

水素同位体置換がプロトン束縛分子の振動準位にもたらす影響

○宮崎貴暉 高柳敏幸 (埼玉大学理学部基礎化学科)

プロトンは希ガスなどの不活性な原子や分子を引き付け、束縛することが知られており、このような分子は一般に、プロトン束縛分子と呼ばれている。最近、希ガスを含むプロトン束縛分子について興味もたれており、 ArHAr^+ や KrHKr^+ 、 XeHXe^+ が実験的に観測されている^[1,2]。これら希ガスプロトン束縛分子については、理論的にも興味もたれており、ポテンシャルエネルギー曲面がいくつかの系で計算されている。特にHeとNeについては高精度な分子軌道計算によって、精度の高いポテンシャルエネルギー曲面が得られている^[3]。

本研究では、プロトンがミュオニウムに置換された場合の、振動準位への影響について考察する。ミュオニウム(Mu)は、水素原子のプロトンが正のミュオン粒子(μ^+)に置き換わったエキゾチック原子であり、その質量はプロトンの約1/9である。最近では、強度の高いミュオンビームが実験的に利用可能になってきており、 HeMuHe^+ や

NeMuNe^+ ような希ガスを含む簡単な分子が近い将来に観測可能になると考えられる。そこで、本研究では、過去の計算された HeHHe^+ および NeHNe^+ についての高精度なポテンシャルエネルギー曲面を用いて量子動力学計算を行い、これら分子の振動束縛準位および解離極限より高い位置に存在する振動共鳴エネルギー準位について考察した。Fig. 1に NeHNe^+ のポテンシャルエネルギー曲面の等高線図を示す。Fig. 2には、 NeXNe^+ ($X = \text{Mu}, \text{H}, \text{D}$)の振動基底状態の波動関数密度をプロットした。Fig. 2の波動関数から、Muについては粒子の位置が、Ne-Ne間に広く分布していることが分かる。詳細は、当日発表する。

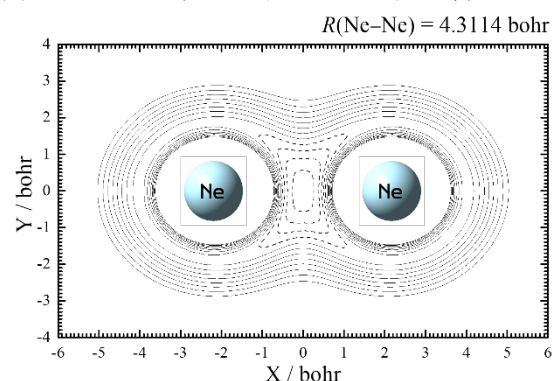


Fig. 1 NeHNe^+ の等高線図.

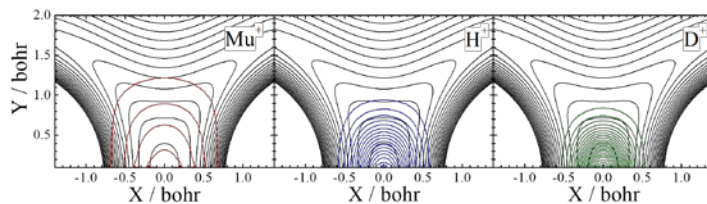


Fig. 2 NeXNe^+ ($X = \text{Mu}, \text{H}, \text{D}$)の波動関数.

[1] V. E. Bondybey, G. C. Pimentel, *J. Chem. Phys.*, 1972, **56**, 3832–3836.

[2] M. Tsuge, J. Kalinowski, R. B. Gerber, Y.-P. Lee, *J. Phys. Chem. A*, 2014, **119**, 2651–2660.

[3] D. Koner, L. Barrios, T. Gonzalez-Lezana, A. N. Panda, *J. Phys. Chem.*, 2016, 144, 034303(11 pages).