

## 水素・反水素分子の四粒子非断熱計算

<sup>1</sup>東北大院理, <sup>2</sup>RIKEN, <sup>3</sup>Warsaw大, <sup>4</sup>Uppsala大

○山下琢磨<sup>1</sup>, 木野康志<sup>1</sup>, 肥山詠美子<sup>2</sup>, Konrad Piszczatowski<sup>3</sup>, Piotr Froelich<sup>4</sup>

### Non-adiabatic four-body calculation of hydrogen-antihydrogen molecule

○Takuma Yamashita<sup>1</sup>, Yasushi Kino<sup>1</sup>, Emiko Hiyama<sup>2</sup>,  
Konrad Piszczatowski<sup>3</sup>, Piotr Froelich<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Department of Chemistry, Tohoku University, Japan*

<sup>2</sup> *RIKEN Nishina Center, RIKEN, Japan*

<sup>3</sup> *Department of Chemistry, University of Warsaw, Poland*

<sup>4</sup> *Department of Chemistry, Uppsala University, Sweden*

**【Abstract】** Antihydrogen atom consisting of a positron and an antiproton that are antiparticles of an electron and a proton, respectively, is a promising system to test the basics of physics by a precise spectroscopy. The molecular formation in the antihydrogen-hydrogen collision is the most fundamental chemical process among matter-antimatter reactions. Although only charge signs of constituents of antihydrogen are opposite to those of hydrogen atom, the formation mechanism of antihydrogen-hydrogen molecule is completely different from that of hydrogen molecule. It requires, therefore, non-adiabatic treatment to calculate the energies and lifetimes of the molecular states. In this work, we develop a non-adiabatic calculation with Gaussian basis sets for the molecular states. We successfully obtain the energies and lifetimes near the collision energy. The molecular states are expected to be formed during the hydrogen-antihydrogen collision, depending strongly on the collision energy. To carry out the fundamental test experiments, hydrogen-antihydrogen energy dependence of the cross section is crucial because quite small amount of hydrogen atom can exist in the experimental system and residual gas affects the experimental conditions.

**【序】** 電子や陽子・中性子には、それぞれ対をなす反粒子（陽電子、反陽子、反中性子）が存在する。粒子と反粒子は電荷の符号が反対である以外は、スピン・質量などについて同じ物理量を持つ。反粒子は粒子と接触して対消滅を起こし、光子や別の軽い粒子・反粒子対へ変換される。陽電子（ $e^+$ ）と反陽子（ $\bar{p}$ ）が結合した系は反水素原子（ $\bar{H}$ ）と呼ばれ、これを極低温で制御する技術がこの十数年で急速に進展した[1]。

水素原子のエネルギー準位は極めて高精度に測定されており、1S-2S 準位のエネルギー差は 15 桁の精度で求められている。水素原子と反水素原子は、現代物理学の基礎となる粒子・反粒子の対称性（CPT 定理）の下で同じエネルギー準位を持つ。分光実験の結果にわずかでも違いがあれば、この基礎理論を見直す手がかりとなる[2, 3]。

極低速・低温の反水素原子を合成・蓄積・制御する技術の目覚ましい発展により、素粒子物理学の基礎理論検証だけでなく、反水素原子と原子分子の化学反応を調べるといった、新たな物質科学（物質・反物質科学）の展開が現実味を帯びてきた。反物質と物質が接触するとどのような化学反応が起こるか、また、その化学反応は従来の量子化学の枠組みで理解出来るかなど、基礎理解の確立していない点も多く残されている。対称性検証のための高精度分光実験においても、生成した低速の反水素原子と実験装置を構成する周囲の物質との対消滅や、超高真空中のわずかな残留原子との相互

作用などを物質科学の立場から理解しておくことは有用である。

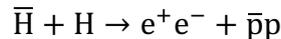
核間距離が近づくと電子を束縛できなくなるため、分子状態の記述に断熱近似が適用できることが知られているが、先行研究の多くは水素分子と同様に断熱近似を基盤にしている[4, 5]. 本研究では、反水素原子と水素原子が形成する分子状態のエネルギーを完全な非断熱計算によって明らかにした。

### 【方法】

クーロン力により結合している四粒子系のハミルトニアンを用いて, Schrödinger 方程式を解く. 基底状態の反水素原子と水素原子が衝突すると,

$$H = -\frac{1}{2m_{\bar{p}}}\nabla_{\bar{p}}^2 - \frac{1}{2m_p}\nabla_p^2 - \frac{1}{2m_{\bar{e}}}\nabla_{\bar{e}}^2 - \frac{1}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{1}{r_{\bar{p}p}} - \frac{1}{r_{\bar{e}e}} - \frac{1}{r_{\bar{p}\bar{e}}} - \frac{1}{r_{pe}} + \frac{1}{r_{\bar{p}e}} + \frac{1}{r_{\bar{e}p}} - K_{CM}$$

陽電子と電子, 反陽子と陽子がそれぞれ引力なので,



という組み替え反応が起こる. ここで, 陽電子と電子が結合した系はポジトロニウム ( $Ps = e^+e^-$ ), 反陽子と陽子が結合した系はプロトニウム ( $Pn = \bar{p}p$ ) と呼ばれる. エネルギー保存則から,  $Pn$  は主量子数  $n \sim 25$  程度の高励起状態として生成する (Fig. 1). したがって, 水素・反水素分子の波動関数は始状態の  $\bar{H}H$  構造だけでなく, 終状態の  $PsPn$  構造もあらわに考慮する必要がある. 本研究では, これらの構造を含め, すべての粒子間相互作用を記述できる複数の座標系を用いた. 試行関数は複素ガウス関数基底[6]で展開した. 水素・反水素分子は  $Pn + Ps$  に解離する共鳴状態として生成するため, その解離崩壊寿命を複素空間スケール法により精密に計算した.

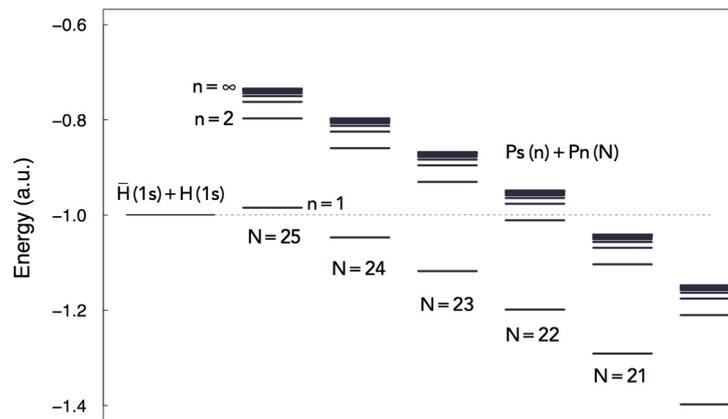


Fig. 1 Energy diagram of the initial state ( $\bar{H} + H$ ) and final states ( $Pn + Ps$ ) of antihydrogen-hydrogen collision.

### 【結果・考察】

水素・反水素分子のエネルギーとその解離崩壊寿命を, 極低温衝突エネルギー近傍で明らかにした. 共鳴状態には, 始状態と終状態の双方の座標系が同等に寄与しており, 始状態は衝突後の解離状態との結合が強いことが示唆された. 反物質と物質の反応を記述する化学理論の構築において, 断熱近似は必ずしも適さないことが明らかになった. 極低温の衝突エネルギーの付近にも共鳴状態が見出され, 衝突過程に影響を与える可能性が大きい. これを利用すれば, 低温反水素原子気体の温度決定や, 共鳴誘導による不純物の効率的な除去も可能であると考える. 更に詳細な計算を進めている.

### 【参考文献】

- [1] The ALPHA Collaboration, *Nature Phys.* **7**, 558 (2011).
- [2] S. Ulmer *et al.*, *Nature* **524**, 196 (2015).
- [3] M. Ahmadi *et al.*, *Nature* **541**, 506 (2016).
- [4] K. Strasburger, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, L435 (2002).
- [5] H. Stegby *et al.*, *Cent. Eur. J. Phys.* **10**, 1038 (2012).
- [6] E. Hiyama, Y. Kino, M. Kamimura, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **51**, 223 (2003).