



ベリリウム多価イオンと励起状態水素 原子の電荷移行断面積

新潟大学 理学部 島倉紀之

平成20年度受託研究

- (1) 委託研究題目：原子・分子・イオンの衝突に関する調査(ベリリウム多価イオンと励起状態水素原子の電荷移行断面積)
- (2) 委託研究の目的：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) 研究委託の内容：ベリリウム多価イオン(Be^{2+} 、 Be^{3+})と2sおよび2p状態にある水素原子の低衝突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により計算する。

受託研究報告書の目次

目次

1	緒言	1
2	計算方法	6
2.1	電子状態の計算	6
2.2	l -依存ガウス型擬ポテンシャル	6
2.3	結合項の計算	6
2.4	遷移確率の計算	8
2.5	断面積の計算	8
3	H(2s)状態とH(2p)状態がシュタルクミキシングした状態から純粋なH(2s)、H(2p)状態への変換	9
4	($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程	11
4.1	電子状態の計算	11
4.2	ポテンシャルエネルギー	13
4.3	電荷移行断面積	13
5	三重項($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程	40
5.1	電子状態の計算	40
5.2	ポテンシャルエネルギー	42
5.3	電荷移行断面積	46
6	一重項($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程	63
6.1	電子状態の計算	63
6.2	ポテンシャルエネルギー	63
6.3	電荷移行断面積	67
7	研究成果概要とこれからの計画	89
	謝辞	

1 緒言

ダイバータープラズマ中のイオン-原子間の電荷移行断面積の評価は、放射冷却の研究やプラズマ分光診断において重要である。プラズマ中ではイオン、原子または分子が励起状態にある可能性があるにもかかわらず、標的水素原子が励起状態にある場合に対しては、我々が研究を始めるまでは信頼できる電荷移行断面積のデータが全くないという状況であった。

我々はこれまでにヘリウム、ベリリウム、ホウ素、炭素、窒素および酸素の多価イオンと水素原子、ヘリウム原子の間で起こる電荷移行過程に対して状態指定電荷交換断面積の計算を行ってきた。我々が断面積を得るために用いる「分子基底に基づき緊密結合方程式を解く」方法は、核融合分野、特にダイバータープラズマ部分で起こっている低、中間衝突エネルギー領域で有効な方法である。

昨年度まで ($\text{Be}^{2+}(1s^2)$, $\text{Be}^{3+}(1s)$, Be^{4+} , $\text{B}^{3+}(1s^2)$, B^{5+} , $\text{C}^{4+}(1s^2)$, $\text{C}^{6+} + \text{H}^*(2l)$) 衝突系に対して、標的水素原子が励起状態 ($2s$, $2p$) にある場合の状態指定電荷移行断面積を求めてきた。これらの結果は昨年度の受託研究「軽元素イオンと励起水素原子の間の電荷移行断面積の計算」で最終的なまとめを行った。

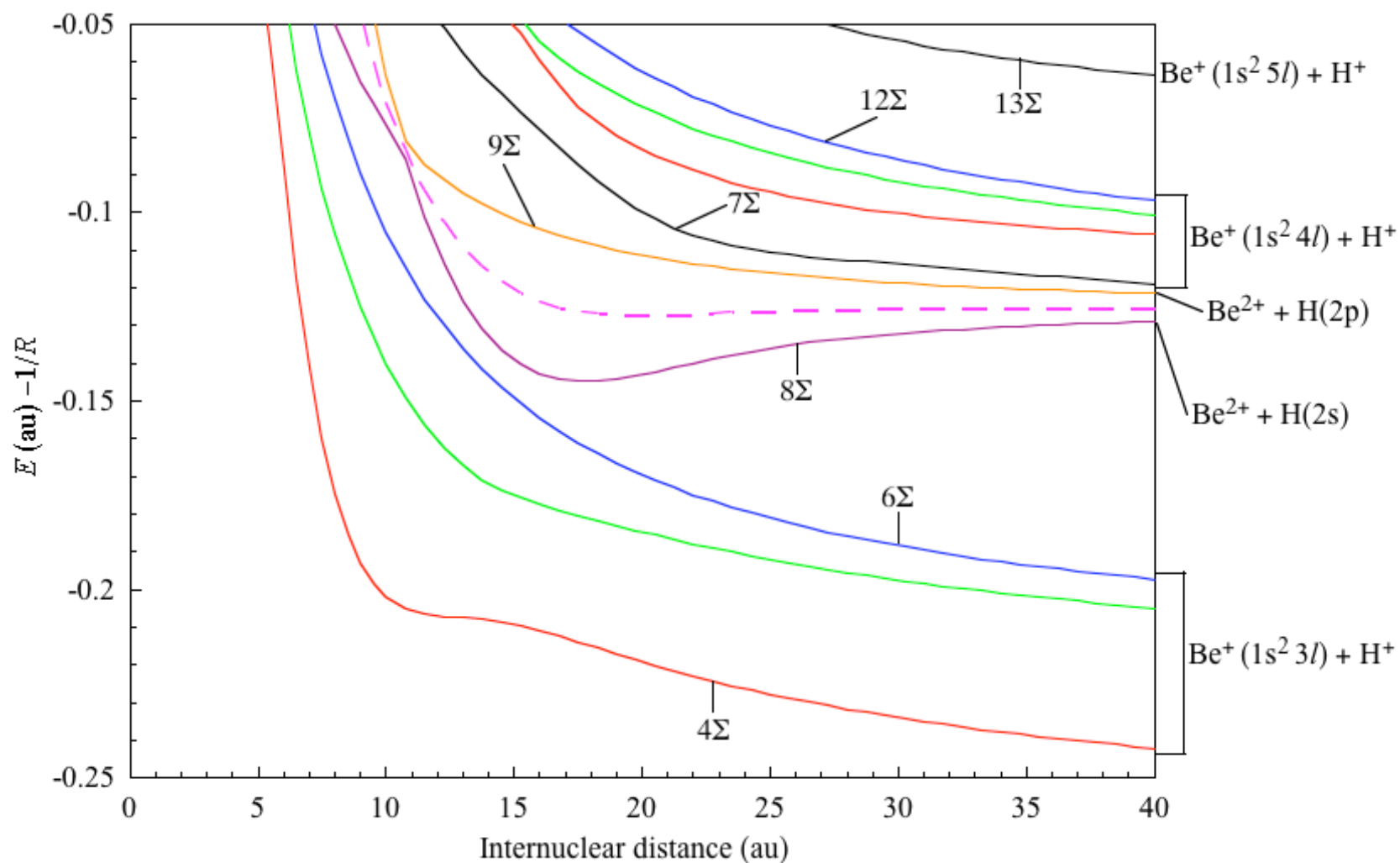
最も正確な電荷移行断面積を得る理論的方法は緊密結合方程式を解く方法である。ところが標的が励起状態にあると、衝突対がどんなに離れた距離から緊密結合方程式を解き始めても有限な核間距離から解き始めることにかわりは

ないので不十分である。これは入射イオンが多価イオンの場合、衝突対が有限の距離にあると多価イオンが**標的水素原子にシュタルクミキシング**を引き起こすからである。実際の炉心プラズマ、ダイバータープラズマでは衝突対の周囲に他の粒子も存在し、状況は複雑になる。**これまで標的水素原子が 2s 状態であるとか 2p 状態であるとか言っていたのは、実はシュタルクミキシングしている状態であった。**実際のプラズマ中では多価イオンも水素原子も他の粒子に取り囲まれているため、始状態として純粋な 2s, 2p 状態を考えた方が良いのか、それらがシュタルクミキシングしている状態を考えた方がよいのか、それほどはつきりはしていない。しかし、少なくとも**標的が純粋な 2s, 2p 状態である場合の電荷移行断面積の値を求めて、これまで得られている値と比較検討する必要がある**と思われる。この研究を遂行するため、我々はまず緊密結合方程式を有限な核間距離から解きながら、 $R=\infty$ から解いたと同じ結果が得られる方法を開発した。今年度の受託研究ではこの方法を用いてベリリウムの多価イオン-励起状態にある水素原子の電荷交換断面積を計算し、これまでの計算結果と比較、検討した。

今年度計算を行った衝突系： **$\text{Be}^{2+}(1s^2)+\text{H}(2l)$** , 3重項および1重項 **$\text{Be}^{3+}(1s)+\text{H}(2l)$**

標的水素原子が励起状態(2s,2p)にある場合に,初期状態としてシュタルクミキシングした状態、ミキシングしていない状態を考える方法の比較

(例) ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2l)$)衝突系



2 計算方法

2.1 電子状態の計算

基底関数：スレーター軌道

$$\psi_{nlm} = \sum R_{nl}(\xi, r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left\{ \sum_i c_i r^{n_i-1} \exp(-\xi_i r) \right\} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{H}_{el} \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) = \varepsilon_i(R) \phi_i^{BO}(\vec{r}; R)$$

多価イオンと電子間の l -依存ガウス型擬ポテンシャル

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

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

2.2 結合項の計算

$$\vec{P}_{ji} = -i \langle \phi_j^{BO}(\vec{r}; R) | \nabla_R | \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) \rangle$$

$$\vec{A}_{ji} = -i \langle \phi_j^{BO}(\vec{r}; R) | \sum_k [\hat{H}_{el}, \vec{S}_i^k] | \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) \rangle$$

2.3 遷移確率の計算

$$\Psi(\vec{r}; R) = \sum_i a_i(t) \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) F_i(\vec{r}; R)$$

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

初期条件 $a_j(t=-\infty) = \delta_{ij}$, E, b のもとで 有限の核間距離から
解き始める。

$$P_j(E, b) = |a_j(t \rightarrow +\infty)|^2$$

2.4 断面積の計算

$$\sigma_j(E) = 2\pi \int_0^\infty b P_j(E, b) db$$

3 H(2s)、H(2p) がシュタルクミキシングしている状態から純粋なH(2s)、H(2p)状態への変換

- H(2s)状態とH(2p)状態がシュタルクミキシングした状態

$$\Sigma \text{ 状態} \quad \begin{pmatrix} \Phi_{SP_+} \\ \Phi_{SP_-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{SP_+,2s} & C_{SP_+,2p_0} \\ C_{SP_-,2s} & C_{SP_-,2p_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{2s} \\ \Psi_{2p_0} \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon_{SP_+}(R) = \varepsilon_H - \frac{3Q}{R^2} - \frac{90Q^2}{R^4}$$

$$\varepsilon_{SP_-}(R) = \varepsilon_H + \frac{3Q}{R^2} - \frac{90Q^2}{R^4}$$

$$\Pi \text{ 状態} \quad \Phi_{2p_{\pm 1}} = \Psi_{2p_{\pm 1}}$$

- シュタルクミキシングした状態からH(2s)状態とH(2p)状態を求める

$$\begin{pmatrix} \Psi_{2s} \\ \Psi_{2p_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{2s,SP_+} & C_{2s,SP_-} \\ C_{2p_0,SP_+} & C_{2p_0,SP_-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{SP_+} \\ \Phi_{SP_-} \end{pmatrix}$$

$C_{2s,SP_+}\Phi_{SP_+} + C_{2s,SP_-}\Phi_{SP_-}$ を初期確率振幅として緊密方程式を解く
 → (Be²⁺(1s²)+H(2s))衝突系の計算

4 (Be²⁺+H(2l))衝突系の電子捕獲過程

- 4.1 電子状態の計算
- 4.2 ポテンシャルエネルギー

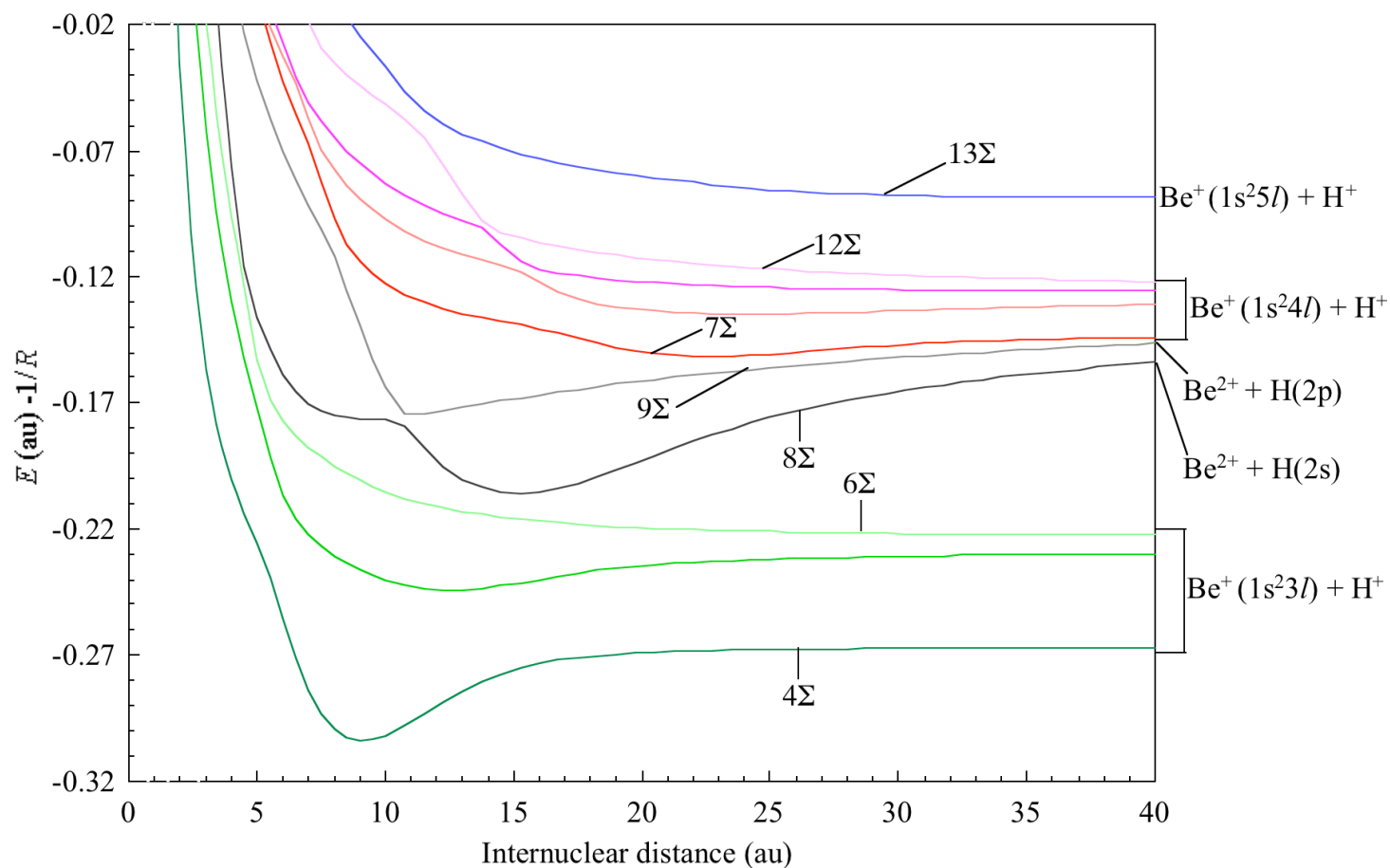


図4.1 BeH²⁺系Σ状態のポテンシャルエネルギー曲線(4Σ-13Σ)

- ・低エネルギー領域では遷移は擬交差点で起こる。
- ・Masseyの判別条件：ポテンシャルエネルギー差と衝突エネルギーが釣り合った所で遷移が起こる。

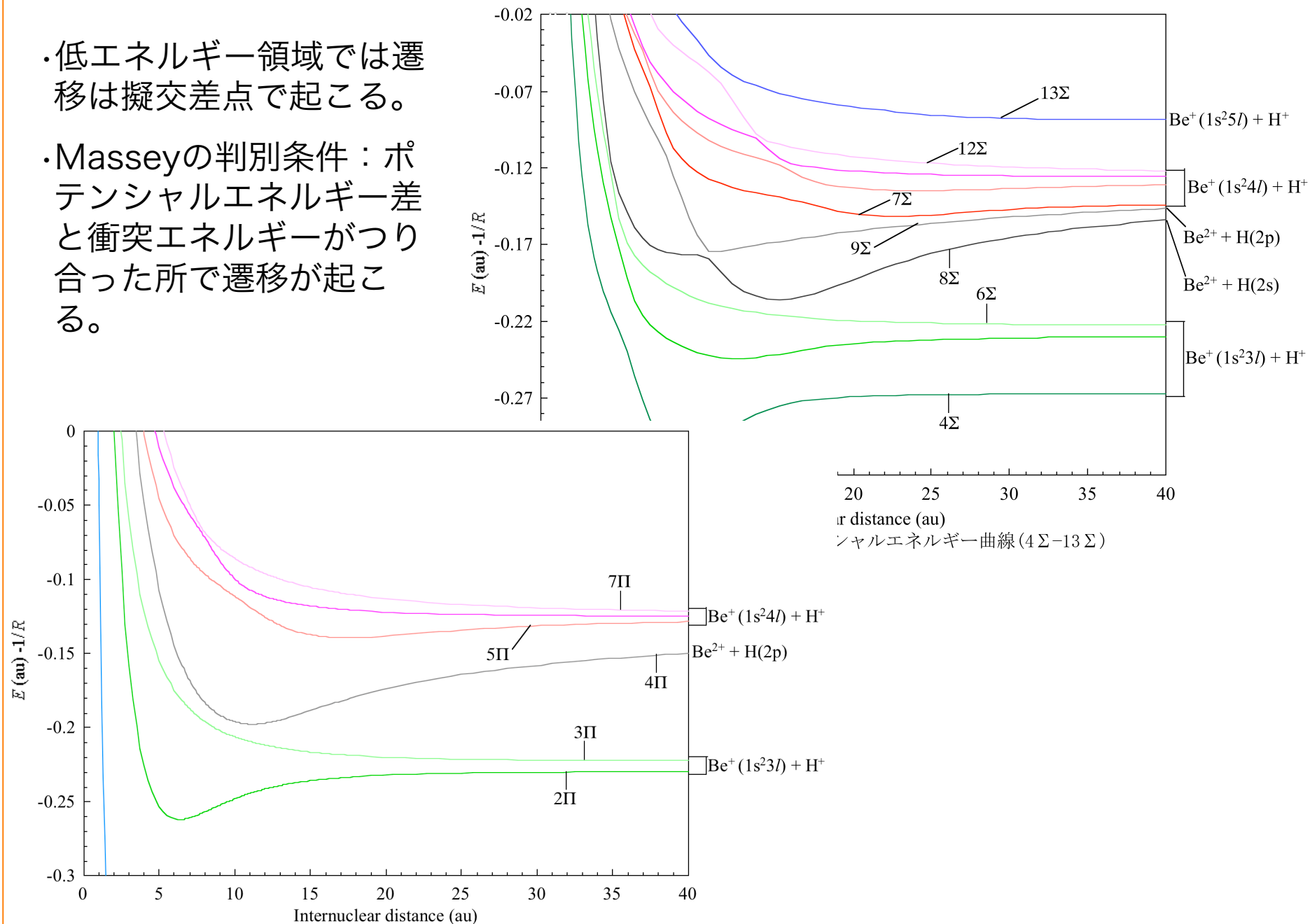


図4.2 BeH_2^+ 系 Π 状態のポテンシャルエネルギー曲線(2 Π -7 Π)

4.3 電荷移行断面積

4.3.1 ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(\text{SP}_+)$)衝突系

・ $\text{Be}^+(1s^2nl; n=3,4,5)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=80\text{au}$ 。

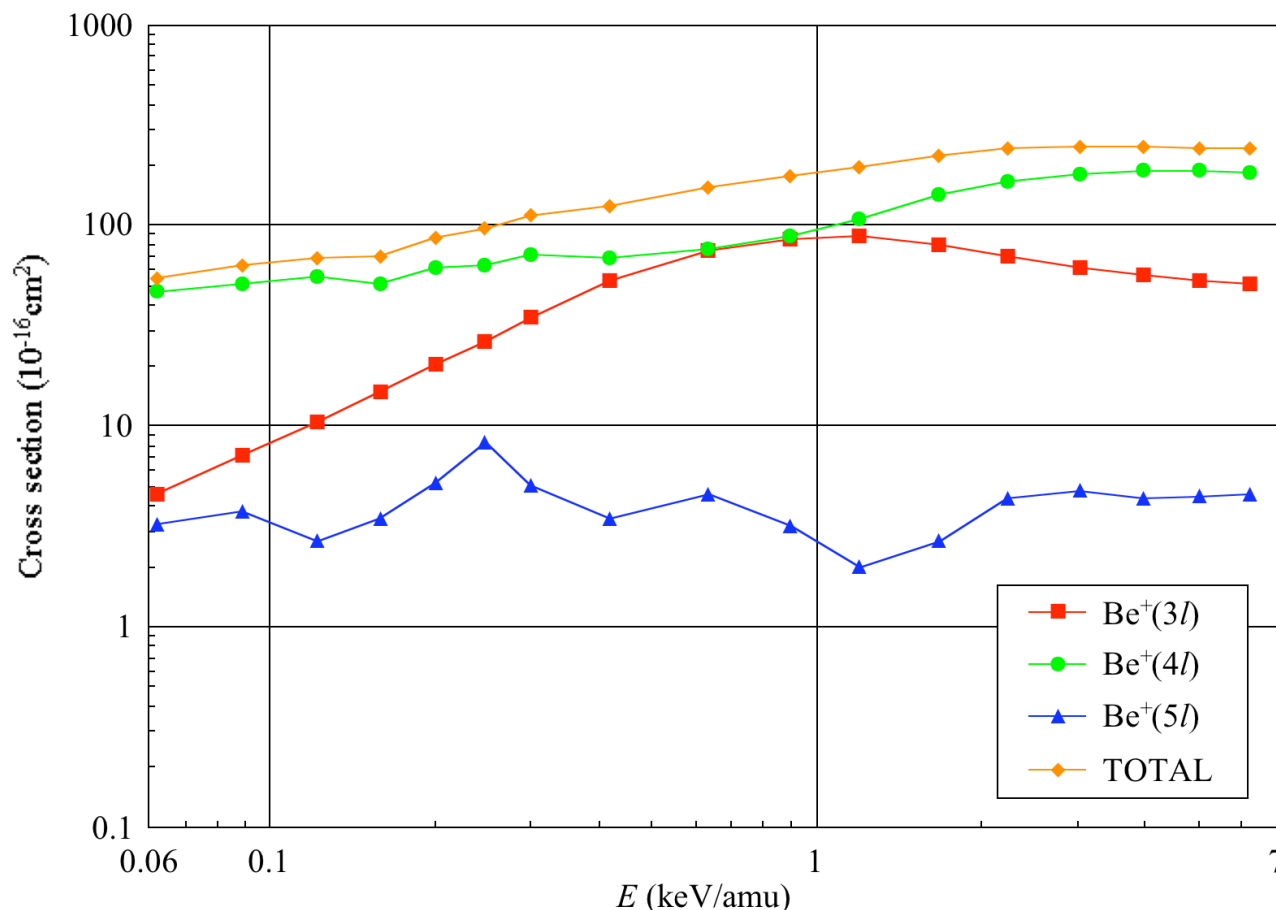


図4.5 ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(\text{SP}_+)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積

・ $\text{Be}^+(1s^24l)$ の寄与最大

・低エネルギー領域：

① $8\Sigma \rightarrow 9\Sigma \rightarrow 7\Sigma$

② 9Σ から回転結合により $5\Pi, 6\Pi, 7\Pi$ に遷移

・高エネルギー領域：

① エネルギーが離れた状態へも遷移($8\Sigma \rightarrow 7\Sigma \rightarrow 10\Sigma \rightarrow \dots$)し、複雑、多岐にわたる。

4.3.2 (Be²⁺+H(SP₋))衝突系

$$\Psi_{SP-} = \sqrt{1/3}\Phi_{SP-} + \sqrt{2/3}\Phi_{2p_{\pm 1}}$$

・Be⁺(1s²nl; n=3,4,5)のΣ,Π,Δ,Φ状態考慮。R_{max}=80au。

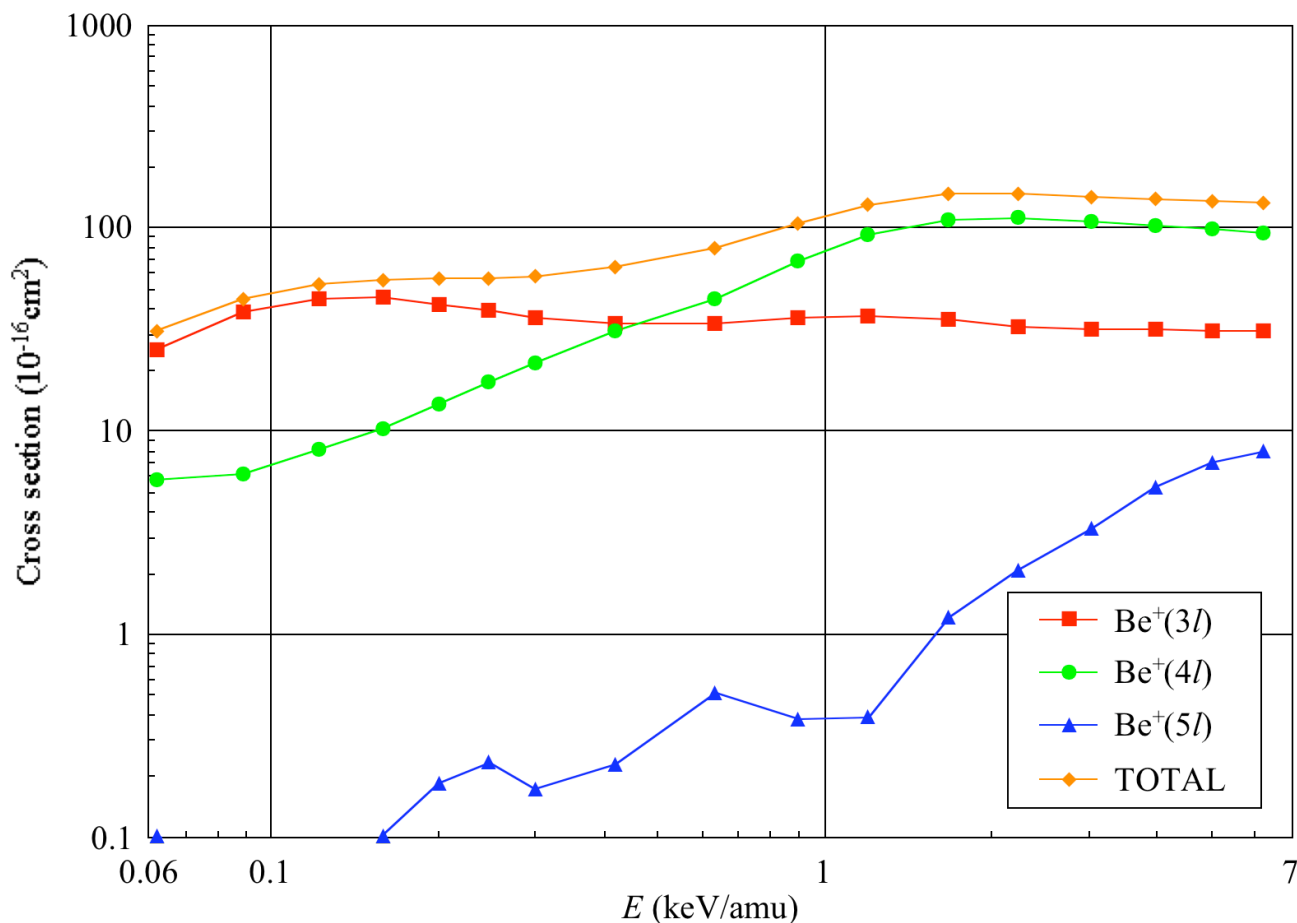


図4.8 (Be²⁺+H(SP₋))衝突系のn依存電荷移行断面積

・低エネルギー領域：

- ①Be⁺(1s²3l)の寄与最大
- ②9Σ→8Σ→6Σ, 9Σ
- ③回転結合の影響なし
4Πは4Πのまま

・高エネルギー領域：

- ①複雑、多岐
- ②Be⁺(1s²4l)の寄与最大
- ③9Σ→8Σ→9Σ (わずかに6Σ, 5Σ, 2Π)
- ④回転結合の影響あり
4Πから9Σ

4.3.3 有限な R ($R_{\max}=80\text{au}$) の確率振幅を用いながら標的が 2s, 2p 状態にあるときの電荷交換断面積を計算するた めの初期確率振幅の決定

(1) Φ_{SP_+} の導出

水素原子の波動関数をSTOで表す

$$\Psi_{2s}^{\text{H}} = -\psi_{1s}^{\text{H}(2s)\text{STO}} + 1.7320508\psi_{2s}^{\text{H}(2s)\text{STO}}$$

計算結果

$$\Phi_{\text{SP}_+} \approx \frac{-0.70132292\psi_{1s}^{\text{H}(2s)\text{STO}} + 1.2111381\psi_{2s}^{\text{H}(2s)\text{STO}}}{1} + 0.71588791\psi_{2p_0}^{\text{H}(2p)\text{STO}}$$

$$\Phi_{\text{SP}_+} = 0.69821528\Psi_{2s} + 0.71588595\Psi_{2p_0}$$

(2) Φ_{SP_-} の導出

$$\Phi_{\text{SP}_-} = 0.71588812\Psi_{2s} - 0.69821501\Psi_{2p_0}$$

(3) Φ_{SP_+} 、 Φ_{SP_-} から Ψ_{2s} 、 Ψ_{2p_0} への変換

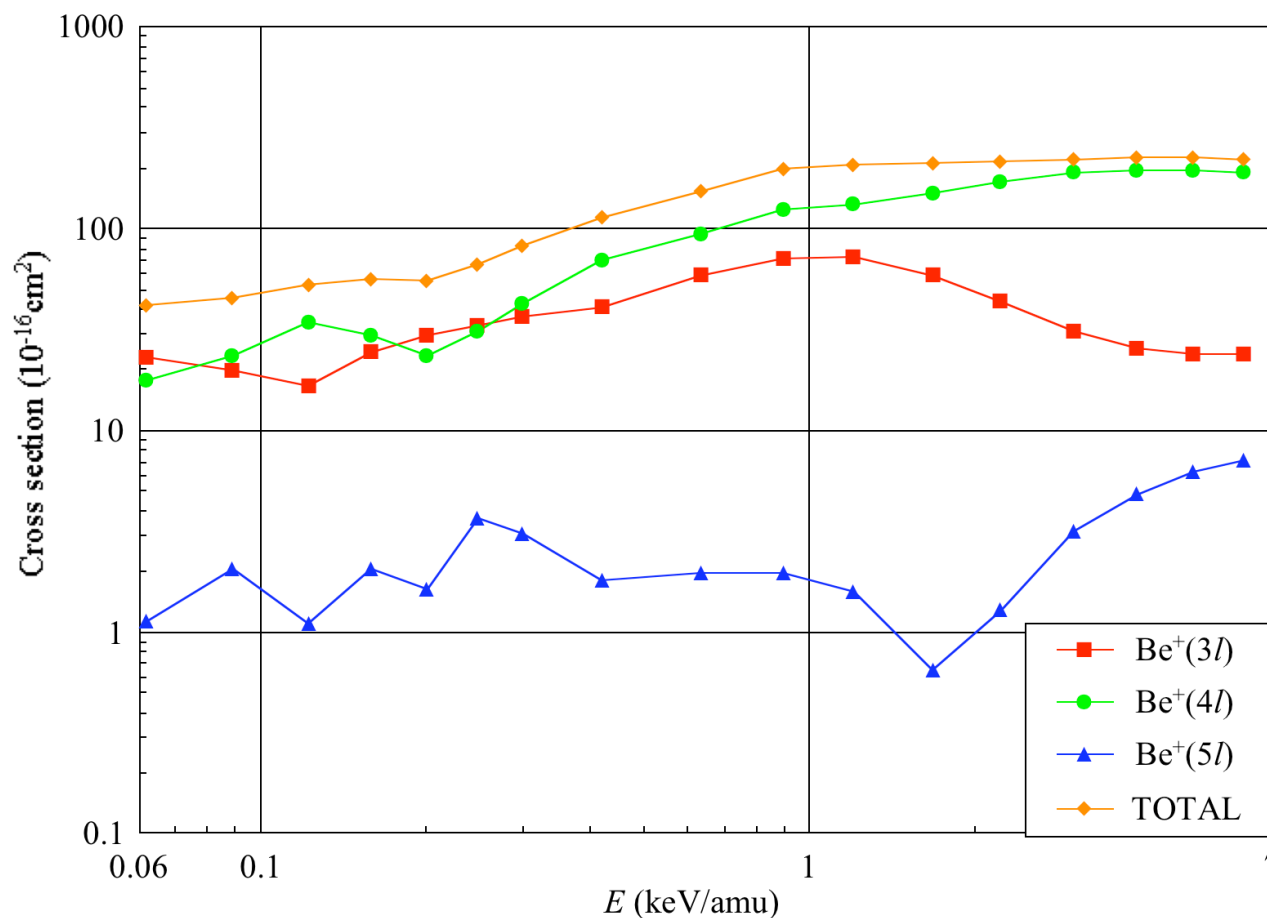
$$\Psi_{2s} = \frac{0.69821494\Phi_{\text{SP}_+} + 0.71588819\Phi_{\text{SP}_-}}{1}$$

$$\Psi_{2p_0} = \frac{0.71588812\Phi_{\text{SP}_+} - 0.69821501\Phi_{\text{SP}_-}}{1}$$

4.3.4 ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2s)$) 衝突系

$$\Psi_{2s} = 0.69821494\Phi_{\text{SP}_+} + 0.71588819\Phi_{\text{SP}_-}$$

・ $\text{Be}^+(1s^2nl; n=3,4,5)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=80\text{au}$ 。



・低エネルギー領域：

① $\text{Be}^+(1s^23l)$, $\text{Be}^+(1s^24l)$ の寄与大

・エネルギーが高くなるにつれ：

① $\text{Be}^+(1s^24l)$ の寄与大

図4.11 ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2s)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積

(Be²⁺+H(2s))衝突系と(Be²⁺+H(SP₊))衝突系の比較

$$\Psi_{2s} = 0.69821494\Phi_{SP_+} + 0.71588819\Phi_{SP_-}$$

・Be⁺(1s²nl;n=3,4,5)のΣ,Π,Δ,Φ状態考慮。R_{max}=80au。

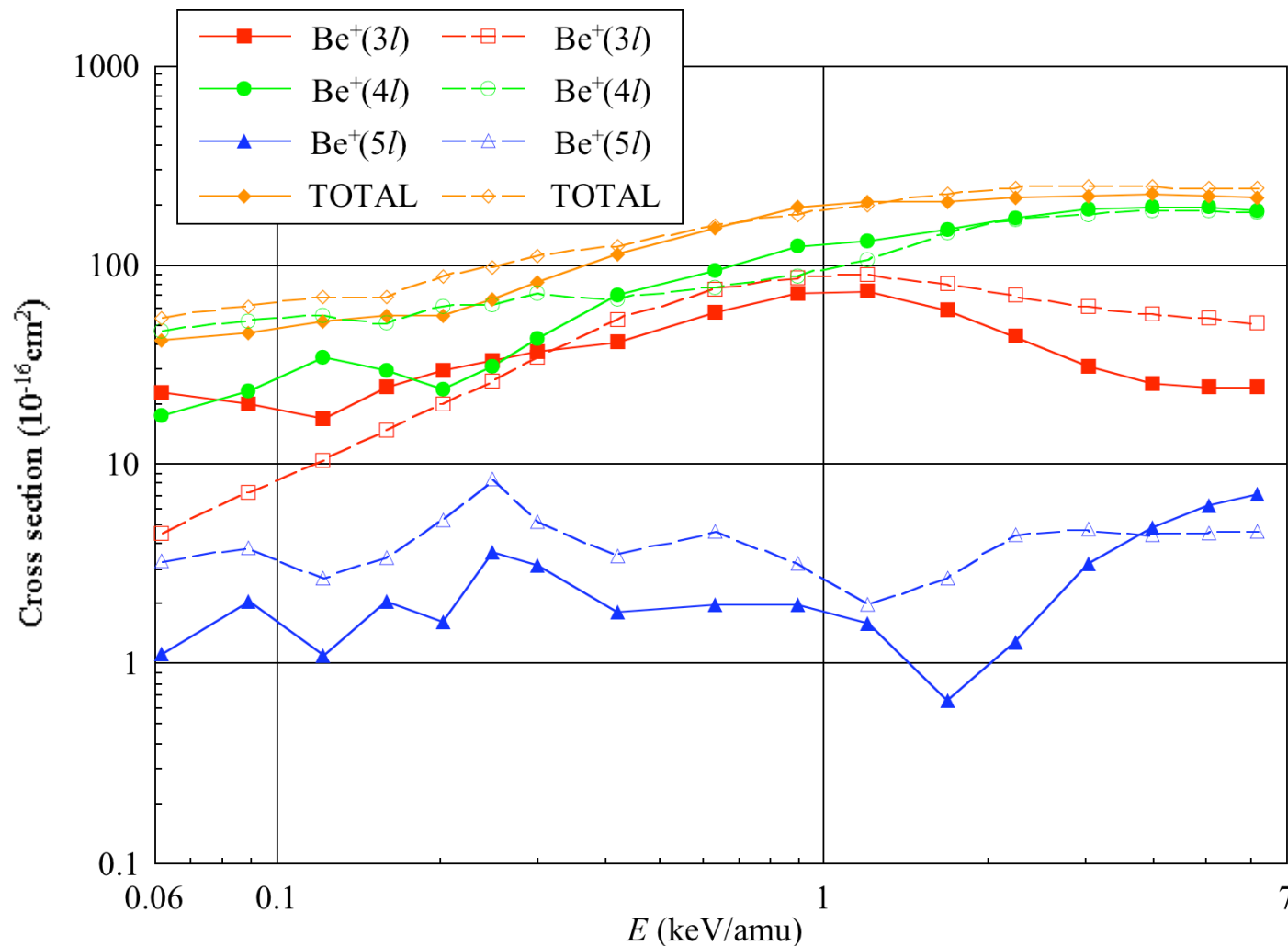


図4.12 (Be²⁺+H(SP₊))衝突系(破線)と(Be²⁺+H(2s))衝突系(実線)のn依存電荷移行断面積の比較

(Be²⁺+H(2s))衝突系と(Be²⁺+H(SP₊))衝突系の断面積の比較

- ・全衝突エネルギー領域にわたり 2つの衝突系の断面積の値はほぼ同じであり、衝突エネルギー依存性も似た傾向を示す。
- ・低エネルギー領域：(Be²⁺+H(2s))衝突系の方が
 - ①全断面積は若干小さくなる
 - ②Be⁺(1s²3l)の寄与が大きく、Be⁺(1s²4l)の寄与は小さい
 - ← 8Σから3Πへの遷移確率が大きく、6Π、7Πへの遷移確率は小さい
 - ほぼ半々であった8Σと9Σが衝突対が接近する過程でほとんど8Σへ遷移し、これが回転結合により3Πへ遷移
- ・中間から高エネルギー領域：
 - ① (Be²⁺+H(2s))衝突系と(Be²⁺+H(SP₊))衝突系の全断面積、部分断面積とも差異は少ない。

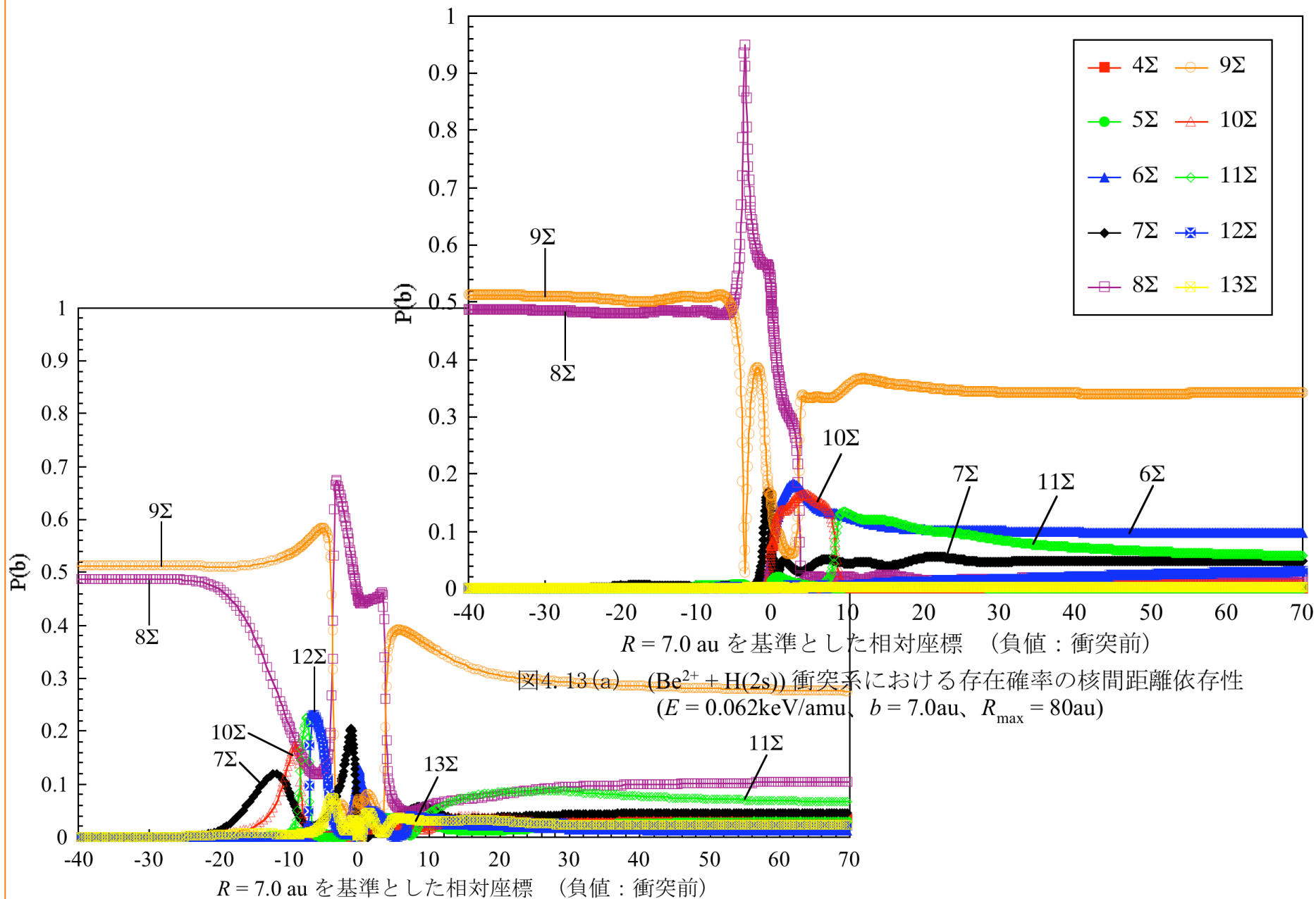
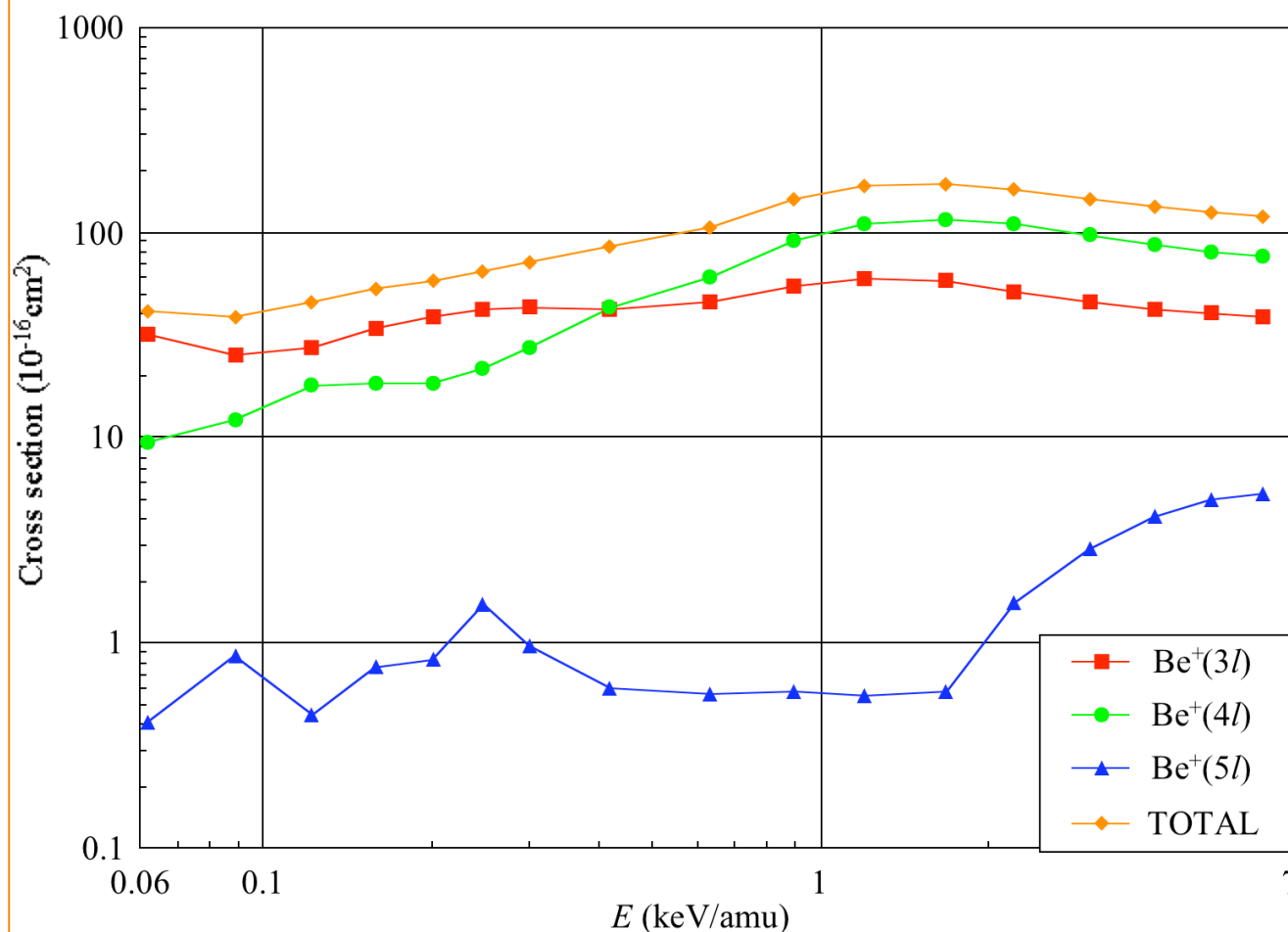


図4. 14(a) ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2s)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2 \text{ keV/amu}$, $b = 7.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 80 \text{ au}$)

4.3.5 ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2p)$) 衝突系

$$\Psi_{2p} = 0.41331820\Phi_{SP_+} - 0.40311462\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

・ $\text{Be}^+(1s^2nl; n=3,4,5)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\max}=80\text{au}$ 。



・低エネルギー領域：

- ① $\text{Be}^+(1s^23l)$ の寄与最大
- ② $9\Sigma \rightarrow 8\Sigma \rightarrow 6\Sigma$
- ③ 回転結合の影響なし

・高エネルギー領域：

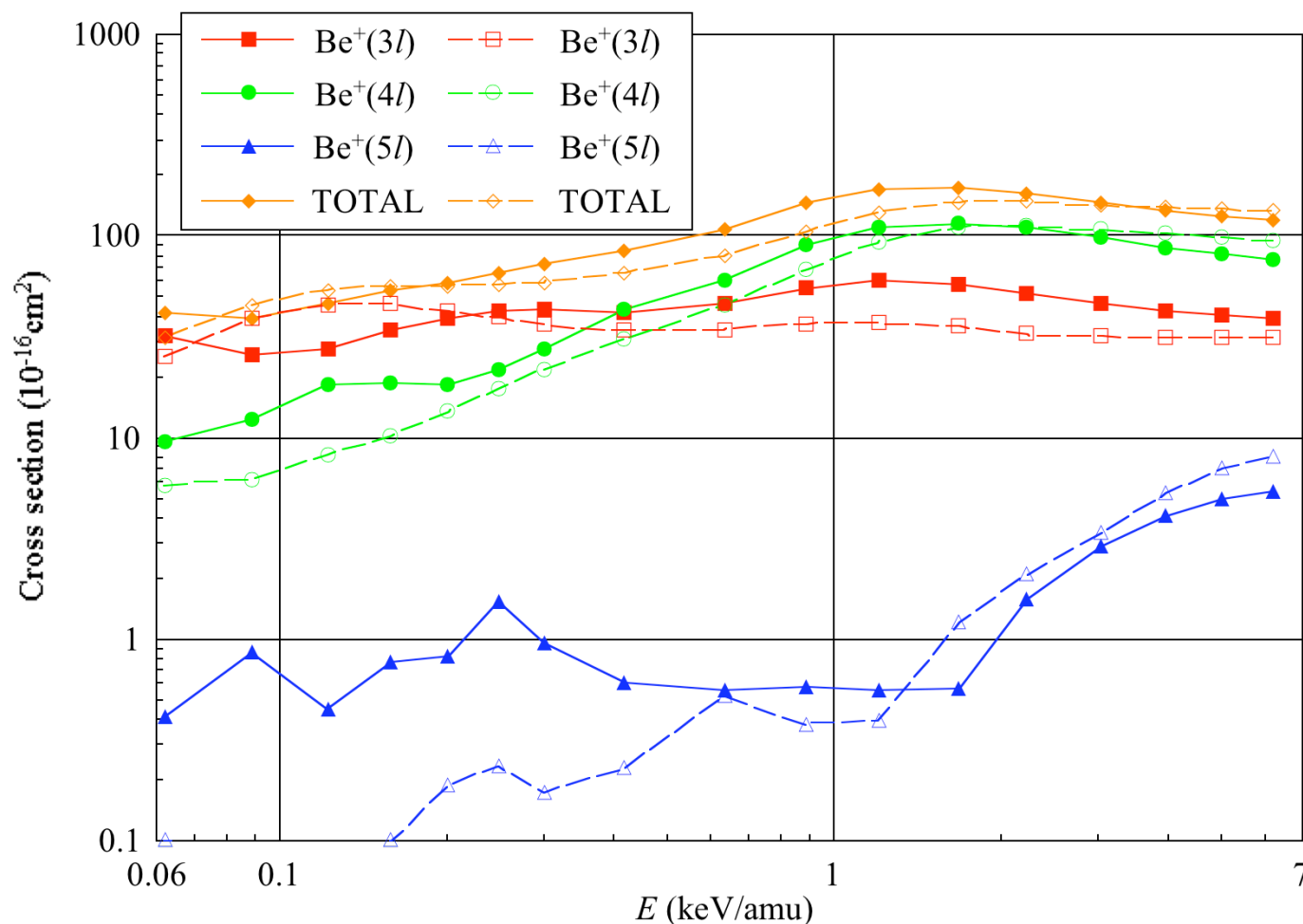
- ① 複雑、多岐
- ② $\text{Be}^+(1s^24l)$ の寄与最大
- ③ $9\Sigma \rightarrow 8\Sigma \rightarrow 9\Sigma, 6\Sigma (5\Sigma, 2\Pi)$
- ④ 回転結合の影響あり。
4 Π から9 Σ

図4.15 ($\text{Be}^{2+} + \text{H}(2p)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積

(Be²⁺+H(2p))衝突系と(Be²⁺+H(SP₋))衝突系の断面積の比較

$$\Psi_{2p} = 0.41331820\Phi_{SP_+} - 0.40311462\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

・Be⁺(1s²nl;n=3,4,5)のΣ,Π,Δ,Φ状態考慮。R_{max}=80au。



・低エネルギー領域、高エネルギー領域とも (Be²⁺+ H(2p))衝突系と (Be²⁺+ H(SP₋))衝突系の断面積の差異は少ない。

図4.16 (Be²⁺+H(SP₋))衝突系(破線)と(Be²⁺+H(2p))衝突系(実線)のn依存電荷移行断面積の比較

(Be²⁺+H(2p)) 衝突系と (Be²⁺+H(SP₋)) 衝突系の断面積の比較

- ・全衝突エネルギー領域にわたり 2つの衝突系の断面積の値に大きな差はなく、衝突エネルギー依存性も似た傾向を示す。
- ・低エネルギー領域：
 - ①Be⁺(1s²3l) の寄与最大
 - ②(Be²⁺+H(2p)) 衝突系の方がBe⁺(1s²3l) の寄与が小さく、Be⁺(1s²4l)、Be⁺(1s²5l) の寄与は大きい
 - ← ほぼ半々であった8Σと9Σが衝突対が接近するときR=11auの擬似交差点でほとんど8Σになり、離れるとき再び同じ擬似交差点で9Σに戻る。8Σに遷移しなかった成分は7Σ→10Σ→11Σと遷移する
 - ③8Σから9Σと6Σに遷移
 - ④4Πから3Πへ遷移
 - ⑤回転結合の影響なし
- ・高エネルギー領域：
 - ①Be⁺(1s²4l) の寄与最大
 - ← ほぼ半々であった8Σと9Σが接近しつつ9Σに遷移、最近接点で8Σになるが、離れるとき再び9Σに戻る。
 - ②(Be²⁺+H(2p)) 衝突系の方がBe⁺(1s²3l) の寄与が大きい
 - ③4Π→8Σと遷移
 - ④複雑で多岐にわたる

5 三重項 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程

5.1 電子状態の計算

5.2 ポテンシャルエネルギー

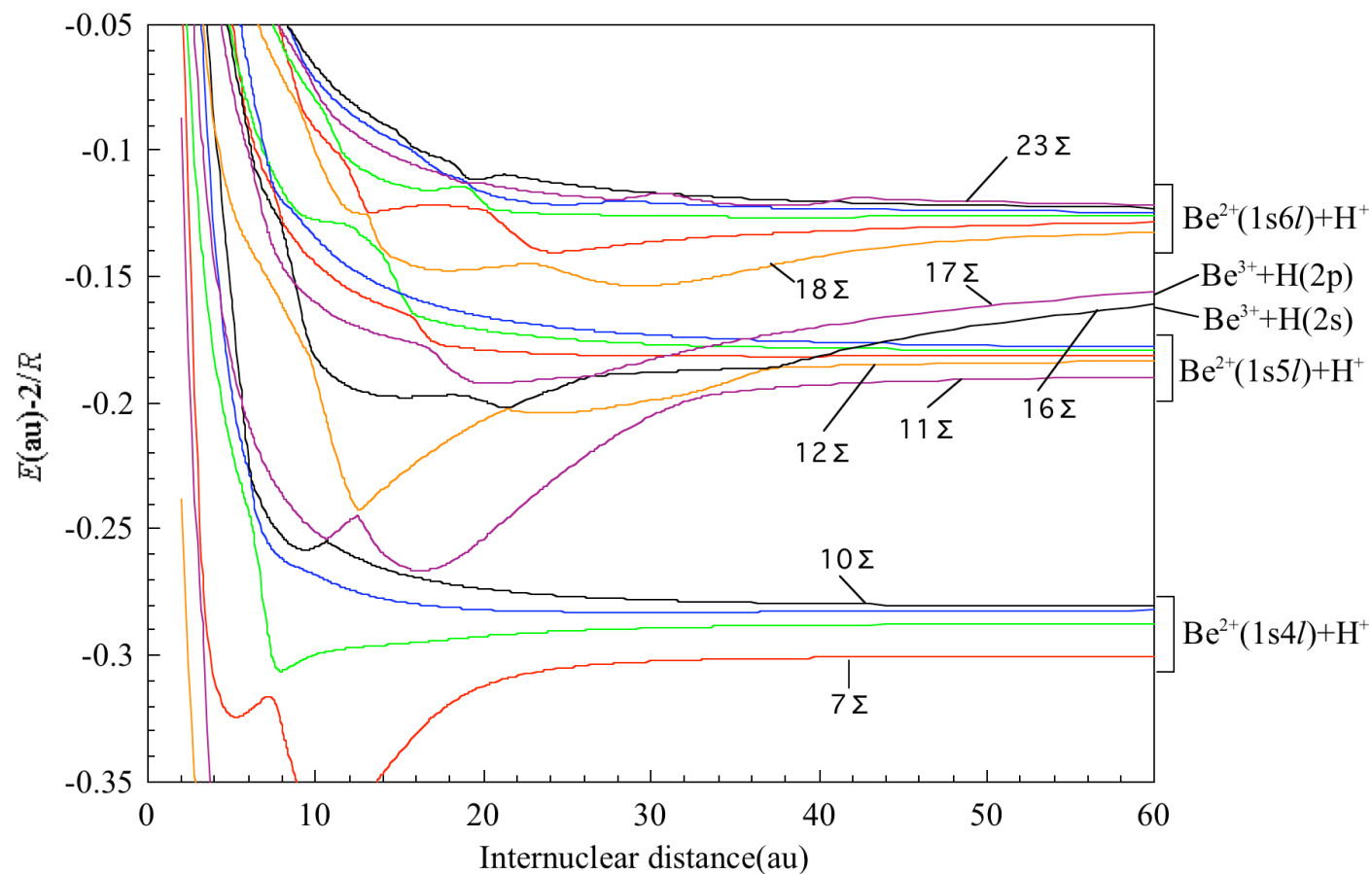
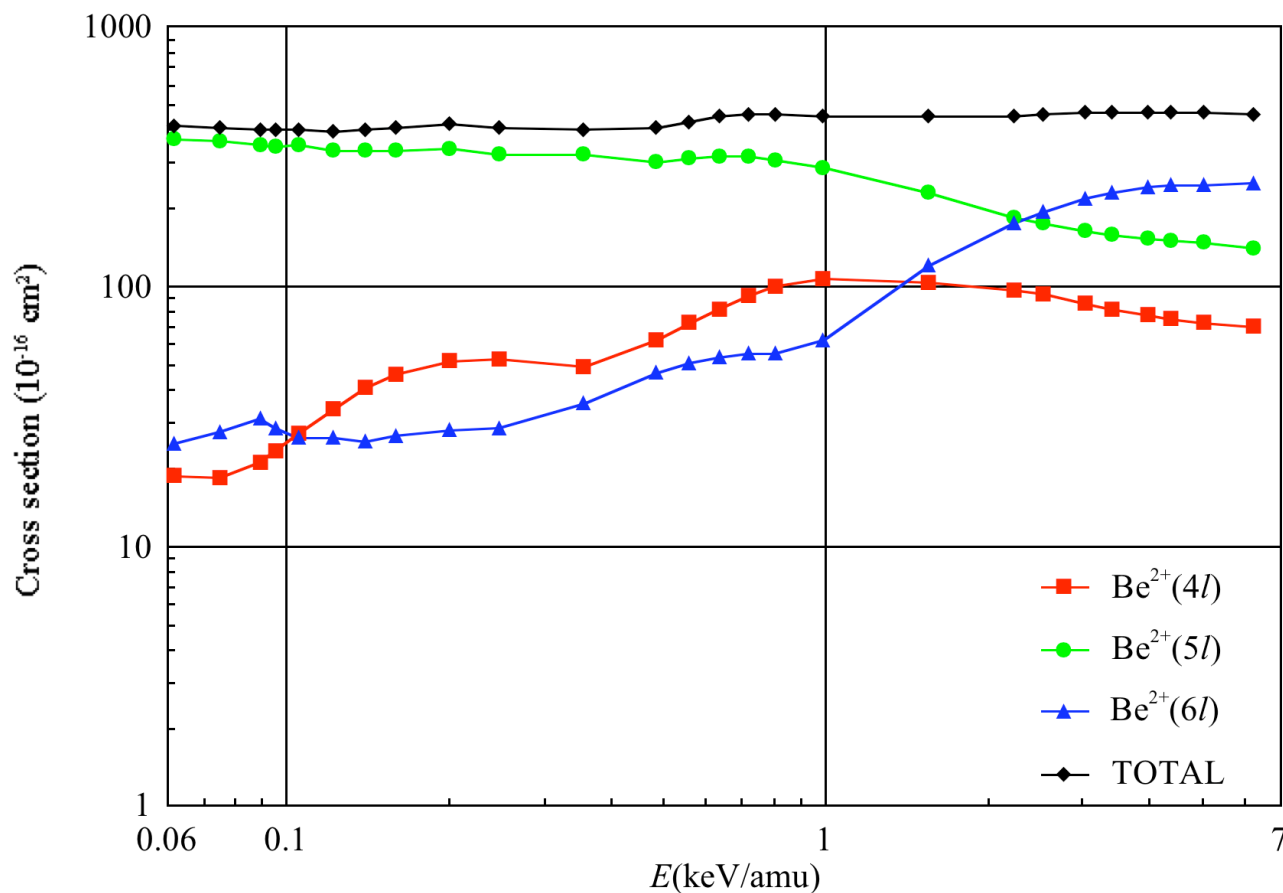


図5.2 三重項 BeH^{3+} 系 Σ 状態のポテンシャルエネルギー曲線 ($7\Sigma \sim 23\Sigma$)

5.3 電荷移行断面積

5.3.1 三重項 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=60\text{au}$ 。



・全断面積の衝突エネルギー依存性は小さい。

・低エネルギー領域：
① $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与大
(特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$)

・高エネルギー領域：
①複雑、多岐
② $\text{Be}^{2+}(1s6l)$ の寄与大

図5.6 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_+)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積(三重項を經由)

・低エネルギー領域：

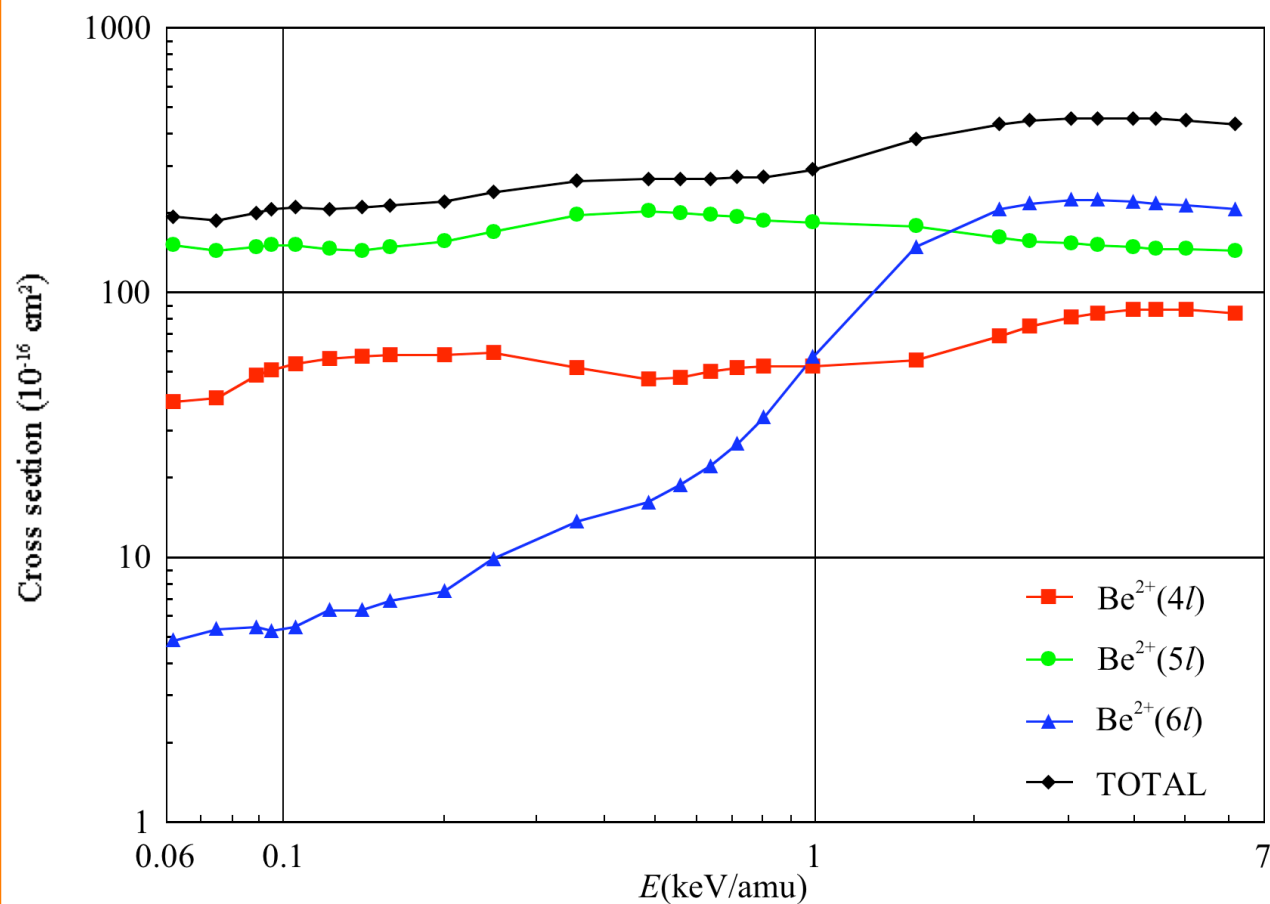
- ① 接近する際、 $16\Sigma \rightarrow 12\Sigma \rightarrow 11\Sigma$ と遷移するが、帰りに $11\Sigma \rightarrow 12\Sigma \rightarrow 16\Sigma$ と遷移しほとんどもとに戻る。一部は 11Σ 、 12Σ に残る。
- ② 回転遷移により 12Σ から $8\Pi \rightarrow 7\Pi$ に遷移するものもある。

・高エネルギー領域：

- ① 複雑、多岐
- ② 接近する際、 $16\Sigma \rightarrow 12\Sigma \rightarrow 11\Sigma$ と遷移するが、その後はさまざまな状態（ 18Σ に遷移した後 19Σ に、また 11Σ から 7Π に）に遷移する。

5.3.2 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_-)$) 衝突系の場合

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=60\text{au}$ 。



・全断面積の衝突エネルギー依存性は小さい。

・低、中間エネルギー領域：

① $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与最大
(特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$)

・高エネルギー領域：

①複雑、多岐

② $\text{Be}^{2+}(1s6l)$ の寄与最大

図5.9 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_-)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積(三重項を經由)

・低エネルギー領域：

- ① 17Σ からまず 16Σ に遷移し、その後 12Σ と 17Σ に分かれて遷移する。 12Σ に遷移した成分は更に 11Σ に遷移。
- ② 11Π から 7Π に遷移するが、最終的には 11Π に戻る。

・高エネルギー領域：

- ① 17Σ からまず 16Σ に遷移するが、その後は多岐に分かれて遷移する。
- ② 11Σ から 7Π に遷移した成分は 11Σ と 12Π に遷移する。

Be³⁺(1s)+H(SP₊)との比較

低エネルギー領域で

- ① 全断面積はBe³⁺(1s)+H(SP₊)衝突系より小さい ← Be²⁺(1s5l)の寄与が小さいから
- ② Be²⁺(1s4l)への断面積はBe³⁺(1s)+H(SP₋)衝突系の方が大きい。

5.3.3 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2s)$) 衝突系の場合

$$\Psi_{2s} = 0.68025737\Phi_{\text{SP}_+} + 0.73297333\Phi_{\text{SP}_-}$$

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=60\text{au}$ 。

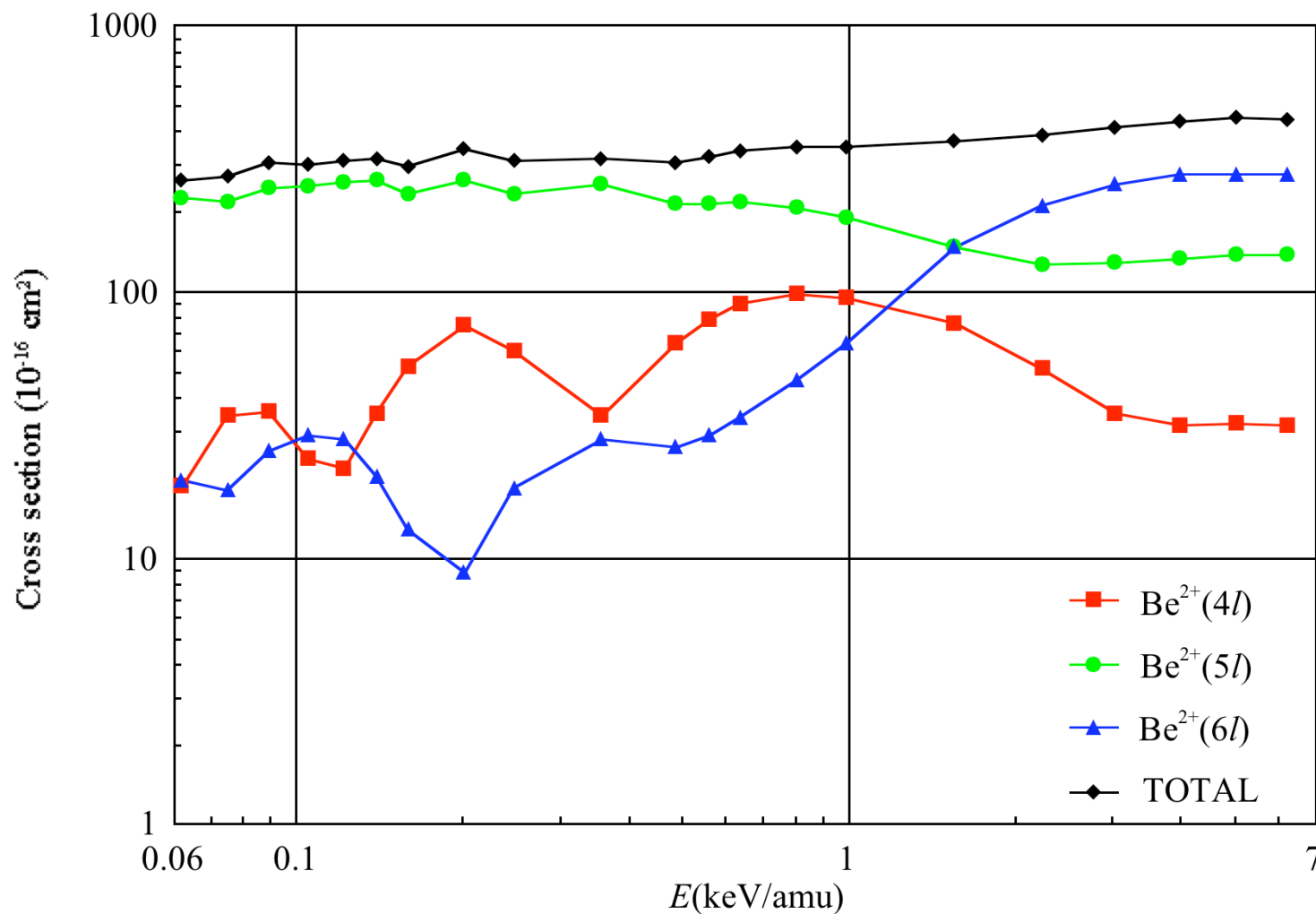
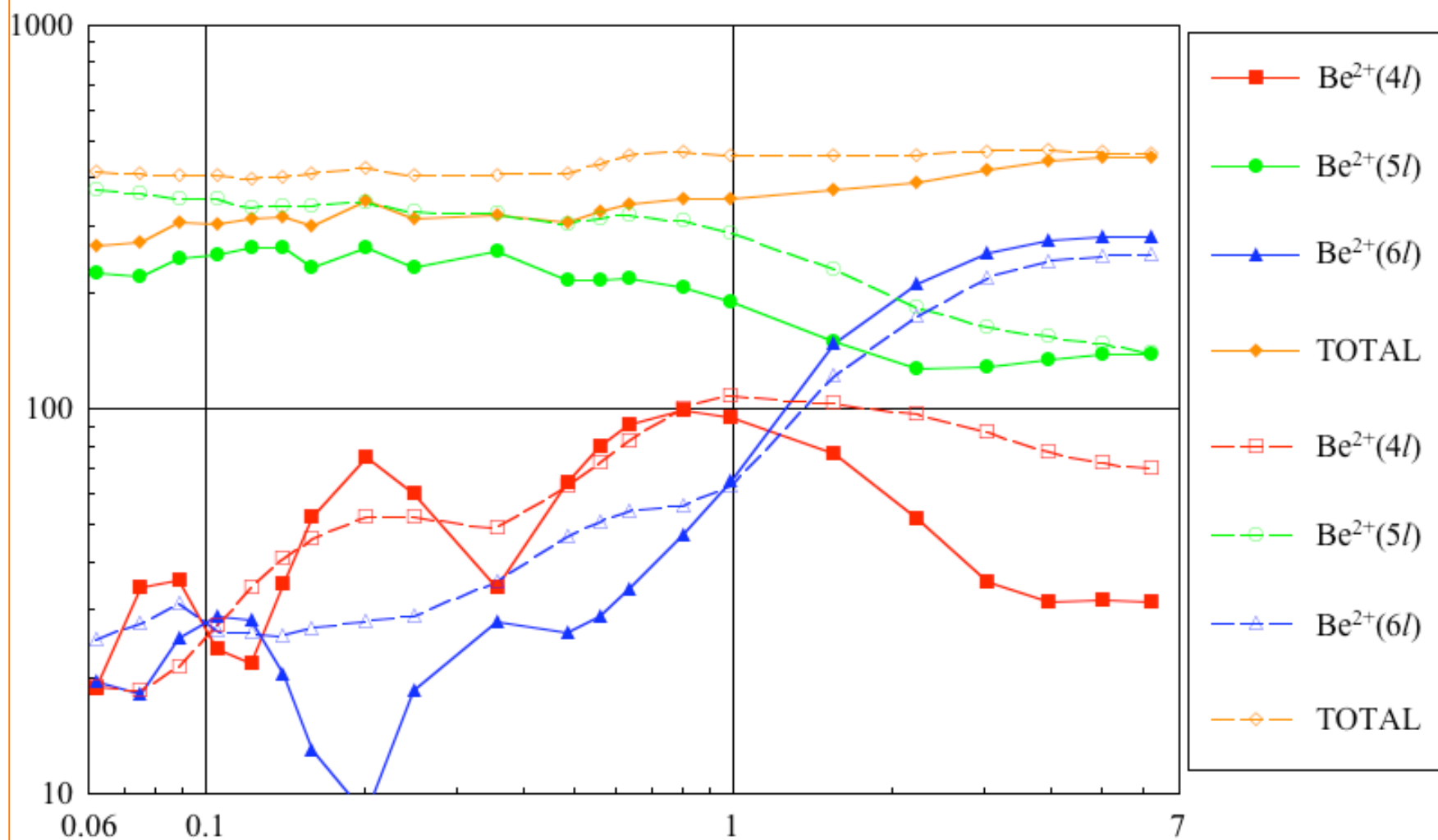


図5.12 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2s)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積(三重項を經由)

(Be³⁺+H(2s))衝突系と(Be³⁺+H(SP₊))衝突系の断面積の比較



(Be³⁺+H(2s))衝突系(実線)と(Be³⁺+H(SP₊))衝突系(破線)の n 依存電荷移行断面積の比較

- ・全断面積は衝突エネルギーとともにゆるやかに増加
- ・低エネルギー領域：
 - ① $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与が最大
(特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$)
- ・高エネルギー領域：
 - ① $\text{Be}^{2+}(1s6l)$ の寄与が最大

($\text{Be}^{3+}+\text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系との比較

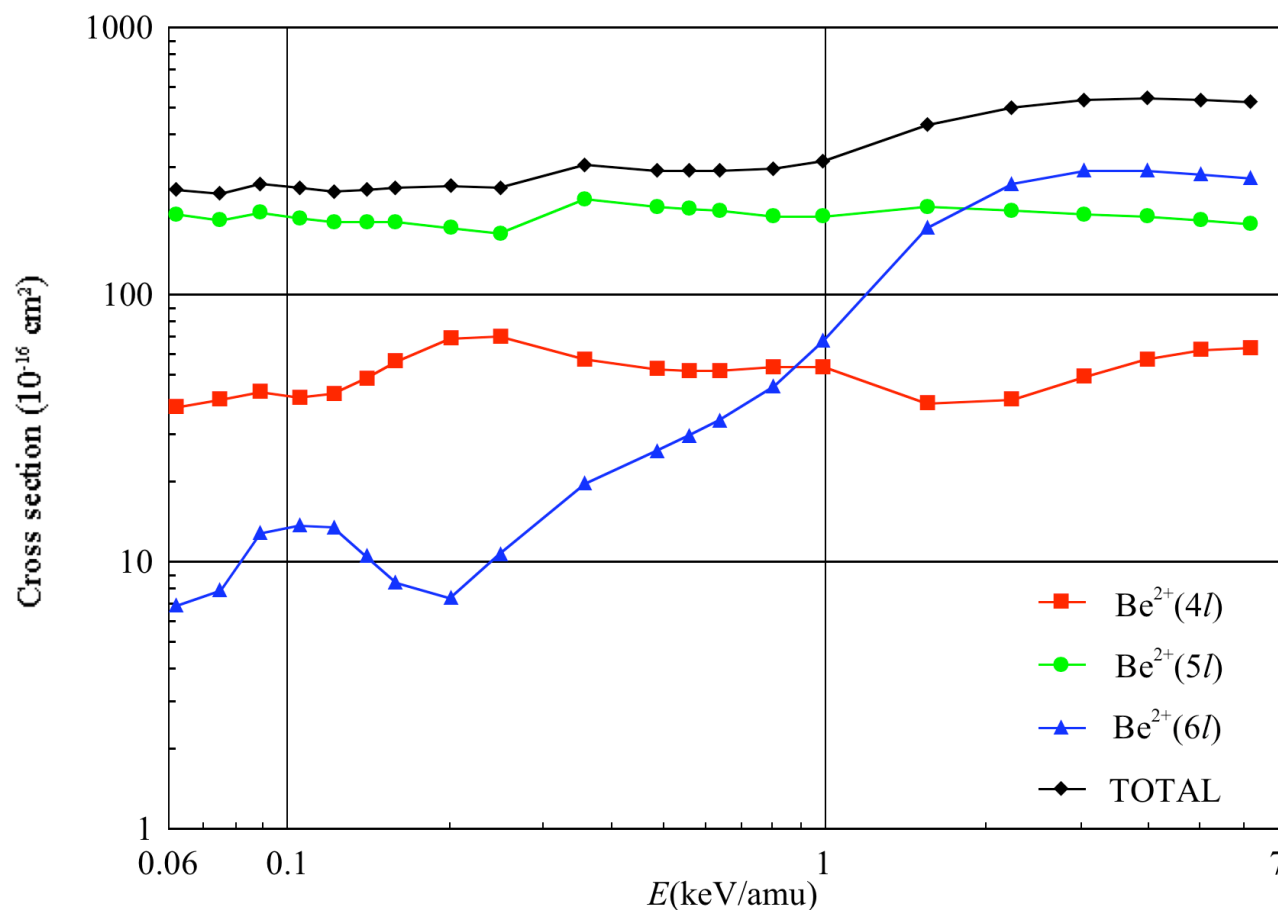
($\text{Be}^{3+}+\text{H}(2s)$) 衝突系の方が

- ① 低エネルギー領域で $\text{Be}^{2+}(1s4l)$ 、 $\text{Be}^{2+}(1s6l)$ 状態への電荷移行断面積のエネルギー依存性が逆位相で大きく振動
- ② 低、中間衝突エネルギー領域で全断面積への寄与が最大の $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ への断面積が小さい
 - ← 17Σ からは $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ 状態へ遷移しないにもかかわらず、電子が 16Σ と 17Σ に分かれて存在しているため

5.3.4 $(\text{Be}^{3+} + \text{H}(2p))$ 衝突系の場合

$$\Psi_{2p} = -0.42265518\Phi_{\text{SP}_-} + 0.39331404\Phi_{\text{SP}_+} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

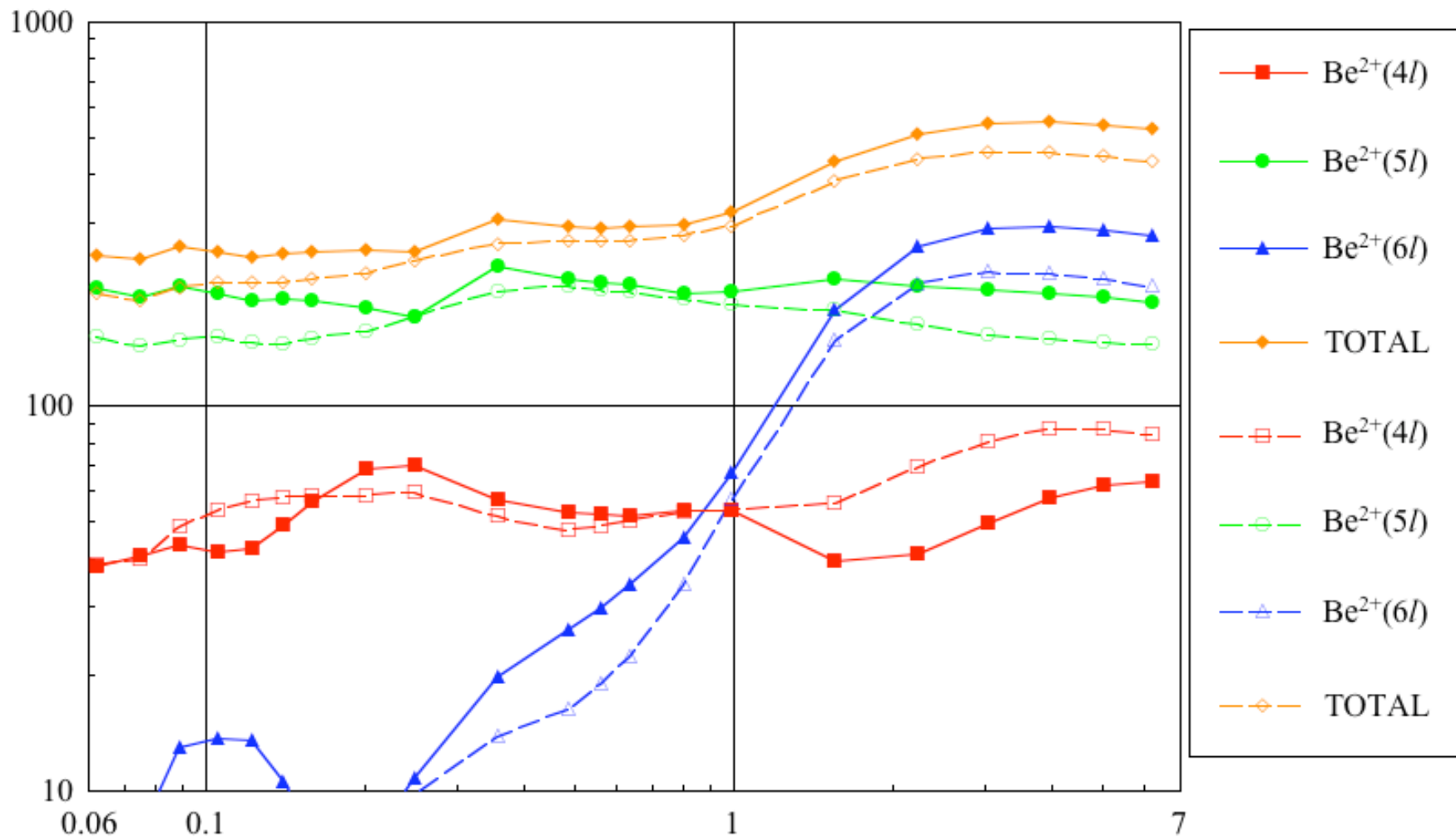
・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=60\text{au}$ 。



- ・ $(\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_-))$ 衝突系と類似 (初期条件が類似: 11Π の初期確率が大)
- ・ 全断面積は衝突エネルギーとともにわずかに増加。
- ・ n^5 則によると $320 \times 10^{-16} \text{cm}^2$
- ・ 低, 中間エネルギー領域 :
 - ① $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与最大 (特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$)
- ・ 高エネルギー領域 :
 - ① 断面積の大きさの順 $\text{Be}^{2+}(1s4l) < \text{Be}^{2+}(1s5l) < \text{Be}^{2+}(1s6l)$

図5.13 $(\text{Be}^{3+} + \text{H}(2p))$ 衝突系の n 依存電荷移行断面積 (三重項を經由)

(Be³⁺+H(2p))衝突系と(Be³⁺+H(SP₋))衝突系の断面積の比較



(Be³⁺+H(2p))衝突系(実線)と(Be³⁺+H(SP₋))衝突系(破線)の n 依存電荷移行断面積の比較

6 一重項 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程

6.1 電子状態の計算

6.2 ポテンシャルエネルギー

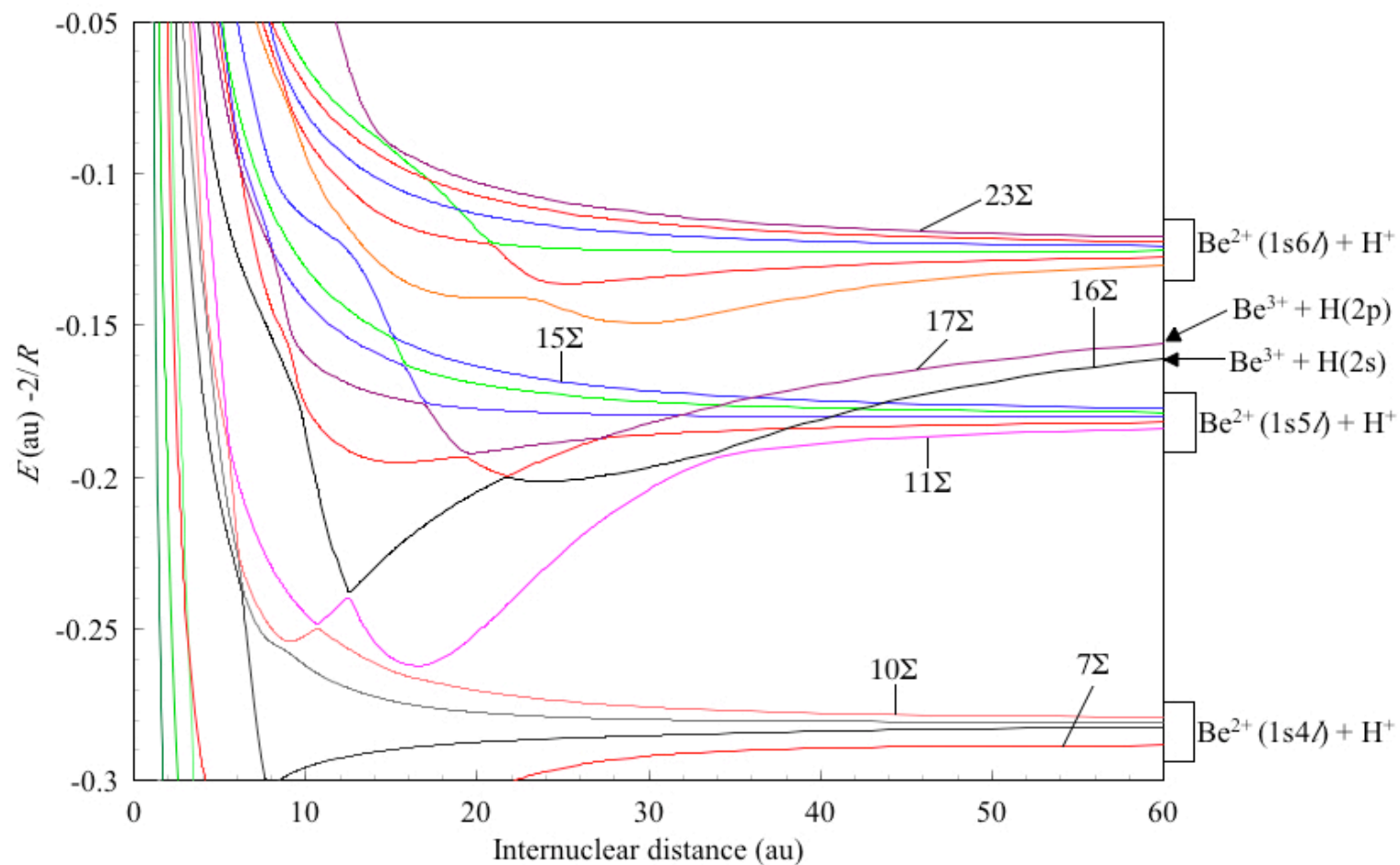


図6.1 一重項 BeH^{3+} 系 Σ 状態のポテンシャルエネルギー曲線 ($7\Sigma - 23\Sigma$)

6.3 電荷移行断面積

6.3.1 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=50\text{au}$ 。

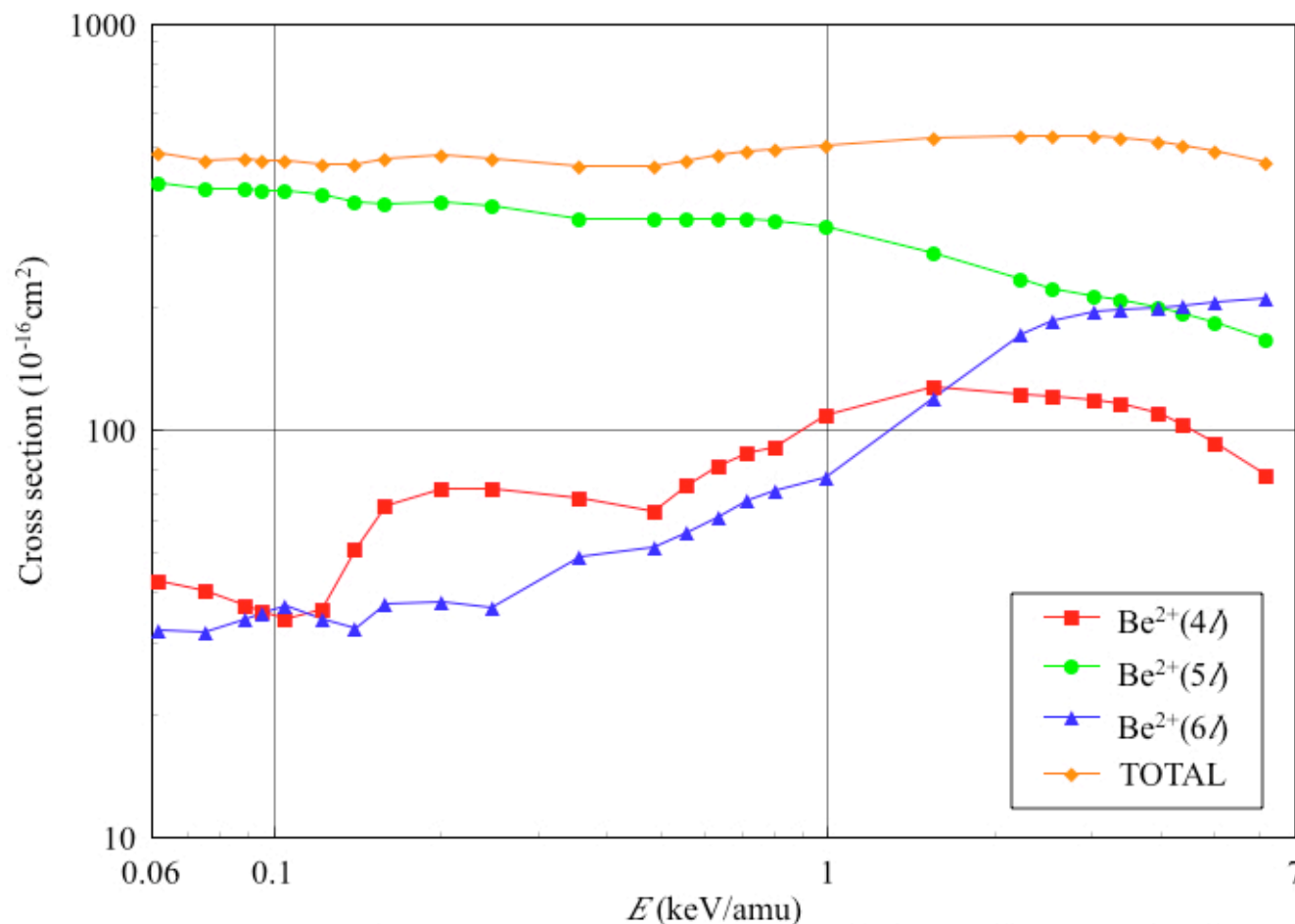


図6.5 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_+)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積 (一重項を經由)

・全断面積の衝突エネルギー依存性は小さい。

・低、中間エネルギー領域： $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与最大 (特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$)

・高エネルギー領域：断面積の大きさの順
 $\text{Be}^{2+}(1s4l) < \text{Be}^{2+}(1s5l) < \text{Be}^{2+}(1s6l)$

低エネルギー領域：

- ① 16Σ から擬似交差点で 11Σ に遷移、衝突後同じ擬似交差点で 16Σ に戻る。
- ② 接近時に 16Σ から 12Σ 、 17Σ に遷移した成分は、 12Σ を経て 16Σ に戻る。
- ③ 回転結合により 16Σ から 11Π に遷移し、その後 7Π に遷移する成分もある。

高エネルギー領域：

- ① 低エネルギー領域で起こっている①、②、③の過程が起こっている。
- ② 反応は複雑、多岐にわたる。

6.3.2 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_-)$) 衝突系

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=50\text{au}$ 。

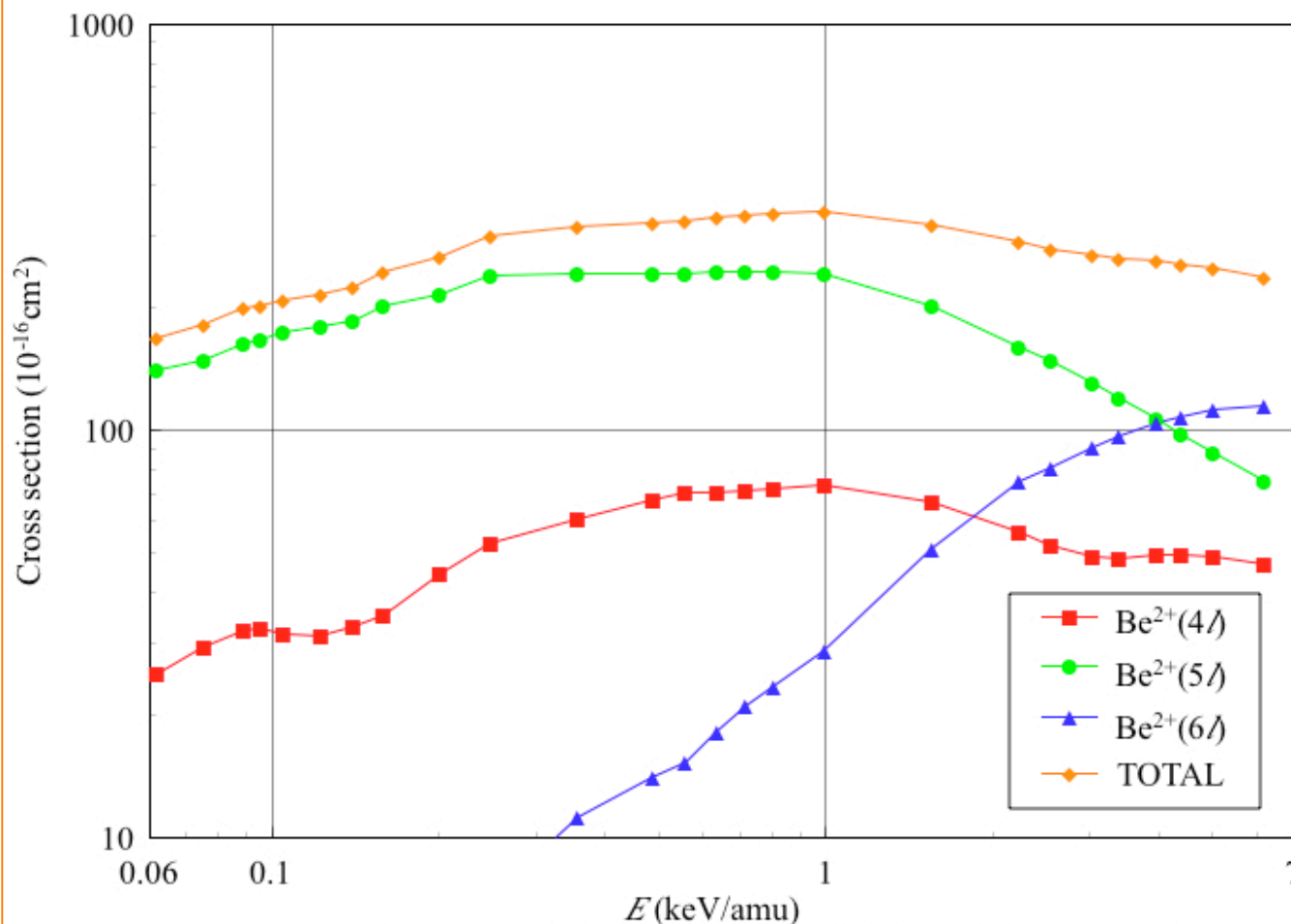


図6.8 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(\text{SP}_-)$) 衝突系の n 依存電荷移行断面積 (一重項を經由)

- ・全断面積は中間の衝突エネルギーでブロードな山を持つ。
- ・低、中間エネルギー領域： $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与大 (特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$)
- ・高エネルギー領域：断面積の大きさの順 $\text{Be}^{2+}(1s4l) < \text{Be}^{2+}(1s5l) < \text{Be}^{2+}(1s6l)$

低エネルギー領域：

- ①17 Σ にあった電子は擬似交差点で12 Σ に遷移、その後16 Σ に遷移する。
この成分は衝突後12 Σ に遷移した後、17 Σ に戻る。
- ②11 Π にあった電子は7 Π を経て、衝突後11 Π に戻り更に16 Σ に遷移する成分と、7 Π から11 Σ に遷移する成分がある。

高エネルギー領域：

- ①低エネルギー領域で起こっている①、②、③の過程が起こっているが、擬似交差点でのみ遷移が起こるのではなく、反応は複雑、多岐にわたる。

6.3.3 $(\text{Be}^{3+} + \text{H}(2s))$ 衝突系

$$\Psi_{2s} = 0.69283411\Phi_{\text{SP}_+} + 0.72109701\Phi_{\text{SP}_-}$$

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=50\text{au}$ 。

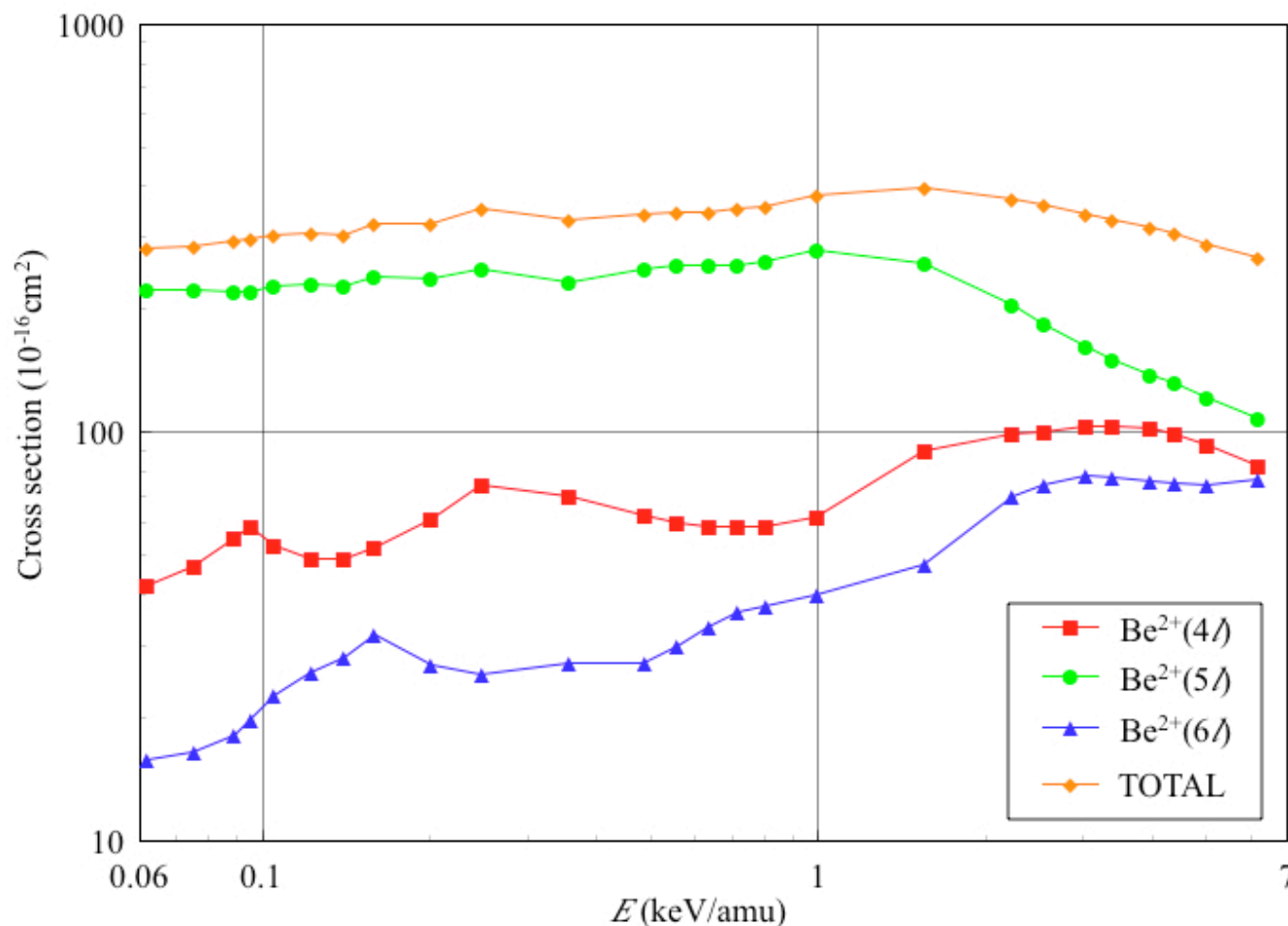


図6.11 $(\text{Be}^{3+} + \text{H}(2s))$ 衝突系の n 依存電荷移行断面積 (一重項を經由)

- ・全断面積は高エネルギー領域で若干減少。
- ・全エネルギー領域で $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与が最大 (低エネルギー領域では $\text{Be}^{2+}(1s5s)$ 状態の寄与大)

(Be²⁺+H(2s))衝突系と(Be²⁺+H(SP₊))衝突系の断面積の比較

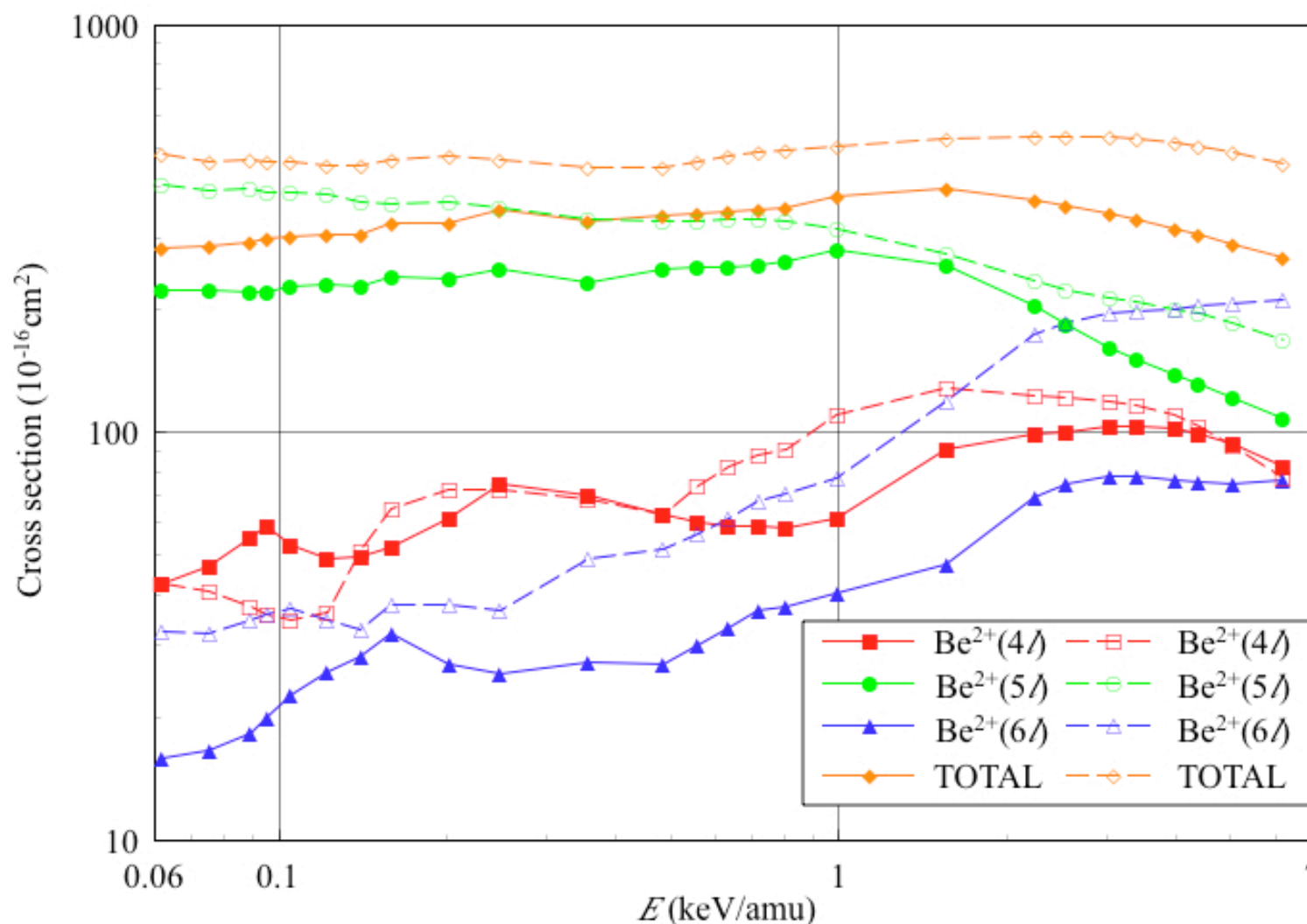


図6.12 (Be³⁺+H(SP₊))衝突系(破線)と(Be³⁺+H(2s))衝突系(実線)の*n*依存電荷移行断面積の比較

(Be²⁺+H(SP₊))衝突系の始状態は16Σ、(Be²⁺+H(2s))衝突系の始状態は16Σと17Σの線形結合

(Be²⁺+H(2s))衝突系

低エネルギー領域：

- ①17Σにあった電子は12Σ、16Σと遷移し、衝突後12Σを経由し17Σに戻る。
- ②16Σにあった電子は11Σに遷移し、衝突後16Σに戻る。
- ③回転結合により16Σは11Πに、11Σからは7Πを経由し、11Πに遷移。

高エネルギー領域：

- ①途中の過程に違いはあるが低エネルギー領域の①、②の反応が起こる。
- ②回転結合による遷移では16Σは11Πに遷移した後7Πに遷移するが、その後は多岐にわたるため複雑になる。

(Be²⁺+H(2s))衝突系と(Be²⁺+H(SP₊))衝突系の断面積の比較

- ・両者の断面積のエネルギー依存性は似ている。
- ・全衝突エネルギー領域にわたり、(Be²⁺+H(2s))衝突系の方が全断面積が小さい。
← Be²⁺(1s5l)状態への遷移が起こりにくいため。
- ・高エネルギー領域ではBe²⁺(1s6l)状態の断面積も小さい。
← (Be²⁺+H(2s))衝突系では始めに16Σと17Σに別れて電子が存在するため、16Σから11Π(12Π、15Πなどへ遷移)への遷移確率が減少するため。

6.3.4 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2p)$) 衝突系

$$\Psi_{2p} = 0.41632471\Phi_{\text{SP}_+} - 0.40000883\Phi_{\text{SP}_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

・ $\text{Be}^{2+}(1s^2nl; n=4,5,6)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=50\text{au}$ 。

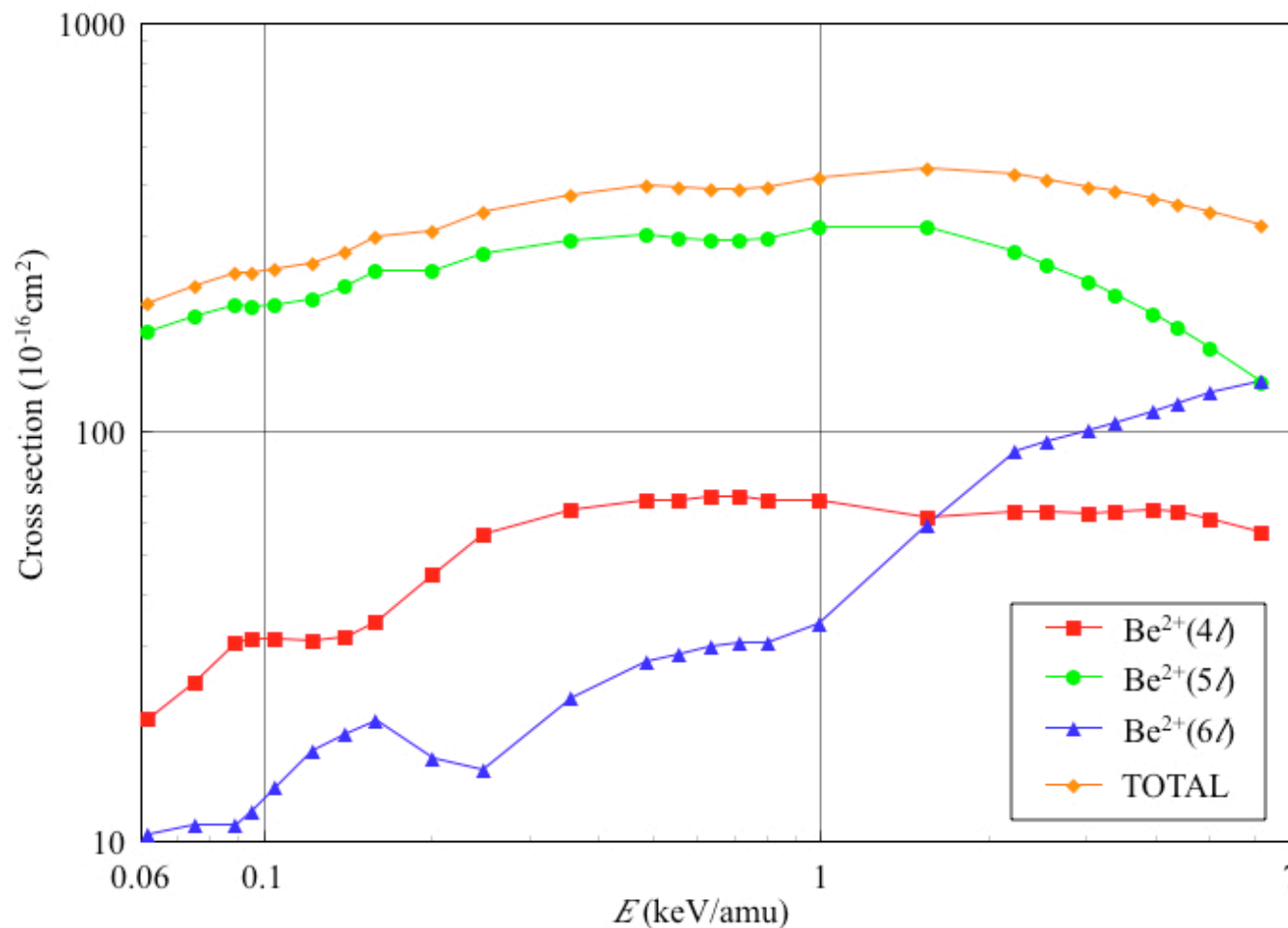


図6.15 ($\text{Be}^{3+} + \text{H}(2p)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積(一重項を經由)

・全断面積は中間の衝突エネルギーでブロードな山を持つ。

・低、中間エネルギー領域：
 $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ の寄与大
 (特に $\text{Be}^{2+}(1s5s)$,
 $\text{Be}^{2+}(1s5p)$)

(Be²⁺+H(2p))衝突系と(Be²⁺+H(SP₋))衝突系の断面積の比較

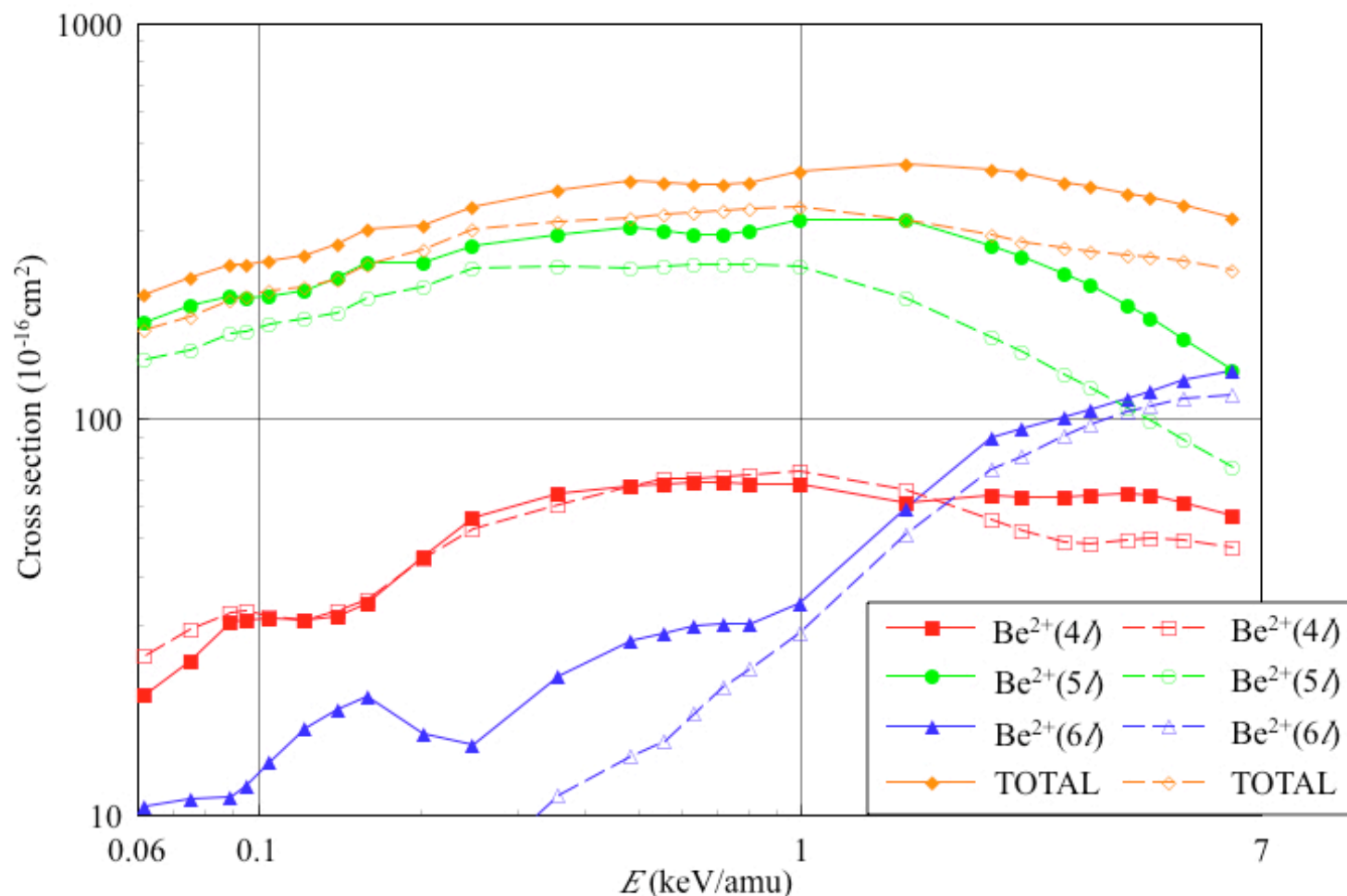


図6.16 (Be³⁺+H(SP₋))衝突系(破線)と(Be³⁺+H(2p))衝突系(実線)の n 依存電荷移行断面積の比較

($\text{Be}^{2+}+\text{H}(\text{SP}_-)$)衝突系の始状態は 17Σ と 11Π の線形結合、($\text{Be}^{2+}+\text{H}(2\text{p})$)衝突系では更に 16Σ が加わる。

($\text{Be}^{2+}+\text{H}(2\text{p})$)衝突系

低エネルギー領域：初期確率として 16Σ と 17Σ に電子が存在

- ① 17Σ にあった電子は 12Σ 、 16Σ と遷移し、衝突後 12Σ を経由し 17Σ に戻る。
- ② 16Σ にあった電子は 11Σ に遷移し、衝突後 16Σ に戻る。
- ③ 11Π にあった電子は 7Π に遷移した後、 11Π に戻る。 7Π からは 11Σ 、 11Π からは 16Σ に遷移する。

高エネルギー領域

- ①低エネルギー領域の①、②、③の反応が起こるが途中で他の状態への遷移も起こる。

($\text{Be}^{2+}+\text{H}(2\text{p})$)衝突系と($\text{Be}^{2+}+\text{H}(\text{SP}_-)$)衝突系の断面積の比較

- ・両者の断面積のエネルギー依存性は似ている。
- ・全衝突エネルギー領域にわたり、($\text{Be}^{2+}+\text{H}(2\text{p})$)衝突系の方が全断面積が大きい。
 ← $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ 状態への遷移が起こりやすいため（低エネルギー領域では $\text{Be}^{2+}(1s5s)$ 、 $\text{Be}^{2+}(1s5p)$. . . 状態への遷移が起こりやすく、高エネルギー領域では $\text{Be}^{2+}(1s5l)$ 状態のすべての状態、更には $\text{Be}^{2+}(1s6l)$ 状態へも遷移が起こる ようになる）。
- ・低エネルギー領域では $\text{Be}^{2+}(1s6l)$ 状態の断面積は($\text{Be}^{2+}+\text{H}(2\text{p})$)衝突系の方が大きい。

研究成果概要

- ・緊密結合方程式を有限の核間距離から解きながら、2s、2p 状態にある水素原子を標的とした計算を実行する方法の開発を行った。
- ・開発した方法を用いて、 $(\text{Be}^{2+}+\text{H}(2s), \text{H}(2p))$ 衝突系, 3重項 $(\text{Be}^{3+}+\text{H}(2s), \text{H}(2p))$ 衝突系, 1重項 $(\text{Be}^{3+}+\text{H}(2s), \text{H}(2p))$ 衝突系に対して、電荷交換部分断面積を求め、これまでに求めたシュタルクミキシングしている場合の断面積と比較検討を行った。

結果の概略

- (1) 両者の全断面積の差異はそれほど大きくない (特にH(2p)の場合とH(SP₋)の場合) が、部分断面積がかなり異なる。
- (2) $(X^{q+}+\text{H}(2s))$ 衝突系の方が $(X^{q+}+\text{H}(SP_+))$ 衝突系よりも断面積は小さいが、 $(X^{q+}+\text{H}(2p))$ 衝突系は $(X^{q+}+\text{H}(SP_-))$ 衝突系よりも断面積は大きい。

これからの計画

- (a) 今年度の受託研究で用いた方法を ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2l)$) 衝突系、($\text{C}^{4+} + \text{H}(2l)$) 衝突系に適用し、標的励起水素原子が $\text{H}(2s)$ 、 $\text{H}(2p)$ の場合の状態指定電荷移行断面積の調査を行う。
- (b) ($\text{X}^{q+} + \text{H}(nl)$) 衝突系の逆過程である ($\text{X}^{(q-1)+} + \text{H}^+$) 衝突系に対して、低、中間衝突エネルギー領域で、(多価)イオン-(多価)イオン衝突電荷交換断面積の計算を行う。
- (c) これまでの理論計算はすべて孤立した衝突系を対象としてきた。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の衝突過程を扱う研究を行う。衝突粒子間の相互作用にデバイポテンシャルの形でプラズマの影響を加えて電荷交換断面積の計算を行う。
- (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を行う。
- (e) Be^+ イオン、 Be^{2+} イオンでさえ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) の分光学的データは不足している。計算によって分光学データを充実させる。

謝辞

本調査の推進にあたって便宜を計っていただいた日本原子力研究開発機構、核融合研究開発部門、プラズマ設計グループリーダー小関隆久博士、プラズマ設計グループ仲野友英博士、JT-60システム統合グループ久保博孝博士（前トカマク解析グループ）、ご指導とご協力をいただいた原研・光量子シミュレーション研究グループ（前核データセンター）白井稔三博士（故）、大阪大学基礎工学科鈴木慎悟准教授（前科学技術振興事業団（科技団）、原研・光量子シミュレーション研究グループ）に厚くお礼を申し上げます。

計算の実行にあたり協力していただいた新潟大学理学部化学科量子化学研究室の学生鶴貝匠君、小林直紀君、松原裕也君、阿部泉さんに感謝します。