1P106

Rigged QED に基づく局所物理量の時間発展の理論的研究

（京大院工）○ 福田 将大, 市川 和秀, 立花 明知

Theoretical Study of Time Evolution of Local Quantities in Rigged QED

（Kyoto Univ.）○ Masahiro Fukuda, Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana

量子力学の枠組みでは、全空間で期待値をとることで初めて物理量が定義されるために局所的な効果が失われているという問題がある。そのため、局所物性を明らかにするには場の量子論に立脚して厳密に定義された力学的な局所物理量（スピントルク密度、ツェータ力密度、局所誘電率密度、局所透磁率密度、局所屈折率密度など）の時間発展を評価する必要がある。本研究では、電子と光子と原子核のダイナミクスを場の量子論的に扱う Rigged QED(Quantum ElectroDynamics) [1] に基づいた時間発展シミュレーション [3, 2] によって、時々刻々と変化する局所的な物理量を計算し、その描像について議論する。

電子のスピン角運動量密度 $\hat{\vec{s}}_e(x)$ が駆動する様子は、スピントルク密度 $\hat{\vec{t}}_e(x)$ とツェータ力密度 $\hat{\vec{\zeta}}_e(x)$ と呼ばれる局所的な物理量によって次のように表される [4]。

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{s}^k_e(x) = \hat{t}^k_e(x) + \hat{\zeta}^k_e(x) \tag{1}$$

ここで、スピン角運動量密度 $\hat{\vec{s}}_e(x)$ とツェータ力密度 $\hat{\vec{\zeta}}_e(x)$ はカイラルカレント $\hat{\vec{j}}^\mu_5(x)$ を用いて次のように書ける [5]。

$$\hat{s}^k_e(x) = \frac{\hbar}{2Z_e\, e\, c}\hat{j}^k_5(x), \quad \hat{\zeta}^k_e(x) = -\frac{\hbar}{2Z_e\, e}\partial_k \hat{j}^0_5(x) \tag{2}$$

$$\hat{j}^\mu_5(x) = Z_e\, e\, c\, \hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\gamma_5\hat{\psi}(x), \quad Z_e = -1 \tag{3}$$

e は電荷の大きさ、c は真空での光速、$\hat{\psi}(x)$ は電子場の演算子、γ^μ はガンマ行列を表す。

スピントルク密度 $\hat{\vec{t}}_e(x)$ は、

$$\hat{t}^k_e(x) = -\varepsilon_{lnk}\hat{\tau}^{\Pi\, ln}_e(x) \tag{4}$$

$$= -\varepsilon_{lnk}\hat{\tau}^{\Pi\, ln}_{eN}(x) - \varepsilon_{lnk}\hat{\tau}^{\Pi\, ln}_{eA}(x) \tag{5}$$

と書ける。ここで、ε_{lnk} はレビ・チビタテンソルであり、$\hat{\tau}^{\Pi\, ln}_e(x)$ はストレステンソル密度、即ち、

$$\hat{\tau}^{\Pi\, kl}_e(x) = \frac{i\hbar c}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{D}_k(x)\hat{\psi}(x) - \left(\hat{D}_k(x)\hat{\psi}(x)\right)^\dagger\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \tag{6}$$

$$\hat{D}_k(x) = \partial_k + i\frac{Z_e e}{\hbar c}\hat{A}_k(x) \tag{7}$$

である。式 (6) に式 (7) を代入すると、

$$\hat{\tau}_e^{\Pi\,kl}(x) = \hat{\tau}_{eN}^{\Pi\,kl}(x) + \hat{\tau}_{eA}^{\Pi\,kl}(x) \tag{8}$$

$$\hat{\tau}_{eN}^{\Pi\,kl}(x) = \frac{i\hbar c}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\partial_k\hat{\psi}(x) - (\partial_k\hat{\psi}^\dagger(x))\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \tag{9}$$

$$\hat{\tau}_{eA}^{\Pi\,kl}(x) = -\frac{Z_e e}{2}\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\gamma^0\gamma^l\hat{A}_k(x)\hat{\psi}(x) + \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{A}_k(x)\gamma^0\gamma^l\hat{\psi}(x)\right) \tag{10}$$

ベクトルポテンシャル $\hat{\vec{A}}(x)$ は、$\hat{\vec{A}}(x) = \hat{\vec{A}}_A(x) + \hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}}(x) + \hat{\vec{A}}_M(x)$ というように遅延ポテンシャル $\hat{\vec{A}}_A(x)$ と外部光子場 $\hat{\vec{A}}_{\mathrm{rad}}(x)$ および外部磁場を作り出す $\hat{\vec{A}}_M(x)$ の和で表わされる。すると、スピントルク密度は

$$\hat{t}_e^k(x) = -\varepsilon_{lnk}\hat{\tau}_{eN}^{\Pi\,ln}(x) - \varepsilon_{lnk}\hat{\tau}_{eA_A}^{\Pi\,ln}(x) - \varepsilon_{lnk}\hat{\tau}_{eA_{\mathrm{rad}}}^{\Pi\,ln}(x) - \varepsilon_{lnk}\hat{\tau}_{eA_M}^{\Pi\,ln}(x) \tag{11}$$

となる。第 2 項は電子場がつくる遅延ポテンシャルによるスピントルク、第 3 項は外部光子場によるスピントルク、第 4 項は外部磁場をつくるベクトルポテンシャルによるスピントルクを表す。

発表では、時刻 $t = 0$ において外部から時間に依存しない一定の磁場 $\hat{\vec{B}}_M(\vec{r})$ が加わり始める原子・分子系を考え、磁場をつくるベクトルポテンシャル $\hat{\vec{A}}_M(\vec{r})$ の影響によって時々刻々と変化する電子スピンの描像を議論する予定である。

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] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html

[3] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana,Int. J. Quant. Chem. 113, 3, 190-202 (2013)

[4] A. Tachibana, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).

[5] A. Tachibana, J. Math. Chem. **50**, 669-688 (2012)