

総 説

低速多価イオン・原子衝突における電子捕獲過程と共鳴現象 その 1 : $\text{He}^{2+} + \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ 衝突系

島倉紀之

新潟大学理学部

shima@shimakura.gs.niigata-u.ac.jp

平成 24 年 5 月 30 日原稿受付

重粒子衝突非弾性散乱過程において形状共鳴はいまだ観測されていない。我々は、これまで、共鳴観測に供するため、量子論的緊密結合法、波束法を用いて、共鳴現象を系統的に調べる理論的研究を行ってきた。今回は、その中から特に He^{2+} イオンとアルカリ金属原子($\text{Li}, \text{Na}, \text{K}$)という衝突系を取り上げ、これまでの理論的研究成果をもとに、形状共鳴について解説する。次回は、これ以外の衝突対を取り上げ、入射イオンの電荷依存性、原子番号依存性などについて解説する予定である。非弾性過程を利用して形状共鳴状態を作るという要求は最近特に強くなっている。

1. はじめに

共鳴は、物理、化学、生物の分野で広く観測されている普遍的な現象であり、何故そのような現象が起こるか、その現象はどのような観測に現れるか研究されてきた。原子衝突の分野では、共鳴は主として電子衝突の分野で良く知られた現象である。例えば、電子と分子の衝突における共鳴の重要性は、弾性散乱、振動励起、電子付着のような過程において長いこと認識されてきた。ある振動励起過程は、共鳴のため、狭いエネルギー範囲ではあるが 2, 3 桁もその断面積の値が大きくなる。電子付着により生成された負の電荷を持つ分子イオンは、不安定であることが多く、短い寿命で解離反応を起こし、ラジカルやイオンのようないろいろな種類の解離フラグメントを生じる。それ故に、共鳴の知識は電子付着を経由した解離過程において、その生成物をコントロールする上で重要である。

電子衝突の場合に比べ重粒子衝突の場合、共鳴現象の研究は十分に行われているとは言えない。重粒子衝突における共鳴現象は 2 種類に分類される。1 つは 10 eV u^{-1} 以下の低衝突エネルギー領域において衝突エネルギーが減少するにつれ断面積が増加するいわゆるオービティング共鳴である。このオービティング共鳴はか

なり以前からさまざまな衝突系において観測されており、我々も $\text{Ar}^{q+} + \text{H}_2$ 衝突系の電子捕獲断面積に現れたオービティング共鳴を報告した [1]。また、オービティング共鳴の断面積への関与を明確にするため、 $\text{N}^{4+} + \text{H}$ 衝突系に対して、実験、理論の共同研究を行った [2]。もう 1 つは 0.1 eV u^{-1} 以下の極低衝突エネルギー領域においてある特定の衝突エネルギーで断面積がピーク状になる形状共鳴である。古い論文で形状共鳴をオービティング共鳴と呼んでいるものもあるので注意が必要である。この総説で扱うのは 2 つ目の形状共鳴である。

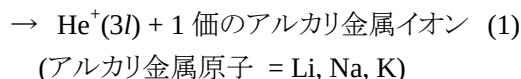
形状共鳴は古くは 1898 年にラジカルーラジカル再結合反応を説明するためボルツマンによって提案されたが [3]、孤立衝突系における形状共鳴の実験による観測は、それから 75 年後のカナダの Waterloo 大学の Scolts のグループによる Hg 原子からの H 原子の弾性散乱断面積の測定まで待たなければならなかった [4]。ほぼ時を同じくして、Toennies のグループは水素原子、水素分子と希ガス($\text{Ne}, \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$)の弾性衝突過程で現れる重粒子共鳴現象の観測結果を報告した [5]。これ以降も、重粒子 2 体衝突においていくつかの系の弾性衝突過程で形状共鳴が観測されている。一方、理論的な研究としては

1978 年のカナダの Alberta 大学の Davis と Thorson の報告が初めてである [6]. 彼らは $H^+ + H(1s)$, $D(1s)$ 衝突系における弾性散乱, 共鳴型電荷移行過程を理論的に扱った. 状態間の遷移を含む非弾性散乱過程における共鳴は, 1984 年に, $(N^{3+} + H)$ 衝突系における電子捕獲過程において, Rittby らによって初めて報告された [7]. 非弾性散乱過程に対して形状共鳴を扱った 2 番目の報告は我々の $(N^{5+} + H)$ 衝突系における電子捕獲過程の研究である [8]. これ以降, 我々の研究も含め, 形状共鳴に対して多くの計算結果が報告されるようになった.

我々は, $N^{5+} + H$ 衝突系における形状共鳴の報告以後 [8], $C^{5+} + H$ 衝突系, $B^{3+} + Li$ 衝突系, $Be^{2+} + Li$ 衝突系, $N^{4+} + H$ 衝突系, $Be^{3+} + He$ 衝突系 [9], $N^{5+} + H$ 衝突系 [10] に対して, 量子論的緊密結合法にもとづき断面積の計算を行うとともに波束法を適用することにより, 共鳴現象解明の研究を続けてきた. その結果, (1) 共鳴は衝突の途中で形成される準分子の振動回転エネルギーと衝突エネルギーが一致すると起こること, (2) ある特定の部分波の散乱行列が大きくなることにより断面積がピーク状に大きな値を持つようになることを見出した. また, (3) 共鳴が高い衝突エネルギーで観測されるには入射イオンの荷数, 標的の分極率が大きい必要があるが, その反面, そのような場合, 多くの状態が複雑に絡み合い, 共鳴が観測しづらくなることもあることを明らかにした. これらの結果は日本物理学会 2002 年秋季大会のシンポジウム(主題: 低速多価イオンの理論)で筆者が報告済みである. この頃から, 世界中で, 電子捕獲過程に現れる共鳴ピークを実験によって観測しようという試みが始まったが, 現在のところすべて徒労に終わっている. これは, 共鳴現象が極端に低い衝突エネルギーで現れること, 更に入射イオンの衝突エネルギーを揃えて衝突させなければならないことによる.

そこで我々は, 共鳴の観測を行ってもらうため, 電子捕獲過程に現れる共鳴の特徴を系統的に調べる理論的研究を行った. 今回はその中から, 特に, He^{2+} イオンとアルカリ金属原子という衝突対の組み合わせ

$He^{2+} + \text{アルカリ金属原子}(ns)$



を取り上げ解説する. 扱ったエネルギー領域では電子捕獲に寄与するのは $He^+(n = 3)$ チャンネルであることが知られているので, 電子捕獲チャンネルとしてそれらのみ考慮した. Scols らのグループ, Toennis らのグループ, Davis と Thorson によって扱われた衝突系はいずれも共鳴は弱い化学結合力によって生じる. これに対して, 多価イオンによる中性粒子からの電子捕獲過程では, 共鳴現象は, 入射イオンの電荷により中性標的原子が分極し, ポテンシャルエネルギー曲線に引力部分(ポテンシャルの井戸)が現れ, 遠心力(斥力)を考慮した有効ポテンシャルに障壁が生じることによる. 注意したいのは, 弱い化学結合力に比べて多価イオンによる中性粒子の分極力はさらに弱いということである. 多価イオンによる電子捕獲過程の場合, 標的原子の分極率が大きいと, 大きい軌道角運動量で, 従って大きい衝突エネルギーで共鳴が観測できる可能性がある. 我々が He^{2+} とアルカリ金属原子という衝突系をとりあげたのは, これらが

- (1) 実験で取り扱い易い衝突系である,
- (2) 大きな双極子分極率を持つ標的と多価入射イオンの組み合わせである,
- (3) 電子捕獲断面積の値が大きい,
- (4) 共鳴ピークとそのバックグラウンドの差が著しい,

と考えたからである. 得られた結果は, 実験による共鳴現象の観測が予想以上に難しいことを示したが, それでもこれまで扱われた系に比べれば, 共鳴が観測される可能性を示していると思われる.

非弾性過程を利用して形状共鳴状態を作るという要求は最近特に強くなっている. これは, 極端に冷えた分子に対して様々な応用が考えられるからであり, 特定の量子状態だけを作る, また余分なエネルギーを持たせないという観点からいうと弾性散乱過程よりも非弾性過程を用いた方が有利だからである. また, 最近の冷たい原子,

分子を作る技術の進展がこのような研究に拍車をかけている [11].

本論文では、断りが無い限り原子単位系を用いる.

2. 理論と計算法

2.1 電子状態の計算

共鳴現象が現れる極低衝突エネルギー領域では衝突系全体を分子として扱う分子基底が良い近似となる. また, 状態間の遷移を引き起こす結合項としては, 動径結合のみ考慮すれば良く, 回転結合は遷移にほとんど影響を与えない. 更に, 遷移は断熱ポテンシャル曲線の擬交差点付近でのみ起こると考えて良い.

この総説で扱う衝突系では, 内殻電子は衝突動力学に影響を与えないと考えることができるので, 原子核と内殻電子をまとめてコアとしてガウス型の擬ポテンシャルで表し, 基底関数としてはスレーター型軌道を用い, 配置間相互作用法を使って, 準分子の固有状態(波動関数)と固有値を求めた [12].

2.2 量子論的緊密結合方程式

断熱基底の量子論的緊密結合方程式は 2 次微分の結合項を含むこと, 結合項が核間距離の狭い範囲で大きな値となることから, 数値的に解くのは不便である. 一方, 透熱基底では, 核間距離の変化に対して状態が比較的ゆっくりと変化するので, 数値積分の際に刻み幅をそれほど細かく取らなくても断面積が精度良く求まる [8, 13, 14]. 緊密結合方程式は部分波(全角運動量 K)ごとに数値的に解かれ, i 状態から f 状態への遷移に対応する散乱行列 S_{fi}^K が得られる. 全散

乱断面積は得られた S_{fi}^K 行列を用いて

$$\sigma_{\mu}(E) = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_K (2K+1) |S_{fi}^K|^2 \quad (2)$$

と書ける. ここで k_i は初期波数である.

2.3 多チャンネル核波束法とスペクトル法

量子的な現象である共鳴の物理的イメージを描くことは, そのダイナミクスを理解する上で, 更にはどんな系で共鳴が観測し易いか予測する上

で, 非常に重要である. しかし, 量子論的緊密結合法では, 断面積の数値を得ることはできるが, 共鳴のダイナミクスのイメージは把握しにくい. このような理由から, 我々は, 原子核の運動も量子的に扱いながら, 状態間の遷移も含めて衝突の追跡ができ, 共鳴のイメージを描くことのできる多チャンネル核波束法を開発した [10]. 1 つのポテンシャル曲線上に核波束を走らせる核波束法はポピュラーなものであったが, 状態間遷移が起こり複数の状態を考慮しなければならない衝突系を扱える核波束法の開発はコンピュータの進歩(計算速度と記憶容量)した最近になってようやく可能となった. 我々の開発した多チャンネル核波束法では, 系のハミルトニアンと初期波束を与えることで, 任意の時間における波束を得ることができる. 初期波束としてはガウス型波束を用いるが, それに含まれるパラメーターの具体的な決定法については論文[10]を参考にして欲しい. アルゴリズムとして, より正確な結果を得るため split-operator 法を, 断熱基底-透熱基底間の変換を効率的かつ正確に行うため高速フーリエ変換法を用いている. 核波束法の原理的な事柄に関しては Balakrishnan らの論文[15]を, また, いくつかの点で我々の方法と異なるが, Vaecck ら[16]が多チャンネル核波束法の開発を行っているので, それらの論文も参照して欲しい.

時間発展の結果得られる波束を用いて, スペクトル法に基づき固有値, 固有関数を得る方法も開発した [10]. この方法では, 数値積分を効率的に行うためウインドウ関数を用いるなど工夫をしているが, 基本的には Feit らの方法[17]を用いている. 量子論的緊密結合法によって得られる S 行列を調べることにより特定の衝突エネルギーで現れた共鳴ピークに寄与する部分波を, つまりは準分子の回転量子数を知ることができる. 一方で, スペクトル法によって, 有効ポテンシャルの井戸中の準分子の振動回転状態のエネルギーが求まる. この両者を比較することによって, 2 つの方法の計算精度の確認がある程度できる. また, 2 つの方法を比較するもう 1 つの利点は共鳴がどのポテンシャル井戸によるものなのか知ることができる点にある. しかし, 量子論的緊密結合法によるピークの位置は電子捕獲に関与する複数の

状態を同時に考慮して得られた結果であり、スペクトル法に基づく同定はあくまでも 1 つの擬状態 (断熱と透熱を組み合わせた) のポテンシャルに基づく結果であるという違いに注意して欲しい。

3. 形状共鳴の性質

この章では、まず 3.1 節で量子論的緊密結合法に基づく計算結果において共鳴がどのような形で現れるか解説し、3.2 節で共鳴が何故生じるのかを有効ポテンシャルの立場から解説した後、3.3 節では「量子論的緊密結合法とスペクトル法を組み合わせ共鳴ピークを同定する」方法について述べる。これにより我々の得た計算結果の理解の一助にされたい。

3.1 量子論的緊密結合法の計算結果から見た形状共鳴

式(2)で角運動量 K に関する和は 0 から散乱行列が断面積に寄与しなくなる十分大きな全角運動量 $K_{\max}$ までとる。形状共鳴が起こらない場合、 $K_{\max}$ の値としては運動量 p と電子捕獲が起こる衝突径数 b の積が 1 つの目安となる。つまり、衝突エネルギーが大きいと、 $K_{\max}$ は大きくなり、大きな $K_{\max}$ まで和を取る必要が生じる。しかし形状共鳴が起こる場合注意が必要である。一例として、図 1 に、 $B^{3+} + Li$ 衝突系の衝突エネルギーが 0.04548 eV の共鳴ピーク付近における、散乱行列の衝突エネルギーおよび全角運動量子数依存性を示した。 $K = 0-185$ では散乱行列の角運動量依存性は衝突エネルギーが変わってもあまり変化しないなめらかな振動関数になっている。またその振動は、 K が小さい領域ではゆったりしているが、 K が大きくなるにつれ短い周期の振幅の大きい振動に変わって行く。少々見にくいですが、 $K \cong 186$ で振動はほとんどなくなり、振動の外側の $K > 186$ では、 $K = 189$ においてのみ散乱行列が大きな値を持っている。この $K = 189$ のときの散乱行列の異常さはその大きさにある。 $K = 0-185$ では散乱行列の二乗の値は最大で 0.02 程度であるが、 $K = 189$ では約 0.85 と 50 倍にもなる (図 1 では縦軸は 0.2 で切ってある)。このように、共鳴現象が起こる場合、散乱行列はある特定のそれも 1 つの角運動量で大きな値を持つ。

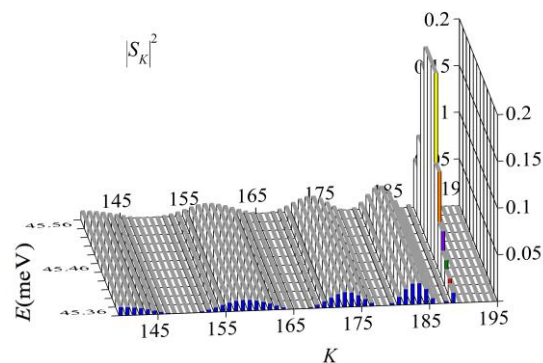


図 1: 散乱行列の衝突エネルギーおよび全角運動量子数依存性. ($B^{3+} + Li$) 衝突系の衝突エネルギーが 0.04548 eV で現れる振動、回転量子数が (0,189) に対応した共鳴の場合を例として示した。

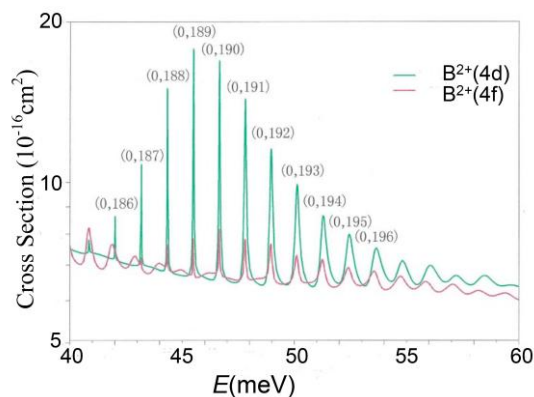


図 2: $B^{3+} + Li \rightarrow B^{2+}(4d,4f) + Li^+$ 電子捕獲断面積の衝突エネルギー依存性。カッコ内の 2 つの数値はそれぞれ準分子の振動量子数と回転量子数を表している。

これが、図 2 に示した $B^{3+} + Li \rightarrow B^{2+}(4d, 4f) + Li^+$ 電子捕獲過程において、衝突エネルギー 0.04548 eV で、断面積がピークになる原因である。量子論的緊密結合方程式を解いて断面積を求めるとき、我々は、 $K = pb$ の関係式から $K_{\max}$ を求めそこまでの和を取るとか、更には K に関する和を 1 つおきにとるとかしがちであるが、そのようなことをしてしまうと共鳴現象が起こっていることを見逃してしまうことがある。

3.2 有効ポテンシャルの立場からみた形状共鳴

断熱ポテンシャルに遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャル

$$V_{\text{eff}}(R) = V(R) + \frac{K(K+1)}{2\mu R^2} \quad (3)$$

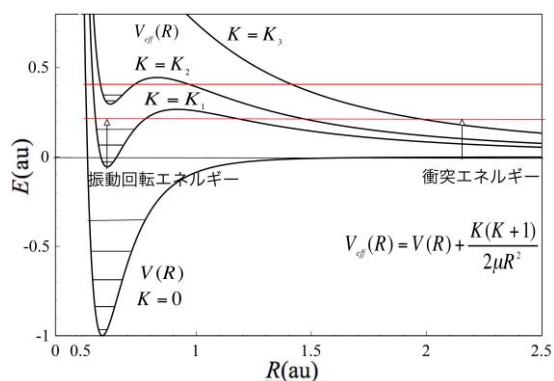


図 3: 断熱ポテンシャル V に遠心力ポテンシャル

$$\frac{K(K+1)}{2\mu R^2}$$

を加えた有効ポテンシャル V_{eff} .

を考える. モデル図を図 3 に示した. ポテンシャルエネルギー曲線が一定の条件を満たす引力型で, 角運動量が 0 でない場合, 有効ポテンシャルはポテンシャル障壁を持ち, それよりも内側にポテンシャル井戸を持つ. この井戸がある程度深いと井戸の中に不連続状態である振動状態ができる. 衝突対は, トンネル効果によりポテンシャル障壁にしみ込み, この振動回転状態のエネルギーと衝突エネルギーが一致すると, 一時的に井戸中に振動回転状態として留まることになる. 角運動量がある値以上に大きくなると, 井戸は消滅する.

3.3 共鳴ピークの同定法

電子捕獲断面積において現れた共鳴ピークの衝突エネルギー付近で, 散乱行列の部分波依存性を調べることで, 共鳴に寄与するただ 1 つの部分波の角運動量がわかる. 更に, この角運動量をもとに遠心力ポテンシャルを求め, その有効ポテンシャル上で波束を走らせることにより, 振動状態のエネルギーと固有関数を求めることができる. スペクトルパワーのエネルギーを衝突対の距離が無限大のときのエネルギーを基準にすることにより, 電子捕獲断面積において現れた共鳴ピークの衝突エネルギーと比較できることになる. これらの作業から電子捕獲断面積に現れた共鳴ピークが準分子のどんな振動回転量子数に対応しているか同定できる.

4 標的原子依存性

共鳴は非常に低い衝突エネルギーで起こる現象なので, できるだけ高い衝突エネルギーで起こる衝突系を探す必要がある. 一方で, 電子捕獲過程は反応過程であり, 共鳴が観測されるにはその反応断面積が大きいということも必要である. Li, Na, K はいずれも双極子分極率が大きい (Li, Na, K の双極子分極率はそれぞれ 162 au^3 , 162 au^3 , 290 au^3) ので, $\text{He}^{2+} + \text{Li, Na, K}$ 系のポテンシャル井戸は深くなる. ポテンシャル井戸が深くなると, 図 3 からわかるように, 角運動量が高くなっても, 有効ポテンシャルの井戸が埋まらず, 大きな振動回転エネルギーをもつ不連続状態が存在することになり, その結果, 高い衝突エネルギーで共鳴を観測できる可能性が生じる. 最初に, 反応が起こり易いかどうか予測する目的で, 断熱ポテンシャルエネルギーについて, 特に擬交差点の位置およびその点でのエネルギー差と電子捕獲断面積の大きさとの関係に注目して, 解説する. 引き続き, 共鳴の同定とメカニズムについて解説する.

4.1 断熱ポテンシャルエネルギー曲線と擬交差点

HeLi^{2+} 系, HeNa^{2+} 系, HeK^{2+} 系の断熱ポテンシャルエネルギー曲線を, それぞれ, 図 4, 図 5, 図 6 に示す. また, 擬似交差点でのエネルギー差を表 1 に, ポテンシャル井戸の深さを表 2 にまとめた. 断熱状態 4Σ から 8Σ はそれぞれ核間距離無限遠で ($\text{He}^+(3s) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$), ($\text{He}^+(3p) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$), ($\text{He}^+(3d) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$), ($\text{He}^{2+} + \text{Li}(2s), \text{Na}(3s), \text{K}(4s)$), ($\text{He}^{2+} + \text{Li}(2p), \text{Na}(3p), \text{K}(4p)$) 状態に繋がっている. 核間距離が大きい領域では, 4Σ から 6Σ のポテンシャルエネルギー曲線は核間距離が大きくなるにつれ右下がりになっているが, これはそれらの状態では衝突対の間にクーロン反発が働いているためである. これに対して, $7\Sigma, 8\Sigma$ 状態では, 核間距離が大きい領域では分極力しか働かないため, ポテンシャルエネルギー曲線はほぼ水平となっている. Massey の判別条件[18]や Landau-Zener 公式[18]により, 擬交差点でのエネルギー差と衝突エネルギーから, その点で遷移が起こり易いかどう

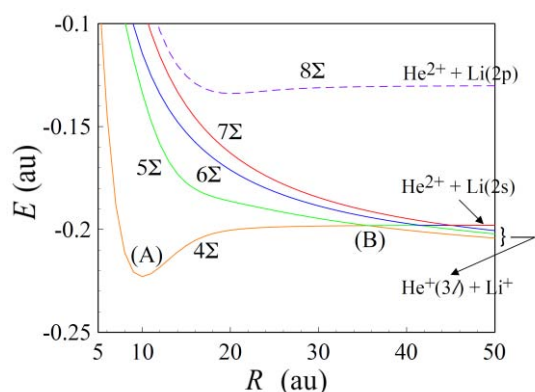


図 4: 準分子 HeLi^{2+} の断熱ポテンシャルエネルギー曲線.

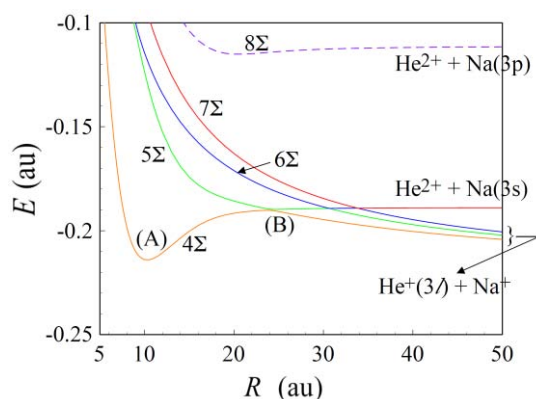


図 5: 準分子 HeNa^{2+} の断熱ポテンシャルエネルギー曲線.

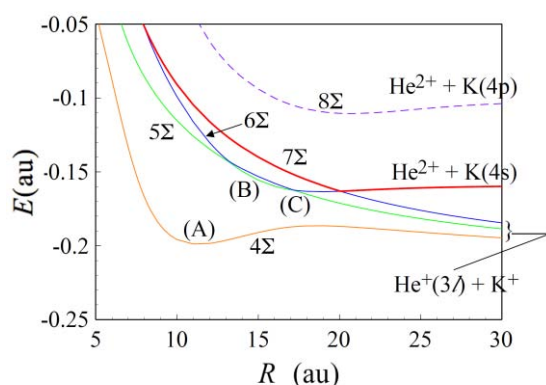


図 6: 準分子 HeK^{2+} の断熱ポテンシャルエネルギー曲線.

か見積もることができる.

① $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系: 表 1 によると核間距離 $R = 35\text{--}45$ au に擬交差点が 3 つあるが, $R \approx 45$ au にある $6\Sigma\text{--}7\Sigma$ 間の擬交差点, $R \approx 42$ au にある $5\Sigma\text{--}6\Sigma$ 間の擬交差点は透熱的に通過し, おもに $R \approx 36$ au の $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点で $\text{He}^+(3s) + \text{Li}^+$ 状態への電子捕獲が起こると考えられる. しかし, この点のエネルギー差はかなり

小さく, 共鳴が現れる極低衝突エネルギーでも電子捕獲断面積は小さいことが予測される. 表 2 からわかるようにポテンシャル井戸(A)の深さは 0.025 au とかなり大きいので, この井戸による共鳴は比較的高い衝突エネルギーで現れると考えられる. 一方, 井戸(B)の深さは 2×10^{-5} au と浅い. 小さい核間距離に現れる井戸(A)はアルカリ金属原子の分極率がそのまま反映されたものであるが, 外側の井戸(B)は擬交差点で入射チャンネル $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ と電子捕獲チャンネル $\text{He}^+(3s) + \text{Li}^+$ のポテンシャル曲線の交差によるものである. この擬交差点 R が大きい領域にあり, この点で分極によるポテンシャルが小さいことも井戸が浅い理由である.

② $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系: 擬交差点は $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 系と比べ R の小さい方に移動している. これは無限遠で $\text{He}^{2+} + \text{Na}(3s)$ 状態が $\text{He}^{2+} + \text{Li}(2s)$ よりも, エネルギー的に, それぞれのイオン化状態 ($\text{He}^{2+} + \text{Na}^+ + e$, $\text{He}^{2+} + \text{Li}^+ + e$ 状態) に近いことによる. この衝突系でも $6\Sigma\text{--}7\Sigma$ 間, $5\Sigma\text{--}6\Sigma$ 間の擬交差点はほぼ透熱的に通り抜け, 電子捕獲は主として $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点で起こり, $\text{He}^+(3s) + \text{Na}^+$ 状態への電子捕獲が支配的であると予想できる. $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点のエネルギー差は, $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系と比べて大きくなっており, 共鳴が現れる極低衝突エネルギー領域の遷移にちょうど良い大きさなので, 電子捕獲断面積は大きくなると予測される. 井戸(B)の深さも $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 系のように浅くはない. いろいろな点を総合すると, この系はこれまで扱った系の中では最も高い衝突エネルギーで共鳴現象が現れると考えられる.

③ $\text{He}^{2+} + \text{K}$ 衝突系: 無限遠での始状態 $\text{He}^{2+} + \text{K}(4s)$ のエネルギーが前述の 2 つの系よりも更に高いため, 擬交差点は 2 つの系よりも更に R の小さい方へ移動している. これに伴い $4\Sigma\text{--}5\Sigma$ 間の擬交差点のエネルギー差は大きくなりすぎ, 低い衝突エネルギーではこの点で遷移は起こらなくなってしまう. 一方, $6\Sigma\text{--}7\Sigma$ 間の擬交差点ではエネルギー差が小さすぎ透熱的に通過することから, $5\Sigma\text{--}6\Sigma$ 間の擬交差点での遷移による $\text{He}^+(3p) + \text{K}^+$ 状態への電子捕獲断面積だけがある程度の大きさを持つと思われる. 共鳴はポテ

表 1: 疑交差点の位置とその点でのエネルギー差.

系	状態間	位置(au)	$\Delta E(\text{eV})$
$\text{He}^{2+} + \text{Li}$	$4\Sigma-5\Sigma$	35.62	6.0×10^{-5}
	$5\Sigma-6\Sigma$	41.56	2.7×10^{-7}
	$6\Sigma-7\Sigma$	45.07	2.7×10^{-8}
$\text{He}^{2+} + \text{Na}$	$4\Sigma-5\Sigma$	24.1	1.6×10^{-2}
	$5\Sigma-6\Sigma$	30.64	2.7×10^{-6}
	$6\Sigma-7\Sigma$	33.83	1.8×10^{-7}
$\text{He}^{2+} + \text{K}$	$4\Sigma-5\Sigma$	18	6.8×10^{-1}
	$5\Sigma-6\Sigma$	17.2	2.7×10^{-3}
	$6\Sigma-7\Sigma$	20.06	4.9×10^{-5}

表 2: 断熱ポテンシャルの井戸の深さ. $R = \infty$ での始状態のエネルギーとの差の大きさである.

系	記号	ポテンシャル井戸の深さ (au)
$\text{He}^{2+} + \text{Li}$	(A)	0.025
	(B)	0.00002
$\text{He}^{2+} + \text{Na}$	(A)	0.0251
	(B)	0.0009
$\text{He}^{2+} + \text{K}$	(A)	0.0397
	(B)	0.0061
	(C)	0.004

ンシャル井戸(B), (C)によるものが現れると考えられるが, 断面積が小さいことからこの系で共鳴は観測しにくいと予想される.

4.2 共鳴の同定とそのメカニズム

$\text{He}^{2+} + \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ 系に対して, $4\Sigma-7\Sigma$ の 4 状態を用いて量子論的緊密結合法により電子捕獲断面積を求め, スペクトル法により振動回転準位の同定を行うことにより得られた共鳴に関する知見は以下のとおりである.

① $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系: 得られた電子捕獲断面積のうち, $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積を図 7(a), (b) に示す. $\text{He}^+(3p)$ 状態, $\text{He}^+(3d)$ 状態への電子捕獲断面積は計算したすべての衝突エネルギー領域で $\text{He}^+(3s)$ 状態の場合に比べ 2 桁程小さかったので割愛した. また, 各共鳴ピークに対しスペクトル法を用いて行った振動回転準位の帰属の結果を本文末表 3 に示した(帰属方法の説明は $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系の所で行う). この表には, 比較のため, 量子論的緊密結合法によって得られた断面積のピークの位置も示してある. 量子論的緊密結合法によるピークの位置からは

部分波の角運動量量子数が得られるだけなので, 例えば, 振動回転準位(55,34)と(4,34)は同じエネルギーとして示してある. 図では井戸(A)による共鳴には*をつけて井戸(B)による共鳴と区別してある($\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 系の場合も同様). 井戸(B)よりも井戸(A)の場合の方がスペクトル法と量子論的緊密結合法による帰属結果が一致している準位の数は多い. 同じ回転量子数では, 井戸(A)の方が振動量子数の大きい状態になっている. また井戸(A)が関係するピークは比較的鋭く, 井戸(B)の場合には幅広いものが多い. これは井戸(A)の方が井戸(B)の場合よりポテンシャル障壁が高く, 幅広いため, 井戸に捕まった準分子の寿命が長いためである. 計算結果によると共鳴が現れる最大の衝突エネルギーは約 0.29 eV である. 図 7(b)に現れている共鳴ピークは, いずれも井戸(A)によるものであり, 回転量子数が高い. 共鳴が高い衝突エネルギーで現れるには, 回転量子数が高くなっても有効ポテンシャルの井戸中に不連続状態が生き続ける必要があるからである.

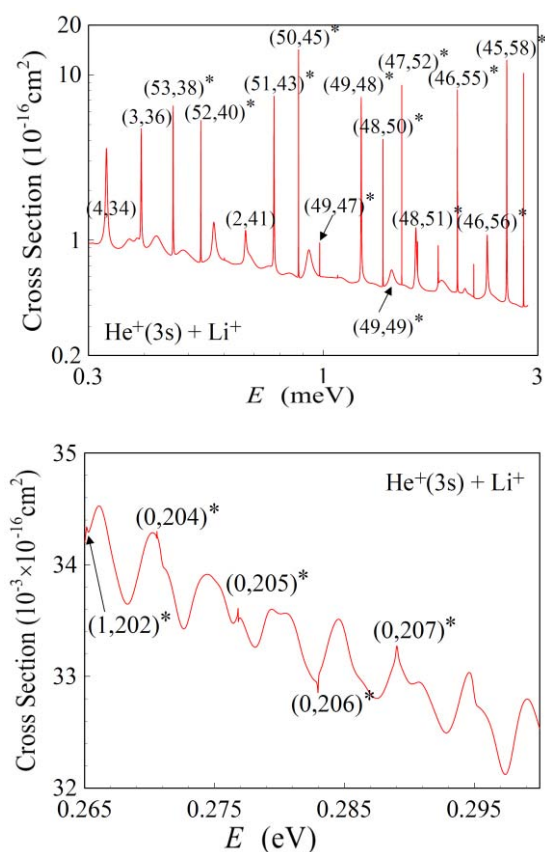


図 7: $\text{He}^{2+} + \text{Li} \rightarrow \text{He}^+(3s) + \text{Li}^+$ 電子捕獲断面積に現れる共鳴ピーク. 括弧内の数字は共鳴状態の振動, 回転量子数. *がついているものは 4Σ の, *がついていないものは 5Σ の井戸による共鳴を表す. (上図, a), (下図, b).

② $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系: 得られた $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積を図 8(a), (b), (c)に示す. $\text{He}^+(3p)$ 状態, $\text{He}^+(3d)$ 状態への電子捕獲断面積は $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積より 2 桁以上小さいので割愛した. 図 8(a), (b)から, 衝突エネルギーが 0.05 meV から 3 meV の領域では, $\text{He}^+(3s)$ 状態への電子捕獲断面積は $(2000-8500) \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ という大きな値になることがわかる. 一方, 図 8(c)は, 共鳴が現れる最も高い衝突エネルギーでも電子捕獲断面積は $250 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ と大きい, そのピークは Stückelberg 振動と重なってしまい, 観測が難しい可能性を示している. 各共鳴ピークに対して, 散乱行列の 2 乗の角運動量量子数依存性および衝突エネルギー依存性を調べた. 一例として, 図 8(b) 中の衝突エネルギー $E = 2.5229 \text{ meV}$ のピーク (1) を取り上げ, 簡単に説明する. このピークを選んだ理由は, 比較的高い衝突エネルギーで現れ, 図

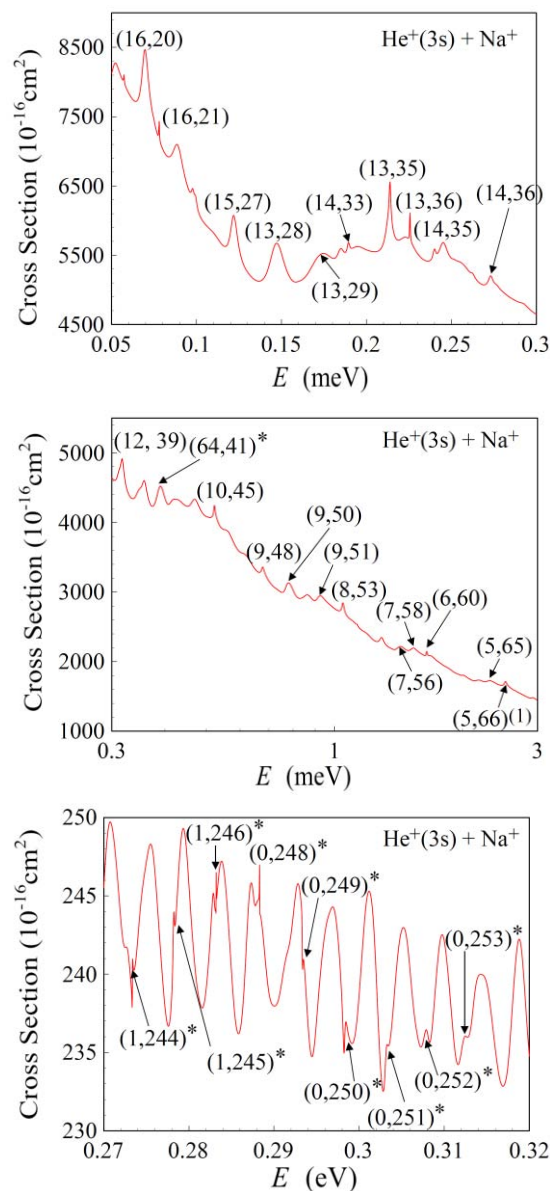


図 8: $\text{He}^{2+} + \text{Na} \rightarrow \text{He}^+(3s) + \text{Na}^+$ において現れる共鳴ピーク. 括弧内の数字は共鳴状態の振動, 回転量子数. *がついているものは 4Σ の, *がついていないものは 4Σ と 5Σ の擬交差点における井戸による共鳴を表す. (上図, a), (中図, b), (下図, c).

8(c)のピークのように Stückelberg 振動と重なっていないことによる. 先に示した $\text{B}^{3+} + \text{Li}$ 衝突系の場合の図 1 ほどはつきりはしていないが, $K = 0-65$ の領域では $|S|^2$ の K 依存性は衝突エネルギーが変わってもほとんど差がないこと, $K = 66$ の場合だけ $|S|^2$ の K 依存性が衝突エネルギーに大きく依存していることがわかった. 次に, この共鳴状態の振動量子数をスペクトル法によって求めた. まず HeNa^{2+} 系の断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$

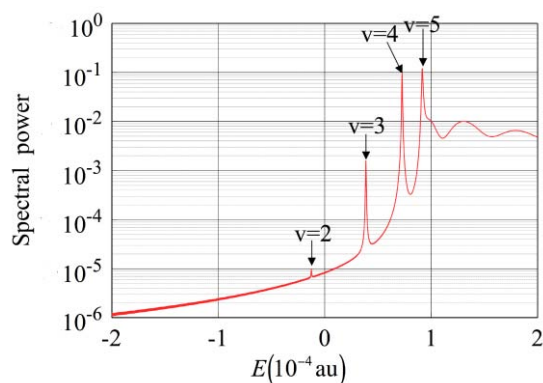


図 9: 準分子 HeNa^{2+} の断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させたポテンシャルエネルギーに $K = 66$ の遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャル中の振動状態のスペクトルパワー。

間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させたポテンシャルエネルギーに $K = 66$ の遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャルエネルギー (ポテンシャル I) を用いて「スペクトルパワー」を求めた。その結果得られた 4 つのピークを図 9 に示した。そのうち $E = 0.00009179 \text{ au}$ ($= 2.4977 \text{ meV}$) のピークのエネルギーが図 8(b) の $E = 2.5229 \text{ meV}$ のピークのエネルギーに近い。そこで、更にスペクトル法を用いてポテンシャル I が作る井戸中の、 $E = 0.00009179 \text{ au}$ のピークに対応する、準安定状態の固有関数を求めた。得られた固有関数の二乗を有効ポテンシャルとともに図 10 に示す。有効ポテンシャルには $R = 50 \text{ au}$ 付近にポテンシャル障壁があり、固有関数はこの障壁の内側に捕まっている振動量子数 5 の状態であることがわかる。他の共鳴ピークに対しても同様な方法を用いて振動回転量子数を求めた。得られた共鳴ピークの帰属結果を本文末表 4 にまとめるとともに図 8(a), (b), (c) の各ピークに記した。但し、*印を付けたピークは断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間に加え、 $4\Sigma-5\Sigma$ 間の擬交差点も透熱的に通過させた有効ポテンシャル (ポテンシャル II) を用いた結果である。 $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系の場合とは異なり、スペクトル法によって同定できたピークには井戸(B)により生じるピークが多い。計算結果によるとこの衝突系で共鳴が現れる最大の衝突エネルギーは約 0.3 eV である。

③ $\text{He}^{2+} + \text{K}$ 衝突系: 衝突エネルギーが 0.5 meV から 3 meV の領域の $\text{He}^+(3p)$ 状態への電子捕獲

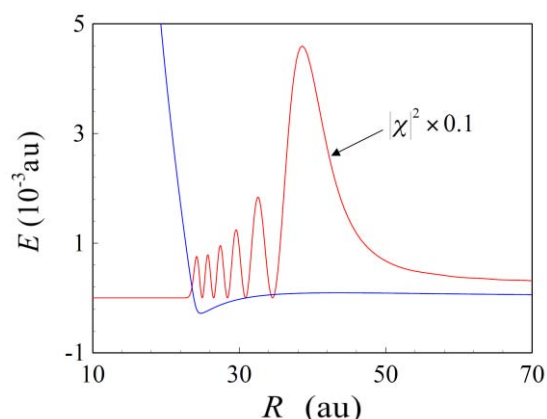


図 10: 準分子 HeNa^{2+} の断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間, $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させたポテンシャルエネルギーに $K = 66$ の遠心力ポテンシャルを加えた有効ポテンシャル中の振動状態 $v = 5$ の固有関数の絶対値の二乗。

断面積を図 11 に示す。 $\text{He}^+(3s)$ 状態, $\text{He}^+(3d)$ 状態への電子捕獲断面積は $\text{He}^+(3p)$ 状態への電子捕獲過程に比べ 2 桁程小さいので割愛した。断熱ポテンシャルの $6\Sigma-7\Sigma$ 間の擬交差点を透熱的に通過させた場合の有効ポテンシャル (ポテンシャル I) および $6\Sigma-7\Sigma$ 間に加え $5\Sigma-6\Sigma$ 間の擬交差点も透熱的に通過させた有効ポテンシャル (ポテンシャル II) の 2 つを用いての共鳴ピークの帰属結果を本文末表 5 にまとめるとともに図 11 の各ピークに記した。図中の*印はポテンシャル II を用いての帰属であることを示す。共鳴のピークは、 $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系と同様鋭く、比較的等間隔に現れている。共鳴ピークの位置、形が単調なことから、共鳴ピークについていろいろな知見を得ることができる。その特徴は(1) 衝突エネルギーが増加するにつれベースとなっている断面積の値は増加している。(2) 振動回転量子数が(30, 63)から(23, 84)までの 8 個の鋭いピークと振動回転量子数が(30, 64)から(23, 82)までの 7 個の少し幅広いピークが、ともに、ほぼ等間隔で現れている。両グループとも、それぞれ、順に振動量子数が 1 減少、回転量子数が 3 増加している。振動エネルギー 1 個分と回転エネルギー 3 個分にそれほど大きい差がないため、有効ポテンシャルの形、井戸の底から計ったそれらの状態のエネルギーなどが似ているものと思われる。(3) 振動量子数が同じで回転量子数が 1 異なる(24, 81)のピークと(24, 82)のピークを比べると、(24,

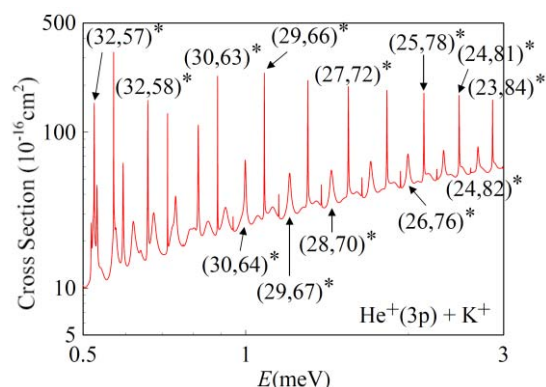


図 11: $\text{He}^{2+} + \text{K} \rightarrow \text{He}^+(3p) + \text{K}^+$ において現れる共鳴ピーク. 括弧内の数字は共鳴状態の振動, 回転量子数. *は 4Σ の井戸による共鳴を表す.

82)のピークの方が高さは低い幅広い. これは (24, 82)のピークの方が有効ポテンシャル障壁の厚さが薄く, 寿命が短いことによる. 計算結果によると共鳴が起こる最大の衝突エネルギーは約 0.044 eV と小さく, この系は $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 系と比べ共鳴は観測しにくいと思われる. しかし, この系は数十 meV 以上の衝突エネルギーでの電子捕獲断面積の計算が難しいため, 実際はより高い衝突エネルギーで共鳴が現れているにもかかわらず見逃している可能性もある.

4.3 多チャンネル核波束法による共鳴ダイナミクスの解析

共鳴を観測するのに最適である可能性が高い $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 系に対して, スペクトル法により振動回転状態(5, 66)であると帰属されたピークを選び, 衝突エネルギー $E = 2.4977$ meV で核波束を走らせることにより, 共鳴のダイナミクスを解析した. 得られた計算結果を図 12 に示す. この図より, 入射波束は, 衝突により, 3 つに分かれることがわかる. 1 つ目は $R = 50$ au 付近にあるポテンシャル障壁によって跳ね返されたものであり, 2 つ目はより内側の $R \leq 25$ au にある He^{2+} イオンと Li^+ イオンの反発ポテンシャルによって跳ね返されたものである. 2 つの波束の大きさを比べると, 後者の波束の確率の方が大きいことがわかる. 3 つ目は, $R = 25$ au まで侵入し, 時間が経過しても同じ核間距離にとどまっている波束である. この波束は時間と共に徐々にその確率は減少しているが同じ形を保っており, 6 つの山からできている. 図 10 に示した固有関数と同じ形であること

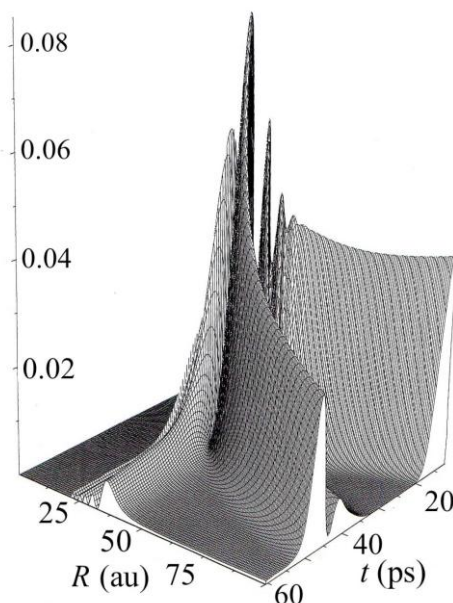


図 12: $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系に対して, ポテンシャル II 上を衝突エネルギー 2.4977 meV で波束を走らせた場合の核波束の時間変化.

から, この波束はポテンシャル井戸にトラップされた振動量子数が 5 の振動回転状態に対応していることがわかる. 波束の確率の減少は, 波束がポテンシャル障壁を通り抜けて外に逃げ出していることに対応している.

波束法により共鳴状態にトラップされた波束を可視化することができた. 可視化により, 電子捕獲断面積のピークの位置で共鳴が起こっていること, 共鳴のメカニズムと動力学をよりはっきりと理解することが可能になった.

4.4 まとめ

Li, Na, K と原子番号が大きくなるにつれ, イオン化エネルギーが小さくなる (Li, Na, K のイオン化エネルギーはそれぞれ 5.39 eV, 5.14 eV, 4.34 eV) とともに双極子分極率は大きくなる. その結果, 始状態 ($\text{He}^{2+} + \text{Li, Na, K}$) と電子捕獲状態 ($\text{He}^+(3l) + \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$) のポテンシャルエネルギー曲線の疑交差点は内側に移動し井戸が深くなるので, この順番で共鳴が高い衝突エネルギーで現れると予想していた. しかし, 計算結果は, 最も高い衝突エネルギーで共鳴が現れるのは $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系であることを示した. これには非断熱遷移確率という要因がからんでいる. 疑交差点の位置とその位置での断熱状態間のエ

エネルギー差にはある程度関連があり、小さい核間距離にある擬交差点ほどエネルギー差は大きい。エネルギー差が大きいと低エネルギーでは遷移が起こりにくくなり、またエネルギー差が小さいとほとんどの衝突エネルギーで非断熱遷移確率が1になってしまう。衝突対が擬交差点を通過する際にほとんど遷移してしまうと、衝突では「行き」と「帰り」の2度必ず交差点を通過するため、衝突が終わった後反応が起こっていないということになってしまう。 $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系では電子捕獲過程の擬交差点が、高い衝突エネルギーで共鳴が生じる適当な位置にたまたまあった。

これまでは、1番内側にある1番深いポテンシャルの井戸もしくはその外側の擬交差点での井戸に関連させて共鳴について議論してきた。その他に、もっと大きい核間距離にも擬交差点がある。これらの交差点において生じるポテンシャル井戸は内側のポテンシャル井戸よりは浅いので、それらに起因する共鳴は衝突エネルギーの低いところに現れるはずである。しかし、交差点が内側に移動するとそれらの井戸も深くなるので、共鳴が高い衝突エネルギーで現れる可能性は捨てきれない。

5. 共鳴観測に向けて

より高い衝突エネルギーで、電子捕獲過程において、共鳴を観測するには、標的原子の分極率が大きく、入射イオンの電荷が大きいことが好ましい。しかし、擬交差点の位置、その点でのエネルギー差に注意する必要があることがわかった。また、一般的にはポテンシャル井戸をもつ状態よりもエネルギー的に下に他の状態が存在するので、ポテンシャル井戸が内側に移動し深くなると、共鳴を引き起こす状態とそれら下の状態とが相互作用して井戸が浅くなることにも注意が必要である。

擬交差点の位置は、アルカリ金属原子が標的の場合、その原子番号が大きくなるにつれ小さい方へ移動する。一方、「低速多価イオン・原子衝突における電子捕獲過程と共鳴現象 その2」で扱うように、入射イオンの原子番号が大きくなるとともにまた入射イオンの電荷が小さくなるとともに擬交差点の位置は大きい方へ移動する。こ

れらから、より高い衝突エネルギーで共鳴を観測するにはどのような系を選べば良いか予測が可能になる。今回述べた衝突系の中では $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系が最も高い衝突エネルギーで共鳴が観測される系であることがわかったが、(1) 標的原子の原子番号、(2) 入射イオンの原子番号、(3) 入射イオンの電荷をうまく調整することで、より適切な衝突系を見つけることも可能になる。

理論的に、十分正確に、共鳴現象が起こる衝突エネルギーがわかったとする。そのとき共鳴を観測するための実験的条件としてどのようなことが要求されるだろうか。これまで報告されている共鳴はすべて衝突エネルギー1 eV 以下に現れている。この衝突エネルギーで多価イオンを標的に衝突させるという条件は十分クリアできる。次に要求される条件はビームのエネルギー幅を十分狭くするということである。共鳴ピークを観測するにはビームのエネルギー幅が共鳴ピークのエネルギー幅よりも十分狭い必要がある。我々の計算結果によると、高い衝突エネルギーで現れる場合でも、共鳴ピークのエネルギー幅は 10^{-3} eV 以下である。このような場合、少なくともビームのエネルギー幅を 10^{-3} eV 以下に、更に衝突エネルギーを 10^{-3} eV 以下の間隔で変化させなければならない。

共鳴状態の寿命が衝突時間よりも短いと共鳴状態とは言えない。仮に共鳴が衝突エネルギー 10^{-1} eV で現れ、その共鳴ピークのエネルギー幅が 10^{-3} eV で、ビームのエネルギー幅を 10^{-4} eV にすることができ、衝突エネルギーを 10^{-4} eV の間隔で変えることができたとする。衝突対の換算質量を1 u とすると、距離 1 Å を通過するのに 2×10^{-14} sec かかる。共鳴ピークのエネルギー幅から寿命は 6×10^{-13} sec であるので、このような状況下で、共鳴は十分観測できることがわかる。実験的に測定できるのであれば、共鳴ピークの幅が狭ければ狭い程寿命が長いので測定には有利と言える。

共鳴状態の寿命を求める理論的方法は2つある。1 つは共鳴状態にある波束の確率の減少から求める方法であり、もう 1 つは断面積のエネルギー依存性に現れるピークの半値幅から求める方法である。2 つの方法を用いて計算を行ったと

ころ、これまで扱った系では、共鳴状態の寿命は 0.5–18 psec の範囲にあることがわかった。衝突領域 1 au, 衝突エネルギー 1 meV – 1 eV の場合の衝突時間は 4×10^{-3} – 0.1 psec であるので、共鳴状態の寿命は衝突時間より長く、共鳴状態は観測可能なはずである。

本総説は九州大学理学院の故季村牟生教授との共同研究の思い出として引き受けた。二人で形状共鳴についていくつか論文を書き、そのあと総説をまとめるという計画を立てていたが、それも今は夢となった。この総説は二人で書きかけていた論文の一部をまとめ、総説用書き直したものである。研究遂行にあたり、新潟大学自然科学研究科の 2 人の修了生、桜井智君、鈴木伸啓君に協力していただいた。謝意を表したい。

参考文献

- [1] S. Kravis, H. Saitoh, K. Okuno, K. Soejima, M. Kimura, I. Shimamura, Y. Awaya, Y. Kaneko, M. Oura, and N. Shimakura, Phys. Rev. **A52** (2), 1206 (1995).
- [2] L. Folkerts, M. A. Haque, C. C. Havener, N. Shimakura, and M. Kimura, Phys. Rev. **A51** (5), 3685 (1995).
- [3] L. Boltzmann, Vorlesung Über Gastheorie II (J. A. Barth, Leipzig, 1989)
- [4] A. Schutte, G. Scols, F. Tommasini, and D. Bassi, Phys. Rev. Lett. **29**, 979 (1972).
- [5] J. P. Toennies, W. Welz, and G. Wolf, J. Chem. Phys. **72**, 614 (1979).
- [6] J. P. Davis and W. R. Thorson, Can. J. Phys. **56**, 996 (1978).
- [7] M. Rittby, N. Elander, E. Brandas, and A. Barany, J. Phys. **B17**, L677 (1984).
- [8] N. Shimakura and M. Kimura, Phys. Rev. **A44**, 1659 (1991).
- [9] S. Suzuki, N. Shimakura, T. Shirai, and M. Kimura, J. Phys. **B17**, 1741 (1998).
- [10] N. Suzuki, N. Shimakura, and H. Kono, Physica Scripta **T92**, 435 (2001).
- [11] D. W. Chandler, J. Chem. Phys. **132**, 110901 (2010).
- [12] J. N. Bardsley, Case Stud. At. Phys. **4**, 299 (1974).
- [13] H. G. Heil, S. E. Butler, and A. Dalgarno, Phys. Rev. **A44**, 1659 (1991).
- [14] R. Boyd, T-S Ho, H. Rabitz, D. A. Padmavathi, and M. K. Mishra, J. Chem. Phys. **101**, 2023 (1994).
- [15] N. Balakrishnan, C. Kalyanaraman, and N. Sathyamurth, Phys. Rep. **280**, 79 (1997).
- [16] N. Vaeck, M. D. Lecomte, and J. Liévin, J. Phys. **B32**, 409 (1999).
- [17] M. D. Feit, J. A. Fleck, and A. Steiger, J. Comput. Phys. **47**, 412 (1982).
- [18] 例えば、高柳和夫, 電子・原子・分子の衝突 (培風館, 1972, 改訂版, 1996)

表 3: $\text{He}^{2+} + \text{Li}$ 衝突系における振動回転準位の同定.

井戸(A)による共鳴			井戸(B)による共鳴		
振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)	振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)
55,34	0.37052	0.17143	4,34	0.37052	0.36462
54,36	0.39308	0.29932	3,36	0.39308	0.39728
53,38	0.463	0.47347	4,35	0.42511	0.32109
52,40	0.53342	0.51701	3,38	0.463	0.36463
53,39	0.57045	0.37823	2,40	0.53342	0.56871
52,41	0.67119	0.66667	3,39	0.57045	0.46531
51,43	0.77629	0.76463	2,41	0.67119	0.66939
50,45	0.88028	0.86803	2,43	0.77629	0.87892
51,44	0.9288	0.66123	0,45	0.88028	0.59864
49,47	0.98091	0.9796	2,44	0.9288	0.74014
49,48	1.21371	1.20817	1,47	0.98091	1.15919
48,50	1.35727	1.3415	1,48	1.21371	1.29796
49,49	1.41903	1.41769	0,50	1.35727	1.17007
47,52	1.49397	1.48028	1,49	1.41903	1.44763
48,51	1.60627	1.61633	0,52	1.49397	1.56463
47,53	1.83082	1.79593	1,51	1.60627	1.36599
46,55	1.98696	1.97552	0,53	1.83082	1.76327
45,57	2.16127	2.14967	0,55	1.98696	2.16327
46,56	2.31476	2.30205	0,57	2.16127	2.58777
45,58	2.55926	2.54423	0,56	2.31476	2.35375
44,60	2.7893	2.77824	0,58	2.55926	2.80818
1,202	265.144	265.933	0,60	2.7893	3.34151
0,204	270.548	271.402	$K=202$	265.144	—
0,205	276.796	277.661	$K=204$	270.548	—
0,206	282.94	283.784	$K=205$	276.796	—
0,207	289.005	289.852	$K=206$	282.94	—

表 4: $\text{He}^{2+} + \text{Na}$ 衝突系における振動回転準位の同定.

井戸(A)による共鳴			井戸(B)による共鳴		
振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)	振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)
$K=19$	0.05216	—	16,19	0.05216	0.03265
$K=22$	0.05733	0.07619	15,22	0.05733	0.04082
$K=20$	0.06959	—	16,20	0.06959	0.04626
71,23	0.07798	0.09524	15,23	0.07798	0.06531
$K=21$	0.08856	0.10884	16,21	0.08856	0.06258
$K=26$	0.09753	0.05442	$K=26$	0.09753	—
$K=27$	0.12188	—	15,27	0.12188	0.13061
$K=28$	0.14726	—	13,28	0.14726	0.15238
$K=29$	0.1734	0.1551	13,29	0.1734	0.17922
$K=34$	0.18494	0.1034	13,34	0.18494	0.13877
$K=33$	0.18938	0.1415	14,33	0.18938	0.20136
$K=35$	0.21382	0.16327	13,35	0.21382	0.17415
66,36	0.22561	0.22313	13,36	0.22561	0.22585
$K=35$	0.24517	—	14,35	0.24517	0.26122
$K=36$	0.27311	0.11429	14,36	0.27311	0.23946
$K=39$	0.31746	—	12,39	0.31746	0.31565
$K=40$	0.35745	0.29932	12,40	0.35745	0.2449
64,41	0.39026	0.38095	11,41	0.39026	0.32381
62,45	0.52253	—	10,45	0.52253	0.50885
61,48	0.67838	—	9,48	0.67838	0.6313
61,50	0.86396	0.90613	9,50	0.86396	0.8517
60,51	0.93069	0.90612	9,51	0.93069	0.96599
59,53	1.0475	—	8,53	1.0475	1.0313
$K=56$	1.42177	—	7,56	1.42177	1.38232
57,58	1.53453	—	7,58	1.53453	1.54286
55,60	1.64834	—	6,60	1.64834	1.62178
56,62	2.01335	2.04899	7,62	2.01335	1.99729
55,63	2.18766	1.98368	6,63	2.18766	2.19321
55,65	2.31685	2.14151	5,65	2.31685	2.29117
53,66	2.52396	2.44082	5,66	2.5229	2.4977
53,69	2.92992	2.966	4,69	2.92992	2.82994
1,244	273.332	273.226	$K=244$	273.332	—
1,245	278.216	278.069	$K=245$	278.216	—
1,246	283.24	282.831	$K=246$	283.24	—
0,248	288.304	288.164	$K=248$	288.304	—
0,249	293.528	293.171	$K=249$	293.528	—
0,250	298.205	298.151	$K=250$	298.205	—
0,251	302.695	302.994	$K=251$	302.695	—
0,252	307.882	308.056	$K=252$	307.882	—
0,253	312.168	312.763	$K=253$	312.168	—

表 5: $\text{He}^{2+} + \text{K}$ 衝突系における振動回転準位の同定.

井戸(B)による共鳴			井戸(C)による共鳴		
振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)	振動回転準位	緊密結合法 (meV)	スペクトル法 (meV)
$K=46$	0.32223	0.2585	$K=46$	0.32223	0.34286
$K=45$	0.33785	0.31837	$K=45$	0.33785	0.29116
$K=48$	0.3532	0.35646	$K=48$	0.3532	0.28844
36,47	0.36169	0.4	36,47	0.36169	0.30784
35,49	0.39333	0.29116	35,49	0.39333	0.41361
$K=51$	0.43206	0.31837	$K=51$	0.43206	0.4381
$K=53$	0.47698	0.42993	$K=53$	0.47698	0.42993
$K=55$	0.52433	0.46803	$K=55$	0.52433	0.59592
32,57	0.56958	0.5034	32,57	0.56958	0.6449
33,56	0.59298	0.55234	$K=56$	0.59298	0.55238
32,58	0.65883	0.65306	$K=58$	0.65883	0.60136
31,60	0.71671	0.71293	$K=60$	0.71671	0.6449
31,61	0.81666	0.81361	31,61	0.81666	0.75647
30,63	0.88686	0.88436	29,63	0.88686	0.80545
29,66	1.0824	1.08028	29,66	1.0824	0.98776
29,67	1.20561	1.20817	29,67	1.20561	1.12926
28,69	1.30221	1.30341	28,69	1.30221	1.19456
29,70	1.43979	1.45035	28,70	1.43979	1.35239
27,72	1.54768	1.55647	27,72	1.54768	1.65443
26,75	1.82384	1.83674	27,75	1.82384	1.93742
26,76	1.99495	2.01089	26,76	1.99495	1.88028
25,78	2.13498	2.14967	25,78	2.13498	2.25851
25,79	2.32219	2.34559	25,79	2.32219	2.46804
24,81	2.48137	2.49253	24,81	2.48137	2.60493
24,82	2.68752	2.71022	24,82	2.68752	2.82722
23,84	2.86015	2.86804	23,84	2.86015	2.98233
3,164	38.3655	38.3539	$K=164$	38.2655	—
3,165	39.5702	39.6603	$K=165$	39.5702	—
2,170	44.0152	44.1226	$K=170$	44.0152	—