# 原子衝突研究協会誌 2012年第9巻第2号

# **Journal of Atomic Collision Research**



### The Society for ATOMIC COLLISION RESEARCH

原子衝突研究協会 2012年3月15日発行 http://www.atomiccollision.jp/

### 原子衝突研究協会賛助会員(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



有限会社 イーオーアール

http://www.eor.jp/



株式会社 オプティマ

110p.// 1111.001.jp/

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

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

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

Optima Corp.

キャンベラジャパン株式会社



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/

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

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

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

真空光学株式会社-Vacuum & Optical Instruments-

スペクトラ・フィジックス株式会社





ツジ電子株式会社



http://www.tsujicon.jp/

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

株式会社東京インスツルメンツ



株式会社東和計測



株式会社トヤマ



株式会社 ナバテック

A Statec

仁木工芸株式会社

伯東株式会社

http://www.touwakeisoku.ecnet.jp/

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

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

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



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



二木 工 芸 株式会社

株式会社パスカル



http://www.pascal-co-ltd.co.jp/

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

丸菱実業株式会社



MARUBISHI CORPORATION

株式会社メディア研究所



http://mediken.jp/

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卷第2号

### 目 次

(巻頭言) 協会による最後のしょうとつ発行にあたって	(河内宣之	)	5
(総説) カスプトラップでの反水素合成	(榎本 嘉範	)	6
(シリーズ) 短波長自由電子レーザーによる原子分子光物理 第三回 FELによるホロー原子固体の研究と今後の研究の)	展開 (米田 仁紀	)	14
(シリーズ) 衝突論ノート IV 複表エネルギーサ能けま在するか。	◎堀ス幽雲		
	(島村 勲)	)	20
(原子衝突のキーワード) 虹効果	(田沼 肇)		27
国際会議発表奨励事業に関するお知らせ	(庶務幹事)		28
「しょうとつ」原稿募集	(編集委員会)		28
今月のユーザー名とパスワード			29

#### カスプトラップでの反水素合成

榎本 嘉範

理化学研究所

enomoto@riken.jp

#### 平成24年2月1日原稿受付

カスプ型の非一様磁場と入れ子型の静電ポテンシャルを組み合わせた新しい荷電粒子トラップを開発し、 このトラップを用いた反水素原子の合成に成功した.本装置の特徴はスピン偏極した反水素原子ビーム を取り出せることであり、反水素原子の精密分光へ向けて新たな道を切り開くものである.

#### 1. はじめに

反水素原子は反陽子1つと陽電子1つからなる 最も単純な反物質原子である.2002 年の ATHENA [1] 及び ATRAP [2] によるネスティッド ペニングトラップ (一様磁場と入れ子構造になっ た静電ポテンシャルを組み合わせた荷電粒子トラ ップ) 中での冷たい反水素の大量合成以来,この 反水素原子の分光を通して、物質-反物質の違い (CPT 対称性)を解明しようとする研究への道がひ らけた.しかしながら反水素原子は電気的に中性 のため,反陽子-陽電子の再結合により合成され た途端に四方に飛び散ってしまい,このままでは 分光実験等の精密測定には利用できない.一方 で反水素原子は磁気モーメントをもつため,非一 様磁場を用いれば運動を制御できることが知られ ている. そこで我々のグループ (ASACUS MUSASHI)では分光実験に利用可能な、反水素 原子を引き出せる新たな反水素源として,カスプト ラップと呼ばれるカスプ型の非一様磁場と入れ子 型の静電ポテンシャルを組み合わせたトラップを 2003年から開発している [3]. 2010年には7年間 に渡る装置開発が実りこのカスプトラップ中で合 成された反水素原子の信号を検出することができ た [4]. これによって, 先行していた 2 グループに 追いつき、あるいは一気に追い越そうとしていると ころである.本稿ではカスプトラップを用いた反水 素原子の合成と検出について,装置の詳細や具 体的なオペレーションにも触れつつ紹介したい. 本研究の背景や反水素の合成に必要となる周辺 装置の詳しい解説については,2011年8月号の 物理学会誌 [5] に特集記事があるので,参考に していただければ幸いである.

#### 2. カスプトラップ法による反水素原子の分 光

図1(a) にカスプトラップ及びこの中で生成された 反水素原子を用いた分光実験の概念図を示す. 反水素原子は予めカスプトラップ中にためこまれ た陽電子中へ反陽子を入射することによって合成 する. 出来上がった反水素原子はトラップより抜け だしてくるが,このうち陽電子のスピンが磁場と反 平行で磁場の弱い方向へ行くほどエネルギー的 に安定な状態 (low field seeking state, LFS) に いる原子はカスプ磁場によって中心軸上へ収束 される.一方で陽電子のスピンが磁場と並行で磁 場の強い方向へ行くほどエネルギー的に安定と なる状態 (high field seeking state, HFS) にいる 原子は反対に中心軸から遠ざかる方向へ力を受 ける.したがって中心軸に沿ってスピン偏極した 反水素原子が取り出されることになる.この反水 素原子はマイクロ波キャビティー, 六重極磁石を 通って検出器へと導かれる. 六重極磁石は上記 のカスプ磁場と同様の原理によりLFSの反水素原 子をを中心軸上へ, HFS の反水素原子を中心軸



図 1: (a) カスプトラップ中で生成された反水素原子を用いた分光実験の概念図. (b) 期待される信号. (c) 1S 状態の反水素原子の磁場中でのエネルギーダイアグラム.

から遠ざける方向へ導く作用があり、ここでもスピン状態を選別することができる.このためマイクロ 波キャビティーにかけるマイクロ波の周波数を掃 引しながら、検出器へ到達する反水素原子数を 観測すると、マイクロ波の周波数と反水素原子の 遷移周波数が一致し、スピン状態がLFSからHFS へ変更された時、検出器へ到達する原子数が減 少する.したがって横軸にマイクロ波の周波数、 縦軸に検出器へ到達した反水素原子の数をプロットすると図 1 (b)のようなグラフが得られ、ディッ プ位置から反水素原子の遷移周波数を知ること ができる.例えば基底状態の反水素原子のエネ ルギー準位は磁場の関数として図 1 (c)のように なっており、この手法を用いて赤の矢印で示した 反水素原子の基底状態の超微細構造分裂周波 数を求めることができる. 我々の実験系ではこの 値を 10<sup>6</sup>程度の精度で測定できるものと期待して いる [6].

3. 再結合による反水素原子の合成レート 分光実験を行うには、反水素原子を効率よく生成 することが不可欠である. 反水素原子の生成は主 に

$$\bar{p} + e^+ \to \bar{H} + h\nu$$
 (1)

$$+e^+ + e^+ \rightarrow \overline{\mathrm{H}} + e^+$$
 (2)

の 2 つの過程がある. これ以外にもレーザー光誘 起による放射性再結合やポジトロニウムを経由す る過程 [7] などがあるが, 我々の実験系では上 記の (1) 放射性再結合と (2) 3体再結合が起こ る. ここでρ。を陽電子密度, *T* を陽電子温度とす

 $\bar{p}$ 



図 2: 反水素原子生成の反応係数. 黒いライン は放射性再結合の場合, それ以外は陽電子密 度をパラメータとした3体再結合の場合.

れば反水素原子の生成レートは、それぞれの場合 $\rho_{e}T^{1/2}$ 、 $\rho_{e}^{2}T^{9/2}$ に比例する [8].

図2に反水素原子生成の反応係数を陽電子温 度の関数としてプロットしたグラフを示す.この値 に反陽子密度と陽電子密度をかけた値が実際の 反応レートとなるが,比較のために3体再結合に 関しては、ρ。をパラメータとして一つ分取り込ん だ形でプロットしてある.何れの過程でも陽電子 密度が高く、温度が低いほど生成レートは大きく なるが、我々が目指している領域(数 K~数十 K)では、3体再結合が支配的であり、陽電子温 度、密度に対して強い依存性をしめすため、低温 高密度な陽電子雲をいかにカスプトラップ中に準 備できるかが効率的な反水素原子合成の鍵とな る.

#### 4. 実験装置

図 3 に本研究で用いた実験装置の模式図を示 す. 我々のグループでは, すでに CERN の反陽 子減速器 (AD) から供給されるエネルギー5.3 MeV の反陽子を減速, 捕捉, 冷却し最大で 10<sup>7</sup> 個の冷たい (sub eV) 反陽子を蓄積可能な荷電



粒子トラップ (反陽子トラップ)を開発しており[9, 10]、ここに蓄積された反陽子をパルス状にして撃 ち出すことにより、カスプトラップ中へ大量 (105-10<sup>6</sup> 個) の反陽子を供給することができる.また 陽電子については、放射性元素である<sup>22</sup>Na から 放出される陽電子を、タングステン多結晶モデレ ータとバッファーガスにより減速し、荷電粒子トラッ プ中へためこむことができる陽電子蓄積器を開発 している [11]. この陽電子蓄積器は 50 秒おきに2 ×10<sup>5</sup> 個の陽電子をパルス状にして引き出すこと ができる.これらの反陽子および陽電子は輸送用 コイルによって作られた磁場にガイドされて、カス プトラップへと輸送される. さらにカスプトラップの 周囲を囲むようにシンチレーターが設置されてお り,反陽子の消滅によって放出されるパイ中間子 をとらえることにより、反陽子の消滅数及び消滅位 置を検出することができるようになっている.

#### 5. 反陽子の閉じ込めと装置の冷却機構

反陽子は物質との衝突により対消滅を起こし失わ れてしまう. 電極や真空槽の内壁へ衝突した場合 はもちろんであるが,たとえ電磁場により壁からう かして閉じ込めた状態であっても残留ガスとの衝 突は避けられず,その結果残留ガス分子に捕獲 されてしまった反陽子は消滅してしまうこの反応 レートを見積もってみると [12], 一般的には超高 真空と言われる 1×10<sup>-10</sup> Torr という真空度であっ ても,閉じ込め時間はわずか数秒程度しかない. 我々の実験では反水素原子の合成に数十秒オ ーダーの時間がかかると考えられており、このまま では反陽子が陽電子と再結合するまえに残留ガ スとの対消滅により失われてしまう.また残留ガス との衝突による反陽子の消滅による信号は、反水 素原子を検出する際にバックグラウンドとなること もあるため, 極力抑えたいところである. そこで真 空度の目標として, 10<sup>-13</sup> Torr 台 (反陽子閉じ込め 時間数千秒オーダー)を目標として,開発を行な ってきた.この真空度を実現するには、装置全体 を極低温 (4K程度)まで冷却することがほぼ唯一 の解と考えられるため、2台の冷凍機を用いて、真 空槽及び電極を冷却する機構を製作した.図4

(a) にカスプトラップのビーム軸に平行方向の断面図,(b) に(a) 中 A-A'で切断したビーム軸に 垂直方向の断面図を示す.開発時の大きな制約 として,すでにあるカスプ磁場発生用の超伝導磁 石に収まるサイズでありつつ,将来の反水素ビー ム取り出しの際の立体角をなるべく稼ぐため,電 極内径は極力大きくしたいという相反する要求が あった.そのため(b) に示されているように,わず か26 mmの隙間に外側から,断熱真空槽,スー パーインシュレーター,輻射シールド用銅パイプ, 電熱用銅バーとカラー内部真空槽が収められて いる[13].

図 5 に反陽子の閉じ込め時間の測定結果を示 す. 横軸は時間で縦軸はシンチレーターでカウン トした消滅反陽子数の積算値を表している. *t* = 0 で反陽子をカスプトラップ中に入射し, その後約 300 秒間閉じ込めたあと, 引き出してトラップ内に 残っている反陽子の数を数えている. したがって *t* = 300 付近でグラフが垂直に立ち上がっている部 分が閉じ込められていた反陽子数であり, その直 前の値が閉じ込め中に失われた反陽子数に対応 する. (a) は内部真空槽の温度が 6.8 K, 電極温



- (a) ビーム軸に平行方向の断面図.
- (b) (a)中の A-A'面で切断したビーム軸に垂直 方向の断面図.



図 5: カスプトラップ中に反陽子を閉じ込めた際の反陽子の消滅信号の積算値. (a) 真空槽温度 6.8 K, 電極温度 20.6 K の場合. (b) 真空槽温度 6.2 K, 電極温度 16.5 K の場合.

度が20.6 Kの時で,(b) は同じくそれぞれ6.2 K, 16.5 K の時の結果である. 装置が十分に冷えた 状態では反陽子の閉じ込め時間は約2000秒に 達しているが,わずかに温度が上昇するだけで, 閉じ込め時間は大幅に短くなる.

#### 6. 反水素原子の合成方法

図 6 (a) に反水素原子の合成及び検出に使われ る多重円筒電極の断面図, (b) に軸上での磁場 分布, (c) に電位分布を示す. はじめに φ2 で 示された電位分布がカスプトラップ内に用意され 図左側からエネルギー約 100 eV の陽電子が入 射される.入射に合わせて電位分布はφ」に変 更され,陽電子は電極 U2 付近まで進み,そこで 電位障壁によって跳ね返される.跳ね返った陽電 子が再び図左側へにげ出してしまう前に素早く電 位分布をすれに戻し,陽電子を電位井戸中へ捕捉 する. 多重円筒電極は約2Tの強い磁場中に置 かれているため、捕捉された陽電子はシンクロトロ ン放射により自動的に冷却され,電位井戸の底へ と落ち着く、この操作を40又は60回程度繰り返し 4~6×10<sup>6</sup> 個の陽電子をカスプトラップ中にため こむ. 同時に回転電場を印加し陽電子雲を動径 方向に圧縮する.この手法は一様磁場を用いた 荷電粒子トラップでは "rotating wall technique"と してよく知られている手法 [14] であるが, 我々は 不均一磁場をもつカスプトラップにもこの手法を適 用し [15] 10<sup>8</sup> e<sup>+</sup>/cm<sup>3</sup> という高密度の陽電子雲を 生成することに成功した. 次に電位分布をφ3 に 変更し反陽子の入射に備える. 反陽子入射に合 わせて電位分布を φ4 に変更し, 陽電子の時と



図6: (a) カスプトラップの多重円筒電極の断面図. (b) 軸上での磁場強度. (c) 軸上での電位分布.

同様に入射された反陽子が逃げ出してしまう前に, 素早く電位分布を φ3 に戻す. このようにして閉じ こめられた反陽子は陽電子との衝突により冷却さ れ、陽電子はシンクロトロン放射で冷却されること によって,互いの相対エネルギーは自動的に減 少していき、やがて再結合して反水素原子が生成 される. できた反水素のうち高励起状態でかつ図 右側へ飛んできたものは,図 6 (c) で FIT (field ionization trap) と示された領域にて,深い井戸を 生成する強い電場によって再電離される. 再電離 によって陽電子を引き離された反陽子はこの電位 井戸中へ捕捉される. 反陽子-陽電子の混合開始 から適度な時間経過した後に電位分布をゅっに 変更し, FIT 中に蓄積された反陽子を排出して, シンチレーターでその消滅信号を観測することに より生成および再電離された反水素原子の数を 得る.

#### 7. 反水素原子の検出

図 7 に電位分布を $\phi_5$  に変更し, FIT 内に蓄積 された反陽子を排出した時のシンチレーターのカ ウント数を示す. 横軸は時間で 0 は電位分布を  $\phi_5$  に変更した時刻を表している. 図 7 (a) は陽 電子無しで反陽子のみをカスプトラップ中に閉じ 込めたとき, 図 7 (b) は陽電子と反陽子の両方を 閉じ込めたときの結果である. いずれの測定にお いても陽電子の有無以外は全く同じ操作を行った にもかかわらず, 陽電子ありの場合は電位分布の 変更に同期したピークが現れ, なしの場合には現 れない. また陽電子雲を RF 電場にて加熱した場 合, たとえ陽電子と反陽子を同時に閉じ込めても 図 7 (b) のようなピークは現れなかった. このこと から反水素原子の合成がカスプトラップ中で行わ れていることが確認された.



図7:電位分布をφ<sub>5</sub> に変更した時刻を0として 前後10ミリ秒のシンチレーターのカウント数. (a) 反陽子のみをカスプトラップ中に50秒間閉 じ込めた場合.(b) 陽電子とともに反陽子を閉じ 込めた場合

さらに 5秒おきに電位分布を $\phi_3$ から $\phi_5$ へ変 更し, 5秒間に FIT 内に蓄積された反陽子数を数 える事によって,反水素原子の生成レートの時間 発展を測定した.結果を図8に示す.この測定より,  $3 \times 10^6$  個の陽電子に対し, $3 \times 10^5$  個の反陽子 を入射した場合,反水素原子の生成レートは時間 と共に増加し約 30 秒付近で最大値を迎え,その 後は減少していくことがわかった.また入射する反 陽子数を増やすと(減らすと)生成レートが最大 を迎える時刻が遅くなる(早くなる)という測定結 果が得られた.これは反陽子入射によって温めら れた陽電子の冷却に要する時間が,反陽子数の 増加(減少)に伴って長く(短く)なるためと考え られる.図8(b)は反水素原子の生成が盛んに起 こっている時間帯の反陽子の消滅位置分布,(c)



図8:(a) 反水素原子の生成レートの時間発展. (b) 0 s < t < 60 s における反陽子の消滅位置分 布.(c) 60 s < t < 120 s における反陽子の消滅 位置分布.

は生成レートが小さくなってからの消滅位置分布 を示している.(b)では反陽子の消滅位置分布が z = -150 付近, すなわち図 6(c)でちょうど陽電子と 重なり合う位置にある.一方(c)では分布はの幅は 広がり, かつ二山となっている.この結果は生成レ ートが 30 秒経過以降減少する理由は,反陽子-陽電子の軸方向の分離によるものであることを示 唆している.反陽子は時間の経過と共に残留ガス との衝突により,エネルギーを失い,図 6(c)で陽 電子が存在する領域の両サイドにあるポテンシャ ルの底へ落ちていき,陽電子との重なりを失って いくものと予想される.

# 8. 生成された反水素原子の束縛エネルギーと反水素原子の生成効率

本研究で用いた反水素原子の検出方法は,生成 された反水素原子の束縛エネルギーによって,検 出効率が変化する.したがってできた反水素原子 数の絶対値を見積もる場合,どのような束縛エネ ルギーの反水素原子ができているかを知る必要 がある. 図9 (b) に FIT の深さを (a) のように変 えて (電極のサイズや配置は固定なので,これは FIT 周辺の電場強度を変更していることに等しい) 測定した反水素原子の数を黒点で示す.また主 量子数 n が 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55 の反水素 原子に対する本実験系での検出効率の計算結 果を各線で示す (実際の実験系では磁場がある ため, n は必ずしもよい指標ではないが, 今は簡 単のためnを用いる). 各nに対する計算結果と実 験データは FIT 深さが 350 V の所で実験データ と重なるように規格化してある.

実験結果と計算結果を比較すると、合成された 反水素原子の主量子数が45から50付近である と考えられる.この結果を用いて、検出効率を見 積もり、生成された反水素原子の数を計算すると、 1回の試行あたり、約7000個の反水素原子ができ ていることになる.この条件の場合、入射した反陽 子数に対し、反水素になった割合は約2%であ った.さらに反陽子、陽電子数の比を変更すると、 最大で約7%の反陽子がが反水素原子に変換 されているという結果が得られた.



図9: (a) 反水素原子の束縛エネルギー測定の ために用いた電位分布.(b) 反水素原子数の測 定結果 (黒丸) と主量子数 n が異なる反水素原 子の検出効率の計算結果 (線).

#### 9. まとめと展望

カスプトラップ中での反水素原子合成の成功は分 光実験へ向けて大きな一歩といえる.すでに分光 用のマイクロ波キャビティーや電磁石の開発は進 んでおり、各コンポーネントは完成しつつある.今 後はより効率的な反水素の合成を目指しつつ、い かに分光に適した状態の反水素を作るかというこ とが課題になってくると思われる.すなわち、より 低エネルギーで、基底状態に近い反水素を合成 する方法が鍵となるであろう.

#### 10. 謝辞

本研究は著者の博士論文のテーマとして山崎泰 規教授の指導のもと行われたものであり、ここに深 く感謝いたします.また毛利明博名誉教授、黒田 直史助教には実験の様々な面でご指導いただき ました.更に本研究の成果は数多くの共同研究 者の方々、ビームを供給してくれた CERN の加速 器グループの方々の協力により得られた成果で 有ることをここに記して感謝いたします.

#### 参考文献

- M. Amoretti, C. Amsler, G. Bonomi, A. Bouchta, P. D. Bowe, *et al.* Nature **419**, 456 (2002).
- [2] G. Gabrielse, N. S. Bowden, P. Oxley, A. Speck,
  C. H. Storry, *et al.* Phys. Rev. Lett. **89**, 213401 (2002).
- [3] A. Mohri and Y. Yamazaki, Eur. Phys. Lett. 63, 207 (2003).
- [4] Y. Enomoto, N. Kuroda, K. Michishio, C. H. Kim, H. Higaki, *et al.* Phys. Rev. Lett. **105**, 243401 (2010).
- [5] 黒田直史, 檜垣浩之, 山崎泰規. 日本物理学会誌 66, 594 (2011).
- [6] ASACUSA collaboration. Technical report, CERN-SPSC 2005-002 (2005).
- [7] C. H. Storry, A. Speck, D. Le Sage, N. Guise,
   G. Gabrielse, *et al.* Phys. Rev. Lett. **93**, 263401 (2004).
- [8] M. E. Glinsky and T. M. O'Neil. Phys. Fluid B 3, 1279 (1991).
- [9] N. Kuroda, H. A. Torii, K. Yoshiki Franzen, Z. Wang, S. Yoneda, *et al.* Phys. Rev. Lett. **94**, 023401 (2005).
- [10] N. Kuroda, H. A. Torii, M. Shibata, Y. Nagata,
  D. Barna, *et al.* Phys. Rev. Lett. **100**, 203402 (2008).
- [11] H. Imao, M. Tarek, K. Michishio, Y. Enomoto, T. Shimoyama, *et al.* Hyperfine Interactions 194, 71 (2009).
- [12] J. S. Cohen. Phys. Rev A 56, 3583 (1997).
- [13] M. Shibata, A. Mohri, Y. Kanai, Y. Enomoto and Y. Yamazaki. Rev. Sci. Instrum. 79, 015112 (2008).
- [14] R. G. Greaves and C. M. Surko. Phys. Rev. Lett. 85, 1883 (2000).
- [15] H. Saitoh, A. Mohri, Y. Enomoto, Y. Kanai, Y. Yamazaki. Phys. Rev. A 77, 051403 (2008).

### Synthesis of Antihydrogen in a Cusp Trap

Yoshinori ENOMOTO

We succeeded to synthesize antihydrogen atoms in a Cusp Trap which consists of a non-uniform cusp-shaped magnetic field and nested electrostatic potential. One of an important feature of the trap is that spinpolarized antihydoregn atoms can be extracted, which open a new path to high precision spectroscopy of antihydrogen atoms.

### 短波長自由電子レーザーによる原子分子光物理 第三回 FEL によるホロー原子固体の研究と今後の研究の展開

米田仁紀
 電気通信大学レーザー新世代研究センター
 〒182-8585 調布市調布ヶ丘 1-5-1
 yoneda@ils.uec.ac.jp
 平成 24 年 1 月 28 日原稿受付

特定のレーザー媒質を用いない「自由電子レーザー」を用いることによって、高いエネルギーを持つコヒ ーレントな光子と物質との相互作用に関する研究に新しい世界が拓ける.本稿では、2006年から稼働を 開始した極端紫外レーザー(SCSS加速器)を用いたレーザー光と固体との相互作用実験によって、従来 の高出力レーザーを用いたプラズマ研究とはどのような点で異なる研究が展開されつつあるかについて 紹介する.また、極端紫外レーザーに関する研究の発展を受けて 2011年に我が国で初めて発振した X 線自由電子レーザーを用いた研究の展開についても述べる.

#### 1. はじめに

「光学レーザー」では、反転分布を起こさせる媒 質によって誘導放出を起こし、コヒーレント光を生 み出す.一方、磁場によるモジュレーションを自由 電子にかけて放射を起こさせる「自由電子レーザ ー」は、媒質がないため、短波長化に対して圧倒 的な優位性を持つ.また、原子遷移を用いないの で媒質の共鳴波長範囲に限定されず、基本的に はどの波長においても連続的に可変できるため、 物質の共鳴状態を利用および探索するのに最適 なツールとして期待されている.

我が国では、2006 年に兵庫県播磨に極短紫外 域で発振可能なレーザー(SCSS 加速器)が完成 した.これまで大まかに得られているパラメータを 以下に示す.[1]

波長 51~61 nm パルス幅 <100 fs エネルギー/パルス 20 μJ 集光性能: 6 μm(共用光学系では 20 μm)

#### 2. 極端紫外光高強度レーザー照射での 相互作用

光学領域のレーザーを固体物質に照射すると,

自由電子との相互作用で吸収が起きる. 金属物 質をターゲットとした場合, その自由電子密度は  $10^{23}$  cm<sup>-3</sup>程度ある. この値は, 光学波長での光の 遮断密度  $n_c$ (=  $4\pi^2 c^2 m_e \varepsilon_0 / \lambda^2 e^2$ , c は光速,  $m_e$  は電 子質量,  $\varepsilon_o$  は真空の誘電率,  $\lambda$ は波長, e は単電 子電荷量)を超えているために, 光の相互作用は, 振動電界での電子加速=>衝突による減衰を通 して, 吸収となる. 誘電体の場合でも, 照射強度 が上がりイオン化による電子がこの遮断密度を超 えれば, 同様なことが起きる.

一方, λ<80 nm以下の波長になると,遮断密度 は固体の原子密度を超えるため, Al などの三価 イオン金属であっても伝導帯の自由電子が吸収 の主となることがなくなり,さらに内殻の電子の光



**Fig.1** 光学レーザー(左)とEUV, X線レーザー(右) での相互作用過程の差



Fig.2 各固体物質での吸収長の光子エネルギー

励起・イオン化が主な吸収過程となる.このことが, 高強度レーザー光の相互作用に大きな影響を与 えている.例えば, Fig. 1 に見られるように,通常 の光学レーザーの場合,固体に照射されるとイオ ン化を伴いながら膨張が起き,固体密度より低い 噴出した部分で臨界密度点となるために,光は固 体密度に直接作用することはなくなる.臨界密度 で自由電子が吸収したエネルギーが熱流となっ て固体密度面に輸送されるわけである.一方,極 端紫外光の場合においては,たとえ固体へのエ ネルギー付与によって表面の膨

張が起き, さらに自由電子をも つプラズマがアブレーションを起 こしても, 入射された EUV 光は 常に固体まで達し, 吸収され続 ける. このことは, 吸収プロセス を単一のものに限定でき, 対象 の非熱化にとっては重要な転換 となっている.

媒質の応答をより詳細に考え ると,自由電子を吸収媒体とし た場合には,その周波数応答は  $\omega = 0$ に極がある形となっている. 光学波長での周波数応答を考 えれば,プラズマ周波数以上の 部分では周波数依存があまりな く,緩やかな応答になる.一方,極端紫外レーザ ーでは,原子の内殻電子のイオン化・励起による 共鳴的な吸収が主となるため,ある共鳴周波数の 周りに Lorentz 的に広がりを持つ形になる.

さらに、極端紫外領域で特筆すべきこととして、 最も吸収長が短い領域であることがあげられる (Fig. 2). このことは、同じ強度の照射条件でも単 位体積あたりのエネルギー付与量が大きくなるた め、エネルギー密度が高くなりやすいことを表して いる.例えば、50 nm 近傍の光を金に照射すると、 その吸収長は  $2 \times 10^8$  m であり、10  $\mu$ J の EUV 光 を 6  $\mu$ m $\phi$ に集光すれば、 $1.7 \times 10^7$  J/cm<sup>3</sup>のエネル ギー付与となる. この時の圧力は 100 Mbar を超え ることになる.

#### 3. 内殻励起状態の生成速度と緩和過程

内殻電子が励起された状態は、よく知られてい るように非常に不安定で、Auger 効果、特性 X 線 放射などを通して高速に緩和が起きる.この過程 で生じた電子は、光励起されたようなエネルギー が伝導帯直上に来るわけではなくエネルギーが 高いため、新たな電子衝突によるイオン化も起き る.逆に、電子が金属などの自由電子を多く持つ フェルミ面に直上に励起された場合には、これら 大量にある電子との衝突によって緩和するという



Fig.3 高エネルギー光子による内殻励起状態の緩和過程

ことも起きる.このような複雑な緩和の中で代表的な後過程の例を Fig.3 にまとめる.

緩和が遅いと仮定すると,励起速度は以下の 式で与えられる.

 $(dN/dt) / N_0 \sim \alpha I/h\nu/N_0 \quad (1)$ 

ここで,  $N_0$  は固体密度,  $\alpha$  は吸収係数, I は照射 強度, hvは光子エネルギーである. 前述したよう に EUV 領域は最も吸収係数が高く、光子エネル ギーも X 線ほど高くないため,低い強度でも非常 に速い励起速度になる. 例えば, 現在 SCSS 加速 器で得られているパラメータを代入すると 10<sup>13</sup> W/cm<sup>2</sup>程度でもAuなどを対象にすれば1fs台の 励起速度が達成できることになる.この時間は、固 体を構成している原子がその格子状態を変化さ せるより十分早く,かつ, Auger 過程などのポスト 過程より励起速度が勝ることを示している.このこ とも, FELの達成により, 短パルス化および高集光 が可能になった今,始めてできる領域であり、この 極限状態を評価,理解,利用することが, EUV-FEL の発展の可能性の1つを示すことにも なると考える.

もう一つの FEL 照射の特徴としては高い同調性 にある.これは高い光子エネルギーで照射された にも関わらず,励起後の状態を準安定に近い状 態にできる可能性がある. このことは, 短波長 FEL が計画された当初には、あまり考慮されていなか ったことに思える. なぜなら, 高強度 X 線を照射さ れた物質では,電子が高速に抜けるため,急激に 電荷中和が崩れ、クーロン爆発を起こすと考えら れていたためである.しかし, FEL の持つエネル ギー幅で 10<sup>-4</sup> 程度の波長同調性を考えれば, 励 起後の余剰エネルギーを1000 K 程度に抑えるこ とができ、励起電子をフェルミ面の直上に位置さ せることが可能である.この時,通常の金属を考え れば,1原子に付いて少なくとも1つの電子が価 電子帯にすでに入っており、この励起された電子 の持つ余剰なエネルギーは高速な衝突緩和によ り,再分配され,低温状態を保つことも可能と考え られる. これらについて, Kitamura [2]は非制限の Hartree Fock 計算を用いて, Li-9 個のクラスタで は少なくとも 30 %の電子が内殻から伝導帯直上 にイオン化したとしても、全体として結合エネルギ ーは下に凸の安定性を示し、Auger などのポスト 過程までは安定な"固体"状態を持つことを明らか にしている.

#### 4. 内殻励起で期待される動的光学素子

前述したように、内殻電子励起により穴が開い た状態で,かつ,原子自身は秩序を保ったまま存 在するとなると,吸収端などの急峻なエッジ構造 は保たれるが,照射前に比べて,その吸収端のエ ネルギーは変化する.大まかに言えば、内殻に電 子がない分,他の電子は原子核により引き寄せら れるため, ポテンシャルエネルギーが増加して, 吸収エッジが高エネルギー側にシフトする (Fig. 4). 極端紫外, X 線領域になると, 多くの物質は 屈折率が1 近傍になり、あまり大きな変化を見せ ないが,もっとも大きな変化をしている吸収エッジ が照射1 fs 後に変化すれば, 高速で大きな透過 率変化を誘起できるはずで,これに伴う光学屈折 率の変化も期待することができる. さらに, 再結合 型もしくは特性 X 線型レーザーを考えた場合, 低 温性を保った状態は利得が高く取れるので非常 に有利であり、X線自由電子レーザー励起レーザ ーも実現できるであろう. 内殻励起後に起きる Auger 過程などは、上述の秩序性を破壊するかも しれないが, 逆に短パルス応答に寄与することに なる.これら動的な光学特性の変化を極端紫外光, X 線領域で生み出せれば、まだ改善の余裕があ る時間的インコヒーレントな部分に対しても, X 線



Fig. 4 秩序性を保たれた内殻励起状態でのエネル ギー準位の変化

自由電子レーザー自身が解決の糸口を与えることになると思われる.

光学分野で非常に発展している固体の非線形 光学過程を使う素子は,極端紫外域ではどうなる か?その1つの指標は,すでに光学領域で使用 されている実験スケーリングから考えることができ る.例えば,2光子吸収係数は,以下のようになっ ている.

$$\beta = K \frac{\sqrt{E_p}}{n_0 E_g^3} F_2 \left(\frac{\hbar\omega}{E_g}\right) \quad (2)$$

ここで、 $E_g$  は固体のバンドギャップ、 $\hbar\omega$ は光子エネルギー、 $n_0$ は屈折率、 $E_p$ は Kane エネルギー (ほぼ 21 eV の一定値)、K は 1 のオーダーの 比例係数である、 $F_2(x)$ は、

$$F_2(x) = \frac{(2x-1)^{3/2}}{2x^5}$$
 (3)

この式は、バンドギャップの半分の光子のエネ ルギーのところで効率的に吸収が起きること を意味しており、逆にどのバンドギャプであっ ても *F*<sub>2</sub>(*x*)の部分はほぼ一定になる.したがっ て、全体としては、バンドギャップエネルギー 3乗で小さくなることを示している.一方、実 際にこの非線形吸収が陽に観測されるには、線 形吸収に勝る必要がある.Fig.2で示したよう に、極端紫外領域では 10<sup>6</sup>~10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup>の高い線 形吸収係数を持つ.そのため、最も低い場合で も現状の SCSS 試験加速器や FLASH などの



Fig. 5 各光子エネルギーでのこれまで達成された 集光強度と非線形光学スケーリング



Fig.6 Auger 効果を含めた簡単な内殻励起モデ

EUV レーザーでは、主たる過程とはなりにく いことがわかる. Fig.5に、各波長領域でのこ れまで達成されてきた照射強度の大まかな値 を示す. 図内の上の点線は上式の(2)のスケー リングによる非線形過程が主となる強度を表 している.

これに対して,可飽和吸収などの非線形光学 素子は,媒質内に照射効果が溜め込まれるため に,違った指標になる.例えば,Fig.6のよう な系を考えると,各準位密度変化は以下の式で 与えられる.

$$\frac{dI}{dx} = -\sigma_{01} (N_0 - N_1) I \qquad (4)$$

$$\frac{dN_0}{dt} = -\frac{\eta_{01}}{h\nu} \alpha_{01} I + \frac{N_2}{\tau_{20}} \qquad (5)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{\eta_{01}}{h\nu} \alpha_{01} I - \frac{N_1}{\tau_{12}} \qquad (6)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = -\frac{N_1}{\tau_{12}} - \frac{N_2}{\tau_{20}} \qquad (7)$$

ここで $\alpha$  は小信号吸収率, $\eta$ は量子効率,tは 緩和時間を表している.この場合,以下の式で 定義される強度より高い場合,基底準位密度  $N_1$ の減少が起こり, $t < t_{12} + t_{20}$ 内では,この減 少量は積分されたものになる.

$$I > \frac{N_1 h \nu}{(\tau_{12} + \tau_{20}) \alpha_{01 \eta_{01}}} \tag{8}$$

光による媒質変化が時間的に積分されていく ことは、ピーク強度のみによる非線形とは異な り、積分時間内の光波としての完全なコヒーレ ンス性を求めない.したがって、実質的には光 源に対してより緩和された条件となっている. 密度を標準的な固体のものと仮定し吸収係数 を前述と同じ $\alpha = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ とした場合の必要強 度は,前述のものに比べけた違いとなることが Fig. 5 からもわかる. (図中の下側の破線がこ の必要強度になる.)

これらの見積もりを受け、SCSS 試験加速器 においてはこれまでに、Sn, FLASH において Al でそれぞれ可飽和吸収過程が観測されてい る.特に,SCSS で発振している波長領域では、 大きな小信号時吸収係数を持つため,可飽和状 態に向かう中で高速な透過率変化を示すこと が確認された[3]. このことは、物質内の状態 分布にも依存している.基底状態,励起状態, そこからの緩和状態,さらに励起状態から励起 された準位という4つの準位モデルで速度方 程式を立て,実験を再現するようにパラメータ を調整した計算結果の一例を Fig.7 に示す. こ の図は、試料内部の EUV 光の強度分布の時間 発展を示しており、これを見ると、 試料内をブ リーチングしている様子がわかる.特に,浸入 しているフロント部の強度分布 I(x)は、初期か ら変わることがなく、いわゆる非励起状態での 指数関数的な分布をしている. ( $I(x) \sim \exp[-\alpha x]$ , *α*は線形吸収係数, *x*は空間座標) 一方, ブリ ーチングする速度vは以下の式で与えられる.



Fig.7 高強度 EUV レーザー照射固体中の

$$v = \frac{l}{hv} \frac{1}{N} \qquad (9)$$

ここで、Nは試料の原子密度、I は照射強度で ある.以上のパラメータから、透過率が上昇す るのに要する時間は $\tau = Nhv/I\alpha$ となることが わかる.極端紫外領域の中では、吸収係数 $\alpha$ が大きいために、現状の SCSS- EUVFEL(10<sup>13</sup> W/cm<sup>2</sup>程度)でも3 fs のスイッチング時間、1 桁強度が上がればアト秒の領域に入ることが わかる.

#### 5. 内殻電子励起状態の観測

固体と高強度短波長 FEL 光の相互作用ででき る内殻電子励起状態を利用するには、その励起 状態でありながら秩序性を保てるのかどうかが重 要なポイントになる.特に,内殻から励起された電 子が,熱的な自由なものになるのか,非熱的な "静かな"状態になるのかについては、実験的に 確かめていく必要がある. そこで, 光学超短パル スレーザーを用いた EUV-FEL ポンプ, 光学レー ザープローブ計測を行った.この測定は、通常の 光学領域のポンププローブ計測と違い、2つのま ったく違うレーザーを同期させた計測になるため に,困難さが生じる.事実,FEL に供する電子加 速器の RF 発振器とプローブに用いるレーザーの 繰り返し周波数を高精度に合わせているが,いま だに 200 fs 程度のジッターが生じている. この問 題を解決するために、プローブとなる超短パルス レーザーを白色化し、同時に時間的にチャープさ



Fig.8 EUV 照射物質の複素誘電率の時間変化

せたものを利用することで,シングルショット計測 を行う方法が提案され,実施されている. Fig. 8は, その観測システムにより、Au の薄膜を試料とした 場合の, 波長 55 nm の EUV-FEL 照射後の複素 誘電率の時間変化を示している.この結果,光励 起された電子は,完全に熱化された連続状態に 入るのではなく,原子の近傍で共鳴状態を作る局 所化状態にあることが明らかになった.このことは, 23 eV(波長 55 nm に対応)という仕事関数(4.9 eV)よりはるかに大きな光子エネルギーで励起さ れた固体にありながら,励起された電子は非常 に静かな状態が生成できていることを意味し, 前述したような内殻励起されたが秩序性が保たれ ていることの実験的な確証が得られたことを意味 している.また,この状態は,計測された周波数幅 から考えて、25 fs 程度の寿命があり、一般的に言 われている Auger 過程が起きるまで保たれている こともわかった.

#### 6. まとめ(XFEL に向けて)

極端紫外光領域では、その吸収係数が高いこと から比較的低い強度(10<sup>13</sup> W/cm<sup>2</sup>)でも、可飽和な どの非線形光学効果が観測することが可能であ った.これを keV 領域の X 線で起こそうとすると、 吸収長の増加にともない必要強度は 10<sup>18</sup> W/cm<sup>2</sup> を超えるものが必要になる.また、予想される吸収 係数変化、屈折率変化は、低温状態での吸収端 スペクトルから 10<sup>4</sup> 程度に抑えられることがわかる. しかし、この変化量は、赤外領域のファイバーレ ーザーで用いられるファイバーグレーティングで の屈折率変調量程度であり、相互作用領域が長 く取れることから、小さな屈折率差を長く作ること で、X 線領域でも魅力的な動的光学素子を生み 出すことができるであろう(たとえば、選択された波 長のみ強度が強くなった場合に反射する、など). また,低温性が保たれることから,レーザー励起レ ーザーとしても高いゲインが期待される.このよう に,光学レーザーと類似の光学素子が X 線で開 発されれば, X 線自由電子レーザーの光を変え て,より質の高い光子での応用研究ができるよう になる.夢の光学素子の開発をめざして, X 線, 極端紫外光の相互作用研究が今後ますます発展 していくことに期待したい.

#### 参考文献

[1] T. Shintake et al., Nature Photonics **2**, 555 - 559 (2008).

[2] H. Kitamura, Theoretical potential energy surfaces for excited mercury trimers, Chem. Phys. 325, 207 (2006).

[3] H. Yoneda et al., Optics Express **17** Issue 26, 23443 (2009).

[4] T. Ohashi, Master Thesis of University of Electro-Communications (2012).

# Research on hollow atom solid produced by intense Free Electron Laser pulse

#### Hitoki Yoneda

Interaction of intense laser light of high energy photon with condensed matter opens new science in extreme state of materials. In this paper, high density matter which consists of innear-shell ionized atoms is considerd. Specially, it is focus into low temperature but nonequilibrium condition in metals produced by well-tuned resonant light. Recent experimental results are introduced and some of the future experiments with X-ray FEL are mentioned.

### 衝突論ノート

# IX. 複素エネルギー状態は実在するか

### - 共鳴過程を裏で操る幽霊 -

#### 島村 勲

#### 理化学研究所原子物理研究室

shimamur@ribf.riken.jp

平成 24 年 2 月 15 日 原稿受付

#### 1 非物理的な複素エネルギー状態

もちろん, 複素エネルギーなど実在するわけ がありません.量子力学の初歩として,物理量 の測定値は必ず実数で,したがってその演算子 は必ずエルミートだと教わります[1,2].しかし, 共鳴状態は複素エネルギーをもつなどというあ り得ないつぶやきも,確かに耳にします.でも, 直ちに真に受けないことです.そもそも,物理現 象の議論に複素数や無限大などが現れたら,な ぜそんな変なものが出てくるのか,その真意は 何か,しっかり確認する習慣が肝心です.

先に打ち明けてしまえば,これは想像の世界 の話です.この世のものではありません.おと ぎ話なら流暢な日本語を犬猫がしゃべり,エネ ルギーが複素数になり,何でもありです.「共鳴 状態」(resonance state)と呼ばれる複素エネル ギー $\mathcal{E}$ の状態の波動関数 $\Psi(\mathcal{E})$ は遠方で際限なく 増大してしまう,量子論で許されない非物理的 な「お話」です(第5節). なぜそんなバカ話にう つつを抜かすのか.目的は、実エネルギーの現実 世界をしばし忘れて空想の世界に浸り,夢と現 実の境から再び真の現実に戻り, つまり複素エ ネルギーの虚部をだんだん小さくした極限とし て実在の物理現象を見直すことによりその理解 を深めることにあります.初めて外国を経験す ると我が国をより良く分かる、そう、あれ、世界 の中の日本, 複素エネルギー平面内の実軸, そ んな見方をすると,非物理的,非現実的な共鳴 状態  $\Psi(\mathcal{E})$ と特異な,しかし現実の物理現象「共 鳴過程」とが密接に結びつくのです(第5節).

この共鳴過程では断面積のエネルギー依存性 に特徴的な鋭い構造が現れます.これは原子分 子過程に限りません.1930年代からすでに議論 のある共鳴過程ですが,今や時宜を得た話題と してあちこちの論文誌,レビュー誌に特集号が 組まれています[3,4].広範な分野で多様な難し い議論や応用が発展していて,それをすべて追 うのはもはや非常に難しい現状です.

今回は共鳴理論を入門的に解説します.実は 以前にも本誌に共鳴の解説を書きましたが[5], それとは少し異なる諸側面に光を当てるつもり です.いくつかの物理量に共鳴特有のローレン ツ分布が現れます.なるべく本稿だけで閉じる よう,文献[5]との多少の重複はお許しください.

#### 2 「共鳴状態」の定義いろいろ

「共鳴状態」 $\Psi(\mathcal{E})$ は非物理的な複素エネルギー 状態と述べました.しかし,違う定義もあります. 現実の過程は波動方程式  $H\Psi(E) = E\Psi(E)$ を実 エネルギーEで正確に解けばその解,つまりハ ミルトニアンHの固有関数 $\Psi$ に情報がすべて含 まれているはずです.共鳴過程も例外ではあり ません.共鳴過程を表すこの実エネルギー固有 状態 $\Psi(E)$ も「共鳴状態」と呼ばれます.これは無 限遠で有限な,物理的に妥当な波動関数で,何 らかの「過程」を表すので当然,連続状態です.そ のくせ,狭いエネルギー領域内,狭い空間領域 内でのみ振幅が大きい束縛状態まがいの波動関 数であることが共鳴過程を表す $\Psi(E)$ の特徴で, 無限遠まで波打つすそ野部分の振幅はそれに比 べて小さいのです.この共鳴状態を準束縛状態 (quasi-bound state)とも呼びます.

振幅の小さなすそ野部分を切り捨てて束縛状 態型にし,大振幅部分も多少変えた近似関数 も「共鳴状態」と呼びます.これもしばしば準束 縛状態と呼ばれます. $\Psi(E)$ や $\Psi(\mathcal{E})$ と違って 争は 波動方程式を正確には満たしません. の作り方 は一義的に決まらず,明確には定義できません. 2 電子励起自動電離状態はこの種の「共鳴状態」 です.この状態 のが断面積の異常なエネルギー 依存性を引き起こす共鳴過程の源なのです.

これら「共鳴状態」のうちどれを意味するのか, それぞれの場合ごとに前後の脈絡,論理の筋道 に従い判断する必要があります.さらにやっか いなことに,共鳴状態を経るわけでもないのに 共鳴散乱と呼ばれる過程もあります(第10節).

#### 3 共鳴状態と摂動

束縛状態型共鳴状態  $\Phi$  を固有関数とする近似 ハミルトニアン  $H_Q$ を考えることもできます.そのとき,正しいハミルトニアン H はこの近似ハ ミルトニアン  $H_Q$ に摂動  $H' = H - H_Q$  が加わっ た形を取ることになります.つまり,

$$H_Q \Phi = E_Q \Phi, \tag{1}$$

$$H\Psi(E) = (H_Q + H')\Psi(E) = E\Psi(E) \qquad (2)$$

と書け,H'を弱い摂動と考えられ, $\Psi(E)$ の大振 幅部分では $\Phi \simeq \Psi$ ということです.

決まった実エネルギー  $E_Q$ をもつ物理的「共鳴 状態」 $\Phi$  は束縛状態型なので遠方への浸み出し は無く,壊れることはありません.一方,現実の 準束縛的連続状態である「共鳴状態」 $\Psi(E)$ は一 定の振幅で遠方まで到達し,これはいずれ壊れ ることを意味します.摂動 H'が壊すのです.

例えば,ヘリウム原子の電子1,2とも1s軌 道を占めることを許さない演算子(付録参照)

$$Q = \{1 - |1s(1)\rangle < 1s(1)|\}\{1 - |1s(2)\rangle < 1s(2)|\}$$

をハミルトニアンに施した  $H_Q = QHQ$ につき固 有値方程式(1)を解くと多くの2電子励起自動電 離状態エネルギー  $E_Q$ を良い近似で得られます. H'の効果によりチャネル  $\text{He}^+(1s) + e^-$ との結 合( coupling , 混ざり合い )が起こり , 自動電離 状態  $\Phi$  が実際に徐々に電離するのです . 詳しく述べませんが,有名なファーノ(Fano) 論文[6]でも,規格化された適当な束縛状態型の  $\Phi$ と共鳴を含まない適当な近似連続状態をこの 方式で結合させて共鳴公式を導いていると解釈 できます.状態 $\Phi$ への射影演算子 $Q = |\Phi> < \Phi|$ により $H_Q = QHQ$ と書けば,式(1)は文献[6]の 近似共鳴準位を表す期待値の式( $\Phi|H|\Phi$ ) =  $E_Q$ と同等なことが示せるからです(付録参照).

狭い空間領域内で $\Psi$ の振幅が大きいというこ とは、時間依存描像ではこの領域に滞在する時 間が長く、中間状態として長寿命状態ができる ことを表し、 $\Phi$ はこの中間状態を近似すると言 えます.ポテンシャル散乱なら入射粒子が場に 捕えられた状態、2体衝突なら衝突粒子同士が 結合した衝突複合体がそれで、その状態が長く 続くのです.これは衝突終了までの時間衝の長い、衝突による時間の遅れ(time delay)  $\Delta t(E)$ が大きいということです(第8節).中間状 態が長寿命なら実質的相互作用が強くなり、そ の過程の断面積 $\sigma(E)$ に強い影響を与えます.無 限にではないけれども長い有限寿命をもつ状態 が形成されるのが共鳴過程の本質です.

実在の準束縛状態の寿命  $\tau$  が長ければ長いほ どそのエネルギー準位(共鳴エネルギー) $E_r$ の測 定に長い時間をかけられ,測定精度を上げられ ます.エネルギーと時間の不確定性関係により, 準束縛状態準位測定の原理的精度限界は

$$\Gamma = \hbar/\tau \tag{3}$$

の程度と期待されます .これが共鳴幅(resonance width)と呼ばれる準束縛状態準位の原理的なあいまいさの目安で,この準束縛状態が当該過程に与える影響,共鳴現象は $E = E_r$ の周り,幅 $\Gamma$ ほどに亘ると期待され,実際,第5節以降でそれを示します.準位自体のあいまいさを具体的に表す式も導きます(第9節).

 $H_Q$ の固有状態  $\Phi$  は束縛状態なのでそのエネ ルギー  $E_Q$ にあいまいさはありません. 摂動 H'が共鳴幅  $\Gamma$ を引き起こすとともに, $E_r$ を $E_Q$ から わずかな量  $\Delta E = E_r - E_Q$  だけずらすのです.

散乱過程とは違う例,シュタルク効果を考え ます.ハミルトニアン $H_Q$ ,波動関数 $\Phi$ ,束縛状 態準位 $E_Q$ で表される孤立原子に静電場をかけ ます(図1).その摂動H'により,エネルギー準 位がわずかにずれて $E_r = E_Q + \Delta E$ になります. 極端に強い電場でない限り、このずれ $\Delta E$ は摂動 論で良く近似できます.しかし、図1から分かる ように、いかに弱い電場でも図のz軸正方向の 十分遠方で全ポテンシャルが $E_r$ より低くなり、 トンネル効果で波動関数はポテンシャル障壁の 外へ浸み出し、束縛状態は準束縛状態に変わり ます.つまり、電場により幅 $\Gamma$ が生まれ、寿命が 有限になります.準束縛状態準位は固有値問題 で決まるわけではなく、固有値に対するふつう の摂動論は使えないはずです.それにも拘わら ず測定されたシュタルク準位が摂動近似で精度 良く再現できる事実から、準束縛状態準位の摂 動論の妥当性を支持する数学が発展しました、



図1. 静電場により束縛状態準位 $E_Q$ が準束縛状 態準位 $E_r$ に変わる様子.シュタルク効果で準位 がずれ,トンネル効果で自動電離する.

#### 4 いろいろな複素エネルギー

有限寿命で壊れる系はこのシリーズで以前に も扱いました [7].陽電子消滅のように流れの保 存則を満たさない現象を虚数ポテンシャル $iV_{Im}$ で表せるという話でした.例えば,電子-陽電子 系束縛状態,ポジトロニウムの波動関数はクー ロン相互作用だけ考えれば水素型ハミルトニア ン $H_Q$ の固有関数  $\Phi = \psi(nl)$ で,固有エネルギー  $E_Q$ は水素型  $-6.8 \text{ eV}/n^2$ です.しかし,対消滅を 起こすポテンシャル $H' = iV_{Im}$  ( $V_{Im} < 0$ )を加え たハミルトニアンHはもはやエルミートではな くなり,エネルギー固有値は複素数になります. この対消滅ポテンシャルはクーロン相互作用に 比べて非常に弱いので,複素エネルギーの虚部 ( $-\Gamma/2$ とします)は1次摂動論により

$$-\Gamma/2 = \langle \psi(nl) | V_{\rm Im} | \psi(nl) \rangle \tag{4}$$

と書けます.時間依存波動関数 $\Psi(\mathbf{r},t)$ は時間非

依存波動関数 $\psi(nl)$ に因子  $e^{-iEt/\hbar}$ を掛けて得られ[7],これが表す存在確率密度  $P(\mathbf{r},t)$ は

$$P(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^{2}$$
  
=  $|\psi(nl)|^{2} |\exp\{-i(E_{Q}-i\Gamma/2)t/\hbar\}|^{2}$   
=  $|\psi(nl)|^{2} \exp(-\Gamma t/\hbar)$  (5)

と時間定数  $\tau = \hbar/\Gamma$  で  $e^{-t/\tau}$ と減衰し, 実エネル ギー準束縛状態の寿命  $\tau$ と共鳴幅  $\Gamma$  の関係 (3)と 整合します. 複素エネルギーの虚部を  $-\Gamma/2$  と 書けばその  $\Gamma$ が共鳴幅の意味をもつということ です. 減衰レートは  $\tau^{-1} = \Gamma/\hbar$  と書けます.

以上,有限寿命状態の減衰を表すため導入した虚数ポテンシャルによりハミルトニアンが非 エルミートになり複素エネルギーを生じました. 一方,第1節で触れ,第5節で詳しく扱うのは, 現実の実数ポテンシャルによるエルミートなハ ミルトニアンの波動方程式(2)で人為的に複素数 にしたエネルギーで,特定の条件を課すと共鳴 に関わります.どちらの複素エネルギーも同じ 有限寿命という物理的意味をもちます(第5節).

複素エネルギーはまた別の理論からも出てき ます.現実のハミルトニアンで座標変数に因子 e<sup>ia</sup>を掛けて複素数に変えてしまう人為的操作 で,複素座標法とか,偏角を a だけ回転するの で複素座標回転法などと呼ばれる手法です.そ の結果,ハミルトニアンは当然非エルミートに なり,パラメータ a に依存する複素エネルギー が出てきます.その中から理論的にあるていど 裏付けされた手続きにより「共鳴状態を表す複 素エネルギー」だけを選び出すのです.有限距離 内に収まる束縛状態型関数を扱えば済むので計 算に大変便利な手法です.その一方,得られる のは複素エネルギーそのものだけで,散乱振幅 や断面積などの観測量は出せず,現実の過程に 共鳴がどう影響するか知る由もありません.

#### 5 複素エネルギーと共鳴公式

中心力場による質量 m,波数 kの粒子の散乱 で部分波lの時間依存動径波動関数は大きな rで

$$\begin{split} & u(r,t;k) \sim e^{-iEt/\hbar} \sin[kr - l\pi/2 + \delta(k)] \\ & \propto e^{-iEt/\hbar} [e^{-i(kr - l\pi/2)} - S(k) e^{+i(kr - l\pi/2)}] \quad (6) \\ & \textbf{と書けます}[7] \ . \ \textbf{ccc} S 行列 S(k) \ \textbf{,} 位相のずれ \end{split}$$

 $\delta(k)$ はlに依存しますが,うるさいので以下,添 え字lを略します.流れの保存のためには外向き 波の振幅の絶対値|S(k)|が内向き波の振幅(の 絶対値)1に等しくなければなりません.S(k)は $\delta(k)$ で $e^{2i\delta(k)}$ と書けるのですから,現実の実 数波数での散乱では事実,|S(k)|=1が,そして 流れの保存則が満たされています[7].

しかし,エネルギー E,波数kを人為的に複素 数にして波動方程式を解けば(第1節),そんな 非物理的状況では流れが保存せず,|S(k)|はど んな値も取れます.いま,S(k)がある複素波数 kで発散する,つまりその特定のkに極をもつ とします.そこでは式(6)の内向き波は巨大係数 がかかる外向き波に比べて無視でき,波動関数 は有限の大きなrで $e^{-iEt/\hbar}e^{ikr}$ に比例します.

 $k = k_1 - ik_2 (k_1 > k_2 > 0)$  に極があるとしまし ょう.エネルギー $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  に焼き直し,極 のエネルギー位置 $E = \mathcal{E} \ \mathcal{E} \ E_r - i\Gamma/2 \ \mathcal{E} \$ 

極が複素エネルギー平面の実軸近くにあれば, つまり  $\Gamma$  が小さければ,S(E)のこの特異な状況が極に近い実数エネルギーでの現象に反映されると予期されます.極が実軸に近いなら,極の近くで使えるS(E)の近似式はその付近の実数エネルギーでも使えるはずです.そのためにはその式は $E = \mathcal{E}$ で発散し,実数のEでは流れの保存則を満たすべく絶対値が1でなければなりません.この両条件とも満たす一般式は,エネルギー依存性の弱い勝手な位相 $\delta_b$ を含んで

$$S(E) = e^{2i\delta_b} \frac{E - \mathcal{E}^*}{E - \mathcal{E}} = e^{2i\delta_b} \left(1 - \frac{i\Gamma}{E - \mathcal{E}}\right)$$
(7)

と表せます.\*は複素共役を表します.式(7)が 中心力場による散乱の部分波S行列のブライト-ウィグナー(Breit-Wigner)共鳴公式です.これ がなぜ共鳴なのか,議論を進めましょう.

実数のEにつき $E - \mathcal{E}^* = (E - E_r) - i\Gamma/2 = ce^{i\delta_r}$ と極形式で表すと偏角  $\delta_r$  は

$$-\cot \delta_r(E) = (E - E_r)/(\Gamma/2) \equiv \epsilon \tag{8}$$

を満たします.また, $E-\mathcal{E}=(E-\mathcal{E}^*)^*=ce^{-i\delta_r}$ と書けるので式 (7)から $e^{2i\delta}=S=e^{2i(\delta_b+\delta_r)}$ が得られ, $\pi$ ラジアンの整数倍の不定性を除いて

 $\delta(E) = \delta_r(E) + \delta_b = -\cot^{-1}\epsilon + \delta_b$  (9) と書けます.これが位相のずれのブライト-ウィ グナー公式です.以下の議論で $\delta_b$ の弱いE依存 性を残しておいても何ら差し支えありませんが, 式の見かけを単純にするため,本稿では一貫し て $\delta_b$ を定数と仮定してしまいましょう.

換算エネルギー  $\epsilon$  が  $\epsilon \ll -1$  から  $\epsilon \gg 1$  まで増 えるとき,つまり E が  $E_r$  を中心に(非常に小 さな)  $\Gamma$  の何倍かのエネルギー範囲を動くとき, 式(9)の $\delta(E)$ はバックグラウンドの値  $\delta_b$  から  $\pi$ ラジアンほど急増し,断面積を急激に変化させ る共鳴過程を示します. $\delta(E)$ が急増する様子は 以前の稿[5]に図示してあります. $\delta(E)$ の増加率 は微分公式  $d(-\cot^{-1}\epsilon)/d\epsilon = (1+\epsilon^2)^{-1}$ により

 $d\delta(E)/dE = d\delta_r(E)/dE = (2\hbar)^{-1}L(E) \quad (10)$ 

と計算されます.半値幅 Гのローレンツ分布

$$L(E) = \frac{\hbar \Gamma}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$
(11)

に比例して共鳴の中心  $E = E_r$  で最大値を取り, 左右対称なピークを示します(図2). 半値幅が決 まればピーク値も決まることにご注意ください.



図 2. 共鳴過程に密接に関わる半値幅 Γ, ピー ク値 4ħ/Γのローレンツ分布 (11).

#### 6 高校数学で導く Fano 公式

共鳴過程は非常に狭いエネルギー範囲で起こ るので部分波断面積 $\sigma_l(E)$ も積 $E\sigma_l(E)$ も殆ど同 じ形を取り, $\sin^2\delta(E)$ に比例します.もしも $\delta_b = 0$ ならば,式(8),(11)により $E\sigma_l(E) \propto \sin^2\delta_r =$  $(1 + \cot^2\delta_r)^{-1} = (1 + \epsilon^2)^{-1} \propto L(E)$ と,断面積は ローレンツ型のE依存性を示し, Гは共鳴幅の 名にふさわしく,断面積に共鳴状態の影響が及 ぶエネルギー幅を代表します.

$$\delta_b \neq 0 \, \mathcal{O}$$
場合,  $1 = \sin^2 x + \cos^2 x \, \mathcal{E}$ 使えば  
$$E \sigma_l(E) \propto \sin^2 \delta(E) = \sin^2(\delta_r + \delta_b)$$
$$= \frac{(\sin \delta_r \cos \delta_b + \cos \delta_r \sin \delta_b)^2}{(\sin^2 \delta_r + \cos^2 \delta_r)(\sin^2 \delta_b + \cos^2 \delta_b)}$$
$$= \frac{(q+\epsilon)^2}{(1+q^2)(1+\epsilon^2)} = \frac{(1+\epsilon/q)^2}{(1+q^{-2})(1+\epsilon^2)} \quad (12)$$

を得ます.ただし,ここで式(8)に似た量

$$= -\cot\delta_b \tag{13}$$

を定義し,式(12)の最後にはqが小さいとき, 大きいときに便利な等価な2式を書きました.

以前の稿 [5] と重複しますが, いくつかの $\delta_b$ (いくつかのq)の値につき式(12)を図3に示し ます.断面積の形がqにより様々に変わるのでqを形状パラメータと呼びます.式(12)はファー J[6]がより一般の過程につき導いた式, ファー J公式(Fano profile)と規格化因子 $1 + q^2$ を除 き同じです.この規格化因子の重要性, ファー Jの図示の問題点につき前稿[5]に述べました.



図 3. 共鳴断面積のエネルギー依存性 (12).形 状パラメータ q の値により様々な形を取る.括 弧内はバックグラウンドの位相のずれ  $\delta_b$  の値.

本節冒頭で導いた  $\delta_b = 0$  の断面積がローレン ツ型ピークを示す事実が図 3 に見えます(ファー ノ式の図ではこの最も典型的なピークが無限に 高くなり,描けません).  $\delta_b = \pi/2$  ならそれを上下 逆転した対称ディップ(谷)になり,  $\delta_b$  がその間の 値を取ればピークとディップが左右に現れます. 様々な形を取る数式的理由は単純です. $\delta(E)$ が  $\delta_b$ から $\delta_b + \pi$ まで急増すると,断面積に比例する  $\sin^2\delta(E)$ は $\sin^2\delta_b$ から始まり1周期を経て元に戻 ります.ゼロから始まれば中途で最大値1を経 てゼロに戻るピークに,1から始まれば中途で最 小値ゼロを経て1に戻るディップになり,半端な 値から始まれば最大値の後に最小値,または最 小値の後に最大値を取って元に戻るのです.

#### 7 共鳴散乱と直接散乱の干渉

断面積が様々な形を取る物理的理由として,共 鳴状態を中間状態として経るために遅れて出て くる共鳴波と中間状態を経ない直接散乱波とが 干渉するからだとよく言われます.直観的には いかにももっともらしく響きますが,理論的な 根拠を考えてみましょう.

式 (12) は,直接散乱を表すバックグラウンド  $\delta_b$ がゼロの共鳴なら  $\sin^2 \delta_r$  に等しく,直接散乱 だけなら  $\sin^2 \delta_b$ になります.そこで干渉効果を

$$[E\sigma_l(E)]_{\text{int}} \propto \sin^2 \delta - [\sin^2 \delta_r + \sin^2 \delta_b]$$
  
=  $\sin^2(\delta_r + \delta_b) - [\sin^2 \delta_r + \sin^2 \delta_b]$   
=  $2\sin \delta_r \sin \delta_b \cos(\delta_r + \delta_b)$  (14)

と解釈するのが妥当と考えられます.

同じことを遷移行列 T = S - 1 の言葉で言い 換えてみましょう. T の定義には文献により定 数倍の違いがありますが, いずれにせよ, これ は散乱振幅の部分波成分に比例します. つまり, T の本質は散乱振幅で, 散乱波の強さ, 部分波 断面積は  $|T|^2$  に比例します. 直接散乱が無いと きの共鳴遷移行列を  $T_r = e^{2i\delta_r} - 1$ , 直接散乱だ けのときを  $T_b = e^{2i\delta_b} - 1$  とすると,

$$T = e^{2i(\delta_r + \delta_b)} - e^{2i\delta_b} + e^{2i\delta_b} - 1$$
  
=  $e^{2i\delta_b}T_r + T_b$ , (15)

したがって ,  $e^{2i\delta_b}T_b^*=-T_b$  に注意すると

$$E\sigma_l(E) \propto |T|^2 = |T_r|^2 + |T_b|^2 - 2\operatorname{Re}[T_rT_b]$$
 (16)

が得られます.Reは実部を取る記号です.これ は正に断面積に共鳴散乱と直接散乱の振幅の干 渉効果が現れることを如実に示す関係式です.

#### 8 共鳴状態の生成と時間遅れ

本シリーズで以前,不確定性原理に基づき速度の測定可能性を論じました[8].その中で,ある波数範囲に亘り時間依存平面波を重ね合せて 波束を作り,停留位相条件を使ってその群速度 を調べました.その議論を平面波の替わりに本 稿の動径波動関数(6)に当てはめてみます.

内向き波の位相  $-Et/\hbar - (kr - l\pi/2)$  に停留位 相条件  $d(-Et/\hbar - kr)/dk = 0$ を課すと動径波束は

$$r = -[dE/d(\hbar k)]t = -(\hbar k/m)t$$
(17)

と負の時刻に一定群速度 $\hbar k/m$ でポテンシャル 領域に向かって入ってきます.一方,外向き波に は係数 $S = e^{2i\delta}$ が掛かっているので停留位相条 件は $d(-Et/\hbar + kr + 2\delta)/dk = 0$ となり,波束は

$$r = [dE/d(\hbar k)]t - 2d\delta/dk$$
$$= (\hbar k/m)[t - 2\hbar(d\delta/dE)]$$
(18)

と正の時刻に同じ一定群速度 ħk/mで放射状に 漸近領域へ出て行きます.ただし,エネルギー 微分が正の位相のずれを生じる散乱が起これば

$$\Delta t(E) = 2\hbar (d\delta/dE) \tag{19}$$

だけ遅れて出ます.つまり,波束は  $\Delta t$  の間, ポテンシャル領域をウロウロしているのです.  $\Delta t(E) < 0$ ならそれだけ先んじて出て行きます.

共鳴散乱では,ブライト-ウィグナー公式(9)に 従いすでに求めてある式(10)の*d*δ<sub>r</sub>/*d*Eにより

$$\Delta t(E) = L(E) \tag{20}$$

とローレンツ型分布が得られます.共鳴中心 $E_r$ で最も長い時間遅れ $4\hbar/\Gamma = 4\tau$ を示し,そこか ら $\Gamma/2$ ずれると時間遅れは半減します(図2).

2体散乱なら衝突粒子同士の相対運動の波束 が至近距離に時間△tほど滞在し,両者が一時結 合した複合体,共鳴状態が作られるのです.

#### 9 共鳴状態と状態数密度分布

ここまで,一つの非物理的複素エネルギー共 鳴状態 $\Psi(\mathcal{E})$ が $\Gamma$ ほどの実エネルギー幅に亘り連 続的に断面積や時間遅れに強い影響を与えるこ とを導きました.しかし,実エネルギー波動関 数 $\Psi(E)$ の状態数にはどんな影響があるのでしょ うか.連続状態ですから,単位エネルギー当り の状態数密度dn(E)/dEを数えてみます.

再び動径波動関数を扱い,数え易いように連 続状態を半径  $r = R_0$ の大きな球に閉じ込めて離 散化します.その n 番目と次の準位とのエネル ギー差を $\Delta E = E_{n+1} - E_n$ ,それに対応する波数 の差を $\Delta k = k_{n+1} - k_n$ と書き,このエネルギー 2点での位相のずれの差を  $\Delta \delta = \delta(E_{n+1}) - \delta(E_n)$ とします.球の壁で波動関数がゼロになる,つま りその位相が $\pi$ の整数倍になる条件から,nが1 増えるごとに $k_n R_0 - l\pi/2 + \delta(E_n)$ が $\pi$ だけ増え ると分かり,単位エネルギー当り状態数密度は [ $\{(\Delta k)R_0 + \Delta \delta\}/\pi$ ]/ $\Delta E$ ,そのうち散乱により 増えた第2項は,式(19)も使うと

$$\rho(E) = \frac{\Delta\delta/\pi}{\Delta E} \xrightarrow[R_0 \to \infty]{} \pi^{-1} \frac{d\delta}{dE} = \frac{\Delta t(E)}{h} \quad (21)$$

となります.共鳴散乱では式(20)により

$$\rho(E) = h^{-1}L(E)$$
 (22)

となり,状態数密度もローレンツ型です.

式(10)のすぐ上に示した微分公式を逆に積分 した  $\int_{-\infty}^{+\infty} (1+\epsilon^2)^{-1} d\epsilon = [-\cot^{-1}\epsilon]_{-\infty}^{+\infty} = \pi$ を使 って式(22)を  $E_r$ の周り十分広い Eの範囲で積 分すると1になることが示せます.

実在の実エネルギー状態として,正に1個の 共鳴状態が半値幅Γのローレンツ型エネルギー 分布に広げられ,そのエネルギー準位にΓほど のあいまいさがあることが証明されたのです.

共鳴散乱の時間遅れ (20) を状態数密度分布  $\rho(E)$ の重みを付けて平均すると  $\int [L^2/h] dE = (4\tau/\pi) \int_{-\infty}^{+\infty} (1+\epsilon^2)^{-2} d\epsilon = 2\tau$  と計算されます. その半分  $\tau$  は共鳴状態の生成に,残りの  $\tau$  は 崩壊にかかる時間と理解できます.

同じ対称性の束縛状態準位が一つ上がるごと にその波動関数の節は一つずつ増えます.準束 縛状態のエネルギー幅より下での位相に比べ, 上での位相はほぼπラジアン急増しており,こ れは波動関数の節がほぼ1個増えたことを表し, 束縛状態の事情に良く似ています.

#### 10 共鳴状態を作らない共鳴散乱?

第5節で議論したS行列の極がもしも複素k平面の正か負の虚軸上, $k = \pm i\kappa$  ( $\kappa > 0$ )にあれ ば大きなrで波動関数は $\propto e^{\mp\kappa r}e^{-iEt/\hbar}$ ,エネル ギーは $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$ となります.極 $k = +i\kappa$ は負エネルギーと漸近的に減少する波動関数, 束縛状態に対応します.極 $k = -i\kappa$ は負エネル ギーと漸近的に増大する非物理的波動関数に対 応し,仮の状態(virtual state)と呼ばれます.ど ちらにせよ,非常に小さな束縛エネルギーをも てば,つまり非常に小さな純虚数波数 $\pm i\kappa$ に極 があればその影響で近くのゼロ波数極限での断 面積が $4\pi/\kappa^2$ と巨大になります[5].これをよく ゼロエネルギー共鳴, virtual 状態共鳴などと呼 びますが, 共鳴状態を中間状態として経る過程 とは物理的機構も断面積のエネルギー依存性も 全く違います.共鳴散乱を表す極 $k = k_1 - ik_2$ の 極限 $k_1 \rightarrow 0$ が仮の状態だと短絡しないことです. この極限では $E_r < 0$ ,  $\Gamma = 0$ になり, 共鳴散乱型 の影響がE > 0へ及ぶわけがありません.「ゼロ エネルギー共鳴」は共鳴散乱の無い直接散乱断 面積が巨大になる現象と理解されます.

実は,共鳴状態が作られても,遠距離型相互作 用による強い直接散乱のためにその効果が打ち 消され,正味の時間遅れが逆に負になってしま う例もあります.直接散乱侮るべからずです.

位相のずれ $\delta(E)$ が $\pi/2$ を通過するのを共鳴と 呼ぶ文献も昔はよくありました.そこで断面積 が極大値を取りますし,幅の非常に狭い共鳴状 態なら $\delta(E) = \pi/2$ になるエネルギーと $E_r$ とは殆 ど同じです.でも,たまたま $\pi/2$ を通り過ぎた だけで $d\delta/dE$ が小さいときは時間遅れが少なく, 共鳴状態が作られたとは言えません.言葉遣い の定義は勝手かも知れませんが,その物理的内 容が全く違うことは肝に銘ずるべきです.

術語「共鳴」の様々な定義を[5]にまとめました.

#### 11 多チャネル過程での共鳴

共鳴状態は一般に複数チャネルへ壊れ得ます. 構成粒子同士への崩壊と電磁波の放出があり,それぞれ生成物の量子状態が指定されます.その中から始めと終りのチャネルを選べば弾性・非弾性・反応性衝突,光電離,2電子性再結合,分子の解離性電子付着など,一つの共鳴過程が決まります.共鳴状態が壊れるレート $\Gamma/\hbar$ は各チャネルiへ壊れるレート $\Gamma_i/\hbar$ の和です.各崩壊モードの寿命は $\tau_i = \hbar/\Gamma_i$ で, $\tau^{-1} = \sum_i \tau_i^{-1}$ と書けます.

直接散乱では位相のずれ $(\delta_b)_i$ を伴う弾性散乱  $i \rightarrow i$ しか起こらない場合,部分波S行列の共鳴 公式(7)を一般化した遷移 $i \rightarrow j$ のS行列要素

$$S_{ij}(E) = e^{i(\delta_b)_i} \left( \delta_{ij} - \frac{i\Gamma_i^{1/2}\Gamma_j^{1/2}}{E - \mathcal{E}} \right) e^{i(\delta_b)_j} \quad (23)$$

が導けます.このS行列は,部分波散乱での流 れの保存則  $|S|^2 = 1$ の一般化  $S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = I(I t)$ 単位行列,  $S^{\dagger} = (S^{T})^*$ , T は転置行列)と時間反転 対称性  $S_{ij} = S_{ji}$  という物理的要請を満たします.  $\mathcal{E} = E_r - i\Gamma/2$  で,弾性散乱を含むどの遷移 $i \rightarrow j$ も同位置 $E_r$ に同一幅 $\Gamma$ で共鳴を起こします.

式 (23) はパラメータが多くて面倒そうです. ところが,直交行列OによりS行列をO<sup>T</sup>SO=  $\Lambda$ と対角化して  $\Lambda_{ij} = \delta_{ij}e^{2i\eta_i}$  と書き, $\delta = \sum_i \eta_i$ ,  $\delta_b = \sum_i (\delta_b)_i$ と置くと位相のずれの共鳴公式(9) と同一の式が導けます.こうしてS行列を中心 力場散乱と同様に簡単に共鳴解析できるのです.

多チャネル散乱の一般的共鳴理論,とくに複 数個の共鳴状態がからみ合うときの理論はたい へん複雑で,このシリーズにはなじみません. ま,そろそろこの辺で筆を置くとしましょう.

#### 付録:射影演算子

2次元ベクトルをx軸やy軸に射影するように,  $(\phi, \varphi) = 0$ , $(\phi, \phi) = 1$ を満たす直交成分で表せる  $\psi = c\phi + \varphi$ から $c\phi$ を抜き出す演算子Qを射影演 算子と呼びます.ディラックのブラ <···|とケッ ト|···> により $Q = |\phi> < \phi|$ と書けます.これは

$$Q\psi = |\phi\rangle \langle \phi | c\phi + \varphi \rangle = c |\phi\rangle \tag{A.1}$$

により示せます . 逆に , $\phi$ 成分を取り除く演算子 , またある軌道 $\phi$ を禁止する演算子は  $1 - |\phi> < \phi|$ です . 実際 , $[1 - |\phi> < \phi|]\psi = \psi - c\phi = \varphi$ です .  $Q = |\phi> < \phi|$ によって定義された演算子  $H_Q$ = QHQについて固有値方程式 (1) は

$$E_Q \phi = Q H Q \phi = |\phi\rangle \langle \phi | H | \phi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$$
  
=  $\langle \phi | H | \phi \rangle \phi$  (A.2)

と書き換えられ,これは期待値 $E_Q = (\phi|H|\phi)$ の 定義と同等なことが分かります.

- [1] 江沢洋, 量子力学 I (裳華房, 2002).
- [2] 島村 勲, しょうとつ, 第7巻第4号 (2010).
- [3] J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42, No. 4, Special Issue on Resonances: From Few-Body to Many-Body Phenomena (2009).
- [4] Advances in Quantum Chemistry, **60** (2010) and **63** (2012), Unstable States in the Continuous Spectra, Parts I and II.
- [5] 島村 勲, しょうとつ, 第2巻第2号 (2005).
- [6] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [7] 島村 勲, しょうとつ, 第7巻第5号 (2010).
- [8] 島村勲, しょうとつ, 第8巻第3号 (2011).

虹効果 (rainbow effect)

重粒子衝突を古典的に考えるとき、衝突パラ メータbの関数としての重心系における散乱角  $\Theta$ は偏向関数 (deflection function) と呼ばれる. 遠距離では引力,近距離では斥力になる粒子間 ポテンシャルの場合, $\Theta(b)$ は極値を持ち,古典 的微分散乱断面積 $\sigma(\Theta)$ は次式で与えられる:

$$\sigma(\Theta) = \frac{1}{\sin\Theta} \sum_{i} b_i \left| \frac{\mathrm{d}\Theta(b)}{\mathrm{d}b} \right|_{b=b}^{-1}$$

ここで、和は同じ散乱角を与える衝突パラメー タ $b_i$ について取る. $\Theta(b)$ の極値においては微係 数が0になるため、 $\sigma(\Theta)$ は無限大に発散する. これが古典的な虹散乱 (rainbow scattering) で あり、衝突パラメータの広い領域が狭い散乱角 範囲に寄与することが虹散乱の本質である.

ここで虹という言葉が使われるのは雨上がり に見られる虹に類似した機構に由来する.図1 に示すように、空中に浮遊する水滴に入射した 光が水滴表面において屈折・全反射・屈折をす ることにより、入射角 $\alpha$ の関数としての散乱角  $\phi$ には極値が存在する.このため、広い入射角 の領域が狭い散乱角範囲に対応することになり、 その角度に散乱光が集中する.波長によって屈 折率nと極大となる角度が異なることが、虹が 七色の光の帯として観測される原因である.

虹散乱における衝突パラメータbも,光学的 な虹における入射角 $\alpha$ も広い範囲に亘って一様 に分布する物理パラメータである.それに対応 する物理量である散乱角の分布が古典的な発散 を持つのは極値に由来する.以下に幾つかの例 を示すが,同様な現象は全て虹効果 (rainbow effect) と呼ばれている.虹効果では常に古典的 断面積が発散するため,実験的には特異的な現 象が観測される.

原子あるいは電子と直線分子の衝突において、 衝突する角度 $\gamma$ の関数としての回転量子数Jは極 大値を持つ.この関係に起因する二重微分断面 積 $\sigma(\Theta, J)$ の極大は、回転虹 (rotational rainbow)



図 1: 光学的な虹が現れる機構. 異なる屈折率 n に対 する入射角 α の関数としての散乱角 φ.

として知られている [1, 2].

回転虹効果は分子の表面散乱においても観測 されている [3]. 一方,高速原子の表面散乱の角 度分布では,他の虹効果では観測が困難な番外の 虹 (supernumerary rainbow)までが非常に明瞭 に観測されている [4]. 両者とも表面虹 (surface rainbow)と呼べる現象であるが,後者を指すの が一般的なようである.

重粒子衝突によって自動電離状態が生成し,粒 子間距離がさほど離れていない準分子状態から 電子が放出されるとき,電子の運動エネルギー は始状態と終状態の粒子間ポテンシャル差で決 定されるが,粒子間距離によってエネルギー差 が異なるため,ポテンシャル差に極値が存在す るとエネルギー・スペクトルにピークが生じる ことがある [5, 6]. この現象は準分子自動電離 (quasi-molecular autoionization) と呼ばれてい るが [7],自動電離虹 (autoionization rainbow) と命名することもできるだろう.

(首都大学東京・田沼肇)

#### 参考文献

- [1] G. Ziegler et al., Phys. Rev. Lett. 58 (1984) 2642.
- [2] H. Tanuma *et al.*, Phys. Rev. A **38** (1988) 5053.
- [3] A. W. Kleyn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 1169.
- [4] A. Schüller & H. Winter, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 097602.
- [5] S. Kita *et al.*, J. Phys. **20** (1987) 3089.
- [6] A. Danjo & F. Koike, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 741.
- [7] G. Gerber & A. Niehaus, J. Phys, B 9 (1976) 123.

**2011 年度 役員・委員会等** 

会長 伊藤秋男 (京都大学) 幹事 今井 誠 (京都大学) 市村 淳(宇宙航空研究開発機構) 高口博志 (広島大学) 本橋健次(東洋大学) 運営委員 石井邦和 (奈良女子大学) 市村 淳 (宇宙航空研究開発機構) 今井 誠 (京都大学) 加藤太治(核融合科学研究所) 北島昌史(東京工業大学) 高口博志 (広島大学) 河内宣之(東京工業大学) 酒井康弘 (東邦大学) 高橋正彦 (東北大学) 田沼 肇(首都大学東京) 長嶋泰之(東京理科大学) 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) 柳下 明(高エネルギー加速器研究機構) 渡辺信一(電気通信大学) 渡部直樹(北海道大学) 会計監事 中村義春 (東京電機大学) 鵜飼正敏 (東京農工大学) 常置委員会等 編集委員会 委員長: 市村 淳(宇宙航空研究開発機構) 行事委員会 委員長: 高口博志(広島大学) 広報渉外委員会 委員長: 本橋健次(東洋大学) 若手奨励賞選考委員会 委員長: 島村 勲(理化学研究所) 国際会議発表奨励者選考委員会 委員長: 伊藤秋男(京都大学) 担当幹事:今井 誠 (京都大学) 協会事務局

しょうとつ 第9巻 第2号 (通巻 45 号)

Journal of Atomic Collision Research ⓒ原子衝突研究協会 2012 http://www.atomiccollision.jp/ 発行: 2012 年 3 月 15 日 配信: 原子衝突研究協会 事務局 <acr-post@bunken.co.jp>