

しょうとつ



**THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN**

原子衝突学会賛助会員(五十音順)

アイオーピー・パブリッシング・リミテッド (IOP英国物理学会出版局) <http://journals.iop.org/>

Institute *of* **Physics**

アステック株式会社

<http://www.astechcorp.co.jp/>

ASTECH
CORPORATION

有限会社 イーオーアール

<http://www.eor.jp/>



Electronics Optics Research Ltd.

株式会社 オプティマ

<http://www.optimacorp.co.jp/>

Optima Corp.

キャンベラジャパン株式会社

<http://www.canberra.com/jp/>



CANBERRA

クリムゾンインタラクティブプライベートリミテッド

<http://www.enago.jp/>

<http://ulatus.jp/>

<http://www.voxtab.jp/>

enago™

株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

<http://www.scilab.co.jp/>



株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

真空光学株式会社

<http://www.shinku-kogaku.co.jp/>

真空光学株式会社 -Vacuum & Optical Instruments-

スペクトラ・フィジックス株式会社

<http://www.spectra-physics.jp/>

Spectra-Physics®

A Newport Corporation Brand

ソーラボジャパン株式会社

<http://www.thorlabs.jp/>



ツジ電子株式会社

<http://www.tsujicon.jp/>



株式会社東京インスツルメンツ

<http://www.tokyoinst.co.jp/>



株式会社東和計測

<http://www.touwakeisoku.co.jp/>



株式会社トヤマ

<http://www.toyama-jp.com/>



株式会社 ナバテック

<http://www.navatec.co.jp/>



仁木工芸株式会社

<http://www.nikiglass.co.jp/>



伯東株式会社

<http://www.g5-hakuto.jp/>



丸菱実業株式会社

<http://www.ec-marubishi.co.jp/>

丸菱実業株式会社

MARUBISHI CORPORATION

株式会社 ラボラトリ・イクイップメント・コーポレーション

<http://www.labo-eq.co.jp/>



しょうとつ

第9巻 第4号

目次

(シリーズ) 宇宙と原子 第二回 原子分子分光学 —「天体物理学」とは「原子分光学」のことだった—	市川 行和	… 5
(シリーズ) 短波長 FEL による原子分子光物理 生体高分子立体構造解明における原子分子物理の役割	森林 健悟	… 8
(シリーズ) 衝突論ノート X. 衝突論クイズ— じっくり考える入門編—	島村 勲	… 14
(解説) 強い短距離斥力相関の下での弱結合少数多体系 — エフィモフ物理と 4He 原子の 3,4 クラスター系—(前編)	上村正康, 肥山詠美子	… 20
(原子衝突のキーワード) シェイク過程	足立 純一	… 32
(原子衝突のキーワード) 一般化振動子強度	酒井 康弘	… 33
(原子衝突の新しい風)	高橋(山本) 果林	… 34
大森賢治教授のフンボルト賞受賞によせて	香月 浩之	… 35
2012 年度日本物理学会科学セミナー 「元素誕生と周期表-私たちを取り巻く原子核」のお知らせ		… 35
第 6 回 プラズマエレクトロニクスインキュベーションホールのお知らせ		… 36
第 39 回定期総会開催のお知らせ	庶務幹事	… 37
国際会議発表奨励事業に関するお知らせ	庶務幹事	… 37
「しょうとつ」原稿募集	編集委員会	… 38
今月のユーザー名とパスワード		… 38

「宇宙と原子」 第二回 原子分子分光学 －「天体物理学」とは「原子分光学」のことだった－

市川行和

yukitikawa@nifty.com

平成 24 年 5 月 7 日原稿受付

宇宙からの情報の大部分を、われわれはさまざまな波長(電波から X 線, ガンマ線まで)の電磁波を受信することで得ている. そこでこれらの電磁波の取得と分析(分光学)が天文学の大きな部分を占めている [1]. そもそも分光学はニュートンが白色の太陽光がさまざまな色の光の重ね合わせであることをプリズムを使って明らかにしたことに始まる. ただ分光学が科学として確立するのは, Fraunhofer による太陽スペクトル中の暗線(フラウンホーファー線)の発見である. 彼は自作の分光器を用いて太陽スペクトルを観測し, 574 本の暗線を見つけ, その波長を確定した(1817 年発表). その中の強度の強いものに, 波長の長い方から順に A から K までの記号をつけた. 有名なナトリウムの D 線はその 4 番目に当たる(図 1).

フラウンホーファー線が何に由来するかを明らかにしたのは Bunsen と Kirchhoff である. 彼らは高温に熱した気体の発する光はそれを構成する物質に固有のものだとし, 「分光分析」の基礎を築いた. たとえば 1860 - 61 年に *Ann. Phys. Chem.* に「スペクトル観測による化学分析」という 2 編の論文を発表し, 多数の分光データを報告している. 彼らによってフラウンホーファー線は太陽大気中の原子による吸収線であることが示された. (正確に言うと, フラウンホーファーの見つけた暗線には地球大気分子による吸収も一部含まれている.) これにより天体を構成する物質は地上のものと同じであり, 同じ法則に従うことがわかったわけである. こうして「天体物理学 (astrophysics)」が始まった. 最初の頃, 天体物理学の研究の多くは分光学であった. 現在もっと

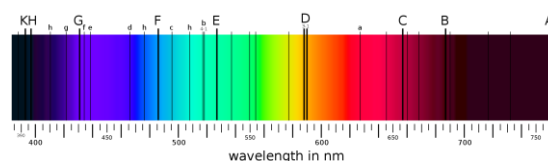


図 1: フラウンホーファー線

も広く読まれている天体物理学の雑誌は *Astrophysical Journal* であるが, 1895 年に創刊されてからしばらくは分光学の雑誌でもあることが明記されていた(図 2).

原子分子は量子力学に従い, その種類ごとに固有のエネルギー状態を持つ. それらの状態間の遷移に伴い特定の波長(振動数)の電磁波を放出あるいは吸収する. すなわち宇宙からやってくる電磁波のスペクトルを見れば, どのような原子がどのようなエネルギー状態にどれだけあるかがわかる. さらに, それらの電磁波の励起の機構の解明から, 周囲の環境(温度や密度, 電場や磁場の存在など)に関する情報が得られる. 光を放出・吸収する原子や分子が動いていると, ドップラー効果により観測される波長が変化する. このことから天体の運動に関する情報が得られる. その最たるものが宇宙膨張に起因する赤方偏移であるが, これについては後であらためて紹介する.

現在では宇宙から来るあらゆる波長の電磁波(電波 赤外 可視 紫外 X 線)について観測が行われている. このうち, 波長の短いもの(紫外や X 線), および赤外線も多くは地球大気による吸収があるので, 大気圏外に出て観測する必要がある. すなわち, ロケットや人工衛星に観測装置を積んで観測する. このような飛翔体を使

う研究を宇宙科学と呼び、第二次大戦後に盛んになった。分光学と宇宙科学が結びついて今まで見えなかったものが見えるようになったのである。

いま波長 λ の電磁波を放出している原子分子を含む気体の温度を T とする。気体原子分子間の衝突で励起(熱励起)が行われているとすると、おおざっぱに言って

$$\lambda \propto 1/T \quad (1)$$

の関係が成り立つ。すなわち、低温の気体からは波長の長い電磁波(電波や赤外線)が、高温の気体からは波長の短いもの(紫外線や X 線)が放出される。したがって調べたい天体に合わせて観測手法を変える必要がある。ただ実際には観測手法毎に研究分野のグループ分けがなされており(電波天文学, 赤外線天文学, など)それぞれで話す言葉が違っていたりするので注意が必要である。

宇宙における電磁波の放出過程は地上におけるそれと本質的には同じである。ただ環境が異なるために地上では起こらないことが起こることがある。宇宙の特徴の一つは、大部分の領域においてその粒子密度が低いことである。銀河系では平均して 1 cm^{-3} (ほとんどが水素原子)であり、星間雲などやや濃いところでも 10^4 cm^{-3} 程度である。粒子密度が低いことで顕著となるのは禁制線の出現である。電磁波の放出・吸収を伴う原子分子の状態間遷移には選択則がある。電気双極子許容遷移以外はその確率が小さく、一般に禁制遷移と呼ばれている。ただ禁制といっても厳密に禁止されているわけではなく、非常に小さな確率ではあるが遷移が可能なのがふつうである。しかし、実験室では周囲の粒子や容器の壁との衝突による脱励起があり、放射の確率があまりにも小さいものは観測にかからない。ところが宇宙では粒子密度が小さく壁もないので禁制遷移に伴う電磁波の放出を観測することができる。

天体の一種に惑星状星雲と呼ばれるものがある。これは高温の星の周りにあるガスの塊で、中心の星の光で電離していて、やや濃く暖かい(密度は 10^4 cm^{-3} , 温度は 10^4 K 程度)。そこからの輝線は 19 世紀後半以来観測されているが、そ

THE ASTROPHYSICAL JOURNAL

AN INTERNATIONAL REVIEW OF SPECTROSCOPY AND
ASTRONOMICAL PHYSICS

VOLUME LXVII JANUARY 1928 NUMBER 1

THE ORIGIN OF THE NEBULAR LINES AND THE STRUCTURE OF THE PLANETARY NEBULAE

By I. S. BOWEN

ABSTRACT

Identification of nebular lines.—Eight of the strongest nebular lines are classified as due to electron jumps from metastable states in N^+_n , O^+_n and O^+_m . Several of the weaker lines are identified with recently discovered lines in the spectrum of highly ionized oxygen and nitrogen.

Behavior of lines in nebulae.—The lines thus identified are shown to behave in various nebulae in a way consistent with the foregoing classifications. A similar study of the few lines yet unknown makes it possible to estimate the stage of ionization from which they arise.

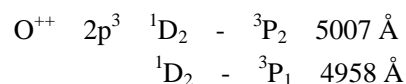
Structure of the planetary nebulae.—On the basis of the foregoing identifications, the relative sizes and intensities of the monochromatic images of the planetary nebulae are explained by an extension and modification of the ideas developed by Zanstra for hydrogen in the diffuse nebulae.

図 2: Bowen の論文 [2] の第一頁。雑誌のタイトルのところに Spectroscopy という言葉が入っている。(文献[2]より、アメリカ天文学会の許可を得て転載。)

の起源の多くが不明だった。たとえば、1918 年に

W. H. Wright は多くの惑星状星雲を観測してそこからの輝線のリストを作った。しかし、その大半は同定できなかった。そこでこれらの輝線は新しい元素ネブリウムの出す光だとされた。しかし、同定できない輝線は多数あり、それらがすべて同じ未知の元素(ネブリウム)から出ているとするのは無理があった。やがて 1928 年 Bowen [2] はこれらの輝線が軽い原子の低価数のイオンによる禁制線であることをつきとめた。そしてそれが観測にかかるのは周囲の密度が低いので衝突による脱励起の確率が小さいためだとした。

一つの例を挙げよう。惑星状星雲からの輝線で比較的強度の大きいのは



である。これらは禁制遷移であり、その確率は詳しい計算 [3] によると $2.0 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ および $6.8 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ である。一方衝突の頻度 ν は

$$\nu = n\nu Q \quad (2)$$

で評価できる。ここに n は衝突相手の粒子密度、 ν はその粒子の速度、 Q は衝突断面積である。

衝突相手として、最も多い水素原子を考えると $n = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $v = 1.3 \times 10^6 \text{ cm s}^{-1}$ (温度を 10000 度とする)とし, Q はわからないので 10^{-16} cm^2 (標的イオンのサイズ程度)とすると

$$vQ = 1.3 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$$

となる. 一方自由電子との衝突を考えると, 断面積は同じ程度としても, 衝突速度が大きいので, vQ は大きい. 電離度は平均すると 100 % よりは小さいだろうから電子密度は 10^4 よりは小さい. したがって衝突頻度は水素原子との衝突と同じ程度であろう. 電子衝突の場合には断面積の理論値が存在する. それを使えばもう少し定量的な議論ができるが, 結論は基本的に変わらない. 結局衝突による脱励起の確率は放射確率よりかなり小さいことになる. このことから禁制線が観測可能であることがわかる. 本シリーズでは今後折に触れて分光観測の話が出てくるが, そのいくつかは禁制線が関係している.

分光学を宇宙に応用する際のもう一つの特異性は宇宙膨張に伴う赤方偏移である. 星や星間雲などの天体は多かれ少なかれ動いている. したがって宇宙からやってくる電磁波にはドップラー効果がつきものである. 宇宙膨張の速度は遠くのものほど速い. そこである程度以上遠くにある天体は宇宙膨張の速度がその天体固有の運動を上回り, 放射する電磁波は一様に波長の長い方にずれる. これが赤方偏移である. 図3は最近, Keck 望遠鏡の分光器を用いて観測された遠方銀河 GN-108036 からの水素原子ライマンアルファ線 (1216 Å) である [4]. 波長 9980 Å のところにあるピークがそれで, 赤方偏移により波長が 8.2 倍に伸びている. 現在の宇宙論のモデルによると, これは 129.1 億光年の彼方にあることになる. もちろん, このピークが水素のライマンアルファであると断定するにはさまざまな吟味が要る. 詳細は原論文に譲るが, 一番決め手になるのがピークの非対称性であった. このピークはよく見ると, 波長の長い方に比べて短い方が急激に下がっている. われわれの地球からこの銀河までの間 (銀河間空間) にはたくさんの水素原子がある (その密度は小さいが距離がきわめて長い). それらがライマンアルファ線を吸収する. それらの水素は問題の銀河より手前にあるので赤方偏

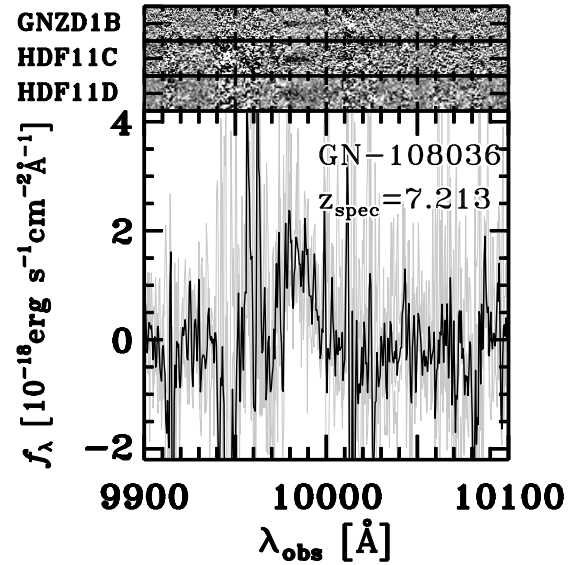


図 3: 遠方銀河 GN-108036 からの水素原子ライマンアルファ線のスペクトル. 赤方偏移により, 波長が 9980 Å のところにずれて観測されている. (文献[4]より, アメリカ天文学会の許可を得て転載.)

移は小さく, 9980 Å より短波長のところで吸収が起こる. すなわちピークの短波長側は銀河間 (および当該銀河の周囲にある) 水素による吸収で削り取られているのである. このような天体がどの程度遠方まで観測できるかということは宇宙の成り立ちを知る際に重要な情報となる. ここでも原子分光学が大きな寄与をしているのである.

参考文献

- [1] 天体分光学の歴史については簡単なまとめがある. B.R. Masters, *Optics and Photonics News* **20**, 34 (2009).
- [2] I. S. Bowen, *Astrophys. J.* **67**, 1 (1928).
- [3] P. J. Storey and C.J. Zeppen, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **312**, 813 (2000).
- [4] Y. Ono et al., *Astrophys. J.* **744**, 83 (2012).

「短波長 FEL による原子分子光物理」 生体高分子立体構造解明における原子分子物理の役割

森林健悟

日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門

moribayashi.kengo@jaea.go.jp

平成 24 年 5 月 22 日原稿受付

1. はじめに

タンパク質など生体高分子の立体構造の情報は創薬に不可欠であるが、立体構造がわかっていない生体高分子が多く存在している。そのため、立体構造の解明の研究が盛んに行われている。その解明の代表的な方法の手順 [1, 2] は以下の通りである。(i) 生体高分子を結晶化する。(ii) SPring8 のような放射光から放射される X 線をこの結晶に様々な方向から照射し、回折像を作る。(iii) コンピューターを用いてすべての回折像を 2 次元の構造に変換する。(iv) これらの 2 次元構造からトモグラフィ法により立体構造を作り上げる。しかしながら、この方法はすべての生体高分子に適用できるわけではない。例えば、創薬で重要な膜タンパク質など結晶化困難な生体高分子には、この方法は適用できない。Neutze らは、この方法が適用できない生体高分子の立体構造を解明するために図 1 に示す実験手法、すなわち、単分子に X 線を照射して回折像を作ることを提案した [3]。結晶化された生体高分子に X 線を照射すると 1 回の照射で非常に多くの回折像を得ることができ、これらの回折像を重ねあわせて平均化することにより高い分解能の立体構造を求めることができる。一方、単分子照射では 1 回の照射で 1 つの回折像しか得ることができないので、個々の回折像から得られる構造の解像度を高くする必要がある。そのため、非常に高強度な X 線が要求される。このような高強度 X 線の必要性からアメリカ、ヨーロッパ、日本で X 線自由電子レーザーの開発が 21 世紀に入って計画された。そして、2009 年にアメリカで、2011 年に日本で波長 1 Å 程度の X 線レーザーが発振した。

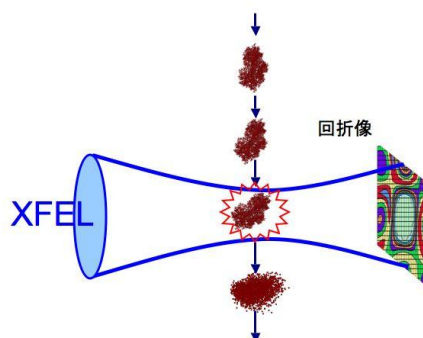


図 1: X 線自由電子レーザー光を用いた生体高分子の立体構造解明のための実験提案

2015 年頃、ヨーロッパでも同様の X 線レーザーを発振させることが計画されている [4]。X 線自由電子レーザー光を用いた生体高分子の立体構造解明の実験では非常に高強度 X 線が使用されるが、高強度になるにつれて X 線吸収過程などにより生体高分子中の多くの原子が電離を起し、多くの損傷を起こすことが予測できる。回折像は生体高分子中の原子に束縛されている電子による弾性散乱(トムソン散乱)光から作られるので、原子の電離は回折像の強度を弱くすることが予測できる。さらに、生成した自由電子による X 線の散乱や生体高分子中での原子の運動は立体構造のノイズとして現れることも予測できる [3]。

2. 原子分子過程

図 1 の実験提案を行った Neutze らは同時に数 fs で X 線吸収、コンプトン散乱、オージェ過程により生体高分子中のほとんどの原子がイオンとなり、おのおのの原子に大きなクーロン力が掛かり、

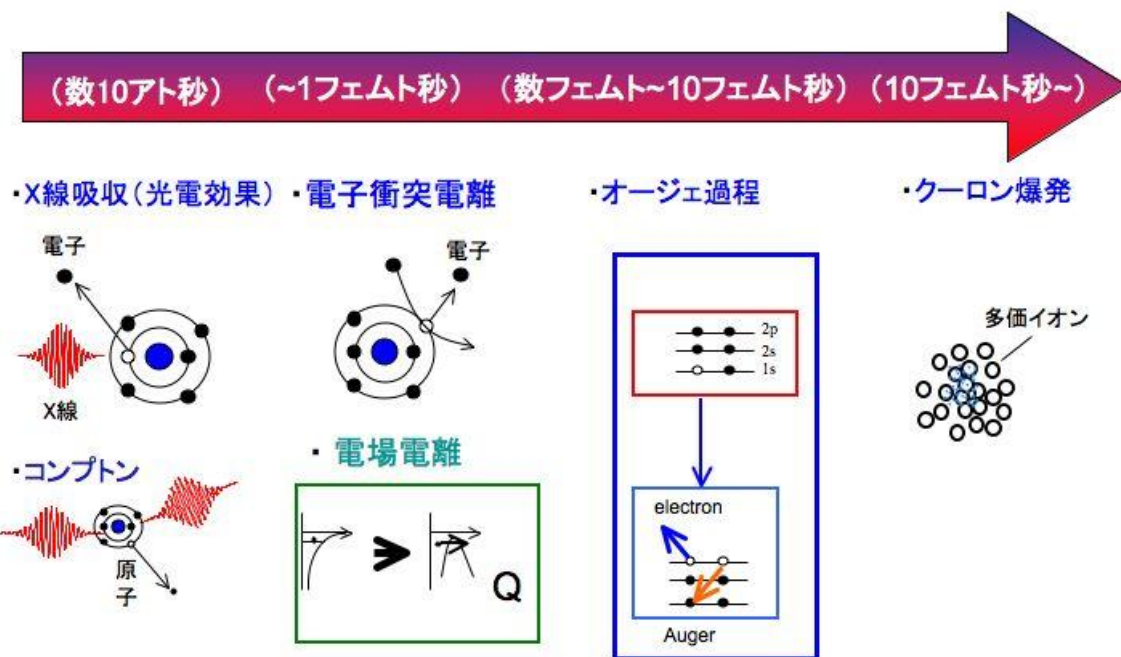


図 2: X 線自由電子レーザー照射により照射後の時間とそのとき起き始める損傷のシナリオ

クーロン爆発を起こすと予測した [3]. さらに、クーロン爆発を起こすと原子の位置が変わり、正確な立体構造を求めることができなくなるので、X線のパルス幅は数 fs 以下にする必要があると述べている. このクーロン爆発の影響を抑える方法として Hau-Riege らは生体高分子を多重の水の層で囲むことを提案した [5]. クーロン爆発は外側の原子から起こるので、最初に外側の層に位置する水分子がクーロン爆発を起こす. 一方、内側にある生体高分子中の原子のクーロン爆発は外の層の水分子のクーロン爆発が終わった後から始まることをシミュレーションで示した. それゆえに、生体高分子中の原子のクーロン爆発の起こる時間を遅らせることができ、50 fs 程度のパルス幅でも実験できる可能性があることを示した.

Neutze らのシミュレーションの後、X 線自由電子レーザー光の生体高分子照射での原子分子過程を用いた研究は分子動力学 (MD) 法 [6 - 9], レート方程式 [5, 10 - 14], 流体力学 [15], PIC (Particle in cell) 法 [16] など様々な手法で多くのシミュレーション研究が行われ、多くの新し

い物理現象が発見された. それぞれの手法には以下の特徴がある. MD 法では生体高分子中の個々の原子、個々の自由電子の運動を個別に取り扱うことができ、シミュレーションが高精度になる. しかしながら、計算時間が非常に掛かるため小さなサイズの生体高分子(数 nm のサイズ程度)しか取り扱うことができない. 一方、PIC 法は標的(生体高分子)をいくつかのセルで分けてそのセルごとに損傷を計算する手法であり、MD 法よりも大きなサイズの生体高分子(数 10 nm のサイズまで可能)を取り扱うことができる. レート方程式、流体力学では連続体モデルを使用するので、MD 法や PIC 法に比べれば計算精度は劣るが計算時間が短くて済む. そのため、多くの計算を短時間で容易にでき、第 3 節で述べるような実験可能な条件の探求の研究などに適している.

図 2 に上述の文献で用いられている原子分子過程のシナリオ(それが起こり始める時間との関係)を生体高分子の主成分である炭素原子の電子状態の変化を用いて示す. X 線が照射されると、まず、(i) X 線吸収(光電効果)(e.g., $C + h\nu \rightarrow$

$C^+ + e^-$) 及び (ii) コンプトン散乱 (e.g., $C + h\nu \rightarrow C^+ + e^- + h\nu'$) が起こり, (iii) それらの過程で発生した自由電子による電子衝突電離過程 (e.g., $C + e^- \rightarrow C^+ + 2e^-$) が起こる. (iv) 同時に, 原子の電離で生成したイオンの電荷が作り出す電場により他の原子が電離する電場電離 (e.g., $C + E \rightarrow C^+ + e^-$) が起こる. (v) その数 fs 後, オーজে過程 (e.g., $C^{+*} \rightarrow C^{2+} + e^-$) が起こり始めるが, (vi) この頃になると生体高分子の内部の原子は正の電荷数を持つイオンになっており, この内部はプラズマ状態になる. 数 fs を超えたころから, 生体高分子の原子の電荷数が非常に大きくなり, クーロン爆発を起こし, 生体高分子は崩壊する. ここで, $h\nu$ と $h\nu'$ は過程が始まる前と後の X 線のエネルギーを表し, E と e^- はそれぞれ, 電場, 電子を表す.

図 2 で示した原子分子過程それぞれの損傷 (原子の電離など) への寄与の大きさは原子分子

物理の専門家にとって興味ある問題と思われるが, その寄与は波長 (λ), パルス幅 (τ), X 線フラックス (F_x) などによって変わり, 定量的に一般論を述べることは難しい. また, その寄与の大きさを示した論文は数少ない. ここでは, その数少ない論文に書かれている各過程の寄与の割合 (X 線吸収の寄与との比較) を紹介する. Hau-Riege らは $\lambda = 0.1 \text{ nm}$, $\tau = 20 \text{ fs}$, $F_x = 3 \times 10^{20}/\text{mm}^2$ の場合, パルスが通過した直後, 電子衝突電離過程及びオージェ過程の損傷への寄与はそれぞれ, X 線吸収の損傷への寄与の約 3 倍, 0.5 倍になると見積もった [10]. 一方, Nakamura らは $\lambda = 0.1 \text{ nm}$, $\tau = 10 \text{ fs}$, $F_x = 10^{21}/\text{mm}^2$ の場合, 電場電離による損傷への寄与は X 線吸収による寄与の約 3 倍になると見積もった [16]. その他の重要な過程として論文に寄与は書かれていないが, コンプトン散乱 [17,18] がある. コンプトン散乱の断面積は $\lambda = 0.1 \text{ nm}$

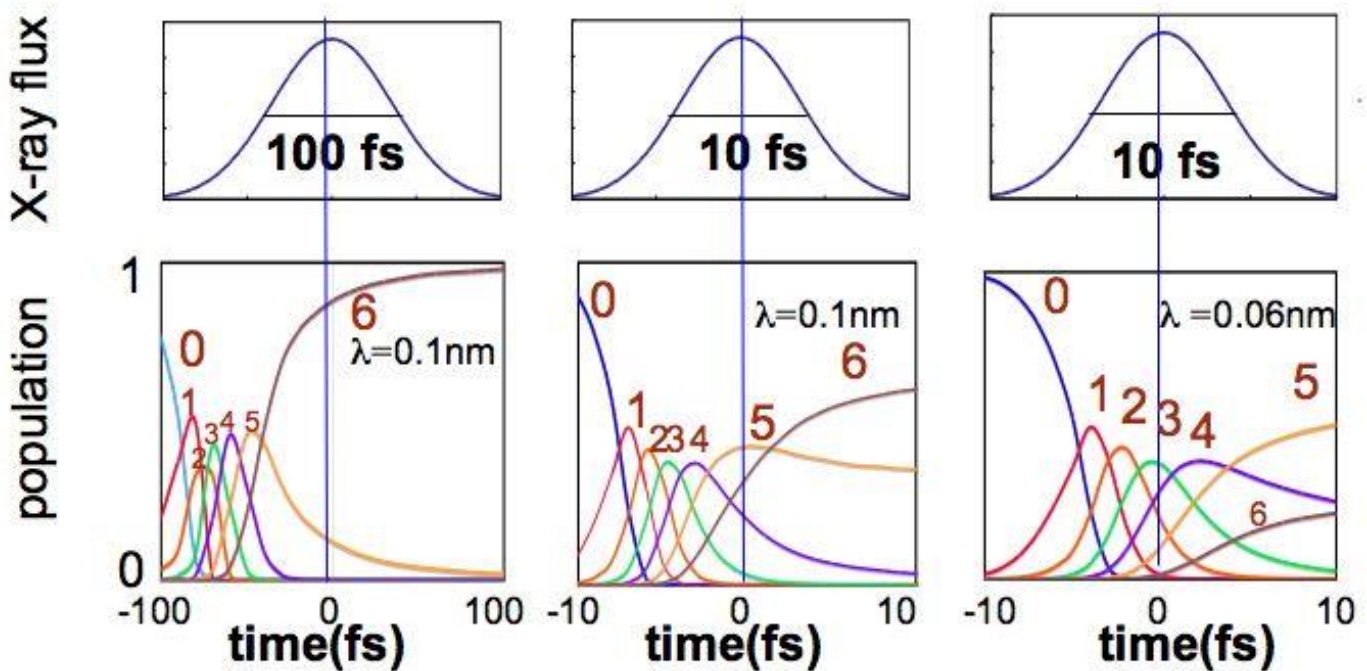


図 3: 上段: X 線自由電子レーザー光の X 線フラックスの時間発展. 下段: X 線自由電子レーザー光の全 X 線フラックスが $10^{22}/\text{パルス}/\text{mm}^2$, 球状の標的の半径 10 nm のときの炭素原子のポピュレーションの時間発展. (a) $\tau = 100 \text{ fs}$, $\lambda = 0.1 \text{ nm}$, (b) $\tau = 10 \text{ fs}$, $\lambda = 0.1 \text{ nm}$, (c) $\tau = 10 \text{ fs}$, $\lambda = 0.06 \text{ nm}$ X 線フラックスのピークが標的に入ったとき時間 0 とした (文献 [7] の Fig.1 を使用).

のときX線吸収の断面積 [19] の0.03倍であり、寄与は小さいので無視されている [10, 16] が、 $\lambda = 0.06 \text{ nm}$ になると0.3倍となり、無視できなくなる。波長が短くなるにつれてコンプトン散乱の寄与は大きくなる。

3. 損傷とX線自由電子レーザーのパラメータとの関係

X線自由電子レーザー光による生体高分子の損傷シミュレーションが始まった当初、波長 (λ), パルス幅 (τ), X線フラックス (F_x) のパラメータは1つの値のみ用いられていた。この当時、研究が始まったばかりで、どの過程が重要なのかよくわかっていなかった。そこで、各過程の研究を詳細に行い、重要な過程の解明が目指されていた。それには1つのパラメータで十分であったと考えられる。それに対して Moribayashi と Kai [12] は実験可能な条件を探し出すためには様々なパラ

メータの値と損傷との関係を明らかにすることが必要であると考えた。そこで、それらの様々な値に対して生体高分子の主要な原子である炭素原子の電離数ごとのポピュレーションの時間発展を計算した(図3と図4にこの文献 [12] の計算結果を示す)。この計算では生体高分子を球形と考え(球形に近い形の生体高分子ほど立体構造がわかっていないことが多い)、半径10 nmとされた。また、炭素原子の密度を $3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ とされたが、この密度は生体高分子中の炭素原子の密度とほぼ同じである。さらに、X線自由電子レーザー光の強度の時間プロファイルはガウス型の時間の関数が使用された(図3の上段の図参照)。X線自由電子レーザーの発振のメカニズムは本シリーズ第1回の記事 [4] に委ねるが、現在、日本のX線自由電子レーザー(さくら)では、SASE(Self-Amplified Spontaneous Emission)型と呼ばれている方式が使用されている。この方式

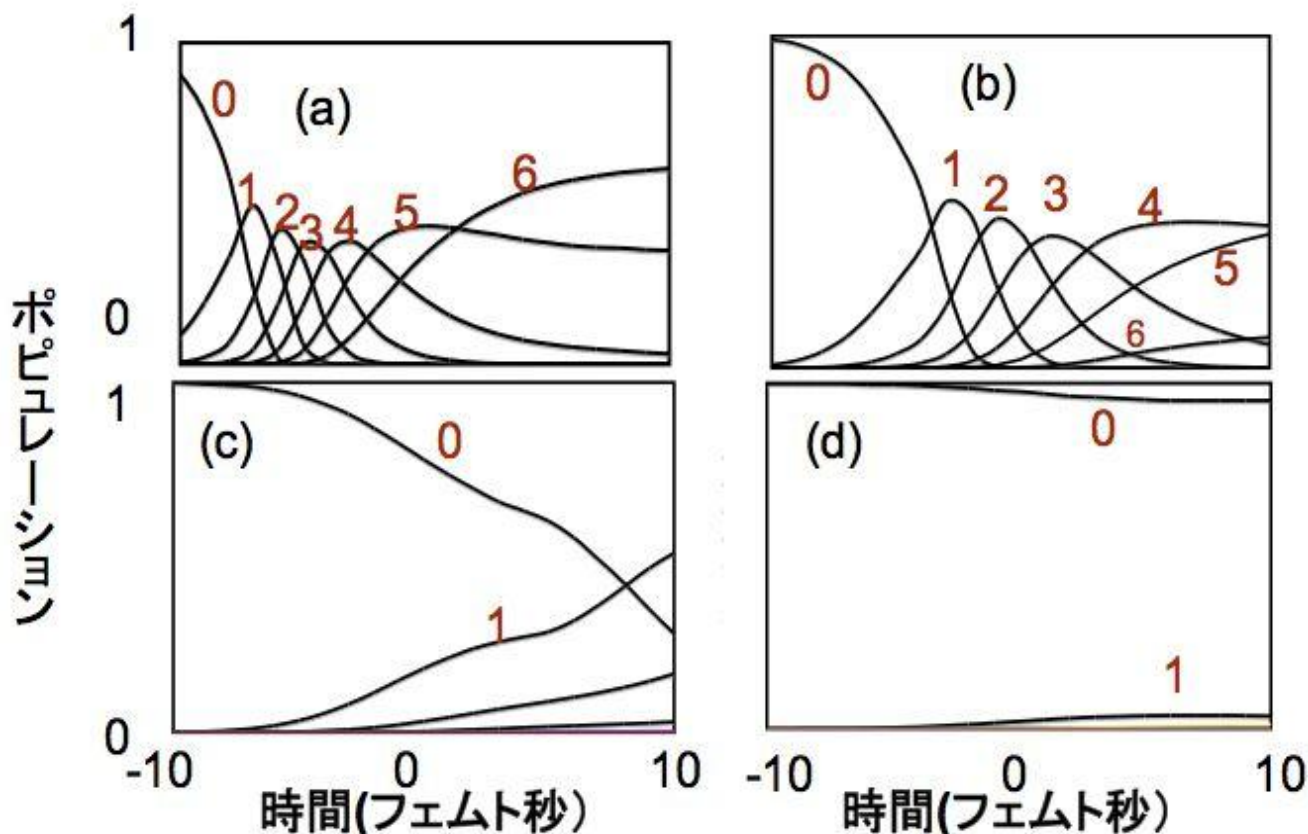


図4: X線フラックス値を変化させた場合の炭素原子のポピュレーションの時間発展の変化を示した図。X線フラックスは(a) 10^{22} /パルス/ mm^2 , (b) 10^{21} /パルス/ mm^2 , (c) 10^{20} /パルス/ mm^2 , (d) 10^{19} /パルス/ mm^2 . $\tau = 10 \text{ fs}$, $\lambda = 0.1 \text{ nm}$. X線自由電子レーザー光のX線フラックスの時間発展のプロファイルは図3と同じものを使用。

では強度の時間プロファイルはカオティックになっている。これは X 線自由電子レーザー光の発振に用いられる電子ビームの分布にばらつきがあるためである。このプロファイルを修正するためには分布にばらつきのない電子ビームを使用すれば良い。それを目指して電子ビームをコヒーレントの高い単一モードのレーザーで同期させることが考案されている [4]。この電子ビームを用いることによって X 線自由電子レーザー光の強度の時間プロファイルは、ここでの計算に用いたガウス型に近くなると考えられている(シーディング方式と呼ばれている)。日本の X 線自由電子レーザーでは将来、このシーディング方式を用いることが計画されている。

図 3(a)に日本の X 線自由電子レーザー開発の計画が始まった頃に予定されていたパラメータ値、すなわち $F_x = 10^{22}$ /パルス/mm², $\tau = 100$ fs, $\lambda = 0.1$ nm が用いられていた場合の計算結果を示した。この図から X 線強度の最大値が生体高分子に届く前に炭素原子は電子を持たない裸のイオンになることがわかる。回折像での計測は序論で述べたように原子に束縛されている電子によって弾性散乱した X 線の数に依存するので原子が電子を持たない裸のイオンになると計測できなくなる。パルス幅を 10 fs と短くすると X 線強度の最大値が届いたとき数個の電子が原子に束縛されており(図 3(b)参照)、測定可能となることがわかる。図 3(a)と(b)の相違ができる理由はオージェ過程の時間スケールが 10 fs 程度であるためである。すなわち、 $\tau = 10$ fs では X 線吸収とオージェ過程が 1 回程度しか起こらないのに対して、 $\tau = 100$ fs になると数回起こることが可能となり、電離が多く起こることが予測できる。また、オージェ電子による電子衝突電離も $\tau = 100$ fs では頻繁に起こり、これが電離を促進させることも予測できる。さらに、 λ を 0.06 nm と短くすると、原子に束縛されている電子の数がさらに増えている(図 3(c)参照)。これは、X 線吸収断面積(σ_x)の波長依存性がおおよそ $\sigma_x \propto \lambda^3$ [19] となっており、波長が短くなると X 線吸収、すなわち、原子の電離過程が起きる割合の減少が原因であると考えられる。この束縛された電子数の増加により、散乱された X 線の数、すなわち、回折像に届く X

線数も増えることが予測できる。これらの結果などにより日本の X 線自由電子レーザー光のパルス幅の予定値が 100 fs から 30 fs に修正された。

図 4 に様々な F_x の値に対するポピュレーションの時間発展の計算結果を示した。図 4 (a - d) での F_x の値はそれぞれ、(a) 10^{22} /パルス/mm², (b) 10^{21} /パルス/mm², (c) 10^{20} /パルス/mm², (d) 10^{19} /パルス/mm² である。ここでは、 $\tau = 10$ fs, $\lambda = 0.1$ nm, 生体高分子の半径 10 nm のパラメータが用いられている。これらの図から F_x が一桁小さくなると電離する数が激減することがわかる。これは X 線吸収電離過程のレート係数(この過程が起こる典型的な時間を表す量)が F_x に比例するため [8], すなわち、 F_x が X 線吸収電離過程の起こる時間スケールに相当するためである。 F_x が 10^{20} /パルス/mm² 以下になると X 線パルスが通過した後もかなりの数の中性原子が残っており、損傷の立場からは、この程度の X 線フラックスが望ましい。

4. おわりに

X 線自由電子レーザー光による生体高分子の立体構造解明での研究において実験可能な条件を導き出すためには損傷のシミュレーションが不可欠であり、このシミュレーションにおいて原子分子物理が重要な役割を演じることを示した。この実験が始まると X 線や光電子、オージェ電子などのスペクトル測定も同時に行われることが予測できるが [8, 11], そのときも原子分子物理が重要な役割を演じると考えている。

謝辞

本レビューでは文献 [12] の図を使用した。使用許可をいただいた IOP の出版社の編集委員に感謝したいと思います。このようなレビューを執筆できたのは「X 線自由電子レーザー利用推進課題研究」(文部科学省)のサポートの基で研究を遂行できたおかげであり、このサポートをしていただいた文部科学省に感謝したいと思います。また、研究を遂行している間に有用な議論をしていただいた郷信広教授、甲斐健師博士、福田佑仁博士、河野秀俊博士、徳久淳師博士、James Koga 博士、山極満博士、さらに日本の X

線自由電子レーザー(さくら)の開発チームのメンバーに感謝したいと思います。

参考文献

- [1] 早稲田嘉夫, 松原英一郎, 「X線構造解析原子の配列を求める」堂山昌男, 小川恵一, 北田正弘監修, 内田老鶴圃出版(1998).
- [2] 田中勲「構造生物学とその解析法」第1章, 京極好正, 月原富武編集, 共立出版株式会社出版(1997) .
- [3] R. Neutze, R. Wouts, D. Spoel, E. Weckert, and J. Hajdu, *Nature*, **406**, 752 (2000).
- [4] 永園充, 田中隆次, 矢橋牧名, 田中均, 石川哲也, 「シリーズ 短波長自由電子レーザーによる原子分子光物理」第1回, 原子衝突学会誌「しょうとつ」第8巻6号(2011)
(http://www.atomiccollision.jp/infomation/infomation02_2.html)
- [5] S.P.Hau-Riege, R.London, H.N. Chapman, A. Szoke, and N. Timneanu, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 198302 (2007).
- [6] Z.Jurek, G.Faigel, and M.Tegze, 2004 *Eur. Phys. J. D*, **29**, 217 (2004).
- [7] Z. Jurek and G. Faigel, *Eur. Phys. J. D*, **50**, 35 (2008).
- [8] K. Moribayashi, *Phys. Rev.A*, **80** 025403 (2009).
- [9] K.Moribaayshi, *J. Phys.B*, **43**, 165602 (2010).
- [10] S.P. Hau-Riege, R. London, and A. Szoke, *Phys.Rev.E*, **69**, 051906 (2004).
- [11] K. Moribayashi, *J. Phys. B*, **41** 085602 (2008).
- [12] K. Moribayashi and T. Kai, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **163**, 012097 (2009).
- [13] T. Kai and K. Moribayashi, *J.Phys: Conf. Ser.*, **163**, 012035 (2009).
- [14] T. Kai, *Phys. Rev. A*, **81**, 023201 (2010).
- [15] B. Ziaja, A.R. B. de Castro, E. Weckert, and T. Möller, *Eur. Phys. J. D*, **40**, 465 (2006).
- [16] T.Nakamura, Y.Fukuda, and Y.Kishimoto, *Phys. Rev. A*, **80**, 053202 (2009).
- [17] V.O.Klein and Y. Nishina, *Z. Phys.* **52**, 853 (1929).
- [18] G.R. Blumenthal and R.J. Gould, *Rev.Mod.Phys.* **42**, 237 (1970).
- [19] B.L. Henke, E.M. Gullikson, and J.C.Davis, *Atomic data & Nuc. Data Tables* **54**, 181 (1993).

衝突論ノート

X．衝突論クイズ

- じっくり考える入門編 -

島村 勲

理化学研究所原子物理研究室

shimamura@ribf.riken.jp

平成 24 年 6 月 15 日 原稿受付

いままで衝突論や量子論の基礎事項の中から毎回何らかのテーマを選び、シニアな研究者でもうっかり見過ごしたり誤解するかも知れないと思われることも含め、私なりのタッチで解説してきました。今回は少し趣向を変え、衝突論入門編の知識と考察を再確認するために、雑多な小項目を集めてみました。

まず、いくつかの主張を述べます。その文章が完全に正しいか、部分的に誤りを含むか、含むなら何が悪いかわかり、じっくりとお考えください。正解ならびにそれに関連する補足を、以下の主張と共通番号の各節で解説いたします。

1．中心力ポテンシャル $V(r)$ による弾性散乱のエネルギーを下げていくと s 波だけで断面積が殆ど決まるようになり、角分布は必ずほぼ球対称になる。例えば、 s 波の位相のずれが 20° 、 p 波は 2° で d 波以上が無視できれば、事実上、 s 波だけで断面積が決まり、ほぼ等方散乱になる。

2．静止ヘリウム原子にキセノンイオンをぶつけて実験室系微分断面積 $q(\theta_L)$ を決め、それから運動量移行断面積 $\int (1 - \cos \theta_L) q(\theta_L) d\omega_L$ を求めるとき $\theta_L \simeq 180^\circ$ の $q(\theta_L)$ に最も重みがかかる。

3．静止水素原子 $H(1s)$ に運動エネルギー 15eV の α 粒子をぶつければある確率で電離できる。

4．原子-2原子分子反応 $A+BC$ で、3原子が一直線上を進む共線衝突 $A \text{---} B \text{---} C$ と、原子 A が分子軸に直角に BC の中央めがけて入射する T 字型衝突の断面積を比較すると反応の起こり易さへの立体効果を研究できる。

5．どんなシュレーディンガー方程式の解も、波動関数は滑らかであるという物理的要請のもとに解かなければならない。

6．ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ による質量 m の粒子の散乱を表すシュレーディンガー方程式

$$[-(\hbar^2/2m)\Delta + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

の解で $V(\mathbf{r})$ が無視できるくらい遠方で漸近形 $\psi \sim C[e^{ikz} + f(\theta)e^{ikr}/r]$ をもつものが表す系の粒子数は係数 C で調節できる (k は波数)。

7．入射平面波 e^{ikz} も散乱球面波 $f(\theta)e^{ikr}/r$ もシュレーディンガー方程式 (1) で $V(\mathbf{r})$ をゼロとし、 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ とした自由運動方程式の解である。

8．クーロンポテンシャルによる粒子の散乱では入射波はポテンシャルの影響を受けずに前方に進む波であるが、散乱球面波はいくら遠方でも長距離相互作用の影響を受けるため、その位相が kr だけ (e^{ikr}) では済まなくなる。

9．散乱角ゼロでの弾性散乱微分断面積は、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ があるときの角度ゼロ方向のビーム強度から $V(\mathbf{r})$ がないときの強度を差し引けば、思考実験として原理的には決められる。

10．ある衝突実験で標的のほぼ縮退している準位 A_1, A_2 (等量分布しているとする) からほぼ縮退している準位 B_1, B_2, B_3 に近縮退準位を区別できずに励起して断面積 $\sigma(A \rightarrow B)$ を測ったとする。その結果を理論断面積 $\sigma(A_i \rightarrow B_j)$ と比べるには、後者を $i = 1, 2, j = 1, 2, 3$ につき加え合わせる必要がある。

1 弱い散乱は無視してよいか？

確かに多くの場合、低いエネルギー E では s 波以外の散乱は弱くなり、殆ど球対称な角分布を示します。ただ、「必ず」球対称と言われれば、ブー、×です。重要な例外を忘れては困ります。大きな r で $V(r)$ がクーロン型 ($\propto r^{-1}$) や双極子型 ($\propto r^{-2}$) ならいくら低エネルギーでも微分断面は前方発散し [1]、決して球対称になりません。

古典論の衝突パラメータ (impact parameter, 衝突径数) b と量子論の角運動量量子数 l は波数 k を通じ、 $l+1/2 \simeq kb$ と対応します (文献 [1] 付録 A)。 $V(r)$ の半径が a ならば $b < a$ のときにだけ古典散乱が起こるので、量子論で散乱が起こる部分波は $l+1/2 \simeq ka$ までと推測されます。

量子論では古典転回点 (最近接距離) r_0 が a より大きな部分波はポテンシャル領域に殆ど入れず、散乱されません。 $r > a$ には遠心力ポテンシャル $V_c(r) \simeq (\hbar^2/2m)(l+1/2)^2/r^2$ しか無く、最近接条件は $V_c(r_0) = E = (\hbar^2/2m)k^2$ 、つまり $l+1/2 \simeq kr_0$ です。散乱条件 $r_0 < a$ によれば散乱部分波は推測通り $l+1/2 \simeq ka$ までで (遠心力のない s 波は当然ポテンシャル領域に入れます)、低エネルギーでは低い部分波しか散乱されないと分かります。

しかし、この議論にはポテンシャルが何らかの有効半径 a をもつという前提条件が必須です。あまりに長距離型のポテンシャルでは有効な a の値が決められず、低エネルギーでも遠方衝突、高い部分波の散乱が無視できません。

なお、ある種の同種粒子同士の衝突では対称性から s 波衝突・等方散乱が禁止されます [2]。

実は、ふつうのポテンシャル散乱でも要注意です。 s 波の位相のずれが $\delta_0 = 20^\circ$ 、 p 波がわずかに $\delta_1 = 2^\circ$ 、 d 波以上は無視できる問題の例を扱います。積分断面 σ は s 波成分と p 波成分の和で、 $\sin^2 \delta_0 + 3 \sin^2 \delta_1 = 0.117 + 0.0037$ に比例します。 p 波による第 2 項は全体の 3% にしか過ぎません。確かに s 波だけ考えれば十分です。

微分断面はどうでしょう。 s 波散乱振幅 f_0 は定数、 p 波散乱振幅 $f_1(\theta)$ は $\cos \theta$ に比例し、

$$\begin{aligned} d\sigma/d\omega &= |f_0 + f_1(\theta)|^2 \\ &\propto \sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \cos \theta \\ &\quad + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \end{aligned} \quad (2)$$

と書けます。定数の第 1 項は s 波散乱、 $\cos^2 \theta$ に

比例する第 3 項は p 波散乱によるもの、 $\cos \theta$ に比例する第 2 項が s 波と p 波の干渉項です。

図 1 に s 波の項を 1 とした相対微分断面積として s 波成分 (もちろんどの角度でも 1)、 p 波成分、そして干渉項も含めた全体を示してあります。 p 波成分は相対的に確かにだいぶ小さいですが、干渉効果の何と大きいことか！ほんのわずかな p 波散乱が s 波の等方分布をこんなにも変えてしまうのです。マイノリティ、侮るべからずです。

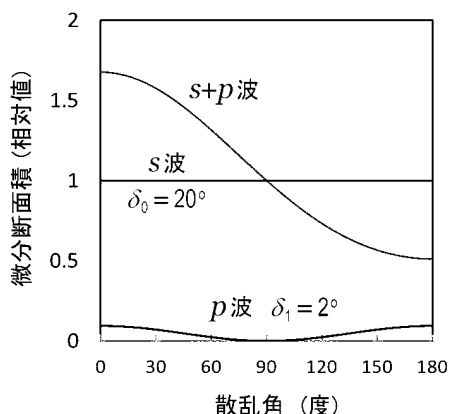


図 1. s 波の位相のずれが $\delta_0 = 20^\circ$ 、 p 波が $\delta_1 = 2^\circ$ 、 d 波以上がゼロのときの微分断面積の球対称 s 波微分断面積に対する相対値。 s 波のみ、 p 波のみ、両方入れたときの 3 種を示す。

強い共鳴散乱が起こるとき、それが s 波共鳴ならほぼ等方的角分布を示します。 p 波共鳴なら $\cos^2 \theta$ に比例して $\sim 90^\circ$ 方向にディップをもつ左右対称に近い角分布、 d 波共鳴なら $(3 \cos^2 \theta - 1)^2$ に比例して $\sim (90 \pm 35)^\circ$ 方向に 2 つのディップをもつ左右対称に近い角分布になります。これを利用して、測定された共鳴微分断面積の形からしばしば共鳴の対称性を推論します。しかし、非共鳴成分との干渉で角分布の形がかなり変わるかも知れず、十分注意を払う必要があります。

2 あり得ない散乱角

主張 2 も、ブー、です。イオン衝突の研究室の人なら問題ないでしょうが、電子衝突の研究室ではピンポンピンポンと叫ぶ学生さんもいるかも知れません。これは実験室系の散乱角 θ_L と重心系の散乱角 θ の関係、弾性散乱なら [3-5]

$$\tan \theta_L = \sin \theta / (\gamma^{-1} + \cos \theta), \quad \gamma = m_T / m_P \quad (3)$$

の問題です。ここで入射粒子、標的の質量を m_P 、 m_T としました。 $m_P > m_T$ なら重心系の θ がゼ

口から $\cos^{-1}(-\gamma)$ まで増えると実験室系では θ_L がゼロから $\theta_L^{\max} = \sin^{-1}\gamma$ まで増えますが、 θ がさらに 180° まで増えると θ_L は逆に θ_L^{\max} からゼロまで減っていきます。この最大散乱角 θ_L^{\max} では重心系微分断面積から実験室系に変換する係数が発散し、実験室系微分断面積が無限大になります。ヘリウムとキセノンの質量から、主張 2 の問題では θ_L^{\max} は $4/131$ ラジアン $\simeq 1.7^\circ$ で、実験室系ではそれ以上の角度で散乱されることはありませんから、主張 2 はもちろん \times です。

実は、移動管法で測られる電場方向のイオン移動度は重心系での運動量移行断面積で決まります [6]。では、重心系でなら 180° 近辺で最も重みが付くのでしょうか。ちょっと待ってください。重みは $(1 - \cos\theta)d\omega = (1 - \cos\theta)\sin\theta d\theta d\phi$ です。これが極大値を取るのは $\cos\theta = -1/2$ 、つまり (180° でなく) $\theta = 120^\circ$ で最も重みが付きます。

電子衝突なら実験室系と重心系は殆ど同じで、実験室系の運動量移行断面積でも散乱角 120° 付近での微分断面積に最も重みがかかります。

3 水素原子は何 eV で電離できる？

主張 3 も、電子衝突系の学生さんだとうっかりするかも知れませんが、正解は \times ですね。相対運動エネルギーは入射粒子や標的の内部状態へ移せませんが、孤立衝突系の重心運動エネルギーは不変です。静止している質量 m_T の標的に質量 m_P の粒子が運動エネルギー E_L で入射するとき、相対運動のエネルギー E は $E_L m_T / (m_P + m_T)$ となります [4]。これが水素原子 H(1s) の電離エネルギー 13.6 eV を上回るような E_L が必要です。 α 粒子と水素原子なら m_T/m_P は $1/4$ ですから、 5×13.6 eV = 68 eV 以上の α 粒子だけが静止水素原子 H(1s) を電離できるのです。

6.8 eV の束縛エネルギーをもつ静止ポジトロニウム(電子-陽電子系)を壊すには、 ^{238}U イオンなら ~ 1.5 MeV ものエネルギーを要します。

4 共線衝突に現実的意味があるか？

主張 4 を と答えてしまった人はいませんか？共線衝突も T 字型衝突も、衝突パラメータ b がゼロのときにしか起こりませんよ。一つの b でしか起こらない過程に断面積は定義できません。

反応確率 $P(b=0)$ なら定義できます。では共線衝突と T 字型衝突の $P(b=0)$ を比べれば反応速度への立体効果が分かるでしょうか。これらは単純で頻繁に議論され、まるで現実性のある衝突モデルのような錯覚を与えがちです。でも、まず注意すべきは、連続変数の特定の一つの値 $b=0$ が実現される確率はゼロということです。

さらに、分子 AB が軸対称なら共線からずれた衝突 $b > 0$ にも反応確率 $P(b)$ が考えられます。このとき、幅 $b \sim b + \delta b$ の間の衝突は断面積 σ のうち $\delta\sigma = 2\pi b P(b) \delta b$ だけを生みます [1]。この式から、 b が小さな、共線に近い衝突は現実の現象の断面積には殆ど無関係と分かります。現実の現象を支配しているのは共線衝突の反応確率 $P(b=0)$ ではなく、共線からずれていくときに $b P(b)$ がゼロからだんだん増えていく有様なのです。

一方、垂直衝突は軸対称ではないので議論が少し変わりますが、ここではこれ以上述べません。

5 波動関数は必ず滑らかか？

主張 5 は散乱理論というより量子力学入門で、答は「ブー」です。自然は滑らかで、それを常に物理的に要請すべきだという信仰を確かによく耳にします。でも、波動関数が滑らかである、つまり値も勾配もあらゆる場所で連続なのは本当はどこから来るのか、振り返ってみましょう。

波動関数が滑らかでない一つの例が剛体球散乱です。 $r < a$ で ∞ 、 $r > a$ でゼロというポテンシャルで、例えば s 波の波動関数は $r < a$ でベタッとゼロ、 $r > a$ では $\sin k(r-a)$ に比例します。 $r = a$ で連続ではありますが、カクンと曲がります。

剛体壁に囲まれた領域 $-a < x < a$ に束縛された波動関数 $\psi(x)$ は $x < -a$ 、 $a < x$ でゼロで、 $x = \pm a$ での $\psi(x)$ の連続性から $\psi(\pm a) = 0$ が導けます。そこで全領域 $-\infty < x < \infty$ での問題が $\psi(\pm a) = 0$ を境界条件とする有限領域 $-a \leq x \leq a$ での境界値問題に帰着します [7]。全領域の $\psi(x)$ は $x = \pm a$ で滑らかではなくカクンと曲がります。これをまず有限壁の問題として $-\infty < x < \infty$ で解いてから壁を無限に高くしても同じことです。

理論屋がときに使うデルタ関数ポテンシャル $V(r) = C\delta(r-r_0)$ のもとでは、 $r = r_0$ で $\psi'(r)$ が突然ジャンプし、 $\psi(r)$ は滑らかではありません。

簡単な1次元シュレーディンガー方程式 $-(\hbar^2/2m)\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$ を例に取ります。仮に連続な $\psi(x)$ に滑らかでない点 x があれば、そこで1階微分 $\psi'(x)$ が跳び、2階微分 $\psi''(x)$ は有限な定数値に決まらず、 $V(x)$ が有限 ($|V(x)|<\infty$) ならシュレーディンガー方程式は満たされません。逆に、 $V(x)$ がどこでも有限ならある点 x_0 で $\psi(x_0)$ と $\psi'(x_0)$ から出発してシュレーディンガー方程式を全 x 領域に亘り連続的に積分できます。 $\psi(x)$ の滑らかさは物理的要請ではなく、 $V(x)$ の有限性を条件にシュレーディンガー方程式が保証する数学的帰結なのです。

しかし、上に挙げた具体的な反例ではいずれもどこかでポテンシャルが無限大になり、数学的帰結は滑らかでない波動関数です。そんな変なポテンシャル、自然界にはないですよ、自然は滑らかです、と言われるかも知れません。しかし、物理にはモデルという人間の創造物が付きものです。それにより自然の理解が進みます。そのモデルが例え滑らかでなくても、それを理論的に矛盾なく取り扱いさえすれば問題ありません。

入門書 [7] では、§6.3 で剛体壁に囲まれた波動関数を求めるときは壁で連続との条件だけを使っています。ところが、§7.2 で井戸型ポテンシャルを扱うときには理由も述べずに「解が領域の境界で滑らかにつながるようにする」と宣言しています。うーん、ちょっと説明不足なような...

6 何粒子系を表すか?

「水素原子にはいくつ電子があるんですか?」

ある私大での原子物理の講義で1電子系の章のもとに話していたとき、こう聞かれました。

「だって、水素の波動関数は電子があっちにもこっちにもいることを表しているんですよ?」

私は嬉しくなりました。言われたことを盲目的に鵜呑みにせず、自分なりに頭の中で考え、生じた疑問を直ちにぶつけてきてくれたからです。

「電子はあっちにもある確率で見出し得るし、こっちにもある確率で見出し得て、その確率を全部寄せ集めると電子1個分になるんですよ。」

「では水素原子の波動関数に大きな係数をかければ、たくさん電子がある水素原子になりますか?」とさらに聞かれればもっと嬉しかったのですが...多粒子系の勉強前になら、係数で系

の電子数を調節できると思うかも知れませんが、実際には、例えば2電子系は両電子の座標 r_1, r_2 (とスピン座標) により表す必要がありますね。

もう、主張6が「ブー」なのは明白ですね。3次元座標1個しか含まないシュレーディンガー方程式(1)は1粒子系しか表せませんし、1粒子波動関数の係数を変えようが、やはり1粒子波動関数です。係数 C によってこの波動関数が表すフラックスは変えられます。でも、ある定常流全体の粒子数などという概念はありませんね。

7 自由運動と散乱球面波

$\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ ですから、シュレーディンガー方程式(1)で $V(\mathbf{r})$ をゼロとし、 $E = \hbar^2 k^2/2m$ とした自由粒子の波動方程式を平面波 e^{ikz} が満たすことは簡単な計算で示せます。

極座標表示によれば、 $\Delta = r^{-2}\partial(r^2\partial/\partial r)/\partial r - \hat{L}^2/(\hbar^2 r^2)$ と書けます。角運動量演算子 \hat{L} を含む第2項は遠心力ポテンシャルを生む角運動エネルギー演算子です。 r が大きい遠方ではこの項が無視でき、自由粒子の動径運動は s 波自由運動と同じく確かに独立解 $e^{\pm ikr}/r$ をもちます。しかし、小さな r ではこの項が無視できず、球面波 $f(\theta)e^{ikr}/r$ は自由運動方程式を満たしません。主張7は半分間違いです。

8 全空間を覆うクーロン相互作用

主張8は、後半は ですが、前半が×です。クーロン散乱は得体の知れない変わり者です。

いま、宇宙にたった一人、正電荷の陽子さんがいるとします。そこから何億光年も先から突然、彼女めがけて自由電子の平行ビームが飛び出します。でも、飛び出た瞬間、彼女の色香に惑い、自由を失います。いかに離れようとも、この世に陽子さんがいる限り、電荷をもつ何者のビームも平面波でいようなど所詮かなわぬ夢なのです。

クーロン散乱の説明にはいつも難しい特殊関数が使われ、うんざりするでしょう。ここでは、事情を初等的に説明するため、簡単な関数

$$u(r) = \sin f(r) = \sin [kr - (\alpha/2k) \log kr + \eta] \quad (4)$$

を考えます。 α, η は定数です。易しい微分演算で $u''(r) = f'' \cos f - (f')^2 \sin f$ 、また、大きな r ではこの右辺が $-[k^2 - \alpha/r + \text{高次項}]u(r)$ と書け

ることが示せます。つまり、 $u(r)$ は大きな r では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\alpha}{r} + \text{高次項} \right] u(r) = 0 \quad (5)$$

を満たします。これは大きな r でポテンシャル $V(r)$ がクーロン型 $\sim (\hbar^2/2m)\alpha/r$ を取るときの動径シュレーディンガー方程式を表します。

2階微分方程式ですから、もう一つ独立解があります。 η は自由に選べますから、例えば位相を $\pi/2$ だけずらし、 $\cos f(r)$ を独立解として採用できます。ですから、いずれにせよ、式(5)の解は大きな r では必ず式(4)の形に書けます。

式(4)、(5)が意味することは、 α が完全にゼロでない限り、つまりポテンシャルの漸近形がクーロン型るとき動径波動関数の漸近形の位相に α に比例する r の対数項が含まれること、いかに遠くへ行こうとも波動関数の位相にクーロン場の影響が必ず残ってしまうことです。入射波も散乱波も、部分波分解すれば動径関数へのこの影響が宇宙の彼方まで消えないと分かります。

厳密な理論によればクーロン散乱波動関数は

$$\exp[ikz + i(\alpha/2k) \log\{2kr \sin^2(\theta/2)\}] + f_c(\theta) \exp[ikr - i(\alpha/2k) \log 2kr]/r \quad (6)$$

という漸近形を取ります [4, 8]。上の部分波の議論で分かったとおり、事実、入射波(第1項)でも散乱球面波(第2項)でもその位相にいかにも遠方でも消えないクーロン場 α の影響が明白です。しかも、入射波の進行方向が z 方向だけでなく、クーロン場により曲げられた波も含んでいます。

ふつうの散乱理論では、自由運動を表す入射波に比べて新たにポテンシャルにより作られた漸近波動関数が散乱球面波です。ところがクーロン散乱では、ポテンシャル効果の一部が入射波の位相にも押し込められています。空間内どこでも消えることのない効果なので、入射波といえども免れ得ません。ただ、漸近形(6)の2項とも、位相に現れる対数項がフラックスに及ぼす影響は r に反比例して遠方で弱まり、そのため、 $|f_c(\theta)|^2$ を微分断面積と考えて構わないのです。

9 測れないゼロ度弾性散乱断面積

主張9が誤りであることはすでに本シリーズで解説しましたが [1, 9]、ここで再確認しておきます。弾性散乱微分断面積は散乱振幅 $f(\theta)$ によ

り $|f(\theta)|^2$ と表せ、漸近領域にある大きな球面から出ていく散乱球面波の全フラックス F_{sc} の成分から決まります。 F_{sc} を前方(ゼロ度近辺)散乱フラックス $F_{sc}^{(0)}$ とそれ以外の総フラックス $F_{sc}^{(>0)}$ に別けます： $F_{sc} = F_{sc}^{(0)} + F_{sc}^{(>0)}$ 。前方には入射平面波と前方散乱球面波が出てきます。その重ね合せが表すフラックスは $F^{(0)} = F_{inc} + F_{sc}^{(0)} + F_{int}$ と3成分から成ります。第1項は入射波だけ、第2項は散乱波だけによるフラックス、最後の項が二つの波の干渉によるフラックスです。

主張9は前方散乱断面積を決めるフラックス $F_{sc}^{(0)}$ が $F^{(0)} - F_{inc}$ に等しい、つまり $F_{int} = 0$ という主張です。しかし、大きな球面から出ていくフラックスの保存則により、平面波フラックス F_{inc} を除くすべてのフラックスの和はゼロで、 $0 = F^{(0)} + F_{sc}^{(>0)} - F_{inc} = F_{sc} + F_{int}$ です。干渉項 F_{int} は積分断面積を決める散乱総フラックス F_{sc} に負号を付けたものであり、散乱が起こる限り必ず負で、ゼロにはならず、主張9は誤りです。

上記フラックス保存則の最初の等号 $0 = \dots$ は $F^{(0)} = F_{inc} - F_{sc}^{(>0)}$ を意味し、これは前方以外に散乱されて入射フラックスから削り取られた残りが前方に出ること、入射フラックスに前方散乱フラックスが加わって前方に出るのではないのごく当り前の事実を表します。フラックス保存則が全散乱を前方散乱だけから決めてしまうことは、積分断面積がゼロ度散乱振幅の虚部に比例するという光学定理にも現れています [10]。

本稿では弾性散乱だけ起こるポテンシャル散乱を考えました。また、本当は大きな角度方向にも干渉フラックスは出ますが、その効果は事実上ゼロと見なせるので無視しました [1]。これが無視できない小角範囲のことを上で「ゼロ度近辺」と表現し、そこへ出てくる散乱波を前方散乱波として別扱いしたわけです。

以上のように、前方散乱フラックス $F_{sc}^{(0)}$ は、したがってゼロ度微分断面積は、思考実験ですら決して直接測定できない空想の産物です。干渉が無視できる条件で定義された断面積を、干渉のある領域へむりやり数学的に外挿しただけの代物です。干渉領域の角度範囲は $\theta < \Delta\theta \sim (kr)^{-1/2}$ と遠方で狭まりますが [1]、どんな大きな r に対しても $\theta = 0$ は必ず干渉領域に入っており、ゼロ度微分断面積は宇宙の果てでも測れません。

10 縮退状態を識別しない断面積

終状態 B_1, B_2, B_3 を区別せずに全部捕えたときの断面積はもちろん個々の断面積 $\sigma(A_i \rightarrow B_j)$ の $j = 1, 2, 3$ についての和になります。しかし、始状態については主張 10 は「ブー」です。

簡単な例をお話ししましょう。いま、標的がすべて同じ始状態 A にあるとします。そのうち半分が占める状態に A_1 、残りの半分が占める状態に A_2 という名前を付けます。名前は違って同じ状態です。すると、それぞれの半分についての断面積間に等式 $\sigma(A_1 \rightarrow B_j) = \sigma(A_2 \rightarrow B_j) = \sigma(A \rightarrow B_j)$ が成り立ちます。したがって、始状態 A_1, A_2 について断面積を加え合わせれば本来の断面積の 2 倍になってしまいます。3 分割して加え合わせれば 3 倍になってしまいます。明らかに、始状態について加え合わせるはいけません。状態 A_1, A_2 の標的が半分ずつ用意されているのなら、断面積の平均を取るべきです。

始状態 A_i ($i = 1, 2, \dots$) に P_i ずつ分布しているならばその重みをつけて平均すべきです：
$$\sigma(A \rightarrow B) = \sum_{ij} (P_i/P) \sigma(A_i \rightarrow B_j) \quad (P = \sum P_i)$$
両辺に衝突速度をかけて速度分布に亘り平均すれば、反応速度定数 κ につき $\kappa(A \rightarrow B) = \sum_{ij} (P_i/P) \kappa(A_i \rightarrow B_j)$ が導けます [11]。

11 終わりに

いかがでしたか？ 一見、 のようで、正解は全部 \times 。ただ、 \times 自体より各節の考察の方が重要です。低い点数を恥じることはありません。何を隠そう、皆さんのボス級の方々と議論していて、あるいは学会討論などを聞いて、ン？ と思って仕込んだネタも入っています。基礎知識では、皆さんとボスとはきっと五十歩百歩です。

ひっかけ問題と思われそうなものもあります。でも、例外的なケースにまで機械的に「常識」をあてはめるなど、いいかげんな投稿論文を読むにつけ、綿密な思考、例外に敏感な注意深さをふだんから訓練しておく必要性を痛感します。何かを学んだとき、少しひねくれ者になって、それが当てはまらない例を考えてみるのも一案です。

10 回に亘ってあだこうだと書いてきました。拾い読み、伝え聞きで眼や耳から入る断片的な知識を、そういうものなんだと無批判に頭に入

れずに、議論の前提条件や論理の筋道に気を配りながら自分の頭でその妥当性をじっくり考えることの重要性はお伝えできたかと思います。

シリーズ「衝突論ノート」もそろそろ年貢の納め時です。10 回分の再編集版を近いうちに皆さんにお届けします。全体を一貫した読み物とし、前後を参照し合い、重複を必要最小限に止め、誤解を招く可能性に気付いたところは書き直し、参考文献もより使い易く工夫するつもりです。

質問、コメント、批判などをいただくことは大歓迎です、初歩的なこと、些細なことでも、疑問はぜひ議論によって解決させてください。比較的注意深い方だと自身、認ずる私も神ならぬ身、10 回も書けば書き間違い、うっかりミスなどいくつかはあろうかと危惧しています。ちなみに、ここで神なら間違いを犯さないとも、そもそも神の存否すら断言していないことにご注意を。物理を志す人ならば、論理的に、論理的に...

- [1] 島村 勲, しょうとつ, 第 7 巻第 6 号 (2010).
- [2] 島村 勲, しょうとつ, 第 8 巻第 2 号 (2011).
- [3] 島村 勲, しょうとつ, 第 8 巻第 3 号 (2011).
- [4] 高柳和夫, 電子・原子・分子の衝突 (培風館, 1972; 改訂版 1996).
- [5] 砂川重信, 散乱の量子論 (岩波書店, 1977).
- [6] E. A. Mason and E. W. McDaniel, Transport Properties of Ions in Gases (Wiley, New York, 1988).
- [7] 江沢 洋, 量子力学 I (裳華房, 2002).
- [8] B. H. Bransden and C. J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules (Pearson Education, Harlow, 1983, 2nd ed. 2003) (ペーパーバック: Longman, Prentice Hall).
- [9] 島村 勲, しょうとつ, 第 8 巻第 1 号 (2011).
- [10] 島村 勲, しょうとつ, 第 7 巻第 5 号 (2010).
- [11] R. D. Levine and R. B. Bernstein, 分子衝突と化学反応 [井上鋒朋 訳] (東大出版会, 1976).

おまけ

過剰サービス エッチ バー
ネコの歯科医は 歯見るとニャン
Mott-Massey 持ってまっせー
うん、同僚の事情でね (p^2)
半径の比は 5 : 9 (hard sphere)

強い短距離斥力相関の下での弱結合少数多体系 — エフィモフ物理と ^4He 原子の 3,4 クラスタ系 — (前編)

上村正康, 肥山詠美子

理化学研究所 仁科センター ストレンジネス核物理研究室

mkamimura@riken.jp, hiyama@riken.jp

平成 24 年 5 月 14 日原稿受付

^4He 原子のクラスタは「強い短距離斥力相関の下での弱結合少数多体系」の基本的典型例である。その 3 体系 (束縛状態 2 個) は エフィモフ状態となる。その理論研究は エフィモフ物理や冷却気体原子 (共鳴的相互作用系) の物理の基礎研究に重要な知見を提供してきた。最近, 4 体系のエフィモフ物理も注目されている。しかし, 最も基本となる ^4He 原子の 4 体系, 特に 励起状態の計算は困難であった。筆者等は, 自身の「少数多体系のガウス関数展開法」を用いて その計算に成功し, ^4He 原子の 3,4 体系の性質を分析した。その性質は, 共鳴的相互作用のゆえに, 原子核における 3,4 体系とも類似点がある。本稿では, 前後編に分けて, それらの研究と計算法を解説する。

1. はじめに

事の発端 22 年前の昔, 筆者の 1 人 (上村) が京大基研の研究会「有限多体系 (原子核, 原子・分子, 超微粒子) の集団運動—その共通性と異質性—」に出席し, 市村淳氏 (宇宙研) の講演「希ガスクラスタと原子核との共通性」(短距離の剛体型斥力と長距離の引力の下での弱結合少数多体系としての共通性の分析) [1] を聴いて, 核物理研究者として 新鮮で示唆に富んだ刺激 (煽動?) を受けた。以後, 特に「 ^4He 原子の弱結合 3 体・4 体系 (trimer, tetramer) の基底・励起状態の研究」を念頭に置いていた (当時 tetramer の信頼しうる計算は無かった)。

後述するように, 1988 年から筆者等は 少数多体系の新しい精密計算法 (ガウス関数展開法, Gaussian Expansion Method for few-body systems [2-4], GEM と略す) を提唱・開発していたので, いずれ上記の状態を解き, ^4He 原子核 (α 粒子) の 3 体・4 体系 (^{12}C 核, ^{16}O 核) や 3 核子・4 核子系 (triton, α 粒子) の基底・励起状態との共通性を調べてみようと考えていた。

エフィモフ物理 その後, 筆者等が注目していたヘリウム原子 3 体系は, エフィモフ状態の候補として新たな角度から光を浴びていた (「しようとうつ」に数納広哉氏の記事 [5,6] がある。以下でこれを参照している)。

1970 年に, ロシアの核物理研究者エフィモフは, 量子 3 体系には 次の (不思議な) 性質がある, と唱えた [7]。 「2 粒子間の s 波散乱長が無限大になるような短距離相互作用 (共鳴的相互作用と呼ばれる) をしている 3 粒子系には, 束縛状態が一定の規則で 無限個現れる」。この状態をエフィモフ状態と言い, このような効果をエフィモフ効果と呼ぶ。散乱長が無限大とは, 2 体束縛状態を作るかどうかのぎりぎりのケースのことである (より深い束縛状態があってもよいが, その場合は, その上にできる新たな束縛状態に関することである)。

エフィモフ効果は, 2 体短距離相互作用が上記条件を満たす限り, 原子系, 核子系, ハドロン系など (原理的には) どこでも起こるはずである。この普遍性 (universality) が, エフィモフ

効果が興味を集める 1つの理由である。

ヘリウム原子 3 体系 現実世界の相互作用は散乱長が無限大ではないので、3 体束縛状態が無限個現れることにはならないが、それに近い性質をもつ候補として、エフィモフは 3 核子系の基底状態 (^3H 核) や ^4He 原子核 (α 粒子) の 3 体系の励起状態 (^{12}C 核の second 0^+) をあげてはいた。しかし、これに関する研究の進展はなかった。

むしろ、ヘリウム原子 3 体系 (trimer) の束縛状態 (2 個だけある) がエフィモフ状態の候補として脚光を浴び始めた。それは、ヘリウム原子間の相互作用がエフィモフ効果の理想条件に近いからである — 即ち、理論計算によれば、ポテンシャルの散乱長 ($\sim 100\text{\AA}$) がレンジ ($\sim 5\text{\AA}$) より非常に大きく、2 体系 (dimer) の束縛エネルギー ($\sim 1\text{ mK}$) が非常に小さい (自然界で最も浅い 2 体基底状態と言われる)。このような新しい問題意識の下に、ヘリウム原子 3 体系の理論研究は、1980 年代後半から約 20 年間で大いに進展した (文献は筆者等の論文 [8] で挙げた、その中の [25–39])。ヘリウム原子クラスターの実験も精力的に行われ、まず、文献 [9] で dimer の束縛エネルギーが 1 mK の order であることが観測され、その後、文献 [10, 11, 12, 13] などを経て、最新 (2000 年) の dimer の観測 [14] では、束縛エネルギー $1.1_{-0.2}^{+0.3}\text{ mK}$ 、粒子間平均距離 $\langle r_{12} \rangle = 52 \pm 4\text{\AA}$ となっている。エフィモフ状態の候補の trimer については、文献 [10, 11, 13] などですべてその存在が観測されたが、2005 年に文献 [15] で、2 粒子間の平均距離が $\langle r_{ij} \rangle = 11_{-5}^{+4}\text{\AA}$ と測定された。エネルギーの測定は未だ無い。

実験的には、エフィモフ状態は、2006 年以後、Cs, K, Li などの超冷却気体原子で観測されて来た (文献 10 件を、筆者等の論文 [8] で挙げた、その中の [15–24])。これらの原子系では、実験技術が進歩し、「外部磁場を微調整し、threshold 近傍の Feshbach 共鳴を利用し、相互作用に非常に大きな散乱長を自在に持たせる」ことが可能になったからである。 ^4He 原子系では、そのような微調整はできないが、その 3 体系の研究は、

エフィモフ物理や冷却気体原子の物理に、重要な基本的知見を提供し続けて来た。

チャンス到来 2009 年、GEM を ^4He 原子の 3 体系に適用し、エフィモフ物理や冷却原子の物理に貢献する機会が訪れた。筆者の 1 人の肥山が、上田正仁氏 (東大理) の研究室のセミナーに呼ばれて、GEM とその応用について講演したことが契機となり、肥山と同研究室との共同研究 [16] が行われた。強い短距離斥力コアをもつ realistic な ^4He - ^4He potential を用いて、 ^4He trimer のエフィモフ スペクトラムの計算を担当し、 ^4He trimer の性質とその universality から、冷却原子気体の実験結果の重要ポイントの 1つが理解可能であることを示した。

この研究の過程で、次のことを知った — 冷却原子の物理において、universality やエフィモフ状態の研究は、3 体系のみでなく最近では 4 体系についても盛んになって来ているが、しかし、最も基本的な ^4He tetramer について、励起状態の信頼できる 4 体計算が未だ成されていない (強い短距離斥力コアの下での非常に浅い束縛励起状態を非断熱的に解く、という量子力学的 4 体問題の難しさによる)。

密かな狙い そこで、筆者等は早速 GEM を用いて ^4He tetramer の計算を行って上記の難題を解決し、様々な結果を得て論文を 2 編発表した [8, 17]。この 2 編は、我々「精密計算屋」の日頃の密かな狙い、即ち「Schrödinger 方程式を“精密に解く”ことによって初めて得られる新たな知見を手に入れたい。次いで、その結果を再現するような簡単で予言力ある model を構築したい」をある程度実現した (?) 研究である。

本稿では、その 2 つの論文の内容を中心に解説する。今回の「前編」では、計算法 GEM を例題付きで紹介 (§2)、ヘリウム 3 体系 trimer に適用した結果を紹介 (§3)。エフィモフ物理や冷却原子の物理との関連、ヘリウム 4 体系 tetramer への適用などを「後編」で紹介する。

2. 少数多体系のガウス関数展開法 (GEM)

GEMの提唱 1988年に上村は、ミュオン触媒核融合 [18, 19] の理論研究において、ミュオン分子イオン ($d\mu^-$, $d\text{He}\mu^-$ など) の構造やミュオン原子衝突 [$(d\mu^-)_{1s} + t \rightarrow (t\mu^-)_{1s} + d + 48\text{eV}$ など] を分析する3体系の計算方法 GEM を提唱し、実行した [2, 20]. これは、非断熱 *ab initio* 変分法の一つで、3体系のヤコビ座標系3つを総て使って波動関数 (散乱波の場合は内部領域成分) を記述し、それを展開する基底関数に、等比数列のレンジをもつガウス関数を用いる方法である。当時 懸案だった $d\mu^-$ 分子の非常に浅い励起状態 ($J = v = 1$) の全エネルギーを7桁の精度で高速に算出することができた。

この方法は、亀山 *et al.* によって、核力 (強い短距離斥力, テンサー力, スピン軌道力などをもつ) で相互作用する3核子系の束縛状態 (^3H 核, ^3He 核) に拡張・適用された [3]. また、木野 *et al.* は、この方法を、角運動量の大きい ($J = 30 \sim 40$) 共鳴状態の場合に拡張し、反陽子ヘリウム原子 ($\bar{p} + \text{He} + e^-$ の3体系) の高励起共鳴状態 ($J \sim 35$) に適用し、鳥居 *et al.* のレーザー分光実験 [21] を高精度で解析して [22], 反陽子の質量の初の決定 (Particle Data Group 推奨値 [23]) に至った (この業績により、木野氏・鳥居氏は、原子衝突研究協会の第2回若手奨励賞を受賞した)。

4体問題への進展 この GEM の欠点は、粒子数が増えると (4個以上), 多数個の球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ を扱う角運動量代数 (Racah algebra) が非常に面倒になることである。肥山は、この面倒さを克服するために、無限小変位ガウスローブ型の基底関数と行列要素計算における無限小処理の方法を提案し [24, 25, 4], 4体問題の計算を非常に簡単にすることに成功した。

肥山は、「核子4体系 (^4He 原子核) の基底状態 (0^+) のエネルギー・密度分布を算出し、同時発表する」という厳しいベンチマークテスト計算論文 [26] (7グループ, 18著者) に参加し、計算

法の有効性を示した。同4体系の第一励起状態 (very diffuse second 0^+ state) にも適用してその特徴を説明し [27], かつ, compact な基底状態から very diffuse な励起状態への drastic な遷移 (非弾性電子散乱実験) の説明にも成功した (ここでは、目下唯一の4体系計算法)。この ^4He 原子核の 0^+ 基底・励起状態への適用の成功が、後述する ^4He 原子 tetramer の基底・励起状態の計算への伏線であった (この2つの4体系の波動関数が、空間スケールは大きく異なるが、形がそっくりであることを後編で示す)。

GEM は、特に、ハイパー核 (ハイペロンを含む原子核) における3体~5体系に広く適用され、review papers に纏められている [4, 28, 29, 30]. GEM 自体の review は 文献 [4, 31] にある。

本稿表題の議論に先立って、GEM による束縛状態の解き方について説明する (反応過程応用については [4] 参照)。

2.1 良い基底関数とは

少数多体系の Schrödinger 方程式

$$(H - E)\Psi_{JM} = 0 \quad (1)$$

を解いて、全角運動量 J とその z 成分 M をもつ束縛解 Ψ_{JM} を求めることを考える。 Ψ_{JM} を、 L^2 積分可能な有限個の基底関数 (一般に非直交系) $\{\Phi_{JM,n}; n = 1, \dots, n_{\max}\}$ を用いて展開する:

$$\Psi_{JM} = \sum_{n=1}^{n_{\max}} C_{J,n} \Phi_{JM,n}. \quad (2)$$

この展開係数とエネルギー固有値は、Rayleigh-Ritz の変分原理

$$\langle \Phi_{JM,n} | H - E | \Psi_{JM} \rangle = 0, \quad (3)$$

($n = 1, \dots, n_{\max}$) により解く。これは、次の一般化行列固有値問題に帰着する。

$$\sum_{n'=1}^{n_{\max}} (H_{nn'} - EN_{nn'}) C_{J,n'} = 0 \quad (4)$$

$$H_{nn'} = \langle \Phi_{JM,n} | H | \Phi_{JM,n'} \rangle, \quad (5)$$

$$N_{nn'} = \langle \Phi_{JM,n} | 1 | \Phi_{JM,n'} \rangle. \quad (6)$$

対角化により n_{\max} 個の固有エネルギーと (直交規格化) 固有関数 $\{E_\nu, \Psi_{JM}^{(\nu)}; \nu = 1, \dots, n_{\max}\}$ が求まる。通常、各 J について、最もエネルギー

の低い数個の状態と実験結果とを比較する。

一般に、良い基底関数 (L^2 積分可能) とは次のようなものであろう (主として、原子核物理が念頭にあるが)。

- a) 系の物理的状況をよく表現できる (粒子間相関, tail 領域, 高振動, 複数粒子の局在化等).
- b) 3 体系以上で座標変換が容易であり, (5),(6) の積分が, 複雑な相互作用についても できるだけ解析的に行える (数値積分は, 1 重積分だけにしたい).
- c) 基底関数間の非直交性が大きくない (行列対角化 (3) で ill-condition を起し難い).
- d) 対角化で得た上記の固有関数系 $\{\Psi_{JM}^{(\nu)}\}$ が, 有限領域 (相互作用領域) でほぼ完全系になる, つまり 常識的な任意関数を展開できる. このうち, d) が特異に見えるので説明する. 通常の変分法では, 「各 J の最低エネルギー状態について, できるだけ少ない数の基底関数で収束する解を得る」ことを目指すが, GEM ではそのような価値観は取らない. 計算速度が速いので, 基底関数の個数が多いことは苦にならず, 少ない努力で早く収束解を手にするこの方を選ぶ. さらに重要な目的は, むしろ十分多い基底関数を採用して, d) を達成することである. これにより, GEM を 連続状態の離散化, 散乱・反応過程に広げて行くことができる. これは, GEM の利点の 1 つである.

2.2 最強の基底関数

3 体, 4 体系にも使われることを考慮した上で, 上記の条件 a)–d) を満たす最強の基底関数は, 2 体系 (相対座標 \mathbf{r}) で書くと, 私見では, 次の (8)–(10) である:

$$\Psi_{lm}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} [C_{nl}^{(\cos)} \phi_{nl}^{(\cos)}(r) + C_{nl}^{(\sin)} \phi_{nl}^{(\sin)}(r)] \times Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (7)$$

$$\phi_{nl}^{(\cos)}(r) = r^l e^{-\nu_n r^2} \cos \omega \nu_n r^2, \quad (8)$$

$$\phi_{nl}^{(\sin)}(r) = r^l e^{-\nu_n r^2} \sin \omega \nu_n r^2. \quad (9)$$

ここで, ガウスのサイズパラメタは等比数列

$$\nu_n = r_n^{-2}, \quad r_n = r_1 a^{n-1}, \quad (10)$$

($n = 1, \dots, n_{\max}$) に取る (これは必須, それらしき理由は後述). 通常 $\omega \sim 1$ に取る.

遠方を考えると, $e^{-\nu_n r^2}$ よりも, $e^{-\nu_n r}$ の方が良さそうだが, 条件 b), c) に反する. \sin, \cos の中は r の 1 乗でなく 2 乗であることに注意, 下の (12)–(14) 参照.

実は, 筆者等が出会ったほとんどの 3,4,5 体問題 [2, 3, 20, 22, 26, 27, 28, 29, 30] においては, \cos, \sin 部分は必要なく,

$$\phi_{nl}(r) = r^l e^{-\nu_n r^2} \quad (11)$$

だけで十分である (3,4 個の node を持つ関数なら, 十分記述できる). しかし, ^4He 原子の 3 体, 4 体計算では, 「強い短距離相関と長い tail」を少しでも精度よく記述するために (8),(9) を使っている. 明らかに, \cos, \sin という振動部分がついている方が関数空間が広い.

ところで, \cos, \sin 部分は, 行列要素 (5),(6) を手で積分する際に邪魔であるから, 複素サイズのガウス関数

$$\phi_{nl}^{(\omega)}(r) = x^l e^{-(1+i\omega)\nu_n r^2}, \quad (12)$$

を導入し, (8),(9) を

$$\phi_{nl}^{(\cos)}(r) = [\phi_{nl}^{(-\omega)}(x) + \phi_{nl}^{(\omega)}(x)]/2, \quad (13)$$

$$\phi_{nl}^{(\sin)}(r) = [\phi_{nl}^{(-\omega)}(x) - \phi_{nl}^{(\omega)}(x)]/2i, \quad (14)$$

と書き換える. これで, (10) の実数サイズのガウス関数用に使った積分公式がそのまま借用でき, subroutine program も, 一部の変数を complex 宣言するだけで利用できる.

以後, 等比数列のガウスサイズのセットを表すのに, $\{n_{\max}, r_1, a\}$ を使わず, $\{n_{\max}, r_1, r_{n_{\max}}\}$ を使う. この方が, 基底関数の空間配置 (内部に濃く, 遠方で粗い) を頭に描きやすい. セットの選び方は, 原則 trial-and-error だが, 容易に適切な選び方の経験が積める.

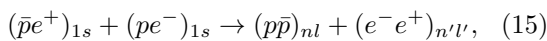
GEM の基本となる行列要素計算 (5),(6) を, できるだけ容易に, 高精度・高速度に行うための各種の工夫をレビュー論文 [4] に記してある.

2.3 2 体系の例題 1: 水素原子 26s 軌道状態

GEM レビュー論文 [4] の §2.4 にあるマニアックな例題だが, 水素原子の $l = 0, n = 1, \dots, 40$ の

状態を, (7)–(10) を用いて, $\{n_{\max} = 80, r_1 = 0.015 \text{ a.u.}, r_{n_{\max}} = 2000 \text{ a.u.}, \omega = 1.5\}$ の基底関数で解いた. 図 1 は, 26s 軌道の波動関数である. exact 解との相対誤差は, $r = 1500 \text{ a.u.}$ まで, $10^{-7} - 10^{-5}$ の高精度であり, 図に描いても差は全く見えない. 26s の固有エネルギーの相対誤差は, 僅かに 2.4×10^{-9} である. 水素原子の exact 固有関数の代用として使える.

反水素–水素反応 この例題を調べた目的は, 将来, 反水素を用いる反応が実行されるのを見越して, 基本的な反水素損失反応



($n+l \sim 24$) の full 4 体のチャネル結合計算の準備をするためであった (未だ計算は始めていないが). この計算では, 4 体系の座標変換が核心だが, 反陽子–陽子原子 (protonium) の固有関数 ($n+l \sim 24$) の exact 関数形を使っては, ほぼ実行不可能であろう. ここで求めた水素原子の GEM 関数形を protonium に変えて使うのが, 座標変換の簡単さ精度の良さから見て得策.

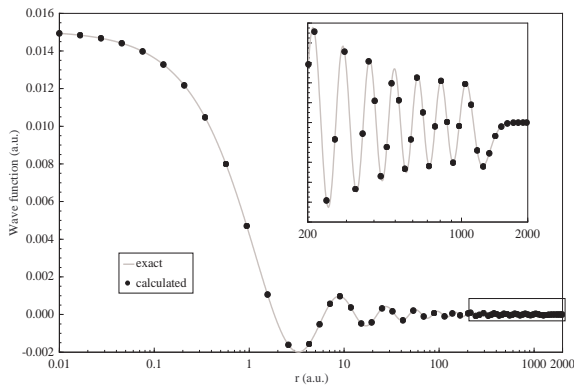


図 1: 水素原子の $l = 0, n = 26$ 状態 (26s) の波動関数. 実線は exact 解. 黒丸は GEM による解だが, 相対誤差は $r = 1500 \text{ a.u.}$ まで $10^{-7} - 10^{-5}$ であり, 差は図では見えない. 最遠方の peak の振幅は, 原点の $\sim 10^{-4}$ 倍. 文献 [4] より.

2.4 2 体系の例題 2: ^4He dimer

ガウス関数は 座標変換や積分には良さそうだが, すぐ減衰してしまうのではないか?—という

疑問をよく聞く. その反証を, ^4He dimer の波動関数を解いて示す.

図 2 の a) に, 非常に強い斥力コアをもつ ^4He – ^4He potential の典型例 LM2M2 potential [32] が描いてある. この中心力 potential をもつ Schrödinger 方程式を, (7)–(10) の GEM 基底関数を使って, $\{n_{\max} = 50, r_1 = 0.5 \text{ \AA}, r_{n_{\max}} = 600 \text{ \AA}, \omega = 1.0\}$ のパラメタで解いた. 図 2 の a) に近距離部分, b) に漸近領域の波動関数が描いてある. 強い短距離相関の様子と, 実用上 十分過ぎる遠方 ($\sim 1200 \text{ \AA}$) まで正しく指数関数的に減衰する様子が同時に記述されている. なお, \cos, \sin 部分のない (11) の基底関数を使っても, 図 2 の遠方が微かに精度が落ちる (また, エネルギー固有値の精度が 6 桁から 4 桁半に落ちる) が, 実用には耐える解が得られる.

dimer の 2 粒子間の平均距離 $\langle r_{12} \rangle$ の観測値は $\langle r_{12} \rangle = 52 \pm 4 \text{ \AA}$ であり, それから簡単な計算で出された束縛エネルギー B_2 は, $B_2 = 1.1_{-0.2}^{+0.3} \text{ mK}$ である. 最近, より妥当な計算で出された値は $B_2 = 1.3_{-0.19}^{+0.25} \text{ mK}$ である ([17] の中に文献あり). LM2M2 potential の場合の理論値 ([8] および多くの文献) は, $\langle r_{12} \rangle = 52.00 \text{ \AA}, B_2 = 1.30348 \text{ mK}$ であり, 観測値を説明している.

なぜ等比数列? ガウス関数は, 1 つでは直ぐに強く減衰するが, 等比数列のサイズを持つものを適切な数だけ重ね合わせることにより, 希望する遠方距離まで, 指数関数的に良い精度で減衰させることができる. このことは, 数学的な証明を思い付かないが, 次のことが関係しているのではないだろうか. ガウス関数 (11) は, 簡単のため規格化してないが, $\langle \phi_{nl} | \phi_{nl} \rangle = 1$ と規格化しておくこと, 次の overlap 関係が成り立つ:

$$\langle \phi_{nl} | \phi_{n+kl} \rangle = \left(\frac{2a^k}{1+a^{2k}} \right)^{l+3/2}. \quad (16)$$

自分 (n 番の base) と k 個目の隣との overlap は, n に依らず, k が増すと 1 から単調に小さくなって行く. このことから, 短距離の base から長距離の base まで, coupling の情報が隣から隣へスムーズに伝わって行き, 全体が coherent に重

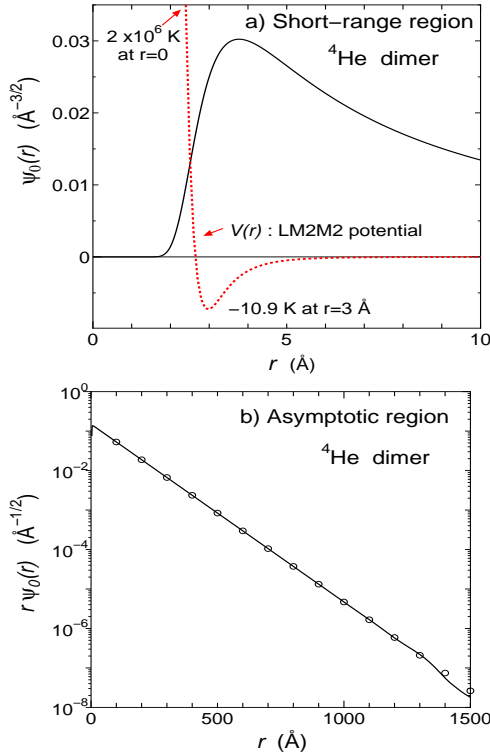


図 2: GEM による ${}^4\text{He}$ dimer の波動関数の a) 短距離部分と b) 漸近領域部分. a) の点線は, 短距離斥力コアを持つ realistic ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ potential の典型例の LM2M2 potential を示す (arbitrary unit). b) の丸印は, exact な漸近解. 強い短距離相関の様子と, 十分過ぎる遠方まで正しく指数関数的に減衰する様子が記述されている. 文献 [8] より.

ね合わさって正解の漸近形を形成するのではないか — という手前味噌の理屈 (感想) で納得した気持ちになっている.

因みに, ガウスサイズを「等差」数列にすると, 精度が悪く全く実用にならない. サイズを stochastic に探る方法は, 非常に強い短距離相関や非常に長い tail を精度良く表現するには適さない — 意思的な設定が不可欠である.

3. ヘリウム原子 3 体系 ${}^4\text{He}$ trimer

ヘリウム原子の 3 体系 (trimer)・4 体系 (tetramer) の エフィモフ物理や冷却原子の物理における位置や 4 体系の計算結果は 後編で取り上げる. この節では, ヘリウム原子 3 体系の

解き方と計算結果について解説する.

GEM による 3 体系の解き方の例題として, ヘリウム原子の trimer を取り上げる. ヤコビ座標を図 3 に示す.

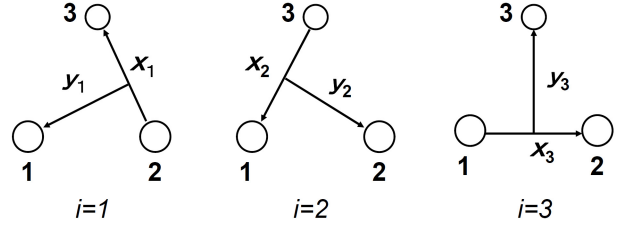


図 3: 3 粒子系のヤコビ座標.

この 3 体系の Schrödinger 方程式

$$(H - E)\Psi_3 = 0, \quad (17)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_x}\nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_y}\nabla_y^2 + \sum_{1=i<j}^3 V(r_{ij}), \quad (18)$$

を満たす波動関数 Ψ_3 を求める. $\mu_x = \frac{1}{2}m$, $\mu_y = \frac{2}{3}m$, m は ${}^4\text{He}$ atom の mass, $V(r_{ij})$ は粒子 i, j 間の中心力 potential (典型例は図 2a の赤点線) である.

3.1 3 体系の基底関数

ヘリウム原子は, spinless boson であるから, Ψ_3 を, 対称化された L^2 積分可能の基底関数 $\{\Phi_\alpha^{(\text{sym})}; \alpha = 1, \dots, \alpha_{\text{max}}\}$ で展開する (異なる 3 粒子の場合は文献 [4] の §5. ミュオン分子, §6. 反陽子ヘリウム原子を参照):

$$\Psi_3 = \sum_{\alpha=1}^{\alpha_{\text{max}}} C_\alpha \Phi_\alpha^{(\text{sym})}, \quad (19)$$

$$\Phi_\alpha^{(\text{sym})} = \Phi_\alpha(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) + \Phi_\alpha(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2) + \Phi_\alpha(\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3). \quad (20)$$

具体的に $\Phi_\alpha(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ を次のように表す:

$$\Phi_\alpha(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \phi_{n_x l_x}^{(\cos)}(x_i) \psi_{n_y l_y}(y_i) \times \left[Y_{l_x}(\hat{\mathbf{x}}_i) Y_{l_y}(\hat{\mathbf{y}}_i) \right]_{JM}, \quad (21)$$

$$\phi_{n_x l_x}^{(\cos)}(x) = x^{l_x} e^{-(x/x_{n_x})^2} \times \begin{cases} \cos \omega(x/x_{n_x})^2 \\ \sin \omega(x/x_{n_x})^2 \end{cases}, \quad (22)$$

$$\psi_{n_y l_y}(y) = y^{l_y} e^{-(y/y_{n_y})^2}. \quad (23)$$

ガウスのサイズは等比数列に取る:

$$x_{n_x} = x_1 a_x^{n_x-1} \quad (n_x = 1, \dots, n_x^{\text{max}}), \quad (24)$$

$$y_{n_y} = y_1 a_y^{n_y-1} \quad (n_y = 1, \dots, n_y^{\text{max}}). \quad (25)$$

ここで, suffix α は,

$$\alpha \equiv \{ \text{'cos' or 'sin'}, \omega, n_x l_x, n_y l_y, JM \} \quad (26)$$

を代表する. ここでは $J = 0$ のみを考えるので ($J > 0$ の束縛状態は存在しない), $l_x = l_y$, かつ, boson の対称性から $l_x = \text{even}$ である.

Rayleigh-Ritz 法の変分パラメタには, 線形パラメタ $\{C_\alpha\}$ と非線形パラメタ $\{\alpha\}$ (角運動量 l_x , ガウスサイズの最小・最大と個数, ω) とがあり, 一旦, 後者の 1 セットを与えれば, 即ち, 3 体系基底関数の 1 セットを設定すれば, 前者と固有エネルギー E は (4)-(6) の一般化固有値問題を解いて求まる. この解のうち, $J = 0$ の最低エネルギー状態が, ^4He trimer の基底状態, 次が第 1 励起状態となる.

角運動量 $l_x (= l_y)$ については, $l_x = 0, 2, \dots$ と上げて行って, 収束するところで止めればよい. ω については, 通常 $\omega \sim 1$ に取る (cos, sin 平等). ガウスサイズの等比数列の取り方については, §2.4 の 2 体系の経験が役に立つ (計算時間は短いので, 3 体系もすぐに経験が積める).

3.2 大きな心配 (1)

強い斥力芯をもつ 2 体系で見られる短距離相関 (図 2a の実線のように, 波動関数が中心付近ではほぼゼロ, すぐに急速に立ち上がる形) が 3 体系のどの 2 体間でも実現するように, 3 体系の基底関数を設定できるかどうか – 大きな心配である. 斥力芯領域で波動関数がゼロ近くにならないければ, 固有エネルギーが十分下がらない. これは, 3 体 (多体) 系計算の宿命的課題であり, 原子核物理 (核力が強い斥力芯を持つ) でも, 古来, 多くの対策が練られてきた.

その review は避けるが, 1 つの典型的な方策は, Jastrow 型の 2 体 correlation factor (function) $f(x_{ij})$ を導入 (仮定) し,

$$\Psi_3 = f(x_{12})f(x_{23})f(x_{31})\Phi_3 \quad (27)$$

のようにして, 急激な短距離相関を $f(x_{ij})$ に押込め, Φ_3 は穏やかな関数とする, という近似法である. $f(x_{ij})$ の 1 例は, 図 2a の 2 体波動関数の原点からピークのところまでを使い (似せ), その外側はピークの高さの定数にすることであ

る. また, $f(x_{ij})$ を選ぶには, 物理的に妥当な形にすることと共に, 基底関数による行列要素積分がなるべく楽なように選ぶことも肝要である. (27) 式と $f(x_{ij})$ の形は, *a priori* な仮定であり, 検証されるべきことである (基底状態, 励起状態で同じ形でよいのか, を含め). 後述するように, 筆者等の ^4He trimer, tetramer の *ab initio* 計算 [8] で, 1 つの肯定的検証を示した.

3.3 大きな心配 (2)

もう 1 つの大きな心配は, 「非常に弱い束縛状態を精度良く記述するために, 十分な遠方 ($\sim 1000\text{\AA}$) まで, 波動関数が正しく減衰する形で求まるか」ということである. 2 体系については, §2.3 で確かめられたが, 3 体系においてはどうか. これを見るために, 3 体系の波動関数の漸近形を調べる. trimer の束縛状態 ($v = 0, 1$) は遠方では, dimer と 1 つの atom に分離した形になっているから, 正しい 3 体波動関数は

$$\Psi_3^{(v)} \rightarrow C_3^{(v)} \sum_{i=1}^3 \Psi_0(\mathbf{x}_i) \frac{e^{-k_3^{(v)} y_i}}{y_i} Y_{00}(\hat{\mathbf{y}}_i) \quad (28)$$

となっているはずである.

即ち, 遠方では, どの粒子 ($i = 1, \dots, 3$) も他の 2 粒子 (dimer) から指数関数的に減衰しているはずである. ここで, $\Psi_0(\mathbf{x}_i)$ は dimer の波動関数 (図 1a), 定数 $C_3^{(v)}$ は, 遠方の振幅係数である [8]. y_i に関して十分遠方まで, (28) 式の $\frac{e^{-k_3^{(v)} y_i}}{y_i}$ と, 同じ形で解 $\Psi_3^{(v)} (v = 0, 1)$ が求まるかどうか心配である.

3.4 よい解決策

GEM の 3 体基底関数 (全ヤコビ座標上での等比数列ガウス関数) は, 上記の心配を解決する. 図 2a において, 基底関数 (22) が 2 体間の短距離相関を記述できることが保証され, かつ, 3 つのヤコビ座標を使うことで, どの 2 体間も「同時に」図 2a の形になり得る可能性がある. 可能性が保証されているだけであって, もちろん, 実際にはある程度よい基底関数を選ばなければならない. 筆者等の文献 [8] に載せた well-converged 基底関数セットを, 表 1 に示す.

3 体基底関数 $\{\Phi_\alpha^{(\text{sym})}; \alpha = 1, \dots, \alpha_{\text{max}}\}$ は,

$\alpha_{\max} = 4400$ 個を要する (で済む). 僅かに, これだけのパラメタと (21)–(25) の関数形で, 4400 個の 3 体系基底関数が完全に指定されているのは, 驚くべきことと言える. その基底関数で, Hamiltonian と overlap の行列要素を計算して, 一般化固有値問題を解けば, 波動関数・エネルギー固有値の解が求まる, という筋道は簡明である. 文献 [8] の読者は, 表 1 の情報 (+相互作用・質量の情報) により, 追計算をして結果をチェックすることが原理的には可能である. すなわち, 計算の透明度・簡明度が非常に高い. 従来⁴He trimer の論文には, 読者が追計算ができるほどに透明・簡明な論文は (筆者の知見では) 皆無に見える.

後述するように, 計算結果をみれば, 上記の「大きな心配」(1),(2) は “自動的に” 2 つ同時に解決されている. なぜか? 計算の枠組みと基底関数が適切であるから, と答える.

3.5 計算結果

GEM 計算で求めた⁴He trimer の基底・励起状態 (2 個だけ) の束縛エネルギー, $B_3^{(0)}$ と $B_3^{(1)}$, その他の物理量を表 2 に示す. 参考に Faddeev 法による解も載せる. 両者は良く一致している. 他の数編の論文の結果とも一致は良い. 角運動量 (l_x) 展開の収束性の良さが, 表 3 に Faddeev 法の結果と共に示してある (GEM では $l_x = 4$ で十分収束する).

GEM が Faddeev 法より収束が速いのは, 後

表 1: ⁴He-trimer 用の 3 体ガウス基底関数 (21)–(25) の全ての非線形パラメタ. $J = 0$ の基底関数の全個数 $\alpha_{\max} = 4400$.

a) $\phi_{n_x l_x}^{(\cos)}(x); \omega = 1$				b) $\psi_{n_y l_y}(y)$			
l_x	n_x^{\max}	x_1	$x_{n_x^{\max}}$	l_y	n_y^{\max}	y_1	$y_{n_y^{\max}}$
		[Å]	[Å]			[Å]	[Å]
0	22	0.3	150.0	0	50	0.4	600.0
2	17	0.6	150.0	2	40	0.8	400.0
4	14	0.8	130.0	4	30	1.0	200.0

者が相互作用と波動関数の両方を角運動量空間 (l_x) で truncate するのに対し, GEM では (一般に変分法では), 相互作用の方は truncate しないからである [8]. GEM の収束性が良いのは, ヤコビ座標の全てのセット (4 体系は 18 セットある) を使っていることも一因である.

表 1 で 基底関数のガウスサイズが, round number で示されているが, エネルギーを 5桁の精度で計算する限り, それ以上細かく optimize しても結果に影響ない (計算時間が速いので, 十分過ぎるくらいに多くの基底関数を取っているから, とも言える). なお, 一般化固有値問題 (4) を, 精度良く, ill-condition を起こさせずに解く工夫を, 論文 [8] の Sec.II-H に載せてある.

表 2 において, 励起状態 ($B_3^{(1)} = 2.2706$ mK) は, dimer と atom 1 個に分かれる threshold (-1.30348 mK) からみて, 僅かに 0.97 mK の束縛である. 2 粒子間の平均距離 $\langle r_{ij} \rangle$ は非常に大きく 84.5 Å であって, 基底状態の 9.6 Å の約 9 倍あり, dimer の 52.0 Å よりやや大きい. 従って, 励起状態は エフィモフ状態的であると誰もが認めているが, 基底状態については異論

表 2: ⁴He trimer の計算結果. $B_3^{(v)}$ ($v = 0, 1$) は束縛エネルギー. r_{ij} は 2 体間の距離. LM2M2 potential 使用.

trimer	基底状態 $v = 0$	
	GEM [8]	Faddeev [33]
$B_3^{(0)}$ (mK)	126.40	126.39
$\langle T \rangle$ (mK)	1660.4	1658
$\langle V \rangle$ (mK)	-1786.8	-1785
$\langle r_{ij} \rangle$ (Å)	9.616	9.612
trimer	励起状態 $v = 1$	
	GEM [8]	Faddeev [33]
$B_3^{(1)}$ (mK)	2.2706	2.268
$\langle T \rangle$ (mK)	122.15	122.1
$\langle V \rangle$ (mK)	-124.42	-124.5
$\langle r_{ij} \rangle$ (Å)	84.51	83.53

表 3: ^4He trimer の基底・励起状態束縛エネルギーの角運動量展開の上限 l_{\max} による収束性. GEM の収束性の速さを示す.

trimer	GEM [2]		Faddeev [33]	
	$B_3^{(0)}$ (mK)	$B_3^{(1)}$ (mK)	$B_3^{(0)}$ (mK)	$B_3^{(1)}$ (mK)
l_{\max}				
0	121.00	2.2397	89.01	2.0093
2	126.39	2.2705	120.67	2.2298
4	126.40	2.2706	125.48	2.2622
8			126.34	2.2677
12			126.39	2.2680
14			126.39	2.2680

もある. これは, 後編で触れる.

trimer の基底状態の 2 粒子間距離の測定値 [15] は $\langle r_{ij} \rangle = 11_{-5}^{+4} \text{ \AA}$ であり (エネルギーの測定は無い), 計算値と consistent である.

3.6 短距離相関の記述

さて, 上で問題にした「どの 2 体間でも短距離相関が正しく記述されているか」についてである. これを見るためには, 通常のように, 2 粒子相関関数 $P_3^{(v)}(x) (v = 0, 1)$ を計算する.

$$P_3^{(v)}(x_1) Y_{00}(\hat{\mathbf{x}}_1) = \langle \Psi_3^{(v)} | \Psi_3^{(v)} \rangle_{y_1}. \quad (29)$$

これは, x_1, x_2, x_3 に関して対称である. 先に使った 2 粒子間距離 $r_{23} = x_1$ である. この関数 $P_3^{(v)}(x)$ は, 2 粒子密度とも呼ばれ, 2 粒子が相対距離 x で見つかる確率を表している. $\int P_3^{(v)}(x) x^2 dx = 1$ で規格化されている. ^4He trimer の基底・励起状態 ($v = 0, 1$) について, $P_3^{(v)}(x)$ を図 4a に示してある. dimer の波動関数 (図 1a) の 2 乗 (密度) も示す. 3 つの曲線は, ピークで一致するように normalize してある [8]. 著者自ら驚いたのだが, この 3 つの曲線は $x < 4 \text{ \AA}$ (potential 内部, 図 1a) できれいに一致している. つまり, 短距離相関は, どの状態でも同じ (dimer と同じ) 形をしているのが “発見” された (後編で示すように, ^4He の 4 体系でも同様である. 筆者等の知識では, このよう

な図は見たことがない). これにより, *a priori* な仮定 (27) の根拠が与えられたことになる.

3.7 漸近領域の記述

一方, 「求まった 3 体波動関数の十分遠方 ($y_i \rightarrow \infty$) が正しく $\frac{e^{-k_3^{(v)} y_i}}{y_i}$ の形になっているか」を見るためには, その形と overlap function

$$\mathcal{O}_3^{(v)}(y_1) Y_{00}(\hat{\mathbf{y}}_1) = \langle \Psi_2(\mathbf{x}_1) | \Psi_3^{(v)} \rangle_{\mathbf{x}_1} \quad (30)$$

とを比べればよい. 図 4b に $y \times \mathcal{O}_3^{(v)}(y)$ を示す. open circle は 遠方の正解 $C_3^{(v)} e^{-k_3^{(v)} y_i}$ を示す ($C_3^{(v)}$ の値は [8]). 次のことが分かる.

i) 基底・励起状態とも遠方は正しく $C_3^{(v)} e^{-k_3^{(v)} y_i}$ の形をしている.

ii) 浅い励起状態 (dimer から僅か 0.97 mK 束縛) について十分過ぎるくらい遠方まで ($\sim 1000 \text{ \AA}$) 正しい漸近形で求まっている.

3 体系でも十分遠方まで正しく減衰する形で求まるのは GEM の威力である.

意外な発見 図 4b を見て また驚いたのだが, trimer の励起状態 ($v = 1$) と dimer の漸近領域の 2 本の線 (ほぼ直線) が平行になっている. なぜ (自明?) だろうか.

4. 精密「直感モデル」の提唱

^4He trimer の非常に浅い励起状態の束縛エネルギーを予言する (よく説明する) 直感的なモデル “Dimerlike-pair model” を筆者等は論文 [8] で提唱した. それを紹介する.

§3.7 で述べたように, 図 4b において 2 本の線が平行になっているということは, この対数グラフの傾斜が等しいことである. これは, dimer の波動関数の binding wave number k_2 (図 2b の $r \Psi_0(r) \propto e^{-k_2 r}$ の k_2) と trimer の $e^{-k_3^{(1)} y_i}$ の $k_3^{(1)}$ とが等しいを示す ($k_3^{(1)} = k_2$). dimer と trimer の binding energy をそれぞれ B_2 と $B_3^{(v)} (v = 0, 1)$ とすると,

$$k_2 = \sqrt{2\mu_x B_2 / \hbar}, \quad (31)$$

$$k_3^{(1)} = \sqrt{2\mu_y (B_3^{(1)} - B_2) / \hbar}, \quad (32)$$

の関係があるから (前出のように $\mu_x = \frac{1}{2}m$, $\mu_y =$

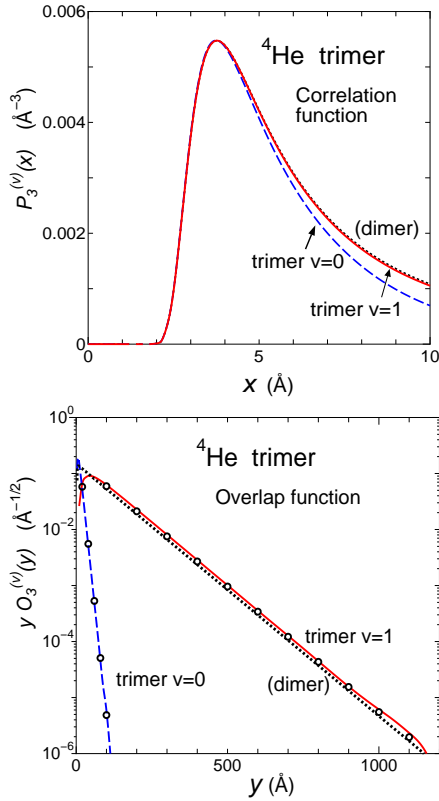


図 4: a) ${}^4\text{He}$ trimer における 2 粒子相関関数. 各曲線は, ピークで一致するように normalize してある [8]. $x < 4\text{Å}$ でどの曲線も同じ形 (同じ短距離相関) をしている \rightarrow (27) の基礎付け. b) ${}^4\text{He}$ trimer と dimer の波動関数の overlap function $y O_3^{(v)}(y)$. trimer の励起状態 ($v = 1$) と dimer とで, 遠方の“傾斜” (bounding wave number) が同じであることが分かる \rightarrow dimerlike-pair model の提唱へ.

$\frac{2}{3}m$), $k_3^{(1)} = k_2$ とおくと,

$$B_3^{(1)} = B_2 + \frac{\mu_x}{\mu_y} B_2 = \frac{7}{4} B_2 \quad (33)$$

が得られる. ところで, 前述のように, LM2M2 potential を使った場合, $B_2 = 1.30348 \text{ mK}$ であるから, (33) 式を使うと, $B_3^{(1)} = 2.2811 \text{ mK}$ となり, $B_3^{(1)} = 2.2706 \text{ mK}$ に極めて近い. この僅かな差は, 図 4b の傾斜を, $k_3^{(1)} = k_2$ と読み取ったことによる — 正しくは, $B_2, B_3^{(1)}$ から逆算して, $k_2 = 0.0104\text{Å}^{-1}$, $k_3^{(1)} = 0.0103\text{Å}^{-1}$ である.

$k_3^{(1)} \simeq k_2$ となることは, 上記のような精密 3 体計算をして波動関数の十分遠方まで図に描いた結果 初めて気が付いたことである. もっとも,

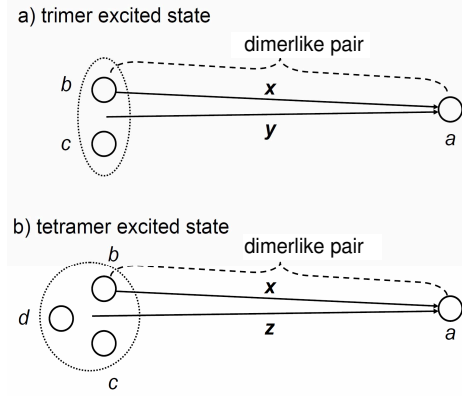


図 5: ${}^4\text{He}$ 原子 3 体系, 4 体系の非常に浅い励起状態の漸近領域での振舞いに関するモデル, Dimerlike-pair model.

波動関数を見なくとも, $B_2, B_3^{(1)}$ から逆算して $k_3^{(1)} \simeq k_2$ に気が付く可能性はあったかも知れないが, 筆者等にその知恵はなかった.

では, なぜ $k_3^{(1)} \simeq k_2$ か. 偶然だろうか?

4.1 Dimerlike-pair model

${}^4\text{He}$ 原子の浅い励起状態にとってこれは偶然ではなく, 次のような簡単なモデル (dimerlike-pair model と名づける) によってその理由が分かる. 但し, 後から気が付いたことだが.

励起状態が, dimer と atom に分離する threshold ($-B_2$) から見て, 非常に浅い結合であるとするなら, 図 5a から次のことが言える.

- i) 粒子 a は, 弱結合の粒子 b と c (dimer) から遠く離れているので, b - c 間の相互作用にほとんど影響されない.
- ii) 従って, 遠い距離 x にある a と b の間は, dimer 的な振る舞い ($\propto e^{-k_2 x}/x$) になっている.
- iii) a は漸近領域に居るので $x \simeq y$ である. 従って, a の y 方向の振る舞い ($\propto e^{-k_3^{(1)} y}/y$) は, x 方向の振る舞いと同じである. すなわち, $k_3^{(1)} \simeq k_2$ である.

この結論は, 図 4b が保証しているので, このモデルの妥当性が示された. なお, このモデルは, 図 4b で得られた empirical な性質を基礎にしているわけではない. その性質は単にモデルを思いつくヒント・動機である. 上で仮定した

のは, a, b, c 粒子間の距離が相互作用の距離よりも大きい, ということである.

しかしながら, このモデルの成功は, ひょっとして, 3 体系だけの幸運かもしれない. 4 体系でも成り立つのかチェックする必要がある.

4 体系の場合, 図 5b を参照にして, 次のように考える. 粒子 a の z 方向の振る舞い ($\propto e^{-k_4^{(1)}z/z}$) が x 方向の振る舞い ($\propto e^{-k_2x/x}$) と同じであると思わせるので, $k_4^{(1)} \simeq k_2$ である. $k_4^{(1)} = \sqrt{2\mu_z(B_4^{(1)} - B_3^{(0)})}/\hbar$ ($\mu_z = \frac{3}{4}m$) であるから, $k_4^{(1)} = k_2$ とおいて,

$$B_4^{(1)} = B_3^{(0)} + \frac{\mu_x}{\mu_y} B_2 = B_3^{(0)} + \frac{2}{3} B_2 \quad (34)$$

が導かれる. LM2M2 potential では, $B_3^{(0)} = 126.40$ mK であるから, dimerlike-pair model は $B_4^{(1)} = 127.27$ mK と予言することになる. trimer+atom の threshold ($-B_3^{(0)}$) から, 僅かに 0.87 mK の束縛となるはずである. こんな簡単な直感モデルが, 複雑な 4 体計算の結果を予言できるのだろうか.

次回, 後編は, ^4He tetramer の GEM 4 体計算の方法・結果を紹介し, この予言を検証するところから始める. 弱結合 4 体系のもつ universality の議論を中心に, エフィモフ物理, 冷却原子の物理との関連に迫る.

参考文献

- [1] 市村淳, 素粒子論研究 **80**, E8 (1990).
- [2] M. Kamimura, Phys. Rev. **A38**, 621 (1988).
- [3] H. Kameyama, M. Kamimura and Y. Fukushima, Phys. Rev. **C 40**, 974 (1989).
- [4] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003). (ガウス関数展開法の review 論文).
- [5] 数納広哉, 「しょうとつ」第 8 巻第 6 号, [原子衝突のキーワード—エフィモフ状態], p.36 (2011).
- [6] 数納広哉, 「しょうとつ」第 8 巻第 2 号, [解説], p.2 (2011). (§4. ヘリウム原子の 3 体再結合).
- [7] V. Efimov, Yad. Fiz. **12**, 1080 (1970) [Sov. J. Nucl. Phys. **12**, 589 (1971)].
- [8] E. Hiyama and M. Kamimura, Phys. Rev. **A 85**, 022502 (2012).
- [9] F. Luo *et al.*, J. Chem. Phys. **98**, 3564 (1993).
- [10] W. Schöllkopf and J.P. Toennies, Science **266**, 1345 (1994).
- [11] W. Schöllkopf and J.P. Toennies, J. Chem. Phys. **104**, 1155 (1996).
- [12] F. Luo *et al.*, J. Chem. Phys. **104**, 1151 (1996).
- [13] L.W. Bruch *et al.*, J. Chem. Phys. **117**, 1544 (2002).
- [14] R. Grisenti *et al.*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2284 (2000).
- [15] R. Brühl *et al.*, Phys. Rev. Lett. **95**, 06002 (2005).
- [16] P. Naidon, E. Hiyama and M. Ueda, Phys. Rev. **A 86** (2012), in press [arXiv:1109.5807].
- [17] E. Hiyama and M. Kamimura, Phys. Rev. **A 85**, 062505 (2012).
- [18] 永嶺謙忠, 物理学最前線 (共立出版) **19**, 75 (1988), 「ミュオン触媒核融合」.
- [19] K. Nagamine and M. Kamimura, Advance in Nuclear Physics **24**, 151 (1998).
- [20] M. Kamimura, Muon Catalyzed Fusion **3**, 335 (1988).
- [21] H.A. Torii *et al.*, Phys. Rev. **A59** (1999) 223.
- [22] Y. Kino, M. Kamimura and H. Kudo, Hyperfine Interact. **119**, 201 (1999).
- [23] Particle Data Group, D. E. Groom *et al.*, Eur. Phys. J. **C15**, 1 (2000).
- [24] E. Hiyama, RCNP Physics Report (Research Center for Nuclear Physics, Osaka Univ.), RCNP-P-132 (1994), p.35.
- [25] E. Hiyama, Proc. Inter. Workshop on the 4-Body Problems, Uppsala, 1995 (Uppsala Univ., 1996), p.28.
- [26] H. Kamada *et al.*, Phys. Rev. **C 64**, 044001 (2001). (18 著者. 核子 4 体系の基底状態のベンチマークテスト計算論文).
- [27] E. Hiyama, B.F. Gibson and M. Kamimura, Phys. Rev. **C 70**, 031001(R) (2004). (核子 4 体系の励起状態).
- [28] E. Hiyama and T. Yamada, Prog. Part. Nucl. Phys. **63**, 339 (2009).
- [29] E. Hiyama *et al.*, Prog. Theor. Phys.

- Supplement **185**, 106 (2010); **185**, 152 (2010).
- [30] E. Hiyama, *Few-Body Systems* **52** (2012) in press.
- [31] 肥山詠美子, 木野康志, 上村正康, *日本物理学会誌* **61**, 27 (2007). [解説] “ガウス関数展開法による少数粒子系の精密計算—原子・分子からクォーク系まで—”.
- [32] R.A. Aziz and M.J. Slaman, *J. Chem. Phys.* **94**, 8047 (1991).
- [33] R. Lazauskas and J. Carbonell, *Phys. Rev. A* **73**, 062717 (2006).

Few-body systems interacting with strong short-range repulsion – Efimov physics and ^4He -atom trimer and tetramer

Masayasu KAMIMURA and Emiko HIYAMA

Theoretical study of few-body systems interacting with strong short-range repulsion is reported. Especially discussed is the ^4He trimer and tetramer calculated with the use of the Gaussian expansion method (GEM) developed by the authors. Relation to Efimov physics is also discussed.

「原子衝突のキーワード」

シェイク過程 (Shake Process)

原子核の電荷が変化するベータ崩壊,あるいは物質に X 線が照射されて光電離を起こす状況を想定しよう. このような過程により, 核電荷あるいは原子核近傍の電荷が突然変化し, 外殻にある電子は急激な電場の変化を受けることになる. すると, 外殻の電子は遷移を起こしうる. このような, 核反応・内殻過程による急激な電場の変化により引き起こされる副次的な過程を, シェイク過程と呼んでいる[1].

シェイク過程は, 外殻電子の遷移が束縛励起・放出される状況について, それぞれシェイクアップ・シェイクオフ過程と呼ばれている. 内殻光電離過程では, 1 電子軌道の電子占有状態が図 1 のようになる. ここでは, 原子分子の内殻光電離に関連する現象を例にして, より詳細を解説する.

光子エネルギー $h\nu$ の X 線を原子に照射し, その内殻光電子スペクトルを測定するとしよう. 注目した内殻軌道のエネルギー準位を E_c とすると, 放出される内殻光電子の主構造 (main line) は電子の運動エネルギー $E_{\text{kin}} = h\nu - E_c$ に現れる. そのとき, この主構造よりも低運動エネルギー側に, 複数の衛線構造 (satellite lines) が観測される. そのような衛線構造を生じる機構の考察では, シェイク過程の概念が重要となる. 衛線構造の起源は, シェイク過程に基づくものだけではなく, 始状態・終状態のそれぞれにおける多電子効果 (相関効果) が起源となっている場合もある[1,2].

光電離断面積は, 双極子近似と瞬間近似[3]の枠組みにおいて,

$$\sigma(E) \propto \underbrace{\left| \langle k_E | \mathbf{r} | \Phi_c \rangle \right|^2}_{\text{双極子部分}} \cdot \underbrace{\left| \langle \Psi_c | \Phi_c \rangle \right|^2}_{\text{単極子部分}} \quad (1)$$

と表される[4]. ここで, Φ_c は始状態の電子配置から内殻軌道 c にある電子が電離されたときの, 凍結軌道で記述した電子配置であり, 一方, Ψ_c は内殻軌道から電離した (緩和後の) 状態の波動関数を表わしている. シェイク過程による遷移は, 式 (1) の単極子部分により強度を持つため, monopole 遷移と呼ばれることがある.

シェイクアップ過程は, 直感的にはつぎのように

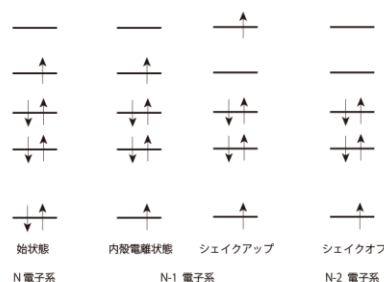


図 1: ある電子配置から内殻電離で生じるシェイク過程の電子配置. $N-1$ 電子配置の終状態が, 内殻光電子スペクトルにピークを形成する. 2 つの電子が放出されるシェイクオフ過程は, エネルギーを分け合うため, ピークを形成しない.

説明できる. 外殻に対する実効核電荷が急激に変化すると, その実効核電荷の下での原子軌道の動径分布は収縮する. この効果は "shaking" あるいは軌道緩和と呼ばれている. このとき, 元の核電荷における軌道の動径分布を保とうとすると (凍結軌道を想定すると), 新たな実効核電荷の下ではより高い主量子数の軌道とは重なりがあり, 遷移が起きると説明できる. つまり, 実効核電荷が急激に変化する状況において, 瞬間近似の下, 外殻軌道の重なりによる遷移確率があることになる. そのとき N 電子系のハミルトニアンから内殻軌道に空孔を持つ $N-1$ 電子系のハミルトニアンに変化することに起因しており, 凍結軌道近似の下でも強度を持つことには注意しておこう.

分子の内殻光電離では, 軌道緩和の効果は単純に収縮だけでなく, 分子内電荷移動 (分極) の効果が現れるため, 衛線構造の機構の解明はさらに複雑なものとなる. このため, 現在も新しい手法が取り入れられ, 研究が行われている[5].

(高エネルギー加速器研究機構 足立純一)

参考文献

- [1] S. Svensson *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **47**, 327 (1988).
- [2] U. Becker *et al.*, Phys. Rev. Lett. **60**, 1490 (1988).
- [3] 例えば, B. H. Bransden and C. J. Joachain "Quantum Mechanics" 2nd ed., Pearson Education Ltd. (2000) Subsection 9.5.
- [4] T. Åberg, Phys. Rev. **156**, 35 (1967).
- [5] Y. Hikosaka *et al.*, J. Chem. Phys. **127**, 4430 (2007).

「原子衝突のキーワード」

一般化振動子強度 (generalized oscillator strength)

一般化振動子強度(英語の頭文字をとって GOS と表記)も, 先に説明した振動子強度(光学的振動子強度, OOS) [1] に対応するものなので, やはり古典的な振動子の個数といえる。OOS が光吸収断面積から求められることに対し, GOS は電子のエネルギー損失スペクトルから得ることができる。電子エネルギー損失スペクトルは, ある特定のエネルギーの電子線を照射し, 散乱電子の運動エネルギーを測定し, 入射電子のエネルギーとの差(エネルギー損失)の関数として散乱電子の強度を表す。電子の散乱であるので, エネルギー損失値と共に散乱方向(散乱角)を考える必要がある。そこで, 散乱電子のエネルギーと散乱角を同時に考慮できるように運動量ベクトルの変化の大きさ(運動量移行の大きさ)という概念を導入する。OOS は,

$$f_{0n} = 2m(E_n - E_0) \frac{|\langle n | \sum_j x_j | 0 \rangle|^2}{\hbar^2}$$

と定義できる[1]。繰り返しになるが, m は電子の質量, E_0, E_n は, それぞれ原子の始状態 0 および終状態 n のエネルギー固有値であり, $(E_n - E_0)$ は励起エネルギーに相当する。 x_j は, 原子内電子のデカルト座標の r_j の x 成分を表し, $\langle n | \sum_j x_j | 0 \rangle$ はその和の行列要素(ここでは, 双極子遷移の遷移行列要素)である。ここで, 電子散乱に対応するように運動量移行ベクトル \mathbf{K} を用いて,

$$F_{0n} = 2m(E_n - E_0) \frac{|\langle n | \sum_j \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) | 0 \rangle|^2}{(\hbar K)^2}$$

と書かれる無次元量 F_{0n} を定義する。入射電子と散乱電子の運動量の大きさをそれぞれ k_i, k_f , 散乱角を θ とすると, K^2 は $K^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos\theta$ である。また, $\langle n | \sum_j \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) | 0 \rangle$ は, $0 \rightarrow n$ 遷移に対する行列要素で, $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j)$ を

$$\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) = 1 + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j - \frac{(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j)^2}{2} + \dots$$

と展開すると, $i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j$ の項が電気双極子遷移, 次項が電気四極子遷移の行列要素になる。双極子近似が成立する($\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \sim 1 + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j$) 場合,

一般化振動子強度(GOS)は上式のように書ける。ここで定義された GOS は, $K \rightarrow 0$ の極限で OOS に一致するという重要な性質をもつ。

Born 近似が成立すれば, 電子エネルギー損失スペクトルから GOS は実験的に求まる。 $0 \rightarrow n$ 遷移に対する微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ と GOS は,

$$F_{0n}(K) = \frac{W}{4Ry} \frac{k_i}{k_f} K^2 \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

の関係にある。ここで W は, 励起エネルギー, Ry は水素原子のイオン化エネルギーである。

終状態が連続状態にある場合も, OOS と同様に一般化振動子強度密度 dF/dE を考えることができ, 離散化状態を含めた全体を, 一般化振動子強度分布という。連続状態の場合, エネルギー損失スペクトルで得られるのは $d\sigma/d\Omega$ をエネルギーで微分した二重微分断面積 $d^2\sigma/(dE d\Omega)$ で,

$$\frac{dF(K)}{dE} = \frac{W}{4Ry} \frac{k_i}{k_f} K^2 \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega}$$

となる。光学的振動子強度の項で述べた総和則 (TRK 総和則) もほぼ同様の形で成り立つ。これは Bethe によって拡張されたもので,

$$\sum_n F_n + \int \frac{dF(K)}{dE} dE = N$$

と表され, 原子内電子の数に一致する [2]。

GOS において $K \rightarrow 0$ は, 励起エネルギーに対して入射電子のエネルギーが十分に高く, 前方散乱($\theta \sim 0$)の場合に実現できる。直感的にわかるように, このとき Born 近似は成立しやすい条件にある。この実験条件と総和則を用いて電子エネルギー損失スペクトルから, OOS を求める実験が盛んに行われた。なお Born 近似が成立していなくても, 実験で得られた $d\sigma/d\Omega$ を用いて F_{0n} に相当する量を求めることができる。これは見かけの一般化振動子強度(Apparent GOS)と呼ばれ, K だけでなく入射電子エネルギー E の関数となる。この見かけの GOS も $K \rightarrow 0$ の極限で OOS に一致するので, 多くの実験が行われている。ただし, 既に指摘があるように[3]極限操作で求められる値であるので, 盲目的に信じることには注意が必要である。

(東邦大学 酒井康弘)

参考文献

- [1] 酒井康弘, しょうとつ, 第9巻3号18(2012).
- [2] M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).
- [3] 島村勲, しょうとつ, 第8巻第6号, 27 (2011).

2012 年度 役員・委員会等

会長

高橋正彦（東北大学）

幹事

渡部直樹（北海道大学）（副会長） 森下 亨（電気通信大学）

足立純一（高エネルギー加速器研究機構） 星野正光（上智大学）

運営委員

石井邦和（奈良女子大学） 高口博志（広島大学）

星野正光（上智大学） 間嶋拓也（京都大学）

美齊津文典（東北大学） 本橋健次（東洋大学）

森下 亨（電気通信大学） 渡辺信一（電気通信大学）

足立純一（高エネルギー加速器研究機構） 岸本直樹（東北大学）

小島隆夫（理化学研究所） 富田成夫（筑波大学）

日高 宏（北海道大学） 渡部直樹（北海道大学）

渡辺 昇（東北大学）

会計監事

鶴飼正敏（東京農工大学）※ 2012 年度総会にて新規監事に交代予定

中村義春

常置委員会等

編集委員会 委員長： 渡部直樹（北海道大学）

行事委員会 委員長： 森下 亨（電気通信大学）

広報渉外委員会 委員長： 足立純一（高エネルギー加速器研究機構）

若手奨励賞選考委員会 委員長： 大野公一（豊田理化学研究所）

国際会議発表奨励者選考委員会 委員長： 高橋正彦（東北大学）

学会事務局 担当幹事： 星野正光（上智大学）

編集委員会

足立純一，岸本直樹，長嶋泰之，中井陽一，羽馬哲也，早川滋雄，日高 宏

森林健悟，渡部直樹

しょうとつ 第9巻 第4号 （通巻 47 号）

Journal of Atomic Collision Research

©原子衝突学会 2012

<http://www.atomiccollision.jp/>

発行: 2012 年 7 月 15 日

配信: 原子衝突学会 事務局

<acr-post@bunken.co.jp>