

場の量子論である QED (Quantum Electrodynamics, 量子電磁力学) に基づいて演算子の期待値の時間発展を時々刻々と求めるためには、従来の QED に対する解法である共変摂動論では不十分で、非摂動的な方法の開発が必要である。特に、QED のハミルトニアンは時間に依存するため、演算子と状態ケット (波動関数) のそれぞれの時間発展を考慮するような手法が必要である。このような QED における時間発展の二元性の問題を扱う方法は文献 [1, 2] で提案されている。それによれば、QED の正準変数から構成されるある物理量演算子 $\hat{F}(t)$ の期待値の時間発展は、

$$\left\langle \tilde{\hat{F}}(t) \right\rangle_{\alpha_i, t_i} = \frac{{}_H \left\langle \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) \left| \hat{F}^{(H)}(t, t_i) \right| \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) \right\rangle_H}{{}_H \left\langle \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) \left| \tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t) \right\rangle_H}, \quad (1)$$

と表される。ここで、 α_i 、 t_i は、状態ケットが時刻 t_i において設定されたある事象 α_i についてのものであることを示している。チルダは、状態ケットが時間に依存して繰り込まれた場の演算子で構成されたものであることを示している。添え字 H は、ハイゼンベルク描像であることを示し、 t_i から t への時間推進演算子 $\hat{U}(t, t_i)$ を用いて $\hat{F}^{(H)}(t, t_i) = \hat{U}(t, t_i) \hat{F}(t) \hat{U}(t, t_i)$ である。この $\hat{U}(t, t_i)$ は、演算子の時間順序積を表す T を用いて $\hat{U}(t, t_i) = T e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \hat{H}_{\text{QED}}(t')}$ と表され、ここで $\hat{H}_{\text{QED}}(t)$ は QED のハミルトニアン演算子であり、上で述べたように時間に依存する。状態ケットについては、 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}(\alpha_i, t_i; t)\rangle_H = 0$ であり、波動関数と基底ケットの時間変化が互いに打ち消し合う描像である。QED のような相互作用する場の量子論において、well-defined な基底ケットを定義し、時間依存する繰り込みの処方を与えることは容易ではないが、文献 [2] において「 α 振動子」を用いた理論が提案されている。この方法は現段階ではそのまま数値計算に適用することが難しいため、本研究では先行研究 [3–6] で提案された方法を基にした近似方法について述べ、どのように QED の演算子期待値の時間発展が計算されるかを述べる。

参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Math. Chem. **53**, 1943 (2015).
- [2] A. Tachibana, J. Math. Chem. **54**, 661 (2016).
- [3] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013); **114**, 1567 (2014); *in press* DOI: 10.1002/qua.25103
- [4] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [5] A. Tachibana, Field Energy Density In Chemical Reaction Systems. In *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, E. J. Brändas and E. S. Kryachko Eds., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2003), Vol. II, pp 211-239.
- [6] A. Tachibana, Electronic Stress with Spin Vorticity. In *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry*, S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj Eds., CRC Press, Florida (2013), pp 235-251