

令和元年6月6日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05653

研究課題名(和文)量子スピン渦理論による量子遷移の理論的研究

研究課題名(英文)Theoretical study of quantum dynamics by quantum spin vorticity theory

研究代表者

立花 明知 (Tachibana, Akitomo)

京都大学・工学研究科・名誉教授

研究者番号：40135463

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：研究代表者は、素粒子代数の数学的下部構造を与えるアルファ振動子代数を発見し、素粒子のアルファ振動子理論を構築した。次いで、アルファ振動子理論における時間依存繰り込みを定式化し、量子電磁力学の漸近場によらない非摂動的定式化を与え、双対コーシー問題とその解法を定式化した。その結果、長年にわたり予知不能とされてきた二重スリット現象に関わる『量子力学のミステリー』を解消した。また、電子のスピン渦度が電子の運動量に寄与することを発見し、電子の量子スピン渦理論を構築した。次いで、量子スピン渦理論において、電子のスピンと光子との相互作用に起因するトルクの力学の幾何学的描像に基づく量子遷移を定式化した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これら一連の成果は著書「New Aspects of Quantum Electrodynamics」(Springer社、平成29年)及び「新講量子電磁力学」(株サイエンス社、平成29年)にまとめられているが、両書とも世界初の非摂動的量子電磁力学の量子エネルギー密度理論への応用に関する成書として高い評価を受けている。量子電磁力学に基づく量子エネルギー密度理論は原子レベルの化学反応性の全く新しい局所力学的描像を与える。さらに、量子エネルギー密度理論に基づく量子物性解析の量子ダイナミクス計算プログラム「QEDynamics」及び「QEDalpha」の開発を遂行し、広く一般に公開している。

研究成果の概要(英文)：The research representative discovered the alpha oscillator algebra which gives the mathematical substructure of elementary particle algebra, and constructed the alpha oscillator theory of elementary particles. Then he formulated time-dependent renormalization in the alpha oscillator theory, gave an asymptotically non-perturbative formulation of quantum electrodynamics (QED), and formulated the dual Cauchy problem and its solution. As a result, the "Mystery of Quantum Mechanics" related to the double slit phenomenon, which has been considered unpredictable for many years, has been resolved. He also discovered that the spin vorticity of electrons contributes to the momentum of electrons, and constructed the quantum spin vorticity theory of electrons. Then, in the quantum spin vorticity theory, he formulated the quantum dynamics based on the geometrical picture of the torque due to the interaction between the electron spin and the photon.

研究分野：理論化学物理学

キーワード：量子電磁力学 アルファ振動子理論 電子スピン渦度 ストレステンソル密度 スピントルク

1. 研究開始当初の背景

電子のスピンをどのように取り扱うかということは現在の化学において最も重要な課題の一つである。その本質的な振る舞いを理解するための鍵となるのは電子に相対性理論を適用することであり、例えば電子のスピン角運動量と軌道角運動量間のスピン-軌道相互作用が相対論的な量子力学の帰結として自然に現れることは周知の事実である。一方、物理学では、特に素粒子理論分野で相対性理論と量子論を矛盾なく融合させる枠組として場の量子論が発展した。これは誕生からおよそ一世紀後の現在でも実験で検証された最先端の理論として成功をおさめている。その中でも荷電粒子と光子の相互作用を扱う量子電磁力学(Quantum Electrodynamics, QED)はもっとも精密な物理理論とされている。原子核と電子からなる原子分子系も深いレベルではこのQEDで記述されるべきであるが、従来化学分野におけるQEDはクーロン力に対する非常に小さい補正としてのみ扱われ、QEDを用いて化学結合・反応が議論されることは長く行われてこなかった。近年になって、研究代表者が原子核をシュレディンガー場として含むQEDであるRigged QED理論およびそれを用いた化学理論を提案し(A. Tachibana, J. Chem. Phys. 115, 3497 (2001))、場の量子論に基づく化学理論の研究が始まった。Rigged QEDに基づく化学理論では、基本的な量は場の量、つまり空間各点で定義される密度量である。これは量子力学ではエネルギーなどの積分量(期待値)のみを扱うのと大きな違いがある。従来の化学理論でも電子の電荷密度は議論されるが、場の量子論であるRigged QEDに基づく他の重要な密度量が定義される。特に重要なのは電子ストレステンソル密度である。一般にストレステンソルは空間的異方性を表現し、対角化したときの固有値が正ならば、その固有ベクトルに直交する面を隔てた両側が互いに相手側を引き上げる引っ張り応力が働き、逆に負ならば相手側を押しやる圧縮応力が働く。化学結合理論として重要な発見は、共有結合性が電子ストレステンソル密度の正の固有値で表されるということである(A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. (2004))。また、最大固有値を与える固有ベクトルが共有結合の方向性を予測する。一方、共有結合とは全く異質の金属結合については3つの固有値が負で縮退しており、共有結合におけるパターンと大きく異なる。研究代表者はこの他、電子運動エネルギー密度・量子エネルギー密度といった密度量を用いて量子物性及び化学結合性・反応性を理解する研究を行ってきた。もちろん電子のスピンについても例外ではなく、QEDによる記述がより本質的である。事実、「電子スピントルク」についての場の量子論的な考察によって重要な発見が研究代表者によってなされた(A. Tachibana, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 943, 138 (2010))。ここで、磁石を例にとり電子スピントルクについて概説する。巨視的な磁石は現象論的にはたくさん的小領域(磁区)から構成されている。それぞれの磁区内部では磁化がそろっており、磁区は一つのスピンを持っているとみなせるが、それは領域内のスピン密度を平均したものである。磁石に磁場がかけられたとき、スピンの反転しうが、これは(スピン)角運動量を変化させるトルクがかかったことになる。つまり、スピン密度を変化させようような量子論的トルクが存在し、これはスピントロニクス分野で電子スピンのダイナミクスを考える上で近年非常に注目されている概念である。研究代表者が言う電子スピントルクは、この磁区を無限小にした極限と言え、正確には電子スピントルク密度と呼ばれるものであるが、こうした各空間点におけるスピントルクの概念も場の量子論であるQEDの枠組で正しく定義することができる。上に挙げた研究代表者の文献で発見されたことは、スピン密度の時間変化が電子スピントルク密度とツェータ力密度(「力」という名称だが、トルクの次元を持つ)というそれまで未知の量の和で表され、定常状態においてはそれらがバランスしているということである。また、外部からの電磁的な擾乱によってこのバランスが乱され、状態は非定常となり量子遷移を生み出すことが予言される。これら密度量の原子分子系の定常状態についての数値計算が行われた。また、QEDに基づく量子遷移の計算(実時間シミュレーション)に向けての理論構築、定式化及びコード開発が研究代表者により開始されているが、このような取り組みは国内外を問わずほとんど無く、招待講演を行うなど注目されている。さらに、近年研究代表者は、QEDを一般座標変換対称性を満たす場の量子論に拡張して扱うことにより、電子スピントルクと電子ストレステンソルのダイナミクスを量子スピン渦理論という統一的な枠組に入れることに成功した。そこで、QEDに基づく量子遷移の方法論の研究を継続し、量子スピン渦理論に基づいて量子遷移を研究することが電子スピンの本質をとらえる上で重要であるという着想に至った。

2. 研究の目的

下記二項目A・Bが研究目的である。

A. QEDに基づく量子遷移の計算(実時間シミュレーション)に向けての理論構築・コード開発
QEDの実時間シミュレーションを遂行するにあたり、場の演算子とケットベクトル並びに波動関数の時間発展を時々刻々求めるアルゴリズムに関して、中西らによって提案されている関連理論(N. Nakanishi, Prog. Theor. Phys. 111, 301 (2004))とその課題を明らかにする。これらの基礎的諸問題の解決のために、研究代表者によって発見された素粒子(場の素励起; 粒子描像を具現)代数の数学的下部構造を構成する「alpha-oscillator代数」について研究を進める。この数学の内容を算術的に落とし込み、QEDの実時間シミュレーション計算コードを開発する。

B. 電子スピン渦度の物性・化学における応用

QED ではベクトルとしてのスピン密度演算子が定義され、スピン渦度はその回転 (rotation) である。量子スピン渦理論では、この電子スピン渦度が理論的に主要な役割を果たすことが見出されたが、この量が実際の分子や材料においてどのように現れ、どのような役割を果たすかは知られていない。この量を定常ないし非定常の電子状態で計算し、化学や物性における有用性を明らかにする。

3. 研究の方法

本研究では、上記概要に挙げた二項目 A・B の研究を行う。「QEDynamics」とは研究代表者および分担者が開発中のプログラムパッケージである。これは、現状では、他のグループによって公開されている定常状態の電子状態計算プログラムの出力を元にして、われわれ独自の場の量子論的な密度量を計算することができる。この QEDynamics を、QED に基づいて非定常な量子遷移の計算を可能にし、各種物理量を時々刻々求めるように拡張するのが研究項目 A であり、新たに重要性が発見された電子スピン渦度の計算をするための拡張が研究項目 B に含まれる。以下、それぞれの研究項目について年度ごとの計画を述べる。

平成 28 年度の研究計画

[研究項目 A]

A. QED に基づく量子遷移の計算 (実時間シミュレーション) に向けての理論構築・コード開発場の量子論である QED の実時間シミュレーションを遂行するにあたっては、その時間発展が演算子の時間発展とケットベクトルの時間発展との二元的 (いずれの時間発展をも知る必要がある) であり、質点の量子力学の時間発展が一元的であることとの違いを認識する必要がある。その上でまず、場の演算子とケットベクトル並びに波動関数の時間発展を時々刻々求めるアルゴリズムに関して、中西らによって提案されている関連理論 (N. Nakanishi, Prog. Theor. Phys. 111, 301 (2004)) とその課題を明らかにする。例えば、(i) 無限遠方で場がゼロと仮定すると、自由場の概念自体に矛盾が生じる。(ii) 「場の演算子力学が解ける条件」(thermalization) と、「物理的」と呼び習わされる「粒子 (particle) 描像」(renormalization) とが非分離であり、繰り込み定数を c-number と仮定すると演算子の交換関係に矛盾が生ずる。(iii) 従来の QED の解法はいわゆる摂動論に限られており、そこでは In 状態 (無限の過去) から Out 状態 (無限の未来) への無限の時間経過が仮定されており (漸近場理論) 時々刻々の繰り込みを取り扱うことができない。これらの基礎的諸問題の解決のために、研究代表者によって発見された素粒子 (場の素励起; 粒子描像を具現) 代数の数学的下部構造を構成する「alpha-oscillator 代数」について研究を進める。この alpha-oscillator 代数を無限に重ね合わせることによって particle 描像 (QED においては光子・電子・陽電子) を表現でき、particle の交換関係は、対応する alpha-oscillator の交換関係を粗視化して導かれる。alpha-oscillator の取り扱いにおいては、上で述べた問題が解決しており、(i) 無限遠方で場がゼロと仮定する必要が無い、(ii) alpha-oscillator の thermalization と renormalization とは独立に定義されるので時々刻々定義される particle 描像と矛盾しない、(iii) 繰り込み定数は時々刻々 q-number として表現される。この数学の内容を算術式に落とし込み、QED の実時間シミュレーション計算コードの開発を継続する。具体的には、どのような演算子の表現をとって行列表示するのが数値計算上都合がよいか、初期条件をどのように選ぶのがよいか、厳密には行列は無限次元となるが妥当な近似はどのようなものか、といった問題に対処する必要がある。コード実装の際には、これまでに研究代表者が受けた特定領域研究および基盤 (C) で開発された数値計算技術とコードが基礎となる。

B. 電子スピン渦度の物性・化学における応用

QED ではベクトルとしてのスピン密度演算子が定義され、スピン渦度はその回転 (rotation) である。これは座標についての一階微分であるため、現行コードからの拡張は容易である。電子スピン渦度を他グループにより公開されている定常状態の電子状態計算プログラムで計算し、分子キラリティー (4 成分相対論的量子化学計算が可能な DIRAC を使用) やスピンホール効果 (非平衡グリーン関数法による外場存在下での 2 成分相対論計算が可能な OpenMX を使用) における有用性を検討する。

平成 29 年度以降の研究計画

A. QED に基づく量子遷移の計算 (実時間シミュレーション) に向けての理論構築・コード開発前年度の結果を受け、QED に基づいて非定常な量子遷移の計算を可能にし、各種物理量、特にストレステンソル密度を時々刻々と計算する。本研究では非常に小さな量子系、陽電子電子対消滅関連としてはボジトロニウムの崩壊過程、アト秒実時間観測関連としては励起水素原子の光放出過程をそれぞれ計算する計画である。

B. 電子スピン渦度の物性・化学における応用前年度の計算をベーテ-サルピーター方程式に基

づく電磁・光学応答の計算が可能な YAMBO プログラムパッケージを用いて行う。研究計画 A が予想外に進めば、スピンホール効果について新たな知見を得るべく、スピン渦の量子遷移のシミュレーションを行う。

4. 研究成果

量子化学の分野においては、電子状態計算理論の進展と計算機性能の発展が相まって、静電八ミルトニアン（相互作用がクーロン力のみによる量子力学理論）を用いて定常状態の分子の全エネルギーや電子密度を計算することは比較的容易に行うことができる。研究代表者の場の量子論に基づくアプローチによれば、電子スピントルク密度を初め、場の量子論に基づく密度量を用いてより本質的な情報を取り出すことが可能である。また、非定常な状態についても QED 八ミルトニアンを用いることで正確な取り扱いが可能となる。研究代表者はそれらの計算を行う独自のプログラムコードを開発し、場の量子論に基づく化学結合や化学反応の研究を世界に先駆けて行ってきた。本研究によりその手法を深化・発展させるとともにより多くの量子系に適用してその有用性を示すことができる。

研究代表者は、素粒子代数の数学的下部構造を与えるアルファ振動子代数を発見し、これに基づき光子、電子および陽電子のアルファ振動子理論を構築した。次いで、アルファ振動子理論における時間依存繰り込みを定式化し、それを相対論的場の量子論のひとつである量子電磁力学（Quantum Electrodynamics、QED）に応用し、QED の漸近場によらない非摂動的定式化を与えた。これを用いて、従来の非相対論的量子力学ではありえなかった双対コーシー問題とその解法を定式化した。その結果、長年にわたり予知不能とされてきた二重スリット現象を時々刻々予言できる理論を構築し、『量子力学のミステリー（ファインマン曰く）』を解消した。双対コーシー問題を取り扱うことにより初めて、隠れた変数を議論することなく、初期条件を全く同じにそろえても違った結果が決定論的に導かれる。二重スリット現象で観測される干渉パターンは、双対コーシー問題の解として与えられる。それは、予想に反して量子力学の波動関数では再現できない。量子力学の波動関数で与えられる干渉パターンは、真の干渉パターンとは似て非なるものである。本理論をアインシュタイン ポドルスキー ローゼン（EPR）観測で知られるエンタングルメントに適用すると、全く新しい完全な形での決定論が予言される。**以上要するにアルファ振動子理論は量子力学の根源に迫るものであり、当初の計画を大きく超える理論的進展をもたらした。**

また、電子のスピン渦度が電子の運動量に寄与することを発見し、電子の量子スピン渦理論を構築した。次いで、量子スピン渦理論において、電子のスピンと光子との相互作用に起因するトルクの力学の幾何学的描像に基づく量子遷移を定式化した。

これら一連の成果は著書「**New Aspects of Quantum Electrodynamics**」(Springer 社、平成 29 年)及び「**新講 量子電磁力学**」(株サイエンス社、平成 29 年)にまとめられているが、両書とも**世界初の非摂動的量子電磁力学の量子エネルギー密度理論への応用に関する成書**として高い評価を受けている。量子電磁力学に基づく量子エネルギー密度理論は原子レベルの化学反応性の全く新しい局所力学的描像を与える。さらに、量子エネルギー密度理論に基づく量子物性解析の量子ダイナミクス計算プログラム「QEDynamics」及び「QEDalpha」の開発を遂行し、広く一般に公開している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 10 件)

著者名 Tachibana Akitomo

論文標題 New aspects of quantum electrodynamics on electronic structure and dynamics

雑誌名 Journal of Computational Chemistry

査読の有無 有

巻 40

発行年 2018 年

最初と最後の頁 316 ~ 327

掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25600

〔学会発表〕(計 47 件)

発表者名 Akitomo Tachibana

発表標題 Renewed Quantum Simulation of Nano-Size Materials: 100 Years of Mystery Solved!

学会等名 THERMEC ' 2018

発表年 2018 年

〔図書〕(計 3 件)

著者名 Akitomo Tachibana

出版社 Springer
書名 New Aspects of Quantum Electrodynamics
発行年 2017 年
総ページ数 189

〔産業財産権〕
出願状況(計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

取得状況(計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕

QEDynamics
https://mfukudaqed.github.io/Tachibana_Lab_HP/qed/index.html
QEDalpha
<https://github.com/mfukudaQED/QEDalpha>
Tachibana Lab
https://mfukudaqed.github.io/Tachibana_Lab_HP/top_e.htm
Tachibana Lab
http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/top_e.htm
上に示した QEDynamics および QEDalpha においては、理論的予言を実利用するための計算プログラムコードを開発公開している。Tachibana Lab(2件)においては、理論的成果を公開している。

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：瀬波 大士
ローマ字氏名：Senami Masato
所属研究機関名：(14301) 京都大学
部局名：(885) 工学研究科
職名：講師
研究者番号(8桁)：40431770

研究分担者氏名：市川 和秀
ローマ字氏名：Ichikawa Kazuhide
所属研究機関名：(14301) 京都大学
部局名：(885) 工学研究科
職名：助教
研究者番号(8桁)：50401287

(2)研究協力者
研究協力者氏名：
ローマ字氏名：

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。