

量子モンテカルロ法によるアルカリ金属水素化物への

陽電子吸着に関する理論的解析

Quantum Monte Carlo study of the binding of a positron to alkali-metal hydrides

北幸海、立川仁典

Yukiumi Kita and Masanori Tachikawa

横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科

Graduate School of Nanobioscience, Yokohama-city University, Seto 22-2,
Kanazawa-ku, Yokohama 236-0027, Japan

陽電子は電子と同質量・同スピンおよび電荷+1 を持つ電子の反粒子であり、電子との相互作用により、2～3個の光子を放出しながら対消滅を起こす。物質中に入射された陽電子は、対消滅を起こす前に、原子・分子のイオン化や励起、電子との一時的な束縛状態であるポジトロニウム形成、そして陽電子と原子・分子の一時的な束縛状態である陽電子化合物の形成など、様々な反応を起こすことが示唆されている。しかし物質中における陽電子の寿命が短いことから、物質中における陽電子の振る舞い、特に陽電子化合物の電子・陽電子状態や安定構造などの基礎的性質の解明には、理論的解析が期待されている。

分子に対する陽電子化合物の生成条件として、Crawford は 1.625 Debye 以上の双極子モーメントを持つ極性分子であれば、陽電子を1つ吸着できることを理論的に示唆している[1]。アルカリ金属水素化物 (XH, X=Li, Na, K, etc.) は、この閾値以上の双極子モーメントを持つことから、陽電子化合物の形成が強く期待されている。そこで本研究では、現在最も精密な第一原理法の一つである量子モンテカルロ(QMC)法[2]を用いて、アルカリ金属水素化物 (XH, X=Li, Na, K) の陽電子吸着能に関する理論的解析を行った[3,4]。図1にQMC法から得られたアルカリ金属水素化物の陽電子親和力(PA)を示す。アルカリ金属水素化物のPAは、LiH → NaH → KHの順番に大きくなり、分子の双極子モーメントと強く相関していることがわかる。発表当日は、陽電子が吸着したアルカリ金属水素化物の解離エネルギーについても報告を行う。

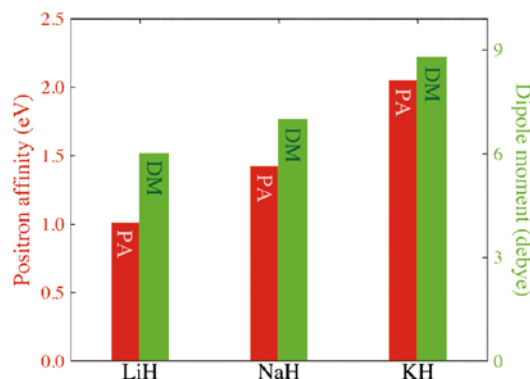


Figure 1. The positron affinity (PA) and the molecular dipole moment (DM) of alkali-metal hydrides XH (X= Li, Na, and K)

[1] O.H. Crawford, Proc. Phys. Soc. **91**, 279 (1967).

[2] B.L. Hammond, W.A. Lester Jr. and P.J. Reynolds, *Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry* (World Scientific, 1994).

[3] Y. Kita, R. Maezono, M. Tachikawa, M. Towler, and R.J. Needs, J. Chem. Phys. **131**, 134310 (2009).

[4] Y. Kita, R. Maezono, M. Tachikawa, M. Towler, and R.J. Needs, J. Chem. Phys. **135**, 054108 (2011).