

3D11 素粒子の標準模型におけるストレステンソルと化学結合における電子状態のスピンル構造の起源

(京大院工) 立花明知

【序】前回の発表 [1]に引き続き、Rigged QED (Rigged Quantum Electrodynamics) 理論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[2]。Rigged QED 理論にもとづき、荷電粒子の場の運動方程式を立てると、体積力としてのローレンツ力に加えて面積力としてのストレステンソルの寄与が自然に導かれる[3]。両者が時空の各点において拮抗することにより量子力学的定常状態の電磁力学的描像が得られる。今回の発表では、非可換ゲージ場を用いる素粒子の標準模型においても同様なストレステンソルの寄与が自然に導かれることを示し、化学結合における電子状態のスピンル構造を生み出す自然な力の統一的描像を明らかにする[4]。講演では、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】素粒子の標準模型はすべてゲージ不変性原理に基づいている。非可換ゲージ理論のラグランジアンは Becci - Rouet - Stora - Tyutin (BRST) 対称性をもつ：

$$\partial_\theta \int d^4x \hat{L}(x) \times \frac{1}{c} = 0$$

ここに、 ∂_θ は BRST 演算子を表す。BRST 対称性は ∂_θ のコホモロジーが理論の物理的内容を表すことを示している。非可換ゲージ理論は単純リー代数：

$$[t_\alpha, t_\beta] = iC_{\gamma\alpha\beta} t_\gamma$$

によって記述され、その完全な分類はカルタンにより与えられている。共変微分演算子

$$\hat{D}_\mu(x)\hat{\psi}(x) = \partial_\mu\hat{\psi}(x) + i\hat{A}_{\beta\mu}(\vec{r})t_\beta\hat{\psi}(x)$$

を用いて、物質場の kinetic momentum density operator $\hat{\Pi}(x)$ を以下のように構成すると：

$$\hat{\Pi}^k(x) = \frac{1}{2} \left(-i\hbar\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{D}_k(x)\hat{\psi}(x) + i\hbar \left(\hat{D}_k^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \right)^\dagger \cdot \hat{\psi}(x) \right)$$

その満たすべき運動方程式は以下のように表現される：

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\Pi}(x) = \hat{L}(x) + \hat{\tau}^\Pi(x) + \hat{R}(\left[\gamma_0, \hat{D}(x) \right]); x$$

ここに、 $\hat{L}(x)$ は Lorentz force density operator

$$\hat{L}^k(x) = c\hbar\hat{F}_{\alpha\mu k}(x)\hat{\psi}(x)\gamma^\mu t_\alpha\hat{\psi}(x)$$

であり、ゲージ場の演算子 $\hat{F}_{\gamma\mu\nu}(x)$

$$\hat{F}_{\gamma\mu\nu}(x) = \partial_\nu\hat{A}_{\gamma\mu}(x) - \partial_\mu\hat{A}_{\gamma\nu}(x) - C_{\gamma\alpha\beta}\hat{A}_{\alpha\nu}(x)\hat{A}_{\beta\mu}(x)$$

はマックスウェルの方程式を満たす：

$$\hat{D}_\lambda(x)\hat{F}_{\alpha\mu\nu}(x) + \hat{D}_\mu(x)\hat{F}_{\alpha\nu\lambda}(x) + \hat{D}_\nu(x)\hat{F}_{\alpha\lambda\mu}(x) = 0$$

$$\hat{D}_\mu(x)\hat{F}_\alpha^{\mu\nu}(x) = \frac{4\pi}{c}\hat{J}_\alpha^\nu(x)$$

物質場のカレント $\hat{J}_\alpha^\nu(x)$ は、以下のように連続の方程式を満たす：

$$\hat{D}_\mu(x)\hat{J}_\alpha^\mu(x) = 0$$

$\hat{\tau}^\Pi(x)$ は tension density operator であり、stress tensor density operator $\hat{\tau}^\Pi(x)$ の divergence によ

り以下のように求められる：

$$\hat{\tau}^{\Pi}(x) = \text{div} \hat{\tau}^{\Pi}(x)$$

$$\hat{\tau}^{\Pi k}(x) = \partial_l \hat{\tau}^{\Pi k l}(x)$$

$$\hat{\tau}^{\Pi k l}(x) = \frac{i\hbar c}{2} [\hat{\psi}(x) \gamma^0 \gamma^l \hat{D}_k(x) \hat{\psi}(x) - (\hat{D}_k(x) \hat{\psi}(x))^{\dagger} \gamma^0 \gamma^l \cdot \hat{\psi}(x)]$$

最後に、 $\hat{R}(\left[\left[\gamma_0, \hat{D}(x) \right] \right]; x)$ は余剰力であり、素粒子の標準模型では消える。さらに、電子の

spin angular momentum density operator の満たすべき運動方程式は以下のように表現される：

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{\ell}_e(\vec{r}) + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_e(\vec{r}) \right) = \vec{r} \times \hat{L}_e(\vec{r}) + \text{div} \left(\vec{r} \times \hat{\tau}_e^{\Pi}(\vec{r}) \right) - \hat{\zeta}_e(\vec{r}), \quad (3.56)$$

$$\hat{\zeta}_e(\vec{r}) = c \partial_l \left(\hat{\psi}(\vec{r}) \gamma^l \frac{1}{2} \hbar \sigma^l \hat{\psi}(\vec{r}) \right). \quad (3.57)$$

ここで、 $\hat{\ell}_e(\vec{r})$ は電子の軌道角運動量密度演算子である。以上から、電子のストレステンソルに由来するトルクが電子スピンの働く力を生み出していることがわかる。ストレステ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。ただし、時空の計量は $\text{diag}(1, -1, -1, -1)$ だから、Rigged QED 理論[3] においてヴィリアル定理に基づくエネルギー密度を見積もる場合、固有値の符号が逆になって寄与する。これは、原子的な電子液滴領域 (electronic drop region; R_D) において電子の運動エネルギーによる安定化が支配的となり、これが、 R_D の圧縮応力 (compressive stress) によって表現されていることに対応している。イオン結合に対応する R_D は、いうまでもなく compressive stress によって表現される。一方、これらとは異なり、原子間の共有結合に対応する R_D を引き伸ばしてゆくと、この引き伸ばしに対抗する抗力が生まれ、これは、共有結合性の引っ張り応力 (tensile stress) によって表現される。このようにして、スピンドル構造[2]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[1]。ナノ・バイオ・非平衡系への応用に向けて、化学反応系に及ぼす外部電磁場効果を string model[5]により取り扱う[1,2,6]。

[1] "A new visualization scheme of chemical energy density and bonds in molecules," A. Tachibana, Journal of Molecular Modeling, Volume -1, Issue Online (12 May 2005).

Link to article: <http://springerlink.metapress.com/link.asp?ID=Q06W667J83574406>

[2] "Spindle Structure of the Stress Tensor of Chemical Bond," A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem., **100**, 981-993 (2004).

[3] "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.

[4] A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem., submitted.

[5] "String Model of Chemical Reaction Coordinate," A. Tachibana, J. Math. Chem., **7**, 95-110 (1991).

[6] "QM/MM による酸化型[NiFe]hydrogenase モデルの水素生成反応機構、" 中野博史、土井謙太郎、立花明知、本討論会、**2P096**.