



# 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23年3月11日(金)  
航空会館

## 平成22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  
(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

- ・ 原子・分子・イオンの衝突に関する調査 (原子分子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にも利用)

### 3 委託研究の内容

- ・ 炭素多価イオン( $C^{4+}$ ,  $C^{6+}$ )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		10
4	( $C^{4+} + H(2l)$ ) 衝突系の電荷移行過程	12
4.1	電子状態の計算	12
4.2	ポテンシャルエネルギー	12
4.3	電荷移行断面積	17
4.4	電荷移行の反応機構 - 量子数 $n$ ごとの存在確率の核間距離依存性	25
4.5	電荷移行の反応機構 - 量子数 $nl$ ごとの存在確率の核間距離依存性	32
5	( $C^{6+} + H(2l)$ ) 衝突系の電荷移行過程	41
5.1	電子状態の計算	41
5.2	ポテンシャルエネルギー	44
5.3	電荷移行断面積	45
5.4	電荷移行の反応機構 - 量子数 $n$ ごとの存在確率の核間距離依存性	62
5.5	電荷移行の反応機構 - 量子数 $nl$ ごとの存在確率の核間距離依存性	69
6	研究成果概要とこれからの研究計画	78
	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、衝突粒子、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。

これまで対象とした衝突系：

( $\text{Be}^{2+}(1s^2)$ ,  $\text{Be}^{3+}(1s)$ ,  $\text{Be}^{4+}$ ,  $\text{B}^{3+}(1s^2)$ ,  $\text{B}^{5+}$ ,  $\text{C}^{4+}(1s^2)$ ,  $\text{C}^{6+} + \text{H}^*(2s, 2p)$ )

(19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」でまとめ)

→ 問題点が判明 シュタルクミキシング

19年度委託研究題目：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)

## 19年度まで

「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」を行ってきた  
 $(\text{Be}^{2+}(1s^2), \text{Be}^{3+}(1s), \text{Be}^{4+}, \text{B}^{3+}(1s^2), \text{B}^{5+}, \text{C}^{4+}(1s^2), \text{C}^{6+} + \text{H}^*(2s, 2p))$

最も正確な断面積を得る理論的方法：緊密結合方程式を解く

標的が励起水素原子の場合：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  $2p_0$  状態が混じる。これまで軽元素イオンによる  $2s$ ,  $2p$  状態にある水素原子のからの電荷移行断面積を計算してきたつもりが、実はシュタルクミキシングした水素原子からの電荷移行断面積を計算してきたことになる。

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ることは必要である。

## 20年度以降

有限の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

$R_{\max}$  が十分大きく、 $R = \infty$ から  $R = R_{\max}$  の領域では断熱近似の破れによる遷移は起こらず単に多価イオンの電荷による水素原子の  $2s$  状態、 $2p$  状態間のシュタルクミキシングが見かけ上遷移となって現れているだけの場合は我々の開発した方法は正しい。実際、 $R > R_{\max} = 42 \text{ au}$  で非断熱項による遷移は起こらないので、我々の近似は妥当と思われる。

$\text{Be}^{2+} + \text{H}(2l)$ 、 $\text{Be}^{3+} + \text{H}(2l)$  (一重項、三重項) の電荷移行断面積の計算

21年度： $\text{Be}^{4+} + \text{H}(2l)$ 、 $\text{C}^{4+}(1s^2) + \text{H}(2l)$  (予備計算)

22年度： $\text{C}^{4+}(1s^2) + \text{H}(2l)$ 、 $\text{C}^{6+} + \text{H}(2l)$  の電荷移行断面積の計算

## 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

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

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ：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

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

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

$$\vec{S}_i^k = \frac{1}{2} f_i(\vec{r}_k; R) \vec{r}_k \quad \because f_i(\vec{r}_k; R): \text{switching function}$$

## 2.4 遷移確率の計算

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

$$F_i(\vec{r}; R) = \exp \left[ i \sum_k \left\{ \frac{1}{2} f_i(\vec{r}_k; R) \vec{v} \cdot \vec{r}_k - \frac{1}{8} \int^t v^2 dt' \right\} \right]$$

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

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。

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

## 2.5 断面積の計算

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

遷移確率の計算の際の初期確率振幅を、有限な核間距離において  
シュタルクミキシングした $SP_+$ ,  $SP_-$  状態から  $H(2s)$ ,  $H(2p)$  状態へ変換

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

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

$\Sigma$ 状態

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

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

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

$\Pi$ 状態

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

- 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

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

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



# 4 (C<sup>4+</sup> + H(2l)) 衝突

## 4.1 電子状態の計算

## 4.2 ポテンシャルエネルギー

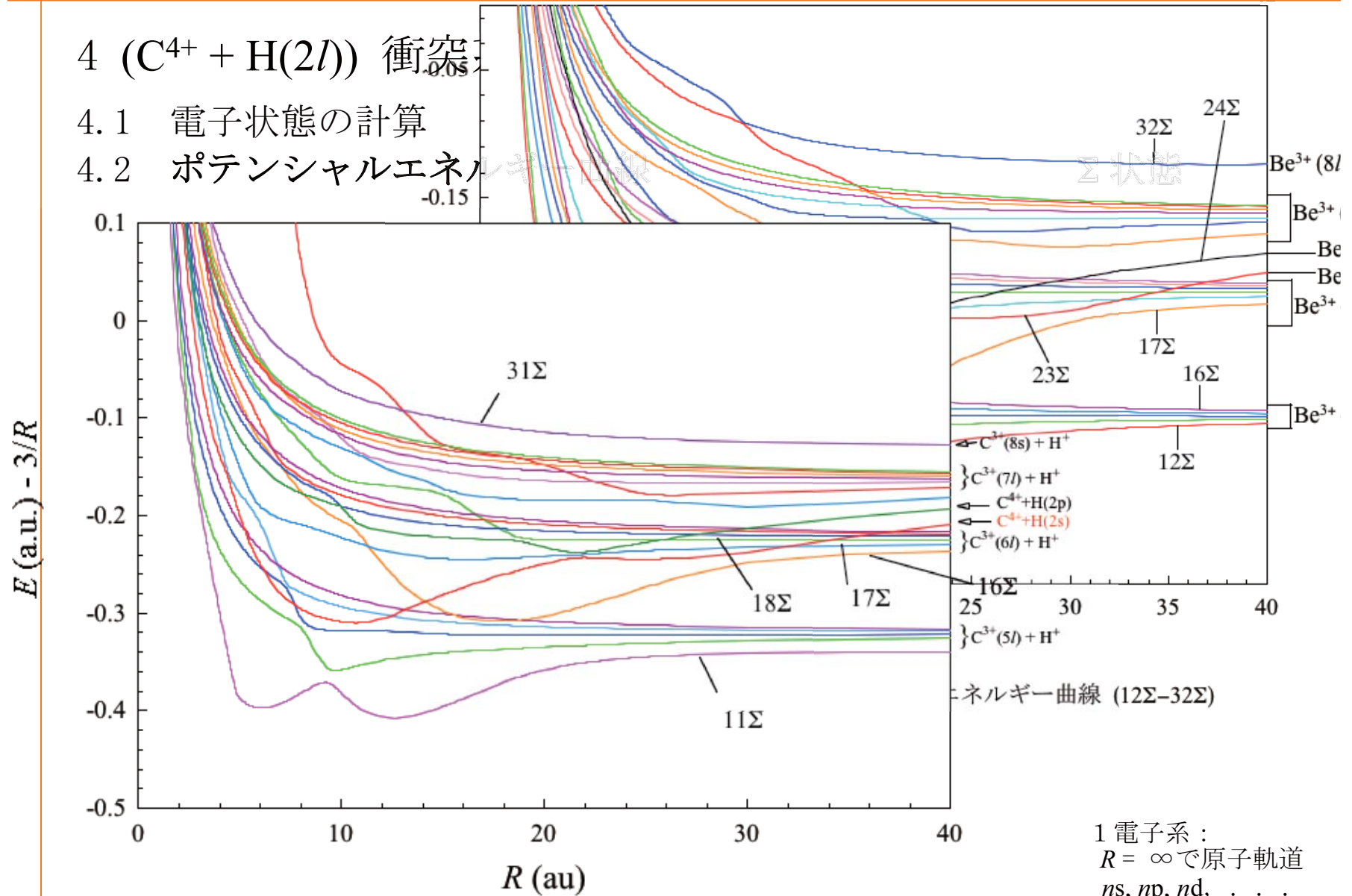


図4.1 (a) CH<sup>4+</sup> 分子イオンのポテンシャルエネルギー曲線

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

## $\Pi$ 状態

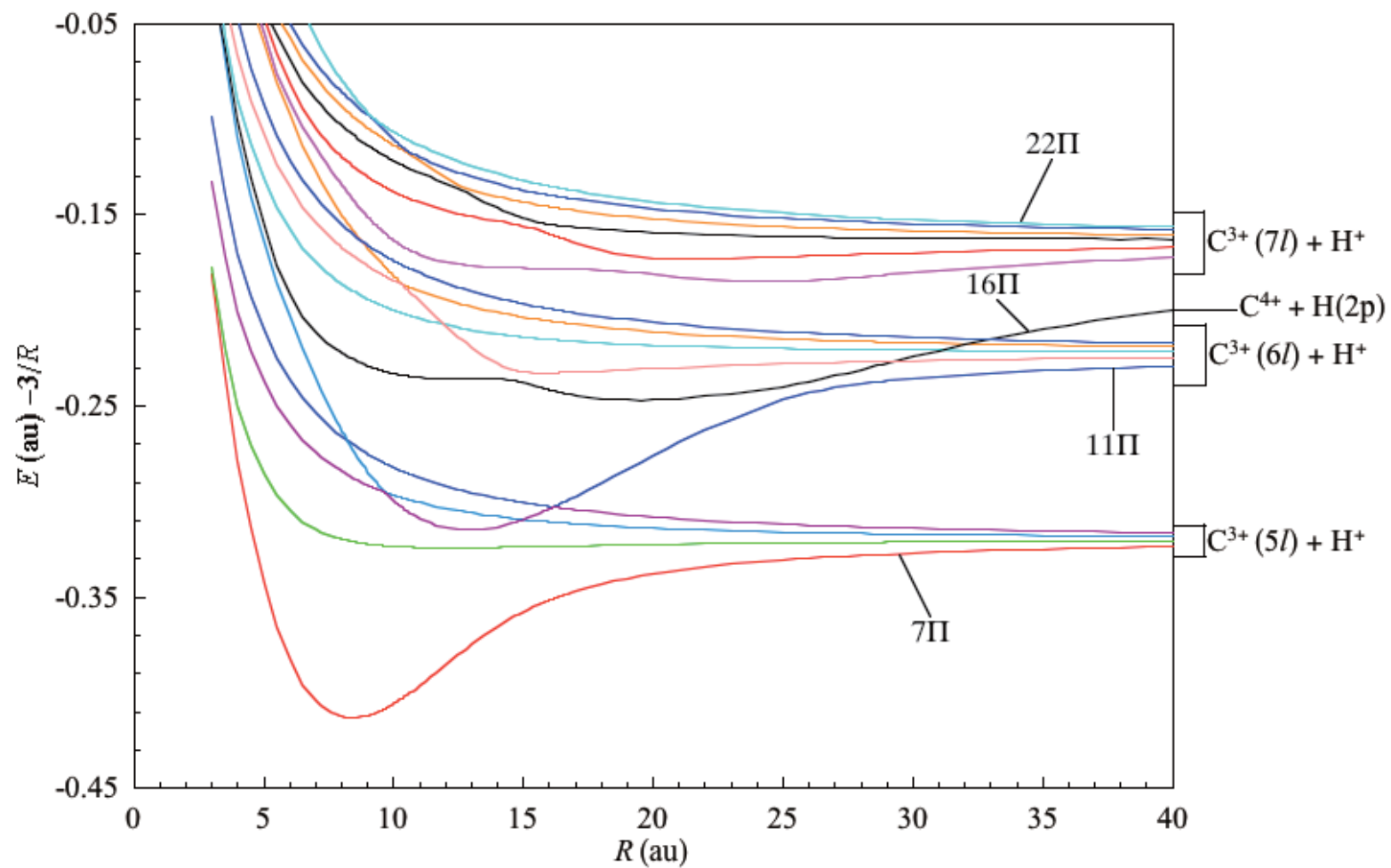


図4.1 (b)  $\text{CH}_4^+$ 系 $\Pi$ 状態のポテンシャルエネルギー曲線 ( $7\Pi$ - $22\Pi$ )

## 4.3 電荷移行断面積

### 4.3.1 ( $C^{4+} + H(SP_+)$ ) $\rightarrow$ ( $C^{3+}(nl) + H^+$ ) 衝突系

$C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態 +  $C^{3+}(1s^28s)$  状態考慮。  $R_{\max} = 50\text{au}$ 。

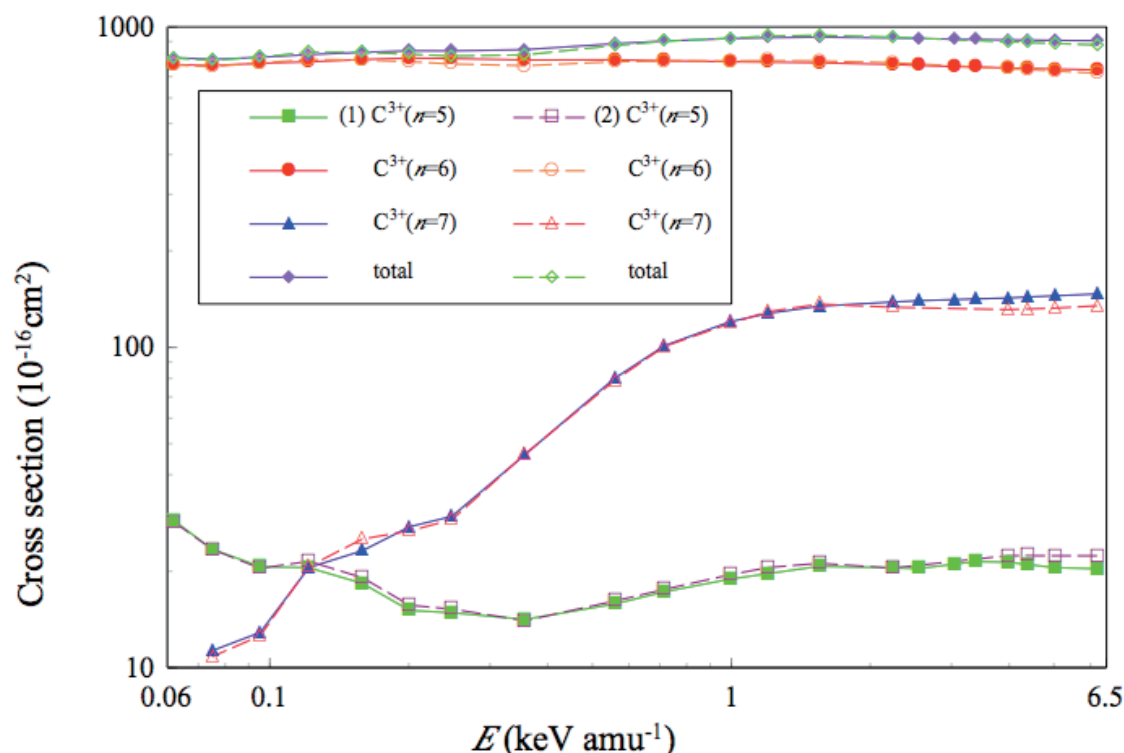


図 4.2  $C^{4+} + H^*(SP)$  衝突系の電荷移行断面積 (実線:  $\Phi$ 状態を含めた場合、破線:  $\Phi$ 状態を含めない場合)

- ・全断面積の衝突エネルギー依存性は小さい。  $C^{3+}(1s^26l)$  の寄与が最大 (特に  $C^{3+}(1s^26s)$ )。  $\Delta$ 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 番目の寄与
  - ② 特定の  $(1s^2nl)$  に集中 ( $C^{3+}(1s^26s)$ )

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

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

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

$\text{C}^{3+}(1s^2nl; n=5, 6, 7)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態 +  $\text{C}^{3+}(1s^28s)$  状態考慮。  $R_{\text{max}}=50\text{au}$ 。

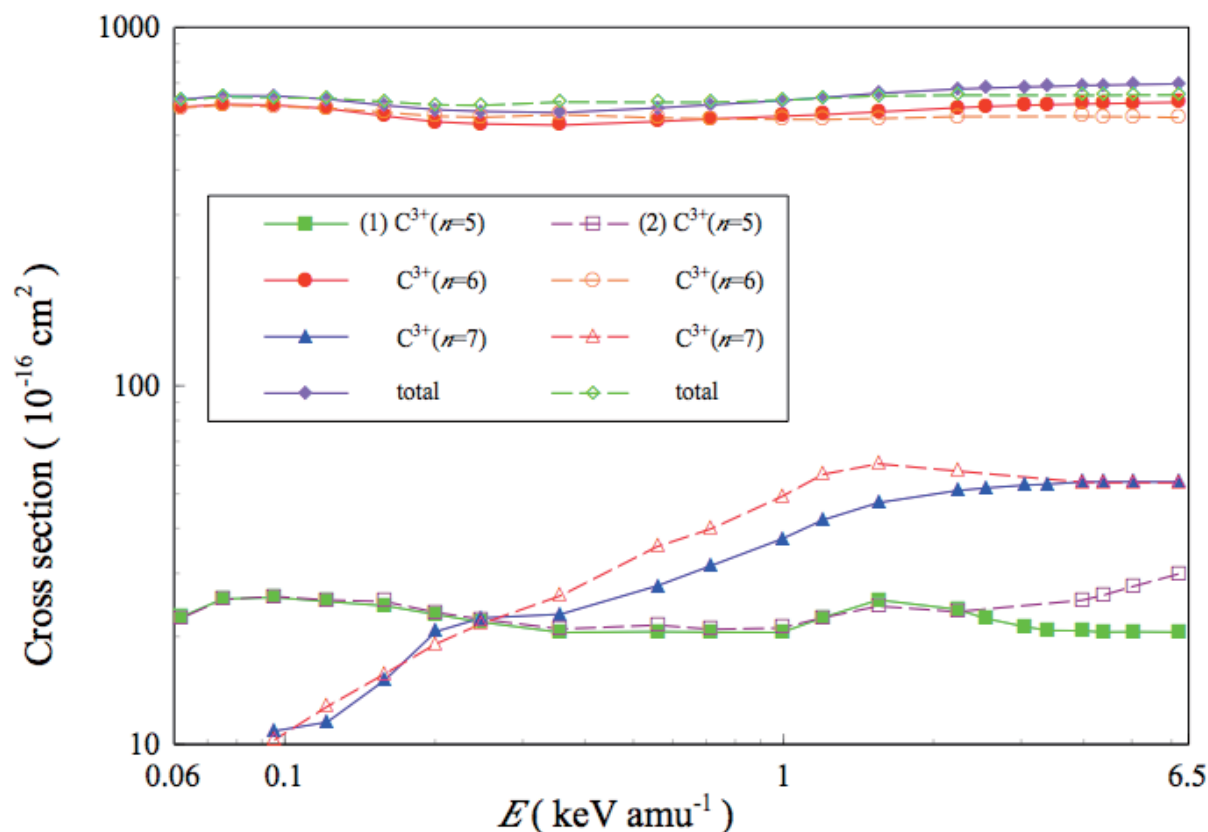


図 4.3  $\text{C}^{4+} + \text{H}^*(\text{SP-})$  衝突系の電荷移行断面積 (実線:  $\Phi$  状態を含めた場合、破線:  $\Phi$  状態を含めない場合)

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

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

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

### 4.3.3 有限な $R$ ( $R_{\max} = 48\text{au}$ ) における $\text{SP}_+$ , $\text{SP}_-$ 状態の確率振幅を用いて, 初期状態が $2s$ , $2p$ 状態のときの電荷移行断面積を計算するための初期 確率振幅の決定

#### (1) $\Phi_{\text{SP}_+}$ 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

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

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

#### (2) $\Phi_{\text{SP}_-}$ の導出

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

#### (3) $\Phi_{\text{SP}_+}$ , $\Phi_{\text{SP}_-}$ から $\Psi_{2s}$ , $\Psi_{2p_0}$ への逆変換

$$\Psi_{2s} = 0.69286347\Phi_{\text{SP}_+} + 0.72106880\Phi_{\text{SP}_-}$$

$$\Psi_{2p_0} = 0.72106628\Phi_{\text{SP}_+} + 0.69286084\Phi_{\text{SP}_-}$$

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

#### 4.3.4 ( $C^{4+} + H(2s)$ ) 衝突系

$C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態 +  $C^{3+}(1s^28s)$  状態考慮。  $R_{\max} = 48a.u.$

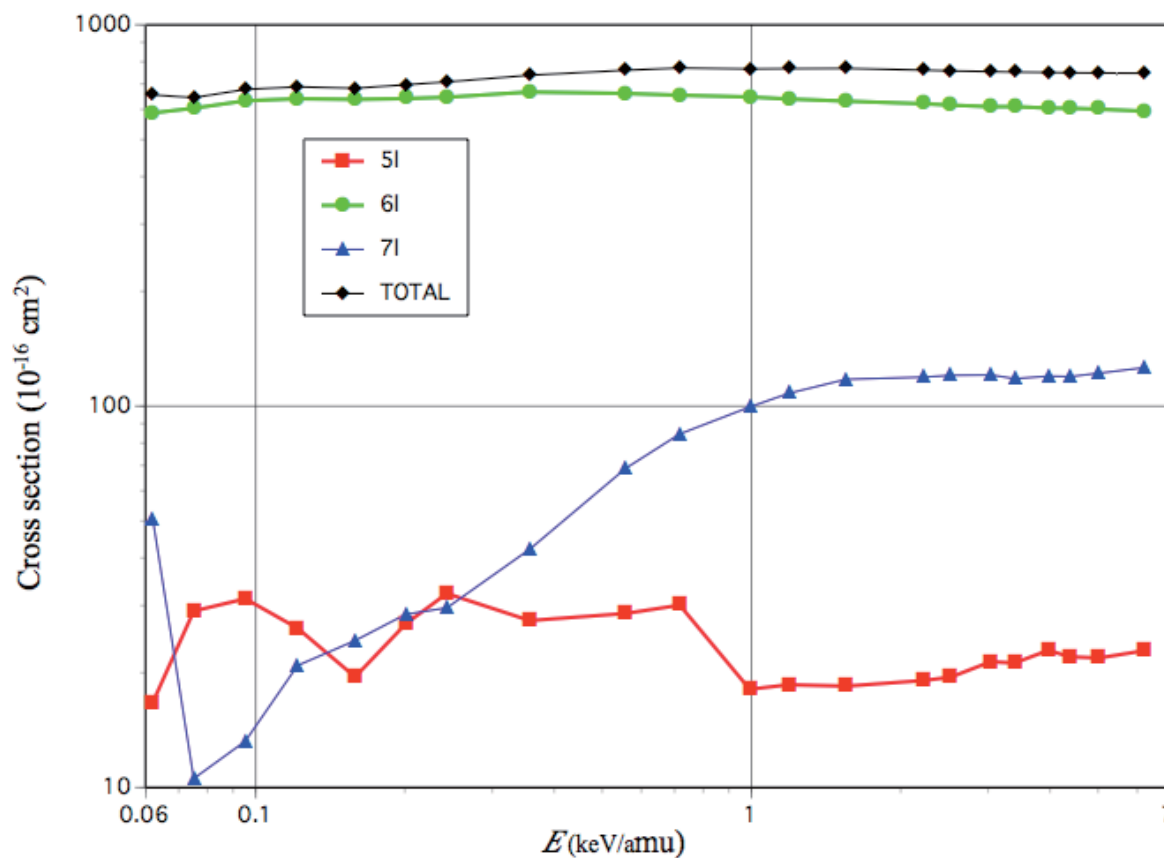


図 4.4  $C^{4+} + H^*(2s)$  衝突系の電荷移行断面積

- 全衝突エネルギー領域にわたり  $C^{3+}(6I)$  の寄与が最大

- 低エネルギー領域：  
 $C^{3+}(5I), C^{3+}(7I)$  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：  
 $C^{3+}(7I)$  の寄与大

4.3.5 ( $C^{4+} + H(2p)$ ) 衝突系

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

$C^{3+}(1s^2nl; n = 5, 6, 7)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態 +  $C^{3+}(1s^28s)$  状態考慮。  $R_{\max} = 48\text{au}$ 。

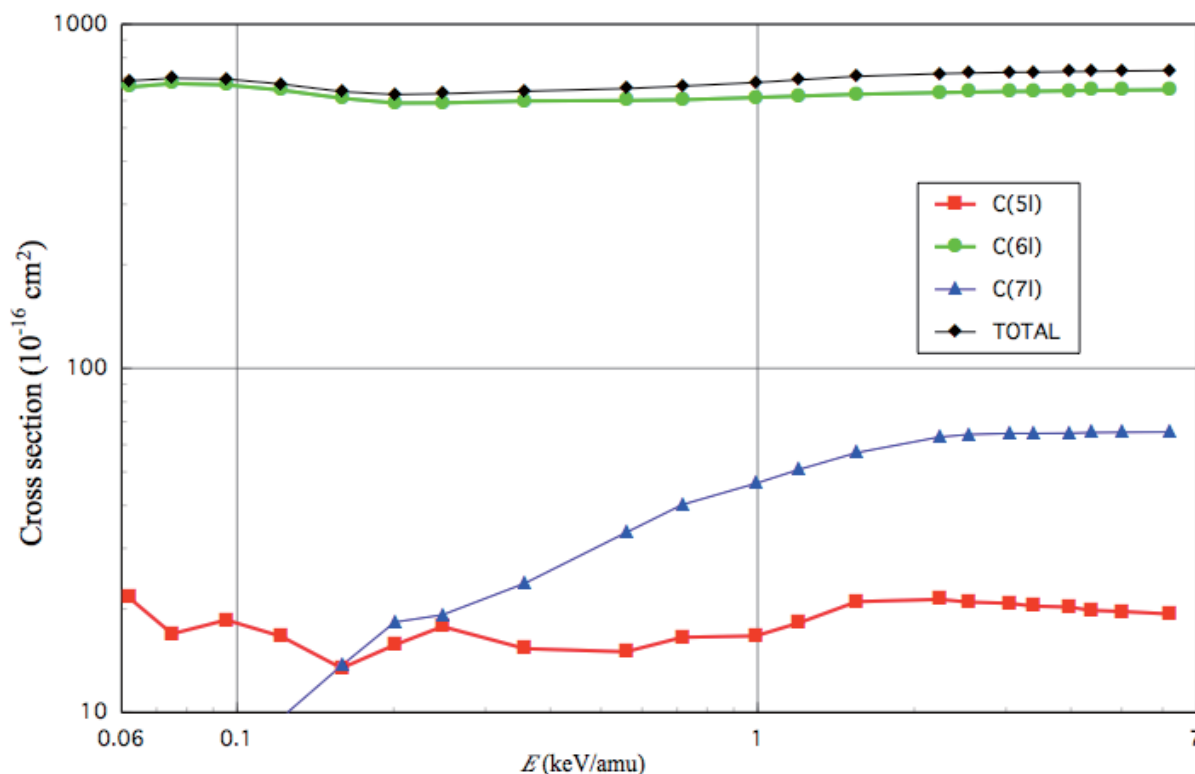


図 4.5  $C^{4+} + H(2p)$  衝突系の電荷移行断面積

- ・( $C^{4+} + H(SP_-)$ )衝突系と類似 (初期条件が類似:  $11\Pi$  の初期確率が大きい)。  
 $C^{3+}(1s^26l)$  の寄与最大 (特に  $C^{3+}(1s^26s)$ )

- ・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  
 $C^{3+}(1s7l) < C^{3+}(1s5l)$   
 $< C^{3+}(1s6l)$

- ・高エネルギー領域:  
断面積の大きさの順  
 $C^{3+}(1s5l) < C^{3+}(1s7l)$   
 $< C^{3+}(1s6l)$

## 5 ( $C^{6+} + H(2l)$ ) 衝突系の電荷移行過程

### 5.1 電子状態の計算

### 5.2 ポテンシャルエネルギー曲線

$\Sigma$  状態

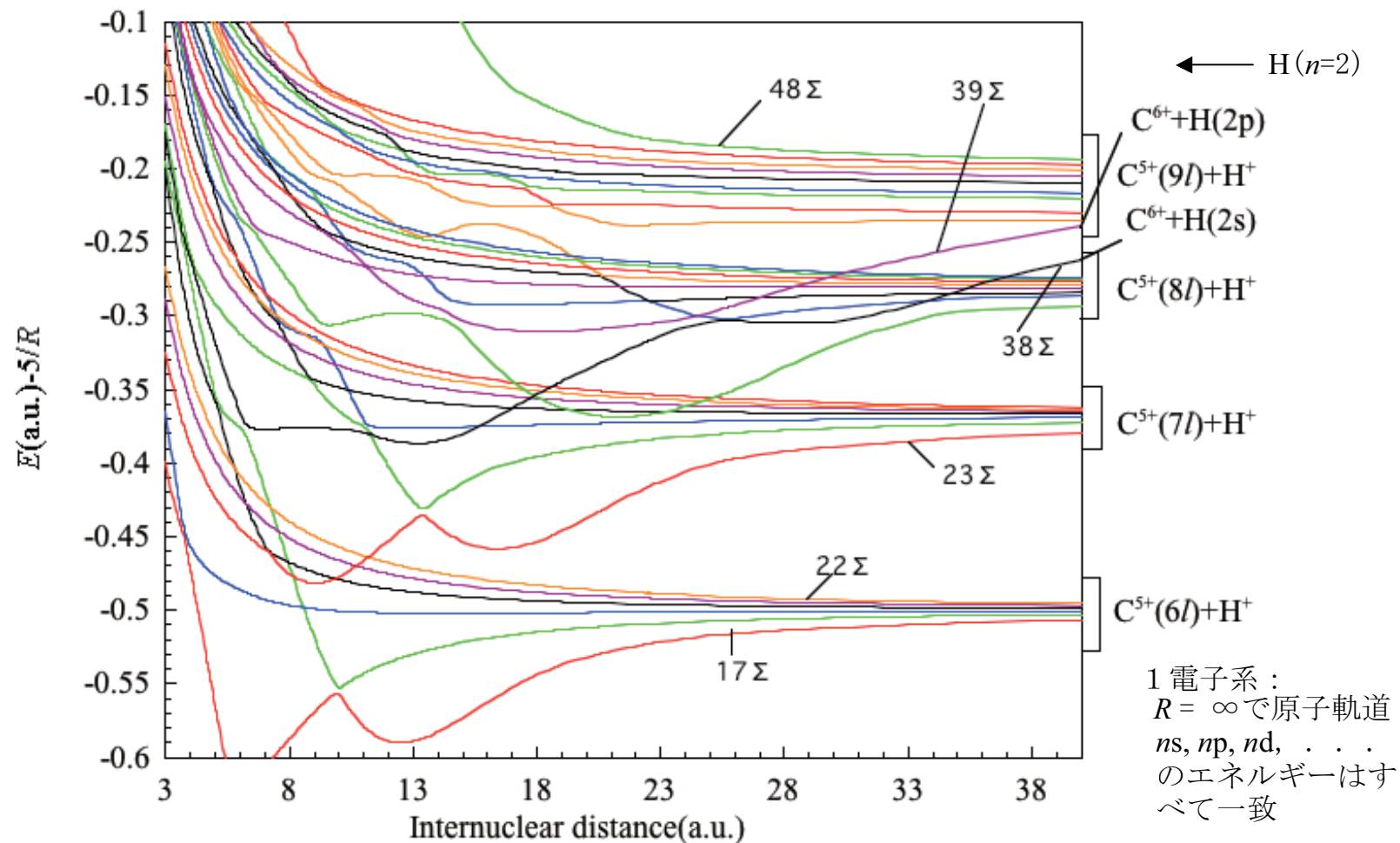


図5.1.1  $CH^{6+}$ 系  $\Sigma$  状態のポテンシャルエネルギー曲線 ( $17\Sigma \sim 48\Sigma$ )



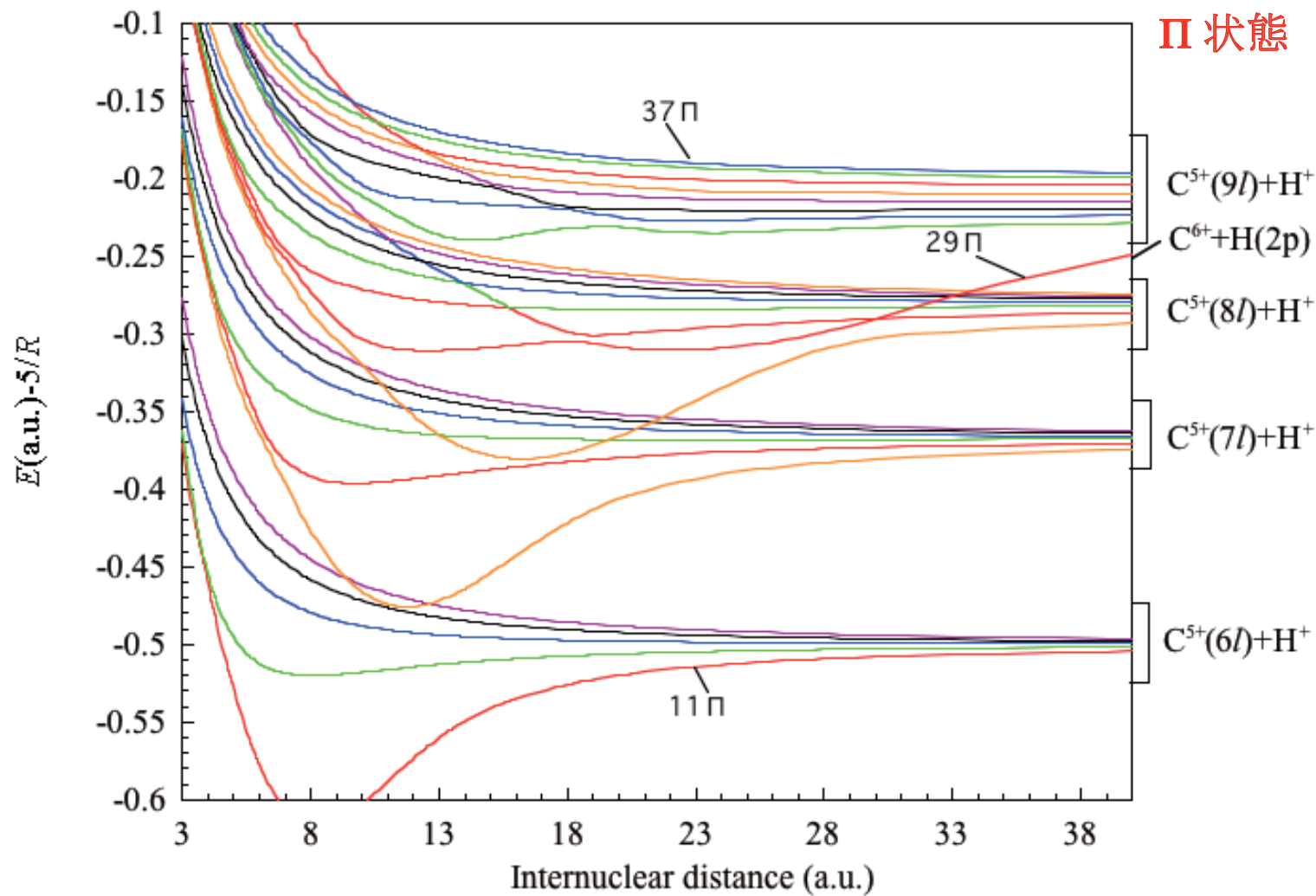


図5.1.2  $\text{CH}^{6+}$ 系  $\Pi$  状態のポテンシャルエネルギー曲線 (11 $\Pi$ ~37 $\Pi$ )

## 5.3 電荷移行断面積

### 5.3.1 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) $\rightarrow$ ( $C^{5+}(nl) + H^+$ ) 衝突系

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $R_{\max} = 42\text{au}$

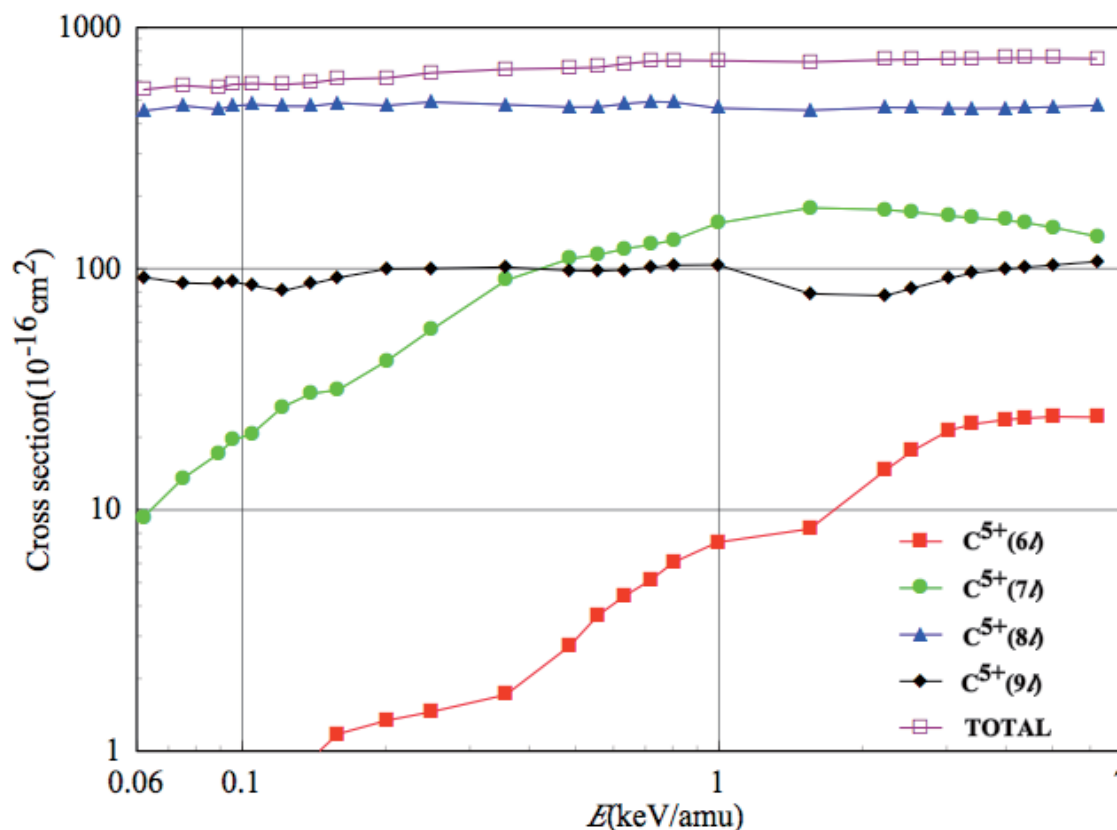


図5.3.1  $H(SP_+)$ を始状態とした時の  $n$  依存部分電荷移行断面積。(99状態使用した場合、 $R_{\max} = 42\text{au}$ )

- $\Delta$ を含めれば断面積は収束。
- 全断面積：衝突エネルギー依存性は小さい。 $C^{5+}(8l)$ の寄与が最大。
- 低エネルギー領域：
  - ①  $C^{5+}(8s)$ の寄与が最大。
  - ②  $C^{5+}(9l)$  が2番目の寄与
- 高エネルギー領域：
  - ①  $C^{5+}(7l), C^{5+}(9l)$ が2番目の寄与
  - ② 複雑、多岐

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

### 5.3.2 ( $\text{C}^{6+} + \text{H}(\text{SP}_-)$ ) $\rightarrow$ ( $\text{C}^{5+} + \text{H}^+$ ) 衝突系

$\text{C}^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $R_{\text{max}} = 42\text{au}$

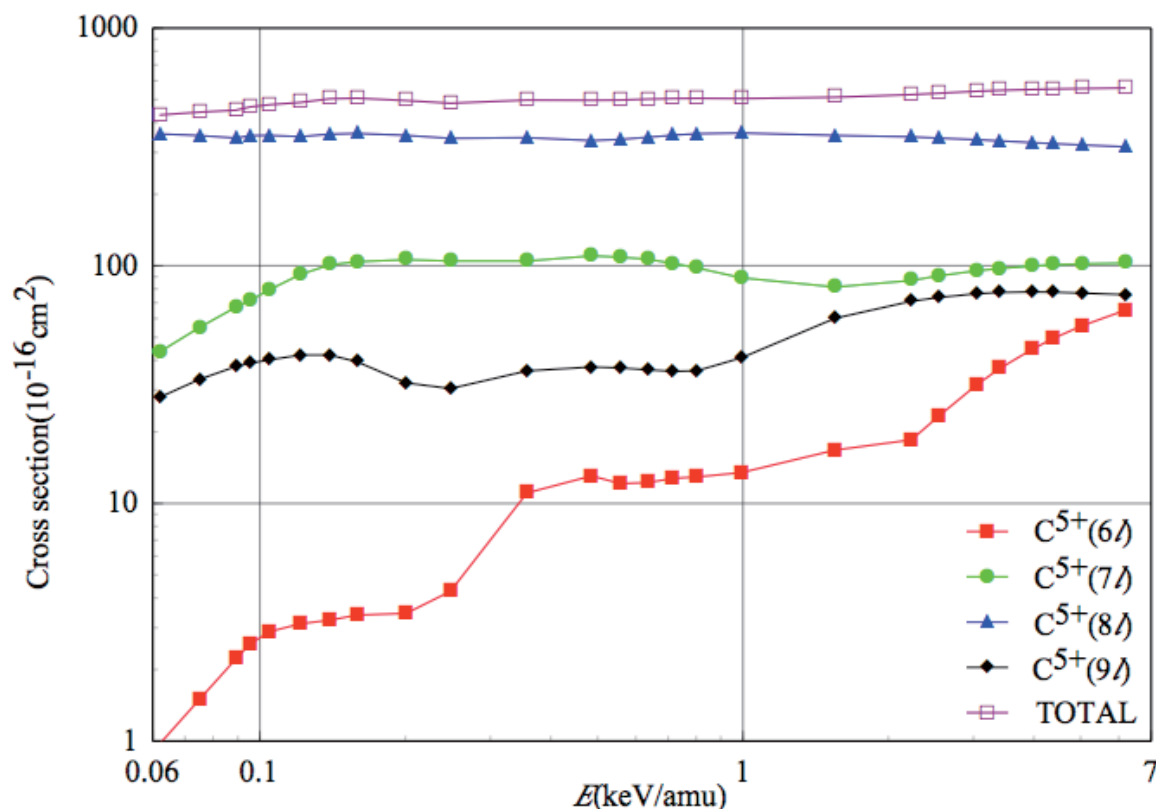


図5.3.2  $\text{H}(\text{SP}_-)$  を始状態としたときの  $n$  依存部分電荷移行断面積 (99 状態を使用した場合、 $R_{\text{max}} = 42 \text{ au}$ )

- $\Delta$ 状態を含めれば断面積は収束。
- 全断面積の衝突エネルギー依存性は小さい。 $\text{C}^{5+}(8l)$ の寄与最大。
- 低エネルギー領域：
  - ①  $\text{C}^{5+}(8s)$ の寄与最大。
  - ②  $\text{C}^{5+}(7l), \text{C}^{5+}(9l)$ が2番目に大きな寄与
- 高エネルギー領域：
  - ①  $\text{C}^{5+}(7l), \text{C}^{5+}(9l), \text{C}^{5+}(6l)$ が2番目に大きな寄与
  - ② 複雑、多岐

5.3.3 有限な  $R$  ( $R_{\max} = 42\text{au}$ ) での  $SP_+$ ,  $SP_-$  の確率振幅を用いて初期状態が  $2s$ ,  $2p$  状態のときの電荷移行断面積を計算するための初期確率振幅の決定

$$\begin{pmatrix} \Psi_{2s} \\ \Psi_{2p_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.699187179 & 0.714938658 \\ 0.714065294 & -0.700079107 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{SP_+} \\ \Phi_{SP_-} \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{2s} = 0.699187179\Phi_{SP_+} + 0.714938658\Phi_{SP_-}$$

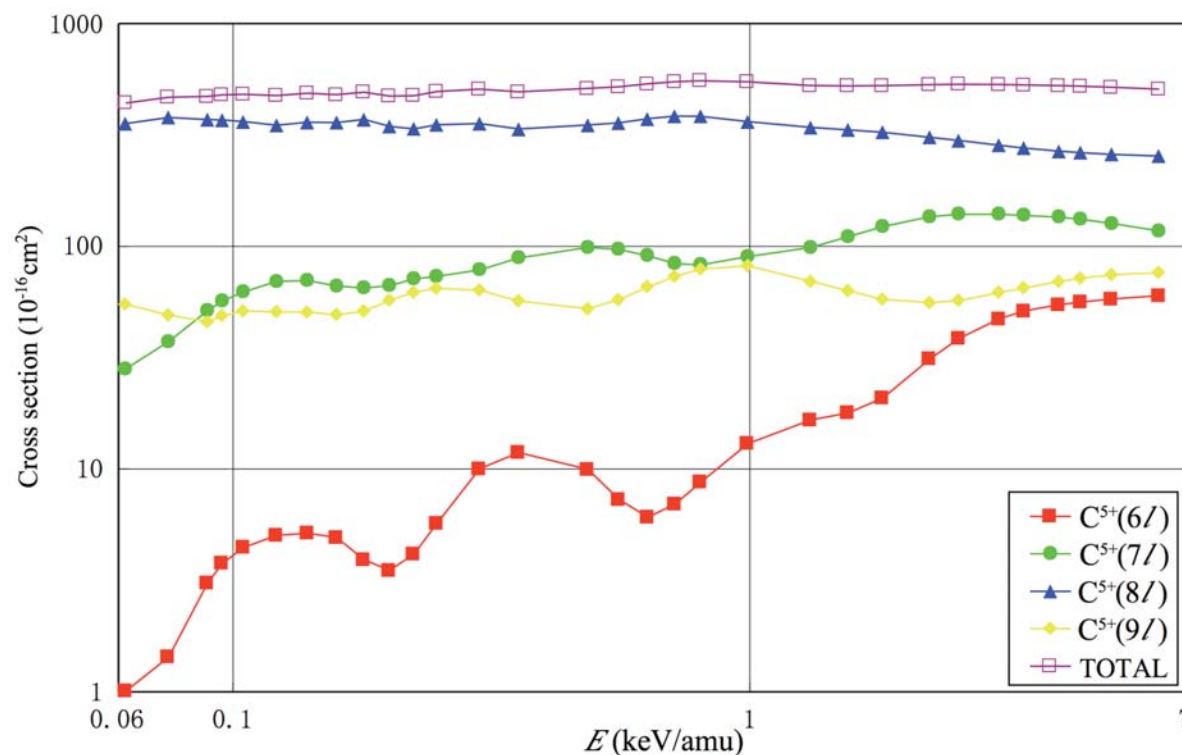
$$\Psi_{2p} = \sqrt{\frac{1}{3}}\Psi_{2p_0} + \sqrt{\frac{2}{3}}\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{2p} &= \sqrt{\frac{1}{3}}(0.714065294\Phi_{SP_+} - 0.700079107\Phi_{SP_-}) + \sqrt{\frac{2}{3}}\Psi_{2p_{\pm 1}} \\ &= 0.412265790\Phi_{SP_+} - 0.404190861\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}} \end{aligned}$$

$$\Psi_{2s} = 0.69918718\Phi_{SP_+} + 0.71493866\Phi_{SP_-}$$

### 5.3.4 (C<sup>6+</sup> + H(2s)) 衝突系

C<sup>5+</sup>(nl;n = 6, 7, 8, 9) の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $R_{\max} = 42\text{au}$ 。



全衝突エネルギー領域  
にわたり C<sup>5+</sup>(8l) の寄与  
が最大

低エネルギー領域：  
C<sup>5+</sup>(9l), C<sup>5+</sup>(7l) の確率は  
ほぼ同じ大きさ。この  
2つの状態の確率の衝  
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：  
①C<sup>5+</sup>(8l) の寄与が減少  
②C<sup>5+</sup>(6l) の寄与が増加

図 5.3.3 H(2s)を始状態としたときのn 依存部分電荷移行断面積(99状態使用した場合  $R_{\max} = 42\text{au}$ )

5.3.5 (C<sup>6+</sup> + H(2p)) 衝突系

$$\Psi_{2p} = 0.412265790\Phi_{SP_+} - 0.404190861\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

C<sup>5+</sup>(nl; n = 6, 7, 8, 9) の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $R_{\max} = 42\text{au}$ 。

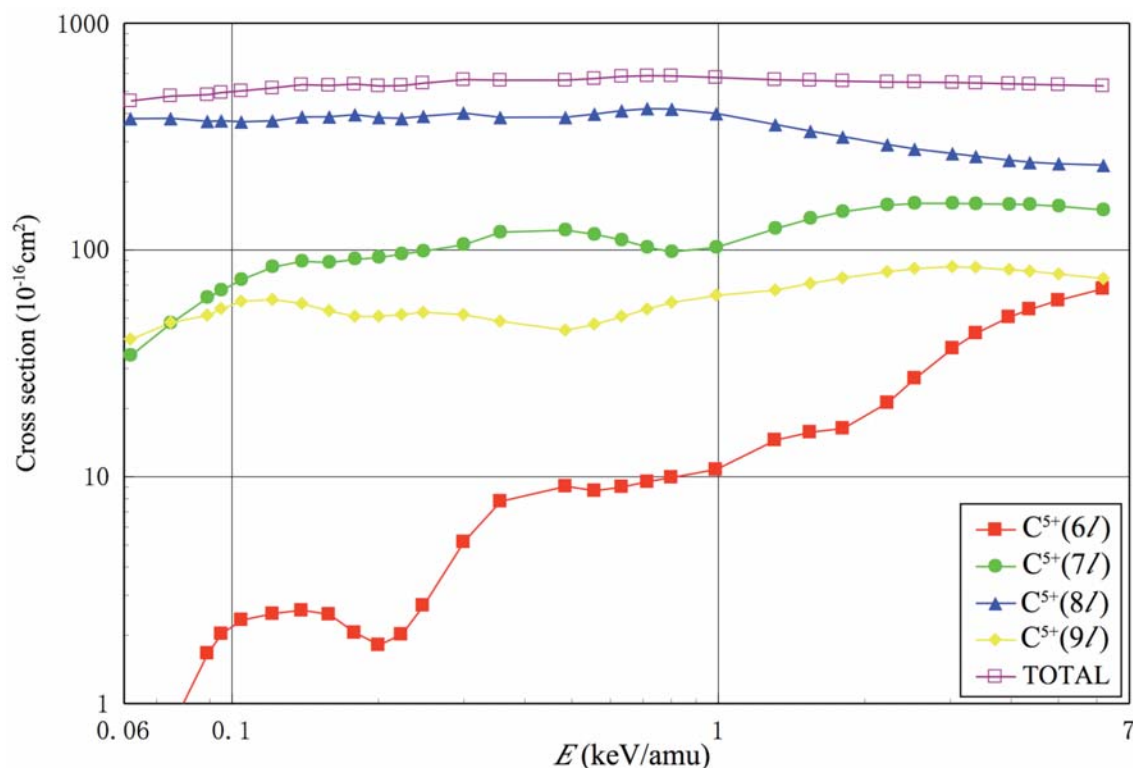


図 5.3.4 H(2p)を始状態としたときのn 依存部分電荷移行断面積(99状態使用した場合  $R_{\max} = 42\text{au}$ )

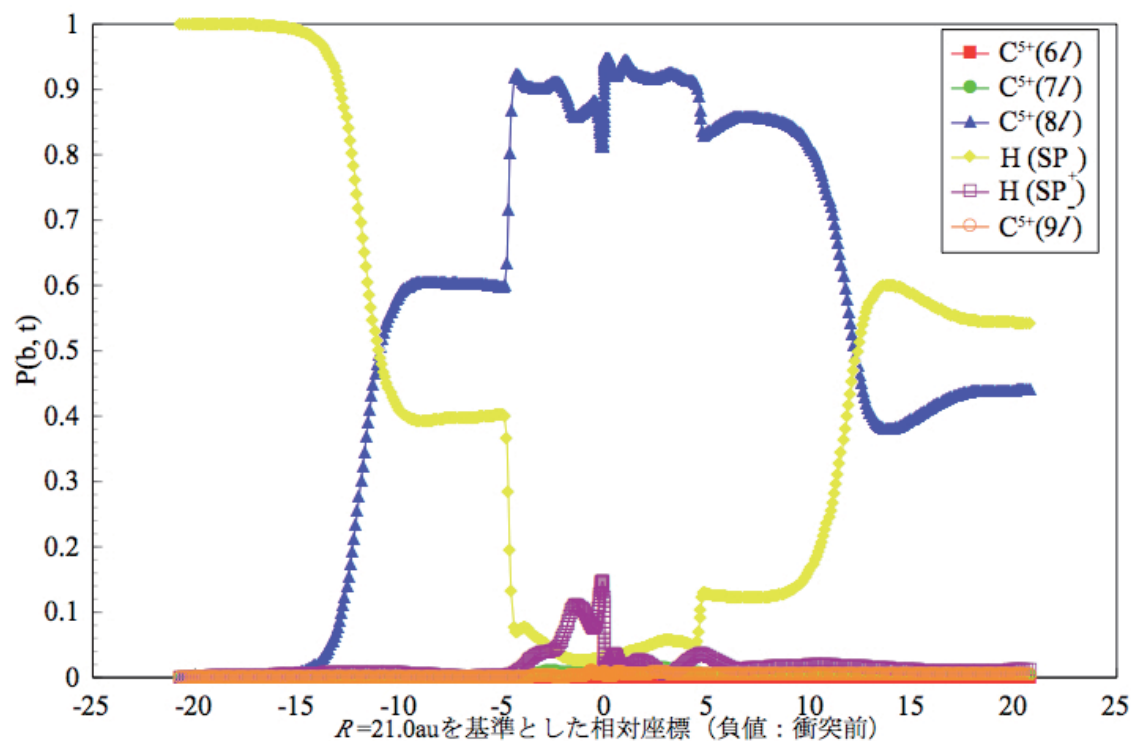
- (C<sup>6+</sup>+H(SP<sub>-</sub>))衝突系と類似 (初期条件が類似:29  $\Pi$ の初期確率が大)。C<sup>5+</sup>(8l)の寄与最大
- 全断面積: 衝突エネルギーとともにわずかに増加。
- 低エネルギー領域: 断面積の大きさの順  
 $C^{5+}(6l) < C^{5+}(9l) \approx C^{5+}(7l) < C^{5+}(8l)$
- 高エネルギー領域:
  - ①断面積の大きさの順  
 $C^{5+}(9l) \approx C^{5+}(6l) < C^{5+}(7l) < C^{5+}(8l)$
  - ②C<sup>5+</sup>(8l)の寄与が減少

## 5.4 電荷移行の反応機構 — 量子数 $n$ ごとの存在確率の核間距離依存性

(衝突中に電子がどの量子数  $n$  の電子状態に存在しているか表す電子の存在確率の核間距離依存性)

### 5.4.1 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。



- $R < 35$  au:  $H(SP_+)$  の多くが  $C^{5+}(8l)$  に遷移
- $R \approx 27$  au:  $H(SP_+)$  から  $C^{5+}(8l)$  へ遷移
- $R \approx 21$  au (最近接距離):  $C^{5+}(8l)$  と  $H(SP_-)$  間で遷移が頻繁
- $R > 21$  au:  $C^{5+}(8l)$  から  $H(SP_+)$  に遷移
- $R > 35$  au:  $H(SP_+)$  から  $C^{5+}(8l)$  に戻る

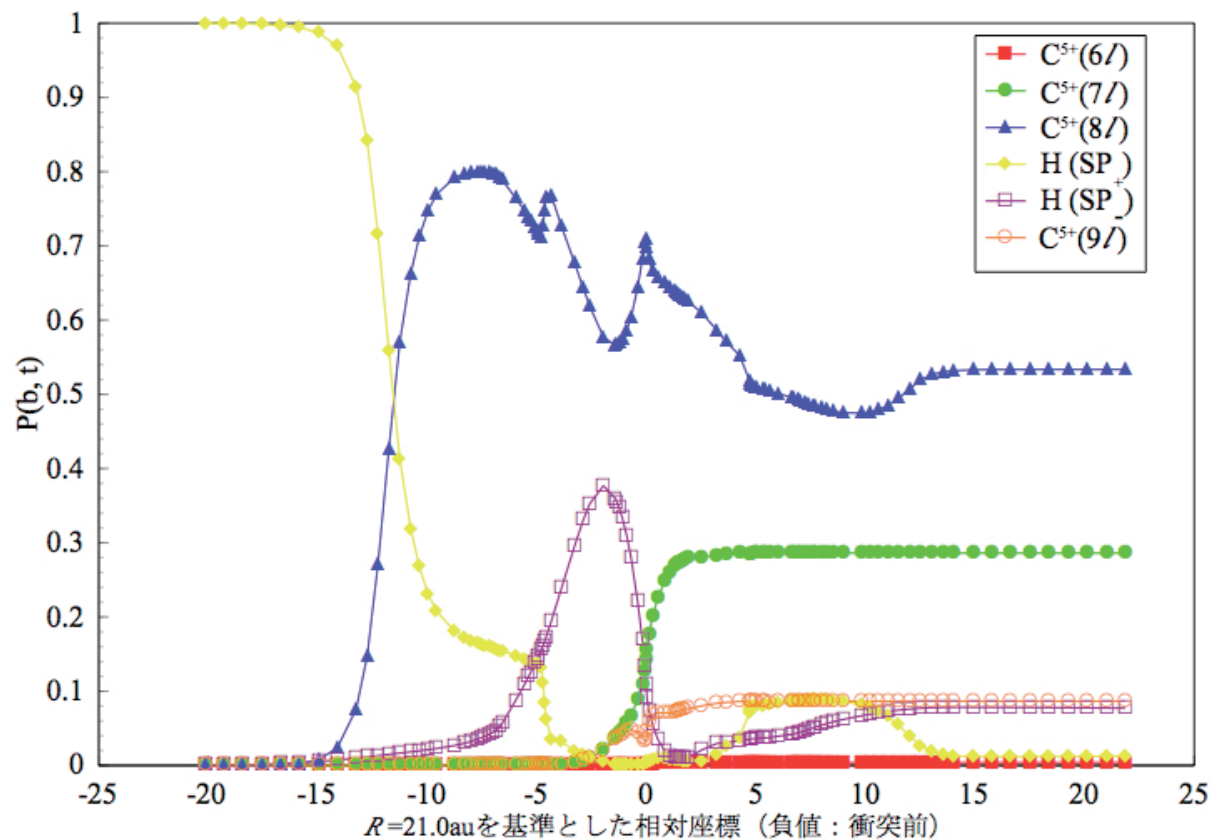
横軸の数値 + 21au =  $R$

図 5.4.1.1 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依存性 ( $E = 62.5$  eV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)



5.4.1 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21 \text{ au}$ ,  $R_{\max} = 42 \text{ au}$ 。



- 最近接距離に近づくまでは低エネルギーの場合とほとんど同じ
- $R < 35 \text{ au}$ :  $H(SP_+)$  その多くが  $C^{5+}(8l)$  に遷移
- 衝突前最近接距離付近： $C^{5+}(8l)$  と  $H(SP_-)$  間で遷移が頻繁
- 最近接距離付近： $H(SP_-)$  から  $C^{5+}(7l)$ ,  $C^{5+}(8l)$  へ遷移。 $C^{5+}(8l)$  の確率は徐々に  $H(SP_-)$  に遷移

図 5.4.1.2 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25 \text{ keV/amu}$ ,  $b=21.0 \text{ au}$ ,  $R_{\max} = 42 \text{ au}$ )



5.4.2 ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。

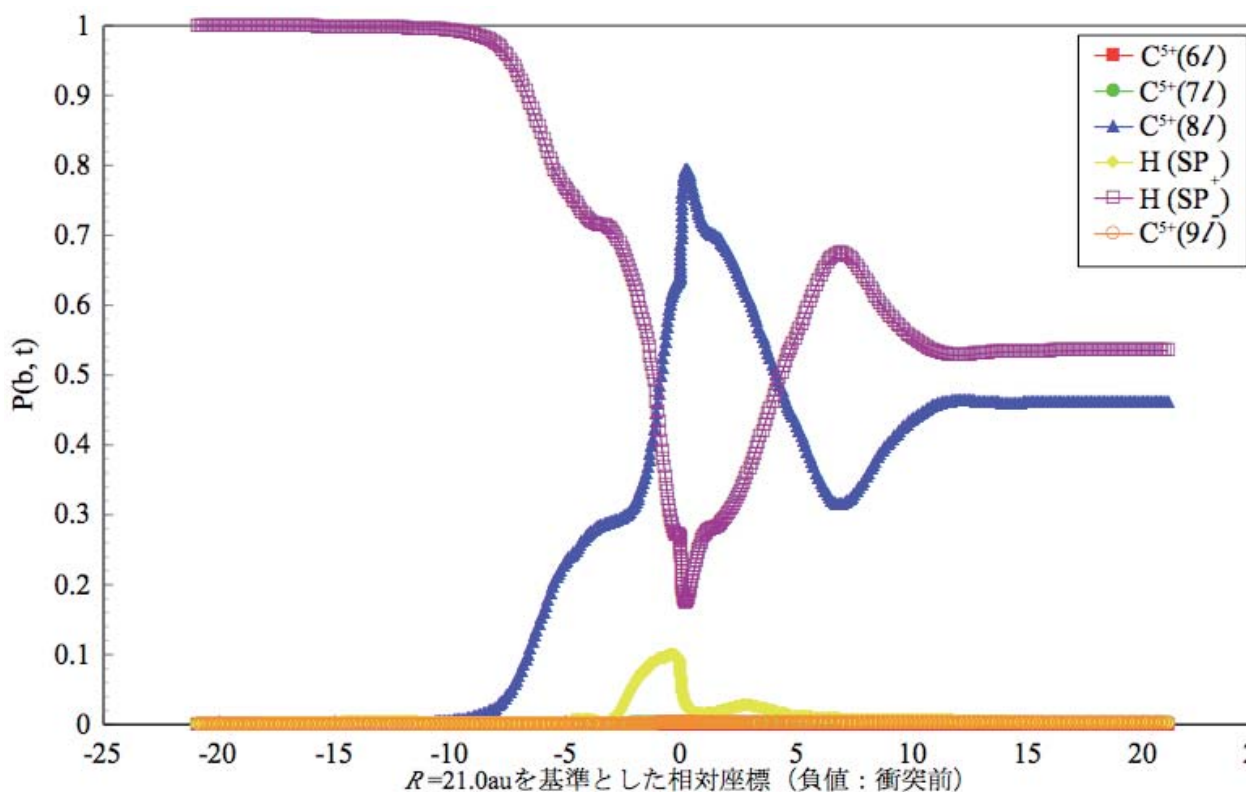


図 5.4.2.1 ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 62.5$  eV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

・最近接距離に近づくまでは低エネルギー衝突、高エネルギー衝突の違いは小さい。

・  $R < 30$  au:  $H(SP_-)$  から、その多くが  $C^{5+}(8l)$  に遷移。 $(C^{6+} + H(SP_+))$  衝突系より緩やか。

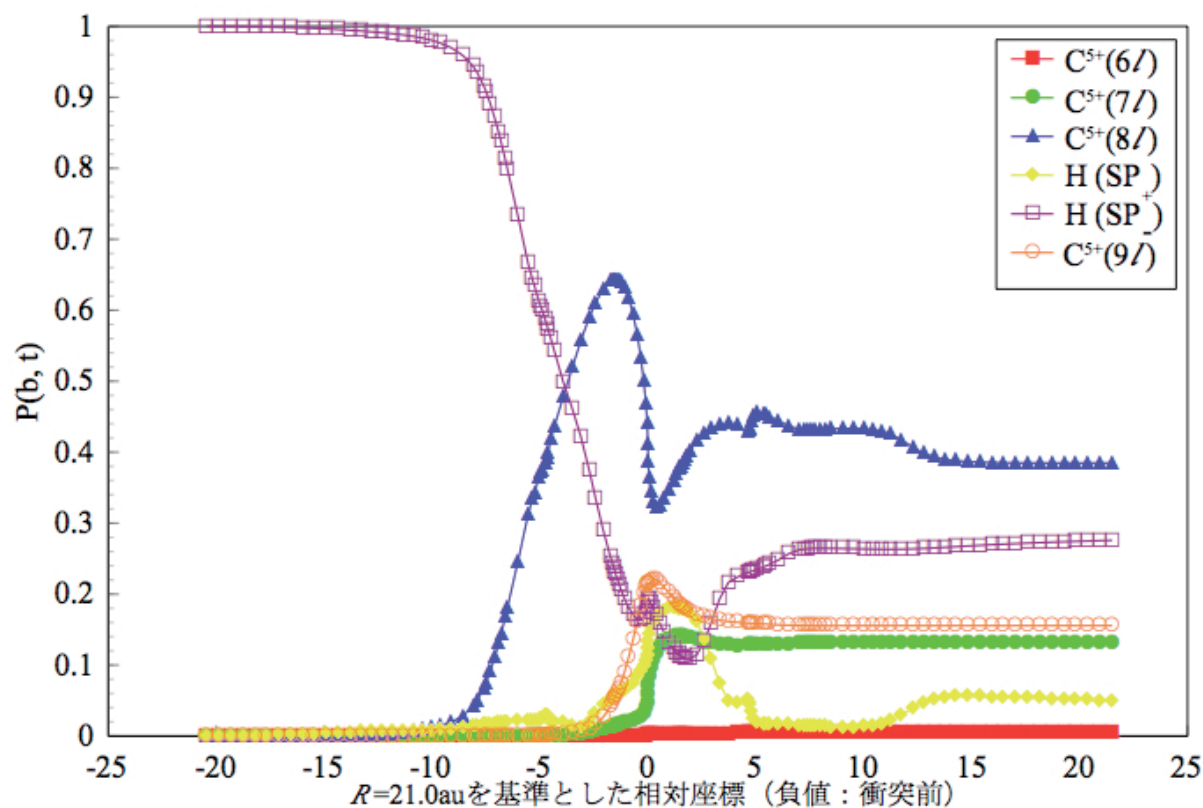
・  $R \approx 25$  au:  $H(SP_-)$ 、 $H(SP_+)$  間で遷移が起こり始め、両状態間で往復。

・ 衝突後:  $C^{5+}(8l)$  から  $H(SP_-)$  へ遷移。

・  $R > 28$  au:  $H(SP_-)$  から  $C^{5+}(8l)$  へ遷移。 $R = 32$  au で遷移は停止。

5.4.2 ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21 \text{ au}$ ,  $R_{\text{max}} = 42 \text{ au}$ 。



- ・最近接距離に近づくまでは低エネルギー衝突、高エネルギー衝突の違いは小さい。

- ・最終的な遷移確率は  $C^{5+}(8l)$  に集中。  $H(SP_+)$  への遷移確率は小さいが、  $H(SP_-)$  への遷移確率は大きい。

- ・衝突エネルギーが大きくなるといろいろな状態への遷移が起こる。

図 5.4.2.2 ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 6.25 \text{ keV/amu}$ ,  $b = 21.0 \text{ au}$ ,  $R_{\text{max}} = 42 \text{ au}$ )

5.4.3 ( $C^{6+} + H(2s)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21 \text{ au}$ ,  $R_{\max} = 42 \text{ au}$ 。

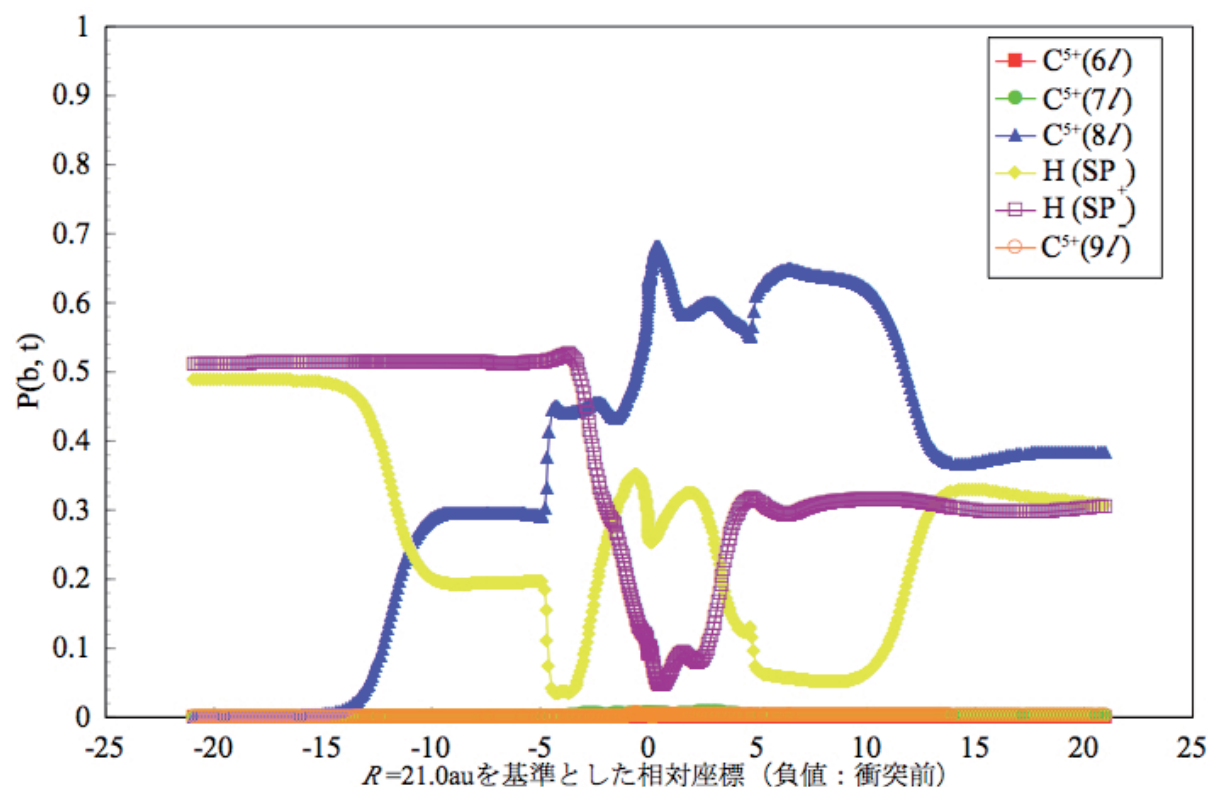


図 5.4.3.1 ( $C^{6+} + H(2s)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 62.5 \text{ eV/amu}$ ,  $b = 21.0 \text{ au}$ ,  $R_{\max} = 42 \text{ au}$ )

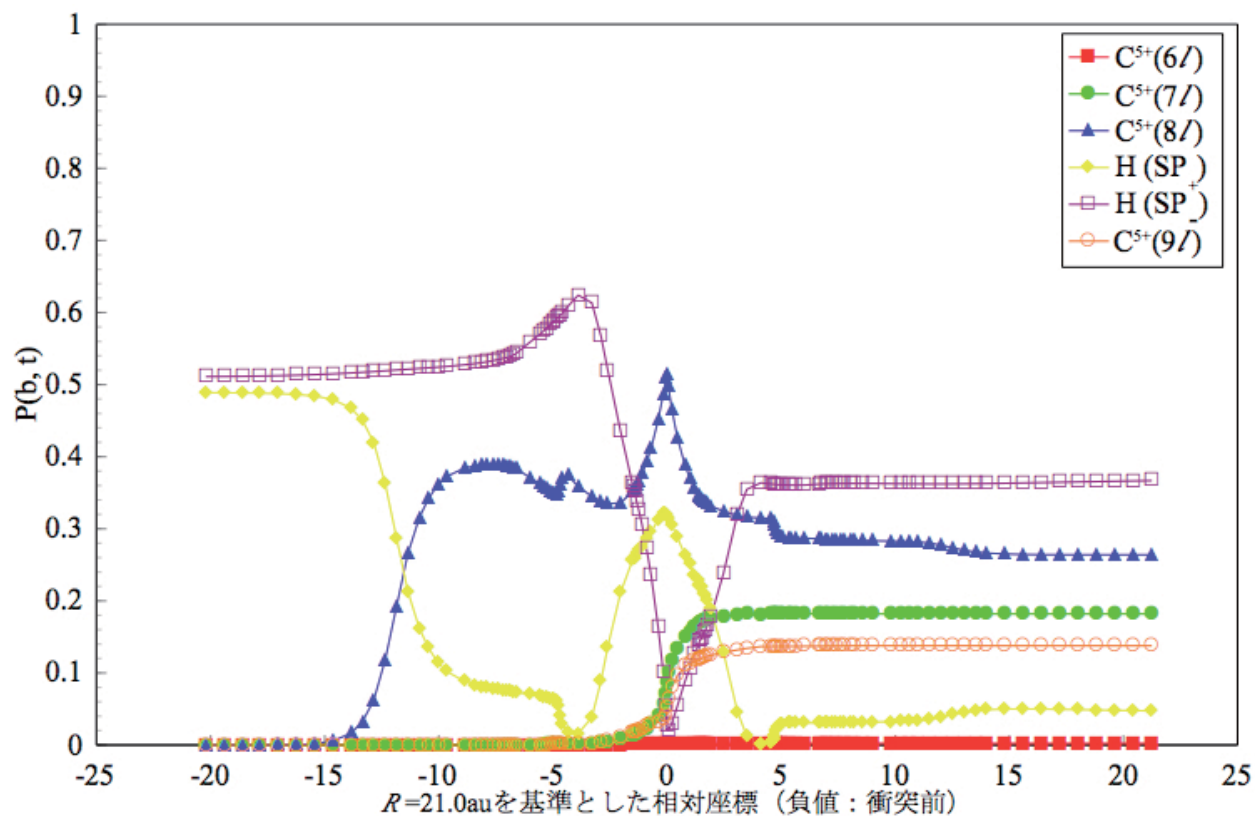
- 始状態： $H(SP_+)$ ,  $H(SP_-)$  にそれぞれ 0.49, 0.51 の確率

- 最近接距離に近づくまで： $H(SP_+)$ ,  $H(SP_-)$  に対して独立に緊密結合方程式を解いた結果とそれほど違いがないように見える。

- 最近接距離以降： $H(SP_+)$ ,  $H(SP_-)$  間で往復。2つの状態にあった確率振幅が複雑に絡み合い、単純に2つの過程を独立に扱って得られた遷移確率を合計するのではうまく表せない。

### 5.4.3 ( $C^{6+} + H(2s)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。



・低エネルギー衝突の場合と比べて最近接距離付近でH(SP<sub>-</sub>)とC<sup>5+</sup>(8l)の確率の入れ替わりはあまり頻繁ではない。

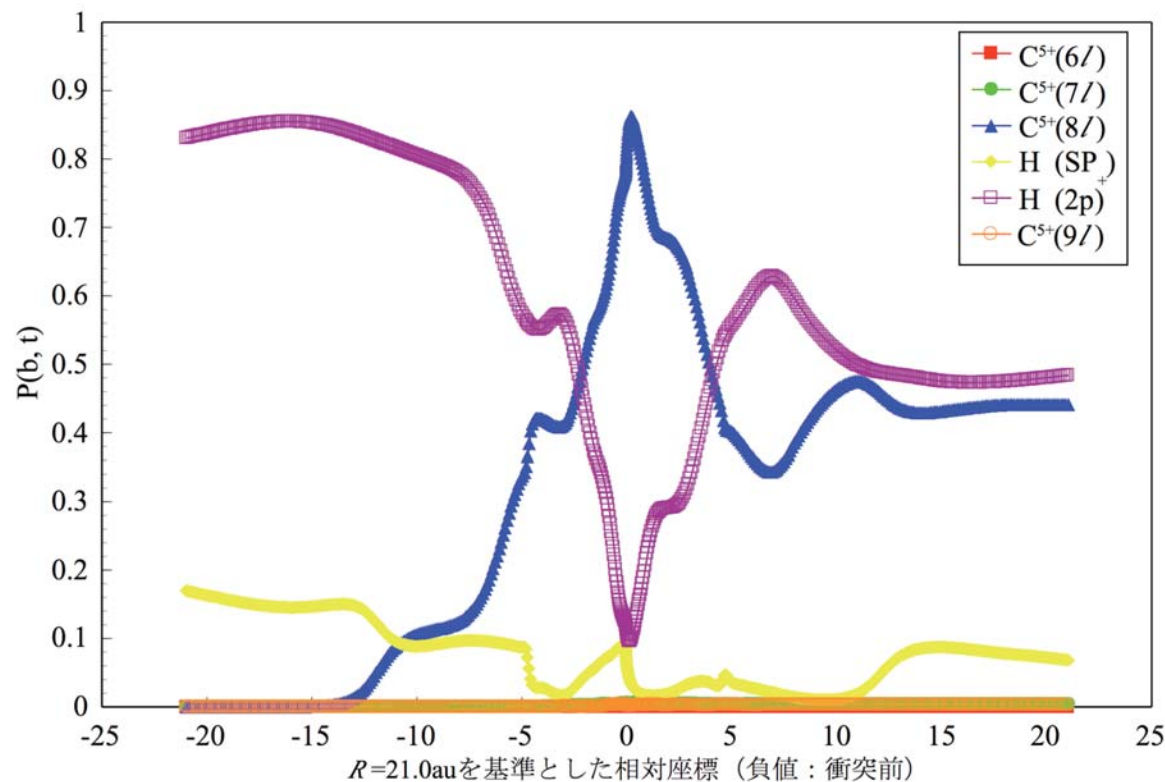
・最終的には：H(SP<sub>+</sub>)、C<sup>5+</sup>(7l)、C<sup>5+</sup>(9l)の確率は大きくなるが、H(SP<sub>-</sub>)の確率は小さくなる

図 5.4.3.2 ( $C^{6+} + H(2s)$ )衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 6.25$  keV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

5.4.4 ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

$$\Psi_{2p} = 0.412265790\Phi_{SP_+} - 0.404190861\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

$H(2p_{\pm 1})$  による  $\Pi$  状態も含めたので  $H(SP_-)$  でなく  $H(2p)$  と表示  
 $C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。



・低エネルギー衝突、高エネルギー衝突で全体的な傾向の違いは小さい。

・ $R < 34$  au:  $H(2p)$  から  $C^{5+}(8l)$  に遷移。最近接距離付近ではほとんどすべて  $C^{5+}(8l)$  に。

・ $H(SP_+)$  の確率：小さい。 $R \approx 33$  au,  $R \approx 26$  au で  $C^{5+}(8l)$  に遷移。

・衝突後： $H(2p)$  と  $C^{5+}(8l)$  間の往復。他の遷移はほとんど起こらず。

・ $R > 33$  u:  $H(2p)$ 、 $C^{5+}(8l)$  から  $H(SP_+)$  への遷移。

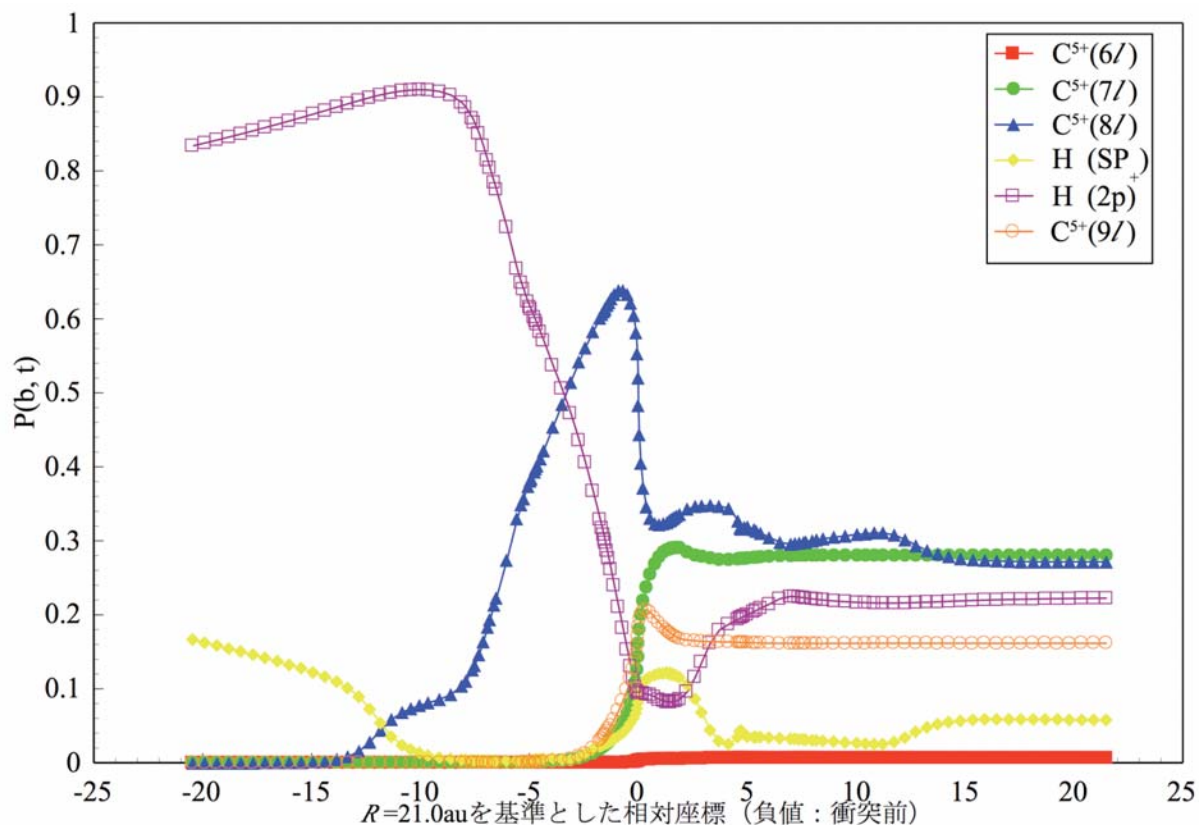
図 5.4.4.1 ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 62.5$  eV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)



5.4.4 ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

$$\Psi_{2p} = 0.412265790\Phi_{SP_+} - 0.404190861\Phi_{SP_-} + 0.81649658\Psi_{2p_{\pm 1}}$$

$H(2p_{\pm 1})$  による  $\Pi$  状態も含めたので  $H(SP_-)$  でなく  $H(2p)$  と表示  
 $C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。



- ・低エネルギー衝突、高エネルギー衝突で全体的な傾向の違いは小さい。

- ・  $R < 30$  au:  $H(2p)$  から  $C^{5+}(8l)$  への遷移がゆっくり起こる。

- ・ 最終的にはいろいろな状態に遷移。

図 5.4.4.2 ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 6.25$  keV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

横軸の数値 + 21 au =  $R$

## 5. 5 電荷移行の反応機構 — 量子数 $nl$ ごとの存在確率の核間距離依存性

(衝突中、各  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態状態に存在している電子の存在確率の核間距離依存性)

### 5. 5 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。

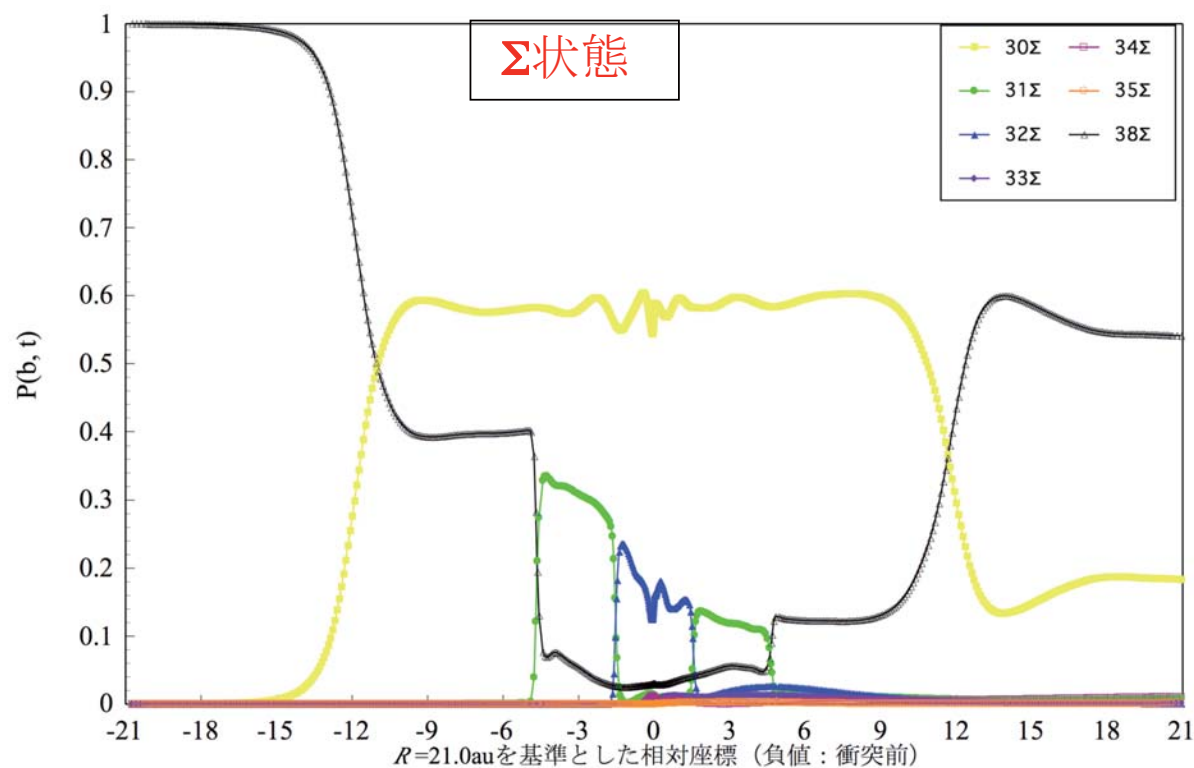


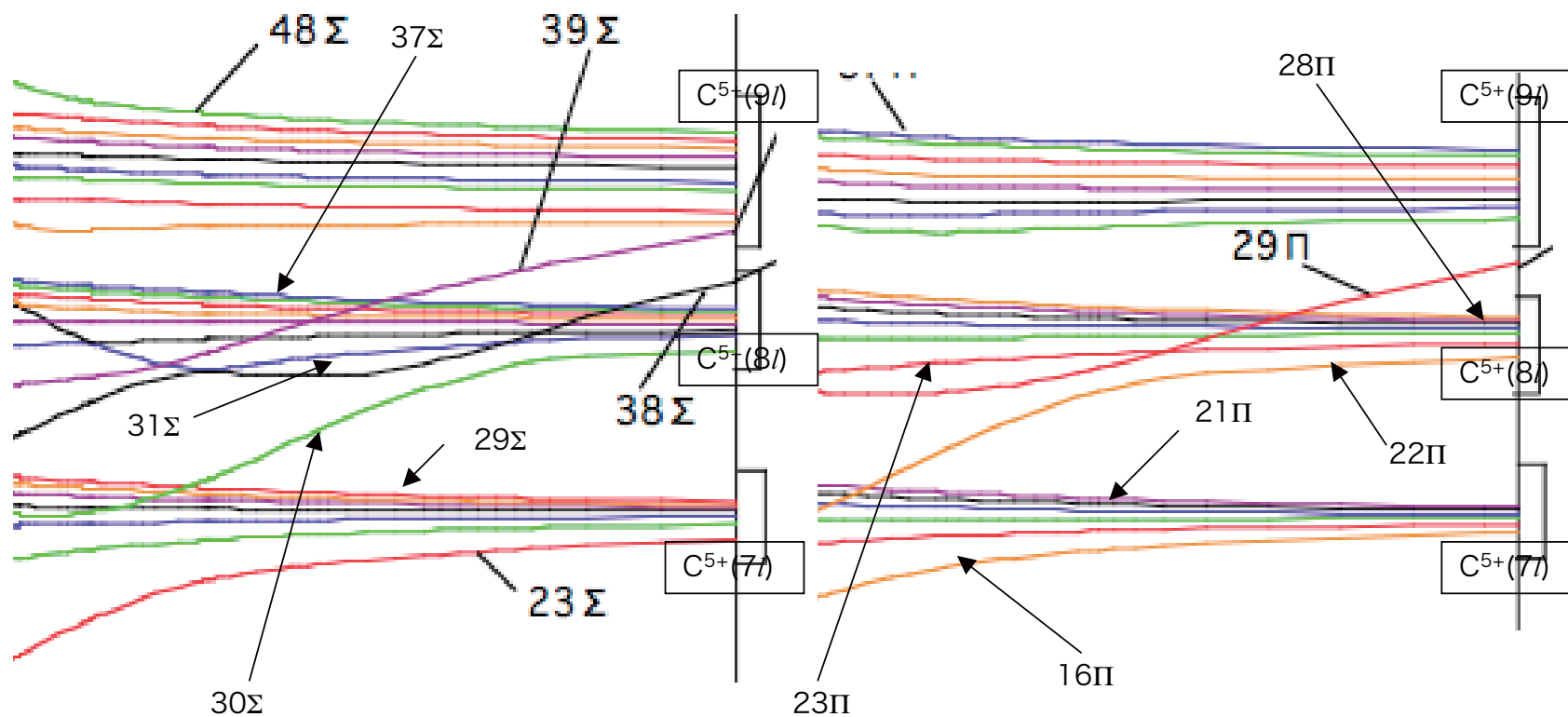
図 5.5.1 (a) ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依存性 ( $E = 62.5$  eV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

- $R > 35$  au: ポテンシャルエネルギー曲線の交差があっても始状態  $38\Sigma$  から遷移起こらず。

- $R \approx 35$  au:  $38\Sigma$  から  $30\Sigma$  に遷移。  $38\Sigma$  に残った確率 ( $\approx 0.15$ ) は  $R \approx 25.5$  au で  $31\Sigma, 29\Pi$  に、また  $R \approx 22.5$  au で  $32\Sigma$  へと次々に遷移。衝突後は  $32\Sigma \rightarrow 31\Sigma \rightarrow 38\Sigma$  と確率が戻る。

- $30\Sigma$  に遷移した確率は  $R \approx 26$  au でわずかに  $29\Pi$  に遷移、また衝突後  $30\Sigma$  のほとんどは  $R \approx 31$  au でその多くが  $38\Sigma$  に戻る。

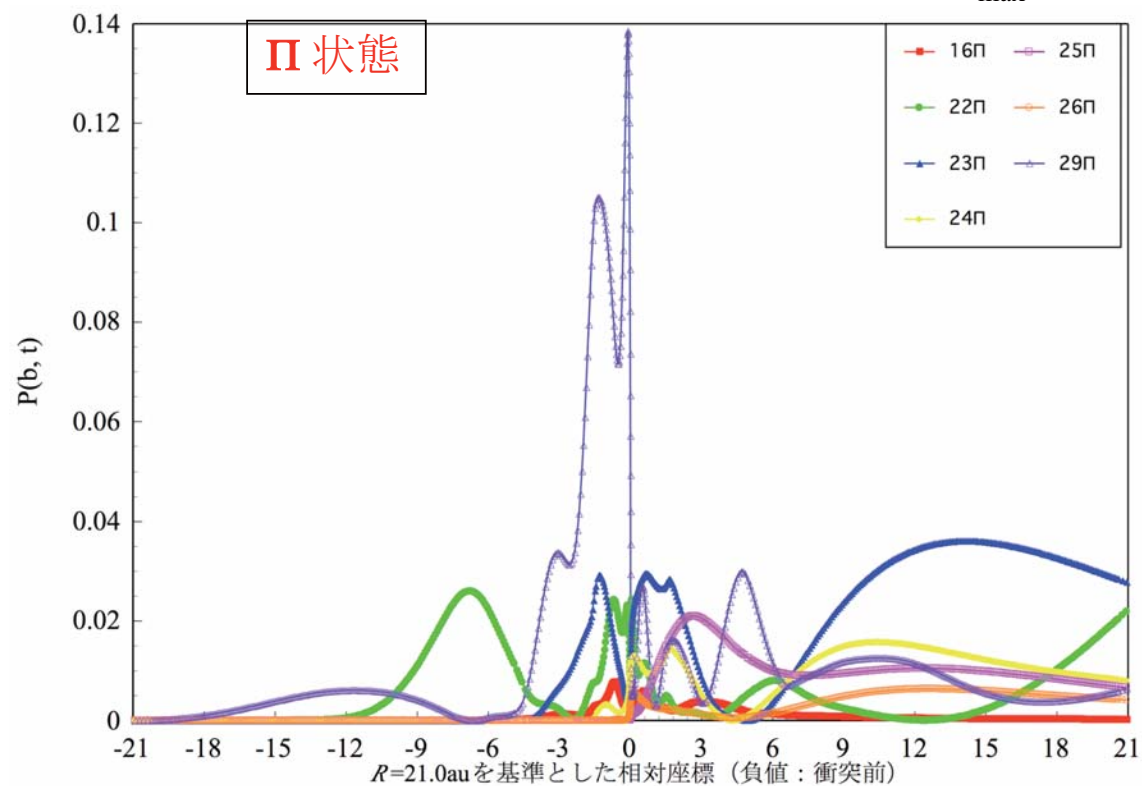
横軸の数値 + 21 au =  $R$  31

CH<sup>6+</sup>分子イオン ポテンシャルエネルギー曲線 :  $\Sigma, \Pi$  状態



## 5.5 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。



- $R \approx 33$  au:  $30\Sigma$  から  $22\Pi$  に遷移するがすぐにもどる。
- $R < 25.5$  au:  $38\Sigma$  から  $29\Pi$  に遷移した後、さまざまな  $\Pi$  にばらまかれる。

図 5.5.1 (b) ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 62.5$  eV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

横軸の数値 + 21 au =  $R$

## 5.5 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。

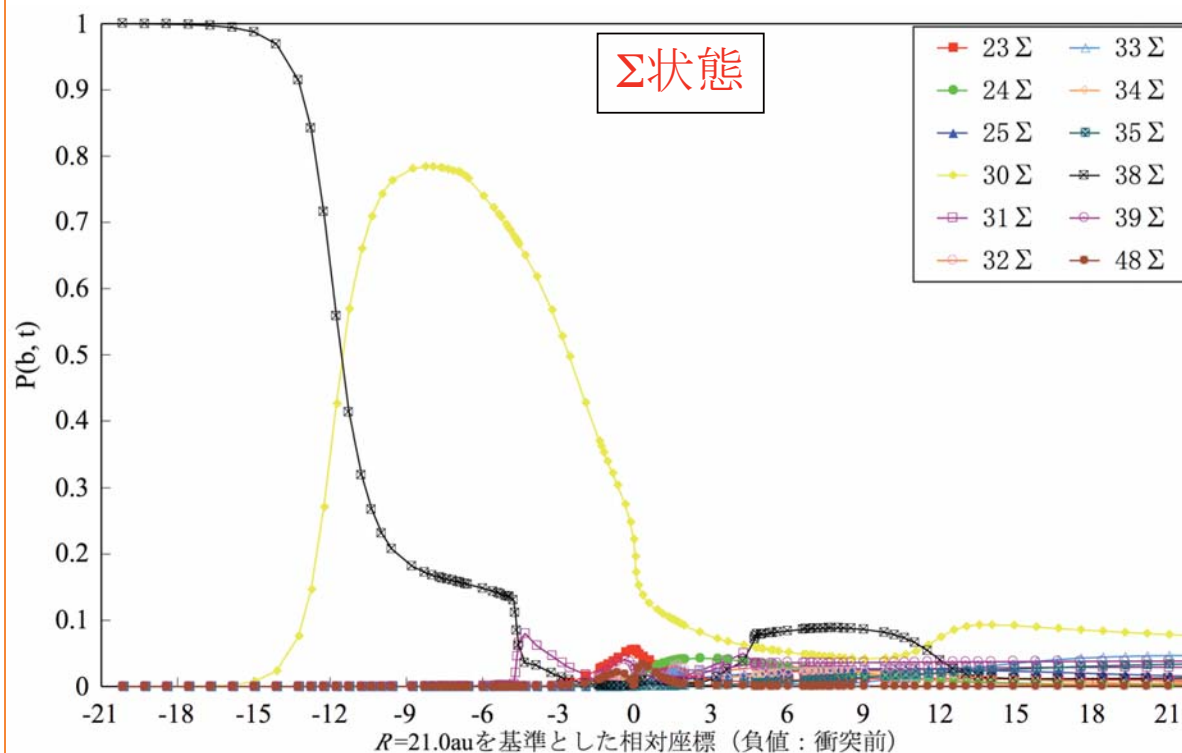


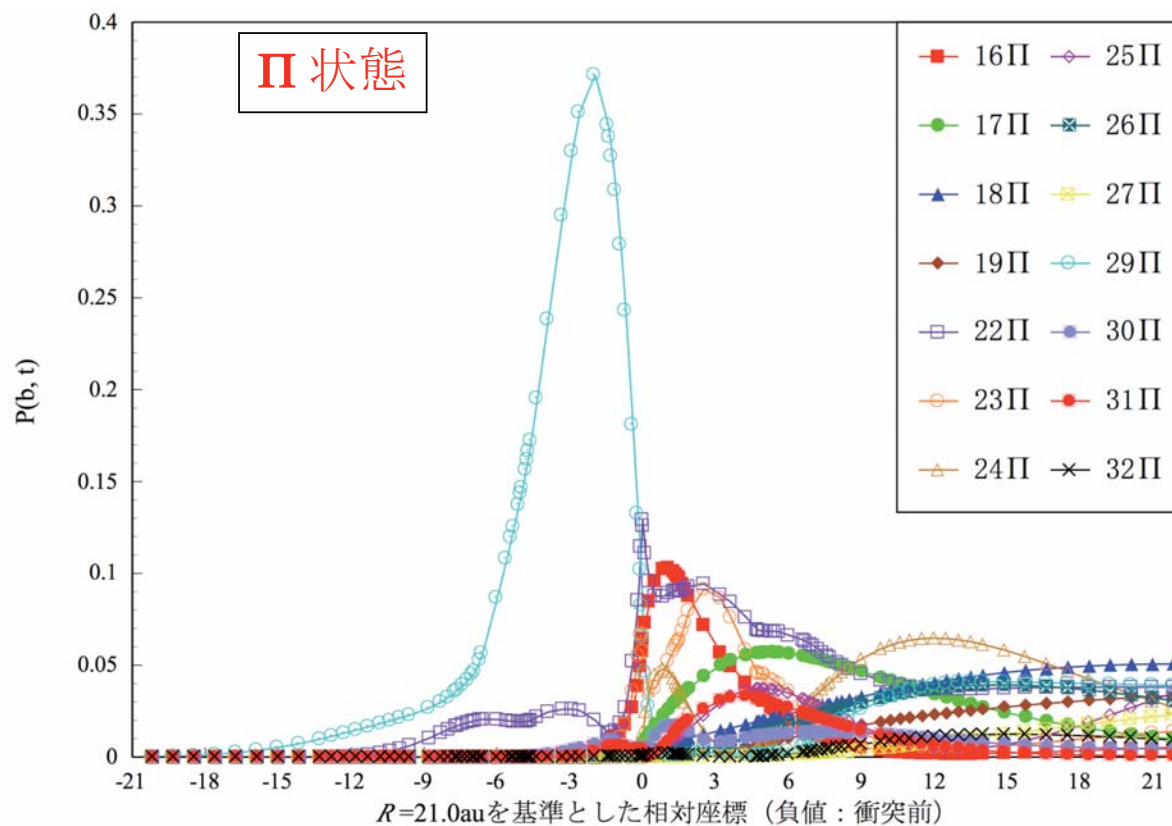
図 5.5.2 (a) ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E = 6.25$  keV/amu  $b = 21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

- $R > 35$  au: ポテンシャルエネルギー曲線の交差があっても始状態  $38\Sigma$  状態から遷移起こらず。
- $R \approx 35$  au:  $38\Sigma$  から  $30\Sigma$  に遷移。残った  $38\Sigma$  の確率 ( $\approx 0.15$ ) は  $R \approx 25.5$  au で  $31\Sigma$ 、 $22\Pi$ 、 $29\Pi$  に遷移。  $30\Sigma$  に遷移した確率は  $R \approx 29$  au で  $29\Pi$  に遷移。

横軸の数値 + 21 au =  $R$

5.5 ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合。

$C^{5+}(nl; n = 6, 7, 8, 9)$  の  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$  状態考慮。  $b = 21$  au,  $R_{\max} = 42$  au。



- ・  $R \approx 35$  au:  $38\Sigma$  から  $30\Sigma$  に遷移した確率は  $29\Pi$  に遷移した後、さまざまな  $\Pi$  状態にばらまかれる。

横軸の数値 + 21 au =  $R$

図 5.5.2 (b) ( $C^{6+} + H(SP_+)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25$  keV/amu  $b=21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

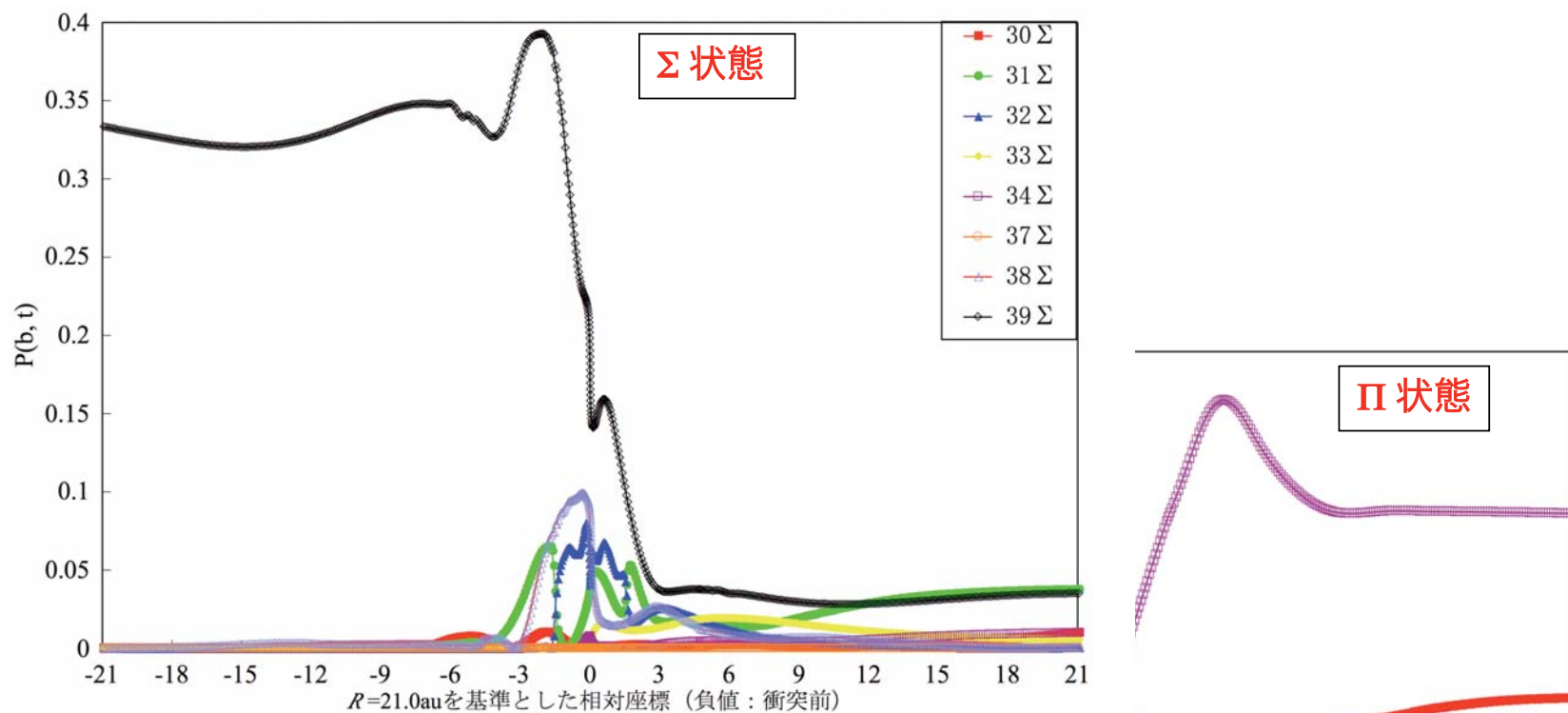
5.5 ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

図 5.5.3 (a) ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=62.5$  eV/amu  $b=21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

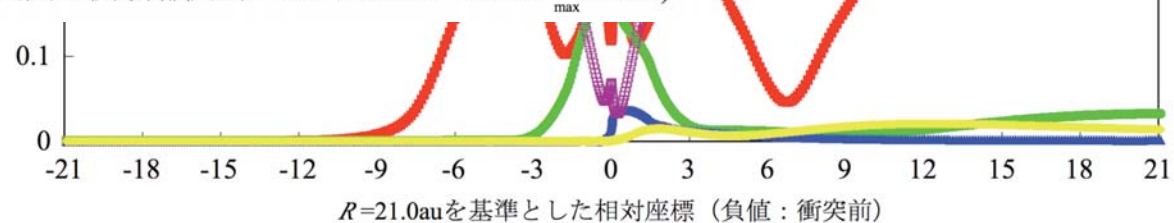


図 5.5.3 (b) ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=62.5$  eV/amu  $b=21.0$  au  $R_{\max} = 42$  au)

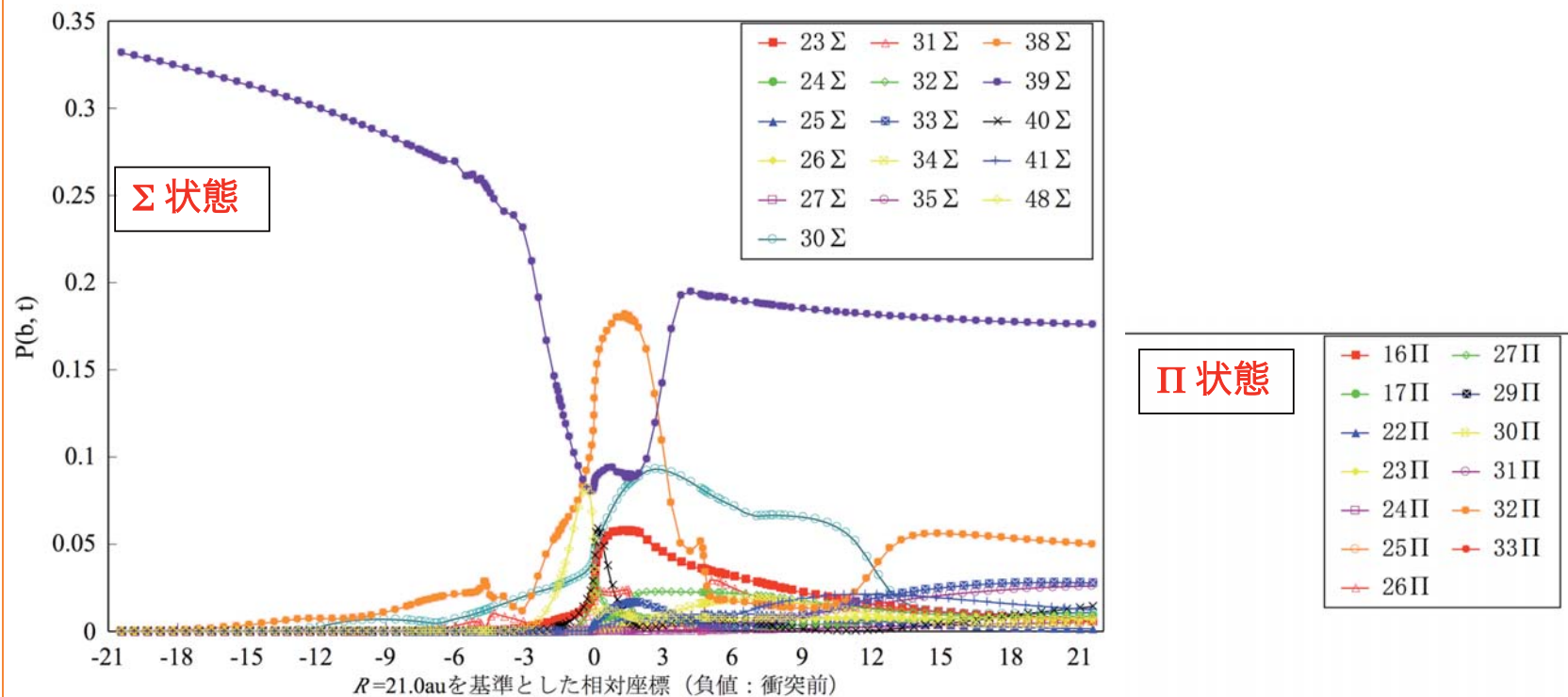
5.5 ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

図 5.5.4 (a) ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25\text{keV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}}=42\text{au}$ )

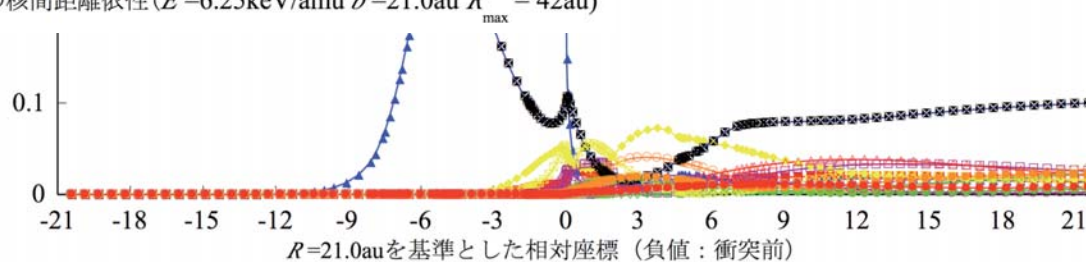


図 5.5.4 (b) ( $C^{6+} + H(SP_-)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25\text{keV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}}=42\text{au}$ )



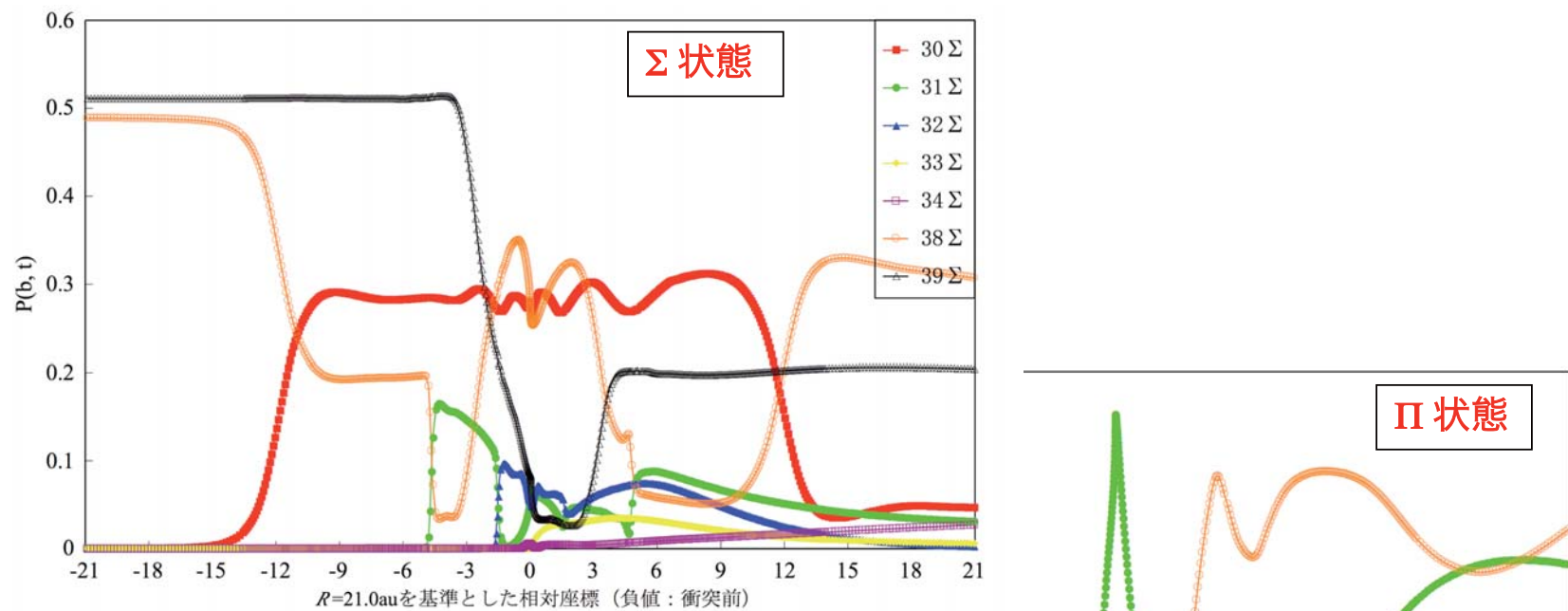
5.5 ( $C^{6+} + H(2s)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

図 5.5.5 (a) ( $C^{6+} + H(2s)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=62.5\text{eV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}}=42\text{au}$ )

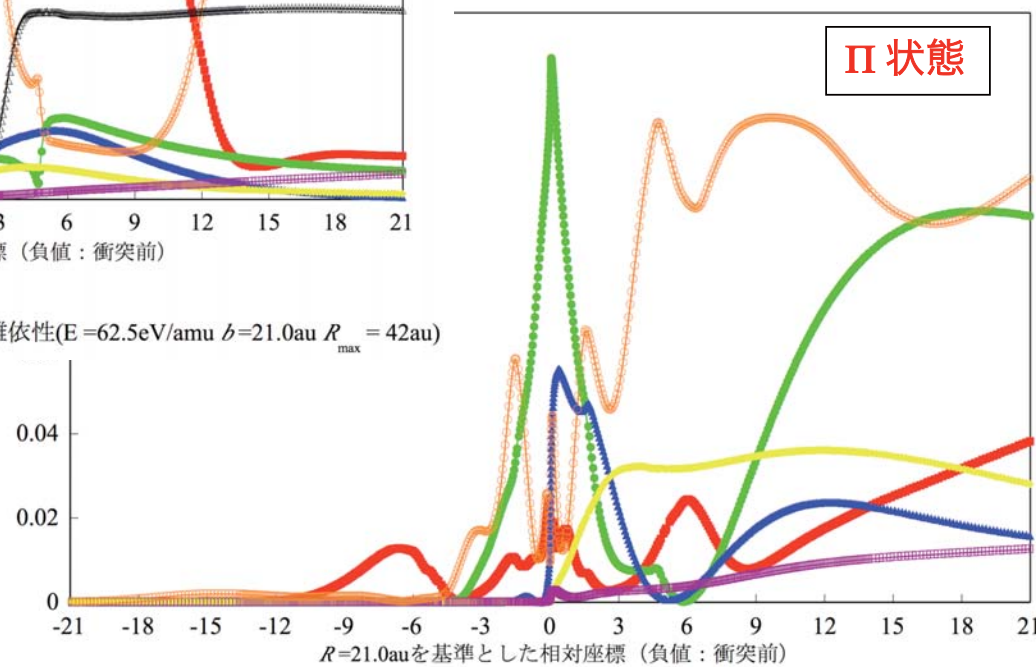


図 5.5.5 (b) ( $C^{6+} + H(2s)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=62.5\text{eV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}}=42\text{au}$ )

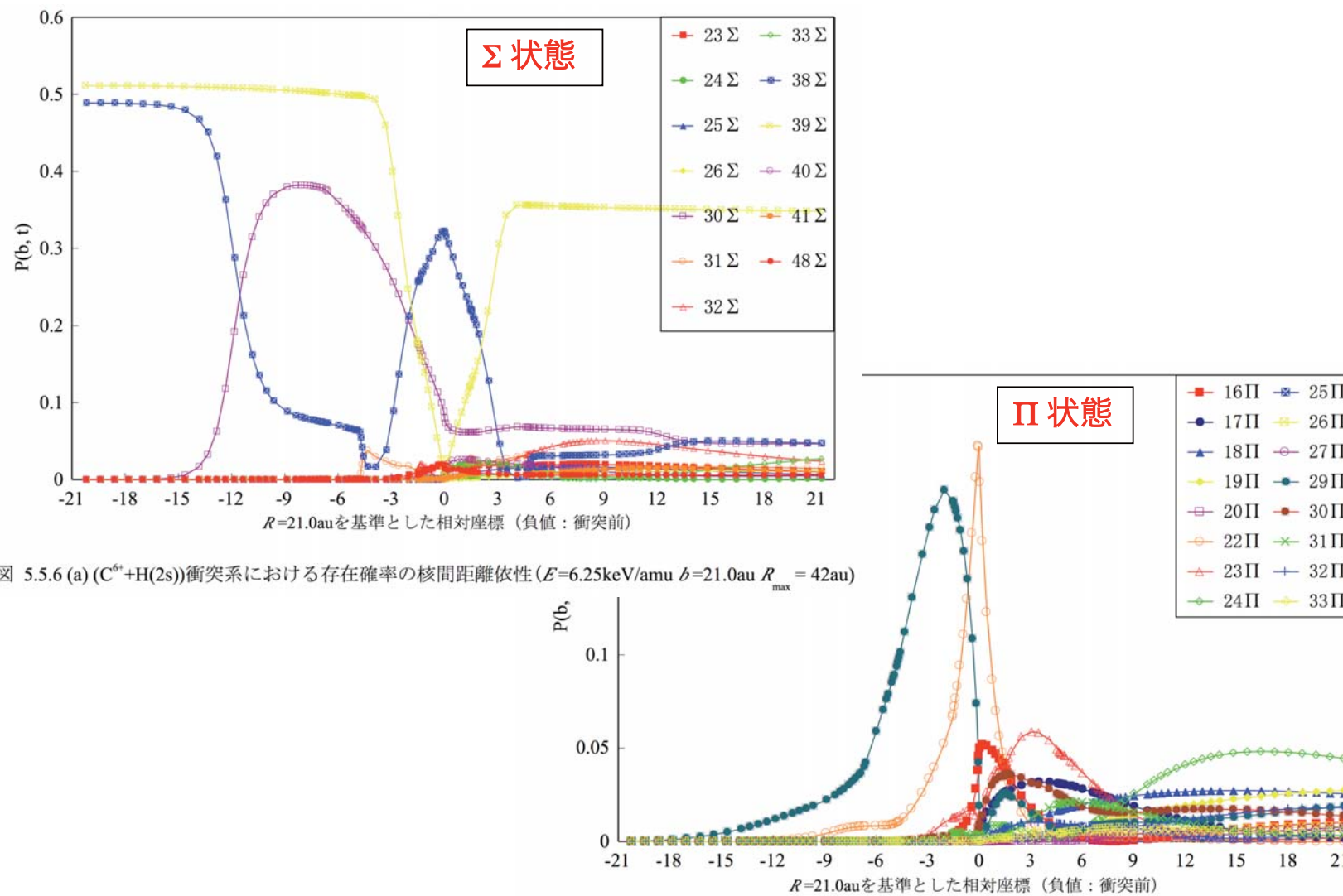
5.5 (C<sup>6+</sup> + H(2s)) 衝突系 : 高エネルギーの場合

図 5.5.6 (a) (C<sup>6+</sup>+H(2s))衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25\text{keV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}} = 42\text{au}$ )

図 5.5.6 (b) (C<sup>6+</sup>+H(2s))衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25\text{keV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}} = 42\text{au}$ )

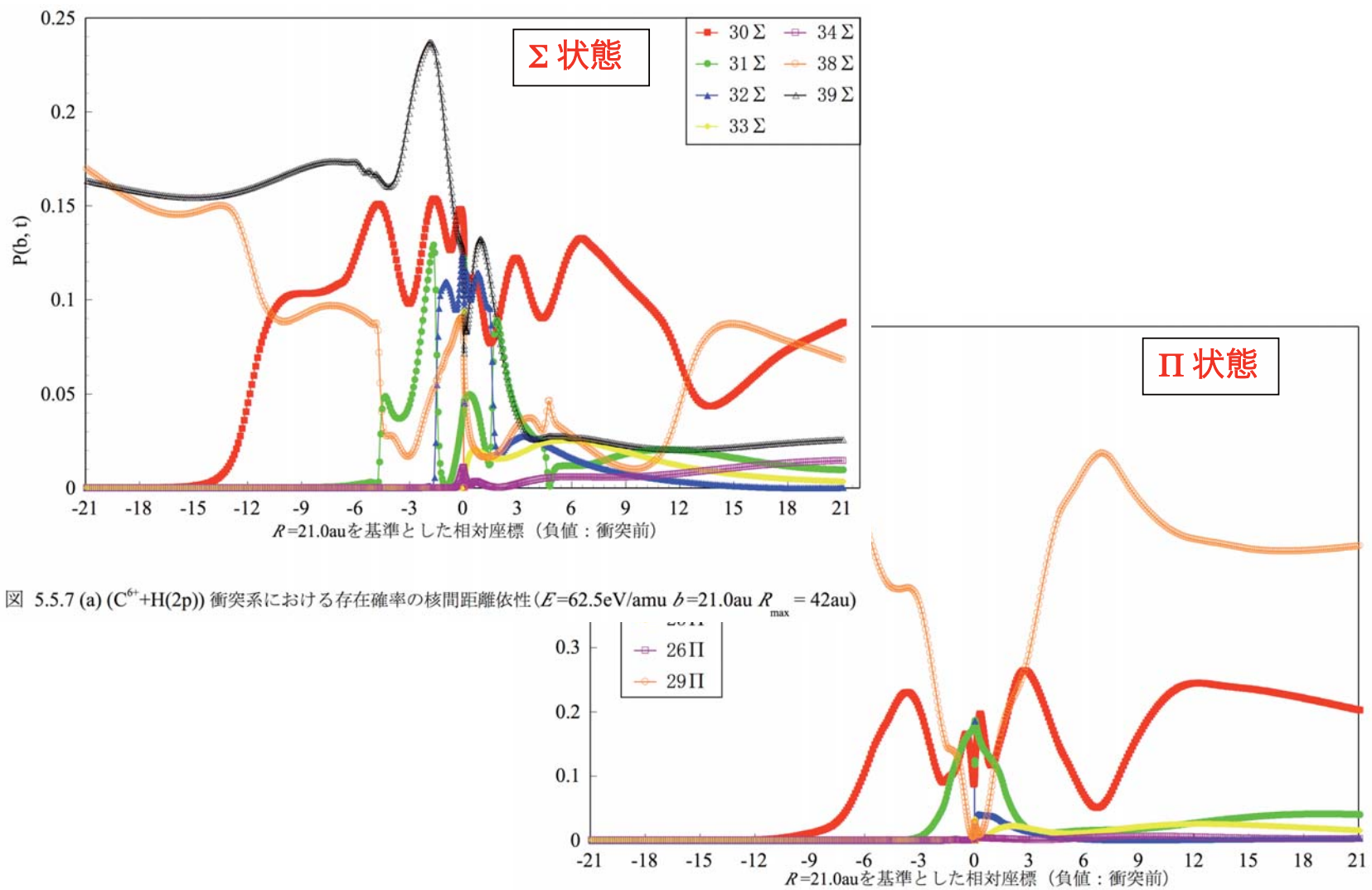
5.5 ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系：低エネルギーの場合

図 5.5.7 (a) ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=62.5\text{eV}/\text{amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}} = 42\text{au}$ )

図 5.5.7 (b) ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=62.5\text{eV}/\text{amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}} = 42\text{au}$ )



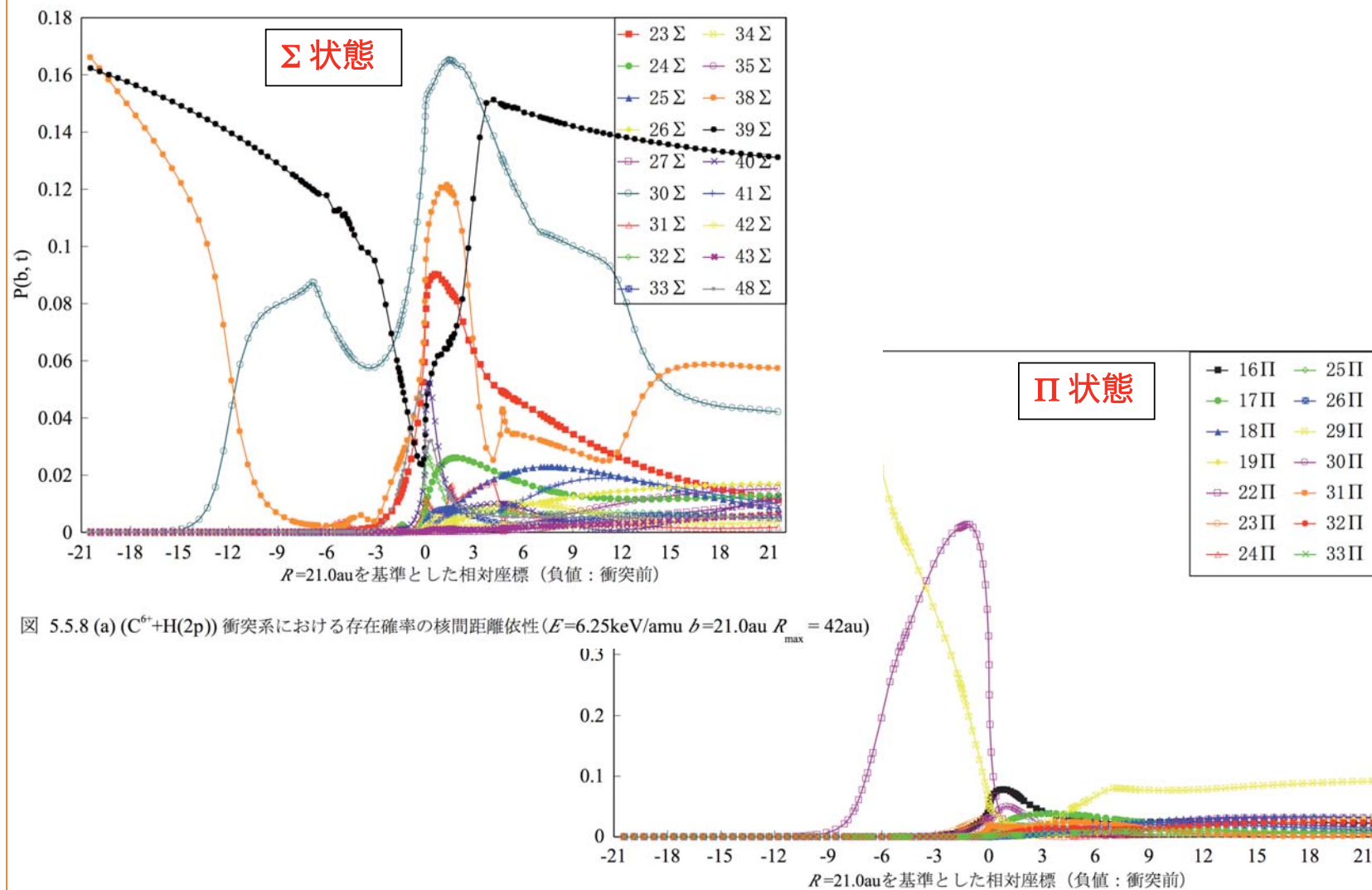
5.5 ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系：高エネルギーの場合

図 5.5.8 (a) ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25\text{keV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}} = 42\text{au}$ )

図 5.5.8 (b) ( $C^{6+} + H(2p)$ ) 衝突系における存在確率の核間距離依性 ( $E=6.25\text{keV/amu}$   $b=21.0\text{au}$   $R_{\text{max}} = 42\text{au}$ )

## 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

我々が開発した緊密結合方程式（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実行する方法）を解き， $(C^{4+}, C^{6+} + H(2s), H(2p))$  衝突系に対し電荷移行部分断面積を求め，シュタルクミキシングしている場合と比較検討を行った。

- (1) 標的水素原子が  $H(2s)$ ,  $H(2p)$  状態の場合とシュタルクミキシングしている  $H(SP_+)$ ,  $H(SP_-)$  状態の場合の全断面積には，低衝突エネルギー領域で若干差異が見られるが，その差異はそれほど大きくない。しかし，状態指定電荷移行断面積は両者でかなり異なっている。
- (2) 高衝突エネルギー領域では， $(X^{q+} + H^*(2s))$  衝突系の方が  $(X^{q+} + H^*(SP_+))$  衝突系よりも断面積は大きい。 $(X^{q+} + H^*(2p))$  衝突系ではちょうど逆の関係になっている。

## 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 ( $\text{N}^{5+} + \text{H}(2l)$ ) 衝突系に適用し、標的水素原子が  $\text{H}(2s), \text{H}(2p)$  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-イオン衝突の電荷移行断面積の計算を行う。
- (c) 衝突対の周囲にある環境の影響を考慮した、実際の核融合炉内のプラズマ状態により近い状態の衝突過程を扱う。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  $\text{C}^{q+}(q=1-6)$ 、窒素イオン  $\text{N}^{q+}(q=1-7)$ 、酸素イオン  $\text{O}^{q+}(q=1-8)$  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) 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的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，JT-60プラズマ設計グループリーダー藤田隆明博士，プラズマ設計グループ仲野友英博士，小関隆久博士(前プラズマ設計グループリーダー)，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），鈴木慎悟博士（前大阪大学基礎工学科准教授，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諸君，伊藤悠太君，青木龍太郎君，山口亜希子さんに感謝します。