



ベリリウム・炭素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

原子分子データ活動に関する研究会」平成22年3月15日(月)
上野システム計算科学センター大会議室

平成21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・炭素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向上のため不純物イオンの挙動の解明と制御

- ・ 必要な原子・分子・イオンの衝突に関する調査 (データベースの作成)
- ・ 軽元素イオンと水素の状態指定電荷移行断面積の計算
→ ダイバータプラズマの分光診断

3 研究委託の内容

・ ベリリウム・炭素多価イオン (Be^{4+} , C^{4+}) による励起状態水素原子 ($n = 2$) からの電荷移行断面積の計算

受託研究報告書の目次

1	緒言	1
2	計算方法	7
2.1	電子状態の計算	7
2.2	l -依存ガウス型擬ポテンシャル	7
2.3	結合項の計算	8
2.4	遷移確率の計算	9
2.5	断面積の計算	9
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	10
4	($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程	12
4.1	電子状態の計算	12
4.2	ポテンシャルエネルギー	14
4.3	電荷移行断面積	16
5	($\text{C}^{4+} + \text{H}(2l)$) 衝突系の電子捕獲過程	39
5.1	電子状態の計算	39
5.2	ポテンシャルエネルギー	39
5.3	電荷移行断面積	43
6	今年度の研究成果概要とこれからの研究計画	50
	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，分子が励起している可能性は高い。それにもかかわらず，衝突対，特に標的原子が励起状態にある場合の電荷移行断面積のデータは，我々が研究を始めるまでは全く存在しなかった。

我々がこれまで計算の対象とした系：

(Be²⁺(1s²), Be³⁺(1s), Be⁴⁺, B³⁺(1s²), B⁵⁺, C⁴⁺(1s²), C⁶⁺ + H^{*}(2s, 2p))

(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の計算。1 昨年度の受託研究報告書「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」を参照)

→ 問題発生

最も正確に断面積を得る理論的方法：緊密結合方程式を解く

(水素原子が励起状態の場合) 衝突対が有限の距離にあると多価イオンが水素原子をシュタルクミキシングさせ、 $2s$ 状態と $2p$ 状態が混じる。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、水素原子の状態として $2s$, $2p$ 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ははっきりしていない。

水素原子が $2s$, $2p$ 状態にある場合の電荷移行断面積を求めて、シュタルクミキシングしているときの値と比較・検討することは必要

- ・有限な核間距離から緊密結合方程式を解きながら、 $R=\infty$ から解いたと同じ結果が得られる方法の開発
- ・昨年度： $\text{Be}^{2+}(1s^2)+\text{H}(2l)$, 3重項および1重項を経由する $\text{Be}^{3+}(1s)+\text{H}(2l)$ の電荷交換断面積の計算
- ・今年度： $\text{Be}^{4+}(1s^2)+\text{H}(2l)$, $\text{C}^{4+}(1s)+\text{H}(2l)$ の電荷交換断面積の計算

ポテンシャルエネルギーで見られるシュタルクミキシングの影響

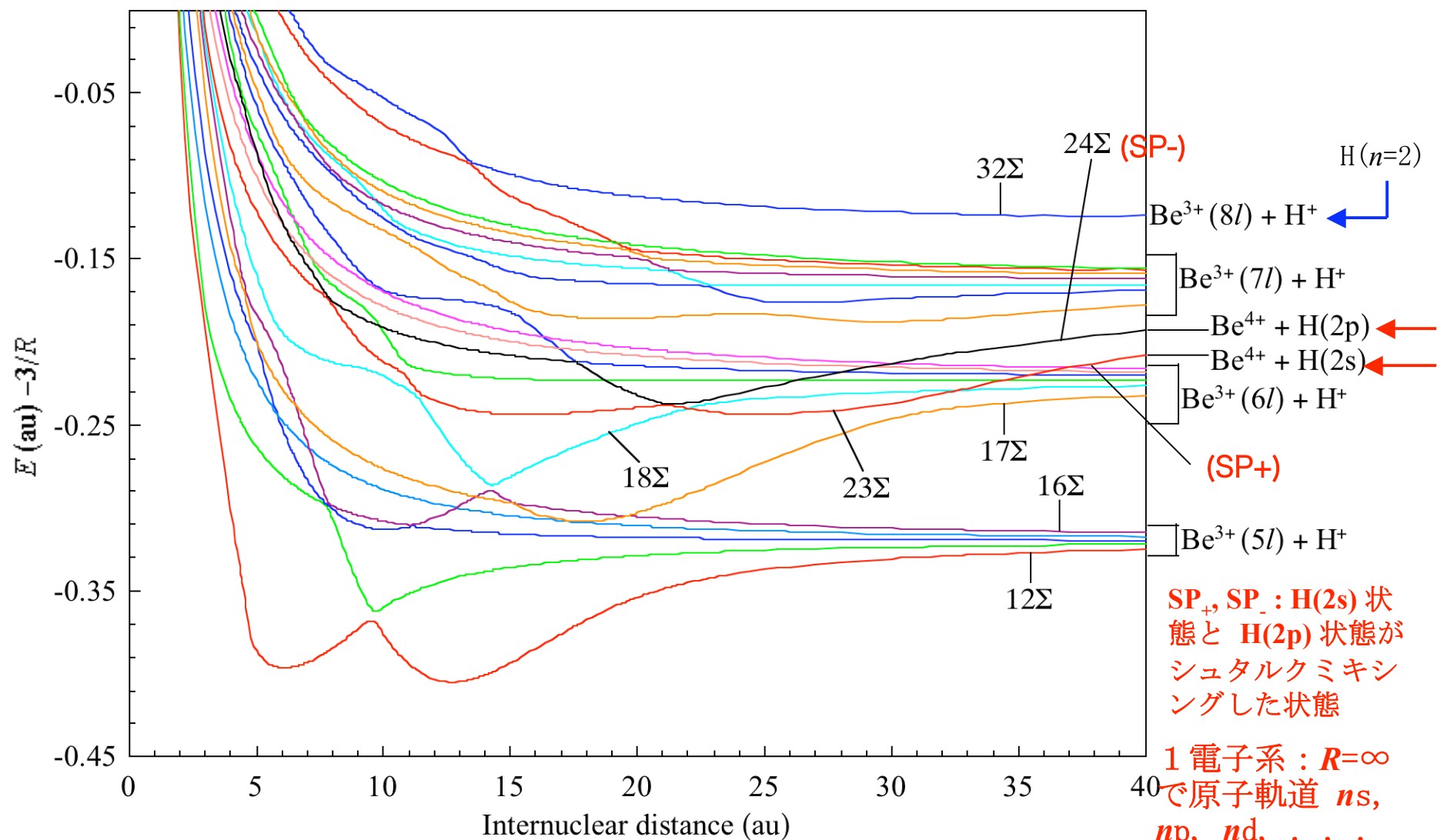


図4.1 BeH⁴⁺系Σ状態のポテンシャルエネルギー曲線 (12Σ-32Σ)

SP₊, SP₋: H(2s) 状態と H(2p) 状態がシュタルクミキシングした状態

1 電子系 : $R=\infty$
で原子軌道 ns ,
 np , nd , . . .
のエネルギーは
すべて一致

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

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

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$: 球面調和関数

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

$$\phi_i^{BO} = \begin{vmatrix} \psi_1(\tau_1) & \psi_2(\tau_1) & \cdots & \psi_n(\tau_1) \\ \psi_1(\tau_2) & \psi_2(\tau_2) & \cdots & \psi_n(\tau_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_1(\tau_n) & \psi_2(\tau_n) & \cdots & \psi_n(\tau_n) \end{vmatrix}$$

2.2 多価イオンと電子の間の l -依存ガウス型擬ポテンシャル

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

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

2.3 結合項の計算

$$\begin{aligned}\vec{P}_{ji} &= -i \langle \phi_j^{BO}(\vec{r}; R) | \nabla_R | \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) \rangle \\ \vec{A}_{ji} &= -i \langle \phi_j^{BO}(\vec{r}; R) | \sum_k [\hat{H}_{el}, \vec{S}_i^k] | \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) \rangle \\ \vec{S}_i^k &= \frac{1}{2} f_i(\vec{r}_k; R) \vec{r}_k \quad \because f_i(\vec{r}_k; R) : \text{switching function}\end{aligned}$$

2.4 遷移確率の計算

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}; R) &= \sum_i a_i(t) \phi_i^{BO}(\vec{r}; R) F_i(\vec{r}; R) \\ F_i(\vec{r}; R) &= \exp \left[i \sum_k \left\{ \frac{1}{2} f_i(\vec{r}_k; R) \vec{v} \cdot \vec{r}_k - \frac{1}{8} \int^t v^2 dt' \right\} \right] \\ i\dot{a}_j &= \varepsilon_j a_j + \sum_i \vec{v} \cdot (\vec{P} + \vec{A})_{ji} a_i \\ \text{初期条件 } a_j(t=-\infty) &= \delta_{ij}, \quad E, b \text{ のもとで有限の核間距離から} \\ &\text{解き始める。} \\ P_j(E, b) &= |a_j(t \rightarrow +\infty)|^2\end{aligned}$$

2.5 断面積の計算

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

有限な核間距離から緊密結合方程式を解きながら, $R=\infty$ から解いたと同じ結果が得られる方法

3 SP_+ , SP_- 状態から $H(2s)$, $H(2p)$ 状態への変換

- SP_+ , SP_- : $H(2s)$ 状態と $H(2p)$ 状態がシュタルクミキシングした状態

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

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

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

$$\Pi \text{状態} \quad \Phi_{2p_{\pm 1}} = \Psi_{2p_{\pm 1}} \quad (\text{復号同順})$$

- シュタルクミキシングした状態から $H(2s)$ 状態, $H(2p)$ 状態へ逆変換

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

- $(Be^{4+}+H(2s))$ 衝突系 $\leftarrow C_{2s,SP_+} \Phi_{SP_+} + C_{2s,SP_-} \Phi_{SP_-}$ を初期確率振幅
- $(Be^{4+}+H(2p))$ 衝突系 $\leftarrow C_{2p_0,SP_+} \Phi_{SP_+} + C_{2p_0,SP_-} \Phi_{SP_-}$ を初期確率振幅

4 (Be⁴⁺+H(2l))衝突系の電子捕獲過程

計算結果(1)

4.1 電子状態の計算

4.2 ポテンシャルエネルギー曲線

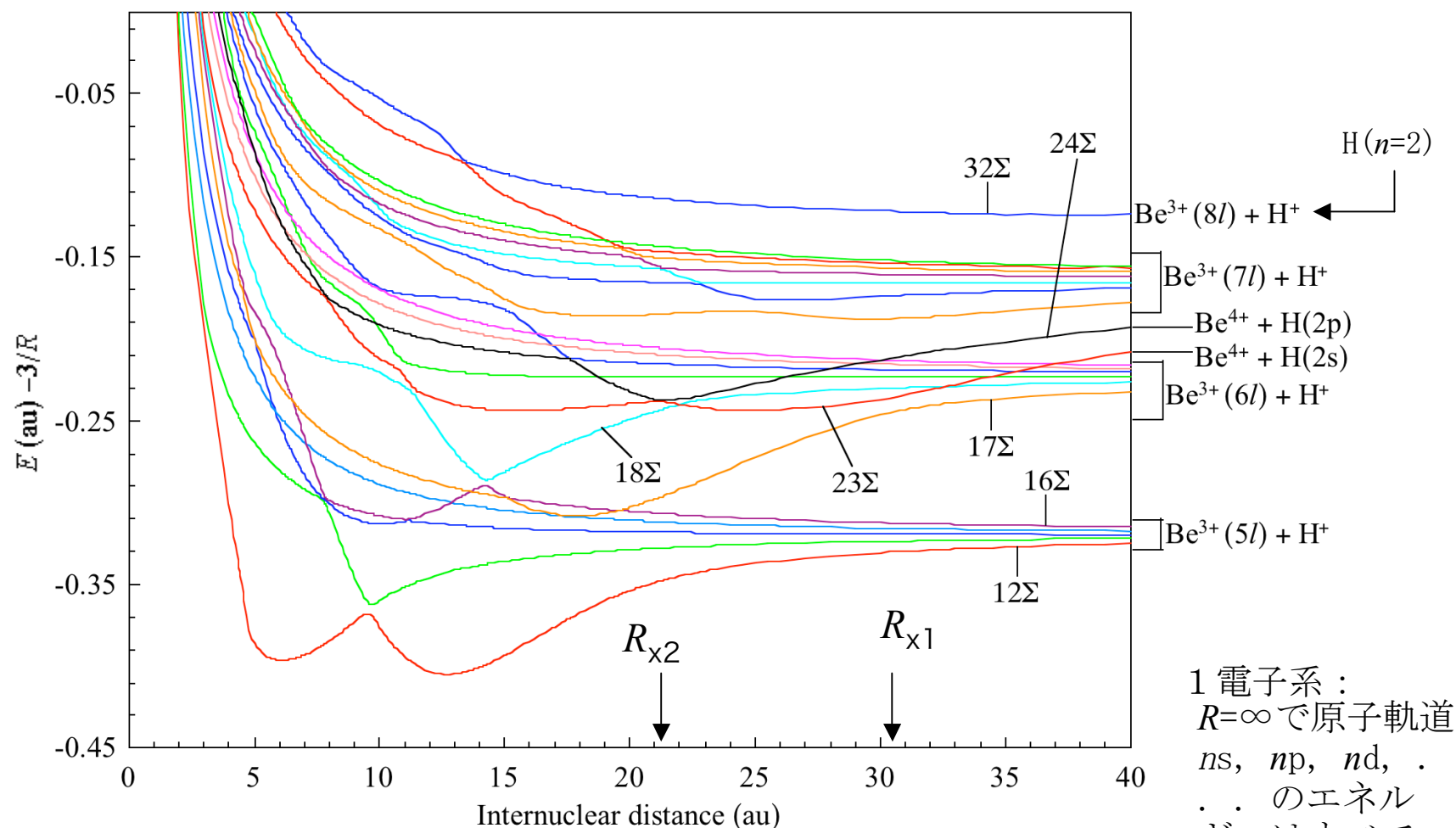
 Σ 状態

図4.1 BeH^{4+} 系 Σ 状態のポテンシャルエネルギー曲線 (12 Σ –32 Σ)

1 電子系：
 $R=\infty$ で原子軌道
 ns , np , nd , .
 . . のエネルギーはすべて一
 致

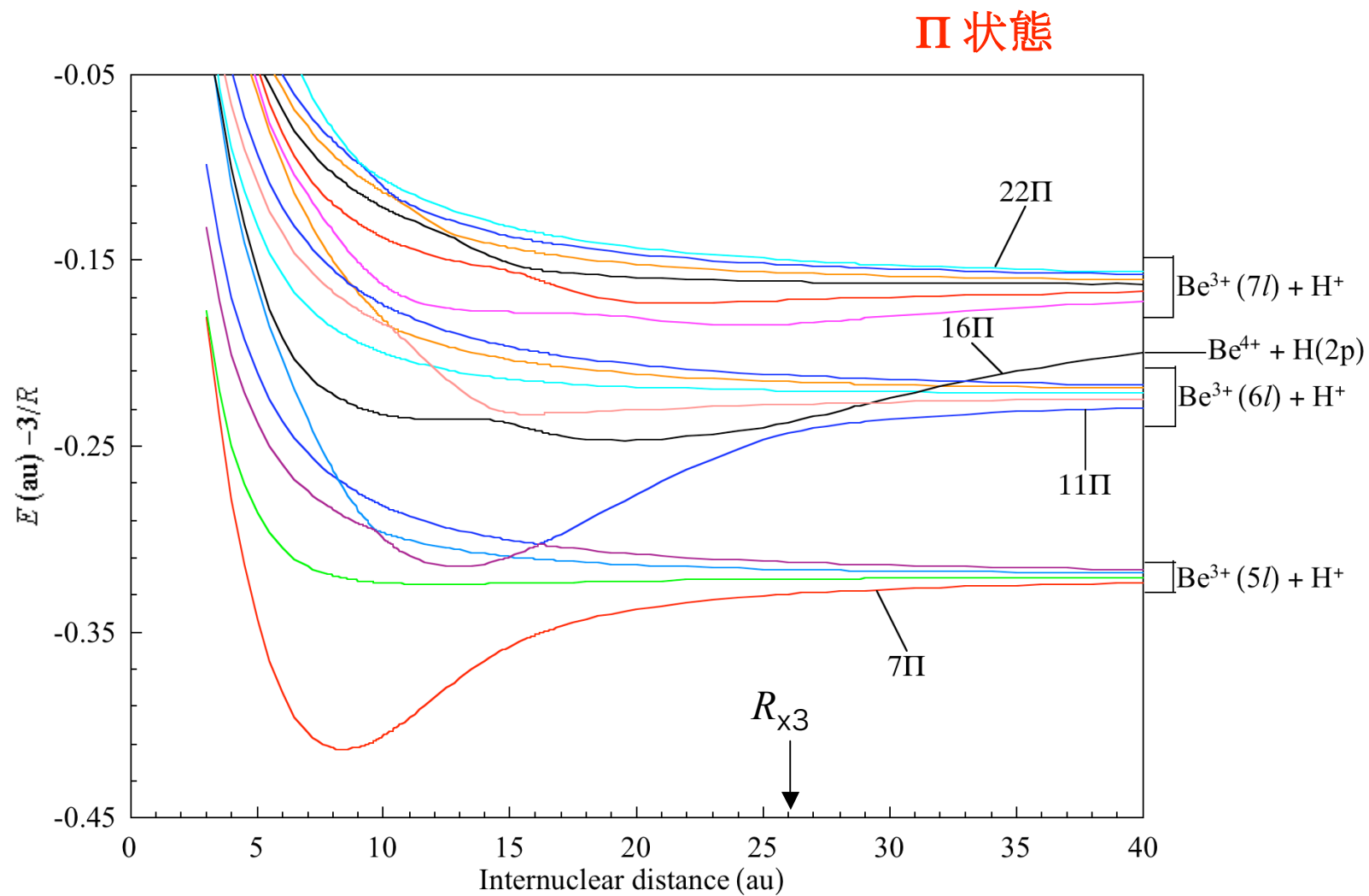
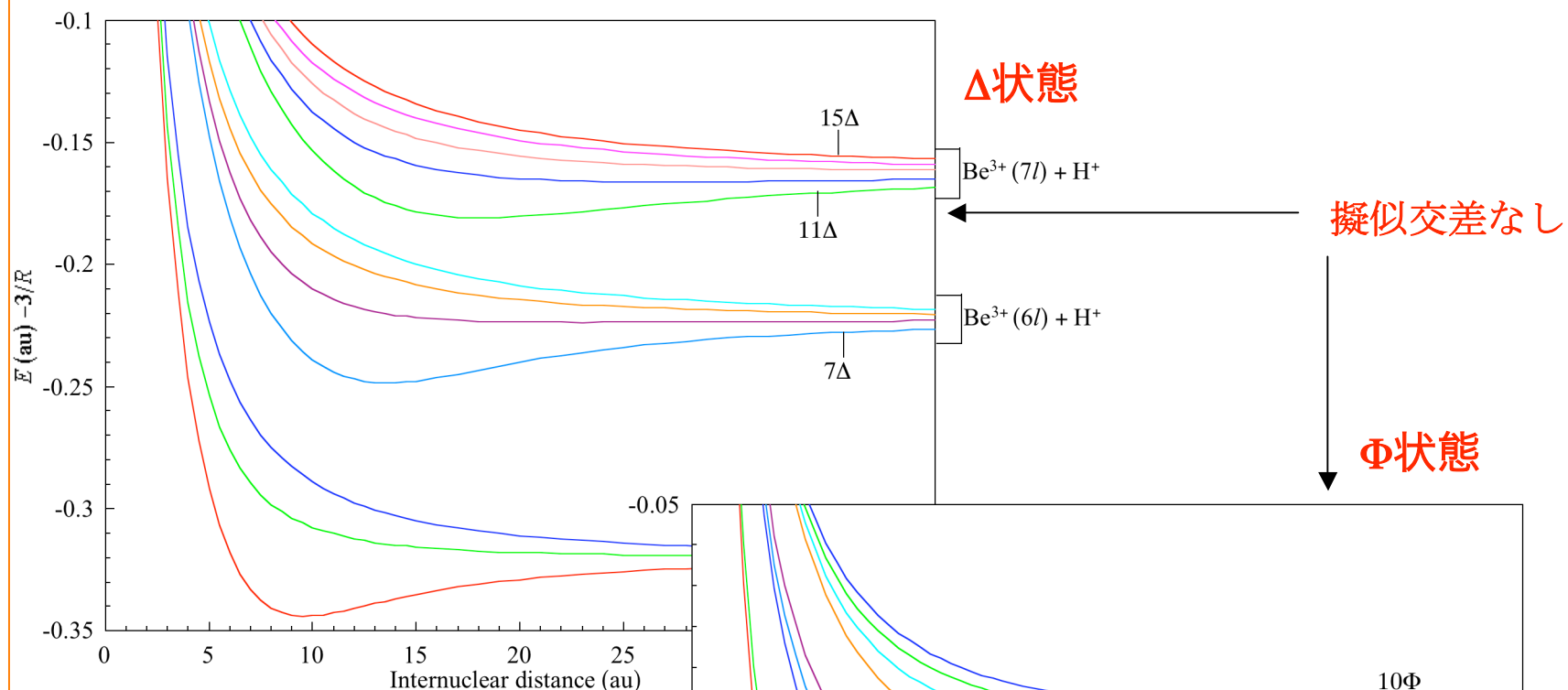
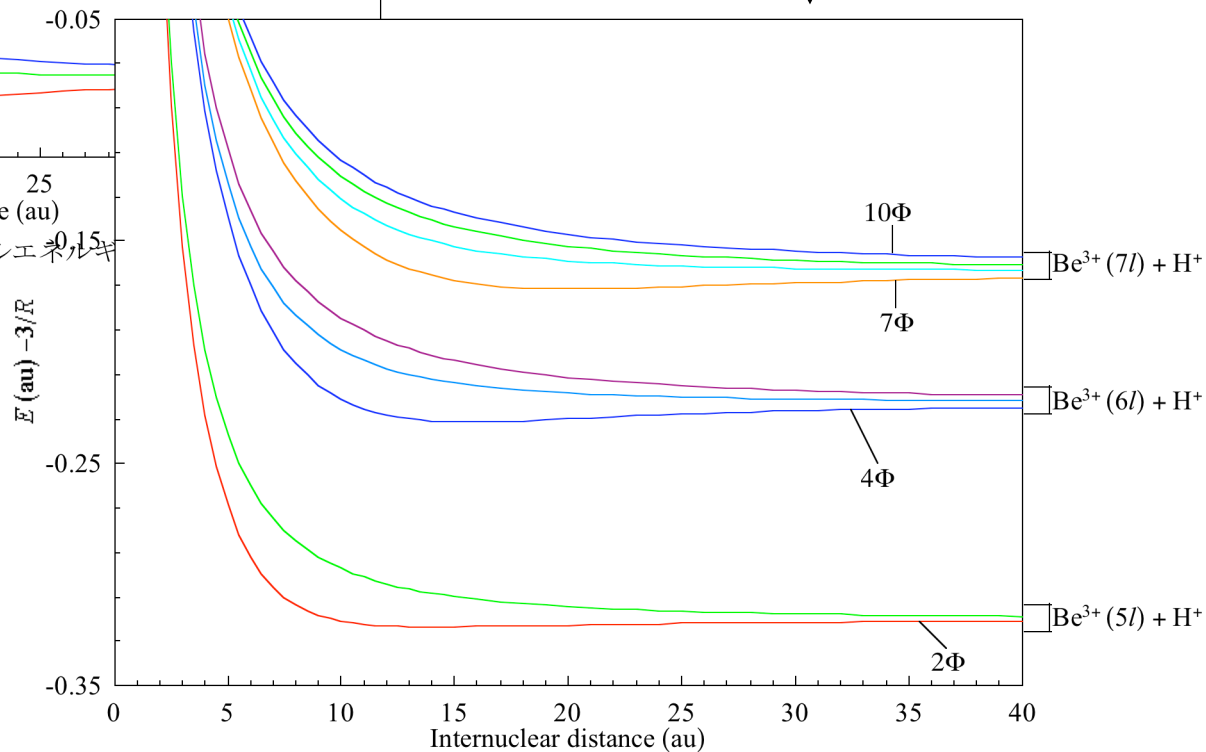


図4.2 BeH^{4+} 系 Π 状態のポテンシャルエネルギー曲線 (7Π - 22Π)

図4.3 BeH^{4+} 系 Δ 状態のポテンシャルエネルギー図4.4 BeH^{4+} 系 Φ 状態のポテンシャルエネルギー曲線 (2 Φ -10 Φ)

4.3 電荷移行断面積

4.3.1 $(\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_+)) \rightarrow (\text{Be}^{3+}(nl) + \text{H}^+)$ 衝突系

$\text{Be}^{3+}(nl; n=5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $\text{Be}^{3+}(8s)$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=48\text{au}$ 。

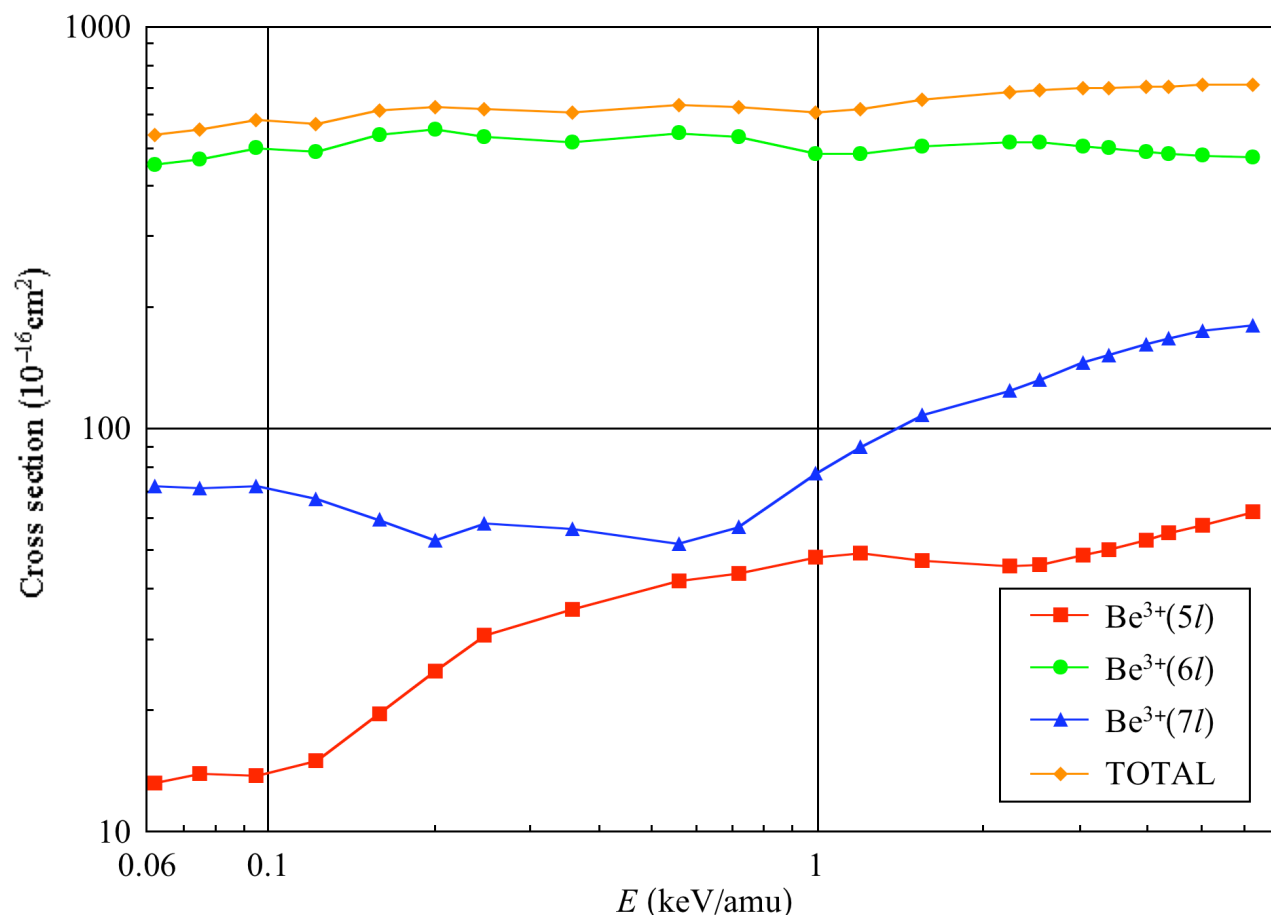


図4.5 $(\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_+))$ 衝突系の n 依存電荷移行断面積

・ $\text{Be}^{3+}(6l)$ が最大の寄与
全エネルギー領域で
65%以上

・ 2 番目の寄与は $\text{Be}^{3+}(7l)$

・ 中間エネルギー領域では
 $\text{Be}^{3+}(5l)$ と $\text{Be}^{3+}(7l)$ の
寄与はほぼ等しい

・ 低エネルギー領域では遷
移は擬交差点で起こる。



① 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つり
合った所で遷移

② Landau-Zener の式

・ 但し擬交差点のみでなく、擬交差点付近でも起こる。

Σ状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合

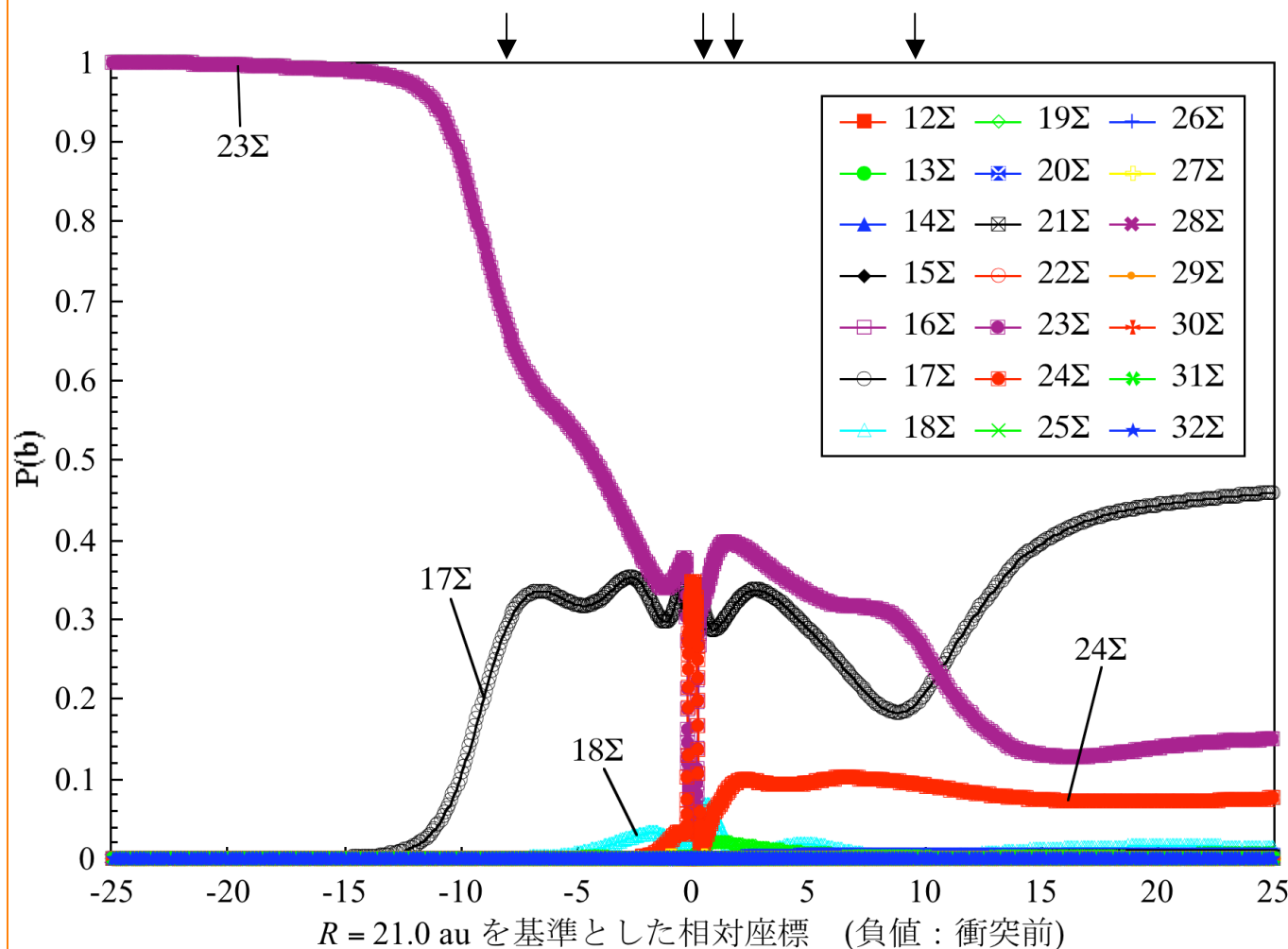


図4.6(a) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

- 23Σ (始状態、 SP_+) と 17Σ が $R_{x1} \sim 30.5 \text{ au}$ で擬似交差。最初の遷移。
- 回帰点 (最近接点) 付近 $R_{x3} \sim 21.5 \text{ au}$ で 23Σ から 24Σ (SP_-) へ遷移。但し $\sim 0 \text{ au}$ では遷移した確率はすぐにすべて 23Σ に戻る。

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合

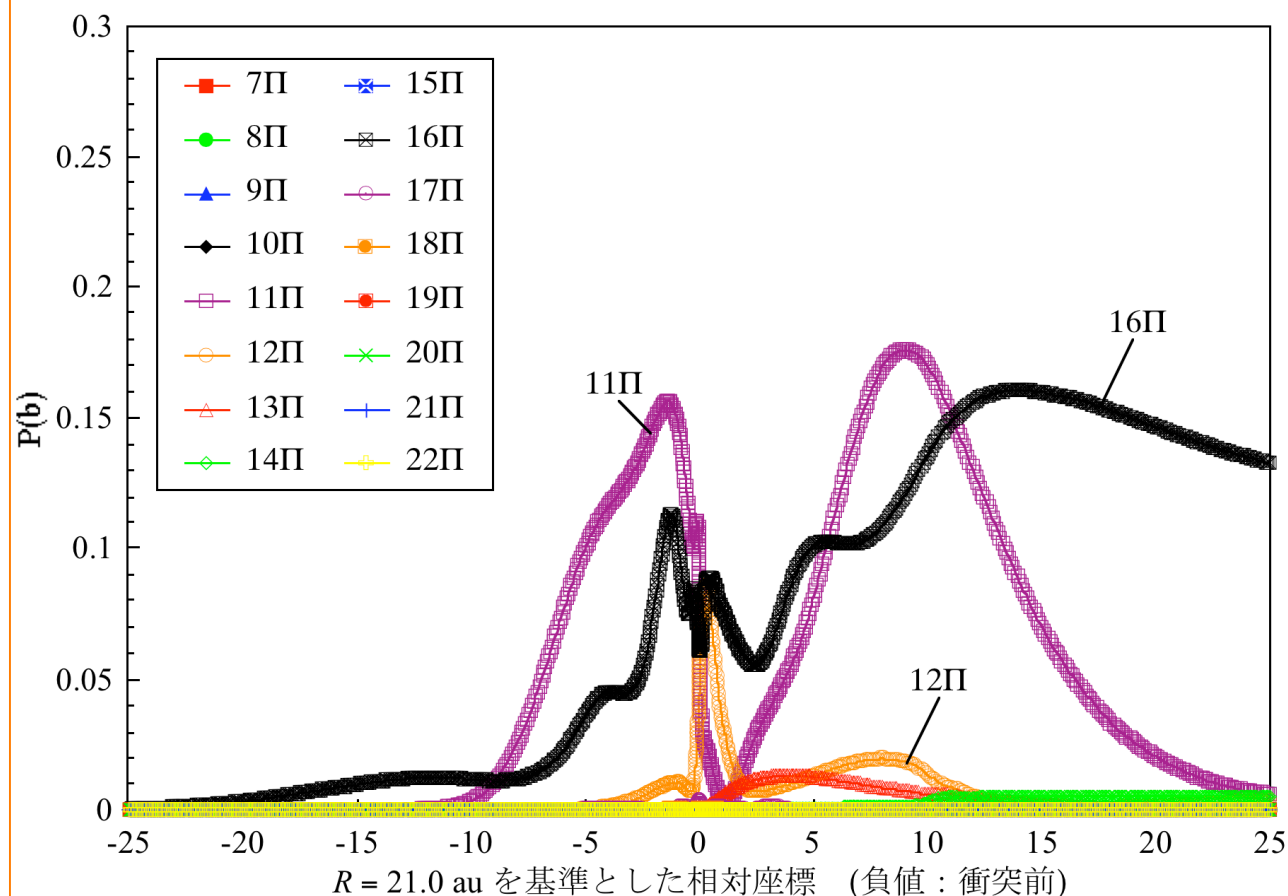


図4.6(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

- 23Σ から 17Σ に遷移した確率は R_{x1} より内側で回転結合により 11Π に遷移。この遷移により減った 17Σ を補うため更に $23\Sigma \rightarrow 17\Sigma$ の遷移が起こる。
- R_{x3} で 16Π から 11Π に遷移
- R_{x1} で 23Σ に残った確率は衝突後の R_{x1} で回転結合により 16Π に遷移。

- 低衝突エネルギーでは擬似交差点付近でのみ遷移が起こるので反応経路が比較的明瞭

Σ状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

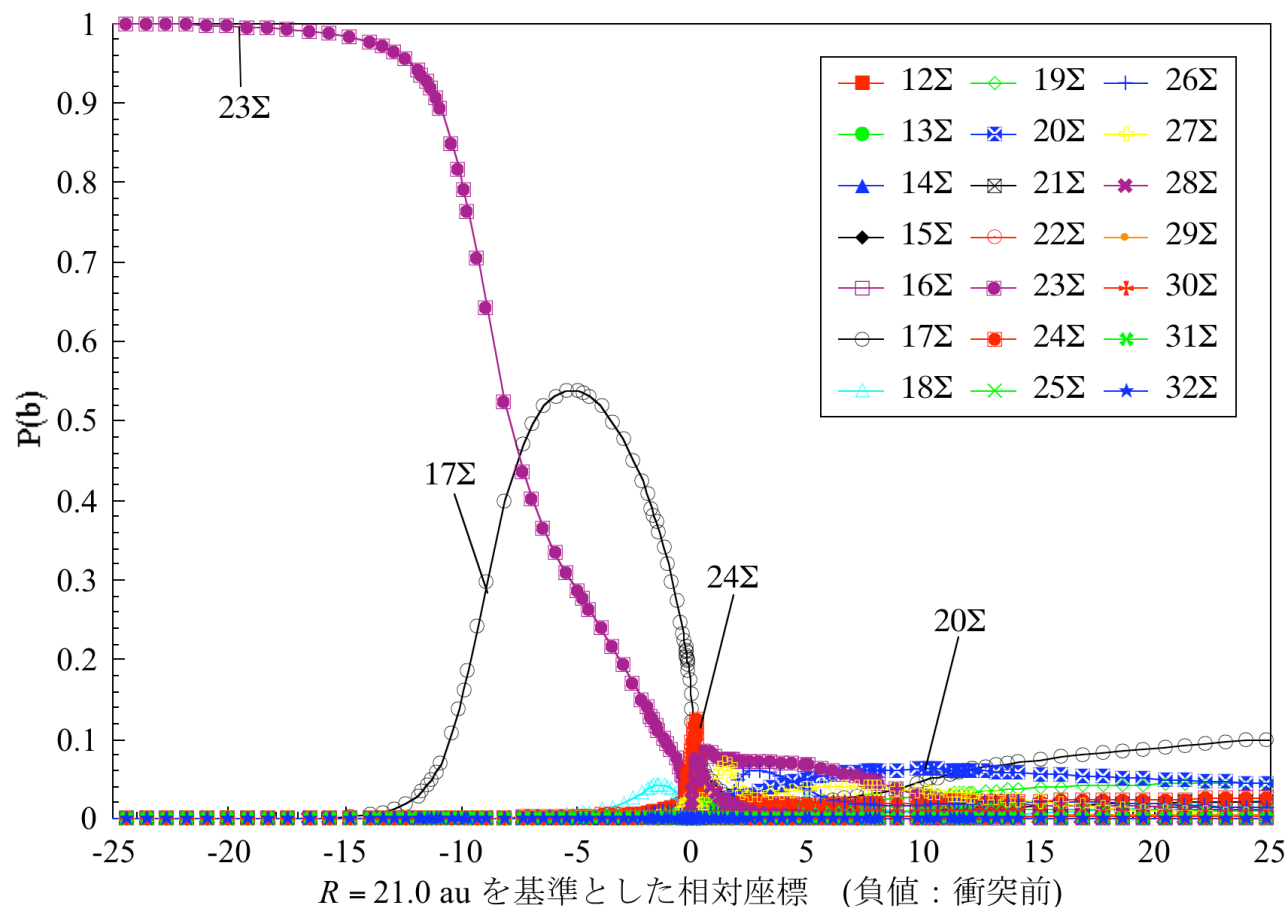


図4.7(a) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2 \text{ keV/amu}$ 、 $b = 21.0 \text{ au}$ 、 $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

- 近づくときは R_{x1} で 23Σ から 17Σ に遷移が起こるが、回帰点に到達する前にほとんど 11Π に遷移。
- 回帰点に到達してからはいろいろな Σ 状態、 Π 状態に分散。

Π 状態への遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

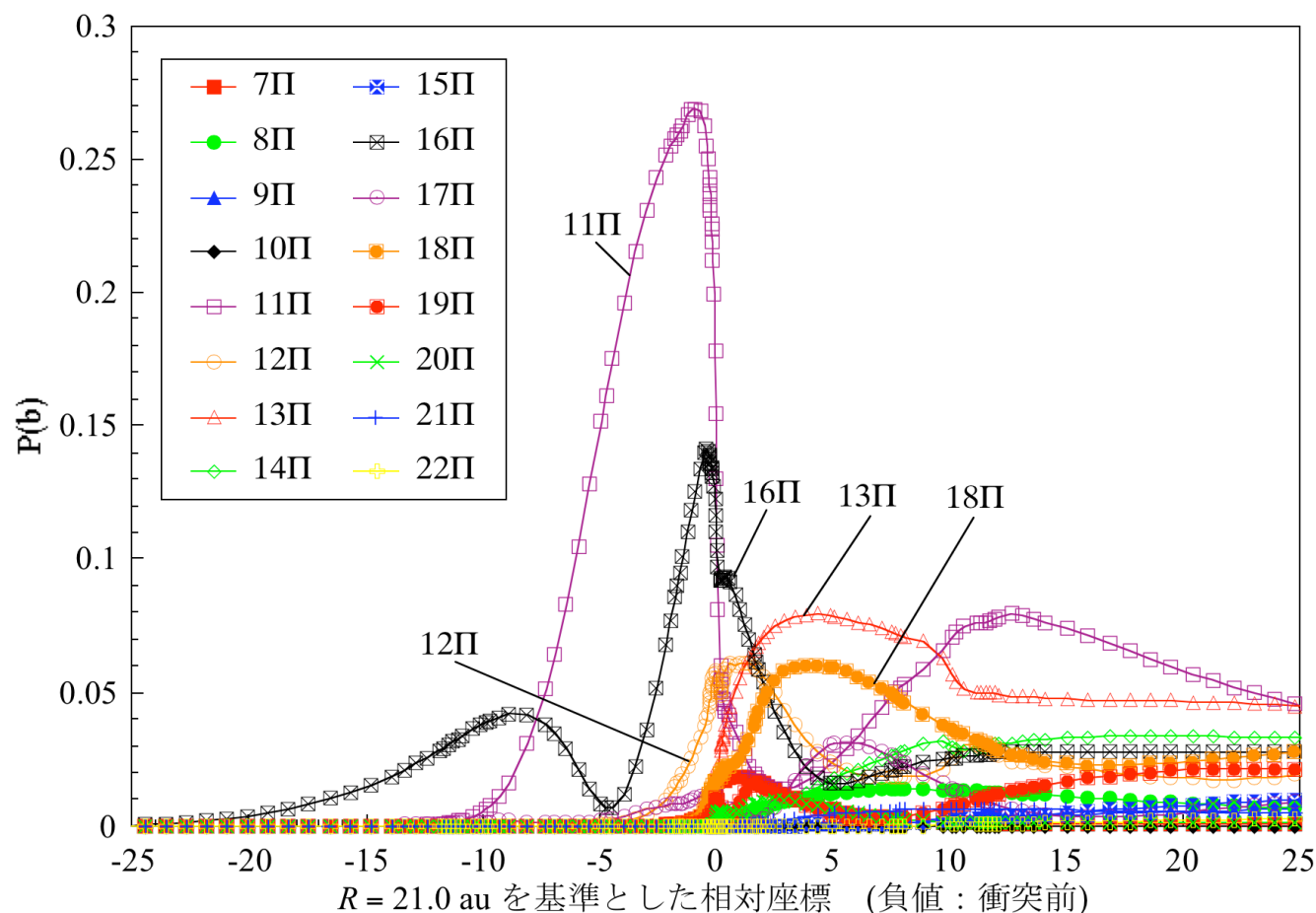


図4.7(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_+)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 $(E = 6.2 \text{ keV/amu}, b = 21.0 \text{ au}, R_{\text{max}} = 48 \text{ au})$

- 23Σ 状態 (始状態, SP_+) から 11Π , 16Π に遷移
- 回転結合で $23\Sigma \rightarrow 11\Pi$ に遷移した確率は衝突後 12Π , 13Π , 16Π , 18Π などのいろいろな Π 状態に遷移

4.3.2 ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_-)$) $\rightarrow$ ($\text{Be}^{3+} + \text{H}^+$) 衝突系

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

$\text{Be}^{3+}(nl; n=5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $\text{Be}^{3+}(8s)$ 状態を考慮。 $R_{\text{max}} = 48\text{au}$ 。

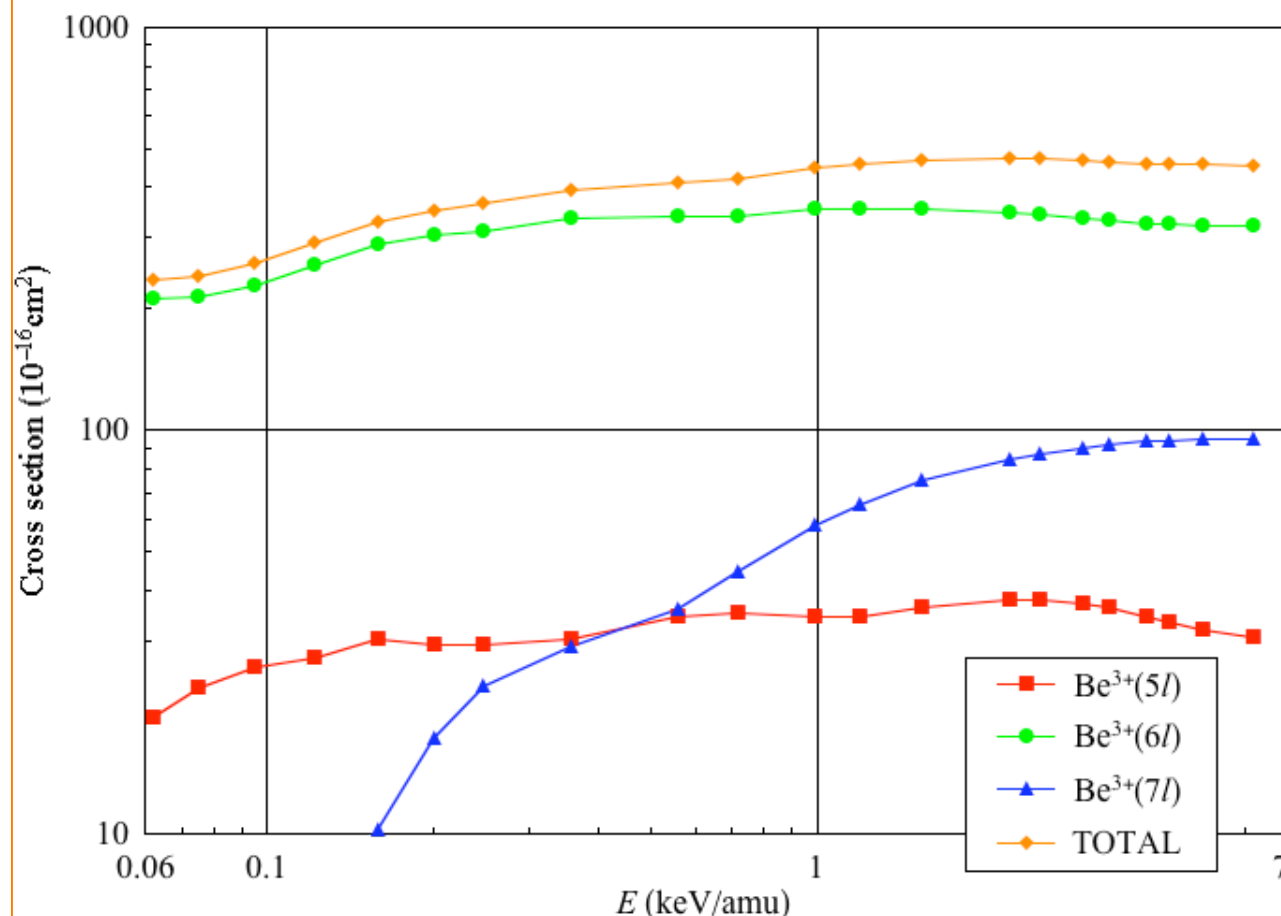


図4.8 ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_-)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積

・全エネルギー領域にわたり $\text{Be}^{3+}(6l)$ の寄与が最大

・低エネルギー領域：

① $\text{Be}^{3+}(5l)$ が 2 番目に大きい寄与

・高エネルギー領域：

① $\text{Be}^{3+}(7l)$ が 2 番目に大きい寄与

Σ状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合

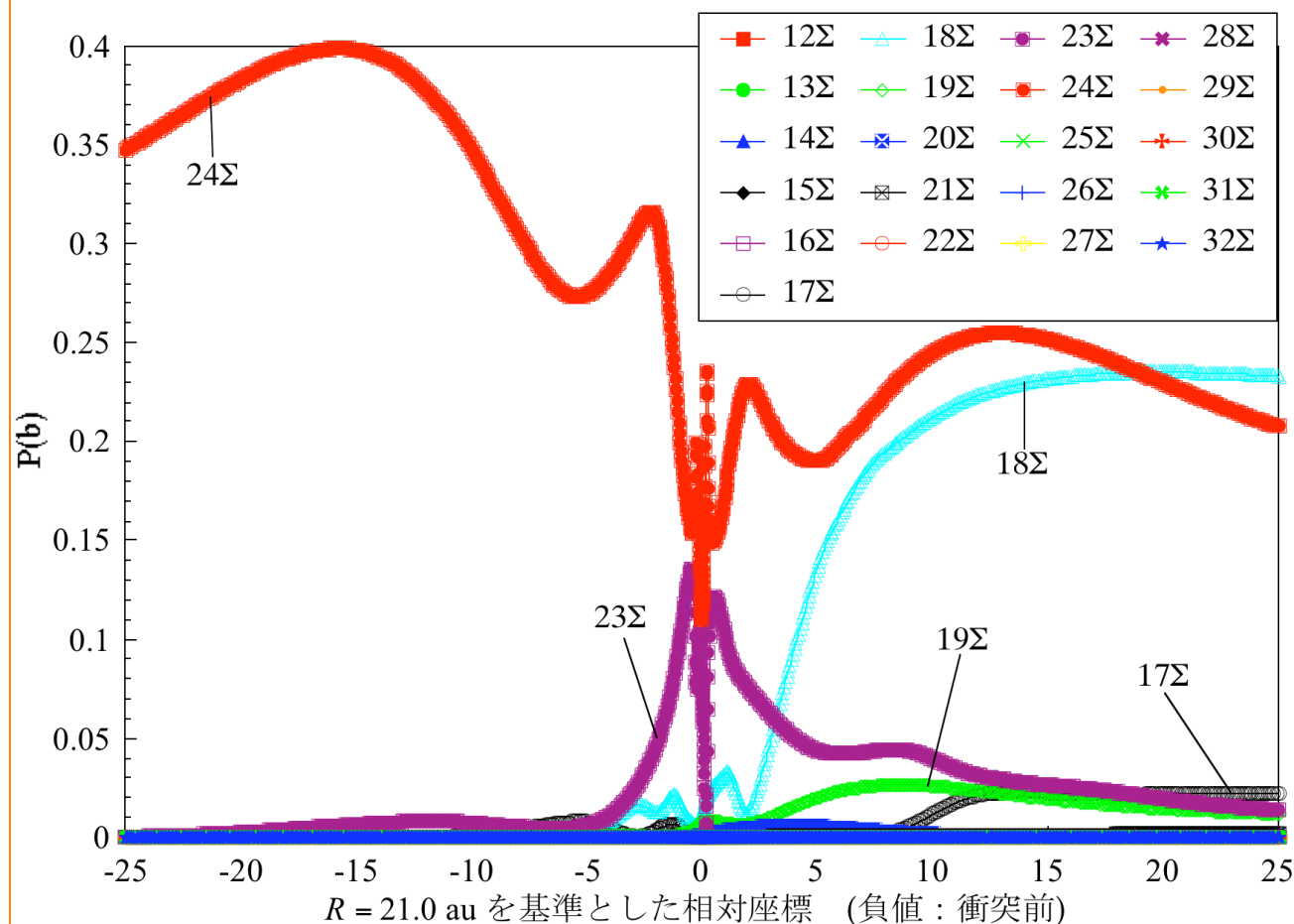
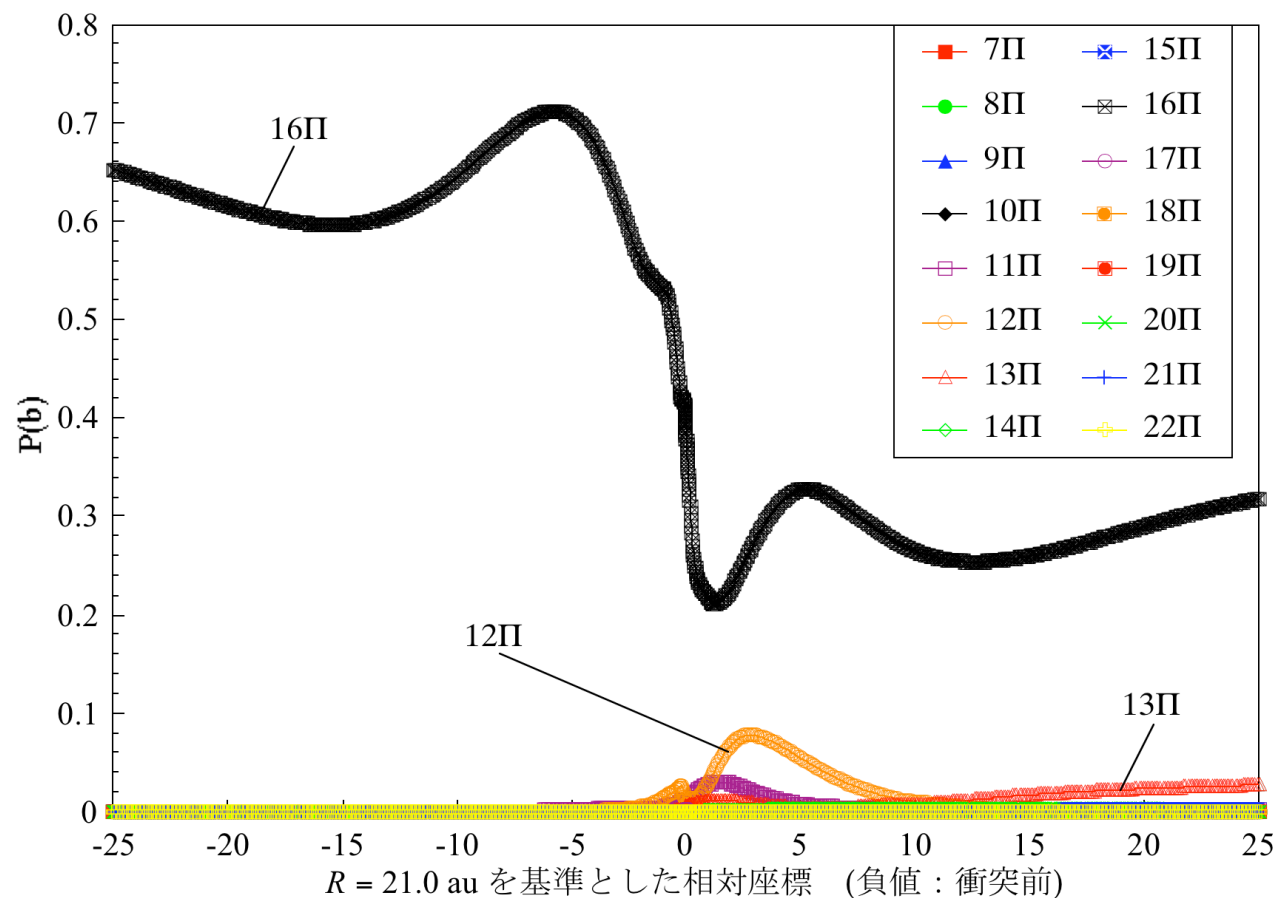


図4.9(a) $(\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_-))$ 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 $(E = 0.062 \text{ keV/amu}, b = 21.0 \text{ au}, R_{\text{max}} = 48 \text{ au})$

- 最初は ($R \leq 35 \text{ au}$) 16Π から 24Σ に遷移
- $R = 35 \sim 27 \text{ au}$ では 24Σ から 16Π にもどる。
- $R \sim 27 \text{ au}$ からは再び 16Π から 24Σ に遷移するとともに 23Σ にも遷移し始める。
- 回帰点では1時的に 23Σ から 24Σ に遷移するがすぐにもどる。
- 衝突後は 23Σ から 24Σ に遷移, その後 $R \sim 25 \text{ au}$ で 24Σ から 18Σ , 16Π に遷移。また 23Σ , 16Π から 18Σ への遷移が起こる。

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合



- 23 Σ と 24 Σ の擬似交差点 (R_{x2}) までは 16 Π から 24 Σ に遷移するが、その後、24 Σ から 16 Π に揺り戻しが起こる。

図4.9(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_j)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

Σ状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

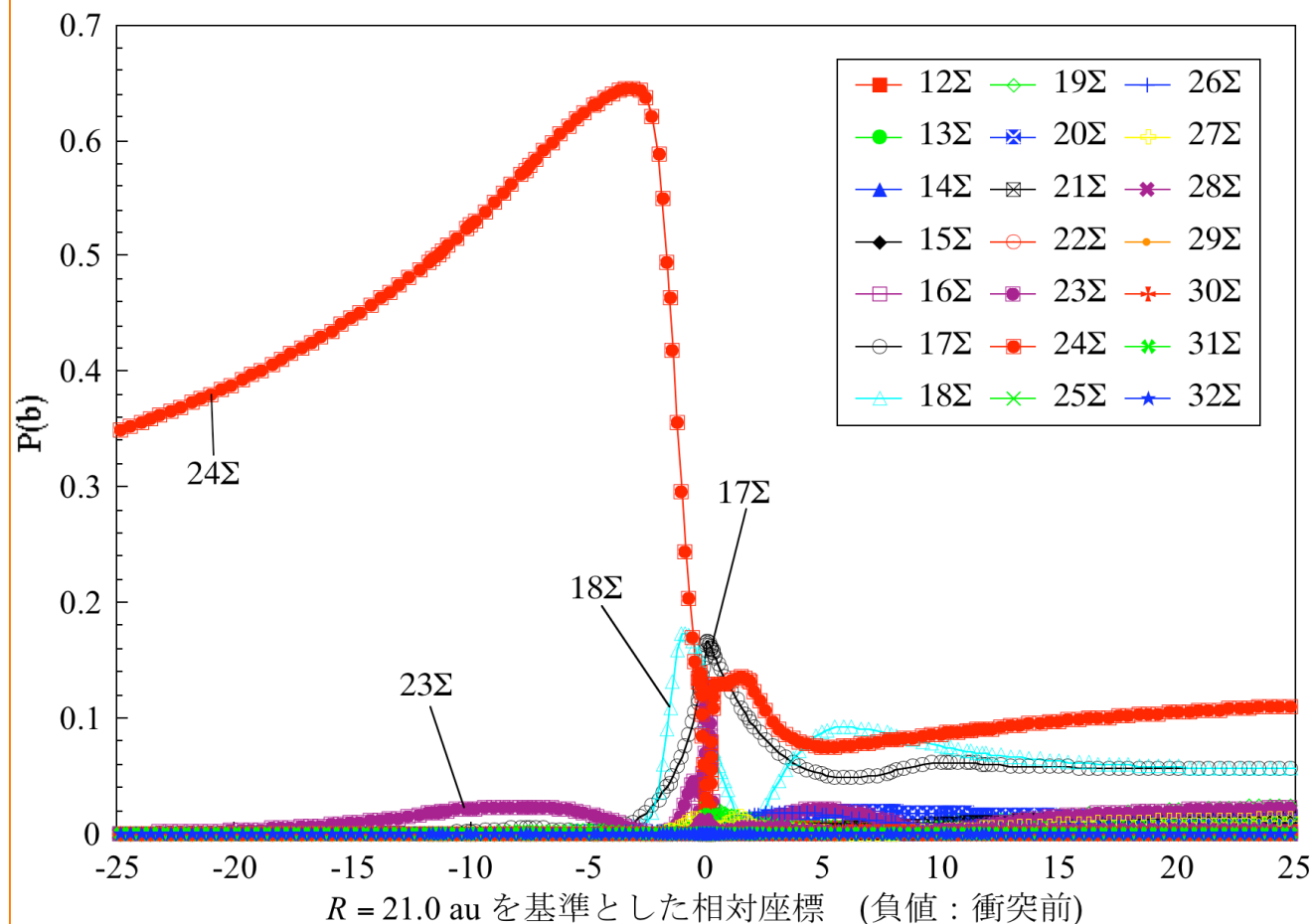


図4.10(a) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_j)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2 \text{ keV/amu}$ 、 $b = 21.0 \text{ au}$ 、 $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

- 回帰点に到達するまでは 16Π から 24Σ に遷移し続ける。
- 回帰点に到達して以降はいろいろな状態に遷移が起こり、反応経路ははっきりしない。

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

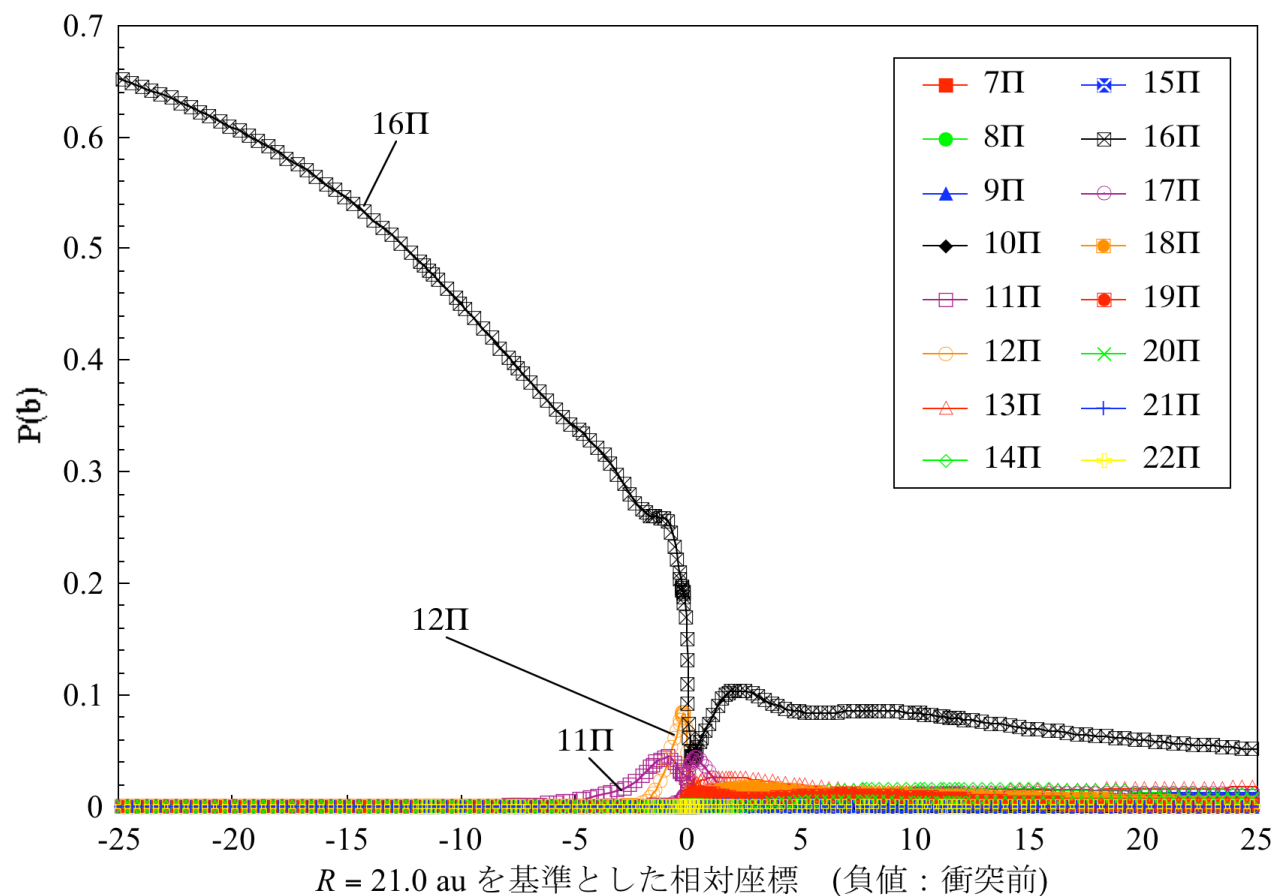


図4.10(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(\text{SP}_-)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2 \text{ keV/amu}$ 、 $b = 21.0 \text{ au}$ 、 $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

- 回帰点に到達するまでは 16Π から 24Σ に遷移し続ける。
- 回帰点に到達して以降はいろいろな状態に遷移が起こり、反応経路ははっきりしない。

4.3.3 有限な R ($R_{\max} = 48\text{au}$)での SP_+ , SP_- の確率振幅を用いて初期状態が $2s$, $2p$ 状態の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 $2s$ 状態の波動関数をSTOで表す

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

$2s$ 状態, $2p$ 状態をシュタルクミキシング

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

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

(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} への逆変換

$$\Psi_{2s} = 0.69827365\Phi_{\text{SP}_+} + 0.72450110\Phi_{\text{SP}_-}$$

$$\Psi_{2p_0} = 0.72449330\Phi_{\text{SP}_+} - 0.68928184\Phi_{\text{SP}_-}$$

4.3.4 ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2s)$) 衝突系

$$\Psi_{2s} = 0.69827365\Phi_{\text{SP}+} + 0.72450110\Phi_{\text{SP}-}$$

$\text{Be}^{3+}(nl; n = 5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $\text{Be}^{3+}(8s)$ 状態を考慮。 $R_{\text{max}} = 48\text{au}$ 。

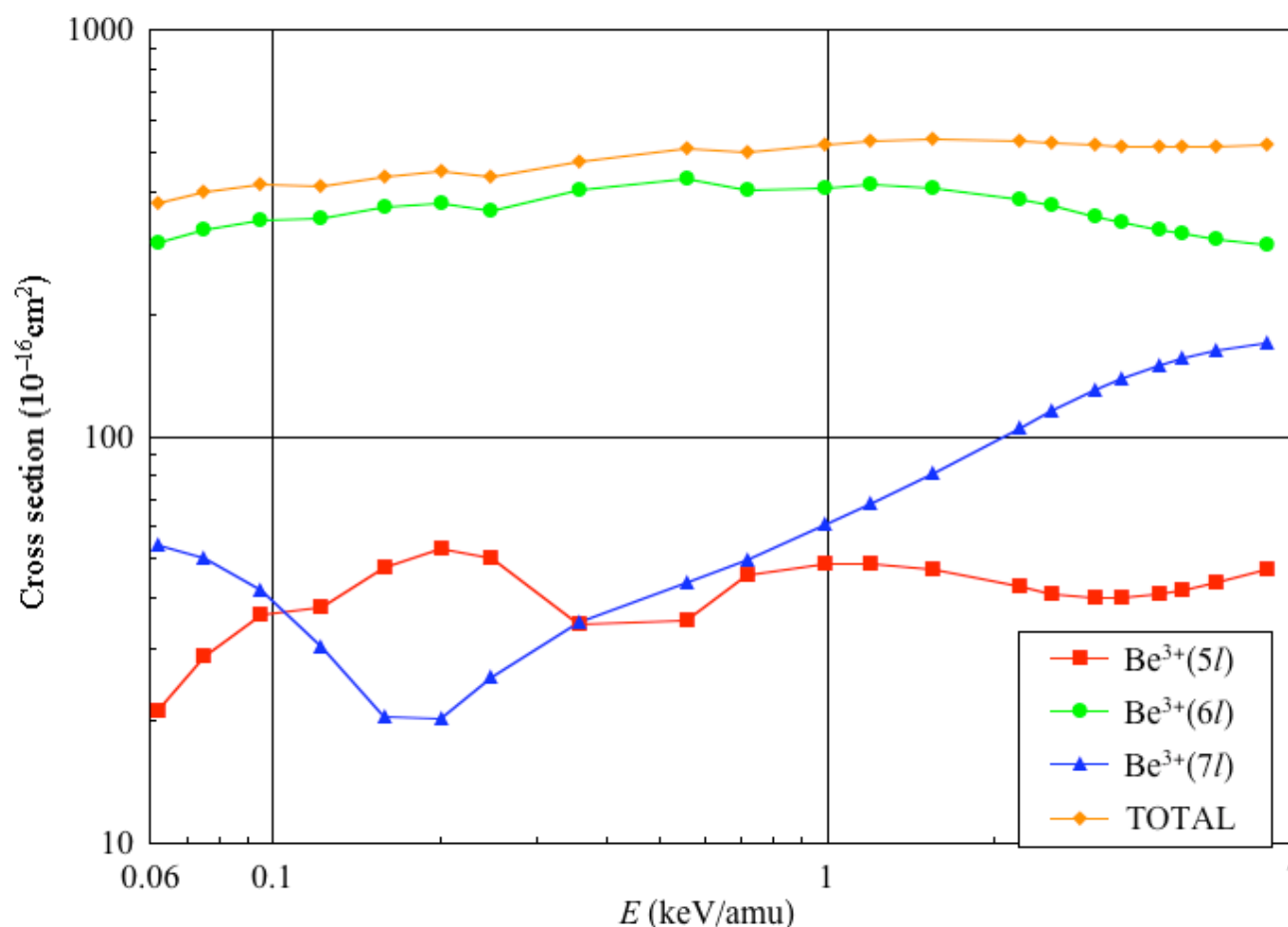


図4.11 ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2s)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積

・全衝突エネルギー領域にわたり $\text{Be}^{3+}(6l)$ の寄与が最大

・低エネルギー領域：
 $\text{Be}^{3+}(5l)$, $\text{Be}^{3+}(7l)$ の確率はほぼ同じ大きさ。確率の衝突エネルギー依存性は互いに逆位相の関係。

・高エネルギー領域：
 $\text{Be}^{3+}(7l)$ の寄与大

(Be⁴⁺+H(2s))衝突系と(Be⁴⁺+H(SP₊))衝突系の比較

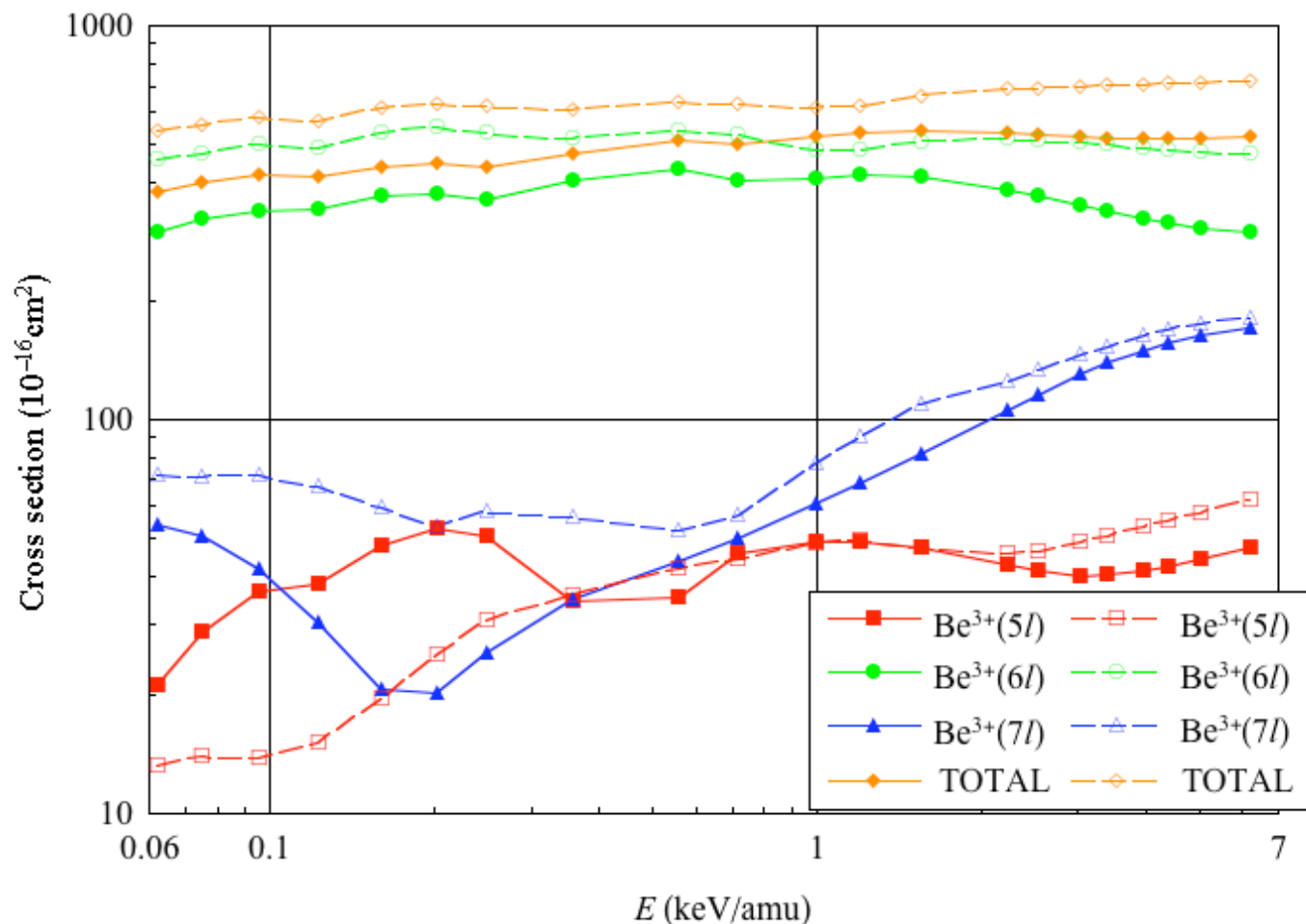


図4.12 (Be⁴⁺+H(2s))衝突系(実線)と(Be⁴⁺+H(SP₊))衝突系(破線)の n 依存電荷移行断面積の比較

・全断面積, Be³⁺(6l)への部分断面積は全衝突エネルギー領域にわたりH(SP₊)の方がH(2s)よりも若干大きい。
 ← Σ 状態の方が擬似交差点が多く、遷移が起こりやすい。

・衝突エネルギー依存性は似た傾向。

・低衝突エネルギー領域：
 H(2s)の方がH(SP₊)よりもBe³⁺(5l)の寄与が大きく、Be³⁺(7l)の寄与は小さい

・高エネルギー領域：
 H(2s)とH(SP₊)の部分断面積は差異は少なくなる。

Σ 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合

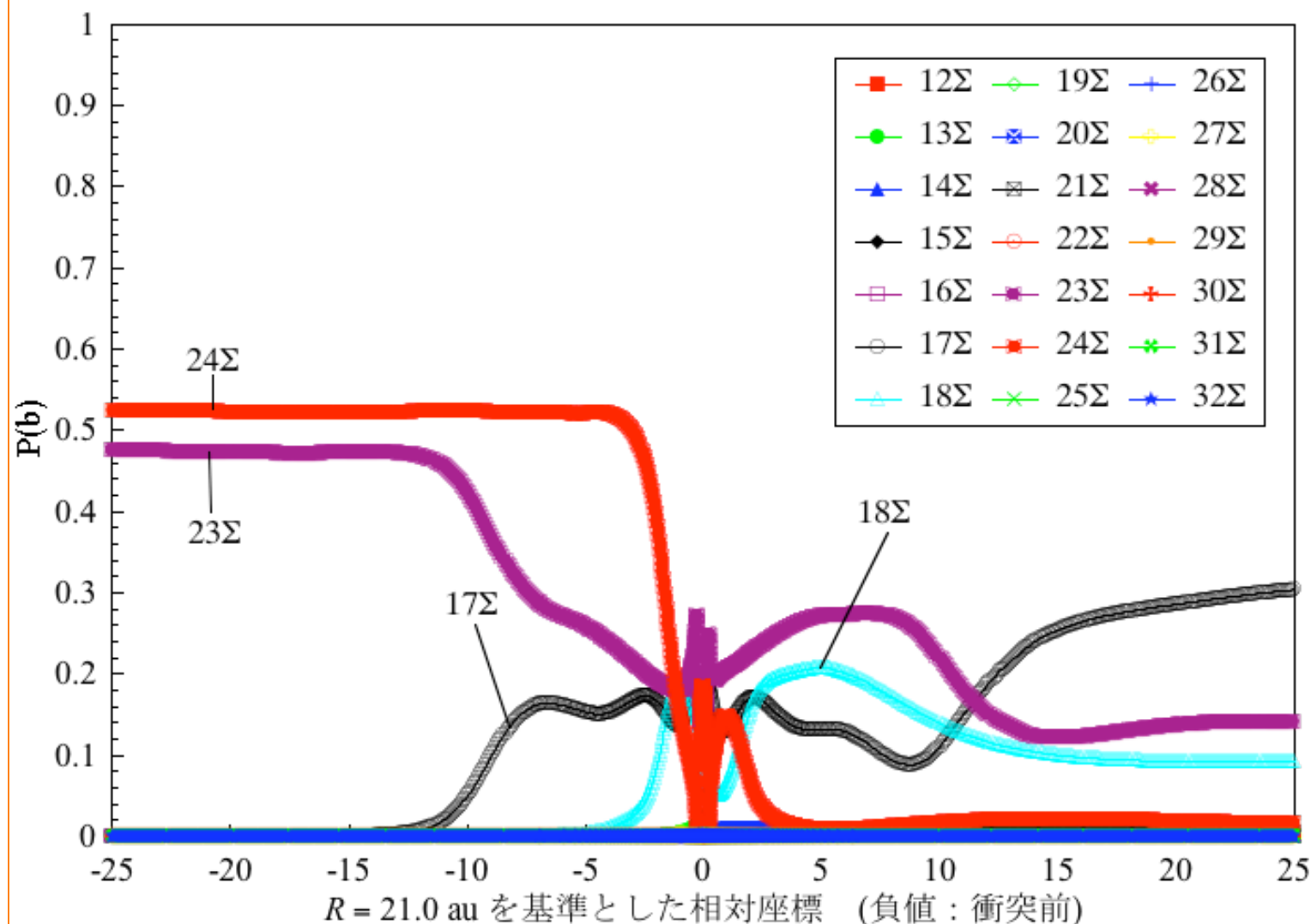
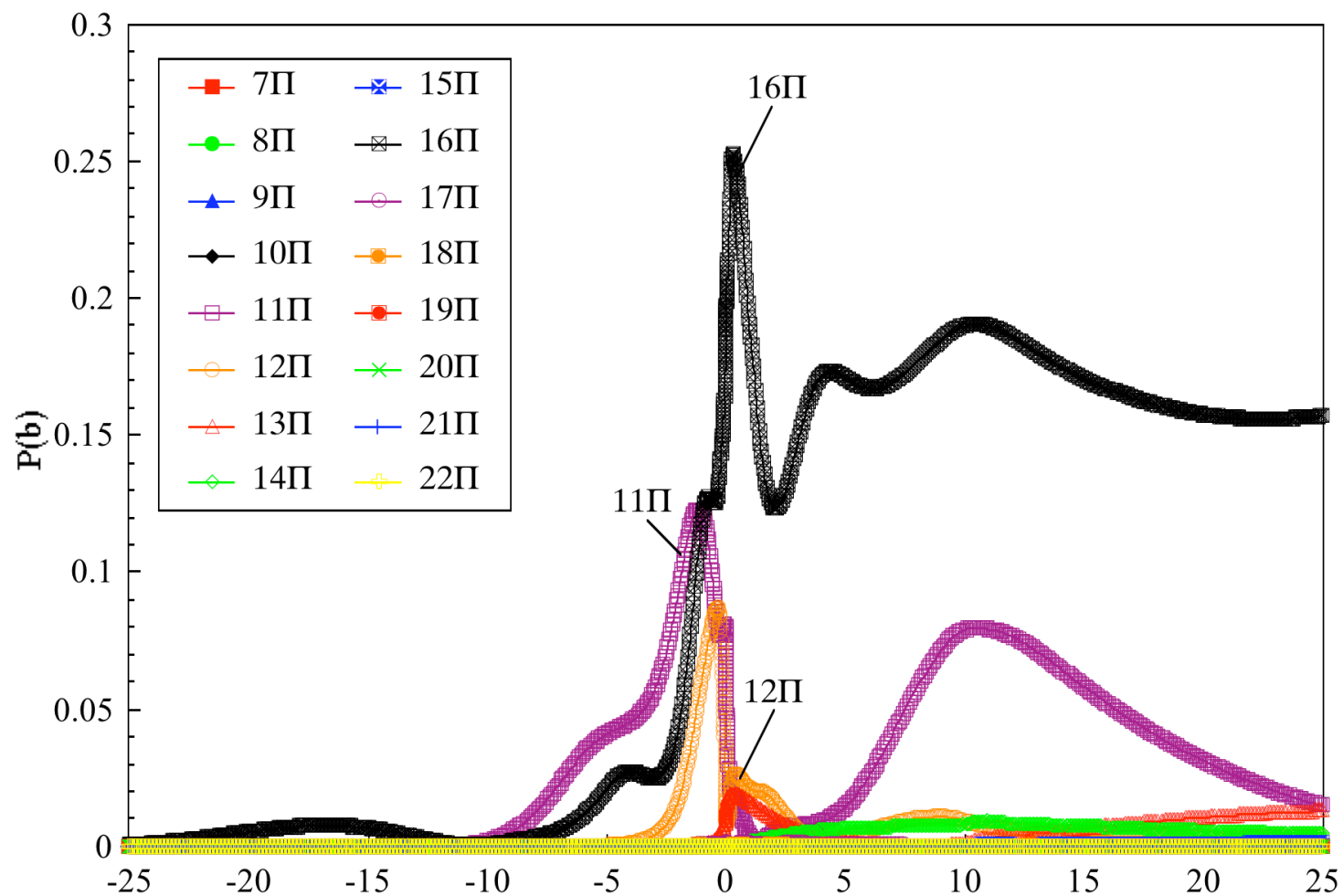


図4.13(a) $(\text{Be}^{4+} + \text{H}(2s))$ 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合



$R = 21.0$ au を基準とした相対座標 (負値：衝突前)

図6.13(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2s)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062\text{keV/amu}$, $b = 21.0\text{au}$, $R_{\text{max}} = 48\text{au}$)

Σ 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

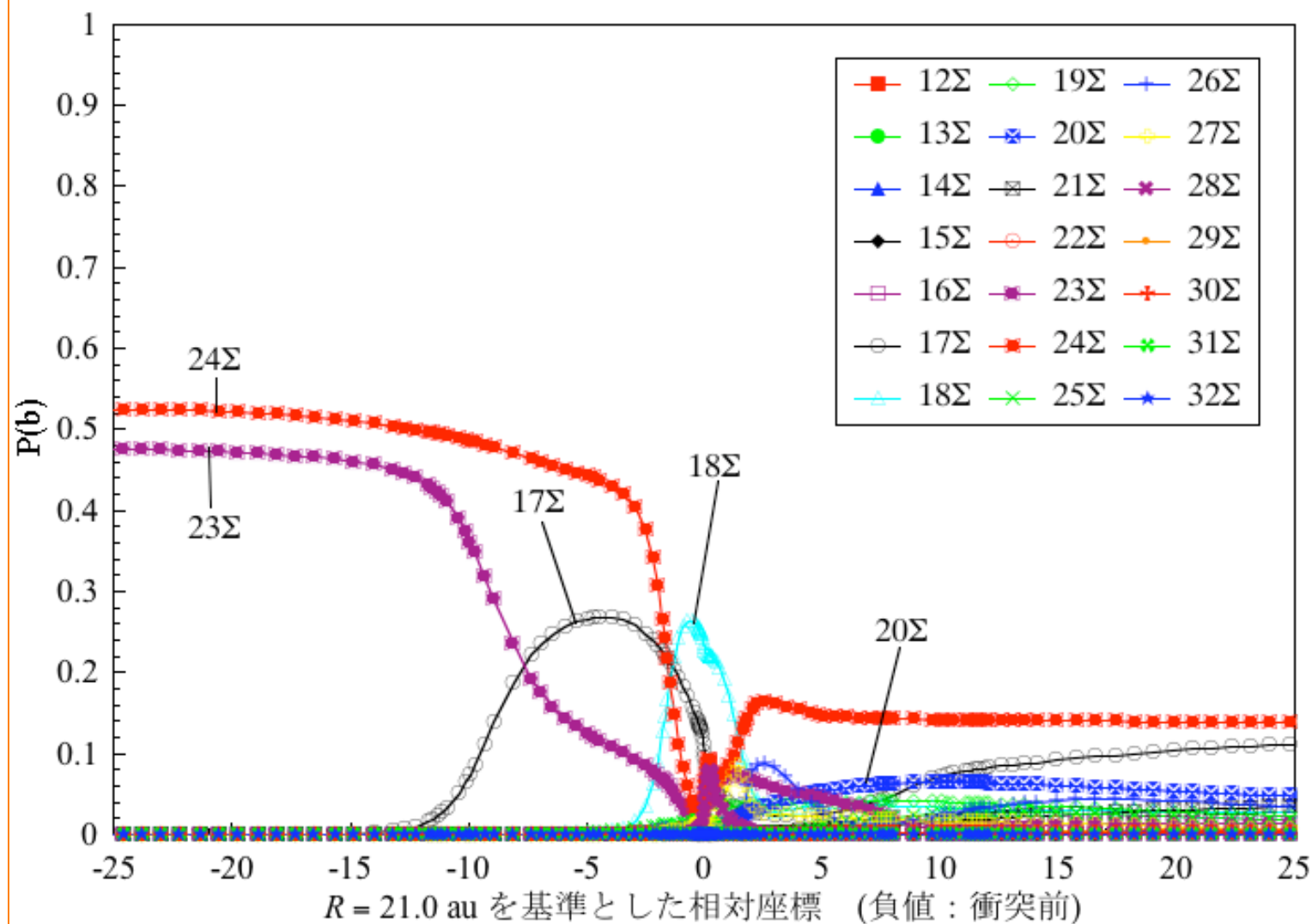


図4.14(a) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2s)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2\text{keV/amu}$, $b = 21.0\text{au}$, $R_{\text{max}} = 48\text{au}$)

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

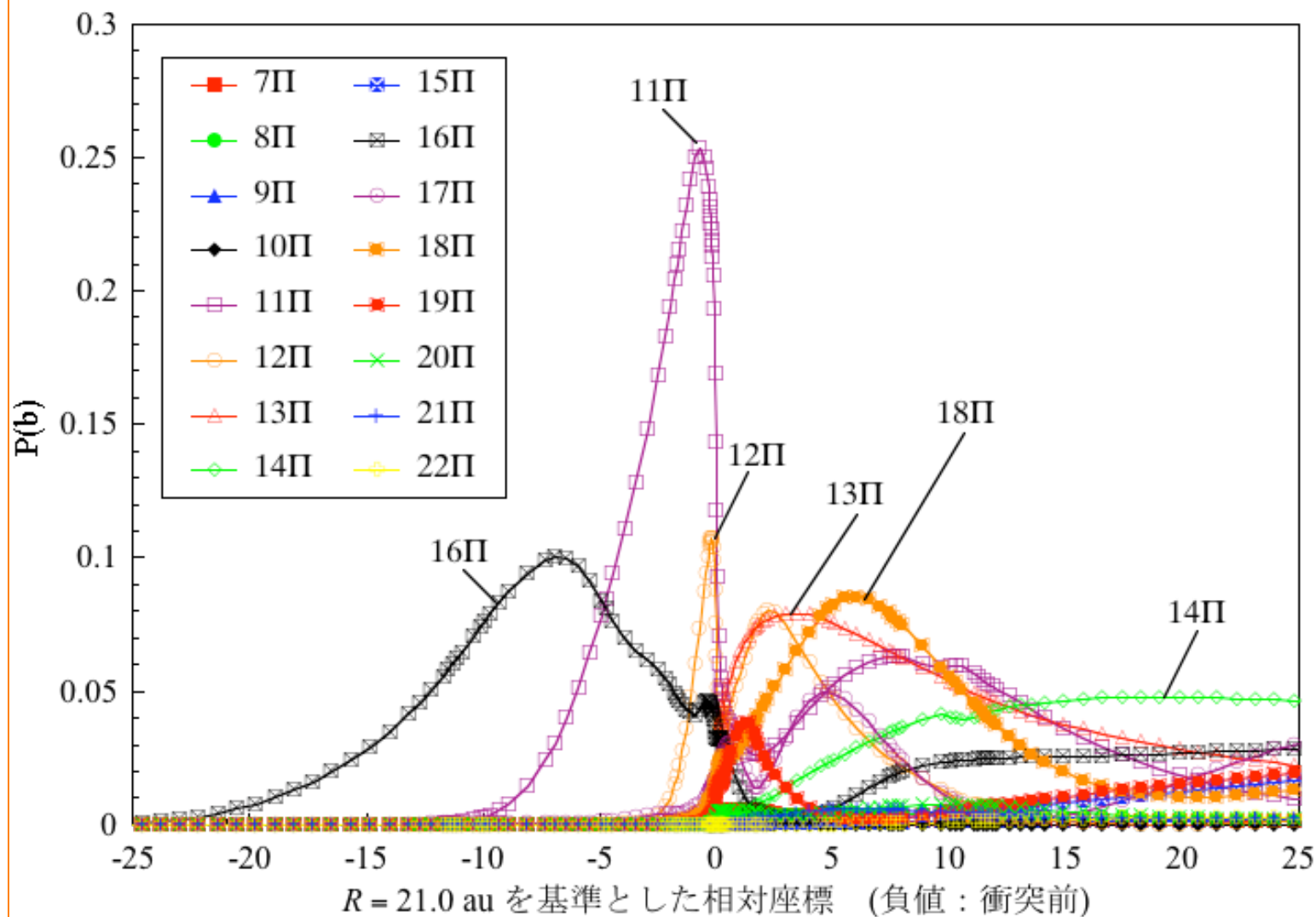
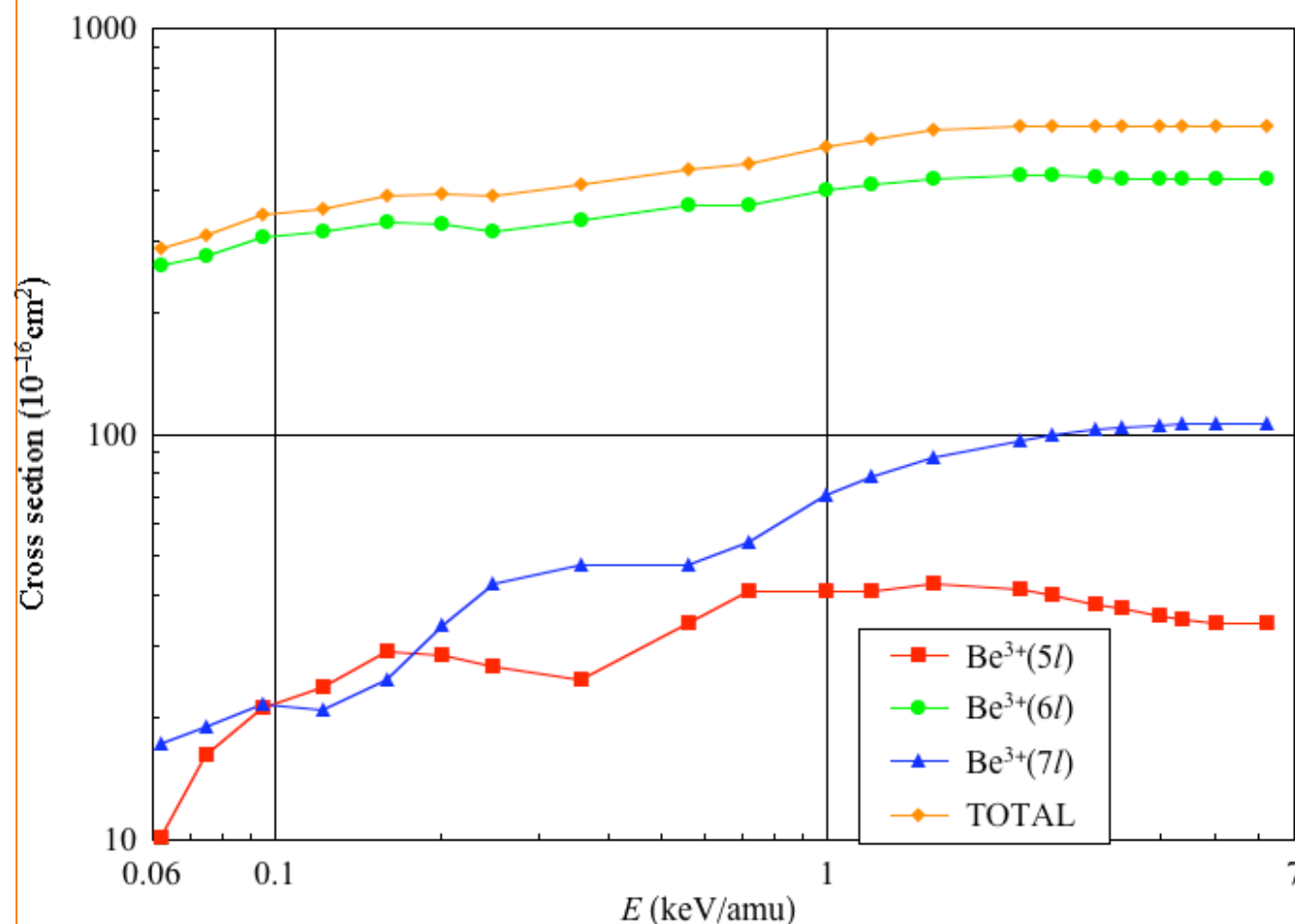


図4.14(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2s)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

4.3.5 ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2p)$) 衝突系

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

$\text{Be}^{3+}(nl; n = 5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $\text{Be}^{3+}(8s)$ 状態考慮。 $R_{\text{max}}=48\text{au}$ 。



・全エネルギー領域にわたり $\text{Be}^{3+}(6l)$ の寄与が最大

・低エネルギー領域：
 $\text{Be}^{3+}(5l)$ の寄与と $\text{Be}^{3+}(7l)$ の寄与はほぼ同程度

・高エネルギー領域：
 $\text{Be}^{3+}(7l)$ の寄与が 2 番目に大きい

図4.15 ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2p)$)衝突系の n 依存電荷移行断面積

(Be⁴⁺+H(2p))衝突系と(Be⁴⁺+H(SP₋))衝突系の断面積の比較

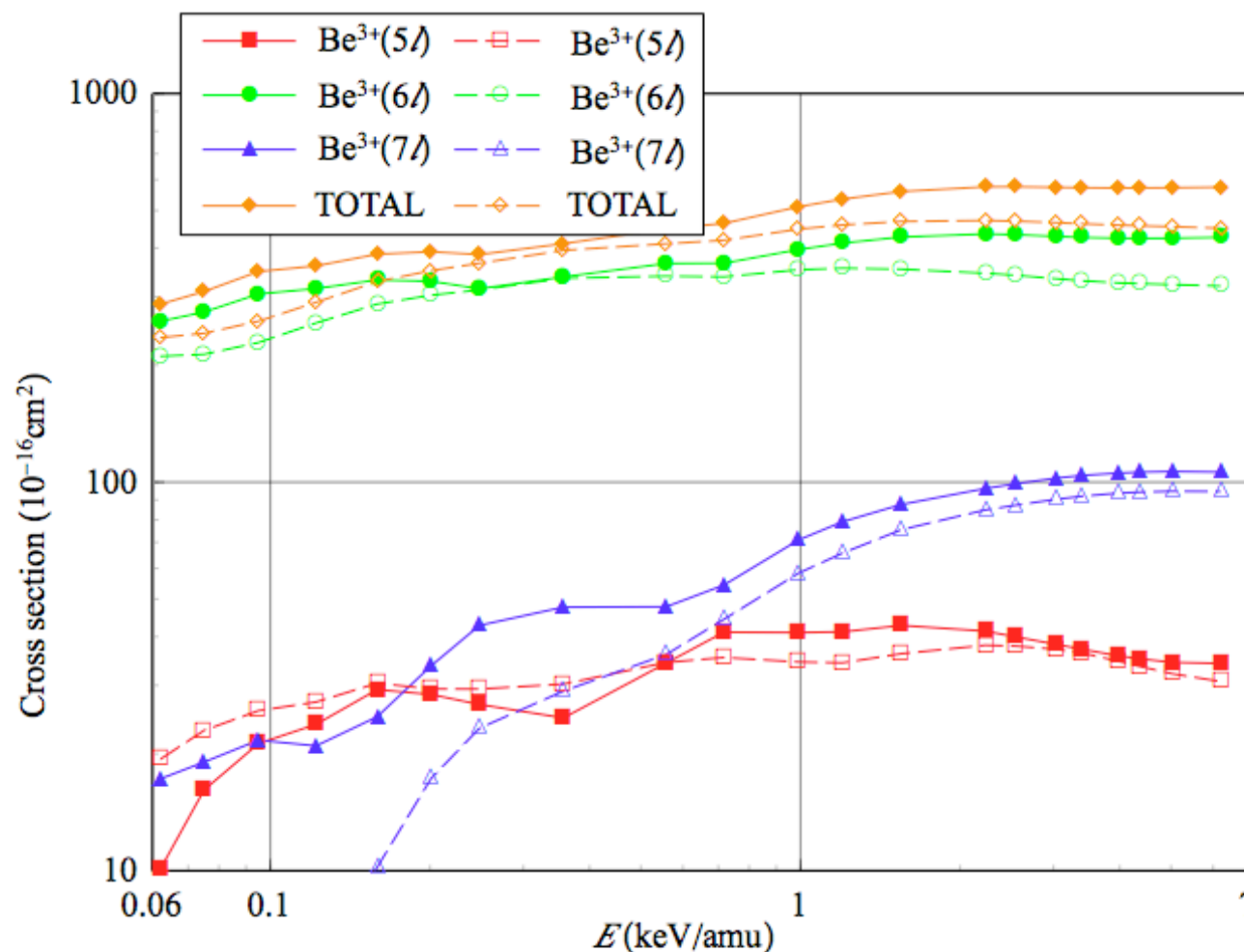


図6.16 (Be⁴⁺+H(2p))衝突系(実線)と(Be⁴⁺+H(SP₋))衝突系(破線)の*n*依存電荷移行断面積の比較

全断面積, Be³⁺(6*l*)への部分断面積は全衝突エネルギー領域にわたりH(2s)の方がH(SP₊)よりも若干大きい。
 - Σ状態の方が擬似交差点が多く、遷移が起こりやすい。

衝突エネルギー依存性は似た傾向。

低衝突エネルギー領域：
 : H(SP₊)の方がH(2s)よりもBe³⁺(5*l*)の寄与が大きく、Be³⁺(7*l*)の寄与は小さい。

高エネルギー領域：H(2s)とH(SP₊)の部分断面積は差異は少なくなる。

Σ 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合

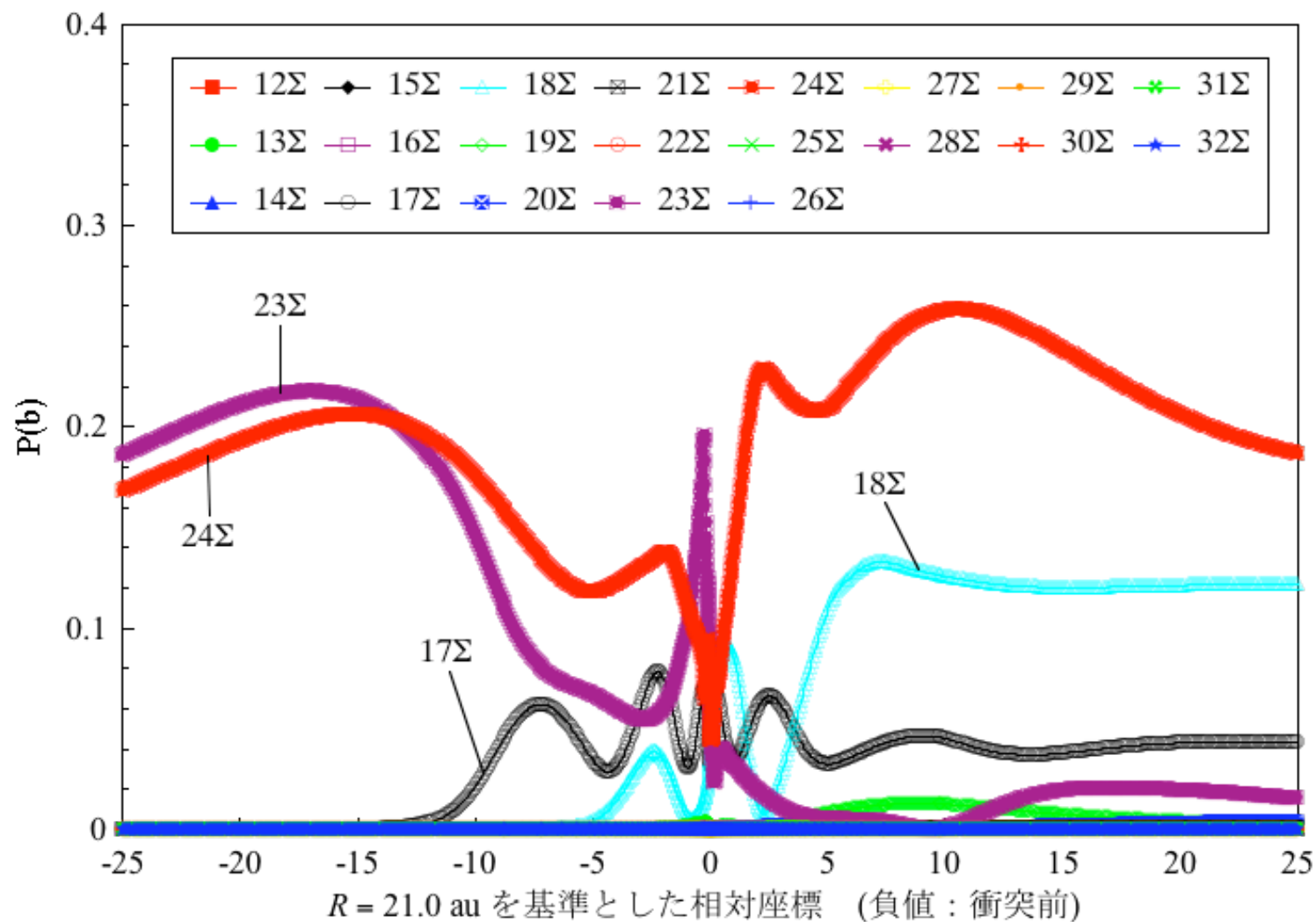


図4.17(a) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2p)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 低衝突エネルギーの場合

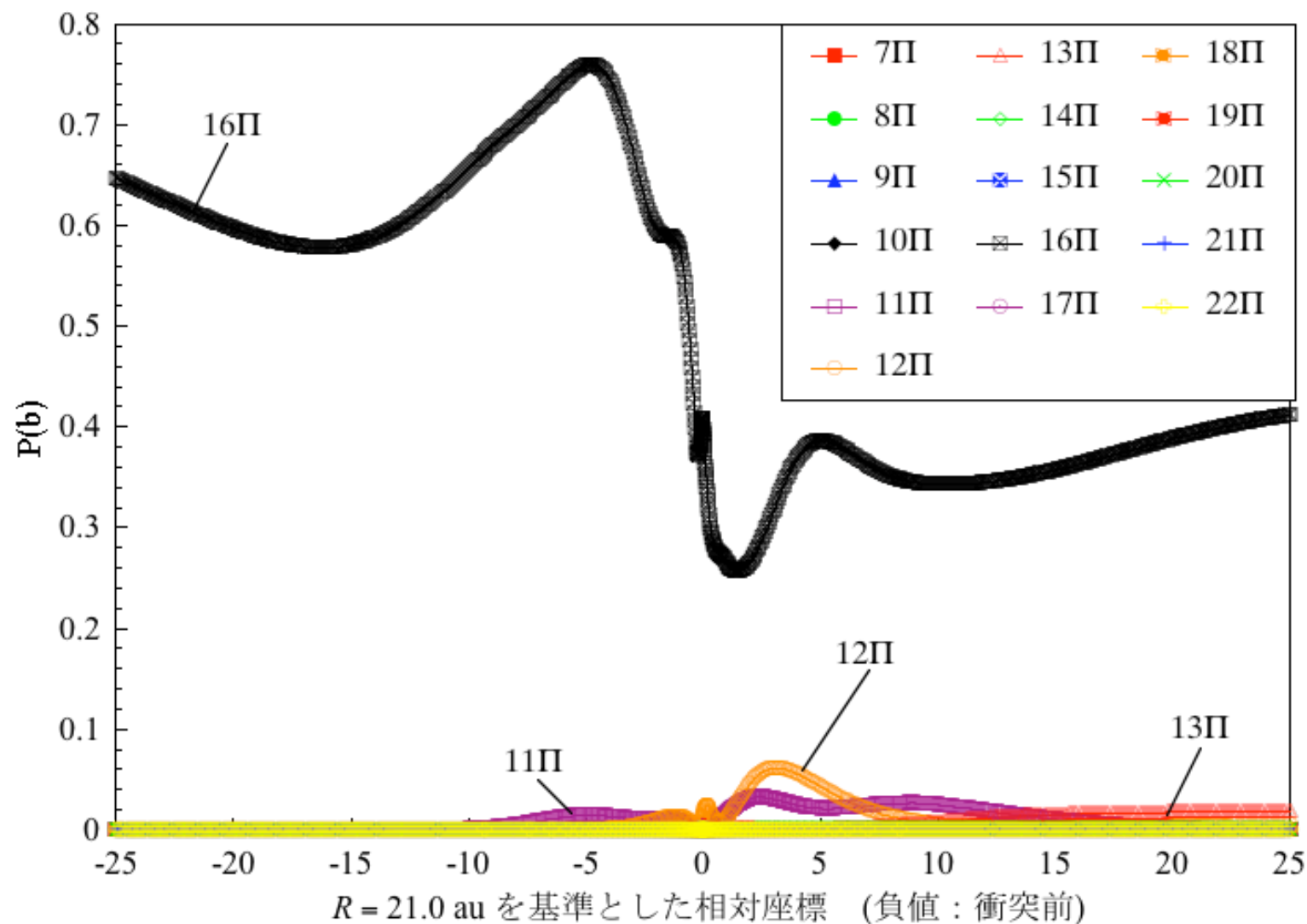


図4.17(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2p)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 0.062 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

Σ 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

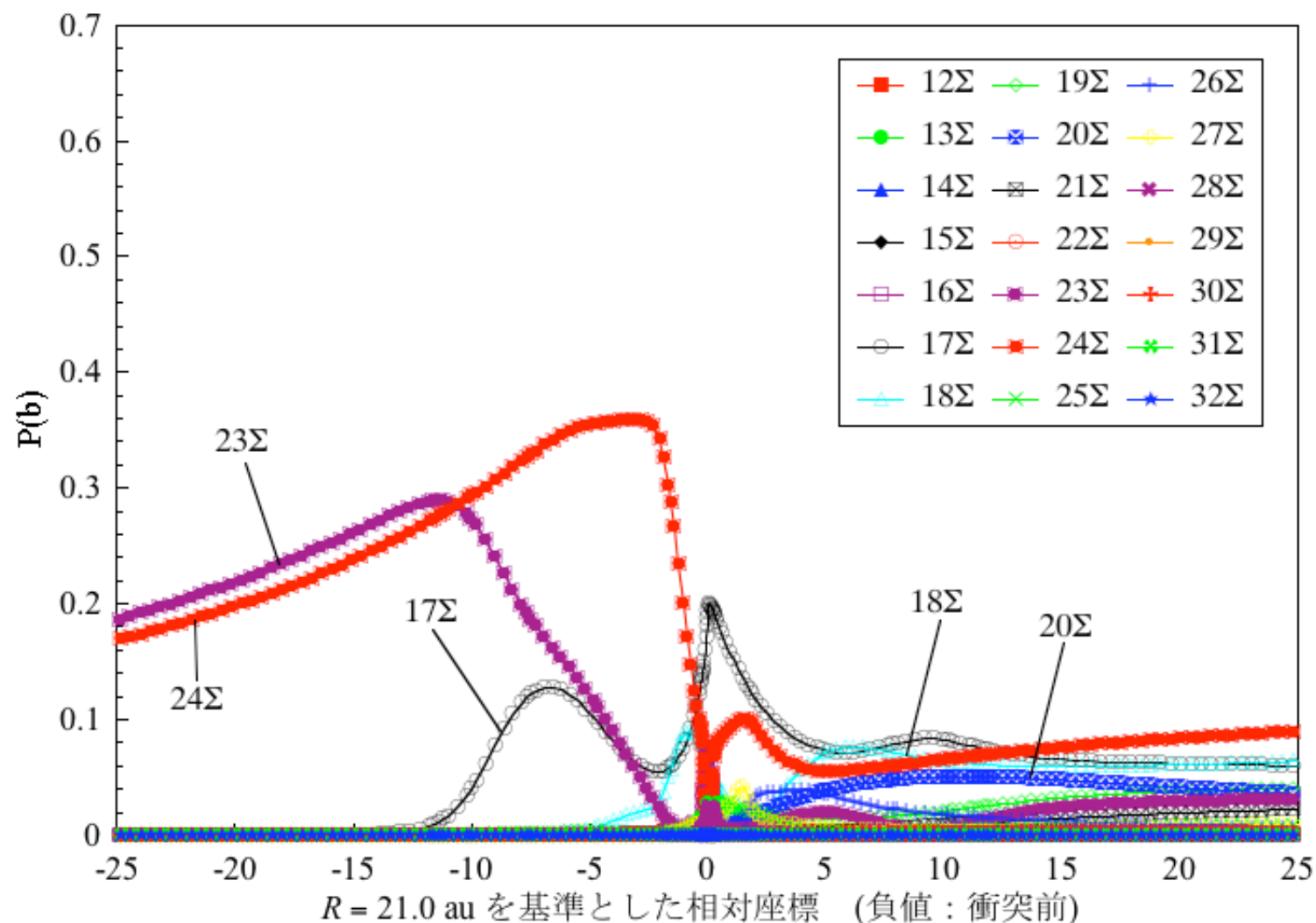


図4.18(a) $(\text{Be}^{4+} + \text{H}(2p))$ 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 $(E = 6.2\text{keV/amu}, b = 21.0\text{au}, R_{\text{max}} = 48\text{au})$

Π 状態の遷移確率の核間距離依存性 – 高衝突エネルギーの場合

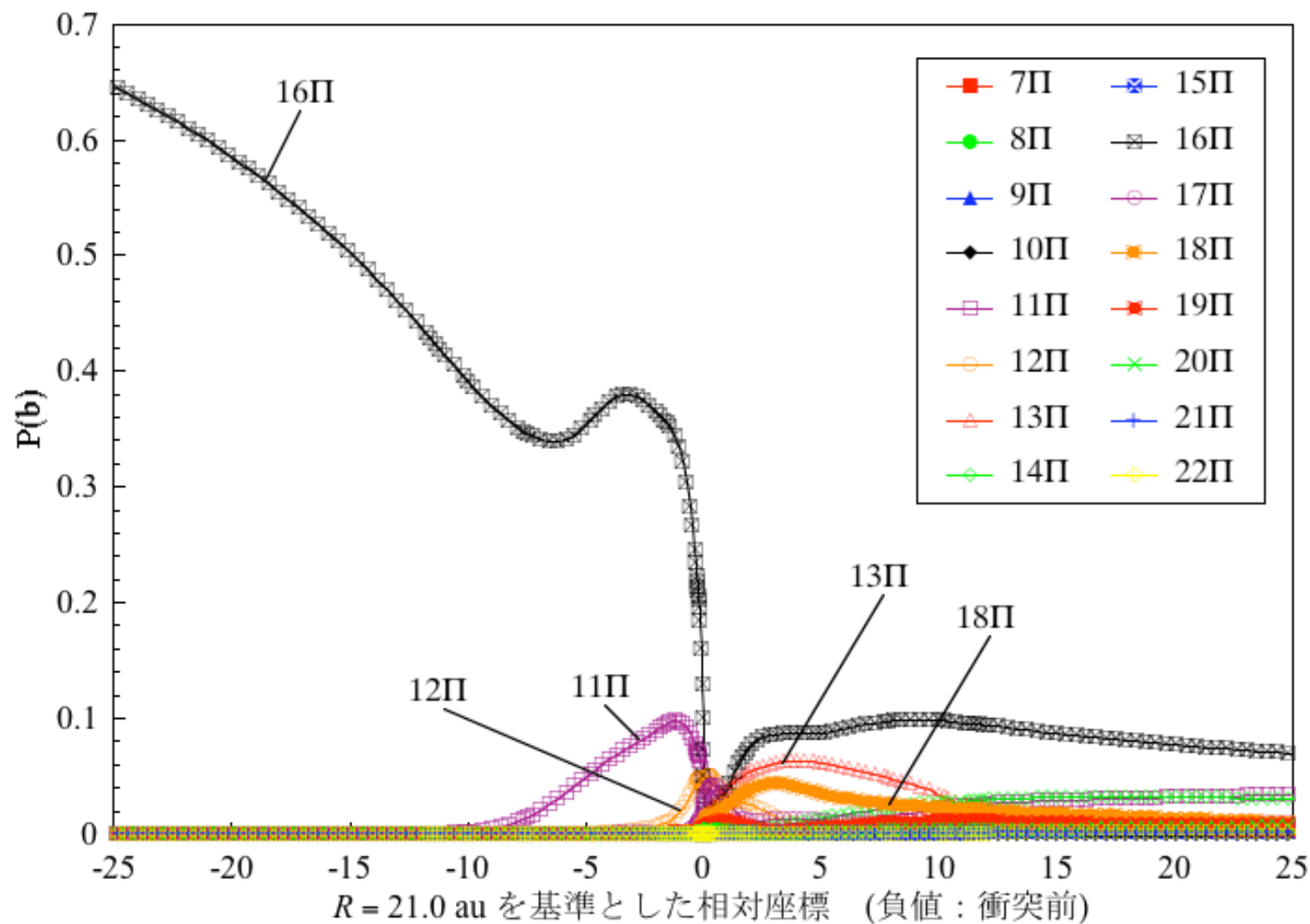


図4.18(b) ($\text{Be}^{4+} + \text{H}(2p)$) 衝突系における存在確率の核間距離依存性
 ($E = 6.2 \text{ keV/amu}$, $b = 21.0 \text{ au}$, $R_{\text{max}} = 48 \text{ au}$)

5 $(C^{4+} + H(2l))$ 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

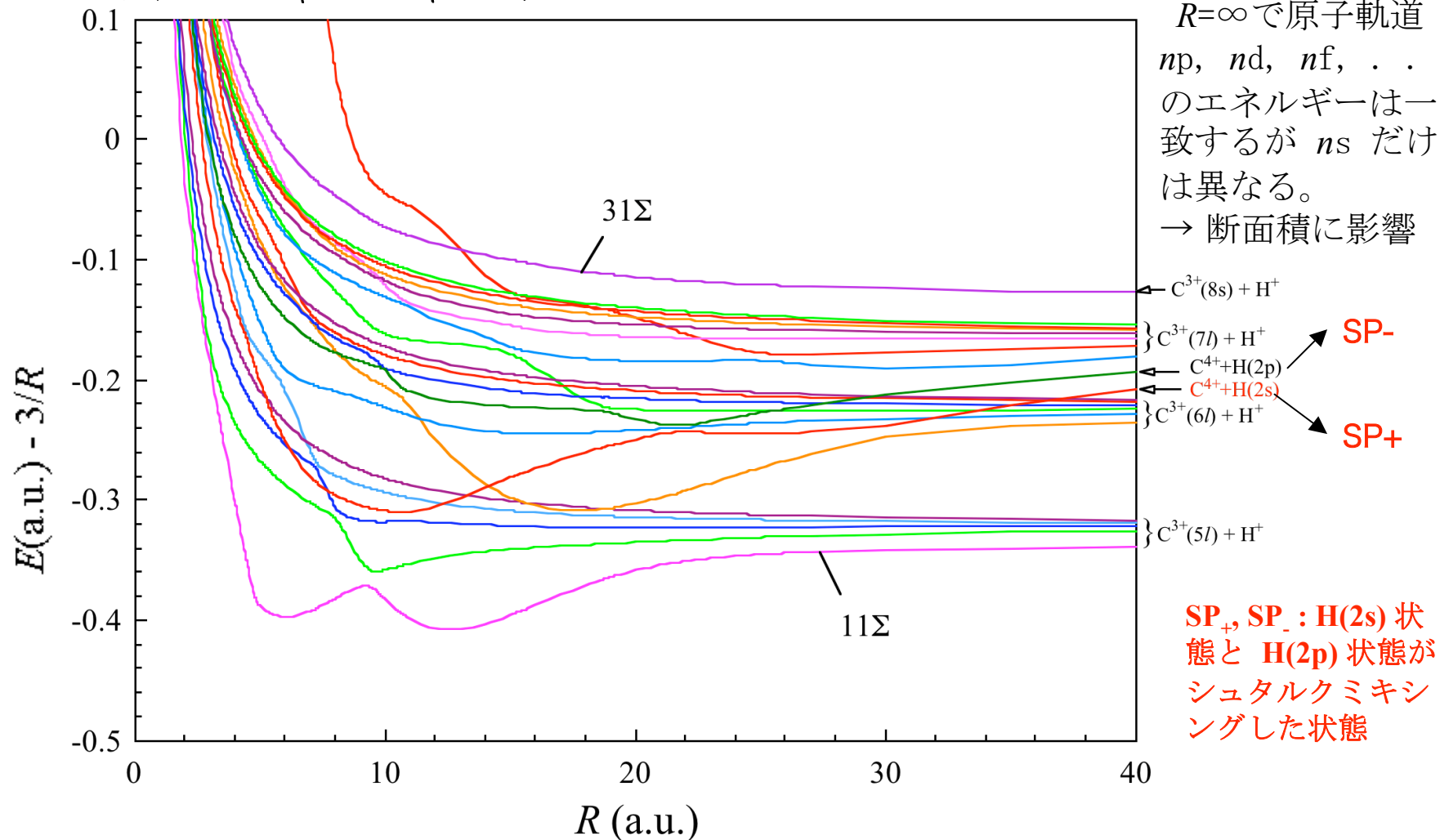


図5.1 CH^{4+} 系 Σ 状態のポテンシャルエネルギー曲線

5.3 電荷移行断面面積

5.3.1 ($C^{4+} + H(SP_+)$) 衝突系

$C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $C^{3+}(8s)$ 状態考慮。 $R_{\max}=60a_u$ 。

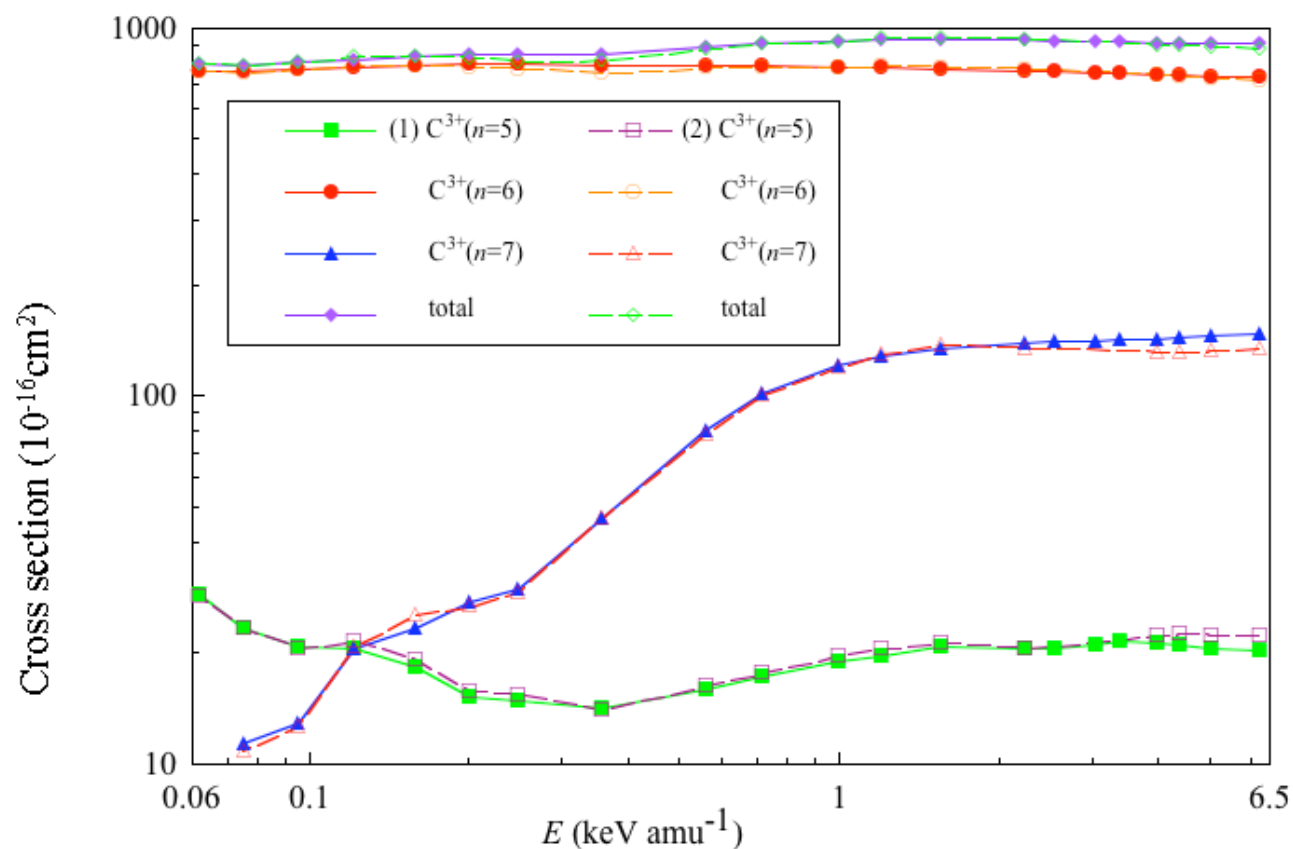


図 5.2 $C^{4+} + H^*(SP_+)$ 衝突系の電荷移行断面面積（実線： Φ 状態を含めた場合、破線： Φ 状態を含めない場合）

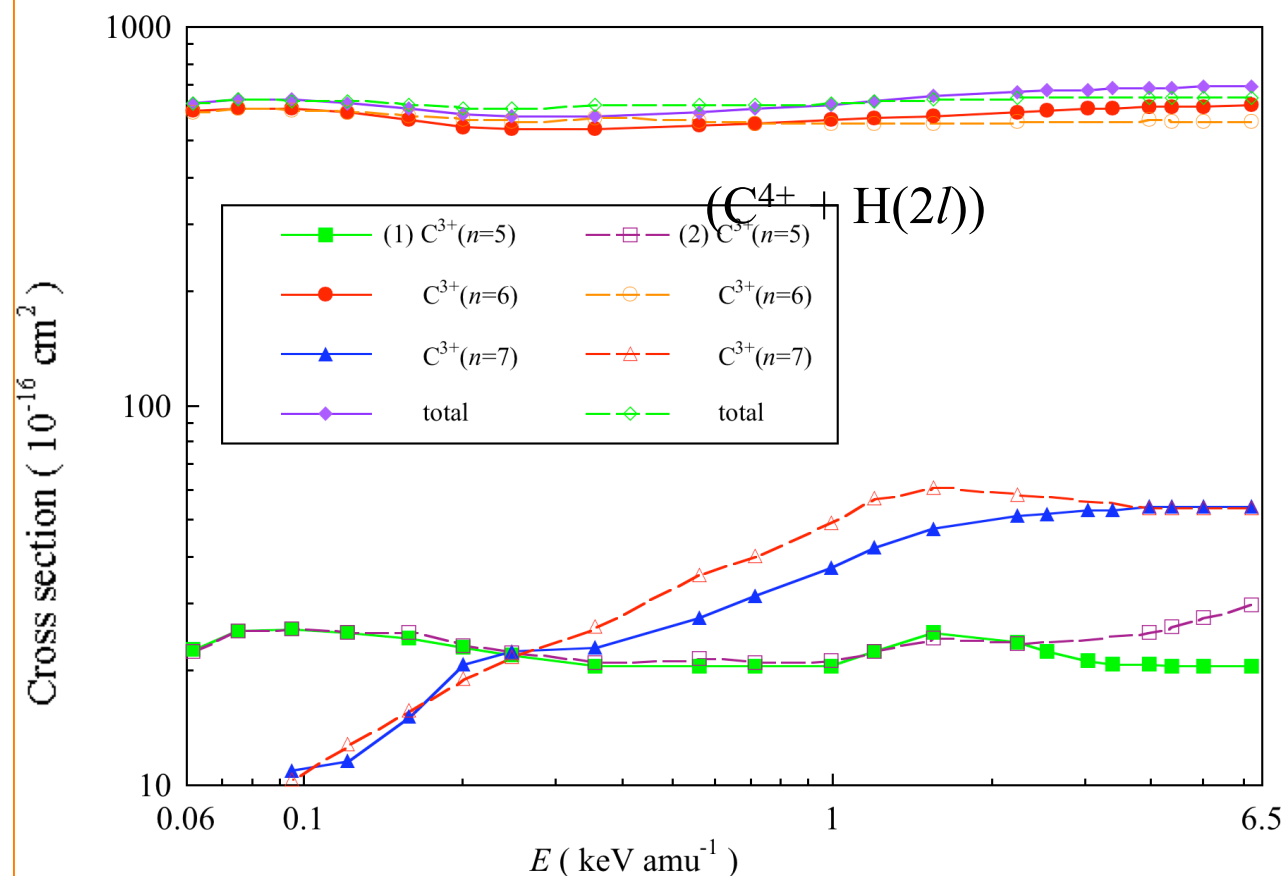
- ・全断面面積の衝突エネルギー依存性は小さい。 $C^{3+}(1s^26l)$ の寄与が最大（特に $C^{3+}(1s^26s)$ 状態）。 Δ 状態を含めれば断面面積は収束。

- ・低エネルギー領域： $C^{3+}(1s^25l)$ 状態が 2 番目の寄与

- ・高エネルギー領域：
 - ① $C^{3+}(1s^27l)$ 状態が 2 番目の寄与
 - ②複雑、多岐

5.3.2 ($C^{4+} + H(SP_-)$) 衝突系の場合

・ $C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $C^{3+}(8s)$ 状態考慮。 $R_{\max}=60a_u$ 。



・全断面積の衝突エネルギー依存性は小さい。
 $C^{3+}(1s^26l)$ の寄与最大（特に $C^{3+}(1s^26s)$ ）。 Δ 状態を含めれば断面積は収束。

・低エネルギー領域：
 ① $C^{3+}(1s^25l)$ が 2 番目に大きな寄与

・高エネルギー領域：
 ① $C^{3+}(1s^27l)$ が 2 番目に大きな寄与
 ② 複雑、多岐

図 5.3 $C^{4+} + H^*(SP_-)$ 衝突系の電荷移行断面積（実線： Φ 状態を含めた場合、破線： Φ 状態を含めない場合）

5.3.4 ($C^{4+} + H(2s)$) 衝突系の場合

$$\Psi_{2s} = 0.69286347\Phi_{SP_+} + 0.72106880\Phi_{SP_-}$$

$\cdot C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $C^{3+}(1s^28s)$ 状態考慮。 $R_{\max}=60a_u$ 。

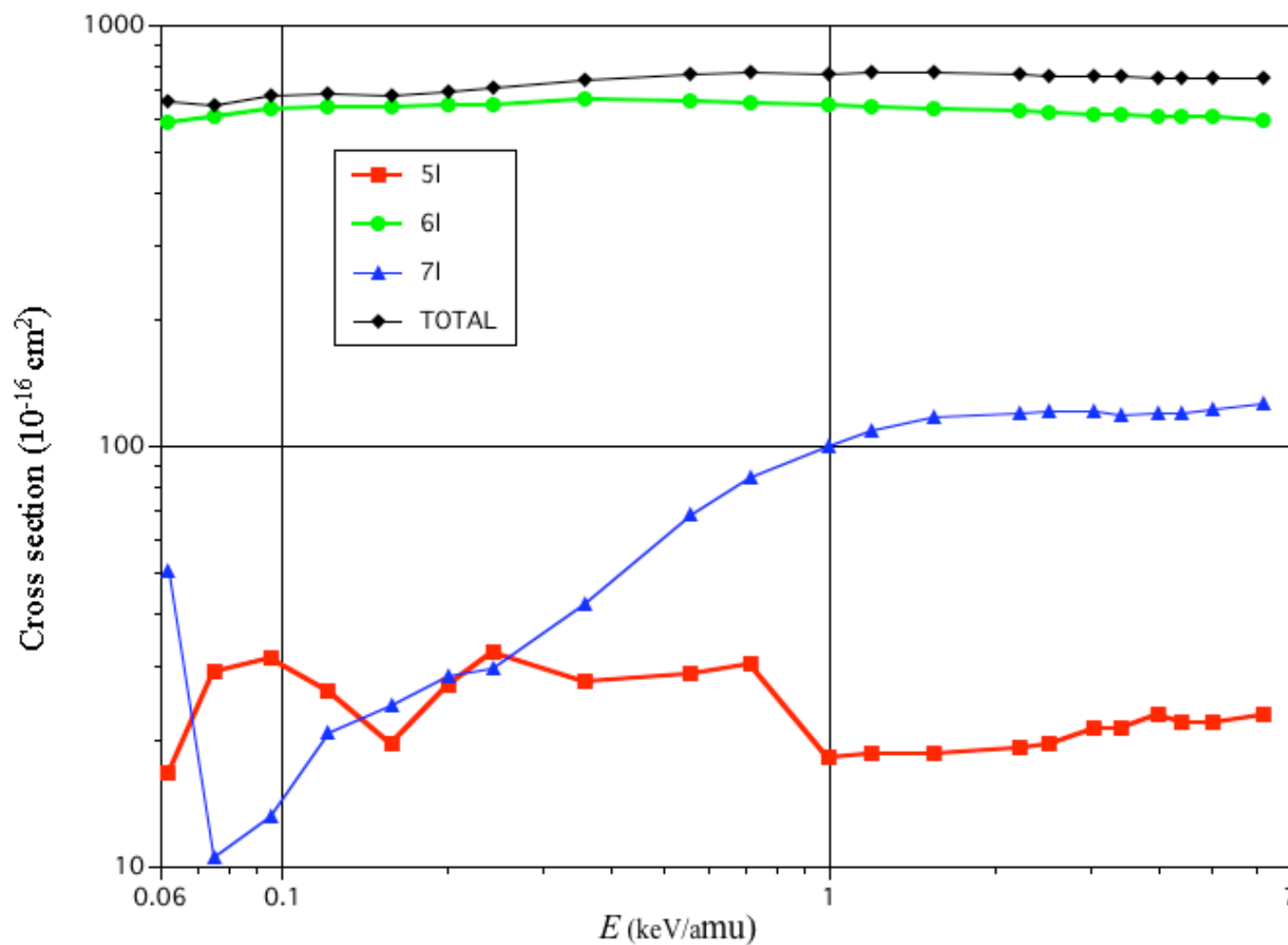


図 5.4 $C^{4+} + H^*(2s)$ 衝突系の電荷移行断面積

5.3.4 ($C^{4+} + H(2p)$) 衝突系の場合

$$\Psi_{2p} = 0.41630781\Phi_{SP_+} - 0.40002642\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p\pm 1}$$

・ $C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$ の $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$ 状態 + $C^{3+}(1s^28s)$ 状態考慮。 $R_{\max}=60a_u$ 。

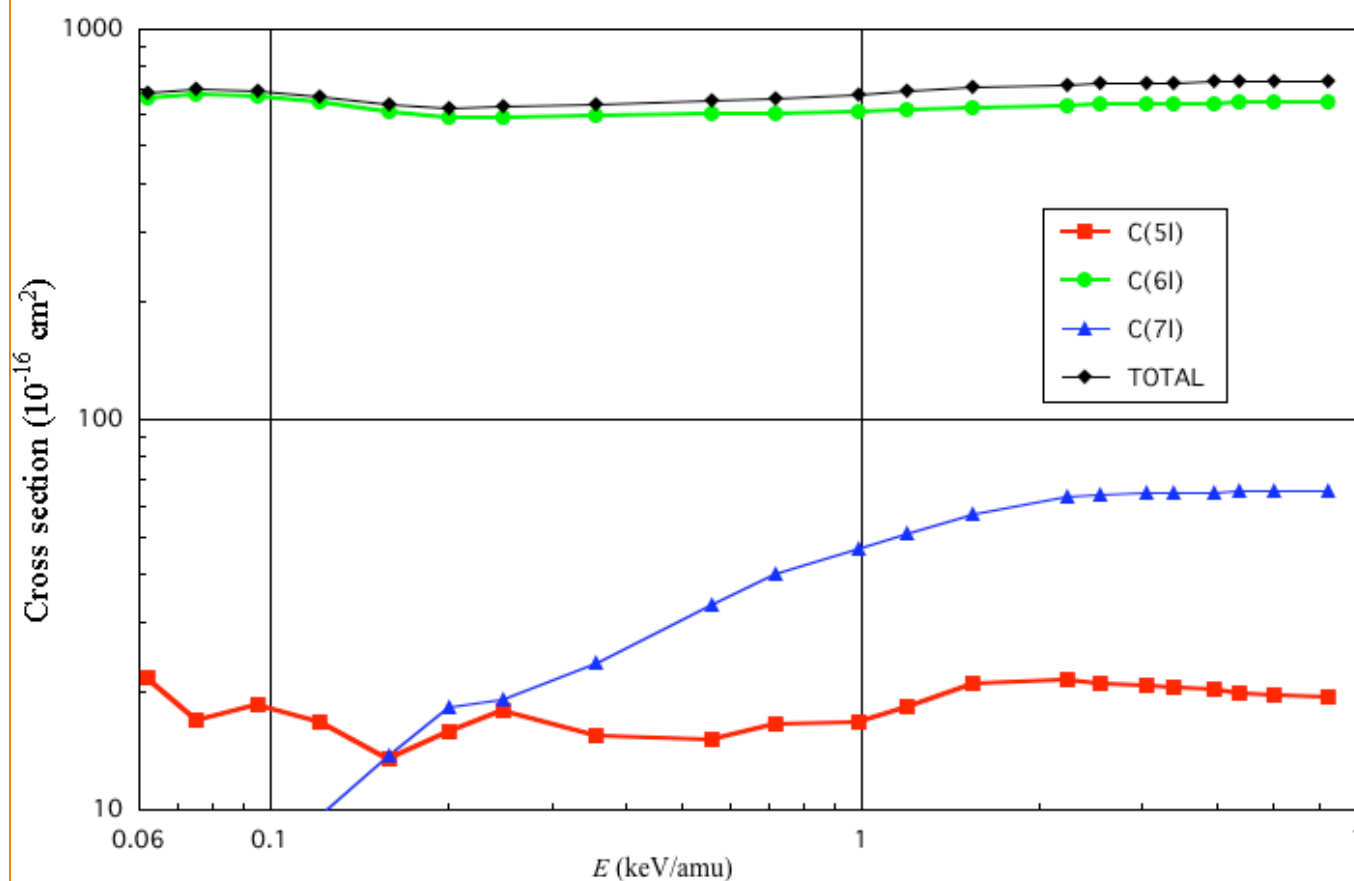


図 5.5 $C^{4+} + H^*(2p)$ 衝突系の電荷移行断面積

・ ($C^{4+}+H(SP_-)$) 衝突系と類似 (初期条件が類似: 11Π の初期確率が大)。
 $C^{3+}(1s^2 6l)$ の寄与最大 (特に $C^{3+}(1s^2 6s)$)

・ 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 $320 \times 10^{-16} \text{cm}^2$

・ 低エネルギー領域：
 断面積の大きさの順
 $C^{3+}(1s^2 7l) < C^{3+}(1s^2 5l)$
 $< C^{3+}(1s^2 6l)$

・ 高エネルギー領域：
 断面積の大きさの順
 $C^{3+}(1s^2 5l) < C^{3+}(1s^2 7l)$
 $< C^{3+}(1s^2 6l)$

6 研究成果概要とこれからの研究計画

6.1 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，標的水素原子が $H(2s)$, $H(2p)$ である場合の計算をする方法を開発し， $(Be^{4+}, C^4 + H(2s), H(2p))$ 衝突系の電荷交換部分断面積の計算に適用，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。

(1) $(Be^{4+}+H(2s))$ 衝突系と $(Be^{4+}+H(SP_+))$ 衝突系の比較

- ①全断面積， $Be^{3+}(6l)$ への断面積は標的が $H(SP_+)$ の方が $H(2s)$ の場合より大きい。
- ②低衝突エネルギー領域：標的が $H(SP_+)$ の方が $H(2s)$ の場合よりも $Be^{3+}(7l)$ への断面積は大きく， $Be^{3+}(5l)$ への断面積は小さい。 $H(2s)$ の断面積は逆位相で大きく振動している。
- ③高衝突エネルギー領域では標的が $H(SP_+)$ と $H(2s)$ の断面積は似た値になる。

(2) $(Be^{4+}+H(2p))$ 衝突系と $(Be^{4+}+H(SP_-))$ 衝突系の比較

- ① $H(2p)$ の方が $H(SP_-)$ の場合より全断面積， $Be^{3+}(6l)$ への断面積は大きい。
- ②低衝突エネルギー領域では標的が $H(SP_+)$ の方が $H(2s)$ の場合よりも $Be^{3+}(7l)$ への断面積は小さく， $Be^{3+}(5l)$ への断面積は大きい。
- ③高衝突エネルギー領域では標的が $H(SP_+)$ と $H(2s)$ の断面積は似た値になる。

(3) Σ 状態間の方が Π 状態間よりも電荷交換反応が起こりやすい ← 交差点が多いから (Δ 状態， Φ 状態には交差点がないので電荷交換反応が起こりにくい)。

(4) $(C^{4+}+H(2s, 2p))$ 衝突系と $(C^{4+}+H(SP_+, SP_-))$ 衝突系も $(Be^{4+}+H(2l))$ 衝突系の場合とほぼ同じ結果。若干差異が少ない。

6.2 これからの計画

- (a) 今年度の受託研究で用いた方法を $(C^{6+} + H(2l))$ 衝突系に適用し、標的励起水素原子が $H(2s)$, $H(2p)$ の場合の状態指定電荷移行断面積の調査を行う。また、 $(C^{4+} + H(2l))$ 衝突系の場合に対して計算を完了させるとともに詳しいメカニズムを調べる。
- (b) $(X^{q+} + H(nl))$ 衝突系の逆過程である $(X^{(q-1)+} + H^+)$ 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)イオン衝突の電荷交換断面積の計算を行う。
- (c) 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。衝突粒子間の相互作用にデバイポテンシャルの形で周囲の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，山口亜希子さん，伊藤悠太君に感謝します。