

# 重なり共鳴の解析における時間遅れ行列の応用

相葉 恵介<sup>1)</sup>, 五十嵐 明則<sup>2)</sup>, 島村 勲<sup>3)</sup>

## An application of time-delay matrix for analysis of overlapping resonances

Keisuke AIBA, Akinori IGARASHI and Isao SHIMAMURA

### Abstract

We have analyzed  $^1\text{P}^0$  resonances for He and  $\text{Ps}^-$  associated with  $n = 5$  thresholds of  $\text{He}^+$  and Ps by the time-delay matrix  $Q(E)$ .  $Q$ -matrix as functions of total energy  $E$  is constructed from scattering matrix obtained by scattering calculation. The eigenvalues  $\{q_i(E)\}$  of  $Q$ -matrix are quite useful to identify resonances in the energy region where some resonances overlap and where the eigenphase sum  $\delta(E)$  and its energy-derivative  $d\delta/dE$  do not provide enough information. Some overlapping resonances are appeared by examination of the eigenvalues  $\{q_i(E)\}$  for He and many new resonances are found for  $\text{Ps}^-$ .

**key words** : Overlapping resonances, Time-delay, Helium atom, Positronium negative ion, Atomic scattering

### 1. 序論

低エネルギー電子散乱や光電離などの原子衝突過程において共鳴状態が形成されることがある。共鳴状態は共鳴エネルギー位置  $E_r$  や共鳴幅  $\Gamma$  といった共鳴パラメータにより特徴付けられ、そのパラメータの計算には、主に複素回転法<sup>1,2)</sup>と散乱計算による方法が用いられる。複素回転法では、複素エネルギー平面上で  $S$  行列の極を  $E_r - i\Gamma/2$  としてパラメータ  $(E_r, \Gamma)$  を高い精度で得ることができるが、断面積などの物理量は得ることができない。

一方の散乱計算による方法では、通常は多チャンネル散乱計算で得られる固有位相  $\delta(E)$  を共鳴解析の対象とする。共鳴エネルギー領域において、固有位相  $\delta(E)$  は約  $\pi$  の急な増加を示し、 $\delta(E)$  のエネルギー微分  $d\delta/dE$  は、共鳴エネルギー領域で Lorentzian 型のピークを示す。この  $\delta(E)$  や  $d\delta/dE$  を Breit-Wigner 公式で表すことができ、この式にフィットすることで共鳴パラメータ  $(E_r, \Gamma)$  を得ることができる<sup>3)</sup>。しかし、この解析法は幅の異なるいくつかの共鳴が混在する重なり共鳴の解析では、幅の広い共鳴の判別が困難となり、あまり有効ではない。

別の共鳴解析方法として、時間遅れ行列  $Q(E)$  を用いる方法がある。 $Q$  行列は単チャンネルにおけるポテンシャル散乱の時間遅れの一般化として、Smith<sup>4)</sup>により定義された。 $Q$  行列は、散乱計算で得られる  $S$  行列を用いて表せるエルミチアン行列で、 $Q$  行列の対角要素和 ( $\text{Tr } Q(E)$ ) 及び  $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  は固有位相和の微分量  $d\delta/dE$  と比例関係にある。Igarashiらは、 $\text{Tr } Q(E)$  と同様に  $\{q_i(E)\}$  の考察が、背景の強い散乱過程で生じる共鳴状態の解析において有効であることを報告している<sup>5,6)</sup>。

最近では、重なり共鳴領域の  $\text{Tr } Q(E)$  のフィッティング式が Shimamura ら<sup>7)</sup>により定式化された。しかし、この式では重なる共鳴の数を予め知る必要がある。

本研究の目的は、固有位相  $\delta(E)$  や  $d\delta/dE$  を用いた従来の共鳴解析の方法では極めて困難であった重なり共鳴において、 $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  を用いた解析の有効性を示すことである。そのため、本研究では He 及び  $\text{Ps}^-$  の  $^1\text{P}^0$  共鳴状態を対象として、散乱計算を行い、共鳴の解析を行った。

以下、第2章で時間遅れ行列  $Q(E)$  を説明し、第3章で He( $^1\text{P}^0$ ) 及び  $\text{Ps}^-$ ( $^1\text{P}^0$ ) で見られた共鳴状態の計算結果と考察を述べ、第4章で結論を述べる。また、特に断らない限り、原子単位 (au) を用いる。

### 2. 時間遅れ行列

1) 宮崎大学大学院 工学研究科 博士前期過程 応用物理学専攻

2) 宮崎大学 工学部 材料物理工学科 助教授

3) 理化学研究所 中央研究所 原子物理研究室 研究嘱託

Smithは多チャネル散乱問題における  $Q$  行列を

$$Q(E) = -i\hbar \frac{dS}{dE} S^\dagger \quad (1)$$

のように定義した<sup>4)</sup>。ここで、 $S$ は開チャネルに関する  $S$  行列であり、開チャネルの数を  $n$  とすると、 $S$  行列は  $n \times n$  のユニタリ行列になる。記号  $\dagger$  はエルミート共役を示す。 $Q$  行列の対角要素  $Q_{ii}$  は常に実数を示し、始チャネル  $i$  についての散乱における平均の時間遅れを表すので、 $\text{Tr } Q(E)$ 、即ち  $2\hbar d\delta/dE$  は可能な散乱過程についての平均時間遅れの総和を表す。この  $Q$  行列の対角和 ( $\text{Tr } Q(E) \equiv \sum_i Q_{ii}$ ) と  $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$ 、そして固有位相  $\delta(E)$  の間には

$$\text{Tr } Q(E) = \sum_i q_i(E) = 2\hbar \frac{d\delta}{dE} \quad (2)$$

の関係が成立する。(2)式は共鳴の有無や、孤立共鳴あるいは重なり共鳴のエネルギー領域に関係なく、全てのエネルギー  $E$  で成り立つ [5]。

孤立共鳴のエネルギー領域では、固有位相  $\delta(E)$  や  $2\hbar d\delta/dE (= \text{Tr } Q(E))$  は

$$\delta(E) = \delta_b(E) + \arctan\left(\frac{\Gamma/2}{E_r - E}\right), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr } Q(E) &= 2\hbar \frac{d\delta}{dE} \\ &= 2\hbar \frac{d\delta_b}{dE} + \frac{\hbar\Gamma}{(E_r - E)^2 + (\Gamma/2)^2} \end{aligned} \quad (4)$$

のように Breit-Wigner 公式で表せる。ここで、 $E_r$  は共鳴エネルギー位置、 $\Gamma$  は共鳴幅、 $\delta_b(E)$  は背景固有位相を示す。固有位相  $\delta(E)$  や  $d\delta/dE$  を Breit-Wigner 公式にフィットすることで、共鳴パラメータ ( $E_r, \Gamma$ ) を得ることができる。

あるエネルギー領域で  $N$  個の共鳴が互いに重なり合って存在しているとき、固有位相  $\delta(E)$  及び  $d\delta/dE$  は

$$\delta(E) = \delta_b(E) + \sum_\nu \arctan\left(\frac{\Gamma_\nu/2}{E_\nu - E}\right), \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr } Q(E) &= 2\hbar \frac{d\delta}{dE} \\ &= 2\hbar \frac{d\delta_b}{dE} + \sum_\nu \frac{\hbar\Gamma_\nu}{(E_\nu - E)^2 + (\Gamma_\nu/2)^2} \end{aligned} \quad (6)$$

のように書ける<sup>7)</sup>。(6)式のように、 $\text{Tr } Q(E)$ 、即ち  $d\delta/dE$  は  $N$  個の Lorentzian と背景部分の重ね合わせで

表せ、各 Lorentzian から重なり合う個々の共鳴のパラメータを得ることができる。(6)式を使用するには、重なり合う共鳴の数を予め知る必要があるが、 $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  のエネルギー依存性が有用な情報を与えてくれることが第3章で示される。

### 3. 結果

本研究では、固有位相  $\delta(E)$  や  $S$  行列を求める散乱計算に、超球緊密結合法 (HSCC 法) を適用した<sup>8,9)</sup>。3粒子系における6次元の超球座標系は、超動径  $\rho$  と5次元の角度座標  $\Omega$  からなる。例えば、He原子における超動径は  $\alpha$  粒子からの電子の動径距離  $r_i$  ( $i = 1, 2$ ) に関して、 $\rho^2 = r_1^2 + r_2^2$  で定義できる。ハミルトニアンは  $\rho$  を断熱パラメータとする断熱項  $h_{ad}(\Omega; \rho)$  と  $\rho$  に関する微分演算子を含む項で構成される。断熱ハミルトニアン  $h_{ad}(\Omega; \rho)$  に関して、 $h_{ad}(\Omega; \rho)$  の固有関数、固有値はそれぞれ、断熱チャネル関数、及び断熱ポテンシャル  $\{U_i(\rho)\}$  である。

散乱解を精度良く得るためには、HSCC法で得られる結合方程式を十分大きな  $\rho$  まで解き、漸近領域では  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  で表される原子基底の漸近形に変換する。考えている粒子系は漸近的に電子と水素イオンの配置を取るため、双極子状態<sup>10)</sup>を用いることにより、双極子ポテンシャルの効果を考慮している。

今回の計算では、 $\text{He}^+(n=5)$  及び  $\text{Ps}(n=5)$  のしきい値エネルギー以下の共鳴状態を扱うため、 $e^- + \text{He}^+(n=1-6)$ 、 $e^- + \text{Ps}(n=1-6)$  に漸近的に解離する全てのチャネルを結合させた。ここで、 $n=5, 6$  のチャネルは閉チャネルとなる。多くの場合、対象とする系のチャネルに対して、 $n$  の1つ多い閉チャネルを入れることで、解における十分な精度を得られることが知られている。

#### 3.1 He 原子

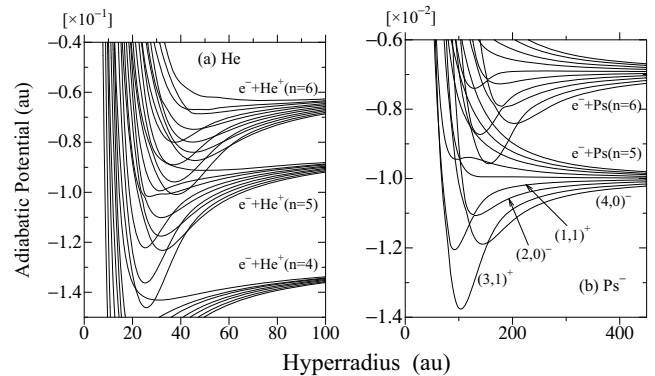


図 1. (a)  $\text{He}^+(\text{P}^*)$ 、(b)  $\text{Ps}^-(\text{P}^*)$  における断熱ポテンシャル  $\{U_i(\rho)\}$ 。(b)において、漸近領域で引力型の大極子ポテンシャルを示すものには相関量子数  $(K, T)^A$  を付記した。

図1(a)に  $\text{He}^+$  ( $n = 4, 5, 6$ ) のしきい値エネルギーに漸近的に収束する  $\text{He}(1\text{P}^0)$  の断熱ポテンシャルを示す。これら全てのポテンシャルは  $-2n^{-2} - \rho^{-1}$  の漸近形を持っているため、引力型クーロン相互作用による無限の Feshbach 共鳴が存在する。

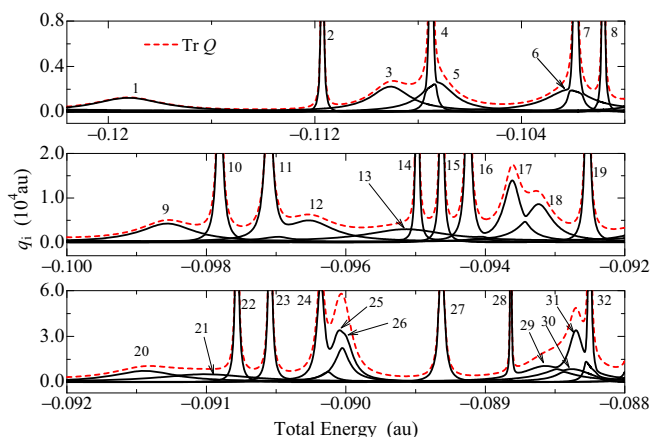


図 2.  $^*P$  対称性における  $\text{He}$  の  $\text{Tr } Q$  と  $Q$  行列の固有値  $\{q_i\}$ 。  
 $\{q_i(E)\}$  が示すピークに番号を付けている。

図 2 では、 $-0.121 \leq E \leq -0.088$  のエネルギー領域における  $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  と  $\text{Tr } Q(E)$  をエネルギー依存性を示す。全ての共鳴に関して、 $\text{Tr } Q(E)$  が典型的な Lorentzian 型のピークを示すわけではなく、特に重なり共鳴領域では、 $\text{Tr } Q(E)$  から共鳴の有無や多重度を判断するのは一般的に困難である。一方、 $\{q_i(E)\}$  は開チャネルと同数の 16 本の曲線で描かれており、多くの固有値は非常に小さい値であるが、いくつかの固有値が Lorentzian 型のピークや擬交差を示している。

図 2 において、1, 2, 27 と標記した共鳴は孤立共鳴であると考えられ、これらについては  $\text{Tr } Q(E)$  と  $\{q_i(E)\}$  が共に Lorentzian ピークを示している。ゆえに、この 3 つの共鳴については  $\text{Tr } Q(E)$  を (4) 式にフィットすることで十分である。

$\{q_i(E)\}$  の振る舞いで見られる 1, 2, 27 以外の共鳴は、互いにピークが重なり合った構造を示しており、それらは重なり共鳴として取り扱う必要がある。

図 3(a), (b), (c) では、重なり共鳴を示す領域の 1 つである  $-0.089 \leq E \leq -0.088$  のエネルギー領域における固有位相和  $\delta(E)$ 、 $\text{Tr } Q(E)$  及び  $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  等を示す。図 3(a) では  $\delta(E)$  の急な増加より 2 つ、また図 3(b) の  $\text{Tr } Q(E)$  では、そのピークから 3 つの共鳴があると考えられ、これより、 $d\delta/dE$  は  $\delta(E)$  よりも、共鳴を見つけ出すのにより感度の良いものであると分かる。しかし、(b) において  $\{q_i(E)\}$  を滑らかに

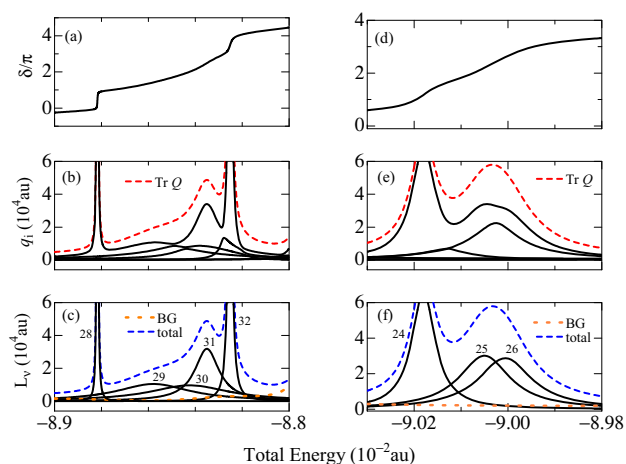


図 3.  $\text{He}(^*P^*)$  における 左:28~32, 右:24~26 の重なり共鳴領域の (a), (d) 固有位相和  $\delta$ , (b), (e)  $\text{Tr } Q$  と  $Q$  行列の固有値  $\{q_i\}$ , (c), (f) フィッティングによる Lorentzian ( $L_\nu$ ) と background (BG), 及びそれらの和 (total)。

つなぐことにより、全部で 5 つの Lorentzian 型のピークが見られ、このエネルギー領域には 5 つの共鳴が存在していると推測できる。 $\{q_i(E)\}$  の考察で見られた幅の広い 2 つのピーク構造 (29, 30) は  $\delta(E)$  や  $\text{Tr } Q(E)$  ( $= 2\hbar d\delta/dE$ ) を用いた解析では見過ごされていた共鳴である。これより、(6) 式において、 $\text{Tr } Q(E)$  5 つの Lorentzian と背景の重ね合わせにフィットした結果が図 3(c) である。各 Lorentzian 型のピークが  $\{q_i(E)\}$  の振る舞いを良く再現できている。図 3(c) の Lorentzian ( $L_\nu$ ) の重ねあわせと背景 (background) の総和 (total) は図 3(b) の  $\text{Tr } Q(E)$  と良い一致を示している。得られた各 Lorentzian ピークから、共鳴パラメータ ( $E_r, \Gamma$ ) を引き出すことができる。

同じく図 3 には、 $-0.0903 \leq E \leq -0.0898$  のエネルギー領域における重なり共鳴の解析も示している。図 3(d) の固有位相和  $\delta(E)$  では、緩やかな増加は見られるものの、狭いエネルギー領域での急な増加は見られず、共鳴の有無を判断しにくい。しかし、図 3(e) の  $\text{Tr } Q(E)$  では 2 つのピークが現れ、2 つの共鳴が存在しているように見える。次に図 3(e) の  $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  が示す振る舞いを滑らかにつないで見ると、 $E = -9.005 \times 10^{-2}$  付近で 2 つかそれ以上の数のピークが見受けられる。我々は、このエネルギー領域における  $\delta(E)$  の増加が約  $3\pi$  程度であることを考慮し、全部で 3 つの共鳴が存在すると考えた。図 3(f) には  $\text{Tr } Q(E)$  を 3 つの Lorentzian と背景の重ね合わせにフィットした結果を示す。図 3(c) と同様に、図 3(f) で示される各 Lorentzian ピークが図 3(e) の固有値  $\{q_i(E)\}$  の振る

舞いとよく対応しており、各 Lorentzian と背景の総和 (total) は、図 3(e) の  $\text{Tr } Q(E)$  と良い一致を示している。このことから、このエネルギー領域には 3 つの共鳴が存在することが分かる。

図 3 で扱ったエネルギー領域以外で見られる重なり共鳴についても、 $\{q_i(E)\}$  の振る舞いから重なり合う様子やその多重度を知ることができ、重なり共鳴領域の  $\text{Tr } Q(E)$  を (6) 式にフィットすることで、共鳴パラメータを引き出すことができる。今回計算したエネルギー領域では、全部で 32 個の共鳴を確認することができた。

### 3.2 $\text{Ps}^-$ イオン

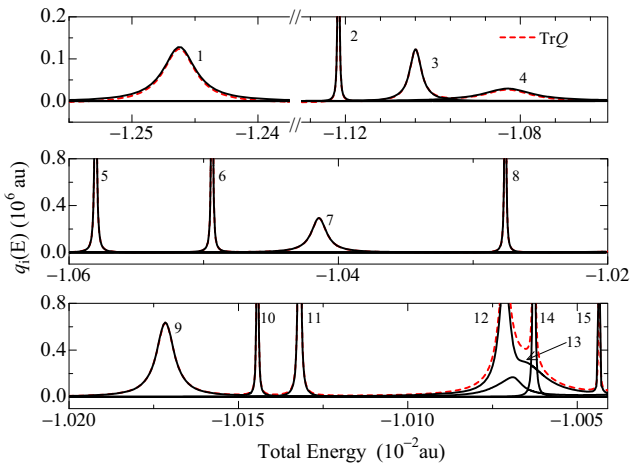


図 4. \*P\* 対称性における  $\text{Ps}^-$  の  $\text{Tr } Q$  と  $Q$  行列の固有値  $\{q_i\}$ 。  
 $\{q_i(E)\}$  の示すピークに番号を付けている。

図 1(b) は、 $e^- + \text{Ps}(n = 5, 6)$  に解離する  $\text{Ps}^-(^1\text{P}^o)$  の断熱ポテンシャルを示す。 $\text{Ps}(n \geq 2)$  の副準位の縮退のため、 $e^-$  と  $\text{Ps}(n)$  との間の漸近的な相互作用は双極子ポテンシャル  $\alpha(2MR^2)^{-1}$  により支配される。ここで、 $\alpha$  は双極子モーメント、 $M$  は換算質量、 $R$  は  $e^-$  と  $\text{Ps}(n)$  の間の距離を表す。 $\alpha$  が  $-1/4$  以下であるチャンネルのポテンシャルカーブは、無限の Feshbach 共鳴に対応する<sup>10)</sup>。図 1(b) における  $\text{Ps}(n = 5)$  のしきい値エネルギーに収束するポテンシャルの中で、相関量子数  $(K, T)^{A11,12}$  を標記した 4 つのチャンネルのポテンシャルが  $\alpha \leq -1/4$  となる。

図 4 は、 $\text{Ps}(n = 5)$  のしきい値エネルギー以下の領域の  $Q$  行列の固有値  $\{q_i(E)\}$  と  $\text{Tr } Q(E)$  を示している。He のときと同様に、ほとんどの  $\{q_i(E)\}$  は小さいが、1 つから 3 つの固有値が顕著なエネルギー依存性を見せている。特に  $\{q_i(E)\}$  の最大値  $q_{\max}(E)$  は  $\text{Tr } Q(E)$  とほぼ同じ振る舞いを見せており、それらが見せるピー

ク構造は孤立共鳴が多く、He の場合ほどの重なり共鳴は見られない。ゆえに、ここで見られる共鳴の解析のほとんどは、(4) 式による  $\text{Tr } Q(E)$  のフィッティングで十分である。

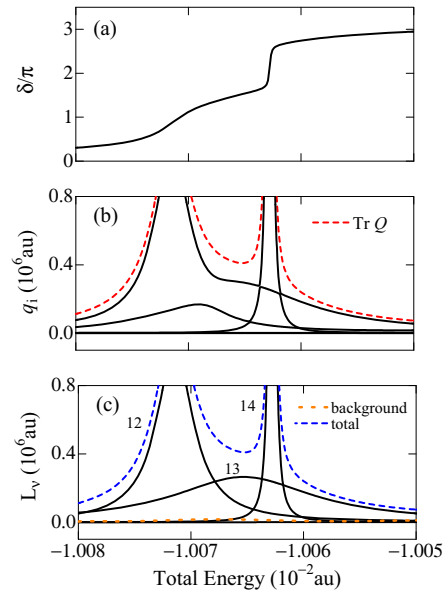


図 5.  $\text{Ps}^-(^1\text{P}^o)$  における 3~15 の重なり共鳴領域の (a) 固有位相和  $\delta$ , (b)  $\text{Tr } Q$  と  $Q$  行列の固有値  $\{q_i\}$ , (c) フィッティングによる 5 つの Lorentzian ( $L_\nu$ ) と background, 及びそれらの和 (total)。

重なり共鳴については、図 4 より  $-0.01008 \leq E \leq -0.01005$  のエネルギー領域で見られる。この重なり共鳴の解析の詳細を図 5 で示す。図 5(a) の固有位相和  $\delta(E)$  は、1 つのエネルギー領域で約  $\pi$  の急な増加が見られ、これより 1 つの共鳴が存在することが考えられ、図 5(b) の  $\text{Tr } Q(E)$  では 2 つのピーク構造を示しており、これより 2 つの共鳴の存在が見受けられる。しかし、図 5(b) の固有値  $\{q_i(E)\}$  が示す擬交差を滑らかにつなぐと、 $\text{Tr } Q(E)$  の示す 2 つのピークの間で、さらに幅の広いピークを 1 つ確認することができる。ゆえに、このエネルギー領域には 3 つの共鳴が存在すると推測できる。 $\{q_i(E)\}$  の考察をもとに、3 つの Lorentzian と背景の重ね合わせで  $\text{Tr } Q(E)$  をフィットした。その結果を図 5(c) に示す。図 5(c) の各 Lorentzian が  $\{q_i(E)\}$  の振る舞いを良く再現しており、各 Lorentzian と背景の総和 (total) も図 5(b) の  $\text{Tr } Q(E)$  と良い一致が見られる。このように、固有値  $\{q_i(E)\}$  のエネルギー依存性を調べることにより、幅の狭い 2 つの共鳴のほか、 $\delta(E)$  や  $\text{Tr } Q(E)$  では見つけられなかった幅の広い共鳴の存在も知ることができる。

$\text{Ps}^-(^1\text{P}^o)$  では、計算を行ったエネルギー領域で 15 個の共鳴が確認でき、それらの多くは他の文献では見ら

表 1 :  $\text{Ps}(n=5)$  のしきい値エネルギー以下の  $\text{Ps}^-(^1\text{P}^\circ)$  共鳴状態における共鳴パラメータ ( $E_r$ ,  $\Gamma$ )。  $x[y] = x \times 10^y$ 。

No.	$(K, T)^A$	Present HSCC		Complex-Rotation[13]	
		$E_r$	$\Gamma$	$E_r$	$\Gamma$
1	$(3, 1)^+$	-1.2462[-2]	3.07[-5]	-1.2462[-2]	3.05[-5]
2	$(4, 0)^-$	-1.1215[-2]	1.94[-6]	-1.1215[-2]	2.7[-6]
3	$(3, 1)^+$	-1.1039[-2]	3.22[-5]	-1.1043[-2]	3.15[-5]
4	$(1, 1)^+$	-1.0829[-2]	1.34[-4]	-1.083 [-2]	1.36[-4]
5	$(4, 0)^-$	-1.0580[-2]	1.31[-6]		
6	$(2, 0)^-$	-1.0493[-2]	8.81[-7]		
7	$(3, 1)^+$	-1.0414[-2]	1.36[-5]		
8	$(4, 0)^-$	-1.0276[-2]	7.42[-7]		
9	$(3, 1)^+$	-1.0171[-2]	6.34[-6]		
10	$(2, 0)^-$	-1.0144[-2]	1.22[-7]		
11	$(4, 0)^-$	-1.0132[-2]	3.67[-7]		
12	$(3, 1)^+$	-1.0071[-2]	3.95[-6]		
13	$(1, 1)^+$	-1.0065[-2]	1.51[-5]		
14	$(4, 0)^-$	-1.0062[-2]	2.11[-7]		
15	$(2, 0)^-$	-1.0043[-2]	4.53[-8]		

れていない共鳴であった。それらの共鳴のパラメータについて表 1 にまとめた。表 1 では Ho ら<sup>13)</sup> により複素回転法で計算された結果も記載しており、相関量子数  $(K, T)^A$  を用いて各共鳴を分類<sup>14)</sup> している。表 2 より、エネルギーの低い方から 4 つの共鳴については、我々の結果と複素回転法の結果とが良好一致を示している。

#### 4. 結論

本研究では、散乱計算で得られる時間遅れ行列  $Q$  の重なり共鳴の解析への有効性を示すことを目的とした。多チャネル散乱過程で見られる共鳴の情報を得るためには、従来、散乱計算で得られる固有位相和  $\delta(E)$  及びそのエネルギー微分  $d\delta/dE$  を Breit-Wigner 公式にフィットさせるが、2 つ以上の共鳴が重なり合う場合、この解析方法ではいくつかの共鳴を簡単に見落としてしまう。本研究を通して、時間遅れ行列  $Q(E)$  の固有値  $\{q_i(E)\}$  のエネルギー依存性を詳しく調べることは、互いに重なり合う共鳴の情報の把握に大変有効であることが分かった。本研究で示した共鳴の解析手法は、原子・分子物理及び核物理の広い分野で有効である。

#### 参考文献

- 1) Ho Y K 1983 *Phys. Rep.* **99** 1
- 2) Moiseyev N 1988 *Phys. Rep.* **302** 211
- 3) Hazi A U 1979 *Phys. Rev. A* **19** 920
- 4) Smith F T 1960 *Phys. Rev.* **118** 349
- 5) Igarashi A and Shimamura I 2004 *Phys. Rev. A* **70** 012706
- 6) Igarashi A and Shimamura I 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 4221
- 7) Shimamura I, McCann J F and Igarashi A 2006 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** 1847
- 8) Igarashi A, Toshima N and Shirai T 1994 *Phys. Rev. A* **50** 4951
- 9) Igarashi A, Shimamura I and Toshima N 2000 *New J. Phys.* **2** 17
- 10) Gailitis M and Damburg R 1963 *Proc. Phys. Soc. London* **82** 192
- 11) Herrick D R 1975 *Phys. Rev. A* **12** 413
- 12) Lin C D 1986 *Adv. At. Mol. Phys.* **22** 77
- 13) Ho Y K and Bhatia A K 1991 *Phys. Rev. A* **44** 2890
- 14) Ho Y K and Green C H 1986 *Phys. Rev. A* **35** 3169