

(dtμ) 分子の束縛状態

石井 一夫*, 山崎 智**

* 岡山理科大学 理学部 応用物理学科

** 横河北辰エンジニアリングサービス株式会社

(昭和61年9月30日 受理)

1. はじめに

負のミューオン (μ^-) を触媒とする核融合反応 $\mu^- + d + t \longrightarrow {}^4\text{He} + n + \mu^-$ が室温で観測され注目されている¹⁾. その際中間状態として deuteron-triton-muon 分子 ($dt\mu$) が形成され, その正確な束縛状態の解明が急がれている²⁾. 特に励起エネルギー ϵ_{11} (回転, 振動ともに量子数 1) はミューオン分子の生成で重要な役割をになう. 我々はこの大変興味ある分子をクーロン 3 体形として出来るだけ解析的に分析する.

よく知られているように分子波動方程式は Born—Oppenheimer 近似又は Born の diagonal 補正により軽粒子系の波動方程式と重粒子系の波動方程式に分離される.

まず Born の方法は次のように要約出来る.

正確な ($dt\mu$) 分子の Hamiltonian を重心系で,

$$H = H_0 + H' \quad (1)$$

に分離する. ミューオン波動関数 $\varphi_n(q, R)$ は

$$H_0 \varphi_n(q, R) = E_n^0(R) \varphi_n(q, R) \quad (2)$$

を満たし正確に解かれていると仮定する. 但し q は μ^- の位置, $R = |\vec{R}|$ は d, t の核間距離である. φ_n は R をパラメーターとする規格直交関数系でしかも real に選べる. そして q の張る空間で完全系をなしている. したがって全系の Schrödinger 方程式,

$$(H_0 + H') \psi(q, \vec{R}) = \epsilon \psi(q, \vec{R}) \quad (3)$$

の波動関数 $\psi(q, \vec{R})$ を $\psi(q, \vec{R}) = \sum_n v_n(\vec{R}) \varphi_n(q, R)$ で展開して(3)に代入すると, 断熱近似 $\varphi = \varphi_n \cdot v_n$ のもとで次の核系の方程式が導出される.

$$\left\{ -\frac{1}{2M} \Delta_R + E_n^0(R) + G_{nn} \right\} v_n(\vec{R}) = \epsilon v_n(\vec{R}) \quad (4)$$

左辺第 1 項は核の運動エネルギーで M は d, t 核の換算質量である.

$$G_{nn} = \int \varphi_n(q, R) H' \varphi_n(q, R) dq \quad (5)$$

が Born の diagonal 補正で, もとの Born—Oppenheimer の近似とこの量だけ異なる。

我々は 2 章で $(dt\mu)$ の内部運動 Hamiltonian を求め 3 章で $U(R) = E_n^0(R) + G_{nn}$ の計算をおこない, 系の全エネルギー ϵ を求める。4 章で最近の理論値² と比較して考察する。

2. $(dt\mu)$ の Hamiltonian

任意の固定座標系から見た d, t, μ^- の位置ベクトルを $\vec{R}_d, \vec{R}_t, \vec{C}$ とし, そして相対位置ベクトル \vec{R}, \vec{r} を $\vec{R} = \vec{R}_d - \vec{R}_t, \vec{r} = \vec{C} - 1/2 \cdot (\vec{R}_d + \vec{R}_t)$ で定義すると, 全系の Hamiltonian H は並進運動の項を除いて, 次のように導かれる。

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H' \\ H_0 &= -\frac{1}{2} \Delta_r + \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_d} - \frac{1}{r_t} \right) \\ H' &= -\frac{1}{2M} \Delta_R - \frac{1}{8M} \Delta_r + \frac{M_t - M_d}{2M_d M_t} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_r \\ \text{但し, } M &= \frac{M_d M_t}{M_d + M_t} \end{aligned} \quad (6)$$

ここで R, r_d, r_t はそれぞれ核間距離, μ^- と d 間の距離, μ^- と t 間の距離を示し, $-i\vec{v}_r, -i\vec{v}_R$ はベクトル \vec{r}, \vec{R} の正準共役運動量である。 M_d, M_t は μ^- の質量を単位として測った時の d, t の質量である。

次に便利な方法として, \vec{R} を極座標 (R, θ, φ) に選びかつあらためて回転座標系 $\vec{r}(x, y, z)$ を導入し, z 軸に分子軸 (\vec{R} の方向) を固定し, 固定座標系 $\vec{r}(x', y', z')$ に対してその回転角をオイラー角に選ぶと, 座標変換

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \theta \cdot \cos \varphi - y \sin \varphi + z \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ y' &= x \cos \theta \cdot \sin \varphi + y \cos \varphi + z \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ z' &= -x \sin \theta + z \cos \theta \end{aligned}$$

のもとでオペレーター Δ_r は不変であるが, Δ_R と $\vec{v}_R \cdot \vec{v}_r$ は変化する³⁾。波動関数から回転の項を分離するために, 固定座標系から見た全系の角運動量 $\vec{K} = -i\vec{R} \times \vec{v}_R + \vec{L}$ を導入する。 \vec{L} はミューオンの角運動量である。 \vec{K} の分子軸への成分は $\vec{R} \cdot \vec{K} / R = L_z = -i\partial / \partial \psi$ となり, ψ はもう一つのオイラー角に一致し z 軸の回りの μ^- の回転角と同じに取れる。そして \vec{K} の固定軸 z' への成分を $K_{z'}$ とすると, オペレーター $\vec{K}^2, K_{z'}, L_z$ はたがいに交換され同時固有関数 Ω が存在し, それらの固有値を $K(K+1), M_K, A$ とする。全 Hamiltonian H は $\vec{K}^2, K_{z'}$ とは可換であるが L_z とは非可換であるから Ω 空間で張るベクトル $|K, M_K, L_z\rangle$ での H のマトリック

要素を $\langle K, M_K, A' | H | K, M_K, A \rangle \equiv \langle A' | H | A \rangle$ と置くとよく知られた手続で選択則 $\langle A' | H | A \rangle = 0$, ($A' \neq A, A' \neq A \pm 1$) を得る. したがって H の対角要素は直接次のように求まる³⁾.

$$\begin{aligned}
 \langle A | H | A \rangle &= \langle A | H_0 | A \rangle + \langle A | H' | A \rangle \\
 \langle A | H_0 | A \rangle &= -\frac{1}{2} \langle A | \Delta_r | A \rangle + \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_d} - \frac{1}{r_t} \right) \\
 \langle A | H' | A \rangle &= \frac{1}{8M} \langle A | \vec{P}^2 | A \rangle \\
 &- \frac{1}{2M} \left\{ \frac{\partial^2}{2R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{2R} - \frac{K(K+1) - A(A+1)}{R^2} - \frac{1}{R^2} \langle A | L^+ L^- | A \rangle \right\} \\
 &+ \frac{i(M_t - M_d)}{2M_d M_t} \left\{ P_z \frac{\partial}{2R} + \frac{1}{2R} \langle A | P^+ L^- - P^- L^+ | A \rangle \right\}
 \end{aligned} \tag{8}$$

但し $P^\pm = P_x \pm iP_y$, $L^\pm = L_x \pm iL_y$ で, \vec{P} は回転座標系での μ^- の運動量で, $\vec{P} = -i\vec{\nabla}_r$, \vec{L} は角運動量である。

3. 計算と結果

まず核系でのポテンシャル $U_n(R) = E_n^0 + G_{nn}$ を求め, 数値計算を行なう. H_0 の固有値方程式は固有関数の角度部分を分離して,

$$\langle A | \Delta_r | A \rangle \varphi_n + 2 \left(E_n^0 + \frac{1}{r_d} + \frac{1}{r_t} - \frac{1}{R} \right) \varphi_n = 0 \tag{9}$$

となる. 上式で R をパラメーターとした固有値 E_n^0 を求めるため, 楕円座標

$\xi = (r_d + r_t)/R$, $\eta = (r_d - r_t)/R$ を使う時,

$$\langle A | \Delta_r | A \rangle = \frac{4}{R^2} \left\{ (\xi^2 - \eta^2)^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] - \frac{A^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right\} \tag{10}$$

と変形されるので(9)は R をパラメーターとする自由度2の方程式になる.

そこで James 形の試験関数

$$\varphi_n = e^{-\delta \xi} (1 + c \eta^2) \tag{11}$$

(δ, c は変分パラメーター) を仮定して E_n^0 を求める. (8), (9)を用いて計算した結果は,

$$\begin{aligned}
 E_n^0(R; \delta, c) &= \frac{\langle \varphi_n | H_0 | \varphi_n \rangle}{\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle} \\
 &= \frac{1}{R} - \frac{4AF}{GR} + \frac{2(AF\delta + 8c^2/15)}{GR^2}
 \end{aligned} \tag{12}$$

$$A \equiv 1 + 2c/3 + c^2/5, \quad B \equiv 1/3 + 2c/5 + c^2/7$$

$$E \equiv 1 + 1/\delta + 1/2\delta^2, \quad F \equiv 1 + 1/2\delta, \quad G \equiv AE - B$$

となる. ここで E_n^0 は $A=0$ の時のみ収束し, 式(10)の右辺最後の項に寄与する E_n^0 はガンマ関数 $\Gamma(0)$ を含むので無視した.

Born の diagonal の補正 G_{nn} を求めるため,

$$\begin{aligned} \langle A | \Delta_R | A \rangle &= -\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \left\{ -K(K+1) + 2A^2 \right\} \\ &- \frac{2}{R^2} \left(1 + R \frac{\partial}{\partial R} \right) \left[(\xi^2 - \eta^2)^{-1} \left\{ \xi(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right\} \right] \\ &+ 1/4 \cdot (\xi^2 + \eta^2 - 1) \langle A | \Delta_r | A \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \langle A | \vec{V}_R \cdot \vec{V}_r | A \rangle &= -1/2 \cdot \xi \eta \langle A | \Delta_r | A \rangle \\ &+ \frac{2}{R^2} \left(1 + R \frac{\partial}{\partial R} \right) \left[(\xi^2 - \eta^2)^{-1} \left\{ \eta(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \xi(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right\} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

の変形された式 (式(8)から導出できる。) を使えば, やや複雑な計算の後, 次のようになる. ただし前と同様 G_{nn} は $A=0$ の時のみ収束する.

$$\begin{aligned} G_{nn}(R; \delta, c) &= \frac{\langle \varphi_n | H' | \varphi_n \rangle}{\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle} \\ &= \frac{K(K+1)}{2MR^2} + \frac{AF\delta}{MGR^2} - \frac{Q\delta + 2A(1/\delta + 2/\delta^2 + 3E/\delta^3) - 4FB + \delta S}{4MGR^2} \end{aligned} \quad (15)$$

ここで Q, S は次のように定義してある.

$$\begin{aligned} Q &= 2E(\delta^2 - 4c\delta^2 + 2c^2 - 6c)/3 + (2c\delta^2 - 2c^2\delta^2 - 6c^2)/5 \\ &\quad + c^2\delta^2/7 - 2\delta^2 - 2c \\ S &= -2(2c^2 + c^2\delta^2)/7 + 2(c^2\delta^2 - 2c\delta^2 + 4c^2 - 2c)/5 \\ &\quad + 2(2c\delta^2 - \delta^2 + 4c - 2c^2)/3 \end{aligned}$$

数値計算は, まず E_n^0 の極小値を仮定し, 換算質量 M は μ^- の質量を単位として, 最近の実験値 $M=10.6441$ であるから変分パラメーターとして,

$$\delta = 1.354, \quad c = 0.4481$$

を得た. 図1はポテンシャル $U(R) = E_n^0 + G_{nn}$ の曲線で, 全角運動量子数 $K=0, 1, 2$ について図示してある.

このように内部波動関数として James 形を仮定してやるとポテンシャル関数 $U(R)$ はあたえられた K に対して,

$$U(R) = q/R^2 - Z^2/R \quad (q, Z \text{ は定数}) \quad (16)$$

の形になる.

このポテンシャル内での核運動方程式(4)は完全な厳密解が存在し⁴⁾, 全エネルギー ϵ は

$$\epsilon_{K, \nu} = -\frac{MZ^4}{2} \left\{ \nu + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 8Mq + 4K(K+1)} \right\}^{-2} \quad (17)$$

となる. ここであらためて K, ν を回転及び振動量子数とする. 図2では図1の全角運動量子数がゼロを仮定したポテンシャルを用いてエネルギー準位を計算し, 図示してある.

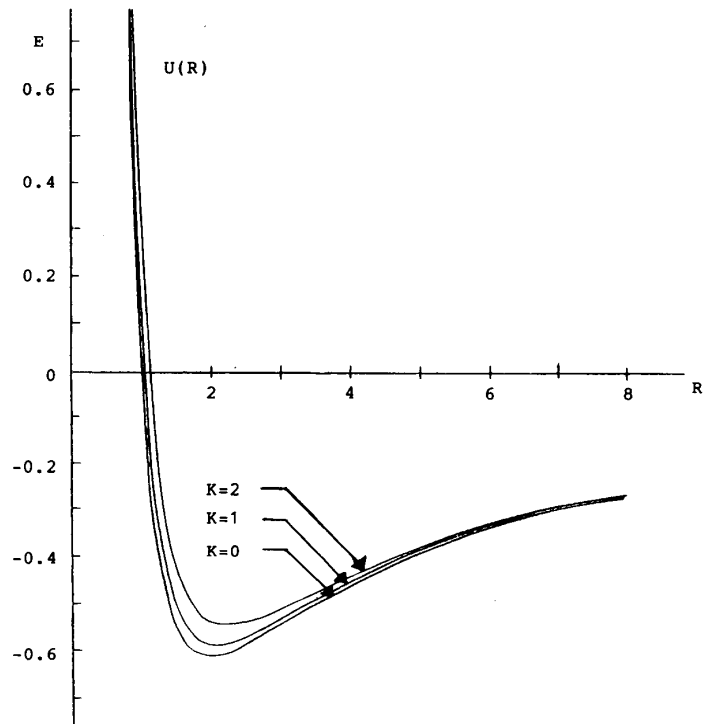


図1. Born の補正項を含むポテンシャル曲線。
横軸は核間距離で、 $1R = 2.55927 \times 10^{-11} \text{cm}$
縦軸はエネルギーで、 $1E = 5.62653 \text{Kev}$

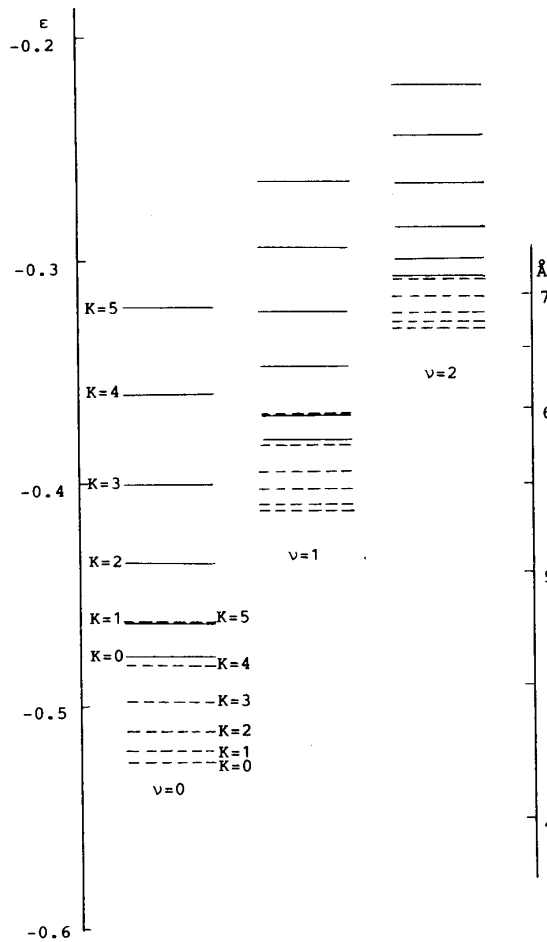


図2. 実線は Born の補正項によるエネルギー準位。破線は Born—Oppenheimer 近似によるもので、左右の縦軸はエネルギー（単位は図1と同じ）及び、対応する波長（単位は Å）を示す。K, ν は回転、振動量子数。

4. 考察

ポテンシャル $U(R)$ については Born—Oppenheimer 近似のものより Born 近似の方が深さがやや浅く、平衡核間距離は長くなっている。これは核系の振動エネルギー及び μ^- の運動量オペレーターに起因する。どちらの場合も水素分子イオンに比べて平衡核間距離は約1/150位で解離エネルギーは約600倍である。このように μ^- は深いポテンシャル内で核に近接していることになる。したがってクーロン力だけではなく、 R が小さい所では核力が影響を及ぼすはずで、Hamiltonian の補正が必要であり、近似方法の再検討が強いられる。我々の $U(R)$ は James の変分関数を用いたため、 μ^- の分子軸のまわりの角運動量 A が $A=0$ の時のみ収束解を持つので基底状態 ($A=0, K=0$) ではさしあたり満足出来るものの、励起状態ではポテンシャルの形はそのまま使っているため当然不満な点が残る。それ故核力を考慮して $A \neq 0$ なる項を引きだすような変分関数を見いだす必要がある。単に式(15)で $K \neq 0$ なる項を入れても正しい励起状態を引きだすことは期待出来ない。図2より励起状態から放出する光の波長は Born—Oppenheimer 近似で $10^{-1} \sim 10^{-2}$ Å であるが、Born 近似では $\sim 10^{-1}$ Å とやや波長が長い。どちらの場合についても、回転によるエネルギー準位の変化よりも振動によるエネルギー準位の変化の方が、放出する光の波長が長いものになっている。このようにして我々の計算モデルは、いわば μ^- が核に非常に安定に束縛され全体として回転、振動している状態に対応している。一方 A.K. Bhatia らは複雑な変分関数 (パラメーターが440個にもおよぶ) を使って ϵ_{Kv} を数値計算した結果、

$$\epsilon_{00}=1.549, \epsilon_{01}=0.169, \epsilon_{10}=1.128, \epsilon_{11}=0.0031$$

を得ている。²⁾ (単位は5.62653Kev) ちなみに、我々は

$$\epsilon_{00}=0.478, \epsilon_{01}=0.378, \epsilon_{10}=0.462, \epsilon_{11}=0.367$$

を求めた。このように ϵ_{11} に対して大きな食い違いが生じている。上記のことを踏まえて、この原因を調べることを今後の課題にしたい。

参考文献

- 1) S.E. Jones, Atomic Physics 9, World—Scientific, (1984) 99~117
- 2) A.K. Bhatia and Richard J. Drachman, Phys. Rev. **A30** 2138 (1984)
- 3) W. Kolos and L. Wolniewicz, Rev. Mod. Phys. **35** 473 (1963)
W. Kolos and L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **41** 3663 (1964)
- 4) ポーリング・ウィルソン共著「量子力学序論」白水社
福井謙一著「近代工業化学2 量子化学」朝食書店

Bound Deuteron-Triton-Muon Molecule

KAZUO ISHII* and SATOSHI YAMAZAKI**

* *Department of Applied Physics, Okayama University of Science, Okayama 700, Japan.*

** *Yokogawa Hokushin Engineering Service, Ltd. Musasino 180, Japan.*

(Received September 30, 1986)

Abstract

We report the energies obtained to data of the bound states of muonic molecules. Our calculations are used techniques in two different ways, yielding different results. The first method is due Born and Oppenheimer and the second has been given later by Born. James trial wave functions are used to describe the internal motion. These results are compared with the recent theoretical values.