

物質デザインへの展開のための量子多成分系分子理論の高度化

Title: Development of Quantum Multi-Component Molecular Theory  
for Its Application to Material Design

立川 仁典、北 幸海

Masanori Tachikawa and Yukiumi Kita

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 Nanobiosystem, Yokohama-city University, Kanazawa-ku,  
Yokohama 236-0027

これまで我々は、従来の第一原理計算だけでは直接取込むことのできない、水素原子核やミュオン、陽電子の量子揺らぎも含めた量子多成分系分子理論を展開してきた。具体的には、分子軌道(MO)法[1-3]や、量子モンテカルロ(QMC)法[4]、さらには密度汎関数(DFT)法[5]に基づく手法と、経路積分法[6, 7]に基づいた、量子多成分系分子理論手法である。本報告では、原子・分子に陽電子( $e^+$ )や正ミュオン( $\mu^+$ )が束縛した、いわゆるエキゾチック化合物に着目する。

電子と陽電子の対消滅を利用した材料評価や医療診断等、陽電子技術は幅広い分野で実用化されているが、分子レベルでの基盤情報は極めて少ない。最近 Danielson らは[8]、孤立分子の陽電子親和力(PA)を実験的に測定することに成功したものの、原子・分子への陽電子束縛機構は未だ十分に解明されていない。一方、正ミュオンは、質量は電子に比べ 200 倍以上重く (プロトンに比べ 9 倍程度軽く)、負ミュオン( $\mu^-$ )の反粒子である。そのため正ミュオンと電子の束縛状態 ( $\mu^+e^- \equiv \text{Mu}$ ) は水素原子の最軽量同位体とみなすことができ、Mu を含む系ではミュオン自身の量子効果が大きな影響を与えると考えられる。そこで本講演では、このようなエキゾチック系分子に対する計算手法を紹介した後、①カルボニル化合物への陽電子親和力や②ミュオン化合物の超微細結合定数(HFCC)といった、具体的計算結果を示したい。

- [1] M. Tachikawa, *Chem. Phys. Lett.*, **350**, 269 (2001), **360**, 494 (2002).
- [2] T. Ishimoto, M. Tachikawa, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.*, **124**, 014112 (2006).
- [3] M. Tachikawa, Y. Kita, and R. J. Buenker, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 2701 (2011), *New J. Phys.*, **14**, 035004 (2012).
- [4] Y. Kita, R. Maezono, M. Tachikawa, M. Towler, and R. J. Needs, *J. Chem. Phys.*, **131**, 134310 (2009), **135**, 054108 (2011).
- [5] T. Udagawa and M. Tachikawa, *J. Chem. Phys.*, **125**, 244105 (2006).
- [6] M. Tachikawa and M. Shiga, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 11908 (2005).
- [7] K. Suzuki, M. Shiga, and M. Tachikawa, *J. Chem. Phys.*, **129**, 144310 (2008).
- [8] J. R. Danielson, J. J. Gosselin, and C. M. Surko, *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 233201 (2010), J. R. Danielson, A. C. L. Jones, M. R. Natisin, and C. M. Surko, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 113201 (2012).