

## 4P067

### CHARGE TRANSFER IN $H^+ + CH_3$ COLLISIONS BELOW 10 keV

(九州大院・理<sup>1</sup>、国際基督教大学院<sup>2</sup>、North Eastern Hill University<sup>3</sup>、Bergische Universität Wuppertal<sup>4</sup>、JAMSTEC<sup>5</sup>)

○長尾正俊<sup>1</sup>、比田剣之輔<sup>1</sup>、季村峯生<sup>1</sup>、Lukas Pichl<sup>2</sup>、Sachchida N. Rai<sup>3</sup>、Heinz-Peter Liebermann<sup>4</sup>、Robert J. Buenker<sup>4</sup>、数納広哉<sup>5</sup>

#### 【緒言】

イオン-分子衝突の研究は実験・理論面ともイオン-原子衝突研究に比べ非常に遅れている。しかしイオン-分子衝突ダイナミックスの知見と反応断面積データは基礎科学や応用科学・技術で重要で早急に整備する必要に迫られている。ここ数年我々はイオン-分子衝突で起きる電子捕獲・電子励起・イオン化過程についての理論研究を推し進めている[1,2]。このプロジェクトの一環として、今回我々は入射エネルギーが数十eVから 10keVの間での $H^+$ イオンの $CH_3$ 分子への衝突における電子捕獲及び電子励起過程を理論的に研究した[3]。

#### 【理論・計算】

今回我々が注目する衝突エネルギーは keV/u 以下の領域であるので、散乱ダイナミックスは半古典的分子軌道展開法を用いる。この方法は、衝突粒子の運動は古典力学で表し、衝突系の電子状態は量子力学で解き求めるというものである。電子状態は MRD-CI(Multireference single- and double-excitation Configuration Interaction)法を用い計算した。散乱ダイナミックスについては古典的軌道の衝突径数に基づく分子軌道緊密展開(MOCC : Molecular-orbital Close-coupling)法を使い電子捕獲・電子励起ダイナミックスの理解と反応断面積を決定した。

今回の計算に用いた $CH_3$ へのプロトンの入射軌道は、

- ①  $CH_3$ 分子の平面に対して垂直に $H^+$ が入射する場合
- ②  $CH_3$ のCH結合のHに向かって $H^+$ が入射する場合
- ③  $CH_3$ 分子のCH結合のH原子とは反対側から $H^+$ が入射する場合

の3種類に関して行った。

#### 【結果】

Fig.1a-cに衝突系の断熱ポテンシャルを示す。断熱ポテンシャルは入射陽子と標的 $CH_3$ 分子との間の距離の関数として、上述の①-③に対応した軌道である。断熱ポテンシャルは、3種類とも核間距離が 15 a.u.の部分でのエネルギーが低い方からState1、2、・・・、9とラベルした。State2は相互作用前の初期状態[ $H^+ + CH_3$ ]に対応している。State1は基底状態への電子移行状態[ $H + CH_3^+$ ]、State3-4は $CH_3$ の励起を伴う電子移行状態[ $H + CH_3^{*+}$ ]、State5-6はより高い励起状態への電子励起を伴う電子移行状態[ $H + CH_3^{**+}$ ]、State7-9は対象分子である $CH_3$ の電子励起状態[ $H^+ + CH_3^*$ ]に対応している。State3-4及びState5-6はそれぞれ2重に縮退しており $\sigma$ と $\pi$ の性質を持っている。プロトンが入射する方向によって断熱ポテンシャルが大きく異なっている。例えば、①の場合、初期状態とState4は核間距離 4 a.u.以下の領域で近接している。②においては $CH_3$ の水素原子の存在の為に核間距離 2.05 a.u.のところ強いポテンシャル障壁が存在している。

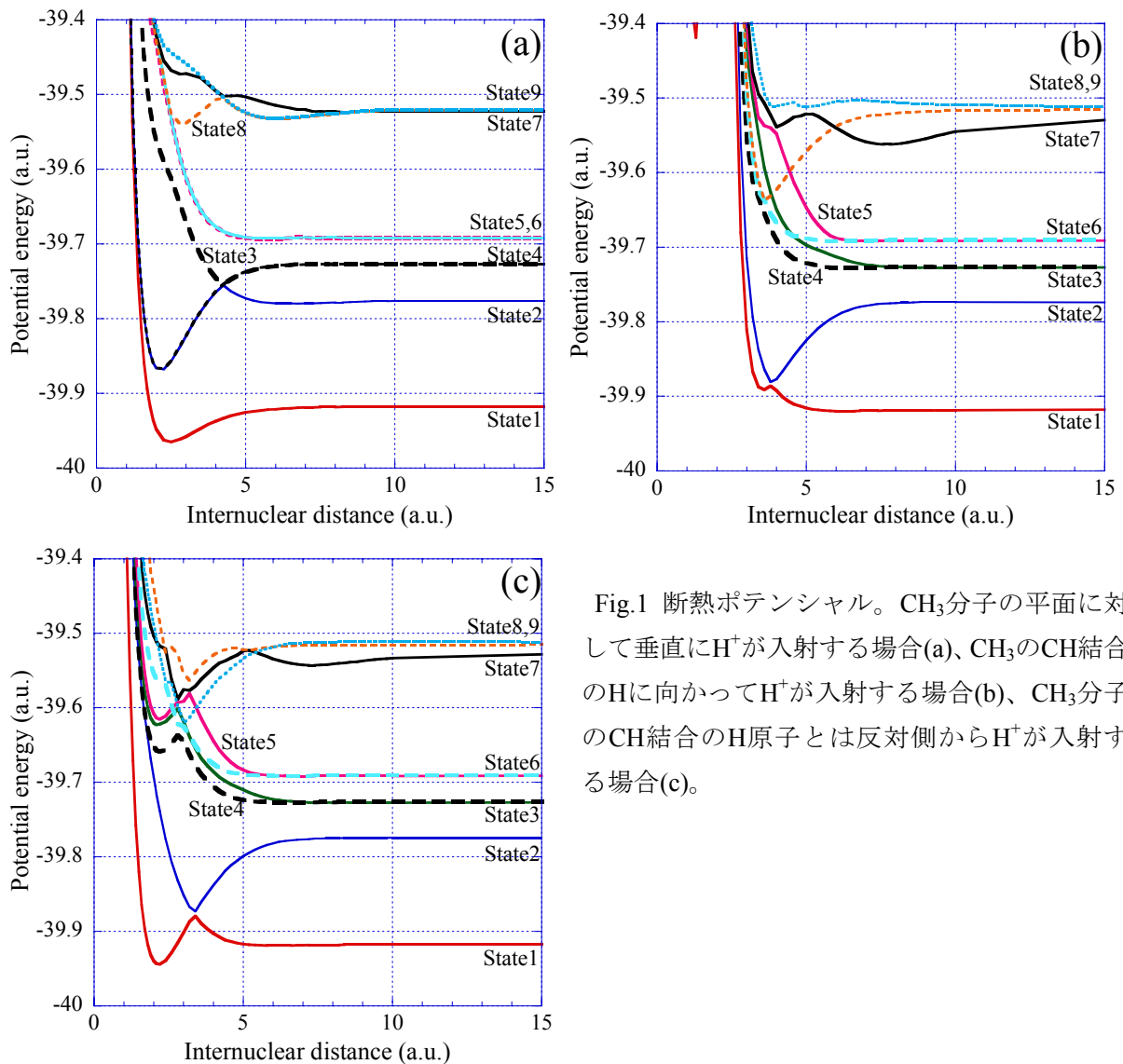


Fig.1 断熱ポテンシャル。CH<sub>3</sub>分子の平面に対して垂直にH<sup>+</sup>が入射する場合(a)、CH<sub>3</sub>のCH結合のHに向かってH<sup>+</sup>が入射する場合(b)、CH<sub>3</sub>分子のCH結合のH原子とは反対側からH<sup>+</sup>が入射する場合(c)。

散乱ダイナミクス計算で電子移行及び電子励起断面積を 60eV/u から 10keV/u の範囲で決定した。全エネルギー領域で電子捕獲断面積が主過程である事がわかった。電子捕獲・電子励起断面積は入射粒子のエネルギーと入射軌道①-③に強く依存する事が確かめられ、断面積が軌道に応じ1桁以上の違いが出る事がわかり、強い分子配向効果の存在を確認した。

References:

[1] T. Kusakabe, K. Asahina, J. P. Gu, G. Hirsch, R. J. Buenker, M. Kimura, H. Tawara, and Y. Nakai, *Phys. Rev. A* **62**, 062714 (2000).  
 [2] R. Suzuki, S. N. Rai, H.-P. Liebermann, R. J. Buenker, L. Pichl, and M. Kimura, *Phys. Rev. A* **71**, 032710 (2005).  
 [3] M. Nagao, K. Hida, M. Kimura, L. Pichl, S. Rai, H.-P. Liebermann, R. J. Buenker and H. Suno, *Phys. Rev. A* (to be published).