

多電子原子イオンを始めとする多体量子系に対する エネルギー準位同定アルゴリズムの開発

Development of Energy Level Identification Algorithms

for Many-Body Quantum Systems Including Many-Electron Atomic Ions

本宮和明¹, 蓮尾昌裕¹, 藤井恵介¹

HONGU Kazuaki¹, HASUO Masahiro¹, FUJII Keisuke¹

京都大学工学研究科¹

Graduate School of Engineering, Kyoto university¹

水素原子のエネルギー準位の同定から量子力学が開拓されていったように、エネルギー準位は量子系の本質的な量である。発光遷移のエネルギーを使ってエネルギー準位を同定することは古くからの課題であった。水素原子やヘリウムのような簡単な系に関しては第一原理計算との比較によって準位が同定されてきた一方で、多電子原子や原子核の高励起状態では複雑な多体相互作用のため第一原理計算の誤差がエネルギー準位間隔より大きくなり、準位同定に用いることが難しかった。本研究では多体量子系のエネルギー準位同定という組み合わせ問題を外れ値検出問題に帰着させ、統計的に準位同定を行う手法を提案する。

既知のエネルギー準位セット $E = \{E_1, E_2, \dots, E_n\}$ と発光線の観測により得られたエネルギー差でいまだ同定されていないもの $\Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m\}$ から、発光線を同定し未知のエネルギー準位を見つけることを考える。実際には単一の準位ペアの差が観測されるエネルギー差として得られるが、本研究では全ての組み合わせを列挙する。具体的には、下準位を E_i としたときの上準位の候補は $E^u = E_i + \lambda_j$ ($i = 0, \dots, n, j = 0, \dots, m$) のようにあらわされ $n \times m$ 通りを挙げることができる (図 1)。なお、選択則を考慮することによってもう少し制限できる。列挙した候補のほとんどは誤った組み合わせであるため、それらにより推定した上準位のエネルギーはランダムに分布すると考えられる。一方で上準位が実在する真の組み合わせの場合は、複数の下準位への遷移が観測されるため候補が集中するはずである。

上記手法の有効性を確かめるため、Peterson らによって行われた中性鉄原子の新しいエネルギー準位の同定 [1] を再現した。既知のエネルギー準位データセットとして、NIST による Atomic Spectral Database を用いた。また、未知のエネルギー差データとして、

Peterson の論文に掲載されたものを用いた。その結果の一例を図??に示す。Peterson らの同定結果とおおむね一致することを確認した。また、NIST に掲載されたタングステンエネルギー準位、スペクトルデータを用いた場合でも未発見のエネルギー準位の可能性が高い候補を発見することができた。すでに掲載されているデータのみから新しいエネルギー準位を発見することができたことから、人の手によるものよりも効率的な同定ができるようになったと考えられる。

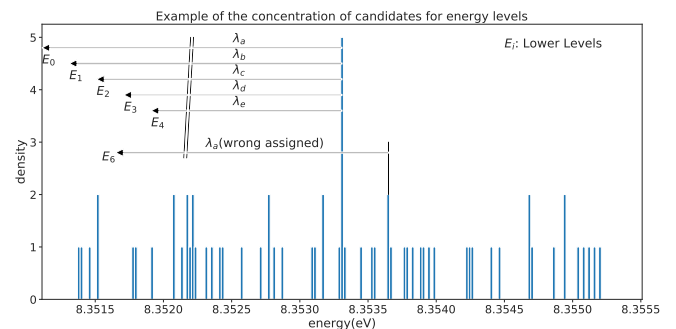


Fig. 1: エネルギー準位が集中する例

References

- [1] Ruth C. Peterson and Robert L. Kurucz. *Astrophysical Journal, Supplement Series*, 216(1), 2015.