

電子衝突によるマグネシウム原子の励起過程

久保 俊博¹⁾ · 甲斐 健師²⁾ · 柏原 広道³⁾ · 中崎 忍⁴⁾

Excitation of Magnesium by Electron-Impact

Toshihiro KUBO, Takeshi KAI, Hiromichi KASHIWABARA and Shinobu NAKAZAKI

Abstract

We calculate integral and differential cross sections for the excitation in magnesium by electron impact. The R-matrix method with 13 and 35 target states is used for the transition of the ground state ($3s^2 \ ^1S$) to the $3s3p \ ^1P$ and $3s3d \ ^1D$ states at incident electron energies of 10 and 20 eV. The present results are in agreement with experiment data at 20 eV.

Key words : Magnesium, Electron-impact, Excitation, R-matrix method, Differential cross section, Integral cross section.

1. 序 論

電子衝突によるマグネシウム原子の励起過程は、天体物理学及び実験室などにおけるプラズマ中の基本的な素過程であり、プラズマ中の電子温度や密度を知る上で重要である。このことから、この過程における様々な実験及び理論的研究が今日までに行われている。

これまで、電子衝突によるマグネシウム原子の励起過程の実験的研究は、まず Aleksahin ら¹⁾ によって $3 \ ^1P$ 状態の励起関数が測定され、その後、Leep ら²⁾ によって測定された(この時、測定された共鳴線は 285.2nm である)。Leep らの結果は、 $3s3d \ ^1D$ 、 $3s4s \ ^1S$ 、 $3s4p \ ^1P$ からのカスケードの効果を含めた Robb³⁾ のボルン近似の結果を使って規格化されており、この結果は、カスケードの効果を含まない Aleksahin ら¹⁾ の結果より約 2 倍高い値を示している。また、Williams ら⁴⁾ は、基底状態 ($3s^2 \ ^1S$) から $3s3p \ ^1P$ 及び $3s3d \ ^1D$ 遷移の入射エネルギー 10、20、40 eV における微分断面積及び積分断面積の結果を発表している。さらに、Brunger ら⁵⁾ によって基底状態から $3s3p \ ^1P$ 遷移の入射エネルギー 10、20、40 eV における微分断面積の結果が報告されている。

一方、理論的研究としては、ボルン近似法、歪曲波近似法、緊密結合法及び R 行列法の近似法を用いて報告されている。その中で、入射・散乱波が標的のポテンシャルによ

て歪められる歪曲波近似法の報告としては、Srivastava ら⁶⁾ が相対論を考慮して基底状態から $3s3d \ ^1D$ 遷移の入射エネルギー 20、40 eV における微分断面積の結果を報告している。また、状態間の結合を考慮し連立微積分方程式を解く緊密結合法の報告としては、Mitroy ら⁷⁾ と Fursa ら⁸⁾ の報告がある。Mitroy らは、全波動関数の展開に 5 個の状態を考慮して基底状態から $3s3p \ ^1P$ 及び $3s3d \ ^1D$ 遷移の入射エネルギー 10、20、40 eV における微分断面積及び積分断面積の結果を報告しており、Fursa らは、全波動関数の展開に 109 個の状態を考慮して基底状態から $3s3p \ ^1P$ 遷移の入射エネルギー 10、20、40 eV における微分断面積の結果を報告している。一般に精度の高い R 行列法の結果としては、Gedeon ら⁹⁾ によって基底状態から $3s3p \ ^1P$ 及び $3s3d \ ^1D$ 遷移の積分断面積が報告されている。彼らは、13 個の物理的状态と 6 個の擬状態を考慮し積分断面積の結果を求めているが、微分断面積の結果は報告されていない。

そこで本研究では、衝突の領域を 2 つの系に分けて計算を行う R 行列法を用いて、電子衝突によるマグネシウム原子の基底状態から $3s3p \ ^1P$ 及び $3s3d \ ^1D$ 遷移の入射エネルギー 10、20 eV における微分断面積、積分断面積を理論的に解析した。全波動関数の展開に含める標的の状態数としては、高い二重励起状態を含む 13 個の状態及び 35 個の状態を考慮し、得られた結果を実験や他の理論値と比較検討した。

2 節では、理論について述べ、3 節では、本研究の結果を示し、同時にその考察を述べる。最後に 4 節で結論を述べる。今後、特に述べない限り原子単位系 (a.u.) を用いる。

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) 材料物理工学科技官
4) 材料物理工学科教授

2. 理 論

R 行列法は、1974 年に原子核物理学で複合核モデルとして Wigner ら¹⁰⁾ によって提唱され、1970 年代に Burke ら¹¹⁾ によって電子・原子の衝突の分野に拡張されたものである。

この方法の特徴は、衝突の領域を内部領域と外部領域の 2 つの領域に分けて計算を行う点であり、これらの領域は、標的内電子と散乱電子の電子交換が生じる領域と生じない領域に分けられる。2 つの領域の境界は、標的内電子の波動関数が十分に小さい所、即ち、標的内電子の存在確率が十分に小さい所として選ばれる。

内部領域では、標的内電子と散乱電子の電子交換の効果を取り入れ、なおかつ電子相関の効果も考慮しなければならない。そこで標的内電子と散乱電子からなる電子系について考え、配置間相互作用法を用いて系の波動関数を決定する。一方、外部領域では、電子交換を無視した緊密結合法を用いて散乱電子の波動関数を決定する。この 2 つの領域で求められた波動関数を境界で滑らかにつなぐことによって散乱振幅が求められ、散乱断面積を得ることができる。

2.1 標的原子の状態

N 個の電子をもつ標的原子の状態 i の波動関数について考える(本研究では、マグネシウム原子としているので $N=12$ である)。これは、直交化された配置の線形和により波動関数を表す配置間相互作用法を用いて次式のように表される。

$$\Phi_i(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_j a_{ij} \phi_j(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N), \quad (1)$$

$$\phi_j(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \equiv \phi_j(1s^{m_{1j}} 2s^{m_{2j}} 2p^{m_{3j}} \dots \dots \alpha_j L_j S_j M_{L_j} M_{S_j} | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N).$$

ここで、 L_j と S_j は標的原子の j 状態の全軌道角運動量量子数と全スピン角運動量量子数であり、 M_{L_j} と M_{S_j} は、各々の z 成分である。また、座標 \mathbf{x}_i は i 番目の電子の座標 α_j は同じ L_j と S_j を持つ状態を区別するための記号(セニヨリティと呼ばれる)、 m_λ はそれぞれの軌道にある電子数を示している。

(1) 式の展開係数 a_{ij} は、次式で表される標的原子のハミルトニアン行列を対角化することにより決定される。

$$\langle \Phi_i | H_N | \Phi_j \rangle = E_i^N \delta_{ij}. \quad (2)$$

2.2 R 行列法の内部領域

内部領域では、標的内電子 (N 電子系) と散乱電子からなる $N+1$ 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。この $N+1$ 電子系の波動関数は、次式のように表される。

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

第 1 項目の関数 $\bar{\Phi}_i$ は、(1) 式の標的原子の束縛状態の波動関数 Φ_i に対応し、それに散乱電子の角度とスピン関数をかけたものを表している。これにより、全軌道角運動量 L 、全スピン角運動量 S 、そしてパリティ π をもつ $N+1$ 電子系の固有状態を表現できる。演算子 A は、標的原子と散乱電子の波動関数を反対称化させる演算子であり、第 2 項目の ϕ_j は、標的原子の束縛状態を構成する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。そして u_{ij} は散乱電子の波動関数の動径部分であり、(5) 式の境界条件を満足する (4) 式の微分方程式の解である。

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

$$u_{ij}(0) = 0,$$

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

ここで、(5) 式の a は、内部領域の境界半径であり(本研究では、標的原子の波動関数の動径関数が 10^{-3} 以下になる所を選んだ)、 b は任意定数である。(4) 式の $P_{nl_i}(r)$ は、標的原子の状態を表す各電子の軌道関数の動径部分である。また、右辺の和については、標的原子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考慮に入れる。 λ_{ijn} は標的原子と散乱電子の動径関数が直交するよう導入されたラグランジェの未定乗数であり、次式が成り立つように選ばれる。

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

このようにして求めた散乱電子の波動関数 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。

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

(3) 式における係数 c_{ijk} と d_{jk} は、次式の $N+1$ 電子系のハミルトニアン行列を対角化することにより決定される。

$$(\Psi_k | H_{N+1} | \Psi_{k'}) = E_k^{N+1} \delta_{kk'}. \quad (8)$$

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

励起状態を (3) 式の第 1 項の展開の中に含めなければならぬ。そのため、励起状態にどのような状態をいくつ含むかということは重要なことである。

2.3 R 行列法の外部領域

外部領域では、内部領域で考慮したような効果を見捨てるため、電子交換散乱を見捨てた通常の緊密結合法により、散乱電子の波動関数 $\omega_i(r)$ を決定する。これは、次の微分方程式を解くことに帰着する。

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + k_i^2 \right) \omega_i(r) = 2 \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{j=1}^n a_{ij}^{\lambda} r^{-\lambda-1} \omega_j(r). \quad (9)$$

ここで、右辺の和の最大値 n は緊密結合展開 (3) 式の中で使われたチャンネルの数を示し、係数 a_{ij}^{λ} は次式で定義される。

$$a_{ij}^{\lambda} = \langle \bar{\Phi}_i | \sum_{k=1}^N r_k^{\lambda} P_{\lambda}(\cos\theta_{kN+1}) | \bar{\Phi}_j \rangle. \quad (10)$$

外部領域で得られた散乱電子の波動関数と内部領域で得られた散乱電子の波動関数を境界でつなぐことにより、散乱情報を得ることができる。

2.4 微分断面積及び積分断面積

散乱振幅は、前節で述べた計算で得られる遷移行列 T を用いて次式のように表される。

$$f = i \left(\frac{\pi}{k_i k_j} \right)^{1/2} \sum_{l_i l_j L M_L S M_S \pi} (2l_i + 1)^{1/2} \times \langle L l_i M_i 0 | L M_L \rangle \langle L M_L | L_j l_j M_{L_j} m_j \rangle \times \langle S_i \frac{1}{2} M_{S_i} m_{s_i} | S M_S \rangle \langle S M_S | S_j \frac{1}{2} M_{S_j} m_{s_j} \rangle \times T_{l_i l_j}^{L S \pi} Y_{l_j m_j}(\theta, \phi). \quad (11)$$

この散乱振幅を用いて、微分断面積は次式で表現される。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_j}{2k_i(2L_i+1)(2S_i+1)} \sum_{\text{all compon.}} |f|^2. \quad (12)$$

また、積分断面積 σ は微分断面積 (12) 式を立体角で積分することにより得られる。

$$\sigma = \frac{\pi a_0^2}{2k_i^2(2L_i+1)(2S_i+1)} \times \sum_{l_i l_j L S \pi} (2L+1)(2S+1) |T_{l_i l_j}^{L S \pi}|^2. \quad (13)$$

3. 結果及び考察

3.1 標的の波動関数

本研究では、標的原子として束縛されている電子の数が 12 個のマグネシウム原子に注目し、基底状態 ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \ ^1S$) から $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3d \ ^1D$ 状態及び $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p \ ^1P$ 状態への励起過程を考慮した。

標的のマグネシウム原子の基底状態は、L 殻まで閉殻を構成しており、最外殻の 3s 軌道に 2 個の電子が存在している。閉殻を構成している電子は、それぞれ核に強く束縛されているので励起過程にそれほど関与せず、弱く束縛されている最外殻の 2 個の電子が励起過程に直接関与すると考えられる。そこで本研究では、 $1s^2 2s^2 2p^6 n l n' l'$ の配置をした束縛状態及び二重励起状態を考え、以下のような基底状態及び励起状態を (3) 式の第 1 項目の展開に含めることとした。これらをそれぞれ 13RM、35RM と呼ぶことにする。

(13RM)	1S	$3s^2, 3s4s, 3p^2$
	3S	$3s4s$
	$^3,^1P$	$3s3p, 3s4p, 3p3d$
	1D	$3s3d, 3p^2$
	3D	$3s3d$

(35RM)	1S	$3s^2, 3s4s, 3s5s, 3p^2, 3p4p$
	3S	$3s4s, 3s5s, 3p4p$
	$^3,^1P$	$3s3p, 3s4p, 3s5p, 3p3d, 3p4s, 3p4d$
	1D	$3s3d, 3s4d, 3p^2, 3p4p, 3p4f$
	3D	$3s3d, 3s4d, 3p4p, 3p4f$
	$^3,^1F$	$3s4f, 3p3d$
	3P	$3p^2, 3p4p$

標的原子の状態を表す (1) 式は各電子の軌道関数から構成されており、それらは動径と角度、そしてスピン関数で表現される。角度部分は、Fano-Racah 表示の球面調和関数で表され、動径部分は Slater 型の軌道関数 (14) 式で表される。

$$P_{n_i l_i}(r) = \sum_j C_{ij} r^{l_{ij}} \exp(-\xi_{ij} r). \quad (14)$$

標的マグネシウム原子において、基底状態を表すそれぞれの軌道関数は、Clementi ら¹²⁾ によって求められている Hartree Fock 法による Slater 型軌道関数を採用する。その他の励起状態を表す軌道関数 (3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f) は、Hibbert¹³⁾ によって発表されている配置間相互作用法を用いたプログラムパッケージ CIV3 を用いて変分的に決定した。

具体的には、3p 軌道に関しては、 $3s3p \ ^1P$ 状態と $3p^2 \ ^1S$ 状態の両方のエネルギーが最小になるように決定した。た

だし、 $3p^2\ ^1S$ 状態は、 $3s^2\ ^1S$ 状態を含めた多重配置間相互作用法を用いて決定した。残りの 3d、4s、4p、4d、4f の軌道関数のパラメータは、単一配置 $3snl(n \leq 5, l \leq 3)$ の励起状態のエネルギーが最小値をとるように決定した。例を挙げて説明すると、4s 軌道は $3s4s\ ^3S$ のエネルギーが最小となるように決定した。各軌道関数を (14) 式のように展開する際、展開に用いる項数は $k = n - l$ の条件を課したが、3d 軌道については、 $k = n - l$ の条件に従わずに独自に 3 つの項を用いて展開した。これは、通常の 1 項より 3 項で展開の方がエネルギー固有値が低くできるからである。

軌道関数を決定する際に、振動子強度の length form と velocity form も確認する必要がある。この 2 つの値は、波動関数が正確なものであれば一致することから、変分的に求めた軌道関数が各々の状態をどの程度正確に表現されているかの目安になる。

決定した全ての軌道関数のパラメータを Table1 に示す。また、それぞれの状態のエネルギーを基底状態からの励起

Table 1 標的マグネシウム原子に用いた Slater 型軌道関数のパラメータ。

Orbital	I_{ij}	ξ_{ij}	C'_{ij}
3p	2	4.47050	0.09978
	3	0.74450	-0.99938
3d	3	2.06170	-0.01559
	3	0.36722	-0.93910
	4	1.05144	-0.10046
4s	1	9.97489	0.03287
	2	3.85032	-0.12302
	3	1.28106	0.49017
	4	0.54395	-1.03696
4p	2	4.46814	0.03407
	3	0.73266	-0.38050
4d	4	0.34356	1.07431
	3	0.42650	0.67455
4f	4	0.23498	-1.13858
	4	0.25141	1.00000
5s	1	9.92025	0.01653
	2	3.87838	-0.06109
	3	1.25752	0.25842
	4	0.55405	-0.72111
	5	0.33458	1.20435
5p	2	4.45029	0.02590
	3	0.75395	-0.27322
	4	0.27593	2.41255
	4	0.26786	-2.82284
	5	0.26786	-2.82284

エネルギーとして Table2 に示し、本研究で考慮した各標的原子の状態間で考えられる光学的許容遷移についての振動子強度を Table3 に示す。これらの値は、実験値や他の理論値と比較している。

Table 2 標的マグネシウム原子の励起エネルギー (eV)。

State	35RM	NIST ¹⁴⁾	Difference(%)
$3s^2\ ^1S$	0.0000	0.0000	0.00
$3s3p\ ^3P$	2.5323	2.7130	6.66
$3s3p\ ^1P$	4.3934	4.3440	1.14
$3s4s\ ^3S$	4.8126	5.1057	5.74
$3s4s\ ^1S$	5.3641	5.3915	0.51
$3s3d\ ^1D$	5.5092	5.7508	4.20
$3s3d\ ^3D$	5.6986	5.9434	4.12
$3s4p\ ^3P$	5.7482	5.9299	3.06
$3s4p\ ^1P$	5.9848	6.1157	2.14
$3s5s\ ^3S$	6.1699	6.4287	4.03
$3s4d\ ^1D$	6.3712	6.5851	3.25
$3s5s\ ^1S$	6.4058	6.5134	1.65
$3s4d\ ^3D$	6.4613	6.7162	3.80
$3s5p\ ^3P$	6.4967	6.7235	3.37
$3s4f\ ^1F$	6.5098	6.7762	3.93
$3s4f\ ^3F$	6.5101	6.7762	3.93
$3s5p\ ^1P$	6.5662	6.7799	3.15

Table 3 標的マグネシウム原子の振動子強度。

Transition		13RM	35RM	Theory ⁹⁾
$3\ ^1S \rightarrow 3\ ^1P$	f_l	1.917	1.828	1.734
	f_v	1.501	1.508	1.693
$3\ ^1S \rightarrow 4\ ^1P$	f_l	0.270	0.246	0.136
	f_v	0.174	0.177	0.119
$3\ ^1P \rightarrow 4\ ^1S$	f_l	0.192	0.194	0.166
	f_v	0.112	0.133	0.116
$3\ ^1P \rightarrow 3\ ^1D$	f_l	0.254	0.308	0.248
	f_v	0.379	0.270	0.260
$4\ ^1S \rightarrow 4\ ^1P$	f_l	0.482	1.367	1.330
	f_v	2.777	1.382	1.234
$3\ ^1D \rightarrow 4\ ^1P$	f_l	0.254	0.171	0.150
	f_v	0.072	0.126	0.151

f_l : length form, f_v : velocity form.

Table2 の励起エネルギーについて、本研究の結果と NIST¹⁴⁾ の実験結果を比較した場合、励起エネルギーは最大約 7 % 程度の違いが見られるが、ほぼ一致している。Table3 の振動子強度において、本研究で得られた length

form と velocity form はほぼ一致している。また、他の理論値と比べると $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s4p\ ^1P$ を除いて本研究の結果は両 form 間で近い値を示している。これらの結果から、散乱断面積を精度良く計算するための標的の波動関数は充分なものと考えられる。

3.2 散乱断面積

前節の波動関数を用いて、前章で述べた R 行列法により求めた $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ 遷移及び $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3p\ ^1P$ 遷移の微分断面積と積分断面積の結果と考察を述べる。

本研究では、散乱断面積を求めるために Berrington ら¹⁵⁾ によってプログラム化された R 行列法のプログラムを使用した。この計算には、前述のように二つのタイプの波動関数が適用され、標的の状態は、13 及び 35 個の状態を考慮した。R 行列法の計算に用いた内部領域の境界半径は、13RM において 44.0[a.u.]、35RM において 66.1[a.u.] である。(3) 式における第二項の 3 電子系の相互作用を表す項は、1s、2s、2p、3s、3d、4s 及び 4p の各束縛軌道で考えられる配置を考慮した。また、全角運動量 L は 0 から 15 まで考慮した。散乱の計算を行う際、マグネシウム原子の励起エネルギーについては、断面積を実験の結果と比較するために NIST¹⁴⁾ の値を用いた。

次に、電子衝突によるマグネシウム原子の励起微分断面積及び積分断面積を R 行列法により計算した結果を以下に示す。まず、入射エネルギー 10 eV について述べる。マグネシウム原子の基底状態から $3s3d\ ^1D$ 状態への励起微分断面積について Fig.1、 $3s3p\ ^1P$ 状態への励起微分断面積について Fig.2 に示す。また、積分断面積について Table4 に示す。

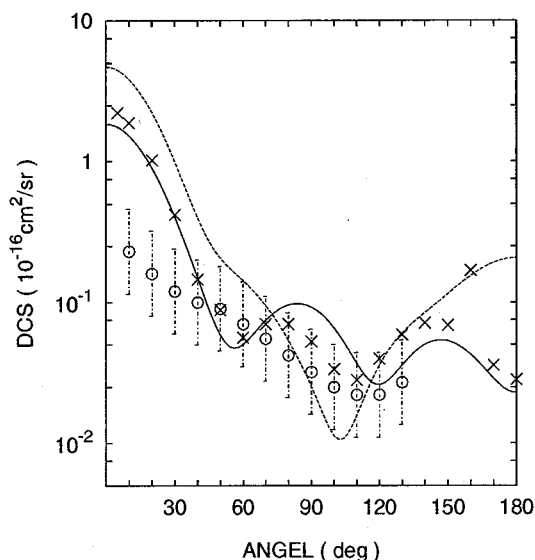


Fig. 1 電子衝突によるマグネシウム原子の $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ 遷移の微分断面積 [$E = 10\text{ eV}$]
 ---; 13RM、—; 35RM、×; Mitroy ら⁷⁾、○; Williams ら⁴⁾

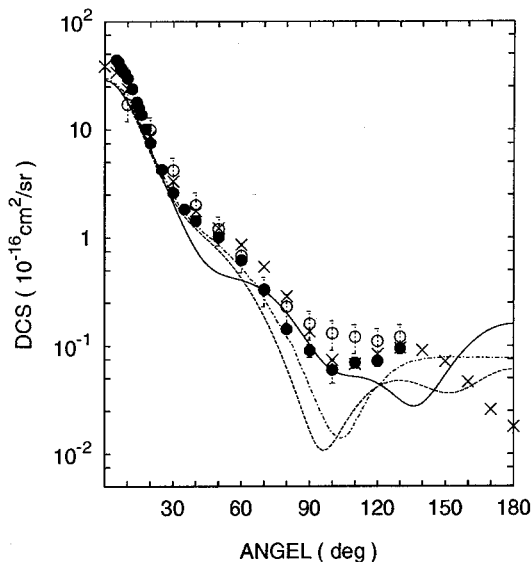


Fig. 2 電子衝突によるマグネシウム原子の $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3p\ ^1P$ 遷移の微分断面積 [$E = 10\text{ eV}$]
 ---; 13RM、—; 35RM、---; Fursa ら⁸⁾、×; Mitroy ら⁷⁾、○; Williams ら⁴⁾、●; Brunger ら⁵⁾

Fig.1 により本研究の結果と Mitroy らの結果は、13RM の

Table 4 入射エネルギー 10eV における積分断面積 (10^{-16} cm^2).

	$3\ ^1S \rightarrow 3\ ^1P$	$3\ ^1S \rightarrow 3\ ^1D$
Present	(cascade)	
13RM	9.73	14.7
35RM	9.83	12.2
Mitroy ら ⁷⁾ (5CC)		17.6
Gedeon ら ⁹⁾ (19RMPS)		12.8
Aleksahin ら ¹⁾	6.77	
Leep ら ²⁾		14.1
Williams ら ⁴⁾	14.0	0.7

結果を除くと全角度にわたって大きな変化は見られない。13RM の結果は、35RM の結果に比べて全波動関数に含める状態数が少ないために違いが生じたと考えられる。また、本研究の結果と Williams らの実験値を比べると、 40° 以上において、35RM の結果は実験誤差の範囲でほぼ一致しているといえる。しかし、本研究の結果は 10° で実験値より 10 倍ほど大きい値を示している。この違いは、Table4 の積分断面積の結果に大きな影響を及ぼしている。本研究では標的の波動関数として、基底状態について MgI または MgII の 2 種類、さらに 3p、3d、4s、4p、4d、4f 等について最適化

の方法をいろいろ変えて各種の波動関数を試みたが、前方の10倍の違いは解決できなかった。この原因として、Gedeonらの積分断面積の結果で10eV付近に共鳴現象が見られることから、本研究の前方の違いは共鳴の効果によるものだと考えられる。ここで共鳴現象とは、入射電子が標的原子と衝突した時に、一時的に入射電子が標的原子に捕獲されることである。この状態はすぐに壊れ終状態となる。この入射エネルギーにおける本研究の二種類(13RM、35RM)の微分断面積及び積分断面積の結果について、十分な結果が得られたか考えにくい。

次に、Fig.2において本研究の結果と実験値及び他の理論値を比較すると、13RM、35RMともに30°以下でFursaらの理論値とWilliamsらの実験値とよく一致している。しかし、10°以下でBrungerらの実験値より低い。角度の大きい部分では、35RMについて収束しているように見え、90°~120°では、Fursaらの結果と比べて実験を再現している。しかし、50°付近での35RMの結果は、実験と比べて低い値を示した。これは、 $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ の励起過程と同様に、共鳴の効果が影響していると考えられる。本研究の結果で(3)式の第2項が共鳴現象に関わってくるのであるが、本研究の結果ではこの部分が十分に表されていないのではないかと考えられる。このことから、この入射エネルギーにおける $3s3p\ ^1P$ 状態への励起微分断面積は、十分な結果とはいえない。

Table4の $3s3p\ ^1P$ 状態への励起積分断面積において、Leepらの実験結果及びGedeonらとMitroyらの理論値は、 $3s3d\ ^1D$ 、 $3s4s\ ^1S$ 、 $3s4p\ ^1P$ 状態からのカスケードの効果を含んでことから、この効果を見逃した本研究の結果よりも高い値を示している。そこで本研究でも、次式のようにカスケードの効果を取り入れた放出電子の断面積 σ_{em} を求めた。

$$\sigma_{em} = \sigma_{3p} + \sigma_{4s} + \sigma_{3d} + 0.147\sigma_{4p}. \quad (15)$$

ここで、分岐比はGedeonらのデータを用いた。カスケードの効果を検討した場合、35RMの結果はこれらの結果と比べて低い値を示した。また、 $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ 遷移における積分断面積と照らし合わせてみると、本研究の結果及びGedeonらの結果はどちらか一方が実験値に近い値になるともう一方の結果が実験値と離れた値になることがわかる。このことから、今後両者の遷移を同時に考えて研究を進めていく必要があるだろう。

次に、入射エネルギーが20eVについて述べる。マグネシウム原子の基底状態から $3s3d\ ^1D$ 状態への励起微分断面積についてFig.3、 $3s3p\ ^1P$ 状態への励起微分断面積についてFig.4に示す。また、積分断面積についてTable5に示す。Fig.3において、二重励起状態を含む本研究の13RM、35RMの結果は、実験値と全角度にわたってよく一致しており、さらにMitroyらの結果ともよく一致しているといえる。相対論を用いたSrivastavaらの歪曲波近似法の結果は、

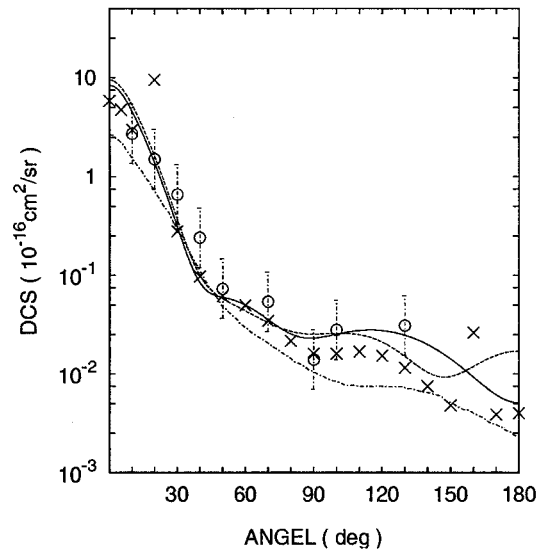


Fig. 3 電子衝突によるマグネシウム原子の $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ 遷移の微分断面積 [E = 20 eV]
 ---; 13RM、—; 35RM、---; Srivastava ら⁶⁾、×; Mitroy ら⁷⁾、○; Williams ら⁴⁾

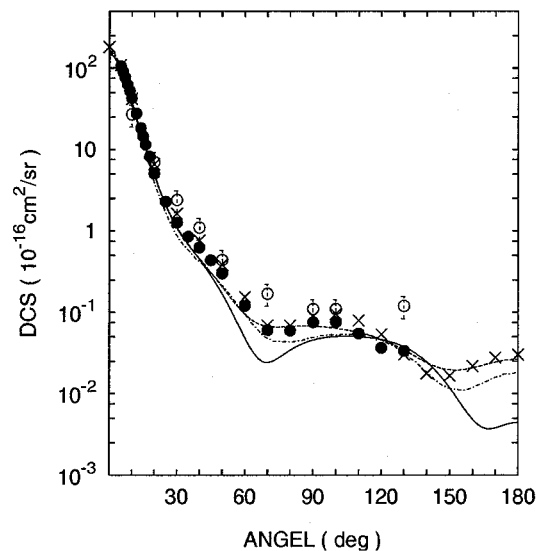


Fig. 4 電子衝突によるマグネシウム原子の $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3p\ ^1P$ 遷移の微分断面積 [E = 20 eV]
 ---; 13RM、—; 35RM、---; Fursa ら⁸⁾、×; Mitroy ら⁷⁾、○; Williams ら⁴⁾、●; Brunger ら⁵⁾

前方及び後方で実験と一致しているとはいえない。以上のことから本研究の微分断面積の計算結果においてこの入射エネルギーでは35RMまでの計算で十分収束しているといえる。また、Table5の積分断面積の結果でもGedeonらの結果や実験値とよく一致していることがわかる。Gedeonらの積分断面積の結果で入射エネルギーが20eV付近には共鳴現象が現れていないことから、10eVにおける計算よりも精度の良い計算が行えたことがいえる。

Table 5 入射エネルギー 20eV における積分断面積 (10^{-16}cm^2).

	$3^1S \rightarrow 3^1P$		$3^1S \rightarrow 3^1D$
Present	(cascade)		
13RM	13.9	18.3	2.34
35RM	13.0	16.0	2.08
Mitroy ら ⁷⁾ (5CC)		18.7	1.49
Gedeon ら ⁹⁾ (19RMPS)		14.5	1.92
Aleksahin ら ¹⁾	8.52		
Leep ら ²⁾		15.2	
Williams ら ⁴⁾		15.0	2.1

Fig.4 において本研究の結果と実験結果と比べると、70° 付近で 35RM の結果が少し低い傾向にあるものの全体的に収束していると考えられる。また、他の理論値ともよい一致が見られた。Table5 の積分断面積の結果について、Leep らの実験結果及び Gedeon らと Mitroy らの理論値は、10eV の時と同様にカスケードの効果を含んでいる。本研究のカスケードの効果を取り入れた結果は、これらの結果とよく一致していることがわかる。以上のことから、この入射エネルギーでの上記の励起過程における微分断面積及び積分断面積は、 $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ の励起過程と同様に、35RM までの計算で十分な結果が得られた。

4. 結論

本研究では、電子衝突によるマグネシウム原子の基底状態から $3s3d\ ^1D$ 状態及び $3s3p\ ^1P$ 状態への励起過程に注目し、R 行列法を用いて入射エネルギーが 10、20eV における微分断面積及び積分断面積の計算を行った。標的原子の状態として、基底状態及び 12、34 個の励起状態を考慮し、状態に高い励起状態を含めることで微分断面積にどう影響するかについて調べた。

入射エネルギーが 10eV における本研究の微分断面積の結果は、 $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3d\ ^1D$ 遷移において状態数を増やすことで他の理論値とよい傾向が見られた。また、40° 以上で実験値と本研究の結果は実験誤差の範囲で一致しているが、10° で 10 倍程高い値を示した。また、 $3s^2\ ^1S \rightarrow 3s3p\ ^1P$ 遷移における微分断面積は、状態数を増やすことで他の理論値及び実験値と 50° 付近で異なる傾向を示した。これは、10eV 付近の共鳴の効果の影響が原因として挙げられる。以上のことからこの入射エネルギーにおける両者の遷移の微分断面積は、十分な結果を得られなかった。積分断面積の

結果も他の結果と比べて違いが見られたことから十分な結果が得られなかった。

入射エネルギーが 20eV における本研究の微分断面積の結果は、2 つの遷移において他の理論値及び実験値とよい一致が得られた。また、積分断面積の結果でも他の理論値及び実験値とよい一致が見られたことから、この入射エネルギーにおいて 31RM までの計算で十分であることがわかった。

今回の研究では、入射エネルギーが 10eV において十分な結果が得られなかった。今後、標的原子の各状態の精度を上げ、全断面積の計算を行い、共鳴現象が現れる領域の詳細な解析が必要だと考える。その上で、より精度の高い微分断面積の結果が望まれる。また、実験的研究も望まれる。

参考文献

1. I. S. Aleksahin, I. P. Zapesochnyi, I. I. Garga, and V. P. Starodub, *Opt. Spektroc.* **34**, 611 (1973).
2. D. Leep, and A. Gallagher, *Phys. Rev. A* **13**, 148 (1975).
3. W. D. Robb, *Atomic Transition Probabilities*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **7**, 1006 (1974).
4. W. Williams, and S. Tarjmar, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11**, 2021 (1978).
5. M. J. Brunger, J. L. Riley, R. E. Scholten, and P. J. O. Teubner, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **21**, 1639 (1988).
6. R. Srivastava, R. P. McEachran, and A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **34**, 2071 (2001).
7. J. Mitroy, and I. E. McCarthy, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **22**, 641 (1989).
8. Dmitry V. Fursa, and Igor Bray, *Phys. Rev. A* **63**, 032708 (2001).
9. V. Gedeon, V. Lengyel, O. Zatsarinny, and C. A. Kocher, *Phys. Rev. A* **59**, 2016 (1999).
10. E. P. Wigner, and L. Eisenbud, *Phys. Rev.* **72**, 29 (1947).
11. P. G. Burke, A. Hibbert, and W. D. Robb, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **4**, 153 (1971).
12. E. Clementi, and C. Roetti, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **14**, 177 (1974).
13. A. Hibbert, *Comput. Phys. Commun.* **9**, 141 (1975).
14. NIST (National Institute of Standard and Technology) *Atomic Spectra Database Data*.
15. K. A. Berrington, P. G. Burke, M. Le Dourneuf, W. D. Robb, K. T. Taylor, and Vo Ky Lan, *Comput. Phys. Commun.* **14**, 367 (1978).