

JAERI - M
82-159

第2回原子衝突と重イオン核反応
合同研究会報告書

1982年11月

物理部

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Section, Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

©Japan Atomic Energy Research Institute, 1982

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 いばらき印刷(株)

第2回原子衝突と重イオン核反応合同研究会報告書

日本原子力研究所東海研究所物理部

(1982年10月18日受理)

「原子衝突と重イオン核反応」の第2回合同研究会が1982年の春に東京で開催された。この合同研究会は、大型加速器の進歩と整備に伴い、加速器を利用する原子衝突と重イオン核反応の2大研究分野に横たわる共通の物理的問題点を明確にし、研究推進のための今後の展望を得る事を目的とした。研究会は両分野の研究者約50名が参加し、16編の発表とその討論が行われた。

本報告書はこれを取りまとめ編集したものである。内容は、総合報告2編と、最近目覚ましい進歩を遂げている14のトピックスに就いての包括的研究で構成されている。

編者 原田吉之助(原 研)
小沢 国夫(")
上坪 宏道(理 研)
野村 亨(")
栗屋 容子(")
渡部 力(東大工)

Proceedings of the 2nd Joint Seminar on Atomic Collisions
and Heavy Ion Induced Nuclear Reactions

Division of Physics, Tokai Research Establishment, JAERI

(Received October 18, 1982)

The meeting of the 2nd joint seminar on atomic collisions and heavy ion induced nuclear reactions was held at the University of Tokyo, May 13 & 14, 1982.

The aim of this seminar has been not only to recognize the common problems lying between above two research fields, but also to obtain an overview of the theoretical and experimental approaches to clear the current problems.

In the seminar, more than 50 participants gathered and presented 16 papers. These are two general reviews and fourteen comprehensive surveys on topical subjects which have been developed very intensively in recent years.

The editors would like to thank all participants for their assistance and cooperation in making possible a publication of these proceedings.

Keywords: Atomic Collision, Nuclear Reaction, Highly Excited Nuclei, Multiple Ionization Process in Atom, Molecular Resonance, Super Heavy Quasi-atom, Mu Mesic Atom, Cluster Model, Yrast Level, High Angular Momentum State, Beam-foil Interaction, Okorokov Effect

Editors

K. Harada(chairman)	JAERI
K. Ozawa	JAERI
H. Kamitsubo	IPCR
T. Nomura	IPCR
Y. Awaya	IPCR
T. Watanabe	The University of Tokyo

まえがき

「原子衝突と重イオン核反応の合同研究会」の第1回研究会が、科研費特定研究(1)「高速イオンビームによる新物質開発の基礎研究」の一環として企画され、1981年1月に理化学研究所で開催された。研究会を企画した趣旨については、同研究会報告書の冒頭に明瞭に記されているので、重複をいとわずその一部を以下に再録してみる。「最近、加速器の整備と相俟って、原子衝突と重イオン核反応の研究はとみに活発化しており、わが国でも多くのすぐれた研究が発表されている。この二つの研究課題は、外見はかなり違うが現象の背後にある物理には共通した所が多い。そこで、原子衝突と重イオン核反応の研究者が一堂に会して、互いに問題点の指摘も含めて現状をレビューしあい、情報を交換することを目的としてこの研究会が企画された。」

このような研究会は初めての試みであり、果して狙い通りの成果が得られるかどうかについて世話人としては多少心配もあったが、幸い研究会では活発な討論が続き、予想以上の好評を参加者全員から頂いた。学問の進歩が細分化、閉鎖化の傾向を強めている現在、この研究会が隣接分野の研究を生々とかつ効率よく理解するのに貴重なチャンスを与えたことは確かなようである。

初めての試みであったこの研究会が極めて有益であったことから、第2回の研究会を開くことが原研、東大、理研の新しい世話人によって企画された。そして、第2回研究会が、1982年5月13日、14日の2日間にわたって開催された。内容は、原子物理と核物理の相互理解を一層深めることに主眼をおいて、第1回とほぼ同じトピックスを再び採りあげ、前回とは異なる視点から紹介しあうようにプログラムを編成した。但し、今回は粒子—固体相互作用のトピックスとして Okorokov 効果の紹介がプログラムにくみこまれた。研究会は、2回目であることもあって、technical term も互いによく理解できるようになっており、第1回よりも更に密度の濃いものとなり、大変有意義なものであった。

研究会の内容は、多くの研究者が随時利用できるように、研究会報告として刊行しておくことが望ましい。有意義な研究会であれば、なおさらその必要性は高い。第1回研究会の報告は、既に刊行されており有益な資料となっている。

原研ではタンデム加速器を利用して原子衝突に関しては固体物理第1研究室が、また重イオン核反応に関しては核物理第1研究室がそれぞれ研究テーマとして研究を進めており、本研究会の内容と密接な関連をもつこと、世話人及びスピーカーなどとして原研物理部から本研究会に参加しているところから、第2回の研究会報告を原研の研究報告書の1部として刊行することにした。

本資料が隣接する2分野の研究者に有効に利用されることを希望する次第です。

(世話人代表 原田吉之助)

目 次

1. 重イオン核反応の概観			1
	東北大理	滝川 昇	
2. イオン・原子衝突の概観			8
	東大工	渡部 力	
3. 高励起原子核の統計的崩壊			27
	原 研	岩本 昭	
4. 多重電離の統計的理論			36
	高千穂商大	並木雅俊	
5. 原子核反応に於ける分子的共鳴状態			55
	東大核研	今西文龍	
6. 分子の電子状態を基底とする低エネルギー原子過程の取扱い			75
	分子科学研究所	中村宏樹	
7. 超重原子形成による陽電子放出の理論			88
	岡山大理	富島康雄	
8. 超重準原子からの陽電子検出の実験			97
	京大化研	中山康之	
	京大RIセンター	伊藤 真	
9. 原子核のクラスター模型			104
	新潟大理	池田清美	
10. 中間子原子			123
	東大理	永嶺謙忠	
11. 原子核における yrast 準位			133
	理 研	郷農靖之	
12. 原子・分子の高角運動量状態 I			142
	東大工	渡部 力	
13. 分子の高角運動量状態 II			148
	九大教養	大旗 淳	
14. Tilted foil と beam の相互作用			157
	京大工	石井慶之	
15. Okorokov 効果の理論			166
	早大理工	山下洋二	
16. Okorokov 効果 (実験)			181
	京大工	万波通彦	

Contents

1.	Review of heavy ion induced nuclear reactions. Noboru Takigawa (Tohoku University).....	1
2.	Review of ion-atom collisions. Tsutomu Watanabe (The University of Tokyo).....	8
3.	Statistical model for the decay of highly excited nuclei. Akira Iwamoto (JAERI).....	27
4.	Statistical model for multiple ionization process in atomic collisions. Masatoshi Namiki (Takachiho College of Commerce).....	36
5.	Molecular resonances in heavy ion reactions. Bunryu Imanishi (The University of Tokyo).....	55
6.	Theory of low energy atomic processes in the molecular electronic state representation. Hiroki Nakamura (Institute for Molecular Science).....	75
7.	Theory on positron emissions from superheavy quasiatoms. Yasuo Tomishima (Okayama University).....	88
8.	Experiments on positron emissions from superheavy quasiatoms. Yasuyuki Nakayama and Shin Ito (Kyoto University).....	97
9.	Cluster models of atomic nuclei. Kiyomi Ikeda (Niigata University).....	104
10.	mesic atoms. Kanetada Nagamine (The University of Tokyo).....	123
11.	Yrast levels in atomic nuclei. Yasuyuki Gōnō (IPCR).....	133
12.	High angular momentum states in atoms or molecules I. Tsutomu Watanabe (The University of Tokyo).....	142
13.	High angular momentum states in molecules II. Kiyoshi O-ohata (Kyushu University).....	148

14.	Interactions of ion beams and tilted foil. Keishi Ishii (Kyoto University).....	157
15.	Theory on the Okorokov effects. Yoji Yamashita (Waseda University).....	166
16.	Experiments on the Okorokov effects. Michihiko Mannami (Kyoto University).....	181

1. 重イオン核反応の概観

東北大理 滝川 昇

1. 重イオン核反応現象 (質量及びエネルギー領域による変化)

重イオン核反応の反応機構及び核物性上の研究課題は、散乱系の質量 (A)、入射角運動量 (l) 及び入射エネルギー (E) を軸とする三次元空間上で大まかに分類する事ができる (第1図)。エネルギー軸上の臨界点としては、原子核の沸点 ϵ_b 、音速に対応するエネルギー ϵ_s 、 π 中間子生成のしきい値 ϵ_π 、相対論領域への境界 ϵ_{rel} などが考えられる。この章では、2, 3 のデータを通して異なる領域での重イオン核反応機構の特徴について簡単に紹介しておこう。

第2図は、低エネルギー軽重イオン散乱の例として、 $^{38}\text{Si} + ^{16}\text{O}$ 弾性散乱などに対する励起関数及び微分断面積を示したものであり、顕著な振動構造が目される。このような振動構造は軽重イオン反応にしばしば観測され、共鳴現象や光学現象 (回折、干渉など) との関連においてしばしば議論されている。その際、重イオン系の特徴は、散乱核の内部励起、近接領域における強い吸収、クーロン斥力と核力に基づく引力ポテンシャルとの競合などの形で現われる。実際、重イオン核反応では、一般に強い吸収効果が存在する為、共鳴現象は、特定の散乱系の表面波に対してのみ起こり得ると考えられている。

理論的には、この種のデータは、通常、光学模型や結合チャンネル法などを用いて解析されるが、同時に、半古典論の開発が進み、それら

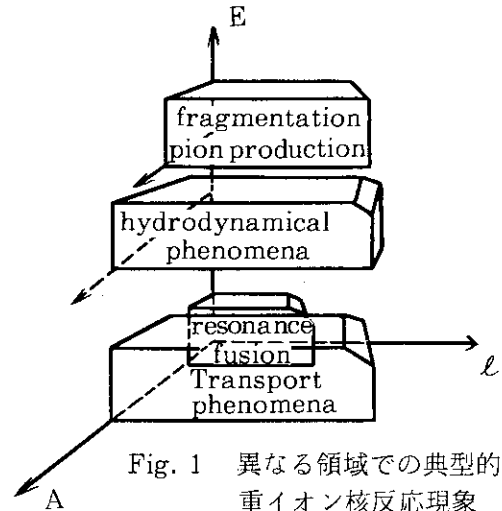


Fig. 1 異なる領域での典型的重イオン核反応現象

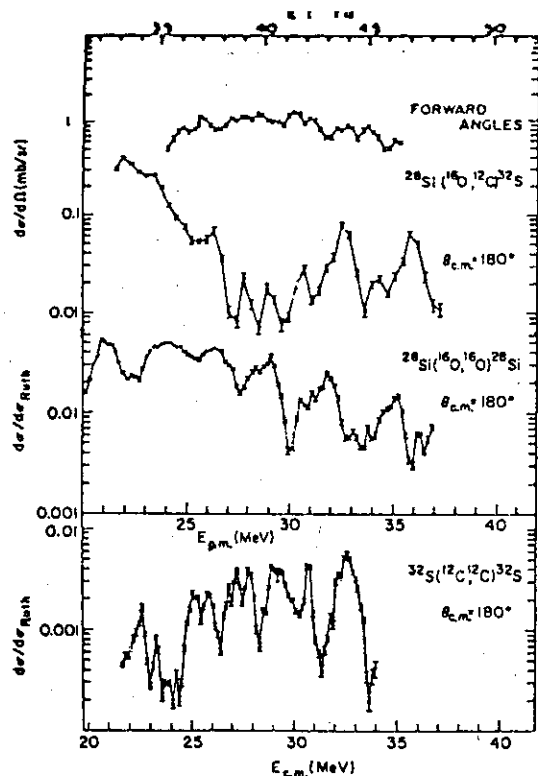


Fig. 2 a 低エネルギー軽重イオン核反応に対する励起関数 (文献1)。

Review of heavy ion induced nuclear reactions.
Noboru Takigawa
(Tohoku University)

の定性的理解に大いに役立っている。第2図b中の実線は、弾性散乱に対しては、光学模型に Regge pole parametrization の補正を加えて計算したもの、移行反応に関しては、S 行列 parametrization によって計算したものを、それぞれ表わす。

第3図は、低エネルギー重イオン散乱の例として、 $^{84}\text{Kr} + ^{209}\text{Bi}$ 散乱 ($E_L = 500 \text{ MeV}$) における反応生成核の断面積を、縦軸に終状態での運動エネルギー、横軸に質量数をとって等高線分布で示したものである。運動エネルギーが入射エネルギーに比べ大巾に失なわれた反応は、深部非弾性散乱 (Deep Inelastic Collision; DIC) と呼ばれ、近年、輸送現象としての観点などから活発な研究がなされてきた。深部非弾性散乱については、§ 2 ~ § 4 で、改めて少し詳しくのべる。

処で、冒頭で述べたように、核反応の様子は、入射角運動量によって強く支配される。第4図は、この事情を、低エネルギー重イオン核反応に対して、入射角運動量毎の断面積の形で定性的に示したものである。DIC は、中間の角運動量に対して起こると考えられている。L_{CF} は、完全核融合反応 (complete fusion) が起こる臨界角運動量であり、E. R. 及び S. F. は、完全核融合反応でできた複合核が、軽粒子を蒸発放出したあと蒸発残留核 (evaporation residue) として測定される場合の断面積、及び核分裂片として測定される場合の断面積を、それぞれ表わしている。Q. E. は非弾性度の比較的小さい反応の断面積で、準弾性散乱 (Quasi Elastic 散乱) の略である。第3図で、 E_{KIN} が 350 MeV 近傍の大きな断面積がそれに対応する。この中には、直接反応 (Direct Reaction) も含まれる。大きな入射角運動量に対しては、弾性散乱 (Elastic Scattering; E) 又はクーロン励起 (Coulomb Excitation; CE) 反応が起こる。

これまでの述べた低エネルギー散乱は、基本的に二体散乱であるという特徴をもつ。それに対して、高エネルギー散乱の基本的様相は、破碎過程である。その一例として第5図にはエマルジョンのデータを示した。入射粒子は 2 GeV/n の Ar であり、飛跡は、標的核破碎片の飛跡を示す。これは、表面散乱 (peripheral collision) に対するものであり、中心散乱 (central collision) に対しては、破碎

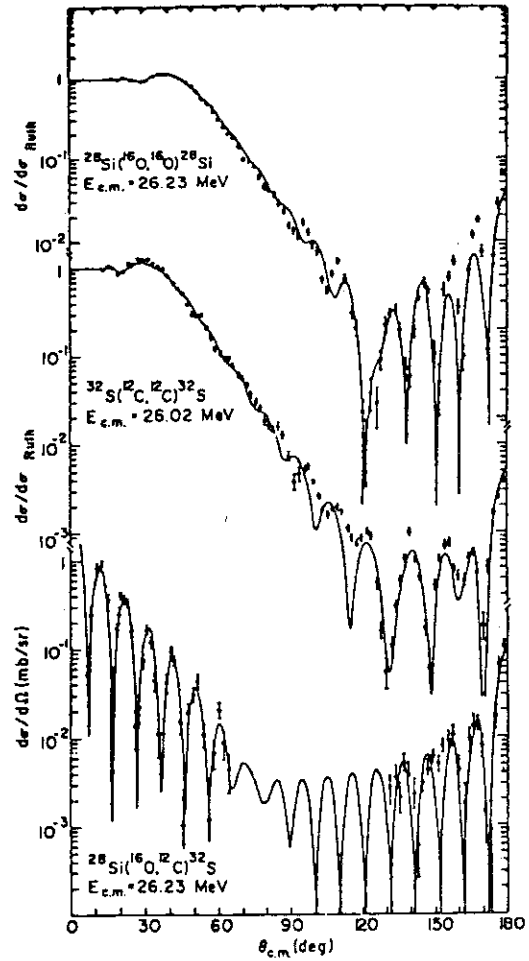


Fig. 2 b 低エネルギー重イオン核反応に対する微分断面積 (文献1)。

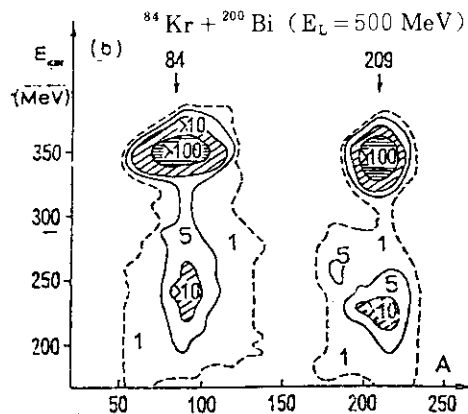


Fig. 3 $^{84}\text{Kr} + ^{209}\text{Bi}$ 散乱 ($E_L = 500 \text{ MeV}$) での反応生成核の運動エネルギー及び質量分布 (文献2)。

片の数がずっと多い。

低エネルギー散乱から高エネルギー散乱への遷移がどの入射エネルギー領域で起こるかは、興味深い問題である。入射エネルギーの関数としての核の温度パラメータ T は、この設問に答える為の一つの指標を与える。⁴⁾ここで T は、低エネルギー領域では、断面積の Q_{gg} 則⁵⁾ (微分断面積の自然対数 $\ln(d\sigma/d\Omega)$ が基底状態の Q 値 Q_{gg} に比例すること) から、高エネルギー領域では、 Q_{gg} 則、又は、破断片の運動量分布から評価される。このようにして決定した T の振舞いは、入射エネルギーが核子当たり 15 MeV 程度の処が、

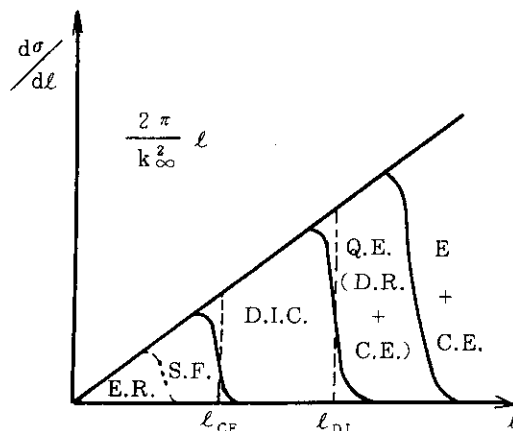


Fig. 4 反応断面積と入射角運動量との関連

反応機構に関する遷移領域であることを示唆している。局所過熱部 (hot spot) の存在及びそこから軽粒子の前平衡放出が議論されているのも、この領域及びより高いエネルギー領域である⁶⁾。

重イオン核反応の実験的研究は、これまで、低エネルギー領域及び Bevalac による高エネルギー領域に限られてきた。しかし、近い将来には、中高エネルギー領域をめざした GANIL (フランス) の稼動が予定されている。世界中で類似の計画も多く、日本でも、理研の SSC 計画などが進められている。これらの新しい世代の加速器の誕生に

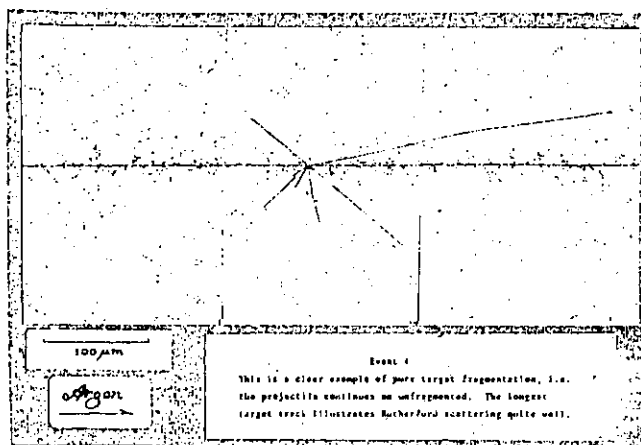


Fig. 5 高エネルギー散乱における標的核破断過程の例 (文献3)。

伴ない、核子当たり数 10 MeV から数百 MeV までの実験データが、近い将来急速に蓄積され、この領域での研究が飛躍的に発展することが期待されている。理論的には、既に、流体模型⁷⁾などによって、異常核物質 (高密度核物質など) の生成や、衝撃波発生の可能性などが議論されている。

以下、深部非弾性散乱に関して少し詳しく補足する。

2. 多核子移行反応

重い原子核同士の低エネルギー衝突は、基本的に二体散乱であり、標的核及び入射核近傍の多様な核種が生成される。 $^{136}\text{Xe} \rightarrow ^{56}\text{Fe}$ 反応 ($E_L = 800$ MeV) に例をとると⁸⁾、比較的大きな断面積をもつ Xe 近傍の生成核は、50 種類を越え、核種の分布は、相対運動からのエネルギー散

逸が増加するにつれて広がる。

Nörenberg は、Dubna で行われた初期の $Ar \rightarrow Th$ 散乱における Ar 近傍核の質量分布（正確には荷電分布）の分布巾が反応時間と共に増大していく事に着目し、重イオン深部非弾性散乱における核子移行過程を、輸送現象の1つとして解釈した⁹⁾。Nörenberg がデータ解析に用いた方程式は、次の Smoluchowski 型の拡散方程式である。

$$\frac{\partial}{\partial t} P(A, t) = - \frac{\partial}{\partial A} (v_A P(A, t)) + \frac{\partial^2}{\partial A^2} (D_{AA} P(A, t)) \quad (1)$$

ここで、 $P(A, t)$ は、時刻 t に入射後から時間発展した核の質量が A である確率を表わす。漂速係数 v_A 、及び拡散係数 D_{AA} が定数 v 及び D のとき、(1)式の解は、初期分布を $\delta(A - A_p)$ として、

$$P(A, t) = (4\pi Dt)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{(A - A_p - vt)^2}{4Dt}\right\} \quad (2)$$

で与えられる。(2)式は、ある角度で測定したときの反応生成核の質量分布を与える(第6図)。但し、反応時間 t と測定角は、角運動量を介して、古典的に関係付けられるものとする。

原子核の殻構造は、重イオン核反応にどのように影響するであろうか。定性的に云えば、殻効果によって、多核子移行反応は、非線型輸送現象又は多安定点をもつ系での輸送現象としての性格をもつ事になる¹⁰⁾。これは、(1)式中の漂速係数が、質量分配に関するエネルギー面 $U(A)$ 及び移動度 γ_{AA} を用いて、

$$v_A = - \frac{\partial}{\partial A} U(A) / \gamma_{AA} \quad (3)$$

で与えられる事、殻効果を考慮したときの $U(A)$ が、第7図に示すように、殻効果の大きい処で、局所的に最小になる事による。

多核子移行反応に関しては、上に述べた殻効果や、2次元 $N-Z$ 平面上での核子輸送の機構、相対運動の核子輸送に及ぼす影響、多体輪による輸送方程式の導出及び輸送係数の評価などについて詳しい研究が進められている。

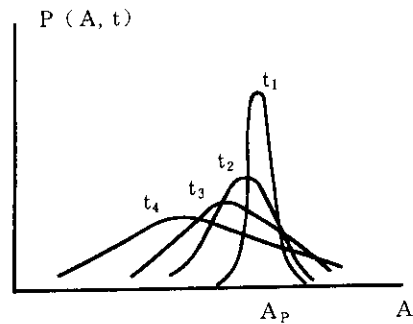


Fig. 6 異なる反応時間(測定角)での質量分布の変化

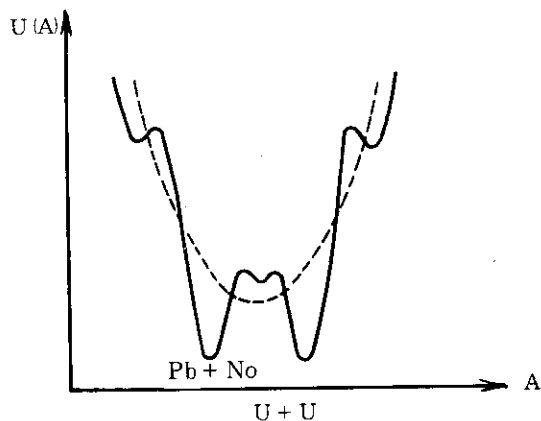


Fig. 7 全質量 $At = 476$, 全電荷 $z_t = 184$ なる散乱系を二つの部分系 zA と $z_t - z(A_t - A)$ に分けるときのエネルギー面。滑らかな点線は、液滴模型で評価したときのエネルギー面である。

3. 開放系の問題としての深部非弾性散乱 (散逸と揺らぎの機構)

重イオン深部非弾性散乱においては、大量のエネルギーや角運動量が、相對運動から内部自由度に轉化される。それに伴ない顕著な揺らぎの現象が観測される。その事情は、第8図に端的にみる事が出来る。図は、Ar + Th 散乱 ($E_l = 388 \text{ MeV}$) で生成される K アイソトープの二重微分断面積 $d^2\sigma/dE d\theta$ を運動エネルギーを縦軸に、測定角を横軸にとって等高線分布で示したものである。

この図は、しばしば Wilczynski 図と呼ばれ、終状態での運動エネルギー (TKE) と測定角 θ との間に強い相関があること、又、運動エネルギー散逸が極めて大量に及ぶことを示している。TKE と θ との強い相関は、重イオン間相對運動を、古典的にニュートン方程式によって記述する事により、容易に理解することが出来る (第8図点線)。この際、散逸現象を記述する為、ニュートン方程式中に摩擦力を入れておくことが肝要である。Wilczynski 図の断面面積は、この古典的相関のまわりに、更に比較的広く分布している。これは、重イオン間の相對運動が、古典的平均軌道のまわりに相当程度揺らいでいる事を示唆している。

理論的には、 $d^2\sigma/dE d\theta$ は相對運動に対する分布関数が求まれば計算することが出来る。それでは、相對運動の自由度を含む全体系の運動方程式から出発して、どのようにしたら、相對運動に対応する部分系の情報を得る事が出来るであろうか (第9図)。この目的で、これまで、線型応答理論¹²⁾、ランダム結合理論¹³⁾、擬線型応答理論¹⁴⁾などが開発されてきた。その過程で、深部非弾性散乱に特有の強結合性は、グリーン関数を通して解決された。この他、相對運動からのエネルギー散逸に対する核のランダムな非集団励起や、集団励起、多核子移行反応などの果たす役割、及び、散逸機構と揺らぎとの相関についても様々な研究がなされてきた。

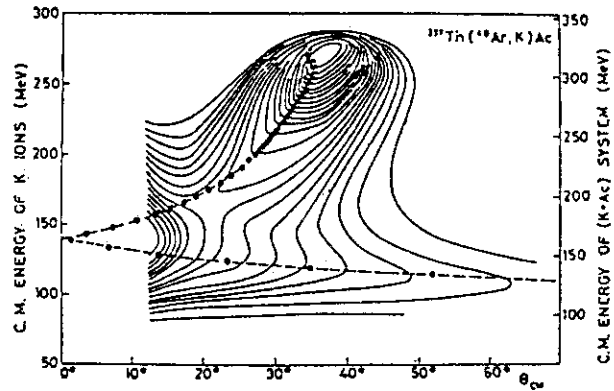


Fig. 8 $^{232}\text{Th} (^{40}\text{Ar}, \text{K}) \text{Ac}$ 散乱 ($E_l = 388 \text{ MeV}$) に対する二重微分断面積 (文献 11)。

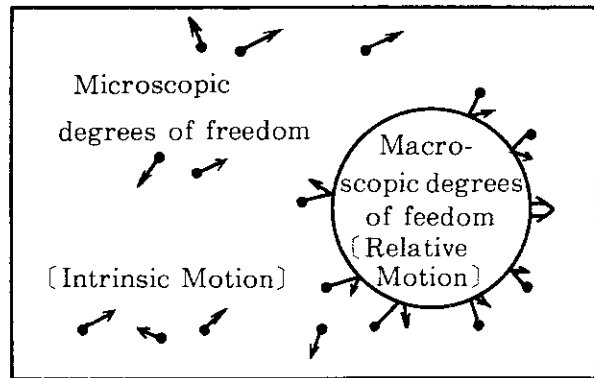


Fig. 9 開放系の問題としての重イオン深部非弾性散乱。Brown 運動との対比で示してある。相對運動は、内部運動との結合によりエネルギーを失い、対応した揺らぎを生ずる。(統計的揺らぎ)。他に波動性による量子的揺らぎなども存在する。¹⁵⁾

4. TDHF 理論 (Time Dependent Hartree Fock 理論)

深部非弾性散乱領域の重イオン核反応を純粹に微視的立場から記述する目的で、TDHF に基づく研究が現在、精力的に進められている。

第 10 図は、 $^{84}\text{Kr} + ^{208}\text{Pb}$ 散乱 ($E_1 = 494 \text{ MeV}$) に対する Wilczynski 図で、TDHF 法で計算された運動エネルギー散逸量と測定角との相関が点線で示してある。図にみるように、TDHF 法は、平均的振舞いに関して、実験データの傾向をよく再現する。

しかし、TDHF 法は本質的に一体近似なので、二粒子演算子に関連した問題の記述には不相当である事が容易に想像される。事実、TDHF 法で計算した反応生成核の質量分布巾は、実測値に比べ 1 桁程小さい。事実、TDHF 法では、実測値よりはるかに小さい限界巾が存在する事を示すことが出来る¹⁷⁾。この事にも関連して、この数年に渡り、結合クラスター法 (coupled cluster 法)¹⁸⁾、グリーン関数法などを用いた TDHF 法の改良が積極的に試みられている¹⁹⁾。

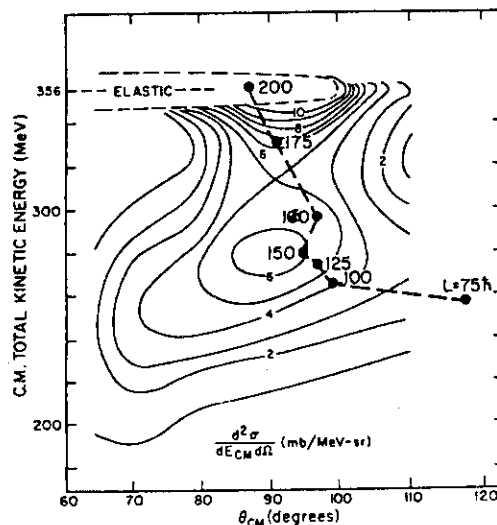


Fig. 10 $^{84}\text{Kr} + ^{208}\text{Pb}$ 散乱 ($E_1 = 494 \text{ MeV}$) に対する Wilczynski 図。点線は TDHF 法の結果 (文献 16)。

研究会では、半古典論及び DIC について少し立ち入って話したが、拡張した内容を 1982 年三者若手夏の学校講義録として執筆する予定なので、ここでは、粗筋のみを記す。

参 考 文 献

- (1) C.K.Gelbke et al., Phys.Rev.Lett. 41(1978) 1778
- (2) M.Lefort et al., Nucl.Phys. A216(1973) 166
- (3) H.Heckman et al., unpublished
- (4) D.K.Scott, NATO Advanced Study Institute Series Vol.38, ed. by K.W.McVoy and W.A.Friedman
- (5) V.V.Volkov, Phys.Rep.44(1978)93
- (6) R.Weiner and M.Weström, Nucl.Phys.A286(1977)282;
H.Utsunomiya et al., Nucl.Phys.A334(1980)127;
N.Stelte and R.Weiner, Phys.Lett.103B(1981)275
- (7) H.Stocker et al., Prog. in Particle and Nuclear Physics, Vol.4(1980)133
- (8) D.Schüll et al., Phys.Lett.102B(1981)116
- (9) W.Nörenberg, Phys.Lett.53B(1974)289

- (10) U.Brosa, Z.Phys.A298(1980)77
- (11) K.Siwiek-Wilczynska and J.Wilczynski, Nucl.Phys.A264(1976)
115
- (12) M.Berlanger et al., Z.Phys.A284(1978)61
- (13) D.Agassi, C.M.Ko and H.A.Weidenmüller, Ann.Phys.117(1979)
407
- (14) N.Takigawa et al., Nucl.Phys., A371(1981)130;
K.Niita and N.Takigawa, preprint, Tohoku University, 1982
- (15) W.Cassing and H.Friedrich, Z.Phys.A298(1980)129
- (16) K.T.R.Davies et al., Phys.Rev.Lett., 41(1978)632
- (17) C.H.Dasso, T.Døssing and H.C.Pauli, Z.Phys.A289(1979)395
- (18) J.Negele, NATO Advanced Study Institute Series, Vol.38;
M.Tohyama and S.Yamaji, private communication
- (19) G.Wolschin, Lecture at the Workshop on Nuclear Theory,
Trieste, Oct.1981

2. イオン・原子衝突の概観

東大工 渡 部 力

イオン・原子散乱は原子衝突の分野では重粒子衝突として、電子と原子分子の散乱から区別して扱う。重粒子衝突の特徴は古典的な描像が成り立ち易いことである。理論的取扱いもこうした物理的背景のもとに定式化されている。こゝではそうした理論的取扱いを紹介する。

1. はじめに

イオン・原子散乱問題は重粒子衝突の問題とも呼ばれて電子と原子分子の散乱問題と区別している。この重粒子衝突の特徴は

(1) 入射粒子のドブロイ波長が相互作用領域の大きさ（直径）に比べて短く、粒子像が成立つこと。

(2) 入射粒子に内部構造があるかまたはもちうることである。

重粒子衝突で扱う現象と、こゝで扱われる過程の特徴をのべる。

化学反応(Head-on型) A, B, C, Dなどを原子とするとき



などが理論的に扱われる例である。この問題の特徴は衝突系として見たとき衝突速度は非常に小さいこと。相互作用が短距離型であること。たゞし等方的でなく強い方向性のあること。組み替え衝突であること、また組み替え衝突を実現するためにはいわゆる close collision でないと起らない。このために化学反応は低速度の Head-on型の衝突問題として扱われる。しかし実際には衝突問題としての散乱角などの知見は今までは必要ではなかった。このために専ら正面衝突の場合のみをとり上げて過程を論じている。(1)の反応を例にとると AB間の核間距離 R_{AB} と BC間の核間距離 R_{BC} とするとき、これらを横軸、縦軸とする2次元ポテンシャルの中の代表点の運動として扱われている。¹⁾ その概念図を図1に示す。²⁾ 図1では始め R_{AB} が平衡核間距離のまわりに振動しており、 R_{BC} は ∞ から近づく。こうした状況を代表点の運動で古典的にあらわす。これの量子力学的な効果を入れた扱いもある。このポテンシャル曲面は A-B-Cが1直線にあるときのものを主にとり上げる。すなわち正面衝突の場合である。

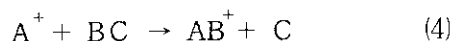
もう一つ正面衝突型の例をあげる。中性原子Aと2原子分子BCが衝突して分子BCの振動状態が励起される場合がそれである。³⁾ すなわち

Review of ion-atom collisions.
Tsutomu Watanabe
(The University of Tokyo)



(BC* は振動の励起状態)である。これもAとBCの相互作用ポテンシャルが短距離型である。

イオン・分子反応 (まき込み型), これに対してイオン分子反応



などは, まき込み型と云われるものに属する。これは $A^+ + BC$ の間に点電荷-中性分極力の遠距離型の引力ポテンシャルがあり,⁴⁾これが遠心力とつり合うある衝突係数 b (軌道角運動量) 以下では遠心力ポテンシャルに打ち勝ってまき込まれるわけである。点電荷-中性分極の間の分散ポテンシャル

$$-\frac{\alpha}{2R^4} \quad (5)$$

に遠心力ポテンシャル

$$+\frac{l(l+1)}{2mR^2} \quad (6)$$

を加えた合成ポテンシャルで (こゝで α は分子BCの分極率, l は A^+ とBCの相対運動の軌道角運動量, R は A^+ とBCの距離, m は衝突系の換算質量である)。図2で示されるように遠心力でつくられる障壁を越えられるか否かで反応が決定されていると考える。障壁を越えてからの挙動は複雑であり, 通常統計的な確率で反応が起るとしている。

イオン衝撃による非弾性衝突 (Distant collision, Glancing collision)

第3の型はイオンなどの荷電粒子による非弾性衝突の中に見られる。⁵⁾これは図3に示すごとく入射粒子が標的の遠くを通り, これによって誘起される電場の時間的変化の周波数成分に合った非弾性変化をもたらす過程によるものである。イオン衝撃による原子・分子の励起 (電子状態, 振動, 回転) 電離などがこの機構で起っている。これらの断面積の入射速度依存性はほゞ図4に示す如くである。すなわち入射速度 v が

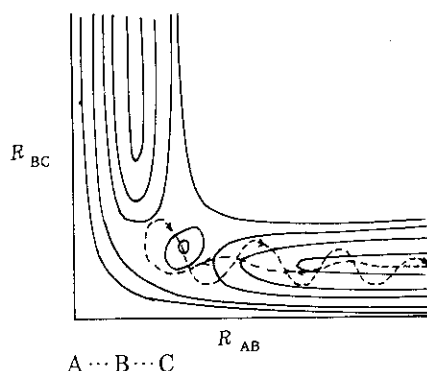


図1 a $AB + C \rightarrow A + BC$ の反応のポテンシャル面上での代表点の運動, この扱いは衝突径数 $b = 0$ の場合である。

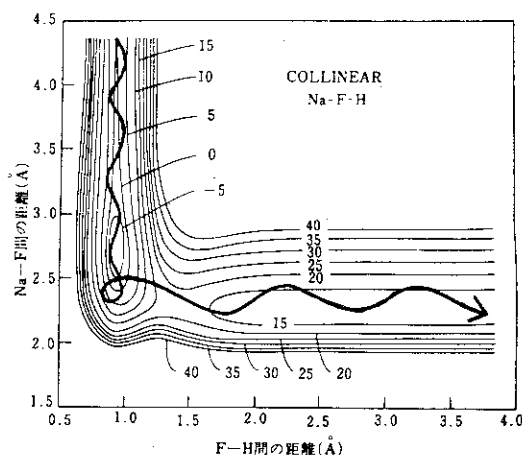


図1 b Na-F-H の系のポテンシャル曲面の計算

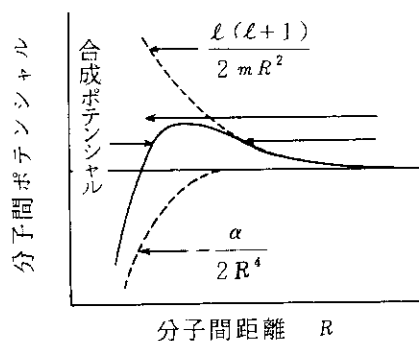


図2 イオン・分子反応のポテンシャルの概念図。
 l の大きい程山は大きくなり, また入射エネルギーの大きい程まき込まれ易くなる。

$$v = v_m = \frac{\Delta E}{\hbar} a \quad (7)$$

の条件を満たすとき断面積 σ は最大となり、最大値 σ_m は

$$\sigma_m = \pi a^2 \quad (8)$$

の程度となる。

電子移動過程、電子遷移を伴う中性原子衝突 (準分子型)

イオン・原子衝突での

電荷移動衝突や、中性原子同士の衝突で電子遷移の起るときは準分子型 (Fano-Lichten 型) と云われる衝突となる。⁶⁾ とくに前にのべたイオン・原子衝突の場合でも v が $v < v_m$ の場合には distant collision の衝突過程に於てもこの準分子型が主要な過程となる。

準分子型とは衝突時間が電子軌道運動の速度に比べて長いとき、衝突している 2 原子系は一時的に分子をつくっていると見做すことができる。これを準分子と云っている。この準分子の電子準位の交差するところを通して電子励起や、電子移動が起る。

高速入射の電荷移動 (ETF 型) 電子 (電荷) 移動の過程は相対速度が電子軌道速度にくらべて遅い場合は準分子型の過程であるが、相対速度が電子軌道速度に比べて速い場合には準分子のモデルは成り立たなくなる。この場合には標的の電子が入射粒子に乗り移る場合を考えると、標的原子から見ると入射イオンの原子軌道は速度 v で走っている。このために乗り移るためには電子にこれだけの運動量変化を伴うか、または標的の中で、たまたま v の方向に走っている成分だけが乗り移れることになる。実際の計算の結果は後者の寄与が大きいことが判っている。大ま

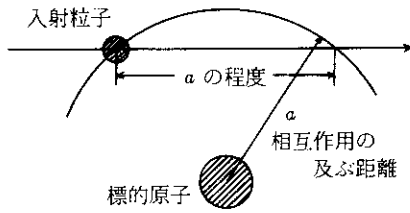


図 3 Distant collision type の概念図。標的から見ての角速度 $\omega (= v/a)$ とするとき、 $\Delta E = \omega$ の標的状態の変化が最も起り易い。

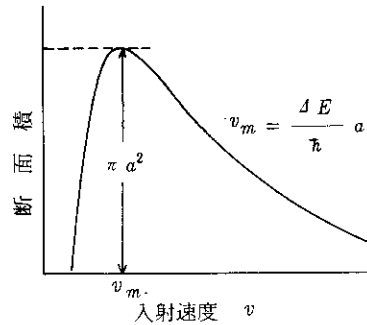


図 4 Distant collision type の断面積の入射速度依存性。

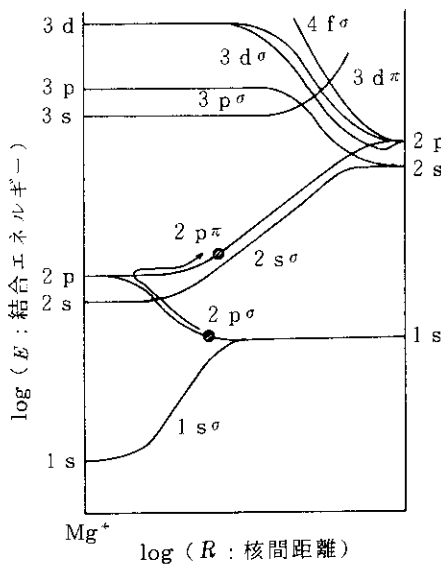


図 5 準分子型衝突過程では準分子の電子準位の準位交差での遷移を通して電子移動や電子捕獲の励起が起る。

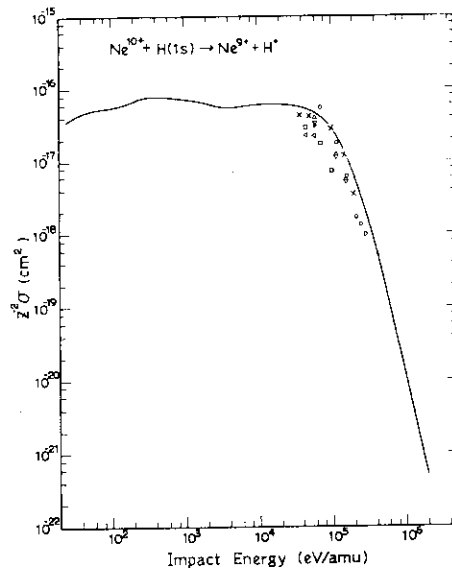


図 6 $\text{Ne}^{10+} + \text{H} \rightarrow \text{Ne}^{9+} + \text{H}^+$ の断面積 σ と核子当りの入射エネルギー (E/A) の関係 25 keV/amu あたりから σ は急激に減少する。

かに云って初期軌道の終軌道の運動量分布の重なり
 の2乗が断面積に比例する。このような速度領域の
 電荷移動の過程をETF過程と呼ぶことにする。言葉
 の意味はelectron translation factor (電子
 走行因子)の略である。初めと終りの電子軌道が糸
 の重心に対して走っている効果を波動関数にとり込
 むためにこの電子走行因子を波動関数に乗ずる。図
 6に示すように電荷移動では準分子領域を越えて
 ETF領域に入ると断面積 σ に急速に減少する。⁷⁾
 ETFは原子核理論ではrecoil factorと云われ
 ているものである。

いま図7はこれらの種々の型の衝突を横軸 l (角
 運動量量子数)と縦軸 v (入射速度)としてその占
 める領域を描いたものである。

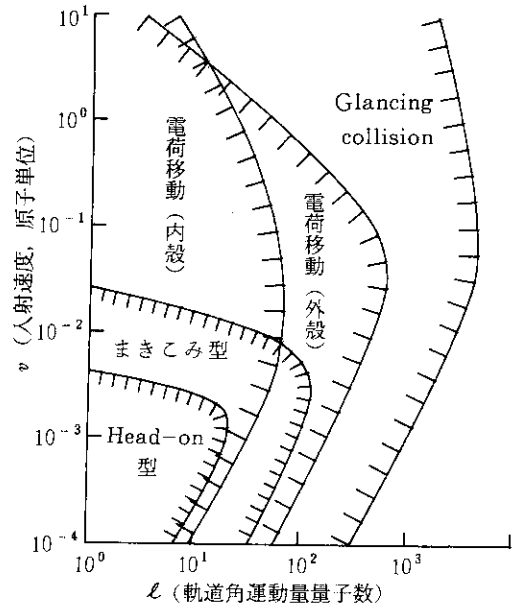


図7 イオン・原子, 原子・原子衝突
 におけるいろいろの衝突過程の
 型と v (相対速度), l (衝突軌
 道の角運動量量子数)の占める
 位置, $////$ とあるのは斜線側が
 その領域であることを示す。

2. 量子力学的取扱い

一般に重粒子系の衝突では古典的な粒子像が成り立ち易いが量子力学的効果も問題となる。図
 8には同じ v と l の関係ではあるがどのような“現象”が対応するかではなく主として電子遷移の
 関与する散乱現象にどのような方法がこれらの現象に対して用いられるかを示す。

主として量子力学的方法が必要な場合とは次の4つの場合になる：

- 1) 相互作用領域 a が相対運動のドブロイ波長 λ より小さい場合
- 2) 散乱波同士の干渉のある場合(虹散乱などで起る)
- 3) 小角散乱の場合($l \rightarrow$ 大の場合)
- 4) 非断熱遷移のある場合(l 小, v 小の場合)

などである。

- 1) は主としてトンネル効果はHead-on型の過程(化学反応)



でトンネル効果が影響を及ぼすのはHで熱速度の場合位である。これより質量の大きい場合, 速
 度の大きい場合にはドブロイ波長は短くなり, 波動効果はきからなくなる。

2) は図9に見られるように引力と斥力の合成ポテンシャルの場合には図8の下に示されるよ
 うに内側の斥力ポテンシャルによる散乱波と外側の引力ポテンシャルによる散乱波が同じ散乱角
 をもって散乱されるときには異った角運動量(衝突径数)の波が干渉し合うことになる。この場
 合には量子力学的に扱わないと正しい散乱微分断面積は求まらない。図10, 図11に



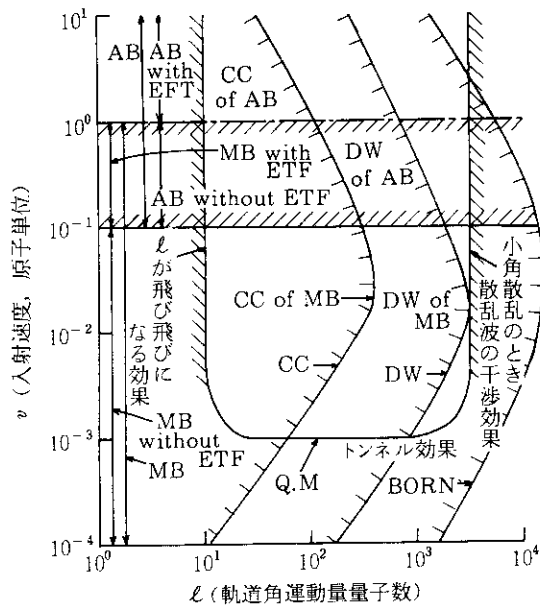


図8 主として電子遷移の関与する衝突現象に対する各理論的方法の $l-v$ での適用範囲

BORN : ボルン近似 (Born approximation)
 DW : 歪曲波近似 (Distorted wave approximation)
 CC : 強結合近似 (Close coupling approximation)
 QM : 量子力学的効果の問題となる領域
 AB : 原子基底 (Atomic base treatment)
 MB : 分子基底 (Molecular base treatment)
 with ETF, without ETF, 電子走行因子の必要な領域, 電子走行因子の寄与の大きくない領域。

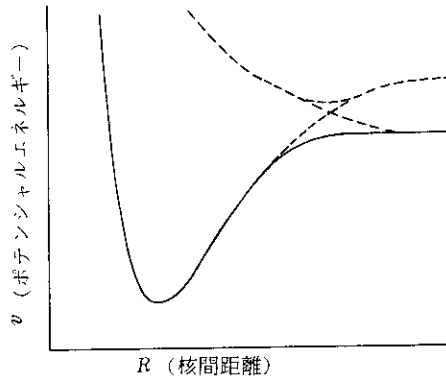
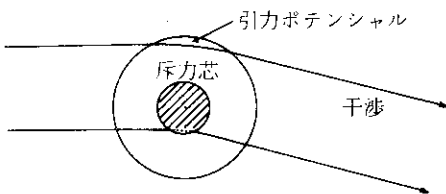


図9 斥力と引力の合成ポテンシャル (上) とこれによる散乱波の干渉の概念図 (下)



という散乱の場合の微分散乱断面積を示す。この衝突系では図8の上の図で示されるような点線との準位の相互作用があり両方の準位の散乱波の干渉もまじり話は複雑である。図10が計算値、図11が実験値である⁸⁾。

3) の小角散乱とは、微分散乱断面積が散乱角 θ の小さなところで散乱波同士の干渉のために振動が起る。

4) の非断熱遷移のある場合には、厳密な意味では衝突径数法は定義できない。すなわち衝突径数法ではつぎに述べるように相対運動を古典的に表現し内部状態を量子力学的にあらわしている。準位遷移があるとこれによって古典的軌道は異なるわけである。すべての状態が遷移するのであれば軌道は一義的にきまるが、ある確率で遷移する場合は古典軌道は一義的には決められない(図12)。

v が大きい場合や衝突径数が大きい場合には、実効的ポテンシャルは遠心力項

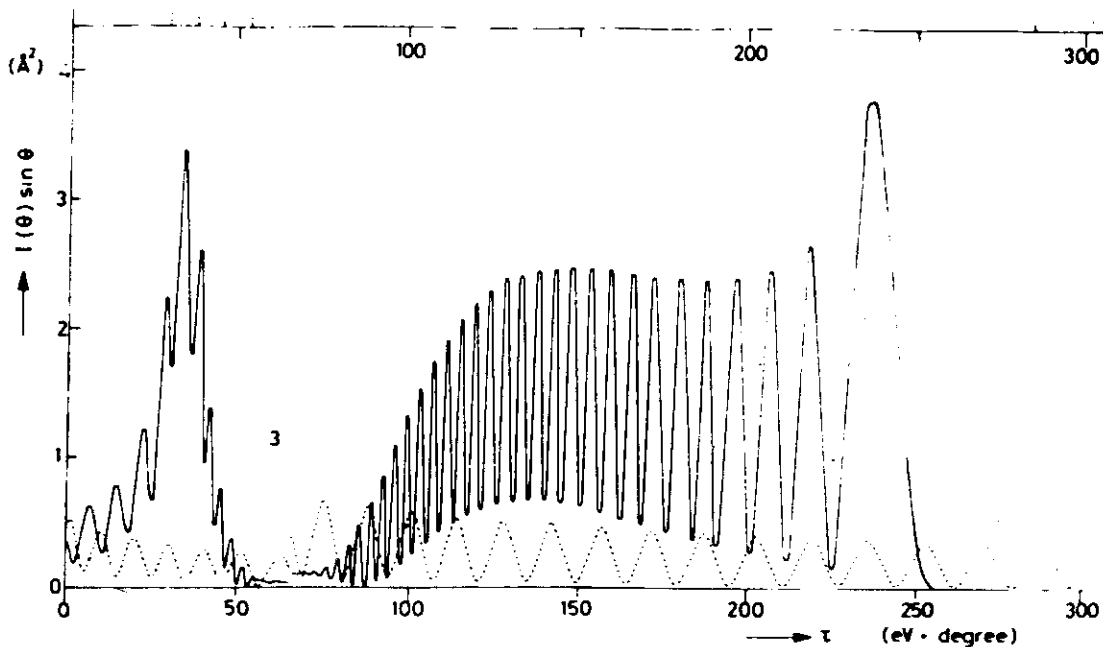


図10 $\text{Na} + \text{I} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{I}^-$ の微分散乱断面積，縦軸は $I(\theta) \sin \theta$ ，縦軸は $E \theta$ をとっている。 $(I(\theta))$ は微分散乱面積 θ 散乱角， E : 入射エネルギー（重心系）。

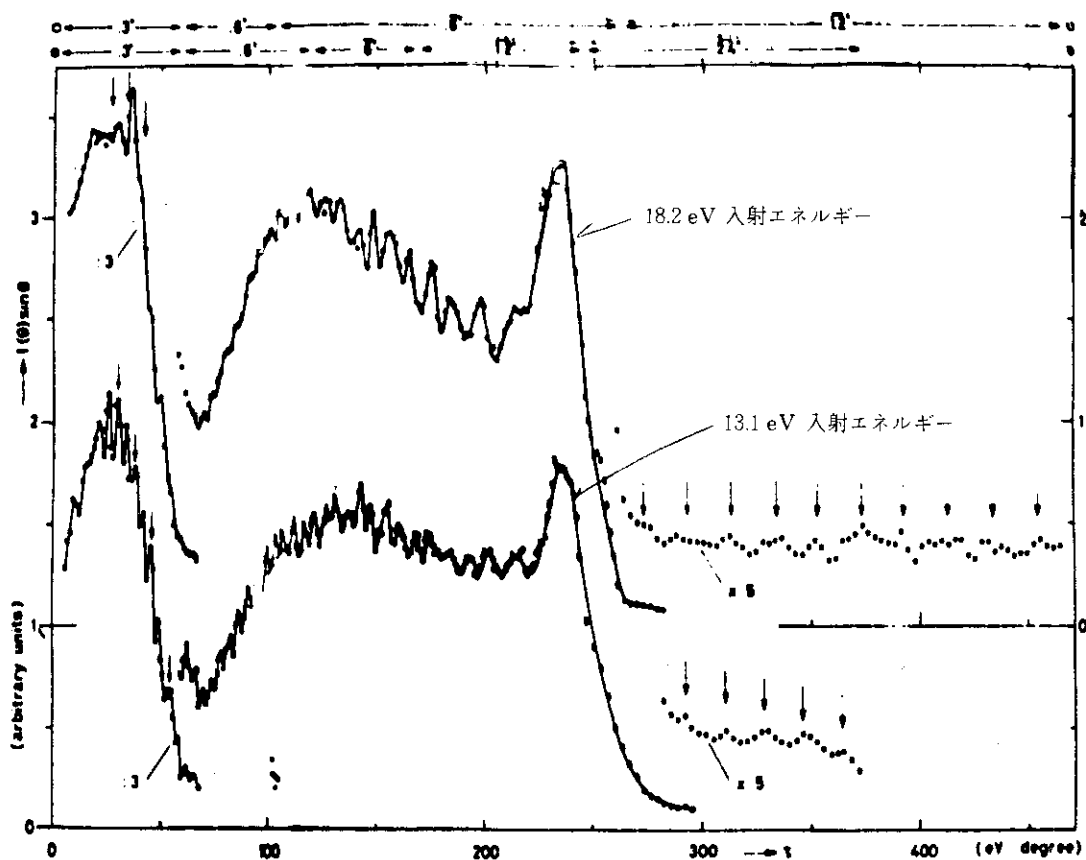


図11 $\text{Na} + \text{I} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{I}^-$ の上の計算に対応する実験値

$$+ \frac{\ell(\ell+1)}{2mR^2} \quad (11)$$

が加わるために、この準位のちがいによる軌道の差はわずかとなり、多くの場合直線近似であらわされる。

$v \rightarrow$ 小 $b \rightarrow$ 小の場合にはこのことがあらわれて量子力学的に扱うことが必要となる。

このように量子力学的効果は何を問題とするかと云う対象によっても考慮に入れねばならなかったり、その必要がなかったりする。

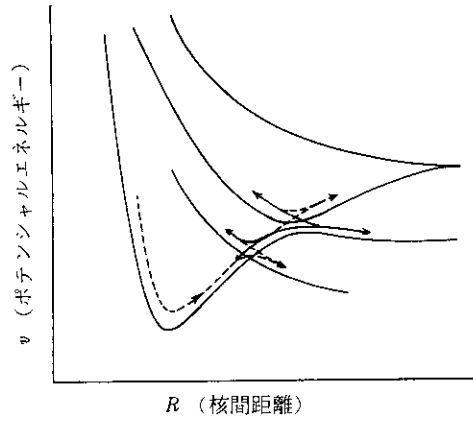


図12 非断熱遷移のある場合には、遷移によって古典軌道が異なるために R と t の関係が一義的に決められなくなる。

3 衝突径数法 I (分子基底)

衝突径数法 (Impact parameter method) では相対運動は古典的に内部状態は量子力学的に扱う。いま衝突系の内部状態の波動関数を

$$\Psi = \sum_n a_n(t) \psi_n(\vec{r}, t) \exp \left[-i \int_{-\infty}^t E_n(t') dt' \right] \quad (12)$$

と展開すると考える。この場合に $\psi_n(\vec{r}, t)$ をどのような基底の波動関数とするかによって、係数 $a_n(t)$ の満足する方程式が異なる。基底の波動関数には代表的な二つの場合に分れる。 ψ_n に分子軌道を用いた分子基底と原子軌道を用いた原子基底である。(以後とくに断らない限り原子単位 ($e = m = \hbar = 1$) を用いる)。

分子基底についてのべる。 ψ_n は分子軌道すなわち2原子の全電子ハミルトニアン H_{el} の固有関数であり、

$$H_{el} \psi_n = E_n(R(t)) \psi_n \quad (13)$$

を満足している。ここで $E_n(R(t))$ は分子電子状態の固有エネルギーであり、核間距離 R の関数である。また R は t の関数であるので時間 t による。(式 (12) を時間依存のシュレーディンガー方程式に代入し (13) の条件を用いることによって a_n に関する方程式

$$\begin{aligned} \dot{a}_n = & - \sum_m \langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} \psi_m \rangle a_m \\ & \times \exp \left[+i \int_{-\infty}^t \{ E_n(t') - E_m(t') \} dt' \right] \end{aligned} \quad (14)$$

をうる。ここで注意すべきことは E_n はすでに H_{el} のハミルトニアン行列で対角化された固有値であることである。したがって相互作用は時間微分の項しかあらわれない⁹⁾

式 (14) を $a_m(-\infty) = 1$, $a_m(-\infty) = 0$ $m \neq n$ のもとで解いて $a_n(\infty)$ を求めれば、 $n \rightarrow m$ の遷移の断面積 $\sigma_{n \rightarrow m}$ は

$$\sigma_{n \rightarrow m} = 2\pi \int |a_m(\infty)|^2 b db$$

で与えられる。ただし b は衝突係数である。(14) 式の E_n , ψ_n は R をパラメータとして含む。これらの時間依存性はこの R と、量子化軸の変化としてあらわれる。これらの間の関係は相対運動が古典力学によって起るとして得られる。 $n \rightarrow m$ に向つる場合には古典的なポテンシャルは一義的にきめられない。この場合は平均的なポテンシャルを考へて $\bar{R}(t)$ の関数をうる。入射速度の比較的速い場合には角運動量が大きく、遠心力ポテンシャルが軌道決定の大部分を占めるので、このような平均ポテンシャルとして大きな誤差は生じない。あとでのべる原子基底の扱いで高速入射の極限の場合として軌道は遠心力ポテンシャルのみで決定されることが出来る、これはそのほかの相互作用を無視して得られる軌道であるので直線軌道となる。

この衝突径数法 (半古典論) と量子力学的方法との関連について述べる。まづ全波動関数 Φ を電子固有関数 $\psi_n(\vec{r}, R)$ と相対運動波動関数 $\chi_n(R)$ の積としてあらわす

$$\Phi = \sum_n \chi_n(R) \psi_n(\vec{r}, R) \quad (15)$$

$\psi_n(\vec{r}, R)$ は式 (13) を満足し、 $\chi_n(R)$ は M を衝突系の換算質量として

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2M} \nabla_R^2 + E_n(R) + V_{nn} - E \right) \chi_n(R) \\ &= \sum_{n'} \langle \psi_n | \frac{1}{2M} \nabla_R^2 | \psi_{n'} \rangle \chi_{n'}(R) \end{aligned} \quad (16)$$

で満足する。こゝで式 (16) の右辺の演算子 ∇_R^2 は ψ_n と χ_n の両方に作用する。 $V_{nn}(R)$ は核間の反跳力である。いま

$$K = \{ E - E_n(R) - V_{nn}(R) \}^{1/2} \sqrt{2M} \quad (17)$$

なる量を定義する。式 (16) は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2M} (-\nabla_R - iK) (-\nabla_R + iK) \chi_n(R) \\ &= \sum_{n'} \langle \psi_n | \frac{1}{M} \nabla_R | \psi_{n'} \rangle \nabla_R \chi_{n'} \end{aligned} \quad (18)$$

となる。この場合右辺の ∇_R は $\psi_{n'}$ および $\chi_{n'}$ にのみ作用する。また上で

$$\langle \psi_n | \frac{1}{2M} \nabla_R^2 | \psi_n \rangle \cong 0 \quad (19)$$

と省略した。式 (17) の中で

$$-\nabla_R \chi_n \cong iK \chi_n \tag{20}$$

を近似する。式 (18) は

$$\left(-\frac{iK}{M} \nabla_R - \frac{K^2}{2M}\right) \chi_n = \sum_{n'} \langle \psi_n | -\frac{i}{M} \nabla_R | \psi_{n'} \rangle iK \chi_{n'} \tag{21}$$

となる。ここで

$$\chi_n = c_n \exp \left[i \int_{-\infty}^t (E - E_n(R) - V_{nn}(R)) dt \right] \tag{22}$$

$v t = Z$, $\nabla_R = \partial/\partial Z$ とすると

$$\dot{c}_n = \sum_{n'} \langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} | \psi_{n'} \rangle c_{n'} \exp \left[-i \int_{-\infty}^t (E_n - E_{n'}) dt' \right] \tag{23}$$

をうる。これは式 (13) と本質的に同じであることがわかる。これには (19), (20) の近似と $\nabla_R \cong \partial/\partial Z$ (直線近似) によって得られるわけである。

再び式 (14) (又は式 (23)) にもどる。式 (14) での相互作用演算子 $\partial/\partial t$ は核間距離 R の変化と分子軸の回転 θ を通して起るので

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial R}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= v_R \frac{\partial}{\partial R} + \frac{v_\infty b}{R^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned} \tag{24}$$

ただし v_R は動径方向の速さ, v_∞ は $R = \infty$ のときの入射速度, b 衝突径数である。式 (24) の第1項を動径結合 (radial coupling), 第2項を回転結合 (rotational coupling) と云っている。動径結合の行列要素は図13に示すように核間距離 R に対して準位の擬交差 (avoided crossing) している点に局在している。しかし回転結合は準位交差している点に行列要素が局在していることはない (図14)¹⁰⁾。

分子基底の扱いは入射速度 (相対速度) が電子の (分子) 軌道速度より遅い場合に有用な近似である。分子基底の基底関数の数を多くとれば, それだけ適用入射速度の領域もひろがるわけであって, 基底関数の数を多くとればこれよりも高い速度領域にも適用出来

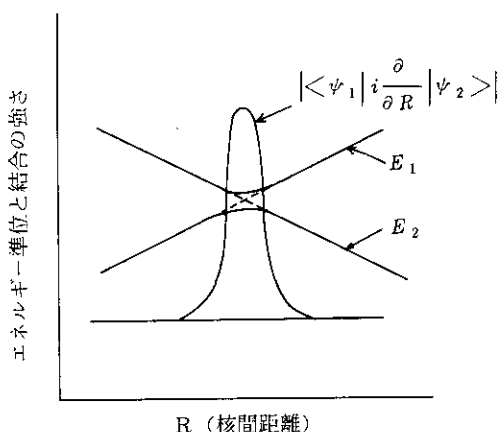
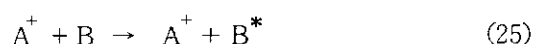


図13 動径結合の強さの R (核間距離) 依存性, 実際の結合の強さはこれに v_R (相対速度の動径方向成分) を乗じたものである。

る。また軌道速度は関数軌道になるほど速くなるので、適用可能な相対速度の領域も速くなる。例えばUのK殻が対象の場合には $v = 92 \text{ au}$ (250 MeV/amu) まで分子基底の近似がよい。

分子基底の扱いの特徴(欠点?)は相互作用が微分演算子であることである。微分演算子の特徴は座標の原点を自由に移動できることである。このために行列要素を形成している初めと終りの波動関数 ψ_n , ψ_m が核間距離 R が大きくなって0にならず一定値になる場合にはこの行列要素は $R \rightarrow \infty$ になっても残る。例えば



などの場合である。 $A^+ + B$, $A^+ + B^*$ を分子基底で表現しこれを原子軌道の線形結合であらわすと、 $R \rightarrow \infty$ で電子はいつでもBにいるので、この状態間の行列要素はいつまでも

$$\langle \psi_n | \nabla | \psi_m \rangle \quad (26)$$

の形で値が残る。もしBと B^* にエネルギー準位に差がなければ(例えばH(2s)とH(2p)の様な場合)断面積は ∞ になってしまう。これは不合理である。この理由は分子基底の表現の中に A^+ もBも相対的に走っている事を入れていないためである。分子軌道もAに近くあるときはAと同じ方向に走り、Bの近くにきたときはBの方向を走ると言うことを入れないと例え低速度でも余計な相互作用をとり込むことになる。これを spurious interaction と呼んでいる。

spurious interaction が入った場合には回転結合は図13の点線のようなになる。spurious interaction を除いて本当の相互作用にするには上に述べたように原子が走っている効果を入れる必要がある。これをETF (electron translation factor 電子走行因子)と云っている。対称型(例えば $Li^+ + Li$ のような)の場合

$$\psi_n \rightarrow \psi_m \exp \left[-i s \vec{v} \cdot \vec{r} / 2 \right] \quad (27)$$

ここで s は r がAの近くにいるときは+1, Bの近くにいるときは-1になるような関数で switching function とし云っている。^{11,12)} このようなETFをswitching functionを用いて導入することにより図13の実線のような行列要素の値になる。

4. 衝突径数法II (原子基底)

相対速度が速くなれば衝突の間に電子が準分子軌道を1周する時間がなくなる。この場合分子基底の扱いは近似が悪くなり基底関数を沢山とる必要が生じる。しかしそれにも限度があり、原子基底をとった方がよくなる。¹³⁾ すなわち、少ない基底関数でよくあわせるのはそれだけ物理的事情を反映しているわけである。このように原子基底は高速度でよい近似であるが、低速度でもよい近似となる場合がある。すなわち原子基底の用いられる criterion は v が軌道速度より

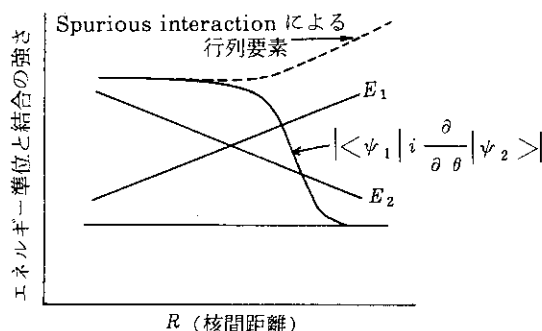


図14 回転結合の強さの R (核間距離) 依存性、実際の結合の強さはこれに $v_\infty b / R^2$ を乗じたものである (v_∞ : $R = \infty$ のときの相対速度, b : 衝突径数)

遅くても

$$|\text{衝突による不確定性のエネルギー巾}| > \Delta E \quad (28)$$

と云う条件が満たされれば原子基底の取扱いがよい近似となる。ここで ΔE 原子基底のエネルギー準位が、粒子が近づいたためのエネルギー分裂を起したときのエネルギー差である。例えば H^+ と H の場合 $1s\sigma_g$ と $1s\sigma_u$ の準位差がこれに当る。

すなわち低エネルギーの入射の場合でも distant collision が主な過程となる場合にはよい近似である。

(図 15)

原子基底衝突径数法では衝突系の内部状態 (今の場合電子状態) の波動関数として (12) 式の $\psi_n(r, t)$ を原子ハミルトニアン固有関数とすることである。すなわち、

$$H_0 \psi_n = E_n \psi_n \quad (29)$$

$$\text{たゞし} \quad H_0 = H_A + H_B \quad \psi_n = \psi_n^A \psi_{n'}^B \quad (30)$$

$$\text{で} \quad H_A \psi_n^A = E_n^A \psi_n^A \quad H_B \psi_{n'}^B = E_{n'}^B \psi_{n'}^B$$

$$\text{として} \quad E_n = E_n^A + E_{n'}^B$$

となる。ここで E_n, ψ_n は t に依存せず一定であるために (12) 式に当る展開は

$$\Psi = \sum_n a_n(t) \psi_n(\vec{r}) \exp[-i E_n t] \quad (31)$$

となる。

係数 $a_n(t)$ の満足する方程式

$$\begin{aligned} \dot{a}_n &= \frac{1}{i} \sum_m \langle \psi_n | H' | \psi_m \rangle a_m \\ &\times \exp[-i(E_m - E_n)t] \end{aligned} \quad (32)$$

たゞし $H' = H - H_0$ である。

相対速度の速い場合の電荷移動過程では電子が移動するための運動量に移る効果を考慮に入れなければならない。すなわち (31) の展開での基底波動関数では原子AあるいはBが走っていると云う効果を入れる必要がある。すなわち

$$\psi_n(\vec{r}) \rightarrow \psi(\vec{r}_A, \text{ or } \vec{r}_B) \exp\left[\pm i \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{r} + i \frac{v^2}{8} t\right] \quad (33)$$

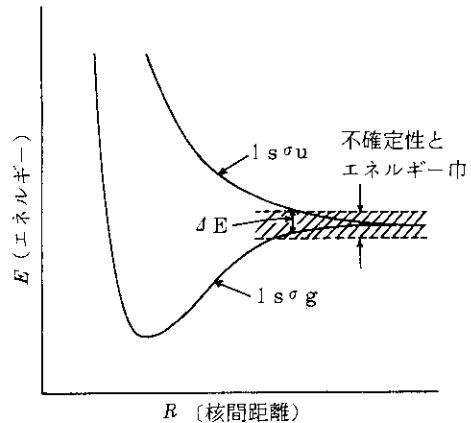


図 15 原子基底の成立つ範囲の指針、衝突による不確定性の巾が ΔE より大きければ原子基底はよい近似である。

とおく±は2つの原子の走行する方向によってきめられる¹⁴⁾。式(33)の指数関数の中はAとBの中心に対して、それぞれ $+\vec{v}/2$, $-\vec{v}/2$ 方向に電子が走っていることを示している。これは式(27)と同じくETF(電子走行因子, Electron translation factor)である。A, Bの質量が異なる場合にはAB間の中心でなくAB間の重心に電子座標 \vec{r} の原点にとるべきと考えられるが、入射軌道が直線の場合には同じ結果になると云う証明があり、散乱角が小さい場合にはこの効果は小さいことがわかっている。

5. 高速度領域での電荷移動と断面積

前節で述べたように入射速度が速い場合には原子基底で考えるのがよい近似であるが



などのようにA, Bの間に電子の移動がない場合には、高速度は相互作用する時間が単に $1/v$ になるために断面積 σ

$$\sigma \propto T^2 \propto |\langle i | H' | f \rangle|^2 \propto \frac{1}{v^2} \quad (36)$$

と云う依存性をもっている。¹⁵⁾ これに対して



などのようにBからAへ電子が移動する場合には式(33)のETFのためにこの過程の衝突断面積 σ は入射速度とともに急速に減少する。この意味は

$$\sigma \propto T^2 \propto |\langle i | H' | f \rangle|^2 \quad (38)$$

で

$$\langle i | H' | f \rangle = \int \langle i | k \rangle \langle k | H' | f \rangle dk \quad (39)$$

$$\cong \int \langle i | k \rangle \langle k | f \rangle dk \langle H' \rangle \quad (40)$$

$\langle H' \rangle$ は k の依存性が少ないと見て k についての積分の外へ出したものである。 $\langle i | k \rangle \langle k | f \rangle$ は初期状態, 終状態のフーリエ変換あるいは運動量分布である。この運動量分布は式(33)のETFのためにその中心がずれる。相対速度 v が大なるに従って、その中心間の距離はひろがり、この重なり積分(式40)は急速に小さくなる。一次摂動のOBK(Oppenheimer - Brinkmann - Kramers)近似では σ は¹⁶⁾

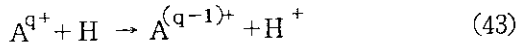
$$\sigma \propto v^{-12} \quad (41)$$

で減少する。二次摂動では

$$\sigma \propto v^{-11} \quad (42)$$

で減少する。二次摂動の減少の割合が一次摂動より ν の依存性より小さいためにいずれは二次摂動の方が優るとの議論があるがこれは $\nu \geq 10 q$ (ただし q は入射イオンの電荷, ν は原子単位, すなわち核子当りのエネルギー $-2.5 \times q^2$ MeV/amu 以上) でないと起らない。式 (40) の ν が大きい場合概念図を図 16 に示す。

また



の電荷移動断面積の核子当りの入射エネルギー依存性の概念図を示す。

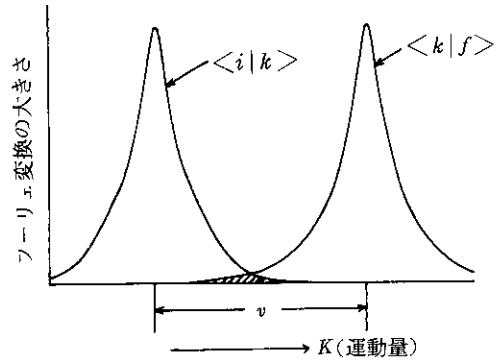


図 16 $\langle i | H' | f \rangle$ の高速入射の場合の運動量空間の重なり概念図。

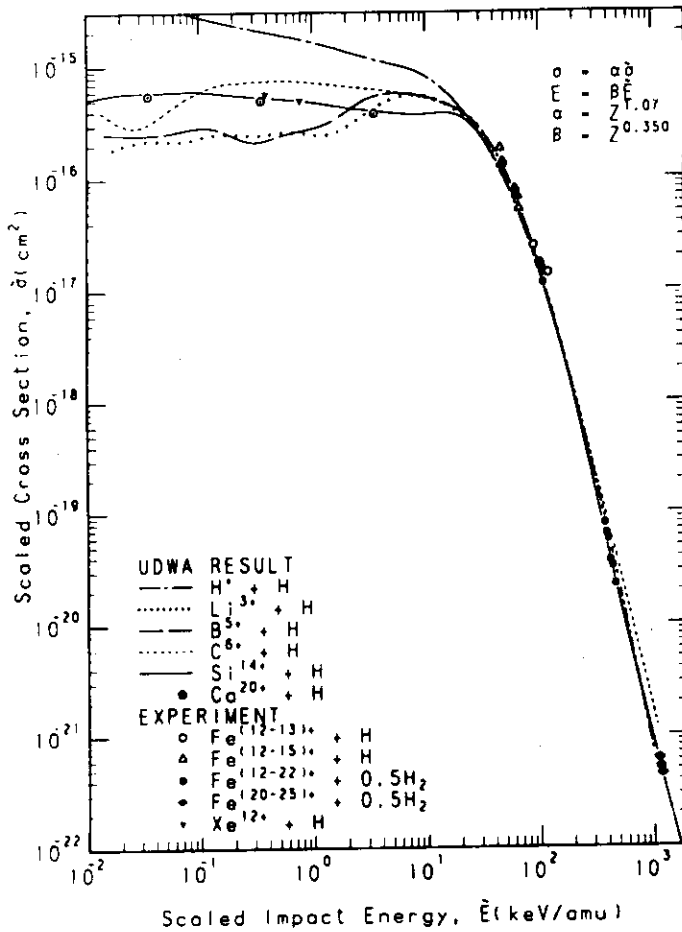


図 17 $A^{q+} + H \rightarrow A^{(q-1)+} + H^+$ の断面積 σ と核子当りエネルギーの関係を示す。 σ , E とともにスケールしてある。

6. 直接過程

これまで述べて来たことは分子基底にせよ原子基底にせよ系の電子準位が準位交叉している（分子基底の場合の擬交叉も含めて）点を通して遷移が起っていた。しかし、系は衝突しているのであり、有限の時間しか相互作用しない。このために準位は不確定性のエネルギー巾をもって、このエネルギー巾の中では交差をしていますが、擬交叉であっても見分けはつかない（図 18）。

このエネルギー巾は確定したものではなくエネルギー差 E_{nm} の比較的大きい二準位間でも確率はわずかであるが遷移の確率が存在する。準位が連続的に存在して、どの準位へも遷移可能な場合には遷移の分布があらわれる。^{17,18,19)} これを式の上から眺めて見よう。衝突径数法による定式化によって系の電子状態波動関数 Ψ は

$$\Psi = \sum_i c_i(t) \psi_i(\vec{r}, t) \exp\left(-i \int_{-\infty}^t E_i dt'\right) \quad (44)$$

（簡単のため ETF は考えないことにする）と考えられるとする。ここで ψ_i は原子軌道、分子軌道のいずれでもよい。 ψ_i は

$$H_0 \psi_i = E_i \psi_i, \quad H = H_0 + H'$$

を満足する。 Ψ が時間依存のシュレーディンガー方程式を満足するとして係数 $c_i(t)$ の満足する方程式は

$$i \frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_j \langle \psi_i | H' - i \frac{\partial}{\partial t} | \psi_j \rangle c_j \exp\left[+i \int_{-\infty}^t (E_i - E_j) dt\right] \quad (45)$$

である。いま $E_i - E_j$ は準位交差するのではなく図 19 の様にほぼ平行になっていると考える。離散準位 E_j が密に沢山ある場合、および連続準位 E_k がある場合を想定する。具体的には準分子状態にある電子準位 E_i からの電子励起、電離などを考えている。

式 (45) での指数関数の項は $E_i - E_j = E_{ij}$, または $E_i - E_k = E_{ik}$ がほぼ一定と見做せるので、

$$\exp[iE_{ij}t] \quad \text{または} \quad \exp[iE_{ik}t]$$

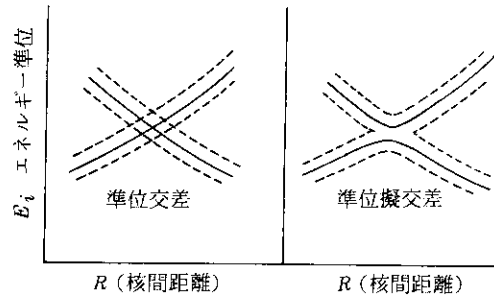


図 18 衝突時間が有限であるためのエネルギー不確定性の巾の中では準位交差であるか、準位擬交叉であるかの区別はなくなる。

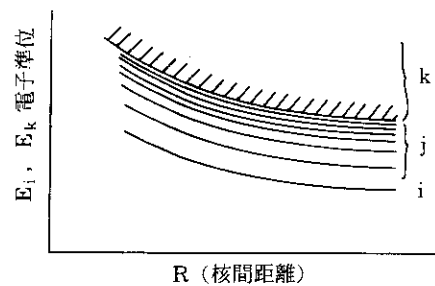


図 19 $(E_i - E_j)$ が交差しないのでほぼ平衡に走っている場合の概念図。準分子状態での電子励起電離などを考えている。遷移 $i \rightarrow j$ は電子励起、遷移 $i \rightarrow k$ は電離過程を示す。

となる。この場合の遷移確率は正確には式(45)を解くことによって得られるが、近似的に一次摂動の考え方によるとすると、

$$P_{i \rightarrow j} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi_i | H' - i \frac{\partial}{\partial t} | \psi_j \rangle \exp [i E_{ij} t] dt \right|^2 \quad (46)$$

で得られる。式(46)は行列要素 $\langle \psi_i | H' - i \frac{\partial}{\partial t} | \psi_j \rangle$ のフーリエ変換と見ることが出来る。

ψ_i が分子軌道の場合には $H' = 0$, $\partial/\partial t$ の項は式(24)によってあらわされる。分子基底では ψ_i は R, θ の変化を通してのみ t に依存しているの

$$P_{i \rightarrow j} = \left| \int \left\{ v_R \langle \psi_i | i \frac{\partial}{\partial R} | \psi_j \rangle + \frac{v_{\infty} b}{R(t)^2} \langle \psi_i | i \frac{\partial}{\partial \theta} | \psi_j \rangle \right\} \times \exp(i E_{ij} t) dt \right|^2 \quad (47)$$

となる。第1項の積分は時間に依存しない項のフーリエ変換と考えれば ≈ 0 である。第2項は時間に依存するのは $R(t)$ のみと近似すると

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{R(t)^2} \exp(i E_{ij} t) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{b^2 + (v_{\infty} t)^2} \cdot \exp(i E_{ij} t) dt \\ &= \frac{\pi}{b v_{\infty}} \exp \left[-b \frac{E_{ij}}{v_{\infty}} \right] \end{aligned} \quad (48)$$

となる。したがって遷移確率 $P_{i \rightarrow j}$ は

$$P_{i \rightarrow j} = \pi^2 \left| \langle \psi_i | i \frac{\partial}{\partial \theta} | \psi_j \rangle \right|^2 \times \exp \left[-2b \frac{E_{ij}}{v_{\infty}} \right] \quad (49)$$

である。 $b E_{ij} / v_{\infty} \approx 1$ はマッセイ判定条件であり、この場合に $P_{i \rightarrow j}$ の遷移が起り易いと考えられている。これは物理的には有限の衝突時間のため準位の不確定性が原因で遷移が起ることを示している。いま $E_{ij} \rightarrow$ 大の場合には同じ b, v_{∞} に対して遷移確率 $P_{i \rightarrow j}$ は

$$P_{i \rightarrow j} \propto \exp \left[-\frac{2b}{v_{\infty}} E_{ij} \right] \quad (50)$$

の依存性で減少することを示している。終状態が連続状態の場合にもこの結論は変わらない。

終状態がいくつかあり、終状態へ行く分布、励起又は電離のスペクトルを考えると E_{ij} 又は $E_{ik} \rightarrow$ 大 では一定の b に対して凡そ、式(50)によってあらわされ、断面積に対しても同じ傾向をもって説明される。図20にその一例を示す。

ψ_i が原子軌道の場合には式(47)で $i \frac{\partial}{\partial t}$ の項はなくなり、 H' のみが残る。一般に H' は R に対して

$$H' = A \cdot R^{-n} \quad (51)$$

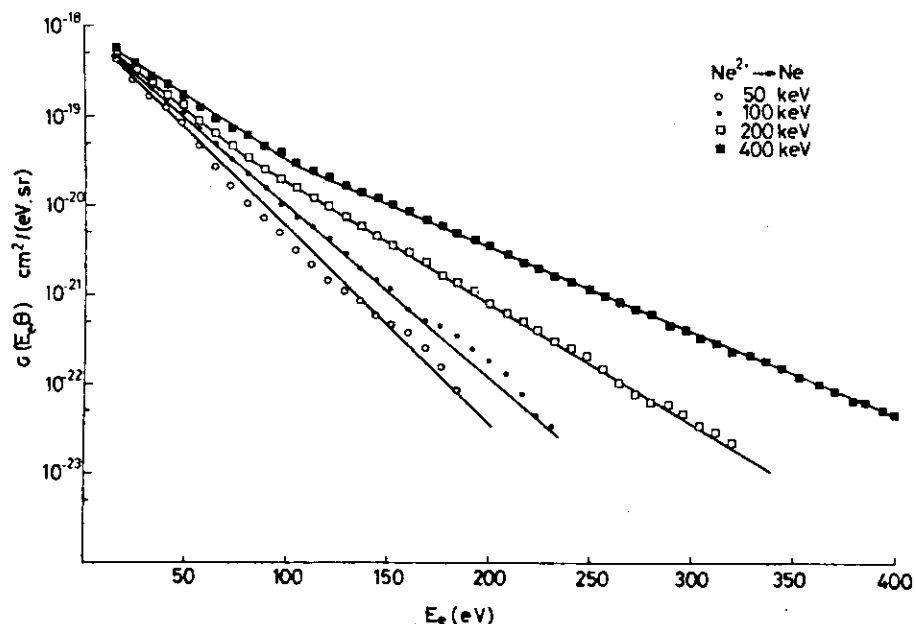


図20 $Ne^{2+} + Ne$ の場合の分子軌道からの直接電離の電子スペクトル[19]。

の依存性をもっていると近似することが出来る。glancing collision による双極子遷移では $n = 2$ であり、四重極子遷移では $n = 3$ である。式 (51) を仮定すると分子基底の場合と同様の取扱いを行なうことにより

$$P_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi E_{ij}^{n-1} A^2}{\Gamma^2\left(\frac{n}{2}\right) v_\infty^{n+1} b^{n-1}} \cdot K_{\frac{n}{2} - \frac{1}{2}}\left(\frac{b E_{ij}}{v_\infty}\right) \quad (52)$$

をうる。ここで $K_\nu(x)$ は第2種変形ベッセル関数である。 $K_\nu(x)$ は x が大きいときは

$$K_\nu(x) \propto \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \quad (53)$$

のように振舞うので、 E_{ij} が大きいときには $P_{i \rightarrow j}$ はやはり

$$P_{i \rightarrow j} \propto e^{-2b E_{ij} / v} \quad (54)$$

のように依存する。

電離過程の場合も全く同じ様に議論をすゝめることができる。このように直接過程による電離放出電子のスペクトルはほぼ

$$I \propto \exp(-\alpha E_{ik}) \quad (55)$$

のような強度 I の E_{ik} 依存性を示すことになる。

上に述べたように直接過程による電離電子のスペクトルの指数関数依存性は分子基底では回転結合の項より生じ、原子基底では相互作用が R^{-n} に比例する場合に一般にあらわれる。

7. まとめ

以上イオン・原子衝突の分野での理論の現状

重粒子系といわれるこの分野の衝突現象の特徴は始めにも述べたように入射粒子、標的粒子ともに内部構造をもっていることと、相対運動に関して半古典的取扱い（衝突径数法）がよい近似で許されるので、物理的描像をえがく上でも、理論的取扱いの上でも、問題は多岐にわたるが、取扱い法としては一応方向が確立していると考えてよい。しかし未だ全く未解決の本質問題もある。

ここではいままでの話をふり取りながらこれらの問題を挙げてこれからの研究の指針としたい。

- (1) 化学反応論を原子衝突の理論から見なおすことは近年盛になってきている。この場合十分な精度でポテンシャル曲面を求めることがまず必要である。これが主として大型計算機の性能の大幅な向上によって可能となった。近接衝突の特徴を考慮に入れたより精密な理論の定式化が期待される。現在全量子力学的取扱い法の開発にはいくつかの困難がある。またポテンシャル面が複数面ある場合の化学反応については2, 3特殊な場合についての研究があるのみであるがこれらがさらに多くの例について研究されれば、この問題についてもいくつかの特徴をもつ場合に体系化出来るであろう。
- (2) 分子基底の取扱い法は一応方法の確立を見ている様に見える。しかしこれはいくつかの本質的な困難性が内在している。その第一は本来走っている系を分子軌道として表現することの問題である。これを元来原子核が静止している表現である分子軌道で描こうとすれば、極めて収束の悪い展開を行っていることになる。こうした点を改良してETFを付したが、こうするとswitching functionという定義に任意性を含む関数を導入しなければならない。これを変分法で求めるという話もあるが、下手をするとswitching functionを求めるためには散乱問題を正確にとく必要があるというような本来転倒のことになってしまう。ETFを入れると計算は非常に複雑になる。ETFを入れないと全断面積はよいのであるが、どの電子状態に行ったかという部分断面積については信頼性のある答は得られない。
- (3) 原子基底の取扱い法は始めからETFを容易にとり入れられるということでは有利である。また結合方程式をとく場合に行列要素の計算も分子基底よりは容易である。一般には原子基底は $v > u$ (v : 入射相対速度, u : 遷移に関与する電子の軌道速度)で成立つと理解されていることが多いが本文中に述べたように、実は遥かに低速度でも成立つ場合がある。近年C. D. Linたちはこうした計算の実証に力を入れている。²⁰⁾ この方法での一番の問題は入射粒子にある原子軌道と標的粒子にある原子軌道が直交しないということである。断面積の大体の傾向や凡その値を求める間はよいが、計算を精密化しようとするとき二つ中心の原子軌道であらわしているためのいわゆるovercomplete問題から種々の理論的な問題点があられる。とくにCTC (charge transfer to continuum) を扱おうとするとこの問題に直面する。まさに原子基底での諸悪の根源はここにある。
- (4) 電荷移動 (charge transfer, CT) の高速度極限については未だに解明されていない過程である。問題の困難さは断面積が急速に減少するために、あまりに小さくなりすぎて、他のいろいろ小さな寄与の高次効果も無視出来なくなって来ることである。本文でも述べた

ように初期状態と終状態の波動関数の運動量分布の重なりでT行列がきめられるのであるが、高速度極限ではこの重なりは、両方の原子核の近傍の波動関数によってきまり、ますます close collision になるため原子軌道の非直交性の問題が重要となる。Born 近似の2次摂動では、いわば2回衝突で distant collision の寄与があり、これが v^{-11} に比例するために、最終的にはこの項が勝つと考えられているがその実験的確認はまだない。

- (5) 直接過程は高速度の場合には、クローン相互作用による過程として扱われており、目新しいものではない。低速度の場合には不確定性の巾が小さいために一般に問題にならないと考えられていた。しかし電離放出電子のスペクトルのようにわずかの確率でもこれを問題にし観測出来るとなると話は別になる。この問題は1979年頃から問題になり出した。^{18,19)}しかし理論的にはその前から別の過程の中で考えられ論じられている¹⁷⁾。ここで述べた分子軌道からの直接励起が回転結合からであろうということは未だ実験的な確認はなく、その検証が望まれる。

参考文献

- [1] 特集「原子分子過程としての化学反応」日本物理学会誌 36 (1981) 91 ~ 124.
- [2] T.C. Tully: "Potential Energy Surfaces" Adv. in Chem. Phys. vol 42 ed by K.P. Lawley (John. Wiley and Sons. Chichester 1980) p.88
- [3] R.D. Levine and R.B. Bernstein: Molecular Reaction Dynamics (Oxford Univ. Press, 1944)
邦訳 井上 鋒朋訳「分子衝突と化学反応」(東大出版会, 1976)
- [4] E.W. McDaniel, V. Čermák V. Dalgarno, E.E. Ferguson and L. Friedman: "Ion. Molecule Reactions" (Wiley-Interscience, New York, 1970)
- [5] 高柳和夫「電子・原子・分子の衝突」(培風館 1972) 第5章.
- [6] U. Fano and W. Lichten: Phys Rev. Letters 14 (1963) 229
- [7] H. Ryufuku and T. Watanabe: Phys Rev. A20 (1979) 1828
- [8] G.A. Delvigne and J. Los: Physica 67 (1973) 166
- [9] J.S. Briggs and J. Macek: J. Phys. B 5 (1972) 579
- [10] T.G. Willer and N.F. Lane: Phys Rev A17 (1978) 66
- [11] W.R. Thorson and J.B. Delos: Phys Rev A18 (1978) 117
- [12] K. Taulbjerg and J.S. Briggs: J. Phys. B 8 (1975) 1895. J.S. Briggs and K. Taulbjerg: J. Phys. B 8 (1975) 1.
- [13] L. Willets and P. F. Cialleher: Phys. Rev. Letters 147, (1966) 13
- [14] D.R. Bates and R. McCarroll: Proc. Roy. Soc. London A245 (1958) 175.
- [15] 高柳和夫「電子・原子・分子の衝突」(培風館 1972) 第4章, 第5章.

- [16] H.C. Brinkman and H.A. Kramers: Proc. Roy. Acad. Sci, Amsterdam 33 (1930) 973
- [17] W.R. Thorson: Phys. Rev. A12 (1975) 1365
- [18] T. Watanabe, P.H. Woerlce and Yu. S. Gordeev: Electronic and Atomic Collisions, XI-ICPEAC abstract Kyoto (The Society for Atomic Collision Research, Tokyo 1979) p652
- [19] P.H. Woerlee, Yu S. Gordeev, H. de Waard and F.W. Saris J. Phys B 14 (1981) 527
- [20] W. Fritsch and C.D. Lin: J. Phys. B 15 (1982) 1255

3. 高励起原子核の統計的崩壊

原研 岩本 昭

1. はじめに

原子核の崩壊といった場合には、通常次のようなものが考えられる。

$$\left[\begin{array}{l} \gamma - \text{decay}, \text{ IC}, \\ (\beta^-, \beta^+) - \text{decay}, \text{ EC}, \\ \text{fission} \\ \text{particle - decay} \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} \alpha - \text{decay} \\ \text{evaporation} \\ \text{pre - equilibrium emission} \\ \text{direct reaction} \end{array} \right.$$

これらについて全てを述べるのは不可能であるので、ここでは高い励起状態からの崩壊という観点から特徴がある、核分裂による崩壊と前平衡状態からの粒子放出に話をしぼり、最近のトピックスを中心に報告しよう。

2. 核分裂による崩壊

核分裂の研究は、核物理研究のごく初期からの歴史をもっているが、ここ 10 年ほどの間に重イオン核融合反応に引続きおきる核分裂が新たな注目を集めてきた。ここでいう核分裂とは、2 つの重イオンが核融合反応を起して 1 つの複合原子核をつくり、その後それが核分裂を起す現象をいう。通常の自発核分裂や軽イオン、光などの入射による核分裂と比べて、関与する角運動量が非常に大きいことが特徴である。このことの直接的な結果として、核分裂障壁が実質的に低くなり、形成された複合核が核分裂を起しやすくなる。複合核の崩壊において重要な物理量として、 Γ_n / Γ_f という量がある。ここで Γ_f は核分裂による崩壊幅、 Γ_n は中性子放出による崩壊幅であるが、この Γ_n / Γ_f が重イオン反応に於いては非常に大きくなりうる。具体的な表式を得るために、原子核の状態密度 $\rho(E)$ に対して、次のような一定温度 T の分布

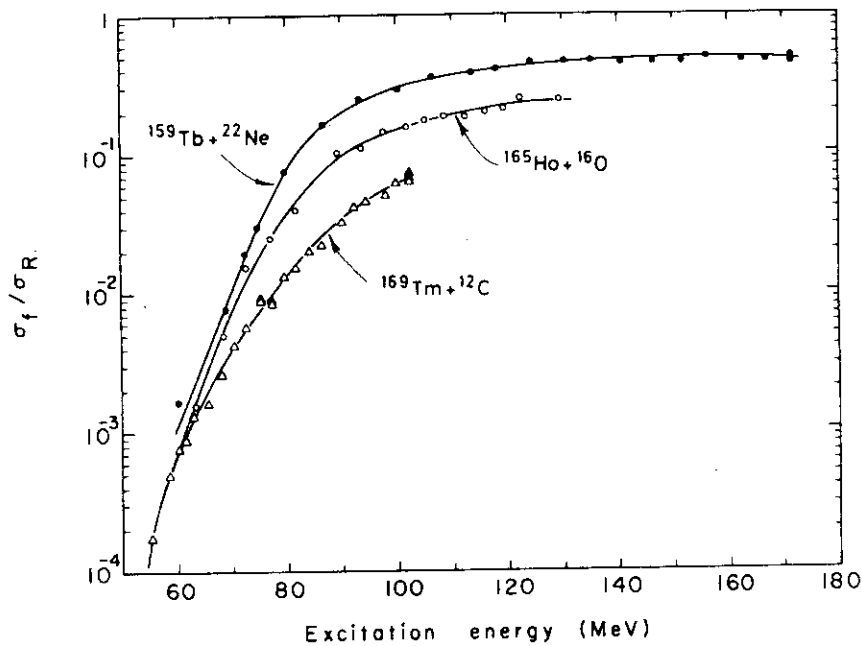
$$\rho(E) = \text{const} \cdot \exp(E/T) \quad (1)$$

を仮定すると

Statistical model for the decay of highly excited nuclei.
Akira Iwamoto
(JAERI)

$$\Gamma_n / \Gamma_f = \text{const} \cdot \exp \{ (B_f - B_n) / T \} \quad (2)$$

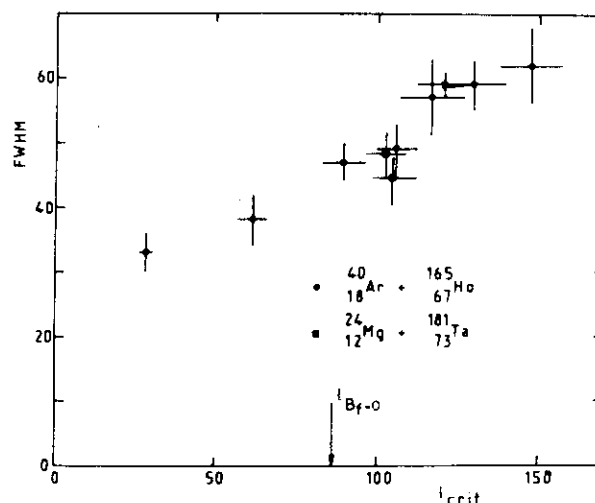
という式が得られる。ここで B_f は核分裂障壁の高さで、 B_n は中性子の束縛エネルギーである。この (2) 式の関係は軽イオン入射の核分裂反応では、比較的良く成立つことが知られている¹⁾。この式のなかに出てくる核分裂障壁の高さ B_f は、核分裂核のポテンシャルエネルギーを計算することにより導かれるが、普通の軽イオン入射の場合には角運動量が零の場合の値が使われる。しかしながら重イオン入射の場合には持込まれる角運動量が大きいため、それに対する遠心力ポテンシャルを加えたものが問題となる。その結果 B_f の値は小さくなり、一方の B_n は角運動量に依存しないと考えると、 Γ_n / Γ_f は小さくなる。直観点には複合核を高速度で回せばちぎれやすくなるというふうに理解できる。この為、軽粒子反応では核分裂を起さないような比較的軽い核も、重イオン核融合-核分裂反応を起し、実際その現象が広く観測されている。この事情を示す例として、第1図に同一の複合核 ^{181}Re を作る3種類の重イオン反応での σ_f / σ_R が、複合核の励起エネルギー E の関数として示してある。ここで σ_f は核分裂断面積、 σ_R は全反応断面積である。同じ励起エネルギーでも、入射粒子の質量が重いほど一般に高い角運動量が持込まれる。それゆえ $^{159}\text{Tb} + ^{22}\text{Ne}$ の場合に最も大きな角運動量が持込まれ、その結果として B_f の値が最も低くなり、従って σ_f / σ_R の値が最も大きくなる様子がこの図より分る。



第1図 同じ複合核 ^{181}Re を作る3種類の重イオン反応に於ける σ_f / σ_R の値を、励起エネルギーの関数として示したもの。文献2より。

次にこの重イオン核融合-核分裂反応での最近の話題の1つを述べる。これは通常“速い核分裂”と呼ばれている現象である。重イオン入射の場合の問題点として、高い角運動量が持込まれるという以外にはたして“通常の複合核”ができるかどうかという点があり、この“速い核分裂”

はこれに関連している。すなわち第2図に、重イオン核融合反応 $^{40}\text{Ar} + ^{165}\text{Ho}$ と $^{20}\text{Ne} + ^{185}\text{W}$ の結果として生じる、対称核分裂の分裂片質量分布の幅を、その複合系がとりうる角運動量の上限値の関数としてプロットしてある。この図で $B_f = 0$ と矢印で示された点付近を境として、質量分布の幅が大きく変化しているように見える。この原因は確定していないが、1つの可能性として次のことが考えられる。すなわち入射エネルギーが高くなるのに応じて、持込まれる角運動量の上限も大きくなる。核分裂障壁の高さ B_f はそれに従がい低くなり、ついにはある角運動量のところで零となる。これ以上の角運動量に対しては、核分裂障壁がないことになり、その複合系は核分裂のモードに対して安定でなくなる—すなわち通常の複合核を形成できなくなる。第2図で $B_f = 0$ と示された点はこの境界の位置を示したもので、この付近で分裂片質量の値が大きく変化していることから、この現象が実験データに表われているのではないかと予想されている。通常の核分裂とは異りこの場合の複合系は短時間の後に分裂してしまうので、これを“速い核分裂”と呼ぶ。この予想が正しいかどうかは今の所明白ではなく、今後よりくわしい研究を必要とするが、重イオン反応で引起される核分裂については、この様な中間的な現象が起る可能性は十分あると思われる。なお $B_f = 0$ の点は回転する液滴模型による計算値である。



第2図 2種類の重イオン反応により作られた複合核 ^{205}At の核分裂より生じる分裂片質量分布の幅。文献3より。

第2図で $B_f = 0$ と示された点はこの境界の位置を示したもので、この付近で分裂片質量の値が大きく変化していることから、この現象が実験データに表われているのではないかと予想されている。通常の核分裂とは異りこの場合の複合系は短時間の後に分裂してしまうので、これを“速い核分裂”と呼ぶ。この予想が正しいかどうかは今の所明白ではなく、今後よりくわしい研究を必要とするが、重イオン反応で引起される核分裂については、この様な中間的な現象が起る可能性は十分あると思われる。なお $B_f = 0$ の点は回転する液滴模型による計算値である。

3. 前平衡状態からの粒子の放出

前平衡状態からの放出粒子とは、複合核からの粒子放出より短い時間スケールで放出される粒子をいう。広い意味では直接反応による放出も含むが、ここでは単純な直接反応（例えば1ステップのDWBA）のようなものについては別の機会にゆずり、かなり複雑で統計的な取扱いが可能であるような過程に関して、最近日本でなされた3つのトピックスについて述べる。この3つはGriffinの提唱したエキシトン模型に基いた理論的模型である。エキシトン模型の基礎的理論については前年度のこの研究会で吉田忠郎氏が⁴⁾、又核子放出反応への応用については江尻宏泰氏が⁵⁾それぞれ報告しているので省略する。

まずこの3つのトピックスで共通に使われる基礎方程式を一般的な型で与える。後に述べる3つの応用例ではいずれもこの方程式を直接(3.1)又は近似的(3.2 & 3.3)に解く。方程式は次の形のマスター方程式である。

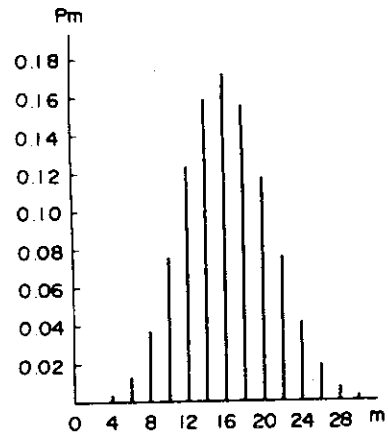
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(\alpha E \mu, t) = & \delta_{\alpha \alpha_0} \delta(E - E_0) \delta(t - t_0) P_0(\alpha_0 E_0 \mu_0) \\ & + \sum_{\alpha' \mu' \beta} (1 - \delta_{\alpha \alpha_0}) \int dE' W^{(1)}(\alpha E \mu; \alpha' E' \mu'; \beta \varepsilon) P(\alpha' E' \mu', t) \\ & + \sum_{\mu'} W^{(2)}(\alpha E \mu; \mu') P(\alpha E \mu', t) \end{aligned} \quad (3)$$

ここで α は原子核の種類, E は励起エネルギー, μ はエキシトン数を表わす。 $P(\alpha E \mu, t)$ は時刻 t に系が状態 $(\alpha E \mu)$ にある確率を表わし, $W^{(1)}$ は状態 $(\alpha' E' \mu')$ より状態 $(\alpha E \mu)$ へエネルギー ε の粒子 β を放出することにより遷移する確率, $W^{(2)}$ は状態 $(\alpha E \mu')$ より状態 $(\alpha E \mu)$ への2体反応による遷移, 及び $(\alpha E \mu)$ から他のチャンネルへのすべての遷移を含む。式 (3) の右辺第1項は $t = t_0$ において系の状態が $P_0(\alpha_0 E_0 \mu_0)$ であったという, 初期条件を表わす項である。

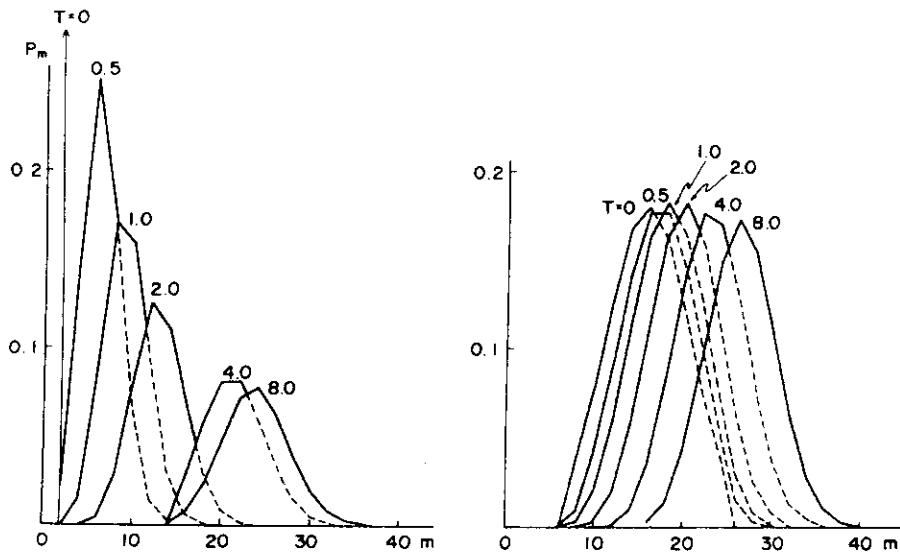
3.1 重イオン核融合反応に伴う前平衡軽粒子の放出 I

これは東北大学の吉田思郎氏によりなされた仕事の紹介である⁶⁾。同程度の質量をもつ重イオン同志の核融合反応に伴う放出軽粒子のエネルギー・スペクトルや, 粒子放出後の種々の断面積を計算する模型で, 通常の統計模型の成分以外に前平衡状態からの粒子放出をも含めて計算を行う。同程度の重イオンを考えるので, エキシトン模型で考える1体場としては, 2つの重イオン核を結合した複合系のポテンシャルを考える。計算が容易であるように, 2核の状態を2つの立方体に閉じ込められたフェルミガスで置換える。さらにもう1つの基本的仮定として, 式 (3) の右辺に表われる初期分布 $P_0(\alpha_0 E_0 \mu_0)$ を計算する際に sudden 近似を用いる。すなわち, 2つの重イオンを表わす立方体の箱をお互に接して置き, その境を瞬間的に取去る過程を考える。この結果ある種の励起状態が複合系の状態として形成され, それは複合系のポテンシャル中での粒子空孔励起の分布として表わされる。この分布を $P_0(\alpha_0 E_0 \mu_0)$ として式 (3) を計算するのであるが, 具体的な計算法については省略して計算結果の一部を示そう。第3図に $^{40}\text{Ca} + ^{40}\text{Ca}$ の系に対してこの方法で計算された初期分布 P_0 をエキシトン数の関数として示してある。このように P_0 はこの系の場合, エキシトン数が16の所に最大値をもつ分布をもち, 通常の軽粒子入射の場合のように, $2p - 1h$ 状態の δ -関数の分布とは大いに異なる。この計算例では2核を静止させておいて中間の壁を取去ったが, 2核の相対運動がある場合には分布はさらにエキシトン数が大きい方へずれる。

初期分布がこのように与えられると, 分布のその後の時間発展は式 (3) を解くことにより求められるが, その様子が図4に示されている。この図には比較のた



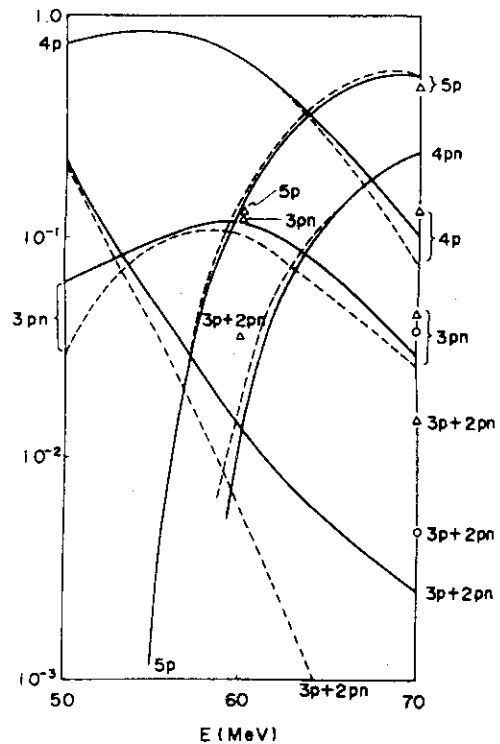
第3図 A=40の2核の接触による初期分布を, エキシトン数 m の関数として示したもの。文献6より。



第4図 エキシトン数の分布関数の時間的发展を、核子入射の場合(左)と重イオン反応の場合(右)に示す。時間Tの単位は 6.58×10^{-22} secで、複合核 $A = 98$ 、励起エネルギー 60 MeVの場合。文献6より。

めに、核子入射の場合の分布関数も同時に示されている。この図より明らかなように、重イオン入射の場合には初期分布と最終的な分布である熱平衡分布との差が、軽イオン反応の場合と比べて小さいことが分る。このことから、重イオン反応での前平衡状態からの軽粒子放出は、軽イオン反応の場合ほど顕著でないことが予想される。

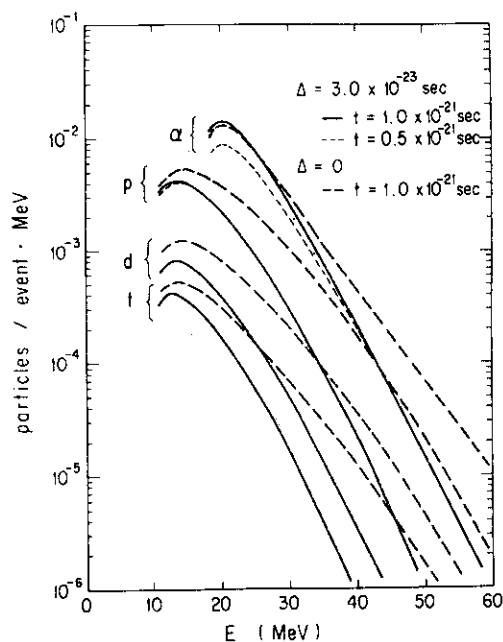
しかしながら放出粒子の数が少ない過程に対しては高エネルギーの軽粒子が放出され、そのような場合の粒子のエネルギースペクトルや娘核の生成断面積には前平衡状態からの放出の影響が少なからずあることを示す例として、次の第5図の結果がある。この図は $^{40}\text{Ca} + ^{58}\text{Ni}$ 反応に対して、その複合核の励起エネルギー E の関数として、種々の娘核の生成断面積を計算したものである。図で実線で示されているのは熱平衡状態からの放出のみを考慮した場合で、これに比べて前平衡状態からの放出をも考慮した結果(点線)、このような変化が認められる。この系では第5図に相当する実験データもあるので、それとの比較から前平衡放出粒子の寄与がどの程度重要であるかを定めることができる。



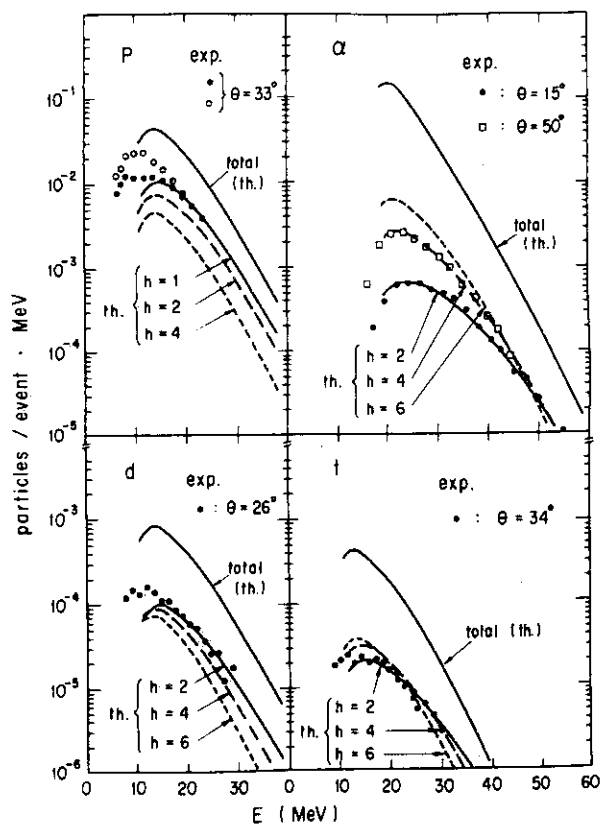
第5図 ^{98}Cd からの粒子放出断面積の相対値。実線は蒸発模型の計算、点線は前平衡模型の計算。文献6より。

3.2 重イオン核融合反応に伴う前平衡軽粒子の放出II

これは原研大塚孝治, 原田吉之助両氏による仕事の紹介である。前節とは異りここでは軽い重イオンが重い標的核へ入射した場合を扱う。そこでエキトシン模型の基礎にとり一体場としては、標的核のポテンシャルを用いて、入射粒子はそのポテンシャルへ外部から粒子を供給する源と考える。さらに、核融合過程が前節のように瞬間的に起るとは考えずに、入射粒子から標的核への核子の流れが生じて、一定の時間の後に核融合が終了すると仮定する。この過程を理想化して、単位時間 Δ 毎に 1 個の核子が標的核へ供給されると考え、且つその度に ΔE という一定の励起エネルギーが持込まれるとする。すなわち式 (3) において、右辺第 1 項の初期条件の代りに、 $t = t_0, t_0 + \Delta, t_0 + 2\Delta, \dots$ 各時刻で外から粒子とエネルギーが供給されるという条件を置く。この模型に従い $^{181}\text{Ta} + ^{14}\text{N}$, $E_{\text{inc}} = 115 \text{ MeV}$ の反応に対して、 p, d, t, α 等の放出粒子スペクトルを計算したものが図 6 に示されている。この図より分る第 1 の点は、 $\Delta = 0$ と $\Delta = 3 \times 10^{-23} \text{ sec}$ ととった場合 ($\Delta = 0$ は ^{14}N の 14 個の核子が同時に標的核へ入射することを意味する) とで、エネルギースペクトルの勾配が系統的に違うことである。 $\Delta = 0$ とするこの勾配がゆるやかで、蒸発模型でいうより高温状態からの蒸発に対応するが、実験値との比較では $\Delta = 3 \times 10^{-23} \text{ sec}$ 程度の値が最も良い結果を与える。第 2 の点は、 α 粒子の場合、粒子放出までの時間 $t = 1 \times 10^{-21} \text{ sec}$ と $t = 0.5 \times 10^{-21} \text{ sec}$ を比べると、前者は後者より勾配がきつい。これは核反応の初期に放出される粒子ほど、相対的に高エネルギー成分を多く含むという、一般的な性質を表わしている。



第 6 図 $^{181}\text{Ta} + ^{14}\text{N}$, $E_{\text{inc}} = 115 \text{ MeV}$ 反応での p, d, t, α のスペクトルの計算値。 Δ は粒子供給の時間単位を表わす。文献 7 より。



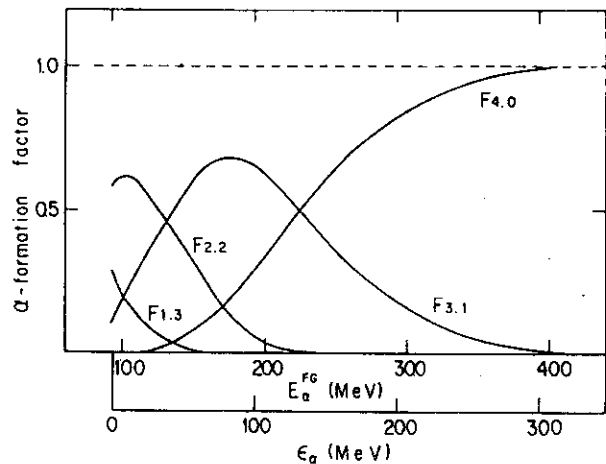
第 7 図 $^{181}\text{Ta} + ^{14}\text{N}$, $E_{\text{inc}} = 115 \text{ MeV}$ 反応での p, d, t, α のスペクトルの実験値及び計算値。 h はホール数を表わす。文献 7 より。

次に第7図に、この模型による計算と実験値との比較を示す。ここで h と書かれた量は標的核の hole 数を示し、この数が多いほど時間としては遅い過程に対応する。例えば α 粒子の場合、角度 15° のデータは $h=2$ のカーブで合わせることができ、角度 50° のデータは $h=4$ のカーブで合わせることができる。これは前方に放出される粒子ほど反応の初期に放出され、後方になるほど遅い過程であることを意味する。この傾向は、多数回の衝突をくり回すと角分布は一様に近ずき、少数回であれば前方ピークになるという一般的な性質に対応する。陽子のスペクトルの勾配は h の値に余り依布しないが、 α 粒子の場合には h が小さいほど勾配がゆるいことも図から分る。なお p, d, t に関しては計算された断面積はほぼ実験値を再現できるが、 α 粒子については計算値を 10 倍ほどしてある。この足りない部分は入射した ^{14}N からの α の放出や、次節で述べる反応機構などを考慮していないことにより生じたのではないかと考えられる。

3.3 軽イオン反応での前平衡複合粒子の放出

これは原研原田吉之助氏と筆者による仕事の紹介である。軽イオン入射により前平衡状態から $d, t, ^3\text{He}, \alpha$ などの複合軽粒子が放出される現象は広く知られていたが、これを計算するには通常のエキシトン模型を拡張する必要がある。例えば (p, α) 反応の場合でいえば、実験値を再現できる模型としては、基底状態の標的核に適当な個数の α 粒子が存在すると考え、これと入射陽子が相互作用をして α を放出させるという模型⁹⁾(pre-formed α model) があるが、非常に多数の α -クラスターの存在が必要になってくるなどの点で無理があると思われる。そこで通常の核子多体系に対するエキシトン模型の立場から、次の様な定式化を行う。

核子放出の場合と異り、複合粒子は一定の内部運動をしているので、この内部運動の情報を取り入れることを考える。この内部運動により、複合粒子を構成する核子の一部はフェルミエネルギー以下の状態であることも可能である。以下、簡単のため話を α 放出に限るが、基本的な考え方は他の複合粒子でも同じである。先ず 4 粒子の殻模型的 1 粒子状態から α 粒子をつくる確率を表す formation factor $F_{\ell, m}(\epsilon_\alpha)$ を導入する。これは ℓ 個のフェルミ面以上の核子と、 m 個のフェルミ面以下の核子とでエネルギー ϵ_α の α 粒子を作る確率である ($\ell+m=4$)。この $F_{\ell, m}$ をフェルミガス模型により行った結果が図8に示されている。図の横軸は放出 α 粒子のエネルギー ϵ_α で、 α 粒子の内部運動は調和振動子模型で評価した。この図より $\epsilon_\alpha \rightarrow \infty$ では $F_{4,0}$ 成分が 1 で他はすべて零、すなわち 4 核子ともフェルミエネルギー以上の状態から α が形成されているが、低いエネルギーになると他の成分、 $F_{3,1}, F_{2,2}, F_{1,3}$ などが重要になる様子が分る。なおこれらの $F_{\ell, m}$ の間には次の関係

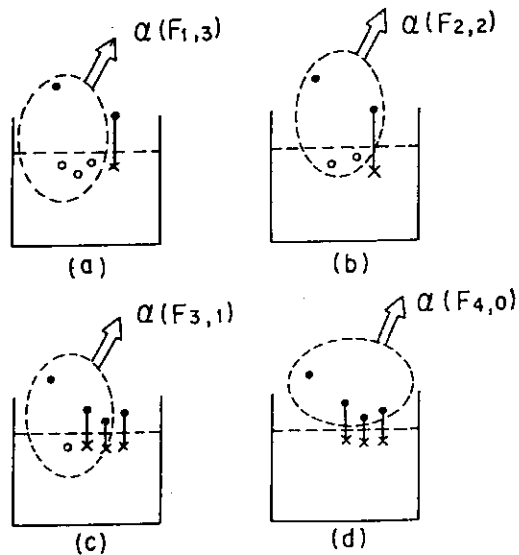


第8図 α -formation factor $F_{\ell, m}(\epsilon_\alpha)$ を放出 α 粒子のエネルギー ϵ_α の関数として示す。文献8より。

$$\sum_{\ell+m=4} F_{\ell, m}(\varepsilon_{\alpha}) = 1 \quad (4)$$

が成立つが、 $F_{0, 4}$ 成分からは α 粒子を核外に放出できないので書いていない。この図に関して重要なことは α 粒子が強く束縛されているために、 $F_{3, 1}$ 、 $F_{2, 2}$ 、 $F_{1, 3}$ などが広いエネルギー領域で有限の値をもつことである（束縛エネルギーを零とみると、 $F_{3, 1}$ 、 $F_{2, 2}$ 、 $F_{1, 3}$ は到る所で零）。

次にこのように計算した $F_{\ell, m}$ を用いて、放出 α 粒子のエネルギースペクトル（角度につき積分したもの）を計算する。試験式の具体的な形は省略するが、重要な点は図 9 に示すように各 $F_{\ell, m}$ に応じて種々の α 形成過程を取入れるということである。これは一種の pick-up 過程を含めた計算をすることに対応する。残留核の状態密度の点でこの pick-up 過程（フェルミ面以下の核子も動員して α を形成する）が断面積に強く利く。数値計算は ^{54}Fe 、 ^{118}Sn の標的核で、入射陽子のエネルギー（30~60）MeV 程度の数種類の (p, α) 反応について行なわれ、系統的に実験データを再現することができた。計算は謂る高エネルギーの α 、 p 、 n についてのみ行なわれ（低エネルギー部分は蒸発模型で記述できる）、その一例を図 10 に示す。これは $^{120}\text{Sn}(p, p')$ 及び $^{120}\text{Sn}(p, \alpha)$ 反



第 9 図 α 粒子形成の種々の成分文献 8 より

応で、 $E_{inc} = 62$ MeV の場合のスペクトルである。図より分るように、 α 粒子のスペクトルの高エネルギー部分は大局的に再現できる。最も単純なエキシトン模型（ $F_{4, 0} = 1$ 、他の $F_{\ell, m} = 0$ とした計算）では断面積が 1 桁以上も足りなかったことを考えると、pick-up 的な過程の重要さが分る。計算の中味を見ると、 $2p-1h$ 及び $3p-2h$ 状態から、 $F_{1, 3}$ 及び $F_{2, 2}$ の成分で放出される α 粒子が断面積の大部分を占めている。計算は $2p-1h$ 状態を出発点としているので、pick-up といっても直接過程のそれとは異なるもので、この "pick-up during cascade" とでも呼べる反応機構が、 (p, α) 反応での高エネルギー α 粒子放出の主要な成分であるとのこの模型は主張している。これの当否は角分布の計算、他の複合粒子放出の計算を通して、将来明らかにされると思われる。

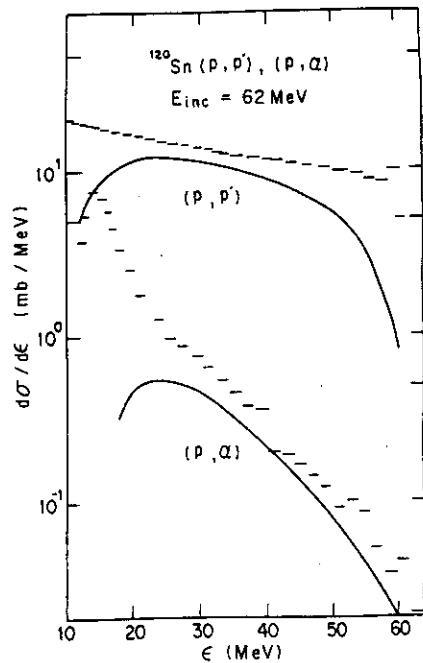


図 10 $^{120}\text{Sn}(p, p')$ 、 (p, α) 反応のスペクトル。実験値は文献 10 によるもの。文献 8 より

文 献

1. VandenBosch, R. & Huizenga, J. R., "Nuclear Fission", Academic Press. (1973)
2. Sikkeland, T., Phys Rev. 135, B669 (1964)
3. Borderic, B. et al, Z.Phys. A299, 263 (1981)
4. Yoshida, S., "原子衝突と重イオン核反応合同研究会報告" 理研, 35 (1981)
5. Ejiri, H.,
同上, 232 (1981)
6. Yoshida, S. perprint
7. Otsuka, T. & Harada, K., preprint
8. Iwamoto, A. & Harada, K., preprint
9. Gadiori, E. et al, Phys. Rev. C16, 1404 (1977)
10. Bertrand, F.E. & Peelle, R.W. Phys. Rev. C8, 1045 (1973)

4. 多重電離の統計的理論

高千穂商大・一般教育 並木 雅俊

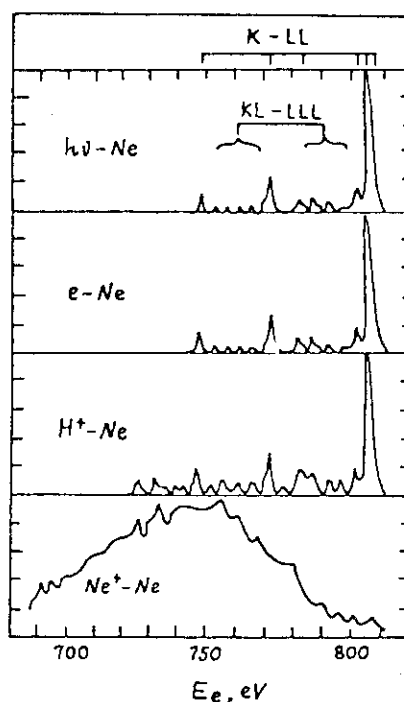
重イオン原子によるたった1回の衝突で原子内の数多くの電子が放出してしまう現象を多重電離と呼ぶ。アクティブな電子が多く存在するこの現象は理論的に非常に取り扱いにくいことより現在においても端的な統計的理論があるだけで今後の研究が待たれている。

1. はじめに

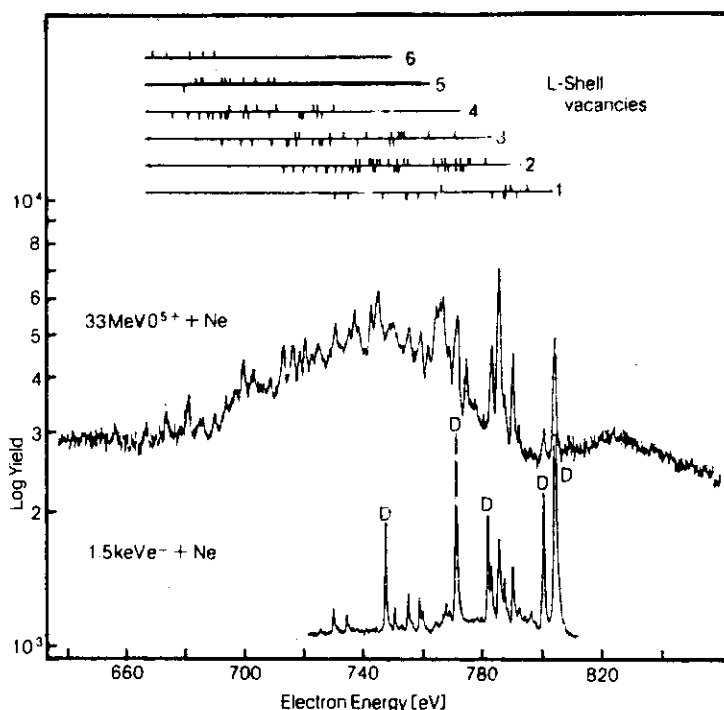
- a. **多重電離とは：** 多重電離を端的に“外場の影響により原子内の複数個の電子が電離して多価イオン原子になる現象”と定義するなら原子に衝撃を与える入射粒子が何んであるかによってそのメカニズムは大きく異なる。光子衝撃においては、まず光子が気体中の原子を光電離させ、気体をプラズマに変える。この光電離電子（多電子原子では、光電離過程において内部殻効果の存在のため光電子を同時に2ヶ放出する確率が大きくなる。¹⁾）が幾度か光電離した他のイオンと衝突して逐次的に原子は多価イオンになってゆくと考えられている。また電子衝撃においても、光子衝撃同様1回の衝突で原子から多くの電子を取り去る確率は非常に小さく、多数個の電子を原子に衝突させることにより原子を多重電離させる。軽イオン衝撃では、原子内の1ヶの電子の電離断面積が入射粒子の原子番号 (Z_1) の自乗に比例すること、それに電子衝撃の様に多数回同じ標的原子に衝突させることが出来ないことから、多重電離は起りにくいと考えられる。入射粒子が重イオンになると、この事象は変わる。まず光子あるいは電子衝撃のように衝突を幾度もくりかえして起るのではなく、一回の衝突により標的原子（あるいは入射イオン）の電子を多数個取り去ってしまう驚くべき現象である。ここでは、この重イオン衝撃の場合のように1回衝突で起る場合を単に多重電離と呼ぶことにする。
- b. **実験的検証：** 多重電離（現象）を調べるにあたって歴史的に、衝突に伴うX線の測定とオージェ電子の測定との2つの有力な手段を上げることができる。まず第1図²⁾に示す内殻電離に伴うオージェ電子の運動エネルギースペクトルを見ていただきたい。これは、入射粒子、電子、陽子それに Ne^+ イオンを Ne 原子に衝突された際に生じた KLL オージェ電子スペクトルである。これ等のスペクトルより光子衝撃と電子衝撃では質的に同等なスペクトルであるが、陽子衝撃では光子あるいは電子衝撃で見られる、主線はほとんど変化しないが衛星線の増加が見られる。これは一回の衝突では多重電離が起りにくいことを示している。しかし Ne^+ イオン衝撃の場合ではこれらと全く異なったスペクトルを示す。主線と衛星線の比が逆転してしまったこの現象は（一回衝突における）多重電離によるものとし解釈出来ない。より物理的描象のはっきりした実験結果として第2図³⁾⁴⁾と第3図⁵⁾をあげる事が出来る。第1図が Krause 等⁶⁾

Statistical model for multiple ionization process in atomic collisions.
Masatoshi Namiki
(Takachiho College of Commerce)

(1970) と Edwards (1967)⁷⁾ による実験をまとめたものであるのに対し第2図と第3図は同一の実験装置により得られたものである。第2図は e^- (1.5 keV) + Ne と O^{5+} (33 MeV) + Ne による K 殻オーグジュ電子スペクトルである。衝突速度がほぼ同じであるにもかかわらず、 O^{5+} イオン衝撃 ($v_i \approx 9.1$ a.u.) においては電子衝撃 ($v_i \approx 10.5$ a.u.) では見られない Ne 原子の L 殻電子 ($v_k^{Ne} \approx 8.1$ a.u., $v_l^{Ne} \approx 1.3 \sim 2.0$ a.u.) が多数電離されているスペクトルが見られる。第3図は標的 Ne 原子に H^+ , He^+ , O^{5+} をほぼ同一速度で衝突させた時のオーグジュ電子スペクトルである。この図からはこの速度では原子番号 (Z_1) の大きいイオンの



第1図 Comparison between electron energy spectra associated with Auger transitions to K vacancy in neon bombarded by different projectiles: $h\nu$ -Ne ($E_{h\nu} = 1.5$ keV) (KSLCM-70), e^- -Ne ($E_e = 3.2$ keV) (KSLCM70), H^+ -Ne ($E_{RH^+} = 300$ keV) (ER68), and Ne^+ -Ne ($E_{Ne^+} = 200$ keV) (Ed67).
文献2)より転載。

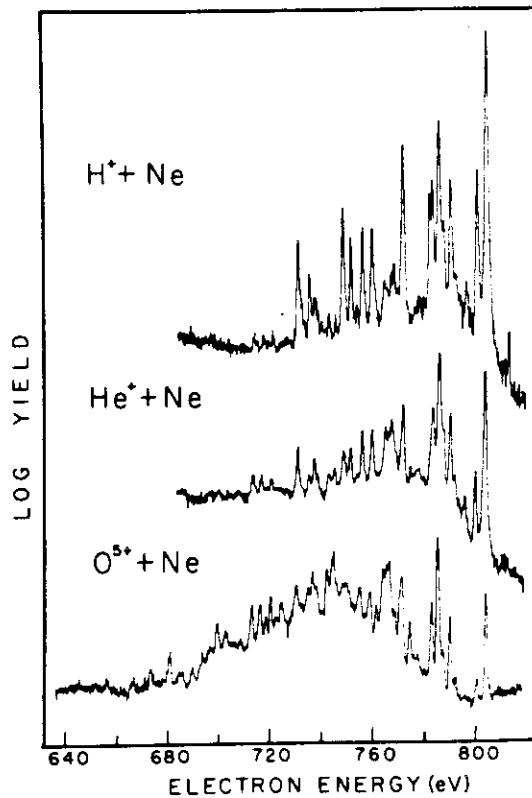


第2図 Comparison of Ne K-Auger electron spectra produced by 33-MeV O^{5+} and 1.5-keV e^- . Normal lines are labeled D. Calculated satellite transition energies are shown on axis which label the number of L-shell vacancies (from MATTHEWS et al. [5.20])

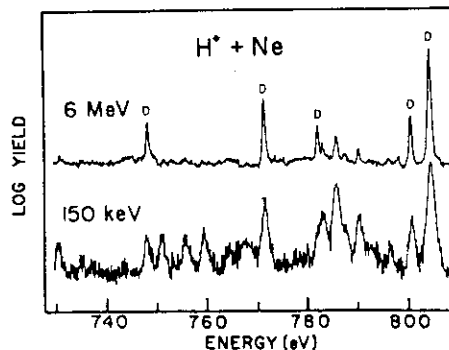
文献4)より転載。

方が標的原子を多重電離させる傾向が強
く、 Z_1 依存性を見ることが出来る。同
様に、同一の Z_1 （同一原子）に対する衝
突エネルギー（速度）依存性は第4図⁴⁾の
6 MeV ($v_1 = 15$ a.u.) の H^+ あるいは
150 keV ($v_1 = 2.5$ a.u.) の H^+ とNe原
子の衝突におけるKLLオージェスペク
トルに見ることができる。多重電離の起
こしにくい H^+ 衝撃であるが、衝突エネ
ルギーを変化させることによる影響は顕
著に現われている。図中の記号Dは単
一電離原子からのオージェスペクトルを
示している。また第5図⁸⁾により入射イ
オンの電荷数 q_1 を変化させた時の標的
NeのKオージェスペクトルの変化を見
ることができる。これより多重電離断
面積が入射粒子の番号(Z_1)だけでは
定まらず、その電荷数 q_1 にも大き
く依存する($\sigma \propto q_1^2$)ことが理解
できる。

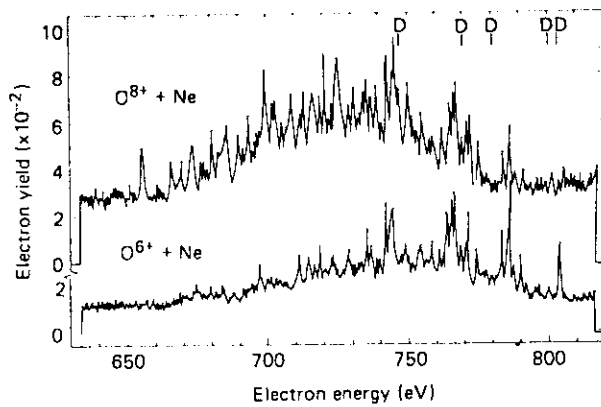
多重電離現象を調べるにはオー
ジェ電子を測定するだけでは完全
ではない。これに対する有力な方法
が、オージェ電子の測定と相補的
関係にある内殻電離に伴ったX線
の測定である。第6図⁹⁾は典型的
なK-X線スペクトルである。これ
は、Ca原子を48 MeVの O^+ イ
オンで衝突させた際に得られた
スペクトルでK殻電子が n ヶ、L
殻電子が m ヶ電離（または他の
殻へ遷移）した K^nL^mX 線の衛星
線を見ることができる。また第7
図¹⁰⁾はHe, C, Nそれ



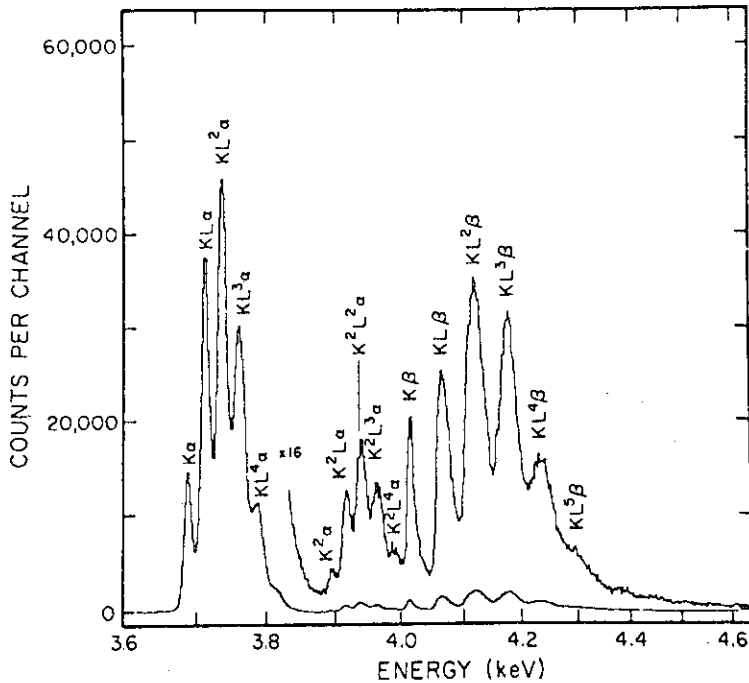
第3図. Comparison of neon Auger electrons for H^+ (0.25 MeV), He^+ (1.0 MeV) and O^{5+} (33 MeV) bombardment. Instrumental resolution of the analyzer was 0.02% FWHM. Each energy data point represents a sum of 12 consecutive channels of raw data. A log display was used to emphasize peaks above background. 文献5)より転載。



第4図. Comparison of neon KLL-Auger spectrum produced by 6-MeV and 150-keV proton bombardment. Letter D labels diagram lines. All other lines of appreciable strength are attributed to initial single K-, single L-vacancy states. From D. L. Matthews, B. M. Johnson, J. J. Mackey, L. E. Smith, W. Hodge, and C. F. Moore, *Phys. Rev. A* 10, 1177 (1974) (courtesy of The Physical Review). 文献4)より転載。

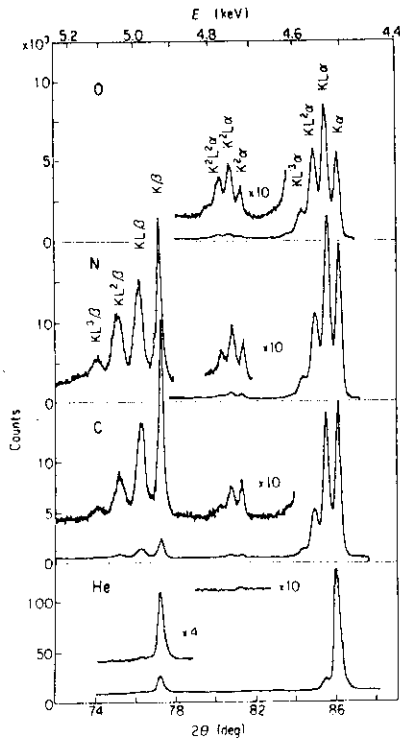


第5図 Neon K-Auger spectrum produced by 35-MeV O^{8+} and O^{6+} bombardment. Letter D marks position of lines from single K-vacancy to L-vacancy states. The strong low-energy lines ($\sim 655-670$ eV) seen with O^{8+} bombardment stem from formation of lithiumlike neon vacancies. From C. F. Moore, J. Mackey, L. Smith, J. Bolger, B. Johnson, and D. Matthews, *J. Phys. B* 7, L302 (1974) (with permission, The Institute of Physics). 文献8)より転載。

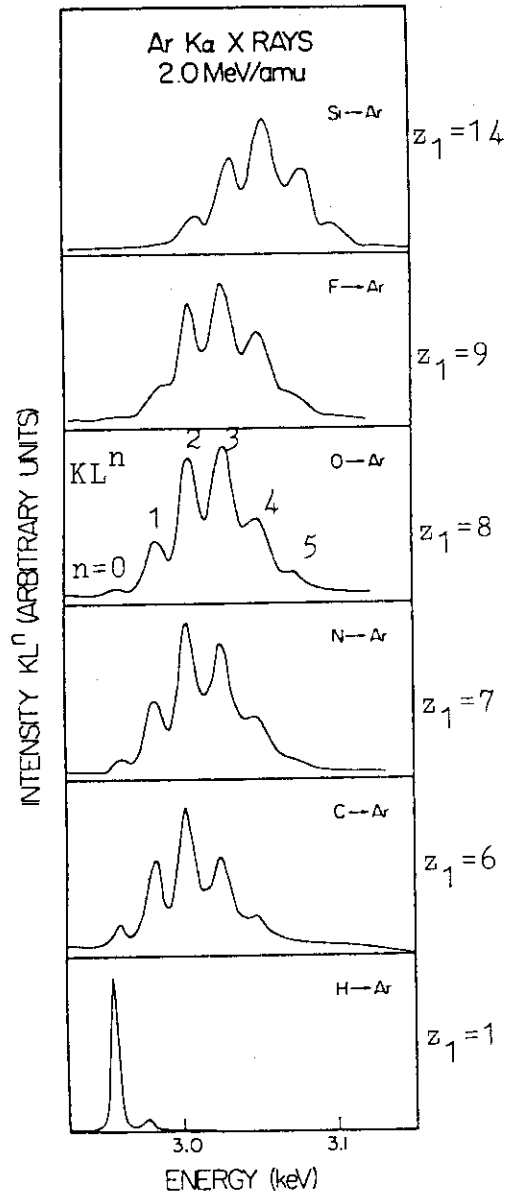


第6図 Calcium K x rays produced by 48-MeV oxygen bombardment, including the K^2L^1 hypersatellite transitions. Spectrum taken with a LiF crystal [D. K. Olsen and C. F. Moore, *Phys. Rev. Lett.* 33, 194 (1974)]. 文献9)より転載。

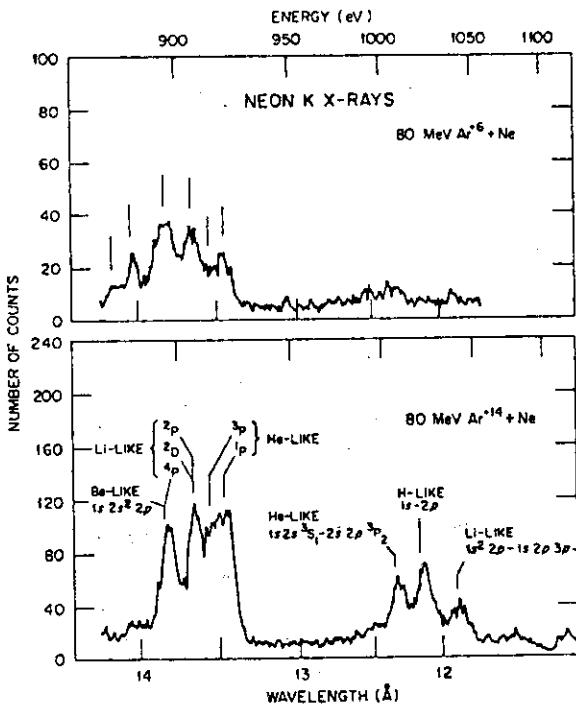
に酸素イオンをチタン原子と同じ速度で衝突させた時に得られたTiのKX線スペクトルを角度を変えて観測したものである。入射イオンの原子番号 Z_1 が増すほど衛星線の強度が増すことが分かる。同様に第8図¹¹⁾に多種の入射イオン(H, C, N, O, F, Si)を同じ速度(核子当たり2 MeV)でAr原子に衝突させた際に生じたAr原子の $K\alpha$ X線スペクトルである。陽子衝撃の場合に見られる大きなピークが主線の $K\alpha$ 線である。 Z_1 が大きくなるにつれてL殻の電子がなくなってゆく傾向が見られる。第9図¹²⁾は q_1 依存性を示す一例である。 $q_1 = 6$ と14における80 MeVの Ar^{+q_1} イオンとNe原子との衝突で得られたNeのKX線のスペクトルである。これより q_1 の増加により多重電離がエンハンスされていることが分かる。



第7図. Ti K X-ray spectra excited by 6 MeV/amu He, C, N and O ions. 文献10より転載。



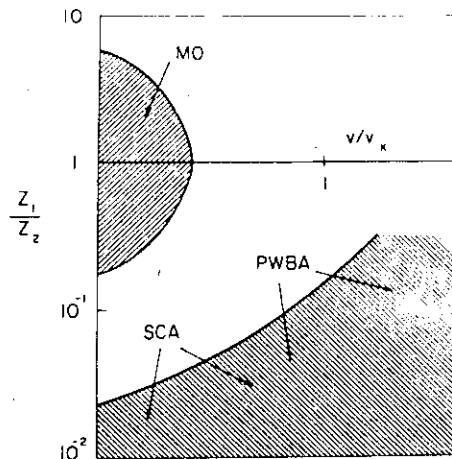
第8図. Representative spectra for 2-MeV/amu ions incident on argon. Due to energy loss in the gas cell windows the collision energies are 1.9 MeV/amu for H ions and 1.95 MeV/amu for Si, F, O, N, and C ions. 文献10より転載。



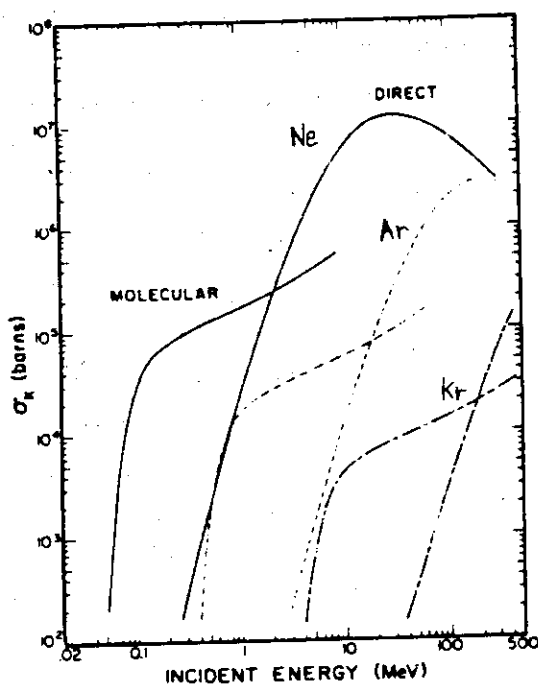
第9図
Neon K x-ray spectrum produced by 80 MeV argon bombardment, showing strong increase of one-, two-, and three-electron target ions with increasing incident projectile charge. 文献12より転載。

c. 理論の準備 (1 電子模型) : 原子衝突においては通常その対象となる束縛電子の軌道速度 (v_{on}) と入射イオンの速度 (v_1) との比により準分子昇降(位)のメカニズムからなるMO(分子軌道)領域と入射粒子と標的原子間のクーロン相互作用による直接過程による領域(普通ダイレクト領域と呼んでいる)の2つの領域に分けて考えられ、その境界は通常 $3Z_2 n v_1 / Z_1 v_{on}$ の値がほぼ1になった所と考えられている。(nは標的原子に束縛されている電子における主量子数) 衝突メカニズムを識るためのいくつかの計算方法の成り立つ領域を図示したものが第10図である。MO領域は、低エネルギーかつ $Z_1=Z_2$ の所で成り立ち、SCA(半古典近似)、PWBA(平面波Born近似)は高エネルギーかつ $Z_1 \ll Z_2$ で成り立つことが示されている。空白領域は今だ未開発領域である。第11図の実線は広いエネルギー領域における $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ 衝突系におけるK殻電離断面積である。図中のMOLECULARと表示してあるものはMOでの計算、DIRECTと表示してあるものはPWBAによる解である。内殻電離は、入射イオンと標的原子内電子との直接クーロン相互作用によるメカニズムが主流であることが分かる。実験値との一致は、互いの領域で非常に良いが、中間のエネルギー領域での実験値は、両方の理論値を足し合せたものよりまだ大きい。現在において、この中間領域では、衝突の際、Ne原子(あるいは Ne^+ イオン)が多重電離を起して $2p\pi$ 分子軌道から $2p\sigma$ 分子軌道へ移る空孔の数が衝突エネルギーに依存するためと解釈している。(1電子模型では実験値と美談のできない一例。) 図中の点線は $\text{Ar}^{+q} + \text{Ar}$ (1点破線は $\text{Kr}^{+q} + \text{Kr}$) 衝突によるK殻電離断面積である。Ne衝突の場合と異なり、1価のイオンでは $2p$ 殻に空孔がなく $2p\pi - 2p\sigma$ 回転結合による電子昇位が起らず $q \geq 9$ (Krでは $q \geq 27$) が必要である。参考のために、非対称衝突系における対応図を第12図とした。図中のHは重い原子を示し、Lは軽い原子を示す。対称衝突系では対応するLとHの $R=\infty$ でのエネルギー差をゼロにして波動函数の対称性 (u,g) を考慮すればよい。

衝突をMOで表示すべきかDirectで表示すべきかを定めるに重要な v_{on} の大きさは、その対象となる電子がどの殻に束縛されているかで定まる。1電子模型では $v_n = Z_2/n$ (a.u.) とな



第10図. Estimated regions of validity for various approximation schemes, as a function of Z_1/Z_2 and v/v_k (with velocity v_k of the electron to be ionized). PWBA, Born approximation; SCA, semiclassical approximation; MO, quasi-molecular electron promotion model [from D. H. Madison and E. Merzbacher, in "Atomic Inner-Shell Processes" (B. Crasemann, ed.), Vol. 1, p. 1. Academic Press, New York, 1975].

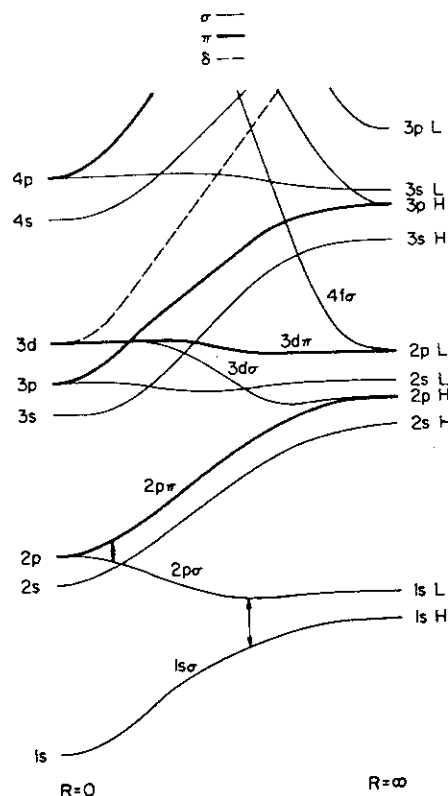


第11図. Calculated K-shell ionization cross sections versus incident energy for three symmetric systems: (—) Ne + Ne, (---) Ar + Ar, (---) Kr + Kr. The curve labeled DIRECT is the prediction of the Coulomb ionization mechanism, whereas the curve labeled MOLECULAR is the prediction of the MO model.

り、束縛エネルギー、その平均軌道半径も端的に

$$E_n = -\frac{Z_2^2}{2n^2}, \quad r_n = \frac{n^2}{Z_2}$$

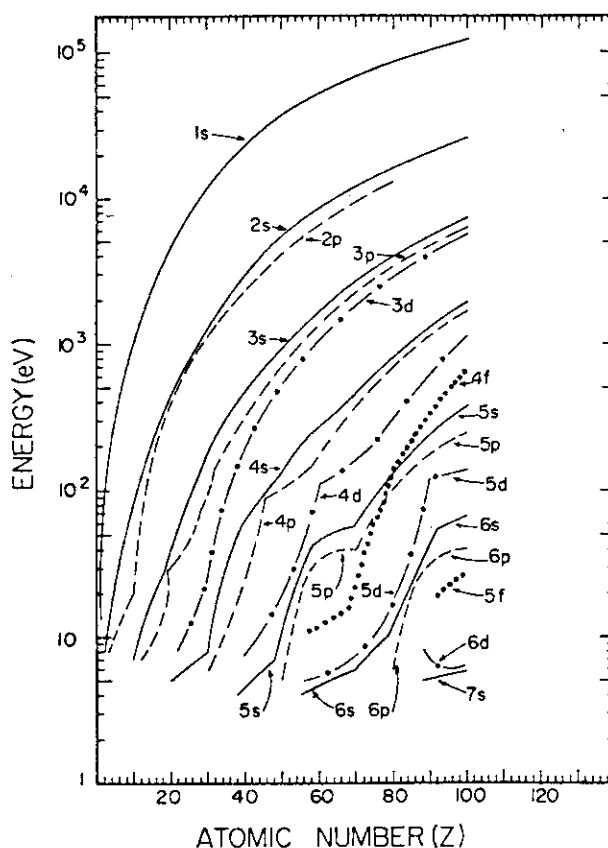
し1原子単位 (a.u) の速度は 2.19×10^8 cm/sec, エネルギーは 27.2 eV, 長さ (ボーア半径) 5.29×10^{-9} cm である。多電子系においても各殻ごとの遮蔽相関を考慮した主量子数 n_s と束縛エネルギーの実験値が分かっていると1電子近似で大掴みな値を知ることができる。この場合、 Z_2 の変りに $Z_s = Z_2 - C_s$ を用いる。この C_s は普通スレーターの値 (K殻なら0.3, L殻なら4.15, また $M_{1,2,3}$ 殻, $M_{4,5}$ 殻では 11.25, 21.15) を用いる。軌道速度 v_s は束縛エネルギーの実験値より得る。また n_s は Z_s / v_s により求めることができる。しかしより一般的に、 Z_s は衝突パラメータに依存する。第13図に原子番号と束縛エネルギーの絶対値の関係を示す。



第12図 Schematic correlation diagram for slightly asymmetric system. L and H refer to lighter and heavier collision partner, respectively.

2. 統計的手法(1)

通常の原子衝突論においては、衝突に伴ってアクティブに活動する電子は1個として取り扱えて、低エネルギー衝突では Fano-Lichten あるいは Barat-Lichten 過程¹³⁾を基に考えられ高エネルギー衝突では PWBA (平面波 Born近似) あるいは BEA (二体衝突近似)を基に考えれば少なくともゼロ次近似的にメカニズムを論じることができる。しかし、多重電離ではこのアクティブな電子が数多く存在し、正に“原子の同じ殻に属する電子は平等であり、重イオンという爆弾が落とされても首相 (active electron) だけが原子国をすてて逃げることなく民衆もつれて逃げだす”という難点(?)がある。この様な現象がどんな場合に起きやすいかは、1節から(ア)入射イオンの原子番号 Z_1 が大きい時(イ)多価イオンが入射した時 (q_1 が大) (ウ)標的原子の内殻(K, L) の平均軌道速度にはほぼ等しい速度で入射した時、等々があることができる。



第13図. Atomic binding energy vs atomic number. The binding energies for various atomic shells and subshells are plotted for all atoms from $Z = 1$ to $Z = 100$. This figure is based on the variational calculations of Herman and Skillman.

文献20より転載。

a. 蒸発模型: 上に述べたように多重電離においてはアクティブ電子が定めにくい、このことから各殻内の電子を平等に取り扱つかう統計的手法がよく物理的描像をとらえた表現となると考えられる。A. Russek は入射イオンの速度が外殻の軌道電子速度とほぼ等しいか小さい場合を想定して蒸発模型¹⁴⁾ (evaporation model) を考えた。基本的には、入射イオンと標的原子との衝突により得たエネルギーにより原子は熱せられることにより (外殻電子間に統計的に分配され)、束縛エネルギーより多くのエネルギーを得た電子は蒸発 (自動電離) すると考えた模型である。Russek はこの模型を創るにあたって次の仮定をたてた。(1)与えられたエネルギー E_T は主として外殻電子の間で統計的に分配される。(2)束縛エネルギー領域でのエネルギーの細胞 (エネルギー範囲を小さな部分に分けた、その各部分) の統計的重みは連続状態の場合と同等に扱う。(3)電子が逃げだすのに必要なエネルギーは逃げだす電子の数に依らない。これらの仮定には正当な理由がある。理由の一つとして、衝突中の原子のエネルギー準位のぼけ (拡がり) をあげることができる。衝突時間を τ , 原子の大きさを a とすれば不確定性関係よりエネルギーは $\Delta E \sim \frac{h}{\tau} \sim \frac{h v_1}{a}$ 程度拡がる。Ar⁺-Ar 衝突を例にとると衝突エネルギー E_1 が 100 keV なら $\Delta E \approx 3.4$ eV また $E_1 = 2$ keV で $\Delta E \approx 0.49$ eV と計算される。但し、 a は Ar 原

子の平均体積の $1/3$ 乗をとった 1.32 \AA とした。このエネルギーの不確かさはKおよびL殻電子の励起エネルギーに比べるとはるかに小さいので、これらの電子は衝突の間多重電離されず断熱的に(電子昇降(位)によって)反応するとみなされる。しかしM殻以上になると各準位間エネルギー差はせいぜい 0.3 eV 程度であるためこれらの準位は連続状態とみなすことができる。すなわち、この仮定は Ar^+-Ar 衝突に関しては $E_1 \geq 2 \text{ keV}$ 程度まで低エネルギー衝突で成り立つと考えられる。(Russekは(1), (2)の仮定に関してはいくつかの例をあげ正当性を唱えているが(3)に関しては経験的に正しいと述べており、実験との対応より見いだしたものであると考えられる。)

仮定より、衝突により得たエネルギー E_T は内殻には分配されず外殻内の N ケの電子に統計的に分配される。この N ケの電子 E_T が分配されそのうちの n ケの電子に蒸発(電離)するに十分なエネルギーが分配される確率を $P_n^{(N)}(E_T)$ と記す。イオン化エネルギーが蒸発する電子の数に依らないと仮定すれば、少々面倒

ではあるが端的な統計計算を行なうことにより

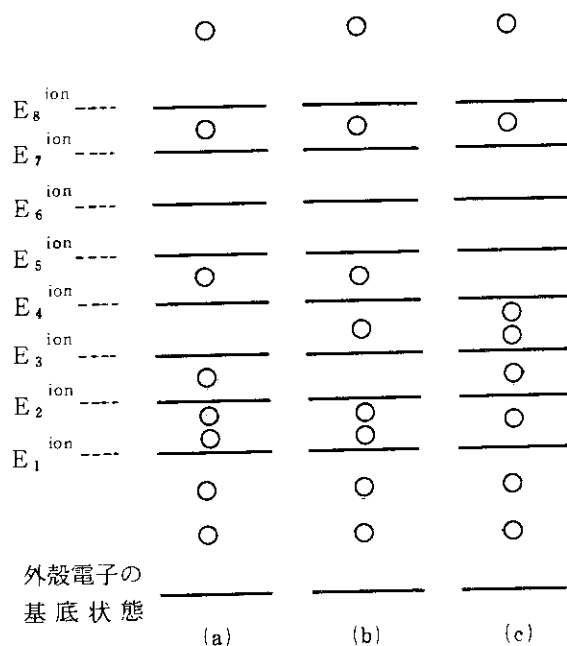
$$P_n^{(N)}(E_T/E^{\text{ion}}) = \binom{N}{n} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{N-n}{j} \left(1 - \frac{n+j}{E_T/E^{\text{ion}}}\right)^{N-1}, \quad (1)$$

但し、 $n+k \leq (E_T/E^{\text{ion}}) \leq n+k+1$

と書ける。 E^{ion} は各電子のイオン化エネルギーを示す。

この仮定の基でイオン化エネルギーが蒸発する電子の数に依存する場合は少々やっかいである。この蒸発電子数に依るイオン化エネルギーを E_n^{ion} は蒸発電子数が n ケの時のイオン化エネルギーを示すもので、 n 番目の電子が電

離するに必要なエネルギーではない。この場合は E_n^{ion} の状態と電子の分布が必要である。例として8ケの外殻電子から3ケの電子が蒸発する確率 $P_3^{(8)}$ について考えてみる。第14図は電子の分布の一例である。ここでは3ケの電子が蒸発するので衝突より得たエネルギー E_T は $E_3^{\text{ion}} \leq E_T \leq E_4^{\text{ion}}$ の範囲で分配される。第14図の(a)の場合には全く問題はなく素直に3ケ蒸発してくれる。(b)では、4つの電子が E_3^{ion} より高いエネルギーを持っている。だがそのうちの1個は E_4^{ion} より低いエネルギーであるため4つ全てが蒸発することができずこのうちの1ケは励起状態として残ることになる。(c)の場合はより複雑であるが、考え方としては(b)と同様にして場合の数の数えすぎをふせぐ。この様な考察に基づいて(1)より一般的なイオン化エネルギーが蒸発電子数に依存する場合の確率は



第14図

$$P_n^{(N)}(E_T) = \binom{N}{n} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{N-n}{j} \left(1 - \frac{n E_n^{\text{ion}} + j E_{n+1}^{\text{ion}}}{E_T}\right)^{N-1} \quad (2)$$

$$\text{但し, } k \leq \left(\frac{E_T}{E_{n+1}^{\text{ion}}} - \frac{n E_n^{\text{ion}}}{E_{n+1}^{\text{ion}}}\right) \leq k+1$$

より求められる。確率(1), (2)は衝突と直接関係はなく, 原子が衝突により得たエネルギー E_T を N 個の電子にどう分配するかを示したものである。このためこの模型の第一段階である重要な量 E_T を衝突パラメーターで表示しておく必要がある。Russek は(1) E_T はイオンと原子の衝突に伴った電子・電子衝突により原子に移動する, (2) E_T のほとんどは衝突径数が原子の大きさに比べて小さい所で得る, という2つの仮定の基で計算を行なった。この仮定より, $e_T(E_1)$ を電子と電子の衝突の際に各電子が得る平均のエネルギー, $\nu(E_1)$ を入射イオンと標的原子の衝突時間中に起こる電子・電子衝突の頻度とすれば

$$E_T(E_T) = e_T(E_1) \nu(E_1) \quad (3)$$

と書ける。 e_T を近似的に標的原子内から見た入射原子イオン内の電子の平均エネルギーと考え,

$$e_T \approx \frac{1}{2} \langle (\vec{v}_0 + \vec{v}_1)^2 \rangle = e_0 \left(1 + \frac{E_1}{Me_0}\right) \text{ とし, } \nu \text{ についても同程度の近似 } \nu \approx \pi L^2 \Phi(R_0)$$

$g(E_1)$ を行なえば

$$E_T(E_1) \approx A \left(1 + \frac{E_1}{Me_0}\right) (1 + \beta E^{-1/2}) \Phi(R_0) \quad (4)$$

と近似できる。ここで $A = \pi e_0 L^2$, $\Phi(R_0)$ は原子イオンと原子両方の電子の面密度を示し, R_0 はイオンと原子衝突の古典的最近接距離を示す。また $g(E_1) = (1 + \beta E^{-1/2})$ は, イオンと原子の衝突時間に電子・電子衝突が起る回数が比例すると考えた。しかし A, β は, 衝突パラメーターより定まらず調節可能なつじつまの合うパラメーターである。

- b. **Russek-Meliの理論:** Russek と Meli は蒸発模型を放出電子のエネルギー分布の計算に適応するためより発展した理論を考えだした。¹⁵⁾ 理論を構成する基本的な仮定は蒸発模型とあまり変わらず電離過程を二段階に分けた。(1) 低エネルギー衝突により系の並進運動エネルギーの一部が衝突原子の電子励起エネルギー (E_T) として付着する。(2) 衝突後互いの原子における衝突により得たエクセス電子エネルギー (E_T) を互いの電子に分布 (但しエネルギー空間ではなく運動量空間へ) させ, 原子は自動電離過程を通して, 励起状態の減衰 (電子の放出) する。電離確率は Fermi の Golden rule を用いて導く。ある離散状態から単一の連続状態に移る単位時間当りの遷移確率は

$$w = 2\pi |H'_{fi}|^2 \rho(E) \quad (5)$$

と書ける。 H'_{fi} は相互作用ポテンシャルの初期離散状態とエネルギー E における連続終状態の行列要素を示し, $\rho(E)$ はエネルギー E における終状態密度を示す。多重電離においては終状態として連続状態の multiple-set の任意の一つを取ることができる。 n 個の電子を電離する全ての終状態の組への単位時間当りの確率は

$$w_n = 2\pi |H'_{ni}|^2 \rho_n \quad (6)$$

と書ける。これより初期離散状態より n 個の電子を電離する確率は

$$P_n = w_n / \sum_m w_m = w_n / w \quad (7)$$

により得られる。(7)を計算するには終状態密度を知る必要がある。1つの電子が連続状態に移

り、エネルギー E_K から $E_K + dE_K$ をもっている終状態密度は

$$\tilde{\rho}_1(E_K) dE_K = \left(\frac{\sqrt{2}V}{\pi^2} \right) E_K^{1/2} dE_K \quad (8)$$

と書ける。2つの電子（全運動エネルギーが E_K ）が連続状態遷移する場合は

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_2(E_K) dE_K &= dE_K \int_0^{E_K} \tilde{\rho}_1(E_K - E') \tilde{\rho}_1(E') dE' \\ &\equiv \left(\frac{\sqrt{2}V}{\pi^2} \right)^2 S_2(E_K) \end{aligned} \quad (9)$$

と書ける。一般に n 電子電離終状態密度は

$$\tilde{\rho}_n(E_K) = \left(\frac{\sqrt{2}V}{\pi^2} \right)^n S_n(E_K) \quad (10)$$

とかけ、 S_n は漸化式

$$S_n(E_K) = \int_0^{E_K} S_{n-1}(E_K - E') S_1(E') dE' \quad (11)$$

より(8)式 ($S_1(E_K) = E_K^{1/2}$) を利用して

$$S_n(E_K) = \frac{2^{\{(n-1)/2\}} \cdot \pi^{\{n/2\}} \cdot E_K^{\{(3n-2)/2\}}}{(3n-2)!!} \quad (12)$$

と得られる。ここで $\{ \}$ はガウスの整数記号を示す。これより N 電子殻より n 電子電離終状態密度の可能な場合の数は

$$\rho(E_K) = \binom{N}{n} \tilde{\rho}_n(E_K) = \binom{N}{n} \left(\frac{\sqrt{2}V}{\pi^2} \right)^n S_n(E_K) \quad (13)$$

と書け(6), (7)式に代入することにより n ケの多重電離確率を求めることができる。この関数 S_n は、 $S_n(E_K/E_1^{ion}) = (V_a/V)^n \epsilon^{3n/2} \rho_n(E_K/E_1^{ion})$ と書き直すことができることより位相空間の単位体積当りのエネルギー状態密度を意味する。ここで E_1^{ion} は、第一イオン化エネルギー、 V_a は初期の電子の存在する空間の体積、 $\epsilon = (\pi^2 / \sqrt{2} V_a)^{2/3}$ を示す。これ等より N ケの外殻電子から n ケ電子を多重電離させる確率は

$$P_n^{(N)}(E_T) = \binom{N}{n} g^n S_n(E_K/E_1^{ion}) / \sum_{j=1}^N \binom{N}{j} g^j S_j(E_K/E_1^{ion}) \quad (14)$$

$$\text{と表わせる。ここで } g^n = (E_1^{ion}/\epsilon)^{3n/2} \left(\frac{V}{V_a} \right)^n |H'_{ni}|^2 \quad (15)$$

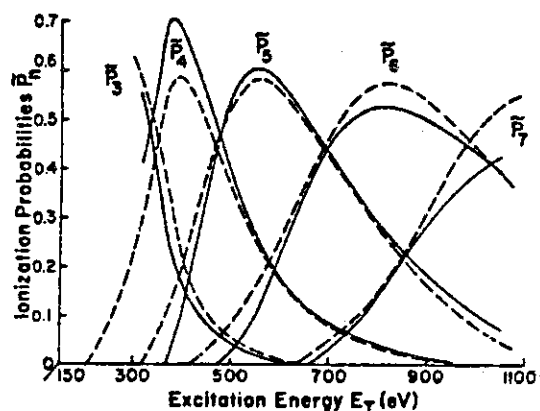
を示す。

(14)式を計算するには、 E_K と E_T の関係が必要である。 E_T は(4)式を用いて衝突パラメーターで表わすことができる。 E_T は連続状態における運動エネルギー E_K 、連続状態に達するまでのイオン化エネルギー E_j^{ion} それに終状態の平均励起エネルギー $E_R(n)$ に分配される。

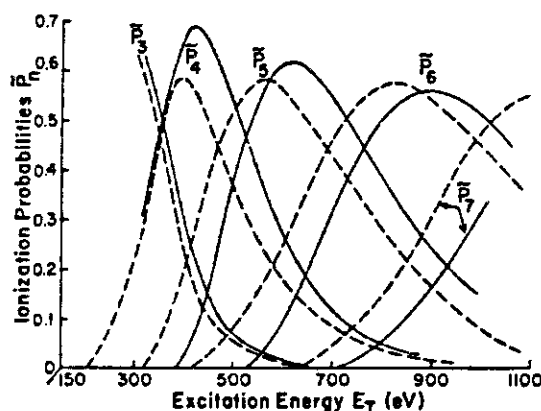
$$E_T = E_K + \sum_{j=1}^n E_j^{ion} + E_R(n) \quad (16)$$

Russek は(4)式を用いて $Ar^+ - Ar$ 衝突系における多重電離確率を E_T ごとに計算し実験値と比較した。(第15図) 第15図(a), (b)の点線は実験値を示し、実線は理論値を示す。(a) はエネルギー統計(蒸発模型)で行なった計算で、(b)は位相空間統計により行なった計算である。

衝突と直接関係のある E_T の表示(4)式は、定まらないパラメータ A_1, β を含みあいまいさをも



第 15 図(a) The ionization probabilities in energy-cell statistics for Ar⁺ on Ar. The dashed curves are the experimental data obtained from fig. 4 of ref. 19. The solid curves are theoretical predictions which follow from the assumption of one fast electron with statistical distribution of the remaining energy. In this figure the statistics follow from the assumption of equal *a priori* probabilities per unit energy cell in the limit of no residual ion excitation, with $g = 1.0$.



第 15 図(b) The ionization probabilities in phase-space statistics for Ar⁺ on Ar. The dashed curves are the experimental data obtained from fig. 4 of ref. 19. The solid curves are theoretical predictions which follow from the assumption of one fast electron with statistical distribution of the remaining energy. In this figure the statistics follow from the assumption of equal *a priori* probabilities per unit volume of phase space in the limit of no residual ion excitation, with $g = 1.0$.

文献 15)より転載。

ている。Firsov¹⁶⁾ は以前この E_T を原子が他の原子と衝突することによるエネルギー移動を互いの原子内に電子が移動することにより衝突エネルギーが減衰し原子に移ると考え衝突パラメーターにより表示した。これは 2 つの原子の中心 (原子核) に垂直かつ重なり合った電子殻の中心を含む平面を通過 (一方の原子から一方の原子へ) する電子のフラックスを互いの原子内の電子の速度分布を Thomas-Fermi 近似を用いた計算より得た。

これは、

$$E_T = 0.344 (Z_1 + Z_2)^{5/3} v_1 / (1 + 0.161 (Z_1 + Z_2)^{1/3} R_0)^5 \quad (\text{a.u.}) \quad (17)$$

と表わされる。ここで R_0 は衝突粒子の最近接距離を示す。

Bruno Schmid と Garcia¹⁷⁾ は Ruseek-Meli 理論に (17) 式を適応させて Ar⁺-Ar 衝突系における放出電子の数を実験値と比較し、良い結果を得た。この際、内殻励起の計算は電子昇位 (3dσ-

3dπ-3dδ) により起ると考え、衝突径数法で行なった。

3. 統計的手法(2)

2節では比較的低エネルギー衝突による多重電離の統計的手法を述べたが、ここでは高いエネルギー衝突での手法を簡単に述べさせて頂く。高エネルギーすなわち衝突時間が対象とする電子の軌道時間より短い場合では、パウリ原理が先行し電子間相互作用が重要となる低エネルギー衝突に対し、衝突速度が $v_1 \geq Z_2$ 程度になると連続状態への遷移が支配的で摂動計算により電子の相互作用は充分無視することができ各電子は独立に取り扱える様になり、その電子の属する殻内の電子は互いに独立な運動を行うという一種の瞬間近似を用いることが可能となる。このため、このエネルギー領域の理論は、電子が配置を変える前に衝突は終わってしまうため各電子間の相関を無視した独立電子模型を仮定している。

Hamsteen と Mosebekk は、上記を基に対象とする殻内の電子を放出(つまみとる)確率を

$$P_n^N(b) = \binom{N}{n} P(b)^n [1-P(b)]^{N-n} \quad (18)$$

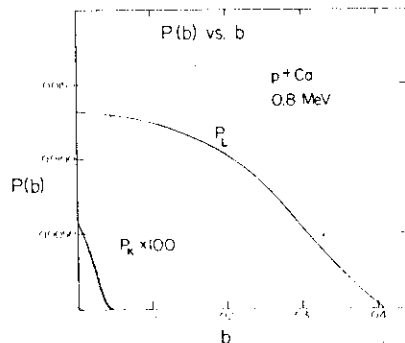
と二項分布で表わし実験値との比較を行なった¹⁸⁾ここで $P(b)$ はその殻から1個の電子を放出する確率であり、SCA(半古典近似)¹⁹⁾により計算された。この近似においては、入射イオンは高速であるため有効電荷 Z_e をもった点電荷 ($E_1 = 1 \text{ MeV/amu}$ ならドブロイ波長 $\lambda_d = 4.5 \text{ fm/amu}$) と見なすことができ、標的原子に束縛されている電子は各殻内で独立であるため、各殻間の電子の異いは単に束縛エネルギー差とパウリ原理を満たす様な電子の数だけで、電子はどの程度の力で核に束縛されているか、あるいは入射粒子の速度それに有効電荷だけを感じることになる。この事実を認めるならば、(18)式において $P(b)$ を何で計算するかでこの方法の真価は定まる。McGuire と Richard は、^{20), 21)} この $P(b)$ を二体衝突(Binary-Encounter)近似において計算を行い誤差の程度を調べた。この手法でL殻多重電離を考えている。(18)式を用いればK殻からm電子電離、L殻からn電子電離を示す断面積は

$$\begin{aligned} \sigma_{mK, nL} &= 2\pi \int P_{mK} P_{nL} b db \\ &= 2\pi \int \binom{2}{m} \{p_K(b)\}^m \cdot \{1-p_K(b)\}^{2-m} \\ &\quad \times \binom{8}{n} \{p_L(b)\}^n \cdot \{1-p_L(b)\}^{8-n} \\ &\quad b db \end{aligned} \quad (19)$$

によって表わされる。しかし、第16図に見られるように $p_K(b)$ と $p_L(b)$ が存在する領域が異なり、 $p_K \times p_L \approx 0$ となる領域は $p_K \approx 0$ の領域であるため(19)式は

$$\begin{aligned} \sigma_{mK, nL} &= \binom{8}{n} \{p_L(0)\}^n \{1-p_L(0)\}^{8-n} \sigma_{mK} \\ &\equiv A_m^L \sigma_{mK} \end{aligned} \quad (20)$$

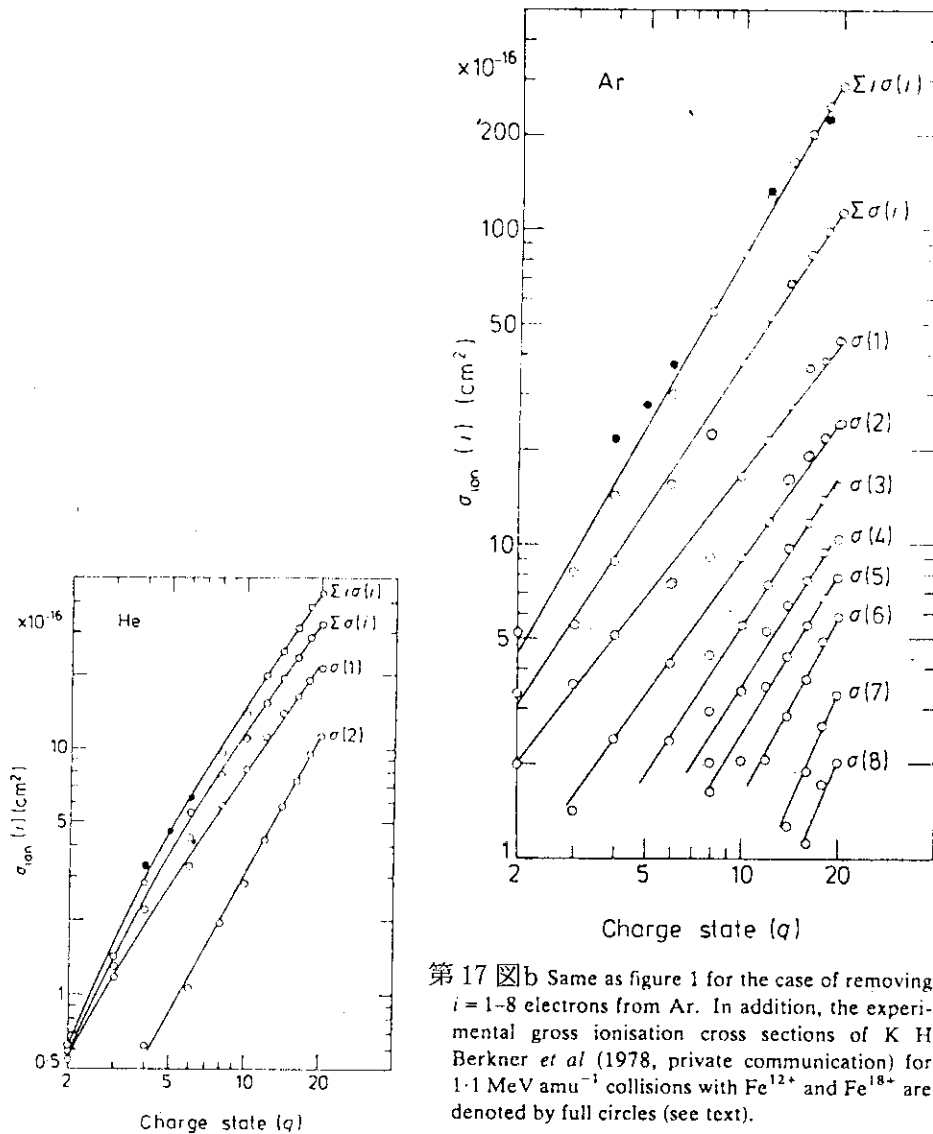
と端に表わせる。ここで $p_L(0)$ と選んだのは、 $p_K \approx 0$ の領域では $p_L(b)$ がほぼ一定値をとることによる。これは、K殻の空孔生成を知るこ



第16図 BEA calculations for $P_K(b)$ and $P_L(b)$ as functions of impact parameters b for case of ionization of calcium by 0.8 MeV protons [R. L. Kauffman, J. H. McGuire, P. Richard, and C. F. Moore, *Phys. Rev. A* 8, 1233 (1973)].

とを示している。通常1電子電離断面積を求めるのに用いられるPWBAでK殻の1電子電離断面積は入射イオンの原子番号 Z_1^2 に比例する。また(20)式から $\sigma_{1K,nL} = A_n^L \sigma_{1K} = A_n^L \sigma_{1K}^{PWBA} \propto Z_1^2$ と予想されたが実験値はこの結果から大きくずれている。これは A_n^L の Z_1 依存性が強いのか、電離電子が感じる入射イオンの有効電荷が衝突速度に依存するのか、あるいは模型の大前提がまちがっているのか現在のところ確かではない。この手法に関して Reading と Ford²⁵⁾ は2つの空孔の生成の確率は2つの空孔がスピン3重項のとき、1ケの電子を取り去る確率の積からは得ることができないと指摘している。

Olson は古典軌道モンテカルロ法 (CTMC) による全く異なった方法で計算を行なった。²⁶⁾ これは、標的原子に対する活性電子の感じる有効電荷 Z_{eff} とその電子のイオン化エネルギー U を入力することにより得られる計算機実験である。第17図は Olson による計算結果を示したものである。



第17図a. Ionisation cross sections for removing $i = 1, 2$ electrons from He by collision with a highly stripped ion in charge state q at an energy of 1 MeV amu^{-1} . \circ , calculated cross section; $\Sigma i \sigma(i)$, gross cross section; \bullet , preliminary experimental gross ionisation cross sections of K H Berkner *et al* (1978, private communication) for 1.1 MeV amu^{-1} collisions with C^{4+} , C^{5+} and C^{6+} ions (see text). Lines have been drawn through the calculated points as a visual aid. 文献26)より転載。

第17図b Same as figure 1 for the case of removing $i = 1-8$ electrons from Ar. In addition, the experimental gross ionisation cross sections of K H Berkner *et al* (1978, private communication) for 1.1 MeV amu^{-1} collisions with Fe^{12+} and Fe^{18+} are denoted by full circles (see text).

第17図の(a)は1 MeV/amuの A^{+q_1} が入射した時の He 原子の電離の様子を q_1 を変えてみたものである。黒マルは $\Sigma j\sigma(j)$ の実験値を示す。(b) 図は標的原子が Ar の場合である。 $\Sigma j\sigma(j)$ の一致は良い。

4. 実験事実との対話 (結論に代えて)

これまでの説明から現解できるように理論的手法としてはまだ現象論的段階にあり、まだメカニズムを論ずるには幼なすぎる感じがする。しかし、数多くの実験結果を何らかの形でまとめあげメカニズムを引き出そうとする試みとしてユニバーサルイオン化曲線がある。第18図(a)は Watson 等²³⁾ が衝突速度を

$$v_i/\bar{v}_L = \sqrt{(E/M_p)(m_e/\bar{u}_L)} \quad (21)$$

によりスケールし、L 殻電離確率を

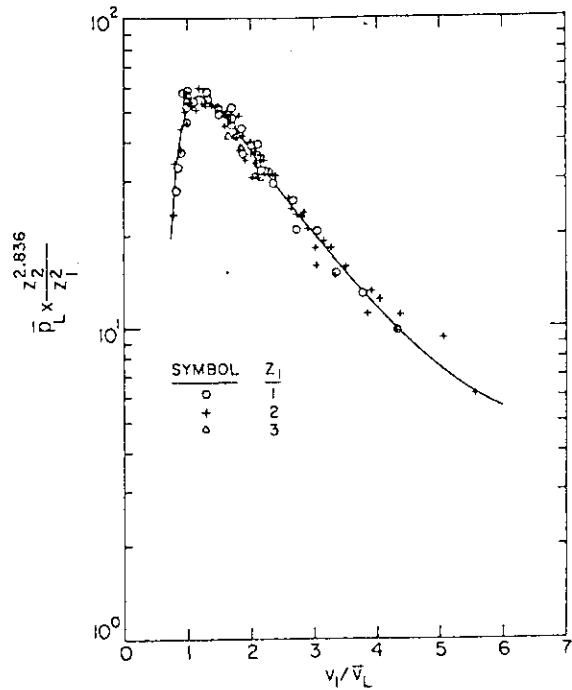
$$\bar{p}_L = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 j\sigma_{KLj} / \sum_{j=0}^8 \sigma_{KLj} \quad (22)$$

でスケールしたものである。

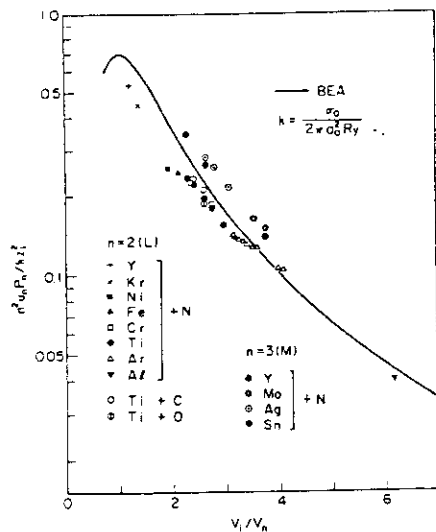
数多くの実験値がこのエネルギー範囲でスケール出きていることを示している。図(b)は Awaya¹⁰⁾ による L 殻の多重電離を同じ曲線にスケールしたものである。ほかに

Basbas 等²⁴⁾, Schmicdekamp 等¹¹⁾ による同様な仕事がある。これまでの理論と実験値の総括的対応がユニヴァーサル曲線の研究(これまでは限られたエネルギー範囲だけのセミ(?)ユニヴァーサル曲線)であるが2節、3節の理論との対応を積極的に行なった仕事として Cocke²⁶⁾ の論文をあげることができる。Cocke は衝突領域(標的原子の核より半径が K, L 殻程度)から多価反跳イオンを引きだし、それを飛行時間法により荷電状態の分布を調べ、低い電荷数 (q_2) が生じる場合には Olson の計算がよく、高い電荷数が生じる場合には Russek-Meli の理論を高エネルギー衝突に適応した計算が測定値との一致がよいことを示した。

Russek-Meli の理論は ① 標的原子が衝突により付着エネルギー E_T (並進エネルギーとして付着) を



第18図a Universal curve for scaled light-ion \bar{p}_L values. 文献²³⁾より転載。



第18図b. Scaled P_L and P_M , and theoretical universal ionization curve vs. scaled projectile velocity.

文献¹⁰⁾より転載。

得る、次に②この E_T が衝突後に各電子に分配されいくつかの電子を自動電離状態にする、という2段階よりなる。Cockeは、この2段階目のメカニズムは高エネルギー衝突においても同じであると考え、1段階目のエネルギー付着のメカニズムを修正した。高エネルギー衝突では入射重イオンのドプロイ波長が短くなる ($E_1 \approx 1 \text{ MeV/amu}$ で $\lambda \approx 4.6 \text{ fm/amu}$) ため、有効電荷 Z_e を持った点電荷が自由な標的電子雲の中を速く通過し、その際各電子にエネルギーを付着するという描像が合う。この時の標的電子座標へのエネルギー伝達は簡単な古典的インパルス近似を用いる。(ボーア・パラメーターが3程度で古典近似が成り立つぎりぎりの所であるが、大きな衝突径数が重要となる全断面積を知るにはさほど悪くない。) この時、電子雲内の一つの電子が受けるとエネルギーは

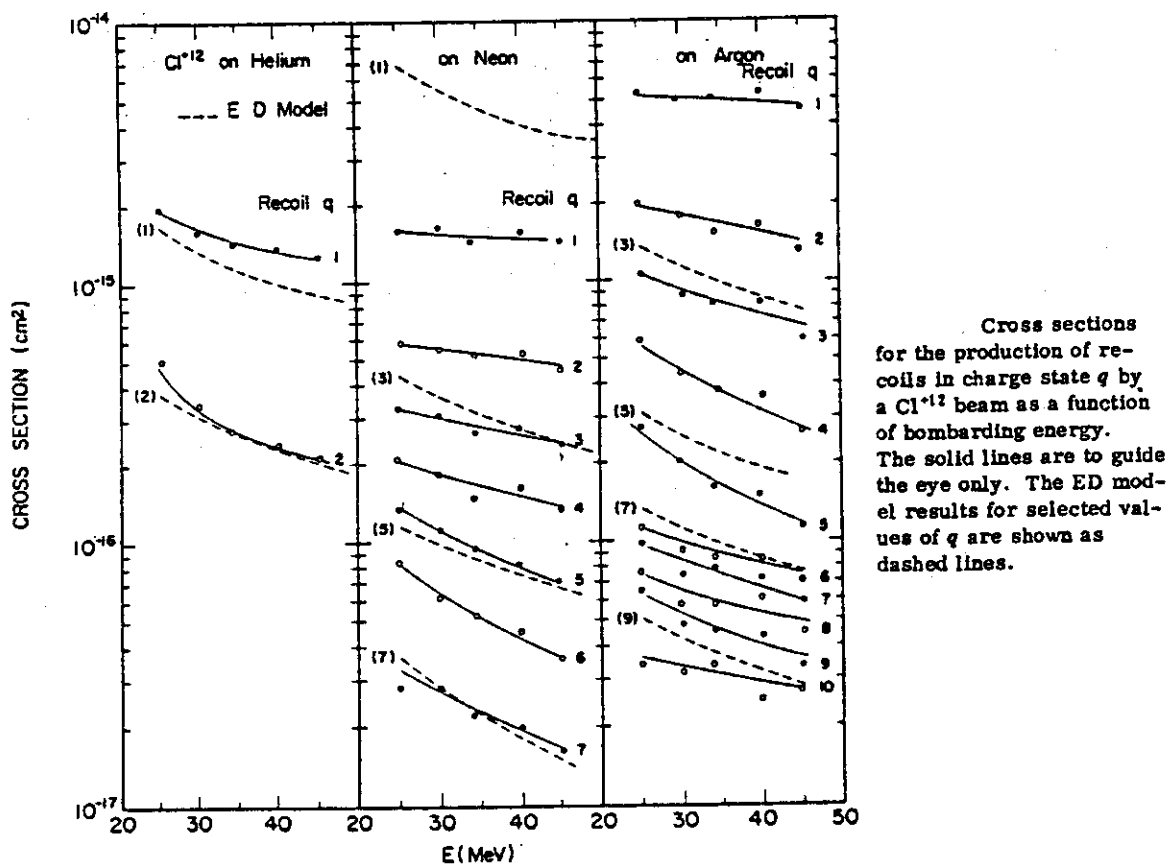
$$T(p) = \frac{2Z_i^2}{v_i^2} \cdot \frac{1}{p^2 + a^2} \cdot a = \frac{Z_i(M_i + 1)}{M_i v_i^2} \quad (\text{a.u.}) \quad (23)$$

となる。ここで p は入射重イオンと自由電子との衝突径数を示す。 ($p = p(b, \vec{r})$) これより N 個の電子雲内の分布により

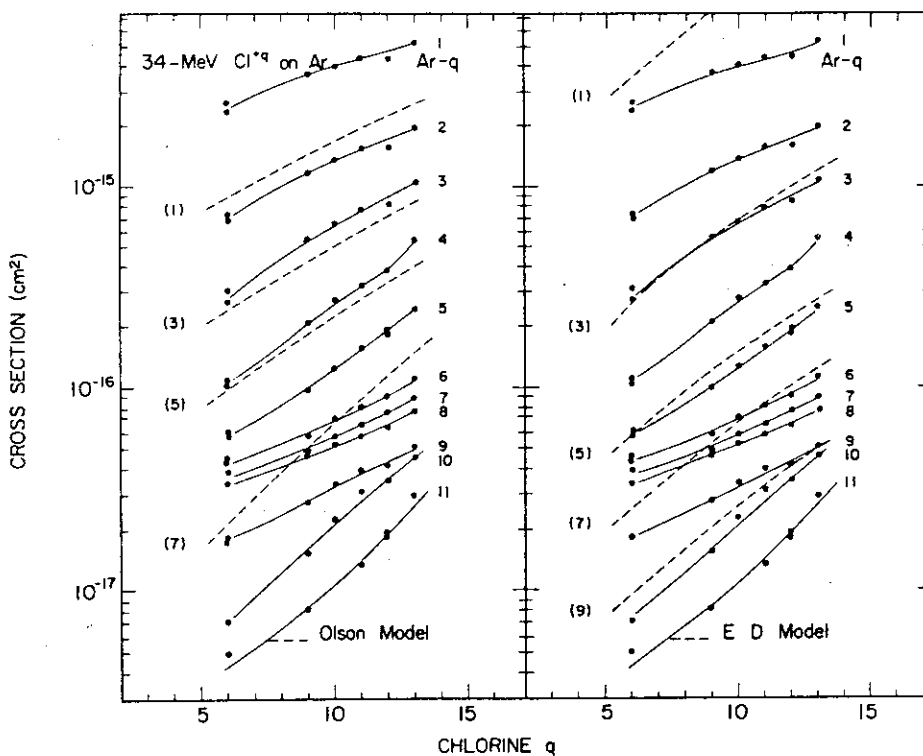
$$E_T(b) = \sum_i \int |\psi_i(\vec{r})|^2 T(p) d^3r \quad (24)$$

として計算され標的原子に付着する全エネルギーを求めることができる。これ以後は Russek—Meli の理論と全く同様に行なえる。第19図(a), (b)が実験値との比較である。E—D (energy—deposition) model と記してあるのは、24式の E_T を用いた Russek—Meli の理論による計算(但し(16)式による E_R を zero とした)、Olson model とあるのは、第17図で示した Olson の結果から引用 (McGuire 達の計算もほぼ同じと考えてよい) したものである。(a)図は、 $\text{Cl}^{+12} + \text{A}$ 衝突の実験値と E—D 模型との衝突エネルギー依存の比較である。標的原子が He の場合を除き、E—D 模型の一電子電離断面積は(16)式の E_R を zero (放出しなかった電子はもとの配置へもどる) とした影響のため over—estimate となっている。このことは最外殻電子のイオン化には光によるエネルギー損失が重要であることを示す。(事実 E_R に第一イオン化エネルギー値を代入すると断面積は $1/3$ 程度になる。しかし3ヶ以上の電子が電離する場合は、 $E_R = 0$ とした時と1割程度しか変化しない。) だが全体としてはほぼ実験値を再現している様に見える。(b)図は、 $\text{Cl}^{+9} + \text{Ar}$ 衝突により Ar^{+q} とする断面積を q_1 を横軸に選び示したものである。左図が Olson の計算との比較で右図が E—D 模型との比較である。この2つの計算の傾向が全く逆で、 q_2 が小さい場合の反応では、Olson は under—estimate になり、E—D 模型では over—estimate となっており、 q_2 が大きい所では逆傾向である。これは、Olson の計算においては、標的原子内電子の束縛エネルギーが非常に敏感であるために起ると考えられる。例えば Ne 原子の同じ L 殻それも副殻の中でさえ $\text{Ne} \rightarrow \text{Ne}^+$ では束縛エネルギーは 21.5 eV だが $\text{Ne}^{+5} \rightarrow \text{Ne}^{+6}$ では 507 eV と 200 倍近く異なる。これが $p(b)$ の計算に影響する。(ie 初めの1つを放出する確率は比較的大きいが、次の一つを放出するには非常に難しく、確率は小さくなる。) 同じ殻内では全く共通の放出確率 $p(b)$ を用いているため、放出電子が少ない時は under—estimate となる。この計算は、より細かな殻に分けて考えれば少しずつ修正されることを示すが、非常にやっかいなものになる。

これまで、多重電離に関する(全く散らばったままで)現象とその理論を紹介させて頂いた。敗けおしみを言わせて頂ければ、多重電離に関する理論的研究はこの様に書かざるをえない段階なのである。最近実験結果を中心としたレビューを Elston²⁷⁾ が書いているが、これも現象の羅列であり、



第 19 図 (a) Cl^{+12} 衝撃における He, Ne, Ar の反発イオンの断面積のエネルギー依存性。文献 26) より転載



第 19 図 (b) Cl^{+q} 衝撃における Ar の反発イオンの断面積の q 依存性。文献 26) より転載

役に立つレビューであるが良いレビューとは言いがたい。他の最近の研究では Bottcher²⁸⁾による衝突計算, カンサス・グループによる Fokker-Plank 方程式による解析があるが, まだ紹介する段階ではないので除かせて頂いた。また実験的には, 最近 Awaya²⁹⁾を中心とした理研グループにより衝突による入射重イオンの多重電離を調べる等多面的な考察が行なわれている。いずれにしても今後の理論的研究の待たれている研究領域である。

参考文献

- (1) M.Y. Amusia; *Comm. At. Mol. Phys.* X4(1981)155
- (2) G.N. Ogurtsov; *Rev. mod. Phys.* 44(1972)1(fig.1)
- (3) D.L. Matthews, B.M. Johnson, J.J. Mackey, C.F. Moore; *Phys. Rev. Lett.* 31(1973)1331
- (4) D.L. Matthews, B.M. Johnson, J.J. Mackey, L.E. Smith, W. Hodge, C.F. Moore; *Phys. Rev.* A10(1974)1177
- (5) C.P. Bhalla, D.L. Matthews and C.F. Moore; *Phys. Lett.* 46A(1974)336
- (6) M.O. Krause, F.A. Stevie, L.J. Lewis, T.A. Carlson and W.E. Moddeman; *Phys. Lett.* 31A(1970)81
- (7) A.K. Edwards; *PhD. Thesis*
- (8) C.F. Moore, J.J. Mackey, L. Smith, J. Bolger, B. Jonson and D. Matthews; *J. Phys.* B7(1974)L302
- (9) D.K. Olsen and C.F. Moore; *Phys. Rev. Lett.* 33(1974)194
- (10) Y. Awaya; "Electronic and Atomic Collisions" Invited Papers in XI ICPEAC (ed. Oda-Takayanagi, 1980)p.325
- (11) C. Schmiedekamp, B.L. Doyle, T.J. Gray, R.K. Gardner, K.A. Jamison and P. Richard; *Phys. Rev.* A18(1978)1892
- (12) J.R. Mowat, R. Lanbert, I.A. Sellin, R.L. Kauffman, M.D. Brown, J.R. MacDonald and P. Richard; *Phys. Rev.* A10(1974)1466
- (13) For instance, W. Lichten; *Atomic Physics (ICAP, Heidelberg)* 4(1974)249
- (14) A. Russek and M.T. Thomas; *Phys. Rev.* 109(1958)2015
ibid. 114(1959)1538
J.B. Bulman and A. Russek; *Phys. Rev.* 122(1961)506
A. Russek; *Phys. Rev.* 132(1963)246
- (15) A. Russek and J. Meli; *Physica* 46(1970)222
- (16) O.B. Firsov; *Sov. Phys. JETP* 36(1959)1076

- (17) G. Bruno Schmid and J. D. Garcia; Phys. Rev. A15(1977)85
- (18) J. M. Hansteen and O. P. Mosebekk; Phys. Rev. Lett. 29(1972)
1361
- (19) J. Bang and J. M. Hansteen; Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 31
(1959)1
- (20) J. H. McGuire and P. Richard; Phys. Rev. A8(1973)1374
- (21) J. H. McGuire and L. Weaver; Phys. Rev. A16(1977)41
- (22) R. E. Olson; J. Phys. B12(1979)1843
- (23) R. L. Watson, B. I. Sonobe, J. A. Demarest and A. Langenberg;
Phys. Rev. A19(1979)1529
- (24) G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert; Phys. Rev. A7(1973)983
- (25) J. F. Reading and A. L. Ford; Phys. Rev. A21(1980)124
- (26) C. L. Cocke; Phys. Rev. A20(1979)749
- (27) S. B. Elston; Inner-shell and X-ray Physics of Atoms and
Solids(ed. Fabian-Kleinpoppen-Watson, 1981)p127
- (28) C. Bottcher; J. Phys. B10(1977)L213
- (29) Y. Awaya et. al.; in preparation.

(注. 1) 単位系は, (21)式を除きすべて原子単位 (atomic unit)を用いた。

(注. 2) (21)式におけるEは入射イオンエネルギー, M_p は入射イオンの質量, m_e は電子の質量そして \bar{u}_L はL殻(2s, 2p)電子の平均束縛エネルギーを示す。

5. 原子核反応に於ける分子的共鳴状態

東大核研 今西文龍

Chalk River のタンデム加速器により 1959 年 Bromley, McKenzie¹⁾等によって¹²C 原子核に¹²C 原子核を衝突させる実験が行われ、弾性散乱や各種の reaction cross section の励起函数にお互いに correlate した著しい共鳴状態がいくつか存在することが示された^(2,3)。その中でも特徴的な peak を示す 3 ヶの resonance ($E_{c.m.} = 5.6, 6.0, 6.3$ MeV) については 1964 年それらのスピンを決める実験が行なわれ table 1 (その後測定された準位についても記述) に示される値が得られた^{3,4,5)}。これらの共鳴準位の特徴は弾性散乱への部分巾 Γ_e が非常に大きい(reduced width に書き改めるとそのことがよく示される) ことである。このことから、これらの共鳴

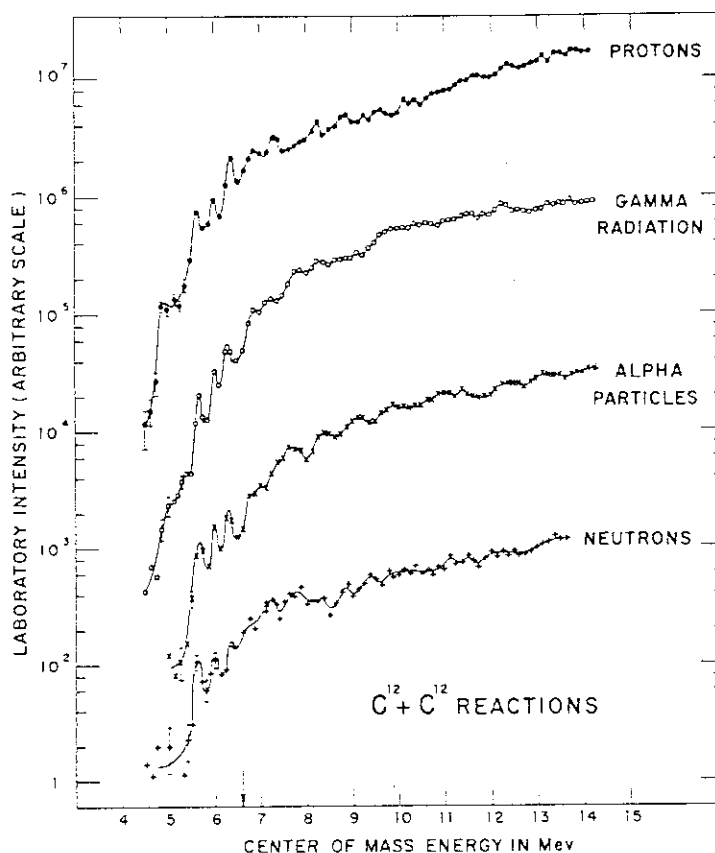


Fig.1 (from ref.2)

状態は 2 ヶの入射 2 原子核のこん跡を強くとどめる様な状態、いいかえれば 2 ヶの入射¹²C 核に近いものから形成される 2 原子核分子状態ではないかと考えられた³⁾。

又、¹⁶O と ¹⁶O, ¹⁶O と ¹²C 原子核の衝突実験も行なわれ¹²C と ¹²C の場合にみられる fine な

Molecular resonances in heavy ion reactions.

Bunryu Imanishi

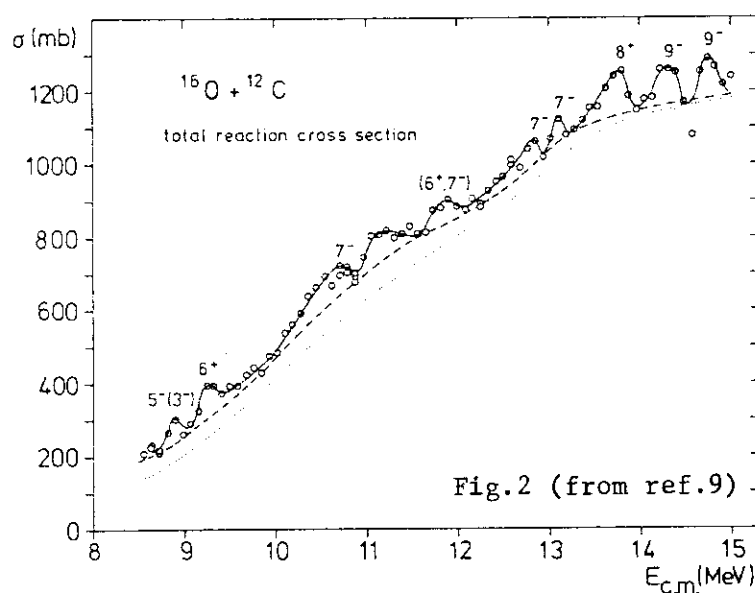
(The University of Tokyo)

peak は殆ど観測されない(?)までも、それらの弾性散乱、非弾性散乱、核子(群)移行又応などに於いて巾2~3 MeVの山や谷(gross structure)が観測された⁶⁾。これらの gross structure に似た structure は、今日では¹²C, ¹⁶O, ²⁰Ne, ²⁴Mg, ²⁸Si 等いわゆる4N核と呼ばれる原子核同志の散乱にみられるだけでなく¹⁴C+¹⁴C等、他の原子核間散乱にもいくつかみられることが指摘される様になった⁸⁾。

Table 1 Resonance parameters and total cross-sections for the ¹²C+¹²C entrance channel (ref. [33, 34]).

$E_{c.m.}$ [Ref.]	J^π	Γ_{tot} (keV)	Γ_0 (keV)	$\frac{(\Gamma_0 \times \Gamma_0)^{\frac{1}{2}}}{\Gamma_{tot}}$ (%)	$\frac{\Gamma_0}{\langle \Gamma_{comp} \rangle}$	σ (mb)
5.60 [33]	2 ⁺	130	10		46	
5.94 [34]	4 ⁺	190	4		29	
6.00 [33]						
6.41 [34]	2 ⁺	140		15.8		17.4
6.68 [34]	2 ⁺	150		16.9		18.8
6.64 [33]		100	20 \pm 4		38	
6.83 [33]	4 ⁺	126	11 \pm 3		19	
7.74 [34]	1 ⁻	150		11.0		12.9
7.90 [34]	4 ⁺	200		11.0		12.1
8.10 [34]	2 ⁺ +4 ⁺	150		12.2		20.9
8.37 [34]	4 ⁺	150		11.2		12.0
8.68 [34]	4 ⁺	220		11.7		12.6
8.88 [34]	0 ⁺	150		8.3		8.9
9.08 [34]	0 ⁺	220		10.2		12.9
9.34 [34]	0 ⁺	150		7.6		7.1
9.56 [34]	0 ⁺	150		8.4		8.4
9.70 [34]	0 ⁺	150		9.5		10.7
9.90 [34]	0 ⁺	220		10.9		14.4
10.20 [34]	(8 ⁺)	140		10.6		16.3
10.43 [34]	(8 ⁺)	250		11.5		18.7
10.68 [34]	8 ⁺	180		10.8		16.4
10.98 [34]	8 ⁺	270		11.3		17.3

(from ref.7)



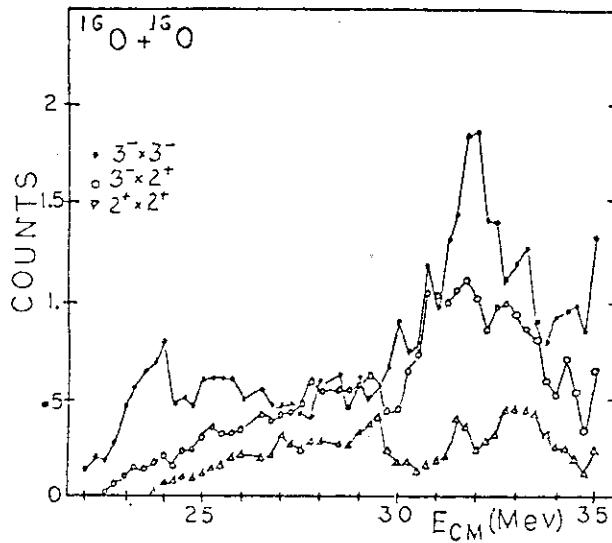


Fig. 3 Excitation functions of the major double excitations from inelastic scattering of ^{16}O on ^{16}O . These data are preliminary.

最近では、更に各種の非弾性散乱、核子(群)移行反応についての非常に詳しい角度分布、励起関数が測定される様になり、これらにみられる山や谷の相関関係が議論される様になった。

中でも非弾性散乱チャンネルの角分布、励起関数などは後にのべる分子模型の観点からも非常に興味深いものがある。図3には最近 Stony Brook のグループによって測定された ^{16}O と ^{16}O による非弾性散乱の結果が示されている¹⁰⁾。ここにもみられる様に、チャンネル間 correlation は gross structure には必ずしも存在しない。

I 励起関数にみられる Gross Structure, 共鳴準位についての解釈

1. 透明な原子核間ポテンシャルに基く共鳴準位

R. H. Davis¹¹⁾ は、原子核間に下図に示される様な光学ポテンシャルが存在すると仮定して、

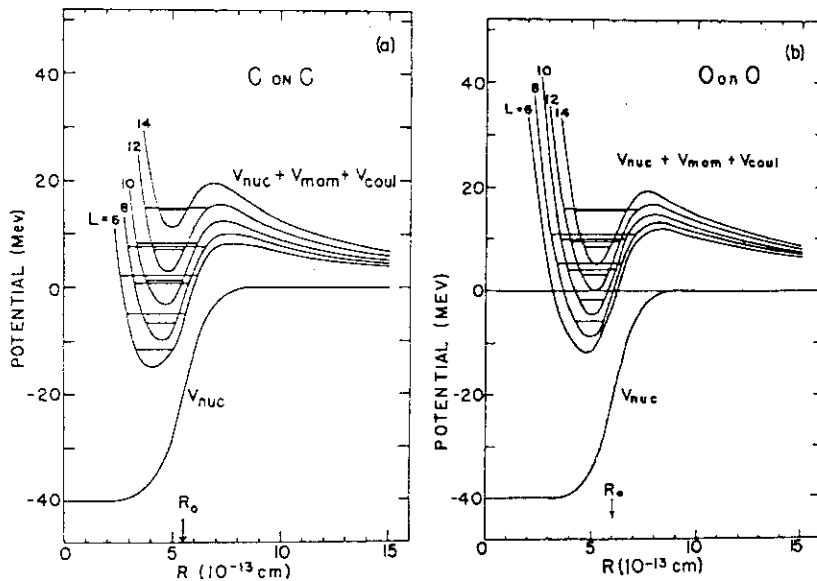


Fig. 4

これにより作られる共鳴準位が実験に観測されるものに相当するものと考えた。この考えは、しかし、仮りにこの様なポテンシャルが存在するとしても、クーロン障壁よりも高い所にみられる $J = 2, 4$ などのスピンを有する共鳴準位 ($\Gamma \sim 100 \text{ keV}$) のせまい巾をどうして説明するかが問題であろう。それに当時、何よりも困ったのは、2ケの原子核がかなりの重なりを有する領域に於いて複合核の形成が進むのを強くおさえる様なポテンシャル虚数部を仮定しなくてはならなかったことである。(後年この考えは、有馬 et al. によって再び取りあげられた)

2. Long Range な原子核間ポテンシャルに基づく共鳴準位

H. McManus と E. Vogt¹²⁾ は2ケの ^{12}C 核の間に、非常に long range なポテンシャルが effective に形成される説をとえ、ポテンシャルの虚数部が十分に小さな所で複合核の形成が行なわれるものと考えた。Long range なポテンシャルは、2ケの原子核が接近すると共に、それら

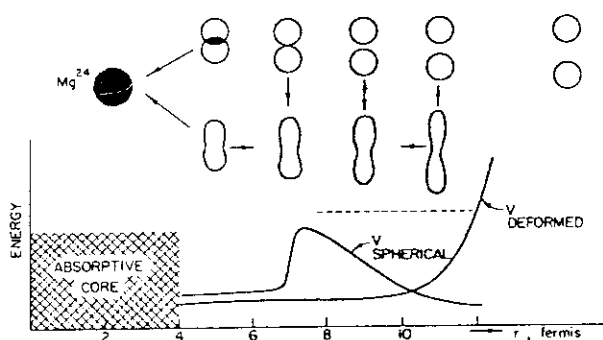


Fig. 5 Schematic Diagram of the Motion of Two Deformable ^{12}C Nuclei for a Center-of-Mass Energy of About 10 Mev. (from ref.12)

が断熱的に強く変形を起す結果形成される。この様なポテンシャルは図6に示される実線によってあらわされ、その中で共鳴準位が図7に示される様に形成されるのである⁴⁾。この説には非常に興味深いものがあるが、準位の巾については実験で観測される様なせまいものを作る事が困難である。これをすくうには、図6のポテンシャルが弾性散乱チャンネルを除外した断熱ポテンシ

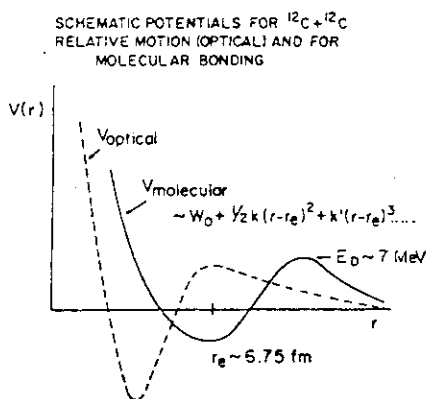
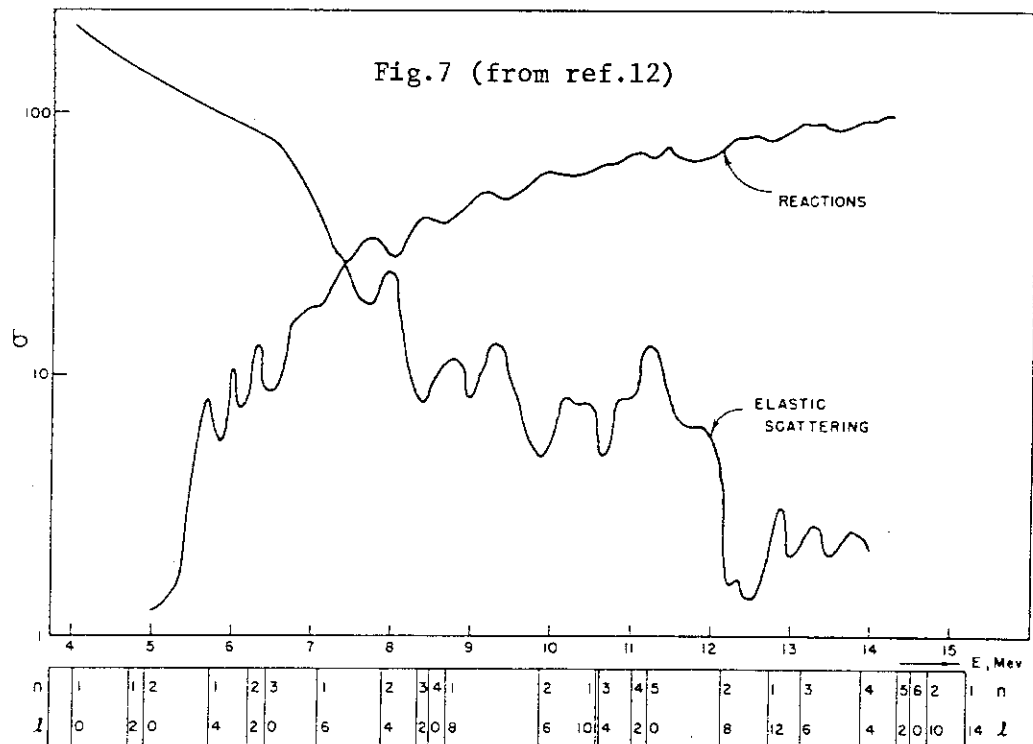


Fig.6 (from ref.4)



ャルと考えて、新たに弾性散乱チャンネルとの結合を考慮に入れる必要がある。いずれにしても、この考えは今日まで未だ定量的な段階まで研究が進められては無い。

3. 集団励起運動に基く非弾性散乱チャンネルに於いて形成される door-way states

野上氏は1963年、共鳴準位の入射チャンネルへの部分巾(〜keV)を解釈するために、共鳴準位が非弾性散乱チャンネルに於いて door-way states として形成されるものと仮定を行った¹³⁾。この非弾性散乱チャンネルは¹²C-核の集団運動に基くものであり、共鳴現象を入射チャンネルとこれらのチャンネルとの間の結合によって観測されるという観点からは McManus-Vogt の唱えた仮定に共通するものである。しかし、door-way states を¹²C核の第一励起状態と考える程度では、図6の様な long range ポテンシャルを引き出すことは困難である。野上氏はある程度の long range な有効ポテンシャルあるいはそれに相当する力を弾性、非弾性チャンネルに導入することはやむを得ないこととしながらも、弾性散乱チャンネルの部分巾がこのモデルによって引き出される可能性のあることを示した。このモデルの有力な点は、入射エネルギーがクーロン障壁をこえても全巾が十分に小さな(〜100 keV)共鳴準位の存在を説明する可能性のあることであった。

3' Door-way States と透明な原子核間ポテンシャル

著者は1968年、野上氏の提唱したモデルを、スピン、対称性を考慮に入れた定式化を行うと共に、¹²C-核間に、通常の range (long range ではない) と浅い深さパラメータ(20 MeV)の斥力部を有する光学ポテンシャル実部を仮定し、更に非常に小さな虚数部(〜50 keV)を仮定した光学ポテンシャルを導入して、共鳴準位の説明を試みた¹⁴⁾。この様な光学ポテンシャルは、当時、

玉垣、田中氏等¹⁵⁾によって微視的立場から進められた $\alpha-\alpha$ 粒子散乱からの類似に基くものであったと同時に、1967年 Blomley によって観測された⁶⁾2ケの ^{16}O 原子核の弾性散乱解析が示唆するポテンシャルでもあった。特にこのポテンシャルの、表面近くでの透明さは現在でも特徴的であるが、著者が $^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$ 共鳴散乱の解析に用いたポテンシャルは、2ケの ^{12}C 核がかなり重なりを示す領域($r \geq 3\text{ fm}$)にまでこの浅い虚数部(透明さ)を仮定したものであった。そのポテンシャルを図8に示す。すなわち、弾性散乱チャンネルと同様に、非弾性散乱チャンネルに対しても仮

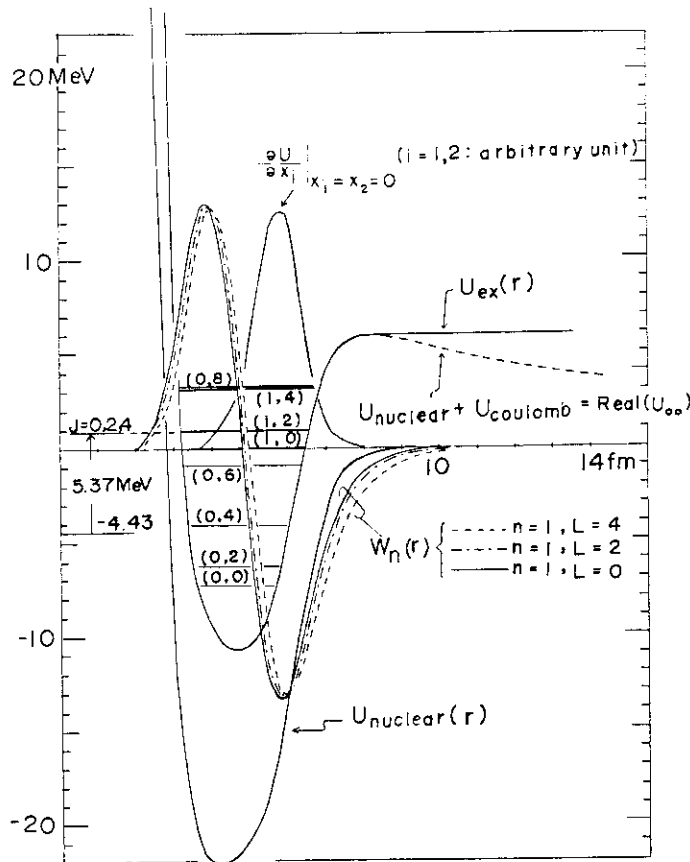


Fig. 8 Potential U_{ex} of the compound system, dU/dx_i ($i = 1, 2$) in arbitrary unit, and energy levels and radial wave functions solved with U_{ex} . The potential U_{ex} and dU/dx_i are constructed from the potential, $\text{Re}(U_{00})$. The wave functions $w_n(r)$ exhibit to be not so dependent of L so far as $J = 2$ thus $L = 0, 2$ and 4 . Thus, the energy levels labeled by (node of $w_n(r)$, angular momentum L) show to be almost rotational-like if quantum number n is fixed. When the coupling potential = 0, the compound states of $J = 0, 2$ and 4 are degenerate to a level ($n = 1, L = 2$), as is shown in the left part of the figure.

定されるこのポテンシャルが非弾性散乱チャンネル内で束縛あるいは共鳴準位を形成する。 $^{12}\text{C}-^{12}\text{C}^*$ 間の運動エネルギーが($^{12}\text{C}^*$ 核の励起に食われて)このポテンシャルのポケットから逃げ出す程大きくなければ、全巾は Γ_c とこのポテンシャルの虚数部で決る巾 Γ^+ の和であらわされるわけである。定式化はチャンネル結合法に基くが、共鳴の準位、全巾、部分巾を陽に知る為、野上氏に従って分散式を導くこととする¹⁶⁾。定式化は次の様に示される。今、チャンネル wave function を $\phi_i^{JM\pi}$ (J :系の全角運動量, M :そのZ-方向成分, π :系の全 parity- $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ 系では $\pi = \text{plus}$ のみ許される, i :系を specify する為に必要な $JM\pi$ 以外の量子数の組)とすれば、全系の trial function $\Psi^{JM\pi}(\tau)$ は、次の様にあらわされる。

$$\psi^{JM\pi}(\tau) = \sum_i \phi_i^{JM\pi}(\xi) u_i^{J\pi}(r)/r \quad (1)$$

$$\phi_i^{JM\pi}(\xi) = [\varphi_{i1}(L) \otimes Y_L(\hat{r})]_{JM} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \varphi_{gr,1=0} = \phi_{l=0}({}^{12}C_1(\text{gr.})) \phi_{l=0}({}^{12}C_2(\text{gr.})) \\ \varphi_{ex,1=2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \phi_{l=0}({}^{12}C_1(\text{gr.})) \phi_{l=2}({}^{12}C_2^*(2^*)) + \phi_{l=0}({}^{12}C_2(\text{gr.})) \right. \\ \quad \left. \phi_{l=2}({}^{12}C_1^*) \right\} \\ \varphi_{ex,1}({}^{12}C_1^* {}^{12}C_2^*) = \dots \end{cases} \quad (3)$$

${}^{12}C$ と ${}^{12}C$ との間に働く相互作用を U^C とあらわせば $\phi_i^{JM\pi}; (i=1,2,\dots,n)$ の base では次の $U_{ij}(r)$ が相互作用をあらわす:

$$U_{ij}^{J\pi}(r) = \langle \phi_i^{JM\pi}, U^C \phi_j^{JM\pi} \rangle \quad (4)$$

従って ${}^{12}C$ と ${}^{12}C$ との間の相対運動を記述する動径波動関数 $u_{ij}^{J\pi}(r)$ は次の方程式の解である:

$$\bar{r} \left\{ \left[E - \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{L_i(L_i+1)}{r^2} + \epsilon_i \right) \right] \delta_{ij} - u_{ij}^{J\pi}(r) \right\} u_{ij}^{J\pi}(r) = 0 \quad (5)$$

$$u_{ij}^{J\pi}(r) \sim f_i(r) \delta_{ij} - \pi h_i^{(+)} T_{ji} \quad (\text{境界条件}) \quad (6)$$

あるいは (5) 式を, チャネルについての Matrix 形を使用して書きかえれば

$$\underbrace{[E - (T(r) + R(r) + \epsilon + U(r))]}_H \mathbf{u} = 0 \quad (7)$$

とあらわされる。今, 入射チャネルだけを取り出す operator P を考えると, ${}^{12}C$ と ${}^{12}C$ 散乱の場合にはその様なチャネルは 1 個だけなので P は次のものである:

$$P = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & 0 & 0 & \dots \\ & 0 & 0 & \\ & \vdots & \cdot & \cdot \\ 0 & & & \end{bmatrix}, \quad \text{又, } P\text{-space 以外は } M \text{ によって取り出されるものとする} \quad (8)$$

$$M = 1 - P$$

そうすれば P -space と M -space との間のチャネル結合方程式 (CC eq.) として,

$$P(E-H)Pu = PUMu, \quad M(E-H)Mu = MUPu \quad (9)$$

を得る。境界条件については 弾性散乱チャネルにのみ入射波があるとするものを選び

$$Pu \sim Pf - \pi Ph^{(+)}T, \quad Mu \sim -\pi Mh^{(+)}T \quad (10)$$

今, 複素数を固有値とする固有値問題;

$$M(\epsilon^\mu - H)Mv^\mu = 0, \quad v^\mu \sim h^{(+)}(k_\mu) t_\mu^{\text{complex}} \quad (11)$$

↑
complex

を考えこの解を用いて Mu を次の様に展開する。

$$Mu = \sum_\mu v^\mu c_\mu + \Delta v, \quad (\Delta v)_i = -\pi h_i^{(+)}T_i \quad (12)$$

M が完全に closed channel のみを指定するのならば ϵ^μ は負の定数であり $\Delta v = 0$ である。特に M に door-way state 的なもの考えるならば, すなわち殆ど closed channel に近いもの考えるならば,

$$\Delta v \doteq 0 \quad (13)$$

とみなせるであろう。 c_μ を求める為, (12) 式を (9) 式に代入すれば次式を得る。

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{\nu} \left[(E - \epsilon^{\nu}) \delta_{\mu\nu} - \langle \tilde{v}^{\mu}, MUP \cdot G_p PUMv^{\nu} \rangle \right] c_{\nu} - \pi \sum_j \left[(E - \epsilon^{\mu}) \langle v^{\mu}, h_j^{(+)} \rangle + \right. \\ & \left. \langle v^{\mu}, MUPG_p PUMh_j \rangle \right] T_j = \langle v^{\mu}, MUPu^0 \rangle = F_{\mu} \quad (14) \\ & \left[(E - \epsilon^{\nu}) \langle h_i^{(+)} \rangle, v^{\nu} \rangle - \langle h_i^{(+)} \rangle, MUPG_p PUMv^{\nu} \rangle \right] c_{\nu} - \pi \sum_j \left[\langle h_i^{(+)} \rangle, M(E-H)Mh_j^{(+)} \rangle \right. \\ & \left. - \langle h_i^{(+)} \rangle, MUPG_p PUMh_j^{(+)} \rangle \right] T_j = \langle h_i^{(+)} \rangle, MUPu^0 \rangle \quad (14') \end{aligned} \right.$$

ここに

$$u^0 \text{ は } P(E-H)Pu^0 = 0 \text{ の解, } G_p = (P(E-H)P)^{-1} \quad (15)$$

である。さて、 c_{μ} を解く為、次式 (齊次方程式) の解 $d_{\mu p}$:

$$\sum_{\mu} \left[(E^p - \epsilon^{\nu}) \delta_{\mu\nu} - \langle \tilde{v}^{\mu}, MUPG_p PUMv^{\nu} \rangle \right] d_{\mu p} = 0 \quad (16)$$

を用いて、 $\Delta v \doteq 0$ とすれば

$$c_{\mu} = \sum_p \frac{1}{E - E^p} d_{\mu p} \langle \tilde{w}^p, MUPu^0 \rangle; \quad w^p = \sum_{\mu} d_{\mu p} v^{\mu} \quad (17)$$

を得る。これを Pu の方程式に代入して弾性散乱に対して散乱振幅を求めれば、

$$T_1 = T_1^0 + \sum_p \frac{1}{E - E^p} \langle \tilde{u}^p, PUMw^p \rangle \langle w^p, MUPu^0 \rangle \quad (18)$$

を得て共鳴単位は $\text{Real}(E_p)$ 、その全巾は $-2 \text{Im}(E_p)$ 、又 $\Gamma_c = \langle \tilde{u}^p, PUMw^p \rangle \cdot \langle w^p, MUPu^0 \rangle$ を得る。但しこれらの量は (16) 式から知られる様に E に依存する。

(16) 式から E_p を

$$E^p \sim \epsilon^{\mu} + \langle v^{\mu}, MUPG_p PUMv^{\mu} \rangle$$

とすれば単位の全巾はほぼ

$$2\Gamma = \text{Im}(E^p) \sim \frac{\text{Im}(\epsilon^{\mu})}{2P'} + \frac{\pi |\langle \tilde{v}^{\mu}, MUPu^0 \rangle|^2}{2\Gamma'} = 2(\Gamma' + \Gamma^{\dagger}) \quad (19)$$

とあらわせる。 Γ' は実験値からすれば $\sim 10 \text{ keV}$ の order でなければならないから、 $\sim 100 \text{ keV}$ の全巾の大部分は Γ^{\dagger} 、すなわち ϵ^{μ} の Imag 部から決められる量である。M が殆ど closed channel 的であれば (11) 式の固有値 ϵ^{μ} については、その虚数部は解析に導入される光学ポテンシャルの虚数部である。実際の計算では $\sim 50 \text{ keV}$ の深さを有する虚数部と図8の実部を有するポテンシャルが用いられ表2にみられる様な結果が $E_{c.m.} = 5.6, 6.0, 6.3 \text{ MeV}$ の resonance について得られた。部分巾 Γ_c についての計算値はほぼ実験値を再現しているのがみられる。

Table 2 (from ref. 14)

計 算 値					実 験 値			
共鳴単位 (MeV)	spin	Γ (keV)	Γ_c^p (keV)		準位	spin	Γ	Γ_c^p
5.66	2	115	11.5	-0.8	5.6	2	130	19.5
5.90	4	116	8.2	-0.7	6.0	4	100	7.5
(6.39	0	150	52.1	-3.1) 6.3			
			real	imag				

1970 年以後になり原子核—原子核散乱に於ける共鳴現象についての実験は急速に進歩を示した。その中で $E_{c.m.} \lesssim 10$ MeV の領域において $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 散乱に於ける吸収断面積が測定され、特にクーロン障壁以下での精密な実験が行われ、光学ポテンシャルによる解析がなされた。

Michaud, Vogt 等は、その解析結果から光学ポテンシャルの実数部が ~ 20 MeV の深さとすれば、虚数部は ~ 1.0 MeV ($E_{c.m.} \sim 6$ MeV) 必要であることを示し、著者が用いたポテンシ

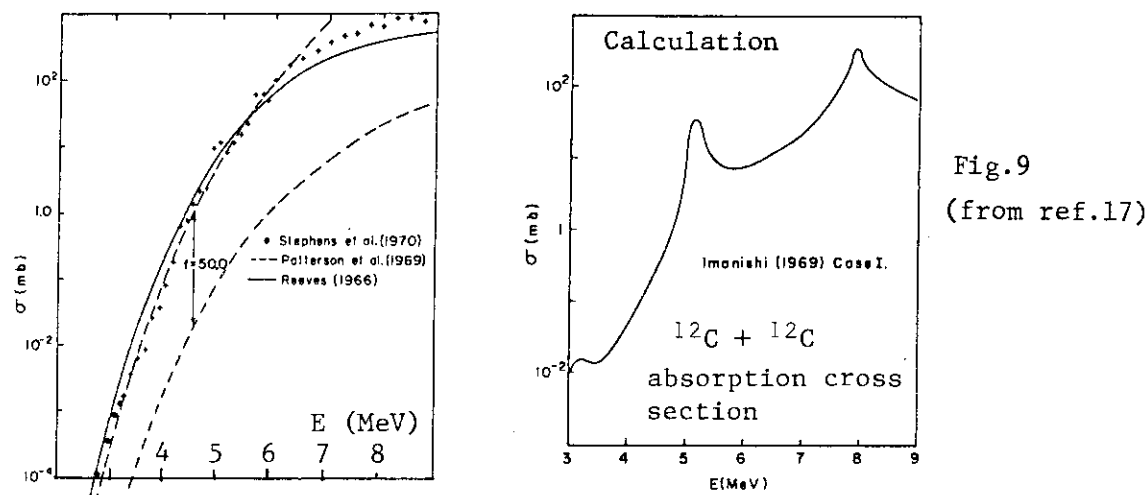


Fig.9
(from ref.17)

ルの虚数部が実験値を再現するのにはあまりにも小さすぎる事(上9図)を主張した¹⁷⁾。しかし、この主張は、あくまで弾性散乱の光学ポテンシャル解析に基いており、チャンネル結合解析に用いられている著者のポテンシャルに対してまでは言及されるべきものではない。1976年に松瀬、阿部、近藤氏¹⁸⁾の正確なチャンネル結合解析に基づく結果が、著者の用いたポテンシャルによって正しい吸収断面積を再現することが確められた。同時に松瀬、阿部、近藤氏は入射エネルギーの低い領域に於いてみられるいくつかの共鳴についても、チャンネル結合解析が実験値を再現し得る可能性のある事を示した(10図)。

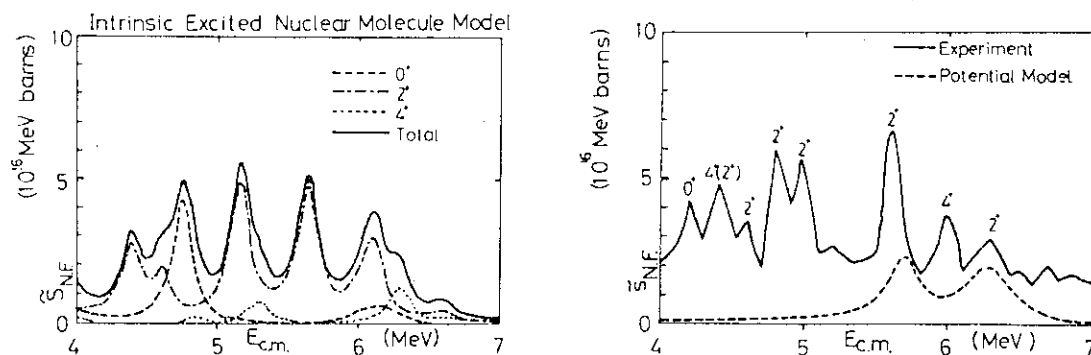


Fig. 10. Calculation of nuclear factor $S_{N.F.}$. Strength W of the imaginary potential is fixed at 100 N.F. keV for all channels. Many resonances with $J=0, 2$ and 4 contribute to the total absorption cross section (from ref. 18).

4. 二重共鳴機構 (Double Resonance Mechanism)

Scheid, Greiner, Lemmer 等¹⁹⁾は1970年、当時¹⁶O と ¹⁶O の弾性、非弾性散乱についての励起函数にみられる Gross structure をチャンネル結合 (非弾性散乱チャンネルとの) 模型により解析した際、この模型が Gross structure の更に微細な構造を説明するのに気がついた。これは、弾性散乱チャンネルの resonance と非弾性散乱チャンネルの resonance がお互いに殆ど縮退している時に、非常に強いチャンネル結合効果によって発生するものである。この解析は、3節で示した door-way resonance の他に、

1. 弾性散乱チャンネルの resonance も、それがかなりクーロン障壁よりも高いエネルギーで発生する時でさえ、細い resonance の形成に強くかかわること。
(つまり弾性散乱チャンネルの resonance の有用性を始めて指摘したこと)
2. 弾性、非弾性散乱両チャンネル resonance (同じ全角運動量 J) の結合結果は比較的中の細い2ヶのお互いに接近した resonance を作り出すこと。

を指摘した点で非常に意義深い。下図 (図 11) にはエネルギー E_3 で入射する時の door-way resonances のメカニズムと、エネルギー E_4 で入射する時の double resonance mechanism が

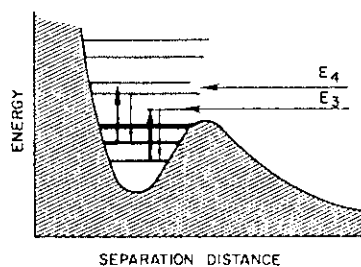


Fig. 11 Schematic illustrations of the potential aspects of quasi-molecular interactions. E_1 indicates the possible excitation of the quasi-bound state in the potential itself while E_2 corresponds to excitation of a virtual state in the same potential. E_3 illustrates the original Nogami-Imanishi mechanism and E_4 the double resonance mechanism suggested by Greiner *et al.* (from ref. 4)

schematic に示されており、図 12 には ¹⁶O + ¹⁶O, ¹⁶O (¹⁶O, ¹⁶O*(3-)) のチャンネル結合解析

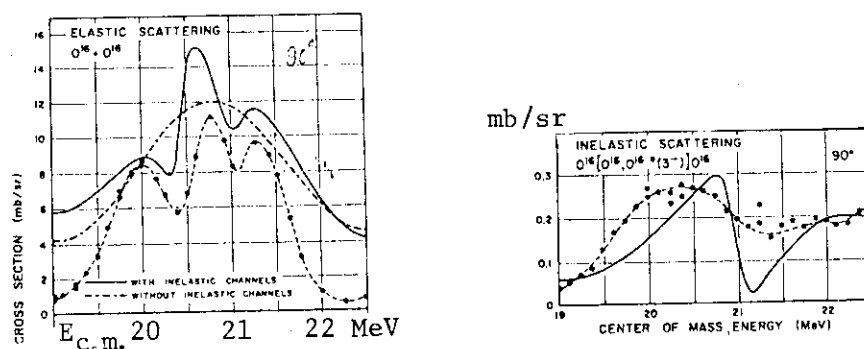


Fig. 12 Comparison of the double resonance mechanism prediction with experimental data. (from ref. 19).

による double resonance mechanism の様子が示されている¹⁹⁾。この mechanism は入射エネルギーがクーロン障壁より高い場合には十分に発生する可能性があり、この発生機構を系統的にまとめたのは、阿部、松瀬、近藤等によって示された (1977) Band crossing の機構である。

5. 入射チャンネルに於けるポテンシャル共鳴の重要さ

有馬, Goldhaber, McVoy 達²⁰⁾は1972年, 入射エネルギーの広い範囲にわたり, $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 散乱の励起函数の山が Reilly のポテンシャルにより再現出来て, それがポテンシャル resonance に相当することを指摘した。すなわち, 多くの核-核散乱の弾性, 非弾性散乱の gross structure が, 弾性散乱のポテンシャル resonance にかかわり, 更に励起函数にみられる微細構造も, この resonance に何かの形でかかわっている事を指摘した事は非常に重要な事柄であった。図13にはこのことが示されている。

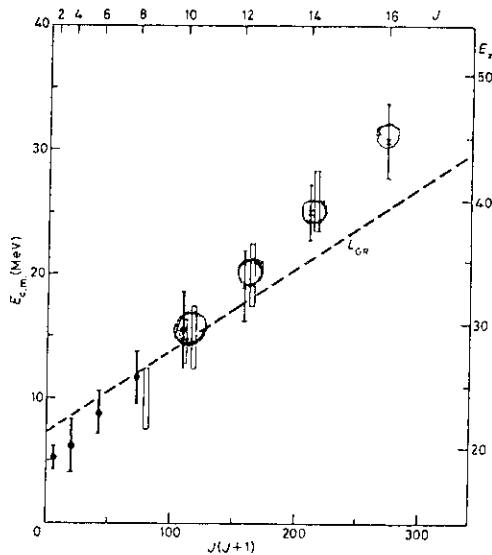


Fig. 13 Comparison of N=0 molecular bands in ^{24}Mg (from ref. 4) with $^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$ smeared out resonance data (*), inelastic scattering data (X) and fusion data (O) (from ref.). Molecular bands are calculated by Arima et al.

6. クーロン障壁よりも高いエネルギー領域での共鳴現象, bump の系統的な理解 (Band Crossing Mechanism)

阿部, 松瀬, 近藤氏等¹⁸⁾は, 入射エネルギーが高い region での励起函数の bump (弾性散乱だけでなく特に非弾性散乱について) について, ^{12}C と ^{12}C , ^{12}C と ^{16}O , ^{16}O と ^{16}O 等の散乱のチャンネル結合解析を行って, 特に非弾性散乱の yield が大きくなる条件として, 入射チャンネルと観測チャンネルの両方で resonances が発生して両チャンネルの結合が強くなるのが大切なことを

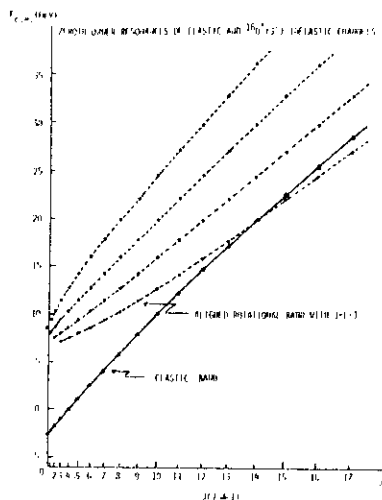


Fig. 14 Mechanism of band crossing. Barrier height is plotted as a function of grazing angular momentum for each sub-channel in coupled channel calculation (from ref.18).

1977年に指摘した。これはまさに double resonance mechanism であるが、この様な機構の発生するエネルギーについての systematics を(入射エネルギーに対する grazing angular momentum の関係を) grazing angular momentum とその barrier height との関係から読み取る事を考えた。図14には ^{16}O (^{16}O , $^{16}\text{O}^*(3^-)$) ^{16}O 非弾性散乱についての bumps を考察する目的で描かれた図であり、この様な bump の systematics を2本の line (2ヶの band) の cross した点から読み取ることが出来る (band crossing model)。この図から、非弾性散乱が強く励起されるエネルギーとそこでの double resonance mechanism を容易に知ることが出来る。図15は上記のチャンネル結合解析の結果を示しているが、それらは実験値をよく再現 ($^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}^*(3^-)$)

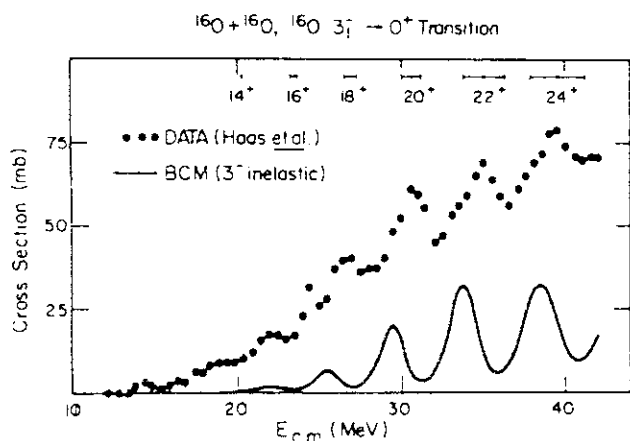


Fig.15

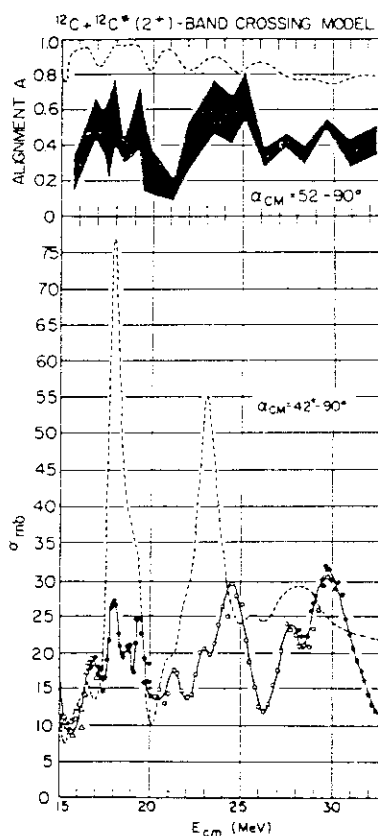
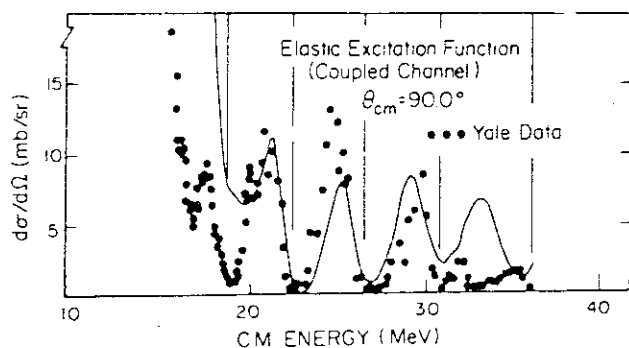


Fig.16

の cross section の大きさは例外として)している。一方、最近では非弾性散乱に於いて励起された原子核の spin alignment を測定する事が可能となり、より実験データが豊富となって来た。図16には ^{12}C (^{12}C , $^{12}\text{C}^*(2^+)$) ^{12}C 非弾性散乱についての $^{12}\text{C}^*(2^+)$ の spin alignment が示されているが、実験との一致はよくない。実験値は $^{12}\text{C}^*(2^+)$ の spin の reorientation の効果が大きいことを示している様でもあり、今後のより一層の詳しい解析が望まれる。更に又最近では、微視的な立場からの研究も大きな進展をみせ、その成果が期待される³¹⁾。

II 共鳴現象あるいは励起函数に bumps がみられる散乱系に valence nucleon 1ヶを付け加えた時にみられる効果

1. Mother-Daughter Relation

$^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 系, $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ 系, $^{12}\text{C} + ^{16}\text{O}$ 系にみられる共鳴現象, あるいは顕著な励起函数の bumps の機構を調べる一つの手段は, $^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$, $^{16}\text{O} + ^{17}\text{O}$, $^{13}\text{C} + ^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C} + ^{17}\text{O}$ 等の散乱を行いこの機構を知ることであろう。この目的で当初 $^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$ の弾性散乱の実験が行われた。その結果は, 予想に反して, 意外にスムーズな励起函数が得られ, これは ^{13}C 中の valence neutron の smear out 効果のせいであるといわれ, この実験があまり意味を持たないと考えられる時期²¹⁾があった。しかし, 実験の精度も増すにつれ, 図 17 にみられる様な anomaly が発見されると共

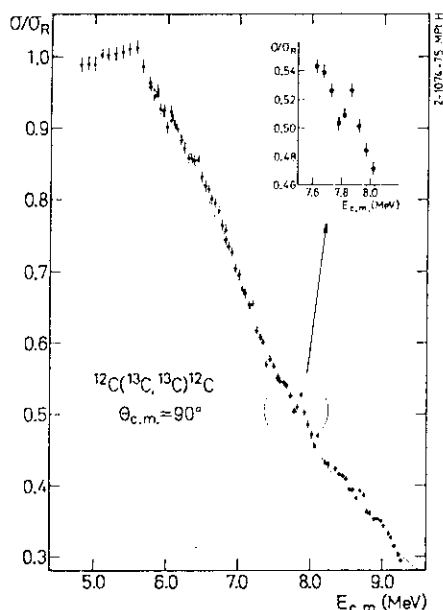
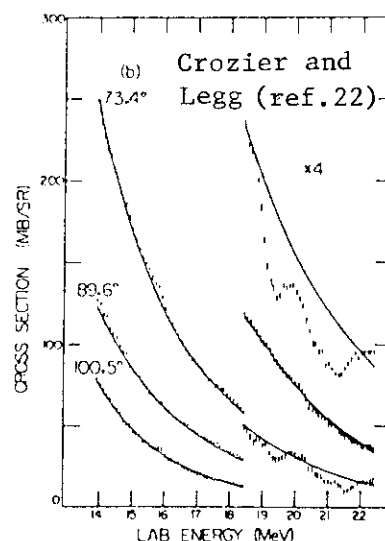


Fig.17
Excitation function for the elastic $^{12}\text{C}-^{13}\text{C}$ scattering at $\theta_{\text{CM}} \approx 90^\circ$. The inset displays a small anomaly observed. The solid line was obtained by an optical model calculation with a deep core-core potential including the elastic transfer (Weiss et al. (22)).



にこの anomaly は必ずしも統計的なゆらぎとは考えられないという報告が^{22, 23)}行われる様になった。更に最近では $^{13}\text{C} (^{12}\text{C}, ^{12}\text{C})^{13}\text{C}^* (3.85 \text{ MeV}, 5/2^+)$ 非弾性散乱の積分断面積 (図 18) が測定され²⁴⁾, その励起函数には $^{12}\text{C} (^{12}\text{C}, ^{12}\text{C})^{12}\text{C}^* (2^+)$ で得られたのとよく似た山や谷がみられる。

更には, ^{12}C と ^{14}C を用いた実験が München のグループによって行われ, 核子移行反応 $^{12}\text{C} (^{14}\text{C}, ^{13}\text{C})^{13}\text{C}$ と非弾性散乱 $^{12}\text{C} (^{14}\text{C}, ^{12}\text{C})^{14}\text{C}^* (3^-, 6.7 \text{ MeV})$ に強い bumps が観測されると共に, 両散乱にみられる bump に強い correlation のあることが報告された (図 19)。この実験で更に興味深いのは $^{12}\text{C} (^{14}\text{C}, ^{14}\text{C})^{12}\text{C}^* (2^+, 4.43 \text{ MeV})$ 非弾性散乱の yield が前記二者にくらべて小さく, 対応する bump も存在しなかった点である。なぜ, この様な結果が得られたのかは, 現在全くの“なぞ”であるが, 最近の Stony Brook の非弾性散乱, $^{16}\text{O} (^{16}\text{O}, ^{16}\text{O})^{16}\text{O}^* (0^+, 6.05 \text{ MeV})$ と $^{16}\text{O} (^{16}\text{O}, ^{16}\text{O})^{16}\text{O}^* (3^-, 6.13 \text{ MeV})$ の積分断面積の結果では, $^{16}\text{O}^* (3^-)$ の yield が $^{16}\text{O}^* (0^+)$ の yield にくらべて非常に大きい点, 更にこの両者にみられる励起函数の山や谷がお互いに inphase である点など, $^{12}\text{C} + ^{14}\text{C}$ 系にみられる“なぞ”とは全く無関係ではないのかも知れない。

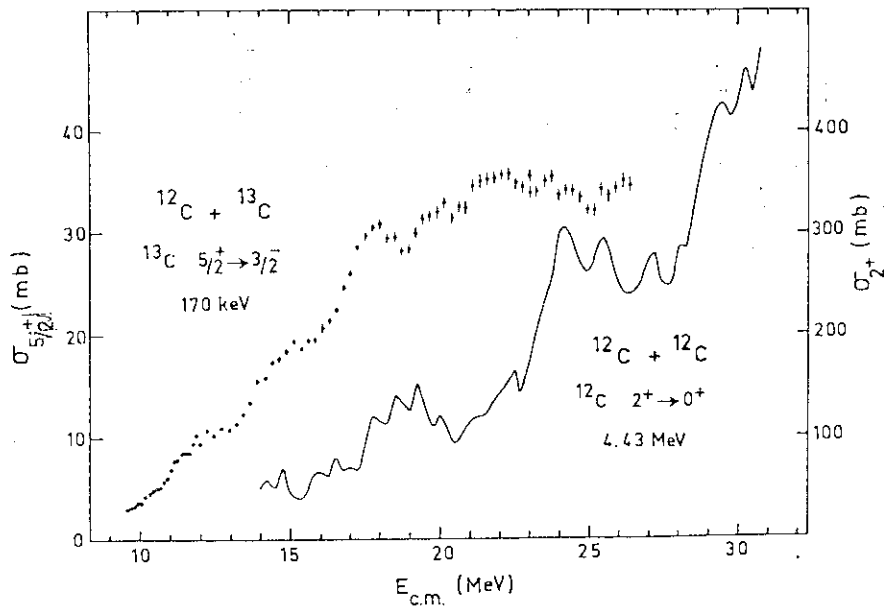


Fig.18
(from ref.24)

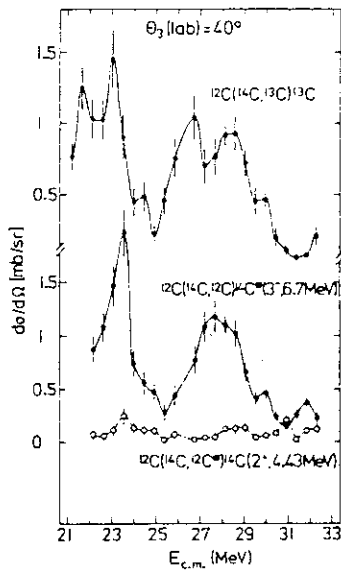


Fig.19 (from ref.25)

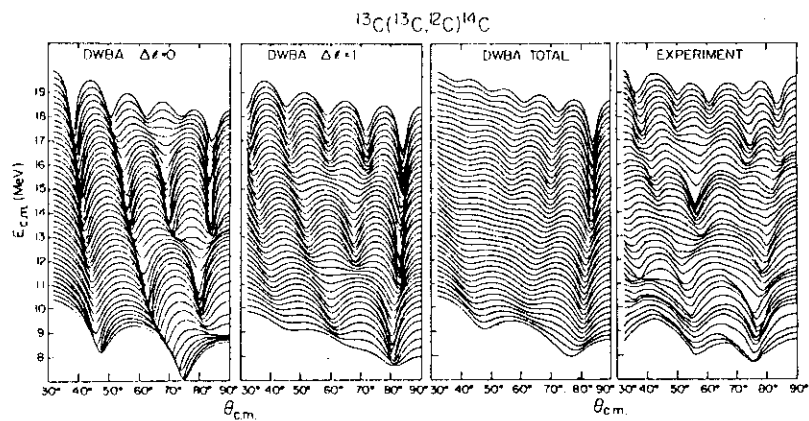


Fig.20 (from ref.5)

図20には、図19にみられる $^{12}\text{C}(^{14}\text{C}, ^{13}\text{C})^{13}\text{C}$ の逆反応 $^{13}\text{C}(^{13}\text{C}, ^{12}\text{C})^{14}\text{C}$ についての角分布が示されている⁵⁾。DWBAに基く計算値については角分布のエネルギー依存性はスムーズであるが、実験は計算値とは全く反対に $E_{c.m.} \sim 17$ MeVの近くで角分布に大きな変化がみられる。恐らく何か特別なことが起っているのであろう。最近では更に $^{14}\text{C} + ^{14}\text{C}$ 系について実験が行なわれ、その弾性散乱の励起函数に強い山や谷が観測された²⁴⁾。共鳴現象の出現は弾性、非弾性散乱のCoupled Channel解析から説明しようとする限り、いわゆるweakly absorbing potentialの使用は必然的である。ポテンシャルの虚数部吸収効果は、いいかえれば入射チャンネルから複合核を形成する度合は、direct processによって他のチャンネルへfluxが逃げる度合も含むので、

その可能性について、旧くは Robson 等フロリダのグループや Vandenbosh 等シアトルのグループにより検討がなされて来た。最近では更に詳しい検討が fusion の結果などを用い、松瀬、有馬、李の諸氏、又阿部、Haas 氏等により行われているが下図 (21 図) は阿部-Haas 氏等の結果を示す²⁶⁾。興味深い事は、 $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 系が弱吸収のポテンシャルを予想して、coupled channel model による共鳴説明の妥当性をあたえている。しかし $^{13}\text{C} + ^{13}\text{C}$ 又は $^{14}\text{C} + ^{14}\text{C}$ 系については、

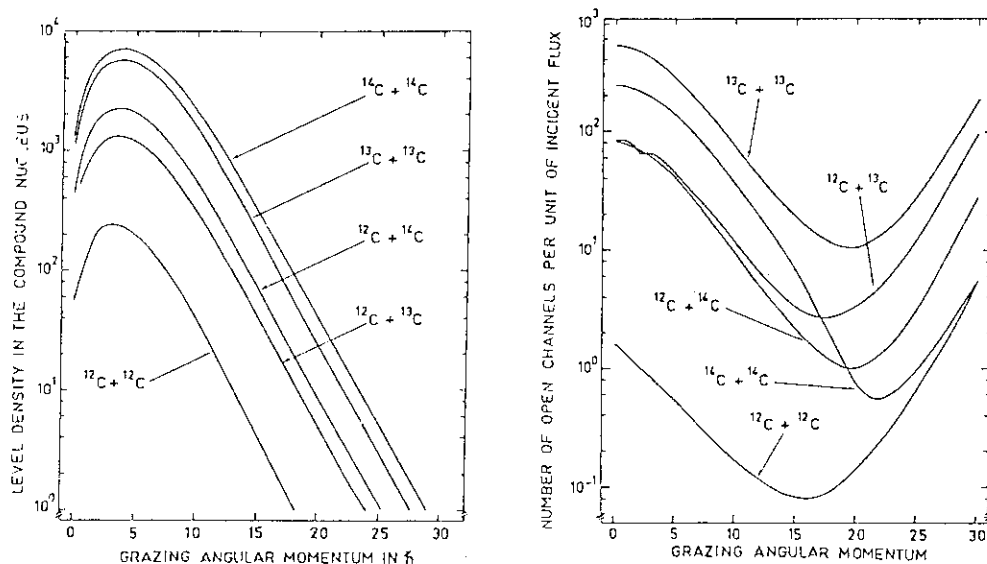


Fig.21 (from ref.26)

実験に強い共鳴現象の可能性が示唆されているにもかかわらず、図 21 の結果は強い吸収効果のあるポテンシャルを予想させる点である。この事は coupled channel model による共鳴現象の説明に大きな疑問を持たせた。

$^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ 系に対して mother-daughter 関係にある $^{16}\text{O} + ^{17}\text{O}$ 系については、その励起函数を取る実験まで行われてない。唯一、Gelbke 達²⁷⁾による $E_{c.m.} = 129^\circ$ に於ける結果が発表されているだけだが、それは図 22 にみられる様に必ずしもスムーズなカーブとは言えない点に興味がある。更に詳しい実験が望まれる所である。(尚、この節に述べた各反応等の積分断面積については、未だ、発表されるデータ毎に非常に変動の大きいことを付け加えておきたい。)

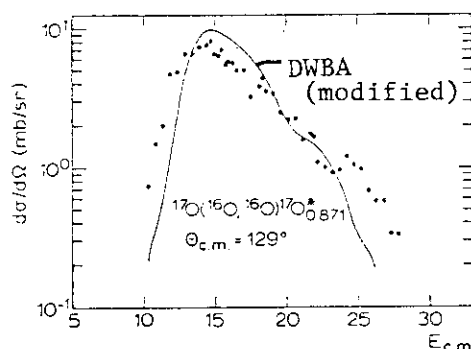


Fig.22 (from ref.27)

2. ^{13}C (^{12}C , ^{12}C) $^{13}\text{C}^*$ (gr.: 3.086 MeV $1/2^+$, 3.854 MeV $5/2^+$) 弾性, 非弾性散乱に於ける valence neutron 注目した解析

$^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$ 系の弾性散乱の実験は $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 系のそれとは異って顕著な構造を励起函数にみる事は出来なかった。 ^{12}C , ^{13}C を他の原子核に衝突させる実験, 例えば $^{12,13}\text{C} + ^{16}\text{O}$, $^{12,13}\text{C} + ^{28}\text{Si}$ (右図, 図 23) に於いても ^{13}C 核中の valence nucleon は同様の効果 (smear out effects) を持たらず²⁸⁾。しかし, それにもかかわらず非弾性散乱 ^{13}C (^{12}C , ^{12}C) $^{13}\text{C}^*$ ($5/2^+$) には明確な構造をその励起函数にみることが出来るし, 同様の事柄は $^{13}\text{C} + ^{16}\text{O}$ 散乱でも認められている。更に ^{13}C (^{12}C , ^{12}C) $^{13}\text{C}^*$ ($1/2^+$, $5/2^+$) 非弾性散乱中には valence nucleon が $1p\ 1/2$ から $2s\ 1/2$, $1d\ 5/2$ へと移行する過程を含むが, このいわゆる " $\Delta l = 1$ " の核子移行過程は DWBA 法 CCBA 法 (^{12}C 核の励起を考慮する) 等を用いて多くの人達はその実験の説明を試みたがすべて失敗に終り, 現在でも, わからない反応の一つである。 ($^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$ 系では最近, 著者等がその事を確めた。)

さて, 著者等 (Imanishi, von Oertzen)²⁹⁾ は表記の散乱中の valence neutron の働きを clear にする為に右図 (図 24) にみられる様な一粒子軌道を basis としてチャンネル結合計算を行った。この際 valence neutron と ^{12}C 核 (2ヶある) の間と 2ヶの ^{12}C 核間に光学ポテンシャルを仮定した。計算結果と実験との比較が図 25 に示されているが, $E_{c.m.} = 7.8$ MeV の例については弾性, 非弾性散乱共に両者の一致は非常によい。しかし, $E_{c.m.} = 9.88$ MeV の場合については, 弾性散乱についてはともかく, 非弾性散乱については $^{13}\text{C}^*$ ($1/2^+$), $^{13}\text{C}^*$ ($5/2^+$) 共に実験で得られる peak は, 解析結果のそれよりも更に後方角で peak 値を示す。この peak 値の内容は transfer process が主なものであるから, 実際には理論で予想されるよりも更に核・核がはなれた所で核子の移行が発生すると思われる。

計算の内容をはっきりとさせる為に断熱近似のもとに $^{12}\text{C}_1$ 核と $^{12}\text{C}_2$ 核の距離を固定しながら valence neutron の orbits の変化, 及びどの地点で非弾性散乱が発生しているかを調べた。尚, 断熱近似については, $E_{c.m.} \leq 10$ MeV ではほぼ問題のない事も確めた。図 26 には valence neutron の密度分布の等高線が示されているが, そこには 2ヶの ^{12}C 核が接近すると共に valence neutron が 2ヶの ^{12}C 核の間に位置し始めるのがみられる。この現象は特に ^{12}C 核間距離が ~ 7.5

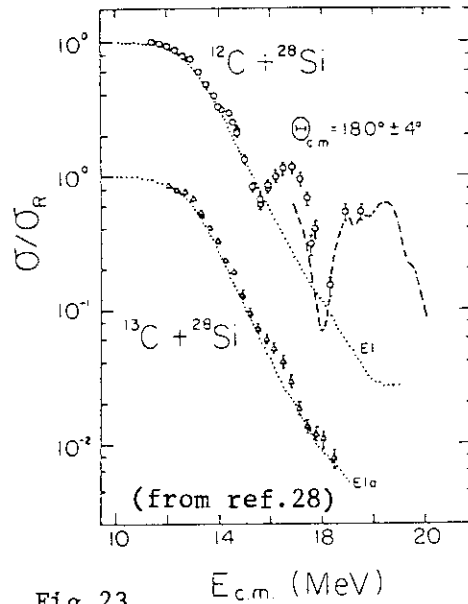


Fig. 23

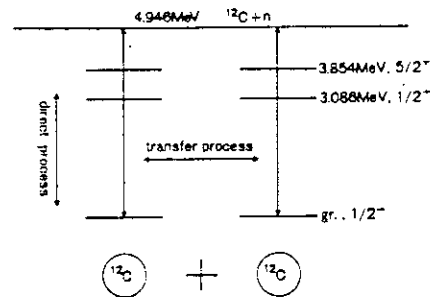


Fig. 24

fm で急速に進む。

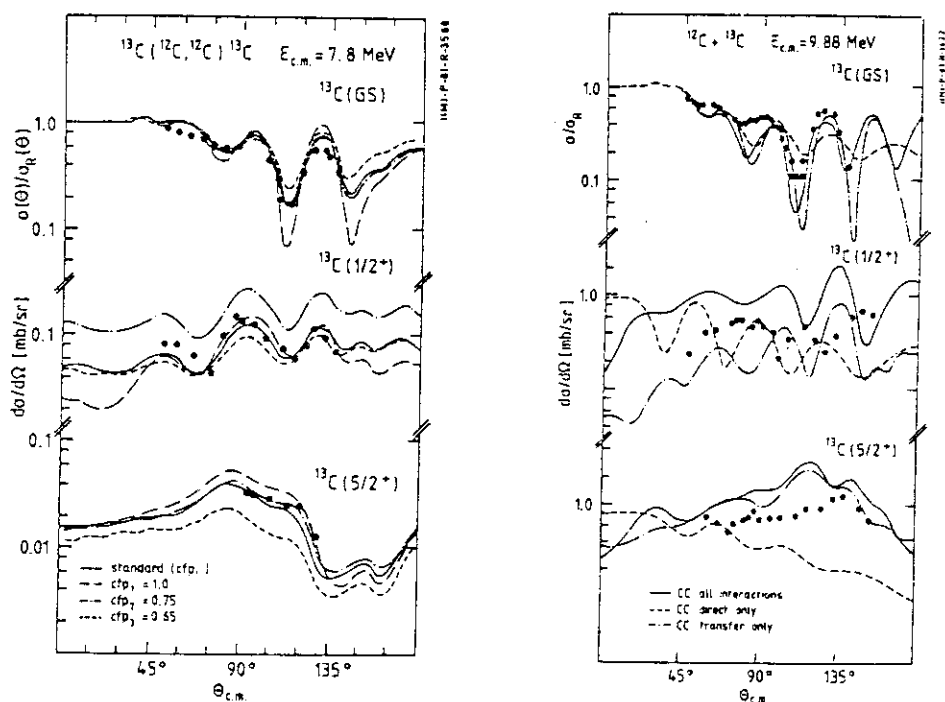


Fig.25

実はこの進む速度に比例して非弾性散乱が発生するのである。図27には、断熱近似的取り扱いの中での弾性散乱チャンネルから非弾性散乱チャンネルへの transition を発生させる interaction が示されているが、核間距離が2.2 fm と7.4 fm でそれが大きくなっているのが示されている。2.2 fmの方は、相当に核・核が近づいている距離なので、むしろ複合核形成過程が主でこの interaction は無視出来ると思われるが、7.4 fmの方は実際に transition が発生する場所をあたえていると考えられる。

さて、valence neutronが $^{12}\text{C}_1$ と $^{12}\text{C}_2$ との間に位置する現象は、それぞれの ^{12}C 核-粒子軌道1p $1/2$ と1d $5/2$ が強く混合して起るものと理解出来る(計算の結果)。このことはチャンネル結合計算の言葉でいえば弾性散乱チャンネルと $^{13}\text{C}^*(5/2^+)$ に関係する非弾性散乱チャンネルが強く結合していることを意味するが、事実、チャンネル結合の計算結果はチャンネル間相互作用のボルンシリーズの和としては、発散を起していることが確められ

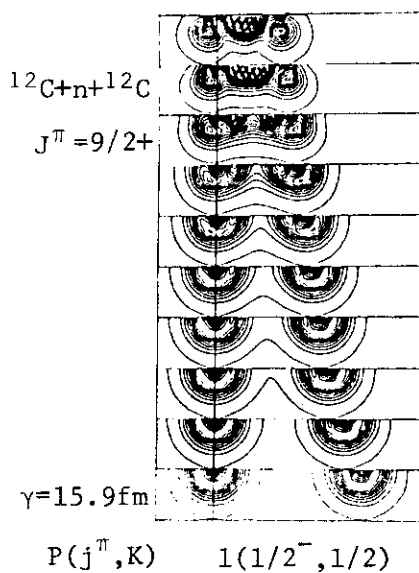


Fig.26

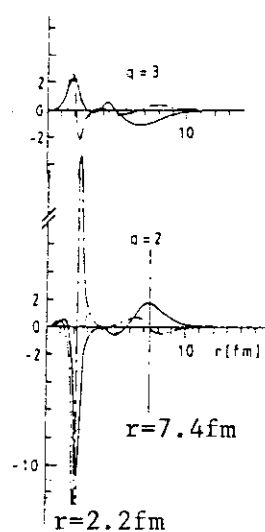


Fig.27

た。 $^{13}\text{C} + ^{13}\text{C}$ 系についても同じ考えのもとに（出発点は 2-centre shell model であるが），Park, Scheid, Greiner 等により弾性，非弾性散乱（ $^{13}\text{C} + ^{13}\text{C}^* (1/2^+)$ チャネルへの）の計算が示され，そこでは励起函数に大きな山や谷を出現させることが出来た。実験もその傾向を示している。

図 24 に示される核子の密度分布についての大きな特徴は，2ケの ^{12}C 核の接近と共に核子とその間に位置して，反対側の密度分布は殆どなくなることである。この現象はそれぞれの ^{12}C 核-粒子軌道， $p1/2$ と $d5/2$ が強く混合した為に発生するもので，この様な混合機構を hybridization と呼んでいる³⁰⁾。この言葉は原子が分子を形成する機構の説明に用いられる言葉であるが，hybridizationは ^6Li ， ^{12}C 等の原子内電子が分子形成（Hと）をなす時に発生する機構である事が知られている。

原子核同志を用いた反応に於いては hybridization 機構が始めて ^{13}C 核に於いて指摘されることになったが，この機構は $^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$ 系だけではなくおそらくもっと一般的に重イオン核反応で見られる現象ではないかと思われる。あるいは，おそらくこの機構が共鳴散乱の大切なない手とも考えてよいのではないだろうか。同時にかなり一般的な現象の様にも考えられる。これは今後調べられるべき大きな課題であろう。

References

- [1] J.M. McKenzie and D.A. Bromley, Bull. Am. Phys. Soc. 4 (1959) 422.
- [2] D.A. Bromley, J.A. Kuehner and E. Almqvist, Phys. Rev. Letts. 4 (1960) 365; Phys. Rev. 123 (1961) 878.
- [3] E. Almqvist, D.A. Bromley, J.A. Kuehner and B. Whalen, Phys. Rev. 130 (1962) 1140.
- [4] D.A. Bromley in Proceedings of the symp. on Nuclear Molecular Phenomena, ed. by N. Cindro, North-Holland Pub. Comp. (1978) p.3.
- [5] D.A. Bromley in Proceedings of the Symp. on Resonances in Heavy Ion Reactions, ed. by K.A. Eberhard, Springer-Verlag (1982), p.3.
- [6] J.V. Maher, M.W. Sacks, R.H. Siemssen, A. Weidinger and D.A. Bromley, Phys. Rev. 188 (1969) 1665.
- [7] N. Cindro, Rivista del Nuovo Cimento 4 (1981) 1.
- [8] See, for example, Proceedings of the same Symp. as in ref. 5.
- [9] H. Fröhlich, P. Dück, W. Treu and H. Voit, in Proceedings of the same Symp. as in ref. 5.
- [10] P. Paul, in the same Proceedings as in ref. 5.
- [11] R.H. Davis, in Proceedings of the Symp. on Reactions between Complex Nuclei, ed. by A. Zuker, F.T. Howard and E.C. Halbert, John Wiley and Sons, Inc. (1960) p.297.

- [12] H. McMamus and E. Vogt, in the same Proceedings as in ref. 11 p.291;
Phys. Rev. Letts. 4 (1960) 518.
- [13] M. Nogami, private communication (1963).
- [14] B. Imanishi, Phys. Letts. 27B (1968) 267; Nucl. Phys. A125 (1969) 33.
- [15] R. Tamagaki and H. Tanaka, Prog. Theor. Phys. 34 (1965) 191;
S. Okai and S.C. Park, Phys. Rev. 145 (1966) 787.
- [16] H.A. Bethe, Revs. Mod. Phys. 9 (1937) 69;
H. Feshbach, Ann. of Phys. 5 (1958) 357.
- [17] G. Michaud and E.W. Vogt, Phys. Letts. 30B (1969) 85;
Phys. Rev. C5 (1972) 350. See also, G. Michaud, Phys. Rev. C8 (1973) 525.
- [18] Y. Kondo, T. Matsuse and Y. Abe, in Proceedings of the INS-Symp. on
Cluster Structure of Nuclei and Transfer Reactions induced by Heavy Ions,
Tokyo (1975) p.280;
Y. Abe, in the same Proceedings as in ref. 4;
T. Matsuse, in the same Proceedings as in ref. 4.
Y. Abe, Y. Kondo and T. Matsuse, Prog. Theor. Phys. Suppl. 68 (1980) 722.
- [19] W. Scheid, W. Greiner and R. Lemmer, Phys. Rev. Letts. 25 (1970) 176;
H.J. Fink, W. Scheid and W. Greiner, Nucl. Phys. A188 (1972) 259.
- [20] A. Arima, G. Sharff-Goldhaber and K.W. McVoy, Phys. Letts. 40B (1972) 7.
- [21] H. Voit et al., Nucl. Phys. A179 (1972) 23; Phys. Rev. C10 (1974) 1331.
- [22] D.J. Crozier and J.C. Legg, Phys. Rev. Letts. 33 (1974) 782;
U. Weiss, D. Fick, K.D. Hildenbraud and W. Weiss, Nucl. Phys. A274 (1976)
253.
- [23] R.A. Dayras, R.G. Stokstad, Z.E. Switkowski and R.M. Wieland, Nucl. Phys.
A265 (1976) 153.
- [24] F. Haas, in Proceedings of "Colloque Franco-Japonais" on Nuclear Physics
with Heavy-Ions, Gif-sur-Yvette, 1979, p.287;
R.M. Freeman, in Proceedings of Symp. on the Resonant Behavior of Heavy
Ion Systems, Aegean Sea (Greece), 1980.
- [25] D. Konnerth, K.G. Bernhardt, K.A. Eberhard, R. Singh and A. Strzalkowski,
W. Trautmann and W. Trombik, Phys. Rev. Letts. 45 (1980) 1154.
- [26] F. Haas and Y. Abe, Phys. Rev. Letts. 46 (1981) 1667.
- [27] G.K. Gelbke et al., Nucl. Phys. A219 (1974) 253.
D. Kalinsky et al., Nucl. Phys. A250 (1975) 364.
- [28] Y.-b. Chan et al., Phys. Rev. C25 (1982) 850.
- [29] B. Imanishi and W. von Oertzen, Phys. Letts. 87B (1979) 188;
W. von Oertzen, B. Imanishi, H.G. Bohlen, W. Treu and H. Voit, Phys.
Letts. 93B (1980) 21;

- W. von Oertzen and B. Imanishi, in Proceedings of Symp. on Resonances in Heavy Ion Reactions (Springer-Verlag) 1982, p.388.
B. Imanishi and W. von Oertzen, in the above Proceedings, p.405.
- [30] L. Pauling, The Nature of the Chemical Bond (Cornell U.P., 1960).
- [31] M. Ohkubo, K. Kato and H. Tanaka, Prog. Theor. Phys. 67(1982) 207.

6. 分子の電子状態を基底とする低エネルギー 原子過程の取扱い

分子科学研究所 中村宏樹

1. はじめに

原子分子物理学と核物理学の大きな違いとして相互作用の種類の違いがあることは言うまでもないことであるが、対象とする素粒子の質量の比が違っていることが理論的手法上の違いを引起こす原因になっていることも事実である。原子分子では基本的相互作用はクーロン相互作用であり、それがしばしば面倒を引起こすことは周知の事実である。一方、逆に

$$(\text{電子質量}) / (\text{原子核質量}) \lesssim \frac{1}{2000} \quad (1)$$

という事実のお陰で多くの利益を受けている。Born-Oppenheimer 近似が低エネルギー原子過程を理解する上ですぐれた描像を与えてくれる。ここでの話はこの利点を大いに利用する話である。その点核反応の問題とはかなり異なっていると思われる。そういう意味では、化学反応（原子の組替え衝突）の動力学理論の方が核反応の理論と多くの共通点を持っているのではないかと考えられる。本研究会において核反応の理論のお話を伺いこの感を一層深くした。蛇足ながら、将来いつか化学反応と核反応の合同研究会を是非企画したいものだと思っている。

さて、本稿では断熱状態表現を基にして低エネルギー原子過程を考え、そこにおける基本的メカニズムを筆者の独断に従って分類する。その中、特に非断熱遷移に関しては詳しく説明を加え、回転結合誘起遷移に関する最近の成果を話し残された問題を指摘する。

2. 基礎方程式と断熱状態表現

話を簡単にするために、ここでは原子同士の衝突過程



を考えることにする。全系のハミルトニアンは

$$H = T_R + H_{el}, \quad T_R = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^2 \quad (3)$$

と書かれる。 μ は衝突系の換算質量、 \mathbf{R} は原子間の相対位置ベクトル、 H_{el} は \mathbf{R} を固定したとき

6. Theory of low energy atomic processes in the molecular electronic state representation.

Hiroki Nakamura

(Institute for Molecular Science)

の分子 A-B のハミルトニアンである。原子衝突論で基礎方程式として通常用いられるのは定常的 Schrödinger 方程式

$$H\Psi = E\Psi \tag{4}$$

に基づいた量子論と、時間に依存する Schrödinger 方程式

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = H_{el} \Phi, \mathbf{R} = \mathbf{R}(t) \tag{5}$$

に基づいた半古典論である。(5)式の右辺のハミルトニアンは H ではなく H_{el} である。時間変数 t は核座標 \mathbf{R} を通じて入る。古典軌道 $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$ は独立な別途条件として課される。これをどう決めるかも1つの大きな問題である。ついでながら、(5)式の右辺の H_{el} を H とした式に基づいた衝突の取扱いが極めて少ないのはどういう訳であろうか。

(1)のお陰で原子核を止めて電子状態についての固有値問題を先に解いてしまうという Born-Oppenheimer 近似が良い近似となる。 H_{el} の固有状態を $\varphi_n(\mathbf{r}; \mathbf{R})$, 固有値を $\epsilon_n(\mathbf{R})$ と書くことにする (\mathbf{r} は電子座標全体を表わす):

$$H_{el} \varphi_n = \epsilon_n \varphi_n. \tag{6}$$

$\varphi_n(\mathbf{r}; \mathbf{R})$ を断熱状態, $\epsilon_n(\mathbf{R})$ を断熱ポテンシャルという。2原子分子の場合には分子軸まわりの回転に関する対称性があるので φ_n も ϵ_n も \mathbf{r} 以外には $R = |\mathbf{R}|$ にだけしか依存しない。断熱状態を規定する量子数は、スピン-軌道相互作用が小さい通常の場合には軌道角運動量の分子軸方向成分とスピンである。前者を A と書く。 $A=0$ の状態を Σ -状態, $|A|=1$ の状態を Π -状態, $|A|=2$ の状態を Δ -状態, …… という。 A の符号だけが異なる状態は縮重している。個々の分子軌道に対しては, Σ, Π, Δ ……の代りに σ, π, δ ……を用いる。断熱ポテンシャルは R の関数であるから図1のようなエネルギー曲線が得られる。一番エネルギーの低いのが基底状態, それ以外が励起状態である。断熱ポテンシャルエネルギー曲線に対して Neumann-Wigner の非交差則

$$\epsilon_{n_1 A_1}(R) \approx \epsilon_{m_1 A_1}(R) \quad (n \approx m) \tag{7}$$

が成り立つ (ただし1電子系は除く)。つまり A に関する対称性が同じ状態のポテンシャルエネルギー曲線は決して交差しない。図1の R_B 点におけるように両者が十分近づくことはよくある。これを擬似交差 (pseudo crossing あるいは avoided crossing) という。断熱状態を基底とする表現 (断熱表現) では H_{el} の行列が対角形であるが, 適当なユニタリ変換によって H_{el} の行列の対角要素が R_B の所で図1の点線のように互いに交差し, 他の所では断

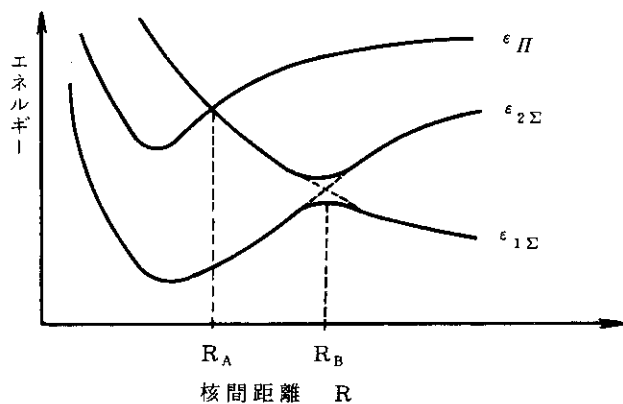


図1 断熱ポテンシャルの模式図

熱ポテンシャルとほぼ同じであって、非対角要素は0でないような表現を作ることが出来る。このときの電子状態を ϕ_j と書くと

$$\left. \begin{aligned} \varphi_n &= \sum_j \alpha_{nj} \phi_j, \\ (H_{el})_{ij} &\equiv \langle \phi_i | H_{el} | \phi_j \rangle_r \neq 0 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

となる。 α_{nj} は変換係数である。 ϕ_j を基底とする表現を透熱表現 (diabatic representation) という。どちらの基底が便利であるかは衝突エネルギーや動力学の手法に依存する。低エネルギーの過程で近似解析理論による取扱いを行うときには、一般に断熱状態表現の方が良い。

全波動関数を φ_n あるいは ϕ_j で

$$\left. \begin{aligned} \Psi &= \sum_n F_n(R) \varphi_n = \sum_j G_j(R) \phi_j, \\ \Phi &= \sum_n C_n(t) \varphi_n = \sum_j D_j(t) \phi_j \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

と展開して(4)ないし(5)に代入すると係数に対する連立微分方程式が得られる。これを緊密結合方程式という。本稿では、これを数値的に解く代りに、近似的な散乱行列要素の表式を利用する手法を説明する。

3. 重要なメカニズム

3.1 非断熱結合——通常の断熱状態間の結合¹⁾

低い励起状態間の遷移が問題となる衝突過程は、前述の断熱状態表現で取扱うのが良いが、その場合には結合項

$$\langle \varphi_m | T_R \varphi_n \rangle_r \text{ あるいは } \langle \varphi_m | \frac{\partial}{\partial t} \varphi_n \rangle_r \quad (10)$$

が遷移の原因となる。ここでは話を簡単にする為に半古典論(5)を用いて議論する。量子力学的基礎づけについては5節で簡単にふれる。核の座標 R, θ (図2参照) を用いて $\frac{\partial}{\partial t}$ を書き直すと次式を得る：

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \dot{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} = \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{\hbar} \dot{\theta} \hat{L}_\xi, \\ \dot{\theta} &= \rho v / R^2. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

θ に関する微分は電子に対するコリオリ力を表わしている。 \hat{L}_ξ は電子の軌道角運動量演算子の ξ 方向成分である。 ρ は衝突径数、 v は衝突速度である。(11)式の第1項は A の同じ状態を結合し、第2項は A が1単位異なる状態を結合する。前者を非断熱動径結合、後者を非断熱回転結合という。これらによる遷移のとり扱いについては4節で詳しく説明する。

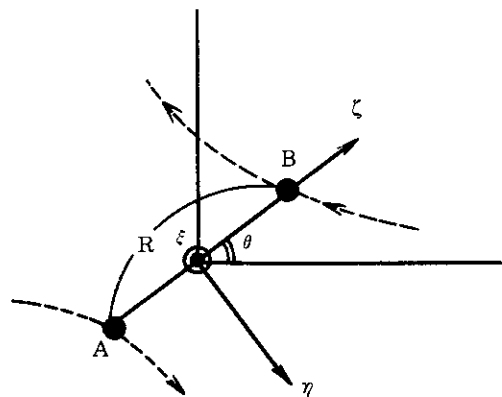


図2 衝突系の座標

3.2 透熱結合 ——リードベルグ状態の場合

分子のリードベルグ状態の関与する動的過程を扱うのに前節の非断熱結合を考えるのは得策でない。ポテンシャル曲線の顕著な擬似交差が存在しないからである。しかも電子が分子のイオン芯から遠く離れた所に存在する確率が大きく連続状態と混然としていてと考えられるので Born-Oppenheimer 近似が良い近似であるとは言えない。イオン芯と電子とのクーロン引力を基本にしてイオン芯の内部構造からくるずれを量子欠損という量で取り入れるという透熱状態表現的な考え方にそった取扱いがなされる。これを多チャンネル量子欠損理論 (Multi-Channel Quantum Defect Theory : MQDT)² という。電子の座標空間を芯に近い部分 (内部領域) と遠い部分 (外部領域) とに分ける。前者では電子が芯と一体になって運動しているという描像が成り立ち、B-O 近似がよい。そこでは A が良い量子数である。全波動関数は断熱状態による展開の形で表現される。その断熱状態は、断熱的 (つまり R に依存する) 量子欠損 $\mu A(R)$ を用いて表現される。外部領域では、電子と芯がむしろ独立に運動していると考えの方が現実的で電子の角運動量 l と芯の回転角運動量 N^+ が独立によい量子数となる。全波動関数は、電子と芯のそれぞれの波動関数の積による緊密結合形の展開で表わされる。ここでは、電子の束縛エネルギーを表わす変数 (束縛状態の場合)、あるいは電子の散乱の位相のずれ (連続状態の場合) がパラメータとなる。2つの形式で表現された全波動関数が中間領域では等しくなくてはならないということから、パラメータの間の関係式が得られる。例として振動励起したリードベルグ分子の自動電離を考える (図3 参照)³。初期状態 (i) は束縛状態 (f) は連続状態である。上述の手続きにより位相のずれのエネルギー依存性の表式が得られる。その式には重要な量として

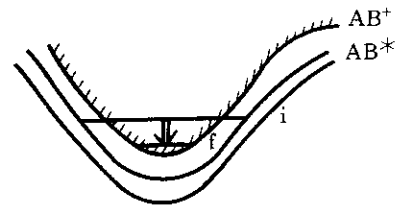


図3 振動励起リードベルグ分子の自動電離

$$\int dR X_{i,f}(R) \begin{pmatrix} \cos \mu A(R) \\ \sin \mu A(R) \end{pmatrix} X_f(R) \tag{12}$$

が含まれる。ただし、 $X_{i,f}(R)$ は始・終状態の振動波動関数である。この理論の衝突過程への活発な適用が望まれる。

3.3 配置間相互作用 (電子相関) 共鳴状態の場合⁴⁾

リードベルグよりも更に高い状態で、連続状態の中に埋もれた状態の関与する過程はどのように取扱われるであろうか (図4 参照)。このような電子状態 ϕ を H_{el} の固有状態として定義することはできない。電子的連続状態を ϕ_e とするとき、常に

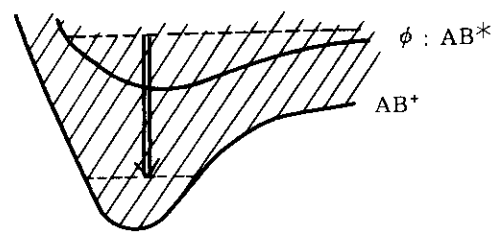


図4 電子相関が重要な場合
 $A^* + B \rightarrow AB^* \rightarrow AB^+ + e$

$$\langle \phi | H_{el} | \phi_e \rangle \approx 0 \tag{13}$$

だからである。射影演算子

$$\left. \begin{aligned} Q &= |\phi\rangle\langle\phi|, \quad P = \int d\epsilon |\phi_\epsilon\rangle\langle\phi_\epsilon| \\ P + Q &= 1 \quad (\text{仮定}) \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

を導入すると(4)式から

$$(E - QHQ - QHP \frac{1}{P(E^+ - H)P} PHQ) Q\psi = 0 \quad (15)$$

が得られる。これは状態 ϕ での核の運動を記述する方程式で、左辺第3項が電子的連続状態の為に生じる有効ポテンシャルで、エネルギーに依存する非局所的な複素ポテンシャルである。非断熱遷移の場合と違って、原子核を距離 R に止めておいても電子相関の為に崩壊が起こるので、この有効ポテンシャルを局所的な複素ポテンシャルで置き換えるのが良い近似であると考えられる：

$$(E - T_R - E_\phi(R) - \Delta E_\phi(R) + \frac{i}{2} \Gamma(R)) F_\phi(R) = 0, \quad (16)$$

$$\left. \begin{aligned} E_\phi(R) &= \langle\phi|H_{el}|\phi\rangle, \quad \Gamma(R) = 2\pi |\langle\phi_\epsilon|H_{el}|\phi\rangle|^2, \\ F_\phi(R) &= \langle\phi|\psi\rangle_{\mathbf{r}}. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

ΔE_ϕ は E_ϕ に対する補正項である。 ϕ が図4のように完全に連続状態の中に埋もれるのではなく、 AB^+ の曲線と交差する場合には(16)の近似は良くない。この場合には、もとの式に戻らなくてはならない⁵⁾。

4. 非断熱遷移の理論

3.1 で説明した非断熱結合の取扱いについて、ここで詳しく説明しよう。

4.1 透熱状態と断熱状態 — 動径結合^{1, 6)}

(i) Landau-Zener 型

透熱状態 $\{\psi_j\}$ の表現 ((8)式参照) で、

$$\left. \begin{aligned} (H_{el})_{12} &= \text{一定} \\ (H_{el})_{11} - (H_{el})_{22} &= (\text{零点を持つ}) \text{一次式} \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

と近似的に表現できる2準位問題を Landau-Zener 型の動径結合問題という。透熱状態間にポテンシャル交差があり、断熱状態が擬似交差を有する場合である (図5参照)。この問題は古く、Landau, Zener, Stueckelberg によって研究され、その後多くの人によって改良が加えられた。断熱状態間を乗り移る遷移確率として次の表式が成り立つ：

$$p = \exp(-2\delta) \quad (19a)$$

$$\delta = I_m \int_{R_c}^{R_*} \{k_2(R) - k_1(R)\} dR \quad (19b)$$

$$\Delta\epsilon(R_*) = \epsilon_1(R_*) - \epsilon_2(R_*) = 0 \quad (19c)$$

$$R_c = R_e(R_*) \quad (19d)$$

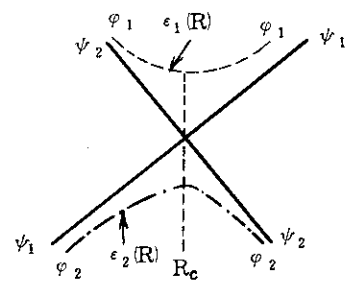


図5 Landau-Zener 型動径結合問題

ψ_j : 透熱状態

ϕ_j : 断熱状態

$$k_j(R) = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \epsilon_j(R) - \frac{1}{R^2} \frac{\hbar^2}{2\mu} \right]} \quad (19e)$$

衝突問題では、粒子は無限遠方から近づいて交差点を2回通過して再び無限遠方に飛び去る。最終的に断熱状態間の遷移を起こす確率は

$$P = 4p(1-p) \sin^2(\sigma + \phi_s) \quad (20)$$

と表わされる。ただし、

$$\sigma = \int_{R_2}^{R_c} k_2(R) dR - \int_{R_1}^{R_c} k_1(R) dR + R_e \int_{R_c}^{R_*} \{k_2(R) - k_1(R)\} dR \quad (21)$$

である。\$R_j\$ はポテンシャル \$\epsilon_j(R)\$ での零点、\$\phi_s\$ は位相補正（詳細は省略）である。

(ii) Rosen-Zener 型

Landau-Zener 型とは対照的な場合で、透熱状態表現での \$H_{e1}\$ の行列が

$$\left. \begin{aligned} (H_{e1})_{12} &\approx \text{指数関数的} \\ (H_{e1})_{22} - (H_{e1})_{11} &\approx \text{一定} \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

と表わされる場合を Rosen-Zener 型という（図6参照）。この場合の遷移確率 \$p\$ は

$$p = [1 + \exp(2\delta)]^{-1} \quad (23)$$

で与えられる。\$\delta\$ が大きいときには (23) は (19a) と一致するが、\$\delta\$ が小さいときには 0.5 に近づき (19a) と異なる。\$\delta\$ が小さくなるのは、たとえば準位間隔に比べて衝突エネルギーが大きい場合に起こり、縮重準位間の共鳴現象に対応している。Rosen-Zener 型の場合には (20) 式における位相補正 \$\phi_s\$ は 0 である。

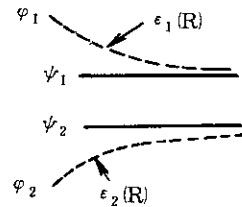


図6 Rosen-Zener 型
動径結合問題
\$\phi_j\$: 透熱状態
\$\phi_j\$: 断熱状態

Landau-Zener 型の場合も Rosen-Zener 型の場合も、断熱状態表現でのエネルギー差と非断熱結合項との解析的性質を調べると表1のようになっていることがわかる。この解析的性質が動径結合問題の特徴で、\$A\epsilon\$ の零点と結合項の極とが一致している為に遷移が \$R_*\$ で局所的に起こる。上述の公式の導出の数学的基礎には、ウェーバー関数の漸近形に関するストークス現象がある。

4.2 断熱状態と動的状態——回転結合

量子数が1単位だけ異なる状態間では(11)式の第2項からくる回転結合項

$$V_{rot} \equiv \frac{\rho v}{R^2} \langle \phi_2 | \hat{L}_z | \phi_1 \rangle \equiv \frac{\rho v}{R^2} V_0 \quad (24)$$

が遷移の原因となる。\$V_0\$ は通常 \$R\$ のおとなしい関数である。したがって \$V_0\$ が \$R=0\$ で 0 でない限り \$V_{rot}\$ はそこに2位の極を持つ。この結合は、イオン-原子衝突過程で重要な役割を演ず

ることが知られている。⁷⁾断熱ポテンシャルの形状によって表1に示す3種類の典型的な場合が考えられる。この3つの場合の解析性はお互いに異なっており、その上動径結合問題の解析性とも異なっている。これらを統一的に扱う解析的公式を求めたい。そのために回転結合項と H_{el} とを同時に対角化する表現を導入する：

$$H_{dyn} \phi_{dyn}^{(j)} = (H_{el} - \frac{\rho v}{R^2} \widehat{L}_z) \phi_{dyn}^{(j)} = E_j(R) \phi_{dyn}^{(j)} \quad (25)$$

これを動的状態表現と呼ぶことにする。分かり易くするために Σ と Π の2準位問題を例にとると、

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \{ \epsilon_{\Sigma}(R) + \epsilon_{\Pi}(R) \pm \sqrt{(\Delta \epsilon)^2 + 4 V_{rot}^2} \} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} W(\text{新しい結合項}) &= \dot{R} \langle \phi_{dyn}^{(2)} | \frac{\partial \phi_{dyn}^{(1)}}{\partial R} \rangle \\ &= \left(\Delta \epsilon \frac{dV_{rot}}{dt} - \frac{d\Delta \epsilon}{dt} V_{rot} \right) / (\Delta E)^2. \end{aligned} \quad (27)$$

26, 27からこの新しい表現での解析性は断熱表現での動径結合問題の解析性と全く同じであることが示される(表1参照)。従って、この表現の下では通常の L-Z や R-Z の公式を回転結合問題に適用することができる。しかも、遷移を ΔE の複素零点 R_* に局在化させることができる。遷移の局在化は多準位問題に理論を拡張する為には大変重要である。何故ならば、局在性がよければ2準位問題の散乱行列の積の形で多準位問題を取扱うからである。議論の詳細はここでは省略する。

表1 非断熱結合問題の解析性

結合様式	断熱エネルギー差	結合項
動径結合	$\Delta \epsilon \propto (R - R_*)^{1/2}$	$V_{rad} \propto (R - R_*)^{-1}$
回転結合		} $V_{rot} \propto R^{-2}$
(a) L-Z型	$\Delta \epsilon \propto (R - R_c)$ R_c : 実数	
(b) R-Z型	$\Delta \epsilon = \text{一定}$	
(c) 融合原子交差型	$\Delta \epsilon \propto R^2$	
動的状態表現	$\Delta E \propto (R - R_*)^{1/2}$	$W \propto (R - R_*)^{-1}$

回転結合遷移の特徴は、結合項が速度 v に依存している為に断面積が v とともに増加する点にある。動的状態表現に基づいた半古典論によってこのことは簡単に示され、

$$\left. \begin{aligned} Q(\text{全断面積}) &\propto \left(\frac{v}{\beta}\right)^{2/3} \quad (\Delta \epsilon = \beta R^2 \text{の場合}), \\ Q &\propto \left(\frac{v}{\Delta \epsilon}\right)^2 \quad (\Delta \epsilon = \text{一定の場合}) \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

が得られる。 $v \rightarrow \infty$ で $Q \rightarrow \infty$ になるのは勿論物理的には正しくない。これは、分子状態を基底と

する近似の悪さが陽に現われているためである。

29の固有状態による表現をここでは動的状態表現とよんだが、これは Crothers の“動的断熱表現”に従った⁹⁾。ただ回転結合の性質上“断熱”という表現は適当でないと思われるのでこれを省いた。同様な表現は、他の人によっても議論されており、電子-回転表現、X-表現、角度断熱表現とか呼ばれていて確定したよび方はまだない。また、この表現の解析性への着目と多準位系への応用を可能とする解析公式の開発とに着眼点を置いたのは筆者らによる研究だけである。

5. 半古典近似の有効性

今迄(1)式を用いた半古典論を用いてきたが、正しくは勿論次の T_R の量子力学的表式を用いなくてはならない：

$$T_R = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + H_{rot} + H_{cor}^{(1)} + H_{cor}^{(2)} \quad (29 a)$$

$$H_{rot} = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - iL_z \cos \theta \right)^2 + L_z \right\} \quad (29 b)$$

$$H_{cor}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} (L_+ U_+ + L_- U_-) \quad (29 c)$$

$$H_{cor}^{(2)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} L^2 \quad (29 d)$$

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (29 e)$$

$$U_{\pm} = \mp \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cot \theta \cdot L_z \quad (29 f)$$

H_{rot} の固有関数は次のように表わされる：

$$H_{rot} y(KM_K A; \theta, \varphi) = \{K(K+1) - 2A^2\} y(KM_K A; \theta, \varphi) \quad (30 a)$$

$$Y(KM_K A; \theta, \varphi) = (-1)^A \sqrt{\frac{2K+1}{4\pi}} d_{M_K A}^K(\theta) e^{iM_K \varphi} \quad (30 b)$$

次に、

$$\left. \begin{aligned} \phi_{\pm}^K(A) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi(A^+) y(KA^+) \pm \varphi(A^-) y(KA^-) \} \\ \phi^K(\Sigma) &\equiv \phi_{\pm}^K(\Sigma) = \varphi(\Sigma) y(K\Sigma), \quad A^{\pm} \equiv \pm |A| \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

を導入すると、 $\{\phi_{\pm}^K(A), \phi^K(\Sigma)\}$ と $\{\phi^K(A)\}$ とは全く結合せず、遷移はそれぞれの集合の中だけで論じればよいことがわかる。各集合の関数を用いて

$$H_{\text{dyn}} \equiv H_{\text{el}} + H_{\text{rot}} + H_{\text{cor}}^{(1)} + H_{\text{cor}}^{(2)} \quad (32)$$

の固有状態 (動的状態)

$$\psi_{\nu}^k = \sum_A C_{\nu}^{kA} (R) \phi_{\pm}^k (A) \quad (33)$$

を作ることができる。2準位問題の場合の(29)に対応する固有値は次のようになる：

$$E_{1,2}^k = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_k (\Sigma) + \varepsilon_k (II) \pm [(\Delta \varepsilon)^2 + \frac{\hbar^4 V_0^2}{\mu^2 R^4} \lambda_{\pm}^2 (K, \pi)]^{1/2} \right\}, \quad (34)$$

$$\varepsilon_k (A) = \varepsilon (A) + \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} [K(K+1) - 2A^2] + \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \langle L^2 \rangle_A, \quad (35)$$

$$\lambda_{\pm} (K, A) = \sqrt{(K \mp A)(K \pm A + 1)}. \quad (36)$$

前述の半古典論は、上述の諸式から以下の近似の下で導かれる：

$$\left. \begin{aligned} K \gg A, \quad y(KA^+) &\approx y(KA^-), \\ \varphi_{\pm}(A) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi(A^+) \pm \varphi(A^-) \}, \\ \phi_{\text{dyn}}^{(\nu)} &= \sum C_{A\nu} \varphi_{\pm}(A), \\ H_{\text{cor}}^{(1)} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \sqrt{K(K+1)(L_+ + L_-)}. \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

核の運動は別に取り扱われる。H_{cor}⁽²⁾は半古典論では現われない。K ≫ Aの近似や H_{cor}⁽²⁾を無視する近似は低エネルギーの極限で問題になると思われる。(24)と(26)をみてわかるように $\rho\nu \leq \frac{2}{\mu} V_0$ では

$$E_2 + \frac{\mu \rho^2 v^2}{2R^2} \longrightarrow \infty - \frac{1}{R^2} \quad (R \rightarrow 0) \quad (38)$$

という大変奇妙なことになるが、これは H_{cor}⁽²⁾を無視しているためで(35)の E₂^kは決して $-\frac{1}{R^2}$ に比例する負の発散を示すことはない。しかし実際には μ が大きいので、よほど低エネルギーでないと(38)の負の発散は問題にならない。K ≫ Aの近似も同様である。一方、前節の最後で述べた通り高エネルギー極限で前述の半古典論が正しくない結果を与えるのは、電子が高速で走っている原子間を乗り移りにくいという効果が正しく取り入れられていないからである。この効果はETF (Electron Translation Factor) 効果とよばれており、緊密結合形の式に新しい結合項を与えることが知られている。断熱状態から動的状態を定義し直したのと同様に、この新しい結合項をもとり入れて対角化すればこの問題は解決すると予想される。

6. 回転結合誘起遷移の計算事例

6.1 $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ 3準位系のモデル計算⁸⁾

図7に3つの分子軌道のエネルギー図を示す。 $2\sigma_u$ 状態と $1\pi_u$ 状態、及び $1\pi_u$ と $1\sigma_u$ がそれぞれ回転結合で結ばれている。動的状態表現での近似解析公式の良さと遷移の局在性を調べる為に先づ $2\sigma_u$ と $1\pi_u$ の2準位問題の計算を行った。結果の一部を図8に示す。直線軌道近似を用いた。

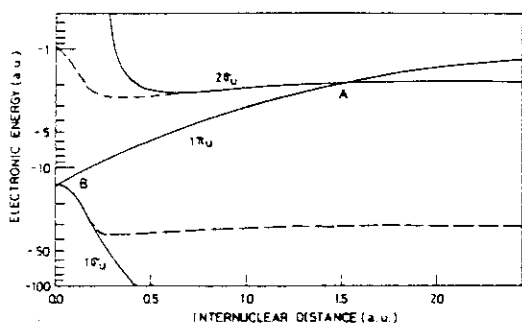


図7 $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ 系の分子軌道エネルギー図
 ———: モデル
 - - - - : 実際のエネルギー

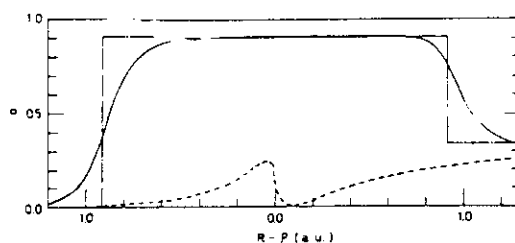
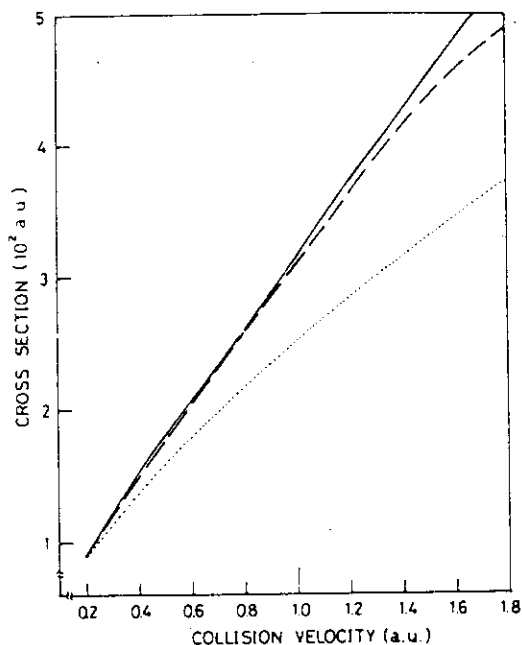


図8 $2\sigma_u - 1\pi_u$ 2準位問題、衝突中における遷移確率の変化
 ——— 動的状態表現 } 正確な
 - - - - 断熱状態表現 } 数値計算
 - · - · 動的状態表現での近似公式

3準位系における $1\pi_u \rightarrow 1\sigma_u$ 遷移の断面積の速度依存性を図9に示す。我々の解析近似公式



——— 近似解析公式 (動的状態表現)
 - - - - 3準位系の正確な結果 (数値解)
 ····· 2準位系の正確な結果 (数値解)

図9 $1\pi_u \rightarrow 1\sigma_u$ 遷移の断面積の速度依存性

が有効であることがわかる。もうひとつ興味あることは、3準位系の結果が $1\pi_u$ 、 $1\sigma_u$ の2準位結果に比べてかなり大きいことである。遷移に直接関係がないと思われる第3準位 $2\sigma_u$ を加える

ことによって断面積が大きくなっている。これを $2\sigma_u$ 状態の触媒効果と呼ぶことにする。この効果は、我々のモデルが少し簡単化されすぎているために誇張されているが、現実にかかる可能性もあり大変興味深い（8節の討論参照）。

6.2 (Li-Na)⁺ 衝突系の計算

ポテンシャルエネルギーを図10に示す。1 Σ と2 Σ 間の結合は、R-Z型の動径結合である。軌道を正しく考慮に入れた我々の半古典論の良さを調べる為に、再び2 Σ と1 Π の2準位だけをとって量子学的緊密結合法の結果と比較した。結果を図11,12に示す。1 Σ , 2 Σ , 1 Π の3準位を考慮に入れて全断面、微分断面積を我々の半古典論で計算し、実験と比較することを現在進めている。

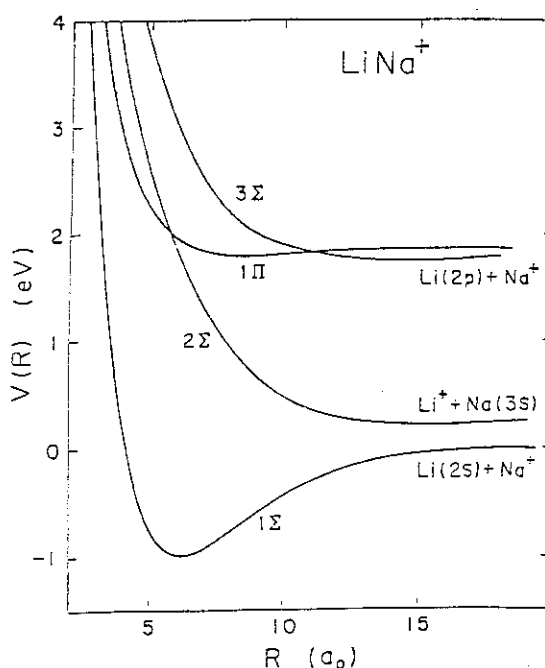


図10 (Li-Na)⁺系のポテンシャルエネルギー

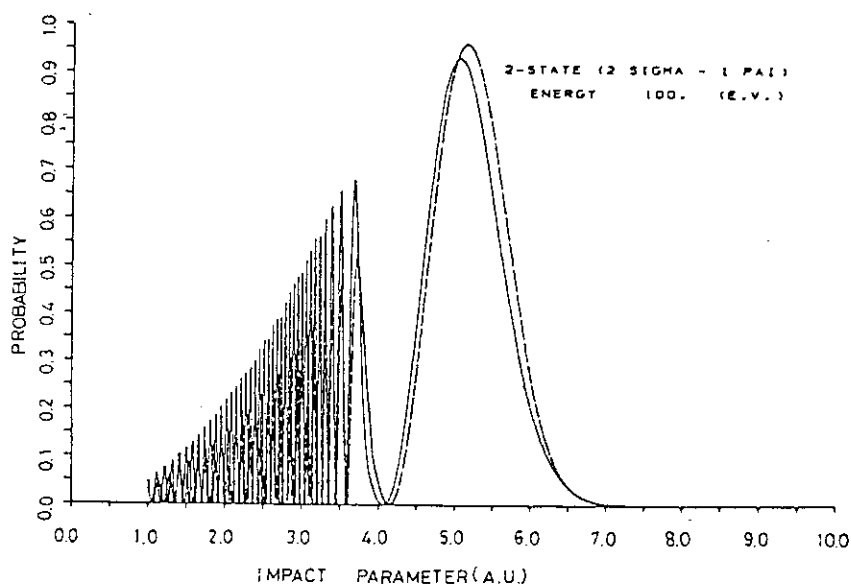


図11 2 Σ -1 Π 間の遷移確率
衝突エネルギー 100 eV
—— 量子力学的緊密結合
---- 近似解析公式

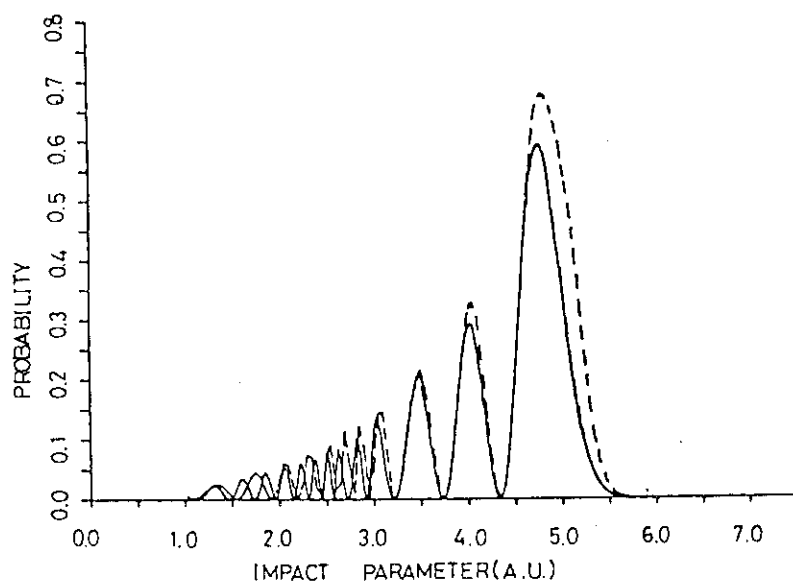


図12 $2\Sigma-1\Pi$ 間の遷移確率
衝突エネルギー 10 eV
—— 量子力学的緊密結合
----- 近似解析公式

7. 今後の問題

- (i) 回転結合問題では、3準位が $R=0$ で同時に縮重することがありうる。この問題の基礎となる数学は、3階常微分方程式のストークス現象で筆者の知る限り一般論はない。3準位同時対角化による動的状態表現を基にした経路積分法での近似的取扱いを現在進めている。
- (ii) 化学反応系への応用
非断熱化学反応にまだ多くの未知分野を残している。たとえば、回転結合による電子状態遷移の系統的な研究は皆無である。

8. 討 論

講演後、以下の3つの質問があった。

- (i) 動的状態表現と同様に ETF 効果をとりこむのを、ハミルトニアンの段階でというのは正しくないのではないか。

答え——ハミルトニアンを段階でといたのは筆者の間違いである。ハミルトニアンを行列表現の段階でとすべきであった。

- (ii) どんな結合も局在化できるのか。

答え——非断熱結合項だけの話であり、4つの主要メカニズムが全て混在しているような場合の統一取扱いはない。

(iii) モデル計算で発見された $2\sigma_u$ 状態の解媒効果について。

単純に考えると $1\pi_u$ から $2\sigma_u$ に確率が流れるので、3準位にすると確率は減ると予想されるが増えるのはどうしてか。

答え——擬似交差点での遷移確率だけを問題にするとその通りであるが、回転結合項が R^{-2} に比例している為に $1\pi_u$, $1\sigma_u$ 状態が $R=0$ の近傍で大きな変形を受け、そのために位相が変化して上述したような結果になっている。従って全確率が減る場合も当然ありうると思われる。

最後に、本稿で述べた回転結合遷移の研究は共同研究者である高千穂商大の並木雅俊氏と、お茶の水女子大の広川令子嬢の協力のもとに行われたものであることを述べておきたい。

文 献

1. たとえば (a) M.S. Child "Electronic Excitation: Nonadiabatic Transitions"
Atom-Molecule Collision Theory edited by R.B. Bernstein
(Plenum, 1979) の第 13 章
(b) J.C. Tully "Nonadiabatic Processes in Molecular Collisions"
"Dynamics of Molecular Collisions Part B" edited by
W.H. Miller (Plenum, 1976) の第 5 章
2. Ch. Jungen and O. Atabek, J. Chem. Phys. 66, 5584 (1977)
3. H. Takagi and H. Nakamura, J. Chem. Phys. 74, 5808 (1981)
4. H. Nakamura, J. Phys. Soc. Japan 26, 1473 (1969)
5. A. Giusti, J. Phys. B13, 3867 (1980)
6. たとえば K.S. Lam and T.F. George "Semiclassical Methods in Molecular
Scattering and Spectroscopy" edited by M.S. Child (D. Reidel, 1980)
P.179
7. たとえば Q.C. Kessel and B. Fastrup, Case Stud. Atom Physics 3, 137
(1973)
8. H. Nakamura and M. Namiki, Phys. Rev. 24, 2963 (1981)
9. D.S.F. Crothers, Adv. Phys. 20, 405 (1971)

7. 超重原子形成による陽電子放出の理論

岡山大理 富島康雄

原子番号 Z が大きくなって、ある臨界値 Z_{cr} (≈ 170) をこえると、電子の $1s_{1/2}$ 軌道エネルギーは負エネルギーの Dirac sea の中にうもれてしまう。もしこの $1s_{1/2}$ 軌道に電子がいなかったとすると Dirac sea の中に穴があくことになる。すなわち、陽電子が発生し、それが時間の経過と共に無限遠にとび去り、あとに電荷をもった真空が残る。以上がこの話しのあら筋である。実験的にまだたしかめられてはいないが、大変面白い問題である。

この問題に精力的にとりくんでいる研究グループが2つある。1つは Prof. W. Greiner を中心とする主として Johan Wolfgang Goethe Universität および Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) に属する人々、他の1つは Prof. V. S. Popov を中心とする Institute of Theoretical and Experimental Physics (Moscow) に属する人々である。

面白いことに、これら2つのグループの計算の方法は全くと言ってよい程異なる。ここではソビエトの人々の計算を主に紹介しようと思う。彼等のやり方は半古典論を基礎にして、なるべく解析的に解を求めよう、Computer にはたよるまいという姿がありありと見え、最近計算機にいささか食傷ぎみの筆者の共感と呼んだという単純な理由からである。なぜ彼等がなるべく Computer を使わないようにするのかという本当の理由はわからない。

記述をなるべく簡単にするため以下では $\hbar = c = m_e = 1$ という単位を用いる。

1) 核の点電荷模型の破綻

点電荷 Ze による純粹のクーロン場の下で Dirac 方程式

$$H\psi = (\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta + V)\psi = \epsilon\psi \quad (1)$$

$$V = -\zeta/r \quad (2)$$

$$\zeta = Z\alpha \approx Z/137 \quad (3)$$

が、解析的に解けることはよく知られている。 $1s_{1/2}$ 状態の固有値は

$$\epsilon(1s_{1/2}) = \sqrt{1 - \zeta^2} \quad (4)$$

で、この式は $\zeta > 1$ で ϵ が虚数になり $1s_{1/2}$ に対応する解は意味を失う。(一般的には $\zeta > j + \frac{1}{2}$ で j 状態が意味を失う。ソビエト学派はこの現象を falling to the center と呼んでいる。)

この原因は、次のような定性的考察からすぐわかる。Dirac Hamiltonian (1) において $\boldsymbol{\alpha}$, β を平均値

$$\left. \begin{aligned} \langle \boldsymbol{\alpha} \rangle &= \mathbf{v} \\ \langle \beta \rangle &= \sqrt{1 - v^2} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Theory on positron emission from superheavy quasiatoms.
Yasuo Tomishima
(Okayama University)

でおきかえ $\mathbf{p} = \mathbf{v} / \sqrt{1 - v^2}$ を使うと

$$H \sim \sqrt{p^2 + 1} - \zeta/r \quad (6)$$

を得る。ここで p と r を Δp , Δr と考えて $\Delta p \Delta r = 1$ を用いると

$$H = \sqrt{\Delta p^2 + 1} - \zeta \Delta p \quad (7)$$

(7)式は $\zeta < 1$ のときのみ極小値を持ち、その極小値はまさに(4)式の値となるが、 $\zeta > 1$ では(7)の第2項がきいて最小値を与えない。クーロン項がいくらでも大きな負の値をとることが、この破綻の原因であることがわかる。

この困難をさける一番簡単な方法として普通用いられるのは、核に有限の大きさ(半径 R)を持たせ、ポテンシャル V を次式のように仮定することである。

$$V(r) = \begin{cases} -\zeta/r, & r > R \\ -\zeta/R f(r/R), & 0 < r < R \end{cases} \quad (8)$$

ここに $f(x)$ は切断関数で、(I)核電荷が表面のみに分布するとすれば $f_I(x) = 1$; (II)核電荷が球内に一様分布すると仮定すれば $f_{II}(x) = (3 - x^2)/2$ となる。

核半径 R は通常 $R = r_0 A^{1/3}$ (A は質量数, r_0 は核子の平均半径で $1.1 \sim 1.2$ fm) ととられる。

(8)を用いると $1s_{1/2}$ 状態のエネルギーは Z ($\propto \zeta$) の増加と共に負でだんだん大きくなり、 Z_{cr} (≈ 170) に到って Dirac sea の上限に達する。(図1)

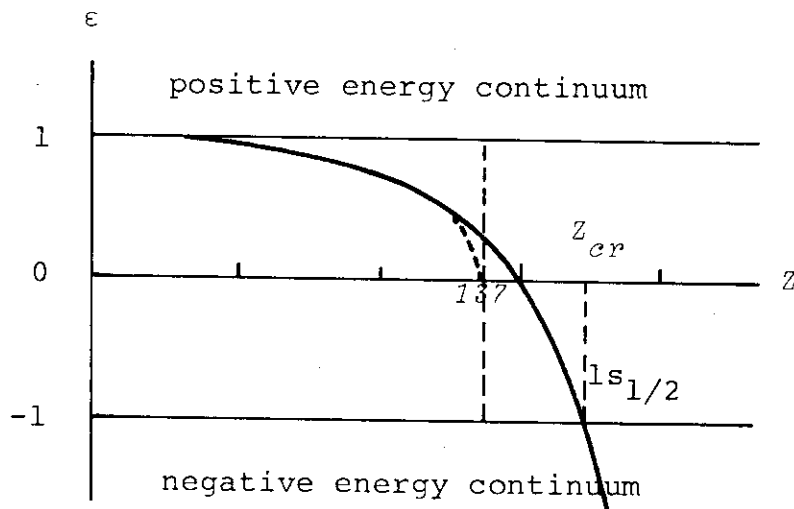


Fig. 1

Z が Z_{cr} をこえると何がおこるか、次節で直観的な考察をしてみよう。

2) 有効ポテンシャル

この節では $1s_{1/2}$ 準位が負の Dirac sea の中にうもれた時に陽電子がでる機構を直観的に理解することを試みる。まず Dirac 方程式(1)を普通の方法で動径部分の方程式に書き直す。

$$\psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \Omega_{jlm} \\ iF(r) \Omega_{j'l'm} \end{pmatrix} \quad \ell' = 2j - \ell \quad (9)$$

ここに Ω_{jlm} は spherical spinor である。 $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ に対して $\kappa = \mp(j + \frac{1}{2})$ とすれば、 G と F の満足する方程式として次式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} G' &= -\frac{\kappa}{r}G + (1 + \varepsilon - V)F \\ F' &= (1 - \varepsilon + V)G + \frac{\kappa}{r}F \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

更に

$$G(r) = [1 + \varepsilon - V]^{1/2} \chi(r) \quad (11)$$

とおき F を消去すると、 χ に対する Schrödinger-like な方程式が得られる。

$$-\frac{1}{2}\chi'' + U(r)\chi = E\chi \quad (12)$$

ただし

$$E = \frac{1}{2}(\varepsilon^2 - 1) \quad (13)$$

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r) \quad (14)$$

$$U_1(r) = \varepsilon V - \frac{1}{2}V^2 + \frac{\kappa(\kappa+1)}{2r^2} \quad (15)$$

$$U_2(r) = \frac{1}{4} \left\{ \frac{V''}{1+\varepsilon-V} + \frac{3}{2} \left(\frac{V'}{1+\varepsilon-V} \right)^2 - \frac{2\kappa V'}{r(1+\varepsilon-V)} \right\} \quad (16)$$

U_1 は Klein-Gordon 方程式に対する有効ポテンシャルと一致し、 U_2 は Dirac スピンに由来する項で U_1 に較べればずっと小さい。

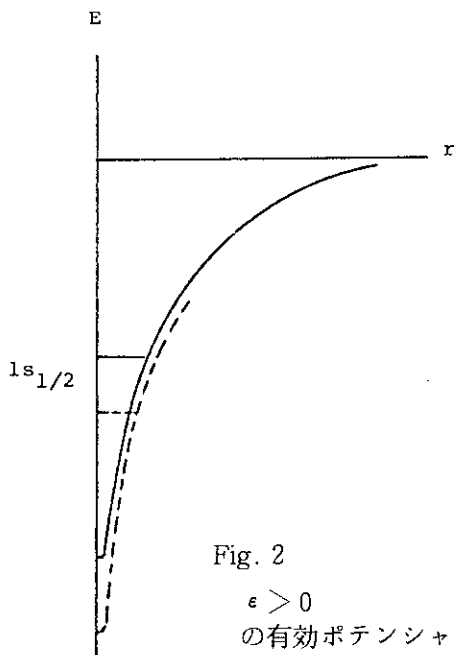


Fig. 2
 $\varepsilon > 0$
 の有効ポテンシャル Z が増すと点線の方へ移る。

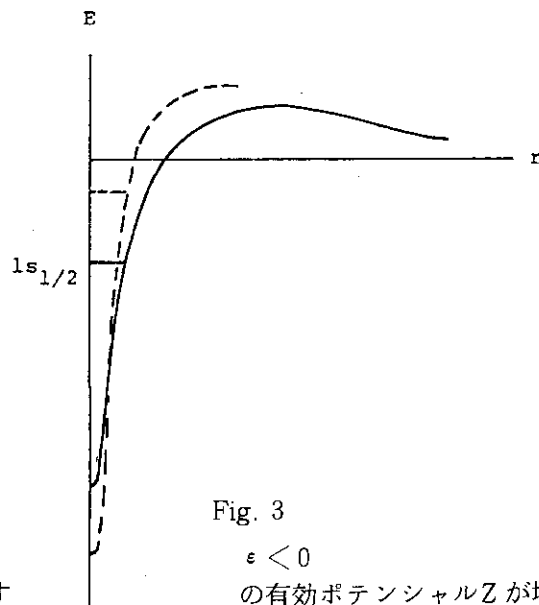


Fig. 3
 $\varepsilon < 0$
 の有効ポテンシャル Z が増すと点線の方へ移る

(15)をみると ϵ の正と負で有効ポテンシャルの形が全くちがうことに気づく。ポテンシャル V が (8) で与えられるとき、 $\epsilon > 0$ の間は Z (or ζ) の増加と共にポテンシャルが深くなり、それに伴って $1s_{1/2}$ 準位は下に下がる。($\epsilon = 0$ で $E = -\frac{1}{2}$ となりそれが最低の値) 図2 参照。 $\epsilon < 0$ になると有効ポテンシャルは図3に示すように正の barrier を持つ。 Z の増加に伴ってポテンシャルは上に持ち上がり、それに伴って $1s_{1/2}$ 準位は上にあがる。 $E = 0$ で $\epsilon = -1$ となり、丁度 Dirac sea の上端に一致する。この時の Z が Z_{cr} である。 Z が更に大きくなると $1s_{1/2}$ level energy は $E > 0$ の範囲におちるが (図4)、この準位は準定常状態であることが図からわかる。もし $1s_{1/2}$ 準位が空であったとすれば、ここに positron がつかまったことになるが、これは安定ではなく、トンネル効果で外に逃げ出す。その確率は WKB 法で計算すれば

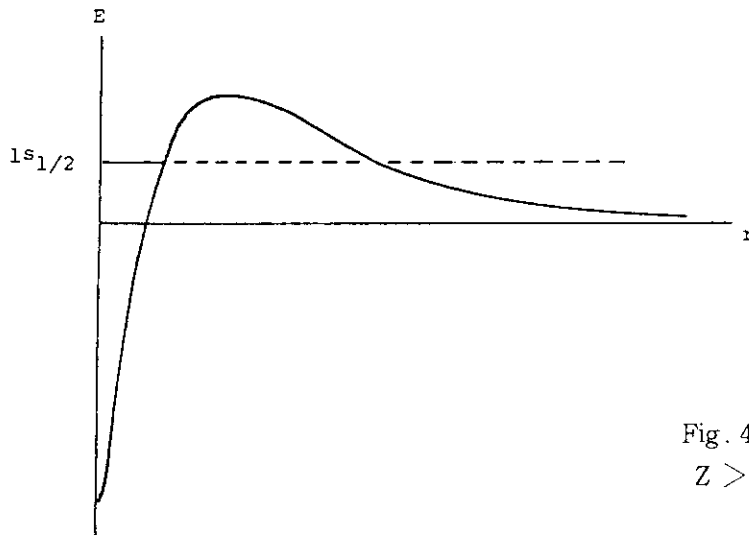


Fig. 4
 $Z > Z_{cr}$ $1s_{1/2}$ 準位

$$r = r_0 \exp \left\{ -2\pi \left[\frac{\zeta}{(1-\epsilon^{-2})^{1/2}} - (\zeta^2 - \kappa^{-2})^{1/2} \right] \right\} \quad (17)$$

($1s_{1/2}$ では $\kappa = -1$, r_0 は 1 の order の定数) となる。これが陽電子放出の確率である。次節でもうすこしきちんとした計算を試みる。

3) Z_{cr} の決定および $Z > Z_{cr}$ における準定常状態

$\epsilon = -1$ とおくと (12) は解析的にとくことができる。まず原子核の外 ($r > R$) で V は Coulomb 型でそこでの解は

$$G(r) = K_{i\nu}(\sqrt{8\zeta}r) ; \nu = 2\sqrt{\zeta^2 - 1} \text{ for } 1s_{1/2} \quad (18)$$

とかける。原子核の内 ($r < R$) で (8) の切断関数を $f(r/R) = 1$ と仮定すると $1s_{1/2}$ に対し

$$\xi(\rho) = G / \frac{dG}{d\rho} = \tan \zeta \rho / \rho \quad (\rho = r/R) \quad (19)$$

となる。 G の対数微分を $r = R$ でつなぐことから次の超越方程式を得る。

$$Z K'_{i\nu}(Z) = \frac{2}{\xi(1)} K_{i\nu}(Z), \quad Z = \sqrt{8\zeta}R \quad (20)$$

これから Z_{cr} が求められる。

$Z > Z_{cr}$ のときの energy を求めるために、まず $Z < Z_{cr}$ で $1s_{1/2}$ のエネルギーが discrete 領域 $-1 < \epsilon < 1$ にある通常の束縛状態の式をまとめておく。

$$G = \sqrt{\frac{1+\epsilon}{r}} (\chi_1 + \chi_2), \quad F = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{r}} (\chi_1 - \chi_2) \quad (21)$$

とすれば $r > R$ の外部解は

$$\chi_j(r) = C_j W_{\kappa_j, ig}(-2\lambda r) \quad (22)$$

ここに

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= \sqrt{1-\epsilon^2} \\ \kappa_1 &= \frac{\epsilon \zeta}{\lambda} - \frac{1}{2} \\ \kappa_2 &= \frac{\epsilon \zeta}{\lambda} + \frac{1}{2} \\ g &= \frac{\nu}{2} = \sqrt{\zeta^2 - 1} \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

W は Whittaker function. W の $r \rightarrow \infty$ の漸近形が $\exp(-2\lambda r)$ であることから、これが束縛状態を表わすことは明らかである。

$r < R$ の内部解を切断関数 $f(r/R) = 1$ のときに求めると、 $\epsilon = -1$ に対して

$$G = \sin kr \quad F = -\frac{kR}{\zeta + (1+\epsilon)R} \left(\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right) \quad (24)$$

ただし

$$kR = \sqrt{\zeta(\zeta - 2R)}$$

内・外の解がなめらかにつながるための条件は

$$x \frac{W'_{\kappa_2, ig}(x)}{W_{\kappa_2, ig}(x)} = \frac{1}{2} + \frac{\zeta \text{ctg } \zeta + r(\zeta - \zeta^{-1} + \text{ctg } \zeta)}{1 + r(\zeta^{-1} - \text{ctg } \zeta)} \quad (25)$$

$$x = 2\lambda R \quad r = \sqrt{(1+\epsilon)/(1-\epsilon)}$$

R が極めて小さいとして展開すれば、エネルギーを定める方程式として次式を得る。

$$-\frac{1}{2\pi} \left[\ln \lambda + \psi\left(-\frac{\epsilon}{\lambda}\right) + \frac{1+\epsilon}{1+\epsilon+\lambda} \right] = \frac{1}{\nu} - \frac{1}{\nu_{cr}} \quad (26)$$

ψ は digamma 関数。この式は $\zeta < \zeta_{cr}$ で実数 ϵ の解を持つ。これが束縛 $1s_{1/2}$ 準位のエネルギーである。

(26) を $\zeta > \zeta_{cr}$ ($\epsilon < -1$) の領域に解析接続する。この場合 λ は imaginary で F, G は無限遠で発散する準定常解となる。(26) から定まる ϵ は complex となり

$$\begin{aligned} \epsilon &= -\left(1 + \frac{p^2}{2}\right) - i \frac{3\pi}{5} e^{-2\pi/p} \\ p &= \sqrt{\frac{12\pi}{5} \frac{\nu - \nu_{cr}}{\nu \nu_{cr}}} \end{aligned} \quad (27)$$

が得られる。ここでRが極めて小さいこと、および $Z - Z_{cr} \ll Z_{cr}$ が仮定されている。 $p^2/2$ が放出される陽電子の運動エネルギーで、その生成確率は

$$\begin{aligned}
 W &= -2 \operatorname{Im} \epsilon \\
 &= \frac{6\pi}{5} \exp \left\{ -\sqrt{\frac{5\pi}{3}} \frac{\nu \nu_{cr}}{\nu - \nu_{cr}} \right\} \\
 \nu &= 2 \sqrt{\zeta^2 - 1}
 \end{aligned} \tag{28}$$

となる。

4) 重イオン衝突による陽電子放出

$Z > Z_{cr}$ (≈ 170)になると陽電子が生成される理由をのべてきたが、このような原子をこしらえる事は現在のところ望めそうもない。現実にとすれば、十分重い裸の原子が衝突し(原子番号 Z_1 および Z_2 , $Z_1 + Z_2 > Z_{cr}$), 合成系の作る電場が十分強くなったときであろう。

核の相対速度は $Z\alpha > 1$ のときの内殻電子の速さに較べて十分小さいので、原子核の運動は古典力学を用いて取扱うことができるし、電子状態は断熱近似で求められると仮定する。

簡単のため $Z_1 = Z_2 = Z$ ($2Z > Z_{cr}$)とし、電子の最低レベル $1s\sigma$ がDirac seaにおちこむような核間距離の限界 R_{cr} を求めてみよう。 Z は137より小さいから核が点電荷であると仮定しても計算上不都合はおこらないから以下点電荷として計算する。

核間距離 R は十分小さいとし、核の近傍の2中心Dirac方程式の解を求める。2中心の常套手段である楕円座標

$$\zeta = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R} \tag{29}$$

を用いると $\zeta = 2Z\alpha$ として

$$\psi \propto (\zeta^2 - \eta^2)^{-\nu}; \quad \nu = 1 - \sqrt{1 - \zeta^2/4} \tag{30}$$

が得られる。

上分遠くでのポテンシャルは略 $-\zeta/r$ と見做せるからここでの解は§3.で求めたものと同じである。

両方の解が r の中間領域でなめらかにつながるようにきめて

$$R_{cr} = C_3 \exp \{ -\pi (\zeta^2 - 1)^{1/2} \} \tag{31}$$

C_3 は1のorderの定数。

また核間距離 R に対する $1s\sigma$ 単位のエネルギーをきめる方程式として次の式が得られる。

$$\begin{aligned}
 \ln \frac{R}{R_{cr}} &= - \left[\psi \left(-\frac{\epsilon}{\lambda} \right) + \ln \lambda + \frac{1 + \epsilon}{1 + \epsilon + \lambda} \right] \\
 \lambda &= (1 - \epsilon^2)^{1/2}
 \end{aligned} \tag{32}$$

勿論 $R > R_{cr}$ では ϵ は実の値を持ちこれが $1s\sigma$ 単位のエネルギーである。しかし $R < R_{cr}$ になると解 ϵ はcomplexになってその形は勿と同じである。ただし、

$$p = \sqrt{\frac{6}{5} \ln R_{cr}/R} \tag{33}$$

陽電子生成の確率は

$$W(R) = \frac{6\pi}{5} \exp \left\{ -2\pi \sqrt{\frac{5}{6 \ln(R_{cr}/R)}} \right\} \tag{34}$$

となる。

この近似では陽電子のエネルギー $\frac{p^2}{2}$ 、およびその生成確率は R/R_{cr} のみに依存している。すなわち Z の値は R_{cr} の決定にしかきいていない。

一方の核が静止していて、片方の核が運動エネルギー E でぶつかるとする。frontal collision の最短核間距離 R_0 が丁度 R_{cr} に等しくなる E の値を E_t とかく。核の運動の軌跡は $\eta = E/E_t$ と impact parameter ρ あるいは重心系における散乱角 θ のみで完全にきまる。すなわち核間距離 R は η と ρ (or θ) が与えられると時間の関数として決定される。

従って陽電子生成の断面積は 34 を積分するだけで得られる。($\eta > 1$ のときのみ陽電子が発生することは言うまでもない。) 計算は初等的であるが、かなりめんどうなので以下に結果のみを示す。

重心系での原子核の散乱角 θ に対する断面積 σ の依存性は

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \sigma F(\theta, \eta) \tag{35}$$

とかける。 $F(\theta, \eta)$ は図 5 に示されている。

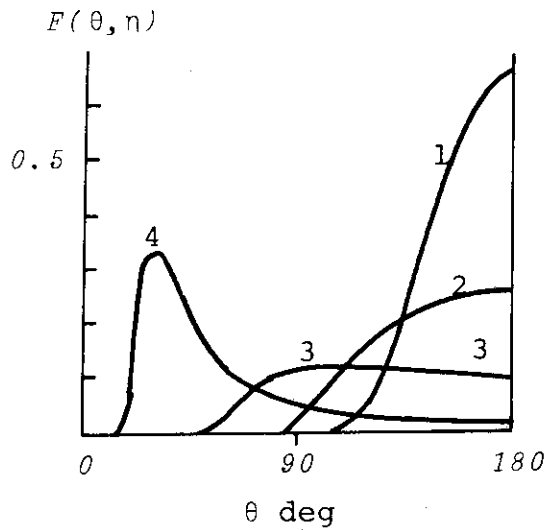


Fig. 5

- 1 $\eta = 1.25$
- 2 $\eta = 1.5$
- 3 $\eta = 2$
- 4 $\eta = 5$

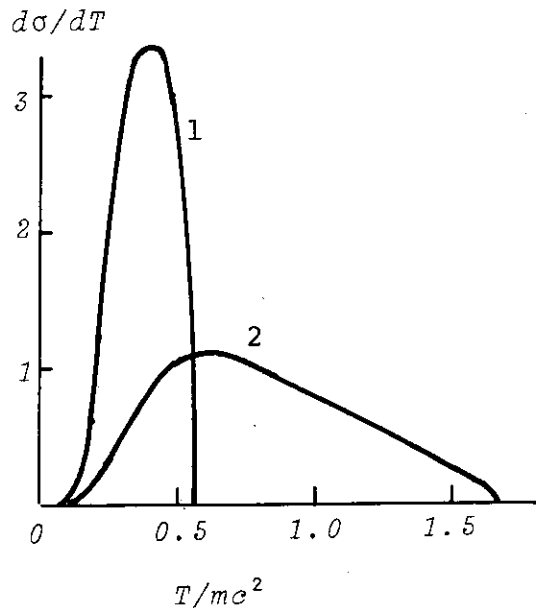


Fig. 6

- T : 陽電子のエネルギー
- 1 $\eta = 2$
 - 2 $\eta = 4$

図6は生成された陽電子のエネルギーの関数として見た断面積の変化を表わす。

全面積は

$$\sigma(E, Z) = \sigma_1(Z)F(\eta)$$

66

と書ける。 σ_1 の値は表1に、 $F(\eta)$ は表2に与えられている。この表からどのくらいの確率で陽電子が放出されるか見当がつくであろう。

TABLE I

	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Gf	Es	Fm	Md	No
$Z = 2Z\alpha$	1.225	1.299	1.314	1.328	1.343	1.358	1.372	1.387	1.401	1.416	1.431	1.445	1.460	1.475	1.489
R_{α}, F	36.4	40.1	43.6	47.5	51.4	55.6	59.8	64.3	68.6	73.3	78.0	82.8	88.0	92.8	98.4
E_t, MeV	612	568	534	502	476	448	426	404	387	369	354	341	327	316	305
σ_1, mb	20.7	28.8	38.5	51.3	67.4	88.1	113	145	181	228	281	344	424	509	620

TABLE II

η	$F(\eta)$	η	$F(\eta)$	η	$F(\eta)$
1.1	$1.24 \cdot 10^{-7}$	2.1	0.174	3.2	0.570
1.2	$6.00 \cdot 10^{-8}$	2.2	0.212	3.4	0.625
1.3	$9.07 \cdot 10^{-8}$	2.3	0.251	3.6	0.675
1.4	$4.41 \cdot 10^{-8}$	2.4	0.290	3.8	0.719
1.5	0.0126	2.5	0.329	4.0	0.758
1.6	0.0267	2.6	0.367	4.2	0.792
1.7	0.0468	2.7	0.404	4.4	0.822
1.8	0.0728	2.8	0.440	4.6	0.848
1.9	0.103	2.9	0.475	4.8	0.872
2.0	0.137	3.0	0.508	5.0	0.892

補 足

渡辺氏から Greiner - 派の結果とどうちがうかとの質問があったので私の知る範囲で記しておく。ここでの議論は $1s\sigma$ レベルが Dirac sea の中におちこんだときに起る所謂 Spontaneous Positron Production に限られている。この範囲では計算の方法に差はあれ、結果に大した差はないように思う。しかし Greiner 等は $1s\sigma$ level がまだ Dirac sea の上の方にあるときにおこる induced positron production も考察していて、これを加えると生成の確率は 1~2 桁大きくなるようである。勉強不足でこれ以上のくわしいことはわからない。

あ と が き

私は陽電子がとび去った後に残る荷電真空の中の電荷分布のトーマス・フェルミ理論に関心があって、すこししらべてきた。原子核の衝突による陽電子放出のような dynamic な問題に関しては全くの素人である。こんなむづかしい問題の解説を書くなどは全くおこがましい事だと思いつつ、この原稿をかいた。思いちがいや誤りもある事と心配している。お気づきの事は御教示いただき度い。

文 献

Popov 一派の論文は膨大な数に及ぶ。ここでは陽電子生成に直接関係するもののみをあげておく。

Popov V S: Sov. Phys. JETP 32 526 ('71)

Positron production in a Coulomb field with $Z \gg 137$

Popov V S: Sov. Phys. JETP 38 18 ('74)

Spontaneous positron production in collisions between heavy nuclei

Popov V S: Sov. J. Nucl. Phys. 19 81 ('74)

Spontaneous creation of positron in collision of heavy nuclei; production cross section and energy spectrum of e^+

Marinov M S & Popov V S: Sov. J. Nucl. Phys. 20 641 ('75)

The energy spectrum of positron produced in nuclear collisions with $R < R_{cr}$

なお、次の解説はいろいろの問題がとりあげられ面白いものである。

Ya. B. Zel'dovich & V. S. Popov: Sov. Phys. Uspekhi 14 673 ('72)

Electronic structure of superheavy atoms

ここでは全くふれなかったが、Greiner 一派の仕事については多くの review があるので、それらをあげておく。

B. Müller, R. K. Smith & W. Greiner: Atomic Physics 4 209 ('75)

The decay of the neutral vacuum in overcritical fields

J. Reinhardt & W. Greiner: Rep. Prog. Phys. 40 219 ('77)

Quantum electrodynamics of strong fields

J. Rafelski: NATO Adv. Study Inst. Ser. C 40 399 ('78)

Bound states of fermions in external and self-consistent fields

J. Rafelski, L. P. Fulcher & A. Klein: Phys. Rep. 38 227 ('78)

Fermions and bosons interacting with arbitrarily strong external fields

J. Reinhardt, B. Müller & W. Greiner: Prog. Part. Nucl. Phys. 4 503 ('80)

Quantum electrodynamics of strong fields in heavy ion collision

P. Kienle: Atomic Physics 7 1 ('81)

Atomic physics of high Z systems

8. 超重準原子からの陽電子放出の実験

京大化研 中山 康之
京大 RI センター 伊藤 真

1. 序

1975年、ダルムシュタット重イオン研究所(GSI)で始まった超重原子衝突系からの陽電子放出に関する実験的研究は、満7年を経過した1982年現在なお同所で三つのグループに分れて続けられている。

現象については既に多くの論文等⁽¹⁾で詳述されているので反復を避けるが、その要点をかいつまんでみると、たとえば高エネルギーU(Z_p)がU標的(Z_T)に衝突したような場合に瞬間的に形成される超重準原子($Z_{ua}=Z_p+Z_T=184$)の $1s\sigma$ 準位のエネルギーは、その核間距離が約30 fmになると $2mc^2$ 以上になって、ディラック方程式の負のエネルギー領域に入り込むと考えられる。この際 $1s\sigma$ が電離されていると負エネルギー領域に空位がもち込まれたことになる。この空位はその領域をみたしている負エネルギーの電子によって自然に埋められ、あとに残った空孔は陽電子(自発陽電子)として Z_{ua} 核のクーロン反撥によって系外に放出される。これは量子電気力学(QED)における中性真空の荷電真空への崩壊と解釈され、超強電場下($Z>137$)のQEDを理解し真空の物理学を明らかにするうえで重要な情報を与えるものである。

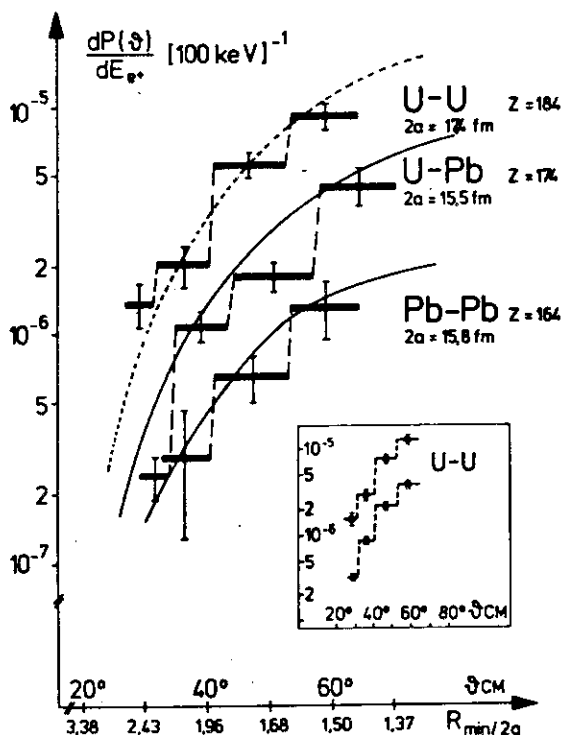
こうした考察は本来“静的”な超重原子に対する理論的興味⁽²⁾から出発しているが、1972年 Saris⁽³⁾らの $Z_{ua}=36$ に始まって、GSI⁽⁴⁾での $Z_{ua}>100$ の δ 電子、MO-X線の観測で瞬間的に準原子(準分子、併合原子とも呼ばれる)ともいふべき $Z_{ua}=Z_p+Z_T$ ができていることがわかり、この点について現在殆ど疑う余地はない。けれどそれらが静的な超重原子と全く同じであるかどうかは別の問題である。とはいえ準原子の $1s\sigma$ の空位の生成率も非常に大きいことも明らかに⁽⁵⁾、強電場下のQEDのテストをするために衝突系を利用することに不都合はないと思われる。

この実験で当初から引き続いて問題になっているのは、高エネルギークーロン励起準位の崩壊に起因する陽電子(核陽電子)と衝突の際の強いクーロン場の変化によって引き起こされる対生成からの陽電子(誘発陽電子、いわゆる Shake off 陽電子もこれに含める)の二種のバックグラウンド陽電子である。前者については衝突時に放出される γ 線を散乱粒子及び反跳粒子と同時計測をすることによって観測すれば、ある程度見積ることができるが後者の誘発陽電子については、そのエネルギースペクトルが自発陽電子と殆ど同じように約500 keVに中心のあるベル型であると予想されているため、少なくともスペクトルの型で見分けることは難しい。以後自発陽電子と誘発陽電子をまとめてQED陽電子と呼ぶ。

Experiments on positron emission from superheavy quasiatoms.
Yasuyuki Nakayama and Shin Ito
(Kyoto University)

2. 現在までの知見

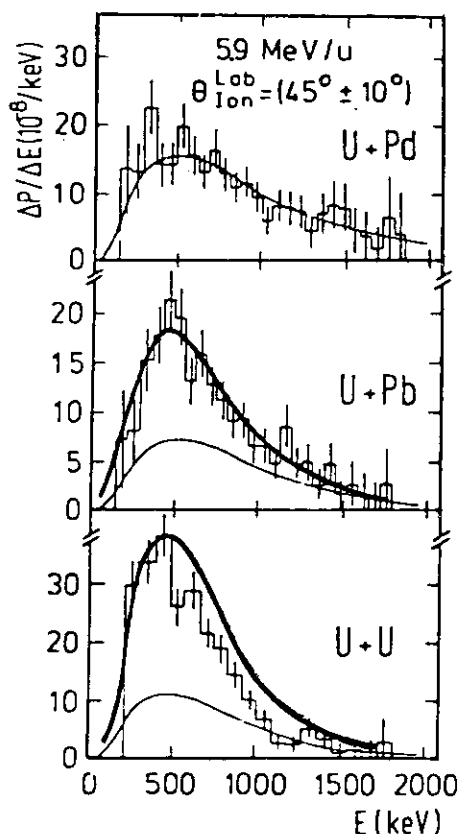
改めて述べるまでもなくまだ自発陽電子は確認されていないが、今までに観測された QED 陽電子についての実験結果を第 1 図⁽⁶⁾と第 2 図⁽⁷⁾⁽⁸⁾に示す。第 1 図は 5.9 MeV/amu (以後衝突エ



第 1 図

陽電子のエネルギー幅を 490 keV を中心に 100 keV とし、入射粒子の重心系散乱角の関数として散乱粒子当りの微分陽電子生成確率を示す。この実験では散乱粒子と反跳粒子は区別されていない。それぞれの衝突系について最短距離 $2a$ の値と Z_{ua} を図中に示した。測定点の横棒は粒子検出器が標的の中心に対して張った角度の広がりであり縦棒は統計誤差である。実線は誘発陽電子についての理論値⁽⁸⁾から引用、点線は、U-U 系について他系からの外挿値である。核陽電子のバックグラウンドは引いてある。

エネルギーはすべて amu あたりである)Pb で Pb 標的を、同じエネルギーの U で U 並びに Pb 標的に衝突させたときの陽電子の微分生成確率を重心系の角度と最近接距離 R_{min} (単位は正面衝突時の最短距離 $2a$) に対して目盛ったものである。陽電子エネルギーはこの測定を行ったオレンジ型スペクトロメーターで $(490 \pm 50 \text{ keV})$ に固定してある。図中の囲みの中の曲線は上が U-U 衝突の場合の全陽電子数 (核陽電子 + QED 陽電子) 下が核陽電子に対する計算値である。実線は Reinhardt⁽⁹⁾らが時間依存の双中心ディラック方程式を解いて、誘発陽電子のみの生成確率を計算したものであるが、よくも合わせたと見られなくもない。この理論が正しければ実験値は殆ど誘発陽電子であるが、自発陽電子もあるとすればこの中に混じっている筈である。力学的パラメーターを定めて陽電子生成確率の Z_{ua} 依存性を調べてみると約 Z_{ua}^{174} にもなる。第 2 図に三種の衝突系から放出された陽電子のエネルギー スペクトルを理論値と共に示す。スペクトルは実験室系 45° の方向に散乱 (反跳) された粒子との間に同時性をとったものである。U-U 系では高エネルギー側に他系にはみられない不一致が認められる。



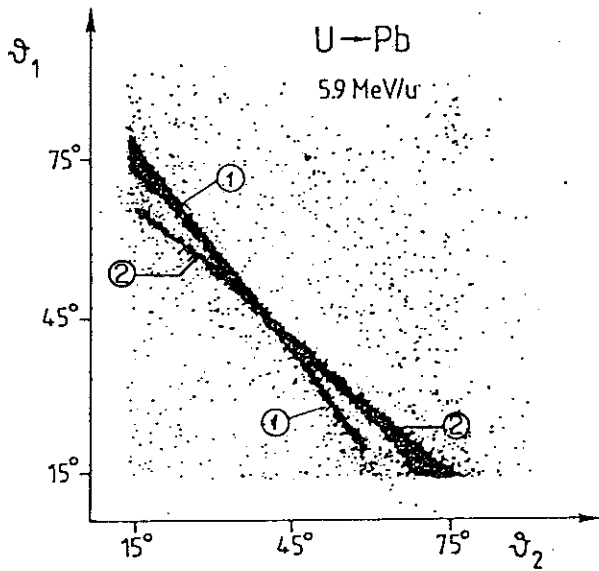
第2図

U-Pd ($Z_{ua} = 138$), U-Pb ($Z_{ua} = 174$), U-U ($Z_{ua} = 184$) の各衝突系からの陽電子エネルギースペクトル。縦軸は keV 当りの生成確率である。U-Pd 系では核陽電子のみのスペクトルと考えられる。図中細い線は核陽電子の計算値であり、太い線は核陽電子を含めた QED 陽電子の計算値⁽⁸⁾である。

3. 進行中の実験

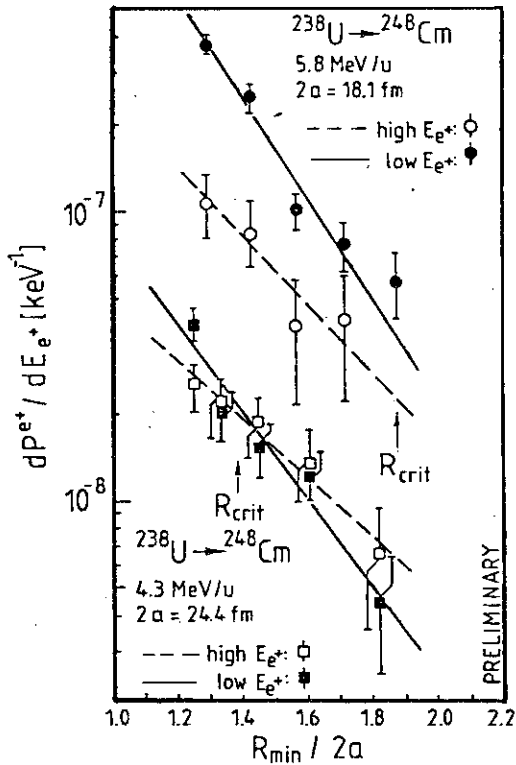
陽電子生成率及びエネルギー スペクトルの R_{min} 依存性をみることは、時間変化のある強いクーロン場の QED を理解するために現在得られる最も有用な情報と言ってよいだろう。前節の第一段階の陽電子実験を経て現在は第二段階に入っているといえる。ここではデータの精密化と同時に新しい結果も出てきている⁽¹⁰⁾。一新された測定装置の主体は陽電子の全エネルギーを同時に測定するためのソレノイド型スペクトロメーターである。新装置の大きな特徴は精密な角度情報が得られる粒子検出器を組み込んだことである。即ち2台の粒子検出器をビーム軸をはさんで対称に配し、散乱(反跳)粒子の同時計測をとって、それぞれ 20° から 70° までほぼ連続的に角度検出を出来るようにした。角度分解能は 0.4° である。この粒子検出器は平行板アバランチ型位置検出器で陰極を遅延線で作ることによって粒子が検出された場所の遅延時間からその角度検出が出来るようにしたものである。これから精密な核間距離が求められるのはいうまでもない。第3図はこれら2台の粒子検出器による U-Pb 系での力学的同時計測を示す一例である。こうした同時計測図から弾性散乱イベントや非弾性散乱(この場合のエネルギー損失を Q とする)のイベントを任意に選び出し放出陽電子との関係について議論出来るのは大きな利点である。また同時計測図からは非対称系では衝突パートナーの識別が可能になるうえに、対称、非対称を問わず標的中の不純物やバックングからのバックグラウンドの選別が出来る。

こうした実験装置で U-Cm 系 ($Z_{ua} = 188$) について行った実験結果を第4図に示す。標的の Cm は現時点で使用出来る最高の原子番号といえるだろう。U のエネルギーは 4.3 及び 5.8 MeV



第3図

U (5.9 MeV/amu) - Pb 系の力学的同時計測。 θ_1 及び θ_2 はそれぞれ2台の粒子検出器で測定した反跳び散乱角。45° 領域で交わった2本の線状イベントのうち①は θ_1 検出器で Pb が θ_2 検出器でUが同時に検出されたことを示す。②はその逆である。



第4図

U - Cm 系からの QED 陽電子生成確率。

U (5.8 MeV) の場合、

High E_e^+ : 600 keV $\leq E_e^+ \leq$ 900 keV

Low E_e^+ : 250 keV $\leq E_e^+ \leq$ 500 KeV,

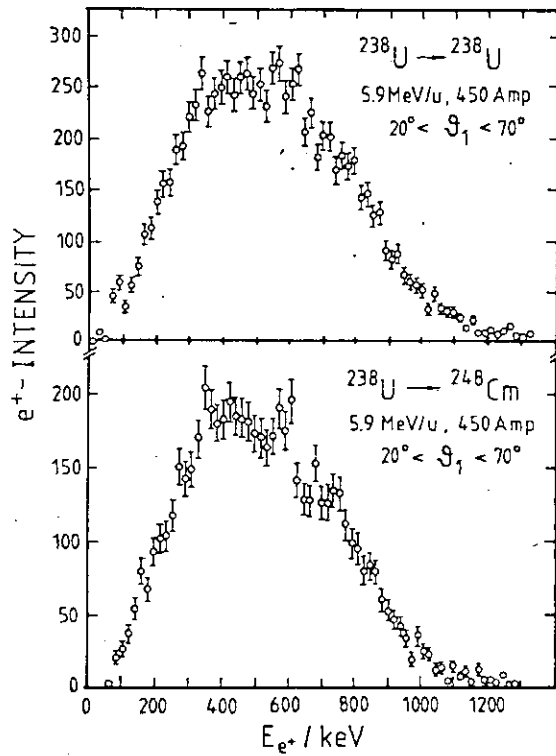
U (4.3 MeV) の場合、

High E_e^+ : 500 keV $\leq E_e^+ \leq$ 800 keV

Low E_e^+ : 200 keV $\leq E_e^+ \leq$ 500 keV,

に対して最短距離 R_{min} ($2a$ を単位として) に対して目盛っている。核陽電子のバックグラウンドは差し引いてある。

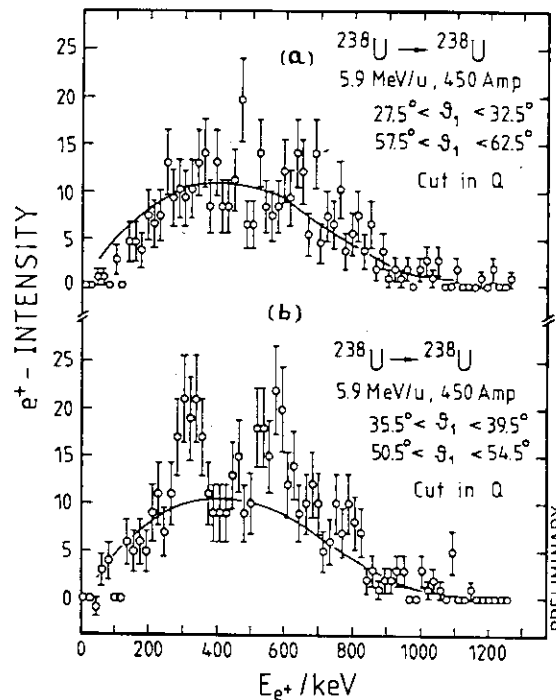
である。両エネルギーとも低い陽電子エネルギーの生成確率が最近接距離が減少するにつれて第1図の勾配より急な勾配を見せているのは、誘発陽電子の傾向に附加的なものがあり、自発陽電子か核陽電子が増えてきたということかも知れない。第5図に U-U 系と U-Cm 系からの全陽電子スペクトルを示す。これは弾性、非弾性成分をとわず θ_1 について 20° から 70° まで積分することによって得られたものである。両系とも陽電子エネルギー 600 keV あたりに、U-Cm 系についてはもう一ヶ所 750 keV 附近にピークらしい構造がみられるのは、核陽電子成分が差し引かれていないとはいえ今迄に見られなかった新しい結果である。力学的同時計測との関連について綿密な解析は更に多くの情報の提供を予想させる。第6図に U-U 系に



第5図

全陽電子エネルギースペクトル。

U (5.9 MeV) を使用して, 上図が U-U 系, 下図が U-Cm 系からのものである。なおスペクトロメーターのトランスミッション及び陽電子検出器の検出効率に対する補正はなされていない。核陽電子についての引き算も行われていない。スペクトロメーターにかけた電流は 450 Amp である。



第6図

U-U 系について衝突の力学的条件を選んだときの陽電子スペクトル。(a)は $27.5^\circ < \theta_1 < 32.5^\circ$, (b)は $35.5^\circ < \theta_1 < 39.5^\circ$ の領域に対してそれぞれ約 15 MeV の Q 値 (図中の cut in Q の意味) を選んだ。なお 2 台の粒子検出器はビームの軸に対して対称に配置してあるので, (a), (b) 図共 θ_1 の二つの領域は対称関係にある。実線は弾性散乱を仮定した理論曲線である。

ついて力学的同時計測図上 (この場合第2図のような枝分れはない) で二つの角度領域及びそれぞれの領域内での約 15 MeV の Q 成分を選んで得られた陽電子スペクトルを示す。(a)ではそれほど顕著ではないが(b)では約 320 keV 及び約 590 keV にピーク様の構造が見られる。Q分解能はこの角度領域では約 45 MeV でここで選んだ 15 MeV の Q成分はかなりせまい。これを 100 MeV にひろげて多少弱くなるがなおこのピーク構造は認められる。従ってこの構造の原因の一つに非弾性度が関係しているとも考えられる。同時に測定した γ 線スペクトルは単調で陽電子のピーク

ク構造に原因する様な形はみられない。但し核の E_0 準位崩壊については γ 線スペクトルからは判らない。ここで示した二つの角度領域だけでなく、 Q 値についても色々な幅で現在データ解析が進行中である。

一方 Kienle⁽¹¹⁾らもオレンジ型スペクトロメーターを使って同じ実験を行っている。彼等も主眼は陽電子スペクトルの核間距離依存性であるが、衝突エネルギーについても 5.7 MeV, 5.82 MeV, 5.88 MeV, 5.97 MeV, 6.05 MeV, 6.2 MeV, とそのエネルギーを変え、散乱角を固定した場合の予備的結果を報告している。U-U 系で散乱角 40° から 50° のところで、陽電子スペクトル上約 300 keV と約 500 keV に同じようにピークが認められる。もしスペクトルのピーク構造が間違いないものならば、それはどういう原因によるものだろうか？何かの原因で、例えば深部非弾性散乱（この場合一般にはもっと高エネルギーによる衝撃が必要である）などによって2粒子の接触時間が長くなると、衝突の際、陽電子の近づいて来る粒子に対する波動函数の間に位相のずれが起こり、その結果特定のエネルギーの陽電子放出の確率が高くなる。この場合特定のエネルギーは一つとは限らない。ここで自発陽電子のエネルギーや生成は核間距離にのみ関係⁽⁸⁾していることを考え合わせると、このピーク構造は自発陽電子の検出を意味するものだろうか？この考え方は実は自発陽電子を確認する方法⁽¹²⁾として提唱されている。

今日までの研究状況を振り返っていえることは、QED 陽電子のうち誘発陽電子は間違いなく検出されていること、それに対応して強電場の QED に関する理論的手法もかなり整備されたことの二点である。今なお自発陽電子の確認への道は遠く、今後世界のもっと多くの研究室でたゆまぬ実験的理論的研究の積み重ねが必要である。

引用文献

1. たとえば J. Reinhardt, B. Müller, and W. Greiner, Phys. Rev. 24A (1981) 103.
2. W. Pieper and W. Greiner, Z. Physik 218 (1969) 327.
3. F. W. Saris, W. F. van der Weg, H. Tawara, and R. Laubert, Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 717.
4. たとえば H. H. Behncke, P. Armbruster, F. Folkman, S. Hagmann, J. R. Macdonald, and P. H. Mokler, GSI-Annual Report (1977) 99.
5. R. Anhold, H. H. Behncke, S. Hagman, P. Armbruster, F. Folkman, and P. Mokler, GSI-Annual Report (1978) 97.
6. K. Kozhuharov, P. Kienle, E. Berderman, H. Bokemeyer, J. S. Greenberg, Y. Nakayama, P. Vincent, H. Backe, L. Handschug, and E. Kankeleit, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 376.
7. H. Backe, W. Bonin, W. Engelhardt, E. Kankeleit, M. Mutterer, P. Senger, F. Weik, R. Willwater, V. Metag, and J. B. Wilhelmy, GSI Scientific Report (1979) 101.

8. U. Müller, J. Reinhardt, T. De Reus, P. Schlüter, G. Soff, K. H. Wietschorke, B. Müller, and W. Greiner, GSI 81-39 Preprint (1981) 15.
9. J. Reinhardt, V. Oberacker, B. Müller, and W. Greiner, Phys. Letters 78B (1978) 189.
10. H. Bokemeyer, K. Bethge, H. Folger, J. S. Greenberg, H. Grein, A. Gruppe, S. Ito, R. Schule, D. Schwalm, J. Schweppe, N. Trautmann, P. Vincent, and M. Waldschmidt, GSI 81-46 Preprint (1981) 11.
11. P. Kienle, Talk at "International Advanced Courses on Quantum Electrodynamics of Strong Fields", Lahnstein/Rhein, June 1981.
12. J. Rafelski, B. Müller, and W. Greiner, Z. Physik A285 (1978) 49.

9. 原子核のクラスター模型

新潟大 理 池田 清美

1. はじめに

原子核のクラスター模型は、はじめは殻模型を補完するものとして、最近では、かなり広い(質量数及びエネルギー)領域に適用しうるものとして用いられ、軽い核の構造を記述するものとして不可欠な模型の一つとなっている。

クラスター模型は“原子核内で核子が局所的に強く相関しあう部分的な小集団”であるクラスターを一つの単位として考え、そのクラスターの集合体を微視的な立場で取扱う模型である。それ故、クラスター相関が強くあらわれる場合には、クラスター間の相対運動が、原子核の運動様式の基本となっているとする立場の模型である。この意味で、一中心ポテンシャル場の粒子運動を基にして種々の粒子相関を取扱うさまざまな模型(代表的なものとして、例えば殻模型)とは立脚点が大いに異なる模型である。

クラスター相関の中で最も顕在化しやすいものが、アルファークラスター(陽子2ケと中性子2ケのクラスター)相関である。 α 粒子は $(0s)^4$ の二重閉殻構造をもつ ${}^4\text{He}$ の原子核で、励起されにくく安定である。この性質のため核表面付近では、 α クラスターの形成が起り易いと考えられる。実際軽い核、特に陽子数と中性子数が等しい原子核(4n核)では、 α クラスター相関が顕在化したクラスター(分子的)状態が豊富に現われている。これらの状態は殻模型による理解が困難な異常な性質をもつが、それらの性質は、クラスター模型の立場からは素直に理解されるものであり、その分析を通じて、漸次クラスター模型の有効性が確立されて来たのである。

クラスター模型の立場からの研究の蓄積がここ10数年行なわれて来たが、研究対象は、p殻核からsd殻核に及び、励起エネルギーでは基底状態から15 MeV程度までの範囲にわたっている。クラスター模型に基づく原子核構造の理解は、それを堅い不変なものとしてではなく、クラスターの生成と生長、又逆に分解と融合という構造の変化を追及することに一つの特徴がある。

クラスター模型は、クラスター間の相対運動を主要な運動様式として取扱うために、結合、準結合状態の核構造解析だけでなく、高励起状態での多様な分子構造の現象する分子共鳴にも、又軽重イオン反応過程の分析にも有効性を発揮するものと考えられ、活用されつつある。標的核又入射核の構造の複合性を取り入れての核間相互作用、又クラスター構造の視点を導入しての反応過程の理解は、これからも重要な課題である。

ここでの報告は、低いエネルギー領域の構造に関する話に限るものとする。

Cluster models of atomic nuclei.
Kiyomi Ikeda
(Niigata University)

II. 典型的なクラスター状態とその規則性

クラスター間相互作用が弱く、クラスター相関が強い場合、クラスター間運動が系の運動様式として最も重要になる。この種の運動が典型的に、また歴史的にも早い時期に、認識されたのは ${}^8\text{Be}$ 原子核である。1960年代前半に展開された Be 領域核の α クラスター構造に関する研究は (Ref. 1, Chap. II), その後の原子核のクラスター構造とクラスター間相互作用の研究の基となった。1960年代の後半に入って以後に、クラスター構造研究は大きな拡がりを見せ、軽い核 (p 殻核から sd 殻核前半) 全域にわたって、また励起エネルギーの領域も広くにわたって展開されるにいたった。その展開の軸になったいくつかの実験事実とその規則性及びそれらの理解について、はじめに簡単に触れる。

二体クラスター (分子的) 構造; ${}^8\text{Be}$ の基底状態 0^+ は 0.095 MeV の α 崩壊可能な準束縛状態で励起 2^+ (2.9 MeV), 4^+ (11.4 MeV) は $\alpha + \alpha$ 散乱共鳴状態で、これらは一つの回転帯を形成する。アルファクラスター模型 (後述) が適用され、これらの準位と phase shift (図 6) が再現される。 $\alpha + \alpha$ クラスター相互作用の見地で眺めるならば、 α クラスターの複合性のため Pauli 原理の効果として生じる“構造的斥力芯”が 1.8 fm と張り出し、その外側に弱い引力効果をもつポテンシャルが、二体核力を基に導かれる。その結合力の大きさは、クーロン相互作用を無視すると、B. E. = 1.4 MeV を生じる程度のものである。スケーリング (長さは、斥力芯の中 R_c を単位、エネルギーは $\hbar^2/M_0 R_c^2$ 単位、ここでは M_0 は関係する粒子の質量) して 2 原子分子 H_2 と比較したものを図 1 に示しておく。 H_2 と比べると結合力は非常に弱いものといえる。しかし重

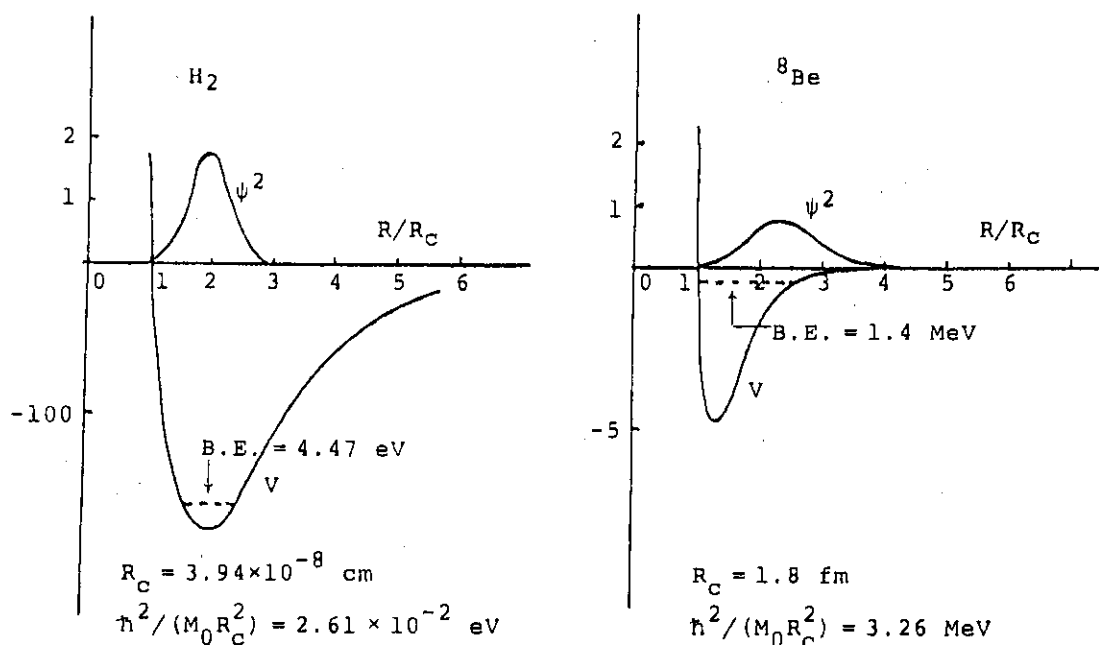


Fig. 1 Comparison of two binding forces; the binding potential for the ground state (${}^1\Gamma_g$) of H_2 -molecule and the α - α potential (nuclear only) for the ${}^8\text{Be}$ ground state

陽子の結合を生み出す核力と比較するならば強いといえる。それは、重陽子の場合はポテンシャルの外に波動関数は大きく拡がり、他方 ^8Be の場合は余り拡がらぬからである。

クラスター構造が Be 領域核特有のものでなく、更に一般性を持っていることが、 ^{16}O 及び ^{20}Ne の 2 体クラスター状態 ($\alpha - ^{12}\text{C}$ 及び $\alpha - ^{16}\text{O}$) の存在を通じて明らかとなった。図 2 に示した $K^\pi = 0^+$ 回転帯が、特に $K^\pi = 0^-$ 回転帯が、典型的な 2 体クラスター状態である。

$K^\pi = 0^-$ 回転帯の準位は α 崩壊シキイ値よりも高く、クーロン+遠心力障壁により崩壊はおさえられるが、崩壊巾をもっている。それは α クラスターの核表面滞在確率が、ほぼ 1 に等しい崩壊換算巾のものである。この事実は $K^\pi = 0^-$ 回転帯で、2 体クラスター構造が、局所的にかなり強く局在してものとなっていることを示す直接的証拠である。

この種の 2 体クラスター (分子的) 構造の存在を受け入れるならば、 ^{16}O ($\alpha - ^{12}\text{C}$) 及び ^{20}Ne ($\alpha - ^{16}\text{O}$) では、その内部構造は、 $\alpha - \alpha$ の場合と異って、“異方性” をもつこととなり、同じ異方性の構造をもつ $K^\pi = 0^+$ 回転体の存在を予想しうる。この双児のパートナーと考えら

れるのが図 2 に示された $^{16}\text{O}^*$ の第 1 励起状態 0_1^+ 準位の上に形成される回転帯であり、 ^{20}Ne の基底回転帯である。これらは原子分子の反転二重項に対応するものであり $K^\pi = 0^+$ 回転帯の間のエネルギーギャップは反転のしにくさを表わしている。実験値から (理論的分析を加えて) 推定されることは、 ^{16}O では $K^\pi = 0^+$ 回転帯も $K^\pi = 0^-$ 回転帯と共に、 $\alpha - ^{12}\text{C}$ の 2 体クラスター状態で、かなり良いものであり、 ^{20}Ne の $K^\pi = 0^-$ (基底回転帯) に於ては、 $\alpha - ^{16}\text{O}$ 構造はかなり崩れ、殻模型的構造に近づいている中途のもの (図 8 参照) と考えられる。

2 つの系で 2 体クラスター状態の存在を仮定し、それらの状態の性質からクラスター間相互作用を、逆に推定するならば、その引力能力は $\alpha + \alpha$ の場合と同様に、そう強くないと考えざるを得ない。即ち、 ^{16}O 及び ^{20}Ne の 2 体クラスター状態が、その 2 体崩壊のシキイ値 ($\alpha + ^{12}\text{C}$ に対して $E_{th} = 7.16 \text{ MeV}$, $\alpha + ^{16}\text{O}$ に対して、 $E_{th} = 4.73 \text{ MeV}$) 近傍に現われることは、クラスター相対運動の零点振動エネルギー程度の引力であることを示し、かつ結合か準結合の状態をつくり出しうる程度のものであることを示している。

上記の ^{16}O , ^{20}Ne の回転帯の内部構造が、2 体クラスター構造であるとの考えは、1960 年代のおわりころには、なじまないものであった。原子核の回転帯の内部構造に関する理解は、重い核を含め一般には、一体場の変形によるものとされ、又 sd 殻核 ($A = 17 \sim 40$) などでは、Elliott による SU_3 群殻模型でなされ、成功を修めていたからである。これらの模型では 4 重極的な粒子相関に起因して変型がひきおこされ、一体場が変形 (主として 4 重極変形) をしていることが基本描像であり、軽い核の上述した様な異常な性質をもつ正パリティの状態についても、その枠組の延長での理解が優先した。独立粒子運動を基礎にする模型では、閉殻芯からの 2 粒子励起

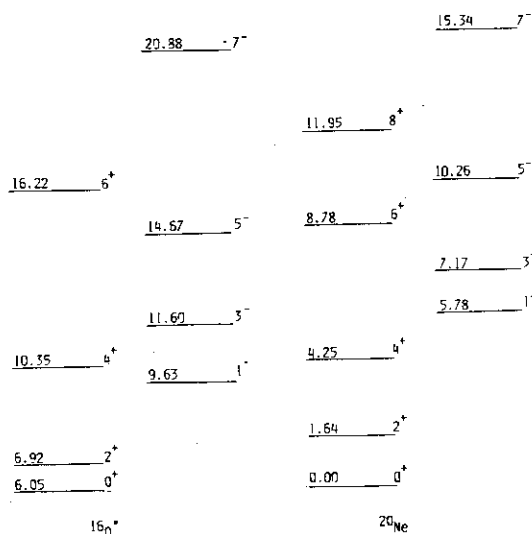


Fig. 2 Energy spectra of the rotational bands with $K^\pi = 0^+$ in $^{16}\text{O}^*$ and ^{20}Ne , where the excitation energies are written in unit of MeV.

(2p-2h) や4粒子励起(4p-4h)等が起り、それらが系全体で一体となって、大きな変形をもつ変形一体場が形成されるとする方向に進んだ。これらの研究の中で注目される点は、閉殻外の4粒子更に8粒子又閉殻芯の中に4粒子の空孔が形成され易いとする点にあり、陰にαクラスター相関の役割の重要性を示していることにある。更に進んで Arima 等は、 $^{16}\text{O}^*$ から ^{20}Ne にいたる異常励起状態では“4p”と“nh”の弱結合模型を唱え、実験との良い対応を得る。ここでは“αクラスター相関”の特異な性質—“αクラスター自身の結合の強さとαクラスターと残りの部分との弱い相互作用”を示唆するに致った。その後の研究から現在では、逆に弱結合模型は、αクラスター相関のあらわれの一形態とみられている。(図3参照)

又後に触れる様に、微視的なクラスター模型を用いての理論的検討から、漸次クラスター状態の認識は定量的にも確かなものとされ来るのである。その早い時期に、2体クラスター状態の新たなものとして、 ^{20}Ne 系に於ては $\alpha + ^{16}\text{O}$ の相対(振動)運動の励起した状態—higher nodal state—が形成されることが認識された。これは、実験的に見出されている ^{20}Ne 系の $K^\pi = 0_4^+$ の回転帯に対応するものと理解されている。(図8参照)

αクラスターの関与する二体クラスター状態の典型例を列挙した。並行して1960年代の前半から重イオン反応あらわれる共鳴状態を、“分子共鳴”と理解する考えもあらわれて来た。(例えば $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ での共鳴状態)その後、 $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ 弾性散乱の励起関数の巨大構造の観測があった。これらの事実や解釈は、αクラスター以外にも2体核分子的構造状態がありうるとするものである。1960年の後半から70年代前半にかけて原子核の分子的描像が大きく育って来る状況にあったといえる。(昨年の本研究会での阿部恭久氏、今回の今西文龍氏の報告参照)。

多体クラスター構造；1958年代の中頃 Morinaga は ^{16}O 、 ^{24}Mg 核 (^{12}C 核についてはその後)の異常に低くかつ性質が殻模型で説明しにくい 0^+ とそれに近接する 2^+ 励起状態に注目して、大胆な考えを提出した。“これらの準位を理解するには、その内部構造が、多粒子励起(4粒子、8粒子……)をおこし、その結果系全体の構造の再編成がおこり、非常に大きく一方向に延びた変形構造か、直線的α鎖状構造があらわれるという想定が必要である。”とする考えであった。上記のような2体クラスター構造の出現は、この先駆的な考えが現実的なものとなり得る可能性を示すものである。

ここでは、具体例として知られている3αクラスター状態、4αクラスター状態について触れる。 ^{12}C については図4に示される様に、第一励起状態は 2_1^+ で、これは14.1 MeV 4^+ とあわせて基底回転帯を形成している。この基底回転帯は、通常その主成分が $(0s)^4(0p_x)^4(0p_y)^4$ のパンケーキ型の変形形状の内部構造(SU₃では(04))をもつ回転帯と理解されている。第2励起状態は又 0_2^+ 状態(7.66 MeV)である。この性質は、その上の 2_2^+ 状態とあわせて、殻模型(又

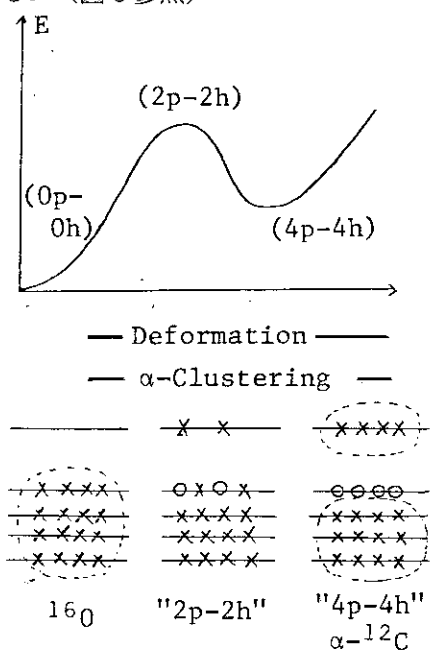


Fig. 3 Schematic picture for the structure changes of ^{16}O due to "4p-4h" excitations or α-clustering

変形模型)では理解しがたい状態である。この 0_2^+ , 2_2^+ 状態は、図に示されている様に ^8Be の基底状態に、又後者は $^8\text{Be}(2^+)$ へも α 崩壊する。斜線は α 崩壊幅が大きいことを示している。また ^{12}C の 0_2^+ と 2_2^+ のエネルギー間隔は ^8Be の 0_1^+ と 2_1^+ とほぼ同じ程度である。 α 崩壊幅とエネルギー準位間隔の理論分析で、そして現在では微視的 3 体クラスター模型による分析で、2 つの状態 (0_2^+ と 2_2^+) は、まぎれもなく 3 α クラスター状態であること、またこの配位は、直線配位でなく、それも含み 3 角形状が主である“ゆるやかに結合した”状態であるとされている。即ち、ここに一つの 3 体クラスター状態の典型例をみることができる。 $^{12}\text{C}(\alpha, ^8\text{Be})^8\text{Be}$ 反応で見出された ^{16}O の励起準位の内に、 ^8Be 崩壊部分幅のかなり大きい回転帯 $K^\pi = 0^+$ がある。

16.8 MeV からはじまるこの回転準位の慣性能率は非常に大きい。その大きさは、4 α 鎖状構造として、はじめて説明のつく大きさのものである。4 α 崩壊シキイ値近くに出現していることも、他の例と同様な状況にある。 ^8Be 崩壊部分幅、全幅の分析からは、4 α 鎖状構造の想定と矛盾する結果はでていない。実験的に多重にチェックされ難く、その確定は未定のまま残されている。

敷居値則と Ikeda 図; 上述した多様な分子的 (クラスター) 構造をもつ状態の出現と、その出現の様相に根拠をおいて、原子核の分子的構造とその構造変化に関する一つのまとまった考えを図式化したのが、Ikeda 図と呼ばれているもので、その図の基底には、敷居値則といわれるものがある。図 5 には α クラスターを基準単位とし、上限には α クラスターに全部が解離した $n\alpha$ クラスターの集合が示されている。側には基底状態からの $n\alpha$ への分離エネルギーが記されている。下限の斜に並んでいるのは、4 N 核の基底状態の構造に対応したものである。その中間には、種々のクラスター単位に分離した配位が画かれており、数値は、その単位への分離エネルギーである。

敷居値則は、分子的構造の出現の規則性に関するもので、「n 核のクラスター C_i ($i = 1 \sim n$) よりなる $C_1 + C_2 + \dots + C_n$ のクラスター (分子的) 構造状態が出現するとするならば、それは、その n 核の構成クラスターへの分裂敷居エネルギー値の近傍又はそれより高い励起エネルギーであって、その領域の上限は、ポテンシャル障壁によって準束縛状態が構成されるところである。」という内容である。その理由を簡単に述べる。

原子核の様な強い相互作用の働く多体系で空間的な局在を許す様な分子的構造が現われるとするならば、それは種々の要因が働いた結果である。もしクラスター間力が強すぎるならば、クラスターは互いにその空間的な局在性を保つことができなくなり、クラスターは相互に融け合い、通

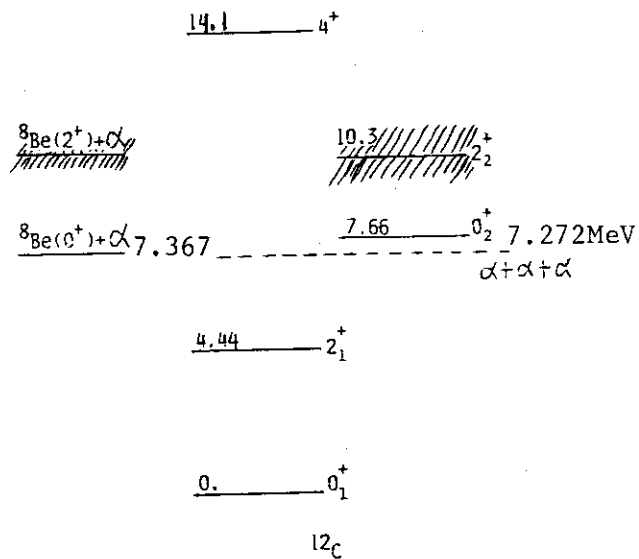


Fig. 4 Energy spectra of two rotational bands in ^{12}C , where the excitation energies (MeV) and spins with parities are written. The relevant thresholds are also drawn.

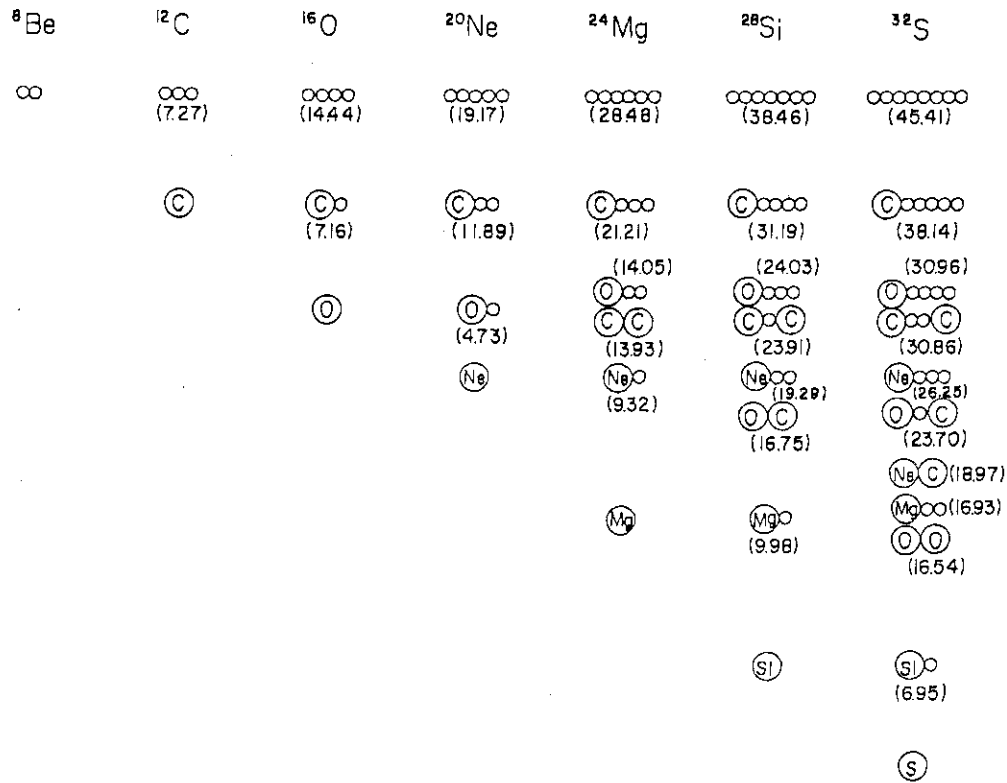


Fig. 5 The Ikeda diagram which shows the subunits of the possible molecule-like structures expected to appear near the respective threshold energies for the break-up into subunit nuclei. The threshold energies are written in parentheses.

常の飽和性を有する構造になる。それ故、分子的構造が出現するには、相互作用は、有効的に弱くなくてはならない。クラスター間力が弱く、かつ構成クラスターが相互作用している際にもその安定さを保てるならば、クラスター間に働く Pauli 原理の効果は、相互に強く重なりあうことを防ぐ斥力芯となって機能する。その機能は相互融合を防ぐ。この様な意味合いで、構成クラスターが互いにかつかつ束縛又準束縛される程度の状態として平均的に離れている場合においてのみクラスター（分子的）状態が形成される。それ故、敷居値則は分子的構造の状態形成の必要な条件として要請されるわけである。既に述べた例の現実に同定されている発達したクラスター状態は、ポテンシャル障壁によってかつかつ束縛されている場合が多い。又敷居値則の例外はない。

図4は又次の様に見做す事もできる。エネルギーの下限にある殻模型的な一中心場に密になっている構造から、励起エネルギーの上昇につれて構造変化を起し、種々の分子的構造を経由して、上限の全ての α クラスターに解離した状態に致るとする構造変化図であると。図4は $4n$ 核の場合を示すが、更に小さな単位又これ以外の非 $4n$ 核の分子的構造の変化にも敷衍することもできる。これにより、軽い核での励起状態にある秩序だった構造へと変化する道筋の大略を予想するものとなった。

この構造変化の規則性を、原子核の密度とエネルギーの飽和性という基本的な一般に成りたつ性質と関係づけて理解することは重要である。上記の構造変化の規則性は、より小単位の安定な原子核への分割である。飽和性は、この分割が“大きなエネルギーの入力を必要とせずにおこりうる”ことを意味する。可分性の視点からすれば、分子的構造の形成はエネルギー的に無理の少

ない自然な構造ともいえる。特に α クラスターはじめ、 ^{12}C , ^{16}O 等の $4n$ 核への分割がエネルギー的に最も容易であり、分割の敷居値エネルギーが極めて低い値をとることが特徴的である。このことは低エネルギー領域での分子的構造の出現を意味している。実際にも $N=Z$ の $4n$ 核からなる分子的構造は基底状態近傍の低励起エネルギー領域から出現している。

低エネルギー領域においての分子的構造の出現は、先づは原子核の構造を考える際に分子的構造は、殻構造の並んで重要であることを意味し、また、準位密度の小さいエネルギー領域であるが故に、純度の高い構造として分子的構造が出現する可能性があることを意味している。 ^{12}C では、第2励起状態に、 ^{16}O では第1励起状態に出現している。この様な、原子核の基本的性質である飽和性と強く結びついてあらわれる分子的構造の状態であるが故に、その発現を“飽和性の動力学的な発現”解することもできる。

以上の様な一般的な視点と展望をもって、その後の研究は展開された。この基本的な観点の形成とその形成に必要な仕事についてのまとめは、1972年のRef.1)の総合報告にまとめられている。その基本的部分の一部を、この第II章では紹介したことになる。それ以後、特に微視的、半微視的クラスター模型を一般的手法で取扱うことが現実的に可能となり、研究は進展した。特に、i) クラスターの複合粒子性によるPauli原理の効果を正確に又正当に取り組み、ii) クラスター間相対運動を動的に取扱うこと、iii) クラスター内部励起とクラスター間相対運動との結合を正当に取り扱うこと等が必要となっている。これら手法の開発と並行して具体的な研究課題が進展した。III章は、用いられた微視的クラスター模型について簡単な紹介を、大筋についてのみ行う。IV章は、研究の成果の一部を、特にこの章での話と関連させまとめた。III章は“微視的クラスター間相対運動とクラスター間相互作用”に関する総合報告”(Ref.2)に拠っており、IV章は、70年代の研究をまとめた総合報告“軽い核の包括的研究”に拠っている。詳しい内容及び文献はそれらを参考にさせていただきたい。

III. クラスター間相対運動を取扱う模型

総称して、広義の微視的クラスター模型ともいえるが、現在用いられている主な手法、i) 共鳴群法 (Resonating Group Method) と ii) 生成座標法 (Generator Coordinate Method) についての概略を紹介し、これらの方法で取扱われるクラスター模型空間が、iii) 殻模型空間を有効的に包含していること、又 Pauli 原理の重要な部分を取り入れた。iv) 半微視的模型 (直交条件模型) について触れる。

i) 共鳴群法 (略称 RGM) ; クラスター間相対運動の微視的記述として最も早く、1937年 Wheeler によって Resonating Group Method として提唱された。これは原子核を $C_1 + C_2 + \dots + C_n$ の n 個のクラスターに分解し、それに対して

$$\psi_c = A \left\{ \chi_c(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{\xi}_n) \phi(c_1) \dots \phi(c_n) \right\} \quad (1)$$

の形の波動関数を用いる。 $\phi(c_i)$ はクラスター c_i の内部状態を記述するもので、通常は模型波

動関数（多くは調和振動子型）で与える。 $X(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_n)$ は $(n-1)$ ケのクラスター間相対座標 $\vec{\xi}_i$ による相対波動関数である。一般の波動関数は、クラスター分解の仕方や、クラスターのスピンの結合の仕方による種々の異なるチャンネル C の波動関数の一次結合をとって、

$$\Psi = \sum_C \omega_C \Psi_C \quad (2)$$

となる。これを、与えられた微視的ハミルトニアンの下での Schrödinger 方程式から出発して得た方程式—それは各チャンネル相対波動関数 X_C と一次結合の係数 ω_C をきめる方程式—によって解きあげることとなる。結合状態は勿論のことであるが、散乱解についても、 $\vec{\xi}_i$ が実座標なので、境界条件がつけ易い利点をもつ。

この枠組の下で、微視的 α クラスター模型が 1950 年代 Wildermuth らによって提唱され、その後主として p 殻核初頭 (He, Li, Be 核等) の極めて軽い核に、この方法は盛んに適用され成果を挙げて来た。前述した ${}^8\text{Be}$ の $\alpha + \alpha$ 模型による研究もこの方法に拠っている。

この方法は、しかし、核子の全反対称化 (A) の演算のもとで内部座標と相対座標とを分離して計算するという極めて複雑困難な取扱い法であるため、更に大きな質量数での使用には適さず、その広い重い質量数の核領域への適用はなされなかった。その後、次に述べる生成座標法の導入と、その併用により、計算上の基本的困難が解決されるに及んで、現在では、直接的に、近似的に、又 RGM 方程式の含む内容を分析しつつ、盛んに用いられるに至っている。前述した例においても、 ${}^{20}\text{Ne}$ の二体 $\alpha + {}^{16}\text{O}$ 模型や ${}^{12}\text{C}$ の 3 α 模型での RGM による分析がなされ、非常に重要な成果と研究の進展の一段階を画するにいたった。また重核同士 ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$ 系をはじめ、その適用がなされ研究が進展し成果を生み出している。

ii) 生成座標法 (略称 GCM); クラスター間相対運動を取扱うもう一つの方法として、生成座標法 (Generator Coordinate Method) がある。これも、Wheeler らによって提案されたものである。核分裂の微視的記述の際に提案され、その後、原子核の集団運動の記述に適用されている。これは、集団運動の記述に適したパラメーターをもつ模型波動関数を設定し、パラメーターの種々の値 (連続又は不連続値) に関する一次結合 (一般に積分) し、その一次結合の振巾をエネルギー変分より得られる方程式 (Griffin—Hill—Wheeler 方程式) で決定する方法である。この一般的手法を多中心のクラスター模型波動関数 (Margenau の提案した) に対して、用いようとしたのが、Bloch や Brink の考えであり、Brink は前述の ${}^{16}\text{O}^* 4p - 4h$ 状態を、多中心の微視的 α クラスター模型波動関数を基底にして、この方法を適用している。

この生成座標による波動関数は、前述の(1)式の Ψ_C に対応して、

$$\phi_C = \int d\vec{S}_1 d\vec{S}_2 \dots d\vec{S}_{n-1} f(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_{n-1}) \times A \left\{ \phi(C_1, \vec{R}_1) \dots \phi(C_n, \vec{R}_n) \right\} \quad (3)$$

で与えられる。ここで、 $\phi(C_i, \vec{R}_i)$ は、パラメーター \vec{R}_i の位置のまわりのクラスター C_i の殻模型波動関数で、従って内部座標の他にクラスターの重心座標も含んでいる。パラメーター \vec{R}_i は n ケの独立座標パラメーターであるが、全体の重心座標パラメーターは、重心運動の期待値が

零になる様に進ぶと、独立なパラメーターの個数は、クラスター相対座標に対応する $(n-1)$ 個の独立な座標パラメーター \vec{S}_i が残される。ここでは、

$$\Psi(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_{n-1}) = A \left\{ \phi(C_1, \vec{R}_1) \cdots \phi(C_n, \vec{R}_n) \right\} \quad (4)$$

から、重心運動の波動関数は分離され、従って、(3)の Φ_c は、重心運動の Spurious (偽の) 励起を含まないものと仮定しておく。 $f(\vec{S}_1 \cdots \vec{S}_{n-1})$ が、変分方程式から決められる振巾である。

$\phi(C_i, \vec{R}_i)$ はクラスター C_i の殻模型波動関数であり、Slater 行列式の有限個の一次結合である。そのため $\Psi(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_{n-1})$ も又有限個の一次結合となる。各々の Slater 行列式の中での、異なるクラスターの単一粒子波動関数は、非直交であるが、いづれにせよ、Slater 行列式による多体系の記述であるために、RGM に比べて、諸々の計算は著しく簡単になり、大きな質量数の系に対しても、多クラスター系に対しても、クラスター間相対運動の微視的な取扱いによる具体的研究が、実行可能となったわけである。

GCM は、上記の利点の他に、原子核多体系の集団運動研究の中で育成された諸概念と結びついた視点や理解を与える利点がある。又直観的な描像、殻模型、分子軌道模型等々と結びつきが明瞭であることも利点として副えられる。しかし実座標でないため、量子多体系固有の困難があらわれたり、(例えば $f(\vec{S}_1 \cdots \vec{S}_{n-1})$ の振舞いが素直なものなくなる。) 又散乱境界条件の附し方の困難さがあらわれたりする。この欠点は、RGM の場合には、あらわれないため、両者を結合して実際の問題に対応することが重要となる。このことを保証したのが、GCM と RGM の同等性の関係である。

iii) GCM と RGM の同等性; 即ち(1)及び(3)の両者の波動関数は、等価であり、RGM の相対波動関数 $X(\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_{n-1})$ と GCM の一次結合振巾関数 $f(S_1, \dots, S_{n-1})$ は積分変換によって相互に変換し得る関係がある。(Ref. 2 の Chap. III, IV, V にはその同等性、及びその関係を用いての一般的かつ具体的な応用法のいくつかが詳しく述べられている。)ここでは、最も簡単な場合、スピン零の2体クラスター系で、クラスターの殻模型波動関数が同じ拡がりをもつ調和振動子型の場合について紹介しておこう。

調和振動子型の殻模型波動関数 $\Psi(C_i; \vec{R}_i)$ は内部座標だけの波動関数 $\phi(C_i)$ とクラスター重心の(OS)波動関数 $\phi(\vec{X}_i; \vec{R}_i)$ の積に分離される。この分離された2つのクラスター重心部分の波動関数の積は、又全体の重心部分 $\phi_0(\vec{X}_0)$ と相対部分 $\Gamma(\vec{\xi} - \vec{S})$ の積であらわされる。以上を式で書くと、

$$\begin{aligned} \Psi(C_i; \vec{R}_i) &= \phi(C_i) \phi(\vec{X}_i; \vec{R}_i) \quad (i=1, 2) \\ \phi(\vec{X}_1; \vec{R}_1) \phi(\vec{X}_2; \vec{R}_2) &= \Gamma(\vec{\xi} - \vec{S}; r) \phi_0(\vec{X}_0) \\ \phi(\vec{X}_i; \vec{R}_i) &= \left(\frac{2A_i \nu}{\pi} \right)^{3/4} e^{-A_i \nu (\vec{X}_i - \vec{R}_i)^2} \\ \Gamma(\vec{\xi} - \vec{S}) &= \left(\frac{2\gamma}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\gamma (\vec{\xi} - \vec{S})^2} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\phi_0(\vec{X}_G) = \left(\frac{2(A_1 + A_2)}{\pi} \right) e^{-(A_1 + A_2) \nu X_G^2}$$

ここで、 $\xi = \vec{X}_1 - \vec{X}_2$, $\vec{X}_G = (A_1 \vec{X}_1 + A_2 \vec{X}_2) / (A_1 + A_2)$ なる実座標の相対及び重心座標をあらわし、座標パラメーターは $\vec{S} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$, $R_G = (A_1 \vec{R}_1 + A_2 \vec{R}_2) / (A_1 + A_2) = 0$ とあらわされている。A_i は C_i クラスタ質量数 (1) の RGM 波動関数に同じ重心波動関数 ϕ_0 を掛けると、

$$\tilde{\Psi}_{\text{RGM}} = A \left\{ \phi(C_1) \phi(C_2) X(\xi) \phi_0 \right\} \quad (6)$$

となり、GCM 波動関数は

$$\Psi_{\text{GCM}} = \int A \left\{ \phi(C_1) \phi(C_2) \Gamma(\vec{\xi} - \vec{S}) \phi_0 f(\vec{S}) d\vec{S} \right\} \quad (7)$$

となる故両者は

$$X(\xi) = \int \Gamma(\vec{\xi} - \vec{S}) f(\vec{S}) d\vec{S} \quad (8)$$

によって結ばれる。この逆変換は存在し、例えば

$$\begin{aligned} f(\vec{S}) &= \int \Gamma^{-1}(\vec{S} - \vec{\xi}) X(\xi) d\xi \\ \Gamma^{-1}(\vec{S} - \vec{\xi}) &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d\vec{k} \\ & e^{-i\vec{k}(\vec{S} - \vec{\xi})} \left[\left(\frac{\gamma}{2\pi} \right)^{3/4} e^{\frac{\mathbf{k}^2}{4\gamma}} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

で与えられる。

ここで示した様な関係を用いると、GCM からクラスター間相対運動の情報が容易に引き出せることとなり、散乱問題も同じ土俵で取組めることとなる。具体的には GCM で諸計算を行うことから出発するのであるが、途中で、又最後に積分変換を施して、RGM 方程式の諸量を得ることになる。この意味で、RGM は GCM と同様に広い領域で適用可能なる微視的枠組であるといえ、クラスター模型の枠組の内では両者は、実質的に区別されない同等な内容の表示法として用いられている。

IV) 殻模型空間との関係

クラスター (分子的) 構造状態の低エネルギー領域での実現ということを理論的に示すには、殻模型構造とクラスター構造の両者を表現するに必要な模型空間での研究が要求される。両者の構造を十分に表現するだけの模型空間が用意されれば良いのであるが、模型である以上、多少枝葉を落した模型空間に限定せざるを得ない。上述したクラスター模型では、良く発達したクラスター (分子的) 構造を表現することは十分できるのであるが、殻模型空間を有効的に含んでいるかが問題となる。ここで有効的とは、低エネルギー領域で実現している殻模型状態を有効的に表

現しうるという意味である。

RGM で表わされる波動関数と殻模型波動関数との相互関係は 1950年代の終りころから Perrin-Skyrme, Witdermuth はじめ日本では Horie 等によって調べられた。結果は、RGM 波動関数で、最もクラスター間の重なりが強い状態—具体的には、調和振動子型模型波動関数では相対運動部分が Pauli 原理で禁止されないもっとも小さい主量子数をもつ調和振動子型波動関数で表現される状態—は、殻模型波動関数、詳しくは SU_3 模型波動関数と等価であることが理解された。 SU_3 模型は、軽い核の殻模型状態の記述にかなり良い模型であることがわかっている。それ故 RGM の模型空間に含まれている殻模型波動関数は、殻模型状態を記述に必要な範囲のものといえる。

研究の進展と共に、2体クラスター系でもクラスター内部励起を取扱ったり、クラスターの組み替えチャンネル結合を取扱ったり、更に3体クラスター系の扱いも行なわれる様になった。このようにクラスター系の取扱い範囲の拡張は、又殻模型空間の範囲の拡張になっている。具体的に調べることににより、殻模型的状态の記述について重要なもの(主な成分殆んどすべて)が、RGM で取扱うチャンネルを少し増加させることなどでおおわれることが明らかにされて来た。

極度に単純な例を挙げるならば、 ${}^8\text{Be} = \alpha + \alpha$ での殻模型極限は $(0s)^4(0p_z)^4 SU_3(40)$ であり、クラスター間距離が有限の場合は $\{g\}^4\{u\}^4$ となること、又 ${}^{12}\text{C}$ の 3α 模型では極限として、 $(0s)^4(0p_x)^4(0p_y)^4$ の $SU_3(04)$ なる基底回転帯の主成分を含むなど枚挙にいとまがない。付け加えるならば、微視的 α クラスター模型で、張られる殻模型空間は $\{4.4 \dots\}$ の対称性の最も良い空間全部をおおうこと、そしてクラスターを更に分解するならば、次々と対称性の劣る状態空間もおおわれることである。

この結果、RGM (GCM) の取扱いの発展は、単に、大きい質量数の系、複雑なクラスター配位の系の微視的記述を可能にしたということにとどまらず、II で展望した様な、原子核の分子的構造の基本問題である構造変化の研究も大きく飛躍させることになった。

V) 直交条件模型 (OCM); 微視的取扱いの進展は、研究の基礎を確かなものとし、分子的構造変化の研究を、核子間有効相互作用と関連させながら展開する道を拓いた。他方、軽い核の重イオン反応をはじめとする実験により、高い励起状態までの核分光学的情報は増加し、異なる質の構造に対応する情報をも、もたらすこととなった。この状況に対応して、微視的取扱いのある基本要素のみを取りあげ、他の多くを半現象論的に取扱う模型が必要とされた。直交条件模型 (Orthogonality Condition Model) は、その一つで、微視的取扱い (RGM) のある基本要素をそのまま持込むことで、RGM の近似的取扱いとなっていると共に、結合項を含むポテンシャル項が半現象論的に取扱われるという意味で、一つの模型ともなっている。この模型は、 $\alpha + \alpha$ 系を微視的に取扱う過程で、考案されたものである。以下、その模型の理解にとって必要な“禁止状態”を説明し、模型それ自身の説明を与える。

$\alpha + \alpha$ の二体クラスター系を考えた場合、RGM 波動関数は、 $A \{X(\vec{\xi}) \phi(\alpha) \phi(\alpha)\}$ の形をしているが、 $\phi(\alpha)$ に調和振動子型のものをとると、 $X(\vec{\xi})$ に対して、禁止状態といわれるものが存在する。禁止状態 $X_F(\vec{\xi})$ は $A \{X_F(\vec{\xi}) \phi(\alpha) \phi(\alpha)\} = 0$ として定義されるものである。具体的に述べてみよう。 ${}^8\text{Be}$ の基底状態を調和振動子型殻模型で考えるならば、その配位は、

$(0s)^4(0p)^4$ となる。原子核は、二種のフェルミオンである陽子と中性子の核子から成り立っているため、同じ状態には4ケの核子しか入れないためである。仮りに $(0s)^8$ 又 $(0s)^6(0p)^2$ の配位の状態は、Pauli原理の排他律のために禁止される。この様な配位の殻模型波動関数を $A\phi^{8-N}(0s)\phi^N(0p)$ であらわし、これを内部座標と相対座標とに分解したRGM型の波動関数は $A\{u_N(\vec{\xi})\phi(\alpha)\phi(\alpha)\phi_0(R_0)\}$ となる。重心部分 $\phi_0(R_0)$ を除けば

$$A\left\{u_N(\vec{\xi})\phi(\alpha)\phi(\alpha)\right\} = \begin{cases} 0 & N = 0, 2 \\ \neq 0 & N = 4 \end{cases} \quad (10)$$

となる。ここでの $u_N(\xi)$ はその主量子数 $N(=2n+1)$ をもつ調和振動子型波動関数である。即ち $N=0, 2$ の上記例は禁止状態と呼ばれるものに外ならない。この様な禁止状態の存在は、RGMの枠組で見れば、その相対波動関数 $X(\vec{\xi})$ のある部分成分が禁止(除外)されることとして表現される。他言すれば、禁止状態の関数空間と直交する空間のみで、RGMの相対波動関数は表現されることを意味する。

この禁止状態への直交性は、相対波動関数においては、相対距離の小さいところで、禁止状態の数に対応するnodeをもって振動することとなってあらわれる。この内部振動は、その起源からして、散乱エネルギーに依存せず安定していると考えられる。 $\alpha + \alpha$ 系では実際にそうになっており、散乱状態の波動関数の変化は、内部振動の最外nodeの外の振舞いに支配される。これは丁度 i) 最外nodeの内部を斥力芯とし、その外側に ii) 弱い引力効果をもつポテンシャル問題を取扱うことに類似している。Tamagaki-Tanaka と Okai-Park は、この安定した内部振動の存在が、 $\alpha + \alpha$ 散乱が斥力芯を持つポテンシャルで良く表現されることの微視的理論的根拠であることを示したのである。(この意味で、構造を持つ複合粒子間にあらわれる斥力芯を“構造的斥力芯”と呼んでいる。)

Pauliの排他原理に起因する禁止状態の存在と内部振動の存在は2体クラスター系に限らず、多体クラスター系にも共通で、かつクラスターが近寄った際の相互作用の性質を規定する重要要素である。RGM方程式にはPauli排他原理の効果を全面的に組込んだ、複雑な非局所性をもつ相互作用があらわれる。しかし上記の $\alpha + \alpha$ 系の理解は、クラスター間相互作用の非局所性の大部分は、禁止状態への直交性を表現するために存在することを予想させるものであった。Saitoは、その考えを推し進めて、非局所的相互作用は、直交性の要請を表わす非局所性(これは規格積分核 $(1 - \hat{K})$)であらわされる。)部分と局所的相互作用 $V_{\text{eff}}(\xi)$ に分解できる型で表現されるとし、次の様な簡明な方程式を導き出した。

$$A\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\xi}^2 + V_{\text{eff}}(\xi) - E\right)A\tilde{X}(\xi) = 0 \quad (11)$$

ここで、 A は禁止状態を排除する射影演算子である。又 $\tilde{X}(\xi)$ はRGMの $X(\xi)$ に規格化積分の分だけ異っており、 $\tilde{X}(\xi) = (1 - \hat{K})^{1/2}X(\xi)$ の関係にある。この方程式がRGMの良い近似解を与えるかどうかは、実際いくつかの軽いクラスターからなる系で確かめられている。

しかし、重い核クラスターのみからなる系に於ては、良い近似の解を与えるとは必ずしも云えず、検討課題の一つである。

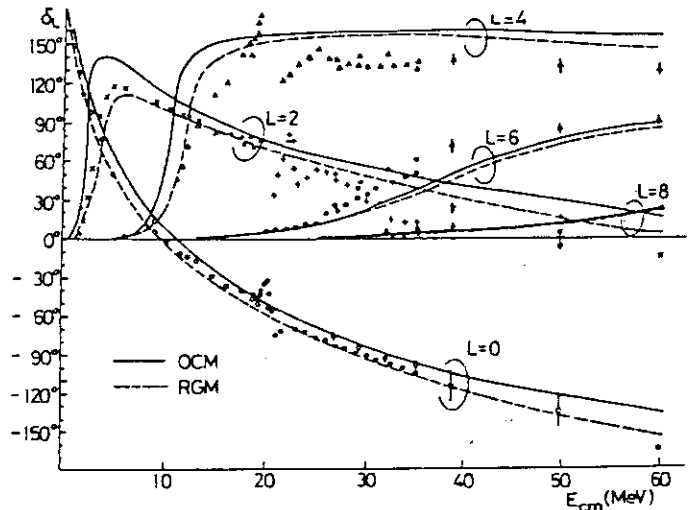


Fig. 6 α - α scattering phase shifts calculated by the RGM and OCM with the use of modified-NH force in comparison with experimental data.

直交条件模型は、禁止状態を除外するという手続きを加える以外は、クラスター系の相對運動に対しての、チャネル結合を含む二体又は多体のポテンシャル模型となっている。また取扱いの簡便さと、実験的に得られたパラメーターを用いることができる枠組になっている。これまで単一チャネルの2体系から、チャネル結合の2体系及び3体系に拡張、適用されて来ており、成果を挙げて来た。今後も微視的模型での研究の展開と相まって、大いに活用されるものと考えられる。

N. クラスター模型による研究とその特徴

微視的、半微視的模型による研究が、その手法の開発と共に1970年代に進められて来たのであるが、その研究の具体的成果については、Ref.3) (又一部はRef.1)) を見ていただくとして、ここでは、研究の特徴を中心にして、例を示し説明する。

クラスター模型による研究は、低エネルギー領域から、より高い励起エネルギー領域へと積みあげられて来ており、クラスターの種類も α や ^{16}O といった二重閉殻核から、一方ではn,d,t等の小さいクラスター単位、又変形核 ^{12}C や他のp殻核(^{14}N , ^{15}O 等)、更に重閉殻核の ^{40}Ca 等への軽重核などの多様な単位が取扱われている。

以上のような、核クラスターを単位として、単純な単一チャネルから一般のチャネル結合の2体クラスター系や、3体をはじめとする多体クラスター系等の複雑な系の研究へと、多岐、多様化して来ている。この種のクラスター系の研究は、基底近傍に限られず、崩壊シキイ値近傍の状態に及んでいるため、束縛状態のみならず、準束縛又共鳴状態等も取扱われ、それらの状態に於け

る構造面に関する研究が主となる。しかし励起エネルギーの上昇と共に散乱状態をもあわせて研究が進められもしている。それと共に、これらに共通してその基礎の一つともなるクラスター間相互作用に関する研究が並行して進められている。

ここでは、クラスター研究の基礎ともいえる α 核 ($N=Z$ の $4n$ 核) を対象とした研究のいくつかの特徴について簡単に紹介する。1970年代の前半から、 α 核の分子的(クラスター)構造の研究は、前記Ⅲ)の微視的、半微視的模型により、具体的かつ定量的に進められた。Ⅱ)で示した、クラスター状態の典型例のあらわれる ^{12}C 、 ^{16}O 、 ^{20}Ne の研究は、 ^{20}Ne は $\alpha+^{16}\text{O}$ 模型で ^{16}O は $\alpha+^{12}\text{C}$ 模型で、又 ^{12}C は3 α 模型で、進められた。これらの研究を足場にして、 ^{24}Mg では $^{16}\text{O}+\alpha+\alpha$ 模型、 $^{20}\text{C}+^8\text{Be}$ 模型や $^{12}\text{C}+2\alpha$ 模型、 ^{16}O では4 α 模型による研究が加わって来た。そして ^{24}Mg 系では更に $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ 模型研究も発展をみせており、高励起エネルギーの分子的共鳴領域へのクラスター模型研究の道が拓かれつつある。

これまでの微視的、半微視的模型による研究の結果の特徴と理解をいくつかの項目としてまとめておこう。

(i) 成長した分子的(クラスター)構造の同定; 既にⅡ)に於て指摘した様に ^8Be 以外に ^{12}C 、 ^{16}O 及び ^{20}Ne の $4n$ 核では発達したクラスター状態が低い励起状態に存在する。殻模型では説明できぬが、しかしクラスター模型では素直に説明しうるこれらの状態を、具体的定量的に同定しえた。それと共にいくつかの成長したクラスター状態が導き出された。これら予想された準束縛状態は、あるものは実験の結果と良い一致を示し、又あるものは傍証が得られたりしている。発達した分子的(クラスター)状態として同定化された状態を列挙する。 ^{20}Ne の $^{16}\text{O}-\alpha$ 構造状態の(5.784 MeV $1\bar{1}$ の上)の $K^\pi=0^-$ 回転帯と更に相対波動関数のnodeの数の1つ多いhigher nodal state (~ 8.3 MeV $0\bar{4}$)の上の $K^\pi=0^+$ 回転帯である。 ^{12}C の3 α 構造状態は予想通りに“ゆるく結合した3体クラスター状態として、第2励起 $0\bar{2}$ (7.66 MeV)状態とその上の $2\bar{2}$ (10.3 MeV)状態が同定化されている。これらは $^8\text{Be}(\alpha-\alpha)$ の 0^+ 、 2^+ にもう一つの α が弱結合しているかの振舞いをする。 ^{16}O の場合は $^{12}\text{C}-\alpha$ の弱結合状態である。 ^{12}C の基底状態クラスターと α クラスターとの分子的状態として、(6.05 MeV $0\bar{2}$ 上)の $K^\pi=0^+$ と(9.63 MeV $1\bar{2}$ 上)の $K^\pi=0^-$ 回転帯は、それにあたり、半微視的模型は実験を良く再現している。更に多くの弱結合(^{12}C の回転運動(0^+ 、 2^+ 、 4^+)と相運動との)状態の存在が予想されていたが、それらが確かめられることとなった。図7に示している(2)の $0^+ \times J$ が上記 $K^\pi=0^+$ で他は $2^+ \times (J=0, 1, 2, 4)$ の状態である。

(ii) 殻構造と分子的構造の構造変化; 原子核の低い励起エネルギー領域の状態は、殻模型で、素直に説明されうる準位と、説明に困難な準位とが入りまじっている。後者の典型例のほとんど全部がクラスター模型の立場から素直に説明しうる事が研究の進展で明らかとなって来た。この事は、低い励起状態で軽い核の基本的構造として、殻構造と共に、分子的構造を考えねばならないことを示す。Ⅱ)の構造変化図(Ikeda 図)の考えを肯定するものである。それと共に、我々は低い励起準位の構造を理解するに、両者の構造の相互の変化の様子を、具体的研究を通じて明らかにすることが必要とされた。研究結果は、個々の核での“構造の変化の具体的様相”を認識させるものとなった。3つの核 ^{12}C 、 ^{16}O 、 ^{20}Ne のいずれをも、その現われ方は異なり、多様性に富んでいることもわかって来た。(以下参照)

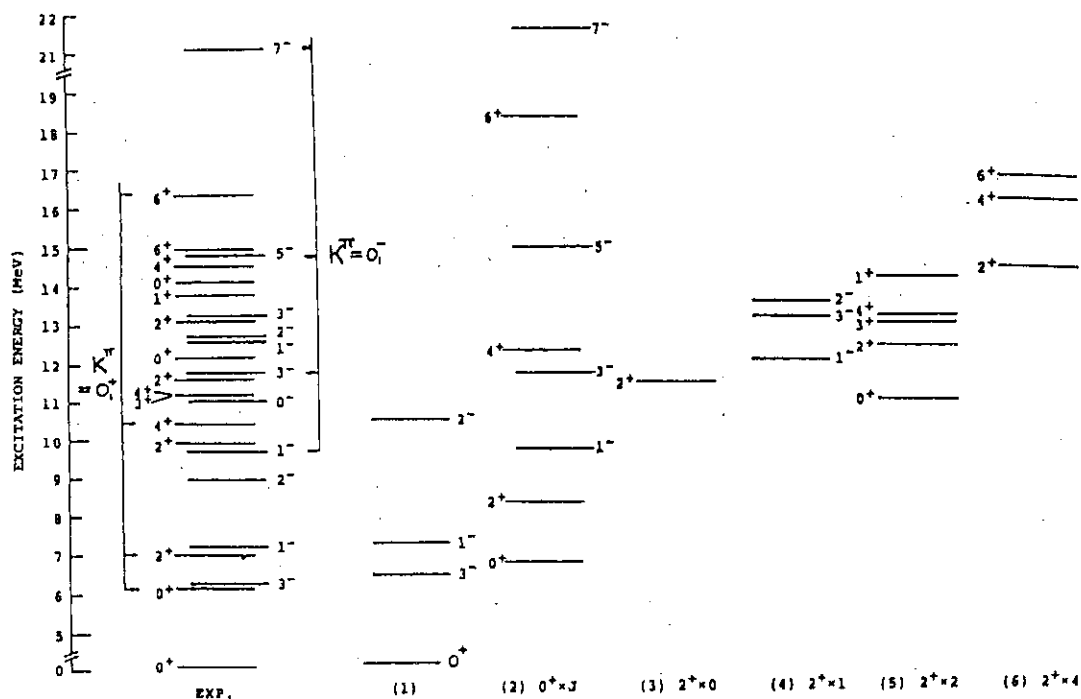


Fig. 7 Classification of the calculated energy levels of ^{16}O .
The experimental spectra are also shown.

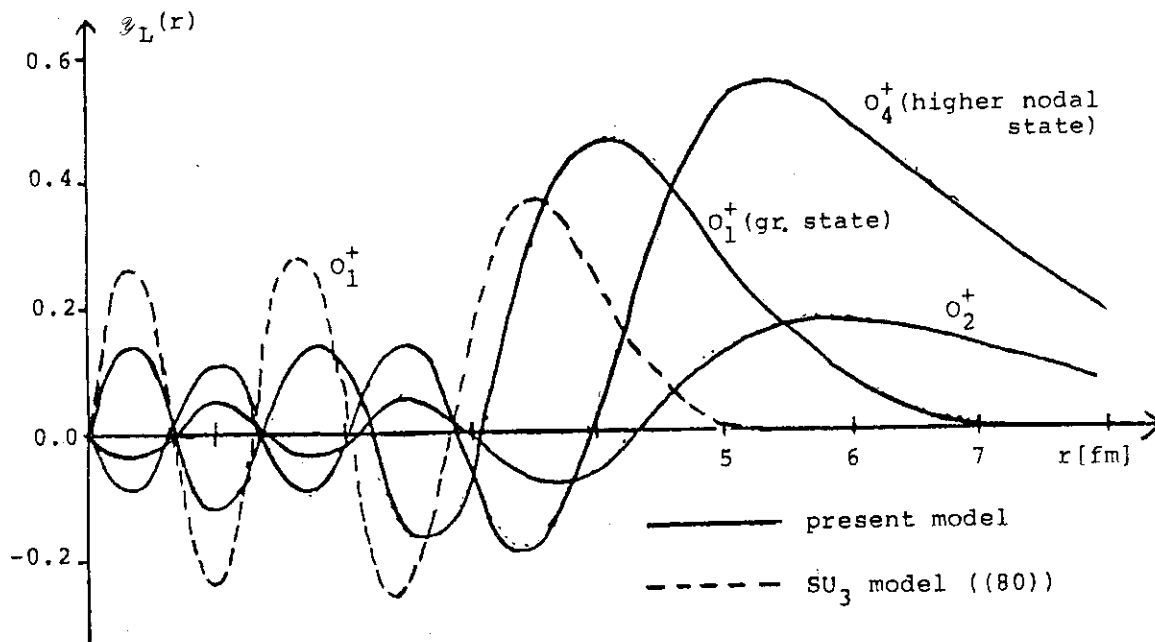


Fig. 8 Reduced width amplitudes for O_1^+ , O_2^+ and O_4^+ state of ^{20}Ne obtained by 5α (quasi-" $\alpha + ^{16}\text{O}$ ") model

(iii) 異なる構造間の相互の結合と浸透; ^{20}Ne においては、基底回転帯の他に higher nodal band O_4^+ , 2_4^+ が存在する。殻模型 (SU₃ 模型) で考えると、基底状態は、 ^{16}O の外の (sd) 殻に 4ヶ同

じ単一粒子状態であるが、一軸方向に伸びた粒子状態に入った配位 $(sd)^4 [4] SU_3(8,0)$ の状態である。 $\alpha + {}^{16}O$ 模型はこの配位状態を含み、かつそれを初項とし SU_3 での $(10,0)(12,0)(14,0)$ とつづく状態の重ね合わせの状態と(重心運動部分を除去すれば)等価である。得られた結果は、(80) が主成分であるが、高い(N0)状態を多く含んだものであり、 α -クラスターの局在化への偏極を強くもったものになっている。図8に、その様相を示すために、次の式で表わされる α -reduced width amplitude の関数

$$Y_L(r) = \sqrt{\binom{20}{4}} \cdot r \cdot \langle \phi_\alpha \phi_{{}^{16}O} \mathcal{Y}_L(\hat{r}) | \Psi_L({}^{20}Ne) \rangle \quad (12)$$

を与えておく。 r は $\alpha + {}^{16}O$ 間相対距離座標で、 $\mathcal{Y}_L(r)$ は、考えている ${}^{20}Ne$ の状態 Ψ_L の中に距離 r の位置にある $\alpha - {}^{16}O$ 構造の振巾をあらわしている。殻模型 ($SU_3, (80)$) と比した場合、基底状態の内部振動振巾は、大きく減じ、最外 node の外の振巾は、増加し外へ張り出していることを見る。ここでは、直接的な殻構造と $\alpha - {}^{16}O$ 分子的構造の結合を見る。図8には $0_2^+, 0_4^+$ の計算された、 $\mathcal{Y}_L(r)$ も示されている。higher nodal state 0_4^+ は node が一つ多くなって、外側の振巾が大きくなっていることがわかる。

${}^{20}Ne$ の励起状態には、 $0_2^+ (6.724 \text{ MeV})$ と $0_3^+ (7.191 \text{ MeV})$ の上に回転帯が形成されている。その準位の特徴は、前者が α 移行反応、後者が 8Be 移行反応の核分光学的因子が大きいことである。前者の性質は、 α 崩壊換算巾がかなり大きいことから実験的に確かめられている。これらの状態に対応させられうる殻模型状態は、ただ一つ SU_3 で (42) とされるものである。しかしこの状態の α -reduced width amplitude は $\mathcal{Y}_L(r) = 0$, 即ちもし純粋に(42)とすると α 巾や α -核分光学的因子は零である。しかるにこの状態は、 α -クラスター状態と結合しやすく 0_2^+ に対応させられうる。

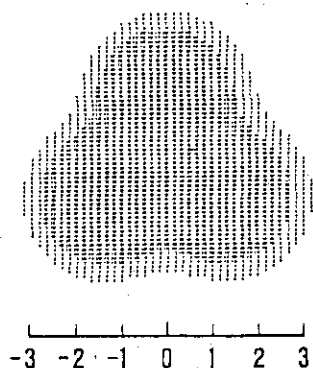
クラスター模型では、この(42)状態は、 α クラスターを崩すか、 ${}^{16}O$ -閉殻を歪めるかすることにより模型空間に含ませうる。 ${}^{16}O$ を4 α クラスター模型(但しクラスター間距離は大きくない)で表現し、歪ませた5 α 模型での計算結果の $\mathcal{Y}_L(r)$ が図8に示してある。 $\mathcal{Y}_L(r)$ を通じて、殻模型状態が、主として higher nodal state と結合していることを続取れる。

更に ${}^{12}C - {}^8Be$ チャネルで表現される模型空間又は ${}^{12}C - 2\alpha$ チャネルのものを組入れることにより、 0_3^+ 回転帯の特徴ある性質は導き出せることが示されている。更にこの模型では、もう少し高いエネルギー領域迄の状態が導かれている。即ち ${}^{20}Ne$ 系では、殻模型的構造・ ${}^{16}O - \alpha$ 的構造、及び ${}^{12}C - {}^8Be({}^{12}C - 2\alpha)$ 的構造の3層的構造の結合が、高くない励起状態で見られ相互に構造が浸透しあっている。

異なる構造が相互に浸透しあっている事は ${}^{12}C, {}^{16}O$ の場合にも見られる。ここでは、基底状態 0_1^+ と、低い励起 0_2^+ 状態(回転帯, ${}^{12}C$ の場合は基底も回転帯)の構造は、判然と異なるにもかかわらず、相互の間の $E0$ 遷移は小さくない値が導け、実験値とよく対応する。印象的にはないが、図9に3 α 模型での ${}^{12}C$ の基底回転帯の内部状態の密度分布を、 SU_3 模型との比較で示しておく。

上記のような、相互の構造の結合と浸透は、微視的(半微視的)クラスター模型の動的取扱いの必然的結果であり、現実の核の状態間にまたがる集団運動的性質のつながりの様相を示すものとなっている。

α -PARTICLE MODEL



SU_3 MODEL

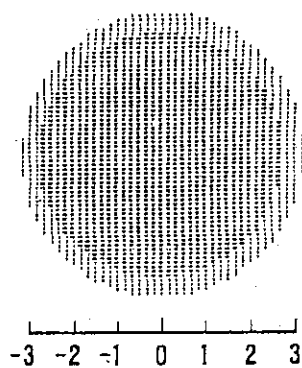


Fig. 9 Mass density distribution for the internal structure of ^{12}C are shown on the plane perpendicular to the symmetry axis

(iv) 構造変化の機構の理解の深化; 「例えば, ^{12}C において基底状態の構造は, 殻模型的な密な構造をもち, 励起状態は 3α のルーズな結合の構造をもつ状態となっている理由は?」との間に正面から答え難いので, 「 $\alpha + \alpha$ の相互作用は $\alpha - \alpha$ 的 2 体クラスター構造の結合エネルギーが零に近いのに, 3α から構成される ^{12}C はその基底状態は, 強く結合し密になり, 再び励起状態に 3α クラスター状態が形成されるのは何故か?」と質問を変えてみる。もし, 図 1 に示した様なポテンシャルで, ^8Be の $\alpha - \alpha$ は, かつかつ結合しているとすると $\langle T \rangle + \langle V \rangle \approx 0$ である。 3α 系で, 同様期待値をとると $2\langle T \rangle + 3\langle V \rangle \approx \langle V \rangle < 0$ となりエネルギーは負が予想される。(運動エネルギーは, 二つの独立な相対座標に対応するもので, $2\langle T \rangle$ であるに対し, 相互作用は, 3つの対になる $3\langle V \rangle$ である。) 2α で均衡の上に成立した“構造芯”は, 3α 系での相互作用引力の増加によって, 均衡が破れ, 芯が融ける。これは, これまで減衰していた内部振動振巾が増加し, 殻模型状態に還元する。勿論, この殻模型状態の結合エネルギーは, 核力から核の結合エネルギーを導く基本問題にあづけられる。内部振巾の大きい殻模型状態が実現したとなると, 励起状態は Pauli 原理での禁止状態の外に, 基底状態との直交条件が加わり, 残りの許される状態空間でエネルギーの低い状態が実現する。殻模型空間では, その様な低いエネルギーの状態はなく,

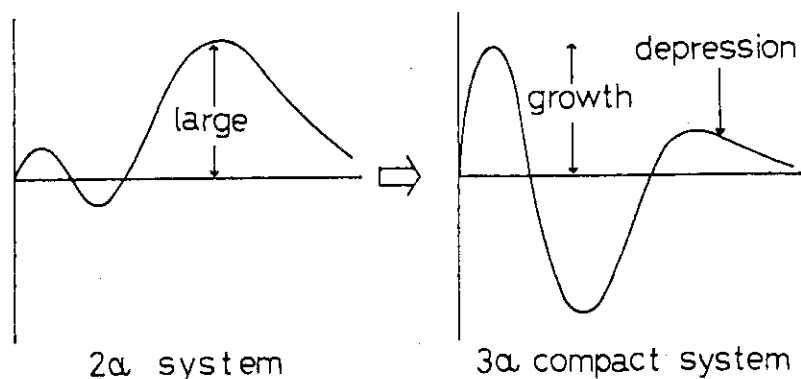


Fig. 10 Schematic picture of growing-up of the inner oscillation from ^8Be gr. state to ^{12}C gr. state

3 α 空間においてかつかつ準束縛が実現された。定量的に裏づけられた以上の説明は、 ^{12}C での構造変化の機構を簡明に表現している様に思われる。(図10参照)。類似の論理は、 ^{16}O 、 ^{20}Ne 等の構造変化の様相についても成立し、自由度の増大と共により複雑な変化を生ずる際の構造変化の理解に資している。

クラスター相対運動の自由度を通して原子核の動的変化を観るという経験及び論理の構築は、今後も増加発展するものと考えられるが、ここでは明確な一例にとどめる。

(v) 分子的構造の広い領域への **persistency**; 上記説明の多くは、4n核の ^8Be 、 ^{12}C 、 ^{16}O 、 ^{20}Ne に材料を採った。ここでの基本骨格は、この領域核全般に適用されうるものである。4n核でも ^{24}Mg 領域、又 $A \leq 24$ の質量数の非4n核を含めた領域においても、その骨組は変わっていないことが明らかにされている。そして、これらの多くの核の、割合高いエネルギー領域(10数 MeV以下)に於て、様相は多種多様であるが、分子的構造とクラスター相関の立場からの理解が進んで来ており、クラスター模型はより高い励起状態での構造研究の大きな柱となって活躍しているといえよう。

V. おわりに

ここでは、主に原子核構造論の局面で、クラスター模型が、殻模型と並んで必要不可欠なものになっているかに力点を置き、説明し論じて来た。これらの研究は、今後も、i) 核子間有効相互作用とクラスター間相互作用の関係の認識。ii) Pauli principleのクラスター系での働きとクラスター間相互作用の関係の認識。iii) 又それらの働く状態空間の様相、特にクラスター(分子的)状態と種々の異なる相の状態群との結合の認識の発展と共に深まっていくものと考えられる。それと共に、a) 軽い核全域を対象とし、クラスター分解の自由度(例えば、 α クラスターの分解の自由度)をも許す枠組での構造論的研究。b) より高いエネルギー領域での多様な分子的構造をもつ状態に関する研究が今後も進展するものと考えられる。前者は、核多体系の中でのクラスター形成と分解の機構を追求する課題を含み、後者はエネルギーの高い領域での分子的状态の発現形態と発現される動的機構が重要な焦点となると思われる。

これらの研究の進展と離れ難く結びついている研究は、核間相互作用の研究である。ここでは、現在達しているクラスター間(一般に核間)相互作用の認識について論じなかった。この方面の研究も、 α クラスター等の軽いクラスターの関係する相互作用の研究だけでなく、 $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ はじめ軽重イオンの内でも重い核同士の相互作用も微視的模型で論じられる様になって来ている。そして前者と後者の間には、質的に相異なる側面が少なからず存在し、 $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 系からはじまるより重い核クラスターによる分子的状态についての理解は、この面からも興味深いものになると考えられる。

軽い核の低い励起状態全域にわたって、クラスター模型が、かなり良い記述を与えた段階で発生する重要な課題の一つは、“クラスター構造の視点を導入しての核反応論”の展開であろう。軽い核を標的核として、入射核としての反応、とりわけクラスター励起を含む反応、クラスター移行反応、組替反応、break up 反応等々を挙げるができる。既にこれらの研究は一部展開されている。今後の軽重イオン反応及び原子核反応論一般の重要な柱となる課題である。

近年、通常の原子核に核子の励起状態やハイペロン (Λ , Σ , Ξ ...) 等、核子以外の言粒子の自由度が加わった核の状態の研究も進んでいる。特に Λ , Σ 等のつけ加わったハイパー核の励起状態の性質が漸次、軽い核で知られて来ている。ここにもクラスター模型の活躍する場が広がっている。ハイパー核固有の種々の興味と共に、ハイペロンの附与による状態又構造の変化にも興味深いものがある。

以上いくつか指摘したが、原子核のクラスター模型は、特に軽い核の動的性質を表現する重要な模型であること、又軽い核に関与した現象は物理学の多くの分野と結びついていること、この2点から、今後もその活躍の場所が大きくひろがっていくものと思われる。

質問いただいた「クラスター構造は何故励起するとでき易いのか」「又それをどの様にして説明(証明)していくのか」「反応論への今後の展開はどのようになされていくのか。」については、ある程度は、本報告の内で応答したつもりである。しかし前二者については、クラスター構造論の基礎的問題なので、今後にも残された課題である。最後の反応の問題について詳しい話は、九大原子核グループ(上村正康氏ほか)など適切な方々に別の機会にお譲りしたいと思っている。

なお本稿の一部は、堀内稔氏(京大・理)との討論に基づいたことを附記させていただきます。

References

- 1) K. Ikeda, T. Marumori, R. Tamagaki, H. Tanaka, J. Hiura H. Horiuchi, Y. Suzuki, F. Nemoto, H. Bando, Y. Abe, T. Takigawa, M. Kamimura, K. Takada, Y. Akaishi and S. Nagata; Prog. Theor. Phys. Suppl. No.52 (1972) Chap.I-Chap.VI.
- 2) K. Ikeda, R. Tamagaki, S. Saito, H. Horiuchi, A. Tohsaki-Suzuki and M. Kamimura; Prog. Theor. Phys. Suppl. No.62 (1977) Chap.I-Chap.V.
- 3) K. Ikeda, H. Horiuchi, S. Saito, Y. Fujiwara, K. Kamimura K. Kato, Y. Suzuki, E. Uegaki, H. Furutani, H. Kanada, T. Kaneko, S. Nagata, H. Nishioka, S. Okabe, T. Sakuda M. Seya, Y. Abe, Y. Kondo, T. Matsuse and A. Tohosaki-Suzuki; Prog. Theor. Phys. Suppl. No.68 (1980) Chap. I-Chap.V.

10. 中間子原子

東大理 永嶺謙忠

1. はじめに

中間子原子とは、電子のかわりに質量のずっと重い素粒子が原子核のまわりをめぐる軌道に入ることによって出来る原子のことである。文字通り中間子である π^- , K^- やレプトンである μ^- などによって中間子がつくれさまざまな研究がなされている。ミニオン(μ^-)を中間子と呼ぶのは適当でないが、ここでは、伝統に従って中間子の名で話を進める。中間子原子に関する一般的な記述は、色々な文献〔1, 2, 3〕に詳しく報告されているので、ここでは μ^- 原子に関して、一般的な記述をした後、比較的最近の topics をとりあげ、最後に筆者の所属する中間子科学実験施設における活動に関することを簡単に述べてみたい。

2. 中間子原子の研究対象

π^- や μ^- などの素粒子が電子と入れかわって原子をつくるときの基本的な性質と、その性質をめぐって、どのような研究がなされているかまとめてみよう。

古典的なボーア原子の性質から、電子原子に比べて中間子原子においては、1s 軌道の半径は質量の逆比で小さくなり、結合エネルギーは質量に比例して大きくなる。中間子原子の生成が起るときの中間子原子軌道の主量子数 (n_c) は、質量の比の平方根になる。 μ , π , K 粒子による中間子原子を考える際の主要パラメーターを表1にまとめる。

表1 μ , π , K 中間子原子のための基本物理量

	m/m_e	$\sqrt{m/m_e} (= n_c)$	寿命 (自由空間) (s)	スピン	大きさ (fm)
π^-	207	14.4	2.197×10^{-6}	0	点状
μ^-	273	16.5	2.60×10^{-8}	$\frac{1}{2}$.663 (23)
K^-	996	31	1.24×10^{-8}	0	.53 (5)

これらの中間子原子を作るには、然るべきエネルギーを持った陽子や電子加速器と、それに続くビーム光学系によって π , μ , K などをつくり、それ等の粒子を中間子原子を作りたいと考えた物質中にとめることによって得られる。物質中に入った数 MeV 以上の高速中間子は、物質内電子との間の電氣的相互作用を通じて、電離や励起をくり返し、原子内電子の価電子のエネルギー

mesic atoms.
Kanetada Nagamine
(The University of Tokyo)

に対応する数 keV まで減速される。その後起る縮退した電子系と中間子との相互作用のメカニズムは非常に複雑であって、古くから Fermi-Teller〔4〕を始めとして、数々の理論研究が行なわれている。中間子がさらに減速され、K 電子のエネルギーと同程度になると、中間子軌道 n_c から、中間子原子が形成され、X 線を放出しながら 1s 軌道に向って遷移する。 π^- や K^- の場合は、原子核の Z が大きくなると高い軌道から核吸収が起り、 μ 原子ではもっぱら 1s 軌道で自由崩壊と競争する形で核吸収が起る。 μ 原子ではこのような原子捕獲課程に、スピン偏極に関連するメカニズムが加わり、複雑になると同時に、豊富な物理現象が展開されることになる。図 1 は μ 原子の場合について、原子生成のメカニズムをまとめたものである。

NEGATIVE MUON

Energy & Time Interval	History	Energy Loss Mechanism	Depolarization Mechanism
~ 50 MeV	Muon Beam		
10^{-9} sec	Slowing Down of Fast Muons	Scattering with Electrons	(Negligible)
~ 3 KeV	Interaction with Atomic Electrons & Capture to Muonic Atoms	Interaction with Degenerate Electrons	<u>Spin-Dependent Capture</u> Depolarization due to Spin-Orbit Force $P = \frac{1}{3} P_{in} \left(1 \pm \frac{2}{2L+1} \right)$ $J = L \pm 1$
10^{-13} sec	Cascade	Auger and Radiative Transition	(even) Cascade Depolarization (odd) Depolarization due to Nuclear hf Field
$0 \sim -6$ MeV	Ground State of Muonic Atoms		$\frac{1}{6} P_i$ $\frac{1}{6} \frac{1}{3} \left(1 + \frac{2}{2L+1} \right)$
$2.2 \sim 0.05$ usec	Decay of Muon & Nuclear Capture		<u>After Effect</u> <u>Solid State Depolarization</u>

図 1 μ^- 原子生成過程と μ^- スピン偏極度の変化

これまでに行なわれた中間子原子に関する研究を原子生成・崩壊過程にそくしてまとめると次のようになる。典型的な参考文献をあげておく。

- 1) 原子捕獲の初段階
 - π, μ, K 原子生成に対する化学結合などの影響〔5, 6, 7〕
 - μ^- を仲介する中間子分子の生成過程〔5〕
- 2) 原子内高位レベル間遷移
 - π^-, μ^- の質量測定〔8〕
 - μ 原子遷移における真空偏極効果, QED の検証〔9〕
- 3) 原子内低位レベル間遷移
 - μ 原子 X 線による原子核電荷分布, 四重極能率分布, 磁気能率分布などの測定〔2, 3〕

π -原子核相互作用の原子軌道への影響〔1, 3〕

4) 基底状態

束縛 μ の g 因子〔10, 11〕

束縛された偏極 μ^- による物性研究 (μ^- SR)〔11, 12〕

μ 吸収過程, 全吸収率, 部分吸収率, 放出粒子分光〔13〕

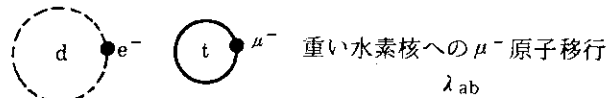
π 吸収過程, 放出粒子分光など〔1〕

3. 中間子原子に関する最近の Topics : 核融合反応におけるミニオンの触媒作用

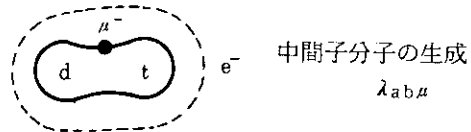
中間子原子の生成のメカニズムに関連して, 最近にわかに話題となっている, ミュオン触媒による核融合反応について以下に述べてみる。

p, d, t などの軽核同士の核融合反応において, μ^- がどのような形で触媒作用をするか, 図 2 の原理図に従って説明してみよう。主として, μ^- -d-t の系を扱う。

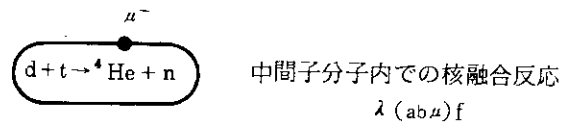
a) H_2, D_2, T_2 などのガス中に μ^- 原子が作られたとする。 μ^- は (μ^- -d) \rightarrow (μ^- -t) のように重い isotope に向かって移行する。



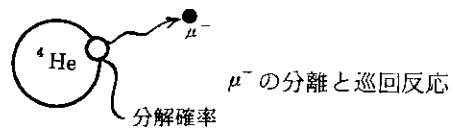
b) (μ^- -t) などの中間子原子は核の電荷が μ^- によって強く遮蔽されているので, d 原子又は D_2 分子と熱エネルギー状態で反応して, μ^- を仲介とする ($d\mu^-t$) なる中間子分子 (mesomolecule) が生成される。



c) 中間子分子内で, 分子の振動エネルギーの助けをかりて, d と t が近ずき $d + t \rightarrow {}^4\text{He} + n + 14.6 \text{ MeV}$ などの核融合反応が起る。



d) 反応後 μ^- は (μ^- - ${}^4\text{He}$) 原子としてとどまらずに, ${}^4\text{He}$ 核から離れて, 再び,



d, t などと中間子原子を生成し, a), b), c) のプロセスを次々とくり返す。

図 2 μ^- 触媒による核融合反応の概念図。 μ^- を D_2, T_2 の混合ガスに入れた場合を例としている。

このような巡回的核融合反応が, μ^- の寿命 $\tau_\mu (\equiv \lambda_0^{-1}, 2.2 \mu\text{s})$ に比べて十分ひんぱんにくり返すことが出来るならば, 大量のエネルギーが生産される。このような過程において問題となる反応速度定数を定義しておく。 λ_a, λ_b : (μ^- -a), (μ^- -b) 原子の生成率。 λ_{ab} : (μ^- -a) \rightarrow (μ^- -b) なる中間子移行速度定数。 $\lambda_{ab\mu}$: (a μ^- b) 中間子分子の生成確率。 $\lambda_{(ab\mu)f}$: 中間子分子内での核融合反応率。 λ_s : 核融合反応後に μ^- が反応生成物から分離される速度。図 3 には定義された λ と各 step の対応が例示されている。

ミュオンが触媒をして, 核融合反応を巡回的に引き起す可能性は, ずい分以前から考えられていた〔14, 15, 16〕。特に Jackson が 1950 年代に行なった理論的解析は有名で, その後の研究を

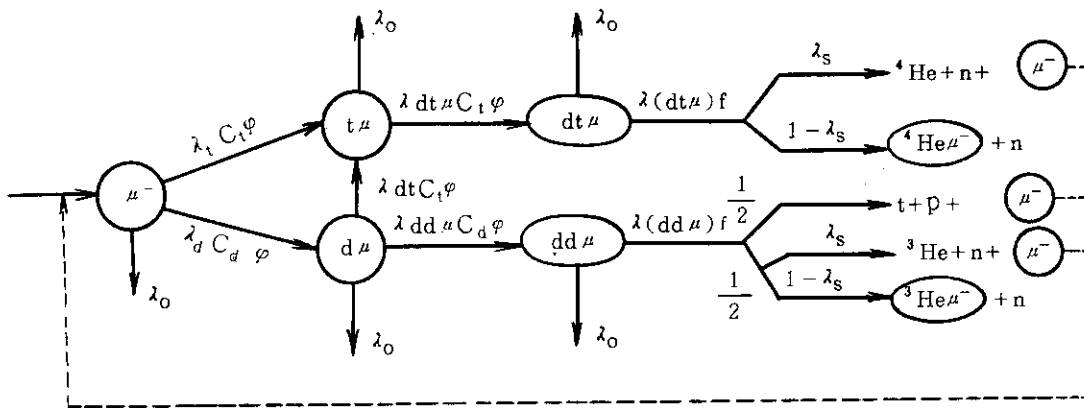


図3 μ -d-t系における核融合過程と競争過程。 ϕ は全ガス濃度を C_d 、 C_t は混合比を表わす。

推進させる役目を果たした。実験研究は、Dubna（ソ連）を中心に行なわれたが、最初に多くの人の注意をひいた μ^- -p-d系では、エネルギー生産の見込みがないことは実験的に早くから確かめられていた。それというのも、 λ_{abu} が十分に大きくないためであった。ところが、1977年頃からDubnaで行なわれた一連の実験で、 μ -d-d系で、共鳴的に中間子分子が生成されることが発見された。この発見がその後今日に至るまで、実験・理論研究のひきがねとなり、さらには、エネルギー生産の経済論まで真面目に議論されるようになってきている。このあたりの状況を次に述べてみよう。

中間子分子、mesomoleculeの共鳴生成の可能性はDubnaで行なわれた μ -d-d系の実験に端を発した〔17〕。 $\lambda_{dd\mu}$ は、はっきりとした温度依存性を持ち、400K程度にピークを持っている。実験結果はあたかも熱エネルギーの微妙な差によって(μ^- -d)と D_2 とが共鳴的に反応して、($d\mu^-d$) (実際は、 $[(dd\mu)d2e]$)なる分子状態が出来ることを示している。Gerstein & Ponomarevは、この事実に対して三体反応の理論を展開した結果、共鳴的分子生成が起ること、また同じことが μ -d-t系についても起り得て、その結果巡回反応によるエネルギー生産が可能かも知れないという結論を導びいた〔18, 19〕。

実験的に中間子分子、mesomoleculeの生成はどのようにして知ることが出来るであろうか。それには、前記 $\lambda_{(ab\mu)f}$ 即ち分子内核融合反応速度が十分早いという前提が必要となる。Jacksonが指摘したように〔15〕、 μ^- が核のクーロン障壁を減少させ、さらに分子振動における零点振動のために、2つの核は相間距離 zero に至るまで近づく確率が生じてくる。pd, dd, dtなどの低エネルギー核反応断面積の実験結果と、分子波動関数の理論計算とから、 $\lambda_{(ab\mu)f}$ の値は予測することが出来る。結果は表2に示すごとく、波動関数を求めるためのパラメーター x_N に対して弱い依存性を持っているが、絶対値は λ_0 に比べると圧倒的に大きい。従って、mesomoleculeが出来れば、即核融合反応が起きると考えてよいことになる。以上の考察から、分子生成率を求める実験は、適当な濃度を持つ混合ガス中に μ 原子を作り、中間子分子生成に対応する核融合生成物を測ることになる。具体的には中性子のエネルギー、時間スペクトル、さらには、中性子放出と核融合反応後に起る μe 崩壊による電子放出との時間相関などを測ることに

よって、核融合反応即ち分子生成を観測することになる。

μ^-d-t 系についての実験がDubnaで行なわれた〔20〕。実験は、 D_2 、 T_2 の混合ガスについてガス圧6.6~66.2気圧、 T_2 濃度0.8%~7.8%までについて行なわれた。結果を要約すると次のようになる。結果は、全て全ガス濃度が液体水素の原子密度($4.22 \times 10^{22}/cc$)に等しくなったとしたときの値に直されて表示されている。

表2 中間子分子内での核融合反応速度 $\lambda_{(ab\mu),f}$ の計算値〔15〕
 x_N : 分子波動函数を計算する際のパラメーター

x_N	$\lambda_{(ad\mu),f}$	$\lambda_{(dd\mu),f}$ (s^{-1})	$\lambda_{(dt\mu),f}$
0	0.18×10^6	0.35×10^{11}	0.11×10^{13}
0.02	0.26×10^6	0.70×10^{11}	0.23×10^{13}
0.05	0.48×10^6	1.41×10^{11}	0.57×10^{13}

1) (μ^-d) \rightarrow (μ^-t)の中間子移行反応速度は速く、 $2.9(4) \times 10^8 s^{-1}$ にもなる。もしこの反応が遅いと図3において、($d\mu^-t$)分子生成には進まず、分子生成の比較的遅い($d\mu^-d$)分子の生成に進行してしまうことになる。

2) ($d\mu^-t$)分子生成は期待通り大きく、 $\lambda_{dt\mu} > 10^8 s^{-1}$ にもなる。実際は〔(dt μ)d2e〕分子の生成になる(図4参照)

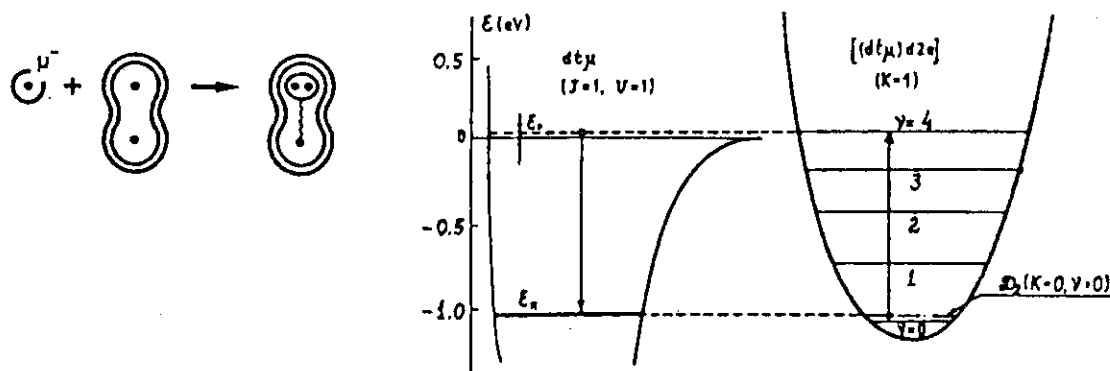


図4 μ^-d-t 系において、中間子分子が共鳴的に生成される様子をより現実的に表わした図。(μ^-t)と D_2 分子が反応して、〔(dt μ)][(dt μ)d2e〕分子が出来る。

3) 温度を93~613Kまで変じたところ、 $\lambda_{dt\mu}$ の温度依存性はきわめて弱いことが判った。実際はもっと早い反応速度で($d\mu^-t$)分子が出来ているのかも知れない。

1)に示された中間子移行反応は、1s状態の μ^- の束縛エネルギーが reduced mass の相違から、表3のようにp, d, tの順にわずかずつ大きくなることによっている。表3bにはこ

表3a 1s状態の μ^- 束縛エネルギー (eV)〔16〕

μ^-p	μ^-d	μ^-t	$\mu^- \infty$
2531	2666	2714	2800

表3b μ^- 移行反応速度, λ_{ab} (s^{-1})〔16〕

	λ_{pd}	λ_{pt}	λ_{dt}
理論値〔16〕	1.3×10^{10}	6.1×10^9	5×10^7
実験値			$2.9(4) \times 10^8$ 〔20〕

れまでに知られている λ_{ab} の値をまとめておく。

このようにして、 μ -d-t系においては、前記4つのステップの内 a), b), c) の3つが満足されていることが判った。最後の d) のプロセスはどうであろうか。 μ^- が核融合反応後に ^4He から十分分離されるだろうか。この λ_s (stripping probability) についての実験はまだ行なわれていない。理論計算が最近改めて行なわれた〔21〕。実験は SIN で計画中である。

計算の通りにゆくとすれば、反応後に出来る

(μ^- He) 原子の 99% は μ^- と ^4He に分離され、 μ^- は連鎖反応的に a) \rightarrow d) のプロセスを次々とくり返すことになる。

これまでは、 μ -d-t系を中心に話を進めて

きたが、他の系に関する data も含めて、 $\lambda_{ab\mu}$, $\lambda_{(ab\mu)f}$, λ_s などの数値を表4にまとめる。 μ -d-t系が優れた性質を持っていることが良く判る。

このような連鎖反応が何回くり返されるであろうか。cycle から離脱する割合 W_c は次のようにかける。(c は $d\mu$ が生成される割合)

$$W_c = c \times \frac{\lambda_0}{\lambda_{dt}} + \frac{\lambda_0}{\lambda_{dt\mu}} + (1 - \lambda_s)$$

従って、 μ -d-t系では、平均約 100 サイクルの反響がくり返されることになる。このときのエネルギー生質は約 2 GeV であり、1個の μ^- から質量の約20倍のエネルギーが生み出されることになる。

このエネルギー生産能力が実用的なものか否かは、 μ^- をどれ位効率よくつくれるかにかかっている。一般に μ^- を作るには、1) 加速器による高エネルギー粒子の発生、2) 核反響による π^- の発生、3) π^- 自由崩壊による μ^- の生成、と3段階を経て生まれる。従って、効率の良い μ^- 生成は容易ではない。Petrov 等は、d 加速によって、1つの μ^- を作るのに 5 GeV のエネルギーを要する〔22〕としている。これ等の議論は、今後加速器技術やビーム光学技術の進歩によって、改善されてゆく可能性は十分残されている。尚、加速された p, d ビームにより破碎中性子をつくり、 ^{238}U などにより核分裂反響を起しエネルギー生産をする際に、余剰として常に得られる π^- , μ^- を用いて subcycle を作ることにより、全体として非常に高いエネルギー生産効率が得られることが、Petrov 等〔22〕, Takahashi 等〔23〕によって考えられた。

4. UT - MSL における中間子原子実験

我々、東京大学理学部中間子科学実験施設は、高エネルギー物理学研究所ブースター利用施設内に、2年程前にパルス状中間子実験ファシリティ BOOM を完成させ、広域中間子科学実験を進めてきている〔24〕。このファシリティでは、500 MeV 陽子ビームが、パルス幅 50 ns、パルス間隔 50 ms というシャープなパルス状ビームが得られることを最大限に使って、大型超電導ソレノイドを用いたミュオンチャンネルを 0° とり出しの位置に、パラサイトパイオンチャンネルを 100° とり出しの位置に配して、良質にして世界最高の瞬時強度を誇るパルス状 $\pi\mu$ ビームが得られている(図5)。

表4 μ^- 触媒核融合反響に関する物理量のまとめ
() 内は理論予測値

	$\lambda_{ab\mu}$ (s^{-1})	$\lambda_{(ab\mu)f}$ (s^{-1})	λ_s
pd μ	6×10^6	(3×10^5)	
dd μ	0.81×10^6	(1.4×10^{11})	(0.85)
dt μ	$> 10^8$	(4×10^{12})	(0.9914)

このようなパルス状 π μ ビームを用いる利点は大きくいて次の2つである。1) accidental coincidenceによるバックグラウンドなしに、 π μ 核吸収に伴う遅延現象、 μe 崩壊、 μ SR時間スペクトル、などの測定を長時間 ($\geq 10\pi\mu$) 測定することが出来る；2) 低いduty factorでしか実験出来ない強力R. F. Laser などの極端実験条件と組み合わせて、ミュオンスピン共鳴などの実験が可能になる。

このような特長を生かした実験が着実に進行している〔24〕が、中間子原子に関する実験結果を2, 3紹介しよう。

4.1 奇核ミュオン核吸収におけるスピン効果の測定〔25〕

1s 状態から μ^- が核吸収する際に、原子核がスピンを持っていると、相互のスピンが平行か反平行かによって、即ちどの超微細1s準位にいるかによって、吸収する割合が異なる。この差をきちんと測定すると、核内 π 電流の μ 吸収への効果などを知ることが出来る。長時間 μe 崩壊を測ることが出来る特徴を使って、図6のような装置を用いて、図7のような測定結果を得た。平行、反平行の状態の識別は、 μ^- 偏極が逆向きであることを用い、時間スペクトルの解析から、 λ_0 (平行) : $0.022(2) (\mu s)^{-1}$, λ_0 (反平行) : $0.019(2) (\mu s)^{-1}$ というpreliminaryな結果を得ている。

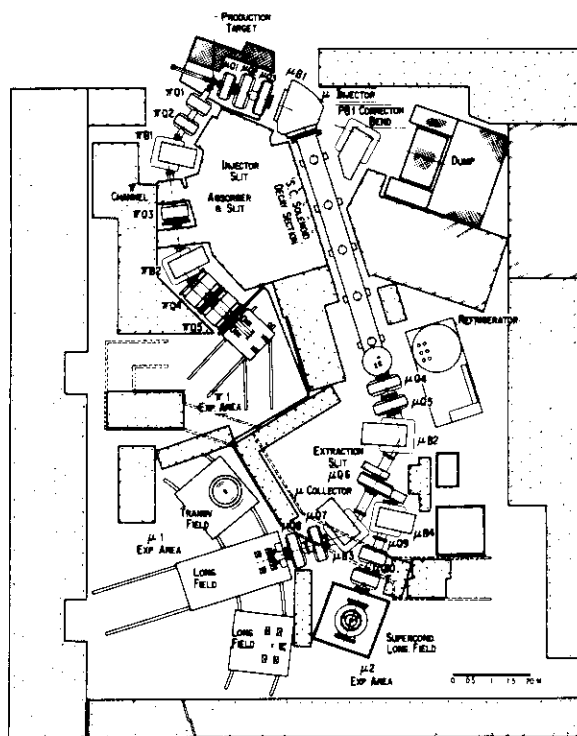


図5 UT-MSL BOOM ファシリティの実験室レイアウト。2つのビームチャンネルと3つの実験ポートがある。

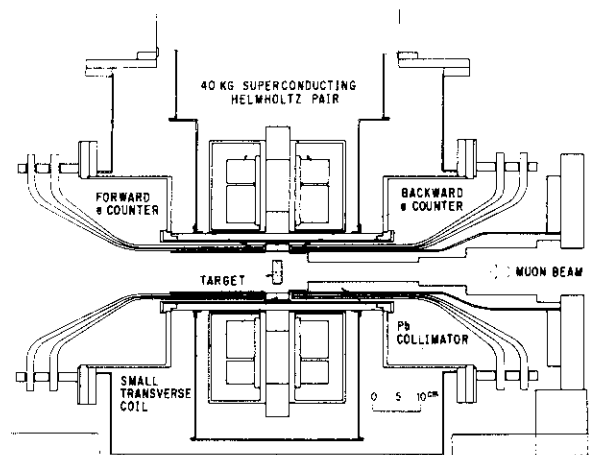


図6 軽奇核 μ^- 原子における μ^- 核吸収のスピン効果を測定するための実験装置。強い反結合磁場を用いて、 μ^- が物性的原因で減偏極しないように考慮されている。

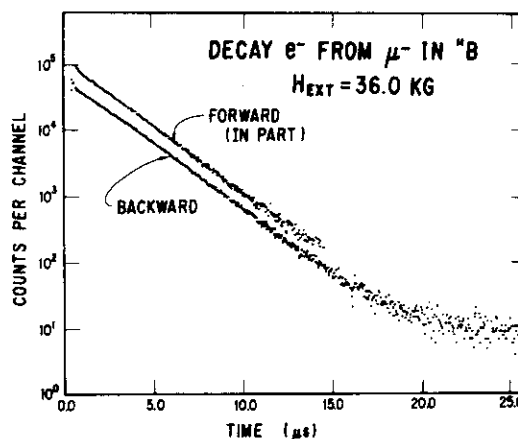


図7 ^{11}B 核 μ^- 原子からの μe 崩壊時間スペクトル。 μ^- 核吸収のスピン効果から、寿命が2成分を持ち、それにスピン偏極の時間変化が重畳されている。

4.2 π 吸収における Isomer 生成率の測定〔26〕

π 核吸収が起り、数 100 μ s ~ 数 10ms の Isomer が出来るときに、その遅延 γ 線測定は、d, c ビームでは大変むずかしいが、パルス状ビームを用いると簡単に行なうことが出来る。放射線シールドを良く考えた Ge 検出器を用いて、 ^{209}Bi 核について図 8 のような遅延スペクトルを得た。これに π X 線による規格化を入れて π^- 1 個当りの Isomer 生成率を示したものが図 9 である。

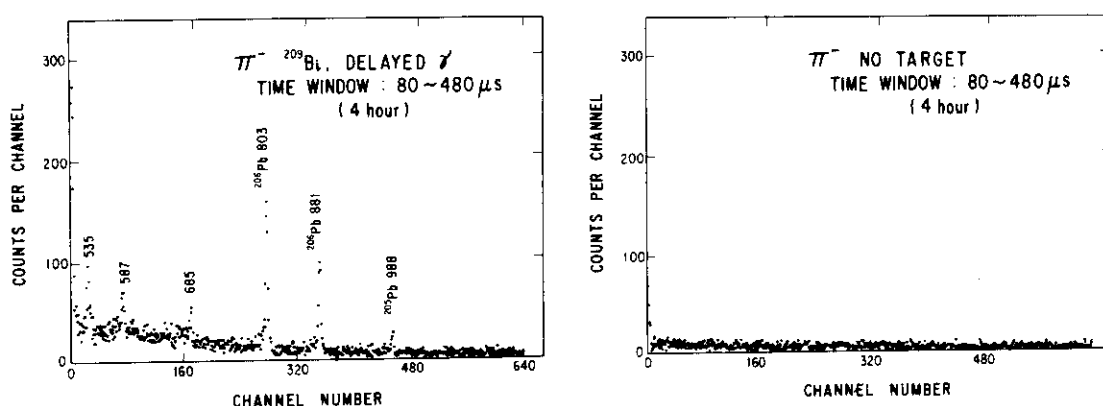


図 8 ^{209}Bi の π 核吸収後の遅延 γ 線スペクトルの測定例。短時間に 100 μ s ~ 10ms 領域の寿命を持つ isomer からの γ 線が測定出来る。S/N を示す意味で、ターゲットを除いたバックグラウンドを右に示す。

この図は、Prompt 生成成分と比較して示されていて、Isomer をプローブとして、 π 核吸収における高い角運動量移行をモニターしているといつてよい。 (π^-, pxn) では中性子放出数(x) \approx 8 のあたりに、 π^- 吸収特有のピークが見えているが、 (π^-, xn) ではみえていない。また (π^-, xn) では $x \approx 3$, $x \approx 12$ でも Isomer が生成されている。

その他、 $\mu^-^{12}\text{C}$ 核吸収における偏極現象の測定〔27〕、 μ^- SR による物性研究などが行なわれている。

5. おわりに; 現在から未来へ

パルス状ミュオンの物理は、ミュオン物理実験の新しい局面をきり開いている。現在の BOOM ファシリティでの実験や、将来より強力なパルス状ミュオンを用いた実験に夢をさせていると、色々な可能性が感じられている。特に、原子物理学との接点にいくつかの重要な問題がありそうである。簡単に以下にふれておく。詳しくは文献〔28〕を参照して頂きたい。

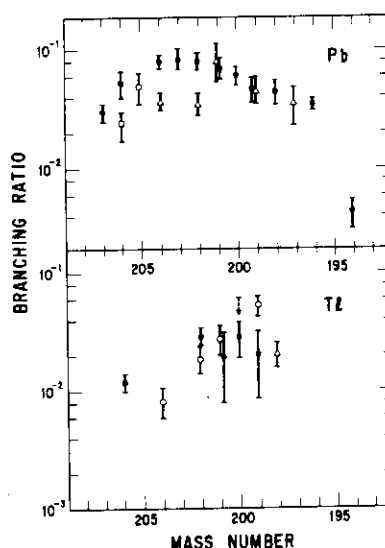
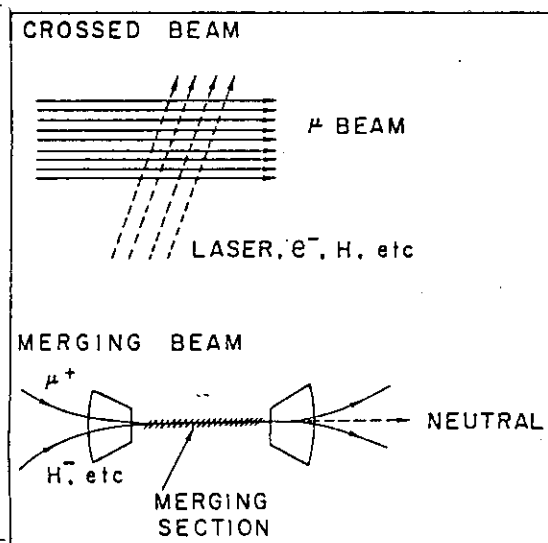


図 9 ^{209}Bi の π 核吸収によって作られる isomer の生成率。 (π^-, xn) が上に、 (π^-, pxn) が下に示されている。黒丸は g, s への生成率(prompt 成分)を示している。

a) Crossed ビームの実験

瞬時強度の高いミュオンとパルス状の強力なレーザー、電子線、水素原子線などと衝突させ、興味ある実験が可能になる。図10に実験例を示す。例えば、 μ^+ とH原子と charge exchange 反応を起させて、真空中にミュオニウム (μ^+ と e^- の中性束縛状態) を作ることができる。また、 $\text{Mu} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{MuCl} + \text{Cl}$ のような反応について、レーザーを用いて、state to state の分光学を行なうことができる。



b) $\mu^+ \mu^-$ 原子の生成

($\mu^+ \mu^-$) の原子は ($e^+ e^-$) と同じようにレプトンのみから構成される束縛状態で、エネルギー単位や対消滅時間の測定は、素粒子物理学上重要であるばかりでなく、物性への応用も可能かも知れない。これを作るには、 μ^- と H_2 ガスとで ($\mu^- \text{H}$) を作り、それに μ^+ ビームを入れ、 $\mu^+ + (\mu^- \text{H}) \rightarrow (\mu^+ \mu^-) + \text{H}^-$ という反応を起させる。実験条件は図11のようになるであろう。上記反応の断面積はどうなるであろうか。原子理論の方々の寄与を切に望みたい。

図10 ミュオンにおけるCrossed Beam実験

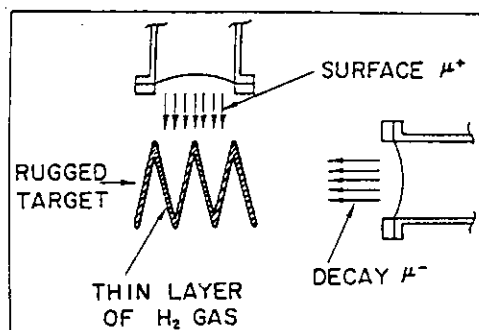


図11 $\mu^+ \mu^-$ 原子生成の実験レイアウト案

以上、中間子原子の世界を急いでながめてみた。元より、若い日進月歩の分野であり、それだけに接点を持つ他分野の方々との協同研究が今後増々必要になってくるであろう。

最期に山崎敏光氏を始め、中間子研究の同僚の日頃の協力に感謝します。

参考文献

- [1] G. Backenstoss, Ann. Rev. Nucl. Sci. 20 (1970) 467.
- [2] C.S. Wu and L. Wilets, Ann. Rev. Nucl. Sci. 19 (1969) 527.
- [3] Y. N. Kim, Mesic atoms and nuclear structure (North-Holland, Amsterdam, 1971).
- [4] E. Fermi and E. Teller, Phys. Rev. 72 (1947) 399.
- [5] L.I. Ponomarev, Ann. Rev. Nucl. Sci. 23 (1973) 395.
- [6] C.E. Wiegand and G.L. Godfrey, Phys. Rev. A9 (1974) 2282.
- [7] J.D. Knight et al., Phys. Rev. 13A (1976) 43.
- [8] D.C. Lu et al., ICOHEPANS 8 (1979) 1B29.

- [9] A. Bertin et al., *Nuovo Cimento* 23B (1974) 489.
- [10] K. M. Ford et al., *Phys. Rev.* 129 (1963) 194.
- [11] T. Yamazaki et al., *Phys. Lett.* 53B (1974) 117.
- [12] 山崎敏光・永嶺謙忠編, 物理学論文選集 205, 日本物理学会刊 (1979)
- [13] N.C. Mukhopadyay, *Phys. Reports* 30C (1977) 1.
- [14] L.W. Alvarez et al., *Phys. Rev.* 105 (1957) 1127.
- [15] J.D. Jackson, *Phys. Rev.* 106 (1957) 330.
- [16] Y.B. Zel'dovich and S.S. Gerstein, *Sov. Phys. Uspekhi*, 3 (1961) 593.
- [17] V.M. Bystritsky et al., *Sov. Phys. JETP* 49 (1979) 232.
- [18] S.S. Gerstein and L.P. Ponomarev, *Phys. Lett.* 72B (1977) 80.
- [19] S.I. Vinitiskii, L.P. Ponomarev et al., *Sov. Phys. JETP* 47 (1978) 444.
- [20] V.M. Bystritsky et al., *Phys. Lett.* 94B (1980) 476.
- [21] S.S. Gerstein et al., *Sov. Phys. JETP* 53 (1981) 872.
- [22] Yu. V. Petrov, *Nature* 285 (1980) 466.
- [23] H. Takahashi et al., BNL Preprint (1980).
- [24] UT-MSL NEWSLETTER No.1 (May 1981). No.2 (May 1982) ed. K. Nagamine and T. Yamazaki;
永嶺謙忠・山崎敏光, 日本物理学会誌 37 (1982) 33.
- [25] K. Ishida et al., to be published
- [26] Y. Morozumi et al., to be published
- [27] Y. Kuno et al., in preparation
- [28] 永嶺謙忠, プスター将来計画研究会報告, KEK Internal Report 82-6 (1982) p. 45

11. 原子核におけるyrast準位

理研 郷 農 靖 之

原子核分光学において、最近の10年間に急速に発展した分野に、高い角運動量を持った状態の研究がある。

この分野は1963年の森永 - Gugelot¹⁾によって始められたインビーム・スペクトロスコピーの手法と、Ge(Li)検出器の出現によって画期的な発展をみた。インビーム・スペクトロスコピーの手法とは、標的をビームで照射しながら、 γ 線や電子線、或いは α 線等を観測するものであり、従来の、核反応で生成した放射性同位元素の α 崩壊や β 崩壊に伴って放出される γ 線・電子線を測定して原子核の励起状態を研究する手法とは異っている。従来の方法では、励起エネルギー及び角運動量に厳しい制約があったが、インビームの手法によりそれが大巾にゆるめられた。更に1970年代には、従来 γ 線検出器の主流であったNaI(Tl)に代って、高分解能のGe(Li)検出器が比較的手軽に使用されるようになって、この分野の進展が飛躍的なものとなった。

この方法では、核反応により生成する原子核の内部励起エネルギーとしては50~60 MeVの複合核が初めは陽子・中性子等の放出次いで γ 線等の放出により基底状態迄冷却してゆくが、その過程で放出される γ 線等が離散的な状態間の遷移として検出されるような強度になったものを検出して原子核の励起準位を同定してその研究を行う。この様にして観測される離散的エネルギーの γ 線は、 γ 線放出の初期の段階が、統計的に起るので、一定の角運動量の状態の中では、エネルギー的に一番低い状態に集まり易く、 γ 線はそれ等の状態間の遷移として観測される事になる。この様に、同一角運動量を持った状態の中で一番エネルギーの低い状態は、原子核が集団回転している場合に対応すると考えられており、内部励起としては、非常に低いものと考えられている。従って高い角運動量状態は速い回転に対応し、めまぐるしく回転する状態という意味のスウェーデン語から、これらの状態がyrast(イラスト)準位と名付けられている²⁾、yrast準位を、原子核の励起エネルギーと角運動量の関係として示したのが図1である。

さて、現在迄に同定されている原子核としては、図2に示したように約2100種類あり、原子核が陽子(或いは中性子)を放出する。謂ゆるproton (neutron) drip lineの範囲内には、更に、同数程度の未知の原子核の存在が予測されている。この様に夥しい数の原子核の性質を見てみると原子の電子

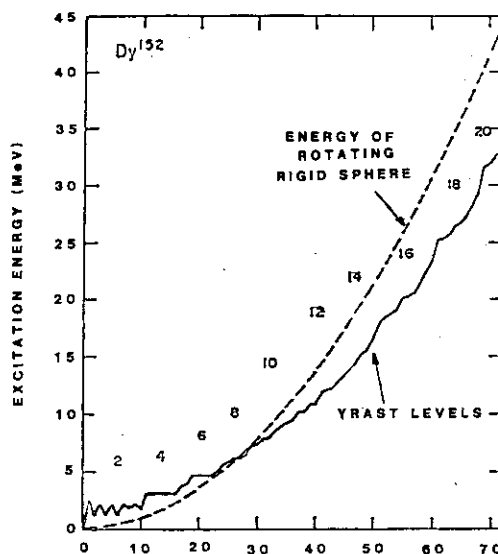


Fig. 1

11. Yrast levels in atomic nuclei.
Yasuyuki Gōnō
(IPCR)

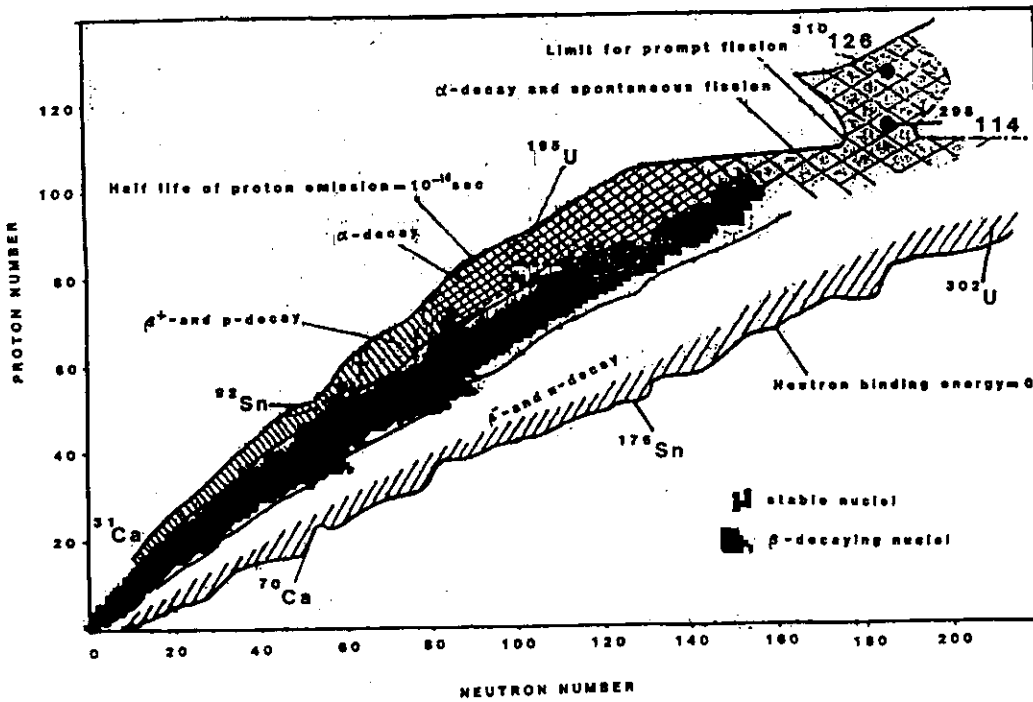


Fig. 2

軌道におけると同様な殻構造があり、従って閉殻というものが存在する。但し原子核の場合は L-S 結合よりも j-j 結合により出て来る magic number がより良く現象を再現する事が知られ

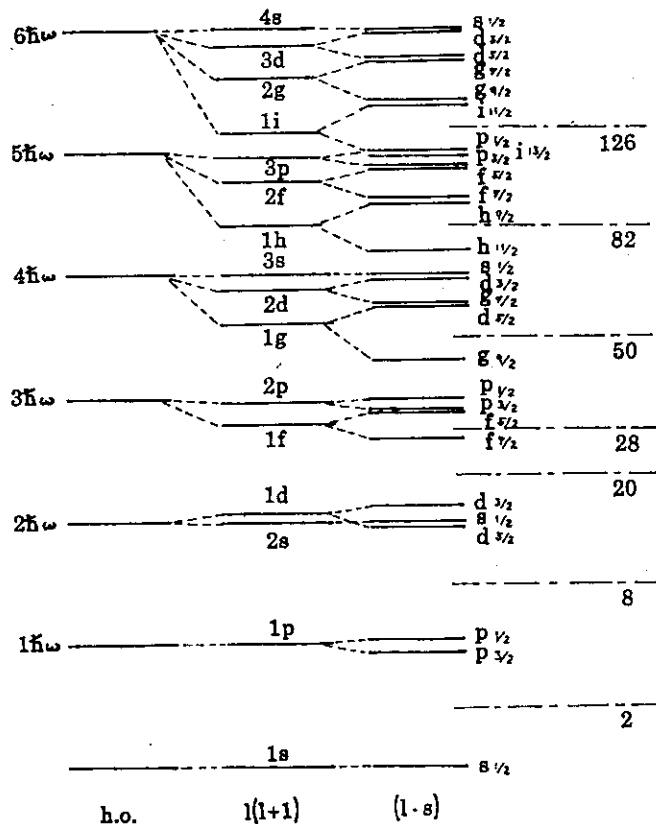


Fig. 3

ており、図3に見られるように、2, 8, 20, 28, 50, 82, 126が閉殻を更に外挿して陽子数114, 中性子数184が次の閉殻であるとの予想で、超重元素 (Super Heavy Element) の探査が各国で精力的に行われている。因みに現在同定されている最も大きな陽子数を有する元素は、陽子数107の元素であり、新元素捜しの先進国となっている。米国とソ連の間での新元素発見に関する論争は、度々国際会議のハイライトの一つになっている。

では閉殻と次の閉殻の間に位置する原子核はどうなっているかといえば、球形の殻模型から予測される値の100倍以上もの四重極モーメントを有する原子核も知られており、これらの核は基底状態が四重極変形している原子核として知られている。原子核半径を $R = R_0 (1 + \beta_2 Y_{20})$ と書いた時、 $\beta_2 \approx 0.3$ 程度のものがランタニド族及びアクチニド族の安定核領域の核に数多く見られる。最近では、図2の様な陽子数と中性子数を変数とした核図表で閉殻数で切った時に閉殻数を表わす線で囲まれた領域の多くで、四重変形した原子核が見出されている。この様に変

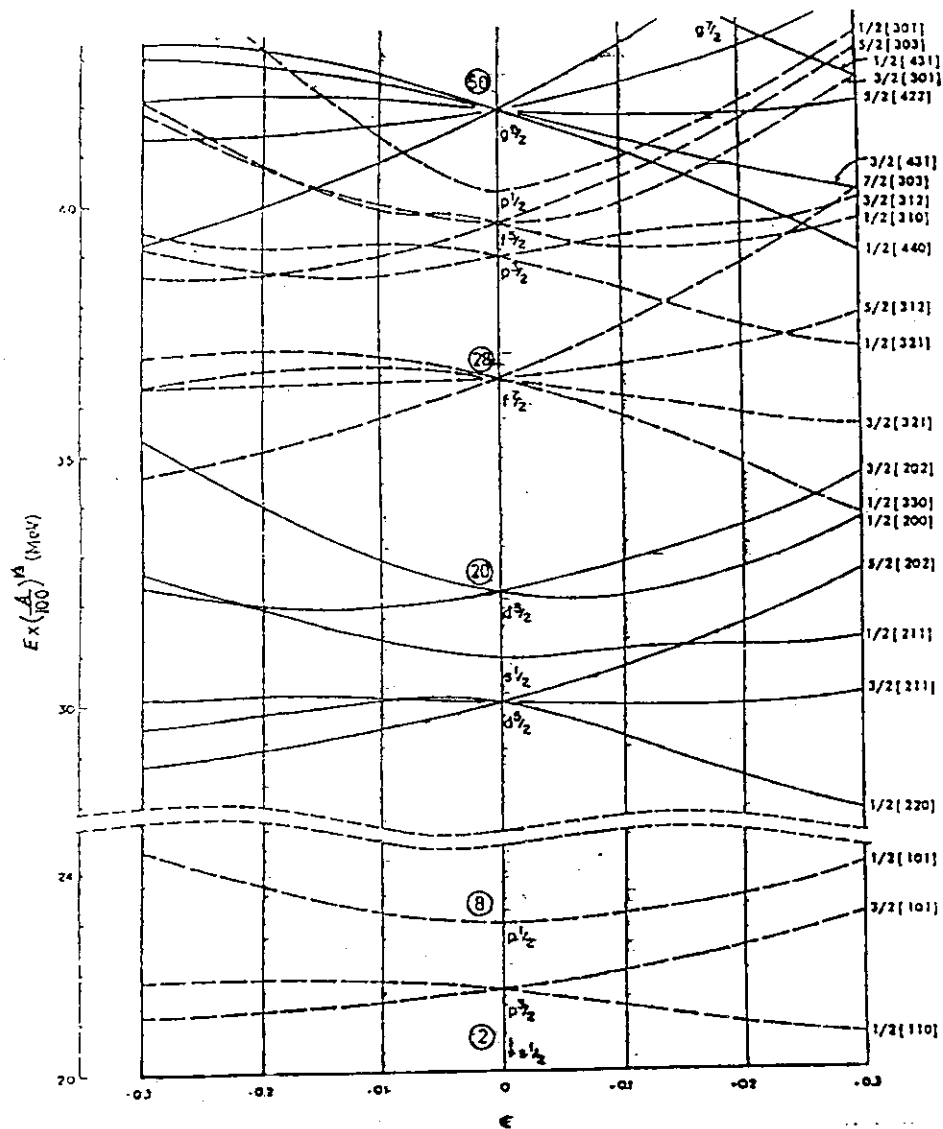


Fig. 4

形した原子核の場合にも、四重極変形したポテンシャルの中での粒子の軌道が Nilsson³⁾によって計算されており、変形のパラメーターを横軸にとった粒子軌道エネルギーの例が図4に示してある。

この様に変形した原子核は粒子軌道を変えるよりも、全体として集団運動をした方がより低エネルギーで励起される事が知られており、その集団運動は Bohr と Mottelson⁴⁾により記述され、その中の典型的な集団運動モードとして、四重極振動と四重極変形した核の回転運動が良く知られている。これらの集団運動モードで記述される励起状態を有する原子核はしばしば、球形振動核、変形回転核と呼ばれ、その核の陽子数・中性子数が閉殻からどの程度離れているかで、その現われ方が異なり、図5にその中性子依存の様子が Sm の同位体の励起状態によって示して

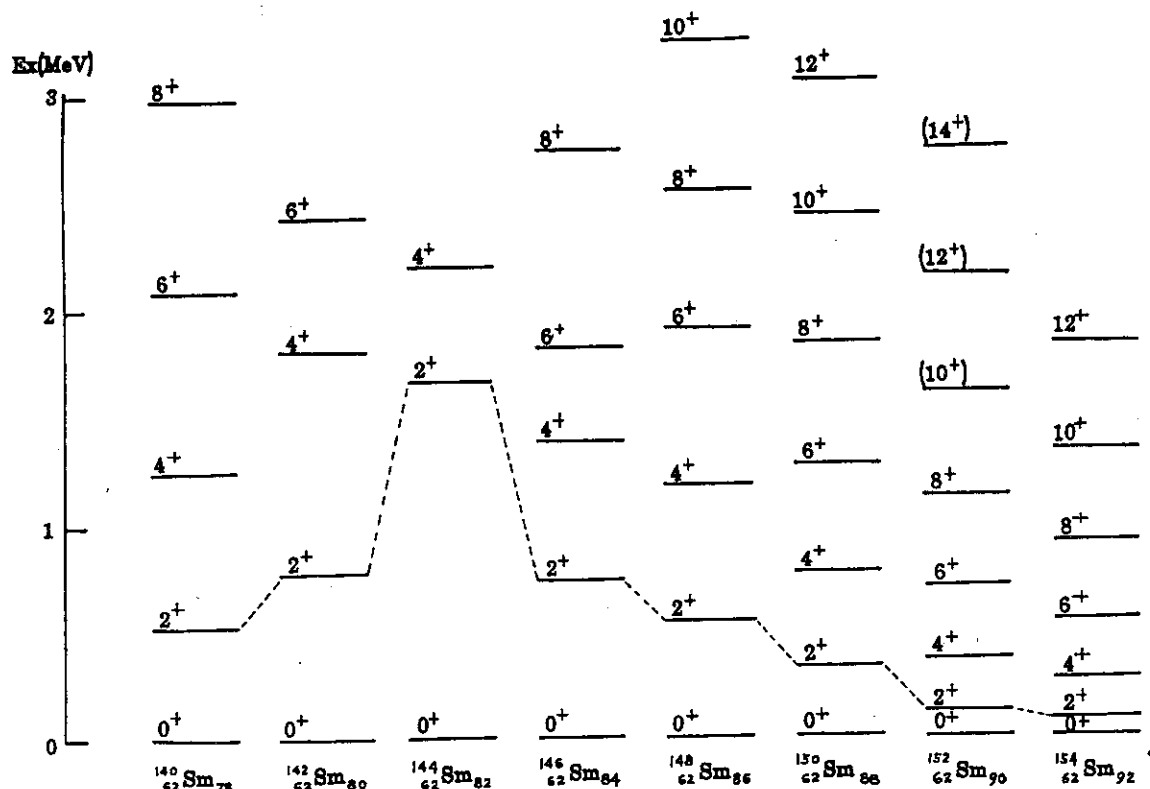


Fig. 5

ある。四重極の集団運動モードは振動、回転共に 2⁺ 励起 γ 遷移では電気四重極遷移 (E 2) で特徴づけられ、図5で中性子数 92 の ¹⁵⁴Sm の励起状態は 0⁺, 2⁺, 4⁺, …… の励起エネルギーが回転から期待される $E_I \propto I(I+1)$ の関係に近く回転準位として理解され、中性子数 86 の ¹⁴⁸Sm では、エネルギー間隔が等間隔に近く、四重極振動子の積み重ねとして理解されて来た。更に中性子数が 82 の ¹⁴⁴Sm の場合は、中性子数が magic number に対応し、集団運動が起り難く 2⁺ 励起エネルギーが高くなっている。また振動核から回転核への移行途中に位置する ¹⁵⁰Sm, ¹⁵²Sm 等は遷移核と呼ばれ、振動模型からも回転模型からも簡単な摂動では扱えず、現在も日本人の理論家を中心にその理論的記述に関して議論が進められている。

これ迄に、原子核がその中性子数と陽子数によって様々な励起様式を示す事を述べてきたが、これらの原子核を初めに述べたインビーム・スペクトロスコピーの手法でイラスト線に沿って、

高い角運動量状態に励起した時に、どのような様相を呈するか見る事にする。

先づ、閉殻の核の例として、陽子数 82、中性子 126 で共に magic number になっている ^{208}Pb と、それに陽子を 2 個加えた ^{210}Po 中性子を 2 個加えた ^{210}Pb の励起準位を図 6 に示した。 ^{208}Pb の場合には、図 3 から分かる様に magic number

のところでは粒子軌道エネルギーの差が大きく、更に、そのギャップの上下では粒子—空孔として組合せた時に、s-f, p-g, d-h, f-i といった 3⁻ に組むものが多く、第一励起準位として 3⁻ 状態が現われている。3⁻ 状態が第一励起準位として現われる事は、 ^{40}Ca の double magic 核にも同様に見られる現象である。中性子数が閉殻 + 2 になった場合の ^{210}Pb では、 $g_{9/2}$ 軌道に 2 つの中性子が入り、その間に短距離力が働いた時の典型的なスペクトルが現われている。陽子数が閉殻 + 2 になった ^{210}Po では、 $h_{9/2}$ 軌道に 2 つの陽子が入った状態として、 ^{210}Pb と同じ様に 8⁺ 迄は理解され、その上に ($h_{9/2}$, $f_{7/2}$)、($h_{9/2}$, $i_{13/2}$) の組合せに 2 つの陽子が入っているものと理解される状態が、夫々近いエネルギーの一群の状態として観測されており、このマルチプレットのスピンの順序、エネルギー

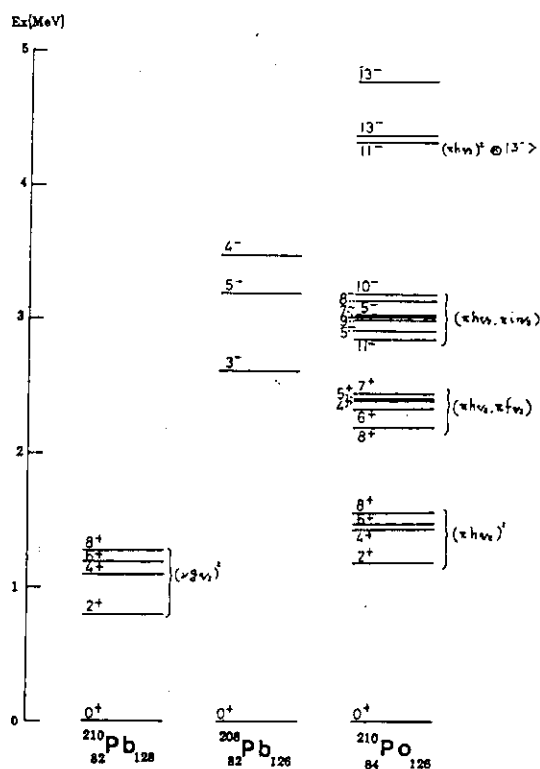


Fig. 6

差は二体相互作用の向きと大きさの情報として使われる。更に 4 MeV を超えるエネルギー領域では、2 つの陽子の粒子軌道の異なる組合せで出来る状態よりも、陽子は ($h_{9/2}$) 軌道に 2 個共とどまり その他の閉殻をなくしていた粒子が励起して ^{208}Pb の 3⁻ に当る状態になった方がエネルギー的に得になり、コア—励起と 2 つの陽子が結合した状態と理解される状態が現われる。更に、この領域で高い励起エネルギーの高い角運動量状態が知られている核として、中性子数が閉殻の 126 で陽子数が閉殻 + 4 の 86 になっている ^{216}Rn がある⁵⁾。この核の励起準位は図 7 に示した様に 30⁺ 状態迄知られているが、この励起エネルギーの範囲 (~ 8.5 MeV) では、4 個の陽子の組合せで出来る角運動量は ($i_{13/2}$)⁴ 又は ($h_{9/2}$)² ($i_{13/2}$)² で出来る 20 h が最大であり、それ以上の角運動量の状態は、 ^{208}Pb 閉殻内粒子の励起を伴ったものと理解され、 $\left((h_{9/2})^3 \cdot f_{7/2} \right) \otimes (g_{9/2} \cdot P_{1/2}^{-1})_5^-$ で 19⁻、 $\left((h_{9/2})^3 \cdot i_{13/2} \right) \otimes (g_{9/2} \cdot P_{1/2}^{-1})_5^-$ で 20⁺、22⁺ 状態が出来ていると解釈されている。 ^{212}Rn の励起状態について、励起エネルギーをスピンを I として $I(I+1)$ の関数としてプロットしたものが図 8 である。励起エネルギーが $I(I+1)$ の関数として直線で表わせるのは回転エネルギーであり、球形の原子核では、量子力学的に回転は意味を持たないが図 8 に書かれた 2 本の直線の内、19⁻ 状態より低い状態に関するものは単なる微分量 dI^2/dE_x と考えるが、19⁻ 以上の状態に関する直線の傾きは有効慣性能率として、粒子の軌道角運動量の和ではあるが回転運動に伴った慣性能率と等価なものとして理解する事が試みられている。この直線から得られる有効慣性能率は 191 MeV^{-1} で、 ^{212}Rn を球形剛体とした時の半古典的慣性能率 208 MeV^{-1}

に非常に近い事が、核内核子をフェルミガスとして扱った時に慣性率 θ が剛体値になる事と相俟って、上記の解釈を尤もらしいものにしていく。

次に十分変形した原子核の高い角運動量状態はどうなっているかを見るために ^{176}Hf の励起状態⁶⁾を図9に示した。十分に変形した原子核は軸対称性を有しており、この図に現われる量子数 K は全角運動量の対称軸への射影であり、核の対称性から K は内部角運動量と一致する。又、原子核は核子間の対相関のために超伝導状態にあると考えられ、BCS理論を適用して、集団運動の微視的取扱いに於ては準粒子を取扱っている。この ^{176}Hf の励起状態にみられる多くのアイソメリック・ステイトは、例えば、 $\{\pi(7/2[404], 9/2[514]), \nu(7/2[514], 5/2[512])\}$ (但し π, ν は夫々陽子、中性子を、 $7/2[404]$ 等は、Nilsson schemeでの量子数 $j[N, n_z, l_z]$ を表わす)で $14^-, \{\pi(7/2[404], 9/2[514]), \nu(9/2[624], 5/2[512])\}$ で 15^+ 等の状態を作っていると解釈し、夫々の状態が長い寿命を有しているのは、 K 量子数の選択則が効いているためと解釈されている。そして夫々の内部状態を持った回転バンドが観測されている訳である。基底状態はこの様な偶—偶核では、 $K=0$ であり、その波動関数の対称性から奇スピン状態は存在せず、 $K \neq 0$ のバンドでは、 $I=K, K+1, \dots$ の準位が現われる事になる。

より高い角運動量状態を調べようとする時には、より高い角運動量を有する複合核からの崩壊を調べる必要があるが、入射粒子によって持ち込まれる角運動量は、

$$l \propto [2\mu R^2(E-V)]^{1/2}$$

但し μ : reduced mass, R ; reaction distance

E ; 重心系での入射エネルギー, V ; クーロン障壁

となり、一般に入射エネルギーは反応のチャンネルにより決まるのでより重い入射粒子を用いる事になる。自然界に存在する同位元素は陽子同志のクーロン斥力のために重くなる程、陽子に比べて中性子の数が増加し、更に複合核からの核子放出に関してもクーロン障壁のために陽子より、中性子が放出され易い。この様な事情から普通、複合核反応を用いたインビーム・スペクトロスコピーでは、 β 安定領域より、中性子数の少ない原子核の励起状態を調べる事になる。より高い角運動量状態を調べてゆく中で見出されたのがバックベンディングと呼ばれる現象で、1972年にA. Johnson 達⁷⁾により発見された。図10に角運動量 $12\hbar$ の状態から $16\hbar$ の状態にかけて、バックベンディングを示す原子核 ^{158}Er と、角運動量 $18\hbar$ 迄バックバンドしない原子核 ^{174}Hf の r 線のスペクトルが示してある。原子核の回転スペクトルは $E_I = \frac{\hbar^2}{2g} I(I+1)$ (但し g : 慣性

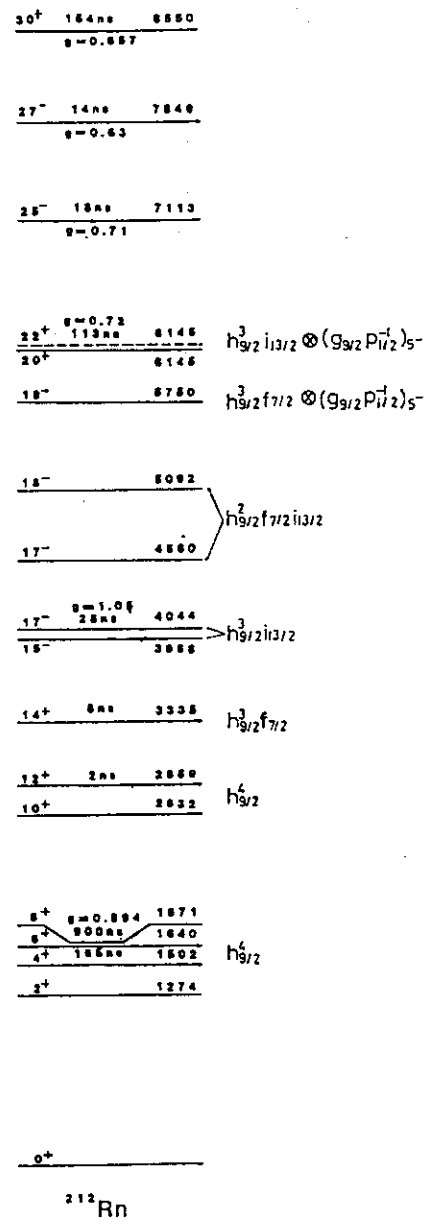


Fig. 7

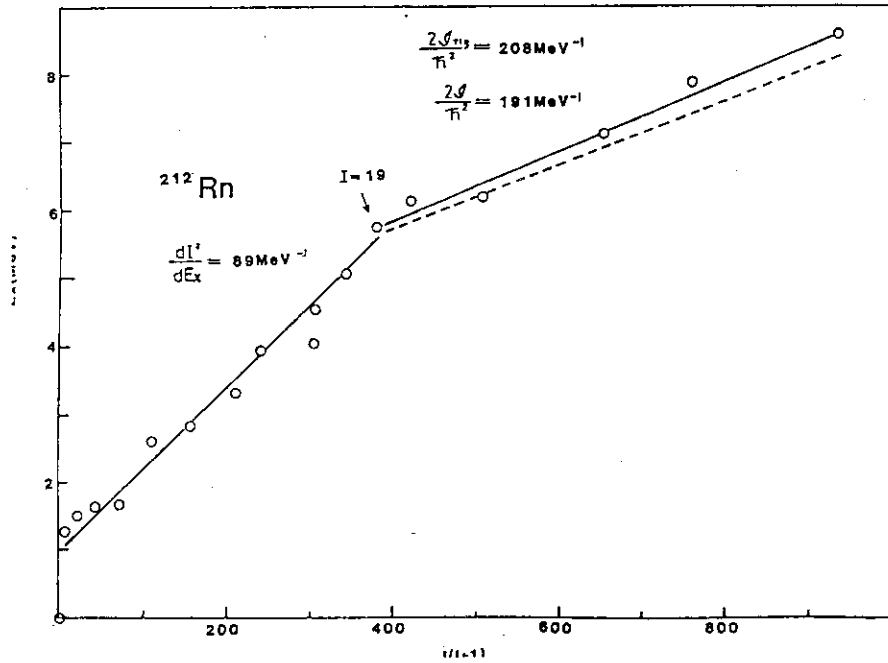


Fig. 8

能率, I : 状態の全角運動量) に近いスペクトルになり, その状態間遷移は $E_r = E_i - E_{i-2} \approx \frac{\hbar^2}{2g} (4I-2)$ に近い, 従って r 線のエネルギーは, ほぼ等間隔で角運動量に比例して高くなってゆくのが特徴であり, 図 10 の ^{174}Hf の場合は, その典型的な例になっている。一方 ^{158}Er の場合には, r 線エネルギーと角運動量の関係が $12\hbar$ から $16\hbar$ にかけて反転している。この変化を慣性率 g の回転角速度 ω への依存の変化として見るために, 剛体の回転エネルギー

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \omega L = \frac{1}{2g} L^2$$

(L ; 角運動量)

で, L を $\hbar \sqrt{I(I+1)}$ で置き換えると

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \hbar \omega \sqrt{I(I+1)} = \frac{\hbar^2}{2g}$$

$$\times I(I+1)$$

となり

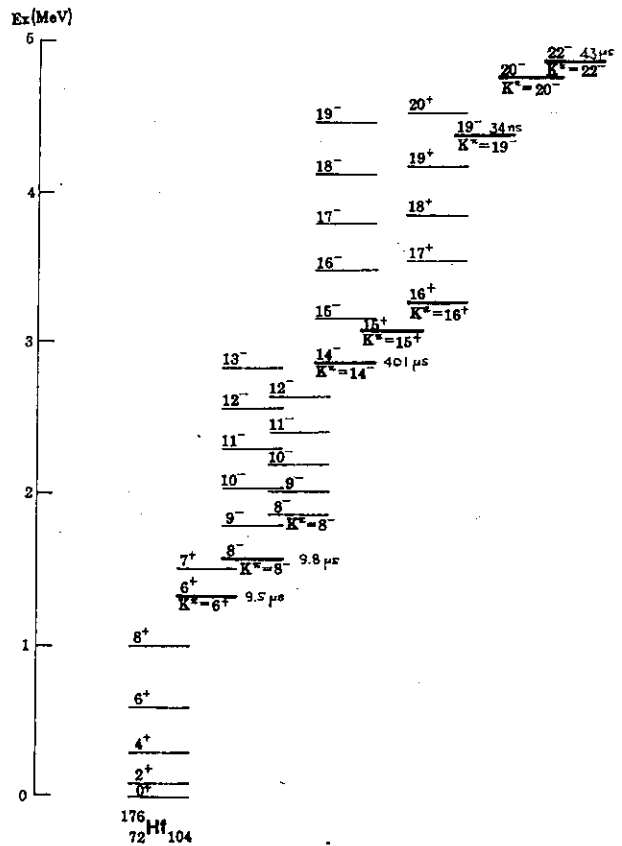


Fig. 9

$$2g/\hbar^2 = \left[\frac{dE}{dI(I+1)} \right]^{-1}$$

$$= \left[\frac{E_I - E_{I-2}}{4I-2} \right]^{-1}$$

$$\hbar\omega = 2 \frac{dE}{d\sqrt{I(I+1)}} \approx (I^2 - I + 1)^{1/2}$$

$$\frac{E_I - E_{I-2}}{2I-1}$$

という関係が得られて、実験から求まる角運動量と γ 線エネルギーから慣性率 g と回転角速度 ω が求まり、前記の2つの原子核について ρ と ω の関係が図 11 の如く得られる。図 11 の ^{158}Er に対する曲線に見られるその形から、この現象がバックベンディングと呼ばれるようになった。この現象が起る原因については現在では、Stephens と Simon⁸⁾ により提唱された Rotation Alignment Scheme によると考えられている。即ち、変形した原子核のハミルトニアンは

$$H = H_{sp} + \frac{\hbar^2}{2g} (\vec{I} - \vec{j})^2$$

(但し、 H_{sp} は単一粒子のハミルトニアン、 \vec{j} は単一粒子の角運動量) と表わされ、この回転運動の部分から、コリオリ項

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2\rho} \cdot \vec{I} \cdot \vec{j}$$

が出て来る。この項の行列要素は

$$\langle I, \Omega \pm 1 | H_c | I, \Omega \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\rho} \sqrt{(I \mp K)(I \pm K + 1)} \sqrt{j(j+1) - \Omega(\Omega \pm 1)}$$

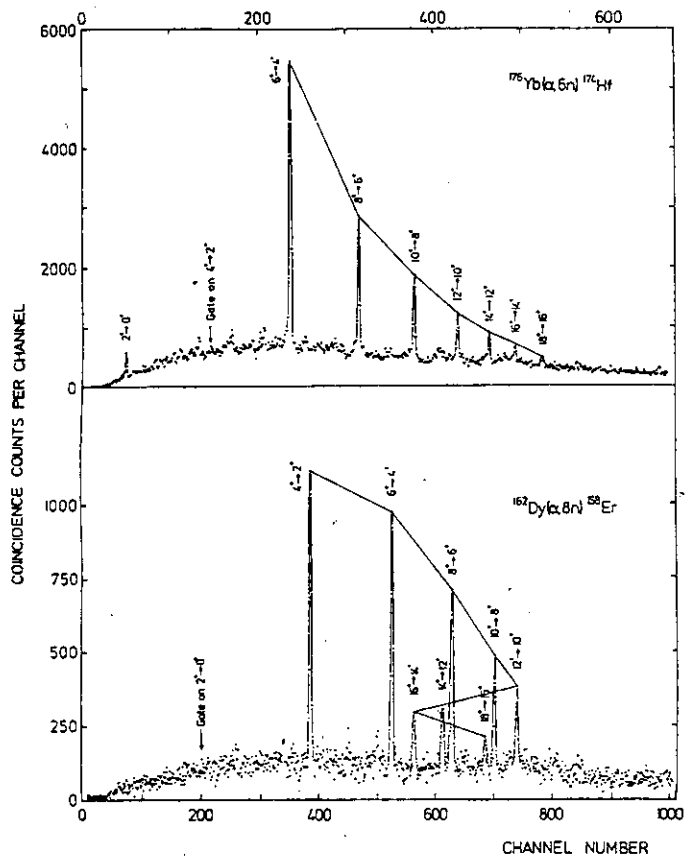


Fig. 10

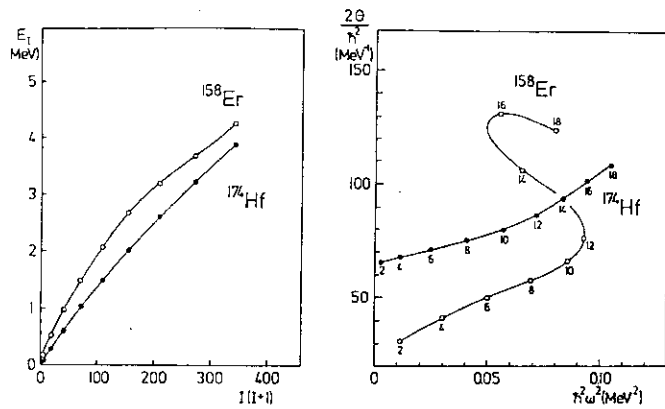


Fig. 11

と表わされる。ここで回転が早くなって角運動量 I が大きくなった時に核子が j が大きく Ω が小さい軌道 (図4参照) にいるとこの Coriolis 項によるエネルギー・ゲインが大きくなり、この軌道の核子の角運動量は、基底状態の近くでは対称軸方向への射影が良い量子数になっていたが (強結合)、高い角運動量状態では回転軸方向への射影が良い量子数になってしまう (Rotation Alignment)。¹⁵⁸Er の場合には、フェルミ面近くの2準粒子が Coriolis 力のためその角運動量ベクトルを回転軸方向へ整列され、その状態がエネルギー的に低い所に現われた、そしてその2準粒子状態の回った回転バンドが基底状態の回転バンドより大きな慣性能率のために、角運動量が12 \hbar と14 \hbar の間で交差し、そのために慣性能率が変わったものと理解されている。この様なバックベンディングを示す原子核は、その後数多く見出され、夫々の領域に応じて2準粒子軌道として関与する状態が種々議論されてきた⁹⁾。最近、Ge 検出器の周囲を大きな NaI (TI) で囲った謂ゆる Anti-Compton Shield を用いる事により、より弱い γ 線の測定も可能になり¹⁰⁾、イラスト単位でのバックベンディングのみならず、イラスト近傍の他の回転バンドでもいくつかのバックベンディングが見出されている¹¹⁾。これ等より精密な研究から、準粒子エネルギーを回転系で見る必要が認識され Cranked Shell Model の計算がなされ、更には、コリオリ項のために破れた回転対称性に代って、回転軸回りの180°回転に対する対称性から出てくる量子数 (Signature; α と呼ばれている) による選択則の重要性が指適されている¹²⁾。

References

- 1) H. Morinaga and P.C. Gugelot, Nucl. Phys. 46 (1963) 210
- 2) J.B. Grover and J. Gilat, Phys. Rev. 157 (1967) 823
- 3) S.G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 29, No.16 (1955)
- 4) A. Bohr and B.R. Mottelson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 27, No.16 (1953)
- 5) D. Horn et al., Nucl. Phys. A317 (1979) 520
- 6) T.L. Khoo et al., Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 823
- 7) A. Johnson et al., Nucl. Phys. A179 (1972) 753
- 8) F.S. Stephens and R.S. Simon, Nucl. Phys. A183 (1972) 753
- 9) F.S. Stephens, Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 43
- 10) N. Roy et al., Nucl. Phys. A382 (1982) 125
- 11) R.M. Lieder, Proc. Int. Symposium on Dynamics of Nuclear Collective Motion, ed. K. Ogawa, 1982
- 12) I. Hamamoto, Phys. Letters 102B (1981) 225

12. 原子・分子の高角運動量状態 I

東大工 渡 部 力

1. はじめに

原子分子の動的過程で高角運動量状態はどのような場合にあらわれ、どのように観測されるのだろうか、これはこの研究会の世話人の会合のときに原子核研究者の側から「高角運動量状態」として出されたテーマである。われわれ原子分子の研究者の側では日頃こうしたテーマで考えたことがなかったので、すぐにどのような現象があるかを考え浮ばなかった。こうした次第ではあるがこれは一応考えて見る価値はありそうだし、とにかく可能性の問題としてもとり上げるのは面白かろうと云うことになった。それで世話人の一人としてどのような問題があるか考え、誰に講演を依頼したらよいかを考えた。本当はこうした概括的な話を誰かにお願いしたいと思ったのであるが適当な人が見当たらないうちに時間も迫ってしまった。それで世話人の一人として考えたことを述べて前座を努めたいと思う。

まずは角運動量状態についての定義から出発する。原子では原子の高い軌道角運動量状態をさしている。また分子ではこれ以外に分子全体としての回転運動の高い運動量状態にあることを云う。これがどのような場合に観測されるかを考えて見よう。原子では一般に基底状態からの直接遷移では出来ないで主として正負イオンの再結合、電子捕獲の際に出来る。寿命は一般に低い軌道角運動量の場合にくらべて長い。また電子の高励起状態は観測が困難である。分子の回転運動の高い角運動量状態は一般に異常回転と呼ばれている。こうした異常回転は分子の解離、分解などの際に起る。すなわち分子の励起、電離、化学反応などにより解離が起ると、全系の重心に対する角運動量は保存されているが、解離によって一部の分解片は重心に対して一定の大きい角運動量をもつ軌道をとって遠くへとんでゆく、その分だけ分子の異常回転となる。

2. 原子の励起状態

中性原子の分光学的に観測されている高角運動量状態はNBSの原子準位表〔1〕では表Iに示すのが最も角運動量の大きい状態の例である。

3. 多価イオンの励起状態

近年多価イオンの電子状態がプラズマ分光、ビームフォイル分光などによって観測されているが、この中で次にのべる場合によるものの他は、あまり高角運動量状態は見かっている。例え

High angular momentum states in atoms or molecules I.
Tsutomu Watanabe
(The University of Tokyo)

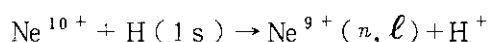
表 I 分光学的に観測されている中性原子の高角運動量状態の例

原子	電子状態	全角運動量
Cr I	$3d^5 ({}^2H) n x$	${}^{3,1}K (L=7), {}^{3,1}L (L=8)$
	$3d^4 4s ({}^2I) n x$	${}^{3,1}K (L=7), {}^{3,1}L (L=8)$
Mn I	$3d^5 4s ({}^2H) n x$	${}^4K (L=7), {}^4L (L=8)$
	$3d^6 ({}^1I) n x$	${}^2K (L=7), {}^2L (L=8)$
Co I	$3d^7 4s ({}^3H) n x$	${}^4I (L=6), {}^4K (L=7)$
		${}^2I (L=6), {}^2K (L=7)$

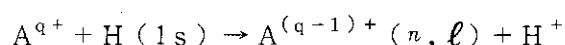
ば Fe VIII ~ Fe XXVI ($Fe^{7+} \sim Fe^{25+}$)での高角運動量状態は Fe X (Fe^{9+})で 4G , Fe XII (Fe^{11+})で 4G などである。これは観測している手段が紫外、可視分光である場合には高角運動量状態からの遷移は波長領域が異なり、観測しにくい。この事点をとらえて高角運動量状態がつかられていないと結論するのは早計である。

4. 電子捕獲による高い ℓ 軌道電子をもつ原子 (イオン)

同じ多価イオンでも中性原子によって外殻電子が捕獲される場合には高い軌道角運動量 ℓ に捕獲される確率が多い。図 1, 図 2 その例を示す。図 1 には



の過程について n, ℓ 分布を核子当りの入射エネルギー - 1 keV/amu, 25 keV/amu, 500 keV/amu について UDWA (Unitarized Distorted Wave Approximation) の計算結果である [2]。また図 2 には



の同じく (n, ℓ) 分布を $q=10 \sim 20$ に対して核子当り入射エネルギー - 100 keV/amu について CTMC (Classical trajectory Monte Carlo) の方法で計算した。両者の一致はかなりよい。これによると相対速度 1 a.u. 以上の入射速度では ℓ の大きいところに捕獲されることを示している [3]。

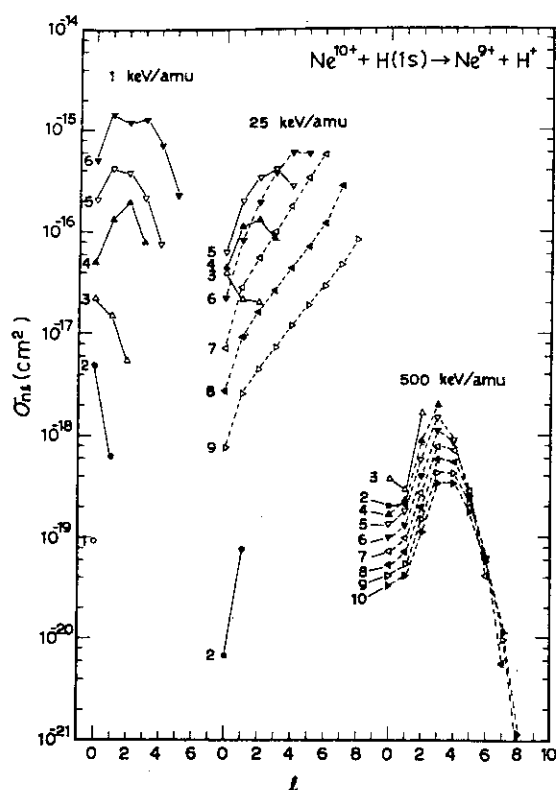


図 1 $Ne^{10+} + H(1s) \rightarrow Ne^{9+}(n, \ell) + H^+$ の過程での終状態の n, ℓ 分布, 計算は UDWA (Unitarized Distorted Wave Approximation) による [2]。

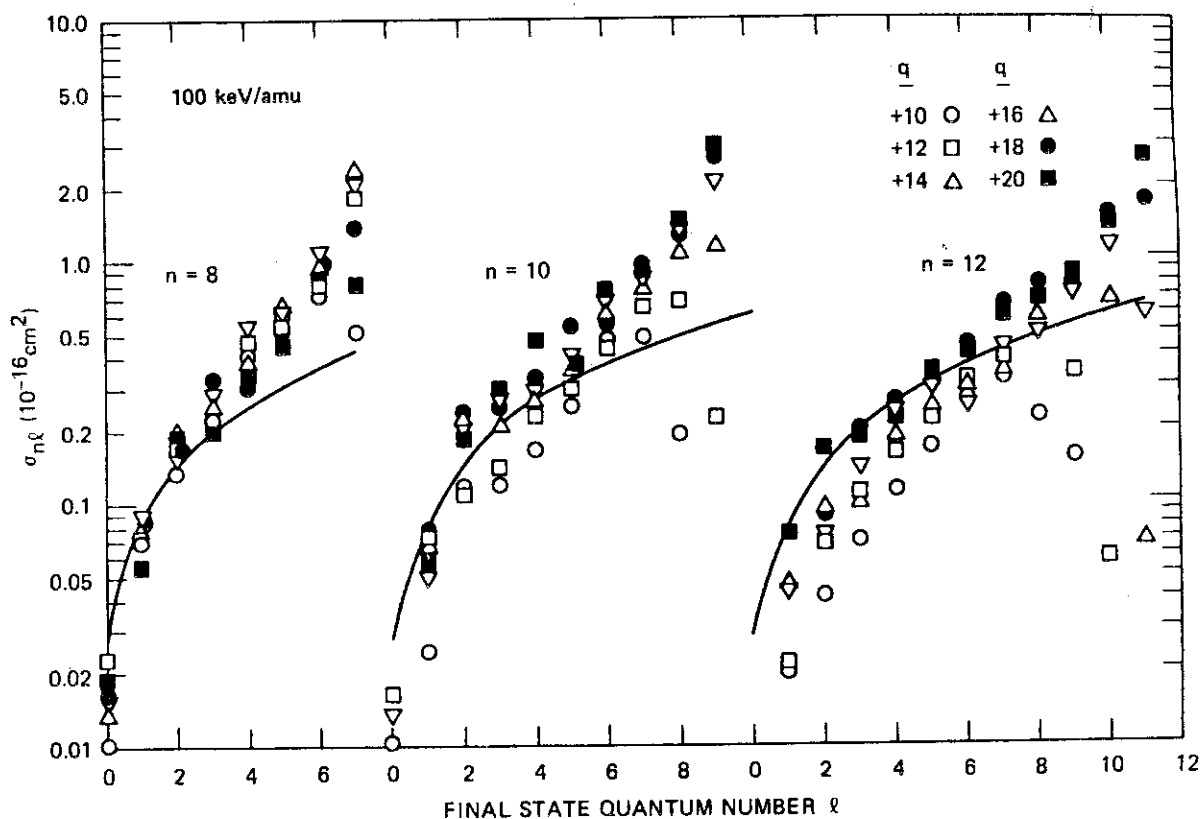


図2 $A^{q+} + H(1s) \rightarrow A^{(q-1)+}(n, l) + H^+$ の過程による終状態の (n, l) 分布をいろいろな q の値について示す。計算はCTMC (Classical Trajectory Monte Carlo) による入射エネルギー 100 keV/amu. [3]。

5. 高リドベリ状態

前の例の n が大きくなればリドベリ (Rydberg) 状態となる。リドベリ状態の放射寿命 (Radiative life time) は軌道角運動量 l によって大いに異なる。これは双極子遷移による遷移が、つねに $l \rightarrow l \pm 1$ しか許されない。このために l が大きいときには $n \rightarrow n'$ が小さくなる。したがってエネルギー差 $\Delta E_{nn'}$ は小さくなる。 $\Delta E_{nn'}$ の小さい場合遷移確率 ($\propto (\text{寿命})^{-1}$) は $\Delta E_{nn'}^2$ に比例して小さくなるためである。水素原子およびヘリウム原子の場合の計算例を図3、図4に示す[3, 4]。縦軸が対数目盛である点に注意されたい。このように l が大きくな

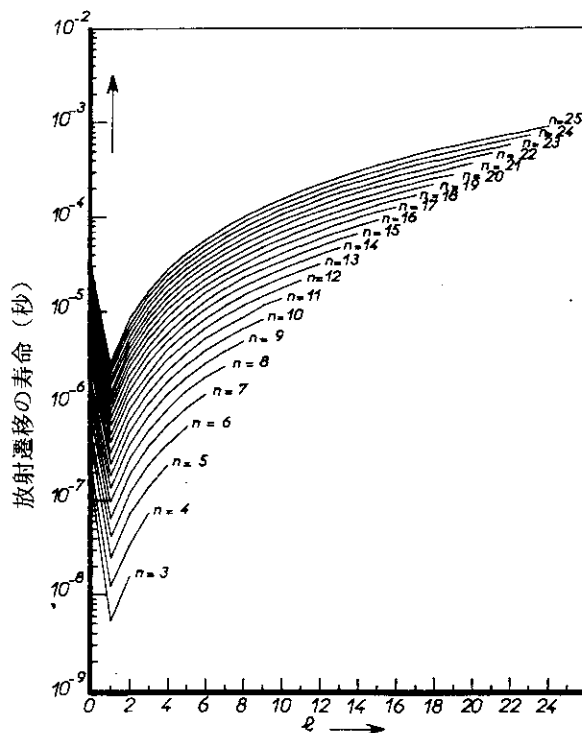


図3 水素原子の n, l 状態とその寿命 [3]

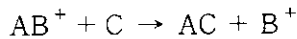
ると放射寿命は急に長くなる。このことが気相での高角運動量リドベリ原子（イオン）の実験を可能にしている。一般に主量子数 $n = 30$ のリドベリ原子なら $l = 0 \sim 29$ までがあるが、レーザー光励起では l が小さい励起状態しか生成されない。 l が大きいリドベリ原子（イオン）を生成するには前記の電子捕獲、再結合反応などが必要である。これらの過程では l の大きい状態が主要となるかまたは l について一様分布に近い分布となる。

6. 内殻多重励起

L 殻に p^3 の空孔が出来たとする場合 $L \leq 3$ であるが、 $L = 3$ であれば G 状態となる。このような多重内殻励起は重イオンによる原子の内殻励起などでくつられる。これがどのような高角運動量状態であるかは未だ識別されていない。これからの問題であると云える。

7. イオン・分子反応

分子の関与する現象では分子の回転運動は原子核の質量が大きいために通常回転運動で熱平衡分布（ボルツマン分布）をしている場合でも分子の回転の量子数は 10 程度になることは（常温で）珍しいことではない。したがって異常回転と云われる現象はこれからいぢるしく外れたところに分布している（多くは高角運動量に）状態をさしている。この異常回転をひき起す過程にイオン・分子反応がある。イオン・分子反応とは



などの様に、イオンと分子の衝突による反応をさしている。イオン・分子反応ははじめ入射系は分子間距離 r ，衝突系の換算質量 μ ，C の分極率 α_c ，衝突系の軌道角運動量量子数 J として

$$-\frac{e^2 \alpha_c}{2 r^4} + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2 \mu r^2}$$

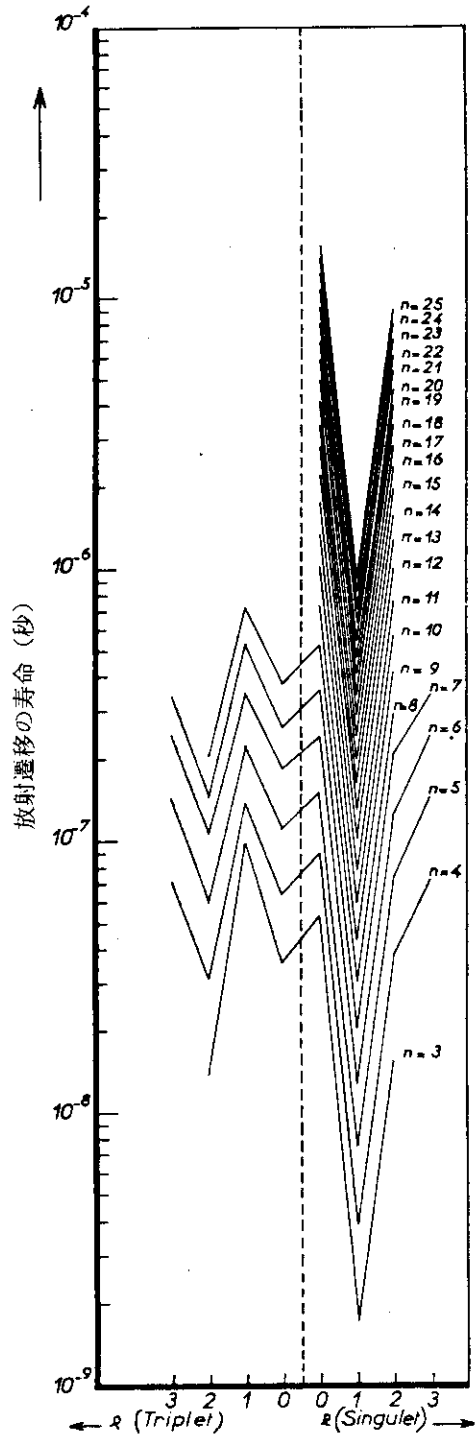


図4 He の高い励起状態とその寿命 [4]。

と云うポテンシャルの中を運動する。第1項は分極ポテンシャル、第2項は遠心力ポテンシャル項である。図5に示すように入射系の運動エネルギーがポテンシャルの最大値Aより大きければイオン分子反応が起る(ある統計的確率で)。この反応の起る臨界のJをしらべて見ると、場合によるが大体、通常で分子で常温で $J \cong 10^3$ の程度である。

ポテンシャルの山を越えて一時的に Collision Complex (活性化錯合体) がつくられるがこの場合の内部全角運動量は 10^3 程度である。これが再び分解によって、上の例ではACと B^+ の相対運動とACの回転運動に転換される。もしこれが等分配されるとすると衝突後のACの回転運動も 10^3 の程度と云うことになる。この回転状態を観測すれば異常回転を行っていることになる。近年ようやくこの種の実験が可能となって来た。

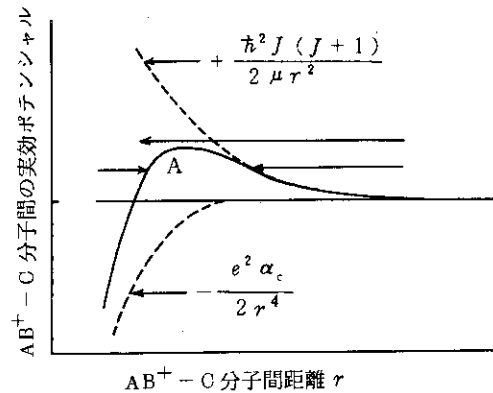


図5 イオン・分子反応の系での実効ポテンシャル。入射系の運動エネルギーが最大値Aを越えると反応が起る。

8. 光分解反応電子衝撃による分解反応

光子または電子衝撃によって分子を電子励起または電離すると分子によっては基底状態とは原子の幾何的配置が異なったものが安定であるものや、不安定で解離へ向う構造を励起状態、電離状態がもっていることが多い。こうした場合には、分解のために異常回転を起すことが多い。例を H_2O にとると H_2O は図6に示すように基底状態では三角形が安定であるがある励起状態では直線形(B)が安定となる。このためにHは安定な位置に向いOHとHに分解した場合にOH基が異常回転をひき起す。この例はつぎの大旗氏の講演〔5〕によって紹介されている。

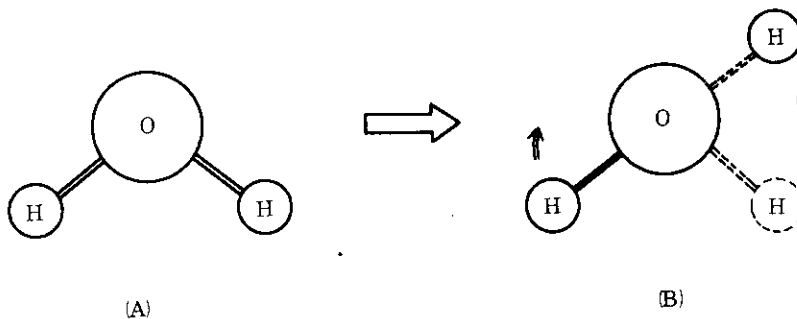


図6 基底状態では三角形が安定な原子配置となっている H_2O はある種の励起状態では直線形が安定である。このために原子はその形にならうとしてOH基が異常回転を起す。

文 献

- [1] C.E. Moore: "Atomic Energy Levels" vol 1^o3 Nat. Stand. Ref. Data Ser, (U.S. Government Printing Office, Washington D.C. 1971).
- [2] H. Ryufuku and T. Watanabe: Phys. Rev. A20 (1979) 1828.
- [3] R.E. Olson: Phys. Rev. A24 1726 (1981).
- [4] J.R. Hiskes and C.B. Tarter: Report of the university of California, Radiation Laboratory UCRL-7088 Rev. I (1964) Livermore.
- [5] A.H. Gabriel and D.W.O. Heddle: Proc. Roy. Soc. A258 (1960) 124.
- [6] 大旗 淳: JAERI-M 82-159 (1982) 148.

13. 分子の高角運動量状態 II

九大教養 大旗 淳

はじめに、研究会での私の話は私供の研究の紹介に主点がかかり、やや宣伝的になったことを反省している。

もう少し、材料を集め他の人々の仕事の紹介もした方が多くの方々に関心をもって頂けると考え、この文ではそのように努力してみた。

さて、分子の一連の帯スペクトルは分子の回転状態を表しており、その強度分布は温度によって決まる。このことが逆に分子の帯スペクトルの強度分布の測定が天体の温度や放電管内の温度の決定に役立つわけである。

ところが、真空放電管中にわずかな量の水 (H_2O) あるいはアセチレン ($HCCH$) を混入させると、OHあるいはCC及びCHのスペクトルが得られる。その帯スペクトルを調べてみると異常な高温に対応する強度分布を示すことが認められた。⁽¹⁾ 水分子の場合この異常回転スペクトルが得られる理由として、早くから水の分解過程において、一つの水素原子が酸素原子のまわりを回転しながら離れて行くためであると想像されていた。⁽²⁾ それは電子との衝突で分子の回転が異常に励起されるとは考えにくいからである。(電子は軽すぎる)

水分子の分解によるOH遊離の異常回転については、上記のOldenbergの発見以来多くの研究

Light source	Investigator	Reference
Geissler discharge	O. Oldenberg	(1)
	H. Wakeshima	(2) (3)
Low voltage arc	M. Ninomiya	(4)
Spark at low pressure	T. Horie, T. Nagura and M. Otsuka	(5)
High frequency glow discharge	M. Ninomiya	(4)
High frequency electrodeless ring discharge	H. P. Broida and W. R. Kane	(7)
	T. Horie	(6)
Sensitized fluorescence	E. R. Lyman	(8)
Electrical arc	E. R. Lyman	(9)
Hydrogen-oxygen flame	H. P. Broida and K. E. Shuler	(10)
	W. R. Kane and H. P. Broida	(11)

References

- 1) O. Oldenberg: Phys. Rev. **46** (1934) 210.
- 2) H. Wakeshima: Proc. Phys. Math. Soc. Japan **24** (1942) 367.
- 3) H. Wakeshima: J. Phys. Soc. Japan **2** (1947) 12.
- 4) M. Ninomiya: J. Phys. Soc. Japan **4** (1949) 275.
- 5) T. Horie, T. Nagura and M. Otsuka: not yet published.
- 6) T. Horie: J. Phys. Soc. Japan **1** (1946) 6.
- 7) H. P. Broida and W. R. Kane: Phys. Rev. **89** (1953) 1053.
- 8) E. R. Lyman: Phys. Rev. **56** (1939) 466.
- 9) E. R. Lyman: Phys. Rev. **53** (1938) 379.
- 10) H. P. Broida and K. E. Shuler: J. Chem. Phys. **20** (1952) 168.
- 11) W. R. Kane and H. P. Broida: J. Chem. Phys. **21** (1953) 347.

High angular momentum states in molecules II.

Kiyoshi O-ohata

(Kyushu University)

者によって調べられた。それについては1956年の堀江らの論文³⁾に紹介されているので、ここではそれを掲げさせて頂く。

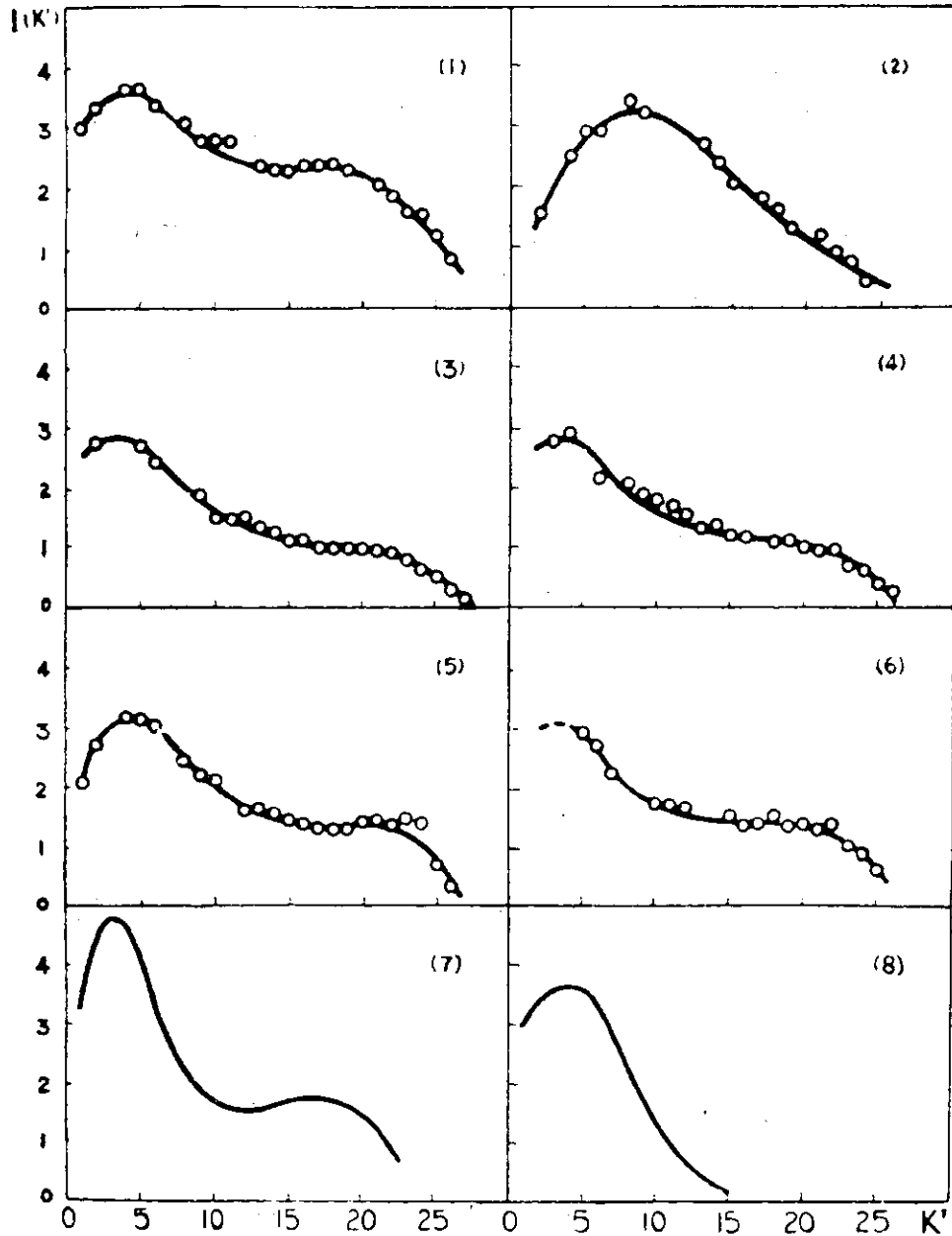


図1. Rotational intensity distributions in several kinds of light sources; (1) Geissler discharge, (2) Spark at low pressure, (3) (4) (5) (6) High frequency electrodeless ring discharge of 5 metres in wave-length, P_1 , P_2 , Q_1 and Q_2 branches respectively, (7) High frequency glow discharge, (8) Maxwellian distribution for 800°K.

図1は前頁の各研究の結果であって横軸はOH基の回転量子数であり、縦軸は水分子から分解によって生じた瞬間におけるOH基の各回転状態を占めている割合である。

いずれの場合でも気体の温度として想定される800 Kに対するマックスウェル分布〔図(8)〕とは異っており、約14,000 Kの温度に対する分布と考えられるもう一つの山がある。

何故このような高い回転数の状態が得られるのであろうかそれが問題であった。

この問題に最初に理論的に挑戦したのは東工大の故新楽和夫教授である。彼は半経験的手法に

よって水分子の励起状態のエネルギー-表面を推定し、図2と3のような結果を得た。⁴⁾

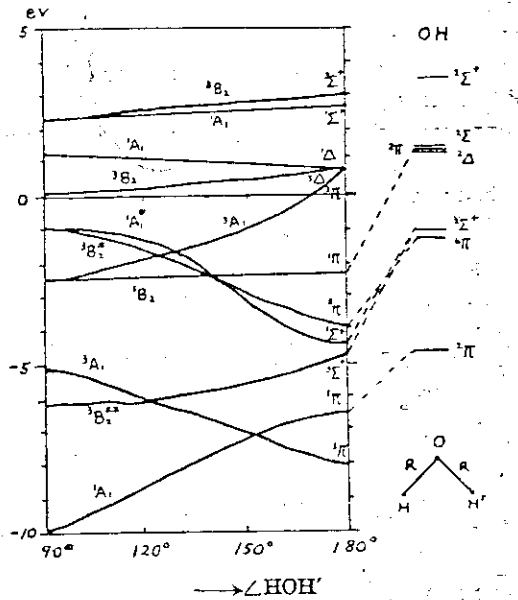


図2. Electronic energies of $1A_1$, $1B_2$, $3A_1$ and $3B_2$ of H_2O ($R=0.96 \text{ \AA}$). The origin of energy is $W(O; 3p)+2W(H; 1s)$.

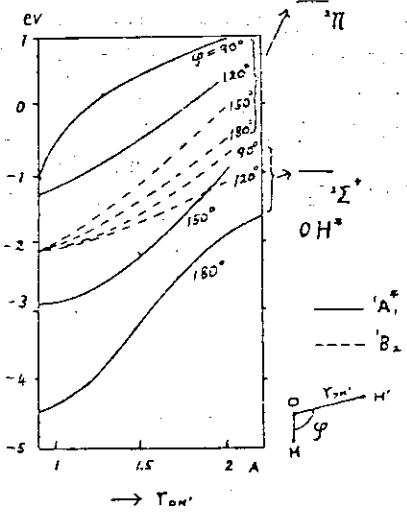


図3. Potential surfaces for $1A_1^*$ and $1B_2$.

The values of J_σ and J_π for arbitrary r_{OH} 's are obtained by the extrapolation according to the semiempirical method of Eyring¹¹⁾.

これらの図から新樂は常温の回転分布は $1A_1^*$ から、異常回転分布は $3B_2^*$ から生ずると結論した。

ところが放電管内の電子には色々な速さのものがあるので、分析がむずかしいというので、電子線のエネルギーをそろえて、水分子にあてる実験が行われた。その結果が前述の1956年の堀江らの論文に与えられている³⁾同じものが図4に与えられている。それみると前頁の放電管内の結果は常温分布の方が異常高温分布より強いが、電子の速さをそろえると逆になることが知れる。

堀江らの意見によると、水分子においては酸素原子の2p電子と水素原子の1s電子の間の電子対によって化学結合が作られていると考えてよい。これに電子が衝突すると酸素原子の2p電子が3s軌道に励起される。酸素の3s電子と水素の1s電子の電子対による化学結合は方向性をもたないので、水素原子は酸素原子のまわり回転し、分子型として線型に近づきつつ離れて行く、角運動量の保存則によって残ったOHは強く回転する。ところが酸素の3s電子と水素の1s電子の間に3重結合が作られるとすれば、それは反結合であり、酸素と水素は強く反発し、このような分解ではOHに回転力は与えられない。

堀江らの意見によると、異常回転は一重項から生じ、常温回転は三重項から生ずる。新樂の結論と矛盾するが、それは新樂は酸素の3s軌道を正しく考慮していないからである、というのである。以上の定性的議論を理論的計算で裏うちされるが強く望まれた。しかし、研究会でも述べたように三原子分子のような簡単な分子の電子状態の計算でも1956年当時は非常に困難であった。つまり、原子軌道としてSlater型が用いられている限りむずかしい。原子軌道として、Gauss型関数が用いられ得ることを明示したのは我々の1965年の論文⁵⁾である。それ以後多原子分子の電子状態の計算にはほとんどGauss型関数が用いられるようになった。

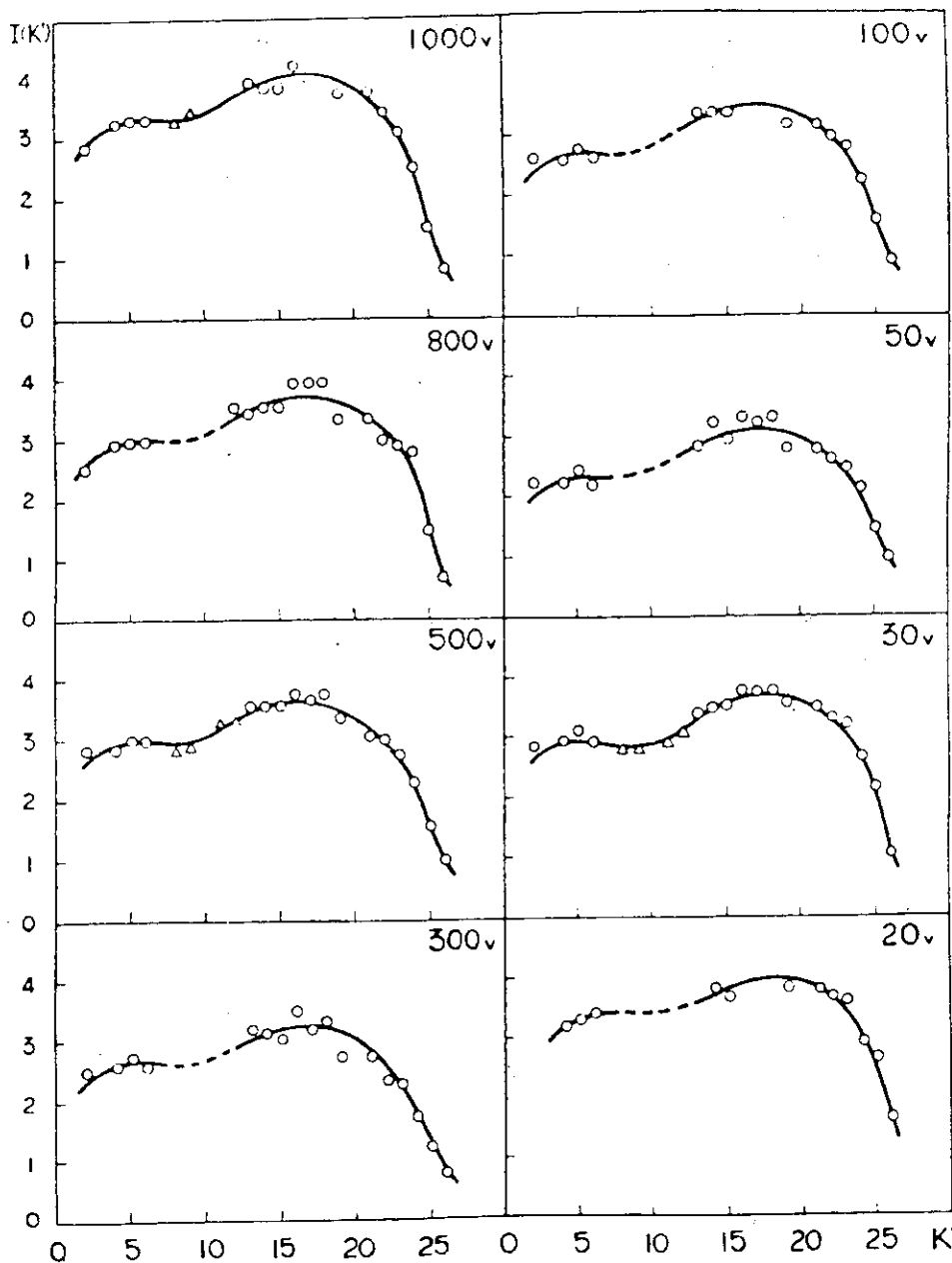


図4. The abnormal intensity distributions among rotational lines in purely electronic collisions of water molecules. The energy of electrons is indicated by the upper limit.

図5は、前述の堀江らの考えを模式的に示した図である。筆者は水分子の分解過程を支配するのは励起状態のポテンシャル表面であると考えているが、必しもそれを知らなくても上述の実験結果を説明することができるという考えがある。それはやはり阪大の堀江研究室の方によってなされた仕事であるが⁶⁾それによるとエネルギー保存則と全角運動量保存則とを守り、一方の水素原子は酸素原子に強く結合したままであるが、一方の水素原子が離れて行くとして、初め平衡の位置にあり、系全体の重心からみて、その水素原子までの距離とその約2倍の距離の範囲の球殻内にいるときは、残基OHと相互作用をもっていると仮定して位相空間の体積を次頁の(1)式で求める。

(1)式でCは分子全体の角運動量、Eはexcessエネルギー、NはOH*の角運動量ベクトル、p、

\mathbf{P} 及び \mathbf{r} , \mathbf{R} は出て行く水素 H と残基 OH^* の運動量及び全系の重心からみた位置ベクトルである。ε は回転エネルギーである。

このような計算を行い、堀江らは実験結果を説明し得るような結果を得ている。このことは出て行く水素原子は酸素原子からの距離が2倍くらい伸びると自由に離れて行く、それまでゆっくり OH 基のまわりをかけめぐり、その間に excess エネルギーを振動や回転の各自由度に十分ゆき渡らせて後離れて行くと考えれば、実験結果を説明できることを示している。この方法は H_2O だけでなく H_2O_2 のような4原子分子の分解にも拡張研究された。⁶⁾ これらの研究の結果を図6, 7, 8に示した。これらを見ると非常によく実験結果を再現しているように思える。

考えてみると不思議である。出て行く水素原子は結合距離の2倍はなれば、もう残基 OH とは無関係に動きうると仮定するのはよい。しかし、これらの論文では水素がそこから出て行くことは何も考えられていない。水素原子が平衡位置から動き出して相互作用のある範囲をうろうろしているときの位相空間の各点各点が、そのまま、分子が分解したときの状態分布に反映されるとは考えにくい。出て行く水素原子が相互作用の範囲を出るときの状態のみが重要であって、それが最終的な振動分布や回転分布を与えるように思う。それ故に実験結果とよく一致するのが不思議なのである。

ところで、水分子を水素原子から出る Lyman α の単色光で輝らすと

異常回転スペクトルのみ得られるという実験結果がでた。⁷⁾ 図6ではその結果も電子衝突の場合も同じように上述の統計力学的手法で説明がつくように述べられているが、筆者の考えでは両者には明らかな違いがある。水分子を Lyman α で照射したときに出る OH のスペクトルを解析

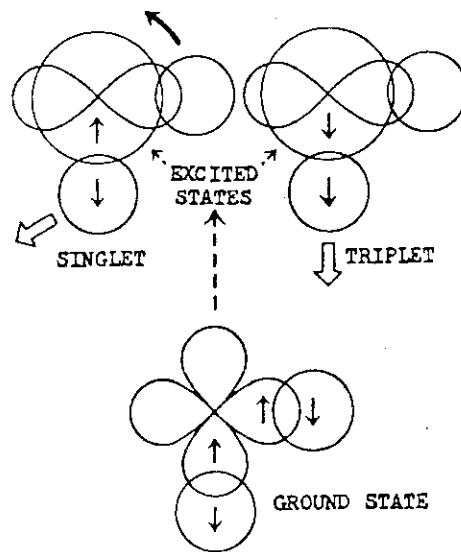


図5. A tentative interpretation of the abnormal rotation.

$$\begin{aligned} \Phi(\epsilon) = & \text{const} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{R} \int d^3\mathbf{p} \int d^3\mathbf{P} \int d\theta d\phi \int dP_\theta dP_\phi \\ & \times \delta[E - (\mathbf{p}^2/2m) - (\mathbf{P}^2/2M) - (N^2/2I)] \\ & \times \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}) \delta(m\mathbf{r} + M\mathbf{R}) \\ & \times \delta(\mathbf{r} \times \mathbf{p} + \mathbf{R} \times \mathbf{P} + \mathbf{N} - \mathbf{C}) \delta[\epsilon - (N^2/2I)]. \quad (1) \end{aligned}$$

where θ , ϕ are the spherical polar coordinates of the molecular axis of OH^* with respect to the rectangular axis fixed in space, and P_θ , P_ϕ the conjugate momenta, and where m is mass of H, M mass of OH^* , I moment of inertia of OH^* .

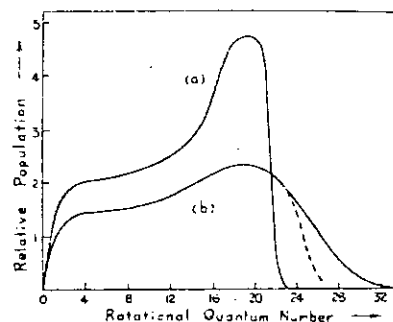
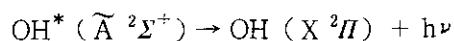


図6. Calculated relative rotational populations of OH^* ($^2\Sigma^+$) split from H_2O . (a) Lyman-alpha photon dissociation of H_2O . (b) Electron-impact dissociation of H_2O . The dotted line indicates deviation due to predissociation of OH^* .

した結果の回転分布が異常回転を示すことは前述の通りである。その様子は図9に与えられている。このときのエネルギー準位の相対的位置が図10に与えられている。これらの図は山下の論文⁷⁾から借用したものである。

Lyman α 線の吸収は 10.20 eV の励起に当り励起状態は一重項である。そこから分解して $\text{OH}^*(\tilde{A}^2\Sigma^+) + \text{H}(^2\text{S})$ となる。問題にしている回転スペクトルが得られるのは、



と示されるように分解した先が OH の励起状態 (*印をつけるのはその為) であって、それが基底状態に移るとき光を出すのである。そのエネルギーは 4.02 eV である。一方 H_2O 分子を熱解離させるのに 5.12 eV 必要であるので水分子が Lyman α を吸収したときの excess エネルギーは 1.06 eV である。従って OH^* の回転状態として最高の量子数は 22 であることが図示されている。それがスペクトルにも認められるというわけである。では 10.20 eV の励起エネルギーに相当する準位は何かということになるが、その詳細な検討は鶴淵によってなされた。⁸⁾そしてその励起状態は \tilde{B}^1A_1 状態であることが明らかになった。次頁に示す鶴淵によって示された相関図 11, 12 からそのことはよくわかる。

図 11 及び 12 はそれぞれ水分子の 1 重項及び 3 重項の各状態とそれが分解するとき、どのような状態につながって行くか、計算や実験の結果を総合して描いた correlation diagram といわれる図 (相関図) である。これは鶴淵氏によってなされた。⁸⁾

この図から $\text{OH}^*(\tilde{A}^2\Sigma^+) + \text{H}(^2\text{S})$ に分

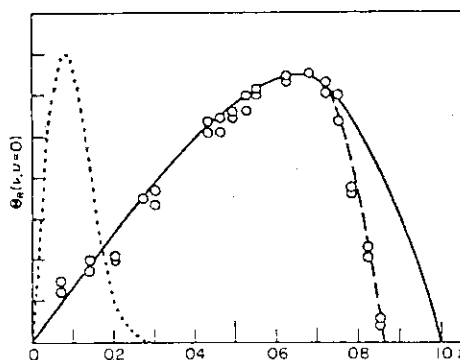


図 7. The i. r. p. d. computed for $\text{OH}(A^2\Sigma^+, v=0)$ from $[\text{H}_2\text{O}_2]$ is shown by the full line curve, and the experimental plots by means of crossed-beam technique are indicated by the open circles. The dashed line curve is due to predissociation of $\text{OH}(A^2\Sigma^+, v=0)$. The dotted line curve shows the thermal distribution of the rotational levels for 300 K.

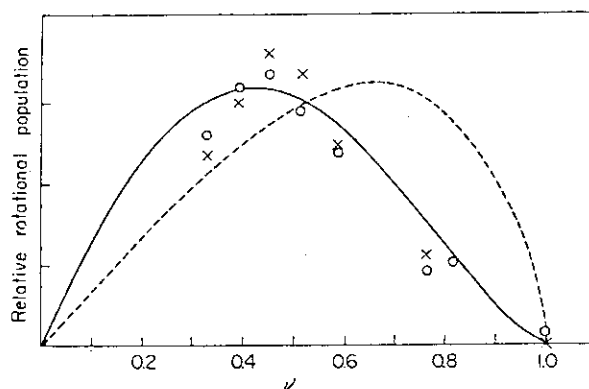


図 8. Experimental plots of the rotational distributions of CH^* resulting from electronically excited C_2H_2 (crosses) and CH_2O (open circles). The full line curve is a theoretical rotational distribution for $[\text{C}_2\text{H}_2]^* \rightarrow \text{H}^* + \text{CH}^* + \text{C}$, while the dashed line curve is for $[\text{C}_2\text{H}_2]^* \rightarrow \text{CH}^* + \text{CH}$.

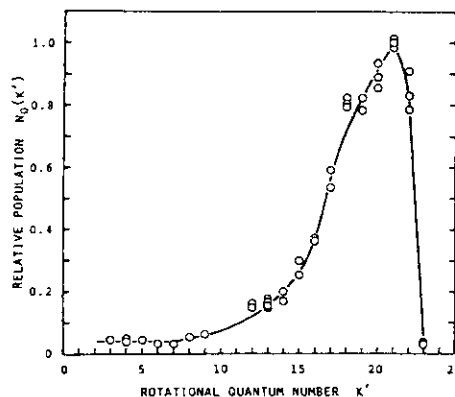


図 9. The rotational population distribution of $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ for $v=0$ obtained by the crossed-beam method.

解する状態は H_2O の励起状態としては \tilde{B}^1A_1 と 3A_1 であることが示されている。

さて、 H_2O の励起状態のポテンシャル表面の量子論的計算は最近かなり行われた⁹⁾しかし、十分でなかったので、筆者は大きな基底関数系をとり、比較的バランスのとれた電子配置間相互作用を取り入れつつ、水分子の励起状態のポテンシャル表面を計算した。

その結果励起状態のポテンシャル表面を比較的良好な精度で求めることができた。そこで筆者は赤松氏と一緒にその表面上で、一つの水素原子の古典力学的運動を取扱った。¹⁰⁾ その結果は次頁の図 13 に示されている。

図 13 は HO を固定して、それに相対的にもう一つの H を動かしたときの \tilde{B}^1A_1 状態のポテンシャル表面である。

OH 軸の両側に穴があいており、 OH の両側に頂度スリバチのようにポテンシャル壁ができています。従ってその上での陽子の運動は頂度サーカスで大きな桶の壁を走ってまわるオートバイのように、 OH 基のまわりをぐるぐるまわる可能性があり、実際にそのような軌跡が得られた。陽子の古典力学的運動の軌跡は破線で描かれている。 H 原子は出ていくまでに非常に長い時間を費すようであるから、先の統計力学的方法ももっともなところもあるわけである。Franck Condon 原理から基底状態と同形のまま励起状態に移り、そこから陽子が出発するわけであるが、陽子の波動関数はそのとき WKB 法で与えられる形に近い wave packet をしていると考えられる。その後その wave packet は自然に拡がると仮定しても、山下らの実験を再現することができそうである。計算結果は図 14 の破線のようになり、山下らが、水分子に Lyman α を照射して得た回転状態の分布とよく

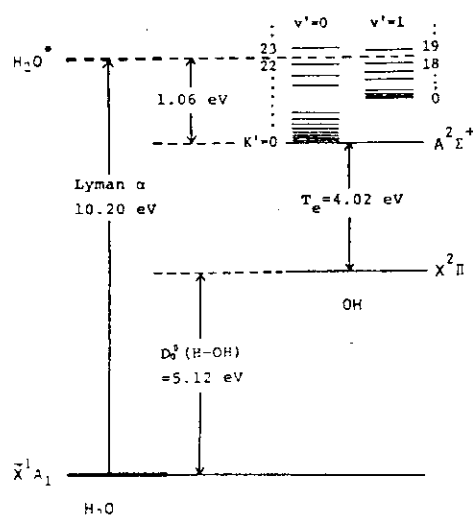


図 10. The energy level diagram related to the Lyman α photon impact excitation of H_2O leading to $OH(A^2\Sigma^+)$.

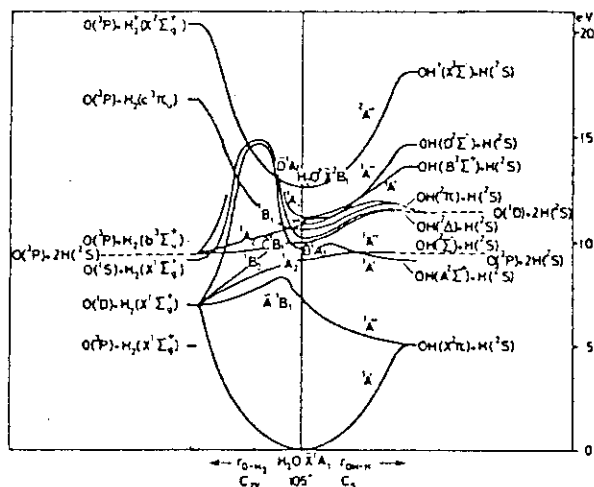


図 11. Correlation diagram for the singlet states of H_2O and fragment species.

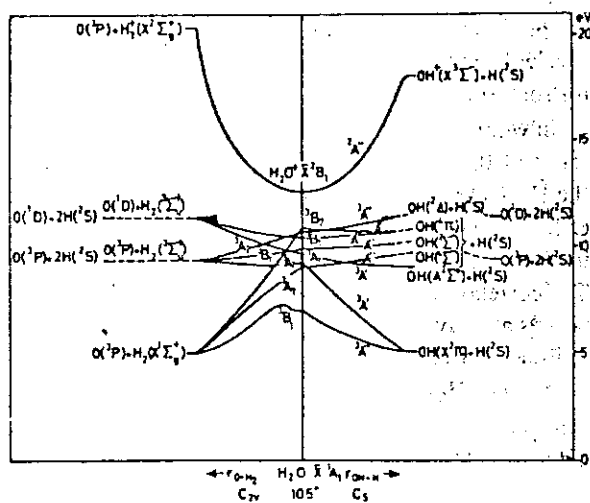


図 12. Correlation diagram for the triplet states of H_2O and fragment species.

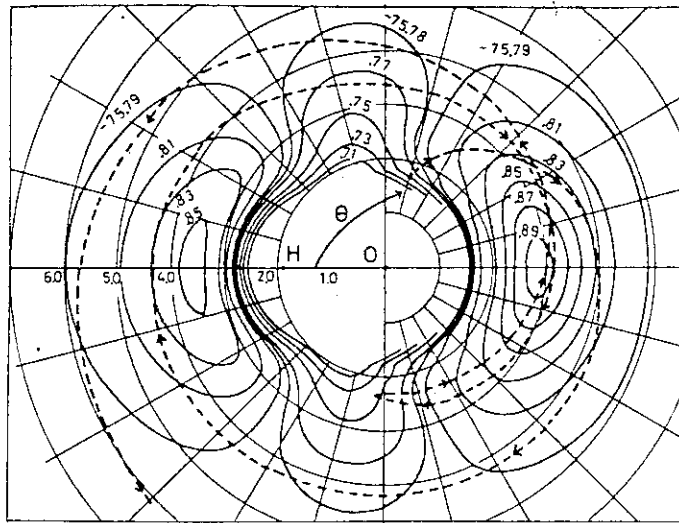


図 13. A contour plot of the analytical potential and a trajectory of the dissociation for $v'=0$. The trajectory shows that H_2O decomposes after a half vibration. It takes 5.40×10^3 a.u. (1 a.u. = 2.42×10^{-17} sec).

一致している。

なお三重項状態つまり 3A_1 状態に対するポテンシャル表面は図15に示す通りである。この場合もOH軸上のO側に浅いくぼみがあるが、これによって陽子の軌道がそんなに曲げられるとも考えられないし、この状態からの水素原子の分離は単純なはなれかたを考えると考えられ、OHの回転分布としては常温分布を示すものと思われる。このようにして電子衝突による分子の分解には3重項状態を経由してのものも考えられ、回転分布に2つの山が認められるけれど、光吸収では異常回転分布だけが得られることも理解できる。

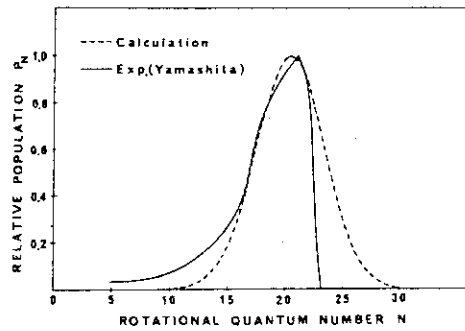


図 14. The calculated angular momentum distribution of OH^* in $v'=0$ together with the experimental data of Yamashita.¹⁰⁾

なお、この分解過程の量子力学的計算も目下企画中であるが、まだ結果は得られていない。方

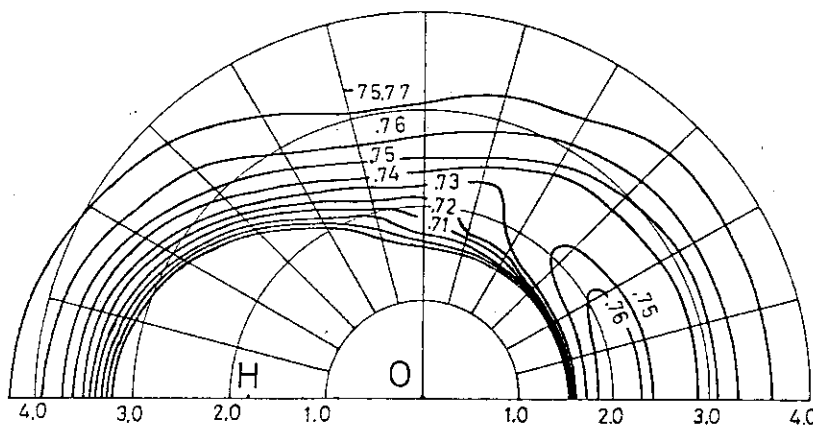


図 15. Contour plot of the $H_2O(^3A_1)$ potential surface after O-ohata and Liu.

法は高柳氏¹¹⁾がイオンと極性2原子分子の衝突による分子の回転励起で用いられている方法が使えるけれど、渡部氏より注意があったように、イオンと2原子分子の衝突による分子の回転励起では、そんなに高い回転量子数の状態は関与しえないが、上記の問題では非常に高い角運動量が関与しているので、連立方程式を解くとしても高次元ものを解くことになり容易ではないだろう。

最後に、長年月に亙り水分子やその他の分子の異状回転現象を研究され、けっして探究の手をゆるめられなかった元大阪大学教授堀江忠男先生に敬意をいたくとともに、先生及び先生の研究室一同のなされた結果を勝手に使用させて頂き、更にそれらに対する筆者の理解も誤っているかもしれないと考えます。お許し下さい。

文献

- 1) O. Oldenberg: Phys. Rev. 37 (1931), 194.
W. Lochte - Holtgreven: Zeits f. Phys. 67 (1931), 590.
- 2) O. Oldenberg: Phys. Rev. 46 (1934), 210.
- 3) T. Horie, T. Nagura and M. Otsuka: J. Phys. Soc. Japan, 11 (1956), 1157.
- 4) K. Niira: J. Phys. Soc. Japan, 7 (1952), 193.
- 5) K. O-ohata, H. Taketa and S. Huzinaga: J. Phys. Soc. Japan, 21 (1966), 2306.
H. Taketa, H. Huzinaga and K. O-ohara: J. Phys. Soc. Japan, 21 (1966), 2313.
- 6) T. Horie and T. Kasuga: J. Chem. Phys. 40 (1964), 1683.
T. Horie and T. Kasuga: J. Phys. Soc. Japan, 19 (1964), 1194.
S. Watanabe, T. Kasuga and T. Horie: Prog. Theor. Phys. 39 (1968), 122.
M. Kimura, S. Watanabe and T. Horie: J. Phys. Soc. Japan, 32 (1972), 1348.
M. Kimura and T. Nishitani: J. Phys. Soc. Japan, 39 (1975), 759.
- 7) I. Yamashita: J. Phys. Soc. Japan, 39 (1975), 205.
I. Tanaka, T. Carrington and H.P. Broida: J. Chem. Phys. 35 (1961), 750.
T. Carrington: J. Chem. Phys. 41 (1964), 2012.
K.H. Welge, S.V. Filseth and J. Davenport: J. Chem. Phys. 53 (1970), 502.
- 8) S. Tsurubuchi: Chem. Phys. 10 (1975), 335.
- 9) J.A. Horsley and W.H. Fink: J. Chem. Phys. 50 (1969), 750.
F. Flouguet and J.A. Horsley: J. Chem. Phys. 60 (1974), 3767.
- 10) R. Akamatsu and K. Oohata: J. Phys. Soc. Japan, 44 (1978), 589.
- 11) K. Takayanagi: J. Phys. Soc. Japan, 45 (1978), 976.

14. Tilted foilとbeamの相互作用

京大工 石井慶之

傾斜フォイル通過後およびそれと類似の斜入射金属表面散乱後のイオンビームの分光研究の現状について概観する。傾斜フォイルに限らず、垂直フォイル励起についても同様であるが、現在のところ励起メカニズムの本質的な解明には至っていない。フォイル通過後イオンは種々の励起状態にあり電子放出あるいは光子放出の過程により脱励起する。従って放出電子・光子を調べることにより励起状態に関する多くの情報がえられるし、相互作用に関する情報もえられる。前者としては、他の方法では求められない多価イオンの振動子強度や高励起状態（高 n 状態のみでなく多電子励起状態）のデータが挙げられる。これらはかなり系統的に調べられている。後者の研究方法は分光に限ると次のように分類される。

パラメーター

- 1) ビーム種類（イオン種，電荷数，原子イオンor分子イオン，基底状態or準安定励起状態，etc.），
- 2) ビームエネルギー
- 3) フォイルタイプ（導電性，結晶or非結晶，入射角，フォイル厚さ，あるいは固体への斜入射，etc.），
- 4) 外場（電場，磁場，etc.）。

測定量

- 1) ビームイオンのスペクトル線（相対強度分布，ドップラー幅，脱励起時間，etc.），
- 2) フォイル物質のスペクトル，
- 3) ビームイオン光の偏光と放出角分布。

ビーム・フォイル相互作用解明のためにはこれらの組合せについて系統的に調べなければならないが、これまでのところその若干について測定されているにすぎない。本報告ではパラメーター(3)と測定量(3)の組合せの場合の例について述べる。

1. イオンの励起偏極と放出光の偏光

フォイル通過後イオンの分光測定から、その電子励起状態とりわけ偏極の形成にはフォイル下流表面の効果が重要であるとされている。これまで大別すると2つのモデルが提唱されている。第1は表面に垂直な方向に電場の存在を仮定するものである¹⁻³⁾。その大きさと範囲はKupferとWinter⁴⁾によると $\sim 10^8$ V/cm，数Åとされているが、疑問が投げられている⁵⁾。第2は電子捕獲モデルである⁶⁾。それによると励起状態の生成は、 n を主量子数とするとき n^{-3} に比例

Interactions of ion beams and tilted foil.
Keishi Ishii
(Kyoto University)

することになるが、多くの例外がある。どのようなモデルを採るかは今後の研究に俟たなければならぬ。以下には上記モデルとは別に、励起における系の幾何学な対称性に基づく考察と観測される光学諸量 (Stokes パラメーター、密度行列との関係について概要を記する⁸⁻¹⁰)。

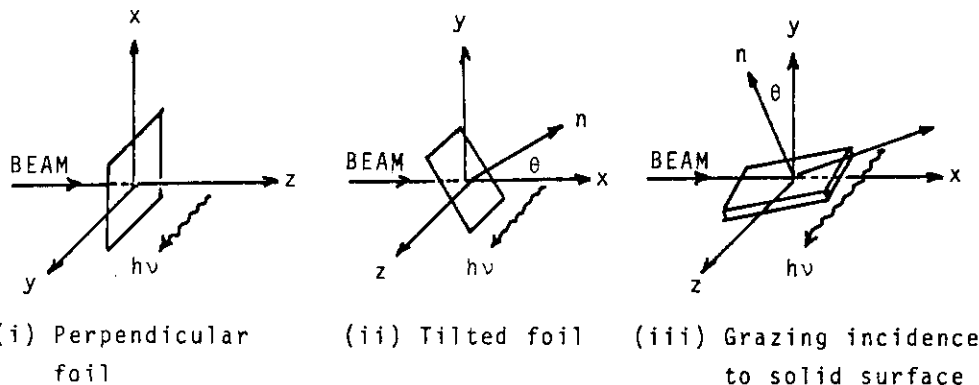


Fig. 1 Geometries of ion-beam excitation by foils and a solid surface.

フォイルあるいは固体表面による励起は球対称ではない。Fig. 1に代表的な励起配置図を示す。フォイルとの相互作用は電氣的なものであり、その持続時間は 10^{-15} secの程度であるとすると電子系がもつ軌道角運動量のみが影響をうける。Fig. 1(i)ではZ-軸(ビーム軸)はx, y軸と同等でなく励起は円柱対称性をもつから m_L -状態への励起確率 $\sigma(m_L)$ に異方性が生じる。 $\sigma(m_L) = \sigma(-m_L)$ であるが $|m_L|$ の関数である。Fig. (ii), (iii)の配置ではフォイルあるいは表面の法線とビーム軸を含む面に対する鏡映対称性へと対称性が更に低下するので $\sigma(m_L)$ は m_L の関数となる。従って放出光 $h\nu$ は(i)では直線偏光, (ii), (iii)ではさらに円偏光性を示すようになる。放出光観測の代表的な光学系配置はFig. 2に示すようなものである。モノクロメ

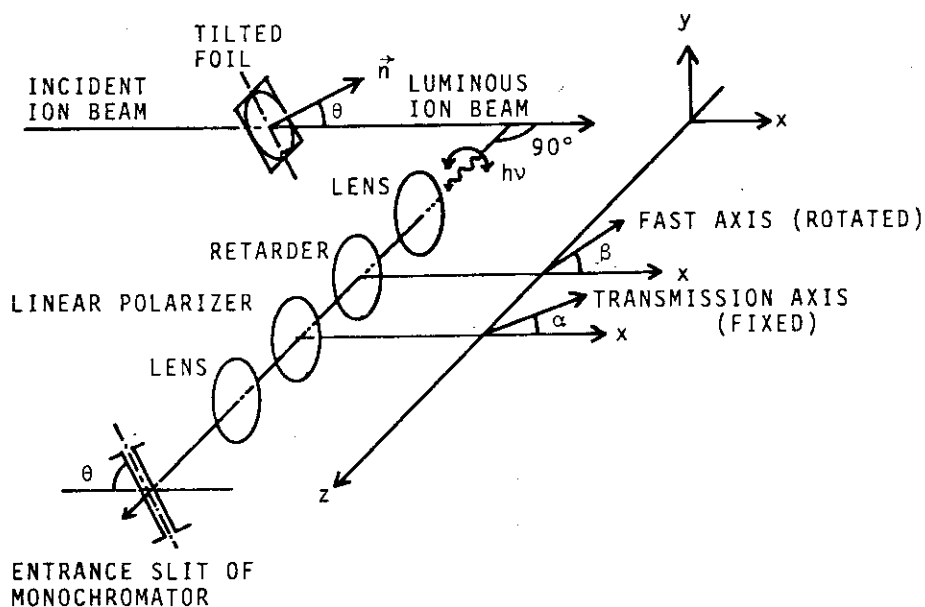


Fig. 2 Arrangement of optical polarization analysis system.

ータの後には光電子増倍管がおかれ光電子数計測がなされる。モノクロメータは干渉フィルターに置きかえられることもある。光の偏光状態を記述するのに“Stokes パラメータ” (I, M, C, S)¹¹⁾を用いると検出される光強度は

$$I^*(\alpha, \beta, d) = \frac{1}{2} \{ I + [M \cos 2\beta + C \sin 2\beta] \cos 2(\alpha - \beta) + [(C \cos 2\beta - M \sin 2\beta) \cos d + S \sin d] \sin 2(\alpha - \beta) \}. \quad (1)$$

とくに $\alpha = 0$ とし, $\beta = \pm \pi/4$ の差をとると, $\lambda/4$ -板の位相差が正確に $\pi/2$ ならば,

$$I^*\left(0, +\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}\right) - I^*\left(0, -\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}\right) = -S, \quad (2)$$

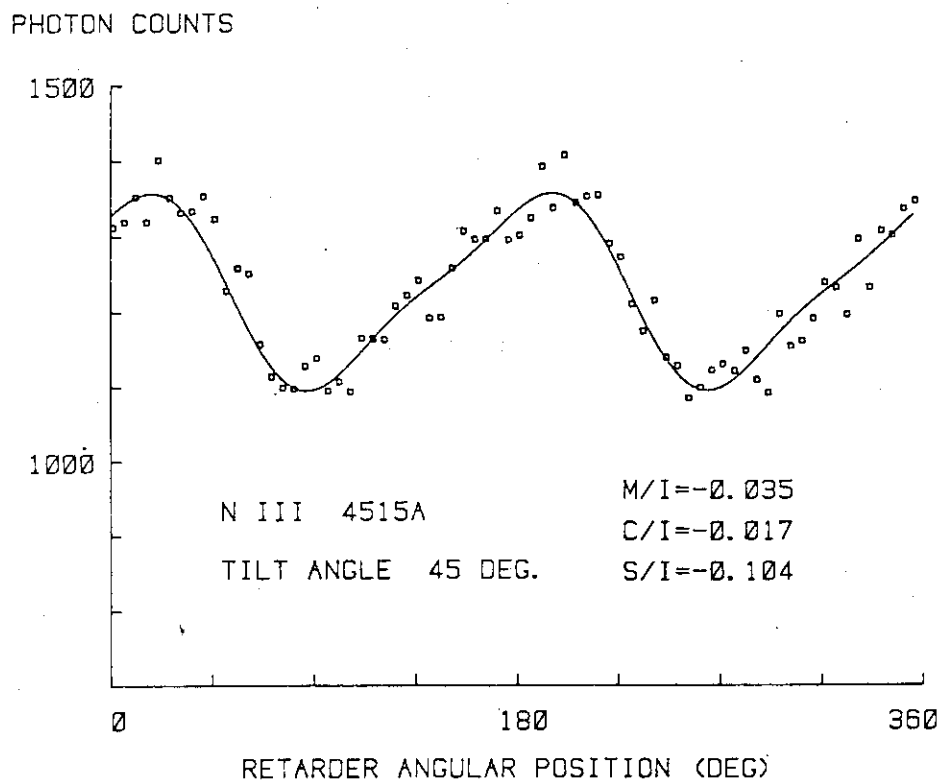


Fig. 3 Data from a polarized source. Intensities are measured as a function of retarder angle β , defined in Fig. 2 Line: NIII 4515A, foil; carbon ($\sim 10\mu\text{g}/\text{cm}^2$), tilt angle; 45° , incident beam; 1.9MeV N^+ .

となり, 円偏光度を表わすSが求められる。Fig. 3に京大工バンデグラフよりの 1.9MeV N^+ ビームを傾斜角 $\theta = 45^\circ$ のC-フォイルに入射した場合の測定例を示す。 α を固定し, I^* を β の関数として測ったもので, 実線はeq. (1)の最少自乗近似である。このようにして相対 Stokesパラメーター (M/I, C/I, S/I) が求められる。これはイオン種とその遷移, 入射ビームエネ

ルギーと電流密度、フォイル傾斜角、フォイル表面および周辺状況によって変る。HeIについては測定例はかなりある¹²⁾が、重イオンの測定例は少ない。4 MeV O イオンについてS/Iのフォイル傾斜角依存性を求めた例をFig. 4に示す¹³⁾。円偏光は傾斜角とともに増加することがわかる。

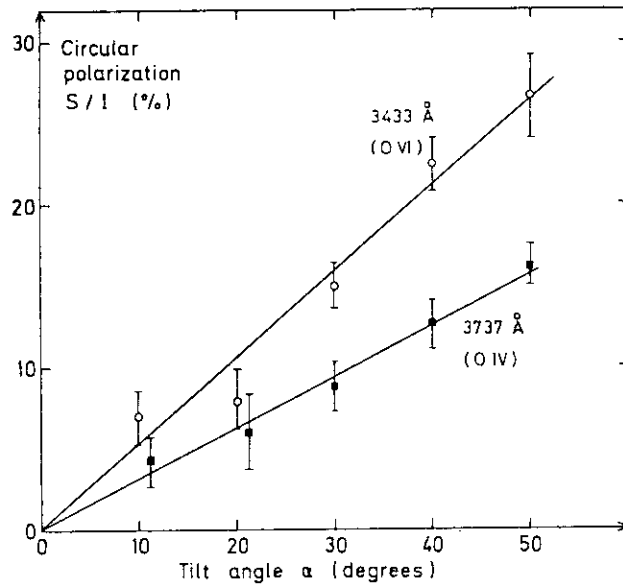


Fig. 4. Circular polarization of the 3433 Å O VI line (open circles) and the 3737 Å O IV line (filled squares) as a function of the tilt angle of the foil. The beam energy was 4 MeV. Error bars indicate statistical uncertainties and linear fits to the points are drawn only to guide the eye. (Ref. 13)

さて上記の相対 Stokes パラメーターの測定値と励起状態の偏極とは次のように関係づけられる⁸⁻¹⁰⁾。放出光を \vec{k} 方向から $\vec{\epsilon}$ 偏光で観測すると強度は

$$I(\vec{k}, \vec{\epsilon}, t) = I_0 (D^+(\vec{k}, \vec{\epsilon}) | e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} | \rho(0)), \quad (3)$$

と表わされる。 I_0 は検出効率を含む定数。 $\rho(0)$ は時刻 $t = 0$ ，すなわちフォイル背面で形成された励起状態を記述する密度行列。 H は自由イオンの Liouvillian， $D(\vec{k}, \vec{\epsilon})$ は検出演算子である。フォイル背面で励起状態を生成する相互作用は電氣的なもので、電子スピンも核スピンも何ら影響を受けないものとする、uncoupled 基底 $\{ I M_I, S M_S, L M_L \}$ で表わすことができ、

$$\rho(0) = (\mathbf{1}_I / (2I+1)) \otimes (\mathbf{1}_S / (2S+1)) \otimes \rho_L(0). \quad (4)$$

相互作用域を脱した後では coupled 基底 $\{ ((LS) J, I) F M_F \}$ で記述できるので、

$$I(\vec{k}, \vec{\epsilon}, t) = \frac{I_0}{(2S+1)(2I+1)} \sum_{\substack{K K' \\ Q Q'}} (D^+(\vec{k}, \vec{\epsilon}) | T_Q^K(F F')) \\ \times (T_Q^K(F F') | e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} | T_{Q'}^{K'}(F F') T_{Q'}^{K'}(F F') | \mathbf{1}_I \mathbf{1}_S \rho_L(0)), \quad (5)$$

ここで $T_Q^K(F F')$ はテンソル演算子。上式は右より励起，摂動，検出を表わす。とくに核スピン $I = 0$ ，電子スピン $S = 0$ ， $L_0 \leftarrow L$ 遷移の場合では

$$I(\vec{k}, \vec{\epsilon}, t) = I_0 \sum_{KQ} (-1)^{I+L+L_0} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & K \\ L & L & L_0 \end{matrix} \right\} |\langle L \| r \| L_0 \rangle|^2 \times \phi_Q^K(\vec{k}, \vec{\epsilon}) \exp(-\gamma t) \rho_Q^K(0), \quad (6)$$

となる。ここで $\phi_Q^K(\vec{k}, \vec{\epsilon})$ は偏光 $(\vec{k}, \vec{\epsilon})$ のテンソル表現である。 γ は励起状態(L)の脱励起遷移確率を表わす。具体的な例を挙げることにする。

(例) ${}^4\text{HeI}$, $1s 2s {}^1S - 1s 3p {}^1P$ 5016Å。

(a) 垂直フォイル励起 (Fig. 1(i))。

$$\left. \begin{aligned} I &= I(0^\circ) + I(90^\circ) = \text{const} \cdot e^{-\gamma t} \left(2 {}^1\rho_0^0 - \frac{1}{\sqrt{2}} {}^1\rho_0^2 \right) \\ M &= I(0^\circ) - I(90^\circ) = \text{const} \cdot e^{-\gamma t} \left(-\frac{3}{\sqrt{2}} {}^1\rho_0^2 \right) \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

従って

$$\frac{M}{I} = -\frac{3({}^1\rho_0^2 / {}^1\rho_0^0)}{2\sqrt{2} - ({}^1\rho_0^2 / {}^1\rho_0^0)}, \quad (8)$$

ここで $I(0^\circ)$ ， $I(90^\circ)$ はそれぞれビーム軸と平行，垂直方向の偏光の強度である。 ${}^1\rho_0^0$ は励起状態(1P)の占有密度， ${}^1\rho_0^2$ は alignment (整列)を表わす量である。このようにして Stokes パラメーターと励起偏極が関係づけられる。

(b) 傾斜フォイル励起 (Fig. 1(ii))。

上記(a)では $C = S = 0$ であるが，この場合は $C \neq 0$ ， $S \neq 0$ である。とくに S に注目すると

$$\frac{S}{I} = \frac{I(\sigma_+) - I(\sigma_-)}{I(\sigma_+) + I(\sigma_-)} = \frac{\sqrt{3}({}^1\rho_0^1 / {}^1\rho_0^0)}{\sqrt{2} + ({}^1\rho_0^2 / {}^1\rho_0^0)}, \quad (9)$$

ここで $I(\sigma_+)$ ， $I(\sigma_-)$ はそれぞれ右まわりと左まわり円偏光の強度である。 ${}^1\rho_0^1$ は orientation (配向)を表わす量である。

もっと一般に核スピン $I \neq 0$ ，電子スピン $S \neq 0$ の場合は eq. (5)から，

$$\text{遷移: } ((L_0 S) J_0, I) F_0 \leftarrow ((LS) J', I) F', \quad (10)$$

に対しての光強度

$$I(\vec{k}, \vec{\epsilon}, t) \propto (\text{DECAY}) \cdot (\text{PERTURBATION}) \cdot (\text{EXCITATION}), \quad (11)$$

において

$$\begin{aligned}
 (\text{PERTURBATION}) = & \sum \frac{\{F, F', J, J'\}}{\{I, S\}} \left\{ \begin{matrix} F' & J' & I \\ J & F & K \end{matrix} \right\}^2 \left\{ \begin{matrix} J' & L & S \\ L & J & K \end{matrix} \right\}^2 \\
 & \times \exp(-i\omega_{JF, J'F'}t - \gamma t), \tag{12}
 \end{aligned}$$

である。ここで $\omega_{JF, J'F'} = (E_{JF} - E_{J'F'}) / \hbar$. 従って放出光は上位準位 fs, hfs の間隔に相当する振動数で振動しながら時定数 (γ) で減衰することがわかる。この場合もさきの $I = 0, S = 0$ の場合と同様にして励起偏極を表わす ρ と Stokes パラメーターとを関連づける具体的な表現を求めることができる。傾斜フォイル励起では S/I はフォイル傾斜角とともに増大する (Fig. 4) ことから, orientation も増大するといえる。Fig. 1(ii) 配置では軌道角運動量の $\langle L_z \rangle$ が θ とともに増大すること, Fig. 1(iii) の配置では θ の減少とともに増大することを意味する。放出光はあくまで励起状態よりの電気双極子放射を観測しているのであるから, その後の強度が変調するということは, 励起状態の偏極は L から, スピン-軌道相互作用を通じて電子スピン S へ, また hfs 相互作用を通じて核スピン I へ移行していくと解釈することができる。従って一度 orientation をもつ電子励起状態をつくると, ある一定時間経過後には核スピン偏極のビームが得られることが予想される。実際 Andr ra らは Li, N イオンについてこのことを実証した^{14, 15)} Fig. 5 にその様子を示す。中図は配置で左方からくるビームを金属表面 (Al の他に Cu も用いられる) に斜入射させ下流域で分光測定するものである。

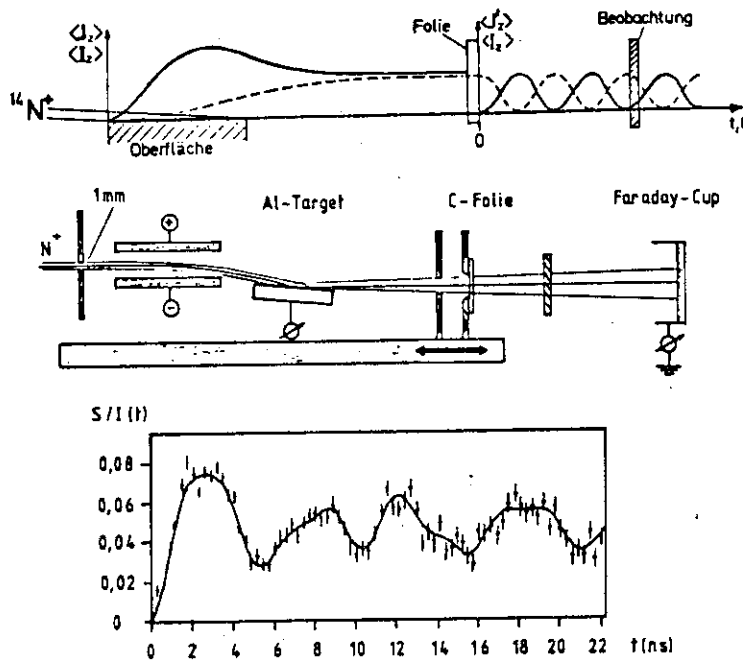


Fig. 5 Time averaged production of a nuclear spin polarized ion beam and its use for a hfs-quantum beat measurement. (Ref. 15)

2. 核スピン偏極ビームの生成

傾斜フォイル励起の場合 S/I , ie., orientation は傾斜角 θ が大きいほど大きくなるが, θ を 80° 以上にすることは技術的に困難である。Andrä らは金属表面への斜入射励起の方法で orientation の大きいイオンを生成し 1. で最後に述べた予想を実証した^{14,15)} Fig. 5 にその概要を示す。まん中の図は装置の配置で左方からくるビームを金属表面(A1の他にCuも用いている)に射入射させる。散乱ビームをコリメートした後垂直フォイルを通過させ, さらにその下流で分光かつ偏光の測定をする。300 keV N^+ 入射の場合の $N \text{ II } 2p 3s \text{ } ^3P^0 - 2p 3p \text{ } ^3D$ 5676 Å線の測定結果は同図下段に示されている。 S/I が垂直フォイル通過後の時間の関数として変調されていることは同図上段の図を用いて次のように説明される。金属表面との相互作用で生成された電子系の orientation $\langle I_z \rangle$ (実線) は走行時間とともに, はじめはゼロであった核の orientation $\langle I_z \rangle$ (点線) へ hf-相互作用通じて移行してゆく。垂直フォイルは電子系の orientation をゼロにするはたらきをもつ。その後の走行中には, 一たん核に貯えられていた orientation は再び hf-相互作用を通じて電子系に移る。下段図の変調は $2p 3p \text{ } ^3D$ -単位の hfs に基づくビートである。もし orientation が核に貯えられることがなければ, 垂直フォイル通過後の放出光に S/I がみられることは決してない。金属表面と垂直フォイルを変えて最も変調の大きいところへもっていったときの変調振巾の解析からフォイルの位置での核スピンの偏極度 P_I として 14% の値を得ている。斜入射励起をくり返すと偏極度はつみ重ねられていくと予想されるが, 実際彼らは2回の励起で $^{14}N^+$ の P_I として 20% になることを示した。

3. 関連の問題

垂直フォイル励起の場合にイオンの励起状態は alignment をもち, 放出光に偏光と量子ビートが観測されることは 1., 2. に述べた。alignment は水素および水素様イオンではかなり広い入射エネルギー範囲で多くの場合, 負の値をもつ¹⁶⁾ のに対し, 非水素様イオン (例えば He I, N II etc) ではつねに正である。このことは, 水素様イオンでは縮退している励起状態がフォイル表面の強い電場¹⁻³⁾ によって Stark 効果を受けていることによるものと説明されている⁴⁾。一方 Sellin ら¹⁷⁾ および Gaupp ら¹⁸⁾ は Eck¹⁹⁾ の理論に基づき, ビーム方向と平行および反平行の電場を印加したときの 100 keV 程度の H イオンの Lyman- α 線 (1215 Å) の強度差をとることにより S-P コヒーレンスを求めた。S-P コヒーレンスの位相の解析から H^+ イオンはフォイルを離れるときには前方に電子を捕獲するという結論を得ている。励起状態形成に電子捕獲モデルを採用すると⁶⁾, その分布は n^{-3} となるはずであるが必ずしもそうではない⁷⁾。単純なモデルでは統一的に記述することは難しいようである。

垂直フォイル励起の He については H について最もよく調べられているものであるが, 最近また新たな問題が提起された。alignment はビームエネルギーに依存するのみでなく, ビーム電流密度にも依存することである^{20,21)}。電流密度依存性は入射エネルギーによってもまた遷移によっても異なる。おそらくフォイル物質, 表面状態によっても異なるであろう。いまのところ 2 次電子生成と関連づけられて一応説明されている。

4. 結 言

はじめにも述べたようにフォイルあるいは金属表面励起後のビームの分光測定がいくつか行われ、相互作用解明の試みがなされてきたが、未だその本質の理解には至っていないのが現状である。今後は、分光特性に対する種々のパラメータ依存性をもっと系統的に調べることと、あわせて別の原理に基づく測定を組合せて総合的に研究してゆく必要があるであろう。核スピン偏極ビームが生成することはわかっているので、その範囲内では分光方法でモニターしながら応用面を広げていることも将来考えられる。

References

- 1) T.G. Eck, Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 1055.
- 2) Y. Band, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1272, and Phys. Rev. A13 (1976) 2061.
- 3) M. Lombardi, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1172.
- 4) E. Kupfer and H. Winter, Z. Physik A285 (1977) 3.
- 5) A. Dennis, J. Desesquelles, M. Druetta and D.J. Pegg, Nucl. Instr. Meth. 194 (1982) 363.
- 6) M.J. Gaillard, J.C. Poizat, J. Remillieux, A. Chateaux-Thierry, A. Gladieux and W. Brandt, Nucl. Instr. Meth. 132 (1976) 547.
- 7) S. Bashkin and E. Veje, Phys. Rev. A25 (1982) 417, and C.J. Latimer, R.G. McMahon and D.P. Murtagh, Phys. Lett. 87A (1982) 232.
- 8) D.G. Ellis, J. Opt. Soc. Am. 63 (1973) 1232.
- 9) U. Fano and J. Macek, Rev. Mod. Phys. 45 (1973) 553.
- 10) H. J. Andrä, in "Progress in Atomic Spectroscopy", eds. W. Hanle and H. Kleinpoppen (New York, Plenum, 1979). Part B, p.829.
- 11) D. Clarke and J.F. Grainger, "Polarized Light and Optical Measurement" (Pergamon, Oxford, 1971).
- 12) T.J. Gay, H.G. Berry, R. Deserio and H.P. Ganir, Phys. Rev. A23 (1981) 1745, and R.L. Brooks, H.G. Berry and E.H. Pinnington, Phys. Rev. A25 (1982) 2545, and references quoted there.
- 13) S. Huldt, L.J. Curtis, B. Denne, L. Engstrom, K. Ishii and I. Martinson, Phys. Lett. 66A (1978) 103.
- 14) H.J. Andrä, H.J. Plöhn, A. Gaupp and R. Fröhling, Z. Physik A281 (1977) 15.
- 15) H. Winter and H.J. Andrä, A291 (1979) 5.
- 16) H.G. Berry, Rep. Prog. Phys. 40 (1977) 155.

- 17) I.A. Sellin, J.R. Moat, R.S. Peterson, P.M. Griffin, R. Laubert and H.H. Haselton, Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 1335.
- 18) A. Gaupp, H.J. Andrä and J. Macek, Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 268.
- 19) T.G. Eck, Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 270.
- 20) T.J. Gay, H.G. Berry, R. DeSerio, H.P. Ganir, R.M. Schectman, N. Schaffel, R.D. Hight and D.J. Burns, Phys. Rev. A23 (1981) 1745.
- 21) H. Winter, Nucl. Instr. Meth. 194 (1982) 357.

15. Okorokov効果の理論

早大・理工 山下 洋二

1. 導 入

近年イオンチャネルリングの実験の発展に伴い、入射イオンが結晶周期場によってコヒーレントに励起される現象が、米国オークリッジ研究所のDatz, Moak 達のグループ¹⁾によって発見された。この現象は予言者の名をとってOkorokov効果²⁾と呼ばれる。この現象がどのようなものかという、たとえば軸チャネルリングを考えると、イオンの励起角振動数 $\omega_{n_0} = (E_n - E_0) / \hbar$ とイオンが結晶周期場から感じる振動数 $2\pi v/d$ (d : 格子間隔, v : イオンの速度) が等しいとき、イオンは0-state からn-state に共鳴的に励起されるだろうというものである。

さて、この現象については新藤・大槻³⁾により He^+ イオンを銀の $\langle 111 \rangle$ 軸チャネルに入射した場合について He^+ の励起確率の計算がなされているが、速度に関し、共鳴速度を中心にして対称なプロファイルが得られていた。しかし、実験¹⁾によって得られたものはこれとは異なり特有の非対称性を有していたり、ピークの中央が分列していたりするなど興味をひくものがあった。本稿ではこれらの説明も含めながら、イオンチャネルリングにおけるOkorokov効果の理論の話を進めていくつもりである。

2. チャネルリングとは⁴⁾

イオンを結晶軸又は結晶面に高速 (H^+ イオンでkeV以上)で入射した場合、イオンはそれらの軸や面を一様な連続体として感じ、大雑把に言うと、結晶を構成する個々の原子から散乱されるのではなく結晶軸全体又は面全体から散乱される。また、このような高速ではイオンの重心運動は古典的に取り扱うことができるので、イオンは図1に示すような運動を行なうことになり、結晶軸又は面にそって結晶内を進行していくことになる。イオンを結晶軸にそって入射させた場合を軸チャネルリング、又この軸に囲まれた空間のことを軸チャネルと言い、イオンを結晶面にそって入射させた場合を面チャネルリング、又この面に囲まれた空間のことを面チャネルと言う。軸チャネルリングの場合イオンの挙動は複雑であるが、面チャネルリングの場合は図1-(b)のようなサインカーブで近似できる。ただし図では極端な書き方をしているが、このようなチャネルリング運動の周期は、一般には数100 Å以上あり、チャネルリングイオンの軌跡はほぼ直線に近いものと言える。

15. Theory on the Okorokov effects.

Yoji Yamashita
(Waseda University)

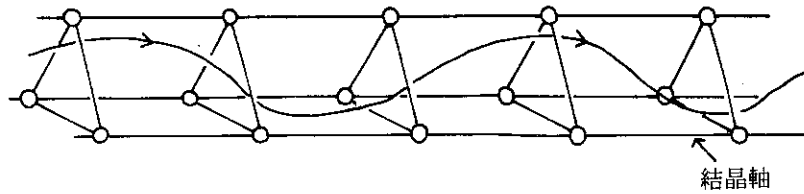


図1-(a) 軸チャンネルリング

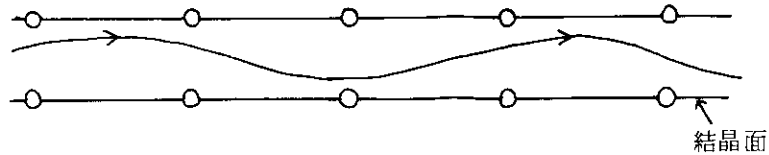


図1-(b) 面チャンネルリング

3. Kinematical な取扱い³⁾

以後の話は簡単のために軸チャンネルリングの場合だけに限るとする。さて、前節での議論でわかるようにチャンネルリングイオンの重心運動はほぼ軸に平行な直線で近似できる。又、イオンの速度もほぼ一定なものを見なせる。従って、チャンネル断面内におけるイオンの位置を \mathbf{b} (図2) とし、イオンの進行方向(軸方向)を z 方向とすると、イオンの重心座標 \mathbf{R} は

$$\mathbf{R} = \mathbf{b} + vt\hat{e}_z, \quad \mathbf{b} \perp \mathbf{v} \quad \dots\dots\dots (1)$$

イオンの重心より見たイオンの電子の座標を \mathbf{r} とすると、イオンの電子の座標は

$$\mathbf{R} + \mathbf{r} = \mathbf{b} + vt\hat{e}_z + \mathbf{r} \quad \dots\dots\dots (2)$$

さて、イオンの電子の感じるポテンシャル V は

$$V = \sum_i V_a(\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

これを結晶周期の逆格子 \mathbf{g} でフーリエ展開すると

$$\begin{aligned} &= \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} \exp\{i 2 \pi \mathbf{g} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r})\} \\ &= \sum_{g_z} \sum_{\mathbf{g}_\perp} V_{\mathbf{g}_\perp, g_z} \exp(i 2 \pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \exp(i 2 \pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_{g_z} \left\{ \sum_{\mathbf{g}_\perp} V_{\mathbf{g}_\perp, g_z} \exp(i 2 \pi \mathbf{g}_\perp \cdot \mathbf{b}) \exp(i 2 \pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \right\} \exp(i 2 \pi g_z t) \\ &= i\hbar \sum_m F^{(m)} \exp\left(i \frac{2 \pi m v}{d} t\right) \quad \dots\dots\dots (3) \end{aligned}$$

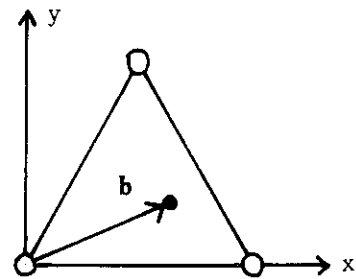


図2 軸チャンネルの断面

ここで V_a は個々の結晶原子のはる atomic ポテンシャル \mathbf{R}_i は個々の結晶原子の位置, Z 方向の軸上での格子間隔を d とすると $g_z = m/d$,

$$F^{(m)} = (1/i\hbar) \sum_{\mathbf{g}_\perp} V_{\mathbf{g}_\perp, m} \exp(i 2\pi \mathbf{g}_\perp \cdot \mathbf{b}) \exp(i 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \quad \dots\dots\dots (4)$$

従って, イオンの持つ電子の感じる摂動ポテンシャルは基本振動数 $2\pi v/d$ のフーリエ成分の和として表すことができる。

さて, ボルン近似でイオンの内部状態 (電子状態) の $0_{\text{state}} \rightarrow n_{\text{state}}$ 励起の確率を計算すると

$$P(t) = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{no}(t') \exp\left(i \frac{E_n - E_0}{\hbar} t'\right) dt' \right|^2 \dots (5)$$

ここで

$$V_{no}(t') = i\hbar \sum_m F_{no}^{(m)} \exp\left(i \frac{2\pi m v}{d} t'\right)$$

従って

$$P_n(t) = \left| \sum_m F_{no}^{(m)} \int_0^t \exp\left\{i \left(\omega_{no} + \frac{2\pi m v}{d}\right) t'\right\} dt' \right|^2$$

$$= \left| \sum_m F_{no}^{(m)} \frac{\exp\left\{i \left(\omega_{no} + \frac{2\pi m v}{d}\right) t\right\} - 1}{i \left(\omega_{no} + \frac{2\pi m v}{d}\right)} \right|^2$$

ここで

$$\omega_{no} = \frac{E_n - E_0}{\hbar}$$

$t \rightarrow \infty$ とすると

$$= 2\pi \sum_m |F_{no}^{(m)}|^2 \delta\left(\omega_{no} + \frac{2\pi m v}{d}\right) t \quad \dots\dots\dots (6)$$

従って

$$\frac{E_n - E_0}{\hbar} = -\frac{2\pi m v}{d} \quad (\text{ただし } m < 0) \quad \dots\dots\dots (7)$$

が $0 \rightarrow n$ 励起の共鳴条件となる。

ところが L を結晶の厚さとした場合, 結晶を通過するに要する時間は L/v であるが, 共鳴条

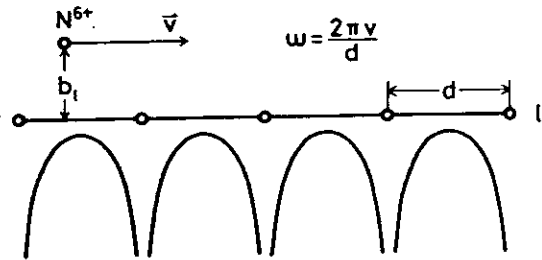


図3 イオンが周期的なクーロン場の中を通過していく (添字の l は何番目の軸かを表し, b_l はこの軸からの衝突係数である)

件のとき

$$P_n \left(\frac{L}{v} \right) \gg 1$$

となりボルン近似は正しい結果を与えない。

4. Dynamical な取り扱い^{3), 5)}

Kinematical な取り扱いでは共鳴条件は導びけても、正しい励起確率が計算できないので、摂動ポテンシャル V を取り入れて Schrödinger 方程式を直接解くことを考える。

結晶周期場中のイオンの内部状態を記述する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + V) \Psi \quad \dots\dots\dots (8)$$

ただし、 H_0 は非摂動の Hamiltonian である。

Ψ を H_0 の個有関数 φ_n で展開すると

$$\Psi = \sum_n a_n(t) \varphi_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}, \quad H_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \quad \dots\dots\dots (9)$$

従って

$$\frac{d}{dt} a_n^{(m)} = \sum_k \sum_{m'} F_{n'k}^{(m)}(\mathbf{b}) \exp(i \varepsilon_{n'k}^{(m)} t) a_k^{(m)} \quad \dots\dots\dots (10)$$

ここで

$$\varepsilon_{n'k}^{(m)} = \frac{E_n - E_k}{\hbar} + \frac{2\pi m'v}{d} \quad \dots\dots\dots (11)$$

すなわち $\varepsilon_{n'k}^{(m)} = 0$ が前の節で導いた共鳴条件である。

さて、これ以後は考えているイオンを水素型イオンに限るとし、基底状態と第 1 励起状態間の遷移のみを考えるとする。

あるフーリエ成分の番号 m' に対して $\varepsilon_{n_0}^{(m')} = 0$ となる速度 v が $0 \rightarrow n$ 励起を与える共鳴速度である。特定の零でない m' (これを $-m$ とする) に対してのこのような共鳴速度付近の速度でイオンを入射した場合について考えると

$$\varepsilon_{n_0}^{(-m)} = \frac{E_n - E_0}{\hbar} - \frac{2\pi m v}{d} \simeq 0$$

$$\varepsilon_{0n}^{(m)} = \frac{E_0 - E_n}{\hbar} + \frac{2\pi m v}{d} = -\varepsilon_{n_0}^{(-m)} \simeq 0$$

$m' \neq 0$ の他の (m', n', k) の組み合わせに対しては $|\varepsilon_{n'k}^{(m')}| \gg |\varepsilon_{n0}^{(-m)}|$

従って、 $m' \neq 0$ の時 $(m', n', k) = (-m, n, 0), (m, 0, n)$ 以外の (m', n', k) の組み合わせに対しては(10)式において、 $\exp(i\varepsilon_{nk}^{(m')}t)$ は $a_k(t)$ よりも t に関して激しく振動すると考えられるので、両者の積を t について積分した場合実質的に零になる。従って(9)式において、これらの (m', n', k) の組み合わせに対応する項は無視できる。又、 n_{state} としては水素型イオンのエネルギーの縮退した4つの第1励起状態(これらを1~4 state とする)を考えているので、(10)式は次の様に近似できる。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} a_0 = -\sum_{n=1}^4 F_{n0}^{(-m)*} \exp(-i\varepsilon_{n0}^{(-m)}t) a_n + F_{00}^{(0)} a_0 \\ \frac{d}{dt} a_n = F_{n0}^{(-m)} \exp(i\varepsilon_{n0}^{(-m)}t) a_0 + \sum_{k=1}^4 F_{kn}^{(0)} a_k \quad (n=1 \sim 4) \end{cases} \dots\dots\dots (12)$$

ただし $F_{n0}^{(-m)*} = F_{0n}^{(m)}$

$$\varepsilon_{10}^{(-m)} = \varepsilon_{20}^{(-m)} = \varepsilon_{30}^{(-m)} = \varepsilon_{40}^{(-m)} = \varepsilon$$

従ってこの連立微分方程式の解を求めればよいことになる。ここで $F_{kn}^{(0)} = V^{(0)}/i\hbar$ であるが $V^{(0)}$ は摂動ポテンシャルをZ方向に平均化したものになっており、チャンネルリングイオンの感じる連続ポテンシャル(軸ポテンシャル)である。つまり(11)式の $F_{kn}^{(0)}$ なる項は軸ポテンシャル(定摂動)の M_{element} であり、エネルギー固有値の補正を与えることになる。(12)式の第2式2項目は $F_{kn}^{(0)}$ の非対角項を含んでいるので、この非対角項が消えるようにイオンの内部状態(電子状態)の基底を組み変える。この新しい基底を $0, 1', 2', 3', 4'$ とすると(12)式は

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} a_0 = -\sum_{n=1}^4 F_{n0}^{(-m)*} \exp(-i\varepsilon_{n0}^{(-m)}t) a_n + F_{00}^{(0)} a_0 \\ \frac{d}{dt} a_n = F_{n0}^{(-m)} \exp(i\varepsilon_{n0}^{(-m)}t) a_0 + F_{nn}^{(0)} a_n \quad (n=1' \sim 4') \end{cases} \dots\dots\dots (13)$$

となる。

さて、これは変数係数の5元連立微分方程式であり、正確に解くことはできないので、簡単のために基底状態と1つの励起状態だけを考える2状態近似を行なう。その場合は、正確な解が求まり

$$|a_n(t)|^2 = \frac{4|F_{n0}^{(-m)}|^2}{\left(\varepsilon_{n0}^{(-m)} + \frac{V_{nn}^{(0)} - V_{00}^{(0)}}{\hbar}\right)^2 + 4|F_{n0}^{(m)}|^2} \times \sin^2 \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\left(\varepsilon_{n0}^{(-m)} + \frac{V_{nn}^{(0)} - V_{00}^{(0)}}{\hbar}\right)^2 + 4|F_{n0}^{(m)}|^2} t \right\} \dots\dots\dots (14)$$

ここで $V_{nn}^{(o)}$ は軸ポテンシャルによる n_{state} のエネルギー固有値の1次の補正である。(4)式より共鳴条件は

$$\frac{(E_n + V_{nn}^{(o)}) - (E_o + V_{oo}^{(o)})}{\hbar} = \frac{2\pi m v}{d} \dots\dots\dots (15)$$

という具合に修正される。

5. Matrix Element の計算^{3),5)}

我々は N^{6+} の様な原子番号の比較的大きな水素型イオンを考えることにする。基底及び第1励起状態の空間的広がり小さいので

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} < 1$$

そこで

$$\begin{aligned} \exp(-i2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) &\simeq 1 - i2\pi g_x x - i2\pi g_y y - i2\pi \frac{m}{d} z \\ &+ \frac{1}{2} (-i2\pi g_x x)^2 x^2 + \frac{1}{2} (-i2\pi g_y y)^2 y^2 + \frac{1}{2} (-i2\pi \frac{m}{d} z)^2 z^2 \end{aligned}$$

これを(4)に代入すれば

$$\begin{aligned} F^m(\mathbf{b}, \mathbf{r}) &\simeq \frac{1}{i\hbar} \left\{ 1 + x \frac{\partial}{\partial b_x} + y \frac{\partial}{\partial b_y} - i2\pi \frac{m}{d} z + \frac{1}{2} x^2 \frac{\partial^2}{\partial b_x^2} \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} y^2 \frac{\partial^2}{\partial b_y^2} - 2\pi^2 \left(\frac{m}{d}\right) z^2 \right\} V_m(\mathbf{b}) \dots\dots\dots (16) \end{aligned}$$

我々はイオンの電子と結晶中の個々の原子との相互作用ポテンシャルとしてモリエールポテンシャルを用いる。

$$V_a(r) = -\frac{Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp\left(-\frac{\beta_i}{a_{TF}} r\right) \dots\dots\dots (17)$$

ここで $\{\alpha_i\} = \{0.35, 0.55, 0.10\}$, $\{\beta_i\} = \{0.30, 1.20, 6.00\}$ で Z_2 と a_{TF} はそれぞれ固体の原子番号と Thomas-Fermi の遮蔽半径である。

(16)式より

$$\begin{aligned} V_m(\mathbf{b}) &= \frac{1}{d} \sum_i e^{i2\pi \frac{m}{d} \delta_i d} \int_{-\infty}^{\infty} dz V_a(\sqrt{b_1^2 + z^2}) e^{i2\pi \frac{m}{d} z} \\ &= -\frac{2Z_2 e^2}{d} \sum_i e^{i2\pi m \delta_i} \sum_j \alpha_j K_0\left(b_1 \sqrt{\left(\frac{\beta_j}{a_{TF}}\right)^2 + \left(\frac{2\pi m}{d}\right)^2}\right) \end{aligned} \dots\dots\dots (18)$$

ここで K_0 は第2種の変形ベッセル関数、 δ_{ld} は l 番目の原子列の1番目の原子列に対する Z 方向のずれである。

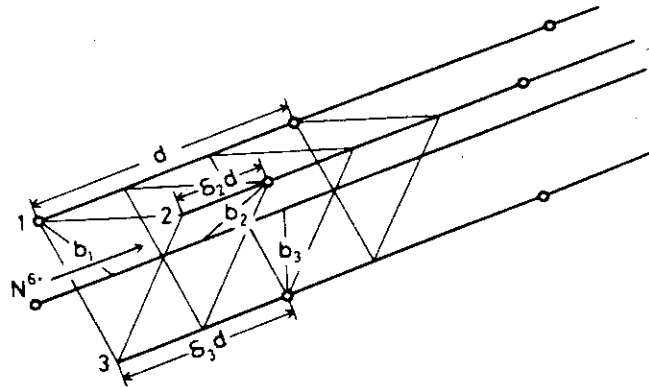


図4 軸チャンネル内を動いていくイオン。 b_l は l 番目の軸から衝突係数であり、 δ_{ld} はその1番目の軸からの軸方向でのずれである。

さて、 $1s, 2p_z, 2s, 2p_1, 2p_{-1}$ に関する M element の計算を行なう。計算は簡単であるが長たらしいので例として2つだけ示しておく。

$$F_{2p_1, 1s}^{(-m)}(\mathbf{b}) = -\frac{i}{\hbar} \left(-\frac{2Z_2 e^2}{d} \right) \sum_{\ell} e^{-i2\pi m \delta_{\ell}} \left(\frac{b_{\ell x} - i b_{\ell y}}{b_{\ell}} \right) \times \sum_i \alpha_i \sqrt{\left(\frac{2\pi m}{d} \right)^2 + \left(\frac{\beta_i}{a_{TF}} \right)^2} \left\{ -K_1 \left(b_{\ell} \sqrt{\left(\frac{2\pi m}{d} \right)^2 + \left(\frac{\beta_i}{a_{TF}} \right)^2} \right) \right\} \left\{ -4 \left(\frac{2}{3} \right)^5 \left(\frac{a_0}{Z_1} \right) \right\} \dots (19)$$

$$V_{1s, 1s}^{(0)}(\mathbf{b}) = \left(-\frac{2Z_2 e^2}{d} \right) \sum_{\ell} \sum_i \left[K_0 \left(\frac{\beta_i b_{\ell}}{a_{TF}} \right) + \left\{ -\frac{1}{b_{\ell}} \frac{\beta_i}{a_{TF}} K_1 \left(\frac{\beta_i}{a_{TF}} b_{\ell} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_i}{a_{TF}} \right)^2 \left(K_0 \left(\frac{\beta_i}{a_{TF}} b_{\ell} \right) + K_2 \left(\frac{\beta_i}{a_{TF}} b_{\ell} \right) \right) \right\} \right] \left(\frac{a_0}{Z_1} \right)^2 \dots (20)$$

ここで Z_1 は入射イオンの原子番号、 a_0 はボア-半径である。又、M element の間には次の様な関係がある。

$$F_{2p_{-1}, 1s}^{(-m)}(\mathbf{b}) = -F_{2p_1, 1s}^{(-m)*}(\mathbf{b}) \dots (21)$$

$$V_{2p_{-1}, 2p_{-1}}^{(0)}(\mathbf{b}) = V_{2p_1, 2p_1}^{(0)}(\mathbf{b}) \dots (22)$$

$$V_{2p_z, 2s}^{(0)}(\mathbf{b}) = V_{2p_z, 2p_1}^{(0)}(\mathbf{b}) = V_{2p_z, 2p_{-1}}^{(0)}(\mathbf{b}) = 0 \dots (23)$$

$$V_{2s,2p_{-1}}^{(0)}(\mathbf{b}) = -V_{2s,2p_1}^{(0)*}(\mathbf{b}) \quad \dots\dots\dots (24)$$

さて、1s, 2p_Z, 2s, 2p₁, 2p₋₁の各状態をそれぞれn=0~4で表すことにする。(23)式より2p_Zは他の第1励起状態と交じることはないが、2s, 2p₁, 2p₋₁はV⁽⁰⁾によって交じり合い、エネルギーの個有状態ではなくなる。この3つの状態に対するV⁽⁰⁾のM elementの非対角項が消えるような変換を行なえばよいわけである。Sを対角化行列とすれば対角化された状態n'に対するF^(-m)のM elementは

$$F_{n'0}^{(-m)} = \sum_{n=2}^4 S_{nn'}^* F_{n0}^{(-m)} \quad (n' = 2 \sim 4) \quad \dots\dots\dots (25)$$

と表される。

6. 実験との関係

Moak 達¹⁾はさまざまな入射速度で、固体を通過した後に、イオン化されずにいたイオンの割合(生き残り部分)を観測した。これは励起状態にいるイオンは基底状態にいるイオンよりもイオン化しやすいということを利用してOkorokov 効果を検出しようとしたものである。図5は実験で求められた固体中の電子衝突によるN⁶⁺からN⁷⁺へのイオン化確率を示したものである。図の上部にはバックグラウンドから生き残り部分を引いたものが示してある。

さて、簡単のために入射イオン(これからはN⁶⁺のみを考える)はOkorokov 効果によって励起され、それが電子衝突によってイオン化する(N⁷⁺になる)という仮定を設ける。又、これからの取り扱いでは、イオン化を無視した時の物理量には添え字の“old”を付け、イオン化を考慮した時の物理量には添え字の“new”を付ける。又、イオン化した状態を添え字の“∞”で表すことにする。

確率保存則より

$$|a_0(t)|_{old}^2 + \sum_{n=1}^4 |a_n(t)|_{old}^2 = 1 \quad \dots\dots\dots (26)$$

$$|a_0(t)|_{new}^2 + \sum_{n=1}^4 |a_n(t)|_{new}^2 = 1 - |a_\infty(t)|^2 \quad \dots\dots\dots (27)$$

ここで、イオン化を考慮しても各状態の他の状態に対する存在確率の比は変わらないとすれば

$$|a_n(t)|_{new}^2 = |a_n(t)|_{old}^2 (1 - |a_\infty(t)|^2) \quad \dots\dots\dots (28)$$

一方

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |a_\infty(t)|^2 &= \sum_{n=1}^4 Nv \sigma_{n\infty} |a_n(t)|_{new}^2 \\ &= \sum_{n=1}^4 Nv \sigma_{n\infty} |a_n(t)|_{old}^2 (1 - |a_\infty(t)|^2) \quad \dots\dots\dots (29) \end{aligned}$$

ここで N はイオン化に寄与する固体内電子密度であり、 $\sigma_{n\infty}$ は電子衝突による n_{state} のイオン化の断面積である。又、簡単のために $n=1' \sim 4'$ のダッシュは落としてある。

(29) 式を t について積分すると

$$|a_{\infty}(t_0)|^2 = 1 - \exp\left(-\sum_{n=1}^4 N \sigma_{n\infty} L \cdot \overline{P_n(t_0)}\right)$$

$$\overline{P_n(t_0)} = \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} |a_n(t)|_{old}^2 dt$$

ここで L は結晶の厚さであり、 t_0 は結晶を通過するに要した時間である。また、 $P_n(t_0)$ は Okorokov 効果による励起確率の時間平均である。

7. チャンネリング平均とピークプロフィール⁵⁾

さて、チャンネルリング軌道について励起確率の平均を行ない、実験と比較すべきピークプロフィールを求める。チャンネルリング平均としては、統計平衡平均⁶⁾を用い、軸に平行入射の場合のみを考える。

図6には Au の $\langle 111 \rangle$ 軸チャンネルが示してある。対称性のために斜線の部分でのみチャンネルリング平均をとった。

また4つの第1励起状態のエネルギー固有値の補正 ($V_{nn}^{(0)} - V_{00}^{(0)}$ (for $n=1 \sim 4$)) を詳しく計算したものを図7. にのせてある。実線はこれらの量の $O-X$ 方向での変化を示したものである。

図8. には $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle$, $m=4$ の場合の各励起状態 (1~4) に対する励起確率のチャンネルリング平均

$$\langle \overline{P_n(t_0)} \rangle_{channel}$$

がのせてある。横軸は入射速度 v を、エネルギー固有値の補正を考慮しない時の共鳴速度 v_{res} で割ったものである。エネルギー固有値の

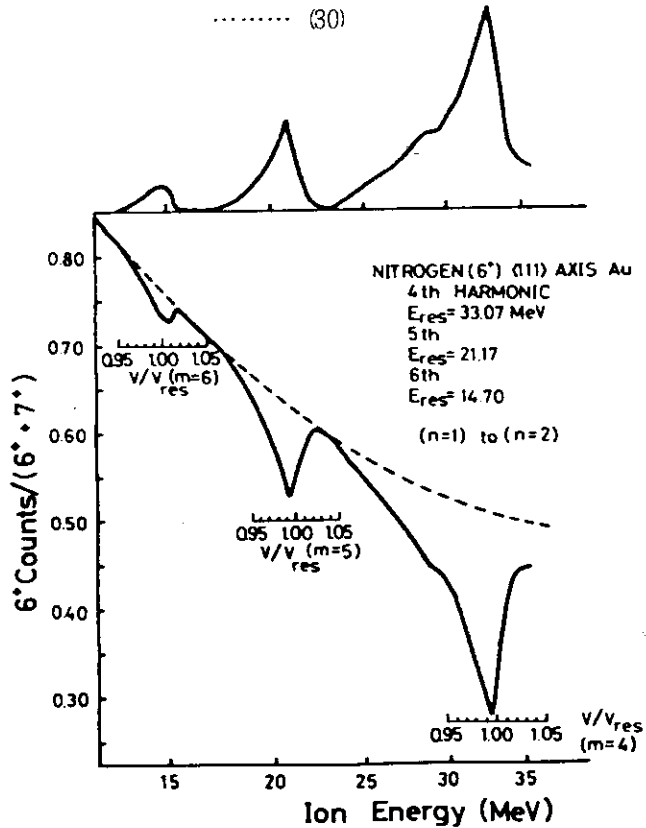
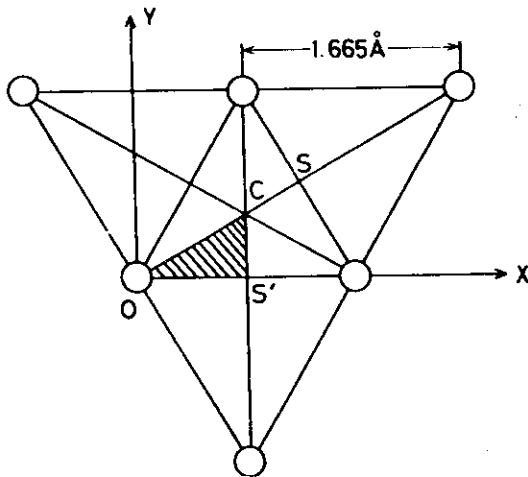


図5 Moak 達の実験で得られた N^{6+} を Au $\langle 111 \rangle$ 軸に入射した時のイオン化確率



Au $\langle 111 \rangle$ Axial Channel

図6 Au の $\langle 111 \rangle$ 軸チャンネル。斜線の領域を対称性のために、代表として選んだ。

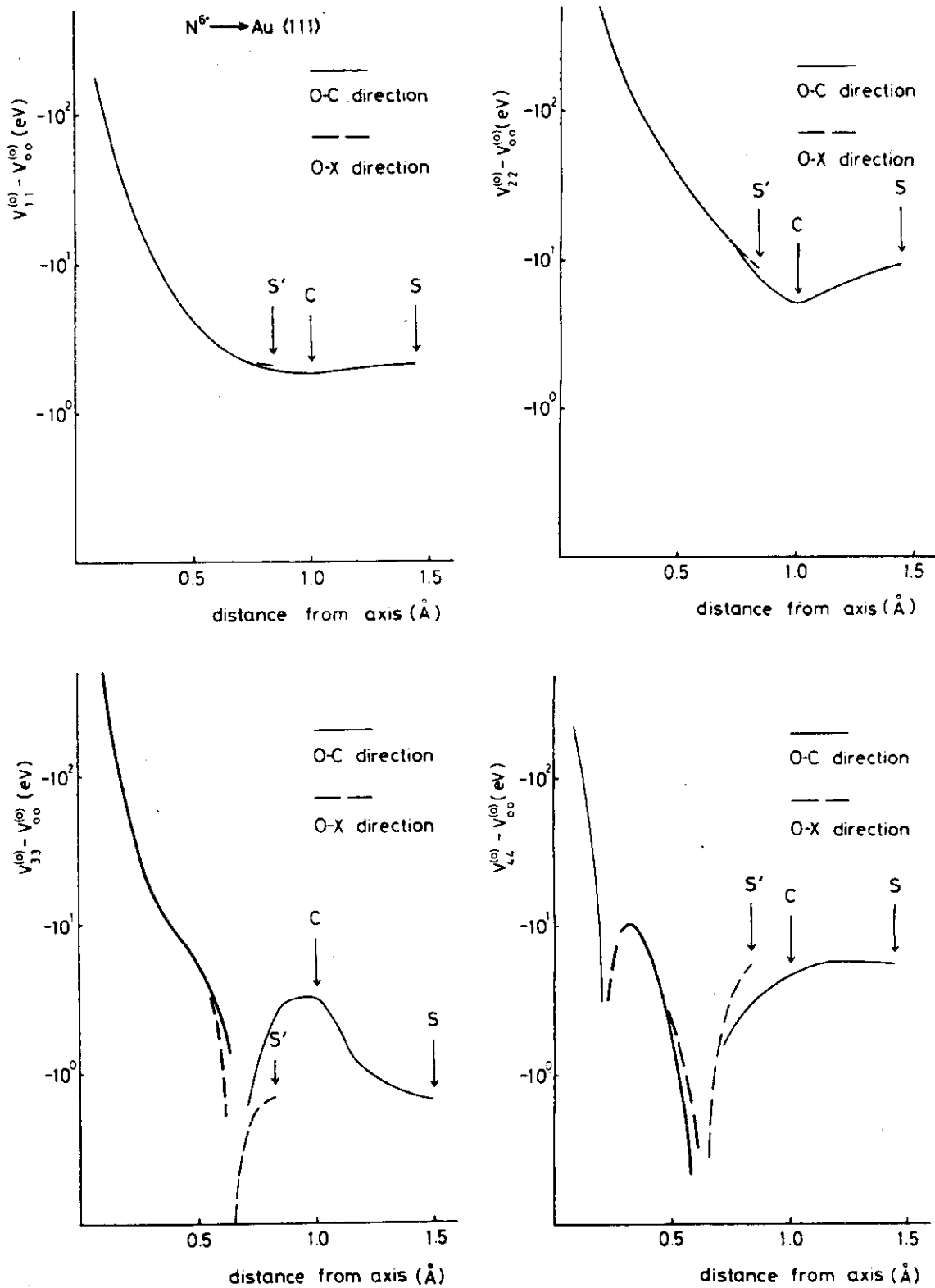


図7 $V_{nn}^{(0)} - V_{00}^{(0)}$ の b 依存性。実線と破線は図6におけるO-C方向への変化とO-X方向への変化を示したものである。太線は正の値を表わしている。

補正が \mathbf{b} の関数であることを反映して $\langle \bar{P}_n \rangle_{\text{channel}}$ は入射速度に対して複雑な振舞を示している。

図9, 10には $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle$ の場合のチャンネル平均した全イオン化確率

$$\langle |a_{\infty}(t_0)|^2 \rangle_{\text{channel}}$$

が示してある。 $\langle P_n \rangle_{\text{channel}}$ の特異な速度依存性を反映して、速度に関して特有な非対称性（入射速度の遅い方にピークの裾野が広がっている）が生じていることがわかる。図の右上には、比較のために、実験により得られたピークプロファイルがのせてある。

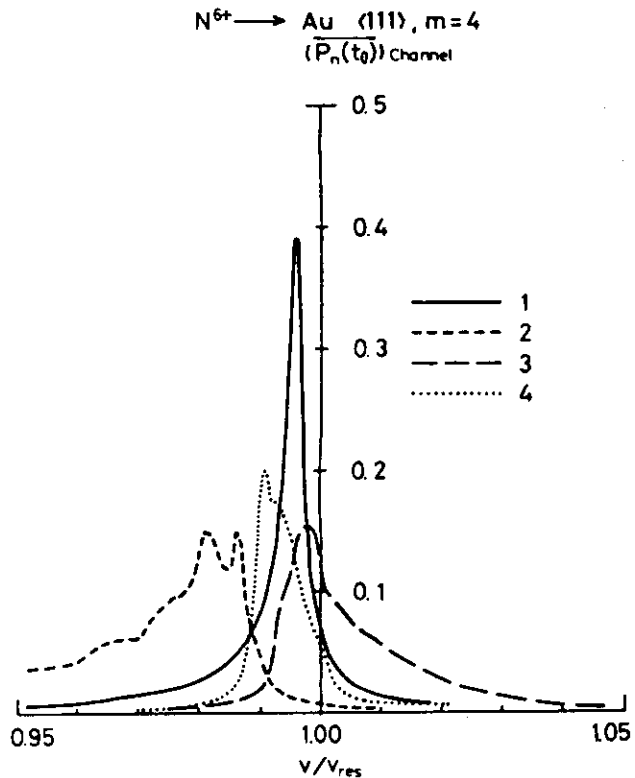


図8 $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle, m=4$ の場合の平均化した励起確率 $\langle \bar{P}_n \rangle_{\text{channel}}$

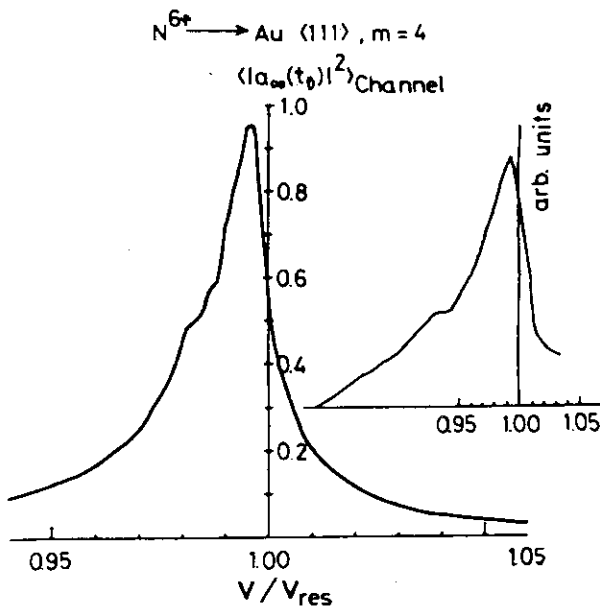


図9 $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle, m=4$ の場合の平均化した全イオン化確率 $\langle |a_{\infty}|^2 \rangle_{\text{channel}}$ 右上はMoak 達の実験結果である。

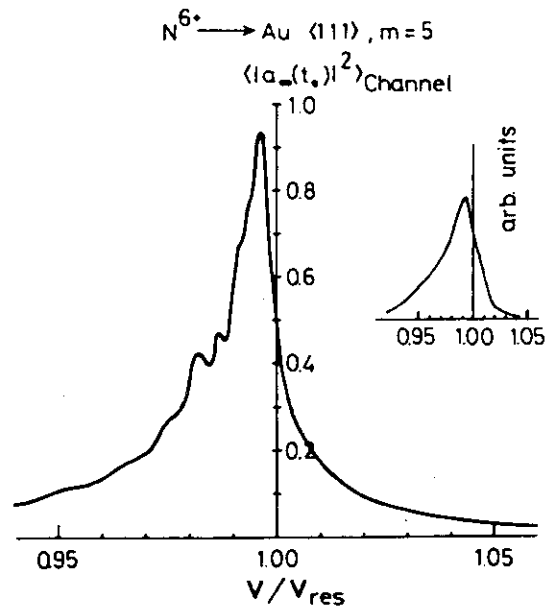


図10 $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle, m=5$ の場合の平均化した全イオン化確率 $\langle |a_{\infty}|^2 \rangle_{\text{channel}}$ 右上はMoak 達の実験結果である。

8. Wake Potential⁶⁾ の影響

イオン（荷電粒子）が電子ガス中を進行していくと、遮蔽の他に、電子ガスを分極させることにより後方に sin 型に振動するポテンシャルを発生させる。これがウェイクポテンシャルである。遮蔽ポテンシャルとウェイクポテンシャルはイオンから見ると定摂動として働くのでこれらによっても状態の混合、エネルギー準位のシフトなどが起こる。図 11.⁷⁾ にイオンの近傍における遮蔽・ウェイクポテンシャルの振舞が示してある。

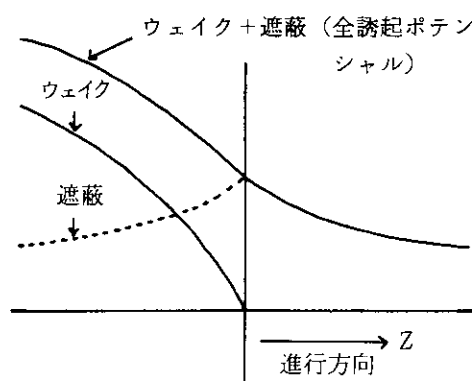


図 11 遮蔽ポテンシャルとウェイクポテンシャル

さて、前節でピークプロファイルを求めた $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle$ のような場合は $\langle 111 \rangle$ 軸チャンネルが狭いチャンネルなので、軸ポテンシャルの影響が大きくこれら誘起されたポテンシャルの影響は相対的に無視できる。しかしながら $N^{6+} \rightarrow Au \langle 100 \rangle$ のような場合は $\langle 100 \rangle$ 軸チャンネルは広いチャンネルなので軸ポテンシャルの影響はあまり小さくなく、誘起されたポテンシャルの影響が無視できず、むしろこちらの方が主要な役割をはたす。これらに対する行列要素を計算してみると、ウェイクポテンシャル、遮蔽ポテンシャルともすべての状態 ($n=0 \sim 4$) に対する対角要素が残るが非対角要素はウェイクポテンシャルを $2s$, $2p_z$ ではさんだもののみが残る（零と異なる）。

さて、今、仮に軸ポテンシャルの影響を無視してみる。すると、ウェイクポテンシャルにより $2s$, $2p_z$ が交じり合い、この間の縮退が解け、エネルギー独立の新しい固有状態が 2 つできる。従って、 $2p_+$, $2p_-$ への励起が小さくて無視できるような場合、この縮退の解けた 2 つの状態への遷移が生ずることにより共鳴励起のピークプロファイルはダブル

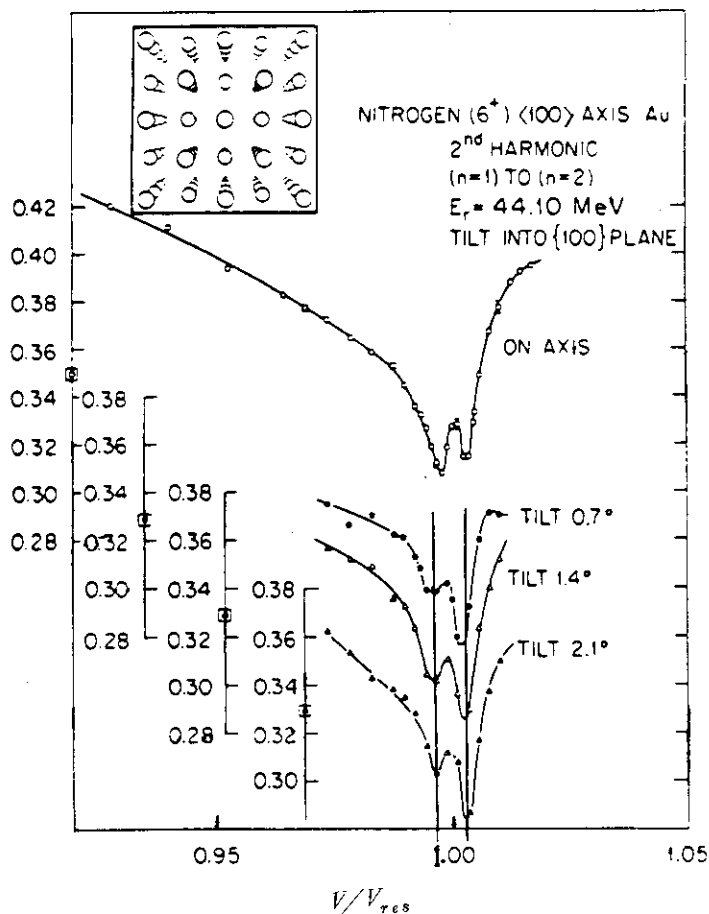


図 12 Moak 達の実験によって得られた $N^{6+} \rightarrow Au \langle 100 \rangle$, $m=2$ に対するダブルピーク

ピークになるはずである。⁸⁾ 実際 $N^{6+} \rightarrow Au <100>$, $m=2$ の場合などは $2p_+$, $2p_-$ への励起が相対的に小さく、実験でもダブルピークが見つかっている (図12)。そこで、遮蔽ポテンシャル、ウェイクポテンシャルをも含めて、ピークプロファイルを計算しなおしてみる。

さて、遮蔽ポテンシャルを V_{sc} , ウェイクポテンシャルを V_w としたとき、これらをイオンの位置を原点にとった円筒座標で表せば

$$V_{sc} = Z_1^* e^2 \int_0^\infty J_0(\kappa \rho) e^{-\kappa|z|} \frac{\frac{\omega_p^2}{v^2}}{\kappa^2 + \frac{\omega_p^2}{v^2}} d\kappa \quad \dots\dots\dots (31)$$

$$V_w = -2Z_1^* e^2 v \omega_p \int_0^{\kappa_c} d\kappa \frac{\kappa}{v^2 \kappa^2 + \omega_p^2} J_0(\kappa \rho) \sin\left(\frac{\omega_p}{v} Z\right) \theta(-Z) \quad \dots\dots\dots (32)$$

ここで Z_1^* は入射イオンの有効電荷 (ほとんど $Z_1 - 1$ とみなせる), ω_p は電子ガス (標的金属) のプラズマ振動数, κ_c はカット波数, θ はヘビサイドのステップ関数, J_0 はベッセル関数である。さて、入射イオンは非常に高速 (N^{6+} で 15 MeV 以上) なので

$$\frac{\omega_p \tau}{v} \ll 1$$

従って V_{sc} , V_w を原点のまわりで展開できて⁷⁾

$$V_{sc} \simeq Z_1^* e^2 \frac{\omega_p}{v} \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\omega_p}{v} \left[|Z| \ln \left(\frac{1.5262}{(\omega_p/v)|Z|} \right) + \rho \right] \right) \quad \dots\dots\dots (31')$$

$$V_w \simeq -2Z_1^* e^2 \omega_p^2 \int_0^{\kappa_c} d\kappa \frac{\kappa}{v^2 \kappa^2 + \omega_p^2} J_0(\kappa \rho) Z \theta(-Z) \quad \dots\dots\dots (32')$$

これらの M element の計算は比較的簡単にできるので, V_{sc} , V_w について1例ずつあげるだけにする。

遮蔽ポテンシャルに対しては

$$\begin{aligned} & \langle 1s | V_{sc} | 1s \rangle \\ &= Z_1^* e^2 \left(\frac{\omega_p}{v} \right)^2 \left(\frac{a_0}{Z_1} \right) \left[\frac{1}{4} \left\{ (\Gamma(2) + \Gamma(3)) \ln \left(\frac{a_0}{2Z_1} \times \frac{\omega_p}{1.5262v} \right) + (\Gamma'(2) + \Gamma'(3)) \right\} - \frac{3}{8} \pi \right] \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (33)$$

ここで Γ はガンマ関数であり, Γ' はその微係数である。ウェイクポテンシャルに対しては

$$\begin{aligned}
 & \langle 2s | V_w | 2p_z \rangle \\
 &= 2Z_1^* e^2 \left(\frac{\omega_p}{v}\right)^2 \frac{3}{2} \left(\frac{a_0}{Z_1}\right) \int_0^{\kappa_c} d\kappa \frac{\kappa}{\kappa^2 + \left(\frac{\omega_p}{v}\right)^2} \left[\frac{2}{\left(1 + \left(\frac{a_0}{Z_1}\right)^2 \kappa^2\right)^4} - \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{a_0}{Z_1}\right)^2 \kappa^2\right)^3} \right] \\
 & \left(\frac{Z_1}{a_0}\right)^2 \gg \left(\frac{\omega_p}{v_F}\right)^2 \gg \left(\frac{\omega_p}{v}\right)^2, \quad \kappa_c \simeq \frac{\omega_p}{v_F} \text{ より} \\
 & \simeq 3Z_1^* e^2 \left(\frac{\omega_p}{v}\right)^2 \left(\frac{a_0}{Z_1}\right) \ln \frac{v}{v_F} \dots\dots\dots (34)
 \end{aligned}$$

ここで v_F はフェルミ速度である。

さて、図 13. には、ウェイクポテンシャル、遮蔽ポテンシャルをも取り入れて求めた全イオン化確率

$$\langle |a_\infty(t_0)|^2 \rangle_{\text{channel}}$$

がのせてある。右上は Moak 達の実験結果¹⁾ である。細い実線はウェイク、遮蔽を無視し軸ポテンシャルのみを考慮にいれて計算したものであり、太い実線はウェイク、遮蔽をも考慮に入れて求めたものである。a) の $N^{6+} \rightarrow Au \langle 100 \rangle$, $m=2$ の場合はウェイク、遮蔽を考慮に入れると、実験結果によく似たダブルピークが生ずる。又 b) の $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle$, $m=4$ の場合はウェイク、遮蔽をも考慮に入れてもピークプロファイルはあまり変化せず、先ほど考えたようにウェイク、遮蔽の影響はあまり大きいものではない。従って前節で $N^{6+} \rightarrow Au \langle 111 \rangle$ の場合に対し軸ポテンシャルの影響のみを考慮にいれてピークプロファイルを求めたがこの結果はほとんど修正を受けることはないと思われる。

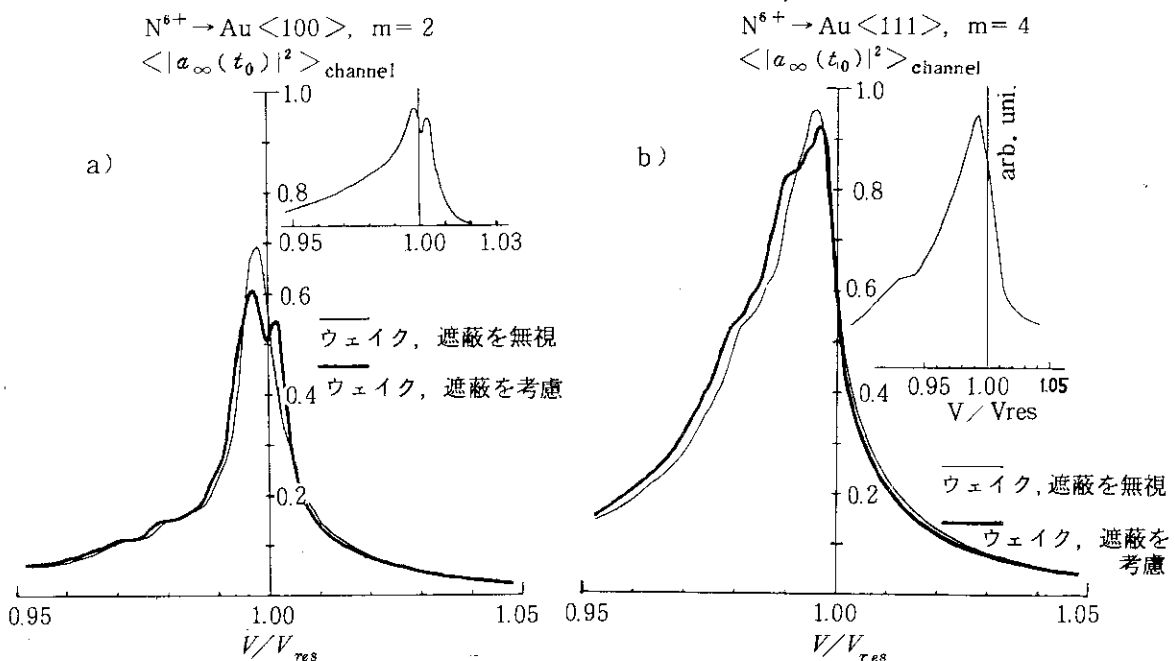


図 13 ウェイク、遮蔽をも考慮した全イオン確率 $\langle |a_\infty|^2 \rangle_{\text{channel}}$ のピークプロファイル

9. 結 論

チャンネルリングイオンの結晶周期場による共鳴励起 (Okorokov 効果) をイオンの軌道に対しては古典近似を行ない、励起確率の計算においては dynamical な手法を用いることによって取り扱った。このような比較的簡単な取り扱いで実験結果がよく説明されることがわかった。特にピークプロファイルに表われる非対称性は軸ポテンシャルの影響によりチャンネルリングイオンの電子状態のエネルギー固有値が垂直方向の位置 b の関数になるためであることが示された。また Wake ポテンシャルの影響が大きいと予想される Case に対し、これを取り入れて計算すると実験と同様なダブルピークを得ることを示したので、間接的に Wake ポテンシャルの存在の証明に寄与した。

Reference

- 1) C.D. Moak, S. Datz, O.H. Crawford, H.F. Krause, P.F. Dittner, J. Gomez del Campo, J.A. Biggerstaff, P.O. Miller, P. Hvelplund, and H. Kundsén, Phys. Rev. A 19, 977 (1979).
- 2) V.V. Okorokov, D.L. Tolchenkov, I.S. Khizhnyakov, Yu. N. Cheblukov, Y.Y. Lapitski, G.A. Iferov, and Yu. N. Zhukova, Phys. Lett. A 43, 485 (1973).
- 3) S. Shindo and Y.H. Ohtsuki, Phys. Rev. B 14, 3929 (1976).
- 4) J. Lindhard, Dansk. Vid. Selsk., Mat. Fys. Medd., 34, No.14 (1965).
- 5) Y. Yamashita and Y.H. Ohtsuki, Phys. Rev. B 22, 1183 (1980).
- 6) J. Neufeld, R.H. Ritchie, Phys. Rev. 98, 1632 (1955).
- 7) P.M. Echenique and R.H. Ritchie, Phys. Rev. B 20, 2567 (1979).
- 8) O.H. Crawford and R.H. Ritchie, Phys. Rev. A 20, 1848 (1979).

16. Okorokov効果 (実験)

京大工 万波通彦

1. 序

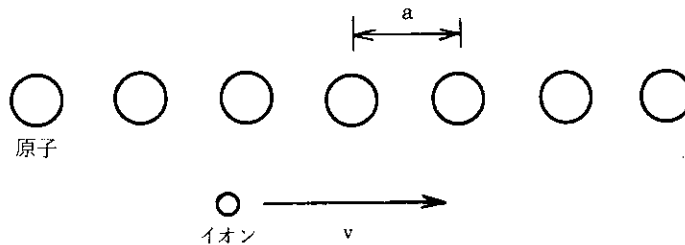
1965年 Okorokov は単結晶の低指数軸に平行に運動する粒子の干渉性励起 (coherent excitation, Okorokov 効果とも呼ばれるが使用例は少ない。)の可能性を提案した。¹⁾以後, Okorokov 自身も含めて数多くの人々が実験を試み, ある人々は観測に成したと称しているが, 実際にはすべて検出に失敗しているとみてよい。²⁾別の観点から実験により, 干渉性励起が検証されたのは, Okorokov の提案以後, 10年以上を経過してからであった。²⁾

あまりいゝ知慧も持たず, 検出失敗の実験の一つを行った者として,³⁾反省も兼ねて Review せよとの主催者の主旨を察し, 現状報告をしたい。

2. 干渉性励起

この現象については, 興味ある理論的取扱いがなされているが,²⁾こゝではこの現象の理論的面的についてのみ述べる。¹⁾

単結晶の指数軸に沿って運動する粒子を考える。粒子の運動方向に平行な原子列上の原子間隔を a , 粒子の速度を v とする。この粒子と共に動く観測者にとっては, v/a の振動数をもつ原子列による電場が作用する。しかし, 原子列の電場は単純な三角関数では書けないから, 電場の ℓ 次の Fourier 係数を考えれば, 高調波 (振動数 $\ell v/a$) が作用しているとみなせる。もし粒子が内部自由度を持つならば, この振動数に対応するエネルギー差の励起が起るといのが, Okorokov の模型である。



即ち, 準位差 ΔE に対し, 粒子の速度が

$$\Delta E = h \ell v / a \quad \ell = 1, 2, \dots$$

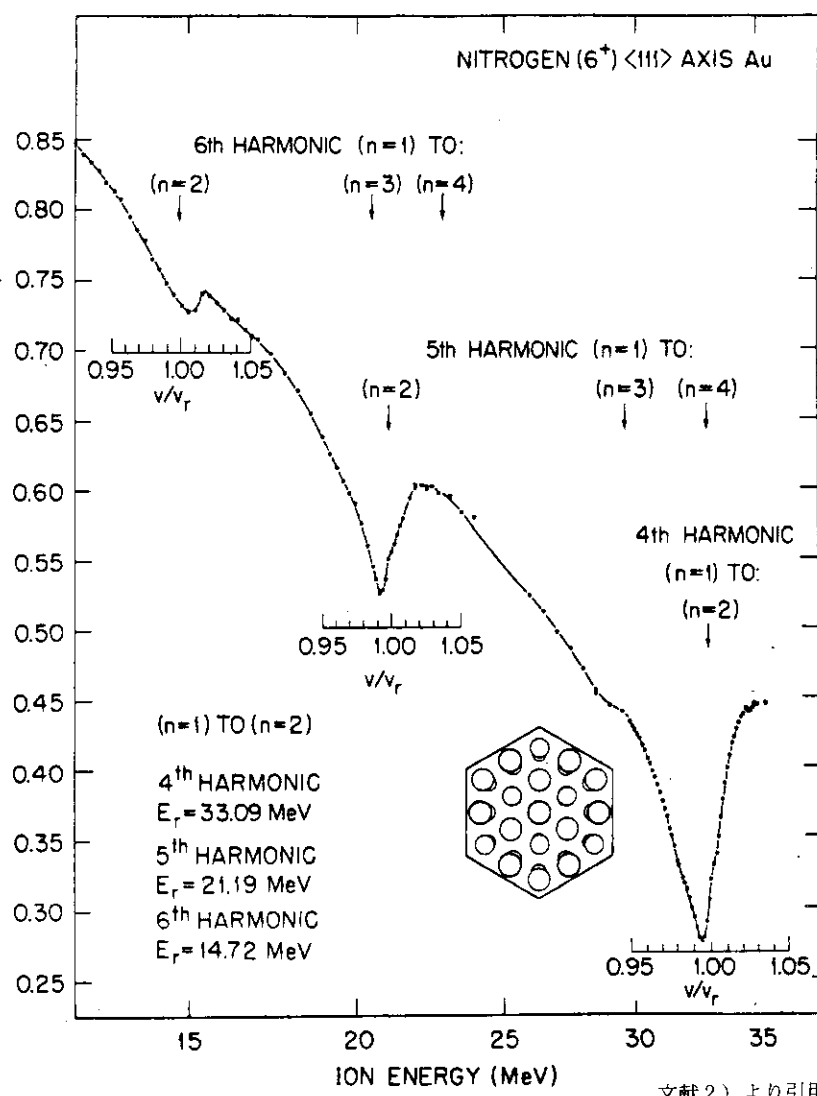
Experiments on the Okorokov effects.
Michihiko Mannami
(Kyoto University)

の条件を満足するとき励起される。この励起エネルギーは非相対論的に計算すると、 $a=0.2\text{ nm}$ 、 $v=c$ において約 6 keV となる。^{*} これは非相対論的速度を持つ粒子に対して、励起エネルギーの大きさの目安である。(但し、 $\ell=1$ の場合の値である) あとで見るように、 ℓ の値としては 5 以上でも十分な励起が観測されているので、比較的低速のイオンでも 1 keV 以上の励起が可能である。

3. 干渉性励起の検証

Moak 等 Oak Ridge 研究所のグループは水素原子状イオン $Z=5\sim 9$ について、イオンのエネルギー範囲 $1\sim 3.5\text{ MeV/amu}$ において $n=1$ から $n=2$ への干渉性共鳴励起を 50 以上の例について観測している。²⁾

その測定は次のような方法を用いている。イオンを単結晶薄膜に入射し、透過イオンの荷電分布をイオンのエネルギーを変えて測定する。イオンの入射方向が単結晶の低指数軸(又は面)に平行なとき、特定のエネルギー附近で、入射イオンと同じ荷電数のイオンの収率が急減することが観察された。図 2 はその一例である。85 nm 厚さの全単結晶の $[111]$ 軸に平行に透過した N^{6+} イオンの割合 (R) がイオンのエネルギーに対して描かれている。矢印で示したエネルギーに対して描かれている。矢印で示したエネルギー



の値附近で N^{6+} の割合が減少している。これは干渉性共鳴励起により励起された水素様原子の

^{*} 討論のとき御指摘があったように、相対論的には、上式は

$$\Delta E = h\ell v / a (1 - v^2 / C^2)^{1/2}$$

と書ける。したがって、有限 a に対しても励起エネルギーに上限はない。

N^{6+} の電子が剥き取られたためと解釈される。よく知られているように、核電荷 Z の水素様原子イオンの s 状態の電子軌道半径は Bohr 半径 a_0 、主量子数 n に対し $n^2 a_0 / Z$ と書ける。大きな軌道半径をもつ電子は原子列との衝突で容易に剥き取られると考えられる。図 2 の測定曲線の近くの v/v_r 軸は、その上に書かれた共鳴エネルギー準位差について、計算より求めた共鳴速度 v_r を単位として書かれている。

これらの測定結果から、次のような傾向が見られる。(1) 狭い結晶チャンネルほど強い励起が起る。(2) 高次の共鳴 (l が大きい) ほど励起は少い。(3) 測定から求めた共鳴エネルギーは、計算値より少し低い値をしめす。(4) 共鳴極大は非対称で低エネルギー側に拡ろがる。

Moak 等以前に行われた実験は、単結晶薄膜を透過したイオンの励起状態を、薄膜下流でのイオン発光を測定するという方法を用いている。イオンは主に He^+ の $n=4$ への励起を $n=4 \rightarrow n=3$ への発光より測定しているが、 N^{3+} の $2s 3p^3 P$ 、 C^{5+} の $2s$ への励起の測定もある。いずれの場合にも干渉性励起は観測できていない。Moak 等の実験が成功した現在、この He^+ の $n=4$ の状態を考えれば、その軌道半径は約 0.4 nm であり、そのような状態は結晶チャンネル内で安定かどうか問題である。また、このような状態の結合エネルギーは結晶内では遮蔽効果のための大きく変化していることが考えられる。したがって、 He^+ を用いた測定で干渉性励起が検出できなかったのは当然かもしれない。

4. 今後の課題

失敗実験の中には、透過イオンの荷電分布のエネルギー依存の測定がある。これには干渉性励起に起因したと思われる異常は見当らない。また励起状態測定の実験でも、イオン出射面付近で起った干渉性励起は固体内励起イオンの平均寿命にもよるが、ある確率で結晶外に出ることも期待されるが、測定結果によれば検出限界以下である。これらの事実は固体内イオン荷電変換過程、更には現在殆んど解明されていない beam-foil 励起過程と関連して今後の研究が必要である。

Moak 等 Oak Ridge グループの研究以外には、現在この種の研究が全く為されていないのは別の意味で興味深い。利用できる加速器の制約から二番煎じの研究は比較的行い難いかも知れない。または、Okorokov 効果と同じような周期場内の(励起)干渉現象として知られる \ddot{U} berall 効果 (coherent bremsstrahlung), 等のように原理的には興味あるがそれを用いて何ができるかという事になると二の足を踏むというのが実情かもしれない。

しかし、以上の経過が見れば、Okorokov 効果を励起状態観測により直接検証するという事は、まだ多少魅力あるテーマであろう。Moak 等の実験は、そのような実験を計画する上で充分検討する必要がある。単純な結論の一つは、励起状態が結晶チャンネル内で比較的安定に存在できるものでなくてはならない。Okorokov の最初の論文では主に核準位の coulomb 励起が議論されている。Moak 等の実験から $l \sim 5$ の高周波励起が可能であることがわかった現在では、核種を適当に選べば、核準位について 実験は現在我が国にある加速器でも充分可能のように思える。我々は、イオン表面チャネリング又は鏡面反射が起るときのイオン干渉性励起⁴⁾の実験を計画している。この場合には励起が結晶表面で起り、励起状態にあるイオンが観測できるのではないかと期待している。

文 献

- 1) V. V. Okorokov, Pisma JETP 11 4 (1965) 175.
- 2) C. D. Moak, S. Datz, O. H. Crawford et al., Phys. Rev. A 19 (1979) 977. この論文の引用文献に詳しい経過が示されている。
- 3) M. Mannami, H. Kudo, et al. Phys. Lett. 64 A. (1977) 136.
- 4) 講演後, このような提案が次の論文中にあることに気付いた。E. Kupfer et al. Z. Phys. A. 300 (1981) 35.