

# 外殻 1 電子イオンの励起過程におけるストークス・パラメータ

秋田 健一<sup>1)</sup> ・ 甲斐 健師<sup>2)</sup> ・ 柏原 広道<sup>3)</sup> ・ 中崎 忍<sup>4)</sup>

## Stokes parameters in excitation of ions with one valence electron by electron-impact

Kenichi AKITA, Takeshi KAI, Hiromichi KASHIWABARA and Shinobu NAKAZAKI

### Abstract

We carry out  $R$ -matrix calculations for electron-impact excitation of ions with one valence electron ( $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{B}^{2+}$  and  $\text{Al}^{2+}$ ) from their ground state to the  $^2\text{P}$  state. Integral and differential cross sections, polarization degree, and the Stokes parameters are obtained at low incident energies. We note that the present Stokes parameter  $P_3$  for  $\text{B}^{2+}$  and  $\text{Al}^{2+}$  at small angles has positive values while the parameter for  $\text{Li}^{2+}$  is negative. The former evidence cannot be explained using the semi-classical theory model which is available for scattering in atoms.

**Key words :** Stokes parameter, Excitation, Electron-impact,  $R$ -matrix, One valence electron.

### 1. 序論

電子と原子又はイオンの衝突過程の研究は、天体物理学や核融合プラズマなどの素過程において重要な基礎データとなる。そのため、多くの原子やイオンの電子衝突に関する実験及び理論的研究が今日まで行われてきた。

電子衝突により原子又はイオンがエネルギーの高い状態へ励起すると、原子又はイオンは脱励起する際に余分なエネルギーを光として放出する。この放光は偏光しており、その偏光度を研究することで、プラズマの素過程の詳細が明らかとなる。その偏光の度合いを表現するパラメータにストークス・パラメータ (Stokes parameter) がある。このパラメータは、直線偏光を表現する  $P_1$  及び  $P_2$ 、円偏光を表現する  $P_3$  の 3 つがある。Andersen ら<sup>1)</sup> は、 $\text{P}$  状態への電子衝突励起過程において、ストークス・パラメータに関係した干渉パラメータ (coherence parameters)  $P_\ell$ 、 $\gamma$  及び  $L_\perp$  を導入した。これら 3 つのパラメータから励起状態の電子雲についての情報が分かる。電子雲の大きさは微分面積から、形状は  $P_\ell$  から、回転はアラインメント角  $\gamma$  から分かり、標的の角運動量移行は  $L_\perp$  から分かる。角運動量移行とは、標的の角運動量の散乱面に垂直な成分の期待値である。干渉パラメータとストークス・パラメータの関係は、 $P_\ell = \sqrt{P_1^2 + P_2^2}$ 、 $\gamma = 0.5 \arg(P_1 + iP_2)$  及び  $L_\perp = -P_3$

である。

Steph と Golden<sup>2)</sup> は角運動量移行  $L_\perp$  に注目し、原子の電子衝突について半古典論モデルを提案した。入射電子は正または負のポテンシャルの影響を受けて散乱されるため、散乱される電子の経路は以下の 2 つの過程が考えられるとするモデルである。

- (1) : 入射電子が標的から遠い所を通過すると正のポテンシャルにより引力を受け散乱する  
⇒ 散乱角は小さい ⇒  $L_\perp > 0$
- (2) : 入射電子が標的の近くを通過すると負のポテンシャルにより斥力を受け散乱する  
⇒ 散乱角は大きい ⇒  $L_\perp < 0$

半古典論モデルを適用することで、角運動量移行  $L_\perp$  から (1) と (2) のどちらの散乱過程がより支配的であるかを理解することができる。原子の電子衝突の  $\text{S} \rightarrow \text{P}$  遷移では、正の長距離ポテンシャルが存在する。入射電子が標的の近くを通過すると散乱角は大きくなり、離れたところを通過すると散乱角は小さくなる。そのため、入射電子が標的の近くを通過する場合は、負の短距離ポテンシャルを受け、散乱角の大きな方向へ散乱されるので、散乱過程 (2) が支配的であり、 $L_\perp < 0$  となる。また、遠くを通過する場合は、負の短距離ポテンシャルを受け、散乱角の小さな方向へ散乱されるので、散乱過程 (1) が支配的であり、 $L_\perp > 0$  となる。

今日までに、様々な中性原子について理論的及び実験的にストークス・パラメータの研究がなされている。その結

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) 日本原子力研究開発機構 関西光科学研究所 特定課題推進員  
3) 宮崎大学 工学部 技術専門職員  
4) 宮崎大学 材料物理工学科 教授

果は全て半古典論モデルで説明ができています。

イオンの電子衝突においては、入射電子とイオン間の正のクーロンポテンシャルも角運動量移行  $L_{\perp}$  に影響を及ぼす。つまり、正のポテンシャルの影響が大きくなるので、イオンの場合でも半古典論モデルで説明できる。

Madison ら<sup>3)</sup> は DW 法を用い、水素原子、水素様イオン  $\text{He}^+$  及び  $\text{Li}^{2+}$  の  $1s^2S^e \rightarrow 2p^2P^o$  遷移におけるオリエンテーション・パラメータ  $O_{-1}^c$  を 100eV の入射電子のエネルギーで計算した。オリエンテーション・パラメータ  $O_{-1}^c$  は角運動量移行  $L_{\perp}$  と、 $O_{-1}^c = \frac{1}{2}L_{\perp}$  の関係がある。 $\text{He}^+$  は、小角度散乱において角運動量移行  $L_{\perp}$  が正であり、 $\text{Li}^{2+}$  は、全散乱角において角運動量移行  $L_{\perp}$  が正であると報告している。Srivastava ら<sup>4)</sup> は DW 法を用い、水素様イオン ( $Z=2, 6, \dots$ ) の  $1s^2S^e \rightarrow 2p^2P^o$  遷移、ヘリウム様イオン ( $Z=3, 8, \dots$ ) の  $1s^2^1S^e \rightarrow 1s2p^1P^o$  遷移における微分断面積、アラインメント角及び角運動量移行  $L_{\perp}$  を  $X = 2, 4$  のエネルギーで計算した。その結果、小角度散乱において角運動量移行  $L_{\perp}$  が正であると報告している。 $X$  はしきい値単位のエネルギーである。Kai ら<sup>5,6)</sup> は  $R$  行列法を用いて、マグネシウム様イオン ( $\text{Si}^{2+}, \text{S}^{4+}, \text{Ar}^{6+}$  及び  $\text{Ca}^{8+}$ ) の  $3s^2^1S^e \rightarrow 3s3p^1P^o$  遷移における積分、微分断面積及びストークス・パラメータを計算した。その結果、小角度散乱において角運動量移行  $L_{\perp}$  が負であり、半古典論モデルで説明できないと報告している。

本研究では、外殻一電子イオンの  $2S^e \rightarrow 2P^o$  遷移に注目し、 $R$  行列法を用いて、積分、微分断面積、ストークス・パラメータ及び偏光度の計算を行った。標的イオンには、水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$ 、リチウム様イオン  $\text{B}^{2+}$  及びナトリウム様イオン  $\text{Al}^{2+}$  を選んだ。標的イオンに 2 価の陽イオンを選んだのは、Kai ら<sup>5)</sup> のマグネシウム様イオン  $\text{Si}^{2+}$  と系統的に角運動量移行  $L_{\perp}$  を調べていくためである。

## 2. $R$ 行列法による電子衝突理論

本研究で用いている  $R$  行列法の特徴は、散乱領域を内部領域と外部領域の二つの領域に分けて計算を行うことである。内部領域とは入射電子が標的内の束縛電子と混在している領域のことで、入射電子と束縛電子の電子交換や電子相関を考慮し、配置間相互作用法 (CI) を用いて全系の波動関数を求める。一方、外部領域は、電子交換や電子相関が無視できる領域として、緊密結合法 (CC) により散乱電子の波動関数を決定する。 $R$  行列法は、この二つの領域で求めた散乱電子の波動関数を境界で滑らかにつなぐことで入射電子のエネルギーが低い領域での散乱振幅を精度良く求める近似法である。

ここでは、 $N$  個の電子を持つ原子番号  $Z$  の標的に電子が入射し、散乱する過程を考える。その際、各電子の空間座標  $\mathbf{r}$  には極座標  $(r, \theta, \varphi)$  を、スピン座標には  $\sigma$  を使い、それらをまとめて  $\mathbf{x}$  と表わすことにする。以後、特に述べな

い限り、原子単位系 (a.u.) を用いる。

### 2.1 標的の束縛状態

束縛電子が  $N$  個から構成される標的の波動関数  $\phi_j$  は、電子の座標の交換に対して反対称であるというパウリの原理を満たさなければならない。そのため、標的の波動関数  $\phi_j$  は各電子の軌道関数で構成されるスレーター行列式で書ける。また、規格直交性を満たすために、これらの線形結合で書く場合もある。それぞれの軌道関数は動径、角度そしてスピン関数で表現され、角度部分は球面調和関数で表され、動径部分はスレーター型の軌道関数 (1) 式で表される。

$$P_{n_i l_i}(r) = \sum_j C_{ij} r^{l_{ij}} \exp(-\xi_{ij} r). \quad (1)$$

標的の状態は、波動関数  $\phi_j$  を用いて、同じ  $L_i$  と  $S_i$  を持った状態 (Symmetry) 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。

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

ここで、 $L_i$  と  $S_i$  は状態の全軌道角運動量子数と全スピン角運動量子数であり、 $M_{L_i}$  と  $M_{S_i}$  は  $L_i$  と  $S_i$  の  $z$  成分である。 $\alpha_j$  はセニヨリティといい、同じ  $L_i$  と  $S_i$  を持つ状態を区別するための記号である。(2) 式の展開係数  $a_{ij}$  や標的の固有エネルギー  $E_i^N$  は標的のハミルトニアン  $H_N$  を対角化することにより求められる。

### 2.2 $R$ 行列法による内部領域

電子と原子又はイオンの衝突過程において、入射電子が標的の電子雲の中に入ってくると、標的内電子との区別ができなくなる。この内部領域での全系の状態を表す波動関数を精度良く表すには、標的内の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。したがって、この領域では、標的内電子と散乱電子から成る  $N + 1$  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。

内部領域における  $N + 1$  電子系の基底関数  $\Psi_k$  を次のように標的の波動関数  $\Phi_i$  を用いて表す。

$$\begin{aligned} & \Psi_k(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_{N+1}) \\ &= \mathcal{A} \sum_{ij} c_{ijk} \bar{\Phi}_i(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N, \hat{\mathbf{r}}_{N+1} \sigma_{N+1}) \\ & \times \frac{u_{ij}(r_{N+1})}{r_{N+1}} + \sum_j d_{jk} \phi_j(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_{N+1}). \quad (3) \end{aligned}$$

ここで、関数  $\bar{\Phi}_i$  は標的の束縛状態の波動関数  $\Phi_i$  に散乱電子の角度とスピン関数を含ませたものである。連続基底関数

$u_{ij}$  は (5) 式の境界条件を満たす (4) 式の微分方程式の解である。

$$\begin{aligned} & \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V(r) + k_{ij}^2 \right) u_{ij}(r) \\ &= \sum_{n=l_i+1}^{n_{max}(l_i)} \lambda_{ijn} P_{nl_i}(r), \end{aligned} \quad (4)$$

$$u_{ij}(0) = 0, \quad \frac{a}{u_{ij}(a)} \frac{du_{ij}(r)}{dr} \Big|_{r=a} = b. \quad (5)$$

ここで、(5) 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。(4) 式の右辺については、軌道角運動量  $l_i$  をもつ標的の軌道関数について和をとっており、 $\lambda_{ijn}$  は標的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。

$$(u_{ij}(r)|P_{nl_i}(r)) = \int_0^a u_{ij}(r) P_{nl_i}(r) dr = 0. \quad (6)$$

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。

$$(u_{ij}(r)|u_{ij'}(r)) = \delta_{ij'}. \quad (7)$$

(3) 式における係数  $c_{ijk}$  と  $d_{jk}$  は、 $N+1$  電子系のハミルトニアン  $H_{N+1}$  を (2) 式の  $a_{ij}$  を求めた時と同様に対角化することで求められる。求めた散乱電子の基底関数  $u_{ij}$  を用いることで、境界  $r=a$  における散乱電子の波動関数は以下のように書ける。

$$F_i(a) = \sum_j R_{ij} \left( a \frac{dF_j(r)}{dr} \Big|_{r=a} - bF_j(a) \right), \quad (8)$$

$$R_{ij} = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}(a)w_{jk}(a)}{E_k^{N+1} - E}, \quad (9)$$

$$w_{ik}(r) = \sum_j c_{ijk} u_{ij}(r). \quad (10)$$

ここで、行列要素  $R_{ij}$  で表わせる行列を  $\mathbf{R}$  行列と呼ぶ。

### 2.3 R 行列法による外部領域

外部領域では、標的の波動関数が十分小さいところを領域として選ぶため、入射電子と標的内電子との電子交換が無視できる。また、散乱電子は標的の平均的なポテンシャルの影響を受けると考えられるため、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。

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

$$= 2 \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{j=1}^n \frac{a_{ij}^{\lambda}}{r^{\lambda+1}} F_j(r). \quad (11)$$

ここで、長距離ポテンシャル係数  $a_{ij}^{\lambda}$  は、

$$a_{ij}^{\lambda} = \left\langle \bar{\Phi}_i \left| \sum_{k=1}^N P_{\lambda}(\cos \theta_{k,N+1}) r_k^{\lambda} \right| \bar{\Phi}_j \right\rangle, \quad (12)$$

と書ける。

内部領域と外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で遷移に関する情報を含んだ  $\mathbf{T}$  行列を求めることが出来る。

### 3. 断面積、ストークスパラメータ及び偏光度

標的が始状態  $N_i$  から終状態  $N_f$  へ遷移する際の散乱振幅  $f(N_i \rightarrow N_f)$  は、前節で得られた  $\mathbf{T}$  行列を用いて以下のように書ける。

$$\begin{aligned} f(N_i \rightarrow N_f) &= i \sum_{l_i l_f L S \Pi} \sqrt{\frac{\pi(2l_i+1)}{k_i k_f}} e^{i(\sigma_{l_i} + \sigma_{l_f})} \\ &\times \langle L_i l_i M_i 0 | LM \rangle \langle LM | L_f l_f M_f m_f \rangle \\ &\times \langle S_i \frac{1}{2} M_{s_i} m_{s_i} | S M_s \rangle \langle S M_s | S_f \frac{1}{2} M_{s_f} m_{s_f} \rangle \\ &\times T_{l_i l_f}^{L S \Pi}(N_i \rightarrow N_f) Y_{l_f m_f}(\theta_e, \phi_e). \end{aligned} \quad (13)$$

ここで

$$\sigma_{l_i} = \arg \Gamma(l_i + 1 - i\eta_i), \quad \eta_i = \frac{Z-N}{k_i}, \quad (14)$$

であり、 $\langle J_1 J_2 M_1 M_2 | JM \rangle$  はクレブシュ・ゴルダン係数である。

外殻に1つの電子を持つイオンの  $2S^e \rightarrow 2P^o$  遷移において、入射・散乱電子及び標的のスピンは共に  $1/2$  であるため、全スピン角運動量  $S$  は1及び0となる。そのため散乱過程は triplet 散乱 ( $S=1$ ) と singlet 散乱 ( $S=0$ ) の2つがある。この2つの散乱における散乱振幅を  $f_{M_f}^t$  及び  $f_{M_f}^s$  と表すと、磁気副準位ごとの微分断面積  $\sigma_{M_f}$  及び積分断面積  $Q_{M_f}$  は、

$$\sigma_{M_f} = \frac{k_f}{4k_i} \{ |f_{M_f}^s|^2 + 3|f_{M_f}^t|^2 \}, \quad (15)$$

$$Q_{M_f} = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma_{M_f} \sin \theta_e d\theta_e, \quad (16)$$

となる。微分断面積及  $\sigma$  び積分断面積  $Q$  は以下のようになる。

$$\sigma, Q = \sum_{M_f} \sigma_{M_f}, Q_{M_f}, \quad (17)$$

singlet 散乱及び triplet 散乱におけるストークス・パラメータは、singlet 散乱振幅  $f_{M_f}^s$  及び triplet 散乱振幅  $f_{M_f}^t$  を用いて以下のように書ける。

$$P_1^{s(t)} = \frac{|f_0^{s(t)}|^2 - 2|f_1^{s(t)}|^2}{\sigma^{s(t)}} \quad (18)$$

$$P_2^{s(t)} = \frac{-2\sqrt{2}\text{Re}(f_1^{s(t)} f_0^{s(t)*})}{\sigma^{s(t)}} \quad (19)$$

$$P_3^{s(t)} = \frac{2\sqrt{2}\text{Im}(f_1^{s(t)} f_0^{s(t)*})}{\sigma^{s(t)}} \quad (20)$$

ここで、 $\sigma^{s(t)}$  はそれぞれ singlet 散乱及び triplet 散乱における微分断面積である。(18) - (20) 式より、ストークス・パラメータは次式のように書ける。

$$P_i = \frac{\sigma^s P_i^s + 3\sigma^t P_i^t}{\sigma^s + 3\sigma^t} \quad (i = 1, 2, 3), \quad (21)$$

偏光度  $P_0$  は、磁気副準位ごとの積分断面積  $Q_{M_f}$  を用いて以下のように書ける。

$$P_0 = \frac{3(Q_0 - Q_1)}{7Q_0 + 11Q_1} \times 100. \quad (22)$$

#### 4. 結果及び考察

本研究では、外殻一電子イオンの  $2S^e \rightarrow 2P^o$  遷移に注目し、 $R$  行列法を用いて、積分、微分断面積、ストークス・パラメータ及び偏光度の計算を行った。標的イオンには、水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$ 、リチウム様イオン  $\text{B}^{2+}$  及びナトリウム様イオン  $\text{Al}^{2+}$  を選んだ。

##### 4.1 水素様イオン $\text{Li}^{2+}$

電子衝突により  $\text{Li}^{2+}$  内の電子が基底状態 ( $1s^2 S^e$ ) から  $2p^2 P^o$  状態へ励起し、その後、光を放出して、基底状態へ脱励起する過程を、標的に 6 状態 (RM6)、10 状態 (RM10) 及び 13 状態 (RM13) を考慮して計算した。表 1 に RM13 の計算に用いた状態を示す。また、RM6 及び RM10 は表 1 においてそれぞれ  $n \leq 3$  及び  $n \leq 4$  である。

表 1. 水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$  に用いた状態数

Symmetry	RM13
$2S^e$	1s, 2s, 3s, 4s, 5s
$2P^o$	2p, 3p, 4p, 5p
$2D^e$	3d, 4d, 5d
$2F^o$	4f

$\text{Li}^{2+}$  の積分断面積の結果を図 1 に示す。図 1 において、RM6 の結果と RM10 及び RM13 の結果は低エネルギー領域でわずかに異なるが、RM10 と RM13 の結果はほぼ一致している。また、状態数が増すにつれて、断面積の収束性が見られ、110eV 以上のエネルギーで状態数が増えたことによる共鳴現象も現れている。図 1 において、入射電子のエネ

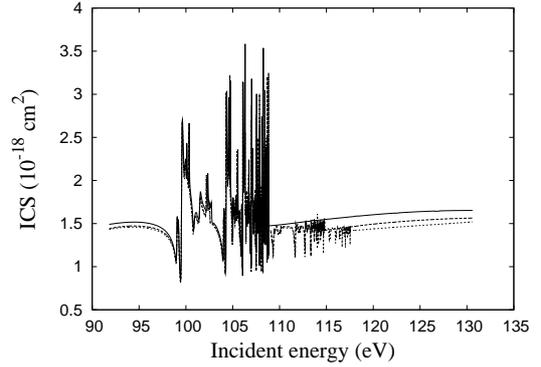


図 1. 電子衝突による水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$  の  $1s^2 S^e \rightarrow 2p^2 P^o$  遷移についての積分断面積: —, RM6; ---, RM10; ·····, RM13.

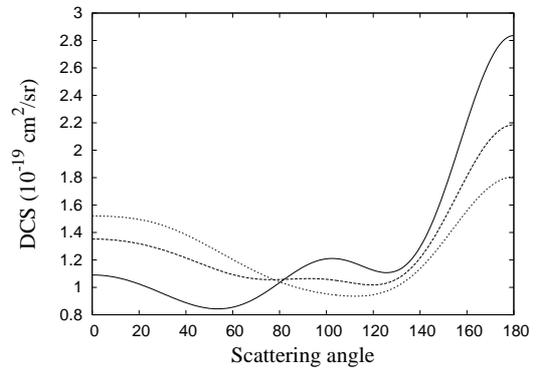


図 2. 電子衝突による水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$  の  $1s^2 S^e \rightarrow 2p^2 P^o$  遷移についての微分断面積: —, 92 eV ( $X=1.002$ ); ---, 94 eV ( $X=1.024$ ); ·····, 96 eV ( $X=1.045$ ).

ルギーが低いところ、特に共鳴現象の見られない領域 (92、94 及び 96eV) での微分断面積の結果を図 2 に、ストークス・パラメータ  $P_1$  及び  $P_2$  の結果を図 3 に、角運動量移行  $L_{\perp}$  の結果を図 4 に示す。

図 2 の微分断面積から、入射電子のエネルギーが低いため、後方散乱の割合が支配的であることが分かる。しかし、入射電子のエネルギーが増加するにしたがって、前方散乱の割合が大きくなっていることも分かる。また、入射電子のエネルギーが 92eV のときとそれ以外のときでは、 $50^\circ$  から  $140^\circ$  において形状が大きく異なっている。これも入射電子のエネルギーが低いため、標的イオンとの相互作用が大きくなっているのだと思われる。

図 3(a) のストークス・パラメータ  $P_1$  から、散乱角が  $0^\circ$  及び  $180^\circ$  においては完全  $0^\circ$  偏光であることが分かる。これは、標的の電子雲が電子衝突によって、入射電子の入射軸に沿って電子雲が形成されるためである。また、入射電子のエネルギーが 92eV のとき、約  $100^\circ$  から  $130^\circ$  において、 $P_1 < 0$  であるため、 $90^\circ$  偏光が  $0^\circ$  偏光より放出される割合が多いことが分かる。

図 3(b) のストークス・パラメータ  $P_2$  から、散乱角が  $0^\circ$

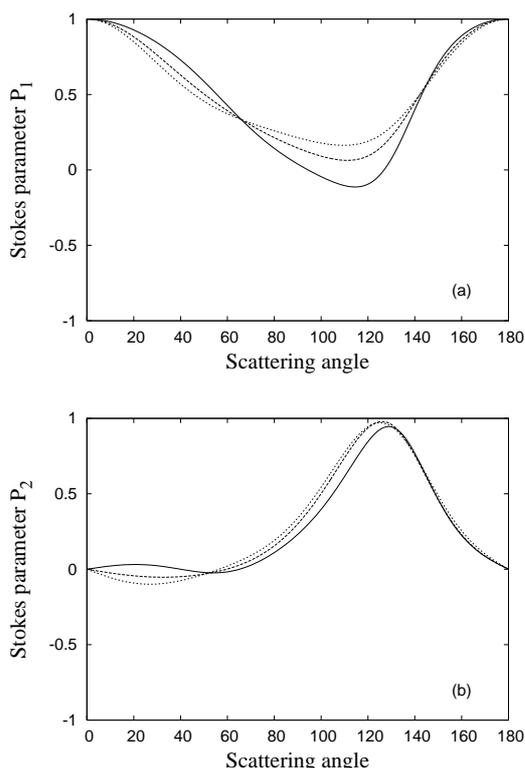


図 3. 電子衝突による水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$  の  $1s^2S^e \rightarrow 2p^2P^o$  遷移についてのストークス・パラメータ: (a) ストークス・パラメータ  $P_1$ : —, 92 eV( $X=1.002$ ); - - -, 94 eV( $X=1.024$ ); ·····, 96 eV( $X=1.045$ ). (b) ストークス・パラメータ  $P_2$ .

及び  $180^\circ$  において  $P_2$  が 0 となっている。これは、その 2 つの散乱角においてはストークス・パラメータ  $P_1$  より、完全  $0^\circ$  偏光であるため、その他の偏光は放出されないためである。また、入射電子のエネルギーが 92eV のとき、約  $0^\circ$  から  $40^\circ$  において、 $P_2 > 0$  であるため、 $45^\circ$  偏光が  $135^\circ$  偏光より放出される割合が多いことが分かる。さらに、 $130^\circ$  付近ではほぼ完全  $45^\circ$  偏光が放出されることも分かる。

図 4 の角運動量移行  $L_\perp$  から、 $80^\circ$  付近において、ほぼ完全な左回り円偏光が放出されることが分かる。また、低エネルギー・小角度散乱において角運動量移行は正、大角度散乱において負の値となり、Steph と Golden<sup>2)</sup> らの提案した半古典論モデルで  $2p^2P^o$  状態が説明できる。

偏光度の結果を図 5 に示す。偏光度は、入射電子のエネルギーがしきい値付近で約 25%、しきい値の 1 倍から 1.45 倍の領域では約 28% の値を得た。

#### 4.2 リチウム様イオン $\text{B}^{2+}$

電子衝突により  $\text{B}^{2+}$  内の電子が基底状態 ( $1s^22s^2S^e$ ) から  $1s^22p^2P^o$  状態へ励起し、その後、光を放出して、基底状態へ脱励起する過程を、標的に 5 状態 (RM5)、9 状態 (RM9) 及び 11 状態 (RM11) を考慮して計算した。表 2 に RM11 の計算に用いた状態を示す。ここで、 $5\bar{s}$  及び  $5\bar{p}$  は擬状態と呼ばれる状態で、主量子数  $n \geq 5$  の寄与と連続状態の寄

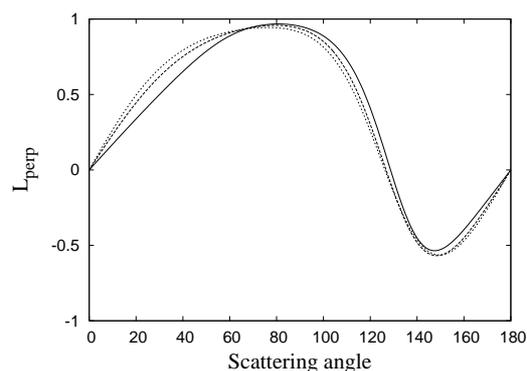


図 4. 電子衝突による水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$  の  $1s^2S^e \rightarrow 2p^2P^o$  遷移についての角運動量移行  $L_\perp$ : —, 92 eV( $X=1.002$ ); - - -, 94 eV( $X=1.024$ ); ·····, 96 eV( $X=1.045$ ).

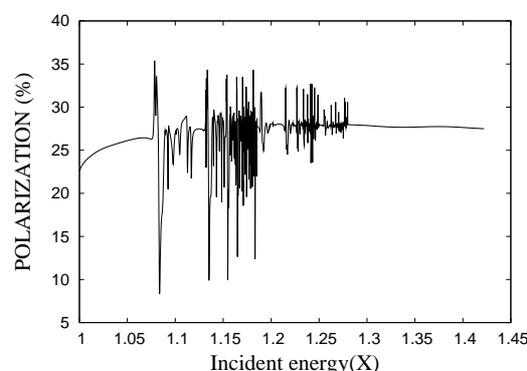


図 5. 電子衝突による水素様イオン  $\text{Li}^{2+}$  の  $1s^2S^e \rightarrow 2p^2P^o$  遷移についての偏光度: —, RM13.

表 2. リチウム様イオン  $\text{B}^{2+}$  に用いた状態数

Symmetry	RM11
$^2S^e$	2s, 3s, 4s, $5\bar{s}$
$^2P^o$	2p, 3p, 4p, $5\bar{p}$
$^2D^e$	3d, 4d
$^2F^o$	4f

与を含めた状態である。また、RM5 及び RM9 は表 2 においてそれぞれ  $n \leq 3$  及び  $n \leq 4$  である。

図 6 に本研究の  $\text{B}^{2+}$  の積分断面積の結果と Marchalant ら<sup>7)</sup> の擬状態を用いた  $R$  行列法 (RMPS) の結果を示す。Marchalant ら<sup>7)</sup> の計算結果と比較しても形状や共鳴現象の現れる位置もほぼ一致している。また、RM5、RM9 及び RM11 と状態数が増加するにつれて断面積の収束性が見られ、25eV 以上のエネルギーで状態数の増加による共鳴現象が現れている。

図 6 の積分断面積において、共鳴現象の見られない領域 (7, 9 及び 11 eV) での微分断面積を図 7 に、ストークス・パラメータ  $P_1$  及び  $P_2$  の結果を図 8 に、角運動量移行  $L_\perp$  の結果を図 9 に示す。

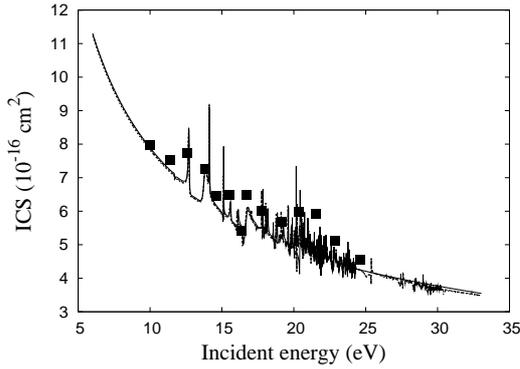


図 6. 電子衝突によるリチウム様イオン  $B^{2+}$  の  $2s\ 2S^e \rightarrow 2p\ 2P^o$  遷移についての積分断面積: —, RM5; - - -, RM9; ·····, RM11; — · —, RMPS (Marchalant *et al*<sup>7)</sup>).

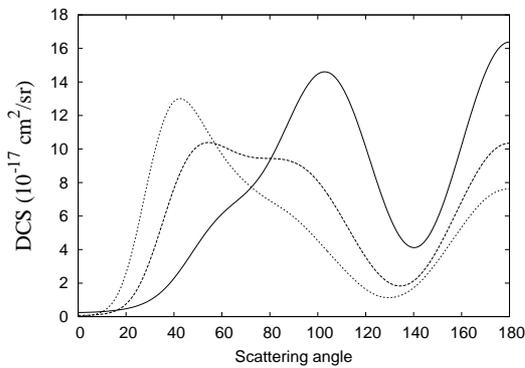


図 7. 電子衝突によるリチウム様イオン  $B^{2+}$  の  $2s\ 2S^e \rightarrow 2p\ 2P^o$  遷移についての微分断面積: —, 7 eV( $X=1.167$ ); - - -, 9 eV( $X=1.500$ ); ·····, 11 eV( $X=1.833$ ).

図 7 の微分断面積から、入射電子のエネルギーが低い場合、後方散乱が支配的であることが分かる。また、入射電子のエネルギーが 7 eV のとき入射軸から約  $100^\circ$  の方向への散乱確率が大きい、エネルギーの増加に伴って前方散乱の割合が大きくなっていることも分かる。

図 8(a) のストークス・パラメータ  $P_1$  から、散乱角が  $0^\circ$  及び  $180^\circ$  においては完全  $0^\circ$  偏光であることは水素様イオン  $Li^{2+}$  の場合と変わらないが、節の数が水素様イオン  $Li^{2+}$  の場合と比べて増えている。これは、 $0^\circ$  及び  $90^\circ$  偏光の放射される割合が同じになる角度が増えていることを意味する。

図 8(b) のストークス・パラメータ  $P_2$  から、入射電子のエネルギーが 7 eV のとき、 $140^\circ$  付近でほぼ完全  $45^\circ$  偏光となることが分かる。また、9 eV のときには  $20^\circ$  付近でほぼ完全  $135^\circ$  偏光となることが分かり、ストークス・パラメータ  $P_1$  と同様に節の数が増えている。

図 9 の角運動量移行  $L_\perp$  から、 $60^\circ$  付近において、ほぼ完全な左回り円偏光が放出されることが分かる。また、低エネルギー・小角度散乱において、角運動量移行は負となり、Steph と Golden<sup>2)</sup> らの提案した半古典論モデルと反する結

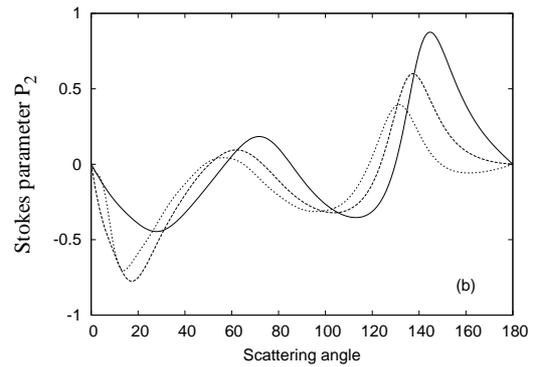
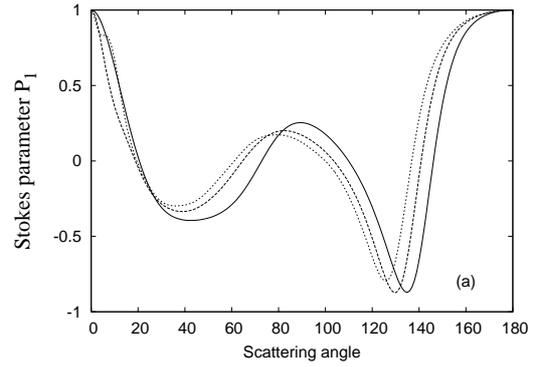


図 8. 電子衝突によるリチウム様イオン  $B^{2+}$  の  $2s\ 2S^e \rightarrow 2p\ 2P^o$  遷移についてのストークス・パラメータ: (a) ストークス・パラメータ  $P_1$ : —, 7 eV( $X=1.157$ ); - - -, 9 eV( $X=1.487$ ); ·····, 11 eV( $X=1.818$ ); (b) ストークス・パラメータ  $P_2$ .

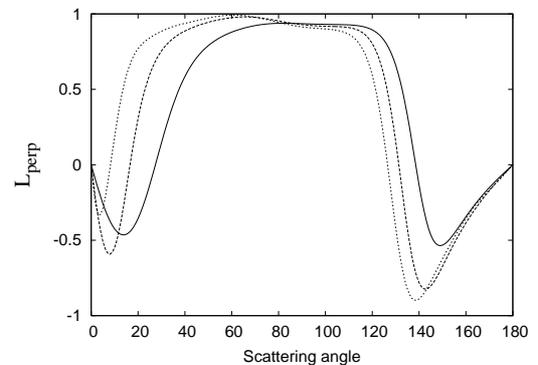


図 9. 電子衝突によるリチウム様イオン  $B^{2+}$  の  $2s\ 2S^e \rightarrow 2p\ 2P^o$  遷移についての角運動量移行  $L_\perp$ : —, 7 eV( $X=1.167$ ); - - -, 9 eV( $X=1.500$ ); ·····, 11 eV( $X=1.833$ ).

果を得た。これは Kai ら<sup>5)</sup> のマグネシウム様イオンに次いで半古典論モデルに反する新たなイオンが見つかったことになる。

偏光度の結果を図 10 に示す。偏光度は、入射電子のエネルギーがしきい値付近で約 13%、しきい値の 1 倍から 2 倍の領域では約 12% の値を得た。

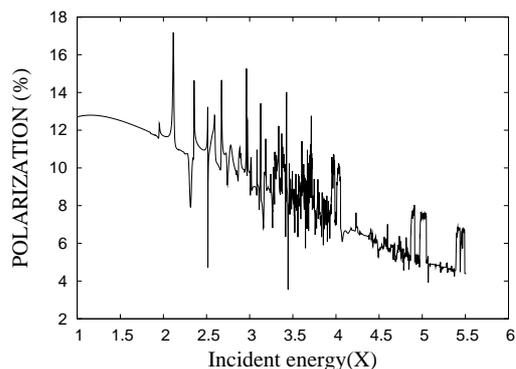


図 10. 電子衝突によるリチウム様イオン  $B^{2+}$  の  $2s^2S^e \rightarrow 2p^2P^o$  遷移についての偏光度: —, RM11.

### 4.3 ナトリウム様イオン $Al^{2+}$

電子衝突により  $Al^{2+}$  内の電子が基底状態 ( $1s^22s^22p^63s^2S^e$ ) から  $1s^22s^22p^63p^2P^o$  状態へ励起し、その後、光を放出して、基底状態へ脱励起する過程を、標的に7状態 (RM7) 及び11状態 (RM11) を考慮して計算した。表3にRM11の計算に用いた状態を示す。また、RM7は表3において  $n \leq 4$  である。

表 3. ナトリウム様イオン  $Al^{2+}$  に用いた状態数

Symmetry	RM11
$2S^e$	3s, 4s, 5s
$2P^o$	3p, 4p, 5p
$2D^e$	3d, 4d, 5d
$2F^o$	4f, 5f

図 11 に本研究の  $Al^{2+}$  の積分断面積の結果と Mitroy と Norcross<sup>8)</sup> の擬状態を含む9状態緊密結合法 (9CC) の結果を示す。Mitroy と Norcross<sup>8)</sup> の結果と多少の違いはあるが、全体的には良く一致している。また、20eV以上のエネルギーで状態数の増加による共鳴現象が現れている。図 11 において、共鳴現象の見られない領域 (7, 9 及び 9.5 eV) での微分断面積を図 12 に、ストークス・パラメータ  $P_1$  及び  $P_2$  の結果を図 13 に、角運動量移行  $L_{\perp}$  の結果を図 14 に示す。

図 12 の微分断面積から、入射電子のエネルギーが低いため、後方散乱が支配的であることが分かる。しかし、入射電子のエネルギーが増加するにしたがって、60° 前方への散乱の割合が急激に大きくなっていることも分かる。また、入射電子のエネルギーが 7.5eV のときとそれ以外のときでは、0° から 40° 及び 140° から 180° において形状が大きく異なっている。これも入射電子のエネルギーが低いため、標的イオンとの相互作用が大きくなっているのだと思われる。

図 13(a) のストークス・パラメータ  $P_1$  から、散乱角が 0° 及び 180° においては完全 0° 偏光であることは水素様イオン  $Li^{2+}$  及びリチウム様イオン  $B^{2+}$  の場合と変わらないが、

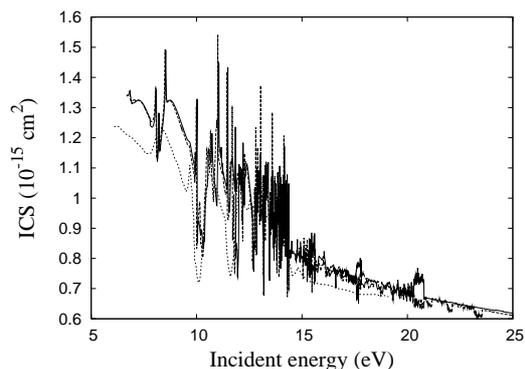


図 11. 電子衝突によるナトリウム様イオン  $Al^{2+}$  の  $3s^2S^e \rightarrow 3p^2P^o$  遷移についての積分断面積: —, RM7; - - -, RM11; ·····, Mitroy と Norcross.<sup>8)</sup>

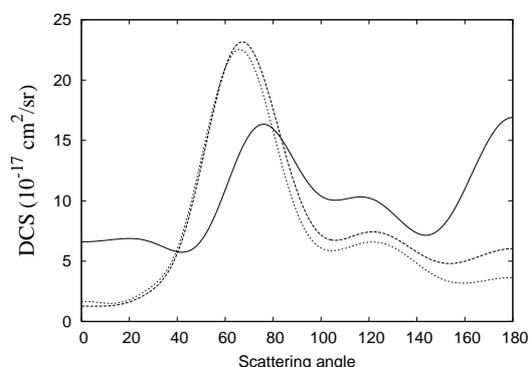


図 12. 電子衝突によるナトリウム様イオン  $Al^{2+}$  の  $3s^2S^e \rightarrow 3p^2P^o$  遷移についての微分断面積: —, 7.5 eV( $X=1.135$ ); - - -, 9 eV( $X=1.362$ ); ·····, 9.5 eV( $X=1.437$ ).

リチウム様イオン  $B^{2+}$  の場合と同様に水素様イオン  $Li^{2+}$  の場合と比べて節の数が増えている。

図 13(b) のストークス・パラメータ  $P_2$  から、入射電子のエネルギーが 7.5eV のとき、20° 付近ではほぼ完全 135° 偏光となることが分かる。また、散乱角の増加に伴って  $P_2$  は右肩上がりになっていることも分かる。

図 14 の角運動量移行  $L_{\perp}$  から、入射電子のエネルギーが 7.5eV のとき、40° 付近において、ほぼ完全な右回り円偏光が放出されることが分かる。また、低エネルギー小角度散乱において、角運動量移行は負となり、Steph と Golden<sup>2)</sup> らの提案した半古典論モデルと反する結果を得た。

偏光度の結果を図 15 に示す。偏光度は、入射電子のエネルギーがしきい値付近で約 19%、しきい値の1倍から 1.45 倍の領域では約 12% の値を得た。

## 5. まとめ

本研究では、電子衝突による外殻1電子イオン (水素様イオン  $Li^{2+}$ 、リチウム様イオン  $B^{2+}$  及びナトリウム様イオン  $Al^{2+}$ ) の  $2S^e \rightarrow 2P^o$  遷移における積分、微分断面積、偏光

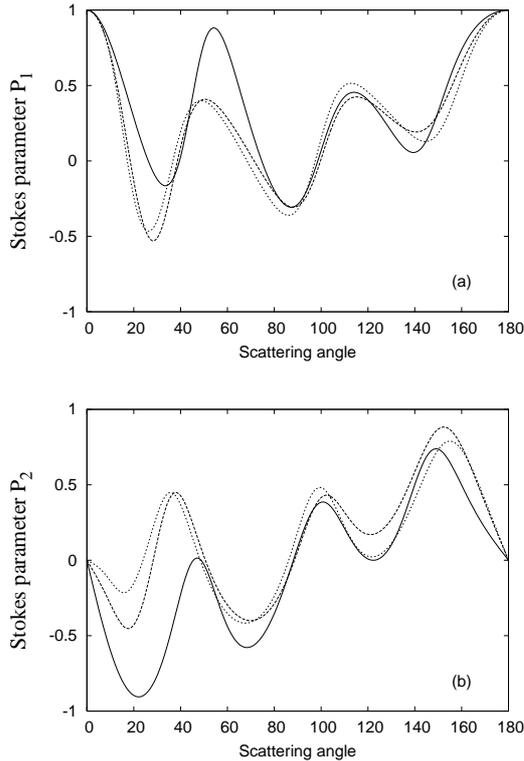


図 13. 電子衝突によるナトリウム様イオン  $\text{Al}^{2+}$  の  $3s\ 2S^e \rightarrow 3p\ 2P^o$  遷移についてのストークス・パラメータ: (a) ストークス・パラメータ  $P_1$ : —, 7.5 eV ( $X=1.135$ ); - - -, 9.0 eV ( $X=1.362$ ); ·····, 9.5 eV ( $X=1.437$ ); (b) ストークス・パラメータ  $P_2$ .

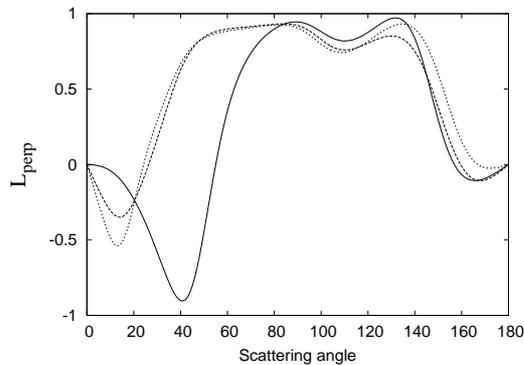


図 14. 電子衝突によるナトリウム様イオン  $\text{Al}^{2+}$  の  $3s\ 2S^e \rightarrow 3p\ 2P^o$  遷移についての角運動量移行  $L_{\perp}$ : —, 7.5 eV ( $X=1.135$ ); - - -, 9 eV ( $X=1.362$ ); ·····, 9.5 eV ( $X=1.437$ ).

度及びストークス・パラメータを  $R$  行列法を用いて理論的に調べた。マグネシウム様イオン以外にリチウム様イオン及びナトリウム様イオンが低エネルギー小角度散乱において、角運動量移行  $L_{\perp} < 0$  となり、半古典論モデル<sup>2)</sup> では説明できないことが分かった。この理由については、散乱電子に影響を及ぼす以下の 3 つのポテンシャルの大小関係を解析することにより何らかの問題解決が見られるのでは

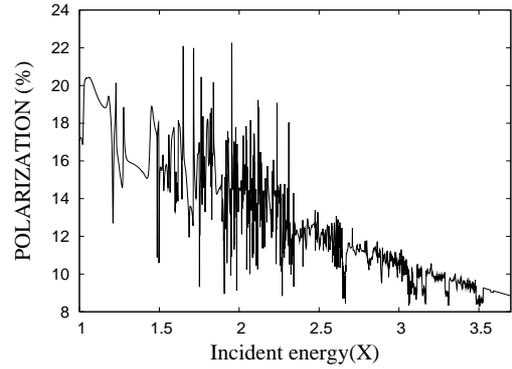


図 15. 電子衝突によるナトリウム様イオン  $\text{Al}^{2+}$  の  $3s\ 2S^e \rightarrow 3p\ 2P^o$  遷移についての偏光度: —, RM11.

ないか現在検討中である。

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{クーロンポテンシャル} + \frac{Z-N}{r} \\ \text{遠距離ポテンシャル} + \frac{\alpha}{r^2} \\ \text{近距離ポテンシャル} - (r \text{ のべき乗の多項式}) e^{-\beta r} \end{array} \right.$$

また、本研究で求めた微分断面積、ストークス・パラメータ及び角運動量移行は比較するデータがなく新しいデータであり、他の理論や実験により本研究の結果が検証されることを期待する。

#### 参考文献

- 1) N. Andersen, J. W. Gallagher and I. V. Hertel, Phys. Rep. **279** 251 (1988).
- 2) N. C. Steph and D. E. Golden, Phys. Rev. A **21**, 1848 (1980).
- 3) D. H. Madison, G. Csanak and D. C. Cartwright, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **19** 3361 (1986).
- 4) R. Srivastava, Y. Itikawa and K. Sakimoto, Phys. Rev. A, **43** 4736 (1991).
- 5) T. Kai, R. Srivastava and S. Nakazaki, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37** 2045 (2004).
- 6) T. Kai, R. Srivastava and S. Nakazaki, Phys. Rev. A, **70**. 062705 (2004).
- 7) P. J. Marchalant, K. Bartschat and I. Bray, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **30** L435 (1997).
- 8) J. Mitroy and D. W. Norcross, Phys. Rev. A **39** 537 (1989).