

R行列法を用いた分子の光電離過程の研究

(京都大学福井謙一記念研究センター) 田代 基慶

はじめに

分子の光電離過程は大気・星間化学等で重要な役割を果たす素過程であり、昔から多くの実験が行われ反応の積分・微分断面積が測定されて来た。また近年では分子反応の時間発展を理解するための実験的手法としても盛んに活用されている。これらの状況に対し、いくつかの理論グループは電子-分子の散乱理論を利用し、乱雑位相近似を用いたK行列法、Schwinger variational principle理論、時間依存密度汎関数理論などによって光電離の計算を行ってきた。

我々はこれまで第一原理R行列法を用いて低エネルギー電子と分子の衝突過程に関する研究を行ってきた。この方法は原子・分子の光電離過程にも適用できることが知られているが[1]、今までの所、原子系への応用がほとんどであり分子系への応用例はあまりない。第一原理R行列法は低エネルギー電子・分子衝突で良好な結果を出してきたため[2]、光電離に関しても同様の良い結果が期待できる。また、振動・解離等の核運動の効果を取り入れることも原理的には可能である。このような状況を踏まえ、我々は第一原理R行列法を利用した分子の光電離過程の研究を行うことにした。

手法

第一原理R行列理論では電子と(N-1)電子分子イオンの散乱問題を解くことで、始状態であるN電子分子の束縛状態波動関数と終状態である[散乱電子+(N-1)電子分子イオン]の散乱状態波動関数を求める。これらの波動関数から双極子遷移要素を計算し、光電離の断面積や散乱電子の分布等を得ることができる。

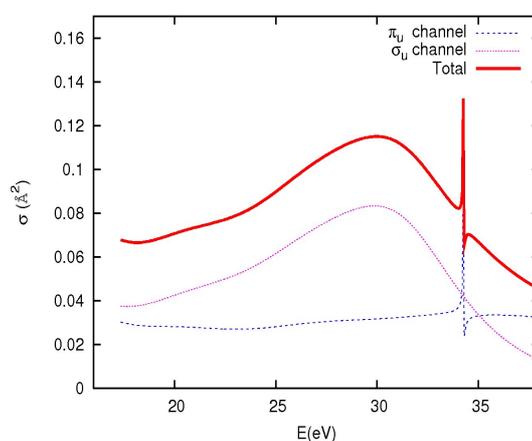
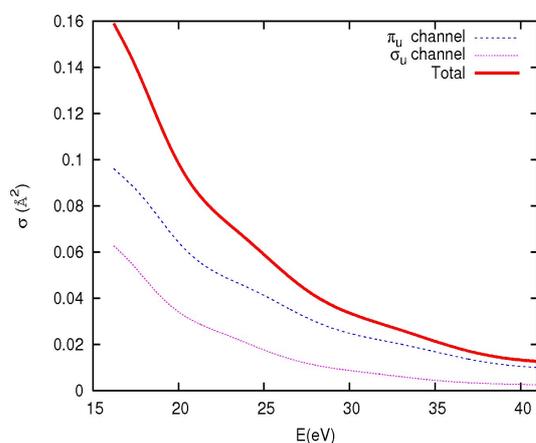
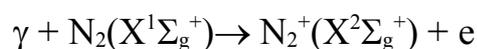
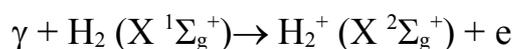
実際の散乱計算の手続きでは、標的分子と散乱電子の距離に応じ内部領域と外部領域の2つの領域に分けて異なるレベルの計算を行う。このうち内部領域では通常の電子状態計算とほぼ同様の手続きで[分子イオン+散乱電子]系の全ての電子状態がCI等の方法で計算される。一方外

部領域で散乱電子のみの自由度を取り扱い、緊密結合方程式を用いて散乱電子の波動関数を計算する。

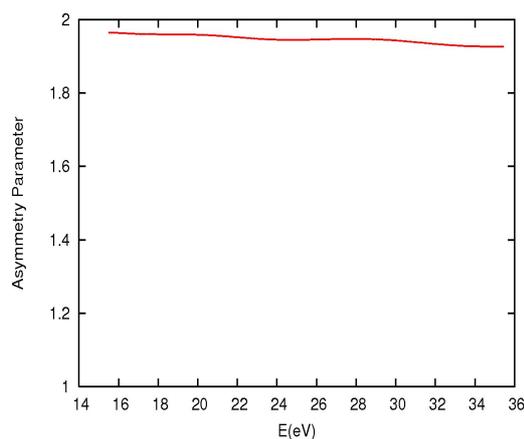
結果

これまでのところ電子・分子衝突の第一原理R行列法プログラムを基にして電離電子の波動関数を作成、双極子遷移要素の計算を行い、水素分子や窒素分子等簡単な場合に対する光電離断面積などを得ることが出来ている(下図)。本発表ではこれらの詳細について報告を行う。

光電離断面積の計算例



水素分子光電離での Asymmetry Parameter



参考文献

- [1] P.G. Burke and K. T. Taylor, J. Phys. B **8**, 2620 (1975).
- [2] M. Tashiro and K. Morokuma, Physical Review A **75**, 012720 (2007).