電子衝突によるカルシウム原子の励起過程

河添 慎太郎[1] ・ 甲斐 健師[2] ・ Rajesh Srivastava[3] ・ 柏原 広道[4] ・ 中崎 忍[5]

Excitation of calcium by electron impact

Shintarou KAWAZOE, Takeshi KAI, Rajesh SRIVASTAVA, Hiromichi KASHIWABARA and Shinobu NAKAZAKI

Abstract

We carry out R-matrix calculations for the excitation of the 4s4p $^1P^o$ state from the ground $4s^2$ $^1S^e$ state of calcium atom. Coherence parameters are obtained using 24 states of the calcium target for electron impact energies of 10, 20 and 25 eV. We compare our results with experimental measurements and other theoretical calculations in this paper. Our results are in very good agreement with the experimental results.

Key words : Excitation, Electron impact, R-matrix method, Calcium, Stokes parameter, Coherence parameter.

1. 序論

電子と原子又はイオンの衝突過程は、天体や実験室におけるプラズマ中の基本的な素過程であり、プラズマの温度及び電子密度を知る上で重要である。このことから、電子と原子の衝突に関する様々な実験及び理論的な研究が今日まで行われてきた。電子衝突励起の研究は、近年の実験装置・実験技術及び計算機の進展に伴い、標的としては、希ガス、アルカリ金属、アルカリ土類金属など様々な原子又はイオンについて研究されている。

これまでに、電子衝突によるカルシウム原子の励起過程において、$4s^2$ $^1S^e \rightarrow$ 4s4p $^1P^o$ 遷移における微分断面積、ストークス・パラメーター及び積分断面積の研究が、実験及び理論の両面からなされてきた。近年報告された研究では、Murray と Cvejanovic[1] が 2003 年に入射電子のエネルギーが 20、25 及び 35 eV でストークス・パラメーター P_1、P_2 及び P_3 の実験結果を報告した。また、Milisavljević ら[2] は 2004 年に入射電子のエネルギーが 10、20、40、60 及び 100 eV で微分断面積の実験結果を初めて報告した。2005 年、Chauhan ら[3] は多くの電子配置を用い、非相対論的歪曲波近似法 (NDW) と相対論的歪曲波近似法 (RDW) の計算を行った。この計算は、Murray と Cvejanovic のストークス・パラメーターの実験結果と比較的に良く一致している。しかし、Milisavljević らの微分断面積の実験結果とは、入射電子のエネルギーが 10 eV で大きく異なる。この異なる原因としてこの理論計算では歪曲波近似法を用いたため、低エネルギー領域では信頼できる結果を得られていないということが考えられる。そこで、Kawazoe ら[4] は、低エネルギー領域で有用と考えられている R 行列法を用いて、入射電子のエネルギーが 10、20 及び 25 eV の時の微分断面積、ストークス・パラメーター及び積分断面積 (しきい値から 25 eV まで) を報告した。この研究では、標的に 15 状態 (RM15)、21 状態 (RM21) 及び 24 状態 (RM24) を考慮した理論計算を行っている。Kawazoe らの RM24 における計算結果は、入射電子のエネルギーが 10、20 及び 25 eV で、Murray と Cvejanovic のストークス・パラメーターの実験結果及び Milisavljević らの微分断面積の実験結果と非常に良く一致した。

本研究では、Kawazoe らの計算した、カルシウム原子の $4s^2$ $^1S^e \rightarrow$ 4s4p $^1P^o$ 遷移におけるストークス・パラメーターを用いて、干渉パラーメーター (coherence parameter) P_l、γ 及び $L_\perp$ を計算した。電子衝突により標的が S 状態から P 状態へ遷移し、その後、光を放出し、P 状態から S 状態へ遷移する過程の干渉パラメーターは、Andersen ら[7] によって導入された。微分断面積と干渉パラメーターを用いて、励起状態の電子雲についての情報、すなわち、微分断面積からその大きさ、P_l からその形状、γ からその回転

1) 宮崎大学大学院 工学研究科 博士前期課程 物質工学専攻
2) 大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター 特任研究員
3) Indian Institute Technology, Roorkee, India, 教授
4) 宮崎大学 工学部 技術専門職員
5) 宮崎大学 材料物理工学科 教授

がわかり、そして $L_\perp$ から標的の角運動量移行がわかる。本研究の計算結果を Murray と Cvejanovic の実験結果及び Chauhan らの計算結果と比較する。

以下、2 章では R 行列法による電子と原子の衝突理論を、3 章では微分断面積、ストークス・パラメーター及び干渉パラメーターの理論的な表現を、4 章で理論的な計算の詳細、結果及び考察を述べ、最後の 5 章で結論を述べる。本研究では、特にことわらない限り、原子単位（a.u.）を用いる。

2. R 行列法による電子衝突理論

R 行列法は、1947 年に原子核反応に関する理論として初めて、Wigner と Eisenbud[5] によって提唱され、その後 Burke ら[6] によって電子と原子衝突の分野へ拡張された。

R 行列法の特徴は、電子と原子の衝突過程において、全空間を二つの領域に分けて計算を行う点にある。入射電子が標的原子の電子雲の中に入ってくると、標的内の電子と明瞭に区別ができなくなってしまう。そのような領域内 (内部領域と呼ぶ) では、標的内の電子と入射電子との電子交換や電子相関を考慮に入れなければならない。そこで N 個の標的内電子と 1 個の散乱電子からなる $N+1$ 電子系について考え、配置間相互作用法を用いて $N+1$ 電子系の波動関数を決定する。内部領域の外側では、標的内電子と入射電子が区別できると考えることから電子交換や電子相関を無視した通常の緊密結合法を用いて散乱電子の波動関数を決定する。R 行列法は、このように空間を内部領域とその外側である外部領域に分け、その二つの領域で求まった散乱電子の波動関数を境界で滑らかにつなぐことで散乱振幅を得る方法である。

2.1 標的原子の束縛状態

まず、N 個の電子をもつ標的原子（本研究では、カルシウム原子であるので N=20 である）の束縛状態の波動関数について考える。各電子の空間座標には極座標 r、θ、ϕ を用い、スピン座標を σ と表し、それらをまとめて $\mathbf{x}$ と表すことにする。標的原子の状態を表す波動関数は、次のように反対称化した波動関数 ϕ_j で表現される。

$$\phi_j(\alpha_j L_j S_j M_{L_j} M_{S_j}|\mathbf{x}_1,...\mathbf{x}_N) \equiv \phi_j(1s^{m_{1j}}2s^{m_{2j}}2p^{m_{3j}}... \\ ...\alpha_j L_j S_j M_{L_j} M_{S_j}|\mathbf{x}_1,...\mathbf{x}_N) . \quad (1)$$

標的原子の束縛状態は、(1) 式の波動関数を用いて、同じ L_i と S_i をもった状態を重ね合わせた配置間相互作用法により次のように表すことができる。

$$\Phi_i(\Gamma_i L_i S_i M_{L_i} M_{S_i}|\mathbf{x}_1,...\mathbf{x}_N) \\ = \sum_j a_{ij}\phi_j(\alpha_j L_i S_i M_{L_i} M_{S_i}|\mathbf{x}_1,...\mathbf{x}_N) . \quad (2)$$

ここで、a_{ij} は展開係数であり、(3) 式で表されるように標的原子のハミルトニアンを対角化することにより決定される。

$$\langle\Phi_i|H_N|\Phi_j\rangle = E_i^N\delta_{ij} . \quad (3)$$

2.2 R 行列法による内部領域

R 行列法における内部領域とは、入射電子が標的原子の電子雲の中に入って標的内電子との区別ができなくなるような領域である。そのような領域内では、標的内電子と散乱電子との電子交換や電子相関を考慮に入れる必要がある。従って、この領域では、標的内電子と散乱電子からなる $N+1$ 個の電子系の状態を考え、配置間相互作用法を用いて波動関数を決定する。

標的原子の波動関数を用いて内部領域における基底関数を次のように表す。

$$\Psi_k(\mathbf{x}_1...\mathbf{x}_{N+1}) = \mathcal{A}\sum_{ij} c_{ijk}\bar{\Phi}_i(\mathbf{x}_1...\mathbf{x}_N,\hat{\mathbf{r}}_{N+1}\sigma_{N+1}) \\ \times\frac{1}{r_{N+1}}u_{ij}(r_{N+1}) + \sum_j d_{jk}\phi_j(x_1...x_{N+1}) . \quad (4)$$

ここで、第一項目の関数 $\bar{\Phi}_i$ は (2) 式の標的原子の束縛状態の波動関数に散乱電子の角度とスピン関数を含ませたものとして表している。これにより、全軌道角運動量 L、全スピン角運動量 S、そしてパリティ π をもつ $N+1$ 電子系の固有状態を表現できる。$\mathcal{A}$ は、標的原子と散乱電子の波動関数を反対称化させる演算子である。第 2 項目の ϕ_j は標的原子の束縛状態で用いた軌道関数を用いて表し、$N+1$ 電子系の束縛状態を表す。(4) 式において、散乱電子の波動関数の動径部分は、連続基底関数 u_{ij} を用いて展開されている。u_{ij} は (6) 式の境界条件を満足する (5) 式の微分方程式の解である。

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V(r) + k_{ij}^2\right)u_{ij}(r) \\ = \sum_{n=l_i+1}^{n_{max(l_i)}} \lambda_{ijn}P_{nl_i}(r) , \quad (5)$$

$$u_{ij}(0) = 0 , \quad \left(\frac{a}{u_{ij}(a)}\right)\left(\frac{du_{ij}}{dr}\right)_{r=a} = b . \quad (6)$$

ここで、(6) 式の a は、内部領域の境界半径であり、b は任意定数である。(5) 式の右辺の和については、標的原子の状態を記述する際に用いたそれぞれの軌道角運動量 l_i に対する全ての主量子数を考慮に入れる。λ_{ijn} は標的原子の軌道関数と連続状態の基底関数が次式を満足するよう導入されたラグランジュの未定乗数である。

$$(u_{ij}(r)|P_{nl_i}(r)) = \int_0^a u_{ij}(r)P_{nl_i}(r)dr = 0 . \quad (7)$$

このようにして求めた散乱電子の基底関数 u_{ij} は、それぞれの軌道角運動量 l_i について規格直交系を満足するよう決定される。

$$(u_{ij}(r)|u_{ij'}(r)) = \delta_{jj'} . \quad (8)$$

(4) 式における係数である c_{ijk} と d_{jk} は、(9) 式の $N+1$ 電子系のハミルトニアン

$$H_{N+1}=\sum_{i=1}^{N+1}\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2-\frac{Z}{r_i}\right)+\sum_{i>j=1}^{N+1}\frac{1}{r_{ij}}\,, \qquad (9)$$

を使い、(3) 式で a_{ij} を求めたように (9) 式のハミルトニアン行列を対角化して決定される。

R 行列法を用いて散乱問題を解く際に、励起は様々な状態を経て起こると考えられるので、状態間で強く結びつく状態を (4) の第 1 項の展開の中に含める必要がある。そのため、励起状態にどのような状態をいくつ含めるかということが重要となる。

2.3 R 行列法における外部領域

電子と原子の衝突では入射（散乱）電子は標的原子から無限に離れたところで平面波となる。外部領域では、標的原子の波動関数が十分小さいところを領域として選ぶ。そのため、内部領域で考慮したような入射電子と標的内の電子との電子交換を無視することができる。また、散乱電子は標的原子の平均的なポテンシャルの影響を受けると考えられる。従って、電子交換散乱を無視した通常の緊密結合法により、次式の微分方程式を解くことで散乱電子の波動関数 $F_i(r)$ を決定することができる。

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l_i(l_i+1)}{r^2}+k_i^2\right)F_i(r)$$

$$=2\sum_{\lambda=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}^{\lambda}r^{-\lambda-1}F_j(r)\,. \qquad (10)$$

ここで、係数 a_{ij}^{λ} は (11) 式で定義される。

$$a_{ij}^{\lambda}=\langle\bar{\Phi}_i|\sum_{k=1}^{N}r_k^{\lambda}P_{\lambda}(\cos\theta_{kN+1})|\bar{\Phi}_j\rangle\,. \qquad (11)$$

外部領域で得られた散乱電子の波動関数と内部領域で得られた散乱電子の波動関数を境界で滑らかにつなぐことにより、散乱振幅を得ることができる。

3. 微分断面積、ストークス・パラメーター及び干渉パラメーター

散乱振幅は、前節で述べた計算で得られる遷移行列 $\mathbf{T}$ を用いて次のように表現される。

$$f(N_i:L_iM_i\Pi_iM_{s_i}m_{s_i}M\to N_f:L_fM_f\Pi_fM_{s_f}m_{s_f}M)$$

$$=\mathrm{i}\sum_{l_il_fLS\Pi}\frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{(k_ik_f)^{\frac{1}{2}}}(2l_i+1)^{\frac{1}{2}}$$

$$\times\langle L_il_iM_i0|LM\rangle\langle LM|L_fl_fM_fm_f\rangle$$

$$\times\langle S_i\frac{1}{2}M_{s_i}m_{s_i}|SM_s\rangle\langle SM_s|S_f\frac{1}{2}M_{s_f}m_{s_f}\rangle$$

$$\times T_{l_il_f}^{LS\Pi}(N_i\to N_f)Y_{l_fm_f}(\theta_e,\phi_e)\,. \qquad (12)$$

ここで、標的原子の初（終）期状態 $N_i(N_f)$ の角運動量量子数を $L_iM_iS_iM_{s_i}(L_fM_fS_fM_{s_f})$、入射（散乱）波の角運動量量子数を $l_im_is_im_{s_i}(l_fm_fs_fm_{s_f})$ と表現している。また、$Y_{l_fm_f}(\theta_e,\phi_e)$ は球面調和関数で、(θ_e,ϕ_e) は散乱電子の方向を示す。Π は全系のパリティー、LS は全系の軌道及びびスピン角運動量量子数であり、MM_s は各々の z 成分である。$k_i(k_f)$ は入射 (散乱) 電子の波数である。また、入射電子は z 軸に沿って入射してくると仮定し $m_i=0$ とした。さらに $s_i=s_f=1/2$ としている。

微分断面積 σ は散乱振幅を用いて次のように書き表せる。

$$\sigma=\sum_{M_f}\sigma_{M_f}\,, \qquad (13)$$

$$\sigma_{M_f}=\frac{k_f}{2k_i(2L_i+1)(2S_i+1)}$$

$$\times\sum_{M_iM_{s_i}M_{s_f}m_fm_{s_i}m_{s_f}}|f(N_i\to N_f)|^2\,. \qquad (14)$$

ここで、$\sigma_{M_f}(M_f=-1,0,1)$ は磁気副準位に関する微分断面積である。

次にストークス・パラメーターについて述べる。散乱電子の散乱角 θ_e に依存したストークス・パラメーターは以下のように定義される。

$$P_1=\frac{I^y(0^\circ,\theta_e)-I^y(90^\circ,\theta_e)}{I^y(0^\circ,\theta_e)+I^y(90^\circ,\theta_e)}\,, \qquad (15)$$

$$P_2=\frac{I^y(45^\circ,\theta_e)-I^y(135^\circ,\theta_e)}{I^y(45^\circ,\theta_e)+I^y(135^\circ,\theta_e)}\,, \qquad (16)$$

$$P_3=\frac{I^y(RHC,\theta_e)-I^y(LHC,\theta_e)}{I^y(RHC,\theta_e)+I^y(LHC,\theta_e)}\,. \qquad (17)$$

ここで、$I^y(\beta,\theta_e)$ は y 軸方向に放出される光の強度で電気ベクトルが z 軸に対して β 度偏光した光の強度、$I^y(RHC,\theta_e)$、$I^y(LHC,\theta_e)$ は同じく y 軸方向に放出される光の強度で右廻り、左廻り偏光した光の強度を表す。

Blum[8] はストークス・パラメーターを散乱振幅と関連づけるために $I^a(\theta_e)$, $I^a\eta_3(\theta_e)$, $I^a\eta_1(\theta_e)$ 及び $I^a\eta_2(\theta_e)$ を用いて次のような関係式を導入した。

$$P_1=\frac{I^y\eta_3(\theta_e)}{I^y(\theta_e)}\,, \qquad (18)$$

$$P_2=\frac{I^y\eta_1(\theta_e)}{I^y(\theta_e)}\,, \qquad (19)$$

$$P_3 = -\frac{I^y\eta_2(\theta_e)}{I^y(\theta_e)} \tag{20}$$

ここで、$I^a(\theta_e)$, $I^a\eta_3(\theta_e)$, $I^a\eta_1(\theta_e)$ 及び $I^a\eta_2(\theta_e)$ は状態多極子 $\langle T(L_f)^+_{kq}\rangle$ を用いて次のように表される。

$$I^a(\theta_e) = \frac{1}{\xi}W(L_j,L_f)(-1)^{L_j+L_f}\frac{2}{3\sqrt{2L_f+1}}\langle T(L_f)^+_{00}\rangle$$

$$-\frac{1}{\xi}W(L_j,L_f)\begin{Bmatrix}1 & 1 & 2\\ L_f & L_f & L_j\end{Bmatrix}$$

$$\times[\langle T(L_f)^+_{22}\rangle\sin^2\theta\cos 2\phi - \langle T(L_f)^+_{21}\rangle\sin 2\theta\cos\phi$$

$$+\frac{1}{\sqrt{6}}\langle T(L_f)^+_{20}\rangle(3\cos^2\theta-1)]\,, \tag{21}$$

$$I^a\eta_3(\theta_e) = \frac{1}{\xi}W(L_j,L_f)\begin{Bmatrix}1 & 1 & 2\\ L_f & L_f & L_j\end{Bmatrix}$$

$$\times[\langle T(L_f)^+_{22}\rangle(1+\cos^2\theta)\cos 2\phi + \langle T(L_f)^+_{21}\rangle\sin\theta\cos\phi$$

$$+\sqrt{\frac{3}{2}}\langle T(L_f)^+_{20}\rangle\sin^2\theta]\,, \tag{22}$$

$$I^a\eta_1(\theta_e) = -\frac{1}{\xi}W(L_j,L_f)\begin{Bmatrix}1 & 1 & 2\\ L_f & L_f & L_j\end{Bmatrix}$$

$$\times\left[\langle T(L_f)^+_{22}\rangle 2\cos\theta\sin 2\phi + \langle T(L_f)^+_{21}\rangle 2\sin\theta\sin\phi\right]\,, \tag{23}$$

$$I^a\eta_2(\theta_e) = -\frac{1}{\xi}W(L_j,L_f)\begin{Bmatrix}1 & 1 & 1\\ L_f & L_f & L_j\end{Bmatrix}$$

$$\times 2\mathrm{i}\langle T(L_f)^+_{11}\rangle\sin\theta\sin\phi\,, \tag{24}$$

$$W(L_j,L_f) = \frac{e^2\omega^4 d\Omega}{2\pi c^3}|\langle L_j||\mathbf{r}||L_f\rangle|^2(-1)^{L_j+L_f} \tag{25}$$

ここで、ξ は脱励起する際の崩壊係数で励起状態の寿命に関係している。ω は放出される光子の振動数、$d\Omega$ は光子が放出される立体角を記述している。(21) − (24) 式では一般的に、光子は θ 及び ϕ をもつ a 軸方向で測定されることを表している。本研究では a 軸方向を y 軸にとっている。L_j の値は光子を放出し、脱励起した後の標的原子の角運動量量子数を示す。状態多極子は散乱振幅 f_{M_f} を用いて以下のように定義される。

$$\langle T(L_f)^+_{kq}\rangle$$

$$= \sum_{M'_f M_f}(-1)^{L_f-M_f}\langle LLM'_f - M_f|kq\rangle\langle f_{M'_f}f_{M_f}\rangle\,, \tag{26}$$

$$\langle f_{M'_f}f_{M_f}\rangle = \frac{k_f}{2k_i(S_i+1)}$$

$$\times\sum_{m_{s_i}m_{s_f}M_{s_i}M_{s_f}} f(N_i\to N'_f)f(N_i\to N_f)^*\,. \tag{27}$$

ここで, $0\le k\le 2L_f$, $-k\le q\le k$。$\langle T(L_f)^+_{00}\rangle$ は、標的原子のポピュレーションつまり断面積を表す。$\langle T(L_f)^+_{1q}\rangle$ は標的原子のオリエンテーションを表し、基底状態から励起状態へ励起する際の角運動量移行に対応する。$\langle T(L_f)^+_{2q}\rangle$ は標的原子のアラインメントを表す。一般的に、偏光は磁気副準位間におけるポピュレーションの不均衡によって起こるものとされている。この不均衡をアラインメントと呼ぶ。

Andersen ら[7] はストークス・パラメーターと関連した 3 つの干渉パラメーター（P_l、$L_\perp$、γ）を導入した。干渉パラメーターとストークス・パラメーターには次のような関係がある。

$$P_l = \sqrt{P_1^2+P_2^2}\,, \tag{28}$$

$$L_\perp = -P_3\,, \tag{29}$$

$$\gamma = \frac{1}{2}\arg(P_1+\mathrm{i}P_2)\,. \tag{30}$$

微分断面積、ストークス・パラメーター及び干渉パラメーターを用いて ^{1}P 状態の電子雲の角度分布 (Θ,Φ) は次式により求められる。

$$\Psi\Psi^*(\Theta,\Phi) = \frac{3\sigma}{8\pi}\sin^2\Theta[1+P_1\cos 2\Phi+P_2\sin 2\Phi]$$

$$= \frac{3\sigma}{8\pi}\sin^2\Theta[1+P_l\cos 2(\Phi-\gamma)]\,. \tag{31}$$

P_l と電子雲の長さ l 及び幅 w には次のような関係がある。

$$l=\frac{(1+P_l)}{2}\,,\quad w=\frac{(1-P_l)}{2}\,. \tag{32}$$

微分断面積から電子雲の大きさがわかり、ストークス・パラメーターから導出される干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ を用いると P_l から電子雲の長さ l 及び幅 w、γ から電子雲の回転、$L_\perp$ から標的の角運動量移行がわかり、標的の励起状態についての詳細な知見を得ることができる。

4. 結果及び考察

本研究では、標的原子として束縛されている電子の数が 20 個のカルシウム原子に注目した。電子衝突により標的内の電子が基底状態である $4s^2\ ^1S^e$ 状態から $4s4p\ ^1P^o$ 状態へ遷移し、その後、光を放出し、電子が $4s4p\ ^1P^o$ 状態から $4s^2\ ^1S^e$ 状態へ遷移する過程 ($4s^2\ ^1S^e \to 4s4p\ ^1P^o \to 4s^2\ ^1S^e$) について考慮した。

本研究では、Kawazoe ら[4] の計算した、カルシウム原子の $4s^2\ ^1S^e \to 4s4p\ ^1P^o$ 遷移におけるストークス・パラメーター P_1、P_2 及び P_3 を用いて、干渉パラーメーター P_l、γ

及び $L_\perp$ を計算した。干渉パラメーターは、(28) - (30) 式を用いて計算した。Kawazoe らの計算では、微分断面積及びストークス・パラメーターを求める際、標的の状態に 15 状態 (RM15)、21 状態 (RM21) 及び 24 状態 (RM24) を考慮した計算を行っている。その結果、微分断面積及びストークス・パラメーターの計算結果は標的の状態として 24 個の状態を考慮した RM24 で収束した結果が得られることを報告している。そこで本研究では、RM24 における干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ を計算した。

図 1(a)-(c) に入射電子のエネルギーが 10 eV のときの干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ の本研究の RM24 における計算結果及び Chauhan ら[3] の RDW における計算結果を示す。入射電子のエネルギーが 10 eV のときのストークス・パラメーター及び干渉パラメーターの実験値は報告されていない。本研究の RM24 における計算結果は、Chauhan らの RDW における計算結果と一致していない。本研究で計算した干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ の計算では、Kawazoe らが微分断面積を求める際に、用いた散乱振幅を採用している。Kawazoe らの計算した入射電子のエネルギーが 10 eV のときの RM24 における微分断面積の結果は、Milisavljević ら[2] の微分断面積の実験結果と非常に良く一致している。一方、Chauhan らの RDW における計算結果は実験結果と大きく異なっている。微分断面積、ストークス・パラメーター及び干渉パラメーターは同じ散乱振幅から計算することができるため、本研究の RM24 における入射電子のエネルギーが 10 eV のときの干渉パラメーターの計算結果は Chauhan らの RDW における計算結果よりも、信頼性の高い結果であると考えられる。

図 2(a)-(c) 及び図 3(a)-(c) にそれぞれ入射電子のエネルギーが 20 eV 及び 25 eV のときの干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ の本研究の RM24 における計算結果を示す。比較のために、Chauhan らの RDW における計算結果及び Murray と Cvejanovic[1] の実験値をも示す。RM24 の結果と Murray と Cvejanovic の実験値及び Chauhan らの RDW における計算結果とは、比較的に良く一致している。また、本研究の RM24 と Chauhan らの RDW の結果とは干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ の形状も似ている。しかし、干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ において、散乱角がおよそ 100° から 120° の領域では、RM24 の結果の方が RDW の結果よりも実験値と良く一致し形状も似ている。これらのことから、本研究の RM24 の結果は Chauhan らの RDW の結果よりも信頼できるものであると判断できる。

本研究で計算した干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ と Kawazoe らの計算した微分断面積の計算結果から (31) 式を用いてカルシウム原子の 4s4p ^{1}P^o 状態の電子雲の形状を求めることができる。

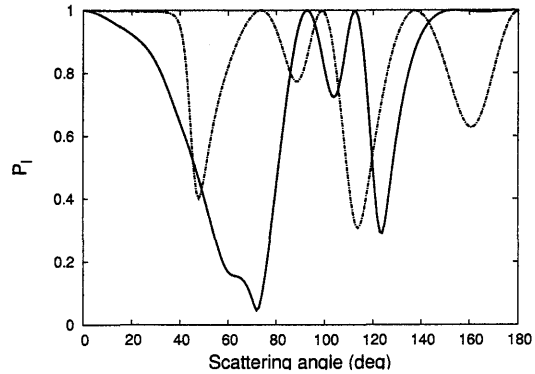


図 1(a). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ ^1S^e \rightarrow 4s4p\ ^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター P_l. 入射電子のエネルギーは 10 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]).

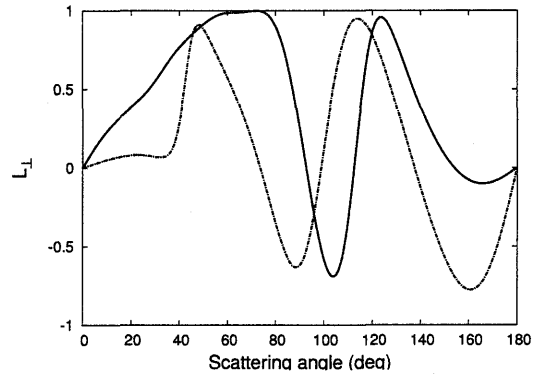


図 1(b). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ ^1S^e \rightarrow 4s4p\ ^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター $L_\perp$. 入射電子のエネルギーは 10 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]).

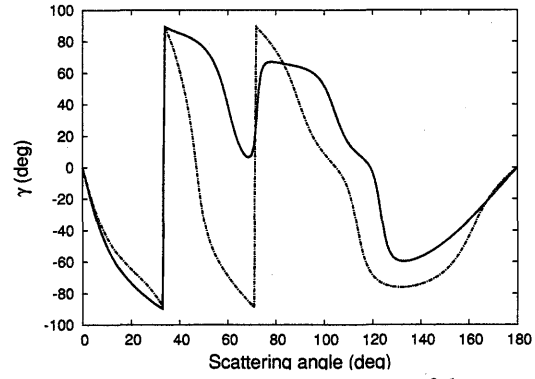


図 1(c). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ ^1S^e \rightarrow 4s4p\ ^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター γ. 入射電子のエネルギーは 10 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]) .

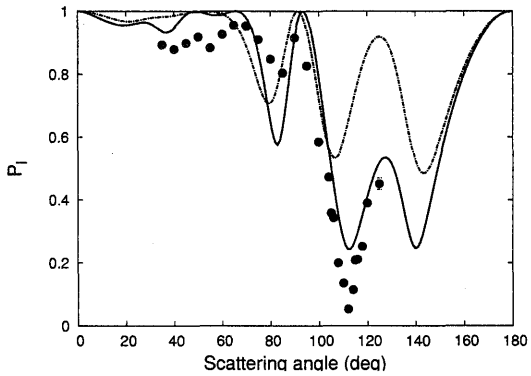


図 2(a). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター P_l. 入射電子のエネルギーは 20 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]). 実験値: ●, Murray と Cvejanovic.[1]

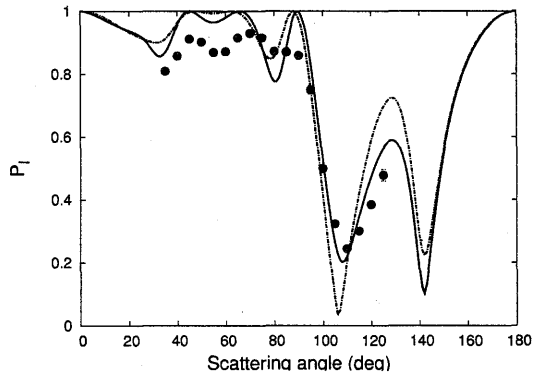


図 3(a). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター P_l. 入射電子のエネルギーは 25 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]). 実験値: ●, Murray と Cvejanovic.[1]

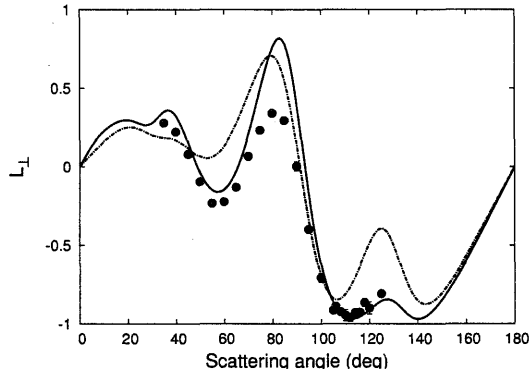


図 2(b). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター $L_\perp$. 入射電子のエネルギーは 20 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]). 実験値: ●, Murray と Cvejanovic.[1]

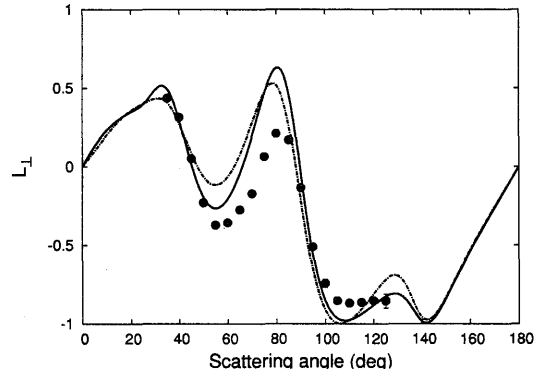


図 3(b). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター $L_\perp$. 入射電子のエネルギーは 25 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]). 実験値: ●, Murray と Cvejanovic.[1]

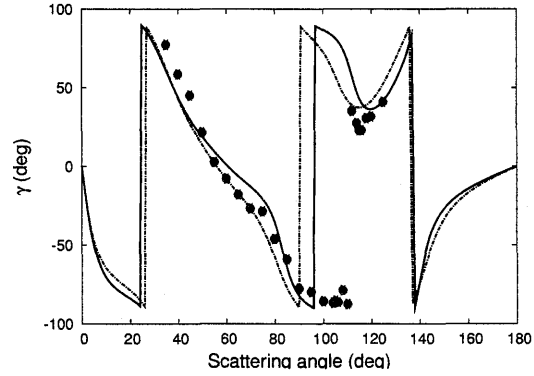


図 2(c). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター γ. 入射電子のエネルギーは 20 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]). 実験値: ●, Murray と Cvejanovic.[1]

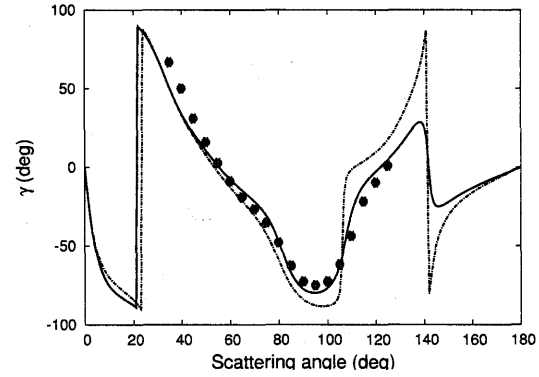


図 3(c). 電子衝突によるカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラメーター γ. 入射電子のエネルギーは 25 eV. 理論値: ——, RM24; – · –, RDW(Chauhan ら[3]). 実験値: ●, Murray と Cvejanovic.[1]

5. 結論

本研究では、電子衝突によりカルシウム原子が基底状態である $4s^2\ {}^1S^e$ 状態から $4s4p\ {}^1P^o$ 状態へ遷移し、その後、光を放出し、電子が $4s4p\ {}^1P^o$ 状態から $4s^2\ {}^1S^e$ 状態へ遷移する過程 ($4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o \rightarrow 4s^2\ {}^1S^e$) について考慮した。入射電子のエネルギーが 10、20 及び 25 eV のときのカルシウム原子の $4s^2\ {}^1S^e \rightarrow 4s4p\ {}^1P^o$ 遷移における干渉パラーメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ を計算した。干渉パラーメーターを求める際、Kawazoe ら[4] の求めた標的の状態として 24 個の状態を考慮した RM24 におけるストークス・パラメーター P_1、P_2 及び P_3 を用いて計算した。

本研究で計算した RM24 における入射電子のエネルギーが 10 eV のときの干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ は Chauhan ら[3] の RDW における計算結果と一致していない。入射電子のエネルギーが 10 eV のときのストークス・パラメーター及び干渉パラメーターの実験値は報告されていない。今後の実験値との比較が待たれる。本研究で計算した RM24 における入射電子のエネルギーが 20 及び 25 eV のときの干渉パラメーター P_l、γ 及び $L_\perp$ は Murray と Cvejanovic[1] の実験結果と良く一致した。

参考文献

1) A. J. Murray and D. Cvejanovic, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 4889(2003).

2) S. Milisavljević, D. Šević, V. Pejčev, D. M. Filipović and B. P. Marinković, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37**, 3571(2004).

3) R. K. Chauhan, R. Srivastava and A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38**, 2385(2005).
R. K. Chauhan, R. Srivastava and A. D. Stauffer, private communication, (2005).

4) S. Kawazoe, T. Kai, R. K. Chauhan, R. Srivastava and S. Nakazaki, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, 493(2006).

5) E. P. Wigner and L. Eisenbud, Phys. Rev. **72**, 29(1947).

6) P. G. Burke, A. Hibbert and W. D. Robb, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **4**, 153(1971).

7) N. Andersen, J. W. Gallagher and I. V. Hertel, Phys. Rep. **279**, 251(1988).

8) K. Blum 1996 *Density Matrix Theory and Applications* 2nd ed. (Plenum, New York, 1996)