

エキゾチック原子分子の 反応と構造の理論計算

東北大学大学院理学研究科

木野康志

エキゾチック原子分子

原子分子内の電子または原子核を他の粒子で置換えたクーロン多体系

電子→**ミュオン、反陽子、スタウ** 原子核→**陽電子、反ミュオン**

- ・ 普通の原子分子系に見られない特異な現象の面白さ
- ・ 素粒子、原子核、原子分子、量子化学、放射化学、原子力等の多彩な分野が関与
- ・ 実験技術や精度の飛躍的な向上で新しい粒子が研究対象となる
- ・ 量子少数多体系の精密解法の開発

研究の目的

物質科学の多様性、量子力学の可能性を追求する

化学

融合

物理学

ミュオン(Muon) μ^-

$$m_\mu = 207 m_e$$

$$\tau_\mu = 2.2 \mu\text{s}$$

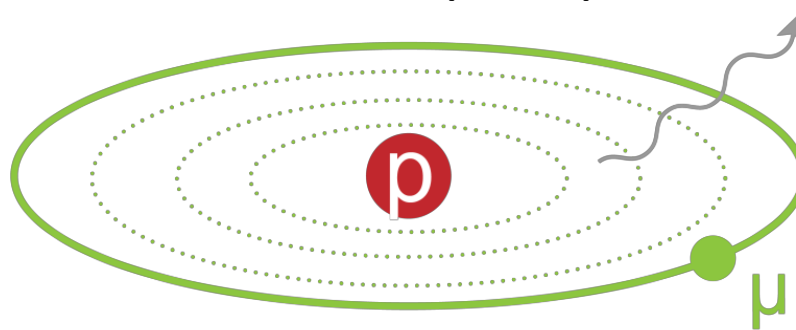
電子と入れ替わる

高励起状態 ($n \approx 14$)



-13.6 eV, 0.053 nm

電子の束縛エネルギー $E = E'$



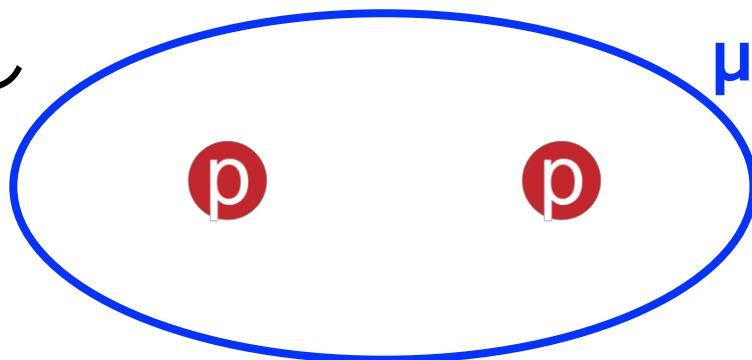
ミュオンの束縛エネルギー

-13.6x207 eV = -2.8 keV
0.053/207 nm = 0.256 pm

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m e^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad -\frac{1}{2} \frac{m e^2}{\hbar^2} \frac{1}{1^2} = -\frac{1}{2} \frac{207 m e^2}{\hbar^2} \frac{1}{14^2}$$

ミュオン原子では、
エネルギーは**207倍**、サイズは**1/207倍**

ミュオン水素分子イオン
ppμ



$E_b = 250 \text{ eV}, 0.750 \text{ pm}$

↑X100, ↑ /150

cf. $\text{H}_2^+ \cdots 2.65 \text{ eV}, 0.11 \text{ nm}$

ミュオン分子では、単純なスケールではない

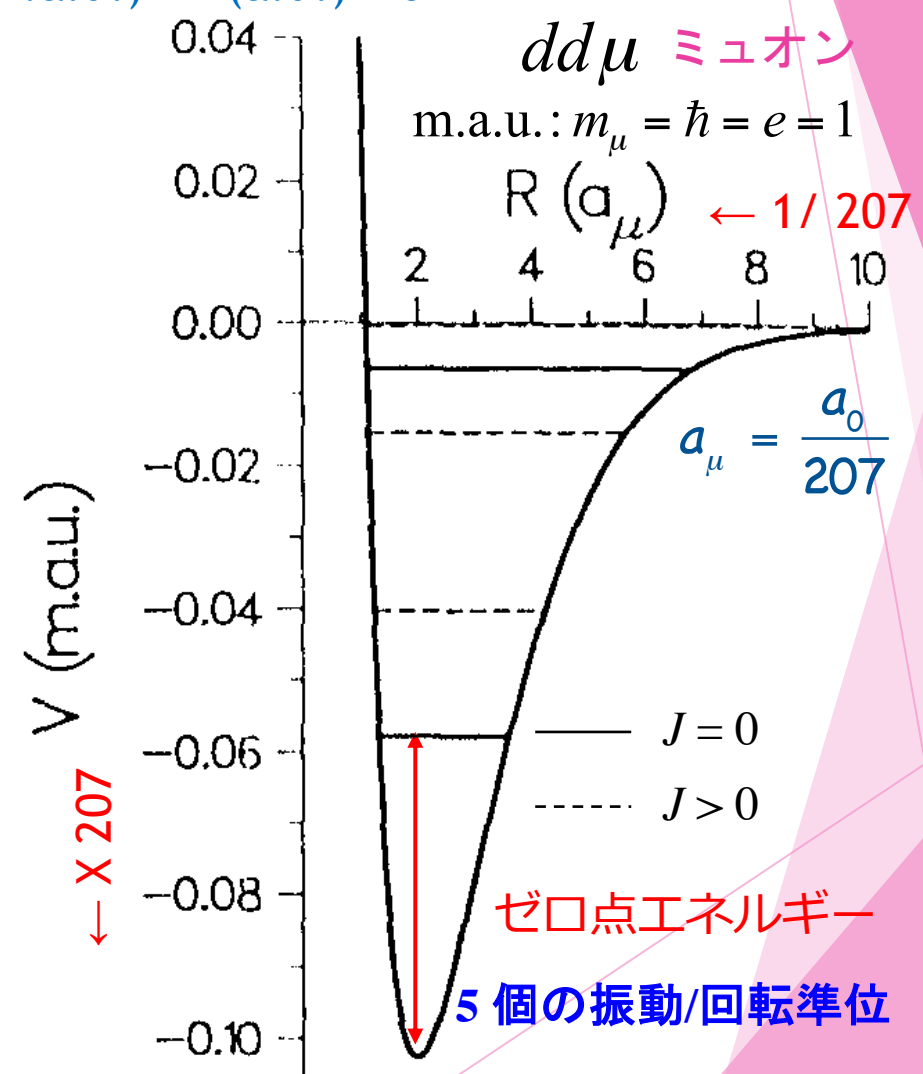
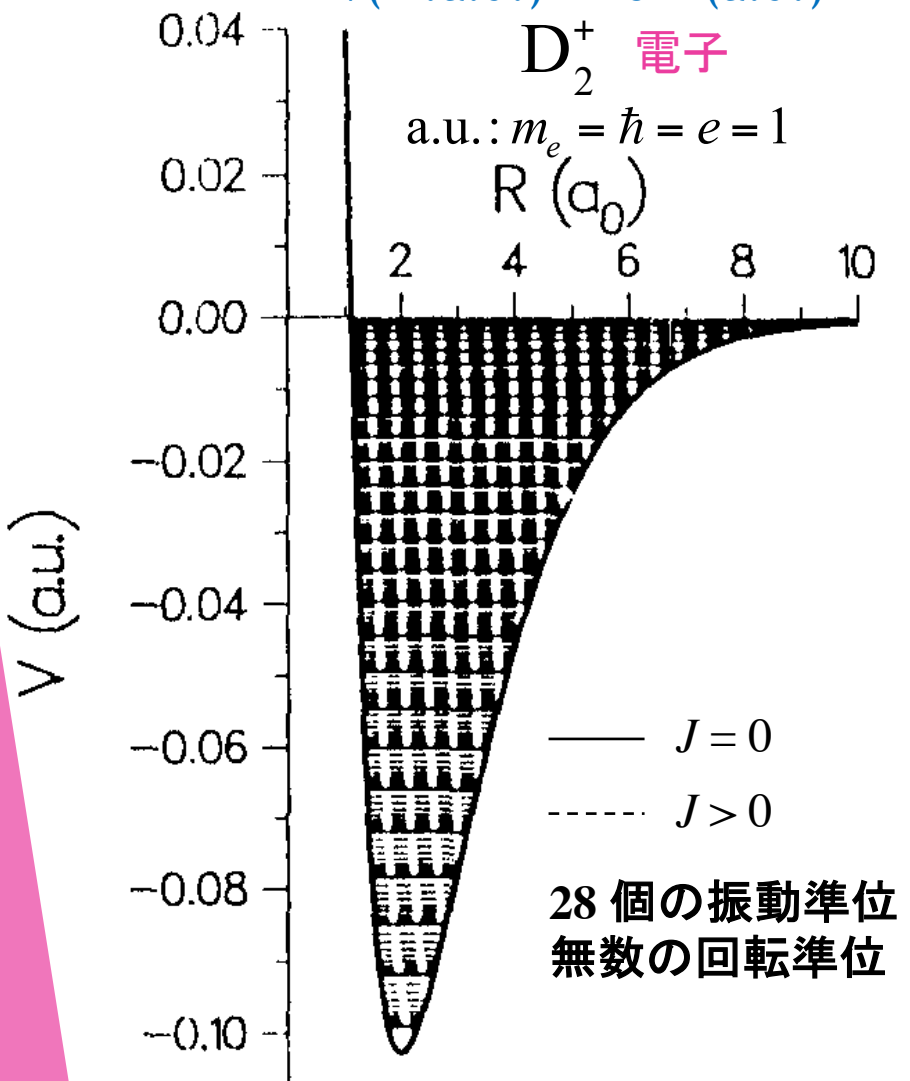
大きな量子効果

ミュオン重水素分子イオンの場合 電子 / ミュオン

V : 断熱ポテンシャル（原子核間距離ごとに計算した電子のエネルギー曲線）

$V(\text{m.a.u.}) \approx 207V(\text{a.u.})$

$R(\text{m.a.u.}) \approx R(\text{a.u.})/207$



大きな量子効果により全く異なる様相

ミュオン水素原子

$$m = 186 m_e$$

$$E = 13.6 \times 186 = 2.5 \text{ keV} \quad a = 0.53 / 186 = 0.0028 \text{ nm}$$

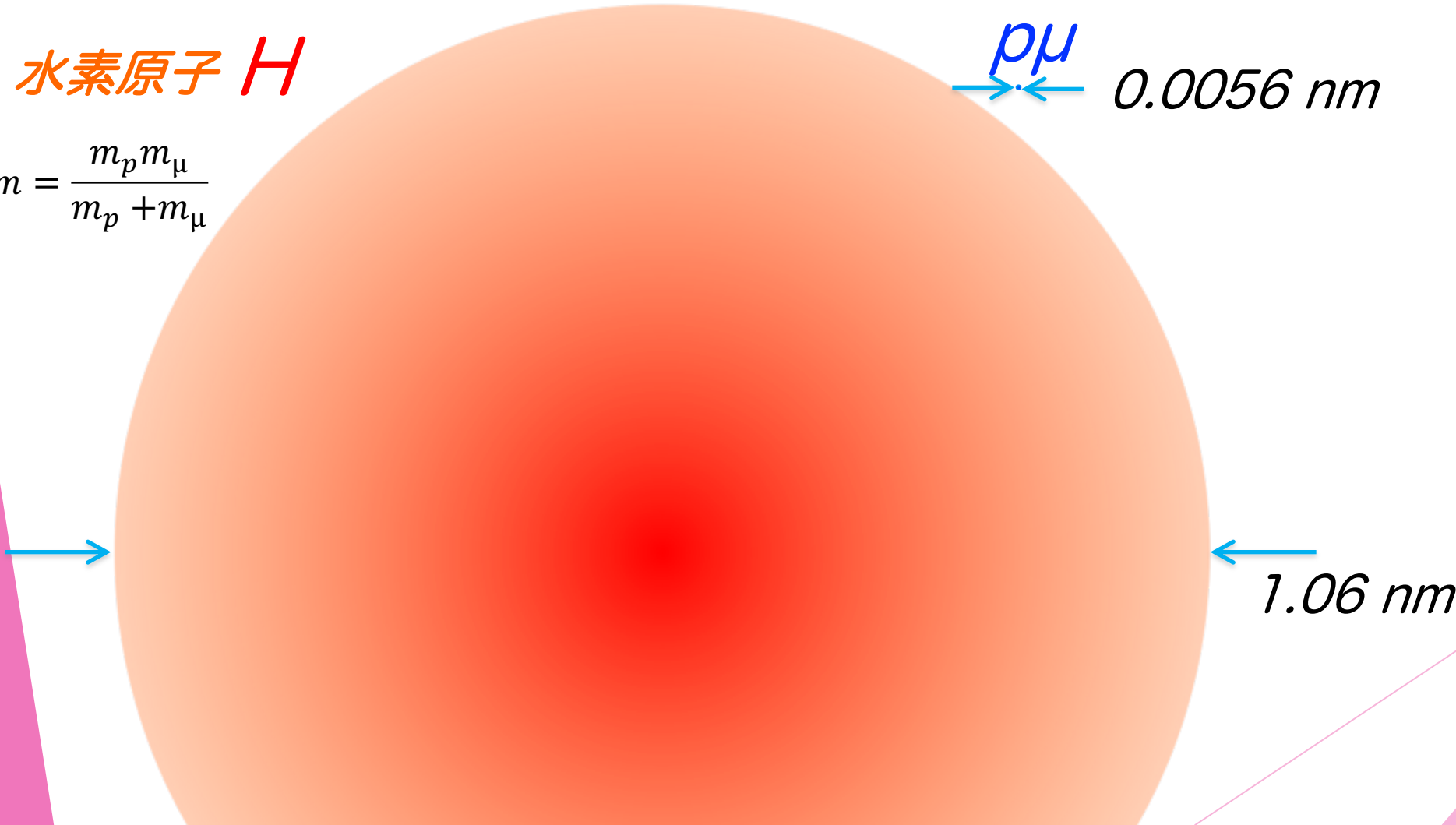
ミュオン水素原子

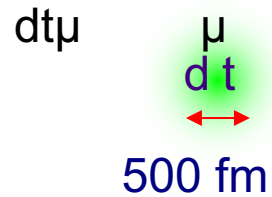
水素原子 H

$$m = \frac{m_p m_\mu}{m_p + m_\mu}$$

$p\mu$
0.0056 nm

1.06 nm





ミュオン分子

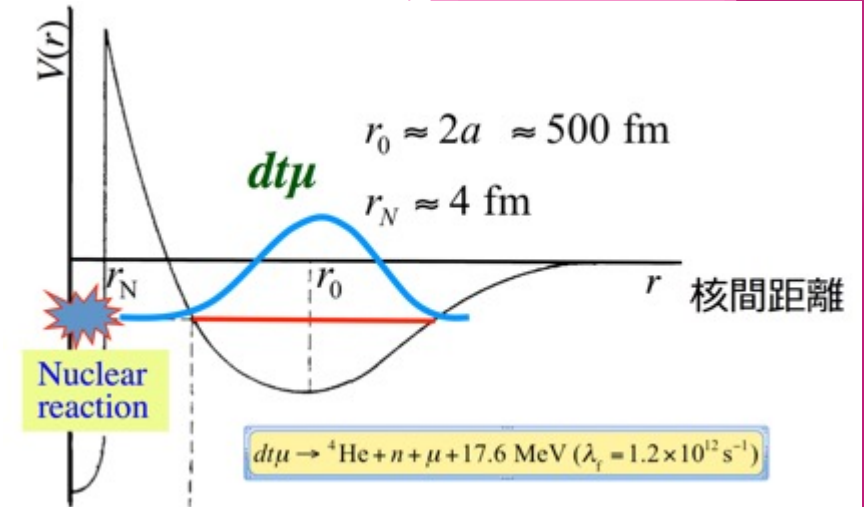
ミュオンが二つの原子核(d と t)を強く束縛

d と t の波動関数の一部が核力の及ぶ範囲で
有意な値をもつ

ミュオン分子内で核融合反応が起こる

$$\lambda = 1.2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

ミュオンの崩壊速度の 10^6 倍



ミュオンが崩壊するまでに次々に核融合反応を触媒 エネルギー生産、中性子源

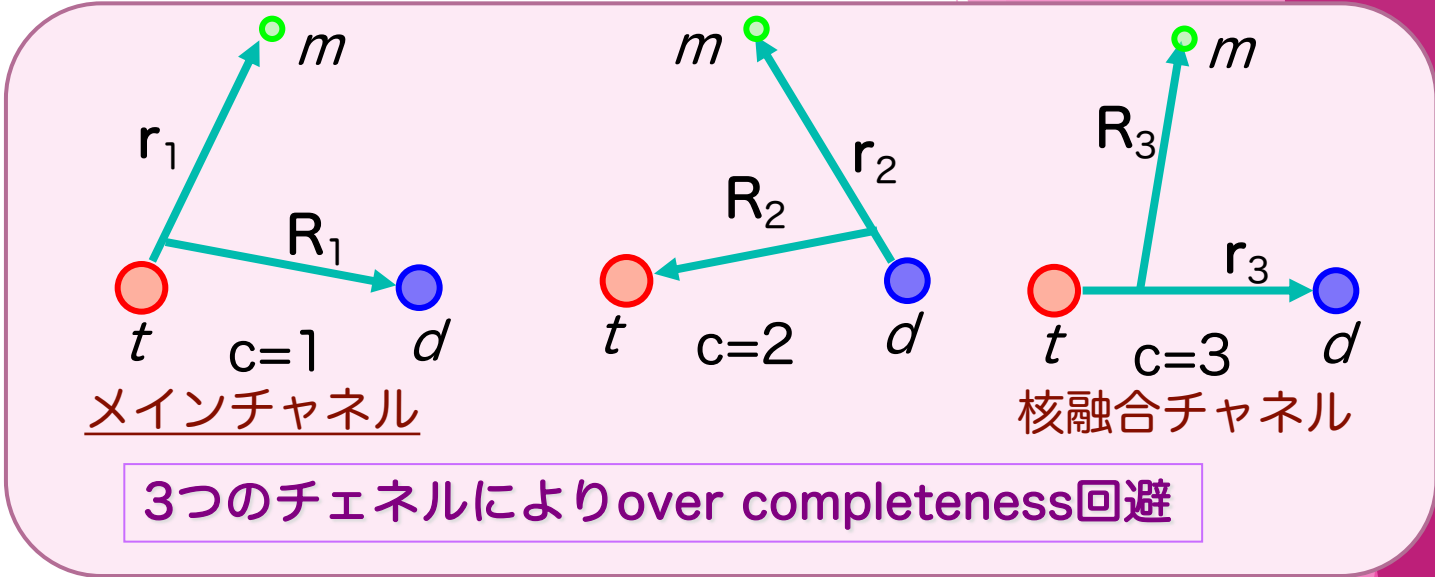
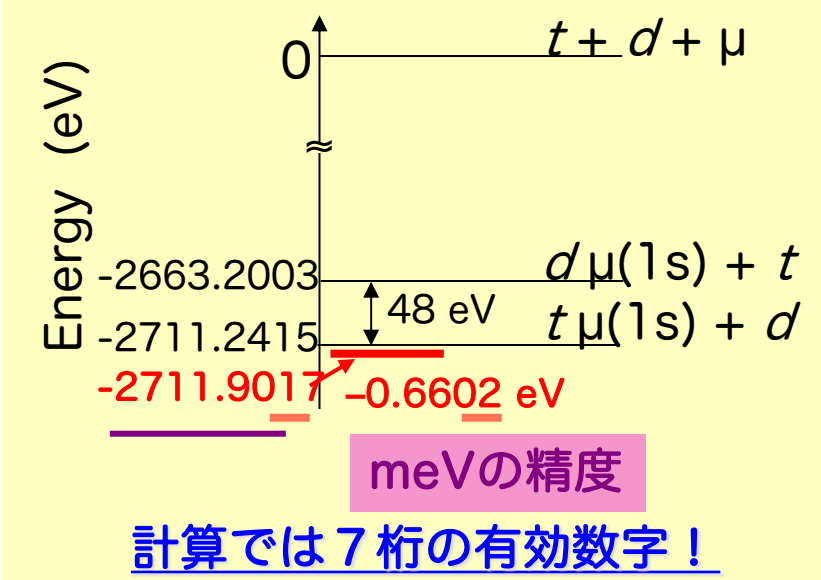
触媒反応を推進するためには、ミュオン原子分子の生成や反応過程が重要

1980-90年代に、

原子核物理学、原子物理学、放射化学、量子化学など多くの分野で研究された

dtμミューオン分子 ($\epsilon_{11} = -0.660$ eV)

上村正康 (九大) による精密計算 (1988)

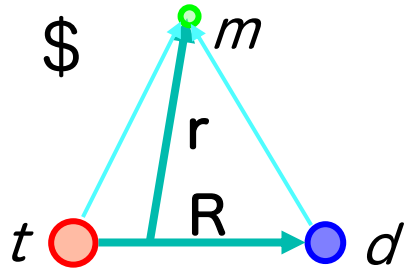
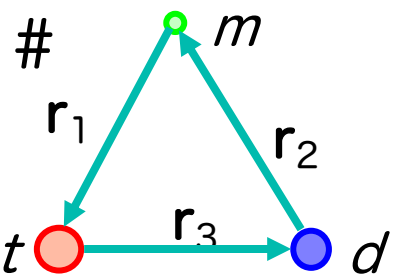


(J, ν)	(0,0)	(0,1)	(1,0)	(1,1)	(2,0)	計算
変分法 (ガウス関数展開法)	319.140	34.8344	232.472	0.6602	102.643	倍精度
変分法 (ヒレラス型座標) [#]	319.140	34.8344	232.472	0.6602		4倍精度
変分法 (楕円座標関数) ^{\$}				0.6597		4倍精度
断熱近似 ^{\$}	319.15	34.87	232.44	0.64	102.54	4倍精度

2分

1月

基底関数の直行性が悪いため多くの有効数字が必要



物理的に合った座標を選ぶかが精密計算の鍵

自己紹介

1988-93 九州大学大学院理学研究科物理学専攻（原子核理論研究室、上村正康教授）

D論 非断熱組替えチャネル結合によるミュオン原子衝突の研究

1993-95 理化学研究所

ミュオン原子散乱

1995- 東北大学大学院理学研究科化学専攻（2006年から放射化学研究室を主宰）

反陽子ヘリウム原子の精密計算（反陽子質量の精密決定：9桁の有効数字）

スタウ原子衝突によるビッグバン元素合成

陽電子原子の精密計算と相対論効果

反水素重力質量のための

（九大計算機利用）

高精度 小数多体系計算

dtμ 束縛エネルギー (7桁の計算精度で実験値と一致) (M. Kamimura, Phys. Rev. A 1987)

ミュオン原子衝突 (YK, MK, 1990-2000)

反陽子ヘリウム原子束縛エネルギー (9桁の計算精度で実験値と一致) (YK, MK,, 1995-2005)



ガウス関数展開法 (GEM)



PERGAMON

Progress in Particle and Nuclear Physics 51 (2003) 223–307

<http://www.elsevier.com/locate/npe>

Progress in
Particle and
Nuclear Physics

構成粒子を平等に扱う →座標変換

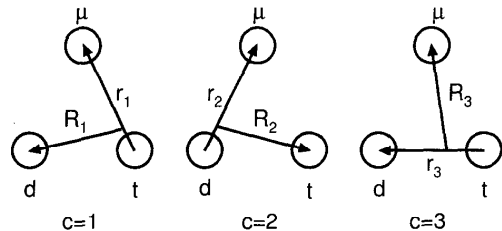


Figure 24: Three Jacobian coordinates of the $d + t + \mu$ system.

The GEM has been successfully applied to

- muonic molecules,
- antiprotonic atoms,
- positronic atoms,
- Antihydrogen atoms
- 3-, 4- nucleon systems
- hyper nuclei
- five-quark systems

Gaussian Expansion Method for Few-Body Systems

E. HIYAMA¹, Y. KINO² and M. KAMIMURA³

¹High Energy Accelerator Research Organization (KEK), Tsukuba 308-0801, Japan

²Department of Chemistry, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan

³Department of Physics, Kyushu University, Fukuoka 812-8581, Japan

April 8, 2003

Abstract

We review our method of calculation, Gaussian Expansion Method (GEM), for bound and scattering states of few-body systems. The method was proposed in 1988 and has been applied to a variety of few-body systems. The understanding on the structure and the mechanisms of reactions of those systems obtained from such applications is discussed together with some useful techniques for the calculations. A well-chosen set of Gaussian basis functions forms an approximate complete set in a finite coordinate space so that it can describe accurately short-range correlations and long-range asymptotic behavior as well as highly oscillatory character of wave functions in the bound and the scattering states of the systems. Examples of applications of GEM include i) the latest determination of antiproton mass by the analysis of laser spectroscopic data for antiprotonic helium atoms, ii) predictions and experimental verifications on the structure of hypernuclei and hyperon-nucleon interactions, iii) Coulomb three-body calculations of bound and resonant states of muonic molecules as well as muon transfer reactions in muon catalyzed fusion cycles, iv) a new treatment of CDCC (continuum-discretized coupled channels) method for three- and four-body breakup processes, and v) benchmark test calculations for three- and four-nucleon bound states using realistic interactions.

引用673件

(九大発の計算法)

ガウス関数展開法による少数粒子系の精密計算 ——原子・分子からクォーク系まで——

肥田 詠美子 (東京女子大学理学部) 610-6306 肥田 圭子 (東京女子大学理学部) e-mail: hiyama@bell.zcu.ac.jp

木野 康志 (東北大学理学部) 980-8507 木野 康志 (東北大学理学部) e-mail: kono@sci.tohoku.ac.jp

上村 正康 (e-mail: kaminomura@sci.tohoku.ac.jp)

物理学には、数値計算上「少数粒子系のシュレーディンガー方程式を精密に解くこと」に属する課題が多い。これにより新しい物理的知見が得られる場合もある。この目的に役立つであろう方法の一つとして、筆者らが採用した方法としてガウス関数展開法を解説する。すべてのヤコビ座標のセットを用い、各座標のガウス関数の積を基底関数(等比数列関数)として全系のハミルトニアンを対角化し固有関数を得る。これにより、固有空間を十分広く取ることができる。種々の物理的状況に特によく対応できる。得られた固有関数を用いて、散乱状態をも算出することができる。当座標の高い精度であり、原子分子からクォーク系の計算にまで適用されてきた。個々の技法の中には、他の課題にも利用できるものもある。

1. はじめに

1.1 反陽子質量の決定

物理学の様々な分野において、少数粒子系シュレーディンガー方程式を「精密」に解くことにより新しい物理的知見が得られる場合が多々ある。次の一例を示す。Particle Data Group (物理学における基礎定数や素粒子データ等の標準値を決定し編集している) による反陽子質量の推奨値は Particle Listings 2000年版になって初めて掲載された。その数値は、CERNにおける反陽子ヘリウム原子 ($He^{+} + \bar{p} + e^{-}$) の精密レーザー分光データと筆者らのガウス関数展開法による精密3体計算によって決定したものである。この実験・理論解析によって得られた「反陽子質量 ($m_{\bar{p}}$) と陽子質量 (m_p) の相対差の上乗率 $|m_{\bar{p}} - m_p|/m_p \times 5 \times 10^{-7}$ は CPT 不変性のテストになると Particle Data Group はコメントしているが、その後の中に精密化した実験と種々の計算により、2004年版では $|m_{\bar{p}} - m_p|/m_p \times 1 \times 10^{-7}$ となっている。間もなく、反陽子質量の方が陽子質量よりも精密に決定されていこうと期待されている。

反陽子ヘリウム原子のエネルギー準位計算は、量子力学の3体問題計算に属するが、その中でも最も難しい課題と云ってよいだろう。それは、i) 4体問題シュレーディンガー方程式に対応して10桁精度の微分方程式計算が必要である(単位制用計算では指し示す)、ii) 3粒子のどの2粒子間にも長距離クーロン力が働いている、iii) 全角運動量が

1.2 ガウス関数展開法の適用範囲

これだけの条件(i-iv)に当てはまる体問題計算は、Hylleraas 座標基底関数を使った変分計算と我々のガウス関数展開法計算である。前者を一つ追って、反陽子の質量に賭き込んだのは後者である。前者の適用は、目下、クーロン力による3体系反陽子・陽子・陽子の計算に特化されている。後者は次のような広範なケースに適用されてきた普遍的な方法である。

- 1) 原子・分子から原子核、ハイパー核、ハドロン系に至る3体、4体、5体系の束縛・共振状態計算、散乱・反発計算。
- 2) 各粒子の質量は、どれかが特に大きい、または小さいことを前提としない、用いる相互作用には、テンソル力、スピン軌道力等の非中心力や運動量依存力を含む、粒子間ポテンシャルの基底関数が任意の形の場合を許す。

本稿では、ガウス関数展開法(Gaussian Expansion Method: GEM)を使うと、何故上のような広範な課題の計算可能なのか、高次元・高次元計算が可能なのかを解説する。数値の部分で、取り上げる計算対象の物理的内容には余り踏み込まない。それは、原論文とレビュー論文に委ねる。

2. ヤコビ座標ガウス型基底関数の威力

2.1 良い基底関数とは

少数粒子系のシュレーディンガー方程式

九大ライブラリ開発

上村正康、木野康志、肥山詠美子、Jan Wallenius

「新登録プログラムライブラリの紹介」
厳密3体理論による量子力学的3体系束縛状態のエネルギーと波動関数

(そのI) ミューオン分子

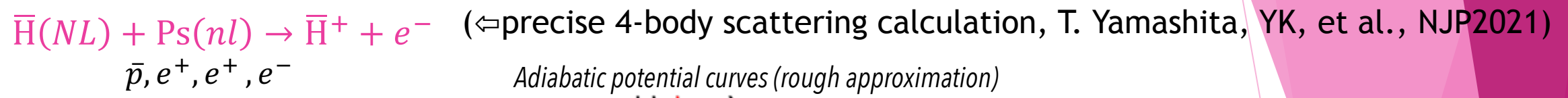
九州大学大型計算機センター広報. 29 (2), pp.78-81, 1996-06

(そのII) 任意中心力ポテンシャル

九州大学大型計算機センター広報. 30 (2), pp.117-123, 1997-06.

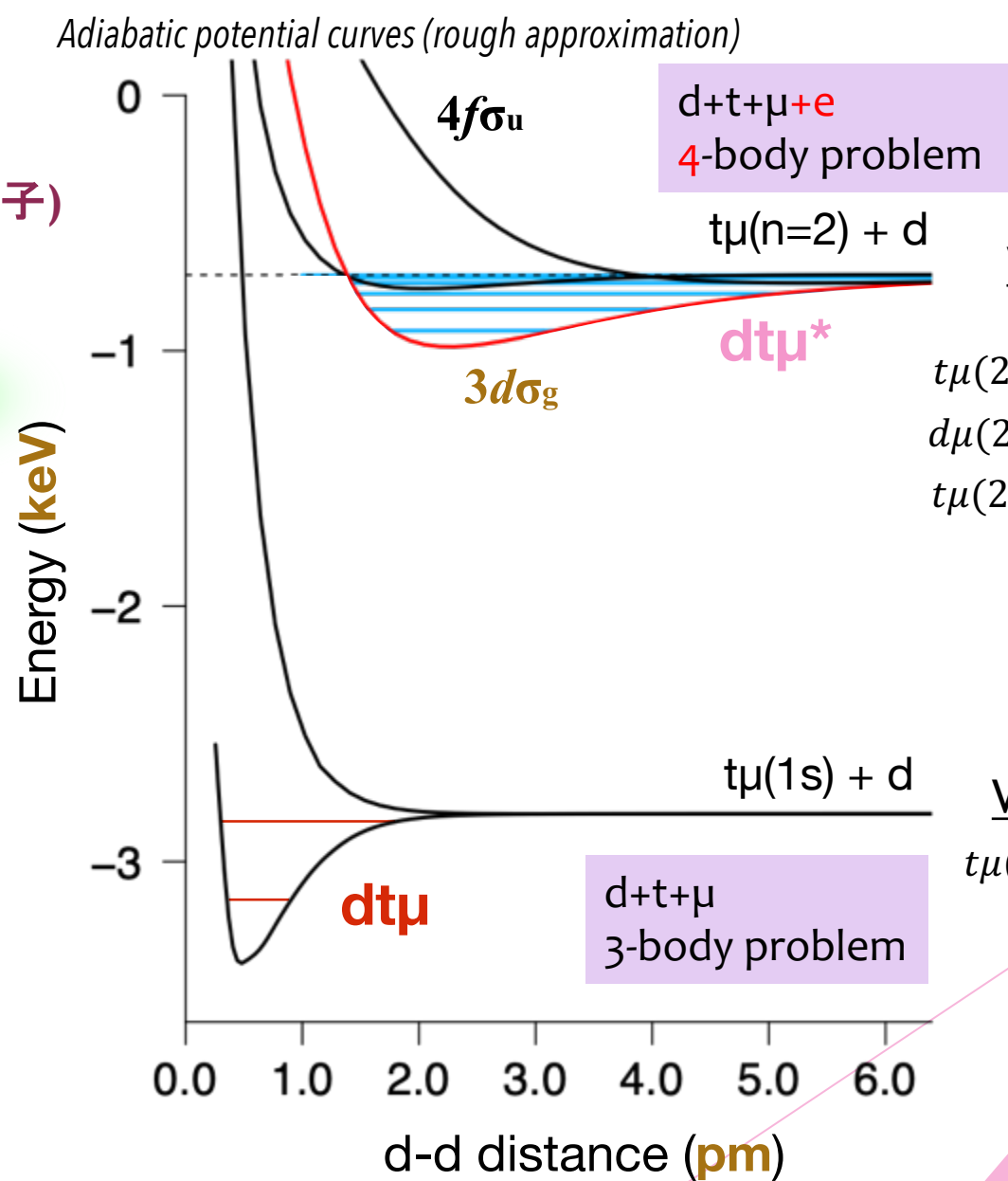
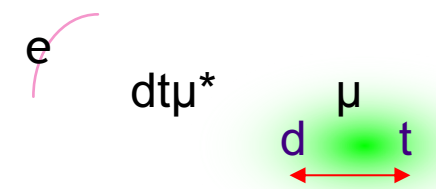
(そのIII) 中心力型、スピン軌道型およびテンサー型の任意関数形ポテンシャル

九州大学大型計算機センター広報. 31 (4), pp.199-206, 1998-12.



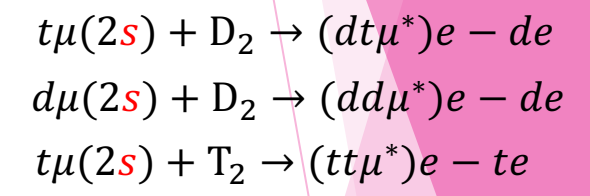
2020~

ミュオン分子と電子(原子分子)



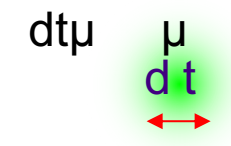
Vesman formation

$\sim 10^{11} \text{ s}^{-1}$



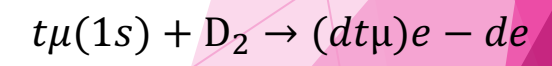
1990~2000

ミュオン分子孤立系



Vesman formation

$\sim 10^8 \text{ s}^{-1}$



シュレディンガー方程式（厳密）

$$H = \sum_i \hat{K}_i - \hat{K}_{\text{CM}} + \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

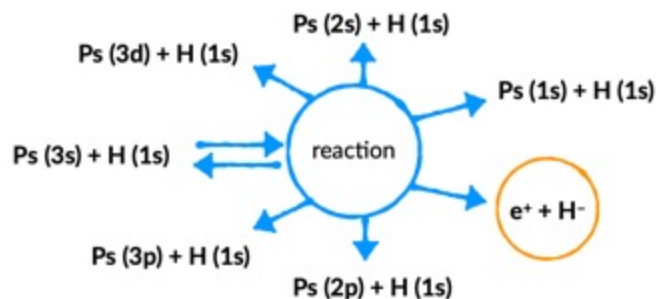
$$\Psi = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} + \sum_{\nu} b_{\nu} \Phi_{\nu}$$

$$\chi_\alpha(\rho') \rightarrow -\sqrt{\frac{v_{\alpha 0}}{v_\alpha}} S_{\alpha\alpha 0} \rho' H_J^{(+)}(k_\alpha \rho'),$$

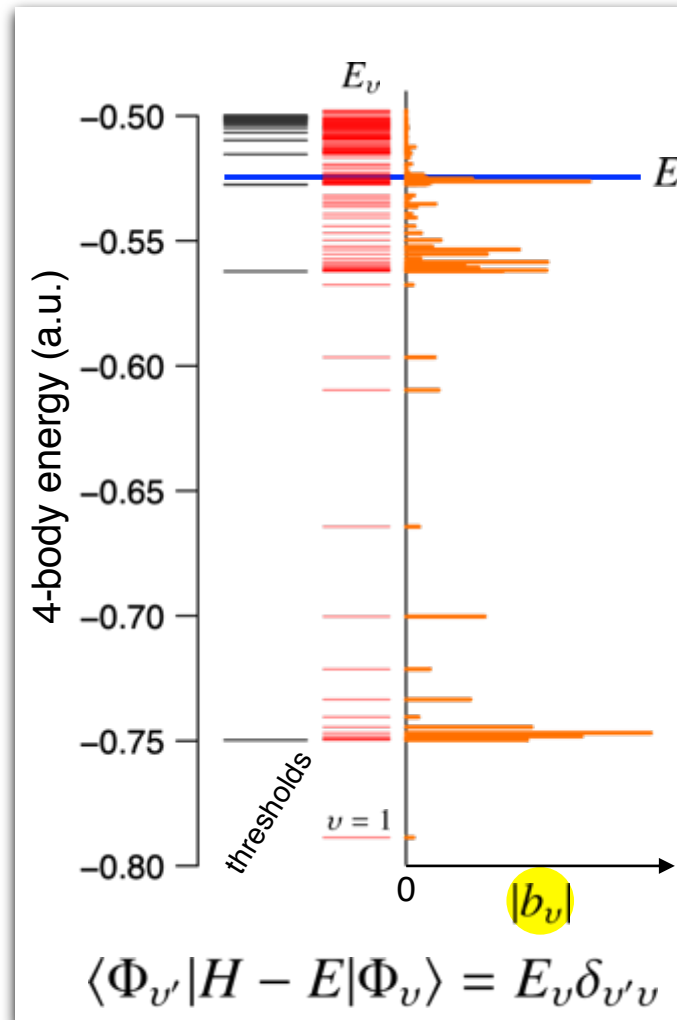
連立微積分方程式

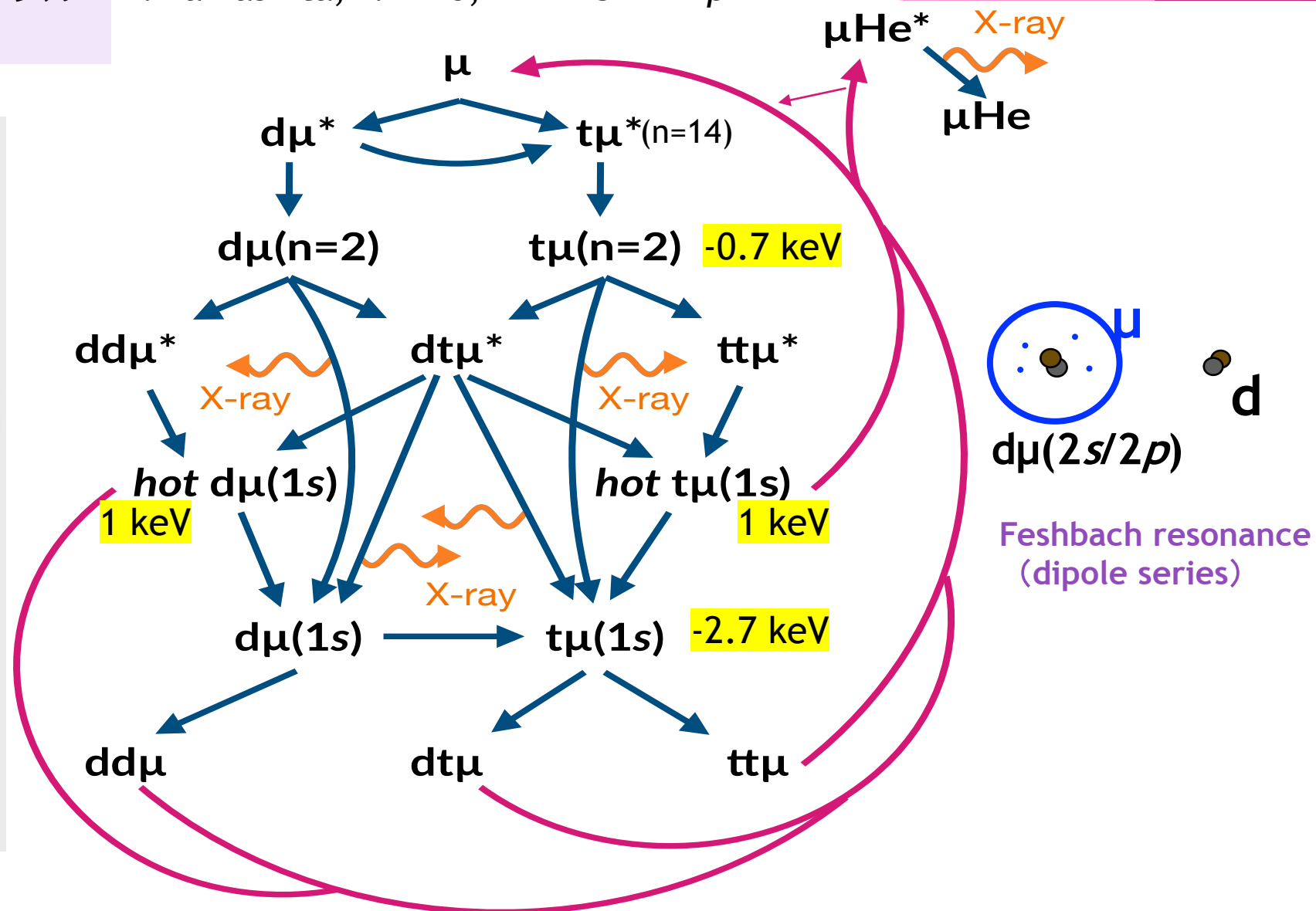
$$\frac{d^2}{d\rho^2}\rho\mathcal{R}_\alpha(\rho) + \cdots + \sum_{\alpha'} \int d\rho' \hat{W}_{\alpha\alpha'}(\rho, \rho') \rho' \mathcal{R}_{\alpha'}(\rho') + \cdots = 0$$

Coupled integro-differential equations: solved by finite difference method



反応領域を多数の
ガウス関数で展開





1990年代の宿題

Muonic atom-nucleus collisions in the energy region of $dt\mu$, resonant states

Y Kino, M Kamimura, *Hyperfine Interactions* 101 (1996) 191-196

Muonic atom deexcitation via formation of metastable molecular states, in light of experimental verification

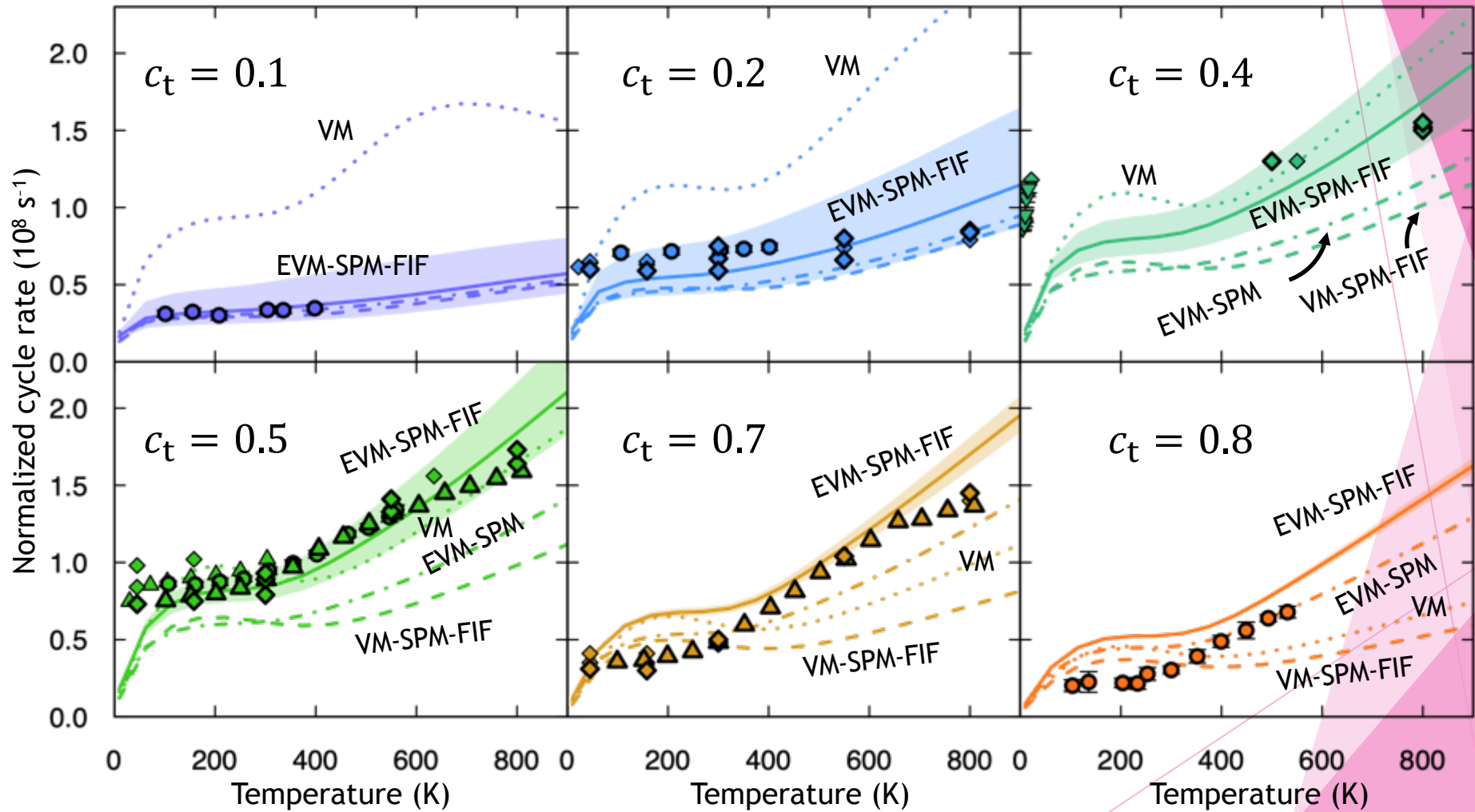
J Wallenius, S Jonsell, Y Kino, P Froelich, *Hyperfine Interactions* 138 (2001), 285-288

陰領域： $dt\mu^*$ の解離分岐比の不確定さ
 $0.1 \leq \gamma_d \leq 0.9$

Cycle rate $\lambda_c = \lambda_\mu [\varphi(Y_f^{-1} - W)]^{-1}$

Total sticking probability

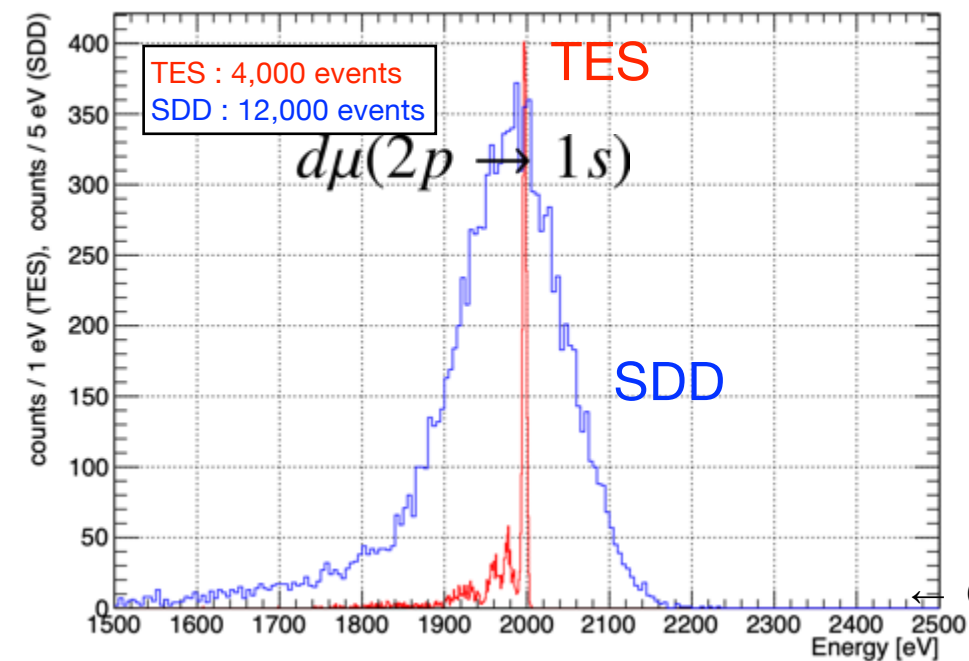
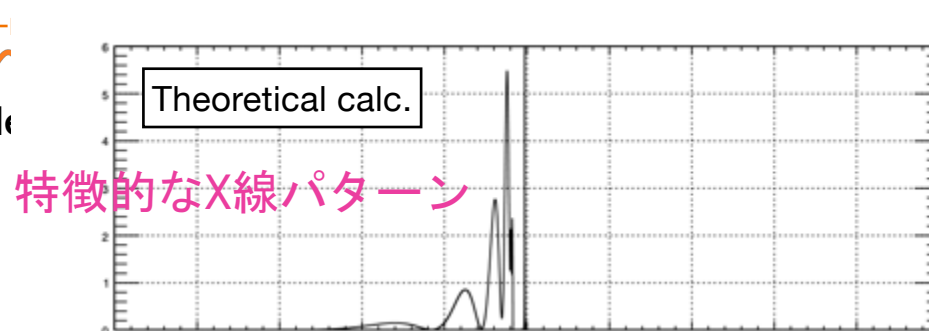
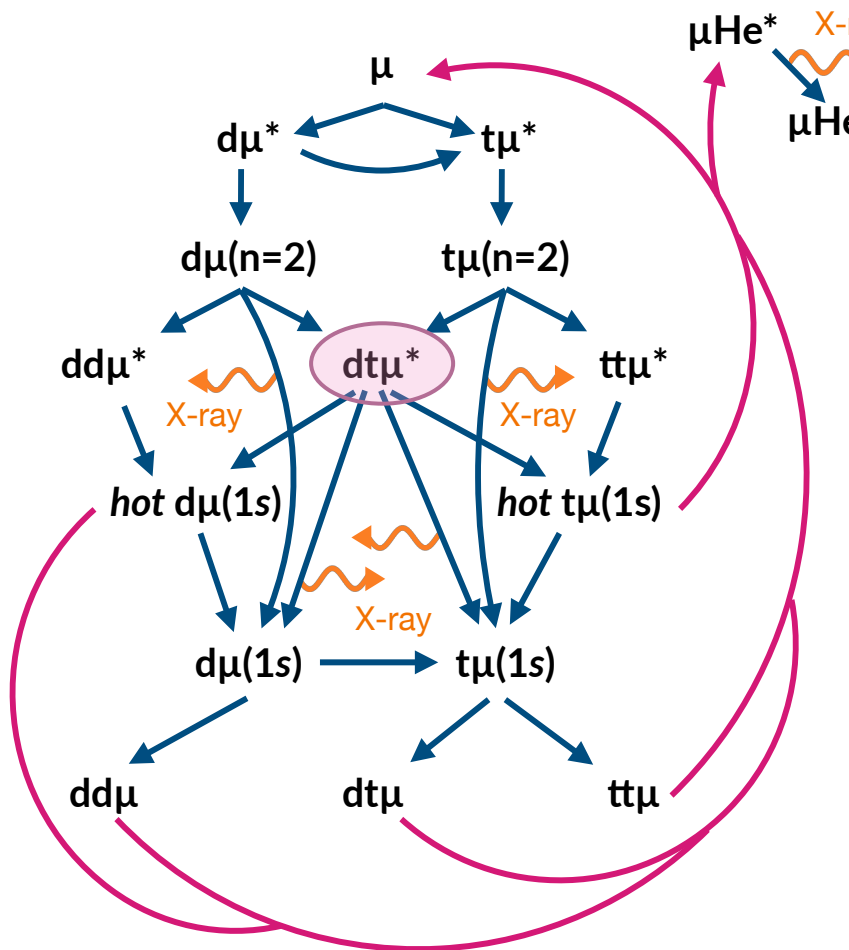
$$W = \sum_F P_{d\mu(1s,F)} \frac{0.58 c_d \lambda_{dd\mu(F)} \omega_d}{c_d \lambda_{dd\mu(F)} + c_t \lambda_{dt}} + \sum_F P_{t\mu(1s,F)} \frac{c_d \lambda_{dt\mu(F)} \omega_s + c_t \lambda_{tt\mu} \omega_t}{c_d \lambda_{dt\mu(F)} + c_t \lambda_{tt\mu}}$$



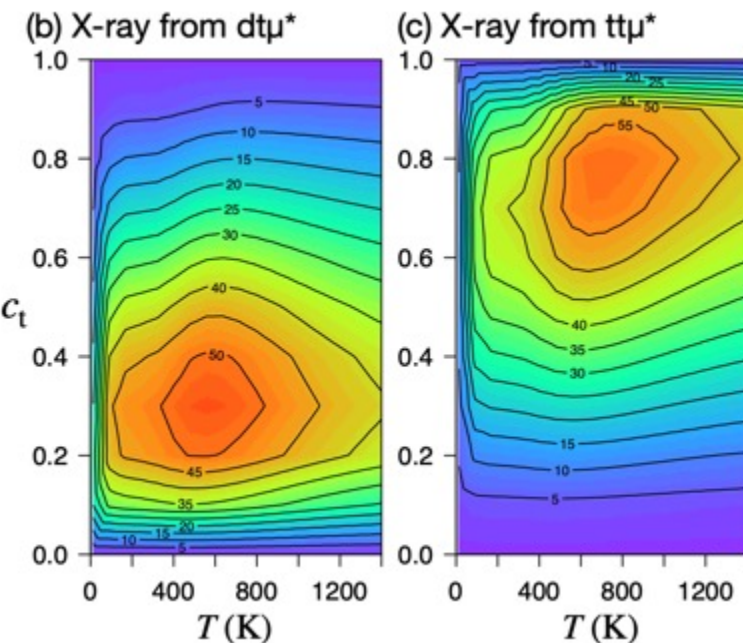
$dt\mu^*$ 経由(サイドパス, SPM) と飛行中 μ CF(FIF)を含むモデルで過去の実験結果をうまく説明

実験による $d\mu^*$ 生成の検証のための精密X線分光

ミュオン分子共鳴状態の解離X線を観測できれば、
SP+FIF μ CFモデルの検証につながる



$$dd\mu^* \rightarrow d\mu(1s) + d + \gamma$$



高エネルギー分解能X線検出器



超伝導転移端検出器
TES

(中部大 岡田)

計算の概要

◆ 複素座標回転法

共鳴状態を取り扱う方法

$r \rightarrow \alpha e^{i\theta} r$ とスケールし、

$$H^\theta \Psi^\theta = E^\theta \Psi^\theta \quad \frac{dE}{d\theta} = 0$$

から共鳴エネルギーと共鳴幅をもとめる

12万×12万次元の複素(非エルミート)一般化固有値問題を解く

◆ 輻射解離X線スペクトルの計算

双極子近似

$$\frac{d\Gamma_\gamma}{dE_\gamma} = \frac{4}{3} \alpha^3 E_\gamma^3 |\langle \Psi_f(E_f) | \overset{\text{双極子モーメント}}{\underset{\substack{\text{終状態(連続状態)} \quad \text{始状態}}}{\mathbf{d}}} | \Psi_i \rangle|^2$$

複素座標回転による変形

終状態(連続状態) $\Psi_f(E_f)$ を回転した完全系($\sum_i |\psi_i(\theta)\rangle \langle \bar{\psi}_i(\theta)| = 1$)で展開

$$\frac{d\Gamma_\gamma}{dE_\gamma} = \frac{4}{3} \alpha^3 E_\gamma^3 \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_n \left[\frac{\langle \bar{\psi}_n(\theta) | \mathbf{d}(\theta) | \Psi_i(\theta) \rangle^2}{E_n(\theta) - E_f} \right]$$

九州大学スーパーコンピュータITO

Fujitsu PRIMERGY CX2570 M4

Intel Xeon Gold 6140 (Skylake-SP)

(2.3 GHz (Turbo 3.7 GHz), 18 core × 2

DDR4 : 384 GB / node

OpenMP並列

計算時間：1週間程度

Γ_γ : 輻射解離速度

E_γ : 光子エネルギー

$$E_\gamma = E_i - E_f$$

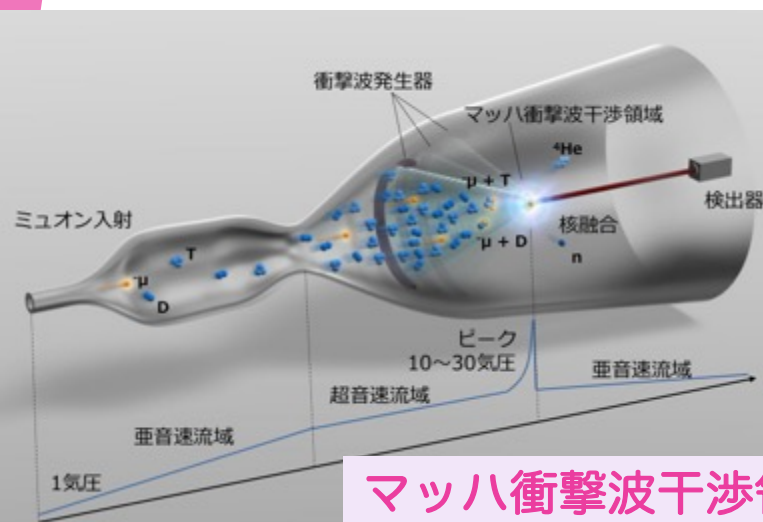
まとめと展望

ガウス関数展開法による精密計算が少数多体系物理学のにおいて威力を発揮してきた

エキゾチック原子分子、原子核、クォーク多体系、、、

ミュオン触媒核融合 (μCF) における長年の問題を解決がみえてきた
2000年ごろから

- ・ ミュオン分子準安定状態（共鳴状態） $\text{dt}\mu^*$ が関与する新しい μCF サイクルを理論と実験で分析・検証中。



マッハ衝撃波干渉領域での μCF

まとめ

山下琢磨^{A,B}、上村正康^C、安田和弘^B、新山元彬^B、神谷直紀^B、佐野大志^B
奥津賢一^B、宮下湖南^B、中島良太^B、小西蓮^B、佐々木喬祐^B、関根勉^B

^A東北大高教機構, ^B東北大・理, ^C理研

謝辞



新学術領域研究「宇宙観測検出器と量子ビームの出会い。新たな応用への架け橋。」
B02: マッハ衝撃波干渉領域での飛行中ミュオン触媒核融合の創生

共同研究者

山下琢磨^{A,B}、安田和弘^A、新山元彬^A、神谷直紀^A、佐野大志^A、奥津賢一^A、
宮下湖南^A、中島良太^A、小西蓮^A、佐々木喬祐^A、関根勉^A、上村正康^C

^A東北大・理、^B東北大高教機構、^C理研

謝辞



九州大学情報基盤研究開発センター研究用計算機システム重点支援制度



新学術領域研究「宇宙観測検出器と量子ビームの出会い。新たな応用への架け橋。」
B02: マッハ衝撃波干渉領域での飛行中ミュオン触媒核融合の創生

最近の論文発表

1. Near-threshold behavior of positronium-antihydrogen scattering cross sections, Physical Review A (2022) accepted.
2. Roles of resonant muonic molecule in new kinetics model and muon catalyzed fusion in compressed gas, Scientific Reports, 12 (2022), 6393 (14 pages)
3. Four-body variational calculation of a hydrogen-like atom involving an excited muonic molecule, Journal of Physics: Conference Series, 2207 (2022) 012035 (6 pages)
4. Calculation of Inelastic Scattering Cross Sections of Positronium–Antihydrogen Collision, Few-Body Systems, 62 (2021) 81(9 pages)
5. Design for detecting recycling muon after muon-catalyzed fusion reaction in ,solid hydrogen isotope target, Fusion Engineering and Design, 170 (2021) 112712-4 pages.
6. De-excitation dynamics of muonic atoms revealed by high precision spectroscopy of electronic K x rays, Physical Review Letters, 127 (2021), 053001(7 pages).
7. Design for detecting recycling muon after muon-catalyzed fusion reaction in solid hydrogen isotope target, Fusion Engineering and Design, 170 (2021) 112712-5 pages.
8. Time evolution calculation of muon catalysed fusion: Emission of recycling muons from a two-layer hydrogen film, Fusion Engineering and Design, 169 (2021) 112580-5 pages.
9. Near-threshold production of antihydrogen positive ion in positronium–antihydrogen collision, New Journal of Physics (First Track Communications), 23 (2021) 012001 (8 pages)