

Rigged QED 数値シミュレーションによる
電子スピンドYNAMIKSの理論的研究

(京大院工) 福田 将大, 市川 和秀, 立花 明知

Theoretical study of electron spin dynamics
by Rigged QED simulation

(Kyoto Univ.) Masahiro Fukuda, Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana
fukuda.masahiro.57w@st.kyoto-u.ac.jp

原子・分子系のような微小領域において、光子と電子のスピンドYNAMIKSの数値シミュレーションを行うには、場の量子論に基づいた計算を行う必要がある。本研究では、場の量子論的に原子と光子の相互作用を扱うことが可能である Rigged QED (Quantum ElectroDynamics) [1] に基づく数値シミュレーションにより、時々刻々と変化する電子のスピンドYNAMIKS密度を可視化し、そのダイナミクスから旋光性について議論する。電子のスピンドYNAMIKS密度の運動方程式は次のように表わされる [2]。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{s}_e(x) = \hat{t}_e(x) + \hat{\zeta}_e(x). \quad (1)$$

式 (1) の右辺第一項はスピントルク密度であり [2]、

$$\hat{t}_e^k(x) = -\varepsilon_{lnk} \hat{\tau}_e^{\Pi ln}(x) \quad (2)$$

$$= -\varepsilon_{lnk} \hat{\tau}_{eN}^{\Pi ln}(x) - \varepsilon_{lnk} \hat{\tau}_{eA}^{\Pi ln}(x) \quad (3)$$

ここで、 ε_{lnk} はレビ・チビタテンソルであり、 $\hat{\tau}_e^{\Pi ln}(x) = \hat{\tau}_{eN}^{\Pi ln}(x) + \hat{\tau}_{eA}^{\Pi ln}(x)$ はストレステンソルを表す。

$$\hat{\tau}_{eN}^{\Pi kl}(x) = \frac{i\hbar c}{2} \left(\hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^l \partial_k \hat{\psi}(x) - (\partial_k \hat{\psi}^\dagger(x)) \gamma^0 \gamma^l \hat{\psi}(x) \right) \quad (4)$$

$$\hat{\tau}_{eA}^{\Pi kl}(x) = -\frac{Z_e e}{2} \left(\hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^l \hat{A}_k(x) \hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{A}_k(x) \gamma^0 \gamma^l \hat{\psi}(x) \right) \quad (5)$$

$\hat{\psi}(x)$ は場の演算子、 $\hat{A}(x)$ はベクトルポテンシャル、 γ はガンマ行列を表す。

式 (1) の右辺第二項はツェータ力密度である [2]。

$$\hat{\zeta}_e^k(x) = -c \partial_k \left(\hat{\psi}(x) \gamma^k \frac{1}{2} \hbar \Sigma^k \hat{\psi}(x) \right); \quad (\text{no sum over } k) \quad (6)$$

$\hat{\Sigma}$ はパウリ行列を対角成分に持つ 4×4 行列である。

ベクトルポテンシャルは $\hat{A}(x) = \hat{A}_A(x) + \hat{A}_{\text{rad}}(x)$ という遅延ポテンシャル $\hat{A}_A(x)$ と外部光子場 $\hat{A}_{\text{rad}}(x)$ の和で表わされる。遅延ポテンシャルが無視できるほど小さいとすると、スピントルク密度は次のように表わされる。

$$\hat{t}_e^k(x) \approx -\varepsilon_{lnk} \hat{\tau}_{eN}^{\Pi ln}(x) - \varepsilon_{lnk} \hat{\tau}_{eA\text{rad}}^{\Pi ln}(x) \quad (7)$$

ただし、

$$\hat{\tau}_{eA\text{rad}}^{\Pi kl}(x) = \frac{1}{c} \hat{j}_e^l(x) \hat{A}_{\text{rad}}^k(x) \quad (8)$$

$$\hat{j}_e^k(x) = Z_e e c \left[\hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^k \hat{\psi}(x) \right] \quad (9)$$

式 (7) の右辺第二項は、電子と光子の相互作用によって光子から電子スピんに与えられるトルクを表している。

式 (1)(7) から次のような理論的な説明がなされる。外部光子場の無い定常状態の電子スピンは局所的にスピントルクとツェータ力が拮抗することにより安定な状態を保っている [3]。しかし、電子が外部からの光子と相互作用する場合には光子から受けるトルクによりそのバランスは崩れ、電子のスピン角運動量密度は時々刻々と変化する。一方で、光子が電子スピんに与えるトルクの反作用として光子にもトルクが働く。これが旋光性という性質の起源であると考えることができる。(もっとも、場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ で表わされる電子状態によって決まる選択則から遷移が禁止される場合には旋光性は生じない。)

以上のような原子・分子系で起こる局所的な電子と光子のスピンダイナミクスを Rigged QED 数値シミュレーション [4] によって調べ、その描像を発表で示す予定である。

参考文献

- [1] A. Tachibana, in *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, ed. by E. J. Brändas and E. S. Kryachko, (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003), Vol. 2, p. 211.
- [2] A. Tachibana, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, **943**, 138 (2010).
- [3] T. Hara, M. Senami, A. Tachibana, *Phys. Lett. A* **376**, 1434-1441 (2012).
- [4] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, *Int. J. Quantum Chem.*, published online (2012). [DOI: 10.1002/qua.24087]