超球座標による水素様イオンと２電子の同時衝突

村田 雅義[1)] ・ 甲斐 健師[2)] ・ 五十嵐 明則[3)] ・ 中崎 忍[4)] ・ 大崎 明彦[4),†]

Excitation of 1s-2s transition of hydrogen like ions by simultaneous two-electron scattering in terms of hypersherical coordinates

M. Murata, T. Kai, A. Igarashi, S. Nakazaki and A. Ohsaki
†E-mail of corresponding author: *ohsaki@phys.miyazaki-u.ac.jp*

Abstract

The excitations of ions in plasmas are mainly caused by the electron impact. When plasma density is low, this process described well by the isolated scattering of electrons. As the density increases, simultaneous scattering of many electrons becomes important. In the present study, we formulate the excitation of the $1s-2s$ transition for hydrogenic ions by the simultaneous two-electron scattering in terms of hyperspherical coordinates. We derived analytical formulas with respect to the matrix elements in the first Born approximation, and compare with the numerical integrations. In the hyperspherical coordinates, we can treat the problem of simultaneous multi-body scattering as a problem of one-body potential-scattering in the multi-dimensional space. We use unperturbed wave functions for the target electron.

Key words : Three-body Collision, High Density Plasma, Hyperspherical Coordinates, Simultaneous Two-electron Scattering

1. 序論

プラズマ中でイオンが励起する過程は、電子衝突が主である。プラズマの密度が低い場合、その過程は電子１個がイオンに衝突するという２体衝突のモデルで十分記述できるが、プラズマの密度が高い場合には、イオンに複数の電子が同時衝突するような多体衝突の頻度が増大してくると期待される。
その具体的な例として、２つの電子 e_1, e_2 があるイオン A に同時衝突してイオンが A^* に励起される過程

$$e_1 + e_2 + A \rightarrow e_1 + e_2 + A^* \tag{1}$$

を考える。この過程については市村等[1)] による反応速度の計算もあるが、２体散乱の特異性から、満足のいく定式化は成されていないのが現状である。本論文では、超球座標を用いて、２電子の同時衝突による水素様イオンの励起過程の定式化を行っている。超球座標を用いること、多体衝突の問題は、多次元空間の１粒子の散乱問題として取り扱うことが出来る。それによって散乱断面積を定義することが可能になる。簡単化のため、標的イオンの束縛状態は無摂動系の波動関数を使用しており、２つの入射電子はいずれも平面波として取り扱っている。標的の核電荷が大きい場合にはクーロン波を用いる必要がある。本論文では、まず、多次元空間に於ける散乱の境界条件を導出し、散乱方程式と散乱断面積を定義する。その後で、第１次 Born 近似を適用し、水素様イオンの 1s-2s 励起散乱の定式化を行う。また、定式化した散乱断面積に含まれる２重積分についての解析公式を導出し、数値積分の結果と比較検討する。特に断らない限り、本論文では原子単位系を用いる。

2. 理論

2.1 散乱方程式と散乱の境界条件

空間に固定された水素様イオンによる２電子の同時衝突を考える。全系のシュレディンガー方程式は、次のように書ける。

1) 物質工学専攻大学院生
2) 物質エネルギー工学専攻大学院生
3) 材料物理工学科助教授
4) 材料物理工学科教授

$$\Big(-\frac{1}{2}\Delta_1^{(3)}-\frac{1}{2}\Delta_2^{(3)}-\frac{1}{2}\Delta_3^{(3)}+\frac{1}{r_{12}}+\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}$$
$$-\frac{Z}{r_1}-\frac{Z}{r_2}-\frac{Z}{r_3}-E\Big)\Psi=0 \quad (2)$$

ここで、r_{ij} は電子 i と電子 j の相対距離、r_i は電子 i と原子核 (電荷 Z) との相対距離を表す。標的の固有状態は以下のシュレディンガー方程式を解いて得られる。

$$(-\frac{1}{2}\Delta_3^{(3)}-\frac{Z}{r_3}-\epsilon_a)\psi_a=0 \quad (3)$$

ここで、ψ_a 及び ϵ_a は量子状態 a の固有関数と固有エネルギーである。この固有関数 ψ_a を用いて、全波動関数 $\Psi(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2},\mathbf{r_3})$ を次のように展開する。

$$\Psi=\sum_a \chi_a(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})\psi_a(\mathbf{r_3}) \quad (4)$$

これを (2) 式に代入し、左から $\psi_a^*(\mathbf{r_3})$ をかけて $\mathbf{r_3}$ について積分すると、散乱方程式

$$[\Delta_1^{(3)}+\Delta_2^{(3)}+k_a^2]\chi_a=2\sum_{a'}V_{aa'}\chi_{a'}, \quad (5)$$

$$V_{aa'}=\langle\psi_a|V|\psi_{a'}\rangle, k_a^2=2(E-\epsilon_a) \quad (6)$$

が得られる。非弾性散乱 $a\to a'$ の場合には、標的の波動関数の直交性により $\langle\psi_a|V|\psi_{a'}\rangle$ は $\langle\psi_a|r_{13}^{-1}+r_{23}^{-1}|\psi_{a'}\rangle$ の項だけが残る。

この散乱方程式を次の超球座標を用いて書き換える。

$$\begin{array}{ll} x_1=\rho\cos\alpha\sin\theta_1\cos\phi_1, & x_2=\rho\sin\alpha\sin\theta_2\cos\phi_2 \\ y_1=\rho\cos\alpha\sin\theta_1\sin\phi_1, & y_2=\rho\sin\alpha\sin\theta_2\sin\phi_2 \\ z_1=\rho\cos\alpha\cos\theta_1, & z_2=\rho\sin\alpha\cos\theta_2 \end{array} \quad (7)$$

ここで、$\mathbf{r_1}=(x_1,y_1,z_1)$、$\mathbf{r_2}=(x_2,y_2,z_2)$ はそれぞれ電子１、電子２の座標を表し、$\rho=\sqrt{\mathbf{r_1}^2+\mathbf{r_2}^2}$ は超球半径、$\alpha=\tan^{-1}r_2/r_1$ である。この超球座標を用いると、６次元のラプラシアン $\Delta^{(6)}(\equiv\Delta_1^{(3)}+\Delta_2^{(3)})$ は、次のように書ける。

$$\Delta^{(6)}=\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\Lambda^2}{\rho^2} \quad (8)$$

ここで Λ は一般化角運動量演算子であり、次の固有方程式を満たすことが知られている[2)]。

$$\begin{aligned}&\Lambda^2A_n^{l_1l_2}(\alpha)P_{l_1}(\cos\theta_1)P_{l_2}(\cos\theta_2)\\&=(l_1+l_2+2n+4)(l_1+l_2+2n)\\&\times A_n^{l_1l_2}(\alpha)P_{l_1}(\cos\theta_1)P_{l_2}(\cos\theta_2)\end{aligned} \quad (9)$$

ここで、$P_l(\cos\theta)$ はルジャンドル関数である。一方、$A_n^{l_1l_2}(\alpha)$ は超幾何級数 ${}_2F_1$ を用いて表すことが出来る。

$$\begin{aligned}A_n^{l_1l_2}(\alpha)&=\cos^{l_1}\alpha\sin^{l_2}\alpha\\&\times{}_2F_1(-n;l_1+l_2+n+2;l_2+3/2;\sin^2\alpha)\end{aligned} \quad (10)$$

角度関数 $A_n^{l_1l_2}(\alpha)$ は積分

$$\begin{aligned}&\int_0^{\pi/2}A_n^{l_1l_2}(\alpha)A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha)\sin^2\alpha\cos^2\alpha d\alpha\\&=\frac{n![\Gamma(l_2+3/2)]^2\Gamma(l_1+n+3/2)}{2(l_1+l_2+2n+2)(l_1+l_2+n+1)!\Gamma(l_2+n+3/2)}\delta_{nn'}\\&=N_n^{l_1l_2}\delta_{nn'}\end{aligned} \quad (11)$$

を用いて規格化することができる。ここで、$1/\sqrt{N_n^{l_1l_2}}$ は規格化定数である。

次に、散乱方程式にユニタリー変換 $U=\rho^{-5/2}$ を施すと、

$$U[\Delta^{(6)}+k_a^2]U^{-1}U\chi_a=2\sum_{a'}V_{aa'}U\chi_{a'} \quad (12)$$

となり、次の式が得られる。

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}-\frac{15}{4\rho^2}-\frac{\Lambda^2}{\rho^2}+k_a^2\right]y_a=2\sum_{a'}V_{aa'}y_{a'} \quad (13)$$

ここで、$y_a=U\chi_a$ である。ユニタリー変換した散乱方程式 (13) の形から、$\rho\to\infty$ における関数 y_a は、平面波の形になることが容易に分かる。従って、散乱波 χ_a の漸近形は次のようになる。

$$\chi_a\sim e^{i\mathbf{k_1}\cdot\mathbf{r_1}+i\mathbf{k_2}\cdot\mathbf{r_2}}+\frac{f(\Omega_{k_1}\Omega_{k_2}\beta;\Omega_{r_1}\Omega_{r_2}\alpha)e^{ik_a\rho}}{\rho^{5/2}} \quad (14)$$

この境界条件を用いると、多体同時衝突の断面積を多次元１粒子の散乱問題に置き換えて散乱断面積を定義することが出来る。散乱方程式を解いて得られた振幅 f から、散乱断面積が得られる。２体衝突の特異性は、終状態が２重の連続状態になっていることから容易に想像できよう。一方、超級座標による定式化では、漸近形から明らかなように、散乱の終状態は超球の動径方向に散乱した複合電子の散乱状態であり、その終状態は１重の連続状態である。従って、従来の散乱理論のように断面積の発散の問題は生じないが、逆に、散乱された個々の電子に対して終状態の波数 (k_1',k_2') を指定した計算には対応しておらず、始状態の波数依存性 $\beta(=\tan^{-1}k_2/k_1)$ のみが現れる。この点は不満の残るところではあるが、多体衝突の効果を理論的に調べるには有効であろう。

2.2 第１次 Born 近似による励起散乱断面積

散乱方程式はグリーン関数を用いて形式的に解くことが出来る。

$$\begin{aligned}\chi_{a'}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})&=\chi_a^{(0)}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})\delta_{aa'}\\&-2\int G_k(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}|\mathbf{r_1'},\mathbf{r_2'})\\&\times V_{a'a}(\mathbf{r_1'},\mathbf{r_2'})\chi_{a'}(\mathbf{r_1'},\mathbf{r_2'})d\mathbf{r_1'}d\mathbf{r_2'}\end{aligned} \quad (15)$$

ここで、$G_k(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}|\mathbf{r_1'},\mathbf{r_2'})$ は２体グリーン関数

$$\begin{aligned}G_k(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}|\mathbf{r_1'},\mathbf{r_2'})&=\frac{i\pi}{2}\sum_{nl_1l_2m_1m_2}\frac{A_n^{l_1l_2}(\alpha)A_n^{l_1l_2}(\alpha')}{N_n^{l_1l_2}}\\&\times Y_{l_1m_1}^*(\Omega_{r_1})Y_{l_1m_1}(\Omega_{r_1}')Y_{l_2m_2}^*(\Omega_{r_2})Y_{l_2m_2}(\Omega_{r_2}')\\&\times\frac{J_{l_1+l_2+2n+2}(k\rho_<)}{\rho_<^2}\frac{H_{l_1+l_2+2n+2}^{(1)}(k\rho_>)}{\rho_>^2}\end{aligned} \quad (16)$$

である。ここで、$\rho_> = \max(\rho,\rho')$、$\rho_< = \min(\rho,\rho')$ である。また、$J_\nu(k\rho)$ はベッセル関数、$Y_{lm}(\Omega)$ は球面調和関数、$H_\nu^{(1)}(k\rho)$ は第1種のハンケル関数である。また、$\chi_a^{(0)}(\rho)$ は入射平面波であり、一般化運動量演算子 Λ の固有関数で展開すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
&\chi_a^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k_1}\cdot\mathbf{r_1}+i\mathbf{k_2}\cdot\mathbf{r_2}}\\
&= \exp\left(ik\rho\cos\beta\cos\alpha\cos\Theta_1 + ik\rho\sin\beta\sin\alpha\cos\Theta_2\right)\\
&= \frac{\pi}{4k^2\rho^2}\sum_{nl_1l_2}(-1)^n i^{l_1+l_2}(2l_1+1)(2l_2+1)\\
&\times\frac{A_n^{l_1l_2}(\beta)A_n^{l_1l_2}(\alpha)}{N_n^{l_1l_2}}P_{l_1}(\cos\Theta_1)P_{l_2}(\cos\Theta_2)J_{l_1+l_2+2n+2}(k\rho),\\
&= \frac{4\pi^3}{k^2\rho^2}\sum_{nl_1l_2m_1m_2}(-1)^n i^{l_1+l_2}\frac{A_n^{l_1l_2}(\beta)A_n^{l_1l_2}(\alpha)}{N_n^{l_1l_2}}\\
&\times Y_{l_1m_1}(\Omega_{r_1})Y^*_{l_1m_1}(\Omega_{k_1})\\
&\times Y_{l_2m_2}(\Omega_{r_2})Y^*_{l_2m_2}(\Omega_{k_2})J_{l_1+l_2+2n+2}(k\rho) \qquad (17)
\end{aligned}$$

ここで $\alpha=\tan^{-1}r_2/r_1, \beta=\tan^{-1}k_2/k_1, \Omega=(\theta,\phi)$ である。これを積分方程式 (15) 第2項の $\chi_{a'}(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2')$ に代入し、(14) の漸近形と比較すると、第1次 Born 近似の散乱振幅が得られる。

$$\begin{aligned}
&f^B_{a\to a'}(\Omega_{k_1}\Omega_{k_2}\beta;\Omega_{r_1}\Omega_{r_2}\alpha) = \pi e^{i\pi/4}\sqrt{\frac{2^5\pi^5}{k_{a'}k_a^4}}\\
&\times\sum_{n'l_1'l_2'm_1'm_2'}(-1)^{n'}(-i)^{l_1'+l_2'}\sum_{nl_1l_2m_1m_2}(-1)^n i^{l_1+l_2}\frac{A_{n'}^{l_1'l_2'}(\alpha)}{\sqrt{N_{n'}^{l_1'l_2'}}}\\
&\times Y_{l_1'm_1'}(\Omega_{r_1})Y_{l_2'm_2'}(\Omega_{r_2})\frac{A_n^{l_1l_2}(\beta)}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}Y^*_{l_1m_1}(\Omega_{k_1})Y^*_{l_2m_2}(\Omega_{k_2})\\
&\times\int J_{l_1'+l_2'+2n'+2}(k_{a'}\rho')\frac{A_{n'}^{l_1'l_2'}(\alpha')}{\sqrt{N_{n'}^{l_1'l_2'}}}V^{a'l_1'l_2'm_1'm_2'}_{al_1l_2m_1m_2}(\rho',\alpha')\\
&\times J_{l_1+l_2+2n+2}(k_a\rho')\frac{A_n^{l_1l_2}(\alpha')}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}\rho'd\rho'\cos^2\alpha'\sin^2\alpha'd\alpha' \qquad (18)
\end{aligned}$$

ここで、$V^{a'l_1'l_2'm_1'm_2'}_{al_1l_2m_1m_2}(\rho',\alpha')$ は以下の式を簡略化したものである。

$$\begin{aligned}
&V^{a'l_1'l_2'm_1'm_2'}_{al_1l_2m_1m_2}(\rho',\alpha') =\\
&\qquad\left\langle Y_{l_1'm_1'}Y_{l_2'm_2'}\middle|V_{a'a}(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2')\middle|Y_{l_1m_1}Y_{l_2m_2}\right\rangle \qquad (19)
\end{aligned}$$

1s→2s 遷移の行列要素 $V_{a'a}$ は $\Omega'_{r_1},\Omega'_{r_2}$ に依存しないので

$$\begin{aligned}
&V^{a'l_1'l_2'm_1'm_2'}_{al_1l_2m_1m_2}(\rho',\alpha') =\\
&\qquad v_{a'a}(\rho',\alpha')\delta_{l_1l_1'}\delta_{m_1m_1'}\delta_{l_2l_2'}\delta_{m_2m_2'} \qquad (20)
\end{aligned}$$

となる。従って、散乱振幅は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
&f^B_{a\to a'}(\Theta_1,\Theta_2;\alpha,\beta) = e^{i\pi/4}\sqrt{\frac{\pi^3}{2^3k_{a'}k_a^4}}\\
&\times\sum_{n'nl_1l_2}(-1)^{n'+n}(2l_1+1)(2l_2+1)\\
&\times P_{l_1}(\cos\Theta_1)P_{l_2}(\cos\Theta_2)\frac{A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha)}{\sqrt{N_{n'}^{l_1l_2}}}\frac{A_n^{l_1l_2}(\beta)}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}\\
&\times\int J_{l_1+l_2+2n'+2}(k_{a'}\rho')\frac{A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha')}{\sqrt{N_{n'}^{l_1l_2}}}v_{a'a}(\rho',\alpha')\\
&\times J_{l_1+l_2+2n+2}(k_a\rho')\frac{A_n^{l_1l_2}(\alpha')}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}\rho'd\rho'\cos^2\alpha'\sin^2\alpha'd\alpha' (21)
\end{aligned}$$

第1次 Born 近似の励起散乱断面積は次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
\sigma_{a\to a'}(\beta) &= \frac{k_{a'}}{k_a}\int|f^B_{a\to a'}|^2\cos^2\alpha\sin^2\alpha\ d\alpha\ d\Omega_1 d\Omega_2\\
&= \frac{\pi^5}{2k_a^5}\sum_{nn''l_1l_2}(-1)^{n+n''}(2l_1+1)(2l_2+1)\\
&\qquad\times\frac{A_n^{l_1l_2}(\beta)}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}\frac{A_{n''}^{l_1l_2}(\beta)}{\sqrt{N_{n''}^{l_1l_2}}}W^{a'nn''}_{al_1l_2} \qquad (22)
\end{aligned}$$

ただし、$W^{a'nn''}_{al_1l_2}\equiv\sum_{n'}U^{a'n'}_{anl_1l_2}(U^{a'n'}_{an''l_1l_2})^*$ である。また、$U^{a'n'}_{anl_1l_2}$ は以下の積分を表す。

$$\begin{aligned}
&U^{a'n'}_{anl_1l_2} = 2\int_0^{\pi/2}\cos^2\alpha\sin^2\alpha d\alpha\frac{A_n^{l_1l_2}(\alpha)}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}\frac{A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha)}{\sqrt{N_{n'}^{l_1l_2}}}\\
&\times\int_0^\infty J_{l_1+l_2+2n+2}(k_a\rho)v_{a'a}(\rho,\alpha)J_{l_1+l_2+2n'+2}(k_{a'}\rho)\rho d\rho \ (23)
\end{aligned}$$

ここで $v_{a'a}(\rho,\alpha)$ は 1s→2s 遷移の行列要素であり、次式で定義されている。

$$\begin{aligned}
&\langle\psi_{2s}(\mathbf{r_3})|\ \frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}\ |\psi_{1s}(\mathbf{r_3})\rangle\\
&= \frac{8\sqrt{2}\lambda}{81}\left\{(1+\lambda r_1)e^{-\lambda r_1}+(1+\lambda r_2)e^{-\lambda r_2}\right\}\\
&= v_{2s,1s}(\rho,\alpha)\quad,\quad\lambda=3Z/2 \qquad (24)
\end{aligned}$$

2.3 2重積分 $U^{a'n'}_{anl_1l_2}$ について

前節で導入した $U^{a'n'}_{anl_1l_2}$ の解法について、$U^{a'n'}_{anl_1l_2}$ を解析的に計算する方法を考える。まず、2重積分 $U^{a'n'}_{anl_1l_2}$ を計算する際に、角度部分 α と動径部分 ρ のどちらを先に積分するかが問題になる。角度部分の積分を先に実行すると、ρ の逆べきが出てくることになる。この場合、ベッセル関数の積分に出てくる不連続性の問題が生じるため、まず動径部分の積分を計算し、その後に角度部分の積分を処理するという方法を選択した。見通しを良くするため、動径部分の積分を

$$I_i(\alpha) = \int_0^\infty\rho\left\{1+C_i(\alpha)\rho\right\}J_\mu(a\rho)J_\nu(b\rho)e^{-C_i(\alpha)\rho}d\rho,\qquad (i=1,2)\qquad (25)$$

のように表す。ただし、$C_1(\alpha)=\lambda\cos\alpha, C_2(\alpha)=\lambda\sin\alpha$ であり、$\mu=l_1+l_2+2n+2, \nu=l_1+l_2+2n'+2, a=k_a, b=k_{a'}$ である。この表記を用いると $U^{a'n'}_{anl_1l_2}$ は

$$\begin{aligned}
U^{a'n'}_{anl_1l_2} = 2\int_0^{\pi/2}(I_1(\alpha)+I_2(\alpha))\frac{A_n^{l_1l_2}(\alpha)}{\sqrt{N_n^{l_1l_2}}}\frac{A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha)}{N_{n'}^{l_1l_2}}\\
\times\cos^2\alpha\sin^2\alpha d\alpha \qquad (26)
\end{aligned}$$

と書ける。$\alpha=0, \alpha=\pi/2$ で正則な形の積分公式が必要であるが、既存の積分公式集[3]には利用可能な公式が無いため、幾つかの積分公式を導出した。単純にベッセル関数をべき展開して ρ で積分すると既存の積分公式が利用できるが、$\sin\alpha(\cos\alpha)$ の高次の逆べきが生じて、それ以降の角度 α に関する積分が困難になる。ベッセル関数を含む積分の公式[3]

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x}J_\mu(\beta x)x^{k-1}dx$$
$$=\frac{1}{(\alpha^2+\beta^2)^{k/2}}\Gamma(\mu+k)P_{k-1}^\mu\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}\right) \quad (27)$$

を利用し、ベッセル関数のべき級数展開[4]

$$J_\mu(ax)=\left(\frac{ax}{2}\right)^\mu\sum_{m=0}^\infty\frac{(-1)^m(ax/2)^{2m}}{m!\Gamma(m+\mu+1)} \quad (28)$$

と、ルジャンドル関数の性質[4]

$$P_\nu^{-m}(x)=(-1)^m\frac{\Gamma(\nu-m+1)}{\Gamma(\nu+m+1)}P_\nu^m(x) \quad (29)$$

を考慮すると、次の積分公式

$$\int_0^\infty x(1+cx)e^{-cx}J_\mu(ax)J_\nu(bx)dx=\left(\frac{a}{2\sqrt{b^2+c^2}}\right)^\mu$$
$$\times\frac{1}{b^2+c^2}\sum_{m=0}^\infty\frac{(\mu+\nu+2m+1)!}{m!(m+\mu)!}\left(-\frac{a^2}{4(b^2+c^2)}\right)^m$$
$$\times\left\{P_{2m+\mu+1}^{-\nu}\left(\frac{c}{\sqrt{b^2+c^2}}\right)\right.$$
$$\left.+\frac{(\mu+\nu+2m+2)c}{\sqrt{b^2+c^2}}P_{2m+\mu+2}^{-\nu}\left(\frac{c}{\sqrt{b^2+c^2}}\right)\right\} \quad (30)$$

が得られる。ただし、a,b,c は実数で $a,b,c\geq 0$ である。また、この積分公式は、超幾何級数 ${}_2F_1$ を用いても表せる。

$$\int_0^\infty x(1+cx)e^{-cx}J_\mu(ax)J_\nu(bx)dx$$
$$=\left(\frac{a}{2\sqrt{b^2+c^2}}\right)^\mu\frac{(-1)^\nu}{b^2+c^2}\left(\frac{\sqrt{b^2+c^2}-c}{\sqrt{b^2+c^2}+c}\right)^{\nu/2}$$
$$\times\sum_{m=0}^\infty\frac{(\mu+\nu+2m+1)!}{m!\nu!(m+\mu)!}\left(-\frac{a^2}{4(b^2+c^2)}\right)^m$$
$$\times\left\{{}_2F_1\left(-\mu-2m-1,\mu+2m+2,\nu+1;\frac{\sqrt{b^2+c^2}-c}{2\sqrt{b^2+c^2}}\right)\right.$$
$$+\frac{(\mu+\nu+2m+2)c}{\sqrt{b^2+c^2}}$$
$$\left.\times{}_2F_1\left(-\mu-2m-2,\mu+2m+3,\nu+1;\frac{\sqrt{b^2+c^2}-c}{2\sqrt{b^2+c^2}}\right)\right\}$$
$$(31)$$

ルジャンドル関数による積分公式は、科学サブルーチンを利用した高精度計算が期待できるが、P_ν^μ の $|\mu|>\nu$ の場合も計算に必要であり、超幾何級数による公式も有用である。

この表式は、直接計算で求めることも出来るが、ルジャンドル陪関数の超幾何級数表示を代入すれば容易に得られる。[4]

$$P_\nu^\mu(x)=\frac{e^{\mu\pi i}}{\Gamma(1-\mu)}\left(\frac{1+x}{1-x}\right)^{\mu/2}$$
$$\times{}_2F_1(-\nu,\nu+1,1-\mu;\frac{1-x}{2}) \quad (32)$$

また、ベッセル関数の積に関する公式[5]

$$\left(\frac{z}{2}\right)^{\gamma-\mu-\nu}J_\mu(\alpha z)J_\nu(\beta z)$$
$$=\frac{\alpha^\mu\beta^\nu}{\Gamma(\mu+1)\Gamma(\nu+1)}\sum_{m=0}^\infty\frac{(\gamma+2m)\Gamma(\gamma+m)}{m!}$$
$$\times F_4(-m,\gamma+m;\mu+1,\nu+1;\alpha^2,\beta^2)\ J_{\gamma+2m}(z) \quad (33)$$

を (25) に代入し、公式[5]

$$\int_0^\infty e^{-\gamma t}J_\mu(at)dt=\frac{(\sqrt{\gamma^2+a^2}-\gamma)^\mu}{a^\mu\sqrt{\gamma^2+a^2}} \quad (34)$$

を利用して計算を行うと、別の積分公式が得られる。

$$\int_0^\infty x(1+cx)e^{-cx}J_\mu(ax)J_\nu(bx)dx$$
$$=\frac{2a^\mu b^\nu}{B(\mu+1,\nu+1)}\frac{(\sqrt{c^2+1}-c)^{\mu+\nu+1}}{\sqrt{c^2+1}}$$
$$\times\sum_{m=0}^\infty\frac{(\sqrt{c^2+1}-c)^{2m}}{m!}(\mu+\nu+2)_m\left\{\frac{(\mu+\nu+2m+1)}{(\mu+\nu+m+1)}\right.$$
$$\times F_4(-m,\mu+\nu+m+1;\mu+1,\nu+1;a^2,b^2)$$
$$+2(\mu+\nu+2m+2)(\sqrt{c^2+1}-c)c$$
$$\left.\times F_4(-m,\mu+\nu+m+2;\mu+1,\nu+1;a^2,b^2)\right\} \quad (35)$$

ここで $B(x,y)(=\Gamma(x)\Gamma(y)/\Gamma(x+y))$ はベータ関数、F_4 は一般化された2変数の超幾何級数

$$F_4(\alpha,\beta,\gamma,\gamma';x,y)=\sum_{m,n}\frac{(\alpha)_{m+n}(\beta)_{m+n}}{(\gamma)_m(\gamma')_n m!n!}x^my^n \quad (36)$$

であり、$(\alpha)_n=\Gamma(\alpha+n)/\Gamma(\alpha)$ は Pochhammer 記号[4]である。根号の部分を展開すると、

$$\int_0^\infty x(1+cx)e^{-cx}J_\mu(ax)J_\nu(bx)dx$$
$$=\frac{2a^\mu b^\nu}{B(\mu+1,\nu+1)}\sum_{m=0}^\infty\frac{(\mu+\nu+2)_m}{m!}\left[\frac{(\mu+\nu+2m+1)}{(\mu+\nu+m+1)}\right.$$
$$\times F_4(-m,\mu+\nu+m+1;\mu+1,\nu+1;a^2,b^2)$$
$$\times\left\{{}_2F_1\left(\frac{\mu+\nu+2m+2}{2},\frac{-(\mu+\nu+2m)}{2};\frac{1}{2};-c^2\right)\right.$$
$$-(\mu+\nu+2m+1)c$$
$$\left.\times{}_2F_1\left(\frac{\mu+\nu+2m+3}{2},\frac{-(\mu+\nu+2m-1)}{2};\frac{3}{2};-c^2\right)\right\}$$
$$+2(\mu+\nu+2m+2)c$$
$$\times F_4(-m,\mu+\nu+m+2;\mu+1,\nu+1;a^2,b^2)$$

$$\times\left\{{}_2F_1\left(\frac{\mu+\nu+2m+3}{2},\frac{-(\mu+\nu+2m+1)}{2};\frac{1}{2};-c^2\right)\right.$$
$$-(\mu+\nu+2m+2)c$$
$$\left.\left.\times{}_2F_1\left(\frac{\mu+\nu+2m+4}{2},\frac{-(\mu+\nu+2m)}{2};\frac{3}{2};-c^2\right)\right\}\right] \quad (37)$$

と書ける。ここで $c(=C_i(\alpha))$ は $\sin\alpha$ または $\cos\alpha$ に比例しているので、$\sin\alpha$ や $\cos\alpha$ のべき級数で表されたことになる。計算の詳細は省くが、ρ に関する積分が解析的に行えれば、残りの角度積分は

$$A_n^{l_1l_2}(\alpha)=(-1)^n\frac{(l_1+3/2)_n}{(l_2+3/2)_n}A_n^{l_2l_1}(\frac{\pi}{2}-\alpha) \quad (38)$$

を利用すると、

$$\int_0^{\pi/2}A_n^{l_1l_2}(\alpha)A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha)\,\cos^j\alpha\,\cos^2\alpha\,\sin^2\alpha\,d\alpha$$
$$=(-1)^{n+n'}\frac{(l_1+3/2)_n(l_1+3/2)_{n'}}{(l_2+3/2)_n(l_2+3/2)_{n'}}$$
$$\times\int_0^{\pi/2}A_n^{l_2l_1}(\alpha)A_{n'}^{l_2l_1}(\alpha)\,\sin^j\alpha\,\cos^2\alpha\,\sin^2\alpha\,d\alpha \quad (39)$$

および

$$\int_0^{\pi/2}A_n^{l_1l_2}(\alpha)A_{n'}^{l_1l_2}(\alpha)\,\sin^j\alpha\,\cos^2\alpha\,\sin^2\alpha\,d\alpha$$
$$=(-1)^{n'}\frac{\Gamma(l_1+n'+3/2)\Gamma(l_2+(j+3)/2)(1-n'+j/2)_{n'}}{2(l_2+3/2)_{n'}\Gamma(l_1+l_2+n'+3+j/2)}$$
$$\times{}_4F_3\left[\begin{array}{c}1+j/2,l_2+(j+3)/2,l_1+l_2+n+2,-n;1\\1-n'+j/2,l_2+3/2,l_1+l_2+n'+3+j/2\end{array}\right] \quad (40)$$

が得られ、これらを用いて式 (37) は項別に積分することが出来る。ここで、${}_4F_3$ は一般化された超幾何級数[6]

$${}_4F_3\left[\begin{array}{l}a_1,a_2,a_3,a_4;z\\b_1,b_2,b_3\end{array}\right]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a_1)_n(a_2)_n(a_3)_n(a_4)_n}{(b_1)_n(b_2)_n(b_3)_n n!}z^n \quad (41)$$

である。従って行列要素を解析的に書き表すことは可能である。しかし、式 (37) の超幾何級数 ${}_2F_1$ の内、半分は有限項で終わるが残りは無限級数となるから、数値計算には向かないと思われる。

3. 数値計算の方法

行列要素 $U_{anl_1l_2}^{a'n'}$ を計算するために、前章で述べた積分公式を利用する方法とは別に、ガウス積分による数値計算も行う。動径部分の積分 (25) については、ベッセル関数の漸近形が

$$\lim_{x\to\infty}J_\mu(x)\sim\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\left(x-\frac{(2\mu+1)\pi}{4}\right) \quad (42)$$

となることを考慮して、次のように変形して数値積分を行う。

$$\int_0^\infty x(1+cx)e^{-cx}J_\mu(ax)J_\nu(bx)dx=\frac{1}{\pi\sqrt{ab}}$$
$$\times\left\{\frac{2c^3}{[c^2+(a+b)^2]^2}\cos\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}\pi\right)\right.$$
$$+\frac{(3c^2+(a+b)^2)(a+b)}{[c^2+(a+b)^2]^2}\sin\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}\pi\right)$$
$$+\frac{2c^3}{[c^2+(a-b)^2]^2}\cos\left(\frac{\nu-\mu}{2}\pi\right)$$
$$\left.+\frac{(3c^2+(a-b)^2)(a-b)}{[c^2+(a-b)^2]^2}\sin\left(\frac{\nu-\mu}{2}\pi\right)\right\}$$
$$+\int_0^\infty(1+cx)\left[xJ_\mu(ax)J_\nu(bx)-\frac{2}{\pi\sqrt{ab}}\right.$$
$$\left.\times\cos\left(ax-\frac{2\mu+1}{4}\pi\right)\cos\left(bx-\frac{2\nu+1}{4}\pi\right)\right]e^{-cx}dx \quad (43)$$

ガウス積分にはガウス・ルジャンドル積分公式を使用し、積分範囲を $[x,x+\Delta x]$ 区間に分けて収束するまで積分を行う。$\cos(ax+d)\cos(bx+d')\exp(-cx)$ 型の関数は、周期 $2\pi/a$ で最大6回の零点を持つから、N分点の公式なら $a\Delta x\simeq 2N$ となるように Δx を与えてやれば十分な精度が得られるはずである。本論文では $N=50$ とする。

4. 結果と考察

結果を考察する前に、数値計算の方法について簡単に述べる。角度関数 $A_n^{l_1l_2}(\alpha)$ は解析的に与えられているが、そのまま計算を行うと桁落ちのため正確な計算が出来ない。$|\alpha|<0.2$ 及び $|\alpha-\pi/2|<0.2$ については超幾何級数をそのまま使用して計算しているが、それ以外の領域では漸化式を用いている。角度積分については、ガウス・ルジャンドル積分の200分点公式を使用して、数値計算に於いて直交性がどこまで成り立つかを計算によって確かめた。倍精度計算の場合で 10^{-5} の誤差の範囲で直交性が成り立つのは、n が 55 まで、l_1,l_2 が 17 までであることが分かった。従って、以降の計算では、n を含む計算では n を最大 55 まで、l_1,l_2 を含む計算では l_1,l_2 を最大 17 まで取っている。

$U_{anl_1l_2}^{a'n'}$ に含まれる積分

$$\int_0^\infty\rho\left\{1+C\rho\right\}J_\mu(a\rho)J_\nu(b\rho)e^{-C\rho}d\rho \quad (44)$$

の解析公式を適用した結果と数値積分の結果を図1に示す。

計算は $\mu=\nu$ の場合についておこなった。水素原子を考えているので C=$3Z/2$=1.5 である。また、水素原子 1s-2s の励起エネルギー E_0 を用いて、係数 a,b は敷居値単位 $X=E/E_0$ で以下のように書ける。

$$a=\sqrt{2E_0X} \quad (45)$$
$$b=\sqrt{2E_0(X-1)} \quad (46)$$

実際の計算では、X=1.5 とした。縦軸に積分の結果を、横軸にベッセル関数の添字 $\mu(=\nu)$ をとっている。図1を見る限り、F_4 を含む解析公式は $\mu=6$、${}_2F_1$ を含む解析公式は $\mu=27$、ルジャンドル陪関数 P_n^m を含む解析公式は $\mu=122$ において、それぞれ値が急激に増大している。これは桁落

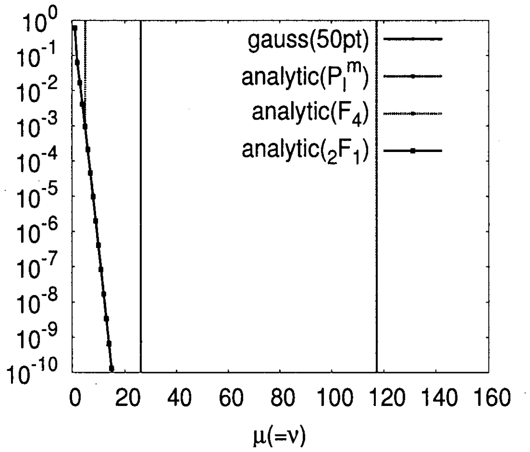
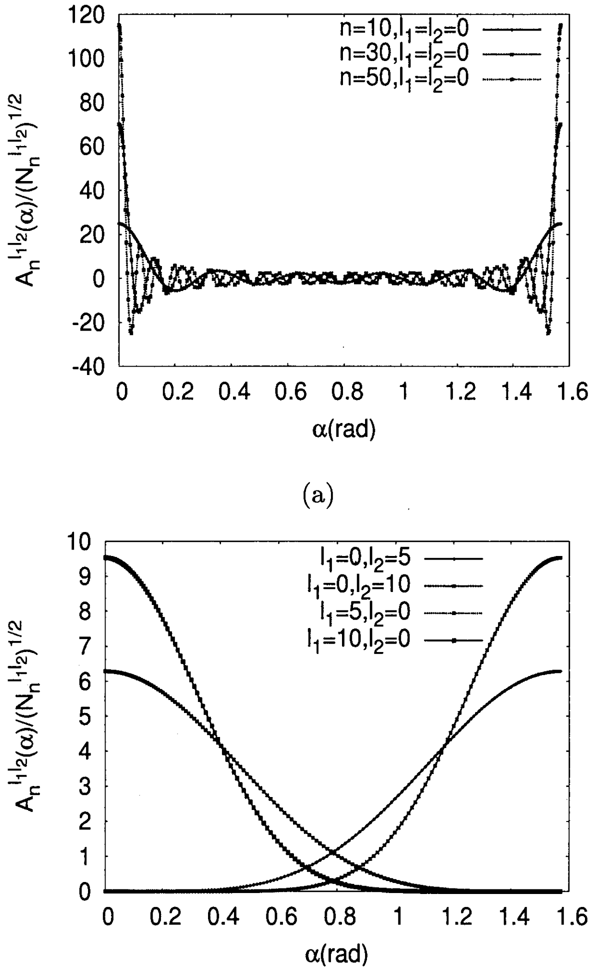


Fig. 1　積分 (25) の解析公式と数値積分の比較



(a)

(b)

Fig. 2　$A_n^{l_1l_2}(\alpha)/\sqrt{N_n^{l_1l_2}}$ の角度依存性

ちが原因であると考えられる。角度関数の直交性が成り立つ範囲を μ,ν に書き直すと、$\mu,\nu \le 2l+2n+2$ より、最大で 146 まで計算可能であるが、いずれの解析公式もその最大値付近までの計算が出来ない。一方、数値積分の方は不自然な振る舞いを示しておらず十分な精度が得られていると考えられる。従って、ベッセル関数を含む積分は数値積分で行うことにした。

続いて、規格化された角度関数 $A_n^{l_1l_2}(\alpha)/\sqrt{N_n^{l_1l_2}}$ の角度依存性を図 2 に示す。図 2(a) は $l_1 = l_2 = 0$ の場合の、$n = 10, n = 30, n = 50$ の角度依存性である。α が 0 付近と $\pi/2$ 付近における関数の値が大きくなっていることが分かる。また、n の値が増えると、$A_n^{l_1l_2}(\alpha)/\sqrt{N_n^{l_1l_2}}$ の振動回数が増えていることが分かる。図 2(b) は $n = 0$ の場合の、$l_1 = 0, l_2 = 5$、$l_1 = 0, l_2 = 10$、$l_1 = 5, l_2 = 0$、$l_1 = 10, l_2 = 0$ の角度依存性である。l_1 の値が増えると $\alpha = 0$ 付近の値が増え、l_2 の値が増えると $\alpha = \pi/2$ 付近の値が増えている。また、l_1, l_2 について、$A_n^{l_1l_2}(\alpha)/\sqrt{N_n^{l_1l_2}}$ は $\alpha = \pi/4$ に関して対称であることが分かる。

散乱行列要素にスケーリング則があれば、水素原子の計算結果を他の標的に応用できる。水素様イオンの軌道半径が水素原子に比べて $1/Z$ にスケールされることから、$l_1 = l_2 = n = n" = 0$ の場合の $W_{al_1l_2}^{a'nn"} (= \sum_{n'} U_{anl_1l_2}^{a'n'} (U_{an"l_1l_2}^{a'n'})^*)$ を Z^2 でスケールした結果を図 3 に示す。比較のため、C^{5+}, O^{7+}, Fe^{+26} の計算結果を載せている。スケーリングされた C^{5+}, O^{7+}, Fe^{+26} の $W_{al_1l_2}^{a'nn"}$ の値は、水素の場合の $W_{al_1l_2}^{a'nn"}$ と良い一致を示している。従って、これ以降の計算は、すべて水素原子を標的として考える。

図 4 は $l_1 = l_2 = 0$ の場合について X=5.0 での $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ の n 依存性を表したものである。図を見る限り、n が大きくなるほど $W_{al_1l_2}^{a'nn"}$ の値は小さくなっているものの、今回計算した $n \le 55$ の範囲では収束していないことが分かる。そのため、断面積の計算まで行うことができなかった。図 5 は $n(= n")$ をパラメータとした場合の $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ の $l_2(= l_1)$ 依存性を示している。これを見る限り、$W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ は $l_2(= l_1)$ の大きい所で収束していることが分かる。図 6 は $n(= n")$ をパラメータとした場合の $l_1 = 0$ での $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ の l_2 依存性を示している。$n \ge 10$ の場合、l_1 と l_2 の差が大きくなっても、収束が遅いことが分かる。また、l_2 の大きな所で $n(= n")$ 依存性も小さいことが分かる。振動していないため外挿法により l の大きな部分からの寄与を見積もることが出来よう。この図の場合のように、収束性の悪い場合をどのように計算するかが今後の課題である。

5. 結論

水素原子と水素様イオンについては、$W_{al_1l_2}^{a'nn"}$ について Z^2 のスケーリング則が良く成り立っていることが分かった。核電荷 Z は断面積において $W_{al_1l_2}^{a'nn"}$ の部分にのみ影響を及ぼすことから、任意の水素様イオンの 2 電子同時衝突による断面積を、水素原子の断面積から求めることができる。

また、断面積の式に含まれる $W_{al_1l_2}^{a'nn"}$ の数値計算の結果を見る限り、断面積は $0 \le n \le 55, 0 \le l_1(l_2) \le 17$ の範囲

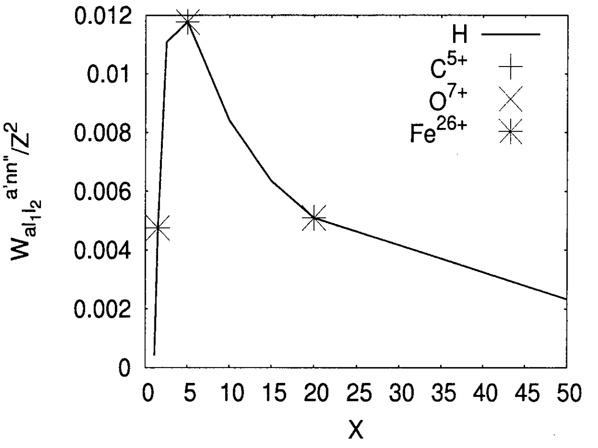


Fig. 3 水素様イオンの $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ $(l_1 = l_2 = n = n" = 0)$

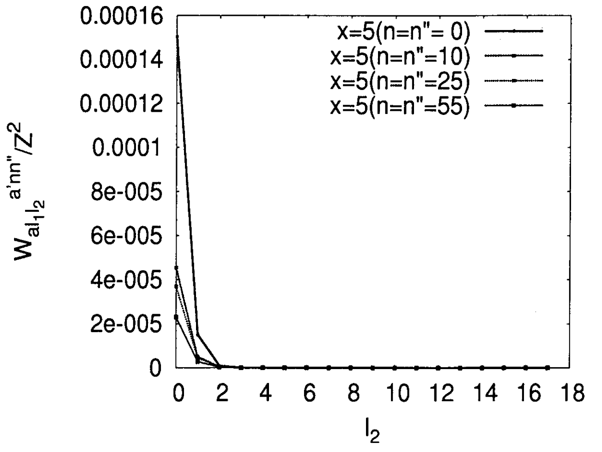


Fig. 5 $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ の l_2 依存性

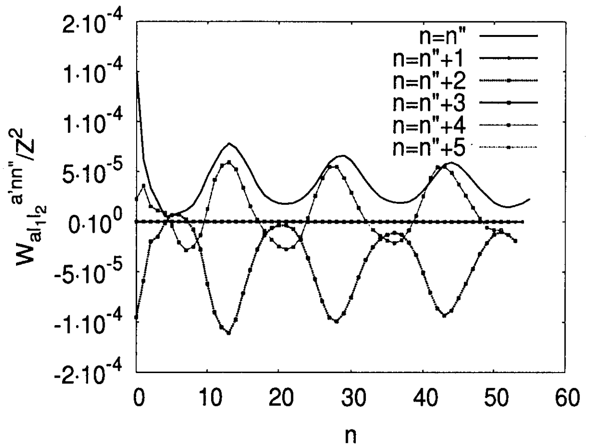


Fig. 4 $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ の n 依存性 $(l_1 = l_2 = 0)$

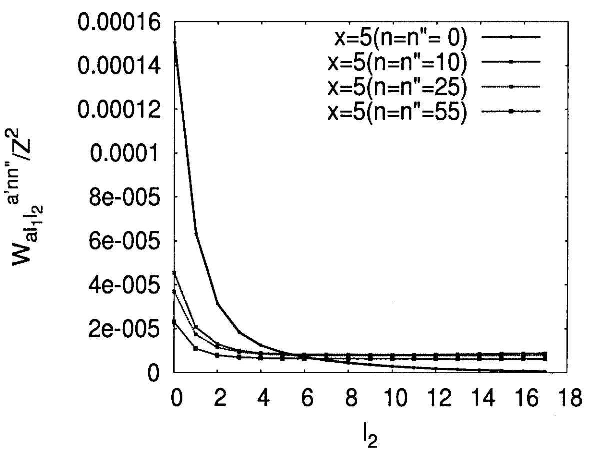


Fig. 6 $W_{al_1l_2}^{a'nn"}/Z^2$ の l_2 及び n=n" の依存性

では収束していない。これは、2電子の同時散乱では低エネルギーでも l の大きな部分まで必要であることを意味している。断面積を計算するためには、l や n の大きな部分からの寄与を精度良く計算する方法を考える必要がある。

本論文では平面波を用いたが、今後研究を進める上ではクーロン波を用いるほうが良いであろう。また、市村等[1]の計算との比較のためには、第2次ボルン近似の計算を行う必要がある。

参考文献

1) A.Ichimura and T.Tshushumi, J.Phys.Soc.Jpn, 57, No.5, pp.1631-1640

2) Morse and Feshbach, "METHODS OF THEORETICAL PHYSICS", Vol.2, (Boston, McGRAW-HILL, 1953)

3) I.S.Gradshteyn and I.M.Ryzhik, "TABLE OF INTEGRALS SERIES AND PRODUCTS", (New York, ACADEMIC PRESS, 1980)

4) 森口繁一 他 (著) 「岩波 数学公式Ⅲ 特殊関数」(岩波書店, 1960)

5) A.Erdélyi ed., "HIGHER TRANSCENDENTAL FUNCTIONS", Vol.2, (New York, McGRAW-HILL, 1953)

6) A.Erdélyi ed., "HIGHER TRANSCENDENTAL FUNCTIONS", Vol.1, (New York, McGRAW-HILL, 1953)