

## R行列法を用いた電子・分子衝突過程の研究

京大福井センター ○田代 基慶、 諸熊奎治

tashiro@fukui.kyoto-u.ac.jp

我々は第一原理R行列法を用いて低エネルギー電子と分子の衝突過程に関する研究を行っている。この方法では電子・分子の距離に応じて空間を内側と外側に分割し、内側の領域では通常の電子状態計算とほぼ同様の全電子計算が行われる。一方、外側の領域では散乱電子と標的分子の電子相関を無視する近似が取られ、散乱電子の動径方向自由度が緊密結合方程式によって取り扱われる。本研究ではイギリスのグループによって開発されてきた UK molecular R-matrix codes を出発点にし、必要に応じて様々な改良を独自に施している。たとえば、電子・分子衝突時に電子状態励起が起きる場合は標的分子の励起状態の記述が重要となる。そこで、従来のHF軌道のかわりに State-Averaged Complete Active Space SCF 軌道を使用できるようにした。他にも、振動励起や解離性電子付加といった核間距離が変化する場合への拡張にも取り組んでいる。本発表では電子と酸素分子/窒素分子衝突での電子状態励起断面積や、スピン交換過程などについて議論を行う予定である。

