

Vol.**18** Issue**5** 2021

解説

イオンと原子・分子の電離及び電荷移行衝突における微分断面積 五十嵐明則

原子衝突学会 www.atomiccollision.jp

## 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)

# Institute of Physics

http://iopscience.iop.org/

アドキャップバキュームテクノロジー株式会社



http://www.adcap-vacuum.com

有限会社イーオーアール



Electronics Optics Research Ltd.

http://www.eor.jp/

イノベーションサイエンス株式会社

株式会社オプティマ

Optima Corp.

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

http://www.innovation-science.co.jp/

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

https://www.cosmotec-co.jp/

研究支援エナゴ の Author First, Quality First

クリムゾン インタラクティブ・ジャパン

コスモ・テック株式会社

**cosmotec** 

株式会社サイエンス ラボラトリーズ



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

真空光学株式会社

空光学株式会社-Vacuum & Optical Instruments-

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

## スペクトラ・フィジックス株式会社



A Newport Company ソーラボジャパン株式会社 http://www.spectra-physics.jp/

http://www.thorlabs.jp/



株式会社東京インスツルメンツ



株式会社ナバテック



仁木工芸株式会社



伯東株式会社



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

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

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

# <sup>原</sup>子衝突学会誌 しようとつ 第18巻第5号



# 目 次

解説 イオンと原子・分子の電離及び電荷移行衝突における微分断面積	五十嵐 明則	106
第46回原子衝突学会年会(オンライン)参加登録・講演申込開始	のお知らせ 行事委員会委員長	118
日本表面真空学会主催の国際シンポジウムと国内学術講演会のお	お知らせ 広報渉外委員会委員長	118
第23回原子衝突学会若手奨励賞募集要項	顕彰委員会委員長	119
2021 年度原子衝突学会学生発表奨励賞 募集要項	顕彰委員会委員長	119
「しょうとつ」原稿募集	編集委員会事務局	120
ユーザー名とパスワード		121

### イオンと原子・分子の電離及び電荷移行衝突における微分断面積

五十嵐 明則 宮崎大学工学部 〒 889-2192 宮崎県宮崎市学園木花台西 1-1 igarashi@phys.miyazaki-u.ac.jp 令和3年7月13日原稿受付

冷却標的反跳イオン運動量分析法の開発により,様々な多重微分断面積が測定され,理論計算との検 討がなされてきている.本稿では,核子当たり数十 keV 以上のイオンと水素原子,ヘリウム,水素分子と の衝突における電離過程や電子捕獲過程について,最近の話題を紹介する.

#### 1. はじめに

荷電粒子と原子や分子の衝突過程で起こる衝 突過程は、複雑で強い相関を示すクーロン少数 多体系を研究するために適した対象である.これ らの衝突機構の解明は、プラズマ物理、材料科学、 宇宙物理、放射線生物学の研究においても重要 である.例えば、高エネルギー陽子線や炭素ビ ームによる粒子線がん治療では、高速イオンによ る直接的な損傷過程以外に、イオン軌跡に沿っ て生体構成物質から生成される二次電子の運動 量分布が重要な基礎データになっている.

1990年代の半ばから報告されるようになっ た冷却標的反跳イオン運動量分析法(cold target recoil ion momentum spectroscopy, COLTRIMS)の 発展により、様々な多重微分断面積が報告される ようになり、複雑なクーロン少数多体系の衝突機 構の詳細についての議論が可能になってきてい る [1,2]. COLTRIMSでは、散乱イオンの運動量 を測定する代わりに、電離した標的イオン(反跳イ オン)の運動量を測定する.飛行時間法と二次元 検出器を併用することで、生成荷電粒子の運動 量が測定できる.標的粒子の熱運動による運動 量が無視できるほど小さいことが、衝突後の生成 粒子の運動量解析のために必要になる.

本稿では、電離衝突を例に COLTRIMS で用い られる運動学と、衝突計算の概要について説明し た後、電離における微分断面積(水素分子とへ リウム原子)、水素分子からの解離性電子捕獲過 程の実験データと理論計算の比較例を示す.

#### 2. COLTRIMS の運動学

電子をまとわない入射イオンによる,標的(原子 または分子)の単電離を例に,実験室系での運動 量保存とエネルギー保存を考える. 今後,特に断 らないかぎり,原子単位を用いる. 入射イオンと標 的イオンの質量を $M_p, M_T$ , 衝突前の入射イオン の運動量を $K_i$ ,標的(標的イオン+電子)の運動 量を  $\kappa$  とする. 衝突後の入射イオン,反跳イオ ン,電離電子の運動量をそれぞれ,  $K_f$ ,  $p_r$ , kとする. 運動量の保存則とエネルギー保存則は

$$K_{i} + \kappa = K_{f} + p_{r} + k, \qquad (1)$$

$$\frac{K_{i}^{2}}{2M_{P}} + \frac{\kappa^{2}}{2(M_{T} + 1)} + \epsilon = \frac{K_{f}^{2}}{2M_{P}} + \frac{p_{r}^{2}}{2M_{T}} + \frac{k^{2}}{2} + \epsilon' \qquad (2)$$

書ける. ここで,  $\epsilon$  と  $\epsilon'$  は, 標的と標的イオンの 内部状態のエネルギーである. 標的は十分冷や されていて  $\kappa \sim 0$  が成立し, k,  $p_r \sim 1$  程度の 電離過程を観測するとする. イオンの質量が電子 質量よりずっと大きいことから, (1), (2) 式は,

$$\boldsymbol{q} \simeq \boldsymbol{p}_r + \boldsymbol{k}$$
,  $\frac{K_i^2}{2M_P} - \frac{K_f^2}{2M_P} \simeq \Delta \epsilon$  (3)

となる. ここで,  $q = K_i - K_f$  は入射イオンの運動量移行,  $\Delta \epsilon = \epsilon' - \epsilon + k^2/2$  は入射イオンの エネルギー損失である.

入射イオンの散乱方向  $d\Omega_P(\theta_p, \phi_p)$ , 放出電 子のエネルギー( $\epsilon_k = k^2/2$ ), 及び放出方向  $d\Omega_k(\theta_k, \phi_k)$  についての単電離 3 重微分断面積  $d^3\sigma/d\epsilon_k d\Omega_k d\Omega_n$ の測定では、衝突後の散乱イ オンの運動量 (K<sub>f</sub>), 電離電子の運動量(k), 及 び 反跳イオンの運動量 ( $p_r$ ) のうち2つの運動 量を同時測定し,残りのもう一つは運動量保存か ら導出する. 測定する 2 つの運動量組み合わせ は, 方法1: $K_{\rm f}$ と k を測定, 方法2:  $p_{\rm r}$ と **k** を測定, 方法 3: **p**<sub>r</sub> と **K**<sub>f</sub> を測定の 3 通り ある [2]. 方法1 は、電子衝突に対して用いら れているが、イオン衝突では行われていない. 電 子衝突の3重微分断面積は、イオン衝突に比べ、 実験と理論の一致は良好である [2]. イオン衝突 では、イオンが電子に比べて数千倍以上重く散 乱角が小さいことと, エネルギー損失が入射イオ ンのエネルギーに比べ小さいため, K<sub>f</sub> を精度よ く測定することが難しくなる. そのため, イオン衝 突の場合には、方法2によって行われることが多 い. 方法3 は 75 keV 陽子入射についてのみ報 告例があるが、入射イオンの質量やエネルギー が大きくなると、散乱されたイオンの運動量の測定 が難しくなる.

#### 3. 衝突計算

イオン衝突によるヘリウムと水素分子の単電離 過程の3重微分断面積の計算に対してよく用いら れている,1電子近似の枠内での CDW-EIS (continuum distorted wave – eikonal initial state) 近似と言われる歪波近似を説明する[3].

#### 3.1 ヘリウムの単電離

ヘリウム原子のイオン衝突による単電離3重微 分断面積の計算について説明する.座標は図1 のように取る.



図 1: 座標系. P, T, e は入射イオン, 標的核, 電離する電子を表す.

1 keV を超えるイオン衝突では、入射イオンの ド・ブロイ波長がボーア半径よりずっと短くなり、入 射イオンと標的間の相対運動は古典的に扱い、 電子については量子論的に扱う半古典的法が良 い近似になる.入射イオンの標的核からの相対 運動は、等速直線運動 R = b + vt で記述され る.ここで、v はイオンの入射速度で、b は衝突 径数ベクトルである.入射方向を z 軸に取れば、 b は xy 面内にある.

有効ポテンシャルをV<sub>e</sub>(r) として, 遷移する電子の原子軌道のハミルトニアンを

$$h_1 = -\frac{1}{2} \overline{V}_r^2 + V_e(r)$$

とする. 始状態の ls 波動関数を  $\varphi_{1s}$  (エネルギ ー $\epsilon_i$ ), 運動量 k の電離電子の波動関数を  $\varphi_k$ (エネルギー $\epsilon_k = k^2/2$ ) とする. 入射イオンの電 荷が  $Z_p$  のときの l 電子ハミルトニアンを

$$H_1 = h_1(r) - Z_P/s$$

と近似する. CDW-EIS 近似では,始状態の歪波 波動関数を

$$\xi_i = e^{-i\epsilon_i t} \varphi_{1s}(\mathbf{r}) D_E(s)$$

と取る.  $D_E(s)$  は、入射イオンによる標的内電子の歪みを記述する因子である. 終状態の電離状態の歪波波動関数は

$$\xi_k = e^{-i\epsilon_k t} \varphi_k(\mathbf{r}) D_P(\mathbf{s})$$

と取る.  $D_p$  は電離した電子が入射イオンから受ける歪みを記述している.  $\varphi_k(\mathbf{r})$  には,  $V_e$  が考慮されている. 衝突径数 b での, 運動量 k の電離状態への遷移振幅は,

$$T_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{b}) = e^{-i\chi_1(b)} \, \tilde{T}_k(\boldsymbol{b})$$

と書ける [4]. ここで,

$$\chi_{1}(b) = \int_{-\infty}^{+\infty} V_{1}(t) dt , \qquad (4)$$
$$\tilde{T}_{k}(\mathbf{b}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \xi_{k} \left| \left( H_{1} - i \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_{\mathbf{r}} \right) \xi_{i} \right\rangle dt \qquad (5)$$

である. (4) 式の  $V_1(R)$  は, 入射イオンとヘリウム イオン間の有効ポテンシャルで,

$$V_1(R) = \int d\mathbf{r} |\varphi_{1s}(r)|^2 \left(\frac{Z_P}{R} - \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|}\right)$$

とする. 運動量移行ベクトルを

原子衝突学会誌しょうとつ 第18巻第5号 (2021)

107 ② 2021 原子衝突学会

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}_{\perp} + q_z \, \hat{\boldsymbol{v}} \,, \quad q_z = (\epsilon_k - \epsilon_i) / \boldsymbol{v}$$

として, 散乱振幅 は

$$f_k(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{2\pi} \int d\boldsymbol{b} \, e^{i\boldsymbol{q}_\perp \cdot \boldsymbol{b}} \, e^{-i\chi_1(b)} \, \tilde{T}_k(\boldsymbol{b}) \tag{6}$$

と書ける. 入射イオンの散乱方向  $(d\Omega_P)$ , 電離電 子のエネルギー $(\epsilon_k)$ と放出方向 $(d\Omega_k)$ についての 3 重微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}^3\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}\mathrm{d}\epsilon_k\mathrm{d}\Omega_k} = N_e(M_P\nu)^2k |f_k(\mathbf{q})|^2$$

となる.  $N_e$  (= 2) はヘリウムが同等な 1s 電子を 2 つ持つことを考慮する因子である.  $q_{\perp}$  は q の xy 面への射影ベクトルで, その大きさは入射イオ ンの散乱角  $\theta_P$  と  $q_{\perp} = 2M_P v \sin(\theta_P/2)$  の関 係がある.

CDW-EIS 近似は, 経験的に  $Z_P/v \leq 1$  のときに実験結果を良く再現する.

#### 3.2 水素分子の単電離

電荷 Z<sub>P</sub> のイオン (P) による水素分子の単電 離過程を, 電離する電子だけを陽に扱う1 電子近 似を用いる. 座標は 図2 のように取る.



図 2:1 電子近似でのイオン(P) と水素分子系の 座標.

標的の水素分子の二つの陽子を  $p_1, p_2$  で表 し、分子軸 $\rho$  は衝突中に静止しているものとする (核固定近似、 $\rho = 1.4$  平衡距離). 分子軸の中 点から測った電子の位置ベクトルを $\mathbf{r}$ ,入射イ オンP からの電子の位置ベクトルを $\mathbf{s}$  とする. 入 射イオンPの分子軸の中点からの相対座標R は、 古典的な等速直線運動 R = b + vt によって記 述する.

P+H2 系の電子ハミルトニアンを

$$H_2 = h_2(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) - Z_P/s$$

原子衝突学会誌しょうとつ 第18巻第5号 (2021)

と近似する. ここで,  $h_2(\mathbf{r}, \mathbf{\rho})$  は, 水素分子内 の有効 1 電子ハミルトニアンである. 始状態の 1so 分子軌道を  $\psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{\rho})$ , 運動量  $\mathbf{k}$  の電離状 態を  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{\rho})$  とし, それらのエネルギーを  $\epsilon_i$ ,  $\epsilon_k = k^2/2$  とする. CDW-EIS 近似では, 始状態, 終状態に対する歪波波動関数を

$$u_{i} = e^{-i\epsilon_{i}t} \psi_{1s\sigma}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) D_{E}(s),$$
$$u_{k} = e^{-i\epsilon_{k}t} \psi_{k}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) D_{P}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{s})$$

と取る [5]. 衝突径数 **b**の電離過程に対する遷移 振幅は

$$T_{k}(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}) = e^{-i\chi_{2}(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho})} \tilde{T}_{k}(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}) ,$$
  

$$\chi_{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ V_{2}(t) ,$$
  

$$\tilde{T}_{k}(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle u_{k} \right| \left( H_{2} - i \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_{r} \right) u_{i} \right\rangle dt$$

と書ける. ここで, 入射イオン と H<sub>2</sub>イオンとの 有効ポテンシャルを

$$V_2(\boldsymbol{R},\boldsymbol{\rho}) = \int d\mathbf{r} |\psi_{1s\sigma}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\rho})|^2 \left(\frac{Z_P}{R_1} + \frac{Z_P}{R_2} - \frac{Z_P}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}\right)$$

としている. 始状態の1sσ 軌道の波動関数を

$$\psi_{1s\sigma} = N_i \left( \zeta_{1s}(r_1) + \zeta_{1s}(r_2) \right), \tag{7}$$

$$\zeta_{1s}(x) = \sqrt{Z_T^3/\pi} \ e^{-z_T x}$$

(N<sub>i</sub>:規格化定数,Z<sub>T</sub>:有効電荷) と表すと,

$$\tilde{T}_{k}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho}) = N_{i} \left( \tilde{T}_{k}^{(1)}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho}) + \tilde{T}_{k}^{(2)}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho}) \right)$$
(8)

となる. ここで,

$$\widetilde{\boldsymbol{T}}_{\boldsymbol{k}}^{(j)}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho}) = \\ -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \ e^{i\omega t} \left\langle \psi_{\boldsymbol{k}} D_{\boldsymbol{p}} \middle| \mathcal{W}_{\boldsymbol{r}} \zeta_{1s}(\boldsymbol{r}_{j}) D_{\boldsymbol{E}} \right\rangle_{\boldsymbol{r}} , \\ \mathcal{W}_{\boldsymbol{r}} \zeta_{1s}(\boldsymbol{r}_{j}) D_{i} \equiv \\ \left[ \frac{1}{2} \zeta_{1s}(\boldsymbol{r}_{j}) \nabla_{\boldsymbol{s}}^{2} D_{\boldsymbol{E}} + (\nabla_{\boldsymbol{r}} \zeta_{1s}) \cdot (\nabla_{\boldsymbol{s}} D_{\boldsymbol{E}}) \right] ,$$

 $\omega=\epsilon_k-\epsilon_i$ 

である. さらに, (8) 式の評価を簡単にするため, 有効 2 中心近似 (Two effective center (TEC)近似)を適用し[6,7],  $\tilde{T}_{k}^{(j)}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho})$  (*j* = 1,2) の各項で

$$\psi_k(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{\rho}) \to (2\pi)^{-3/2} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} D^{Z_e}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}_i) \qquad (9)$$

108 © 2021 原子衝突学会 の置き換えを行う[8].  $D^{Z_e}(k, r_j)$ は、電離した電 子が陽子  $p_j$ に置いた有効電荷  $Z_e$ による歪み を記述する関数である[8]. TEC 近似では、 陽子  $p_1$ に中心にもつ ls 軌道  $\zeta_{1s}(r_1)$ から電離した電 子には  $p_1$ からの有効クーロン力が働き、 陽子  $p_2$ に中心にもつ ls 軌道  $\zeta_{1s}(r_2)$ から電離した電 子には  $p_2$ からの有効クーロン力が働くものとし ている.

TEC 近似の結果, (8) 式は

$$\widetilde{T}_{k}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho}) = e^{-i\Lambda}\mathcal{T}_{k}(\boldsymbol{b}_{1}) + e^{i\Lambda}\mathcal{T}_{k}(\boldsymbol{b}_{2}), \qquad (10)$$
$$\Lambda = (q_{z}\,\hat{v} - \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{\rho}, \ q_{z} = (\epsilon_{k} - \epsilon_{i}) / v$$

となる. (10) 式の  $b_1, b_2$  は, それぞれ  $R_1, R_2$ の xy 面への射影である.  $\mathcal{T}_k(b_j)$  (j = 1,2) は, 擬水素原子  $\zeta_{1s}(r_j)$  に対する電離遷移振幅で, (4) 式のように書ける. 散乱振幅は,

$$F_{k}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{\rho}) = N_{i}/2\pi \int d\boldsymbol{b} \ e^{i\boldsymbol{q}_{\perp}\cdot\boldsymbol{b}} \ e^{-i\chi_{2}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{\rho})} \times \left(e^{-i\Lambda}\mathcal{T}_{k}(\boldsymbol{b}_{1}) + e^{i\Lambda}\mathcal{T}_{k}(\boldsymbol{b}_{2})\right)$$
(11)

で求まる [8].

(9), (10) 式では, 電離電子が  $H_2^+$  から受ける 歪みについて TEC 近似を適用したが, 相対運動 の歪み  $e^{-i\chi_2(b,\rho)}$  についても TEC 近似を適用す ると,

$$F'_{k}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{\rho}) = 2N_{i} \cos\left(\frac{\boldsymbol{p}_{r}\cdot\boldsymbol{\rho}}{2}\right) f'_{k}(\boldsymbol{q}), \qquad (12)$$
$$\boldsymbol{p}_{r} = \boldsymbol{q} - \boldsymbol{k}$$

を得る [8].  $f'_k(q)$  は (6) 式と同様に,入射イオ ンによる擬水素原子 1s 軌道 ((7)式の $\zeta_{1s}$ ) に対 する電離散乱振幅を表し,  $p_r$  は電離で生成した  $H_2^+$  イオンの反跳運動量である.

(12) 式では、 $\cos(p_r \cdot \rho/2)$  により2つの擬水 素原子の散乱振幅の干渉が表され、水素分子の 計算が水素原子標的の計算程度に簡略化されて いるが、あくまで近似の結果である.

分子の向きを固定しての,入射イオンの散乱方 向,電離電子の放出方向,及びそのエネルギー についての3重微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}^{3}\sigma(\hat{\rho})}{\mathrm{d}\Omega_{P}d\epsilon_{k}d\Omega_{k}} = N_{e}N_{i}^{2}(M_{P}\nu)^{2}k |F_{k}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{\rho})|^{2} \qquad (13)$$

となる. 分子の向きで平均した3 重微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}^3\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}d\epsilon_k d\Omega_k} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\mathrm{d}^4\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}d\epsilon_k d\Omega_k d\Omega_\rho} \,\mathrm{d}\Omega_\rho$$

となる. (13) 式で, F<sub>k</sub>(q, p) の代わりに (12) 式を使うと

$$\frac{\mathrm{d}^{3}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}d\epsilon_{k}\mathrm{d}\Omega_{k}} = N_{e}N_{i}^{2}I(p_{r}\rho)(M_{P}\nu)^{2}k |f_{k}'(\boldsymbol{q}_{\perp}|^{2},$$
$$I(p_{r}\rho) = 2\left(1 + \frac{\sin(p_{r}\rho)}{p_{r}\rho}\right) \tag{14}$$

となる. (14) 式では,水素分子の3 重微分断面 積が,擬水素様原子の3 重微分断面積と干渉効 果を表す項  $I(p_r\rho)$  の積として書ける.

等核2原子分子の光電離過程について,電子 配置の二中心性からくる干渉効果を指摘したのは, CohenとFanoである[9].水素分子で見られる干 渉効果は,ヤングの干渉実験に似たもので,光電 離,電子衝突,およびイオン衝突の実験で確認さ れている[10].水素分子以外でも,窒素分子, 酸素分子,一酸化炭素について干渉効果の実験 がなされている[11].

#### 4. 陽子と水素分子の衝突

イオン衝突による水素分子の単電離の3 重微 分断面積  $(d^3\sigma/d\epsilon_k d\Omega_k d\Omega_p)$  を報告しているの は、ミズリー工科大 (MST) のグループだけで、 75 keV 陽子を入射体として用いている [2,12,13]. ここでは、主にMST グループの実験データと計 算結果の比較例を紹介する.

#### 4.1 単電離における微分断面積

水素原子は内部状態の記述にあいまいさが無いため、衝突計算の厳密な評価ができる. 陽子と 水素分子標的のデータを示す前に、75 keV 陽子 と水素原子の衝突 (75 keV p + H 衝突)の電離に おける、陽子散乱角と電離電子エネルギーにつ いての 2 重微分断面積  $(d^2\sigma/d\epsilon_k d\Omega_p)$ を図 3 に示す. 電離電子のエネルギーは  $\epsilon_k = 16.4$  eV と 36.4 eV である. CDW-EIS 近似 と、Walters 等 の緊密結合の計算結果は良く一致している [14,15]. これらの計算結果と、実験値 [16,17] は小角散乱では良く一致しているが、大角散乱で は不一致が見られる.



図 3:75 keV 陽子衝突による水素原子の電離 2 重微分断面積(DDCS). CDW-EIS [14] (黒実線), 緊密結合法 [15] (赤破線). 実験値 [16,17] (〇).

75 keV p + H<sub>2</sub> 衝突における電離 2 重微分断 面積( $d^2\sigma/d\epsilon_k d\Omega_P$ )が、電子放出エネルギー  $\epsilon_k = 14.6 \text{ eV}$ から 54.6 eV で報告されている [18,19]. 実験値と計算結果を 図 4 に示す. 比 較のため, Chowdhury 等の M3DW-EIS 近似の結 果を, 図4 に含めているが,絶対値が実験値に 合うよう 4.5 倍されている [20]. M3DW-EIS 近似 は CDW-EIS 近似と似ているが, 分子の軌道を全 方向について平均し,原子標的並みの計算に軽 減化が図られている. 図4の  $\epsilon_k = 14.6 \text{ eV}$ では, 理論値と実験値の一致は悪くない.  $\epsilon_k$  =14.6 eV において, Alexander 等の実験[18] と M3DW-EIS の角度分布は,  $\theta_P = 0.8$  rad 付近に構造を 示していているが、後に報告された Sharama 等の 実験データには、構造は見られない [19].  $\epsilon_k =$ 54.6 eV では、理論計算の微分断面積が小角散 乱で実験データより小さくなり、一致が悪くなる. この傾向は  $\epsilon_k$  が大きくなるにつれて顕著になる.

図 4 の微分断面積を陽子散乱角で積分すれ ば $d\sigma/d\epsilon_k$  が得られる.  $\epsilon_k = 54.6$  eV では, Alexander 等の 2 重微分断面積は,小角領域で CDW-EIS の結果より 2 倍程度大きいので,  $d\sigma/d\epsilon_k$  も 2 倍程度大きくなる. Geally 等は, 20 keV から 114 keV の陽子衝突による水素分子の 電離微分断面積 ( $d^2\sigma/d\epsilon_k d\Omega_k$ ,  $d\sigma/d\epsilon_k$ ,  $d\sigma/d\Omega_k$ )を報告している [21]. 75 keV の測定はなさ れていないが, その前後の 67 keV と 95 keV の  $d\sigma/d\epsilon_k$ の 実験値を 図 5 に示す. この 2 つの エネルギーで, 今回の CDW-EIS 近似の計算結 果は実験値を良く再現している. このことから, 75 keV において, CDW-EIS 近似は悪くない  $d\sigma/d\epsilon_k$ を与え, 図4の Alexander 等の $\epsilon_k = 54.6 \text{ eV}$ の2 重微分断面積は2倍ほど大きすぎると思われる.



図 4:75 keV 陽子衝突による水素分子の電離 2 重微分断面積. CDW-EIS [14] (黒実線), M3DW-EIS の 4.5 倍 [20] (青破線). 実験値: [18] (○), [19] (□).



図 5:67 keV,95 keV 陽子入射による水素分子の微分断面積 (dσ/dε<sub>k</sub>). CDW-EIS (実線). 実験値 [21] (○, ○).

#### 原子衝突学会誌しょうとつ 第18巻第5号 (2021)

Egodapitiya 等は入射ビームの横方向 (xy 方 向)の広がり(横方向のコヒーレンス長)を,スリ ットの開口径 (a) とスリットと標的間の距離 (L) を変えることで制御できることを報告した [22]. 入射イオンのド・ブロイ波長を λ とすると, 横方向 のコヒーレンス長は  $\Delta r_{\perp} = L\lambda/(2a)$  によって見 積もられる. Egodapitiya 等は p+H<sub>2</sub> 衝突の電 離 2 重微分断面積 ( $d^2\sigma/d\epsilon_k d\Omega_P$ ) の測定を  $\Delta r = 0.86 \ge 6.6$ の75 keV 陽子ビームを用いて 行い,陽子散乱の角度分布が変調することを示し た (図 6). Δr<sub>1</sub> = 6.6 は水素分子の広がりより 数倍大きいので、 $\Delta r_{\perp} = \infty$ とした通常の衝突計 算で扱うことができ、その実験データは CDW-EIS の計算 (図 6 の黒実線)に近い. Δr<sub>1</sub> = 0.86 の実験値は水素分子のサイズより小さいの で,通常の計算では再現できない.不確定性関 係から,波束の空間的な横広がりが小さくなると, 横方向の運動量広がりが大きくなる.



図 6: 75 keV 陽子衝突による水素分子の電離 2 重微分断面積 ( $\epsilon_k$ =14.6 eV). CDW-EIS: 畳み 込みなし (黒実線),  $\Delta r_{\perp} = 0.86$  で畳み込み (赤点線). 実験値 [22]:  $\Delta r_{\perp} = 6.6$  ( $\triangle$ ),  $\Delta r_{\perp} = 0.86$  ( $\Box$ ).

Feagin 等 や Sarkadi 等 は、入射イオンの横方 向の運動量分布を考慮し、*Δr* = 0.86 の実験デー タの再現を試みた [23,24]. 運動量の横成分に 広がりをもつ入射波束に対する有効2重微分断面 積は

$$\sigma_{\rm eff}^{(2)}(\boldsymbol{q}_{\perp}, \boldsymbol{\epsilon}_k) = \int d\boldsymbol{K}_{\perp} \Phi\left(\boldsymbol{K}_{\perp}\right) \times \sigma^{(2)}(\boldsymbol{q}_{\perp} + \boldsymbol{K}_{\perp}, \boldsymbol{\epsilon}_k)$$
(15)

と書ける [25 – 27]. ここで,  $K_i$ ,  $K_f$  は, それぞ れ入射イオンと散乱イオンの運動量を表し,  $\sigma^{(2)}(q_{\perp}, \epsilon_k)$ は 2 重微分断面積  $d^2\sigma/d\epsilon_k d\Omega_P$ を 運動量移行の横成分 $q_{\perp}$ を使って表したものであ る.入射波束の横成分の運動量分布を表す関数  $\Phi(K_{\perp})$ は, ガウス関数により

$$\Phi(\mathbf{K}_{\perp}) = 2\Delta r_{\perp}^2 / \pi \exp(-2\Delta r_{\perp}^2 K_{\perp}^2)$$

と近似される.(15)式の有効微分断面積は、入 射イオンの横方向の運動量広がりのため、 $q_{\perp}$ 近 傍の運動量移行 $Q_{\perp} = q_{\perp} + K_{\perp}$ の微分断面積 の畳み込み積分になっている.

(15) 式を適用すると、図 6 の赤破線が得られ、  $\Delta r_{\perp} = 0.86$  の実験データを再現することができる [8]. しかし、(15)式を使えば、MST グループが行った有限の  $\Delta r_{\perp}$  の実験データをいつも再現できるわけではない.

75 keV p + H<sub>2</sub> 衝突の電離 3 重微分断面積の 例として, 運動量移行の大きさ q = 0.71, 1.86, 電離電子のエネルギー  $\epsilon_k$  = 14.6 eV における 散乱面内への電子放出角分布を 図 7 に示す [28]. 陽子の入射方向を z 軸, 入射陽子の運動



図 7:75 keV 陽子衝突による水素分子の散乱面 への電子放出に対する電離 3 重微分断面積. CDW-EIS [8](黒実線). 実験値 [28] (○).

量移行 q の xy 面への射影  $q_{\perp}$  の方向を x 軸 としたとき, zx面を散乱面という.  $\theta_k$  は電離電子 の運動量と z 軸とのなす角である.

図7のピークは  $q \parallel k$  となる  $\theta_k$  付近に現わ れ,2 体衝突ピークと言われる. ピーク位置や角 度分布について,実験値と理論値の一致は良く ない. q = 0.71 では実験値と理論値の大きさに 3 倍程度の不一致が見られる. 75 keV 陽子とヘリ ウムの電離過程についても同様な不一致がある [29-31]. このような事情は他の歪波近似を用い た計算でも同様で,理論計算の間でも大きな不一 致が見られるケースもある.

実験値と理論値の不一致の解明のために,独 立したグループの実験データが望まれる. 陽子の入射エネルギー 75 keV の3 重微分断面 積に対して, CDW-EIS 近似がどれほど良いかは わからないので,信頼性の高い緊密結合法の計 算が望まれる.75 keV では電荷移行が無視できな い.

Egodapitiya 等の報告後, MST グループは, 横 方向のコヒーレンス長 (Δr) が標的サイズ程度の 75 keV 入射ビーム (非干渉性ビーム) と, 標的サ イズより大きいビーム (干渉性ビーム) の2種類を 用いて微分断面積 を測定し, その比を考察して 衝突機構を議論している [2,12,13, 及びこれらの 参考文献]. これらは, 非干渉性ビームは 2 個の 水素原子の微分断面積に対応し, 干渉性ビーム の衝突実験は水素分子の実験に対応して, その 比は水素分子標的では (14) 式の *I(pp)* に相 当するという解釈に動機付けされている. しかし, 干渉性ビームと非干渉性ビームのそれぞれの微 分断面積の実験データは, 衝突計算によりうまく 再現できないことが多い.

#### 4.2 解離性電子捕獲

4.1 節のイオン入射による水素分子の単電離の 実験では、分子軸の方向については測定されて いない. 衝突後の解離生成イオンを捕まえること で分子の向きを指定した実験も報告されている [32-41].ここでは、

$$p + H_2(1s\sigma^2, \nu_i = 0) \rightarrow H(1s) + H_2^+(1s\sigma, \nu)$$
(16)

で起こる, 解離性電子捕獲 (dissociative electron capture, DC) と 非解離電子捕獲 (non dissociative electron capture, NDC) を考える. (16) 式の  $v_i$ , v はそれぞれ H<sub>2</sub>(1s $\sigma^2$ ), H<sup>+</sup><sub>2</sub>(1s $\sigma$ )の振動 量子数である.

核固定近似, 1 電子近似, 及び 有効 2 中心 近似を用いた簡単なモデルで電子捕獲衝突を扱 うと, (12) 式に対応して

$$F'_c(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{\rho}) = 2N_i \cos(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\rho}/2) f'_c(\boldsymbol{q}) \qquad (17)$$

$$oldsymbol{p}=oldsymbol{q}-oldsymbol{v}, \ oldsymbol{q}=(oldsymbol{q}_{\perp}$$
 ,  $oldsymbol{q}_z=v^2/2-0.5-\epsilon_i)$ 

となる. *f*<sub>c</sub>'(**q**) は, 陽子入射による擬水素原子からの電子捕獲散乱振幅である.

(16) の衝突に対して, 分子の振動運動を考慮 する. 水素分子イオンの2つの陽子間のベクトル を ρ, 換算質量を μ とすると, H<sub>2</sub><sup>+</sup>(1sσ)の振動 状態は

$$\left(-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{d\rho^2} + \mathcal{E}_{1s\sigma}(\rho)\right)\chi_{\nu}(\rho) = E_{\nu}^{1s\sigma}\chi_{\nu}(\rho)$$

を満たす ( $v = 0,1,2,\cdots$ ). ここで,  $\mathcal{E}_{1s\sigma}(\rho)$  は H<sup>+</sup><sub>2</sub>(1s $\sigma$ ) の断熱ポテンシャルである. 計算の簡 単化のため,

$$\chi_{\nu}(0) = \chi_{\nu}(\rho_{max}) = 0$$

を課し,  $E_{\nu}^{1s\sigma}$ を離散化する.  $\mathcal{E}_{1s\sigma}(\rho \to \infty) = -0.5$ なので,  $E_{\nu}^{1s\sigma} > -0.5$  に対する振動状態  $\chi_{\nu}$  は 連続状態を代替する. 離散化した計算の信頼性 は  $\rho_{max}$  についての結果の収束性で判断できる. 今回の計算では,  $\rho_{max} \ge 10$  で安定した結果 が得られた.

(17) 式を使って, (16) の衝突の散乱振幅を

$$\mathcal{F}_{c,\nu}\left(\boldsymbol{q}, \widehat{\boldsymbol{\rho}}\right) = \int d\rho \,\chi_{\nu}(\rho) \chi_{i}(\rho) \,F_{c}'(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{\rho}) \\ = N_{i} \,\mathcal{C}_{\nu}(\boldsymbol{p} \cdot \widehat{\boldsymbol{\rho}}) \,f_{c}'(\boldsymbol{q}), \tag{18}$$

$$C_{\nu}(\boldsymbol{p}\cdot\hat{\rho}) = 2\int d\rho \,\chi_{\nu}(\rho)\chi_{i}(\rho) \times \cos(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\rho}/2)$$
(19)

である. 分子の向きを固定した微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{v}}(\hat{\rho})}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}} = N_{i}^{2} |\mathcal{C}_{\mathrm{v}}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\widehat{\rho}})|^{2} \left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{2H}'}$$

$$(d\sigma_{\rm c}/d\Omega)_{\rm 2H'} = N_e (M_{\rm P}v)^2 |f_c'(q)|^2$$

は2つの擬水素原子からの電子捕獲微分断面積 である. DC の微分断面積は

$$\frac{d\sigma_{DC}(\hat{\rho})}{d\Omega_{P}} = \sum_{\nu}' \frac{d\sigma_{\nu}(\hat{\rho})}{d\Omega_{P}}$$
$$= (\sum_{\nu}' |\mathcal{C}_{\nu}(\boldsymbol{p} \cdot \hat{\rho})|^{2}) \times N_{i}^{2} \left(\frac{d\sigma_{c}}{d\Omega}\right)_{2H'}$$
(20)

と書ける.  $\Sigma'_{\nu}$  は,  $E^{1s\sigma}_{\nu} > -0.5$  となる  $\nu$  につい ての和を表す.

同様に、NDCの微分断面積  $d\sigma_{NDC}(\hat{\rho})/d\Omega_P$  は  $E_{\nu}^{1s\sigma} < -0.5$  となる $\nu$  について和を取ればよい.

(20) 式 C<sub>ν</sub> の cos(p · ρ/2) で, ρ → ρ<sub>e</sub> (平 衡距離) と置けば

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{DC}}(\hat{\rho})}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}} = 4 F_{DC} \cos^{2}\left(\frac{p \cdot \rho_{e}}{2}\right) N_{i}^{2} \left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{2H}'}, \quad (21)$$
$$F_{DC} = \Sigma_{\nu}' F_{\nu}, \quad F_{\nu} = \left|\int d\rho \,\chi_{\nu}(\rho)\chi_{i}(\rho)\right|^{2}$$

となる.  $F_{DC}$  は, DC 過程についてのフランクーコ ンドン因子で  $F_{DC} \simeq 0.015$  である. H<sup>+</sup><sub>2</sub> の振動 分布を区別しない電子捕獲微分断面積は, DC と NDC の微分断面積の和であるから,  $\sum_{v} F_{v} =$ 1 を使い, (21) 式で  $F_{DC} \rightarrow 1$  とし,

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{c}}(\hat{\rho})}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{P}}} = 4\cos^{2}\left(\frac{p\cdot\rho_{e}}{2}\right) N_{i}^{2} \left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{2\mathrm{H}}$$

となる. これを分子軸方向について平均すれば, 核固定近似での電子捕獲微分断面積

$$\frac{d\sigma_{\rm c}}{d\Omega_{\rm P}} = 2N_i^2 \left(1 + \frac{\sin(p\rho_e)}{p\rho_e}\right) \left(\frac{d\sigma_{\rm c}}{d\Omega}\right)_{\rm 2H'}$$
(22)

が得られる.

図8 に, 25 keV と75 keV 陽子による H<sub>2</sub>からの電子捕獲微分断面積を示す [42,43]. 理論値は (22) 式で計算したもので,分子の向きについては平均している. 25 keV では,理論値と実験値の一致は良い. 75 keV の小角散乱では良く一致しているが, $\theta_P > 0.5$  mrad では一致は悪い.

入射方向を z 軸 ( $\hat{z} \parallel \hat{v}$ ),  $\mathbf{q}_{\perp}$  の方向を x 軸,  $\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{q}_{\perp}$  の方向を y 軸に取る. 図 9 に, (a)  $\hat{\rho} \parallel$   $\hat{x} \geq$  (b)  $\hat{\rho} \parallel \hat{y}$  における 75 keV 陽子衝突の  $d\sigma_{DC}(\hat{\rho})/d\Omega_{P}$  を示す. 図 9 には,分子の振動運 動を考慮した計算((20) 式), 核固定近似の計 算((21) 式),分子軸方向について平均化した 核固定近似の計算 ((22) 式) に  $F_{DC}$  を掛けた 計算結果が含まれている. 図 9 中の Lamichhane 等の実験データ [40] は絶対値ではないので, 適当にスケールしている.  $\theta_P < 1$  mrad で,実験 データは計算結果よりゆっくり減少している.

図9(a) の場合には,  $p \cdot \rho = q_{\perp}\rho \sim M_P v \theta_P$  が  $\theta_P$  とともに増加するので,3つの計算結果に大き な違いが見られる.(20) 式の結果の振る舞いは, 核固定近似の計算(21) 式より実験データに近く, 核間の振動運動を陽に考慮することの重要性を 示している.図9(b) の場合には  $p \cdot \rho = 0$  なの で,(20) 式 と(21) 式の結果は一致し,3つの計 算の微分断面積は単調に減少している.図9に は手の込んだ2電子計算の結果も示している.簡 単な(20) 式のモデル計算が2電子計算の結果 を定性的に良く再現していることが,図9(a) か らわかる.

Lamichhane 等の実験では、2eV以下の解離 した陽子を検出して分子軸を特定している.小角 散乱では、陽子運動エネルギーが小さいDCほど 寄与が大きいが、小さすぎると軸反跳近似 (axial recoil 近似) が成り立たない.このことが、散乱角 の小さいところでの理論値と実験値の不一致の一 因と思われる.



図 8: 25 keV, 75 keV 陽子入射による水素分子からの電子捕獲の微分断面積. CDW-EIS [42] (一 点波線). 実験値 [43] (〇).

#### 原子衝突学会誌しょうとつ 第18巻第5号 (2021)



図 9:75 keV 陽子入射による水素分子の解離 性電子捕獲の微分断面積. (a) *p̂* || *x̂*. (b) *p̂* || *ŷ*. (20) 式 (黄緑実線), (21) 式 (赤点 線), (22)式 × F<sub>DC</sub> (黒波線), 2 電子計算 [42] (黒実線). 実験値 [40] (〇).

#### 5. C<sup>6+</sup>パズル

2003 年に、100 MeV/u C<sup>6+</sup> イオンによるヘリウ ムの単電離の3 重微分断面積が Shulz 等によっ て報告された [44] .実験は2章の方法2 により 測定されている.(入射イオンの電荷)/(入射速度) ~0.1 の衝突条件なので、ボルン近似が十分妥 当と思われる.散乱面への電子放出については 期待通りボルン近似で良い一致が得られたが、yz 面の電子放出ではボルン近似の結果は桁違いに 実験値より小さくなってしまう(図10参照).歪波 近似や緊密結合計算の結果もボルン近似の結果 に近く、相対論的効果を考慮しても実験との不一 致はあまり改善されなかった [45-47].この不可 解な問題は C<sup>6+</sup>パズルと呼ばれ、多くの研究が なされている.

この不一致について、Olson 等は COLTRIMS で冷却されている標的ヘリウムの運動量分布に由 来する実験の分解能のためだとして、実験データ の不確定さを考慮した計算を行い、実験結果を良 く再現した [48-51]. つまり、(1) 式で  $\kappa = 0$ とできないということであるが、Dürr 等は実験の 分解能を再検討し、Olson 等の説明を否定してい る [52]. Schulz 等や Járai-Szabó 等は,入射イオンの 散乱角に対応した衝突径数(b)を古典力学的な ポテンシャル散乱から特定し, b を通過した弾性 散乱微分断面積と,ボルン近似で求めた b にお ける電離確率との積を取ることにより,実験データ が再現できることを示した [53-55].しかし,これら の計算は理論的に受け入れ難い.

Kouzakov 等は入射イオンと標的の運動量分布 を考慮した有効微分断面積の表式を導出し,測 定法によって表式が異なることを指摘した [56,57].彼らの理論によれば,方法2の測定法 に対する有効微分断面積は入射イオンの運動量 分布によらず,標的の運動量分布を考慮する必 要がある.一方,MST で行われた75keV 陽子入 射で用いられた 方法3 の測定に対する表式は, 入射イオンと標的の運動量分布の両方が影響す る.

Gassert 等は, 1 MeV 陽子によるヘリウム原子の 単電離における電子放出に対する 3 重微分断面 積を,入射陽子の横コヒーレンス長を変えて方法 2 により測定した [58].実験結果はボルン近似 で概ね再現され,横コヒーレンス長に対する依存 性は確認されなかった.この実験結果は Kouzakov 等の理論と矛盾しない.

*方法2* で測定された実験結果に対する有効微 分断面積は(15) 式と同形で,  $\Delta r_{\perp} \rightarrow 1/(\sqrt{2} \Delta p_{\perp})$ と置き換えたものになっている [59,60]:

$$\sigma_{\rm eff}^{(3)}(\boldsymbol{q}_{\perp},\boldsymbol{k}) = \int d\boldsymbol{K}_{\perp} \, \sigma^{(3)}(\boldsymbol{q}_{\perp} + \boldsymbol{K}_{\perp},\boldsymbol{k}) \times (\pi \Delta p_{\perp})^{-1} \, \exp(-K_{\perp}^2 \, / \Delta p_{\perp}^2) \,.$$
(23)

 $\sigma^{(3)}(\boldsymbol{q}_{\perp},\boldsymbol{k}) = \mathrm{d}^{3}\sigma/\mathrm{d}\epsilon_{\mathrm{k}}d\Omega_{k}d\Omega_{P}$ 

で、 $\Delta p_{\perp}$  は標的の xy 方向の運動量広がりである. この式を適用して、実験値と理論値の一致が 大きく改善される例を示す.

図 10 は 100 MeV/u C<sup>6+</sup> + He単電離過程の zx 平面および yz 面への電子放出に関する3 重 微分断面積である [42].座標軸の方向は 4.2 節と同じく  $\hat{z} \parallel v$ ,  $\hat{x} \parallel q_{\perp}$  である. yz 面への電 子放出について,通常の計算で得られる微分断 面積  $\sigma^{(3)}(q_{\perp}, k)$  は実験値に比べ小さすぎる が, (23) 式の畳み込み積分したものは,実験値と



図 10: 100 MeV/u C<sup>6+</sup> 入射によるヘリウムの電 離 3 重微分断面積 d<sup>3</sup> $\sigma/dq_{\perp}d\epsilon_{k}d\Omega_{k}$  ( $\epsilon_{k} = 6.5 \text{ eV. } q = 0.75$ ). CDW-EIS [60]: 畳み込み なし(黒実線),  $\Delta p_{\perp} = 0.3$ で畳み込み(赤波 線). 実験値 [44] (〇).

良く一致する.

図 11 は、3.6 MeV/u Au<sup>24+</sup> + He 単電離の 3 重微分断面積の、散乱面への電子放出分布であ る [61]. 畳み込んだ有効微分断面積と実験値は 良く合っている. 実験値には  $\theta_k = 0^\circ$  付近に構 造が見られるが、その理由はまだわかっていない.

 $\sigma^{(3)}(q_{\perp}, k)$ は、 $q_{\perp}$ が増加すると急激に減少 する.図 10、図 11 の $\sigma^{(3)}_{eff}(q_{\perp}, k)$ は $q_{\perp}$ 近傍の 運動量移行の3 重微分断面積が混じるため、通 常の $\sigma^{(3)}(q_{\perp}, k)$ (図 10、図 11 図の黒実線)か ら大きく変化している.(23)式は標的ヘリウム原 子の熱運動による運動量分布で畳み込みをして いるが、入射イオンの運動量分布による畳み込み と解釈している人たちもいる[2,13,62,63].

#### 6. おわりに

本稿では、比較的簡単な原子や分子のイオン 衝突による電離や電子捕獲過程の微分断面積に ついて、我々の最近の研究を紹介した.1 電子遷 移にも関わらず、実験データと理論値の一致は必 ずしも良くない.通常の散乱計算では一致が得ら れないが、入射体や標的の運動量分布について



図 11: 3.6 MeV/u Au<sup>24+</sup> 入射によるヘリウムの 電離 3 重微分断面積 ( $\epsilon_k = 4 \text{ eV}$ ). CDW-EIS [60]: 畳み込みなし (黒実線),  $\Delta p_{\perp} = 0.3$ で畳み込み (赤波線). 実験値 [61] (〇).

畳み込みを行うことにより、一致が改善される場合 もある.引き続き、実験データと理論計算の不一 致の解明に向けて、継続的な研究が必要だと思 われる.また、比較的簡単な原子や分子におい ても、1電子遷移や独立粒子モデルを超えた理論 の報告例は少ない.2電子捕獲や、電離+電子捕 獲、電離+励起などの多電子遷移について、理 論側の更なる進展が望まれる.

#### 参考文献

- J. Ullrich et al., Rep. Prog. Phys. 66, 1463 (2003).
- [2] M. Schulz, 'Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics Vol. 66' (Elsevier, Amsterdam) 2017, p. 508.
- [3] D. S. F. Crothers and J. F. McCann, J. Phys. B 16, 3229 (1983).
- [4] L. Gulyás, P. D. Fainstein, and A. Salin, J. Phys. B 28, 245 (1995).
- [5] M. E. Galassi et al., Phys. Rev. A 66, 052705 (2002).
- [6] Y. D. Wang et al., Phys. Rev. A 40, 3673 (1989).

原子衝突学会誌しょうとつ 第18巻第5号 (2021)

- [7] S. E. Corchs, R. D. Rivarola, and J. H. McGuire, Phys. Rev. A 47, 3937 (1993).
- [8] A. Igarashi and L. Gulyás, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 50, 035201 (2017).
- [9] H. D. Cohen and U. Fano, Phys. Rev. 150, 30 (1966).
- [10] M. F. Ciappina, O. A. Fojón and R. D. Rivarola, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47 042001 (2014).
- [11] M. R. Chowdhury et al., Phys. Rev. A 94, 052703 (2016).
- [12] M. Dhital et al., Phys. Rev. A 102, 032818 (2020).
- [13] M. Schulz et al., J. Phys. Conf. Ser. 1412, 062007 (2020).
- [14] A. Igarashi and L. Gulyás, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 51, 035201 (2018).
- [15] H. R. J. Walters and C. T. Whelan, Phys. Rev. A 92, 062712 (2015).
- [16] A. C. Laforge et al., Phys. Rev. Lett. 103, 053201 (2009).
- [17] M. Schulz et al., Phys. Rev. A 81, 052705 (2010).
- [18] J. S. Alexander et al., Phys. Rev. A 78, 060701(R) (2008).
- [19] S. Sharma et al., Phys. Rev. A 89, 052703 (2014).
- [20] U. Chowdhury, M. Schulz, and D. H. Madison, Phys. Rev. A 83, 032712 (2011).
- [21] M. W. Gealy et al., Phys. Rev. A 51, 2247 (1995).
- [22] K. N. Egodapitiya et al., Phys. Rev. Lett. 106, 153202 (2011).
- [23] J. M. Feagin, L. Hargreaves, Phys. Rev. A 88, 032705 (2013).
- [24] L. Sarkadi, R. Barrachina, Phys. Rev. A 93, 032702 (2016).
- [25] E. H. Wichmann, Am. J. Phys. 33, 20 (1965).
- [26] J. R. Taylor, Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions (Wiley, New York, 1972).
- [27] D. V. Karlovets, G. L. Kotkin, and V. G. Serbo, Phys. Rev. A 92, 052703 (2015).

- [28] A. Hasan et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47, 215201 (2014).
- [29] N. V. Maydanyuk et al., Phys. Rev. Lett. 94, 243201 (2005).
- [30] M. Schulz et al., Phys. Rev. A 73, 062704 (2006).
- [31] T. P Arthanayaka et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **49**, 13LT02 (2016).
- [32] A. K. Edwards et al., Phys. Rev. A **42**, 1367 (1990).
- [33] M. Takahashi et al., Phys. Rev. Lett. 94, 213202 (2005).
- [34] C. Dimopoulou et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 38, 593 (2005).
- [35] D. Schmidt D et al., Phys. Rev. Lett. 101, 083201 (2008).
- [36] D. Misra et al., Phys. Rev. Lett. 102, 153201 (2009).
- [37] S. Bellm et al., Phys. Rev. Lett. 104, 023202 (2010).
- [38] A. J. Senftleben et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 081002 (2010).
- [39] X. Ren et al., Phys. Rev. Lett. 109, 123202 (2012).
- [40] B. R. Lamichhane et al., Phys. Rev. Lett. 119, 083402 (2017).
- [41] B. R. Lamichhane et al., Phys. Rev. A 96, 042708 (2017).
- [42] A. Igarashi, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 225205 (2020).
- [43] S. Sharma et al., Phys. Rev. A 86, 022706 (2012).
- [44] M. Schulz et al., Nature **422**, 48 (2003).
- [45] M. McGovern, Phys. Rev. A 81, 042704 (2010).
- [46] M. McGovern, C. T. Whelan, and H. R. J. Walters, Phys. Rev. A 82, 032702 (2010).
- [47] I. B. Abdurakhmanov et al., Phys. Rev. A 86, 034701 (2012).
- [48] R. E. Olson, J. Fiol, Phys. Rev. Lett. 95, 263203 (2005).
- [49] S. Otranto et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39, L175 (2006).
- [50] J. Fiol et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39,

L285 (2006).

- [51] J. Fiol et al., J. Phys.: Conf. Ser. 88, 012014 (2007).
- [52] M. Dürr et al., Phys. Rev. A 75, 062708 (2007).
- [53] M. Schulz et al., Phys. Rev. A 76, 032712 (2007).
- [54] F. Járai-Szabó and L. Nagy, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40, 4259 (2007).
- [55] F. Járai-Szabó and L. Nagy, Nucl. Instrum. Methods B 267, 292 (2009).
- [56] K. A. Kouzakov et al., Phys. Rev. A 87, 046702 (2013).
- [57] K. A. Kouzakov, Eur. Phys. J. D 71, 63 (2017).
- [58] H. Gassert et al., Phys. Rev. Lett. 116, 073201 (2016).
- [59] L. Gulyás, S. Egri, A. Igarashi, Phys. Rev. A 99, 032704 (2019).
- [60] A. Igarashi, L. Gulyás, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245203 (2019).
- [61] D. Fischer, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36, 3555 (2003).
- [62] F. Navarrete et al., Nucl. Instrum. Meth. B **408**, 165 (2017).
- [63] F. Navarrete et al., Atoms 7, 31 (2019).

### 2021 年度 役員·委員会

#### 会長

長嶋泰之 (東京理科大学)

#### 幹事

星野正光	(上智大学)〔	副会長〕	中野祐司	(立教大学)
鳥居寛之	(東京大学)		石井邦和	(奈良女子大学)
永田祐吾	(東京理科大学	学)		

#### 運営委員

石井邦和(奈良女子大学)	岡田邦宏	(上智大学)
小田切丈(上智大学)	北島昌史	(東京工業大学)
久間晋(理化学研究所)	酒井康弘	(東邦大学)
高峰愛子(理化学研究所)	土田秀次	(京都大学)
鳥居寛之(東京大学)	中野祐司	(立教大学)
永田祐吾 (東京理科大学)	中村信行	(電気通信大学)
樋山みやび(群馬大学)	星野正光	(上智大学)
山崎優一(東京工業大学)	渡部直樹	(北海道大学)

#### 常置委員会

編集委員会	委員長:中野祐司	(立教大学)
行事委員会	委員長:石井邦和	(奈良女子大学)
広報渉外委員会	委員長:鳥居寛之	(東京大学)
顕彰委員会	委員長:星野正光	(上智大学)
庶務委員会	委員長:永田祐吾	(東京理科大学)

編集委員 石川顕一,岩山洋士,大橋隼人,岡田信二,椎名陽子, 土田秀次,冨田成夫,中野祐司,山崎優一



THE ATOMIC COLLISION SOCIETY OF JAPAN **原子衝突学会誌しょうとつ** 第18巻第5号(通巻102号) Journal of Atomic Collision Research ©原子衝突学会2021 <u>http://www.atomiccollision.jp/</u> 発行: 2021年9月15日 配信: 原子衝突学会事務局 <<u>acr-post@bunken.co.jp</u>>