

3L06

量子電子スピン渦理論

立花 明知

京大院工

akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp

【序】電子ストレステンソルの起源を Einstein の一般相対性理論に求め [1]、Einstein が発見した「時空の曲率が物体に働く重力を生み出す」、という測地線原理に加えて、「時空のねじれが電子スピンの働くトルクを生み出す」、という量子電子スピン渦原理を発見した[2]：

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

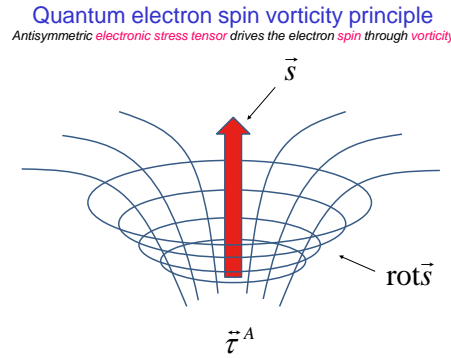


Fig. 1. Quantum electron spin vorticity principle.

本報告では、超重カダイナミクスが駆動する電子スピントルクを示す。

【理論】超重カダイナミクスにおける量子電子スピン渦原理は単純超対称性のもとで

$$\varepsilon^{A\mu\nu}(\text{SUGRA}) + \tau^{A\mu\nu}(\text{SUGRA}) = 0 \quad (2)$$

となる。弱重力の極限を取れば、超カレントは

$$\Theta_\mu = \frac{i}{12} \sum_n \left(-4\hbar^2 (\Phi_n^\dagger \partial_\mu \Phi_n - \Phi_n \partial_\mu \Phi_n^\dagger) - i\hbar \left((\bar{D}\Phi_n^\dagger) \gamma_\mu (D\Phi_n) \right) \right) \times c \quad (3)$$

カイラル超場は

$$\begin{aligned} \Phi_n = & \phi_n - \sqrt{2} \left(\bar{\theta} \frac{1+\gamma_5}{2} \psi_n \right) + \left(\bar{\theta} \frac{1+\gamma_5}{2} \theta \right) F_n - \frac{1}{2} i\hbar (\bar{\theta} \gamma_5 \partial \phi_n \theta) \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} i\hbar (\bar{\theta} \gamma_5 \theta) \left(\bar{\theta} \frac{1-\gamma_5}{2} \partial \psi_n \right) + \frac{1}{8} \hbar^2 (\bar{\theta} \gamma_5 \theta)^2 \square \phi_n \end{aligned} \quad (4)$$

拡張ゲージ原理は

$$\Phi_n(x, \theta) \rightarrow \sum_m \left[\exp \left(i \sum_A t_A \Omega^A(x_-) \right) \right]_{nm} \Phi_m(x, \theta) \quad (5)$$

$$\Gamma(x, \theta) \rightarrow \exp \left(-i \sum_A t_A \Omega^A(x_-) \right) \Gamma(x, \theta) \exp \left(+i \sum_A t_A \Omega^{A\dagger}(x_-) \right) \quad (6)$$

将来的に超対称粒子の存在が確認されれば、超対称量子電子スピン渦原理が実証される[3]。

参考文献

[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 *Frontiers in Theoretical Chemistry: Concepts and Methods*, Taylor & Francis / CRC Press, Chap. **12**, pp. 235-251 (2013).

[3] A. Tachibana, to be published.

3L07

Rigged QED に基づく光子の相互作用と時間発展

○瀬波 大土、立花 明知¹

京大院工

senami@me.kyoto-u.ac.jp

ゲージ不変性を保った形で QED に原子核を追加した Rigged QED[1] に基づいて系の時間発展を調べる計算コード QEDynamics[2] の開発を行っている。

光と物質の反応を正しく理解するためには、光子の量子性を正しく取り扱うことが重要である。この目的のためには、量子系は場の理論である QED に基づいて取り扱われるべきである。この理論においては、例えば、光子からの仮想電子・陽電子の生成消滅の効果など光子の持つ量子性を正しく記述することができる。

これまで、QED はラムシフト・異常磁気双極子の定量的評価といった量子力学が原理的に役に立たない現象に対して解を与えたり、摂動計算に基づく自由粒子の散乱過程の解析において非常に大きな成功をもたらしている。ただし、それらの成功はいわゆる自由粒子が漸近場として存在するとの仮定が非常に良い場合に限定されている。しかし、原子や分子中の電子や原子核は束縛状態としてしか記述できない。束縛状態の記述については、これまでベーテ・サルピーターの方法や NRQED[3] による記述等があり一定の成果を上げているが、まだまだ満足のいく段階に達していない。

このような状況を踏まえて、我々は Rigged QED に基づく計算コード開発を行っている。電子・原子核・光子を生成消滅演算子を用いて記述し、Heisenberg 描像に基づいて演算子の時間発展を計算し、量子状態の時間発展を追跡する。原子核はシュレディンガー場として、電子は 2 成分スピノルとして記述する。この枠組みは Primary Rigged QED[4] と呼ばれている。相対論的 4 成分スピノルを 2 成分スピノルとして展開する方法はよく知られており、電子に対するローレンツ対称性を保った記述も可能である。具体的に演算子は $t = 0$ での演算子の多項式を用いて展開し、その多項式の係数を各時刻で計算するという手法を用いる。

本講演では、光子による相互作用を数値計算上で取り扱うための近似の手法と、QED のハミルトニアンと初期状態を用意する手続きである thermalization についての進展について報告する。特に光子と物質との相互作用の記述は QED 計算にとって最も重要なところである。これに対してどのような方針で計算すべきか、その範囲においてどのような近似が効率的であるかについて報告する。Thermalization の実行方法については、開発が進んで来ているところであり、thermalization の意義と今後に向けての課題についても検討する。本研究グループでは開発されたコードを物性分野に応用することを考えており、その一例として外部電場に対する応答の周波数依存性の計算結果についても報告する。

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

[2] M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana, <http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed>; M. Senami, T. Miyazato, S. Takada, Y. Ikeda, and A. Tachibana, to be published in *J. Phys. Conf. Ser.*; K. Ichikawa, M. Fukuda, A. Tachibana, *Int. J. Quant. Chem.* **113**, 190 (2013).

[3] W. E. Caswell and G. P. Lepage, *Phys. Lett.* **167B**, 437 (1986).

[4] “Electronic Stress with Spin Vorticity”, A. Tachibana, *Frontiers in Theoretical Chemistry: Concepts and Methods: A tribute to Prof. B. M. Deb*; Eds. by S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj; Taylor & Francis / CRC Press, 2013; Chapter 12, pp.235-251.

¹akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp

3L08

Rigged QED における電子質量に対する自己エネルギーの寄与について

○市川和秀¹、福田将大¹、立花明知¹

¹ 京大院工

kazuhide@me.kyoto-u.ac.jp

Rigged QED (Quantum Electrodynamics, 量子電磁力学) とは、電子・原子核・光子を含む場の量子論である [1]。これまでに、この理論のもとで電子や原子核の生成消滅演算子の時間発展の式を密度行列の時間発展で近似するという定式化および数値計算を行っており、電荷密度に、仮想電子陽電子対生成と対消滅に起因していると考えられる「電子陽電子振動」という高速の振動が見られることを見いだした [2, 3]。本研究では光子の生成消滅演算子を含むような密度行列を連立して例えば電荷密度の時間変化を計算することにより、電子質量に対して自己エネルギーの寄与が生じてくることを示す。

より具体的には、電子陽電子を表すディラック場を $\hat{\psi}(ct, \vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \hat{e}_{na}(t) \psi_{na}(\vec{r})$ のように電子の消滅演算子 $\hat{e}_{n+}(t)$ と陽電子の生成演算子 $\hat{e}_{n-}(t)$ で展開し、励起演算子 $\hat{\mathcal{E}}_{pq^d} \equiv \hat{e}_{pc}^\dagger \hat{e}_{qd}$ を定義すると、電荷密度演算子など物理量の演算子はこれら励起演算子で表されるが、この励起演算子について、ハイゼンベルグ形式で時間発展を計算する。これに加えて $\hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{pq^d} = \hat{e}_{pa}^\dagger \hat{R} \hat{e}_{qb}$ ($\hat{R} = \hat{a}(\vec{p}, \sigma)$ または $\hat{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma)$ で、運動量 \vec{p} で偏光 σ の光子の消滅または生成演算子) の時間発展を連立させて解く。

実際には、それらの正規積を状態 $|\Phi\rangle = |\Phi_e\rangle \otimes |\Phi_{ph}\rangle$ で期待値をとった密度行列

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{pq^d} &\equiv \langle \Phi | : \hat{\mathcal{E}}_{pq^d} : | \Phi \rangle = \mathcal{E}_{pq^d}^\Phi - \mathcal{E}_{pq^d}^0 \\ (\mathcal{E}_{pq^d}^\Phi &\equiv \langle \Phi | \hat{\mathcal{E}}_{pq^d} | \Phi \rangle, \quad \mathcal{E}_{pq^d}^0 \equiv \langle 0 | \hat{\mathcal{E}}_{pq^d} | 0 \rangle) \end{aligned} \quad (1)$$

と

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\hat{R}]_{pq^d} &\equiv \langle \Phi | : \hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{pq^d} : | \Phi \rangle = \mathcal{E}^\Phi[\hat{R}]_{pq^d} - \mathcal{E}^0[\hat{R}]_{pq^d} \\ (\mathcal{E}^\Phi[\hat{R}]_{pq^d} &\equiv \langle \Phi | \hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{pq^d} | \Phi \rangle, \quad \mathcal{E}^0[\hat{R}]_{pq^d} \equiv \langle 0 | \hat{\mathcal{E}}[\hat{R}]_{pq^d} | 0 \rangle) \end{aligned} \quad (2)$$

の時間発展方程式を連立させて数値的に解くことにより、電子電荷密度における電子陽電子振動がどのように影響をうけるかを示す。

参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).
- [2] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013)
- [3] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>

迫田憲治¹, 池上勇人¹, G. A. Pino², C. Jouvét³, C. Dedonder³, ○関谷 博¹

¹九大院理, ²コルドバ大, ³パリ南大

sekiya@chem.kyushu-univ.jp

【序】超音速ジェット冷却された溶媒和クラスターを生成させ、周波数分光と時間分解分光を行うことにより、クラスターサイズと電子・振動状態を選別しながら水ネットワークのダイナミクスについて調査できる。更に実験と理論計算から得られた結果を組み合わせると、励起状態ダイナミクスについて詳細な描像を得ることができる。7-アザインドール (7AI) と水の 1 : 3 クラスター[7AI-(H₂O)₃]の水素結合ネットワークの再配列と励起状態プロトン移動 (ESPT) の結果について報告する。

【結果と考察】超音速ジェット冷却された 7AI と水の 1 : 2 クラスター[7AI-(H₂O)₂]と 7AI-(H₂O)₃ の蛍光分光、S₁(ππ*)状態の赤外分光、およびピコ秒時間分解分光を行った。ここでは、7AI-(H₂O)₃ の結果のみ記載する。7AI-(H₂O)₃ を励起したときの蛍光の波長領域が S₁ 状態の内部エネルギーに依存することが分かった。S₁←S₀(0-0)遷移 (ΔE=0) を励起した場合は UV 蛍光、+163 cm⁻¹ より高い振電バンドを励起した場合にはレッドシフトした UV 蛍光、+744 cm⁻¹ より高波数のバンドを励起すると可視蛍光が観測される。UV 蛍光と可視蛍光をそれぞれ bridged-planar (Planar) 構造 (Fig.1) と ESPT によって生成した Tautomer の S₁ →S₀ 遷移に帰属した。レッドシフトした UV 蛍光を与える分子種についてピコ秒時間分解分光から情報が得られた。S₁ 状態の振電状態の減衰時間 (τ) は、0-0、+163 cm⁻¹、+744 cm⁻¹ のバンドについて、それぞれ >10 ns、900 ps、15 ps と測定された。この結果は、内部エネルギーの増加に伴い無輻射過程が著しく促進されることを示している¹⁾。TD-DFT 計算により、S₁ 状態において Planar 構造よりエネルギー的に安定な nonplanar cyclic (Cyclic) 構造が存在することが分かり、蛍光スペクトルのレッドシフトとτ値の減少が、Planar 構造から Cyclic 構造への水素結合ネットワークの再配列によることが示された。ごく最近、S₁ 状態の +163 cm⁻¹ より高い波数のバンドを励起して得られた IR スペクトルのパターンが Cyclic 構造によることが確認された。本研究の結果をもとに、モデルポテンシャルエネルギー曲線と異性化反応過程を Fig.1 に示した。

最近、Yu らによって 7AI-(H₂O)₃ の励起状態の構造と異性化反応のポテンシャルエネルギープロファイルの高精度量子化学計算 (CASPT2 など) が行われ、Fig.1 の異性化反応過程を支持する結果が得られた。また、Planar 構造からの励起状態 4 重プロトン移動のポテンシャル障壁と比べて Cyclic 構造からの励起状態 3 重プロトン移動のポテンシャル障壁がかなり低いことが示された²⁾。このように、実験と理論の interplay により、長年未解明であった 7AI-(H₂O)₃ の励起状態ダイナミクスが明らかにされた。

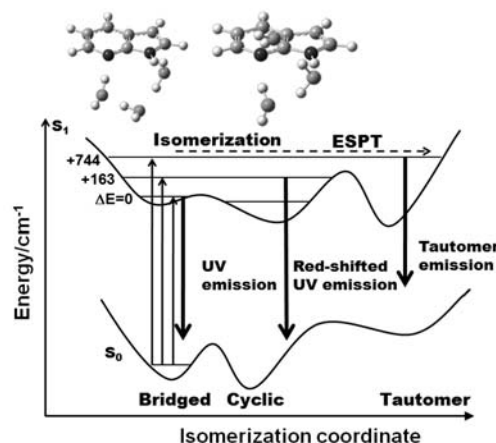


Fig. 1 7AI-(H₂O)₃ の異性化反応

1) G. A. Pino, I. Alata, C. Dedonder, C. Jouvét, K. Sakota, H. Sekiya, PCCP, **13**, 6325 (2011).

2) X.-F. Yu, S. Yamazaki, T. Taketsugu, J. Phys. Chem. A, **116**, 10566 (2012).