

水素分子の 解離性再結合断面積

北里大一般教育 高木秀一

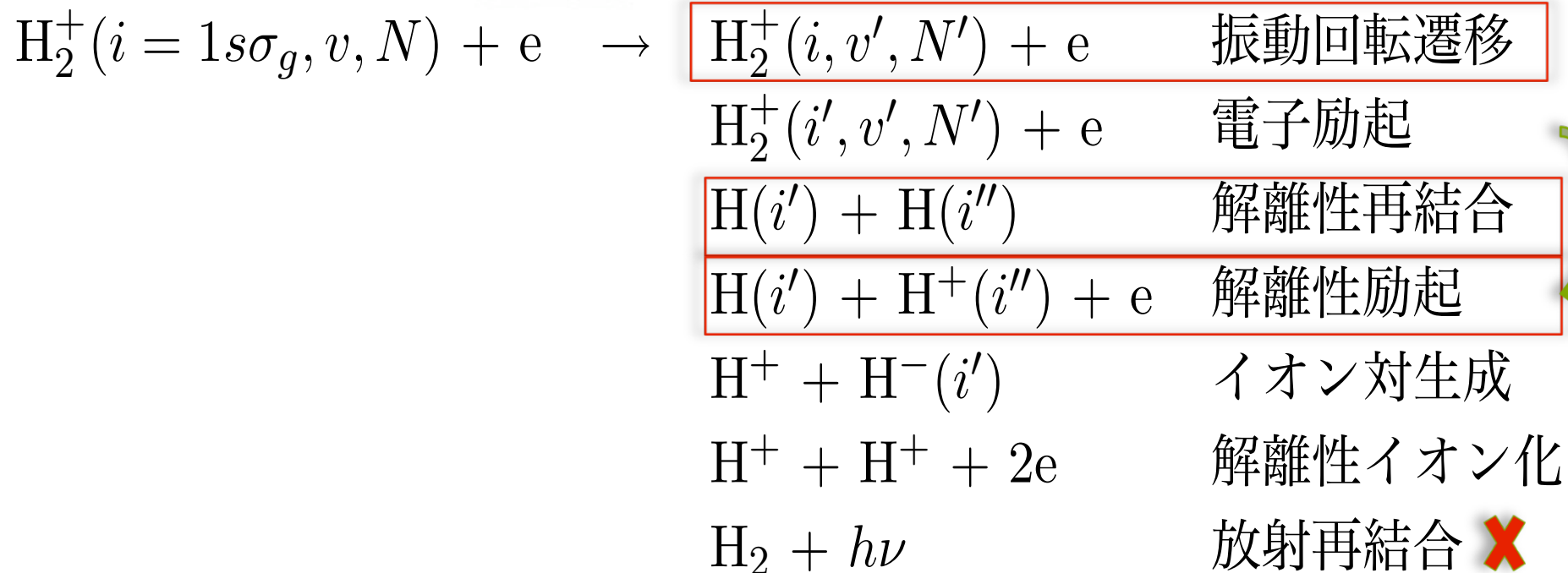
Detached plasma

💧 ガスダイバータ detached plasma

Molecular Assisted Recombination,
Dissociation,
Ionization.

effect of high rotational states,
excited atom production

水素分子イオンの関与する過程



2009年度の成果

2008年度： H_2^+

2009年度： HD^+ 信頼性の高いチェック

D_2^+

T_2^+

DT^+

ITER



解離性再結合， 解離性励起

振動回転遷移は信頼性が低いので除外

電子状態 (Sharp)

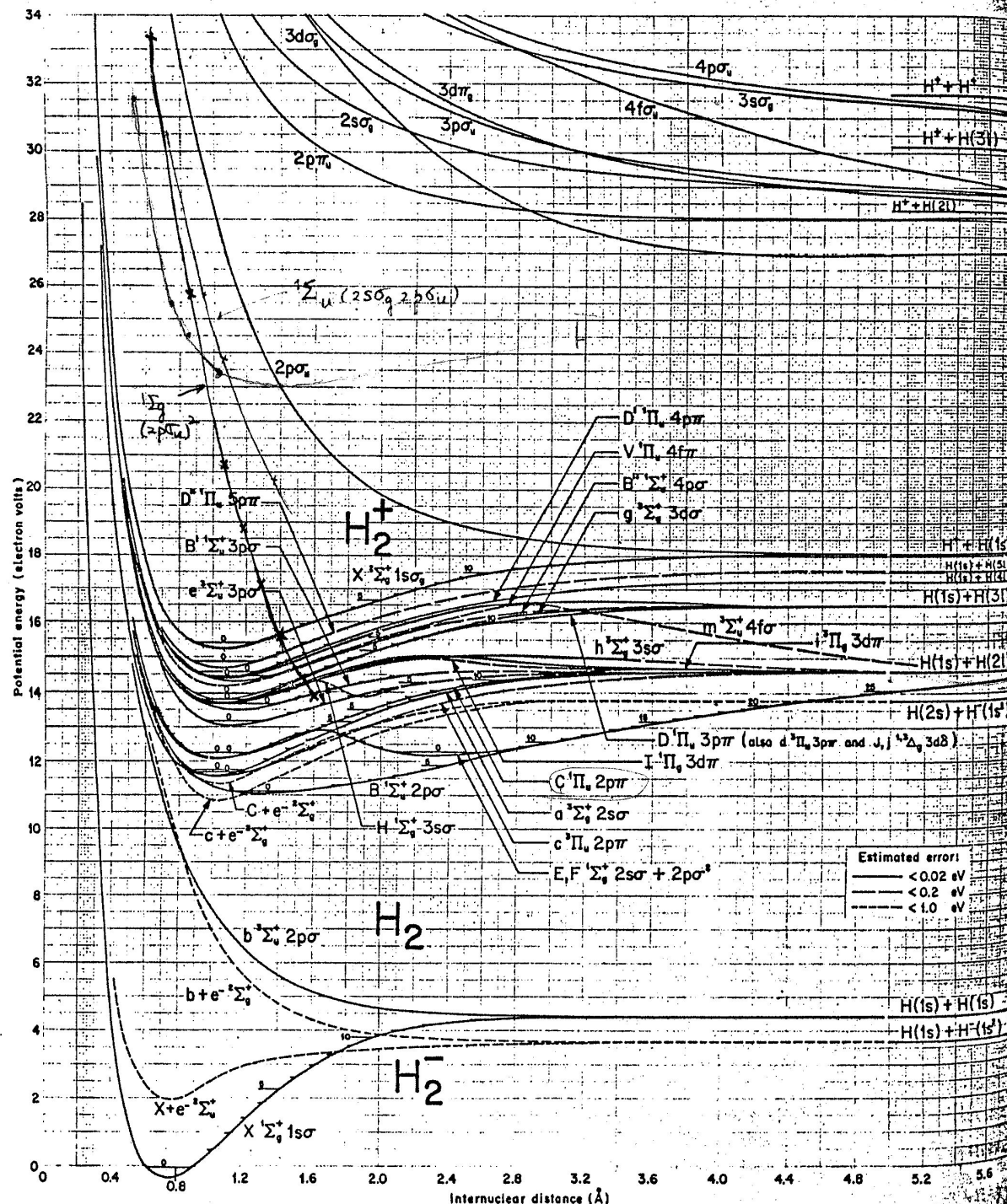


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^- , H_2 , and H_2^+
A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
In general $1s$ has been omitted from state designations in order to save space

電子状態 (Sharp)

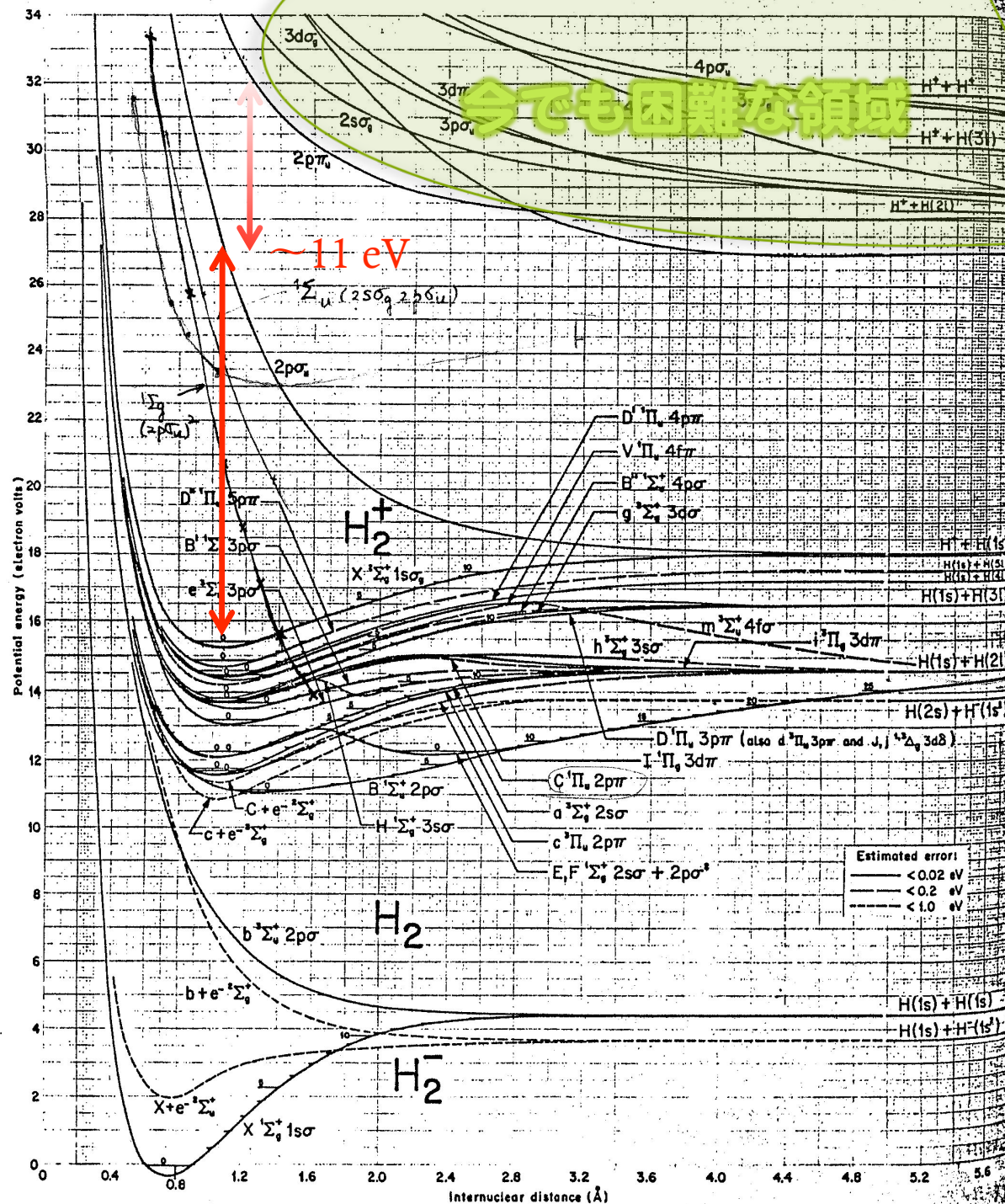


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^- , H_2 , and H_2^+
A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
In general $1s\sigma$ has been omitted from state designations in order to save space

状態選別断面積の必要性

- ◆ 初期振動状態依存性：解離性再結合，解離性励起
- ◆ 回転状態依存性： 低エネルギーで重要 (<0.3 eV)



振動回転遷移過程の必要性

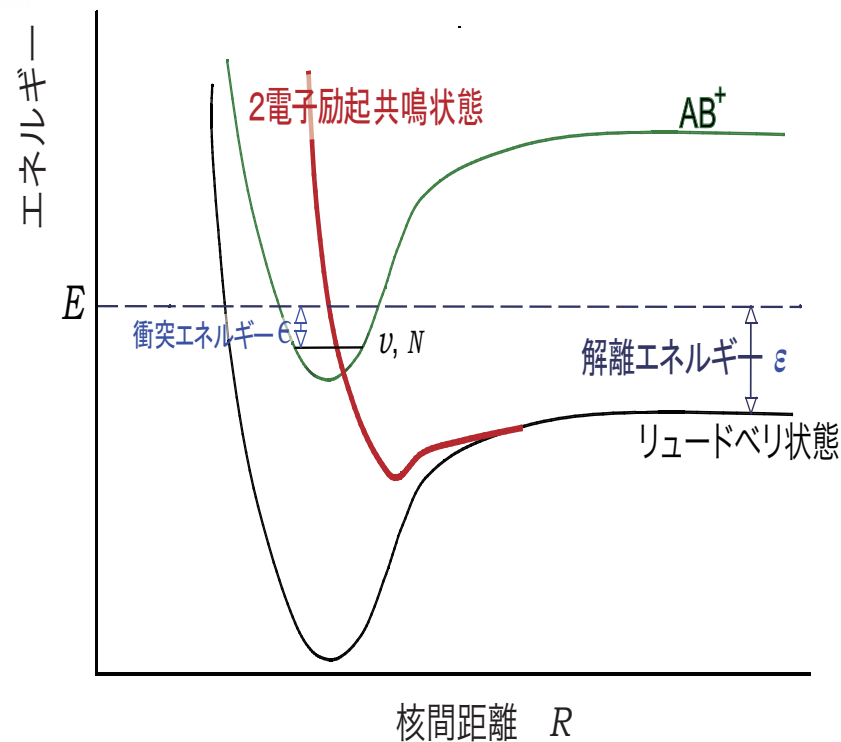
状態選別断面積  理論計算

理論計算の方法

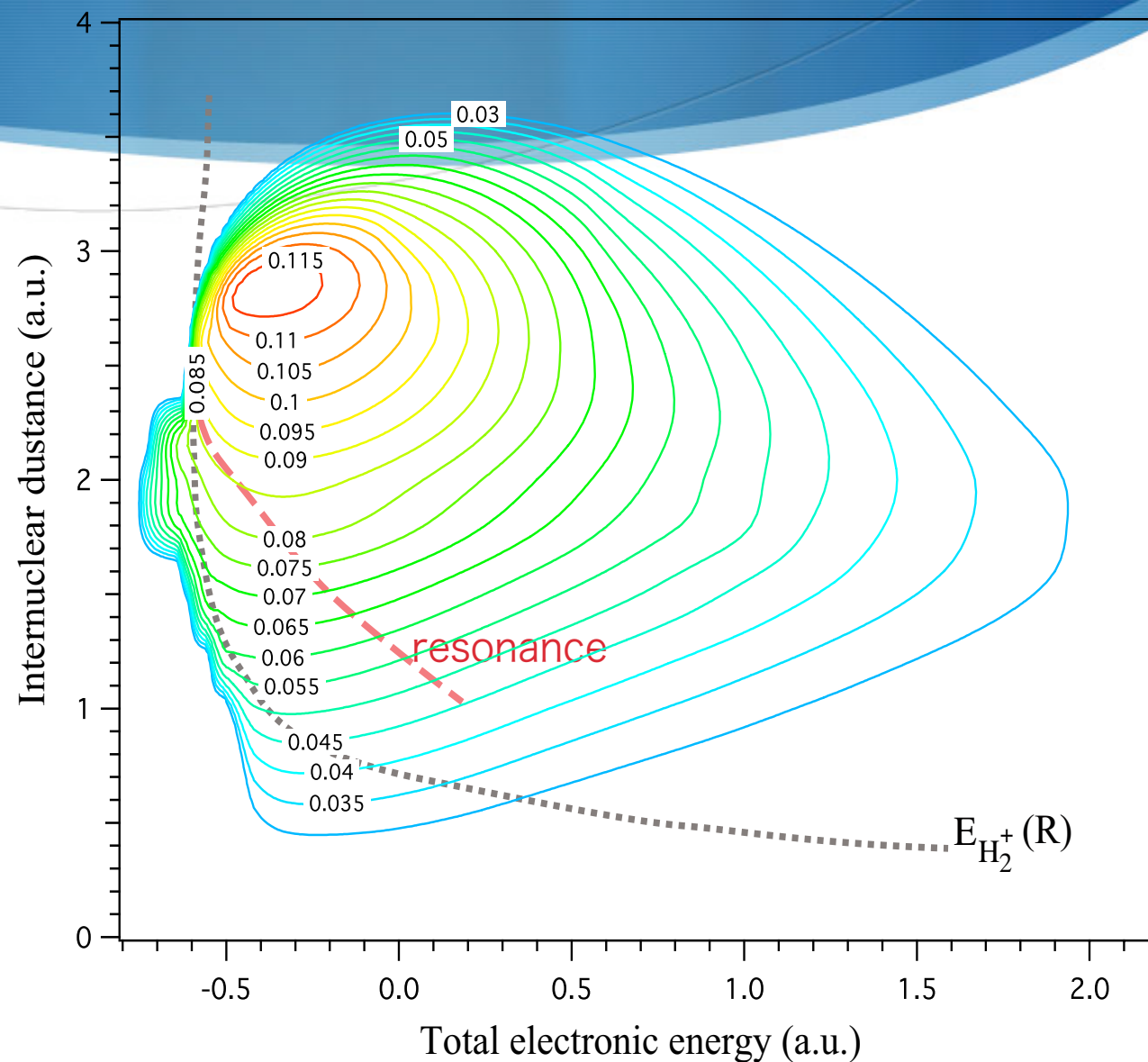
配置間相互作用による解離状態への遷移

非断熱相互作用によるRydberg状態への遷移

量子欠損理論



配置間相互作用の正確な記述



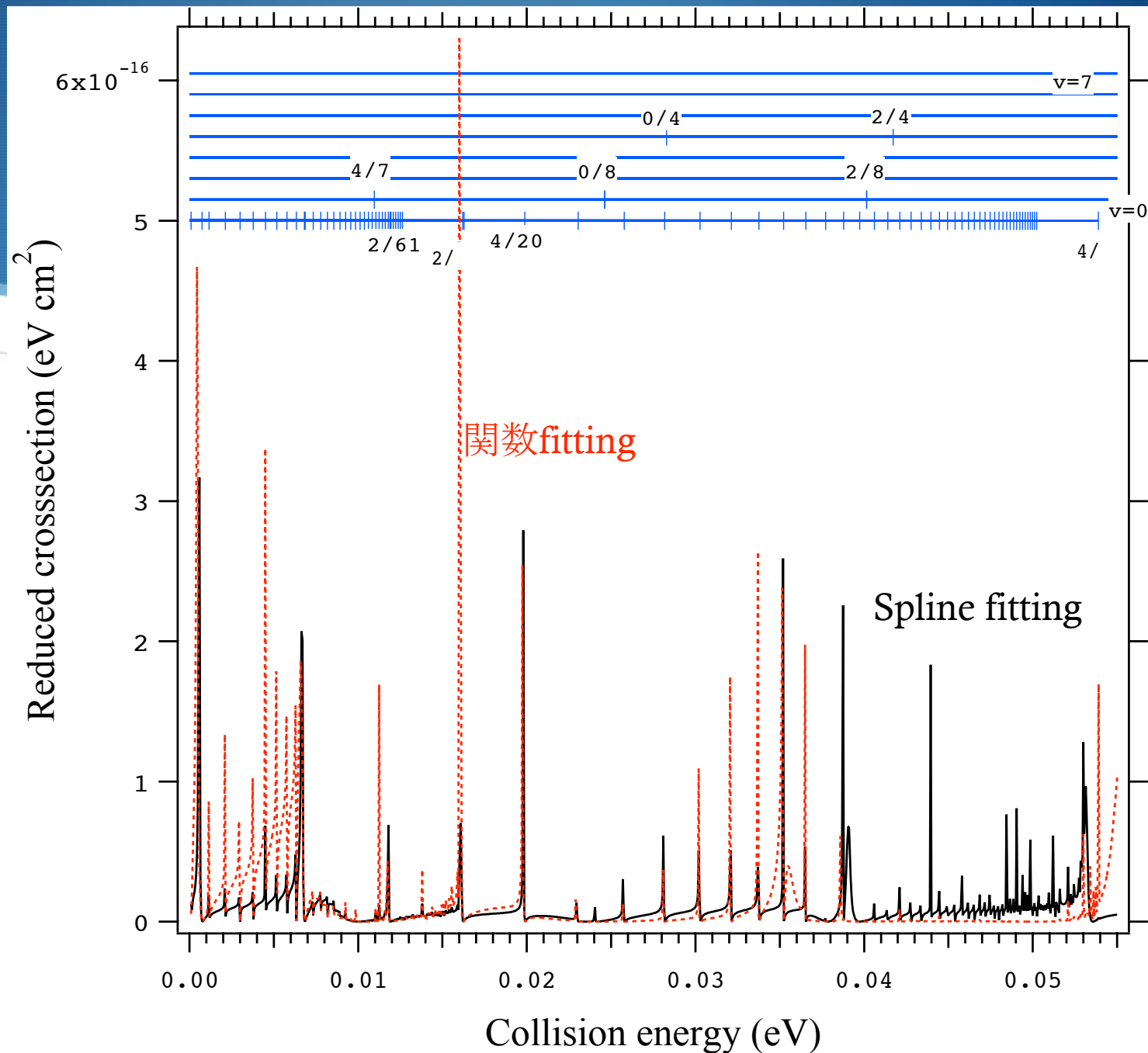
高木, 原, 佐藤 2009

散乱問題の非摂動解法

- Lippmann-Schwinger方程式の代数解法
- Chebyshev求積法の応用
- 負の電子エネルギーからの寄与
(Rydberg状態の寄与)

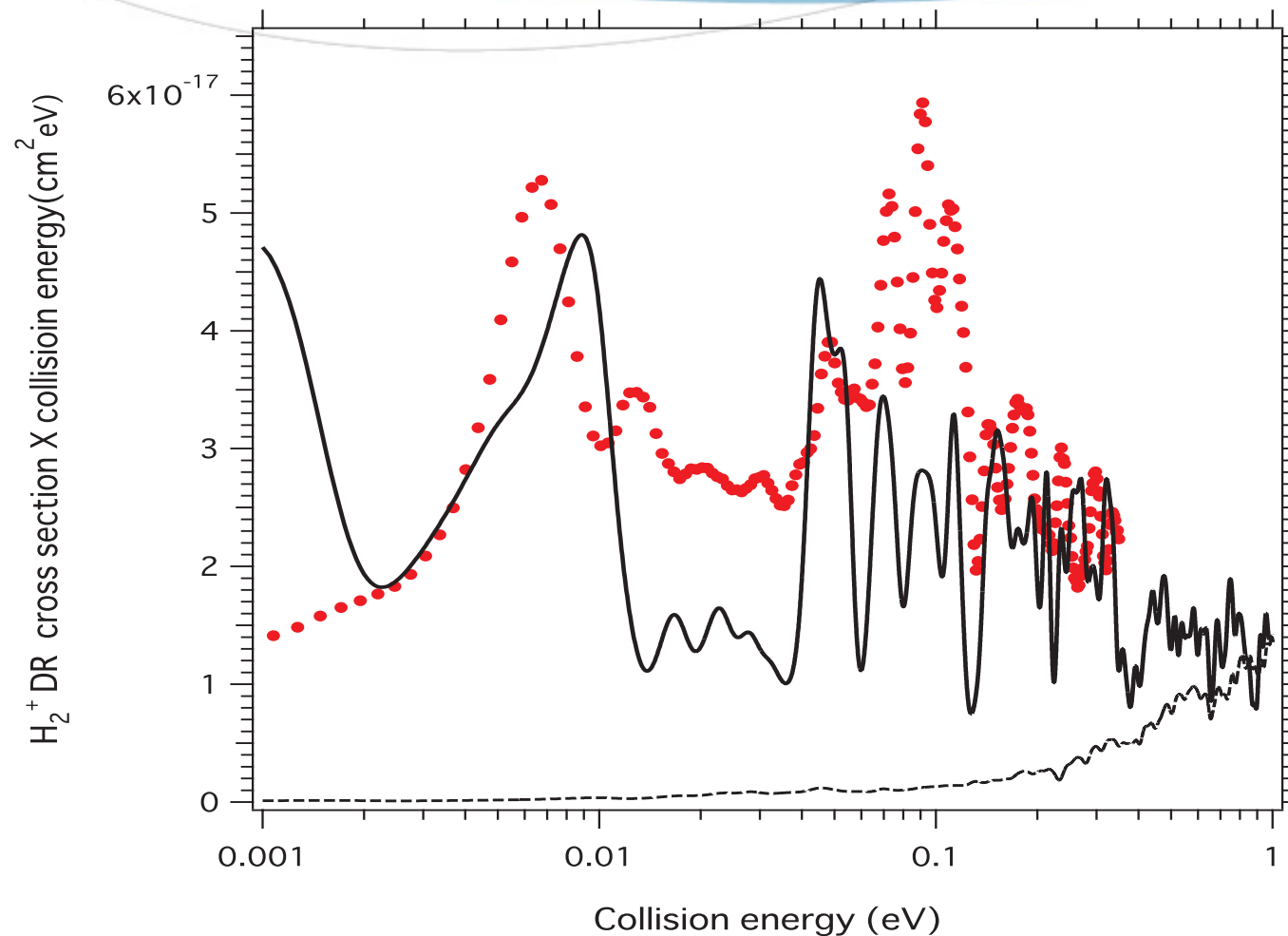
HD⁺ CI強 度の影響

回転励起に
よるRydberg
状態への再
結合



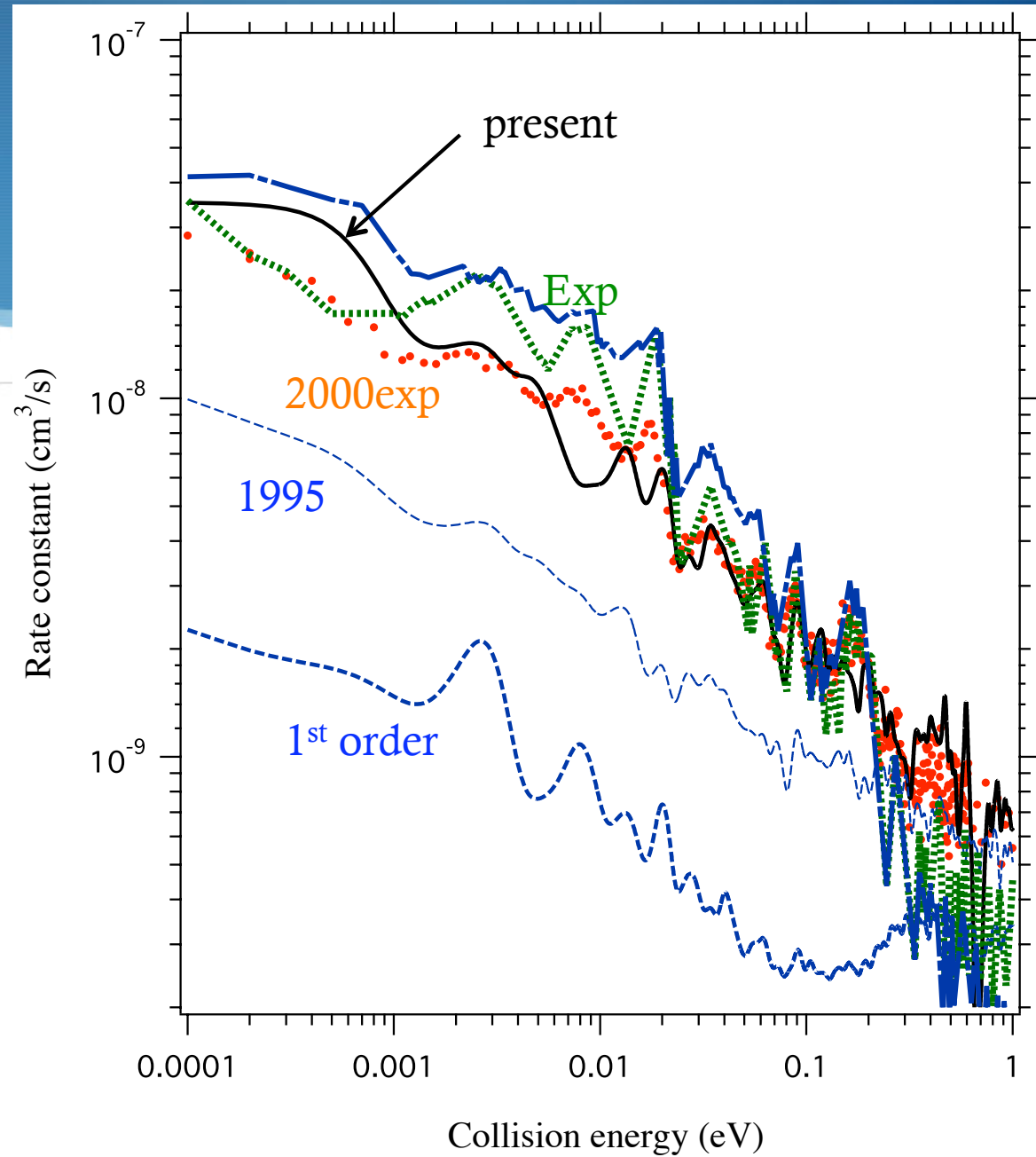
実験との比較 (H₂, Zande et al)

前回の調査 $\nu=0, N=0$



取り扱いによる差(HD)

HD⁺(v=0) DR, 300K rotaional temperature



HD⁺($\nu=0$)解離性再結合

回転温度300K

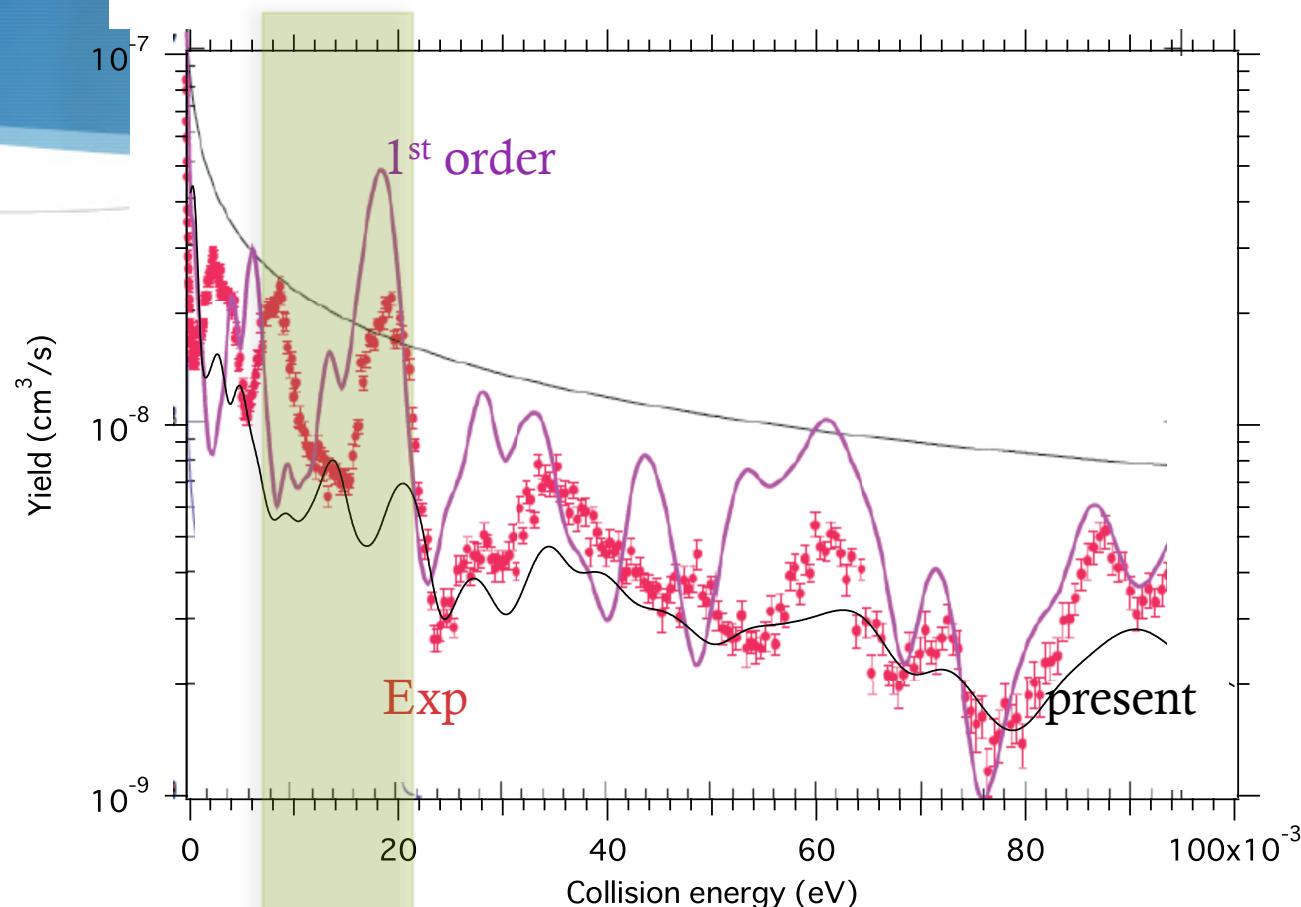
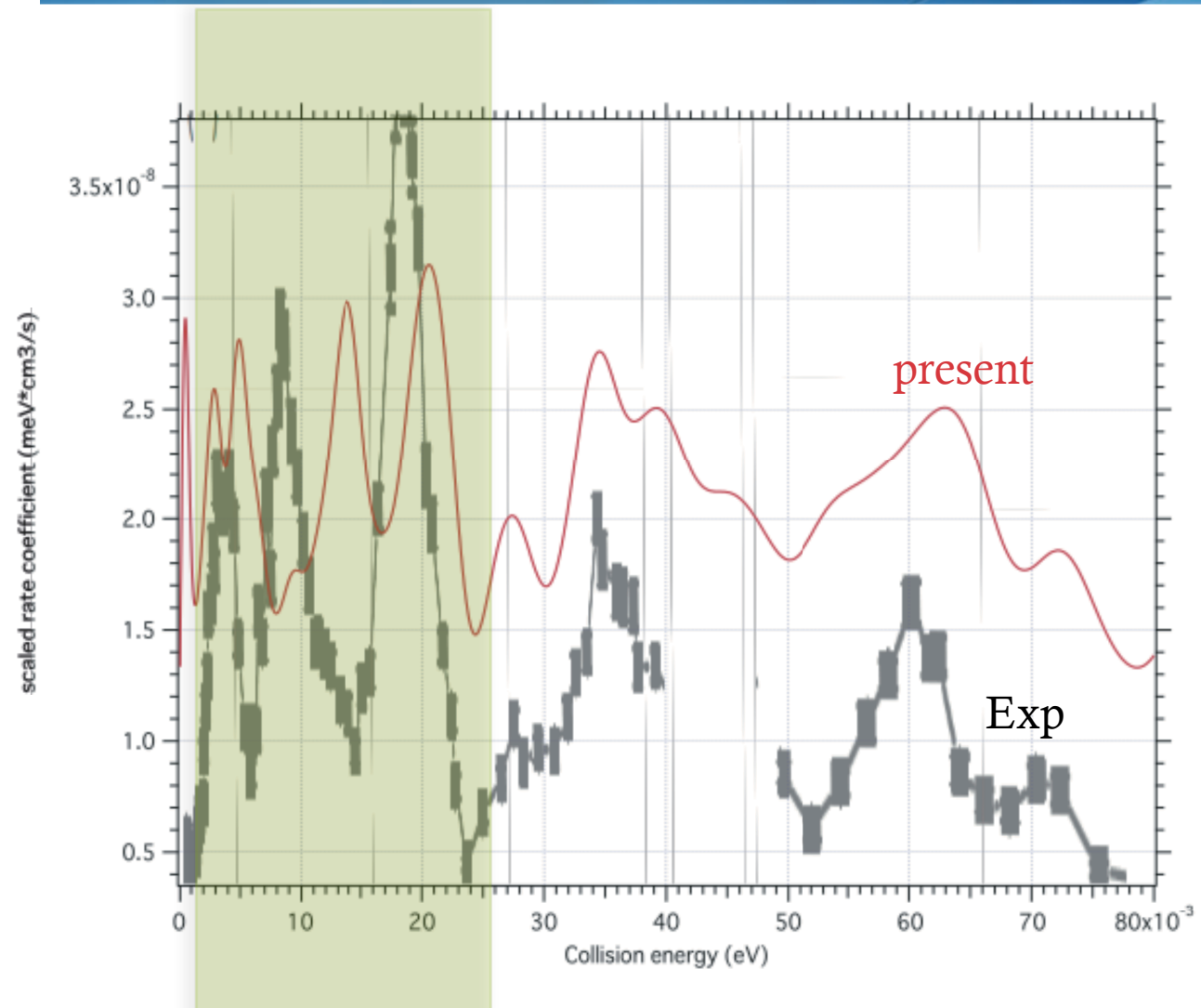


図 2.5: HD⁺($\nu = 0$) の解離性再結合 Yield (単色反応速度係数)。低い実線 (黒): 本計算, ドット (赤, エラーバー付き): 実験 [15], 実線 (赤): 一次摂動計算 [15], 高い実線 (黒): 直接過程 [15]。計算値は, 回転エネルギー 300K, ビーム軸方向熱揺らぎ 0.5meV, 直角方向 0.02meV で畳み込んである。

断面積×衝突エネルギー



膨大なデータ

解離性再結合

振動状態 0-6 (7)

回転状態 0-10 (11)

組み合わせ: 77 の

エネルギー依存断面積

振動遷移

振動状態 0-16 (17)

組み合わせ: $17C2 = 272$

エネルギー依存断面積

電子データでの利用が不可欠

データ形式の統一の問題 : tag word & num. data

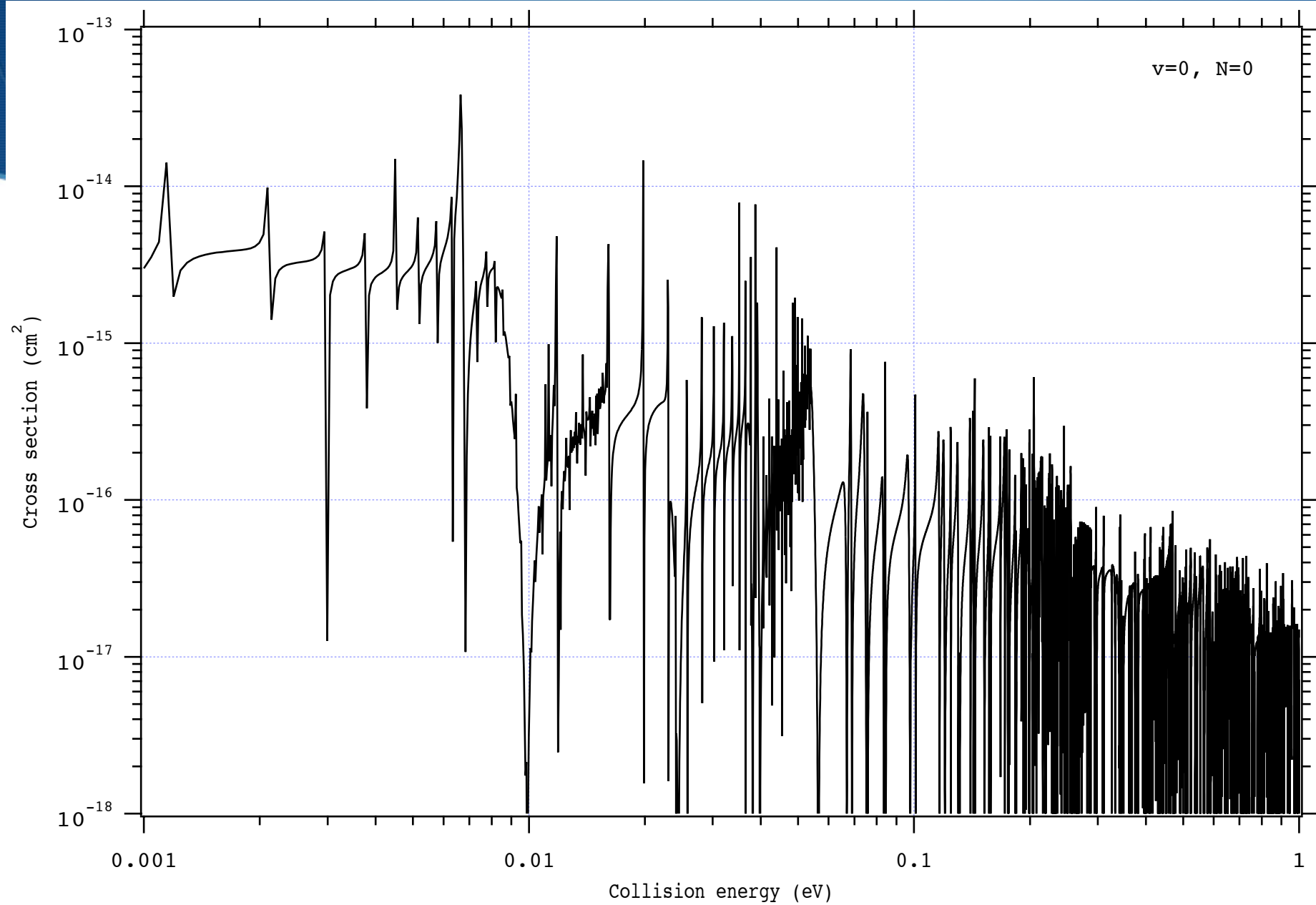


Fig. 24 @DR of $\text{HD}^+(v, N)$

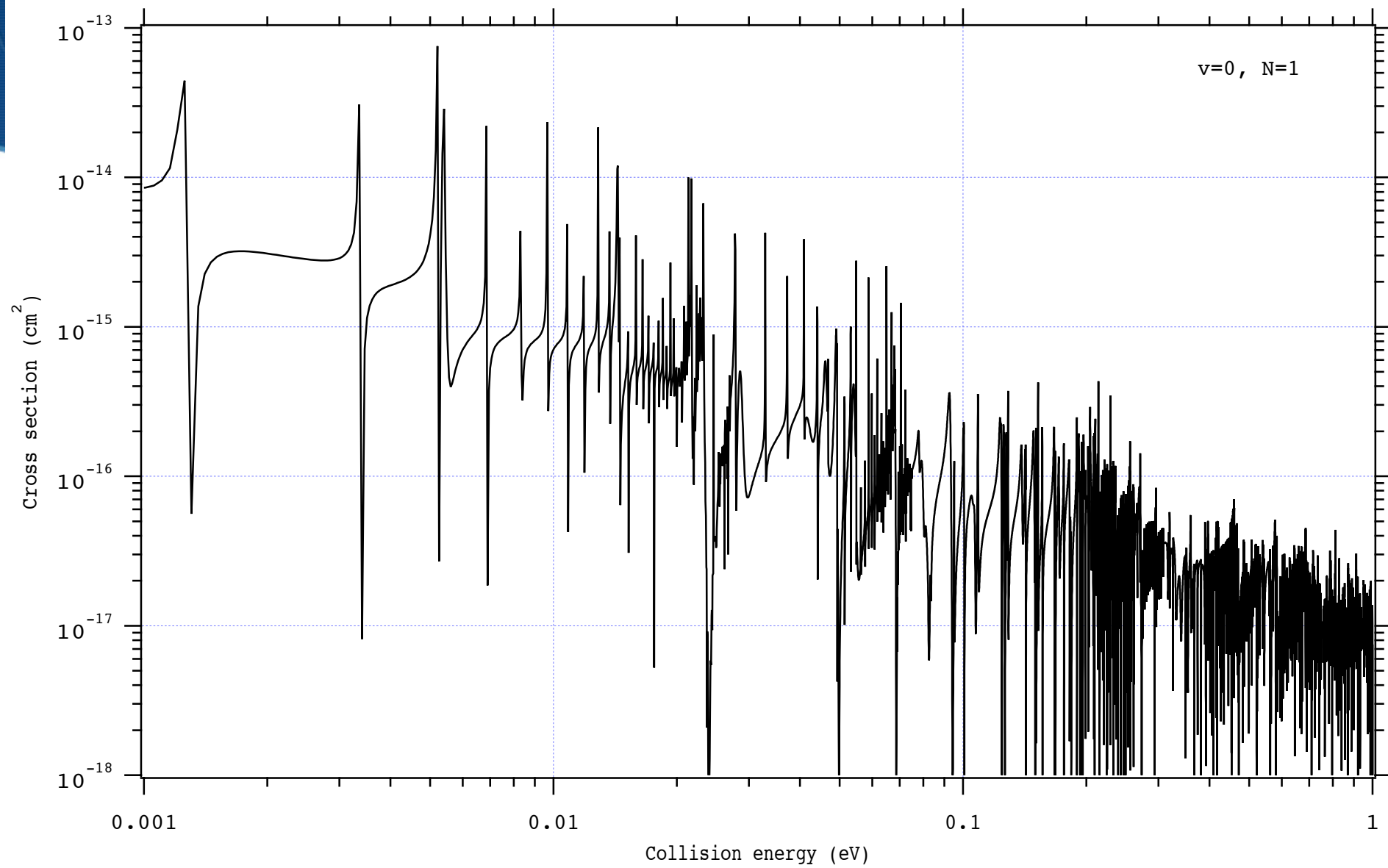


Fig. 25 QDR of $\text{HD}^+(v, N)$

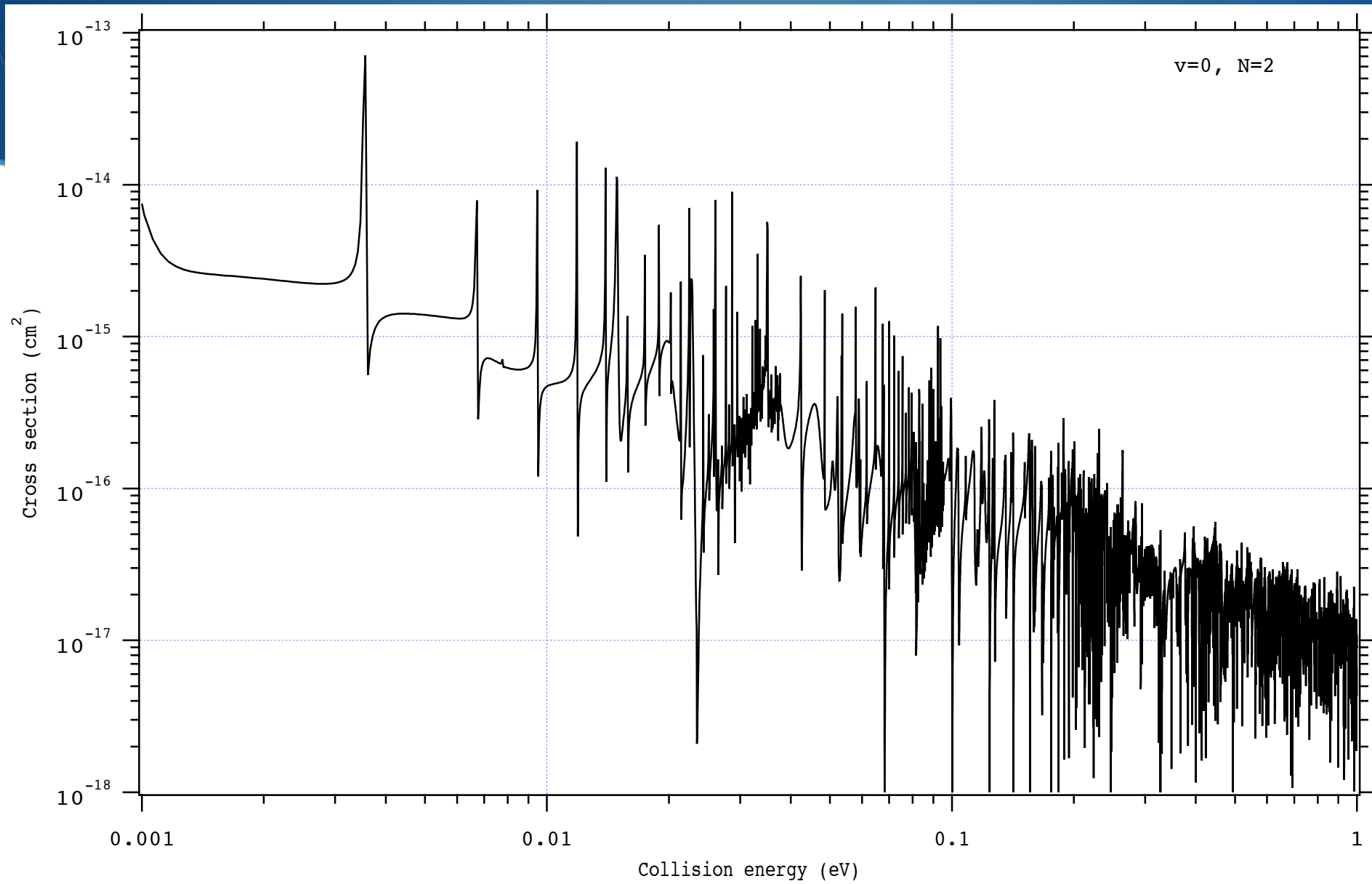


Fig.26 σ DR of HD⁺(v, N)

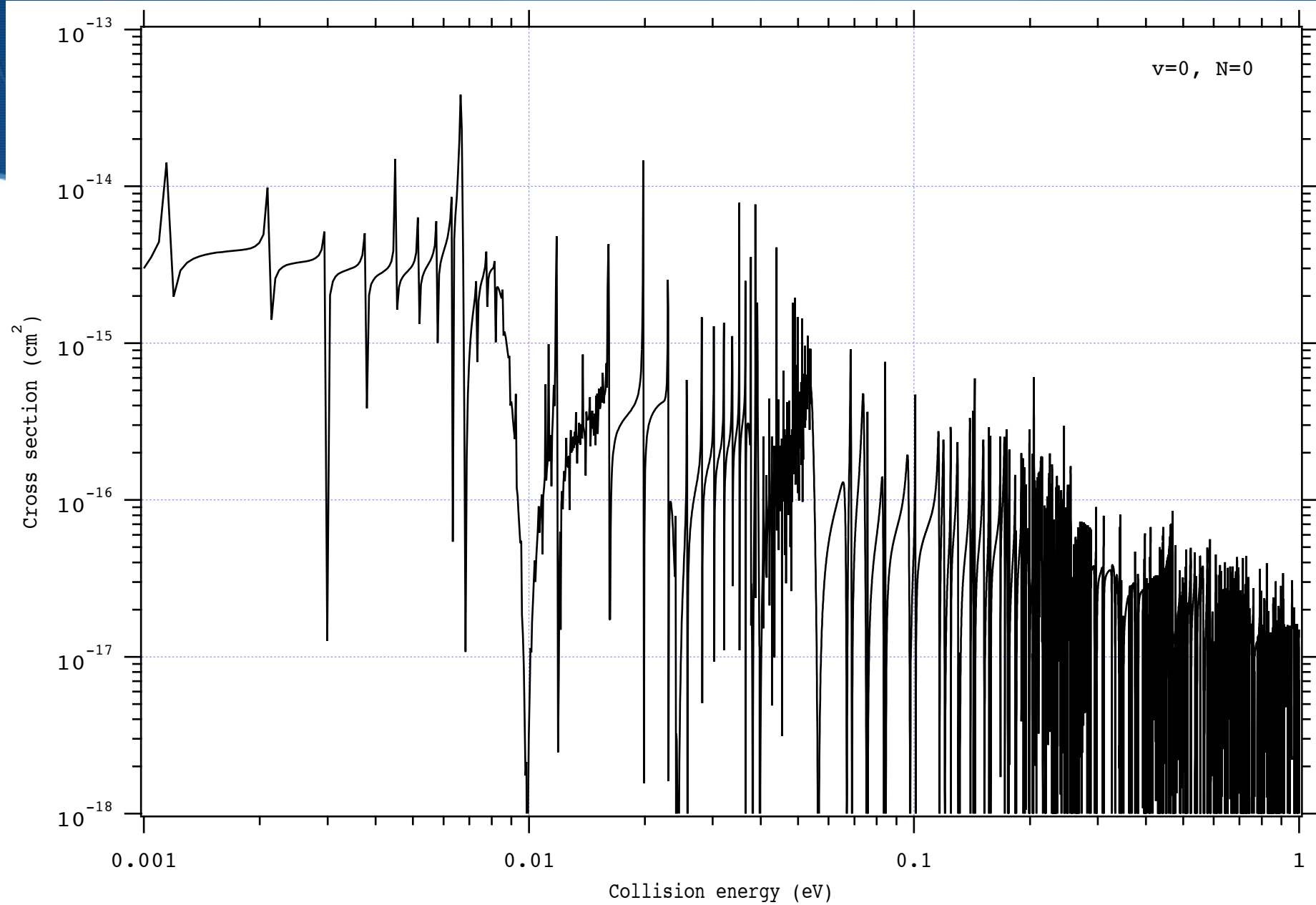


Fig. 24 @DR of $\text{HD}^+(v, N)$

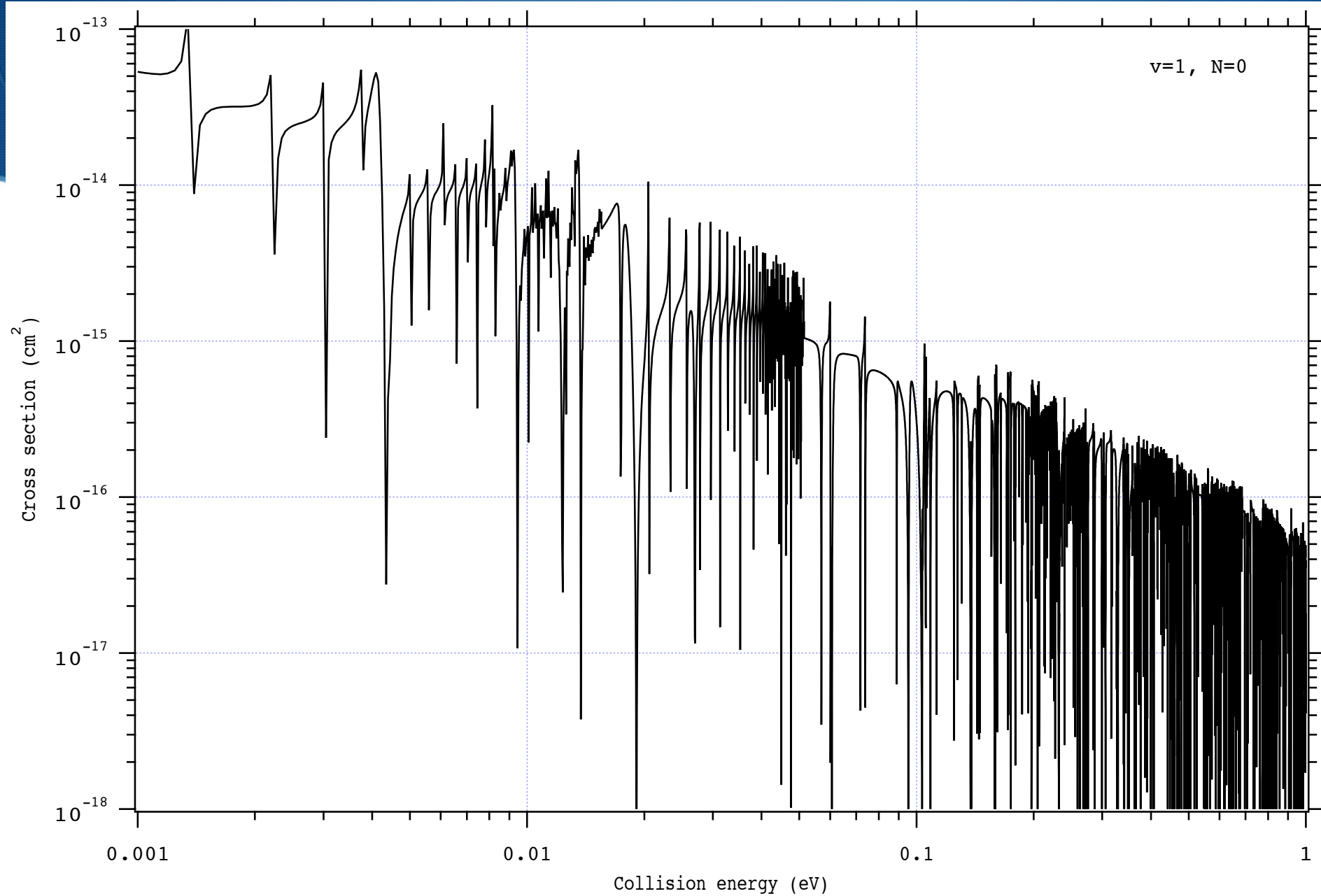


Fig. 35 σ_{DR} of $\text{HD}^+(v, N)$

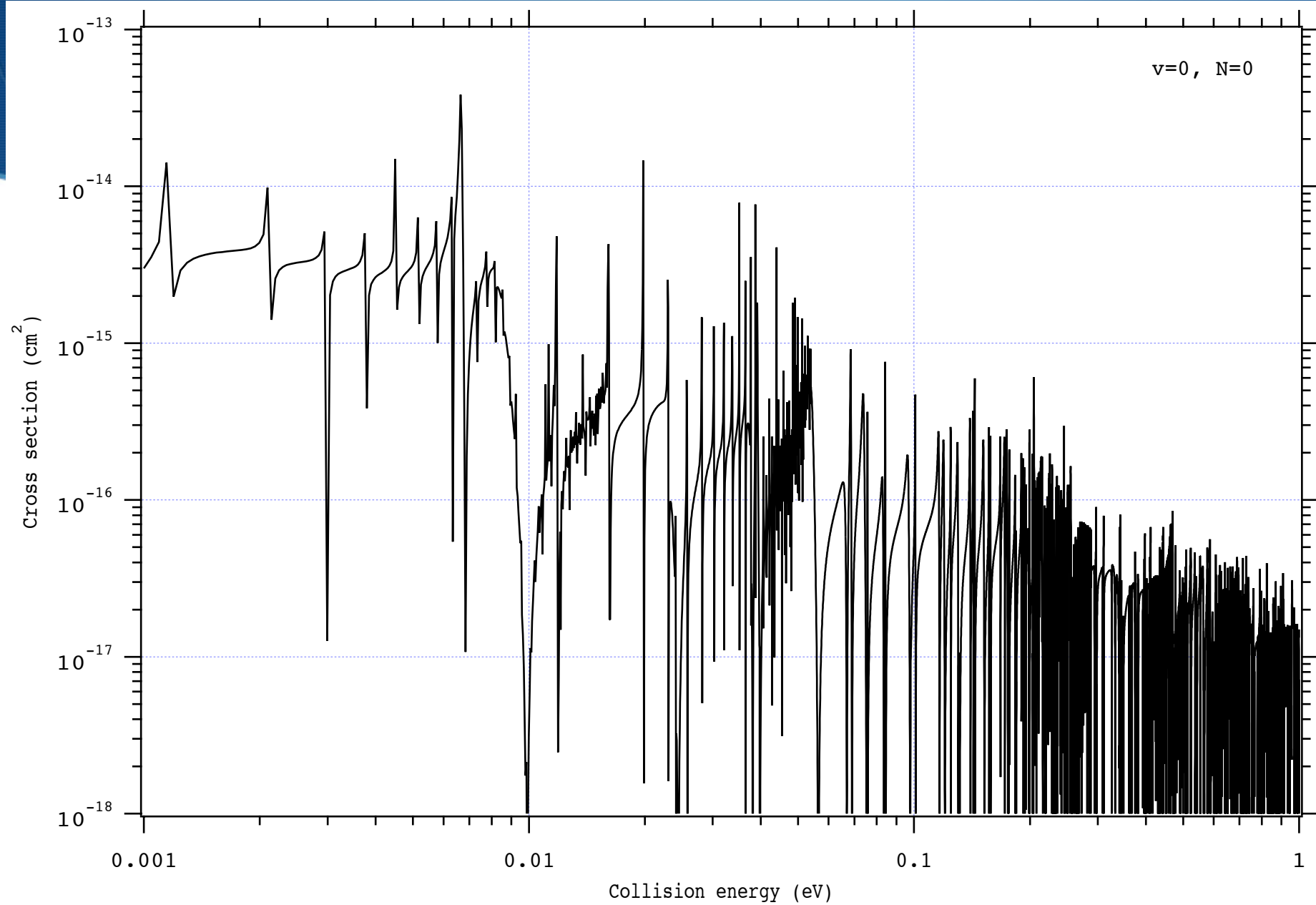


Fig. 24 @DR of $\text{HD}^+(v, N)$

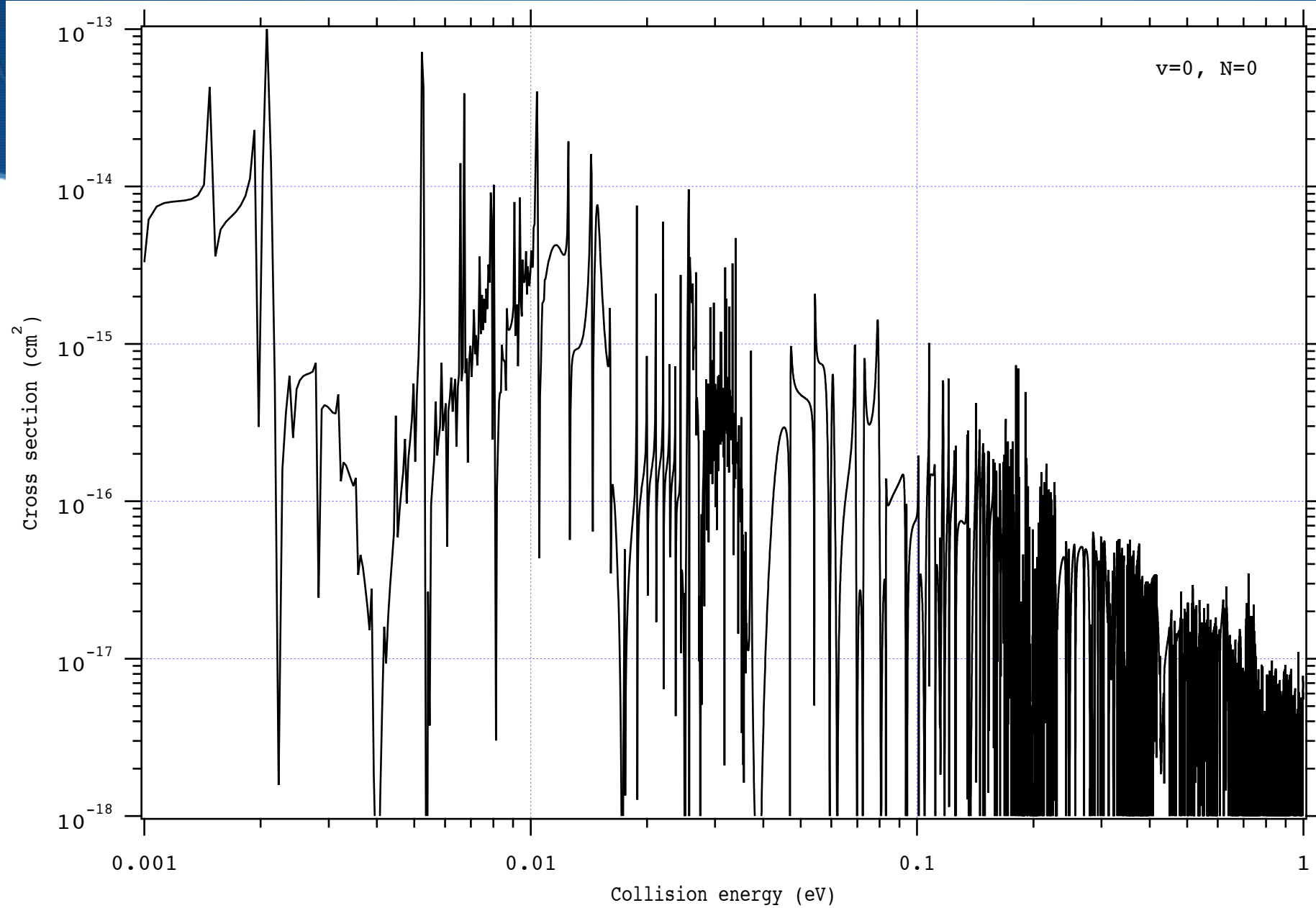


Fig. 76 σ_{DR} of $D_2^+(v, N)$

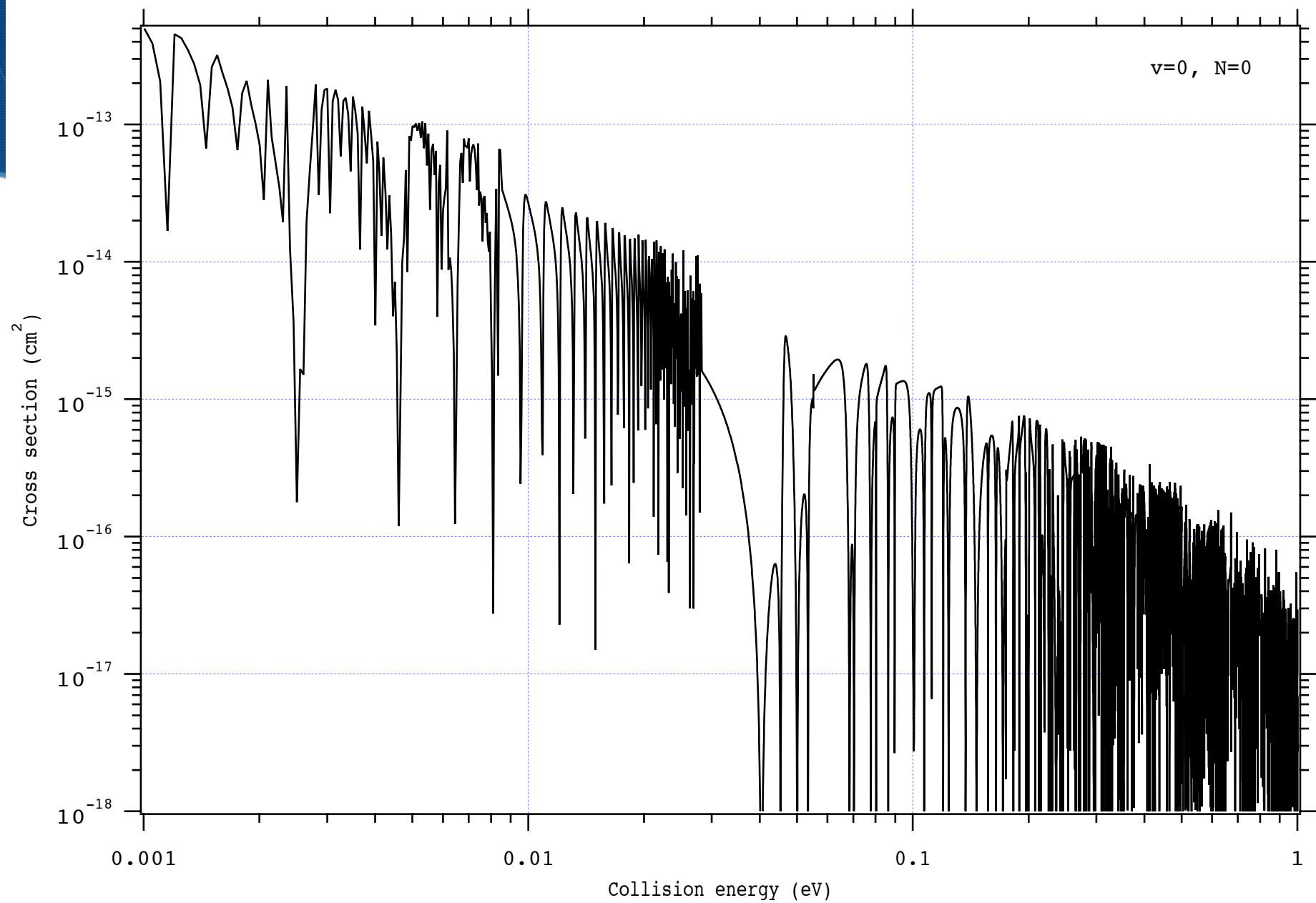


Fig.99 σ_{DR} of $\text{DT}^+(v, N)$

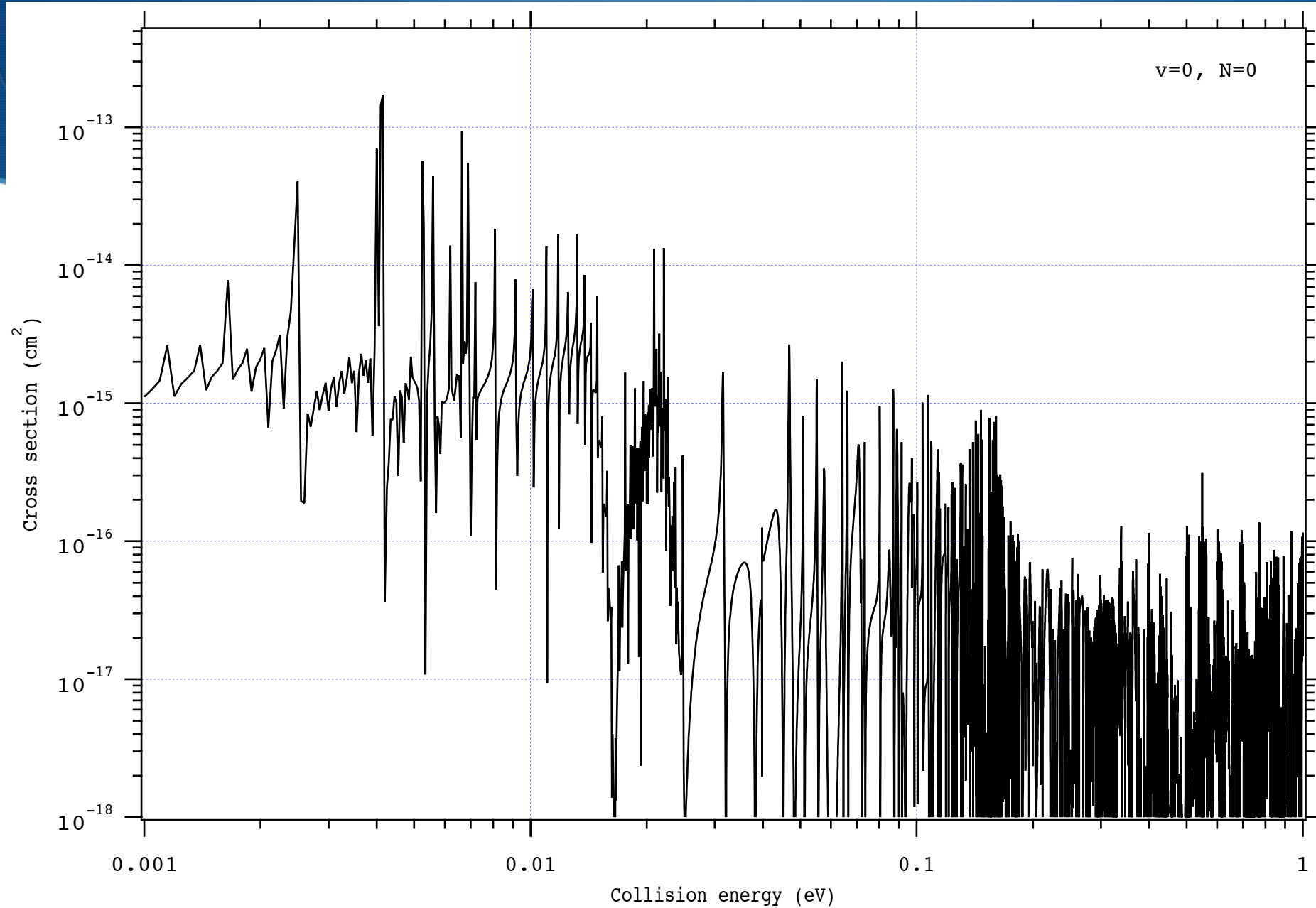


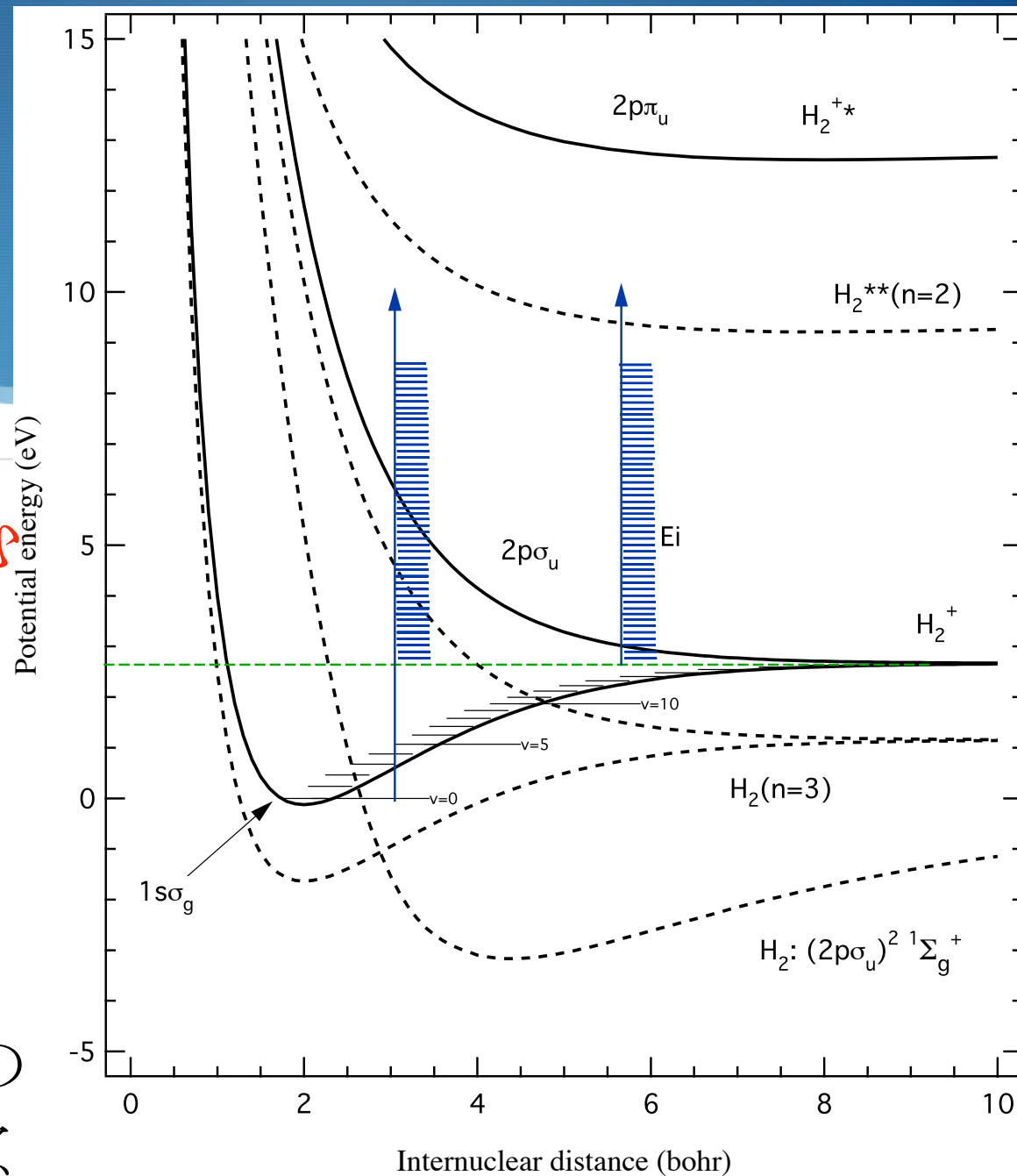
Fig.122 σ_{DCS} of $T_2^+(v, N)$

2 電子励起 Rydberg状態

解離状態を含む
量子欠損理論

振動状態のように
解離状態を加える

寄与の大きな 5 つの
Rydberg 系列を考慮



閉じた解離チャンネル CDC

エネルギー保存を満たさない解離状態と
Rydberg状態の組み合わせ



漸近領域で閉じたチャンネルとなる
(量子欠損理論)

Fig. 001 n-distribution in $\text{HD}^+(\nu^+) + e \rightarrow \text{H} + \text{D}(n)$

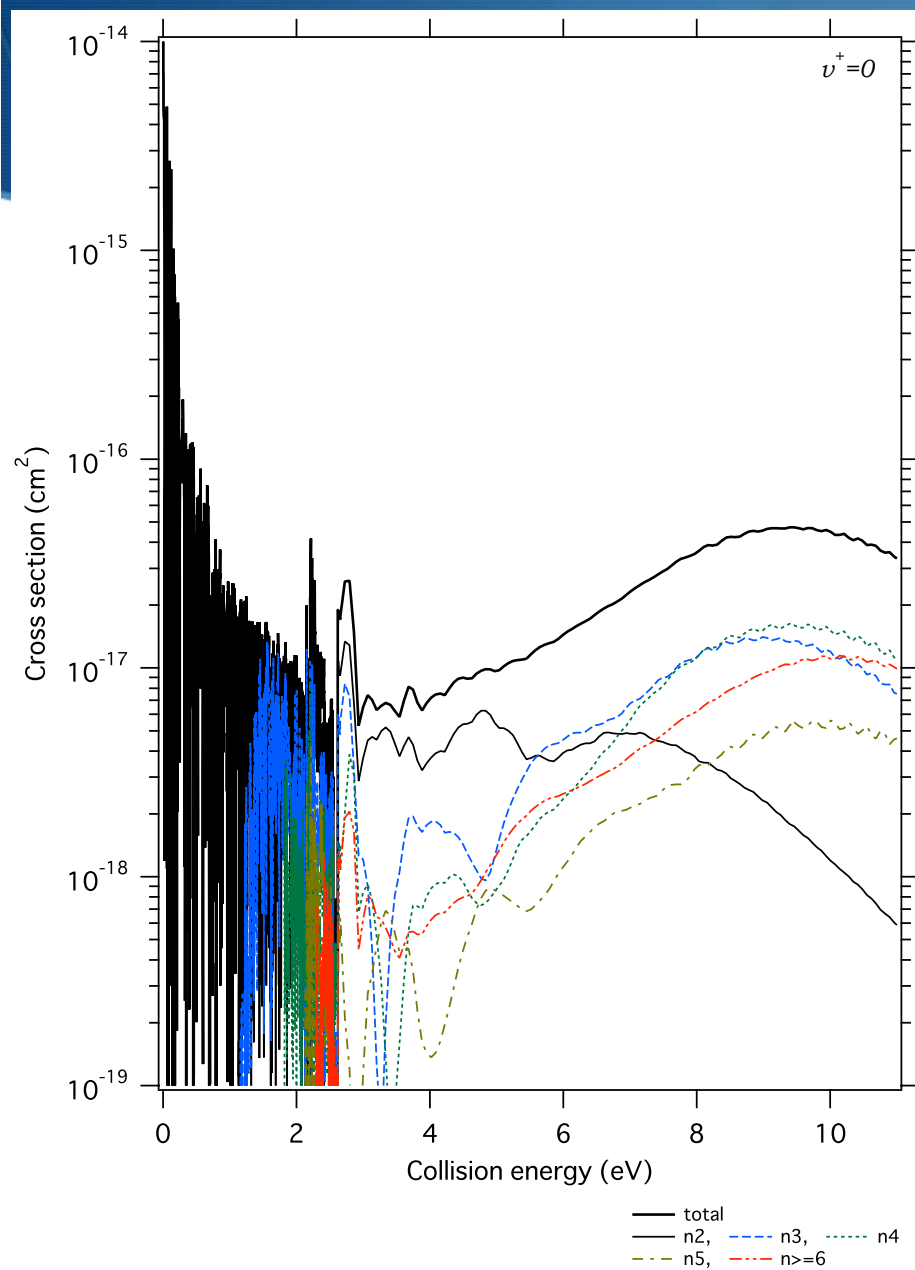


Fig. 002 n-distribution in $\text{HD}^+(\nu^+) + e \rightarrow \text{H} + \text{D}(n)$

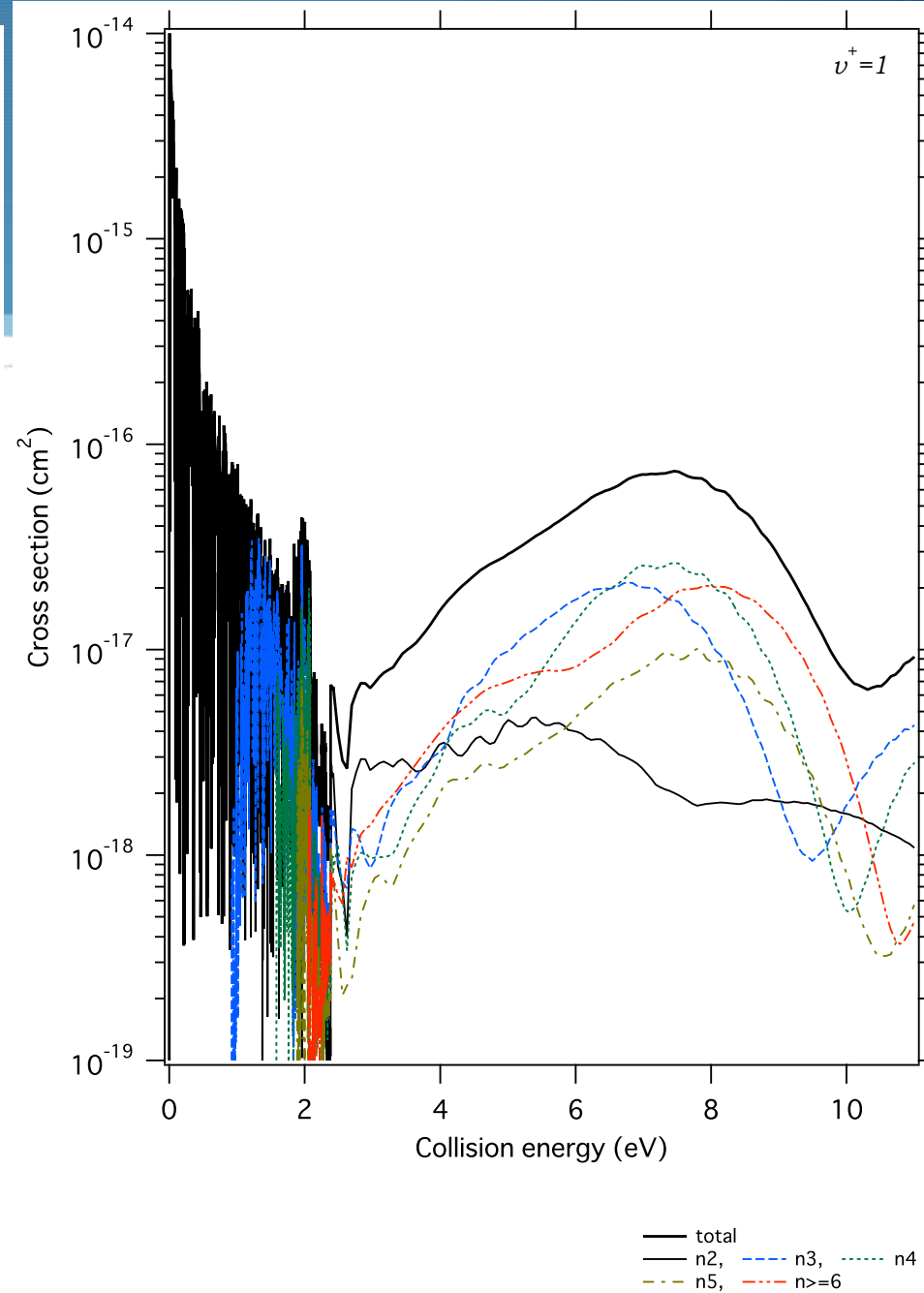


Fig. 68 n-distribution in $D_2^+(v^+) + e \rightarrow D + D(n)$

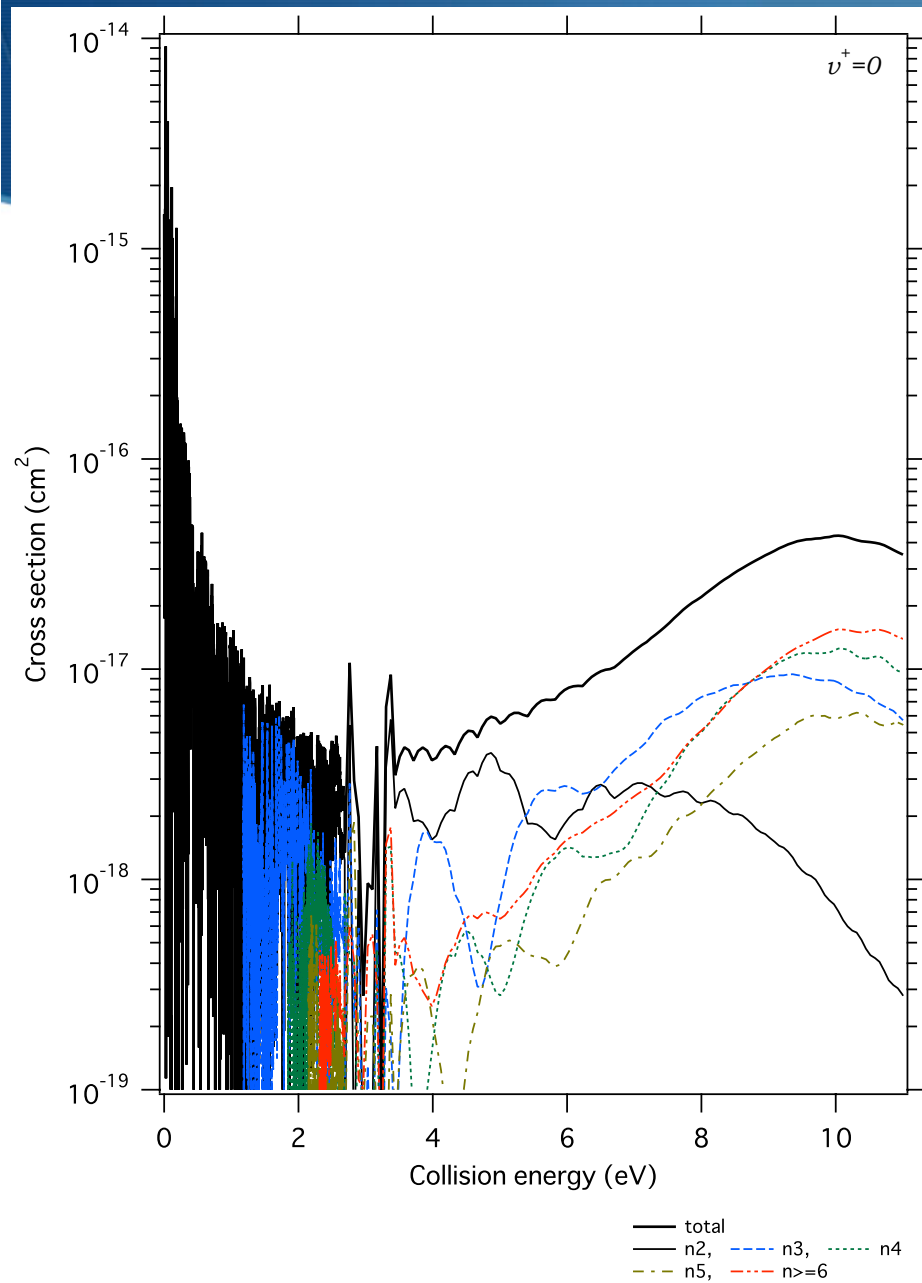


Fig. 69 n-distribution in $D_2^+(v^+) + e \rightarrow D + D(n)$

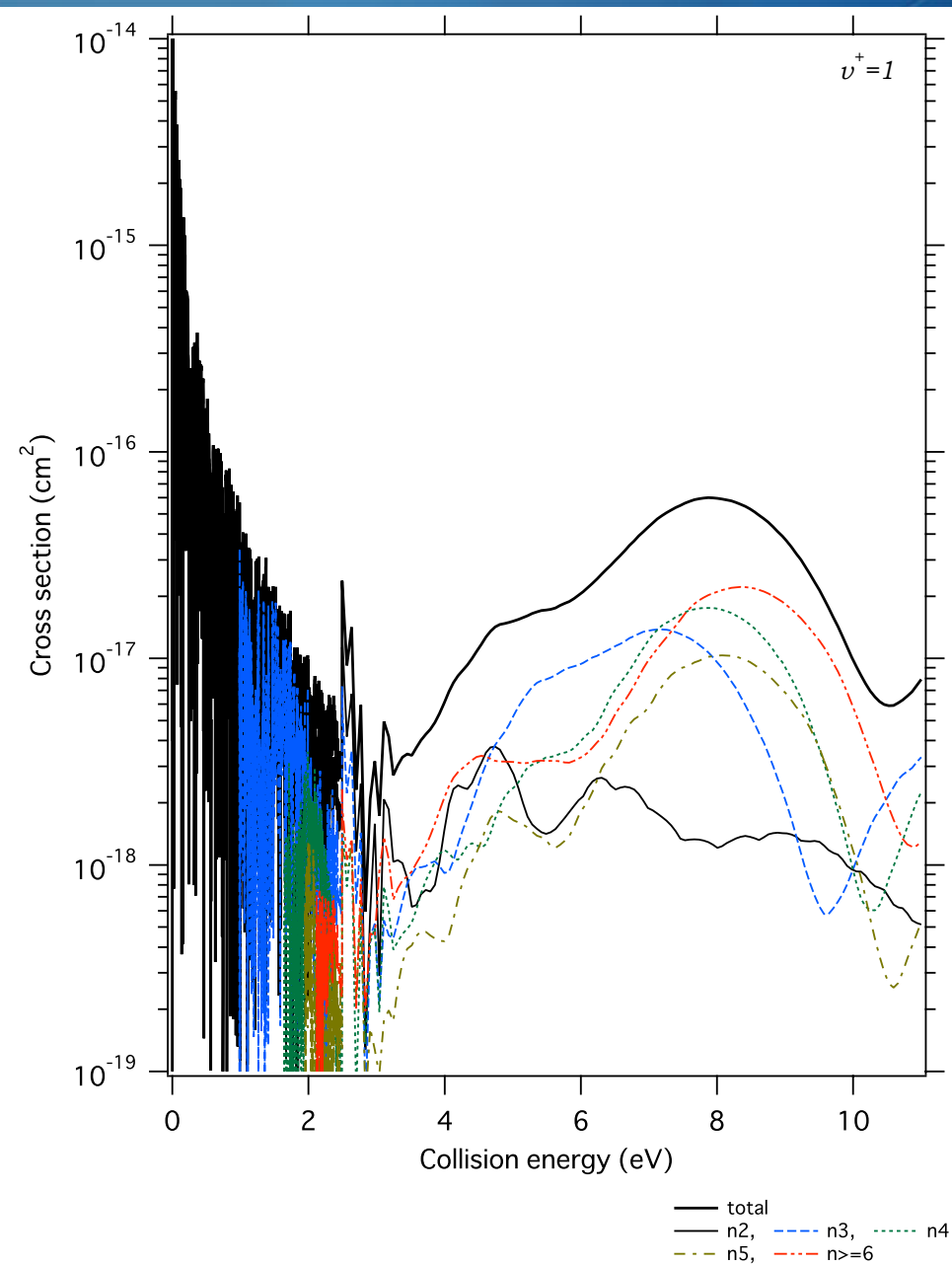


Fig. 91 @n-distribution in $DT^+(\nu^+) + e \rightarrow D + T(n)$

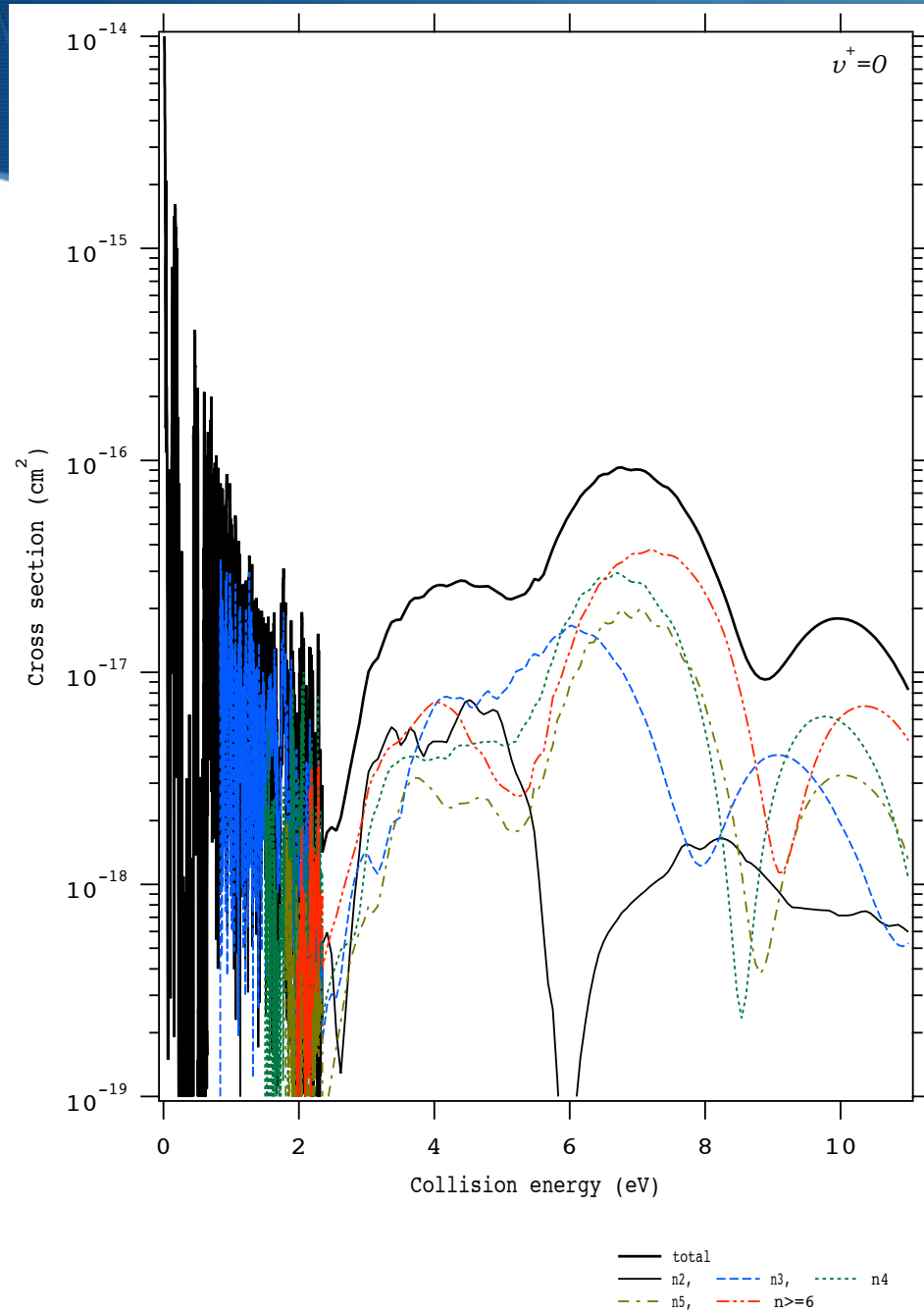


Fig. 92 @n-distribution in $DT^+(\nu^+) + e \rightarrow D + T(n)$

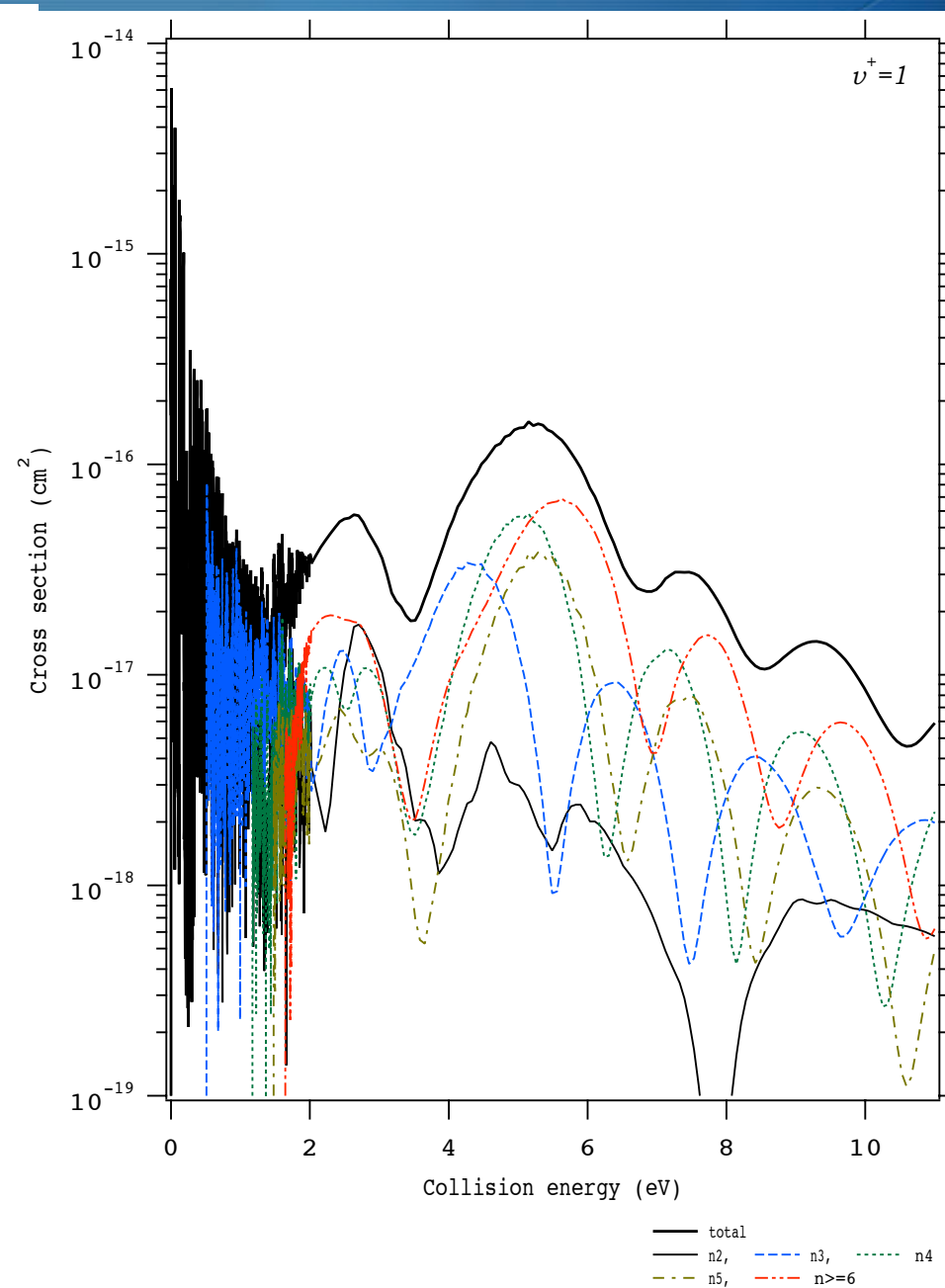


Fig. 114 n-distribution in $T_2^+(v^+) + e \rightarrow T + T(n)$

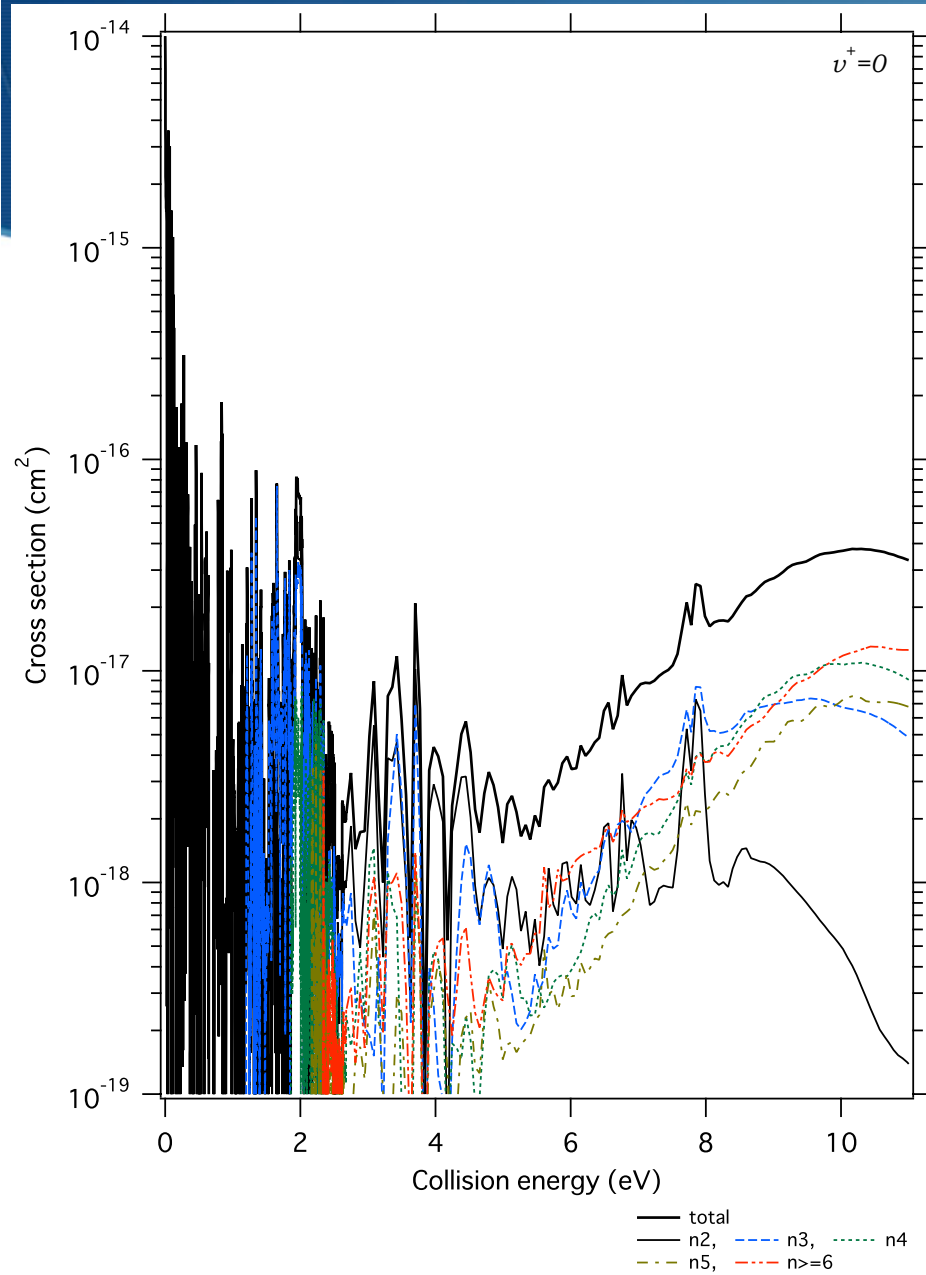


Fig. 115 n-distribution in $T_2^+(v^+) + e \rightarrow T + T(n)$

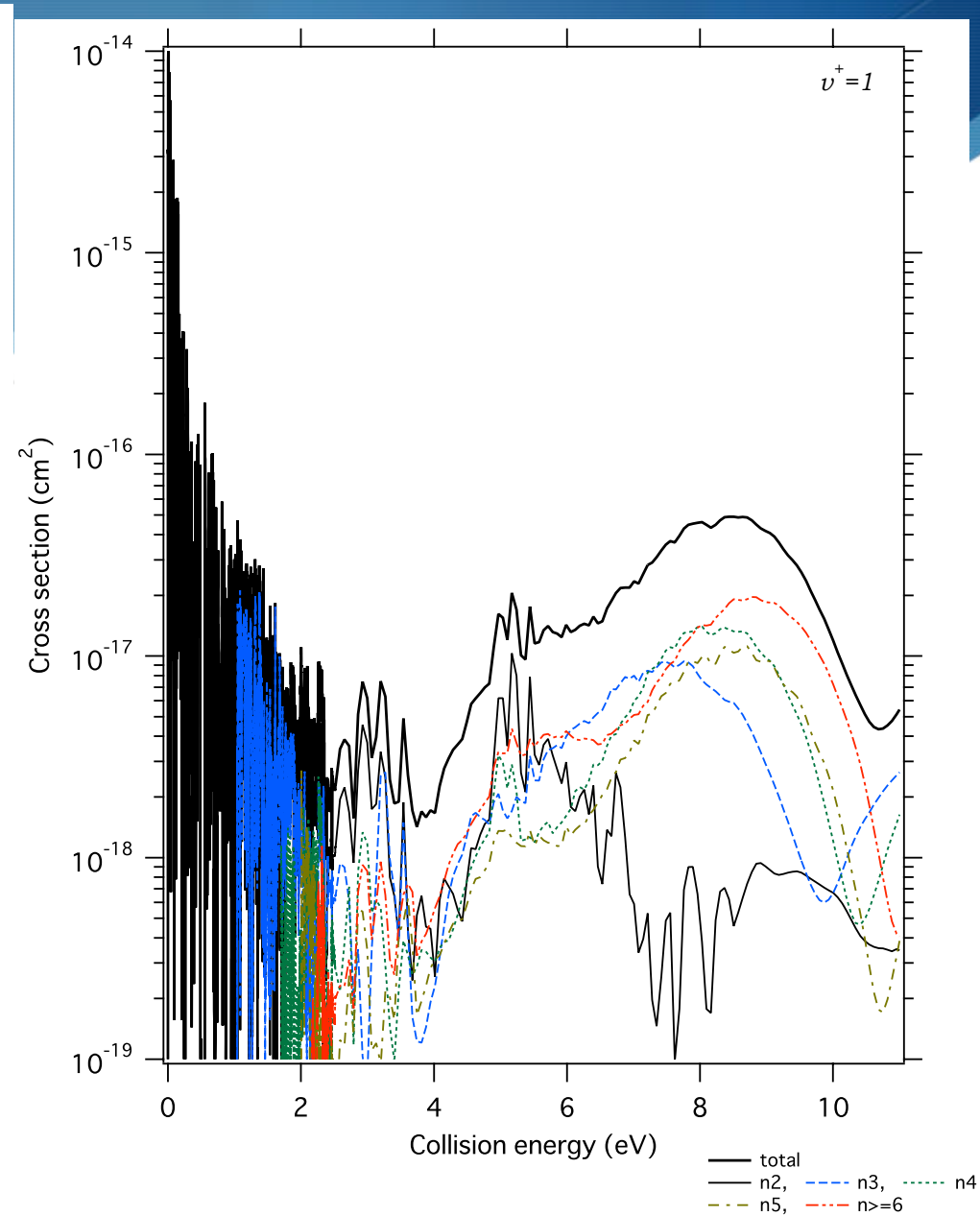


Fig. 020 Dessociative excitation cross section of HD^+

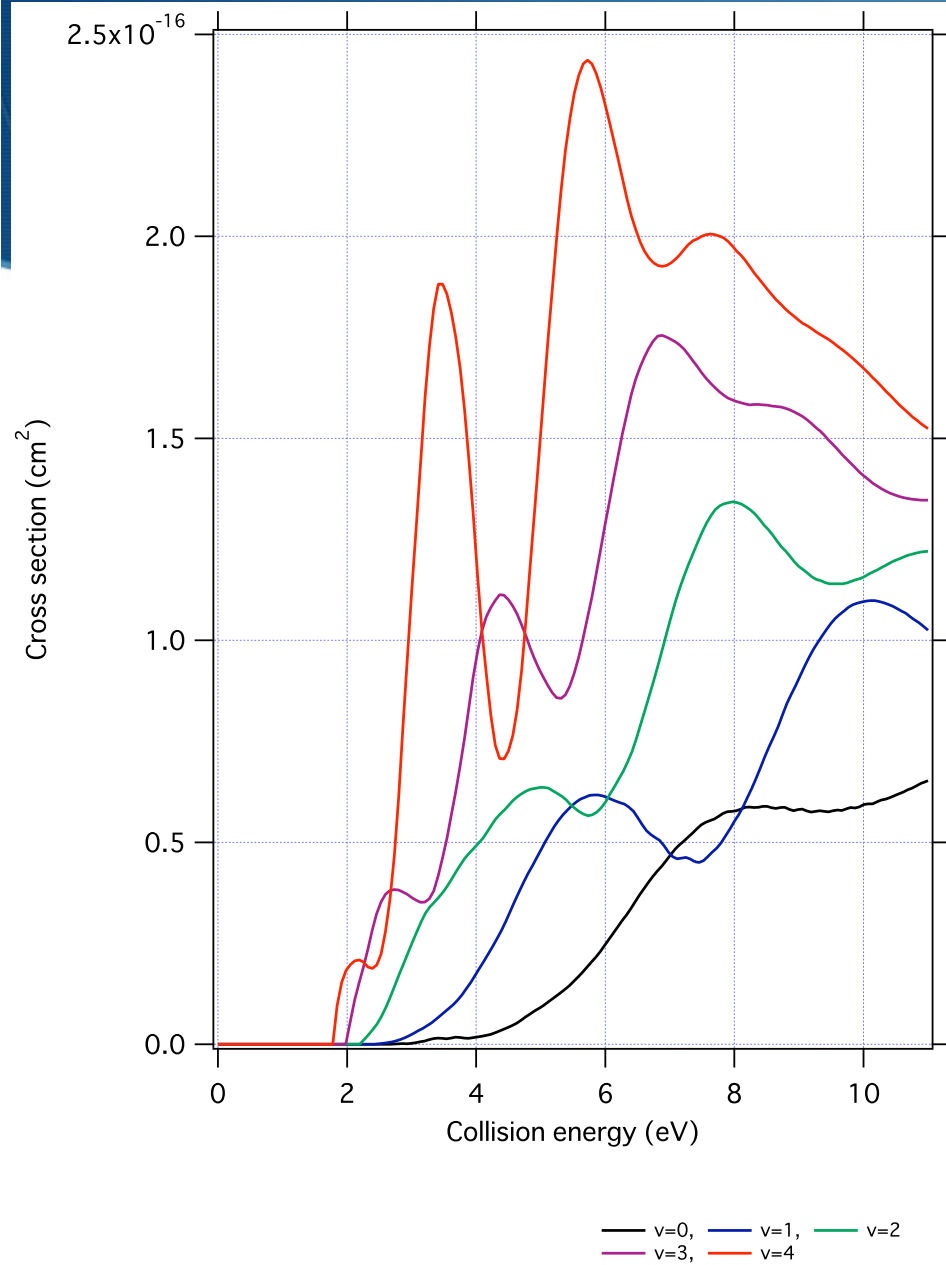


Fig. 022 Dessociative excitation cross section of HD^+

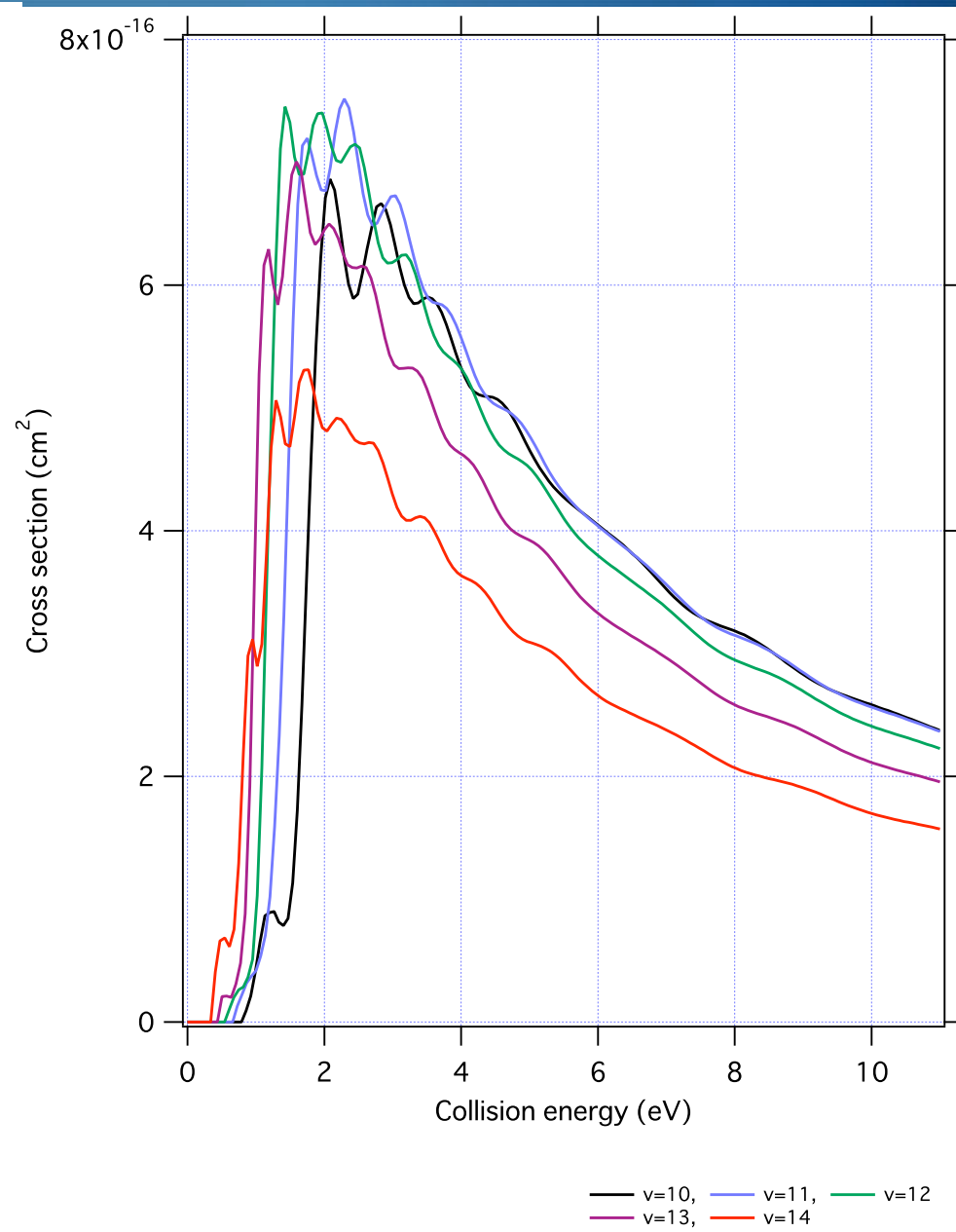


Fig. 74 @Dissociative excitation cross section of D_2^+

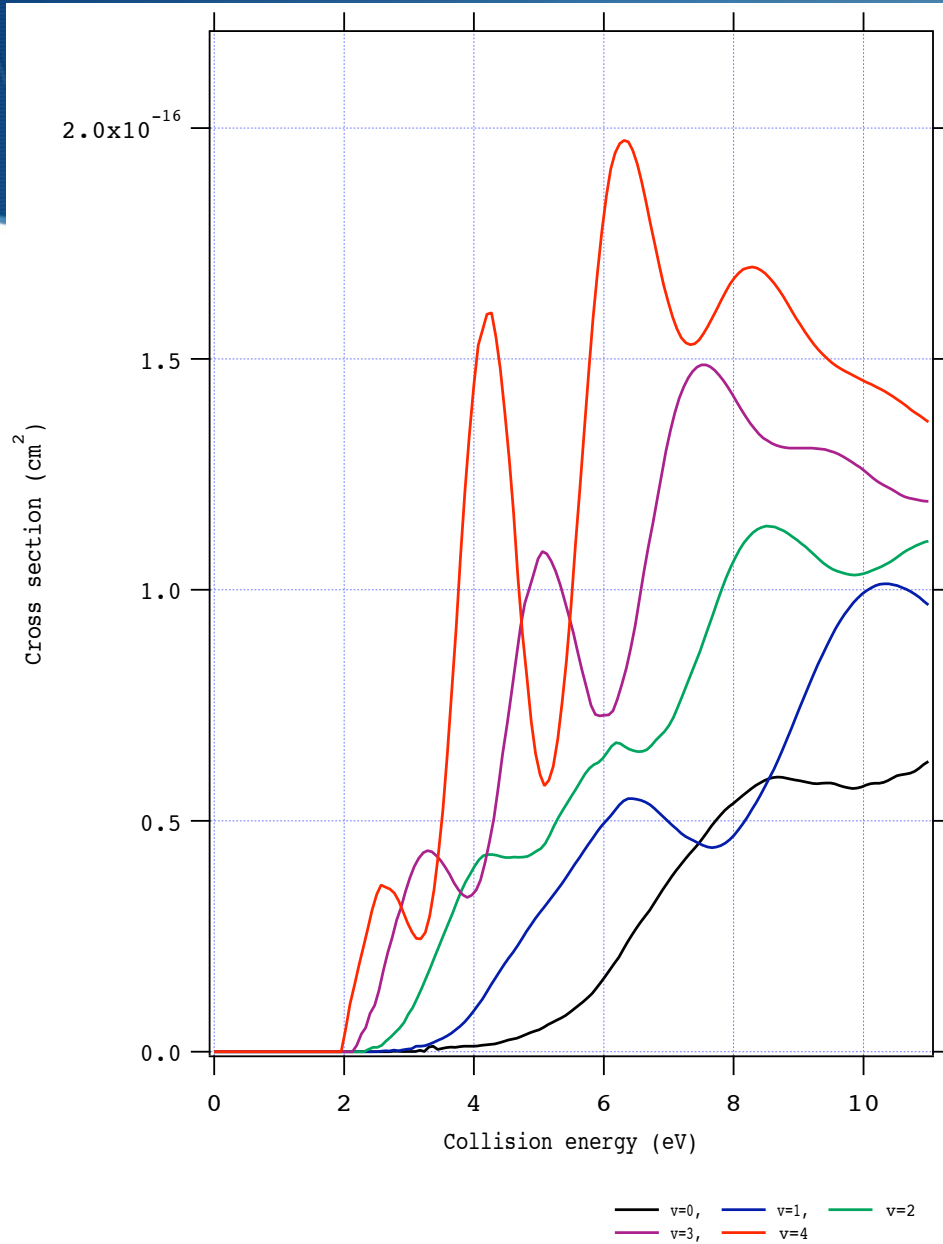


Fig. 97 @Dissociative excitation cross section of $DT^+(v)$

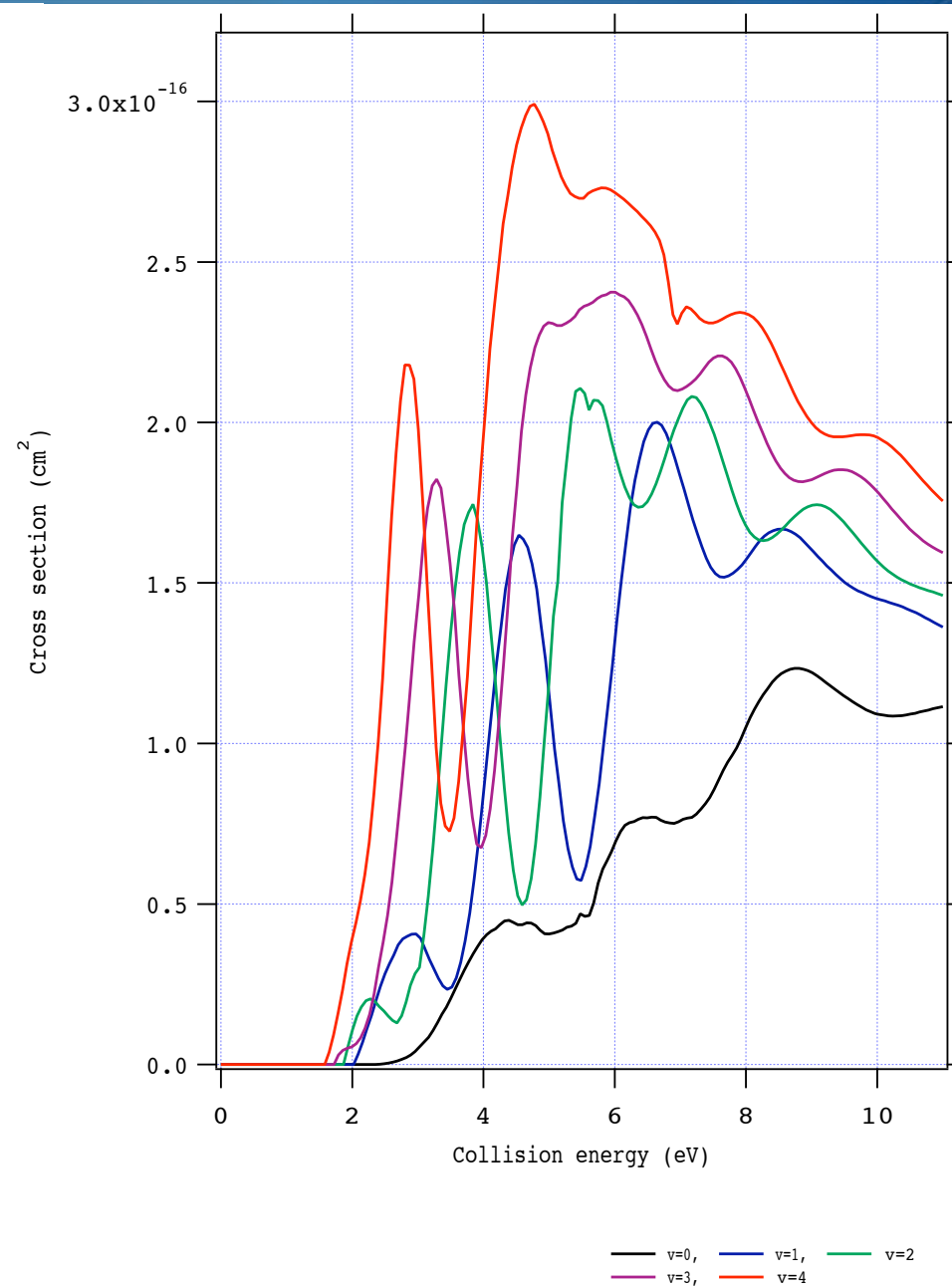
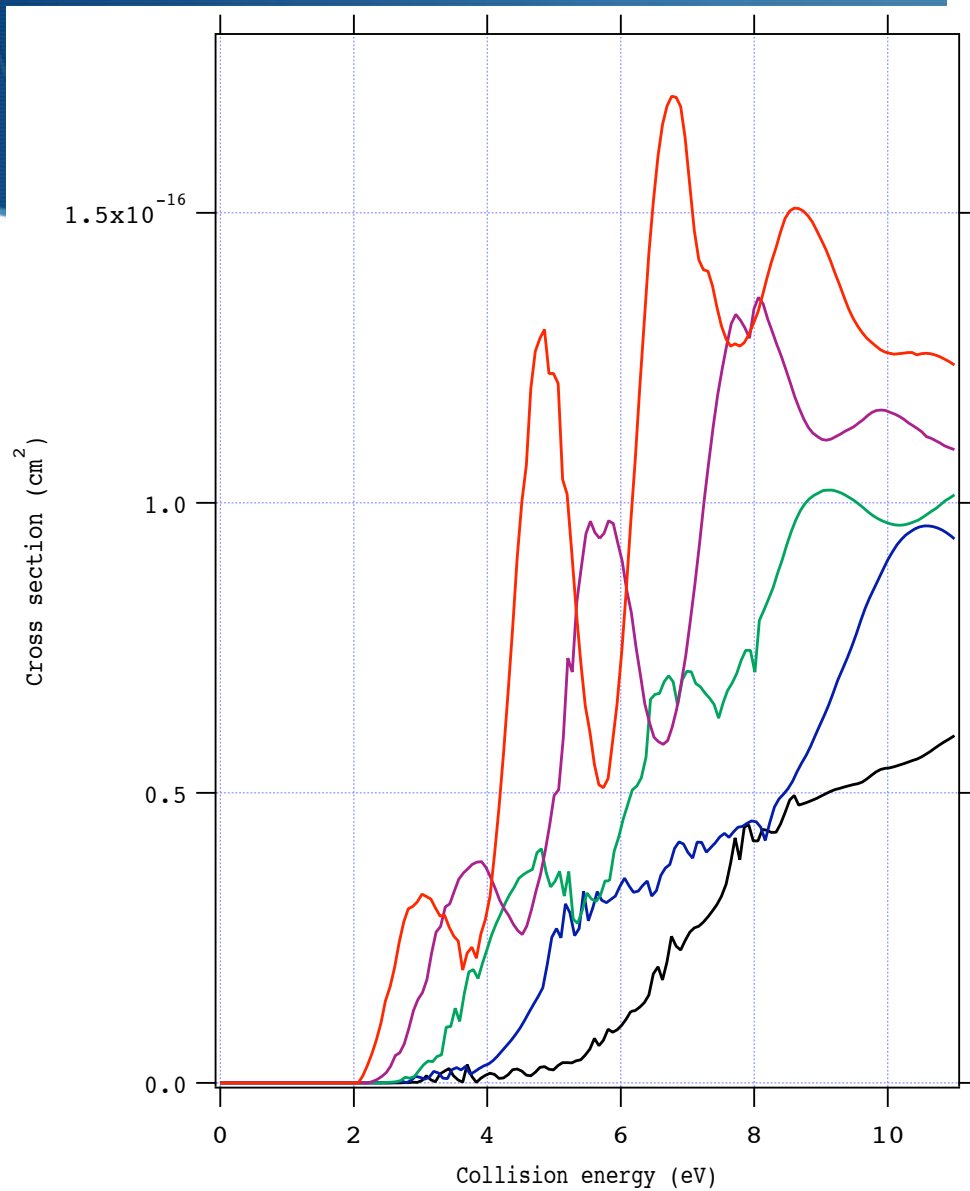
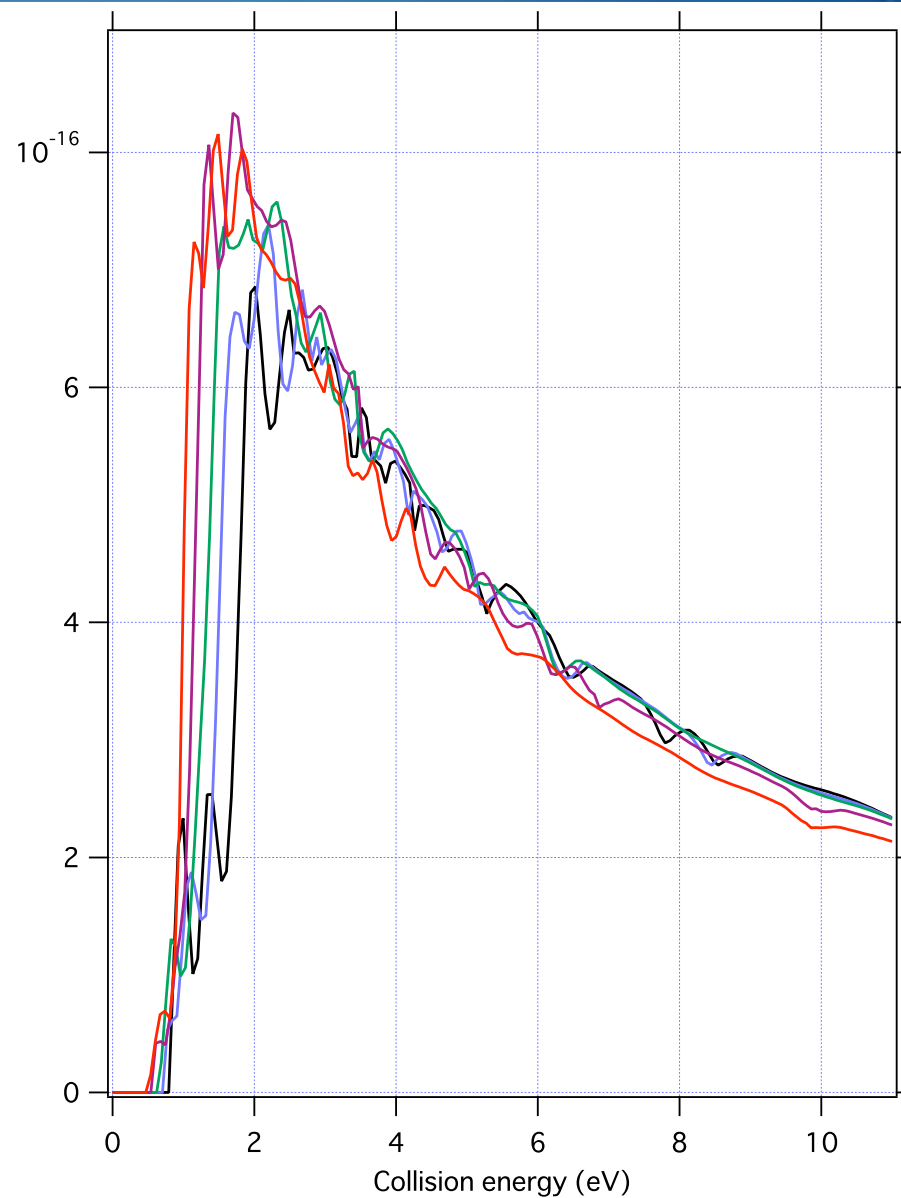


Fig.120 @Dessociative excitation cross section of $T_2^+(v)$

Dessociative excitation cross section of TT^+



— $v=0$, — $v=1$, — $v=2$
— $v=3$, — $v=4$



— $v=15$, — $v=16$
— $v=17$, — $v=18$
— DEV19

次の目標

- 衝突エネルギー11 eV以上
- 信頼性の向上
- H_3^+

IAEAのCRPと共同歩調