

JAERI-M

6 2 7 4

衝突径数表現による電荷移動断面積の計算

1975年10月

龍 福 廣

この報告書は、日本原子力研究所が JAERI-M レポートとして、不定期に刊行している研究報告書です。入手、複製などのお問い合わせは、日本原子力研究所技術情報部（茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしください。

JAERI-M reports, issued irregularly, describe the results of research works carried out in JAERI. Inquiries about the availability of reports and their reproduction should be addressed to Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, Japan.

## 衝突径数表現による電荷移動断面積の計算

日本原子力研究所東海研究所保健物理安全管理部

龍 福 廣

(1975年9月29日受理)

原子衝突における電荷移動断面積の近似的計算法を、Born 近似、歪曲波の方法、Perturbed stationary state (PSS) 法および衝突係数法について、記述した。これらの方法の間を衝突係数による表現を用いて明らかにした。陽子およびアルファ粒子が水素原子に衝突する場合について数値計算を行い実験と比較した。

JAERI-M 6274

Calculation of Charge Transfer Cross Sections in Atomic Collision  
by Impact Parameter Representation

Hiroshi RYUFUKU

Division of Health Physics and Safety, Tokai, JAERI

(Received September 29, 1975)

The methods by approximation are described of calculation of the charge transfer cross sections in atomic collision, including the methods of Born approximation, distorted wave, perturbed stationary state (PSS) and impact parameter. The relation among these methods is made clear by the description using the impact parameter representation. The results of numerical calculation are compared with the experimental ones for the impact of protons and alpha particles on atomic hydrogen.

## 目 次

1. はしがき .....	1
2. Born 近似 .....	2
2.1 Brinkman - Kramers 近似 .....	6
2.2 Bates - Dalgarno - Jackson - Schiff 近似 .....	11
3. 歪曲波の方法 .....	14
3.1 Bassel - Gerjuoy の取扱い .....	15
4. Perturbed Stationary State (PSS) 法 .....	17
4.1 対称共鳴の場合 .....	17
4.2 半古典的近似 .....	19
4.3 非共鳴電荷移動 .....	19
4.4 Dalgarno - Yadav の計算 .....	20
5. 衝突径数法 .....	21
5.1 McCarroll の計算 .....	24
5.2 McCarroll - Mc Elroy の計算 .....	25
5.3 Mc Elroy の計算 .....	25
附 録 .....	34
文 献 .....	47

## 1. はしがき

原子衝突過程での電荷移動断面積の計算法を各近似法ごとに記述した。本レポートで述べる近似法は、Born近似、歪曲波の方法、Perturbed Stationary State (PSS)法および衝突径数法で、Impulse法およびClose Coupling法については次回にまわす。Born近似、歪曲波の方法等においても、衝突径数による表現を附記したが、これは衝突径数で得られる結果と比較するためである。

第5節に述べるBatesの衝突径数法(後にMc Carrollによって拡張された)は、低エネルギー( $e^2/kv > 1$ )から高エネルギー( $e^2/kv < 1$ )領域にわたって適用できる、対称共鳴過程の計算法、および、高エネルギー領域にだけ適用できる非共鳴電荷移動の計算法であるが、その近似度を低くすると、対称共鳴のPSS法、歪曲波の方法およびBorn近似が得られる。したがって、第5節はそれまで述べて来た計算法のまとめの役割をもっている。

本レポートでは、各近似法ごとに一般論を記述し、水素原子標的に陽子または $\alpha$ 粒子が衝突する過程について具体的計算例を示し、計算結果を実験値と比較検討した。

ここで、以後用いる記号について述べておく、単位系として、原子単位( $\hbar = 1$ ,  $e = 1$ ,  $m_e = 1$ )<sup>\*</sup>を用いる。

標的原子の核を粒子A、入射荷電粒子を粒子B、電子を粒子Cとして、次の如く記号を定める(Fig. 1参照)。

$M_a$  : 粒子Aの質量

$M_b$  : 粒子Bの質量

$Z_a$  : 粒子Aの電荷

$Z_b$  : 粒子Bの電荷

$\vec{r}_a$  : 粒子Aに対する電子の位置ベクトル

$\vec{r}_b$  : 粒子Bに対する電子の位置ベクトル

$\vec{r}$  : 粒子AとBの重心に対する電子の位置ベクトル

$\vec{R}_i$  : 粒子Aと電子の重心に対する粒子Bの位置ベクトル

$\vec{R}_f$  : 粒子Bと電子の重心の粒子Aに対する位置ベクトル

$\vec{R}$  : 粒子Aに対する粒子Bの位置ベクトル

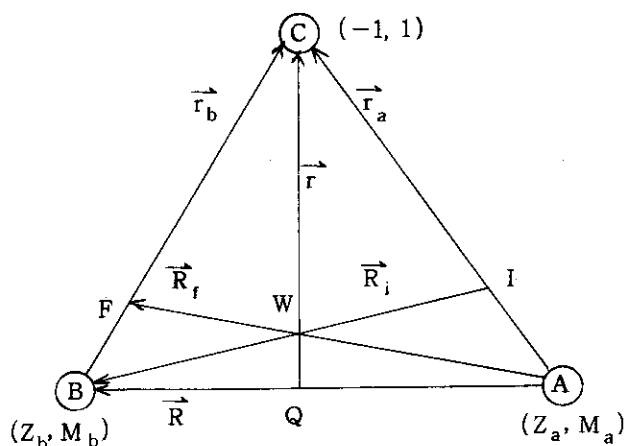


Fig. 1 位置ベクトルの関係。

電子Cは最初核Aに束縛されており、電荷移動反応により入射荷電粒子Bに捕えられる。

\* 原子単位系では、第一Bohr半径 $a_0 = 1$ 、水素原子の基底状態における電子の古典軌道速度 $v_0 = 1$ 、Rydberg定数 $R_H = \frac{1}{2}$ となる。

## 2. Born 近似

全系の波動関数を  $\Psi$ 、エネルギーを  $E$  とすると、重心系において次式が成立する。

$$\left[ -\frac{1}{2\mu_f} \nabla_f^2 - \frac{1}{2m_b} \nabla_b^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} \right] \Psi = E \Psi. \quad (2.1)$$

ただし、

$$\mu_f = \frac{M_a(M_b+1)}{M_a+M_b+1}, \quad m_b = \frac{M_b}{M_b+1} \quad (2.2)$$

で、 $\nabla_f^2$  は  $\vec{R}_f$  に関する Laplacian、 $\nabla_b^2$  は  $\vec{r}_b$  に関する Laplacian である。いま、 $\Psi$  を波動方程式

$$\left[ -\frac{1}{2m_b} \nabla_b^2 - \frac{Z_b}{r_b} \right] \phi_n^b = \omega_n^b \phi_n^b \quad (2.3)$$

を満足する  $\phi_n^b$  で展開する。<sup>注1)</sup>

$$\Psi = \sum_n G_n(\vec{R}_f) \phi_n^b(\vec{r}_b). \quad (2.4)$$

これを式(2.1)へ代入し、式(2.3)の關係を用いると次式が得られる。

$$\sum_n \phi_n^b(\vec{r}_b) \left[ -\frac{1}{2\mu_f} \nabla_f^2 + \omega_n^b - E \right] G_n(\vec{R}_f) = -V_f \Psi. \quad (2.5)$$

ただし、

$$V_f = \frac{Z_a Z_b}{R} - \frac{Z_a}{r_a} \quad (2.6)$$

両辺に  $\phi_n^{b*}$  をかけて  $\vec{r}_b$  について積分すれば、

$$\left[ -\frac{1}{2\mu_f} \nabla_f^2 + \omega_n^b - E \right] G_n(\vec{R}_f) = -\int \phi_n^{b*} V_f \Psi d^3 \vec{r}_b \quad (2.7)$$

または、

$$k_f^2 = 2\mu_f (E - \omega_n^b) \quad (2.8)$$

を用いて、

$$\left[ \nabla_f^2 + k_f^2 \right] G_n(\vec{R}_f) = 2\mu_f \int \phi_n^{b*} V_f \Psi d^3 \vec{r}_b \quad (2.9)$$

を得る。ここに、 $d^3 \vec{r}_b$  は  $\vec{r}_b$  についての3次元積分を表わす。式(2.9)の右辺で、 $\Psi$  を衝突前の波動関数

$$\phi_0^a e^{i \vec{k}_i \cdot \vec{R}_i} \quad (2.10)$$

で置き換える近似が Born 近似である。ただし、衝突前における粒子Bの標的(粒子A+電子)の重心に対する運動方向を  $\vec{n}_i$  とし、

$$\vec{k}_i = \vec{n}_i \sqrt{2\mu_i (E - \omega_0^a)}$$

注1) 固有値  $\omega_n^b$  は不連続値と共に連続値をも含む、また式(2.4)の  $\sum_n \phi_n^b$  は不連続状態に関しては  $\sum_n \phi_n^b$  を表わし、連続状態については積分  $\int d\omega \phi_\omega^b$  を表わす。 $\omega$  は固有値を表わす。

である。さらに、

$$\mu_i = \frac{M_b(M_a+1)}{M_b+M_b+1}$$

で、 $\omega_0^a$  は次の波動方程式の固有値である。

$$\left[ -\frac{1}{2m_a} \nabla_a^2 - \frac{Z_a}{r_a} \right] \phi_0^a = \omega_0^a \phi_0^a \quad (2.11)$$

ここに、 $\nabla_a^2$  は  $\vec{r}_a$  に関する Laplacian で、また

$$m_a = \frac{M_a}{M_a+1} \quad (2.12)$$

である。

さて、式(2.10)を式(2.9)の  $\Psi$  に用いたとき、この式の解として、

$$G_n(\vec{R}_f) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(i k_f |\vec{R}_f - \vec{R}_f'|)}{|\vec{R}_f - \vec{R}_f'|} Q(\vec{R}_f') d^3 \vec{R}_f' \quad (2.13)$$

$$Q(\vec{R}_f) = 2 \mu_f \int \phi_n^{b*} V_f \phi_0^a e^{i \vec{k}_f \cdot \vec{R}_f} d^3 \vec{r}_b,$$

が得られる。<sup>1)</sup>  $R_f \rightarrow \infty$  のとき、

$$|\vec{R}_f - \vec{R}_f'| \sim R_f - (\vec{R}_f' \cdot \vec{n}_f) \quad (2.14)$$

$$(\vec{n}_f \equiv \vec{R}_f / R_f)$$

であるから、

$$\frac{1}{|\vec{R}_f - \vec{R}_f'|} \sim \frac{1}{R_f \left[ 1 - (\vec{R}_f' \cdot \vec{n}_f) \frac{1}{R_f} \right]} \sim \frac{1}{R_f} \left[ 1 + O\left(\frac{R_f'}{R_f}\right) \right] \quad (2.15)$$

$$k_f |\vec{R}_f - \vec{R}_f'| \sim k_f R_f - \vec{k}_f \cdot \vec{R}_f' \quad (2.16)$$

$$(\vec{k}_f \equiv k_f \vec{n}_f)$$

となる。したがって、 $R_f \rightarrow \infty$  のときの式(2.13)の漸近形を

$$G_n(\vec{R}_f) \sim \frac{e^{i k_f R_f}}{R_f} f(\theta) \quad (2.17)$$

と表わすと、

$$f(\theta) = \frac{\mu_f}{2\pi} \iint e^{-i(\vec{k}_f \cdot \vec{R}_f - \vec{k}_i \cdot \vec{R}_i)} \phi_n^{b*} V_f \phi_0^a d^3 \vec{r}_b d^3 \vec{R}_f' \quad (2.18)$$

となる。ここに、 $\theta = \cos^{-1}(\vec{n}_f \cdot \vec{n}_i)$  である。断面積は

$$\sigma = \frac{v_f}{v_i} \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (2.19)$$

として求められる。ただし、

$$\vec{v}_i = \vec{k}_i / \mu_i, \quad \vec{v}_f = \vec{k}_f / \mu_f \quad (2.20)$$



で、 $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$  である。

式(2.18)を具体的例について計算する前に、これを衝突径数を用いて表わしておこう。位置ベクトルは互に次の関係をもつ (Fig. 1 および附録A 参照)。

$$\vec{R}_i = (\mu \vec{R} - \eta_a m \vec{r}) / \mu_i, \quad \vec{R}_f = (\mu \vec{R} + \eta_b m \vec{r}) / \mu_f, \quad (2.21)$$

$$\vec{r}_a = \vec{r} + \eta_a \vec{R}, \quad \vec{r}_b = \vec{r} - \eta_b \vec{R}, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial (\vec{R}_f, \vec{r}_b)}{\partial (\vec{R}, \vec{r})} = 1. \quad (2.23)$$

ここに、

$$\mu = \frac{M_a M_b}{M_a + M_b}, \quad m = \frac{M_a + M_b}{M_a + M_b + 1}, \quad (2.24)$$

$$\eta_a = \frac{M_b}{M_a + M_b}, \quad \eta_b = \frac{M_a}{M_a + M_b}, \quad (2.25)$$

であり、 $\mu$  はA粒子に対するB粒子の相対質量、 $m$  はA粒子とB粒子から成る系に対する電子の相対質量である。式(2.20)~(2.23)を式(2.18)に用いると次式が得られる。

$$f(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \int d^3 \vec{R} e^{-i(\vec{v}_f - \vec{v}_i) \mu \vec{R}} \times \int d^3 \vec{r} e^{-i(\eta_b \vec{v}_f + \eta_a \vec{v}_i) m \vec{r}} \phi_n^{b*} V_f \phi_b^a \quad (2.26)$$

ここで、Fig. 2 に示す円柱座標を導入し、 $\vec{R}$  を  $(z, \rho, \varphi)$  で表わすと、次のようになる。

$$(\vec{v}_f - \vec{v}_i) \vec{R} = v_f \rho \sin \theta \cos \varphi + (v_f \cos \theta - v_i) Z. \quad (2.27)$$

したがって、式(2.26)は次のように書き換えられる。

$$f(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \int_0^\infty \rho d\rho \times \int_{-\infty}^\infty dZ \int_0^{2\pi} d\varphi \times e^{-i\mu v_f \rho \sin \theta \cos \varphi} \times e^{-i\mu(v_f \cos \theta - v_i) Z} \times U_{fi}. \quad (2.28)$$

$$U_{fi} = \int e^{-i(\eta_a \vec{v}_i + \eta_b \vec{v}_b) m \vec{r}} \times \phi_n^{b*} V_f \phi_b^a d^3 \vec{r}. \quad (2.29)$$

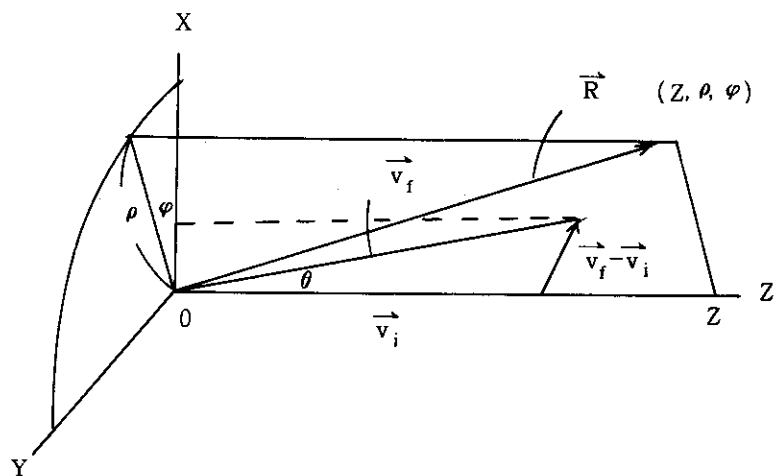


Fig. 2 円柱座標。Z軸は $\vec{P}_i$ の方向(入射方向)、Xはそれに垂直で $\vec{P}_f$ と $\vec{P}_i$ を含む面内にある。

明らかに、 $U_{fi}$  は $\varphi$ に依存しないから、式(2.28)を $\varphi$ について積分すると次式が得られる。<sup>注)</sup>

注) ただし、 $\phi_n^b$  が量子数  $(n, l, m)$  をもつとき、式(2.30)における  $J_0(\mu v_f \rho \sin \theta)$  の代わりに、 $J_m(\mu v_f \rho \sin \theta)$  を用いる。

$$f(\theta) = \int_0^\infty \rho d\rho J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) \int_{-\infty}^\infty dZ e^{-i\mu(v_f \cos \theta - v_i)Z} U_{fi}. \quad (2.30)$$

ここに、 $J_0(x)$ は零次のBessel関数で、

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{\pm i x \cos \varphi} \quad (2.31)$$

の関係を用いた。

後述するように、われわれの扱っている問題では、前方散乱の確率が非常に大きいので、

$$\cos \theta \approx 1 \quad (2.32)$$

と近似して差支えない。したがって、 $v_i$ と $v_f$ の差も小さいことを考慮して、

$$\eta_a \vec{v}_i + \eta_b \vec{v}_f \approx (\eta_a + \eta_b) \vec{v}_i = \left( \frac{M_b}{M_a + M_b} + \frac{M_b}{M_a + M_b} \right) \vec{v}_i = \vec{v}_i \quad (2.33)$$

と近似する。さらに、 $M_a, M_b \gg 1$ であるから、

$$m = \frac{M_a + M_b}{M_a + M_b + 1} \approx 1, \quad \mu_f = \frac{M_a(M_b + 1)}{M_a + M_b + 1} \approx \frac{M_a M_b}{M_a + M_b} = \mu \quad (2.34)$$

のように表わすことができる。以上のことを考慮すると、式(2.29)~(2.30)は次のように書き換えることができる。

$$f(\theta) = \mu v_f \int_0^\infty \rho d\rho J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) B(\rho), \quad (2.35)$$

$$B(\rho) = -\frac{1}{v_f} \int_{-\infty}^\infty dZ e^{-i\mu(v_f - v_i)Z} \int e^{-i\vec{v}_i \cdot \vec{r}} \varphi_n^{b*} V_f \varphi_0^a d^3\vec{r}. \quad (2.36)$$

断面積は、式(2.19)に式(2.35)を代入することにより、次のように求められる。

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{v_f}{v_i} \mu^2 v_f^2 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left| \int_0^\infty \rho d\rho J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) B(\rho) \right|^2 \\ &= \frac{v_f}{v_i} \mu^2 v_f^2 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^\infty \rho' d\rho' \\ &\quad \times J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) J_0(\mu v_f \rho' \sin \theta) B^*(\rho) B(\rho') \end{aligned} \quad (2.37)$$

ここで、再び散乱が $\theta=0$ 附近に大部分起ることを考慮すると、 $\sin \theta \approx \theta$ とし、積分上限を1とおくことができる。さらに、附録Bで示すように、 $\mu v_f \gg 1$ であるとき、

$$\sqrt{\rho\rho'} \mu^2 v_f^2 \int_0^1 \theta d\theta J_0(\mu v_f \rho \theta) J_0(\mu v_f \rho' \theta) \approx \delta(\rho - \rho') \quad (2.38)$$

となるから、これを式(2.37)に用いれば、次式が得られる。

$$\sigma = 2\pi \frac{v_f}{v_i} \int_0^\infty \rho d\rho |B(\rho)|^2. \quad (2.39)$$

式(2.39)は、衝突径数が $\rho$ のときの遷移確率が

$$P(\rho) = \frac{v_f}{v_i} |B(\rho)|^2 \quad (2.40)$$

で与えられる場合の断面積の表現と同じ形をしている。実際、粒子Bは前方に散乱される確率が極めて大きく、衝突の過程で直線軌道を描いて通過するという古典的近似が成り立つ状態に

ある。このような場合、 $\rho$  は衝突径数に相当する量と解釈されよう。また、部分波分解による取扱いで、前方散乱の確率が大きいとした近似を行い、

$$\rho = \frac{\ell + \frac{1}{2}}{\mu v_f} \quad (241)$$

とおくと、式(235)の表現が得られる<sup>4)</sup>。この式で与えられる $\rho$ も明らかに衝突径数と解釈することができる。

このような理由から、以後 $\rho$ を衝突径数と呼び、式(235)および(239)を衝突径数による表現と呼ぶ。衝突径数による表現においては、電荷移動問題のBorn近似は式(236)で与えられる。

なお、 $B(\rho)$ を $f(\theta)$ で表現するためには次のように行う。式(235)の両辺に $J_0(\mu v_f \rho \sin \theta)$ をかけて立体角で積分する。

$$\begin{aligned} 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) f(\theta) \\ = 2\pi \mu v_f \int_0^\pi \sin \theta d\theta J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) \int_0^\infty \rho' d\rho' J_0(\mu v_f \rho' \sin \theta) B(\rho'). \end{aligned}$$

式(237)から式(239)を導びいた方法を用いると、次のようになる。

$$\begin{aligned} &= 2\pi \frac{1}{\mu v_f} \int_0^\infty \sqrt{\frac{\rho'}{\rho}} d\rho' \delta(\rho - \rho') B(\rho') \\ &= \frac{2\pi}{\mu v_f} B(\rho) \end{aligned} \quad (242)$$

故に、

$$B(\rho) = \mu v_f \int_0^\pi \sin \theta d\theta J_0(\mu v_f \rho \sin \theta) f(\theta). \quad (243)$$

電荷移動問題における衝突径数による表現はMc Carroll と Salinにより議論されている<sup>5)</sup>。また、式(235)および式(243)において $\sin \theta$ の代りに $2 \sin \frac{\theta}{2}$ を用いて後方散乱まで含め厳密に取り扱う方法がAdachiとKotaniにより報告されている<sup>6)</sup>。ただし、後者の場合、 $\rho$ の物理的解釈が明らかになっていない。

## 2.1 Brinkman-Kramersの近似(BK近似)

電荷移動断面積を始めて計算したのはBrinkmanとKramersである(1930)<sup>7)</sup>。彼らは、電子と核との相互作用のみを考慮したBorn近似を行った。すなわち、式(2.6)の $V_f$ を

$$V_f = -\frac{Z_a}{r_a} \quad (244)$$

とした。彼らの計算によれば、電荷移動過程

$$p + H(1s) \rightarrow H(1s) + p \quad (245)$$

の散乱振幅は、附録Fの式(F35)で $\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = 0$ として得られ、

$$f(\theta) = \frac{16\mu}{\left[1 + \frac{v^2}{4} + 4\mu^2 v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right]^3} \quad (2.46)$$

となる。ただし、 $v = v_i = v_f$  であり、また  $m_a = m_b \approx 1$ 、 $\mu_i = \mu_f \approx \mu$  と近似した。式(2.43)を用いて  $B(\rho)$  は次のように計算できる。

$$B(\rho) = \mu v \int_0^\pi \sin \theta d\theta J_0(\mu v \rho \sin \theta) f(\theta) \quad (2.47)$$

ここで、式(2.46)より  $2\sin \frac{\theta}{2} \geq \left\{ (1 + \frac{v^2}{4}) / \mu^2 v^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{\mu} \approx 1 \times 10^{-3}$  の範囲では  $f(\theta)$  が急激に小さくなるので、次のように近似する。

$$\sin \theta \approx \theta, \quad \sin \frac{\theta}{2} \approx \frac{\theta}{2}, \quad f(\theta) \approx \frac{16\mu}{\left[1 + \frac{v^2}{4} + \mu^2 v^2 \theta^2\right]^3} \quad (2.48)$$

また、積分の上限を  $\infty$  とする。こうすると、次のようになる。

$$\begin{aligned} B(\rho) &= \mu v \int_0^\infty \theta d\theta J_0(\mu v \rho \theta) \frac{16\mu}{\left[1 + \frac{v^2}{4} + \mu^2 v^2 \theta^2\right]^3} \\ &= \frac{16}{v} \int_0^\infty x dx \frac{J_0(\rho x)}{\left[1 + \frac{v^2}{4} + x^2\right]^3} \\ &= \frac{16}{v} \frac{\rho^2 K_2(\rho \sqrt{1 + v^2/4})}{8(1 + \frac{v^2}{4})} \\ &= \frac{2\rho^2 K^2(\rho \sqrt{1 + v^2/4})}{v(1 + \frac{v^2}{4})} \end{aligned} \quad (2.49)$$

ここに、 $K_\nu(x)$  は第2種の変形された Bessel 関数である。ただし、

$$\int_0^\infty \frac{x^{\nu+1} J_\nu(ax)}{(x^2 + y^2)^{\mu+1}} dx = \frac{a^\mu y^{\nu-\mu} K_{\nu-\mu}(ay)}{2^\mu \Gamma(\mu+1)} \quad (2.50)$$

$$(2 \operatorname{Re} \mu + \frac{3}{2} > \operatorname{Re} \nu > -1)$$

の関係を用いた (ref. 2 の p. 196 参照)

一方、式(2.36)からは次の表現が得られる。

$$B(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^\infty u_{1s,1s}^{ba} dZ \quad (2.51)$$

ただし、

$$u_{1s,1s}^{ba} = \int e^{-i\vec{v}\cdot\vec{r}} \phi_{1s}^b \left(-\frac{1}{r_a}\right) \phi_{1s}^a d^3\vec{r} \quad (2.52)$$

で、 $\phi_{1s}^a$  と  $\phi_{1s}^b$  はそれぞれ粒子 A と B (両方とも陽子) の水素原子波動関数である。式(2.52)

は附録Cに示す方法を用い、次式のような形にして数値計算によって値を求める。

$$u_{1s1s}^{ba} = -R^2 \int_1^\infty d\lambda e^{-R\lambda} \{ \lambda j_0(\zeta) - i j_1(\zeta) P_1(\cos \psi) \} \quad (2.53)$$

ここに、

$$\zeta \cos \psi = v \lambda \cos \delta \frac{R}{2}, \quad \zeta \sin \psi = v \sqrt{\lambda^2 - 1} \sin \delta \cdot \frac{R}{2}, \quad (2.54)$$

$$\cos \delta = \frac{Z}{R}, \quad \sin \delta = \frac{\rho}{R} \quad (2.55)$$

で、 $j_n(x)$  は  $n$  次球 Bessel 関数、 $P_n(x)$  は  $n$  次 Legendre 関数である。式(2.53)における  $\lambda$  についての積分は附録Dに示す方法で行うことができる。

当然のことながら、 $B(\rho)$  の値を式(2.49)で求めたものと、式(2.51)~(2.55)で求めたものは数値計算の誤差以内で一致するはずである。このことは、数値計算の精度を評価するのに用いることができる。

断面積は次のようになる。

$$\begin{aligned} \sigma &= 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \\ &\approx 2\pi \int_0^\infty \frac{(16\mu)^2 \theta d\theta}{[1 + \frac{v^2}{4} + \mu^2 v^2 \theta^2]^6} \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$= \frac{2^8 \pi}{5 v^2 (1 + \frac{v^2}{4})^5} \quad (2.57)$$

式(2.57)の近似による誤差は  $O(\mu^{-10})$  程度である(附録E参照)。

相対速度  $v=1.2$  はそれぞれ実験室系における粒子Bの入射エネルギー 25 keV および 100 keV に相当する。このときの  $|f(\theta)|^2$  と  $\rho |B(\rho)|^2$  をそれぞれ Fig. 3 および Fig. 5~6 に示した。また、入射エネルギー 25~200 keV の範囲の断面積  $\sigma$  を Fig. 7 に示した。

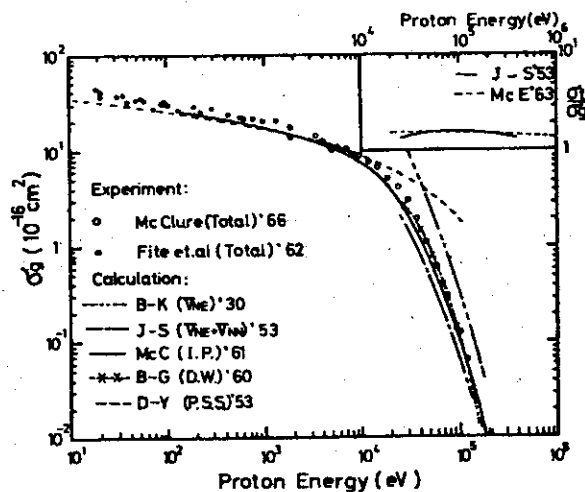


Fig. 7 Theoretical values of Charge transfer cross section for  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ , and experimental values for  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(\text{all states}) + H^+$ . Estimated ratio of total to ground state cross section (in the top of this figure).

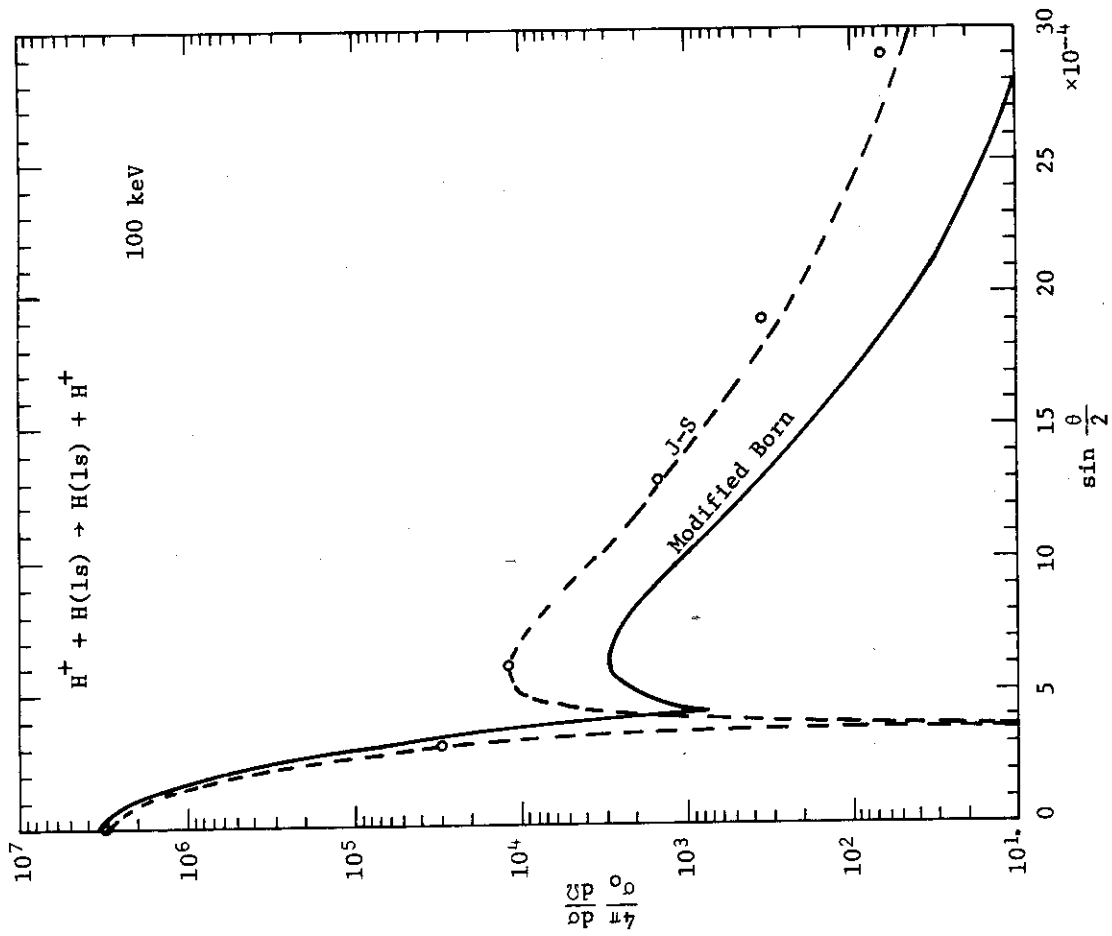


Fig. 4 Angular distribution for reaction:  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ , and proton energy: 100 keV  $\sigma_0 = \pi a_0^2$ ;  $a_0 =$  Bohr radius

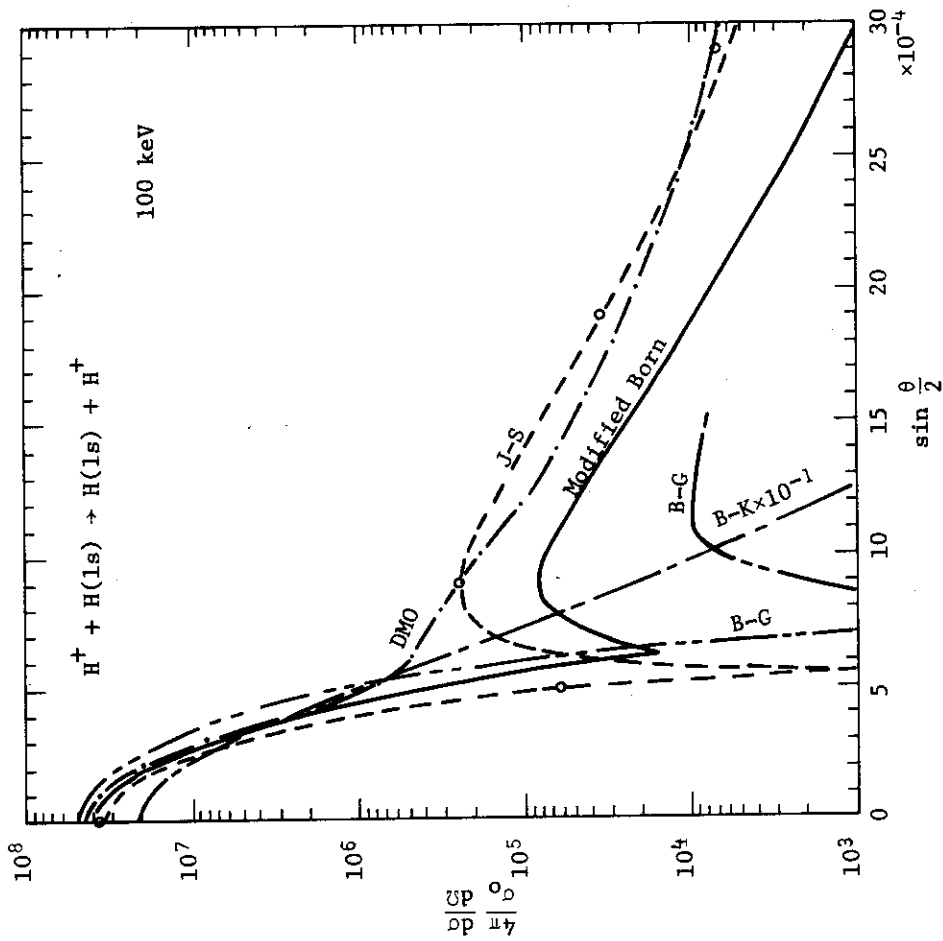


Fig. 3 Angular distribution for  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$  (25 keV)  $\sigma_0 = \pi a_0^2$ , B-K Brinkman-Kramers (Vne) '30  $a_0 =$  Bohr radius, J-S Jackson-Schiff (Vnn+Vne) '53 B-G Bassel-Gerjuoy (D.W.) '60 Modified Born Ryufuku DMO Ryufuku (4-state D.M.O.)

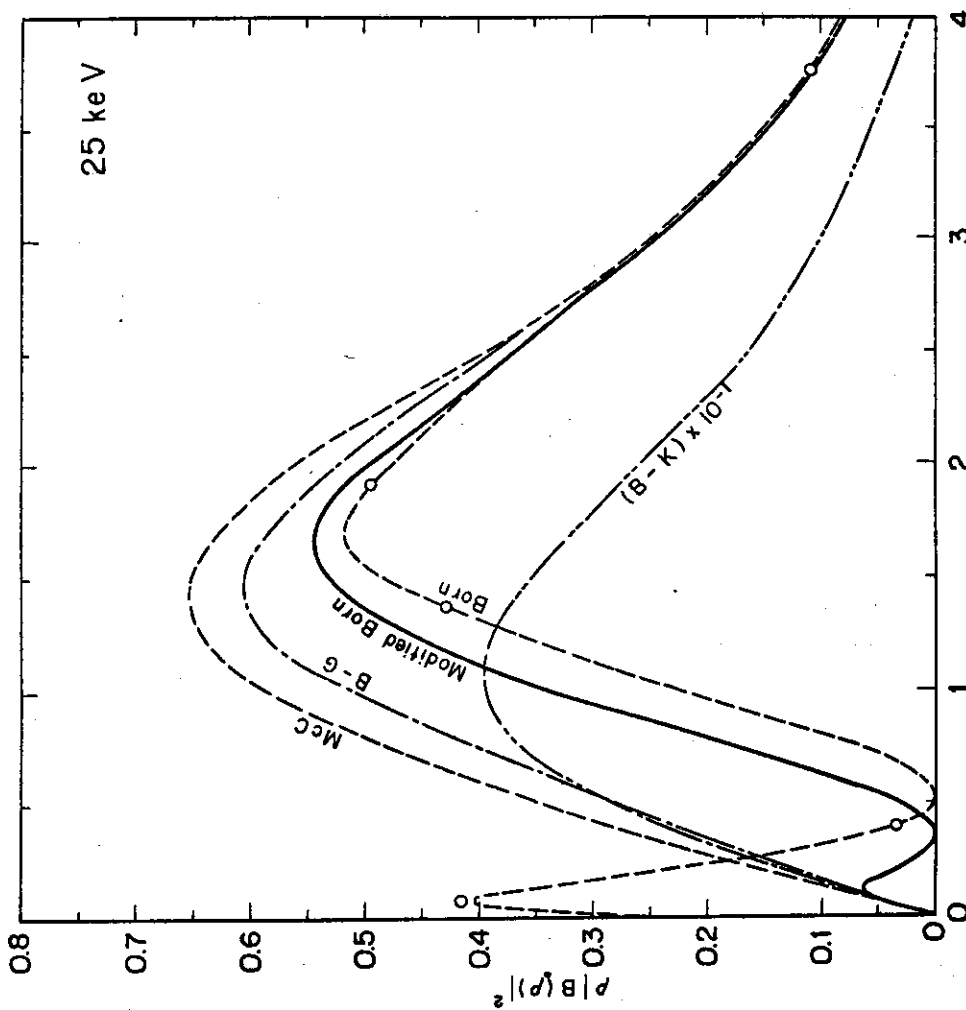


Fig. 5 Graph of  $\rho |B(\rho)|^2$  against  $\rho$  for an energy of 25 keV.  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ . The cross section is given by  $\sigma = 2\pi f_0^\infty |B(\rho)|^2 \rho d\rho$ .

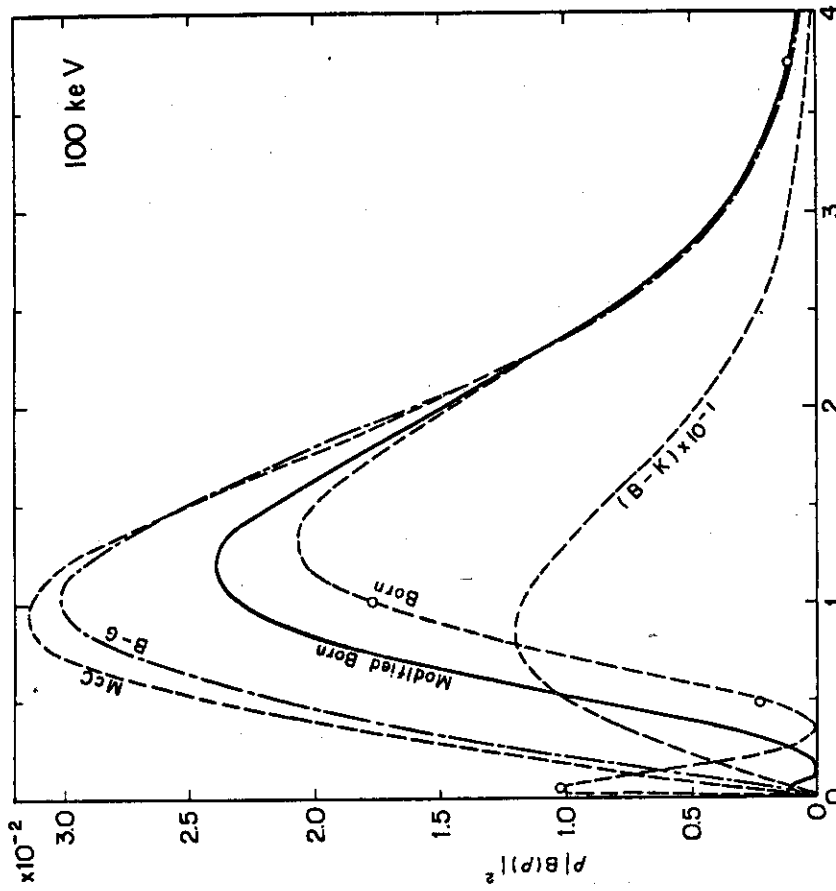


Fig. 6 Graph of  $\rho |B(\rho)|^2$  against  $\rho$  for an energy of 100 keV.  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ .

比較のために、他の近似法で得られたものも図示した。Fig. 7 には、Mc Clure<sup>8)</sup> と Fite et al.<sup>9,10)</sup> によって得られた実験値をも示したが、他の近似に比べ Brinkman-Kramers 近似は実験値との差が大きいことが分る。 $v < 1$  (入射エネルギー  $< 25 \text{ keV}$ ) の領域では Born 近似は成り立たない。

Brinkman-Kramers 近似にはこのような難点があるが、得られた結果が非常に簡単な形をしているため、励起状態が関係する電荷移動過程の断面積が主量子数にどのように依存するか等を論ずる場合、しばしば引合に出されて来た。<sup>11,12,13,14)</sup> 参考までに、粒子 B の主量子数  $n$  の原子軌道への電子捕獲断面積の和は

$$\sigma_n = \frac{n^2 2^{18} (Z_a Z_b / n)^5 \pi v^8}{5 [v^2 + (Z_a - \frac{Z_b}{n})^2]^5 [v^2 + (Z_a + \frac{Z_b}{n})^2]^5} \quad (258)$$

である。<sup>11)</sup>ここに、 $Z_a, Z_b$  はそれぞれ粒子 A, B の電荷である。

## 2.2 Bates-Dalgarno-Jackson-Schiff の近似 (BDJS 近似)

Brinkman と Kramers の計算 (1930) から約 20 年たって、ようやく精密な実験結果が得られ、<sup>15,16)</sup> 計算値との差が大きいことが分った。1952 年に Bates と Dalgarno<sup>17)</sup> が、また 1953 年に Jackson と Schiff<sup>12)</sup> が新しい計算を行った。彼らは、式 (2.6) において Brinkman と Kramers が無視した核-核間相互作用  $Z_a Z_b / R$  を取り入れて、式 (2.6) そのままの形を用いた。その結果は、Fig. 7 に示すように、実験値との一致はかなり良くなった。

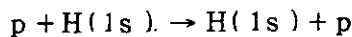
Bates と Dalgarno は

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} = \sum_s r_s(r_a, r_b) P_s \left( \frac{\vec{r}_a \cdot \vec{r}_b}{r_a r_b} \right), \quad (259)$$

$$r_s(r_a, r_b) = \begin{cases} r_a^s / r_b^{s+1} & (r_b > r_a) \\ r_b^s / r_a^{s+1} & (r_a > r_b) \end{cases} \quad (260)$$

と展開し、式 (2.18) を  $\vec{r}_a$  と  $\vec{r}_b$  の積分に分離して計算を行った。

Jackson と Schiff<sup>12)</sup> および Schiff<sup>11)</sup> によれば、共鳴電荷移動過程



の散乱振動は次のように与えられる (附録 F)。

$$f(\theta) = -16\mu \left( \frac{2\lambda_0 - 1}{A^3} + \frac{\lambda_1}{A^2} + \frac{3}{4} \frac{\lambda_2}{A} \right) \quad (261)$$

ここに、

$$\lambda_n = \int_0^1 \frac{z(1-z) dz}{\{1 + v^2 z(1-z)\}^{\frac{2n+1}{2}}}, \quad (262)$$

$$A = 1 + \frac{v^2}{4} + 4\mu v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (263)$$



式(2.61)で $\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = 0$ とおけばBrinkman-Kramersの近似が得られる。

衝突径数による表現は次のようにして得られる。

$$B(\rho) = \mu v \int_0^\infty \theta d\theta J_0(\mu v \rho \theta) \times \left[ -16\mu \left\{ \frac{2\lambda_0 - 1}{(d + \mu^2 v^2 \theta^2)^3} + \frac{\lambda_1}{(d + \mu^2 v^2 \theta^2)^2} + \frac{\frac{3}{4}\lambda_2}{(d + \mu^2 v^2 \theta^2)} \right\} \right] \quad (2.64)$$

ただし、 $d = 1 + v^2/4$ 。式(2.50)を用いると次のようになる。

$$B(\rho) = -\frac{16}{v} \left[ \frac{2\lambda_0 - 1}{8d} \rho^2 K_2(\rho d^{\frac{1}{2}}) + \frac{\lambda_1}{2d^{\frac{1}{2}}} \rho K_1(\rho d^{\frac{1}{2}}) + \frac{3}{4} \lambda_2 K_0(\rho d^{\frac{1}{2}}) \right]. \quad (2.64)$$

断面積は式(2.61)より次のように与えられる。

$$\sigma = \frac{2^3 \pi}{v^2} \left[ \frac{(2\lambda_0 - 1)^2}{5d^5} + \frac{2(2\lambda_0 - 1)\lambda_1}{4d^4} + \frac{\lambda_1^2 + \frac{3}{2}(2\lambda_0 - 1)\lambda_2}{2d^3} + \frac{\frac{3}{2}\lambda_1\lambda_2}{2d^2} + \frac{9}{16} \frac{\lambda_2^2}{d} \right]. \quad (2.65)$$

また、式(2.36)より衝突径数による表現を求めると次のようになる。

$$B(\rho) = -\frac{1}{v} \int_0^\infty dZ \left( \frac{1}{R} s_{1s,1s}^{ba} + u_{1s,1s}^{ba} \right). \quad (2.66)$$

ここに、 $u_{1s,1s}^{ba}$ は式(2.52)~(2.53)で与えられ、

$$s_{1s,1s}^{ba} = \int e^{-i\vec{v}\cdot\vec{r}} \phi_{1s}^b \phi_{1s}^a d^3\vec{r}, \quad (2.67)$$

$$= \frac{R^3}{2} \int_1^\infty d\lambda e^{-R\lambda} \left[ \left( \lambda^2 - \frac{1}{3} \right) j_0(\zeta) + \frac{2}{3} j_2(\zeta) P_2(\cos\psi) \right] \quad (2.68)$$

である。 $\zeta, \cos\psi$ は式(2.54)で与えられる。

散乱の角分布 $|f(\theta)|^2$ をFig. 3~4に、 $\rho|B(\rho)|^2$ をFig. 5~6に、断面積をFig. 7に、それぞれ他の近似と共に示した。JacksonとSchiffは2sと2p状態への電荷移動断面積 $\sigma_2$ を求め、Brinkman-Kramersの断面積(式(2.58))を考慮して、全断面積を次のように評価している。

$$\sigma_1 = \sum_{n=1}^\infty \sigma_n \approx \sigma_1 \left[ 1 + \frac{8\sigma_2}{\sigma_1} \left( \sum_{n=1}^\infty n^{-3} - 1 \right) \right] = \sigma_1 [1 + 1.616 \sigma_2 / \sigma_1]. \quad (2.69)$$

比 $\sigma_2/\sigma_1$ をFig. 7の右上に示した。このようにして得られた $\sigma_1$ と実験値との差は、Brinkman-Kramers近似に比べ、極めて小さくなった。

このように、核-核間相互作用 $Z_a Z_b / R$ を取り入れたことによって、実験値との一致は非常によい結果が得られたが、一方これには次のようなWickの批判がある<sup>18)</sup>。すなわち、厳密な計算を行えば、核-核間相互作用は無視できる程度( $1/M_a$ の程度)の寄与しかない筈である。このことは、核の質量を無限大とし衝突径数法で計算してみれば容易に分る。明らかに、核-核間相互作用は適当な正準変換でHamiltonianから除去できるから、厳密な遷移確率には影

響する筈がない、というものである。

その後、核-核間相互作用が最終結果には効いて来ないような近似法が数多く報告された（次節以降参照）。

## 3. 歪曲波の方法 (Distorted Wave Method)

全体の波動関数  $\Psi$  は次式を満足する。

$$H\Psi = E\Psi. \quad (3.1)$$

ただし,

$$H = \frac{1}{2\mu_i} \vec{p}_i^2 - \frac{1}{2m_a} \vec{p}_a^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} \quad (3.2)$$

$$= \frac{1}{2\mu_f} \vec{p}_f^2 - \frac{1}{2m_b} \vec{p}_b^2 - \frac{Z_b}{r_b} - \frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_a Z_b}{R}. \quad (3.3)$$

いま,

$$\left( -\frac{1}{2m_a} \vec{p}_a^2 - \frac{Z_a}{r_a} \right) \phi_n^a = \omega_n^a \phi_n^a, \quad (3.4)$$

$$\left( -\frac{1}{2m_b} \vec{p}_b^2 - \frac{Z_b}{r_b} \right) \phi_n^b = \omega_n^b \phi_n^b. \quad (3.5)$$

を満す  $\phi_n^a, \phi_n^b$  を用いて, 二状態近似 (two-state approximation) に従って trial function として,

$$\Psi = \phi_0^a(\vec{r}_a) F(\vec{R}_i) + \phi_0^b(\vec{r}_b) G(\vec{R}_f) \quad (3.6)$$

とおく。これを式 (3.1) へ代入して, 式 (3.4)~(3.5) を用い, 得られた式に  $\phi_0^{a*}$  または  $\phi_0^{b*}$  をかけて, それぞれ  $\vec{r}_a$  または  $\vec{r}_b$  について積分すれば, 次式が得られる。

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{1}{2\mu_i} \vec{p}_i^2 - E_i + \bar{V}_i(\vec{R}_i) \right] F(\vec{R}_i) \\ & = -\int \phi_0^{a*}(\vec{r}_a) \left[ -\frac{1}{2\mu_f} \vec{p}_f^2 - E_f + V_f(\vec{r}_b, \vec{R}_f) \right] \phi_n^b(\vec{r}_b) G(\vec{R}_f) d^3\vec{r}_a, \quad (3.7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{1}{2\mu_f} \vec{p}_f^2 - E_f + \bar{V}_f(\vec{R}_f) \right] G(\vec{R}_f) \\ & = -\int \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \left[ -\frac{1}{2\mu_i} \vec{p}_i^2 - E_i + V_i(\vec{r}_a, \vec{R}_i) \right] \phi_n^a(\vec{r}_a) F(\vec{R}_i) d^3\vec{r}_b. \quad (3.8) \end{aligned}$$

ここに,

$$V_i(\vec{r}_a, \vec{R}_i) = -\frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} = \frac{Z_b}{|\vec{R}_i - \frac{M_a}{M_a+1} \vec{r}_a|} + \frac{Z_a Z_b}{|\vec{R}_i + \frac{1}{M_a+1} \vec{r}_a|}, \quad (3.9)$$

$$V_f(\vec{r}_b, \vec{R}_f) = -\frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_a Z_b}{R} = \frac{Z_b}{|\vec{R}_f - \frac{M_b}{M_b+1} \vec{r}_b|} + \frac{Z_a Z_b}{|\vec{R}_f - \frac{1}{M_b+1} \vec{r}_b|}, \quad (3.10)$$

$$\bar{V}_i(\vec{R}_i) = \int V_i(\vec{r}_a, \vec{R}_i) |\phi_0^a(\vec{r}_a)|^2 d^3\vec{r}_a, \quad (3.11)$$

$$\bar{V}_f(\vec{R}_f) = \int V_f(\vec{r}_b, \vec{R}_f) |\phi_0^b(\vec{r}_b)|^2 d^3\vec{r}_b, \quad (3.12)$$

$$E_i = E - \omega_0^a, \quad E_f = E - \omega_0^b. \quad (3.13)$$

式 (3.7)~(3.8) の右辺を零とした方程式の解をそれぞれ  $F(\vec{R}_i), G(\vec{R}_f)$  で表わし, その漸

近解が

$$\mathcal{F}(\vec{R}_i) \sim e^{ik_i R_i \cos \theta_i} + R^{-1} e^{ik_i R_i} f(\theta_i, \phi_i), \quad (3.14)$$

$$\mathcal{G}(\vec{R}_f) \sim e^{ik_f R_f \cos \theta_f} + R^{-1} e^{ik_f R_f} g(\theta_f, \phi_f), \quad (3.15)$$

$$k_i = (2\mu_i E_i)^{\frac{1}{2}}, \quad k_f = (2\mu_f E_f)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.16)$$

であるとする。式(3.8)の漸近解は次のように表わすことができる。

$$G(\vec{R}_f) \sim R_f^{-1} e^{ik_f R_f} f(\theta_f, \phi_f). \quad (3.17)$$

ここに,

$$f(\theta_f, \phi_f) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \iint \mathcal{G}(R_f', \pi - \theta) \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \\ \times [V_i(\vec{r}_a, \vec{R}_i) - \bar{V}_i(\vec{R}_i)] \phi_0^a(\vec{r}_a) \mathcal{F}(\vec{R}_i) d^3 \vec{r}_b d^3 \vec{R}_i', \quad (3.18)$$

$$\cos \theta = \cos \theta_f \cos \theta_f' + \sin \theta_f \sin \theta_f' \cos(\phi_f - \phi_f'). \quad (3.19)$$

式(3.18)が歪曲波の方法による散乱振幅を与える。これをもう少し簡単化するために、次のように近似する。 $M_a \gg 1$ であるから、

$$\int \frac{|\phi_0^a(\vec{r}_a)|^2}{|\vec{R}_i + \frac{1}{M_a+1} \vec{r}_a|} d^3 \vec{r}_a \approx \int \frac{|\phi_0^a(\vec{r}_a)|^2}{R_i} d^3 \vec{r}_a \approx \frac{1}{R}. \quad (3.20)$$

従って

$$V_i(\vec{r}_a, \vec{R}_i) - \bar{V}_i(\vec{R}_i) = \frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} - \int \left( -\frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{|\vec{R}_i + \frac{1}{M_a+1} \vec{r}_a|} \right) |\phi_0^a|^2 d^3 \vec{r}_a \\ \approx -\frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} - \int \left( -\frac{Z_b}{r_b} \right) |\phi_0^a(\vec{r}_a)|^2 d^3 \vec{r}_a - \frac{Z_a Z_b}{R} \\ = -\frac{Z_b}{r_b} - u_{00}^{aa} \quad (3.21)$$

ただし,

$$u_{00}^{aa} = \int \left( \frac{Z_b}{r_b} \right) |\phi_0^a(\vec{r}_a)|^2 d^3 \vec{r}_a. \quad (3.22)$$

式(3.21)を式(3.18)に用いてると、散乱振幅は次のようになる。

$$f(\theta_f, \phi_f) = -\frac{\mu}{2\pi} \iint \mathcal{G}(R_f', \pi - \theta) \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \\ \times \left[ -\frac{Z_b}{r_b} - u_{00}^{aa} \right] \phi_0^a(\vec{r}_a) \mathcal{F}(\vec{R}_i) d^3 \vec{r}_b d^3 \vec{R}_i'. \quad (3.23)$$

### 3.1 Bassel と Gerjuoy の取扱い

式(3.23)はまだ複雑な形をしているので、Bassel と Gerjuoy<sup>19)</sup> は  $\mathcal{G}$  と  $\mathcal{F}$  を平面波で置き代える近似を行った。すなわち、

$$f(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi} \iint e^{i(\vec{k}_f \vec{R}_f - \vec{k}_i \vec{R}_i)} \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \left[ -\frac{Z_b}{r_b} - u_{00}^{aa} \right] \phi_0^a(\vec{r}_a) d^3\vec{r}_b d^3\vec{r}_a' \quad (3.24)$$

式(3.24)には、核-核間相互作用を含んでいない代わりに、電子-核間の平均ポテンシャル  $u_{00}^{aa}$  が入っている。

Born 近似の場合と同様に、衝突径数による表現は次のようになる。

$$f(\theta) = \mu v_f \int_0^\infty \rho d\rho J_m(\mu v_f \sin \theta) B(\rho), \quad (3.25)$$

$$B(\theta) = -\frac{1}{v_f} \int_{-\infty}^\infty dZ e^{-i\mu(v_f - v_i)Z} [u_{n0}^{ba} - s_{n0}^{ba} u_{00}^{aa}]. \quad (3.26)$$

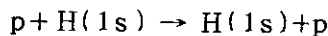
ここに、

$$s_{n0}^{ba} = \int e^{-i\vec{v}\vec{r}} \phi_n^{b*} \phi_0^a d^3\vec{r}, \quad (3.27)$$

$$u_{n0}^{ba} = \int e^{-i\vec{v}\vec{r}} \phi_n^{b*} \left(-\frac{Z_b}{r_b}\right) \phi_0^a d^3\vec{r} \quad (3.28)$$

で、 $m$ は  $\phi_n^b$  の磁気量子数である。

Bassel と Gerjuoy は共鳴電荷移動過程



の散乱振幅  $f_{BG}(\theta)$  を計算し、また、式(3.25)の逆変換によって、 $B(\rho)$  を計算した。すなわち、 $\sin \theta \approx \theta$  として、

$$B_{BG}(\rho) = \frac{1}{\mu v} \int_0^\infty \lambda d\lambda J_0(\lambda \rho) f_{BG}(\theta) \quad (3.29)$$

ただし、 $\lambda = \mu v \theta$ 。Fig. 3 に  $|f_{BG}(\theta)|^2$  を、Fig. 5~6 に  $\rho |B_{BG}(\rho)|^2$  を、Fig. 7 に  $f_{BG}(\theta)$  から得られた断面積を示した。Fig. 5~6 を見ると、衝突径数  $\rho$  が大きくなると Jackson-Schliff の近似と Bassel-Gerjuoy の近似の結果が一致して来る<sup>注)</sup>ことが分る。

これは次のような理由によるものと思われる<sup>20)</sup>。この場合、 $u_{00}^{aa}$  は次のようになる。

$$u_{1s,1s}^{aa} = -\frac{Z_b}{R} [1 - (1 + Z_a R) e^{-2Z_a R}]. \quad (3.30)$$

したがって、 $\rho$  が大きいところでは、 $R$  は大きくなり、 $u_{1s,1s}^{aa} \approx -Z_b/R$  となるから、これは  $Z_a = Z_b = 1$  とすれば、核-核間ポテンシャルの符号を変えたものと数値的に同じになる。すなわち、式(3.24)において、 $u_{00}^{aa} = -1/R$  とおけば Jackson-Schliff の近似になる。

注) Bassel-Gerjuoy の原論文<sup>19)</sup>にある図では、両者はいく分ずれているが、これは Schiff<sup>11)</sup> の不正確な図を引用したためである。

#### 4. Perturbed Stationary State (PSS) 法

粒子A, Bの相対速度があまり大きくない ( $v < 1$ ) ときは, 原子波動関数の代りに分子波動関数を用いる近似が応用できる。すなわち, 電子の状態を衝突の全過程を通じて, 核A, Bを静止させた状態での分子波動関数で表わす方法である。これはPerturbed Stationary State (PSS) 法と呼ばれ, Bates, Massey および Stewart により詳細に論じられている。<sup>21)</sup>

全系の波動方程式は次のとおりである。

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \nabla_{\vec{R}}^2 + \frac{Z_a Z_b}{R} - \frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} \right] \Psi = E \Psi. \quad (4.1)$$

ここに,  $\nabla_{\vec{R}}^2$  は  $\vec{R}$  に関する,  $\nabla_{\vec{r}}^2$  は  $\vec{r}$  に関する Laplacian である。いま,  $\vec{R}$  を固定したときの方程式

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} \right] \chi(\vec{r}, \vec{R}) = \epsilon(R) \chi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (4.2)$$

を考えると,  $\chi$  は核A, Bをもつ分子の波動関数である。漸近的に,

$$\chi_m^a(\vec{r}, \vec{R}) \sim \phi_m^a(\vec{r}_a), \quad \chi_n^b(\vec{r}, \vec{R}) \sim \phi_n^b(\vec{r}_b), \quad (R \rightarrow \infty), \quad (4.3)$$

となるような解  $\chi_m^a, \chi_n^b$  および  $\epsilon_m^a, \epsilon_n^b$  が得られたとしよう。このとき, 全体の波動関数は次のように展開できよう。

$$\Psi = \sum_m F_m^a(\vec{R}) \chi_m^a(\vec{r}, \vec{R}) + \sum_n F_n^b(\vec{R}) \chi_n^b(\vec{r}, \vec{R}). \quad (4.4)$$

ただし,  $R \rightarrow \infty$  で

$$\Psi \sim e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}_i} \phi_m^a \quad \text{または} \quad e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}_f} \phi_n^b \quad (4.5)$$

とするためには, 式(4.4)の前の項と後の項にそれぞれ

$$e^{-i\vec{v}_i \cdot \vec{r}} \quad \text{および} \quad e^{i\vec{v}_f \cdot \vec{r}} \quad (4.6)$$

をかける必要がある。しかし, slow collision ( $v < 1$ ) の場合, これらの係数を無視してよい。

##### 4.1 対称共鳴の場合 (symmetric resonant process)

粒子AとBが同種るとき, 同じエネルギー状態間で遷移が起る。波動関数はAとBの入れ換に関して対称または反対称でなければならない。それらを  $\chi^\pm$  とし,  $R \rightarrow \infty$  で同じエネルギーをもつとする。このとき

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} (\chi^+ + \chi^-) &\rightarrow \phi(\vec{r}_a) \\ \frac{1}{2} (\chi^+ - \chi^-) &\rightarrow \phi(\vec{r}_b) \end{aligned} \right\} \quad (R \rightarrow \infty) \quad (4.7)$$

となる。(この場合,  $\phi_m^a(\vec{r}_a)$  と  $\phi_n^b(\vec{r}_b)$  は同じ形である。) 分子状態として, いま考えているもの以外はすべて無視する近似で, 全体の波動関数は次のように書ける。

$$\Psi = F^+(\vec{R}) \chi^+(\vec{r}, \vec{R}) + F^-(\vec{R}) \chi^-(\vec{r}, \vec{R}) \quad (4.8)$$

$$= \frac{1}{2} [(F^+ + F^-)(\chi^+ + \chi^-) + (F^+ - F^-)(\chi^+ - \chi^-)]. \quad (4.9)$$

$R \rightarrow \infty$  のとき,

$$F^+ \sim \frac{1}{2} \left\{ e^{i\vec{k}\vec{R}} + \frac{e^{ikR}}{R} f^+(\theta, \phi) \right\} \quad (4.10)$$

$$F^- \sim \frac{1}{2} \left\{ e^{i\vec{k}\vec{R}} + \frac{e^{ikR}}{R} f^-(\theta, \phi) \right\} \quad (4.11)$$

であれば,

$$\psi \sim e^{i\vec{k}\vec{R}} \phi(\vec{r}_a) + \frac{1}{2} \frac{e^{ikR}}{R} \{ (f^+ - f^-) \phi(\vec{r}_b) + (f^+ + f^-) \phi(r_a) \} \quad (4.12)$$

従って, 電荷移動の断面積は

$$\sigma_{tr} = \frac{1}{4} \iint |f^+ - f^-|^2 \sin \theta d\theta d\phi, \quad (4.13)$$

また, 弾性散乱の断面積は

$$\sigma_{el} = \frac{1}{4} \iint |f^+ + f^-|^2 \sin \theta d\theta d\phi \quad (4.14)$$

となる。

$f^\pm$  を決定するために, 式(4.8)を式(4.1)へ代入して,

$$\left[ -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_r^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_a}{r_b} - \epsilon^\pm(R) \right] \chi^\pm(\vec{r}, \vec{R}) = 0, \quad (4.15)$$

の関係を用い, 両辺に  $\chi^{\pm*}$  をかけて積分すると,

$$\left[ \vec{\nabla}_R^2 + k^2 - 2\mu \left\{ \frac{Z_a^2}{R} + \epsilon^\pm(R) - \epsilon^\pm(\infty) \right\} \right] F^\pm(\vec{R}) = 0 \quad (4.16)$$

$$k = [ 2\mu \{ E - \epsilon^\pm(\infty) \} ]^{\frac{1}{2}} \quad (4.17)$$

が得られる。

$$F^\pm(\vec{R}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell P_\ell(\cos \theta) G_\ell(R) R^{-1} \quad (4.18)$$

とおいて, 式(4.16)へ代入して, 次式を得る。

$$\left[ \frac{d^2}{dR^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} - 2\mu \left\{ \frac{Z_a^2}{R} + \epsilon^\pm(R) - \epsilon^\pm(\infty) \right\} \right] G_\ell^\pm(R) = 0. \quad (4.19)$$

これより,  $R=0$  で零,  $R \rightarrow \infty$  で

$$G_{\ell}^\pm \sim \sin \left( kR - \frac{1}{2} \ell\pi + \eta_\ell^\pm \right) \quad (4.20)$$

なる解を得ることができる。このとき,  $\eta_\ell^\pm$  を用いて,

$$f^\pm(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum (2\ell+1) (e^{2i\eta_\ell^\pm} - 1) P_\ell(\cos \theta), \quad (4.21)$$

したがって,

$$\sigma_{tr} = \frac{\pi}{k^2} \sum (2\ell+1) \sin^2(\eta_\ell^+ - \eta_\ell^-), \quad (4.22)$$

$$\sigma_{e,\ell} = \frac{2\pi}{k^2} \sum (2\ell+1) \left\{ \sin^2 \eta_\ell^+ + \sin^2 \eta_\ell^- - \frac{1}{2} \sin^2(\eta_\ell^+ - \eta_\ell^-) \right\}, \quad (4.23)$$

を得る。

#### 4.2 半古典的近似

軌道がほとんど一直線のときは、かなりよい近似で

$$\eta_{\ell}^{\pm} = -\frac{\mu}{k} \int_0^{\infty} \left\{ \frac{Z_a^2}{R} + \epsilon^{\pm}(R) - \epsilon^{\pm}(\infty) \right\} dZ, \quad (4.24)$$

$$R^2 = Z^2 + (\ell + \frac{1}{2})^2 / k^2 \quad (4.25)$$

とできる<sup>22)</sup>。ただし、 $\ell$  はあまり小さくないとする。したがって、

$$\sigma_{tr} \approx \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{\infty} (\ell + \frac{1}{2}) \sin^2(\eta_{\ell}^+ - \eta_{\ell}^-) d\ell \quad (4.26)$$

$$= 2\pi \int_0^{\infty} \rho d\rho \sin^2 \zeta(\rho). \quad (4.27)$$

ここで、

$$\rho = (\ell + \frac{1}{2}) / k, \quad (4.28)$$

$$\zeta(\rho) = \frac{1}{v} \int_0^{\infty} [\epsilon^+(\sqrt{Z^2 + \rho^2}) - \epsilon^-(\sqrt{Z^2 + \rho^2})] dZ. \quad (4.29)$$

で、 $v = k/\mu$  である。 $\rho$  は古典運動の衝突径数と考えられる。

#### 4.3 非共鳴電荷移動

$$\Psi = F^a(\vec{R}) \chi^a(\vec{r}, \vec{R}) + F^b(\vec{R}) \chi^b(\vec{r}, \vec{R}) \quad (4.30)$$

とおく。ただし、量子数を表す  $m, n$  を省略する。4.1 節と同様にして、

$$\begin{aligned} & \left[ \vec{V}_R^2 + k_a^2 - 2\mu \left\{ \frac{Z_a Z_b}{R} + \epsilon^a(R) - \epsilon^a(\infty) \right\} \right] F^a(\vec{R}) \\ & = 2 \int \chi^a \vec{V}_R \chi^b \cdot \vec{V}_R F^b d^3 \vec{r}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} & \left[ \vec{V}_R^2 + k_b^2 - 2\mu \left\{ \frac{Z_a Z_b}{R} + \epsilon^b(R) - \epsilon^b(\infty) \right\} \right] F^b(\vec{R}) \\ & = 2 \int \chi^b \vec{V}_R \chi^a \cdot \vec{V}_R F^a d^3 \vec{r}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

を得る。これら両式より、歪曲波の方法で、次の断面積を得ることができる。

$$\sigma = \frac{k_b}{k_a} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |f(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi. \quad (4.33)$$

ここに、

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) = & 2 \iint \mathcal{F}^b(R', \pi - \mathcal{G}) \chi^b(\vec{r}, R') \vec{V}_{R'} \chi^a(\vec{r}, R') \\ & \times \vec{V}_{R'} \mathcal{F}^a(R') d^3 \vec{r} d^3 R'. \end{aligned} \quad (4.34)$$

また、 $F^a, F^b$  は次の方程式の解である。

$$\left[ \vec{V}_R^2 + k_{a,b}^2 - 2\mu \left\{ \frac{Z_a Z_b}{R} + \epsilon^{a,b}(R) - \epsilon^{a,b}(\infty) \right\} \right] \mathcal{F}^{a,b}(\vec{R}) = 0. \quad (4.35)$$

ただし、 $R \rightarrow \infty$  で



$$f^{a,b}(\vec{R}) \sim e^{ik^{a,b}R \cos \theta} + \frac{e^{ik^{a,b}R}}{R} f^{a,b}(\theta, \phi) \quad (4.36)$$

とする。また、

$$\cos \varphi = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi') \quad (4.37)$$

である。

4.2節と同様に、半古典的近似で断面積は次のように表わすことができる。

$$\sigma = 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \left| \int_{-\infty}^\infty L(\vec{R}) \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^Z [\epsilon^a(R') - \epsilon^b(R')] dZ'\right) dZ' \right|^2 \quad (4.38)$$

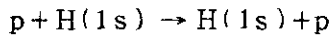
ここで、

$$L(\vec{R}) = \int \chi^b(\vec{r}, \vec{R}) \frac{\partial}{\partial Z} \chi^a(\vec{r}, \vec{R}) d^3r, \quad (4.39)$$

$$R^2 = \rho^2 + Z^2. \quad (4.40)$$

#### 4.4 Dalgarno-Yadavの計算

DalgarnoとYadavは式(4.22)に従って対称共鳴電荷移動過程



の断面積を計算した。<sup>23)</sup> 彼らは、位相のずれ  $\eta_{\ell}^{\pm}$  を Jeffrey の WKB 近似を Langer が修正した形 (LJWKB 近似)<sup>24)</sup> で求めた。すなわち、

$$\eta_{\ell}^{\pm} = \int^\infty \left\{ k^2 - 2\mu \epsilon^{\pm}(R) - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{R^2} \right\}^{\frac{1}{2}} dR - \int^\infty \left\{ k^2 - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{R^2} \right\}^{\frac{1}{2}} dR. \quad (4.41)$$

(積分の下限は被積分関数が零になる  $R$  の値) ここで、 $\epsilon^+(R)$ 、 $\epsilon^-(R)$  はそれぞれ波動関数  $\chi^+$ 、 $\chi^-$  で表わされた  $H_2^+$  分子の  $1s\sigma$ 、 $2p\sigma$  状態のエネルギーであるが、これを Heitler-London 近似

$$\epsilon^{\pm}(R) = \frac{2}{R} + \frac{-2/R + 2\{e^{-2R}(1+1/R) \mp e^{-R}(1+R)\}}{1 \pm e^{-R}(1+R+R^2/3)} \quad (4.42)$$

に2次の摂動項 (Coulson によって1941年に計算された。)

$$-\frac{9}{4R^2} - \frac{15}{2R^6} - \frac{213}{4R^7} - \frac{7755}{64R^8} - \frac{1773}{2R^9} - \frac{86049}{16R^{10}} \quad (4.43)$$

を加えた形で表わした。

Dalgarno-Yadav によって計算された断面積を Fig. 7 に示した。

## 5. 衝突径数法

入射粒子が衝突の全過程を通じて直線軌道上を定速で動くことと仮定し、そのときの電子遷移確率を求め、それから電子遷移の断面積を得る方法を「衝突径数法 (Impact parameter method)」と言う。すなわち、衝突径数  $\rho$  のときの電子遷移確率を  $P(\rho)$  とすると、断面積  $\sigma$  は次のように与えられる。

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} P(\rho) \rho d\rho \quad (5.1)$$

この方法は、粒子A, Bの相対運動については古典的近似を、電子状態については量子力学的取扱いを行うという近似法である。

以下では、Batesの取扱い<sup>20)</sup>に従って述べる。電子の波動関数  $\phi$  は次式を満足する。(  $\vec{r}$  は粒子A, Bの中心(固定)に対す電子の位置ベクトル )

$$H_e \phi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) \quad (5.2)$$

ここに、

$$H_e = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_r^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} \quad (5.3)$$

いま、 $\phi$  を

$$\left[ -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_a^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \omega_m^a \right] \phi_m^a(\vec{r}_a) = 0, \quad (5.4)$$

$$\left[ -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_b^2 - \frac{Z_b}{r_b} - \omega_n^b \right] \phi_n^b(\vec{r}_b) = 0, \quad (5.5)$$

を満足する波動関数  $\phi_m^a$ ,  $\phi_n^b$  を用いて次のように近似する。

$$\phi(\vec{r}, t) = a_m \phi_m^a e^{-\frac{1}{2} i \vec{v} \cdot \vec{r} - i(\omega_m^a + \frac{1}{8} v^2) t} + b_n \phi_n^b e^{-\frac{1}{2} i \vec{v} \cdot \vec{r} - i(\omega_n^b + \frac{1}{8} v^2) t} \quad (5.6)$$

ここに、 $\vec{v}$  は粒子Aに対する粒子Bの相対速度である。式(5.6)を(5.2)へ代入し、式(5.4)~(5.5)の関係を用い、さらに両辺に  $\phi_m^{a*} e^{i\omega_m^a t}$  または  $\phi_n^{b*} e^{i\omega_n^b t}$  をかけて  $\vec{r}$  について積分すると、次の連立方程式が得られる。

$$i(\dot{a}_m + \dot{b}_n s_{mn}^{ab} e^{-i(\omega_n^b - \omega_m^a) t}) = b_n u_{mn}^{ab} e^{-i(\omega_n^b - \omega_m^a) t} + a_m u_{mm}^{aa}, \quad (5.7)$$

$$i(\dot{b}_n + \dot{a}_m s_{mn}^{ba} e^{-i(\omega_m^a - \omega_n^b) t}) = a_m u_{nm}^{ba} e^{-i(\omega_m^a - \omega_n^b) t} + b_n u_{nn}^{bb}. \quad (5.8)$$

ここに、 $\dot{x} = dx/dt$  で、

$$s_{mn}^{ab} = \int \phi_m^{a*}(\vec{r}_a) \phi_n^b(\vec{r}_b) e^{i \vec{v} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r}, \quad (5.9)$$

$$s_{nm}^{ba} = \int \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \phi_m^a(\vec{r}_a) e^{-i \vec{v} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r}, \quad (5.10)$$

$$u_{mn}^{ab} = \int \phi_m^{a*}(\vec{r}_a) \left[ -\frac{Z_a}{r_a} \right] \phi_n^b(\vec{r}_b) e^{i \vec{v} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r}, \quad (5.11)$$

$$u_{nm}^{ba} = \int \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \left[ -\frac{Z_b}{r_b} \right] \phi_m^a(\vec{r}_a) e^{-i \vec{v} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r}, \quad (5.12)$$

$$u_{mm}^{aa} = \int \phi_m^{a*}(\vec{r}_a) \left[-\frac{Z_b}{r_b}\right] \phi_m^a(\vec{r}_a) d^3\vec{r}, \quad (5.13)$$

$$u_{nn}^{bb} = \int \phi_n^{b*}(\vec{r}_b) \left[-\frac{Z_a}{r_a}\right] \phi_n^b(\vec{r}_b) d^3\vec{r}. \quad (5.14)$$

連立方程式(5.7)~(5.8)は次のように書き換えることができる。

$$i(1-s^2)\dot{a}_m = \{u_{mm}^{aa} - s_{mn}^{ab} u_{nm}^{ba}\} a_m + \{u_{mn}^{ab} - s_{mn}^{ab} u_{nn}^{bb}\} b_m e^{-i(\omega_n^b - \omega_m^a)t}, \quad (5.15)$$

$$i(1-s^2)\dot{b}_n = \{u_{nn}^{bb} - s_{nm}^{ba} u_{mn}^{ab}\} b_n + \{u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{ba} u_{mm}^{aa}\} a_m e^{-i(\omega_m^a - \omega_n^b)t}. \quad (5.16)$$

ここに,

$$s = |s_{mn}^{ab}| = |s_{nm}^{ba}|. \quad (5.17)$$

初期条件は

$$a_m(-\infty) = 1, \quad b_n(-\infty) = 0, \quad (5.18)$$

である。そこで、普通行われているように、任意の $t$ に対して、

$$b_n(t) \ll a_m(t) \quad (5.19)$$

と仮定して、式(5.15)の右辺第二項を無視すると、

$$a_m = \exp\left[-i \int_{-\infty}^t \frac{u_{mm}^{aa} - s_{mn}^{ab} u_{nm}^{ba}}{1-s^2} dt\right] \quad (5.20)$$

これを式(5.16)へ代入して、 $b_n$ について解くと次式が得られる。

$$b_n(t) = -i \int_{-\infty}^t \mu dt. \quad (5.21)$$

ただし、

$$\mu = \frac{u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{ba} u_{mm}^{aa}}{1-s^2} \exp[-i(\omega_m^a - \omega_n^b)t - i\delta], \quad (4.22)$$

$$\delta = \int_{-\infty}^t \frac{u_{mm}^{aa} - u_{nn}^{bb} - s_{mn}^{ab} u_{nm}^{ba} + s_{nm}^{ba} u_{mn}^{ab}}{1-s^2} dt. \quad (5.23)$$

電荷移動断面積は次のように与えられる。

$$\sigma = 2\pi \int_0^\infty |b_n(\infty)|^2 \rho d\rho. \quad (5.24)$$

ここで述べた近似法は条件(5.19)が示すように速い衝突( $v > 1$ )の場合にのみ適用できる。

さて、式(5.21)~(5.24)で与えられる近似法が、いままで述べて来た近似法とどういう関係にあるかを調べよう。そのために、 $Z = vt$ とおくと、

$$\frac{1}{2\mu} k_f^2 + \omega_n^b = \frac{1}{2\mu} k_i^2 + \omega_m^a \quad (5.25)$$

の関係から、

$$\begin{aligned} \omega_m^a - \omega_n^b &= \frac{1}{2\mu} (k_f^2 - k_i^2) \\ &= \frac{1}{2\mu} (k_f + k_i)(k_f - k_i) \\ &\approx v(k_f - k_i) \quad (\because \frac{k_i + k_f}{2\mu} \approx v) \end{aligned} \quad (5.26)$$

を得る。したがって、 $b(\infty)$  は次のように書き換えることができる。

$$-ib(\infty) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \times \frac{u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{ba} u_{mm}^{aa}}{1-s^2} \exp \left[ \frac{i}{v} \int_{-\infty}^Z \{ \epsilon_n^b(R') - \epsilon_m^a(R') \} dZ' \right], \quad (5.27)$$

ここに、 $R = \sqrt{\rho^2 + Z^2}$  で、

$$\epsilon_m^a(R) = \frac{u_{mm}^{aa} - s_{mn}^{ab} u_{nm}^{ba}}{1-s^2}, \quad \epsilon_n^b(R) = \frac{u_{nn}^{bb} - s_{nm}^{ba} u_{mn}^{ab}}{1-s^2} \quad (5.28)$$

[近似 I]

$\epsilon_m^a(R) = \epsilon_n^b(R) = s = 0$  とすると Bassel-Gerjuoy の近似 (式 3.26) が得られる。 $\epsilon_m^a(R)$   $\epsilon_n^b(R)$  は、2 状態近似における、エネルギーの摂動から生じたものである。 $1-s^2$  は、連立方程式 (5.7) ~ (5.8) から (5.15) ~ (5.16) への移行を見れば分かるように、 $\phi_m^a$  と  $\phi_n^b$  の非直交性を考慮したために生じたもので、Bassel-Gerjuoy の近似では無視されて、 $s=0$  とおかれている。

[近似 II]

近似 I において、平均ポテンシャル  $\bar{V}_i(\vec{R})$  を無視すると Jackson-Schiff の近似となる。すなわち、

$$u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{ba} u_{mm}^{aa} = u_{nm}^{ba} + \frac{Z_a Z_b}{R} s_{nm}^{ba} - \left( \frac{Z_a Z_b}{R} + u_{mm}^{aa} \right) s_{nm}^{ba}. \quad (5.29)$$

ここで、右辺第二項は

$$\left( \frac{Z_a Z_b}{R} + u_{mm}^{aa} \right) s_{nm}^{ba} = \int \phi_n^{b*} \left( \frac{Z_a Z_b}{R} + u_{mm}^{aa} \right) \phi_m^a e^{i\vec{v}\vec{r}} d^3\vec{r} \quad (5.30)$$

となり、さらに ( ) の中は

$$\begin{aligned} \frac{Z_a Z_b}{R} + u_{mm}^{aa} &= \int \phi_m^{a*} \left( \frac{Z_a Z_b}{R} - \frac{Z_b}{r_b} \right) \phi_m^a d^3\vec{r} \\ &= \int \phi_m^{a*} V_i(\vec{r}_b, \vec{R}) \phi_m^a d^3\vec{r} \\ &= \bar{V}_i(\vec{R}) \end{aligned} \quad (5.31)$$

となるから、式 (5.29) は

$$u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{ba} u_{mm}^{aa} = \int \phi_n^{b*} \{ V_i(\vec{r}_b, \vec{R}) - \bar{V}_i(\vec{R}) \} \phi_m^a e^{i\vec{v}\vec{r}} d^3\vec{r} \quad (5.32)$$

となる。従って  $\bar{V}_i(\vec{R})$  を無視すると、

$$-ib(\infty) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \int \phi_n^{b*} V_i(\vec{r}_b, \vec{R}) \phi_m^a e^{-i\vec{v}\vec{r}} d^3\vec{r} \quad (5.33)$$

となり、式 (2.36) において  $V_f$  を  $V_i$  におきかえた式と同じになる。Born 近似の場合には、 $V_f$ 、 $V_i$  のいずれを用いても結果は同じになることが証明できる (附録 G)。

[近似 III]

近似 II において、さらに核-核間相互作用  $Z_a Z_b / R$  を無視すると Brinkman-Kramers 近

似になる。

### 5.1 McCarroll の計算

McCarroll は衝突径数法で共鳴電荷移動

$$(I) \quad p+H(1s) \rightarrow H(1s)+p$$

について計算した。<sup>25)</sup> 彼は連立方程式 (5.15)~(5.16) から故めて、

$$i(1-s^2)\dot{a} = a(c-sh)+b(h-sc), \quad (5.34)$$

$$i(1-s^2)\dot{b} = b(c-sh)+a(h-sc), \quad (5.35)$$

とおいた。ただし、

$$a = a_{1s}, \quad b = b_{1s}, \quad (5.36)$$

$$s = s_{1s}^{ab} = s_{1s}^{ba}, \quad (5.37)$$

$$c = u_{1s}^{aa} = u_{1s}^{bb}, \quad (5.38)$$

$$h = u_{1s}^{ba} = u_{1s}^{ab}, \quad (5.39)$$

であり、さらに  $\epsilon_{1s}^a = \epsilon_{1s}^b$  を用いた。ここで、

$$x^+(t) = a(t) + b(t), \quad (5.40)$$

$$x^-(t) = a(t) - b(t), \quad (5.41)$$

なる量  $x^\pm$  を導入すると、連立方程式 (5.34)~(5.35) は次のように分離することができる。

$$i(1-s^2)\dot{x}^+ = (c-sh)x^+ + (h-sc)x^+, \quad (5.42)$$

$$i(1-s^2)\dot{x}^- = (c-sh)x^- - (h-sc)x^-. \quad (5.43)$$

これらの式は、 $a(-\infty)=1$ ,  $b(-\infty)=0$  として、次のように積分することができる。

$$x^\pm(t) = \exp\left[-i \int_{-\infty}^t \frac{(c-sh) \pm (h-sc)}{1-s^2} dt\right]. \quad (5.45)$$

したがって、 $b(t)$  として次式を得る。

$$b(t) = -i \exp\left[-i \int_{-\infty}^t \frac{c-sh}{1-s^2} dt\right] \sin\left[\int_{-\infty}^t \frac{h-sc}{1-s^2} dt\right]. \quad (5.46)$$

速い衝突の場合には

$$\frac{h-sc}{1-s^2} \ll 1 \quad (5.47)$$

であるから、

$$b(t) \simeq -i \int_{-\infty}^t \frac{h-sc}{1-s^2} dt \quad (\text{速い衝突}) \quad (5.48)$$

となって、これはBatesによって得られた式 (5.21)~(5.23) に一致する(ただし、共鳴電荷移動の場合  $\omega_m^a = \omega_n^b$ ,  $\delta=0$  となることに注意)。式 (5.46) を導出するのに、条件 (5.19) を用いていないので、低速の衝突 ( $v < 1$ ) にも適用することができる。

断面積は次のようになる。

$$\begin{aligned}\sigma &= 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho |b(\infty)|^2 \\ &= 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \sin^2 \int_{-\infty}^\infty \frac{h-cs}{1-s^2} \frac{dZ}{v}.\end{aligned}\quad (5.49)$$

ただし,

$$s(-Z) = s(Z), \quad \text{Im } s(Z) = 0, \quad (5.50)$$

$$c(-Z) = c(Z), \quad \text{Im } c(Z) = 0, \quad (5.51)$$

$$h(-Z) = h^*(Z), \quad (5.52)$$

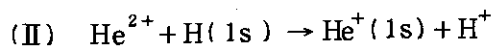
$$\therefore \text{Im} \int_{-\infty}^\infty \frac{c-sh}{1-s^2} \frac{dZ}{v} = \text{Im} \int_{-\infty}^\infty \frac{h-cs}{1-s^2} \frac{dZ}{v} = 0, \quad (5.53)$$

を用いた。

$\rho |b(\infty)|^2$  を Fig. 5~6 および Fig. 8~9 に, 断面積  $\sigma$  を Fig. 7 に示した。BK 近似とBDJS 近似との比較をすると Fig. 10 のようになる。

## 5.2 Mc Carroll - Mc Elroy の計算

Mc Carroll と Mc Elroy は式 (5.21) ~ (5.24) を用いて, 非共鳴電荷移動

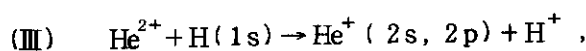


について計算を行った。<sup>26)</sup> 彼らは歪曲の効果  $\delta$  (式 (5.23)) を取り入れた場合とそれを無視した場合の断面積を計算し, BK 近似またはBDJS 近似によって得られた断面積と比較した (Fig. 11)。その結果次のように説明している。

- 1) 歪曲位相  $\delta$  を取り入れた断面積  $Q_D^A$  は, 広いエネルギー範囲にわたって,  $\delta$  を無視した断面積  $Q^A$  よりかなり大きい。
- 2) BK 近似による断面積  $Q^{ne}$  及びBDJS 近似による断面積  $Q^{ne+nn}$  と  $Q^A$  を比較すると, 低エネルギーといく分高いエネルギー範囲では,  $Q^{ne+nn}$  は  $Q^A$  より大きく, 高エネルギー側では小さくなるが,  $Q^{ne}$  は, エネルギーが 50~1600 keV で,  $Q^A$  より常に大きい。
- 3) 対称共鳴の場合 (Mc Carroll の計算参照<sup>25)</sup>) と同じように,  $Q^{ne+nn}$  と  $Q^A$  は, 高エネルギー極限で, 同じ減衰の割合を示して, 異った値に収束するが,  $Q^{ne}$  に収束する様子は極めてゆっくりである。1600 keV でも, 2 倍の違いがある。

## 5.3 Mc Elroy の計算

Mc Elroy<sup>13)</sup> は accidental resonance process



および, non-resonance process

注) Jackson と Schiff によって示された如く,<sup>12)</sup> 高エネルギー極限で

$$Q^{ne+nn}/Q^{ne} = 0.661$$

であることを意味する。

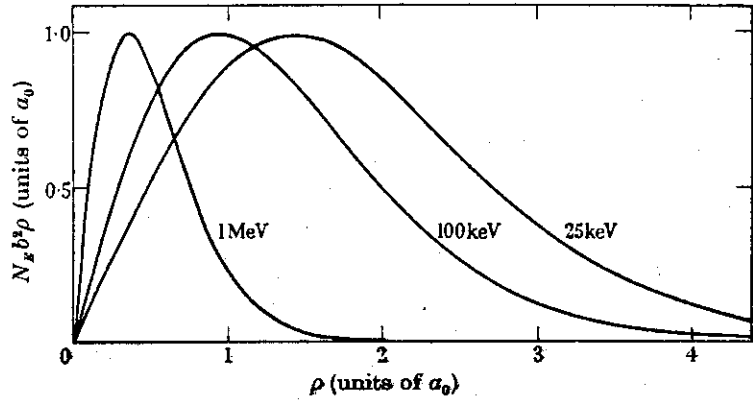


Fig.8 Graph of  $N_E b^2 \rho$  against  $\rho$  in units of  $a_0$ , for energies 25, 100 and 1000 keV.  $N_E$  is a normalizing factor depending only on the energy and is so chosen that the maximum of each curve is unity. For 25, 100 and 1000 keV,  $N_E$  takes the values  $1.518$ ,  $3.153 \times 10^1$  and  $6.010 \times 10^3$ , respectively. (McCarroll)

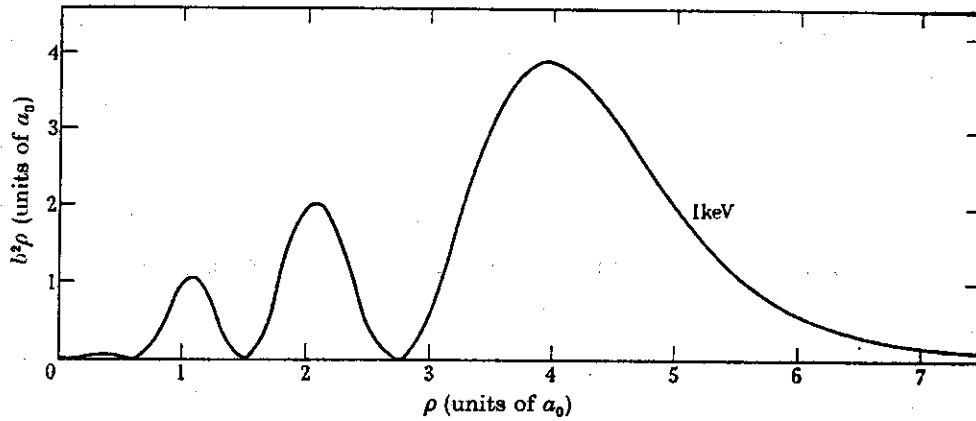


Fig. 9 Graph of  $b^2 \rho$  against  $\rho$  in units of  $a_0$  for an energy of 1 keV. (McCarroll)

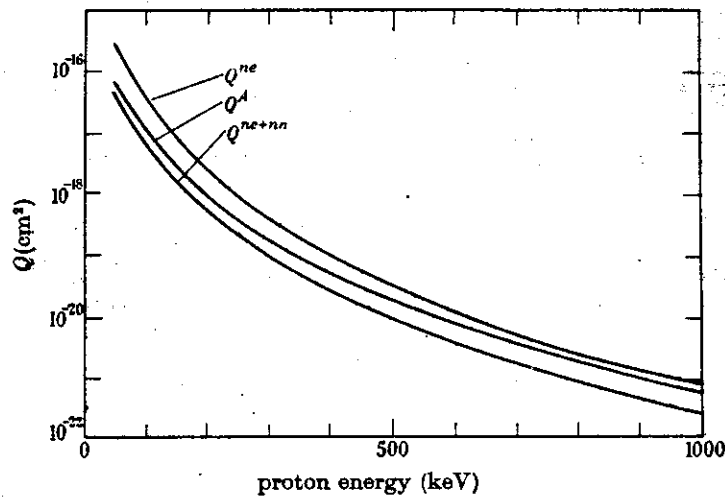


Fig.10 Electron capture cross-sections in units of  $\text{cm}^2$  for reaction (2), comparing  $Q^{ne}$  and  $Q^{ne+nn}$  with  $Q^A$  in the range of proton energies 50 to 1000 keV. (McCarroll)

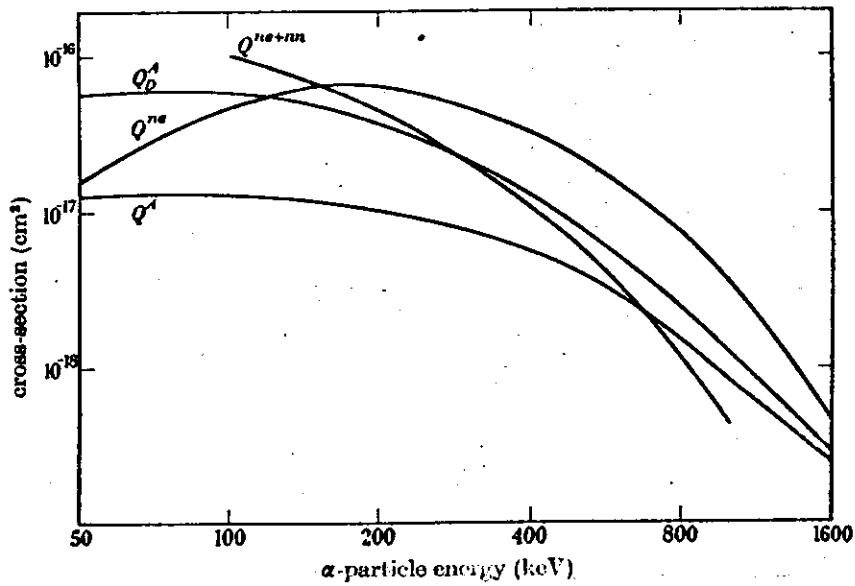


Fig.11 Cross-sections for  $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+(1s) + \text{H}^+$ :  $Q_{ne}$ ,  $Q_{ne+nn}$  earlier approximations in which no account is taken of distortion or non-orthogonality with ne and ne+nn interactions;  $Q^A$ ,  $Q^D$  refined approximation allowing for non-orthogonality, the former ignoring, the latter including, distortion. Schiff (1953) does not give a direct graph of  $Q_{ne+nn}$  and consequently our reproduction of his numerical results may not be very accurate. (McCarroll and McElroy)

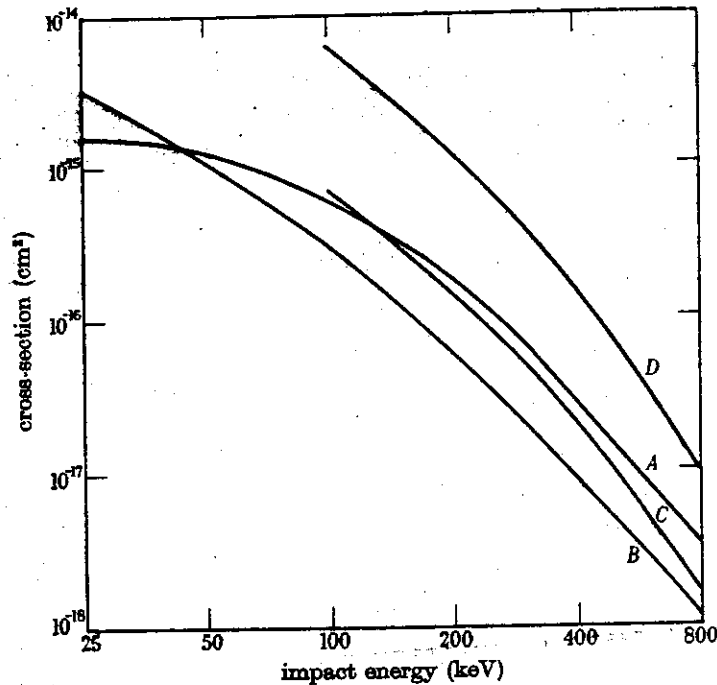
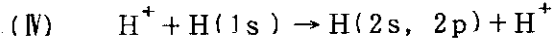


Fig.12 Cross-sections for reactions  $\text{He}^{++} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+(2) + \text{H}^+$ . A, orthogonal approximation with distortion; B, orthogonal approximation without distortion; C, (ne+nn) interaction approximation; D, ne interaction approximation. (McElroy)



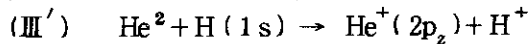


にBatesの方法(式(5.21)~(5.24))を適用し、得られた結果をBK近似およびBDJS近似と比較した。Fig. 12に、これらの方法で得られた過程(III)の断面積の和を示した。Fig. 13における、各々の曲線は

- A : Batesの方法で歪曲位相 $\delta$ を取り入れた場合( $Q_D^A$ )
- B : " を無視した場合( $Q^A$ )
- C : BDJS近似( $Q^{ne+nn}$ )
- D : BK近似( $Q^{ne}$ )

を示す。彼は断面積のエネルギー依存性について次のように説明している。Accidental resonance process (III) について、

- 1) 過程(II)の場合と同様、歪曲 $\delta$ の断面積への効果は大きい。それは中間から高エネルギーの領域で断面積を大きくし、速度 $v$ が零に向うに従って急激に断面積を零にする。
- 2) 他の近似(上述A, B, C)では、対称共鳴過程(I)と同様に、速度 $v$ が小さくなるに従って、断面積は無限に大きくなる。
- 3) 近似AとBは高エネルギー極限でBK近似に近づく。
- 4) 過程(II)の場合と比べ、エネルギーが高くなるに従って、断面積は急激に小さくなる。従って、十分高いエネルギーでは、電子捕獲はほとんど基底状態に対し行われる。



の $|p|b(\infty)|^2$ を、エネルギーが25, 50, 100 keVの場合について、示した。

$|p|b(\infty)|^2$ が最大になる衝突径数 $\rho$ はエネルギーが高くなるに従って小さくなる。これは、他の電荷移動過程についても同様に言えることである。

Fig. 14に、過程(III)の各状態への電子捕獲断面積の計算値とFite et al. によって得られた実験値<sup>10)</sup>を示した。Fig. 14には、さらに次のようにして得られた全断面積の理論値をも示した。

$$\begin{aligned} Q_D^A(\text{total}) &= Q_D^A(1) + Q_D^A(2) + Q_D^A(2) \frac{Q^{ne}(2)}{Q^{ne}(2)} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{27}{n^2} \\ &= Q_D^A(1) + Q_D^A(2) + 21Q_D^A(2) \frac{Q^{ne}(3)}{Q^{ne}(2)} \end{aligned} \quad (5.54)$$

ただし、 $Q_D^A(n)$ ,  $Q^{ne}(n)$ は主量子数が $n$ であるすべての状態への電子捕獲断面積で、それぞれ上述の近似AとDによって求められた量である。

Fig. 15には、過程(IV)の断面積の和と過程(I)の断面積の比を示した。この図には、

- (イ) Batesの方法で歪曲位相 $\delta$ を取り入れた場合( $Q_D^A$ )
- (ロ) " を無視した場合( $Q^A$ )
- (ハ) BK近似( $Q^{ne}$ )

について示してある。全断面積は、この場合、次のように評価されている。

$$\begin{aligned}
Q_D^A(\text{total}) &\approx Q_D^A(1) + Q_D^A(2) + \sum_{n=3}^{\infty} Q_D^A(2) \frac{Q^{ne}(n)}{Q^{ne}(2)} \\
&= Q_D^A(1) + Q_D^A(1 + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{2^8}{n^2}) \\
&= Q_D^A(1) + 1.62 Q_D^A(2). \tag{5.55}
\end{aligned}$$

比  $Q_D^A(\text{total})/Q_D^A(1)$  のエネルギー依存性を Fig. 7 の右上に示した。

Fig. 18~19 に, H(2s) および H(2p) 状態への電子捕獲断面積を Bayfield<sup>27)</sup> と Ryding et al.<sup>28)</sup> および Stebbings et al.<sup>29)</sup> と Gaily et al.<sup>30)</sup> によって得られた実験値と共に示した。

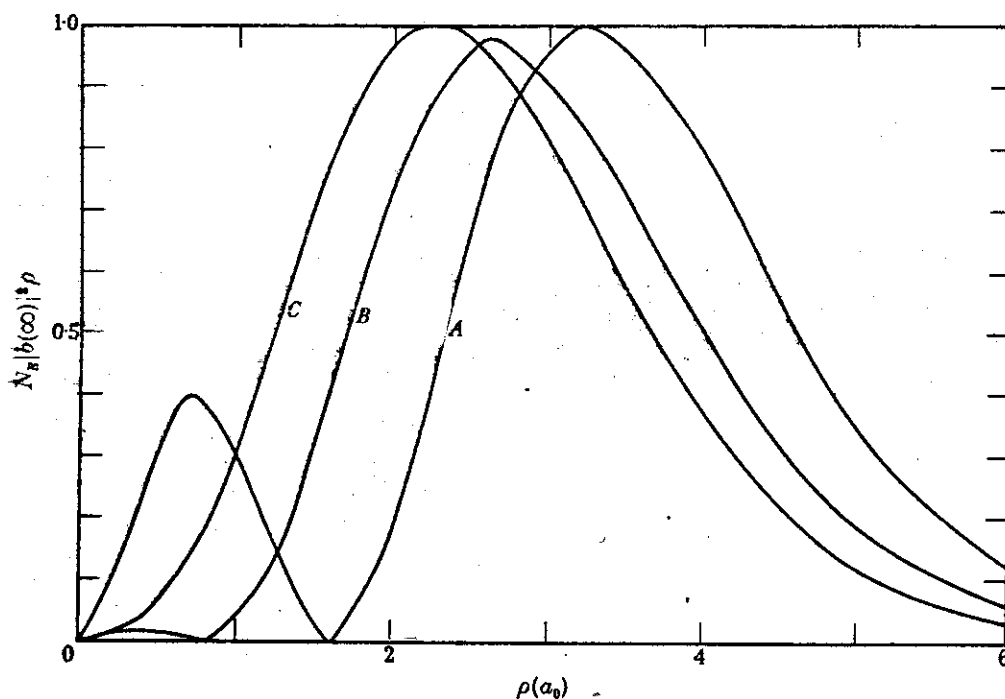


Fig.13 Graph of  $N_E b^2 \rho$  against  $\rho$  in units of  $a_0$  and  $b^2$  is the probability of capture occurring for reaction (22).  $N_E$  is a normalizing factor depending only on the energy and so chosen that the maximum of each curve is unity. For A, B, and C corresponding to 25, 50 and 100 keV,  $N_E$  takes the values 0.72, 0.77 and 1.52, respectively. (McElroy)

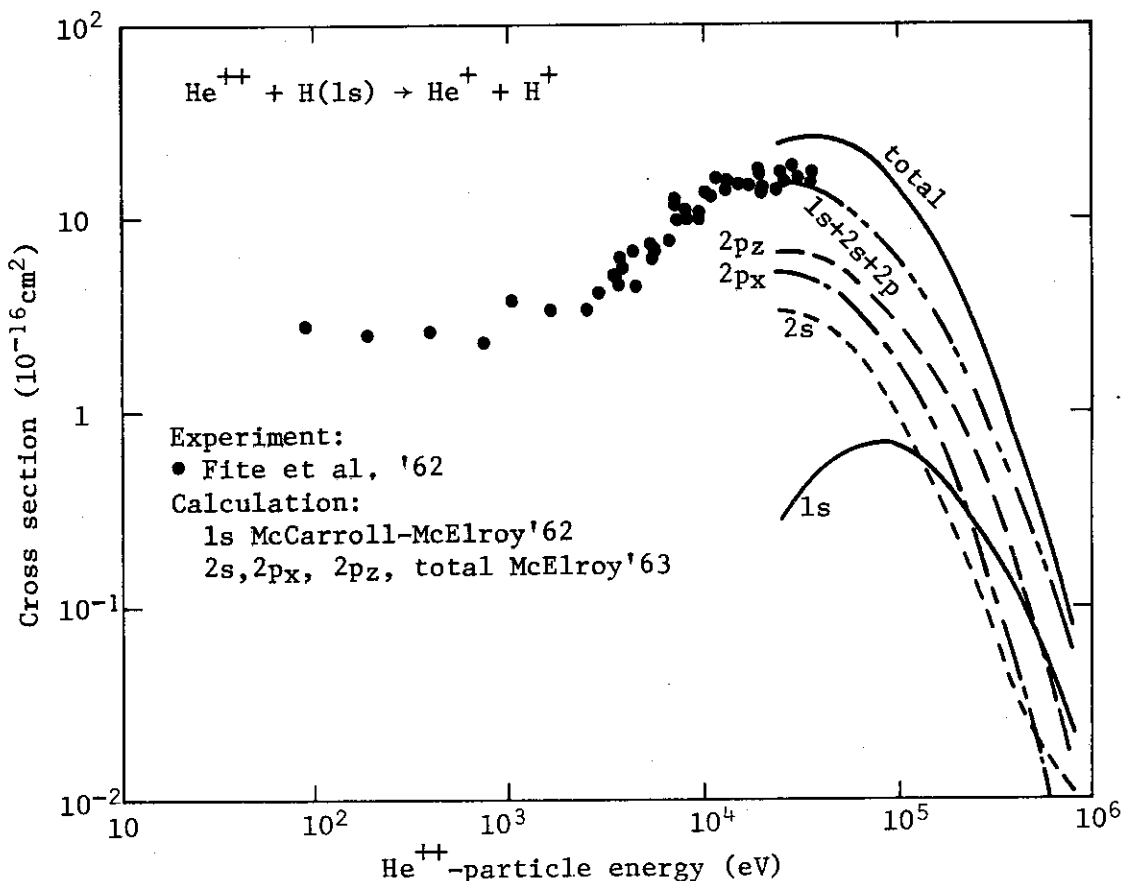


Fig. 14 Cross section for  $\text{He}^{++} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+(n\ell x, n\ell y) + \text{H}^+$

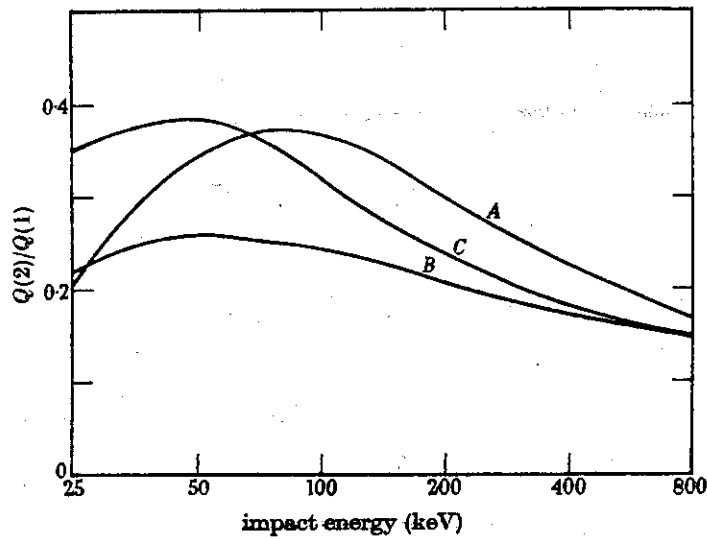


Fig.15 Graph of the ratio  $Q(2)/Q(1)$  against energy where  $Q(2)$  is the cross-section for  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(2) + H^+$  and  $Q(1)$  is the corresponding cross-section for capture into the ground state. A, orthogonal approximation with distortion; B, orthogonal approximation without distortion; C, no interactions approximation. (McElroy)

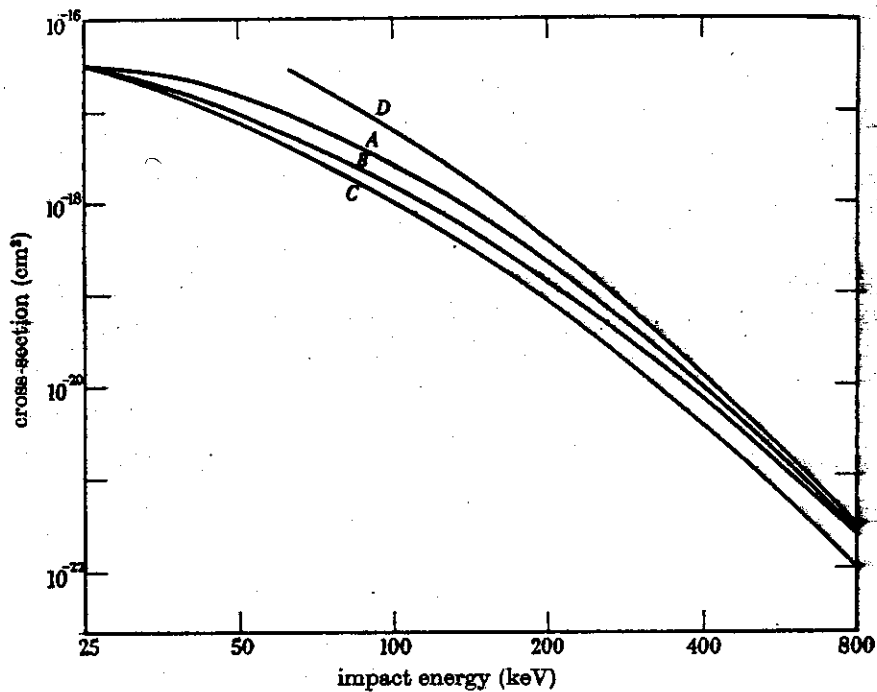


Fig.16 Cross-sections in  $cm^2$  for reaction  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(2s) + H^+$ . A,B,C,D, refer to the different approximations as in Fig.12. (McElroy)

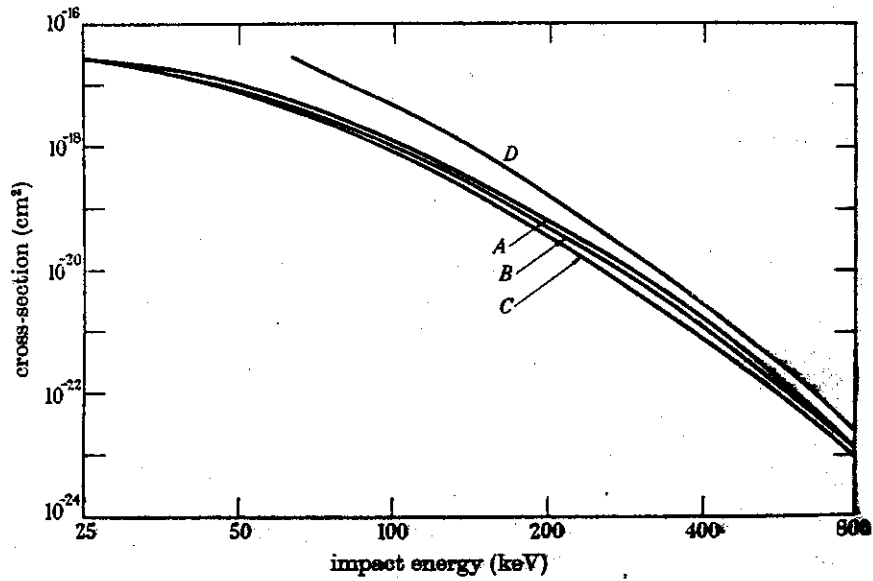
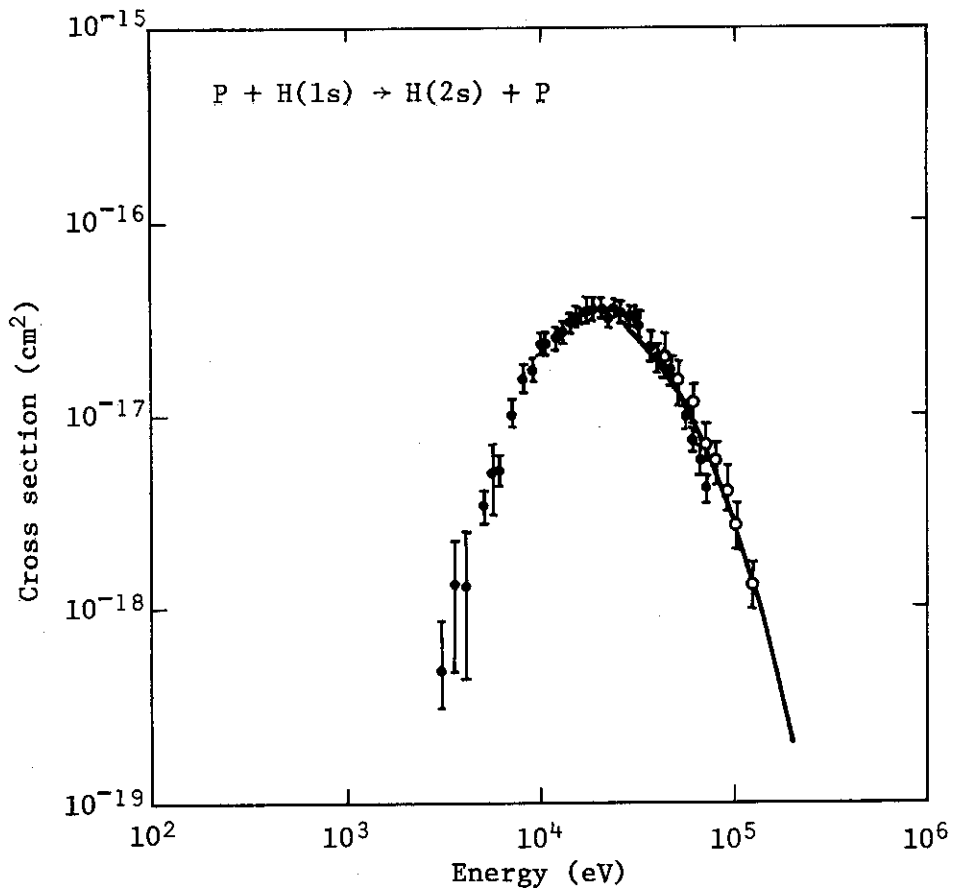


Fig.17 Cross-sections for  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(2p) + H^+$ , in  $cm^2$ . A,B,C,D are as in Fig. 12 and Fig. 16 (McElroy)



Experiment:

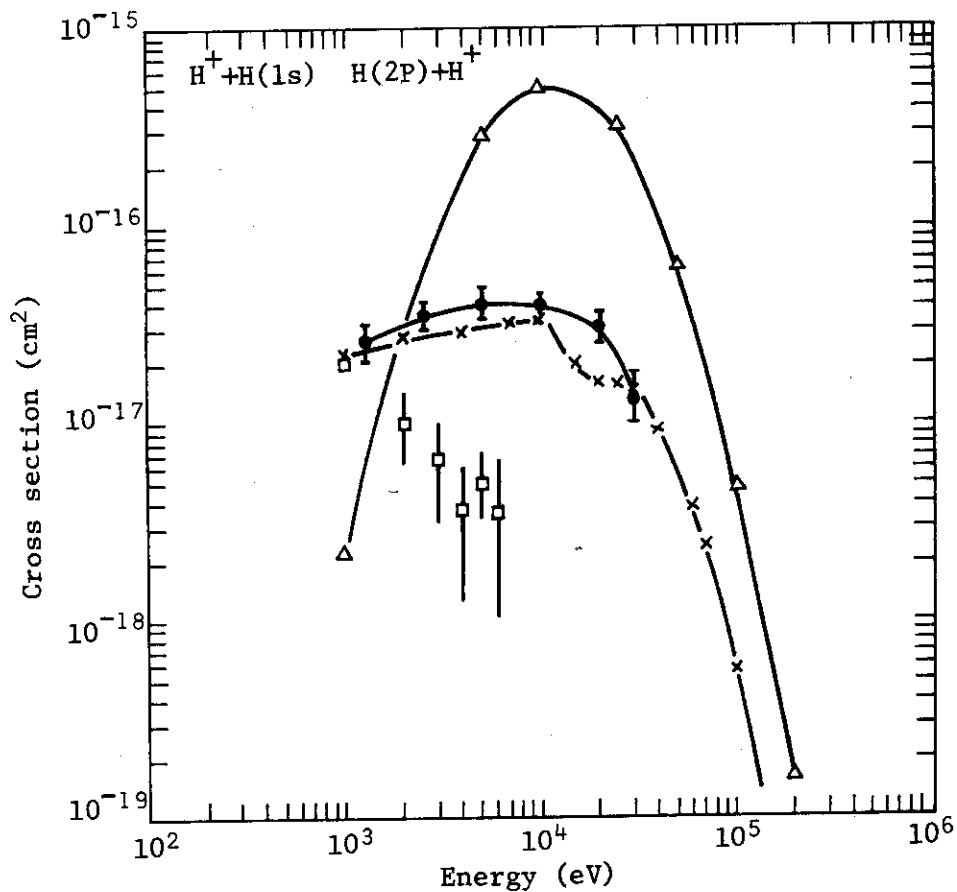
⊖ Bayfield'69 ( $\pm 25\%$ )

○ Ryding et al.'66 normalized by Gaily

Calculation:

— McElroy'63

Fig. 18 Charge transfer cross section for  $P + H(1s) \rightarrow H(2s) + P$



- ◆ Stebbings et al.'65 corrected by Young et al.
- ◻ Gaily et al.' quated in Cheshire et al.'s paper '70
- △— Brinkman-Kramers approx.
- x— Cheshire et al.'70

Fig. 19 Charge transfer cross section for  $H^+ + H(1s) \rightarrow H(2p) + H^+$

## 附 録

## A. 位置ベクトルの関係

位置ベクトル  $\vec{R}_i, \vec{R}_f, \vec{r}_a, \vec{r}_b$  と  $\vec{R}, \vec{r}$  との関係を導く (Fig. 1 参照)。

$$\vec{r}_a = \vec{r} + \frac{M_b}{M_a + M_b} \vec{R}, \quad \vec{r}_b = \vec{r} - \frac{M_a}{M_a + M_b} \vec{R}, \quad (\text{A1})$$

$$\begin{aligned} \vec{R}_i &= \vec{R} - \frac{1}{M_a + 1} \vec{r}_a = \vec{R} - \frac{1}{M_a + 1} \left( \vec{r} + \frac{M_b}{M_a + M_b} \vec{R} \right) \\ &= \left( 1 - \frac{M_b}{(M_a + 1)(M_a + M_b)} \right) \vec{R} - \frac{1}{M_a + 1} \vec{r} \\ &= \frac{M_a(M_a + M_b) + M_a}{(M_a + 1)(M_a + M_b)} \vec{R} - \frac{1}{M_a + 1} \vec{r} = \frac{M_a(M_a + M_b + 1)}{(M_a + 1)(M_a + M_b)} \vec{R} - \frac{1}{M_a + 1} \vec{r} \\ &= \frac{M_a + M_b + 1}{M_b(M_a + 1)} \left( \frac{M_a M_b}{M_a + M_b} \vec{R} - \frac{M_b}{M_a + M_b + 1} \vec{r} \right) \\ &= \frac{1}{\mu_i} (\mu \vec{R} - \eta_a m \vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

ただし,  $\mu_i = M_b(M_a + 1)/(M_a + M_b + 1)$  を用い, 次の記号を導入した。

$$\mu = \frac{M_a M_b}{M_a + M_b}, \quad \eta_a = \frac{M_b}{M_a + M_b}, \quad m = \frac{M_a + M_b}{M_a + M_b + 1}. \quad (\text{A3})$$

同様に,

$$\begin{aligned} \vec{R}_f &= \vec{R} + \frac{1}{M_b + 1} \vec{r}_b = \vec{R} + \frac{1}{M_b + 1} \left( \vec{r} - \frac{M_a}{M_a + M_b} \vec{R} \right) \\ &= \left( 1 - \frac{M_a}{(M_b + 1)(M_a + M_b)} \right) \vec{R} + \frac{1}{M_b + 1} \vec{r} \\ &= \frac{M_b(M_a + M_b + 1)}{(M_b + 1)(M_a + M_b)} \vec{R} + \frac{1}{M_b + 1} \vec{r} \\ &= \frac{M_a + M_b + 1}{M_a(M_b + 1)} \left( \frac{M_a M_b}{M_a + M_b} \vec{R} + \frac{M_a}{M_a + M_b + 1} \vec{r} \right) \\ &= \frac{1}{\mu_f} (\mu \vec{R} + \eta_b m \vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

ただし,  $\mu_f = M_a(M_b + 1)/(M_a + M_b + 1)$  を用い, 次の記号を導入した。

$$\eta_b = \frac{M_a}{M_a + M_b}. \quad (\text{A5})$$

次に Jacobian を求める。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\vec{R}_f, \vec{r}_b)}{\partial(\vec{R}, \vec{r})} &= \begin{vmatrix} \frac{\mu}{\mu_f} - \eta_b & \\ \eta_b m & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{\mu_f} (\mu + \eta_b^2 m) \\ &= \frac{M_a + M_b + 1}{M_a (M_b + 1)} \left[ \frac{M_a M_b}{M_a + M_b} + \left( \frac{M_a}{M_a + M_b} \right)^2 \frac{M_a + M_b}{M_a + M_b + 1} \right] \\ &= \frac{M_a + M_b + 1}{(M_a + M_b)(M_b + 1)} \left[ M_b + \frac{M_a}{M_a + M_b + 1} \right] \\ &= \frac{M_b (M_a + M_b + 1) + M_a}{(M_a + M_b)(M_b + 1)} = \frac{(M_a + M_b) M_b + M_b + M_a}{(M_a + M_b)(M_b + 1)} \\ &= \frac{(M_a + M_b)(M_b + 1)}{(M_a + M_b)(M_b + 1)} = 1. \end{aligned}$$

故に,

$$\frac{\partial(\vec{R}_f, \vec{r}_b)}{\partial(\vec{R}, \vec{r})} = 1. \tag{A6}$$

B.  $\sqrt{\rho' \rho} \mu^2 v_f^2 \int_0^1 \theta d\theta J_0(\mu v_f \rho \theta) J_0(\mu v_f \rho' \theta) \approx \delta(\rho - \rho')$  の証明

左辺をIとおく。

$$\begin{aligned} I &= \sqrt{\rho \rho'} \int_0^{\mu v_f} \lambda d\lambda J_0(\lambda \rho) J_0(\lambda \rho') \\ &= \sqrt{\rho \rho'} \frac{\mu v_f}{\rho^2 - \rho'^2} [\rho J_1(\mu v_f \rho) J_0(\mu v_f \rho') - \rho' J_0(\mu v_f \rho) J_1(\mu v_f \rho')] \tag{B1} \end{aligned}$$

(ref. 2 の p. 190 参照)。

となるが、われわれの扱う問題では  $v_f \geq 0.1$  (Born 近似は  $v_f \gg 1$  の場合以外は成り立たない) であり、また  $\mu \geq 1000$  であるから  $\mu v_f \geq 100$  である。このとき、次の漸近形を用いることができる。  $|Z| \rightarrow \infty$  のとき、

$$J_0(Z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \cos\left(Z - \frac{\pi}{4}\right), \quad J_1(Z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \sin\left(Z - \frac{\pi}{4}\right). \tag{B2}$$

(ref. 2 の p. 154)

これを式(B1)に用いると、次のようになる。

$$\begin{aligned} I &= \frac{\sqrt{\rho \rho'} \mu v_f}{\rho^2 - \rho'^2} \frac{2}{\pi \mu v_f} \sqrt{\frac{1}{\rho \rho'}} [\rho \sin\left(\mu v_f \rho - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\mu v_f \rho' - \frac{\pi}{4}\right) \\ &\quad - \rho' \cos\left(\mu v_f \rho - \frac{\pi}{4}\right) \sin\left(\mu v_f \rho' - \frac{\pi}{4}\right)] \\ &= \frac{1}{\rho^2 - \rho'^2} \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \frac{1}{2} [\rho (\sin \mu v_f \rho - \cos \mu v_f \rho) (\cos \mu v_f \rho' + \sin \mu v_f \rho') \\ &\quad - \rho' (\cos \mu v_f \rho + \sin \mu v_f \rho) (\sin \mu v_f \rho' - \cos \mu v_f \rho')] \\ &= \frac{1}{\rho^2 - \rho'^2} \cdot \frac{1}{\pi} \cdot [(\rho + \rho') (\sin \mu v_f \rho' - \cos \mu v_f \rho' - \cos \mu v_f \rho \sin \mu v_f \rho')] \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 & +(\rho-\rho')(\sin \mu v_f \rho \sin \mu v_f \rho' - \cos \mu v_f \rho \cos \mu v_f \rho')] \\
 & = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\sin \mu v_f (\rho-\rho')}{\rho-\rho'} - \frac{\cos \mu v_f (\rho+\rho')}{\rho+\rho'} \right] \\
 & \approx \frac{1}{\pi} \frac{\sin \mu v_f (\rho-\rho')}{\rho-\rho'} \quad (\because \mu v_f \gg 1) \tag{B3}
 \end{aligned}$$

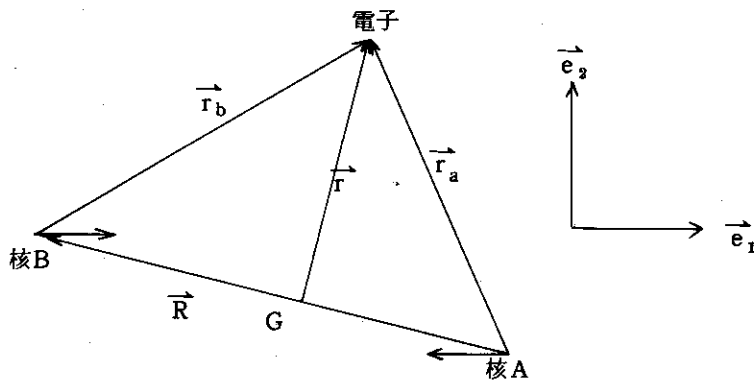
$$\approx \delta(\rho-\rho') \quad (\because \mu v_f \gg 1) \tag{B4}$$

すなわち、式(B4)は、式(B3)より

$$|\rho-\rho'| < \frac{\pi}{\mu v_f}$$

の範囲だけが効いて来るということから理解できる。数値計算によって、I を求めグラフで示した例が ref. 3 に報告されている。

C.  $s_{mn}^{ba}, u_{mn}^{ba}, t_{mn}^{ba}, s_{mn}^{ab}, u_{mn}^{ab}, t_{mn}^{ab}$  の計算 <sup>(25), (26), (13)</sup>



第C1図 Gは核A, Bの重心。  $\vec{e}_1$  は核Bの進行方向の、 $\vec{e}_2$  は衝突面内で $\vec{e}_1$ に垂直方向の単位ベクトル

原子Aの量子化軸は、その進行方向( $-\vec{e}_1$ )にとり、原子Bのそれは、同じくその進行方向( $\vec{e}_1$ )にとる。このとき、それぞれの波動関数(1s, 2s, 2p<sub>z</sub>, 2p<sub>x</sub>)は次のように与えられる。

$$\phi_{1s}^a = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_a^{\frac{3}{2}} 2 e^{-Z_a r_a}, \tag{C1}$$

$$\phi_{2s}^a = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_a^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{Z_a}{2} r_a} \left[ 1 - \frac{Z_a}{2} r_a \right], \tag{C2}$$

$$\phi_{2p_z}^a = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_a^{\frac{3}{2}} \frac{Z_a}{2\sqrt{2}} e^{-\frac{Z_a}{2} r_a} (-\vec{e}_1 \cdot \vec{r}_a), \tag{C3}$$

$$\phi_{2p_x}^a = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_a^{\frac{3}{2}} \frac{Z_a}{2\sqrt{2}} e^{-\frac{Z_a}{2} r_a} (-\vec{e}_2 \cdot \vec{r}_a), \tag{C4}$$

$$\phi_{1s}^b = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_b^{\frac{3}{2}} 2 e^{-Z_b r_b}, \quad (C5)$$

$$\phi_{2s}^b = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_b^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{Z_b}{2} r_b} \left[ 1 - \frac{Z_b}{2} r_b \right], \quad (C6)$$

$$\phi_{2p_z}^b = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_b^{\frac{3}{2}} \frac{Z_b}{2\sqrt{2}} e^{-\frac{Z_b}{2} r_b} (\vec{e}_1 \cdot \vec{r}_b), \quad (C7)$$

$$\phi_{2p_x}^b = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Z_b^{\frac{3}{2}} \frac{Z_b}{2\sqrt{2}} e^{-\frac{Z_b}{2} r_b} (\vec{e}_2 \cdot \vec{r}_b), \quad (C8)$$

これらの波動関数は次の形をしている。

$$\phi^a = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} b_1 e^{-a_1 r_a} g_1(\vec{r}_a), \quad (C9)$$

$$\phi^b = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} b_2 e^{-a_2 r_b} g_2(\vec{r}_b). \quad (C10)$$

求める積分

$$S_{mn}^{ba} = \int e^{-i\nu \vec{e}_1 \cdot \vec{r}} \phi^b \phi^a d^3\vec{r}, \quad (C11)$$

$$U_{mn}^{ba} = \int e^{-i\nu \vec{e}_1 \cdot \vec{r}} \phi^b \left( -\frac{Z_b}{r_b} \right) \phi^a d^3\vec{r}, \quad (C12)$$

$$t_{mn}^{ba} = -i \frac{M_b}{M_a + M_b} \nu \int e^{-i\nu \vec{e}_1 \cdot \vec{r}} \phi^b (\vec{e}_1 \cdot \vec{\nabla}_r) \phi^a d^3\vec{r}, \quad (C13)$$

は次の形に表わすことができる。

$$I^{ba} = \int e^{-i\nu \vec{e}_1 \cdot \vec{r}} \phi^b V \phi^a d^3\vec{r}. \quad (C14)$$

式(C9)~(C10)を(C14)へ代入すると次のようになる。

$$I^{ba} = \frac{b_1 b_2}{4\pi} \int F e^{-a_1 r_a - a_2 r_b - i\nu \vec{e}_1 \cdot \vec{r}} d^3\vec{r}. \quad (C15)$$

ただし、

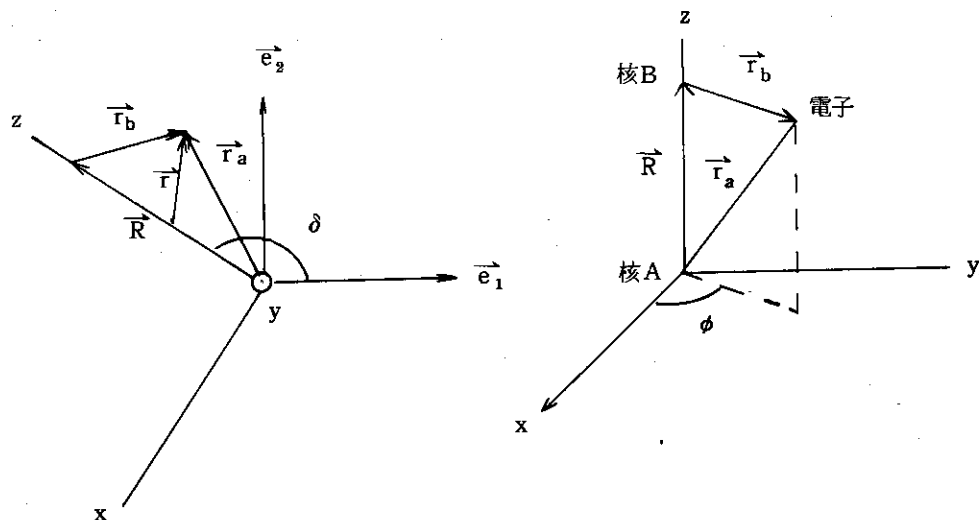
$$F = g_2(\vec{r}_b) V g_1(\vec{r}_a). \quad (C16)$$

ここで、第C2図に示すような、ベクトル $\vec{R}$ の方向にz軸を、これと直角で $\vec{R}$ と $\vec{e}_1$ を含む面内にx軸をもつデカルト座標を導入する。 $\vec{e}_1$ と $\vec{R}$ の間の角を $\delta$ とする。こうすると、

$$\vec{e}_1 = (-\sin \delta, 0, \cos \delta), \quad (C17)$$

$$\vec{e}_2 = (\cos \delta, 0, \sin \delta), \quad (C18)$$

となる。故に、



第C2図 電子のデカルト座標

$$\vec{e}_1 \vec{r}_a = -x \sin \delta + z \cos \delta, \quad (C19)$$

$$\vec{e}_2 \vec{r}_b = x \cos \delta + z \sin \delta. \quad (C20)$$

次に、回転楕円体座標,  $(\lambda, \mu, \phi)$  を導入する。

$$x = \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \cos \phi \cdot \frac{R}{2}, \quad (C21)$$

$$y = \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \sin \phi \cdot \frac{R}{2}, \quad (C22)$$

$$z = (1 - \lambda\mu) \frac{R}{2}. \quad (C23)$$

これらを用いると次のようになる。

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(\lambda, \mu, \phi)} = (\lambda^2 - \mu^2) \frac{R^3}{8}, \quad (C24)$$

$$r_a = (\lambda - \mu) \frac{R}{2}, \quad r_b = (\lambda + \mu) \frac{R}{2}, \quad (C25)$$

$$\vec{e}_1 \vec{r}_a = (1 - \lambda\mu) \frac{R}{2} \cos \delta - \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \cos \phi \sin \delta \cdot \frac{R}{2}, \quad (C26)$$

$$\vec{e}_2 \vec{r}_b = (1 - \lambda\mu) \frac{R}{2} \sin \delta + \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \cos \phi \cos \delta \cdot \frac{R}{2}, \quad (C27)$$

$$\begin{aligned} \vec{e}_1 \vec{r}_b &= \vec{e}_1 \vec{r}_a - \vec{e}_1 \vec{R} = \vec{e}_1 \vec{r}_a - R \cos \delta \\ &= -(1 + \lambda\mu) \frac{R}{2} \cos \delta - \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \cos \phi \sin \delta \cdot \frac{R}{2}, \end{aligned} \quad (C28)$$

$$\begin{aligned} \vec{e}_2 \vec{r}_b &= \vec{e}_2 \vec{r}_b - \vec{e}_2 \vec{R} = \vec{e}_2 \vec{r}_a - R \sin \delta \\ &= -(1 + \lambda\mu) \frac{R}{2} \sin \delta + \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \cos \phi \cos \delta \cdot \frac{R}{2}, \end{aligned} \quad (C29)$$

$$\int d^3 \vec{r} = \int_1^\infty d\lambda \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi (\lambda^2 - \mu^2) \frac{R^3}{8}, \quad (C30)$$

また,

$$\begin{aligned} \vec{e}_1 \vec{r} &= \vec{e}_1 \vec{r}_a - \frac{M_b}{M_a + M_b} \vec{e}_1 \vec{R} = \vec{e}_1 \vec{r}_a - \frac{M_b}{M_a + M_b} R \cos \delta \\ &= (1 - \lambda \mu) \frac{R}{2} \cos \delta - \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \cos \phi \sin \delta \cdot \frac{R}{2} - \frac{M_b}{M_a + M_b} R \cos \delta. \end{aligned} \quad (C 31)$$

$$\begin{aligned} I^{ba} &= \frac{b_1 b_2}{4\pi} \frac{R^3}{8} \int_1^\infty d\lambda \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi (\lambda^2 - \mu^2) F \exp \left( i \frac{M_b}{M_a + M_b} v R \cos \delta \right) \\ &\quad \times \exp \left[ -a_1 (\lambda - \mu) \frac{R}{2} - a_2 (\lambda + \mu) \frac{R}{2} \right. \\ &\quad \left. - i v \left\{ (1 - \lambda \mu) \frac{R}{2} \cos \delta - \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{R}{2} \cos \phi \sin \delta \right\} \right]. \end{aligned} \quad (C 32)$$

これを整理すると次のようになる。

$$\begin{aligned} I^{ba} &= \frac{b_1 b_2 R^3}{32\pi} \exp \left( i \frac{M_a - M_b}{M_a + M_b} \cdot \frac{vR}{2} \cos \delta \right) \int_1^\infty d\lambda \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi (\lambda^2 - \mu^2) F \\ &\quad \times \exp \left[ -(a_1 + a_2) \frac{R}{2} \lambda + (a_1 - a_2) \frac{R}{2} \mu \right. \\ &\quad \left. + i v \left\{ \lambda \mu \frac{R}{2} \cos \delta + \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{R}{2} \cos \phi \sin \delta \right\} \right] \end{aligned} \quad (C 33)$$

さらに、式 (C 25) ~ (C 29) を考慮すれば、

$$(\lambda^2 - \mu^2) F = CR^k \sum_{\ell=0}^L \sum_{m=-\ell}^M f_m^\ell(\lambda) P_m^\ell(\mu) \cos \ell \phi \quad (C 34)$$

と書き表わすことができる。ただし、 $c, k, L, M$  は定数で、 $P_m^\ell$  は Legendre の陪関係である。式 (C 34) を式 (C 33) を式 (C 33) へ代入して次式を得る。

$$\begin{aligned} I^{ba} &= \frac{b_1 b_2 CR^{k+2}}{32\pi} \exp \left( i \frac{M_a - M_b}{M_a + M_b} \cdot \frac{vR}{2} \cos \delta \right) \int_1^\infty d\lambda e^{-(a_1 + a_2) \frac{R}{2} \lambda} \\ &\quad \times \sum_{\ell=0}^L \sum_{m=-\ell}^M f_m^\ell(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi P_m^\ell(\mu) \cos \ell \phi \\ &\quad \times \exp \left[ (a_1 - a_2) \frac{R}{2} \mu + i v \left\{ \lambda \mu \frac{R}{2} \cos \delta + \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{R}{2} \cos \phi \sin \delta \right\} \right]. \end{aligned} \quad (C 35)$$

ここで、

$$\zeta \cos \phi = \left\{ v \lambda \cos \delta - i (a_1 - a_2) \right\} \frac{R}{2}, \quad (C 36)$$

$$\zeta \sin \phi = v \sqrt{\lambda^2 - 1} \sin \delta \cdot \frac{R}{2}, \quad (C 37)$$

とおけば、

$$\begin{aligned} I^{ba} &= \frac{b_1 b_2 CR^{k+2}}{32\pi} \exp \left( i \frac{M_a - M_b}{M_a + M_b} \cdot \frac{vR}{2} \cos \delta \right) \int_1^\infty d\lambda e^{-(a_1 + a_2) \frac{R}{2} \lambda} \\ &\quad \times \sum_{\ell=0}^L \sum_{m=-\ell}^M f_m^\ell(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi P_m^\ell(\mu) \cos \ell \phi \\ &\quad \times \exp \left[ i \mu \zeta \cos \phi + i \zeta \sin \phi \cdot \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi \right] \end{aligned} \quad (C 38)$$

となり、これは Bessel 関数の積分表示 (ref. 2 の p. 178 参照)

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi i^n} \int_0^{2\pi} e^{iz \cos \theta} \cos n \theta d\theta \quad (C 39)$$

を用いると,

$$I^{ba} = \frac{b_1 b_2 C R^{k+3}}{16} \exp\left(i \frac{M_a - M_b}{M_a + N_b} \cdot \frac{vR}{2} \cos \vartheta\right) \int_1^\infty d\lambda e^{-(a_1 + a_2) \frac{R}{2} \lambda} \\ \times \sum_{\ell=0}^L \sum_{m=\ell}^M i^{-\ell} f_m^{\ell}(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu P_m^{\ell}(\mu) e^{i\mu \zeta \cos \psi} J_{\ell}(\zeta \sin \psi \cdot \sqrt{1-\mu^2}) \quad (C40)$$

が得られる。さらに、公式 (ref. 2 の p. 185)

$$j_n(z) P_n^m(\cos \alpha) = \frac{i^m}{2i^n} \int_0^{\pi} e^{iz \cos \alpha \cos \theta} J_m(z \sin \alpha \cos \theta) P_n^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta \\ (\operatorname{Re}(\sin \alpha) \geq 0) \quad (C41)$$

を用いると、次のようになる。

$$I^{ba} = \frac{b_1 b_2 C R^{k+3}}{8} \exp\left(i \frac{M_a - M_b}{M_a - M_b} \cdot \frac{vR}{2} \cos \vartheta\right) \int_1^\infty d\lambda e^{-(a_1 + a_2) \frac{R}{2} \lambda} \\ \times \sum_{\ell=0}^L \sum_{m=\ell}^M i^m f_m^{\ell}(\lambda) j_m(\zeta) P_m^{\ell}(\cos \psi). \quad (C42) \\ (\operatorname{Re}(\sin \psi) \geq 0)$$

これから先は数値計算により求める。

$s_{mn}^{ab}, u_{mn}^{ab}, t_{mn}^{ab}$  も同様の方法により (C42) の形に表わすことができる。

#### D. 数値積分

a) 積分  $\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx$

次のような近似式<sup>32), 33)</sup>を用いる。

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n a_i f(x_i). \quad (D1)$$

ただし,

$$a_i = \frac{1}{x_i [L'_n(x_i)]^2} \quad (D2)$$

で、 $L_n(x)$  は  $n$  次 Laguerre の多項式、 $x_i$  は  $L_n(x)$  の  $i$  番目の零点、 $L'_n(x) = \frac{d}{dx} L_n(x)$  である。

b) 積分  $f(\theta) = \mu v \int_0^\infty \rho d\rho J_m(\mu v \rho \sin \theta) B(\rho)$  (D5)

まず、次のように近似する。

$$\rho B(\rho) \approx e^{-a\rho} \sum_{n=m}^N A_n \rho^n. \quad (D4)$$

ここに、定数  $a$  および  $A_n$  は、例えば最小自乗法のような、curve fitting 法により決める。次に、公式<sup>34)</sup>

$$\int_0^\infty t^n e^{-t \cos \beta} J_m(t \sin \beta) dt = \Gamma(n-m+1) P_n^m(\cos \beta), \quad (D5) \\ (0 < \beta < \frac{\pi}{2}, n \geq m)$$

を用いると、求める積分は

$$\begin{aligned}
 f(\theta) &= \mu v \sum_{n=m}^{\infty} A_n \int_0^{\infty} \rho^n e^{-a\rho} J_m(\mu v \rho \sin \theta) d\rho \\
 &= \mu v \sum_{n=m}^{\infty} A_n \frac{1}{(a^2 + \mu^2 v^2 \sin^2 \theta)^{\frac{n+1}{2}}} \int_0^{\infty} t^n e^{-t \cos \beta} J_m(t \sin \beta) dt \\
 &\quad \left( \begin{aligned} \cos \beta &= a / (a^2 + \mu^2 v^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}, \\ \sin \beta &= \mu v \sin \theta / (a^2 + \mu^2 v^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \right) \\
 \therefore f(\theta) &= \mu v \sum_{n=m}^{\infty} \frac{A_n \Gamma(n-m+1)}{(a^2 + \mu^2 v^2 \sin^2 \theta)^{\frac{n+1}{2}}} P_n^m \left( \frac{a}{\sqrt{a^2 + \mu^2 v^2 \sin^2 \theta}} \right). \quad (D6)
 \end{aligned}$$

E. Jackson-Schiffの断面積

式(261)を用いて、

$$\begin{aligned}
 \sigma &= 2\pi \int_0^{\pi} |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \\
 &= 2\pi \int_0^{\pi} \left[ -16\mu \left( \frac{2\lambda_0 - 1}{A^3} + \frac{\lambda_1}{A^2} + \frac{\frac{3}{4}\lambda_2}{A} \right) \right]^2 \sin \theta d\theta \\
 &= 2\pi \cdot 2^8 \mu^2 \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \sum_{n=2}^6 \frac{A_n}{A^n}. \quad (E1)
 \end{aligned}$$

ただし、

$$A_2 = \frac{9}{16} \lambda_2^2, \quad A_3 = \frac{3}{2} \lambda_1 \lambda_2, \quad A_4 = \lambda_1^2 + \frac{3}{2} (2\lambda_0 - 1) \lambda_2, \quad (E2)$$

$$A_5 = 2(2\lambda_0 - 1) \lambda_1, \quad A_6 = (2\lambda_0 - 1)^2, \quad (E3)$$

$$A = d + 4\mu^2 v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (E4)$$

$$d = 1 + \frac{v^2}{4}. \quad (E5)$$

いま、 $y = \sin \frac{\theta}{2}$  とおけば  $dy = \frac{1}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = \frac{1}{2} (1-y^2)^{\frac{1}{2}} d\theta$  ,

$\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = 2y(1-y^2)^{\frac{1}{2}}$  , 故に  $\sin \theta d\theta = 4y dy$  となる。したがって、

$$\begin{aligned}
 \sigma &= 2^{11} \pi \mu^2 \int_0^1 y dy \sum_{n=2}^6 \frac{A_n}{(d + 4\mu^2 v^2 y^2)^n} \\
 &= 2^{10} \pi \mu^2 \frac{1}{4\mu^2 v^2} \sum_{n=2}^6 \left[ \frac{-A_n}{(n-1)(d + 4\mu^2 v^2 y^2)^{n-1}} \right]_{y^2=0}^{y^2=1} \\
 &= \frac{2^8 \pi}{v^2} \sum_{n=2}^6 \frac{A_n}{n-1} \left[ \frac{1}{d^{n-1}} - \frac{1}{(d + 4\mu^2 v^2)^{n-1}} \right]. \quad (E6)
 \end{aligned}$$

故に、 $O(\mu^{-2})$  の項を無視することにより、断面積は次のようになる。

$$\sigma = \frac{2^8 \pi}{v^2} \sum_{n=2}^6 \frac{A_n}{(n-1)d^{n-1}}. \quad (E7)$$

同様にBK近似の場合 ( $A_b=1$ , 他は零) は  $O(\mu^{-10})$  の項を無視すると式 (2.57) が得られる。

F. Jackson-Schiff の散乱振幅 ( $p+H(1s) \rightarrow H(1s)+p$  の場合)

$$f(\theta) = \frac{\mu_f}{2\pi} \iint e^{i(\vec{A}\vec{r}_a - \vec{B}\vec{r}_b)} \phi_{1s}(\vec{r}_b) V_f \phi_{1s}(\vec{r}_a) d^3\vec{r}_a d^3\vec{r}_b \quad (F1)$$

ただし,

$$\vec{A} = \frac{M_a}{M_a+1} \vec{k}_i - \vec{k}_f, \quad \vec{B} = \vec{k}_i - \frac{M_b}{M_b+1} \vec{k}_f, \quad (F2)$$

$$V_f = \frac{Z_a Z_b}{R} - \frac{Z_a}{r_a}, \quad \vec{R} = \vec{r}_a - \vec{r}_b \quad (F3)$$

この場合,  $Z_a=Z_b$ ,  $M_a=M_b$  である。先ず,  $\phi_{1s}(\vec{r}_a)$ ,  $\phi_{1s}(\vec{r}_b)$ ,  $V_f$  を Fourier 変換すると次のようになる。

$$\phi_{1s}(\vec{r}_a) = \left(\frac{Z_a}{\pi}\right)^{5/2} \int (k^2 + Z_a^2)^{-2} e^{i\vec{k}\vec{r}_a} d^3\vec{k}, \quad (F4)$$

$$\phi_{1s}(\vec{r}_b) = \left(\frac{Z_b}{\pi}\right)^{5/2} \int (k^2 + Z_b^2)^{-2} e^{i\vec{k}\vec{r}_b} d^3\vec{k}, \quad (F5)$$

$$V_f(R) = \frac{Z_a Z_b}{2\pi^2} \int k^{-2} e^{i\vec{k}\vec{R}} d^3\vec{k} - \frac{Z_a}{2\pi^2} \int k^{-2} e^{i\vec{k}\vec{r}_a} d^3\vec{k}. \quad (F6)$$

式 (F4) ~ (F6) を式 (F1) へ代入して,

$$\delta(\vec{k}-\vec{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}} d^3\vec{x} \quad (F7)$$

の関係を用いると次式が得られる。

$$f(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \cdot \frac{32(Z_a Z_b)^{5/2}}{\pi} \int d^3\vec{k} k^{-2} \left[ \{(\vec{A}+\vec{k})^2 + Z_a^2\}^{-2} \{(\vec{B}+\vec{k})^2 + Z_b^2\}^{-2} - \frac{1}{Z_b} \{(\vec{A}+\vec{k})^2 + Z_a^2\}^{-2} \{B^2 + Z_b^2\}^{-2} \right] \quad (F8)$$

この式の第二項は, 簡単に証明できる積分

$$\int \frac{d^3\vec{k}}{k^2 [(\vec{A}+\vec{k})^2 + Z_a^2]^2} = \frac{\pi^2}{Z_a(A^2 + Z_a^2)} \quad (F9)$$

を用いれば, 次のようになる。

$$f^{ne}(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \frac{32(Z_a Z_b)^{5/2} \pi}{(A^2 + Z_a^2)(B^2 + Z_b^2)^2} \quad (F10)$$

また,

$$(ab)^{-2} = \int_0^1 \frac{6x(1-x)dx}{[ax+b(1+x)]^4} \quad (F11)$$

を用いて, 式 (F8) の第一項は次のように変形できる。

$$f^{no}(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \cdot \frac{32(Z_a Z_b)^{5/2}}{\pi} \int_0^1 x(1-x)dx \int \frac{6d^3\vec{k}}{k^2 [k^2 + A - 2\vec{k}\cdot\vec{q}]^4} \quad (F12)$$

ただし,

$$A = (B^2 + Z_b^2 - A^2 - Z_a^2) x + A^2 + Z_a^2, \quad (F 13)$$

$$\vec{q} = -\{(\vec{B} - \vec{A})_x + \vec{A}\}. \quad (F 14)$$

ところで、式(F 9)において、 $A^2 + Z_a^2 = \delta$ 、 $\vec{A} = -\vec{r}$ とおけば、

$$\int \frac{d^3 \vec{k}}{k^2 [k^2 + \delta - 2\vec{k} \cdot \vec{r}]^2} = \frac{\pi^2}{\delta (\delta - r^2)^{1/2}} \quad (F 15)$$

となる。これを $\delta$ で2回微分すると

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3 \vec{k}}{k^2 [k^2 + \delta - 2\vec{k} \cdot \vec{r}]^4} \\ = \frac{\pi^2}{6} \left[ 2\delta^{-3} (\delta - r^2)^{-\frac{1}{2}} + \delta^{-2} (\delta - r^2)^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{4} \delta^{-1} (\delta - r^2)^{-\frac{5}{2}} \right] \end{aligned} \quad (F 16)$$

が得られる。これを式(F 12)に用いると次のようになる。

$$\begin{aligned} f^{nn}(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \cdot 32(Z_a Z_b)^{3/2} \pi \int_0^1 x(1-x) dx \\ \times \left[ 2A^{-3} (A - q^2)^{-\frac{1}{2}} + A^{-2} (A - q^2)^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{4} A^{-1} (A - q^2)^{-\frac{5}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (F 17)$$

ここで、エネルギー保存の関係から出て来た式(G 17)において、 $m_a = m_b = 1$ 、 $\omega_a = -\frac{1}{2} Z_a^2$ 、 $\omega_b = -\frac{1}{2} Z_b^2$ とおいて次式を得る。

$$A^2 + Z_a^2 = B^2 + Z_b^2. \quad (F 18)$$

したがって、式(F 13)より $A$ は $x$ に無関係となり、次式を得る。

$$f^{nn}(\theta) = -\frac{\mu_f}{2\pi} \cdot 32(Z_a Z_b)^{3/2} \pi \left[ \frac{2\lambda_0}{A^3} + \frac{\lambda_1}{A^2} + \frac{\frac{3}{4}\lambda_2}{A} \right]. \quad (F 19)$$

ここに、

$$\lambda_n = \int_0^1 \frac{x(1-x) dx}{(A - q^2)^{\frac{2n+1}{2}}}, \quad (F 20)$$

$$A = A^2 + Z_a^2. \quad (F 21)$$

さて、

$$\begin{aligned} A - q^2 &= A^2 + Z_a^2 - \{(\vec{B} - \vec{A})_x + \vec{A}\}^2 \\ &= Z_a^2 - 2(\vec{B} \cdot \vec{A} - A^2)_x - (\vec{B} - \vec{A})^2 x^2 \end{aligned} \quad (F 22)$$

となるが、 $M_a = M_b$ であることを考慮して、式(F 2)より

$$(\vec{A} - \vec{B}) = \left( \frac{1}{M_a + 1} \right)^2 (\vec{k}_i + \vec{k}_f)^2 \quad (F 23)$$

$$2(\vec{B} \cdot \vec{A} - A^2) = -2 \frac{1}{M_a + 1} (\vec{k}_i + \vec{k}_f) \left( \vec{k}_i - \frac{M_a}{M_a + 1} \vec{k}_f \right) \quad (F 24)$$

を得る。さらに、 $Z_a = Z_b$ 、 $M_a = M_b$ であることを考慮すれば、エネルギー保存より $k_i = k_f$ である。従って、式(F 23)~(F 24)は次のようになる。



$$\begin{aligned}
 (\vec{A}-\vec{B}) &= \left(\frac{1}{M_a+1}\right)^2 2k_i^2 (1+\cos\theta) \\
 &= \left(\frac{2k_i}{M_a+1}\right)^2 (1-y^2)
 \end{aligned}
 \tag{F 25}$$

$$\begin{aligned}
 2(\vec{A}\vec{B}-A^2) &= -\frac{2k_i^2}{(M_a+1)^2} (1+\cos\theta) \\
 &= -\left(\frac{2k_i}{M_a+1}\right)^2 (1-y^2).
 \end{aligned}
 \tag{F 26}$$

ただし,

$$\vec{k}_i \vec{k}_f = k_i k_f \cos\theta = k_i k_f \left(1 - 2\sin^2 \frac{\theta}{2}\right) = k_i k_f (1 - 2y^2), \tag{F 27}$$

$$y = \sin \frac{\theta}{2}. \tag{F 28}$$

式 (F 25)~(F 26) を式 (F 22) へ代入して, 次式を得る。

$$4-q^2 = Z_a^2 + \left(\frac{2k_i}{M_a+1}\right)^2 (1-y^2)x - \left(\frac{2k_i}{M_a+1}\right)^2 (1-y^2)x^2. \tag{F 29}$$

したがって,

$$\lambda_n = \int_0^1 \frac{x(1-x) dx}{\left\{ Z_a^2 + v^2(1-y^2)x - v^2(1-y^2)x^2 \right\}^{\frac{2n+1}{2}}}. \tag{F 30}$$

ただし,

$$\frac{2k_i}{M_a+1} = \frac{2}{M_a+1} \frac{M_b(M_a+1)}{M_a+M_b+1} v \approx v. \tag{F 31}$$

とおいた。x について積分して, 次式を得る。

$$\lambda_0 = Z_a^{-1} \left[ \frac{1}{2a} + \frac{a-4}{4a^{3/2}} \sin^{-1} \sqrt{\frac{a}{a+4}} \right], \tag{F 32}$$

$$\lambda_1 = Z_a^{-3} \left[ -\frac{4}{(a+4)a} + \frac{2}{a^{3/2}} \sin^{-1} \sqrt{\frac{a}{a+4}} \right], \tag{F 33}$$

$$\lambda_2 = Z_a^{-4} \frac{8}{3(a+4)^2}. \tag{F 34}$$

ただし,  $a = Z_a^{-2} v^2 (1-y^2)$ 。

$\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$  は y の変化に対して,

$$y = 0 \text{ のとき } \lambda_0 = 0.152, \lambda_1 = 0.128, \lambda_2 = 0.107$$

$$y = 1 \text{ のとき } \lambda_0 = 0.167, \lambda_1 = 0.167, \lambda_2 = 0.167$$

の程度の変化を示すが, 式 (F 19) において  $\frac{1}{A}$  は  $y=0$  で最大で, y が大きくなるに従って, 急激に小さくなるので,  $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$  の値として,  $y=0$  のときの値に固定して差支えない。

このようにして, 式 (F 10) と (F 19) および式 (F 30) (ただし,  $y=0$  とする) から, 次のようにまとめることができる。

$$\begin{aligned}
 f(\theta) &= f^{nn}(\theta) + f^{ne}(\theta) \\
 &= -16\mu_f Z_a^7 \left[ \frac{2\lambda_0 - 1/Z_a^2}{A^2} + \frac{\lambda_1}{A^2} + \frac{3\lambda_2}{A} \right].
 \end{aligned}
 \tag{F 35}$$

ただし,

$$D = Z_a^2 + \frac{v^2}{4} + 4\mu_i^2 v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \text{注)} \quad (F 36)$$

$$\lambda_n = \int_0^1 \frac{x(1-x)dx}{[Z_a^2 + v^2 x - v^2 x^2]^{\frac{n+1}{2}}}, \quad (F 37)$$

で,  $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$  は式 (F 32) ~ 式 (F 33) で  $a = v^2/Z_a^2$  とおいて得られる。

G. Born 近似の matrix element  $I_f = I_i$  の証明

$$I_f = \iint e^{+i(\vec{k}_f \vec{R}_f - \vec{k}_i \vec{R}_i)} \phi_n^{b*} V_f \phi_m^a d^3 \vec{r}_b d^3 \vec{R}_f \quad (G 1)$$

$$I_i = \iint e^{+i(\vec{k}_f \vec{R}_f - \vec{k}_i \vec{R}_i)} \phi_n^{b*} V_i \phi_m^a d^3 \vec{r}_b d^3 \vec{R}_f \quad (G 2)$$

$$V_i = \frac{Z_a Z_b}{R} - \frac{Z_b}{r_b}, \quad V_f = \frac{Z_a Z_b}{R} - \frac{Z_a}{r_a}, \quad (G 3)$$

であるとき,  $I_f = I_i$  を証明する。Fig. 1 より,

$$\vec{R}_f = \vec{r}_a - \frac{M_b}{M_b+1} \vec{r}_b, \quad (G 4)$$

$$\vec{R}_i = \frac{M_a}{M_a+1} \vec{r}_a - \vec{r}_b, \quad (G 5)$$

である。従って,  $I_f$  は次のように書き換えられる。

$$I_f = \iint e^{+i(\vec{A} \vec{r}_a - \vec{B} \vec{r}_b)} \phi_n^{b*} V_f \phi_m^a d^3 \vec{r}_a d^3 \vec{r}_b. \quad (G 6)$$

ただし,

$$\vec{A} = -\vec{k}_f + \frac{M_a}{M_a+1} \vec{k}_i, \quad \vec{B} = -\frac{M_b}{M_b+1} \vec{k}_f + \vec{k}_i. \quad (G 7)$$

ここで,

$$-\frac{Z_a}{r_a} \phi_m^a = (\omega_m^a + \frac{1}{2m_a} \vec{p}_a^2) \phi_m^a \quad (G 8)$$

であるから, 式 (G 6) は次のようになる。

注)  $D = A^2 + Z_a^2$

$$\begin{aligned} &= \left( \frac{M_a}{M_a+1} \vec{k}_i - \vec{k}_f \right)^2 + Z_a^2 \\ &= \left( \frac{M_a}{M_a+1} \right)^2 k_i^2 - \frac{2M_a}{M_a+1} k_i k_f \cos \theta + k_f^2 + Z_a^2 \\ &= \frac{M_a^2 + (M_a+1)^2}{(M_a+1)^2} k_i^2 - \frac{2M_a}{M_a+1} k_i^2 (1 - 2\sin^2 \frac{\theta}{2}) + Z_a^2 \\ &= Z_a^2 + \frac{1}{(M_a+1)^2} k_i^2 + \frac{4M_a}{M_a+1} k_i^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ &= Z_a^2 + \frac{v^2}{4} + 4\mu_i^2 v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned}$$

$$I_f = \iint e^{+i(\vec{A}\vec{r}_a - \vec{B}\vec{r}_b)} \phi_n^{b*} \left[ \omega_n^a + \frac{1}{2m_a} \vec{v}_a^2 + \frac{Z_a Z_b}{R} \right] \phi_m^a d^3\vec{r}_a d^3\vec{r}_b. \quad (G9)$$

部分積分を2回くりかえして次式を得る。

$$I_f = \iint e^{+i(\vec{A}\vec{r}_a - \vec{B}\vec{r}_b)} \phi_n^{b*} \left[ \omega_m^a - \frac{A^2}{2m_a} + \frac{Z_a Z_b}{R} \right] \phi_m^a d^3\vec{r}_a d^3\vec{r}_b. \quad (G10)$$

同様にして、

$$I_i = \iint e^{+i(\vec{A}\vec{r}_a - \vec{B}\vec{r}_b)} \phi_n^{b*} \left[ \omega_n^b - \frac{B^2}{2m_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} \right] \phi_m^a d^3\vec{r}_a d^3\vec{r}_b. \quad (G11)$$

式(G7)より

$$\begin{aligned} \frac{A^2}{2m_a} &= \frac{1}{2m_a} \left[ k_f^2 - \frac{2M_a}{M_a+1} \vec{k}_f \vec{k}_i + \left( \frac{M_a}{M_a+1} \right)^2 k_i^2 \right] \\ &= \frac{M_a+1}{2M_a} k_f^2 - \vec{k}_f \vec{k}_i + \frac{M_a}{2(M_a+1)} k_i^2, \quad (\because m_a = \frac{M_a}{M_a+1}) \end{aligned} \quad (G12)$$

$$\begin{aligned} \frac{B^2}{2m_b} &= \frac{1}{2m_b} \left[ \left( \frac{M_b}{M_b+1} \right)^2 k_f^2 - \frac{2M_b}{M_b+1} \vec{k}_f \vec{k}_i + k_i^2 \right] \\ &= \frac{M_b}{2(M_b+1)} k_f^2 - \vec{k}_f \vec{k}_i + \frac{M_b+1}{2M_b} k_i^2, \quad (\because m_b = \frac{M_b}{M_b+1}) \end{aligned} \quad (G13)$$

が得られるので、従って

$$\begin{aligned} \frac{A^2}{2m_a} - \frac{B^2}{2m_b} &= \left( \frac{M_a+1}{M_a} - \frac{M_b}{M_b+1} \right) \frac{k_f^2}{2} + \left( \frac{M_a}{M_a+1} - \frac{M_b+1}{M_b} \right) \frac{k_i^2}{2} \\ &= \frac{M_a+M_b+1}{M_a(M_b+1)} \frac{k_f^2}{2} - \frac{M_a+M_b+1}{M_b(M_a+1)} \frac{k_i^2}{2} \\ &= \frac{1}{2\mu_f} k_f^2 - \frac{1}{2\mu_i} k_i^2. \end{aligned} \quad (G14)$$

しかるに、エネルギー保存から

$$\frac{1}{2\mu_f} k_f^2 - \frac{1}{2\mu_i} k_i^2 = \omega_m^a - \omega_n^b \quad (G15)$$

であるから、

$$\frac{A^2}{2m_a} - \frac{B^2}{2m_b} = \omega_m^a - \omega_n^b. \quad (G16)$$

$$\therefore \omega_m^a - \frac{A^2}{2m_a} = \omega_n^b - \frac{B^2}{2m_b}. \quad (G17)$$

故に、 $I_i = I_f$ . 証明終。

## 文 献

- 1) 高柳和夫；電子・原子・分子の衝突（培風館，1972）p. 74.
- 2) 森口，宇田川，一松；数学公式Ⅲ（岩波書店，1967）
- 3) 龍福，安達，小谷；放射線物理研究，3（1969）1.
- 4) R. Glanber, Lectures in Theoretical Physics (Interscience Publishers, Inc., New York, vol.1, p.315 (1958).
- 5) R. McCarroll and A. Salin, J. Phys. B, 1 (1968) 163.
- 6) T. Adachi and T. Kotani, Prog. Theor. Phys. 39, (1968) 430. 39 (1968) 758.
- 7) H.C. Brinkman and H.A. Kramers, Proc. Acad. Sci., Amsterdam, 33 (1930) 973.
- 8) G.W. McClure, Phys. Rev. 148 (1966) 47.
- 9) W.L. Fite, R.F. Stebbings, D.G. Hummer, and R.T. Brackmann, Phys. Rev. 119 (1960) 663.
- 10) W.L. Fite, A.C.H. Smith and R.F. Stebbings, Proc. Roy. Soc. A268 (1962) 527.
- 11) H. Schiff, Canad. J. Phys. 32 (1954) 393.
- 12) J.D. Jackson and H. Schiff, Phys. Rev. 89 (1953) 359.
- 13) M.B. McElroy, Proc. Roy. Soc. A272 (1963) 542.
- 14) T.F. Tuan and E. Gerjuoy, Phys. Rev. 117 (1960) 756.
- 15) J.P. Keene, Phil. Mag., 40 (1949) 369.
- 16) F. Ribe, Phys. Rev. 83 (1951) 1217.
- 17) D.R. Bates and A. Dalgarno, Proc. Phys. Soc. A65 (1952) 919.
- 18) G.C. Wick, foot note in ref. 12.
- 19) R.H. Bassel and E. Gerjuoy, Phys. Rev. 117 (1960) 749.
- 20) D.R. Bates, Proc. Roy. Soc. A247 (1958) 294.
- 21) D.R. Bates, H.S.W. Massey and A.L. Stewart, Proc. Roy. Soc. 216 (1953) 437.
- 22) N.F. Mott and H.S.W. Massey, The Theory of Atomic Collisions 3rd ed. (Oxford at the Clarendon Press, 1965), p.191.
- 23) A. Dalgarno and H.N. Yadav, Proc. Phys. Soc. A66 (1953) 173.
- 24) ref. 22 の p.98.
- 25) R. McCarroll, Proc. Roy. Soc. A264 (1961) 547.
- 26) R. McCarroll and M.B. McElroy, Proc. Roy. Soc. A266 (1962) 422.
- 27) J.E. Bayfield, Phys. Rev. Letters, 20 (1968) 1223.
- 28) G. Rydings, A.B. Wittkower and H.B. Gilbody, Proc. Phys. Soc. 89 (1966) 547.

- 29) R.F. Stebbings, R.A. Young, C.L. Oxley and H. Ehrhard, Phys. Rev. **138** (1965) A1312.
- 30) Gaily and Geballe (1970), 次の論文に引用  
I.M. Cheshire, D.F. Gallaher and A. Joanna Taylor, J. Phys. B.:  
Atom. molec. Phys. **3** (1970) 813.
- 31) R.A. Young, R.F. Stebbings, and J.W. McGowan, Phys. Rev. **171** (1968) 85.
- 32) H. Bateman, Higher Transcendental Functions, Vol.2 (McGraw-Hill Book  
Co., Inc., 1953) pp.160, 188.
- 33) P. Rabinowitz and G. Weiss, Mathematical Tables & Aids to Computation  
(MTAC) **13** (1959) 285.
- 34) G.N. Watson, A Treatise on the Theory of Bessel Functions, (Cambridge  
at the University Press, 1966) p.387.

電荷移動断面積の衝突径数による表現

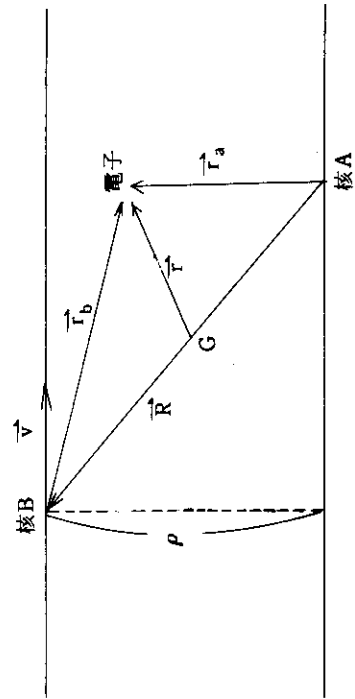
衝突径数  $\rho$  を用いて、全断面積  $\sigma$ 、散乱振幅  $f(\theta)$  は次のように表現できる。

$$\sigma = 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho |B(\rho)|^2, \quad \left( = \frac{v_f}{v_i} \int H(\theta) |^2 d\Omega \right).$$

$$f(\theta) = k_f \int_0^\infty \rho d\rho J_m(2k_f \rho \sin \frac{\theta}{2}) B(\rho).$$

ただし、 $v_i, v_f$  は初期および終期速度である。 $J_m(x)$  は  $m$  次 Bessel 関数で、 $m$  は終状態の磁気量子数である。 $B(\rho)$  は次表を示すような確率振幅である。次の関係が成り立つ。

$$B(\rho) = k_f \int_0^\pi \sin \theta d\theta J_m(2k_f \rho \sin \frac{\theta}{2}) f(\theta).$$



核A : 標的原子の核 (電荷  $Z_a$ , 質量  $M_a$ )

核B : 入射荷電粒子 (電荷  $Z_b$ , 質量  $M_b$ )

$\vec{R}$  : 核A に対する核B の位置ベクトル

$\rho$  : 衝突径数

$\vec{r}$  : 核A と核B の重心G に対する電子の位置ベクトル

$\vec{r}_a$  : 核A に対する電子の位置ベクトル

$\vec{r}_b$  : 核B " "

$v$  : 実験室系における核B の速度

$\phi_m^a(\vec{r}_a)$  : (核A + 電子) 系の原子波動関数

$\phi_n^b(\vec{r}_b)$  : (核B + 電子) 系の " "

$$S_{nm}^{ba} = \int e^{-i\vec{v}\cdot\vec{r}} \phi_n^{b*} \phi_m^a d^3\vec{r}$$

$$S_{mn}^{ab} = \int e^{i\vec{v}\cdot\vec{r}} \phi_m^{a*} \phi_n^b d^3\vec{r}$$

$$u_{nm}^{ba} = \int e^{-i\vec{v}\cdot\vec{r}} \phi_n^{b*} \left( -\frac{Z_b}{r_b} \right) \phi_m^a d^3\vec{r}$$

$$u_{mn}^{ab} = \int e^{i\vec{v}\cdot\vec{r}} \phi_m^{a*} \left( -\frac{Z_a}{r_a} \right) \phi_n^b d^3\vec{r}$$

近 似 法	確 率 振 幅	参 考 文 献
Born 近似 (E/核子) >> 25 keV	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} u_{nm}^{ba}$ $B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \left[ u_{nm}^{ba} + \frac{Z Z_a^{ba} u_{nm}^{ba}}{R} \right]$	7) 11), 12)
	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} [u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{aa} u_{nm}^{aa}]$	19)
歪曲波の方法 (E/核子) >> 25 keV	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \frac{u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{aa} u_{nm}^{aa}}{1 - s^2}$ $\times \exp \left[ \frac{i}{v} \int_{-\infty}^Z \{ \epsilon_n^b(\vec{R}') - \epsilon_m^a(\vec{R}') \} dZ' \right],$ $\epsilon_m^a(\vec{R}) = \frac{u_{nm}^{aa} - s_{nm}^{ab} u_{nm}^{ba}}{1 - s^2}, \quad \epsilon_n^b(\vec{R}) = \frac{u_{nm}^{bb} - s_{nm}^{ab} u_{nm}^{ab}}{1 - s^2},$ $s =  s_{nm}^{ab}  =  s_{nm}^{ba} .$	20), 26)
Bates-Massey-Stewart 半古典的近似 P.S.S. 法 (E/核子) << 25 keV	<p>Symmetric Resonance :</p> $B_{Res}(\rho) = \frac{1}{2i} \left\{ -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon_{1s}^+(\vec{R}) dZ - e^{-i} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon_{1s}^-(\vec{R}) dZ \right\}.$ <p>Non-Resonance :</p> $B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} e^{-i} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon_n^b(\vec{R}) dZ \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z}$ $\times L_{nm}^{ba} \exp \left[ \frac{i}{v} \int_{-\infty}^Z \{ \epsilon_n^b(\vec{R}') - \epsilon_m^a(\vec{R}') \} dZ' \right],$ $L_{nm}^{ba} = \int x_n^b(\vec{r}, \vec{R}) \frac{\partial}{\partial Z} x_m^a(\vec{r}, \vec{R}) d^3r.$	21), 23)

近似法	近似法	確率振幅	参考文献
Born 近似 (E/核子) >> 25 keV	Brinkman-Kramers 近似	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} u_{nm}^{ba}$	7)
(E/核子) >> 25 keV	Jackson-Schiff 近似	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \left[ u_{nm}^{ba} + \frac{Z Z_b}{R} u_{nm}^{ba} \right]$	11), 12)
	Bassel-Geryuoy 近似	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \left[ u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{aa} u_{nm}^{aa} \right]$	19)
歪曲波の方法 (E/核子) >> 25 keV	Bates の衝突径数法	$B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z} \frac{u_{nm}^{ba} - s_{nm}^{aa} u_{nm}^{aa}}{1 - s^2}$ $\times \exp \left[ \frac{i}{v} \int_{-\infty}^Z \{ \epsilon_n^b(\vec{R}') - \epsilon_m^a(\vec{R}') \} dZ' \right],$ $\epsilon_m^a(\vec{R}) = \frac{u_{mm}^{aa} - s_{mm}^{ab} u_{mm}^{ba}}{1 - s^2}, \quad \epsilon_n^b(\vec{R}) = \frac{u_{nn}^{bb} - s_{nn}^{ab} u_{nn}^{ba}}{1 - s^2},$ $s =  s_{mn}^{ab}  =  s_{nm}^{ba} .$	20), 26)
P.S.S. 法 (E/核子) << 25 keV	Bates-Massey-Stewart  半古典的近似	<p>Symmetric Resonance :</p> $B_{Res}(\rho) = \frac{1}{2i} \left\{ e^{-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon_{1s}^+(\vec{R}) dZ} - e^{-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon_{1s}^-(\vec{R}) dZ} \right\}.$ <p>Non-Resonance :</p> $B_{nm}(\rho) = -\frac{1}{v} e^{-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon_n^b(\vec{R}) dZ} \int_{-\infty}^{\infty} dZ e^{-i(k_f - k_i)Z}$ $\times L_{nm}^{ba} \exp \left[ \frac{i}{v} \int_{-\infty}^Z \{ \epsilon_n^b(\vec{R}') - \epsilon_m^a(\vec{R}') \} dZ' \right],$ $L_{nm}^{ba} = \int \chi_n^b(\vec{r}, \vec{R}) \frac{\partial}{\partial Z} \chi_m^a(\vec{r}, \vec{R}) d^3r.$	21), 23)