2E13

右巻き電子と左巻き電子のダイナミクスの厳密解

（京大院・工）○立花 明知

akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp

【序】電子スピンの本質を理解することにより、化学結合をはじめとする既知の化学現象を統一的に理解し、さらに進んで新しい化学現象を予言することができると考えられる。そこで、本講演においては、アインシュタインの等価原理によって電子のスピノールが自然に導入されることを基礎とし、分子の中に混在する右巻き電子と左巻き電子のダイナミクスを、キラリティーにかかわる右巻き光子と左巻き光子のダイナミクスとの関わりにおいて、カイラルスピンを運ぶ電子ストレステンソルが生まれる、ねじれを持つワイツェンベック時空の微分幾何学的構造から明らかにする。

【理論】電子スピン $\hat{\vec{\sigma}}_e(x) = \hat{\psi}^\dagger(x)\vec{\sigma}\hat{\psi}(x)$ の運動方程式は以下のように与えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\hbar\hat{\vec{\sigma}}_e(x)\right) = \hat{\vec{t}}_e(x) + \hat{\vec{\zeta}}_e(x)$$

ここに、スピントルク $\hat{\vec{t}}_e(x)$ は電子のストレステンソル $\hat{\vec{\tau}}_e^{\Pi}(x)$ の非対称成分から生じる：

$$\hat{t}_e^k(x) = -\varepsilon_{\ell nk}\hat{\tau}_e^{\Pi\ell n}(x)$$

電子のストレステンソル $\hat{\vec{\tau}}_e^{\Pi}(x)$ にはゲージ原理に由来する共変微分を介して光子のヘリシティー（右巻きと左巻き）を表現するゲージ場が組み込まれている。他方、ツェータ力 $\hat{\vec{\zeta}}_e(x)$ は電子のヘリシティー（右巻きと左巻き）を表現するカイラルカレント $\hat{j}_5^\mu(x)$ の第０成分 $\hat{j}_5^0(x)$ のグラディエントから生じる：

$$\hat{\zeta}_e^k(x) = -\partial_k\hat{\phi}_5(x)$$

$$\hat{\phi}_5(x) = \frac{\hbar}{2Z_e e}\hat{j}_5^0(x)$$

$$\hat{j}_5^\mu(x) = cZ_e e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^\mu\gamma_5\hat{\psi}(x)$$

スピントルク $\hat{\vec{t}}_e(x)$ とツェータ力 $\hat{\vec{\zeta}}_e(x)$ とが互いに拮抗すればスピンの定常状態が生まれる。

量子重力の場の方程式はアインシュタインテンソル $\hat{G}^{\mu\nu}(x)$ と場のストレステンソル $\hat{Y}^{\mu\nu}(x)$ とを用いて以下のように与えられる：

$$\hat{G}^{\mu\nu}(x) = \hat{Y}^{\mu\nu}(x)$$

$$\hat{G}^{\mu\nu}(x) = \hat{R}^{\mu\nu}(x) - \frac{1}{2}\hat{g}^{\mu\nu}(x)\hat{R}(x)$$

電子の存在は、ねじれを持つ接続で特徴づけられ、場のストレステンソル $\hat{Y}^{\mu\nu}(x)$ にはねじれを持つ接続に由来する非対称テンソル成分が含まれる。この非対称テンソル成分を打ち消してアインシュタインテンソル $\hat{G}^{\mu\nu}(x)$ の対称性に適うために、場のストレステンソル $\hat{Y}^{\mu\nu}(x)$ に含まれる電子のストレステンソル $\hat{\tau}_e{}^{\mu\nu}(x)$ は、非相対論における symmetric な $\hat{\tau}_e^{S\mu\nu}(x)$ ではありえず、相対論的な場の量子論における polarized した $\hat{\tau}_e^{\Pi\mu\nu}(x)$ でなければならない：

$$\hat{\tau}_e{}^{\mu\nu}(x) \neq \hat{\tau}_e^{S\mu\nu}(x) \text{ but } \hat{\tau}_e{}^{\mu\nu}(x) = \hat{\tau}_e^{\Pi\mu\nu}(x)$$

従って、電子スピンを駆動するスピントルク$\hat{\vec{t}}_e(x)$は、量子重力の場の理論におけるねじれを持つ接続の幾何学に由来している、と言える。さらに、これを打ち消して化学結合の源である電子スピンの定常運動をもたらすツェータ力$\hat{\vec{\zeta}}_e(x)$が右巻き電子密度と左巻き電子密度の差のグラディエントから生じるのも、同様にして、ねじれを持つ接続の幾何学に由来している、と言えることを示すことができる。

【結果・考察】うえで得られた理論を応用し、相対論的量子力学の範囲でいくつかの例を挙げてスピントルクやツェータ力をはじめとするカイラルスピンダイナミクスの厳密解を示す。さらに、アインシュタイン方程式を用いて重力場とスピンのかかわりを示す。

参考文献

[1] A. Tachibana, J. Mol. Model. **11**, 301 (2005); J. Mol. Struct.: THEOCHEM **943**,138 (2010); to be published.