

相対論的場の量子論に基づくスピンの関する局所物理量

○福田 将大, 市川 和秀, 瀬波 大士, 立花 明知

京大院工

fukuda.masahiro.57w@st.kyoto-u.ac.jp

一般共変性から得られる対称エネルギー・運動量テンソルに由来する物理量とそれらに関係づける方程式は、スピン渦理論 [1] によって与えられる。対称エネルギー・運動量テンソルから得られる電子の全運動量密度 \hat{P}_e は動的運動量密度 $\hat{\Pi}_e$ だけでなく、スピンの渦度による寄与を含む。

$$\hat{P}_e \equiv \hat{\Pi}_e + \frac{1}{2} \text{rot} \hat{s}_e, \quad \hat{\Pi}_e \equiv \frac{1}{2} \left(\hat{\psi}^\dagger \left(i\hbar \hat{D}_e \right) \hat{\psi} + h.c. \right), \quad \hat{s}_e \equiv \hat{\psi}^\dagger \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \hat{\psi}.$$

ここで、 $\hat{\psi}$ は 4 成分電子場、 \hat{D}_e は共変微分、 γ^μ はガンマ行列、 $\vec{\Sigma}$ は 4×4 のパウリ行列を表す。電子の全運動量密度 \hat{P}_e の時間発展の式はローレンツ力密度 \hat{L} と電子ストレステンソル密度 $\hat{\tau}_e^\Pi$ の対称成分 $\hat{\tau}_e^S$ を用いて以下のように表される。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}_e = \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{\Pi}_e + \frac{1}{2} \text{rot} \hat{s}_e \right) = \hat{L} + \text{div} \hat{\tau}_e^S,$$

$$\hat{L} \equiv \hat{E} \hat{\rho}_e + \frac{1}{c} \hat{j}_e \times \hat{B}, \quad \hat{\tau}_e^{\Pi ij} \equiv \frac{i\hbar c}{2} \hat{\psi}^\dagger \gamma^0 \gamma^j \hat{D}_{ei} \hat{\psi} + h.c.$$

電子ストレステンソル密度 $\hat{\tau}_e^\Pi$ の反対称成分 $\hat{\tau}_e^A$ はスピン角運動量密度 \hat{s}_e の時間発展の式に現れ、スピントルク密度の役割を担う。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{s}_e^i = -\epsilon_{ijk} \hat{\tau}_e^{Ajk} - \partial_i \hat{\phi}_5, \quad \hat{\phi}_5 \equiv \frac{\hbar c}{2} \hat{\psi}^\dagger \gamma_5 \hat{\psi}.$$

ここで、ツェータポテンシャル $\hat{\phi}_5$ は右巻き電子と左巻き電子の確率密度の差に由来する物理量であり、その勾配はツェータ力と呼ばれる量子力学のハイゼンベルクの運動方程式では導かれぬ場の量子論特有の局所的なトルク密度である。

本研究では、分子系の相対論的電子状態を用いて上記に示した相対論的場の量子論に基づくスピンに関する局所物理量を計算し [2]、その力学的描像について議論する。また、分子軌道ごとの局所物理量の分布から、軌道エネルギーにはほとんど影響を与えない相対論的な相互作用が局所描像に対しては強い影響を与えることを示す [3]。

参考文献

- [1] A. Tachibana, *J. Math. Chem.* **50**, 669 (2012); *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; *J. Comput. Chem. Jpn.* **13**, 18 (2014); *Indian J. Chem. A*, **53**, 1031 (2014).
- [2] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [3] M. Fukuda, K. Soga, M. Senami, and A. Tachibana, *Int. J. Quant. Chem.*, published online. [DOI: 10.1002/qua.25102] (2016).