

平成31年 4月23日

若手研究者海外挑戦プログラム報告書

独立行政法人日本学術振興会 理事長 殿

受付番号 201880193

氏名 石川 彩光

(氏名は必ず自署すること)

若手研究者海外挑戦プログラムによる派遣を終了しましたので、下記のとおり報告いたします。
なお、下記記載の内容については相違ありません。

記

- 派遣先: 都市名 トゥールーズ (国名 フランス)
- 研究課題名 (和文) : QED 効果を考慮した高精度電子状態理論の開発—新規素粒子理論構築を目指して—
- 派遣期間: 平成30年 4月 1日 ~ 平成31年 3月 31日 (365日間)
- 受入機関名・部局名: University of Paul Sabatier
- 派遣先で従事した研究内容と研究状況 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

近年の計算資源および計算技術の発展により、相対論効果および電子相関効果を考慮した高精度電子状態計算が可能になってきた。更なる精度向上のためには、自己エネルギー効果、真空偏極効果等の量子電磁気学(QED)効果を考慮する必要がある。

厳密な QED の枠組みにおける計算は、数電子原子においては報告されているものの、計算コストが高いため、多電子系に応用することはできない。より実用的であるが近似的なアプローチは、QED 効果を考慮するための有効ポテンシャルの導入である。原子系においては有効ポテンシャルを用いた QED 計算を行うためのプログラムが報告されており、実験値と非常によく一致することが報告されている。一方分子については、QED 効果を考慮した擬ポテンシャル、及びパラメータフィッティングされたモデルポテンシャルを用いた計算が報告されているのみであった。

当研究では、分子専用の全電子 4 成分相対論計算プログラム DIRAC に、QED 効果を考慮するための有効ポテンシャルを実装した。実装したポテンシャルは、真空偏極効果を考慮するための Uehling ポテンシャル、自己エネルギー効果を考慮するための Pekka, Zhao のモデルポテンシャル、Flambaum, Ginges の有効ポテンシャルの 3 種類である。これらの 1 電子積分は、数値的に計算した。これらの QED ポテンシャルは、DIRAC プログラムに実装されている全ての計算方法と組み合わせることが出来る。既存の原子専用のプログラムによる計算結果と比較し、申請者が作成したプログラムが正確に作動することを確認した。

6. 研究成果発表等の見通し及び今後の研究計画の方向性 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

現段階で論文執筆には至っていないものの、プログラムは大方完成しているため、テスト計算の結果を2019年7月に開催される国際学会 10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics で報告する予定である。また、2019年度以内に論文を執筆する予定である。

今後の研究計画としては、(1)プログラムの高速化、(2)応用計算、(3)原子軌道に依存する有効ポテンシャルの導入が挙げられる。

(1) プログラムの高速化については、現在のプログラムを用いた Au_2 分子でのテスト計算では、QED 部分の計算だけで3時間程度の時間が掛かる。これは通常の相対論計算と比べて5倍程度余計に時間が掛かる。数値計算ライブラリを使用するためのアルゴリズムを開発したり、並列計算を導入したりする予定である。十分な高速化が得られた後、(2)応用計算を行う。

(2) 応用計算については、イオン化エネルギー、電子親和力などの外殻軌道由来の物性は、擬ポテンシャルを用いた QED 計算でも良い精度が得られることが知られている。当研究では、内殻軌道が寄与する物性の応用計算に取り組む予定である。磁気物性、内殻軌道の励起やイオン化スペクトル、電子の電気双極子モーメント探索のために必要な有効電場を予定している。応用計算を流し、計算が終了するのを待っている間に、(3)を行う。

(3) 原子軌道に依存する有効ポテンシャルの導入については、現在までに実装した有効ポテンシャルは、原子の相対論的軌道 (例: $s_{1/2}$, $p_{1/2}$, $p_{3/2}$) によって異なるものではなく、原子番号および原子核と電子間の距離のみに依存するものであった。これでも定性的に十分な値が得られるものの、より精度を上げるため、原子の相対論的軌道に依存するポテンシャルを実装する予定である。

7. 本プログラムに採用されたことで得られたこと (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

フランスの中では、パリには多くの日本人が住んでいる一方で、私が住んでいたトゥールーズ市には日本人はほとんどいない。特に大学内や住んでいるアパートの周辺では、日本人を見かけたことはなかった。日本人がいない環境下で1年間無事に生活を送った経験は、研究活動に限らず、今後の人生に強く自信が持てるようになった。

また、この1年間で非常に大きな研究の進捗があったため、本プログラムの滞在期間終了後も滞在させていただくことにした。そのためには、VISAの有効期間の延長を行う必要がある。手続きの書類は全てフランス語で書かれており、私一人で書類作成を行うことは到底不可能であったが、フランスで出来た友人の力を借りつつ、有効期間の延長手続きに成功した。フランスで出来た友人とは、coffee break を共にするだけでなく、休日に外出する等私的な交流もある。海外で日本人以外の友人を作ることが出来たことは、非常に良い経験になった。

日本の研究室では、「日本人」と「留学生」の間に大きな境界があると感じていた。一方でフランスの研究室では、「フランス人」「外国人」間の境界がほぼないと感じた。また、日本における私の留学生への接し方と比べて、外国人である私に対して優しく接してくれた。フランス人より留学生の方が多く、皆英語が流ちょうに話せる等の背景はあるものの、帰国した際に留学生と接するときの参考になった。

受け入れ研究者である Trond Saue 教授は、相対論的量子化学の分野で世界的に高く評価されている研究者である。彼との1年間の共同研究を通して、私が想像していたものより、世界トップレベルの知識・研究能力は遥かに高いことが分かった。いずれは越えていかねばならないが、現段階で目標とする段階を確認することができ、今後研究活動を行う上でのモチベーションが高まった。