

振動量子モンテカルロ法による無極性分子の 陽電子吸着に関する理論的解析

○武田 湧*、北 幸海*、立川 仁典*

* 横浜市立大学大学院 生命ナノ

【緒言】

陽電子は電子と同じ質量・スピンを持つが、電荷のみが電子の逆符号 (+1)を持つ電子の反粒子である。陽電子は電子と対消滅を起こして γ 線を放出するが、それまでの過程において原子・分子に一時的に束縛され安定な複合体(陽電子複合体)を形成することが知られている[1]。理論的には 1.625 debye 以上の永久双極子モーメントをもつ極性分子であれば、安定な陽電子複合体を形成することが示唆されており[2]、実験的にも様々な極性分子に対して陽電子束縛エネルギー(陽電子親和力, PA)が測定されている[3, 4]。

一方、近年 Danielson らは、振動 Feshbach 共鳴 (VFR) を利用した分子ガスへの低速陽電子照射実験により、無極性分子である二硫化炭素 (CS_2) が陽電子を吸着可能であることを見いだした[5]。しかし、無極性分子への陽電子吸着は上述した理論モデルだけでは説明することができず、その吸着機構の詳細は十分明らかになっていない。VFR を利用した Danielson らの実験では、分子の振動励起が陽電子吸着に寄与することが示唆されており、したがって CS_2 分子への陽電子吸着機構を解明するためには、分子振動の寄与を考慮した理論的解析が必要不可欠である。

そこで本研究では、振動励起状態における CS_2 の陽電子吸着機構の詳細を明らかにすることを目的に、多成分分子軌道(MC_MO)法[7]および非調和振動解析を用いて、分子振動を考慮した陽電子親和力の理論的解析を行った。

【方法】

分子振動を考慮した陽電子親和力を算出するために、本研究では各振動状態における振動の確率密度分布(振動の波動関数の二乗)により PA を重み付けた振動平均 PA (PA_{ave})の解析を行った。振動の波動関数の解析には量子モンテカルロ(QMC)法を、PA の算出には CISD レベルの MC_MO 法を用いた。また、実験で陽電子吸着への寄与が示唆されている双極子モーメントと分極率についても同様の方法で振動平均値を解析し、回帰分析から PA とこれらのプロパティとの相関関係を解析した。

【結果】

各振動準位における PA_{ave} および平衡構造 (equil.)における PA を Fig.1 に示す。 CS_2 分子の PA は平衡構造ではゼロであるが、振動励起状態では正の PA を持つことがわかる。ここで正の PA は、安定な陽電子複合体の形成を意味している。また最も高い赤外活性を持つ逆対称伸縮モードの振動励起だけが PA を増大させることがわかった。線形回帰分析から、振動励起状態における永久双極子モーメントの増大が、これら PA の増大に支配的に寄与していることがわかった。

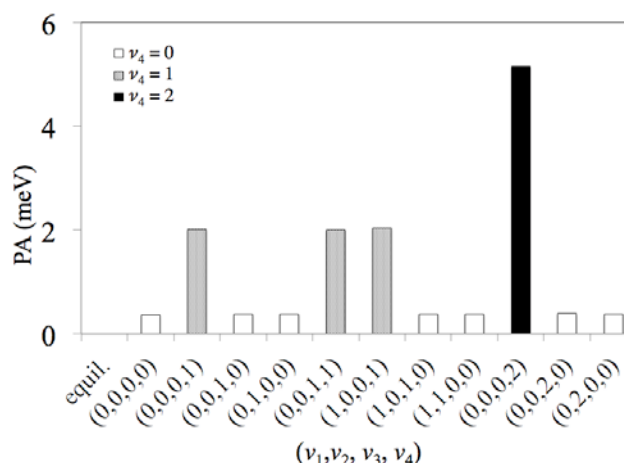


Fig.1 各振動状態における振動平均 PA 値。 v_1, v_2, v_3 および v_4 はそれぞれ変角・対称伸縮・逆対称伸縮モードの振動量子数

参考文献

- [1] 日本アイソトープ協会 編,陽電子計測の科学,(社)日本アイソトープ協会(1993). [2] O. H. Crawford, *Proc. Phys. Soc.* **91**, 279, (1967). [3] G. F. Gribakin, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2557 (2010). [4] J. A. Young and C. M. Surko, *Phys. Rev. A* **78**, 032702 (2008). [5] J.R. Danielson, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 233201 (2010). [6] K. Koyanagi, *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 16208 (2013). [7] M. Tachikawa, *Chem. Phys. Lett.* **360**, 494 (2002).