15. チャネリング粒子の非弾性散乱

並木　周

高速荷電粒子が結晶中を、激しく散乱されることなく、奥深く侵入していく現象をチャネリングという。チャネリングは、結晶の周期構造に起因する現象である。チャネリング粒子は、結晶の原子列、あるいは、原子面の間を滑らかな周期的軌道を描きながら運動する。従って、チャネリングは、結晶の局所的な情報を得るという意味で非常に重要な現象である。また逆に、チャネリング粒子の結晶との局所的な相互作用に関する理論的な解析は、チャネリングを考える上で不可欠となる。

本研究では、チャネリング粒子の非弾性散乱について考察する。チャネリングに関する物理量で最も重要なものとして、阻止能と拡散係数がある。ここでは、電子励起の局所拡散係数と阻止能を取り扱う。

上述したように、阻止能にしても拡散係数にしても、チャネル内での、粒子の位置依存性が問題となる。有名なベーテの阻止能公式は、原子の分布がランダムであることを前提としているが、チャネリング粒子からみた結晶原子は、規則的に分布して、かつ、粒子までの距離はあまり近づくことなく周期的に変化している。このように、チャネリング粒子の非弾性散乱を考えるには、結晶内の正確な電子状態を記述する必要がある。

拡散係数及び阻止能の計算には、新田による定義式を用いた。同定義式によると、拡散係数と阻止能は、一般化された振動子強度によって以下のように書き表される。

$$D_{\perp}(R_{\perp}) = \frac{1}{2v}\sum_{g_{\perp}} e^{ig_{\perp}\cdot R_{\perp}} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, \hbar^2\left(q_{\perp}^2 - \frac{g_{\perp}^2}{4}\right)\sum_{n\neq 0} S_n\left(q+\frac{g_{\perp}}{2}, q-\frac{g_{\perp}}{2}, \Delta\varepsilon\right)$$

$$W(R_{\perp}) = \frac{1}{v}\sum_{g_{\perp}} e^{ig_{\perp}\cdot R_{\perp}} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sum_{n\neq 0} E_{n0}\, S_n\left(q+\frac{g_{\perp}}{2}, q-\frac{g_{\perp}}{2}, \Delta\varepsilon\right),$$

$$S_n(q, q'; \Delta\varepsilon) = \frac{2\pi}{\hbar} H'_{n0}(q) H'_{n0}(-q')\ \delta\left(\frac{\hbar^2 K_0^2}{2M} - \frac{\hbar^2 (K_0-q)^2}{2M} - E_{n0}\right)$$

但し、Wは阻止能、Dは拡散係数、そして、Sは一般化された振動子強度である。この定義式は、衝突係数法による定義式に一致することが確かめられている。結晶内の各電子からの寄与をできる限り正確に取り入れるために、ハートリー・フォック波動関数を用いた。

新田による定義式は、相対論的にも拡張されている。また、相対論的チャネリング粒子に対する、局所拡散係数・阻止能の理論的計算はほとんど行われていない。本研究では、この計算も試みる。相対論的に拡張された定義式は、上の定義式にある一般化振動子強度を次のもので置き換えればよい。

$$S'_n(q, q'; \Delta\varepsilon) = \frac{1}{2}\sum_{s_0, s}\sum 2\pi\, u_0^{+} H'_{0n}(q)\, u u^{+} H'_{n0}(q')\, u_0\, \delta(\Delta\varepsilon - E_{n0})$$

相対論的領域では、クーロン相互作用のほか、遅滞効果も含めねばならない。遅滞効果の計算は、ディラック方程式での二次の摂動となるので、容易ではない。ここでは、相対論的計算の手始めとして、遅滞効果の影響について調べる。