

我々はQED(Quantum ElectroDynamics, 量子電磁力学)に基づき定義された局所的な物理量を用いて、微小領域の物性評価を行っている [1]。量子力学では全空間での期待値を取り扱うため、局所的な寄与は失われる。一方で、場の量子論に基づいて定義された局所的な力学的物理量を取り扱えば、全く新しい観点から局所的描像を得ることができる。

近年のナノテクノロジーの進歩により、スピントロニクス分野においても観測・制御の技術が発達している。将来的な実験の更なる高精度・高分解能化により、全空間での期待値のみを記述する従来の量子力学的な計算手法では予測できない、局所的な効果が観測されることが期待される。そのため、デバイス内のような微小領域の物性評価を行うには、場の理論に立脚した局所的なスピンダイナミクスの描像が必要となる。

場の量子論において、立花により提唱されている量子電子スピン渦理論 [2] によって以下の電子スピンの運動方程式が導かれる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{s}_e(x) = \hat{t}_e(x) + \hat{\zeta}_e(x) \quad (1)$$

スピン角運動量密度 \hat{s}_e 、スピントルク密度 \hat{t}_e 、およびツェータ力密度 $\hat{\zeta}_e$ は以下のように定義される。

$$\hat{s}_e = \frac{\hbar}{2} \hat{\psi}^\dagger \Sigma^k \hat{\psi}, \quad \hat{t}_e = -\varepsilon_{ijk} \hat{\tau}_e^{\Pi ij}, \quad \hat{\zeta}_e = -\partial_i \hat{\phi}_5 \quad (2)$$

ここで、 $\vec{\Sigma}$ は 4×4 パウリ行列である。 ϕ_5 はツェータポテンシャルと呼ばれ、次のように表される。

$$\hat{\phi}_5 = \frac{\hbar c}{2} \hat{\psi}^\dagger \gamma_5 \hat{\psi} \quad \gamma_5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 \quad (3)$$

このように電子スピンの時間発展は、スピントルクとツェータ力により支配される。スピントルクは量子力学におけるハイゼンベルクの運動方程式に現れるトルクに対応するが、ツェータ力は局所的な効果を表し、量子力学では記述できない量である。これらは定常状態においても有限な値を持ち、空間の各点で拮抗することで電子スピンの定常状態は保たれる。

ツェータ力はツェータポテンシャルの勾配として記述され、ツェータポテンシャルは右手型電子と左手型電子の密度差に比例するため、ツェータポテンシャルは分子構造の対称性に関連した性質を持つ。分子軌道スピノルが n 回回転対称性を持つならばツェータポテンシャルも n 回回転対称性を持ち、分子軌道スピノルが鏡映対称性を持つならばツェータポテンシャルは鏡映面に対して符号が逆転する。

キラル分子ではエナンチオマー同士で正負の反転したツェータポテンシャル分布が得られる。またツェータポテンシャルを全空間で積分した値は、それぞれ符号が逆転した 0 でない有限な値を持つため、分子のキラリティーの違いにより電子のカイラリティーが異なっていることが確認できる。本研究では、簡単なキラル分子の様々な構造におけるスピントルクやツェータ力、ツェータポテンシャルについて調べる。

参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Model. 11, 301 (2005); J. Mol. Struct. (THEOCHEM), **943**, 138 (2010).
- [2] A. Tachibana, J. Math. Chem. **50**, 669-688 (2012).