

# 第 1 章

## 多極子と量子論

### 1.1 ミクロな多極子の演算子表現

#### 電気多極子演算子の導出

電荷密度演算子  $\hat{\rho}(\mathbf{r})$  を周りの位置  $\mathbf{r}_j$  にある電子からの寄与として表す。

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = -e \sum_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (1.1)$$

これより、電気多極子演算子は

$$\hat{Q}_l^m = \int d\mathbf{r}' O_l^m(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') = -e \sum_j \int d\mathbf{r}' O_l^m(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) = -e \sum_j \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \quad (1.2)$$

となる。

#### 磁気多極子演算子の導出

次に、磁気多極子の演算子表現を得るため、電流の由来は軌道運動と、スピンによるものの2つがあるので、それぞれの電流演算子を  $\hat{\mathbf{j}}^{(o)}(\mathbf{r})$ ,  $\hat{\mathbf{j}}^{(s)}(\mathbf{r})$  とする。まずは磁化  $\mathbf{M}$  を求めよう。軌道運動による磁化は角運動量にボーア磁子をかけたものであることより位置  $\mathbf{r}_j$  における角運動量の作る磁化を足していくと、

$$\hat{\mathbf{M}}^{(o)}(\mathbf{r}) := -\mu_B \sum_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \hat{\mathbf{L}}_j \quad (1.3)$$

となる。<sup>\*1</sup> <sup>\*2</sup>古典電磁気との類推により

$$\hat{\mathbf{M}}^{(o)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2c} \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{j}}^{(o)}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

を満たすと考えられる。この形ならば、磁気多極子の定義の中に現れているのでこれより磁気多極子の軌道成分は

$$\hat{M}_m^{l(o)} = \frac{1}{c(l+1)} \int d\mathbf{r}' \nabla O_l^m(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r}' \times \hat{\mathbf{j}}^{(o)}(\mathbf{r}')) \quad (1.5)$$

$$= \frac{1}{l+1} \int d\mathbf{r}' \nabla O_l^m(\mathbf{r}') \cdot \left( -2\mu_B \sum_j \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \hat{\mathbf{L}}_j \right) \quad (1.6)$$

$$= -\mu_B \sum_j \nabla O_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot \frac{2\hat{\mathbf{L}}_j}{l+1} \quad (1.7)$$

となる。スピンによる磁化はパウリ演算子を  $\sigma$  として

$$\mathbf{M}^{(s)}(\mathbf{r}) = -\mu_B \sum_j \sigma_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (1.8)$$

<sup>\*1</sup> この文章内では  $\hat{\mathbf{L}} = -i\mathbf{r} \times \nabla$

<sup>\*2</sup> 量子化する際、角運動量演算子等の微分演算子が  $\nabla O_l^m(\mathbf{r})$  や  $\delta(\mathbf{r})$  にかからないようにして、ケットに作用するように作っていることに注意。

でとなる。また、磁化を使うと電流は  $\mathbf{j} = c \nabla \times \mathbf{M}$  よりスピンの電流は

$$\hat{\mathbf{j}}^{(s)}(\mathbf{r}) = c \nabla \times \mathbf{M}^{(s)}(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

これより

$$\hat{M}_m^{j(s)} = \int d\mathbf{r}' \nabla O_l^m(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}^{(s)} \quad (1.10)$$

$$= -\mu_B \int d\mathbf{r}' \nabla O_l^m(\mathbf{r}') \cdot \left\{ \sum_j \sigma_j \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \right\} \quad (1.11)$$

$$= -\mu_B \sum_j \nabla O_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot \sigma_j \quad (1.12)$$

なので磁気多極子演算子は

$$\hat{M}_l^m = -\mu_B \sum_j \nabla \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{m}_l(\mathbf{r}_j) \quad (1.13)$$

$$\mathbf{m}_l(\mathbf{r}) = \frac{2\hat{\mathbf{L}}}{l+1} + \sigma \quad (1.14)$$

というように得られる。

### 1.1.1 磁気トロイダル多極子演算子の導出

同様にして軌道成分とスピン成分にわけて、磁気トロイダル多極子の演算子を導出しよう。 $\nabla \cdot \mathbf{j} = c \nabla \cdot \nabla \times \mathbf{M} = 0$  のもと成り立つ次の関係式を使う

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{j})) \cdot \nabla O_l^m(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} \left[ \nabla \cdot \left\{ (\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{j})) O_l^m(\mathbf{r}) \right\} - O_l^m(\mathbf{r}) \nabla \cdot (\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{j})) \right] = - \int d\mathbf{r} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kpq} \partial_i (x_j x_p j_q) O_l^m \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$= - \int d\mathbf{r} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kpq} (\delta_{ij} x_p j_q + x_j \delta_{ip} j_q + x_j x_p (\partial_i j_q)) O_l^m \quad (1.16)$$

$$= \int d\mathbf{r} \left[ -\varepsilon_{pjk} \varepsilon_{kpq} x_j j_q O_l^m(\mathbf{r}) - (\delta_{ip} \delta_{jq} - \delta_{iq} \delta_{jp}) x_j x_p (\partial_i j_q) O_l^m(\mathbf{r}) \right] \quad (1.17)$$

$$= \int d\mathbf{r} \left[ -2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) - x_q x_p (\partial_p j_q) O_l^m(\mathbf{r}) + r^2 (\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) \right] \quad (1.18)$$

$$= \int d\mathbf{r} \left[ -2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) - \partial_p (x_q x_p j_q O_l^m(\mathbf{r})) + \partial_p (x_q x_p) j_q O_l^m(\mathbf{r}) + x_q x_p j_q (\partial_q O_l^m(\mathbf{r})) \right] \quad (1.19)$$

$$= \int d\mathbf{r} \left[ -2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) + 3x_q j_q O_l^m(\mathbf{r}) + \delta_{pq} x_q j_q O_l^m(\mathbf{r}) + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) \left\{ \mathbf{r} \cdot \nabla O_l^m(\mathbf{r}) \right\} \right] \quad (1.20)$$

$$= \int d\mathbf{r} \left[ 2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) \left\{ r \frac{\partial}{\partial r} r^l Z_l^m(\theta, \varphi) \right\} \right] \quad (1.21)$$

$$= (l+2) \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) \quad (1.22)$$

これより、

$$\hat{T}_l^{m(o)} = \frac{1}{c(l+1)} \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{j}}^{(o)}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

$$= \frac{1}{c(l+1)(l+2)} \int d\mathbf{r} \nabla O_l^m(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{j}}^{(o)})) \quad (1.24)$$

$$= \frac{-2\mu_B}{(l+1)(l+2)} \sum_j \nabla \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{L}}_j) \quad (1.25)$$

となる。スピンについては

$$\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{j}}^{(s)}(\mathbf{r}) = c \mathbf{r} \cdot (\nabla \times \mathbf{M}^{(s)}(\mathbf{r})) = -c \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{M}^{(s)}(\mathbf{r})) \quad (1.26)$$

を使うと

$$\hat{T}_l^{m(s)} = \frac{1}{c(l+1)} \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})) O_l^m(\mathbf{r}) \quad (1.27)$$

$$= -\frac{1}{l+1} \int d\mathbf{r} O_l^m(\mathbf{r}) \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{M}^{(s)}(\mathbf{r})) \quad (1.28)$$

$$= \frac{1}{l+1} \int d\mathbf{r} \nabla O_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{M}^{(s)}(\mathbf{r})) \quad (1.29)$$

$$= -\frac{\mu_B}{l+1} \sum_j \nabla \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_j \times \sigma_j) \quad (1.30)$$

よって、磁気トロイダル多極子演算子は

$$\hat{T}_l^m = -\mu_B \sum_j \nabla \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{t}_j(\mathbf{r}_j) = -\mu_B \sum_j \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{t}_j(\mathbf{r}_j) \quad (1.31)$$

$$\mathbf{t}_j(\mathbf{r}_j) = \frac{\mathbf{r}_j}{l+1} \times \left( \frac{2\hat{\mathbf{L}}_j}{l+2} + \sigma_j \right) \quad (1.32)$$

となる。ここで  $\overleftarrow{\nabla}$  は左にある関数を微分しろという意味の演算子である。申し訳ないことに変な演算子を導入したが、次の節のためにナブラの位置をずらす必要がある。

実際には  $\mathbf{t}_j$  内の演算子を対象化してエルミートにすることで、磁気トロイダル多極子演算子の固有値を実数にする必要がある。

## 電気トロイダル多極子の導出

電気トロイダル多極子についても同様にすれば得られるように思われるかもしれない。しかし、古典的な多極子放射で現れないように、演算子の定義にも注意が必要である。いろいろ試す方法はあるけれど、電気多極子演算子を再現するような磁流密度をうまく定義して、それを電気トロイダル多極子演算子に適用しようとする、 $\hat{G}_l^m = 0$  になってしまうようである。<sup>\*3</sup>

楠瀬先生のグループが見つけたいい方法を紹介していく。電気多極子演算子と磁気トロイダル多極子演算子のパリティに注目すると時間反転だけが異なっている。多極子演算子の中身を見ると

$$\hat{Q}_l^m = -e \sum_j \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j), \quad = -\mu_B \sum_j \hat{O}_l^m(\mathbf{r}_j) \overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{t}_j(\mathbf{r}_j) \quad (1.33)$$

となっている。これを見てみると、電気素量  $e$  がボーア磁子  $\mu_B$  に代わり、右から

$$\overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{t}_j \quad (1.34)$$

という演算子が作用した形になっている。<sup>\*4</sup>電気素量からボーア磁子に変えているのは電気から磁気に変えていると考えると、時間反転にかかわる部分は  $\overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{t}_j$  の部分である。

これからの類推をすると、磁気多極子演算子をもとに電気トロイダル多極子演算子を考えることができそうである。磁気多極子演算子のボーア磁子  $\mu_B$  を電気素量  $e$  に変えて、 $\overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{t}_j$  をいい感じのところにに入れてみると

$$\hat{G}_l^m = -e \sum_j \left[ [\nabla O_l^m(\mathbf{r}_j)] \overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{t}_j \right] \cdot \mathbf{m}_l \quad (1.35)$$

となる。これを成分で書くと意味ありげな、

$$\hat{G}_l^m = -e \sum_j \left[ \nabla_\alpha \nabla_\beta O_l^m(\hat{\mathbf{r}}_j) \right] g_l^{\alpha\beta}(\hat{\mathbf{r}}_j) \quad (1.36)$$

$$g_l^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_j) = t_l^\alpha(\mathbf{r}_j) m_l^\beta(\mathbf{r}_j) \quad (1.37)$$

という表式が得られる。<sup>\*5</sup>

<sup>\*3</sup> そりゃモノポールなんて存在しないものを使って定義するのは難しいものがあるんじゃない？ Dirac モノポールとかグローバルに整合するような定義がないのでゲージ変換でつじつま合わせてるし。

<sup>\*4</sup> この notation はオリジナルなのでここからの表記であってかわからない。

<sup>\*5</sup>  $O_l^m(\mathbf{r})$  の曲率を計量  $g^{\alpha\beta}$  のなかで集めて足した代物のようにも見える。