



第一回琉球大学計算科学シンポジウム “素粒子と物性・化学は協力し合える！” プログラム

2017年6月23日(金)～25日(日)

場所：琉球大学工学部1号館3階322室

実行委員

琉球大学工学部 大西拓(客員研究員)・下地伸明(助教)

琉球大学理学部 柳澤将(准教授)

協賛：京都大学 SPIRITS 「革新的量子状態計算により迫る素粒子・宇宙の謎」
(SPIRITS 担当者：瀬波大土、津村浩二)

URL：http://www.cc.u-ryukyu.ac.jp/~nshimoji/06_seminar.html



京都大学
KYOTO UNIVERSITY

SPIRITS
SUPPORTING PROGRAM FOR INTERACTION-BASED
INITIATIVE TEAM STUDIES

=====
1日目：6月23日金曜日
=====

セッション1

座長：柳澤将

14:30-14:35 あいさつ

14:35-14:50 瀬波大土 “素粒子と物性・化学の協働がもたらすもの”

14:50-15:05 大西拓 “量子計算化学における波動関数解析”

15:05-16:05 津村浩二 “原子を使ったニュートリノ質量分光”

休憩

セッション2

座長：津村浩二

16:20-17:20 田中実 “素粒子の新しい相互作用と原子スペクトルにおける同位体効果”

17:20-17:50 佐藤丈 “レプトンフレーバーの破れを見る新しい実験の提案”

夕食会

=====
2日目：6月24日土曜日
=====

セッション3

座長：瀬波大土

13:00-13:30 小林広和 “電子スピン共鳴法による有機一次元細孔内の
有機ラジカルの分子配向と運動の研究”

13:30-14:00 伊藤圭人 “鏡像異性体分子中の電子カイラリティ非対称性が導く
生体のパリティの破れ”

休憩

セッション4

座長：瀬波大土、大西拓

14:15-14:45 福島啓悟 “電子状態計算を用いた局所的な誘電特性の評価方法の
定義とその応用”

14:45-15:15 柳澤将 “有機半導体結晶における電子準位・バンド構造の理論的
決定”

15:15-15:30 下地伸明 “雷放電路の色分析：天文測光学の応用”

休憩

セッション5

座長：田中実

15:45-16:45 瀬名波栄問 “素粒子衝突過程におけるバンド構造の効果”

16:45-17:15 山中真人 “Asymmetry of matter/antimatter in the universe
generated by a quantum interference effect”

17:15-17:45 高橋俊貴 “電子の電気双極子モーメントと場の量子論に基づく
スピントルク描像”

休憩

ナイトレクチャー

19:00-19:30 佐甲徳栄 “人工原子における電子相関と多体波動関数”

懇親会

=====
3日目：6月25日日曜日
=====

フリーディスカッション



第一回琉球大学計算科学シンポジウム “素粒子と物性・化学は協力し合える！” アブストラクト

“素粒子と物性・化学の協働がもたらすもの” 京都大学 大学院工学研究科 マイクロエンジニアリング専攻 瀬波大士

京都大学の融合チーム研究プログラム(SPIRITS)「革新的量子状態計算により迫る素粒子・宇宙の謎」の概要と意義について紹介する。このプロジェクトでは、素粒子物理と量子物性の両分野の研究手法を融合し、これまでにない手法により素粒子・宇宙の謎に迫ることを目的としている。素粒子と物性・化学の研究者の交流が生み出す派生効果として、物性・化学の分野では利用が限定的であった場の量子論を量子物性・量子化学の分野への導入をさらに進めることにより、新たな研究領域を開拓することも目的としている。

“量子計算化学における波動関数解析” 三重大学極限ナノエレクトロニクスセンター 大西拓

量子計算化学の基本方程式は、Schrödinger 方程式である。Hartree-Fock 法を適用することによって1電子のHartree-Fock方程式が導かれ、その解が分子軌道となる。(密度汎関数法では、Kohn-Sham方程式が導かれる)分子軌道は、実空間の波動関数であり、波動関数を解釈することによって、電子状態・化学結合を理解しなければならない。我々は、得られた分子軌道に対して、化学結合特性を判定する「化学結合則」を理論構築した。このルールを適用することによって、イオン伝導体における伝導イオンの化学結合を判定することができるようになった。

[チュートリアル講演] “原子を使ったニュートリノ質量分光” 京都大学 大学院理学研究科 物理学第二教室 津村浩二

ニュートリノ振動現象によりニュートリノ質量の存在は疑いない。しかし、その微小質量の決定は依然として素粒子物理学の重要課題である。ニュートリノ質量は新たな物理スケールを示唆し、また物質・反物質非対称宇宙の種を供給する可能性があり、理論的にも非常に興味深い。本講演では、原子からの光を伴うニュートリノ対放射に注目する。放射された光のエネルギースペクトルを高精度で測ることで、ニュートリノ質量の情報を引き出すことができる(ニュートリノ質量分光)。この実験の実現には、反応率の増幅や背景事象の制御などの問題がある。その解決方法について紹介したい。

[チュートリアル講演] “素粒子の新しい相互作用と原子スペクトルにおける同位体効果” 大阪大学 大学院理学研究科 物理学専攻 田中実

2012年のヒッグス粒子の発見により素粒子の標準模型が実験的に確立した。現在の素粒子物理は、暗黒物質や宇宙バリオン数等の未解決問題の解明に向けた「新しい物理」の探索という方向で展開している。

一方、原子物理分野では、次世代の周波数標準となる光時計の開発が進んでおり、17桁を越える精度の分光技術が実現されている。本講演では、この精密分光による新しい物理の探索の可能性について議論する。注目するのは原子スペクトルにおける同位体効果(isotope shift, IS)である。原子内に作用する新しい相互作用によるISを評価し、ISの精密測定から期待される探索感度を議論する。

“レプトンフレーバーの破れを見る新しい実験の提案”

埼玉大学 大学院理工学研究科 佐藤丈

標準理論ではレプトンフレーバーは厳密に保存するので、標準理論を超える物理を探る手段としてレプトンフレーバーの破れの観測が行われてきた。ニュートリノ振動現象から確実に破れていることは分かっているものの、標準理論を最小限拡張したモデルでは荷電レプトンでのレプトンフレーバーの破れが大変小さいことも分かっている。しかし、一般には標準理論を超える物理を考えると大きな破れが期待できるので、その探索は精力的に行われている。

ミューオンを用いた実験としては、 $\mu \rightarrow e \gamma$ 、 $\mu \rightarrow e$ 転換、 $\mu \rightarrow eee$ という三種類の実験が行われてきた。これらの発見が待たれる現状であるが、もし見つかったとすると、それぞれのモードの大きさは標準理論を超える物理によって様々な予言がなされている。しかも、その予言をもとに理論を分類しようとしても、完全にはモデルが分類できないことが分かっている。

そこで、この研究ではミューオン原子中で $\mu \rightarrow ee$ という新しいモードを提案し、その感度についての詳細な計算を説明する。

“電子スピン共鳴法による有機一次元細孔内の有機ラジカルの分子配向と運動の研究”

昭和大学 富士吉田教育部 小林広和

近年、[(有機一次元細孔)-(有機ラジカル)]包接体を合成し、一次元スピン鎖を有する新規有機磁性体を構築する試みが様々なされている。このような物質が示すスピン間相互作用は、包接された有機ラジカルの一軸性分子運動と相関をもつ可能性が提案されている。ナノ空間内の有機ラジカルの分子配向や運動を詳細に調べる上で、電子スピン共鳴(ESR)は重要なツールである。今回は磁気共鳴の基本原理解を述べつつ、有機一次元細孔内の phenylnitronylnitroxide および phenyliminonitroxide ラジカルの示す ESR スペクトルを ESR シミュレーションソフト EasySpin で再現し、その分子配向や運動について述べる。

“鏡像異性体分子中の電子カイラリティ非対称性が導く生体のパリティの破れ”

京都大学 大学院工学研究科 マイクロエンジニアリング専攻 伊藤圭人

アミノ酸や糖などの自然界の生体分子は2つの鏡像異性体の内、一方しか存在しない。その起源は未だ謎であるが、最初に何らかの鏡像異性体の均衡の破れが生じ、それが増幅されて大きな鏡像異性体過剰に至ったと広く考えられている。最初の均衡の破れがどのように生じたかは解明されておらず様々な議論がなされている。我々はこれまで注目されてこなかった分子全体での電子カイラリティの非対称性が鏡像異性体間で弱い相互作用の反応率の差を生むことを提案し、その反応率の差が鏡像異性体過剰に及ぼす効果についての検討を行っている。本講演では、いくつかの鏡像異性体分子について電子カイラリティの非対称性を報告する。

“電子状態計算を用いた局所的な誘電特性の評価方法の定義とその応用”

福井大学 大学院工学研究科 機械工学専攻 福島啓悟

ナノスケールのデバイスにとって欠陥や不純物、界面といった材料の不均一性がもたらす物性値の変化の影響は非常に大きく、ときには破壊の原因などにもなる。このような系の不均一性による変化を評価する手法として空間分布を捉える方法は非常に有効である。そこで我々は電子の電場応答によって生じるポテンシャルの変化に着目し、局所的な誘電特性を定義する。その局所的な誘電率を用いて、不純物による結合の変化や界面領域での応答の変化などを明らかにする。

“有機半導体結晶における電子準位・バンド構造の理論的決定”

琉球大学 理学部 物質地球科学科 物理系 柳澤将

有機分子からなる材料が次世代エレクトロニクス材料の候補として注目され、材料中のキャリア(正孔・電子)移動の機構の基礎的理解が求められている。化学結合に比べ、一般に分子間相互作用は一桁以上小さいため、結晶中でも、孤立した分子間を飛び移るキャリアの描像が重要と考えられてきた。しかし近年、一部の単結晶などで、バンド構造の実験的観測が報告され、分子間に非局在化したパイ電子のキャリア移動での役割が注目されている。本発表では有機半導体のバルクや表面での電荷準位を多体摂動論の方法で理論的に決定する例を紹介し、電荷準位を決定する物理的要因について議論する。

“雷放電路の色分析：天文測光学の応用”
琉球大学 工学部 工学科 電気システム工学コース 下地伸明

我々は雷の新しい分析手法を確立するため、雷放電路の色分析に取り組んでいる。分析には雷放電が写ったデジタル画像(画像提供：青木豊)を使用した。また天文学の分野の色指数を用いている。しかし、天文学ではUBVRcIcシステムなど独自の測光システムが用いられるが、雷画像はRGBシステムで撮影されていることや、天体と雷では対象が違うことなどによって、色指数の分析には若干の違いが生じてくる。色指数で雷放電路を見ると、空間的に色の強度が変化している結果が得られた。特に、電流が強い放電路付近のブランチリーダーは短波長のBバンドの光が強まっている結果が得られた。これはZピンチ効果によると考えられる。

[チュートリアル講演] “素粒子衝突過程におけるバンド構造の効果”
国立台湾大学 物理学系 瀨名波栄問

素粒子標準模型では量子異常と呼ばれる現象によってバリオン数(陽子は1)を破る過程の存在が予言されているが、実験的には未検証である。90年代に、とりわけ高エネルギー加速器でのバリオン数非保存過程の検出可能性について活発な議論がなされたが、否定的な結論が大多数であった。ところが、2015年にTyeとWongらによって、その当時の計算では考慮されていなかった効果(周期ポテンシャルによるバンド構造)によって、バリオン数非保存過程の確率が増大することが指摘され、検出可能性の議論が再燃している。このトークでは、バリオン数非保存過程についてレビューをし、その後、彼らの主張の真偽を確かめる。またこの過程が重要な役割を果たす宇宙の物質-反物質不均衡問題に対するインパクトも議論する。

**“Asymmetry of matter/antimatter in the universe
generated by a quantum interference effect”**
京都産業大学 益川塾 山中真人

この宇宙は物質のみで構成されており、反物質の量はごくわずかです。ところが、標準的な宇宙物理・素粒子物理で考えると、物質と反物質は初期宇宙で同じ数だけ生み出されます。今の宇宙に物質だけが残った理由は明らかになっていません。物質・反物質非対称を解決案として、共鳴レプトン数生成と呼ばれる機構が有力視されています。この機構では右巻きニュートリノと呼ばれる粒子が、性質がよく似た粒子と量子干渉しながら崩壊することで、物質・反物質非対称をもたらします。本講演では、高温・高密度の膨張宇宙における右巻きニュートリノの数密度、この量子干渉効果の度合、そして、もたらされる物質・反物質非対称を非平衡統計の手法(Kadanoff-Baym方程式)を用いて導きます。

“電子の電気双極子モーメントと場の量子論に基づくスピントルク描像”
京都大学 大学院工学研究科 マイクロエンジニアリング専攻 高橋俊貴

電子は古典的には負電荷を持つ点粒子に過ぎないが、量子論においてはスピンというベクトル量を持ちそれに付随して電荷分布の偏りが生まれる。これが電子の電気双極子モーメント(EDM)である。この電子EDMは今までに検出はされていないが、EDMの存在は時間反転対称性破れの直接的な証拠になるため、多くの探索実験が行われている。電子EDMの探査には、分子内部の有効電場とそれに依存するスピンの歳差運動を捉える必要がある。本講演では、我々の研究グループによるEDMの有効電場計算と、場の理論に基づくスピンドYNAMIKSの視点からのEDM実験におけるスピン歳差運動の描像について紹介する。

[ナイトレクチャー] “人工原子における電子相関と多体波動関数”
日本大学理工学部 佐甲徳栄

半導体微細加工技術の飛躍的進展によって、現在ナノスケールの低次元井戸に少数の電子を閉じ込めることが可能となっている。このような系は人工原子あるいは量子ドットと呼ばれ、新規な物性を示す少数多体系として近年大きな注目を集めている。人工原子は、電子相関が非常に大きく、相関エネルギーが全エネルギーの10パーセント以上にも達するため、独立粒子モデルに基づく従来の電子状態理論の枠組みに対して本質的な問題を提示する。本講演では、この複雑な波動関数を持つ人工原子のエネルギースペクトルおよび電子相関について、フェルミ孔および共役フェルミ孔に着目した解析を紹介する。
