

## 二次の Born 近似計算による He と水素分子の二電子過程

(東北大多元研) 渡辺 昇, 浅野 佑策, 高橋 正彦

【序】二電子過程は、projectile との衝突によって標的原子分子に束縛された一つの電子がイオン化する際に束縛電子がもう一つ励起またはイオン化する過程で、多体相互作用のより詳細な解明に重要な役割を担う。我々は、電子 projectile との衝突によって起こる二電子過程を対象として、He[1,2]、H<sub>2</sub>[3-5]、および Xe[6,7]を標的とする binary (e,2e)分光実験を進めてきている。これにより、一次の Born 近似に基づく平面波撃力近似(PWIA)ではその衝突ダイナミクスを定性的にすら理解できない二電子過程があり、その理解にはBorn近似の二次項の一つであるtwo-stepメカニズムが鍵を握ることを見出した。こうした実験による新しい知見との比較のため、我々は two-step メカニズムの寄与を取り込んだ二次の Born 近似(SBA)計算を開始し、He[2,8]と H<sub>2</sub>[9]に対する結果を得た。ここでは、開発した SBA 計算の手法を報告し、主として He の励起イオン化過程および二重イオン化過程の実験結果と比較する。H<sub>2</sub>の実験結果との比較は、浅野らが本討論会 4C01 にて報告する。

【binary (e,2e)分光の原理】 binary(e,2e)分光では、大きなエネルギー損失と大きな運動量移行を伴う高速電子衝撃イオン化で生成する非弾性散乱電子と電離電子双方のエネルギー  $E_1$ ,  $E_2$  と運動量  $p_1$ ,  $p_2$  を測定する。これにより、入射電子のエネルギー  $E_0$  と運動量  $p_0$  は既知なので散乱前後のエネルギー保存則と運動量保存則を利用して、イオン化エネルギー  $E_{\text{bind}}$  および生成イオンの反跳運動量  $q$  の二つの物理量をパラメータとする三重微分散乱断面積を得ることができる。実験および装置の詳細は、文献[10]を参照されたい。

【二次の Born 近似計算】 二次の Born 近似の枠組みでは、電子衝撃イオン化過程の三重微分散断面積は一般に(1)式で与えられる。

$$\frac{d^3\sigma_{SBA}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = \frac{p_1 p_2}{p_0} \left\{ \frac{1}{4} |f(p_0, p_1, p_2) + f(p_0, p_2, p_1)|^2 + \frac{3}{4} |f(p_0, p_1, p_2) - f(p_0, p_2, p_1)|^2 \right\} \quad (1)$$

ここで、散乱振幅  $f(p_0, p_1, p_2)$  は Born 近似の一次項  $f_{B1}(p_0, p_1, p_2)$  と二次項  $f_{B2}(p_0, p_1, p_2)$  の和であり、標的イオン終状態  $\Phi_f^{(-)}$  への遷移に対する  $f_{B1}$  と  $f_{B2}$  はそれぞれ(2)式と(3)式で表される。

$$f_{B1}(p_0, p_1, p_2) = \frac{2}{K^2} \langle \Phi_f^{(-)}(p_2) | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \Phi_i \rangle \quad (2)$$

$$f_{B2}(p_0, p_1, p_2) = -\frac{2}{\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_v \int dp_a \frac{\langle \Phi_f^{(-)}(p_2) | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{r}_j) \Phi_v \rangle \langle \Phi_v | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_j) \Phi_i \rangle}{[p_a^2 - \{p_0^2 - 2(E_v - E_i)\} - i\eta] K_i^2 K_f^2} \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{r}_j$  ( $j=1,2$ )は標的電子の位置座標、 $\mathbf{K}$  ( $=\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1$ )、 $\mathbf{K}_i$  ( $=\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a$ )、 $\mathbf{K}_f$  ( $=\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_1$ )は移行運動量である。 $\Phi_i$  と  $\Phi_v$  はそれぞれ、エネルギー  $E_i$  と  $E_v$  をもつ標的中性始状態および中間状態を表す。

SBA 計算には実験条件に即した幾つかの近似を導入し、標的 CI 波動関数を用いて励起イオン化過程および二重イオン化過程の理論的な三重微分散乱断面積を得た。

**【結果と考察】** 図1は、Heの $n=2$ イオン励起状態への遷移に対する散乱断面積の $q$ 依存性、すなわち運動量分布を入射電子エネルギー1240, 2080, 4260 eVとした場合に求めたSBA計算の結果である。図には、比較のため、実験、PWIA計算、および入射電子と散乱電子の歪曲効果を取り入れた歪曲波Born近似(DWBA)計算の結果を併せて示している。ここでは、SBA計算の結果は絶対断面積で表示しているが、実験および異なる理論的手法による計算結果と比較するため、 $n=1$ イオン化主遷移の運動量分布の面積がSBA計算のそれと等しくなるように規格化を行い、それに対する相対強度として $n=2$ 状態への遷移強度をプロットしている。図から、観測したすべての入射電子エネルギーで、実験はPWIA/DWBA計算よりも数十%大きな強度を示しており、この実験と理論との差異はSBA計算によってほぼ解消されることが見てとれる。これは、two-stepメカニズムが二電子励起過程で重要な役割を担うことを明確に示している。

こうしたtwo-stepメカニズムの重要性は、図2からも分かる。この図は、二次以下のBorn近似項をshake-up過程を表す $f_{SU}$ 、および電離電子が異なる標的電子と相互作用をする $f_{TS1}$ 、イオン化・励起あるいは励起・イオン化の順で入射電子が標的と二回の相互作用をもつ $f_{TS21}$ 、 $f_{TS22}$ の3種のtwo-stepメカニズムとに分けて、それぞれの寄与の大きさを比較したものである。図から、 $f_{TS1}$ と $f_{TS22}$ の大きさは $f_{TS21}$ と比べてはるかに大きく、 $f_{SU}$ と匹敵することが見てとれる。

当日は、Heの二重イオン化過程も含めて、電子衝突による二電子過程の衝突ダイナミクスを議論する。

### 【参考文献】

- [1] N. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. A **72**, 032705 (2005). [2] N. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. A **75**, 052701 (2007).  
 [3] M. Takahashi *et al.*, Phys. Rev. A **68**, 042710 (2003). [4] M. Takahashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 213202 (2005).  
 [5] Y. Asano *et al.*, to be submitted. [6] M. Takahashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98**, 013201 (2007).  
 [7] Y. Asano *et al.*, to be submitted. [8] N. Watanabe *et al.*, to be submitted.  
 [9] N. Watanabe *et al.*, to be submitted. [10] M. Takahashi *et al.*, J. Electron Spectrosc. **141**, 83 (2004).

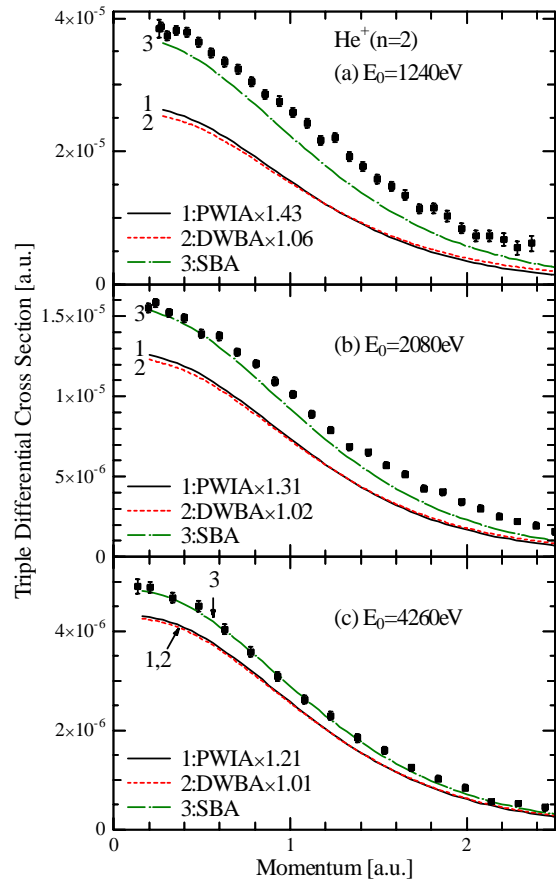


図1. Heの $n=2$ イオン状態への遷移の運動量分布

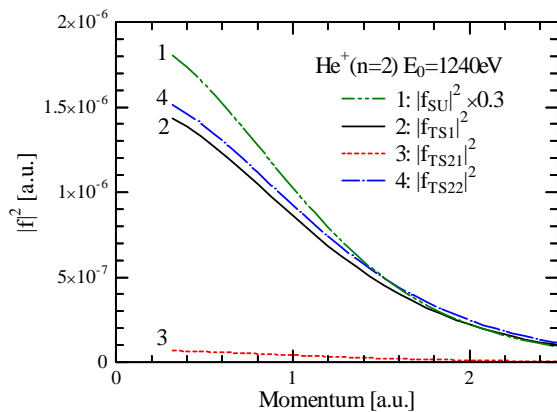


図2. Heの $n=2$ イオン状態への遷移に対するtwo-stepメカニズムの寄与の詳細