2017/10/14 AICS一般公開

ぜんぶ方程式のせいだ

〜 That's all because of equation

藤堂 眞治

東京大学大学院理学系研究科/物性研究所

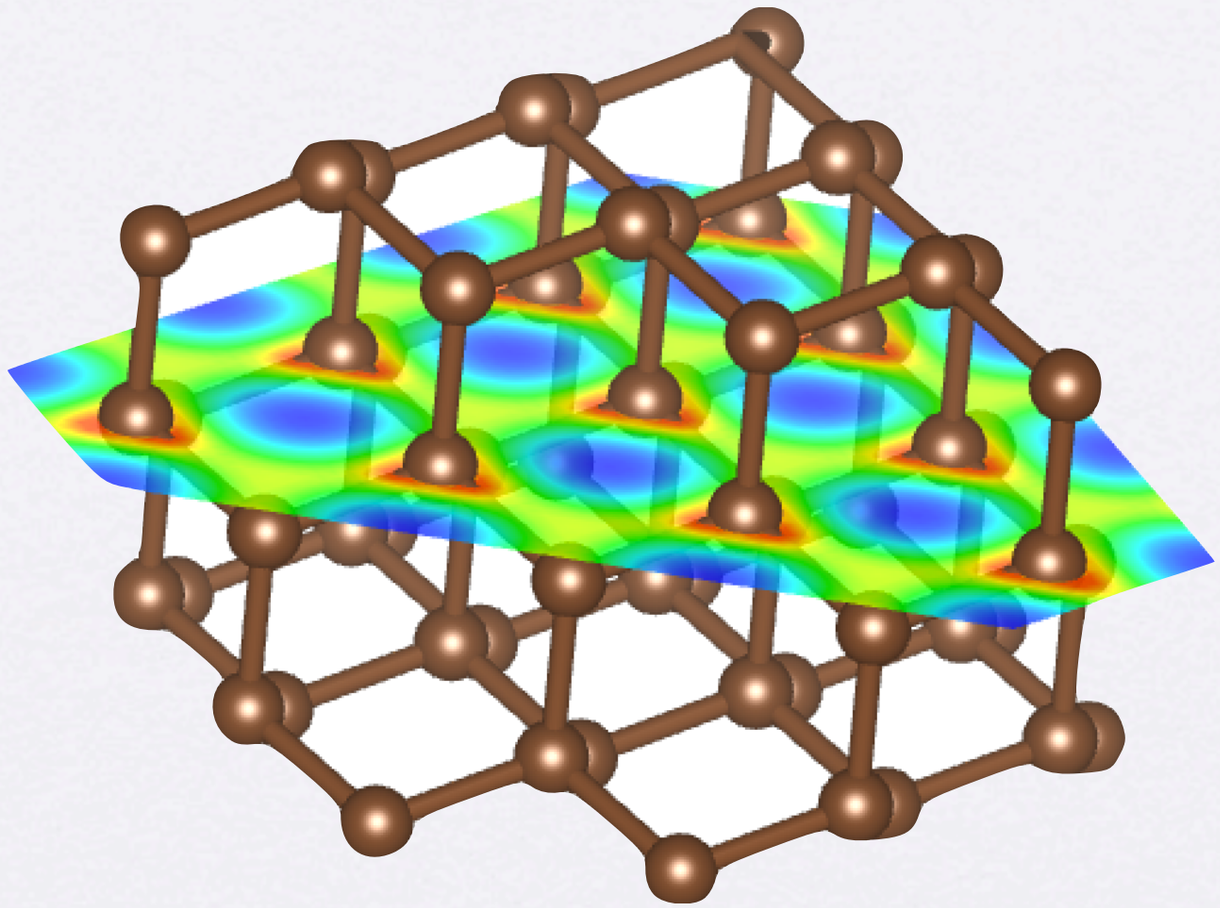
CDMSI (ポスト「京」重点課題7)

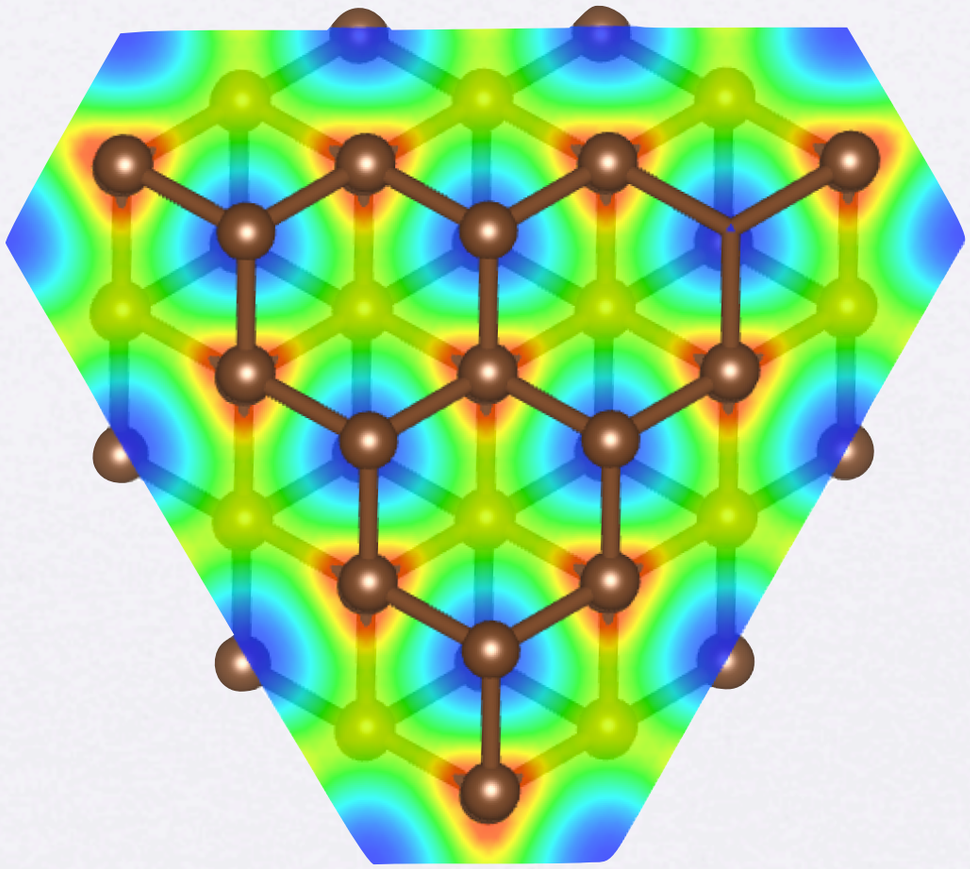
量子力学が明らかにした物質の姿

- 身の回りのすべての物質は原子核と電子からできている
- 原子核は硬くて重いツブツブ
- 電子は糊(のり)の役目を果たしている
- 電子の糊が原子核の間を繋ぎとめて分子や結晶を作り出す

ダイヤモンドの電子状態

第一原理計算による電子密度計算





赤〜黄色の場所は電子密度が高い

量子の世界の基本方程式

シュレディンガー方程式

物質の振る舞いをつかさどる量子力学の基礎方程式。
量子力学の世界では、全ての物質は粒子ではなく
波としての性質をもつ。シュレディンガー方程式の中では、
物質の運動は位置と運動量ではなく、
“波動関数”という波であらわされる。

式のよみ

あいえいちばー でるぷさい でるてぃー いこーる
えいち ぷさい

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi$$

$\hbar$：プランク定数 h を 2π で割った量

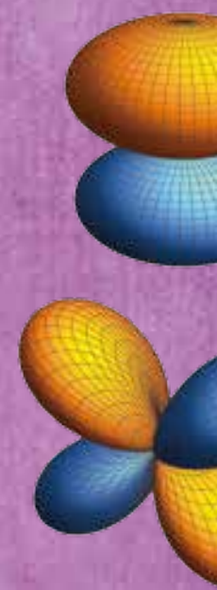
i：虚数単位

t：時刻

H：ハミルトニアン。粒子のエネルギーをあらわす演算子

Ψ：波動関数。絶対値の二乗がある時刻の場所ごとの粒子の存在確率を与える

水素原子での電子固有状態



この式は、波動関数という“波”が空間を伝わっていく様子を記述している。ただ、この波は普通の波ではなく、実部と虚部をもつ複素数の摩訶不思議な波だ。波だから、2つの波がぶつかると干渉して、打ち消し合ったり、強め合ったりする。光の波、すなわち、質量のない光子だけでなく、通常は粒だと思われている電子でさえも、ナノスケールでは波としてあらわされ、干渉が起こるというのが、シュレディンガー方程式の教えるところだ。その干渉が、日常のニュートン方程式とは違う、超伝導や超流動などに代表される量子力学特有の振る舞いを呼び起こす。シュレディンガー方程式を解くことで、物質の電子に関わる性質はほぼ全てが分かることになる。

ハミルトニアン H は、一般的に運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの項からなる。もしハミルトニアン H に含まれるポテンシャルエネルギーが時間に依存しない(時刻 t を陽に含まない)場合、シュレディンガー方程式はある定数 E を用いて

$$H\Psi = E\Psi$$

という形に書き換えることが可能である。これを“時間に依存しないシュレディンガー方程式”と呼ぶ。

その波動関数は、定在波のように複素空間をくるくる振動するだけで、粒子の存在確率は時間変化しない。このような特別な波動関数を“固有状態”と呼ぶ。

物質の性質は電子の固有状態に大きく影響されるため、時間に依存しないシュレディンガー方程式を解いて、固有状態を計算することが重要になる。単一粒子の場合には、ハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

のような簡単な形であたえられる。

ここで V は原子核のつくる静電ポテン
など、粒子が受けるポテンシャルエネ
をあらわす。例えば水素原子について
析的にシュレディンガー方程式を解く
可能であり、おなじみのs軌道、p軌道
道といった電子の波動関数が得られ
の図に解の一例を示す。
電子の数が増えるにつれて、計算機で
ディンガー方程式を解くのに必要な時
指数関数的に大きくなる。そのため、
分子や、半導体などの固体について
ディンガー方程式を解くことは、現代
パーコンピュータの力をもってしても
可能である。そのような系の電子状
実的な時間で求めるために、ハート
フォック方程式やコーン・シャム方程
様々な近似理論が構築されてきている

「計算機シミュレーション」するとは？

- シュレディンガー方程式から出発
- 少し簡単な方程式 (コーンシャム方程式) に直す (近似)
- 微分や演算子の記号を足し算・引き算・掛け算・割り算だけを使って書き直す (差分法)
- 一度に方程式を解くことはできないので、正しい解にたどり着くまでひたすら何度も繰り返す (逐次近似)

より詳しくは、、、

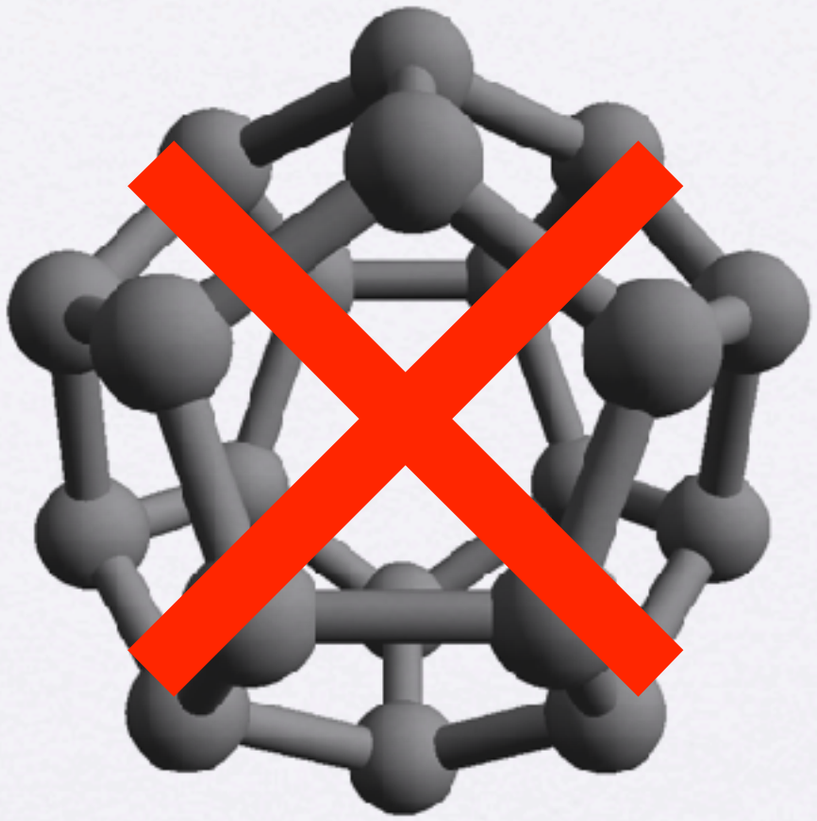
電子書籍「ケイサン ブッシツ カガク」

計算物質科学イニシアティブ編

6階 C7展示スペース「ぜんぶ方程式のせいだ」で閲覧できます

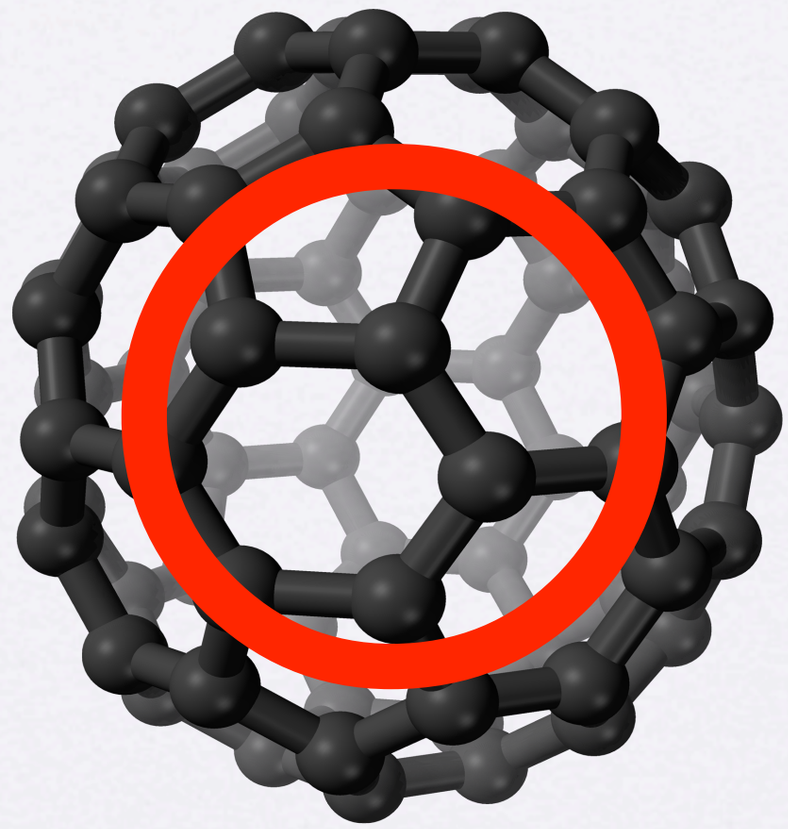
学研BookBeyond, Amazon, Apple Store 他で電子書籍発売中

C_{20}とC_{60} どちらが安定？



正十二面体 (正五角形のみからなる)

不安定ですぐに壊れる

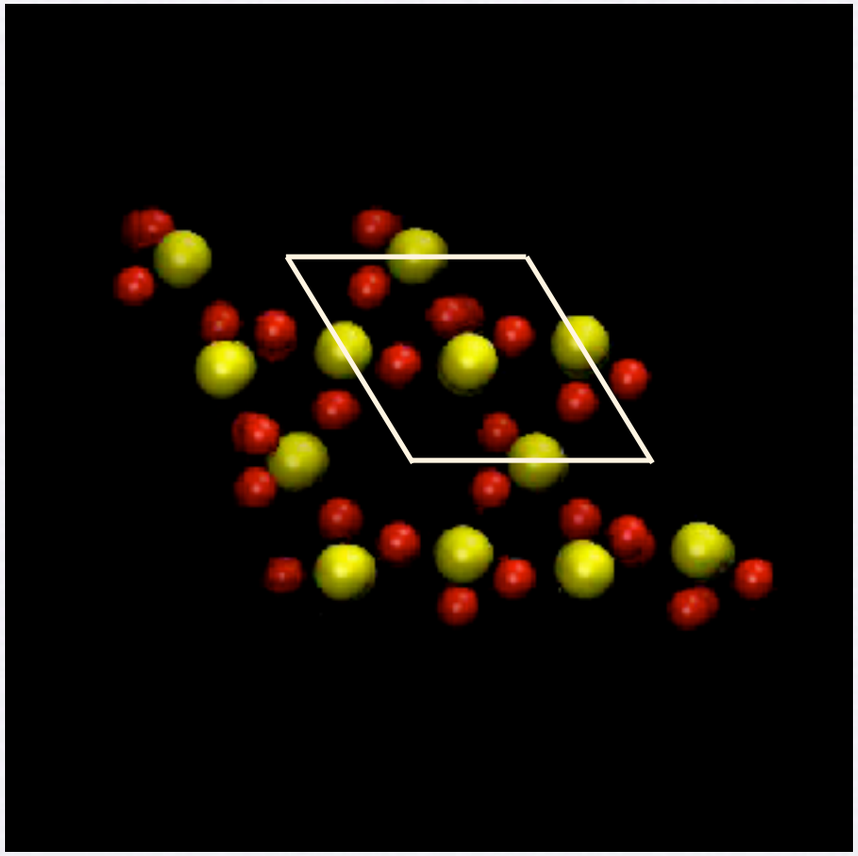


切頂二十面体 = サッカーボール
(正五角形と正六角形が混在)

フラーレン
1985年発見 1996年ノーベル賞

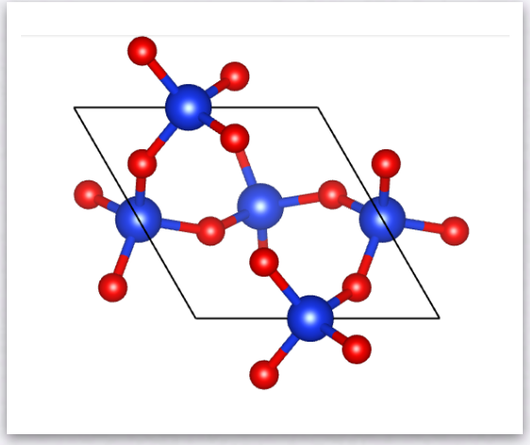
シリカ SiO_2 の構造最適化

- シリコン Si 32個、酸素 O 64個を動かして最もエネルギーの低い安定な位置を探索



黄: シリコン

赤: 酸素



石英 (水晶)

量子力学が明らかにした物質の姿

- 身の回りのすべての物質は原子核と電子からできている
- 電子の糊が原子核の間を繋ぎとめて分子や結晶を作り出す
- 方程式を解くと様々な構造や不思議な模様が生み出される
- フラーレン、カーボンナノチューブ、フラクタル構造など

6階 C7展示スペース「ぜんぶ方程式のせいだ」

CDMSI (ポスト「京」重点課題7)

- 方程式人気投票: 気になる方程式に投票してみましょう！！
- 自然界に現れる美しい立体の謎を探る
  - 体験: 多面体を作ってみよう！
- 自然の中の不思議な形 〜 フラクタル
  - 体験: フラクタルを描いてみよう！
- ケイサンブッシツカガク 展示
- CDMSI (ポスト「京」重点課題7)の概要

- 画像の出典
  - マイスナー効果: Mai-Linh Doan, https://en.wikipedia.org/wiki/Meissner_effect, 氷の結晶: https://en.wikipedia.org/wiki/Fractal, 高層ビル: https://www.pakutaso.com/20161142309post-9436.html, 波: https://ja.wikipedia.org/wiki/神奈川沖波裏, ロマネスコブロッコリー: https://www.flickr.com/people/23178876@N03, 基盤: https://www.pakutaso.com/20110956271post-675.html, 入道雲: https://www.priga.jp/. 磁力線: https://en.wikipedia.org/wiki/Magnet
  - ダイヤモンドの電子状態計算:「MateriApps: OpenMXを利用した第一原理計算の簡単な実習」加藤岳夫, https://www.slideshare.net/cms_initiative/materiapps-openmx
  - C_{20}: https://ja.wikipedia.org/wiki/低次フラーレン, C_{60}: https://ja.wikipedia.org/wiki/フラーレン
  - 「ケイサン ブッシツ カガク」計算物質科学イニシアティブ編 (学研プラス, 2016)
  - 石英(水晶)の構造探索シミュレーション: N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo, S. Tsuneyuki, arXiv:1705.08613, 石英(水晶): http://www.asahi-net.or.jp/~up5s-andu/SUISHO