

エキゾチック分子の量子化学

(横浜市大・データサイエンス) 伊藤駿平、吉田大輔、北幸海、島崎智実、立川仁典*

* tachi@yokohama-cu.ac.jp

電子の反粒子である「陽電子」は、分子と一時的に束縛状態（陽電子束縛化合物）を形成し、分子内電子と対消滅しガンマ線を放出する。この性質を利用した陽電子消滅法は、非破壊的にガンマ線の検出が可能であるという利点から、材料科学や核医学などへ、既に実用化レベルで応用されている。しかしながら、陽電子束縛化合物に関する基礎的な情報は、未だ十分に解明されていない。一方、「正ミュオン（正電荷をもつミュオン、プロトンの約 1/9 倍・電子の約 200 倍の質量）」が分子に束縛されるとミュオン束縛化合物を形成し、ミュオンスピン回転/緩和/共鳴(μ SR)法により超微細結合定数(HFCC)が測定される。しかしながら μ SR 法により測定された HFCC 値と、量子化学計算による計算値の間に大きな差異が生じる場合があり、その原因が不明であった。

このような背景のもと、我々のグループでは、分子系に陽電子や正ミュオンが束縛された「エキゾチック分子」に対する量子化学計算を実現するために、電子だけでなく陽電子やミュオン自身の量子効果を取り込むための、新しい第一原理計算手法（量子多成分系分子理論）を開発・展開してきた。具体的には、多成分系分子軌道(MC_MO)法[1]、多成分系量子モンテカルロ(MC_QMC)法[2]、多成分系密度汎関数(MC_DFT)法[3]である。さらには温度効果に加え、核の量子揺らぎをビーズとして表現できる第一原理経路積分分子動力学(*ab initio* PIMD)法[4]である。

我々は、上述の手法を用いて、様々な陽電子束縛化合物の計算を行い、陽電子束縛エネルギーや対消滅率の高精度計算を実現した[1-3]。対応する実験値を再現し、陽電子束縛機構としては永久双極子モーメントと誘起双極子モーメント（陽電子の作る電場によって生じる分極）が影響していることを示した。DNA 分子やジペプチド分子等への陽電子吸着予測計算も実施し、一部の分子は予測通りの実験結果を示すに至った。一方、ミュオン束縛化合物計算を行ったところ、正ミュオン自身の持つ大きな量子効果（主に結合方向の非調和性の影響）により、HFCC の計算値が、対応する実験値と定量的に一致する計算結果を得ることができた[4]。

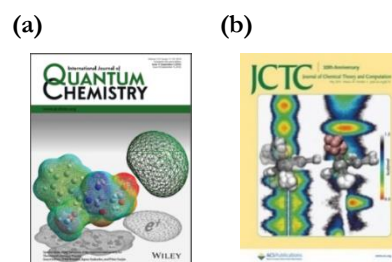


図 1. (a) 陽電子束縛化合物 [1-3]、
(b) ミュオン束縛化合物 [4]

References:

[1] MT, **Chem. Phys. Lett.**, 350, 269 (2001), 360, 494 (2002). MT, Y. Kita, R. J. Buenker, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 13, 2701 (2011), **New J. Phys.**, 14, 035004 (2012). [2] Y. Kita, R. Maezono, MT, M. Towler, and R. J. Needs, **J. Chem. Phys.**, 131, 134310 (2009), 135, 054108 (2011). Y. Yamada, Y. Kita, and MT, **Phys. Rev. A**, 89, 062711 (2014). S. Ito, D. Yoshida, Y. Kita, and MT, **J. Chem. Phys.**, 153, 224305 (2020). [3] T. Udagawa and MT, **J. Chem. Phys.**, 125, 244105 (2006). T. Udagawa, T. Tsuneda, and MT, **Phys. Rev. A**, 89, 052519 (2014). Y. Sugiura, T. Takayanagi, Y. Kita, and MT, **Eur. Phys. J. D73**, 162 (2019). [4] K. Yamada, Y. Kawashima, and MT, **J. Chem. Theor. Comput.**, 10, 2005 (2014). Y. Oba, T. Kawatsu, and MT, **J. Chem. Phys.**, 145, 064301 (2016).