

AGNAGN ゼミ

chapter 11. 重元素と高エネルギー効果 11.1-11.3

菊地 泰輝

8月8日

11.1 導入

これまで、次について議論してきた.

- H^0, He^0 の光電離
- HII 領域, 星雲

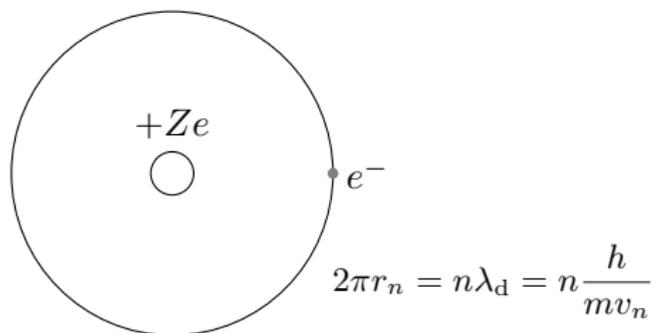
この章では, **高いエネルギー**を伴った物理過程を記述する.

- X 線, ガンマ線, 宇宙線
- AGN, 超新星残骸などから放たれる.

今回, **重元素**の原子やイオンの役割が重要となる.

8.2 相対論効果

Fe^{+25} (電子 1 つ) の古典ボーアモデルを考えよう.



簡単な計算ののち,

$$v_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \frac{1}{n} \xrightarrow{n=1} v_1 \simeq 0.19c \quad (1)$$

ここからわかるように、重元素の高階電離状態においては電子の軌道速度は c に近づく.

→ 特殊相対論の効果は無視できない.

8.2 相対論効果

相対論効果

- $\Delta S = 1$ 遷移が起きやすくなる.
- $J = 0 \rightarrow J = 0$ 遷移も起きる (電子双極子では通常禁止).

これらの遷移確率の厳密な計算には相対論適量子力学 (ディラック方程式) が必要になる.

$$i\gamma_\mu \partial^\mu \psi(x) - m\psi(x) = 0 \quad (2)$$

ディラック方程式によれば, 1次補正したエネルギーは

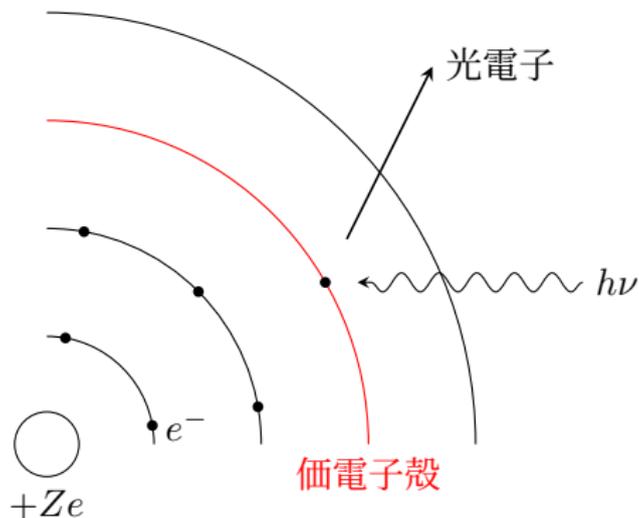
$$E_{n,j} \simeq -\frac{Z^2 \cdot 13.6\text{eV}}{n^2} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (3)$$

なお,

- エネルギー固有値は j に依存する (縮退が解ける).
- 補正項は Z^4 に比例する. \rightarrow 重元素の Z において効果的になる.

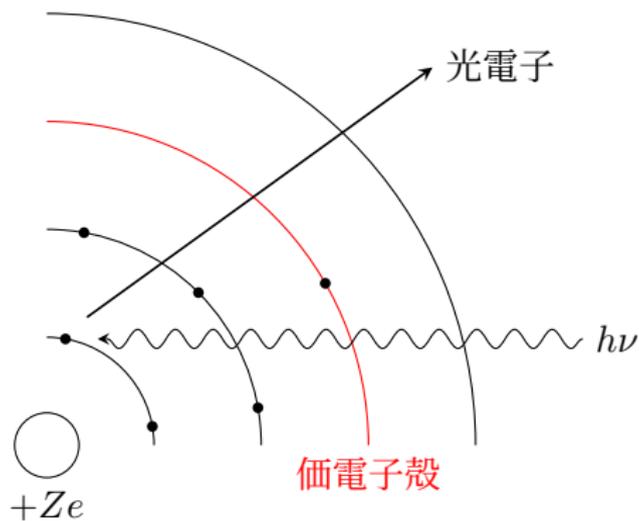
11.2 光電離 (これまで)

前章まで、最外殻の電子の光電離について議論してきた。
”最外殻”のことをここでは**価電子殻**と呼ぶ。

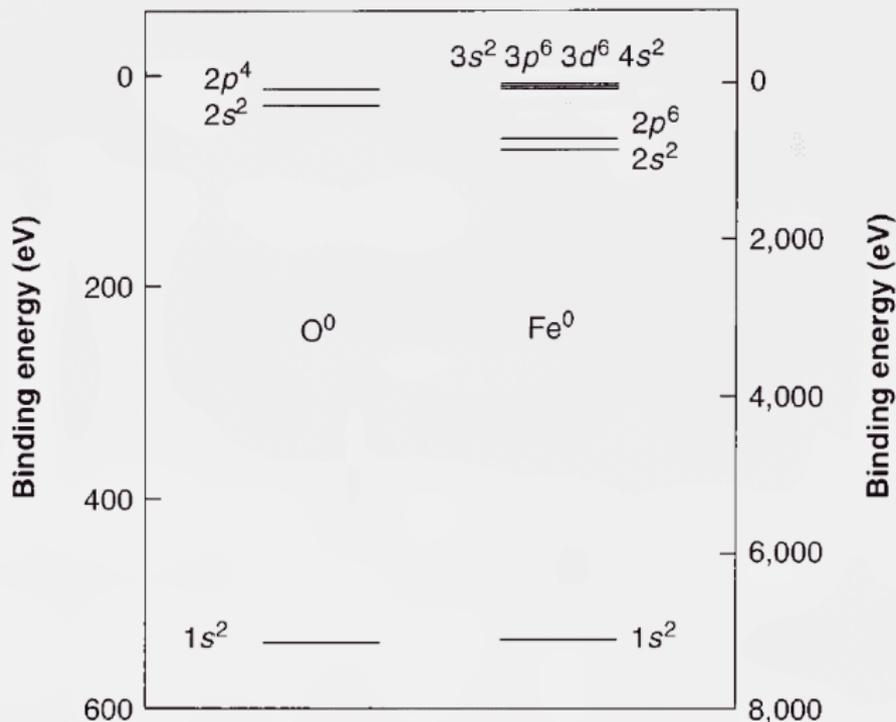


11.2 内殻の光電離

今回, 内殻の電子の光電離について考えてゆこう.



11.2 エネルギー準位の構造 (O, Fe)



8.2 エネルギー準位の構造 (O, Fe)

0th 次のオーダーでは、エネルギーとその固有状態は水素様原子のものと同じであり

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} 13.6\text{eV}, \quad |\psi\rangle = |n, l, m\rangle \quad (4)$$

さらに電子にはスピン状態の自由度が存在し、(違うスピンの向きの)2つの電子が同じ量子数 (n, l, m) の状態をとることができる。

$$|\psi_1\rangle = |n, l, m\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\psi_2\rangle = |n, l, m\rangle \otimes |\downarrow\rangle \quad (5)$$

ここで $|\uparrow\rangle = |1/2; +1/2\rangle, |\downarrow\rangle = |1/2; -1/2\rangle$.

殻記号

$$L(2p^6) \Leftrightarrow |2, 1, (-1, 0, 1)\rangle \otimes |\uparrow, \downarrow\rangle \quad (6)$$

ここで $n = 1, 2, 3, \dots$ を **K, L, M (殻)**, $l = 0, 1, 2, \dots$ を s, p, d (副殻) で指定し、電子数を上添字で表示している。

11.2 微細構造

(スピン軌道相互作用などの) 副殻構造による寄与は無視できない。

例 1.)

$L(2s^2) \Leftrightarrow |2, 0, 0\rangle \otimes |\uparrow, \downarrow\rangle$. 合成角運動量は $J = \frac{1}{2}$ であり状態は $|n, l, J, J_z\rangle = |2, 0, 1/2, \pm 1/2\rangle$. この状態を $L_1(2s_{1/2})$ と表記することにする.

例 2.

$L(2p^6) \Leftrightarrow |2, 1, (-1, 0, 1)\rangle \otimes |\uparrow, \downarrow\rangle$. 合成角運動量は $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ で, 状態は $|n, l, J, J_z\rangle = |2, 1, 1/2, \pm 1/2\rangle, |2, 1, 3/2, (-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2})\rangle$



そして, これらの合成状態をそれぞれ $L_2(2p_{1/2}), L_3(2p_{3/2})$ と表記する.

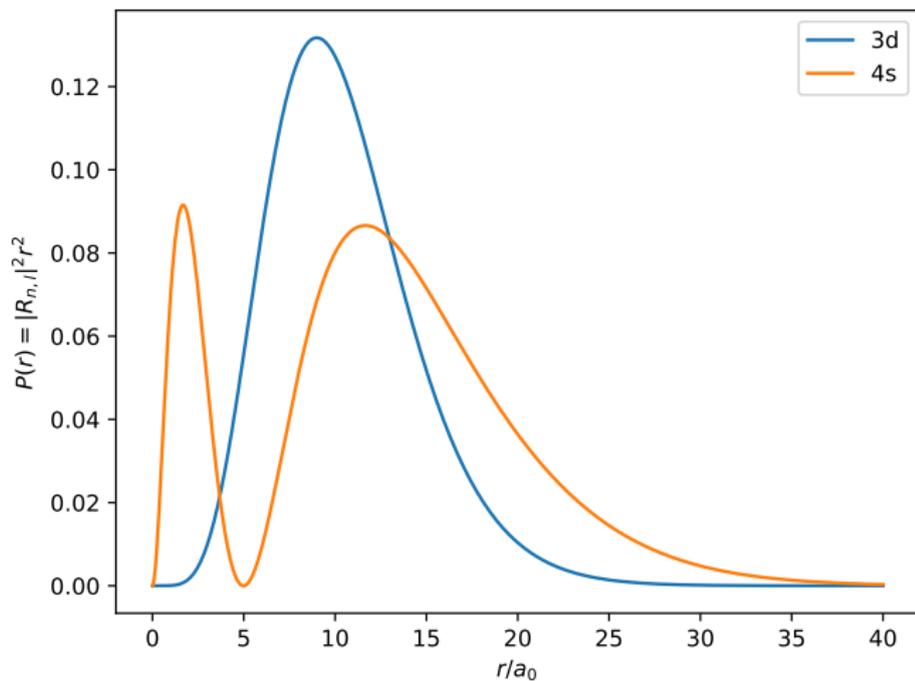
11.2 副殻の順序

理想的な水素原子では、 n が大きいほどエネルギー E_n も大きい。
しかし実際は、電子-電子相互作用によっていくつかの **逆転** が起きる。

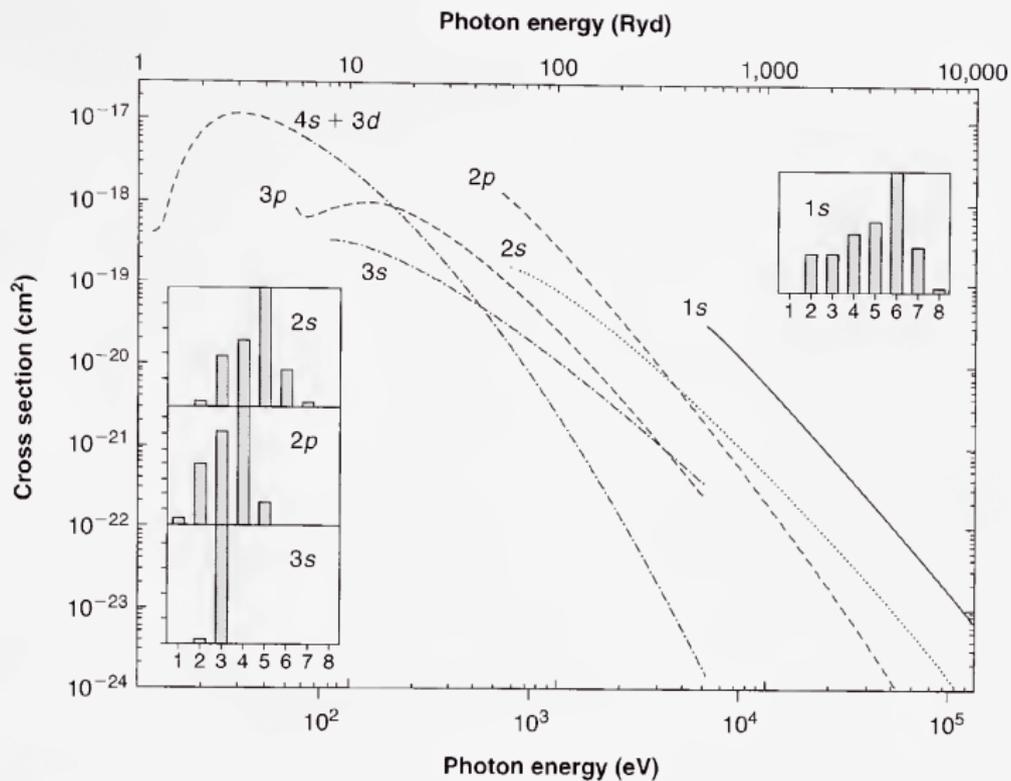
- (Fe など) N 殻が価電子殻である原子の場合、 M 殻と N 殻の $4s^2$ 電子が **同程度のエネルギー** を持ちうる。
- これは、 $4s$ 電子が **“突入”** 軌道を持っているためである。
 - それゆえ **大きな有効核電荷** を感じる。
 - そしてより安定 (強く束縛される)。
- 副殻に埋まる時の通常の間隔は

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 4p, 5s, 4d \quad (7)$$

11.2 “突入”軌道



11.2 断面積 (Fe)



11.2 Quiz !

$h\nu = 1\text{keV}$ を持つ電離光子が Fe に入射したら、どの電子 (状態) が電離されやすいか? 下記の状態を並べ替えよ.

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d + 4s$$

前のスライドの断面積の図を参考にして良い.

11.2 Quiz !

$h\nu = 1\text{keV}$ を持つ電離光子が Fe に入射したら、どの電子 (状態) が電離されやすいか? 下記の状態を並べ替えよ.

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d + 4s$$

前のスライドの断面積の図を参考にして良い.

Answer

$h\nu = 1\text{keV} = 10^3\text{eV}$ の線を断面積の図に描き入れることで,

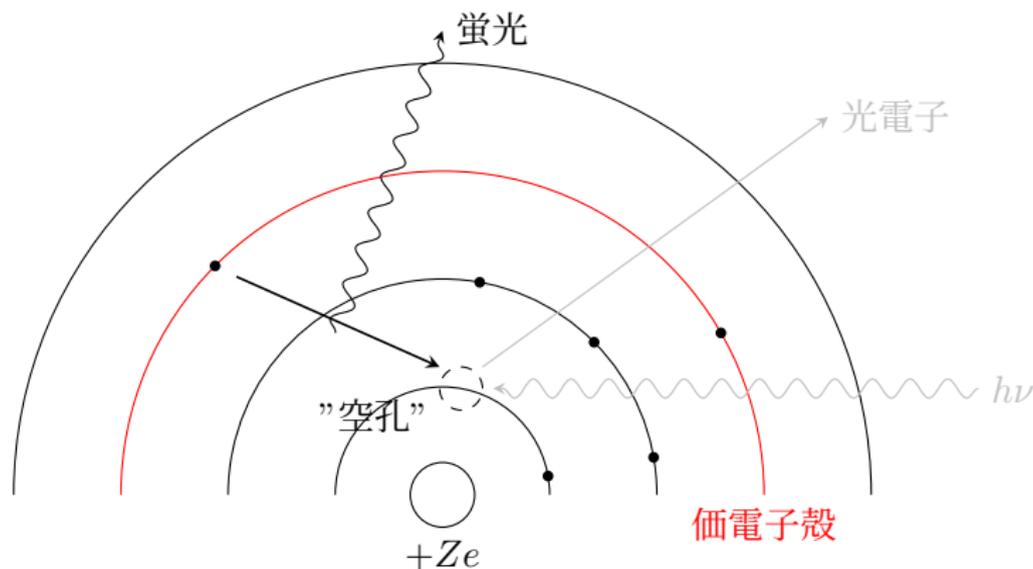
$$2p, 2s, 3p, 3s, 4s + 3d \tag{8}$$

となり、 $1s$ は電離できないことがわかる.

11.2 内殻の蛍光放射

断面積によると、次のことが示唆される。

- 光子は、価電子よりも内殻の電子を取り除く傾向にある。
- すると内殻に空席または”空孔”が現れ、それが即座に外側の電子によって埋められる。
- この過程で光子が放出される。(これを**蛍光**と呼ぶ)



11.2 内殻蛍光放射

主要な蛍光輝線 ; $2p \rightarrow 1s$ または $L \rightarrow K$ を $K\alpha$ 輝線と呼ぶ.

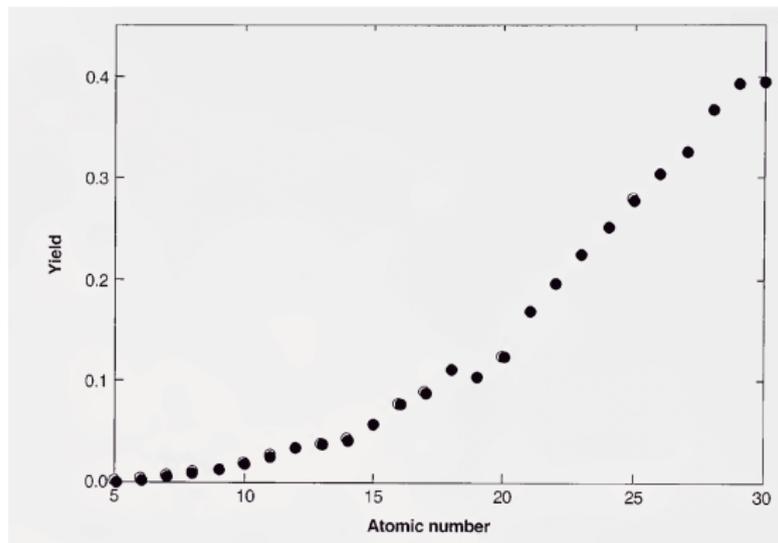
実際は $K\alpha$ 輝線は, 微細構造による $L_2 - K, L_3 - K$ の2つの輝線からなる.

11.2 蛍光収率

ここで**蛍光収率** Y を次の様に定義する.

$$Y = \frac{\#(\text{埋まった空孔})}{\#(\text{全空孔})} \quad (9)$$

この量の Z 依存性は



11.2 蛍光収率

$Y(Z)$ 依存性についての大雑把な評価.

$Y \propto A$ (遷移確率) という最も簡単な近似を考える.

- $E_n \approx -Z^2 13.6 \text{eV} / n^2 \propto Z^2$ であるから, $h\nu = \Delta E \propto Z^2$
- フェルミの黄金律によると,

$$A = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{c^3} |\langle f | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{r}} | i \rangle|^2 \quad (10)$$

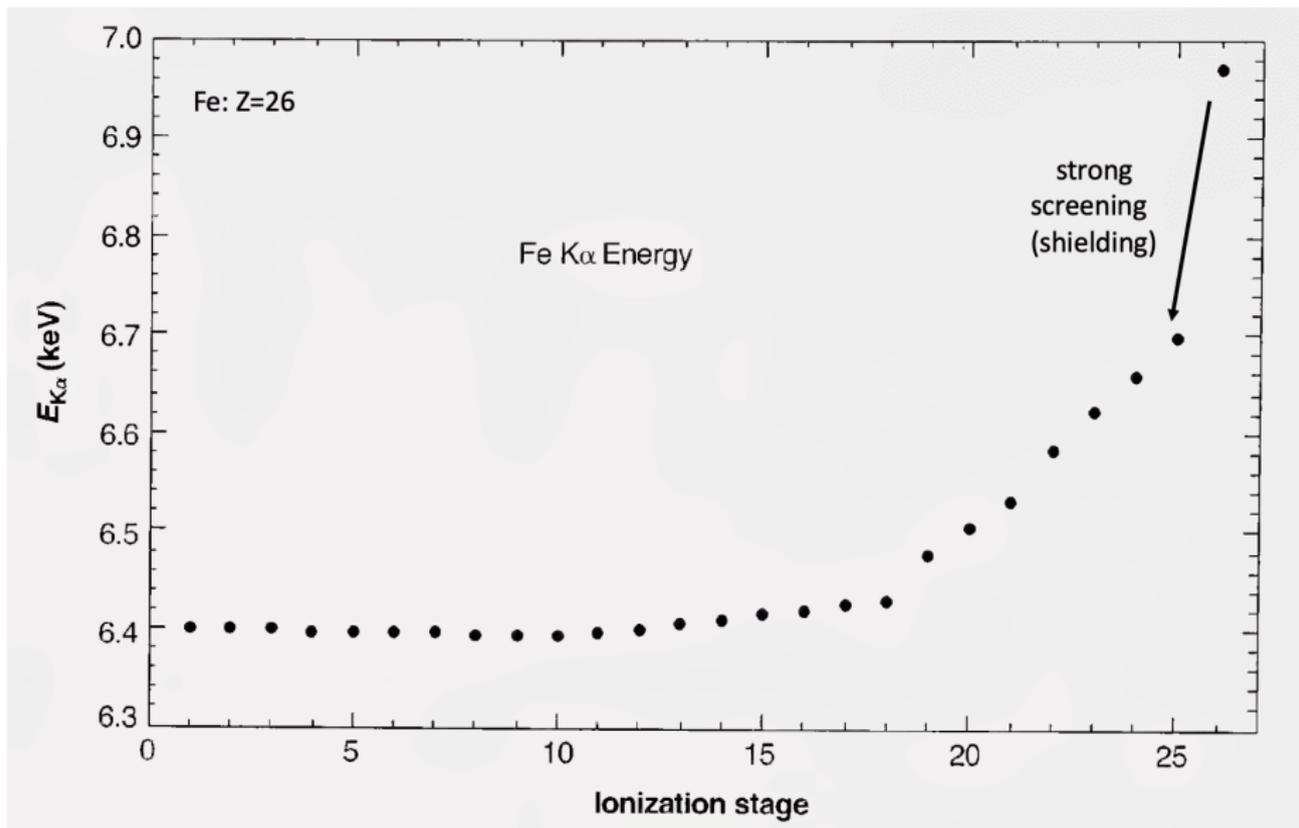
- また, ボーアモデルによれば $r \propto 1/Z$
- したがって, $A \propto \omega^3 r^2 \propto Z^6 Z^{-2} = Z^4$

従って, 遷移確率 A とその結果従う収率 Y は原子番号 Z の増加に伴って **急激に増加する**.

蛍光の放射率

$$4\pi j_l = n_{ion} h\nu_l Y_l \int_{\nu_1}^{\infty} \frac{4\pi J_\nu}{h\nu} \sigma_\nu d\nu \quad (11)$$

11.2 蛍光の電離段階依存性



11.2 蛍光の電離段階依存性

- Fe XXVI は単原子イオンから発せられるので, $K\alpha$ は 6.97keV のエネルギーを持つ.
- Fe XXV については, 電子が 2 つあるので $K\alpha$ のエネルギーは 6.72 keV まで落ちる. これは, もう一方の $1s$ 電子による遮蔽効果のためである.
- 同じ様にして, $2s, 2p$ 電子は核電荷を遮蔽し, 有効核電荷を減らす効果がある.
- $3s, 3p, 3d$ は重なり積分が小さいため, 核を効率的に遮蔽することができない.

Quiz !

Fe XXVI $K\alpha$ のエネルギーを水素様原子のエネルギー固有値 $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13.6\text{eV}$ を用いて計算せよ. なぜこの計算結果は 6.97 keV からずれているのか?

11.2 蛍光の電離段階依存性

- Fe XXVI は単原子イオンから発せられるので、 $K\alpha$ は 6.97keV のエネルギーを持つ。
- Fe XXV については、電子が 2 つあるので $K\alpha$ のエネルギーは 6.72 keV まで落ちる。これは、もう一方の $1s$ 電子による遮蔽効果のためである。
- 同じ様にして、 $2s, 2p$ 電子は核電荷を遮蔽し、有効核電荷を減らす効果がある。
- $3s, 3p, 3d$ は重なり積分が小さいため、核を効率的に遮蔽することができない。

Quiz !

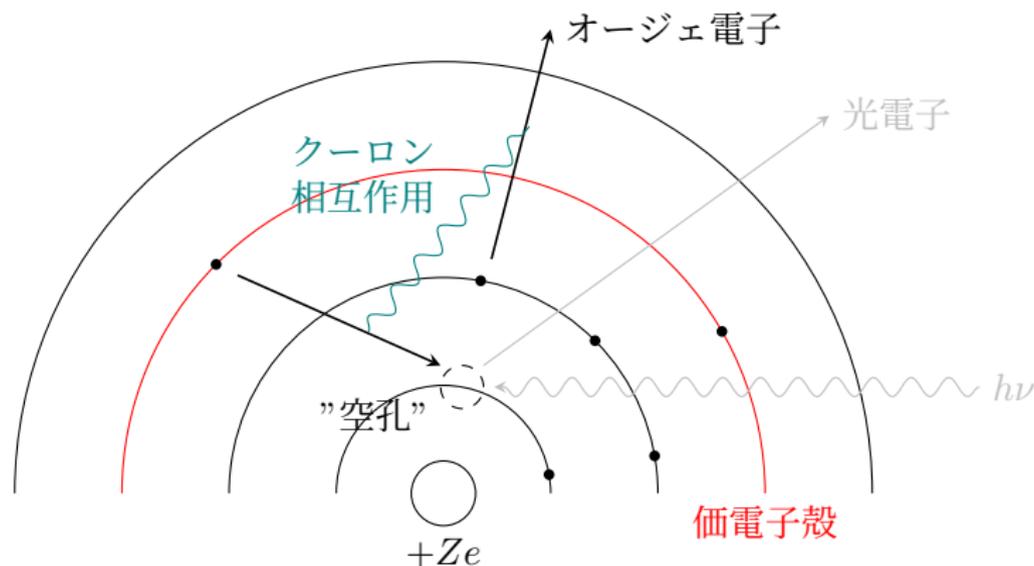
Fe XXVI $K\alpha$ のエネルギーを水素様原子のエネルギー固有値 $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13.6\text{eV}$ を用いて計算せよ。なぜこの計算結果は 6.97 keV からずれているのか？

answer

$Z = 26, E_{K\alpha} = -Z^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) \cdot 13.6\text{eV} = 6.9\text{keV}$. ずれは相対論的效果 (前のスライドで述べた).

11.2 オージェ効果

- 蛍光：“空孔”が外側の電子によって埋まった時、エネルギー差 ΔE に相当する光子が放出される。
- 光子の放出の代わりに、外側の電子の弾き飛ばしも起きる (オージェ効果)。弾き出された電子をオージェ電子と呼ぶ。



11.2 オージェ電子のエネルギー

Quiz !

今, 水素様原子のエネルギー固有値 $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} 13.6\text{eV}$ を持つ $\text{Fe}(Z = 26)$ を考える. $1s$ 電子が1つ光電離され, $1s$ "空孔" が作られた時, 外側の電子 ($2p$) が "空孔" を埋めて, 別の外側の電子 ($2p$) が弾き出される.

オージェ電子は, 原子の外に出た時どれほどの運動エネルギーを持つか?
 $\text{O}(Z = 8)$ の場合はどうなるか?

11.2 オージェ電子のエネルギー

Quiz !

今、水素様原子のエネルギー固有値 $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} 13.6\text{eV}$ を持つ Fe ($Z = 26$) を考える。1s 電子が1つ光電離され、1s”空孔”が作られた時、外側の電子 (2p) が”空孔”を埋めて、別の外側の電子 (2p) が弾き出される。オージェ電子は、原子の外に出た時どれほどの運動エネルギーを持つか？ O ($Z = 8$) の場合はどうなるか？

answer

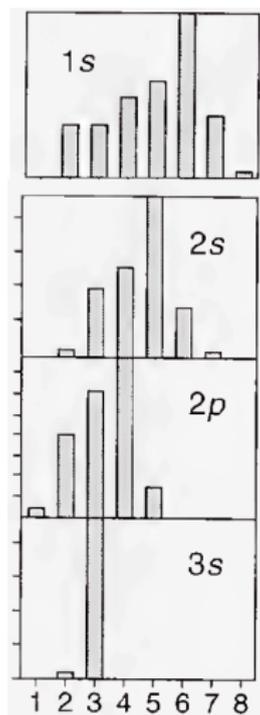
エネルギー保存則

$$Z^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) 13.6\text{eV} = \frac{Z^2}{2^2} 13.6\text{eV} + K \quad (12)$$

$$K_{\text{Fe}} = 4.6\text{keV}, K_{\text{O}} = 440\text{eV}$$

11.2 オージェ電子と電離段階

1つの”空孔”に対して幾つのオージェ電子が弾き出されるか？



11.2 オージェ電子と電離段階

オージェ電子の個数分布によれば

- K 殻の空席は典型的に 6 個の電子を弾き出す.
- Fe^0 の $1s$ 電子を取り除くと, 典型的には Fe^{+7} となる.

1 回のオージェ効果によって高い電離段階が生成される.

オージェ効果は, 重元素において高い電離状態を生み出す主な物理過程の 1 つである.

11.3 さらに高いエネルギーにおける物理過程

以下のことを議論してきた.

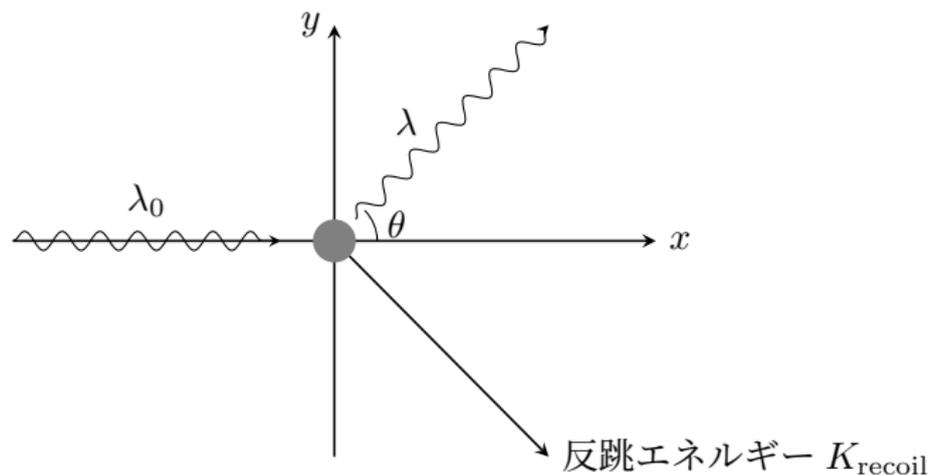
- 内殻の光電離
- 蛍光放射
- オージェ効果

入射する光子が $10^2 \sim 10^3$ eV のエネルギーを持っているとき, これらの効果が重要な役割を果たすのであった.

ここからは, さらに高いエネルギー領域に注目しよう.

- コンプトン効果
- 対生成
- 二次電離
- 宇宙線

11.3.1 コンプトン効果



コンプトン効果：電子によって光子が散乱される現象

その断面積は**トムソン散乱断面積** $\sigma_T = 0.66 \times 10^{-24} \text{cm}^{-2}$ として知られる。

電子の静止系で、 λ_0 の光子が電子によって散乱され、 λ となり角度 θ 方向に飛んでゆく。

11.3.1 コンプトン効果

公式

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta) \quad (13)$$

が (特殊相対論での) エネルギー運動量の保存によって導かれる。

しかし実際は, 電子は熱的速度分布に従って動いている。
コンプトン効果による平均的なエネルギー変化量は

$$\left\langle \frac{\delta(h\nu)}{h\nu} \right\rangle = \frac{4kT}{mc^2}, \quad \text{where} \quad \frac{3}{2}kT = \left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle \quad (14)$$

(ローレンツ変換によってこれを導くことができる.)

11.3.1 コンプトン効果

もし $kT > h\nu$ ならば、衝突の過程で電子がエネルギーを獲得することが可能であり、この場合を逆コンプトン散乱と呼ぶ。

1回の散乱過程で、正味の平均加熱(冷却)は

$$\langle \Delta E_{\text{elec}} \rangle = h\nu \frac{h\nu - 4kT}{mc^2} \quad (15)$$

であり、放射場 J_ν 下での全体の正味加熱は

$$H_{\text{Comp}} = n_e \int \frac{4\pi J_\nu}{h\nu} \sigma_T \langle \Delta E_{\text{elec}} \rangle d\nu \quad (16)$$

11.3.1 コンプトン反跳

電子の運動エネルギーはコンプトン散乱の過程で増加する (コンプトン反跳).
反跳エネルギーは

$$K_{\text{recoil}} = h\nu_0 - h\nu = hc \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right) \quad (17)$$

$$= \frac{hc}{\lambda_0} \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_0} \right) = h\nu_0 \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{h\nu_0}{mc^2} (1 - \cos \theta)} \right) \quad (18)$$

典型的には

$$K_{\text{recoil}} \approx h\nu_0 \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{h\nu_0}{mc^2}} \right) \quad (19)$$

11.3.1 コンプトン反跳

コンプトン反跳による電離

もし反跳エネルギー K_{recoil} が電離ポテンシャル $\chi_0 \approx 13.6 \cdot Z^2 \text{eV}$ を上回るなら,

$$K_{\text{recoil}} = h\nu_0 \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{h\nu_0}{mc^2}} \right) > \chi_0 \quad (20)$$

コンプトン反跳による電離が起きる.

これにより次の電離条件を得る.

$$h\nu_0 > \frac{\chi_0 + \sqrt{\chi_0^2 + 4\chi_0 mc^2}}{2} \quad (21)$$

例)
 $Z = 1, \chi_0 = 13.6 \text{eV} \ll mc^2 = 511 \text{keV}$ のとき, 条件は

$$h\nu_0 > \frac{\chi_0 + \sqrt{\chi_0^2 + 4\chi_0 mc^2}}{2} \approx \sqrt{\chi_0 mc^2} = 2.6 \text{keV} \quad (22)$$

11.3.1 コンプトン効果の断面積

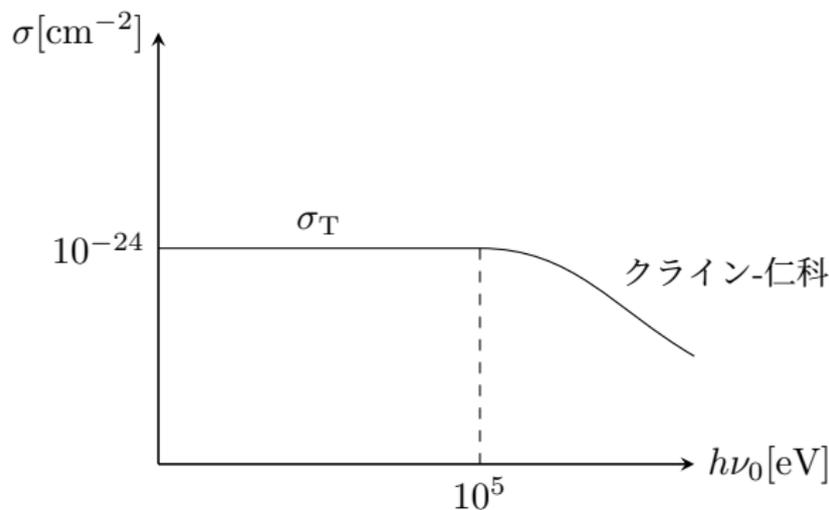
コンプトン効果の断面積は大雑把にはトムソン散乱断面積

$\sigma_T = 0.66 \times 10^{-24} \text{cm}^{-2}$ に等しい.

しかし, エネルギーが十分高いと差が無視できなくなる.

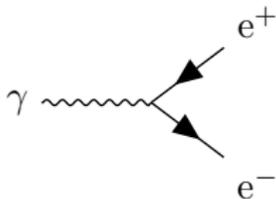
高エネルギー領域では, 断面積は**クライン-仁科の公式**によって与えられる.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^2 \frac{h^2}{2m^2c^2} \frac{\lambda_0^2}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda_0} + \frac{\lambda_0}{\lambda} - \sin^2\theta \right], \quad \sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (23)$$



11.3.2 対生成

光子のエネルギーが $2mc^2 \approx 1\text{MeV}$ より大きいとき、エネルギー保存則の観点では光子が $e^+ - e^-$ 対となることが許される。



- 運動量が保存されていなくてはならないために、 $e^+ - e^-$ 対は**仮想的**である (真空中では現実の対となることができない)。
- もし対が原子核の近くにあるならば、運動量を原子核に輸送することができ、現実の対となることができる。
- 対生成の典型的な断面積は $\sim 10^{-27}\text{cm}^{-2}$
- 対は最終的には消滅し、2つの光子を生成する。光子はそれぞれ 0.511 MeV を持つ。 (これを **消滅輝線** と呼ぶ)。

11.3.3 二次電離

- オージェ電子
- $e^+ - e^-$ 対
- 強い放射による光電子

のエネルギーは熱的な電子のエネルギー (kT) よりも遥かに大きい.

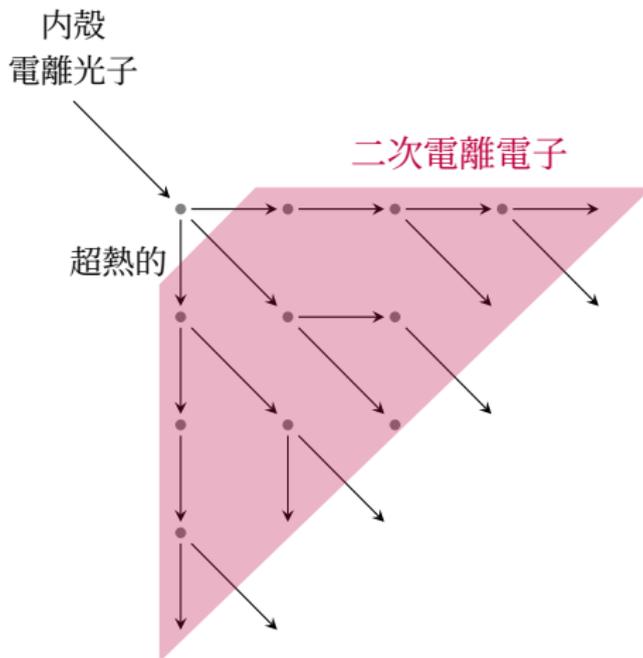
電離ガスの環境下

これらの”超熱的な”電子は、周囲の熱的電子と衝突しながら徐々に熱化されてゆく.

中性ガスの環境下

- これらの”超熱的な”電子は原子と衝突する. → 衝突電離
- すると、もし衝突によって電離が起きれば**第二の超熱的な電子**が生成される.

11.3.3 二次電離のシャワー



中性の原子は電離され、第二の超熱的な電子が次々と生成されてゆく。

11.3.3 エネルギー変換

電離割合

$$x := \frac{n(\text{H}^+)}{n(\text{H})} \quad (24)$$

が二次電離の重要性を決定する.

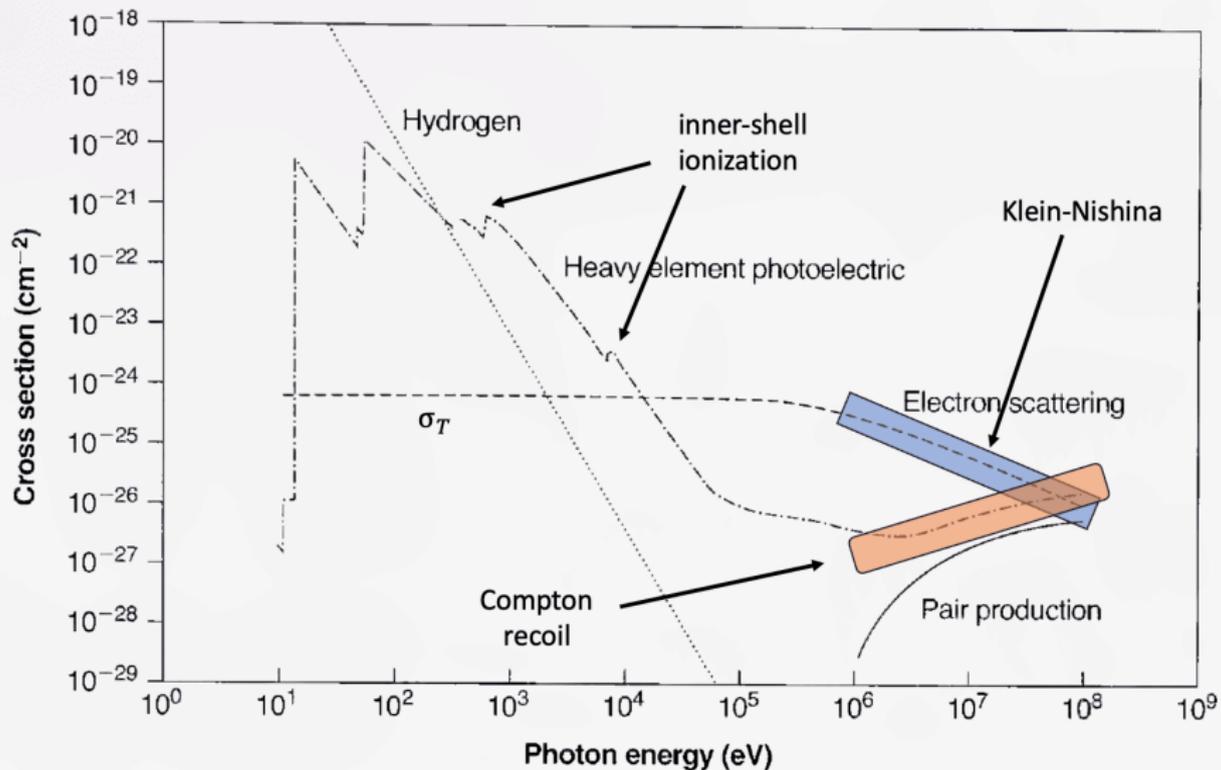
- もし $x > 0.9$ なら, ほとんどの運動エネルギーは熱に変換される.
- もし $x \ll 0.9$ なら, 第一の電子のエネルギーのほとんどは二次電離 (40%) や二次励起 (40%) に消費され, and 熱に変換されるのは僅かである (14%).

11.3.4 宇宙線

宇宙線：相対論的なエネルギーを持った原子核や電子 ($\lesssim 10\text{GeV}$).

- 分布関数 $n(E) \propto E^{-2.4}$
- 比較的低いエネルギーの宇宙線は地球から直接は観測できないが、シンクロトロン放射によってその存在が間接的に示唆される.
- 宇宙線は中性の原子を加熱よりも、電離する.
- H^0 の電離率はおおよそ $2 \times 10^{-17}\text{s}^{-1}$ である.
- 宇宙線によって電離された電子の典型的なエネルギーは 35eV (超熱的) である.
- この超熱的電子は第二電離電子を生成する.

11.3.5 合計の不透明度



11.3.5 合計の不透明度

不透明度はエネルギー領域ごとにその原因が異なる。

- 低いエネルギー帯 ($< 54\text{eV}$): H(13.6eV), He(24.6, 54eV), 固体微粒子
- 中間～高エネルギー帯 ($54\text{eV} < h\nu < \mathcal{O}(\text{keV})$): 内殻の電離 (\rightarrow オージェ効果, 蛍光)
- 高エネルギー帯 ($100\text{keV} < h\nu < \mathcal{O}(\text{MeV})$): コンプトン反跳, 対生成

柱密度

$$\tau_\nu = a_\nu N(\text{H}) = 1 \quad \rightarrow \quad N(\text{H}) = a_\nu^{-1} \approx 10^{24} \text{cm}^{-2} \quad (25)$$

高エネルギー過程は比較的大きな柱密度 (10^{24}cm^{-2} 以上) になると極めて重要になる。