2E04

フェルミオンとボソンのスピントルクダイナミクス

（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。

昨年の本討論会講演『2E13 右巻き電子と左巻き電子のダイナミクスの厳密解』においては、アインシュタインの等価原理を用いて、分子の中に混在する右巻き電子と左巻き電子のスピントルクダイナミクスを、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、ねじれを許容する背景時空の微分幾何学的構造から明らかにするとともに、フェルミオンに働くスピントルクダイナミクスについて考察した。

そこで本講演では、ボソンに働くスピントルクダイナミクスについての考察を加え、その応用として、旋光性とスピントルク相関発現や重力によるスピントルク発現のメカニズムを示す。

【理論】

ディラック電子の右巻き成分と左巻き成分は時々刻々互いに移り変わる。原子分子の世界に現れる電子密度 $\hat{N}(x)$ や電子スピン密度 $\hat{\vec{s}}(x)$ はこれら両成分からの寄与の和で書ける：

$$\hat{N}(x) = \hat{N}_R(x) + \hat{N}_L(x),\quad \hat{\vec{s}}(x) = \hat{\vec{s}}_R(x) + \hat{\vec{s}}_L(x)$$

各成分はカイラルスピノール $\hat{\psi}_{R,L}(x)$ とパウリ行列 $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ とを用いて与えられる：

$$\hat{N}_R(x) = \hat{\psi}_R{}^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x),\quad \hat{N}_L(x) = \hat{\psi}_L{}^\dagger(x)\hat{\psi}_L(x)$$

$$\hat{\vec{s}}_R(x) = \frac{1}{2}\hbar\hat{\psi}_R{}^\dagger(x)\vec{\sigma}\hat{\psi}_R(x),\quad \hat{\vec{s}}_L(x) = \frac{1}{2}\hbar\hat{\psi}_L{}^\dagger(x)\vec{\sigma}\hat{\psi}_L(x)$$

電子スピン密度 $\hat{\vec{s}}(x)$ の運動方程式は以下のように与えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{s}}(x) = \hat{\vec{t}}_e(x) + \hat{\vec{\zeta}}_e(x)$$

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：

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

ツェータ力 $\hat{\vec{\zeta}}_e(x)$ は電子密度 $\hat{N}(x)$ の右巻き成分と左巻き成分の差によって与えられるツェータポテンシャル $\hat{\phi}_5(x)$ のグラディエントから生じる：

$$\hat{\zeta}_e^k(x) = -\partial_k\hat{\phi}_5(x),\quad \hat{\phi}_5(x) = \frac{\hbar c^2}{2}\left(\hat{N}_R(x) - \hat{N}_L(x)\right)$$

【結果と考察】

Rigged QED 系の全角運動量は保存する：

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\left(\hat{\vec{u}}(x) + \hat{\vec{u}}^\dagger(x)\right) + \hat{\vec{\ell}}_e(x) + \hat{\vec{s}}(x) + \sum_a \hat{\vec{\ell}}_a(x)\right)$$
$$= -\mathrm{div}\left(\vec{r} \times \left(\hat{\vec{\sigma}}(x) - \hat{\vec{\tau}}(x)\right)\right) + \hat{\vec{\zeta}}_e(x)$$

従って、荷電粒子（電子や原子核）に輻射場が作用してトルクが働くということは、その反作用として輻射場そのものにもトルクが働くことになる。このことを、輻射場を構成するボ

ソン、すなわちフォトンのヘリシティーを計算することにより以下に示す。

Rigged QED 系の電磁場の角運動量$\hat{\vec{u}}(x)$の一成分である電磁場のスピン密度$\hat{\vec{S}}(x)$を構成する物質粒子の寄与$\hat{\vec{S}}_{\mathrm{matter}}(x)$は、波動帯において漸近的に以下のように与えられる：

$$\hat{\vec{S}}_{\mathrm{matter}}(x) \simeq \frac{\varepsilon}{4\pi c^2}\left(\left(\frac{\partial \hat{\vec{A}}(x)}{\partial t}\times\vec{n}\right)\times\vec{n}\right)\times\hat{\vec{A}}(x)$$

$$\hat{\vec{A}}(ct,\vec{r}) = \frac{1}{c}\int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\vec{j}}_{\mathrm{T}}(cu,\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|} \simeq \frac{1}{cr}\int d^3\vec{s}\,\hat{\vec{j}}_{\mathrm{T}}(cu,\vec{s})$$

$$u = t - \frac{|\vec{r}-\vec{s}|}{c} \simeq t - \frac{r-\vec{n}\bullet\vec{s}}{c},\quad |\vec{r}-\vec{s}| \simeq r-\vec{n}\bullet\vec{s},\quad \vec{n}=\frac{\vec{r}}{r}$$

$$\hat{\vec{j}}_{\mathrm{T}}(\vec{r}) = \hat{\vec{j}}(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi}\mathrm{grad}\frac{\partial \hat{A}_0(\vec{r})}{\partial t},\quad \hat{A}_0(\vec{r}) = \int d^3\vec{s}\,\frac{\hat{\rho}(\vec{s})}{|\vec{r}-\vec{s}|}$$

これは漸近場におけるフォトンのスピン密度、すなわちヘリシティー密度に影響を与える。一方、荷電粒子と相互作用しない自由フォトンのスピン、すなわちヘリシティー$\hat{\vec{S}}_{\mathrm{radiation}}$は以下のように与えられる：

$$\hat{\vec{S}}_{\mathrm{radiation}} = \sum_{\sigma=\pm1}\sum_{\vec{k}}\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\sigma}\hat{a}_{\vec{k},\sigma}\sigma\hbar\vec{\varepsilon}_{\vec{k}}$$

相対論的量子力学の範囲で、漸近的に自由であった電子が右偏光・左偏光（ヘリシティー ＋１・－１）からトルクを受け、その反作用により波動帯における右左フォトンのヘリシティー密度の空間的な非一様性に右左差が現れることを厳密解を用いて解析的に示す。

このようにして、原子分子に光を当てると角運動量にトルクが働き、定常状態において互いに拮抗していた電子のスピントルクとツェータ力のバランスが崩れるが、その反作用として、ボソンであるフォトンのスピンにもトルクが働き旋光性が発現する、というスピントルクダイナミクスのメカニズムが明らかとなった。ただし、これは演算子の時間発展に伴う力学的な描像であり、現象論的には、ケットベクトルの対称性により規制されて禁制となる過程ももちろんある。

さらに、超対称性を用いることにより、フェルミオンに働くスピントルクとボソンに働くスピントルクとを統一的に理解することができる。このとき、最も基本的なフェルミオン的超対称性生成子$\hat{Q}_{\dot{U}r}$は以下の交換関係ならびに反交換関係を満たす：

$$\left[\hat{\vec{J}},\hat{Q}_{\dot{U}r}\right] = -\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_{\dot{U}}{}^{\dot{V}}\hat{Q}_{\dot{V}r},\quad \left[\hat{\vec{K}},\hat{Q}_{\dot{U}r}\right] = -i\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_{\dot{U}}{}^{\dot{V}}\hat{Q}_{\dot{V}r}$$

$$\left\{\hat{Q}_r,\hat{\bar{Q}}_s\right\} = -2i\hbar\hat{P}_{\mu}\gamma^{\mu}\delta_{rs} + \frac{1}{2}\left(1+\gamma_5\right)\hat{Z}^{*}_{sr} + \frac{1}{2}\left(1-\gamma_5\right)\hat{Z}_{rs},\quad \hat{Q}_r = \begin{pmatrix}\varepsilon^{AB}\hat{Q}^{*}_{Br}\\ \hat{Q}_{\dot{V}r}\end{pmatrix},\quad \varepsilon^{AB} = \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$$

ここでは、局所ローレンツ変換の対称性を取り扱っているので、$\hat{\vec{J}}$は角運動量演算子、$\hat{\vec{K}}$はブースト演算子、$\hat{P}^{\mu}$は運動量演算子、$\hat{Z}_{rs},\hat{Z}^{*}_{sr}$は中心電荷としてのボソン的超対称性生成子、$\hat{Q}_r,\hat{\bar{Q}}_s$は４成分マヨラナスピノール演算子である。さらに、超重力理論を援用すれば、重力により生まれるスピントルクの新しい記述が可能となる。将来的に超対称粒子の存在が確認されれば、スピントルクダイナミクスを駆動する具体的な超対称粒子描像が実証される。

参考文献

[1] A. Tachibana, J. Mol. Model. **11**, 301 (2005); J. Mol. Struct.: THEOCHEM **943**,138 (2010); to be published; 第４回分子科学討論会、**2E13** (2010) ; 第１４回理論化学討論会、**2D4a** (2011)