

電子の電気双極子モーメントのスピントルクへの寄与
についての理論的研究

(京都大院・工) ○小木曾 陽司, 福田 将大, 瀬波 大土, 立花 明知

Spin torque by electron electric dipole moment

(Kyoto Univ.) Yoji Ogiso, Masahiro Fukuda, Masato Senami, Akitomo Tachibana

【研究の背景・目的】

素粒子理論の標準模型に対する拡張模型では、大きな電子の電気双極子 (EDM) が予言されている。この EDM の存在による電子スピンのトルクへの影響について研究する。EDM により、スピンと電場の向きに応じて力が生じ、これがトルクとしてどのように作用するのかを調べる。本研究では立花により場の理論に基づいて提案された局所的なスピントルクとツェータ力[1]に対してどのような変更を与えるかを示す。具体的には、電磁場中での Dirac 方程式の解を用いて、スピンに対するトルクがどのようにになっているかを定量的に調べる。特に EDM の観測実験で用いられている YbF 分子などについて分子内部におけるスピンに対する局所的トルクがどのように分布しているかを明らかにする。

【理論】

電子のスピン角運動量密度の運動方程式は次のように表わされる。

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

電子の定常状態 (左辺=0) では、スピントルクとツェータ力が互いに拮抗し、局所的に釣り合っている。これは全空間での期待値だけが釣り合う量子力学とは異なる、場の量子論特有の描像である。

式(1)の右辺第一項はスピントルク密度であり、

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

$\hat{t}_e^{\Pi kl}(x)$ はストレステンソルを表す。

$$\hat{t}_e^{\Pi kl}(x) = \frac{i\hbar c}{2} [\hat{\psi}(x) \gamma^l \hat{D}_{ek}(x) \hat{\psi}(x) - (\hat{D}_{ek}(x) \hat{\psi}(x))^\dagger \gamma^0 \gamma^l \hat{\psi}(x)]. \quad (3)$$

式(1)の右辺第二項はツェータ力密度である。

$$\hat{g}_e^k(x) = -\partial_k \hat{\phi}_5(x). \quad (4)$$

$\hat{\phi}_5(x)$ はツェータポテンシャルを表す。

$$\hat{\phi}_5(x) = \frac{\hbar}{2Z_e e} \hat{j}_5^0(x) = \frac{\hbar c}{2} \hat{\psi}(x) \gamma^0 \gamma_j \hat{\psi}(x). \quad (5)$$

講演ではこのスピントルクとツェータ力を、平面波電磁場中を運動する電子の厳密解である Volkov の解を用いて定量的に調べた結果を発表する。また磁場中の分子に対するスピントルクの計算についても発表する。

また EDM によるハミルトニアンは

$$H_{EDM} = -d_e \vec{E} \cdot \frac{\vec{S}}{|S|}. \quad (6)$$

であり、相対論的一般化をすると

$$\hat{L}_{EDM} = -d_e \frac{i}{2} \hat{\psi} \sigma^{\mu\nu} \gamma_5 \hat{\psi} \hat{F}_{\mu\nu}, \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]. \quad (7)$$

QED と Dirac 方程式の立場から考えると、これは有効相互作用となっている。これによりスピントルクにも以下のような補正が生じることになる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\hat{\psi}^\dagger \Sigma^i \hat{\psi}) = \hat{t}_e + \hat{\zeta}_e - \frac{cd_e}{2\hbar} \hat{\psi}^\dagger [\gamma_5 \sigma_{\mu\nu} \Sigma^i + \Sigma^i \sigma_{\mu\nu} \gamma_5] \hat{\psi} \hat{F}_{\mu\nu}. \quad (8)$$

この式の第3項が EDM によるトルクへの補正項である。これを T_{EDM} と書く。

$$T_{EDM} = \frac{cd_e}{2\hbar} \hat{\psi}^\dagger [\sigma_{\mu\nu} \gamma^i \gamma^0 + \gamma^i \gamma^0 \sigma_{\mu\nu}] \hat{\psi} \hat{F}_{\mu\nu}. \quad (9)$$

このとき、電場・磁場の存在によりどのようなトルクが生じるかを考えると次の式ようになる。

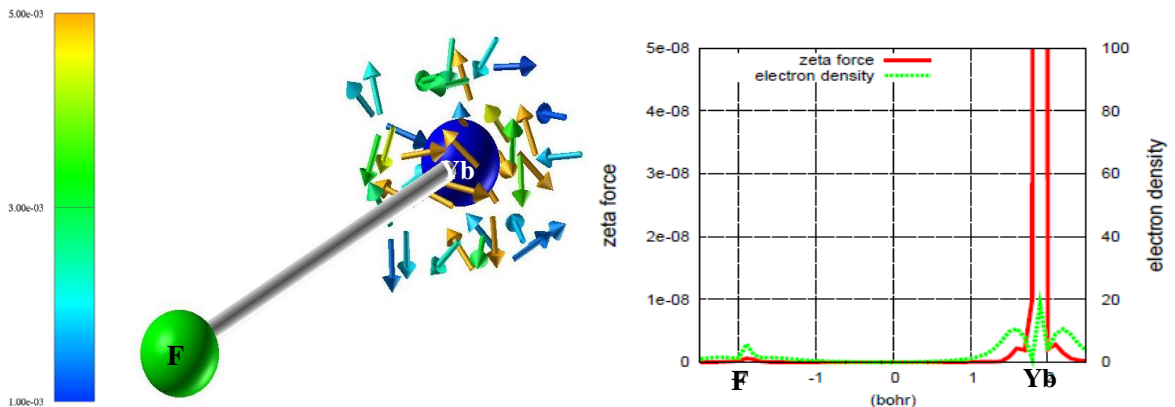
$$\frac{cd_e}{2\hbar} \hat{\psi}^\dagger [\sigma^{\mu\nu} \gamma^i \gamma^0 + \gamma^i \gamma^0 \sigma^{\mu\nu}] \hat{\psi} \hat{F}_{\mu\nu} = \frac{2cd_e}{\hbar} \hat{\psi}^\dagger \Sigma^k \hat{\psi} \varepsilon^{ijk} E_j + \frac{cd_e}{\hbar} [-\hat{\psi}^\dagger \gamma_5 \hat{\psi} B^i + \hat{\psi}^\dagger \gamma^k \hat{\psi} \varepsilon^{ikl} B^l]. \quad (10)$$

電場に対しては、電場とスピン各運動量密度に垂直な方向を向きそれぞれに比例した大きさを持つトルクがあることがわかる。磁場に対しては、 T_{EDM} には二つの寄与がある。一方は右手系と左手系のキラリティの電荷密度の差に比例するものであり、その方向は磁場と反対である。他方は電子電流に比例するものであり、その方向は電流と磁場に垂直である。

本研究では局所的なスピントルクとツェータ力に対してこの補正がどのような効果を与えるか調べる。

【結果及び考察】

外部電磁場中における EDM 由来のトルクを調べるために、まず外部電磁場の存在を無視した状態での YbF 分子内部のツェータ力の分布を以下に示す。ツェータ力は Yb 原子の付近で大きな値を取っており、特に Yb の原子核付近では電子密度に対するツェータ力の比が特に大きくなっていることが特徴である。なお電子の定常状態において理論的には、スピントルクとツェータ力は局所的に互いに釣り合う事が期待されるが、今回の計算結果では釣り合って相殺する傾向は強く現れているが、完全には相殺せず十分な精度では無かった。今後はさらに高い精度で電子状態を求める事を目指す。EDM の効果はこのトルクに対する補正として現れるので、この状態を精度良く決定する事が重要である。精度良くトルク状態を決定した上で、外部電磁場や EDM の効果を調べることにより真の局所的なトルクの描像を明らかにする。



青の球は Yb 原子を表し、黄緑は F 原子を表す。左図の矢印はツェータ力のベクトルを表しており、閾値を 0.001[a.u.] としている。

図は CI 計算において活性空間に含めた電子の寄与だけを描いている。左図に F-Yb 間でのツェータ力と電荷密度の分布を示す。

【文献】

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