

令和 6 年 6 月 6 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究

研究期間：2022～2023

課題番号：22K13980

研究課題名（和文）励起ミュオン水素原子と水素原子の新奇な二原子分子描像の開拓

研究課題名（英文）Search for a novel diatomic molecule consisting of a hydrogen atom and an excited muonic hydrogen atom

研究代表者

山下 琢磨 (Yamashita, Takuma)

東北大学・高度教養教育・学生支援機構・助教

研究者番号：40844965

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：素粒子ミュオンは、電子の207倍の質量をもつ素粒子で、本研究では、ミュオンが二つの水素原子核を結合して作る極小の分子の量子状態を明らかにしました。特に、ミュオン分子の共鳴状態（一時的な結合状態）が電子を纏って生成した際の量子状態を理解するため、精密計算を行いました。四粒子系の波動関数を直接求めることで、電子を纏ったミュオン分子が孤立系に比べて収縮することや、ミュオン分子の共鳴状態が発する解離X線に分子固有の特徴的なエネルギー構造が現れることを明らかにしました。この結果は、最新の精密X線分光実験と連動して、ミュオン分子の存在形態に新しい描像を提案する成果となります。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ミュオン分子は二つの核間距離がミュオンの強力な化学結合によって通常の子の100分の1程度まで短くなっており、分子内で核融合反応を起こすことが知られています。ミュオン触媒核融合と呼ばれるこの現象は、プラズマを必要としない点で特徴的であり、その効率向上にはミュオン分子を含めたダイナミクスの理解が必要になります。本研究で明らかにしたミュオン分子の共鳴状態は、重水素・三重水素混合標的でのミュオン触媒核融合の効率を大きく左右する状態であり、その検出方法や量子的性質が明らかになったことで、今後より精密な設計が可能になると期待されます。

研究成果の概要（英文）：The muon is an elementary particle with a mass 207 times greater than that of the electron. In this study, the quantum state of a tiny molecule formed when a muon combines two hydrogen nuclei was revealed. In particular, precise calculations were carried out to understand the quantum state of the resonance state (temporary bound state) of the muonic molecule under the electron cloud. By directly obtaining the wavefunction of the four-particle system, it was revealed that the muonic molecule contracts under the electron cloud compared to the isolated muonic molecule, and that the dissociative X-ray emitted by the resonant state of the muonic molecule shows a characteristic energy structure identifying the quantum state. These results, in conjunction with the latest precision X-ray spectroscopy experiments, provide a new picture of the muonic molecules and cascade processes.

研究分野：原子物理学

キーワード：ミュオン エキゾチックアトム 共鳴状態 オージェ遷移 X線分光 量子少数多体計算

1. 研究開始当初の背景

電子の 207 倍の質量をもつ素粒子「ミュオン (μ)」は、水素標的中に入射すると、水素原子 H の中の電子と入れ替わり、高い励起状態の「ミュオン水素原子 ($p\mu$)」を形成する。ミュオン水素原子は生成時に高い励起状態にあるが、脱励起を繰り返してやがて基底状態に至る。基底状態のミュオン水素原子は電氣的に中性で空間的な大きさが水素原子の 1/200 程度と小さい。したがって物質中でも容易に動き回ることができ、電子雲を掻い潜って様々な原子衝突過程を経る。

近年の実験結果から、脱励起の過程で生じる準安定なミュオン原子 (2s 状態) から、ミュオン分子の共鳴状態が生成している可能性が指摘されていた。図 1 (a) にカスケード過程の概略を示す。ミュオン水素原子の 2s 状態は 2p 状態に比べて 0.2 eV ほどエネルギーが低く、1s 状態への E1 遷移は禁制であるため、熱化した 2s 状態は長寿命であると期待される。しかし、2s 状態のミュオン水素原子が系中の別の水素分子と衝突すると、ミュオン分子 $pp\mu$ の共鳴状態 ($pp\mu^*$ と記載する) を経て 1s 状態へ遷移するため、短寿命化する。なお、2p 状態は X 線を放出して基底 (1s) 状態へ遷移する。

図 1 (b) に、ミュオン分子の共鳴状態が生成する過程を図解した。共鳴状態 $pp\mu^*$ の結合エネルギーが衝突相手の水素分子の振動回転励起に渡されることで、高効率に生成すると期待される。このとき、 $pp\mu^*$ は『電子を纏った状態』で生成する。このような機構を Vesman 機構と呼ぶ。『電子を纏ったミュオン分子共鳴状態』は、大きな内部エネルギーを持ったクーロン多体擬似核を内包する新しい原子系で、高精度計算によって基礎方程式を解くことによって初めて解明できる量子状態である。

孤立したミュオン分子の共鳴エネルギー準位は、 $dt\mu^*$ を中心に複数の理論研究[例えば、Hara1989, PRA]があるが、電子と結合した状態の計算は研究開始当時先例がなかった。ここで、d は重水素核、t は三重水素核を表す。 $dt\mu^*$ はミュオン触媒核融合 (μCF) への応用面で特に関心が高く、非常に高精度な三体計算も報告されている[Kilic 2004 Phys. Rev. A]。 $dt\mu^*$ の存在の有無は、ミュオン触媒核融合の $d\mu, t\mu$ 分布のバランスを変え、 μCF サイクル効率に大きく関わると指摘するモデルもある[Froelich 1995 Phys. Rev. Lett.]。実験では、 μ を入射した水素標的から、900 eV 付近の運動エネルギーを持った $p\mu$ が放出されることが確認されており[Pohl 2006 Phys. Rev. Lett.]、これは、 $pp\mu^*$ の解離によるものと推定される。2s-2p レーザー分光実験では、非常に早い $p\mu(2s), d\mu(2s)$ 消失速度が見出されており[Diepold 2013 Phys. Rev. A]、ミュオン分子の共鳴状態がその機構として提案されていた。しかし、分子形成を経ないクーロン脱励起 $p\mu(2s) + p \rightarrow p\mu(1s) + p$ と厳密な区別は難しく、後者の寄与が大きいとする論文もある[Popov 2017 Phys. Rev. A]。

本研究では、ミュオン分子の共鳴状態の生成速度を精密計算によって明らかにし、その形成有無や、実験的検出方法の提案を目指した。

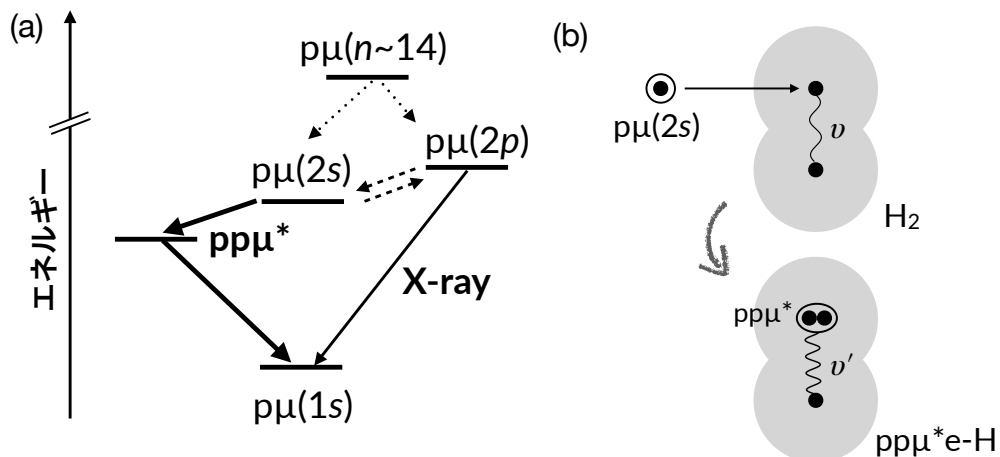


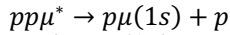
図 1 (a) ミュオン原子のカスケード過程の概略図、(b) ミュオン分子の共鳴状態の形成過程の模式図。

2. 研究の目的

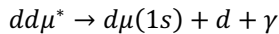
準安定なミュオン水素原子 (2s 状態) と水素分子の衝突によって生成しうるミュオン分子の共鳴状態について、その生成速度、電子を纏った状態の構造やエネルギー準位、実験的検出方法を明らかにすることを目的とした。

3. 研究の方法

ミュオン分子の共鳴状態は、構成する水素原子核の種類によって主な解離過程が異なることが指摘されていた [Lindroth 2003 Phys. Rev. A, Kilic 2004 Phys. Rev. A]。すなわち、 $pp\mu^*$ では光子を放出しない無輻射解離



が、 $dd\mu^*$ では光子を放出する輻射解離



が主であることが知られていた (図 2)。輻射解離で放出される光子は 1.7 keV 以上の X 線領域であるが、2.0 keV に存在する $d\mu$ の $K\alpha$ 線とエネルギーが近く、従来の半導体検出器では分解は難しかった。本研究期間中に、超伝導転移端検出器 (TES) の優れたエネルギー分解能を活かしたミュオン原子の X 線分光が報告され [Okumura 2023 Phys. Rev. Lett.]、ミュオン分子の共鳴状態を精密 X 線分光によって調べることが可能になりつつあった。

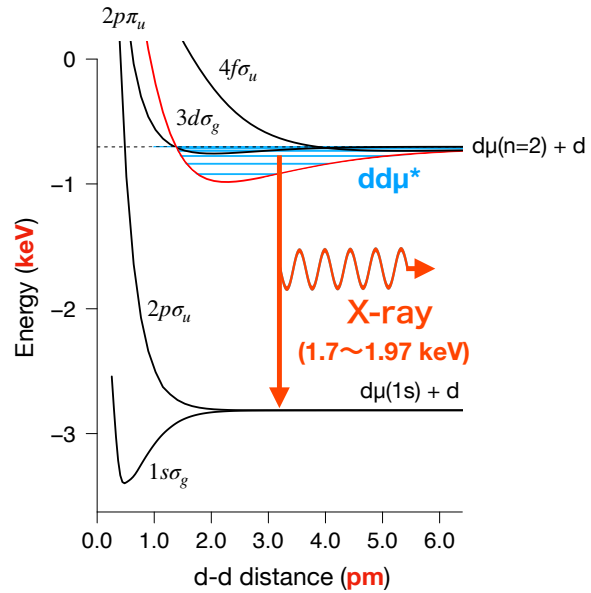


図 2 ミュオン分子の共鳴状態の解離 X 線放出過程を断熱ポテンシャルとともに示した。

ミュオン分子の共鳴状態が輻射解離で放出する X 線スペクトルは、いくつかの状態について計算例はあるのみで、包括的な理解はなされていなかった。また、Vesman 機構で生成した直後の状態から、オーグメント遷移によって電子を放出し、その後 X 線を放出する 2 段階過程が有力であったが、オーグメント遷移後の状態分布も不明だった。そこで、本研究では、(1) $dd\mu^*$ の解離 X 線スペクトルの網羅的な計算、(2) 電子を纏ったミュオン分子のエネルギー準位・構造の計算、(3) 電子を纏ったミュオン分子のオーグメント遷移の計算を行った。

$dd\mu^*$ の解離 X 線スペクトルの計算では、まず、複素座標回転法によって連続状態を記述する計算法を実装したコード開発を行った。三粒子系 (d, d, μ) の複素座標回転ハミルトニアンを、ガウス関数展開法 [Hiyama 2003 Prog. Part. Nucl. Phys.] を用いて展開し、その固有関数を重ね合わせることで終状態 ($d\mu(1s) + d$) への遷移速度を計算した。重水素核のスピンの状態によって状態を整理し、光子の放出によって角運動量が増加する過程と減少する過程を区別してスペクトルを計算した。

電子を纏ったミュオン分子のエネルギー準位の計算では、基底関数を図 3 に示すような複数の座標系で展開し、実スケール法によって共鳴エネルギーと疑似核である $dd\mu^*$ の構造を計算した。複数の座標で記述される基底関数を組み合わせることで、エネルギーの収束を格段に早めることができる。例えば、図 3 の $c = 1, 2, 3$ の座標系は、ミュオン分子 (ここでは $dt\mu$) の内部構造とその重心からの電子の運動を記述する上で優れており、 $c = 4, 5$ の座標系はミュオン分子の構造が大きく広がった際に、正電荷を持った原子核と電子が結合する二原子分子描像を記述する上で優れている。

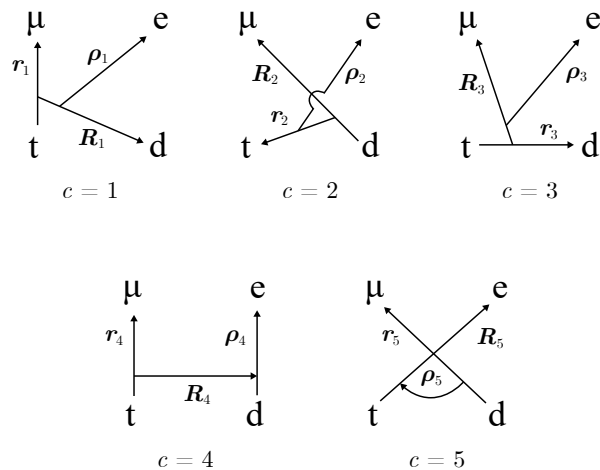


図 3 電子を纏ったミュオン分子共鳴状態の計算に使用した座標系。

電子を纏ったミュオン分子のオーグジュ遷移速度は、ミュオン分子の双極子モーメントの変化に伴う過程として近似して計算し、オーグジュ遷移後の準位分布を見積もった。

4. 研究成果

(1) $dd\mu^*$ の解離 X 線スペクトルの網羅的な計算

先行研究では数個の共鳴状態からの解離 X 線スペクトルが報告されていたが、精密 X 線分光実験の結果を解析することを念頭に、広い軌道角運動量範囲 ($J = 0 - 3$)、振動量子数範囲 ($v = 0 - 8$) で解離スペクトル計算を行った。長さゲージと速度ゲージの双方で計算を行い、X 線スペクトル形が一致することを確認した。X 線スペクトルは始状態の核間波動関数構造を反映した節構造を持ち、軌道角運動量の変化によって節のエネルギーは 50 eV 程度変化すること、すなわち、通常の分子に比べてエネルギー間隔が疎であり、大きな量子性が発現していることが示された[山下ほか、2022 年分子科学会]。

精密 X 線分光の実験グループと共同研究を開始し、固体重水素標的を用いて $dd\mu^*$ の X 線を観測する実験を J-PARC ミュオン実験施設にて実施した。現在結果を解析中であり、本研究で計算した X 線スペクトルが解析に利用されている[外山ほか、2023 年日本物理学会]。

(2) 電子を纏ったミュオン分子のエネルギー準位・構造の計算

ミュオン分子と電子の四粒子系を直接変分法によって計算し、その構造変化を明らかにした。図 4 にいくつかの状態について計算した核間動径分布関数を示す。破線は電子と結合していない孤立系ミュオン分子の核間確率密度関数であり、実線は電子を纏った状態を示す。高い振動準位になるほど、 $d\mu\text{-d}$ 間の確率分布は広がるが、電子を纏うことでこれが収縮し、その度合いも高い振動準位ほど顕著であることが明らかになった。ミュオン分子を構成する粒子は少なくとも電子の 200 倍以上であり、核は電子の 3600 倍の質量である。このような重粒子の量子的広がりが電子という軽い 1 粒子によって大きく左右されることは注目に値する。本研究で取り込んだ二原子分子描像によって、疑似核描像では消失する準位が維持されることが明らかになった。このような状態では図 4 のように分子の収縮が起きており、二原子分子描像の役割が明確になった。

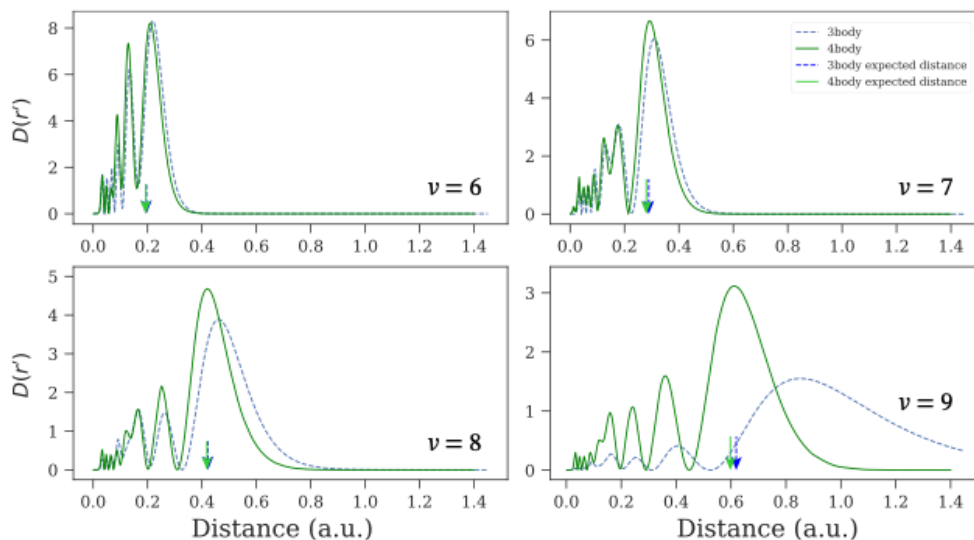
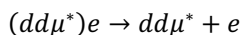


図 4 電子を纏ったミュオン分子が孤立系に比べて収縮している様子を振動量子数ごとに示した。

(3) 電子を纏ったミュオン分子のオーজে遷移の計算

解離 X 線スペクトルの計算で開発したミュオン分子の双極子モーメントの計算コードを利用して、Vesman 機構で生成した「電子を纏った」ミュオン分子が脱励起によって電子を放出する過程



の計算を行った。電子の波動関数は、始状態を 1s 軌道波動関数、終状態は対応する運動エネルギーのクーロン関数で近似し、状態間遷移速度を計算した。その結果を図 5 に示した。水色の領域が Vesman 機構で生成しうる状態である。オーজে遷移を起こすためには、ミュオン分子の内部エネルギーが 13.6 eV 以上変化する必要がある、その結果、振動量子数が低い状態が生成しやすくなる。また、赤い点線で囲った状態のように、Vesman 機構で生成しにくく、オーজে遷移でも到達しにくい状態 (dark state) が存在することが明らかになった。

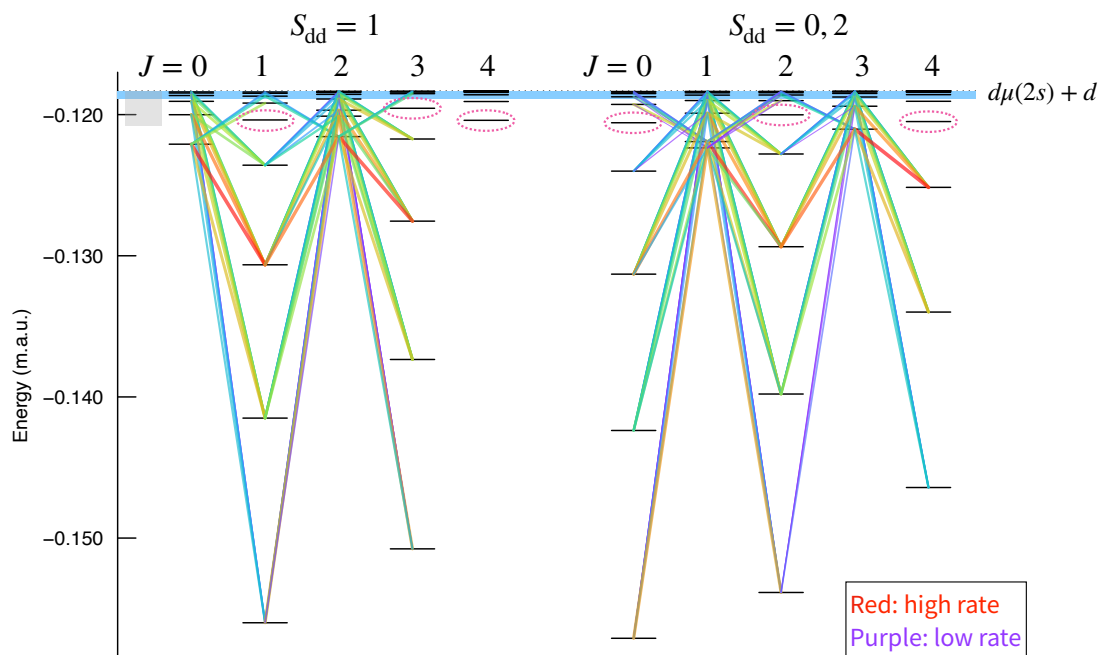


図 5 ミュオン分子のオーজে遷移速度を色分けして示した。赤い経路ほど早く、紫の経路ほど遅いことを示す。 S_{dd} は二つの重水素の合成スピンを示す。

(4) 関連する計算法の開発

複素座標回転法の応用として、複素エネルギーから散乱の位相シフトを計算する方法を検討した[山下ほか、2022 年アイソトープ・放射線研究発表会]。また、四粒子系の散乱問題の解法を確立し、反水素原子-ポジトロニウム衝突の 11 チャネル問題を解いた結果を Physical Review A 誌に出版した。この解法は上記のオーজে遷移速度をミュオン分子の収縮効果まで含めて解くために利用可能であり、今後より確度の高い計算が可能になる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Yamashita Takuma, Kino Yasushi, Okutsu Kenichi, Okada Shinji, Sato Motoyasu	4. 巻 12
2. 論文標題 Roles of resonant muonic molecule in new kinetics model and muon catalyzed fusion in compressed gas	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 6393
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41598-022-09487-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Yamashita Takuma, Niiyama Motoaki, Yasuda Kazuhiro, Kino Yasushi	4. 巻 2207
2. 論文標題 Four-body variational calculation of a hydrogen-like atom involving an excited muonic molecule	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012035 ~ 012035
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-6596/2207/1/012035	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kamimura M., Kino Y., Yamashita T.	4. 巻 107
2. 論文標題 Comprehensive study of muon-catalyzed nuclear reaction processes in the $\langle \text{mml:math xmlns:mml="http://www.w3.org/1998/Math/MathML"} \rangle \langle \text{mml:mrow} \langle \text{mml:mi} \rangle \text{d} \langle \text{mml:mi} \rangle \langle \text{mml:mi} \rangle \text{t} \langle \text{mml:mi} \rangle \langle \text{mml:mi} \rangle \mu \langle \text{mml:mi} \rangle \langle \text{mml:mrow} \rangle \langle \text{mml:math} \rangle$ molecule	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 34607
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevC.107.034607	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamashita Takuma, Kino Yasushi, Hiyama Emiko, Jonseil Svante, Froelich Piotr	4. 巻 105
2. 論文標題 Near-threshold behavior of positronium-antihydrogen scattering cross sections	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 52812
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.105.052812	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 山下琢磨, 安田和弘, 奥津賢一, 木野康志
2. 発表標題 ミュオン水素分子イオンの解離X線スペクトルの非断熱計算
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takuma Yamashita, Kazuhiro Yasuda, Yasushi Kino
2. 発表標題 Four-body calculation of muonic molecular resonances in an electron cloud
3. 学会等名 33rd IUPAP Conference on Computational Physics
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 YAMASHITA, Takuma, YASUDA, Kazuhiro, OKUTSU, Kenichi, KINO, Yasushi
2. 発表標題 Non-adiabatic three-body calculation of X-ray spectrum from muonic hydrogen molecular ions
3. 学会等名 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Yamashita, Y. Kino, E. Hiyama, S. Jonsell, P. Froelich
2. 発表標題 Four-body calculation of positronium-antihydrogen scattering near antihydrogen positive ion production threshold
3. 学会等名 The 14th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	木野 康志 (Kino Yasushi)		
研究協力者	岡田 信二 (Okada Shinji)		
研究協力者	外山 裕一 (Toyama Yuichi)		
研究協力者	神谷 直紀 (Kamiya Naoki)		
研究協力者	佐野 大志 (Sano Taishi)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------

スウェーデン	ウプサラ大学	ストックホルム大学		
--------	--------	-----------	--	--