{p},\sigma) e^{+ix_\mu p^\mu/\hbar} \right] \tag{174}$$

つまり、光子場の radiation 部分の時間変化は解けている (→ 平面波)。$\hat{a}(\vec{p},\sigma)$ や $\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)$ は時間に依らない演算子。
Polarization vector $e^\mu(\vec{p},\sigma)$ は、

$$\begin{aligned}
e^0(\vec{p},\sigma) &= 0, & (175)\\
p^\mu e_\mu(\vec{p},\sigma) &= 0, & (176)\\
\sum_{\sigma=\pm 1} e^i(\vec{p},\sigma) e^{*j}(\vec{p},\sigma) &= \delta_{ij} - \frac{p^i p^j}{|\vec{p}|^2}, & (177)\\
e^k(\vec{p},\bar{\sigma}) e^{*k}(\vec{p},\sigma) &= \delta_{\sigma\bar{\sigma}}, & (178)\\
e^k(-\vec{p},\bar{\sigma}) e^k(\vec{p},\sigma) &= \delta_{\bar{\sigma}\sigma} & (179)
\end{aligned}$$

をみたすようなものにとる。
$\vec{p}$ の極座標表示を

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} p^0 \sin\theta \cos\phi \\ p^0 \sin\theta \sin\phi \\ p^0 \cos\theta \end{pmatrix}, \tag{180}$$

とすると ($0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \phi < 2\pi$, $|\vec{p}| = p^0$)、

$$e^\mu(\vec{p},\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \cos\phi\cos\theta \mp i\sin\phi \\ \sin\phi\cos\theta \pm i\cos\phi \\ -\sin\theta \end{pmatrix}, \tag{181}$$

で、複号は $\sigma = \pm 1$ に対応する。$e^\mu(-\vec{p},\sigma) = e^{*\mu}(\vec{p},\sigma)$ である。($\vec{p} \to -\vec{p}$ は極座標では $\theta \to \pi - \theta$ と $\phi \to \phi + \pi$ なので、$\sin\theta \to \sin\theta$、$\cos\theta \to -\cos\theta$、$\sin\phi \to -\sin\phi$、$\cos\phi \to -\cos\phi$ である。)

時間変化への寄与は $\hat{\vec{A}}_A$ と同型で、

$$\frac{\partial \hat{\psi}(x)}{\partial t} \ni \frac{Z_e e}{i\hbar} \left\{ -\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{A}}_{\rm rad}(x) \right\} \hat{\psi}(x) \tag{182}$$

となり、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} &\ni \frac{Z_e e}{i\hbar} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \left\{ -\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r}) \right\} \hat{e}_{m^b} \psi_{m^b}(\vec{r}), & (183) \\ &= -\frac{Z_e e}{i\hbar} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{m^b}(\vec{r}) \hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r}) \hat{e}_{m^b} & (184) \\ &= -\frac{1}{i\hbar c} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) \hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r}) \hat{e}_{m^b} & (185) \end{aligned}$$

ここで、ψ_{n^a}(ただの数) は $\hat{A}$ と交換することを用いた。

$$\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\hat{a}(\vec{p},\sigma) e^k(\vec{p},\sigma) e^{-icp^0 t/\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} + \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma) e^{*k}(\vec{p},\sigma) e^{icp^0 t/\hbar} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \right] \tag{186}$$

として計算するので、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni -\frac{1}{i\hbar c} \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \Bigg[&\int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} e^k(\vec{p},\sigma) e^{-icp^0 t/\hbar} \hat{a}(\vec{p},\sigma) \hat{e}_{m^b} \\ + &\int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} e^{*k}(\vec{p},\sigma) e^{icp^0 t/\hbar} \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma) \hat{e}_{m^b} \Bigg]. \end{aligned} \tag{187}$$

ここで、charge current density (126) のフーリエ変換の積分を

$$F^k_{n^a m^b}(\vec{p}) = \int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = (Z_e\, e\, c) \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{m^b}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{188}$$

($a, b = +$ or $-$) とすると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni -\frac{1}{i\hbar} \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2}}{\sqrt{c(2\pi\hbar)^3}} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \times \\ \left[F^k_{n^a m^b}(\vec{p}) e^k(\vec{p},\sigma) e^{-icp^0 t/\hbar} \hat{a}(\vec{p},\sigma) \hat{e}_{m^b} + F^k_{n^a m^b}(-\vec{p}) e^{*k}(\vec{p},\sigma) e^{icp^0 t/\hbar} \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma) \hat{e}_{m^b} \right]. \end{aligned} \tag{189}$$

$F^k_{n^a m^b}(\vec{p})$ の計算は、`function intF_mat(k,vecP,p,a,q,b)` で行う。

4.7 運動項と質量項

時間発展の運動項からの寄与は、

$$\frac{\partial \hat{\psi}(x)}{\partial t} \ni -c\gamma^0 \gamma^i \partial_i \hat{\psi}(x). \tag{190}$$

ディラック場の展開を行うと、

$$\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\frac{\partial\hat{e}_{m^b}}{\partial t}\psi_{m^b}(\vec{r})\ni -c\gamma^0\gamma^i\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\hat{e}_{m^b}\partial_i\psi_{m^b}(\vec{r}). \tag{191}$$

左から $\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})$ を行うと、

$$\frac{\partial\hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni -c\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\left[\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^i\partial_i\psi_{m^b}(\vec{r})\right]\hat{e}_{m^b}. \tag{192}$$

なので、運動エネルギー積分を

$$T_{n^a m^b} = -i\hbar c\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^i\partial_i\psi_{m^b}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\cdot c\alpha^i(-i\hbar\partial_i)\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{193}$$

$(a, b = +\ \mathrm{or}\ -)$ とすると、

$$\frac{\partial\hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{1}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}T_{n^a m^b}\hat{e}_{m^b}. \tag{194}$$

$T_{n^a m^b}$ の計算は、function `intT_mat(n,a,m,b)` で行う。

時間発展の質量項からの寄与は、

$$\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t}\ni\frac{m_ec^2}{i\hbar}\gamma^0\hat{\psi}(x). \tag{195}$$

ディラック場の展開を行うと、

$$\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\frac{\partial\hat{e}_{m^b}}{\partial t}\psi_{m^b}(\vec{r})\ni\frac{m_ec^2}{i\hbar}\gamma^0\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\hat{e}_{m^b}\psi_{m^b}(\vec{r}). \tag{196}$$

左から $\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})$ を行うと、

$$\frac{\partial\hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{m_ec^2}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\left[\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\psi_{m^b}(\vec{r})\right]\hat{e}_{m^b}. \tag{197}$$

なので、質量エネルギー積分を

$$M_{n^a m^b} = m_ec^2\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\psi_{m^b}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})(m_ec^2\beta)\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{198}$$

$(a, b = +\ \mathrm{or}\ -)$ とすると、

$$\frac{\partial\hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni \frac{1}{i\hbar}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}M_{n^a m^b}\hat{e}_{m^b}. \tag{199}$$

$M_{n^a m^b}$ の計算は、function `intM_mat(n,a,m,b)` で行う。

この質量エネルギー積分は、

$$\beta=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\0&-2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{200}$$

より、

$$\tilde{M}_{n^a m^b} = m_ec^2\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\begin{pmatrix}0&0\\0&-2\end{pmatrix}\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{201}$$

とすると、ψ_{n^a} の正規直交性より、

$$M_{n^a m^b} = \tilde{M}_{n^a m^b} + (m_e c^2)\delta_{n^a m^b} \tag{202}$$

である。

運動エネルギー積分・質量エネルギー積分の寄与を、核引力積分の寄与 (145) と合わせて書く。(1 電子積分で書ける部分をまとめる)

$$h_{n^a m^b} = T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b} + \sum_{a=1}^{N_a} (Z_a e) V_{n^a m^b}(\vec{R}_a) \tag{203}$$

$(a, b = +\ \mathrm{or}\ -)$ とすると、

$$\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \quad \ni \quad \frac{1}{i\hbar} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} h_{n^a m^b} \hat{e}_{m^b}. \tag{204}$$

$h_{n^a m^b}$ の計算には、function `inth_mat(n,a,m,b)` を用いる。

また、

$$\tilde{h}_{n^a m^b} = T_{n^a m^b} + \tilde{M}_{n^a m^b} + \sum_{a=1}^{N_a} (Z_a e) V_{n^a m^b}(\vec{R}_a) \tag{205}$$

とする。

4.8 $\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t}$

以上をまとめると、消滅演算子の時間発展を表す式は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} &= \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} h_{n^a m^b} \hat{e}_{m^b} + \sum_{m,p,q=1}^{N_D} \sum_{b,c,d=\pm} (n^a m^b | p^c q^d) \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} \hat{e}_{m^b} \\ &- \frac{1}{c^2} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) \frac{\hat{j}^k_T(cu, \vec{s})}{|\vec{r} - \vec{s}|} \hat{e}_{m^b} \\ &- \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2}}{\sqrt{c(2\pi\hbar)^3}} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{k=1}^{3} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \times \\ &\left[F^k_{n^a m^b}(\vec{p}) e^k(\vec{p}, \sigma) e^{-icp^0 t/\hbar} \hat{a}(\vec{p}, \sigma) \hat{e}_{m^b} + F^k_{n^a m^b}(-\vec{p}) e^{*k}(\vec{p}, \sigma) e^{icp^0 t/\hbar} \hat{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \hat{e}_{m^b} \right]. \end{aligned} \tag{206}$$

ここで、

$$h_{n^a m^b} = T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b} + \sum_{a=1}^{N_a} (Z_a e) V_{n^a m^b}(\vec{R}_a), \tag{207}$$

$$u = t - \frac{|\vec{r} - \vec{s}|}{c}, \tag{208}$$

$$\hat{j}^k_T(cu, \vec{s}) \quad = \quad \sum_{p,q=1}^{N_D} \sum_{c,d=\pm} \left\{ j^k_{p^c q^d}(\vec{s}) \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(u) + E^k_{p^c q^d}(\vec{s}) \frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}}{dt}(u) \right\}, \tag{209}$$

$$F^k_{n^a m^b}(\vec{p}) = \int d^3\vec{r}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{210}$$

である。

4.9 Spinor の複素共役

(使わないかも。)

次のような spinor bilinear の関係式を使う。

$$[\psi^\dagger \chi]^* = [\psi^*_\alpha \chi_\alpha]^* = \chi^*_\alpha \psi_\alpha = \chi^\dagger \psi \tag{211}$$

$$[\psi^\dagger \gamma^0 \chi]^* = [\psi^*_\alpha \gamma^0_{\alpha\beta} \chi_\beta]^* = \chi^*_\beta \gamma^{0\dagger}_{\beta\alpha} \psi_\alpha = \chi^\dagger \gamma^{0\dagger} \psi = \chi^\dagger \gamma^0 \psi \tag{212}$$

$$[\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^k \chi]^* = [\psi^*_\alpha \gamma^0_{\alpha\beta} \gamma^k_{\beta\gamma} \chi_\gamma]^* = \chi^*_\gamma \gamma^{k\dagger}_{\gamma\beta} \gamma^{0\dagger}_{\beta\alpha} \psi_\alpha = \chi^\dagger \gamma^{k\dagger} \gamma^{0\dagger} \psi = -\chi^\dagger \gamma^k \gamma^0 \psi = \chi^\dagger \gamma^0 \gamma^k \psi \tag{213}$$

核引力積分 (138) の複素共役は、

$$[V_{n^a m^b}(\vec{R})]^* = (Z_e e) \int d^3\vec{s}\, \frac{[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{s}) \psi_{m^b}(\vec{s})]^*}{|\vec{s} - \vec{R}|} = (Z_e e) \int d^3\vec{s}\, \frac{\psi^\dagger_{m^b}(\vec{s}) \psi_{n^a}(\vec{s})}{|\vec{s} - \vec{R}|} = V_{m^b n^a}(\vec{R}) \tag{214}$$

２電子積分 (148) の複素共役は、

$$\begin{aligned} (n^a m^b | p^c q^d)^* &= (Z_e e)^2 \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s} \left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \psi_{m^b}(\vec{r})\right]^* \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \left[\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s}) \psi_{q^d}(\vec{s})\right]^* \\ &= (Z_e e)^2 \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, \psi^\dagger_{m^b}(\vec{r}) \psi_{n^a}(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \psi^\dagger_{q^d}(\vec{s}) \psi_{p^c}(\vec{s}) \\ &= (m^b n^a | q^d p^c) \end{aligned} \tag{215}$$

電場積分 (164) の複素共役は、

$$[E^k_{n^a m^b}(\vec{R})]^* = const. \int d^3\vec{s} \left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{s}) \psi_{m^b}(\vec{s})\right]^* \frac{(\vec{s} - \vec{R})^k}{|\vec{s} - \vec{R}|^3} = const. \int d^3\vec{s}\, \psi^\dagger_{m^b}(\vec{s}) \psi_{n^a}(\vec{s}) \frac{(\vec{s} - \vec{R})^k}{|\vec{s} - \vec{R}|^3} = E^k_{m^b n^a}(\vec{R}) \tag{216}$$

電流のフーリエ変換の積分 (188) の複素共役は、

$$\begin{aligned} [F^k_{n^a m^b}(\vec{p})]^* &= (Z_e\, e\, c) \int d^3\vec{r} \left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{m^b}(\vec{r})\right]^* \left[e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right]^* \\ &= (Z_e\, e\, c) \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{m^b}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{n^a}(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = F^k_{m^b n^a}(-\vec{p}) \end{aligned} \tag{217}$$

運動エネルギー積分 (193) の複素共役は、

$$\begin{aligned} [T_{n^a m^b}]^* &= +i\hbar c \int d^3\vec{r} \left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^i \partial_i \psi_{m^b}(\vec{r})\right]^* = +i\hbar c \int d^3\vec{r}\, \partial_i \psi^\dagger_{m^b}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^i \psi_{n^a}(\vec{r}) \\ &= -i\hbar c \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{m^b}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^i \partial_i \psi_{n^a}(\vec{r}) = T_{m^b n^a} \end{aligned} \tag{218}$$

質量エネルギー積分 (198) の複素共役は、

$$[M_{n^a m^b}]^* = m_e c^2 \int d^3\vec{r} \left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r}) \gamma^0 \psi_{m^b}(\vec{r})\right]^* = m_e c^2 \int d^3\vec{r}\, \psi^\dagger_{m^b}(\vec{r}) \gamma^0 \psi_{n^a}(\vec{r}) = M_{m^b n^a} \tag{219}$$

(よって、１電子積分の複素共役は、$[h_{n^a m^b}]^* = h_{m^b n^a}$。)

電流にでてくる式 (126) の複素共役は、

$$[j^k_{p^a q^b}(\vec{r})]^* = Z_e\, e\, c\, [\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{q^b}(\vec{r})]^* = Z_e\, e\, c\, \psi^\dagger_{q^b}(\vec{r}) \gamma^0 \gamma^k \psi_{p^a}(\vec{r}) = j^k_{q^b p^a}(\vec{r}) \tag{220}$$

なので、式 (161) より $\hat{j}^{k\dagger} = \hat{j}^k$。電場積分の複素共役も同様だったので、(165) より $\hat{j}^{k\dagger}_L = \hat{j}^k_L$。よって、$\hat{j}^{k\dagger}_T = \hat{j}^k_T$。

5 物理量

(時間変化しない)Heisenberg 表示の状態 bracket ではさむ。
実際は正規積にする。
電荷密度: $\hat{\rho}_e(x)$、電流密度: $\hat{j}_e(x)$ は前に定義してある。

5.1 電磁場・ローレンツカ

電磁場の演算子は、

$$\hat{\vec{E}}(x) = -\mathrm{grad}\hat{A}_0(x) - \frac{1}{c}\frac{\partial\hat{\vec{A}}(x)}{\partial t}, \qquad \mathrm{div}\hat{\vec{A}}(x) = 0, \tag{221}$$

$$\hat{\vec{B}}(x) = \mathrm{rot}\hat{\vec{A}}(x) \tag{222}$$

電子のローレンツカ密度演算子は、

$$\hat{\vec{L}}_e(x) = \hat{\vec{E}}(x)\hat{\rho}_e(x) + \frac{1}{c}\hat{\vec{j}}_e(x) \times \hat{\vec{B}}(x) \tag{223}$$

5.2 テンション密度とストレステンソル密度

動的運動量 (kinetic momentum) 密度演算子

$$\hat{\vec{\Pi}}_e(x) = \frac{1}{2}\left(i\hbar\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\vec{D}}_e(x)\hat{\psi}(x) - i\hbar\left(\hat{\vec{D}}_e(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger \cdot \hat{\psi}(x)\right) \tag{224}$$

の時間微分の式より得られる量。動的運動量は質量 x 速度の意味での運動量で、正準運動量と区別するための呼称。エルミートである。この時間微分は速度場の微分の量子論版で、流体のオイラー方程式の場の量子論版といえる。
これは

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{\Pi}}_e(x) = \hat{\vec{L}}_e(x) + \hat{\vec{\tau}}_e^{\Pi}(x) \tag{225}$$

と、ローレンツカ密度演算子とテンション密度演算子の和で書ける。
テンション密度演算子は

$$\begin{aligned}\hat{\tau}_e^{\Pi k}(x) &= \frac{i\hbar c}{2}\left[\left(\hat{D}_{el}(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger \gamma^0\gamma^l \cdot \hat{D}_{ek}(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^l\hat{D}_{ek}(x)\hat{D}_{el}(x)\hat{\psi}(x)\right. \\ &\left. - \left(\hat{D}_{ek}(x)\hat{D}_{el}(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger \gamma^0\gamma^l \cdot \hat{\psi}(x) - \left(\hat{D}_{ek}(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger \gamma^0\gamma^l \cdot \hat{D}_{el}(x)\hat{\psi}(x)\right] - \frac{1}{c}\left(\hat{\vec{j}}_e(x) \times \vec{B}(x)\right)^k\end{aligned} \tag{226}$$

で、これはストレステンソル密度演算子の div になっている。

$$\hat{\vec{\tau}}_e^{\Pi}(x) = \mathrm{div}\,\hat{\overleftrightarrow{\tau}}_e{}^{\Pi}(x) \tag{227}$$

ストレステンソル密度演算子は

$$\hat{\tau}_e^{\Pi\,kl}(x) = \frac{i\hbar c}{2}\left[\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^l\hat{D}_{e\,k}(x)\hat{\psi}(x) - \left(\hat{D}_{e\,k}(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger \gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right] \tag{228}$$

これを

$$\hat{D}_{e\,k}(x) = \partial_k + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_k(x), \quad Z_e = -1, \tag{229}$$

を用いて変形すると、

$$
\begin{aligned}
\hat{\tau}_e^{\Pi\,kl}(x) &= \frac{i\hbar c}{2}\Bigg[\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\partial_k\hat{\psi}(x) - (\partial_k\hat{\psi}^\dagger(x))\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x) \\
&\quad + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{A}_k(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{A}_k(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right)\Bigg] \qquad (230) \\
&= \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\tau^{kl}_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} - \frac{Z_e e}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{A}_k(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{A}_k(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \qquad (231)
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\tau^{kl}_{p^a q^b}(\vec{r}) = \frac{i\hbar c}{2}\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^l\partial_k\psi_{q^b}(\vec{r}) - \partial_k\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^l\psi_{q^b}(\vec{r})\right] \qquad (232)
$$

$(a, b = +\text{ or } -)$ とした。この関数は `tau_mat(k,l,x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。この関数にはベクトルポテンシャルの寄与が入っていないことに注意。

5.3 スピン角運動量密度

電子のスピン角運動量密度演算子は、Tachibana2010 式 (4.3)

$$
\begin{aligned}
\hat{\vec{\sigma}}_e(x) &= \hat{\psi}^\dagger(x)\vec{\Sigma}\hat{\psi}(x), \qquad (233) \\
\Sigma^k &= \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix}. \qquad (234)
\end{aligned}
$$

とすると

$$
\hat{\vec{s}}_e(x) = \frac{1}{2}\hbar\hat{\vec{\sigma}}_e(x), \qquad (235)
$$

である。電子密度演算子に $\vec{\Sigma}$ が挟まったもの。明示的に書くと、

$$
\Sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (236)
$$

$$
\hat{s}^k_e(x) = \frac{1}{2}\hbar\hat{\psi}^\dagger(x)\Sigma^k\hat{\psi}(x) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} s^k_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} \qquad (237)
$$

ここで、

$$
s^k_{p^a q^b}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\hbar\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\Sigma^k\psi_{q^b}(\vec{r})\right] \qquad (238)
$$

$(a, b = +\text{ or } -)$ とした。この関数は `s_mat(k,x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。

5.4 スピントルク密度とツェータ力密度

スピン角運動量密度の運動方程式に現れる量。Tachibana2010 式 (4.4)

$$
\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{s}}_e(x) = \hat{\vec{t}}_e(x) + \hat{\vec{\zeta}}_e(x). \qquad (239)
$$

右辺の 1 項目はストレステンソルで書ける量で、スピントルク密度演算子である。Tachibana2010 式 (4.5)

$$
\hat{t}^k_e(x) = -\varepsilon_{lnk}\hat{\tau}^{\Pi ln}_e(x). \qquad (240)
$$

これに関して、

$$t^k_{p^aq^b}(\vec{r}) = -\varepsilon_{lnk}\tau^{ln}_{p^aq^b}(\vec{r}) \tag{241}$$

$(a,b=+\ \mathrm{or}\ -)$ を定義する。この関数は `t_mat(k,x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。この関数にはベクトルポテンシャルの寄与が入っていないことに注意。明示的に書くと、

$$t^1_{p^aq^b}(\vec{r}) = -\tau^{23}_{p^aq^b}(\vec{r}) + \tau^{32}_{p^aq^b}(\vec{r}) \tag{242}$$

$$t^2_{p^aq^b}(\vec{r}) = +\tau^{13}_{p^aq^b}(\vec{r}) - \tau^{31}_{p^aq^b}(\vec{r}) \tag{243}$$

$$t^3_{p^aq^b}(\vec{r}) = -\tau^{12}_{p^aq^b}(\vec{r}) + \tau^{21}_{p^aq^b}(\vec{r}) \tag{244}$$

２項目はツェータ力密度演算子である。Tachibana2010(4.6)

$$\hat{\zeta}^k_e(x) = -c\partial_k\left(\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^k\frac{1}{2}\hbar\Sigma^k\hat{\psi}(x)\right); \quad (\text{no sum over } k) \tag{245}$$

$$= -\frac{\hbar c}{2}\partial_k\left(\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^k\Sigma^k\hat{\psi}(x)\right) \tag{246}$$

$$= \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\zeta^k_{p^aq^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b} \tag{247}$$

ここで、

$$\zeta^k_{p^aq^b}(\vec{r}) = -\frac{\hbar c}{2}\partial_k\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\Sigma^k\psi_{q^b}(\vec{r})\right]; \quad (\text{no sum over } k) \tag{248}$$

$$= -\frac{\hbar c}{2}\left[\left(\partial_k\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\right)\gamma^0\gamma^k\Sigma^k\psi_{q^b}(\vec{r}) + \psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\Sigma^k\partial_k\psi_{q^b}(\vec{r})\right] \tag{249}$$

$(a,b=+\ \mathrm{or}\ -)$ とした。この関数は `zeta_mat(k,x,y,z,p,a,q,b)` で計算できる。

ツェータ力密度演算子はカイラル密度演算子の微分からできていると見ることもできる。

$$\hat{\zeta}^k_e(x) = -\partial_k\hat{\phi}_5(x), \tag{250}$$

$$\hat{\phi}_5(x) = \frac{\hbar c}{2}\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^k\Sigma^k\hat{\psi}(x) = \frac{\hbar}{2Z_e e}\hat{j}^0_5(x). \tag{251}$$

ここでも k の和はとらないので注意 (どの k で計算しても同じ)。

カイラルカレントの定義は、

$$\hat{j}^\mu_5(x) = cZ_e e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^\mu\gamma_5\hat{\psi}(x), \tag{252}$$

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \tag{253}$$

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{254}$$

5.5 誘電率:$\hat{\overleftrightarrow{\varepsilon}}(x)$

分極は、Tachibana2010 式 (5.8)

$$\hat{\vec{P}}(x) = \frac{1}{4\pi}\mathrm{grad}\hat{A}_0(x) + \frac{1}{4\pi c}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{A}}_A(x) \tag{255}$$

で与えられる。今 M が無いので、Tachibana2010 式 (5.30)

$$\hat{\vec{P}}(x) = \hat{\overleftrightarrow{\alpha}}(x)\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(x)\right) \tag{256}$$

により $\hat{\overleftrightarrow{\alpha}}(x)$ が決まり、誘電率 $\hat{\overleftrightarrow{\varepsilon}}(x)$ とは Tachibana2010 式 (5.31)

$$\hat{\overleftrightarrow{\varepsilon}}(x) = \frac{1}{1-4\pi\hat{\overleftrightarrow{\alpha}}(x)} \tag{257}$$

の関係にある。

分極密度演算子を生成消滅演算子で書く。スカラーポテンシャルは (137) なので、

$$\begin{aligned}
\hat{P}^k(x) &\ni \frac{1}{4\pi}({\rm grad}\hat{A}_0(x))^k && (258)\\
&= \frac{1}{4\pi}\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\frac{\partial V_{p^aq^b}(\vec{r})}{\partial r^k}\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b} + \frac{1}{4\pi}\sum_{a=1}^{N_a}(Z_ae)\frac{\partial}{\partial r^k}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_a|} && (259)\\
&= -\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}E^k_{p^aq^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b} - \frac{1}{4\pi}\sum_{a=1}^{N_a}(Z_ae)\frac{(\vec{r}-\vec{R}_a)^k}{|\vec{r}-\vec{R}_a|^3} && (260)
\end{aligned}$$

ベクトルポテンシャルは (167) なので、

$$\begin{aligned}
\hat{P}^k(x) &\ni \frac{1}{4\pi c}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^k_A(x) && (261)\\
&= \frac{1}{4\pi c^2}\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\int d^3\vec{s}\left\{\frac{j^k_{p^aq^b}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b}}{dt}(u) + \frac{E^k_{p^aq^b}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\frac{d^2\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b}}{dt^2}(u)\right\} && (262)
\end{aligned}$$

ここで、$u = t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}$ である。遅延ポテンシャル部分は Sec. 6.3 のように計算する。

$\hat{\overleftrightarrow{\alpha}}(x)$ を定義する側の入射 photon の計算は、(186) を用いて、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r})}{\partial t} &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\Bigg[\hat{a}(\vec{p},\sigma)e^k(\vec{p},\sigma)\left(\frac{-icp^0}{\hbar}\right)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\\
&\qquad +\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)e^{*k}(\vec{p},\sigma)\left(\frac{icp^0}{\hbar}\right)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\Bigg] && (263)\\
&= \left(\frac{-ic}{\hbar}\right)\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\left[\hat{a}(\vec{p},\sigma)e^k(\vec{p},\sigma)p^0e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} - \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)e^{*k}(\vec{p},\sigma)p^0e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right]\\
& && (264)
\end{aligned}$$

より計算できる。

5.6 透磁率:$\hat{\overleftrightarrow{\mu}}(x)$

磁化は、Tachibana2010 式 (5.11)

$$\hat{\vec{M}}(x) = \frac{1}{4\pi}{\rm rot}\hat{\vec{A}}_A(x) \tag{265}$$

で与えられる。今 M が無いので、Tachibana2010 式 (5.12)(5.30)

$$\hat{\vec{H}}(x) = {\rm rot}\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(x), \tag{266}$$

$$\hat{\vec{M}}(x) = \hat{\overleftrightarrow{\chi}}_m(x)\hat{\vec{H}}(x) \tag{267}$$

により $\overset{\leftrightarrow}{\chi}_m(x)$ が決まり、透磁率 $\overset{\leftrightarrow}{\mu}(x)$ とは Tachibana2010 式 (5.32)

$$\overset{\leftrightarrow}{\mu}(x) \quad = 1 + 4\pi\overset{\leftrightarrow}{\chi}_m(x) \tag{268}$$

の関係にある。

磁化密度演算子を生成消滅演算子で書く。ベクトルポテンシャルは (167) だが、これの空間微分は、演算子の引数に retardation による空間依存性が入っているため、このままの形では計算しにくい。遅延ポテンシャル部分を Sec. 6.3 のように変形してから微分する。

$\overset{\leftrightarrow}{\chi}_m(x)$ を定義する側の入射 photon の計算は、(186) を用いて計算できる。

$$\mathrm{rot}\mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{or} \quad (\mathrm{rot}\mathbf{A})^k = \varepsilon_{kij}\partial_i A^j \tag{269}$$

なので、$\varepsilon_{kij}p^i e^j(\vec{p},\sigma) = (\vec{p}\times\vec{e})^k$ の計算が必要。

$$\vec{p}\times\vec{e}(\vec{p},\sigma) = \begin{pmatrix} p^0\sin\theta\cos\phi \\ p^0\sin\theta\sin\phi \\ p^0\cos\theta \end{pmatrix} \times \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\phi\cos\theta \mp i\sin\phi \\ \sin\phi\cos\theta \pm i\cos\phi \\ -\sin\theta \end{pmatrix} = \frac{p^0}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\sin\phi \mp i\cos\phi\cos\theta \\ \cos\phi \mp i\cos\theta\sin\phi \\ \pm i\sin\theta \end{pmatrix} \tag{270}$$

$$\begin{aligned}(\mathrm{rot}\hat{A}_{\mathrm{rad}})^k &= \varepsilon_{kij}\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\Big[\hat{a}(\vec{p},\sigma)e^j(\vec{p},\sigma)\left(\frac{ip^i}{\hbar}\right)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \\ &\qquad +\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)e^{*j}(\vec{p},\sigma)\left(\frac{-ip^i}{\hbar}\right)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\Big] \qquad (271) \\ &= \frac{i}{\hbar}\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\left[\hat{a}(\vec{p},\sigma)(\vec{p}\times\vec{e})^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} - \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)(\vec{p}\times\vec{e}^*)^k(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \qquad (272)\end{aligned}$$

5.7 屈折率: $\overset{\leftrightarrow}{n}(\vec{r})$

$\overset{\leftrightarrow}{n}(\vec{r}) = \sqrt{\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}(\vec{r})\,\overset{\leftrightarrow}{\mu}(\vec{r})}$

6 数値計算 1

6.1 演算子

登場する演算子は、光子 $\hat{a}(\vec{p},\sigma)$, 電子 $\hat{e}_n$, 陽電子 $\hat{f}_n$ の 3 種類。

ある物理量の演算子はこれらで表される。

演算子を時間発展させ (時間がたった時の演算子を時刻 0 での演算子で表し)、ある状態 (これは時間発展しない。時刻 0 の演算子を真空にかけたもの) で期待値を取ることで、時間がたった時のある物理量の値を得る。

6.2 初期条件

$t = 0$ で、遅延ポテンシャルはゼロ ($t < 0$ で全ての量はゼロ) という近似を採用する。特に $\hat{A}_A(\vec{r})|_{t=0} = 0$ となる。

これは、電気素量と電子質量を静止電子の観測値に設定すること、Furry 表示の基底を選んだこと、に対応している。

6.3 遅延ポテンシャルの扱い

ガウス型積分の公式を用いる事ができるように次のようにすることもできる。

$t=0$ などで、$t<0$ での量が必要となるが、それらは全てゼロと置くことにする。

[9] の Appendix A に従う。

$$\hat{\vec{j}}_T(u,\vec{s}) = \hat{j}^\mu(u,\vec{s}) = 0, \quad u<0, \tag{273}$$

と

$$\hat{\vec{j}}_T(u,\vec{s}) = \hat{j}^\mu(u,\vec{s}) = 0, \quad u>t, \tag{274}$$

を用いると、次のように変形できる。(152)

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r}) &= \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} && (275)\\
&= \frac{1}{c}\int_{-\infty}^{\infty} du \int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\delta\left(u-\left(t-\frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}\right)\right) && (276)\\
&= \frac{1}{c^2\pi}\int_0^t du \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \int d^3\vec{s}\,\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})\exp\left(i\alpha\left((u-t)^2-\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)\right) && (277)
\end{aligned}$$

ここで、

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2a}\left\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\right\}, \quad a>0, \tag{278}$$

と

$$\delta\left((u-t)^2-\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha e^{i\alpha\left((u-t)^2-\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)} \tag{279}$$

を用いた。

$$\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r}) = \frac{1}{c^2\pi}\int_0^t du \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp\left(i\alpha(u-t)^2\right)\int d^3\vec{s}\,\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{280}$$

$\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s}$ を期待値で置き換え、ガウス型とすると、s 積分は解析的に計算できる。u, α は数値的に積分する必要がありそう。

6.4 Photon 運動量の離散化

運動量の積分は、極座標で行うのが便利と思われる。

$$\int d^3\vec{p} = \int_0^{\infty} dp^0 \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\,(p^0)^2\sin\theta \tag{281}$$

例えば極座標の積分を離散化するとき、p^0 方向に 1 つ ($p^0 = p_{\max} = \Delta p^0$)、$\theta$ 方向に 3 つ ($\theta = 0, \pi/2, \pi,\ \Delta\theta = \pi/2$)、$\phi$ 方向に 4 つ ($0, \pi/2, \pi, 3\pi/2,\ \Delta\phi = \pi/2$) とると、実質 p_x, p_y, p_z の正負の 6 つの向きを表すことができる。つまり、$(p,\theta,\phi) = (p_{\max},0,0)$, $(p_{\max},\pi/2,0)$, $(p_{\max},\pi/2,\pi/2)$, $(p_{\max},\pi/2,\pi)$, $(p_{\max},\pi/2,3\pi/2)$, $(p_{\max},\pi,0)$ の和をとる。

$p^0=0$ は含まない。

このように離散化した時の光子の自由度 (運動量の grid 数 ($N_{p^0}\times N_\theta\times N_\phi$)× 偏光 (2)) を $N_{\rm ph} = 2N_p$ として、$(\vec{p},\sigma)$ を添字 j でまとめて表すと、

$$\sum_{\sigma=\pm1}\int d^3\vec{p} \to \sum_{j=1}^{N_{\rm ph}} \Delta p^0\Delta\theta\Delta\phi(p^0)^2\sin\theta \tag{282}$$

となり、

$$\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni -\frac{1}{i\hbar}\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2}}{\sqrt{c(2\pi\hbar)^3}}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{k=1}^{3}\sum_{\sigma=\pm 1}\int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \times \left[F^k_{n^a m^b}(\vec{p})e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0 t/\hbar}\hat{a}(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{m^b} + F^k_{n^a m^b}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0 t/\hbar}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{m^b}\right]. \tag{283}$$

は、

$$i\hbar\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni -\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2}}{\sqrt{c(2\pi\hbar)^3}}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{k=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_{\rm ph}}\frac{\Delta p^0\Delta\theta\Delta\phi(p_j^0)^2\sin\theta}{\sqrt{2p_j^0}} \times \left[F^k_{n^a m^b}(\vec{p}_j)e^k_j e^{-icp_j^0 t/\hbar}\hat{a}_j\hat{e}_{m^b} + F^k_{n^a m^b}(-\vec{p}_j)e^{*k}_j e^{icp_j^0 t/\hbar}\hat{a}_j^\dagger\hat{e}_{m^b}\right], \tag{284}$$

となる。

離散化を指定する値は、module Constants で定義されている。

$$p_{\max} \rightarrow \mathtt{POMAX} \tag{285}$$
$$N_{p^0} \rightarrow \mathtt{NP0} \tag{286}$$
$$N_\theta \rightarrow \mathtt{NPTH} \tag{287}$$
$$N_\phi \rightarrow \mathtt{NPPHI} \tag{288}$$
$$N_{\rm ph} \rightarrow \mathtt{Nph} = \mathtt{NP0} * \mathtt{NPTH} * \mathtt{NPPHI} * 2 \tag{289}$$

記法の簡単のために、

$$\mathcal{F}_{n^a m^b j}(t) \equiv \sum_{k=1}^{3} F^k_{n^a m^b}(\vec{p}_j)e^k_j e^{-icp_j^0 t/\hbar} \tag{290}$$

を導入する。(188) の複素共役は、

$$\begin{aligned}[F^k_{n^a m^b}(\vec{p})]^* &= (Z_e\, e\, c)\int d^3\vec{r}\left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})\right]^*\left[e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right]^* \\ &= (Z_e\, e\, c)\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{m^b}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{n^a}(\vec{r})e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = F^k_{m^b n^a}(-\vec{p}),\end{aligned} \tag{291}$$

より、

$$[\mathcal{F}_{n^a m^b j}(t)]^* = \sum_{k=1}^{3} F^k_{m^b n^a}(-\vec{p}_j)e^{*k}_j e^{icp_j^0 t/\hbar} \tag{292}$$

これらを用いると、

$$i\hbar\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} \ni -\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2}}{\sqrt{c(2\pi\hbar)^3}}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{j=1}^{N_{\rm ph}}\frac{\Delta p^0\Delta\theta\Delta\phi(p_j^0)^2\sin\theta}{\sqrt{2p_j^0}}\left[\mathcal{F}_{n^a m^b j}(t)\hat{a}_j\hat{e}_{m^b} + \mathcal{F}^*_{m^b n^a j}(t)\hat{a}_j^\dagger\hat{e}_{m^b}\right], \tag{293}$$

となる。

$F^k_{n^a m^b}(\vec{p})e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0 t/\hbar}$ は function intcalF_mat(t,p0,th,phi,sig,p,a,q,b) で計算され、それを離散化した $\mathcal{F}_{n^a m^b j}(t)$ は、function intcalFj_mat(T,j,p,a,q,b) 計算している。それらの関係づけに用いる、1次元のラベルを3次元のラベルに変換する作業は subroutine convert_label_2(j,NX,NY,NZ,ix,iy,iz,sig) で行っている。

6.5 ガウス積分

核引力積分 (138)、2電子積分 (148)、電場積分 (164)、電流のフーリエ変換の積分 (188)、運動項の積分 (193)、質量項の積分 (198) は解析的に実行できる。それらに必要な原始ガウス関数の式を挙げる。

中心が $\vec{A}$ にあり、軌道指数が α_A で、角運動量が n_x, n_y, n_z で表される規格化されていない原始ガウス関数 $\tilde{g}(\vec{x})$ は

$$\begin{aligned}\tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z) &= (x-A_x)^{n_x}(y-A_y)^{n_y}(z-A_z)^{n_z}e^{-\alpha_A r_A^2}, &(294)\\ r_A^2 &= (x-A_x)^2+(y-A_y)^2+(z-A_z)^2 &(295)\end{aligned}$$

書ける。これの規格化係数は、function `norm_pg(alpha,nx,ny,nz)` で計算できる。

重なり積分は

$$\texttt{overlap} = \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) \tag{296}$$

subroutine `gauss_int_overlap(posA,alphaA,nx,ny,nz,posB,alphaB,nbarx,nbary,nbarz,overlap)` で計算される。`posA` が $\vec{A}$ を表す等。

これに grad が入ったもの (相対論的な運動エネルギーに使う) は、

$$\texttt{grad(3)} = \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\nabla\tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) \tag{297}$$

subroutine `gauss_int_relKE(posA,alphaA,nx,ny,nz,posB,alphaB,nbarx,nbary,nbarz,grad)` で計算される。

ちなみに、非相対論的な運動エネルギー積分は

$$\texttt{ene\_kin} = \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\left(-\frac{1}{2}\nabla^2\right)\tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) \tag{298}$$

subroutine `gauss_int_KE(posA,alphaA,nx,ny,nz,posB,alphaB,nbarx,nbary,nbarz,ene_kin)` で計算される。

使わないかもしれないが、中心が $\vec{C}$ のモーメント積分は

$$\texttt{moment(3)} = \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\left(\vec{x}-\vec{C}\right)\tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) \tag{299}$$

subroutine `gauss_int_moment(posA,alphaA,nx,ny,nz,posB,alphaB,nbarx,nbary,nbarz,posC,moment)` で計算できる。

核引力積分と、その微分 (電場の計算に使う) は `gauss_int` というサブルーチンで計算できる。原子核の位置は $\vec{C}$ とし、原子核の電荷や負号は含まれていない。`ef` は `nucatt` を $\vec{C}$ で微分したもの。

$$\begin{aligned}\texttt{nucatt} &= \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\frac{1}{|\vec{x}-\vec{C}|}\tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) &(300)\\ \texttt{ef(3)} &= \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\frac{\vec{x}-\vec{C}}{|\vec{x}-\vec{C}|^3}\tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) &(301)\end{aligned}$$

subroutine `gauss_int(posA,alphaA,nx,ny,nz,posB,alphaB,nbarx,nbary,nbarz,posC,overlap,nucatt,ef)` となっていて、`overlap` もついでに計算されてしまう。

２電子積分は、

$$\texttt{twoele} = \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2\, \tilde{g}(\vec{x}_1;\vec{A},\alpha_A,\vec{n}_1)\tilde{g}(\vec{x}_1;\vec{B},\alpha_B,\vec{\bar{n}}_1)\frac{1}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}\tilde{g}(\vec{x}_2;\vec{C},\alpha_C,\vec{n}_2)\tilde{g}(\vec{x}_2;\vec{D},\alpha_D,\vec{\bar{n}}_2) \tag{302}$$

subroutine `gauss_int_twoele(posA,alphaA,n1,posB,alphaB,nbar1,posC,alphaC,n2,posD,alphaD,nbar2,twoele)` で計算される。

フーリエ変換の積分は、

$$\texttt{fourier} = \int d\vec{x}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{A},\alpha_A,n_x,n_y,n_z)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, \tilde{g}(\vec{x};\vec{B},\alpha_B,\bar{n}_x,\bar{n}_y,\bar{n}_z) \tag{303}$$

subroutine `gauss_int_fourier(posA,alphaA,nx,ny,nz,posB,alphaB,nbarx,nbary,nbarz,vecK,fourier)` で計算できる。

これらは、`sub_gauss_int.f90` に定義されている。このファイルは `gammp_KI.f90`(ガンマ関数が定義されている) と一緒に使う必要がある。

6.6 Dirac10 からの係数等の取り出し

base.txt と vectors.txt から、`mrdft` の方法で、陽電子のも読むように拡張した。
Dirac10 の陽電子解 (negative energy の軌道) は、規格直交している模様。

6.7 積分の効率的な計算方法

原始ガウス関数の積分に、Dirac の係数を掛けて足す時に、メモリを消費するかわりにループのネスト数を減らすことができる。

6.7.1 二電子積分

$$(n^a m^b|p^c q^d) \equiv (Z_e e)^2 \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\psi_{q^d}(\vec{s}) \tag{304}$$

を `inttwoele(-NBS:NBS,2,-NBS:NBS,2,-NBS:NBS,2,-NBS:NBS,2)` のような複素変数に確保する。これを (`n`, `a`, `m`, `b`, `p`, `c`, `q`, `d`) とした時、`n`, `m`, `p`, `q` が `1` ∼ `NBS` の時は Kramers pair のうちのバー無し、$-$`1` ∼ $-$`NBS` の時はバー有りを表す。絶対値が同じもの同士が pair になる。`0` は使わない。`a`, `b`, `c`, `d` が `1` の時は electron $(a,b,c,d=+)$, `2` の時は positron $(a,b,c,d=-)$ を表す。

Dirac コードでは、分子軌道は複素 4 成分だが、実のガウス型関数で展開されており、large 成分と small 成分で展開関数は一般に異なる。原始ガウス関数での展開をまとめて書くと次のようになる。

$$[\psi_{n^a}(\vec{r})]_\alpha = \sum_{i=1}^{N(\alpha)} c^\alpha_{n^a i}\, g_i^{X(\alpha)}(\vec{r}) \tag{305}$$

ここで、$\alpha = 1 \sim 4$ はスピノルの足で、

$$N(\alpha) = \begin{cases} N_L & (\alpha = 1,2) \\ N_S & (\alpha = 3,4) \end{cases} \tag{306}$$

$$X(\alpha) = \begin{cases} L & (\alpha = 1,2) \\ S & (\alpha = 3,4) \end{cases} \tag{307}$$

係数 $c^\alpha_{n^a i}$ ($n = 1 \sim$ `NBS`, $a = +,-$) は Dirac コードの出力からとってくる。Kramers pair (n が負) はそれらから作る。これは、`subroutine copy_DiracOutput_cp(p,a,c_p)` により得ることができ、`p` に ±`1` ∼ ±`NBS`, `a` に 1,2 を入れると、`c_p(4)` が (係数が 4 成分まとめて) 返ってくる。

原始ガウス基底の展開を代入すると、

$$(n^a m^b|p^c q^d) \equiv (Z_e e)^2 \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, \psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\psi_{q^d}(\vec{s}) \tag{308}$$

$$= (Z_e e)^2 \sum_{\alpha,\beta=1}^{4}\sum_{i=1}^{N(\alpha)}\sum_{j=1}^{N(\alpha)}\sum_{k=1}^{N(\beta)}\sum_{l=1}^{N(\beta)} (c^\alpha_{n^a i})^*(c^\alpha_{m^b j})(c^\beta_{p^c k})^*(c^\beta_{q^d l}) \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, g_i^{X(\alpha)}(\vec{r}) g_j^{X(\alpha)}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|} g_k^{X(\beta)}(\vec{s}) g_l^{X(\beta)}(\vec{s}) \tag{309}$$

$$= (Z_e e)^2 \sum_{\alpha,\beta=1}^{4}\sum_{i=1}^{N_S}(c^\alpha_{n^a i})^*\sum_{j=1}^{N_S}(c^\alpha_{m^b j})\sum_{k=1}^{N_S}(c^\beta_{p^c k})^*\sum_{l=1}^{N_S}(c^\beta_{q^d l})(ij|kl)^{\alpha\beta} \tag{310}$$

ここで $(ij|kl)^{\alpha\beta}$ は原始ガウス関数の二電子積分で、$i,j,k,l = 1 \sim N_S$ で定義し、$i,j > N(\alpha)$ または $k,l > N(\beta)$ の時はゼロになるものとし、そのため、i,j,k,l による和の上限を $N_S(\geq N_L)$ に置き換えた。

プログラム中では、

$$\int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, g_i^{X(\alpha)}(\vec{r}) g_j^{X(\beta)}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|} g_k^{X(\gamma)}(\vec{s}) g_l^{X(\delta)}(\vec{s}) \tag{311}$$

（の各成分）を function inttwoele_pg(i,j,k,l,s_i,s_j,s_k,s_l,NL,NS,pg) が計算し、$(ij|kl)^{\alpha\beta}$(の全成分) を subroutine calc_inttwoele_pg_mat(NL,NS,pg,inttwoele_pg_mat) が計算している。

係数を掛けて和を取って、$(n^a m^b|p^c q^d)$ の全成分を計算することは subroutine calc_inttwoele_mat(inttwoele) で行っているが、その際には上の式で右側の和を計算するたびに全成分をメモリに入れ (例えば $(ij|kq^d)^{\alpha\beta}$ の全成分を tmp1 に確保)、次の和に使うことで、ループがネストすることを回避している。

最終的に $(NM|PQ)$ $(N,M,P,Q = 1 \sim 4 \times \mathrm{NBS})$ をつくるのは、sub_makeQmat.f90 中の subroutine setQmat_twoele(twoele_Qmat) で行っている。

6.7.2 電場積分

$$\begin{aligned}
E^k_{n^a m^b}(\vec{R}) &= -\frac{Z_e e}{4\pi}\int d^3\vec{s}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{s})\psi_{m^b}(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{R})^k}{|\vec{s}-\vec{R}|^3} &(312)\\
&= -\frac{Z_e e}{4\pi}\sum_{\alpha=1}^{4}\sum_{i=1}^{N(\alpha)}\sum_{j=1}^{N(\alpha)}(c^\alpha_{n^a i})^*(c^\alpha_{m^b j})\int d^3\vec{s}\,g_i^{X(\alpha)}(\vec{s})g_j^{X(\alpha)}(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{R})^k}{|\vec{s}-\vec{R}|^3} &(313)\\
&= -\frac{Z_e e}{4\pi}\sum_{\alpha=1}^{4}\sum_{i=1}^{N_S}(c^\alpha_{n^a i})^*\sum_{j=1}^{N_S}(c^\alpha_{m^b j})E^k(ij)^\alpha(\vec{R}) &(314)
\end{aligned}$$

ここで $E^k(ij)^\alpha(\vec{R})$ は原始ガウス関数の電場積分で、$i,j = 1 \sim N_S$ で定義し、$i,j > N(\alpha)$ の時はゼロになるものとし、そのため、i,j による和の上限を $N_S(\geq N_L)$ に置き換えた。

プログラム中では、

$$\int d^3\vec{s}\,g_i^{X(\alpha)}(\vec{s})g_j^{X(\beta)}(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{R})^k}{|\vec{s}-\vec{R}|^3} \tag{315}$$

（の各成分）を function intE_pg(kk,posR,i,j,s_i,s_j,NL,NS,pg) が計算し、$E^k(ij)^\alpha(\vec{R})$(の全成分) を subroutine calc_intE_pg_mat(posR,NL,NS,pg,intE_pg_mat) が計算している。

係数を掛けて和を取って、$E^k_{n^a m^b}(\vec{R})$ の全成分を計算することは subroutine calc_intEk_mat(posR,intE) で行っている。

最終的に $E^k_{NM}(\vec{R})$ $(N,M = 1 \sim 4 \times \mathrm{NBS})$ をつくるのは、sub_makeQmat.f90 中の subroutine setQmat_E(posR,E_Qmat) で行っている。

6.7.3 外部定常電流とベクトルポテンシャルの積分

外部環境が定常に設定されているとすると、遅延ポテンシャルによって複雑になっている積分が簡単化される。電流の縦波成分もゼロになり、$\vec{\mathcal{J}}_T(cu,\vec{s}) = \vec{J}(=\mathrm{const.})$ とする。

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_{2PQ} &\ni -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{PQ}(\vec{r})\cdot\vec{\mathcal{A}}_M(\vec{r}) &(316)\\
&= -\frac{1}{c^2}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{PQ}(\vec{r})\cdot\int_M d^3\vec{s}\,\frac{\vec{J}}{|\vec{r}-\vec{s}|} &(317)\\
&= -\frac{\vec{J}}{c^2}\cdot\int_M d^3\vec{s}\int d^3\vec{r}\,\frac{\vec{j}_{PQ}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} &(318)
\end{aligned}$$

$$j^k_{p^a q^b}(\vec{r}) = Z_e\,e\,c\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^b}(\vec{r})\right] \tag{319}$$

より、

$$\mathcal{I}_{2n^a m^b} \ni -\sum_{k=1}^{3} \frac{J^k}{c}(Z_e\, e) \int_M d^3\vec{s} \int d^3\vec{r}\, \frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{320}$$

$$\equiv -\frac{Z_e\, e}{c}\sum_{k=1}^{3} J^k \int_M d^3\vec{s}\, I^k_{JcA,n^a m^b}(\vec{s}) \tag{321}$$

$$I^k_{JcA,n^a m^b}(\vec{s}) \equiv \int d^3\vec{r}\, \frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{322}$$

$$= \sum_{\alpha,\beta=1}^{4} \int d^3\vec{r}\, \frac{[\psi^*_{n^a}(\vec{r})]_\alpha[\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta}[\psi_{m^b}(\vec{r})]_\beta}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{323}$$

$$= \sum_{\alpha,\beta=1}^{4} [\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N(\alpha)}\sum_{j=1}^{N(\beta)} (c^\alpha_{n^a i})^*(c^\beta_{m^b j}) \int d^3\vec{r}\, \frac{g_i^{X(\alpha)}(\vec{r})g_j^{X(\beta)}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{324}$$

$$= \sum_{\alpha,\beta=1}^{4} [\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N_S}(c^\alpha_{n^a i})^* \sum_{j=1}^{N_S}(c^\beta_{m^b j}) V(ij)^{\alpha\beta}(\vec{s}) \tag{325}$$

ここで $V(ij)^{\alpha\beta}(\vec{s})$ は原始ガウス関数の核引力積分で、$i,j = 1 \sim N_S$ で定義し、$i,j > N(\alpha)$ の時はゼロになるものとし、そのため、i,j による和の上限を $N_S(\geq N_L)$ に置き換えた。

プログラム中では、

$$\int d^3\vec{s}\, \frac{g_i^{X(\alpha)}(\vec{s})g_j^{X(\beta)}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{R}|} \tag{326}$$

(の各成分) を function `intV_pg(posR,i,j,s_i,s_j,NL,NS,pg)` が計算し、$V(ij)^{\alpha\beta}(\vec{s})$(の全成分) を subroutine `calc_intV2_pg_mat(posR,NL,NS,pg,intJcA_pg_mat)` が計算している。

$I^k_{JcA,n^a m^b}(\vec{s})$ を計算してから J^k と内積をとるより、先にガンマ行列と内積をとったほうがよさそう。

$$I_{JcA,n^a m^b}(\vec{s},\vec{J}) \equiv \sum_{k=1}^{3} J^k \int d^3\vec{r}\, \frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{327}$$

$$= \sum_{\alpha,\beta=1}^{4}\sum_{k=1}^{3} J^k[\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N_S}(c^\alpha_{n^a i})^* \sum_{j=1}^{N_S}(c^\beta_{m^b j}) V(ij)^{\alpha\beta}(\vec{s}) \tag{328}$$

この関数を $\vec{s} \in M$ について積分するには数値積分する必要がある。それは計算コストが高いので、M を全空間ととって電流を中と外で減衰するようなガウス型にとることで、積分を解析的に行う。つまり、

$$\mathcal{I}_{2n^a m^b} \ni -\frac{Z_e\, e}{c}\sum_{k=1}^{3} J^k \int_M d^3\vec{s} \int d^3\vec{r}\, \frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{329}$$

$$\approx -\frac{Z_e\, e}{c}\sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{s} \sum_{p,q=1}^{N_J} J^k_{pq} g_p(\vec{s}) g_q(\vec{s}) \int d^3\vec{r}\, \frac{\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{330}$$

$$= -\frac{Z_e\, e}{c}\sum_{p,q=1}^{N_J}\sum_{\alpha,\beta=1}^{4}\sum_{k=1}^{3} J^k_{pq}[\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N(\alpha)}\sum_{j=1}^{N(\beta)} (c^\alpha_{n^a i})^*(c^\beta_{m^b j}) \int d^3\vec{s}\, d^3\vec{r}\, \frac{g_p(\vec{s})g_q(\vec{s})g_i^{X(\alpha)}(\vec{r})g_j^{X(\beta)}(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \tag{331}$$

$$= -\frac{Z_e\, e}{c}\sum_{p,q=1}^{N_J}\sum_{\alpha,\beta=1}^{4} \left(\sum_{k=1}^{3} J^k_{pq}[\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta}\right) \sum_{i=1}^{N_S}(c^\alpha_{n^a i})^* \sum_{j=1}^{N_S}(c^\beta_{m^b j})(pq|i^\alpha j^\beta) \tag{332}$$

6.7.4 電流とベクトルポテンシャルの積分

遅延ポテンシャルをきちんと考慮する場合に必要な積分。二電子積分と似たかんじ。

$$
\begin{aligned}
I_{JJ,n^a m^b p^c q^d} &\equiv \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r}) j^k_{p^c q^d}(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) && (333)\\
&= (Z_e\, e\, c)^2 \sum_{k=1}^{3} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s} \left[\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{m^b}(\vec{r})\right]\left[\psi^\dagger_{p^c}(\vec{s})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^d}(\vec{s})\right] \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) && (334)\\
&= (Z_e\, e\, c)^2 \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^{4} \left\{\sum_{k'=1}^{3} [\gamma^0\gamma^{k'}]_{\alpha\beta}[\gamma^0\gamma^{k'}]_{\gamma\delta}\right\} \sum_{i=1}^{N(\alpha)} \sum_{j=1}^{N(\beta)} \sum_{k=1}^{N(\gamma)} \sum_{l=1}^{N(\delta)} (c^{\alpha}_{n^a i})^* (c^{\beta}_{m^b j})(c^{\gamma}_{p^c k})^* (c^{\delta}_{q^d l}) \\
&\quad \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, g_i^{X(\alpha)}(\vec{r}) g_j^{X(\beta)}(\vec{r}) g_k^{X(\gamma)}(\vec{s}) g_l^{X(\delta)}(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) && (335)\\
&= (Z_e\, e\, c)^2 \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^{4} \Gamma^{JJ}_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{i=1}^{N_S} (c^{\alpha}_{n^a i})^* \sum_{j=1}^{N_S} (c^{\beta}_{m^b j}) \sum_{k=1}^{N_S} (c^{\gamma}_{p^c k})^* \sum_{l=1}^{N_S} (c^{\delta}_{q^d l}) (ij|\theta_{JJ}|kl)^{\alpha\beta\gamma\delta} && (336)
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\Gamma^{JJ}_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv \sum_{k=1}^{3} [\gamma^0\gamma^k]_{\alpha\beta}[\gamma^0\gamma^k]_{\gamma\delta} = [\alpha^k]_{\alpha\beta}[\alpha^k]_{\gamma\delta} \tag{337}
$$

$$
(ij|\theta_{JJ}|kl)^{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, g_i^{X(\alpha)}(\vec{r}) g_j^{X(\beta)}(\vec{r}) g_k^{X(\gamma)}(\vec{s}) g_l^{X(\delta)}(\vec{s}) \exp\left(-i\alpha \frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{338}
$$

で、$i,j,k,l = 1 \sim N_S$ で定義し、$i > N(\alpha)$ などの時はゼロになるものとし、そのため、i,j,k,l による和の上限を $N_S(\geq N_L)$ に置き換えた。$(ij|\theta_{JJ}|kl)^{\alpha\beta\gamma\delta}$ の計算は subroutine gauss_int_thetaJJ(alpha,posA,alphaA,n1,posB,alphaB,nbar1,posC,alphaC,n2,posD,alphaD,nbar2,thetaJJ) を基に、function intthetaJJ_pg(alpha,i,j,k,l,s_i,s_j,s_k,s_l,NL,NS,pg) で計算する。

$\Gamma^{JJ}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ はほとんどの成分がゼロ。

6.8 Operator 積期待値の計算

電子陽電子の反交換関係は、

$$
\{\hat{e}_n, \hat{e}^\dagger_m\} = \delta_{nm}, \qquad \{\hat{f}_n, \hat{f}^\dagger_m\} = \delta_{nm}. \tag{339}
$$

ほかの組み合わせの反交換子はゼロ。これらはまとめて

$$
\left\{\hat{e}_{n^a}, \hat{e}^\dagger_{m^b}\right\} = \delta_{nm}\delta_{ab} \tag{340}
$$

とも書ける。

真空は、

$$
\hat{e}_n|0\rangle = 0, \qquad \hat{f}_n|0\rangle = 0, \tag{341}
$$

または、

$$
\hat{e}_{n^+}|0\rangle = 0, \qquad \hat{e}^\dagger_{n^-}|0\rangle = 0, \tag{342}
$$

で定義される。

われわれが主に関心がある (期待値をとるのに使う) 状態は、電子がいくつかある状態で、

$$
|\Phi\rangle = \prod_{i=occ} \hat{e}^\dagger_i|0\rangle = \prod_{i=occ} \hat{e}^\dagger_{i^+}|0\rangle \tag{343}
$$

のように、真空に占有軌道の電子の生成消滅演算子を掛けたものになる。この状態への生成消滅演算子の作用を考えると便利かも。

$$\hat{e}^\dagger_n|\Phi\rangle = 0\,(\mathrm{n : occupied}), \qquad \hat{e}_n|\Phi\rangle = 0\,(\mathrm{n : virtual}), \qquad \hat{f}_n|\Phi\rangle = 0, \tag{344}$$

または

$$\hat{e}^\dagger_{n^+}|\Phi\rangle = 0\,(\mathrm{n : occupied}), \qquad \hat{e}_{n^+}|\Phi\rangle = 0\,(\mathrm{n : virtual}), \qquad \hat{e}^\dagger_{n^-}|\Phi\rangle = 0. \tag{345}$$

陽電子は occupied という見方をすると (Dirac sea のように)

$$\hat{e}^\dagger_{n^a}|\Phi\rangle = 0\,(\mathrm{n : occupied}), \qquad \hat{e}_{n^a}|\Phi\rangle = 0\,(\mathrm{n : virtual}), \tag{346}$$

とまとめて書けるが、これは量子化学でよく使われる関係と同じ形である。

Wick の定理を使う場合。

$$\hat{e}_{n^+}|0\rangle = 0, \qquad \hat{e}^\dagger_{n^-}|0\rangle = 0, \tag{347}$$

$$\langle 0|\hat{e}^\dagger_{n^+} = 0, \qquad \langle 0|\hat{e}_{n^-} = 0, \tag{348}$$

より normal order ($N(...)$ で表す) は、$\hat{e}_{n^+}$、$\hat{e}^\dagger_{n^-}$ を右によせて、$\hat{e}^\dagger_{n^+}$、 $\hat{e}_{n^-}$ を左によせる、ということになる。例えば、

$$N(\hat{e}^\dagger_{n^-}\hat{e}_{m^-}) = -\hat{e}_{m^-}\hat{e}^\dagger_{n^-} \tag{349}$$

$$N(\hat{e}_{m^+}\hat{e}^\dagger_{n^+}) = -\hat{e}^\dagger_{n^+}\hat{e}_{m^+} \tag{350}$$

$$\hat{x}\hat{y} = \overbracket{\hat{x}\hat{y}} + N(\hat{x}\hat{y}) \tag{351}$$

で contraction を定義すると、反交換関係より、non-zero の contraction は

$$\overbracket{\hat{e}^\dagger_{n^-}\hat{e}_{m^-}} = \delta_{nm} \tag{352}$$

$$\overbracket{\hat{e}_{m^+}\hat{e}^\dagger_{n^+}} = \delta_{mn} \tag{353}$$

のみ。

$|\Phi\rangle$ で期待値を取る場合は、

$$\hat{e}_{n^u}|\Phi\rangle = 0, \qquad \hat{e}^\dagger_{n^o}|\Phi\rangle = 0, \tag{354}$$

$$\langle\Phi|\hat{e}^\dagger_{n^u} = 0, \qquad \langle\Phi|\hat{e}_{n^o} = 0, \tag{355}$$

であるため (u は非占有 (unoccupied)、o は占有 (occupied) 軌道を表す)、contraction は

$$\overbracket{\hat{e}^\dagger_{n^o}\hat{e}_{m^o}} = \delta_{nm} \tag{356}$$

$$\overbracket{\hat{e}_{m^u}\hat{e}^\dagger_{n^u}} = \delta_{mn} \tag{357}$$

になる。$|0\rangle$ という状態は n^- は occupied(とみなせば)、n^+ は unoccupied なので、この特別な場合になっている。

6.9 $\hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b}(t_1)$ の計算

1 ステップだけ時間が進んだ量を計算する。

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b}(t_1) &= \hat{e}^\dagger_{n^a}(t_1)\hat{e}_{m^b}(t_1) &(358)\\
&\approx \left(\hat{e}^\dagger_{n^a} + \frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}(t_0)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t^2}(t_0)(\Delta t)^2\right)\left(\hat{e}_{m^b} + \frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}(t_0)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \hat{e}_{m^b}}{\partial t^2}(t_0)(\Delta t)^2\right) &(359)\\
&\approx \hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b} + \left(\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}(t_0)\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}(t_0)\right)\Delta t \\
&\quad + \left(\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}(t_0)\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}(t_0) + \frac{1}{2}\hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial^2 \hat{e}_{m^b}}{\partial t^2}(t_0) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t^2}(t_0)\hat{e}_{m^b}\right)(\Delta t)^2 &(360)
\end{aligned}
$$

これの真空期待値を計算する。$|\Phi\rangle$(photon は無い状態) での期待値は、真空期待値での結果を、$-$ を occupied、$+$ を unoccupied と読み替えることによって得られる。(あとでわかるように Δt に比例する部分の期待値は消えるので、$(\Delta t)^2$ まで考えている。)

第一項は、

$$
\begin{aligned}
\langle 0|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}|0\rangle &= \langle 0|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b} + N(\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b})|0\rangle &(361)\\
&= \langle 0|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}|0\rangle &(362)\\
&= \begin{cases} \delta_{nm} & (a=b=-) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} &(363)\\
&\equiv \tilde{\delta}_{n^a m^b} &(364)
\end{aligned}
$$

($|\Phi\rangle$ での期待値は、

$$
\langle \Phi|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}|\Phi\rangle = \begin{cases} \delta_{nm} & (a=b=\text{occupied}=-\&\oplus) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{365}
$$

となり、物理量の計算に使う値は、

$$
\langle \Phi| : \hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b} : |\Phi\rangle \equiv \langle \Phi|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}|\Phi\rangle - \langle 0|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}|0\rangle = \begin{cases} \delta_{nm} & (a=b=\text{electron occupied}\equiv\oplus) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{366}
$$

となる。これは初期状態の計算としてもっともらしい。)

6.9.1 (Δt) に比例する項の計算

特に書いていない場合は $t=0$ での演算子。$t=0$ でベクトルポテンシャルはゼロとするので、

$$
\begin{aligned}
-i\hbar\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}(t_0)\hat{e}_{m^b} &= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h^*_{n^a r^e}\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{e}_{m^b} + \sum_{r,p,q=1}^{N_D}\sum_{e,c,d=\pm}(n^a r^e|p^c q^d)^*\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{\mathcal{E}}_{q^d p^c}\hat{e}_{m^b} \\
&\quad - \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{j=1}^{N_{\rm ph}}\widetilde{\Delta p}_j\left[\mathcal{F}^*_{n^a r^e j}(t)\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{a}^\dagger_j\hat{e}_{m^b} + \mathcal{F}_{r^e n^a j}(t)\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{a}_j\hat{e}_{m^b}\right]. &(367)
\end{aligned}
$$

これの期待値を取る時に２項目で必要となるのは、

$$
\begin{aligned}
\langle 0|\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{e}^\dagger_{q^d}\hat{e}_{p^c}\hat{e}_{m^b}|0\rangle &= \langle 0|\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{e}^\dagger_{q^d}\hat{e}_{p^c}\hat{e}_{m^b}|0\rangle - \langle 0|\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{e}^\dagger_{q^d}\hat{e}_{p^c}\hat{e}_{m^b}|0\rangle &(368)\\
&= \tilde{\delta}_{r^e m^b}\tilde{\delta}_{q^d p^c} - \tilde{\delta}_{r^e p^c}\tilde{\delta}_{q^d m^b}. &(369)
\end{aligned}
$$

これを用いて、

$$\begin{aligned}\langle 0| -i\hbar\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}\hat{e}_{m^b}|0\rangle &= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h^*_{n^a r^e}\tilde{\delta}_{r^e m^b} + \sum_{r,p,q=1}^{N_D}\sum_{e,c,d=\pm}(n^a r^e|p^c q^d)^*\left(\tilde{\delta}_{r^e m^b}\tilde{\delta}_{q^d p^c} - \tilde{\delta}_{r^e p^c}\tilde{\delta}_{q^d m^b}\right)\\ &= h^*_{n^a m^-} + \sum_{p=1}^{N_D}\left\{(n^a m^-|p^- p^-)^* - (n^a p^-|p^- m^-)^*\right\}. \end{aligned} \tag{370}$$

ここで、$\langle 0|\hat{a}_j|0\rangle = 0$ と $\langle 0|\hat{a}^\dagger_j|0\rangle = 0$ を用いた。$h^*_{n^a m^-}$ という表記は準位 m が positron のもの (“−”) でないとゼロになることを表す。

(Δt) に比例する項のもうひとつは、これのエルミート共役をとり、n^a と m^b を入れ替えると得られる。

$$\langle 0|i\hbar\,\hat{e}^\dagger_{m^b}\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t}|0\rangle = h_{n^a m^-} + \sum_{p=1}^{N_D}\left\{(n^a m^-|p^- p^-) - (n^a p^-|p^- m^-)\right\}, \tag{371}$$

$$\langle 0|i\hbar\,\hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}|0\rangle = h_{m^b n^-} + \sum_{p=1}^{N_D}\left\{(m^b n^-|p^- p^-) - (m^b p^-|p^- n^-)\right\}. \tag{372}$$

まとめると、

$$\begin{aligned}(-i\hbar)\langle 0|\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}|0\rangle &= (h^*_{n^a m^-} - h_{m^b n^-})\\ &+\sum_{p=1}^{N_D}\left\{(n^a m^-|p^- p^-)^* - (n^a p^-|p^- m^-)^* - (m^b n^-|p^- p^-) + (m^b p^-|p^- n^-)\right\}. \end{aligned}\tag{373}$$

:: の期待値では、positron の準位の添字を持つものは相殺されてゼロになるので、

$$\begin{aligned}(-i\hbar)\langle \Phi| :\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}:|\Phi\rangle &= (h^*_{n^a m^\oplus} - h_{m^b n^\oplus})\\ &+\sum_{p=1}^{N_\oplus}\left\{(n^a m^\oplus|p^\oplus p^\oplus)^* - (n^a p^\oplus|p^\oplus m^\oplus)^* - (m^b n^\oplus|p^\oplus p^\oplus) + (m^b p^\oplus|p^\oplus n^\oplus)\right\}, \end{aligned}\tag{374}$$

と書ける。$\oplus$ は、上で定義したが、electron (“+”) かつ occupied のものを示す。$h^*_{n^a m^\oplus}$ は準位 m が electron で occupied でないとゼロになることを表す。

これは Fock 行列で書ける (Dyall p.181 式 (11.34) など)。

$$f_{n^a m^b} \equiv h_{n^a m^b} + \sum_{i=1}^{N_\oplus}\left[(n^a m^b|i^\oplus i^\oplus) - (n^a i^\oplus|i^\oplus m^b)\right], \tag{375}$$

$(f^*_{n^a m^b} = f_{m^b n^a})$ とすると、

$$(-i\hbar)\langle \Phi| :\frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t}:|\Phi\rangle = f^*_{n^a m^\oplus} - f_{m^b n^\oplus} \tag{376}$$

[要確認] Fock 行列が実対称のとき (Dirac10 でデフォルトの対称性だとこうなるっぽい)

$$\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm} f_{n^a m^b}\psi_{m^b} = \varepsilon_{n^a}\psi_{n^a}, \tag{377}$$

$$\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm} f_{n^a m^b}\psi^\dagger_{m^b} = \varepsilon_{n^a}\psi^\dagger_{n^a}, \tag{378}$$

である。ε_{n^a} はエネルギー固有値。

電子密度演算子の期待値を計算する。

$$\begin{aligned}
\langle \hat{N}_e(t_1,\vec{r})\rangle &= \sum_{n,m=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} n_{n^a m^b}(\vec{r})\langle \hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b}(t_1)\rangle && (379)\\
&\ni \sum_{n,m=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} \psi^\dagger_{n^a}\psi_{m^b}(f^*_{n^a m\oplus} - f_{m^b n\oplus})\frac{\Delta t}{-i\hbar} && (380)\\
&\propto \sum_{n,m=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} f_{m\oplus n^a}\psi^\dagger_{n^a}\psi_{m^b} - \sum_{n,m=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\psi^\dagger_{n^a} f_{n\oplus m^b}\psi_{m^b} && (381)\\
&= \sum_{m=1}^{N_\oplus}\varepsilon_{m\oplus}\psi^\dagger_{m\oplus}\psi_{m\oplus} - \sum_{n=1}^{N_\oplus}\psi^\dagger_{n\oplus}\varepsilon_{n\oplus}\psi_{n\oplus} = 0 && (382)
\end{aligned}$$

と、(Δt) に比例する項はゼロになる。Fock 行列は一般にはエルミートなので (Dirac10 の計算では、対称性をつけない、と指定する必要有り)、一般にはこうならない。

6.10 数値計算メモ

$N, M, ...$ の添字は、最初の半分が $+$ (electron), 後の半分が $-$ (positron) を表す。$+, -$ それぞれにおいて、$1, \bar{1}, 2, \bar{2}, ...$ のように、ある軌道と Kramers partner が交互に並んでいる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{NMj}(t) &= \mathcal{F}_{NMj}(t=0)e^{-icp_j^0 t/\hbar} && (383)\\
\mathcal{F}^*_{NMj}(t) &= \mathcal{F}^*_{NMj}(t=0)e^{+icp_j^0 t/\hbar} && (384)
\end{aligned}$$

$\mathcal{F}_{NMj}(t=0)$ を `subroutine setQmat_calFj0(calFj0_Qmat)` で計算。
h_{NM} は `subroutine setQmat_h(h_Qmat)`、$n_{NM}(\vec{r})$ は `function density_Qmat(x,y,z,nn,mm)` で計算。
$(NM|PQ)$ は `subroutine setQmat_twoele(twoele_Qmat)` で計算。

7 Rigged QED (full)

7.1 シュレディンガー場: $\hat{\chi}_a$

原子核を表す。原子核 N の生成消滅演算子 $\hat{c}_{ai}$, $\hat{c}^\dagger_{ai}$(これらは原子核の種類に応じて交換関係または反交換関係をみたす。)を用いて、次のように展開する。

$$\hat{\chi}_a(ct,\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N'_D}\hat{c}_{ai}(t)\chi_{ai}(\vec{r}) \tag{385}$$

原子核場の展開に用いる波束 $\chi_{ai}(\vec{r})$ をどう選ぶかは検討の余地がある。今のところ正規直交性だけ仮定しておく。とりあえず核スピンは無視する。

$$\int d^3\vec{r}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}) = \delta_{ij} \tag{386}$$

$\hat{\chi}_a(ct,\vec{r})$ の時間発展を記述する式は、(Tachibana2010, (2.22))

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\chi}_a(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_a}\hat{\vec{D}}_a^2(x)\hat{\chi}_a(x) + Z_a e\hat{A}_0(x)\hat{\chi}_a(x), \tag{387}$$

と共変微分

$$\hat{D}_{a\mu}(x) = \partial_\mu + i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{A}_\mu(x), \tag{388}$$

$$\hat{\vec{D}}_a(x) = -\vec{\nabla} + i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\vec{A}}(x). \tag{389}$$

$$\tag{390}$$

ここで、

$$\hat{\vec{D}}_a^2(x) = \left(-\vec{\nabla} + i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\vec{A}}\right)\cdot\left(-\vec{\nabla} + i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\vec{A}}\right) \tag{391}$$

$$= \vec{\nabla}^2 - i\frac{Z_a e}{\hbar c}(\vec{\nabla}\cdot\hat{\vec{A}}) - 2i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\vec{A}}\cdot\vec{\nabla} - \left(\frac{Z_a e}{\hbar c}\right)^2\hat{\vec{A}}\cdot\hat{\vec{A}}, \tag{392}$$

で、第２項はクーロンゲージをとっているのでゼロになる。よって、$\hat{\chi}_a(ct,\vec{r})$ の時間発展を記述する式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\chi}_a(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_a}\left\{\vec{\nabla}^2 - 2i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\vec{A}}\cdot\vec{\nabla} - \left(\frac{Z_a e}{\hbar c}\right)^2\hat{\vec{A}}\cdot\hat{\vec{A}}\right\}\hat{\chi}_a(x) + Z_a e\hat{A}_0(x)\hat{\chi}_a(x). \tag{393}$$

この式に $\hat{\chi}_a(ct,\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N'_D}\hat{c}_{aj}(t)\chi_{aj}(\vec{r})$ の展開を代入して、$\chi^*_{ai}(\vec{r})$ をかけて $\int d^3\vec{r}$ すると $\hat{c}_{ai}(t)$ の時間発展の式が得られる。すなわち、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{c}_{ai}(t) = \sum_{j=1}^{N'_D}\left(\hat{I}_{1aij} + \hat{I}_{2aij} + \hat{I}_{3aij} + \hat{I}_{4aij}\right)\hat{c}_{aj}, \tag{394}$$

$$\hat{I}_{1aij} = -\frac{\hbar^2}{2m_a}\int d^3\vec{r}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\vec{\nabla}^2\chi_{aj}(\vec{r}), \tag{395}$$

$$\hat{I}_{2aij} = \frac{i\hbar Z_a e}{m_a c}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\left(\chi^*_{ai}(\vec{r})\vec{\nabla}\chi_{aj}(\vec{r})\right), \tag{396}$$

$$\hat{I}_{3aij} = \frac{(Z_a e)^2}{2m_a c^2}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{r})\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}), \tag{397}$$

$$\hat{I}_{4aij} = (Z_a e)\int d^3\vec{r}\,\hat{A}_0(\vec{r})\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}), \tag{398}$$

これらは、それぞれ $\hat{I}^\dagger_{naij} = \hat{I}_{nNji}$ $(n = 1\sim 4)$ となっている（部分積分、クーロンゲージ、$\hat{A}$ はエルミートより）。

あとで便利なため、電子の時に同様のものを定義したように、原子核の生成消滅演算子から次の演算子を定義しておく。

$$\hat{\mathcal{C}}_{aij} \equiv \hat{c}^\dagger_{ai}\hat{c}_{aj} \tag{399}$$

この時間微分は、

$$i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{C}}_{aij}}{dt} = \left(i\hbar\frac{d\hat{c}^\dagger_{ai}}{dt}\right)\hat{c}_{aj} + \hat{c}^\dagger_{ai}\left(i\hbar\frac{d\hat{c}_{aj}}{dt}\right) \tag{400}$$

$$= -\hat{c}^\dagger_{ak}\hat{I}^\dagger_{aik}\hat{c}_{aj} + \hat{c}^\dagger_{ai}\hat{I}_{ajk}\hat{c}_{ak} \tag{401}$$

$$= -\hat{c}^\dagger_{ak}\hat{I}_{aki}\hat{c}_{aj} + \hat{c}^\dagger_{ai}\hat{I}_{ajk}\hat{c}_{ak} \tag{402}$$

となる。$\hat{I}_{aij} = \hat{I}_{1aij} + \hat{I}_{2aij} + \hat{I}_{3aij} + \hat{I}_{4aij}$ と書いた。$\hat{I}^\dagger_{aij} = \hat{I}_{aji}$ を用いた。

以下で説明するように電荷、電流に原子核の場の寄与が入ってくる。

7.2 原子核電荷密度: $\hat{\rho}_a(x)$

原子核 N の charge density operator $\hat{\rho}_a(x)$ は、

$$\hat{\rho}_a(x) = Z_a e\hat{N}_a(x) = Z_a e\hat{\chi}^\dagger_a(x)\hat{\chi}_a(x) \tag{403}$$

$$= Z_a e\sum_{i,j=1}^{N'_D} n_{aij}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} = \sum_{i,j=1}^{N'_D}\rho_{aij}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} \tag{404}$$

ここで、

$$n_{aij}(\vec{r}) = \chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}) \tag{405}$$

$$\rho_{aij}(\vec{r}) = (Z_a e)\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}) \tag{406}$$

$\hat{N}_a(x)$ は原子核位置確率密度演算子で、

$$\hat{N}_a(x) = \hat{\chi}^\dagger_a(x)\hat{\chi}_a(x) = \sum_{i,j=1}^{N'_D} n_{aij}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} \tag{407}$$

これを全空間で積分したものは、$\chi_{aj}(\vec{r})$ の正規直交性より、$\hat{N}_a(x)$ は原子核位置確率密度演算子で、

$$\hat{N}_{a,tot}(x) = \int d^3\vec{r}\,\hat{\chi}^\dagger_a(x)\hat{\chi}_a(x) = \sum_{i=1}^{N'_D}\hat{\mathcal{C}}_{aii} \tag{408}$$

7.3 原子核電流密度: $\hat{j}_a(x)$

原子核 N の charge current density は、(Tachibana2010 (2.11))

$$\hat{\vec{j}}_a(x) = Z_a e\hat{\vec{v}}_a(x) \tag{409}$$

$$= Z_a e\frac{1}{2m_a}\left(i\hbar\hat{\chi}^\dagger_a(x)\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x) - i\hbar\left(\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x)\right)^\dagger\cdot\hat{\chi}_a(x)\right) \tag{410}$$

で、連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_a(x) + \mathrm{div}\hat{\vec{j}}_a(x) = 0 \tag{411}$$

を満たす。

$$\hat{j}^k_a(x) = Z_a e\hat{v}^k_a \tag{412}$$

$$= \frac{Z_a e}{2m_a}\left\{i\hbar\hat{\chi}^\dagger_a(x)\hat{D}^k_a(x)\hat{\chi}_a(x) - i\hbar\left(\hat{D}^k_a(x)\hat{\chi}_a(x)\right)^\dagger\cdot\hat{\chi}_a(x)\right\} \tag{413}$$

$$= \frac{Z_a e}{2m_a}\left\{i\hbar\hat{\chi}^\dagger_a\left(-\nabla^k\hat{\chi}_a + i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{A}^k\hat{\chi}_a\right) - i\hbar\left(-\nabla^k\hat{\chi}^\dagger_a - i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\chi}^\dagger_a\hat{A}^k\right)\hat{\chi}_a\right\} \tag{414}$$

$$= \frac{i\hbar Z_a e}{2m_a}\left\{-\hat{\chi}^\dagger_a\nabla^k\hat{\chi}_a + \left(\nabla^k\hat{\chi}^\dagger_a\right)\hat{\chi}_a + 2i\frac{Z_a e}{\hbar c}\hat{\chi}^\dagger_a\hat{A}^k\hat{\chi}_a\right\} \tag{415}$$

$$= \sum_{i,j=1}^{N'_D} Z_a e\frac{i\hbar}{2m_a}\left\{-\chi^*_{ai}\nabla^k\chi_{aj} + \left(\nabla^k\chi^*_{ai}\right)\chi_{aj}\right\}\hat{\mathcal{C}}_{aij} - \frac{(Z_a e)^2}{m_a c}\left(\chi^*_{ai}\chi_{aj}\right)\hat{c}^\dagger_{ai}\hat{A}^k\hat{c}_{aj} \tag{416}$$

ここでシュレディンガー波動関数から作られる確率の流れ（に $Z_a e$ をかけたもの）

$$j^k_{aij}(\vec{r}) = -Z_a e\frac{i\hbar}{2m_a}\left\{\chi^*_{ai}(\vec{r})\nabla^k\chi_{aj}(\vec{r}) - \left(\nabla^k\chi^*_{ai}(\vec{r})\right)\chi_{aj}(\vec{r})\right\} \tag{417}$$

を定義すると（$j^{*k}_{aij}(\vec{r}) = j^k_{aji}(\vec{r})$）、

$$\hat{j}^k_a(x) = \sum_{i,j=1}^{N'_D} j^k_{aij}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} - \frac{(Z_a e)^2}{m_a c}n_{aij}(\vec{r})\left(\hat{c}^\dagger_{ai}\hat{A}^k_{\mathrm{rad}}\hat{c}_{aj} + \hat{c}^\dagger_{ai}\hat{A}^k_A\hat{c}_{aj}\right) \tag{418}$$

と書ける。($\hat{c}_{ai}$ と $\hat{A}^k_{\mathrm{rad}}$, $\hat{A}^k_A$ は交換しない。IJQC 論文では「$\hat{c}_{ai}$ と $\hat{A}^k_{\mathrm{rad}}$ は交換する」と書いてあって、変形しているが、間違い。t=0 では $\hat{c}_{ai}$ と $\hat{A}^k_{\mathrm{rad}}$ は交換する。)

7.4 スカラーポテンシャル: $\hat{A}_0$

光子場のスカラー成分は

$$\hat{A}_0(ct,\vec{r}) = \int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(ct,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, \tag{419}$$

で

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(x) &= \hat{\rho}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a}\hat{\rho}_a(x) = Z_e e\hat{N}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a} Z_a e\hat{N}_a(x) &(420)\\ &= Z_e e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^0\hat{\psi}(x) + \sum_{a=1}^{N_a} Z_a e\hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\chi}_a(x), &(421)\\ &= Z_e e\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\psi_{p^a}^\dagger(\vec{r})\psi_{q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} + \sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N_D'} Z_a e\chi_{ai}^*(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} &(422)\end{aligned}$$

である。(BO 近似では、原子核の寄与である第２項をデルタ関数で置き換えていた。)

電子の時と同様の

$$V_{aij}(\vec{R}) = (Z_a e)\int d^3\vec{s}\,\frac{\chi_{ai}^*(\vec{s})\chi_{aj}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{R}|} = \int d^3\vec{s}\,\frac{\rho_{aij}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{R}|} \tag{423}$$

を定義すると、

$$\hat{A}_0(ct,\vec{r}) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} V_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} + \sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N_D'} V_{aij}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} \tag{424}$$

(BO 近似の時は、

$$\hat{A}_0(ct,\vec{r}) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} V_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} + \sum_{a=1}^{N_a}\frac{Z_a e}{|\vec{r}-\vec{R}_a|} \tag{425}$$

となっていた。)

7.5 ベクトルポテンシャル: $\hat{\vec{A}}_A$

光子場のベクトル成分は $\hat{\vec{A}} = \hat{\vec{A}}_{\rm rad} + \hat{\vec{A}}_A$ で

$$\begin{aligned}\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r}) &= \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}, &(426)\\ u &= t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c} &(427)\end{aligned}$$

で、

$$\begin{aligned}\hat{\vec{j}}(x) &= \hat{\vec{j}}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a}\hat{\vec{j}}_a(x) = Z_e e\hat{\vec{v}}_e(x) + \sum_{a=1}^{N_a} Z_a e\hat{\vec{v}}_a(x) &(428)\\ &= Z_e\,e\,c\,\hat{\bar{\psi}}(x)\vec{\gamma}\hat{\psi}(x) + \sum_{a=1}^{N_a} Z_a e\frac{1}{2m_a}\left(i\hbar\hat{\chi}_a^\dagger(x)\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x) - i\hbar\left(\hat{\vec{D}}_a(x)\hat{\chi}_a(x)\right)^\dagger\cdot\hat{\chi}_a(x)\right) &(429)\end{aligned}$$

である。(BO 近似では、原子核の寄与である第２項をゼロとしていた。) $\hat{\vec{A}}_{\rm rad}$ は前と同じ。$\hat{\vec{A}}$ を決めるための $\hat{j}$ (の原子核からの寄与) には $\hat{\vec{A}}$ が入っているが、これは過去の時間のものを使うため、決定可能である。

生成消滅演算子で表すと、

$$\hat{j}^k(x) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} j^k_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} + \sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N'_D}\left\{ j^k_N(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} - \frac{(Z_a e)^2}{m_a c} n_{aij}(\vec{r})\left(\hat{c}^\dagger_{ai}\hat{A}^k_{\mathrm{rad}}\hat{c}_{aj} + \hat{c}^\dagger_{ai}\hat{A}^k_A\hat{c}_{aj}\right)\right\} \tag{430}$$

縦波成分は、

$$\hat{j}^k_L(x) = \frac{1}{4\pi}\frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_0(x) \tag{431}$$

で、(424) から計算できる。電場積分 (電場は $-\mathrm{grad}\, V$ みたいなものなので) の原子核版を

$$E^k_{aij}(\vec{R}) \equiv -\frac{1}{4\pi}\frac{\partial}{\partial R^k}V_{aij}(\vec{R}) \tag{432}$$

$$= -\frac{Z_a e}{4\pi}\int d^3\vec{s}\,\chi^*_{ai}(\vec{s})\chi_{aj}(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{R})^k}{|\vec{s}-\vec{R}|^3} \tag{433}$$

と定義すると、

$$\hat{j}^k_L(x) = -\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm} E^k_{p^a q^b}(\vec{r})\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}}{dt} - \sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N'_D} E^k_{aij}(\vec{r})\frac{d\hat{\mathcal{C}}_{aij}}{dt} \tag{434}$$

である。

7.6 原子核生成消滅演算子の運動方程式にでてくる積分：$\hat{I}_{1\sim 4aij}$

7.6.1 $\hat{I}_{1aij}$（原子核運動エネルギー）

$$\hat{I}_{1aij} = -\frac{\hbar^2}{2m_a}\int d^3\vec{r}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\vec{\nabla}^2\chi_{aj}(\vec{r}) \equiv T_{aij} \tag{435}$$

は原子核の運動エネルギーからくる項で、これは単に積分（T_{aij} と書くことにする）である。

7.6.2 $\hat{I}_{4aij}$（原子核とスカラーポテンシャルとの相互作用）

$$\hat{I}_{4aij} = (Z_a e)\int d^3\vec{r}\,\hat{A}_0(\vec{r})\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}), \tag{436}$$

$\hat{A}_0(\vec{r})$ は式 (424) である。これを代入すると、

$$\int d^3\vec{r}\,\hat{A}_0(\vec{r})\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r})V_{p^a q^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}$$

$$+ \sum_{M=1}^{N_a}\sum_{k,l=1}^{N'_D}\int d^3\vec{r}\,\chi^*_{ak}(\vec{r})\chi_{al}(\vec{r})V_{Mkl}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{bkl} \tag{437}$$

$$= (Z_e e)\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r})\frac{\psi^\dagger_{p^a}(\vec{s})\psi_{q^b}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{r}|}\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}$$

$$+ \sum_{M=1}^{N_a}(Z_b e)\sum_{k,l=1}^{N'_D}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r})\frac{\chi^*_{bk}(\vec{s})\chi_{bl}(\vec{s})}{|\vec{s}-\vec{r}|}\hat{\mathcal{C}}_{bkl} \tag{438}$$

よって、4中心積分を

$$(i_a j_a|p^a q^b) \equiv (Z_a e)(Z_e e)\int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\psi^\dagger_{p^a}(\vec{s})\psi_{q^b}(\vec{s}) \tag{439}$$

$$= \int d^3\vec{s}\, V_{aij}(\vec{s})\rho_{p^a q^b}(\vec{s}) = (p^a q^b|i_a j_a) \tag{440}$$

$$(i_a j_a|k_b l_b) \equiv (Z_a e)(Z_b e)\int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\,\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r})\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}\chi^*_{bk}(\vec{s})\chi_{bl}(\vec{s}) \tag{441}$$

と定義すると、

$$\hat{I}_{4aij} = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}(i_a j_a|p^a q^b)\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} + \sum_{M=1}^{N_a}\sum_{k,l=1}^{N'_D}(i_a j_a|k_b l_b)\hat{\mathcal{C}}_{bkl} \tag{442}$$

となる。

7.6.3 $\hat{I}_{2aij}$（原子核電流と光子場との相互作用）

$$\hat{I}_{2aij} = \frac{i\hbar Z_a e}{m_a c}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\left(\chi^*_{ai}(\vec{r})\vec{\nabla}\chi_{aj}(\vec{r})\right) \tag{443}$$

これをクーロンゲージ $\vec{\nabla}\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{r})$ を用いて部分積分すると、

$$\hat{I}_{2aij} = -\frac{i\hbar Z_a e}{m_a c}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\left(\vec{\nabla}\chi^*_{ai}(\vec{r})\cdot\chi_{aj}(\vec{r})\right) \tag{444}$$

$$= \frac{i\hbar Z_a e}{2m_a c}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\left(\chi^*_{ai}(\vec{r})\vec{\nabla}\chi_{aj}(\vec{r}) - \vec{\nabla}\chi^*_{ai}(\vec{r})\cdot\chi_{aj}(\vec{r})\right) \tag{445}$$

$$= -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{aij}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{r}) \tag{446}$$

$$= -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{aij}(\vec{r})\cdot\left(\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r}) + \hat{\vec{A}}_A(\vec{r})\right) \tag{447}$$

このうちで $\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r})$ を含む項は、電子陽電子の時と同じ形で、電流密度が原子核のものに置き換わっただけである。なので、原子核電流のフーリエ変換

$$F^k_{aij}(\vec{p}) \equiv \int d^3\vec{r}\, j^k_{aij}(\vec{r})e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}, \tag{448}$$

を定義すると、

$$-\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{aij}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r}) = -\frac{1}{c}\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\times \left[\vec{F}_{aij}(\vec{p})\cdot\vec{e}(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}\hat{a}(\vec{p},\sigma) + \vec{F}_{aij}(-\vec{p})\cdot\vec{e^*}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\right], \tag{449}$$

と書ける。

7.6.4 $\hat{I}_{3aij}$（原子核密度と光子場との相互作用）

$$\hat{I}_{3aij} = \frac{(Z_a e)^2}{2m_a c^2}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{r})\chi^*_{ai}(\vec{r})\chi_{aj}(\vec{r}) \tag{450}$$

$$= \frac{(Z_a e)^2}{2m_a c^2}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{r})n_{aij}(\vec{r}) \tag{451}$$

$$= \frac{Z_a e}{2m_a c^2}\int d^3\vec{r}\,\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(\vec{r})\rho_{aij}(\vec{r}) \tag{452}$$

$$= \frac{Z_a e}{2m_a c^2}\int d^3\vec{r}\,\left(\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r}) + \hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}_A(\vec{r}) + \hat{\vec{A}}_A(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r}) + \hat{\vec{A}}_A(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}_A(\vec{r})\right)\rho_{aij}(\vec{r}) \tag{453}$$

($\hat{\vec{A}}_{\rm rad}(\vec{r})$ と $\hat{\vec{A}}_A(\vec{r})$ は交換しない。)

第 1 項は次のように書き変えることができる。まず原子核電荷密度のフーリエ変換を

$$F_{aij}(\vec{p}) \equiv \int d^3\vec{r}\,\rho_{aij}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}, \tag{454}$$

のように定義して（上の原子核電流密度のフーリエ変換と記号が似ているが、空間の足をもっていないことで区別する。)、それを用いて

$$G_{aij}(\vec{p},\sigma,\vec{q},\tau) \equiv \vec{e}(\vec{p},\sigma)\cdot\vec{e}(\vec{q},\tau)\,F_{aij}(\vec{p}+\vec{q}), \tag{455}$$

を定義する。これを用いると、

$$\begin{aligned}\frac{Z_a e}{2m_a c^2}\int d^3\vec{r}\left(\hat{\vec{A}}_{\rm rad}\cdot\hat{\vec{A}}_{\rm rad}\right)\rho_{aij}(\vec{r}) &= \frac{Z_a e}{4\pi^2 m_a\hbar c}\sum_{\sigma,\tau=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\frac{d^3\vec{q}}{\sqrt{2q^0}}\times\\ &\Big[G_{aij}(\vec{p},\sigma,\vec{q},\tau)e^{-ic(p^0+q^0)t/\hbar}\hat{a}(\vec{p},\sigma)\hat{a}(\vec{q},\tau)+G_{aij}(\vec{p},\sigma,-\vec{q},\tau)e^{-ic(p^0-q^0)t/\hbar}\hat{a}(\vec{p},\sigma)\hat{a}^\dagger(\vec{q},\tau)+\\ &G_{aij}(-\vec{p},\sigma,\vec{q},\tau)e^{ic(p^0-q^0)t/\hbar}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\hat{a}(\vec{q},\tau)+G_{aij}(-\vec{p},\sigma,-\vec{q},\tau)e^{ic(p^0+q^0)t/\hbar}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\hat{a}^\dagger(\vec{q},\tau)\Big],\end{aligned} \tag{456}$$

と書ける。ただし、$e^\mu(-\vec{p},\sigma)=e^{*\mu}(\vec{p},\sigma)$ を用いた。

7.7 ディラック場（電子陽電子）

BO 近似を外したことによる変更。

ディラック方程式 (Sec. 4.1)

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t} = \left\{\alpha^i\left(-i\hbar c\nabla^i-(Z_e e)\hat{A}^i(x)\right)+m_e c^2\beta+(Z_e e)\hat{A}_0(x)\right\}\hat{\psi}(x), \tag{457}$$

から演算子の式を（再）導出。これに、$\hat{\psi}(x)=\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\hat{e}_{m^b}(t)\psi_{m^b}(\vec{r})$ を代入して、$\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})$ すれば $\hat{e}_{n^a}(t)$ の時間微分が求まる。すなわち、

$$i\hbar\frac{\partial\hat{e}_{n^a}}{\partial t} = \sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\left(\hat{I}_{1n^am^b}+\hat{I}_{2n^am^b}+\hat{I}_{3n^am^b}+\hat{I}_{4n^am^b}\right)\hat{e}_{m^b} \tag{458}$$

$$\hat{I}_{1n^am^b} = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\alpha^i\left(-i\hbar c\nabla^i\right)\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{459}$$

$$\hat{I}_{2n^am^b} = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\alpha^i\left(-(Z_e e)\hat{A}^i(x)\right)\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{460}$$

$$\hat{I}_{3n^am^b} = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})m_e c^2\beta\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{461}$$

$$\hat{I}_{4n^am^b} = \int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})(Z_e e)\hat{A}_0(x)\psi_{m^b}(\vec{r}) \tag{462}$$

である。

$\hat{I}_{1n^am^b}$ は、式 (193)（運動エネルギー積分）と同じ（$\nabla^i=\partial_i$）。$\hat{I}_{1n^am^b}=T_{n^am^b}$。$\hat{I}_{3n^am^b}$ は、式 (198)（質量エネルギー積分）と同じ。$\hat{I}_{3n^am^b}=M_{n^am^b}$。

$$\hat{I}_{4n^am^b} = (Z_e e)\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\psi_{m^b}(\vec{r})\hat{A}_0(x) = (Z_e e)\int d^3\vec{r}\,n_{n^am^b}(\vec{r})\hat{A}_0(x) = \int d^3\vec{r}\,\rho_{n^am^b}(\vec{r})\hat{A}_0(x) \tag{463}$$

$$\hat{I}_{2n^am^b} = -(Z_e e)\int d^3\vec{r}\,\psi^\dagger_{n^a}(\vec{r})\alpha^i\psi_{m^b}(\vec{r})\hat{A}^i(x) = -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,j^i_{n^am^b}(\vec{r})\hat{A}^i(x) \tag{464}$$

これらは、それぞれ $\hat{I}^\dagger_{in^am^b}=\hat{I}_{im^bn^a}$ $(i=1\sim4)$ となっている（spinor bilinear の複素共役の関係式、$\hat{A}$ はエルミートより)。

まとめると、

$$i\hbar\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} = \sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\left\{T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b} + \left(\int d^3\vec{r}\,\rho_{n^a m^b}(\vec{r})\hat{A}_0(x) - \frac{1}{c}\vec{j}_{n^a m^b}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(x)\right)\right\}\hat{e}_{m^b} \tag{465}$$

$\hat{I}_{4n^a m^b}$ は式 (424) を用いて２電子積分であらわせる。

$$\hat{I}_{4n^a m^b} = \int d^3\vec{r}\,\rho_{n^a m^b}(\vec{r})\hat{A}_0(x) \tag{466}$$

$$= \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm}\int d^3\vec{r}\,\rho_{n^a m^b}(\vec{r})V_{p^c q^d}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} + \sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N'_D}\int d^3\vec{r}\,\rho_{n^a m^b}(\vec{r})V_{aij}(\vec{r})\hat{\mathcal{C}}_{aij} \tag{467}$$

$$= \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm}(n^a m^b|p^c q^d)\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} + \sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N'_D}(n^a m^b|i_a j_a)\hat{\mathcal{C}}_{aij} \tag{468}$$

１電子積分の２項をまとめて $h'_{n^a m^b} \equiv T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b}$ と書くと、

$$i\hbar\frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} = \sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}h'_{n^a m^b}\hat{e}_{m^b} + \sum_{m,p,q=1}^{N_D}\sum_{b,c,d=\pm}(n^a m^b|p^c q^d)\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}\hat{e}_{m^b}$$
$$+\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{a=1}^{N_a}\sum_{i,j=1}^{N'_D}(n^a m^b|i_a j_a)\hat{\mathcal{C}}_{aij}\hat{e}_{m^b} - \frac{1}{c}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{n^a m^b}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{A}}(x)\hat{e}_{m^b} \tag{469}$$

$\hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b} \equiv \hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}$ の時間発展の式は、$\hat{\mathcal{C}}_{aij}$ のものと同形になり、

$$i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{n^a m^b}}{dt} = \left(i\hbar\frac{d\hat{e}^\dagger_{n^a}}{dt}\right)\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\left(i\hbar\frac{d\hat{e}_{m^b}}{dt}\right) \tag{470}$$

$$= -\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{I}^\dagger_{n^a r^e}\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{I}_{m^b r^e}\hat{e}_{r^e} \tag{471}$$

$$= -\hat{e}^\dagger_{r^e}\hat{I}_{r^e n^a}\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{I}_{m^b r^e}\hat{e}_{r^e} \tag{472}$$

となる。$\hat{I}_{n^a m^b} = \hat{I}_{1n^a m^b} + \hat{I}_{2n^a m^b} + \hat{I}_{3n^a m^b} + \hat{I}_{4n^a m^b}$ と書いた。$\hat{I}^\dagger_{n^a m^b} = \hat{I}_{m^b n^a}$ を用いた。

8 Rigged QED （full）：近似１

8.1 期待値で置き換える近似１

まず、時間発展の式の中などででてくる $\hat{\vec{A}}_A(ct,\vec{r})$ は normal order にした期待値（初期状態にあたる Heisenberg bra-ket で挟んだもの）で置き換えるという近似を行う。

$$\hat{\vec{A}}_A \longrightarrow \langle\Phi| : \hat{\vec{A}}_A : |\Phi\rangle \equiv \vec{\mathcal{A}}_A \tag{473}$$

この期待値を求めるためには電流の期待値

$$\langle\Phi| : \hat{\vec{j}}_T : |\Phi\rangle \equiv \vec{\mathcal{J}}_T \tag{474}$$

の計算が必要だが、その際には $\hat{A}^k_{\rm rad}$ も期待値 $\langle\hat{A}^k_{\rm rad}\rangle$ で置き換える（photon が無い状態ではこれはゼロになる）。

次に、電子、原子核の生成消滅演算子の時間発展の式において、$\hat{I}_{xxx}$ の部分を normal order にした期待値で置き換えるという近似を行う。

$$\hat{I}_{xxx} \longrightarrow \langle\Phi| : \hat{I}_{xxx} : |\Phi\rangle \equiv \mathcal{I}_{xxx} \tag{475}$$

この近似ででてくる、励起演算子の normal order の期待値を

$$\langle\Phi| : \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} : |\Phi\rangle \equiv \mathcal{E}_{p^c q^d} = \mathcal{E}_{PQ} \quad (476)$$
$$\langle\Phi| : \hat{\mathcal{C}}_{aij} : |\Phi\rangle \equiv \mathcal{C}_{aij} \quad (477)$$

と定義、それぞれ電子の密度行列、原子核の密度行列とよぶ。

$n^a, m^b, ...$ などの添字をまとめて $N, M, ...$ と表記することにする。

8.2 電流・ベクトルポテンシャル

上の置き換えをすると、まず電流は、

$$\mathcal{J}^k(x) = j^k_{PQ}(\vec{r})\mathcal{E}_{PQ} + \sum_{a=1}^{N_a}\left\{ j^k_a(\vec{r})\mathcal{C}_{aij} - \frac{(Z_a e)^2}{m_a c} n_{aij}(\vec{r}) \left(\langle \hat{A}^k_{\mathrm{rad}} \rangle \mathcal{C}_{aij} + \mathcal{A}^k_A(\vec{r})\mathcal{C}_{aij} \right) \right\} \quad (478)$$
$$\mathcal{J}^k_L(x) = -E^k_{PQ}(\vec{r})\frac{d\mathcal{E}_{PQ}}{dt} - \sum_{a=1}^{N_a} E^k_{aij}(\vec{r})\frac{d\mathcal{C}_{aij}}{dt} \quad (479)$$
$$\mathcal{J}^k_T(x) = \mathcal{J}^k(x) - \mathcal{J}^k_L(x) \quad (480)$$

となる。

8.3 原子核

上の置き換えにより、$\hat{I}_{2aij}$, $\hat{I}_{3aij}$, $\hat{I}_{4aij}$ が数になる。($\hat{I}_{1aij} = T_{aij}$ はもともと数)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{c}_{ai}(t) = \sum_{j=1}^{N'_D} \left(\mathcal{I}_{1aij} + \mathcal{I}_{2aij} + \mathcal{I}_{3aij} + \mathcal{I}_{4aij} \right) \hat{c}_{aj}, \quad (481)$$
$$\mathcal{I}_{1aij} = T_{aij}, \quad (482)$$
$$\mathcal{I}_{2aij} = -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\, \vec{j}_{aij}(\vec{r}) \cdot \left(\langle \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}} \rangle + \vec{\mathcal{A}}_A \right), \quad (483)$$
$$\mathcal{I}_{3aij} = \frac{Z_a e}{2 m_a c^2}\int d^3\vec{r}\, \left(\langle \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}} \cdot \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}} \rangle + 2\langle \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}} \rangle \cdot \vec{\mathcal{A}}_A + \vec{\mathcal{A}}_A \cdot \vec{\mathcal{A}}_A \right) \rho_{aij}(\vec{r}), \quad (484)$$
$$\mathcal{I}_{4aij} = (i_a j_a|PQ)\mathcal{E}_{PQ} + \sum_{M=1}^{N_a} (i_a j_a|k_b l_b)\mathcal{C}_{bkl} \quad (485)$$

$\mathcal{I}_{aij} = \mathcal{I}_{1aij} + \mathcal{I}_{2aij} + \mathcal{I}_{3aij} + \mathcal{I}_{4aij}$ と書くと、

$$i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{C}}_{aij}}{dt} = -\hat{c}^\dagger_{ak}\mathcal{I}_{aki}\hat{c}_{aj} + \hat{c}^\dagger_{ai}\mathcal{I}_{ajk}\hat{c}_{ak} \quad (486)$$
$$= -\mathcal{I}_{aki}\hat{\mathcal{C}}_{akj} + \mathcal{I}_{ajk}\hat{\mathcal{C}}_{aik} \quad (487)$$

の期待値をとって、

$$i\hbar\frac{d\mathcal{C}_{aij}}{dt} = -\mathcal{I}_{aki}\mathcal{C}_{akj} + \mathcal{I}_{ajk}\mathcal{C}_{aik} \quad (488)$$

8.4 電子陽電子

上の置き換えにより、$\hat{I}_{4n^a m^b}, \hat{I}_{2n^a m^b}$ が数になる。$\hat{I}_{1n^a m^b}$ と $\hat{I}_{3n^a m^b}$ はもともと数。

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial \hat{e}_P}{\partial t} &= \left(\mathcal{I}_{1PQ} + \mathcal{I}_{2PQ} + \mathcal{I}_{3PQ} + \mathcal{I}_{4PQ}\right)\hat{e}_Q && (489)\\
\mathcal{I}_{1PQ} &= T_{PQ} && (490)\\
\mathcal{I}_{2PQ} &= -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{PQ}(\vec{r})\cdot\left(\langle\hat{\vec{A}}_{\rm rad}\rangle + \vec{\mathcal{A}}_A\right) && (491)\\
\mathcal{I}_{3PQ} &= M_{PQ} && (492)\\
\mathcal{I}_{4PQ} &= (PQ|RS)\mathcal{E}_{RS} + \sum_{a=1}^{N_a}(PQ|i_a j_a)\mathcal{C}_{aij} && (493)
\end{aligned}
$$

$\mathcal{I}_{PQ} = \mathcal{I}_{1PQ} + \mathcal{I}_{2PQ} + \mathcal{I}_{3PQ} + \mathcal{I}_{4PQ}$ と書くと、

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{PQ}}{dt} &= -\hat{e}_R^\dagger \mathcal{I}_{RP}\hat{e}_Q + \hat{e}_P^\dagger \mathcal{I}_{QR}\hat{e}_R && (494)\\
&= -\mathcal{I}_{RP}\hat{\mathcal{E}}_{RQ} + \mathcal{I}_{QR}\hat{\mathcal{E}}_{PR} && (495)
\end{aligned}
$$

の期待値をとって、

$$
i\hbar\frac{d\mathcal{E}_{PQ}}{dt} = -\mathcal{I}_{RP}\mathcal{E}_{RQ} + \mathcal{I}_{QR}\mathcal{E}_{PR} \tag{496}
$$

8.5 数値計算

$\frac{d\mathcal{E}_{PQ}}{dt}$ と $\frac{d\mathcal{C}_{aij}}{dt}$ は $\mathcal{E}_{PQ}$ と $\mathcal{C}_{aij}$ と $\vec{\mathcal{A}}$ に依存している。

$\vec{\mathcal{A}}_A$ の初期値はゼロにとる（簡単のため $\vec{\mathcal{A}}_{\rm rad}$ は無い場合を考える）。数値計算の順序は次のようになる。下付き添字は時間ステップを示す。

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{E}_0, \mathcal{C}_0] &\longrightarrow \left[\frac{d\mathcal{E}_0}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_0}{dt}\right]\\
\left[\mathcal{E}_0, \mathcal{C}_0, \frac{d\mathcal{E}_0}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_0}{dt}\right] &\longrightarrow [\mathcal{E}_1, \mathcal{C}_1], [\mathcal{J}_{T0}]\\
[\mathcal{J}_{T0}] &\longrightarrow \left[\vec{\mathcal{A}}_1\right]\\
\left[\mathcal{E}_1, \mathcal{C}_1, \vec{\mathcal{A}}_1\right] &\longrightarrow \left[\frac{d\mathcal{E}_1}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_1}{dt}\right]\\
\left[\mathcal{E}_1, \mathcal{C}_1, \frac{d\mathcal{E}_1}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_1}{dt}\right] &\longrightarrow [\mathcal{E}_2, \mathcal{C}_2], [\mathcal{J}_{T1}]\\
[\mathcal{J}_{T0}, \mathcal{J}_{T1}] &\longrightarrow \left[\vec{\mathcal{A}}_2\right]\\
\left[\mathcal{E}_2, \mathcal{C}_2, \vec{\mathcal{A}}_2\right] &\longrightarrow \left[\frac{d\mathcal{E}_3}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_3}{dt}\right]\\
&\cdots\\
\left[\mathcal{E}_i, \mathcal{C}_i, \vec{\mathcal{A}}_i\right] &\longrightarrow \left[\frac{d\mathcal{E}_i}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_i}{dt}\right]\\
\left[\mathcal{E}_i, \mathcal{C}_i, \frac{d\mathcal{E}_i}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_i}{dt}\right] &\longrightarrow [\mathcal{E}_{i+1}, \mathcal{C}_{i+1}], [\mathcal{J}_{Ti}]\\
[\mathcal{J}_{T0}, \mathcal{J}_{T1} \ldots, \mathcal{J}_{Ti}] &\longrightarrow \left[\vec{\mathcal{A}}_{i+1}\right]\\
\left[\mathcal{E}_{i+1}, \mathcal{C}_{i+1}, \vec{\mathcal{A}}_{i+1}\right] &\longrightarrow \left[\frac{d\mathcal{E}_{i+1}}{dt}, \frac{d\mathcal{C}_{i+1}}{dt}\right]\\
&\cdots
\end{aligned}
\tag{497}
$$

8.6 初期条件（電子、CI ket）

初期電子 ket を CI 計算で用意し、密度行列を計算して初期値を与える。

簡単のため、初期状態は電子のみ（陽電子無し）を考え、CI 計算も陽電子の準位に励起した行列式は使わないとする。（DIRAC の計算はこうなっている。）なので、この section では $\hat{e}_{p+}$ を単に $\hat{e}_p$ と書く。

DHF 計算は Kramers Restricted 計算として、軌道のラベル i は、$i = 1, \bar{1}, 2, \bar{2}...$ とする。

電子の数を N とする。N が偶数ならば $i = 1, \bar{1}, ...M, \bar{M}$ $(M \equiv N/2)$ が occupied (占有)、それ以外が unoccupied。N が奇数ならば $i = 1, \bar{1}, ...M, \bar{M}, M+1$ $(M \equiv (N-1)/2)$ が occupied (占有)、それ以外が unoccupied。

8.7 初期条件（光子のコヒーレント状態）

式 (186)

$$\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\hat{a}(\vec{p},\sigma)e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} + \hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \tag{498}$$

のように、われわれは全空間での量子化をしているため、radiation の初期状態は continuous-mode [11] で考えるのが適している。

[11] の 6.3 章あたりの議論を、３次元、polarization ありの notation で書いておく。

continuous-mode coherent 状態は、

$$|\{\alpha\}\rangle = |\alpha(\vec{p}_1,\sigma_1)\rangle|\alpha(\vec{p}_2,\sigma_2)\rangle|\alpha(\vec{p}_3,\sigma_3)\rangle... \tag{499}$$

のように single-mode の直積で書ける ($\vec{p}$ が離散的な時は multi-mode coherent 状態という)。

$$\hat{a}(\vec{p},\sigma)|\{\alpha\}\rangle = \alpha(\vec{p},\sigma)|\{\alpha\}\rangle \tag{500}$$

のような固有値（$\vec{p},\sigma$ に依存する）を持っている。$\alpha(\vec{p},\sigma)$ は spectral amplitude と呼ばれている。これは

$$\sum_\sigma \int d^3\vec{p}\,|\alpha(\vec{p},\sigma)|^2 = \langle n\rangle \tag{501}$$

のような normalization を持っていて、$\langle n\rangle$ はたしかに coherent 状態にある平均 photon 数であることが示せる。

ちなみに $|\{\alpha\}\rangle$ は single-mode の displacement operator を一般化したもので書ける。

$$|\{\alpha\}\rangle = \exp\left(\hat{a}^\dagger_\alpha - \hat{a}_\alpha\right)|0\rangle, \tag{502}$$

ここで、wavepacket operator を

$$\hat{a}^\dagger_\alpha = \sum_\sigma \int d^3\vec{p}\,\alpha(\vec{p},\sigma)\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma) \tag{503}$$

と定義した。

この continuous-mode の書き方で、実質 $\vec{p}_j, \sigma_j$ の single-mode とみなせるような光（バンド幅が小さいとみなせるレーザー光のような）をあらわすには、

$$\alpha(\vec{p},\sigma) = \alpha\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_j)\delta_{\sigma,\sigma_j} \tag{504}$$

とする。(右辺の α は複素数の定数。) $|\alpha|^2$ が time-independent mean photon flux に比例している（はず）。このような stationary coherent state の $\alpha(\vec{p},\sigma)$ だと $\langle n\rangle$ が無限大になってしまうが、多くの実験を表すのに便利であることが知られている。

$\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r})$ の $|\{\alpha\}\rangle$ による期待値を計算する。spectral amplitude は上のデルタ関数とする。

$$\begin{aligned}
\langle\{\alpha\}|\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r})|\{\alpha\}\rangle &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\Big[\langle\hat{a}(\vec{p},\sigma)\rangle e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \qquad (505)\\
&\quad +\langle\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\rangle e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\Big]\\
&= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\Big[\alpha\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_j)\delta_{\sigma,\sigma_j}e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \qquad (506)\\
&\quad +\alpha^*\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_j)\delta_{\sigma,\sigma_j}e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\Big]\\
&= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\frac{1}{\sqrt{2p^0_j}}\Big[\alpha e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp^0_jt/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}+\alpha^*e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp^0_jt/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\Big] \qquad (507)\\
&= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar p^0_j}}\Big[\alpha e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp^0_jt/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}+\alpha^*e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp^0_jt/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\Big] \qquad (508)
\end{aligned}$$

密度行列の時間発展に必要なのは、$\mathcal{I}_{2p^cq^d}$ という項に入っている電子の電流密度との空間積分

$$\mathcal{I}_{2PQ} = -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{PQ}(\vec{r})\cdot\vec{\mathcal{A}}(x) \ni -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{PQ}(\vec{r})\cdot\vec{\mathcal{A}}_{\rm rad}(x) \qquad (509)$$

である。$\vec{\mathcal{A}}_{\rm rad}(x)$ として上の期待値を用いると、

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_{2PQ} &\ni -\frac{1}{c}\int d^3\vec{r}\,\vec{j}_{PQ}(\vec{r})\cdot\vec{\mathcal{A}}_{\rm rad}(x) \qquad (510)\\
&= -\frac{1}{c}\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\frac{1}{\sqrt{2p^0_j}}\sum_{k=1}^3\Big[\alpha e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp^0_jt/\hbar}\int d^3\vec{r}\,j^k_{PQ}(\vec{r})e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar} \qquad (511)\\
&\quad +\alpha^*e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp^0_jt/\hbar}\int d^3\vec{r}\,j^k_{PQ}(\vec{r})e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\Big]\\
&= -\frac{1}{c}\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\frac{1}{\sqrt{2p^0_j}}\sum_{k=1}^3\Big[\alpha e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp^0_jt/\hbar}F^k_{PQ}(\vec{p}_j)+\alpha^*e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp^0_jt/\hbar}F^k_{PQ}(-\vec{p}_j)\Big] \qquad (512)\\
&= -\frac{1}{2\pi\sqrt{p^0_j\hbar c}}\left[\alpha\mathcal{F}_{PQj}(t)+\alpha^*\mathcal{F}^*_{QPj}(t)\right] \qquad (513)
\end{aligned}$$

ここで、$\mathcal{F}$ は `intcalFj_mat` で計算できる（このルーチンを使うと毎時間積分計算を行うことになってしまうので、$\exp\{-icp^0_jt/\hbar\}$ を除いたものを計算して、`calFj0_Qmat(nn,mm,j)` という配列に保存している）。

mode ごとに固有値が異なるような multi-mode 的な状態を考えるには、α を α_j と j に依存するようにして、$\sum_j$ をすればよい。

$$\alpha(\vec{p},\sigma) = \sum_j \alpha_j\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_j)\delta_{\sigma,\sigma_j} \qquad (514)$$

となり、

$$\langle\{\alpha\}|\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r})|\{\alpha\}\rangle = \sum_j\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar p^0_j}}\Big[\alpha_j e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp^0_jt/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}+\alpha^*_je^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp^0_jt/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\Big] \qquad (515)$$

電場への寄与を計算するのに次の量が必要。

$$\langle\{\alpha\}| - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^k_{\rm rad}(\vec{r})|\{\alpha\}\rangle \tag{516}$$
$$= -\frac{1}{c}\sum_j \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar p_j^0}}\left[\alpha_j e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)\left(-\frac{icp_j^0}{\hbar}\right)e^{-icp_j^0t/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar} + \alpha_j^* e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)\left(\frac{icp_j^0}{\hbar}\right)e^{icp_j^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \tag{517}$$
$$= -\frac{1}{c}\sum_j \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar p_j^0}}\left(-\frac{icp_j^0}{\hbar}\right)\left[\alpha_j e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp_j^0t/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar} - \alpha_j^* e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp_j^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \tag{518}$$
$$= -\frac{1}{c}\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar}}\left(-\frac{ic}{\hbar}\right)\sum_j \sqrt{p_j^0}\left[\alpha_j e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp_j^0t/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar} - \alpha_j^* e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp_j^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \tag{519}$$
$$= \frac{i}{2\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar^3}}\sum_j \sqrt{p_j^0}\left[\alpha_j e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp_j^0t/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar} - \alpha_j^* e^{*k}(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{icp_j^0t/\hbar}e^{-i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \tag{520}$$
$$= -\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{c}{\hbar^3}}\sum_j \sqrt{p_j^0}\,{\rm Im}\left[\alpha_j e^k(\vec{p}_j,\sigma_j)e^{-icp_j^0t/\hbar}e^{i\vec{p}_j\cdot\vec{r}/\hbar}\right] \tag{521}$$

8.8 保存量

$$\langle\hat{N}_e(t,\vec{r})\rangle = n_{NM}(\vec{r})\langle\hat{\mathcal{E}}_{NM}(t)\rangle = n_{NM}(\vec{r})\mathcal{E}_{NM}(t) \tag{522}$$

と計算される。全位置確率 $N_{e,{\rm tot}}$ は、(119) より、$N_{e,{\rm tot}}(t) = \mathcal{E}_{NN}(t)$ のように、$\mathcal{E}_{NM}(t)$ のトレースとして計算される。

電子陽電子の全位置確率、原子核 N の全位置確率は次のように密度行列のトレースで計算される。

$$N_{e,{\rm tot}}(t) = \mathcal{E}_{PP}(t) \tag{523}$$
$$N_{N,{\rm tot}}(t) = \mathcal{C}_{aii}(t) \tag{524}$$

この量が保存することで、数値計算の精度を確認する。

8.9 ストレステンソル密度の期待値

ストレステンソル密度演算子は、式 (231)

$$\hat{\tau}_e^{\Pi\,kl}(x) = \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\tau^{kl}_{p^aq^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b} - \frac{Z_e e}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{A}_k(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{A}_k(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \tag{525}$$

である。この期待値を計算するとき、第 1 項は密度行列で書けるが、それ以外は $\hat{A}_k(x)$ と $\hat{\psi}(x)$ が交換しないので簡単にならない。この章で採用している、$\hat{\vec{A}}_A \longrightarrow \langle\Phi| : \hat{\vec{A}}_A : |\Phi\rangle \equiv \vec{\mathcal{A}}_A$ という近似と、電流を計算する時のように $\hat{A}^k_{\rm rad}$ も期待値で置き換えるという近似を行って計算する。$\mathcal{A}^k = \langle\hat{A}^k_{\rm rad}\rangle + \mathcal{A}^k_A$ と書く。

この近似のもとで、

$$\hat{\tau}_e^{\Pi\,kl}(x) \ni -\frac{Z_e e}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{A}_k(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{A}_k(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \tag{526}$$
$$\to +\frac{Z_e e}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\mathcal{A}^k(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x)\mathcal{A}^k(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \tag{527}$$
$$= Z_e e\mathcal{A}^k(x)\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x) \tag{528}$$
$$= \mathcal{A}^k(x)\frac{\hat{j}_e^l(x)}{c} \tag{529}$$
$$= \mathcal{A}^k(x)\frac{j^l_{PQ}(\vec{r})}{c}\hat{\mathcal{E}}_{PQ} \tag{530}$$
$$\tag{531}$$

より、期待値は、

$$\langle\Phi|:\hat{\tau}_e^{\Pi\,kl}(x):|\Phi\rangle=\left(\tau_{PQ}^{kl}(\vec{r})+\mathcal{A}^k(x)\frac{j_{PQ}^l(\vec{r})}{c}\right)\mathcal{E}_{PQ} \tag{532}$$

8.10 分極密度の期待値

system の分極の演算子は

$$\hat{\vec{P}}(x)=\frac{1}{4\pi}\mathrm{grad}\hat{A}_0(x)+\frac{1}{4\pi c}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{A}}_A(x) \tag{533}$$

これを生成消滅演算子で表す。

BO 近似の時は、

$$\begin{aligned}\hat{P}^k(x) &= -\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}E^k_{p^aq^b}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b}-\frac{1}{4\pi}\sum_{a=1}^{N_a}(Z_ae)\frac{(\vec{r}-\vec{R}_a)^k}{|\vec{r}-\vec{R}_a|^3}\\ &\quad+\frac{1}{4\pi c^2}\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{a,b=\pm}\int d^3\vec{s}\left\{\frac{j^k_{p^aq^b}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b}}{dt}(u)+\frac{E^k_{p^aq^b}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\frac{d^2\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b}}{dt^2}(u)\right\}\end{aligned} \tag{534}$$

ここで、$u=t-\frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}$ である。($\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{A}}_A(x)$ は数値的に時間微分したほうがいいかも。)

$\vec{R}_a$ や $\sum_{a=1}^{N_a}(Z_ae)$ の作り方は、`intV_mat(n,a,m,b)` を参考にするとよい。

8.11 (反) 交換関係

ここでの近似では演算子そのものは計算できないので、(反) 交換関係の期待値をとったものがどうなっているかを計算する。とりあえず電子の方を考える。

反交換子は excitation operator $\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b}\equiv\hat{e}^\dagger_{p^a}\hat{e}_{q^b}$ だけでは表すことができず、

$$\hat{\mathcal{D}}_{p^aq^b}\equiv\hat{e}_{p^a}\hat{e}^\dagger_{q^b} \tag{535}$$

という combination が必要。

$$\left\{\hat{e}_{p^a},\hat{e}^\dagger_{q^b}\right\}\equiv\hat{e}_{p^a}\hat{e}^\dagger_{q^b}+\hat{e}^\dagger_{q^b}\hat{e}_{p^a}=\hat{\mathcal{D}}_{p^aq^b}+\hat{\mathcal{E}}_{q^bp^a} \tag{536}$$

である。(２項目の $\hat{\mathcal{E}}$ の添字の順序に注意。)

$\hat{\mathcal{D}}_{p^aq^b}$ の時間発展の式は、

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{D}}_{PQ}}{dt} &= i\hbar\frac{d}{dt}\left(\hat{e}_P\hat{e}^\dagger_Q\right) &(537)\\ &= \left(i\hbar\frac{d\hat{e}_P}{dt}\right)\hat{e}^\dagger_Q+\hat{e}_P\left(i\hbar\frac{d\hat{e}^\dagger_Q}{dt}\right) &(538)\\ &= \hat{I}_{PR}\hat{e}_R\hat{e}^\dagger_Q-\hat{e}_P\hat{e}^\dagger_R\hat{I}^\dagger_{QR} &(539)\\ &= \hat{I}_{PR}\hat{\mathcal{D}}_{RQ}-\hat{\mathcal{D}}_{PR}\hat{I}_{RQ} &(540)\end{aligned}$$

ここで、電流・ベクトルポテンシャルを normal order の期待値で置き換える近似を行うと、

$$i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{D}}_{PQ}}{dt}=\mathcal{I}_{PR}\hat{\mathcal{D}}_{RQ}-\mathcal{I}_{RQ}\hat{\mathcal{D}}_{PR} \tag{541}$$

となる。$\mathcal{I}$ は上で定義されている $\mathcal{E},\mathcal{C}$ による量。

電子の反交換関係は、$\left\{\hat{e}_{n^a},\hat{e}^\dagger_{m^b}\right\}=\delta_{nm}\delta_{ab}$ であるが、今の近似手法では演算子の時間発展を追っていないので、期待値をとって考える。

$\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b}$ の期待値の方は、$\langle\Phi| : \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} : |\Phi\rangle \equiv \mathcal{E}_{p^c q^d} = \mathcal{E}_{PQ}$ が物理量の計算で計算されるので、$|\Phi\rangle$ での期待値を考えるのがよいかと思われるが、$\langle\Phi| : \left\{\hat{e}_{n^a}, \hat{e}^\dagger_{m^b}\right\} : |\Phi\rangle = 0$ になってしまう (?) ので ($t = 0$ では直接計算でそうなる)、真空期待値を計算することにする。$\langle 0| \left\{\hat{e}_{n^a}, \hat{e}^\dagger_{m^b}\right\} |0\rangle = \delta_{nm}\delta_{ab}$ がどのように時間変化するかを計算する。($t = 0$ では直接計算でこうなる。)

$$\langle 0|\hat{\mathcal{D}}_{p^c q^d}|0\rangle \equiv \mathcal{D}_{V,p^c q^d} = \mathcal{D}_{V,PQ} \tag{542}$$

$$\langle 0|\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}|0\rangle \equiv \mathcal{E}_{V,p^c q^d} = \mathcal{E}_{V,PQ} \tag{543}$$

とすると、$\langle 0| \left\{\hat{e}_{p^a}, \hat{e}^\dagger_{q^b}\right\} |0\rangle = \mathcal{D}_{V,p^c q^d} + \mathcal{E}_{V,p^c q^d}$ と計算される。これらは、いまの近似の下では、式 (495) と式 (541) の両辺の真空期待値をとることで得られる。

$$i\hbar \frac{d\mathcal{D}_{V,PQ}}{dt} = \mathcal{I}_{PR}\mathcal{D}_{V,RQ} - \mathcal{I}_{RQ}\mathcal{D}_{V,PR} \tag{544}$$

$$i\hbar \frac{d\mathcal{E}_{V,PQ}}{dt} = -\mathcal{I}_{RP}\mathcal{E}_{V,RQ} + \mathcal{I}_{QR}\mathcal{E}_{V,PR} \tag{545}$$

$\mathcal{E}_V$ の方の式は、$\mathcal{E}$ の式と同形で、初期条件が違うだけである。

初期条件は、Sec. 6.9 でやった計算、$t = 0$ において

$$\mathcal{D}_{V,n^a m^b} = \langle 0|\hat{e}_{n^a}\hat{e}^\dagger_{m^b}|0\rangle = \begin{cases} \delta_{nm} & (a = b = +) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{546}$$

$$\mathcal{E}_{V,n^a m^b} = \langle 0|\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{m^b}|0\rangle = \begin{cases} \delta_{nm} & (a = b = -) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{547}$$

から決められる。すなわち、$\mathcal{D}_{V,PQ}$ は electron の対角成分、 $\mathcal{E}_{V,PQ}$ は positron の対角成分だけ 1 で他はゼロである。$\mathcal{D}_{V,PQ} + \mathcal{E}_{V,QP}$ を計算する。

9 Thermalization の計算にむけて

9.1 これまでのまとめ (BO 近似)

物理量は、正規積の期待値から計算される。正規積の定義は、

$$\langle\Phi| : \hat{O} : |\Phi\rangle \equiv \langle\Phi|\hat{O}|\Phi\rangle - \langle 0|\hat{O}|0\rangle \tag{548}$$

のように、ある状態の期待値から真空期待値を引き去った期待値である。一般の状態は、$|\Phi\rangle = |\Phi_e\rangle \otimes |\Phi_{ph}\rangle$ のような直積になっている。

消滅演算子の時間発展を表す式は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{e}_{n^a}}{\partial t} &= \sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm} h_{n^a m^b}\hat{e}_{m^b} + \sum_{m,p,q=1}^{N_D}\sum_{b,c,d=\pm}(n^a m^b|p^c q^d)\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}\hat{e}_{m^b} \\ &- \frac{1}{c^2}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\, d^3\vec{s}\, j^k_{n^a m^b}(\vec{r})\frac{\hat{j}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\hat{e}_{m^b} \\ &- \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2}}{\sqrt{c(2\pi\hbar)^3}}\sum_{m=1}^{N_D}\sum_{b=\pm}\sum_{k=1}^{3}\sum_{\sigma=\pm 1}\int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \times \\ &\left[F^k_{n^a m^b}(\vec{p})e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0 t/\hbar}\hat{a}(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{m^b} + F^k_{n^a m^b}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0 t/\hbar}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{m^b}\right]. \end{aligned} \tag{549}$$

ここで、

$$h_{n^a m^b} = T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b} + \sum_{a=1}^{N_a}(Z_a e)V_{n^a m^b}(\vec{R}_a), \tag{550}$$

$$u = t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}, \tag{551}$$

$$\hat{j}^k_T(cu,\vec{s}) \quad = \quad \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm}\left\{ j^k_{p^cq^d}(\vec{s})\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}(u) + E^k_{p^cq^d}(\vec{s})\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}}{dt}(u)\right\}, \tag{552}$$

$$F^k_{n^am^b}(\vec{p}) = \int d^3\vec{r}\, j^k_{n^am^b}(\vec{r})e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{553}$$

である。

励起演算子

$$\hat{\mathcal{E}}_{p^aq^b} \quad \equiv \quad \hat{e}^\dagger_{p^a}\hat{e}_{q^b} \tag{554}$$

$$\hat{\mathcal{E}}^\dagger_{p^aq^b} \quad = \quad \hat{e}^\dagger_{q^b}\hat{e}_{p^a} = \hat{\mathcal{E}}_{q^bp^a} \tag{555}$$

の時間微分は、

$$\frac{d\hat{\mathcal{E}}_{n^am^b}}{dt} \quad = \quad \frac{\partial \hat{e}^\dagger_{n^a}}{\partial t}\hat{e}_{m^b} + \hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t} \tag{556}$$

$$\quad = \quad \hat{O}^\dagger_{m^bn^a} + \hat{O}_{n^am^b} \tag{557}$$

ここで、

$$\hat{O}_{n^am^b} \equiv \hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t} \tag{558}$$

とした。ある状態での期待値を、$\langle \hat{O}_{n^am^b}\rangle \equiv \mathcal{O}_{n^am^b}$ と行列で表した時、$\langle \hat{O}^\dagger_{n^am^b}\rangle = \mathcal{O}^*_{n^am^b} = \mathcal{O}^\dagger_{m^bn^a}$ となる。(演算子に $\dagger$ がつくと期待値は $*$ がつくだけ。行列に $\dagger$ がつくと転置もする。) よって、

$$\frac{d\langle\hat{\mathcal{E}}_{n^am^b}\rangle}{dt} = \mathcal{O}^\dagger_{n^am^b} + \mathcal{O}_{n^am^b} \tag{559}$$

で、エルミート行列になる。$\hat{O}_{n^am^b}$ だけ計算しておけばよい。

$$i\hbar\hat{O}_{n^am^b} \quad = \quad i\hbar\hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\partial \hat{e}_{m^b}}{\partial t} \tag{560}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^br^e}\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{r^e} + \sum_{r,p,q=1}^{N_D}\sum_{e,c,d=\pm}(m^br^e|p^cq^d)\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}\hat{e}_{r^e} \\
&- \frac{1}{c^2}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\, j^k_{m^br^e}(\vec{r})\hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\hat{j}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\hat{e}_{r^e} \\
&- \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\sum_{\sigma=\pm1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\times \\
&\left[F^k_{m^br^e}(\vec{p})e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{a}(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{r^e} + F^k_{m^br^e}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{r^e}\right].
\end{aligned} \tag{561}$$

期待値をとって、閉じた微分方程式系を得るために、いくつか近似を行う。２項目の４つの演算子の積は、$t=0$ でのみ成り立つ関係式 (Wick の定理) を用いて分解する。

$$\langle\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{\mathcal{E}}_{p^cq^d}\hat{e}_{r^e}\rangle \quad = \quad \langle\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}^\dagger_{p^c}\hat{e}_{q^d}\hat{e}_{r^e}\rangle \tag{562}$$

$$\quad \approx \quad \langle\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{r^e}\rangle\langle\hat{e}^\dagger_{p^c}\hat{e}_{q^d}\rangle - \langle\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{q^d}\rangle\langle\hat{e}^\dagger_{p^c}\hat{e}_{r^e}\rangle \tag{563}$$

３項目の $\hat{j}^k_T(cu,\vec{s})$ に関しては、正規積をとった期待値 (物理的な電流横波成分の期待値) で置き換える。

$$\langle\Phi| : \hat{j}^k_T(cu,\vec{s}) : |\Phi\rangle \equiv \mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s}) \tag{564}$$

すると、

$$-\frac{1}{c^2}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\hat{e}^\dagger_{n^a}\frac{\hat{j}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\hat{e}_{r^e} = -\frac{1}{c^2}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\frac{\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{r^e} \tag{565}$$

とできる。ここで積分は c 数のものになり、実行できる。$u = t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c}$ の部分は次のように u 積分に変形する。

$$\int d^3\vec{s}\,\frac{\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} = \frac{1}{c\pi}\int_0^t du\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\exp\left(i\alpha(u-t)^2\right)\int d^3\vec{s}\,\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{566}$$

これを用いると、

$$\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\frac{\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} = \frac{1}{c\pi}\int_0^t du\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\exp\left(i\alpha(u-t)^2\right)\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{567}$$

となる。この空間積分は、

$$\begin{aligned}&\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)\\ &\quad= \sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\left\{j^k_{p^c q^d}(\vec{s})\mathcal{E}_{p^c q^d}(u) + E^k_{p^c q^d}(\vec{s})\frac{d\mathcal{E}_{p^c q^d}}{dt}(u)\right\}\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)\end{aligned} \tag{568}$$

となる。ここで、

$$\langle\Phi| : \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} : |\Phi\rangle \equiv \mathcal{E}_{p^c q^d} \tag{569}$$

と定義した。

$$I_{jj,m^b r^e p^c q^d} \equiv \sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})j^k_{p^c q^d}(\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{570}$$

$$I_{jE,m^b r^e p^c q^d} \equiv \sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})E^k_{p^c q^d}(\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{571}$$

と積分を定義すると、第３項目の演算子 $\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{e}_{r^e}$ の係数は、

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{c^2}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})\frac{\mathcal{J}^k_T(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}\\ &\quad= -\frac{1}{c^3\pi}\sum_{r,p,q=1}^{N_D}\sum_{e,c,d=\pm}\int_0^t du\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha\exp\left(i\alpha(u-t)^2\right)\left\{I_{jj,m^b r^e p^c q^d}\mathcal{E}_{p^c q^d}(u) + I_{jE,m^b r^e p^c q^d}\frac{d\mathcal{E}_{p^c q^d}}{dt}(u)\right\}\end{aligned} \tag{572}$$

これは t による。u,α 積分は数値計算する必要がある。積分 I_{jj} と I_{jE} は、

$$j^k_{p^a q^b}(\vec{r}) = Z_e\,e\,c\left[\psi^\dagger_{p^a}(\vec{r})\gamma^0\gamma^k\psi_{q^b}(\vec{r})\right] \tag{573}$$

$$E^k_{p^c q^d}(\vec{s}) = -\frac{Z_e e}{4\pi}\int d^3\vec{t}\,\psi^\dagger_{p^c}(\vec{t})\psi_{q^d}(\vec{t})\frac{(\vec{t}-\vec{s})^k}{|\vec{t}-\vec{s}|^3} = -\frac{Z_e e}{4\pi}\frac{\partial}{\partial s^k}\int d^3\vec{t}\,\frac{\psi^\dagger_{p^c}(\vec{t})\psi_{q^d}(\vec{t})}{|\vec{t}-\vec{s}|} \tag{574}$$

より、ガウス積分に帰着する。I_{jj} を計算するには、

$$\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,g_i(\vec{r})g_j(\vec{r})g_k(\vec{s})g_l(\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{575}$$

I_{jE} を計算するには、

$$\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,d^3\vec{t}\,g_i(\vec{r})g_j(\vec{r})g_k(\vec{t})g_l(\vec{t})\frac{(\vec{t}-\vec{s})^k}{|\vec{t}-\vec{s}|^3}\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{576}$$

$$= \int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,d^3\vec{t}\,g_i(\vec{r})g_j(\vec{r})g_k(\vec{s})g_l(\vec{s})\frac{(\vec{s}-\vec{t})^k}{|\vec{s}-\vec{t}|^3}\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{t})^2}{c^2}\right) \tag{577}$$

$$= \int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,d^3\vec{t}\,g_i(\vec{r})g_j(\vec{r})g_k(\vec{s})g_l(\vec{s})\left\{\frac{\partial}{\partial t^k}\frac{1}{|\vec{s}-\vec{t}|}\right\}\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{t})^2}{c^2}\right) \tag{578}$$

のようなガウス積分が必要。これらは、2電子積分と同じ形で、$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{s}|}$ のかわりに $\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right)$ にしたものと、$\int d^3\vec{t}\left\{\frac{\partial}{\partial t^k}\frac{1}{|\vec{s}-\vec{t}|}\right\}\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{t})^2}{c^2}\right)$ にしたもの。よって、s 型のガウス型関数についての式が得られれば、他の形のガウス型関数についての式は2電子積分を作ったのと同じ様にコードできる。

4項目の $\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{a}(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{r^e}$ と $\hat{e}^\dagger_{n^a}\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)\hat{e}_{r^e}$ は、$t=0$ で成り立つ関係、$\hat{e}^\dagger_{n^a}$ や $\hat{e}_{r^e}$ が $\hat{a}(\vec{p},\sigma)$ と交換すると関係を他の時刻でも成り立つとする近似を用いた。このとき、光子の状態がコヒーレント状態でないと、この項はゼロになる。コヒーレント状態を用いることで、半古典的な扱いをすることになり、photon を量子的に扱うことができない。以下で、この近似を用いない方法を議論する。

9.2 微分方程式まとめ

状態は $|\Phi\rangle = |\Phi_e\rangle\otimes|\Phi_{ph}\rangle$ と表される。

各種変数を次のように定義する。

$$\hat{\mathcal{E}}_{p^a q^b} \equiv \hat{e}^\dagger_{p^a}\hat{e}_{q^b} \tag{579}$$
$$\mathcal{E}_{p^c q^d} \equiv \langle\Phi| : \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d} : |\Phi\rangle \tag{580}$$
$$\mathcal{E}^\Phi_{p^c q^d} \equiv \langle\Phi|\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}|\Phi\rangle \tag{581}$$
$$\mathcal{E}^0_{p^c q^d} \equiv \langle 0|\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}|0\rangle \tag{582}$$
$$\mathcal{E}_{p^c q^d} = \mathcal{E}^\Phi_{p^c q^d} - \mathcal{E}^0_{p^c q^d} \tag{583}$$

$\hat{R} = \hat{a}(\vec{p},\sigma)$ または $\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)$ として、

$$\hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{p^a q^b} \equiv \hat{e}^\dagger_{p^a}\hat{R}\hat{e}_{q^b} \tag{584}$$
$$\mathcal{E}[\hat{R}]_{p^c q^d} \equiv \langle\Phi| : \hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{p^c q^d} : |\Phi\rangle \tag{585}$$
$$\mathcal{E}^\Phi[\hat{R}]_{p^c q^d} \equiv \langle\Phi|\hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{p^c q^d}|\Phi\rangle \tag{586}$$
$$\mathcal{E}^0[\hat{R}]_{p^c q^d} \equiv \langle 0|\hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{p^c q^d}|0\rangle \tag{587}$$
$$\mathcal{E}[\hat{R}]_{p^c q^d} = \mathcal{E}^\Phi[\hat{R}]_{p^c q^d} - \mathcal{E}^0[\hat{R}]_{p^c q^d} \tag{588}$$

$t=0$ では、$\hat{e}$ と $\hat{R}$ が交換するため、コヒーレント状態を考えなければ、これらは全成分ゼロである。

上のような近似のもとでの微分方程式は以下のようになる。

$$\frac{d\mathcal{E}^\Phi_{n^a m^b}}{dt} = \mathcal{O}^\Phi_{n^a m^b} + \mathcal{O}^{\Phi\dagger}_{n^a m^b} \tag{589}$$
$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}^\Phi[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a m^b} = \mathcal{Q}^{\Phi\dagger}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) + \mathcal{P}^\Phi_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) \tag{590}$$
$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}^\Phi[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a m^b} = \mathcal{P}^{\Phi\dagger}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) + \mathcal{Q}^\Phi_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) \tag{591}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar\mathcal{O}^\Phi_{n^a m^b} &= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^b r^e}\mathcal{E}^\Phi_{n^a r^e} + \sum_{r,p,q=1}^{N_D}\sum_{e,c,d=\pm}(m^b r^e|p^c q^d)\left(\mathcal{E}^\Phi_{n^a r^e}\mathcal{E}^\Phi_{p^c q^d} - \mathcal{E}^\Phi_{n^a q^d}\mathcal{E}^\Phi_{p^c r^e}\right) \\
&+ \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E}, \frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e}\mathcal{E}^\Phi_{n^a r^e} \\
&- \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\sum_{\sigma=\pm 1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\times \\
&\left\{F^k_{m^b r^e}(\vec{p})e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}\mathcal{E}^\Phi[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} + F^k_{m^b r^e}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}\mathcal{E}^\Phi[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e}\right\}
\end{aligned} \tag{592}$$

$$i\hbar \mathcal{P}^{\Phi}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) = \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^b r^e}\mathcal{E}^{\Phi}[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} + \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E},\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e}\mathcal{E}^{\Phi}[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} - \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\frac{1}{\sqrt{2p^0}}F^k_{m^b r^e}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0 t/\hbar}(n_{\vec{p}\sigma}+1)\mathcal{E}^{\Phi}_{n^a r^e} \tag{593}$$

$$i\hbar \mathcal{Q}^{\Phi}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) = \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^b r^e}\mathcal{E}^{\Phi}[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} + \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E},\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e}\mathcal{E}^{\Phi}[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} - \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\frac{1}{\sqrt{2p^0}}F^k_{m^b r^e}(\vec{p})e^{k}(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0 t/\hbar}n_{\vec{p}\sigma}\mathcal{E}^{\Phi}_{n^a r^e} \tag{594}$$

ここで、$n_{\vec{p}\sigma}$ は、光子の状態 $|\Phi_{ph}\rangle$ におけるモード $(\vec{p},\sigma)$ の光子の占有数。また、

$$I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E},\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e} \equiv -\frac{1}{c^3\pi}\sum_{p,q=1}^{N_D}\sum_{c,d=\pm}\int_0^t du\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha \exp\left(i\alpha(u-t)^2\right)\left\{I_{jj,m^b r^e p^c q^d}\mathcal{E}_{p^c q^d}(u) + I_{jE,m^b r^e p^c q^d}\frac{d\mathcal{E}_{p^c q^d}}{dt}(u)\right\} \tag{595}$$

を定義した。この積分にでてくる $\mathcal{E}$ は物理量としての電流で置き換えた近似に由来しているため、$\mathcal{E}^{\Phi}$ ではないことに注意。上の式ででてくる積分は、

$$h_{n^a m^b} = T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b} + \sum_{a=1}^{N_a}(Z_a e)V_{n^a m^b}(\vec{R}_a) \tag{596}$$

$$I_{jj,m^b r^e p^c q^d} = \sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})j^k_{p^c q^d}(\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{597}$$

$$I_{jE,m^b r^e p^c q^d} = \sum_{k=1}^{3}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{s}\,j^k_{m^b r^e}(\vec{r})E^k_{p^c q^d}(\vec{s})\exp\left(-i\alpha\frac{(\vec{r}-\vec{s})^2}{c^2}\right) \tag{598}$$

$$F^k_{n^a m^b}(\vec{p}) = \int d^3\vec{r}\,j^k_{n^a m^b}(\vec{r})e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{599}$$

等。

真空期待値の微分方程式

$$\frac{d\mathcal{E}^0_{n^a m^b}}{dt} = \mathcal{O}^0_{n^a m^b} + \mathcal{O}^{0\dagger}_{n^a m^b} \tag{600}$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}^0[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a m^b} = \mathcal{Q}^{0\dagger}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) + \mathcal{P}^0_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) \tag{601}$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}^0[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a m^b} = \mathcal{P}^{0\dagger}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) + \mathcal{Q}^0_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) \tag{602}$$

は、$\mathcal{O}^{\Phi}_{n^a m^b}$、$\mathcal{P}^{\Phi}_{n^a m^b}$、$\mathcal{Q}^{\Phi}_{n^a m^b}$ で $\Phi \to 0$ として得られる。真空では全てのモードについて $n_{\vec{p}\sigma} = 0$ である。

$\mathcal{E}_{p^c q^d} = \mathcal{E}^{\Phi}_{p^c q^d} - \mathcal{E}^0_{p^c q^d}$ により、上の微分方程式系は閉じる。

$\mathcal{O}^{\Phi}_{n^a m^b}$ に現れる非線形項（２電子積分を含む項）を無視することにすると、６つの微分方程式ではなく、$\mathcal{E}_{p^c q^d} = \mathcal{E}^{\Phi}_{p^c q^d} - \mathcal{E}^0_{p^c q^d}$ と $\mathcal{E}[\hat{R}]_{p^c q^d} = \mathcal{E}^{\Phi}[\hat{R}]_{p^c q^d} - \mathcal{E}^0[\hat{R}]_{p^c q^d}$ の３種類の正規積の期待値の方程式を解けばよいことになる。つまり、

$$\frac{d\mathcal{E}_{n^a m^b}}{dt} = \mathcal{O}^N_{n^a m^b} + \mathcal{O}^{N\dagger}_{n^a m^b} \tag{603}$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a m^b} = \mathcal{Q}^{N\dagger}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) + \mathcal{P}^N_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) \tag{604}$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a m^b} = \mathcal{P}^{N\dagger}_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) + \mathcal{Q}^N_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) \tag{605}$$

を解く。ここで、

$$
\begin{aligned}
i\hbar\mathcal{O}^N_{n^a m^b} &= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^b r^e}\mathcal{E}_{n^a r^e} + \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E}, \frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e}\mathcal{E}_{n^a r^e} \\
&- \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\sum_{\sigma=\pm 1}\int\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}}\times \\
&\left\{F^k_{m^b r^e}(\vec{p})e^k(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}\mathcal{E}[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} + F^k_{m^b r^e}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}\mathcal{E}[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e}\right\} \qquad (606)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
i\hbar\mathcal{P}^N_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) &= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^b r^e}\mathcal{E}[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} + \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E}, \frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e}\mathcal{E}[\hat{a}(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} \\
&- \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\frac{1}{\sqrt{2p^0}}F^k_{m^b r^e}(-\vec{p})e^{*k}(\vec{p},\sigma)e^{icp^0t/\hbar}(n_{\vec{p}\sigma}+1)\mathcal{E}_{n^a r^e} \qquad (607)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
i\hbar\mathcal{Q}^N_{n^a m^b}(\vec{p},\sigma) &= \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} h_{m^b r^e}\mathcal{E}[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} + \sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm} I_{j_T}(t)\left[\mathcal{E}, \frac{d\mathcal{E}}{dt}\right]_{m^b r^e}\mathcal{E}[\hat{a}^\dagger(\vec{p},\sigma)]_{n^a r^e} \\
&- \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar c}}\sum_{r=1}^{N_D}\sum_{e=\pm}\sum_{k=1}^{3}\frac{1}{\sqrt{2p^0}}F^k_{m^b r^e}(\vec{p})e^{k}(\vec{p},\sigma)e^{-icp^0t/\hbar}n_{\vec{p}\sigma}\mathcal{E}_{n^a r^e} \qquad (608)
\end{aligned}
$$

近似的に得た正規積の期待値の微分方程式であることを思い出すために、上付き N をつけた。

参考文献

[1] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields I*, Cambridge University Press (1995).

[2] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001)

[3] W. H. Furry, Phys. Rev. **81**, 115 (1951).

[4] A. Tachibana, in *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, ed. by E. J. Brändas and E. S. Kryachko, (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003), Vol. 2, p. 211.

[5] A. Tachibana, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).

[6] 立花明知, 量子物性学２００９ノート

[7] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskiĭ, *Relativistic Quantum Theory*, Pergamon Press

[8] J. J. サクライ, 上級量子力学 (*Advanced Quantum Mechanics*)

[9] A. Tachibana, Frontiers in Theoretical Chemistry: Concepts and Methods: A tribute to Professor B. M. Deb; Eds. by Swapan K. Ghosh and Pratim K. Chattarj; Taylor and Francis / CRC Press, 2013; Chapter 12, pp. 235-251.

[10] K. G. Dyall and K. Fægri, Jr., *Relativistic Quantum Chemistry*, Oxford University Press (2007)

[11] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light, third edition*, Oxford University Press (2000)

[12] L. E. McMurchie and E. R. Davidson, Journal of Computational Physics **26**, 218-231 (1978)

[13] A. Tachibana, J. Math. Chem. **50**, 669-688 (2012)

[14] D. R. Brill and J. A. Wheeler, Rev. Mod. Phys. **29**, 465 (1957)

[15] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013)

[16] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
`http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html`