九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

量子3体系・4体系精密計算コードのライブラリ開発と応用研究 : そのII : 反陽子ヘリウム原子と反陽子質量の精密3体計算

木野, 康志
東北大学理学研究科化学専攻

https://doi.org/10.15017/1467673

出版情報：九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 6 (2), pp.76-79, 2006-09. 九州大学情報基盤センター
バージョン：
権利関係：

量子３体系・４体系精密計算コードのライブラリ開発と応用研究

—— そのII：反陽子ヘリウム原子と反陽子質量の精密３体計算 ——

木野康志 (東北大学理学研究科 化学専攻)

報告書そのI [1] で述べたように、九州大学原子核理論グループ（筆者を含む）では、1996 年以来、九州大学情報基盤センターのライブラリ開発の一環として、量子論的３体系・４体系の束縛状態の精密計算コードを作成してきた。また、それらを利用し、発展させて、原子核、ハイパー核、クオーク系、ミュオン分子、反陽子ヘリウム原子など各種の応用研究を行って来た [2,3]。　今回の無料キャンペーン期間に、筆者は、反陽子ヘリウム原子の精密３体計算において、Darwin 項と呼ばれる相対性理論に基づく補正項について計算精度を確かめた。

1. 反陽子ヘリウム原子と反陽子質量

反陽子 ($\bar{p}$) は陽子の反粒子で、物質中では ps の寿命で瞬時に消滅してしまうが、ヘリウム中に打込まれた反陽子の約３％が「反陽子ヘリウム原子（Fig. 1, $\bar{p}\mathrm{He}^+(=\bar{p}+\mathrm{He}+e^-)$)」の準安定状態を形成し、瞬時の消滅を免れ数 μs も長生きする (この現象は、現在ヘリウム以外の標的では見つかっていない)。我々は、この３体系に対して、ガウス関数展開法（GEM）[2,3] を用い $\bar{p}\mathrm{He}^+$ の準安定状態のエネルギー準位を精密に計算し、更にこのエキゾチック原子の特異な性質を明らかにしてきた [2,3]。

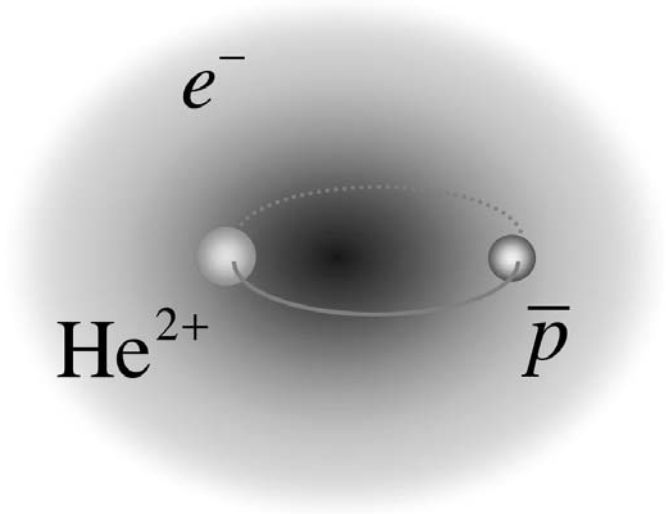

Figure 1: 反陽子ヘリウム原子 ($\bar{p}\mathrm{He}^+$) の準安定状態。核間 (He^{2+} と $\bar{p}$) は大きな角運動量 ($\sim 35\hbar$) を持ち、電子はほぼ s 軌道をとり等方的に分布するが、e^- と $\bar{p}$ 間の相関により電子雲は僅かに分極している。

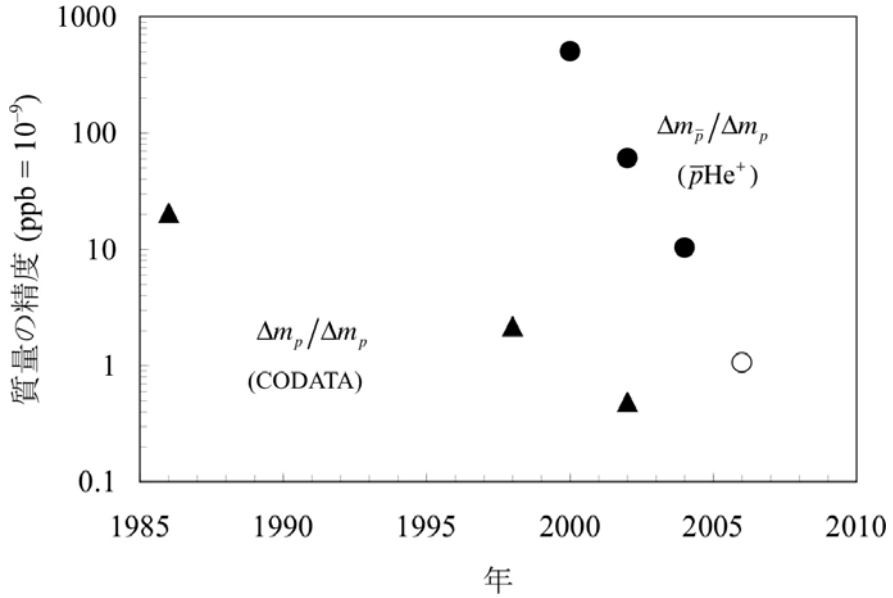

Figure 2: 陽子・反陽子の質量の精度の向上。●は $\bar{p}$He$^+$ の実験と理論から得られた反陽子・陽子の質量の相対差の上限。○は 最新 の実験と理論から得られた値 (preliminary)。▲は CODATA による 陽子 質量 (原子単位系) の不確定さ。

一方、東京大学の早野ら実験グループによりレーザー分光実験が精力的に行われ、状態間の遷移周波数が精密に測定されている。実験結果と理論計算の比較により反陽子質量 ($m_{\bar{p}}$)、陽子質量 (m_p) の相対差の上限 ($|m_{\bar{p}} - m_p|/m_p$) が得られる。この上限値は、Particle Data Group(物理学における基礎定数や素粒子データ等の標準値を認定し編纂する組織) により 2000 年に反陽子質量に関する推奨値として初めて採用され、粒子・反粒子の対称性 (CPT 不変性) の高精度検証として注目されている。

その後、Fig. 2 に示すように実験および理論の発展により年々精度が向上し、上限値は陽子質量の精度に匹敵してきている。CPT 不変性は現代の基礎物理学の中心的な研究課題であり、これが破れている事は多くの理論模型で示唆されているが、実際に粒子と反粒子の質量差が何桁目に現れるかを定量的に示す理論はない。現在、様々な系で CPT 不変性の検証が行われている。

2. 反陽子ヘリウム原子の超精密３体計算

現在、レーザー分光の実験値は 8 桁の有効数字で得られている。実験は遷移周波数は 2 準位間のエネルギー差の測定であるが、理論計算ではエネルギーの絶対値を求めるため、桁落ちにより実験値と比べるためには 10 桁の有効数字が必要である。現在、この精密計算ができるのは、我々と Korobov(ロシア) の 2 グループだけである。

この 3 体系を「精密」に計算が困難であるのは、i) 3 粒子の質量が全て異なり、どの 2 粒子間にも長距離クーロン力が働いている、ii) 全角運動量が $\sim 35\hbar$ であり非

常に大きい、iii) 対象となる準位は束縛状態でなく Feshbach 型共鳴状態である、iv) この 3 体系は原子的顔 (正電荷核と負電荷粒子 2 個) と分子的な顔 (核 2 個と電子) を合わせ持ち、かつ反陽子と電子間の斥力相関が無視できない、v) ヘリウム原子核と反陽子間は引力が働くので核間運動を断熱近似的には扱えないからである。我々は、ガウス関数展開法 (GEM) によりこれらの困難を克服できた。本稿では、i–v) のなかで特に重要な iv) について簡単に説明する。

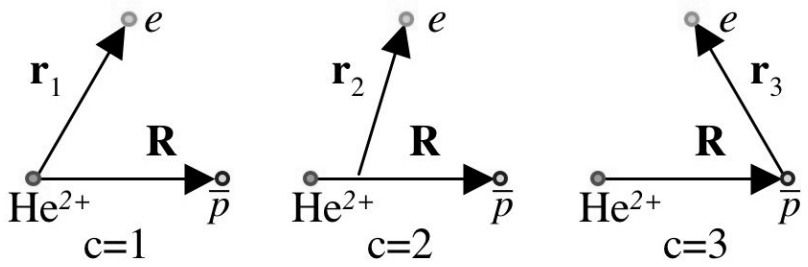

Figure 3: $\bar{p}\mathrm{He}^+$ の 3 つの組替え座標系

$\bar{p}$–He^+ の波動関数を、Fig. 3 に示す 3 つの組替え座標系で記述する。チャネル $c = 1$ と $c = 2$ はそれぞれ の原子的、分子的性質を記述し、$c = 3$ は $\bar{p}$–He^{2+} 間の相関を記述する。電子質量は原子核に比べ十分小さいのでチャネル $c = 1$ と $c = 3$ は原子核に座標の中心をとるが、運動エネルギー演算子中の質量分極項を正確に取り扱う。

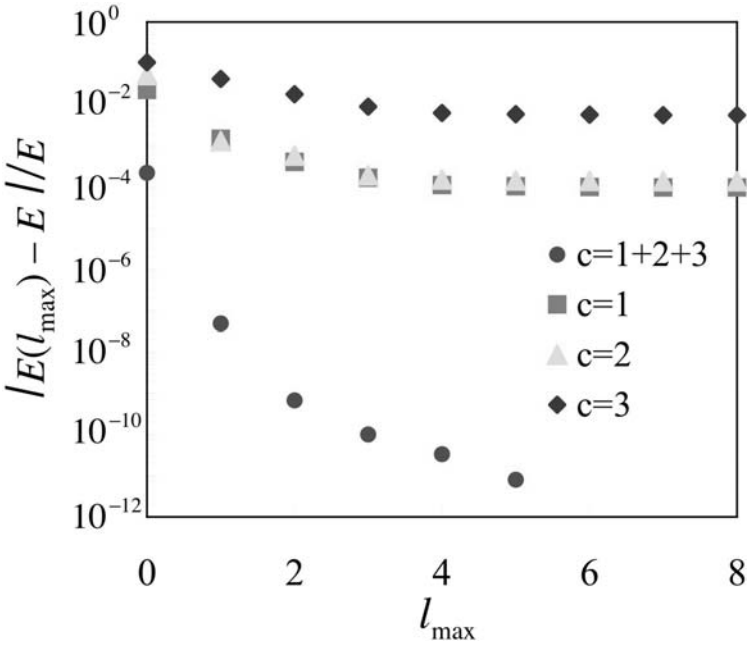

Figure 4: $\bar{p}\mathrm{He}^+$ の $J = 35\hbar$, $v = 0$ のエネルギー準位の $l_{\max}$ に対するエネルギーの収束性。E は最終の収束値を示す。

Fig. 4 に $\bar{p}\mathrm{He}^+$ の全角運動量 $J = 35\hbar$、振動状態 $v = 0$ のエネルギー準位の $l_{\max}$ に対する収束性の一例を示す。ここで、$l_{\max}$ は電子の持つ角運動量量子数の最大値である。$l_{\max}$ を ∞ とすれば数学的には正しいが、$l_{\max}$ が小さな値で結果が十分収束すれば物理的に正しいモデルを採用したことになる。●は Fig. 3 の 3 つの座標系を全て同時に使った場合を示し、$l_{\max} = 4$ で 10 桁以上の精度で収束している。一方、他の 3 つの点■、▲、◆は Fig. 3 の中の 1 つだけの座標系を使った場合の結果を示し、収束は非常に遅い。ここで、$c = 1$ と $c = 2$ はそれぞれ原子的、分子的性質を記述するが、どちらも同等な収束性を示すことからも $\bar{p}\mathrm{He}^+$ が原子と分子の二面性を持つ事が分かる。

3. 無料キャンペーン期間での計算

高精度数値計算のための必要条件は、計算時間が短い事である。多種多様な変分パラメータで繰り返し計算が可能であれば、数値計算に伴う系統誤差や収束性を把握できる。上記のように GEM は波動関数を効率良く記述する事により、高速に計算ができ、計算精度を向上させる事ができる。$\bar{p}\mathrm{He}^+$ のエネルギー準位の計算では、現在 10 桁の有効数字が達成されている。

今回の無料キャンペーンでは、$\bar{p}\mathrm{He}^+$ のエネルギー準位に対し Darwin 項と呼ばれる相対性理論に基づく補正項について計算精度を確かめた。この項ではデルタ関数の期待値を求めるが、ガウス型基底関数では原点付近の波動関数の再現性が一般には良くないと考えられている。しかし、GEM では、多くの短いレンジを持つガウス型基底関数を重ね合わせる事によりこの困難を克服できる。我々はガウス型基底関数のレンジパラメータを変化させて計算を何度も行い、その結果を注意深く解析し高精度の収束値を得た。その結果、精密なレーザー分光実験との比較により見積もられる反陽子質量の精度は、Fig. 2 に見られるように、1 ppb に達する。この値は、現在バリオンに関する最高精度の CPT 不変性の検証になっている。

参考文献

[1] 肥山詠美子,「量子 3 体系・4 体系精密計算コードのライブラリ開発と応用研究 —その I:世界初の Ξ ハイパー核発見の可能性の理論予測—」, 九州大学情報基盤センター広報 全国共同利用版 Vol.6, No.2 (掲載予定)(2006).

[2] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51** (2003) 223. (GEM のレビュー論文)

[3] 肥山詠美子, 木野康志, 上村正康, 日本物理学会誌 **61** (2006) No.1, 29. (GEM の解説記事)