

入射重イオンによる金属自由電子の捕獲過程 についての理論的考察

Nogami, Mokichiro / 野上, 茂吉郎

(出版者 / Publisher)

法政大学工学部

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

法政大学工学部研究集報 / 法政大学工学部研究集報

(巻 / Volume)

16

(開始ページ / Start Page)

19

(終了ページ / End Page)

26

(発行年 / Year)

1980-03

(URL)

<https://doi.org/10.15002/00004143>

入射重イオンによる金属自由電子の捕獲 過程についての理論的考察

野 上 茂吉郎*

Theoretical Studies on Capture Processes of Metallic Free Electron by Heavy Ion

Mokichiro NOGAMI

Abstract

Probabilities are calculated for the radiative and Auger-type captures of free electrons by a high energy heavy ion projected into a metallic crystal, in the Plane Wave Born approximation.

Energy distributions of X-ray photons and Auger electrons are computed in the case of 200 MeV Ne^{+10} projected into Al.

Some discussions are given as to the comparison of the Plane Wave Born approximation with other method.

§ 1. 緒 言

高速高電荷の重イオンが気体の中を走るありさまが初めて明白に観測されたのは、多分、1939年頃に核分裂破片核が Wilson の霧箱写真にとらえられたときであろう。その後20年ほどたって、1960年代にはいると、加速重イオンを用いた原子核反応の研究は世界中の研究所のブーム的な研究題目になった。多くの新しい現象が発見され、それらの理論的解明についても著しい進歩が記録された。そして今日では、一般的傾向として、ますます重い核をますます高いエネルギーまで加速する方向に進みつつある。ウランの核の1核子あたり GeV のエネルギーまでの加速が実現するのも、あまり遠い先のことでははないであろう。

このような核物理学への応用と平行して、重イオンビームの物性物理学への応用もまた多彩な新しい研究分野をひらき、半導体工学、プラズマ工学、核工学などへの応用とあいまって、活気を呈している。

この分野での基礎的研究は、現在、その重点が主として、重イオンと原子の衝突機構の解明におかれていて、原子の内殻励起についての Fano-Lichten 過程^①、分子軌道X線^②の発生などの新しい発見があいついでおり、それら諸現象の理論的解釈も大きな成功をおさめている。

* 電気工学科, 電気・電子専攻

一方、固体と重イオンの相互作用に関しても、それぞれ興味のある、応用上にも重要な諸現象が関連していて、それらについての活発な研究が展開されている。しかし、それらの広範な諸現象の背後にある基本過程に関する固体理論にもとづく系統的な理論的研究の方は、イオン-原子の相互作用の場合に比較すると、なお初期的な立ち遅れた段階にとどまっているように思われる。

たとえば、金属ターゲットに入射した重イオンの引きおこす素過程の研究の場合にも、入射イオンと金属イオンの相互作用に大きな関心が払われ、——そこでは、基本的にはイオン-原子の衝突理論が適用できる——、金属自由電子の役割については、実験的にも理論的にもまだ十分な研究が行なわれていない。

このような状況を考へて、高速高電荷の重イオンが金属ターゲットに入射したときの、重イオンへの自由電子の輻射捕獲と Auger 捕獲についての初歩的な理論的考察を行なってみた。

§2. 重イオンによる自由電子の輻射捕獲

これは、1個の自由電子が入射重イオンの内殻準位（たとえばK殻）に捕獲されて、数keV領域の連続X線を放射する現象である。この過程について今までに発表されている数少ない理論的な計算^①では、Bethe-Salpeterの方法（BS）とよばれる計算法が使われて成功していることが報告されている。この方法では、入射イオンは一定の速度で動くと考え、この入射イオンといっしょに運動する座標系を用いて遷移確率を計算する。

しかし、ここではこの方法を使わないで、その代りに平面波 Born 近似（PWB）を使ってみる。その理由は、PWBの方法がこの問題の計算に適切であるというのではない。PWBの方法は最も初歩的な方法であって、その方法の物理的基礎が明瞭であり、より精度の高い計算へ進む際の出発点になり得るからである。たとえば、そこでは結晶格子の電場や入射イオンの電場の自由電子への影響が省略されている。また、結晶格子内部に入射した重イオンに対する格子電場の影響も省略され、重イオンは自由電子との衝突の際に自由に反跳を受けることが仮定されている。より精度の高い計算を行う際にはこれらの諸点が吟味されなければならない。

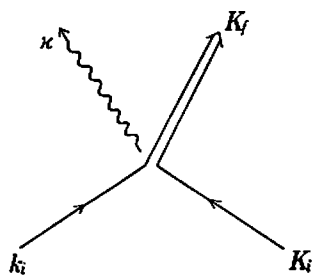


図1

いま、原子番号 z の裸の高速イオンが運動量 $\hbar K_i$ ($2\pi\hbar$ は Planck 定数, K_i は波数ベクトル) で入射するとき、運動量 $\hbar k_i$ の自由電子が入射イオンのK殻軌道に捕獲され、運動量 $\hbar k$, 偏り ϵ の光子が立体角要素 $d\Omega_\epsilon$ の中に放射されるとする。この過程は図1の diagram であらわされる。

PWB 近似を使うと、初めの状態の状態関数は

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK_i \cdot R} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_i \cdot r}, \quad (2.1)$$

終りの状態の状態関数は

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R}} u(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (2.2)$$

で与えられる。ここで $\mathbf{R}$, $\mathbf{r}$ はそれぞれ重イオン原子核と自由電子との位置ベクトル, V は規格化体積, また,

$$u(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{R}|/a}, \quad a = a_B/z \quad (2.3)$$

はK殻軌道関数, $a_B = 5.29 \times 10^{-8} \text{cm}$ は Bohr 半径である。

また, 電子と重イオンの質量をそれぞれ, m , M とおき, K殻エネルギーを $-w$, 放出光子エネルギーを $\hbar\omega = \hbar c\kappa$ とおくと, エネルギー, 運動量の保存法則は, それぞれ,

$$\frac{\hbar^2 K_i^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K_f^2}{2M} - w + \hbar\omega, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{K}_i + \mathbf{k}_i = \mathbf{K}_f + \boldsymbol{\kappa} \quad (2.5)$$

で与えられる。輻射捕獲遷移の行列要素は,

$$H'_{i,f} = \frac{ie\hbar}{mc} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \right)^{1/2} \int \Psi_f^* e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla) \Psi_i d\mathbf{r} d\mathbf{R} \quad (2.6)$$

と書かれる。ここで, e は電荷素量, c は光速, ∇ は $\mathbf{r}$ についての gradient 演算子である。 $\boldsymbol{\varepsilon}$ は偏りの方向の単位ベクトルである。

単位時間あたりの輻射捕獲の確率はこの行列要素を用いて,

$$dC = \int_{k \leq k_F} 2 \frac{V d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} |H'_{i,f}|^2 \quad (2.7)$$

で計算されるが, $\sum_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ は光子の偏りの2つの方向での和をあらわす。終の状態の状態密度 ρ_f は

$$\rho_f = V \frac{\kappa^2 d\Omega_{\kappa}}{(2\pi)^3 \hbar c} \quad (2.8)$$

で与えられ, さらに, 自由電子は0から $\hbar k_F$ までの運動量分布をもつことを考慮して, その範囲にわたって積分を行う。 $\hbar k_F$ は自由電子の Fermi エネルギー $\varepsilon_F = (\hbar k_F)^2 / 2m$ に対応する最大運動量である。

(2.1), (2.2)を代入して計算すると, (2.7)は

$$dC = 32 \frac{e^2 \hbar a^3}{(mc)^2} \int_{k_i \leq k_F} \frac{2 d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^3} \kappa d\Omega_{\kappa} \frac{k_i^2 - \frac{(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{k}_i)^2}{\kappa^2}}{[1 + (\mathbf{k}_i - \boldsymbol{\kappa})^2 a^2]^4} \quad (2.9)$$

となるが, さらに, 無次元の量を扱う目的で,

$$a\mathbf{k}_i = \mathbf{x}_i, \quad a\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{x}, \quad a\mathbf{K}_i = \mathbf{X}_i, \quad a k_F = x_F \quad (2.10)$$

を用いて書き直すと,

$$dC = 32 \frac{e^2 \hbar}{(mc)^2 a^3} \int_{x_i \leq x_F} 2 \frac{x_i^2 d\mathbf{x}_i}{(2\pi)^3} x d\Omega_x \frac{1 - \cos^2 \theta}{[1 + (\mathbf{x}_i - \mathbf{x})^2]^4} \quad (2.11)$$

となり、 θ は2つのベクトル $\mathbf{k}_i$ と $\mathbf{\kappa}$ のなす角度である。

(2.11)の積分を行う前に、2つの保存法則(2.4), (2.5)から得られる結果を吟味しよう。この2つの式から $\mathbf{K}_f$ を消去すると次の関係を得る。

$$\frac{\hbar^2}{2M}\kappa^2 - \frac{\hbar^2}{M}(\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{\kappa}) + \hbar c \kappa = w + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{M}(\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{k}_i) - \frac{\hbar^2}{2M} k_i^2. \quad (2.12)$$

そこで、 $m \ll M$ に注意し、また重イオンの入射運動量について、 $\hbar k_F \ll \hbar K < Mc$ の条件が成り立つ場合を考えると、(2.12)を κ についての2次方程式とみなして、これを近似的に解くことができる、

$$\hbar\omega = w \frac{1 - 2\frac{m}{M} a K_i \cdot a k_i \cos \theta_i}{1 + \frac{m}{M} \frac{ze^2}{\hbar c} a K_i \cos \theta_\kappa} \quad (2.13)$$

を得る。 θ_i, θ_κ はそれぞれ重イオン入射方向と $\mathbf{k}_i$ および $\mathbf{\kappa}$ のなす角度である。

したがって、X線は

$$\hbar\omega_{\min} = w \frac{1 - 2\frac{m}{M} a K_i a k_F}{1 + \frac{m}{M} \frac{ze^2}{\hbar c} a K_i} \quad (2.14)$$

から

$$\hbar\omega_{\max} = w \frac{1 + 2\frac{m}{M} a K_i a k_F}{1 - \frac{m}{M} \frac{ze^2}{\hbar c} a K_i} \quad (2.15)$$

の間にひろがる連続スペクトルをもつ。その巾、 $\hbar\omega_{\max} - \hbar\omega_{\min}$ は入射イオンの運動量 $\hbar K_i$ が大きいほど広がる。

諸量の大きさを見積るための具体例として、 Ne^{+10} のイオン ($z=10$, 質量数 $A=20$) が1核子あたり 10 MeV の運動エネルギーをもって、金属 Al ($\epsilon_F=11.6$ eV) の中を運動する場合を考えよう。すると、

$$\begin{aligned} a &= 0.053 \text{ \AA}, \quad w = 1.36 \text{ keV}, \quad m/M = 0.27 \times 10^{-4}, \\ X_i &= 0.74 \times 10^6, \quad 0 \leq x_i \leq x_F = 0.092 \end{aligned} \quad (2.16)$$

となり、X線スペクトルは

$$0.75 \text{ keV} \leq \hbar\omega \leq 2.2 \text{ keV} \quad (2.17)$$

のように、 $w=1.36$ keV のまわりに、1.45 keV の巾をもつことがわかる。また、(2.13)から、イオンの入射方向には $\hbar\omega$ の小さい光子が、それと逆方向には $\hbar\omega$ の大きい光子が放射される。

次に、(2.11)を積分して遷移確率のおよその大きさを評価してみよう。上述の具体例の数値(2.16)から $x_i^2 \leq 10^{-2}$ また、(2.17)から $x = (a/\hbar c)\hbar\omega \approx 10^{-2}$ となるので、右辺の被積分関数の分母は1でおきかえてよい。また分子の $1 - \cos^2 \theta$ をその平均値 $2/3$ で近似しよう。すると、積

分結果は

$$C \approx \frac{128\pi}{5} z \frac{\varepsilon_F}{w} r_0^2 cn \quad (2.18)$$

となる。ここに、 n は自由電子密度、また、 $r_0 = e^2/mc^2 = 2.8 \times 10^{-13} \text{ cm}$ は電子の古典半径である。(2.18)を断面積になおすと、

$$Q \approx \frac{128\pi}{5} \frac{z\varepsilon_F}{w} \frac{r_0^2}{\beta} \quad (2.19)$$

を得る。 β は入射イオン速度と光速の比である。上述の数値例(2.16)では、 $Q \approx 2 \times 10^{-23} \text{ cm}^2$ となる。これは、原子内の電子が入射イオンに輻射捕獲される過程の断面積の 10^{-3} 程度の小さい値である。

次に、X線スペクトルの強度分布を近似的に求めるためには、(2.11)の被積分関数に上述の近似を行なった後、積分変数の変換を行って x 以外の変数で積分する。結果は、

$$dC = \frac{8}{3\pi} \frac{e^2 \hbar}{(mc)^2 a^3} \frac{M}{m} \left(\frac{ze^2}{\hbar c} \right)^{-1} \cdot \frac{1}{X_i} J(x; X_i, z, x_F) dx \quad (2.20)$$

と書かれる。強度分布をあらわす関数 $J(x; X_i, z, x_F)$ は長い式になるのでここには書かないで、前述の具体例(2.16)に対する数値積分の結果を図2に示す。横軸スケールは $2x = (z/137)(\hbar\omega/w)$ の関係を用いて、 x から $\hbar\omega/w$ に直してある。

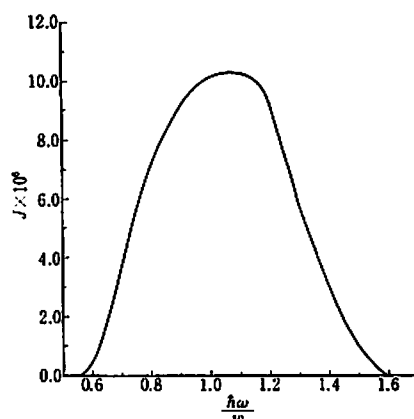


図 2

§ 3. 重イオンによる自由電子の Auger 捕獲

次に考察する Auger 捕獲では、入射重イオンが2個の自由電子と衝突し、一方の電子が重イオンのK殻にとびこみ、それによって放出されるエネルギーを第2の電子が持ち去る。この過程は図3の diagram であらわせる。

衝突前の2電子の運動量を $\hbar k_1$, $\hbar k_2$, とび去る電子の運動量を $\hbar k'$, 衝突前後の重イオンの運動量をそれぞれ, $\hbar K_i$, $\hbar K_f$ とおくと、初めの状態の状態関数は

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK_i \cdot R} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_1 \cdot r_1} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_2 \cdot r_2}, \quad (3.1)$$

終の状態の状態関数は

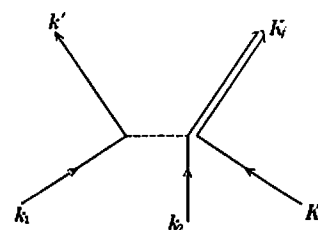


図 3

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK_f \cdot R} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik' \cdot r_1} u(r_2 - R) \quad (3.2)$$

である。 r_1, r_2 は2電子の位置ベクトル, その他の記号は(2.1), (2.2)の場合と同じである。2電子に対する状態関数の反対称化は無視することにする。

遷移をひきおこす摂動は2電子間の相互作用ポテンシャルであって,

$$V(r_1, r_2) = e^2 \frac{e^{-\lambda|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} \quad (3.3)$$

と書かれ, 遮蔽定数 λ は, 自由電子密度を n として,

$$\lambda^2 = \frac{4me^2}{\hbar^2} n^{1/3} = 4 \frac{n^{1/3}}{a_B} \quad (3.4)$$

で与えられる。

また, エネルギー, 運動量の保存法則はそれぞれ,

$$\frac{\hbar^2 K_i^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K_f^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - w, \quad (3.5)$$

$$K_i + k_1 + k_2 = K_f + k' \quad (3.6)$$

となる。この2式から K_f を消去すると次の式を得る,

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2) &= \frac{\hbar^2}{2M} (k_1 + k_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2M} k'^2 - \frac{\hbar^2}{M} (k_1 + k_2) \cdot k' \\ &+ \frac{\hbar^2}{M} K_i \cdot (k_1 + k_2) - \frac{\hbar^2}{M} K_i \cdot k' + \frac{\hbar^2}{2m} k'^2 - w. \end{aligned} \quad (3.7)$$

ふたたび無次元の量を扱うために, (2.10)の中の第3, 第4式に加えて,

$$ak = x_1, \quad ak_2 = x_2, \quad ak' = x' \quad (3.8)$$

とおこう。(3.7)の左辺および右辺第1, 2, 3項は他の項にくらべて無視できるので, (3.7)は

$$x'^2 - \frac{2m}{M} X_i x' \cos \theta' = 1 - \frac{2m}{M} X_i \cdot (x_1 + x_2) \quad (3.9)$$

と簡単化される。 θ' は k' と K_i の間の角である。

前に考えた 200 MeV 程度の Ne^{+10} の入射の場合を例にとると, 右辺第2項の最大値は1にくらべて1桁小さい。さらに, 自由電子の運動量の向きについて平均すれば, この項の平均値は0になる。したがって, 粗い近似で満足することにして, 右辺第2項を省略すると,

$$x' = \frac{m}{M} X_i \cos \theta' + \sqrt{1 + \frac{m^2}{M^2} X_i^2 \cos^2 \theta'} \quad (3.10)$$

のように Auger 電子の運動量の大きさはその放出方向によってきまることになる。

(3.10)から, Auger 電子のエネルギー ε' の領域を計算すると, 上述の具体例の場合,

$$0.08 \text{ keV} \leq \varepsilon' \leq 24 \text{ keV} \quad (3.11)$$

を得る。

単位時間あたりの遷移確率は,

$$dC = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{k_1 \leq k_F} \frac{2dk_1}{(2\pi)^3} \int_{k_2 \leq k_F} \frac{2dk_2}{(2\pi)^3} \frac{mk'd\Omega'}{(2\pi)^3 \hbar^2} \cdot \frac{(4\pi e^2)^2}{[|k_1 - k_2|^2 + \lambda^2]^2} \cdot \frac{64\pi a^3}{[(k' - k_1 - k_2)^2 a^2 + 1]^4} \quad (3.12)$$

であらわされ、 $d\Omega'$ は k' 方向の立体角要素である。(3.12)の積分を遂行することは困難なので、 $[(k' - k_1 - k_2)^2 a^2 + 1]^{-4}$ をその平均値でおき代えてそれを γ であらわす。さらに(3.8)の無次元の量で書きあらわすと、

$$dC = \frac{16}{\pi^5} \frac{me^4}{\hbar^3} \gamma \int_{x_1 \leq x_F} dx_1 \int_{x_2 \leq x_F} dx_2 x' d\Omega' \frac{1}{[|x' - x_1|^2 + (\lambda a)^2]^2} \quad (3.13)$$

となる。具体例の場合、 $(\lambda a)^2 = 0.012$ は $|x' - x_1|^2$ にくらべてやや小さいので、粗い近似としてそれを無視し、(3.10)を用いて変数変換して、Auger 電子のエネルギー・スペクトルの強度分布の式をつくと、

$$dC = \frac{64\pi}{137} \gamma \frac{(na^3)^2 v_0}{za\beta} \frac{1 + \frac{\varepsilon'}{w}}{\left(\frac{\varepsilon'}{w}\right)^3} f\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon'}\right) d\left(\frac{\varepsilon'}{w}\right) \quad (3.14)$$

を得る。ここに、 v_0 は重イオンK殻軌道の電子速度、 βc は重イオンの入射速度、 w は重イオンK殻の結合エネルギー、 ε_F はターゲット金属の自由電子の Fermi energy である。また関数 f は、

$$f(\xi) = \frac{3}{4\xi^3} \left(\frac{2\xi}{1-\xi^2} - \ln \frac{1+\xi}{1-\xi} \right) \quad (3.15)$$

で定義され、 $\xi \rightarrow 0$ で $f(\xi) \rightarrow 1$ となる。

具体例の場合、 $\varepsilon_F = 11.6 \text{ eV}$ なので $\varepsilon_F/\varepsilon' \ll 1$ であって、 $f(\varepsilon_F/\varepsilon')$ は近似的に1とおいてよい。したがって、Auger 電子のエネルギー分布強度は主として(3.14)の中の $(1 + \varepsilon'/w)(\varepsilon'/w)^{-3}$ で支配され、 $\varepsilon'_{\min}$ 近くの低エネルギーの電子が重イオンの入射方向と逆方向に強く放射されることになる。

(3.14)を積分して全遷移確率を求めると

$$C = 512\pi\gamma \frac{(na^3)^2}{z^2} \frac{v_0}{a} \left\{ 1 + \left(\frac{137}{z} \right)^2 \beta^2 \right\}^{3/2} \quad (3.16)$$

となる。自由電子密度 n の2乗に比例するのは、入射重イオンが2個の電子と衝突する過程であることに由来する。

平均値 γ の値を評価してみると 10^{-2} の程度になる。そして、具体例の場合、(3.16)の数値は輻射捕獲の確率(2.18)とはほぼ同じ程度の大きさになる。

§ 4. 結 論

金属に高速・高電荷の重イオンが入射したときに自由電子がどのような役割を演ずるかという問題をしらべるための第1歩として、入射イオンのK殻への自由電子の輻射捕獲と Auger 捕獲との確率を、電子、イオンの双方に PWB 近似を使って計算した。また、裸の Ne イオンが 200 MeV のエネルギーで金属 Al に入射する例について、放射X線と Auger 電子のエネルギー・スペクトルを計算した。Auger 捕獲の計算結果は、過程の複雑さのために粗い近似にとどまっている。

X線光子も Auger 電子も、K殻結合エネルギー w を含んでその両側の広いエネルギー域にわたる連続スペクトルを示す。これは電子と入射イオンの衝突の際に入射イオンの反跳がおり、光子とイオンまたは Auger 電子とイオンの間にエネルギーのやりとりが行なわれるためである。したがって、この計算で得られたエネルギー・スペクトルは PWB 近似に特有のものである。

事実、入射イオンの反跳を全く許さない BS の方法では、放射 X 線スペクトルはこの計算結果と同じ程度のひろがりを持つが、そのピークの位置はずっと高いエネルギーの場所に現われる。特に入射イオンがチャネリングを行っているときには、PWB 近似の許すような大きな反跳の自由度は多分存在せず、BS の方法の方が真実により近いかも知れない。

いずれにせよ、自由電子の捕獲に伴うX線や Auger 電子のスペクトルについての実測は金属単結晶の中での高速高電荷イオンの運動について重要な知見を与えるであろう。

この計算は電気工学科4年学生に対するゼミナールの1つの課題として計画され、参加学生、吉田登志夫、秋山亮一、水島利明の諸氏の協力のもとに行なわれたものである。

最後に、この問題について、いろいろの御教示と御批判をいただいた早稲田大学理工学部の大槻義彦教授に厚く御礼申し上げる。

文 献

- 1) U. Fano and W. Lichten: *Phys. Rev. Letters*, 14 (1965) 627.
- 2) F.W. Saris, W.F. van der Weg, H. Tawara and R. Laubert: *Phys. Rev. Letters*, 28 (1972) 717.
- 3) K. Koyama, Y.H. Ohtsuki: *Phys. Rev.*, B15 (1977) 61.