

水素分子可視発光線解析のための 水素分子衝突輻射モデルの構築

(信州大高周波プラズマにおけるヘリウム・水素分光)

澤田圭司

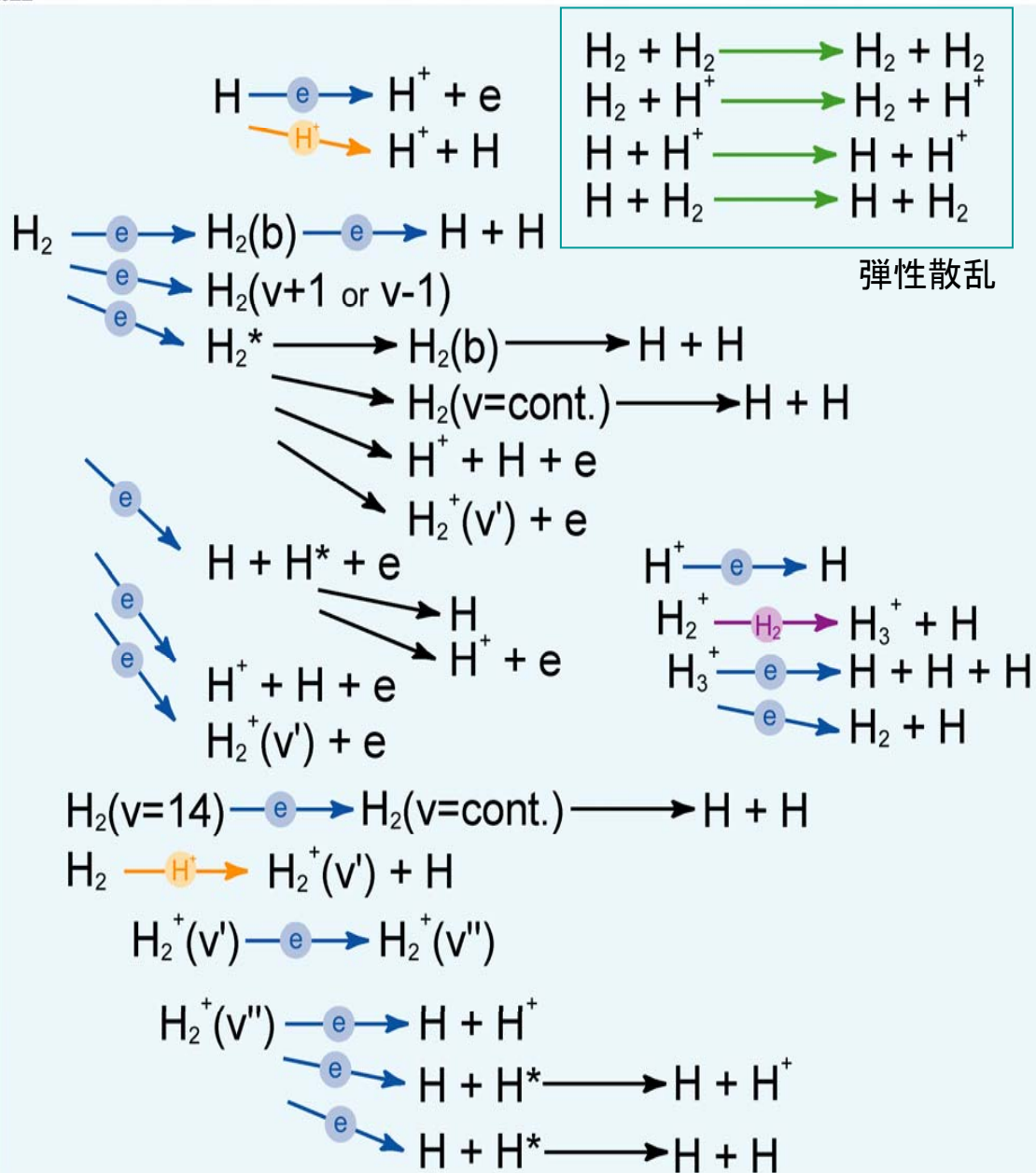
信州大学工学部

ご協力いただいている先生方 江角先生¹⁾, 後藤先生²⁾, 岩前先生³⁾, 高木先生⁴⁾

長野高専¹⁾, 核融合研²⁾, 原子力機構³⁾, 北里大⁴⁾

研究の背景と目的

wall



水素原子衝突輻射モデル 水素分子衝突輻射モデル

励起状態の生成・消滅を記述

- ・励起状態密度 (ポピュレーション)
- ・各種反応の実効的速度係数

中性粒子輸送コード

乱数を用いて各種の反応を追跡

- ・反応までの飛行距離
- ・反応の種類
- ・反応後の飛行方向

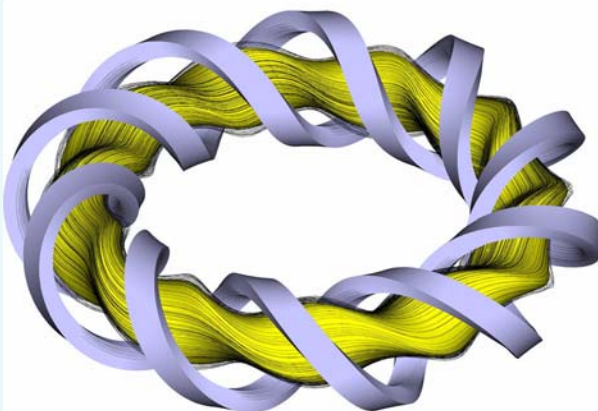
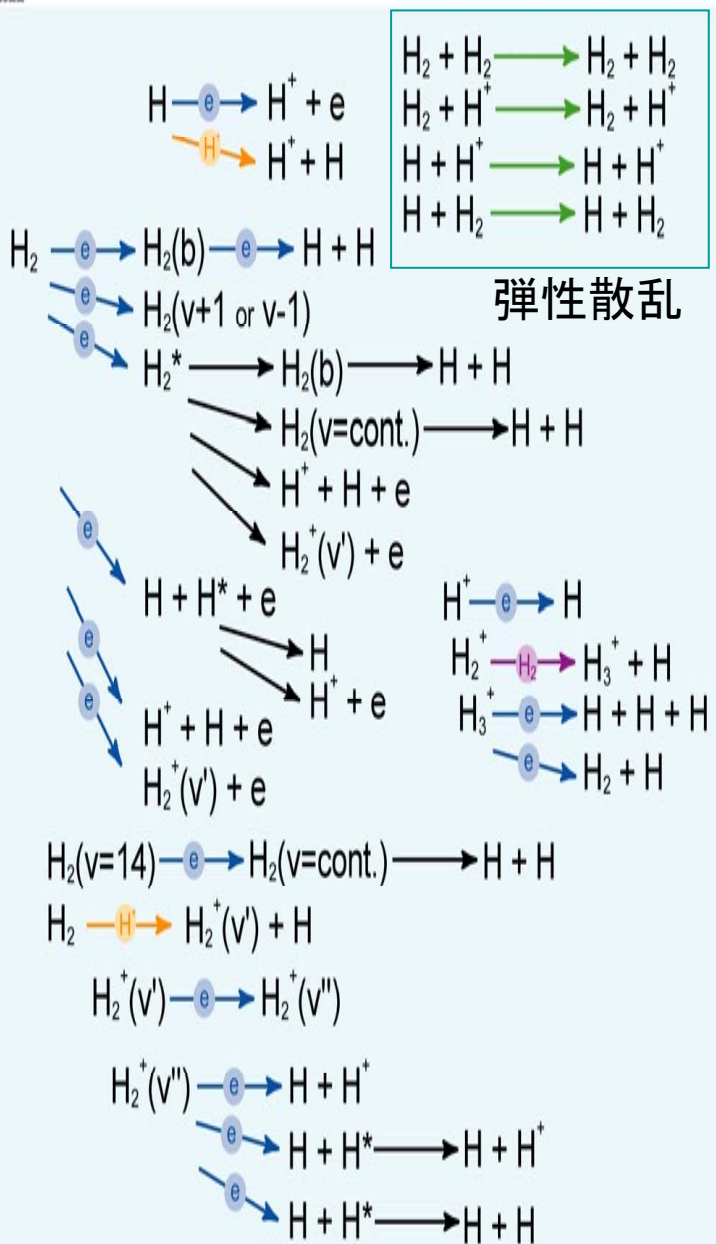
各種粒子の密度・流れを計算

プラズマ周辺部の原子・分子の反応・空間的な流れ・光放射の解明

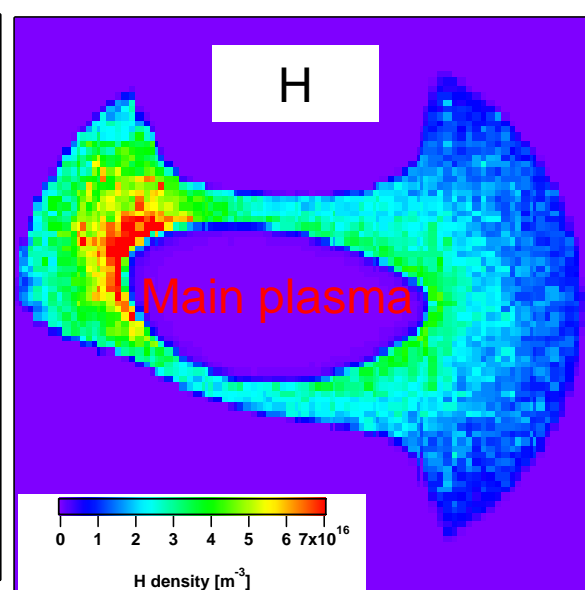
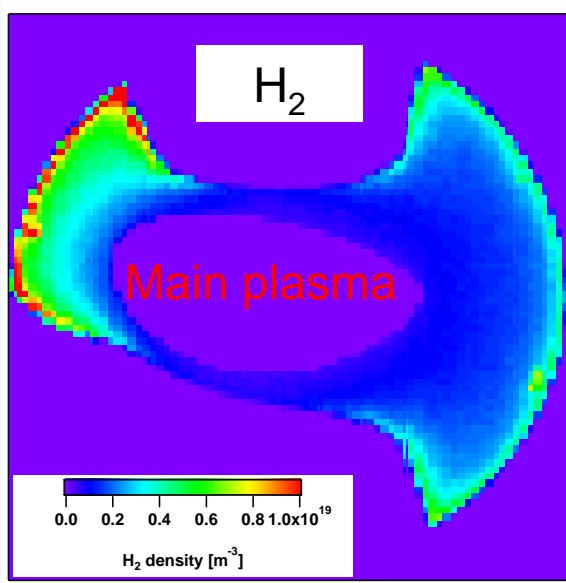
wall

核融合科学研究所
LHD

「プラズマ・核融合学会編 プラズマエネルギーのすべて」
(日本実業出版社刊) より

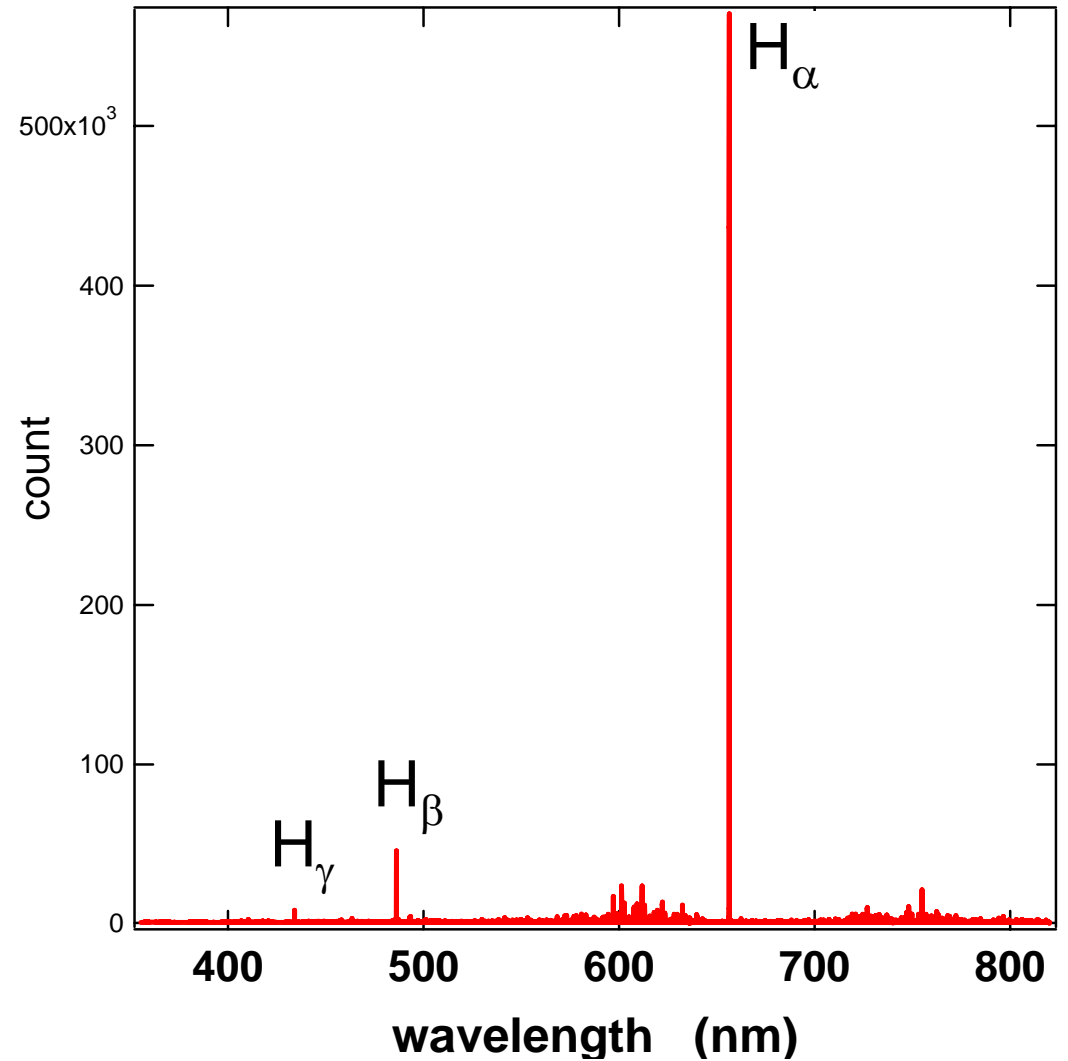
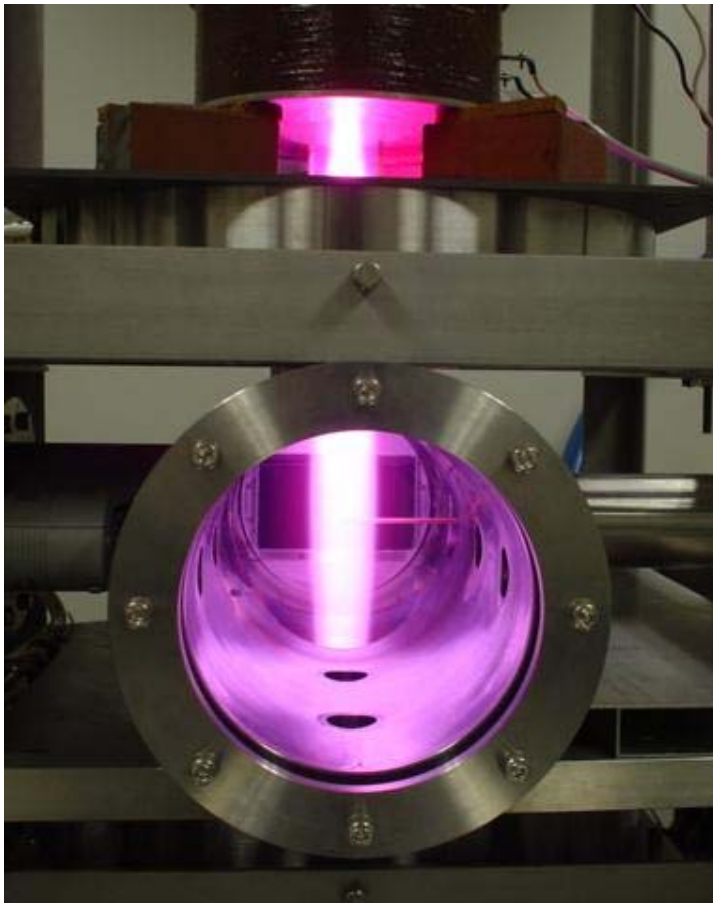


我々の計算機コードによる水素原子・分子密度の計算結果



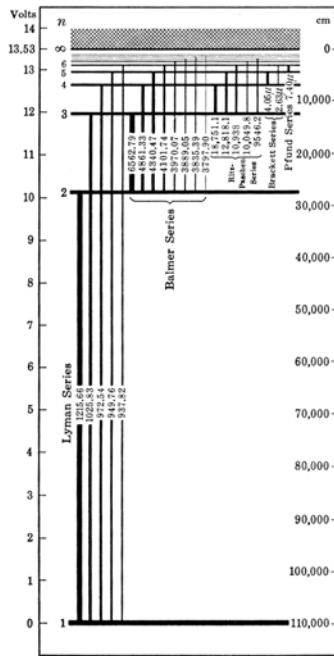
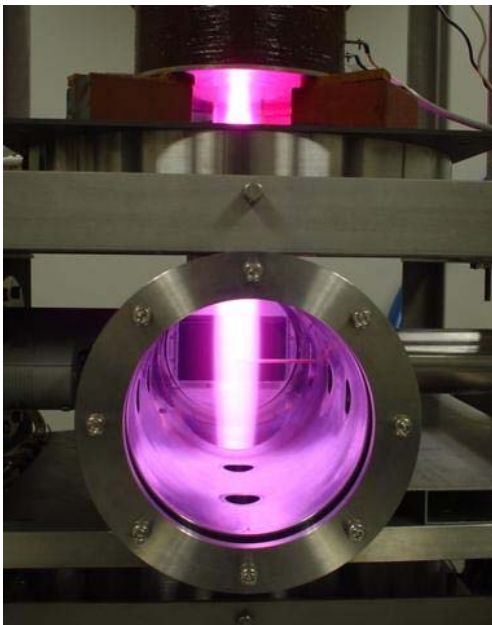
水素放電

衝突輻射モデル・中性粒子輸送コードの検証

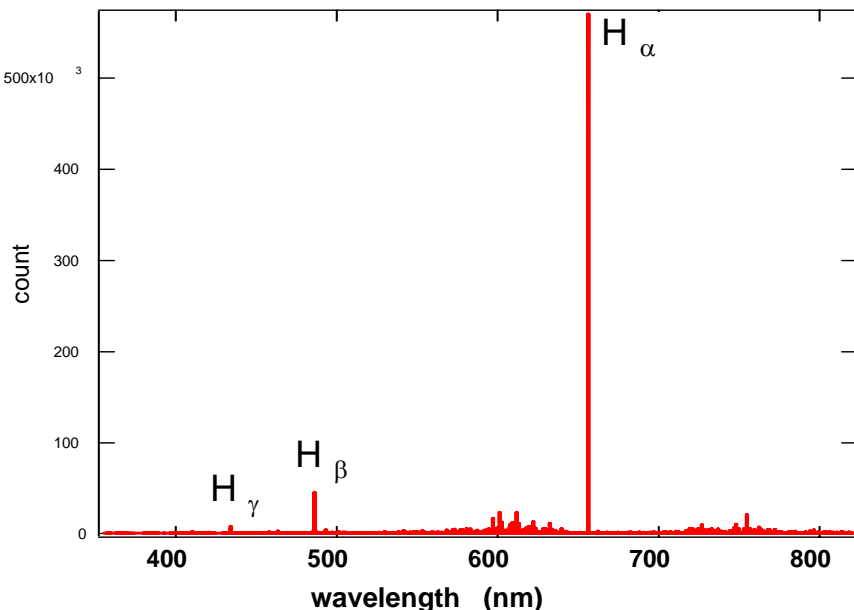
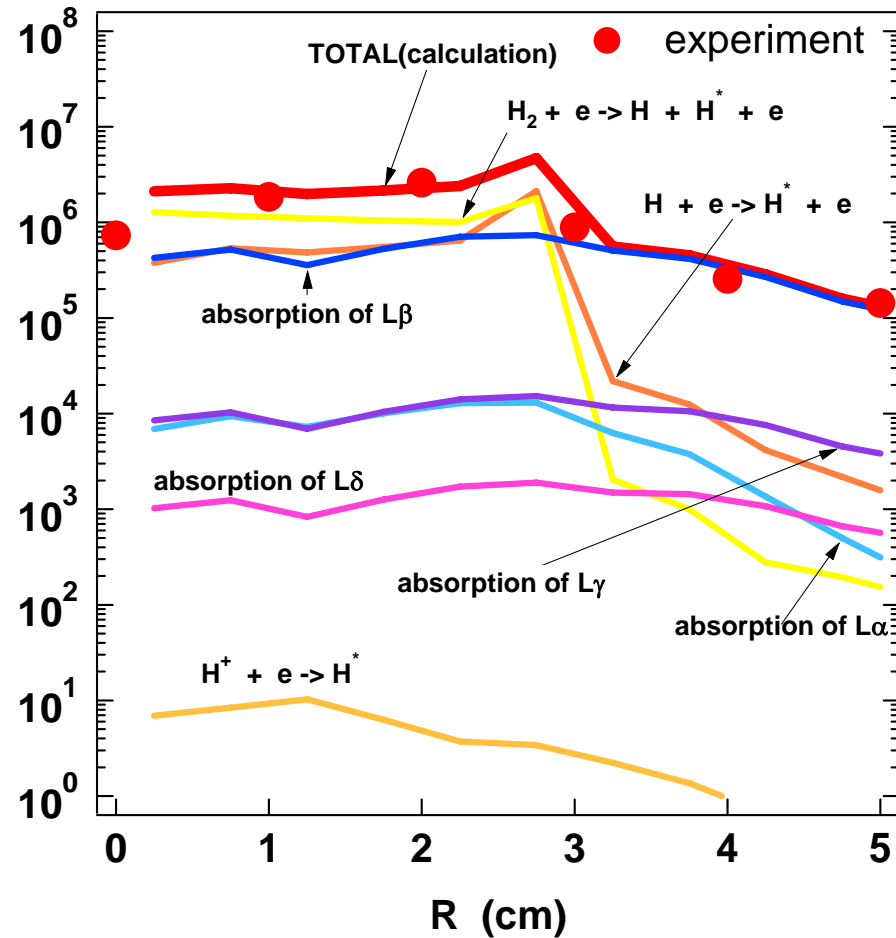


水素放電

水素原子発光線の解析



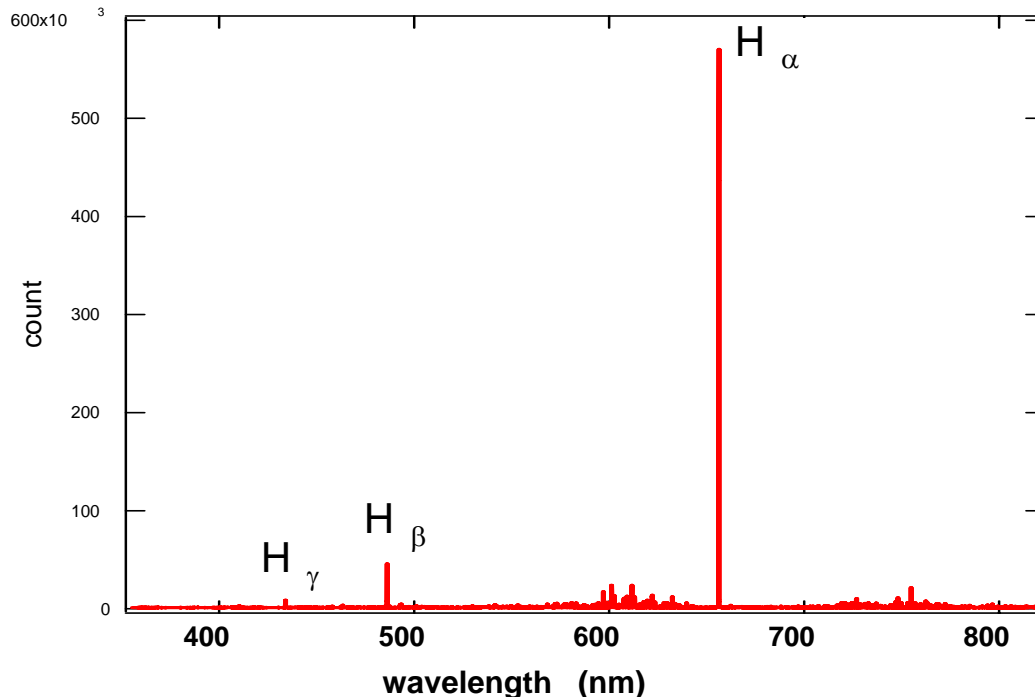
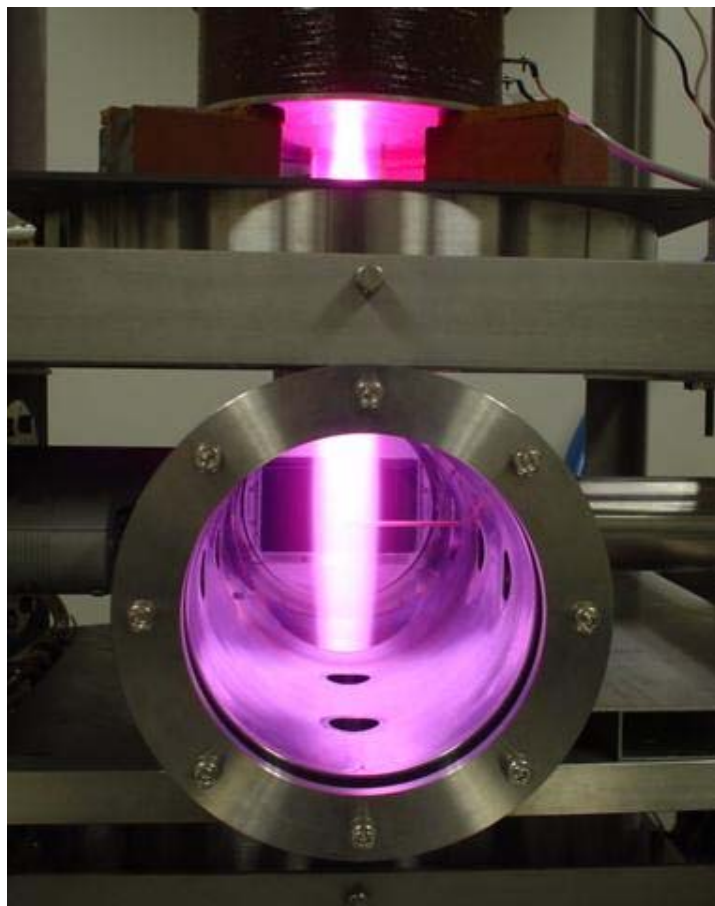
$n(3) \text{ (cm}^{-3}\text{)}$



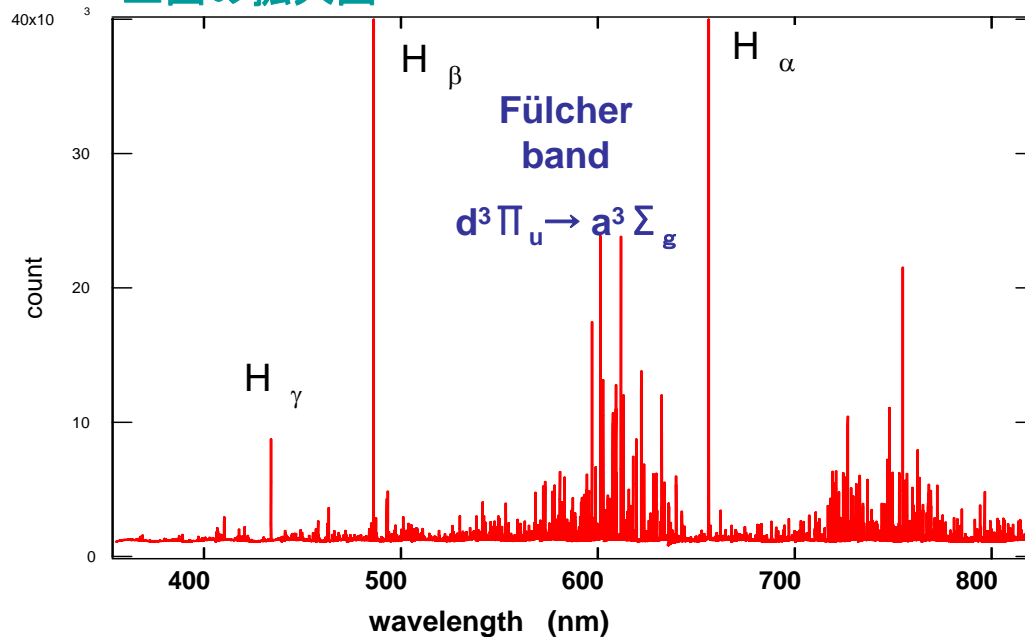
- ・水素原子からの励起原子生成
- ・水素分子からの励起原子生成
- ・輻射輸送

水素放電

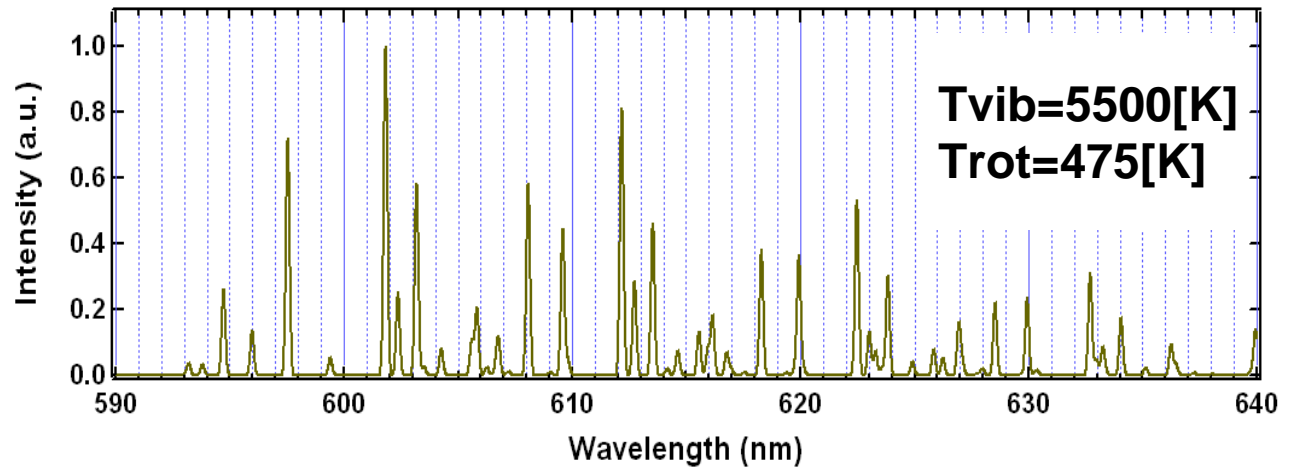
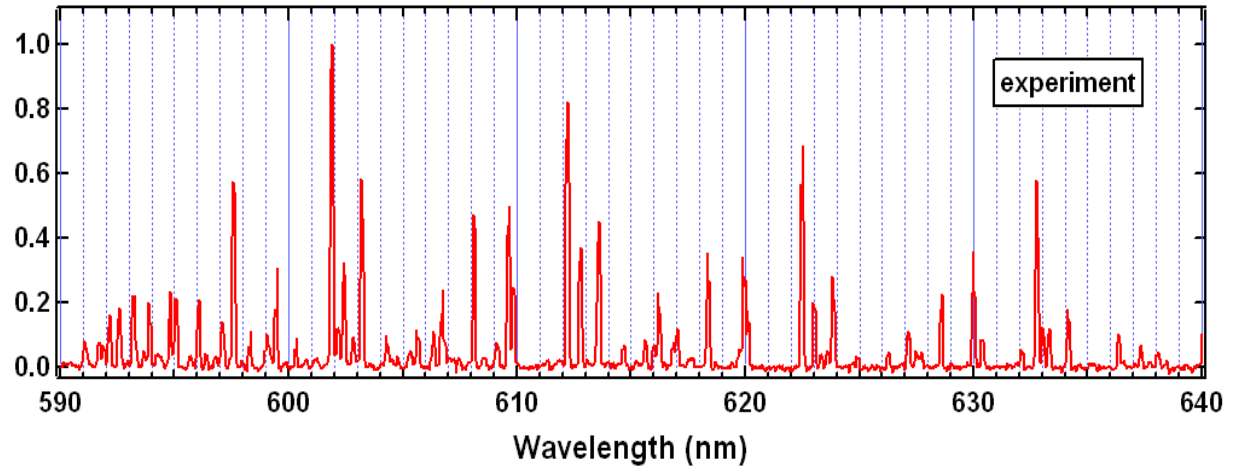
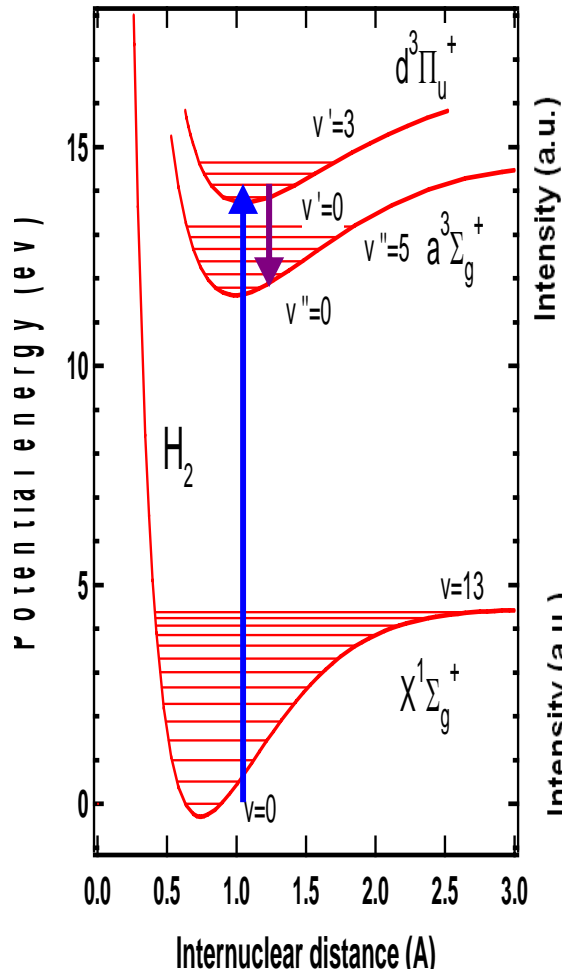
水素分子発光線の解析



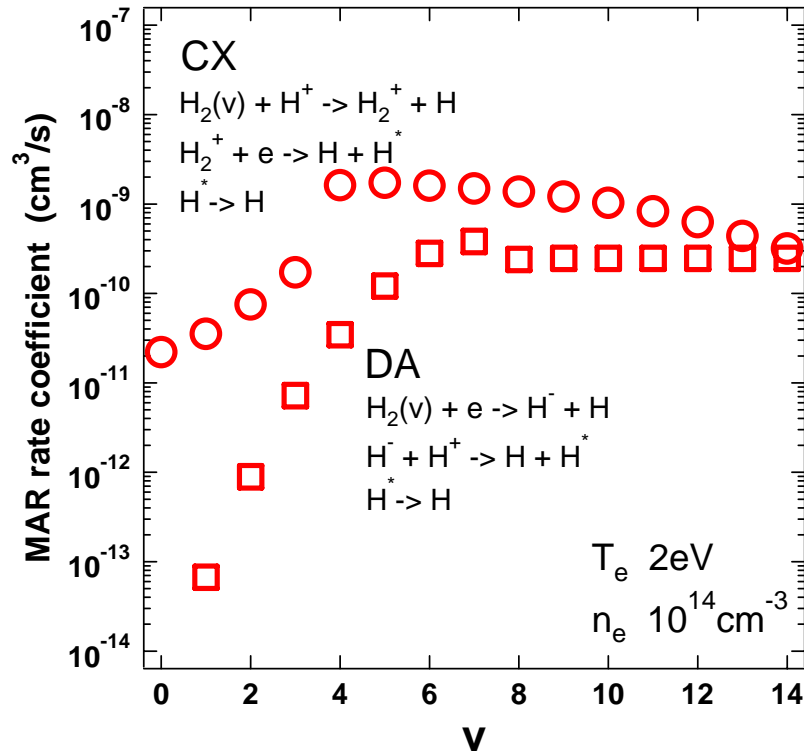
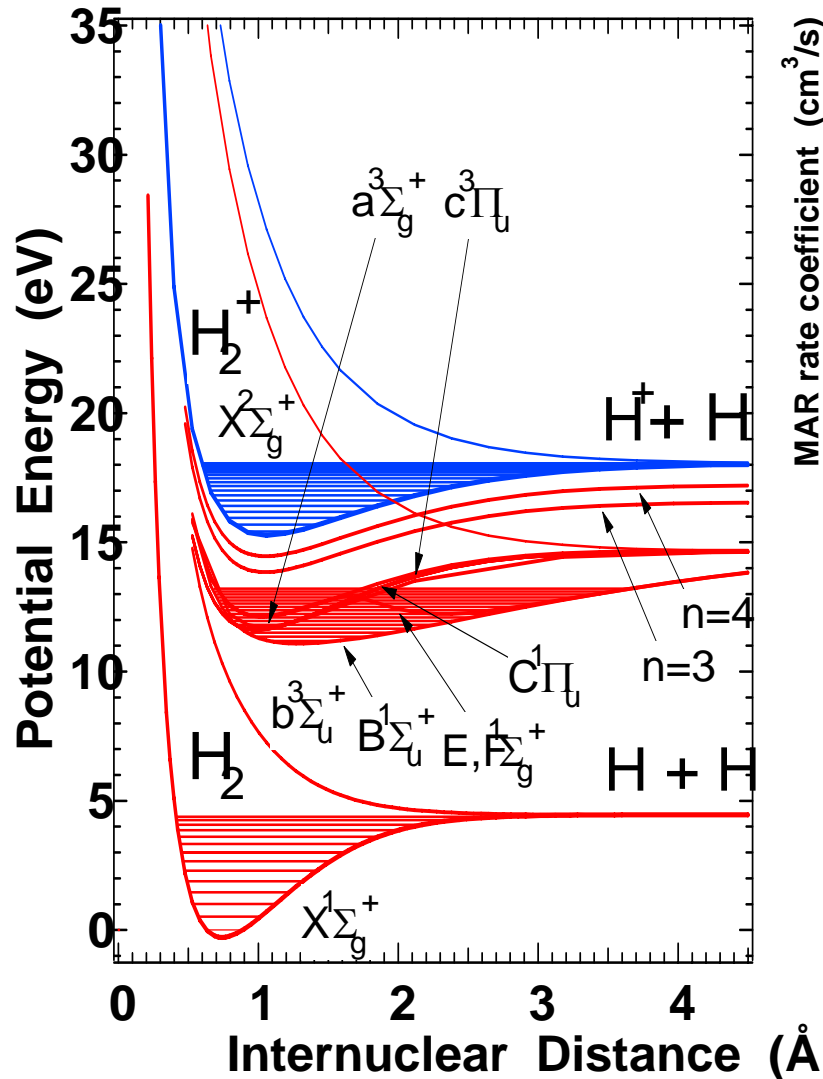
上図の拡大図



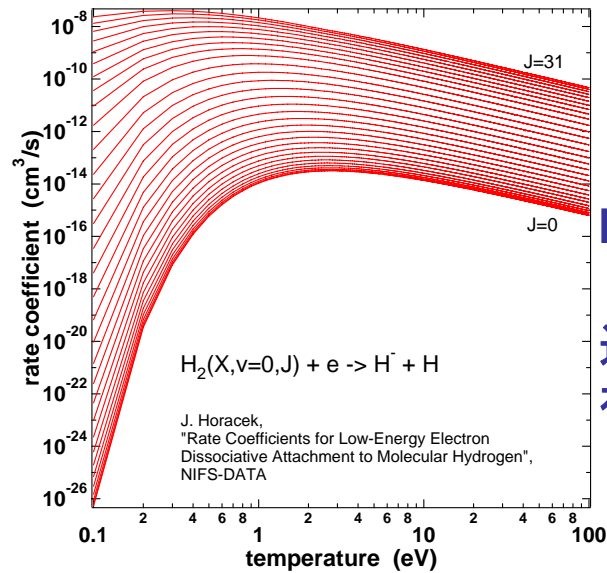
可視分子発光線の解析 Fülcher帯 ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$)



分子活性再結合(MAR)



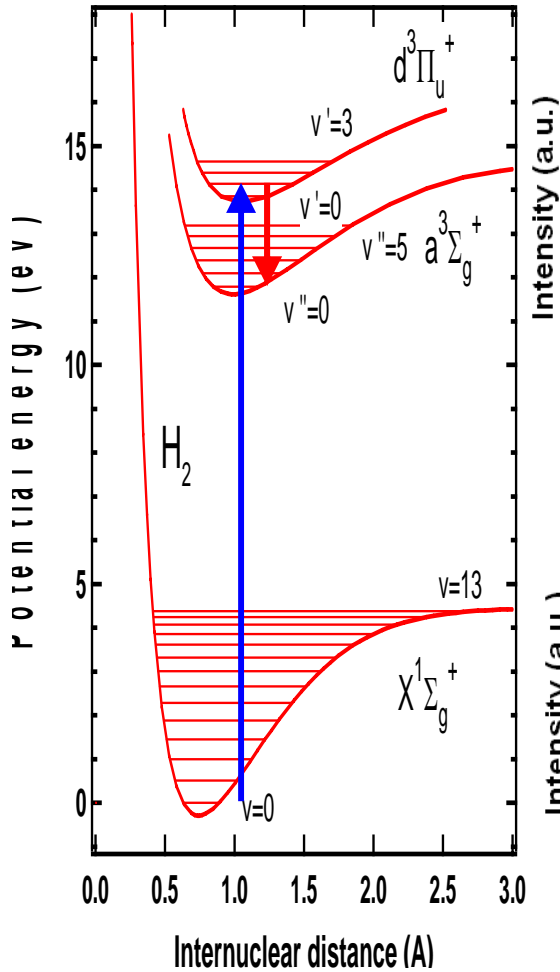
MAR
 実効的
 速度係数



$H_2 + e \rightarrow H^- + H$
 速度係数
 初期回転状態依存性

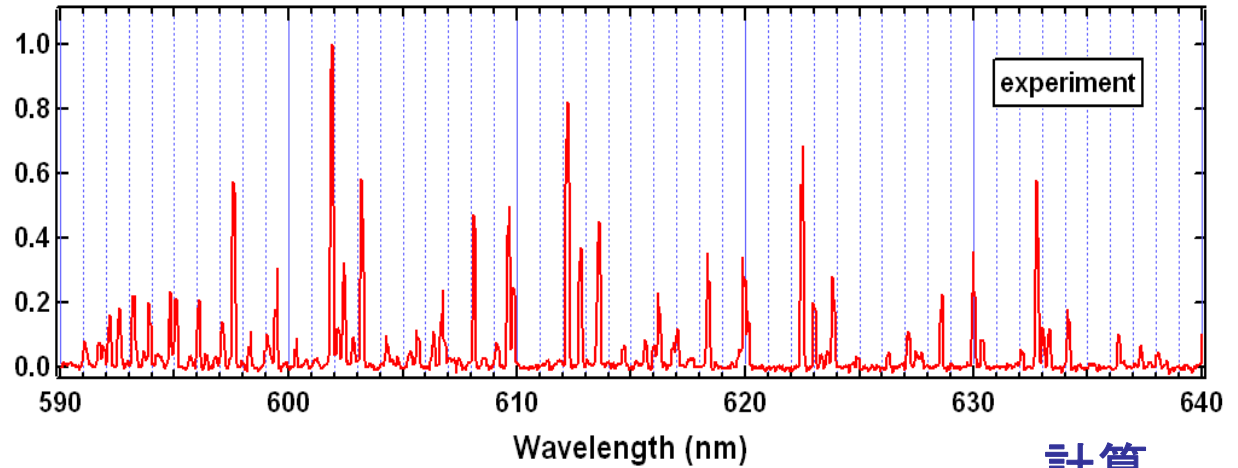
可視分子発光線の解析 Fülcher帯 ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$)

コロナモデル

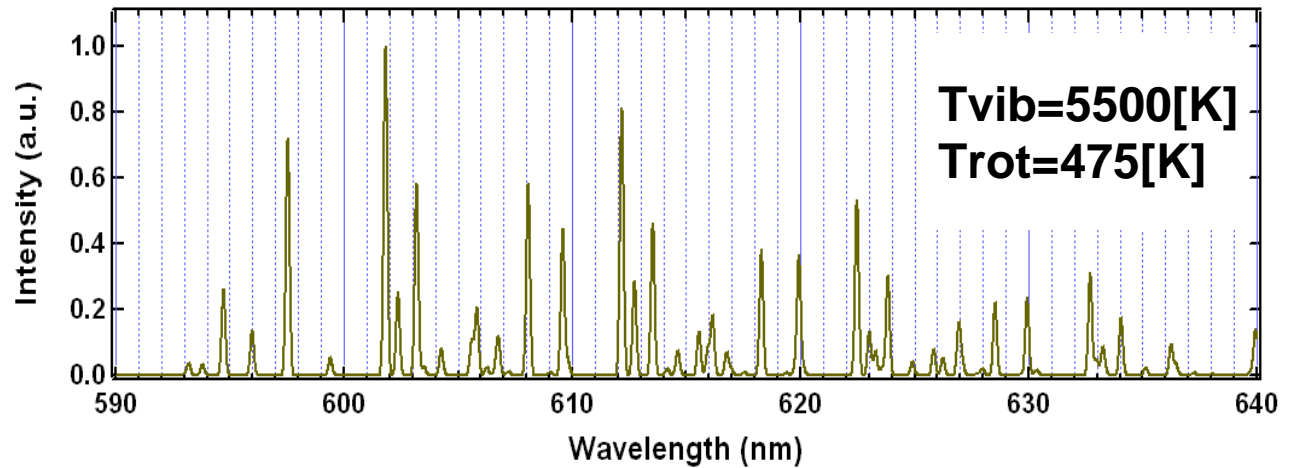


大型装置の電子密度では成立しない

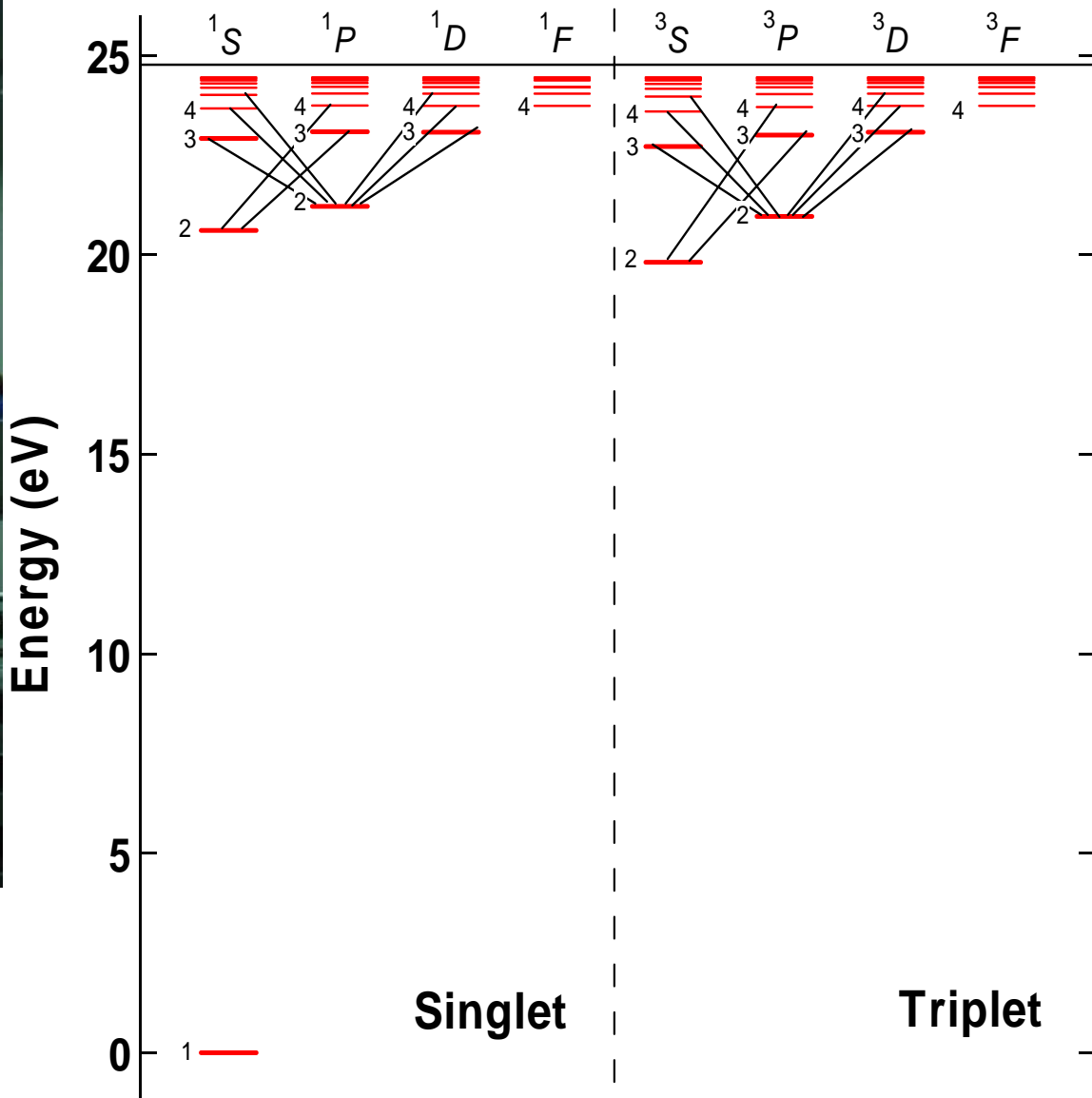
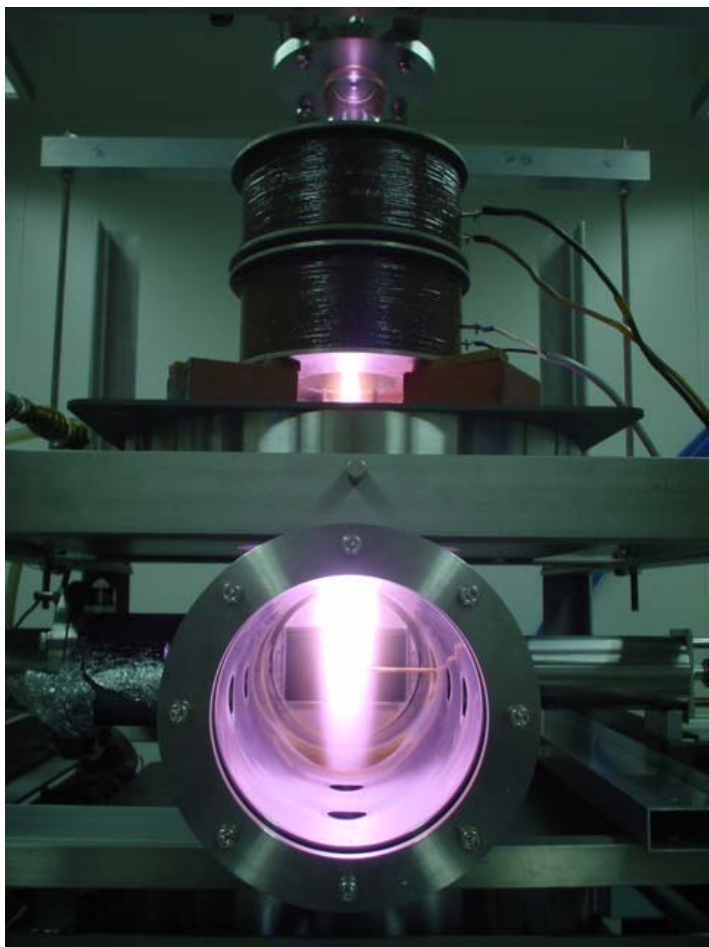
実験



計算



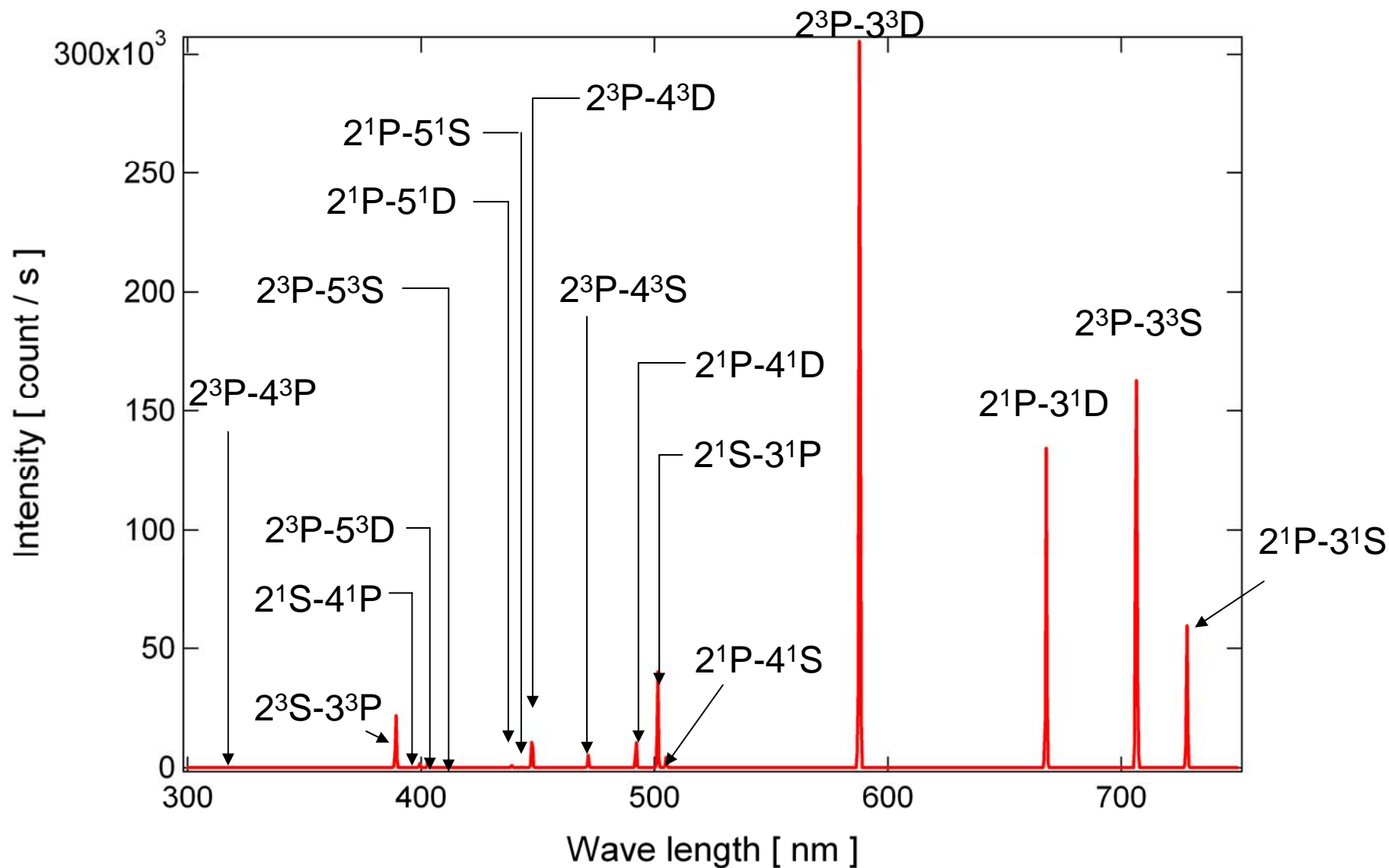
ヘリウム原子発光線解析による電子温度・電子密度の決定



衝突輻射モデルによる
 T_e, n_e 等の決定

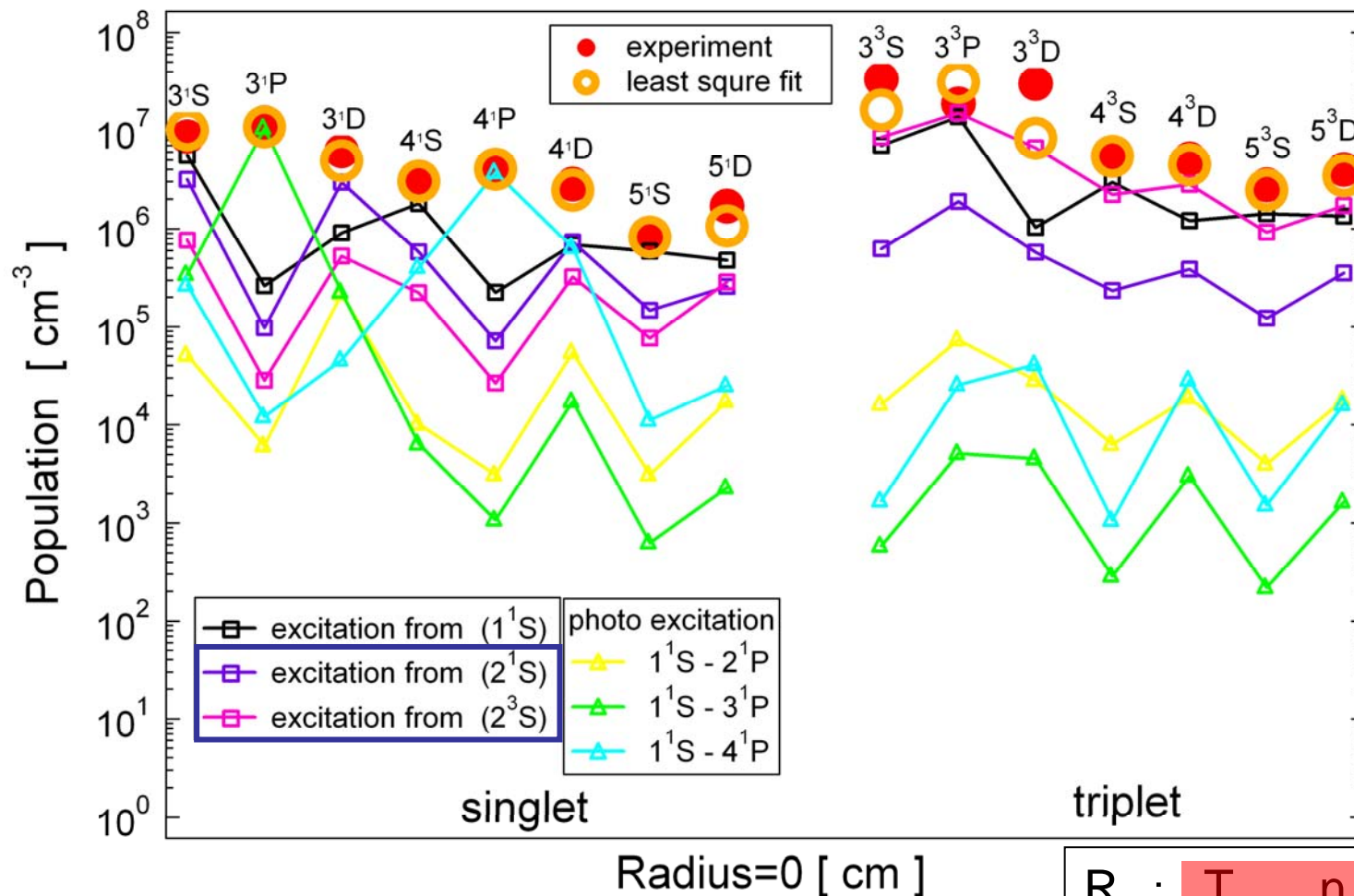
ヘリウム原子発光線

ガス圧 0.03 [Torr]
出力 800 [W]



準安定状態 非定常

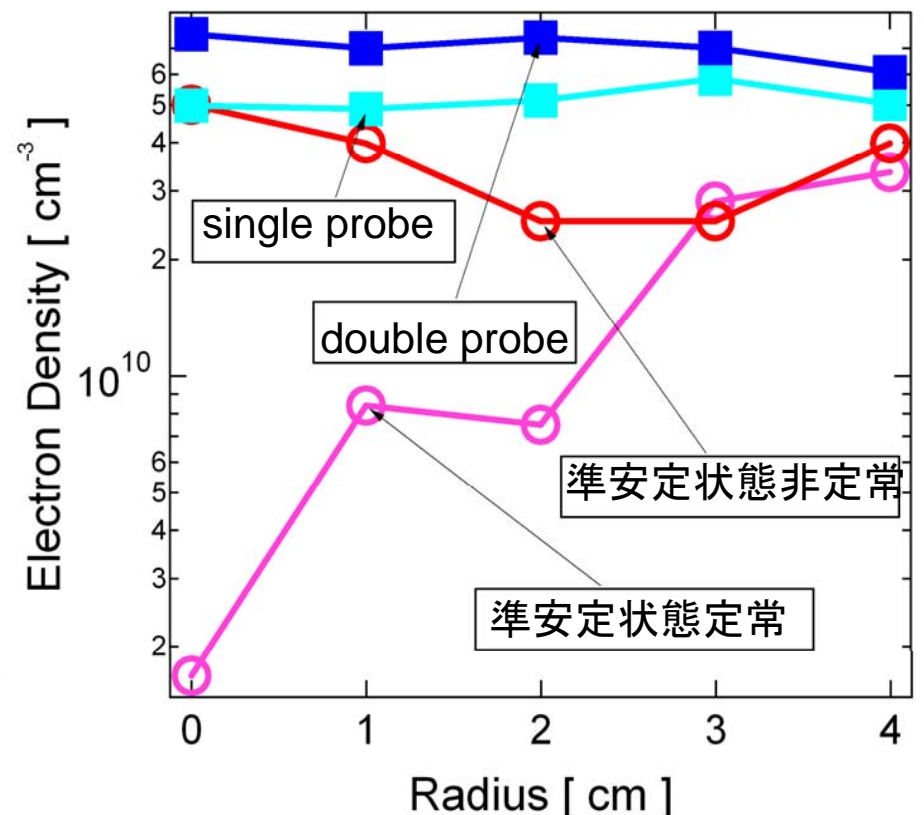
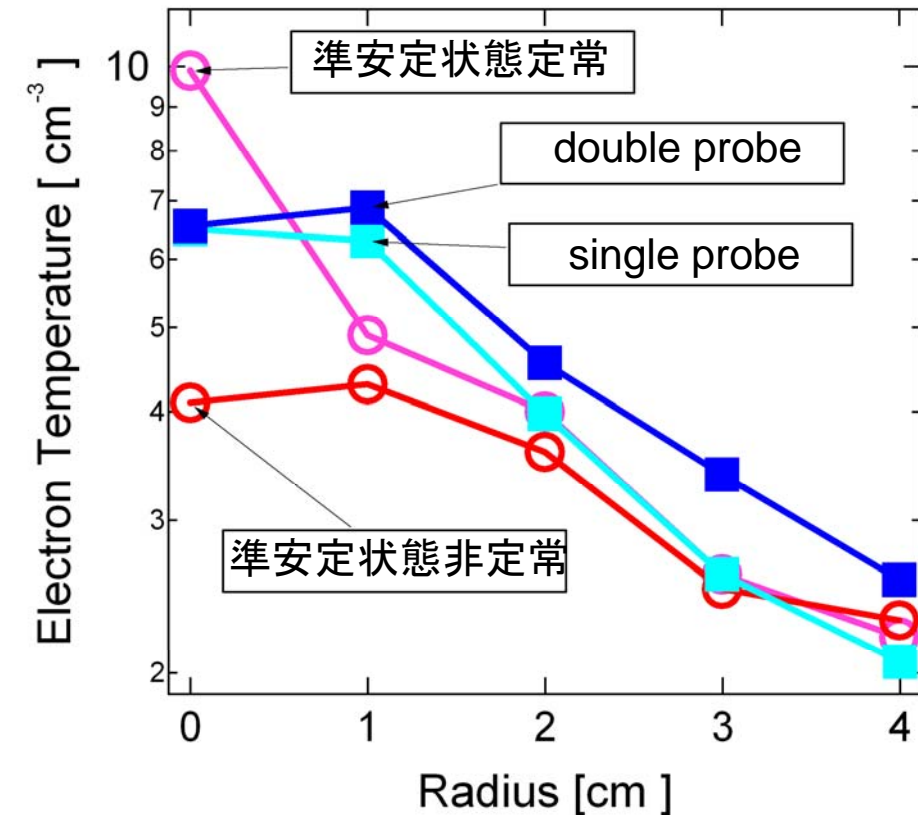
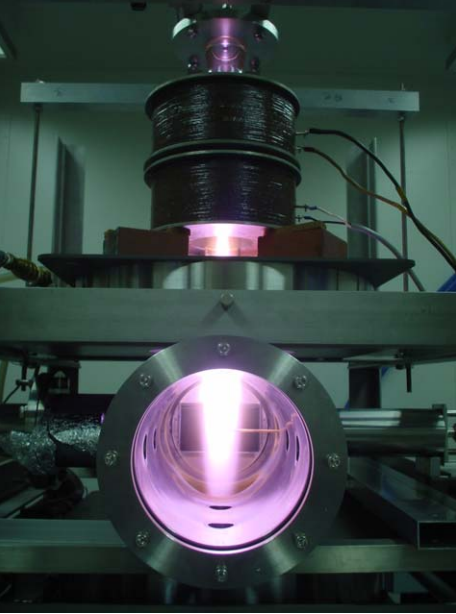
未知数 $T_e, n_e, n(2^1S), n(2^3S), L_{2^1P}, L_{3^1P}, L_{4^1P}$



$$n_{cal}(p) = \underline{R_1(p)n(1^1S)n_e} + \underline{R_2(p)n(2^1S)n_e} + \underline{R_3(p)n(2^3S)n_e} + \underline{R_{2^1P}(p)n(1^1S)L_{2^1P}} + \underline{R_{3^1P}(p)n(1^1S)L_{3^1P}} + \underline{R_{4^1P}(p)n(1^1S)L_{4^1P}}$$

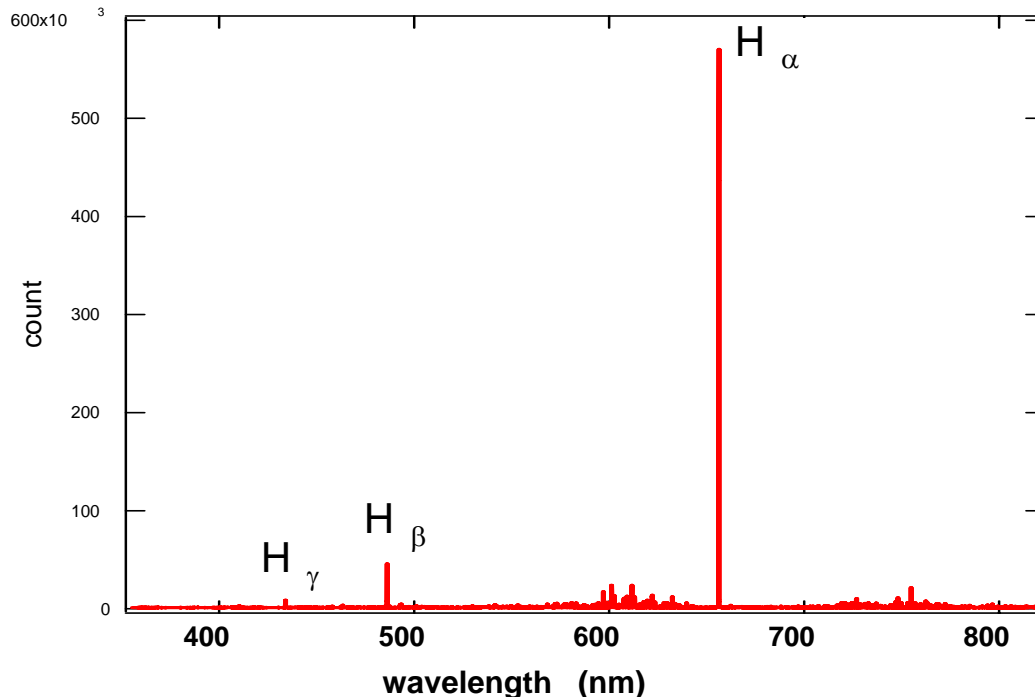
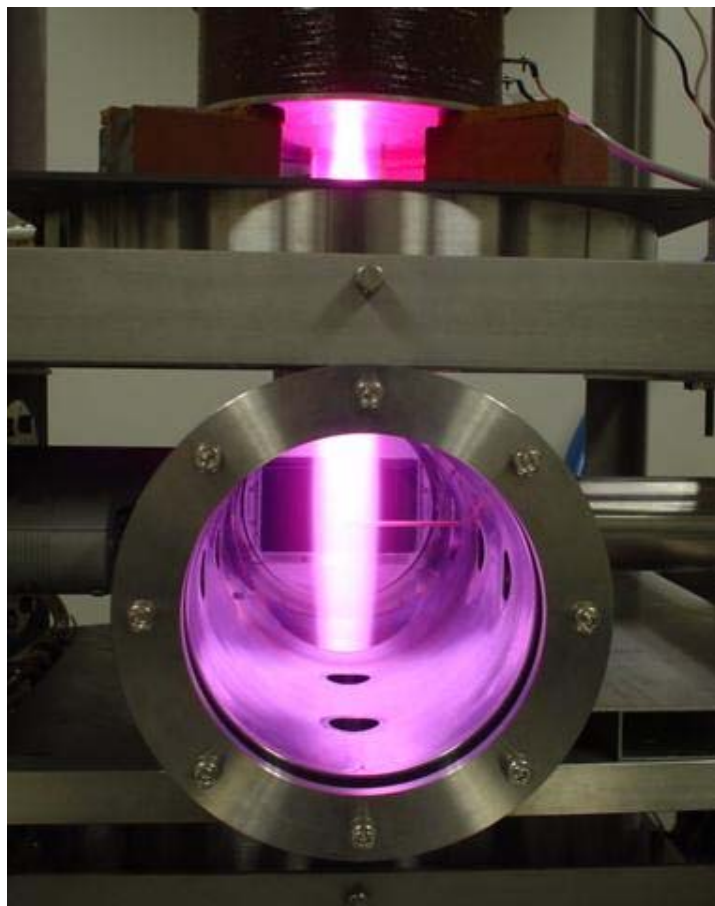
電子温度・電子密度

ヘリウム発光線解析とプローブ解析の比較

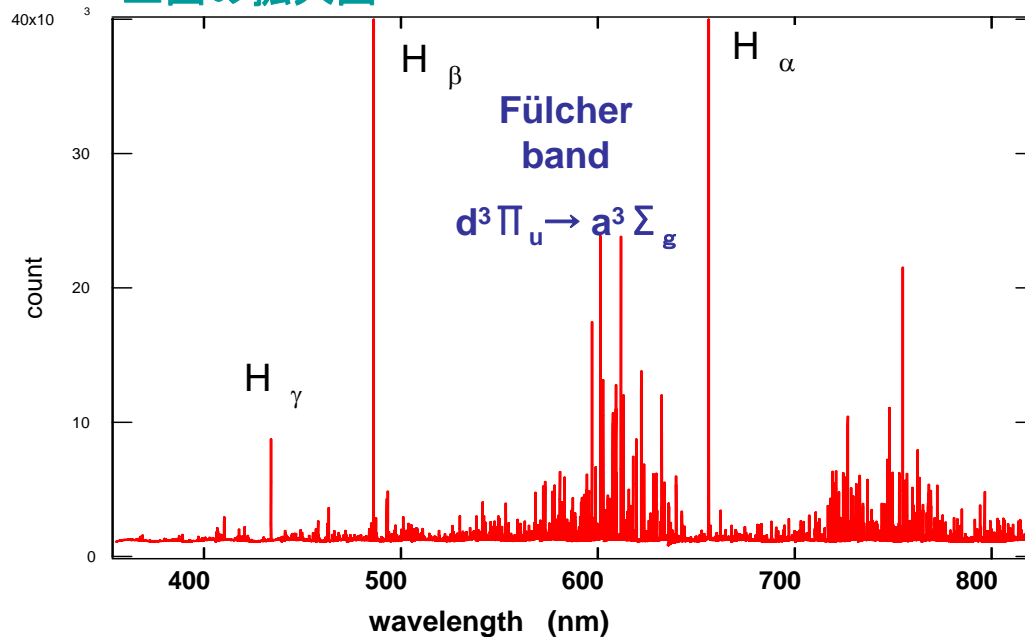


水素放電

水素分子発光線の解析

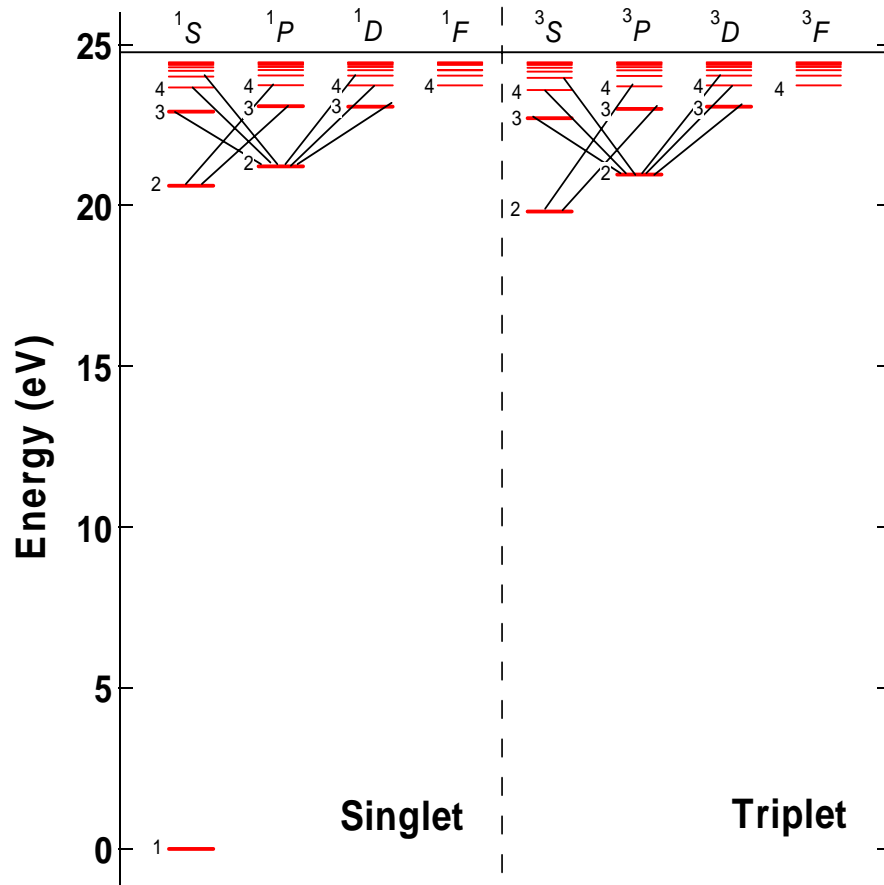


上図の拡大図

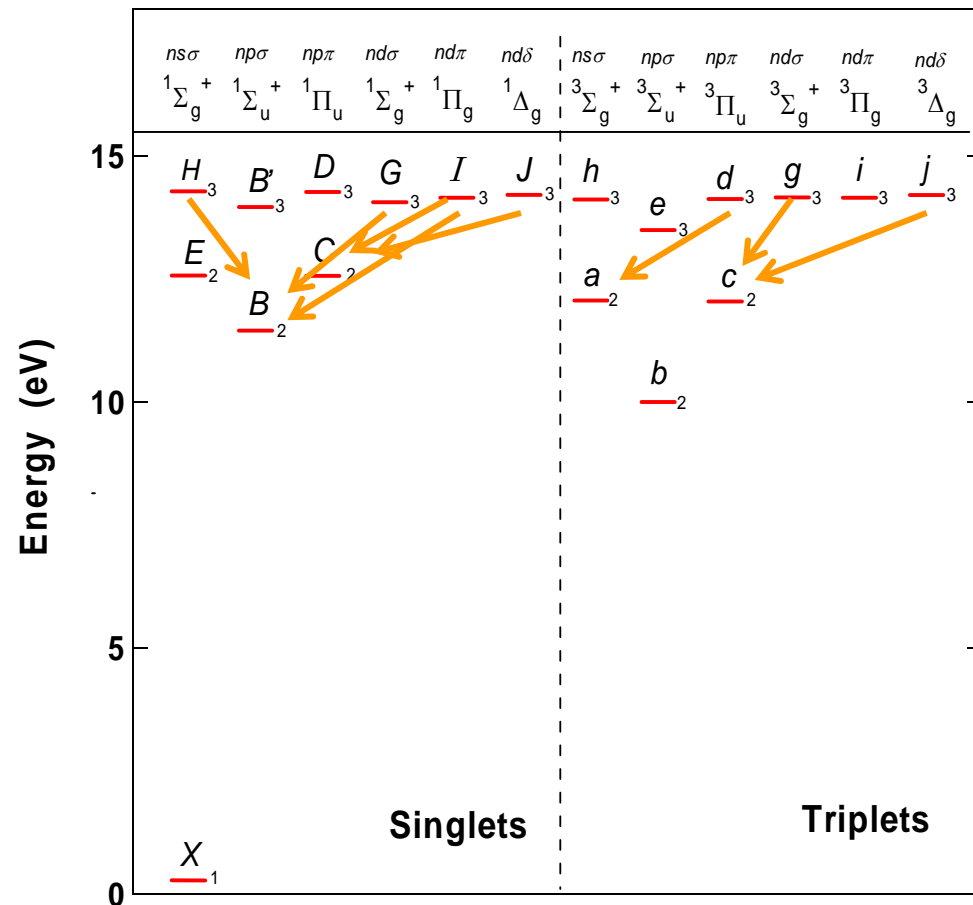


衝突輻射モデルを用いた水素分子発光線解析による 電子温度・電子密度および振動・回転ポピュレーション分布の決定

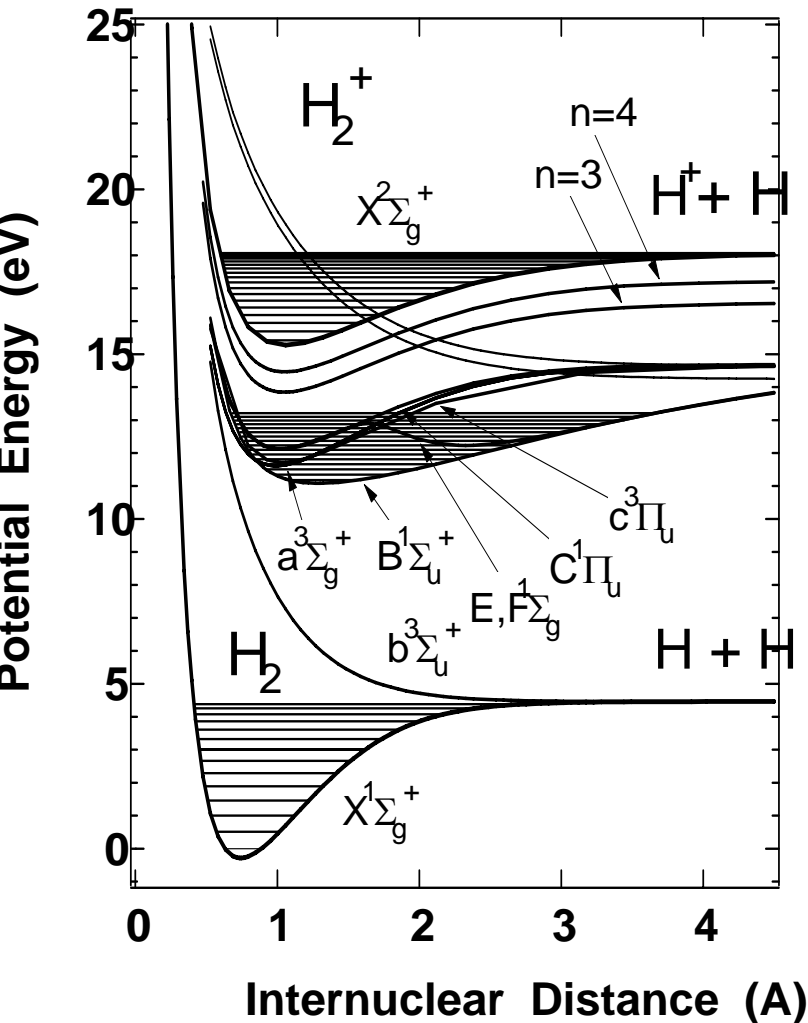
ヘリウム原子



水素分子



水素分子衝突輻射モデルの開発状況

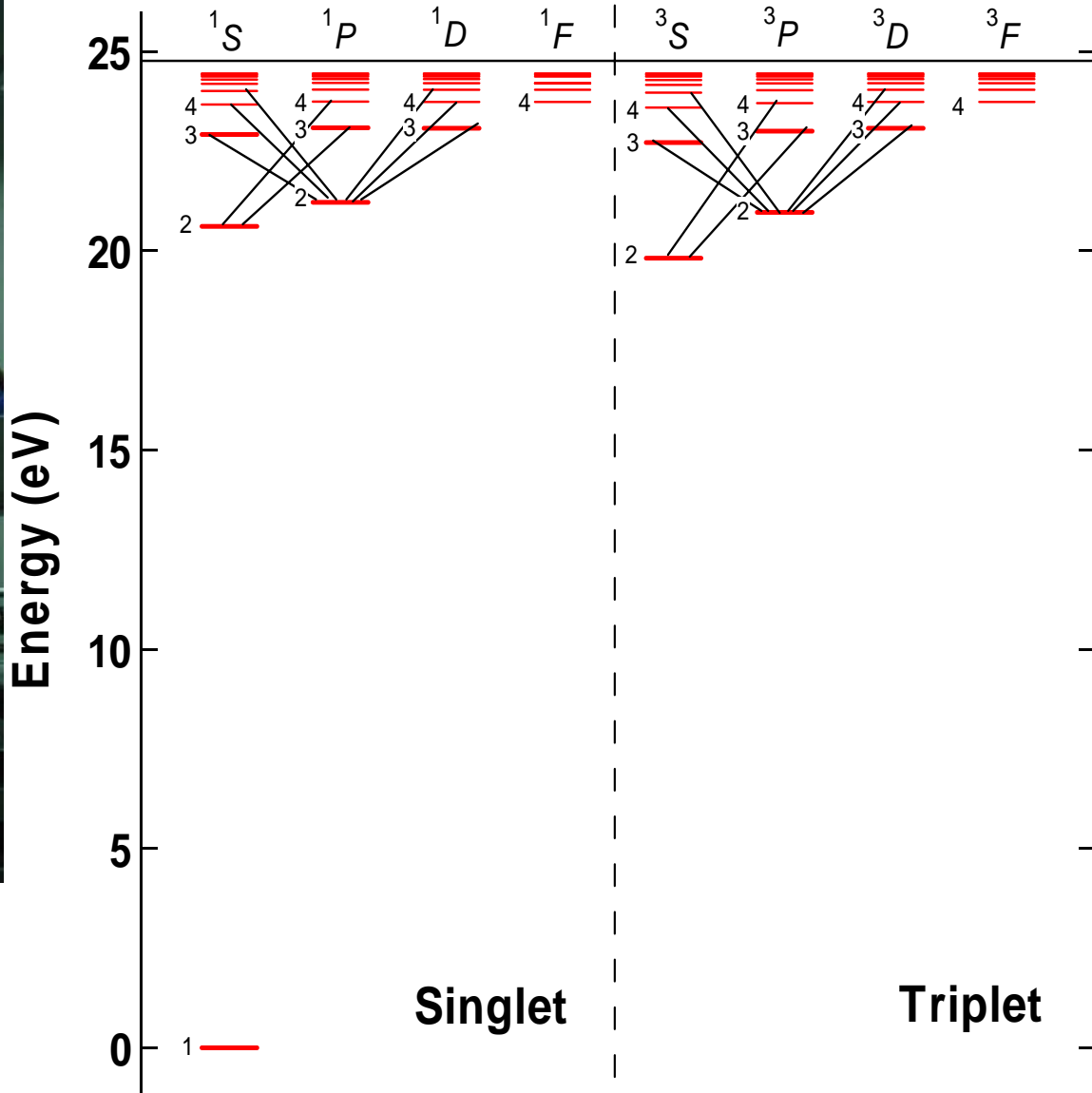
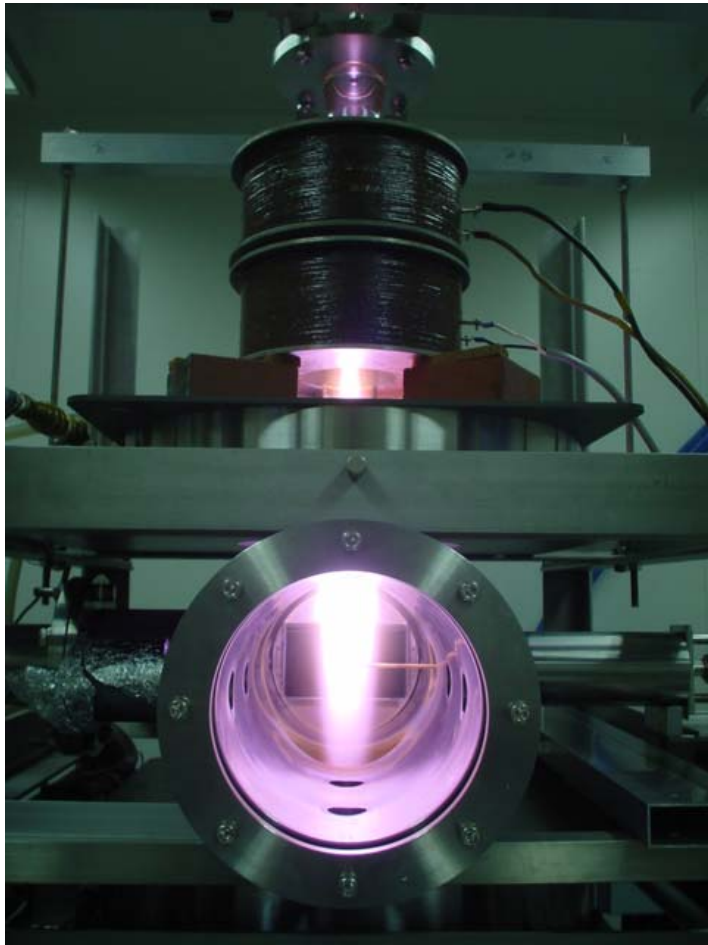


主量子数2までの準位の電子状態・振動状態を
区別したモデルを構築済み.

- ・電離・解離等の各種反応の実効的速度係数の計算
- ・高電子密度の場合の可視水素分子発光線の解析.
(n=3の準位の統計重率密度分布を仮定)

可視水素分子発光線解析のためモデルを拡張.

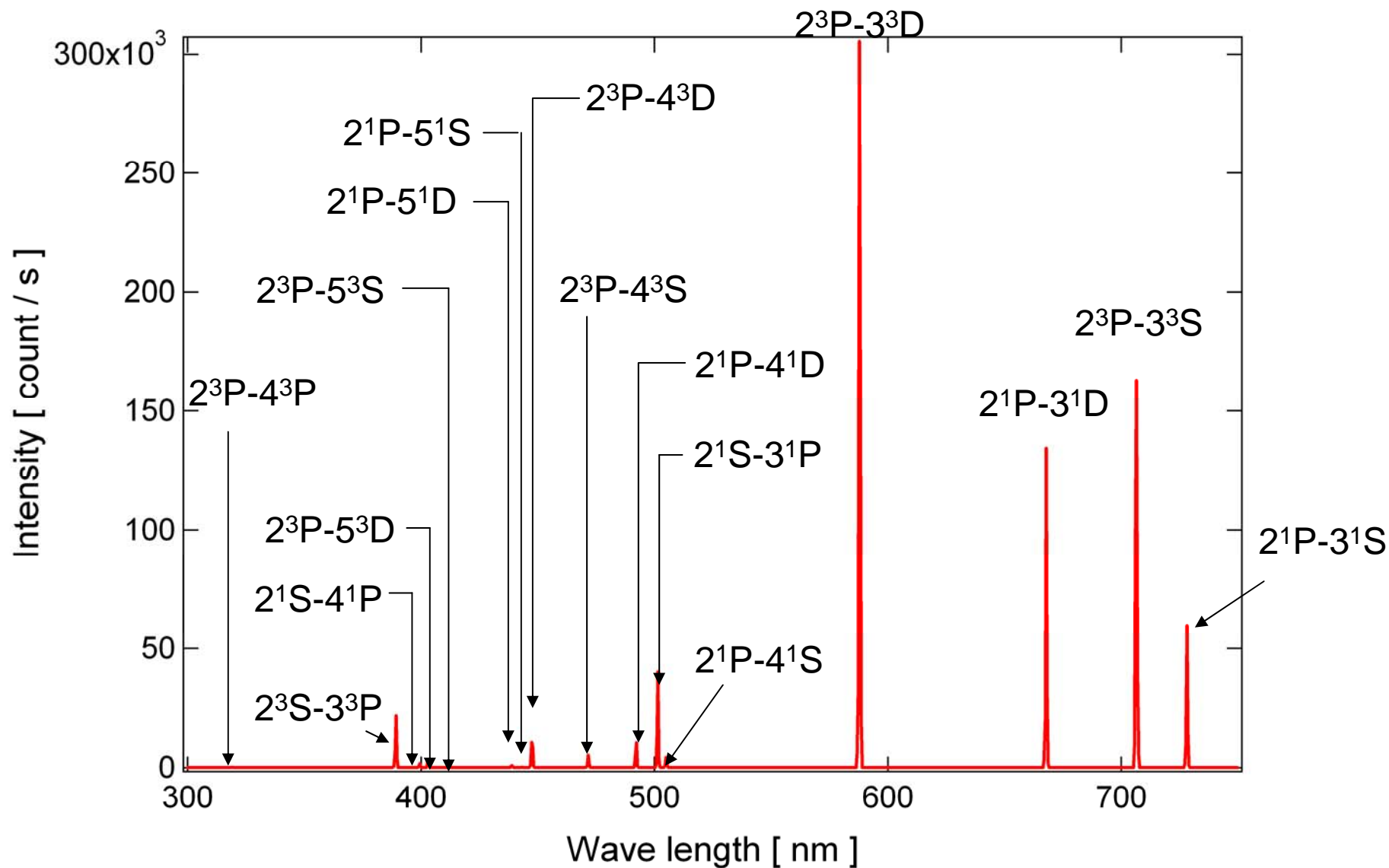
ヘリウム原子発光線解析による電子温度・電子密度の決定



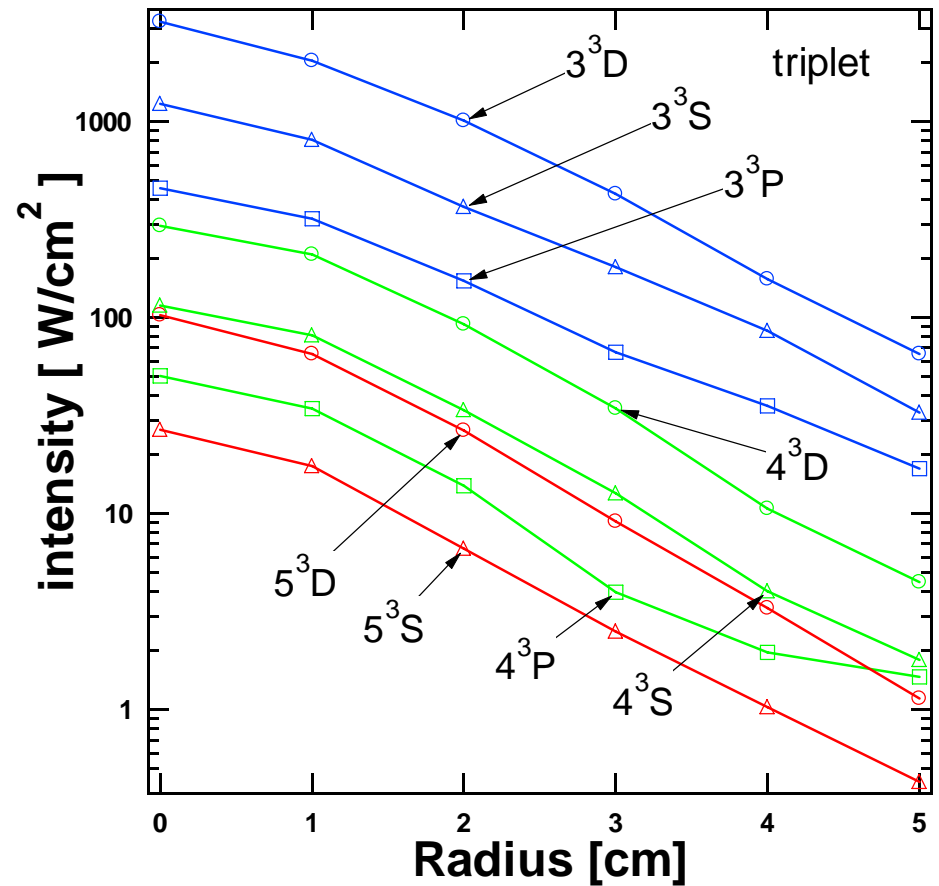
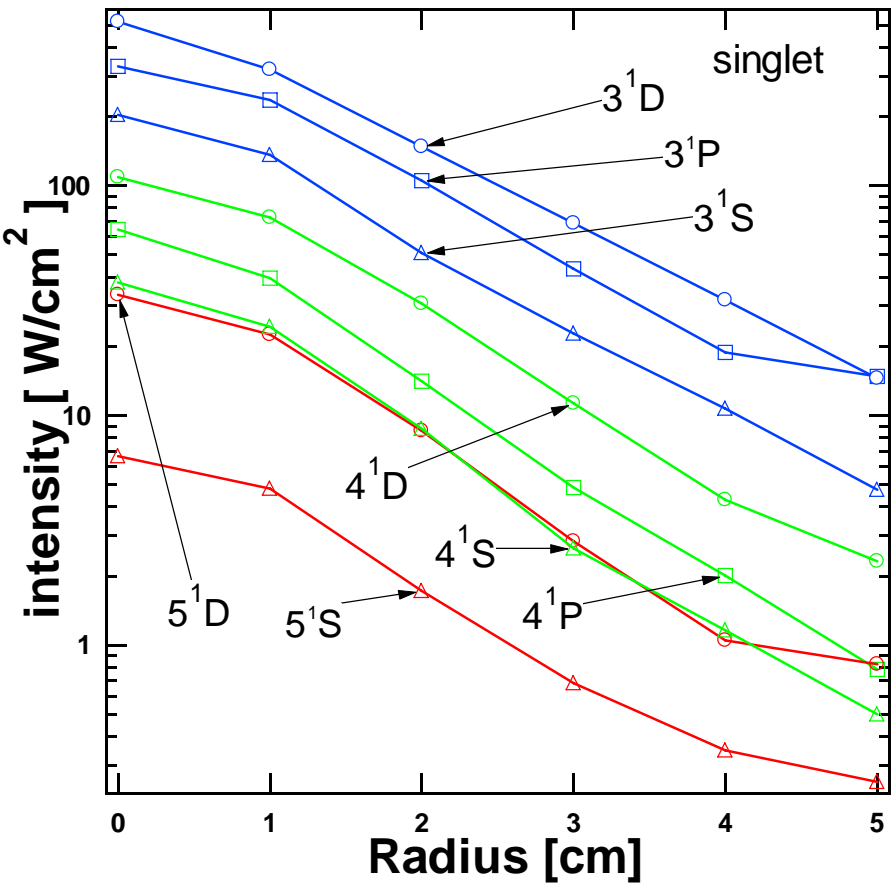
衝突輻射モデルによる
 T_e , n_e 等の決定

ヘリウム原子発光線

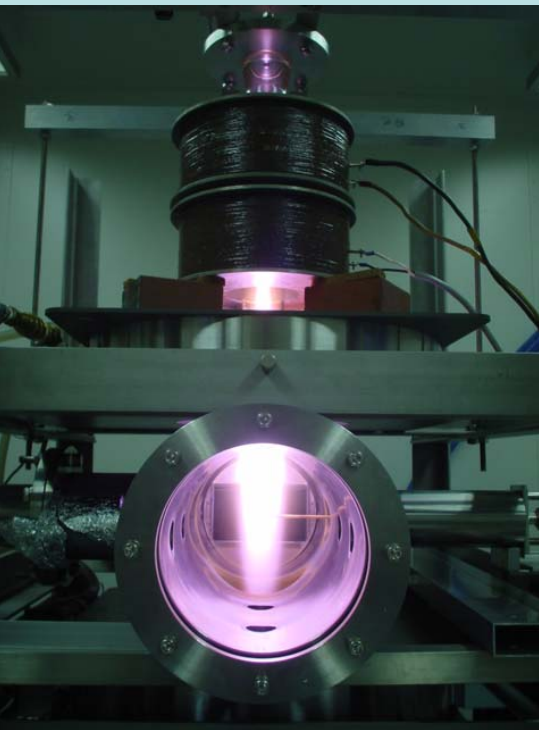
ガス圧 0.03 [Torr]
出力 800 [W]



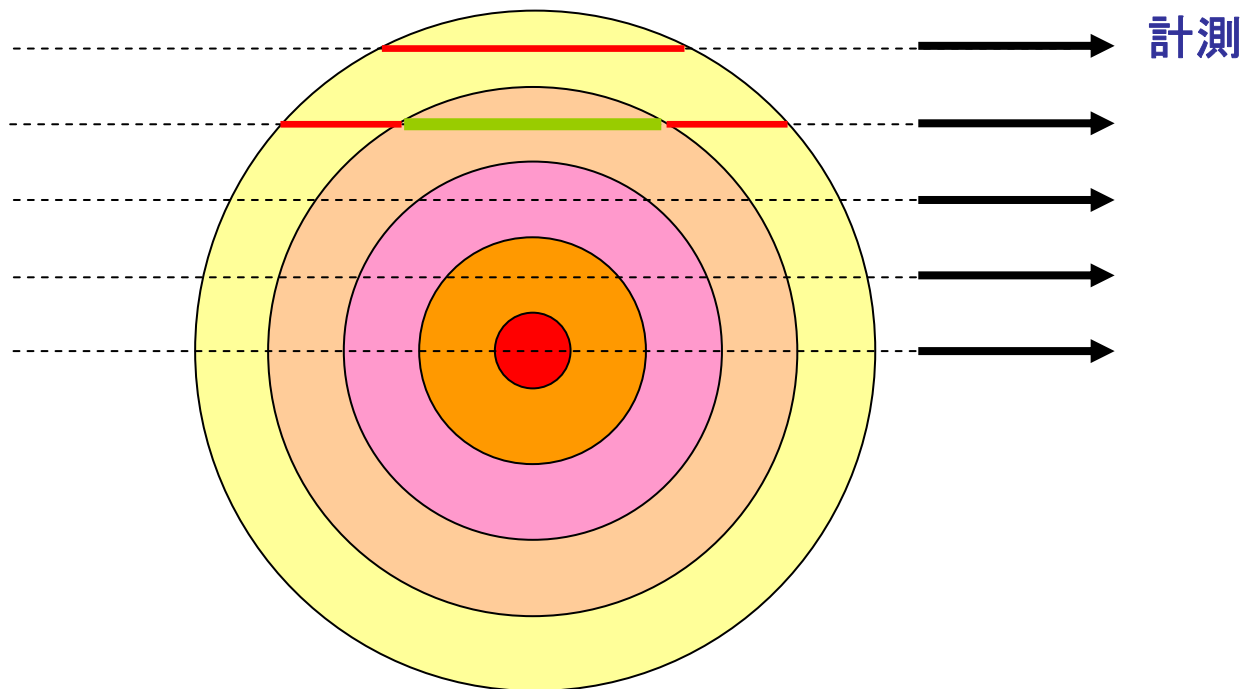
ヘリウム放電 分光計測(発光線強度)



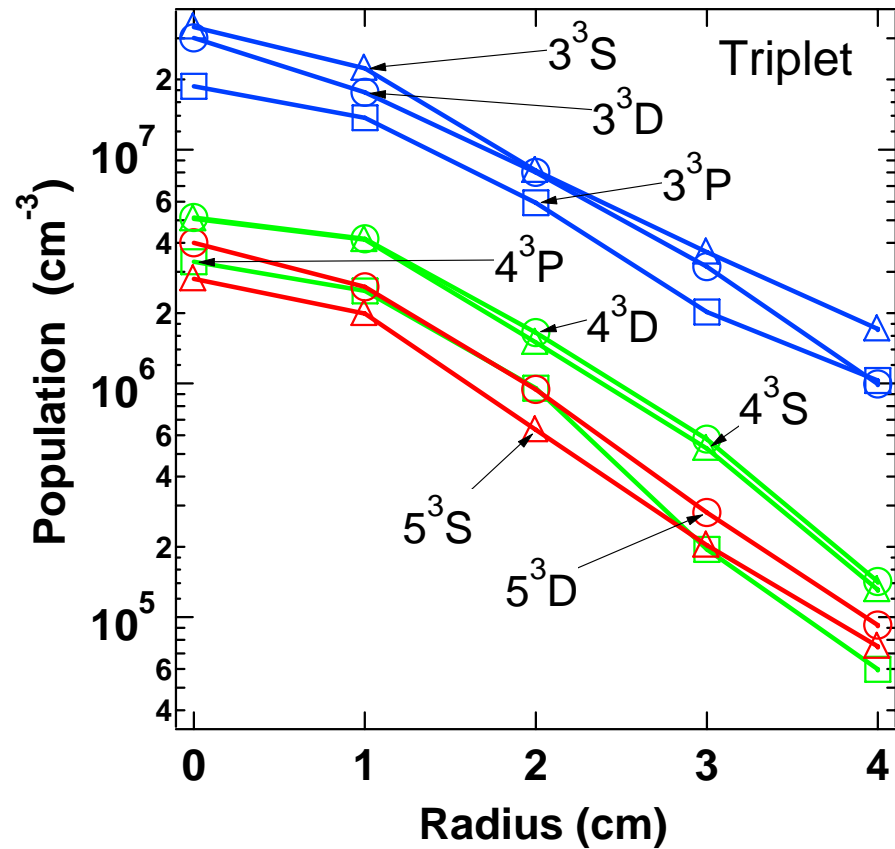
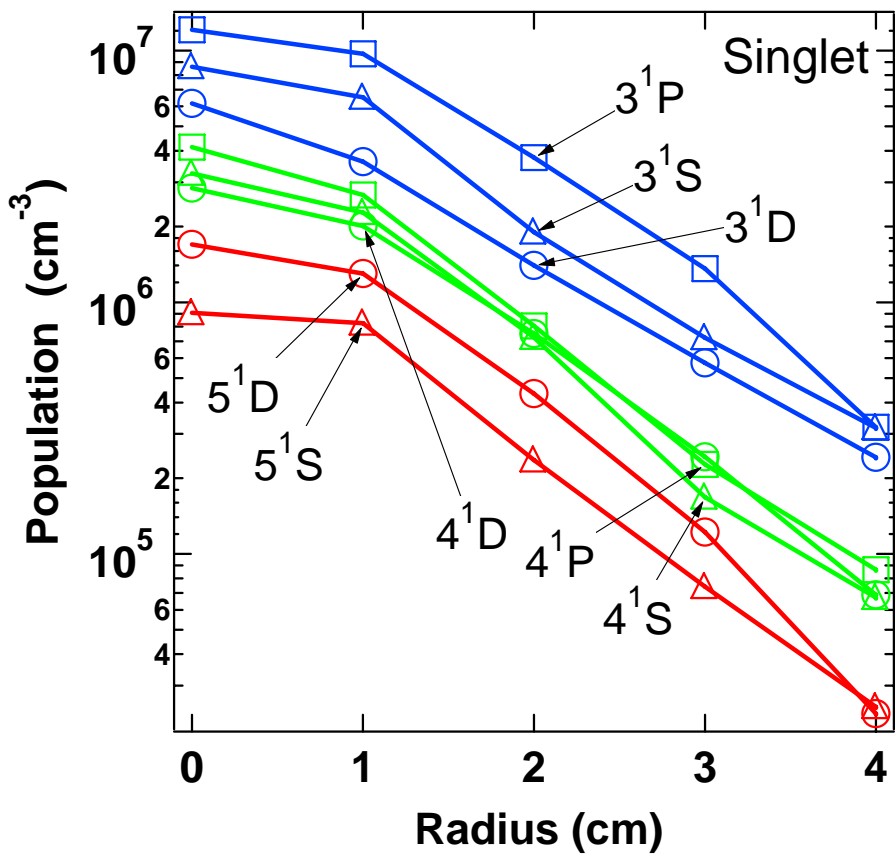
アーベル変換



プラズマを同心円状と仮定

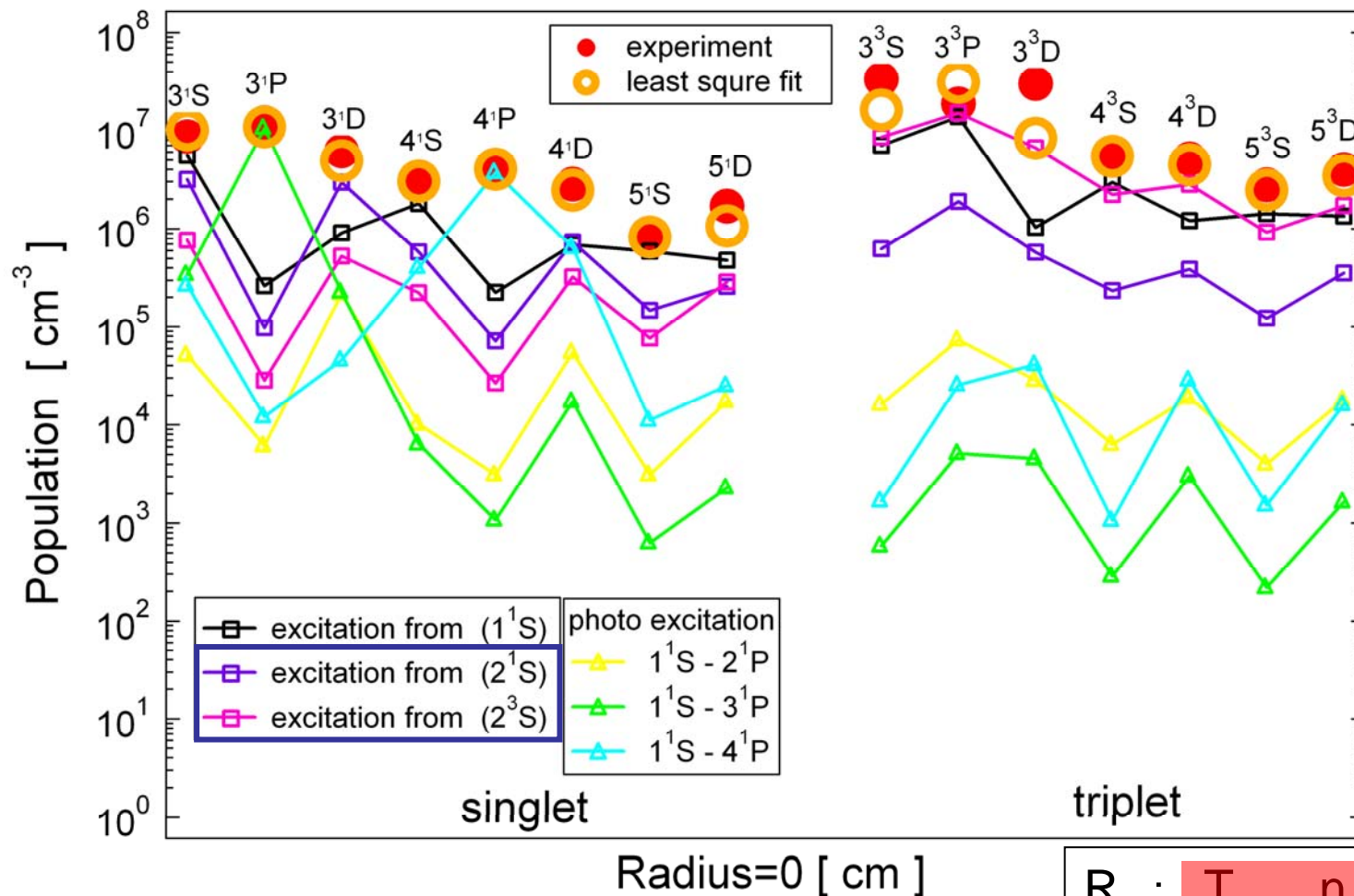


ヘリウム励起原子密度



準安定状態 非定常

未知数 $T_e, n_e, n(2^1S), n(2^3S), L_{2^1P}, L_{3^1P}, L_{4^1P}$



$$n_{cal}(p) = \underline{R_1(p)n(1^1S)n_e} + \underline{R_2(p)n(2^1S)n_e} + \underline{R_3(p)n(2^3S)n_e} + \underline{R_{2^1P}(p)n(1^1S)L_{2^1P}} + \underline{R_{3^1P}(p)n(1^1S)L_{3^1P}} + \underline{R_{4^1P}(p)n(1^1S)L_{4^1P}}$$

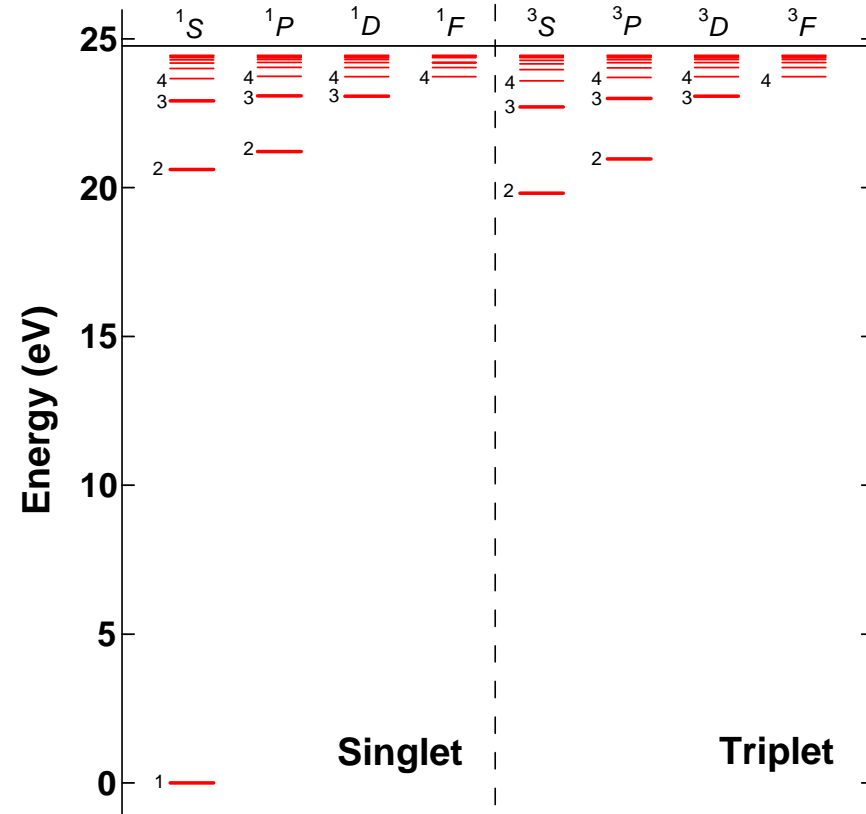
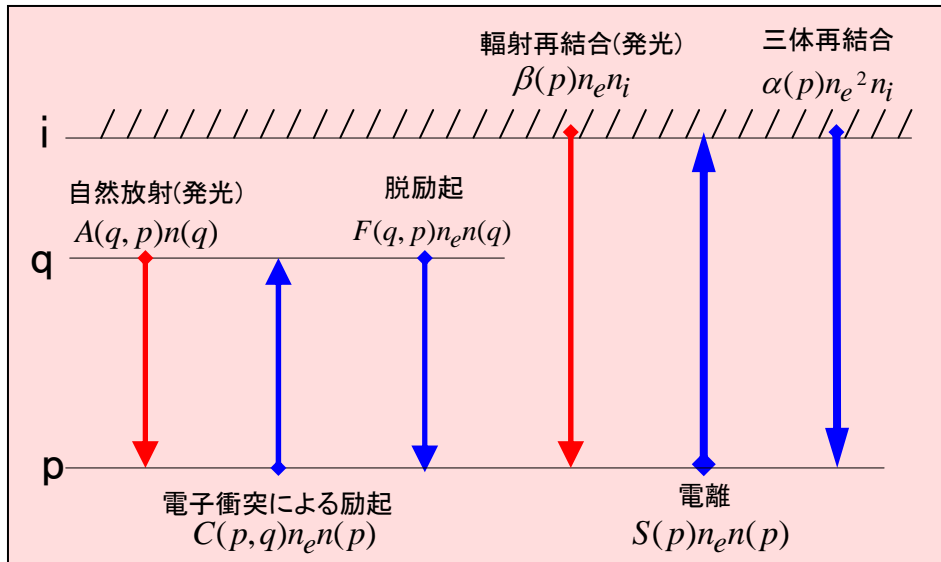
衝突輻射モデル

流入項

$$\frac{dn(p)}{dt} = \sum_{q < p} C(q, p)n_e n(q) + \sum_{q > p} \{F(q, p)n_e + A(q, p)\}n(q) + \alpha(p)n_e^2 n_i + \beta(p)n_e n_i$$

$$-[\sum_{q < p} F(p, q) + \sum_{q > p} C(p, q) + S(p)]n_e + \sum_{q < p} A(p, q)n(p)$$

流出項



衝突輻射モデル

$$\frac{dn(p)}{dt} = \sum_{q < p} C(q, p) n_e n(q) + \sum_{q > p} \{ F(q, p) n_e + A(q, p) \} n(q) + \alpha(p) n_e^2 n_i + \beta(p) n_e n_i$$

$$- \left[\sum_{q < p} F(p, q) + \sum_{q > p} C(p, q) + S(p) \right] n_e + \sum_{q < p} A(p, q) n(p)$$

$p \geq 2$

未知数

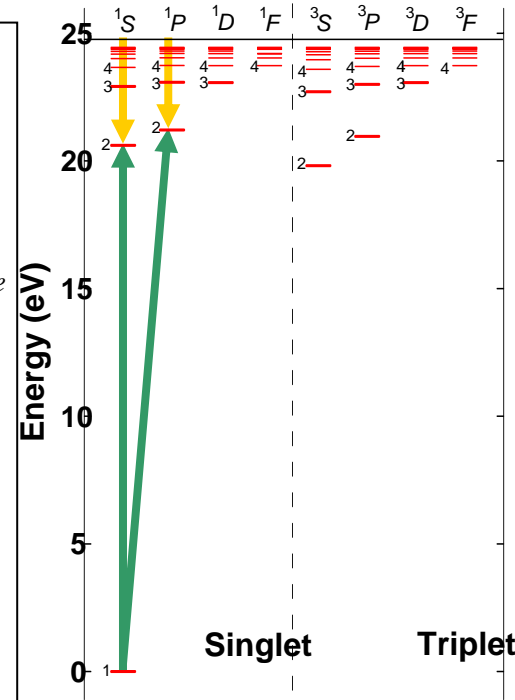
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ n(3) \\ n(2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ n(3) \\ n(2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \alpha(3)n_e + \beta(3) \\ \alpha(2)n_e + \beta(2) \end{pmatrix} n_i n_e + \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ C(1,3) \\ C(1,2) \end{pmatrix} n(1) n_e$$

0

準定常近似

(QSS)

$$n(p) = \frac{R_0(p) n_i n_e}{\text{再結合プラズマ成分}} + \frac{R_1(p) n(1) n_e}{\text{電離プラズマ成分}}$$



$p=1$

$$\frac{dn(1)}{dt} = -S_{CR} n(1) n_e + \alpha_{CR} n_{H^+} n_e$$

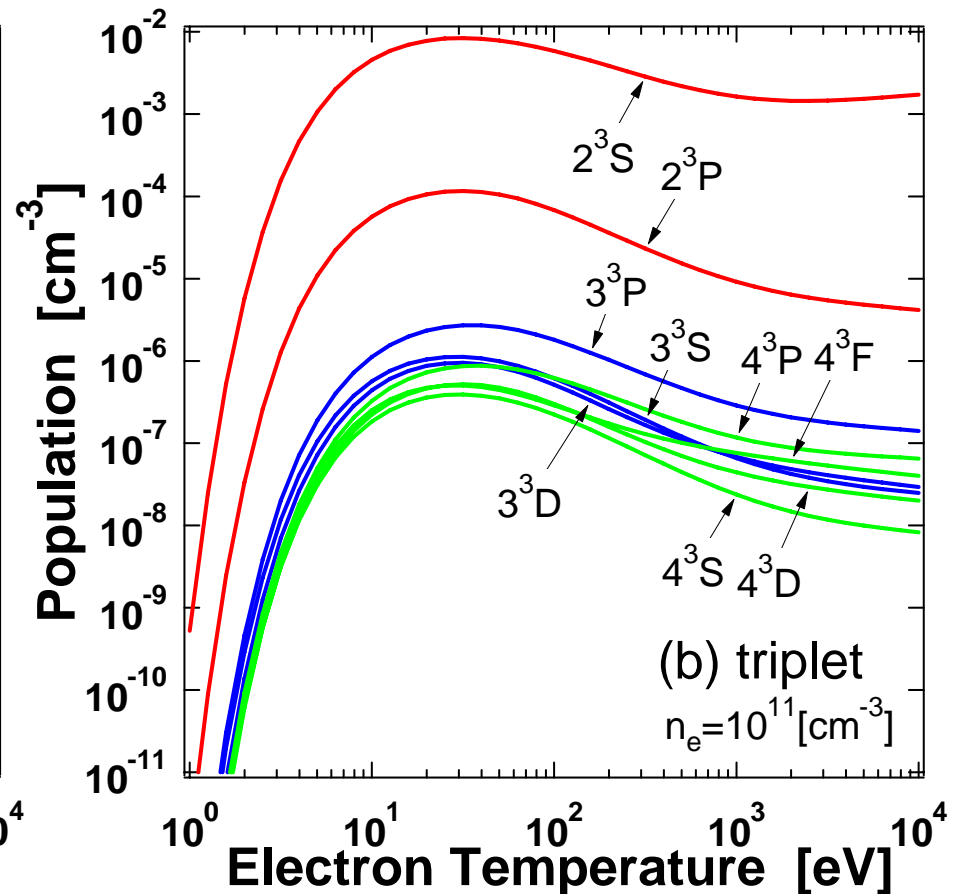
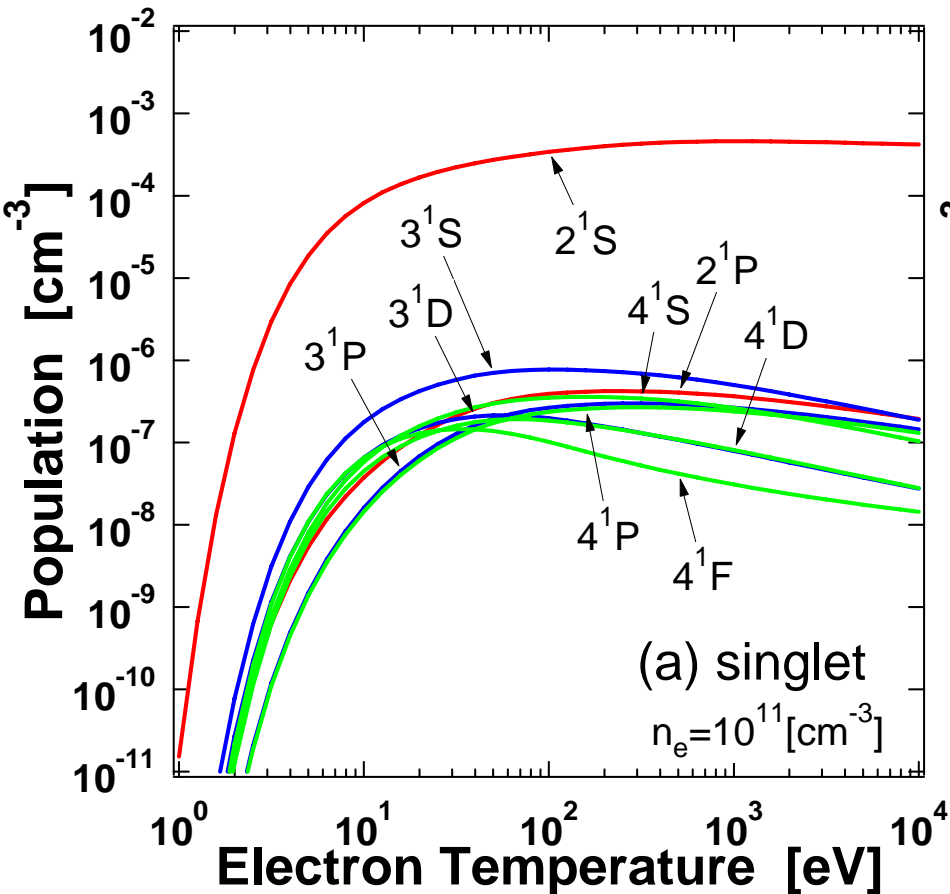
S_{CR} 実効的電離速度係数
 α_{CR} 実効的再結合速度係数

電離プラズマ 励起原子密度の電子温度依存性

核融合研 後藤基志氏

ヘリウム衝突輻射モデルにより計算

$n(1^1S) = 1 \text{ [cm}^{-3}\text{]}$

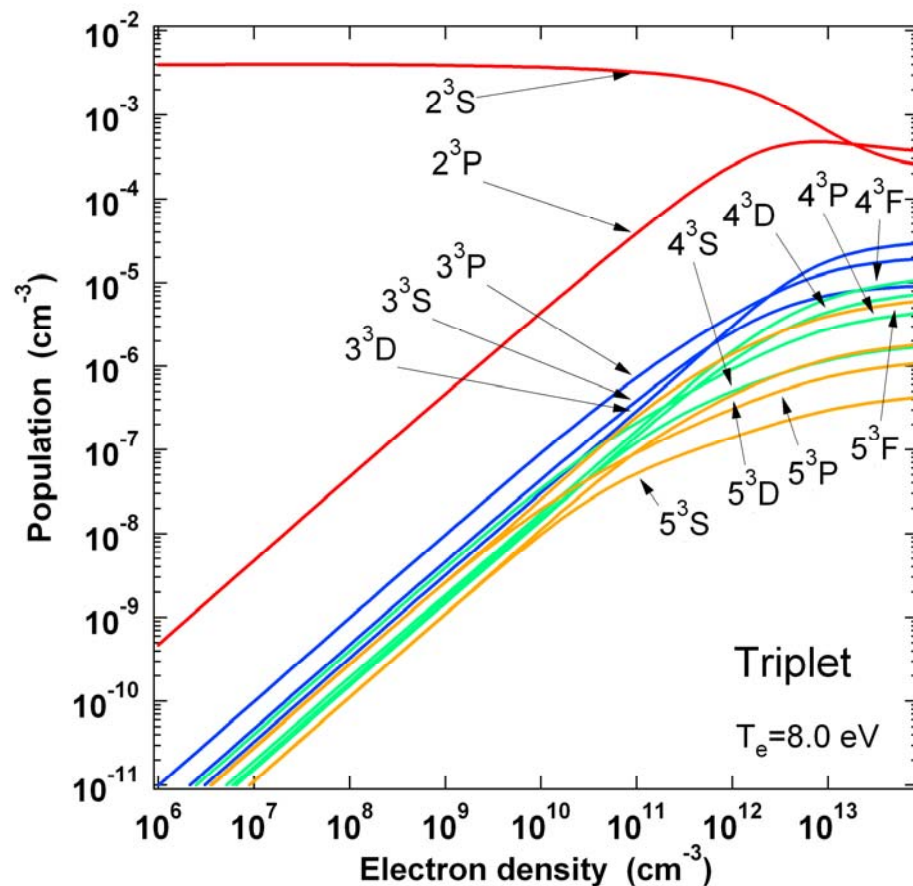
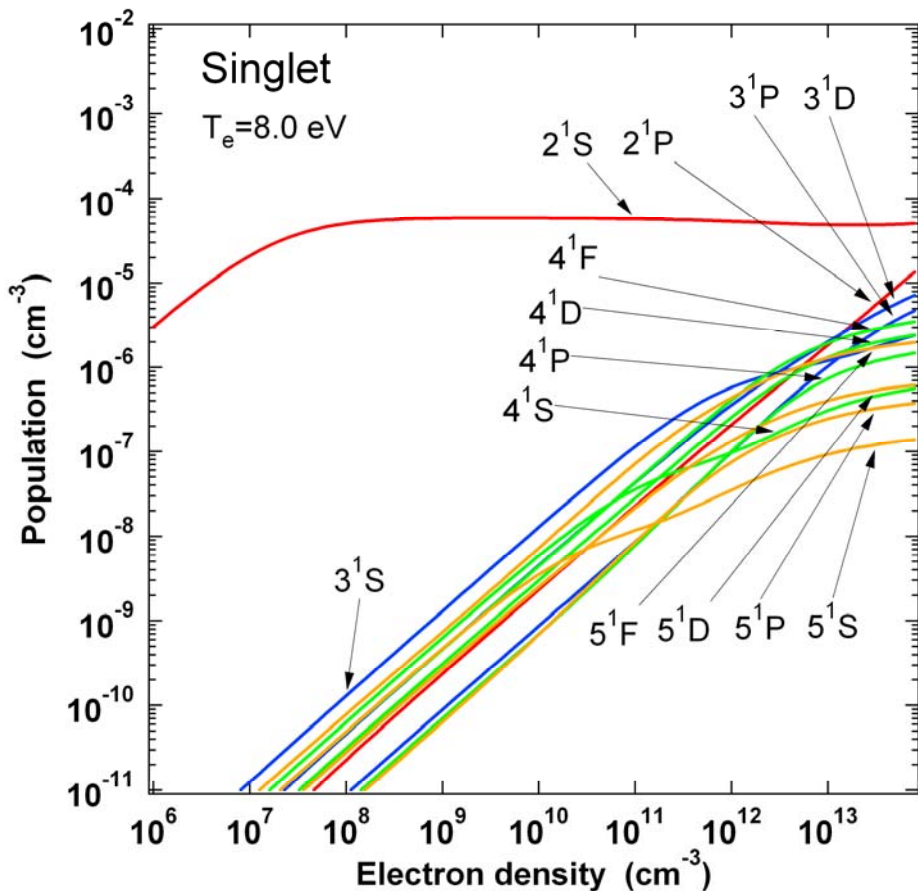


電離プラズマ 励起原子密度の電子密度依存性

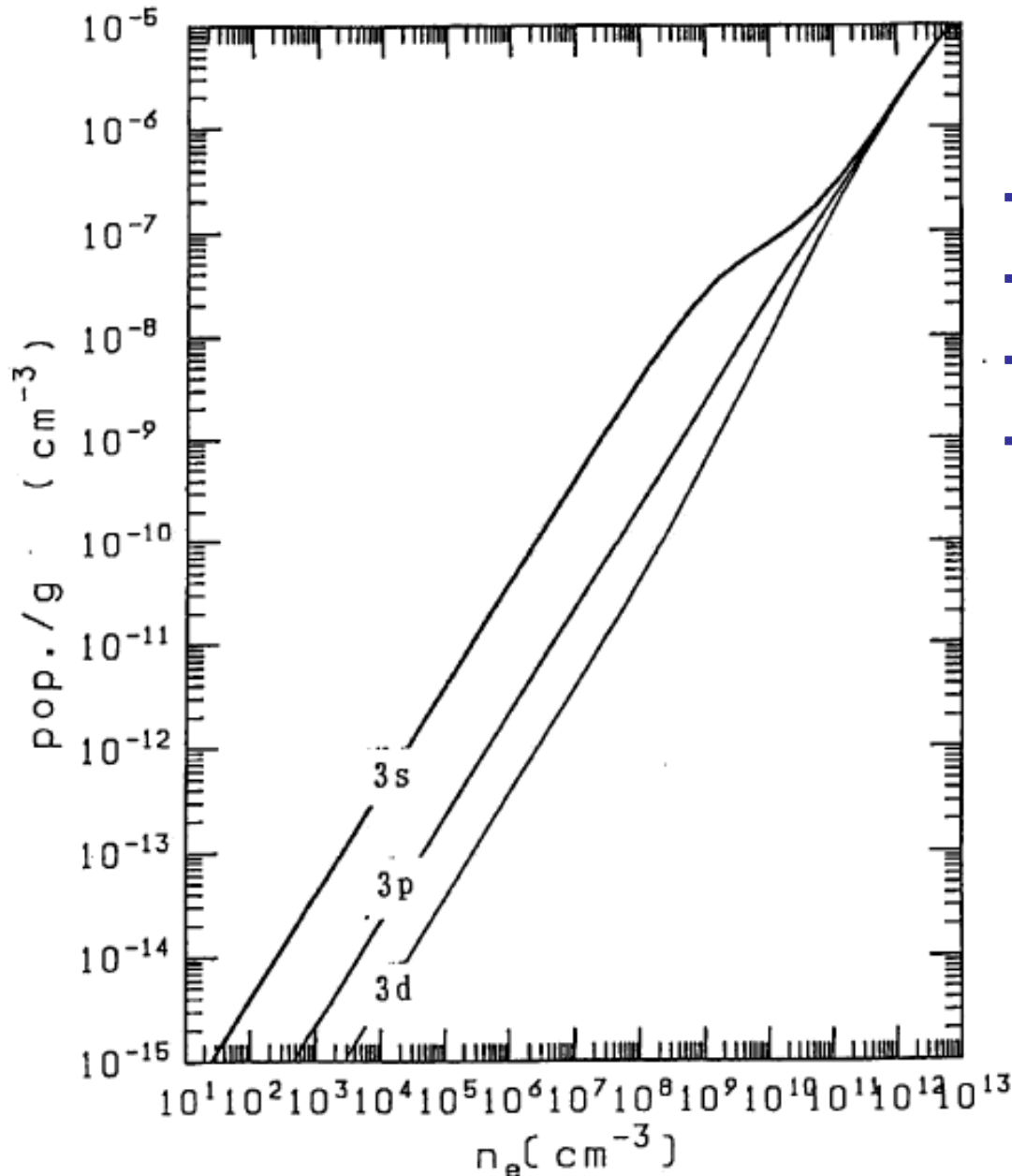
核融合研 後藤基志氏

ヘリウム衝突輻射モデルにより計算

$n(1^1S) = 1 \text{ [cm}^{-3}\text{]}$



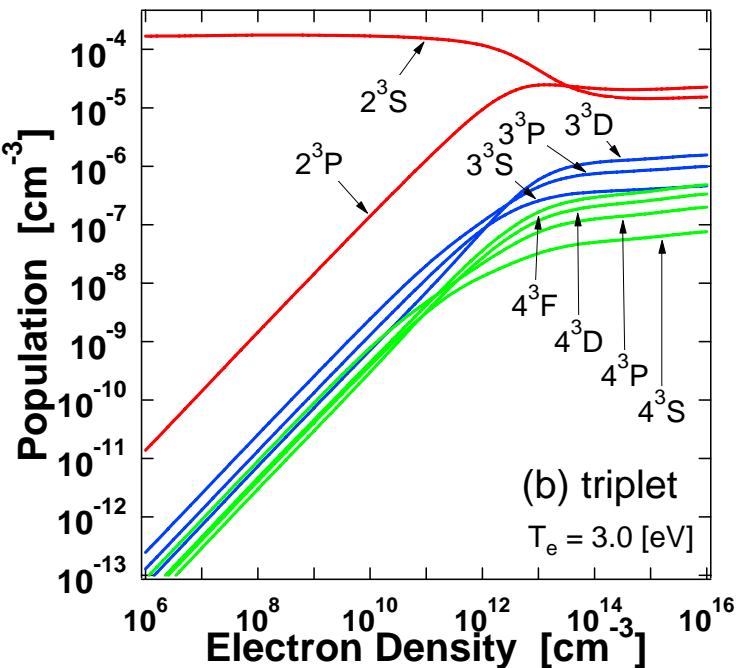
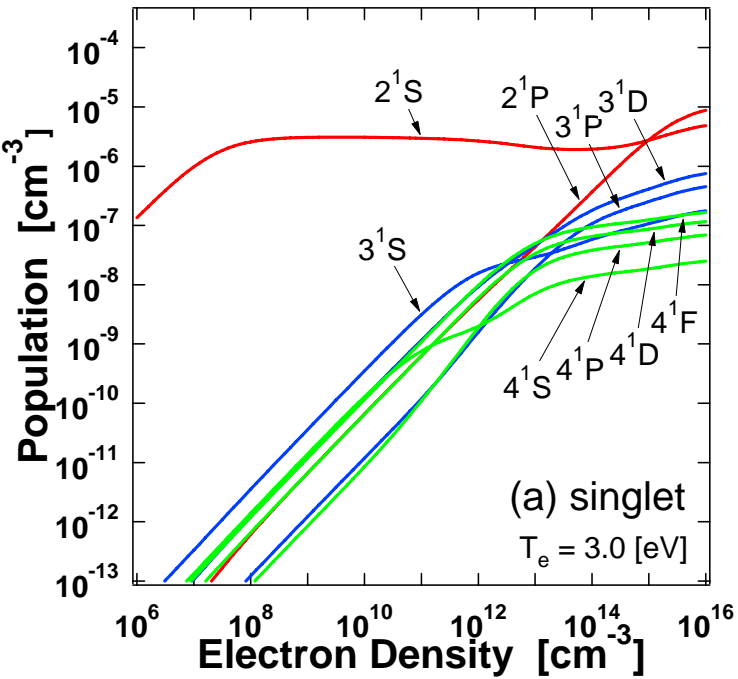
参考 水素原子の場合



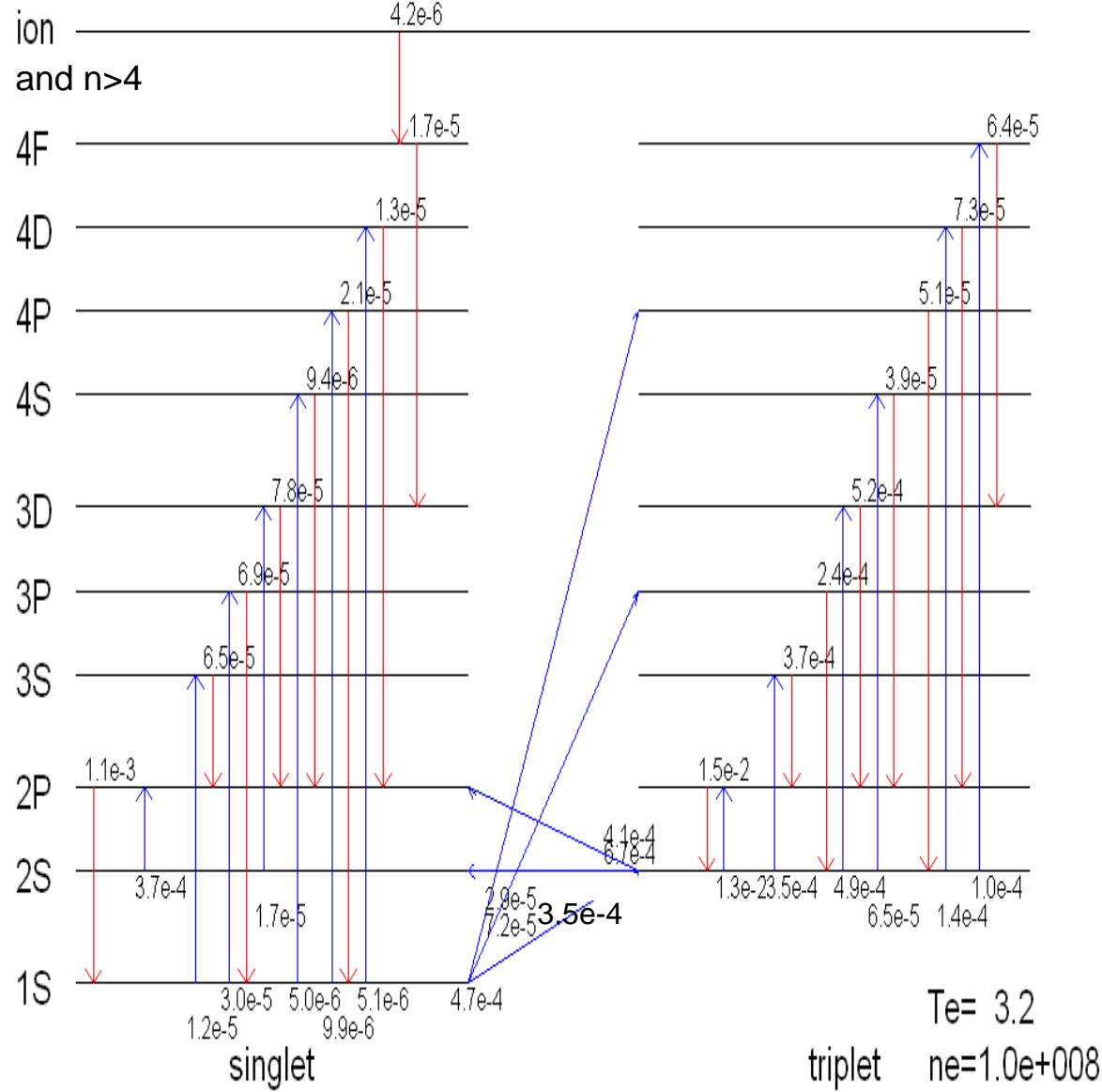
- ・ダブレットしかない
- ・励起状態が分子から作られる
- ・同じ主量子数では波長が同じ
- ・電子密度依存性がある領域が小さくかつ、低電子密度領域にある

電子温度・密度の決定は困難

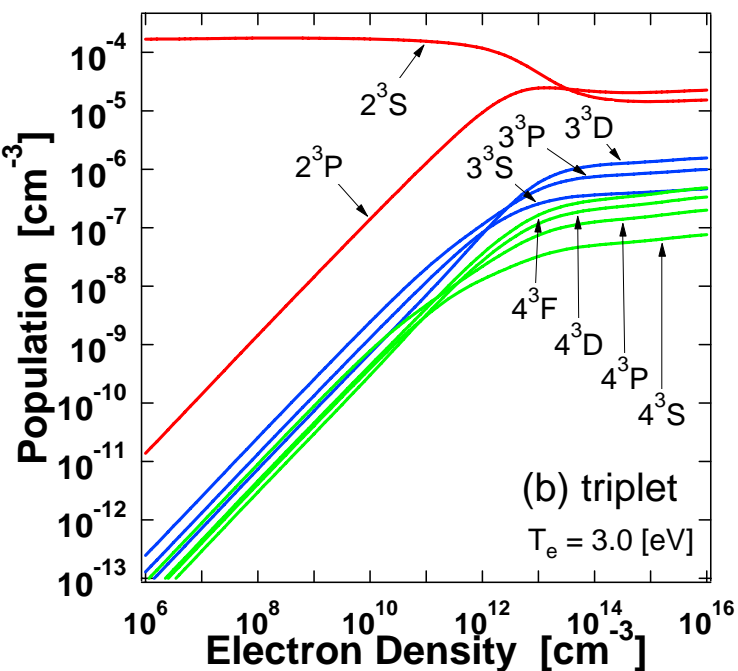
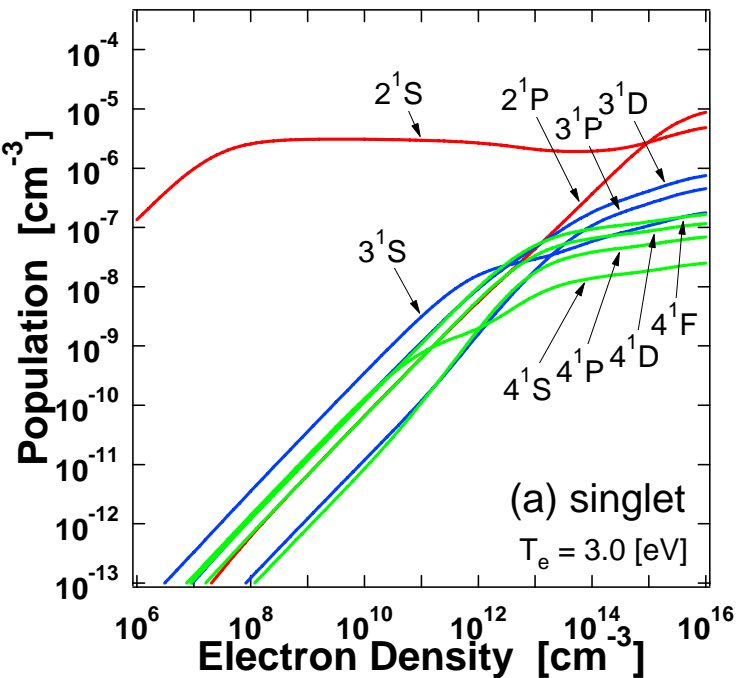
流れ図(電離プラズマ成分) $n_e=10^8\text{cm}^{-3}$



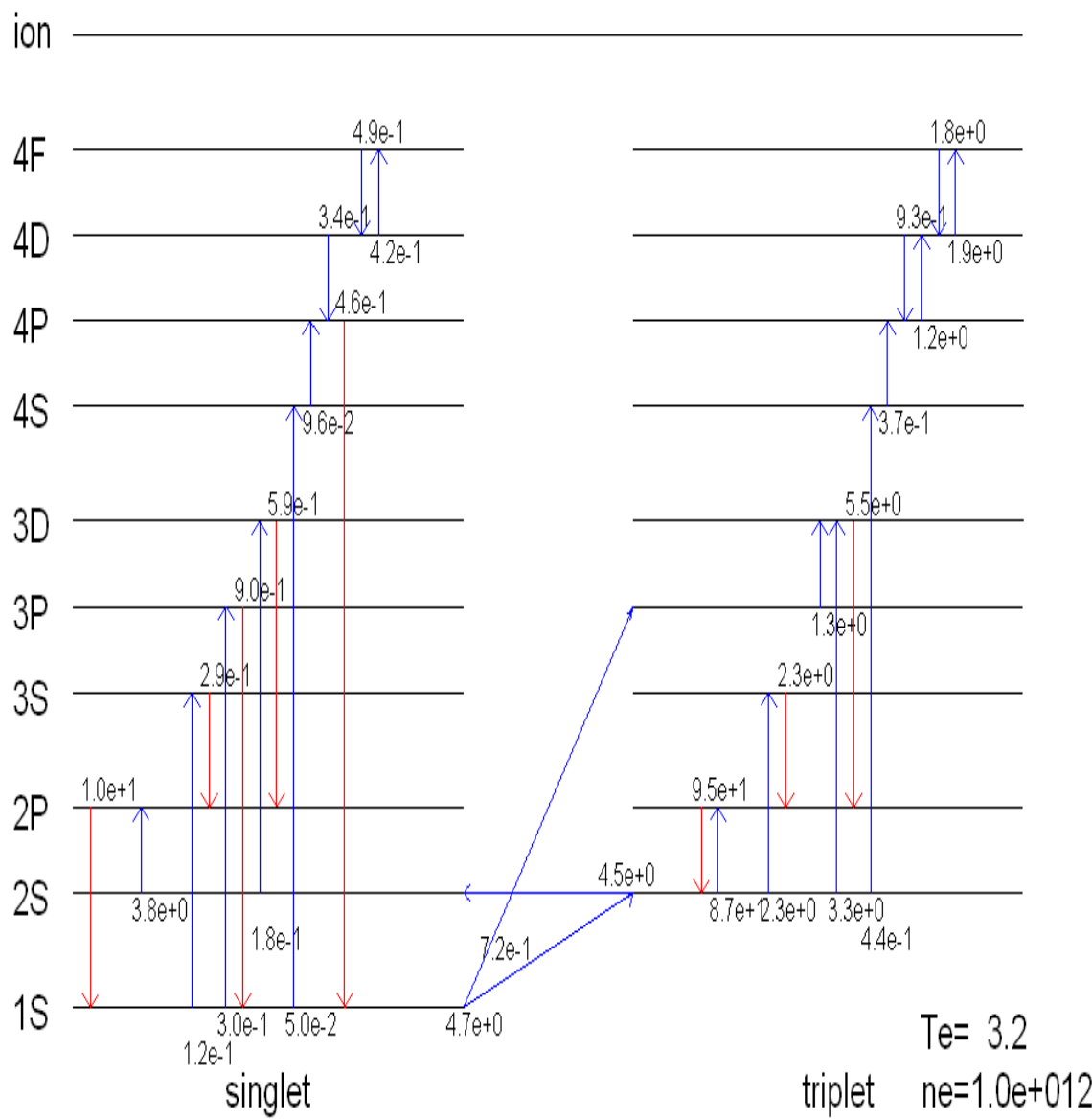
$T_e=3.2\text{eV}$ $n(1^1S)=1$ [cm^{-3}]



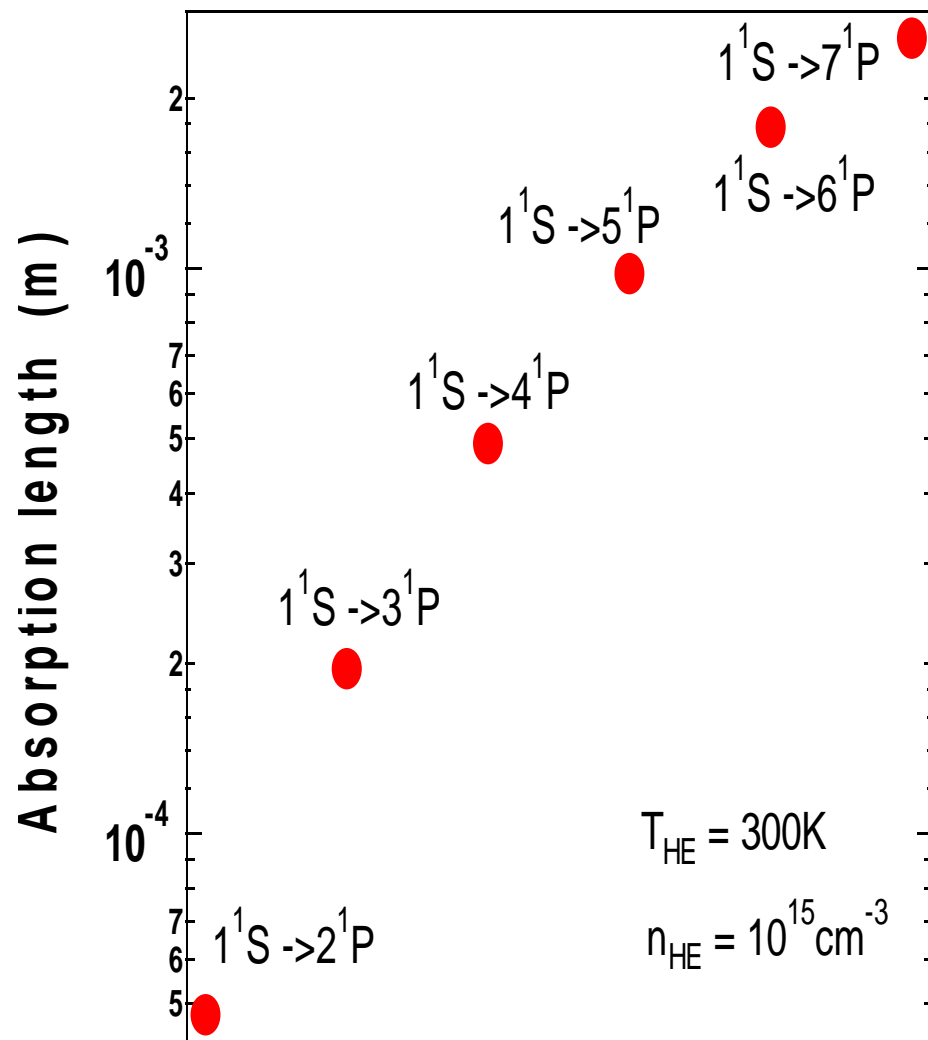
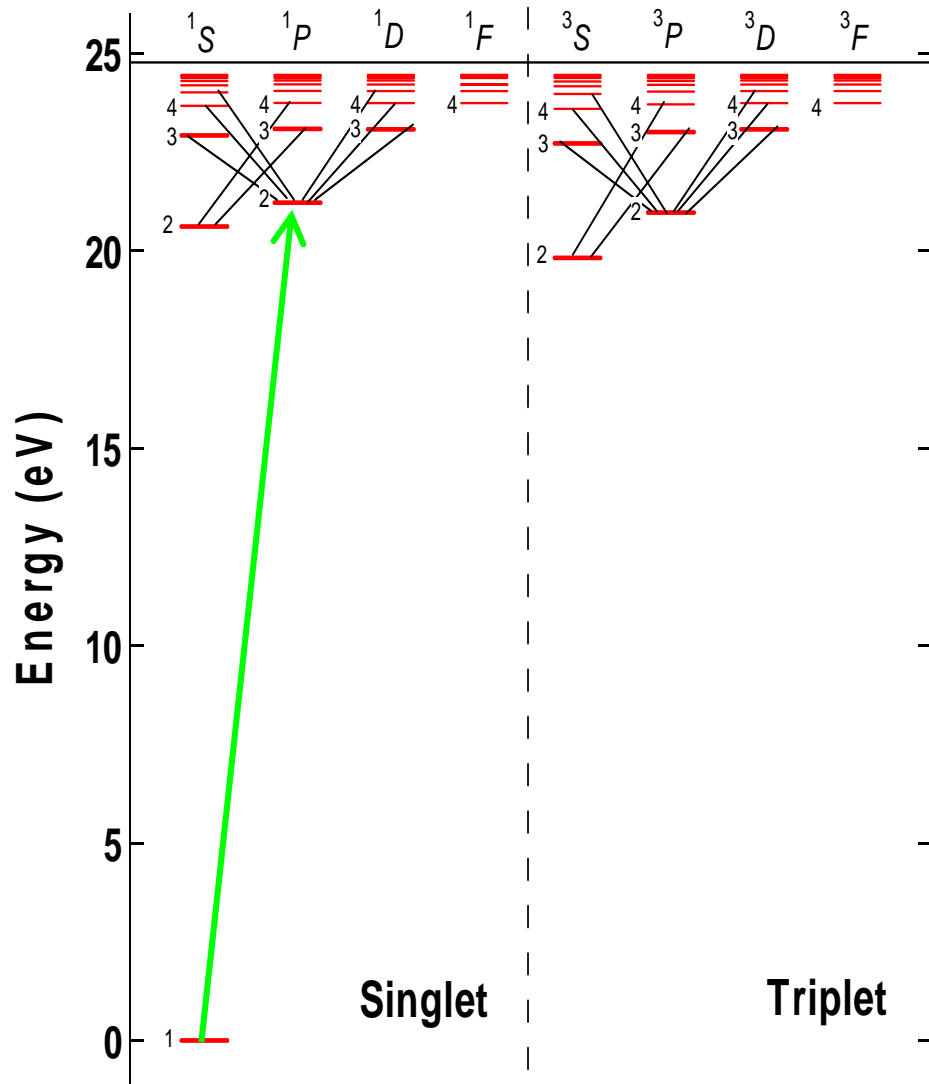
流れ図(電離プラズマ成分) $n_e=10^{12}\text{cm}^{-3}$



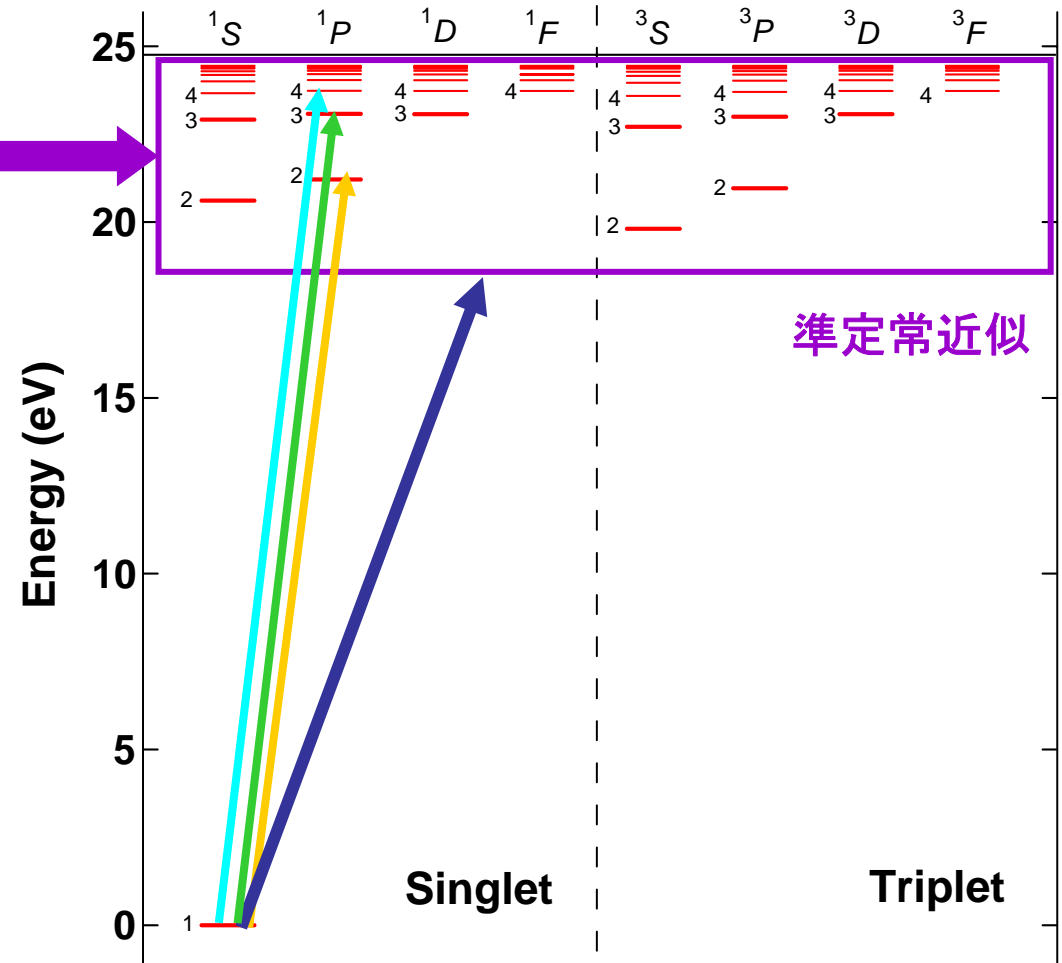
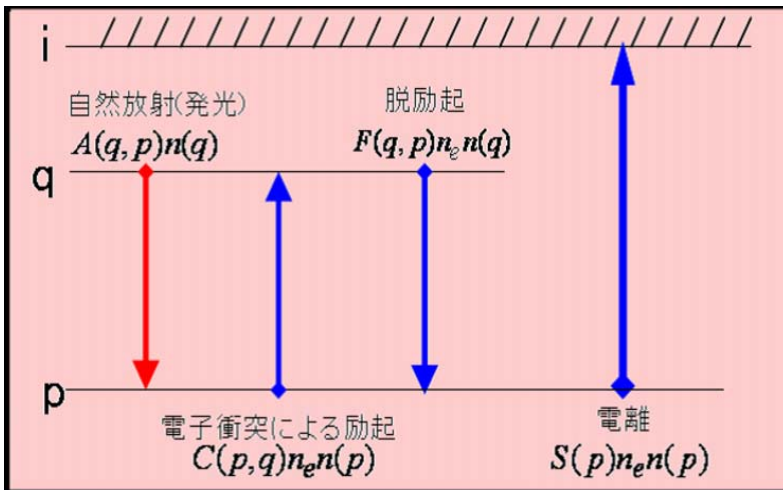
$T_e=3.2\text{eV}$ $n(1^1\text{S})=1$ [cm^{-3}]



光が放出されてから吸収されるまでの距離



輻射輸送の組み込み



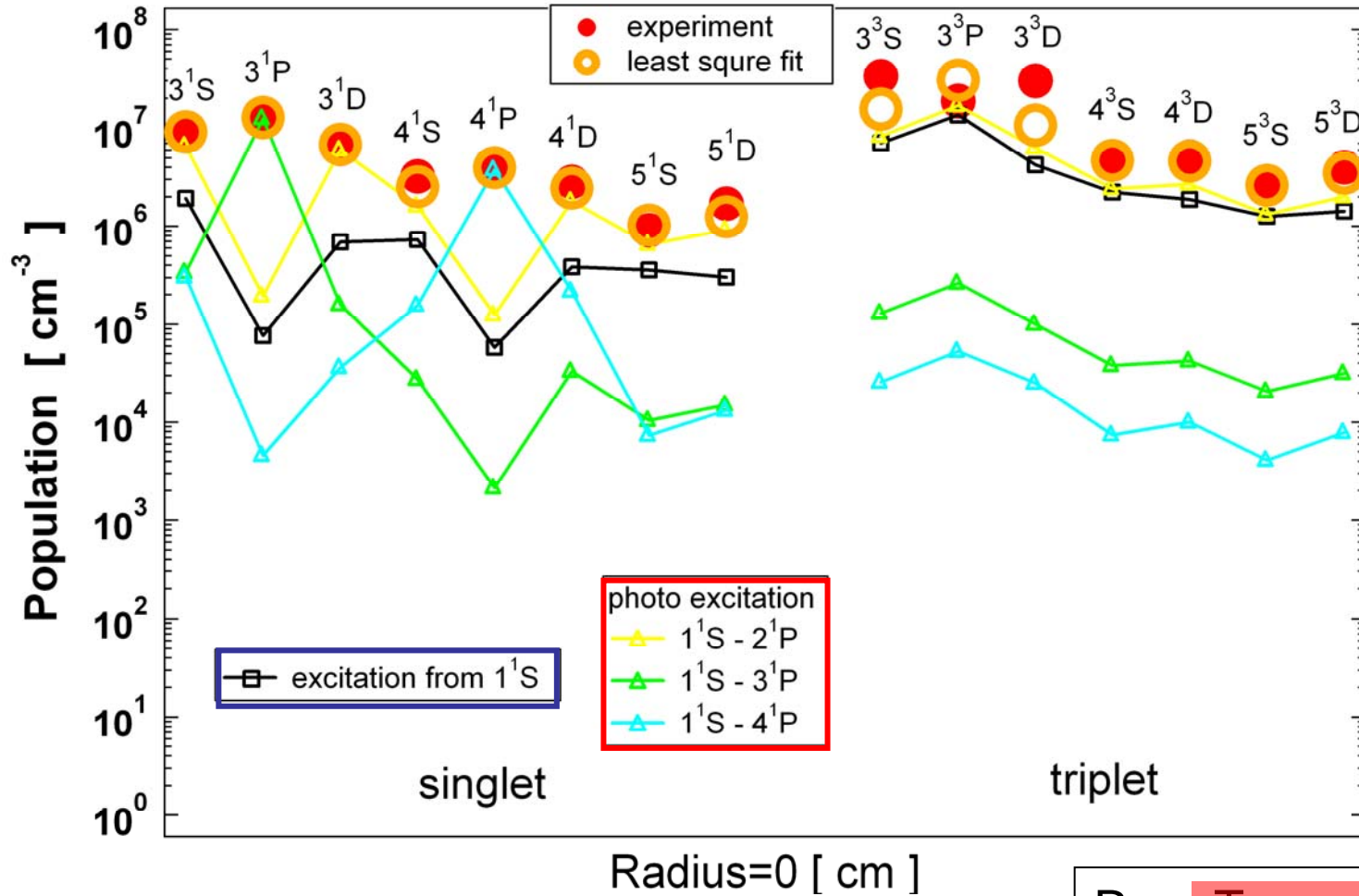
励起原子密度 $n(p)$ [cm^{-3}]

R : T_e, n_e の関数

$$n_{cal}(p) = R_1(p)n(1^1S)n_e + R_{2^1P}(p)n(1^1S)L_{2^1P} + R_{3^1P}(p)n(1^1S)L_{3^1P} + R_{4^1P}(p)n(1^1S)L_{4^1P}$$

準安定状態 準定常近似適用

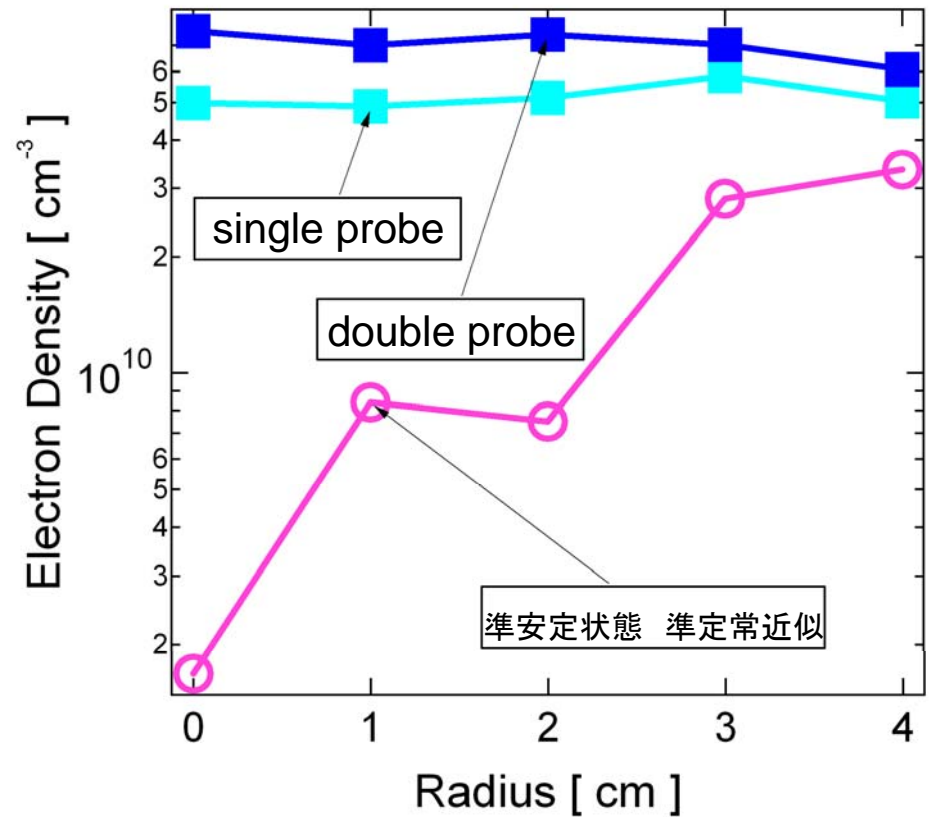
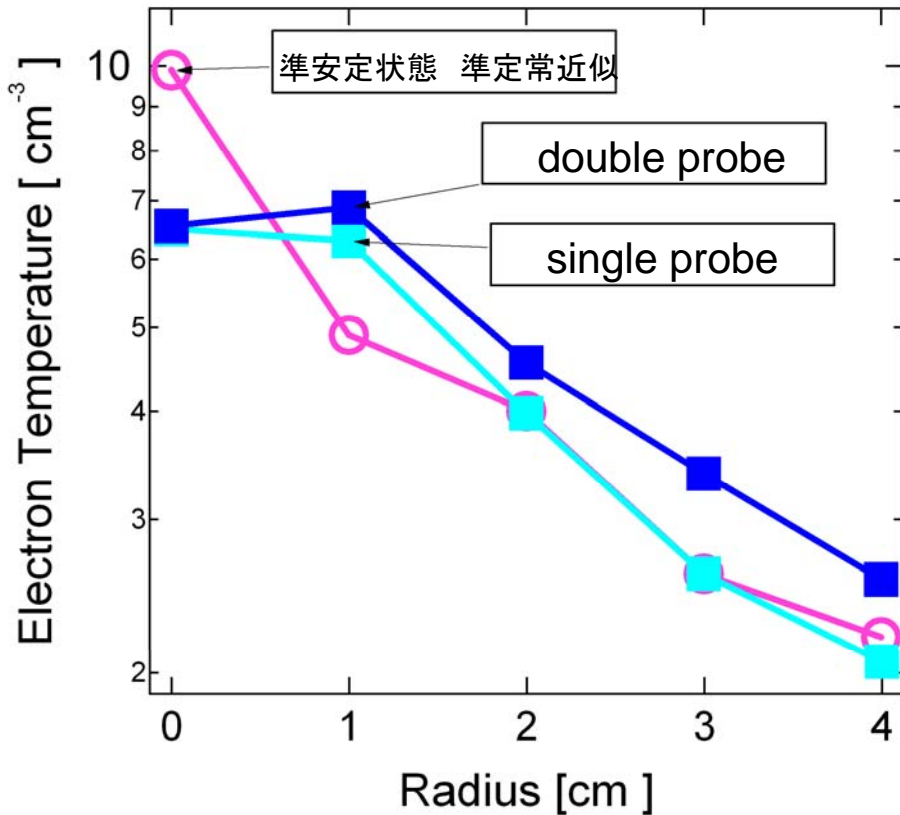
未知数 $T_e, n_e, L_{2^1P}, L_{3^1P}, L_{4^1P}$



R : T_e, n_e の関数

$$n_{cal}(p) = R_1(p)n(1^1S)n_e + R_{2^1P}(p)n(1^1S)L_{2^1P} + R_{3^1P}(p)n(1^1S)L_{3^1P} + R_{4^1P}(p)n(1^1S)L_{4^1P}$$

発光線解析とプローブ解析による 電子温度・電子密度の比較



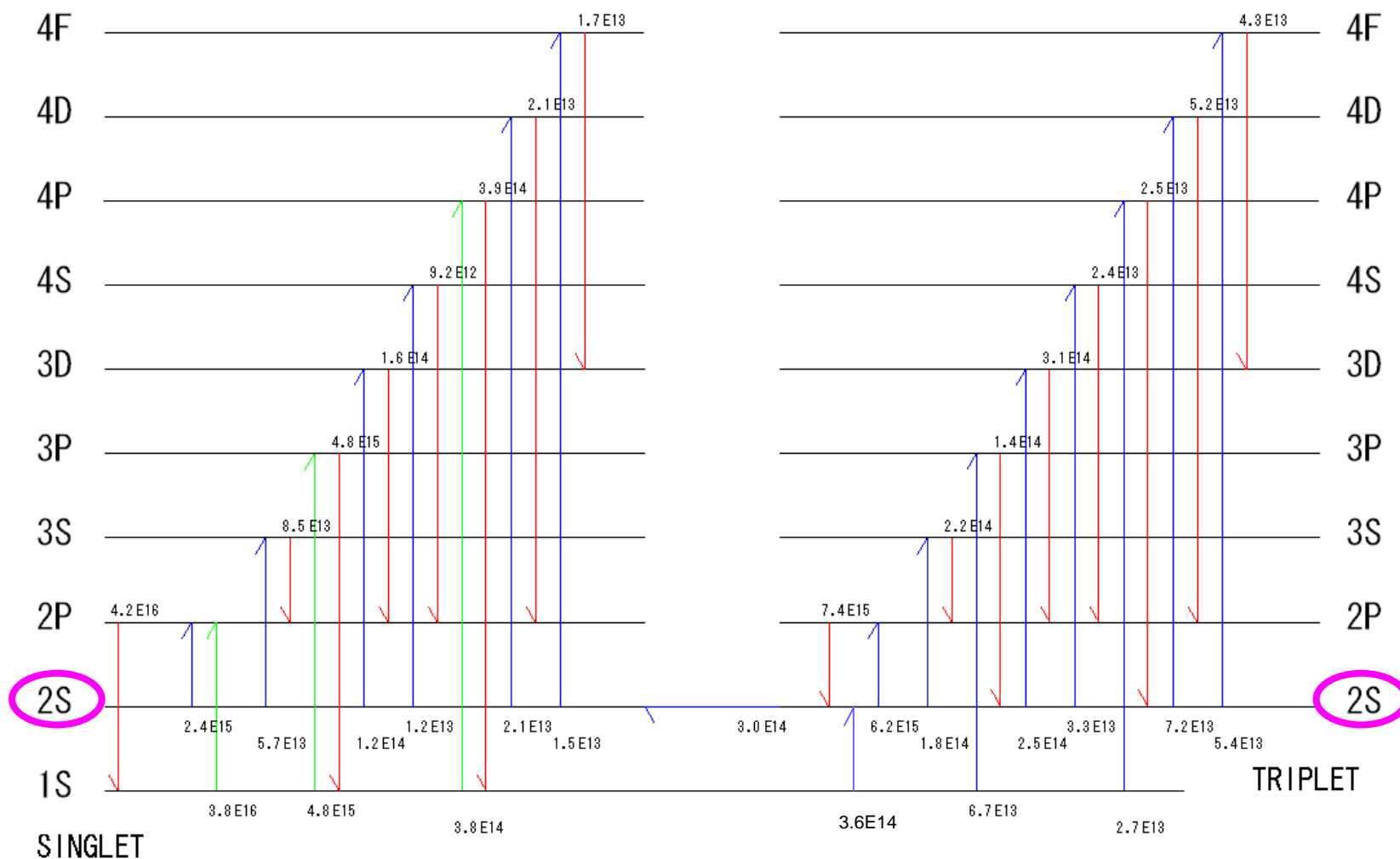
励起状態の生成・消滅の流れ図

Radius = 2

FORMULA 1

FIRST FLOW

He+ and $n > 4$



準安定状態に対する準定常近似の適用の評価

$$T_e = 3.6 \text{ [eV]} \quad n_e = 4.0 \times 10^{10} \text{ [cm}^{-3}\text{]}$$

2³S 緩和時間 τ [s]: C [cm³·s⁻¹] : 励起速度係数

$$2^3S \rightarrow 2^1S \quad C = 3.8 \times 10^{-8} \text{ [cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$$

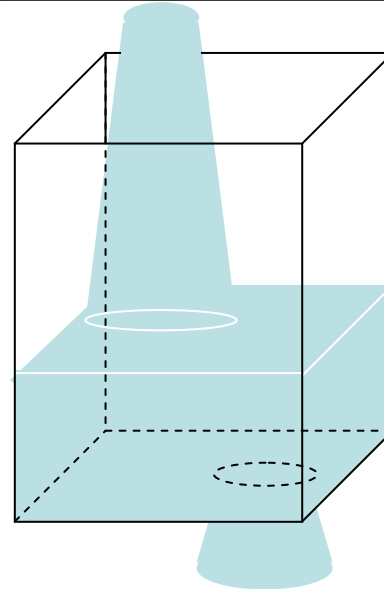
$$\tau = 1/(Cn_e) = 6.6 \times 10^{-4} \text{ [s]}$$

2³S 原子の速度 V [m/s]:

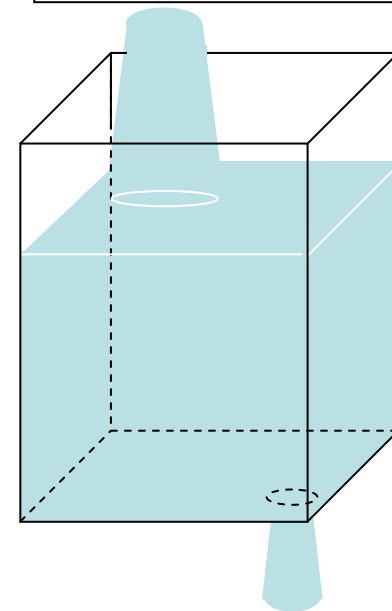
$$\frac{1}{2} m V^2 = \frac{3}{2} kT$$

$$T : 300 \text{ [K]} \quad V = 1.4 \times 10^3 \text{ [m/s]}$$

他の励起状態



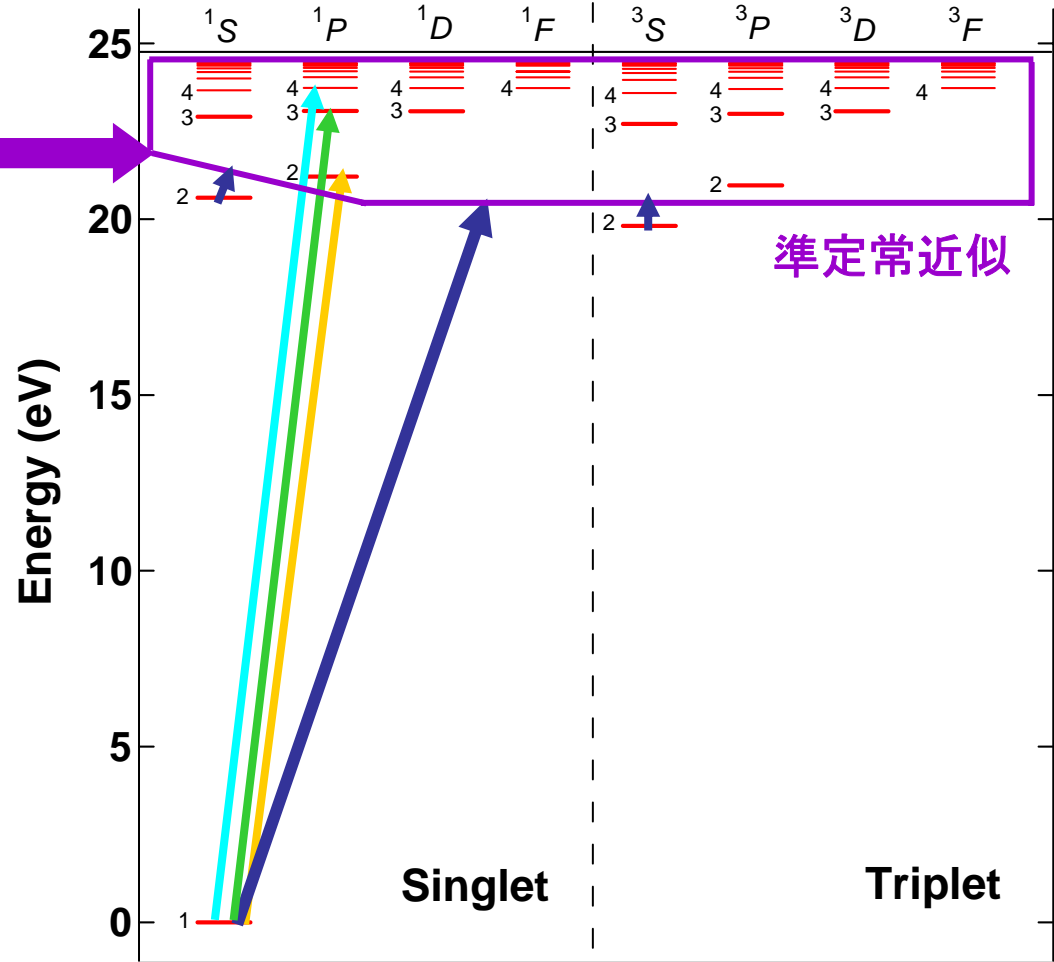
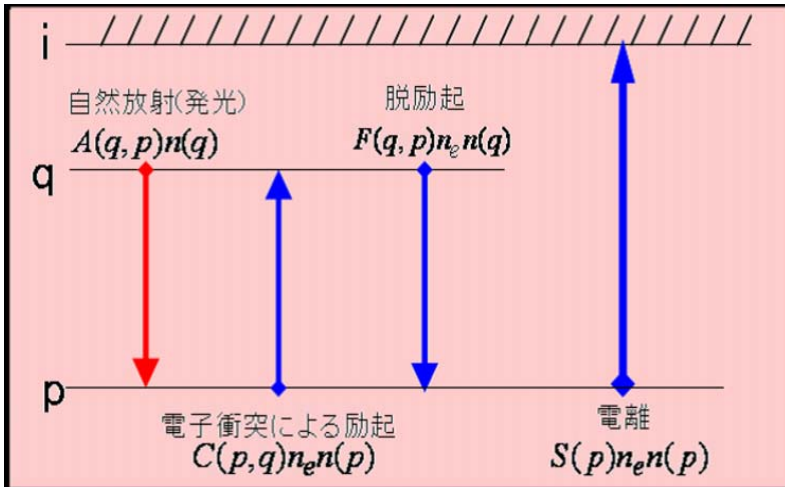
準安定状態



プラズマが一様と見なせる空間スケール(1cm)
を通過するのにかかる時間 t [s]:

$$t = 7.1 \times 10^{-6} \text{ [s]}$$

準安定状態 非定常 (密度未知数)



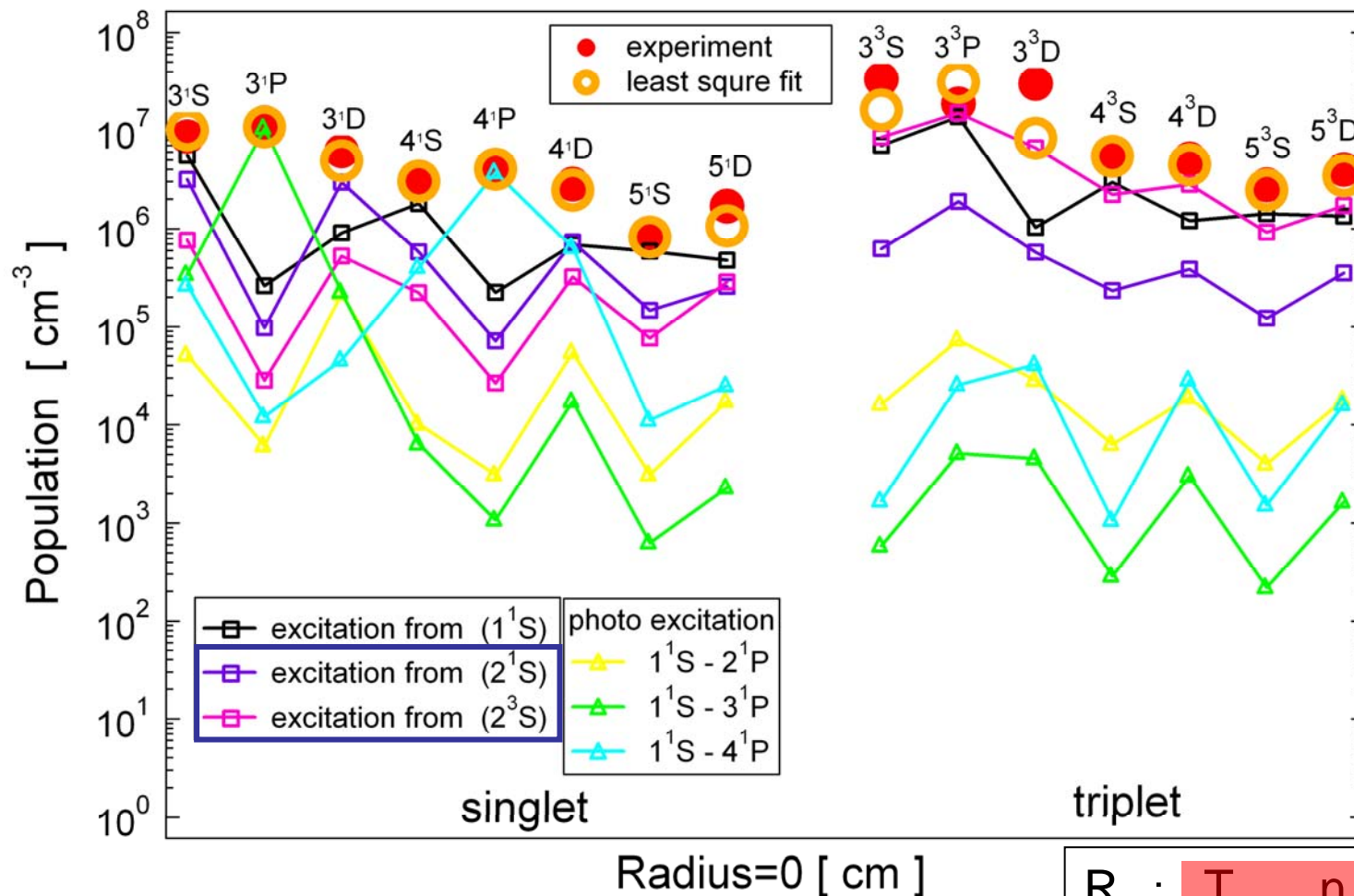
励起原子密度 $n(p)$ [cm^{-3}]

R : T_e, n_e の関数

$$n_{cal}(p) = \frac{R_1(p)n(1^1S)n_e}{+R_2(p)n(2^1S)n_e} + \frac{R_3(p)n(2^3S)n_e}{+R_{2^1P}(p)n(1^1S)L_{2^1P}} + \frac{R_{3^1P}(p)n(1^1S)L_{3^1P}}{+R_{4^1P}(p)n(1^1S)L_{4^1P}}$$

準安定状態 非定常

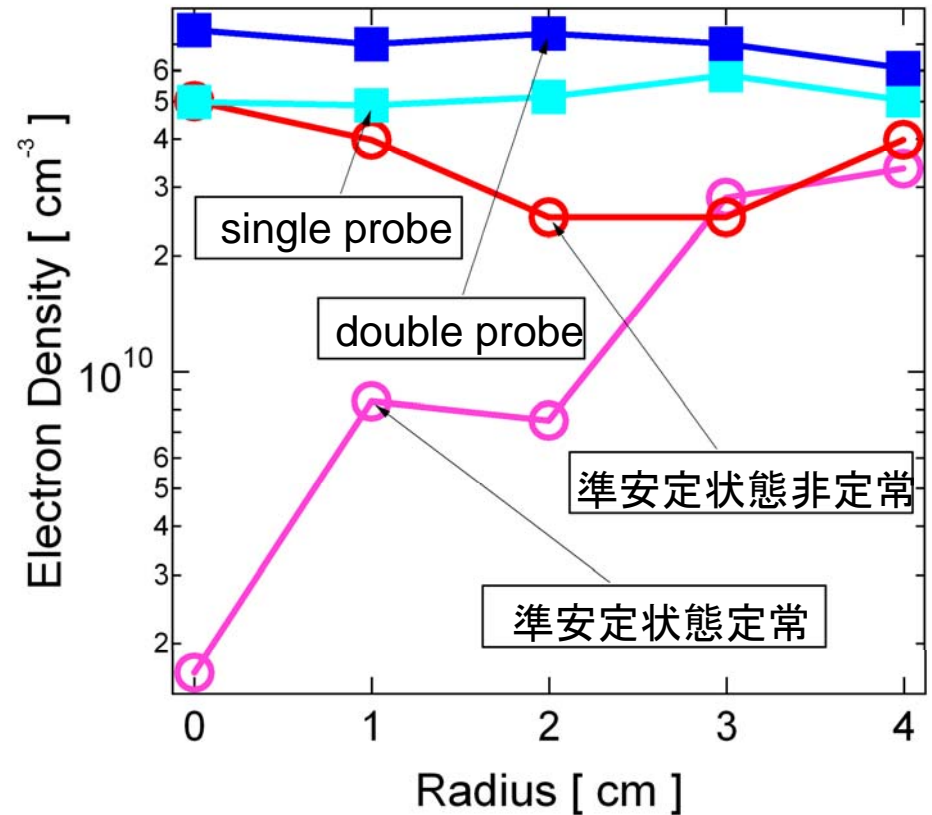
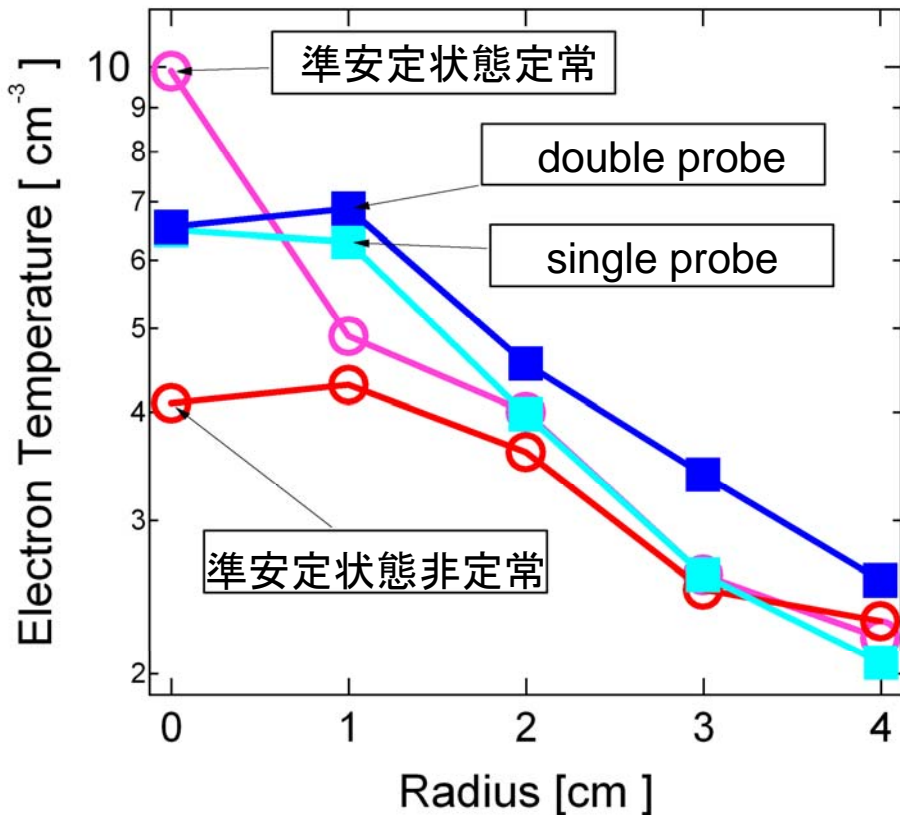
未知数 $T_e, n_e, n(2^1S), n(2^3S), L_{2^1P}, L_{3^1P}, L_{4^1P}$



$R : T_e, n_e$ の関数

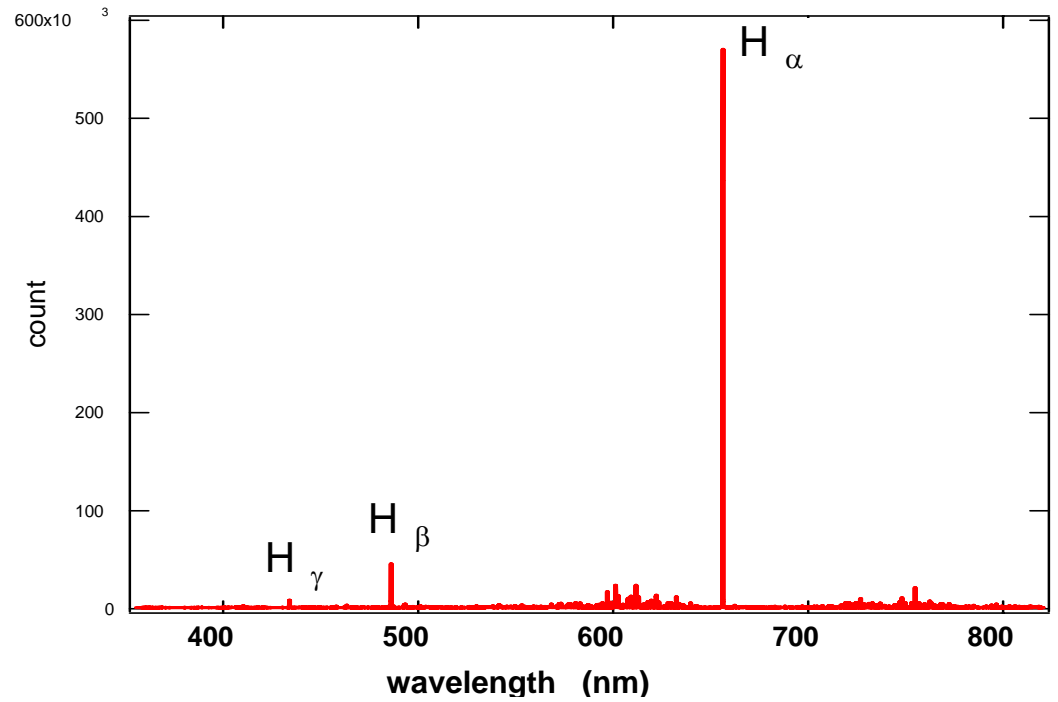
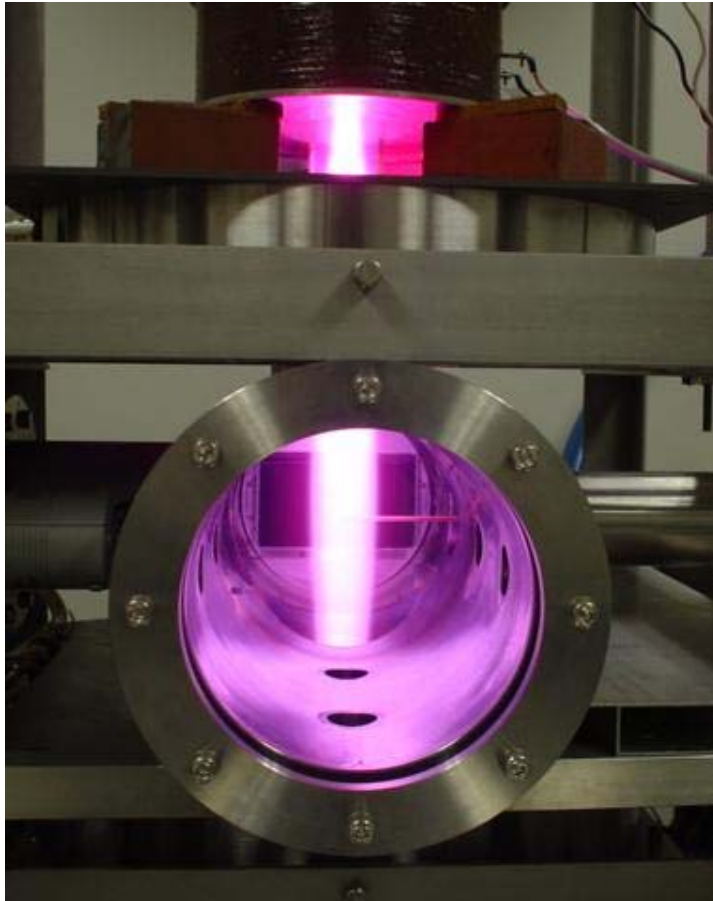
$$n_{cal}(p) = \underline{R_1(p)n(1^1S)n_e} + \underline{R_2(p)n(2^1S)n_e} + \underline{R_3(p)n(2^3S)n_e} + \underline{R_{2^1P}(p)n(1^1S)L_{2^1P}} + \underline{R_{3^1P}(p)n(1^1S)L_{3^1P}} + \underline{R_{4^1P}(p)n(1^1S)L_{4^1P}}$$

分光解析とプローブ解析における 電子温度・電子密度の比較

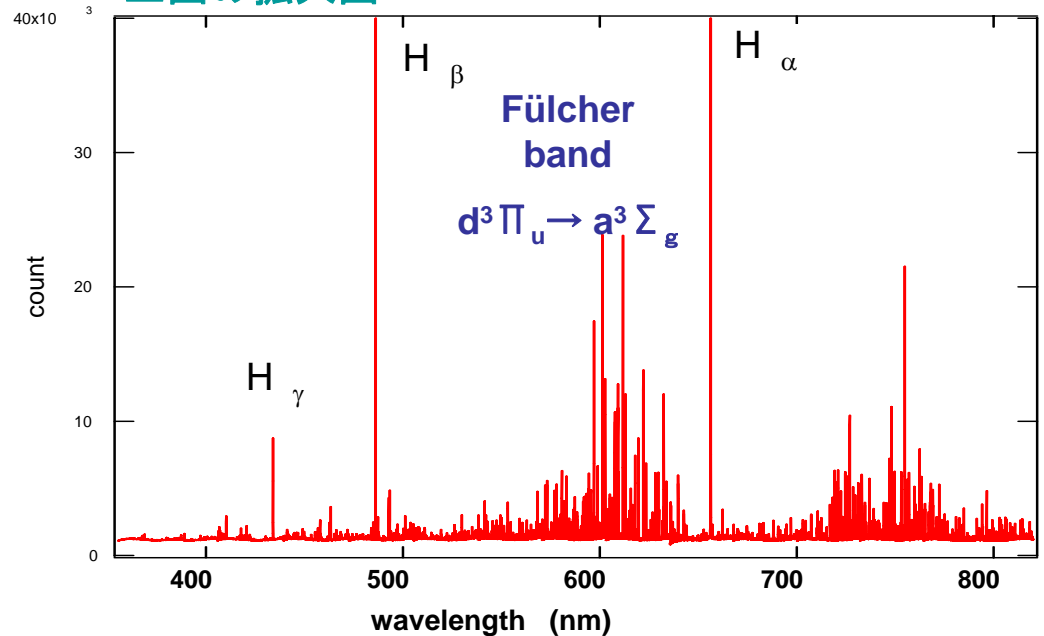


水素放電

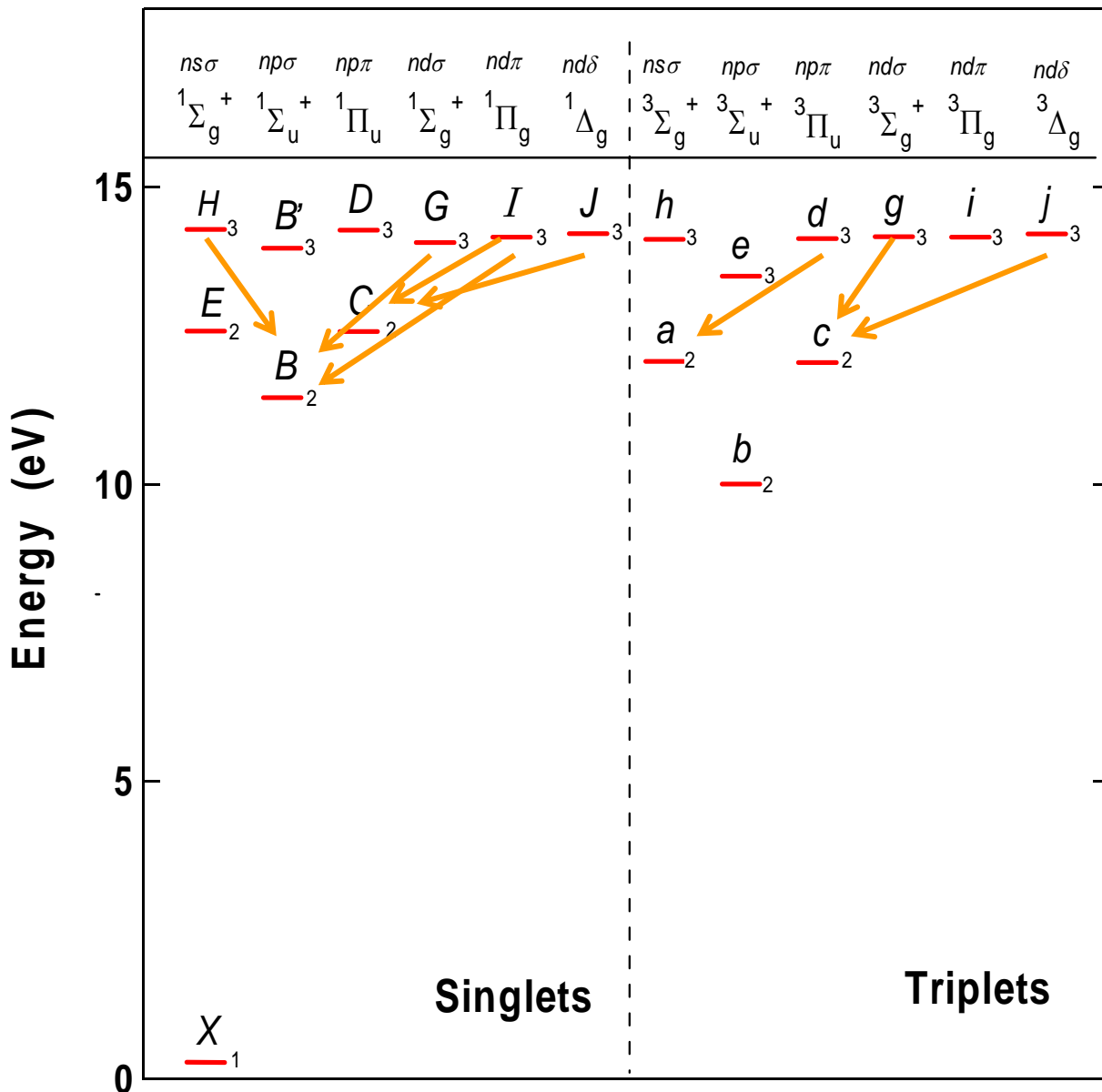
水素分子発光線の解析



上図の拡大図



水素分子発光線の同定結果



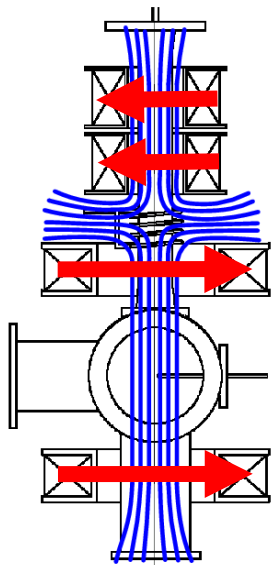
THE HYDROGEN
MOLECULE WAVELENGTH
TABLES OF GERHARD
HEINRICH DIEKE

EDITED BY
H. M. CROSSWHITE

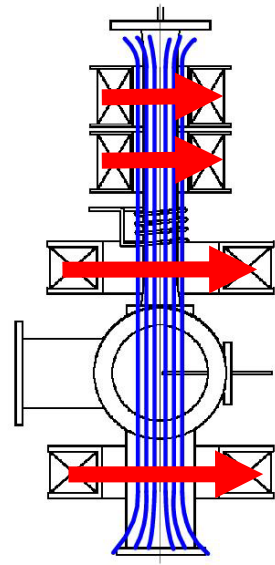
John Wiley & Sons, Inc.

高周波水素プラズマ実験

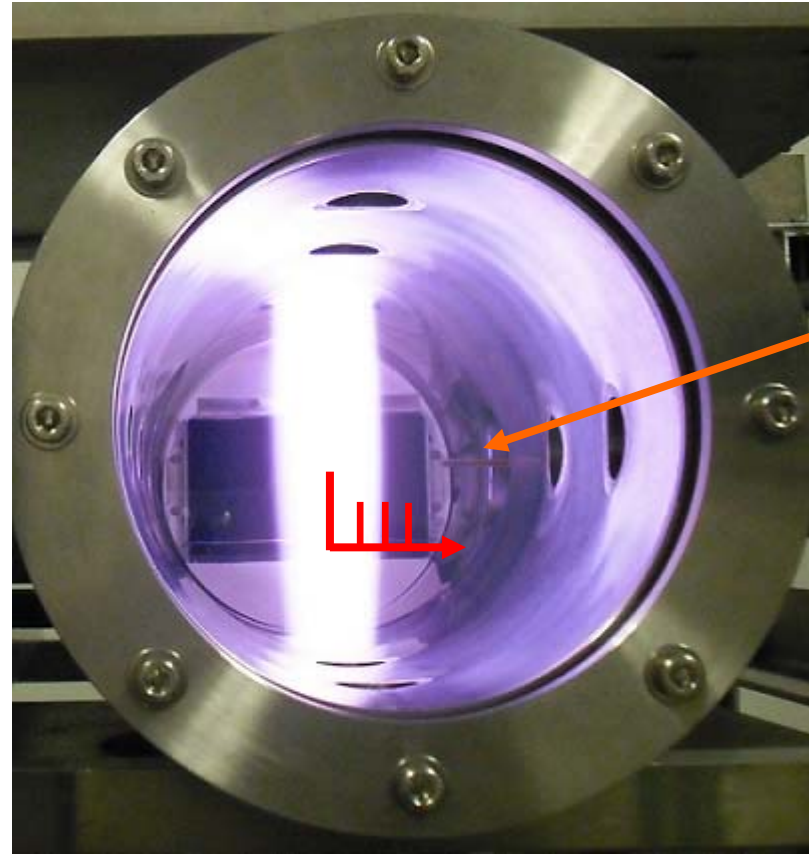
	ガス圧 [Torr]	アンテナ 出力 [W]	コイル 磁場
1	0.01	800	CUSP
2	0.005	700	MIRROR



CUSP磁場



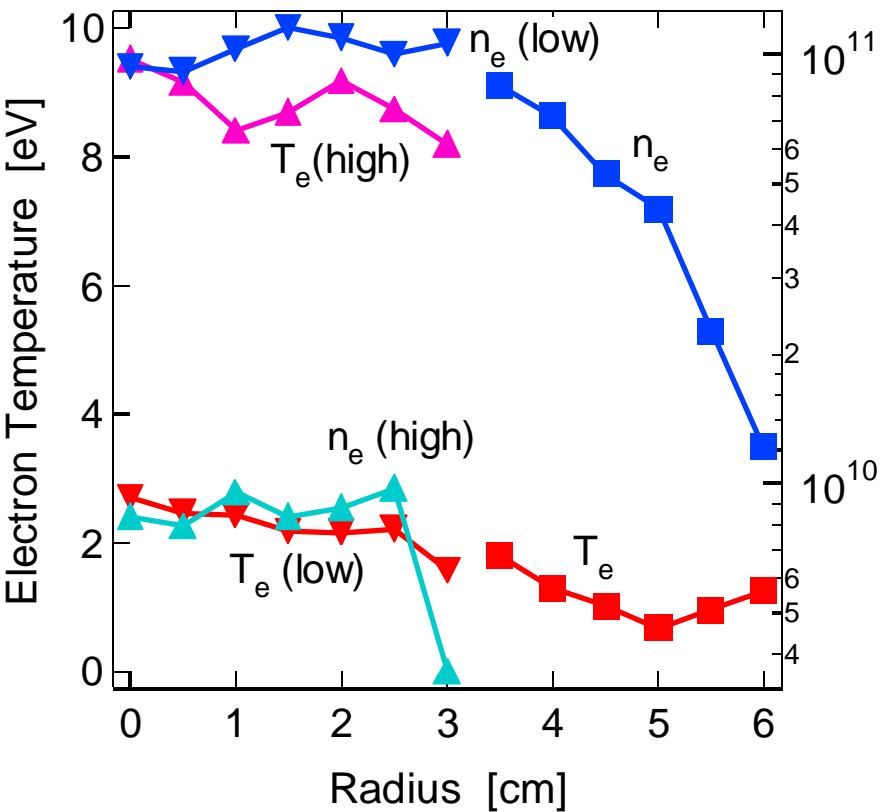
MIRROR磁場



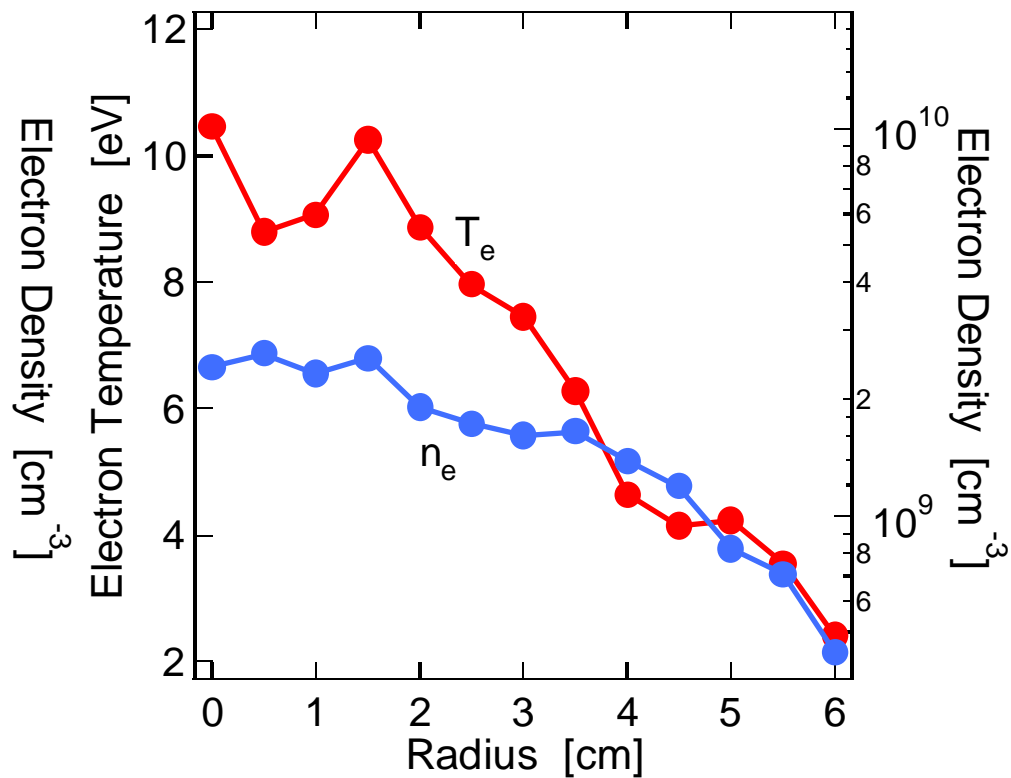
プローブ

各実験条件において、プラズマ円柱の中心部0[cm]から径方向外側6[cm]まで、0.5[cm]間隔でプローブ計測による電子温度・密度の計測と、分光計測を行った。

プローブ計測結果

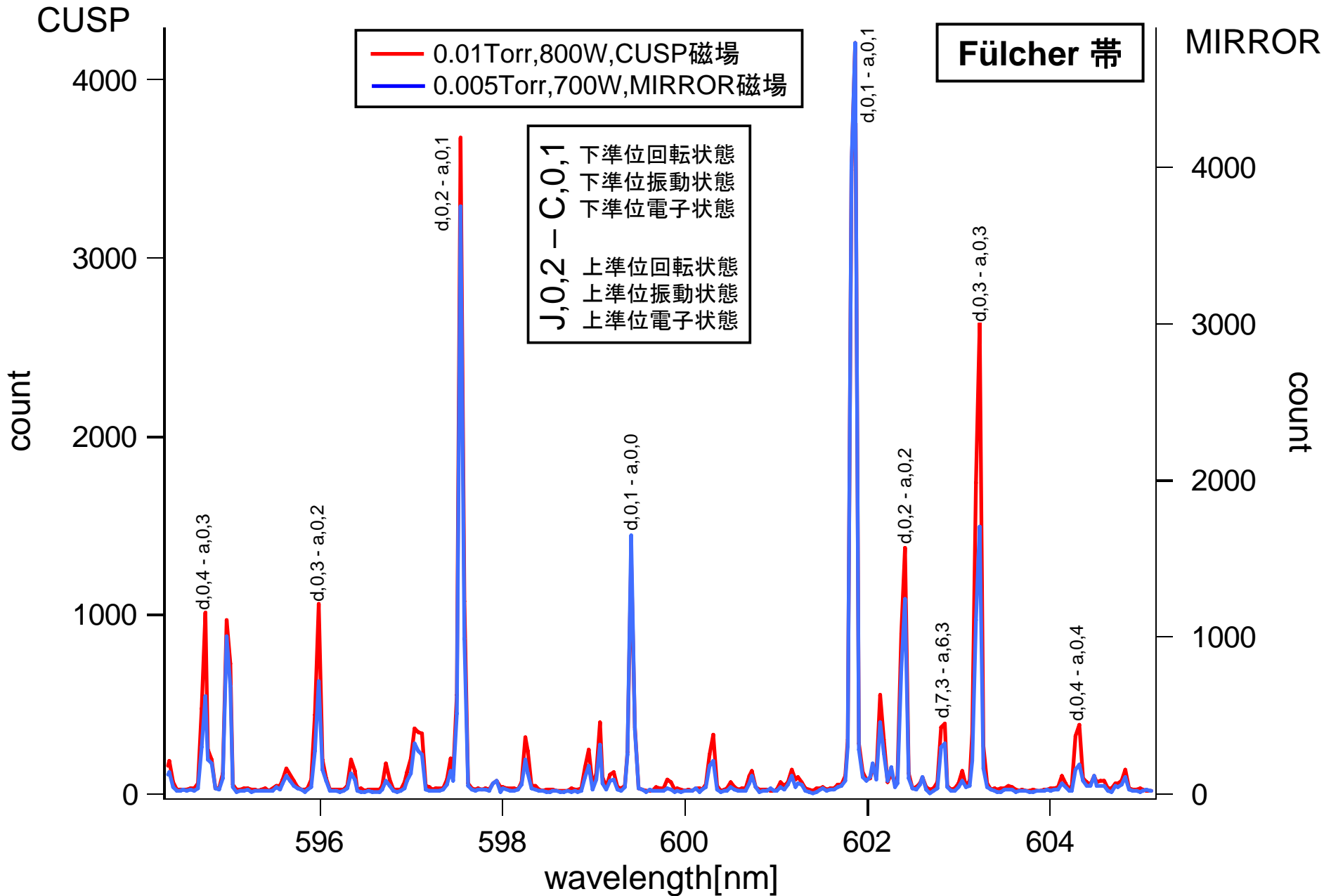


0.01Torr 800W CUSP

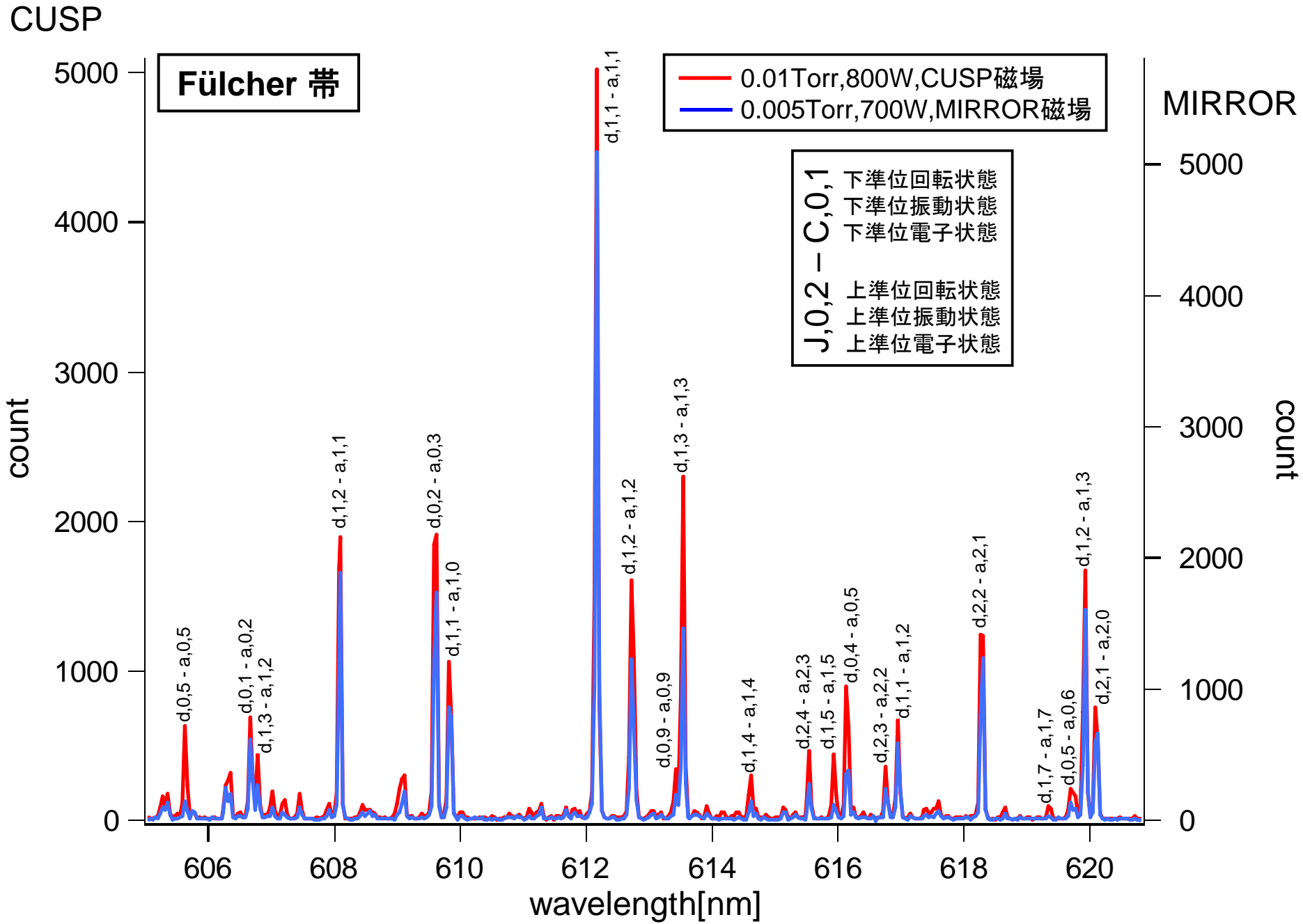


0.005Torr 700W MIRROR

分子発光スペクトル(594.4~605nm)

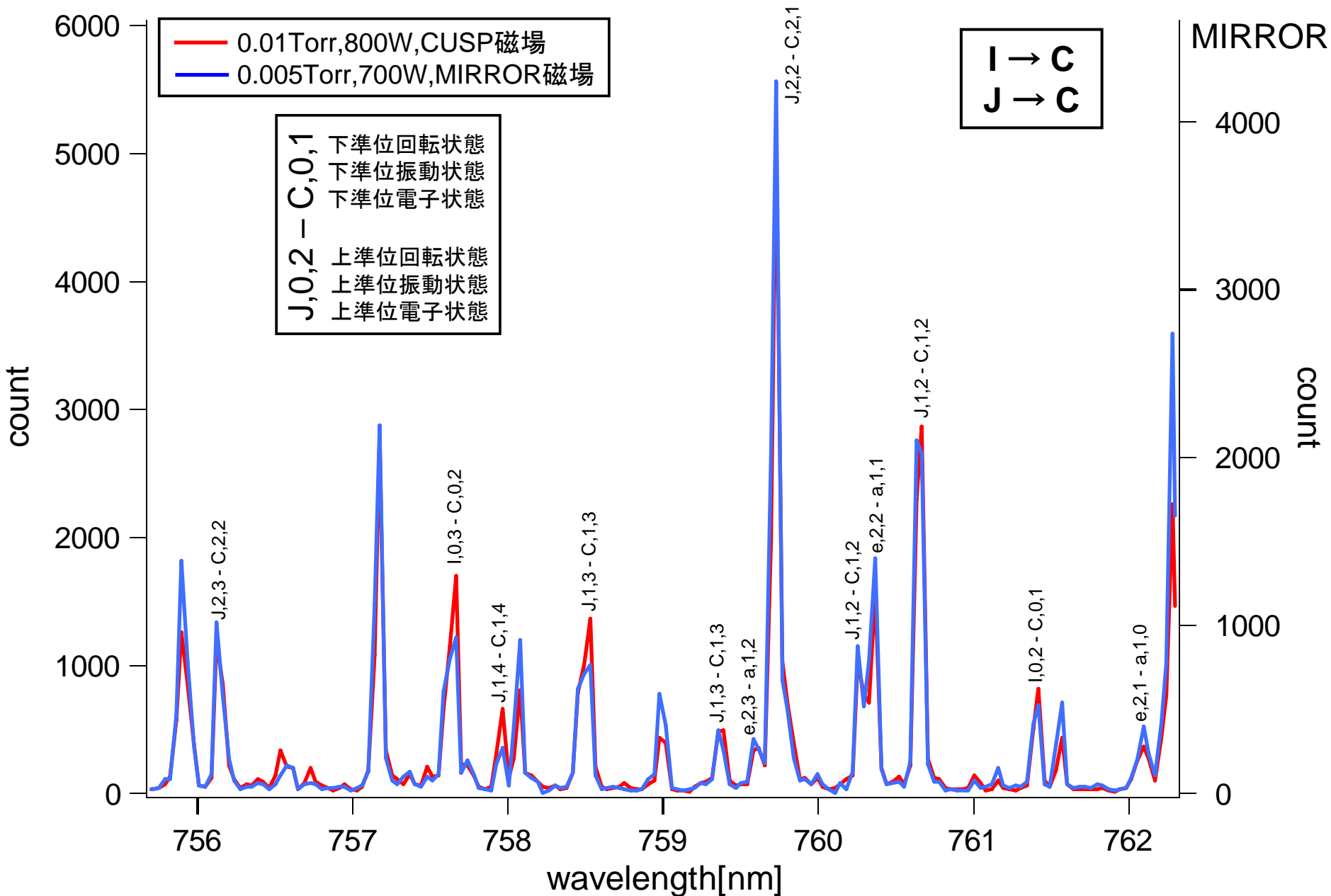


分子発光スペクトル(605~620.7nm)

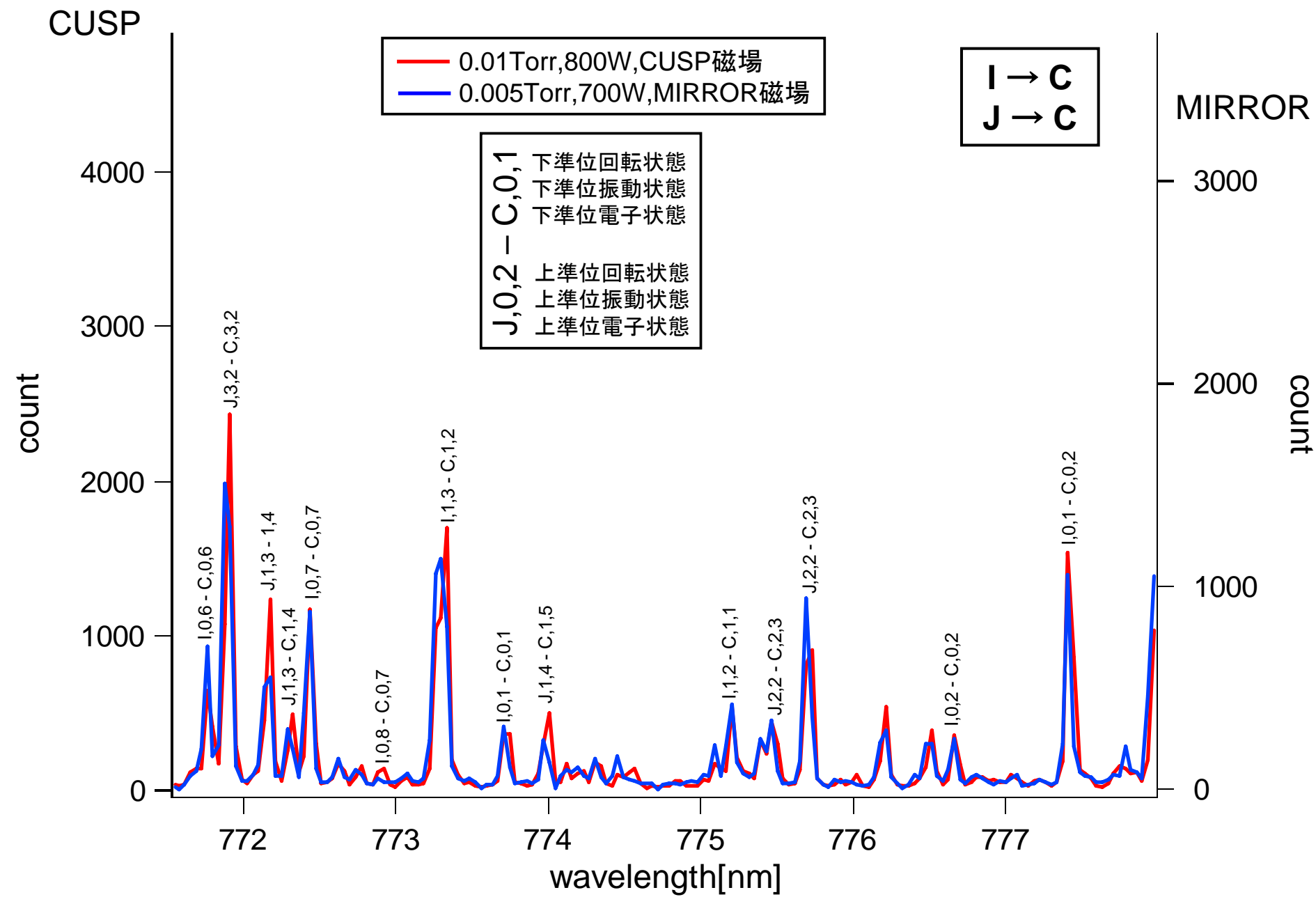


分子発光スペクトル(755.7~762.3nm)

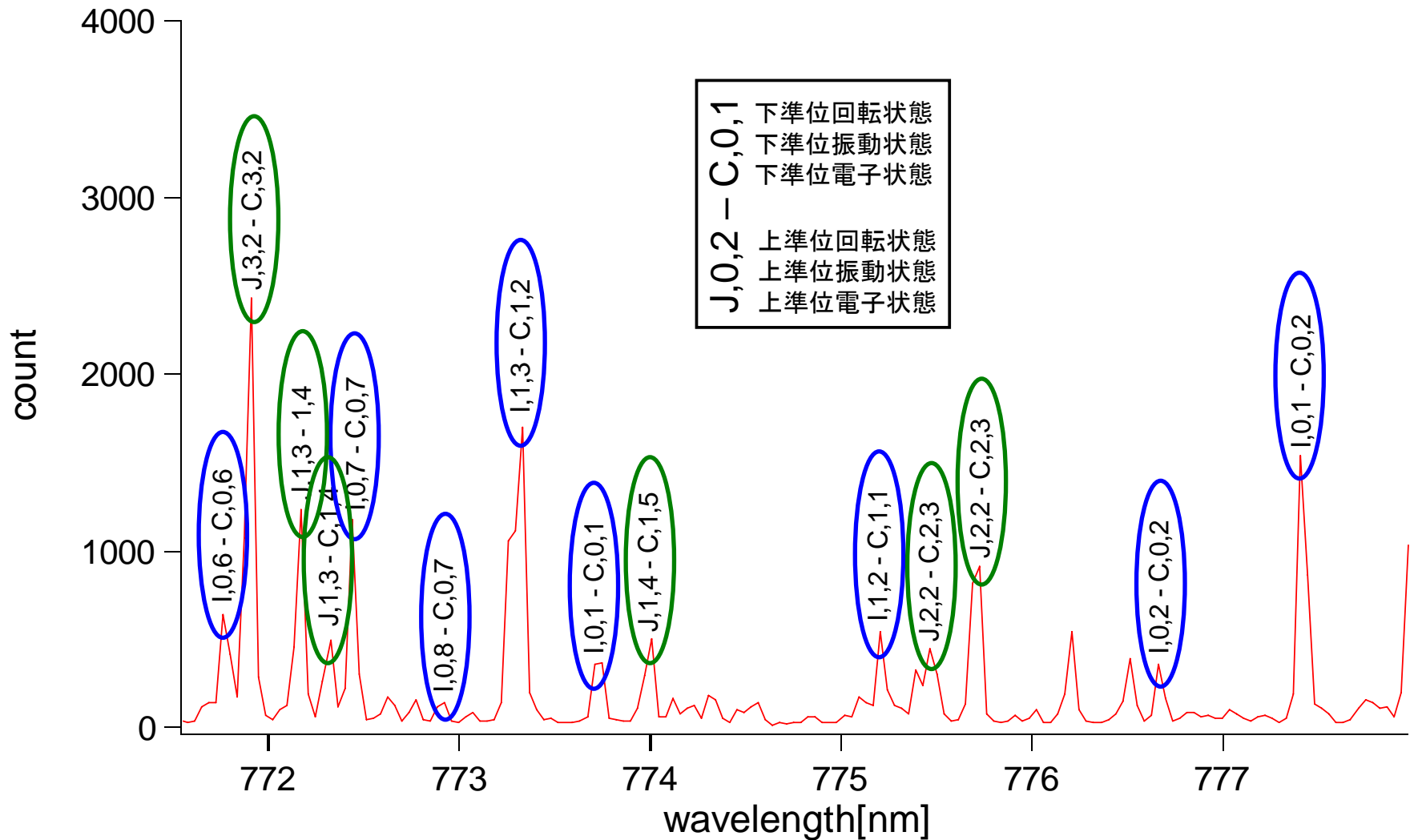
CUSP



分子発光スペクトル(771.5~777.8nm)

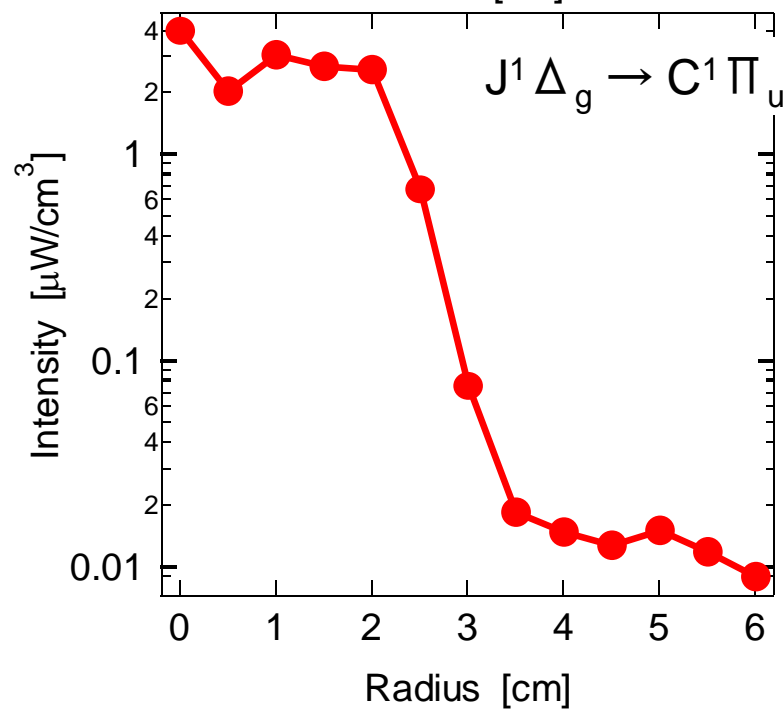
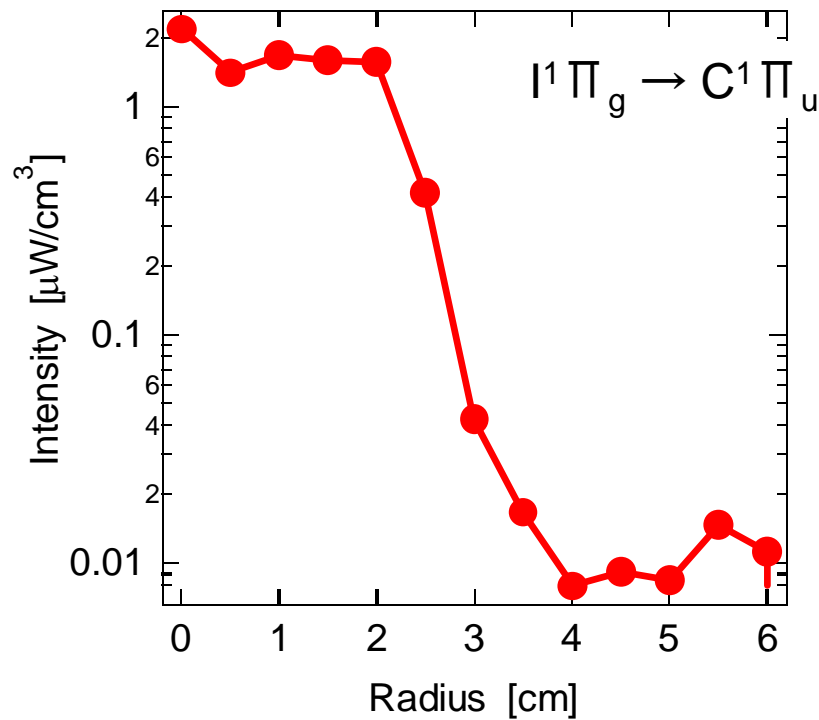
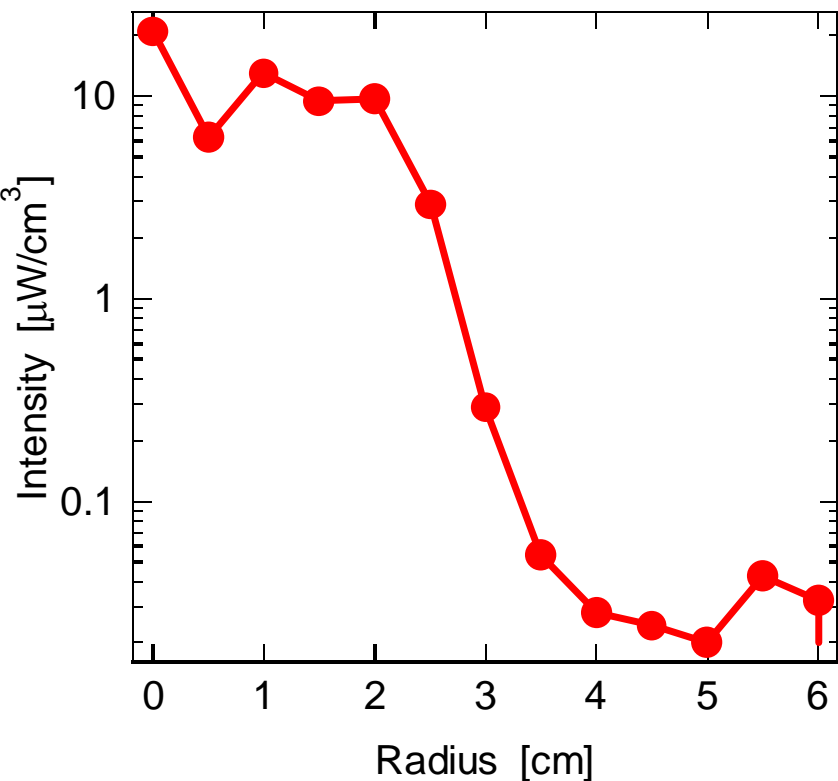


CUSP発光線強度 (電子状態のみを考慮した簡単な考察)



各発光線を電子状態遷移別に足し合わせていく

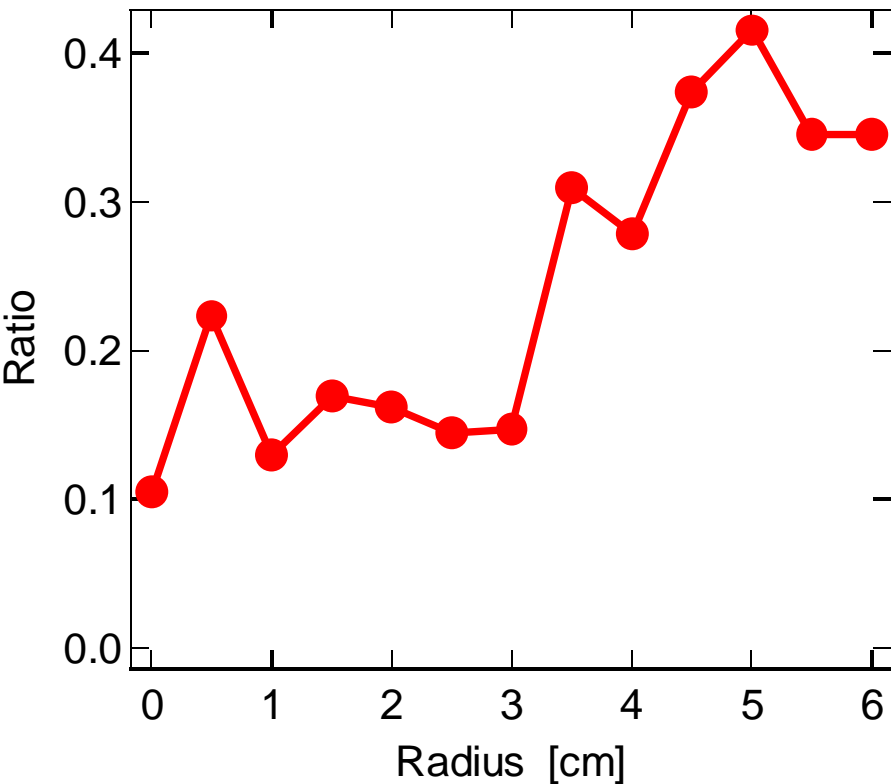
CUSP発光線強度



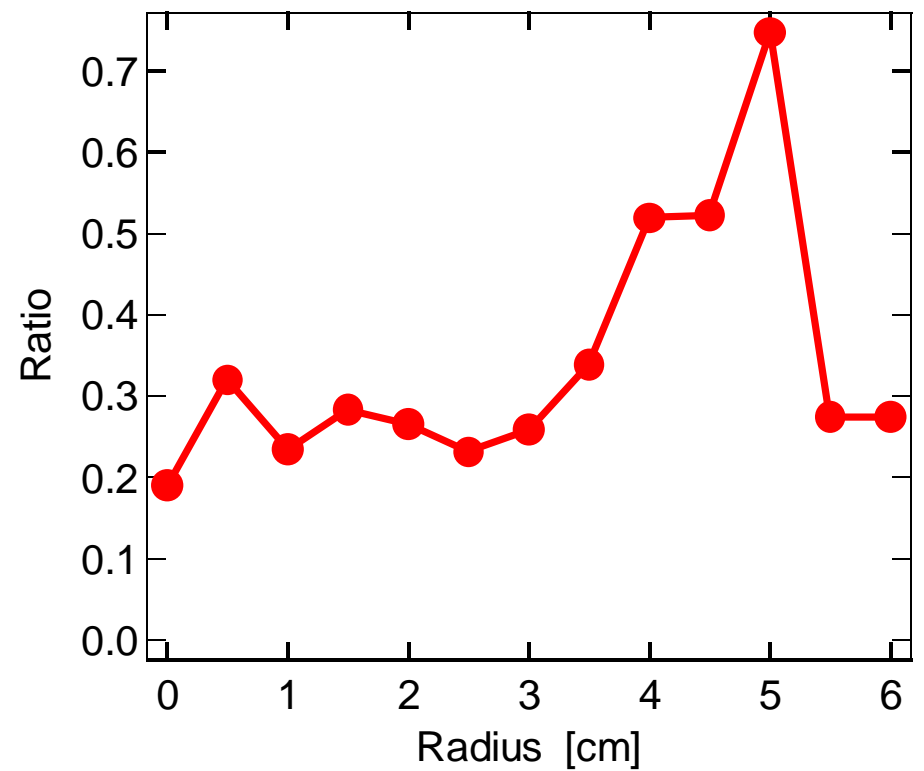
発光線強度比

$$(I \rightarrow C) / (d \rightarrow a)$$

$$(J \rightarrow C) / (d \rightarrow a)$$

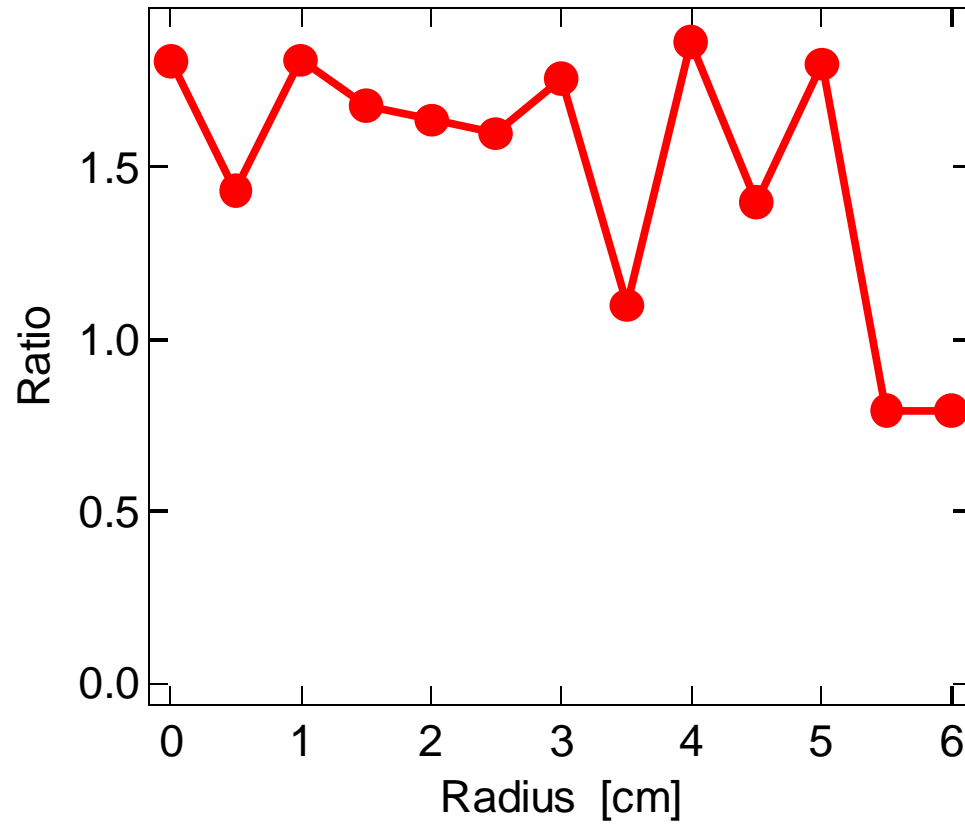


$$(I \rightarrow C) / (d \rightarrow a)$$



$$(J \rightarrow C) / (d \rightarrow a)$$

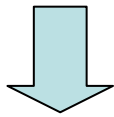
発光線強度比 $(J \rightarrow C) / (I \rightarrow C)$



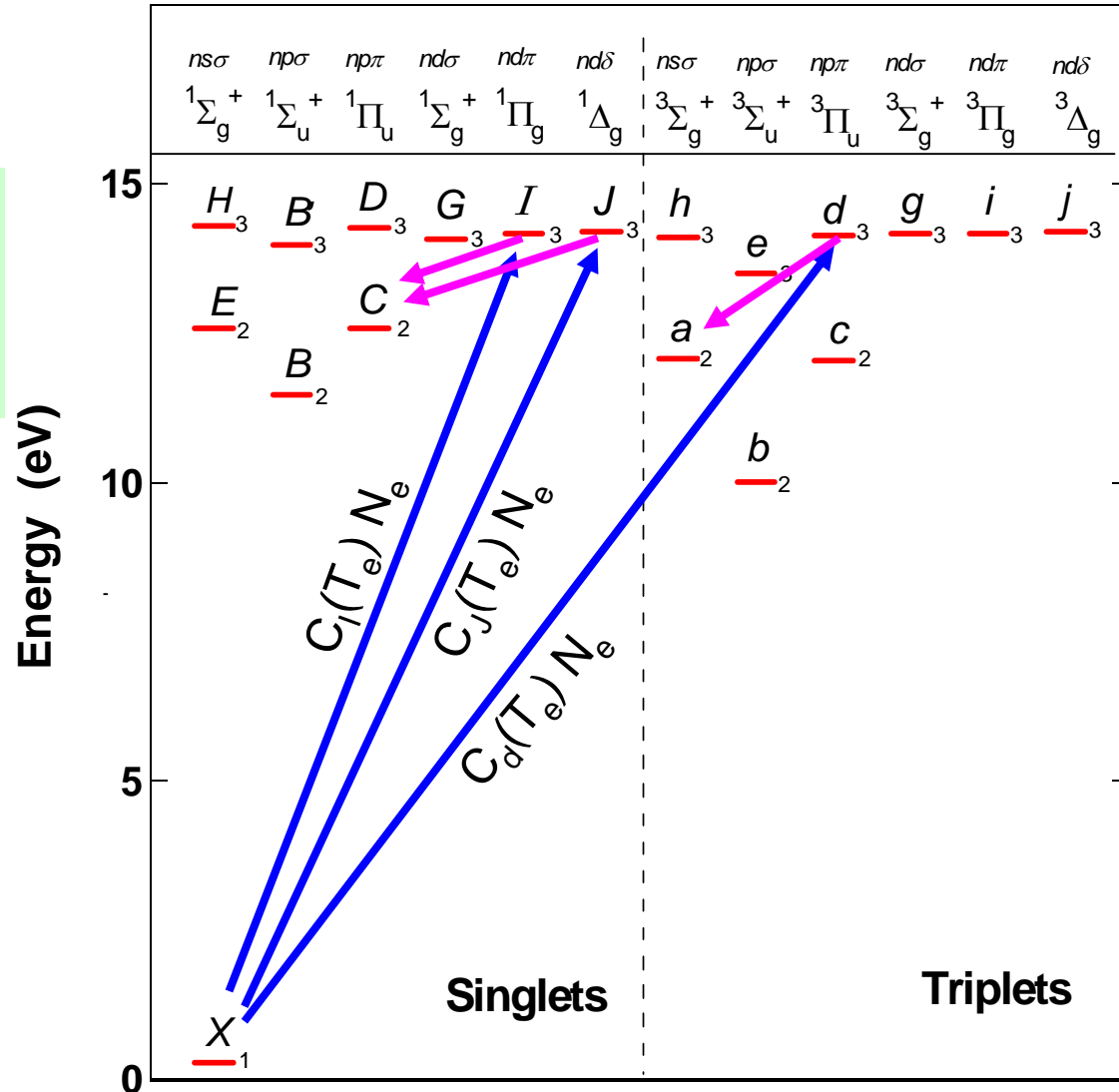
発光線強度比解析

各遷移においてコロナモデルが成り立っていると仮定

上準位が電子基底状態からの電子衝突によってのみ生成され、下準位への遷移が自然放出遷移によってのみ行われる

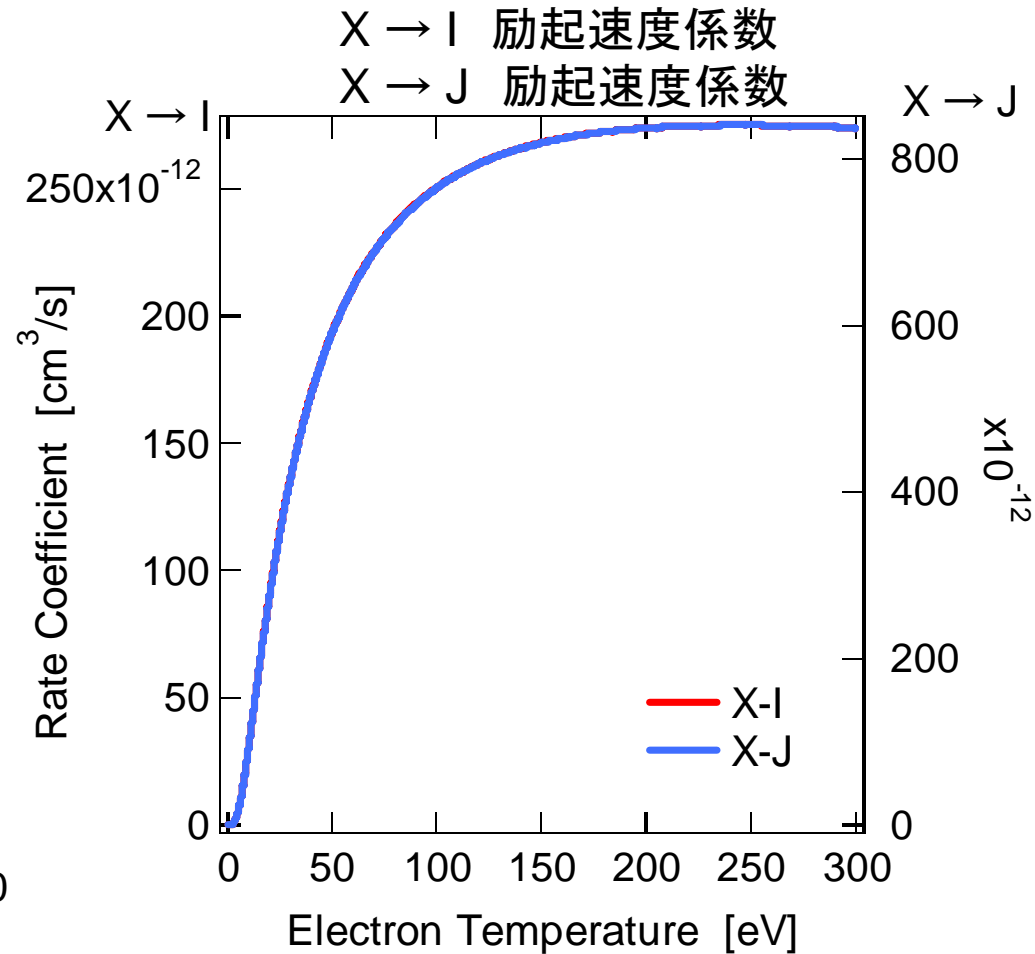
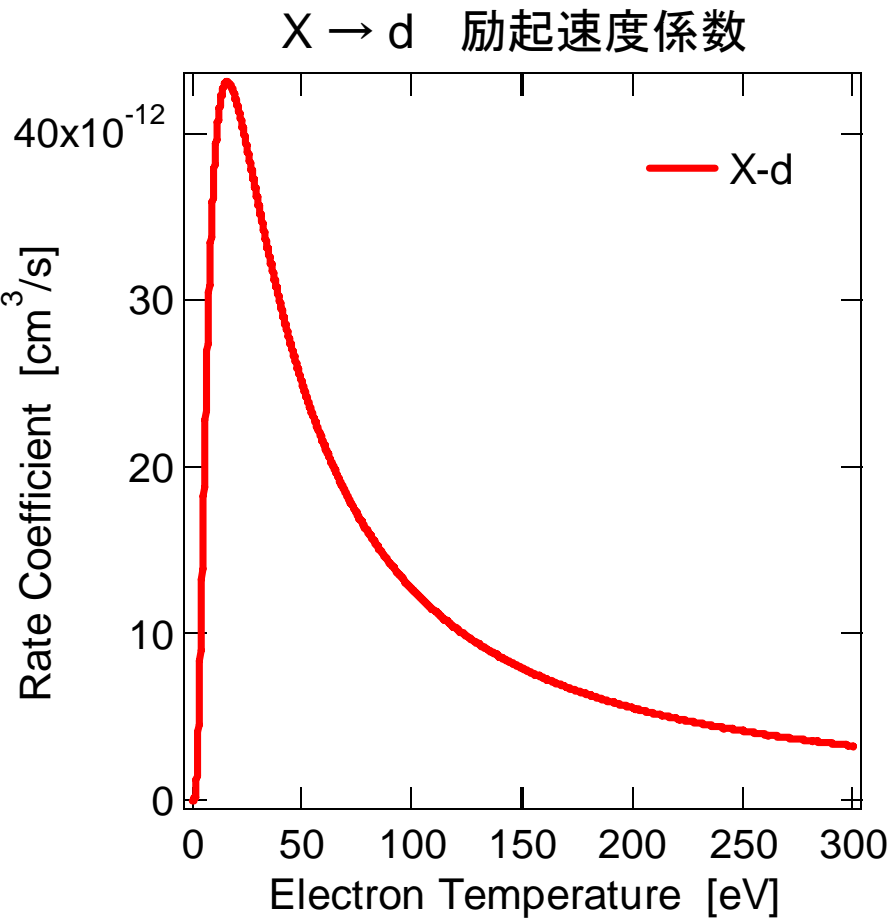


発光線強度の比と電子衝突励起速度係数の比は比例する



電子衝突励起速度係数

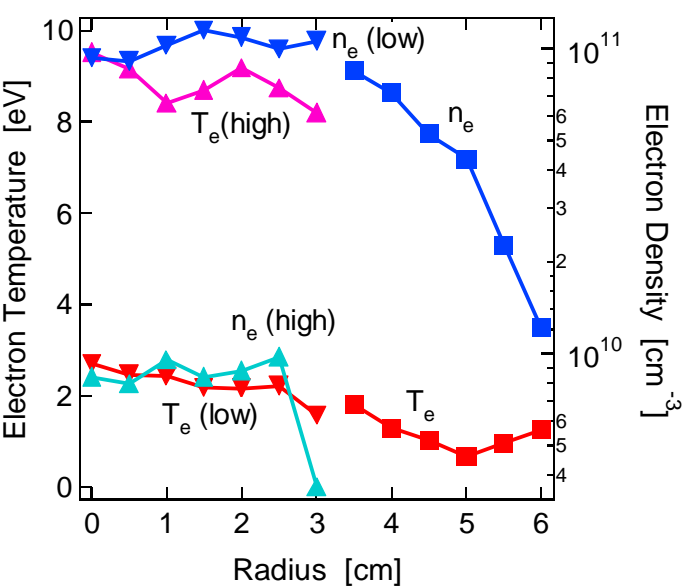
Collision Processes in Low-Temperature Hydrogen Plasmas, R.K.Janev, D.Reiter, U.Samm



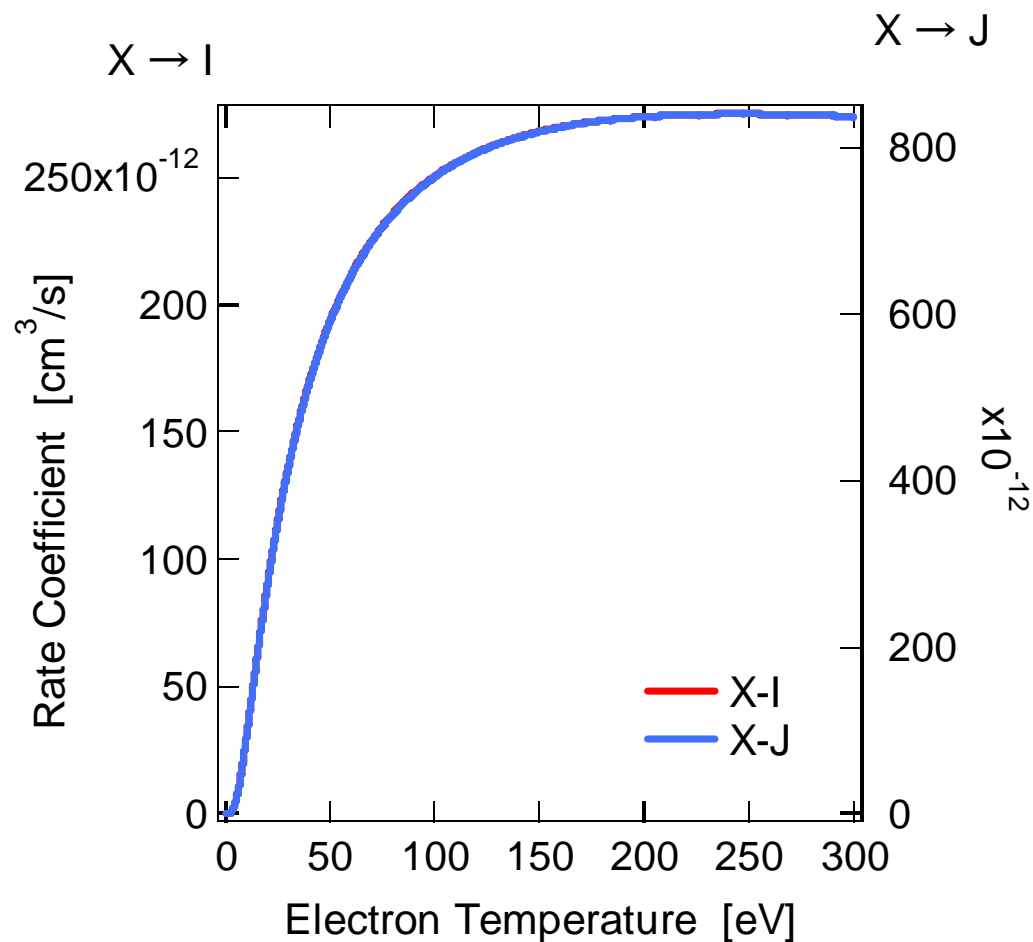
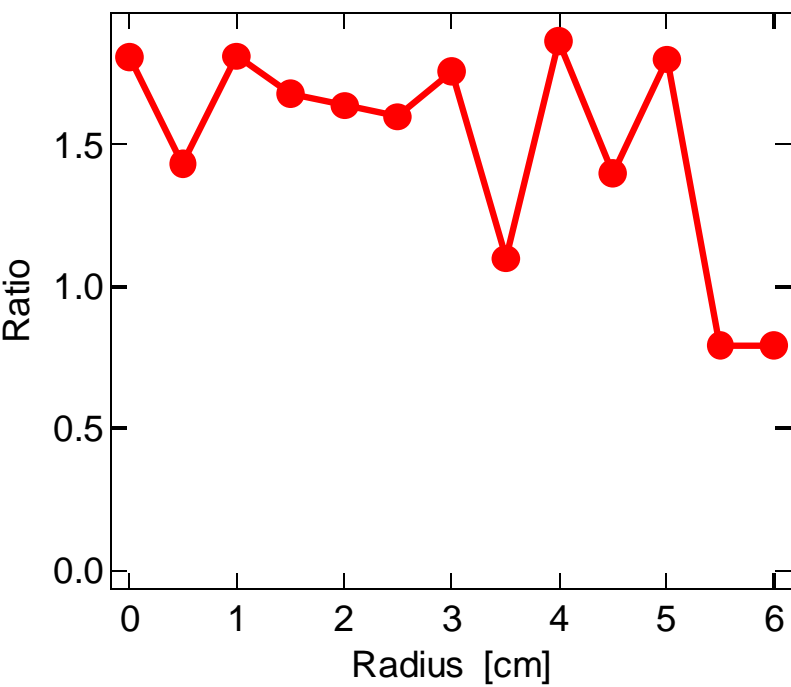
I, Jでは電子温度に対する
相対的な変化は等しい → 比は一定

実験結果とコロナモデルの比較

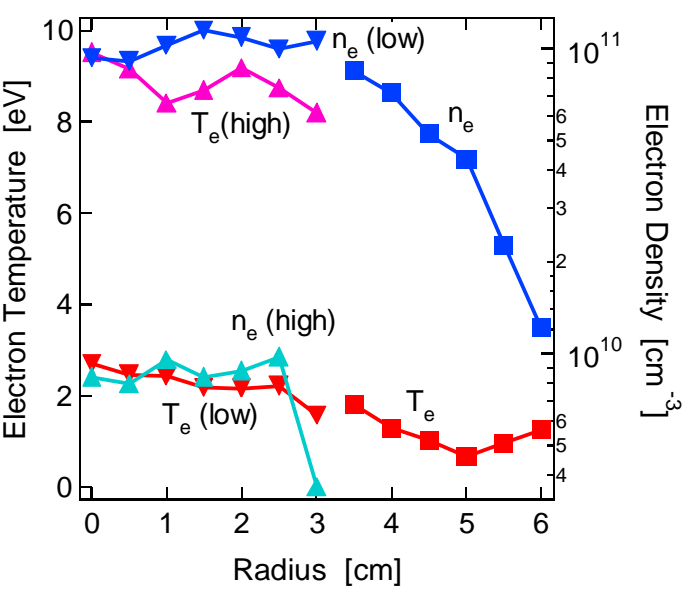
Singlet ($J \rightarrow C$) / ($I \rightarrow C$)



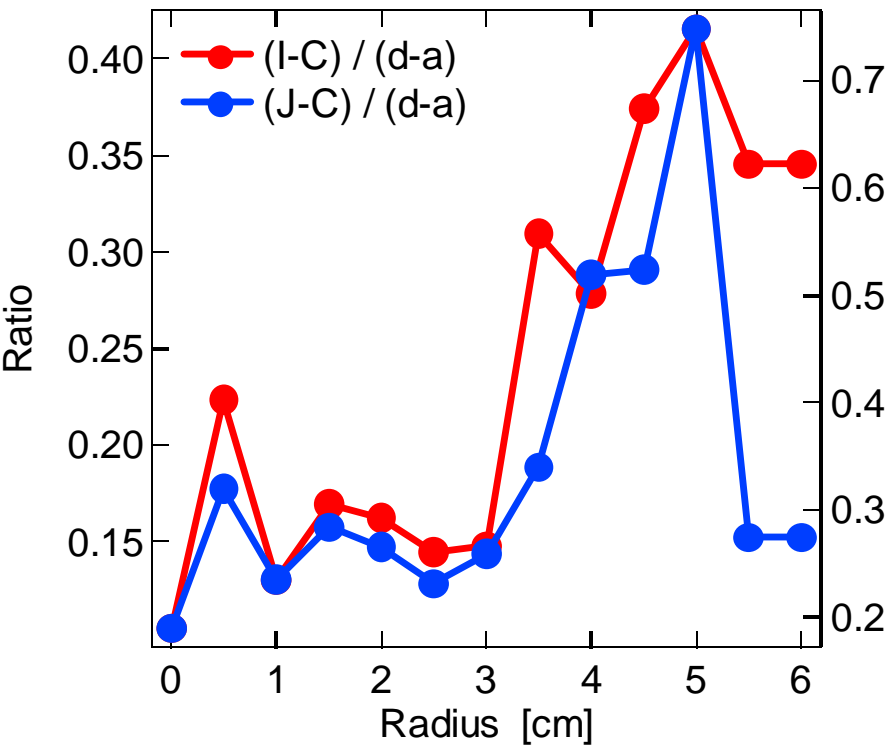
実験



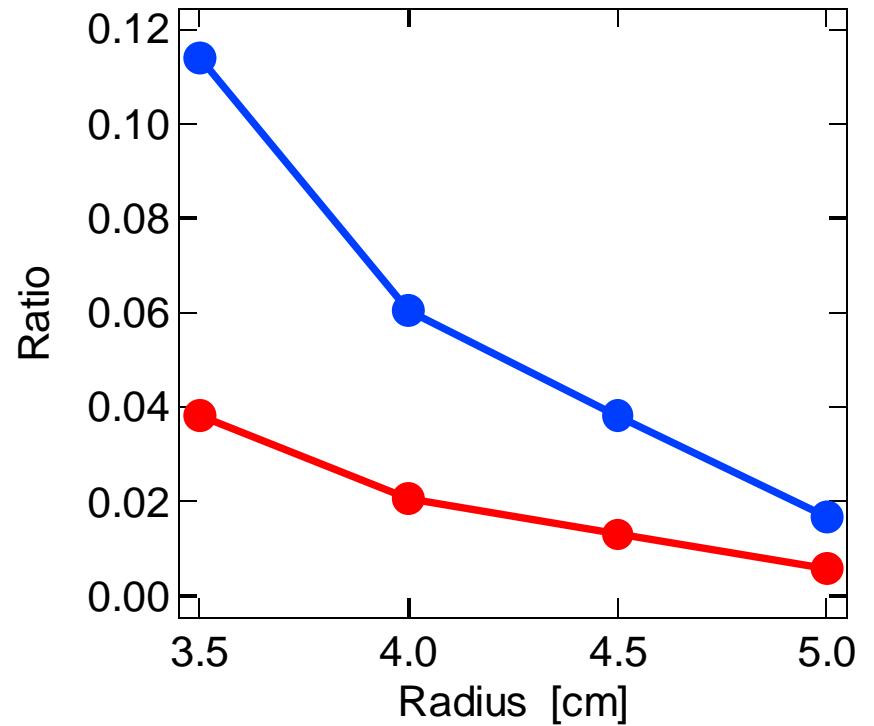
実験結果とコロナモデルの比較



実験

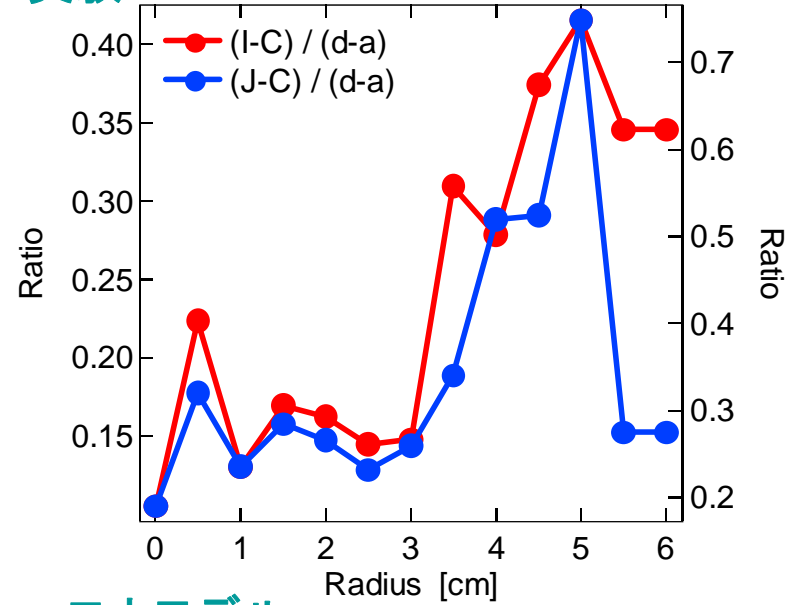
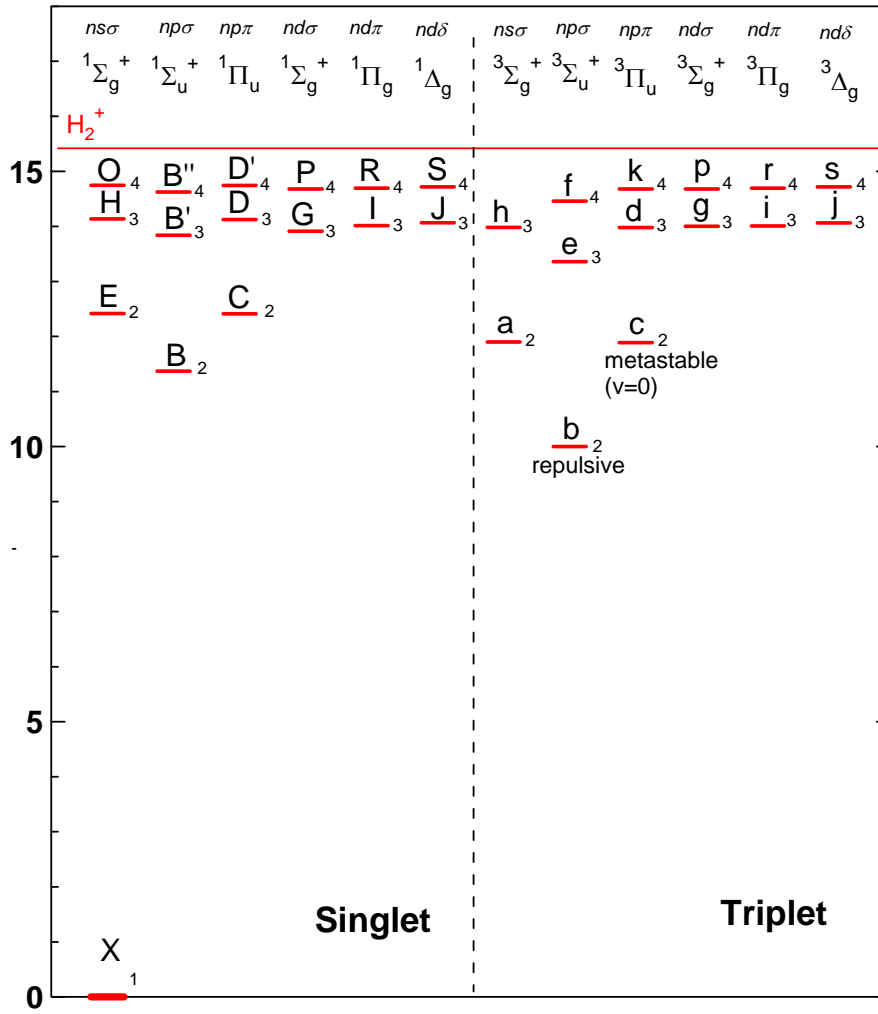


コロナモデルから予測される
発光線強度相対変化

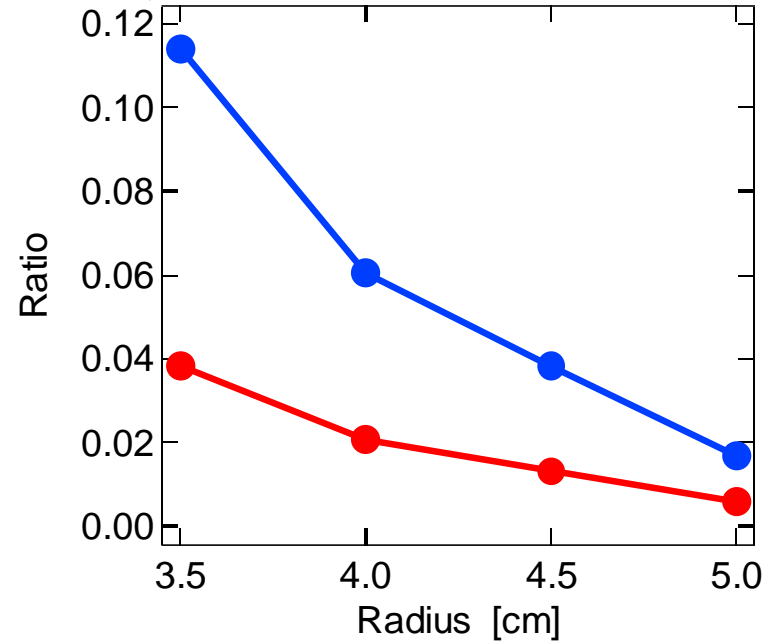


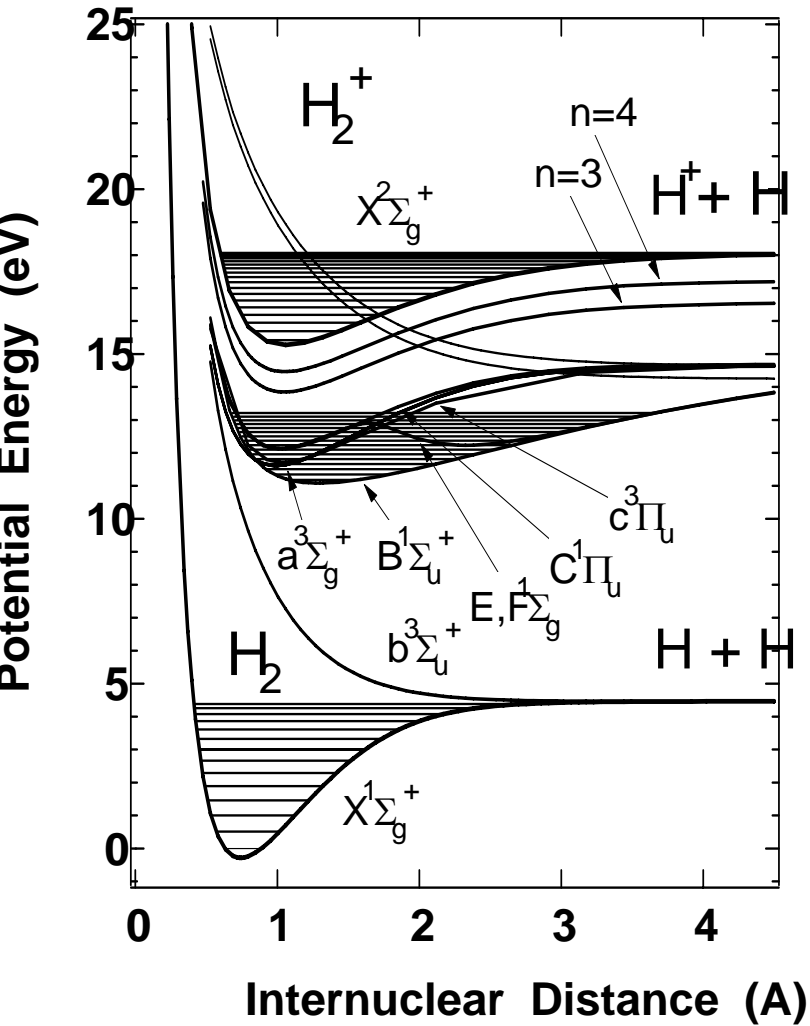
準安定状態からの励起？

実験



コロナモデル



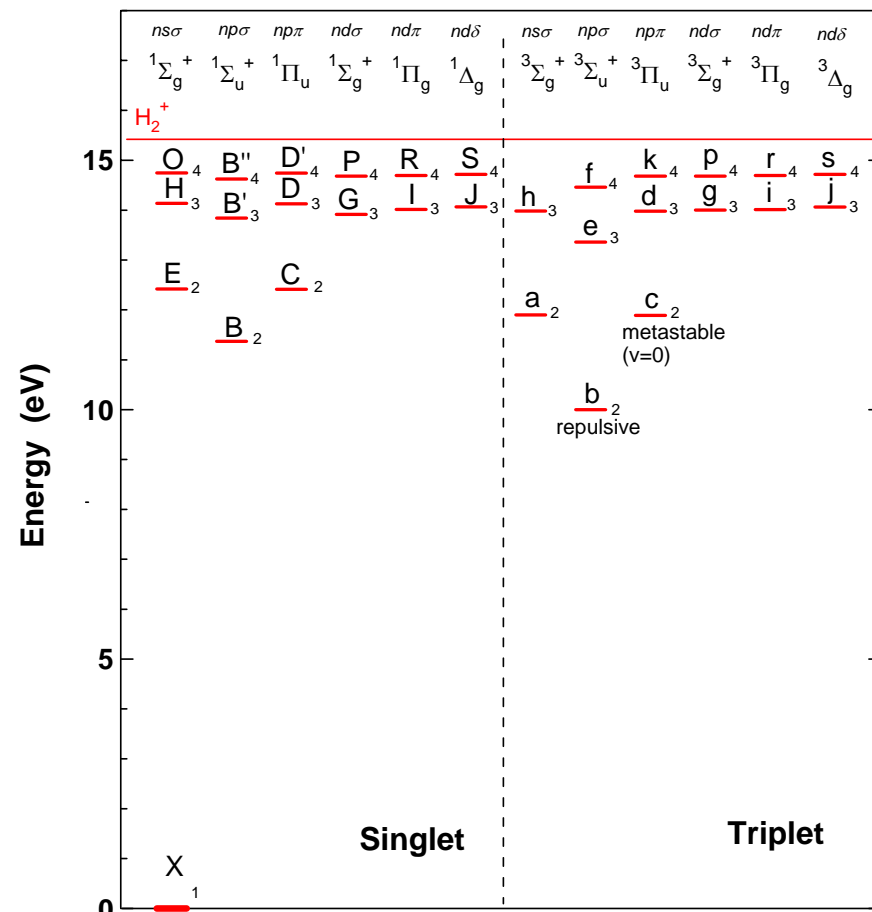
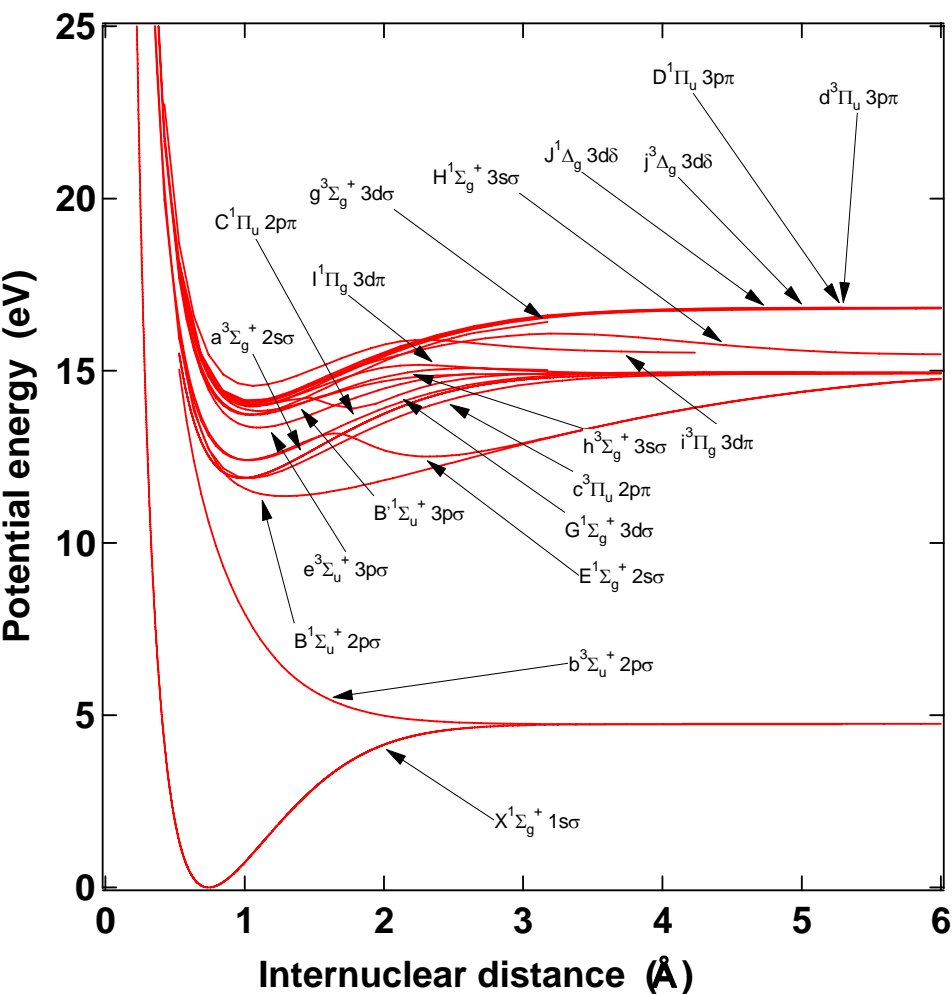


主量子数2までの準位の電子状態・振動状態を区別したモデルを構築済み.

- ・電離・解離等の各種反応の実効的速度係数の計算
- ・高電子密度の場合の可視水素分子発光線の解析.
($n=3$ の準位の統計重率密度分布を仮定)

可視水素分子発光線解析のためモデルを拡張.

電子状態の波動関数・ポテンシャルエネルギー・遷移モーメント



上図中の電子状態のうち、
トリプレットpをのぞき Kolos,
Wolniewicz らによりすべて
計算されている

遷移モーメントもほぼすべて
計算されている

Review

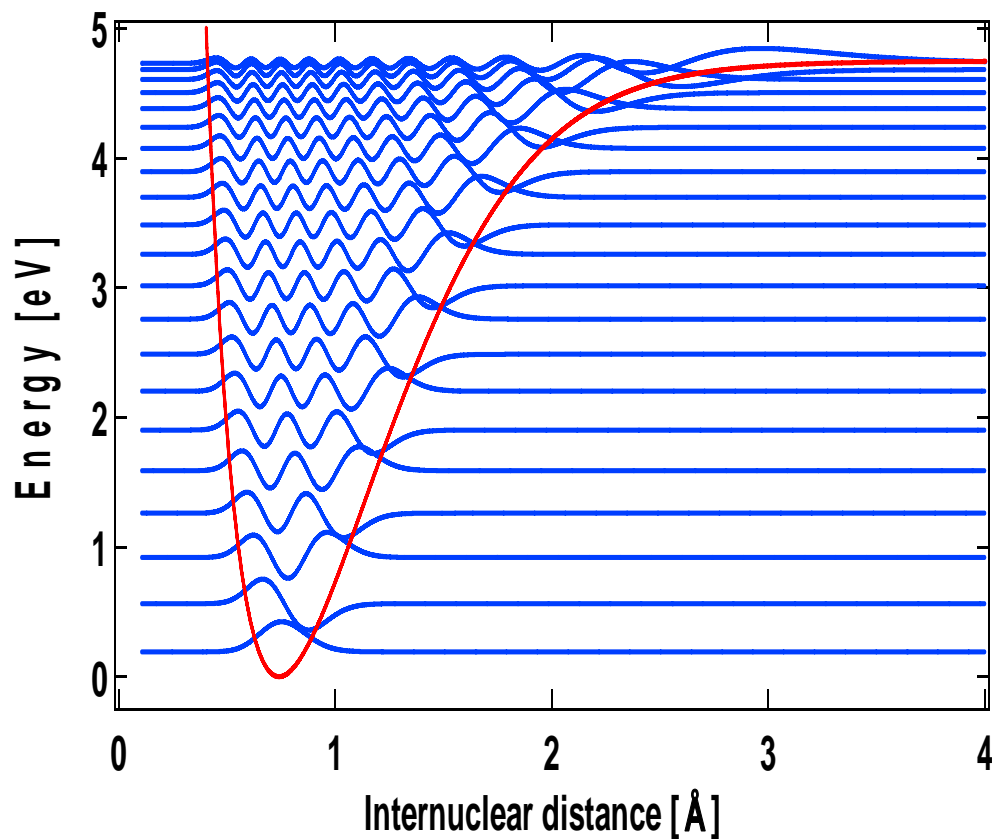
Explicitly Correlated Wave Function in Chemistry and Physics
Theory and Applications

Jacek Rychlewski (Ed.)

Kluwer Academic Publishers

振動状態波動関数およびフランク-コンドン因子の計算

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi_v}{dR^2} + U(R)\psi_v + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{J(J+1)}{R^2}\psi_v = E\psi_v$$

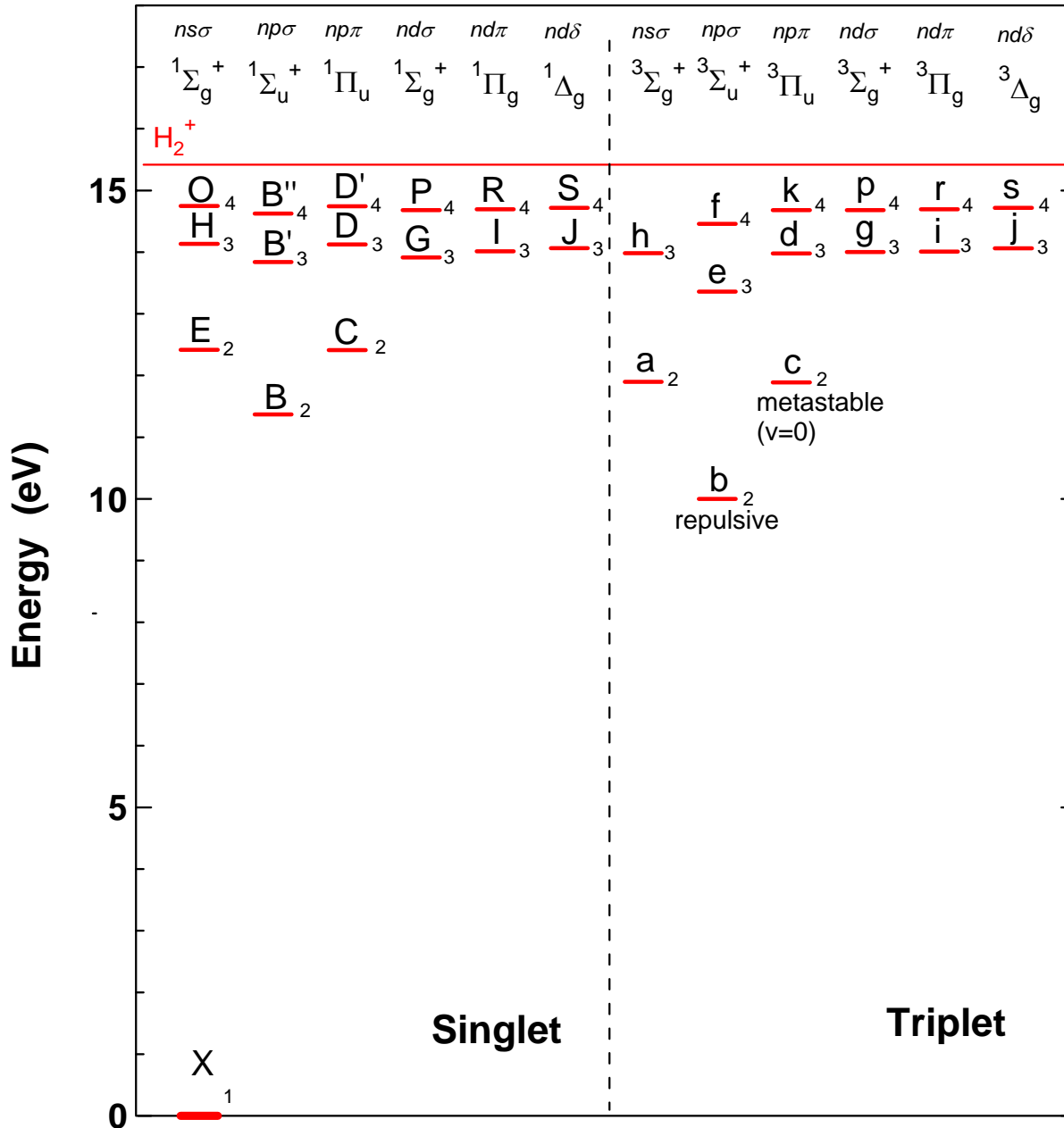


フランク-コンドン因子

$$q_{n'v'J',nvJ} = \left| \int \psi_{n'v'J'}(R)\psi_{nvJ}(R)dR \right|^2$$

重水素分子電子基底状態の計算例(J=0)
Numerov法

各電子状態の振動・回転準位



THE HYDROGEN MOLECULE
WAVELENGTH TABLES OF
GERHARD HEINRICH DIEKE

EDITED BY

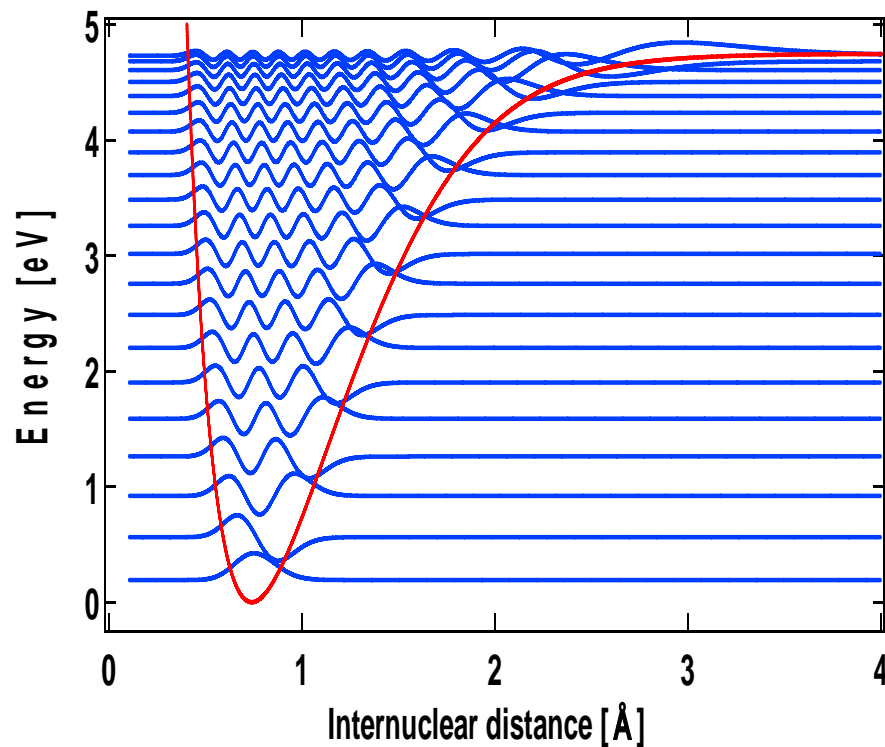
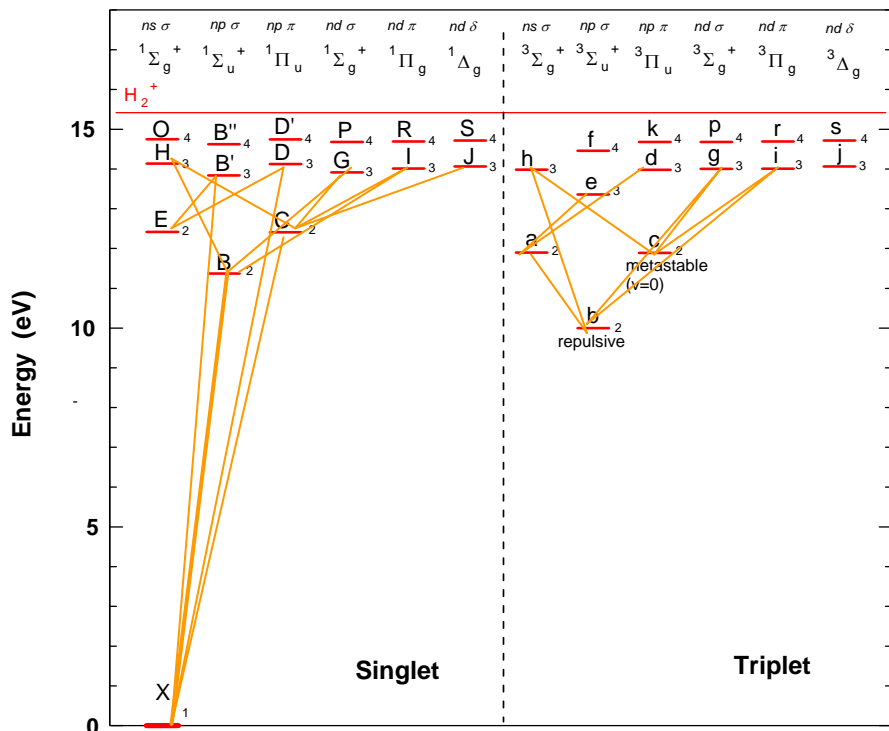
H. M. CROSSWHITE

John Wiley & Sons, Inc.

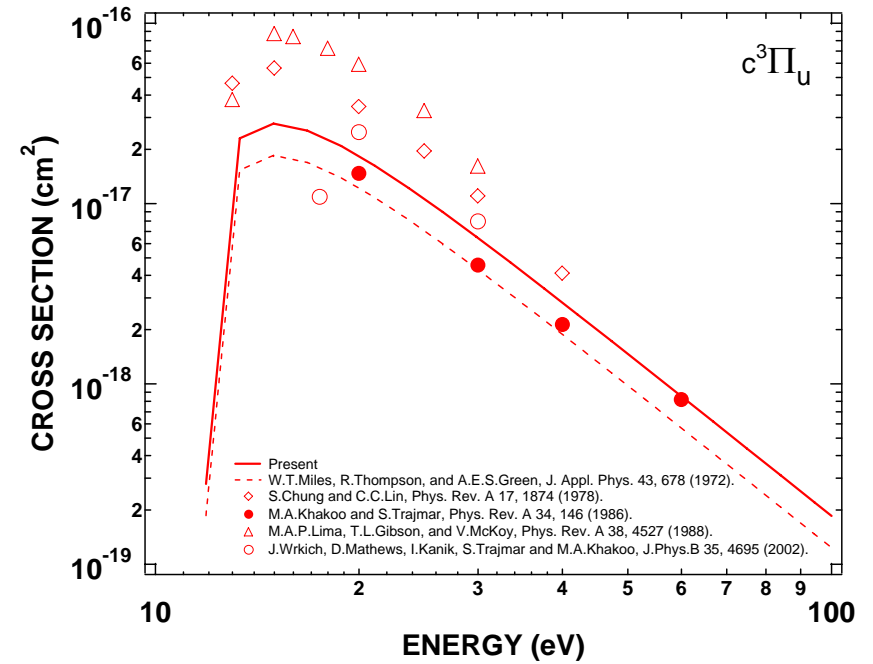
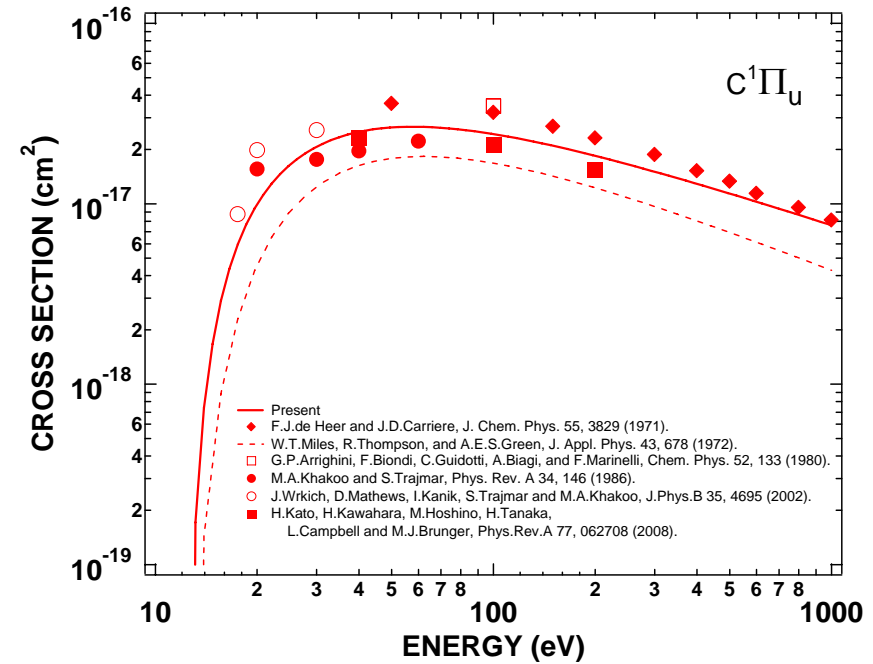
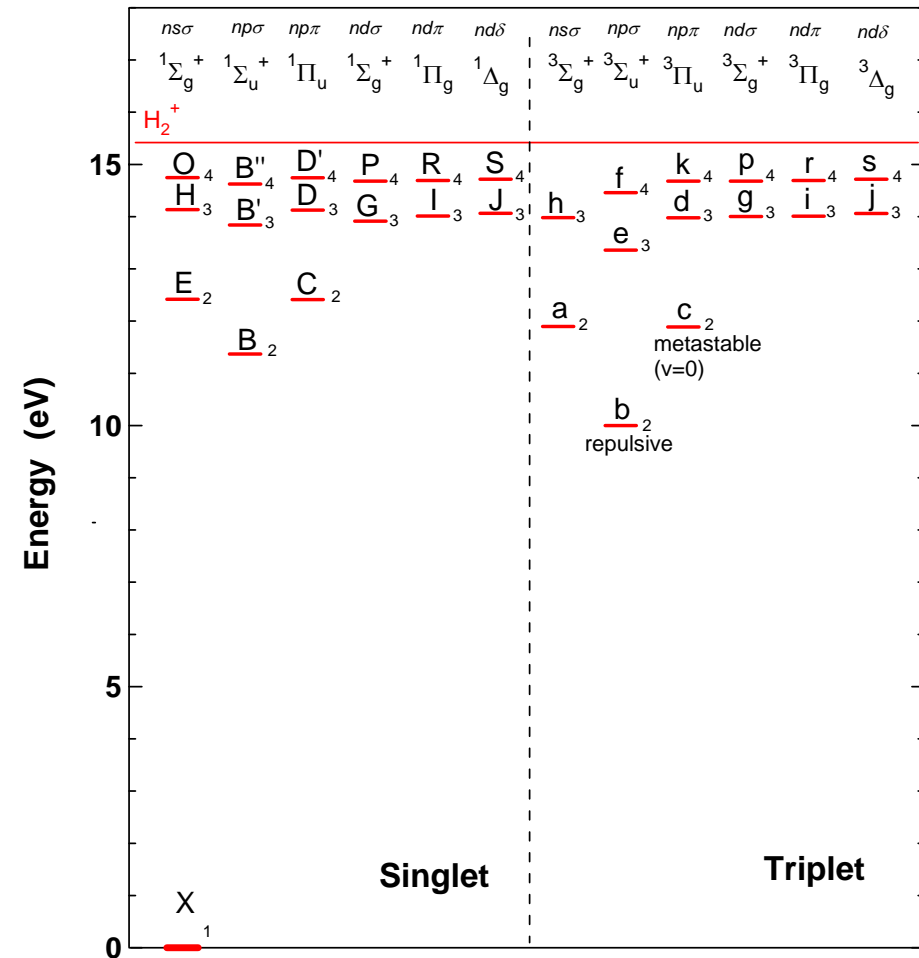
自然放出確率

$$A(n'v'J', n''v''J'') \propto \left| \int \psi_{n'v'J'}(R) R_e(R) \psi_{n''v''J''}(R) dR \right|^2 S_{J'J''}$$

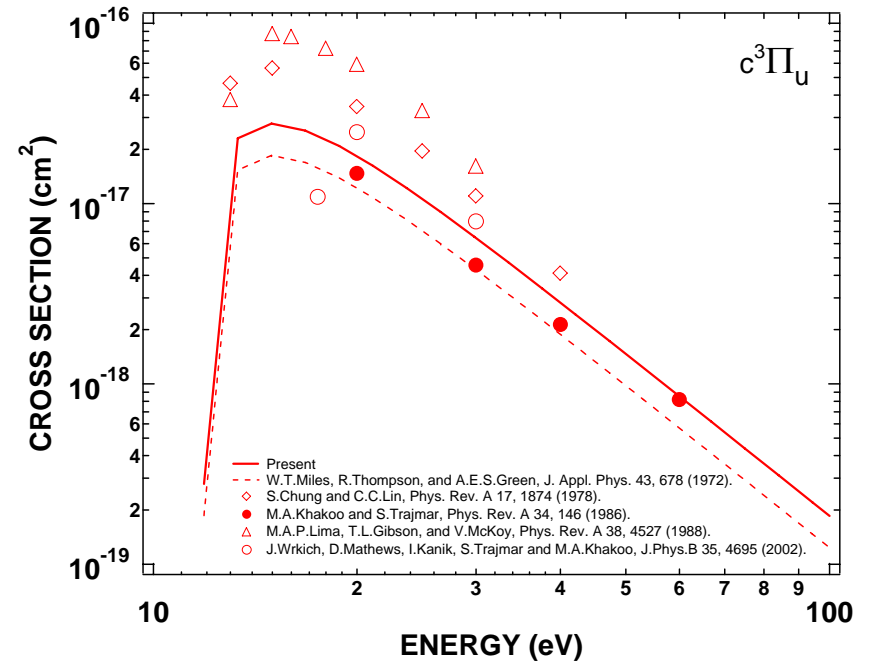
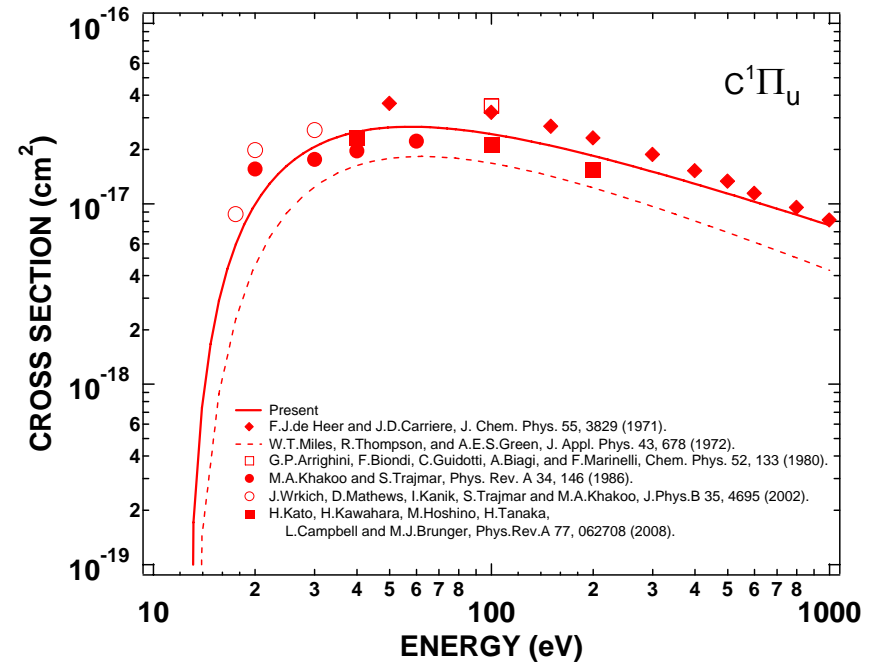
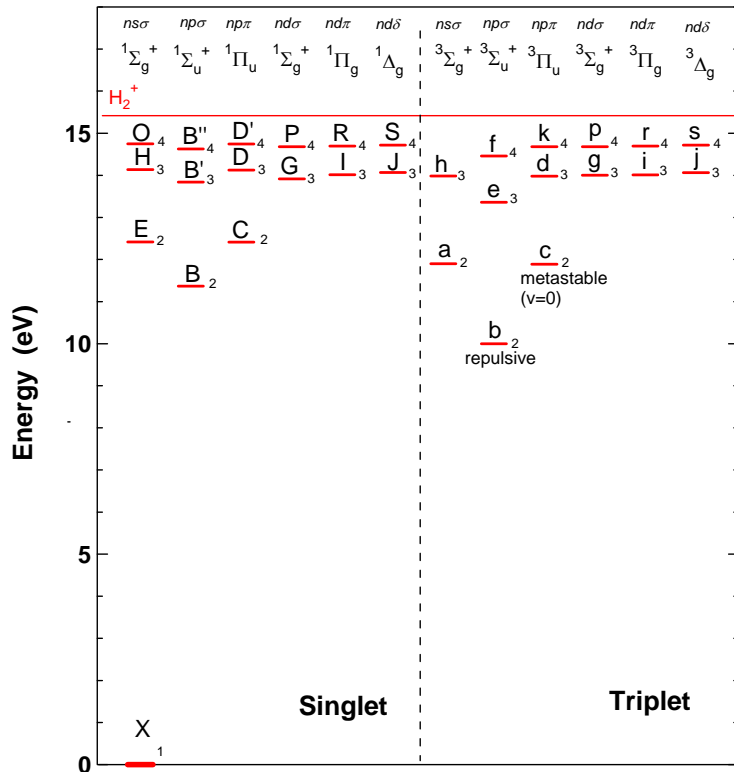
Honl-London
factor

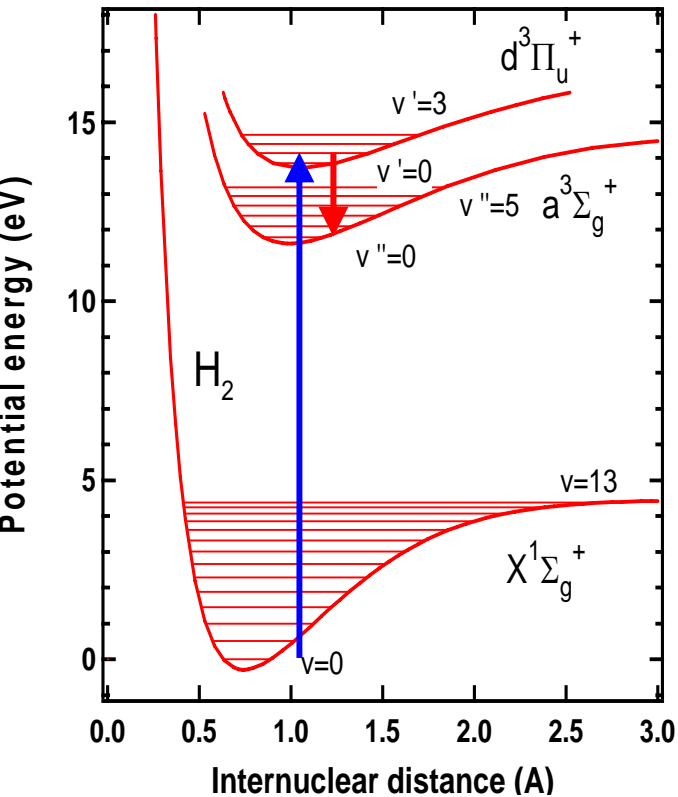


電子基底状態からの電子衝突励起断面積



Born-Bethe approximation modified at low energies by phenomenological techniques





Proceedings of the Lebedev Physics Institute
Academy of Sciences of the USSR Series,
Editor N.G.Basov, Volume 179 Supplemental
Volume 2,

ELECTRON-EXCITED MOLECULES IN
NONEQUILIBRIUM PLASMA

Edited by N.N.Sobolev

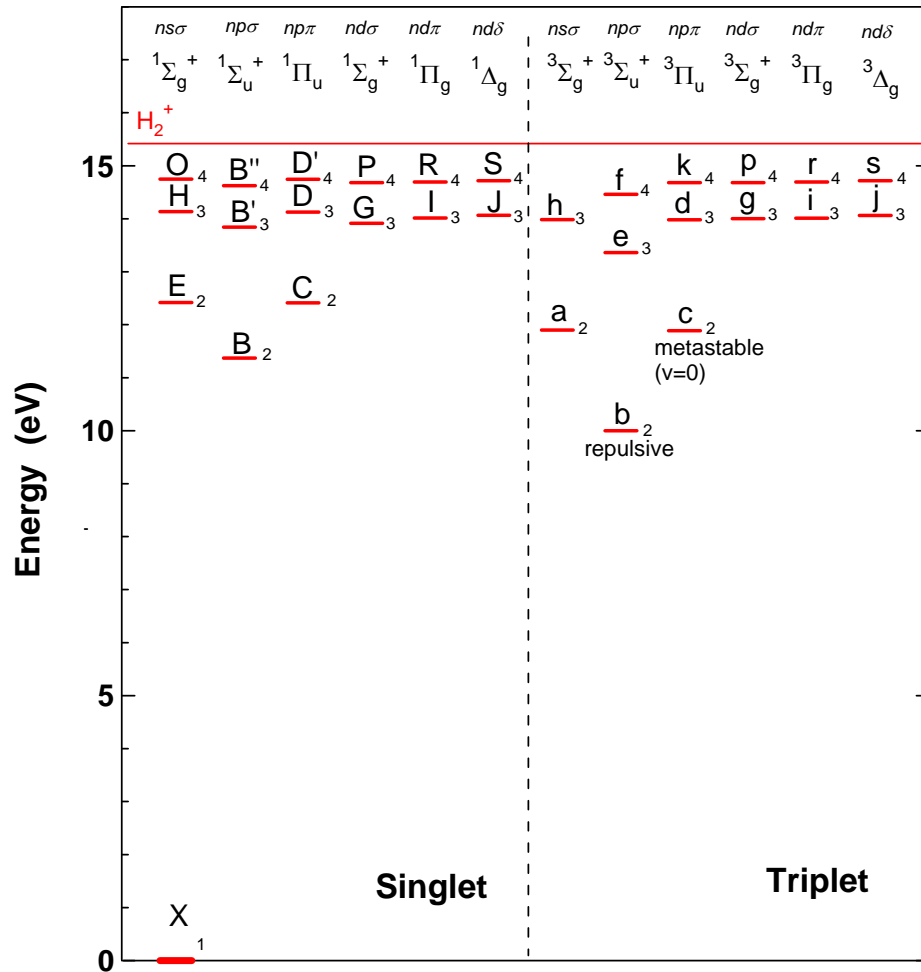
“Adiabatic Approximation”

$$\langle v_e \sigma_e^{K^0, v^0, K', v'} \rangle = \langle v_e \sigma_e^{v^0, v'} \rangle a_{K^0, v^0, K', v'} = \langle v_e \sigma_e^{v^0, v'} \rangle q_{v^0, v'} \sum_r \bar{Q}'_r (2K' + 1) \begin{pmatrix} K' & r & K^0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}^2$$

Here \bar{Q}'_r are the partial electron cross-sections Q'_r averaged over electron velocities.

分子スペクトルから係数が決められる？

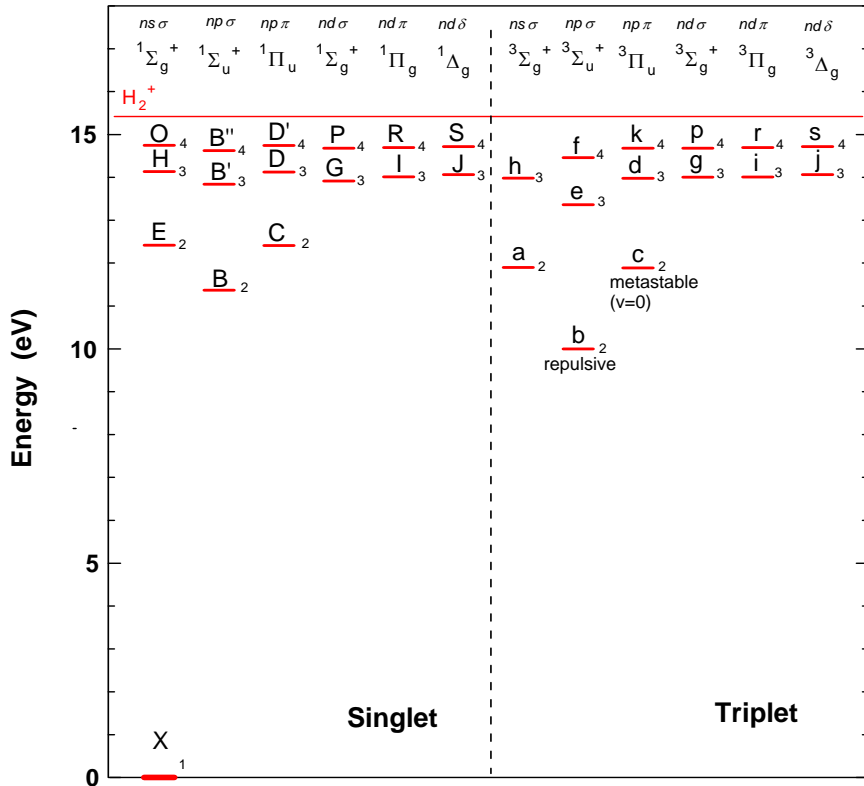
振動・回転状態を区別した断面積



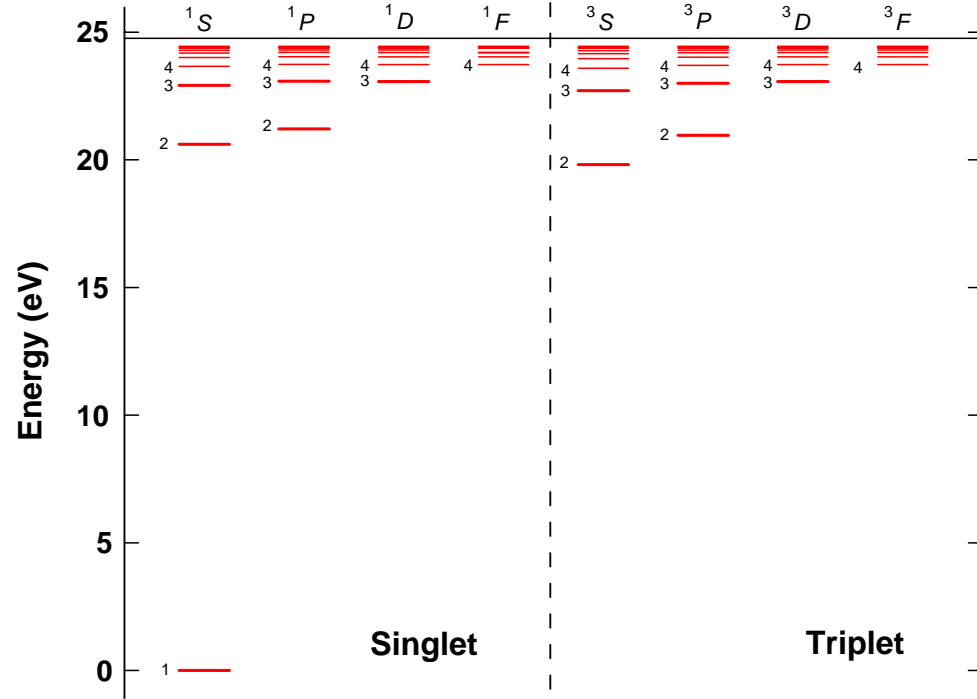
- ・フランク-コンドン因子を用いて振動状態に分けることはできるだろう。
- ・回転状態をどう区別するのか？

励起状態間の電子衝突励起

水素分子



ヘリウム原子



- ・ヘリウム原子断面積を利用？
- ・ボルン近似(?)で自分で計算？

後藤 ヘリウム衝突輻射モデルの断面積 (M.GOTO, JQSRT, 76, 331 (2003))

close-coupling (CCC) method and R-matrix with pseudostates (RMPS)

$$\sigma(n'v'J', n''v''J'') \propto \left| \int \psi_{n'v'J'}(R) R_e(R) \psi_{n''v''J''}(R) dR \right|^2 S_{J'J''} \quad ?$$