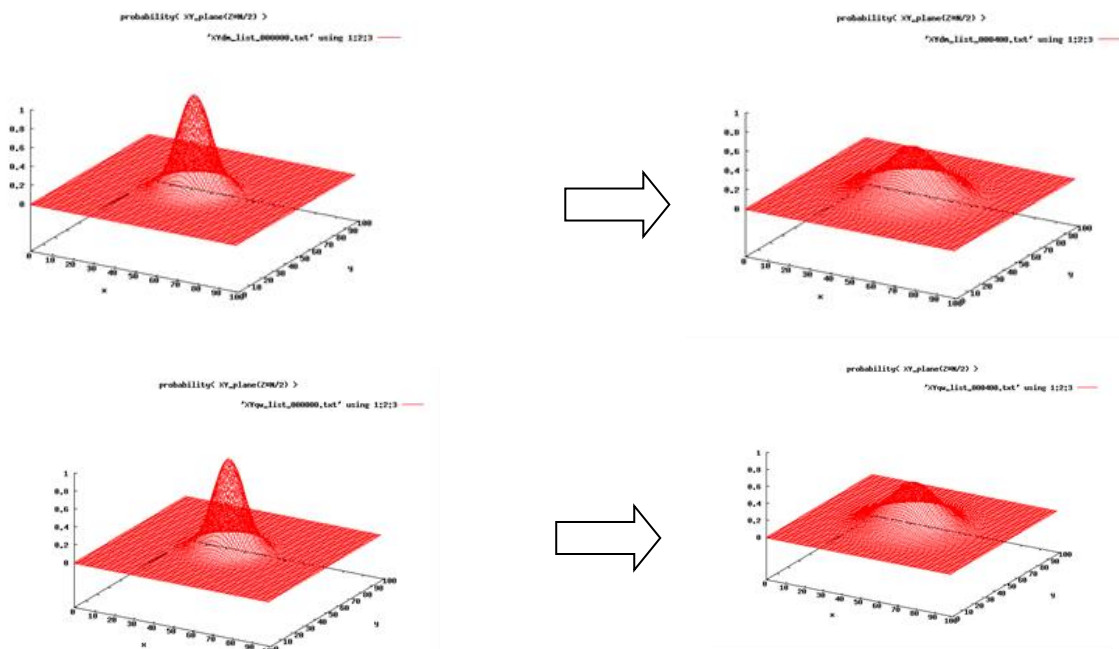


量子ウォークの多体系への拡張

○関野秀男^{1,2} 浜田信次³¹ ストーンブルック大, ² 東工大, ³ 豊橋技大

sekinoh@gmail.com

量子力学の基本方程式である Schrödinger 方程式(SE)や Dirac 方程式は時間についても空間についても無限小に対して成立する微分方程式で表現されている。物理や化学で扱う情報の分布は波動関数という一般に時間・空間変数に幅のある滑らかな関数として表現され、微分方程式の解であることが要求される。こうした幅のある滑らかな分布の時間発展が、離散時空上のシフトとその内部自由度のユニタリー変換のみにより再現されることが確かめられている[1,2]。我々はこうした量子ウォーク法のような単純なアルゴリズムが物理や化学で有用な定量的・現実的なシミュレーションツールとして有効な手段となりうるか検討してきた。1粒子問題については外場下3次元シミュレーションがSE厳密解を再現、厳密解の存在しない一般外場についても、古典的差分法を再現することが分かった[3] (下図)。然し多体問題を第一原理的に扱うために本法論をそのまま拡張すると、次元爆発が起こってしまい、すぐに現実系のシミュレーションが困難となる。我々は量子ウォーク法で空間を表現するために導入されるグリッドをサイトと見立て、サイト空間上に第二量子化表現をすることにより、一般多粒子系の量子ウォーク法を開発した。その結果サイト間の量子ウォークのみを許す近似が最隣接ホッピングをハミルトニアン運動エネルギー項と見なす Matrix Product State (MPS)法と等しいことが判明した。また多量子状態のゼロ次近似として挙げられる平均場近似での波動関数が、実際に再現されることを示した。



References

- [1] Sekino H, Kawahata, and Hamada S. “A Solution of Time Dependent Schrödinger Equation by Quantum Walk” *Physics Journal of Physics Conference Series*, **352** 012013 (2012)
- [2] Hamada S, Kawahata M., and Sekino H “Solution of the Time Dependent Schrödinger Equation and the Advection Equation via Quantum Walk with Variable Parameters”, *J. Quantum Info. Science*, **11**(04), 1360008 (2013)
- [3] Miyazaki A., Masuda T., Hamada S. and Sekino H., *Interdisciplinary Information Sciences*, submitted