

Ca 原子の 3p shake-up 領域の光吸収

小出美知、香山恵美、大澤哲太郎、長田哲夫、小原 哲^A、東 善郎^A 小池文博^B
明星大・理工、^A 高エネ研・PF、^B 北里大・医

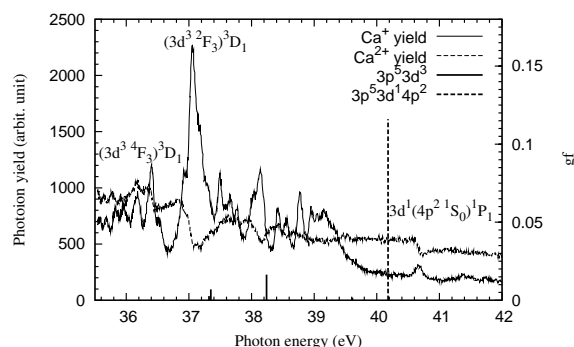
Ca 原子の 3p 領域 (27~35 eV) の光吸収に関しては、1977 年の Mansfield and Newsom の光吸収スペクトルの測定 [?], Sato 達の光イオン生成スペクトルの測定 [?] などが報告されている。この 3p 領域と 3s 領域 (48~54 eV) の間に非常に弱い興味ある吸収構造が観測されている [?]。この領域を 3p shake-up 領域と名づける。この領域で観測されたスペクトル構造の MCDF 計算による詳しい解析を行ったので報告する。

実験は PF の BL-3B で、飛行時間質量分析器を使って価数分離した光イオン生成スペクトル法で行った。その結果を図に示す。この方法の利点の一つは、1 価と 2 価を分けることで普通の光吸収実験では見えない構造が見えることである。

GRASP92 は原子内電子の波動関数をすべて独立に計算してそれを使って生成される CSF を用いて原子の全エネルギーを求める MCDF の計算コードである。目的とする状態の CSF とその励起状態の CSF を作り、各電子の波動関数ごとの最適化を行いながら自己無撞着場の計算を行う。計算に際しては同じ configuration で term の異なる状態を独立に指定する事ができる。そのため $L + S$ を H と同時に対格化することが可能であり、 J が共通で L や S の異なる同じ電子配置の状態を区別してしかも同時に最適化する事が可能である。このような計算は、原子内電子の角運動量 l が大きい系では特に威力を発揮する。 l が大きい軌道の波動関数の形状は、有効核電場に非常に敏感でありそれは内殻励起を含む多電子励起状態の場合、電子間相互作用によって決まるため、term の違いによる波動関数の形状の違いを正確に記述する

ことが重要である。

今回計算した $3p^5 3d^2 4s^1$ 、 $3p^5 3d^3$ 、 $3p^5 3d^1 4p^2$ の三つの励起状態は open shell の電子を三つ含みいづれも l が 0 ではないため同じ配置から生成される csl の minimal basis set が 18~35 と非常に多い。MCDF は変分法的一种なので最適化されるのは一番低エネルギーな状態である。ところが、十数本のレベルがある上に l - s のカップリングによるエネルギー差が 10eV 以上あることから一番下のレベルに最適化された波動関数では上の状態を上手く記述できないらしい事がわかってきた。そこで、minimal basis set のみを使って term dependent な小規模計算を行ったところ実験をよく再現することがわかった。



参考文献

- [1] M. W. D. Mansfield and G. H. Newsom, Proc. R. Soc. Lond. A **357** (1977) 77.
- [2] Y. Sato *et al.* J. Phys. B **18** (1985) 225.
- [3] E. Kayama *et al.* Abstr. Book of 22nd Intern. Workshop on Photoionization, Spring-8, Hyogo, Japan, 2002, FA07.