

B^{5+} イオン、 C^{6+} イオンによる励起水素原子(2s, 2p)からの 状態指定電荷移行断面積の計算

新潟大学 理学部

島倉紀之

1. 平成19年度受託研究

- (1) 研究題目：原子・分子・イオンの衝突に関する調査（軽元素イオンと水素の電荷移行断面積 IV）
- (2) 研究目的：炉心プラズマの性能を向上するには、不純物イオンの挙動を解明し、制御する必要がある。このために必要とされる原子・分子・イオンの衝突に関する調査を行い、核融合開発に必要な原子分子データベースの作成に資する。
本件では、ダイバータプラズマの分光診断に必要な軽元素イオンと水素の電荷移行断面積の計算を行う。
- (3) 研究内容： C^{6+} とH原子（ $n = 1, 2$ ）の低エネルギー領域における電荷移行断面積を分子基底展開緊密結合法を用いて計算する。また、軽元素イオン（Be, B, C）の完全電離およびヘリウム様イオンとH原子（ $n = 1, 2$ ）の低エネルギー領域における電荷移行過程についてまとめる。

受託研究成果報告書目次

1	緒言	1
2	計算方法の概略	6
3	理論	8
3.1	分子基底に基づく半古典的緊密結合法	8
3.2	動径結合と回転結合	10
3.3	量子論的緊密結合法	11
4	B^{5+} イオンによる水素原子からの電荷移行断面積	16
4.1	電子状態の計算	16
4.2	$(B^{5+} + H(2s))$ 衝突系電荷移行断面積	24
4.3	$(B^{5+} + H(2p))$ 衝突系電荷移行断面積	28
4.4	まとめ	32
5	C^{6+} イオンによる水素原子からの電荷移行断面積	33
5.1	電子状態の計算	33
5.2	$(C^{6+} + H(1s))$ 衝突系電荷移行断面積	41
5.3	$(C^{6+} + H(2s))$ 衝突系電荷移行断面積	43
5.4	$(C^{6+} + H(2p))$ 衝突系電荷移行断面積	51
5.5	まとめ	59
6	研究成果概要とこれからの計画	60
7	(追加) $R = \infty$ から緊密結合方程式を解いて得られた3重項 ($Be^{3+} + H(2s)$) 衝突系の電荷移行断面積	64
	謝辞	
	付録	
A.1	$(Be^{2+} + H)$ 衝突系における電荷移行断面積	A-1
A.2	Be^{3+} イオンによる水素原子からの電荷移行断面積	A-6
A.3	$(Be^{4+} + H)$ 衝突系における電荷移行断面積	A-17
A.4	B^{3+} イオンによる水素原子からの電荷移行断面積	A-25
A.5	C^{4+} イオンによる水素原子からの電荷移行断面積	A-28

2. 計算方法

低エネルギー領域（衝突エネルギー $E < 25.0$ keV/amu, 相対速度で $v < 1.0$ au）で有効な分子基底に基づく緊密結合法を用いる。

- ① 衝突系を準分子とみなし電子状態を計算 → ポテンシャルエネルギーと波動関数
- ② 波動関数を用い、電子並進因子を考慮し、動径結合、回転結合を計算
- ③ ポテンシャルエネルギーと結合項を用い、緊密結合方程式を解く → 遷移確率、断面積

2.1 電子状態の計算

- ① A generalized valence-bond configuration-interaction method (with l -dependent Gaussian-type pseudo-potential)
- ② l -dependent Gaussian-type pseudo-potential

$$V(r) = \sum_{l,m} V_l(r) |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}|$$

$$V_l(r) = A_l \exp(-\xi_l r^2) - \frac{\alpha_d}{2(r^2 + d^2)^2} - \frac{\alpha_q}{2(r^2 + d^2)^3} + \frac{q}{r}$$

- ③ Slater-type orbital: The orbital exponents are obtained by optimizing the energies of respective electronic states of $R = \infty$
- ④ The accuracy with respect to the spectroscopic values is better than 0.05 eV

2.2 A semi-classical molecular-state close-coupling method

$$\Psi = \sum_i a_i(t) \Phi_i(r, R) F_i(r, R)$$

$\Phi_i(r, R)$: Adiabatic wavefunction

$F_i(r, R)$: Electron translation factors (ETFs)

- 緊密結合方程式

$$i\dot{a}_j = \varepsilon_j a_j + \sum_i v \cdot (\underline{P} + \underline{A})_{ji} a_i$$

ε : Adiabatic potential energy

\underline{P} : Non-adiabatic coupling

\underline{A} : ETFs correction

- m 状態への遷移確率

$$P_m(E, b) = |a_m(E, b)|^2$$

- m 状態への電荷交換断面積

$$\sigma_m(E) = 2\pi \int db b P_m(E, b)$$

3. B⁵⁺イオンによる水素原子からの電荷移行断面積

3.1 電子状態の計算

3.1.1 基底関数

表3.1 (BH)⁵⁺分子イオンの電子状態計算に用いたB⁴⁺イオンと水素原子用のスレーター型基底関数の軌道指数

B ⁴⁺		H	
<i>nl</i>	軌道指数	<i>nl</i>	軌道指数
1s	1.0519	1s	1.0000
2s	1.0585	2s	0.5000
2p	0.8947	2p	0.5000
3s	0.6993		
3p	0.7716		
3d	0.6500		
4s	0.6906		
4p	0.6094		
4d	0.6566		
4f	0.8544		
5s	0.8500		
5p	0.8500		
5d	0.8500		
5f	0.8403		
5g	0.8398		
6s	0.8333		
6p	0.8333		
6d	0.8333		
6f	0.8333		
6g	0.8333		
6h	0.8333		
7s	0.7143		
7p	0.7143		
7d	0.7143		
7f	0.7143		
7g	0.7143		
7h	0.7143		
7i	0.7143		
8s	0.6250		
8p	0.6250		
8d	0.6250		
8f	0.6250		
8g	0.6250		
8h	0.6250		
8i	0.6250		
8j	0.6250		

表3.2 $B^{4+}(nl)$ イオンの電子エネルギーの計算値と理論値の比較

nl	計算値(a. u.)	理論値(a. u.)	誤差(eV)
6s	-0.347689	-0.347222	-0.012714
6p	-0.347266	-0.347222	-0.001187
6d	-0.347246	-0.347222	-0.000649
6f	-0.347215	-0.347222	0.000194
6g	-0.346864	-0.347222	0.009761
6h	-0.346433	-0.347222	0.021478
7s	-0.256508	-0.255102	-0.038253
7p	-0.255183	-0.255102	-0.002192
7d	-0.255071	-0.255102	0.000837
7f	-0.254860	-0.255102	0.006584
7g	-0.254828	-0.255102	0.007465
7h	-0.254765	-0.255102	0.009172
7i	-0.254280	-0.255102	0.022360
8s	-0.200856	-0.195313	-0.150859
8p	-0.195313	-0.195313	0.000000
8d	-0.192890	-0.195313	0.065925
8f	-0.190524	-0.195313	0.130312
8g	-0.186775	-0.195313	0.232318
8h	-0.182606	-0.195313	0.345778
8i	-0.179377	-0.195313	0.433625
8j	-0.178315	-0.195313	0.462542

誤差は主量子数 $n = 8$ の状態において最大で 0.46eV あるが $n = 6, 7$ の状態においては 0.04eV 以内に収まっている。

3.1.2 ポテンシャルエネルギー曲線

- Σ 、 Π 、 Δ 、 Φ 状態のポテンシャルエネルギー曲線を図3.1.1～3.1.4に示す。ポテンシャルエネルギー曲線間の交差が見やすいように、縦軸はポテンシャルエネルギーからクーロン反発項 $4/R$ を引いて表した。図から、始状態が $B^{5+}+H(2l)$ のときの遷移は始状態とエネルギーが近い $B^{4+}(6l)$ および $B^{4+}(7l)$ が支配的であると予想される。

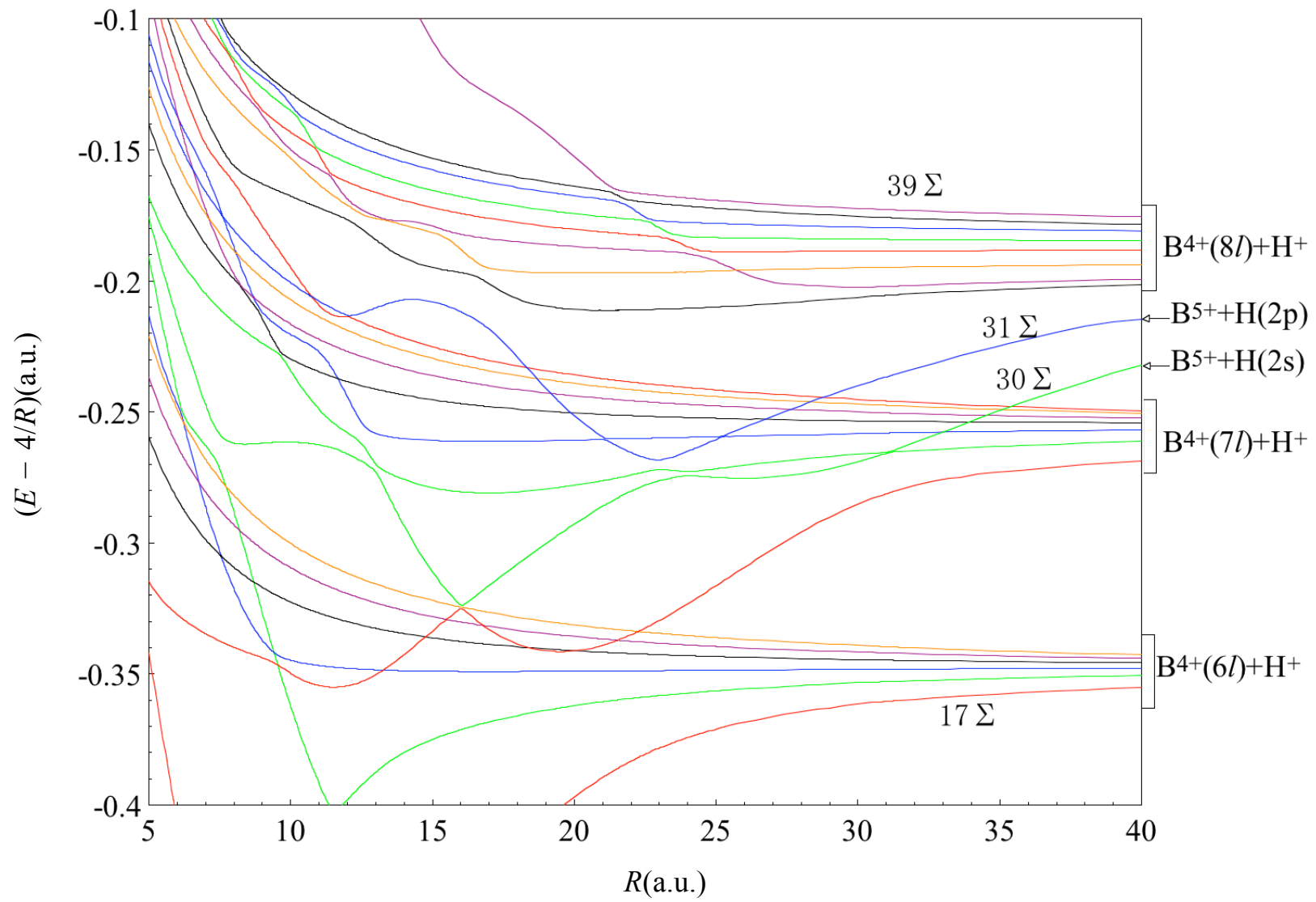


図3.1.1 $(BH)^{5+}$ 系 Σ 状態のポテンシャルエネルギー曲線

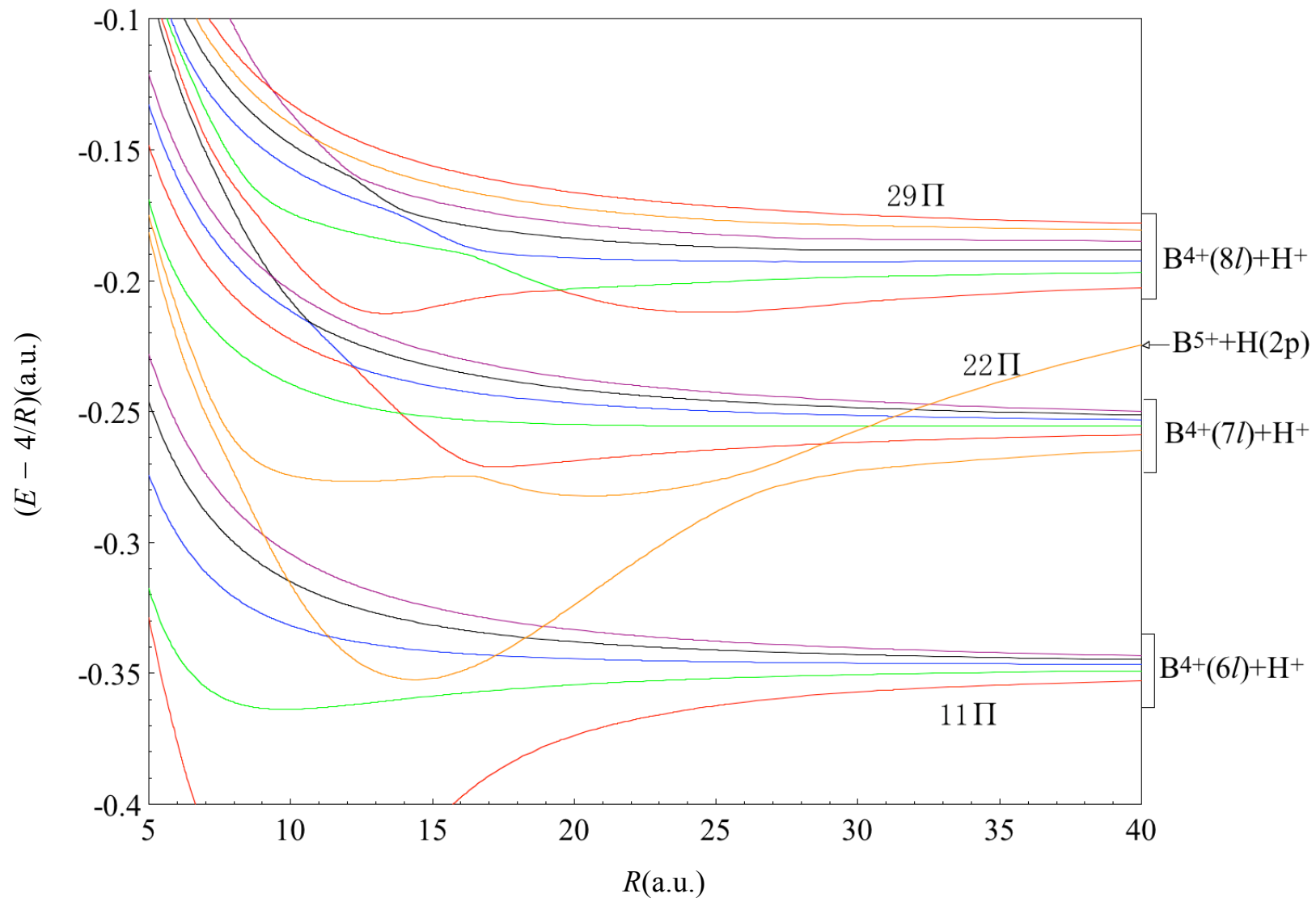


図3.1.2 $(BH)^{5+}$ 系 Π 状態のポテンシャルエネルギー曲線

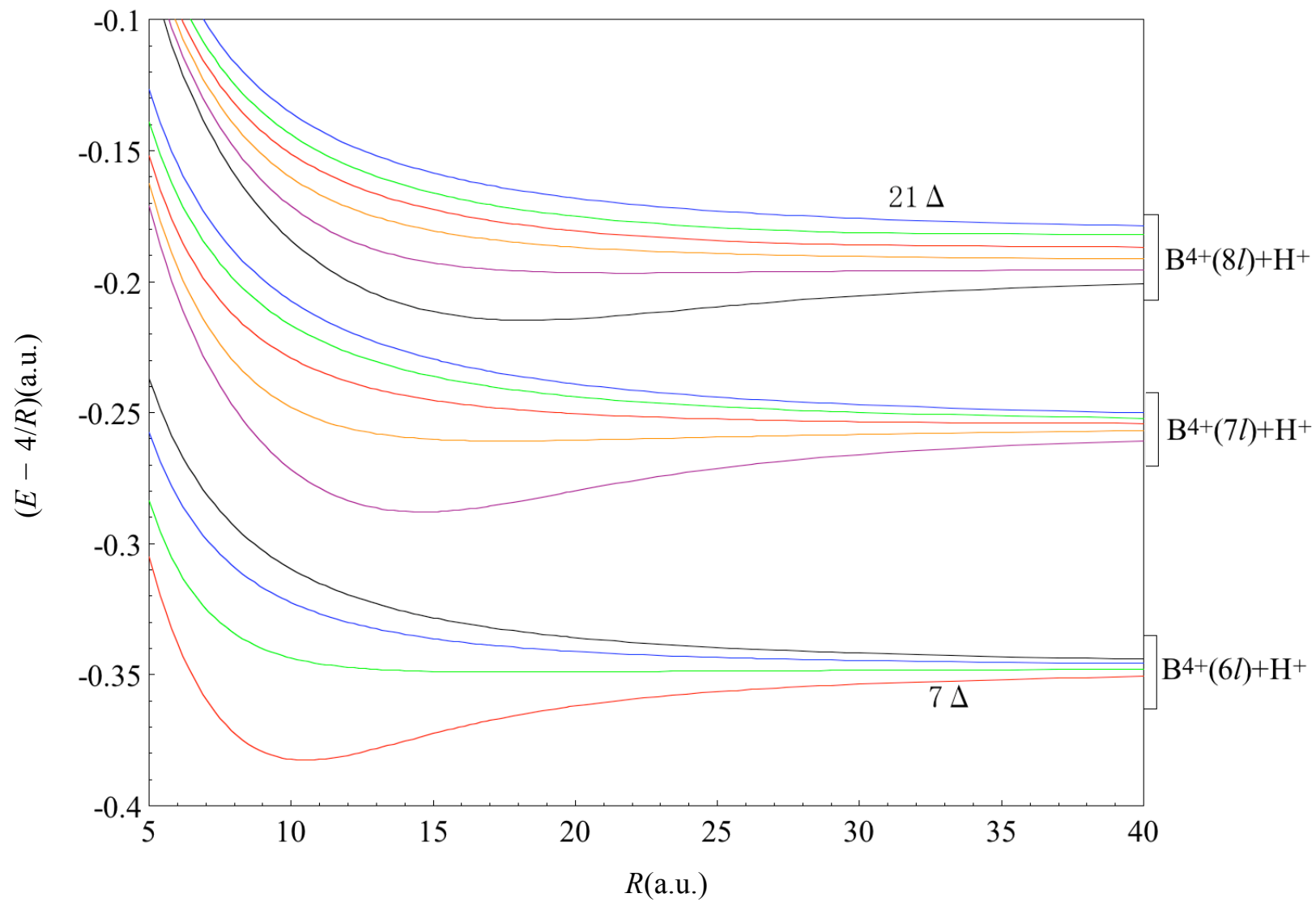


図3.1.3 $(\text{BH})^{5+}$ 系 Δ 状態のポテンシャルエネルギー曲線

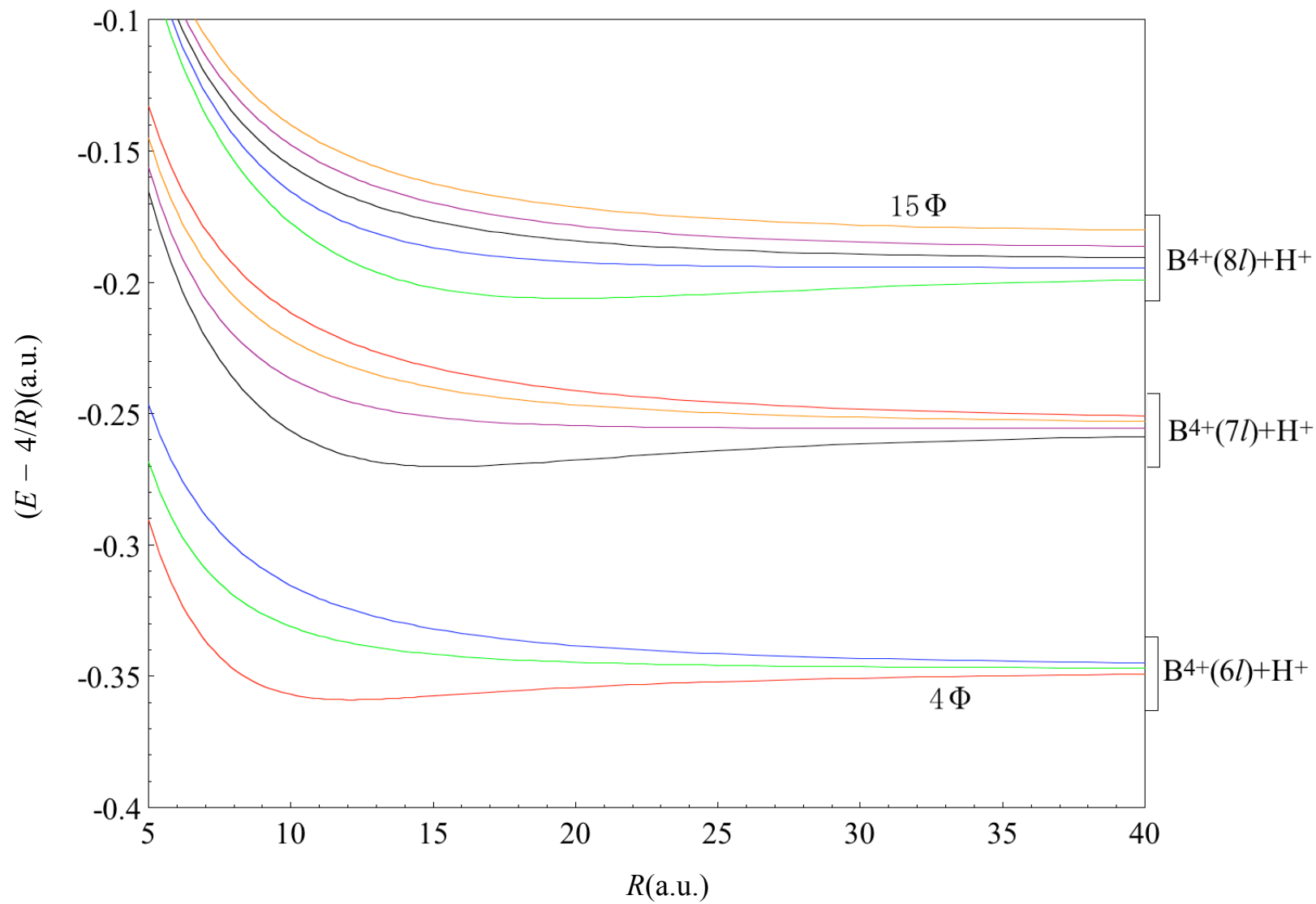


図3.1.4 $(\text{BH})^{5+}$ 系 Φ 状態のポテンシャルエネルギー曲線

3.2 (B⁵⁺ + H (2s)) 衝突系の電荷移行断面積

3.2.1 *n* 依存部分断面積

69個の状態を用いて、分子基底に基づく半古典的緊密結合方程式を解いて状態指定電荷移行断面積を求めた。*n*依存部分断面積を図3.2.1に、数値を表3.2.1に示した。

- ① 全電荷移行断面積は $590 \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \sim 750 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ 程度であり、衝突エネルギーが大きくなるにつれてゆっくりと増加している
- ② すべてのエネルギーで B⁴⁺(7*l*) への電子捕獲が支配的
- ③ 計算した衝突エネルギーの中で最も低い衝突エネルギー 62 eV/amuでB⁴⁺(7*l*) の全断面積への寄与は約90%である

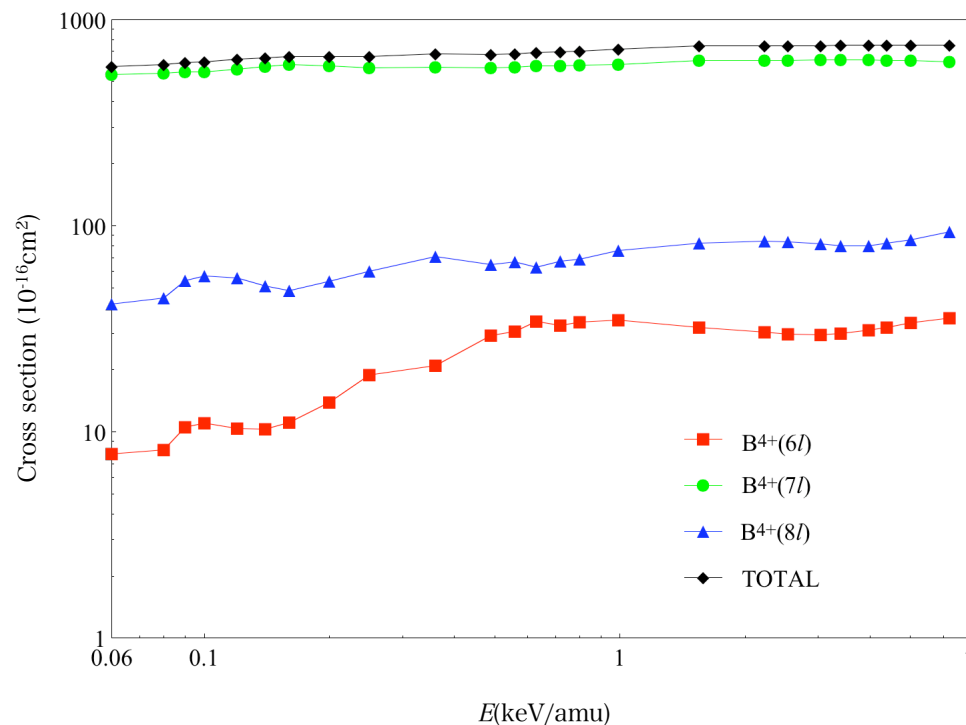


図3.2.1 (B⁵⁺+H(2s)) 衝突系の*n*依存部分断面積

表3.2.1 (B⁵⁺+H(2s))衝突系の n 依存部分断面積

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
B ⁴⁺ (6l)	7.82	8.19	10.58	11.03	10.37	10.28	11.15	13.89	18.89	20.93	29.39	30.69	34.44	32.92	34.11	34.90	32.15	30.52	29.83	29.54	29.91	31.22	32.10	33.79	35.62
B ⁴⁺ (7l)	540.65	549.68	554.88	555.71	575.35	591.31	603.70	594.43	584.43	588.83	583.24	585.46	594.13	596.92	600.11	606.20	630.59	632.50	634.02	637.00	638.28	636.91	634.32	630.24	622.95
B ⁴⁺ (8l)	41.70	44.49	54.30	57.17	55.62	50.82	48.58	53.80	59.90	71.08	64.66	66.55	63.10	67.44	68.52	75.51	82.55	84.07	83.20	81.39	79.96	80.05	82.03	85.15	93.13
TOTAL	590.18	602.36	619.76	623.90	641.33	652.41	663.43	662.12	663.23	680.84	677.29	682.70	691.67	697.29	702.73	716.62	745.29	747.09	747.05	747.93	748.15	748.18	748.45	749.19	751.70

($\times 10^{16} \text{cm}^2$)

3.2.2 nl 依存部分断面積

($B^{5+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積を表3.2.2に示した

表3.2.2(a) ($B^{5+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($E = 0.062\sim 0.635$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558	0.635
$B^{4+}(6s)$	1.22	0.71	2.67	2.71	1.02	0.49	0.78	1.05	1.98	1.98	2.53	2.30	2.22
$B^{4+}(6p)$	0.70	0.96	1.11	1.17	0.99	1.21	1.32	1.86	2.25	2.88	4.87	3.97	3.75
$B^{4+}(6d)$	2.42	2.22	1.78	1.74	1.89	1.61	1.81	2.32	2.82	3.37	4.65	4.69	5.54
$B^{4+}(6f)$	1.96	2.64	2.85	3.04	4.04	4.39	4.36	4.54	6.23	4.48	6.24	7.97	9.89
$B^{4+}(6g)$	0.96	1.10	1.47	1.64	1.69	1.86	2.11	3.20	3.88	4.61	7.78	8.79	9.70
$B^{4+}(6h)$	0.56	0.57	0.70	0.73	0.74	0.74	0.78	0.91	1.73	3.60	3.32	2.97	3.34
$B^{4+}(7s)$	36.90	37.78	37.09	37.23	43.43	43.12	45.11	39.32	34.26	35.98	30.85	32.99	37.32
$B^{4+}(7p)$	133.10	117.39	103.26	98.58	81.90	85.18	86.87	82.05	76.21	71.66	57.55	55.27	52.39
$B^{4+}(7d)$	185.96	179.71	167.44	161.22	154.40	151.52	151.71	145.05	137.51	121.88	111.70	104.50	99.70
$B^{4+}(7f)$	116.85	129.23	141.79	144.74	143.29	138.81	134.67	131.57	134.27	140.77	151.94	157.56	164.30
$B^{4+}(7g)$	47.35	60.02	73.56	79.06	98.73	106.67	109.43	103.59	93.91	85.57	87.53	90.74	94.10
$B^{4+}(7h)$	16.09	20.88	26.83	29.67	44.70	54.60	62.15	71.99	78.56	87.88	91.17	90.13	89.95
$B^{4+}(7i)$	4.40	4.66	4.91	5.21	8.90	11.41	13.76	20.87	29.70	45.10	52.51	54.27	56.37
$B^{4+}(8s)$	3.16	4.39	5.35	5.47	4.56	3.48	3.67	6.24	8.07	7.69	6.15	4.58	4.10
$B^{4+}(8p)$	6.43	6.03	5.66	5.87	7.59	6.40	5.23	5.35	5.94	6.22	5.18	6.49	7.31
$B^{4+}(8d)$	12.41	11.61	11.22	11.62	12.41	9.80	8.61	11.10	11.29	10.45	8.87	9.52	8.49
$B^{4+}(8f)$	10.34	11.08	15.02	15.23	11.91	11.69	11.42	9.82	10.38	12.56	9.84	9.84	9.63
$B^{4+}(8g)$	4.17	5.02	7.77	8.25	6.40	6.63	6.76	7.45	8.72	9.71	7.94	6.95	6.42
$B^{4+}(8h)$	2.53	3.09	4.57	5.19	5.28	5.38	5.41	5.36	5.01	6.33	6.27	6.11	6.40
$B^{4+}(8i)$	2.06	2.58	3.57	4.12	5.63	5.52	5.35	5.68	6.68	8.68	11.21	13.40	12.80
$B^{4+}(8j)$	0.59	0.69	1.15	1.41	1.84	1.92	2.12	2.80	3.83	9.44	9.20	9.66	7.96
TOTAL	590.18	602.36	619.76	623.90	641.33	652.41	663.43	662.12	663.23	680.84	677.29	682.70	691.67

($\times 10^{16} \text{cm}^2$)

3.2.2 nl 依存部分断面積

表3.2.2(b) ($B^{5+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($E = 0.717\sim 6.2$ keV/amu)

E (keV/amu)	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$B^{4+}(6s)$	1.88	2.44	3.75	3.89	4.09	3.85	3.58	3.42	3.26	3.05	2.89	2.83
$B^{4+}(6p)$	3.26	4.22	4.99	6.43	6.87	6.59	6.33	6.46	7.10	7.61	8.51	9.43
$B^{4+}(6d)$	4.90	5.09	5.13	6.01	6.51	6.40	6.31	6.48	7.14	7.74	8.77	10.10
$B^{4+}(6f)$	10.72	10.81	11.26	8.84	7.15	7.28	8.10	8.77	9.61	9.96	10.28	10.24
$B^{4+}(6g)$	9.07	8.27	6.84	4.47	3.82	3.84	3.68	3.43	2.97	2.68	2.32	1.95
$B^{4+}(6h)$	3.09	3.28	2.93	2.51	2.08	1.86	1.54	1.35	1.14	1.06	1.02	1.07
$B^{4+}(7s)$	40.01	42.56	46.53	52.96	46.83	44.47	40.56	38.65	36.54	35.62	34.21	32.66
$B^{4+}(7p)$	52.15	51.17	46.97	48.60	55.72	60.63	67.95	70.67	72.84	72.84	71.57	67.84
$B^{4+}(7d)$	94.92	89.50	84.22	78.06	75.86	77.23	77.73	77.80	76.14	75.02	75.16	77.92
$B^{4+}(7f)$	166.80	169.55	170.58	173.52	168.17	165.00	162.05	162.17	163.86	165.06	165.68	165.64
$B^{4+}(7g)$	97.52	101.33	110.47	129.82	140.66	142.33	144.87	145.69	145.54	144.85	143.49	140.33
$B^{4+}(7h)$	87.64	86.84	86.79	85.10	83.01	83.56	84.97	85.30	84.85	84.30	83.64	82.10
$B^{4+}(7i)$	57.88	59.16	60.64	62.53	62.25	60.81	58.87	58.00	57.13	56.64	56.50	56.45
$B^{4+}(8s)$	4.26	4.86	4.54	5.62	6.32	6.52	6.42	6.17	5.87	5.83	6.12	7.31
$B^{4+}(8p)$	8.82	9.08	9.59	10.33	9.46	8.99	8.84	8.93	9.51	9.89	10.69	11.77
$B^{4+}(8d)$	9.53	8.53	10.11	15.43	16.33	16.03	15.46	14.54	13.70	13.63	14.00	15.79
$B^{4+}(8f)$	9.67	9.92	12.13	18.21	16.88	16.25	15.23	14.85	14.92	15.76	16.49	18.45
$B^{4+}(8g)$	6.66	7.31	8.82	9.74	9.93	9.64	9.25	9.13	9.20	9.63	9.90	10.91
$B^{4+}(8h)$	6.19	6.46	7.55	7.91	8.39	8.33	8.11	7.96	7.80	7.78	7.85	7.84
$B^{4+}(8i)$	13.36	13.82	12.17	8.77	9.72	9.98	10.65	11.14	11.70	12.14	12.85	13.47
$B^{4+}(8j)$	8.97	8.54	10.60	6.54	7.04	7.46	7.43	7.24	7.36	7.36	7.25	7.59
TOTAL	697.29	702.73	716.62	745.29	747.09	747.05	747.93	748.15	748.18	748.45	749.19	751.70

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

3.3 (B⁵⁺ + H(2p)) 衝突系の電荷移行断面積

3.3.1 n 依存部分断面積。図3.3.1、数値を表3.3.1に示した。

- ① 全電荷移行断面積はおよそ $370.0 \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \sim 500.0 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ 程度であり、 $E = 0.99 \text{ keV/amu}$ で断面積は最大になる
- ② (B⁵⁺ + H(2s)) 衝突系と同様、どのエネルギー領域でも B⁴⁺(7l) 状態への電子捕獲が支配的
- ③ B⁴⁺(7l) 状態に次いで寄与が大きいのは、 $E < 3 \text{ keV/amu}$ では B⁴⁺(6l) 状態であるが $E > 3 \text{ keV/amu}$ では B⁴⁺(8l) 状態となる

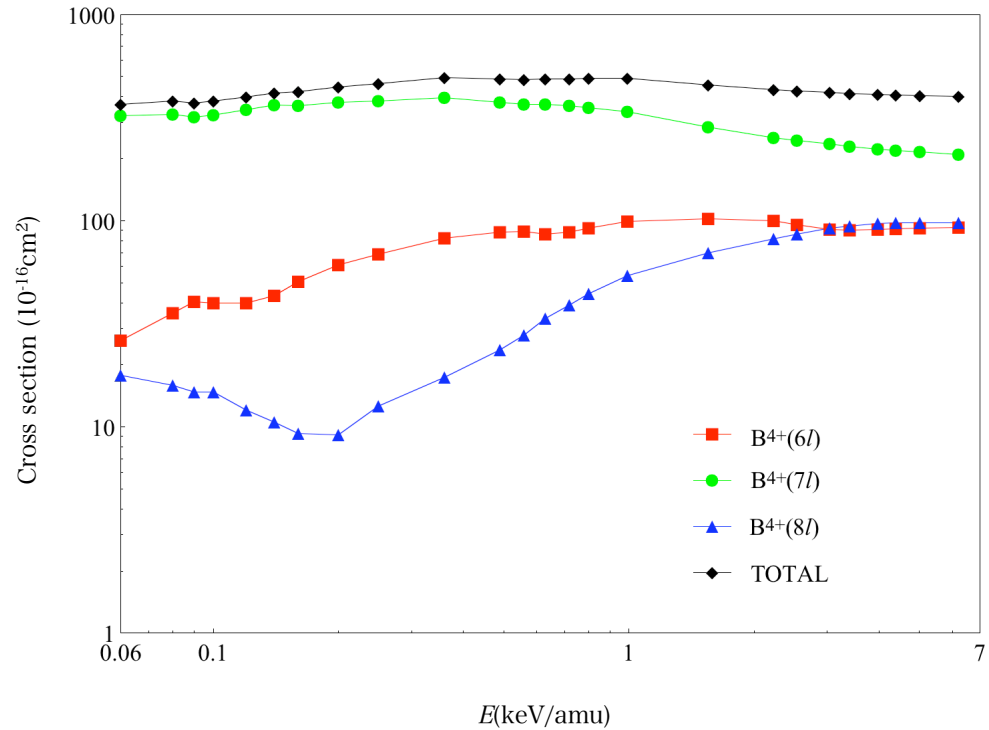


図3.3.1 (B⁵⁺ + H(2p)) 衝突系の n 依存電荷移行断面積

表3.3.1 (B⁵⁺+H(2p))衝突系の n 依存部分断面積

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
B ⁴⁺ (6l)	26.23	35.51	40.32	39.99	39.92	43.41	50.67	61.01	68.58	82.51	88.28	88.62	85.74	87.90	92.01	99.30	102.28	99.99	95.63	90.95	89.96	90.44	91.10	92.24	92.92
B ⁴⁺ (7l)	323.89	327.73	317.74	325.20	346.12	363.00	362.18	374.18	381.35	395.22	375.31	366.17	367.18	360.72	353.97	338.35	284.41	251.43	244.51	235.32	229.54	222.39	219.04	215.07	209.35
B ⁴⁺ (8l)	17.76	15.92	14.78	14.81	12.03	10.52	9.30	9.15	12.57	17.35	23.65	27.88	33.65	38.94	44.36	54.05	69.55	81.89	86.08	91.87	94.15	96.76	97.54	97.60	97.51
TOTAL	367.89	379.17	372.84	380.00	398.07	416.94	422.14	444.35	462.50	495.08	487.23	482.67	486.56	487.56	490.33	491.70	456.24	433.32	426.22	418.14	413.65	409.59	407.68	404.90	399.78

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

3.3.2 nl 依存部分断面積

($B^{5+}+H(2p)$) 衝突系の nl 依存部分断面積を表3.3.2に示した

表3.3.2(a) ($B^{5+}+H(2p)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($E = 0.062\sim 0.635$ keV/amu)

E (keV/amu)	0.062	0.075	0.089	0.095	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558	0.635
$B^{4+}(6s)$	1.92	2.93	4.25	3.99	2.54	3.07	3.99	6.35	5.05	3.39	5.23	6.30	6.75
$B^{4+}(6p)$	2.69	3.10	2.70	2.95	4.29	4.59	5.37	6.61	7.79	9.83	10.12	10.80	10.66
$B^{4+}(6d)$	6.04	7.58	8.55	8.26	6.87	7.13	7.61	7.81	8.54	12.68	18.69	20.71	21.21
$B^{4+}(6f)$	10.40	15.50	17.74	17.57	15.57	15.43	17.36	19.14	23.28	26.90	28.63	28.47	26.64
$B^{4+}(6g)$	3.25	4.46	5.18	5.55	8.22	9.66	11.98	16.19	17.90	19.64	19.66	17.76	15.46
$B^{4+}(6h)$	1.93	1.95	1.90	1.67	2.44	3.54	4.35	4.92	6.02	10.08	5.94	4.56	5.02
$B^{4+}(7s)$	22.24	24.52	20.64	20.12	26.88	19.68	16.79	27.92	18.70	28.86	25.55	31.38	35.29
$B^{4+}(7p)$	120.99	119.12	109.84	113.96	117.55	131.15	116.77	99.21	87.27	65.82	50.36	44.01	40.52
$B^{4+}(7d)$	105.13	103.56	99.39	100.22	101.32	106.60	112.53	108.85	113.52	93.94	80.75	74.92	75.49
$B^{4+}(7f)$	48.00	47.73	53.89	56.97	63.34	62.85	66.41	74.11	91.45	112.45	119.06	115.20	111.73
$B^{4+}(7g)$	17.18	19.59	18.23	17.40	18.62	22.54	27.04	32.23	38.18	54.35	63.02	64.32	63.68
$B^{4+}(7h)$	7.37	9.34	10.79	11.21	12.51	13.22	14.60	19.64	19.06	24.05	24.16	25.99	29.70
$B^{4+}(7i)$	2.97	3.87	4.96	5.32	5.90	6.97	8.04	12.22	13.18	15.74	12.41	10.35	10.78
$B^{4+}(8s)$	1.81	1.49	1.40	1.34	0.69	0.67	0.59	1.20	1.16	1.00	1.37	2.37	3.56
$B^{4+}(8p)$	2.37	1.95	1.76	1.68	1.43	1.46	1.79	1.22	1.69	2.16	3.15	3.38	4.53
$B^{4+}(8d)$	5.14	4.33	3.40	3.27	2.97	2.55	1.84	1.72	2.20	2.65	4.63	5.56	7.91
$B^{4+}(8f)$	5.27	5.13	4.89	4.83	2.79	1.95	1.47	1.15	1.51	3.01	3.37	4.38	5.13
$B^{4+}(8g)$	1.12	1.06	1.27	1.46	1.41	1.34	1.26	0.86	1.14	1.68	2.30	2.74	3.26
$B^{4+}(8h)$	1.00	0.89	0.92	1.03	1.09	0.94	0.85	0.98	1.42	1.93	2.09	2.41	2.73
$B^{4+}(8i)$	0.66	0.70	0.70	0.71	0.97	0.89	0.71	0.84	1.62	2.28	3.59	3.75	3.16
$B^{4+}(8j)$	0.40	0.38	0.44	0.49	0.68	0.71	0.78	1.19	1.83	2.64	3.13	3.28	3.35
TOTAL	367.89	379.17	372.84	380.00	398.07	416.94	422.14	444.35	462.50	495.08	487.23	482.67	486.56

($\times 10^{16} \text{cm}^2$)

3.3.2 nl 依存部分断面積

表3.3.2(b) ($B^{5+}+H(2p)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($E = 0.717\sim 6.2$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$B^{4+}(6s)$	7.61	8.26	9.61	10.26	12.17	11.37	9.28	8.17	7.30	6.67	5.93	4.91
$B^{4+}(6p)$	11.25	12.89	15.43	17.03	21.62	20.41	18.48	17.66	16.50	15.82	14.68	12.52
$B^{4+}(6d)$	22.78	23.54	24.83	21.14	14.96	14.42	14.81	14.98	15.01	15.05	15.37	16.20
$B^{4+}(6f)$	24.64	24.00	21.74	17.19	18.92	19.31	20.16	21.22	23.27	24.61	26.27	27.70
$B^{4+}(6g)$	14.69	14.09	14.20	19.78	19.35	18.73	18.32	18.59	19.45	20.17	21.30	22.83
$B^{4+}(6h)$	6.92	9.24	13.49	16.88	12.98	11.38	9.89	9.34	8.91	8.78	8.70	8.76
$B^{4+}(7s)$	35.92	35.93	35.88	33.96	28.86	27.70	26.29	25.62	24.63	23.85	22.77	20.91
$B^{4+}(7p)$	37.83	34.94	31.40	28.24	30.36	32.25	31.43	29.90	29.37	30.32	32.46	36.84
$B^{4+}(7d)$	72.56	70.75	68.98	68.22	61.85	58.83	55.61	53.12	48.27	45.25	41.28	36.61
$B^{4+}(7f)$	107.69	102.46	90.85	56.30	46.36	45.30	45.12	45.30	45.71	45.83	45.74	44.72
$B^{4+}(7g)$	63.49	65.57	64.70	44.29	31.86	29.58	28.31	27.89	27.87	27.87	27.83	27.12
$B^{4+}(7h)$	32.24	32.96	34.51	38.22	34.34	32.76	30.42	29.48	28.21	27.51	26.53	24.72
$B^{4+}(7i)$	10.98	11.35	12.03	15.18	17.80	18.08	18.15	18.23	18.34	18.39	18.46	18.43
$B^{4+}(8s)$	4.26	4.66	5.79	8.36	9.07	9.02	9.14	9.40	9.76	9.69	9.28	8.34
$B^{4+}(8p)$	5.13	6.64	9.46	11.80	14.28	14.75	15.03	14.51	13.86	13.34	12.43	11.12
$B^{4+}(8d)$	9.43	10.93	12.41	14.21	16.58	17.41	18.51	18.97	19.09	18.80	17.89	16.01
$B^{4+}(8f)$	6.63	7.37	8.94	12.72	17.11	18.77	20.60	21.19	21.99	22.31	22.52	22.60
$B^{4+}(8g)$	3.74	4.09	4.92	6.79	9.58	10.77	12.02	12.62	13.35	13.82	14.46	15.57
$B^{4+}(8h)$	3.10	3.41	3.53	4.68	5.41	5.66	6.19	6.52	6.82	7.08	7.48	8.36
$B^{4+}(8i)$	3.10	3.30	3.95	4.81	4.46	4.30	4.79	5.04	5.34	5.55	6.07	6.99
$B^{4+}(8j)$	3.57	3.97	5.04	6.18	5.38	5.40	5.60	5.90	6.54	6.94	7.46	8.52
TOTAL	487.56	490.33	491.70	456.24	433.32	426.22	418.14	413.65	409.59	407.68	404.90	399.78

($\times 10^{-16}\text{cm}^2$)

4. C⁶⁺イオンによる水素原子からの電荷移行断面積

4.1 電子状態の計算

4.1.1 基底関数

CH⁶⁺系は1電子系なので電子状態の計算は断熱近似の元で厳密に行うことができる。しかし、(C⁶⁺+H(2l)) 衝突系においては多価イオンの価数が高いこと、Hが励起状態にあることから、C⁵⁺(8l) 状態への電子捕獲が支配的であると予想される。よって、電荷移行断面積の計算には多くの状態を取り込んで計算する必要がある。簡略化のために、電子状態を適切に表せる範囲内で、基底関数の数を減らした。用いたスレーター型軌道の軌道指数を表4.1に、それらの基底関数を用いて得られたC⁵⁺イオンの電子エネルギーの実験値と計算値との比較を表4.2に示す。

表4.1 (CH)⁶⁺ 分子イオンの電子状態計算に用いたスレーター型基底関数の軌道指数

C ⁵⁺		H			
<i>nl</i>	軌道指数	<i>nl</i>	軌道指数		
1s	1.9938	7s	0.8571	1s	0.5000
2s	1.4933	7p	0.8571	2s	0.5000
2p	1.4730	7d	0.8571	2p	0.5000
3s	1.2289	7f	0.8571		
3p	1.1148	7g	0.8571		
3d	0.9114	7h	0.8571		
4s	1.0105	7i	0.8571		
4p	1.0118	8s	0.7500		
4d	1.4131	8p	0.7500		
	0.9451	8d	0.7500		
4f	1.4243	8f	0.7500		
	0.9456	8g	0.7500		
5s	0.6571	8h	0.7500		
5p	0.7172	8i	0.7500		
5d	1.0398	8j	0.7500		
5f	1.0961	9s	0.6667		
5g	1.0101	9p	0.6667		
6s	0.8551	9d	0.6667		
6p	0.8987	9f	0.6667		
6d	1.0000	9g	0.6667		
6f	1.0000	9h	0.6667		
6g	1.0000	9i	0.6667		
6h	1.0000	9j	0.6667		
		9k	0.6667		

表4.2 $C^{5+}(nl)$ イオンの電子エネルギーの計算値と理論値の比較

nl	計算値(a.u.)	理論値(a.u.)	誤差(eV)	nl	計算値(a.u.)	理論値(a.u.)	誤差(eV)
6s	-0.50004	-0.50000	0.00097	8d	-0.28139	-0.28125	0.00372
6p	-0.50002	-0.50000	0.00052	8f	-0.28101	-0.28125	-0.00648
6d	-0.50000	-0.50000	-0.00008	8g	-0.28088	-0.28125	-0.01007
6f	-0.49998	-0.50000	-0.00042	8h	-0.28030	-0.28125	-0.02593
6g	-0.49924	-0.50000	-0.02060	8i	-0.28001	-0.28125	-0.03383
6h	-0.49855	-0.50000	-0.03943	8j	-0.27935	-0.28125	-0.05169
7s	-0.36781	-0.36735	0.01263	9s	-0.23384	-0.22222	0.31606
7p	-0.36746	-0.36735	0.00305	9p	-0.23218	-0.22222	0.27102
7d	-0.36733	-0.36735	-0.00037	9d	-0.22222	-0.22222	0.00000
7f	-0.36721	-0.36735	-0.00377	9f	-0.21925	-0.22222	-0.08080
7g	-0.36718	-0.36735	-0.00442	9g	-0.21179	-0.22222	-0.28385
7h	-0.36714	-0.36735	-0.00552	9h	-0.20855	-0.22222	-0.37210
7i	-0.36692	-0.36735	-0.01167	9i	-0.20393	-0.22222	-0.49770
8s	-0.28212	-0.28125	0.02380	9j	-0.20188	-0.22222	-0.55366
8p	-0.28168	-0.28125	0.01165	9k	-0.19959	-0.22222	-0.61583

計算値の誤差は $n = 9$ で最大0.6eVであるが、 $n = 6-8$ では全て0.06eV以内におさまっている。

4.1.2 ポテンシャルエネルギー曲線

- Σ 、 Π 、 Δ 、 Φ 状態のポテンシャルエネルギー曲線を図4.1.1~4.1.4に示す。ポテンシャルエネルギー曲線間の交差が見やすいように縦軸はポテンシャルエネルギーからクーロン反発項 $5/R$ を引いている。

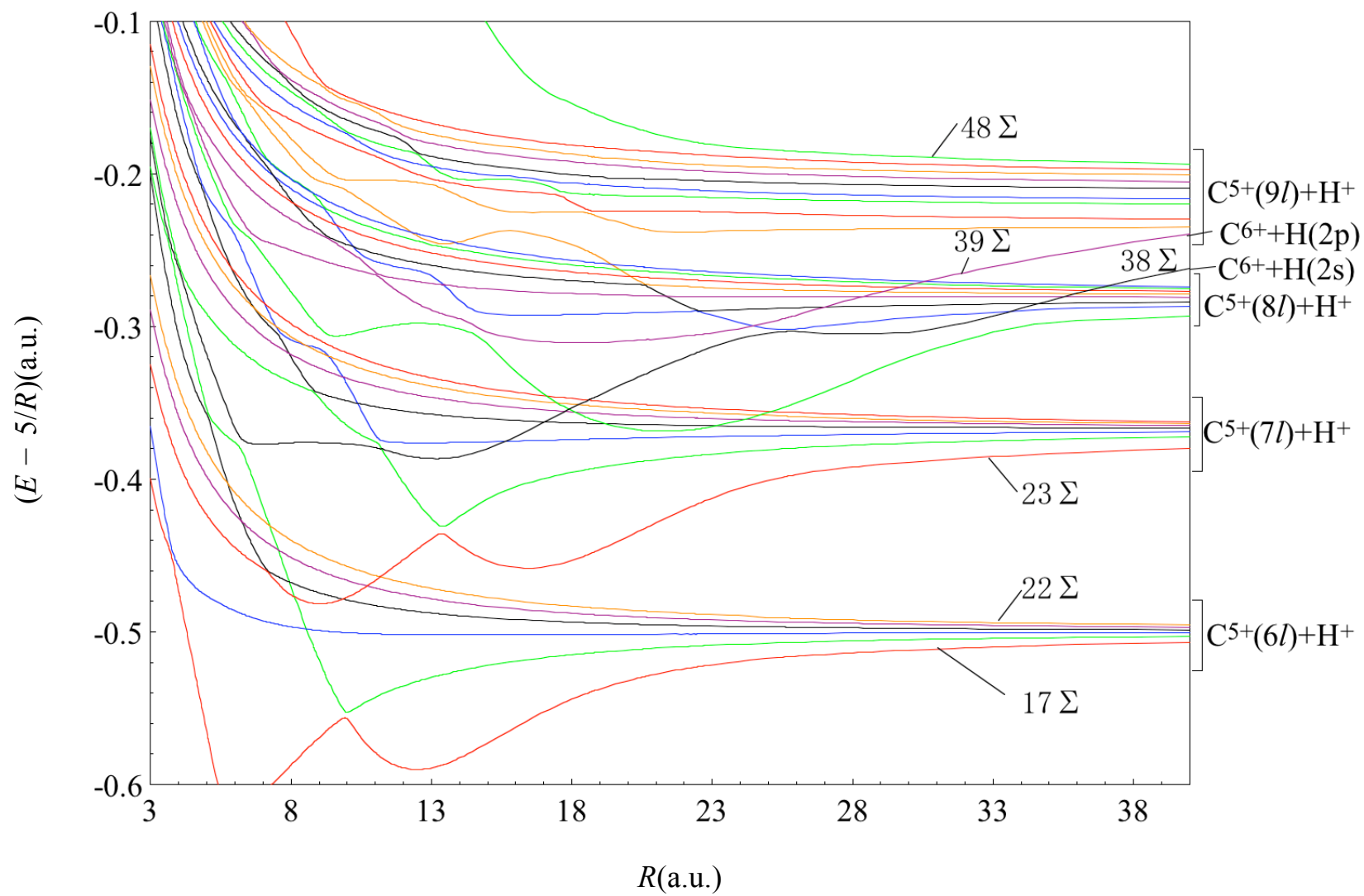


図4.1.1 $(CH)^{6+}$ 系 Σ 状態ポテンシャルエネルギー曲線 ($17 \Sigma \sim 48 \Sigma$)

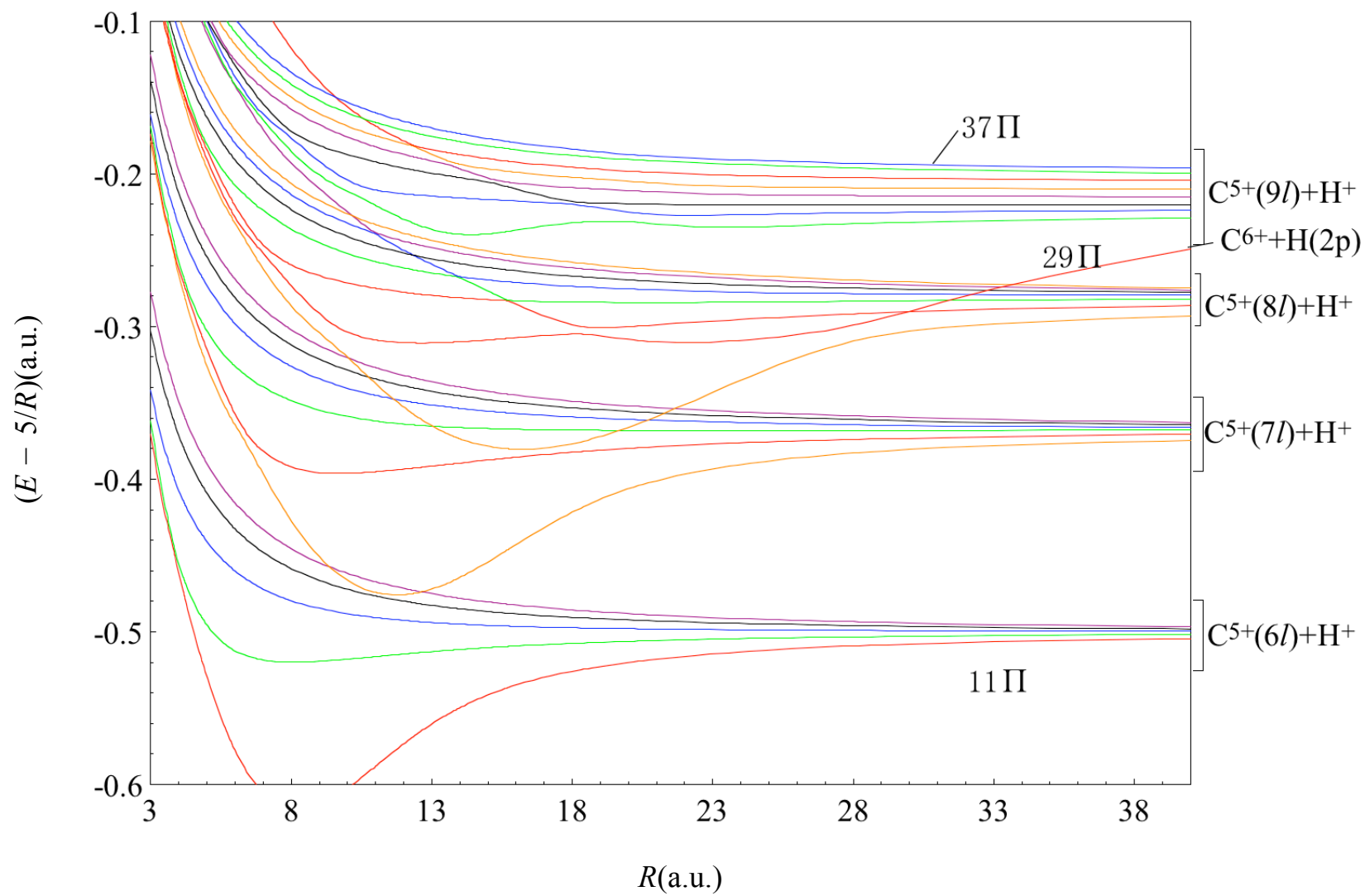


図4.1.2 $(CH)^{6+}$ 系 Π 状態ポテンシャルエネルギー曲線 (11 Π ~37 Π)

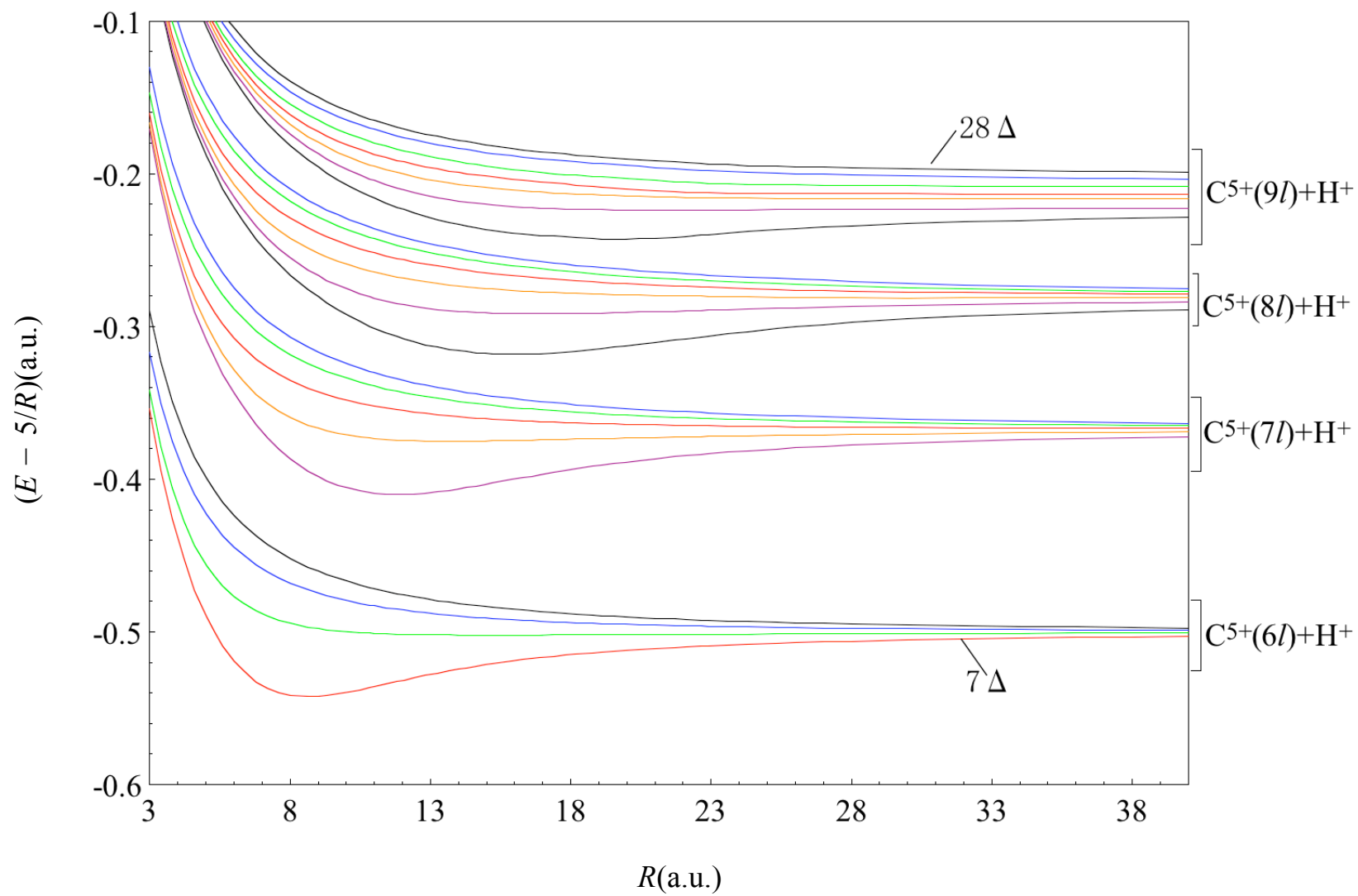


図4.1.3 $(\text{CH})_6^+$ 系 Δ 状態ポテンシャルエネルギー曲線 ($7\Delta \sim 28\Delta$)

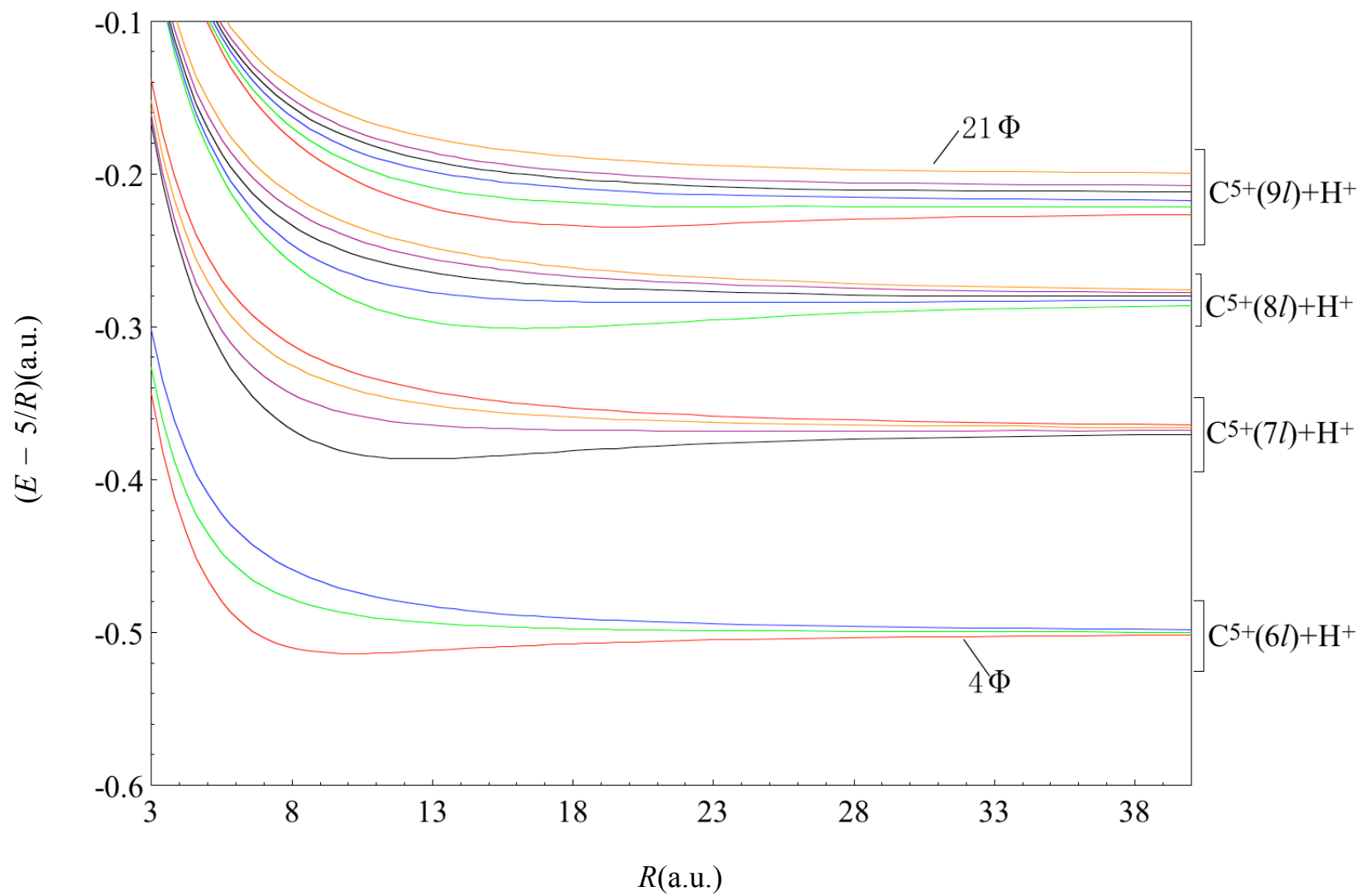


図4.1.4 $(CH)^{6+}$ 系 Φ 状態ポテンシャルエネルギー曲線 ($4\Phi \sim 21\Phi$)

4.2 (C⁶⁺ + H(1s)) 衝突系の電荷移行断面積

(C⁶⁺ + H(1s)) 衝突系に関してはいくつか論文 [1-3]があり、それらの全電荷移行断面積を比較したものを図4.2に示す。

- ① 衝突エネルギーが大きくなると全断面積は大きくなる。
- ② 全電荷移行断面積は最大で約45 × 10⁻¹⁶cm²

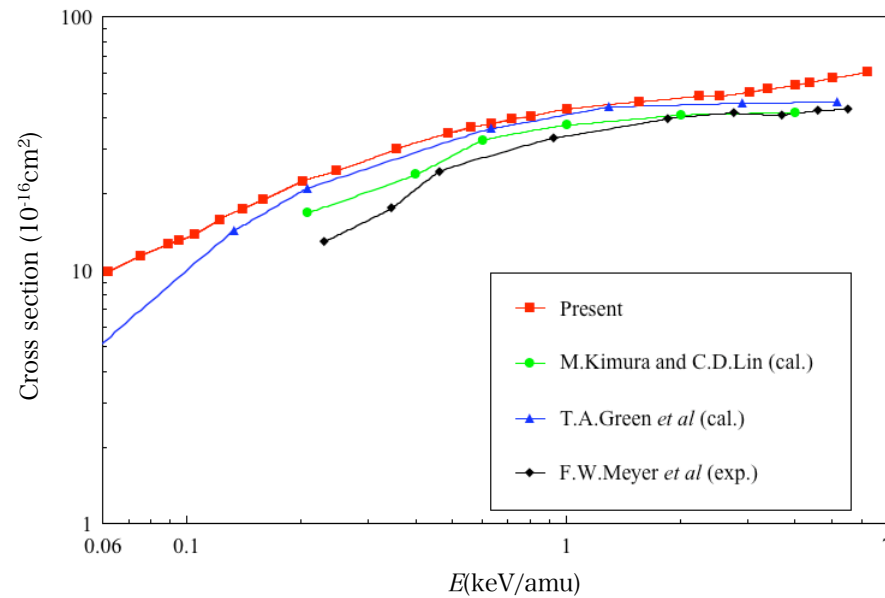


図4.2 (C⁶⁺+H(1s)) 衝突系の全電荷移行断面積

[1] M. Kimura and C. D. Lin, Phys. Rev., A32, 1357 (1985)

[2] T. A. Green, E. J. Shipsey and J. C. Browne, Phys. Rev., A25, 1364 (1982)

[3] F. W. Meyer, A. M. Howald, C. C. Havener, and R. A. Phaneuf, Phys. Rev., A32, 3310 (1985)

4.3 (C⁶⁺+H(2s)) 衝突系の電荷移行断面積

4.3.1 *n* 依存部分断面積

99個の状態を用いて、分子基底に基づく半古典的緊密結合方程式を解いて状態指定電荷移行断面積を求めた。*n*依存部分断面積を図4.3.1に示し、数値を表4.3.1に示した。

- ① 計算した全衝突エネルギー領域で、C⁵⁺(*n*=8) 状態への電子捕獲が支配的であり、最も低い衝突エネルギーでその寄与は約80%
- ② C⁵⁺(*n*=8)状態の次に寄与が大きいのは、低衝突エネルギー領域($E \leq 0.36\text{keV/amu}$)ではC⁵⁺(*n*=9) だが、衝突エネルギーが大きくなるにつれてC⁵⁺(*n*=7) 状態の寄与が急激に増加しC⁵⁺(*n*=8) 状態について支配的になる
- ③ 全断面積は衝突エネルギーが大きくなるにつれ増加し、 $E = 6.2\text{ keV/amu}$ で $740 \times 10^{-16}\text{ cm}^2$ 程度
- ④ 全衝突エネルギー領域でC⁵⁺(*n*=6) 状態の部分断面積は小さく全断面積に対して最大で3%程度の寄与

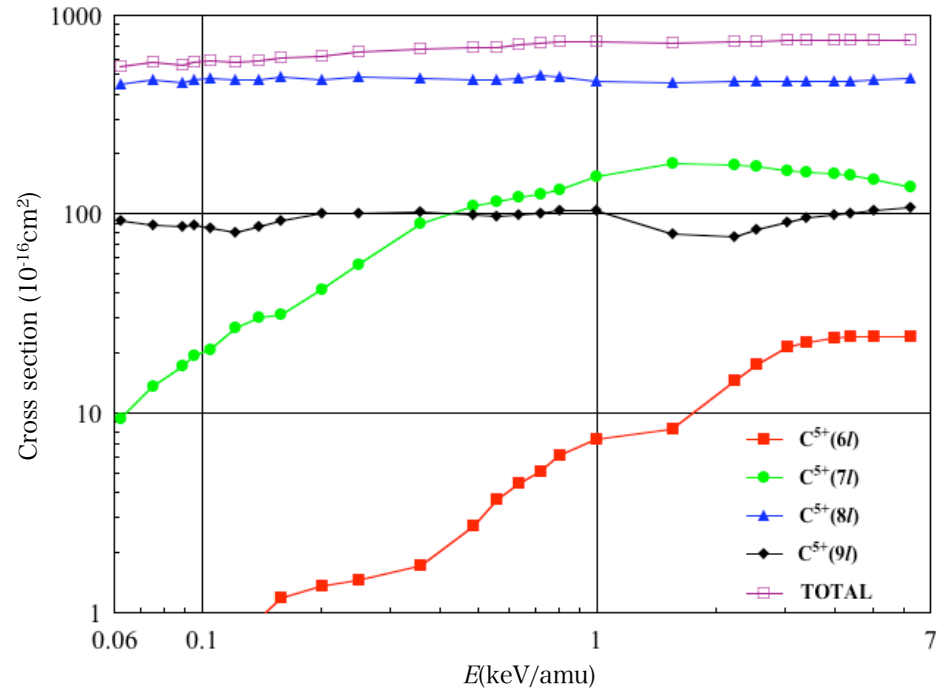


図4.3.1 (C⁶⁺+H(2s)) 衝突系の*n*依存電荷移行断面積

表4.3.1 (C⁶⁺ + H(2s)) 衝突系の n 依存電荷移行断面積

E (keV/amu)	0.062	0.075	0.089	0.095	0.105	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558
C ⁵⁺ (6l)	0.13	0.30	0.41	0.44	0.47	0.61	0.93	1.18	1.34	1.45	1.71	2.73	3.66
C ⁵⁺ (7l)	9.32	13.50	17.13	19.42	20.69	26.71	30.35	31.40	41.44	55.48	89.46	109.94	114.26
C ⁵⁺ (8l)	450.93	473.82	458.41	472.78	479.40	472.06	471.53	486.34	474.97	490.94	478.93	467.80	468.41
C ⁵⁺ (9l)	92.15	87.26	86.54	88.37	85.23	80.72	86.45	91.75	99.77	100.23	101.55	98.29	97.79
TOTAL	552.53	574.88	562.50	581.01	585.80	580.10	589.26	610.67	617.51	648.11	671.66	678.76	684.12

E (keV/amu)	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
C ⁵⁺ (6l)	4.41	5.10	6.07	7.34	8.34	14.59	17.53	21.36	22.64	23.63	23.97	24.34	24.21
C ⁵⁺ (7l)	120.94	125.60	131.38	154.35	178.74	175.69	171.73	165.45	162.40	158.94	155.32	148.28	136.12
C ⁵⁺ (8l)	482.57	492.68	490.03	463.26	453.89	466.40	465.18	462.45	461.67	462.74	464.90	468.67	475.20
C ⁵⁺ (9l)	98.75	100.84	103.42	103.83	78.77	77.24	82.90	91.24	95.92	99.42	101.26	103.49	107.00
TOTAL	706.67	724.21	730.90	728.78	719.74	733.93	737.33	740.50	742.62	744.74	745.46	744.79	742.54

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.3.2 nl 依存部分断面積

($C^{6+}+H(2s)$) 衝突系の nl 依存部分断面積を表4.3.2に示した

表4.3.2(a) ($C^{6+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(6s)\sim C^{5+}(7i)$ 状態、 $E = 0.062\sim 0.558$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.105	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558
$C^{5+}(6s)$	0.05	0.09	0.07	0.09	0.11	0.12	0.16	0.13	0.11	0.11	0.12	0.19	0.30
$C^{5+}(6p)$	0.01	0.02	0.05	0.05	0.07	0.13	0.19	0.26	0.18	0.16	0.15	0.32	0.38
$C^{5+}(6d)$	0.02	0.07	0.08	0.08	0.08	0.12	0.23	0.25	0.26	0.26	0.31	0.37	0.59
$C^{5+}(6f)$	0.02	0.05	0.09	0.09	0.08	0.11	0.16	0.25	0.38	0.47	0.52	0.71	1.01
$C^{5+}(6g)$	0.01	0.05	0.08	0.08	0.07	0.09	0.13	0.21	0.30	0.35	0.46	0.66	0.77
$C^{5+}(6h)$	0.01	0.03	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.08	0.10	0.10	0.15	0.47	0.61
$C^{5+}(7s)$	2.66	4.01	3.68	4.39	4.15	6.89	8.01	5.71	6.70	6.73	13.16	10.72	7.05
$C^{5+}(7p)$	1.59	2.00	2.94	3.47	3.59	4.29	5.32	6.20	9.21	10.17	9.06	11.37	12.62
$C^{5+}(7d)$	1.71	2.77	3.36	3.54	3.93	4.21	3.85	4.71	6.60	9.12	13.02	14.65	16.92
$C^{5+}(7f)$	1.75	2.56	3.79	4.16	4.40	5.15	5.40	5.80	7.49	11.27	19.25	27.09	26.60
$C^{5+}(7g)$	1.00	1.25	1.79	2.08	2.56	3.42	4.23	4.87	6.27	9.81	18.30	23.65	25.45
$C^{5+}(7h)$	0.36	0.54	1.02	1.19	1.42	1.97	2.63	3.09	3.90	6.29	11.88	16.15	18.24
$C^{5+}(7i)$	0.25	0.38	0.55	0.59	0.65	0.79	0.91	1.03	1.26	2.09	4.80	6.31	7.40

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.3.2 nl 依存部分断面積

表4.3.2(b) ($C^{6+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(6s)\sim C^{5+}(7i)$ 状態、 $E = 0.635\sim 6.200$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$C^{5+}(6s)$	0.30	0.33	0.42	0.52	0.87	1.30	1.33	1.57	1.60	1.54	1.44	1.32	1.19
$C^{5+}(6p)$	0.40	0.48	0.71	0.91	1.33	2.54	2.84	3.19	3.18	3.20	3.32	3.64	4.01
$C^{5+}(6d)$	0.83	0.98	1.12	1.38	1.53	2.13	2.55	3.08	3.24	3.60	3.93	4.37	4.73
$C^{5+}(6f)$	1.35	1.61	1.88	2.22	2.46	3.12	3.54	4.63	5.33	6.06	6.24	6.22	5.80
$C^{5+}(6g)$	0.86	0.96	1.11	1.36	1.42	2.83	3.91	5.02	5.26	5.10	4.87	4.56	4.26
$C^{5+}(6h)$	0.67	0.73	0.82	0.95	0.74	2.67	3.34	3.88	4.03	4.13	4.16	4.23	4.23
$C^{5+}(7s)$	5.81	5.89	4.83	6.10	3.22	2.70	2.59	2.91	3.49	4.30	4.40	4.11	3.92
$C^{5+}(7p)$	14.03	10.90	8.95	11.30	10.24	8.79	8.00	6.62	6.78	7.86	8.43	8.98	9.11
$C^{5+}(7d)$	17.56	16.97	17.15	18.84	20.57	20.59	19.41	16.56	14.99	12.56	11.26	9.75	8.29
$C^{5+}(7f)$	25.88	26.71	28.23	32.73	42.99	45.63	44.98	42.30	40.00	36.92	34.95	32.17	27.82
$C^{5+}(7g)$	27.98	30.69	33.34	38.83	49.89	47.57	45.44	43.33	42.02	40.35	39.10	36.59	32.81
$C^{5+}(7h)$	20.56	23.42	26.26	31.52	35.45	33.36	33.86	35.16	35.53	35.89	35.47	34.43	31.85
$C^{5+}(7i)$	9.12	11.02	12.61	15.03	16.38	17.05	17.44	18.57	19.59	21.05	21.72	22.27	22.32

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.3.2 nl 依存部分断面積

表4.3.2(c) ($C^{6+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(8s)\sim C^{5+}(9k)$ 状態、 $E = 0.062\sim 0.558$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.105	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558
$C^{5+}(8s)$	214.47	218.57	210.94	222.31	222.22	217.84	219.61	231.17	211.15	212.49	195.15	182.96	166.70
$C^{5+}(8p)$	81.29	82.43	82.37	82.39	89.76	93.84	94.90	98.12	101.40	99.92	107.49	93.36	100.97
$C^{5+}(8d)$	68.74	77.86	74.20	75.76	73.98	67.39	61.55	59.41	60.10	67.72	59.99	62.24	63.33
$C^{5+}(8f)$	40.65	37.83	36.18	37.73	39.33	42.64	42.43	43.39	43.60	49.34	57.06	62.23	68.47
$C^{5+}(8g)$	21.92	26.03	25.51	25.77	27.43	25.26	24.70	24.13	26.82	30.48	26.50	29.57	30.88
$C^{5+}(8h)$	12.99	18.87	17.02	17.64	17.47	15.41	15.41	17.20	18.63	16.77	17.49	16.29	17.26
$C^{5+}(8i)$	7.86	8.49	8.28	7.41	5.96	6.56	8.57	7.52	7.61	10.78	7.43	12.77	13.97
$C^{5+}(8j)$	3.02	3.72	3.92	3.77	3.25	3.12	4.35	5.41	5.67	3.43	7.82	8.38	6.84
$C^{5+}(9s)$	9.70	12.51	10.52	12.23	14.37	12.35	10.78	12.20	15.48	11.53	8.73	8.89	8.90
$C^{5+}(9p)$	20.83	13.53	14.75	13.89	10.12	8.91	9.86	10.02	11.48	11.42	6.92	8.76	7.51
$C^{5+}(9d)$	19.83	17.60	15.97	17.16	19.32	20.87	18.40	16.23	20.03	21.60	13.35	14.21	15.01
$C^{5+}(9f)$	15.73	17.29	15.98	15.58	15.48	13.70	14.09	17.19	18.50	18.77	18.24	20.65	21.77
$C^{5+}(9g)$	9.12	8.04	7.81	8.12	7.50	8.76	8.94	7.29	11.81	12.23	12.82	13.29	15.72
$C^{5+}(9h)$	8.26	8.28	8.60	9.48	8.11	6.11	8.92	9.61	8.68	8.90	13.22	12.24	11.27
$C^{5+}(9i)$	3.96	4.41	4.60	4.26	3.97	3.74	5.71	7.31	5.82	6.79	9.10	6.79	5.57
$C^{5+}(9j)$	2.48	2.89	4.23	4.10	3.23	3.11	5.37	6.38	3.86	4.96	8.75	5.18	5.29
$C^{5+}(9k)$	2.24	2.71	4.08	3.55	3.12	3.17	4.38	5.53	4.11	4.04	10.43	8.28	6.76
TOTAL	552.53	574.88	562.50	581.01	585.80	580.10	589.26	610.67	617.51	648.11	671.66	678.76	684.12

($\times 10^{-16}\text{cm}^2$)

4.3.2 nl 依存部分断面積

表4.3.2(d) ($C^{6+}+H(2s)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(8s)\sim C^{5+}(9k)$ 状態、 $E = 0.635\sim 6.200$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$C^{5+}(8s)$	160.13	154.31	143.55	113.48	75.84	58.98	54.57	49.47	46.75	43.40	41.83	39.97	36.66
$C^{5+}(8p)$	112.32	119.29	116.45	96.23	69.24	65.83	64.79	61.47	58.41	54.49	52.17	49.68	46.30
$C^{5+}(8d)$	69.83	76.33	80.58	85.86	94.28	92.21	91.13	91.18	90.33	90.45	90.46	90.05	87.77
$C^{5+}(8f)$	70.52	70.56	72.92	80.70	93.33	104.92	106.94	108.19	110.14	112.84	114.41	115.83	119.08
$C^{5+}(8g)$	31.35	32.79	35.68	42.52	57.24	66.33	67.16	69.88	71.89	74.40	76.16	78.90	83.76
$C^{5+}(8h)$	17.78	18.28	18.64	20.63	34.06	40.95	43.68	46.39	48.31	51.25	53.45	56.68	61.55
$C^{5+}(8i)$	14.26	14.25	14.51	14.87	18.19	22.58	22.26	22.25	22.76	23.81	24.66	26.02	28.42
$C^{5+}(8j)$	6.40	6.88	7.71	8.98	11.71	14.60	14.66	13.63	13.07	12.10	11.76	11.54	11.66
$C^{5+}(9s)$	8.36	8.34	9.42	11.82	5.71	4.35	4.20	4.51	4.57	4.79	4.84	4.81	4.73
$C^{5+}(9p)$	5.93	6.60	8.79	11.77	8.06	8.09	8.45	9.02	9.09	8.83	8.51	8.39	8.52
$C^{5+}(9d)$	15.70	15.85	15.44	12.43	8.34	9.30	10.90	11.32	11.37	11.08	10.78	10.30	10.33
$C^{5+}(9f)$	22.01	21.71	21.17	20.16	16.49	17.56	19.49	21.78	23.31	24.23	24.46	24.22	23.29
$C^{5+}(9g)$	18.23	18.16	16.24	12.90	9.15	10.26	11.32	12.39	13.30	13.73	14.04	14.91	15.31
$C^{5+}(9h)$	11.51	12.02	11.98	10.33	8.07	8.76	9.38	11.26	12.10	12.82	13.29	14.09	15.43
$C^{5+}(9i)$	5.28	5.68	6.33	8.02	8.30	5.92	5.74	6.24	6.68	7.59	8.10	8.85	10.08
$C^{5+}(9j)$	5.95	6.71	7.55	8.64	7.39	6.06	6.12	6.67	7.15	7.79	8.18	8.57	9.20
$C^{5+}(9k)$	5.79	5.75	6.50	7.77	7.27	6.94	7.29	8.05	8.36	8.59	9.06	9.36	10.10
TOTAL	706.67	724.21	730.90	728.78	719.74	733.93	737.33	740.50	742.62	744.74	745.46	744.79	742.54

($\times 10^{-16}\text{cm}^2$)

4.4 (C⁶⁺ + H(2p)) 衝突系の電荷移行断面積

4.4.1 *n* 依存部分断面積

*n*依存電荷移行断面積を図4.4.1に示し、数値を表4.4.1に示した。

- ① 全断面積は衝突エネルギーが大きくなるにつれわずかではあるが増加する
- ② (C⁶⁺ + H(2s)) 衝突系よりも断面積の値は小さく $E = 6.2 \text{ keV/amu}$ で $560 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ 程度
- ③ 計算した全衝突エネルギー領域で、C⁵⁺(*n*=8) 状態への電子捕獲が支配的であり、最も低い衝突エネルギーでこの状態の寄与は約80%
- ④ C⁵⁺(*n*=8) 状態の次に寄与するのは順に C⁵⁺(*n*=7)、C⁵⁺(*n*=9) 状態
- ⑤ C⁵⁺(*n*=6) 状態の部分断面積は衝突エネルギーが大きいくところでは多少寄与し $E = 6.2 \text{ keV/amu}$ で全電荷移行断面積の約12%になる

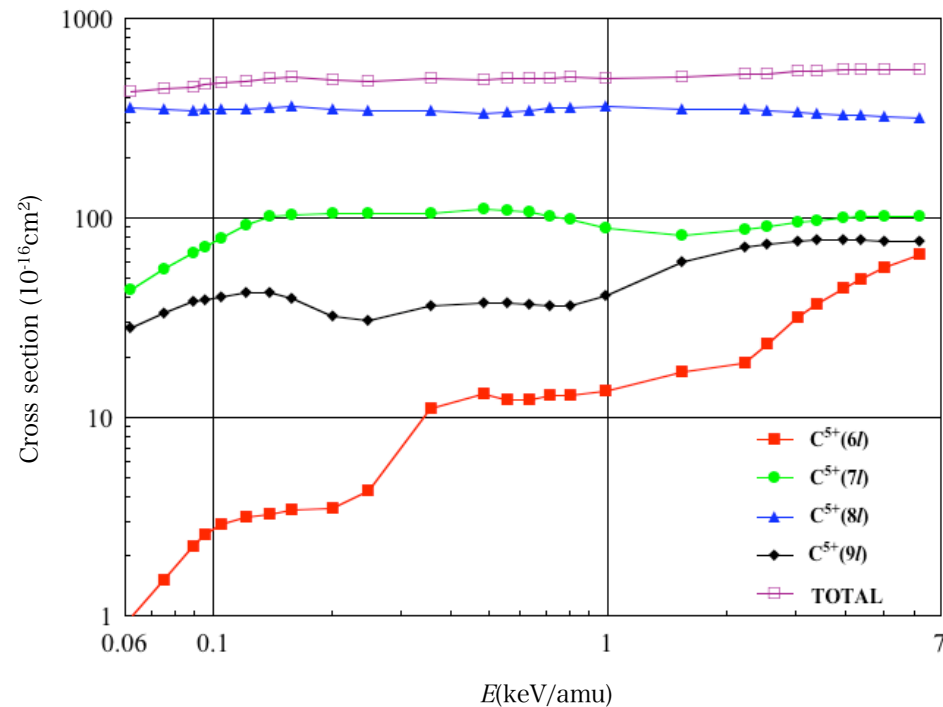


図4.4.1 (C⁶⁺+H(2p)) 衝突系の*n*依存電荷移行断面積

表4.4.1 (C⁶⁺ + H(2p)) 衝突系の n 依存電荷移行断面積

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.105	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558
C⁵⁺(6l)	0.97	1.50	2.22	2.56	2.89	3.12	3.23	3.39	3.45	4.27	11.07	13.06	12.12
C⁵⁺(7l)	43.39	55.04	67.01	71.32	79.39	92.05	100.85	103.98	106.04	104.67	104.65	110.08	108.63
C⁵⁺(8l)	358.70	353.17	344.67	353.05	353.68	349.53	358.00	360.36	353.77	343.68	346.01	336.16	340.21
C⁵⁺(9l)	27.96	33.29	37.71	38.87	40.21	42.12	42.12	39.50	32.15	30.42	36.10	37.50	37.16
TOTAL	431.01	442.99	451.62	465.80	476.16	486.83	504.19	507.23	495.41	483.04	497.83	496.80	498.12

$E(\text{keV/amu})$	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
C⁵⁺(6l)	12.23	12.75	12.93	13.47	16.77	18.51	23.25	31.40	36.91	44.50	49.31	55.81	65.11
C⁵⁺(7l)	106.56	102.28	97.92	88.99	81.35	86.69	90.68	95.19	97.36	99.69	100.89	101.87	102.56
C⁵⁺(8l)	347.27	354.35	359.56	361.82	353.62	348.66	344.50	339.34	335.40	329.78	326.59	322.30	316.66
C⁵⁺(9l)	36.49	35.96	36.17	40.97	60.09	70.94	73.53	76.28	77.19	77.62	77.43	76.73	75.57
TOTAL	502.55	505.35	506.58	505.25	511.83	524.80	531.96	542.21	546.86	551.59	554.21	556.70	559.90

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.4.2 nl 依存部分断面積

($C^{6+}+H(2p)$) 衝突系の nl 依存部分断面積を表4.4.2に示した

表4.4.2(a) ($C^{6+}+H(2p)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(6s)\sim C^{5+}(7i)$)状態、 $E = 0.062\sim 0.558$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$C^{5+}(6s)$	1.04	1.12	1.06	0.86	1.13	0.90	1.37	1.65	1.61	1.74	1.92	2.11	2.23
$C^{5+}(6p)$	1.68	1.90	1.96	1.64	1.84	2.33	2.92	3.64	4.07	4.52	4.75	5.07	5.95
$C^{5+}(6d)$	2.82	3.11	3.28	3.30	4.29	3.73	4.61	6.67	7.95	9.11	9.57	9.99	9.70
$C^{5+}(6f)$	2.91	2.89	3.03	4.04	4.67	5.36	6.52	7.62	8.23	9.53	10.72	12.80	16.36
$C^{5+}(6g)$	2.59	2.41	2.28	2.22	3.09	4.48	5.35	7.85	10.03	13.24	15.18	17.52	20.80
$C^{5+}(6h)$	1.19	1.32	1.33	1.41	1.75	1.72	2.47	3.98	5.02	6.36	7.18	8.30	10.07
$C^{5+}(7s)$	7.97	8.09	7.10	4.62	1.88	2.41	2.93	3.17	3.09	2.93	2.88	2.87	2.94
$C^{5+}(7p)$	12.99	10.41	8.42	6.96	10.14	10.14	11.17	12.28	12.29	11.80	11.54	11.24	11.19
$C^{5+}(7d)$	16.70	17.37	17.38	14.97	12.69	9.40	8.92	9.05	9.35	9.59	9.70	9.88	10.37
$C^{5+}(7f)$	18.67	21.07	22.63	22.66	19.62	19.80	19.11	17.85	17.66	18.51	19.48	20.75	21.82
$C^{5+}(7g)$	27.99	26.33	24.89	22.25	16.80	16.16	16.37	17.31	18.31	19.96	20.85	21.61	22.25
$C^{5+}(7h)$	17.42	15.42	14.08	12.64	11.01	14.17	15.51	17.08	17.96	19.07	19.55	20.13	20.95
$C^{5+}(7i)$	4.83	3.60	3.43	4.89	9.21	14.61	16.67	18.45	18.70	17.83	16.88	15.39	13.03

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.4.2 nl 依存部分断面積

表4.4.2(b) ($C^{6+}+H(2p)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(6s)\sim C^{5+}(7i)$)状態、 $E = 0.635\sim 6.200$ keV/amu)

E (keV/amu)	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$C^{5+}(6s)$	1.04	1.12	1.06	0.86	1.13	0.90	1.37	1.65	1.61	1.74	1.92	2.11	2.23
$C^{5+}(6p)$	1.68	1.90	1.96	1.64	1.84	2.33	2.92	3.64	4.07	4.52	4.75	5.07	5.95
$C^{5+}(6d)$	2.82	3.11	3.28	3.30	4.29	3.73	4.61	6.67	7.95	9.11	9.57	9.99	9.70
$C^{5+}(6f)$	2.91	2.89	3.03	4.04	4.67	5.36	6.52	7.62	8.23	9.53	10.72	12.80	16.36
$C^{5+}(6g)$	2.59	2.41	2.28	2.22	3.09	4.48	5.35	7.85	10.03	13.24	15.18	17.52	20.80
$C^{5+}(6h)$	1.19	1.32	1.33	1.41	1.75	1.72	2.47	3.98	5.02	6.36	7.18	8.30	10.07
$C^{5+}(7s)$	7.97	8.09	7.10	4.62	1.88	2.41	2.93	3.17	3.09	2.93	2.88	2.87	2.94
$C^{5+}(7p)$	12.99	10.41	8.42	6.96	10.14	10.14	11.17	12.28	12.29	11.80	11.54	11.24	11.19
$C^{5+}(7d)$	16.70	17.37	17.38	14.97	12.69	9.40	8.92	9.05	9.35	9.59	9.70	9.88	10.37
$C^{5+}(7f)$	18.67	21.07	22.63	22.66	19.62	19.80	19.11	17.85	17.66	18.51	19.48	20.75	21.82
$C^{5+}(7g)$	27.99	26.33	24.89	22.25	16.80	16.16	16.37	17.31	18.31	19.96	20.85	21.61	22.25
$C^{5+}(7h)$	17.42	15.42	14.08	12.64	11.01	14.17	15.51	17.08	17.96	19.07	19.55	20.13	20.95
$C^{5+}(7i)$	4.83	3.60	3.43	4.89	9.21	14.61	16.67	18.45	18.70	17.83	16.88	15.39	13.03

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.4.2 nl 依存部分断面積

表4.4.2(c) ($C^{6+}+H(2p)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(8s)\sim C^{5+}(9k)$ 状態、 $E = 0.062\sim 0.558$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.062	0.075	0.089	0.095	0.105	0.122	0.140	0.159	0.201	0.248	0.357	0.486	0.558
$C^{5+}(8s)$	34.97	40.59	40.77	42.04	42.96	45.65	50.56	47.66	44.80	43.09	50.23	46.70	47.75
$C^{5+}(8p)$	149.51	139.58	104.63	101.62	92.57	80.15	78.11	86.30	88.23	81.36	75.53	68.52	67.82
$C^{5+}(8d)$	96.38	82.95	88.03	88.53	86.38	84.70	87.66	84.36	83.67	85.93	82.45	75.15	71.01
$C^{5+}(8f)$	50.24	53.29	59.69	64.48	69.62	70.49	70.17	69.20	70.17	71.70	69.80	67.31	65.85
$C^{5+}(8g)$	16.85	22.29	31.74	35.02	38.92	42.22	42.17	41.62	40.13	40.73	41.94	37.72	38.40
$C^{5+}(8h)$	6.38	9.14	13.51	14.82	16.27	18.77	20.94	21.96	18.41	14.11	15.40	18.83	21.62
$C^{5+}(8i)$	2.73	3.54	4.65	4.91	5.28	5.93	6.55	7.39	6.50	4.69	7.07	13.19	15.91
$C^{5+}(8j)$	1.63	1.80	1.64	1.65	1.68	1.63	1.83	1.88	1.84	2.07	3.59	8.74	11.86
$C^{5+}(9s)$	1.93	3.00	4.55	5.41	6.11	6.91	6.79	5.81	4.76	4.24	3.38	3.40	4.12
$C^{5+}(9p)$	6.73	5.90	6.00	5.50	4.92	4.79	4.85	4.61	4.14	3.59	3.50	3.78	4.32
$C^{5+}(9d)$	5.20	6.86	7.32	7.39	7.59	7.96	8.15	8.12	5.71	5.03	6.19	5.33	4.45
$C^{5+}(9f)$	5.96	7.55	8.16	8.14	8.35	7.99	7.60	6.78	5.93	5.62	5.69	6.67	6.61
$C^{5+}(9g)$	3.46	4.04	5.12	5.50	6.07	6.56	6.72	6.37	4.87	4.57	6.34	5.86	5.21
$C^{5+}(9h)$	2.02	2.51	3.11	3.10	3.10	3.21	3.48	3.59	2.56	2.57	3.18	4.53	4.59
$C^{5+}(9i)$	1.29	1.77	1.61	1.69	1.94	2.15	1.99	1.88	2.02	2.37	3.05	3.03	3.04
$C^{5+}(9j)$	0.94	1.14	1.16	1.11	1.08	1.48	1.54	1.29	1.33	1.49	2.37	2.13	2.16
$C^{5+}(9k)$	0.43	0.51	0.66	1.03	1.04	1.07	0.99	1.04	0.85	0.95	2.41	2.77	2.66
TOTAL	431.01	442.99	451.62	465.80	476.16	486.83	504.19	507.23	495.41	483.04	497.83	496.80	498.12

($\times 10^{-16} \text{cm}^2$)

4.4.2 nl 依存部分断面積

表4.4.2(d) ($C^{6+}+H(2p)$)衝突系の nl 依存部分断面積 ($C^{5+}(8s)\sim C^{5+}(9k)$ 状態、 $E = 0.635\sim 6.200$ keV/amu)

$E(\text{keV/amu})$	0.635	0.717	0.804	0.992	1.550	2.232	2.540	3.038	3.395	3.968	4.375	5.022	6.200
$C^{5+}(8s)$	49.99	53.84	56.89	60.58	67.49	69.87	70.91	72.08	72.45	72.96	73.44	74.19	76.49
$C^{5+}(8p)$	66.53	62.16	56.67	49.09	44.68	40.27	38.41	37.71	37.67	37.26	36.87	36.15	34.51
$C^{5+}(8d)$	68.11	66.15	64.96	60.36	42.44	36.91	35.97	35.09	34.45	33.71	33.21	32.06	30.48
$C^{5+}(8f)$	64.40	63.23	62.20	58.29	51.19	49.67	48.75	47.28	46.04	44.05	42.95	41.60	40.00
$C^{5+}(8g)$	40.03	42.17	44.17	46.26	43.49	42.49	41.92	40.88	39.83	37.78	36.40	34.93	32.89
$C^{5+}(8h)$	25.11	28.80	32.05	36.22	36.88	34.86	34.20	33.15	32.45	31.93	31.52	31.08	29.80
$C^{5+}(8i)$	18.36	20.63	22.94	27.70	35.58	36.73	36.10	35.52	35.35	35.07	34.99	34.93	34.98
$C^{5+}(8j)$	14.73	17.38	19.68	23.32	31.88	37.85	38.25	37.63	37.14	37.02	37.21	37.37	37.51
$C^{5+}(9s)$	4.67	5.08	5.08	4.38	5.81	6.05	5.93	5.43	5.15	4.91	4.91	5.08	5.55
$C^{5+}(9p)$	4.36	4.20	4.16	5.46	9.98	10.51	10.14	10.17	10.31	10.55	10.63	10.60	10.53
$C^{5+}(9d)$	3.91	3.85	4.13	6.15	8.69	9.85	10.67	11.43	11.47	10.91	10.39	9.55	8.43
$C^{5+}(9f)$	6.42	6.22	6.26	6.74	8.98	10.87	11.13	11.55	11.82	12.11	12.14	12.06	11.94
$C^{5+}(9g)$	4.70	4.33	4.22	4.96	7.33	10.01	10.64	10.52	10.03	9.34	9.05	8.85	9.25
$C^{5+}(9h)$	4.28	3.82	3.50	3.34	6.21	7.04	7.19	7.78	8.23	8.80	9.02	9.01	8.71
$C^{5+}(9i)$	3.08	3.17	3.35	3.92	6.30	7.71	7.93	7.93	7.87	7.79	7.63	7.19	6.16
$C^{5+}(9j)$	2.27	2.27	2.22	2.08	2.66	3.50	3.65	3.82	3.91	4.09	4.13	4.07	4.11
$C^{5+}(9k)$	2.80	3.03	3.25	3.94	4.11	5.40	6.25	7.64	8.40	9.11	9.53	10.33	10.90
TOTAL	502.55	505.35	506.58	505.25	511.83	524.80	531.96	542.21	546.86	551.59	554.21	556.70	559.90

($\times 10^{-16}\text{cm}^2$)

研究成果概要とこれからの計画

平成16年度からこれまで3年間

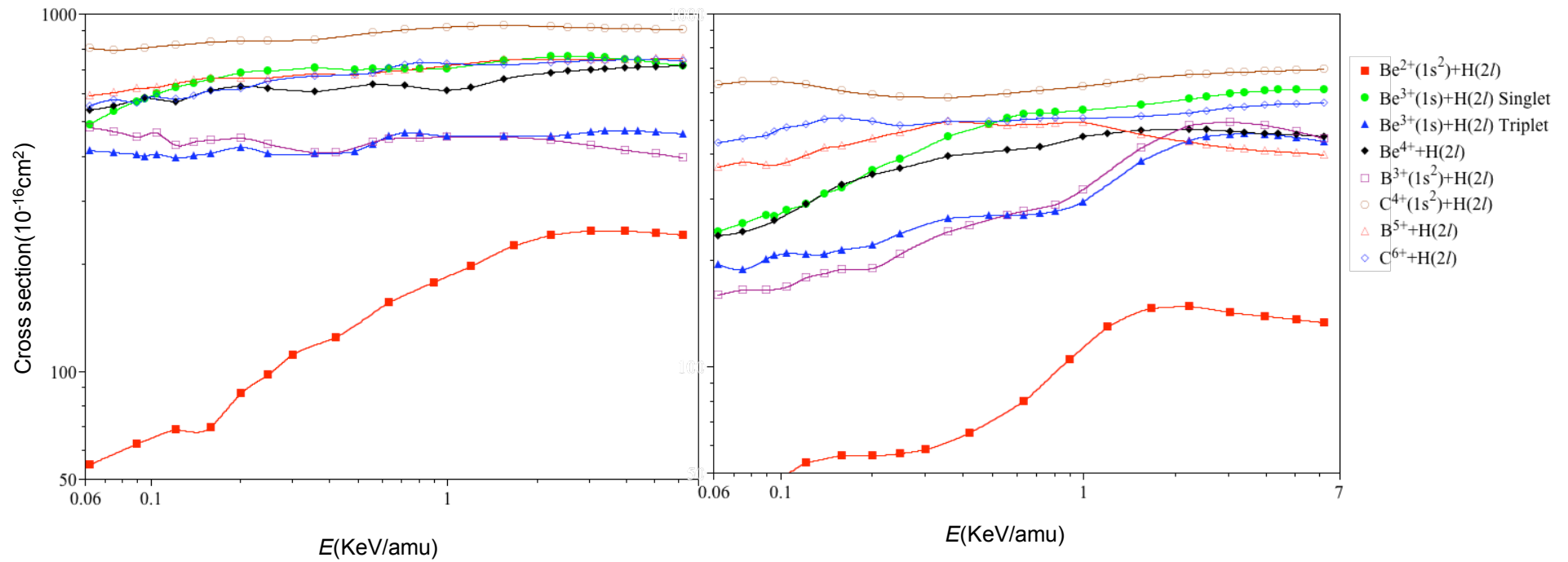
- (1) $(\text{Be}^{2+}(1s^2) + \text{H}^*(2l))$ 衝突系
- (2) $(\text{Be}^{3+}(1s) + \text{H}^*(2l))$ 衝突系
- (3) $(\text{Be}^{4+} + \text{H}^*(2l))$ 衝突系
- (4) $(\text{B}^{3+} + \text{H}^*(2l))$ 衝突系
- (5) $(\text{C}^{4+}(1s^2) + \text{H}^*(2l))$ 衝突系

に対して状態指定電荷移行断面積の計算を行った。今年度はこれらに加え

- (6) $(\text{B}^{5+} + \text{H}^*(2l))$ 衝突系
- (7) $(\text{C}^{6+} + \text{H}^*(2l))$ 衝突系

に対してダイバータープラズマ領域での状態指定電荷移行断面積を求め、「軽元素イオンと励起水素原子間の電荷移行断面積の計算」のまとめとした。

計算結果のまとめ



($A^{Z+}+\text{H}(2s)$)衝突系の全断面積の比較

($A^{Z+}+\text{H}(2p)$)衝突系の全断面積の比較

表5.3 標的水素原子が基底状態にある場合と $n = 2$ にある場合の電荷移行断面積の比較：入射イオンが $C^{4+}(1s^2)$ の場合

水素原子の状態	断面積/ 10^{-16}cm^2
H(1s)	~ 30
H(2s)	~ 950

• Macek-Ovchinnikov モデルによる予想値

$$\sigma_{H(2s)} \sim \sigma_{H(1s)} \times 2^5 = 30 \times 32 = 960$$

水素原子が励起状態の場合、何故電荷移行断面積が大きな値を持つのか

- 主量子数 n の場合の電子の軌道半径は $1s$ の場合に比べて n^2 倍。
 $n=2$ 場合 \rightarrow 4倍。
- 多価イオンが $H(n=2)$ 近づくと、衝突対の間の距離が4倍の所で電子捕獲が起こる。
- 4倍の距離で遷移が起こると断面積は $4^2 = 16$ 倍大きくなる。
 $\rightarrow n^4$ 依存性
- 電子と原子核の間の結合エネルギーが小さくなるなど他のさまざまな因子

これからの計画

(a) 実際の核融合炉内のプラズマ状態により近い、弱く相互作用したプラズマ中での衝突過程を扱う研究

Charge exchange and ionization in hydrogen atom-fully stripped ion collisions in Debye plasmas

H. Zhang¹, J. G. Wang¹, B. He¹, Y.B. Qiu¹, and R. K. Janev²

¹ Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, P. O. Box 8009, Beijing 100088, P. R. China

² Macedonian Academy of Sciences and Arts, P. O. Box 428, 1000 Skopje, Macedonia

Abstract

The processes of charge exchange and ionization in collisions of ground state hydrogen atom with fully stripped ions in a weakly coupled plasma are studied by the classical trajectory Monte Carlo method in the collision energy range 10–900keV/amu. The inter-particle interactions are described by the Debye-Hückel model with inclusion of dynamical effects associated with the projectile velocity. The microcanonical distribution of initial state electronic coordinates and momenta has been determined by inclusion of plasma screening effects. The cross section dependences on plasma parameters and ion charge and velocity are investigated. It is shown that plasma effects on charge exchange and ionization cross sections are significant and particularly pronounced at low collision velocities. The results of systematic cross section calculations for different values of Debye screening length (in the range 1 – 50 a_0) and ion charges (in the range 1 – 14) are presented.

Classical Trajectory Monte Carlo 法（高エネルギー近似であり、ダーバータープラズマのような低エネルギー領域では不適切）

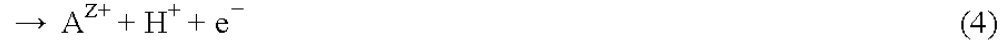
→ デバイポテンシャルの形でプラズマの影響を考慮し、分子基底緊密結合法を用いて電荷交換断面積を計算

years (see, e.g., Refs.5-7, and references therein). The major collective plasma effect on the interaction between charged particles in a plasma is manifested as screening, which in the case of an ideal, Coulomb-uncoupled plasma is represented by the Debye-Hückel length

$$r_d = \left(\frac{k_B T_e}{4\pi e^2 n_e} \right)^{1/2} \quad (1)$$

where e is the unit electric charge, k_B is the Boltzmann constant, and n_e and T_e are the plasma electron

In the present work we shall study the charge exchange and ionization processes of a fully stripped ion A^{Z+} colliding with a hydrogen atom in its ground state



in a background plasma that satisfies the conditions $r_d \geq 1$, $\Gamma \leq 1$ and $\gamma \ll 1$. Expressing r_d in units of the Bohr radius a_0 of ground state hydrogen atom ($a_0 = 0.529 \times 10^{-8} \text{cm}$), T_e in keV, and n_e in 10^{24}cm^{-3} , the above conditions take the form

$$r_d = 4.444 \left(\frac{T_e(\text{keV})}{n_e(10^{24} \text{cm}^{-3})} \right)^{1/2} a_0 \geq 1 \quad (5a)$$

The collective plasma effects on the Coulomb interaction between two charged particles, represented by the Debye screening radius (1), describe only the static plasma screening of this interaction. If an ion moves in a plasma with velocity V comparable or larger than the thermal velocity V_{th} of plasma electrons, its interaction with another charged particle acquires an additional (“dynamical”) screening (see, e.g., Ref. 13). The Debye length (1) is then modified and becomes [13]

$$r_0 = r_d \left(1 + \frac{V^2}{V_{th}^2} \right)^{1/2} \quad (6)$$

or, in the energy units

$$r_0 = r_d \left(1 + 5.54 \times 10^{-4} \frac{E(\text{keV}/\text{amu})}{T_e(\text{keV})} \right)^{1/2} \quad (7)$$

where E is the ion kinetic energy (per nucleon), and r_d is the static Debye length. Dynamical plasma interaction V_{ep} between H^+ and e (since their relative velocity is always small). With these remarks, and denoting by r_{eZ} , r_{ep} and r_{pZ} the mutual distances in the (A^{Z+}, H^+, e) system (p stands for H^+), the plasma screened interactions V_{eZ} , V_{ep} and V_{pZ} have the form

$$V_{eZ} = -\frac{Z}{r_{eZ}} \exp\left(-\frac{r_{eZ}}{r_d}\right) \quad (8)$$

$$V_{ep} = -\frac{1}{r_{ep}} \exp\left(-\frac{r_{ep}}{r_0}\right) \quad (9)$$

$$V_{pZ} = \frac{Z}{r_{pZ}} \exp\left(-\frac{r_{pZ}}{r_0}\right) \quad (10)$$

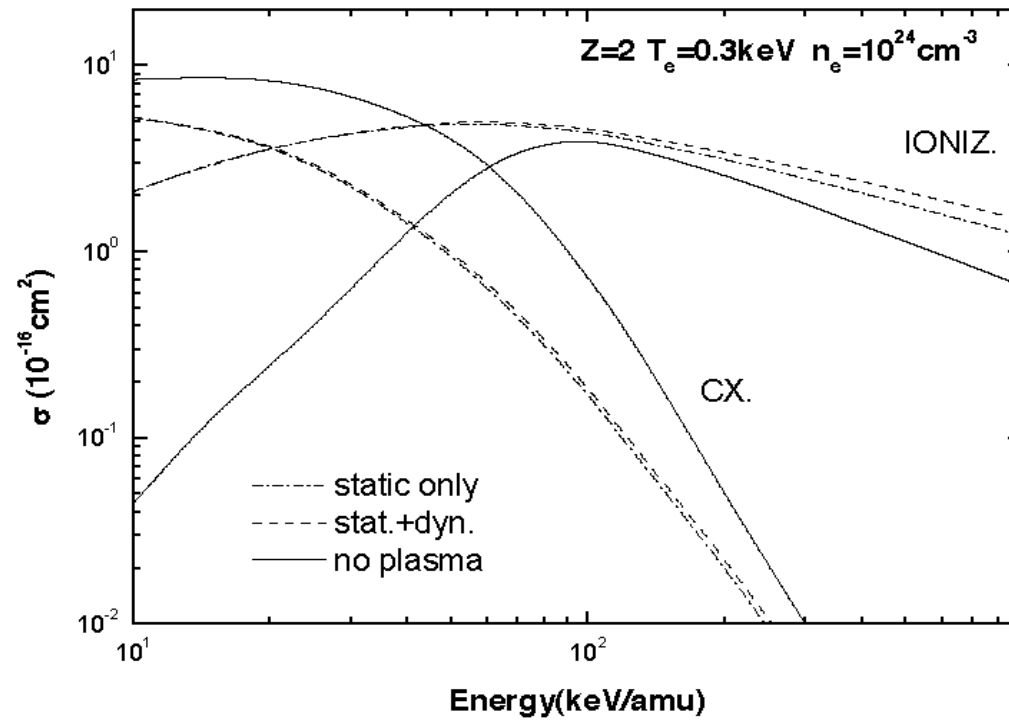


Fig.2. Charge exchange (CX) and ionization (IONIZ) cross sections for the $A^{Z+} + H(1s)$ collision with $Z=2$ in a plasma with parameters $T_e=0.3$ keV and $n_e=10^{24}$ cm^{-3} . Solid lines: no plasma case; dash-dotted lines: static screening only; dashed lines: both static and dynamic screenings included.

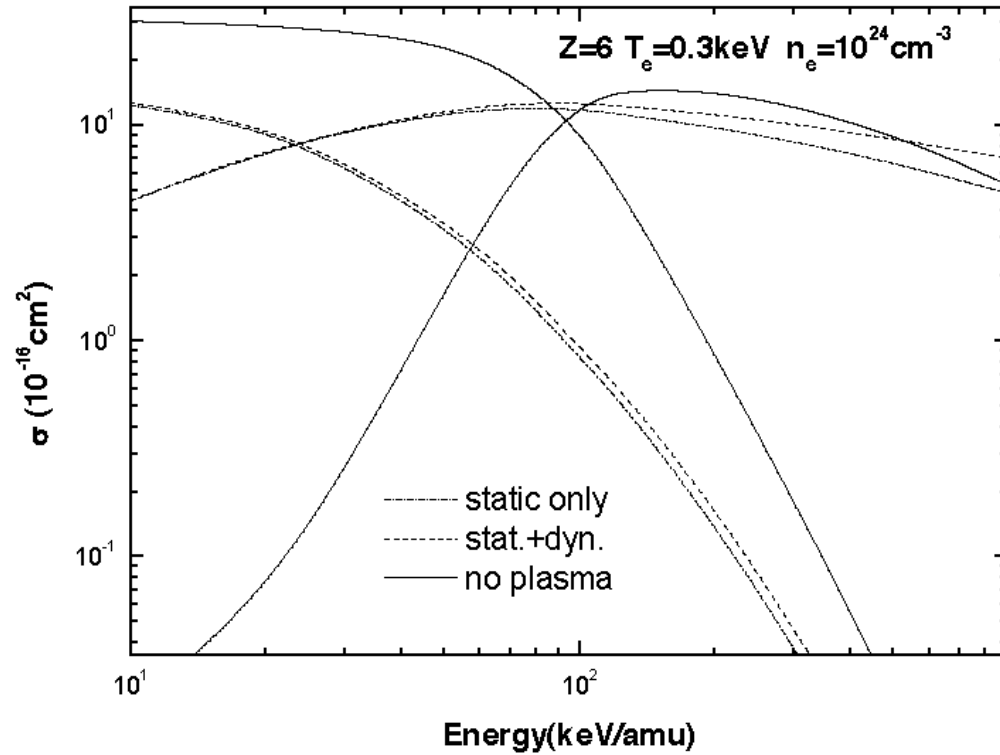


Fig.3. Charge exchange (CX) and ionization (IONIZ) cross sections for the $A^{Z+} + H(1s)$ collision with $Z=6$ in a plasma with parameters $T_e=0.3$ keV and $n_e=10^{24}$ cm^{-3} . Solid lines: no plasma case; dash-dotted lines: static screening only; dashed lines: both static and dynamic screenings included.

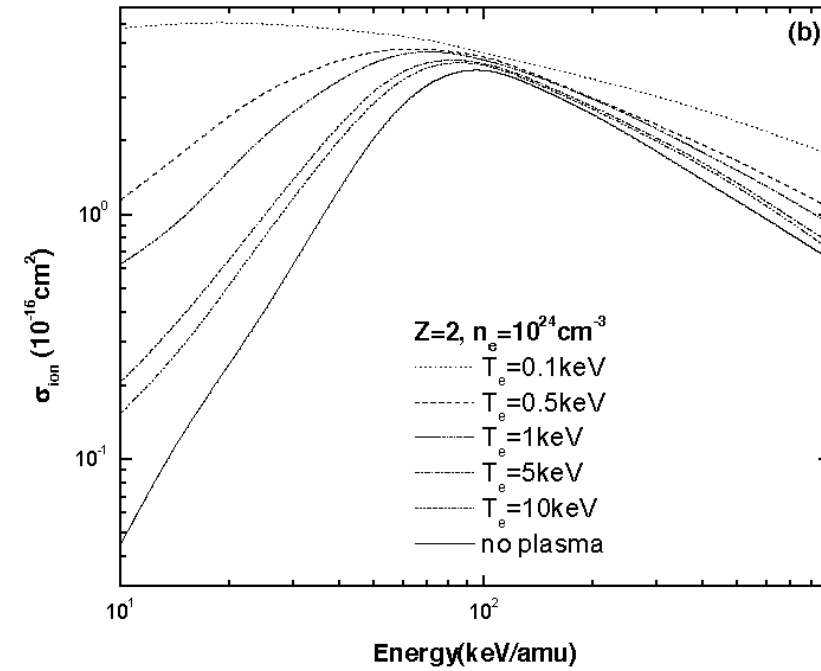
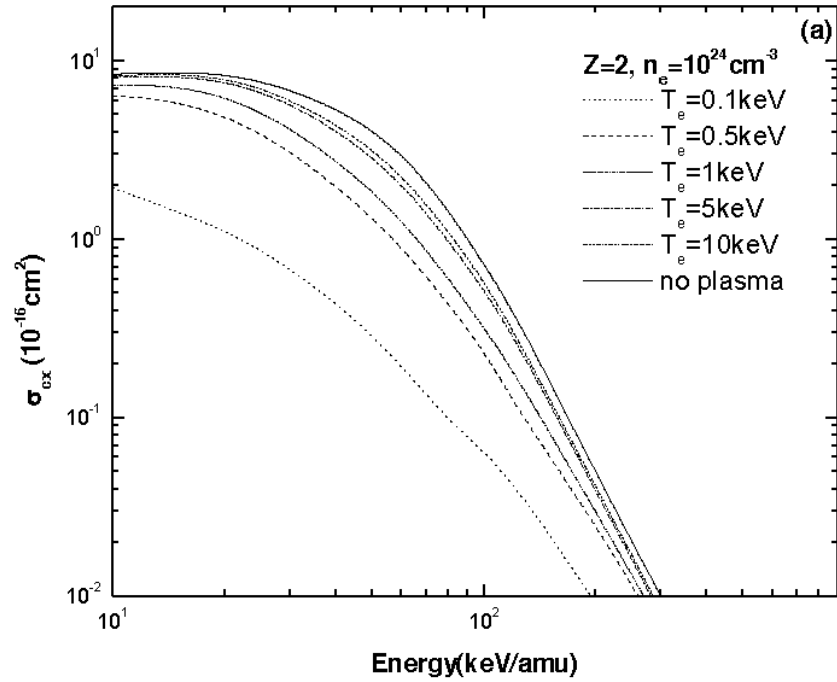


Fig.4. Charge exchange (panel (a)) and ionization (panel (b)) cross sections for $A^{Z+} + H(1s)$ collision with $Z=2$ in a plasma with density $n_e=10^{24} \text{ cm}^{-3}$ at several temperatures T_e . The solid lines are for the no plasma case.

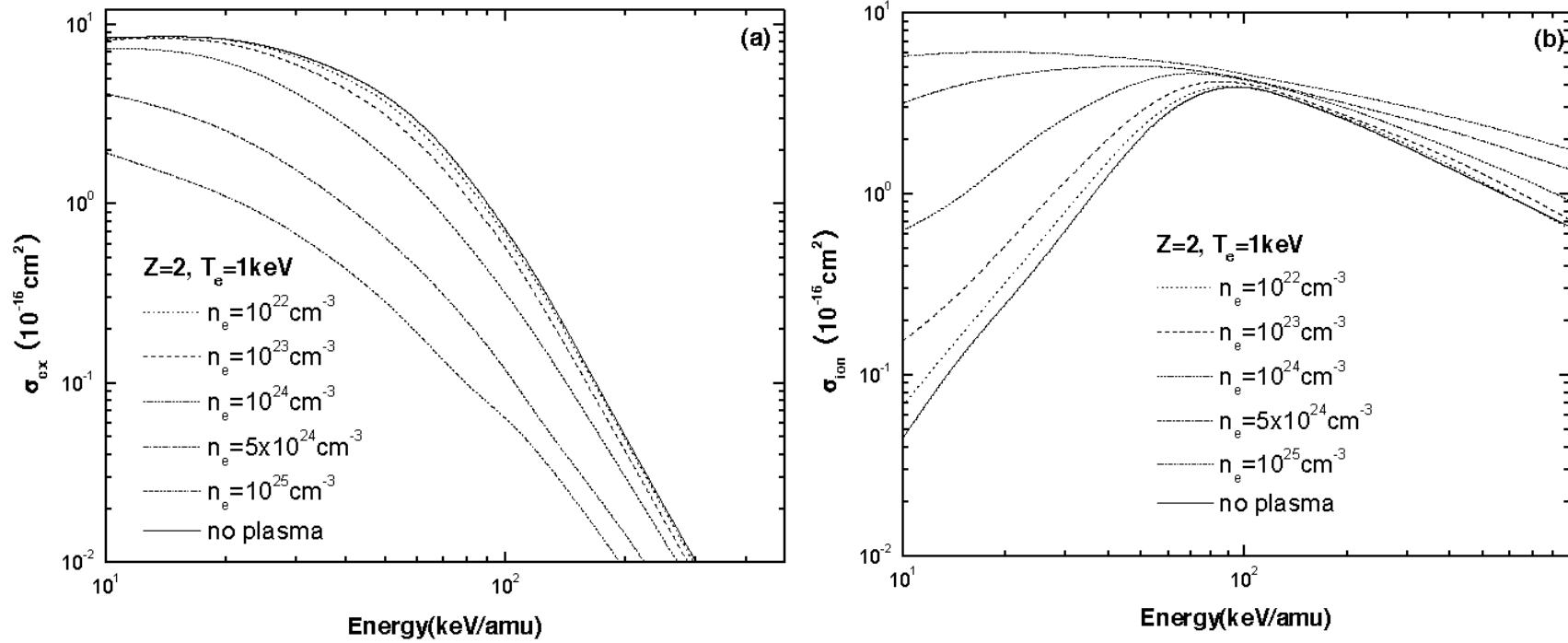


Fig.5. Charge exchange (panel (a)) and ionization (panel (b)) cross sections for $A^{Z+} + H(1s)$ collision with $Z=2$ in a plasma with temperature $T_e=1 \text{ keV}$ at several densities n_e . The solid lines are for the no plasma case.

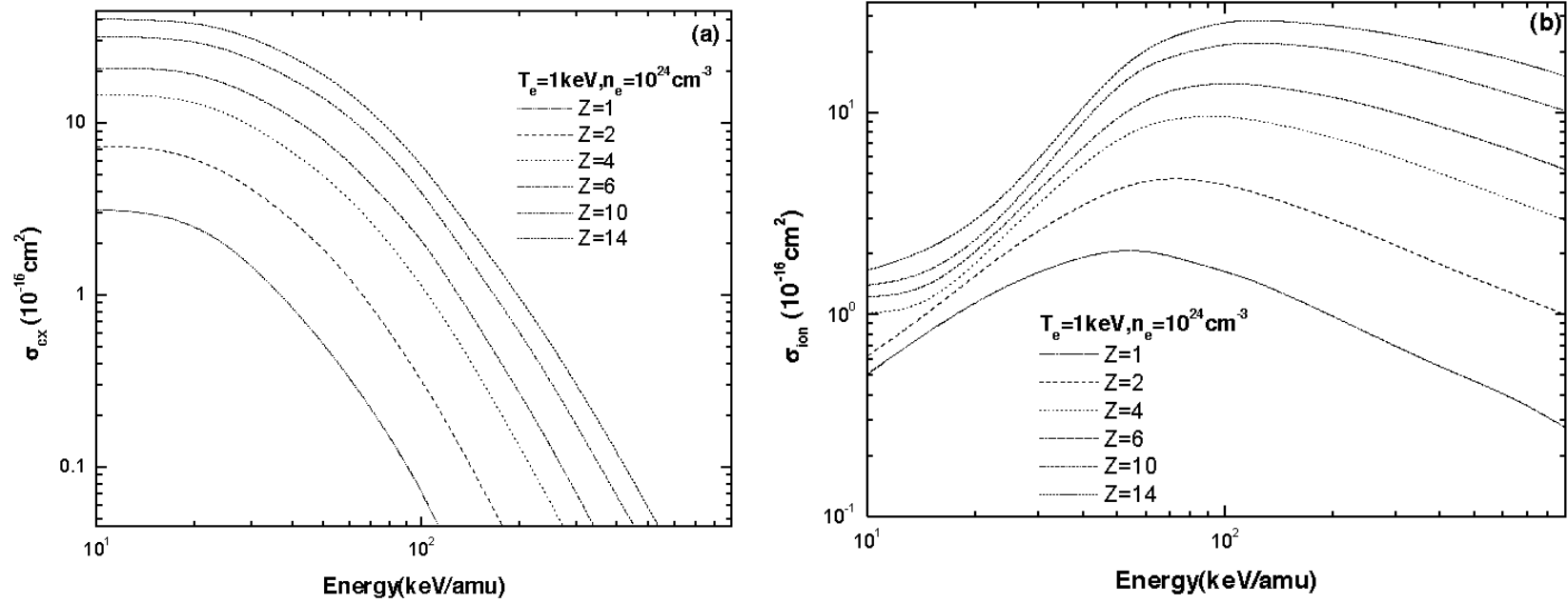


Fig.6. Charge exchange (panel (a)) and ionization (panel (b)) cross sections for the $A^{Z+} + H(1s)$ collision in a plasma with parameters $T_e=1 \text{ keV}$ and $n_e=10^{24} \text{ cm}^{-3}$ for different ion charges Z .

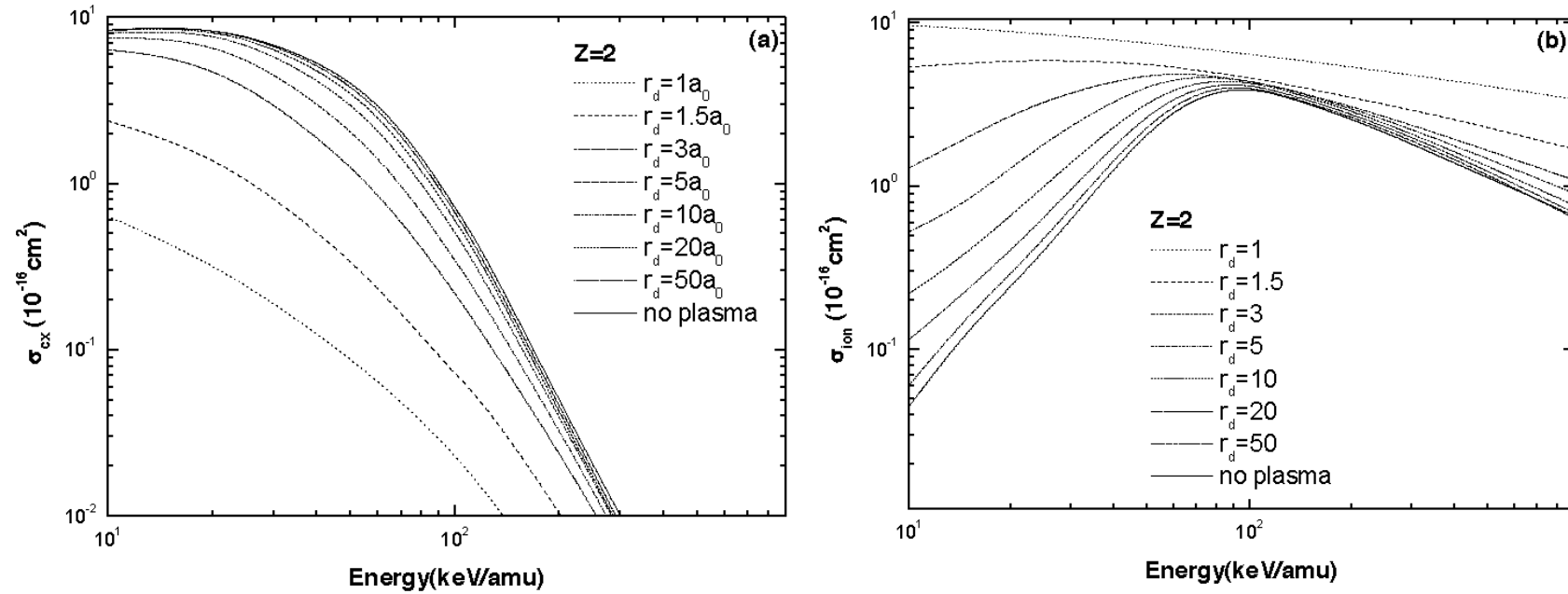


Fig. 7. Charge exchange (panel (a)) and ionization (panel (b)) cross sections for the $A^{Z+} + H(1s)$ collision with $Z=2$ in plasmas with different Debye lengths. The solid lines are for the no plasma case.

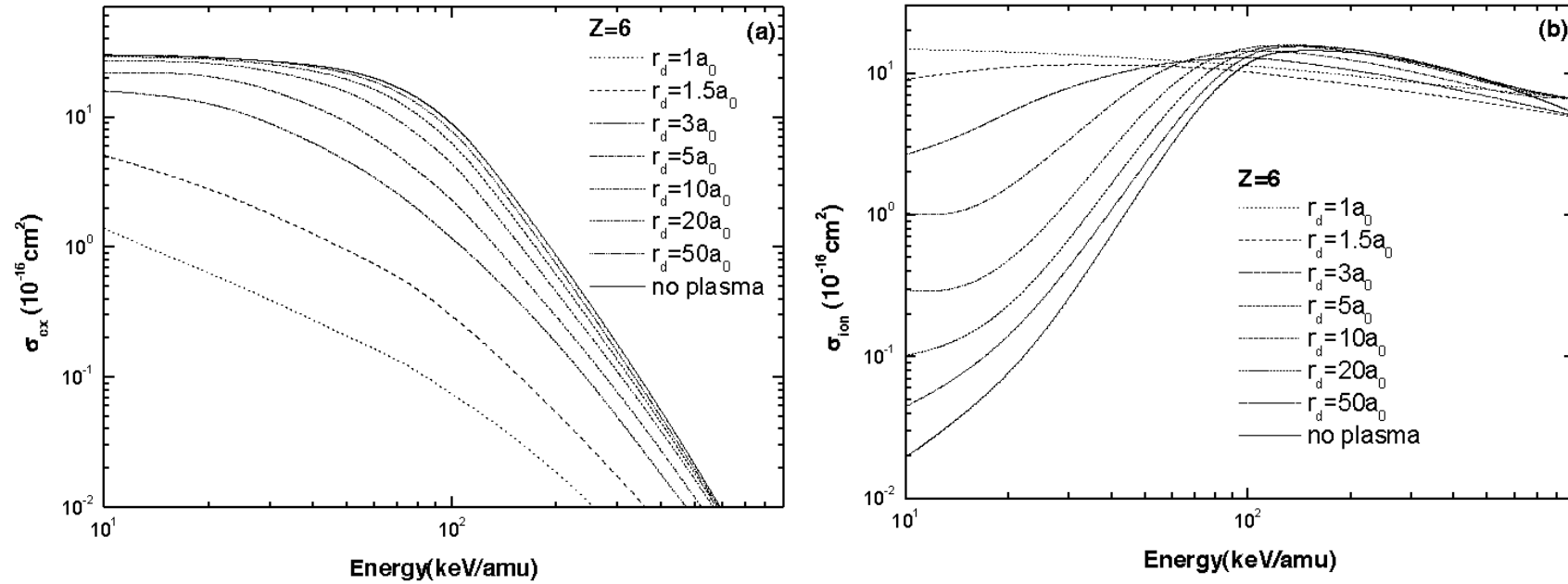


Fig. 8. Charge exchange (panel (a)) and ionization (panel (b)) cross sections for the $A^{Z+} + H(1s)$ collision with $Z=6$ in plasmas with different Debye lengths. The solid lines are for the no plasma case.

これからの計画

(b) 理論的には有限な領域内で衝突過程を扱うが、実際の衝突系、入射イオンが多価イオンで標的が励起水素原子の場合、シュタルクミキシングが起こっている。

炉心プラズマ，ダイバータープラズマでは衝突対のまわりに他の粒子も存在し，更に状況は複雑

このシュタルクミキシングの問題を解決する方法を開発

→ 多価イオン-励起水素原子の場合に適用

多価イオンが2s,2p状態にある水素原子と衝突した場合とシュタルクミキシングした状態にある水素原子と衝突した場合の断面積の比較

最初の適用例：3重項 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}^*(2s)$), ($\text{Be}^{3+} + \text{H}^*(2p)$)衝突系

(Be³⁺ + H*(2s)) 衝突系

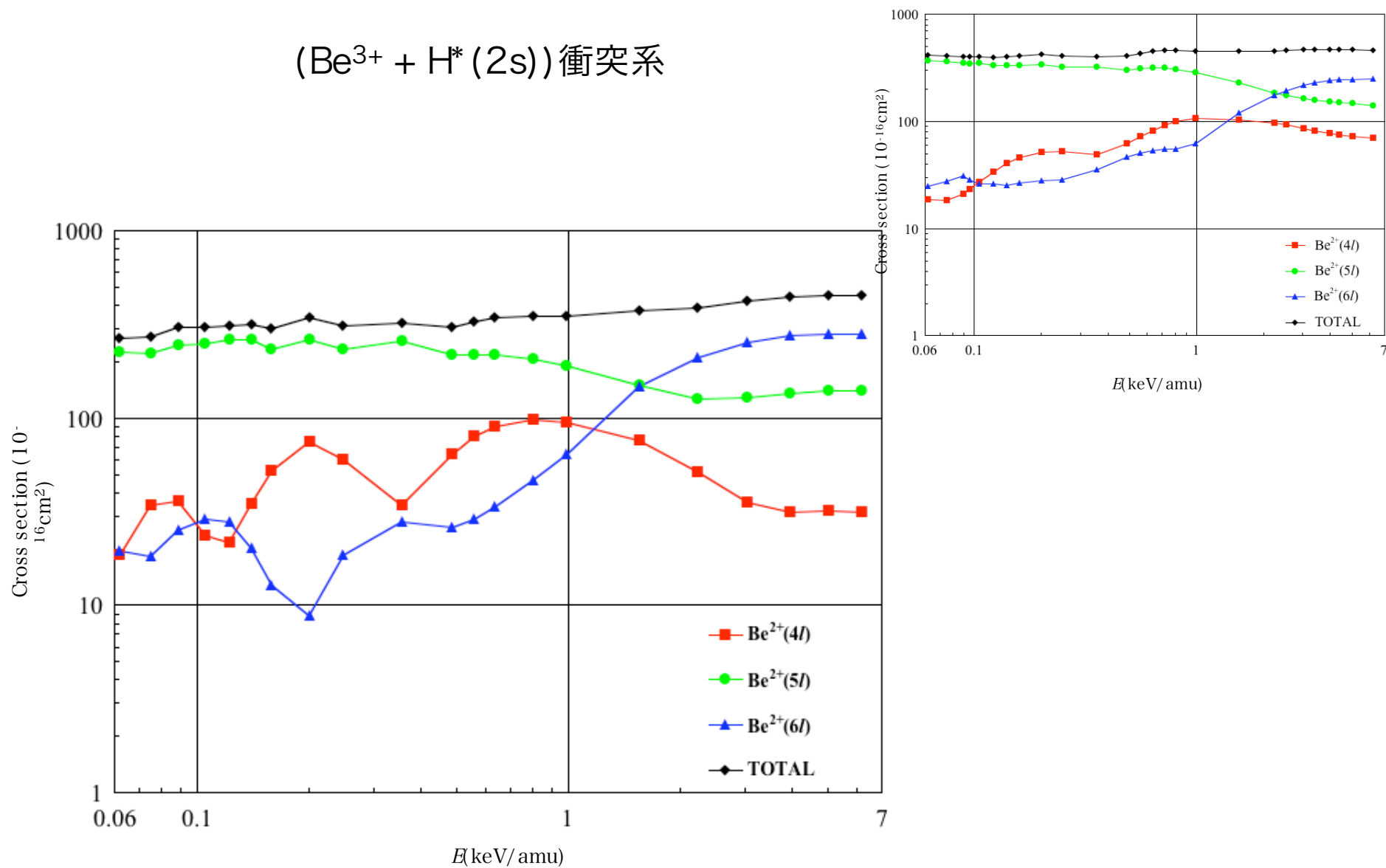


図7.1 H(2s)を始状態とした時の n 依存部分断面積 (45状態を使用した場合、 $R_{\text{max}} = \infty$)

(Be³⁺ + H* (2p)) 衝突系

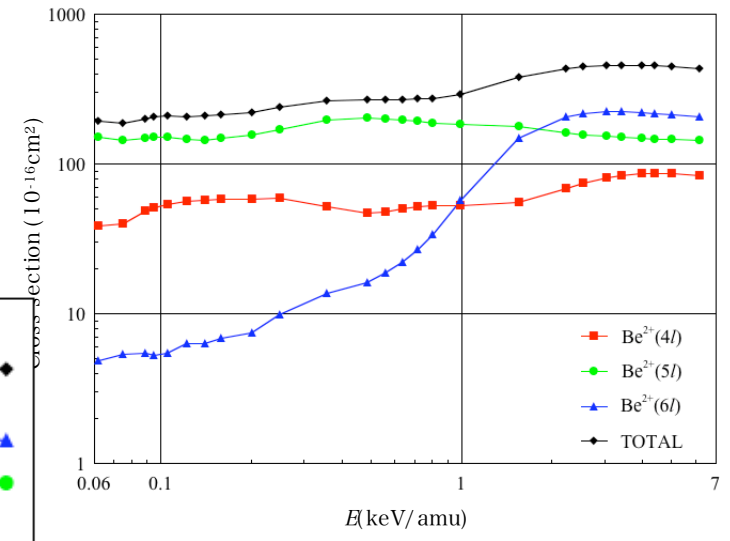
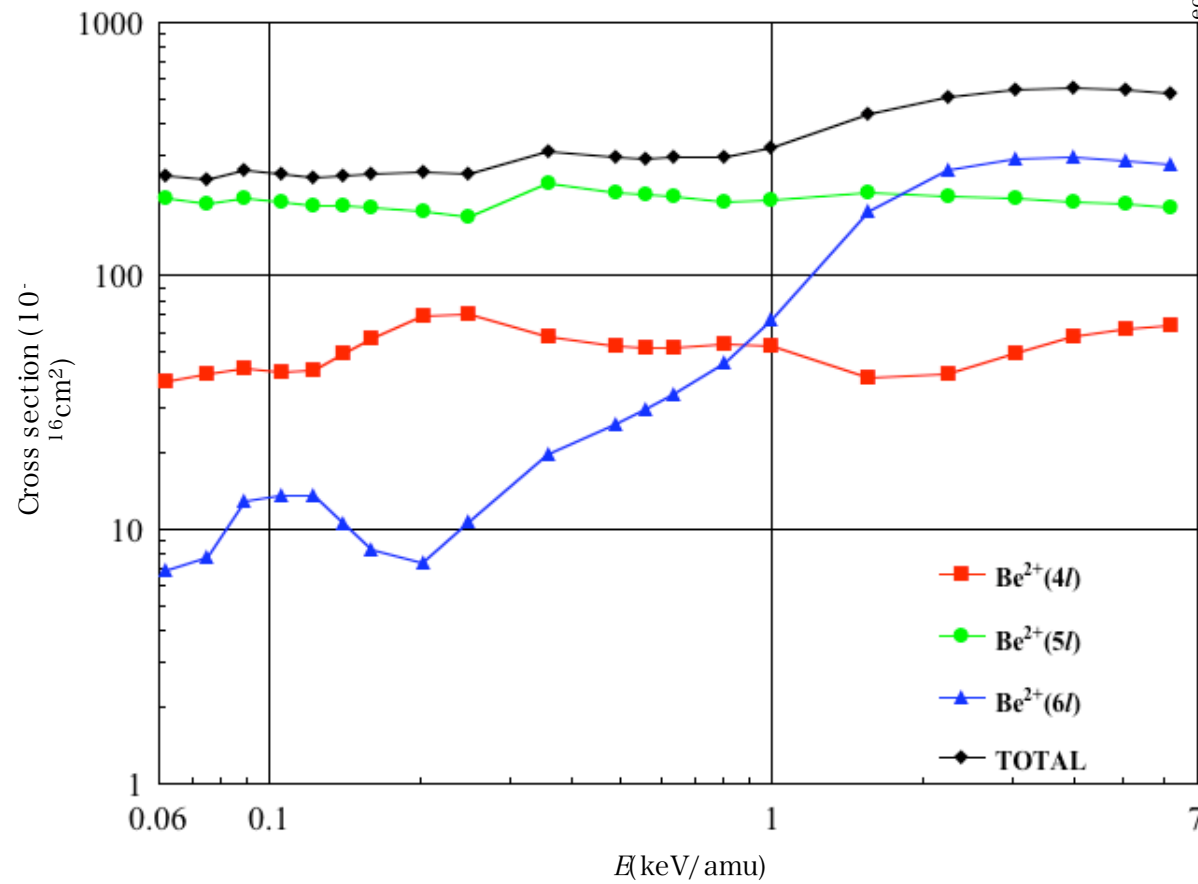


図7.2 H(2p)を始状態とした時の n 依存部分断面積 (45状態を使用した場合、 $R_{\max}=\infty$)

(c) (多価) イオン- (多価) イオン衝突に関する調査

平成19年度の「原子分子データ活動に関する研究会」で仲野氏からのコメント

「プラズマ中でのイオン-イオン衝突のデータは少ない」

(d) 炭素イオン C^{q+} ($q = 1 - 6$), 窒素イオン N^{q+} ($q = 1 - 7$), 酸素イオン O^{q+} ($q = 1 - 8$) による水素分子からの状態指定電荷移行断面積の調査

(e) 中空原子およびイオン (多電子励起状態にある原子およびイオン) の分光学的データに関する調査