

相対論的歪曲波近似による Li 様イオンの衝突強度の計算

田村 琢洋¹⁾ ・ 五十嵐 明則²⁾ ・ 中崎 忍³⁾ ・ 大崎 明彦^{3),†}

Calculation of collision strength of Li-like ion by relativistic distorted wave approximation

T. Tamura, A. Igarasi, S. Nakazaki and A. Ohsaki

[†]E-mail of corresponding author: ohsaki@phys.miyazaki-u.ac.jp

Abstract

We present energy levels and collision strengths by electron impact excitation calculated using the Flexible Atomic Code for Cl^{14+} . In the present paper, energy levels are calculated in the configuration mixing approximation. The radial orbitals for the construction of basis states are derived from a modified self-consistent Dirac-Fock-Slater iteration on a fictitious mean configuration with fractional occupation numbers. Collision strengths are calculated by the relativistic distorted wave approximation. In the present paper, we treat transitions that from $1s^2 2s^2 S^e$ to $1s^2 2p_{1/2} 2P^o$, $1s^2 2p_{3/2} 2P^o$, $1s^2 3p_{1/2} 2P^o$, $1s^2 3p_{3/2} 2P^o$, $1s 2s ({}^3S) 3s 4S^e$, $1s 2s ({}^3S) 3s 2S^e$, respectively.

Key words : Relativistic Distorted Wave Approximation, Collision Strengths, Energy Levels

1. 序論

電子の衝突による多価イオンの励起過程の理論的研究は、核融合プラズマや天体プラズマにおけるプラズマ診断の解析的なデータとして重要とされている。実験的に電子と多価イオンの衝突強度を求めることは困難であり、信頼性のある衝突強度の理論的研究が必要とされている。理論的研究によって求められた積分断面積や衝突強度などは、プラズマ中の物理現象を解析するために用いられる。

電子と多価イオンの衝突における理論的研究の方法としては、入射、散乱波を Coulomb 波として近似する Coulomb-Born 近似 (CB)、入射、散乱波が標的のポテンシャルによって歪められるとする歪曲波近似 (DW)、連立微分方程式を解く緊密結合法 (CC)、そして R 行列法などが代表的である。R 行列法は電子と原子衝突における理論的な最も正確な計算法の 1 つと考えられているが、高エネルギー領域では計算量や計算機のメモリー等の制約があるため大規模な計算は難しい。一方、高エネルギー領域では歪曲波近似が十分正確な計算結果を与えることが知られている。

相対論を考慮した多くの計算コードは別々に開発された種々の計算コードを使用しており、使い難く、計算方法も一貫したものになっていない。一方、 Gu^{**} によって開発され

たプラズマ中の素過程の総合的な解析コード FAC (Flexible Atomic Code) は相対論的な波動関数の計算からエネルギー準位、放射性遷移、電子衝突による励起・イオン化、自動イオン化、放射性再結合など様々な素過程の計算まですべて独自に開発されたプログラムコードである。本研究では FAC の電子衝突による励起の衝突強度を計算する部分を用いて計算を行った。一般的には精度の高い計算を行う場合 CI を用いた計算が行われるが、FAC では CI を用いる代わりに分数の占有数を持つ平均配置を用いて Dirac-Fock-Slater 反復法により電子状態の計算を行っている。この計算方法では波動関数の直交性が自動的に満たされる利点がある。ハミルトニアンは標準的な Dirac-Coulomb 型を使用しておりスピン-軌道相互作用、質量効果、およびその他の相対論効果の主要項が取り入れられている。

本研究では Cl^{14+} イオンのエネルギー準位の計算と電子衝突による $1s^2 2s^2 S^e$ 状態から $1s^2 2p_{1/2} 2P^o$, $1s^2 2p_{3/2} 2P^o$, $1s^2 3p_{1/2} 2P^o$, $1s^2 3p_{3/2} 2P^o$, $1s 2s ({}^3S) 3s 4S^e$, $1s 2s ({}^3S) 3s 2S^e$ 状態への励起における衝突強度の計算を行った。

1) 物質工学専攻大学院生
2) 材料物理工学科准教授
3) 材料物理工学科教授

2. 理論

この章では本研究の理論について述べる。2.1 節では原子構造について述べる。2.2 節では本研究で用いる相対論的歪曲波近似法の理論について述べる。本論文では特別断らない限り原子単位系 (a.u.) を用いる。

2.1 原子構造

核電荷が大きくなると相対論の効果重要になってくる。 N 電子のイオンのエネルギーレベルは、相対論的ハミルトニアン H を対角化することによって得ることができる。

$$H = \sum_{i \cdot \cdot}^N H_D(i) + \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (1)$$

ここで、 $H_D(i)$ は、核電荷のポテンシャルについての 1 電子ディラックハミルトニアンである。基礎関数 Φ_ν は、 N 個の 1 電子ディラックスピノール $\varphi_{n\kappa m}$ の積の反対称結合である。ここで、 $\varphi_{n\kappa m}$ は

$$\varphi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r)\chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{n\kappa}(r)\chi_{-\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix} \quad (2)$$

である。ここで、 $\chi_{\kappa m}$ はスピン σ と角 (θ, ϕ) の関数である。 n は主量子数、 κ は相対論的角運動量子数である。相対論的角運動量子数は軌道角運動量と全角運動量が関係付けられている。

$$\kappa = (l - j)(2j + 1) \quad (3)$$

そして、 m は全角運動量 \mathbf{j} の z 成分である。

イオンの波動関数は同じ対称性をともなう基礎関数 Φ_ν を混ぜ合わせることで与えられる。

$$\psi = \sum_{\nu} b_{\nu} \Phi_{\nu} \quad (4)$$

ここで、係数 b_{ν} は全ハミルトニアン H の対角化で得られる。

2.1.1 局所中心ポテンシャル

標準的なディラック・フォック・スレーター法では局所中心ポテンシャル $V(r)$ に対してラージコンポーネント $P_{n\kappa}$ とスモールコンポーネント $Q_{n\kappa}$ を次の連立微分方程式を解いて求める。

$$\begin{cases} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) P_{n\kappa} = \alpha (\varepsilon_{n\kappa} - V + \frac{\dot{\kappa}}{\alpha^2}) Q_{n\kappa} \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right) Q_{n\kappa} = \alpha (-\varepsilon_{n\kappa} + V) P_{n\kappa} \end{cases} \quad (5)$$

ここで、 α は微細構造係数、 $\varepsilon_{n\kappa}$ は相対論的一電子軌道関数のエネルギー固有値である。

局所中心ポテンシャル V は核電荷ポテンシャル $V^N(r)$ と電子-電子相互作用 $V^{ee}(r)$ からの寄与を含んでいる。核電荷ポテンシャルは以下のように書ける。

$$V^N = \begin{cases} \frac{Z}{r} \left(\frac{r}{R_N}\right) \left[3 - \left(\frac{r}{R_N}\right)\right] & r \leq R_N \\ Z, & r > R_N \end{cases} \quad (6)$$

ここで、 R_N は原子核の統計的モデル半径¹⁾で、原子質量 A によって $R_N = 2.2677 \times 10^{-4} A^{1/3}$ と表すことができる。

標準的なディラック・フォック・スレーター法では電子-電子相互作用は束縛電子による球対称ポテンシャルと交換相互作用の局所近似を含む。

$$\begin{aligned} V^{ee}(r) &= V_c(r) - \left[\frac{3}{4\pi^* r^*} \sum_{n\kappa} \omega_{n\kappa} \rho_{n\kappa}(r) \right]^* / \cdot \\ V^c(r) &= \sum_{n\kappa} \int_{r >} \frac{\omega_{n\kappa}}{r} \rho_{n\kappa}(r') dr' \\ \rho_{n\kappa} &= P_{n\kappa}^*(r) + Q_{n\kappa}^*(r) \end{aligned} \quad (7)$$

ここで $\omega_{n\kappa}$ は副殻 $n\kappa$ の占有数、 $r_>$ は r と r' の大きい方である。このポテンシャルは自己相互作用を含み、漸近的な振る舞いは不正確である。そのため我々は下記のポテンシャルを使用する。

$$\begin{aligned} V^{ee}(r) &= \frac{1}{r \sum_a \omega_a \rho_a(r)} \\ &\times \left\{ \sum_{ab} \omega_a (\omega_b - \delta_{ab}) Y_{bb}^*(r) \rho_a(r) \right. \\ &+ \sum_a \omega_a (\omega_a - 1) \sum_{k > \cdot} f_k(a, a) Y_{aa}^k(r) \\ &+ \left. \sum_{a'/b} \sum_k \omega_a \omega_b g_k(a, b) Y_{ab}^k(r) \rho_{ab}(r) \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

ここで $a = n\kappa$ 、 $b = n'\kappa'$ である。そして、

$$\begin{aligned} \rho_{ab} &= P_a(r)P_b(r) + Q_a(r)Q_b(r) \\ Y_{ab}^k(r) &= r \int_{r_{<}}^{r_{>}} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^k} \rho_{ab}(r') dr' \end{aligned} \quad (9)$$

ここで $r_{<}$ と $r_{>}$ はそれぞれ r と r' の大、小である。 f_k と g_k は下記で定義する直接相互作用の係数と交換相互作用の係数である。

$$\begin{aligned} f_k(a, b) &= - \left(1 + \frac{1}{2j_a} \right) \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ -\frac{\cdot}{\cdot} & 0 & \frac{\cdot}{\cdot} \end{pmatrix} \\ g_k(a, b) &= - \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ -\frac{\cdot}{\cdot} & 0 & \frac{\cdot}{\cdot} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、 $\begin{pmatrix} j & j & j \\ m & m & m \end{pmatrix}$ はウイグナーの $3j$ 記号である。電子-電子相互作用 (8) を用いると平均エネルギーへの電子-電子寄与は下記の様になる。

$$\begin{aligned} E^{ee} &= \frac{1}{2} \sum_a \omega_a \langle a | V^{ee} | a \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_a \omega_a \int V^{ee}(r) \rho_a(r) dr \end{aligned} \quad (11)$$

配置間相互作用 (CI) は電子配置の異なる複数の状態 (スレーター行列式) を用いて高い精度の計算を目指したものであるが、CI を多数導入しようとするとき大規模な計算になってしまう。スレーター行列式 ϕ_ν を展開して b_ν をかけ、電子軌道毎に整理すると、分数の重みがかかった電子軌道の和として表わせる。この状態は分数占有数を持つ電

子軌道からなる1個のスレーター行列式(平均配置)を展開したものを見なせる。Sampsonら²²は副殻の初期状態と終状態の相加平均を取ることによって、平均的な分数占有率を仮定して1個の平均配置を作り、それを用いて連立ディラック方程式(5)の解 $P_{n\kappa}, Q_{n\kappa}$ を決定した。そして彼らは計算速度が高速であり、CI計算と同様に精度の高い計算が行えることを示した。本研究の目的としているDWBA法は標的の始状態と終状態の波動関数のみを必要としており、Sampsonらの計算方法は非常に有効であるからこの計算方法を採用する。

2.1.2 ディラック方程式の解

平均場 $V(r)$ は動径軌道関数に依存し、また動径軌道関数はそのポテンシャルに依存する。したがって式(5)を解くのに自己無頓着反復法を用いる。具体的には、まず式(5)のスモールコンポーネントを消去して次のような置き換えを行う。²³

$$\begin{aligned} P_a &= \xi_a(r)F_a(r) \\ \xi_a(r) &= \sqrt{1 + \frac{\alpha'}{2}[\varepsilon_a - V(r)]} \\ Q_a &= \frac{\alpha}{2\xi_a} \left(\frac{d}{dr}P_a + \frac{\kappa}{r}P_a \right) \end{aligned} \quad (12)$$

計算を進めると最終的に下記の式が得られる。

$$\frac{d}{dr}F_a(r) + \left\{ 2[\varepsilon_a - U(r)] - \frac{\kappa(\kappa+1)}{r^2} \right\} F_a(r) = 0 \quad (13)$$

ここで、 $U(r)$ は

$$\begin{aligned} U(r) &= V(r) - \frac{\alpha'}{2} \\ &\times \{ [V(r) - \varepsilon_a] - W(r) \} \\ W(r) &= \frac{1}{4\xi^2(r)} \\ &\times \left[\frac{d}{dr}V(r) + \frac{3\alpha'}{4\xi^2(r)} \left(\frac{d}{dr}V(r) \right) - \frac{2\kappa}{r} \frac{d}{dr}V(r) \right] \end{aligned} \quad (14)$$

で定義される有効ポテンシャルである。

2.1.3 動径積分とハミルトニアン行列要素

式(1)で、ハミルトニアンの第一項は一電子演算子で第二項は二電子演算子である。それらの行列要素はそれぞれの項が角度部分と動径部分の積になっている和に展開して計算する。動径部分はラッカ代数を使って計算される。

1. 一電子演算子

ハミルトニアンの一電子演算子はスカラーであるが、一般的なテンソル演算子 $O_M^L = \sum_i o_M^L(i)$ として取り扱う。第二量子化形式では O_M^L は下記のように表される。

$$O_M^L = \sum_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta \langle \hat{\alpha} | o_M^L | \hat{\beta} \rangle \quad (15)$$

ここで、 $\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ は電子状態 $n\kappa m$ を表している。 a^\dagger は生成演算子、 a は消滅演算子である。 o_M^L の行列要素についての

Wigner-Ekart理論を使うと

$$O_M^L = \sum_{\alpha\beta} Z_M^L(\alpha, \beta) \langle \alpha | o^L | \beta \rangle \quad (16)$$

と表すことが出来る。ここで、 $\langle \alpha | o^L | \beta \rangle$ は縮約された行列要素を表し、 α と β は量子数 $n\kappa$ を表している。ここで Z_M^L は下記で定義される。

$$Z_M^L(\alpha, \beta) = -[L]^{-1} [a_\alpha^\dagger \times \tilde{a}_\beta]_M^L \quad (17)$$

ここで $[L] = 2L + 1$ 、 $\tilde{a}_\beta = (-1)^{j_\beta - m_\beta} a_{-\beta}$ を表し、 $-\hat{\beta}$ は電子状態 $(n_\beta \kappa_\beta - m_\beta)$ を意味している。

2. 二電子演算子

代数操作²⁴の後、電子間の静電相互作用は

$$\begin{aligned} \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_k \{ Z^k(\alpha, \gamma) \cdot Z^k(\beta, \delta) \\ &- (-1)^{j_\alpha - j_\beta} [j_\alpha]^{-1} Z^k(\alpha\delta) \} X^k(\alpha\beta; \gamma\delta) \end{aligned} \quad (18)$$

となる。ここで $Z^k(\alpha, \gamma) \cdot Z^k(\beta, \delta)$ は二つのテンソルのスカラ積を表している。そして

$$X^k(\alpha\beta; \gamma\delta) = \langle \alpha | C^k | \gamma \rangle \langle \beta | C^k | \delta \rangle R^k(\alpha\beta; \gamma\delta) \quad (19)$$

ここで、 C^k は規格化球面調和テンソル²⁵である。そして、 R^k は一般化されたスレーター積分である。

$$R^k(\alpha\beta; \gamma\delta) = \int \frac{r_{\alpha\gamma}^k}{r_{\beta\delta}^k} \rho_{\alpha\gamma}(r_\alpha) \rho_{\beta\delta}(r_\beta) dr_\alpha dr_\beta \quad (20)$$

$Z^k(\alpha, \gamma) \cdot Z^k(\beta, \delta)$ の行列要素はGaigalasら²⁶によって計算されている。

2.2 相対論的歪曲波近似法

2.2.1 衝突強度

初期状態 ψ_i から終状態 ψ_f への電子衝突による励起断面積 σ_{if} は衝突強度 Ω_{if} によって下記のように表すことができる。

$$\sigma_{if} = \frac{\pi}{k_i g_i} \Omega_{if} \quad (21)$$

ここで、 g_i は初期状態の統計的重み、そして k_i は入射電子の運動量である。それらはエネルギー ε_i と次式で関係付けられる。

$$k_i = 2\varepsilon_i \left(1 + \frac{\alpha'}{2} \varepsilon_i \right) \quad (22)$$

ここで、 α は微細構造定数である。

連続状態の波動関数は δ 関数を用いて規格化される。ラージコンポーネントの振幅は漸近領域で $\sqrt{k/\varepsilon}$ であり、非相対論極限で $\sqrt{2/k}$ になる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} [P_\varepsilon(r) P_{\varepsilon'}(r) + Q_\varepsilon(r) Q_{\varepsilon'}(r)] dr = \pi \delta(\varepsilon - \varepsilon') \quad (23)$$

ここで、 ε と k は軌道のエネルギーと運動量、 P_ε と Q_ε は連続状態の波動関数のラージコンポーネントとスモールコ

ンポーネントである。衝突強度は

$$\Omega_{..} = 2 \sum_{\kappa_0 \kappa_1} \sum_{J_T} [J_T] \times | \langle \psi_{.}(\kappa_{.} J_T M_T) | \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} | \psi_{.}(\kappa_{.} J_T M_T) \rangle | \quad (24)$$

と表すことができる。ここで $\kappa_{.}$ と $\kappa_{.}$ は入射電子と散乱電子の相対論的角運動量子数、 J_T は標的の状態が連続状態に結合したときの全角運動量、 M_T は全角運動量の Z 成分、そして $[J] = 2J + 1$ である。Bar-Shalom ら²² は式 (24) が次式のように動径積分の部分と角度積分の部分の積として表わせることを示した。

$$\Omega_{..} = 2 \sum_k \sum_{\alpha_0 \alpha_1 \beta_0 \beta_1} \{ Q^k(\alpha_{.} \alpha_{.}; \beta_{.} \beta_{.}) \times \langle \psi_{.} || Z^k(\alpha_{.}, \alpha_{.}) || \psi_{.} \rangle \langle \psi_{.} || Z^k(\beta_{.}, \beta_{.}) || \psi_{.} \rangle \} \quad (25)$$

ここで、

$$Q^k(\alpha_{.} \alpha_{.}; \beta_{.} \beta_{.}) = \sum_{\kappa_0 \kappa_1} [k]^{-} P^k(\kappa_{.} \kappa_{.}; \alpha_{.} \alpha_{.}) \times P^k(\kappa_{.} \kappa_{.}; \beta_{.} \beta_{.}) \quad (26)$$

また、

$$P^k(\kappa_{.} \kappa_{.}; \alpha_{.} \alpha_{.}) = \sum_t (-1)^{k-t} \begin{Bmatrix} j_{\alpha_0} & j_{.} & t \\ j_{.} & j_{\alpha_1} & k \end{Bmatrix} \times X^t(\alpha_{.} \kappa_{.}; \kappa_{.} \alpha_{.}) + X^t(\alpha_{.} \kappa_{.}; \alpha_{.} \kappa_{.}) \quad (27)$$

となる。動径積分 $Q^k(\alpha_{.} \alpha_{.}; \beta_{.} \beta_{.})$ は様々な遷移の中に現れ、入射電子と散乱電子のエネルギーまたは、散乱電子エネルギーが一定の場合には遷移の励起エネルギーに依存する。

2.2.2 連続状態についてのディラック方程式の解

連続状態の波動関数も束縛状態に対するディラック方程式と同様の方程式を解くことによって得られる。

$$\frac{d^r}{dr^r} F(r) + \left\{ 2[\varepsilon - U(r)] - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^r} \right\} F(r) = 0 \quad (28)$$

ここで ε は自由電子のエネルギーである。

式 (28) を解く際に境域を二つに分ける。内部領域では波動関数はあまり振動せず、Numerov 法を使い外側へ積分する。外部領域では波動関数の振動周期が短くなるため直接積分法の代わりに位相振幅法が用いられる。 $F(r)$ の漸近解は

$$F(r) = A \frac{1}{\eta^{r/2}(r)} \sin \phi(r) \quad (29)$$

となる。ここで定数 A は適切な一般化を確実にするために選ばれる。 $\phi(r)$ と $\eta(r)$ は下記を満たす。

$$\phi(r) = \int_{.}^r \eta(s) ds$$

$$\eta^r(r) = \eta^{r/2} \frac{d^r}{dr^r} \eta^{-r/2} + \omega^r(r) \quad (30)$$

ここで、

$$\omega^r(r) = 2[\varepsilon - U(r)] - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^r} \quad (31)$$

である。

2.2.3 部分波総和

式 (26) は部分波の総和として下記のように表せられる。

$$Q^k = \sum_{l_0} \sum_{l_1} \tilde{Q}^k(l_{.}, l_{.})$$

$$\tilde{Q}^k(l_{.}, l_{.}) = \sum_{j_0 j_1} [k]^{-} P^k(\kappa_{.} \kappa_{.}; \alpha_{.} \alpha_{.}) P^k(\kappa_{.} \kappa_{.}; \beta_{.} \beta_{.}) \quad (32)$$

ここで $\kappa_{.}$ についての総和は軌道角運動量と全角運動量の総和として書かれている。 $\tilde{Q}^k(l_{.}, l_{.})$ は $l_{.}$ と $l_{.}$ のすべての値において計算されず、 $l_{.}$ の値は 0 から l_{max} までの値がとられ、それぞれの $l_{.}$ について $\tilde{Q}^k(l_{.}) = \sum_{l_1} \tilde{Q}^k(l_{.}, l_{.})$ が計算される。ここで $l_{.}$ の値は三角関係によって制限される。

禁制遷移については大きな軌道角運動量を持つ部分波からの寄与は重要ではなく、総和は収束する。許容遷移については Coulomb-Bethe 近似を使い、大きな軌道角運動量を持つ部分波からの寄与の見積りをする。この方法では P^k の交換項が無視され、直接項は次式で近似される。

$$P_{CB}^k(\kappa_{.} \kappa_{.}; \alpha_{.} \alpha_{.}) = M_k(\alpha_{.} \alpha_{.}) R_k(\kappa_{.} \kappa_{.}) \quad (33)$$

ここで、

$$M_k(\alpha_{.} \alpha_{.}) = \langle \alpha_{.} || C^k || \alpha_{.} \rangle \times \int (P_{\alpha_0} P_{\alpha_1} + Q_{\alpha_0} Q_{\alpha_1}) r^k dr$$

$$R_k(\kappa_{.} \kappa_{.}) = \int (P_{\kappa_0} P_{\kappa_1} + Q_{\kappa_0} Q_{\kappa_1}) \frac{1}{r^k} dr \quad (34)$$

Coulomb-Bethe 近似で $\tilde{Q}^k(l_{.}, l_{.})$ に対応するものは

$$\tilde{Q}_{CB}^k(l_{.}, l_{.}) = M_k(\alpha_{.} \alpha_{.}) M_k(\beta_{.} \beta_{.}) \sum_{j_0 j_1} [k]^{-} R_k(\kappa_{.} \kappa_{.}) \quad (35)$$

そして

$$\tilde{Q}_{CB}^k(l_{.}) = \sum_{l_0} \tilde{Q}_{CB}^k(l_{.}, l_{.}) \quad (36)$$

となる。比

$$\gamma(l_{.}) = \frac{\tilde{Q}_{CB}^k(l_{.} + 1)}{\tilde{Q}_{CB}^k(l_{.})} \quad (37)$$

は連続状態軌道だけに依存し、 $l_{.}$ が大きな値では定数 $\gamma_{\infty} = \varepsilon_{.} / \varepsilon_{.}$ に収束する。

$k \geq 2$ についてはこの漸近値への収束は早く、 $l_{.}$ についての和を近似することが出来る。

$$\sum_{l_0 > l_{max}} \tilde{Q}_{CB}^k(l_{.}) = \tilde{Q}_{CB}^k(l_{max}) \frac{\gamma_{\infty}}{1 - \gamma_{\infty}} \quad (38)$$

不確定性 Δ は

$$\Delta = \tilde{Q}_{CB}^k(l_{max}) \frac{\delta}{(1 - \gamma_{\infty})} \quad (39)$$

ここで、 δ は γ_{∞} と $\tilde{Q}^k(l_{.} + 1) / \tilde{Q}^k(l_{.})$ の差となっている。

$k = 0, 1$ については遷移エネルギーが非常に小さい場合、または衝突エネルギーが高い場合には $l_{.} \gg \varepsilon_{.} / (\varepsilon_{.} - \varepsilon_{.})$ と

なるまで $\gamma(l.)$ は γ_∞ に達しない。そのような場合、 $\gamma(l.)$ が γ_∞ に収束するように $\tilde{Q}_{CB}^k(l., l.)$ と $l.$ を関係付ける非相対論的な漸化式を使う。これら比は大きな軌道角運動量を持つ部分波からの寄与の見積もりに使われる。

3. 結果と考察

本研究では相対論的歪曲波近似法を用いて Cl^{**} の衝突強度の計算を目的としている。標的 Cl^{**} の電子状態も同様に相対論の立場で計算する必要がある。本研究で使用している電子状態の計算法は、通常の配置間相互作用 (CI) による方法とは異なっており、まず、その有効性を検討する。

He 原子は最も簡単な体系であり数値的に厳密な計算を行える系である。内海と佐々木は日本原子力研究所の研究開発報告書の中で原子の電子状態の相対論的高精度計算手順について解説している。内海と佐々木による `grasp92` コードによる He の基底状態のエネルギーは -2.903699 a.u. で、一方 FAC による計算では -2.903751 a.u. である。彼らが計算に使用した `grasp92` は多電子配位原子の相対論的波動関数を MCDHF (Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock) 法で解くプログラムコードであり、その計算結果は非常に高精度なものとなっている。FAC で計算した結果と比較すると誤差は約 0.005% と小さく FAC で十分な精度が得られている。表 1 に Cl^{**} のエネルギー準位の Fischer による MCDHF 法による計算値と本研究の結果を示す。2つの値を比較すると、約 1~5% の誤差で収まっており良い一致を示している。これにより、核電荷が大きいイオンでのレベルエネルギーの FAC による計算も十分に正確であると思われる。表 2 に Cl^{**} のエネルギー準位の Fischer による MCHF (Multiconfiguration Hartree-Fock) 法での計算値と R 行列法^{*)} の計算に使われたエネルギー準位を示す。Fischer による MCHF 法では Breit-Pauli のハミルトニアンを対角化して計算しており、質量補正項、Darwin 項などの相対論効果が含まれている。一方、R 行列法の計算に使われたエネルギー準位は相対論の効果は含まれておらず、通常の CI で計算されている。その両方の値を比較すると、約 1a.u. の差がある。一方、表 3 に R 行列法の計算に用いた相対論の CI 計算によるエネルギー準位と FAC によるエネルギー準位を示す。エネルギー準位の違いは相対論効果によるものである。

図 1 に Cl^{**} の遷移 $1s^2 2s^2 S^2 \rightarrow 1s 2s (^2S) 3s^2 S^2$ の R 行列法による衝突強度の計算値と本研究の FAC による結果を示す。低エネルギー領域で FAC の値は R 行列法の値よりも約 30% 大きい。R 行列法では中間状態が計算に含まれているため共鳴構造を計算することが出来るが、歪曲波近似を用いている FAC では中間状態を取り込んでいないためだと考えられる。図 2 に図 1 のしきい値付近を拡大した図を示す。この図より、入射エネルギーに比べてエネルギー準位の差 (~27eV) の値は十分小さいことが分かり、エネルギー準位の差による高エネルギー領域での計算への影響はほと

んどなく、十分信頼性のある結果が得られていることが分かる。一方、高エネルギー領域での衝突強度の振舞いはよく知られている為、外挿を行うことが出来る。ここで光学的許容遷移の場合の外挿式は

$$x = \frac{E.}{E_{th}}$$

$$\Omega = p. \left(\frac{1}{x}\right)^{p_1} + p. \left(1 - \frac{1}{x}\right)^{p_3} + b \ln x \quad (40)$$

ここで、 $E.$ は入射電子のエネルギー、 E_{th} はしきい値、 $p.$ 、 $p.$ 、 $p.$ はフィッティングパラメーター、 b は Bethe 係数である。次に光学的禁制遷移の場合の外挿式は

$$\gamma = -2.0 + p. \frac{1}{p. + x} + p. \left(\frac{1}{p. + x}\right)^.$$

$$\Omega = p. x^\gamma \quad (41)$$

となる。ここで図 1 に示している R 行列法は X=6 まで本研究では X=30 まで計算し、X=30~200 の値は外挿値となっている。よって、外挿値は高エネルギーまでのデータを使用しているため本研究の値のほうがより正確であると思われる。

図 3 - 7 に、 Cl^{**} の初期状態 $1s^2_{./} 2s_{./} S^2_{./}$ からそれぞれ終状態が $1s^2_{./} 2p_{./} P^2_{./}$ 、 $1s^2_{./} 2p_{./} P^2_{./}$ 、 $1s^2_{./} 3p_{./} P^2_{./}$ 、 $1s^2_{./} 3p_{./} P^2_{./}$ 、 $1s_{./} 2s_{./} 3s_{./} S^2_{./}$ への励起の衝突強度の本研究の計算値を示す。それぞれ X=30 まで計算し X=30~200 の値は外挿した値となっている。図 3 - 6 の衝突強度の値は衝突エネルギーが高くなるにつれて単調増加している。また、図 7 の衝突強度は非常に小さく、衝突エネルギーが高くなるにつれて減少している。これは図 3 - 6 は光学的許容遷移、図 7 は光学的禁制遷移の違いである。

State	Energy(Fischer)	Energy(FAC)
$1s^2_{./} 2s_{./} S^2_{./}$	-309.16	-309.18
$1s^2_{./} 2p_{./} P^2_{./}$	-308.06	-308.11
$1s^2_{./} 2p_{./} P^2_{./}$	-307.97	-308.02
$1s^2_{./} 3s_{./} S^2_{./}$	-292.38	-292.37
$1s^2_{./} 3p_{./} P^2_{./}$	-292.08	-292.05
$1s^2_{./} 3p_{./} P^2_{./}$	-292.05	-292.03
$1s^2_{./} 3d_{./} D^2_{./}$	-291.94	-291.95
$1s^2_{./} 3d_{./} D^2_{./}$	-291.93	-291.94

Table 1 Cl^{**} のエネルギー準位の Fischer による MCDHF 法での計算値と本研究の FAC による計算値。単位は [a.u.]

4. 結論

本研究では Li 様イオンである Cl^{**} の相対論的エネルギー準位の計算と初期状態 $1s^2_{./} 2s_{./} S^2_{./}$ から終状態 $1s 2s (^2S) 3s^2 S^2$ の衝突強度の計算を行

State(R-MAT)	Energy	State(Fischer)	Energy
$1s^* 2s^* S^e$	-308.10	$1s^*_{/} 2s^*_{/} \cdot S^e_{/}$	-309.40
$1s^* 2p^* P^o$	-307.01	$1s^*_{/} 2p^*_{/} \cdot P^o_{/}$	-308.31
		$1s^*_{/} 2p^*_{/} \cdot P^o_{/}$	-308.22
$1s^* 3s^* S^e$	-291.40	$1s^*_{/} 3s^*_{/} \cdot S^e_{/}$	-292.59
$1s^* 3p^* P^o$	-291.10	$1s^*_{/} 3p^*_{/} \cdot P^o_{/}$	-292.30
		$1s^*_{/} 3p^*_{/} \cdot P^o_{/}$	-292.27
$1s^* 3d^* D^e$	-290.99	$1s^*_{/} 3d^*_{/} \cdot D^e_{/}$	-292.18
		$1s^*_{/} 3d^*_{/} \cdot D^e_{/}$	-292.17

Table 2 Cl^{17+} のエネルギー準位の Fischer による MCHF 法での計算値^{**} と R 行列法^{***} での計算に使われたエネルギー準位。単位は [a.u.]

State(R-MAT)	Energy	State(FAC)	Energy
$1s^2 2s^2 S^e$	-308.10	$1s^2_{1/2} 2s_{1/2}$	${}^2S^e_{1/2}$ -309.18
$1s^2 2p^2 P^o$	-307.01	$1s^2_{1/2} 2p_{1/2}$	${}^2P^o_{1/2}$ -308.11
		$1s^2_{1/2} 2p_{3/2}$	${}^2P^o_{3/2}$ -308.02
$1s^2 3s^2 S^e$	-291.40	$1s^2_{1/2} 3s_{1/2}$	${}^2S^e_{1/2}$ -292.37
$1s^2 3p^2 P^o$	-291.10	$1s^2_{1/2} 3p_{1/2}$	${}^2P^o_{1/2}$ -292.05
		$1s^2_{1/2} 3p_{3/2}$	${}^2P^o_{3/2}$ -292.03
$1s^2 3d^2 D^e$	-290.99	$1s^2_{1/2} 3d_{3/2}$	${}^2D^e_{3/2}$ -291.95
		$1s^2_{1/2} 3d_{5/2}$	${}^2D^e_{5/2}$ -291.94
$1s 2s^2 S^e$	-207.87	$1s_{1/2} 2s^2_{1/2}$	${}^2S^e_{1/2}$ -208.73
$1s 2s ({}^3S) 2p^4 P^o$	-207.60	$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{1/2}$	${}^4P^o_{1/2}$ -208.45
		$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{3/2}$	${}^4P^o_{3/2}$ -208.39
		$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{3/2}$	${}^4P^o_{5/2}$ -208.39
$1s 2s ({}^1S) 2p^2 P^o$	-206.77	$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{1/2}$	${}^2P^o_{1/2}$ -207.55
		$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{3/2}$	${}^2P^o_{3/2}$ -207.50
$1s 2s ({}^3S) 2p^2 P^o$	-206.36	$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{3/2}$	${}^2P^o_{1/2}$ -207.15
		$1s_{1/2} 2s_{1/2} 2p_{3/2}$	${}^2P^o_{3/2}$ -207.13
$1s 2s ({}^3S) 3s^4 S^e$	-190.68	$1s_{1/2} 2s_{1/2} 3s_{1/2}$	${}^4S^e_{3/2}$ -191.51
$1s 2s ({}^3S) 3s^2 S^e$	-190.41	$1s_{1/2} 2s_{1/2} 3s_{1/2}$	${}^2S^e_{1/2}$ -191.23

Table 3 Cl^{17+} の非相対論の R 行列法での計算に使われたエネルギー準位と本研究の FAC による計算値。単位は [a.u.]

い、R 行列法の結果と比較した。また、初期状態 $1s^*_{/} 2s^*_{/} \cdot S^e_{/}$ からそれぞれ終状態 $1s^*_{/} 2p^*_{/} \cdot P^o_{/}$ 、 $1s^*_{/} 2p^*_{/} \cdot P^o_{/}$ 、 $1s^*_{/} 3p^*_{/} \cdot P^o_{/}$ 、 $1s^*_{/} 3p^*_{/} \cdot P^o_{/}$ 、 $1s^*_{/} 2s^*_{/} 3s^*_{/} \cdot S^e_{/}$ の電子衝突による衝突強度の計算を行った。

本研究で得られた結果はプラズマ中の原子素過程の基礎解析に有用なデータと考えられる。今後、我々の研究結果を検証するための実験的研究が期待される。

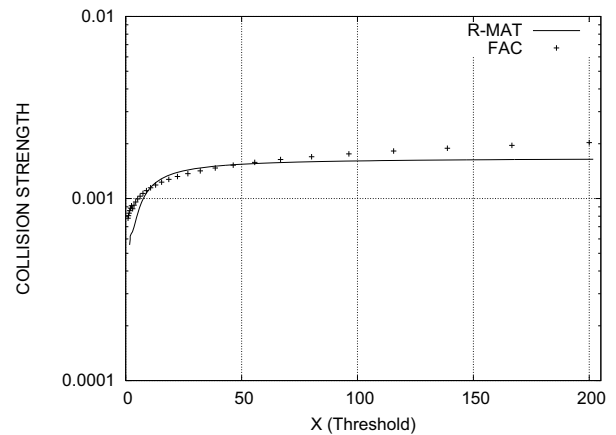


Fig. 1 電子衝突による Cl^{17+} の衝突強度 ($1s^* 2s^* S^e \rightarrow 1s 2s ({}^3S) 3s^* S^e$) —, R 行列法; +, 相対論的 DW 法 (FAC) R 行列法は X=6 まで計算し X=6~200 の値は外挿値。

参考文献

- 1) M. F. Gu, *Astrophysical Journal*, **852**, 1241(2003)
- 2) L. V. Chernysheva and V. L. Yakhontov, *Comp. Phys. Comm.* **119**, 232(1999)
- 3) D. H. Sampson, H. L. Zhang, A. K. Mohanty, and R. E. H. Clark, *Phys. Rev. A* **40**, 604(1989)
- 4) A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, *Phys. Rev. A* **38**, 1773(1988)
- 5) R. D. Cowan, *Theory of atomic Structure and Spectra* (University of California Press, Berkely, 1981)
- 6) G. Gaigalas, Z. Rudzikas, and C. F. Fischer, *J. Phys. B* **30**, 3747(1997)
- 7) A. Burgess and V. B. Sheorey, *J. Phys. B* **7**, 2403(1974)
- 8) 内海隆行, 佐々木明, 日本原子力開発機構研究開発報告書 JAERI-Data/Code 2000-003, (2000)
- 9) C. F. Fischer and G. Tachiev, "Energy levels and Lifetimes of Li-like Cl XV" in *The MCHF/MCDHF Collection*, Eds. C. F. Fischer, 2004, Vanderbilt University, Nashville, TN (<http://atoms.vuse.vanderbilt.edu/>)
- 10) S. Nakazaki (private communication)