

陽電子消滅に関する理論的研究： γ 線スペクトル半値幅の系統的解析

○岩撫徹¹、五十幡康弘¹、中井浩巳^{1,4}

¹早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

²早稲田大学理工学研究所 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

³JST-CREST (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

⁴京大 ESICB (〒618-8520 京都市西区大学桂 京都大学ローム記念館 316 号室)

【緒言】

陽電子は電子の反粒子であり、固体や分子中の電子と衝突して対消滅を起こす。この時 2 本の γ 線が生じる。生じた γ 線のエネルギーは衝突する時の電子と陽電子の運動量の総和で決まる。運動量の総和が 0 ならば放出される γ 線のエネルギーは 511 keV となるが、0 でない時はドップラー効果によりシフトするため、結果として幅を持ったスペクトルが観測される。当研究室では、核・電子軌道(NOMO)法^[1,2]によって消滅 γ 線スペクトルを理論的に見積もる手法を検討してきた。その結果、陽電子を平面波として扱う従来の手法に比べ、精度良く消滅 γ 線スペクトルを再現できることがわかった^[3]。本研究では NOMO 法を用いて原子・分子の消滅 γ 線スペクトルの半値幅 $\Delta\varepsilon$ を計算し、軌道ごとの半値幅を系統的に解析し、実験では理解が困難な消滅 γ 線スペクトルの傾向を説明する。

【理論】

電子・陽電子の運動量の総和を \mathbf{P} 、 i 番目の分子軌道を φ_i^e 、運動量 \mathbf{k} を持った陽電子の分子軌道を φ_k^p とすると、消滅振幅 $A_{i\mathbf{k}}(\mathbf{P})$ は次の式で表すことができる^[4]。

$$A_{i\mathbf{k}}(\mathbf{P}) = \int e^{-i\mathbf{P}\cdot\mathbf{r}} \varphi_i^e(\mathbf{r}) \varphi_k^p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1)$$

消滅振幅 $A_{i\mathbf{k}}(\mathbf{P})$ から総運動量 \mathbf{P} をもつ光子の確率分布関数 $W_i(\mathbf{P})$ は

$$W_i(\mathbf{P}) = \pi r_0^2 c |A_{i\mathbf{k}}(\mathbf{P})|^2 \quad (2)$$

となる。 r_0 は古典電子半径 ($2.8179402894 \times 10^{-15}$ m)、 c は光速である。この式から、 i 番目の分子軌道に由来する消滅スペクトルが得られる。

$$w_i(\varepsilon) = \frac{1}{c} \iint_{2|\varepsilon|/c}^{\infty} W_i(\mathbf{P}) \frac{P dP d\Omega_P}{(2\pi)^3} \quad (3)$$

ここで光子のエネルギー ε は

$$\varepsilon = \frac{cP}{2} \cos \theta \quad (4)$$

で定義される。 θ は光子の向きと電子・陽電子対の運動する方向のなす角である。全体のスペクトルは分子軌道に関する和として得られる。本研究では $w(0)/w(\varepsilon_n) = 0.5$ となる ε_n を求め、差分により半値幅 $\Delta\varepsilon$ を求め、ドップラーシフトの大きさを示す指標とした。

【結果】

NOMO 法に密度汎関数理論(DFT)を導入した NOMO/DFT による原子の消滅 γ 線スペクトルの半値幅の計算を行った。計算結果を Figure 1 に示す。用いた交換相関汎関数は BLYP 汎関数で、電子の基底関数は 6-311++G**、陽電子の基底関数は even-tempered スキームで指数を決定した 8s8d ($\alpha = 0.0001, \beta = \sqrt{10}$) である。

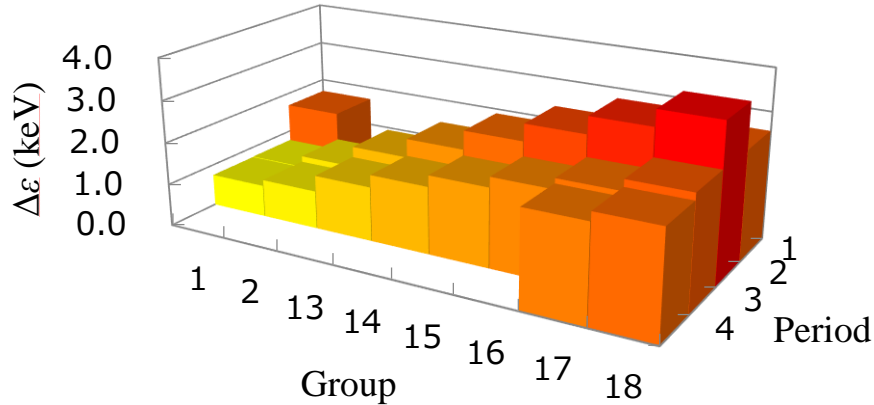


Figure 1. The value of Doppler shifts $\Delta\epsilon$ of atoms.

$\Delta\epsilon$ の値に関しては、同周期であれば周期表の右の元素ほど大きくなり、同族であればヘリウムを除くと周期表の下の方の元素ほど小さくなる傾向が確認された。これらの傾向は、軌道ごとの $\Delta\epsilon$ と全スペクトルへの寄与から理論的に説明することが可能である。同周期元素の傾向は、原子核の電荷が増加することで電子が原子に引き付けられ、運動量が増加したことが原因と考えられる。同族元素の傾向は、価電子軌道が広がることによる電子の運動量の減少が原因であると考えられる。内殻軌道の電子に関しては全ての原子に共通して $\Delta\epsilon$ の値は価電子軌道に比べ大きい、全スペクトルへの寄与は数十分の一程度と小さい。

次に、様々な分子種に関して $\Delta\epsilon$ の値を計算した。分子内に非共有電子対を持つ分子は非共有電子対を持つ原子(ヘテロ原子)と近い半値幅となったが、非共有電子対を持たない炭化水素に関しては分子軌道ごとの解析により半値幅の増加を説明することが可能であることがわかった。当日は上に記載されている以外の原子・分子に関しての解析結果も示す。

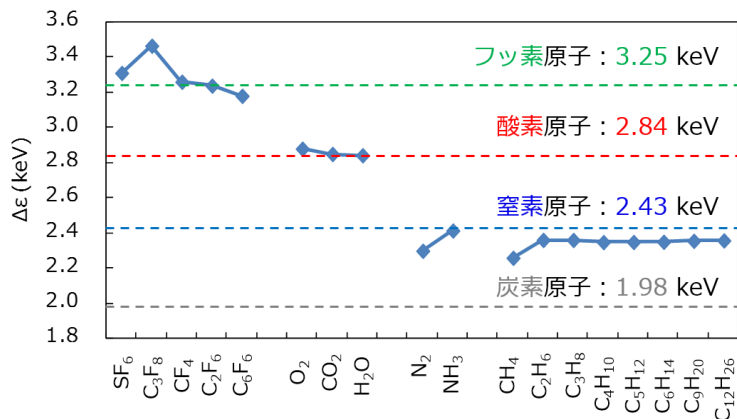


Figure 2. The Value of Doppler shifts $\Delta\epsilon$ of molecules.

【参考文献】

- [1] M. Tachikawa, K. Mori, H. Nakai, K. Iguchi, *Chem. Phys. Lett.*, **290**, 437 (1998).
- [2] H. Nakai, *Int. J. Quant. Chem.*, **86**, 511 (2002).
- [3] 饗庭理沙, 卒業論文, 早稲田大学 (2014).
- [4] F. Wang, X. Ma, L. Selvam, G. Gribakin, and C. M. Surko, *New Journal of Physics*, **14**, 085022 (2012).