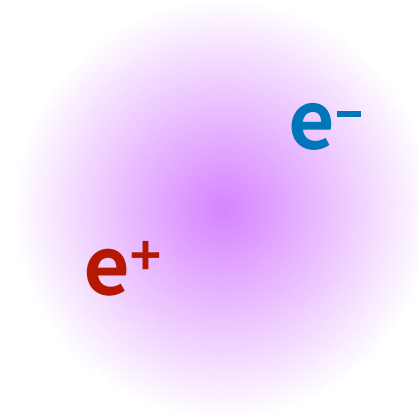


二電子系ポジトロニウム化合物の部分系構造解析

東北大学 高度教養教育・学生支援機構

山下琢磨

ポジトロニウム (Ps)



電子と陽電子の束縛状態 (1s束縛エネルギー 6.8 eV)

原子に準ずる系 (水素原子と同じシュレーディンガー方程式)

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{1}{r} \quad \mu = 1/2 \quad E_n = -\frac{1}{2\mu n^2}$$

対消滅寿命(1s state)

142 ns (spin triplet)

125 ps (spin singlet)

原子単位系 (a.u.) $m_e = \hbar = e = 1$

1 a.u. (length) = 5.29×10^{-11} m

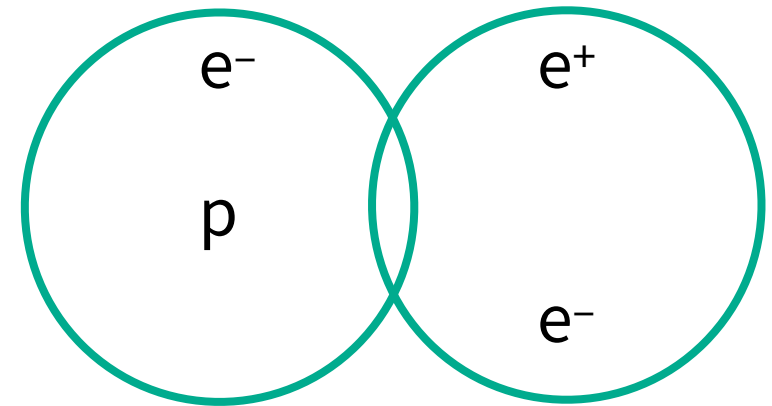
1 a.u. (energy) = 27.211 eV

1 a.u. (time) = 2.42×10^{-17} s

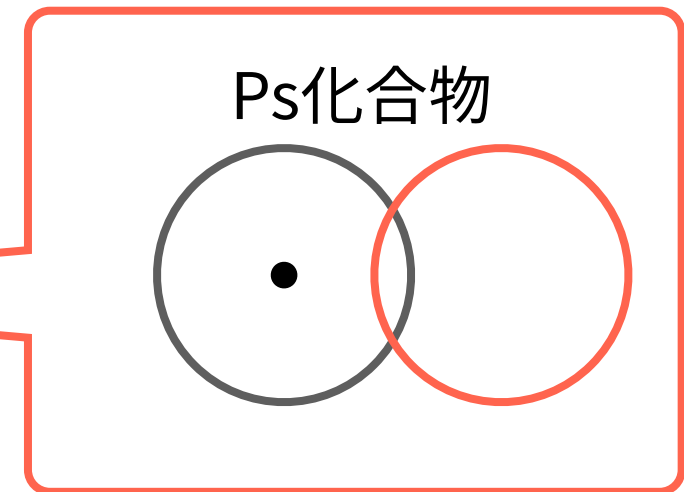
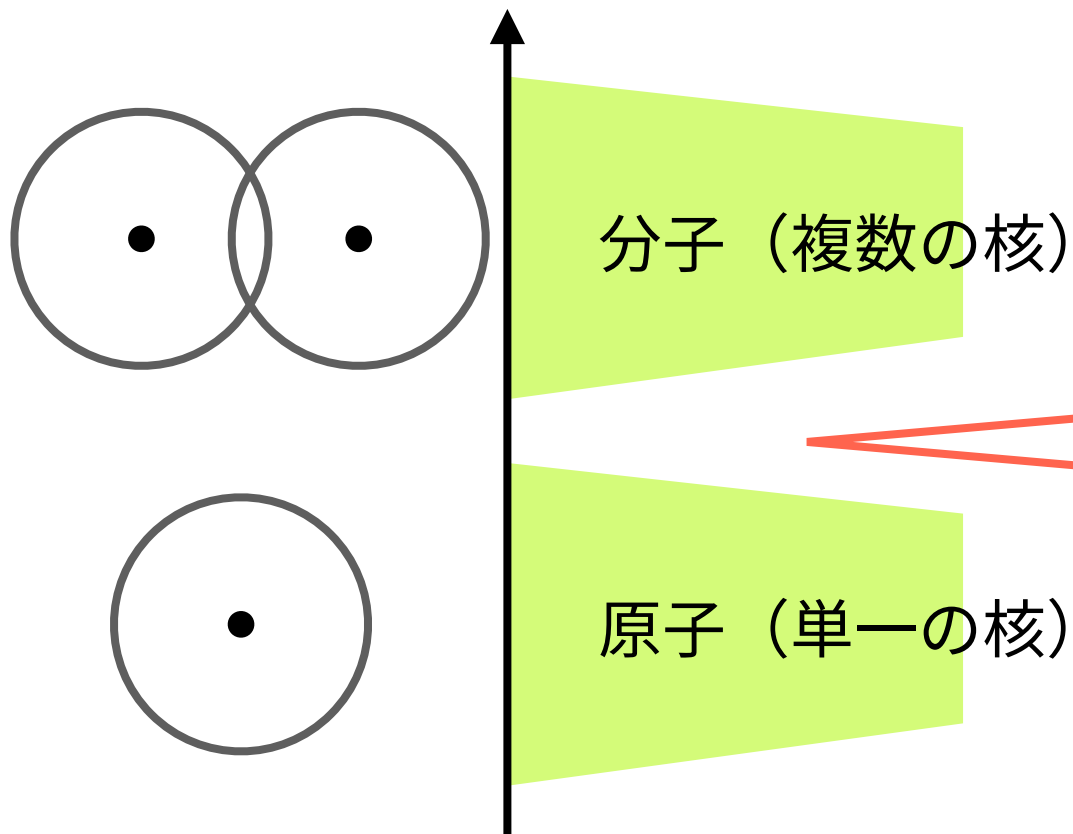
ポジトロニウム化合物

... Psが原子やイオンと結合した系

水素化ポジトロニウム

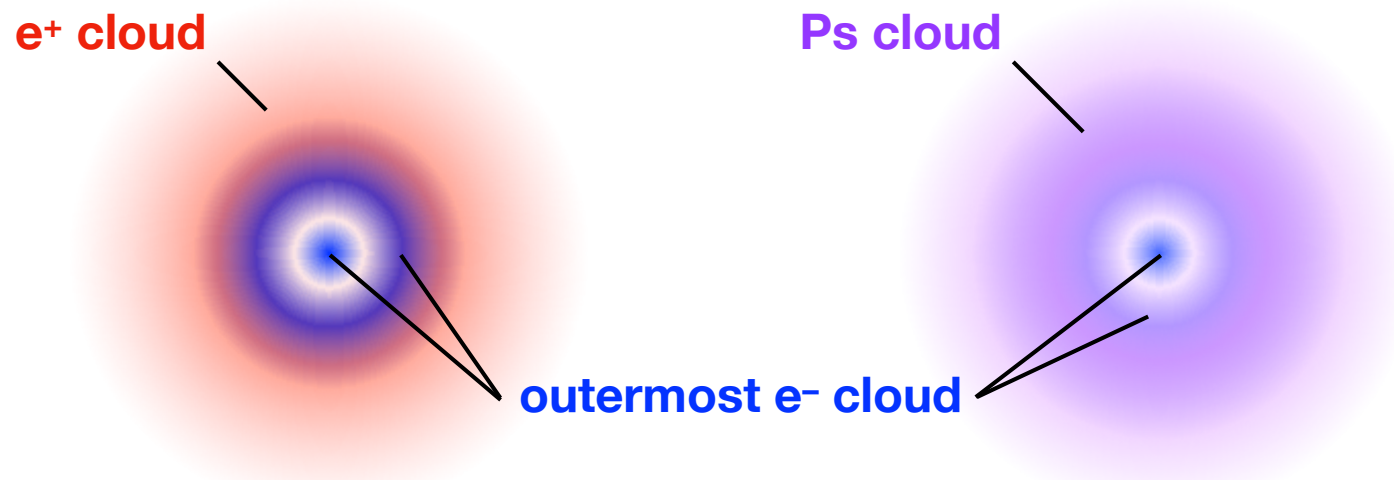
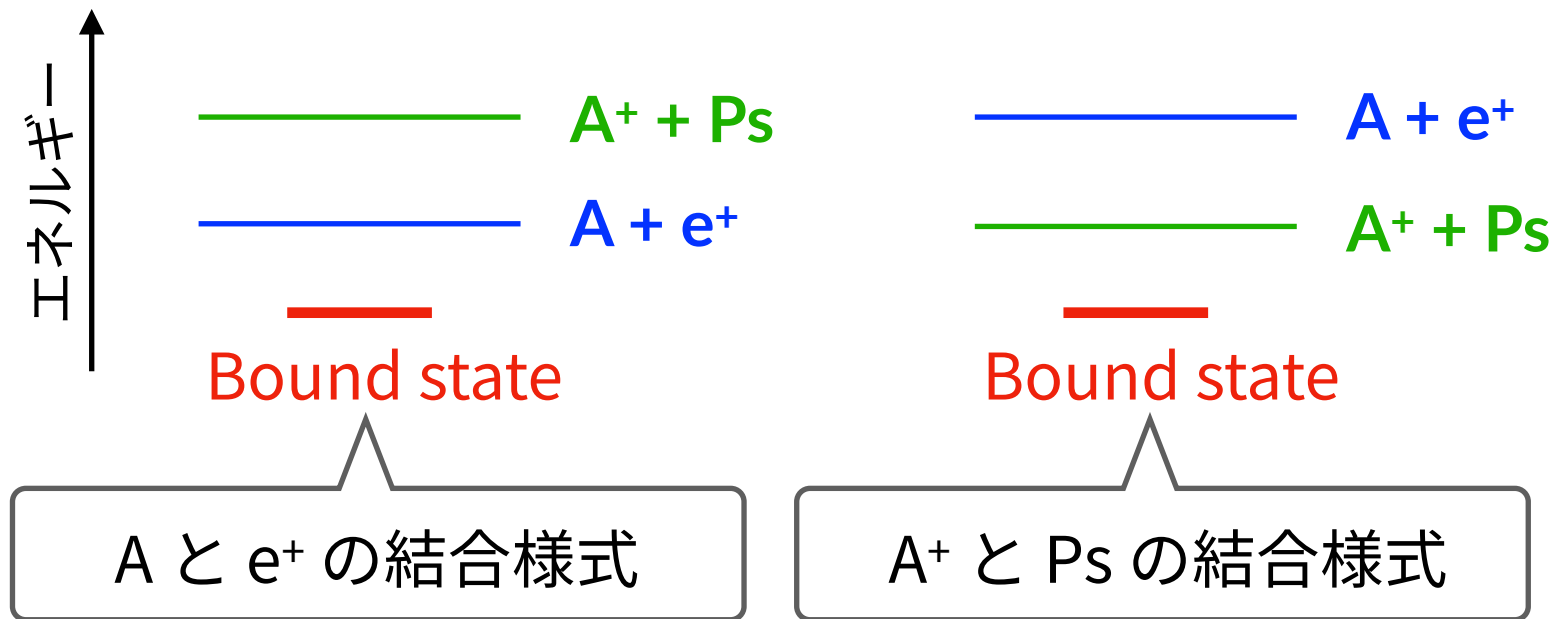


原子と分子の境界領域

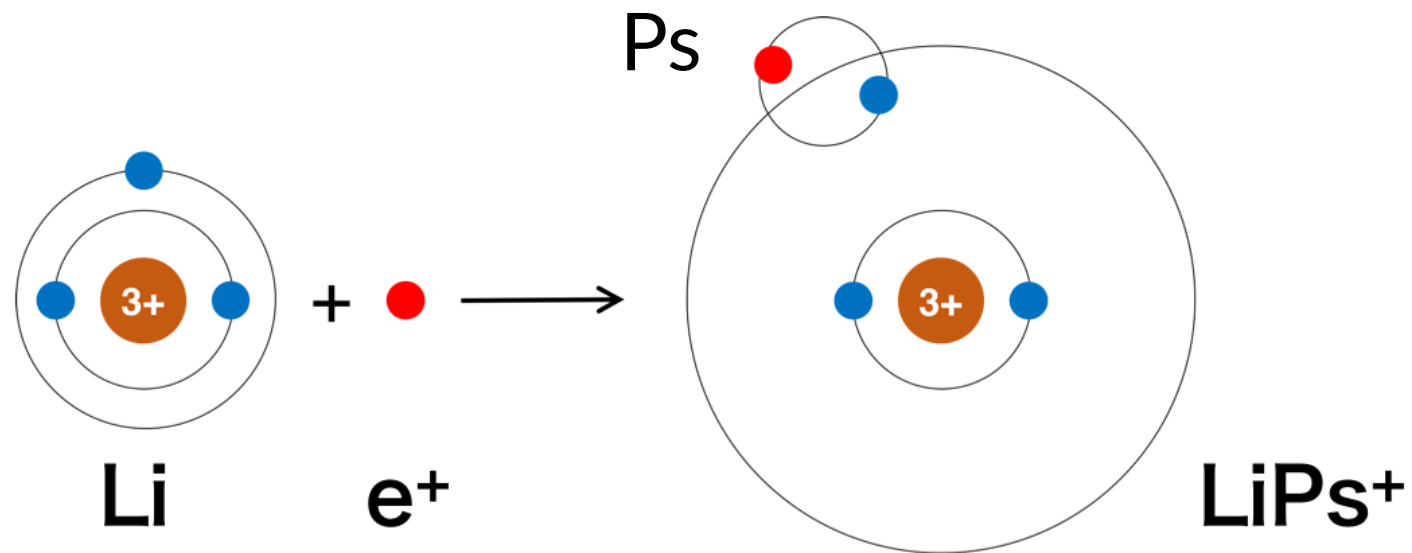


Psは分子のBuilding block
としての「原子」の役割

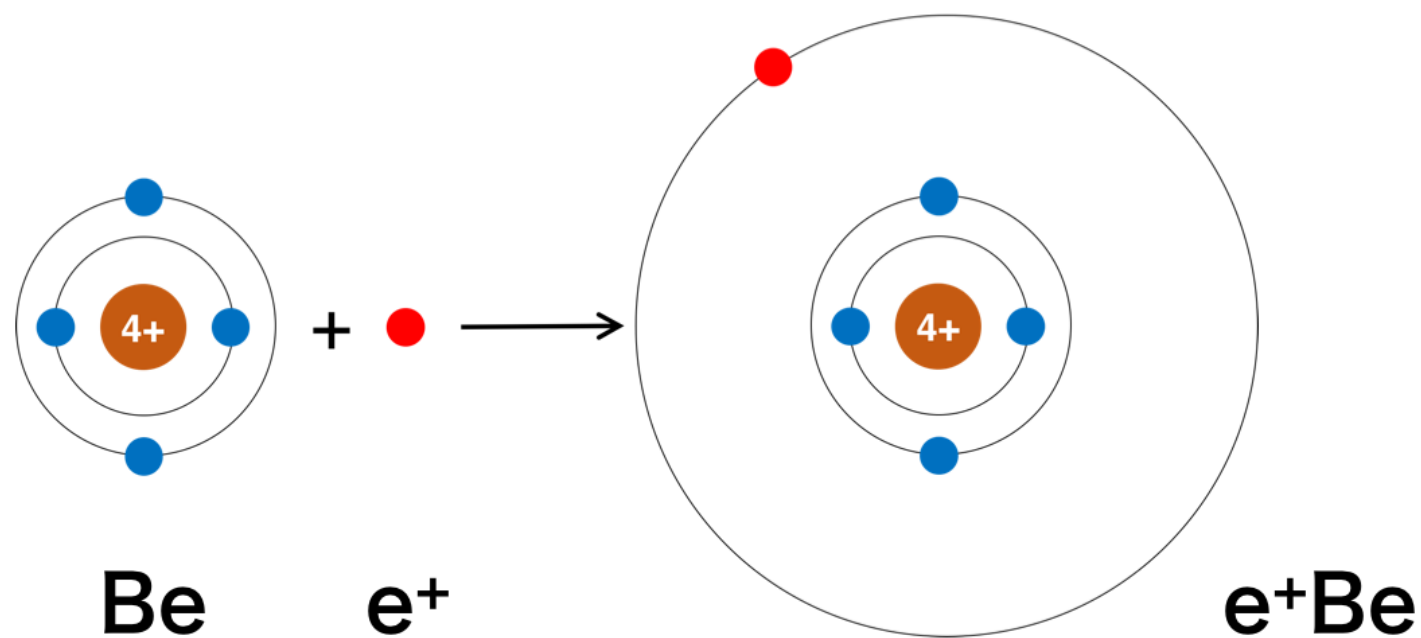
陽電子原子：陽電子 (e^+) と中性原子 (A) が結合した系



IP (Li) < IP (Ps)
5.4 eV 6.8 eV

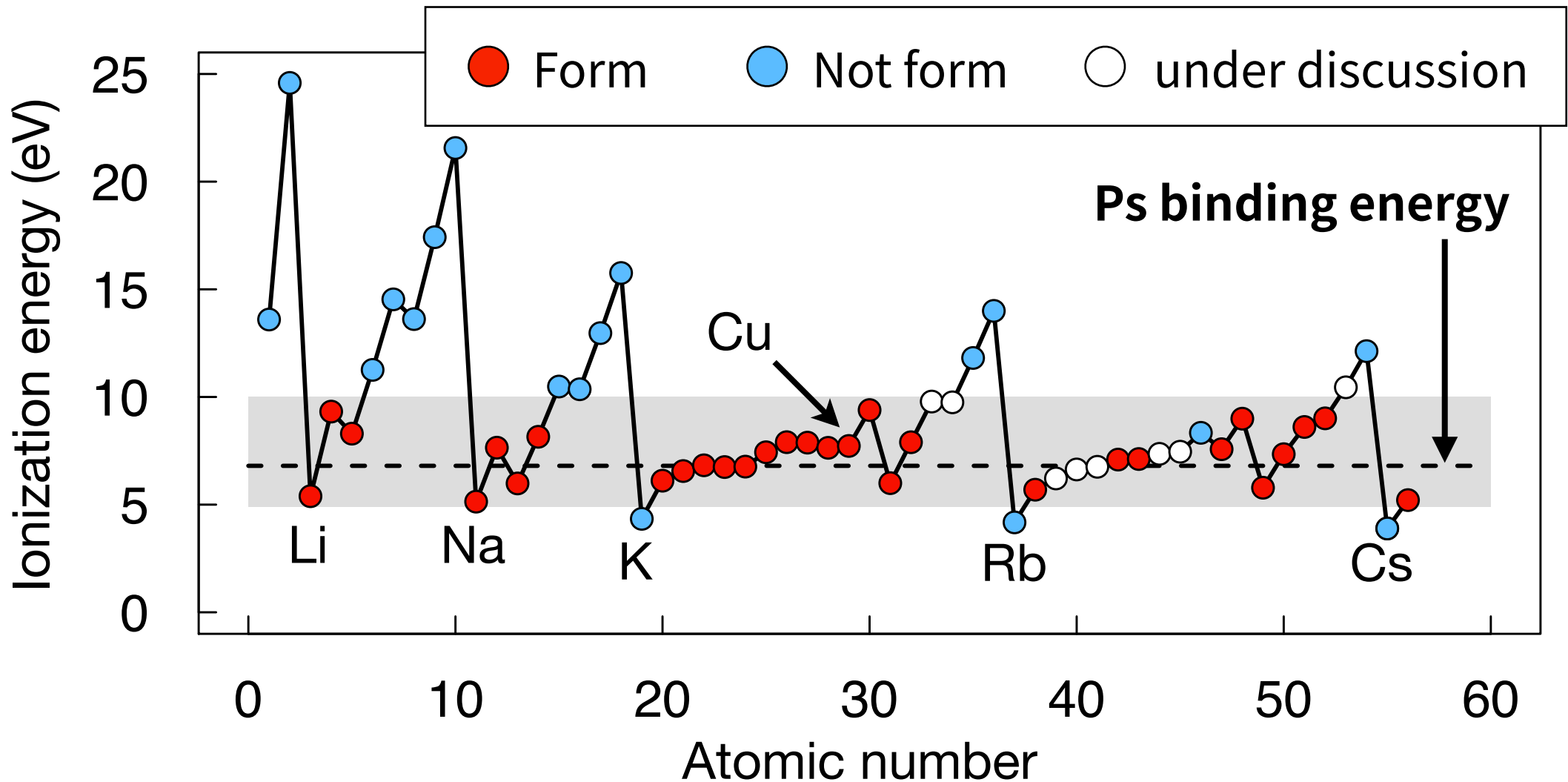


IP (Be) > IP (Ps)
9.3 eV 6.8 eV



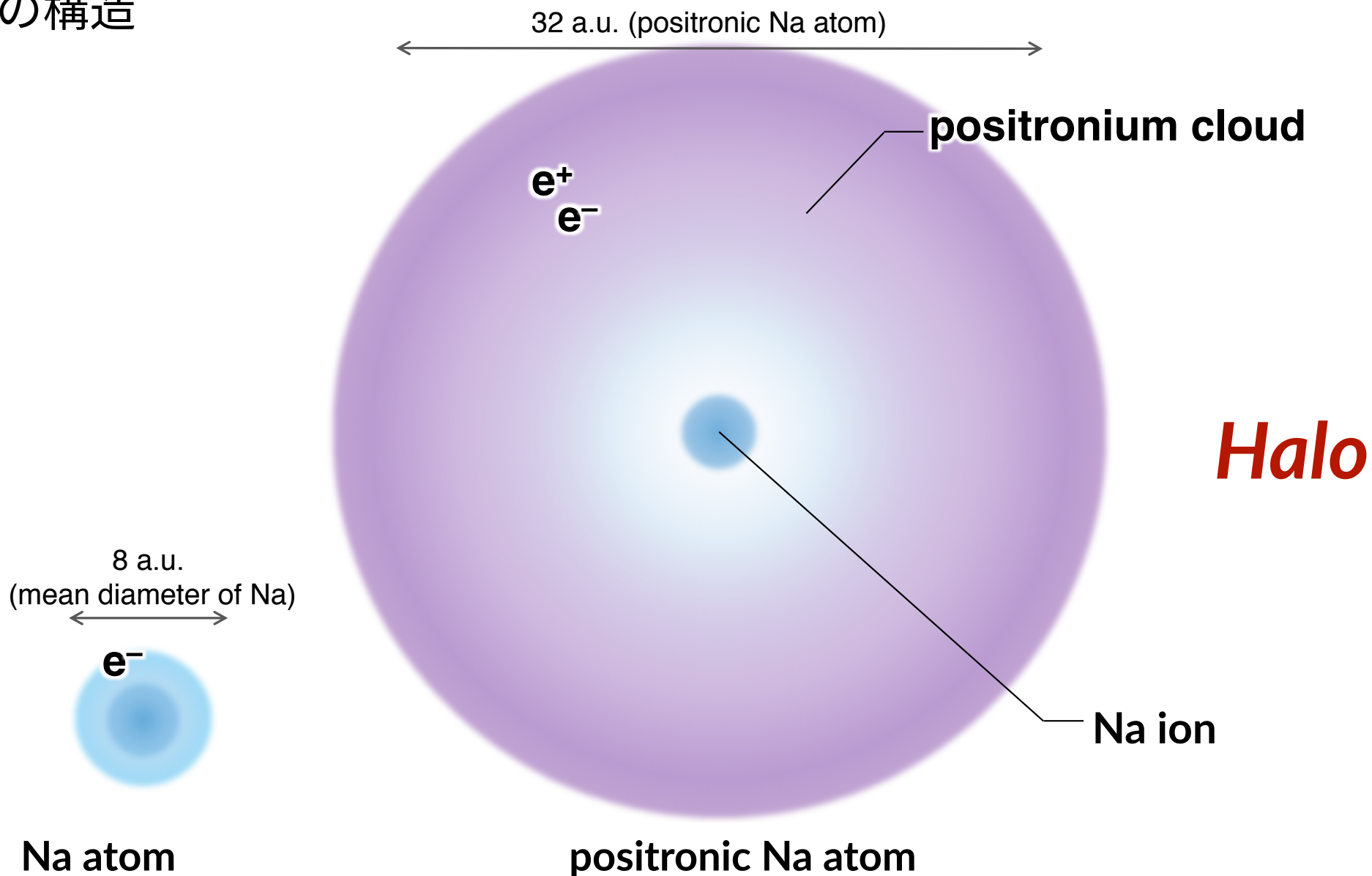
陽電子原子を形成する元素

原子のイオン化エネルギーがPsの束縛エネルギーと近いときに
陽電子原子を形成しうる



X. Cheng, D. Babikov, D. M. Schrader: Phys. Rev. A 83 (2011) 032504. より作成

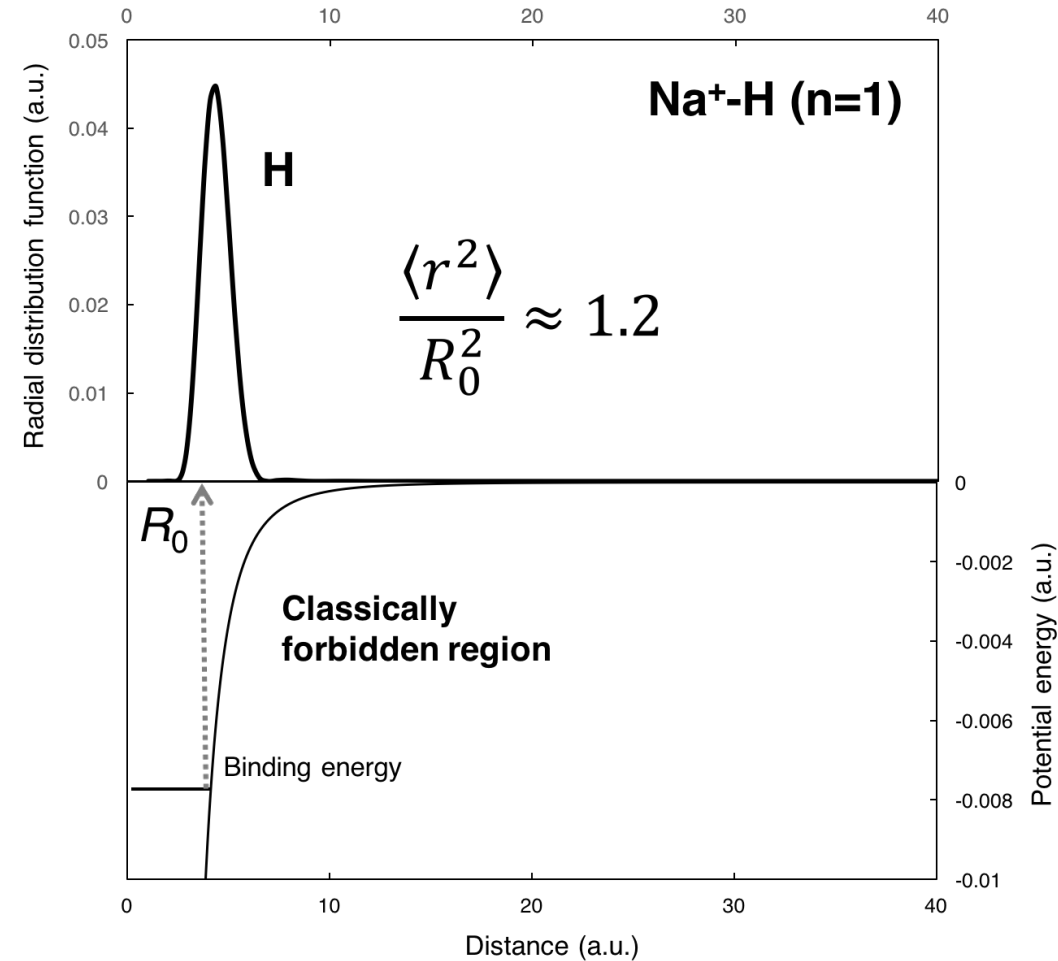
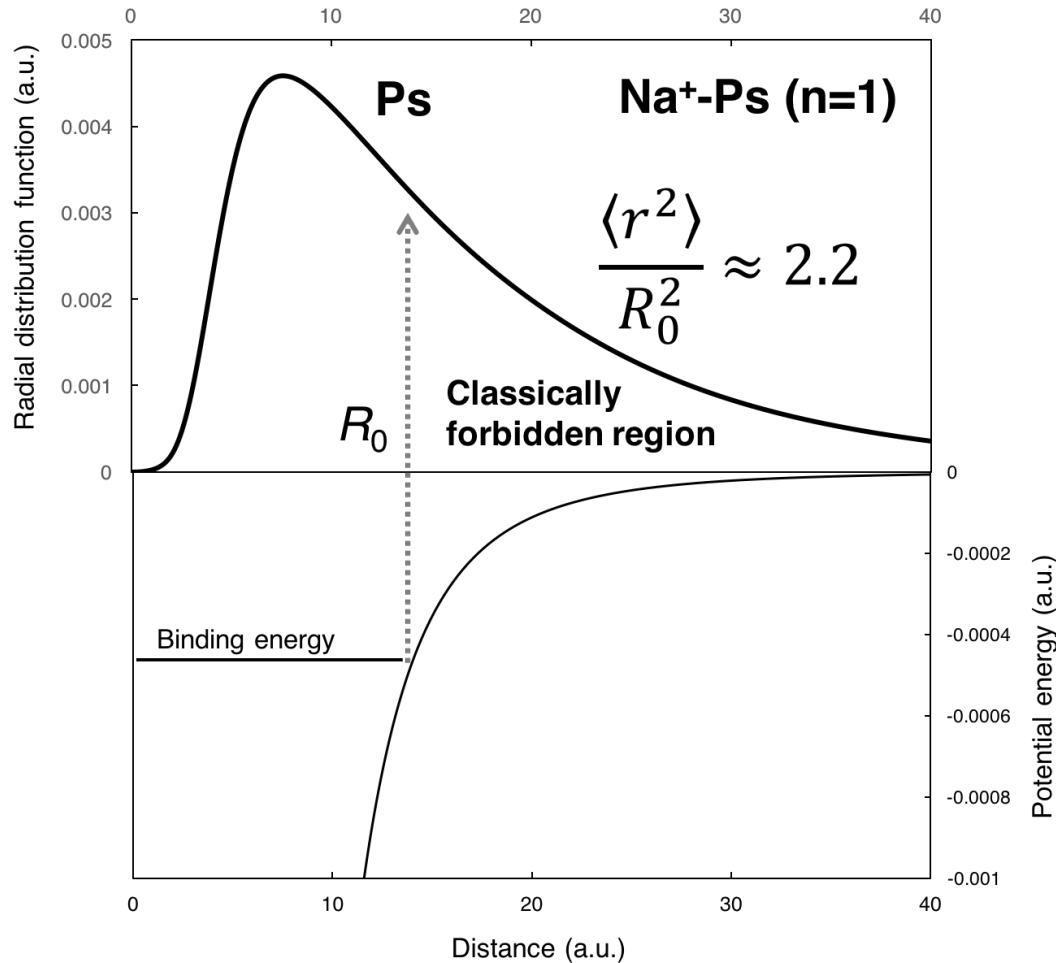
NaPs⁺の構造



束縛エネルギー0.01 eV

J. Mitroy: Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 033402.

Ps雲の広がり



原子分子系では、ハローの発現は稀有

ヘリウムクラスター：He_n... Van der Waals相互作用 ($-r^{-6}$)

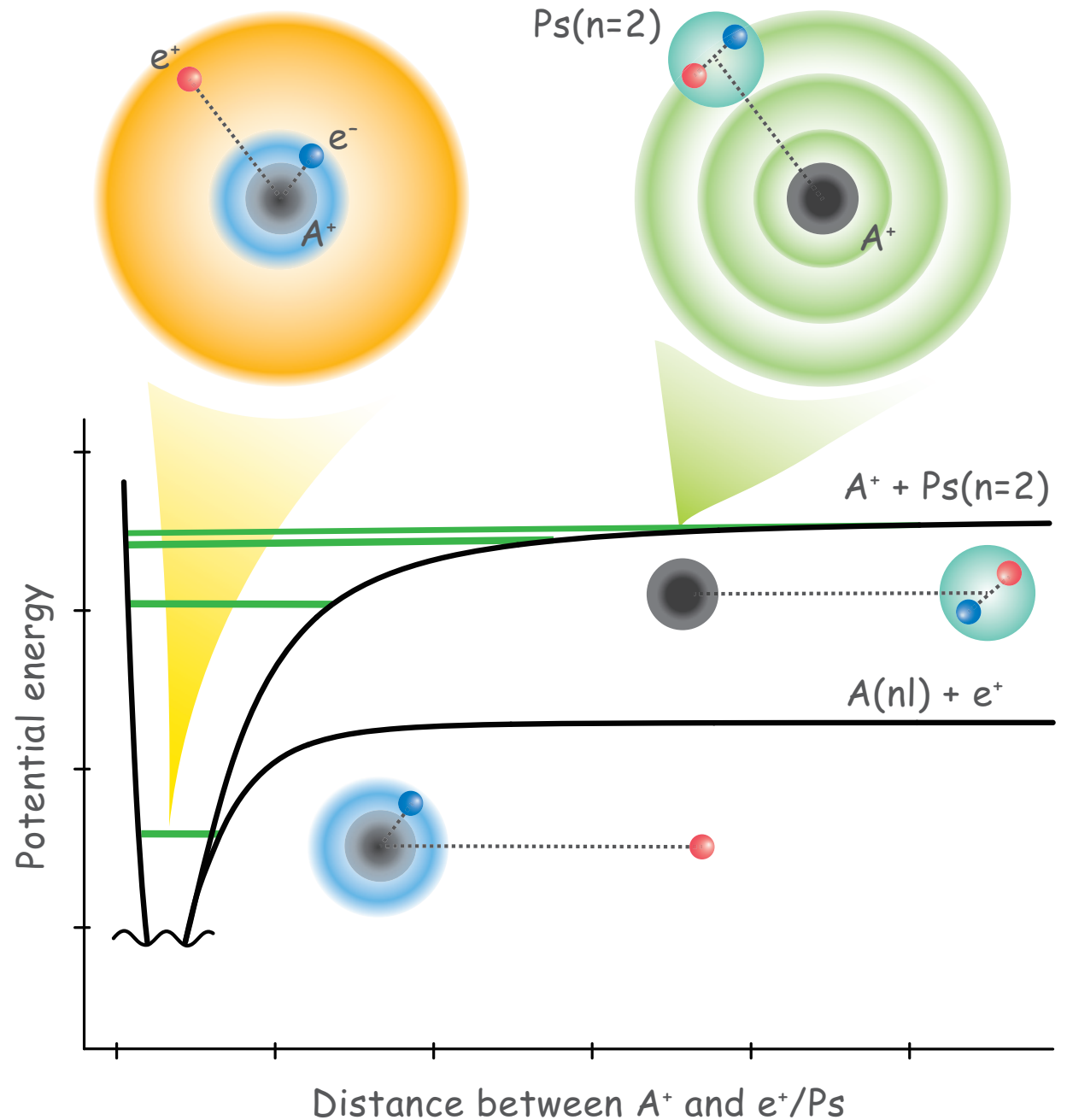
陽電子原子：APs⁺... 誘起分極相互作用 ($-r^{-4}$)

Feshbach共鳴：Ps(n=2)の双極子系列

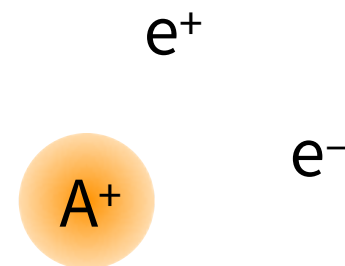
Psは水素様原子であり、
電場によってPs(2s)と
Ps(2p)が混合する



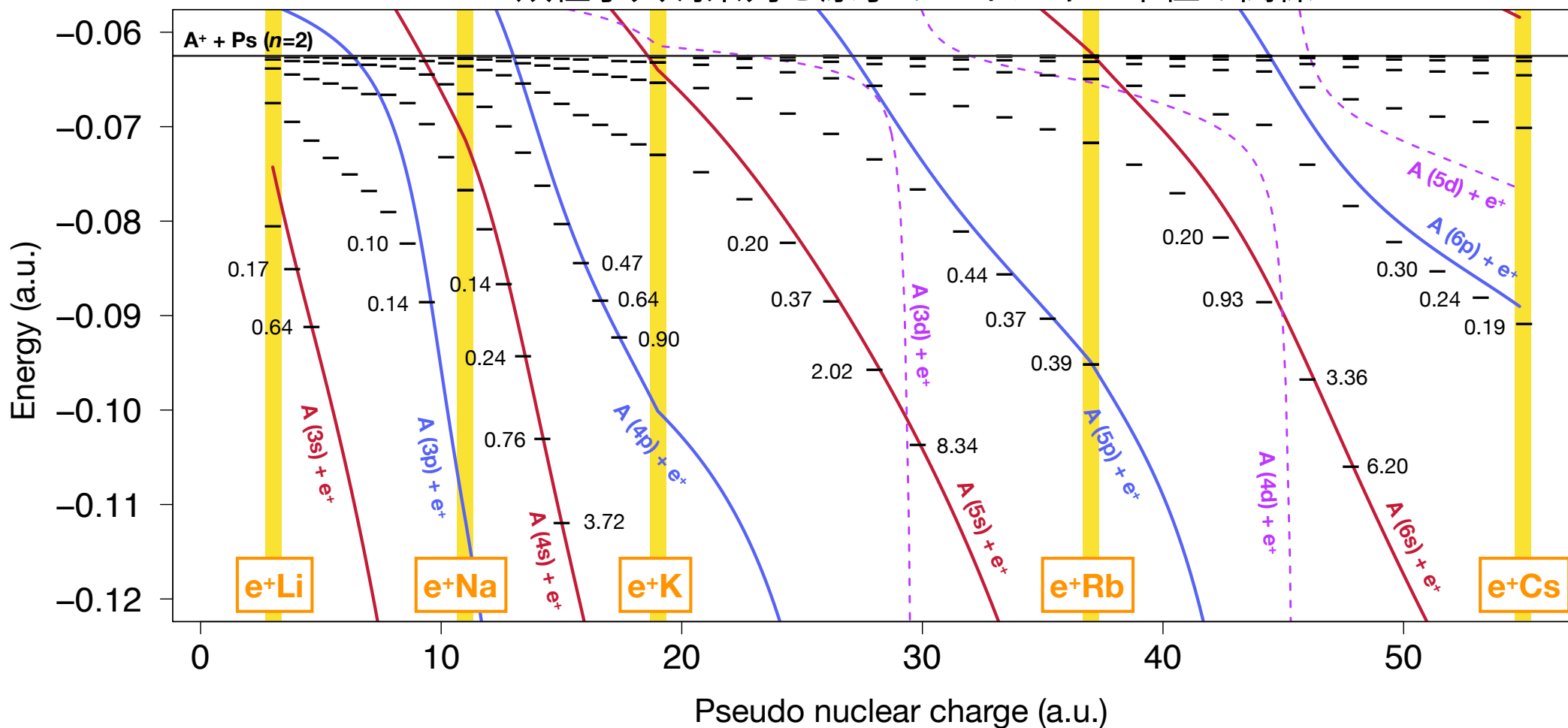
永久双極子モーメントを獲
得し、 r^{-2} に比例するイオ
ン-双極子相互作用によっ
て多数のFeshbach共鳴状
態を生じる



三粒子模型による共鳴準位の計算



双極子共鳴系列と原子のエネルギー準位の関係

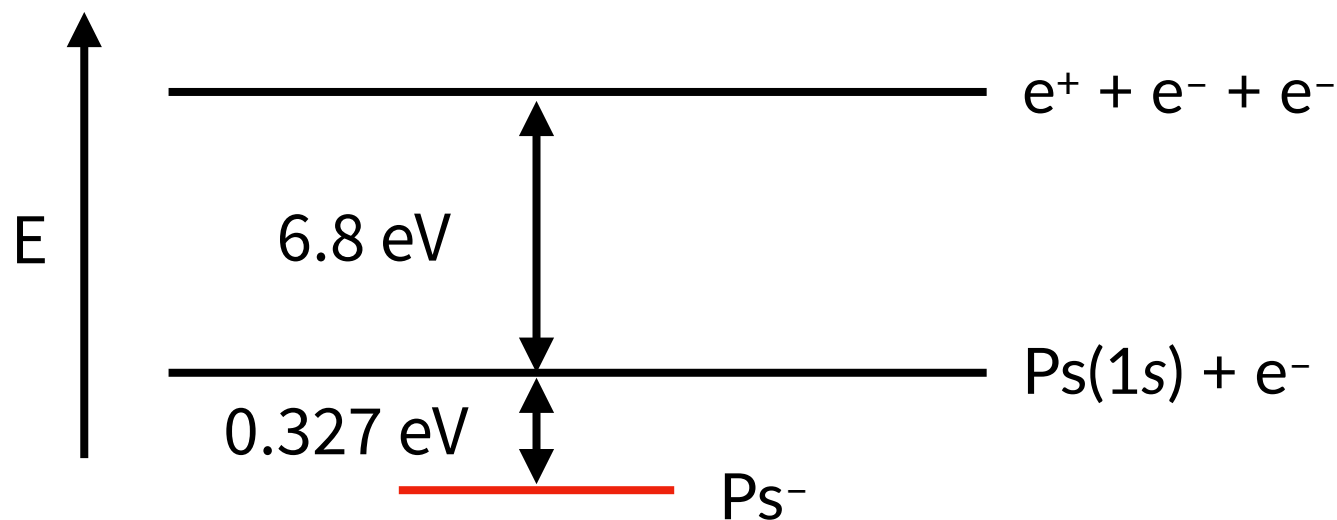
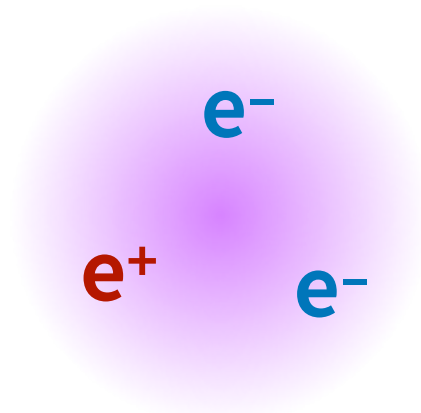


T.Y., Y. Kino: Eur. Phys. J. D 72 (2018) 13.

二電子系ポジトロニウム化合物の構造

ポジトロニウム負イオン (Ps^- , $e^+e^-e^-$)

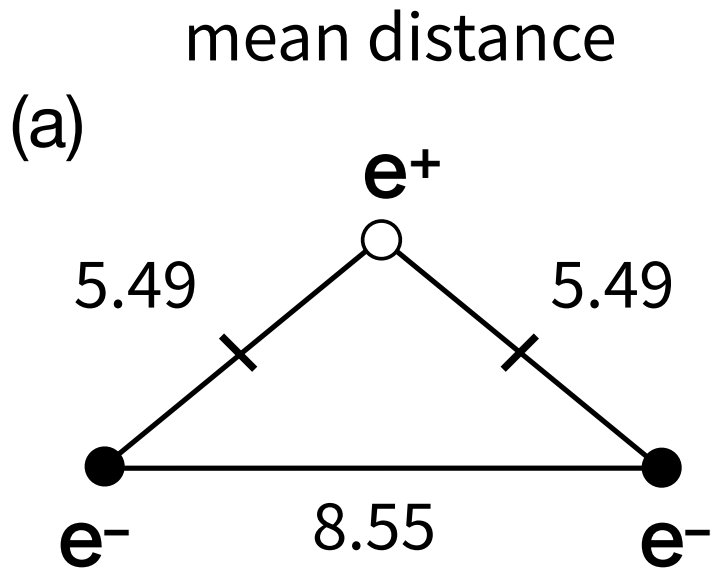
$$1/\Gamma_{2\gamma} = 479 \text{ ps}$$



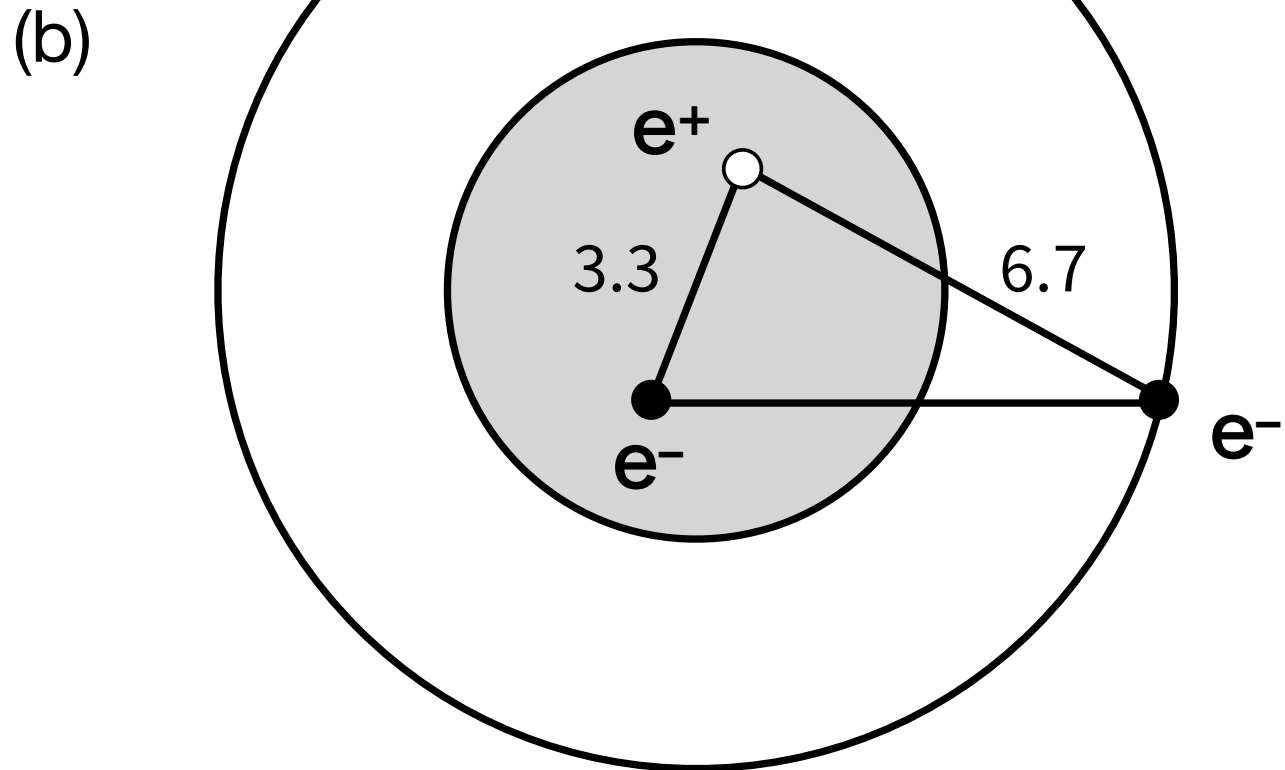
実験値：対消滅率、Shape resonance、束縛エネルギー*

*K. Michishio et al., Phys. Rev. Lett., 125, 063001 (2020).

ポジトロニウム負イオンの構造



A. M. Frolov,
Phys. Rev. A, 60, 2834 (1999).

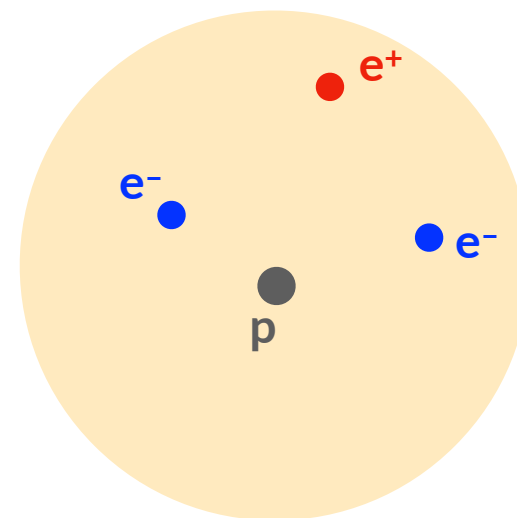


A. K. Bhatia and R. J. Drachman.,
Phys. Rev. A, 28, 2523 (1983).

$$\Psi = (\sin \theta_{12})^L \sum_{lmn} C_{lmn} \left[r_1^l r_2^m e^{-(\gamma r_1 - \delta r_2)} + (1 \leftrightarrow 2) \right] r_1 2^n \mathcal{D}_L^{0+}$$

水素化ポジトロニウム (Positronium hydride, PsH)

- 基本的な陽電子化合物
- 束縛エネルギー : **1.065 eV**
- 対消滅寿命(2γ) : **410 ps**



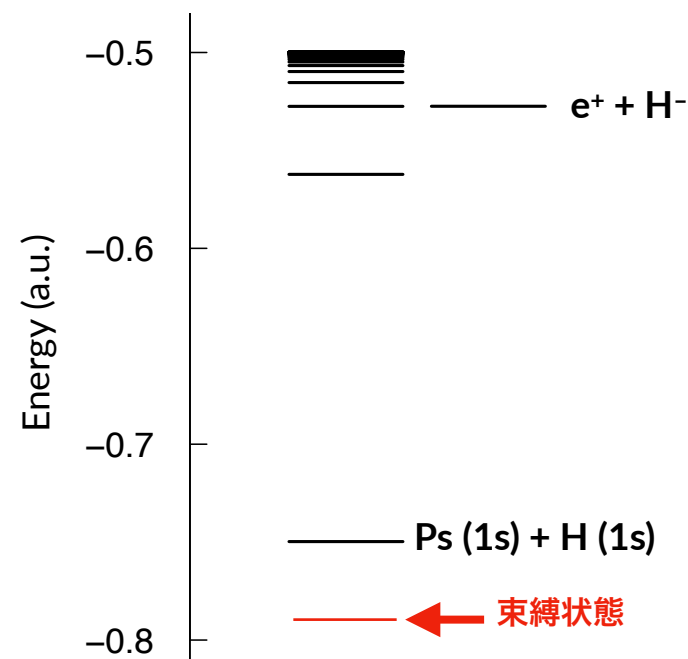
1951 A. Ore, "The Existence of Wheeler-Compounds"

(変分計算による束縛エネルギーの予言)



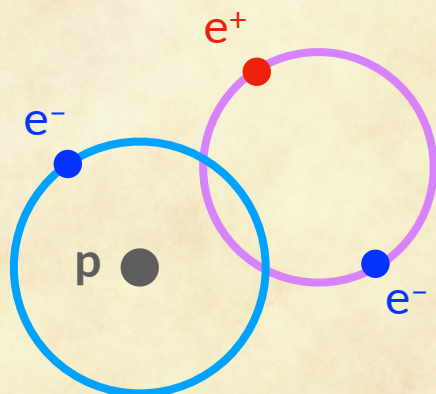
- 様々な理論計算法の試金石
- 8桁以上の高精度な非相対論的エネルギー
- Ps-中性原子相互作用の雛形

S. Bubin and K. Varga, Rhys. Rev. A 84, 012509 (2011).



水素化ポジトロニウムの構造

分子

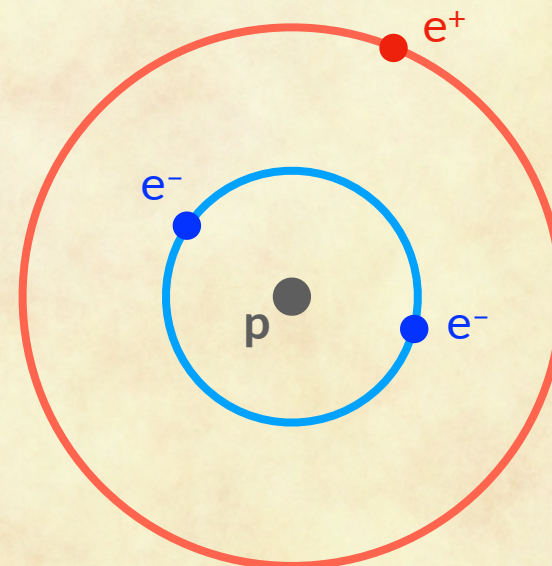


PsH

- H に Ps が結合した描像
- Psを一つの原子とみる二原子分子

VS

原子



e^+H^-

- H^- に e^+ が結合した描像
- H^- を擬似核とした“水素様原子”

本研究：二電子系ポジトロニウム化合物の部分系構造解析

- 2つ以上の電子を含むPs化合物では、**Ps部分系の構造が含まれていても、電子の同種粒子性のためにその描像が埋もれうる。**
 - 精密な波動関数は複雑な変分基底関数で大規模展開されており、エネルギー収束と構造議論の接続が悪い。
- ➡ 二電子系Ps化合物の**精密な**波動関数を三次元構造解析することで **Ps部分系を可視化**する。部分系の構造や歪みの情報に基づいて、Ps化合物の新しい描像を原子と分子の両面から解明する。

角度分解二次元確率密度関数：

$$P(r, R, \theta) = r^2 R^2 \int d\rho d\hat{\tau} \Psi^* \Psi$$

基底関数

ガウス関数

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\Psi = \sum_c \sum_{l_c L_c \lambda_c} \sum_{n_c N_c \nu_c} A_\gamma N_\gamma r_c^{l_c} R_c^{L_c} \rho_c^{\lambda_c} \exp(-a_\gamma r_c^2 - A_\gamma R_c^2 - \alpha_\gamma \rho_c^2)$$

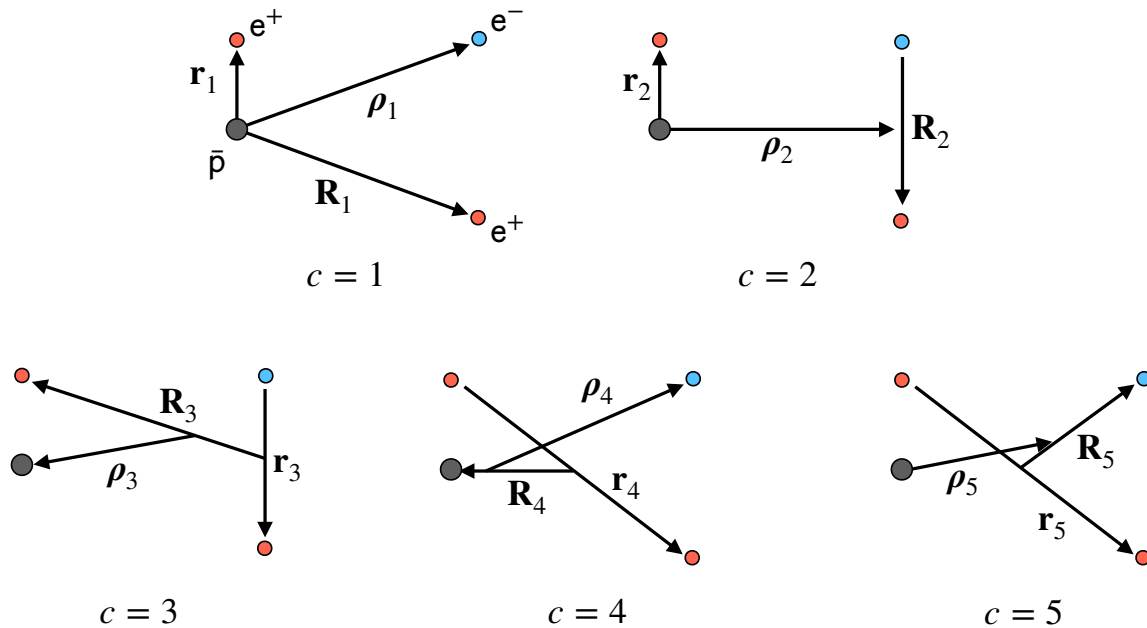
$$\times \exp(-\sigma_{aA} \sqrt{a_\gamma A_\gamma} \mathbf{r}_c \cdot \mathbf{R}_c - \sigma_{Aa} \sqrt{A_\gamma \alpha_\gamma} \mathbf{R}_c \cdot \boldsymbol{\rho}_c - \sigma_{\alpha a} \sqrt{\alpha_\gamma a_\gamma} \boldsymbol{\rho}_c \cdot \mathbf{r}_c) \left[\left[Y_{l_c}(\hat{\mathbf{r}}_c) \otimes Y_{L_c}(\hat{\mathbf{R}}_c) \right]_{\Lambda_c} Y_{\lambda_c}(\hat{\boldsymbol{\rho}}_c) \right]_{JM}$$

角相関の記述を補助する関数

球面調和関数

最小限の球面調和関数で精密な波動関数を構築→多次元分析の数学的な処理が容易

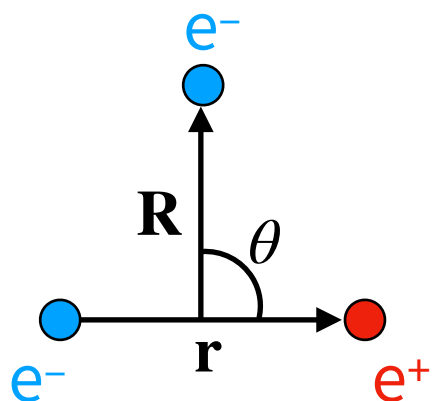
Based on E. Hiyama, Y. Kino, and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. 51, 223 (2003).



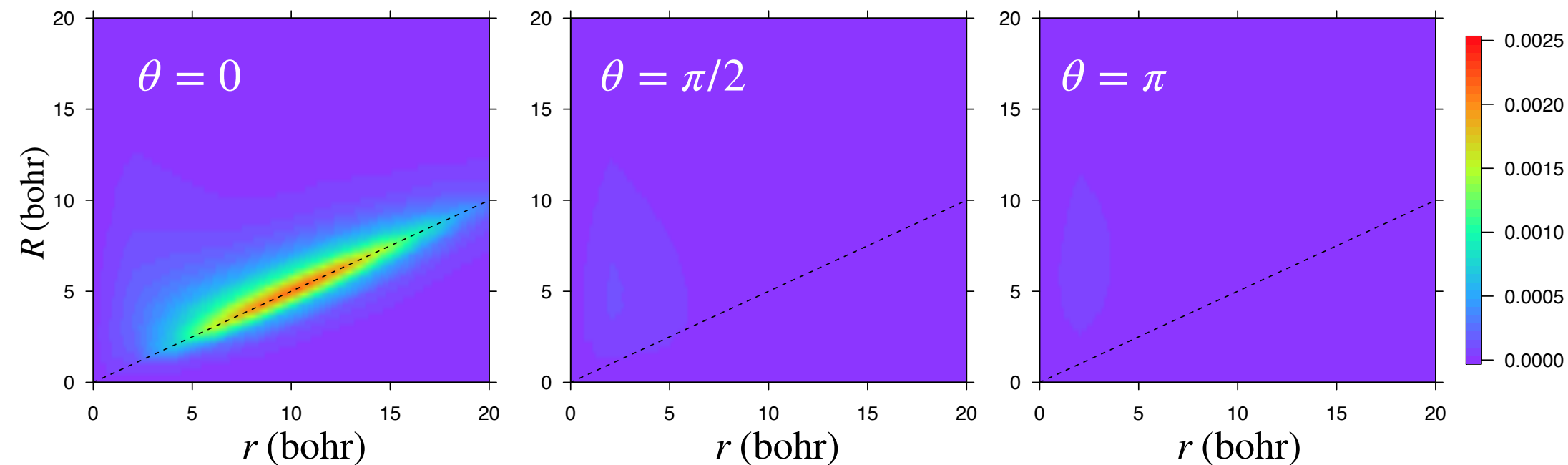
N_{tot}	$n_{\text{ch}}^{\text{tot}}$	E
5000	5	-0.786 540
9374	11	-0.788 613
13748	17	-0.788 778
18122	23	-0.788 816
22496	29	-0.788 844
26870	35	-0.788 850
47450	95	-0.788 867
52450	135	-0.788 868

-0.788 870
(best variational value)

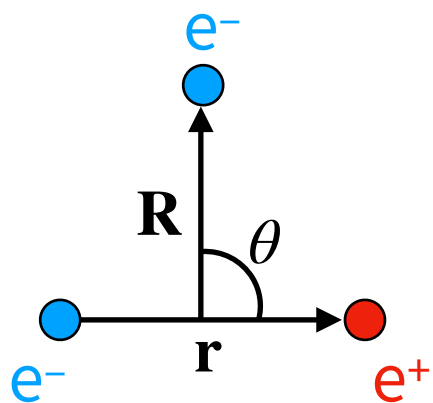
三体系での解析：ポジトロニウム負イオン



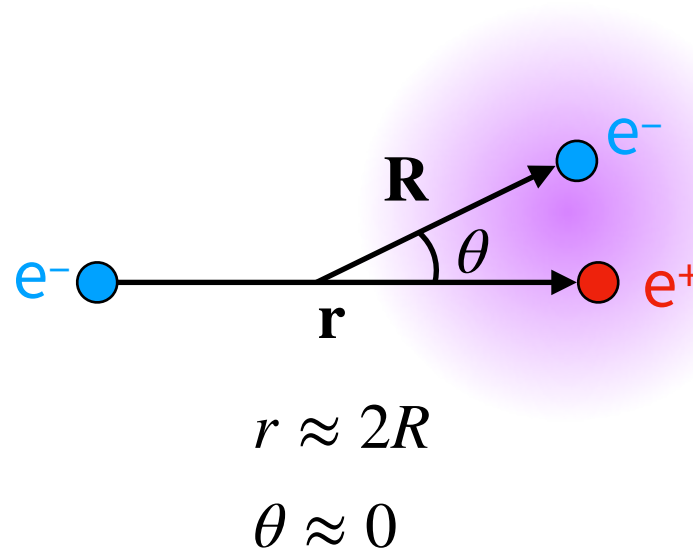
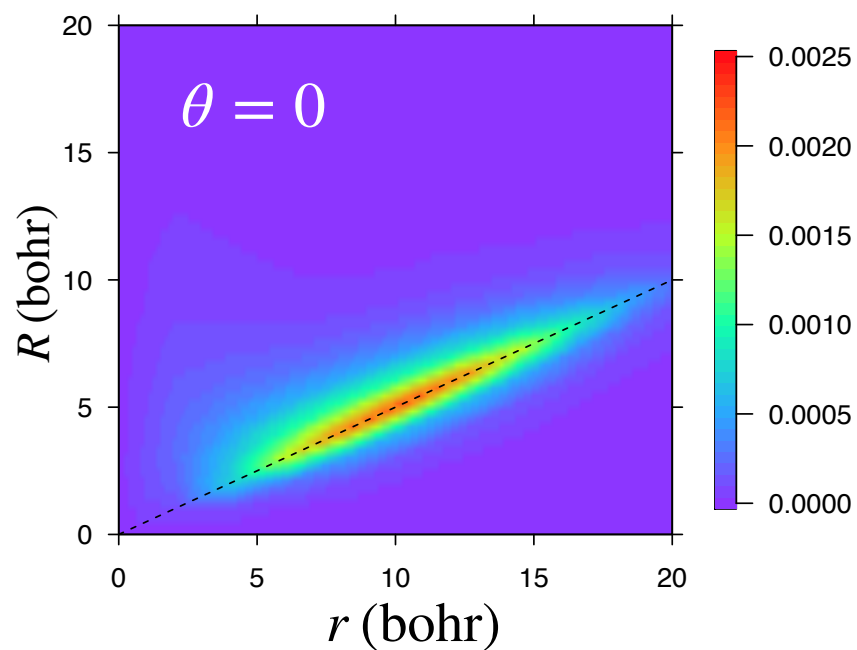
$$P(r, R, \theta) = r^2 R^2 \int d\hat{\tau} \Psi^* \Psi$$

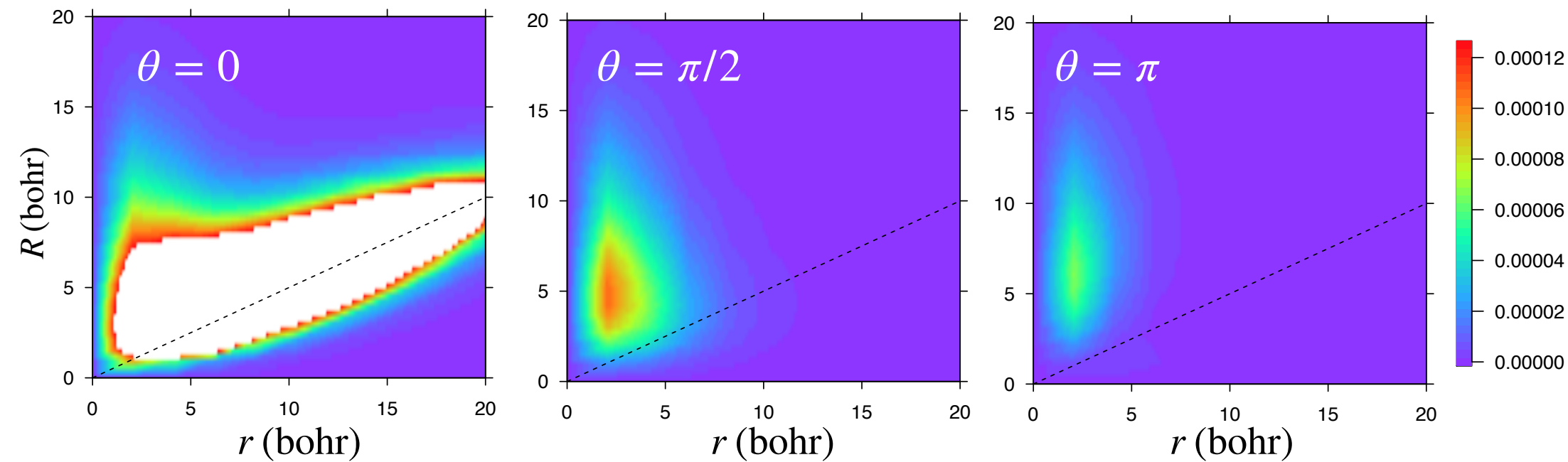
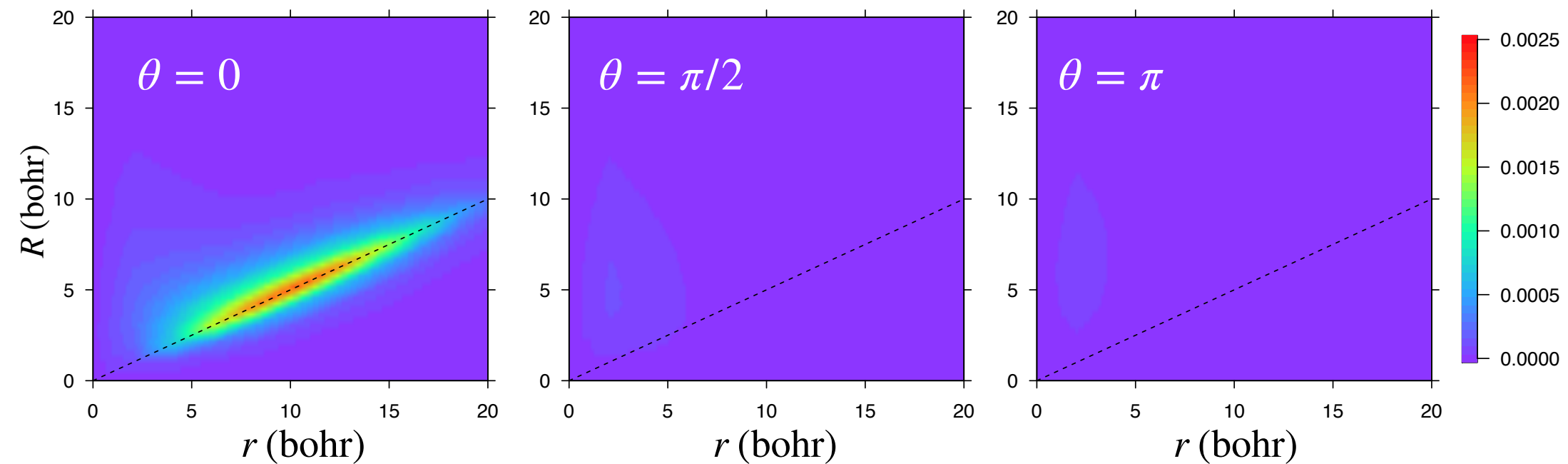


三体系での解析：ポジトロニウム負イオン

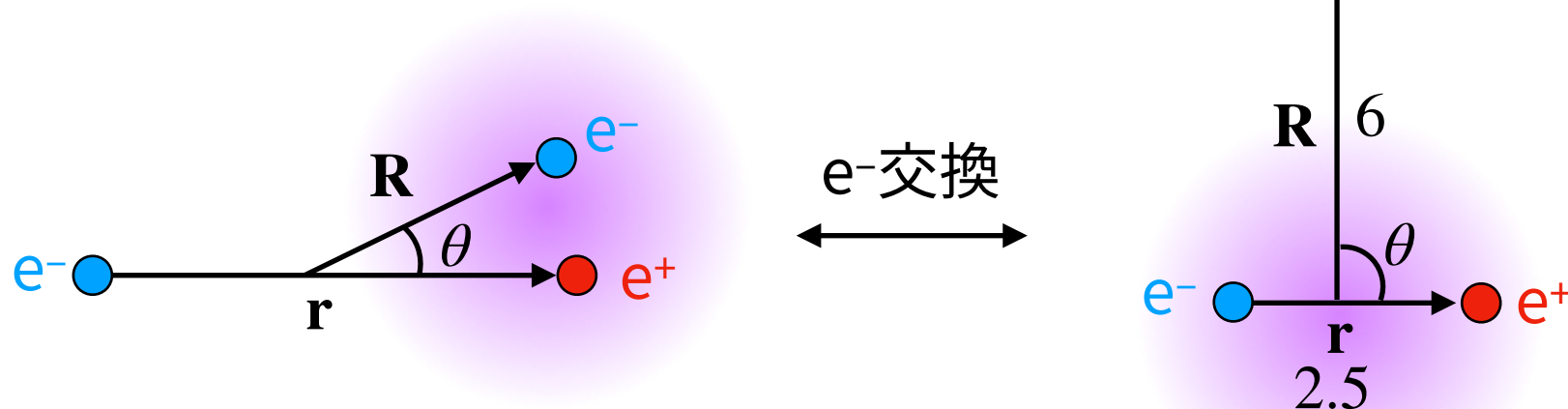


$$P(r, R, \theta) = r^2 R^2 \int d\hat{\tau} \Psi^* \Psi$$



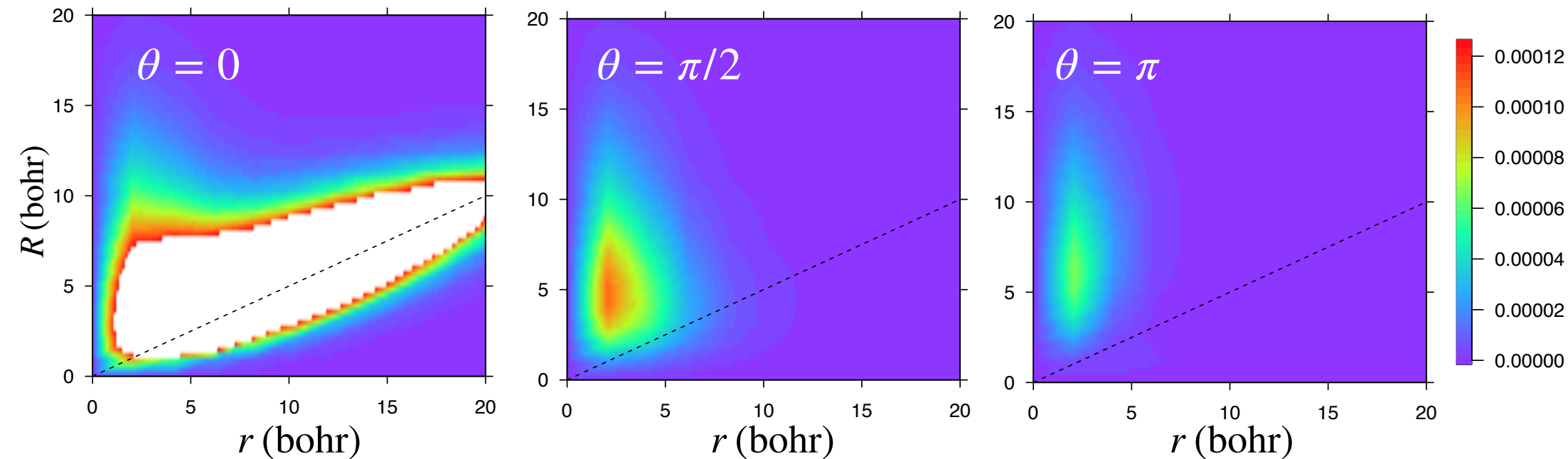


角度依存性から部分系構造を抽出する



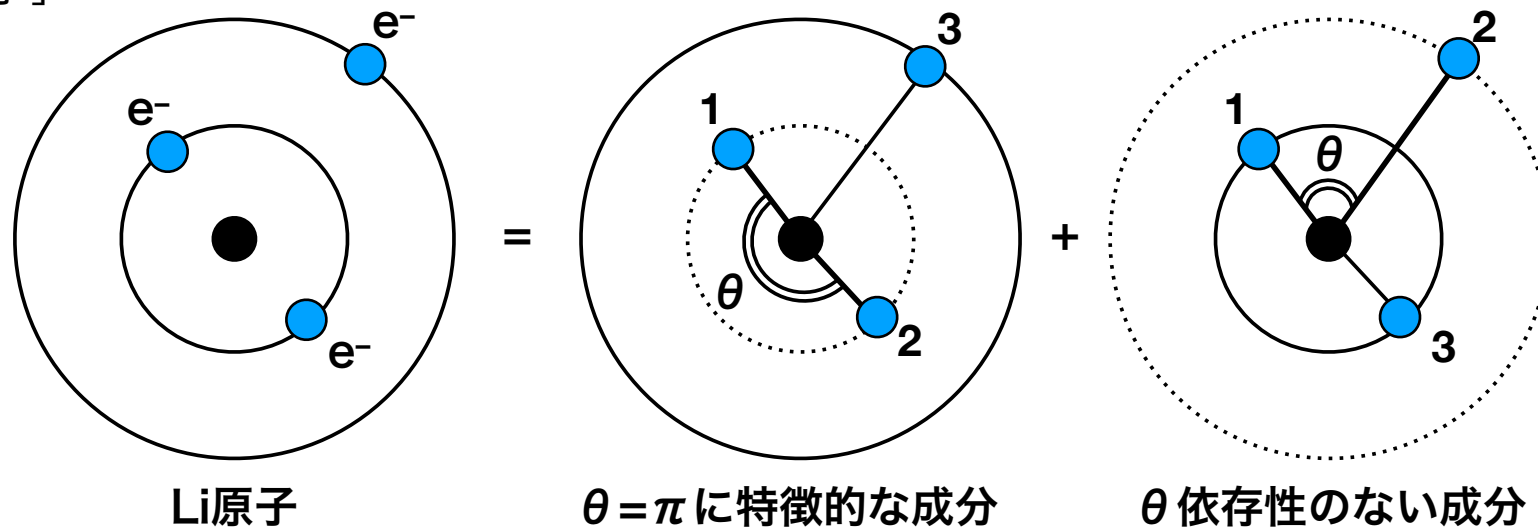
$\theta = 0$ に特徴的な成分

θ 依存性の小さい成分

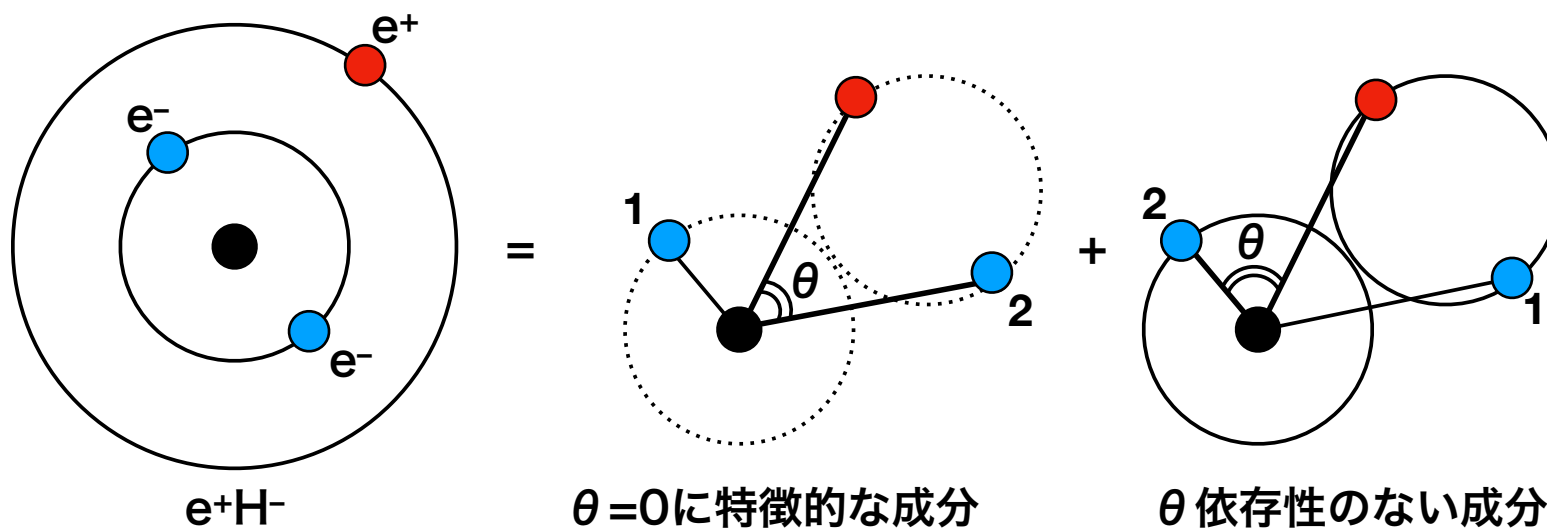


角度依存性から部分系構造を抽出する (4体系)

[通常の原子]



[水素化ポジトロニウム]



研究計画

PsX (X=1電子系)

(1) 通常の原子・分子系の解析 (陽電子付加による変化の明確化)

By-product: Li原子の芯分極歪み etc

(2) 水素化ポジトロニウムの部分系 →PsH の分子構造の有無

(3) Ps部分系、励起Ps部分系、Ps-部分系発現機構

→原子種と内部エネルギーに依存してどのような部分系が発現するか

