

課題名(タイトル):

Few-body calculation of quantum reactive scattering including exotic atoms and molecules

利用者氏名:○山下 琢磨

理研における所属研究室名:仁科加速器科学研究センター 少数多体系物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係

原子や分子を構成する電子や原子核を、素粒子(ミュオン $\mu^{+/-}$)や反粒子(陽電子 e^+)などで置き換えた系をエキゾチック原子と呼ぶ。エキゾチック原子では、正電荷粒子と負電荷粒子の質量が近く、量子化学計算で有効な断熱近似(核の運動と電子の運動を切り離して考える近似)が適さない。エキゾチック原子の低速散乱における反応など、ダイナミクスの計算では、量子散乱理論に基づく厳密な計算が重要である。

本研究では、エキゾチック原子を含む量子反応性散乱の少数多体系精密計算を行い、反応断面積のエネルギー依存性や、束縛・共鳴状態と連続状態の光学遷移を明らかにする。また、得られた散乱断面積を用いてレート方程式を構築し、ミュオン原子カスケード過程やミュオン触媒核融合のダイナミクス解明を目指す。このほかに、複素座標回転法を用いた連続状態表現法を活用し、陽電子散乱やポジトロニウム(Ps)の衝突、ミュオン水素原子と水素原子の反応過程等を計算する。実験の共同研究と連携し、Ps-BECやミュオン触媒核融合の物理を開拓する。

今年度は特に、(1)複素座標回転法を用いた陽電子-正イオン弾性散乱位相シフトの計算[1]、(2)ミュオン分子の共鳴状態の電気双極子遷移速度の計算[2] に注力した。陽電子と原子標的の散乱断面積は、物質中での陽電子の振る舞いを理解する基礎であるとともに、低速陽電子回折による表面分析のデータベースとしても重要である。陽電子と原子の散乱過程の理解には、ポジトロニウム(Ps)形成など、衝突中の電子-陽電子間引力相互作用を精密に取り入れた計算が必要である。Ps形成しきいエネルギー以下の低速散乱においても、仮想的なPs形成が散乱断面積の計算に重要な役割を果たす。近年の低速陽電子ビーム技術の発展により、原子・分子標的との散乱断面積も測定されている[3]。

2. 具体的な利用内容、計算方法

(1)複素座標回転法を用いた陽電子-正イオン弾性散乱位相シフトの計算

陽電子と正イオン(水素様 He^+ , Li^{2+} , B^{3+} , 及びヘリウム様 Li^+)の低速散乱に着目した。正イオンは電子の結合エネルギーが大きく、中性原子との衝突に比べてPs形成チャンネルが高いエネルギーで開く。例えば、中性の水素原子ではPs形成しきいエネルギーは6.8 eVであるが、水素様の He^+ 標的では47.6 eVであり、これは He^+ の第一励起しきいエネルギー40.8 eV よりも高い。また、陽電子-正イオン間に長距離のクーロン斥力が残る点も中性原子標的と異なる。これまでに理論的な興味から複数の異なる計算法によって $e^+-\text{He}^+$, Li^{2+} , B^{3+} の散乱断面積が報告されている[4, 5]。

今年度は、既報の計算法とは全く異なるアプローチ[6]で $e^+-\text{He}^+$, Li^{2+} , B^{3+} の散乱位相シフトおよび断面積を計算した。すなわち、複素スケーリング法(Complex scaling method, CSM)を用いて複素固有エネルギーを計算し、連続状態密度から散乱の位相シフトを算出した。CSMでは、衝突エネルギーごとに波動関数を計算する必要がないという特色があり、将来的には多チャンネル散乱を低コストで計算できる可能性がある。複素固有エネルギーの計算にはガウス関数展開法[7]を用い、組替座標系を用いて定義した粒子間相関ガウス型基底関数により複素回転ハミルトニアンを対角化した。Arnoldi iteration 法により複素非エルミート一般化固有値問題を解いた。

(2)ミュオン分子の共鳴状態の電気双極子遷移速度の計算

負ミュオンが二つの水素原子核を束縛した系をミュオン分子と呼ぶ。特に、重水素原子核(d)からなる $\text{dd}\mu$ や、重水素・三重水素からなる $\text{dt}\mu$ 分子は、ミュオン触媒核融合[8]への応用上重要な系である。ミュオン分子 $\text{dd}\mu$ の共鳴状態($\text{dd}\mu^*$)は、 $\text{d}\mu(n=2) + \text{d}$ の解離しきいエネルギー直下に存在する Feshbach 共鳴状態で、X線を放出して解離する。ミュオン触媒核融合サイクルにおいて、 $\text{dt}\mu^*$ の生成・解離は核融合中性子の測定結果を説明する上で重要である[9]。本研究では、共鳴状態 $\text{dd}\mu^*$, $\text{dt}\mu^*$ から連続状態への解離速度

および束縛状態への遷移速度を明らかにした。まず、ガウス関数展開法を用い、共鳴状態の波動関数を計算した。連続状態は複素座標回転法による擬状態の重ね合わせで表現し、双極子近似により遷移行列を計算した。

3. 結果

(1)複素座標回転法を用いた陽電子-正イオン弾性散乱位相シフトの計算[1]

二体系モデルの陽電子-貴ガス原子散乱において見いだされた位相シフトの収束挙動を分析し、CSM による低速散乱計算で有効な補正法を提案した。提案した補正法を用いて、 $e^+ + \text{He}^+, \text{Li}^{2+}, \text{B}^{3+}, \text{Li}^+$ 散乱の位相シフトを明らかにした。CSM によって計算した S 波散乱の位相シフトが先行研究の結果[4, 5]と一致することを確認し、少数の固有エネルギーの組から弾性散乱断面積を算出できることを示した。計算に必要な固有エネルギーの数が削減されたことで、多体系への適用が容易になった。

(2)ミュオン分子の共鳴状態の電気双極子遷移速度の計算[2]

$dd\mu^*$ について解離 X 線スペクトルと共鳴-束縛遷移速度の網羅的計算を行った。共鳴状態のエネルギー準位は d-d 間のスピンの応じて分類し、回転角運動量量子数 $J=3$ まで、振動量子数 8 まで求めた。既報が存在する $J=0,1$ についてエネルギー準位がよい精度で一致することを確認した。次に、連続状態への解離 X 線スペクトルを長さゲージ、速度ゲージで計算し、両者が一致することを確認した。さらに、共鳴-束縛遷移速度が、一部の状態 ($2p\pi u$ 断熱ポテンシャルに相当する状態)で連続状態への解離速度に匹敵することを見いだした。同様の計算を $dt\mu^*$ でも行い、類似の現象を報告した。

共鳴-束縛遷移速度は 10^{10} s^{-1} 程度で、これは通常の $dt\mu$ 形成速度 10^8 s^{-1} よりも速い。すなわち、この過程を最大化することでミュオン触媒核融合サイクル速度向上が期待される。

4. まとめ

散乱位相シフトの計算に複素固有エネルギーのみを用いるという新しい計算法により、陽電子-正イオン散乱断面積が計算できることを示した。これまでは中性子散乱など短距離力の系で適用されていたが、クーロン力が遠方まで残る原子分子系でも有効な方法であることが示唆された。

ミュオン分子の共鳴-束縛遷移が一部の状態で非常に大きな分岐比を持つことは、これまでの研究では見過ごされてきた新しい脱励起経路である。今後の応用研究上も利用価値がある。

5. 今後の計画・展望

複素座標回転法による位相シフト計算は今後、陽電子に限らず電子散乱、原子-原子散乱でその有効性を検証する。また、ミュオン触媒核融合ではカスケード過程をシミュレーションするモンテカルロ計算コードを開発中である。最先端の X 線分光実験と連動してミュオン原子の励起状態分布の時間発展を明らかにする。

参考文献

- [1] T. Sano, T. Yamashita, Y. Kino, Phys. Rev. A **109**, 062803 (2024).
- [2] T. Yamashita, K. Yasuda, Y. Kino, Phys. Rev. A **111**, 012811 (2025).
- [3] L. Chiari, A. Zecca, Eur. Phys. J. D **68**, 297 (2014).
- [4] T. T. Gien, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. **34**, 5103 (2001).
- [5] B. H. Bransden, C. J. Noble, and R. J. Whitehead, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. **34**, 2267 (2001).
- [4] M. Odsuren et al., Phys. Rev. C **104**, 014325 (2021).
- [5] E. Hiyama et al., Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).
- [6] T. Sano, T. Yamashita, Y. Kino, Phys. Rev. A **109**, 062803 (2024).
- [8] P. Froelich, Adv. Phys. **41**, 405 (1992).
- [9] T. Yamashita, Y. Kino, K. Okutsu, S. Okada, M. Sato, Sci Rep **12**, 6393 (2022).

2024 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

“Radiative decay of muonic molecules in resonance states”

Physical Review A 111, 012811 (2025); arXiv:2407.01756

Takuma Yamashita, Kazuhiro Yasuda, Yasushi Kino

“Complex scaling calculation of phase shifts for positron collisions with positive ions”

Physical Review A 109, 062803 (12pp) (2024), arXiv:2403.00296

Taishi Sano, Takuma Yamashita, Yasushi Kino

“Complex coordinate rotation calculation of photodetachment cross sections of positronium negative ions”

J. Phys.: Conf. Proc. (accepted)

Naoki Kamiya, Takuma Yamashita, Yasushi Kino

“Calculation of S-wave phase shifts of positron scattering off hydrogen-like positive ions using complex scaling method”

J. Phys.: Conf. Proc. (accepted)

Takuma Yamashita, Yasushi Kino

【口頭発表】

“Few-body calculation of positron and positronium scattering by atoms and ions”

Takuma Yamashita

The 13th International Workshop on The 13th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry Positron and Positronium Chemistry (PPC13), Kanazawa, Japan, 2024/10/27-11/1.

(Invited)

“Resonance series in positronic atoms and muonic molecules”

Takuma Yamashita,

Universality of Strongly Correlated Few-body and Many-body Quantum Systems, Sendai, Miyagi, 2024/9/13.

(Oral)

“Calculation of integration and disintegration processes of antihydrogen positive ions in collisions with positronium”

Takuma Yamashita, Yasushi Kino, Emiko Hiyama, Svante Jonsell, Piotr Froelich

International Conference on Exotic Atoms and Related Topics and conference on Low Energy Antiprotons (EXA/LEAP 2024), Vienna, Austria, 2024/8/25-30.

(Oral)

“複素座標回転法を用いた陽電子-正イオン散乱位相シフトの解析”

山下琢磨、佐野大志、木野康志

京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」，京都大学複合原子力科学研究所，大阪府熊取町，2024/12/13-14.

(口頭発表)

2024 年度 利用報告書

“陽電子・ポジトロニウムと原子の相互作用の理論計算”

山下琢磨

第 16 回陽電子科学研究交流会, 金沢市文化ホール, 石川県金沢市, 2024/11/2-3.

(基礎講義)

“ミュオン分子の共鳴-束縛遷移速度の計算”

山下琢磨, 木野康志

日本物理学会第 79 回年次大会, 北海道大学, 北海道札幌市, 2024/9/16-19.

(口頭発表)

“極低温反物質生成のためのポジトロニウム・反水素原子四体系 多チャンネル組替散乱の理論研究”

山下琢磨

原子衝突学会第 49 回年会, 奈良女子大学, 奈良県奈良市, 2024/8/7-9.

(第 25 回若手奨励賞受賞講演)

“ミュオン分子の共鳴状態を含む新しいミュオン触媒核融合の理論研究”

山下琢磨

第 2 回 中間子科学の将来討論会, ホテルラフォーレ那須, 栃木県那須郡那須町, 2024/7/24-25.

(口頭発表)

“量子少数多体計算によるミュオン分子や陽電子原子の共鳴状態の研究”

山下琢磨

量子物理学・ナノサイエンス第 385 回セミナー, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2024/3/22.

(招待講演)

“ミュオン重水素分子共鳴状態の輻射解離機構の分析 III”

山下琢磨, 安田和弘, 神谷直紀, 木野康志

日本物理学会 2024 年春季大会, オンライン, 2024/3/18-21.

(口頭発表)