

YbF 分子内部の有効電場と電子の電気双極子モーメントによるスピントルク
(京大院・工) 曾我 康太、福田 将大、瀬波 大士、立花 明知

Effective electric field and spin torque induced by electron electric dipole moment
in the YbF molecule

(Kyoto Univ.) ○Kota Soga, Masahiro Fukuda, Masato Senami, Akitomo Tachibana

素粒子の標準模型に対する拡張的理論において、大きな値を持った電子の電気双極子モーメント (EDM) の存在が予言されている。EDM の探査には分子内部に存在する有効電場、そして EDM が引き起こすスピンの歳差運動が重要な役割を果たし、実験と理論計算双方からのアプローチが不可欠である。我々の研究グループでは、EDM 有効電場の計算に加え、場の理論に基づくスピンドYNAMIKSの研究も行っている [1]。本研究では、YbF 分子を対象に、EDM 有効電場の計算結果、および EDM により誘起されるスピントルクの分布を示す。

立花が提唱する量子電子スピン渦理論 [2-4] によると、電子ストレステンソルの反対称成分 $\hat{\tau}^{A\mu\nu}$ と時空の幾何学的テンソルの反対称成分 $\hat{\varepsilon}^{A\mu\nu}$ は拮抗する。

$$\hat{\tau}^{A\mu\nu} + \hat{\varepsilon}^{A\mu\nu} = 0. \quad (1)$$

上式は、重力が弱い極限で電子のスピン角運動量密度 $\hat{s}_e^i(x)$ の時間発展方程式を与える。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{s}_e^i(x) = \hat{t}_e^i(x) + \hat{\zeta}_e^i(x). \quad (2)$$

ここで、スピン角運動量密度 $\hat{s}_e^i(x)$ とツェータ力密度 $\hat{\zeta}_e^i(x)$ はカイラルカレント $\hat{j}_5^\mu(x)$ を用いて次のように書ける。

$$\hat{s}_e^i(x) = \frac{\hbar}{2Z_e e c} \hat{j}_5^i(x), \quad \hat{\zeta}_e^i(x) = -\frac{\hbar}{2Z_e e c} \partial_k \hat{j}_5^0(x), \quad (3)$$

$$\hat{j}_5^\mu(x) = Z_e e c \hat{\psi}(x) \gamma^\mu \gamma_5 \hat{\psi}(x), \quad \gamma_5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3, \quad Z_e = -1. \quad (4)$$

e は素電荷、 c は真空中での光速、 $\hat{\psi}(x)$ は電子場の演算子、 γ^μ はガンマ行列である。また、スピントルク密度 $\hat{t}_e^i(x)$ は電子ストレステンソル $\hat{\tau}_e^{\Pi\mu\nu}(x)$ を用いて次のように書ける。

$$\hat{t}_e^i(x) = -\varepsilon_{ijk} \hat{\tau}_e^{\Pi jk}(x), \quad (5)$$

$$\hat{\tau}_e^{\Pi\mu\nu}(x) = \frac{i\hbar c}{2} \left(\hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^\nu \hat{D}_{e\mu}(x) \hat{\psi}(x) - (\hat{D}_{e\mu}(x) \hat{\psi}(x))^\dagger \gamma^0 \gamma^\nu \hat{\psi}(x) \right), \quad (6)$$

$$\hat{D}_{e\mu}(x) = \partial_\mu + i \frac{Z_e e}{\hbar c} \hat{A}_\mu(x). \quad (7)$$

ε_{ijk} はレビ・チビタテンソル、 \hat{A}_μ は 4 元ポテンシャルである。電子スピンの運動方程式 (2) において、右辺第 2 項のツェータ力は場の理論的に取り扱った場合のみ現れ、左辺 = 0 の定常状態ではスピントルクとツェータ力が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、場の理論特有の描像である。

EDM の存在がスピントルクに対して新たな寄与を生み出す。EDM ハミルトニアンは

$$H_{\text{EDM}} = -d_e \vec{E} \cdot \frac{\vec{S}}{|\vec{S}|}, \quad (8)$$

であり、これを相対論的一般化したラグランジアンは次のように与えられる。

$$\hat{L}_{\text{EDM}} = -d_e \frac{i}{2} \hat{\psi} \sigma^{\mu\nu} \gamma_5 \hat{\psi} \hat{F}_{\mu\nu}, \quad \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]. \quad (9)$$

EDM 起因のスピントルクは次のようになり、これが式 (2) の右辺に補正項として加わる。

$$\hat{T}_{\text{EDM}} = \hat{T}_{\text{EDM}}^{\text{ele}} + \hat{T}_{\text{EDM}}^{\text{mag}}, \quad (10)$$

$$\hat{T}_{\text{EDM}}^{\text{ele}} = d_e \hat{\psi} (\vec{\Sigma} \times \vec{E}) \hat{\psi}, \quad \hat{T}_{\text{EDM}}^{\text{mag}} = -id_e \hat{\psi} \gamma^0 (\vec{\gamma} \times \vec{B}) \hat{\psi}. \quad (11)$$

d_e は電子の EDM、 Σ^i は 4×4 パウリ行列、 $\hat{F}_{\mu\nu}$ は電磁テンソル、 \vec{E} , \vec{B} は電磁場である。相対論的一般化の結果、EDM トルクは電場だけでなく磁場によっても誘起される。

定常的で基底状態にある YbF 分子に対して、時刻 $t = 0$ に外部静電磁場 $\vec{E}_M = (1, 0, 0)$, $\vec{B}_M = (1, 0, 0)$ [a.u.] を印加したときのスピン角運動量密度、および EDM トルクを我々の研究グループが開発を行っている QEDynamics[5] を用いて計算した。それぞれの分布を図 1-3 に示す。図の赤い球は Yb 原子核を、青い球は F 原子核を表している。電場による EDM トルクは電場・スピン角運動量密度双方と直交し、原子核の片側に分布している。磁場による EDM トルクは磁場と直交し、原子核の周囲に渦巻くように分布している。発表では、EDM 有効電場の計算結果も示す予定である。

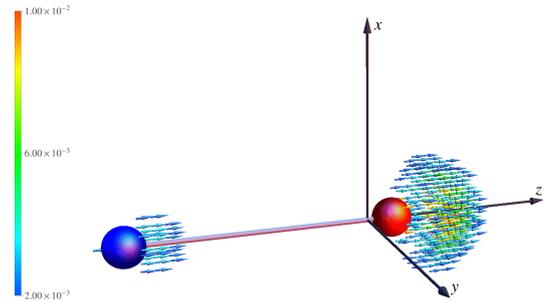


図 1 スピン角運動量密度 [a.u.]

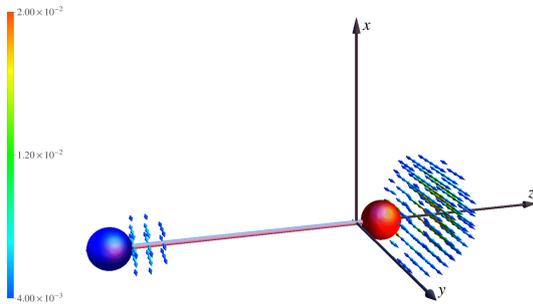


図 2 電場による EDM トルク [a.u.]

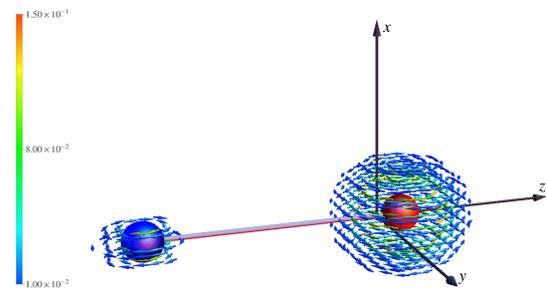


図 3 磁場による EDM トルク [a.u.]

1. A. Tachibana, J. Mol. Model. **11**, 301-311 (2005); J. Mol. Struct.: THEOCHEM **943**, 138-151 (2010).
2. A. Tachibana, J. Math. Chem. **50**, 669-688 (2012).
3. A. Tachibana, In Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry, S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj Eds., CRC Press, Florida (2013), pp 235-251.
4. A. Tachibana, J. Comput. Chem. Jpn. **13**, 18-31 (2014).
5. QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, <http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>.