

「原子衝突のキーワード」

シェイク過程 (Shake Process)

原子核の電荷が変化するベータ崩壊, あるいは, 物質に X 線が照射されて光電離を起こす状況を想定しよう. このような過程により, 核電荷あるいは原子核近傍の電荷が突然変化し, 外殻にある電子は急激な電場の変化を受けることになる. すると, 外殻の電子は遷移を起こしうる. このような, 核反応・内殻過程による急激な電場の変化により引き起こされる副次的な過程を, シェイク過程と呼んでいる[1].

シェイク過程は, 外殻電子の遷移が束縛励起・放出される状況について, それぞれシェイクアップ・シェイクオフ過程と呼ばれている. 内殻光電離過程では, 1 電子軌道の電子占有状態が図 1 のようになる. ここでは, 原子分子の内殻光電離に関連する現象を例にして, より詳細を解説する.

光子エネルギー $h\nu$ の X 線を原子に照射し, その内殻光電子スペクトルを測定するとしよう. 注目した内殻軌道のエネルギー準位を E_c とすると, 放出される内殻光電子の主構造 (main line) は電子の運動エネルギー $E_{\text{kin}} = h\nu - E_c$ に現れる. そのとき, この主構造よりも低運動エネルギー側に, 複数の衛線構造 (satellite lines) が観測される. そのような衛線構造を生じる機構の考察では, シェイク過程の概念が重要となる. 衛線構造の起源は, シェイク過程に基づくものだけではなく, 始状態・終状態のそれぞれにおける多電子効果 (相関効果) が起源となっている場合もある[1,2].

光電離断面積は, 双極子近似と瞬間近似[3]の枠組みにおいて,

$$\sigma(E) \propto \underbrace{\left| \langle k_E | \mathbf{r} | \Phi_c \rangle \right|^2}_{\text{双極子部分}} \cdot \underbrace{\left| \langle \Psi_c | \Phi_c \rangle \right|^2}_{\text{単極子部分}} \quad (1)$$

と表される[4]. ここで, Φ_c は始状態の電子配置から内殻軌道 c にある電子が電離されたときの, 凍結軌道で記述した電子配置であり, 一方, Ψ_c は内殻軌道から電離した (緩和後の) 状態の波動関数を表わしている. シェイク過程による遷移は, 式 (1) の単極子部分により強度を持つため, monopole 遷移と呼ばれることがある.

シェイクアップ過程は, 直感的にはつぎのように

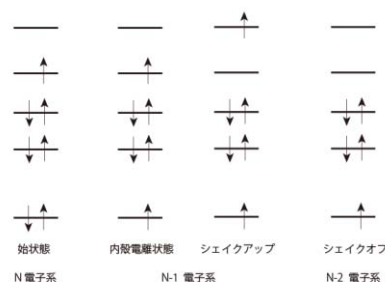


図1: ある電子配置から内殻電離で生じるシェイク過程の電子配置. N-1 電子配置の終状態が, 内殻光電子スペクトルにピークを形成する. 2 つの電子が放出されるシェイクオフ過程は, エネルギーを分け合うため, ピークを形成しない.

説明できる. 外殻に対する実効核電荷が急激に変化すると, その実効核電荷の下での原子軌道の動径分布は収縮する. この効果は "shaking" あるいは軌道緩和と呼ばれている. このとき, 元の核電荷における軌道の動径分布を保とうとすると (凍結軌道を想定すると), 新たな実効核電荷の下ではより高い主量子数の軌道とは重なりがあり, 遷移が起きると説明できる. つまり, 実効核電荷が急激に変化する状況において, 瞬間近似の下, 外殻軌道の重なりによる遷移確率があることになる. そのとき N 電子系のハミルトニアンから内殻軌道に空孔を持つ $N-1$ 電子系のハミルトニアンに変化することに起因しており, 凍結軌道近似の下でも強度を持つことには注意しておこう.

分子の内殻光電離では, 軌道緩和の効果は単純に収縮だけでなく, 分子内電荷移動 (分極) の効果が現れるため, 衛線構造の機構の解明はさらに複雑なものとなる. このため, 現在も新しい手法が取り入れられ, 研究が行われている[5].

(高エネルギー加速器研究機構 足立純一)

参考文献

- [1] S. Svensson *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **47**, 327 (1988).
- [2] U. Becker *et al.*, Phys. Rev. Lett. **60**, 1490 (1988).
- [3] 例えば, B. H. Bransden and C. J. Joachain "Quantum Mechanics" 2nd ed., Pearson Education Ltd. (2000) Subsection 9.5.
- [4] T. Åberg, Phys. Rev. **156**, 35 (1967).
- [5] Y. Hikosaka *et al.*, J. Chem. Phys. **127**, 4430 (2007).