

陽電子と電子による分子付着機構とその効果に対する比較理論研究

(九州大院・理¹, 国際基督教大院・理², Bergische Universität Wuppertal³)○馬田 省吾¹, Lukas Pichl², Heinz-Peter Liebermann³, Robert Buenker³, 季村 峯生¹

【序論】

陽電子とは、電子と等しい質量・スピンを持つが逆の電荷を持った電子の反粒子である。陽電子と電子が衝突すると対消滅をして約 1102keV の非常に大きなエネルギーの光子(γ 線)を放出する。電子の分子付着はよく研究されているが、陽電子の分子付着に関する研究はほとんどない。陽電子が分子に対して付着する可能性と付着メカニズムを調べるのが本研究の目的である。

応用としては、PET(ポジトロン断層撮影)高精度・高画像化や陽電子照射による材料診断、ガン病巣への重粒子線治療計画の基礎、透過型陽電子顕微鏡などが挙げられる。ここで PET 検査については、陽電子付着過程やポジトロニウム生成過程は未だにほとんどわかっていないにも関わらず、実用的にはすでに用いられている。この技術によるガン病巣の検査は、その後の重粒子線治療を前提にする上ではまだ精度が十分とは言えず、より高精度・高分解能画像が望まれている。この精度を上げていくためには、さらなる陽電子-電子または陽電子-分子間のダイナミクスの理解が重要となってくるものと考えられる。

よって、分子への電子及び陽電子付着の効果を調べ、これらの付着状態を比較検討することで、より論理的な解釈を可能にし、今まで知られることの無かった陽電子の物理化学的性質を理解できると考える。電子がある種の分子と安定な束縛状態を作ることにはよく知られているが、陽電子が分子と束縛状態を作るかどうかの確証はまだ存在しない。もし陽電子が分子の場につかまり、短い寿命の後に対消滅をすると生成される分子正イオンの多くは不安定と考えられ、すぐに分子イオンがフラグメント化すると考えられる。この分子解離(フラグメント化)のメカニズムは、陽電子付着という観点についてはいまだ全く理解されていない。陽電子衝撃による実験結果としては、分子解離過程についていくつかの有機分子に対して実験により考察されており、数eV以下の低エネルギー陽電子を入射した場合に、特に電子や光子入射とは全く異なったメカニズムが考えられている[1]。

【計算】

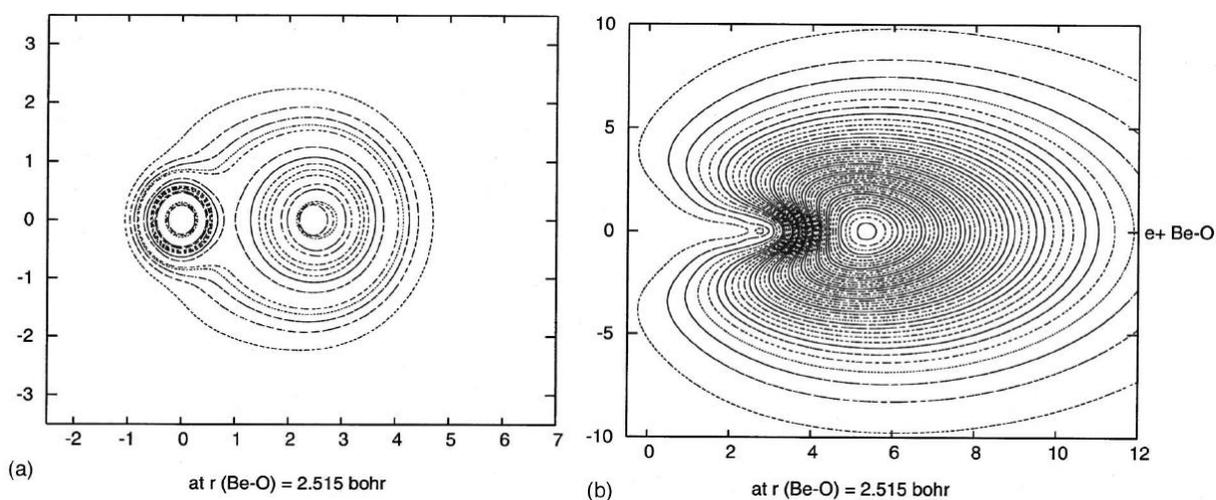
独国 Universität Wuppertal の Robert J. Buenker 教授らによって開発された MRD-CI 法(Multireference single- and double-excitation configuration-interaction method) [2-4]と呼ばれる量子化学手法を用い[陽電子+分子]複合系の電子状態の計算を実行した。これは原子基底関数としてガウス型軌道を用い、数万から数10万の配置(Configuration)を考慮した CI 法の大掛かりな分子軌道計算であり、完全 CI 法に近い精度を持って高い

励起状態まで計算することができる。今回は原子基底関数に cc-pVTZ を使い、2 原子分子である NO や CO 分子についてその主に基底状態の断熱ポテンシャルと双極子モーメントを求め、さらにこれら分子に対し電子または陽電子が 1 個付着した場合についても同様の計算を行った。

【結果と考察】

今回の発表では、陽電子と電子の分子への付着前と付着後の断熱ポテンシャルの変化や、電子または陽電子の分子系内での付着位置や分布を調べ、電子付着と陽電子付着による電荷分布の相違性・相似性について報告予定である。これら得られた結果は、すでに発表されている BeO 分子についての結果[5]とも比較する。2 原子分子については、それぞれの原子の電気陰性度に大きな差があると、分子の双極子モーメントは大きくなり、結果として電気陰性度の高いほうの原子がより高い電子密度を持ち、その付近に陽電子は付着することができるかと予想できる。つまり BeO、CO、NO、と分子の双極子モーメントの違いによる様々な変化も見ることができると予想される。

例として、下に BeO 分子に付着した電子または陽電子の電荷分布の図を示す[5]。ここで(a)が電子、(b)が陽電子の電荷分布で、Be 原子を座標中心に取り O 原子は平行核間距離の分だけ離してある。特に陽電子電荷分布について、ほとんどが O 原子の後方に電子よりもかなり広い範囲に分布していることがわかる。つまり、分子の作る分極ポテンシャルの場にゆるやかに束縛されていることが見てとれる。



【参考文献】

- [1] M. Tachikawa, R. J. Buenker and M. Kimura, *J. Chem. Phys.*, **119**, 5005 (2003)
- [2] R. J. Buenker, and S. D. Peyerimhoff, *Theor. Chim. Acta*, **35**, 33 (1974)
- [3] R. J. Buenker, and S. D. Peyerimhoff, *Theor. Chim. Acta*, **39**, 217 (1975)
- [4] R. J. Buenker, *Int. J. Quantum Chem.* **29**, 435 (1986)
- [5] R. J. Buenker, H-P. Liebermann, L. Pichl, M. Tachikawa and M. Kimura, *J. Chem. Phys.*, **126**, 104305 (2007)