

電子衝突によるルビジウムイオンの励起断面積

加藤 修平¹⁾, 柏原 広道²⁾, 中崎 忍³⁾

Electron-Impact Excitation of Rb⁺

Shuhei KATO, Hiromichi KASHIWABARA and Shinobu NAKAZAKI

Abstract

We carry out R-matrix calculations for excitations of $4p^5 5s \ ^1P_1^o$, $\ ^3P_1^o$ states and $4p^5 4d \ ^1P_1^o$, $\ ^3P_1^o$, $\ ^3D_1^o$ states from the ground $4p^6 \ ^1S_0^e$ state of Rb⁺. The R-matrix method with 35, 61 and 73 target state is used for these transitions in the low incident energy. We compare our results with experimental measurements. The energy dependence of present cross sections for the $4p^6 \ ^1S_0^e \rightarrow 4p^5 5s \ ^1P_1^o$ and $\ ^3P_1^o$ transitions are in agreement with the experimental results.

Key Words : Excitation, Electron impact, R-matrix method, Rubidium ion, Cross section

1. 序論

電子衝突におけるイオンの励起過程は、主に核融合プラズマや天体プラズマ中で起こる現象である。近年の実験技術、実験装置の進歩によって、電子ビームを気体の原子又はイオンに衝突させてかなり正確な励起断面積の実験値を得ることができるようになった。一方、理論的研究も計算機の進歩によって、これら実験値の信頼性の確認および実験の困難な励起過程に対してより精度の良い計算結果を得ることが出来るようになった。

電子とイオンの衝突における理論的計算の方法としては、入射波を Coulomb 波として近似する Coulomb-Born(CB) 近似法、CB 近似法において入射電子が標的イオンの束縛電子と入れ替わり散乱されるという電子交換を考慮した Coulomb-Born-Oppenheimer(CBO) 近似法がある。また、入射・散乱波を標的イオンのポテンシャルによって歪められた波として考える歪曲波 (DW) 近似法がある。更に、標的の状態が互いに緊密に結合しあう過程を含めた有限個の連立微積分方程式を解く緊密結合法 (CC)、そして標的の電子と入射電子を区別できる領域とできない領域に分けて計算を行う R 行列法などが挙げられる。本研究では、電子衝突による Rb⁺ の励起断面積について、R 行列法を用いて理論的研究を行った。

R 行列法は、1947 年に原子核物理学の分野で複合核モデルとして Wigner ら¹⁾ によって提唱され、1970 年代に Burke ら²⁾ によって電子・原子衝突の分野に拡張されたものである。この近似法の特徴は、衝突過程を内部領域と外部領域の 2 つの系に分けて計算を行う点にある。内部領域では入射電子が標的の束縛電子と混在している領域で入射電子と標的内電子の電子交換や電子相関を考慮する。そこで、入射電子と標的内電子 (N 個とする) からなる $N + 1$ 電子系について配置間相互作用法を用いて全系の波動関数を求める。一方、外部領域では、電子交換散乱が無視できる領域で、通常の緊密結合法により散乱電子の波動関数を決定する。これらの領域で求めた波動関数を境界で滑らかに結合することで散乱電子の波動関数を決定し、散乱断面積を得ることができる。

R 行列法は低エネルギー領域の計算に適している。その理由としては、R 行列法は散乱振幅を求める際に入射電子のエネルギーに依存しない部分を先に計算し、その後、エネルギーに依存する部分の計算を行ってそれぞれを結合して求めるため、全領域の計算をエネルギーごとに行う緊密結合法に比べて、たくさんのエネルギーポイントでの計算を行いやすい。励起しきい値付近の低エネルギー領域では、共鳴構造による励起断面積の急激な変化が多く見られるため、入射電子のエネルギーのきざみを細かく計算することが重要になる。また、内部領域の計算に含める N 電子系、 $N + 1$ 電子系の状態を変えることにより、その状態により起こる

1) 宮崎大学大学院 工学研究科 博士前期課程 応用物理学専攻

2) 宮崎大学 工学部 技術専門職員

3) 宮崎大学 材料理工学科 教授

共鳴現象の変化を調べたり、特定のエネルギーで起きる共鳴現象にどの状態が寄与しているかを調べることが可能である。

これまで、電子衝突によるアルカリ金属イオン (Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ , Fr^+) の励起過程について、 Na^+ では多くの研究がなされてきているが、原子番号の大きなイオンについては理論的計算例は 2005 年までなく、 K^+ , Rb^+ 及び Cs^+ について Zapesochnyi ら⁶⁾ の実験が唯一報告されている。 K^+ については、Berrington ら⁷⁾ が 2006 年に理論的計算を行い実験結果との大きな差異を報告している。しかし、 Rb^+ の $4p^6 \ ^1S_0^e \rightarrow 4p^5 5s \ ^1P_1^o$, $\ ^3P_1^o$ 遷移、及び $4p^6 \ ^1S_0^e \rightarrow 4p^5 4d \ ^1P_1^o$, $\ ^3P_1^o$, $\ ^3D_1^o$ 遷移の励起断面積について理論的研究はない。 Rb^+ (基底状態、 $4s^2 4p^6 \ ^1S$) についての実験報告によると K^+ (基底状態、 $3s^2 3p^6 \ ^1S$) に比べて明確な共鳴構造が得られている。そこで、本研究では、相対論的な効果を取り入れた Briet-Pauli R 行列法⁵⁾ を用いて電子衝突による Rb^+ の $4p^6 \ ^1S_0^e \rightarrow 4p^5 5s \ ^1P_1^o$, $\ ^3P_1^o$ 遷移、及び $4p^6 \ ^1S_0^e \rightarrow 4p^5 4d \ ^1P_1^o$, $\ ^3P_1^o$, $\ ^3D_1^o$ 遷移の励起断面積を理論的に求め、その入射電子のエネルギー依存性や共鳴構造の影響を調べ、実験との比較を行った。

本論文では、まず 2 章で計算に用いた理論を述べる。また、3 章で結果を示して考察を行い、4 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. 理論

2.1 標的イオン Rb^+ の束縛状態

はじめに、 N 個の電子を持つ標的イオンである Rb^+ (原子番号 Z が 37) の束縛状態の波動関数について考える。この標的はクリプトン様イオンで束縛電子の数は $N=36$ であり、その基底状態は $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 \ ^1S$ である。標的イオンの状態を次のように反対称化した波動関数 ϕ_j で表現する。

$$\begin{aligned} & \phi_j(\alpha_j L_j S_j M_{L_j} M_{S_j} | x_1, \dots, x_N) \\ & \equiv \phi_j(1s^{m_{1j}} 2s^{m_{2j}} 2p^{m_{3j}} \dots \\ & \dots \alpha_j L_j S_j M_{L_j} M_{S_j} | x_1, \dots, x_N). \quad (1) \end{aligned}$$

標的イオンの束縛状態は、(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。

$$\Phi_j(L_j S_j M_{L_j} M_{S_j} | x_1, \dots, x_N)$$

$$\equiv \sum_k b_{ik} \phi_k(\alpha_j L_k S_j M_{L_j} M_{S_j} | x_1, \dots, x_N). \quad (2)$$

ここで、 x_i は i 番目の電子の空間座標とスピン座標を含めた表示であり、 L_j , S_j は標的イオンの軌道角運動量、スピン角運動量、 M_{L_j} , M_{S_j} はそれらの Z 成分を表している。 b_{ij} は展開係数であり、(3) 式で表されるように標的イオンのハミルトニアンを対角化することにより決定される。

$$\langle \Phi_i | H_N | \Phi_k \rangle = E_i^N \delta_{ik}, \quad (3)$$

2.2 R 行列法による内部領域

R 行列法は電子と標的の衝突過程を内部領域と外部領域に分けて取り扱い、最終的には 2 つの領域の波動関数を境界上で滑らかに接続して散乱断面積を求める方法である。この節では内部領域についての理論的取り扱いを述べ、次節 2.3 で外部領域の取り扱いを述べる。内部領域では、入射電子と束縛電子との電子交換や電子相関効果を考慮しなければならない。そこで、標的内電子と入射電子からなる $N+1$ 電子系の状態を考え、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。まず、内部領域における $N+1$ 電子系の波動関数を (4) 式の形で表現する。

$$\begin{aligned} & \Psi_k(x_1 \dots x_{N+1}) \\ & = A \sum_{ij} c_{ijk} \Phi_i(x_1 \dots x_{N+1}, \hat{r}_{N+1} \sigma_{N+1}) \\ & \times \frac{1}{r_{N+1}} u_{ij} r_{N+1} + \sum_j d_{jk} \phi_j(x_1 \dots x_{N+1}). \quad (4) \end{aligned}$$

(4) 式の第 1 項目の関数 Φ は (2) 式の Φ に対応し、標的イオンの束縛状態の波動関数に散乱電子の角度部分 \hat{r}_{N+1} とスピン座標 σ_{N+1} を含ませたものを表している。 A は、標的イオン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 項の ϕ_j は標的イオンの束縛状態における個々の電子の軌道関数を用いて表現した $N+1$ 電子系の波動関数である。 u_{ij} は散乱電子の波動関数の動径部分であり、(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。

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

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

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、標的イオン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持つ $P_{nl_i}(r)$ を考慮に入れる。 λ_{ij} は標的イオンと散乱電子の動径関数が直交するように決めるラグランジェの未定乗数である。

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

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

(5) 式を用いて求めた散乱電子の波動関数 u_{ij} は、(8) 式において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に決定する。(7) 式と (8) 式から、0 から a までの範囲で軌道関数は完全系を構成していることがわかる。次に、 $N+1$ 電子系のハミルトニアンを (9) 式で表現する。

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

(4) 式における係数である c_{ijk} と d_{jk} は、(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) 式の第 1 項の展開の中にも含める必要がある。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 行列法による外部領域

外部領域では入射電子と標的の束縛電子が区別でき、内部領域で考慮したような電子交換や電子相関の効果は働かないものとして計算を行うため、通常の緊密結合法における電子交換効果を見捨てた連立微積分方程式は、2 階の連立微分方程式になる。次式の連立微分方程式を解くことで散乱電子の波動関数 $\omega_i(r)$ を決定することができる。

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + \frac{2(Z-N)}{r} + k_i^2 \right) \omega_i(r) \\ & = 2 \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{j=1}^n a_{ij}^{\lambda} r^{-\lambda-1} \omega_j(r), \quad (10) \end{aligned}$$

ただし、 a_{ij}^{λ} は次式である。

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

(10) 式の微分方程式の漸近解は、散乱行列 \mathbf{K} を用いて次式で表現できる。

$$\begin{cases} \omega_{ij} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} (\sin \theta_i \delta_{ij} + \cos \theta_i K_{ij}) & k_i^2 > 0, \\ \omega_{ij} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} 0 & k_i^2 < 0. \end{cases} \quad (12)$$

ここで θ_i はクーロンの位相をも含むものである。内部領域と外部領域それぞれの波動関数を境界で滑らかにつなぐことにより、 \mathbf{K} 行列要素を得ることができる。 \mathbf{K} 行列より \mathbf{T} 行列が以下の式により求められる。

$$\mathbf{T} = \frac{-2i\mathbf{K}}{1-i\mathbf{K}}. \quad (13)$$

2.4 Breit-Pauli R 行列法による電子衝突理論

Breit-Pauli R 行列法は Berrington ら⁵⁾ によりその詳細が述べられている。Breit-Pauli R 行列法はディラックの相対論による方程式において後に述べる近似を用いた半相対論的なハミルトニアンを用いている。このため、標的及び全系の電子状態は、非相対論的な取り扱いの LS 結合ではなく、 JJ 結合により表記される。

N 個の電子を持つ原子番号 Z の原子またはイオンの場合を考える。このとき、Breit-Pauli ハミルトニアンは次のように非相対論のハミルトニアン H_{NR}^N に相対論的な項 H_{REL}^N を付け加えた形で表される。

$$H_{BP}^N = H_{NR}^N + H_{REL}^N. \quad (14)$$

H_{REL}^N はスピン・軌道相互作用 H_{SO}^N 、質量補正 H_{mass}^N 及びダーウィン項 $H_{D_1}^N$ により次のように表される。

$$H_{REL}^N = H_{SO}^N + H_{mass}^N + H_{D_1}^N. \quad (15)$$

非相対論的な取り扱いを行う R 行列法と同様に、内部領域における $N+1$ 電子系の波動関数は以下のように展開される。

$$\begin{aligned} & \Psi_k(\Delta_i J_i M_{J_i} \Pi | \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_{N+1}) \\ & = \mathcal{A} \sum_{ij} c_{ijk} \bar{\Phi}_i(\Delta_i J_i M_{J_i} \Pi | \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N, \hat{\mathbf{r}}_{N+1} \sigma_{N+1}) \\ & \quad \times \frac{1}{r_{N+1}} u_{ij}(r_{N+1}) \end{aligned}$$

$$+ \sum_j d_{jk} \phi_j(\Delta_i J_i M_{J_i} \Pi | x_1 \dots x_{N+1}). \quad (16)$$

Π は全系のパリティである。また、展開係数 c_{ijk} と d_{jk} は $N+1$ 電子系のハミルトニアン H_{BP}^{N+1} を対角化することにより求められる。

$$\langle \Psi_k | H_{BP}^{N+1} | \Psi_{k'} \rangle = \delta_{kk'} E_k^{N+1}. \quad (17)$$

ここで、 JLK 結合表示を導入する。この表示では次の関係がある。

$$\mathbf{J}_i + \mathbf{l} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{K} + \frac{1}{2} = \mathbf{J}. \quad (18)$$

ここで、 \mathbf{J}_i は標的の全角運動量、 \mathbf{l} は入射電子の角運動量、 \mathbf{J} は $N+1$ 電子系の全角運動量である。非相対論的な R 行列法と同様に、内部領域の波動関数と外部領域の波動関数を境界半径上で滑らかにつなぐことで JLK 結合表示の K 行列が求まり、 JLK 結合表示の散乱行列 T が求められる。

2.5 励起断面積

T 行列を用いると部分衝突強度は次のようになる。

$$\Omega_{ij}^{LS\pi} = \frac{(2J+1)}{2} \sum_{l_i l_f} |T_{l_i l_f}^{LS\pi}|. \quad (19)$$

衝突強度は部分衝突強度の各 $LS\pi$ の和で表されるので次のようになる。

$$\Omega_{ij} = \sum_{LS\pi} \Omega_{ij}^{LS\pi}. \quad (20)$$

また次の関係式を用いて積分断面積は求められる。

$$Q_{ij} = \frac{\pi a_0^2}{k_i^2 (2J_i + 1)} \Omega_{ij}. \quad (21)$$

3. 結果と考察

3.1 標的の波動関数

本研究では、基底状態及び励起状態を表す電子の軌道関数について、1s、2s、2p、3s、3p、3d、4s、4p は Clementi と Roetti³⁾ によって求められている Hartree-Fock 法による Slater 型軌道関数を使用し、その他の軌道関数は Hibbert⁴⁾ によって発表された配置間相互作用法によるプログラムパッケージ CIV3 を用いて変分的に決定した。これらの軌道の最適化の方法を表 1 に示し、表 2 に最適化した軌道関数のパラメータを示す。これ

表 1. Rb⁺ のスレーター型軌道関数の最適化の方法

軌道関数	最適化を行ったエネルギー準位
4d	4p ⁵ 4d (³ P + ¹ P)
4f	4p ⁵ 4f ³ D
5s	4p ⁵ 5s ³ P
5p	4p ⁵ 5p ³ S
5d	4p ⁵ 5d ³ P
6s	4p ⁵ 6s ³ P
6p	4p ⁵ 6p ³ S

らを用い、表 3 に示した電子配置によって標的イオンの波動関数を記述することにより、波動関数を求めた。表 3 で示される 73 状態のエネルギー準位を求めた。本研究で試みる励起断面積は基底状態 4p⁶ ¹S₀ から励起状態 4p⁵5s ¹P₁^o, ³P₁^o 及び 4p⁵4d ¹P₁^o, ³P₁^o, ³D₁^o への励起であることから、この励起エネルギーを表 4 に、振動子強度を表 5 に示す。

表 4 に示すように、本研究で求めた励起エネルギーは実験値よりも大きい。また、表 5 に示す振動子強度の LENGTH と VELOCITY の値を比べると、5s ¹P₁^o, ³P₁^o 遷移では LENGTH と VELOCITY が近い値である。4d ¹P₁^o, ³P₁^o, ³D₁^o 遷移では LENGTH と VELOCITY に差がある。表 4 の結果と波動関数が正確であれば振動子強度の LENGTH 成分と VELOCITY 成分が同じ値をとるという一般論を考えると、今回求めた波動関数は精度が高いとは言いがたい程度信頼おけるものと考えられる。

3.2 励起断面積

本研究では、R 行列法の計算に Berrington ら⁵⁾ によって発表されたプログラムパッケージを用いて、4p⁶ ¹S₀ → 4p⁵5s ¹P₁^o, ³P₁^o 及び 4p⁵4d ¹P₁^o, ³P₁^o, ³D₁^o 遷移における 35 状態、61 状態、73 状態の励起断面積を求め、その収束について調べた。これらの計算に含めた励起状態を表 6 に示す。結果をそれぞれ図 1～図 15 に示す。ここで、Zapesochnyi ら⁶⁾ の実験値は高エネルギー部で CB 近似法に規格化していることが彼らの論文で述べられている。彼らの結果は本研究の結果と比べて全体的に大きな値である。そこで、エネルギー依存性について本研究結果と比較しやすいように、4p⁶ ¹S₀ → 4p⁵5s ¹P₁^o 遷移の 25 eV で本研究結果と一致するように実験結果を 1/9 倍した。他の遷移についても実験値を 1/9 倍してある。また、実験で共鳴が現れているエネルギーが本研究と一致するように実験の入射エネルギーを 1 eV 少なくして図に示している。

表 2. Rb⁺ のスレーター型軌道関数のパラメータ

Orbital	I_{ij}	ξ_{ij}	C_{ij}		
4d	3	8.8286100	38.5914642		
	4	1.1402911	-0.2033229		
	4f	4	0.5201859	0.0059510	
		5s	1	23.7992727	7.0810204
			2	15.0707366	-89.4113552
3	7.2104429		80.7226469		
4	3.7182456		-15.4170163		
5p	5	1.3418243	0.1204514		
	2	16.5391070	65.0082981		
	3	7.2917119	-62.8373243		
	4	3.1927449	7.4805983		
	5	1.1499595	-0.0512844		
5d	3	8.4690097	96.0298616		
	4	2.0085600	-1.7536809		
	5	0.7067648	0.0029754		
6s	1	23.1956670	3.5379070		
	2	15.3326501	-46.7487835		
	3	7.2888076	40.2700840		
	4	3.6015148	-6.9939313		
	5	1.4922829	0.1076364		
	6	0.7624519	-0.0007563		
6p	2	16.3849076	33.2113703		
	3	7.4273725	-33.9139551		
	4	3.1182250	3.6288373		
	5	1.2701785	-0.0475768		
6	0.6750837	0.0003480			

表 3. Rb⁺ の波動関数の決定に用いた状態

J	π	State
0	even	$4p^6\ ^1S_0$; $4p^55p\ ^1S_0$; $4p^56p\ ^1S_0$, 3P_1 ; $4p^44d\ ^1S_0$; $4p^45p\ ^3S_1$
1	even	$4p^55p\ ^3S_1$, 1P_1 , 3P_1 , 3D_1 ; $4p^56p\ ^3S_1$, 1P_1 , 3P_1 , 3D_1 ; $4p^54f\ ^3D_1$; $4p^45p\ ^3S_1$
2	even	$4p^55p\ ^3P_1$, 1D_1 , 3D_1 ; $4p^56p\ ^3P_1$, 1D_1 , 3D_1 ; $4p^54f\ ^1D_1$, 3D_1 , 3F_1
3	even	$4p^55p\ ^3D_1$; $4p^56p\ ^3D_1$; $4p^54f\ ^3D_1$, 1F_1 , 3F_1 , 3G_1 ; $4p^45p\ ^3D_1$
4	even	$4p^54f\ ^3F_1$, 1G_1 , 3G_1
5	even	$4p^54f\ ^3G_1$
0	odd	$4p^55s\ ^3P_1$; $4p^56s\ ^3P_1$; $4p^54d\ ^3P_1$; $4p^55d\ ^3P_1$; $4p^45s5p\ ^3P_1$
1	odd	$4p^55s\ ^1P_1$, 3P_1 ; $4p^56s\ ^1P_1$, 3P_1 ; $4p^54d\ ^1P_1$, 3P_1 , 3D_1 ; $4p^55d\ ^1P_1$, 3P_1 , 3D_1
2	odd	$4p^55s\ ^3P_1$; $4p^56s\ ^3P_1$; $4p^54d\ ^3P_1$, 1P_1 , 3D_1 , 3F_1 ; $4p^55d\ ^3P_1$, 1D_1 , 3D_1 , 3F_1
3	odd	$4p^54d\ ^3D_1$, 1F_1 , 3F_1 ; $4p^55d\ ^3D_1$, 1F_1 , 3F_1
4	odd	$4p^54d\ ^3F_1$; $4p^55d\ ^3F_1$

表 4. 73 状態における Rb⁺ の励起エネルギー

Level	Energy (Ryd)	
	Present	Experiment ¹⁰⁾
$4p^6\ ^1S_0$	0	0
$4p^55s\ ^3P_1^o$	1.2877592	1.22902360
$4p^55s\ ^1P_1^o$	1.3466826	1.28133303
$4p^54d\ ^3P_1^o$	1.4245069	1.30732173
$4p^54d\ ^3D_1^o$	1.5415397	1.41527810
$4p^54d\ ^1P_1^o$	1.6608235	1.54604234

表 5. Rb⁺ の基底状態 ($4p^6\ ^1S_0^o$) からの遷移における振動子強度

State	Present		Others ⁹⁾
	LENGTH	VELOCITY	
$4p^55s\ ^3P_1^o$	0.174927	0.153401	0.25
$4p^55s\ ^1P_1^o$	0.345711	0.324591	0.26
$4p^54d\ ^3P_1^o$	0.181382e-4	0.168461e-3	
$4p^54d\ ^1P_1^o$	0.111576	0.0659088	
$4p^54d\ ^3D_1^o$	2.06812	1.119998	

まず、 $4p^6\ ^1S_0^o \rightarrow 4p^55s\ ^1P_1^o$ 遷移について、35 状態の図 1 では実験値同様に 20 eV 付近での共鳴のピークを見ることができるが、21 eV 以上の領域において複雑な共鳴状態が現れず、23 eV での共鳴のピークも現れていない。この領域での振舞いを見るために状態数を 61 状態に増やした結果が図 2 である。状態数を増やすことで 35 状態では見られなかった 23 eV 付近での共鳴状態を表すことができた。このため、23 eV 付近での共鳴状態には新たに追加した 6s、6p、5d 軌道に関する状態が深く寄与しているものと考えられる。更に状態数を 73 状態に増やした結果が図 3 である。24 eV 以上の領域において実験値では励起断面積が減少する傾向にあるのに対して 73 状態では増加しているという違いがあるものの、20 eV 付近、23 eV 付近に実験値同様の共鳴のピークが見られ、励起断面積のエネルギー依存性について実験値と良く一致しているといえる。R 行列法の計算を行う際に、更に 2 電子励起状態等の状態を追加することで、24 eV 以降での実験値との不一致は解決できるのではないかとと思われる。

次に、 $4p^6\ ^1S_0^o \rightarrow 4p^55s\ ^3P_1^o$ 遷移について述べる。実験値では 17 eV、19 eV、23 eV に大きく 3 つの共鳴のピークを見ることができるが、図 4 の 35 状態では 23 eV でのピークが全く現れていない。 $^1P_1^o$ の場合と同様に 6s、6p、5d 軌道に関する状態が深く寄与しているものと考えられ、状態数を 61 状態に増やしたところ、3 つのピークが現れた (図 5)。しかし、23 eV ではなく 22 eV にピークが現れている。これは、更に状態数を増や

表 6. R 行列法に用いた状態数及びその電子配置

State	Configuration
35	4p ⁶ (¹ S); 4p ⁵ 5s(¹ P, ³ P); 4p ⁵ 5p(¹ S, ³ S, ¹ P, ³ P, ¹ D, ³ D); 4p ⁵ 4d(¹ P, ³ P, ¹ D, ³ D, ¹ F, ³ F) 4p ⁴ 5s(³ S); 4p ⁴ 5p(³ S, ³ D); 4p ⁴ 4d(¹ S); 4p ⁴ 5s5p(³ P)
61	35state + 4p ⁵ 6s(¹ P, ³ P); 4p ⁵ 6p(¹ S, ³ S, ¹ P, ³ P, ¹ D, ³ D); 4p ⁵ 5d(¹ P, ³ P, ¹ D, ³ D, ¹ F, ³ F)
73	61state + 4p ⁵ 4f(¹ D, ³ D, ¹ F, ³ F, ¹ G, ³ G)

した図 6 の 73 状態でも同様の傾向が見られた。21 eV 以下の領域に関しては実験値と励起断面積のエネルギー依存性が良く一致していると言える。21 eV 以降の領域については、2 電子励起状態や 6d 軌道等の更に上の軌道を含んだ状態を考慮することで改善が期待できる。

4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵4d 1P₁^o, 3P₁^o, 3D₁^o 遷移については、実験値とあまり良い一致を示していない (図 7~15)。表 5 に示すように、これらの遷移では振動子強度の LENGTH と VELOCITY に大きな差があるため、波動関数の精度が良くない。このことが実験値との差に影響を与えたと考えられる。これを改善するためには、より精度の良い波動関数を用いることや、他の遷移同様に更に状態数を増やすことが考えられる。

4. 結論

本研究では、精度が高く低エネルギー領域の計算に適した R 行列法を用いて、電子衝突による Rb⁺ の基底状態 4p⁶ 1S₀^e から励起状態 4p⁵5s 1P₁^o, 3P₁^o 及び 4p⁵4d 1P₁^o, 3P₁^o, 3D₁^o への励起断面積について計算を行った。標的イオンの束縛電子の波動関数には、配置間相互作用法を用いて波動関数を決定した。R 行列法に含める標的イオンの状態数について、35 状態、61 状態、73 状態を考慮し、それぞれの励起断面積を求め、実験値とエネルギー依存性について比較、検討した。

4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵5s 1P₁^o 遷移における励起断面積のエネルギー依存性は、73 状態で実験値と同様の共鳴のピークを得た。しかし実験では現れていない多くの共鳴が本計算では得られた。4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵5s 3P₁^o 遷移における励起断面積のエネルギー依存性は、73 状態で実験値と同様に 3 つの大きなピークを見ることができ、21 eV で不一致が見られた。また、4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵4d 1P₁^o, 3P₁^o 及び 3D₁^o 遷移における励起断面積のエネルギー依存性は、本研究結果は実験値との一致を得

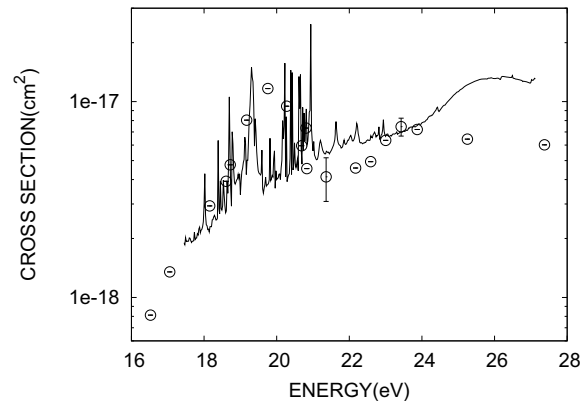


図 1. 電子衝突による Rb⁺ の励起断面積 (4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵5s 1P₁^o) . —, 35states; o, Zapesochnyi ら⁶⁾

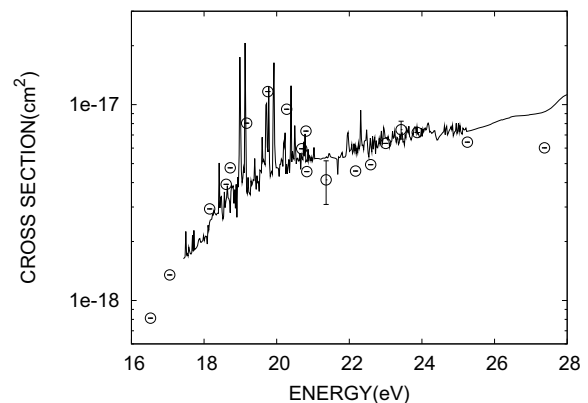


図 2. 電子衝突による Rb⁺ の励起断面積 (4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵5s 1P₁^o) . —, 61states; o, Zapesochnyi ら⁶⁾

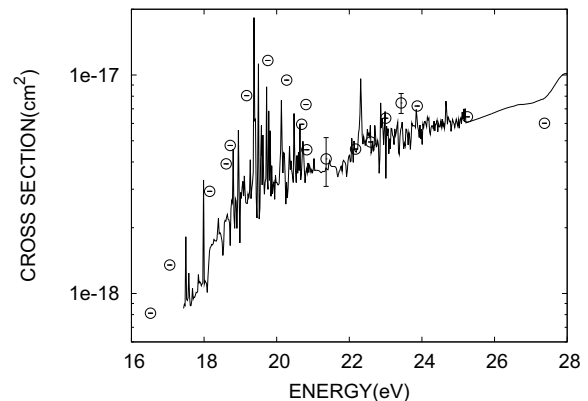


図 3. 電子衝突による Rb⁺ の励起断面積 (4p⁶ 1S₀^e → 4p⁵5s 1P₁^o) . —, 73states; o, Zapesochnyi ら⁶⁾

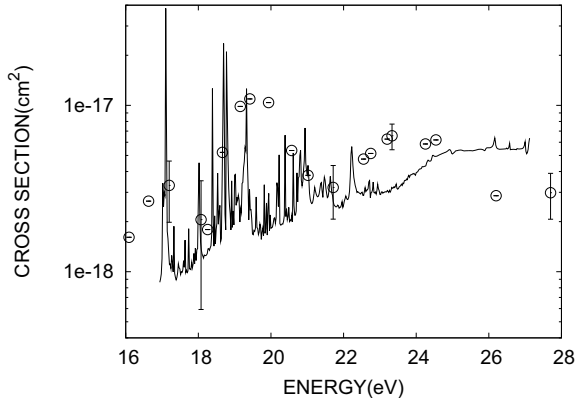


図4. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^55s \ ^3P_1$) . —, 35states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

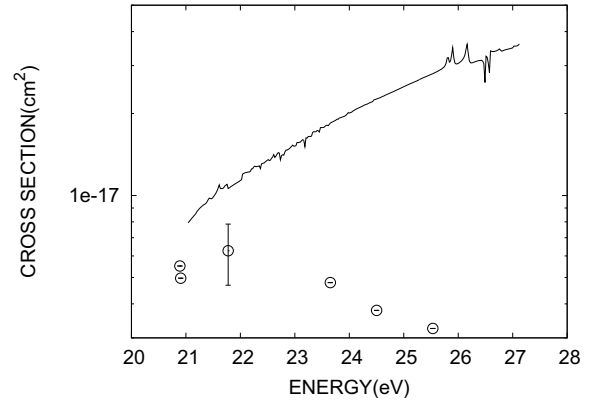


図7. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^1P_1$) . —, 35states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

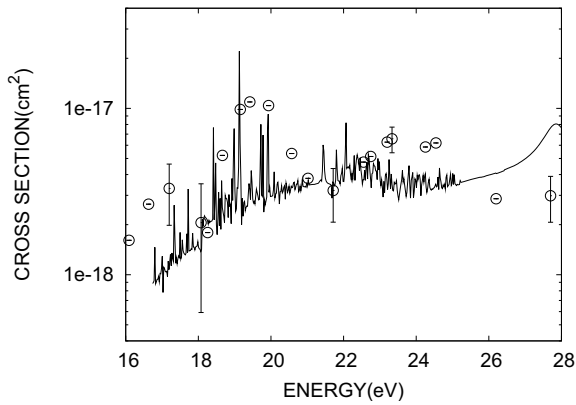


図5. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^55s \ ^3P_1$) . —, 61states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

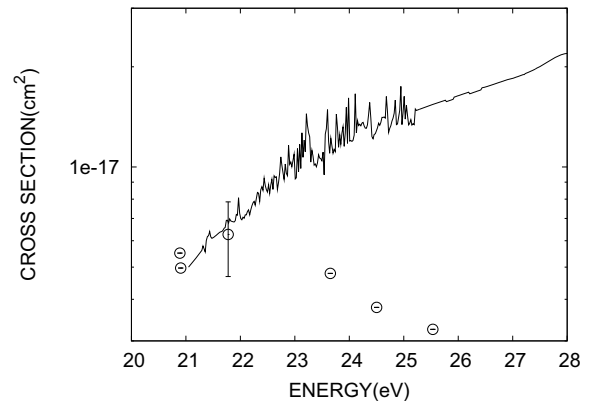


図8. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^1P_1$) . —, 61states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

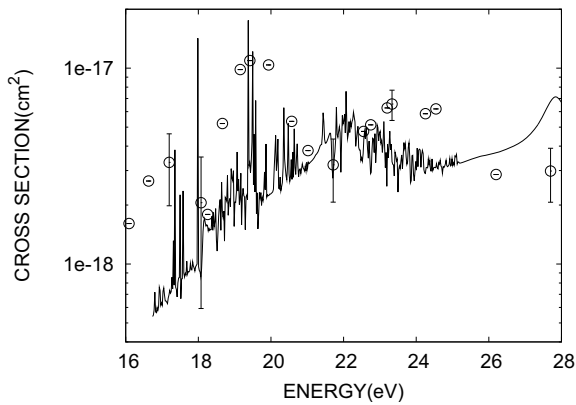


図6. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^55s \ ^3P_1$) . —, 73states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

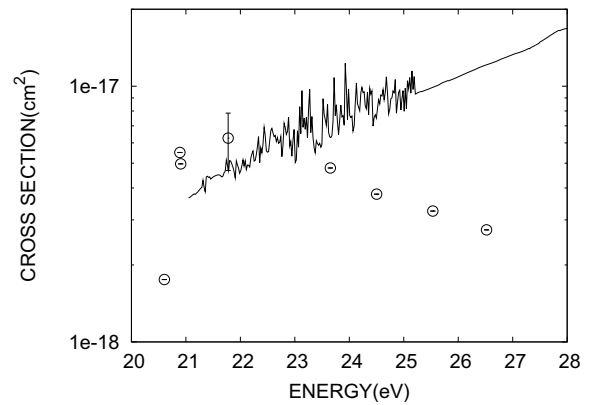


図9. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^1P_1$) . —, 73states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

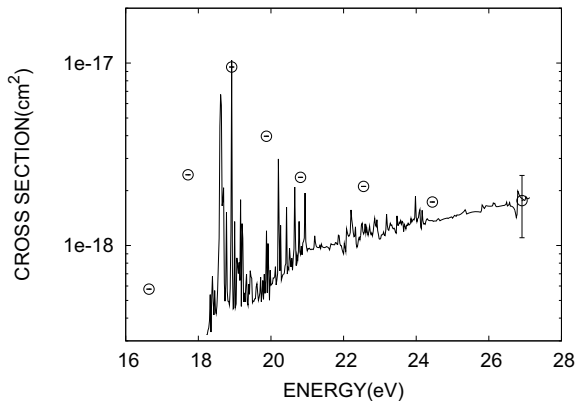


図 10. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^3P_1^0$) . —, 35states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

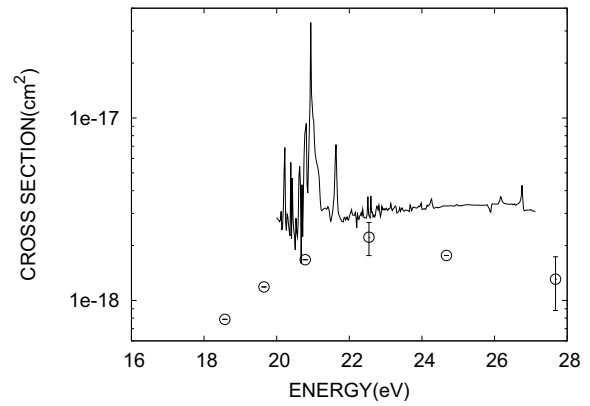


図 13. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^3D_1^0$) . —, 35states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

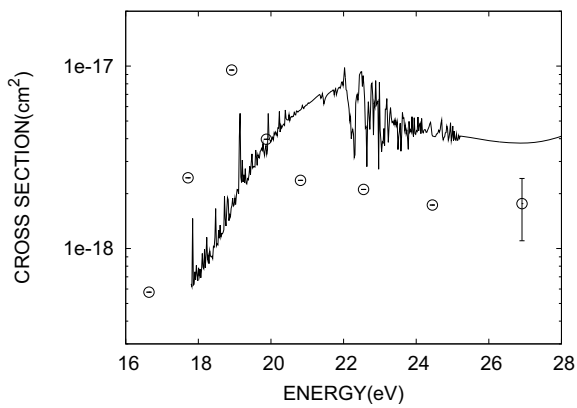


図 11. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^3P_1^0$) . —, 61states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

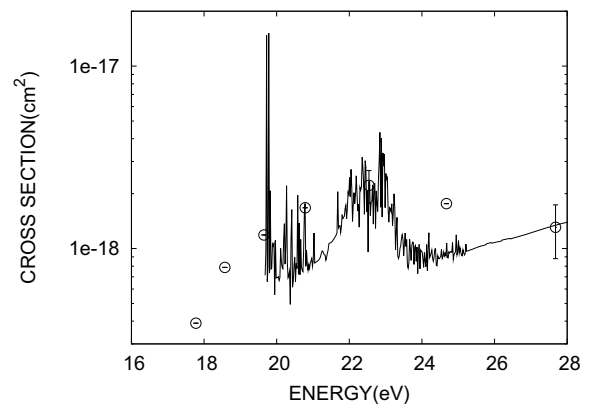


図 14. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^3D_1^0$) . —, 61states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

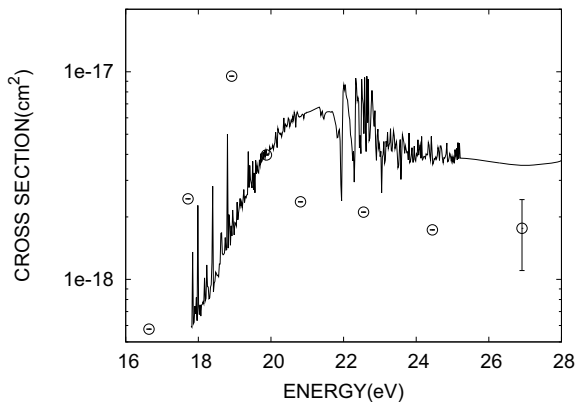


図 12. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^3P_1^0$) . —, 73states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

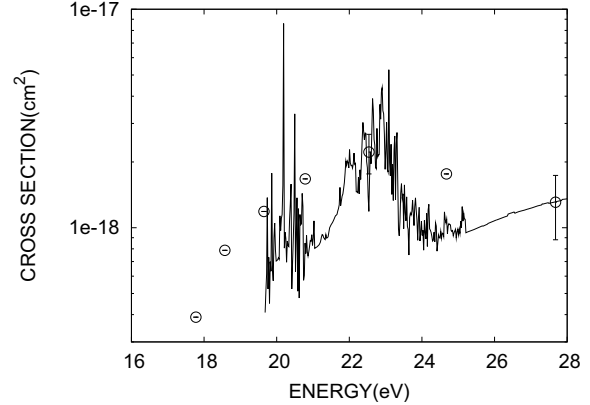


図 15. 電子衝突による Rb^+ の励起断面積 ($4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4p^54d \ ^3D_1^0$) . —, 73states; \circ , Zapesochnyi ら⁶⁾

ることができなかった。

今後、より精度の良い波動関数を求めるために連続状態を考慮した擬状態を用いることや、R行列法に含める状態に2電子励起状態を更に含める計算が望まれる。

参考文献

1. E. P. Wigner and L. Eisenbud, *Phys. Rev.* **72**, 29 (1947).
2. P. G. Burke, A. Hibbert and W. D. Robb, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **4**, 153 (1971).
3. E. Clementi and C. Roetti, *AtomicDataTables*, **14**, Nos. 3-4 (1974).
4. A. Hibbert, *Comp. Phys. Commun.* **9**, 141 (1975).
5. K. A. Berrington, W. B. Eissner and P. H. Norrington, *Comp. Phys. Commun.* **92**, 290 (1995).
6. A. I. Zapesochnyĭ, A. I. Imre, I. S. Aleksakhin, I. P. Zapesochnyĭ and O. I. Zatsarinnyĭ, *Sov. Phys. JETP* **63**, 1155 (1986).
7. K. A. Berrington, S. Nakazaki and Y. Murakami, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, 1-13 (2006).
8. K. Bartschat and N. S. Scott, *Comp. Phys. Commun.* **30**, 369 (1983).
9. P. F. Gruzdev, *Opt. Spectrosc. (USSR)* **22**, 170 (1967).
10. National Institute of Standards and Technology (<http://physics.nist.gov>).