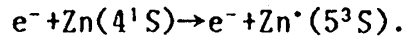


7. 低エネルギー電子衝撃によるZnの励起断面積のエネルギー依存性

齊 藤 肇

〔研究主旨〕

この研究は、低エネルギー電子衝撃によるZnの 5^3S 状態への励起断面積のエネルギー依存性をOCHKUR近似を用いて計算し、実験結果と比較したものである。



〔OCHKUR近似^{(1),(2)}〕

OCHKUR近似は、全エネルギー領域における交換散乱を記述するのに用いられる近似のうちで最も簡単な方法である^{(3),(4)}。これは、高エネルギー領域についてのみ成り立つBORN-OPPENHEIMER(B-0)近似を低エネルギー領域でも成り立つように、修正したものである。B-0近似では、交換散乱振幅は(以下、原子単位系)、

$$f_{B-0} = -(2\pi)^{-1} \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \\ = -(2\pi)^{-1} \int \psi_f(2,3) V(1,2;3) \psi_i(1,2) \exp[i(\vec{k}_i \cdot \vec{r}_3 - \vec{k}_f \cdot \vec{r}_1)] d\tau.$$

ここで、 Ψ_f, Ψ_i はそれぞれ終状態と始状態の系全体の波動関数であり、 ψ_f, ψ_i はそれぞれ、終状態と始状態の原子の波動関数である。そして、 V はポテンシャルであり、

$$V(1,2;3) = 1/r_{13} + 1/r_{23} + v(r_3).$$

ここで、 $v(r)$ はコアポテンシャルであり、1,2と3はそれぞれ外殻原子内電子と入射電子を表わしている。OCHKUR近似では交換散乱振幅 f_{B-0} の中のポテンシャル V のうち、

$$1/r_{13} = 4\pi k_i^{-2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)$$

とおいて他の項を無視する。このようにすると交換散乱振幅 f_{OCH} は、

$$f_{OCH} = -2k_i^{-2} \int \psi_f(1,2) \psi_i(1,2) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_1) d\tau_1 d\tau_2.$$

ここで、 $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ は、運動量移行である。singlet $\rightarrow$ tripletの遷移における励起断面積 σ は、

$$\sigma = 3k_f/k_i \int |f_{OCH}|^2 \sin\theta d\theta d\chi \\ = 24k_i^{-6} \int_{q_{MIN}}^{q_{MAX}} |\langle \psi_i | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_1) | \psi_f \rangle|^2 q dq.$$

ここで、 $q_{MAX} = k_i + k_f, q_{MIN} = k_i - k_f$ である。

〔Znの波動関数〕

この研究では、 $4^1S(4s^2), 5^3S(4s5s)$ の波動関数が必要である。 $4^1S(4s^2)$ の波動関数はCLEMENTIら⁽⁵⁾によりROOTHAAN-HARTREE-FOCK近似法で求められたもの(fig.1)を使用した。そして、 $5^3S(4s5s)$ の波動関数はZnイオンの基底状態 $4^2S(4s)$ の波動関数⁽⁵⁾をもとにHARTREE近似法により求めた(fig.2)。ただし、このとき $\epsilon_{5s} = 0$ とおき、 $r_1 = 1$ より外側で下の方程式を解き、 $r_1 = 1$ より内部は $4s$ 軌道の波動関数とした。

$$[-(1/2)\Delta_1 - Z/r_1 + \sum_i J_i] \phi_{5s}(1) = \epsilon_{5s} \phi_{5s}(1); Z=30.$$

ここで、 J_i はクーロン演算子と呼ばれ、

$$J_i \phi_{5s}(1) = \left\{ \int (\phi_i^2(2)/r_{12}) d\tau_2 \right\} \phi_{5s}(1).$$

そして、 ψ_i, ψ_f はそれぞれ、次のようになる。

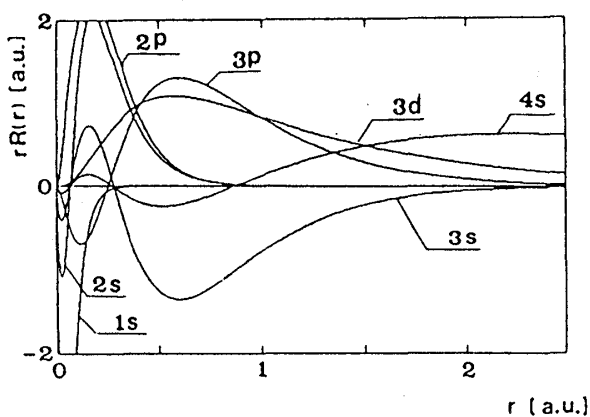
$$\psi_i(1,2) = \phi_{4s}(1)\phi_{4s}(2),$$

$$\psi_f(1,2) = [\phi_{3d}(1)\phi_{4s}(2) - \phi_{4s}(1)\phi_{3d}(2)].$$

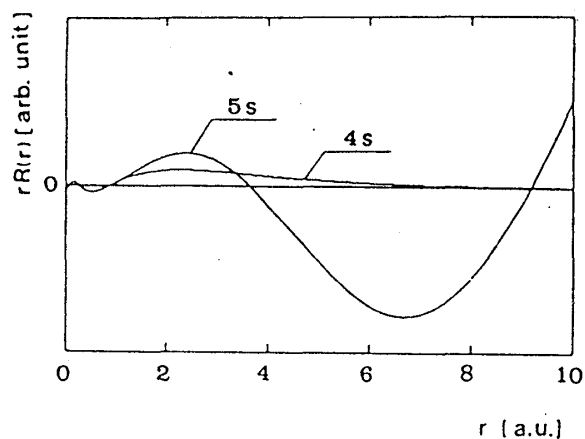
$\psi_f(1,2)$ は規格化していない。そして、 ϕ_{4s} は Zn イオンの 4s 軌道の波動関数を表わしている。

[Zn の励起断面積]

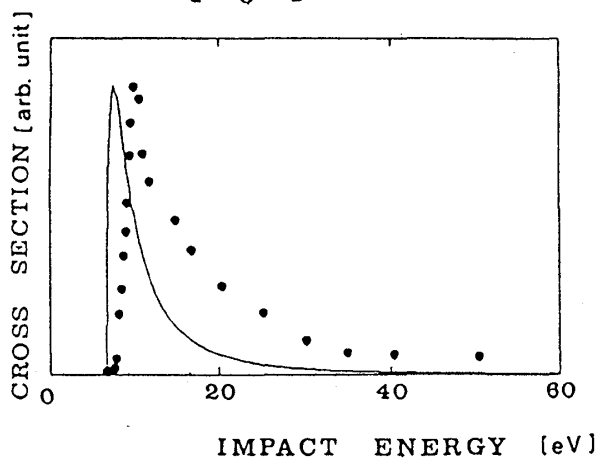
このようにして求めた結果と実験結果⁽⁶⁾ を (FIG. 3, 4) に示す。(fig. 4) は両対数で表わしたもので ● は実験値であり、実験では断面積はエネルギー^{-2.6} 乗に比例し、この結果は、^{-3.0} 乗に比例する。両者の食い違いは、OCHKUR 近似を使った事、5s 軌道の波動関数を $\varepsilon_{5s} = 0$ として、交換演算子を考慮していない HARTREE 近似を使った事、また、実験誤差等、考えられる。



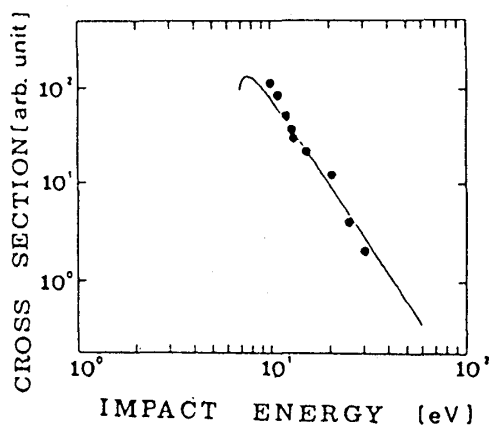
[fig.1]



[fig.2]



[fig.3]



[fig.4]

[参考文献]

- (1) V.I. Ochkur, Soviet Physics-JETP 18, 503 (1964)
- (2) R.A. Bonham, J. Chem. Phys. 36, 3260 (1962)
- (3) M.R.H. Rudge, Proc. Phys. Soc. 85, 607 (1965)
- (4) W.M. Huo, J. Chem. Phys. 60, 3544 (1974)
- (5) E. Clementi and C. Roetti, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14, (1974)
- (6) "Zn 原子の低エネルギー電子線衝突による励起発光" 高井 潔 修士論文 (1987)