2E01

スピン渦理論の実時間シミュレーションにおける b-photon, f-electron, f^c-positron 代数

（京大院工）立花　明知

Quantum electron spin vorticity theory with b-photon, f-electron, f^c-positron algebras

(Kyoto Univ.) Akitomo TACHIBANA

【序】電子スピントルクの本質を QED に基づいて理論的に明らかにすることにより、化学結合を始めとする既知の化学現象を統一的に理論的に理解し、さらに進んで新しい化学現象を予言することができる[1-5]。昨年度は量子電子スピン渦理論における重力効果を報告した。本年度は当該理論の実時間シミュレーションを遂行するにあたり、場の演算子とケットベクトルならびに波動関数の時間発展を時々刻々求めるアルゴリズムに関して、中西襄によって提案されている関連理論とその課題を明らかにする。例えば、無限遠方で場がゼロと仮定すると、自由場の概念自体に矛盾が生ずる。『場の演算子力学が解ける条件』（thermalization）と、『物理的』と呼び習わされる『粒子（particle）描像』（renormalization）とが非分離であり、繰り込み定数を c-number と仮定すると演算子の交換関係に矛盾が生ずる。In（無限の過去）から Out（無限の未来）への無限の時間経過を仮定する漸近場理論では時々刻々の繰り込みを取り扱うことができない。これらの基礎的諸問題の解決のために、素粒子（場の素励起；particle 描像を具現）代数の数学的下部構造を構成する α-oscillator 代数を見出したので報告する[5]。α-oscillator を無限に重ね合わせて particle 描像(QED における photon, electron, positron)を表現できる。Particle の交換関係は、対応する α-oscillator の交換関係を粗視化して導かれる

$$\left[\hat{\alpha}_{\text{particle}}, \hat{\beta}_{\text{particle}}\right]_{\pm} = \int_0^{\infty} d\nu \int_0^{\infty} d\nu' \left[\hat{\alpha}(\nu), \hat{\beta}(\nu')\right]_{\pm} \tag{1}$$

α-oscillator の取り扱いにおいては、無限遠方で場がゼロと仮定する必要が無い。『非』保存系である QED 系の Hamiltonian は、そもそも Poincare 変換に対して Lorentz scalar として変換する密度演算子を空間変数に関して積分して定義されるから、多重周期的な時間依存性を示す。これは演算子としての時間依存性なので、正規順序積で定義された $\hat{H}_{\text{QED}}(t)$ でも残る。かかる『非』保存系においても α-oscillator の thermalization は renormalization とは独立に定義されるので時々刻々定義される particle 描像と矛盾しない。繰り込み定数は時々刻々q-number として表現される。超対称性を導入した super-α-oscillator 代数は重力子（graviton）を与える。

【理論】QED に現れる 3 種の α-oscillator について、その第一は電磁場を構成する b-photon

$$\left[\hat{b}(\nu,\vec{p},\sigma), \hat{b}(\nu',\vec{q},\sigma')\right] = \left[\hat{b}^{\dagger}(\nu,\vec{p},\sigma), \hat{b}^{\dagger}(\nu',\vec{q},\sigma')\right] = 0 \tag{2}$$

$$\left[\hat{b}(\nu,\vec{p},\sigma), \hat{b}^{\dagger}(\nu',\vec{q},\sigma')\right] = \delta_{\sigma\sigma'}\delta^3(\vec{p}-\vec{q})\,\delta\left(\nu-\nu\left(|\vec{p}|\right)_b\right)\delta\left(\nu'-\nu\left(|\vec{q}|\right)_b\right) \tag{3}$$

photon のベクトルポテンシャルは b-photon を無限に重ね合わせて

$$\hat{\vec{A}}(x) = \hat{\vec{b}}(x) + \hat{\vec{b}}^{\dagger}(x) \tag{4}$$

$$\hat{\vec{b}}(x) = \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int_0^{\infty} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0\left(\nu,|\vec{p}|\right)}} \hat{b}(\nu,\vec{p},\sigma) e^{-i2\pi\nu t} \vec{e}(\vec{p},\sigma) e^{i\vec{x}\bullet\vec{p}/\hbar} \tag{5}$$

transversal current の表現

$$\hat{\vec{j}}_T(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int_0^{\infty} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{p} \left(\hat{\vec{j}}_T(\nu,\vec{p}) e^{-i2\pi\nu t} e^{i\vec{x}\bullet\vec{p}/\hbar} + \hat{\vec{j}}_T{}^{\dagger}(\nu,\vec{p}) e^{+i2\pi\nu t} e^{-i\vec{x}\bullet\vec{p}/\hbar}\right) \tag{6}$$

を用いて、b-photon の thermalization は

$$\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{2p^0\left(\nu,\left|\vec{p}\right|\right)}}\left(-\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2+\frac{\left|\vec{p}\right|^2}{\hbar^2}\right)\sum_{\sigma=\pm1}\hat{b}\left(\nu,\vec{p},\sigma\right)\vec{e}(\vec{p},\sigma)=\frac{4\pi}{c}\hat{\vec{j}}_T\left(\nu,\vec{p}\right) \tag{7}$$

renormalization は以下の 3 段階(I), (II), (III)を経て導入される。

(I) Particle spectrum condition

$$\mathrm{c}p^0\left(\nu_{\mathrm{photon}},\left|\vec{p}\right|\right)=h\nu\left(\left|\vec{p}\right|\right)_b=c\left|\vec{p}\right| \tag{8}$$

従って

$$\mathrm{c}p_{\mathrm{photon}}{}^0=h\nu_{\mathrm{photon}}=c\left|\vec{p}\right| \quad \left(i.e.,\ =cp^0\left(\nu_{\mathrm{photon}},\left|\vec{p}\right|\right)=h\nu\left(\left|\vec{p}\right|\right)_b\right) \tag{9}$$

(II) Algebra normal mode condition

$$\left[\frac{1}{\sqrt{\hat{z}_b\left(\tilde{\omega},t\right)}}\hat{b}_{\mathrm{photon}}\left(\tilde{\omega}\right),\hat{H}_{\mathrm{QED}}\left(t\right)\right]=h\nu_{\mathrm{photon}}\frac{1}{\sqrt{\hat{z}_b\left(\tilde{\omega},t\right)}}\hat{b}_{\mathrm{photon}}\left(\tilde{\omega}\right) \tag{10}$$

ただし

$$\begin{aligned}\left[\hat{b}_{\mathrm{photon}}\left(\tilde{\omega}\right),\hat{b}^{\dagger}_{\mathrm{photon}}\left(\tilde{\omega}'\right)\right]&=\int_0^\infty d\nu\int_0^\infty d\nu'\left[\hat{b}\left(\omega\right),\hat{b}^{\dagger}\left(\omega'\right)\right]\\&=\delta\left(\tilde{\omega}-\tilde{\omega}'\right)=\delta_{\sigma\sigma'}\delta^3\left(\vec{p}-\vec{q}\right)\end{aligned} \tag{11}$$

ここに

$$\tilde{\omega}=\int_0^\infty d\nu\omega\delta\left(\nu-\nu_{\mathrm{photon}}\right)\ =\left\{\nu_{\mathrm{photon}},\vec{p},\sigma\right\} \tag{12}$$

(III) Field operator renormalization condition

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{\hat{z}_b\left(t\right)}}\hat{\vec{b}}_{\mathrm{photon}}(x)&=\frac{\sqrt{4\pi\hbar^2 c}}{\sqrt{\left(2\pi\hbar\right)^3}}\sum_{\sigma=\pm1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p_{\mathrm{photon}}{}^0\left(\nu_{\mathrm{photon}},\left|\vec{p}\right|\right)}}\\&\quad\times\frac{1}{\sqrt{\hat{z}_b\left(\tilde{\omega},t\right)}}\hat{b}_{\mathrm{photon}}\left(\tilde{\omega}\right)e^{-i2\pi\nu_{\mathrm{photon}}t}\vec{e}(\vec{p},\sigma)e^{i\vec{x}\bullet\vec{p}/\hbar}\end{aligned} \tag{13}$$

ただし

$$\hat{\vec{b}}(x)=\frac{1}{\sqrt{\hat{z}_b\left(t\right)}}\hat{\vec{b}}_{\mathrm{photon}}(x) \tag{14}$$

$$\hat{b}\left(\omega\right)=\frac{1}{\sqrt{\hat{z}_b\left(\tilde{\omega},t\right)}}\hat{b}_{\mathrm{photon}}\left(\tilde{\omega}\right)\delta\left(\nu-\nu_{\mathrm{photon}}\right) \tag{15}$$

α -oscillator のケットベクトルと波動関数[5]を粗視化して particle のケットベクトルと波動関数が得られる。この粗視化を通して時間発展の二元性が招来される。QED に現れる他の 2 種の α -oscillator は Dirac 場を構成する f -electron と f^c -positron である。詳細を当日発表する。

<u>参考文献</u>

[1] A. Tachibana, “General relativistic symmetry of electron spin torque,” Journal of Mathematical Chemistry **50**, 669-688 (2012).

[2] A. Tachibana, “Electronic Stress with Spin Vorticity,” In Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Electronic Structure and Reactivity, Ghosh S K & Chattaraj P K, Eds., (Taylor & Francis / CRC Press, New York, U.S.A.) 2013, Chapter 12, pp. 235-251.

[3] A. Tachibana, “Stress Tensor of Electron as Energy Density with Spin Vorticity,” J. Comput. Chem. Jpn., **13**, 18-31 (2014).

[4] A. Tachibana, “Electronic stress tensor of chemical bond,” Indian Journal of Chemistry A **53**, 1031-1035 (2014).

[5] A. Tachibana, “General relativistic symmetry of electron spin vorticity,” Journal of Mathematical Chemistry, http://link.springer.com/article/10.1007/s10910-015-0528-0; A. Tachibana, to be published.