

令和 4 年 6 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2021

課題番号：20K14381

研究課題名（和文）ミュオン触媒核融合における共鳴コアの形成・崩壊過程の四体散乱理論

研究課題名（英文）Four-body scattering theory on resonant core in muon catalyzed fusion

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）：負ミュオンが核融合反応を媒介するミュオン触媒核融合は、エキゾチックな原子過程が多く含まれ、量子散乱理論検証の舞台として優れている。本研究では、その中でも、電子雲中の準安定核のような、軽粒子を纏った小さな準安定量子系「共鳴コア」に着目し、その形成・崩壊過程を精密な理論計算から明らかにすることを目的とした。電子雲中でのミュオン分子共鳴コアのエネルギー準位・構造が量子四体計算によって初めて明らかになり、共鳴準位の一部が有限体積効果による不安定化と二原子分子的な結合による安定化の絶妙な拮抗状態にあることが判明した。これらの状態が解離X線スペクトルを通して実験の観測と結びつくことを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ミュオン触媒核融合は、熱核融合と異なり、高温のプラズマを必要とせず、気体・液体・固体の水素で反応が起こるため、新しいエネルギー・中性子源として期待されている。一方で、原子核と強く結合するミュオンの原子過程は複雑で、特に、本研究で着目した「電子雲中のミュオン分子」のような系は、コアと電子の空間的な大きさが大きく異なり、それらを同時に扱った理論研究は未だ発展途上である。本研究では、これまで定性的に理解されていた複数の量子状態を最新の精密計算によって予言し、これを観測する道を示した。この結果は、ミュオン触媒核融合の新しい反応経路の探索に寄与する。

研究成果の概要（英文）：Muon-catalyzed fusion, in which a negative muon mediates a nuclear fusion reaction, involves a lot of exotic atomic processes and is suitable for testing quantum mechanical scattering theory. In this study, we focus on small metastable quantum systems, 'resonant cores', such as metastable nucleus in electron clouds, embedded in a light particle cloud. The aim of this study is to clarify their formation and decay processes from precise theoretical calculations. The energy levels and structure of the muonic molecule resonant core in the electron cloud have been revealed for the first time by quantum four-body calculations, and it is found that some of the resonance levels are generated by opposite quantum mechanical effects, namely finite volume effect and diatomic bonding. These states can be investigated by observation of dissociative X-rays.

研究分野：原子・分子理論

キーワード：ミュオン 少数多体系理論 原子衝突 共鳴状態 オージェ遷移

1. 研究開始当初の背景

負ミューオン (μ) は電子の 207 倍、核子の 1/9 の質量を持つ負電荷の素粒子である。近年、 μ ビーム強度が飛躍的に向上し、1980 年代から 2000 年頃まで盛んに研究されたミューオン触媒核融合 (μ -Catalyzed Fusion; μ CF) に再び光が当たっている。 μ CF では、重水素・三重水素混合体 (D/T) 中で、重水素核 (d) と三重水素核 (t) の核融合反応を、 μ が触媒する (Froelich: Adv. Phys. 1992)。 μ CF は核反応・化学反応を記述する量子散乱理論の優れた試金石であるとともに、将来の単色中性子源・エネルギー源としても期待されている。

図 1 に、 μ が d、t を結合してミューオン分子 $dt\mu$ を形成する過程の模式図を示す。 μ は“重い電子”として振る舞い、t と強く結合してミューオン原子 ($t\mu$) を作る。 $t\mu$ 原子と d が結合してミューオン分子 $dt\mu$ を形成すると、核間距離は通常の水素分子イオン H_2^+ の約 100 分の 1 と小さくなる。このために、分子内核融合が起こり、アルファ粒子と中性子を生じる。ミューオンは再び自由となり、別の核融合反応を引き起こす。

ミューオンは水素原子の電子と入れ替わることでミューオン水素原子となるが、ミューオン水素原子は高いエネルギー準位 ($n \approx 14$) に生成することが知られている。すなわち、上述の分子内核融合に至るまでには、ミューオン原子の脱励起や原子・分子との衝突によって、さまざまな原子過程を経験することになる。この過程で生じる「共鳴コア」の理解には課題があり、本研究の目標に設定した。

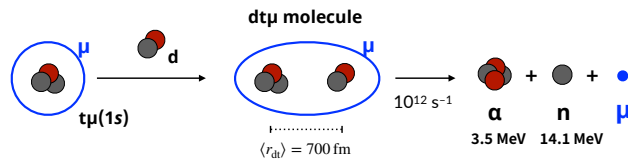


図 1 (a) 電子雲中のミューオン分子共鳴コアおよび (b) ミューオン雲中のヘリウム原子核共鳴コアの模式図。それぞれ、コアと軽粒子雲の空間的な広がり異なる。

共鳴コアとは、軽粒子を纏った小さな準安定量子系を指す。例えば、 $t\mu$ と d の衝突エネルギーが $t\mu$ の励起エネルギーに近い時、電子を纏った共鳴ミューオン分子 ($dt\mu^*$) が形成される (図 2a)。 $dt\mu^*$ の大きさ ($\sim 10^{-12} \text{ m}$) は電子雲の大きさ ($\sim 10^{-10} \text{ m}$) に比べて小さく、電子雲のコアとみなせる。分子内核融合のまさにその瞬間には、d と t が融合し、ミューオンを纏った共鳴ヘリウム核 ${}^5\text{He}^*$ が生じる (図 2b)。 ${}^5\text{He}^*$ の大きさ ($\sim 10^{-15} \text{ m}$) はミューオン雲の大きさ ($\sim 10^{-12} \text{ m}$) に比べて小さく、ミューオン雲のコアとみなせる。共鳴コアと軽粒子の間にはクーロン力を介した相互作用があり、共鳴コアの形成・崩壊過程は軽粒子の運動と密接に関係する。

共鳴コアの物理は、放射壊変において核のエネルギーが軌道電子に渡る内部転換や、多価イオン衝突時に生成する中空原子の自動電離など、微小な量子系からエネルギーがどのように系外へ散逸するかという普遍的な問題を内包するが、階層の隔たりや多体相関によって問題が複雑化しやすい。 μ CF に現れる共鳴コアは、原子階層と核階層の境界に位置し、少数粒子系として扱いやすいため、共鳴コアの物理を探索する格好の系である。一方で、これまで理論研究の軸であった「三体散乱理論」では、共鳴コアと軽粒子の運動を同時に解くことができないという課題があった。共鳴コアの形成・崩壊を軽粒子は促進(抑制)するか? 共鳴コアに蓄えられたエネルギーは如何に軽粒子に移行するか? といった基本的な問いに答えるには、軽粒子と共鳴コアの運動を同時に解き、その協奏関係を明らかにする必要があった。

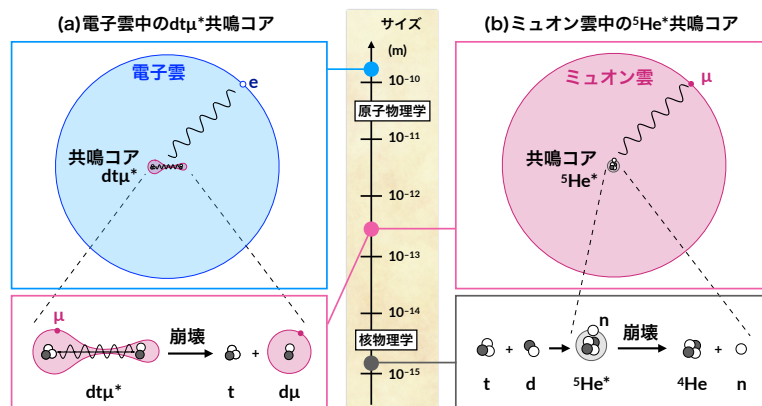


図 2 (a) 電子雲中のミューオン分子共鳴コアおよび (b) ミューオン雲中のヘリウム原子核共鳴コアの模式図。それぞれ、コアと軽粒子雲の空間的な広がり異なる。

2. 研究の目的

本研究では、軽粒子を纏った共鳴コアの形成・崩壊を量子少数多体系計算により明らかにする。従来の三体計算を脱却し、四体の問題を解くことで、共鳴コアと軽粒子の運動をあらわに含む波動関数を初めて導く。散乱断面積から「共鳴コアの形成・崩壊を軽粒子がどの程度促進(抑制)するのか」「共鳴コアから軽粒子へエネルギーの移行はどのように起こるのか」を予言し、 μCF の理解を一新する。

電子雲中での dtp^* 共鳴コアを四体散乱として理解できると、

- [1] dtp^* 共鳴コアから電子にエネルギーを渡して dtp 分子を形成するオージェ過程の確率がわかり、 μCF 効率の改善につながる
- [2] dtp^* 共鳴コアの崩壊を利用した $\text{d}\mu$ ビーム (Kino: Hyperfine Interact. 1996) の強度・運動量分布が予言でき、超低速での原子核衝突実験に道が拓ける。

ミュオン雲中での $^5\text{He}^*$ 共鳴コアを四体散乱として記述できると

- [3] 核融合炉の心臓である d-t 反応が核子移行反応として可視化され、低エネルギーでの核力モデルの試金石になる
- [4] $^5\text{He}^*$ 共鳴コア崩壊後の μ の運動量分布が予言でき、需要の厚い高品質 μ ビーム創出につながる。
- [5] 化学・核反応を支配する量子散乱理論の精密な検証という点でも、 μCF 共鳴コアは重要である。

量子散乱理論は二体問題を軸に定式化されており、散乱行列などの解析的な性質が示されているが、多体系の散乱においても成立するかは非自明である。通常の分子系では、無数の振動・回転準位が関係するため、状態間遷移の量子効果を実験と照らし合わせて検証することは現状難しい。 μCF 共鳴コアは状態密度が疎であり、状態間遷移を厳密に検証できる。散乱後の粒子が系外へ透過するため、実験観測も現実的である。

3. 研究の方法

共鳴コアは崩壊後、複数の終状態に移行しうる。複数チャネルの散乱計算はこれまで難しかったが、近年申請者が独自に開発した計算法 (散乱の四体相関を記述する最適な基底関数 = 中間状態を自動生成し、重ね合わせる方法) により、複数の終状態を同時に含む散乱波動関数を計算することに成功した (Froelich, Yamashita et al.: Hyperfine interact. 2019)。この計算法を応用することで、共鳴コアの形成と崩壊を一貫して扱うことができ、軽粒子との相互作用を記述する四体散乱理論の構築が初めて可能になる。

4. 研究成果

(1) 電子雲中でのミュオン分子共鳴コア

孤立したミュオン分子 $\text{dd}\mu$, dtp , ttp の共鳴状態を三粒子精密計算によって求めた。広範な振動・回転状態を網羅した計算を達成し、特に ttp 系については初めてのデータとなった。計算法にはガウス関数展開法 (E. Hiyama et al. 2003) を用い、共鳴状態の特定には実スケール法と複素スケール法を併用した。この三粒子波動関数は、断熱近似 (核位置を固定する近似) を用いず、シュレーディンガー方程式を解くことで得られたものであり、ミュオンの質量が原子核の質量に近いことによって生じる非断熱効果もあらわに取り込まれている。

孤立したミュオン分子共鳴状態を記述できる基底関数を組み込み、電子雲中でのミュオン分子共鳴コアのエネルギー準位・構造を四粒子計算によって明らかにした。二つの重水素核 d とミュオンが結合した $\text{dd}\mu$ 分子は、 $\text{d}\mu$ ($n=2$) + d のしきいエネルギー下に多数の共鳴状態が存在することが知られている。電子雲中では、 $\text{dd}\mu$ 共鳴状態は $\text{d}\mu$ - d 間の双極子-イオン相互作用が電子によって阻害されるため、準位の変化や消失が予想された。

本研究の結果、高い振動状態に対応する共鳴準位は有限体積効果によって大きく不安定化するが、予想に反して、二原子分子的な $\text{d}\mu$ - de 結合によって安定化し、準位の消失を免れることが明らかになった。この効果は一つの大きな発見であり、励起ミュオン原子と分子の衝突の際、Vesman 機構による共鳴分子形成において重要な役割を果たすと期待される。また、電子が共鳴分子構造を収縮させる効果が新たに見出された。これは、電子によって、質量の大きな原子核と

ミュオンの複合系の構造が変化することを示しており、量子少数多体系の現象として興味深い結果である。

(2) ミュオン分子共鳴状態の解離 X 線スペクトルの計算：新たな展開

dd μ 共鳴状態の輻射解離過程の計算に研究を展開した。電子をまとった dd μ 共鳴状態の崩壊には、余剰エネルギーを粒子間の相対運動で共有する無輻射解離過程(オージェ遷移)と、光子(X線)を放出して解離する輻射解離過程が存在する。孤立した dd μ 共鳴状態では輻射解離過程の寄与が大きいことが知られている (E. Lindroth et al., Phys. Rev. A 68, 032502 (2003))。

dd μ 共鳴状態の輻射解離スペクトルを回転量子数 3 まで、振動量子数 8 までの範囲で、網羅的に計算し、明らかにした。これにより、解離 X 線スペクトルのデータベースを作ることができた。四粒子計算での輻射解離過程にも研究を展開し、X 線分光の分解能の範囲で孤立系と同様のスペクトルが得られることを指摘した。

(3) 四粒子散乱計算法の確立

本年度のコード開発により、複素座標回転法を基軸とした電子をまとった dd μ 共鳴状態の輻射解離過程の理論計算が可能になり、スペクトル構造が初めて明らかになった。当該コードは、水素化ポジトロニウム系における第二束縛状態の輻射解離スペクトル計算にてテストされ、十分に収束した結果を与えることが明らかになった (T. Yamashita et al., Phys. Rev. A 105, 012814 (2022)). この計算の中で、これまで未知であった束縛-共鳴遷移が初めて特定された。

四粒子の散乱計算法を反陽子過程をベンチマークとして開発し、多チャネルの反応過程を記述できることを示した (T. Yamashita et al., New J. Phys. 23, 012001 (2021)). 加えて、計算された断面積が(多数のチャネルが開いている状況でも)しきい値近傍で Wigner 則にしたがうことが見出された (T. Yamashita et al., accepted by Phys. Rev. A 2022)。これらの結果は、ミュオン原子過程のような複雑な散乱問題を理論的に解析可能になることを示している。

(4) ミュオン雲中の $^5\text{He}^*$ 共鳴コア

6 種類の粒子を扱う少数多体計算により、分子内核融合によって放出されるミュオンの運動エネルギー分布を明らかにした (arXiv:2112.08399)。これまでの理論計算では相対的な値のみが報告されており、近似も粗い状態であったが、計算に取り込む物理的な要素が一新され、絶対値での議論が可能になった。

(5) ミュオン分子共鳴コアの寄与を取り込んだ新しいミュオン触媒核融合モデルの提案

上述の共鳴コアの寄与を取り入れて、ミュオン触媒核融合サイクルの新しいモデルを提案し、運動学的な解析を行った。特に、 $d\tau\mu^*$ の形成・崩壊によって $d\mu/t\mu$ 分布が変化すること、無輻射・輻射解離過程を経てミュオン原子が再加熱されることを指摘し、新しいモデルが既存の実験値をよく再現することを示した(図3)。この結果は、核融合科学の研究者との学際的な研究となり、Scientific Reports にて発表された。

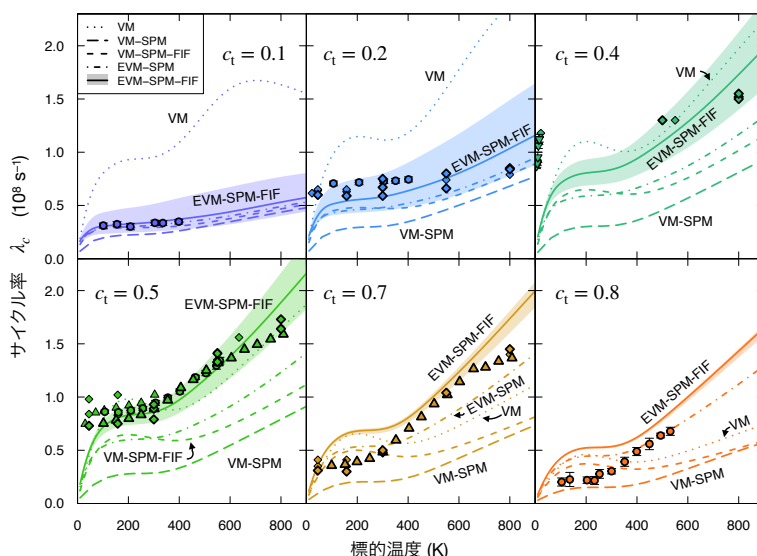


図3 ミュオン分子共鳴コアの寄与を取り入れた新しいミュオン触媒核融合モデルによるシミュレーション結果。サイクル効率を温度の関数としてプロットし、三重水素割合を c_t で付記した。点が実験値、線が各種モデル計算値である。TY et al., Scientific Reports 12, 6393 (2022) より作成。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6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, Hiyama Emiko, Yoshida Daisuke, Tachikawa Masanori	4. 巻 105
2. 論文標題 Spontaneous radiative dissociation of the second bound state of positronium hydride	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 12814
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physreva.105.012814	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, 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 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, Kino Yasushi, Hiyama Emiko, Jonseil Svante, Froelich Piotr	4. 巻 23
2. 論文標題 Near-threshold production of antihydrogen positive ion in positronium?antihydrogen collision	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 New Journal of Physics	6. 最初と最後の頁 012001 ~ 012001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1367-2630/abd682	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

1. 著者名 山下琢磨、木野康志	4. 巻 15
2. 論文標題 陽電子原子の三粒子描像による高精度構造計算I：束縛状態	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 陽電子科学	6. 最初と最後の頁 17-27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 山下琢磨、木野康志	4. 巻 16
2. 論文標題 陽電子原子の三粒子描像による高精度構造計算II：共鳴状態	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 陽電子科学	6. 最初と最後の頁 11-21
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 山下琢磨
2. 発表標題 少数多体精密計算による陽電子化合物の構造分析
3. 学会等名 物質科学研究討論会:基礎と応用の新展開
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山下琢磨
2. 発表標題 精密三体系計算による陽電子と原子の結合状態の理論的研究
3. 学会等名 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takuma Yamashita, Kazuhiro Yasuda, Motoaki Niiyama, Yasushi Kino
2. 発表標題 Four-body variational calculation of muonic molecules in an electron cloud
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takuma Yamashita, Yasushi Kino
2. 発表標題 Relativistic effects on loosely bound states of positronic alkali-metal atom
3. 学会等名 32nd International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Virtual iCPEAC)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K Yasuda, T Yamashita, K Okutsu, Y Kino
2. 発表標題 Four-body calculation of muonic molecular resonances in the electron cloud
3. 学会等名 32nd International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Virtual iCPEAC)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 安田和弘, 山下琢磨, 新山元彬, 奥津賢一, 木野康志
2. 発表標題 ミュオン触媒核融合におけるミュオン分子共鳴状態4体系の精密計算
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山下琢磨,木野康志,肥山詠美子,Svante Jonsell,Piotr Froelich
2. 発表標題 反水素原子と励起状態ポジトロニウムの衝突における反水素正イオン生成断面積の計算
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山下琢磨,奥津賢一,木野康志,中島良太,宮下湖南,安田和弘,岡田信二,佐藤元泰,岡壽崇,河村成肇,神田聡太郎,下村浩一郎,Strasser Patrick,竹下聡史,反保元伸,土居内翔伍,永谷幸則,名取寛顕,西村昇一郎,Amba Datt Pant,三宅康博,石田勝彦
2. 発表標題 ルンゲクッタ法によるミュオン触媒核融合の時間発展の計算
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Yamashita,K. Okutsu,Y. Kino,R. Nakashima,K. Miyashita,K. Yasuda,S. Okada,M. Sato,T. Oka,N. Kawamura,S. Kanda,K. Shimomura,P. Strasser,S. Takeshita,M. Tampo,S. Doiuchi,Y. Nakatani,H. Natori,S. Nishimura,A. D. Pant,Y. Miyake,K. Ishida
2. 発表標題 Time evolution calculation of muon-catalyzed fusion in deuterium-tritium mixture
3. 学会等名 3rd Asia Pacific Symposium on Tritium Science (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 安田和弘,山下琢磨,奥津賢一,木野康志
2. 発表標題 電子雲中のミュオン分子共鳴状態のエネルギーと構造の計算
3. 学会等名 原子衝突学会第45回年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山下琢磨,木野康志
2. 発表標題 陽電子アルカリ金属原子における相対論効果
3. 学会等名 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」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takuma Yamashita,Yasushi Kino,Emiko Hiyama,Konrad Piszczatowski,Svante Jonsell,Piotr Froelich
2. 発表標題 Four-body treatment of antihydrogen atomic collisions
3. 学会等名 Yamada Conference LXXII: The 8th Asia-Pacific conference on Few-Body problems in Physics (APFB2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 安田和弘,山下琢磨,奥津賢一,木野康志
2. 発表標題 ミュオン分子4体系の精密計算:電子によるミュオン分子共鳴構造の変化
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山下琢磨,木野康志,肥山詠美子,Svante Jonsell,Piotr Froelich
2. 発表標題 陽電子と水素原子負イオンのリドバーグ系列:解離分岐比の四体散乱計算
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021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
--	---------------------------	-----------------------	----

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		