

しょうとつ



**THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN**

原子衝突学会賛助会員(五十音順)

アイオーピー・パブリッシング・リミテッド (IOP英国物理学会出版局) <http://journals.iop.org/>

Institute *of* **Physics**

アステック株式会社

<http://www.astechcorp.co.jp/>

ASTECH
CORPORATION

アドキャップバキュームテクノロジー株式会

<http://www.adcap-vacuum.com>

ADCAP

有限会社 イーオーアール

<http://www.eor.jp/>



Electronics Optics Research Ltd.

株式会社 オプティマ

<http://www.optimacorp.co.jp/>

Optima Corp.

カクタス・コミュニケーションズ株式会社

<http://www.editage.jp>
<http://www.cactus.co.jp>

ed|tage

Helping you get published

キャンベラジャパン株式会社

<http://www.canberra.com/jp/>

A

CANBERRA

クリムゾンインタラクティブプライベートリミテッド

<http://www.enago.jp/>
<http://ulatus.jp/>
<http://www.voxtab.jp/>

enago[™]

株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

<http://www.scilab.co.jp/>



株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

真空光学株式会社

<http://www.shinku-kogaku.co.jp/>



スペクトラ・フィジックス株式会社

<http://www.spectra-physics.jp/>



ソーラボジャパン株式会社

<http://www.thorlabs.jp/>



ツジ電子株式会社

<http://www.tsujicon.jp/>



株式会社東京インスツルメンツ

<http://www.tokyoinst.co.jp/>



株式会社東和計測

<http://www.touwakeisoku.co.jp/>



株式会社トヤマ

<http://www.toyama-jp.com/>



株式会社 ナバテック

<http://www.navatec.co.jp/>



仁木工芸株式会社

<http://www.nikiglass.co.jp/>



仁木工芸株式会社

TOM JARROW

伯東株式会社

<http://www.g5-hakuto.jp/>



Hakuto 伯東株式会社

丸菱実業株式会社

<http://www.ec-marubishi.co.jp/>

丸菱実業株式会社

MARUBISHI CORPORATION

株式会社 ラボラトリ・イクイップメント・コーポレーション

<http://www.labo-eq.co.jp/>



しょうとつ

第9巻 第5号

目次

(シリーズ) 宇宙と原子 第三回 多価イオン —宇宙には極端に熱いところがある—	市川 行和	... 5
(若手奨励賞受賞研究) 高速重イオン荷電変換衝突における分子分解過程の研究	水野 智也	... 8
(総説) 低速多価イオン・原子衝突における電子捕獲過程と共鳴現象 その 1: $\text{He}^{2+} + \text{Li, Na, K}$ 衝突系	島倉 紀之	... 16
(解説) 強い短距離斥力相関の下での弱結合少数多体系 — エフィモフ物理と ^4He 原子の 3,4 クラスター系—(後編)	上村正康, 肥山詠美子	... 31
(原子衝突のキーワード) 2 電子性再結合	中村 信行	... 41
(原子衝突のキーワード) 放射性電子再結合と放射性電子捕獲	神原 正	... 42
(原子衝突の新しい風)	後藤 基	... 43
原子衝突学会改称記念式典報告	高橋正彦, 森下 亨	... 44
原子衝突学会第 37 回年会報告	行事委員会	... 44
学会財政の現状と今後の見通し	高橋 正彦	... 45
原子衝突学会への改称に寄せて	山崎 優一	... 47
原子衝突学会への改称に寄せて	羽馬 哲也	... 47
原子衝突若手の会 第 33 回秋の学校開催のお知らせ 第 33 回 秋の学校開催事務局		... 48
2012 年度第 3 回運営委員会報告	庶務幹事	... 48
第 39 回定期総会報告	庶務幹事	... 48
第 13 回若手奨励賞選考理由報告	庶務幹事	... 49
国際会議発表奨励事業に関するお知らせ	庶務幹事	... 50
編集委員会からのお知らせ:「しょうとつ」の配信方法変更について	編集委員長	... 50
「しょうとつ」原稿募集	編集委員会	... 51
今月のユーザー名とパスワード		... 51

「宇宙と原子」

第三回 多価イオン

—宇宙には極端に熱いところがある—

市川行和

yukitikawa@nifty.com

平成 24 年 7 月 6 日原稿受付

「世の中に多価イオンというものがあり、原子物理学的にも応用上も興味深い」ということが言われて久くなる [1]. 多価イオンの研究は現在では目新しさがなくなかったが、その分着実に続けられている. 2 年に 1 度開かれている国際会議も盛んのようなのである [2].

気体を熱すると衝突が盛んになり、やがて原子から電子がはぎ取られてイオンができる. つまりプラズマ状態になる. 衝突がはげしくなると多数の電子がはぎ取られる. すなわち、高温のプラズマには必ず多価イオンが含まれる. 多価イオンは同じ数の束縛電子をもつ中性原子と比べると、必ずしも同じ電子構造をもつわけではない. むしろ「新しい原子」として振る舞う. 価数の大きなイオンはきわめて強いクーロン引力を周囲の物質に及ぼし、反応性に富んでいる. 固体表面の改質など応用に役立てようという研究も進んでいる.

地上で高温プラズマを作るには特別な装置が必要だが、宇宙にはいたるところに高温プラズマが存在する. その典型的な例が太陽コロナである. そもそも多価イオンが初めて見つかったのは

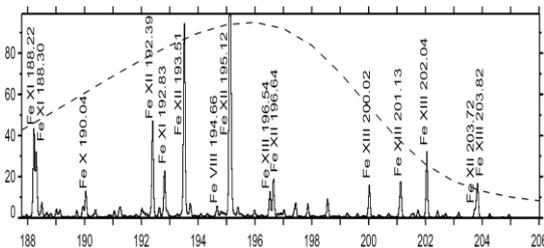


図 1: 太陽コロナの紫外線スペクトル. 横軸は波長 (Å), 縦軸は強度 (相対値). 破線は感度曲線に相当するもの. 人工衛星「ひので」による観測 (文献 [3] より転載).

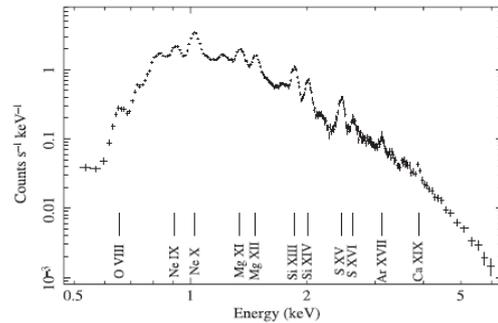


図 2: 超新星残骸 IC443 の X 線スペクトル. 人工衛星「すざく」による観測 (文献 [4] よりアメリカ天文学会の許可を得て転載).

太陽コロナの分光スペクトルの中であった. (1869 年)ただしその実体は不明で、当初は新しい元素「コロニウム」と考えられた. その後、地上の実験室で多価イオンが見つかり(1920 年代)コロニウムは鉄の多価イオンと判明した.

前回説明したように、高温のプラズマからの放射は基本的に波長の短いものになる(励起状態間の遷移に伴って放出される可視光が観測されることもある). 図 1 は太陽観測用人工衛星「ひので」搭載の極端紫外線撮像分光装置 (EIS) で観測した太陽コロナのスペクトルの一例である [3]. さまざまな多価イオンの輝線が見られる. この例では、鉄の 11 価 Fe XII の 195.12 Å の線が最も顕著である. イオン化と再結合のつり合いからイオンの存在割合をもとめる、いわゆる電離平衡の計算によると、Fe XII の割合が最大になるのはプラズマの温度が 126 万度のときである. このスペクトルは太陽活動が静かなときのものである. すなわち、太陽コロナは常時その程度の高温になっている. ところで太陽はきわめて普通の星で

あり、そのことから高温プラズマが宇宙のどこにもあることが推察される。

高温プラズマのもう一つの例は超新星残骸 (SNR) である。IC443 と名付けられている SNR の X 線スペクトルを図 2 に示す [4]。この天体は今から 4000 年ほどまえに爆発した超新星の残骸で地球から 5000 光年離れたところにある。このスペクトルは X 線観測用人工衛星「すざく」により観測された。波長分解能は 130 eV である。ここにはさまざまな原子の H 様あるいは He 様イオンの K α 線 (2p-1s, 1s2p-1s²) が示されている。このスペクトルの解析から約 700 万度のプラズマからの放射であることがわかる。宇宙からの X 線の観測はロケットの開発とともにはじめられ、現在では大型の人工衛星を用いて精力的に行われている。観測された X 線のうち、線スペクトルは基本的に多価イオンからの放射である。

高温プラズマからの紫外線や X 線の観測には多価イオンの分光学的データが必要である。またそのスペクトルの解析には多価イオンの生成消滅や励起に関する原子衝突素過程の知識が不可欠である [5]。特に、電子衝突によるイオンの励起、イオン化、再結合、光吸収によるイオンの励起、イオン化、イオンと原子の電荷移行衝突などが重要である。

紫外線や X 線の観測の発展に伴って、それに必要な多価イオンに関する分光学的データや衝突断面積データの整備が進められてきた。その成果はいくつかのデータベースとしてまとめられている。その中でも特に充実しているのが、CHIANTI と呼ばれるものである。これは主として太陽コロナのスペクトルの解析を目的として作られたもので、水素 (Z=1) から亜鉛 (Z=30) までのほとんどあらゆるイオン (一部中性原子も含む) について

- エネルギー準位
- 輝線の波長、遷移確率
- 電子・イオン衝突による励起・イオン化・再結合の速度係数
- その他関連する素過程データ

が集められており、ネットを通じてだれでも利用できる。1997 年に第 1 版が発表になって以来、多価イオン研究の進展に伴い随時改訂が行わ

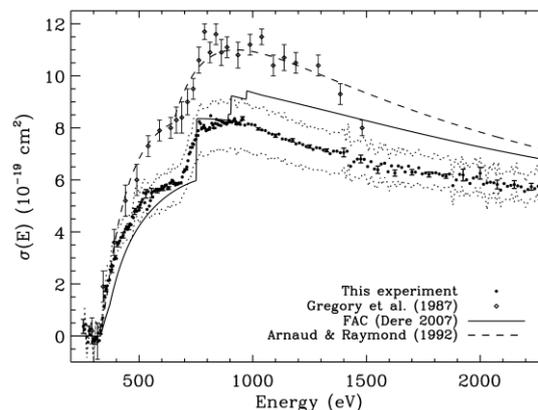


図 3: 電子衝突による Fe¹¹⁺ のイオン化断面積。黒丸がイオン蓄積リングを用いた実験値、その上下にある小さな黒点は誤差の範囲を表す。図の上方にある誤差棒つきの点は交差ビーム法を用いた従来の実験値 [8]。それに重なっている破線はこれまでの推奨値。実線は理論値である。詳細は文献[7]を参照のこと。(文献 [7] よりアメリカ天文学会の許可を得て転載。)

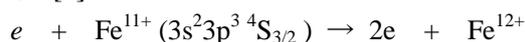
れ、2012 年現在第 7 版 [6] が使用可能である。ところで、Chianti というのは、イタリアのトスカーナ地方にある地名で、そこで生産されるワインの名前ともなっている。関係者にきいたところ、どうしてこういう名前がデータベースについたかは不明であるが、おそらく最初に名前を考える際にワインを飲みながら議論していて誰かが思いつきで提案したのがそのままになったのであろう、とのことである。その後よくあるように、何かの略語にならないかと努力したがうまくいかなかったそうである。

多価イオンの関与する衝突過程の断面積データはこのようかなり整備されてきているが、まだ不足しているものも多くあり、既存のデータもその信頼度が十分でない場合がある。そこで現在も多価イオン衝突過程の研究は精力的に行われている。その一例を紹介しよう。

多価イオンのイオン化断面積を求める実験は比較的容易なので古くからおこなわれている [5]。その多くは標的イオンビームに電子ビームを当てる交差ビーム型実験である。しかし、通常のイオン源で生成されるイオンには準安定状態にあるものが混ざっていることが多い。何らかの方法でそれらの励起イオンを取り除かないと、基底状

態にあるイオンについての断面積を得ることができない。もし準安定状態にあるイオンを取り除かなければ、その分だけ得られた断面積の誤差が大きくなる。

準安定状態にあるイオンを除く一つの方法は、イオン蓄積リングを使うことである。リングの中を回っているうちに、準安定状態にあるイオンは脱励起し、基底状態にあるもののみが残る。そうしてから電子と衝突させる。その例が Hahn らの実験 [7] である。ここでは



の断面積を求めた。その結果を図 3 に示す。

実験はハイデルベルクにあるイオン蓄積リング TSR で行われた。イオンはパルス状に注入され、入射後数秒たってから電子と衝突させる。準安定状態(今の場合は $3s^2 3p^3 \ ^2D_{5/2}$)の寿命は 0.5 秒とされており、衝突の際にはほとんどなくなってしまっている。なお、イオン化のしきい値は 330.39 eV である。結果をみると、これまでに発表されていた交差ビーム法による値 [8] は今回の値より 30 %ほど大きい。これは準安定状態の寄与である。現在コロナのスペクトルの解析に用いられているのはこの古い値なので、今後変更が必要である。Hahn らの論文のタイトル (Storage ring cross section measurements for electron impact ionization of Fe^{11+} forming Fe^{12+} and Fe^{13+}) をみると、純粹に原子衝突の研究であり天文学とは無関係にみえる。実際、内容も基本的には原子物理である。しかし、それが天体物理の雑誌 (Astrophysical Journal) に掲載されていることは、宇宙と原子の研究が密接な関係にあることを示す証拠となる。

参考文献

- [1] 多価イオンに関する解説は多数あるが、最近のものでは
プラズマ・核融合学会誌 83 巻 8 号 (2007 年)
「小特集: 多価イオン原子過程の基礎と広がる応用研究」.
- [2] 2010 年に開かれた第 15 回多価イオン国際会議 (HCI) の報告は以下にある:
Phys. Scr. **T144** (2011) .
- [3] P. R. Young et al., Publ. Astron. Soc. Japan **59**, S857 (2007).
- [4] H. Yamaguchi et al., Astrophys. J. **705**, L6 (2009).
- [5] T. R. Kallman and P. Palmeri, Rev. Mod. Phys. **79**, 79 (2007).
- [6] E. Landi et al., Astrophys. J. **744**, 99 (2012).
- [7] M. Hahn et al., Astrophys. J. **729**, 76 (2011).
- [8] D. C. Gregory et al., Phys. Rev. A **35**, 3256 (1987).

高速重イオン荷電変換衝突における分子分解過程の研究

水野智也

高エネルギー加速器研究機構 〒 305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1

tmizuno@post.kek.jp

平成 24 年 7 月 18 日原稿受付

入射イオンの衝突後の価数を選別し、荷電変換衝突毎の反応過程を調べると、衝突過程をより詳細に議論できるようになる。本稿では CO と C₂H₂ 分子の電離分解過程をそれぞれ紹介し、分解分岐比や分解イオン片の運動エネルギーの分布が衝突径数によって整理できる事を示す。また荷電変換衝突による電離分解過程の分子配向依存性について紹介し、最後に C₂H₂ 分子の衝突誘起による構造変形過程について議論を行う。

1. はじめに

近年の測定技術の発展により高速重イオンと原子分子の相互作用の研究は盛んに行われている。特に運動量画像観測法[1,2]を用いた、衝突時の分子配向依存、分解イオン片の運動エネルギー(KER=kinetic energy release)の分布から励起状態の同定の研究など、数多く報告されている。

高速重イオン衝突の研究は純粋に原子分子物理としての興味だけでなく、イオンビームを用いた分析技術、重粒子線癌治療の原子分子過程の解明などの観点からも関心がもたれている。

高速重イオンが気相分子に衝突すると、電離・電子励起が引き起こされ、その後分解に到る。それと同時に入射イオンの荷電変換も起こる。入射イオンの荷電変換と標的分子の電離分解過程には強い相関があり、衝突過程を十分に理解しようと思うと、荷電変換毎に衝突過程を分けた研究が求められる。

本研究では衝突後の入射イオン価数を特定し、それと同時に標的分子の分解イオンを飛行時間法と画像観測法を用いて三次元運動量分布を測定する装置の開発を行い、高速重イオンと気相分子の衝突過程を詳細に調べた。

2. 実験セットアップ

図 1 に本研究の実験セットアップを示す。実験槽上部から標的ガスを導入し、加速器から引き

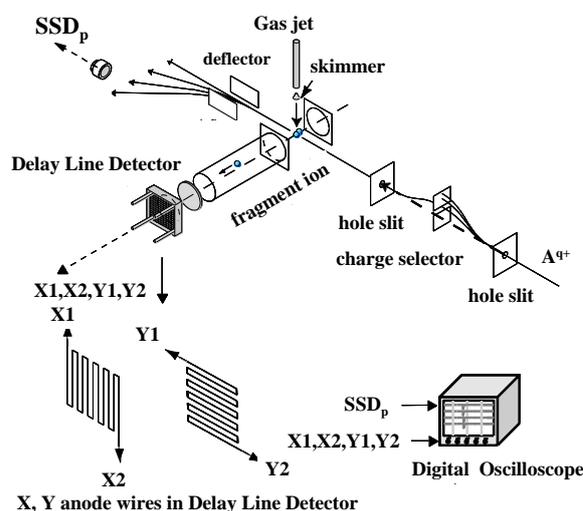


図 1: 実験セットアップ。

出したイオンビームと衝突させた。そのとき生成した分解片イオンを衝突領域にかけてある静電場によって引き出し Delay Line Detector (DLD) によって二次元検出位置と飛行時間を計測し、分解イオン片の三次元運動量分布を得た。

また同時に衝突後の入射イオンを静電偏向器によって価数選別し PIPS (Passivated Implanted Planar Silicon) タイプの半導体検出器によって検出した。

3. CO 分子に対する高速 Si²⁺ の衝突過程

MeV エネルギー領域の高速重イオンと二原子分子の衝突過程は衝突径数、衝突時の分子配向に強く依存する。入射イオンの荷電変換過程

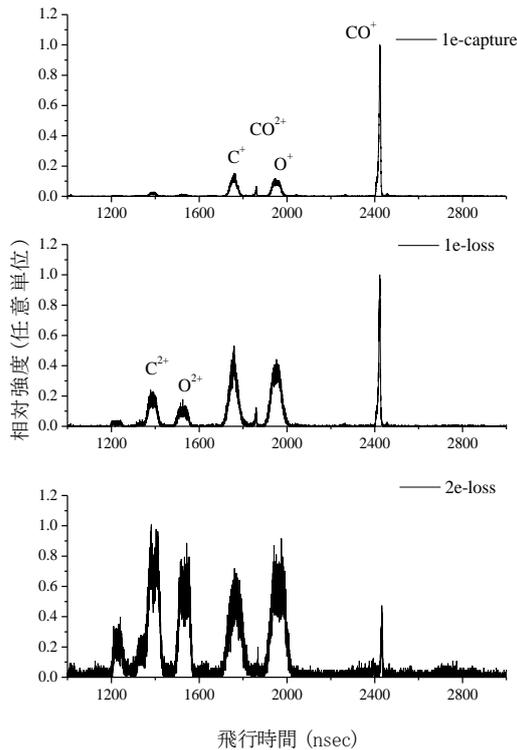


図 2: 2 MeV Si^{2+} 衝突における CO 分子の解離イオン片 TOF スペクトル.

は衝突径数に強く依存するため荷電変換衝突毎に分けた測定結果は定性的には衝突径数依存性として理解できると期待される.

本研究では 2 MeV Si^{2+} -CO 衝突による CO 分子電離分解過程を詳細に調べる事により, 高速重イオン衝突がどのように整理できるか検討した [3]. 図 2 に CO 分子の衝突による分解イオン片の飛行時間(TOF)質量スペクトルを荷電変換衝突毎に示す. 荷電変換衝突はそれぞれ次のように表記する事にする. {1e-loss($\text{Si}^{2+} \rightarrow \text{Si}^{3+}$), 2e-loss($\text{Si}^{2+} \rightarrow \text{Si}^{4+}$), 1e-capture($\text{Si}^{2+} \rightarrow \text{Si}^{+}$)}

TOF スペクトルは荷電変換衝突毎に大きく異なっている事がわかる. 1e-capture では e-loss と比べて親イオン(CO^+)の収量が多く, 分解イオンの収量が少ない. また e-loss だけで比較すると 1e-loss より 2e-loss の方が分解イオンの収量が増えているのが見て取れる. 2 MeV Si^{2+} (速度 $v \sim 1.69$ a.u.)の速度領域では e-loss に比べ e-capture の方が衝突径数が大きい衝突である事が知られている [4]. 衝突径数が大きいため標的分子に対するエネルギー付与が小さく, 分解が抑制されると考えられる. 1e-loss と 2e-loss では入射イオ

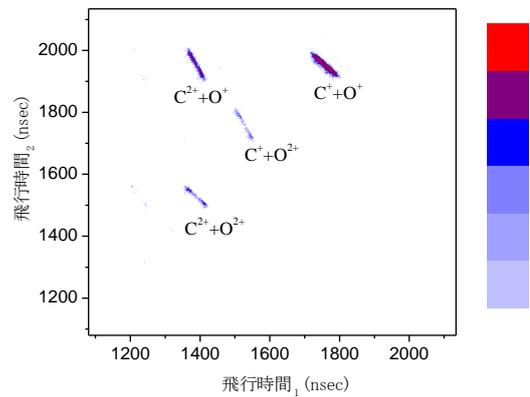
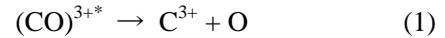


図 3: 2 MeV Si^{2+} 衝突(1e-loss)における CO 分子の分解イオン片質量相関図. (飛行時間₁に飛行時間の短いほうをプロット)

ンが二重電離するためには一重電離するよりも衝突径数が小さくなければならない. このため 2e-loss の方が分解が促進される事になる.

図 3 に 1e-loss でのイオン対解離における分解イオン片質量相関を示す. 標的分子が三重電離が起こった際には以下の分解過程が存在する.



(C^{2+} , O^+)イオン対解離のほうが(C^+ , O^{2+})イオン対解離より収量が多い事がわかる. これは O の第二イオン化ポテンシャルは 35.1 eV であるのに対し C は 24.4 eV であり, (C^+ , O^{2+})イオン対解離のほうがよりエネルギー的に高い状態にあるためである.

表 1 に荷電変換衝突毎の相対電離断面積と各電離度(r , CO^{r+*})毎の分解分岐比を示した. 相対電離断面積は荷電変換衝突毎に 100 に規格化しており, 四重電離以上の断面積の割合は 1% を切っているため無視している.

先行研究として 865 MeV Xe^{44+} (速度 $v = 16$ a.u.) [5], 19 MeV F^{4+} (速度 $v = 6.3$ a.u.) [6]の結果も示した. 先行研究では入射イオンの衝突後の価数選別は行われていない. この結果をみると先行研究である 865 MeV Xe^{44+} と 19 MeV F^{4+} の結果は非常に近い値になっている. 衝突を特

表 1: 相対断面積と分解分岐比

2 MeV Si²⁺荷電変換衝突($v = 1.69$ a.u.) [3], 865 MeV Xe⁴⁴⁺($v = 16$ a.u.) [5], 19 MeV F⁴⁺($v = 6.3$ a.u.) [6]

	2 MeV Si ²⁺			865 MeV Xe ⁴⁴⁺	19 MeV F ⁴⁺
	1e-cap	1e-loss	2e-loss		
r=1	75 ±0.4	48 ±0.4	23 ±0.4	75.3 ±5.5	78.6 ±0.2
CO ⁺	76 ±0.4	42 ±0.4	12 ±0.4	73.1 ±2.4	77.0 ±0.2
C ⁺ +O ⁰	14 ±0.03	30 ±0.2	40 ±0.6	15 ±1.2	12.2 ±1.2
C ⁰ +O ⁺	10 ±0.1	28 ±0.2	48 ±0.7	12 ±1.8	10.8 ±1.0
r=2	22 ±0.4	36 ±0.5	45 ±0.6	13.1 ±2.1	14.4 ±1.7
CO ²⁺	12 ±0.3	5 ±0.1	2 ±0.1	5.3 ±1.0	6.0 ±0.6
C ²⁺ +O ⁰	8 ±0.1	18 ±0.2	30 ±0.3	11.2 ±6.9	13.8 ±2.0
C ⁰ +O ²⁺	4 ±0.1	11 ±0.2	29 ±0.2	1.8 ±4.1	6.6 ±1.2
C ⁺ +O ⁺	76 ±1.2	66 ±0.9	39 ±0.8	81.7 ±6.2	73.6 ±8.0
r=3	3 ±0.1	13 ±0.3	21 ±0.7	5.8 ±1.0	4.9 ±0.6
C ²⁺ +O ⁺	82 ±3.4	68 ±1.5	70 ±1.7	63.2 ±8.8	66.6 ±7.0
C ⁺ +O ²⁺	18 ±1.6	32 ±1.0	30 ±1.1	29.7 ±3.0	27.3 ±3.0
C ³⁺ +O ⁰	-	-	-	7.1 ±5.2	5.9 ±1.0
C ⁰ +O ³⁺	-	-	-	-	0.2 ±0.5

徴づけるパラメーターの一つとして Sommerfeld parameter $k = q/v$ (価数 q , 速度 v) が知られており, $k < 1$ では摂動論を用いて衝突過程を表現でき, $k > 1$ では非摂動論的な取り扱いが必要とされている. また $k > 1$ となる衝突過程においては分解分岐比, 分解イオン片の KER が入射イオン速度, 価数, イオン種に殆ど依存しない事が報告されている [7, 8]. 本研究($k = 1.18$)において荷電変換毎に分けて分解分岐比を測定すると, $k > 1$ の領域においても分解過程が大きく異なる事を示した. 先行研究では $k > 1$ の領域においては, k は衝突過程を良く表すパラメーターにはならず q/vb (b は衝突径数) をパラメーターとして用いないといけない事が指摘されている [7]. 本研究の結果は衝突径数によって分解パターンが異なることを意味しており, $k > 1$ においては q/vb が衝突を特徴づけるパラメーターである事を支持している.

次に図 4 に分解イオン片の運動エネルギー (KER) の分布を荷電変換毎に示した. KER においても荷電変換毎に大きく変化している事がわかる. 1e-capture において KER 分布は最も小さく, 1e-loss, 2e-loss になるにつれて KER 分布が大きくなっている. KER の大きさは励起エネルギーの大きさに関係しており, 衝突径数の小さい, エネ

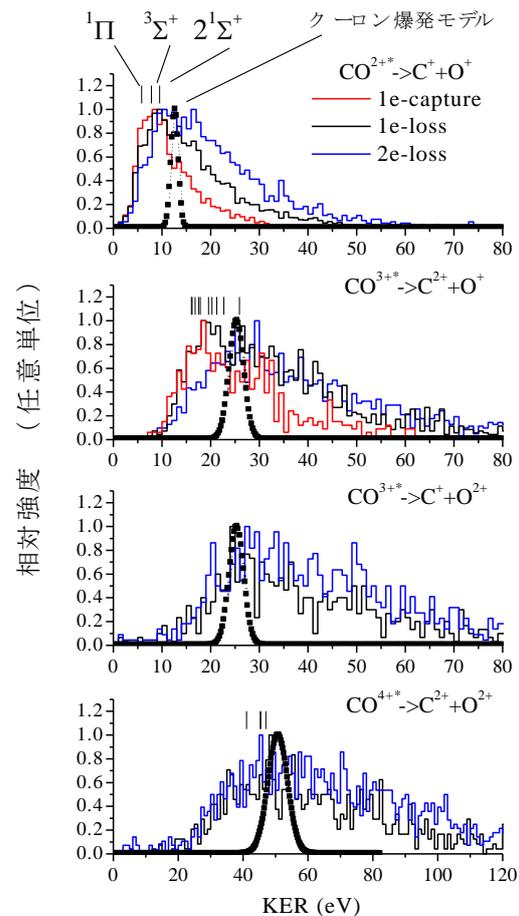


図 4: 2 MeV Si²⁺衝突における CO 分子 KER スペクトル(縦線はポテンシャル曲線から予想される値).

ルギー付与の大きな衝突の場合は同じ電離度においても標的分子をエネルギー的に高い状態に励起していると言える。

KER の値は単純に純粋なクーロンポテンシャルによって記述すると以下の式で近似できる(クーロン爆発モデル)。

$$\text{KER} = q_1 q_2 / R \quad (5)$$

q_1 は炭素イオンの電荷, q_2 は酸素イオンの電荷, R は炭素原子と酸素原子の核間距離である。

KER の分布は基底状態の波動関数を用いて核間距離分布を計算し, (5)式に代入する事により求めている。KER 分布は純粋なクーロン爆発モデルでは再現できない構造を有していることが知られており, イオン化状態ごとにポテンシャル曲線を計算し, フランク・コンドン原理により基底状態から電離状態に垂直遷移する事を用いて解離状態との差として KER を計算する事で再現する事が出来る [9]。図 4 に示した縦線は存在するイオン化状態の KER の値である。 $(\text{CO})^{2+*} \rightarrow \text{C}^+ + \text{O}^+$ イオン対解離に関しては対応する電子状態も示しておいた。

本研究において $k > 1$ のエネルギー領域においても荷電変換衝突を分けて測定すると, 分解分岐比, KER が大きく変化していることがわかった。衝突過程をより良く理解するためには衝突径数を分けた測定が必要であり, 荷電変換衝突を分けて測定すると定性的ではあるが衝突径数の議論が出来る事が示された。

4. 入射イオン荷電変換衝突の CO 分子配向依存性

標的分子の電離過程は衝突時の分子配向に強く依存し, 二原子分子の場合では, 多重電離過程は分子軸と入射イオンの進行方向が平行になるような衝突において優勢に起こる事が報告されている [7,8]。標的分子の電離過程の配向依存性は, 標的分子の電子密度の異方性によって入射イオンの進行方向と分子軸が平行な衝突の方がエネルギー付与が大きくなる事から説明されている [10,11]。

本研究では, 入射イオンの荷電変換過程が分子配向から受ける影響について調べた [12]。図 5 に分子配向 θ の定義を示す。図 6 に 6 MeV

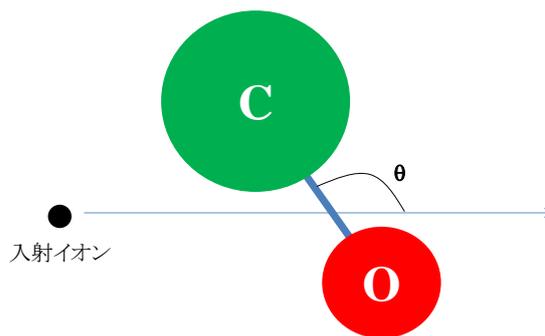


図 5: 分子配向 θ の定義. (入射イオンの進行方向と炭素イオンの運動量ベクトルのなす角で定義している)

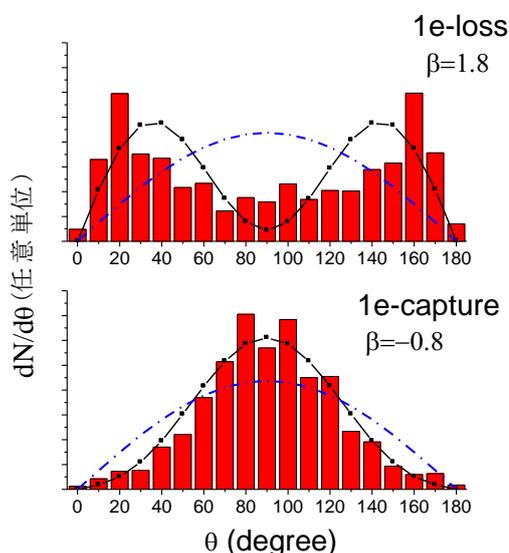


図 6: $(\text{C}^{2+}, \text{O}^+)$ 分解過程の配向依存性

O^{4+} -CO 衝突における 1e-loss と 1e-capture 毎の $(\text{C}^{2+}, \text{O}^+)$ 分解過程における配向依存性を示した。高速領域でのイオン衝突での電離微分断面積 σ の配向依存性は以下の式で近似できる事が知られている [11]。

$$d\sigma/d\Omega = N_0(1+\beta P_2(\cos\theta)) \quad (6)$$

ここで N_0 は規格化定数, β は異方性パラメータ, $P_2(x)=(3x^2-1)/2$ でありルジャンドルの二次の多項式である。立体角 $d\Omega$ は $\sin\theta d\theta d\phi$ であるため相対強度 N の微分は以下の式になる。

$$dN = n I d\sigma = I N_0(1+\beta P_2(\cos\theta)) \sin\theta d\theta d\phi \quad (7)$$

I は入射イオン強度であり, n は標的数である。 N の配向角 θ での微分は以下の式になる。(ϕ 方向で積分することにより 2π の係数が掛かっている)

$$dN/d\theta=2\pi N_0(1+\beta P_2(\cos\theta))\sin\theta \quad (8)$$

電離微分断面積に配向依存性が無い時($\beta=0$), 相対強度の角度微分 $dN/d\theta$ は $\sin\theta$ の依存性を示す事になる.

配向依存性は荷電変換衝突によって大きく異なり 1e-loss と 1e-capture では正反対の依存性を示すことが明らかになった. 1e-capture においては $\sin\theta$ 分布に近く分子軸と入射イオンの進行方向が垂直のとき起こりやすい傾向を示している. 相対強度分布が $\sin\theta$ に比較的近いことから電離微分断面積の角度依存性は小さいと言える.

他方で 1e-loss においては分子軸と入射イオンの進行方向が平行な場合において優勢に起こっており $\sin\theta$ 分布から大きくずれている. 1e-loss では O^{4+} から O^{5+} に電離するために 114 eVもの大きなエネルギー付与が中性分子から与えられる必要がある. そのため必然的にエネルギー付与の大きな分子軸に平行な衝突が優勢に起こると考えられる. 逆に 1e-capture では O^{4+} から O^{3+} への電子移行反応は発熱過程であるため衝突径数が大きな場合でも起こる. 衝突径数が大きい場合, 標的分子の電子密度の異方性は小さく分子軸に大きく依存しなくなる. そのため 1e-capture 衝突においては配向依存性が小さくなると言える.

5. C_2H_2 分子の電離・分解・構造変形過程

標的分子が多原子分子となった場合, 衝突誘起による緩和過程には二原子分子標的では存在しない結合の組み換えや構造変形などの過程が存在する. 分解イオン片の運動エネルギー分布(KER)や運動量ベクトル相関から分解経路の同定と構造変形過程について調べた [10,11].

図 7 に 2 MeV Si^{2+} - C_2H_2 における 1e-capture 衝突における分解イオン片の TOF 質量スペクトルを示した. H_2^+ や CH_2^+ などが観測され, 組み換え反応がイオン衝突によって誘起されている事がわかる.

図 8 に(C_2H^+ , H^+)分解過程における分解イオン片 KER 分布を示した. 1e-capture と 1e-loss においては 3 eV にピークを持つ分布となり, 非常に良く一致した. 2e-loss において 3 eV と 5 eV に

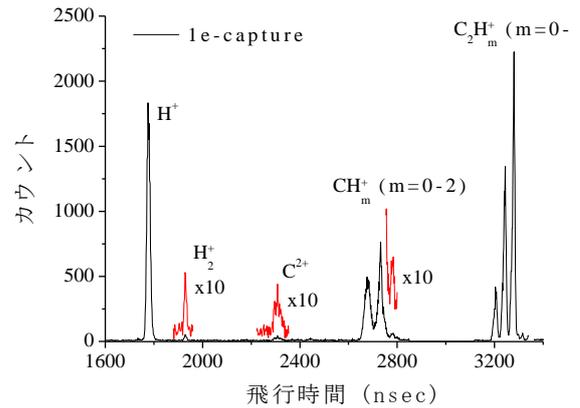


図 7: 2 MeV Si^{2+} 1e-capture($Si^{2+} \rightarrow Si^{3+}$)における C_2H_2 分子の解離イオン片 TOF スペクトル

二つのピークを持つ構造をしている. 放射光を用いた先行研究で, C_2H_2 分子の C 1s に空孔をあけ Auger 過程によって二価の C_2H_2 を生成させ, (C_2H^+ , H^+)に分解した過程の KER が報告されている [15]. その結果では KER は 3.5 eV と 5.3 eV の二つのピークを持つ構造をしている事が報告されている. また分解イオン片の KER と同時に Auger 電子の運動エネルギーと角度分布も測定されており, 3.5 eV の KER の場合は二価の C_2H_2 分子の電子状態は $^1\Sigma_g^+$ と同定され, KER が 5.3 eV の場合は $^1\Pi_u$ と同定されている. よって本研究で観測された 3 eV と 5 eV の KER はそれぞれ $^1\Sigma_g^+$ と $^1\Pi_u$ と考えられる. 2e-loss において $^1\Pi_u$ が顕著に観測される理由は, より高い励起状態である $^1\Pi_u$ は一番近接衝突でエネルギー付与の大きい 2e-loss で最も生成されやすいためである.

図 9 に(CH^+ , CH^+)分解過程の KER 分布を示した. 2e-loss は収量が十分でないために載せていない. 3~4eV 付近にピークを持つ構造をしている事がわかる. 先ほどの放射光の結果では, 6.5 eV にピークを持ち, この状態として $^1\Pi_g^+$ と同定されている [15]. 明らかに本研究での KER は放射光の結果と比較して小さい値を取っている. 重水素化アセチレン C_2D_2 を用いた, 800nm の波長でパルス幅 9 fs, 強度 0.13 PWcm²の超短パルスレーザーでの実験[16]でも放射光の結果同様に 6.5 eV 近辺にピークを有している. 他方で 1.2 MeV Ar^{8+} 衝突の実験結果も報告されており, 2.5 eV 近辺にピークを有している [17]. 更に

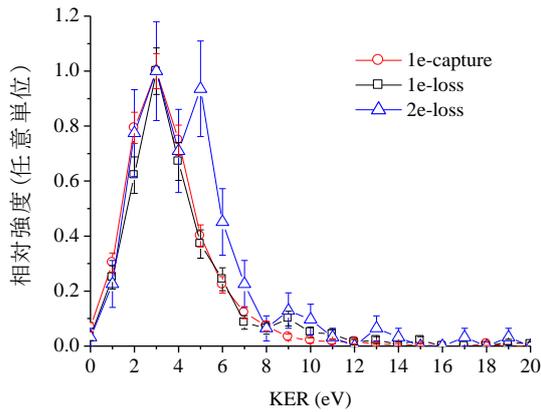


図 8: 2 MeV Si^{2+} 衝突における $(\text{C}_2\text{H}^+, \text{H}^+)$ 分解過程における KER 分布

1e-capture 同様に KER 分布がダブルピークになることも報告されている。つまりイオン衝突では光照射とは異なる分解過程が存在する事を示している。

イオン衝突では光では誘起されない禁制遷移も起こるため、光照射では生成されない電子状

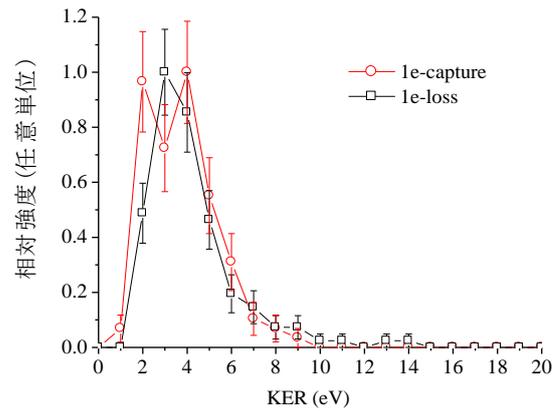


図 9: 2 MeV Si^{2+} 衝突における $(\text{CH}^+, \text{CH}^+)$ 分解過程における KER 分布

態からの分解を考慮する必要があり、禁制遷移状態のポテンシャル曲面の計算がまたれる。

次に C_2H_2 分子のイオン衝突による構造変形過程の研究を行った。6 MeV O^{4+} - C_2H_2 衝突における分解過程の C^+ の運動量ベクトル $P(\text{C}^+)$ と H^+ の運動量ベクトル $P(\text{H}^+)$ のなす角 θ をそれぞれ

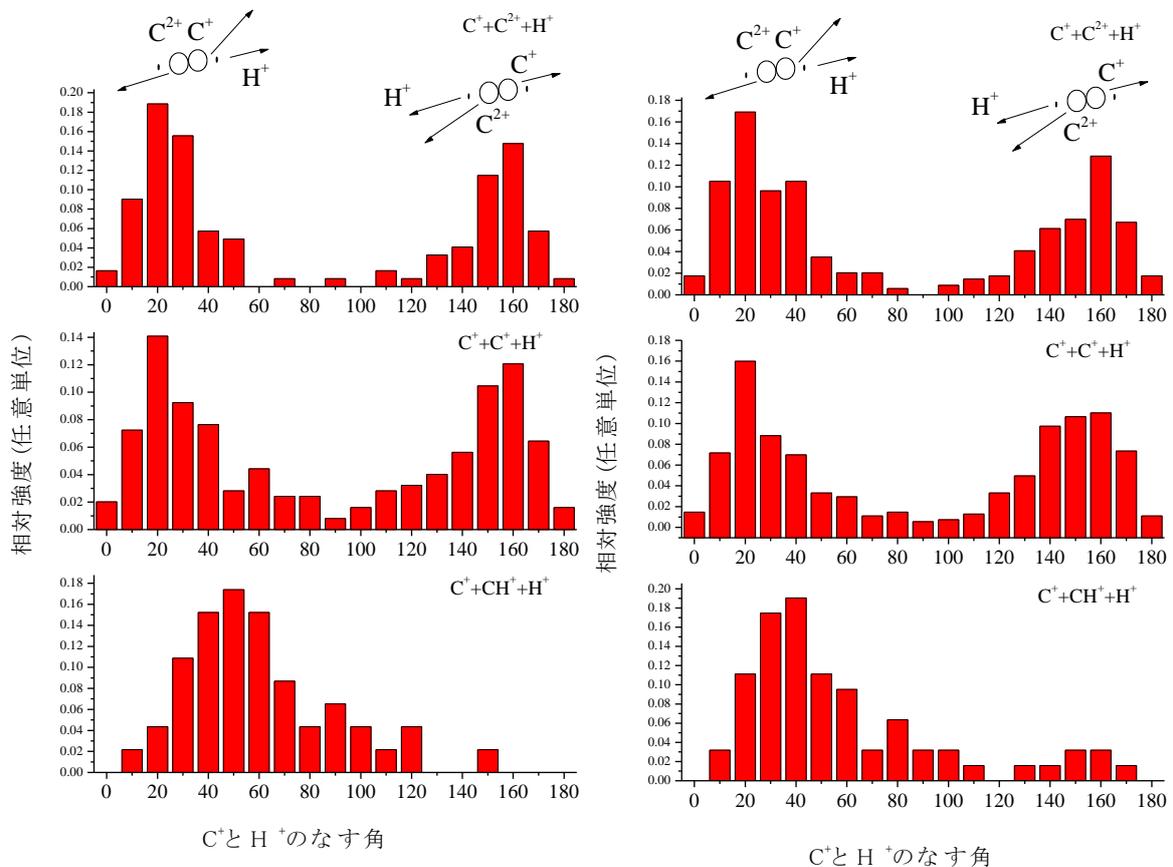


図 10: 6 MeV O^{4+} 衝突における C^+ の運動量ベクトルと H^+ の運動量ベクトルのなす角。
左: 1e-loss ($\text{O}^{4+} \rightarrow \text{O}^{5+}$), 右: 1e-capture ($\text{O}^{4+} \rightarrow \text{O}^{3+}$)

1e-loss, 1e-capture ごとに(H^+ , C^+ , C^{2+}), (H^+ , C^+ , C^+), (H^+ , C^+ , CH^+)分解過程にわけて図 10 に示した. 1e-loss と 1e-capture で大きな違いは観測されていない. 次に 4 体解離(H^+ , C^+ , C^{2+}), (H^+ , C^+ , C^+)においてピークが二つ観測されているのは H^+ がどちらのCと結合していたかを見ていることに対応している. すなわち H と結合しているほうの C 原子とは同じ方向の運動量ベクトルを持ち, 結合していない方の C 原子とは逆方向の運動量ベクトルを持つ. 4 体解離の場合 0 度と 180 度が直線分子に対応し, 20 度と 160 度のピークは C-C 結合からどちらとも 20 度折れ曲がって H^+ が放出されていることを意味している. 他方で 3 体解離の場合は H^+ は必ず C^+ と結合していたことが自明であることから(もう一方が CH^+ であるため), H^+ と C^+ の運動量のなす角はそのまま C-C 結合からの折れ曲がりを表す. 4 体解離では 20 度の折れ曲がり度でピークを持つのにに対し, 3 体解離では 40~50 度にピークを持つ. つまり 3 体解離の方が 4 体解離より分解前に構造が直線構造から屈曲構造へ変形していることが言える.

以下では(H^+ , C^+ , CH^+)分解過程において構造変形が起こるメカニズムを考察する. 放射光を用いた先行研究で $C\ 1s \rightarrow \pi^*$ 遷移による Renner-Teller 効果によって直線分子から屈曲した分子への構造変形が報告されている [18]. 本研究の速度領域では $C\ 1s$ 内殻電離や励起過程は全断面面積において 2~3 % と非常に小さく, 入射イオン速度が 1 a.u. 近辺の衝突過程では無視することができる. 二価の C_2H_2 分子においては価電子励起状態において屈曲構造に構造変形することが予想されており [19], 実際に超短パルスレーザーを用いたポンプ-プローブにより二価イオンのビニリデン構造(CCH_2)への構造変形が実時間で観測されている [16]. 三価イオンがどのようなポテンシャル曲面を持っているのか報告されていないため確定的な事は言えないが三価イオンにおいても構造変形を起こす価電子励起状態が存在する可能性は高い. 他方で 120 keV Ar^{8+} - CS_2 衝突では振動励起によって屈曲が誘起されていると結論づけられている [20]. これらのことを総合すると構造変形は電子励起もしくは振動励起によって誘起されていると考えら

れる.

6. まとめ

高速重イオン荷電変換衝突に伴う気相分子の電離分解過程を分解イオン片運動量画像観測法を用い, 分解イオンの運動エネルギー(KER), 入射イオンに対する分子軸依存性, 分解イオン片運動量ベクトル相関から議論してきた. Sommerfeld parameter k が 1 以上の値を持つ衝突過程においても荷電変換毎に分けて測定すれば分解分岐比, KER は大きく異なることを明らかにし, 衝突過程を特徴づけるパラメーターとして衝突径数 b を含めた q/vb を用いる必要があることを改めて指摘した.

分子軸依存性では荷電変換の過程に必要なエネルギー付与量によって分子配向依存性が議論できることを明らかにした.

C_2H_2 を標的に用いた実験では, 分解過程によっては光照射とは異なる状態を経由した解離過程がイオン衝突では存在することを明らかにし, 禁制遷移を経由した解離過程をイオン衝突では考慮しなければならない事を改めて示した. イオン衝突による構造変形を議論し, そのメカニズムとして価電子励起, 振動励起が考えられることを示した.

7. 謝辞

本研究は京都大学大学院工学研究科 原子核工学専攻に在学中に伊藤秋男教授の御指導の下行ったものです. ここに改めて感謝いたします. また土田秀次准教授(京都大学), 間嶋拓也助教(京都大学)には本研究の遂行に対して数多くのご助言を頂いたことを感謝いたします. 共同研究者として研究に参加して頂いた中井陽一博士(理研)には研究全般にわたり数多くのご助力頂いた事感謝いたします.

また共に実験を行った京都大学原子核工学専攻量子システム工学研究室の皆様方に深く御礼を申し上げます.

参考文献

- [1] J. Ullrich *et al.*, Rep. Prog. Phys. **66**, 1463 (2003).

- [2] J. Ullrich *et al.*, J. Phys. B **30**, 2917 (1997).
- [3] T. Mizuno, T. Yamada, H. Tsuchida, Y. Nakai, and A. Itoh, Phys. Rev. A **81**, 012704 (2010).
- [4] S. De, P. N. Ghosh, A. Roy, C. P. Safvan, Nucl. Instr. and Meth. B **243**, 435 (2006).
- [5] L. Adoui *et al.*, J. Phys. B **32**, 631 (1999).
- [6] Ben-Itzhak *et al.*, Phys. Rev. A **47**, 2827 (1993).
- [7] V. Krishnamurthi, I. Ben-Itzhak and K. D. Carnes, J. Phys. B **29**, 287 (1996).
- [8] B. Siegmann *et al.*, Phys. Rev. A **62**, 022718 (2000).
- [9] M. Lundqvist *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1058 (1995).
- [10] U. Werner *et al.* Phys. Rev. Lett. **79**, 1662 (1997).
- [11] B. Siegmann *et al.*, Phys. Rev. A **66**, 052701 (2002).
- [12] T. Mizuno, T. Majima, H. Tsuchida, Y. Nakai, and A. Itoh, J. Phys. Conf. Sires **58**, 173 (2007).
- [13] T. Mizuno, T. Yamada, H. Tsuchida, Y. Nakai, and A. Itoh, J. Phys. Conf. Sires **163**, 12039 (2009).
- [14] A. Itoh, T. Mizuno, T. Majima, J. Phys. Conf. Ser. **288**, 012027 (2011).
- [15] T. Osipov *et al.*, J. Phys. B **41**, 091001 (2008).
- [16] A. Matsuda, M. Fushitani, E. Takahashi, and A. Hishikawa, Phys. Chem., Chem. Phys. **13**, 8697 (2011).
- [17] S. De, J. Rajput, A. Roy, P. N. Ghosh, and C. P. Safvan, Phys. Rev. A **77**, 022708 (2008).
- [18] N. Sato *et al.*, Chem. Phys. Lett. **393**, 295 (2004).
- [19] T. S. Zyubina *et al.*, J. Chem. Phys. **123**, 134320 (2005).
- [20] F. A. Rajgara *et al.*, Phys. Rev. A **64**, 032712 (1999).

低速多価イオン・原子衝突における電子捕獲過程と共鳴現象 その 1 : $\text{He}^{2+} + \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ 衝突系

島倉紀之

新潟大学理学部

shima@shimakura.gs.niigata-u.ac.jp

平成 24 年 5 月 30 日原稿受付

重粒子衝突非弾性散乱過程において形状共鳴はいまだ観測されていない。我々は、これまで、共鳴観測に供するため、量子論的緊密結合法、波束法を用いて、共鳴現象を系統的に調べる理論的研究を行ってきた。今回は、その中から特に He^{2+} イオンとアルカリ金属原子 ($\text{Li}, \text{Na}, \text{K}$) という衝突系を取り上げ、これまでの理論的研究成果をもとに、形状共鳴について解説する。次回は、これ以外の衝突対を取り上げ、入射イオンの電荷依存性、原子番号依存性などについて解説する予定である。非弾性過程を利用して形状共鳴状態を作るという要求は最近特に強くなっている。

1. はじめに

共鳴は、物理、化学、生物の分野で広く観測されている普遍的な現象であり、何故そのような現象が起こるか、その現象はどのような観測に現れるか研究されてきた。原子衝突の分野では、共鳴は主として電子衝突の分野で良く知られた現象である。例えば、電子と分子の衝突における共鳴の重要性は、弾性散乱、振動励起、電子付着のような過程において長いこと認識されてきた。ある振動励起過程は、共鳴のため、狭いエネルギー範囲ではあるが 2, 3 桁もその断面積の値が大きくなる。電子付着により生成された負の電荷を持つ分子イオンは、不安定であることが多く、短い寿命で解離反応を起こし、ラジカルやイオンのようないろいろな種類の解離フラグメントを生じる。それ故に、共鳴の知識は電子付着を経由した解離過程において、その生成物をコントロールする上で重要である。

電子衝突の場合に比べ重粒子衝突の場合、共鳴現象の研究は十分に行われているとは言えない。重粒子衝突における共鳴現象は 2 種類に分類される。1 つは 10 eV u^{-1} 以下の低衝突エネルギー領域において衝突エネルギーが減少するにつれ断面積が増加するいわゆるオービティング共鳴である。このオービティング共鳴はか

なり以前からさまざまな衝突系において観測されており、我々も $\text{Ar}^{q+} + \text{H}_2$ 衝突系の電子捕獲断面積に現れたオービティング共鳴を報告した [1]。また、オービティング共鳴の断面積への関与を明確にするため、 $\text{N}^{4+} + \text{H}$ 衝突系に対して、実験、理論の共同研究を行った [2]。もう 1 つは 0.1 eV u^{-1} 以下の極低衝突エネルギー領域においてある特定の衝突エネルギーで断面積がピーク状になる形状共鳴である。古い論文で形状共鳴をオービティング共鳴と呼んでいるものもあるので注意が必要である。この総説で扱うのは 2 つ目の形状共鳴である。

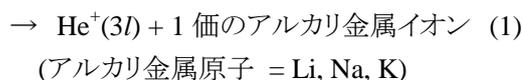
形状共鳴は古くは 1898 年にラジカルラジカル再結合反応を説明するためボルツマンによって提案されたが [3]、孤立衝突系における形状共鳴の実験による観測は、それから 75 年後のカナダの Waterloo 大学の Scols のグループによる Hg 原子からの H 原子の弾性散乱断面積の測定まで待たなければならなかった [4]。ほぼ時を同じくして、Toennies のグループは水素原子、水素分子と希ガス ($\text{Ne}, \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$) の弾性衝突過程で現れる重粒子共鳴現象の観測結果を報告した [5]。これ以降も、重粒子 2 体衝突においていくつかの系の弾性衝突過程で形状共鳴が観測されている。一方、理論的な研究としては

1978 年のカナダの Alberta 大学の Davis と Thorson の報告が初めてである [6]. 彼らは $H^+ + H(1s)$, $D(1s)$ 衝突系における弾性散乱, 共鳴型電荷移行過程を理論的に扱った. 状態間の遷移を含む非弾性散乱過程における共鳴は, 1984 年に, $(N^{3+} + H)$ 衝突系における電子捕獲過程において, Rittby らによって初めて報告された [7]. 非弾性散乱過程に対して形状共鳴を扱った 2 番目の報告は我々の $(N^{5+} + H)$ 衝突系における電子捕獲過程の研究である [8]. これ以降, 我々の研究も含め, 形状共鳴に対して多くの計算結果が報告されるようになった.

我々は, $N^{5+} + H$ 衝突系における形状共鳴の報告以後 [8], $C^{5+} + H$ 衝突系, $B^{3+} + Li$ 衝突系, $Be^{2+} + Li$ 衝突系, $N^{4+} + H$ 衝突系, $Be^{3+} + He$ 衝突系 [9], $N^{5+} + H$ 衝突系 [10] に対して, 量子論的緊密結合法にもとづき断面積の計算を行うとともに波束法を適用することにより, 共鳴現象解明の研究を続けてきた. その結果, (1) 共鳴は衝突の途中で形成される準分子の振動回転エネルギーと衝突エネルギーが一致すると起こること, (2) ある特定の部分波の散乱行列が大きくなることにより断面積がピーク状に大きな値を持つようになることを見出した. また, (3) 共鳴が高い衝突エネルギーで観測されるには入射イオンの荷数, 標的の分極率が大きい必要があるが, その反面, そのような場合, 多くの状態が複雑に絡み合い, 共鳴が観測しづらくなることもあることを明らかにした. これらの結果は日本物理学会 2002 年秋季大会のシンポジウム(主題: 低速多価イオンの理論)で筆者が報告済みである. この頃から, 世界中で, 電子捕獲過程に現れる共鳴ピークを実験によって観測しようという試みが始まったが, 現在のところすべて徒労に終わっている. これは, 共鳴現象が極端に低い衝突エネルギーで現れること, 更に入射イオンの衝突エネルギーを揃えて衝突させなければならないことによる.

そこで我々は, 共鳴の観測を行ってもらうため, 電子捕獲過程に現れる共鳴の特徴を系統的に調べる理論的研究を行った. 今回はその中から, 特に, He^{2+} イオンとアルカリ金属原子という衝突対の組み合わせ

$He^{2+} + \text{アルカリ金属原子}(ns)$



を取り上げ解説する. 扱ったエネルギー領域では電子捕獲に寄与するのは $He^+(n=3)$ チャンネルであることが知られているので, 電子捕獲チャンネルとしてそれらのみ考慮した. Scols らのグループ, Toennis らのグループ, Davis と Thorson によって扱われた衝突系はいずれも共鳴は弱い化学結合力によって生じる. これに対して, 多価イオンによる中性粒子からの電子捕獲過程では, 共鳴現象は, 入射イオンの電荷により中性標的原子が分極し, ポテンシャルエネルギー曲線に引力部分(ポテンシャルの井戸)が現れ, 遠心力(斥力)を考慮した有効ポテンシャルに障壁が生じることによる. 注意したいのは, 弱い化学結合力に比べて多価イオンによる中性粒子の分極力はさらに弱いということである. 多価イオンによる電子捕獲過程の場合, 標的原子の分極率が大きいと, 大きい軌道角運動量で, 従って大きい衝突エネルギーで共鳴が観測できる可能性がある. 我々が He^{2+} とアルカリ金属原子という衝突系をとりあげたのは, これらが

- (1) 実験で取り扱い易い衝突系である,
- (2) 大きな双極子分極率を持つ標的と多価入射イオンの組み合わせである,
- (3) 電子捕獲断面積の値が大きい,
- (4) 共鳴ピークとそのバックグラウンドの差が著しい,

と考えたからである. 得られた結果は, 実験による共鳴現象の観測が予想以上に難しいことを示したが, それでもこれまで扱われた系に比べれば, 共鳴が観測される可能性を示していると思われる.

非弾性過程を利用して形状共鳴状態を作るという要求は最近特に強くなっている. これは, 極端に冷えた分子に対して様々な応用が考えられるからであり, 特定の量子状態だけを作る, また余分なエネルギーを持たせないという観点からいうと弾性散乱過程よりも非弾性過程を用いた方が有利だからである. また, 最近の冷たい原子,

分子を作る技術の進展がこのような研究に拍車をかけている [11].

本論文では、断りが無い限り原子単位系を用いる.

2. 理論と計算法

2.1 電子状態の計算

共鳴現象が現れる極低衝突エネルギー領域では衝突系全体を分子として扱う分子基底が良い近似となる. また, 状態間の遷移を引き起こす結合項としては, 動径結合のみ考慮すれば良く, 回転結合は遷移にほとんど影響を与えない. 更に, 遷移は断熱ポテンシャル曲線の擬交差点付近でのみ起こると考えて良い.

この総説で扱う衝突系では, 内殻電子は衝突動力学に影響を与えないと考えることができるので, 原子核と内殻電子をまとめてコアとしてガウス型の擬ポテンシャルで表し, 基底関数としてはスレーター型軌道を用い, 配置間相互作用法を使って, 準分子の固有状態(波動関数)と固有値を求めた [12].

2.2 量子論的緊密結合方程式

断熱基底の量子論的緊密結合方程式は 2 次微分の結合項を含むこと, 結合項が核間距離の狭い範囲で大きな値となることから, 数値的に解くのは不便である. 一方, 透熱基底では, 核間距離の変化に対して状態が比較的ゆっくりと変化するので, 数値積分の際に刻み幅をそれほど細かく取らなくても断面積が精度良く求まる [8, 13, 14]. 緊密結合方程式は部分波(全角運動量 K)ごとに数値的に解かれ, i 状態から f 状態への遷移に対応する散乱行列 S_{fi}^K が得られる. 全散乱断面積は得られた S_{fi}^K 行列を用いて

$$\sigma_{fi}(E) = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_K (2K+1) |S_{fi}^K|^2 \quad (2)$$

と書ける. ここで k_i は初期波数である.

2.3 多チャンネル核波束法とスペクトル法

量子的な現象である共鳴の物理的イメージを描くことは, そのダイナミクスを理解する上で, 更にはどんな系で共鳴が観測し易いか予測する上

で, 非常に重要である. しかし, 量子論的緊密結合法では, 断面積の数値を得ることはできるが, 共鳴のダイナミクスのイメージは把握しにくい. このような理由から, 我々は, 原子核の運動も量子的に扱いながら, 状態間の遷移も含めて衝突の追跡ができ, 共鳴のイメージを描くことのできる多チャンネル核波束法を開発した [10]. 1 つのポテンシャル曲線上に核波束を走らせる核波束法はポピュラーなものであったが, 状態間遷移が起こり複数の状態を考慮しなければならない衝突系を扱える核波束法の開発はコンピュータの進歩(計算速度と記憶容量)した最近になってようやく可能となった. 我々の開発した多チャンネル核波束法では, 系のハミルトニアンと初期波束を与えることで, 任意の時間における波束を得ることができる. 初期波束としてはガウス型波束を用いるが, それに含まれるパラメーターの具体的な決定法については論文[10]を参考にして欲しい. アルゴリズムとして, より正確な結果を得るため split-operator 法を, 断熱基底-透熱基底間の変換を効率的かつ正確に行うため高速フーリエ変換法を用いている. 核波束法の原理的な事柄に関しては Balakrishnan らの論文[15]を, また, いくつかの点で我々の方法と異なるが, Vaeck ら[16]が多チャンネル核波束法の開発を行っているので, それらの論文も参照して欲しい.

時間発展の結果得られる波束を用いて, スペクトル法に基づき固有値, 固有関数を得る方法も開発した [10]. この方法では, 数値積分を効率的に行うためウインドウ関数を用いるなど工夫をしているが, 基本的には Feit らの方法[17]を用いている. 量子論的緊密結合法によって得られる S 行列を調べることにより特定の衝突エネルギーで現れた共鳴ピークに寄与する部分波を, つまりは準分子の回転量子数を知ることができる. 一方で, スペクトル法によって, 有効ポテンシャルの井戸中の準分子の振動回転状態のエネルギーが求まる. この両者を比較することによって, 2 つの方法の計算精度の確認がある程度できる. また, 2 つの方法を比較するもう 1 つの利点は共鳴がどのポテンシャル井戸によるものなのか知ることができる点にある. しかし, 量子論的緊密結合法によるピークの位置は電子捕獲に関与する複数の

状態を同時に考慮して得られた結果であり、スペクトル法に基づく同定はあくまでも 1 つの擬状態 (断熱と透熱を組み合わせた) のポテンシャルに基づく結果であるという違いに注意して欲しい。

3. 形状共鳴の性質

この章では、まず 3.1 節で量子論的緊密結合法に基づく計算結果において共鳴がどのような形で現れるか解説し、3.2 節で共鳴が何故生じるのかを有効ポテンシャルの立場から解説した後、3.3 節では「量子論的緊密結合法とスペクトル法を組み合わせ共鳴ピークを同定する」方法について述べる。これにより我々の得た計算結果の理解の一助にされたい。

3.1 量子論的緊密結合法の計算結果から見た形状共鳴

式(2)で角運動量 K に関する和は 0 から散乱行列が断面積に寄与しなくなる十分大きな全角運動量 K_{\max} までとる。形状共鳴が起こらない場合、 K_{\max} の値としては運動量 p と電子捕獲が起こる衝突径数 b の積が 1 つの目安となる。つまり、衝突エネルギーが大きいと、 K_{\max} は大きくなり、大きな K_{\max} まで和を取る必要が生じる。しかし形状共鳴が起こる場合注意が必要である。一例として、図 1 に、 $B^{3+} + Li$ 衝突系の衝突エネルギーが 0.04548 eV の共鳴ピーク付近における、散乱行列の衝突エネルギーおよび全角運動量量子数依存性を示した。 $K = 0-185$ では散乱行列の角運動量依存性は衝突エネルギーが変わってもあまり変化しないなめらかな振動関数になっている。またその振動は、 K が小さい領域ではゆったりしているが、 K が大きくなるにつれ短い周期の振幅の大きい振動に変わって行く。少々見にくいですが、 $K \cong 186$ で振動はほとんどなくなり、振動の外側の $K > 186$ では、 $K = 189$ においてのみ散乱行列が大きな値を持っている。この $K = 189$ のときの散乱行列の異常さはその大きさにある。 $K = 0-185$ では散乱行列の二乗の値は最大で 0.02 程度であるが、 $K = 189$ では約 0.85 と 50 倍にもなる (図 1 では縦軸は 0.2 で切っている)。このように、共鳴現象が起こる場合、散乱行列はある特定のそれも 1 つの角運動量で大きな値を持つ。

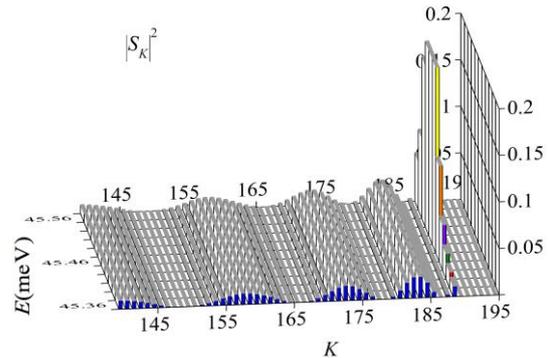


図 1: 散乱行列の衝突エネルギーおよび全角運動量量子数依存性. ($B^{3+} + Li$) 衝突系の衝突エネルギーが 0.04548 eV で現れる振動, 回転量子数が (0,189) に対応した共鳴の場合を例として示した。

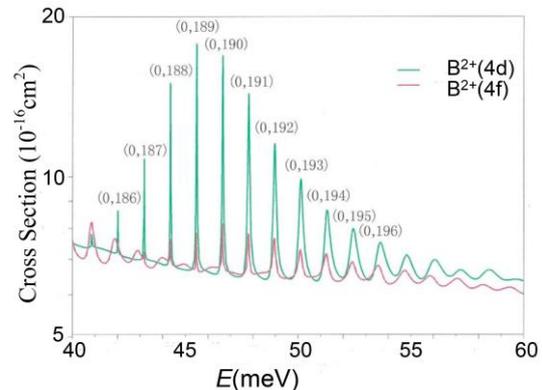


図 2: $B^{3+} + Li \rightarrow B^{2+}(4d,4f) + Li^+$ 電子捕獲断面積の衝突エネルギー依存性. カッコ内の 2 つの数値はそれぞれ準分子の振動量子数と回転量子数を表している。

これが、図 2 に示した $B^{3+} + Li \rightarrow B^{2+}(4d, 4f) + Li^+$ 電子捕獲過程において、衝突エネルギー 0.04548 eV で、断面積がピークになる原因である。量子論的緊密結合方程式を解いて断面積を求めるとき、我々は、 $K = pb$ の関係式から K_{\max} を求めそこまでの和を取るとか、更には K に関する和を 1 つおきにとるとかしがちであるが、そのようなことをしてしまうと共鳴現象が起こっていることを見逃してしまうことがある。

3.2 有効ポテンシャルの立場からみた形状共鳴

断熱ポテンシャルに遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャル

$$V_{\text{eff}}(R) = V(R) + \frac{K(K+1)}{2\mu R^2} \quad (3)$$

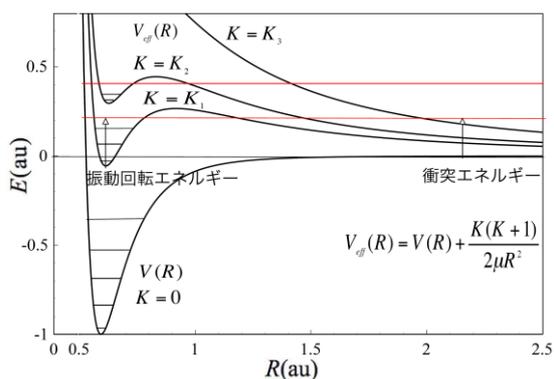


図 3: 断熱ポテンシャル V に遠心力ポテンシャル

$$\frac{K(K+1)}{2\mu R^2}$$

を加えた有効ポテンシャル V_{eff} .

を考える。モデル図を図 3 に示した。ポテンシャルエネルギー曲線が一定の条件を満たす引力型で、角運動量が 0 でない場合、有効ポテンシャルはポテンシャル障壁を持ち、それよりも内側にポテンシャル井戸を持つ。この井戸がある程度深いと井戸の中に不連続状態である振動状態ができる。衝突対は、トンネル効果によりポテンシャル障壁にしみ込み、この振動回転状態のエネルギーと衝突エネルギーが一致すると、一時的に井戸中に振動回転状態として留まることになる。角運動量がある値以上に大きくなると、井戸は消滅する。

3.3 共鳴ピークの同定法

電子捕獲断面積において現れた共鳴ピークの衝突エネルギー付近で、散乱行列の部分波依存性を調べることで、共鳴に寄与するただ 1 つの部分波の角運動量がわかる。更に、この角運動量をもとに遠心力ポテンシャルを求め、その有効ポテンシャル上で波束を走らせることにより、振動状態のエネルギーと固有関数を求めることができる。スペクトルパワーのエネルギーを衝突対の距離が無限大のときのエネルギーを基準にすることにより、電子捕獲断面積において現れた共鳴ピークの衝突エネルギーと比較できることになる。これらの作業から電子捕獲断面積に現れた共鳴ピークが準分子のどんな振動回転量子数に対応しているか同定できる。

4 標的原子依存性

共鳴は非常に低い衝突エネルギーで起こる現象なので、できるだけ高い衝突エネルギーで起こる衝突系を探す必要がある。一方で、電子捕獲過程は反応過程であり、共鳴が観測されるにはその反応断面積が大きいということも必要である。Li, Na, K はいずれも双極子分極率が大きい (Li, Na, K の双極子分極率はそれぞれ 162 au^3 , 162 au^3 , 290 au^3) ので、 $\text{He}^{2+} + \text{Li, Na, K}$ 系のポテンシャル井戸は深くなる。ポテンシャル井戸が深くなると、図 3 からわかるように、角運動量が高くなっても、有効ポテンシャルの井戸が埋まらず、大きな振動回転エネルギーをもつ不連続状態が存在することになり、その結果、高い衝突エネルギーで共鳴を観測できる可能性が生じる。最初に、反応が起こり易いかどうか予測する目的で、断熱ポテンシャルエネルギーについて、特に擬交差点の位置およびその点でのエネルギー差と電子捕獲断面積の大きさとの関係に注目して、解説する。引き続き、共鳴の同定とメカニズムについて解説する。

4.1 断熱ポテンシャルエネルギー曲線と擬交差点

HeLi^{2+} 系, HeNa^{2+} 系, HeK^{2+} 系の断熱ポテンシャルエネルギー曲線を、それぞれ、図 4, 図 5, 図 6 に示す。また、擬似交差点でのエネルギー差を表 1 に、ポテンシャル井戸の深さを表 2 にまとめた。断熱状態 4Σ から 8Σ はそれぞれ核間距離無限遠で ($\text{He}^+(3s) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$), ($\text{He}^+(3p) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$), ($\text{He}^+(3d) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$), ($\text{He}^{2+} + \text{Li}(2s), \text{Na}(3s), \text{K}(4s)$), ($\text{He}^{2+} + \text{Li}(2p), \text{Na}(3p), \text{K}(4p)$) 状態に繋がっている。核間距離が大きい領域では、 4Σ から 6Σ のポテンシャルエネルギー曲線は核間距離が大きくなるにつれ右下がりになっているが、これはそれらの状態では衝突対の間にクーロン反発が働いているためである。これに対して、 $7\Sigma, 8\Sigma$ 状態では、核間距離が大きい領域では分極力しか働かないため、ポテンシャルエネルギー曲線はほぼ水平となっている。Massey の判別条件[18]や Landau-Zener 公式[18]により、擬交差点でのエネルギー差と衝突エネルギーから、その点で遷移が起こり易いかどう

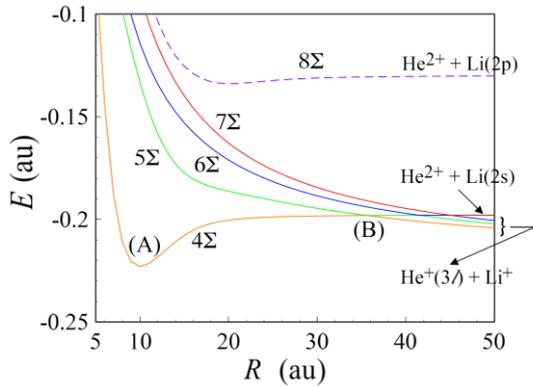


図 4: 準分子 HeLi^{2+} の断熱ポテンシャルエネルギー曲線.

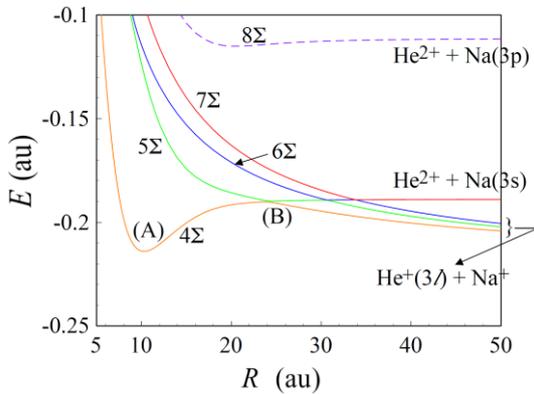


図 5: 準分子 HeNa^{2+} の断熱ポテンシャルエネルギー曲線.

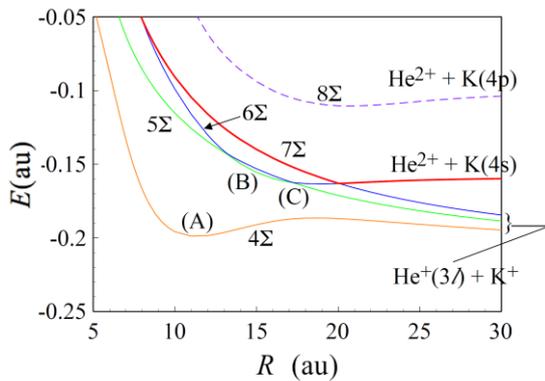


図 6: 準分子 HeK^{2+} の断熱ポテンシャルエネルギー曲線.

か見積もることができる.

① $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系: 表 1 によると核間距離 $R = 35\text{--}45$ au に擬交差点が 3 つあるが, $R \approx 45$ au にある $6\Sigma\text{--}7\Sigma$ 間の擬交差点, $R \approx 42$ au にある $5\Sigma\text{--}6\Sigma$ 間の擬交差点は透熱的に通過し, おもに $R \approx 36$ au の $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点で $\text{He}^+(3s) + \text{Li}^+$ 状態への電子捕獲が起こると考えられる. しかし, この点のエネルギー差はかなり

小さく, 共鳴が現れる極低衝突エネルギーでも電子捕獲断面積は小さいことが予測される. 表 2 からわかるようにポテンシャル井戸(A)の深さは 0.025 au とかなり大きいので, この井戸による共鳴は比較的高い衝突エネルギーで現れると考えられる. 一方, 井戸(B)の深さは 2×10^{-5} au と浅い. 小さい核間距離に現れる井戸(A)はアルカリ金属原子の分極率がそのまま反映されたものであるが, 外側の井戸(B)は擬交差点で入射チャンネル $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ と電子捕獲チャンネル $\text{He}^+(3s) + \text{Li}^+$ のポテンシャル曲線の交差によるものである. この擬交差点 R が大きい領域にあり, この点で分極によるポテンシャルが小さいことも井戸が浅い理由である.

② $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系: 擬交差点は $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 系と比べ R の小さい方に移動している. これは無限遠で $\text{He}^{2+} + \text{Na}(3s)$ 状態が $\text{He}^{2+} + \text{Li}(2s)$ よりも, エネルギー的に, それぞれのイオン化状態 ($\text{He}^{2+} + \text{Na}^+ + e$, $\text{He}^{2+} + \text{Li}^+ + e$ 状態) に近いことによる. この衝突系でも $6\Sigma\text{--}7\Sigma$ 間, $5\Sigma\text{--}6\Sigma$ 間の擬交差点はほぼ透熱的に通り抜け, 電子捕獲は主として $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点で起こり, $\text{He}^+(3s) + \text{Na}^+$ 状態への電子捕獲が支配的であると予想できる. $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点のエネルギー差は, $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系と比べて大きくなっており, 共鳴が現れる極低衝突エネルギー領域の遷移にちょうど良い大きさなので, 電子捕獲断面積は大きくなると予測される. 井戸(B)の深さも $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 系のように浅くはない. いろいろな点を総合すると, この系はこれまで扱った系の中では最も高い衝突エネルギーで共鳴現象が現れると考えられる.

③ $\text{He}^{2+} + \text{K}$ 衝突系: 無限遠での始状態 $\text{He}^{2+} + \text{K}(4s)$ のエネルギーが前述の 2 つの系よりも更に高いため, 擬交差点は 2 つの系よりも更に R の小さい方へ移動している. これに伴い $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点のエネルギー差は大きくなりすぎ, 低い衝突エネルギーではこの点で遷移は起こらなくなってしまふ. 一方, $6\Sigma\text{--}7\Sigma$ 間の擬交差点ではエネルギー差が小さすぎ透熱的に通過することから, $5\Sigma\text{--}6\Sigma$ 間の擬交差点での遷移による $\text{He}^+(3p) + \text{K}^+$ 状態への電子捕獲断面積だけがある程度の大きさを持つと思われる. 共鳴はポテ

表 1: 疑交差点の位置とその点でのエネルギー差.

系	状態間	位置(au)	$\Delta E(\text{eV})$
$\text{He}^{2+} + \text{Li}$	4 Σ -5 Σ	35.62	6.0×10^{-5}
	5 Σ -6 Σ	41.56	2.7×10^{-7}
	6 Σ -7 Σ	45.07	2.7×10^{-8}
$\text{He}^{2+} + \text{Na}$	4 Σ -5 Σ	24.1	1.6×10^{-2}
	5 Σ -6 Σ	30.64	2.7×10^{-6}
	6 Σ -7 Σ	33.83	1.8×10^{-7}
$\text{He}^{2+} + \text{K}$	4 Σ -5 Σ	18	6.8×10^{-1}
	5 Σ -6 Σ	17.2	2.7×10^{-3}
	6 Σ -7 Σ	20.06	4.9×10^{-5}

表 2: 断熱ポテンシャルの井戸の深さ. $R = \infty$ での始状態のエネルギーとの差の大きさである.

系	記号	ポテンシャル井戸の深さ (au)
$\text{He}^{2+} + \text{Li}$	(A)	0.025
	(B)	0.00002
$\text{He}^{2+} + \text{Na}$	(A)	0.0251
	(B)	0.0009
$\text{He}^{2+} + \text{K}$	(A)	0.0397
	(B)	0.0061
	(C)	0.004

ンシャル井戸(B), (C)によるものが現れると考えられるが, 断面積が小さいことからこの系で共鳴は観測しにくいと予想される.

4.2 共鳴の同定とそのメカニズム

$\text{He}^{2+} + \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ 系に対して, 4 Σ -7 Σ の 4 状態を用いて量子論的緊密結合法により電子捕獲断面積を求め, スペクトル法により振動回転準位の同定を行うことにより得られた共鳴に関する知見は以下のとおりである.

① $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系: 得られた電子捕獲断面積のうち, $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積を図 7(a), (b) に示す. $\text{He}^+(3p)$ 状態, $\text{He}^+(3d)$ 状態への電子捕獲断面積は計算したすべての衝突エネルギー領域で $\text{He}^+(3s)$ 状態の場合に比べ 2 桁程小さかったので割愛した. また, 各共鳴ピークに対しスペクトル法を用いて行った振動回転準位の帰属の結果を本文末表 3 に示した(帰属方法の説明は $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系の所で行う). この表には, 比較のため, 量子論的緊密結合法によって得られた断面積のピークの位置も示してある. 量子論的緊密結合法によるピークの位置からは

部分波の角運動量子数が得られるだけなので, 例えば, 振動回転準位(55,34)と(4,34)は同じエネルギーとして示してある. 図では井戸(A)による共鳴には*をつけて井戸(B)による共鳴と区別してある($\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 系の場合も同様). 井戸(B)よりも井戸(A)の場合の方がスペクトル法と量子論的緊密結合法による帰属結果が一致している準位の数は多い. 同じ回転量子数では, 井戸(A)の方が振動量子数の大きい状態になっている. また井戸(A)が関係するピークは比較的鋭く, 井戸(B)の場合には幅広いものが多い. これは井戸(A)の方が井戸(B)の場合よりポテンシャル障壁が高く, 幅広いため, 井戸に捕まった準分子の寿命が長いためである. 計算結果によると共鳴が現れる最大の衝突エネルギーは約 0.29 eV である. 図 7(b)に現れている共鳴ピークは, いずれも井戸(A)によるものであり, 回転量子数が高い. 共鳴が高い衝突エネルギーで現れるには, 回転量子数が高くなっても有効ポテンシャルの井戸中に不連続状態が生き続ける必要があるからである.

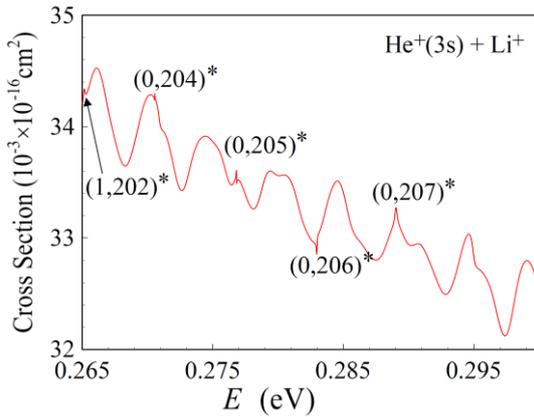
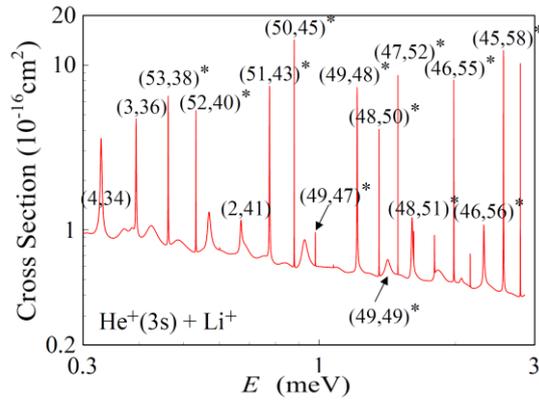


図 7: $\text{He}^{2+} + \text{Li} \rightarrow \text{He}^+(3s) + \text{Li}^+$ 電子捕獲断面積に現れる共鳴ピーク. 括弧内の数字は共鳴状態の振動, 回転量子数. *がついているものは 4Σ の, *がついていないものは 5Σ の井戸による共鳴を表す. (上図, a), (下図, b).

② $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系: 得られた $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積を図 8(a), (b), (c)に示す. $\text{He}^+(3p)$ 状態, $\text{He}^+(3d)$ 状態への電子捕獲断面積は $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積より 2 桁以上小さいので割愛した. 図 8(a), (b)から, 衝突エネルギーが 0.05 meV から 3 meV の領域では, $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積は $(2000\text{--}8500) \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ という大きな値になることがわかる. 一方, 図 8(c)は, 共鳴が現れる最も高い衝突エネルギーでも電子捕獲断面積は $250 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ と大きい, そのピークは Stückelberg 振動と重なってしまい, 観測が難しい可能性を示している. 各共鳴ピークに対して, 散乱行列の 2 乗の角運動量量子数依存性および衝突エネルギー依存性を調べた. 一例として, 図 8(b) 中の衝突エネルギー $E = 2.5229 \text{ meV}$ のピーク (1) を取り上げ, 簡単に説明する. このピークを選んだ理由は, 比較的高い衝突エネルギーで現れ, 図

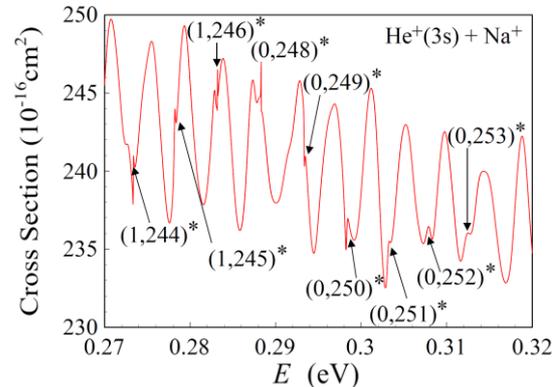
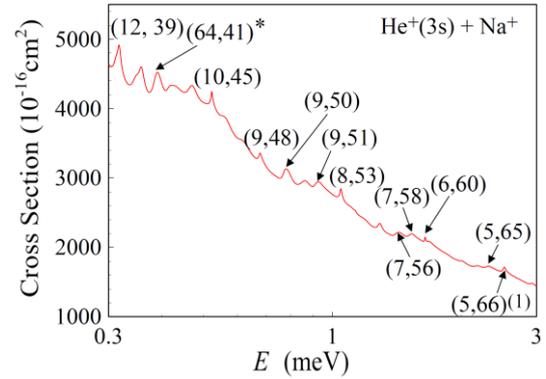
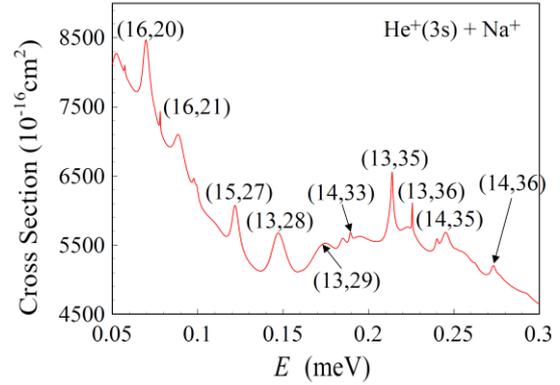


図 8: $\text{He}^{2+} + \text{Na} \rightarrow \text{He}^+(3s) + \text{Na}^+$ において現れる共鳴ピーク. 括弧内の数字は共鳴状態の振動, 回転量子数. *がついているものは 4Σ の, *がついていないものは 4Σ と 5Σ の擬交差点における井戸による共鳴を表す. (上図, a), (中図, b), (下図, c).

8(c)のピークのように Stückelberg 振動と重なっていないことによる. 先に示した $\text{B}^{3+} + \text{Li}$ 衝突系の場合の図 1 ほどはっきりはしていないが, $K = 0\text{--}65$ の領域では $|S|^2$ の K 依存性は衝突エネルギーが変わってもほとんど差がないこと, $K = 66$ の場合だけ $|S|^2$ の K 依存性が衝突エネルギーに大きく依存していることがわかった. 次に, この共鳴状態の振動量子数をスペクトル法によって求めた. まず HeNa^{2+} 系の断熱ポテンシャルの $6\Sigma\text{--}7\Sigma$

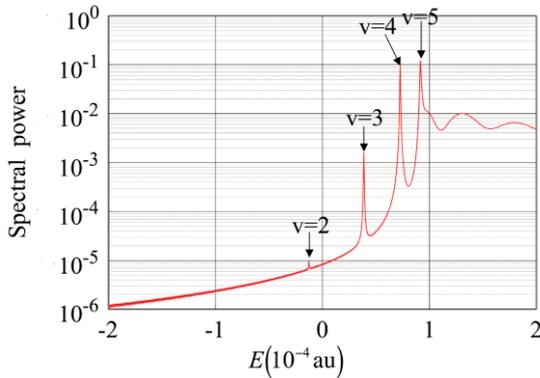


図 9: 準分子 HeNa^{2+} の断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させたポテンシャルエネルギーに $K = 66$ の遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャル中の振動状態のスペクトルパワー.

間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させたポテンシャルエネルギーに $K = 66$ の遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャルエネルギー (ポテンシャル I) を用いて「スペクトルパワー」を求めた. その結果得られた 4 つのピークを図 9 に示した. そのうち $E = 0.00009179 \text{ au}$ ($= 2.4977 \text{ meV}$) のピークのエネルギーが図 8(b) の $E = 2.5229 \text{ meV}$ のピークのエネルギーに近い. そこで, 更にスペクトル法を用いてポテンシャル I が作る井戸中の, $E = 0.00009179 \text{ au}$ のピークに対応する, 準安定状態の固有関数を求めた. 得られた固有関数の二乗を有効ポテンシャルとともに図 10 に示す. 有効ポテンシャルには $R = 50 \text{ au}$ 付近にポテンシャル障壁があり, 固有関数はこの障壁の内側に捕まっている振動量子数 5 の状態であることがわかる. 他の共鳴ピークに対しても同様な方法を用いて振動回転量子数を求めた. 得られた共鳴ピークの帰属結果を本文末表 4 にまとめるとともに図 8(a), (b), (c) の各ピークに記した. 但し, *印を付けたピークは断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間に加え, $4\Sigma-5\Sigma$ 間の擬交差点も透熱的に通過させた有効ポテンシャル (ポテンシャル II) を用いた結果である. $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系の場合とは異なり, スペクトル法によって同定できたピークには井戸(B)により生じるピークが多い. 計算結果によるとこの衝突系で共鳴が現れる最大の衝突エネルギーは約 0.3 eV である.

③ $\text{He}^{2+} + \text{K}$ 衝突系: 衝突エネルギーが 0.5 meV から 3 meV の領域の $\text{He}^+(3p)$ 状態への電子捕獲

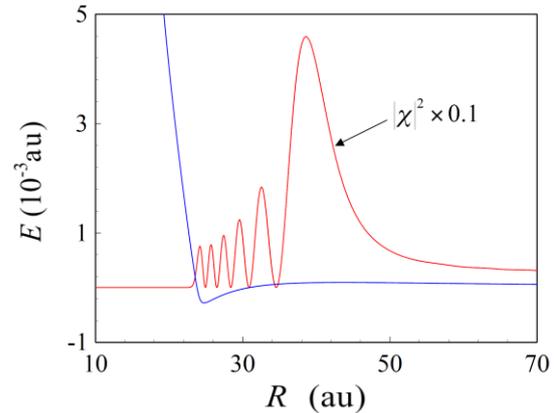


図 10: 準分子 HeNa^{2+} の断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させたポテンシャルエネルギーに $K = 66$ の遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャル中の振動状態 $\nu = 5$ の固有関数の絶対値の二乗.

断面積を図 11 に示す. $\text{He}^+(3s)$ 状態, $\text{He}^+(3d)$ 状態への電子捕獲断面積は $\text{He}^+(3p)$ 状態への電子捕獲過程に比べ 2 桁程小さいので割愛した. 断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させた場合の有効ポテンシャル (ポテンシャル I) および $6\Sigma-7\Sigma$ 間に加え $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点も透熱的に通過させた有効ポテンシャル (ポテンシャル II) の 2 つを用いての共鳴ピークの帰属結果を本文末表 5 にまとめるとともに図 11 の各ピークに記した. 図中の*印はポテンシャル II を用いての帰属であることを示す. 共鳴のピークは, $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系と同様鋭く, 比較的等間隔に現れている. 共鳴ピークの位置, 形が単調なことから, 共鳴ピークについていろいろな知見を得ることができる. その特徴は (1) 衝突エネルギーが増加するにつれベースとなっている断面積の値は増加している. (2) 振動回転量子数が (30, 63) から (23, 84) までの 8 個の鋭いピークと振動回転量子数が (30, 64) から (23, 82) までの 7 個の少し幅広いピークが, とともに, ほぼ等間隔で現れている. 両グループとも, それぞれ, 順に振動量子数が 1 減少, 回転量子数が 3 増加している. 振動エネルギー 1 個分と回転エネルギー 3 個分にそれほど大きい差がないため, 有効ポテンシャルの形, 井戸の底から計ったそれらの状態のエネルギーなどが似ているものと思われる. (3) 振動量子数が同じで回転量子数が 1 異なる (24, 81) のピークと (24, 82) のピークを比べると, (24,

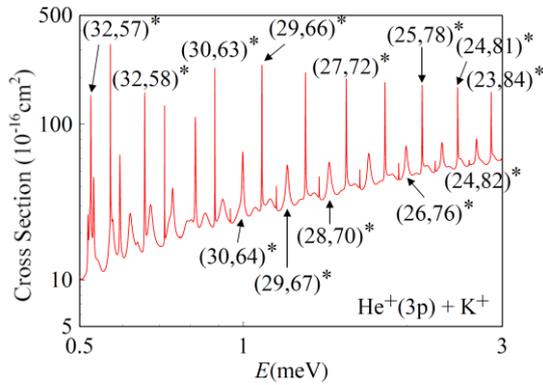


図 11: $\text{He}^{2+} + \text{K} \rightarrow \text{He}^+(3p) + \text{K}^+$ において現れる共鳴ピーク. 括弧内の数字は共鳴状態の振動, 回転量子数. *は 4Σ の井戸による共鳴を表す.

82)のピークの方が高さは低い幅広い. これは (24, 82)のピークの方が有効ポテンシャル障壁の厚さが薄く, 寿命が短いことによる. 計算結果によると共鳴が起こる最大の衝突エネルギーは約 0.044 eV と小さく, この系は $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 系と比べ共鳴は観測しにくいと思われる. しかし, この系は数十 meV 以上の衝突エネルギーでの電子捕獲断面積の計算が難しいため, 実際はより高い衝突エネルギーで共鳴が現れているにもかかわらず見逃している可能性もある.

4.3 多チャンネル核波束法による共鳴ダイナミクスの解析

共鳴を観測するのに最適である可能性が高い $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 系に対して, スペクトル法により振動回転状態(5, 66)であると帰属されたピークを選び, 衝突エネルギー $E = 2.4977$ meV で核波束を走らせることにより, 共鳴のダイナミクスを解析した. 得られた計算結果を図 12 に示す. この図より, 入射波束は, 衝突により, 3 つに分かれることがわかる. 1 つ目は $R = 50$ au 付近にあるポテンシャル障壁によって跳ね返されたものであり, 2 つ目はより内側の $R \leq 25$ au にある He^{2+} イオンと Li^+ イオンの反発ポテンシャルによって跳ね返されたものである. 2 つの波束の大きさを比べると, 後者の波束の確率の方が大きいことがわかる. 3 つ目は, $R = 25$ au まで侵入し, 時間が経過しても同じ核間距離にとどまっている波束である. この波束は時間と共に徐々にその確率は減少しているが同じ形を保っており, 6 つの山からできている. 図 10 に示した固有関数と同じ形であること

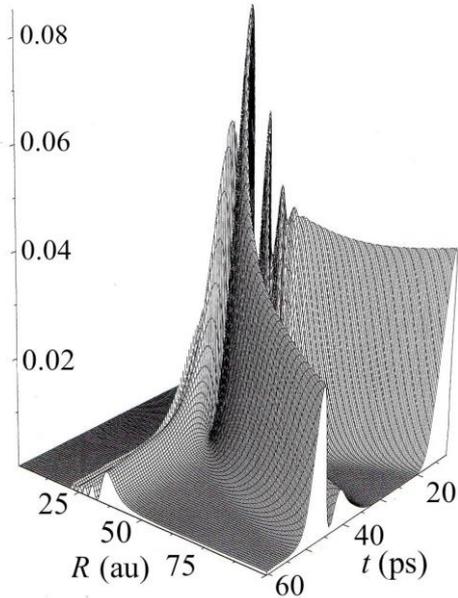


図 12: $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系に対して, ポテンシャル II 上を衝突エネルギー 2.4977 meV で波束を走らせた場合の核波束の時間変化.

から, この波束はポテンシャル井戸にトラップされた振動量子数が 5 の振動回転状態に対応していることがわかる. 波束の確率の減少は, 波束がポテンシャル障壁を通り抜けて外に逃げ出していることに対応している.

波束法により共鳴状態にトラップされた波束を可視化することができた. 可視化により, 電子捕獲断面積のピークの位置で共鳴が起こっていること, 共鳴のメカニズムと動力学をよりはっきりと理解することが可能になった.

4.4 まとめ

Li, Na, K と原子番号が大きくなるにつれ, イオン化エネルギーが小さくなる (Li, Na, K のイオン化エネルギーはそれぞれ 5.39 eV, 5.14 eV, 4.34 eV) とともに双極子分極率は大きくなる. その結果, 始状態 ($\text{He}^{2+} + \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$) と電子捕獲状態 ($\text{He}^+(3l) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$) のポテンシャルエネルギー曲線の疑交差点は内側に移動し井戸が深くなるので, この順番で共鳴が高い衝突エネルギーで現れると予想していた. しかし, 計算結果は, 最も高い衝突エネルギーで共鳴が現れるのは $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系であることを示した. これには非断熱遷移確率という要因がからんでいる. 疑交差点の位置とその位置での断熱状態間のエ

エネルギー差にはある程度関連があり、小さい核間距離にある擬交差点ほどエネルギー差は大きい。エネルギー差が大きいと低エネルギーでは遷移が起こりにくくなり、またエネルギー差が小さいとほとんどの衝突エネルギーで非断熱遷移確率が1になってしまう。衝突対が擬交差点を通過する際にほとんど遷移してしまうと、衝突では「行き」と「帰り」の2度必ず交差点を通過するため、衝突が終わった後反応が起こっていないということになってしまう。He²⁺ + Na 衝突系では電子捕獲過程の擬交差点が、高い衝突エネルギーで共鳴が生じる適当な位置にたまたまあった。

これまでは、1番内側にある1番深いポテンシャルの井戸もしくはその外側の擬交差点での井戸に関連させて共鳴について議論してきた。その他に、もっと大きい核間距離にも擬交差点がある。これらの交差点において生じるポテンシャル井戸は内側のポテンシャル井戸よりは浅いので、それらに起因する共鳴は衝突エネルギーの低いところに現れるはずである。しかし、交差点が内側に移動するとそれらの井戸も深くなるので、共鳴が高い衝突エネルギーで現れる可能性は捨てきれない。

5. 共鳴観測に向けて

より高い衝突エネルギーで、電子捕獲過程において、共鳴を観測するには、標的原子の分極率が大きく、入射イオンの電荷が大きいことが好ましい。しかし、擬交差点の位置、その点でのエネルギー差に注意する必要があることがわかった。また、一般的にはポテンシャル井戸をもつ状態よりもエネルギー的に下に他の状態が存在するので、ポテンシャル井戸が内側に移動し深くなると、共鳴を引き起こす状態とそれら下の状態とが相互作用して井戸が浅くなることにも注意が必要である。

擬交差点の位置は、アルカリ金属原子が標的の場合、その原子番号が大きくなるにつれ小さい方へ移動する。一方、「低速多価イオン・原子衝突における電子捕獲過程と共鳴現象 その2」で扱うように、入射イオンの原子番号が大きくなるとともにまた入射イオンの電荷が小さくなるとともに擬交差点の位置は大きい方へ移動する。こ

れらから、より高い衝突エネルギーで共鳴を観測するにはどのような系を選べば良いか予測が可能になる。今回述べた衝突系の中では He²⁺ + Na 衝突系が最も高い衝突エネルギーで共鳴が観測される系であることがわかったが、(1) 標的原子の原子番号、(2) 入射イオンの原子番号、(3) 入射イオンの電荷をうまく調整することで、より適切な衝突系を見つけることも可能になる。

理論的に、十分正確に、共鳴現象が起こる衝突エネルギーがわかったとする。そのとき共鳴を観測するための実験的条件としてどのようなことが要求されるだろうか。これまで報告されている共鳴はすべて衝突エネルギー1 eV 以下に現れている。この衝突エネルギーで多価イオンを標的に衝突させるという条件は十分クリアできる。次に要求される条件はビームのエネルギー幅を十分狭くするということである。共鳴ピークを観測するにはビームのエネルギー幅が共鳴ピークのエネルギー幅よりも十分狭い必要がある。我々の計算結果によると、高い衝突エネルギーで現れる場合でも、共鳴ピークのエネルギー幅は 10⁻³ eV 以下である。このような場合、少なくともビームのエネルギー幅を 10⁻³ eV 以下に、更に衝突エネルギーを 10⁻³ eV 以下の間隔で変化させなければならない。

共鳴状態の寿命が衝突時間よりも短いと共鳴状態とは言えない。仮に共鳴が衝突エネルギー 10⁻¹ eV で現れ、その共鳴ピークのエネルギー幅が 10⁻³ eV で、ビームのエネルギー幅を 10⁻⁴ eV にすることができ、衝突エネルギーを 10⁻⁴ eV の間隔で変えることができたとする。衝突対の換算質量を 1 u とすると、距離 1 Å を通過するのに 2 × 10⁻¹⁴ sec かかる。共鳴ピークのエネルギー幅から寿命は 6 × 10⁻¹³ sec であるので、このような状況下で、共鳴は十分観測できることがわかる。実験的に測定できるのであれば、共鳴ピークの幅が狭ければ狭い程寿命が長いので測定には有利と言える。

共鳴状態の寿命を求める理論的方法は2つある。1 つは共鳴状態にある波束の確率の減少から求める方法であり、もう 1 つは断面積のエネルギー依存性に現れるピークの半値幅から求める方法である。2 つの方法を用いて計算を行ったと

ころ,これまで扱った系では,共鳴状態の寿命は0.5–18 psec の範囲にあることがわかった. 衝突領域 1 au, 衝突エネルギー1 meV – 1 eV の場合の衝突時間は 4×10^{-3} – 0.1 psec であるので,共鳴状態の寿命は衝突時間より長く,共鳴状態は観測可能なはずである.

本総説は九州大学理学研究院の故季村牟生教授との共同研究の思い出として引き受けた. 二人で形状共鳴についていくつか論文を書き,そのあと総説をまとめるという計画を立てていたが,それも今は夢となった. この総説は二人で書きかいていた論文の一部をまとめ,総説用に書き直したものである. 研究遂行にあたり,新潟大学自然科学研究科の2人の修了生,桜井智君,鈴木伸啓君に協力していただいた. 謝意を表したい.

参考文献

- [1] S. Kravis, H. Saitoh, K. Okuno, K. Soejima, M. Kimura, I. Shimamura, Y. Awaya, Y. Kaneko, M. Oura, and N. Shimakura, *Phys. Rev.* **A52** (2), 1206 (1995).
- [2] L. Folkerts, M. A. Haque, C. C. Havener, N. Shimakura, and M. Kimura, *Phys. Rev.* **A51** (5), 3685 (1995).
- [3] L. Boltzmann, *Vorlesung Uber Gastheorie II* (J. A. Barth, Leipzig, 1989)
- [4] A. Schutte, G. Scols, F. Tommasini, and D. Bassi, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 979 (1972).
- [5] J. P. Toennies, W. Welz, and G. Wolf, *J. Chem. Phys.* **72**, 614 (1979).
- [6] J. P. Davis and W. R. Thorson, *Can. J. Phys.* **56**, 996 (1978).
- [7] M. Rittby, N. Elander, E. Brandas, and A. Barany, *J. Phys.* **B17**, L677 (1984).
- [8] N. Shimakura and M. Kimura, *Phys. Rev.* **A44**, 1659 (1991).
- [9] S. Suzuki, N. Shimakura, T. Shirai, and M. Kimura, *J. Phys.* **B17**, 1741 (1998).
- [10] N. Suzuki, N. Shimakura, and H. Kono, *Physica Scripta* **T92**, 435 (2001).
- [11] D. W. Chandler, *J. Chem. Phys.* **132**, 110901 (2010).
- [12] J. N. Bardsley, *Case Stud. At. Phys.* **4**, 299 (1974).
- [13] H. G. Heil, S. E. Butler, and A. Dalgarno, *Phys. Rev.* **A44**, 1659 (1991).
- [14] R. Boyd, T-S Ho, H. Rabitz, D. A. Padmavathi, and M. K. Mishra, *J. Chem. Phys.* **101**, 2023 (1994).
- [15] N. Balakrishnan, C. Kalyanaraman, and N. Sathyamurth, *Phys. Rep.* **280**, 79 (1997).
- [16] N. Vaeck, M. D. Lecomte, and J. Liévin, *J. Phys.* **B32**, 409 (1999).
- [17] M. D. Feit, J. A. Fleck, and A. Steiger, *J. Comput. Phys.* **47**, 412 (1982).
- [18] 例えば,高柳和夫,電子・原子・分子の衝突(培風館,1972,改訂版,1996)

表 3: $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系における振動回転準位の同定.

井戸(A)による共鳴			井戸(B)による共鳴		
振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)	振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)
55,34	0.37052	0.17143	4,34	0.37052	0.36462
54,36	0.39308	0.29932	3,36	0.39308	0.39728
53,38	0.463	0.47347	4,35	0.42511	0.32109
52,40	0.53342	0.51701	3,38	0.463	0.36463
53,39	0.57045	0.37823	2,40	0.53342	0.56871
52,41	0.67119	0.66667	3,39	0.57045	0.46531
51,43	0.77629	0.76463	2,41	0.67119	0.66939
50,45	0.88028	0.86803	2,43	0.77629	0.87892
51,44	0.9288	0.66123	0,45	0.88028	0.59864
49,47	0.98091	0.9796	2,44	0.9288	0.74014
49,48	1.21371	1.20817	1,47	0.98091	1.15919
48,50	1.35727	1.3415	1,48	1.21371	1.29796
49,49	1.41903	1.41769	0,50	1.35727	1.17007
47,52	1.49397	1.48028	1,49	1.41903	1.44763
48,51	1.60627	1.61633	0,52	1.49397	1.56463
47,53	1.83082	1.79593	1,51	1.60627	1.36599
46,55	1.98696	1.97552	0,53	1.83082	1.76327
45,57	2.16127	2.14967	0,55	1.98696	2.16327
46,56	2.31476	2.30205	0,57	2.16127	2.58777
45,58	2.55926	2.54423	0,56	2.31476	2.35375
44,60	2.7893	2.77824	0,58	2.55926	2.80818
1,202	265.144	265.933	0,60	2.7893	3.34151
0,204	270.548	271.402	$K=202$	265.144	–
0,205	276.796	277.661	$K=204$	270.548	–
0,206	282.94	283.784	$K=205$	276.796	–
0,207	289.005	289.852	$K=206$	282.94	–

表 4: $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系における振動回転準位の同定.

井戸(A)による共鳴			井戸(B)による共鳴		
振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)	振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)
$K=19$	0.05216	–	16,19	0.05216	0.03265
$K=22$	0.05733	0.07619	15,22	0.05733	0.04082
$K=20$	0.06959	–	16,20	0.06959	0.04626
71,23	0.07798	0.09524	15,23	0.07798	0.06531
$K=21$	0.08856	0.10884	16,21	0.08856	0.06258
$K=26$	0.09753	0.05442	$K=26$	0.09753	–
$K=27$	0.12188	–	15,27	0.12188	0.13061
$K=28$	0.14726	–	13,28	0.14726	0.15238
$K=29$	0.1734	0.1551	13,29	0.1734	0.17922
$K=34$	0.18494	0.1034	13,34	0.18494	0.13877
$K=33$	0.18938	0.1415	14,33	0.18938	0.20136
$K=35$	0.21382	0.16327	13,35	0.21382	0.17415
66,36	0.22561	0.22313	13,36	0.22561	0.22585
$K=35$	0.24517	–	14,35	0.24517	0.26122
$K=36$	0.27311	0.11429	14,36	0.27311	0.23946
$K=39$	0.31746	–	12,39	0.31746	0.31565
$K=40$	0.35745	0.29932	12,40	0.35745	0.2449
64,41	0.39026	0.38095	11,41	0.39026	0.32381
62,45	0.52253	–	10,45	0.52253	0.50885
61,48	0.67838	–	9,48	0.67838	0.6313
61,50	0.86396	0.90613	9,50	0.86396	0.8517
60,51	0.93069	0.90612	9,51	0.93069	0.96599
59,53	1.0475	–	8,53	1.0475	1.0313
$K=56$	1.42177	–	7,56	1.42177	1.38232
57,58	1.53453	–	7,58	1.53453	1.54286
55,60	1.64834	–	6,60	1.64834	1.62178
56,62	2.01335	2.04899	7,62	2.01335	1.99729
55,63	2.18766	1.98368	6,63	2.18766	2.19321
55,65	2.31685	2.14151	5,65	2.31685	2.29117
53,66	2.52396	2.44082	5,66	2.5229	2.4977
53,69	2.92992	2.966	4,69	2.92992	2.82994
1,244	273.332	273.226	$K=244$	273.332	–
1,245	278.216	278.069	$K=245$	278.216	–
1,246	283.24	282.831	$K=246$	283.24	–
0,248	288.304	288.164	$K=248$	288.304	–
0,249	293.528	293.171	$K=249$	293.528	–
0,250	298.205	298.151	$K=250$	298.205	–
0,251	302.695	302.994	$K=251$	302.695	–
0,252	307.882	308.056	$K=252$	307.882	–
0,253	312.168	312.763	$K=253$	312.168	–

表 5: $\text{He}^{2+} + \text{K}$ 衝突系における振動回転準位の同定.

井戸(B)による共鳴			井戸(C)による共鳴		
振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)	振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)
$K=46$	0.32223	0.2585	$K=46$	0.32223	0.34286
$K=45$	0.33785	0.31837	$K=45$	0.33785	0.29116
$K=48$	0.3532	0.35646	$K=48$	0.3532	0.28844
36,47	0.36169	0.4	36,47	0.36169	0.30784
35,49	0.39333	0.29116	35,49	0.39333	0.41361
$K=51$	0.43206	0.31837	$K=51$	0.43206	0.4381
$K=53$	0.47698	0.42993	$K=53$	0.47698	0.42993
$K=55$	0.52433	0.46803	$K=55$	0.52433	0.59592
32,57	0.56958	0.5034	32,57	0.56958	0.6449
33,56	0.59298	0.55234	$K=56$	0.59298	0.55238
32,58	0.65883	0.65306	$K=58$	0.65883	0.60136
31,60	0.71671	0.71293	$K=60$	0.71671	0.6449
31,61	0.81666	0.81361	31,61	0.81666	0.75647
30,63	0.88686	0.88436	29,63	0.88686	0.80545
29,66	1.0824	1.08028	29,66	1.0824	0.98776
29,67	1.20561	1.20817	29,67	1.20561	1.12926
28,69	1.30221	1.30341	28,69	1.30221	1.19456
29,70	1.43979	1.45035	28,70	1.43979	1.35239
27,72	1.54768	1.55647	27,72	1.54768	1.65443
26,75	1.82384	1.83674	27,75	1.82384	1.93742
26,76	1.99495	2.01089	26,76	1.99495	1.88028
25,78	2.13498	2.14967	25,78	2.13498	2.25851
25,79	2.32219	2.34559	25,79	2.32219	2.46804
24,81	2.48137	2.49253	24,81	2.48137	2.60493
24,82	2.68752	2.71022	24,82	2.68752	2.82722
23,84	2.86015	2.86804	23,84	2.86015	2.98233
3,164	38.3655	38.3539	$K=164$	38.2655	–
3,165	39.5702	39.6603	$K=165$	39.5702	–
2,170	44.0152	44.1226	$K=170$	44.0152	–

強い短距離斥力相関の下での弱結合少数多体系 ー エフィモフ物理と ^4He 原子の 3,4 クラスタ系 ー (後編)

上村正康, 肥山詠美子

理化学研究所 仁科センター ストレンジネス核物理研究室

mkamimura@riken.jp, hiyama@riken.jp

平成 24 年 7 月 23 日原稿受付

前編 (9 巻 4 号 20 ページ) に引き続き, 本稿では表題に関する解説を行う. ^4He 原子のクラスタの理論研究は エフィモフ物理や冷却気体原子の物理の基礎研究に重要な知見を提供してきた. 最近, 4 体系のエフィモフ物理も注目されている. 本稿では, ^4He 原子の 4 体系 (tetramer) の基底・励起状態について, ^4He - ^4He の realistic potential を用いた精密計算結果を基に, エネルギーレベル, 空間構造, 短距離相関, 3 体・4 体の束縛エネルギーの相関 (generalized Tjon lines) などについて議論する. 「大きな散乱長で短距離相互作用をしている少数粒子系」の持つ universality という観点から, 原子核の弱結合 3 体・4 体系との類似性にも着目する.

1. はじめに

1.1 背後に何があるのか?

筆者の 1 人 (上村) は, 核物理の弱結合系に関する研究会 (2012 年 7 月) において, 本解説 (前・後編) に相当する内容の講演を行った. その冒頭において, 以下の図 1-3 の 3 枚のスライドを示して, 原子核の弱結合系と ^4He 原子のクラスタ系との間に有る共通性について注意を喚起した.

図 1 は, 「このエネルギー レベル (模式図) は, 何という粒子 (X) の 2 体, 3 体, 4 体系のエネルギーレベルか?」という質問形であるが, 答は, $X=^4\text{He}$ 原子である. しかし, 核物理研究者から見ると, この図は, $X=\alpha$ 粒子 (^4He 原子核) として, 2 体系= ^8Be 原子核, 3 体系= ^{12}C 原子核, 4 体系= ^{16}O 原子核のレベルに特徴がそっくりである. また, X =核子として, 2 体系=重陽子, 3 体系=三重陽子, 4 体系= α 粒子とも似ている (但し, 三重陽子の励起状態は束縛状態, 共鳴状態としては見つからないが). この類似性の背後に何があるのだろうか.

このエネルギーレベル(略図)は, 何という粒子(X)の
2体, 3体, 4体系のエネルギーレベルか?

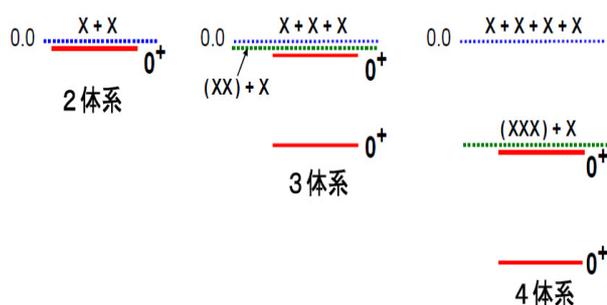


図 1: ^4He 原子の 2, 3, 4 体系のレベル構造の模式図. ^4He 原子核 (α 粒子) の 2, 3, 4 体系 (^8Be , ^{12}C , ^{16}O 核) のレベル構造と特徴がそっくりである. また, 核子の 2, 3, 4 体系 (d , t , α) ともよく似ている (但し, t の励起状態を除く).

図 2 は, 3 体系と 4 体系の波動関数の overlap function と呼ばれるもののグラフである. 左が ^4He 原子核の基底・励起状態 (0^+) と三重陽子との overlap [1] であり, 右が ^4He 原子の tetramer

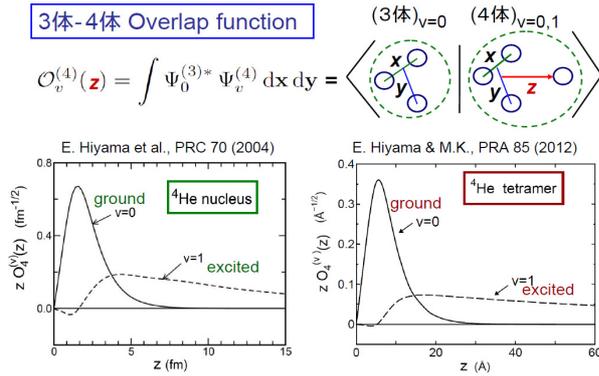


図 2: 3 体系と 4 体系の波動関数の overlap function. 左が ${}^4\text{He}$ 原子核の基底・励起状態 (0^+) と三重陽子との overlap [1], 右が ${}^4\text{He}$ 原子の tetramer の基底・励起状態 (0^+) と trimer との overlap [2]. 両者のスケールは数十万倍違うが, 空間構造は非常によく似ている.

の基底・励起状態 (0^+) と trimer との overlap [2] である. 両者のスケールは数十万倍の違いがあるが, この空間構造の類似性の背後に何があるのだろうか.

図 3 は, 3 体系と 4 体系の結合エネルギーの相関を表す. 左図は 核物理で Tjon line [3, 4] と呼ばれるもので, 様々な 2 体核力による三重陽子と α 粒子の結合エネルギーが, ほぼ直線の相関になっていることを示している. 右図は ${}^4\text{He}$ 原子の trimer と tetramer の基底状態の結合エネルギーの相関を表す. 筆者等の論文 [2] において, それが 様々な realistic ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ potentials に関して, ほぼ完璧に直線に乗っていることが明らかになった (§2.5). 直線の傾き (slope) は, 左が 4.8, 右が 4.778 である. この一致の背後に何があるのだろうか.

1.2 背後に universality

上記研究会で述べたことだが, 背後にあるもの (即ち, エフィモフ物理の核心) を一言でいうと (著名なレビュー論文 [5] の表題を取って), “Universality in few-body systems with large scattering length” であろう. もう少し引き伸ばすと (この論文の abstract の冒頭文から取って) “Particles with short-range interactions and

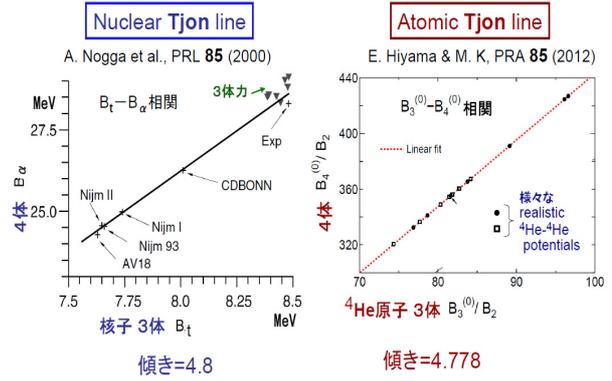


図 3: 左は, 核物理で Tjon line と呼ばれるもので, 様々な 2 体核力による三重陽子と α 粒子の結合エネルギーが, ほぼ直線の相関になっている [3, 4]. 右図では, ${}^4\text{He}$ 原子の trimer と tetramer の基底状態の結合エネルギーの相関 (Atomic Tjon line) が様々な realistic ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ potentials に関して, ほぼ完璧に直線になっていることを表す [2].

a large scattering length have universal low-energy properties that do not depend on the details of their intrinsic structure or their interactions at short distances.” ということであろう.

1.3 Effective theory

エフィモフ物理, 言い換えれば Universal Few-body Physics, における 3 体系, 4 体系の理論計算には 2 つのタイプがある.

(a) Effective theory の leading order 計算,

(b) 原子間の realistic potential を用いる計算. 筆者等の勝手な理解では, 前者 (a) の立場は次のように見える — “散乱長が十分大きければ, 短距離相互作用の詳細に依らない” のだから難しい realistic potential を使う必要は無く, 簡単な effective potential でよい. i) 2 体の contact (point-like) interaction で散乱長を出し, ii) 3-body parameter (3 体の contact interaction または 3 体の内部領域境界条件) によって 3 体・4 体のエネルギー・波動関数を出す — という様に, realistic-potential 3 体・4 体問題を renormalize できるはずである [5]. (本稿では, 相互作用の中身について, これ以上立ち入ら

ない). universal property は leading-order effective theory で理解でき, それを超えることは non-universal effect である.

上記 (b) の realistic potential は, 目下のところ ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ potential しかない. その他のケース (Li, K, Rb, Cs など) は, 作るのが難しい. しかし, ${}^4\text{He}$ 3 体・4 体の結果は, scaling によって大きな原子にも敷衍できるであろう. Effective theory による分析の基礎を固める, または, 十分記述できない部分 (non-universal effect) を明らかにするという役割もある.

1.4 4 体のエフィモフ状態

前編で述べたように, 2006 年に 3 体のエフィモフ状態 [6, 7] は, Cs の超冷却原子気体において観測された (その後, Rb, K, Li など) . 散乱長を変化させて, エフィモフ状態が 3 体 breakup threshold のすぐ上の共鳴状態になる散乱長の値 (leading-order effective theory が予測する値) で, 3-body recombination と呼ばれる現象 ($B+B+B \rightarrow B_2+B$) が観測され (B はボソン), エフィモフ状態の証拠とみなされた. その後, 2009 年に 4 体ボソンのエフィモフ状態について, leading-order effective theory の計算がなされ [8], それが予測する散乱長で, 4-body recombination ($B+B+B+B \rightarrow B_3+B$, B_2+B+B , B_2+B_2) が観測され [9], 4 体のエフィモフ状態の証拠とされた.

1.5 Realistic-potential 4 体計算

realistic potential を用いた ${}^4\text{He}$ trimer の計算は, 前編で述べたように多くの文献で実行され, 十分一致する結果が得られた. 最近の重要な新しい計算は, P. Naidon, 上田正仁と筆者の 1 人 (肥山) [10] による次の計算であろう — ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ の LM2M2 realistic potential [11] を用いて, 「 ${}^4\text{He}$ trimer の基底状態が 3 体 breakup threshold のすぐ上の共鳴状態になる散乱長の値」を求め, 実験で見つかった Cs, Rb, K, Li の 3-body recombination を起こす散乱長と同じであることを示した (potential の effective range で normalize する) .

一方, realistic potential を用いた ${}^4\text{He}$ tetramer の計算は, 極度に強い短距離斥力コアの下での非常に浅い束縛励起状態を非断熱的に解く, という量子力学的 4 体問題の難しさにより, 進展が遅れていた. 即ち, 2006 年の時点で, 基底状態のエネルギー (LM2M2 potential) は, 数件の計算がほぼ一致した値を出していたが (有効数字 3 桁目が僅かに異なる), 励起状態については, trimer+atom の threshold energy (-126.40 mK) から測った束縛エネルギーは, 1.0 mK, 6.6 mK, 51.6 mK というように, バラついていた (文献 [12] の Table VIII 参照) . 特に, 1.0 mK という値は, Faddeev 法が低エネルギー散乱計算の S 行列の振る舞いから求めたものであり, 同法としては, “束縛状態計算” によって このように極度に強い短距離斥力コアの下での非常に浅い束縛励起状態を解く事は現在の計算技術では不可能である, と give-up 宣言をしていた [14].

しかし, 上述したように, leading-order effective theory 計算が予測した通りに 4 体のエフィモフ状態の証拠が見つかったという刺激もあり, realistic potential を用いた ${}^4\text{He}$ tetramer 計算が渴望されていた. また, effective theory 計算が, 「ボソン 3 体の基底状態および各励起状態のエネルギーのすぐ下に, ボソン 4 体の束縛状態が 2 個付随している」という明解な予言 [8] をしており, これを ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ realistic potential を使って確認することも急務であった. このことを筆者等が知って, ${}^4\text{He}$ trimer, tetramer の精密計算を行い, 文献 [12] に発表した次第である.

1.6 3 体・4 体の束縛エネルギーの相関

散乱長の大きい 2 体短距離相互作用をしている 3 体系・4 体系が持つ universality の 1 つに, それぞれの束縛エネルギーの間の相関がある. 図 3 で見たように, 原子核物理では, ${}^3\text{He}$ 原子核と ${}^4\text{He}$ 原子核の基底状態の束縛エネルギー (B_3 と B_4) を様々な realistic 2 体核力 potential で計算して, B_3 - B_4 平面に plot したもの (ほぼ直線になる, 傾き=4.8) が, Tjon line として知られ

ている. ${}^4\text{He}$ 原子の 3 体系と 4 体系には, どちらも基底状態と励起状態があるので, その束縛エネルギー ($B_3^{(0)}, B_3^{(1)}$ と $B_4^{(0)}, B_4^{(1)}$) の間には, 計 6 通りの相関がある (generalized Tjon lines と呼ばれる).

それらの相関は, leading-order effective theory を用いて, 文献 [13] で計算され (2004 年), 妥当なエネルギー領域でどれも直線の相関になっていることが報告されていた ($B_3^{(0)}-B_4^{(0)}$ 相関の傾き 4.08 と核力の場合の傾き 4.8 との違いは, 前者に next-to-leading order effect=non-universal effect が入っていないためか? §2.5 で明らかになる). しかし, ${}^4\text{He}$ の realistic potential を用いた計算とどのような相違があるか (両者の差として, non-universal effect が見えるか) は, 不明であった — 上述したように, realistic potential による 4 体計算が不十分であったためである.

筆者等は, この問題を解くため, 多数の ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ realistic potential を用いて, エネルギー相関の計算を行い, 6 通りの相関が全てほぼ完璧な直線の相関であることを示した [2]. 同時に, effective theory の leading-order 計算では取り込めない non-universal effect を明らかにした.

本稿 (後編) では, まず, ${}^4\text{He}$ 原子の 4 体系 (tetramer) の基底状態と励起状態の 2 つの束縛状態の解き方と計算結果の説明を行う. また, 前編で紹介した筆者等の「直感モデル: dimerlike-pair model」による励起状態エネルギーの予言が精密に的中していることを示す. 使用する realistic ${}^4\text{He}$ potential は, 前編では広く使われてきた LM2M2 potential (1991 年) だけであったが, 後編では, 最近 (2010 年) 発表された最も精密な potential (PCKLJS potential [15] と呼ばれる. 相対論補正, QED 補正あり) を含む多数の realistic potentials を用いて, 3 体, 4 体系の束縛エネルギーの間の 6 通りの相関 (Generalized Tjon lines) を計算し, 相関の universality, non-universal effect について議論する.

2. ヘリウム原子 4 体系 ${}^4\text{He}$ tetramer

少数粒子系の精密解法「ガウス関数展開法 (GEM)」によってヘリウム原子の 4 体系 tetramer を解く. まず, 解き方を説明する (詳しくは, 文献 [12] の Sec.IIIA). ヤコビ座標を図 4 に示す.

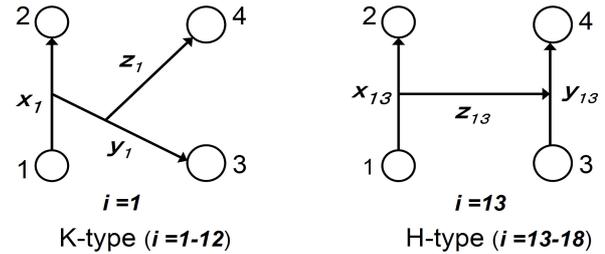


図 4: 4 粒子系のヤコビ座標. K -type と H -type がある. 4 粒子を cyclic に入れ替えたセット $i = 1, \dots, 12$ (K -type) と $i = 13, \dots, 18$ (H -type) とがある. 18 個のあからさまな図は, 文献 [16] の Fig.18 にある.

この 4 体系の Schrödinger 方程式

$$(H - E)\Psi_4 = 0, \quad (1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_x}\nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_y}\nabla_y^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_z}\nabla_z^2 + \sum_{1=i<j}^4 V(r_{ij}), \quad (2)$$

を満たす波動関数 Ψ_4 を求める. $\mu_x = \frac{1}{2}m$, $\mu_y = \frac{2}{3}m$, $\mu_z = \frac{3}{4}m$, m は ${}^4\text{He}$ atom の mass. $V(r_{ij})$ は 粒子 i, j 間の中心力 potential であり, 通常, realistic ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ potential が使われる. "realistic" とは, 合計 4 個の電子の自由度を然るべき方法で消去して, ${}^4\text{He}$ 原子核間のみ関数として, ${}^4\text{He}$ 原子間相互作用を表すことである. ${}^4\text{He}$ trimer, tetramer の計算に最も頻繁に使われるのは, 前編の図 2a の赤点線で示した LM2M2 potential [11] である. $V(r_{ij})$ の遠方は van der Waals 型 ($\propto r_{ij}^{-6}$) であるが, 原点近傍 ($r_{ij} \lesssim 2\text{\AA}$) では, 極度に強い斥力になっている ($V(0) \sim 10^6\text{K}$).

2.1 4体系の基底関数

ヘリウム原子は, spinless boson であるから, Ψ_4 を, 対称化された L^2 積分可能な基底関数 (K -type と H -type がある) で展開する.

$$\Psi_4 = \sum_{\alpha_K=1}^{\alpha_K^{\max}} A_{\alpha_K}^{(K)} \Phi_{\alpha_K}^{(\text{sym};K)} + \sum_{\alpha_H=1}^{\alpha_H^{\max}} A_{\alpha_H}^{(H)} \Phi_{\alpha_H}^{(\text{sym};H)}, \quad (3)$$

$$\Phi_{\alpha_K}^{(\text{sym};K)} = \sum_{i=1}^{12} \Phi_{\alpha_K}^{(K)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i), \quad (4)$$

$$\Phi_{\alpha_H}^{(\text{sym};H)} = \sum_{i=13}^{18} \Phi_{\alpha_H}^{(H)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i). \quad (5)$$

ここで, $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i)$ は, i 番目のヤコビ座標セットである. K -type と H -type の基底関数で展開することは重要必須であり, 関数空間を大きく広げている.

固有エネルギー E と展開係数 $A_{\alpha_K}^{(K)} (A_{\alpha_H}^{(H)})$ は, Raileigh-Ritz の変分法で解く:

$$\langle \Phi_{\alpha_K}^{(\text{sym};K)} | H - E | \Psi_4 \rangle = 0, \quad (6)$$

$$\langle \Phi_{\alpha_H}^{(\text{sym};H)} | H - E | \Psi_4 \rangle = 0. \quad (7)$$

ここで, $\alpha_K = 1, \dots, \alpha_K^{\max}$ および $\alpha_H = 1, \dots, \alpha_H^{\max}$. 式 (6),(7) は, 前編 (4)–(6) の形の一般化行列固有値問題に行き着く.

基底関数 $\Phi_{\alpha_K}^{(K)} (\Phi_{\alpha_H}^{(H)})$ を次の様に角運動量表示にする:

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha_K}^{(K)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i) &= \phi_{n_x l_x}^{(\cos)}(x_i) \psi_{n_y l_y}(y_i) \varphi_{n_z l_z}(z_i) \\ &\times \left[[Y_{l_x}(\hat{\mathbf{x}}_i) Y_{l_y}(\hat{\mathbf{y}}_i)]_{\Lambda} Y_{l_z}(\hat{\mathbf{z}}_i) \right]_{JM}, \\ &(i = 1, \dots, 12) \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha_H}^{(H)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i) &= \phi_{n_x l_x}^{(\sin)}(x_i) \psi_{n_y l_y}(y_i) \varphi_{n_z l_z}(z_i) \\ &\times \left[[Y_{l_x}(\hat{\mathbf{x}}_i) Y_{l_y}(\hat{\mathbf{y}}_i)]_{\Lambda} Y_{l_z}(\hat{\mathbf{z}}_i) \right]_{JM}. \\ &(i = 13, \dots, 18) \end{aligned} \quad (9)$$

ここで α_K は, 次の量を代表する (H -type についても同様):

$\alpha_K \equiv \{ \cos \text{ or } \sin, \omega, n_x l_x, n_y l_y, n_z l_z, \Lambda, JM \}$. J, M は, 全角運動量とその z 成分. 本計算では, $J = 0$ のみを扱うので ($J > 0$ には束縛状態は無い), 4 粒子の対称化から, i) K -type に対して, $l_x = \text{even}, l_y + l_z = \text{even}$ および $\Lambda = l_z$, ii) H -type に対して, $l_x = \text{even}, l_y = \text{even}$ および

$\Lambda = l_z = \text{even}$ である.

基底関数の動径部分は, 3 体系の場合と同様に, 次のように表す.

$$\phi_{n_x l_x}^{(\cos)}(x) = x^{l_x} e^{-(x/x_{n_x})^2} \times \left\{ \begin{array}{l} \cos \omega (x/x_{n_x})^2 \\ \sin \omega (x/x_{n_x})^2 \end{array} \right\}, \quad (10)$$

$$\psi_{n_y l_y}(y) = y^{l_y} e^{-(y/y_{n_y})^2}, \quad (11)$$

$$\varphi_{n_z l_z}(z) = z^{l_z} e^{-(z/z_{n_z})^2}. \quad (12)$$

ガウスのサイズは等比数列に取る:

$$x_{n_x} = x_1 a_x^{n_x - 1} \quad (n_x = 1, \dots, n_x^{\max}), \quad (13)$$

$$y_{n_y} = y_1 a_y^{n_y - 1} \quad (n_y = 1, \dots, n_y^{\max}), \quad (14)$$

$$z_{n_z} = z_1 a_z^{n_z - 1} \quad (n_z = 1, \dots, n_z^{\max}). \quad (15)$$

4 体系の基底関数の総数は 29 056 個である. 基底関数の non-linear paramers は, 文献 [12] の Table VI に載せてある.

2.2 ^4He tetramer のエネルギー準位

表 1 に, ^4He tetramer の基底・励起状態の束縛エネルギー, 2 粒子間平均距離の計算結果を示す. 励起状態の位置, $B_4^{(1)} = 127.33$ mK, は trimer の束縛エネルギー $B_3^{(0)} = 126.40$ mK (前編の表 2) から見て僅かに 0.93 mK である. trimer, tetramer について, 図 1 の模式図で示したレベル構造が見られる. 確かに, §1.5 で触れた effective theory 計算による予言「ボソン 3 体の基底状態および各励起状態のエネルギーのすぐ下に, ボソン 4 体の束縛状態が 2 個付随している」が, ^4He trimer の基底状態については, realistic potential 計算でも成り立っていることが分かった.

空間分布は, 大雑把に言うと, tetramer の基底状態は, trimer の基底状態とほぼ同じサイズである. tetramer の励起状態においては, 3 粒子がほぼ trimer の基底状態にあり, 第 4 の粒子が他の粒子から遠くそれぞれ dimer の粒子間距離程度離れている (図 2 参照).

前編で, dimerlike-pair model が予言した tetramer の励起状態の束縛エネルギーは $B_4^{(1)} = 126.27$ mK (LM2M2 potential) であったから, 非常によく的中している. より一般的な予言式 [前編の (34) 式, B_2 は dimer の束縛エネルギー]

$$\frac{B_4^{(1)}}{B_2} = \frac{B_3^{(0)}}{B_2} + \frac{2}{3}, \quad (16)$$

表 1: ${}^4\text{He}$ tetramer の 4 体計算結果. $B_4^{(v)}$ ($v = 0, 1$) は束縛エネルギー. r_{ij} は 2 体間の距離. LM2M2 potential 使用. $\langle T \rangle$, $\langle V \rangle$ は, 運動エネルギー, ポテンシャル エネルギーの期待値. Ref. [14] の $B_4^{(1)}$ は, 散乱 S 行列から外挿したもの.

Tetramer	基底状態 $v = 0$	
	GEM [12]	Faddeev [14]
$B_4^{(0)}$ (mK)	558.98	557.7
$\langle T \rangle$ (mK)	4282.2	4107
$\langle V \rangle$ (mK)	-4841.2	-4665
$\langle r_{ij} \rangle$ (Å)	8.43	8.40
Tetramer	励起状態 $v = 1$	
	GEM [12]	Faddeev [14]
$B_4^{(1)}$ (mK)	127.33	127.5
$\langle T \rangle$ (mK)	1639.2	
$\langle V \rangle$ (mK)	-1766.5	
$\langle r_{ij} \rangle$ (Å)	35.8	

は, §2.5 の atomic Tjon lines の内の $B_3^{(0)}$ - $B_4^{(1)}$ 相関において更なる威力を発揮する.

2.3 ${}^4\text{He}$ tetramer の短距離相関

前編で述べた大きな心配 (1) 短距離相関の記述と (2) 漸近形の記述は, 4 体系でも同じであり, さらに, 計算の困難さは増しているの, 心配はより強い. しかし, GEM の枠組みのよさと基底関数 (ガウス関数のレンジ, 個数) の適切な採用 (文献 [12] の Table VI) により, これらの心配が見事に解決されている.

まず, tetramer での短距離相関を見るために, trimer のとき, 前編 (29) 式, と同様に 2 体相関関数 $P_4^{(v)}(x)$ ($v = 0, 1$) を定義する.

$$P_4^{(v)}(x_1) Y_{00}(\hat{\mathbf{x}}_1) = \langle \Psi_4^{(v)} | \Psi_4^{(v)} \rangle_{\mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1}. \quad (17)$$

図 5 に tetramer の基底 ($v = 0$)・励起 ($v = 1$) 状態の結果を示してある [12]. trimer, dimer のケース (前編の図 4a) も描き入れてある. dimer 基底状態の線は trimer 励起状態にほぼ重なっている. 各曲線はピークで一致するよう normalizes してある. $x \lesssim 4 \text{ \AA}$ でどの曲線も同じ形 (同じ

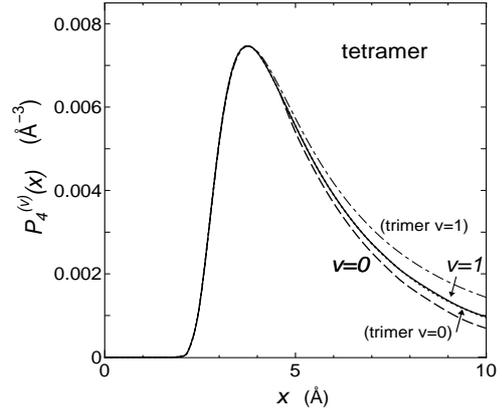


図 5: ${}^4\text{He}$ tetramer における 2 粒子相関関数 $P_4^{(v)}(x)$ [12]. trimer, dimer のケース (前編の図 4a) も描き入れてある. dimer 基底状態の線は trimer 励起状態にほぼ重なっている. 各曲線はピークで一致するよう normalizes してある. $x < 4 \text{ \AA}$ でどの曲線も同じ形 (同じ短距離相関) をしている → 前編 (27) 式の 4 体系のケースの基礎付けにもなっている.

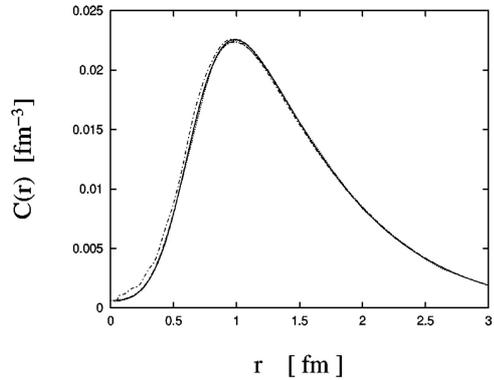


図 6: 4 核子系 (${}^4\text{He}$ 原子核) の基底状態における 2 粒子相関関数. 同状態に関して文献 [17] において行われた 7 グループによるベンチマークテスト計算の結果. ${}^4\text{He}$ tetramer における 2 粒子相関関数 (図 5) の方が ${}^4\text{He}$ 原子核の場合より遥かに強いことが分かる.

短距離相関) をしている—これには著者自身驚いた. このことは, 4 体計算において, 強い短距離相関を直接扱うことを避けるために, Jastrow type などの 2 体の correlation factor を 4 体系波動関数に *a priori* に掛けておく — という仮定に基礎を与えることにもなっている [3 体系の

前編 (29) 式参照].

参考までに、核力による短距離相関と比較してみる. 図 6 は, 4 核子系 (${}^4\text{He}$ 原子核) の基底状態における 2 粒子相関 (図 5 と同じ物理量) を示す [17]. この図の原点付近の値はピーク値の $\sim 10^{-2}$ 程度であるが, 図 5 における ${}^4\text{He}$ 原子 tetramer での相関では $\sim 10^{-6}$ であり, 後者の短距離相関の方が遥かに強いことを示している.

2.4 ${}^4\text{He}$ tetramer 波動関数の漸近形

「求まった 4 体波動関数の十分遠方 ($z_i \rightarrow \infty$) が正しく $\frac{e^{-k_4^{(v)} z_i}}{z_i}$ の形になっているか」を見るためには, その形と overlap function

$$O_4^{(v)}(z_1) Y_{00}(\hat{\mathbf{z}}_1) = \langle \Psi_3^{(0)} | \Psi_4^{(v)} \rangle_{\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1}, \quad (18)$$

とを比べればよい. 図 7 に $z \times O_4^{(v)}(z)$ を示す. open circle は 遠方の正解 $C_4^{(v)} e^{-k_4^{(v)} z_i}$ を示す ($C_4^{(v)}$ の値は [12]). 十分過ぎる遠方まで満足できる精度で求まっている. 但し, 図中の trimer, dimer の線に比べると, さすがに 4 体計算の難しさが見えてしまうが.

特筆すべきは, 遠方での 3 本の線がほぼ平行になっていることである ($k_4^{(1)} \simeq k_3^{(1)}, k_4^{(1)} \simeq k_2$). これは, 前編の trimer 計算で提唱した dimerlike-pair model が, tetramer でも成り立つことを保証している.

2.5 ${}^4\text{He}$ の generalized Tjon lines

「S 波散乱長が大きい短距離相互作用をする 3 体・4 体系」が見せる universality の内, 束縛エネルギーの間の相関は好んで議論される. 原子核物理では, ${}^3\text{He}$ 原子核, ${}^4\text{He}$ 原子核の基底状態の束縛エネルギー ($B_3^{(0)}, B_4^{(0)}$) 間の相関が著名であり, 図 3 のように, 様々な 2 体の realistic potential で計算した値が, ほぼ直線 (Tjon line, 傾斜=4.8) に乗ることが知られている (そうなる理由は, 核物理側では深くは議論されていない).

3 体・4 体ボソンの leading-order effective theory の計算では, 散乱長が無限大である場合 (unitary limit と呼ばれる) には, $B_4^{(0)}/B_3^{(0)} \approx 4.6$, $B_4^{(1)}/B_3^{(0)} \approx 1.01$ であることが知られていた (文

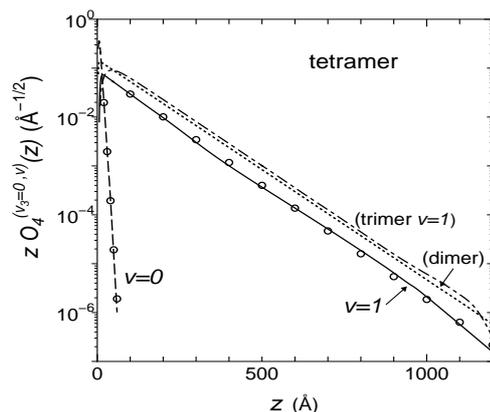


図 7: ${}^4\text{He}$ tetramer における overlap function $O_4^{(v)}(z)$ ($v=0, 1$) [12] (z を掛けてある) の遠方での振舞い. trimer 励起状態と dimer のケースも描き入れてある. 丸印は, 結合エネルギーから計算した漸近形. 遠方の 3 本の線がほぼ平行になっている = dimerlike-pair model の予言.

献 [2] 中の [32, 35, 47]).

${}^4\text{He}$ 原子の 3 体・4 体系には, それぞれ基底状態と励起状態があるので, その束縛エネルギー ($B_3^{(0)}, B_3^{(1)}$ と $B_4^{(0)}, B_4^{(1)}$) の間には, 計 6 通りの相関がある (generalized Tjon lines と呼ばれる). 文献 [13] で, これらの相関図 (universal scaling curve と呼ばれる) が leading-order effective theory を用いて計算されて, ${}^4\text{He}$ クラスタの妥当な束縛エネルギーの範囲で, どれも直線になっていることが示されている (図 8 と図 9 の中の黒実線として転載した). しかし, 当時, ${}^4\text{He}$ tetramer (特に励起状態) の信頼できる計算がそろっていなかったため, 相関の直線性や non-universality effect の有無については議論が進まなかった.

筆者等は, これらを解明すべく, 文献 [2] において, 発表されている realistic potential を 14 通り持ち出し (本稿ではその中身に触れないが, 文献 [2] に詳述されている), その結果を, 6 通りの相関図に plot した. 図 8 と図 9 の中の closed circles と open squares がそれを表す. 赤点線は最小 2 乗法による直線での fit である. どの相関もきれいに直線に乗っているのが驚いた (異なる potential を使った計算であり, ある特定の potential のパラメータを変化させた計算ではない

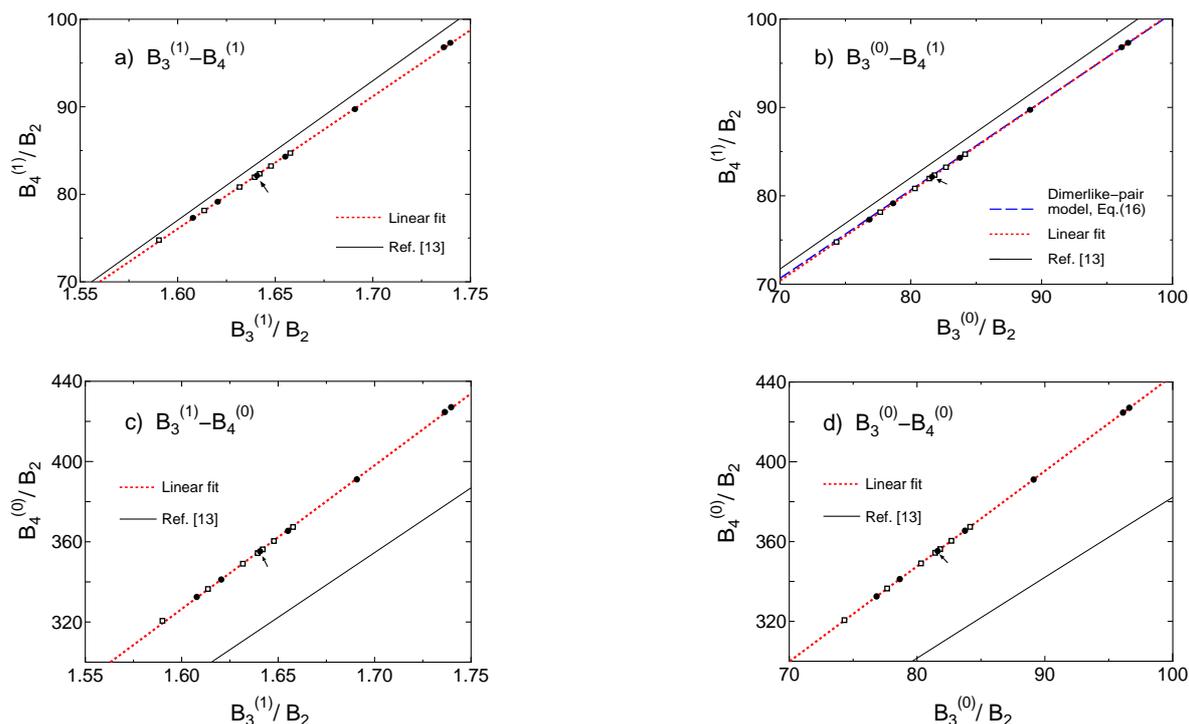


図 8: ${}^4\text{He}$ trimer と tetramer の基底状態・励起状態のエネルギー相関 (generalized Tjon line) [2]. a) $B_3^{(1)}-B_4^{(1)}$ 相関, b) $B_3^{(0)}-B_4^{(1)}$ 相関, c) $B_3^{(1)}-B_4^{(0)}$ 相関 および d) $B_3^{(0)}-B_4^{(0)}$ 相関を表す. 各エネルギーは dimer のエネルギー B_2 で normalize してある. 14 個の closed circles, open squares は, 各種の ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$ realistic potential を用いた計算結果を表す. potential の詳細については文献 Ref. [2] 参照. 赤点線は, 計算結果を最小 2 乗法で直線近似したもの. b) 中の青鎖線は, dimmerlike-pair model による予言, (16) 式. 黒実線は, ${}^4\text{He}$ trimer, tetramer に対する leading-order effective theory による計算 [13].

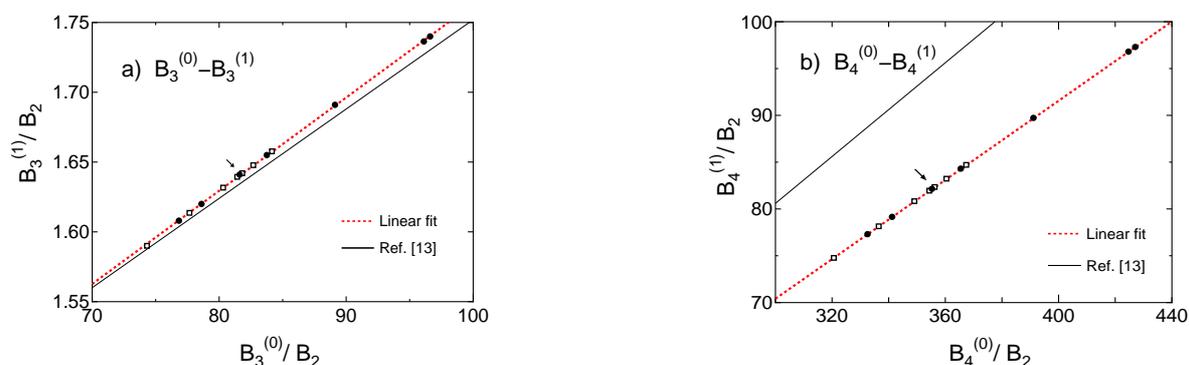


図 9: ${}^4\text{He}$ trimer と tetramer の基底状態・励起状態のエネルギー相関 (generalized Tjon line) [2]. a) $B_3^{(1)}-B_3^{(0)}$ 相関, b) $B_4^{(1)}-B_4^{(0)}$ 相関を表す. その他は, 図 8 と同じ.

ことは特筆すべきである). 最小 2 乗法による直線の係数, 計算値と直線のずれの具合などは, 文献 [2] に記載されている.

黒実線で示された leading-order effective theory 計算 [13] は, 図 8(a),(b) および図 9(a) においては計算値とかなりよく一致している (ずれは

2-3% である). しかし, 図 8(c),(d) および図 9(b) においては, 無視できないずれが見える. 後者のずれは, effective theory が, $B_4^{(0)}$ (tetramer 基底状態のエネルギー) の値を 12-14% underestimate していることが原因である. それが non-universal effect であり, next-leading-order

effect を持ち出すか、何らかの 4 体パラメータを導入する必要がある。今後、これらの研究が進むものと思われる。

図 8(b) の中の青鎖線は, dimerlike-pair model の予言式 (16) を plot したものである。計算値および赤点線とほぼ重なっており, 予言の正確さを表している。

3. おわりに

筆者等が, ^4He 原子の trimer, tetramer の理論研究に参入した動機は, 前編の §1 に述べたように, 原子核で培った少数粒子系計算法「ガウス関数展開法, GEM」を適用するためであった。しかし, 研究を進めて行くうちに, 原子核の弱結合系の物理と ^4He 原子クラスターの物理 (広く冷却原子気体の物理) との間の共通性に関して, 自らの計算結果を通して, 認識が深くなってきた。両分野に通底しているものは, universal few-body physics (または, universality in few-body systems with large scattering length) という言葉で括れる。

原子核の世界では, 2 体相互作用の大きさを外から変化させることはもちろん不可能だが, しかし, 冷却原子気体の世界では, 外から磁場をかけ, Feshbach resonance を利用して, 2 体短距離相互作用の散乱長を微調整できる (つまり, 相互作用の大きさを変化させられる) ことは驚異である。 μK , 10^{-10}eV のレベル世界のことだから, 原子核の研究とは関係ない, と見過ごすことはできない。なぜなら, universality を通して, 同様なことが原子核の世界でも見られるはずだからである (例を §1 の図 1-3 で示した)。

冷却原子気体の世界で, 少数粒子系の構造や反応メカニズムを, 相互作用を変化させて調べることは, 原子核の弱結合系の世界で仮想的に相互作用を変化させて起こるダイナミクスを, universality を通して, simulate している可能性がある。そうであれば, これは原子核の研究に大いに役立つかも知れない — と想像 (空想?) している。

本研究は, 筆者等が自身の計算法を携えて, 原子核分野から冷却原子分野に進出して行った例であるが, 一方で, 「逆向き」に, 冷却原子分野の主力理論研究者が, 同分野の基幹の論理を展開・適用すべく, 原子核の弱結合系 (クラスター物理, 不安定核物理など) に進出し始めている例 (その種の研究のレビュー論文は文献 [18]) を横目で見て, 複雑な気持ちで居る。確かに, 広い概念 (universal few-body physics) で分析・整理が行われようとしていることは, 納得できると同時に, 内心脅威を感じている。両分野の交流が深く行われ, 両者の発展に寄与して行くことを祈って筆を措く。

参考文献

- [1] E. Hiyama, B.F. Gibson and M. Kamimura, Phys. Rev. C **70**, 031001(R) (2004).
- [2] E. Hiyama and M. Kamimura, Phys. Rev. A **85**, 062505 (2012).
- [3] J.A. Tjon, Phys. Lett. B **56**, 217 (1975).
- [4] A. Nogga, S.K. Bogner and A. Schwenk, Phys. Rev. C **70**, 061002 (2004).
- [5] E. Braaten and H-W. Hammer, Phys. Reports **428**, 259 (2006).
- [6] V. Efimov, Yad. Fiz. **12**, 1080 (1970) [Sov. J. Nucl. Phys. **12**, 589 (1971)].
- [7] 数納広哉, 「しょうとつ」第 8 巻第 6 号, [原子衝突のキーワード—エフィモフ状態], p.36 (2011).
- [8] J. von Stecher, J.P. D’Incao and C.H. Greene, Nature Phys. **5**, 417 (2009).
- [9] F. Ferlaino *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 140401 (2009).
- [10] P. Naidon, E. Hiyama and M. Ueda, Phys. Rev. A **86**, 012502 (2012).
- [11] R.A. Aziz and M.J. Slaman, J. Chem. Phys. **94**, 8047 (1991).
- [12] E. Hiyama and M. Kamimura, Phys. Rev. A **85**, 022502 (2012).
- [13] L. Platter, H.-W. Hammer and Ulf-G. Meissner, Phys. Rev. A **70**, 052101 (2004).
- [14] R. Lazauskas and J. Carbonell, Phys. Rev. A **73**, 062717 (2006).

- [15] M. Przybytek *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 183003 (2010).
- [16] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).
- [17] H. Kamada *et al.*, Phys. Rev. C **64**, 044001 (2001).
- [18] H.-W. Hammer and L. Platter, Ann. Rev Part. Sci. **60**, 207 (2010).

Few-body systems interacting with strong short-range repulsion – Efimov physics and ^4He -atom trimer and tetramer

Masayasu KAMIMURA and Emiko HIYAMA

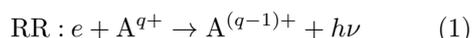
Theoretical study of few-body systems interacting with strong short-range repulsion is reported. Especially discussed is the energy level, spatial structure, correlation between the binding energies and short-range correlations of the ^4He trimer and tetramer that are calculated with the use of the Gaussian expansion method (GEM) developed by the authors. Relation to Efimov physics is also discussed.

「原子衝突のキーワード」

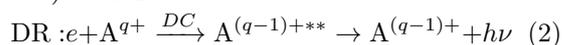
2 電子性再結合

(Dielectronic Recombination)

原子あるいは分子から電子を剥ぎ取ることを「電離」と言う。電離で生成される正の電荷を持ったイオンが、再び電子を奪い返すことを「再結合」(recombination)と言う。つまり再結合は電離の逆過程と言える。電離にはエネルギーの付与が必要であるのに対して、再結合ではエネルギーが放出される。このエネルギーが分子の解離に供される過程が、第9巻第3号で紹介された「解離性再結合」である。一方、エネルギーを光子として放出する過程は「放射性再結合」(radiative recombination, 以下 RR) と呼ばれる。



ここで h はプランク定数、 ν は放出される光の振動数である。上式からも明らかなように放射性再結合は光電離の逆過程である。光電離においては、光子が直接電子をはじき出す直接電離過程と、2電子励起状態を介した間接電離過程があるが、後者の逆過程が本稿の主題である「2電子性再結合」(dielectronic recombination, 以下 DR) である。



DR は上式に記したように、自動電離の逆過程である2電子性電子捕獲(dielectronic capture: DC)と、それに伴い生成される2電子励起状態の光放射脱励起から成る。

DR は特定の衝突エネルギーにおいて極めて大きな断面積を持つ共鳴過程であり、プラズマ中イオンの電離平衡状態での価数分布に強く影響する。その重要性は1940年代にMasseyとBates[1]によって指摘された。1960年代にはBurgess[2]が、 10^6 K程度の高温プラズマである太陽コロナにおいて、鉄多価イオンのDRが重要であることを示した。以降、天体プラズマや核融合プラズマに関係する多価イオンのDRの研究が精力的に進められてきた。

DRを実験的に研究するには、交差ビーム法

の他、蓄積リングを用いた合流ビーム法や、電子ビームイオントラップ(Electron Beam Ion Trap: EBIT)を用いる方法などがあるが、重元素多価イオンの場合には、後述の2つが主な方法となる[3]。

重元素多価イオンのDRの研究は、プラズマ素過程として重要であるばかりでなく、「原子衝突学」的にも興味深い話題を多く含んでいる。反応式(1)および(2)から分かるように、RRとDRは始状態と終状態が同じであるため、原理的にそれぞれ干渉し合い、ヘリウムの光電離スペクトルで得られるような非対称な共鳴形状(いわゆるFanoプロファイル)を示す。一般に多価イオンではDRがRRに比べ桁違いに大きいため干渉効果は小さいが、その定性的な理解に反して明瞭な非対称形状が観測されることもある。相対論効果が強い重元素多価イオンにおける干渉効果を計算するのは容易ではないが、理論的にも研究が進められている[4]。また、ときに相対論効果が支配的に現れることがある。電通大のTokyo-EBITを用いたAuやBiなど重元素のLi様イオンのDRの測定では、ブライト相互作用(電子間相互作用における相対論効果)が共鳴強度を倍増させたり、放射X線の角度分布を支配したりすることが示された[5]。「ブライト相互作用」については、続号のこのコーナーで改めて紹介される予定である。

(電気通信大学 中村信行)

参考文献

- [1] H. S. W. Massey and D.R. Bates, Rept. Prog. Phys. **9**, 62 (1943).
- [2] A. Burgess, ApJ **139**, 776 (1964).
- [3] 渡辺裕文, 加藤太治, プラズマ核融合学会誌 83巻 **660** (2007).
- [4] X. M. Tong *et al.*, Phys. Rev. A **80**, 042502 (2009).
- [5] N. Nakamura *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 073203 (2008); Z. Hu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 073002 (2012).

「原子衝突のキーワード」

放射性電子再結合と放射性電子捕獲
(Radiative Recombination and Radiative Electron Capture)

放射性電子再結合 (RR) は、イオンが自由電子を捕獲すると同時に光子を放出する過程

$$e + A^{q+} \rightarrow A^{(q-1)+} + \hbar\omega \quad (1)$$

で、連続状態から離散状態への 1 電子遷移過程すなわち光電効果の逆過程である。プラズマで重要な原子過程で、また重イオン蓄積リングの電子冷却によるビーム損失にも関与する。

静止したイオンに対して運動エネルギー T で入射した電子が RR により束縛エネルギー E_B の状態に捕獲される場合、光子のエネルギーは

$$\hbar\omega = T + E_B \quad (2)$$

となる。終状態がネオンより重いイオンの 1s 軌道であれば、光子エネルギーは 1keV 以上の X 線の領域である。

速度 v の電子が原子番号 Z の裸核の 1s 軌道に RR で捕獲される全断面積は、非相対論 ($Z\alpha \ll 1$, $v \ll c$, ただし α は微細構造定数) と電気双極子遷移を仮定すれば、 $\nu = Ze^2/\hbar v$ として

$$\sigma_{RR} = 9.2 \times 10^{-21} \left(\frac{\nu^3}{1 + \nu^2} \right)^2 \frac{e^{-4\nu \arctan(1/\nu)}}{1 - e^{-2\pi\nu}} \quad (3)$$

となる (単位 cm^2) [1]。 σ_{RR} は v が同じならば Z とともに増加し、 Z が同じならば大きな v で v^{-5} に従って減少する。また終状態の主量子数 n に対して近似的に $Z^4 R^2/nT(n^2T + Z^2R)$ (ただし R はリュードベリ定数) に比例する。終状態が 1s の場合、電子入射と光子放出の間の角度 θ に対して、光子の角分布は $\sin^2 \theta$ に比例し、電子光子の面内に 100%直線偏光する。

放射性電子捕獲 (REC) は、原子・分子と衝突したイオンが標的から電子を捕獲して光子を放出する過程

$$A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-1)+} + B^+ + \hbar\omega \quad (4)$$

である。標的にゆるく束縛された電子を自由電子とみなせば、REC は運動量分布を持つ自由電子の RR で近似できる。光子のエネルギーは式

(2) の値を中心に分布し、その幅は標的内電子の運動量分布できまる。断面積や光子の角分布・偏光も RR と同様の特徴を持つ。ただし実験室系ではほぼ静止した電子に高速のイオンが衝突するので、光子の放出角度・エネルギーや微分断面積はイオン静止系からローレンツ変換する必要がある。なお 10 MeV/核子以上のイオンと原子分子の衝突による電子捕獲では REC の寄与が重要となる。

REC の実験は 1970 年代から重イオン加速器を用いて数多く行われている。一方 RR の実験には自由電子とイオンの衝突装置が必要で、重イオン蓄積リングと電子ビームイオントラップ (EBIT) の開発にともない 1990 年代以降に研究が大きく進展した。イオン蓄積リングでは周回するイオンビームが同じ速度の電子ビームと合流して起こるきわめて低い相対速度の RR が、また EBIT では蓄積された高電離イオンと高速の電子ビームの衝突による RR が観測されている。REC と RR を合わせると、実験に用いられたイオンは水素からウランまで、またイオンに対する電子の速度はゼロから $0.99998c$ にわたり、全断面積や角分布、終状態分布だけでなく最近では X 線の偏光の測定も行われている。実験結果によると、電気双極子近似による全断面積の式 (3) は広範囲の衝突系と衝突速度でそこそこ成り立つが、 $Z\alpha \sim 1$ あるいは $v \sim c$ では相対論的効果・多重極遷移の寄与が顕著である。また終状態が励起状態の場合の磁気量子数分布、他の電子捕獲過程との干渉などについても、理論的な研究と相まって多彩な研究が行われている。くわしくは参考文献 [2] を参照。

(理化学研究所 神原 正)

参考文献

- [1] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, 'Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms', (Plenum, New York) 1977, p320.
- [2] J. Eichler and Th. Stöhlker, Phys. Rep. **439**, (2007) 1-99.

2012 年度 役員・委員会等

会長

高橋正彦（東北大学）

幹事

渡部直樹（北海道大学）（副会長） 森下 亨（電気通信大学）

足立純一（高エネルギー加速器研究機構） 星野正光（上智大学）

運営委員

石井邦和（奈良女子大学） 高口博志（広島大学）

星野正光（上智大学） 間嶋拓也（京都大学）

美齊津文典（東北大学） 本橋健次（東洋大学）

森下 亨（電気通信大学） 渡辺信一（電気通信大学）

足立純一（高エネルギー加速器研究機構） 岸本直樹（東北大学）

小島隆夫（理化学研究所） 富田成夫（筑波大学）

日高 宏（北海道大学） 渡部直樹（北海道大学）

渡辺 昇（東北大学）

会計監事

城丸春夫（首都大学東京）

中村義春

常置委員会等

編集委員会 委員長： 渡部直樹（北海道大学）

行事委員会 委員長： 森下 亨（電気通信大学）

広報渉外委員会 委員長： 足立純一（高エネルギー加速器研究機構）

若手奨励賞選考委員会 委員長： 大野公一（豊田理化学研究所）

国際会議発表奨励者選考委員会 委員長： 高橋正彦（東北大学）

学会事務局 担当幹事： 星野正光（上智大学）

編集委員会

足立純一，岸本直樹，長嶋泰之，中井陽一，羽馬哲也，早川滋雄，日高 宏

森林健悟，渡部直樹

しょうとつ 第9巻 第5号 （通巻 48 号）

Journal of Atomic Collision Research

©原子衝突学会 2012

<http://www.atomiccollision.jp/>

発行: 2012 年 9 月 15 日

配信: 原子衝突学会 事務局

<acr-post@bunken.co.jp>