「原子衝突のキーワード」

一般化振動子強度
(generalized oscillator strength)

一般化振動子強度(英語の頭文字をとってGOSと表記)も，先に説明した振動子強度(光学的振動子強度，OOS) [1] に対応するものなので，やはり古典的な振動子の個数ということができる．OOS が光吸収断面積から求められることに対し，GOS は電子のエネルギー損失スペクトルから得ることができる．電子エネルギー損失スペクトルは，ある特定のエネルギーの電子線を照射し，散乱電子の運動エネルギーを測定し，入射電子のエネルギーとの差(エネルギー損失)の関数として散乱電子の強度を表す．電子の散乱であるので，エネルギー損失値と共に散乱方向(散乱角)を考える必要ある．そこで，散乱電子のエネルギーと散乱角を同時に考慮できるように運動量ベクトルの変化の大きさ(運動量移行の大きさ)という概念を導入する．OOS は，

$$f_{0n} = 2m(E_n - E_o)\frac{\left|\langle n\left|\sum_j x_j\right|0\rangle\right|^2}{\hbar^2}$$

と定義できる[1]．繰り返しになるが，mは電子の質量，E_0，E_nは，それぞれ原子の始状態 0 および終状態 n のエネルギー固有値であり，$(E_n - E_0)$は励起エネルギーに相当する．x_jは，原子内電子のデカルト座標の$\boldsymbol{r}_j$の x 成分を表し，$\langle n\left|\sum_j x_j\right|0\rangle$はその和の行列要素(ここでは，双極子遷移の遷移行列要素)である．ここで，電子散乱に対応するように運動量移行ベクトル$\boldsymbol{K}$を用いて，

$$F_{0n} = 2m(E_n - E_o)\frac{\left|\langle n\left|\sum_j \exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j)\right|0\rangle\right|^2}{(\hbar K)^2}$$

と書かれる無次元量F_{0n}を定義する．入射電子と散乱電子の運動量の大きさをそれぞれk_i，k_f，散乱角をθとすると，K^2 は $K^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f cos\theta$である．また，$\left\langle n\middle|\Sigma_j \exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j)\middle|0\right\rangle$は，$0\to n$遷移に対する行列要素で，$\exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j)$を

$$\exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j) = 1 + i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j - \frac{(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j)^2}{\boldsymbol{2}} + \cdots$$

と展開すると，$i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j$の項が電気双極子遷移,次項が電気四極子遷移の行列要素になる．双極子近似が成立する($\exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j) \sim 1 + i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_j$)場合，一般化振動子強度(GOS)は上式のように書ける．ここで定義された GOS は，$K\to 0$ の極限で OOS に一致するという重要な性質をもつ．

Born 近似が成立すれば，電子エネルギー損失スペクトルから GOS は実験的に求まる．$0\to n$遷移に対する微分断面積$d\sigma/d\Omega$と GOS は，

$$F_{0n}(K) = \frac{W}{4Ry}\frac{k_i}{k_f}K^2\frac{d\sigma}{d\Omega}$$

の関係にある．ここでWは，励起エネルギー，Ryは水素原子のイオン化エネルギーである．

終状態が連続状態にある場合も，OOS と同様に一般化振動子強度密度dF/dEを考えることができ，離散化状態を含めた全体を，一般化振動子強度分布という．連続状態の場合，エネルギー損失スペクトルで得られるのは$d\sigma/d\Omega$をエネルギーで微分した二重微分断面積$d^2\sigma/(dEd\Omega)$で，

$$\frac{dF(K)}{dE} = \frac{W}{4Ry}\frac{k_i}{k_f}K^2\frac{d^2\sigma}{dEd\Omega}$$

となる．光学的振動子強度の項で述べた総和則(TRK 総和則)もほぼ同様の形で成り立つ．これは Bethe によって拡張されたもので，

$$\Sigma_n F_n + \int \frac{dF(K)}{dE}dE = N$$

と表され，原子内電子の数に一致する [2].

GOS において$K\to 0$ は，励起エネルギーに対して入射電子のエネルギーが十分に高く，前方散乱($\theta\sim 0$)の場合に実現できる．直感的にわかるように，このとき Born 近似は成立しやすい条件にある．この実験条件と総和則を用いて電子エネルギー損失スペクトルから，OOS を求める実験が盛んに行われた．なお Born 近似が成立していなくても，実験で得られた$d\sigma/d\Omega$を用いてF_{0n}に相当する量を求めることができる．これは見かけの一般化振動子強度(Apparent GOS)と呼ばれ，Kだけでなく入射電子エネルギーEの関数となる．この見かけの GOS も$K\to 0$ の極限で OOS に一致するので，多くの実験が行われている．ただし，既に指摘があるように[3]極限操作で求められる値であるので，盲目的に信じることには注意が必要である．

(東邦大学　酒井康弘)

参考文献

[1] 酒井康弘，しょうとつ，第 9 巻 3 号 18 (2012).

[2] M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).

[3] 島村勲，しょうとつ，第 8 巻第 6 号, 27 (2011).