

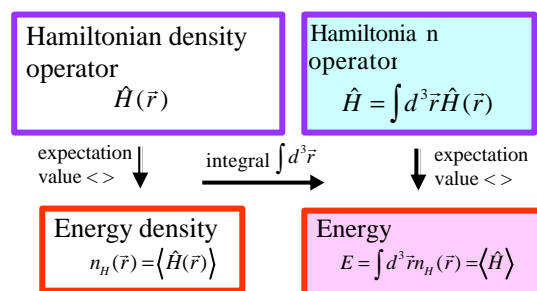
1C04 化学的相互作用場の理論的研究

(京大院工) 立花明知

【序】 前回の発表 (Int. J. Quant. Chem., in press) に引き続き、Rigged QED (Rigged Quantum Electrodynamics) に基づく化学的相互作用に関する場の理論的研究を展開する。Spindle 構造に代表されるまったく新しいテンソル的な化学的量子エネルギー密度の成り立ちが幾何学的に明示される。簡単な原子・分子系への応用を示し、本理論の有用性を実証する。

【理論】 Rigged QED 理論: $\hat{H}_{\text{rigged QED}}(\vec{r}) = \hat{H}_g(\vec{r}) + \hat{H}_e(\vec{r}) + \hat{H}_{\text{atom}}(\vec{r})$

Field theory of energy density



においては、原子核によって生じるカレントも込めて、全荷電粒子は Maxwell 方程式

Maxwell's equations

Maxwell's equations

$$\text{rot} \hat{E}(\vec{r}) + \frac{1}{c} \frac{\partial \hat{B}(\vec{r})}{\partial t} = 0, \quad \text{div} \hat{B}(\vec{r}) = 0$$

$$\text{div} \hat{E}(\vec{r}) = 4\pi \hat{\rho}(\vec{r}), \quad \text{rot} \hat{B}(\vec{r}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \hat{E}(\vec{r})}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \hat{j}(\vec{r})$$

Electric field and Magnetic flux density

$$\hat{E}(\vec{r}) = -\text{grad} \hat{\phi}(\vec{r}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \hat{A}(\vec{r})}{\partial t}, \quad \hat{B}(\vec{r}) = \text{rot} \hat{A}(\vec{r}), \quad \text{div} \hat{A}(\vec{r}) = 0$$

を満たしていたが、原子核を有効場として取り扱うため、Poincare 対称性の破れが引き起こされていた。これを解消するために、QCD (Quantum Chromodynamics) からのアプローチを試みる:

$$SU(3)_c \times SU(2)_w \times U(1)_y \rightarrow SU(3)_c \times U(1)_{\text{QED}}$$

ここで、Higgs 場が electroweak ゲージ対称性 $SU(2)_w \times U(1)_y$ を $U(1)_{\text{QED}}$ に落としているが、color と charge の対称性は残されている。運動方程式に現れるストレステンソル密度の発散から張力密度が得られ、さらに、ローレンツ力密度と合わせて、空間の各点において電子に働く力の密度が得られる。これらは、4-spinor から 2-spinor に落として見ると以下のように見える:

Tension density and stress tensor density operators

Tension density operator

$$\hat{t}_a^{Sk}(\vec{r}) = \partial_l \hat{t}_a^{Slk}(\vec{r})$$

Stress tensor density operator

$$\hat{t}_a^S(\vec{r})$$

Stress tensor density operator

$$\hat{t}_a^{Sk}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{4m_a} [\hat{c}_a^+(\vec{r}) \hat{D}_{ak}(\vec{r}) \hat{D}_{al}(\vec{r}) \hat{c}_a(\vec{r}) + \hat{D}_{ak}^+(\vec{r}) \hat{D}_{al}(\vec{r}) \hat{c}_a^+(\vec{r}) \cdot \hat{c}_a(\vec{r}) - \hat{D}_{ak}^+(\vec{r}) \hat{c}_a^+(\vec{r}) \cdot \hat{D}_{al}(\vec{r}) \hat{c}_a(\vec{r}) - \hat{D}_{al}(\vec{r}) \hat{c}_a^+(\vec{r}) \cdot \hat{D}_{ak}(\vec{r}) \hat{c}_a(\vec{r})]$$

ストレストンソル密度は新しいテンソルのエネルギー密度の概念を与える：

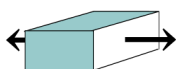
Principal stress and principal axis

$$\langle \hat{t}_a^S(\vec{r}) \rangle = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{a,xx}^S(\vec{r}) & \mathbf{t}_{a,xy}^S(\vec{r}) & \mathbf{t}_{a,xz}^S(\vec{r}) \\ \mathbf{t}_{a,yx}^S(\vec{r}) & \mathbf{t}_{a,yy}^S(\vec{r}) & \mathbf{t}_{a,yz}^S(\vec{r}) \\ \mathbf{t}_{a,zx}^S(\vec{r}) & \mathbf{t}_{a,zy}^S(\vec{r}) & \mathbf{t}_{a,zz}^S(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{diag}} \begin{pmatrix} \mathbf{t}_a^{S11}(\vec{r}) & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{t}_a^{S22}(\vec{r}) & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{t}_a^{S33}(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

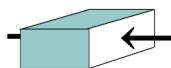
$$\mathbf{t}_a^{S11}(\vec{r}) \leq \mathbf{t}_a^{S22}(\vec{r}) \leq \mathbf{t}_a^{S33}(\vec{r})$$

Local 3rd principal stress



(a)

$$\mathbf{t}_a^{S33}(\vec{r}) > 0: \text{tensile stress}$$



(b)

$$\mathbf{t}_a^{S33}(\vec{r}) < 0: \text{compressive stress}$$

[1] "Spindle Structure of the Stress Tensor of Chemical Bond," A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem., in press.

[2] "Field Energy Density in Chemical Reaction Systems," A. Tachibana, in Fundamental Perspectives in Quantum Chemistry: A Tribute to the Memory of Per-Olov Lowdin, Eds. by Erkki Brandas and Eugene Kryachko (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003), pp.211-239.