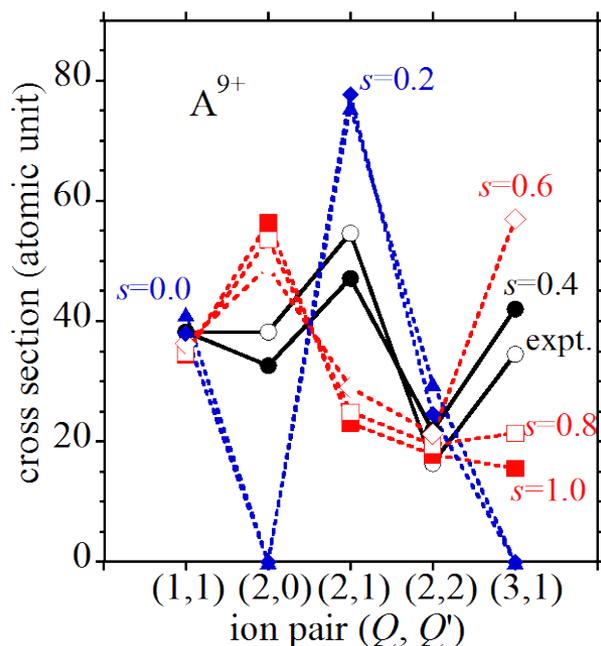


多重電離分子における多電子動力学

研究代表者 東京都立産業技術高等専門学校 山口知子



研究成果(平成24年度)

- 分子は多価に電離するとクーロン爆発を起こし、崩壊します。低速(\sim keV/amu)の多価イオンと2原子分子の衝突における多電子移行の物理モデル(古典的3中心 over-barrier model)を修正し、標的が希ガス2量体(Ar_2)の場合に適用しました。
- 希ガス2量体では、準分子を形成している電子による部分的遮蔽効果を取り入れました。特に、 A^{9+} 衝突では、 $s=0.4$ が共同研究者の松本らの行った実験と良い一致が得られました。この結果、部分的遮蔽が本質であることが解りました。
- さらに、電子数とイオンの価数を合わせた量が保存されるよう入射イオンにも部分的遮蔽を取り入れました。

論文、国際会議

- “Multiple ionization of rare gas dimers by highly charged ions: projectile dependence of screening effect”, T.O-Yamaguchi and A. Ichimura, *29th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics*, Sendai, 6/5 – 6/7, 2013.
- Multiple ionization of Ar dimers by slow highly charged ions: projectile dependence of screening effect, , T.O-Yamaguchi and A. Ichimura, 11th EUROPIAN CONFERENCE ON ATOMS, MOLECULES AND PHOTONS, Aarhus Denmark, 6/24-6/28, 2013.
- Multiple ionization of rare gas dimers by slow highly charged ions: screening effect during a collision, T. Ohyama-Yamaguchi and A. Ichimura, *Physica Scripta* **T156** (2013) 014043.

多重電離分子における多電子動力学

東京都立産業技術高等専門学校 電子情報工学コース
教授 山口知子

一般に希ガス 2 量体では、共有結合分子の場合と異なり、すべての電子がどちらかの原子に局在している。著者は、この効果を考慮した低速 ($\sim \text{keV}/\text{amu}$) の多価イオンと希ガス 2 量体の衝突における多電子移行の物理モデル (古典的 3 中心 over-barrier model)、および既に準分子を形成している電子による部分的遮蔽効果 (パラメータ s) を考慮した改良モデルを提案した。パラメータ s を同じ値で比較すると、 $\text{Ar}^{9+} - \text{Ar}_2$ および $\text{Xe}^{20+} - \text{Ar}_2$ 衝突における準分子形成の臨界距離は、入射イオンの価数が大きいほど、2 電子連鎖過程が起きやすいことを示した。電荷対分布を求め、 s 依存性を調べたところ、 $\text{Ar}^{9+} - \text{Ar}_2$ 衝突では $s = 0.4$ 、 $\text{Xe}^{20+} - \text{Ar}_2$ 衝突では $s = 0.6$ とした場合、首都大の松本らが行った実験結果とよい一致を見た。(図 1)

しかし、Mathematica を用いて行なった古典的位相空間の体積から評価したパラメータ s は、実験との一致を見たパラメータ s よりかなり低いことが判った。即ち、電子が分子内鞍点を超えるために有限の時間を要し、これが大きな s を必要とする原因と予測した。そこで、標的分子 (BC) のみならず、入射イオン (A) にも、移行した電子による遮蔽効果を取り入れ、下記のようにイオンの価数を設定した。サイト B がアクティブな場合、

$$q_A = q - (Q_B + Q_C)(1 - s), \quad q_B = Q_B + 1, \quad q_C = (1 - s)Q_C, \quad (1)$$

サイト C がアクティブな場合、

$$q_A = q - (Q_B + Q_C)(1 - s), \quad q_B = (1 - s)Q_B, \quad q_C = Q_C + 1, \quad (2)$$

とした。しかし、多少の改善が見られるものの、結果を大きく変えるには至らなかった。(図 2)

平成 25 年度は、研究成果を 2 つの国際会議、および秋、春の日本物理学会で発表することができた。このうちデンマークで開催された国際会議-11th EUROPIAN CONFERENCE ON ATOMS, MOLECULES AND PHOTONS (第 11 回原子、分子、光に関するヨーロッパ国際会議) - の参加費用に大学・高専連携事業で配分された研究費を充てることができた。それにより、原子、分子、光の物理に関する物理の最前線の研究の動向を探り、欧米の研究者と直に議論をし、研究の更なる発展ができたものと自負する。

平成 25 年度をもって、大学・高専連携事業は終了するが、多重電離分子における多電子動力学に関する研究は継続して行うつもりである。

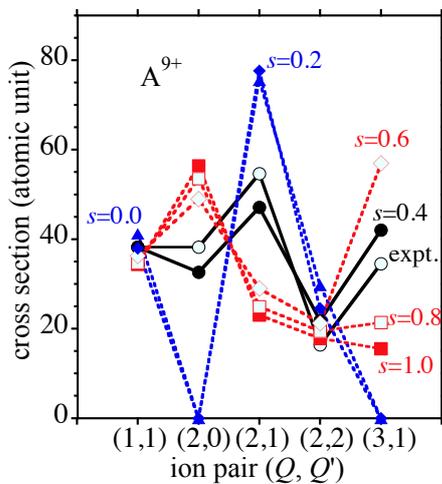


図 1. $\text{Ar}^{9+} + \text{Ar}_2$ 衝突におけるイオン対 (Q, Q') 生成断面積の s 依存性。および、実験との比較。

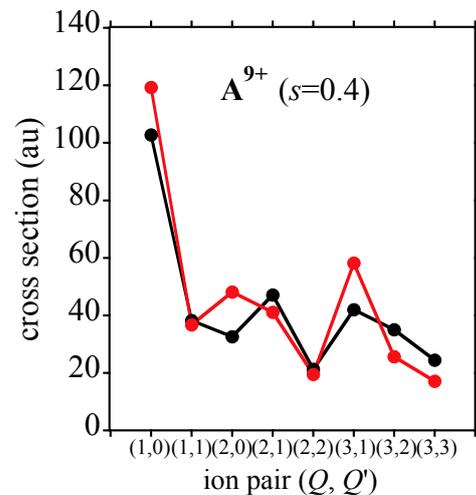


図 2. イオン対 (Q, Q') 生成断面積。 $s = 0.4$ における、入射イオンに遮蔽効果を取り入れた場合 (赤線) と遮蔽効果を取り入れない場合 (黒線) の比較。