

原子衝突学会誌

しょうとつ

第 13 巻
第 2 号
2016 年

シリーズ 「陽電子が拓く物質の科学」

第 2 回 陽電子・原子間相互作用と陽電子原子
木野康志, 山下琢磨

シリーズ 「多価イオンの物理とその応用：これまでの進展と今後の展開」 第 4 回 多価イオンと電子の相対論的相互作用
中村信行

キーワード 量子もつれ 穂坂綱一



**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）

Institute *of* Physics

<http://journals.iop.org/>

アステック株式会社

ASTECH
CORPORATION

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

アドキャップバキュームテクノロジー株式会社

ADCAP

<http://www.adcap-vacuum.com>

有限会社イーオーアール



Electronics Optics Research Ltd.

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

株式会社オプティマ

Optima Corp.

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

キャンベラジャパン株式会社

A
CANBERRA

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

クリムゾン インタラクティブ プライベート リミテッド

enago[™]

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

<http://ulatus.jp/>

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

株式会社サイエンス ラボラトリーズ



株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

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

真空光学株式会社

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

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

スペクトラ・フィジックス株式会社



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

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/>

株式会社パルスパワー技術研究所



<http://www.mypsj.com>

丸菱実業株式会社

丸菱実業株式会社

MARUBISHI CORPORATION

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

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 13 卷 第 2 号



THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN

目 次

シリーズ「陽電子が拓く物質の科学」 第 2 回 陽電子・原子間相互作用と陽電子原子	木野康志, 山下琢磨	...37
シリーズ「多価イオンの物理とその応用：これまでの 進展と今後の展開」 第 4 回 多価イオンと電子の相対論的相互作用	中村信行	...47
原子衝突のキーワード 量子もつれ	穂坂綱一	...55
第 23 回原子衝突セミナースケジュールのお知らせ	行事委員会委員長	...56
2016 年度国際会議発表奨励賞募集要項(再掲)	顕彰委員会委員長	...57
「しょうとつ」原稿募集	編集委員会事務局	...58
ユーザー名とパスワード		...58

陽電子が拓く物質の科学 第2回 陽電子・原子間相互作用と陽電子原子

木野康志*, 山下琢磨

東北大学大学院理学研究科 〒 980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3

y.k@m.tohoku.ac.jp

平成 28 年 1 月 27 日原稿受付

陽電子はプローブとして、また物質中に取り込ませて物質に変化を与える粒子として、原子・分子の研究から材料分析にいたるまで幅広く使われている。陽電子と原子間の相互作用は電子の場合と大きく異なるため、原子が陽電子を取り込み陽電子原子を形成すると、電子の系では見られないエキゾチックな現象が見られる。アルカリ原子の場合を例に取り、陽電子と原子の結合や相対論効果について紹介する。陽電子アルカリ原子は、陽電子を含む原子・分子系を考察する上で必要な、ポジトロニウム形成や、内殻電子の分極効果などの性質を網羅しているため、陽電子原子の雛形となる系である。

1. はじめに

陽電子(e^+)は電子(e^-)の反粒子であり、電荷の符号以外は電子と同じ性質をもつ。また、陽電子の質量は電子と同じため、陽電子は電子のように非局在化し大きな量子効果を示す。電子は原子・分子の主要な構成粒子であり、原子・分子の性質の多くは電子によって決まる。電子は原子・分子の性質を調べる良いプローブとして広く使われている。電荷の符号のみ異なる陽電子をプローブとすれば電子とは異なる知見が得られ、陽電子を不純物として原子・分子に注入すれば、通常の原子・分子には見られないエキゾチックな原子・分子が生成すると考えられる。また、陽電子は電子と接触すると対消滅し、質量エネルギーに相当する高エネルギーの光子を放出する。対消滅する電子と陽電子のスピンの重項のとき、511 keVの光子を180度方向に2つ放出する。この高エネルギー光子は物質中を透過しやすいため、対消滅を使った様々な分析が行われている[1]。本シリーズ第1回で紹介されたように[2]、消滅光子の時間、角度相関、エネルギーの情報から対消滅相手の電子を含む原子・分子の電子状態などの詳細がわかる。陽電子と原子・分子間の相互作用や原子・分子内での陽電子の振る舞いを明らかにすることにより、原子・分子の理

解が進むとともに、より高度な陽電子を使った材料分析が可能になると期待される。

本稿では、少数多体系の見地から陽電子と原子の結合の特徴的な性質を紹介する。より複雑な、陽電子と分子、またはポジトロニウム(positronium, $Ps = e^- + e^+$)と原子・分子の結合については、本シリーズの中の立川氏による解説に委ねる。なお、以下特に断りのない限り、原子単位系(atomic unit, a.u.; $\hbar = e = m_e = 1$)を用いる。

2. 陽電子原子

陽電子と中性原子の安定な束縛状態を「陽電子原子」とよぶ。陽電子原子は対消滅に対しては安定ではないが、その寿命は1 ns程度あり、原子・分子の時間スケール($1 \text{ a.u.} = 2.4 \times 10^{-8} \text{ ns}$)より十分長く、安定に存在すると考えてよい。(対消滅によるエネルギー不確定さの幅は 10^{-6} eV に相当する。)

陽電子は1930年にDiracにより予言され[3]、1933年にAndersonにより発見された[4]。陽電子と電子の束縛状態であるPsは、1934年にMohorovičićにより予言され[5]、1951年にDeutschにより発見された[6]。Psは、換算質量を除けば水素原子と同じハミルトニアンをもつので、

表 1: 電子および陽電子と, 原子・分子間の相互作用の比較 [9].

	電子	陽電子
静電相互作用	引力	斥力
分極相互作用	引力	引力
軌道電子との交換	あり	なし
ポジトロニウム生成	なし	あり
対消滅	なし	あり

軽い水素原子と見なすこともできる. Ps「原子」と陽電子の結合は, 荷電反転させた系である $\text{Ps}^- = \text{Ps} + e^-$ が, Wheeler により 1946 年に予言され[7], 1981 年に Mills により観測された[8].

一方, 「陽電子が原子に束縛されるか?」「陽電子原子は安定に存在するか?」は, 陽電子発見以来長い間の問題であった. 電子および陽電子と, 原子・分子の相互作用の比較を表 1 に示す[9]. 電荷の符号の違いにより静電相互作用は力の向きが逆になり, 原子核から強い引力を受ける電子とは反対に, 陽電子は原子内部で強い斥力を受ける. 分極相互作用は軌道電子の仮想励起による二次の相互作用であり, 電荷の符号にはよらない. このため分極相互作用はどちらも引力となる. 陽電子は原子・分子内粒子とは異種粒子であるため軌道電子との交換は考慮しなくてよいが, 陽電子には Ps 生成と軌道電子との対消滅がある. 対消滅の断面積は散乱断面積と比べて桁違いに小さいため原子・分子の構造に大きな影響を与えないが, Ps 生成は陽電子に特徴的な現象である.

陽電子は静電相互作用による強い斥力のため原子内部には侵入できず, 原子の価電子の平均半径より充分遠方では分極力による弱い引力を受ける. 軽い陽電子は零点振動が大きいので, 弱い分極ポテンシャルでは結合を支えられないのではないかと考えられてきた(陽電子を陽子に置き換えた系では束縛状態は存在する). ところが, 1997 年になって初めて, Li 原子が陽電子を束縛できることが理論計算により示された[10]. その束縛エネルギーは, わずか 0.06 eV であった. Li 原子のイオン化エネルギーが 5.4 eV, Li 原子に電子が付着した負イオン Li^- が 0.6 eV[11,12] と比べると, 陽電子原子の結合が弱いことがわか

る.

Mirtoy らは, 原子(A)のイオン化エネルギー(IE)とPsの束縛エネルギー(6.8 eV)の大小関係によって, 陽電子原子の束縛の形態をつぎのように分類した[13]. $\text{IE} > 6.8 \text{ eV}$ のとき, 原子 A は e^+ からの電場により誘導分極し, e^+ と束縛状態を形成する. 一方, $\text{IE} < 6.8 \text{ eV}$ のとき, 陽電子 e^+ は原子から e^- を引き抜き, 原子内部で Ps を形成する. Ps が残りのイオン A^+ からの電場により誘導分極し, A^+ と束縛状態を形成する. 陽電子 Li 原子は後者に分類される.

Cheng らによると[14], 26 種類の原子についてこれまで理論計算がなされ, そのうち 12 種類の原子(Ps, Li, Be, Na, Mg, Ca, Cu, Zn, Sr, Ag, Cd, Hg)が陽電子と束縛状態を形成し, 14 種類の原子(H, He, N, F, Ne, Cl, Ar, K, Br, Kr, Rb, Xe, Cs, Au)が束縛状態を形成しないと報告されている. この中でアルカリ土類金属原子の束縛エネルギーが大きく, 最大は Ca の 0.521(10) eV[15]である. さらに Cheng らは, 既に計算のある Hg を除く 11 種類の陽電子原子の束縛エネルギーと, 原子のイオン化エネルギー, 分極率, 価電子数との良い相関を見出し, この関係から新たに 24 種類(B, Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Ga, Ge, Mo, Tc, In, Sn, Sb, Te, Ba, Re, Tl, Pb, Bi)の原子が陽電子を束縛する可能性があり, 4 種類(C, O, P, S)が束縛しないと予言した[14]. ここで, 束縛状態を形成する中で, 最も大きい束縛エネルギーは Ti の 0.84 eV で, 周期表の Ti の両隣の原子である V と Sc が次に大きく, それぞれ 0.81 eV, 0.75 eV であった. いずれにしても, 陽電子原子は通常の原子と比べ結合が弱いことがわかる.

3. 陽電子アルカリ原子

著者らが最も注目している陽電子アルカリ原子($\text{APs}^+ = \text{A} + e^+$)について取り上げる. A はアルカリ原子を示す. Ps の束縛エネルギー(6.8 eV)の方が A 原子のイオン化エネルギー($\sim 5 \text{ eV}$)より大きいので, この陽電子原子は, 前述のようにアルカリ原子のイオンコア(A^+)に Ps が弱く結合した構造をとる. このため, この陽電子原子を APs^+ と記述する[16].

A は価電子(e^-)と, A^+ に分けることができる.

陽電子は正の電荷をもつため、陽電子原子では陽電子の波動関数はAの内部まで到達せず、Aから遠く離れた領域で e^- と主に相互作用する。この性質ゆえ、 A^+ をコアとして扱う三体近似は妥当である。三体系であれば、 APs^+ に対して精密な非経験的な理論計算が可能である。 e^+ と e^- のあらわな相関、 e^+ や e^- による A^+ の分極効果など、陽電子原子に現れる相互作用は一通り網羅されているので、 APs^+ は陽電子原子研究の雛形となる。

3.1 有効相互作用

A^+ は閉殻構造をとるため、Aのエネルギー準位は、 A^+ と e^- 間の有効ポテンシャルを用いた二体系のシュレディンガー方程式により精度よく求めることができる。この e^- に対する有効ポテンシャルは、 \mathbf{r}_e を原子核から見た e^- の位置ベクトルとして、

$$V_e(r_e) = V_{st}(r_e) + V_{exch}^{(l_e)}(r_e) + V_{pol}(r_e) \quad (1)$$

と書ける。 $V_{st}(r_e)$ は A^+ 内の電子による遮蔽効果を取り入れた原子核と e^- 間の静電的なクーロンポテンシャルである[17,18]。 $V_{exch}^{(l_e)}(r_e)$ は価電子と内殻電子との電子交換効果を表すポテンシャルで、角運動量子数 l_e に依存するとして、Furnessら[19]やGianturcoら[20]によって与えられた電子交換ポテンシャル $V_{exch}(r_e)$ に角運動量子数依存性を付加した。この依存性は小さいと考えられるので、ここでは簡単に、角運動量の二乗の固有値 $l_e(l_e+1)$ が良い量子数であることを利用して、

$$V_{exch}^{(l_e)}(r_e) = (1 - a_{exch} \mathbf{I}_e^2) V_{exch}(r_e) \quad (2)$$

と近似した。ここで、多体系でも使用できるように角運動量の二乗は、 \mathbf{I}_e^2 のように演算子の形にしておく。 a_{exch} は1より小さな定数で、 $V_{exch}(r_e)$ は、

$$V_{exch}(r_e) = U(r_e) - \sqrt{\{U(r_e)\}^2 + 16\pi\rho_e(r_e)} \quad (3)$$

と与えられる[20]。 $U(r_e)$ は静電ポテンシャル $V_{st}(r_e)$ と内殻電子密度 $\rho_e(r_e)$ を用いて、

$$U(r_e) = \frac{1}{2} \left[-V_{st}(r_e) + \frac{3}{10} \{3\pi\rho_e(r_e)\}^{\frac{2}{3}} \right] \quad (4)$$

と表される。 $V_{pol}(r_e)$ は、 e^- による A^+ の誘導分極により生じる分極ポテンシャルであり、

$$V_{pol}(r_e) = -\frac{\alpha_d}{2r_e^4} [1 - f(r_e)] \quad (5)$$

とおける。 α_d は A^+ の分極率である[21]。 $f(r_e)$ は短距離型関数で、

$$\lim_{r_e \rightarrow 0} V_{pol}(r_e) = \lim_{r_e \rightarrow 0} \frac{d}{dr_e} V_{pol}(r_e) = 0 \quad (6)$$

および

$$\lim_{r_e \rightarrow \infty} V_{pol}(r_e) = -\frac{\alpha_d}{2r_e^4} \quad (7)$$

の条件を満足するように選ぶ。

ここで得た有効ポテンシャルを用い、 A^+ と e^- の二体系のシュレディンガー方程式を解き、A原子の束縛状態や高励起状態($n'_e=1-5$, $l'_e=0-3$)のエネルギー準位およびその微細構造分裂の実験値[22]を精密に再現するように、有効ポテンシャル中の定数 a_{exch} や $f(r_e)$ の関数形が決定される[23]。なお、実験値には相対論効果が含まれるので、Dirac方程式をPauli近似して得られる相対論補正

$$H_A^{rel} = \alpha^2 \left(-\frac{1}{8} \nabla_e^4 + \frac{1}{8} \nabla_e^2 V_e(r_e) + \frac{1}{2} \frac{1}{r_e} \frac{dV_e(r_e)}{dr_e} \mathbf{I}_e \cdot \mathbf{s}_e \right) \quad (8)$$

を用い、一次の摂動計算からエネルギーの計算値に相対論補正を加える。ここで、 α は微細構造定数である($\alpha \approx 1/137$)。また、 ∇_e は \mathbf{r}_e に関する微分演算子、 \mathbf{s}_e は e^- のスピン演算子である。基底状態に対して 10^{-5} 、14個の励起状態で最高 10^{-4} の精度で実験値を再現できた[23]。ここで得られた e^- に対する有効ポテンシャル $V_e(r_e)$ を用いて、 e^+ に対する有効ポテンシャル

$$V_p(r_p) = -V_{st}(r_p) + V_{pol}(r_p) \quad (9)$$

を構築できる[10]。ここで、 \mathbf{r}_p は原子核から見た e^+ の位置ベクトルである。

3.2 三体系計算

陽電子アルカリ原子三体系の計算には、ガウス関数展開法(Gaussian Expansion Method; GEM)[24,25]を用いた。この方法は、これまでエキゾチック原子分子では、ミュオン水素分子イオ

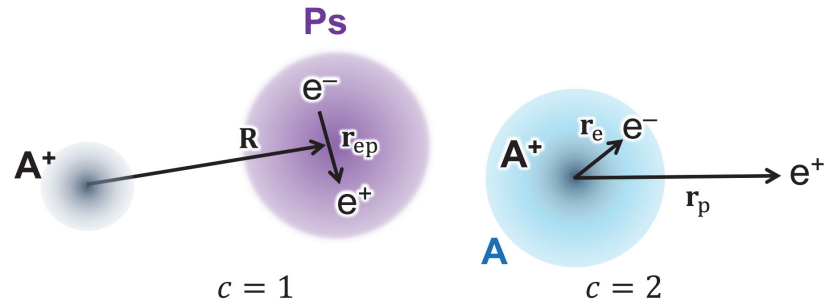


図 1: 三体計算に用いた 2 つのヤコビ座標系(原子核の質量を無限大と仮定している). $c = 1$ の座標系は, $\text{Ps}(e^-, e^+)$ と A^+ が相互作用する粒子配置を表現する. 一方, $c = 2$ の座標系は, e^- と e^+ がそれぞれ A^+ と相互作用するが, 実際には 2 つの粒子の電荷の符号の違いにより, $A(A^+, e^-)$ と e^+ が相互作用する粒子配置を表現する.

ン[26,27], 反陽子ヘリウム原子の超精密計算 [28–30]に使われ, 9桁の有効数字で実験値を再現した. また, これらのエキゾチック原子分子の他にも He 原子クラスター[31–33], 少数核子系 [34–36], 5クオーク系[37]など多彩な分野に応用され, 成功を収めている.

この方法は, 非断熱 *ab initio* 変分法の一つである. 三体の波動関数を 3 種類のヤコビ座標系で記述される部分波動関数の和として記述する. 座標変換を容易にするため, 各部分波動関数は, ガウス型基底関数と球面調和関数で展開される. 十分な個数のガウス関数を用意し, それぞれのガウス関数のレンジパラメータを等比数列

で与えることにより, 波動関数の近距離での複雑な変化から遠距離での穏やかな変化まで, 効率的に記述することができる. また, ガウス関数を使用することにより, 後述の相対論補正も含め, 全ての行列要素を解析的に計算でき, 数値積分を必要としないため, 高精度に計算することができる.

原子核の質量を無限大と仮定し, 図 1 に示す 2 つの座標系で陽電子アルカリ原子三体の全波動関数 Ψ を

$$\Psi = \Phi^{(1)}(\mathbf{r}_{ep}, \mathbf{R}) + \Phi^{(2)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) \quad (10)$$

のように記述する. それぞれの部分波動関数

表 2: 陽電子アルカリ原子の非相対論の束縛エネルギーと平均粒子間距離. FCSVM: Fixed Core Stochastic Variational Method, AHM: Adiabatic Hyperspherical Method, FEM: Finite Element Method

System	Method	Binding energy	$\langle r_e \rangle$	$\langle r_p \rangle$	$\langle r_{ep} \rangle$
LiPs ⁺	GEM [48,49]	0.002 505	9.041	9.900	3.399
	GEM [23]	0.002 579	8.987	9.859	3.403
	GEM [16]	0.002 615	8.950	9.824	3.404
	FCSVM [39,40]	0.002 478 9	9.110 1	9.967 8	3.396 7
	AHM [41]	0.002 455	9.135	9.991	3.393
	FEM [42]	0.002 37	9.01(10)	9.87(10)	3.40(5)
NaPs ⁺	GEM [48,49]	0.000 474	16.18	16.83	3.164
	GEM [23]	0.000 480	16.66	17.07	3.165
	GEM [16]	0.000 401	17.87	18.25	3.152
	FCSVM [43]	0.000 473	16.818	17.231	3.162
	AHM [41]	0.000 447	17.12	17.52	3.159
	FEM [44]	0.000 357	18.24	18.62	3.146

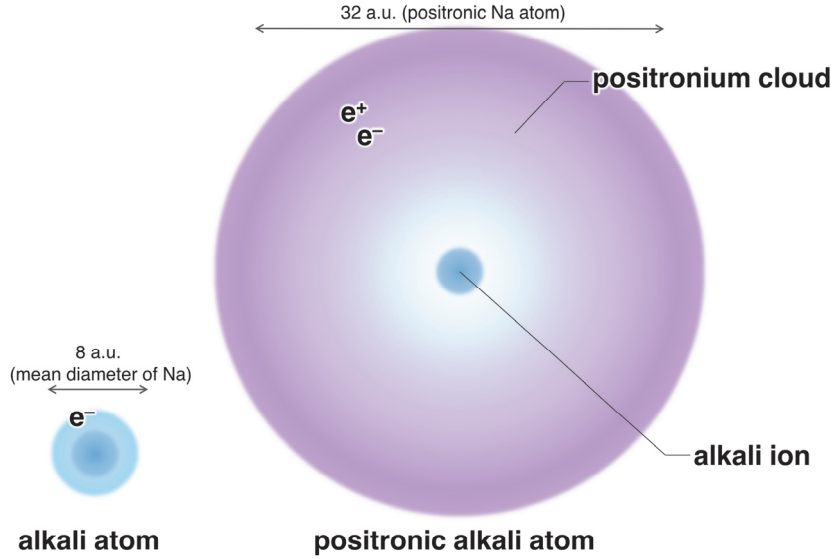


図 2: 陽電子ナトリウム原子 (NaPs^+) のイメージ図. 陽電子アルカリ原子では, アルカリ原子コアイオンの周りを Ps のハローが取り囲む.

$\Phi^{(c)}(\mathbf{x}_c, \mathbf{y}_c)$ は,

$$\Phi^{(c)}(\mathbf{x}_c, \mathbf{y}_c) = \sum_{n_c N_c l_c} A_{n_c N_c l_c}^c \exp(-\mu_{n_c} x_c^2 - \nu_{n_c} y_c^2) \cdot x_c^{l_c} y_c^{l_c} P_{l_c}(\cos \theta_c) \quad (11)$$

と展開する. ここで, $(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) = (\mathbf{r}_{\text{ep}}, \mathbf{R})$ または $(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2) = (\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$, θ_c は \mathbf{x}_c と \mathbf{y}_c のなす角, $P_l(\cos \theta_c)$ はルジャンドルの多項式を示す.

展開に使用した角運動量 l_c は, $0 \leq l_c \leq 3$ を用いることでエネルギーは良い精度で収束する. 相対論補正の計算では, $0 \leq l_c \leq 5$ まで取り入れ, 収束性のチェックを行った.

非相対論のエネルギー固有値 $E_{\text{APs}^+}^{\text{nr}}$ および波動関数の線形係数 $A_{n_c N_c l_c}^c$ は, Rayleigh-Ritz の変分原理に則って求められる. 陽電子アルカリ原子の場合, 約 8000 個のガウス型基底関数を用いることで有効数字 7 桁の精度で非相対論のエネルギーを得ることができる.

3.3 陽電子アルカリ原子のエネルギーと構造

三体系の非相対論ハミルトニアンは,

$$H_{\text{APs}^+}^{\text{nr}} = -\frac{1}{2} \nabla_e^2 - \frac{1}{2} \nabla_p^2 + V_e(r_e) + V_p(r_p) - \frac{1}{r_{\text{ep}}} + V_{2\text{pol}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) + \lambda \sum_i \left| \phi_i^{\text{core}}(r_e) \right\rangle \left\langle \phi_i^{\text{core}}(r_e) \right| \quad (12)$$

と与えられる. ∇_p は \mathbf{r}_p に関する微分演算子, $V_{2\text{pol}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$ は e^- と e^+ の相対的な位置によりイオンコアの分極ポテンシャルを補正する三体効果の項である. これは Norcross ら[38]により,

$$V_{2\text{pol}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = 2 \cos \theta_2 \sqrt{V_{\text{pol}}(r_e) V_{\text{pol}}(r_p)} \quad (13)$$

と与えられる. 最後の項は, 射影演算子により, 有効ポテンシャルを導入した際に計算上生じる擬状態 $\phi_i^{\text{core}}(r_e)$ (有効ポテンシャルがつくる内殻軌道に相当する状態) を排除するものである. λ に 1000 a.u. 程度の大きな値を入れると, 擬状態と重なる成分には大きな値がエネルギー固有値に加わることになり, 結果としてこの成分は束縛エネルギーに関与できなくなる.

最もエネルギーの低い解離しきい状態は $\text{A}^+ + \text{Ps}(1s)$ なので, 束縛エネルギーは,

$$-\mathcal{E}^{\text{nr}} = E_{\text{APs}^+}^{\text{nr}} - E_{\text{Ps}}^{\text{nr}}(1s) \quad (14)$$

と与えられる. $E_{\text{Ps}}^{\text{nr}}(1s) = -0.25$ は基底状態の Ps の非相対論のエネルギーである. 表 2 に束縛エネルギーと平均粒子間距離を示す. 我々の当初の計算 GEM[16]では, Albright らが提案した方法[50]に従って A 原子と e^- 間の有効ポテンシャルを決定した. この方法では, 交換ポテンシャルの角運動量依存性を考慮せず, 式(5)の短距離

表 3: 陽電子アルカリ原子 (LiPs^+ , NaPs^+), アルカリ原子 (Li , Na), Ps についての非相対論的計算による束縛エネルギー (ε^{nr}), 電子-陽電子スピン三重項に対応する相対論補正を含めた束縛エネルギー (ε^{rel}), および相対論補正の相対比 ($(\varepsilon^{\text{rel}} - \varepsilon^{\text{nr}}) / \varepsilon^{\text{rel}}$) [48,49]. 表中の $\{ \}$ 内の数字は, 電子-陽電子スピン三重項についての値を示す.

system	LiPs^+	$\text{Li}(2s)$	NaPs^+	$\text{Na}(3s)$	$\text{Ps}(1s)$
ε^{nr}	0.002 505	0.198 126	0.000 474	0.188 576	0.250 000
ε^{rel}	0.002 511 {0.000 2507}	0.198 140	0.000 491 {0.000 489}	0.188 877	0.249 986 {0.250 018}
$\frac{\varepsilon^{\text{rel}} - \varepsilon^{\text{nr}}}{\varepsilon^{\text{rel}}} \text{ (%)}$	0.21 {0.06}	0.007	3.4 {3.1}	0.16	-0.005 {0.007}

型関数 $f(r_e)$ を

$$f(r_e) = \exp\left\{-\left(\frac{r_e}{r_c}\right)^6\right\} \quad (15)$$

として, r_c と分極率 α_d の 2 つのみをエネルギー準位のフィッティングパラメータにしていたため, p, d 状態の再現性に問題があった. また, 実験値[22]との比較にあたって相対論も考慮されていなかった. GEM[23]では, 角運動量依存性を入れ, 式(5)の $f(r_e)$ を 40 個のガウス関数で展開し, 原子のエネルギー準位の再現性を上述の精度まで格段に向上させた. GEM[48,49]では, 相対論の補正も加えて, 微細構造分裂まで再現するようにポテンシャルのパラメータを決定した. 相対論補正は短距離相互作用のため, これまで任意性の高かった短距離部分のポテンシャルの形状を決めることができた. これらのことから, APs^+ の浅い束縛エネルギーは, 有効ポテンシャルの形状に敏感であることがわかる.

粒子間距離の期待値から, APs^+ では Ps が A^+ から離れて結合していることがわかる. Ps の $1s$ の粒子間距離の期待値は 3 a.u. であり, それぞれ若干距離が伸びているのは, A^+ からのクーロン相互作用により Ps が分極しているためだと考えられる. Ps と A^+ 間の角運動量はほぼ s 波であり, APs^+ は A^+ の周りを Ps の雲 (positronium cloud) が等方的に広がっていると考えられる (図 2).

この場合, Ps の波動関数は, $\alpha_d/2R_0^4 = \varepsilon_{\text{APs}^+}^{\text{nr}}$ で与えられる古典的回帰点 (R_0) を大きく超えて広がり, ハローと呼ばれる特異的な量子状態を形成する[51]. 通常の原子分子系における束縛は長距離力のクーロン引力が支配的で, ハロー

は発現しにくい. 希ガス少数多体系や陽電子原子などの弱束縛状態においては, 束縛を支配する相互作用がファンデルワールス力や誘起分極などの短距離力となり, ハローを形成しうる.

3.4 相対論補正

相対論補正 $H_{\text{APs}^+}^{\text{rel}}$ は, Breit-Pauli 相互作用 [45,46] に基づき,

$$H_{\text{APs}^+}^{\text{rel}} = \alpha^2 (H_{\text{mv}} + H_{\text{D}} + H_{\text{oo}} + H_{\text{ss}} + H_{\text{a}}) \quad (16)$$

と与えられる. ここで H_{mv} は運動量補正項, H_{D} はダーウィン項, H_{oo} は遅延項, H_{ss} はスピン-スピン相互作用項, H_{a} は電子・陽電子の仮想対消滅を反映する項であり, それぞれ,

$$H_{\text{mv}} = -\frac{1}{8} (\nabla_{\text{e}}^4 + \nabla_{\text{p}}^4) \quad (17)$$

$$H_{\text{D}} = \frac{1}{8} \left\{ \nabla_{\text{e}}^2 V_{\text{e}}(r_{\text{e}}) + \nabla_{\text{p}}^2 V_{\text{p}}(r_{\text{p}}) \right\} + \pi \delta(\mathbf{r}_{\text{ep}}) \quad (18)$$

$$H_{\text{oo}} = -\frac{1}{2} \left[\frac{\nabla_{\text{e}} \cdot \nabla_{\text{p}}}{r_{\text{ep}}} + \frac{\mathbf{r}_{\text{ep}} \cdot (\mathbf{r}_{\text{ep}} \cdot \nabla_{\text{e}}) \nabla_{\text{p}}}{r_{\text{ep}}^3} \right] \quad (19)$$

$$H_{\text{ss}} = \frac{8\pi}{3} \mathbf{s}_{\text{e}} \cdot \mathbf{s}_{\text{p}} \delta(\mathbf{r}_{\text{ep}}) \quad (20)$$

$$H_{\text{a}} = 2\pi \left(\frac{3}{4} + \mathbf{s}_{\text{e}} \cdot \mathbf{s}_{\text{p}} \right) \delta(\mathbf{r}_{\text{ep}}) \quad (21)$$

と与えられる. ここで, \mathbf{s}_{p} は e^+ のスピン演算子である. 陽電子アルカリ原子の相対論補正は, 一次の摂動論により,

$$\Delta E_{\text{APs}^+}^{\text{rel}} = \left\langle \Psi \left| H_{\text{APs}^+}^{\text{rel}} \right| \Psi \right\rangle \quad (22)$$

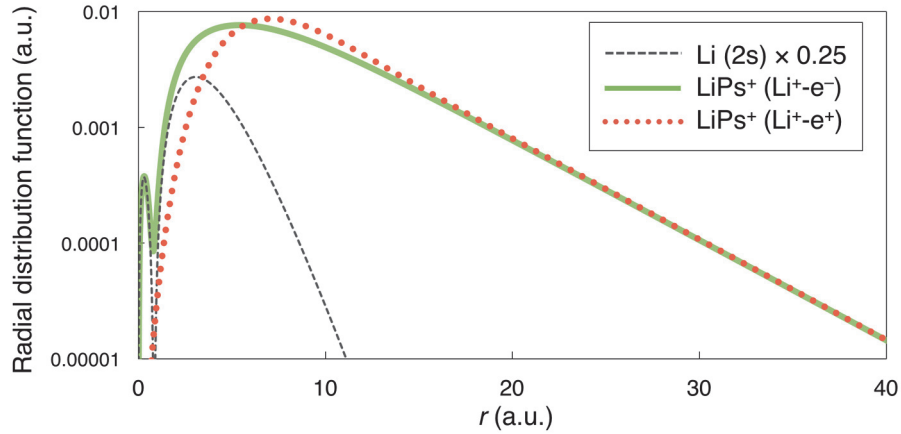


図 3: LiPs⁺中の Li⁺e⁻, Li⁺e⁺間の動径分布関数 ($D_e(r)$, $D_p(r)$). 遠方で電子と陽電子の分布が重なり, Li⁺ + Ps の配置をとる. $D_e(r)$ は r が小さい領域で $D_p(r)$ より大きく, Li 原子の価電子の分布と似た振る舞いを示す. また, $D_p(r)$ は $r = 8$ 付近で $D_e(r)$ より大きくなっている. これらは, 波動関数の成分について Li⁺ + Ps の配置が優勢だが, Li + e⁺ の配置 (式 (10) の第 2 項) の寄与も無視できないことを示している[16].

から計算される[47–49]. 相対論補正も含む束縛エネルギーは,

$$\begin{aligned} -\varepsilon^{\text{rel}} &= \left\{ E_{\text{APs}^+}^{\text{nr}} + \Delta E_{\text{APs}^+}^{\text{rel}} \right\} - \left\{ E_{\text{Ps}}^{\text{nr}}(1s) + \Delta E_{\text{Ps}}^{\text{rel}}(1s) \right\} \\ &= -\varepsilon^{\text{nr}} + \Delta E_{\text{APs}^+}^{\text{rel}} - \Delta E_{\text{Ps}}^{\text{rel}}(1s) \end{aligned} \quad (23)$$

で与えられる. ここで, $\Delta E_{\text{Ps}}^{\text{rel}}(1s) = 0.000\ 0136$ はスピン三重項の o-Ps (オルソポジトロニウム) の相対論補正である¹.

陽電子アルカリ原子 (LiPs⁺, NaPs⁺), アルカリ原子 (Li, Na), Ps について, 非相対論の束縛エネルギー (ε^{nr}), 相対論効果を含めた束縛エネルギー (ε^{rel}), および相対論補正の相対比を表 3 に示した. 相対論補正の値は小さいが, 束縛エネルギーが小さい陽電子アルカリ原子の方がアルカリ原子に比べ, 相対比はずっと大きくなる. LiPs⁺ は Li に比べ 31 倍 (三重項), 8 倍 (一重項) 大きくなり, NaPs⁺ は Na に比べ 22 倍 (三重項), 20 倍 (一重項) 大きくなった. アルカリ原子は陽電子と結合することにより, 束縛は弱くなったが, 逆に相対論効果はクローズアップされることにな

¹ Ps にはスピン一重項の p-Ps (パラポジトロニウム) があり, p-Ps は o-Ps より 0.0000311 a.u. エネルギーが低い, その寿命が短いため (o-Ps: 142 ns, p-Ps: 0.125 ns), 観測にかかるのは主に o-Ps と A⁺ が結合した陽電子アルカリ原子であると考えられる.

った. このメカニズムについて次のセクションで議論する.

3.5 陽電子アルカリ原子の結合様式

これまでの多くの陽電子アルカリ原子の計算 [13,15,39–44,52–57] で指摘されているように, その支配的な束縛機構は A⁺ による Ps の分極である. アルカリ原子のイオン化エネルギー (~5 eV) が Ps の束縛エネルギー (6.8 eV) よりも小さいため, 陽電子がアルカリ原子と束縛する際に, 陽電子は価電子を強く引きつけ, 原子内で Ps を形成する. 表 2 で示したように Ps はアルカリ原子コアイオンからみて遙か彼方に存在する. つまり, ほぼ 1 価の正電荷と僅かに分極した Ps が緩く結合していると考えられる. ところが, 同様な系でも H⁺ は Ps と結合しない. もう少し正確に述べると, 水素原子の束縛エネルギーは Ps の 2 倍なので, H + e⁺ に解離してしまう. しかし, 1 価の電荷が Ps を分極し結合状態をつくるのが可能ならば, Ps + H⁺ の解離しきい値の近くに共鳴状態があってもおかしくない. Toya らは, 多くの試行関数を用意し大規模な変分計算を行ったが共鳴状態の痕跡も見つけられなかった. しかし, 水素原子の電荷の大きさを人為的に 1 からずらして計算すると, $Z = 1.14$ で共鳴状態が発現した[58,59]. つまり, Ps がイオンと結合するためには, 1 価のクーロン

ポテンシャルの他に別の引力の助けが必要である。

図 3 に LiPs^+ 中の電子と陽電子の動径分布関数

$$D_e(r) = r_e^2 \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}) | \Psi \rangle \quad (24)$$

$$D_p(r) = r_p^2 \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}) | \Psi \rangle \quad (25)$$

を示す。遠方では 2 つの関数は同一の直線上になっている。この直線の傾きを計算すると、 Ps と Li^+ の束縛エネルギーに等しくなっており、遠方では $\text{Li}^+ + \text{Ps}$ の配置となっていることがわかる。

一方、 $r < 2$ で、 $D_e(r)$ は Li の価電子の動径分布関数に似た形になっている。また、この領域で、 $D_p(r)$ は急激に減衰するので、陽電子は電子より遠いところに分布している ($r \sim 8$ での $D_p(r)$ と $D_e(r)$ のわずかな差が、遠くにいる陽電子の成分を示す)。つまり、電子が原子核の近くにいるとき、配置は $\text{Li} + e^+$ となっていることがわかる。また、 NaPs^+ においても同様の $D_e(r)$ 、 $D_p(r)$ の振る舞いが見られる。

原子核近傍では、内殻電子の遮蔽が効かないため、電子は 1 価より大きな電荷を感じる。我々は、この分の寄与が加わることにより、 H^+ と Ps のときより結合が強くなり、 A^+ と Ps が束縛状態を形成できると結論した[16]。

次に、図 4 に LiPs^+ 中の $e^- - e^+$ 間相関関数を示す。相関関数は、

$$C_{ep}(r) = \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_{ep} - \mathbf{r}) | \Psi \rangle \quad (26)$$

で与えられ、三体波動関数 Ψ 中の Ps 成分の波動関数二乗形を表す。波動関数の大部分は $\text{Ps}(1s)$ の成分であるが、遠方では Ps の励起状態成分の混合により e^+ と e^- 間の波動関数が $\text{Ps}(1s)$ より広がっていることがみてとれる。三体波動関数と $\text{Ps}(1s)$ のオーバーラップは、 LiPs^+ は 87%、 NaPs^+ は 95% で、原子核からの距離が長いほど、確率は高くなった[16]。

先に議論した相対論効果は、原子番号に強く依存する。つまり、相対論効果は A^+ の中心部で大きくなる。陽電子アルカリ原子のなかで、 $\text{A} + e^+$ と配置した成分が相対論効果の源となる。なお、 $\text{A}^+ + \text{Ps}$ 成分のなかの Ps にも相対論効果がある

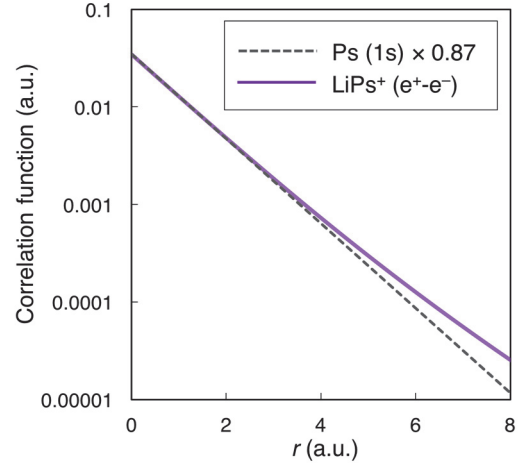


図 4: LiPs^+ 中の価電子-陽電子間の相関関数(実線)。自由な $\text{Ps}(1s)$ の相関関数(破線)は対数スケールで直線となるが、 LiPs^+ 中の価電子-陽電子間の相関関数は遠方で $1s$ の相関関数から外れていることがわかる。これは、 Ps の励起状態の成分が混合するためである[16]。

が、三体波動関数と $\text{Ps}(1s)$ のオーバーラップの確率が 1 に近いため、式(23)の束縛エネルギーの計算の際、 $\Delta E_{\text{Ps}}^{\text{rel}}(1s)$ と相殺してしまう。

4. 結語

陽電子アルカリ原子の構造的な特異性について考察した。 Ps が A^+ からのクーロン相互作用で分極し結合状態をつくるが、このとき寄与の値自体は小さいものの、 e^- が再び A^+ と結合して e^+ と相互作用する $\text{A} + e^+$ の配置が、 APs^+ の結合には不可欠である。

この系が相対論効果という短距離の相互作用にも敏感である[47–49]ということは新たな知見である。この相対論効果がクローズアップされる機構にも $\text{A} + e^+$ の配置が重要な役割を果たしていると考えられる。

また、これまで相対論効果は重元素について大きく取り上げられてきたが、今回取り上げたような軽元素では、原子核の構造などがよく解明されているため、相対論効果や QED など、より精密な検証を行えるという可能性を秘めている。

現在、陽電子アルカリ原子を実験的に生成することは難しいが、共鳴状態を経ての精密計算を通して生成機構について検討している。

参考文献

- [1] 日本アイソトープ協会編, “陽電子計測の科学” 日本アイソトープ協会(1993)
- [2] 澁谷憲悟, 齋藤晴雄, しょうとつ, **15**, 182 (2015).
- [3] P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Philos. Soc. **26**, 361 (1930).
- [4] C. D. Anderson, Phys. Rev. **43**, 491 (1933).
- [5] S. Mohorovičić, Astron. Nachr. **235**, 93 (1934).
- [6] M. Deutsch, Phys. Rev. **82**, 455 (1951).
- [7] J. A. Wheeler, Ann. N. Y. Acad. Sci. **48**, 219 (1946).
- [8] A. P. Mills, Jr., Phys. Rev. Lett. **46**, 717 (1981).
- [9] M. Charlton, J. W. Humberston, ‘Positron Physics’, (Cambridge University Press) 2001.
- [10] G. G. Ryzhikh, J. Mitroy, Phys. Rev. Lett. **79**, 4124 (1997).
- [11] T. Andersen, Phys. Rep. **394**, 157 (2004).
- [12] H.-L. Han, X.-Z. Zhang, T.-Y. Shi, Chin. Phys. Lett., **12**, 3392 (2007).
- [13] J. Mitroy, M. W. J. Bromley, G. Ryzhikh, J. Phys. B **35**, R81 (2002).
- [14] X. Cheng, D. Babikov, D. M. Schrader, Phys. Rev. A **83**, 032504 (2011).
- [15] M. W. J. Bromley, J. Mitroy, Phys. Rev. A **73**, 032507 (2006).
- [16] Y. Kubota, Y. Kino, New J. Phys. **10**, 023038 (2008).
- [17] D. R. Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. **24**, 111 (1928).
- [18] J. Mitroy, PhD Thesis University of Melbourne (1983).
- [19] J. B. Furness, I. E. McCarthy, J. Phys. B **6**, 2280 (1973).
- [20] F. A. Gianturco, S. Scialla, J. Phys. B **20**, 3171 (1987).
- [21] T. Gien, Phys. Rev. A **35**, 2026 (1987).
- [22] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.2) <http://physics.nist.gov/asd>.
- [23] T. Yamashita, Y. Kino, J. Phys. Conf. Ser **618**, 012009 (2015).
- [24] E. Hiyama, Y. Kino, M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).
- [25] 肥山詠美子, 木野康志, 上村正康, 日本物理学会誌, **61**, 27 (2006).
- [26] M. Kamimura, Phys. Rev. A **38**, 621 (1988).
- [27] Y. Kino, M. R. Harston, I. Shimamura, E. A. G. Armour, and M. Kamimura, Phys. Rev. A **52**, 870 (1995).
- [28] Y. Kino, M. Kamimura and H. Kudo, Hyperfine Interact. **119**, 201 (1999).
- [29] N. Yamanaka, Y. Kino, H. Kudo, M. Kamimura, Phys. Rev. A **63**, 012518 (2000).
- [30] Y. Kino, H. Kudo, M. Kamimura, Mod. Phys. Lett. A **18**, 388 (2003).
- [31] E. Hiyama and M. Kamimura, Phys. Rev. A **85**, 022502 (2012).
- [32] E. Hiyama and M. Kamimura, Phys. Rev. A **85**, 062505 (2012).
- [33] 上村正康, 肥山詠美子, しょうとつ, **9**, 20 (2012); **9**, 31 (2012).
- [34] E. Hiyama, Few-Body Syst. **56**, 787 (2015).
- [35] E. Hiyama and T. Yamada, Prog. Part. Nucl. Phys. **63**, 339 (2009).
- [36] E. Hiyama, Prog. Theor. Exp. Phys. **2012**, 01A204 (2012).
- [37] E. Hiyama, M. Kamimura, A. Hosaka, H. Toki, M. Yahiro, Phys. Lett. B **633**, 237 (2006).
- [38] D. W. Norcross, M. J. Seaton, J. Phys. B **9**, 2983 (1976).
- [39] J. Mitroy, Phys. Rev. A **70**, 024502 (2004).
- [40] J. Mitroy, Phys. Rev. Lett., **94**, 033402 (2005).
- [41] H.-L. Han, Y. Li, X.-Z. Zhang, T.-Y. Shi, J. Chem. Phys. **128**, 244314 (2008).
- [42] J. Shertzer, S. Ward, Phys. Rev. A **73**, 022504 (2006).
- [43] J. Mitroy, G. Ryzhikh, J. Phys. B **32**, L621 (1999).
- [44] J. Shertzer, S. Ward, Phys. Rev. A **81**, 064505 (2010).
- [45] H. A. Bethe, E. E. Salpeter, ‘Quantum

- Mechanics of One and Two-Electron Atoms', (Plenum, New York) 1977.
- [46] V. B. Berestetskiĭ, E. M. Lifshitz, L. P. Pitaevskii, 'Kvantovaya Elektrodinamika (Quantum Electrodynamics)', (Nauka Moscow) 1989, *in Russian*.
- [47] T. Yamashita, A. Irisawa, Y. Kino, Jpn. J. Appl. Phys. Conf. Proc. **2**, 011005 (2014).
- [48] T. Yamashita, Y. Kino, J. Phys. Conf. Ser. **635**, 052086 (2015).
- [49] T. Yamashita, Y. Kino, (to be submitted).
- [50] B. J. Albright, K. Bartschat, P. R. Flicek, J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. **26**, 337 (1993).
- [51] J. Mitroy, Phys. Rev. Lett., **94**, 033402 (2005).
- [52] G. Ryzhikh, J. Mitroy, Phys. Rev. Lett. **79**, 4124 (1997).
- [53] K. Strasburger, H. Chojnacki, J. Chem. Phys. **108**, 3218 (1998).
- [54] G. Ryzhikh, J. Mitroy, K. Varga, J. Phys. B **31**, 3965 (1998).
- [55] J. Yuan, B. Esry, T. Morishita, C. Lin, Phys. Rev. A **58**, R4 (1998).
- [56] J. Mitroy, M. W. J. Bromley, G. Ryzhikh, J. Phys. B **32**, 2203 (1999). 1,5-15
- [57] A.-T. Le, M. Bromley, C. Lin, Phys. Rev. A **71**, 032713 (2005).
- [58] Y. Toya, PhD Thesis Tohoku University (2003).
- [59] Y. Toya, Y. Kino, H. Kudo, Mater. Sci. Forum **445**, 446 (2004).

多価イオンの物理とその応用：これまでの進展と今後の展開 第4回 多価イオンと電子の相対論的相互作用

中村信行

電気通信大学レーザー新世代研究センター 〒182-8585 東京都調布市調布ヶ丘 1-5-1

n_nakamu@ils.uec.ac.jp

平成 28 年 1 月 17 日原稿受付

電子と多価イオンの衝突過程は、高温プラズマ中素過程の中で最も基本的かつ重要なものであり研究の歴史も比較的長いですが、近年でも衝突物理的に興味深い話題を提供している。その一つが2電子性再結合と呼ばれる共鳴過程であり、特にその共鳴強度やX線放射角度分布において現れるブライト相互作用と呼ばれる相対論効果である。重元素多価イオンのエネルギー準位では重要であると認識されつつも補正の域を決して出ていなかった相対論効果が、電子-重元素多価イオンの衝突過程においてはクーロン相互作用を凌駕して支配的な寄与を示す例がいくつか報告され、実験、理論の両面で精力的な研究が進められている。筆者らの成果を中心に、主に電子ビームイオントラップを用いて行われている研究の進展について紹介する。

1. はじめに

本シリーズのイントロダクション [1] で既に書いたように、多価イオン研究はプラズマ物理の一部として始まったと言っても良いであろう。本稿で扱う電子と多価イオンの衝突過程は、そのプラズマ中の素過程の中でも最も重要なものであり、従ってその歴史も長い。励起、電離、再結合の3つの主要な過程がそれぞれどれだけの反応速度係数を持つかがプラズマを理解する上で重要であり、それらの基礎データの蓄積が実験、理論の両面から行われてきた。先人から連綿と続けられているその尽力の成果は、様々なデータベースにまとめられ、人類の財産となっている [2]。

語弊を恐れずに言えば、その財産においては反応速度係数（あるいは衝突断面積）がどのような値であるかのみが重要であり、「なぜ」そのような値になっているかは気にしなくても良い。しかし原子衝突物理を生業とする研究者にとっては、逆に値そのものよりも「なぜ」の部分に当然興味が湧く。特に、市川行和先生のお言

葉 [3] をお借りすれば、「研究者は滑らかなものを見てもあまり関心を持たないが、凹凸のあるものを見ると不思議に思う」ため、共鳴過程などは「プラズマの理解」というもともとの動機を忘れて研究に駆り立てられるようになる。本稿では、電子と多価イオンの衝突における「なぜ」を紐解く重要な鍵の一つである相対論効果について、特に共鳴過程である2電子性再結合 [4] に注目しつつ紹介したい。

2. 電子衝突における相対論効果

前稿 [1] で書いたように、重元素多価イオンのエネルギー準位には相対論効果が顕著に現れる。その場合の相対論効果とは、主に電子のスピン磁気モーメントと軌道磁気モーメントとの磁氣的相互作用、つまりスピン-軌道相互作用であり、その結果は微細構造として現れる。電子が複数ある場合には、電子間相互作用にも軌道-軌道、スピン-スピン、スピン-他軌道¹ という磁

¹一方の電子のスピン磁気モーメントと他方の電子の軌道磁気モーメントとの相互作用。この「スピン-他軌道」という日本語が正しいかどうかは分からないが、英語では spin-other-orbit という言葉が使われる。

氣的相互作用が相対論効果として静電的クーロン相互作用に加わる。この磁氣的相互作用を含め、電子間相互作用は量子電磁力学の枠組みでは仮想光子のやりとりとして記述される。そこには、クーロン相互作用や上述の磁氣的相互作用に加え、横波成分から生じる遅延効果 [5]、つまり光子の速度が有限であり相互作用の伝播時間も有限であることに基づく効果も含まれる。電子間相互作用のうち、磁氣的相互作用と遅延効果は合わせてブライト相互作用 [5, 6] と呼ばれ、非相対論的な静電的クーロン相互作用に対する相対論補正項として扱われる。ブライト相互作用はやはり重元素多価イオンにおいて重要となるが、エネルギー準位においては電子間相互作用自体が電子-核相互作用に比べて相対的に小さくなるため（つまり電子が独立して運動する水素様波動関数に近付くため）、その寄与は微小な補正の域を出ない。換言すれば、エネルギー準位を決めるハミルトニアンにおいては原子核による大きなポテンシャルが主項として存在するため、それに摂動的に加わる電子間相互作用ポテンシャルの相対論補正はいくら重元素多価イオンであっても見えづらい。一方、電子-イオン衝突過程の相互作用ポテンシャルにおいては電子間相互作用が主項となるため、その相対論補正項であるブライト相互作用の寄与が見えやすく、標的が重元素多価イオンの場合にはときに顕に現れるようなことが起こる。

磁氣的相互作用、遅延効果のいずれを考えた場合でも、相互作用する互いの電子が高速で運動しているときに重要となってくる。従って多価イオンでなく中性原子であっても、例えば相対論的エネルギーを持った電子による内殻電子の電離や励起過程を考えるのであれば、ブライト相互作用が重要になってくるであろう。しかし、電子衝突電離や励起においては外殻電子が寄与する断面積の方が圧倒的に大きいため、少なくとも実験でそのような研究は難しいと考えられる。その意味で本稿で述べる顕著なブライト相互作用の効果は、多価イオンに特徴的なものであると言ってよいであろう。

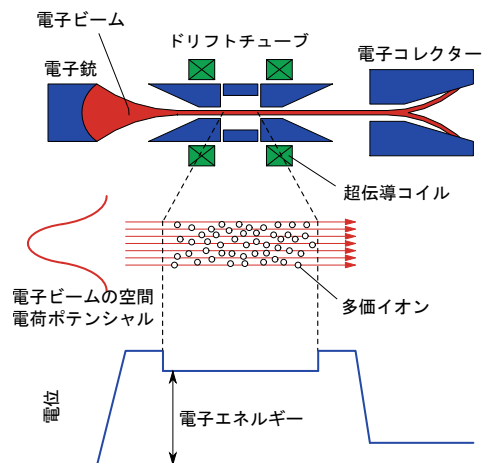


図 1: 電子ビームイオントラップの原理概略図。

3. 実験手法

電子と重元素多価イオンとの衝突過程を実験的に調べる装置としては、主に蓄積リング [7] と電子ビームイオントラップ (electron beam ion trap: EBIT) [8, 9] が挙げられる。蓄積リングによる実験は、周回する高速イオンに電子冷却器の電子ビームを合流させる手法が一般的であるため、相対速度が 0 に近いような低エネルギー領域の衝突実験に特に有用であるが、電子冷却器とは別にイオンを冷却する機構を設けることができれば、電子は標的としてのみ用いることが可能となるため、より高いエネルギー領域での実験も可能である。例えば、ドイツの重イオン研究所 GSI の重イオン蓄積リング ESR では、イオン冷却に確率冷却 (stochastic cooling) を用いることで、衝突エネルギーが 100 keV 程度にも及ぶ実験を可能としている [10]。イオン、電子ともに電流やビーム形状を測定することが可能であるため、断面積の絶対値が得やすいことも特長の一つである。

一方 EBIT は、強磁場で圧縮した高エネルギー高密度電子ビーム (典型的に数~数百 keV, $10^{10} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$) による逐次電離で多価イオンを生成する装置であり、図 1 に模式的に示すように、主に電子銃、ドリフトチューブ、電子コレクター、超伝導コイルから成る。ドリフトチューブは 3 つあるいはそれ以上に分割された円筒型電極で

あり、そこに井戸型電位を印可することによって、軸方向にイオンを閉じ込める。径方向には、超伝導コイルによる軸方向の強磁場と、高密度に圧縮された電子ビームの空間電荷ポテンシャルによって、やはりイオンを閉じ込める。このようにトラップされたイオンが、高エネルギー電子による逐次電離を受け、多価イオンが生成される。電子ビームを多価イオン生成のみならず電子衝突実験のプローブとしても利用することで、EBITは多価イオン源であると同時に電子-多価イオン衝突実験装置にもなる。調べたい衝突エネルギーがイオンを生成するために必要なエネルギーと異なる場合には、まず生成エネルギーでイオンを生成した後、プローブ・エネルギーまで瞬時に下げたり高速掃引したりするなどの必要がある。原理的に、ある特定の価数を持ったイオンのみを生成することはできないので、標的となる多価イオンはある価数分布を持つが、単色電子ビームであるために、プラズマ装置などに比べると狭い価数分布を持つ。

EBITはアメリカのローレンス・リバモア研究所で20年以上前に開発された装置であるが、当初から多価イオンの電子衝突実験に威力を發揮した。例えばMarrsら[11]は、Super-EBITと呼ばれる高電子エネルギーEBITを用いて水素様ウランイオンの電子衝突電離断面積を測定し、その値が当時存在した理論値よりも50%ほど大きいことを指摘した。後の理論研究[12]により、この50%の増大はブライト相互作用を考慮に入れることで説明できることが分かった。図2にそのウランの結果も含めた水素様イオンの電離断面積の原子番号依存性を示す。クーロン相互作用のみを考慮した場合、電離断面積の値は原子番号の4乗で大凡スケールされるが、ブライト相互作用の寄与によりスケールから大きく外れ、ウランでは50%の増大をもたらしていることが分かる。また、Widmannら[13]はヘリウム様キセノンの励起断面積をやはりSuper-EBITを用いて測定し理論計算と比較することによって、ブライト相互作用が断面積を半分以下に減じることを指摘した。このように、ブラ

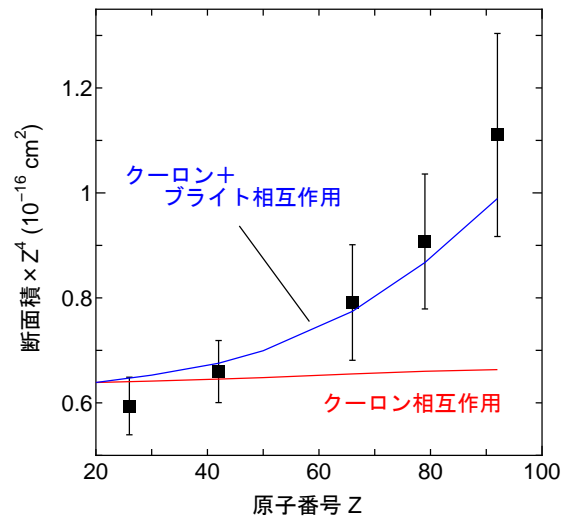
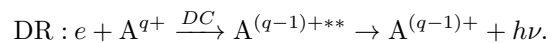
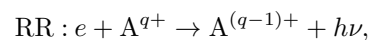


図2: 水素様イオンの電離断面積の原子番号依存性。■は実験値 [14, 15] で衝突エネルギーはいずれも約 1.5 (しきい値単位)。赤実線、青実線は衝突エネルギー 1.5 (しきい値単位)における理論値 [12] で、前者はクーロン相互作用のみ、後者はクーロン相互作用に加えブライト相互作用を考慮したもの。

イト相互作用効果は断面積の増大となって現れる場合もあれば減少となって現れる場合もある。

4. 2 電子性再結合過程

電子とイオンの衝突における再結合過程は、放射性再結合 (radiative recombination: RR) と 2 電子性再結合 (dielectronic recombination: DR) の 2 つに大別される [4]。



前者は入射電子と標的イオンの原子核との相互作用によって引き起こされる過程であるのに対して、後者は入射電子と標的イオン内の束縛電子との相互作用によって引き起こされる過程であるため、その点で両者は本質的に異なる。本稿では電子間相互作用に興味があるため、DRに絞って話を進める。DRは上式に示されるように2段階に分けることができ、まず2電子性電子捕獲 (dielectronic capture: DC) により内殻励起状態が中間状態として生成され、それが

光放射脱励起することにより完結する。DCにおいて注目して頂きたいのは、図3(a)に模式的に示したように、自由電子がイオンの束縛状態に捕獲されると同時に、その余剰エネルギーによってイオンの内殻電子が励起している点である。つまり、図中の E_1 と E_2 が一致するような電子エネルギーであるときにのみ起こる共鳴的な過程である。一方RRは、本稿で注目しているような相対論的な電子エネルギーに対しては緩やかな依存性しか持たない非共鳴過程であり、DRとはこの点でも本質的に異なる²。DCにより生成された内殻励起状態が自動電離すれば共鳴弾性散乱となるが、重元素多価イオンでは内殻励起状態の蛍光収量³がほぼ1であるため、共鳴弾性散乱へのパスはほとんどの場合考える必要がない。つまり、DR断面積はDC断面積に等しい。またDCは自動電離の逆過程であるため、その断面積は自動電離確率によって決まる。つまり、DR断面積は中間状態として生成される内殻励起状態の自動電離確率 $2\pi |\langle \psi_d | V | \psi_i \rangle|^2$ によって決まることになる。ここで ψ_i は入射電子を含む初期状態、 ψ_d は内殻励起状態、 V は電子間相互作用ポテンシャルである。

DRをEBITで観測する方法は主に二通りある[18]。一つは、生成された内殻励起状態の安定化に伴い放出されるX線を観測する方法である。電子ビームエネルギーを掃引しながらX線を観測すると、非共鳴エネルギーにおいてはRRによるX線のみが観測されるが、共鳴エネルギーにおいてはDRの寄与がX線強度の増大となって観測される。このX線強度の増大分を、一般に断面積計算の信頼性が高いとされているRRのX線強度に規格化することで、DRの断面積

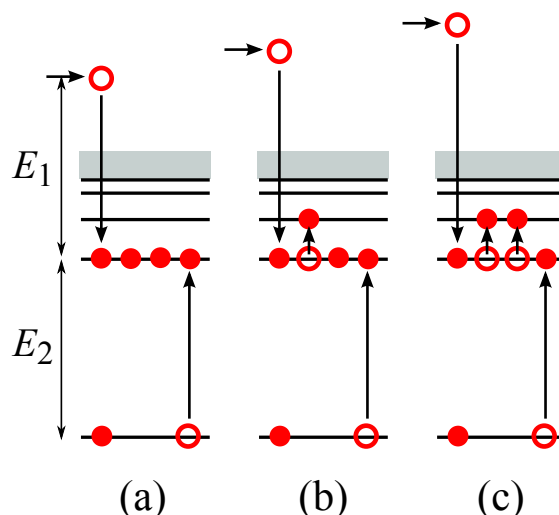


図3: (a)2電子性電子捕獲(DC), (b)3電子性電子捕獲(TC), (c)4電子性電子捕獲(QC)の模式図。生成された内殻励起状態がX線放出により脱励起した場合、それぞれ2電子性再結合(DR), 3電子性再結合(TR), 4電子性再結合(QR)となる。

を得ることができる。なお、多くの実験では電子ビームに対して90°方向からX線を観測するが、X線強度には異方性があることに注意する必要がある。DRを観測するもう一つの方法は、EBIT内イオンの価数分布を電子ビームエネルギーの関数として測定する方法である。一般に価数分布は電子ビームエネルギーに対して緩やかな依存性しか持たないが、共鳴エネルギーにおいてはDRによる価数分布の急激な変化が見られる。例えば、 A^{q+} イオンのDR共鳴エネルギーでは A^{q+} イオンが減少し $A^{(q-1)+}$ イオンが増加するため、DR断面積の大きさに依存してそれらのイオン量の比 n_{q-1}/n_q が増大する。イオン量の絶対値を知ることは難しいが、比であればEBITから引き出したイオンの価数分析により測定することが出来る。前者のX線による観測では、RRに規格化することで絶対値が得られることが利点である一方、トラップ内の複数の価数を持ったイオンからの寄与が分離しづらいことが欠点である。逆に後者の価数分布による観測では、異なる価数からの寄与は電磁石等により完全に分離できる一方、断面積の絶対値を得ることが困難であるという難点がある。

²RRとDRが「本質的に異なる」と2度も書いたが、前頁の反応式を見ても分かるように、両者は等しい始状態と終状態を持ちうるため可干渉である。つまり、RRとDRを完全に独立に扱うことは出来ず、それぞれの断面積を σ_{RR} および σ_{DR} などとして、再結合断面積をその足し合わせ $\sigma_{RR} + \sigma_{DR}$ と考えるのは誤りである。これに干渉項が加わらなければならず、共鳴は所謂 Fano 形状を示す。詳しくは文献 [16, 17] などを参照されたい。

³内殻に空孔が生じた場合、自動電離により電子を放出して安定化する場合と、電子を放出せず光のみを放出して安定化する場合がある。後者により安定化する割合を蛍光収量と呼ぶ。

DR に現れるブライト相互作用効果の顕著な例として、筆者らが電気通信大学の Tokyo-EBIT [9] を用いて、リチウム様イオンの DR 過程を測定した結果を図 4 に示す。これは上述の二つの方法のうち価数分布による測定方法で得たものであり、絶対値を求めることが難しいため、以下の 2 つの中間状態を介する DR の共鳴強度⁴ の比を縦軸に取っている。

$$A : [1s2s^22p_{1/2}]_{J=1}, B : [1s2s2p_{1/2}^2]_{J=1}.$$

この共鳴強度比が強い原子番号依存性を持つことが実験結果から分かるが、相互作用ポテンシャル V にクーロン相互作用のみを考慮した計算(図中の赤丸)ではこれを全く再現することができない。一方、相互作用ポテンシャル V にブライト相互作用を入れることにより(図中の青丸)計算値が大きく修正を受け、実験を再現するようになることが分かる。A, B それぞれを介した共鳴強度の理論計算の結果を紐解くことにより、B の共鳴強度は強い原子番号依存性を持たず、A を介した再結合にのみブライト相互作用の効果が強い原子番号依存性を持って顕著に現れることが分かった。

DC は入射電子が標的イオンに捕捉されると同時に標的イオンの内殻電子が励起される過程であるが、同時に複数の内殻電子が励起される過程も観測されている(図 3(b)(c))。2 つの内殻電子が励起される 3 電子性捕獲 (trielecronic capture: TC) は重イオン蓄積リングによる実験 [19] で初めて観測されたが、比較的最近の Heidelberg-EBIT による実験 [20] では同時に 3 つの内殻電子が励起される 4 電子性捕獲 (quadreelectronic capture: QC) も観測されている。

5. 磁気量子数分布

一般に電子衝突によって生じた励起状態は、入射電子の方向を量子化軸として偏った磁気量子数分布を持つ。従ってその励起状態が脱励起す

⁴DR 断面積をエネルギー E の関数として $\sigma_{DR}(E)$ としたとき、共鳴強度は $\int \sigma_{DR}(E)dE$ で定義される。言葉の通り共鳴の強さを表す量であり、共鳴の幅には依存しない。

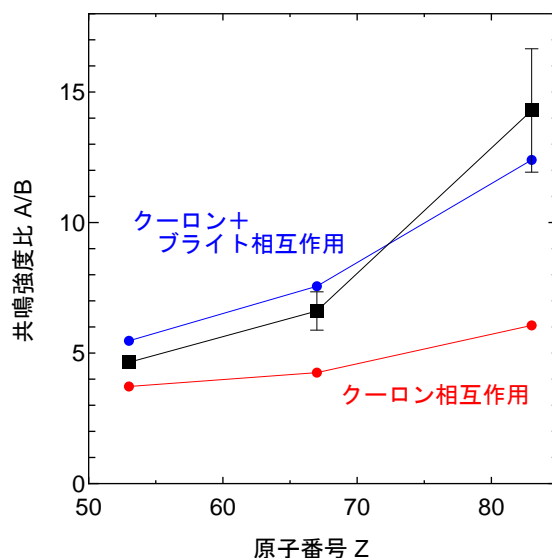


図 4: リチウム様イオンに対する DR 共鳴強度。横軸は原子番号、縦軸は $[1s2s^22p_{1/2}]_{J=1}$ (A) および $[1s2s2p_{1/2}^2]_{J=1}$ (B) を介する DR 共鳴強度の比。黒点が実験値で、赤はクーロン相互作用のみを考慮に入れた計算結果、青はブライト相互作用を考慮した計算結果。

る際に放出される光は、角度分布や偏光を持つことになる。逆にこのことを利用すれば、放射の異方性や偏光からプラズマにおける非熱的成分を診断することができるため⁵、磁気量子数分布は応用においても重要である。

筆者らは以前、Tokyo-EBIT の単色電子ビームにより励起された水素様チタンイオンの Lyman- α_1 線 ($2p_{3/2} \rightarrow 1s$ 遷移) の偏光度を測定し、当時存在した理論との差異を初めて指摘した [22]。その時点でその差異の原因は不明であったが、追従した他のグループの実験および理論研究により、その原因がブライト相互作用にあることが分かった [23]。これは偏光度に対するブライト相互作用の効果を明らかにしたという点で注目すべき成果であるが、この場合のブライト相

⁵一般にプラズマは(局所)熱平衡であり等方的であると仮定され議論されることが多いが、核融合実験プラズマのような人工プラズマであっても天体プラズマのような自然のプラズマであっても、熱平衡状態や等方性からのずれを顕著に示す場合がある。そのようなずれを「非熱的」と称する。「熱的」つまり熱平衡が成り立っている等方的なプラズマでは放射も等方的であり無偏光であるが、例えばプラズマ中で運動する電子が異方性を持つ場合、つまりある特定の方向に偏った運動している場合は、放射に異方性や偏光を生じるようになる [21]。非熱的なプラズマの典型例として太陽フレアなどがある。

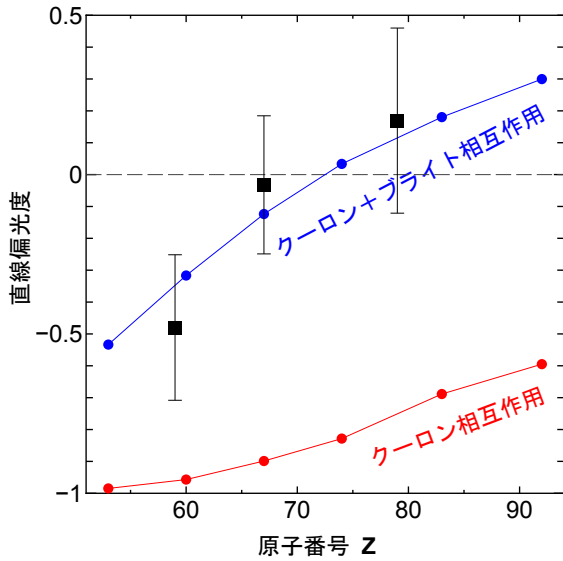


図 5: 共鳴状態 $[1s2s^2 2p_{1/2}]_{J=1}$ を介する 2 電子性再結合過程において放出される X 線の直線偏光度. 黒点が実験値で, 赤はクーロン相互作用のみを考慮に入れた計算結果, 青はブライト相互作用を考慮した計算結果.

相互作用の寄与は直線偏光度の値を 0.1 ほど減ずる程度の小さいものであった.

一方, より最近の筆者らの研究では, DR における内殻励起状態からの X 線の偏光度に対するブライト相互作用の効果が, クーロン相互作用を凌駕する支配的な寄与として現れることが示された [24, 25]. その結果を図 5 に示す. これは, 前章と同じくリチウム様イオンが内殻励起状態 A を介して再結合する際に放出される X 線の偏光度である. つまり DC により生じた内殻励起状態 A の磁気量子数分布を反映している. 図から明らかなように, 偏光度に対してブライト相互作用が支配的な寄与を示していることが分かる. ブライト相互作用が偏光度の値を大きく修正するだけでなく, 偏光度の正と負, つまり角度分布で言えば 90° で極大を持つか極小を持つかという本質的な違いも生む. これは, 磁気量子数 $M_J = 0$ を介する共鳴強度に極めて顕著なブライト相互作用効果が現れる結果であることが後の理論解析により分かった [25].

著者らのこの成果が発端となり, DR さらには TR, QR といった再結合過程で放出される偏光度の研究が盛んに行われるようになった [26].

上述の筆者らの研究は偏光度を直接測定したものではなく, 全立体角における積分共鳴強度に相当する価数分布測定と, 90° 方向における微分共鳴強度に相当する X 線測定とを組み合わせることにより間接的に求めたものであったが, 近年開発が目覚ましい硬 X 線偏光計を用いて直接偏光度を測定する研究も行われるようになり, 興味深い成果が得られつつある [26, 27].

6. ブライト相互作用に関する理論研究

最近では Flexible Atomic Code (FAC) [28] と呼ばれる比較的手軽な計算コードが配布されていることもあり, ブライト相互作用を考慮に入れた場合と入れない場合とで断面積の計算値を比べ, ブライト相互作用の寄与を考察するようなことが実験屋でも比較的容易に行えるようになってきている. しかし, その本質的理解のためにはやはり理論研究者による詳細な解析に頼らざるを得ない. 本質的理解とは例えば, 磁氣的相互作用と遅延効果のいずれが重要なのか, 磁氣的相互作用の中でも軌道-軌道, スピン-スピン, スピン-他軌道のうちどれが重要なのか, 良く使われる仮想光子の周波数を 0 とする近似⁶がどこまで有効であるのか, 相互作用ポテンシャルの実数部分と虚数部分それぞれがどの程度の寄与を持っているのか, 等々である. そのような理論研究の詳細に立ち入ることは筆者の能力および本稿の趣旨から外れているので, 本文中に挙げられたいくつかの文献および筆者の共同研究者による最近の文献 [29, 30] を参照して頂きたい. 例えば, 文献 [29] では仮想光子の周波数を 0 とする近似がどの程度の影響を与えるか, 文献 [30] では相互作用の虚数部分がどの程度の寄与を持っているか, などを調べることで本質に迫ろうとしている.

7. おわりに

本稿では主に 2 電子性再結合に現れる相対論

⁶この近似を用いた場合と用いない場合とを特に区別する場合, 前者を単にブライト相互作用, 後者を一般化ブライト相互作用と呼ぶ [5].

効果, ブライト相互作用効果を中心に, 多価イオンと電子との衝突過程に関する最近の研究の進展を簡単に紹介した. これらの実験, 理論両面による研究により, 重元素多価イオンの電子衝突におけるブライト相互作用の理解はこの数年間だけでも大きく進展した. しかしそれでもなお, 「なぜ」の疑問に一般的に答えられるだけの定性的・普遍的理解が得られたかと言えば, 残念ながら答えは今のところ「否」であるように筆者は思う. つまり, ブライト相互作用の大きさがどの程度であるかは, それぞれの過程について個別に計算してみたり実験してみたりしないと分からないというのが現状である. 定性的・普遍的理解を得るため, 今後更なる研究が必要である.

序章で述べたように, 電離, 励起, 再結合の断面積を得ることは, 相対論効果のような興味深い物理がたとえ無くとも重要な仕事であり, 核融合プラズマや天体プラズマを理解するために必要とされている. また, レーザー生成プラズマを利用した新しい短波長光源開発などの応用においても重要である. それらの内容については, 本シリーズ第2回, 第3回を参照して頂きたい [31, 32].

なお, 本稿で紹介した筆者の研究は多くの共同研究者の方と行われたことを最後に記し感謝したい.

参考文献

- [1] 中村信行, しょうとつ, **12**, 137 (2015).
- [2] 村上泉, 加藤太治著 “プラズマ原子分子過程ハンドブック, 浜口智志, 村上泉, 加藤太治, プラズマ・核融合学会 (編), 第17章” 大阪大学出版会 (2011) p369.
- [3] 市川行和著 “衝突する原子” 丸善 (1985)
- [4] 中村信行, しょうとつ, **9**, 41 (2012).
- [5] 加藤太治, しょうとつ, **10**, 23 (2013).
- [6] G. Breit, Phys. Rev., **34**, 553 (1929).
- [7] B. Franzke, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **24**, 18 (1987).
- [8] R. E. Marrs, M. A. Levine, D. A. Knapp, and J. R. Henderson, Phys. Rev. Lett., **60**, 1715 (1988).
- [9] 中村信行, 大谷俊介, 日本物理学会誌, **52**, 919 (1997).
- [10] D. Bernhardt, C. Brandau, Z. Harman, C. Kozhuharov, A. Müller, W. Scheid, S. Schippers, E. W. Schmidt, D. Yu, A. N. Artemyev, I. I. Tupitsyn, S. Böhm, F. Bosch, F. J. Currell, B. Franzke, A. Gumberidze, J. Jacobi, P. H. Mokler, F. Nolden, U. Spillman, Z. Stachura, M. Steck, and T. Stöhlker, Phys. Rev. A, **83**, 020701 (2011).
- [11] R. E. Marrs, S. R. Elliott, and D. A. Knapp, Phys. Rev. Lett., **72**, 4082 (1994).
- [12] C. Fontes, D. Sampson, and H. Zhang, Phys. Rev. A, **59**, 1329 (1999).
- [13] K. Widmann, P. Beiersdorfer, G. V. Brown, J. R. C. López-Urrutia, A. L. Osterheld, K. J. Reed, J. H. Scofield, and S. B. Utter, ‘Proc. Int. Conf. on X-ray and Inner-Shell Processes, No.506 in AIP Conference Proceedings, D. S. Gemmell, S. H. Southworth, R. W. Dunford, E. P. Kanter, and L. Young, editors’, (American Institute of Physics, New York) 2000, p444.
- [14] B. O’Rourke, F. J. Currell, H. Kuramoto, Y. M. Li, S. Ohtani, X. M. Tong, and H. Watanabe, J. Phys. B, **34**, 4003 (2001).
- [15] R. E. Marrs, S. R. Elliott, and J. H. Scofield, Phys. Rev. A, **56**, 1338 (1997).
- [16] N. Nakamura, A. P. Kavanagh, H. Watanabe, H. A. Sakaue, Y. Li, D. Kato, F. J. Currell, X.-M. Tong, T. Watanabe, and S. Ohtani, Phys. Rev. A, **80**, 014503 (2009).
- [17] X. M. Tong, N. Nakamura, S. Ohtani, T. Watanabe, and N. Toshima, Phys.

- Rev. A, **80**, 042502 (2009).
- [18] 中村信行, 日本物理学会誌, **69**, 623 (2014).
- [19] M. Schnell, G. Gwinner, N. R. Badnell, M. E. Bannister, S. Böhm, J. Colligan, S. Kieslich, S. D. Loch, D. Mitnik, A. Müller, M. S. Pindzola, S. Schippers, D. Schwalm, W. Shi, A. Wolf, and S.-G. Zhou, Phys. Rev. Lett., **91**, 043001 (2003).
- [20] C. Beilmann, J. R. C. López-Urrutia, P. H. Mokler, and J. Ullrich, JINST, **5**, C0900 (2010).
- [21] 藤本孝, 核融合研究, **65**, 358 (2015).
- [22] N. Nakamura, D. Kato, N. Miura, T. Nakahara, and S. Ohtani, Phys. Rev. A, **63**, 024501 (2001).
- [23] C. J. Bostock, D. V. Fursa, and I. Bray, Can. J. Phys., **89**, 503 (2011).
- [24] Z. Hu, X. Han, Y. Li, D. Kato, X. Tong, and N. Nakamura, Phys. Rev. Lett., **108**, 073002 (2012).
- [25] Z. Hu, Y. Li, X. Han, D. Kato, X. Tong, H. Watanabe, and N. Nakamura, Phys. Rev. A, **90**, 062702 (2014).
- [26] C. Shah, H. Jörg, S. Bernitt, S. Dobredey, R. Steinbrügge, C. Beilmann, P. Amaro, Z. Hu, S. Weber, S. Fritzsche, A. Surzhykov, J. R. Crespo López-Urrutia, and S. Tashenov, Phys. Rev. A, **92**, 042702 (2015).
- [27] G. Weber, H. Bräuning, A. Surzhykov, C. Brandau, S. Fritzsche, S. Geyer, R. E. Grisenti, S. Hagmann, C. Hahn, R. Hess, S. Hess, C. Kozhuharov, M. Kühnel, R. Märtin, N. Petridis, U. Spillmann, S. Trotsenko, D. F. A. Winters, and T. Stöhlker, J. Phys. B, **48**, 144031 (2015).
- [28] M. F. Gu, Can. J. Phys., **86**, 675 (2008).
- [29] X.-M. Tong, Z. Hu, Y. Li, X. Han, D. Kato, H. Watanabe, and N. Nakamura, J. Phys. B, **48**, 144002 (2015).
- [30] Y. Li, P. Li, B. Duan, Z. Wu, and J. Yan, J. Phys. B, **48**, 174001 (2015).
- [31] 加藤太治, 坂上裕之, 村上泉, しょうとつ, **12**, 161 (2015).
- [32] 大橋隼人, 東口武史, しょうとつ, **13**, 5 (2016).

「原子衝突のキーワード」

量子もつれ (Entanglement)

2つの部分系 (各部分系の密度行列が ρ_n, σ_n) から成る全系の密度行列 ρ が

$$\rho = \sum_n c_n \rho_n \otimes \sigma_n, \quad (1)$$

と積の形で書ける場合を積状態, 書けない場合をエンタングルした (量子もつれした, もつれた) 状態と呼ぶ (c_n は 1 以下の正の実数)[1].

部分系が純粋状態の場合には,

$$|\xi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle = |\phi\psi\rangle \quad (2)$$

とは書けない状態がもつれた状態である. $1/2$ スピン (固有状態: α, β) から成る, 2 スピン系のスピン固有関数 $\chi_{S,M}$ は合成スピンの大きさ S , 射影成分 M に応じて以下のように書ける.

$$\begin{aligned} |\chi_{1,1}\rangle &= |\alpha\alpha\rangle, & |\chi_{1,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\beta\rangle + |\beta\alpha\rangle), \\ |\chi_{1,-1}\rangle &= |\beta\beta\rangle, & |\chi_{0,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle). \end{aligned} \quad (3)$$

ここで $|\chi_{1,\pm 1}\rangle$ の密度行列, $\rho_{1,\pm 1} = |\chi_{1,\pm 1}\rangle\langle\chi_{1,\pm 1}|$ は, 部分系 1,2 の密度行列に分解できる.

$$\begin{aligned} \rho_{1,1} &= |\alpha\alpha\rangle\langle\alpha\alpha| = |\alpha\rangle\langle\alpha|_1 \otimes |\alpha\rangle\langle\alpha|_2, \\ \rho_{1,-1} &= |\beta\beta\rangle\langle\beta\beta| = |\beta\rangle\langle\beta|_1 \otimes |\beta\rangle\langle\beta|_2. \end{aligned} \quad (4)$$

一方で $\rho_{1,0}$ と $\rho_{0,0}$ は以下のように分解できず,

$$\rho_{0/1,0} = |\alpha\beta\rangle\langle\alpha\beta| \mp |\alpha\beta\rangle\langle\beta\alpha| \mp |\beta\alpha\rangle\langle\alpha\beta| + |\beta\alpha\rangle\langle\beta\alpha|, \quad (5)$$

$\chi_{1,0}$ と $\chi_{0,0}$ はもつれた状態である. ここで重要なのは 2 項間の位相関係 (+ や -) であり, $|\alpha\beta\rangle$ と $|\beta\alpha\rangle$ の間の位相の定まらない混合状態の密度行列は式 (5) の第 2,3 項が消えるため, 式 (1) の形で書け, 積状態である.

$$\begin{aligned} \rho_{\text{混合}} &= |\alpha\beta\rangle\langle\alpha\beta| + |\beta\alpha\rangle\langle\beta\alpha| \\ &= |\alpha\rangle\langle\alpha|_1 \otimes |\beta\rangle\langle\beta|_2 + |\beta\rangle\langle\beta|_1 \otimes |\alpha\rangle\langle\alpha|_2. \end{aligned} \quad (6)$$

もつれた状態は “古典論 (局所実在論) を超えた相関 (Einstein-Podolsky-Rosen パラドックス)” に特徴がある [1]. 古典論でも 2 つの箱のど

ちらかにコインがある場合には, 1 つの箱での測定は, もう一つの箱の測定結果を決定する. つまり 2 測定は相関を持つ. 問題は相関の程度であり, もつれた状態が, 古典的な相関の上限 (Bell の不等式 [2]) よりも強い相関を持つことは, Aspect らにより実験で示された [3].

ここで $\chi_{0,0}$ を例に定性的な説明を試みる. 量子状態の場合, 射影測定の量子化軸により測定値は異なる. 式 (6) の混合状態でも, スピンの測定結果には相関はあるが, 量子化軸を変えると, その相関は失われる. しかし, $\chi_{0,0}$ はどのような量子化軸で記述しても $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle)$ となり, 量子化軸に依らず一方での測定が, 他方のスピン状態を決める. この強い相関は 2 項の定まった位相関係に由来し, もつれた状態でのみ現れる.

このもつれの持つ強い相関を利用して, 因数分解の計算速度を劇的に向上させる量子アルゴリズムが 1994 年に Shor により提案され [4], それ以降, 光子, イオンなど, 様々な物理系でももつれた状態を利用した量子計算機の研究が急速に進展した. 最近では量子シミュレータなど量子もつれの新しい応用 [5] や, 光解離片 [6] など新しい系への適用が広がっている.

(東京工業大学 穂坂綱一)

参考文献

- [1] R. Werner, Phys. Rev. A **40**, 4277 (1989).
- [2] J. S. Bell, Physics **1**, 195 (1965).
- [3] A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, Phys. Rev. Lett. **49**, 1804 (1982).
- [4] P. W. Shor, ‘Proceeding of the 35th Annual Symposium on Foundation of Computer Science’, (IEEE Computer Society Press) 1994, p116.
- [5] R. Blatt and D. Wineland, Nature **453**, 1008 (2008).
- [6] Y. Nakanishi *et al.*, Phys. Rev. A **90**, 043405 (2014).

2015 年度 役員・委員会

会長

高橋正彦 (東北大学)

幹事

城丸春夫 (首都大学東京) [副会長]

加藤太治 (核融合科学研究所)

中井陽一 (理化学研究所)

渡邊 昇 (東北大学)

運営委員

市村 淳 (宇宙科学研究所)

鵜飼正敏 (東京農工大学)

加藤太治 (核融合科学研究所)

北島昌史 (東京工業大学)

田沼 肇 (首都大学東京)

長嶋泰之 (東京理科大学)

中井陽一 (理化学研究所)

渡邊 昇 (東北大学)

石井邦和 (奈良女子大学)

金井保之 (理化学研究所)

木野康志 (東北大学)

高口博志 (広島大学)

河内宣之 (東京工業大学)

酒井康弘 (東邦大学)

城丸春夫 (首都大学東京)

常置委員会

庶務委員会

委員長：渡邊 昇 (東北大学)

編集委員会

委員長：中井陽一 (理化学研究所)

行事委員会

委員長：加藤太治 (核融合科学研究所)

広報渉外委員会

委員長：城丸春夫 (首都大学東京)

顕彰委員会

委員長：鵜飼正敏 (東京農工大学)

編集委員 岸本直樹, 北島昌史, 富田成夫, 中井陽一,
彦坂泰正, 日高宏, 間嶋拓也, 森林健悟



しょうとつ 第13巻 第2号 (通巻69号)

Journal of Atomic Collision Research

©原子衝突学会 2016

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

発行: 2016年3月15日

配信: 原子衝突学会事務局 <acr-post@bunken.co.jp>