

ヘリウム原子・イオン衝突による原子・ 分子の反応断面積の経験式作成V

大阪ニュークリアサイエンス協会 委託調査

大阪府立大学工学研究科

堀 史説

計算手法

- ・ 最小二乗プログラム：ALESQ (*produced by T.Tabata & R.Ito*)
- ・ 実験データソース：京都大学 ～2008
C.F.Barnett, ed. H.T.Hunter et al., Oak Ridge Natl.
Lab. Rep. ORNL-6086/V1 (1990)
- ・ 上記のプログラムにより実験データソースのフィッティングを行い、反応の経験式（フィッティングパラメータ）を作成する。

手法、計算アルゴリズムについてはJAERI-Research 2003-015に記載

反応の経験式関数

Green-McNeal型経験式関数

Basic Relations

$$f_1(x; c_1, c_2) = \sigma_0 c_1 (x / E_R)^{c_2}$$

$$f_2(x; c_1, c_2, c_3, c_4) = f_1(x; c_1, c_2) / \left[1 + (x / c_3)^{c_2 + c_4} \right]$$

$$f_3(x; c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6) = f_1(x; c_1, c_2) / \left[1 + (x / c_3)^{c_2 + c_4} + (x / c_5)^{c_2 + c_6} \right]$$

$$f_4(x; c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8) = f_1(x; c_1, c_2) / \left[1 + (x / c_3)^{c_2 + c_4} + (x / c_5)^{c_2 + c_6} + (x / c_7)^{c_2 + c_8} \right]$$

$$f_5(x; c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8, c_9, c_{10}) = f_1(x; c_1, c_2) / \left[1 + (x / c_3)^{c_2 + c_4} + (x / c_5)^{c_2 + c_6} + (x / c_7)^{c_2 + c_8} + (x / c_9)^{c_2 + c_{10}} \right]$$

$$\sigma_0 = 1 \times 10^{-16} \text{ cm}$$

$E_R = 99.27 \text{ keV}$ for He, and 74.80 keV for ^3He

E = projectile energy in keV/amu

E_{th} = threshold energy in keV/amu

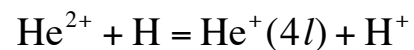
$x = E - E_{th}$ or $(E - E_{th})/a_i$

本年度フィッティングを行った反応

State selective capture

DATA SOURCES ref.

001



002



003



004

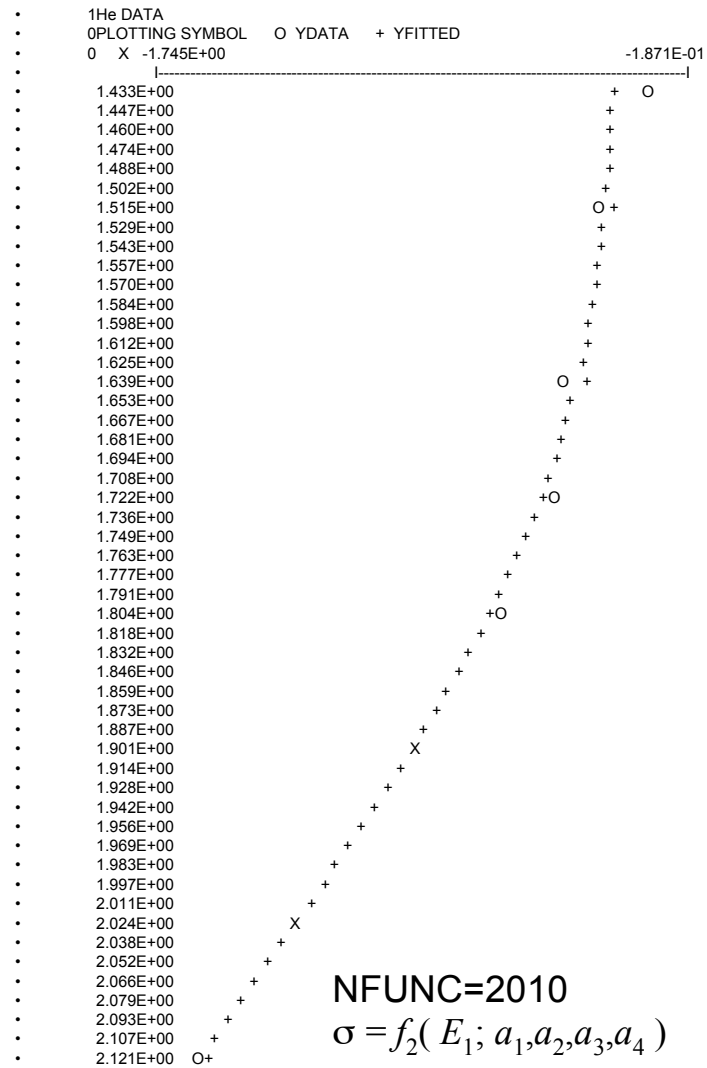


005



1. F.Fremont, K.Sommer, D.Lecler, S.Hicham, P.Boduch, X.Husson, and N.Stolterfoht, Phys. Rev. A 46 222 (1992)
2. G.J.Frieling, R.Hoekstra, E.Smulders, W.J.Dickson, A.N.Zinoviev, S.J.Kuppens, and F.J.Deheer, J. Phys. B 25 1245 (1992)

Rough plot of the analytic expression (+) with initial values of adjustable parameters to compare with data 001 (o).



Fitting parameters;

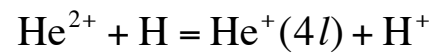
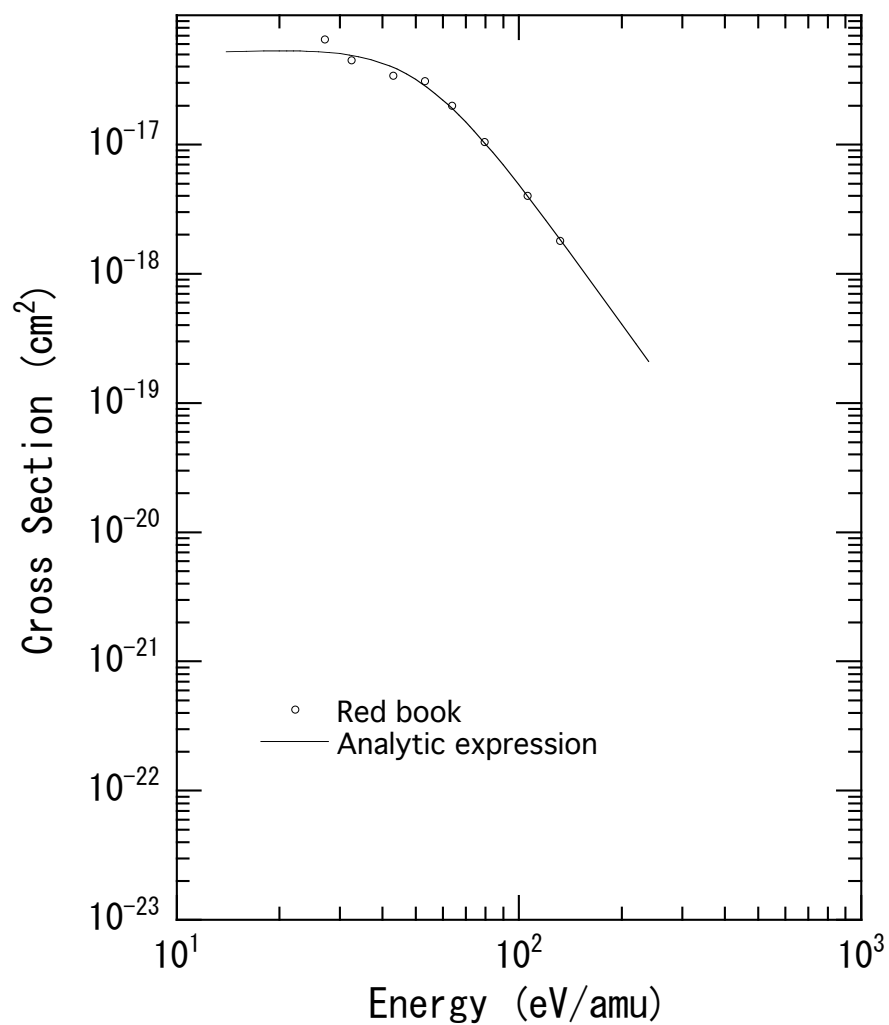
$$a_1 = 6.390E-01$$

$$a_2 = 1.000E-01$$

$$a_3 = 5.180E+01$$

$$a_4 = 3.690E+00$$

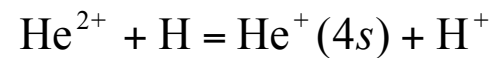
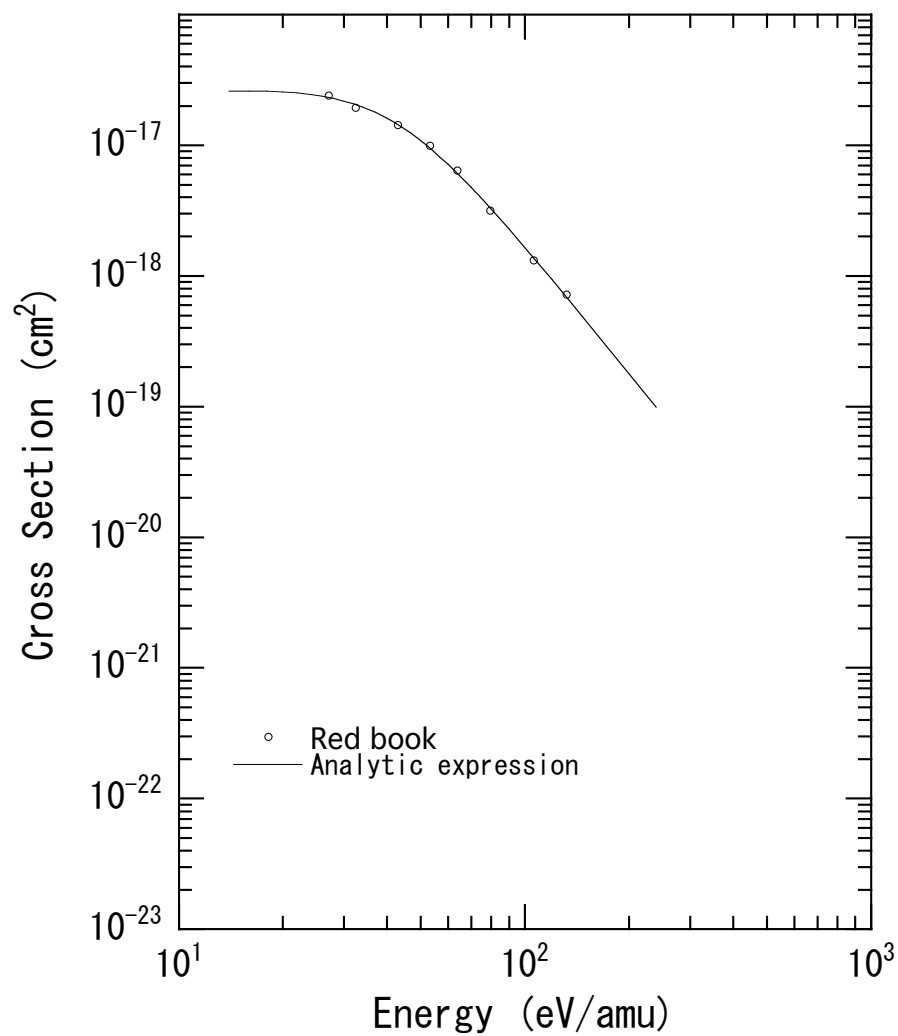
ヘリウム原子、イオン衝突における原子分子の反応断面積の実験値と計算によるフィッティング結果



$$\delta_{\text{rms}} = 10.3\% (n = 4)$$

$$\delta_{\text{max}} = 20.5\%$$

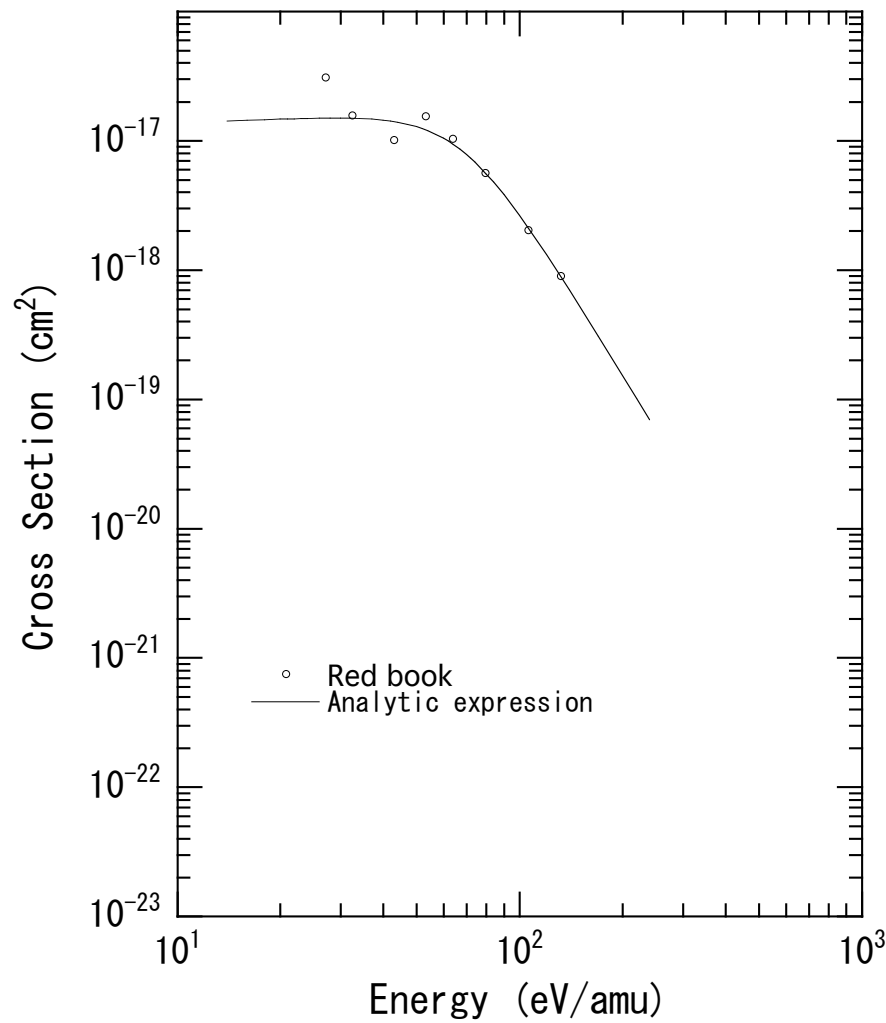
ヘリウム原子、イオン衝突における原子分子の反応断面積の実験値と計算によるフィッティング結果



$$\delta_{\text{rms}} = 4.4\% \quad (n = 4)$$

$$\delta_{\text{maxs}} = 5.4\%$$

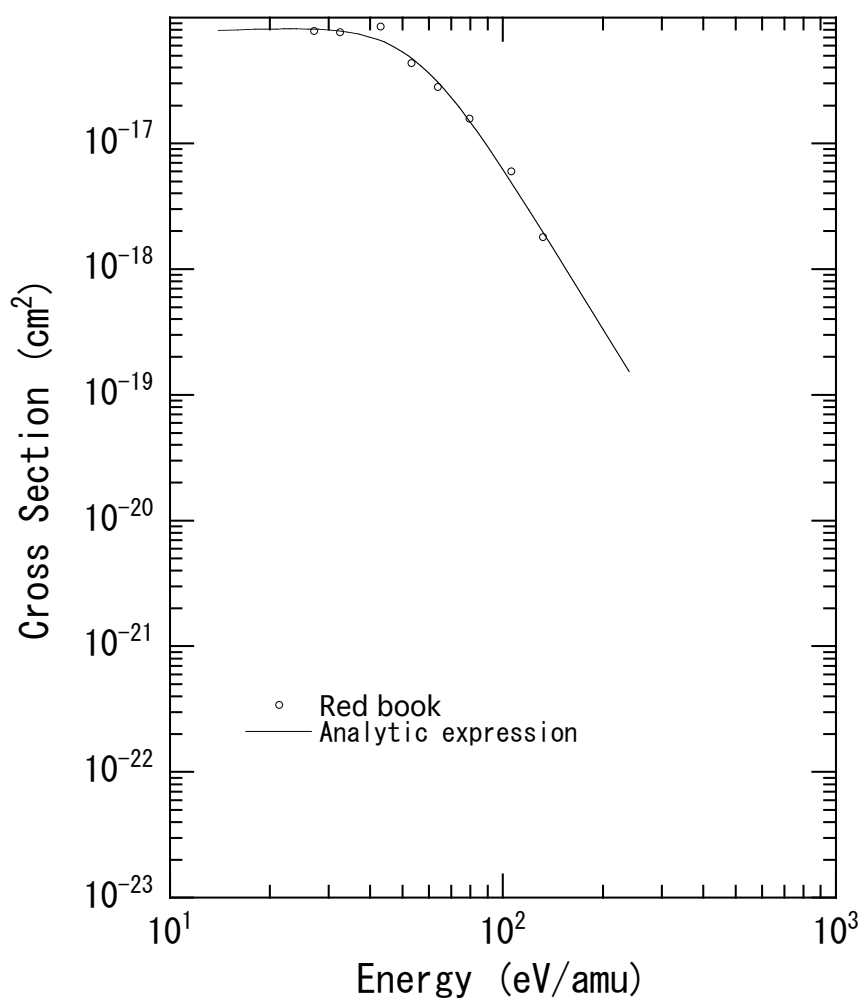
ヘリウム原子、イオン衝突における原子分子の反応断面積の実験値と計算によるフィッティング結果



$$\delta_{\text{rms}} = 24.3\% \quad (n = 4)$$

$$\delta_{\text{max}} = 51.9\%$$

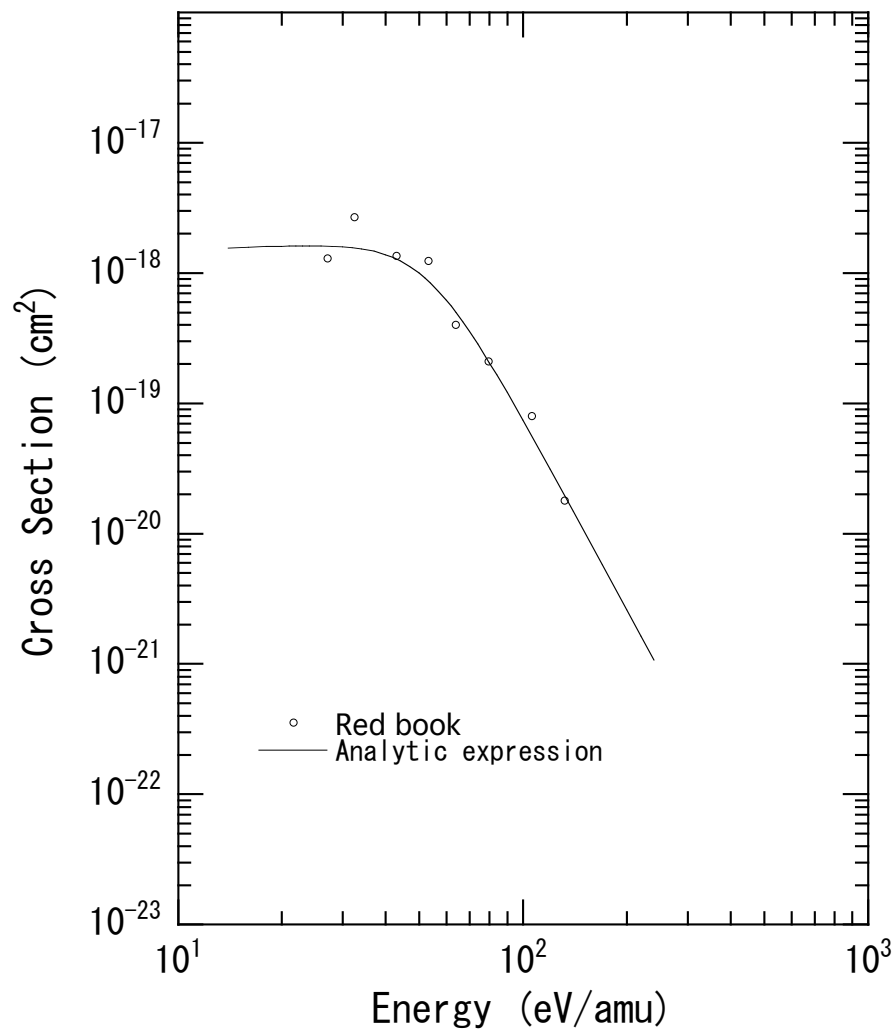
ヘリウム原子、イオン衝突における原子分子の反応断面積の実験値と計算によるフィッティング結果



$$\delta_{\text{rms}} = 12.0\% (n = 4)$$

$$\delta_{\text{max}} = 22.7\%$$

ヘリウム原子、イオン衝突における原子分子の反応断面積の実験値と計算によるフィッティング結果



$$\delta_{\text{rms}} = 24.8\% (n = 4)$$

$$\delta_{\text{max}} = 42.4\%$$

TABLE. Parameters of the Analytic Expressions for He Ion and Atom in Collisions with Atoms and Molecules

No.	E_{\min}	E_{\max}	δ_{rms}	δ_{\max}	$E_{\delta_{\max}}$	E_{R}	E_{th}	m	n	$(a_i, i=1, 2, 3, \dots, n)$			
001	2.71E+01	1.32E+02	10.3	20.5	2.71E+01	9.927E+01	0.000E+00	4	4	6.390E-01	1.000E-01	5.180E+01	3.690E+00
002	2.71E+01	1.32E+02	4.4	5.4	3.25E+01	9.927E+01	0.000E+00	4	4	3.238E-01	1.000E-01	4.212E+01	3.280E+00
003	2.71E+01	1.32E+02	24.3	51.9	2.71E+01	9.927E+01	0.000E+00	4	4	1.728E-01	1.000E-01	6.803E+01	4.341E+00
004	2.71E+01	1.32E+02	12.0	22.7	4.29E+01	9.927E+01	0.000E+00	4	4	9.612E-02	1.000E-01	5.457E+01	4.311E+00
005	2.71E+01	1.32E+02	24.8	42.4	3.25E+01	9.927E+01	0.000E+00	4	4	1.896E-02	1.000E-01	5.267E+01	4.893E+00

$m = 4, n = 4$: NFUNC=2010

$$\sigma = f_2(E_1; a_1, a_2, a_3, a_4)$$

本計算フィッティングにおける問題点

E_R の見直し

Green-McNeal型経験式関数

$$f_1(x; c_1, c_2) = \sigma_0 c_1 (x/E_R)^{c_2}$$

立ち上がり部分はエネルギーのべき関数になっているため、べきの底を dimensionless にしておくのが合理的 Dimensionless にするだけの目的ならば、エネルギーの dimension をもつ定数であれば、値は何でもよいのだが、反応のピークがよく現れるエネルギー付近の値にとると、ピークが一つだけの単純な場合、ピーク付近では E/E_R のべき乗が大体1となり、他の因子がまだ効き始めないので、断面積は近似的に全体にかかる係数 a_1 で与えられることになり、推定が容易になる。

電子入射の多くの原子分子反応では、ピークの生じるエネルギーはリードベルク・エネルギー R_y のオーダーであり、この場合には R_y を用いるのがよい。そして、水素原子入射のときには、

$$E_R = (m_p/m_e)R_y \quad (1)$$

を使うのがよいと思われ、また、その延長で水素分子（または同イオン）、He原子（または同イオン）入射のときには、上式において、 m_p を水素分子と He 原子の質量にそれぞれ置き換えて E_R の値を決めて来た。JAERI-M 93-117 (1993) にまとめられている委託調査の仕事以来のことである。

しかし、経験式の中で、エネルギー E としては keV/amu 単位の値を用いるように指定し、また、図においても eV/amu で表示しながら、 E_R が keV 単位であるのは不合理ではないかと思われる。amu は実質的には dimensionless であり、矛盾というほどではなく、いままでのまでも作成した経験式の精度や使用に支障はないが、考え方として、いささか不徹底である（いままで気づかなかったのは、前担当者の専門が原子分子分野でなく、eV/amu という単位に不慣れだったことによる）。

E_R を E と同じく keV/amu 単位にするということは、すべての原子・分子・イオン入射の場合（電子入射の場合だけは別）に (1) 式を使えばよいということであり、経験式の利用が簡便化される。He 入射だけを考えても、 ^3He というデータがあり、この簡便化は重要である。

以上の考察により、平成16年度以降の成果をJAEA Report にまとめる機会に、 E_R を (1) 式のものに変更しておくのがよいと考える。経験式の精度に有意義の変化は生じないが、各式の a_1 (およびそれと同等の役割をしている adjustable parameter) の値が変わって来る。

新しい係数 (変わる adjustable parameter の値) は換算でも求められるが、自乗平均誤差および最大誤差を有効数字2桁で表に載せているので、2桁目でも変化が生じないか (係数の丸めの割合の微小な相違によって、生じる可能性がある) どうかを、念のためデータを最小自乗法プログラムにかけてチェックし、変化のある場合には表の数値を訂正する必要がある。

今後の予定

- データの経験式化
- a. 京大で集められたデータの残り、18種の断面積について
- b. 他に JAEA から新しいデータの提供があれば取り組む
- He 入射の場合の JAEA Report の完成（前担当者の協力を仰ぐ）
- a. 京大で集められたデータを ORNL Redbook の分類へ振り分ける
- b. 図の作成
- c. E_R の修正に伴う係数と誤差の修正

Acknowledgments

- ・ 本調査の推進にあたってご指導とお世話いただいた原子力機構の核融合研究開発部門トカマク実験グループ仲野友英博士、原子力基礎工学研究部門耐照射性原子力材料開発グループ佐高正雄博士、ならびに経営企画部久保博孝博士に厚くお礼を申し上げます。
- ・ 本調査を行うにあたり、引継ぎから手法にいたるまで貴重な時間をさいてご指導いただいた本調査前任者の多幡達夫博士に感謝いたします。