

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 15 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25410012

研究課題名(和文) ストレステンソル密度とスピントルクによる量子遷移の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical study of quantum transition due to the stress tensor density and the spin torque

研究代表者

立花 明知 (Tachibana, Akitomo)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：40135463

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：二重スリット現象は、ファインマンが言うところの量子力学の「ミステリー」であり、それを時々刻々予言することはできないとされてきました。本研究成果として、量子力学ではなく場の量子論である量子電磁力学を用いることで時々刻々の予言が可能であることがわかりました。そのカギは「双対コーシー問題」(場の演算子と波動関数両方の時間発展)を解くことにあり、そのアルゴリズムが「アルファ振動子」(素粒子代数の数学的下部構造を構成するもの)理論により与えられることを発見しました。

研究成果の概要(英文)：The double slit phenomenon is the “mystery” of the quantum mechanics, quoting the Feynman’s word, and has been considered to be unpredictable step by step in time. As the result of our research, however, by using the quantum field theory, in particular quantum electrodynamics, instead of the quantum mechanics, it is shown to be predicted every moment. The key is solving the “dual Cauchy problem” (time evolution of both field operators and wavefunctions). Furthermore, the algorithm for its solution is shown to be provided by the theory of “alpha-oscillators”, which constitute a mathematical substructure of the algebra of particles.

研究分野：理論化学

キーワード： ストレステンソル密度 スピントルク密度 ツェータカ密度 スピン渦密度 双対コーシー問題 アルファ振動子

### 1. 研究開始当初の背景

QED (Quantum Electrodynamics; 量子電磁力学) に基づいて電子の局所的なストレステンソル密度により化学結合・反応性の本質を明らかにする試みは、研究代表者によって初めて行われ、その有用性・汎用性が実証されてきた。その主たる成果を以下に列挙すると、共有結合を表現するスピンドル構造の発見、エネルギー密度を用いた力学的な原理に基づく結合次数概念の確立、領域化学ポテンシャルによる化学反応座標の予言、がある。

ストレステンソル密度は、場の理論において運動量密度演算子の運動方程式に現れる量である。研究代表者は同時にスピン角運動量密度演算子の運動方程式において、ストレステンソルが与えるトルク(スピントルク)ともう一つ未知の力(ツェータ力)がスピンを駆動することを示した。ツェータ力は空間反転に対して特徴的にふるまう(符号を変える)カイラルカレントという量で表されることが興味深い。本研究グループではこれらの量を計算する相対論的電子状態計算コードを開発し、基礎的な性質を調べてきた。

ストレステンソルの応用の対象として、またスピントルクやツェータ力の可能性を探る研究対象としては量子遷移現象が有用である。その理由は以下の通りである：古典力学におけるストレステンソルは電磁気学のマクスウェル理論や重力のアインシュタイン理論に登場し、物質粒子に働く力を生み出している。量子力学におけるストレステンソル密度はシュレーディンガー場の理論や物質と重力の超対称性理論に登場し、物質粒子に働く力密度を生み出している。この量子力学的力密度が荷電粒子に作用し、古典力学的なローレンツ力密度と完全にバランスすれば量子力学的定常状態が生み出される。従って、このバランスの乱れは量子遷移を生み出すからである。

このような理論の具体的な応用研究対象として、キラリ光化学とスピントロニクス材料の解析が挙げられる。

(1) キラリ光化学は、広い意味ではキラリティーが関連した光反応を扱い旋光性や円二色性といった古くからある話題も含む。最近、円偏光によるキラリティーの発現へ注目が集まっている。これは円偏光した紫外線による医薬品の(絶対)不斉合成や光記録といった工業的な応用だけでなく、自然科学の大きな謎の一つである自然界のホモキラリティーを説明する手段としても注目され、多くの実験が行われている。

(2) スピントロニクスはスピンの特性を活用して、これまでの電子デバイスでは実現できない特性を実現するものである。このためにはスピントルクの制御が非常に重要であることが知られている。結果、スピントルクの実験的測定や理論的定式化が盛んに研究されている。

### 2. 研究の目的

本研究では、研究代表者により定式化された電子のストレステンソル密度・スピントルク密度・ツェータ力密度を用いて量子遷移現象の理論的研究を推進する。これまでの研究で開発した相対論・非相対論の系を対象とした量子遷移過程の計算プログラムを進展させ、多様な実在系への応用研究への道筋をつける。具体的な応用の研究対象として、キラリティーとスピントルクの解析を考えている。これらを上に挙げた量を用いて局所的に解析し、キラリティーが発現するメカニズムや、スピントロニクス材料のスピントルク特性を明らかにする。

### 3. 研究の方法

昨年度までに研究開発を進めた QED に立脚して非摂動的に量子遷移過程を計算する計算コードをさらに進展させ、多様な実在系への応用研究への道筋をつける。キラリ光反応系とスピントロニクス材料におけるストレステンソル・スピントルク・ツェータ力といった局所物理量を計算し、キラリティー発現のメカニズムやスピントルクが生み出されるダイナミクスを明らかにする。また、本研究は大きく分けて以下の 3 つの研究項目からなる。

- (1) 理論構築
- (2) 時間発展プログラム開発
- (3) 現象論的応用

### 4. 研究成果

- (1) 理論構築における成果は以下のようなものである。
- ① 超重力理論に基づくスピン渦理論における具体例の計算が行われた。
  - ② ブロッホ関数で表される電子状態の電子ストレステンソル密度において、平面波部分から液体的な振る舞いが現れることを解析的に示した。
  - ③ 量子ストレステンソル理論および量子スピン渦理論について、従来は準古典的な作用原理から導かれていた結果を単純超対称性のもと拡張して定式化し、量子的な作用に基づくものへと拡張した。
  - ④ 量子スピン渦理論における重力波の量子効果を示した。
  - ⑤ 場の量子論である QED の時間発展が場の演算子の時間発展とケットベクトルの時間発展の二元的(いずれの時間発展をも知る必要がある)であり、QED ハミルトニアンが時間に依存することに伴う定式化を行った。
  - ⑥ 漸近場によらない定式化を与えるために、素粒子(場の素励起; 粒子描像を具現)代数の数学的下部構造を構成する「アルファ振動子代数」を発見し、(i) 無限遠方で場がゼロと仮定する必要が無い、(ii) アルファ振動子の thermalization と 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、(iii) 繰り込み

定数は時々刻々 q-number として表現される、ことを見出した。

(2) プログラム開発における成果は以下のようなものである。

①遅延ポテンシャル項の積分について、必要な分子積分公式を導出し、コードに実装した。また、無限区間の振動積分を行う必要があるが、これについて二重指数関数型公式 (double exponential formula, DE 公式) による効率的な方法の実装を行った。

②演算子の時間発展に加えて波動関数の時間発展を行う部分のコード開発を行った。具体的にポジトロニウムの時間発展を取り扱い、量子状態が状態ベクトルを設定する時刻に依存することを示した。

③相互作用を記述する光子場の時間発展についての系統的な計算コードを開発した。その結果として、場の量子論に基づいて正しく記述される光子状態を得る thermalization の過程が、非常に重要であることを示した。電流と電磁場が矛盾なく得られるためには適切な thermalization 過程が必要であることがわかった。

(3) 現象論における成果は以下のようなものである。

①電子の電気双極子モーメント (EDM) がある場合のスピントルクの定式化を行った。Volkov 解に対する振る舞いを調べ、スピントルク、ツェータ力と直交した成分を持つことを示した。

②YbF 分子内部の EDM によるスピントルクの研究を行った。相対論的拡張のもとでは、EDM により誘起されるスピントルクは電場だけでなく磁場によっても誘起され、そのそれぞれの分布を計算した。分子全体へのトルクとしては電場によるものの方が強く作用することを示した。

③スピントルク密度に関しては、ツェータを作り出すポテンシャルであるツェータポテンシャルは、分子全体のものよりも1つの軌道だけが作るものの方が大きく、その互いの相殺によって小さなツェータポテンシャルが得られていたことを示した。電子の電気双極子モーメントに関わる有効電場は分子内部のスピン非対称分布によって作り出されていることを示した。

④物性分野への応用として、量子スピン渦理論とスピンホール効果の関連について研究を行った。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計19件)

① Hiroo Nozaki, Kazuhide Ichikawa, and Akitomo Tachibana “Theoretical study of atoms by the electronic kinetic energy density and stress tensor density” *International Journal of Quantum*

*Chemistry*, 116, 504-514 (2016)

DOI:10.1002/qua.25073 査読有

② Akitomo Tachibana “Time-dependent renormalization of alpha-oscillators for QED” *Journal of Mathematical Chemistry*, 54, 661-681 (2016)

DOI:10.1007/s10910-015-0587-2 査読有

③ Masahiro Fukuda, Kota Soga, Masato Senami, and Akitomo Tachibana “Local spin dynamics with the electron electric dipole moment” *Physical Review A* 93, 012518 (2016)

DOI:10.1103/PhysRevA.93.012518 査読有

④ Hiroo Nozaki, Masato Senami, Kazuhide Ichikawa, and Akitomo Tachibana “Tension density as counter force to the Lorentz force density” *Japanese Journal of Applied Physics*, 55, 08PE01(8) (2016)

DOI:10.7567/JJAP.55.08PE01 査読有

⑤ Masahiro Fukuda, Kota Soga, Masato Senami, and Akitomo Tachibana “Local physical quantities for spin based on the relativistic quantum field theory in molecular systems” *International Journal of Quantum Chemistry*, 116, 920-931 (2016)

DOI:10.1002/qua.25102 査読有

⑥ Masahiro Fukuda, Kazuhide Ichikawa, Masato Senami, Akitomo Tachibana “Dynamical Picture of Spin Hall Effect Based on Quantum Spin Vorticity Theory” *AIP Advances*, 6, 025108(8) (2016)

DOI:10.1063/1.4942087 査読有

⑦ David J. Henry, Kazuhide Ichikawa, Hiroo Nozaki, Akitomo Tachibana “Bonding in doped gallium nanoclusters: Insights from regional DFT” *Computational Materials Science*, 115, 145-153 (2016)

DOI:10.1016/j.commatsci.2016.01.008 査読有

⑧ Masahiro Fukuda, Kento Naito, Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana

“Computational Method for the Retarded Potential in the Real-Time Simulation of Quantum Electrodynamics” *International Journal of Quantum Chemistry*, 116, 932-938 (2016)

DOI:10.1002/qua.25103 査読有

⑨ Akitomo Tachibana “General relativistic symmetry of electron spin vorticity” *Journal of Mathematical Chemistry*, 53, 1943-1965 (2015)

DOI:10.1007/s10910-015-0528-0 査読有

⑩ Hiroo Nozaki, Yuji Ikeda, Kazuhide Ichikawa, and Akitomo Tachibana

“Electronic Stress Tensor Analysis of Molecules in Gas Phase of CVD Process for GeSbTe Alloy” *Journal of Computational Chemistry*, 36, 1240-1251 (2015)

DOI:10.1002/jcc.23920 査読有

⑪ Kazuhide Ichikawa, Hiroo Nozaki and Akitomo Tachibana, “Use of Electronic Stress Tensor Density and Energy Density in Chemistry”, Proceedings for THERMEC’ 2013 Materials Science Forum Vols. 783-786 (2014) 2207-2212

DOI:10.4028/www.scientific.net/MSF.783-786.2207 査読有

⑫ Akitomo Tachibana “Electronic stress tensor of chemical bond”, Indian J. Chem. 53A, 1031-1035 (2014) Special Issue on Chemical Reactivity Theory Guest Editor: Prof. Pratim Kumar Chattaraj NISCAIR Online Periodicals Repository (NOPR) at [http://www.niscair.res.in/sciencecommunication/researchjournals/rejour/ijca/ijca2k14/ijca\\_aug\\_sep14.asp](http://www.niscair.res.in/sciencecommunication/researchjournals/rejour/ijca/ijca2k14/ijca_aug_sep14.asp) 査読有

⑬ Kazuhide Ichikawa, Masahiro Fukuda and Akitomo Tachibana,

“Study of Simulation Method of Time Evolution of Atomic and Molecular Systems by Quantum Electrodynamics”, International Journal of Quantum Chemistry, 114, 1567-1580 (2014)

DOI:10.1002/qua.24726 査読有

⑭ Masato Senami, Soujiro Takada, and Akitomo Tachibana “Description of Photon Field in Dynamics Simulation of Bound States Based on Quantum Field Theory”, JPS Conference Proceedings 1, 016014(5), (2014)

DOI:10.7566/JPSCP.1.016014 査読有

⑮ Akitomo Tachibana “Stress Tensor of Electron as Energy Density with Spin Vorticity”, J. Comput. Chem. Jpn., Vol. 13, No. 1, 18-31 (2014)

DOI:10.2477/jccj.2013-0012 査読有

⑯ Masato Senami, Masahiro Fukuda, Yoji Ogiso, Akitomo Tachibana “Torque for electron spin induced by electron permanent electric dipole moment”, AIP Conference Proceedings 1618, 954-957 (2014)

DOI:10.1063/1.4897891 査読有

⑰ Masahiro Fukuda, Masato Senami, Yoji Ogiso, Akitomo Tachibana “Local spin torque induced by electron electric dipole moment in the YbF molecule”, AIP Conference Proceedings 1618, 958-962 (2014)

DOI:10.1063/1.4897892 査読有

⑱ Yuji Ikeda, Masato Senami, and Akitomo Tachibana, “A Non-Hermitian Coupled Perturbed Hartree-Fock Method for Complex Potentials and Calculations of Electronic Structures with Electric Currents”, Transactions of the Materials Research Society of Japan, 38[3] pp. 397-404 (2013)

DOI:10.14723/tmrsj.38.397 査読有

⑲ Masato Senami, Youji Ogiso, Toshihide Miyazato, Fumiya Yoshino, Yuji Ikeda, and Akitomo Tachibana “Rigged QED Analysis of Local Dielectric Response”, Transactions of the Materials Research Society of Japan, 38[4] pp. 535-544 (2013)

DOI:10.14723/tmrsj.38.535 査読有

[学会発表] (計 111 件)

① Akitomo Tachibana “Use of Electronic Stress Tensor Density and Energy Density in Chemistry” THERMEC’ 2013, 2013 年 12 月 4 日, USA (招待講演)

② Masato Senami “Time evolution of quantum system based on QED: Formulation and Simulation” 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, 2013 年 12 月 5 日, Nara, Japan (招待講演)

③ Akitomo Tachibana “Spin vorticity and stress tensor of electron” Modeling and Design of Molecular Materials 2014 (MDMM2014), 2014 年 7 月 1 日, Poland (招待講演)

④ Akitomo Tachibana “Electronic stress tensor of chemical bond.” 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), 2014 年 10 月 7 日, Chile (招待講演)

⑤ Kazuhide Ichikawa “Study of Spacetime-Resolved Simulation Method Based on QED” 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), 2015 年 10 月 12 日, Slovakia (招待講演)

[図書] (計 1 件)

Masahiro Fukuda, Masato Senami, Akitomo Tachibana, “Spin Torque and Zeta Force in Allene Type Molecules”, Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Volume 27; Eds. Matti Hotokka, Erkki J. Brändas, Jean Maruani, Gerardo Delgado-Barrio; Springer, 2013, Chapter 7, pp 131-139. DOI:10.1007/978-3-319-01529-3\_7

[その他]

ホームページ情報

QEDynamics

<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>

国際シンポジウム開催(2016年3月7-9日)  
Symposium: New Generation Quantum Theory -Particle Physics, Cosmology, and Chemistry-

(シンポジウム「新世代量子力学 -素粒子・宇宙・化学-」)

[http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/symposium/01\\_top.html](http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/symposium/01_top.html)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

立花 明知 (TACHIBANA, Akitomo)  
京都大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号：40135463

### (2) 研究分担者

瀬波 大土 (SENAMI, Masato)  
京都大学・大学院工学研究科・講師  
研究者番号：40431770  
市川 和秀 (ICHIKAWA, Kazuhide)  
京都大学・大学院工学研究科・助教  
研究者番号：50401287

### (3) 連携研究者