

3P041

格子欠陥に対する陽電子の振る舞いの理論的研究: NOMO 法の応用

(早大先進理工) ○ 表達矢、西澤宏晃、中井浩巳

【緒言】

陽電子は電子の反粒子であり、医療現場において癌の診断を行うポジトロン断層法 (PET) や格子欠陥の検出などに用いられる。これらは陽電子が電子と対消滅する際に生じる γ 線を検出することで観測ができる。PET においては、癌細胞が通常の細胞より多くのブドウ糖を必要とすることを利用し、陽電子を放出するブドウ糖類似の検査薬 (FDG) を用いる。癌細胞の付近では FDG が多く分解されるため、 γ 線の検出によりその位置を特定できる。また、完全結晶中では原子核からの反発により格子間に分布するが、格子欠陥が存在するとそこにトラップされる。そして、対消滅するとき生じる γ 線を検出することで欠陥の存在がわかる。トラップされた陽電子の寿命は欠陥中の電子密度が低いため、トラップされていないものに比べ長くなる。対消滅するとき発生する γ 線を測定することで、欠陥の大きさなどの情報を得ることができる。しかし物質中における陽電子の寿命は非常に短く、陽電子の物質中における振る舞いは十分に明らかになっていない。そのため PET や格子欠陥の検出の信頼性は定かではない。本研究ではこの陽電子の振る舞い、消滅速度、寿命を量子化学計算により求めることを試みる。陽電子の計算には、当研究室で開発されてきた *ab initio* nuclear orbital plus molecular orbital (NOMO) 法[1-5]を用いる。NOMO 法を用いることで、電子と陽電子が相互作用した状態を記述できる。

【理論】

NOMO 法における Hartree-Fock (HF) 方程式は

$$\left(\hat{t}^e + \sum_i (\hat{J}_i^e - \hat{K}_i^e) + \sum_I \hat{J}_I^e \right) \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \quad (1)$$

$$\left(\hat{t}^n + \sum_I (\hat{J}_I^n + \hat{K}_I^n) + \sum_i \hat{J}_i^n \right) \varphi_I = \varepsilon_I \varphi_I \quad (2)$$

である。 \hat{J}_i^e , \hat{J}_I^n は電子、核のクーロン演算子、 \hat{K}_i^e , \hat{K}_I^n は電子、原子核交換演算子である。 \hat{J}_i^n , \hat{J}_I^e は電子と原子核の相互作用を表す。式(1)、(2)の核の部分陽電子に置き換えることで陽電子の計算ができる。

以前の研究[6, 7]では、陽電子の寿命 τ は、陽電子消滅速度 λ の逆数で表され、計算で得られた電子の密度 n_- と陽電子の密度 n_+ を用いて次のように計算されている。

$$\lambda = 1/\tau = 16\pi \int d\mathbf{r} n_+(\mathbf{r})g(r_s,0)n_-(\mathbf{r}) \quad (3)$$

ここで $g(r_s,0)$ は Enhancement Factor と呼ばれるもので、陽電子の周りに電子がクーロン相互作用によって集まり電子状態が変化する効果を取り入れるために導入された汎関数であるが、本研究では電子及び陽電子の波動関数を決定する際に既にこの効果は取り込まれている。

【結果と考察】

テスト計算として、メタノール分子上での陽電子の状態を NOMO/HF により計算した。メタノール分子の構造は実験値を用い、陽電子は分布を再現するために陽電子の基底関数中心を、(i)酸素原子上にのみ置いたもの、(ii)炭素原子と酸素原子上に置いたもの、(iii)すべての原子上に置いたもの、それぞれについて計算を行った。電子の基底関数は 6-31G* を、陽電子の基底関数は even-tempered スキームにより軌道指数を決定した 9s, 9s9p, 9s9p9d を用いた。

図 1 に、全エネルギーに対する陽電子の基底関数依存性を示す。基底関数が 9s の場合、3 者の相違は 0.1 mhartree 程度存在するが、9s9p9d では 0.01 mhartree 以下である。このことは、陽電子波動関数が、酸素上に局在化していることを表している。厳密には、図 2 に示すように酸素の電子雲を取り囲むように陽電子波動関数が分布している。

格子欠陥における陽電子消滅に関しては当日報告する。

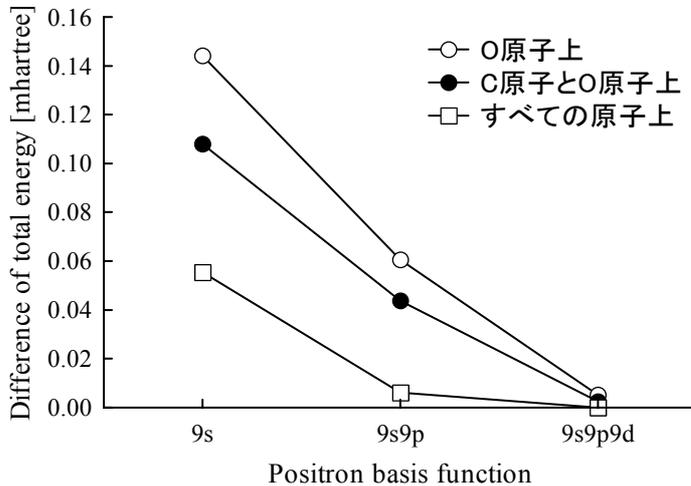


Fig. 1. Basis set dependency

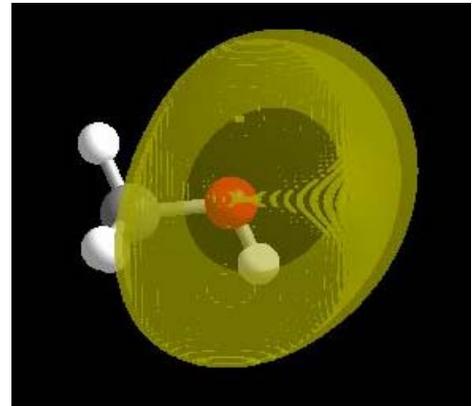


Fig. 2. Density of positron

- [1] M. Tachikawa, K. Mori, H. Nakai, K. Iguchi, *Chem. Phys. Lett.*, **290** (1998) 437.
- [2] H. Nakai, *J. Quant. Chem.*, **86** (2002) 511.
- [3] H. Nakai, K. Sodeyama, M. Hoshino, *Chem. Phys. Lett.*, **345** (2001) 118.
- [4] H. Nakai, K. Sodeyama, *J. Chem. Phys.*, **118** (2003) 1119.
- [5] H. Nakai, M. Hoshino, K. Miyamoto, S. Hyodo, *J. Chem. Phys.*, **122** (2005) 164101.
- [6] E. Boroński, R. M. Nieminen, *Phys. Rev. B*, **34** (1986) 3820.
- [7] H. Stachowiak, E. Boroński, *Phys. Rev. B*, **71** (2005) 245107.