

## Rigged QED に基づくポジトロニウムの時間発展

○瀬波 大土、築島 千馬、立花 明知

京大院工

senami@me.kyoto-u.ac.jp

Rigged QED[1] に基づいて量子系の時間発展計算コードである QEDynamics[2] の開発を行っている。QED は場の量子論によって記述されており、我々はハイゼンベルク描像を採用して時間発展計算を進めている。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。

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

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規定ケットは時間発展している。したがってフォック規定ケットに対する係数関数である波動関数とその時間発展依存性を相殺する形で、ハイゼンベルク描像における状態ベクトルが時間発展しないことを担保している。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。

これまでの我々の研究では演算子の時間発展を重視していたため、この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、これまででは状態ベクトルを設定する時刻は初期時刻のみであったが、任意の時刻に状態ベクトルを設定することができるようになった。

本研究ではポジトロニウムの系での時間発展についての結果を示す。特に状態ベクトルを異なる時刻に設定することにより、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。

[1] A. Tachibana, J. Mol. Model. 11, 301 (2005); J. Mol. Struct.:(THEOCHEM) 943, 138 (2010); Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity, Eds. by S. K. Ghosh, P. K. Chattaraj; CRC Press, 2013, pp. 235-251.

[2] M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, <http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>; M. Senami et al., J. Phys. Conf. Ser. 454, 012052, (2013); K. Ichikawa, M. Fukuda, A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. 113, 190 (2013); M. Senami et al., Trans. Mat. Res. Soc. Jpn, 38[4], 535 (2013); M. Senami, S. Takada, A. Tachibana, JPS Conf. Proc. 1, 016014(5), (2014).