

## Rigged QED に基づく物理量の時間発展計算

(京大院・工) 瀬波 大土, 築島 千馬, 立花 明知

## Computation of time evolution of observables based on Rigged QED

(Kyoto Univ.) Masato Senami, Kazuma Tsukishima, Akitomo Tachibana

場の量子論は量子力学と比べてより根源的な基礎理論として広く受け入れられている。例えば場の量子論はラムシフトや電子の磁気双極子能率の値など量子力学では説明のできない様々な現象を説明することができる。その上、場の量子論は相対論と矛盾のない量子論でもある。相対論的量子力学も知られているが、空孔理論の弱い相互作用やスカラー粒子への拡張が不可能であることから、基礎理論の観点からは相対論と無矛盾とは受け入れられていない。これらのことは場の量子論の教科書にも記載されておりすでに確立している。

それに加えて著者の一人によって、二重スリット実験の説明についても場の量子論には優位性があると指摘された。量子力学では、単にミステリーと言われ、電子が1個だけ入射する場合であっても確率的分布だけが予言され確率解釈によってのみ取り扱われていた。それとは異なり、場の量子論では原理的には、1個1個の入射ごとにどこで検出器と相互作用するか、予言することのできる理論的枠組みを有しているということである。

これらのことから量子現象を真に正しく理解するには場の量子論に基づいて調べなくてはならないと考えている。具体的な場の量子論の理論として量子電磁力学(QED)を用いる。これは値としては小さな補正としてQEDの効果を取り入れるのではなく、真に正しい物理的描像の下で量子現象を正しく理解することである。例えば、量子力学では予言すできないラムシフトが場の量子論では有限な値を持って予言するのであり、数値の大きさの問題ではなく現象を記述する能力の有無が異なるのである。

QEDを用いた、原子・分子といった束縛状態の記述は、ベーテ・サルピーターの方法やNRQED[1]、最近ではLattice QCDを用いた試みなどがありエネルギー準位の計算などで一定の成果をあげている。しかし、量子状態の時間発展計算に関しては、理論面においてすら確立した取り扱いが定まっていない。Thermo-field dynamics、2粒子既約作用やclosed time path formalismを用いる方法などいくつかの試みが行われているが、まだまだ十分な状況にはなっておらず、特に時間依存した量子系のくりこみ方法については確立した議論がない。

このような状況の中、本研究グループではRigged QED[2]に基づく量子現象の時間発展を計算するシミュレーションプログラムパッケージ、QEDynamics[3, 5, 4]を開発している。QEDynamicsは電子スピノルの記述方法により2つに分けられる。1つは4成分スピノルによるものであり[4]、もう一つは本研究で取り扱う2成分スピノルによるものである[5]。フェルミオンを2成分スピノルとして記述する表式としては、Primary Rigged QED[6]に基づいた定式化を採用している。スピン1/2を持つ粒子のローレンツ群による最小表現は2次元表現であり、本来この理論はローレンツ不変に記述することが可能である。しかし、非相対論的粒子を効果的に記述する目的から、ハミルトニアンを級数展開を利用したコーディングを進めている。量子系の時間発展についてはハイゼンベルク描像を採用している。場の量子論では演算子と状態ベクトルがあり、演算子についてはハイゼンベルク方程式に従って時間発展し、状態ベクトルは時間発展しない。しかし、状態ベクトル内のフォック基底ケットは次のように、真空と生成演算子を用いて記述される。

$$\begin{aligned} & |n_{e_1}, \dots, n_{e_n}, n_{p_1}, \dots, n_{p_n}, n_{\gamma_1}, \dots, n_{\gamma_n}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_e! n_p! n_\gamma!}} (\hat{\psi}_{e_1}^\dagger)^{n_{e_1}} \dots (\hat{\psi}_{e_n}^\dagger)^{n_{e_n}} (\hat{\psi}_{p_1}^\dagger)^{n_{p_1}} \dots (\hat{\psi}_{p_n}^\dagger)^{n_{p_n}} (\hat{A}_{\gamma_1}^{\mu_1(\dagger)})^{n_{\gamma_1}} \dots (\hat{A}_{\gamma_n}^{\mu_n(\dagger)})^{n_{\gamma_n}} |0\rangle \end{aligned}$$

この時、生成演算子が時間依存性を持っているので、状態ベクトル中のフォック基底ケットは時間発展しなくてはならないことがわかる。したがってフォック基底ケットの係数関数、波動関数、がその時間発展依存性とちょうど逆に発展することにより、状態ベクトルが時間発展しない構造となっている。したがって、演算子の時間発展と波動関数の時間発展の2つの時間発展を取り扱う必要がある。これまでの報告では演算子の時間発展を重視しており、波動関数の時間発展は取り入れず、状態ベクトルは時間発展させない初期時刻の生成演算子を用いて記述するという近似の下で時間発展計算していた。本研究では波動関数の時間発展を正しく取り扱うよう計算コードの拡張を行った。これによりコード上で任意の時刻に状態ベクトルを設定できるようになった。本研究では、状態ベクトルを異なる時刻に設定することにより、同じ状態ベクトルであっても、異なる時間発展が与えられることを示す。これは演算子の時間発展に伴いハミルトニアンが時間依存性を有しているためであり、これが量子力学における確率解釈を超えて量子論の予言を拡張していくことを期待している。

## 参考文献

- [1] W. E. Caswell, G. P. Lepage, Phys. Lett. **167B**, 437 (1986).
- [2] A. Tachibana: in *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, ed. E. J. Brändas and E. S. Kryachko (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003) Vol. 2, p. 211; A. Tachibana, J. Mol. Modelling **11**, 301 (2005); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010); J. Math. Chem. **50**, 669 (2012).
- [3] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, (<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>)
- [4] K. Ichikawa, M. Fukuda, A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013).
- [5] M. Senami, T. Miyazato, S. Takada, Y. Ikeda, A. Tachibana, J. Phys. Conf. Ser. **454**, 012052 (2013); M. Senami, Y. Ogiso, T. Miyazato, F. Yoshino, Y. Ikeda, A. Tachibana, Trans. Mat. Res. Soc. Jpn **38**[4], 535 (2013); M. Senami, S. Takada, A. Tachibana, JPS Conf. Proc. **1**, 016014 (2014).
- [6] A. Tachibana, *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry*, ed. S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj (CRC Press, Florida, 2013) p. 235.