

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エネルギー準位や構造のみならず、エキゾチック原子を含む低速散乱など、ダイナミクス・反応の計算では、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、反応断面積や、状態間の遷移速度を明らかにする。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。実験の共同研究と連携し、量子少数多体系の物理を開拓する。

今年度は特に以下の課題に注力した。

- (1)ミュオン分子の共鳴状態の Vesman 機構による生成速度の計算とホスト分子依存性の評価
- (2)ミュオン原子と水素原子の会合性イオン化によるミュオン分子生成断面積の計算
- (3)ミュオン水素原子の脱励起過程(カスケード過程)のモンテカルロシミュレーションコードの開発

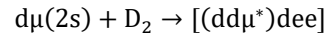
これらの課題はミュオン触媒核融合[1]に関する散乱過程である。負ミュオン(μ)を重水素・三重水素の混合体に入射すると、ミュオン水素原子($d\mu$, $t\mu$)を形成し、これがさらに別の水素分子に衝突することで共鳴過程によりミュオン分子 $dt\mu$ を生じる。 $dt\mu$ は 10^{12} s^{-1} の速度で分子内核融合を起こし、 μ が再び一連の反応を繰り返す。この $dt\mu$ 機構を Vesman 機構と呼ぶ。ミュオン分子 $dd\mu$ の共鳴状態($dd\mu^*$)は、 $d\mu(n=2) + d$ の解離しきいエネルギー直下に存在する Feshbach 共鳴状態で、Vesman 機構と同様の機構で生成すると考えられる。最新の精密 X 線分光の結果[2]もこれを支持している。本研究では、(1)において $dd\mu^*$ の生成速度の計算を行った。加えて、Vesman 機構と異なる非共鳴過程でのミュオン分子 $dd\mu$, $tt\mu$, $pp\mu$ の生成断面積の計算を(2)で行った。さらに、ミュオン水素原子の基底状態での運動エ

ネルギー分布を求めるため、励起状態で生成したミュオン水素原子が脱励起を繰り返すカスケード過程のシミュレーションコードを(3)で開発した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

(1)ミュオン分子の共鳴状態の Vesman 機構による生成速度の計算とホスト分子依存性の評価

ミュオン重水素原子 $d\mu$ の $2s$ 状態が D_2 分子と衝突し、 $dd\mu^*$ を分子内に生成する反応



を計算する。終状態のチャネルの波動関数を

$$\Psi_f = \psi_{dd\mu} \Phi_{XD}$$

と近似する。ここで、 $\psi_{dd\mu}$ は $dd\mu^*$ 三体系の波動関数、 Φ_{XD} は重水素分子の一方の核を $dd\mu$ の質量を持つ1粒子に置き換えた場合の分子の波動関数である。本研究では、入射チャネルの波動関数を

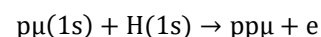
$$\Psi_i = \psi_{d\mu+d} \Phi_{D_2}$$

と近似した。 $\psi_{d\mu+d}$ は $d\mu$ と d の三体系散乱状態の波動関数であり、 Φ_{D_2} は D_2 分子の波動関数である。

$\psi_{d\mu+d}$, $\psi_{dd\mu}$ を求めるため、本研究ではガウス関数展開法[3]を適用した。共鳴状態は複素座標回転法[4]により共鳴エネルギーの収束を基底関数の数に対して確認した。連続状態の射影演算子を複素座標回転法の枠組み[5]で擬連続状態の重ね合わせとして記述した。 D_2 , XD 分子の波動関数には Born-Oppenheimer 近似を適用した。遷移の相互作用ハミルトニアンを多重極展開し、双極子近似により遷移行列を計算した。複素非エルミート一般化固有値問題を Arnol'di iteration 法(ARPACK パッケージ)により解いた。散乱標的を D_2 とした場合と D_2^+ とした場合で生成速度を比較した。

(2)ミュオン原子と水素原子の会合性イオン化によるミュオン分子生成断面積の計算

非共鳴的なミュオン分子生成反応



およびその同位体の四体系組替散乱を計算した。ミュオン分子の束縛エネルギーが H 原子のイオン化エネルギーより

大きいため、発熱反応でミュオン分子が生成する。計算法は著者らがすでに開発し、反水素原子-ポジトロニウム散乱へ適用実績[6,7]のある四体系組替散乱計算コードを用いた。散乱状態の全波動関数を

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

と記述する。まずハミルトニアンを四体系の基底関数系(ガウス関数展開法)で対角化し、固有エネルギーと固有ベクトル $\{\Phi_{\nu}\}$ を得る。これを線形結合して散乱の中間状態とする。散乱の境界条件を満たすように ψ_{α} を数値計算で求め、散乱行列から断面積を得る。対角化には intel oneAPI の DSYGVX ソルバーを用いた。連立微積分方程式は自作のコードおよび intel oneAPI のソルバーを用いた。

(3)ミュオン水素原子の脱励起過程(カスケード過程)のモンテカルロシミュレーションコードの開発

ミュオン水素原子は水素原子(分子)の電子と置換して生成するため、生成直後は主量子数 14 前後の高励起状態にある[8]。その後基底状態まで脱励起を繰り返す。これをカスケード過程と呼ぶ。脱励起の素過程には X 線を放出する輻射遷移のほか、クーロン脱励起や外部オーグメント遷移が存在する。ミュオン水素原子の基底状態は 2.5 keV 程度の束縛エネルギーであり、クーロン脱励起や外部オーグメント遷移によって脱励起のエネルギーがミュオン原子の運動エネルギーに転換されるため、基底状態到達時の運動エネルギー分布を予測するには、カスケード過程全体のシミュレーションが不可欠である。カスケード過程の実験的検証には、X 線分光が有用である[9]が、従来の検出器ではエネルギー分解能のため情報が K α 線、K β 線に限られていた。近年の低温 X 線検出器[10]により、今後詳細なカスケード過程の検証が可能になると考えられる。

本研究では、各量子状態間の遷移速度をデータベースとし、カスケード過程をモンテカルロ法によりシミュレーションするコードを開発した。輻射遷移は厳密な波動関数から E1 遷移を求めた。クーロン脱励起、外部オーグメント遷移、シュタルク遷移は Born 近似により推定値を求め、経験的な補正係数を導入して既存の実験結果を広い密度範囲で再現するように設定した。ミュオン分子の共鳴状態の生成速度は(1)の計算結果を用いた。このコードを用いて X 線の強度比の計算を行った。

3. 結果

(1)ミュオン分子の共鳴状態の Vesman 機構による生成速度の計算とホスト分子依存性の評価

生成する dd μ^* の角運動量を J=0-3 まで取り込み、生成速度を計算した。d μ 原子の温度を 10 K と仮定したとき、液体水素密度中での dd μ^* 生成速度は $1.7 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ となり[11]、これは d $\mu(2p)$ の輻射遷移と類似した速度である。d $\mu(2s)$ と d $\mu(2p)$ 間のシュタルク遷移を考慮することで、K α 線と dd μ^* 由来の解離 X 線のスペクトル強度比を計算可能である。

標的分子を D $_2$ から D $_2^+$ に変更すると、1.5 倍程度反応速度が向上する結果が得られた[12]。これは、D $_2^+$ のポテンシャルカーブが広い井戸を持ち、遠方で緩やかに減衰することで振動準位密度が上昇した効果と考えられる。

(2)ミュオン原子と水素原子の会合性イオン化によるミュオン分子生成断面積の計算

低速で支配的な寄与を持つ S 波散乱の弾性散乱断面積、ミュオン分子生成断面積を求めた。反応しやすい値近傍での断面積の振る舞いが Wigner 則に合致することを確認した。また、pp μ の生成速度は p-p 間のスピンによって大きく異なり、スピナー重項と三重項を比較すると、一重項では弾性散乱断面積は大きいものの pp μ 生成速度は小さく、三重項では弾性散乱断面積が小さく pp μ 生成速度が大きいという結果が得られた。

同位体依存性について pp μ , dd μ , tt μ の生成速度を比較すると、ミュオン分子の束縛エネルギーと概ね相関し、放出される電子の運動エネルギーが反応性に寄与していることが推察された。一方、pp μ の回転基底状態と励起状態で反応速度を詳細に検討すると、電子のみでは生成速度の比を説明できず、p μ +p の量子散乱の取り扱いが重要であることが明らかになった(論文投稿済み[13])。

(3)ミュオン水素原子の脱励起過程(カスケード過程)のモンテカルロシミュレーション

断面積を過大評価する Born 近似の断面積を補正するため、主量子数を変数とする3次の Bernstein 多項式を導入し、Lauss らによる広い密度範囲での X 線測定実験の結果[14]を再現するカスケードモデルの構築を行った。補正を用いない場合に比べて大幅に水素の特性 X 線強度比を再現できることが確認できた。

4. まとめ

負ミュオンを含むエキゾチック原子の量子散乱計算を行った。特に、ミュオン触媒核融合との関連が深い系を対象に、ミュオン分子の生成速度やカスケード過程の計算およびコード開発を進めた。ddp*の生成速度は本研究が初めての計算例であり、最新の精密 X 線分光実験の解釈に適用可能である。会合性イオン化によるミュオン分子生成速度の計算では、これまで電子をあらわに扱った先例がなく、本研究が初めての厳格な計算となった。カスケードモデルの開発では、これらの精密計算の結果を取り込みつつ、近似が粗い素過程については少数のパラメータで補正を取り込むことができた。今後、ミュオン原子の減速過程も考慮し、運動エネルギー分布の推定に取り組む。

5. 今後の計画・展望

陽電子を含むエキゾチック原子の光解離過程の精密計算にも取り組んでいる。特に、ポジトロニウム分子の励起状態の解離光スペクトルの計算(論文投稿済み[15])や陽電子ナトリウム原子の光解離断面積の計算を進めている。

参考文献

- [1] P. Froelich, Adv. Phys. **41**, 405 (1992).
- [2] Y. Toyama, S. Okada, T. Yamashita, Y. Kino, et al., Sci. Adv. (accepted).
- [3] E. Hiyama et al., Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).
- [4] Y. K. Ho, Phys. Rep. **99**, 1 (1983).
- [5] A. Buchleitner et al., J. Phys. B **27**, 2663 (1994).
- [6] T. Yamashita, Y. Kino, E. Hiyama, S. Jonsell and P. Froelich, New J. Phys. **23**, 012001 (2021).
- [7] T. Yamashita, Y. Kino, E. Hiyama, S. Jonsell and P. Froelich, Phys. Rev. A **105**, 052812 (2022).
- [8] X. M. Tong et al., Phys. Rev. Lett. **134**, 193001 (2025).
- [9] S. Sakamoto et al., Phys. Lett. A **260**, 253 (1999).
- [10] T. Okumura et al., Phys. Rev. Lett. **134**, 243001 (2025).
- [11] Takuma Yamashita, Yasushi Kino, ICPEAC (2025).
- [12] 山下琢磨, 木野康志, 日本物理学会第 80 回年次大会(2025).
- [13] A. Neki, T. Yamashita, Y. Kino, submitted.
- [14] B. Lauss et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 3041 (1998).
- [15] N. Kamiya, T. Yamashita, Y. Kino, submitted.

2025 年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

1. "Radiative dissociation of positronium molecules in excited state", N. Kamiya, T. Yamashita, Y. Kino, XXII International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics & XXIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms (POSMOL2025), Matsue, Japan, 2025/8/7-8/10. (Hot topic)
2. "Three-particle correlation in positronium ions and in positronium (anti)hydrides", T. Yamashita, Y. Kino, E. Hiyama, S. Jonsell, P. Froelich, XXII International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics & XXIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms (POSMOL2025), Matsue, Japan, 2025/8/7-8/10. (Hot topic)
3. "Recent theoretical progress in muon catalyzed fusion", Takuma Yamashita, Yasushi Kino, 34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC2025), Sapporo, Japan, 2025/7/29-8/5. (Progress report, Invited)
4. "Scattering of positron and positronium by atoms: application of complex scaling method to resonant and non-resonant states", Takuma Yamashita, Naoki Kamiya, Yasushi Kino, The 20th International Conference on Positron Annihilation (ICPA20), Takamatsu, Kagawa, 2025/6/1-6. (Invited)
5. "Muon catalyzed fusion", Takuma Yamashita, Muon4Future, Venezia, Italy, 2025/5/26-30. (Invited)
6. "陽電子-ヘリウム原子散乱における共鳴状態の 4 体計算", 山下琢磨, 神谷直紀, 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, 大阪府熊取町, 2025/12/12-13.
7. "Vesman 機構による共鳴状態ミュオン分子の生成断面積の計算", 山下琢磨, 木野康志, 日本物理学会第 80 回年次大会, 広島大学, 広島県東広島市, 2025/9/16-19.

【ポスター発表】

1. "ミュオン水素原子特性 X 線系列解析のためのカスケード計算", 山下琢磨, 中川鈴彩, 染川純, 清水快, 神谷 直紀, 木野康志, 原子衝突学会第 50 回年会, 東京都立大学, 東京都八王子市, 2025/8/18-20.