



Title	高温高密度レーザープラズマ中の原子過程に関する理論的研究
Author(s)	河村, 徹
Citation	大阪大学, 1999, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3155391
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

高温高密度レーザープラズマ中の
原子過程に関する理論的研究

平成11年1月

河村 徹

内容梗概

本論文は、著者が大阪大学大学院工学研究科電子情報エネルギー工学専攻電磁エネルギー工学コース後期課程において行った、高温高密度レーザープラズマ中における原子過程に関する理論的研究の成果をまとめたものである。

レーザー核融合では、燃料球殻ターゲットにレーザーを照射し、圧縮加熱することによって固体密度の1千倍の密度と、1億度の温度を達成する必要がある。高強度のレーザー ($\sim 10^{14} \text{W/cm}^2$) を燃料球に照射すると、燃料球表面がプラズマ化し、その外側に噴出 (アブレーション) する。この時に得られるアブレーション圧力によって中心に向かう衝撃波が駆動され、燃料を加速し球心圧縮することによって中心部に高温部 (ホット・スパーク) を形成し、核融合点火を行う。中心部の核融合反応が十分に起こると、それを取り巻く低温高密度の主燃料部も燃焼し、高利得を達成することができる。

ホット・スパークの加熱の成否は、圧縮過程の均一性に大きく依存する。ところがターゲット表面の不均一、レーザー照射時の非一様性に起因する流体運動の擾乱が、球殻ターゲットの圧縮過程において流体力学的不安定性を引き起こし、高温高密度圧縮を妨げる。従って、均一圧縮実現のため、高真球度ペレット製作技術や、レーザー均一照射技術の開発が進められてきた。またその一方で、圧縮の不均一性に起因する流体力学的不安定性に対する理解が、実験及び理論シミュレーションの両面から進みつつある。実験サイドでは、均一圧縮に必要なレーザーやペレット製作の技術開発と並行して、爆縮物理の理解を進め、不均一圧縮の要因とホット・スパーク加熱の定量的関係を把握するため、ホット・スパークの時間的及び空間的变化をX線分光法によって観測している。具体的には、予め燃料と共に微量の Ar 等の元素をトレーサーとして混入させ、そのX線発光スペクトルによってホット・スパークの診断を行うというものである。

従来の微量混入させた Ar 等の発光スペクトルの解析には、その水素 (H) 様及びヘリウム (He) 様イオンの共鳴線スペクトル (例えば、 $\text{He-}\beta:1s^2 - 1s3p$ 、 $\text{Ly-}\beta:1s - 3p$) を用いた解析が行われてきた。近年、更に詳細なスペクトル情報によって爆縮プラズマのダイナミクスを解析するため、共鳴線の低エネルギー側に発光スペクトルを示す二電子励起イオンの存在が重要視されてきた。これらのイオンからの発光スペクトルは、サテライト (衛星) 線と呼ばれている。これまで主に解析が行われてきたサテライト線は、例えば $1s^2 2l - 1s 2p 2l$ や $1s^2 2l - 1s 3p 2l$ などに見られるように、遷移する発光電子に対して、同じ軌道或いは、エネルギー準位がより低い軌道に励起電子を持つ二電子励起イオンからの発光スペクトルであった。これらのスペクトルは、共鳴線から比較的、分解観測可能なエネルギー領域にあるために計測しやすいという利点をもって

いる．しかし、爆縮プラズマに見られるような高密度状態では、自由電子との頻繁な衝突過程によって、発光電子の軌道よりも高いエネルギー準位の軌道、特に、Rydberg軌道に電子を束縛した二電子励起イオンが多く存在すると考えられる．これらのイオンから発光するサテライト線は、共鳴線とは分解観測不可能なエネルギー領域に発光スペクトルを示し、実質上、共鳴線からの発光のように見える．これまで、このようなサテライト線の寄与は小さいものとして、暗黙の内に無視されてきたが、より詳細なスペクトル情報を解析に利用するようになりつつある現状において、理論的にその寄与を解析する必要性が浮上してきた．

本論文では、主として、高温高密度レーザープラズマにおいて、特に共鳴線と分解観測不可能なサテライト線の寄与に関する理論的研究の成果について述べる．このようなサテライト線の寄与を考慮するには、発光電子以外に高励起軌道に電子を束縛する二電子励起イオンのポピュレーションを求める必要がある．しかし、爆縮プラズマに見られるような高密度状態では、平均イオン間距離が、束縛準位の軌道半径(の期待値)とほぼ同程度になるため、必ずしもその軌道は、束縛状態を維持しない．従来、このような状況下における束縛準位の存在確率を評価する経験式が、Moreらによって提案されていた．本論文では、彼等の経験式は、高励起軌道の存在確率の評価には適しないことを明らかにした．また経験則に依らない第一原理からの理論解析により、Moreらの示す確率よりも高い確率で高励起軌道が存在することを示した．その結果、これまで暗黙の内に無視されてきた共鳴線と分解観測不可能なサテライト線の寄与が、無視できないものであることを初めて見出した．

本論文は全6章より構成されている．

第1章は緒論であり、レーザー爆縮核融合の原理について述べられている．そして、その中で高密度レーザープラズマにおけるX線スペクトル解析の重要性について述べ、本研究がどのような位置付けで関わってくるのかを、現在の本分野における研究動向に照らし合わせ説明し、その目的を明らかにする．

第2章は、レーザープラズマにおける原子過程の研究の現状をまとめ、X線スペクトルの理論解析に不可欠な各素過程についてレビューを行う．

第3章では、共鳴線と分解観測不可能なサテライト線の発光源となる、二電子励起イオンのポピュレーションの求解に対する理論モデルの提案を行う．また、その理論モデルの妥当性について検証する．さらに、高密度プラズマ中における高励起準位の存在確率を評価するために、これまで広く利用されてきたMoreらの経験式について考察し、その問題点を指摘する．高励起束縛状態の存在確率は、第3章において示されるように高次サテライト線の発光に大きく影響する．

第4章では、第3章の結果を受けて、高励起束縛状態の高密度プラズマ中における存在確率について、先のMoreらの経験式に対して、経験的因子を全く含まない第一原理に基づいた理論解析を行う．共鳴線近傍のサテライト線の寄与を考察するには、高励起準位に束縛電子を持つ二電子励起イオンのポピュレーションの正確な評価が重要である．第4章の考察から得られた知見を用いて、改めて共鳴線と分解観測不可能なサテライト線の発光量の寄与を評価する．

第5章では、前章において行った発光量の寄与に対して、この章ではStark広がりを

含めた、スペクトル形状に対する寄与について考察する．第 5 章の中で示されている実験計測結果の例において見られるように、He 様イオンの共鳴線 $\text{He-}\beta$ からの発光スペクトルは、その形状において、Stark 広がりが顕著な様子が見られる．本章でも共鳴線 $\text{He-}\beta$ に着目し、その近傍に発光するサテライト線の寄与を含めたスペクトル形状の評価を行う．

第 6 章は結論であり、本研究を通して得られた全ての知見を総括する．

目次

内容梗概	i
本論文で使用している単位系	ix
第1章 緒論	1
1.1 はじめに	1
1.2 レーザー爆縮核融合の原理	2
1.3 レーザー核融合におけるX線スペクトル解析の位置付けとその動向	4
1.4 本研究の目的と本論文の構成	6
参考文献	7
第2章 高密度レーザープラズマにおける原子過程	11
2.1 はじめに	11
2.2 プラズマにおける原子過程	11
2.2.1 レート方程式	12
2.2.2 衝突励起・脱励起	13
2.2.3 衝突電離、三体再結合	14
2.2.4 放射性脱励起	16
2.2.5 放射性再結合	16
2.2.6 二電子性再結合	16
2.2.7 自動電離	17
2.2.8 光電離、光励起	18
2.3 コロナ平衡、局所熱平衡	19
2.4 X線放射係数、吸収係数	20
2.4.1 自由自由遷移	21
2.4.2 自由束縛遷移	22
2.4.3 束縛束縛遷移	23
2.5 第2章まとめ	24
参考文献	24
第3章 高次サテライト線の考察と高励起準位の存在確率に対する問題提起	27
3.1 はじめに	27
3.2 ポピュレーション求解モデル	29
3.2.1 基底状態及び一電子励起イオンのポピュレーション	29

3.2.2	二電子励起イオンのポピュレーション	30
3.3	微量混入された Ar イオンのポピュレーション	33
3.4	H 様、He 様 Ar イオンからの X 線スペクトル	34
3.5	高励起束縛状態の存在確率に対する問題提起	37
3.6	第 3 章まとめ	40
	参考文献	40
第 4 章	高密度プラズマにおける高励起束縛状態の存在確率	43
4.1	はじめに	43
4.2	高励起束縛状態のエネルギー準位の求解	44
4.2.1	核ポテンシャルの遮蔽効果 (等方成分)	44
4.2.2	Stark 効果 (非等方成分)	46
4.2.3	摂動電界の確率分布	47
4.3	高励起準位のエネルギー・シフト	49
4.4	高励起束縛状態の有効統計重率	51
4.5	高次サテライト線の発光量に対する寄与	53
4.6	第 4 章まとめ	56
	参考文献	56
第 5 章	高次サテライト線の Stark 広がりを考慮した X 線スペクトルの理論解析	59
5.1	はじめに	59
5.2	スペクトル広がり	60
5.3	発光イオンに対する荷電粒子による擾乱の近似法	61
5.4	基礎方程式	62
5.5	高次サテライト線のスペクトル広がりに対する寄与	64
5.6	実験解析への応用	68
5.7	第 5 章まとめ	70
	参考文献	70
第 6 章	結論	73
補遺 A	GRASP コード	77
補遺 B	自動電離係数の導出	79
補遺 C	Griem の境界	81
補遺 D	Thomas-Fermi モデル	83
補遺 E	原子単位 (Atomic Unit)	85
補遺 F	束縛エネルギー準位の求解方法 (Pankratov, Meyer-ter-Vehn の方法)	87

	vii
補遺 G Stewart-Pyatt ポテンシャル	91
補遺 H 電子衝突広がりスペクトル形状の導出	95
H.1 相互作用表示	95
H.2 衝突近似	97
謝辞	101
業績目録	103

本論文で使用している単位系

特に断りのない限り、本論文中に出てくる各式で使用している単位系は、cgs 単位系である。例外として、cgs 単位系以外の単位系を用いている箇所は以下の通りである。

- 第2章 2.2.2 節「衝突励起・脱励起」～ 2.2.7 節「自動電離」のレート係数の表式では、その使用上の利便性を考慮して、エネルギー及び温度の単位は「eV」で表記している。
- 第3章において、エネルギー及び、温度の単位は全て「eV」である。
- 第4章において現れる全ての式は、
 - (1) 表式が簡単になる。
 - (2) 解析コードの作成が容易になる。

以上の点を考慮して、原子単位 (Atomic Unit) を用いている。尚、グラフ及び文章中に現れる密度と、温度 (エネルギー) の単位は各々、「 cm^{-3} 」、「eV」を用いている。

- 補遺 C において、エネルギー及び、温度の単位は全て「eV」である。
- 補遺 A 及び補遺 F において現れる全ての式は、原著の論文の表記にならない原子単位を用いている。

第1章 緒論

1.1 はじめに

文明の発展に従って、人類のエネルギーの需要は増加の一途をたどっている。いろいろの推測はあるが、全世界のエネルギー消費量は次のようなものとされている [1]。この

表 1.1: 全世界のエネルギー消費量

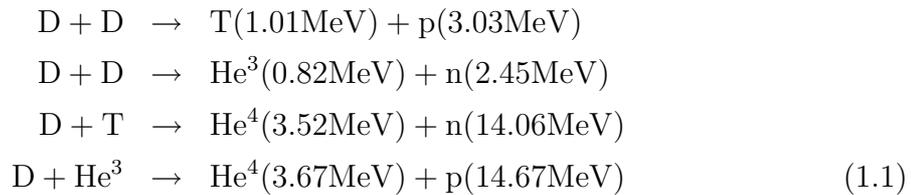
～ 1850 年	0.3 ～ 0.5Q/1 世紀
1850～ 1950 年	4Q/1 世紀
1950～ 2000 年	11Q/半世紀
2000～ 2050 年	61Q/半世紀

ように、19 世紀に入ってから急速にエネルギー消費は増え、1975 年ごろでは約 0.3Q/年の消費率とされている（表中、1Q = 10^{18} BTU(British Thermal Unit) = 1.05×10^{21} J = 1.05×10^{28} erg である。）

これに対し、石油、石炭などの化石燃料の利用可能な埋蔵量は約 80Q 程度と見積もられており、このままでは 100 年内これらの資源は消費されつくしてしまうことになる。従って、化石燃料にかわる次代のエネルギー資源として、原子力エネルギーが重要視されている。

核分裂連鎖反応による原子炉は現在稼働中である。現在実用化されている熱中性子炉は、ウランの同位元素 U - 235 の熱中性子による核分裂連鎖反応によるもので、この同位元素は、天然ウランの 0.7% しか利用できない。ゆえに利用できるエネルギー量としては、約 3Q 程度と見積もられており、これではとても十分な量とは言えない。一方、核融合反応による原子力エネルギー利用の可能性を考えると、燃料とする元素は、軽い核、特に重水素、三重水素、ヘリウム - 3 である。重水素は極めて豊富で、 $1.35 \times 10^9 \text{km}^3$ の海水中の水素の 0.015% が重水素 (D) である。この D - D 反応による核融合エネルギー資源は $3.7 \times 10^9 \text{Q}$ に相当する。この資源は遍在することなく、また高放射能の核分裂生成物に悩まされることも少ない。しかし、この夢のエネルギー資源も、今は未だ実用化に至っていない。水素爆弾のような爆発的核融合反応の場合を除いて、制御された核融合反応によるエネルギー利用の研究開発は、まだ基礎的段階にある。

利用可能な核融合反応として現在考えられているものを下記に示す．



ここで、Tは三重水素、pは陽子でnは中性子を示している．

イオンは正に帯電しているため、核融合を起こすためには、Coulomb 障壁を乗り越える必要がある．つまり、Coulomb 障壁を乗り越えられるような高エネルギーにまで原子核を加速してやらねばならない．例えば、D - T (重水素 - 三重水素) 反応の断面積 (cross section) は、50keV 以上になると急激に大きくなり、100keV でピークに達する．そしてさらに高エネルギーになると徐々に減少する．

高エネルギーにまで原子核を加速するために加速器を利用しても、そこから出てくる重水素ビームは残念ながら使い物にならない．なぜなら、ビームをトリチウムか重水素の固体標的に入射した時、大部分のエネルギーが標的の加熱や弾性衝突、イオン化のために失われてしまうからである．また、ビームを互いに衝突させる場合も、加速に必要なエネルギーよりも大きな出力が得られるほど、ビームを高密度にすることはできない．問題の解決のためには、Maxwell 分布の裾野にある高速粒子が、核融合を促進するようなプラズマを作る必要がある．Maxwell 分布の場合、弾性衝突は分布関数を変化させず、またプラズマの加熱に使われたエネルギーは、粒子が反応するか容器から逃げるかするまで保持される．これが核融合を起こすためには、高温プラズマを必要とする理由であり、熱核融合反応 (thermonuclear fusion reaction) と呼ぶ理由である [2] ．

1.2 レーザー爆縮核融合の原理

重水素 (D) と三重水素 (T) が高速で衝突すると、核力により融合し、不安定な核が形成される．これがヘリウム (アルファ粒子) と中性子に分裂するとき、大量のエネルギーが放出される．重水素・三重水素を超高温度に加熱することにより、このような衝突を十分頻繁に起こすことができる．衝突の確率は密度が高いほど大きくなる．比較的 low 密度 (10^{14} 個/cm³) で、長い時間 (数秒) にゆっくりと核融合を行う方式が磁場閉じ込め核融合 (Magnetically Confinement Fusion:MCF) 方式であり、高密度状態 (5×10^{25} 個/cm³、固体密度の 1 千倍) を実現し、短時間 (100 億分の 1 秒) に核融合反応を十分に行う方式が慣性核融合 (Inertial Confinement Fusion:ICF) 方式である．レーザーを用いた慣性核融合をレーザー核融合という [3] ．

球状の DT 燃料ターゲット (質量密度 $\rho = 0.2\text{g/cm}^3$) にレーザーを均一に照射すると、図 1.1(a) のようにターゲット表面でレーザーの吸収が起こり、急速に高温 (2 ~ 3 千万度) に達し、表面が超高压 (数千万気圧) となる．この圧力でターゲットは中心方向に加速される．加速の原理はロケット推進と同じである．加速された燃料が球中心

で衝突すると、圧縮と同時に加熱が起きる．十分球対称であれば、中心部は1億度程度にまで加熱され、核融合反応を開始する．核融合炉では、初期半径3mm程度のターゲットを0.1mm程度にまで爆発的に収縮（爆縮）させることが必要である．このため、高度のレーザー照射均一性やターゲット均一性が要求される．

球対称な爆縮が実現すれば、図1.1(b)のような圧縮状態が実現する．中心部は高温で比較的低密度の点火部が形成され、その周りには低温高密度の主燃料部が形成される．中心部における核融合反応に伴い、高エネルギーのアルファ粒子と中性子が多量に発生する．中性子はそのまま外部に逃げてしまうが、アルファ粒子は周りの燃料と衝突を繰り返し、その結果、燃料は加熱される．これを自己加熱という．自己加熱が十分起こると周りの主燃料部も高温となり、核融合反応は連鎖的に起こる．これを自己点火という．

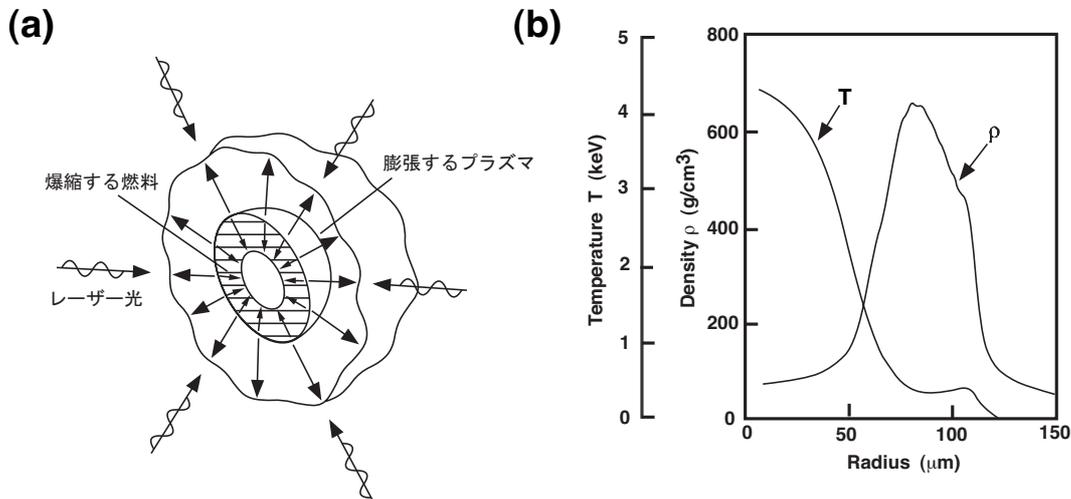


図 1.1: (a) レーザー核融合の原理と、(b) 球対称爆縮時のコア・プラズマの温度密度分布
 (a) 球状ターゲットにレーザー ($\sim 10^{14} \text{W/cm}^2$) を均一に照射すると、表面でレーザーの吸収が起こり、高温の膨張プラズマが形成される．この膨張によるアブレーション圧力によって燃料プラズマは圧縮される．
 (b) 中心部に高温低密度のホット・スパーク部が形成され、その周りを低温高密度の主燃料部が取り囲む．

アルファ粒子は、慣性核融合の尺度 ρR (密度 \times 半径) が $0.3 \sim 0.4 \text{g/cm}^2$ 程度あると、十分衝突を行ってプラズマを加熱し、自己点火を起こす．このことから点火に必要な燃料の量 (加熱すべき燃料の全原子数 N) は、数密度を n (個/cm³) とすると、

$$\begin{aligned} N &= \frac{4\pi}{3} R^3 n \\ &= \frac{4\pi}{3} (nR)^3 \frac{1}{n^2}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

であることが分かる．点火条件は $\rho R = 0.4 \text{g/cm}^2$ であり、 $\rho \propto n$ であることから、 N は密度の2乗に逆比例する．つまり、圧縮密度を高めれば、それだけ少量の燃料で自己

点火を行うことができ、小爆発で制御可能な核融合炉を実現できる．これがレーザー核融合の目指すところである．

1.3 レーザー核融合におけるX線スペクトル解析の位置付けとその動向

レーザー核融合では、強力なレーザー光 ($\sim 10^{14} \text{W/cm}^2$) を球殻燃料ターゲットに照射し、高温高密度プラズマを生成する．図 1.2 は、直接駆動型レーザー爆縮方式と呼ばれる方式のシナリオと、それにおけるX線スペクトル解析の位置付けについて簡単に図示したものである．

図に示されているように、燃料ターゲットはシェル構造を持ち、その内側に固体もし

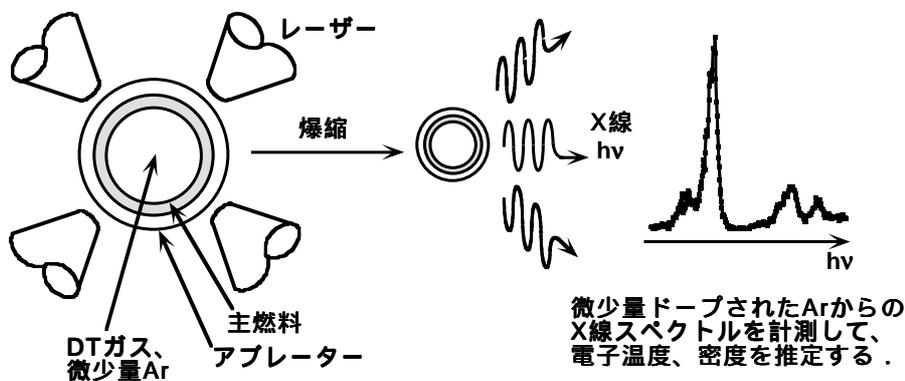


図 1.2: レーザー核融合におけるX線スペクトル解析の位置付け
中心部のDT燃料ガスと共に、微量のArガスを混入させ、爆縮過程で発生するArイオンからのX線スペクトルによって、コア・プラズマの温度密度の計測を行い、爆縮ダイナミクスを把握する．

くは液体状の重水素・三重水素 (DT) の主燃料層を有している．また中心部には高圧 (10 気圧以上) のDTガスが充填されている．実際の実験では、プラズマの電子温度及び電子密度を計測するために、微量のArガスをトレーサーとして混入させている．前節でも述べたように、ターゲットにレーザーが照射されると、ターゲット表面でレーザーの吸収が起こり、アブレターが加熱されて外側に向かって膨張する．この膨張の反作用によって燃料が内向きに加速されて圧縮される．このときのプラズマの密度は、主燃料部では1000倍程度にまで圧縮される．また中心部は圧縮とともに加熱され、核融合点火源となる高温低密度のコア (ホット・スパーク) が形成される．このような高温プラズマが生成された時、中心部に微量混入させたArは、その殆どが水素 (H) 様あるいはヘリウム (He) 様イオン程度にまでイオン化が進み、それらの励起イオンからの放射性脱励起によって、数 keV のX線を発生する．図 1.3 は、空間積分されたArのX線スペクトルの時間発展の実験結果の一例を示しており、He様Arイオンからの

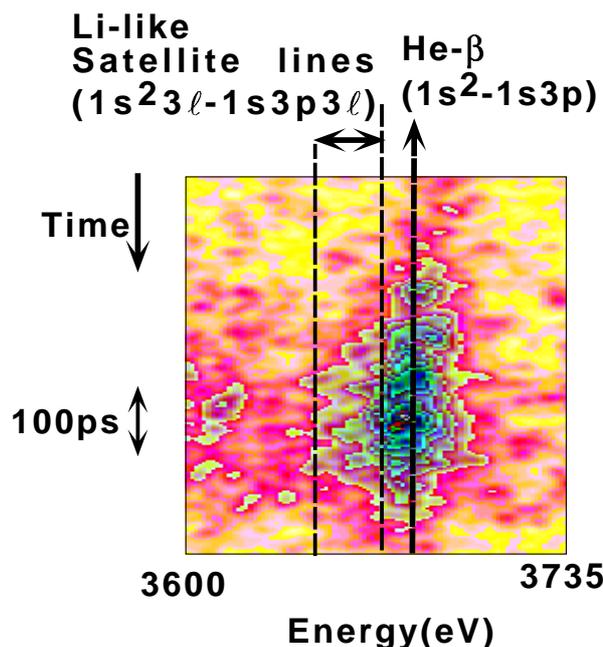


図 1.3: 空間積分された He 様 Ar イオンの共鳴線 He- β と Li 様サテライト線 ($1s^2 3l - 1s3p3l$) の時間発展の計測例

Li 様サテライト線は、共鳴線 He- β の低エネルギー側に発光する。

発光スペクトルとして、共鳴線 He- β ($1s^2 - 1s3p$) と、そのリチウム (Li) 様サテライト線 ($1s^2 3l - 1s3p3l$) の発光が観測されているのが分かる。発生する X 線は、その時のコア・プラズマの温度密度の情報を持っており、得られた X 線スペクトルは、ホット・スパークの爆縮ダイナミクスを理解する上で重要な手がかりとなる。

実際、大阪大学レーザー核融合研究センターにおける「激光 XII 号」レーザー装置を使った実験において、微量混入させた Ar イオンからの共鳴線 He- β 及び Ly- β ($1s^2 - 1s3p$) の発光強度比やスペクトルの半値全幅を用いた、電子温度及び電子密度の解析結果が、西村らの研究チームによって報告されている [4, 5, 6]。また、図 1.3 や図 1.4 において見られるような、Li 様イオンからのサテライト線を利用しようとする試みがあり、Mancini[7]、Keane や Hammel[8, 9] らの研究チームは、Li 様サテライト線を含む共鳴線 He- β の X 線スペクトル形状による解析結果を報告している。また、Woolsey らの研究チームは、共鳴線 He- β と Li 様サテライト線の発光強度比による電子温度の解析結果を報告している [10]。このように、爆縮プラズマのダイナミクスの解析を行うために、共鳴線のみならず、その近傍のサテライト線を利用して解析しようとする試みが数多くある。

レーザー核融合プラズマ以外の分野においても、サテライト線を積極的に利用してプラズマの温度密度を計測しようとする試みがある。Gabriel と Paget は、 θ ピンチ・プラズマの計測に、He 様窒素 (N) 又は酸素 (O) イオンの共鳴線 He- α 近傍のサテライト線 ($1s^2 2l - 1s2p2l$) を用いている [11]。また Rosmej は、 z ピンチ・プラズマや [12]、更に近年では、レーザー・プラズマの X 線スペクトルについて研究を行っている。レ-

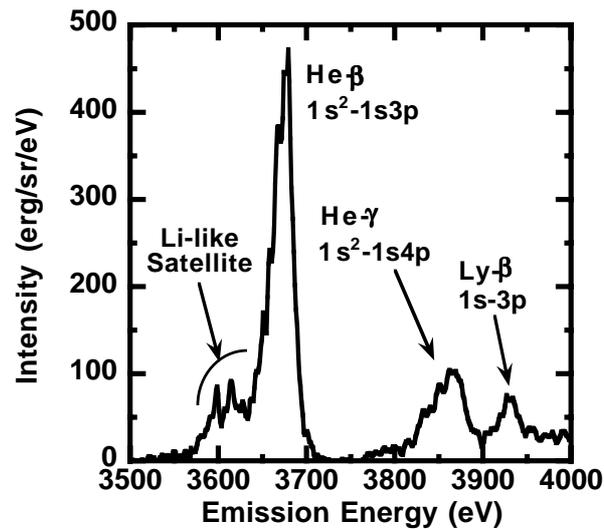


図 1.4: H 様、He 様 Ar イオンからの空間時間積分された X 線発光スペクトルの計測例

ザー・プラズマの研究では、Mg ターゲットに最大 10^{18}W/cm^3 のレーザー強度で、ピコ秒のパルス幅を持ったレーザーを照射した時に得られる X 線スペクトルの解析を行い、ベリリウム (Be) 様イオンからのサテライト線 ($1s^2 2lnl' - 1s 2p 2lnl'$) が重要な役割を担うことを示した [13] .

これらの研究報告から全体的に言えることは、現在のプラズマからの X 線スペクトルの解析方法の動向としては、より詳細なスペクトル情報を積極的に利用しようとする方向性がある。特に、低エネルギー側に現れるサテライト線に対する解析が進みつつあり、それによってプラズマ・ダイナミクスの解析精度の向上を狙おうとする試みが主流となっている。

1.4 本研究の目的と本論文の構成

本論文は、レーザー核融合プラズマにおける原子過程に関する理論的研究の成果をまとめたものである。本章 1.3 節で述べたように、現在のプラズマ計測における X 線スペクトルの解析には、より詳細なスペクトル情報を積極的に利用しようとする方向性がある。これまで用いられてきた「詳細なスペクトル情報」とされているサテライト線は、発光電子以外に、それと同じ軌道あるいは、エネルギー的に近傍の軌道に電子を束縛する多電子励起イオンからの発光スペクトルである。しかし、レーザー核融合プラズマに見られるような高密度プラズマでは、イオンと自由電子の衝突過程が頻繁に起こっており、その結果、連続準位に近い Rydberg 軌道に電子を束縛する多電子励起イオンが多数存在すると考えられる。これらの電子は、発光電子が遷移する一方で、それ自身は遷移することなく、元の軌道に束縛されたままの状態を保っている電子であり、今後、本論文においてこれらの電子のことを「傍観者」という意味を込めて、スペクテーター電子と呼ぶことにする。

スペクテーター電子を Rydberg 軌道に束縛する二電子励起イオンからの発光スペクトルの特徴としては、以下の事が挙げられる。

- (1) 一電子励起イオンからの発光である共鳴線スペクトルに対して、「非常に」近接したエネルギー位置に発光スペクトルを示す。後の章で示すように、これらのサテライト線は、共鳴線と分解観測不可能なスペクトル線群を呈する（Rydberg 軌道にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンからのサテライト線を、本論文では特に、高次サテライト線と呼ぶことにする。）
- (2) LS カップリングにより、項の数が非常に多くなるため、線スペクトル数も非常に多くなる。

本論文では主として、高次サテライト線に対する理論解析を行うと共に、その理論解析に必要な高温高密度プラズマに特有の物理現象を明らかにすることを目的としている。本論文の構成は以下の通りである。

本章では、核融合反応過程、レーザー爆縮核融合の原理について述べ、その中で高密度レーザープラズマと原子過程の関わりについて、X線スペクトル解析に視点を当てて述べた。また本研究が全体の中でどのような位置付けをされているのかを、現在の本分野の研究動向に照らし合わせ説明し、その目的を明らかにした。

第2章は、レーザープラズマにおける原子過程の導入的内容になっている。X線スペクトルの理論解析に不可欠な各素過程について簡単にレビューを行う。

第3章では、高次サテライト線の寄与を考察するにあたって、その発光源となる二電子励起イオン（高励起準位にスペクテーター電子を束縛するイオン）のポピュレーションの求解に対する理論モデルの提案を行う。また、その理論モデルの妥当性を検証する。さらに、高密度プラズマ中における高励起準位の存在確率を評価するために、これまで広く利用されてきた Moreらの経験式について考察し、その問題点を指摘する。高励起束縛状態の存在確率は、第3章で示すように高次サテライト線の発光に大きく影響する。

第4章では、第3章の結果を受けて、高励起束縛状態の高密度プラズマ中における存在確率について、先の Moreらの経験式に対して、経験的因子を全く含まない第一原理に基づいた理論解析を行う。共鳴線近傍の高次サテライト線の寄与を考察するには、高励起準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンのポピュレーションの評価が重要である。第4章の考察から得られた知見を用いて、改めて高次サテライト線の発光量の寄与を評価する。

第5章では、第4章において行った高次サテライト線の発光量の寄与に対して、Stark 広がりを含めた、スペクトル形状に対する高次サテライト線の寄与について考察する。この章において示す実験計測結果の一例からも分かるように、He 様イオンの共鳴線 He- β の発光スペクトルは、Stark 広がりが顕著に現れており、第5章でも、共鳴線 He- β に着目して、その近傍に発光する高次サテライト線の寄与を評価する。

第6章は結論であり、本研究を通して得られた全ての知見を総括する。以上が本論文の構成である。

参考文献

- [1] 宮本健朗、核融合のためのプラズマ物理 ー改訂版ー (岩波書店、1987) 第1章 .
- [2] F.F.Chen、内田袋二郎訳、プラズマ物理入門 (丸善、1977) 第9章 .
- [3] 高部英明、三間囿興、核融合研究別冊、特集 ー激光 XII 号によるレーザー核融合研究の現状と展望ー, **68**, 13(1992).
- [4] H. Nishimura, T. Kiso, H. Shiraga, T. Endo, K. Fujita, A. Sunahara, H. Takabe, Y. Kato and S. Nakai: Phys. Plasmas **2**, 2063(1995).
- [5] Yoshihiro Ochi, Hiroaki. Nishimura, Kazuhisa. Fujita, Shuji. Naruo, Isamu. Niki, Atsushi. Sunahara, Hiroyuki. Shiraga, Hiroshi. Azechi, Hideaki. Takabe, Sadao. Nakai and Kunioki. Mima: Technology Reports of the Osaka University **48**, No.2319, 157(1998).
- [6] K. Fujita, Y. Ochi, H. Nishimura, H. Azechi, N. Miyanaga, H. Shiraga, I. Uschmann, M. Vollbrecht, E. Förster, A. Sunahara, H. Takabe and K. Mima: J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **58**, 585(1997).
- [7] R. C. Mancini, C. F. Hooper, Jr., N. D. Delamater, A. Hauer, C. J. Keane, B. A. Hammel and J. K. Nash: Rev. Sci. Instrum. **63**, 5119(1992).
- [8] C. J. Keane, B. A. Hammel, D. R. Kania, J. D. Kilkenny, R. W. Lee, A. L. Osterheld, L. J. Suter, R. C. Mancini, C. F. Hooper, Jr. and N. D. Delamater: Phys. Fluids B **5**, 3328(1993).
- [9] C. J. Keane, B. A. Hammel, A. L. Osterheld, R. W. Lee, D. R. Kania, L. J. Suter, R. C. Mancini, C. F. Hooper, Jr. and N. D. Delamater: J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **51**, 147(1994).
- [10] N. C. Woolsey, B. A. Hammel, C. J. Keane, C. A. Back, J. C. Moreno, J. K. Nash, A. Calisti, C. Mosse, L. Godbert, R. Stamm, B. Talin, C. F. Hooper, A. Asfaw, L. S. Klein and R. W. Lee: J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **58**, 975(1997).
- [11] A. H. Gabriel and T. M. Paget: J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **5**, 673(1972).
- [12] F. B. Rosmej: J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **51**, 319(1994).

- [13] F. B. Rosmej, B. A. Bryunetkin, A. Ya. Faenov, I. Yu. Skobelev, M. P. Kalashnikov, P. V. Nickles and M. Schnürer: J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **29**, L299(1996).

第2章 高密度レーザープラズマにおける原子過程

2.1 はじめに

プラズマ中の原子過程は大きく分けて電離 (ionizaion)、再結合 (recombination)、励起 (excitation)、脱励起 (deexcitaion) の4つの過程がある [1]。原子は、中性の状態では、その原子番号に相当する数の電子を軌道に束縛している。この原子に外部から電子・光子などの衝突が加わると、束縛されていた電子を原子から弾き飛ばす。これが電離過程である。また加えられる衝突が弱い場合には、束縛電子は電離するのに必要なエネルギーを十分に受けないために、エネルギーの高い準位へと励起されるだけである。これを励起過程という。また自由空間を運動する電子も、他の電子やイオンとの衝突によってエネルギーを失えば、近くのイオンに捕獲される。これが再結合過程である。また、高いエネルギー準位にある束縛電子も衝突でエネルギーを失ったり、また、ある寿命で下準位へ落ちる。これが脱励起過程である。これらの原子過程の内、再結合過程と脱励起過程の2つには、電磁波を放出してエネルギーを失う過程がある。この時に放射される電磁波はX線領域にあり、前章でも述べたように、そのX線スペクトルは、爆縮プラズマのパラメーターを計測をする上で重要な情報源となる。以下の節では順を追って、プラズマ中の原子過程を記述する上で必要な各素過程について、その詳細を述べていく。

2.2 プラズマにおける原子過程

図2.1は、先に述べた4つの原子過程について、その個々の詳細な過程を模式的に示したものである。図中の実線の矢印は、束縛電子がエネルギーを得て、エネルギーの高い束縛準位に励起、あるいは連続準位へ電離する過程を示し、点線の矢印は、束縛電子がエネルギーを失って低いエネルギー準位へ脱励起、あるいは自由電子がエネルギーを失って捕獲され、再結合する過程を示している。自動電離は一種の電離過程ではあるが、後述するように、二電子励起状態から一電子励起状態、あるいは基底状態への脱励起過程と見なすことが可能なため点線の矢印で表した。

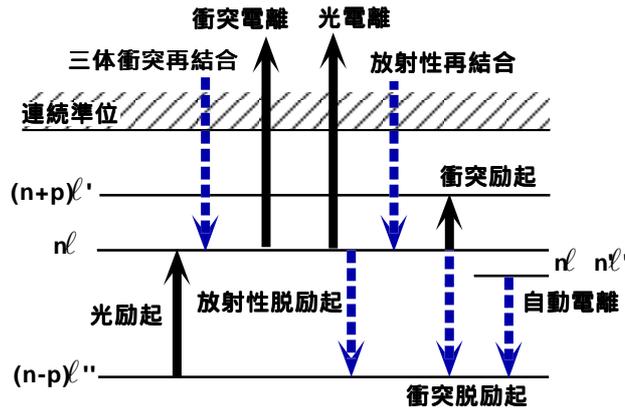


図 2.1: プラズマ中の原子過程
 プラズマ中では幾つもの原子過程が存在し、それらの過程を取り込んだレート方程式(本章 2.2.1 節参照)によって、イオンのポピュレーションが決定される。

2.2.1 レート方程式

図 2.1 にあるような原子過程を記述するには、一般的に、以下に示す式 (2.1) のレート方程式を解いて、各イオンのポピュレーション $N(z, i)$ (z : 価数、 i : 準位 ($i = 1$: 基底状態、 $i > 1$: 励起状態)) を求める。

$$\begin{aligned}
 \frac{dN(z, i)}{dt} &= \sum_{j(<i)} E(z, j \rightarrow z, i) N(z, j) + \sum_{j(>i)} DE(z, j \rightarrow z, i) N(z, j) \\
 &- \sum_{j(>i)} E(z, i \rightarrow z, j) N(z, i) - \sum_{j(<i)} DE(z, i \rightarrow z, j) N(z, j) \\
 &+ \sum_j I(z-1, j \rightarrow z, i) N(z-1, j) + \sum_j R(z+1, j \rightarrow z, i) N(z+1, j) \\
 &- \sum_j I(z, i \rightarrow z+1, j) N(z, i) \\
 &- \sum_j R(z, i \rightarrow z-1, j) N(z, i). \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

式中、 $E(z, i' \rightarrow z, i)$ と $DE(z, i' \rightarrow z, i)$ は各々、励起及び脱励起過程を示し、 $I(z', i' \rightarrow z, i)$ 、 $R(z', i' \rightarrow z, i)$ は各々、電離及び再結合過程を示している。これは、衝突輻射 (Collisional Radiative: CR) モデルと呼ばれる時間発展レート方程式であり、広いプラズマ・パラメーター (電子温度、電子密度) において適用可能なモデルである。しかし、レーザー核融合に見られるような爆縮プラズマでは、その流体力学的な挙動は、イオン音波に支配されている一方で、原子過程は光の速度に支配されている。そのため、実際の解析には、式 (2.1) の左辺を 0 とした平衡解がよく用いられる。衝突輻射平衡 (Collisional Radiative Equilibrium: CRE) モデルでは、図 2.1 における衝突過程と放射過程 (自動電離に見られる無放射過程を含む) が釣り合うようにイオンのポピュレーションが決められるというモデルであり、プラズマの原子過程を記述する上で有効なモデルである [2]。

2.2.2 衝突励起・脱励起

衝突励起 (collisional excitation) 過程は、図 2.2 や式 (2.2) に示されるように、電子又はイオンとの衝突によって、束縛電子が高エネルギー準位に励起される過程のことを指す。

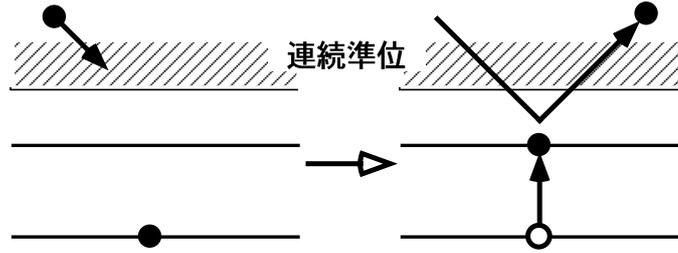
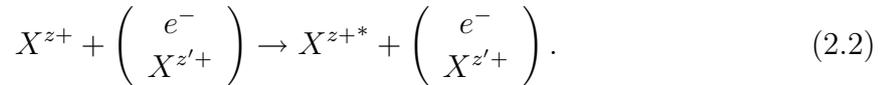


図 2.2: 衝突励起過程
衝突によって束縛電子がエネルギーを得て、高いエネルギー準位に励起される。



式 (2.2) 中の * は、イオンが初期状態よりも励起されていることを示している。

電子衝突励起係数は、Mewe によって得られた以下の式で表すことができる [3]。

$$C_e(i \rightarrow j) = 1.58 \times 10^{-5} f_{ij} T_e^{-\frac{1}{2}} E_{ij}^{-1} \exp(-E_{ij}/T_e) G \text{ (cm}^3/\text{s)}. \quad (2.3)$$

ここで、 f_{ij} は、準位 i から j への吸収の振動子強度 (absorption oscillator strength) を示し、 E_{ij} は励起エネルギー (excitation energy)[eV] を示している。また、 T_e は電子温度 (electron temperature)[eV] を表している。 G はガウント因子 (Gaunt factor) を指し、次式のように表すことができる [3]。

$$G = (0.15 + 0.28 \exp(-E_{ij}/T_e) E_1(E_{ij}/T_e)). \quad (2.4)$$

E_1 は、第一種の積分指数関数 (exponential integral) を表しており、以下の式で示される [4]。

$$E_1(x) = \int_x^\infty \frac{\exp(-t)}{t} dt. \quad (2.5)$$

一方、衝突励起前後で主量子数が変化せず ($\Delta n = 0$)、方位量子数のみが増加する過程を特に、“ l -mixing” の過程といい、その衝突励起過程は、準位間のエネルギー・ギャップが小さいことから、電子よりもむしろ速度の遅いイオンとの衝突過程によって記述される。Jacobs、Davis らによれば [5]、

$$C_i(i \rightarrow j) = \left(\frac{\mu}{m_e}\right)^{1/2} z_0^2 \frac{12\pi^{1/2} a_0^3 E_H}{\hbar} \frac{l_{>}}{2l+1} \left(\frac{n}{z+1}\right)^2$$

$$\times (n^2 - l_{>}^2) \left(\frac{E_H}{T} \right)^{1/2} E_1(y) \text{ (cm}^3/\text{s)}, \quad (2.6)$$

ここで、

$$y = \left(\frac{n^2}{2(z+1)E_H} \right)^2 \frac{\mu E_H}{m_e T} (E_{ij}^2 + \Gamma^2 + \hbar^2 \omega_p^2). \quad (2.7)$$

\hbar は Planck 定数 ($= 4.135 \times 10^{-15} \text{eV} \cdot \text{sec}$) を 2π で除した値を示し、 μ は衝突する2つのイオンの換算質量 (reduced mass) [g] で、 Γ は自然幅 [eV]、 ω_p はプラズマ周波数 (plasma frequency) [eV] を示している。 $E_H = 13.6 \text{eV}$ は、水素原子のイオン化エネルギーを示し、 m_e は電子質量 (electron mass) ($= 9.1 \times 10^{-28} \text{g}$)、 a_0 は Bohr 半径 ($= 0.529 \times 10^{-8} \text{cm}$) を示している。 z_0 と z は各々、入射イオン (incident ion) と散乱中心イオン (target ion) の電荷数で、 T はイオン温度 (ion temperature) [eV] を指し、ここでは $T = T_e$ としている。

一方、衝突脱励起 (collisional deexcitation) 係数 $D_{e(i)}$ は、衝突励起係数 $C_{e(i)}$ との詳細釣り合い (detailed balance) から得られる。

$$D_{e(i)}(j \rightarrow i) = (g_i/g_j) \exp(E_{ij}/T_e) C_{e(i)}(i \rightarrow j) \text{ (cm}^3/\text{s)}. \quad (2.8)$$

ここで g_i と g_j は各々、準位 i と j の統計重率 (statistical weight) を表している。

2.2.3 衝突電離、三体再結合

衝突電離 (collisional ionization) 過程は、図 2.3 や式 (2.9) に示されるように、電子との衝突によって、束縛電子がエネルギーを得て、連続準位へ弾き出される過程を指す。

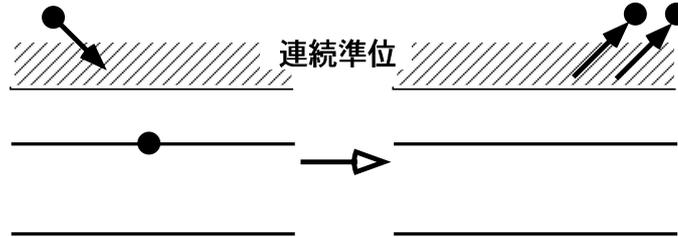


図 2.3: 衝突電離過程
束縛電子が衝突によってエネルギーを得て、連続準位に弾き出される。



衝突電離係数は、幾つかの文献によって、異なった表式の経験式が与えられているが、その一般形は次のような形で与えられる。

$$I^c(z, i) = C_{\xi, z, i} T_e^{-3/2} \times \frac{\exp(-E_{z, i}/T_e)}{(E_{z, i}/T_e)^k} F\left(\frac{E_{z, i}}{T_e}\right) \text{ (cm}^3/\text{s)}. \quad (2.10)$$

C, k , は定数で、 $F(E_{z,i}/T_e)$ は、表式によって決まる関数である。 $E_{z,i}$ は、イオン価数 z の準位 i に束縛された電子のイオン化エネルギー [eV] を表しており、また $\xi_{z,i}$ は、準位 i における束縛電子数を示している。

これまで導出された表式には、例えば McWhirter[6]、Seaton[7]、Lotz[8]、そして Landshoff と Perez[9] による表式がある。それを表 2.1 に示す。これらのレート係数の中で最

表 2.1: 衝突電離レート係数の経験式

Author	$C(\text{cm}^3/\text{eV}^{3/2}\text{sec})$	k	$F(E_{z,i}/T_e)$
Landshoff-Perez	1.24×10^{-6}	2	$0.915(1 + 0.064T_e/E_{z,i})^{-2} + 0.42(1 + 0.5T_e/E_{z,i})^{-2}$
Lotz	3×10^{-6}	1	$E_1(E_{z,i}/T_e) \exp(E_{z,i}/T_e)$
Seaton	2.15×10^{-6}	2	1
McWhirter	0.234×10^{-6}	7/4	1

も新しく、精度が良いとされている表式は、Landshoff と Perez によるもので、Salzmann は、表に示した 4 つのレート係数の内、それまで広く用いられてきた McWhirter の表式は最も小さい値を示すことを明らかにし [10]、Landshoff らのレート係数を推奨している。本解析においても、衝突電離係数には、Landshoff と Perez によるレート係数を用いている。則ち、

$$I^c(z, i) = 1.24 \times 10^{-6} \xi_{z,i} T_e^{-3/2} \frac{\exp(-E_{z,i}/T_e)}{(E_{z,i}/T_e)^2} \times \left[\frac{0.915}{(1 + 0.064T_e/E_{z,i})^2} + \frac{0.42}{(1 + 0.5T_e/E_{z,i})^2} \right] (\text{cm}^3/\text{s}). \quad (2.11)$$

三体再結合 (three body recombination) 過程は、衝突電離過程の逆過程で、図 2.4 や式 (2.12) に示されるように、連続しておこる 2 回の電子衝突によって起こる過程を指す。

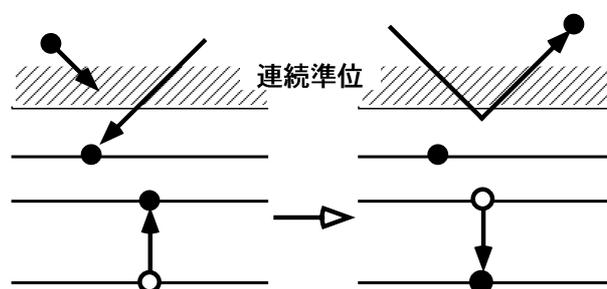
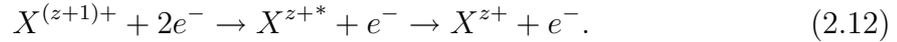


図 2.4: 三体再結合過程

まず一度目の自由電子との衝突によって、入射電子は、束縛電子にエネルギーを奪われて捕獲され、高励起状態を形成する。そして、その高励起状態が崩壊しない内に、さらに電子衝突が起こると、高励起状態のイオンは、自由電子にエネルギーを与えて安定状態へ移る。



三体再結合係数は、衝突電離係数 $I^c(z, i)$ との詳細釣合いによって得られる。

$$R^{3b}(z, i) = 1.66 \times 10^{-22} T_e^{-3/2} n_e \frac{g_{z,i}}{g_{z+1,1}} \exp(E_{z,i}/T_e) I^c(z, i) \text{ (cm}^3/\text{s)}. \quad (2.13)$$

ここで n_e は電子密度 [cm^{-3}] を示し、 $g_{z+1,1}$ 、 $g_{z,i}$ は再結合前後の統計重率を示している。

2.2.4 放射性脱励起

放射性脱励起 (radiative decay) 過程は、自然放出の Einstein の A 係数で与えられる。則ち、

$$A_r(j \rightarrow i) = 4.34 \times 10^7 \frac{g_i}{g_j} f_{ij} E_{ij}^2 \text{ (1/s)}. \quad (2.14)$$

2.2.5 放射性再結合

放射性再結合 (radiative recombination) 過程は、図 2.5 や式 (2.15) に示されるように、連続準位にある自由電子が、輻射によってエネルギーを失い、イオンに捕獲される過程を指す。

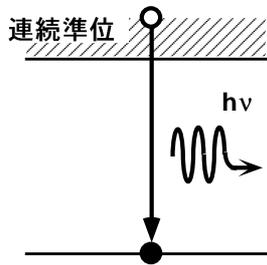
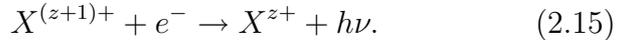


図 2.5: 放射性再結合過程



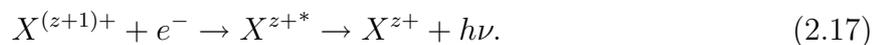
放射性再結合係数は、Seaton によると、以下の式で表される [11] .

$$R^r(z, i) = 5.20 \times 10^{-14} q_{z,i} \left(\frac{E_{z,i}}{T_e} \right)^{3/2} \times \exp(E_{z,i}/T_e) E_1(E_{z,i}/T_e) \text{ (cm}^3/\text{s)}. \quad (2.16)$$

ここで $q_{z,i}$ は、準位 i の束縛電子に対する有効電荷を表している。

2.2.6 二電子性再結合

二電子性再結合 (dielectronic recombination) 過程は、図 2.6 や式 (2.17) に示されるように、連続準位にある自由電子が、エネルギーを失ってイオンに捕獲される一方で、自由電子からエネルギーを得た束縛電子が、励起されて二電子励起状態を形成し、この準安定状態からいずれかの励起電子が、放射性脱励起して安定状態となる過程を指す。



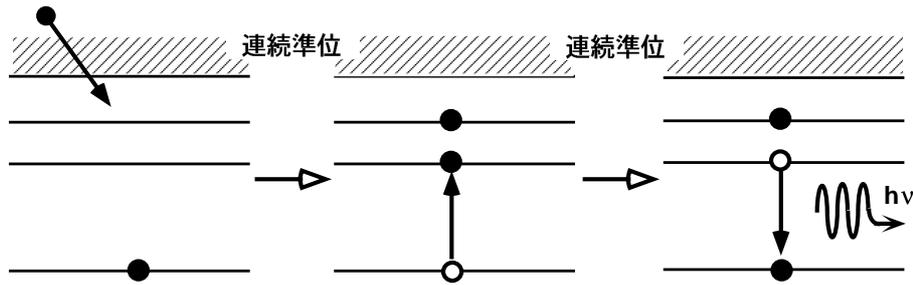


図 2.6: 二電子性再結合過程

自由電子が、エネルギーを失ってイオンに捕獲される一方で、束縛電子が励起されて二電子励起状態を形成する。その後、いずれかの励起電子が、放射性脱励起することによって安定状態となる。

二電子性再結合係数は、Burgess によって与えられており [12, 13, 14]、

$$R^d(z) = 2.40 \times 10^{-9} B(q_{z,i}) D(q_{z,i}, T_e) T_e^{-3/2} \sum_j f_{ij} A(y) \exp(-\overline{E}_{ij}/T_e) \text{ (cm}^3/\text{s)}. \quad (2.18)$$

ここで i は、再結合するイオンの初期状態を表している。更に

$$\begin{aligned} B(q_{z,i}) &= q_{z,i}^{1/2} (q_{z,i} + 1)^{5/2} / (q_{z,i}^2 + 13.4)^{1/2}, \\ \overline{E}_{ij} &= (E_{ij}/a), \\ a &= 1 + 0.015 q_{z,i}^3 / (q_{z,i} + 1)^2, \\ y &= E_{ij} / [13.6 (q_{z,i} + 1)]. \end{aligned}$$

また関数 $A(y)$ は、 $\Delta n = n_j - n_i \neq 0$ の遷移に対して、

$$\begin{aligned} A(y) &= 0.5 y^{1/2} / (1 + 0.210 y + 0.030 y^2), \\ D(q_{z,i}, T_e) &= \frac{0.0015 [(q_{z,i} + 1) n_t]^2}{1 + 0.0015 [(q_{z,i} + 1) n_t]^2}, \end{aligned}$$

であり、 $\Delta n = 0$ の遷移には、

$$\begin{aligned} A(y) &= y^{1/2} / (1 + 0.105 y + 0.015 y^2), \\ D(q_{z,i}, T_e) &= \frac{n_t / 200}{1 + n_t / 200}, \end{aligned}$$

となる。ここで $n_t^7 = 1.5084 \times 10^{17} q_{z,i}^6 T_e^{1/2} / n_e$ である。

2.2.7 自動電離

自動電離 (auto ionization) 過程は、図 2.7 や式 (2.19) に示されるように、二電子励起状態を形成するイオンにおいて、この準安定状態からいずれかの励起電子が、エネルギーを失って脱励起する一方で、もう 1 つの励起電子が、そのエネルギーを得て、連

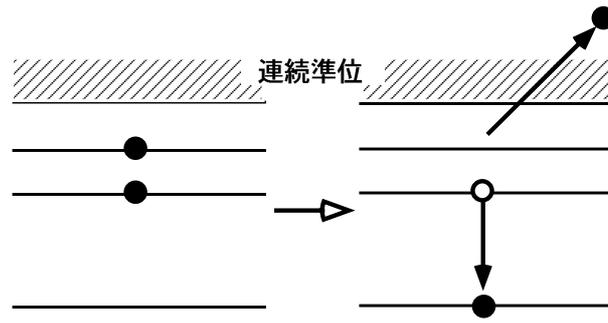


図 2.7: 自動電離過程

二電子励起状態を形成するイオンにおいて、いずれかの励起電子が、エネルギーを失って脱励起する一方で、もう1つの励起電子が、そのエネルギーを得て電離する。

続準位に電離して安定状態になる過程を指し、先の二電子性再結合過程の二電子性捕獲過程の逆過程に相当する。



自動電離係数 (補遺 B 参照) は、Seaton によって導出されており [15]、

$$A_a(nn' \rightarrow n'' + e^{-}) = \frac{2q_{n'}^2 E_a}{\hbar n'^3 \pi^2 a_0^2} \frac{g_{n''}}{g_{nn'}} \sigma(n'' \rightarrow n) \quad (1/s). \quad (2.20)$$

ここで、 E_a は電離エネルギー [eV] であり、束縛電子は、このエネルギーを得て、連続準位へ電離する。 $\sigma(n'' \rightarrow n)$ は、準位 n'' から n への衝突励起断面積 [cm^2] である。この過程は、電離する束縛電子が、もう1つの束縛電子の脱励起エネルギーを全て吸収する無放射過程である。

2.2.8 光電離、光励起

プラズマの密度が高く、光学的に厚くなってくると、放射過程によって放出された光子は、イオンによって再吸収される。この時、イオンの束縛電子は、吸収した光子のエネルギーに応じて、更に高いエネルギー準位に励起されたり、連続準位へ電離する。



光電離の断面積 σ_{bf} は、水素様近似では次のように表すことができる [16, 17, 18]。

$$\sigma_{\text{bf}} = \frac{64\pi^4 e^{10} m_e q_{z,i}^4}{3\sqrt{3} h^6 c n^5 \nu^3} \quad (\text{cm}^2). \quad (2.23)$$

ここで、 e は電気素量 ($= 4.8 \times 10^{-10}$ esu)、 m_e は電子質量、 h, c は各々、Planck 定数 ($= 6.626 \times 10^{-27}$ erg·sec) と、光速 ($= 2.998 \times 10^{10}$ cm/sec) を表し、 n, ν は、束縛電子の主量子数及び光子の周波数 [Hz] を示している。

これより光電離係数は、

$$I^p(z, i) = 4\pi \int_{h\nu \geq E_{z,i}} \sigma_{\text{bf}} \frac{I_\nu}{h\nu} d\nu \text{ (sec}^{-1}\text{)}, \quad (2.24)$$

となる． I_ν は放射強度を表しており、実際の計算では、輻射場の温度 T_r を定義して、Planck の熱放射分布関数を用いることがある．

$$I_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu/k_B T_r) - 1} \text{ (erg/cm}^2\text{/str/sec/Hz)}. \quad (2.25)$$

k_B は Boltzmann 定数 ($= 1.38 \times 10^{-16}$ erg/K) を表している．また上式は、単位立体角当たりの放射強度を表している．

一方、光励起係数は、

$$I^p(i \rightarrow j) = 4\pi \int \sigma_{\text{bb}} \frac{I_\nu}{h\nu} d\nu \text{ (sec}^{-1}\text{)}, \quad (2.26)$$

となる．先ほどの光電離係数の場合と同様に、 I_ν は放射強度を表しており、実際の計算では、輻射場の温度 T_r を定義して、Planck の熱放射分布関数を用いることがある．光励起の断面積 σ_{bb} は以下のように表すことができる [17] ．

$$\sigma_{\text{bb}} = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{ij} \phi(\nu) \text{ (cm}^2\text{)}. \quad (2.27)$$

ここで $\phi(\nu)$ は、線スペクトルの形状を表す関数 [Hz^{-1}] であり、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\nu) d\nu = 1, \quad (2.28)$$

で規格化されている．

2.3 コロナ平衡、局所熱平衡

先のレート方程式には2つの極限状態がある．1つは低密度の極限で成り立つコロナ平衡 (Corona Equilibrium: CE) であり、もう1つは高密度の極限で成り立つ局所熱平衡 (Local Thermal Equilibrium: LTE) である．以下の節では、この2つの平衡モデルについて触れることにする．

コロナ平衡

密度が低密度の極限では、放射された X 線放射は再吸収されず、ゆえに光電離及び光励起過程は起こらない．また密度が低いために、電子衝突による素過程 (衝突励起過程) に比較して、放射過程 (放射性脱励起過程) が顕著になるために、励起イオンは、電子衝突によって更に励起される前に基底状態に脱励起する．則ち、ポピュレーション

のほとんどは、基底状態のイオンによって占められるようになる．さらに再結合過程に対しては、三体再結合過程よりも二体過程の放射性再結合過程が顕著になる．従って、平衡状態（全電離レート係数 = 全再結合レート係数）において、 z 価と $(z+1)$ 価イオンのポピュレーションの比は、次式に示されるように、放射性再結合係数 $R^r(z, i)$ と衝突電離係数 $I^c(z, i)$ の比で決まる．

$$\begin{aligned} \frac{N_{z+1}}{N_z} &\approx \frac{N_{z+1,g}}{N_{z,g}} \\ &= \frac{I^c(z, 1)}{R^r(z, 1)}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

これがコロナ平衡の条件であり、式(2.29)からも明らかなように、 N_{z+1}/N_z は電子密度に依存せず、電子温度のみの関数になる．

局所熱平衡

密度が高密度の極限では、放射された放射は完全にプラズマに再吸収されるため、レート方程式における放射過程は、全体でバランスして0となる．則ち、イオンのポピュレーションは衝突過程によって決まる．従って、式(2.8)の衝突励起・脱励起過程の詳細釣り合いにより、 $C_e(i \rightarrow j)N_{z,i} = D_e(j \rightarrow i)N_{z,j}$ が得られ、従って、

$$\frac{N_{z,i}}{N_{z,j}} = \frac{g_i}{g_j} \exp\left(\frac{E_{ij}}{T_e}\right), \quad (2.30)$$

となり、Boltzmann 分布となる．また式(2.13)の電離、再結合過程の詳細釣り合いにより、 $R^{3b}(z, i)N_{z+1,1} = I^c(z, i)N_{z,i}$ が得られ、従って、

$$\frac{N_{z,i}}{N_{z+1,1}n_e} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e T_e}\right)^{3/2} \frac{g_{z,i}}{2g_{z+1,1}} \exp(E_{z,i}/T_e), \quad (2.31)$$

となる．この式は Saha の式と呼ばれ、この式から高密度の極限では、イオンのポピュレーションの分布は、熱平衡状態における分布を取ることが分かる．

2.4 X線放射係数、吸収係数

X線スペクトルは、大きく2つの部分に分けることが可能である．一つは線スペクトルで、もう一つは連続準位からのスペクトルである．連続スペクトルは、低 Z イオンや完全電離イオンの計測に重要な役割を果たす一方で、中高 Z イオンの計測には、線スペクトルが重要な情報源となる．連続スペクトルはさらに2種類あり、線スペクトルと合わせて光の放出、吸収を伴う電子の遷移には、以下に示すように3種類ある [16, 17, 18] ．

- (1) 自由自由遷移（制動放射）
- (2) 自由束縛遷移

(3) 束縛束縛遷移

以下の節では、これらの遷移に関わる放射、吸収係数の導出を行う。尚、各式の導出には cgs 単位系を用いて導出している。また、誘導放出の計算では Population を LTE として仮定している。

2.4.1 自由自由遷移

自由自由遷移の放射係数

Z 価のイオンの密度を N_z 、自由電子の速度分布関数 $f(v)$ を Maxwell 分布として、電子速度 $v \sim v + dv$ 、周波数 $\nu \sim \nu + d\nu$ における自由自由遷移による X 線放射係数は、次式のように表すことができる [17]。

$$N_z n_e v f(v) d^3v dq_\nu(v) \text{ (erg/cm}^3\text{/sec)}. \quad (2.32)$$

ここで dq_ν は、周波数 $\nu \sim \nu + d\nu$ における、イオンあたり単位電子流束あたりの放射エネルギー (erg · cm²) を示し、

$$dq_\nu(v) = \frac{32\pi^2 Z^2 e^6}{3\sqrt{3} m_e^2 c^3 v^2} d\nu \text{ (erg} \cdot \text{cm}^2\text{)}, \quad (2.33)$$

の形で表される。これを Maxwell 速度分布関数で積分すると、周波数 $\nu \sim \nu + d\nu$ 間の放射係数 $j_\nu d\nu$ は、以下のように導出される。

$$\begin{aligned} j_{\text{ff}} d\nu &= \frac{32}{3} \pi \left(\frac{2\pi}{3m_e k_B T_e} \right)^{1/2} \frac{Z^2 e^6}{m_e c^3} \\ &\times N_z n_e \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T_e}\right) d\nu \text{ (erg/cm}^3\text{/sec)}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

k_B は Boltzmann 定数 (= 1.38×10^{-16} erg/K) を表している。この時の積分範囲の下限は、 $v_{\text{min}} = \sqrt{2h\nu/m_e}$ である。

自由自由遷移の吸収係数

X 線吸収係数は、放射過程との詳細釣り合いによって求めることができる [17]。則ち、

$$\begin{aligned} N_z n_e v' f(v') d^3v' dq_\nu(v') = \\ N_z n_e U_\nu d\nu \cdot c f(v) d^3v \cdot a_\nu \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T_e}\right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

が成立する。 v' 、 v は各々、衝突前後の電子の速度を表しており、 a_ν は、イオンと電子の衝突によって吸収される光子エネルギーの割合を示す。また、 $U_\nu = 4\pi I_\nu/c$ で、周波数 $\nu \sim \nu + d\nu$ におけるエネルギー密度を示す。式の中にある因子 $\{1 - \exp(-h\nu/k_B T_e)\}$ は、誘導放射による実効的な吸収の低減を表している。

エネルギー保存即より、

$$\frac{m_e v'^2}{2} = \frac{m_e v^2}{2} + h\nu, \quad (2.36)$$

が成立し、 $v dv = v' dv'$ 及び、 $dq_\nu = h\nu d\sigma_\nu$ (σ_ν : 弾性散乱断面積 (cross section of elastic scattering)) より、

$$a_\nu = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{hcm_e^2 \nu^3} (\text{cm}^5), \quad (2.37)$$

が導出され、これを Maxwell 速度分布関数で平均し、 N_z と n_e をかけて、自由自由遷移の吸収係数 κ'_{ff} を求めると、

$$\kappa'_{\text{ff}} = \frac{4}{3} \left(\frac{2\pi}{3m_e k_B T_e} \right)^{1/2} \frac{Z^2 e^6}{hcm_e \nu^3} N_z n_e (\text{cm}^{-1}), \quad (2.38)$$

となる。これに誘導放射による因子を掛けて最終的に次式が得られる。

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{ff}} &= \frac{4}{3} \left(\frac{2\pi}{3m_e k_B T_e} \right)^{1/2} \frac{Z^2 e^6}{hcm_e \nu^3} N_z n_e \\ &\times \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T_e}\right) \right\} (\text{cm}^{-1}). \end{aligned} \quad (2.39)$$

2.4.2 自由束縛遷移

自由束縛遷移の放射係数

連続準位から束縛準位 n へ再結合する電子捕獲断面積を σ_{cn} とすると、単位体積単位時間あたりの、電子速度 $v \sim v + dv$ における、放射性再結合による電子捕獲の回数は、次式のように表すことができる [17] .

$$N_z n_e v f(v) d^3v \sigma_{\text{cn}} (\text{cm}^{-3} \cdot \text{sec}^{-1}). \quad (2.40)$$

電子捕獲断面積 σ_{cn} は、

$$\sigma_{\text{cn}} = \frac{128\pi^4}{3\sqrt{3}} \frac{Z^4 e^{10}}{mc^3 h^4 v^2 \nu n^3} (\text{cm}^2), \quad (2.41)$$

である。従って、電子速度 $v \sim v + dv$ 、周波数 $\nu \sim \nu + d\nu$ 、単位体積単位時間あたりの放射エネルギーは、

$$j_{\text{fb}} d\nu = N_z n_e v f(v) d^3v h\nu \sigma_{\text{cn}} (\text{erg/cm}^3/\text{sec}), \quad (2.42)$$

で表され、 $f(v)$ に Maxwell 速度分布関数、 σ_{cn} に式 (2.41)、また $h\nu = (1/2)m_e v^2 + Z^2 E_{\text{H}}/n^2$ より、 $h d\nu = mv dv$ を用いると、

$$\begin{aligned} j_{\text{fb}} d\nu &= \frac{64\pi^{1/2}}{3\sqrt{3}} \frac{Z^4 e^4 h}{m_e^2 c^3} \left(\frac{E_{\text{H}}}{k_B T_e} \right)^{3/2} N_z n_e \\ &\times \exp\left(-\frac{h\nu - E_{z,i}}{k_B T_e}\right) \frac{1}{n^3} d\nu (\text{erg/cm}^3/\text{sec}), \end{aligned} \quad (2.43)$$

を得る。

自由束縛遷移の吸収係数

自由自由遷移の時と同じように詳細釣り合いを用いて、

$$N_z n_e v f(v) d^3v \sigma_{\text{cn}} = N_{z-1,n} \frac{U_\nu}{h\nu} d\nu \cdot c \cdot \sigma_{\text{nc}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T_e}\right) \right\}, \quad (2.44)$$

が成立する．ここで σ_{nc} は、エネルギーが $h\nu$ の光子に対する、励起準位 n に束縛電子を持つイオンの吸収断面積を示す．吸収断面積 σ_{nc} は、以下の Milne の式によって電子捕獲断面積 σ_{cn} から得られる [18] ．

$$\frac{\sigma_{\text{nc}}}{\sigma_{\text{cn}}} = \left(\frac{mc\nu}{h\nu} \right)^2 \frac{g_{z,1}}{g_{z-1,n}}. \quad (2.45)$$

更に誘導放射による因子を考慮して、

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{bf}} &= \frac{128\pi^4 Z^4 e^{10} m}{3\sqrt{3} h^6 c \nu^3} \frac{g_{z,1}}{g_{z-1,n}} \frac{1}{n^3} N_{z-1,n} \\ &\times \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T_e}\right) \right\} \text{ (cm}^{-1}\text{)}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

を得る．

自由束縛遷移の放射吸収過程は、準位 n に束縛された電子のイオン化エネルギー以上の光子が必要であり、それ以下のエネルギーでは、放射吸収両過程の係数は 0 となる．

2.4.3 束縛束縛遷移

束縛束縛遷移の放射係数

準位 j から i (但し、 $i < j$) への束縛束縛遷移の放射エネルギーは、自然放出の Einstein の A 係数で表すことができる．則ち、

$$j_{\text{bb}} = h\nu_{ij} A(j \rightarrow i) N_{z,j} \phi(\nu) \text{ (erg/cm}^3\text{/sec/Hz)}. \quad (2.47)$$

束縛束縛遷移の吸収係数

吸収係数は Einstein の B 係数を用いて表すことができる．誘導放出の項を考慮して、

$$\kappa_{\text{bb}} = h\nu_{ij} B(i \rightarrow j) N_{z,i} \phi(\nu) \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{h\nu_{ij}}{k_B T_e}\right) \right\} \text{ (cm}^{-1}\text{)}. \quad (2.48)$$

ここで ν_{ij} は、準位 i から j への励起エネルギー [Hz] を示している．

2.5 第2章まとめ

本章では、プラズマ中における原子過程、特に、X線放射吸収過程を記述する上で基本となる事項を述べてきた。高密度プラズマ中の原子過程を解析するには、様々な素過程を考慮しなくてはならない。この章ではスペクトル広がりについては触れなかったが、これについては第5章にて論じることにする。

以下に続く各章では、本論文の主たるテーマである、「共鳴線と分解観測不可能なサテライト線の解析」に不可欠なプラズマ原子物理を解明してゆくと共に、このようなサテライト線が、最終的にはどのような寄与を持ってX線スペクトルに影響を及ぼしていくのかを明らかにしてゆく。

参考文献

- [1] 横山昌弘 編著、プラズマ理工学 ー大電流プラズマ現象とその応用ー (日刊工業新聞社、1988) 第 3 章 .
- [2] M. Itoh and T. Yabe: Phys. Rev. A **35**, 233(1987).
- [3] R. Mewe: Astron. and Astrophys. **20**, 215(1972).
- [4] *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover Publications, Inc., New York, 1972) edited by M. Abramowitz and I. A. Stegun,
- [5] V. L. Jacobs and J. Davis: Phys. Rev. **18**, 697(1978).
- [6] R. W. P. McWhirter: *Plasma Diagnostic Techniques*, (Academic, New York, 1965) edited by R. H. Huddlestone and S. L. Leonard, Chap.5.
- [7] M. J. Seaton: *Atomic and Molecular Processes*, (Academic, New York, 1962) edited by D. R. Bates, p.375.
- [8] W. Lotz: Z. Phys. **216**, 241(1968).
- [9] R. K. Landshoff and J. D. Perez: Phys. Rev. A **13**, 1619(1976).
- [10] D. Salzmann and A. Krumbein: J. Appl. Phys. **49**, 3229(1978).
- [11] M. Seaton: Mon. Not. R. Astron. Soc. **119**, 81(1959).
- [12] A. Burgess: Astrophys. J. **139**, 776(1964).
- [13] A. Burgess: Astrophys. J. **141**, 1588(1965).
- [14] D. E. Post, R. V. Jensen, C. B. Tarter, W. H. Grasberger and W. A. Lokke: Atomic Data and Nuclear Data Tables **20**, 397(1977).
- [15] M. J. Seaton and P. J. Storey: *Atomic Processes and Applications*, (North-Holland, Amsterdam, 1976), Chap.6.
- [16] D. H. Menzel and C. L. Pekeris: Monthly Notices Roy. Astron. Soc. **96**, 77(1936).

- [17] Ya. B. Zel'dovich and Yu. P. Raizer: *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*, (Academic press, New York, 1966), Chap.5.
- [18] J. Cooper: Rep. Prog. Phys. **29**, 35(1966).

第3章 高次サテライト線の考察と高励起準位の存在確率に対する問題提起

3.1 はじめに

緒論で述べたように、これまで爆縮プラズマの解析に用いられてきたX線スペクトルは、H様、He様 Ar イオンの $\text{Ly-}\beta(1s-3p)$, $\text{He-}\beta(1s^2-1s3p)$ 等の共鳴線及び $\text{He-}\beta$ の低エネルギー側に見られる Li 様サテライト線 ($1s^22l-1s2l3p, 1s^23l-1s3p3l$) である。近年のX線スペクトル解析の動向として、より詳細なスペクトル情報を利用する傾向にあり、特にサテライト線に着眼点を置いた解析結果が多数報告されているが、これらの報告の中で対象となっているのは、共鳴線から比較的、分解観測可能なエネルギー領域で発光するサテライト線である。ところが共鳴線スペクトルのごく近傍には、非常に多くの分解観測不可能なサテライト線が多数集中している。これらのスペクトル線は、スペクテーター電子を高励起準位に持つ、二電子励起イオンからの発光を示すものであり、これまでの爆縮プラズマにおけるX線スペクトル解析に関する研究報告には、そのようなサテライト線を取り扱ったものはない。

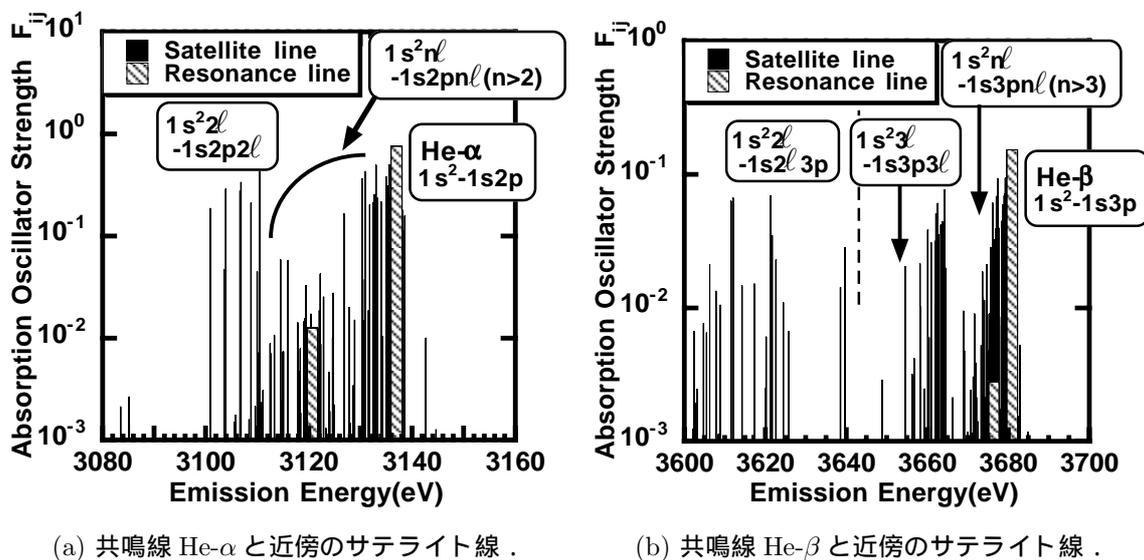


図 3.1: He 様 Ar イオンの共鳴線とサテライト線の吸収の振動子強度分布 $1s2l2l, 1s2l3l$ によるサテライト線は、Vainshtein、Safronova らの計算データと数 eV の範囲で一致している事を確認した [1, 2]。高次サテライト線は他に計算の例はない。共鳴線は Bashkin、Stoner らのデータと同様の一致を確認した [3]。

図3.1は、MCDF(Multi Configuration Dirac-Fock)法を基盤としたGRASP (a General purpose Relativistic Atomic Structure Program) [4, 5] と呼ばれる原子構造解析コードを用いて、He様Arイオンの共鳴線He- α 、He- β 及び、それらのサテライト線の発光エネルギー位置と、吸収の振動子強度を図示したものである。共鳴線のサテライト線としては、 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 2, 3, 4, 5, 6$) 及び $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 2, 3, 4, 5, 6$) のサテライト線を示した。これからも分かるように、共鳴線近傍には非常に多くの高次サテライト線が集中しているのが分かる。

スペクテーター電子が束縛される準位が高エネルギー準位であるほど、共鳴線との発光エネルギー位置の差は小さくなる。まずはこの理由を簡単に説明しよう。図3.2は、スペクテーター電子を束縛するイオンの模式図である。スペクテーター電子は、量子力学的には、核近辺に有限の存在確率を持つ。そして、それによって発光電子に作用する核の有効電荷を遮蔽する。その結果、発光電子に及ぼされる核電荷のポテンシャル・エネルギーが低減し、遷移による発光エネルギーが小さくなる。スペクテーター電子の発光電子に対する遮蔽効果は、両者の束縛される軌道が近い程大きく、発光エネルギーの低減も大きい。今まで解析に利用されてきたLi様サテライト線が、共鳴線から分解観測可能だった理由はそこにある。しかし本論文で着目する、高次サテライト線を発光する二電子励起イオンは、スペクテーター電子を高励起準位に束縛するために、核ポテンシャルの遮蔽効果は殆どない。従って、得られるスペクトルは実質上、共鳴線との区別がつかない。また、そのような二電子励起イオンから発光スペクトルには、スペクテーター電子が束縛される軌道が高励起であるために、LSカップリングにより項の種類が多数現れ、スペクトル線数が非常に多くなるという特徴を持っている。これまでの実験解析では、これら高次サテライト線の存在は、共鳴線に対する寄

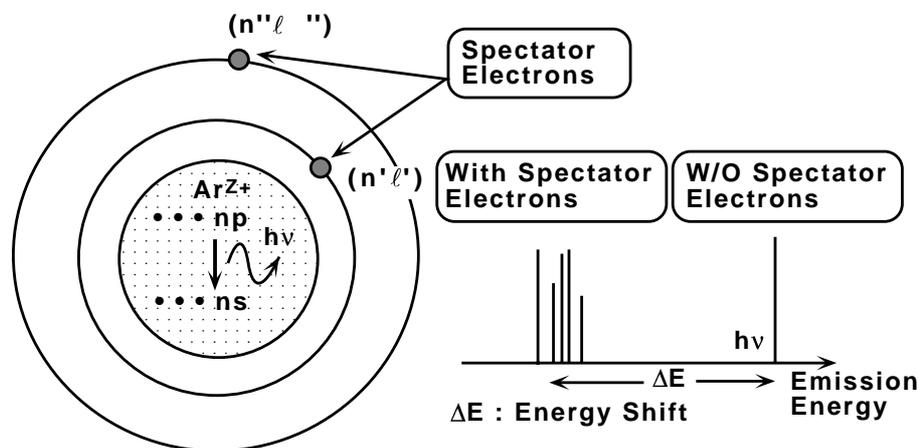


図3.2: スペクテーター電子を束縛するイオンからの発光スペクトルの模式図
 スペクテーター電子が、発光電子の軌道の内側にも有限の存在確率を持つことにより、発光電子に作用する核の有効電荷を遮蔽し、スペクトル線が低エネルギー側に ΔE だけシフトする。またLSカップリングにより多数のスペクトル線が現れる。

与が小さいものとして無視されてきた。本論文では以後、高次サテライト線の共鳴線スペクトルに対する寄与を解析することを目的とする。

3.2 ポピュレーション求解モデル

X線スペクトルの解析を行うには先ず、各イオンのポピュレーションを求める必要がある。先の第2章で述べたように、衝突輻射平衡 (Collisional Radiative Equilibrium: CRE) モデルは、爆縮プラズマの解析には有効なモデルである [6]。しかし、レーザー核融合に見られる高密度プラズマでは、連続準位に近い束縛準位は、自由電子との衝突過程が顕著であり、部分的に局所熱平衡 (Local Thermal Equilibrium: LTE) が成立すると考えられる。高次サテライト線は、スペクテーター電子を連続準位に近い Rydberg 軌道に束縛しており、そのようなイオンのポピュレーションを解析するために、図 3.3 のようなモデルを仮定する。基底状態及び一電子励起イオンのポピュレーションは、CRE によって求め、二電子励起イオンのポピュレーションは、一電子励起イオンとの LTE の関係によって評価する。以下の節では、このモデルの詳細を述べると共に、その妥当性について評価する。

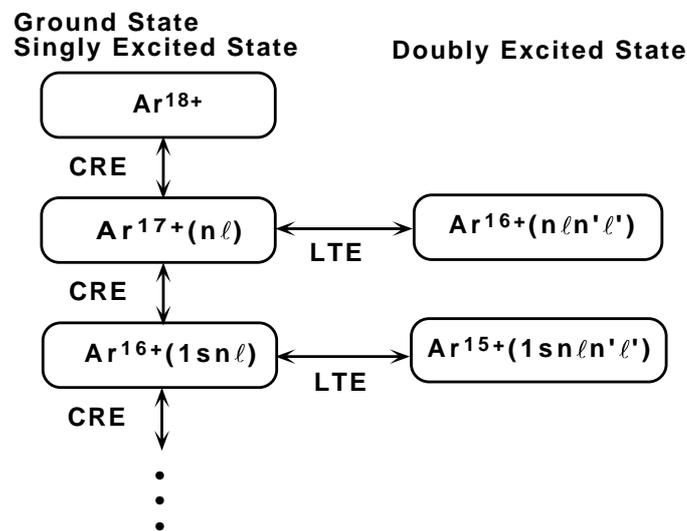


図 3.3: Ar イオンのポピュレーションの計算モデル
二電子励起イオンのポピュレーションは、一電子励起イオンとの LTE の関係によって記述する。

3.2.1 基底状態及び一電子励起イオンのポピュレーション

一電子励起イオン ($i > 1$) と、基底状態 ($i = 1$) のイオンのポピュレーションは、以下に示す式 (3.1) のレート方程式によって求めることができる [7]。

$$\frac{dN(z, i)}{dt} = \sum_{j(<i)} C_{e(i)}(j \rightarrow i) n_{e(i)} N(z, j) + \sum_{j(>i)} \left\{ D_{e(i)}(j \rightarrow i) n_{e(i)} + A_r(j \rightarrow i) \right\} N(z, j) - \left[\left\{ \sum_{j(>i)} C_{e(i)}(i \rightarrow j) + \sum_{j(<i)} D_{e(i)}(i \rightarrow j) \right\} n_{e(i)} + \sum_{j(<i)} A_r(i \rightarrow j) \right] N(z, i)$$

$$\begin{aligned}
& - I^c(z, i)n_e N(z, i) + R(z, i)n_e N(z + 1, 1) \\
& + \sum_j \{I^c(z - 1, j)n_e N(z - 1, j) - R(z - 1, j)n_e N(z, 1)\} \delta_{1,i} \\
& = 0.
\end{aligned} \tag{3.1}$$

式中、 $\delta_{1,i}$ は、Kronecker の δ を示す．添字 e と i は各々、電子及びイオンを表している．例えば、 n_e と n_i は各々、電子密度、イオン密度を表している．同じ主量子数内での束縛電子の遷移過程を求める場合は、式中の電子密度 n_e をイオン密度 n_i に置き換える．すなわち、“ l -mixing” は、イオン衝突によって記述する [8] ．

$C_{e(i)}(j \rightarrow i)$ と $D_{e(i)}(j \rightarrow i)$ は各々、 j 準位から i 準位への衝突励起及び衝突脱励起係数である．また、 $A_r(j \rightarrow i)$ は放射性脱励起係数であり、Einstein の A 係数とも呼ばれている． $I^c(z, i)$ は、 z 価 i 準位のイオンに対する衝突電離係数を示している．最後に $R(z, i)$ は、 $(z + 1)$ 価の基底イオンから z 価 i 準位のイオンへの再結合係数を表している．再結合係数 $R(z, i)$ には三体再結合、放射性再結合、二電子性再結合係数を含んでいる．実際の計算では、ここで問題にするイオンは H 様、He 様、Li 様イオンのような束縛電子数が少ないイオンを対象としていることから、第2章で述べた H 様イオンに対するレート係数を補間して用いている．

3.2.2 二電子励起イオンのポピュレーション

二電子励起イオンのポピュレーションを、一電子励起イオンとの LTE によって評価することの妥当性は、一電子励起イオンについて適用される「Griem の境界 [9] (補遺 C 参照 .)」を、以下のように二電子励起イオンについて拡張することによって評価することができる．即ち、一電子励起イオンの場合と同様にして、発光電子とスペクテーター電子の衝突励起係数の和が、両者の放射性脱励起係数及び自動電離係数の和と等しくなる準位を求めれば良い [10] ．この準位よりも高い励起準位は、衝突過程が放射過程よりも顕著になり、近似的に LTE が成立する．そのような準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンは、図 3.3 に示すように、一電子励起イオンとの LTE の関係でポピュレーションを評価することが可能となる．

$$\begin{aligned}
& \sum_{n''(>n)} C_e(nn' \rightarrow n''n')n_e + \sum_{n''(>n')} C_e(nn' \rightarrow nn'')n_e = \\
& \sum_{n''(<n')} A_r(nn' \rightarrow nn'') + \sum_{n''(<n)} A_a(nn' \rightarrow n'' + e^-) + \sum_{n''(<n)} A_r(nn' \rightarrow n''n'), \tag{3.2} \\
& \text{但し、} n \leq n'.
\end{aligned}$$

ここで n, n' は各々、発光電子及びスペクテーター電子の軌道の主量子数を示し、式 (3.2) において、例えば、 $C_e(nn' \rightarrow n''n')$ は、自由電子との衝突によって、主量子数 n の軌道に束縛された発光電子が、主量子数 n'' の軌道に遷移する割合を示す衝突励起係数である．また $A_r(nn' \rightarrow n''n')$ 、 $A_a(nn' \rightarrow n'' + e^-)$ は各々、放射性脱励起係数、自動電離係数を示している．尚、各レート係数の評価の際には、簡単のため、スペクテーター電子と発光電子の相関は無視している．

発光電子の衝突励起係数は、第2章の式(2.3)のH様イオンの値で近似する。尚、以下の式は Gaunt 因子として $\frac{\sqrt{3}}{2\pi}$ を乗じることによって得られる [11] .

$$\begin{aligned} C_e(nn' \rightarrow n''n') &\approx C_e(n \rightarrow n'') \\ &= \frac{8.7 \times 10^{-8}}{q_n^3} f_{nn''} \left(\frac{q_n^2 E_H}{E_{nn''}} \right) \left(\frac{q_n^2 E_H}{T_e} \right)^{1/2} \\ &\times \exp\left(-\frac{E_{nn''}}{T_e}\right) (\text{cm}^3/\text{s}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

ここで q_n は、発光電子に作用する有効電荷を示す。発光電子に対する衝突励起係数は、藤本 [12] によれば、 $C_e(n \rightarrow n+1)$ の寄与が最も大きく、 $\sum_{n''(>n)} C_e(n \rightarrow n'') \approx C_e(n \rightarrow n+1)$ が成立する。吸収振動子強度 f_{nn+1} は、およそ $n/2^2$ であり、また $q_n^2 E_H / E_{nn+1} \approx n^3/2$ が成立する。スペクテーター電子に対する衝突励起係数は、有効電荷を q_n ではなく $(q_n - 1)$ として解析を行った。

発光電子の全放射性脱励起係数は、 $\sum_{n''(<n)} A_r(nn' \rightarrow n''n') \approx \sum_{n''(<n)} A_r(n \rightarrow n'')$ として近似した [9] . 即ち、

$$\sum_{n''(<n)} A_r(nn' \rightarrow n''n') \approx 1.62 \times 10^{10} \frac{q_n^4}{n^{9/2}} (1/\text{s}). \quad (3.4)$$

またスペクテーター電子の全放射性脱励起係数は、衝突励起係数の場合と同様に、有効電荷を1だけ減じて評価を行った。

自動電離は、スペクテーター軌道への二電子性捕獲過程の逆過程として評価できる。二電子性捕獲断面積は、コアイオン(核と発光電子)の衝突励起断面積曲線を、閾値となる励起エネルギー以下に補間することによって得られる。最終的に自動電離係数は、次に示す式(3.5)によって与えられる(補遺B参照) [10, 13, 14] .

$$A_a(nn' \rightarrow n'' + e^-) = \frac{2(q_n - 1)^2 E_a}{\hbar n'^3 \pi^2 a_0^2} \frac{g_{n''}}{g_{nn'}} \sigma(n'' \rightarrow n) (1/\text{s}). \quad (3.5)$$

ここで、 $E_a = E_{nn''} - (q_n - 1)^2 E_H / n'^2$ である。衝突励起断面積 $\sigma(n'' \rightarrow n)$ の評価には、Henri van Regemorter による H 様近似の式により評価している [15] . ここで注意しなければならないのは、発光電子が主量子数 $n = 3$ に束縛されている場合には、基底状態への遷移に加えて、自動電離のチャンネルをもう1つ考慮に入れなければならないことである。即ち、 $\text{Ar}(3ln') \rightarrow \text{Ar}(2l'') + e^-$ の遷移である。この時、発光電子が主量子数 $n = 3$ から $n = 2$ へ遷移することによって失うエネルギーは、その外殻軌道に束縛されるスペクテーター電子の束縛エネルギーよりも大きいために自動電離が起こる。

図3.4は、スペクテーター電子を $n'l'$ に束縛した He 様イオン $2ln'$ と $3ln'$ について「Griem の境界」を図示したものである。図中の「Optical Electron」は、発光電子が束縛される軌道を示している。「Griem の境界」よりも主量子数が大きい軌道は、衝突過程が放射過程よりも顕著なため、近似的に LTE が成立する。本評価では、方位量子数を区別して評価を行っているわけではない。しかし表現の便宜上、「 l 」を付けてある。

本論文で解析の対象としているプラズマ・パラメーターは、電子温度 $T_e = 0.5 \sim 2\text{keV}$ 、電子密度 $n_e = 10^{23} \sim 10^{24}\text{cm}^{-3}$ のような高温高密度のプラズマであり、この領域にお

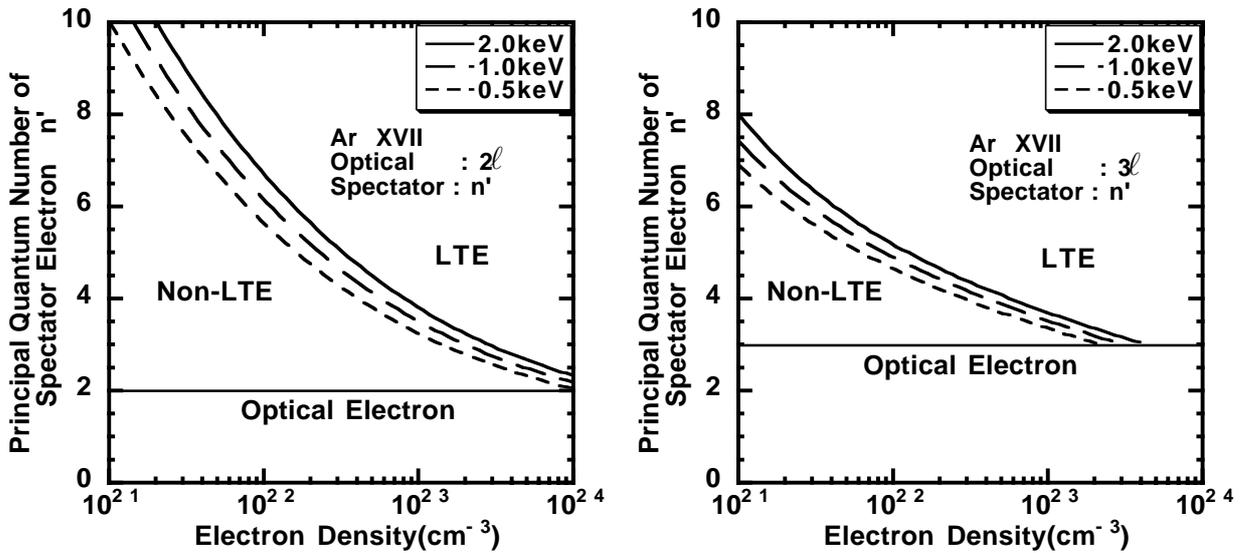
(a) $2ln'$ イオンに対する「Griemの境界」.(b) $3ln'$ イオンに対する「Griemの境界」.

図 3.4: 二電子励起 He 様 Ar イオンに対する拡張された「Griemの境界」(n' :スペクテーター軌道)

ける $2ln'$ イオンに対する「Griemの境界」は、およそ $n' = 3$ である．同様に $3ln'$ イオンの「Griemの境界」は $n' = 3 \sim 4$ である．これらの結果により、発光電子よりも外殻の軌道にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンは、図 3.3 に示されるように、一電子励起イオンとの LTE によって、そのポピュレーションの評価が可能であり、それは以下に示す Saha の式によって与えられる．

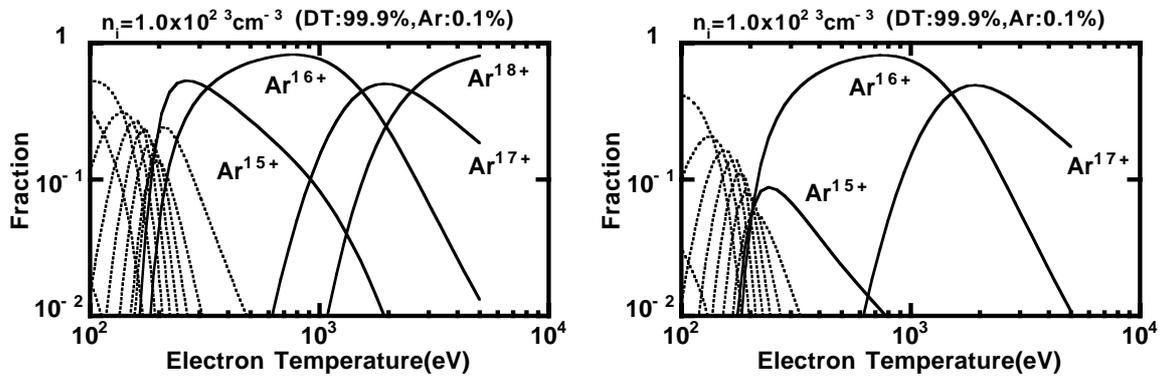
$$\frac{N_{nl'n'l'}}{N_{nl}n_e} = \left\{ \frac{2\pi\hbar^2}{m_e T_e} \right\}^{3/2} \frac{g_{nl'n'l'}}{2g_{nl}} \exp(E_{\text{spec}}/T_e). \quad (3.6)$$

ここで、 E_{spec} は Continuum Lowering[16] を含む、スペクテーター電子のイオン化エネルギーであり、 N_{nl} は励起準位 nl に束縛電子を持つ一電子励起イオンのポピュレーションを示す．コアイオン（核と発光電子）の放射性脱励起による発光は、共鳴線のごく近傍に分解観測不可能なスペクトル線群を形成する．

スペクテーター電子を $n'l'$ に束縛した Li 様イオン $1s2ln'$ と $1s3ln'$ も、上記と同様の方法で「Griemの境界」の評価が可能である．その結果は、図 3.4 と類似した結果となる．さらに言えば、有効電荷が 1 だけ減少するため、核との相互作用として評価される放射性脱励起係数は小さくなる．その一方、衝突励起係数は大きくなるため、図 3.4 の場合よりも「Griemの境界」の主量子数は小さくなる．

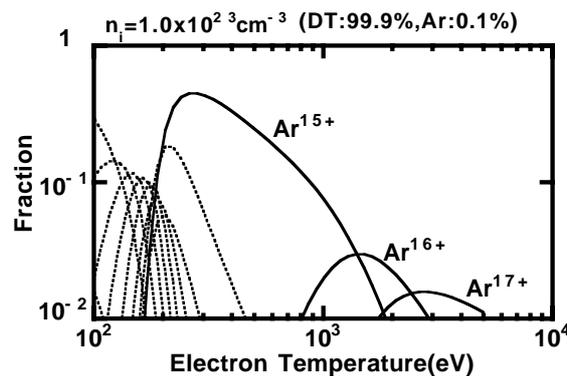
3.3 微量混入された Ar イオンのポピュレーション

図 3.5 は、DT プラズマに微量混入された Ar のポピュレーションを、イオン価ごとに図示したものである。図中の点線は、Be 様より価数の小さいイオンのポピュレーションを示している。図より He 様イオンが広い温度範囲に渡って顕著な様子が伺える



(a) 全イオンに対する価数別の Fraction .

(b) 基底状態のイオンに対する価数別の Fraction .



(c) 一電子励起状態のイオンに対する価数別の Fraction .

図 3.5: DT プラズマ中に微量混入された Ar イオンのポピュレーション

が、その殆どは、基底状態のイオン ($1s^2$) である。基底状態の He 様イオンの電子配置は、主量子数 $n = 1$ で閉殻構造を持ち、そのイオン化エネルギーは 4117eV で非常に大きな値を示す。また電子温度が 2keV を超えると、基底状態の H 様 Ar イオンが顕著になる。このイオン化エネルギーは、 4426eV である。参考までに、基底状態にある Li 様 Ar イオンのイオン化エネルギーは、 915eV で、先の 2 つのイオンに比較してずっと小さい。H 様或いは H 様イオンが顕著な温度領域 ($T_e \geq 500\text{eV}$) では、励起状態にあるイオンは非常に微小であり、その時の Ar イオンの平均電離度は、基底状態の H 様、He 様イオンで決定される。これは後に述べる圧力電離のモデル [17] に対する問題提起に関連して重要な知見となる。

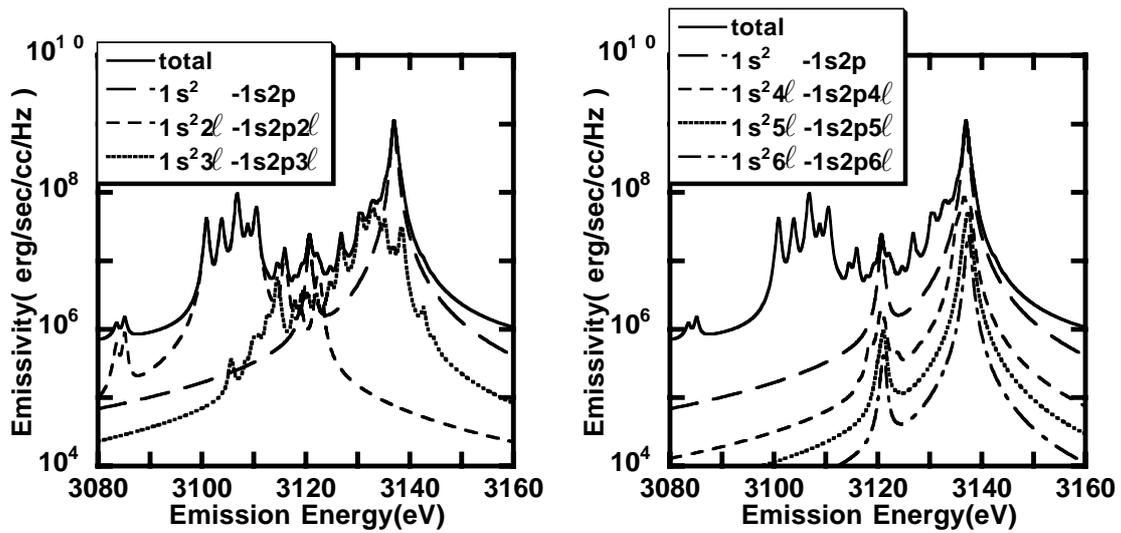
3.4 H様、He様 Ar イオンからのX線スペクトル

この節では、高次サテライト線の共鳴線に対する寄与を、そのX線発光量によって評価する。高次サテライト線は、その発光エネルギー位置が、共鳴線のそれと殆ど等しく、その寄与は見かけ上、共鳴線のX線発光量の増加として現れると考えられる。そして、その寄与の大きさは、スペクテーター電子を束縛する Rydberg 軌道のプラズマ中における存在確率に大きく依存する。本節では、次節において説明する More、Tsakiris、Eidmann らによる経験式を用いて存在確率の評価を行っている [17, 18]。

図 3.6 のスペクトルは、DT プラズマ中に微量混入された Ar の共鳴線 $\text{He-}\alpha(1s^2 - 1s2p)$ 及び $\text{He-}\beta(1s^2 - 1s3p)$ と、その近傍に位置するサテライト線の分布を示したものである。プラズマ・パラメーターは、イオン密度 $n_i = 10^{24}\text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600\text{eV}$ である。イオン密度に対する Ar の割合は 0.1% で、今の場合、イオン密度 $n_i \approx$ 電子密度 n_e となる。ライン広がり、Voigt プロファイルの近似形を用いた [18]。本来ならばシュタルク広がりを考慮すべきではあるが、ここでは高次サテライト線の発光量の寄与を評価することを目的とするために無視した。尚、シュタルク広がりを考慮したライン・プロファイルについては、第 5 章で議論する。

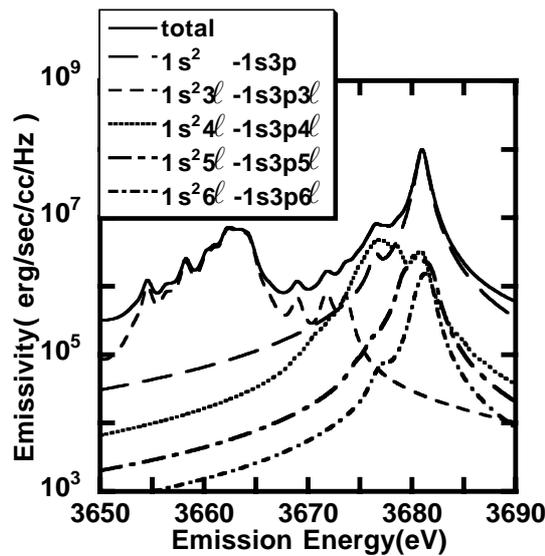
図 3.6(b) 及び (c) から分かるように、見かけ上、共鳴線 $\text{He-}\alpha$ 、 $\text{He-}\beta$ は各々、スペクテーター電子を主量子数 $n' \geq 3$ 及び、 $n' \geq 4$ に束縛した二電子励起イオンからの発光によってエンハンスされているのが分かる。これらのサテライト線は、各共鳴線と分解観測不可能なエネルギー領域の発光であり、本論文で定義する高次サテライト線の範疇に属する。

本解析において、二電子励起イオン $2l2l'$ 、 $1s2l2l'$ からのサテライト線の精度は最も悪くなる。なぜなら、前節の図 3.4(a) から分かるように、スペクテーター軌道の主量子数 $n' = 2$ は「Griem の境界」よりも低いエネルギー準位にある。また主量子数 $n = 2$ の波動関数は、他の励起軌道の波動関数に比較して、分散(空間的な広がり)が小さい [19]。発光電子とスペクテーター電子の電子相関は、互いの波動関数の重なり積分で決まることを考慮すると、先の電子相関を無視した二電子性捕獲断面積の近似は、これらのイオンの自動電離の評価精度を最も悪くする。同様に、この評価方法は、 $3l3l'$ 、 $1s3l3l'$ イオンにも影響するが、式 (3.5) を見ても分かるように、自動電離係数はスペクテーター軌道の主量子数 n' の 3 乗に逆比例して小さくなる。また発光電子の軌道の主量子数 n に対しても同様の依存性があるために大きな影響はない(補遺 B 参照)。実際、 $2l2l'$ イオンの自動電離係数は、Vainshtein、Safronova らの計算結果によれば [1]、 $10^{13} \sim 10^{14}\text{sec}^{-1}$ であることから、 $3l3l'$ イオンの自動電離係数は $(2^3/3^3)^2$ 倍され、 $10^{12} \sim 10^{13}\text{sec}^{-1}$ 程度と見積もることができる。一方、電子密度 $n_e = 10^{24}\text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 500\text{eV} \sim 1\text{keV}$ における、主量子数 $n = 3$ に対する電子衝突励起係数は 10^{14}sec^{-1} 程度であり、自動電離係数の寄与はせいぜい、その 1/10 程度でしかない。



(a) 共鳴線 He- α と、サテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 2, 3$) の分布 .

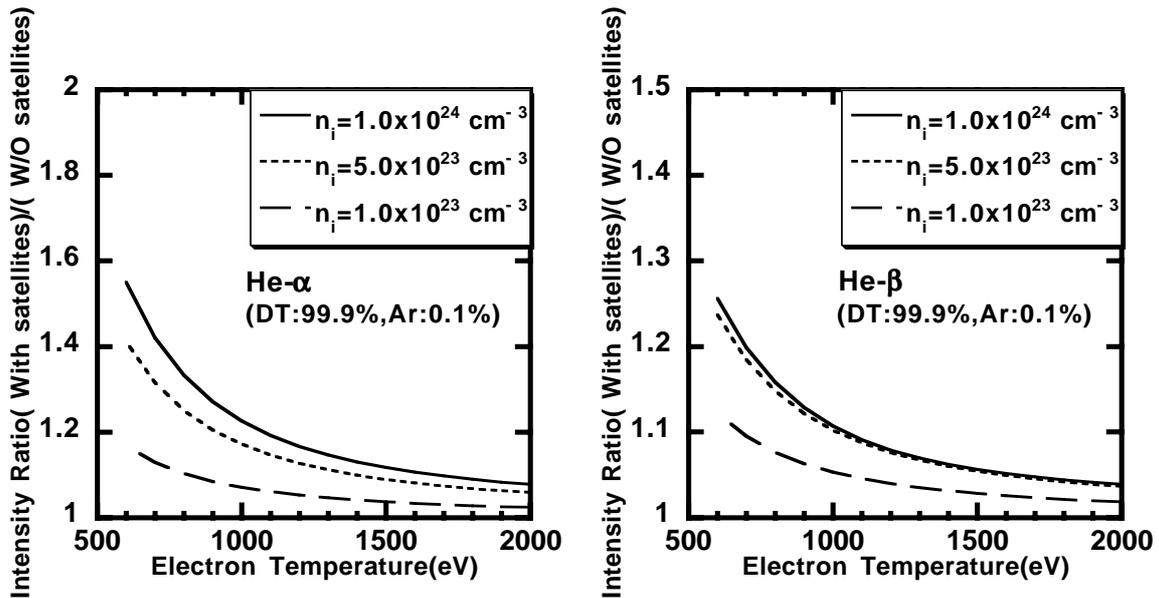
(b) 共鳴線 He- α と、サテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 4, 5, 6$) の分布 .



(c) 共鳴線 He- β と、サテライト線 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) の分布 .

図 3.6: 共鳴線近傍の高次サテライト線のスペクトル分布

イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ 、Ar の割合は 0.1% である .
 (a) 実線 : 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む .) 破線 (長) : 共鳴線 He- α ($1s^2 - 1s2p$)、破線 (短) : サテライト線 $1s^22l - 1s2p2l$ 、点線 : サテライト線 $1s^23l - 1s2p3l$.
 (b) 実線と破線 (長) は (a) に同じ、破線 (短) : サテライト線 $1s^24l - 1s2p4l$ 、点線 : サテライト線 $1s^25l - 1s2p5l$ 、一点鎖線 : サテライト線 $1s^26l - 1s2p6l$.
 (c) 実線 : 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む .) 破線 (長) : 共鳴線 He- β ($1s^2 - 1s3p$)、破線 (短) : サテライト線 $1s^23l - 1s3p3l$ 、点線 : サテライト線 $1s^24l - 1s3p4l$ 、一点鎖線 (長) : サテライト線 $1s^25l - 1s3p5l$ 、一点鎖線 (短) : サテライト線 $1s^26l - 1s3p6l$.



(a) 共鳴線 He- α (“With satellites” の場合は高次サテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) を含む) .

(b) 共鳴線 He- β (“With satellites” の場合は高次サテライト線 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 4, 5, 6$) を含む) .

図 3.7: 高次サテライト線からの発光量の寄与
高次サテライト線の発光量は、共鳴線の発光量に対して無視できない寄与がある．各イオン密度において、Ar の割合は全て 0.1% である．

図 3.7 に、共鳴線の発光量に対する、高次サテライト線を含む全発光量の比を示す．共鳴線 He- α に対する高次サテライト線としては、 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) のサテライト線を考慮した．また、共鳴線 He- β に対しては、 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 4, 5, 6$) のサテライト線の X 線発光量を考慮した．今、二電子励起イオンは、一電子励起イオンとの熱平衡を仮定している．この時、電子温度が上昇すると、実質的な自由空間の状態密度が増加するために二電子励起イオンのポピュレーションは減少し、強度比は小さくなる．またイオン密度が増加すると、今度は自由空間の状態密度が減少するために二電子励起イオンのポピュレーションは増加し、強度比も増加する．しかし、密度の増加と共に、スペクテーター軌道の有効束縛状態数が減少してゆくため、強度比の増加は飽和するようになる．いずれにせよ、共鳴線 He- α 、He- β に比較して、イオン密度 $n_i \geq 5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e \leq 1 \text{keV}$ の領域で、高次サテライト線の発光量が無視できないことが分かる．

3.5 高励起束縛状態の存在確率に対する問題提起

前節では、高次サテライト線の共鳴線に対する寄与として、その発光量に対する評価を行った。高次サテライト線を発光する二電子励起イオンは、そのスペクテーター電子を Rydberg 軌道に束縛する。高密度プラズマ中では、発光イオンは、周囲を取り巻く他のイオンや自由電子によって擾乱を受ける。図 3.8 に示すように、イオン球半径 (ion sphere radius) a_i が、束縛準位の軌道半径 (の期待値) と同程度になると、その軌道は必ずしも束縛状態を維持しない。これを圧力電離という。

本解析において、各束縛軌道のプラズマ中における存在確率 P_{More} は、次式に示す More、Tsakiris、Eidmann らによる経験式を用いて評価を行っている [17]。彼らの経験式には 2 つの経験的に決定されるフィッティング・パラメーター (a, b) があり、その値は $(a, b) = (3, 4)$ とされている [18]。Tsakiris、Eidmann らは、式 (3.7) を用いた CRE モデルによって平均電離度を求め、それが Thomas-Fermi モデル (補遺 D 参照) によって求めた平均電離度に一致するように (a, b) を決め、高密度の極限で電子縮退の効果が入るよう考慮した。

$$P_{\text{More}} = \frac{1}{1 + (aR_n/a_i)^b} \quad (3.7)$$

ここで、 R_n は孤立イオンの束縛準位 n における軌道半径の期待値であり、 a_i はイオン球半径を表している。イオン球半径 a_i は以下のように表すことができる。

$$a_i = \left(\frac{3\langle z \rangle_{\text{ave}}}{4\pi n_e} \right)^{1/3} \quad (3.8)$$

上式において、 $\langle z \rangle_{\text{ave}}$ は平均電離度を表している。一般的に、価数の小さなイオンは、イオン化ポテンシャルが小さいために圧力電離による影響

が大きく、価数の大きなイオン、特に、基底状態の H 様、He 様イオンは、イオン化ポテンシャルが大きいため圧力電離による影響は小さい。本章 3.3 節で述べたように、H 様、He 様イオンが多く存在する温度領域 (電子温度 $T_e \geq 500\text{eV}$) では、その大部分が

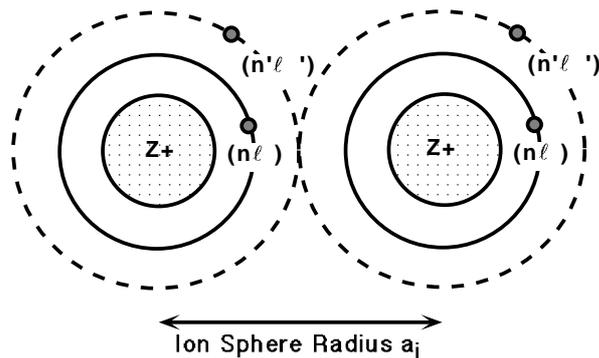


図 3.8: 圧力電離
高密度プラズマにおいて、高励起準位の軌道は必ずしも束縛状態を維持しない。

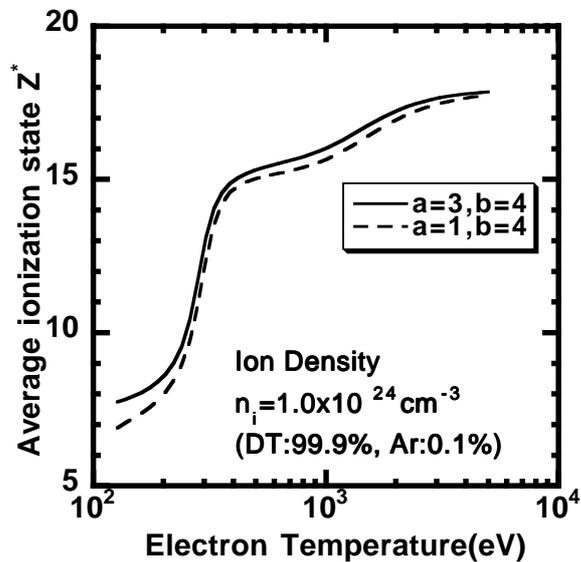
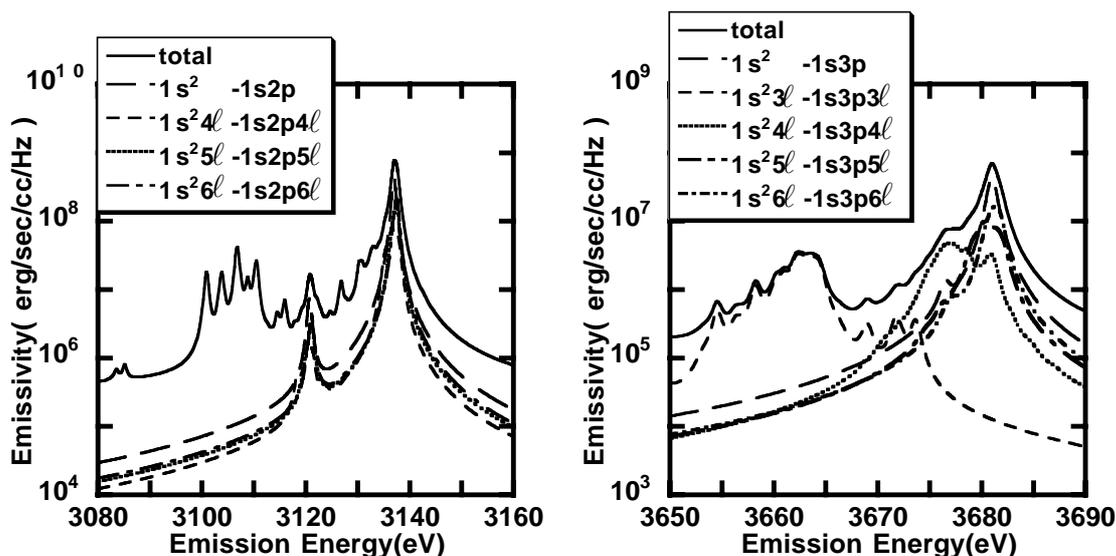


図 3.9: More の経験式において $(a, b) = (3, 4)$ 及び $(1, 4)$ とした時の平均電離度

基底状態のH様、He様イオンで占められている。即ち、わずかなポピュレーションしかない励起イオンの平均電離度への寄与は殆ど無い。

ここで先ず、平均電離度の経験パラメーターに対する依存性を調べてみることにしよう。経験パラメーターを $(a, b) = (3, 4)$ 及び $(1, 4)$ として評価した結果を図3.9に示す。図3.9に見られるように、電子縮退の効果が見れる低温度領域では両者に差が見られるが、問題とする高温領域では、両者の平均電離度は大差ないことが分かる。しかしながら、図3.6(b)と図3.10(a)、また図3.6(c)と図3.10(b)を見ても明らかのように、 $(a, b) = (3, 4)$ と $(1, 4)$ では高次サテライト線の寄与は大きく異なる。



(a) $(a, b) = (1, 4)$ の時の共鳴線 He- α とサテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 4, 5, 6$) の分布。

(b) $(a, b) = (1, 4)$ の時の共鳴線 He- β とサテライト線 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) の分布。

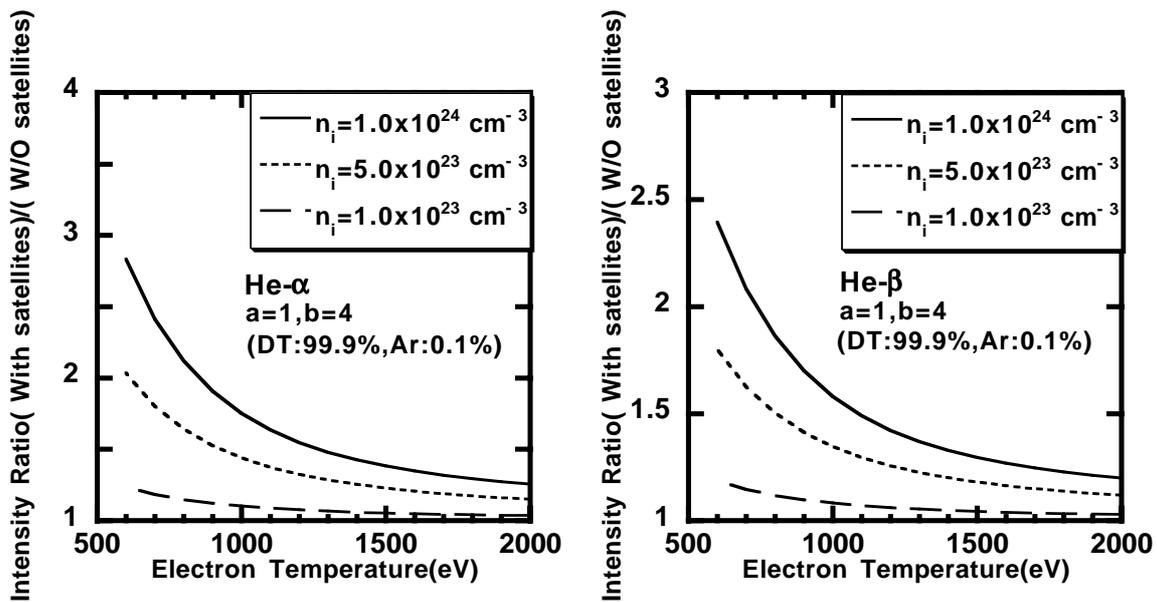
図3.10: More の経験式において $(a, b) = (1, 4)$ とした時の高次サテライト線からの寄与イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ 、Ar の割合は 0.1% である。

(a) 実線: 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む)、破線(長): 共鳴線 He- α ($1s^2 - 1s2p$)、破線(短): サテライト線 $1s^24l - 1s2p4l$ 、点線: サテライト線 $1s^25l - 1s2p5l$ 、一点鎖線: サテライト線 $1s^26l - 1s2p6l$ 。

(b) 実線: 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む)、破線(長): 共鳴線 He- β ($1s^2 - 1s3p$)、破線(短): サテライト線 $1s^23l - 1s3p3l$ 、点線: サテライト線 $1s^24l - 1s3p4l$ 、一点鎖線(長): サテライト線 $1s^25l - 1s3p5l$ 、一点鎖線(短): サテライト線 $1s^26l - 1s3p6l$ 。

パラメーター $(a, b) = (1, 4)$ の時の高次サテライト線を含む全発光量と、正味の共鳴線の発光量の比を図示すると図3.11 のようになる。先の図3.7と比較しても分かるように、 (a, b) パラメーターの選択によって、高次サテライト線の寄与が非常に大きく変化することが分かる。

前に述べたように、 (a, b) の値を決定したよりどころになっている平均電離度には、励起イオンの寄与が殆どない。ゆえに、ここで問題とする高温領域における彼らのパ



(a) 共鳴線 He- α (“With satellites” の場合には、高次サテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) を含む)。

(b) 共鳴線 He- β (“With satellites” の場合には、高次サテライト線 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 4, 5, 6$) を含む)。

図 3.11: More の経験式において $(a, b) = (1, 4)$ とした時の高次サテライト線からの寄与

ラメーターが意味するところは、 $(a, b) = (3, 4)$ のパラメーター・セットは、主量子数 $n = 1, 2$ 又は 3 のような、深いエネルギー準位の軌道の評価に適したパラメーターであり、エネルギー準位の高い Rydberg 軌道の評価には、適切な値ではないということである。本章の解析結果だけでは適切なパラメーターを選択することはできないが、圧力電離が、浅いエネルギー準位の軌道に顕著に作用することを考慮すると、深いエネルギー準位に適合された彼らのパラメーターは、高励起準位の存在確率を過小評価している可能性がある。

以上のことから、高次サテライト線の寄与を評価するには、高励起スペクテーター軌道が、どれだけの存在確率で束縛状態を維持しているのかを評価することが重要であり、従来用いられてきた More の経験式を、Tsakiris のパラメーターで評価することは必ずしも適切ではないことが明らかになった。高励起束縛状態の存在確率のプラズマ・パラメーター依存性については更に詳細な解析を必要とする。

3.6 第3章まとめ

本章では、共鳴線近傍のサテライト線の寄与について理論的に解析を行った。以下に得られた知見の要約を列挙する。

- (1) スペクテーター電子を束縛した二電子励起イオンからの発光スペクトルは、共鳴線の近傍に分布し、特に、スペクテーター電子を発光電子の軌道よりも高い励起準位に束縛した二電子励起イオンからの発光スペクトルは、共鳴線と分解観測不可能なエネルギー位置に分布することを示した。
- (2) 高次サテライト線を発光する二電子励起イオンのポピュレーションは、「Griemの境界」の評価によって、電子温度 $T_e = 0.5 \sim 2 \text{keV}$ 、電子密度 $n_e = 10^{23} \sim 10^{24} \text{cm}^{-3}$ (本解析では、電子密度 $n_e \approx$ イオン密度 n_i) のような高温高密度プラズマにおいて、一電子励起イオンとのLTEによって評価可能であることが明らかになった。
- (3) 高次サテライト線の寄与を評価するには、高密度プラズマ中における高励起スペクテーター軌道の存在確率の評価が重要である。これまで用いられてきたMoreの経験式を、Tsakirisらのパラメーターで表した束縛状態の存在確率は、H様又はHe様Arイオンが顕著な高温領域では、主量子数 $n = 1, 2$ などの低い(深い)エネルギー準位の存在確率の評価には適用可能だが、高励起束縛状態の存在確率の評価には適していないことが明らかになった。むしろMoreらの経験式は、高励起束縛状態の存在確率を過小評価する傾向にあることが推察された。

次章では、本章で問題となった、高励起束縛状態の存在確率について更に詳しく解析した結果について議論する。

参考文献

- [1] L. A. Vainshtein and U. I. Safronova: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **21**, 49(1978).
- [2] L. A. Vainshtein and U. I. Safronova: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **25**, 311(1980).
- [3] S. Bashkin and J. O. Stoner, Jr.: *Atomic Energy-Level and Grotrian Diagrams*, (North-Holland Publishing company, Amsterdam, Oxford, New York, 1978), Vol.2.
- [4] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia and E. P. Plummer: *Comput. Phys. Commun.* **55**, 425(1989).
- [5] I. P. Grant: *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **7**, 1458(1974).
- [6] H. Takabe and T. Nishikawa: *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51**, 379(1994).
- [7] Y. T. Lee: *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **38**, 131(1987).
- [8] V. L. Jacobs and J. Davis: *Phys. Rev.* **18**, 697(1978).
- [9] H. R. Griem: *Plasma Spectroscopy*(McGraw-Hill, New York, 1964), p.145.
- [10] T. Fujimoto and T. Kato: *Phys. Rev. A* **32**, 1663(1985).
- [11] R. Mewe: *Astron. and Astrophys.* **20**, 215(1972).
- [12] T. Fujimoto: *J. Phys. Soc. Japan* **47**, 273(1979).
- [13] I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein and E. A. Yukov: *Excitation of Atom and Broadening of Spectral Lines*, (Springer-Verlag, Berlin, Germany, 1995), 2nd ed., p.120.
- [14] M. J. Seaton and P. J. Storey: *Atomic Processes and Applications*, (North-Holland, Amsterdam, 1976), Chap.6.
- [15] H. V. Regemorter: *Astrophys. J.* **136**, 906(1962).
- [16] J. C. Stewart and K. D. Pyatt: *Astrophys. J.* **144**, 1203(1966).
- [17] R. M. More: *Atomic physics in inertial confinement fusion*. Lawrence Livermore Laboratory Report, UCRL-84991(1981).

- [18] G. D. Tsakiris and K. Eidmann: *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **38**, 353(1987).
- [19] H. A. Bethe and E. E. Salpeter: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, (Plenum Publishing Corporation, New York, 1977), p.17-18.
- [20] P. Pankratov and J. Meyer-ter-Vehn: *Phys. Rev. A* **46**, 5497(1992).

第4章 高密度プラズマにおける高励起束縛状態の存在確率

4.1 はじめに

第3章では、高密度プラズマ中の Ar イオンの束縛状態の存在確率を、More らの経験式を用いて評価を行い、高次サテライト線の寄与を考察した。彼らの経験式の中には、2つのフィッティング・パラメーターがあり、Tsakiris は高密度低温度の極限で、電子縮退の効果を取り入れるために $(a, b) = (3, 4)$ とした。しかし、H 様や He 様イオンが顕著になる高温領域では、必ずしも彼らのパラメーターが、全ての束縛準位に対して適切ではないことが明らかになった。特に、高励起束縛状態の存在確率の評価には適した値ではなく、およそ主量子数 $n = 1, 2$ 又は 3 のような深いエネルギー準位の存在確率の評価に適したものであった。高次サテライト線の寄与を評価するためには、スペクター電子が束縛される高励起準位の存在確率が重要であり、今あらためて、それらを実評価する必要性が生じた [1]。

これまでのこの分野の研究動向としては、More の式に似た経験式が Busquet によって提案されている [2]。また島村、藤本らは、H 様イオンの状態密度の解析解をイオン球モデルを仮定して導出した [3]。Preist は、遮蔽されたポテンシャル (Debye-Hückel 型ポテンシャル) において、Schrödinger 方程式を解き、束縛状態密度を計算した [4]。他にも多くの遮蔽ポテンシャルによる Continuum Lowering に関する研究報告がなされているが、どれもプラズマ効果としては、Coulomb ポテンシャルからの等方的な遮蔽効果のみを考慮したものである [5, 6, 7, 8, 9]。また、これらの研究報告が対象としているのは、主量子数 $n = 2$ あるいは $n = 3$ のような深いエネルギー準位から基底状態 $n = 1$ への共鳴線スペクトルであるために、その束縛状態はプラズマによって擾乱を受けにくく、その存在確率は孤立イオンの場合と殆ど変わりなく扱うことが可能であった。一方、山本らは線形近似の範囲で、H 様 Ne イオンのエネルギー準位の全 Stark 分裂幅のエンベロープの解析を行ったが、束縛状態の存在確率を議論するまでには至っていない [10]。

本章では、第3章において懸案事項となっていた高励起束縛状態の存在確率について、経験的な因子を含まない方法で解析を行い、そのプラズマ・パラメーター依存性を明確にすると共に、その知見から高次サテライト線の共鳴線に対する寄与を改めて評価することを目的とする。プラズマ中のイオンの束縛軌道のエネルギー準位を解析するには、周囲のイオンや自由電子による核ポテンシャルの遮蔽効果と、摂動電界の揺らぎによる Stark 効果を記述するモデルが必要であり、それによってエネルギー準位のレベル・シフトや、摂動電界によるレベルの消失といった現象を存在確率の計算に

組み入れることができる。

4.2 高励起束縛状態のエネルギー準位の求解

本節における目的は、Rydberg 軌道のエネルギー準位を求めることにある。そこで有効な近似法として WKB 近似を採用する。エネルギー準位のプラズマ効果による全変化量を、以下の式 (4.1) に示すように、遮蔽ポテンシャルによる項と、Stark 効果による項の2つに分けて考える。前者は空間的に等方な成分を示し、後者は空間的に非等方な成分を示す。両者の成分は本質的に異なる成分である。

$$\Delta E_{\text{total}} = \Delta E_{\text{Screen}} + \Delta E_{\text{Stark}}(\epsilon). \quad (4.1)$$

上式において、 ΔE_{Screen} (等方成分) は、遮蔽ポテンシャルによるレベル・シフトを示す項で、一方、 $\Delta E_{\text{Stark}}(\epsilon)$ (非等方成分) は、Stark 効果によるレベル・シフトの項を示している。 ϵ は摂動電界の強さを表している。

イオンが周囲のプラズマから受ける摂動電界は、ある確率分布 (詳細は、本章 4.2.3 節参照) を持っている。またその確率分布 $Q(\epsilon)$ から束縛状態の存在確率を求めることができる。今、 $\epsilon \leq \epsilon_c$ の時、エネルギー準位 $E_{\text{total}} \leq 0$ とすると、求める存在確率 P_{total} は、式 (4.2) によって計算できる。

$$P_{\text{total}} = \int_0^{\epsilon_c} Q(\epsilon) d\epsilon. \quad (4.2)$$

束縛準位が消失する電界 ϵ_c は、プラズマ効果による全レベル・シフト ΔE_{total} が、束縛エネルギーを上回り、実質的に連続準位になる場合と、摂動電界による直接的なイオン化現象 (摂動電界が、束縛電子を直接的にはぎ取る現象。本章 4.3 節を参照) によって決定される [11]。

式 (4.1) の総和則は、Stark 効果の線形成分が顕著な場合に、精度よく記述できる。実際、微量の Ar が DT プラズマに混入されている状況下では、イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ の時でも (Ar が微量なので、イオン密度は電子密度にほぼ等しくなる。) DT プラズマによる摂動電界が、強い非線形 Stark 効果を示すことはない。この場合、最大確率で生じる摂動電界 $\epsilon_{\text{Max.Prob.}}$ は、およそ Holtsmark の基準電界強度に等しく、 $\epsilon_{\text{Max.Prob.}} \approx e/a_e^2 \approx 0.727(\text{Atomic Unit})$ である。ここで、 a_e は、Wigner-Seitz 半径を示している。この摂動電界の下では、例えば、主量子数 $n = 5$ に対する線形 Stark シフトは約 30eV で、高次 Stark シフトはせいぜい 2 ~ 3eV のオーダーである。また後に示すように、イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ において、束縛状態をほぼ完全に維持することの可能な Rydberg 軌道の上限は $n = 5$ である。

4.2.1 核ポテンシャルの遮蔽効果 (等方成分)

本節から、式の中で使用する単位は、その利便性を考慮して原子単位 (補遺 E 参照) を採用する。但し、文章中の温度と密度については今まで通り cm^{-3} 及び eV を利用す

る．今、核電荷 Z_0 のイオンが、電子密度 n_e 、温度 T (ここでは、イオンと電子の温度の区別はなく、両者は等しいと仮定している．) のプラズマ中に置かれたとする．このような状況の下で、試験電荷は、式 (4.3) に示されるポテンシャルを形成する (補遺 G 参照) [12] .

$$\begin{aligned} V_{\text{sp}} &= -(Z_0/r) + J - (2/3)\pi n_e r^2 \quad (r < r_b), \\ &= -(Z_0/r) \exp(-r/\lambda_d) \quad (r \geq r_b), \end{aligned} \quad (4.3)$$

ここで、

$$\begin{aligned} J &= (3Z_0/2a_i)[\{1 + (\lambda_d/a_i)^3\}^{2/3} - (\lambda_d/a_i)^2], \\ r_b &= \lambda_d[\{1 + (a_i/\lambda_d)^3\}^{1/3} - 1]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

式中、 $a_i = (3Z_0/4\pi n_e)^{1/3}$ は、イオン球半径を示し、 λ_d は、Debye 長を示している．このポテンシャルは、1966 年に Stewart と Pyatt らによって導出されたポテンシャルであり、核から離れたところでは Debye-Hückel 型ポテンシャルに漸近し、核に近い領域では、高密度の極限でイオン球モデルのポテンシャルに漸近する． r_b, J はプラズマ・パラメーターによって決まる定数である．前者は、これら 2 つの型のポテンシャルを接続する位置を示し、 J は第 3 項目と共に核ポテンシャルの遮蔽効果を示している．このポテンシャルは、自由電子が縮退していないプラズマ・パラメーターの領域で成立する．今、イオン密度 $n_i = 10^{23} \sim 10^{24} \text{cm}^{-3}$ (\approx 電子密度 n_e)、プラズマ温度 $T \geq 500 \text{eV}$ における縮退パラメーター $\theta (= T/E_F)$ は 13 以上で、非縮退プラズマの仮定が成立する．ここで E_F は、式 (4.5) で与えられるフェルミ・エネルギーを表している．

$$E_F = \frac{k_F^2}{2}. \quad (4.5)$$

一方、 k_F はフェルミ波数を示している．

$$k_F = \{3\pi^2 n_e\}^{1/3}. \quad (4.6)$$

また、この時のイオン球半径及び Debye 長は各々、 $a_i = 3.1(\text{Atomic Unit})$ 、 $\lambda_d = 2.2(\text{Atomic Unit})$ であり、これより r_b は、およそ $1.2(\text{Atomic Unit})$ となる．従って、水素様 Ar イオンの場合は、主量子数 $n \geq 4$ の軌道は、ほぼ Debye-Hückel 型ポテンシャルの領域に存在する．

プラズマによって等方的に遮蔽されたポテンシャルにおける Rydberg 軌道のエネルギー準位を求めるために、「Bohr-Sommerfeld 量子化条件」、則ち、WKB 近似により計算を行う [3, 13] .

$$\begin{aligned} \int_{r_i}^{r_o} p_r(r) dr &= (n - l - \frac{1}{2})\pi \quad (l \neq 0), \\ &= n\pi \quad (l = 0). \end{aligned} \quad (4.7)$$

ここで、 $p_r(r)$ 、 $V_l(r)$ は、それぞれ動径方向の運動量、遠心力ポテンシャルを含む束縛電子に作用する実効的なポテンシャルを示し、以下の式で表すことができる．

$$p_r(r) = \sqrt{2(E_{nl} - V_l)},$$

$$\begin{aligned}
V_l(r) &= V_{\text{sp}} + \frac{(l+1/2)}{2r^2} \quad (l \neq 0), \\
&= V_{\text{sp}} \quad (l = 0).
\end{aligned} \tag{4.8}$$

上式において、 (n, l) は、電子が束縛される軌道の主量子数及び方位量子数を示している。 r_i と r_o は、束縛電子がポテンシャル $V_l(r)$ において古典的に運動可能な領域を示す回帰点 (turning point) である。

4.2.2 Stark 効果 (非等方成分)

Stark 効果によるエネルギー準位の変化 $\Delta E_{\text{Stark}}(\epsilon)$ を求めるために、放物座標 (ξ, η) を導入して、各 Stark コンポーネントのエネルギー準位の解析を行う。尚、前節と同様に「Bohr-Sommerfeld 量子化条件」を用いる [11]。

$$\begin{aligned}
\int_{\xi_i}^{\xi_o} p_\xi(\xi) d\xi &= (n_1 + \frac{1}{2})\pi \quad (|m| > 1), \\
&= (n_1 + 1)\pi \quad (|m| = 1), \\
\int_{\eta_i}^{\eta_o} p_\eta(\eta) d\eta &= (n_2 + \frac{1}{2})\pi \quad (|m| > 1), \\
&= (n_2 + 1)\pi \quad (|m| = 1).
\end{aligned} \tag{4.9}$$

ここで、 $p_\xi(\xi)$ 、 $p_\eta(\eta)$ は、それぞれ放物座標の各方向における運動量を示している。

$$\begin{aligned}
p_\xi(\xi) &= \sqrt{\frac{1}{2}E_{\text{Stark}} + \frac{Z_1}{\xi} - \frac{|m|^2 - 1}{4\xi^2} - \frac{1}{4}\epsilon\xi}, \\
p_\eta(\eta) &= \sqrt{\frac{1}{2}E_{\text{Stark}} + \frac{Z_2}{\eta} - \frac{|m|^2 - 1}{4\eta^2} + \frac{1}{4}\epsilon\eta}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

上式において、 $Z_0 = Z_1 + Z_2$ の関係があり、 (n_1, n_2) は、放物量子数 (parabolic quantum number) である。磁気量子数 m とは、 $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ の関係がある。 E_{Stark} は、電界の強さが ϵ における量子状態 (n_1, n_2, m) のエネルギー準位の値を示す。

磁気量子数 $m = 0$ の時は、式 (4.10) の第3項目の ξ^{-2} 或いは η^{-2} の項のため、内側の回帰点 $\xi = 0$ 又は $\eta = 0$ における運動量が発散する。それゆえ、磁気量子数 $m = 0$ の時は、式 (4.9) の「Bohr-Sommerfeld 量子化条件」は適用できない。そこでこの場合に限り、以下に示す3次のオーダの摂動展開から各 Stark コンポーネントのエネルギー準位を求める [11]。

$$\begin{aligned}
\Delta E_{\text{Stark}}(\epsilon) &= \Delta E_1(\epsilon) + \Delta E_2(\epsilon) + \Delta E_3(\epsilon), \\
\Delta E_1(\epsilon) &= \frac{3}{2}\epsilon \frac{n}{Z_0} (n_1 - n_2), \\
\Delta E_2(\epsilon) &= -\frac{1}{16}\epsilon^2 \left(\frac{n}{Z_0}\right)^4 \{17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9|m|^2 + 19\}, \\
\Delta E_3(\epsilon) &= \frac{3}{32}\epsilon^3 \left(\frac{n}{Z_0}\right)^7 (n_1 - n_2) \{23n^2 - (n_1 - n_2)^2 + 11|m|^2 + 39\}.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

尚、磁気量子数 $m = 0$ に対する内側及び外側の回帰点は、式 (4.10) から $p_\xi(\xi) = 0$ 又は $p_\eta(\eta) = 0$ として求める。

各 Stark コンポーネントにおいて、量子数 n_1 が小さく量子数 n_2 が大きな量子状態は、低い(深い)エネルギー準位にあり、そのような量子状態は、量子数 n_1 が大きく量子数 n_2 が小さな量子状態よりも小さな電界強度で、その束縛状態が消失する。

4.2.3 摂動電界の確率分布

イオンが、周囲のプラズマから受ける摂動電界(以下、これをマイクロ・フィールドと呼ぶ)の確率分布は、1985年に Iglesiasらが開発した“Adjustable-Parameter EXponential (APEX) 近似”により求めた [14]。マイクロ・フィールドが ϵ であるような確率 $Q(\epsilon)$ は、以下に示す式によって表すことができる。

$$Q(\epsilon) = \frac{2\epsilon}{\pi} \int_0^\infty dk k \sin(k\epsilon) T(k). \quad (4.12)$$

上式の中で、 $T(k)$ は次式で示される。

$$T(k) = \exp\left[4\pi \sum_i \rho_i \int_0^\infty dr r^2 g_i(r) \frac{f(r)}{F_i(r)} \{j_0[kZ_i F_i(r)] - 1\}\right]. \quad (4.13)$$

ここで、 $f(r)$ 及び F_i は、

$$\begin{aligned} f(r) &= \frac{1}{r^2} (1 + r/\lambda_{de}) \exp(-r/\lambda_{de}), \\ F_i(r) &= \frac{1 + \alpha_i r}{r^2} \exp(-\alpha_i r), \end{aligned} \quad (4.14)$$

である。 λ_{de} は電子に対する Debye 長、 j_0 は 0 次の球ベッセル関数を示し、 ρ_i は第 i 番目の種類のイオンの密度で、 $g_i(r)$ は、試験電荷 Z_0 と第 i 番目のイオンの間の二体分布関数を表している。パラメーター α_i は、APEX の中では“Parameterized inverse Debye-length”と呼ばれている。イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、プラズマ温度 $T = 600 \text{eV}$ における H 様 Ar イオンと重水素 (D) (又は三重水素 (T)) イオン間のイオン結合係数 Γ は、 $\Gamma = Z_0 Z_i / a_{\text{Ar-D(orT)}} T \approx Z_0 Z_i / a_i T \approx 0.2 \sim 0.3$ である。 $a_{\text{Ar-D(orT)}}$ は、H 様 Ar イオンと重水素 (D) (又は三重水素 (T)) イオンの平均イオン間距離を示している。二体分布関数 $g_i(r)$ は、プラズマのような Coulomb 多体系を記述するのに良く用いられる HNC (Hypernetted-chain) 近似によって求めることができる。しかし、イオン結合係数 Γ が、 $\Gamma \ll 1$ のような弱結合プラズマでは Debye-Hückel 近似が成立し、二体分布関数 $g_i(r)$ は次式のように表される。

$$g_i(r) = \exp\left[-\frac{Z_0 Z_i}{rT} \exp(-r/\lambda_d)\right]. \quad (4.15)$$

図 4.1 は、上記のプラズマ・パラメーターにおける二体分布関数を、HNC 近似 (実線) [15] 及び、Debye-Hückel 近似 (点) によって計算した結果を比較したものである。Ar の割合は 0.1% である。両者を見ても分かるように、本論文において解析対象とす

るプラズマは、Debye-Hückel 理論によって近似可能な弱結合プラズマであることが分かる。これにより、今後、マイクロ・フィールドの計算には、Debye-Hückel 近似により求めた二体分布関数を用いることにする。

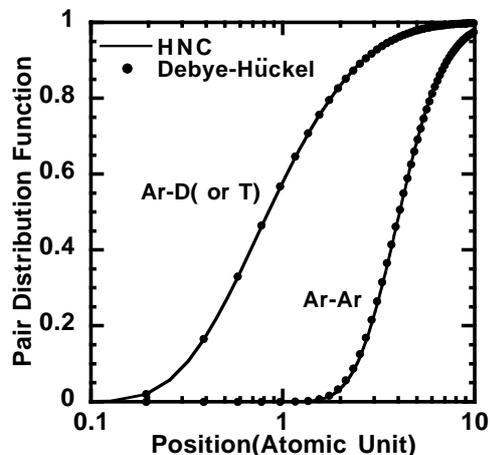


図 4.1: HNC 近似及び Debye-Hückel 近似より得られた H 様 Ar イオンと D(T) イオン、H 様 Ar イオンと H 様 Ar イオン間の二体分布関数
イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ における二体分布関数は、Debye-Hückel 近似によって記述できる。尚、Ar プラズマの割合は 0.1% である。

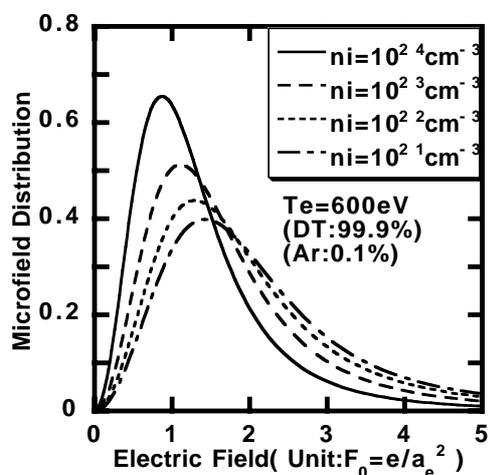


図 4.2: H 様 Ar イオンに対するマイクロ・フィールドの確率分布関数
イオン密度 $n_i = 10^{21} \sim 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、プラズマ温度 $T = 600 \text{eV}$ 、Ar の割合は 0.1% である。どの密度の場合でも、最も確率が高い摂動電界の強さは、ほぼ Holtsmark の基準電界 F_0 である。

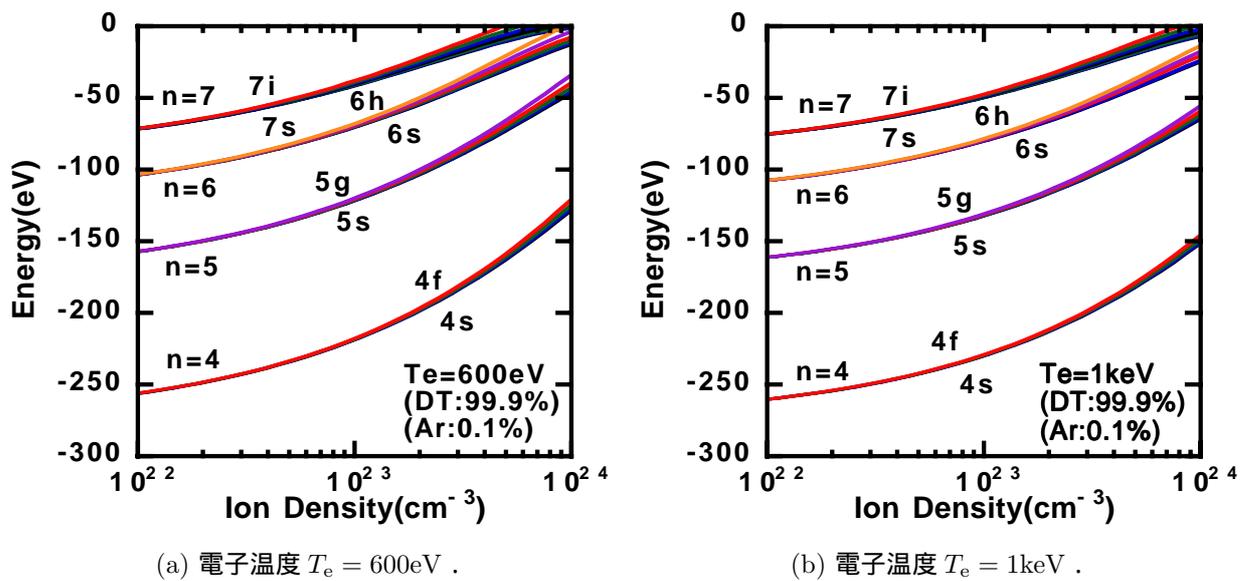


図 4.3: 核ポテンシャルへの遮蔽効果 (等方成分) のみを考慮した時のエネルギー準位のプラズマ密度依存性
イオン密度が高くなると、核ポテンシャルの Coulomb ポテンシャルからのずれが大きくなり、縮退が解ける。尚、Ar の割合は 0.1% である。

図 4.2 は、実際にイオン密度 $n_i = 10^{21} \sim 10^{24}\text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600\text{eV}$ におけるマイクロ・フィールドの確率分布を計算したものである。横軸はマイクロ・フィールドの強さを表しており、Holtsmark の基準電界 F_0 で規格化している。もっとも確率が高いマイクロ・フィールドは、どのイオン密度の場合でもおよそ F_0 の時であることが分かる。

4.3 高励起準位のエネルギー・シフト

図 4.3 は、電子温度 $T_e = 600\text{eV}$ と 1keV における、遮蔽された核ポテンシャルの下での各軌道の束縛エネルギーのプラズマ密度依存性を図示したものである。図からも分かるように、エネルギー準位が高くなる程、エネルギー準位の広がりが大きくなる。これは、密度が高くなるにつれて核ポテンシャルの Coulomb ポテンシャルからのずれが大きくなり、束縛準位の縮退が解けたことを意味している。電子温度 T_e が高くなり、Debye 長が長くなると、核ポテンシャルの遮蔽効果が小さくなって、エネルギー準位の広がり小さくなると共に、束縛準位のレベル・シフトによる消失効果も低減する。プラズマ中における束縛エネルギーの求めるには、核ポテンシャルの遮蔽効果 (等方成分) に加えて Stark 効果 (非等方成分) を含めて考えることが重要である。Stark 効果を考慮するには、前節で述べたマイクロ・フィールドの確率分布関数が必要である。これまでに Iglesias ら以外にも、その先駆者として、Hooper, Jr., O'Brien, Tighe らがマイクロ・フィールドの理論解析についての研究報告を発表している [16, 17, 18]。Iglesias

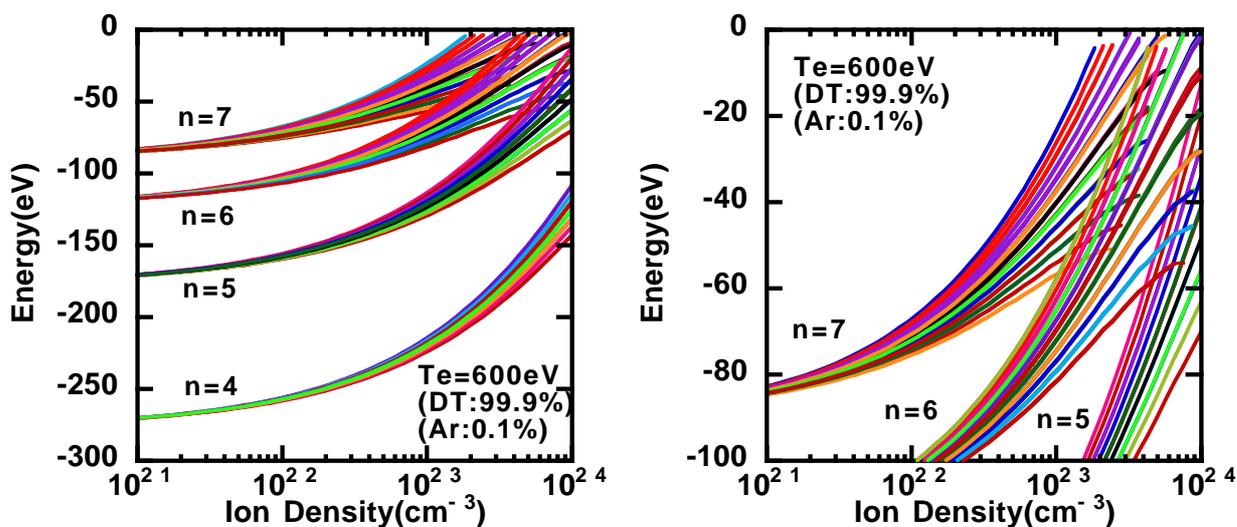
(a) 電子温度 $T_e = 600\text{eV}$ 、Ar の割合は 0.1% .(b) (a) において、主量子数 $n = 5, 6$ の軌道が、それぞれ 1 つ上の準位とオーバー・ラップする領域近辺の拡大図 .

図 4.4: 核ポテンシャルの遮蔽効果 (等方成分) と Stark 効果 (非等方成分) を含むエネルギー準位のプラズマ密度依存性

の報告も含めて、これらの計算結果が与える確率分布関数は、原点 ($r = 0$) におけるものである。しかし、各々の束縛状態の波動関数は、有限の広がりを持っている。ゆえに Debye 長に相当にする軌道半径 (の期待値) をもつ準位が APEX への適用限界の軌道となる。例えば、電子温度 $T_e = 500\text{eV} \sim 1\text{keV}$ 、イオン密度 $n_i = 10^{24}\text{cm}^{-3}$ のプラズマでは、Debye 長は $2 \sim 3$ (Atomic Unit) 程度であり、その時の適用限界となる H 様 Ar イオンの Rydberg 軌道は、およそ主量子数 $n = 7$ になる。

図 4.4(a) は、核ポテンシャルの遮蔽効果と、Stark 効果の両方の効果を含んだエネルギー準位のプラズマ密度依存性を示したものである。マイクロ・フィールドの強さは、確率分布関数の中で最も高い確率の電界値を選んだ。図 4.4(b) は、図 4.4(a) の拡大図である。

量子状態が $n_1 > n_2$ (高エネルギー準位) にある量子状態は、連続準位にレベル・シフトして、その束縛状態が消失する傾向があるのに対し、量子状態が $n_1 < n_2$ (低エネルギー準位) にある束縛状態は、連続準位へのレベル・シフトではなく、電界による直接的な電離によって束縛状態を消失する傾向にある。これは図 4.5 に示すように、後者の量子状態は、図の左側の領域に波動関数が存在する。ゆえに電界によって核近辺よりも深いポテンシャル領域が核から離れた領域に生じて、束縛電子が電離する [11]。例えば、図 4.4(b) において、主量子数 $n = 7$ の軌道は、Stark 効果により 28 のレベルに分裂する。これらのレベルの内、低 (深い) エネルギー準位にある束縛状態は、連続準位にレベル・シフトするまでもなく、イオン密度がほぼ $n_i = 10^{23}\text{cm}^{-3}$ において消失している様子が伺えるが、これは先の理由によるものである。この時の $n = 7$ にお

ける全 Stark 分裂幅は、およそ 40eV であり、その内、線形 Stark 効果による全分裂幅は 33eV で、ほぼ線形 Stark 効果の近似が成立する。

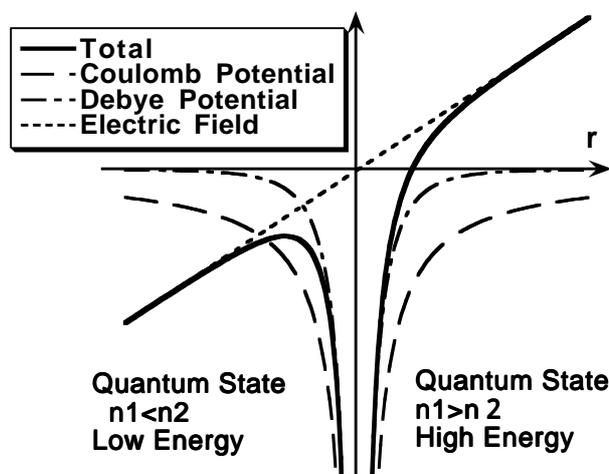


図 4.5: Stark コンポーネントの量子状態

4.4 高励起束縛状態の有効統計重率

More の経験式によれば、束縛状態の存在確率は次式で示される。

$$P_{\text{More}} = \frac{1}{1 + (aR_n/a_i)^b}. \quad (4.16)$$

上式において、 R_n は、第 n 準位の軌道半径(の期待値)を示す。Tsakiris と Eidmann らは、 $(a, b) = (3, 4)$ としたが、このパラメーターは、高励起準位の存在確率の評価には適していないことが第 3 章の解析結果から明らかになっている。

図 4.6 は、本解析結果から得られた束縛状態の存在確率が、プラズマ密度の増加と共に低減してゆく様子を図示したものである。比較の対象として、第 3 章から問題としてきた More の経験式から得られる値と一緒に図示した。主量子数毎の存在確率の算出には、同じ主量子数に分類される各 Stark コンポーネントの存在確率を、その状態数で重みを付けて平均を取った。

図からも分かるように、主量子数の大きな軌道になるほど、2 つの計算結果間の違いが大きくなっていることが分かる。例えば、主量子数 $n = 6$ の軌道では、本論文の結果は、More の経験式から得られる値のおよそ 6 倍の存在確率を示している。則ち、高次サテライト線の寄与が、More の経験式から評価した第 3 章の値よりも、更に大きな値になることが容易に推測できる。

一方、電子温度依存性は、プラズマ密度依存性に比較すると弱い依存性でしかない。電子温度が高くなれば、周囲のイオンの擾乱によるマイクロ・フィールドが強くなる

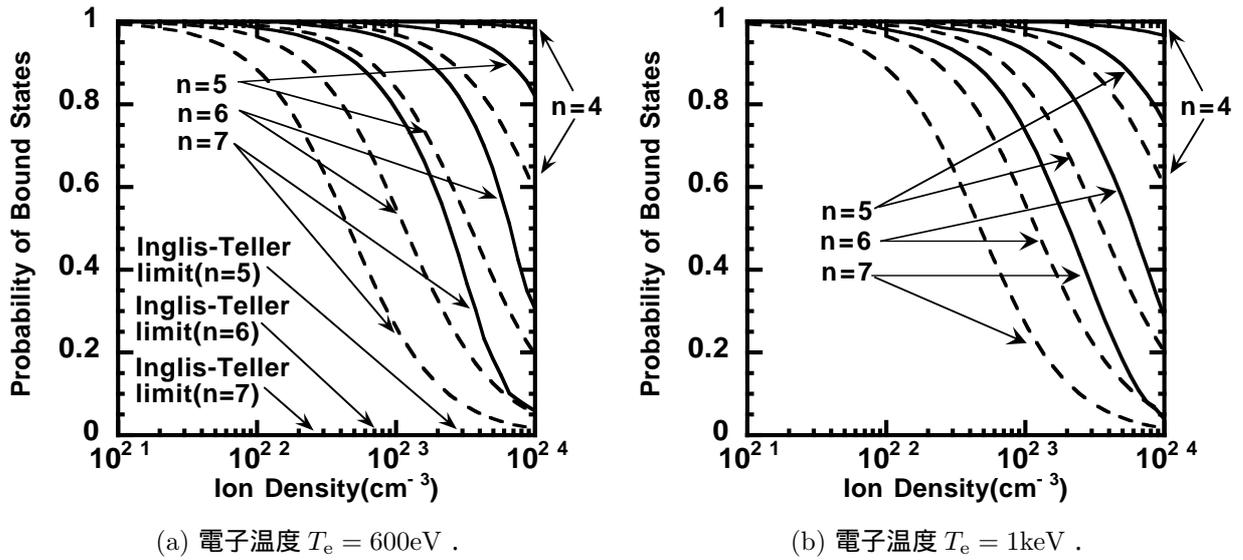


図 4.6: 本解析結果から得られた H 様 Ar イオンの束縛状態の存在確率 (実線) と More の経験式 (点線) との比較
主量子数が大きくなるほど、両者の違いが大きくなっていく。Inglis-Teller limit は、本解析結果において、ほぼ束縛状態が消失し始めるイオン密度に相当する。More の経験式のパラメータは、 $(a,b)=(3,4)$ である。

反面、図 4.3 から分かるように、等方的な Continuum Lowering によるシフト量が減少するために、互いに打ち消し合い、存在確率の変化は小さくなる。

図には参考のため、主量子数 $n = 5, 6, 7$ に対する Inglis-Teller limit におけるイオン密度 n_{IT} も合わせて示した [19]。

$$n_{IT} \approx \frac{Z_0^{4.5}}{117 Z_p^{3/2}} \left\{ \frac{1/n^2 - 1/(n+1)^2}{n^2 - n_f^2} \right\}^{1.5}. \quad (4.17)$$

式中、 Z_p は、周囲を取り巻くプラズマの有効電荷を示す。また n_f は、遷移の終状態における主量子数を示す。ここでは基底状態への遷移を考え、 $n_f = 1$ として図にを示した。図 4.6 の Inglis-Teller limit におけるイオン密度 n_{IT} は、およそ束縛状態が消失し始めるイオン密度を示していることが分かる。

Inglis-Teller limit が示す密度の値は、Stark 効果によるレベル分裂によって、1つ上の主量子数の準位と重なり始める密度値を見積もったものである。この図における $n = 5, 6$ に対する Inglis-Teller limit のイオン密度 n_{IT} は、図 4.4(b) の結果が示すように各々、1つ上の主量子数 $n = 6, 7$ の束縛準位にオーバーラップするイオン密度とほぼ一致する。

最後に、本解析結果を More の経験式でフィッティングしたとするならば、それは必ずしも完全に一致させることはできないが、主量子数 $n = 4, 5$ では $(a, b) \approx (1.6, 3.5)$ 、また、主量子数 $n = 6, 7$ では $(a, b) \approx (1.75, 3.5)$ にする事によって、本解析結果に近い値を再現することができる。

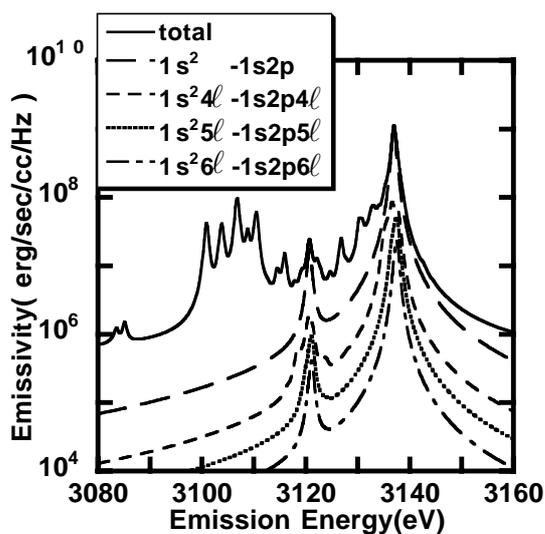
4.5 高次サテライト線の発光量に対する寄与

前節で示したように、Moreの経験式から求められた高励起準位の存在確率は、本論文の結果よりも低く見積もられることが示された。このことから、第3章において、Moreの経験式を用いて評価された高次サテライト線の寄与をもう一度評価をする必要がある。共鳴線近傍の高次サテライト線（例えば、共鳴線 $\text{He-}\alpha(1s^2 - 1s2p)$ に対しては、 $1s^2nl - 1s2pnl(n \geq 3)$ のサテライト線、共鳴線 $\text{He-}\beta(1s^2 - 1s3p)$ に対しては、 $1s^2nl - 1s3pnl(n \geq 4)$ のサテライト線）は、共鳴線スペクトルと完全にオーバー・ラップして分解観測不可能なスペクトル線群を形成する。レーザー核融合の実験では、微量混入させた Ar の H 様、He 様イオンからの X 線スペクトルを、爆縮プラズマの電子温度及び電子密度の計測に利用しており、実験で得られたスペクトルから正確にプラズマ・パラメーターを計測するためにも、これら高次サテライト線の寄与を明らかにする必要がある。

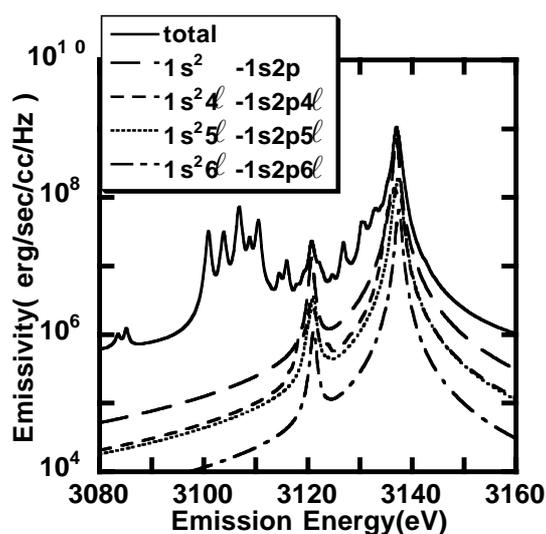
図 4.7 は、共鳴線 $\text{He-}\alpha$ 及び $\text{He-}\beta$ と、その近傍の高次サテライト線の寄与を示したスペクトル図である。尚、比較のために More の経験式の使用した場合のスペクトル図も併記した。経験式のフィッティング・パラメーターは $(a, b) = (3, 4)$ である。前節と同様の理由により、ここでもスペクトル広がりには、Stark 広がりには考慮されていない。これらの図からも明らかなように、More の経験式を利用した場合に比較して、特にスペクテーター電子を主量子数 $n = 4, 5, 6$ に束縛する二電子励起イオンからの発光が大きく寄与していることが分かる。

また、図 4.8 には、第 3 章の図 3.7 と同様にして評価を行った、共鳴線に対する高次サテライト線を含む全発光量の比を示した。先の図 3.7 と同様に、共鳴線 $\text{He-}\alpha$ に対する高次サテライト線としては $1s^2nl - 1s2pnl(n = 3, 4, 5, 6)$ の X 線発光量を積分し、また共鳴線 $\text{He-}\beta$ に対しては $1s^2nl - 1s3pnl(n = 4, 5, 6)$ の X 線発光量を積分した。ここでも比較のため More の経験式を用いた場合の結果を併記した。

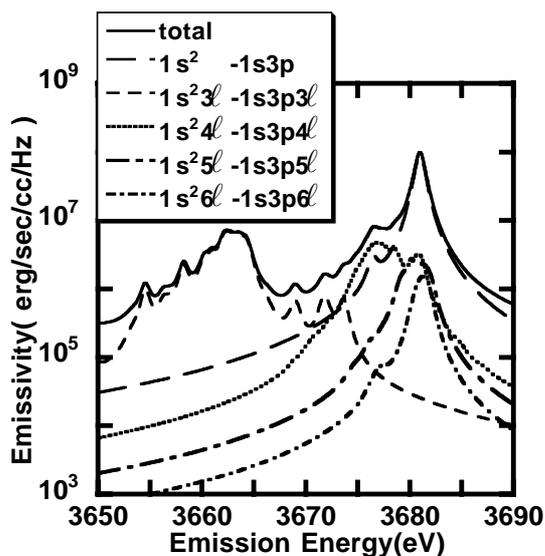
これらの図からも分かるように、高次サテライト線の発光量の寄与は無視できないものであり、共鳴線近傍の X 線スペクトルの解析には、その存在を考慮することが重要であることが、一層、明瞭に示されている。また、More の経験式から予測される寄与よりも、2 倍程の寄与があることが分かる。この結果から最終的に、スペクトル形状まで含めた高次サテライト線の寄与を理論的に解析する必要性がより鮮明になった。



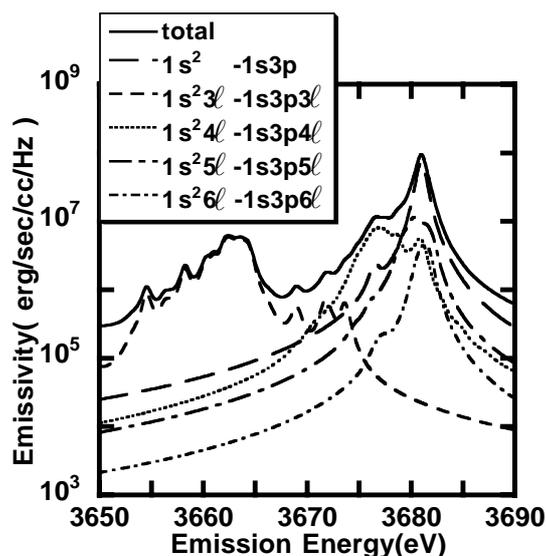
(a) More の経験式による共鳴線 He- α と、サテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 4, 5, 6$) の分布 .



(b) 本解析結果における共鳴線 He- α と、サテライト線 $1s^2nl - 1s2pnl$ ($n = 4, 5, 6$) の分布 .



(c) More の経験式による共鳴線 He- β と、サテライト線 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) の分布 .



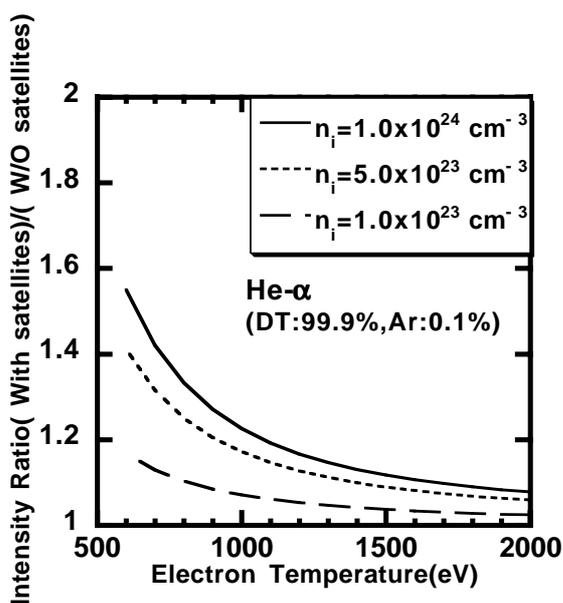
(d) 本解析結果における共鳴線 He- β と、サテライト線 $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) の分布 .

図 4.7: 共鳴線近傍の高次サテライト線のスペクトル分布 (More の経験式と本解析結果との比較)

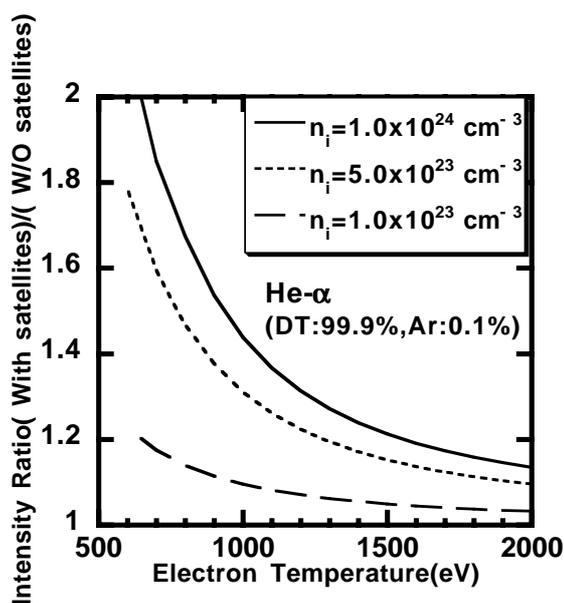
イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ 、Ar の割合は 0.1% である . また More の式における経験パラメータは $a = 3, b = 4$ である .

(a)(b) 実線 : 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む .) 破線 (長) : 共鳴線 He- α ($1s^2 - 1s2p$)、破線 (短) : サテライト線 $1s^24l - 1s2p4l$ 、点線 : サテライト線 $1s^25l - 1s2p5l$ 、一点鎖線 : サテライト線 $1s^26l - 1s2p6l$.

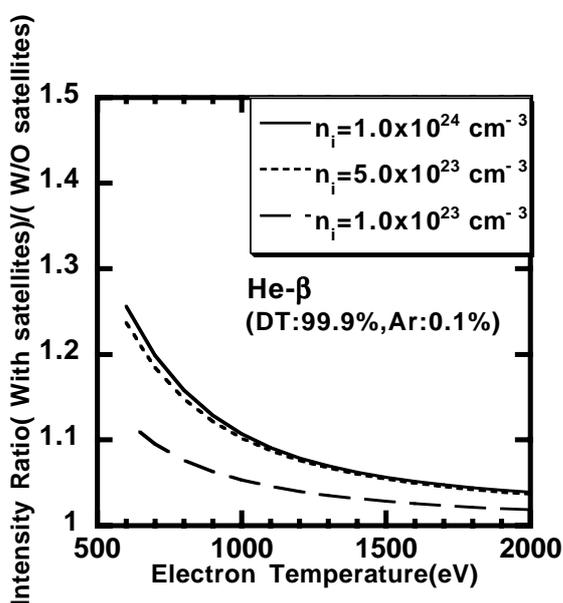
(c)(d) 実線 : 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む .) 破線 (長) : 共鳴線 He- β ($1s^2 - 1s3p$)、破線 (短) : サテライト線 $1s^23l - 1s3p3l$ 、点線 : サテライト線 $1s^24l - 1s3p4l$ 、一点鎖線 (長) : サテライト線 $1s^25l - 1s3p5l$ 、一点鎖線 (短) : サテライト線 $1s^26l - 1s3p6l$.



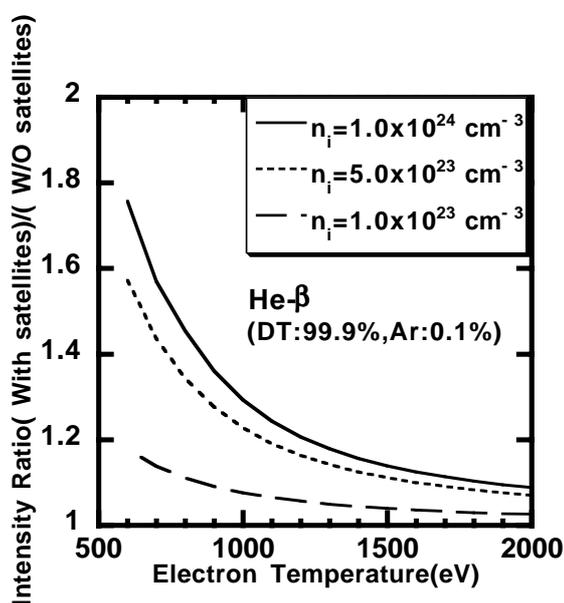
(a) Moreの経験式による高次サテライト線の共鳴線 He- α に対する寄与 (“With satellites” の場合には高次サテライト線 $1s^2nl-1s2pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) を含む)。



(b) 本解析結果における高次サテライト線の共鳴線 He- α に対する寄与 (“With satellites” の場合には高次サテライト線 $1s^2nl-1s2pnl$ ($n = 3, 4, 5, 6$) を含む)。



(c) Moreの経験式による高次サテライト線の共鳴線 He- β に対する寄与 (“With satellites” の場合には高次サテライト線 $1s^2nl-1s3pnl$ ($n = 4, 5, 6$) を含む)。



(d) 本解析結果における高次サテライト線の共鳴線 He- β に対する寄与 (“With satellites” の場合には高次サテライト線 $1s^2nl-1s3pnl$ ($n = 4, 5, 6$) を含む)。

図 4.8: 高次サテライト線からの発光量の寄与 (More の経験式と本解析結果との比較)

4.6 第4章まとめ

共鳴線近傍の高次サテライト線の寄与を考察するには、高励起準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンのポピュレーションの評価が重要である。またそのためには、高密度プラズマにおける高励起準位の存在確率の評価が必要である。本章では従来、束縛状態の存在確率の評価に用いられてきた More の経験式を再考する意味で、経験的要素を排除して、理論的に高励起準位の存在確率の解析を行った。以下にその結果得られた知見の要約を列挙する。

- (1) 微量混入された Ar イオンと周囲の D(T) イオン又は他の Ar イオン間の二体分布関数は、本解析の対象とするプラズマ・パラメーターでは、Debye-Hückel 理論が成立する弱結合プラズマとして解析可能であることを示した。
- (2) マイクロ・フィールドの確率分布関数の解析を実施した結果、最も確率が高くなる電界の強さは、ほぼ Holtsmark の基準電界であることを示した。
- (3) イオン密度 $n_i = 10^{23} \sim 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 500 \text{eV} \sim 1 \text{keV}$ において、微量混入された H 様 Ar イオンに対する Stark 効果は、その線形効果が顕著であり、非線形効果はわずかの寄与でしかないことを示した。例えば、本解析において、主量子数 $n = 7$ の軌道が消失する直前のイオン密度 $n_i = 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ において、全 Stark 分裂幅 40eV の内、線形 Stark 効果による分裂幅は 33eV であり、非線形 Stark 効果は 7eV ほどの寄与しかない。
- (4) More の経験式を Tsakiris らのパラメーターで表した束縛状態の存在確率の評価結果は、高励起準位になるに従って過小評価されることが明らかになった。これにより、第3章における推察が正しかったことが証明された。
- (5) 本章における高励起準位の存在確率の知見から、高次サテライト線の発光量に関する寄与を再評価した。その結果、共鳴線に対して無視できない発光量の寄与があることが明らかになり、最終的にスペクトル形状への寄与を含めた解析の必要性がより鮮明になった。

次章では、これら高次サテライト線の Stark 広がりを含めた X 線スペクトル形状の理論解析を実施し、高次サテライト線全体としての寄与を明らかにする。

参考文献

- [1] T. Kawamura, K. Mima and F. Koike: to be published in J. Phys. Soc. Japan **68**, 104(1999)(in press).
- [2] M. Busquet: J. Quant. Spectrosc. Radiat.Transfer **43**, 91(1990).
- [3] I. Shimamura and T. Fujimoto: Phys. Rev. A. **42**, 2346(1990).
- [4] T. W. Preist: J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **4**, 1129(1971).
- [5] F. J. Rogers, H. C. Graboske, Jr. and D. J. Harwood: Phys. Rev. A **1**, 1577(1970).
- [6] J. Davis and M. Blaha: J. Quant. Spectrosc. Radiat.Transfer **27**, 307(1982).
- [7] S. Skupsky: Phys. Rev. A. **21**, 1316(1980).
- [8] J. Stein and D. Salzmann: Phys. Rev. A. **45**, 3943(1992).
- [9] M. W. C. Dharma-wardana and F. Perrot: Phys. Rev. A. **45**, 5883(1992).
- [10] K. Yamamoto and H. Narumi: J. Phys. Soc. Japan **52**, 520(1983).
- [11] H. A. Bethe and E. E. Salpeter: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, (Plenum Publishing Corporation, New York, 1977), p228-p236
- [12] J. C. Stewart and K. D. Pyatt: Astrophys: J. **144**, 1203(1966).
- [13] A. B. Migdal, V. Krainov, Translated by Y. Iwasaki, Ryosi Rikigaku no Kinjiteki Houhou (Approximation Methods in Quantum Mechanics), (Sogo Tosyo, Tokyo, 1976), 2nd ed., p154-157[in Japanese].
- [14] C. A. Iglesias, H. E. DeWitt, J. L. Lebowitz, D. MacGowan and W. B. Hubbard: Phys. Rev. A. **31**, 1698(1985).
- [15] H. Furukawa and K. Nishihara: Phys. Rev. A. **46**, 6569(1992).
- [16] C. F. Hooper, Jr.: Phys. Rev. **165**, 215(1968).
- [17] J. T. O'Brien and C. F. Hooper, Jr.: Phys. Rev. A. **5**, 867(1972).
- [18] R. J. Tighe and C. F. Hooper, Jr.: Phys. Rev. A. **15**, 1773(1977).

- [19] H. R. Griem: *Spectral Line Broadening by Plasmas*, (Academic Press, New York and London, 1974), p.7-9.

第5章 高次サテライト線の Stark 広がりを考慮した X 線スペクトルの理論解析

5.1 はじめに

前章までの解析によって、X 線発光量の観点から、高次サテライト線の寄与を無視することができないことが示された。特に、電子温度 $T_e \leq 1\text{keV}$ 、イオン密度 $n_i \geq 5.0 \times 10^{23}\text{cm}^{-3}$ (Ar は微量で、ほとんどが DT プラズマであることから、イオン密度 \approx 電子密度) のプラズマ・パラメーター領域において顕著になることが明らかになった。本章では、高次サテライト線の寄与を考える上で、今まで保留にしていた Stark 広がりについて解析する。高温高密度プラズマにおいて、発光原子の X 線スペクトルは、その周囲に分布する他のイオンや自由電子によるマイクロ・フィールドによってスペクトル線の広がりを生じる。これまでの知見から高次サテライト線の X 線発光量が、共鳴線と同等レベルにあるようなプラズマ・パラメーター領域では、高次サテライト線による寄与を考慮することによって、共鳴線のみでのスペクトル形状に対して顕著な変化をもたらすだろうと推測できる。

これまでの動向としては、先の章でも述べているように、共鳴線から分解観測可能なエネルギー領域にあるサテライト線の解析が進みつつある中、本論文では一貫して、高次サテライト線の寄与について論じてきた点において新規性がある。

Stark 広がりそのものについては、今までに非常に多くの研究報告がある [1, 2, 3, 4]。これらの報告の殆どは、イオンによるマイクロ・フィールドの影響を準静的 (quasi-static approximation) な近似で取り入れる一方、自由電子による摂動は、衝突近似 (impact approximation) によって取り入れられている (準静的近似と衝突近似については、本章 5.3 節参照)。Stamm らは、イオンの取り扱いを今までの準静的な近似から、動的な効果を取り入れた解析を分子動力学 (Molecular Dynamics:MD) シミュレーションによって行った [5, 6]。これは、イオンのプラズマ角周波数 ω_i の逆数程度の時間において、イオン相関が遷移過程に及ぼす影響を考慮したものであり、その結果、中心エネルギー (孤立イオンの時のエネルギー位置) 近傍のスペクトル形状が広がるという結果を示した。例えば、共鳴線 $\text{He-}\beta(1s^2 - 1s3p)$ の中心エネルギー近傍に見られたスペクトルの窪みが、動的効果を取り入れることによって低減することを示した。しかし、中心近傍以外のところでは、準静的近似から得られるスペクトル形状と殆ど一致する。

本論文では、イオンを準静的な近似の範囲で取り扱い Stark 広がりを論じているが、今まで取り扱われたことのない高次サテライト線が、共鳴線スペクトルにどのような形で寄与するのかを調べることは非常に興味深い。イオンの動的効果については、今後の課題として残すことになるが、本章の考察によって、最終的に高次サテライト線

を考慮すべきか否かを明らかにすることが可能となる。

5.2 スペクトル広がり

本章で考察する Stark 広がり以外にも、以下の表 5.1 に示すようなスペクトル広がりが存在する [7]。

表 5.1: プラズマ中で生じるスペクトル広がり

スペクトル広がり	スペクトル形状
自然広がり (natural broadening)	Lorentzian
Doppler 広がり (Doppler broadening)	Gaussian
電子衝突広がり (electron impact broadening)	Lorentzian

プラズマ中では多くの場合、2種類以上の原因によるスペクトル広がりが重なっている。例えば、自然放出及び電子衝突による Lorentz 広がり、Gauss 形の Doppler 広がり、ほとんど常に共存している。今、共通の中心周波数 ν_0 を有する2種類のスペクトル広がり $\phi_1(\nu)$ と、 $\phi_2(\nu)$ が重なっているとすると、両者を合成したスペクトル形状 $\phi(\nu)$ は、次式で示されるように2つのプロファイルのたたみこみ (convolution) 積分で表される。

$$\phi(\nu) = \int_0^\infty \phi_1(\nu'_0) \phi_2(\nu - \nu'_0) d(\nu'_0) \quad (1/\text{Hz}). \quad (5.1)$$

2つのスペクトル広がりが共に Lorentz 形で、半値全幅がそれぞれ $\Delta\nu_1$ と $\Delta\nu_2$ の時、合成プロファイル $\phi(\nu)$ は Lorentz 形であり、その半値全幅 $\Delta\nu$ は、 $\Delta\nu = \Delta\nu_1 + \Delta\nu_2$ である。また2つのスペクトル広がりが Gauss 形の時は、合成プロファイルも Gauss 形であり、その半値全幅は、 $(\Delta\nu)^2 = (\Delta\nu_1)^2 + (\Delta\nu_2)^2$ で表すことができる。

今、先の例のような自然広がり $\Delta\nu_{\text{natural}}$ と、Doppler 広がり $\Delta\nu_{\text{Doppler}}$ が共存するような場合は、その合成プロファイルは Voigt プロファイルと呼ばれ、次式で与えられる。

$$\phi(x) = \frac{\Delta\nu_{\text{natural}}}{\pi^{3/2} \Delta\nu_{\text{Doppler}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[-(t/\Delta\nu_{\text{Doppler}})^2]}{(x-t)^2 + \Delta\nu_{\text{natural}}^2} dt \quad (1/\text{Hz}). \quad (5.2)$$

ここで、 $x = h\nu - h\nu_0$ を示す。

Stark 広がり、以上に挙げたようなスペクトル広がりと共に共存して生じるが、本論文が取り扱うような、イオン密度 $n_i = 10^{23} \sim 10^{24} \text{cm}^{-3}$ (\approx 電子密度) のような高密度プラズマでは、イオンによる Stark 広がり、電子衝突広がりが、そのスペクトル形状を決定することが多い。例えば、Ar の共鳴線 He- β は、そのスペクトルの半値全幅が数十 eV にもなるため、自然広がりや Doppler 広がり、殆ど無視できる。実際、イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 1 \text{keV}$ 程度のプラズマの自然広がり及び Doppler 広がりを計算してみると、自然広がり、パラメーターに関わりなく、自然放

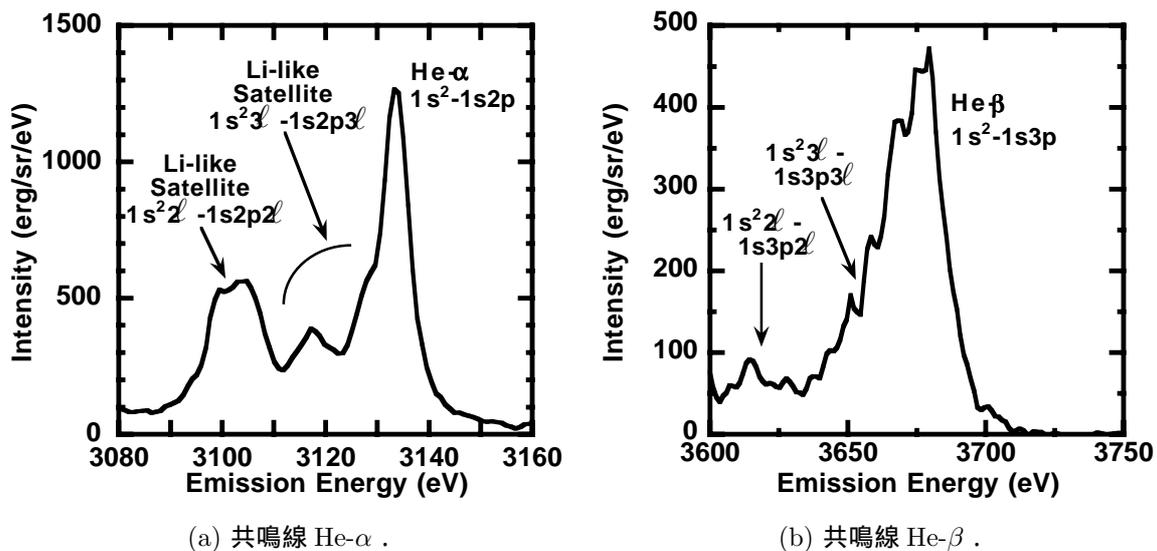


図 5.1: He 様 Ar イオンの共鳴線 He- α 、He- β の時間空間積分された X 線スペクトルの計測例

出の A 係数で決まり、約 0.1eV 程度の大きさである。また、Doppler 広がり約 1.5eV の大きさであるため、Stark 広がりと比較して、スペクトル形状へ寄与は殆ど無視できる。一方、Ar の共鳴線 He- α ($1s^2 - 1s2p$) は、発光電子の束縛軌道が、共鳴線 He- β のそれと比較して深い準位にあるため、マイクロ・フィールドによる擾乱を受けにくい、従って Stark 広がり、共鳴線 He- β ほど顕著には現れない。実際、図 5.1 に示されているように、実験で得られた He 様 Ar イオンの共鳴線 He- α 及び He- β を見ても、共鳴線 He- α は、共鳴線 He- β ほどスペクトル広がりが顕著ではない事が分かる（本実験データにおける X 線スペクトルの装置広がり約 4eV）。以上の事により、本章では、実験解析でも頻繁に用いられている He 様 Ar イオンの共鳴線 He- β と、その近傍のサテライト線に焦点を当てて理論解析を行った結果について論じる。

5.3 発光イオンに対する荷電粒子による擾乱の近似法

本論文で対象にしているプラズマ・パラメーター、則ちイオン密度 $n_i = 10^{23} \sim 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 0.5 \sim 1 \text{keV}$ において、発光イオンに作用する周囲の荷電粒子（イオン、自由電子）による摂動について考察する。イオンによるマイクロ・フィールドの揺らぎの周波数は、およそ発光イオンと摂動イオンとの衝突周波数 $\nu_{i \rightarrow i}$ 程度と見積もることができる。則ち、 $\nu_{i \rightarrow i} = \sqrt{m_e/m_i} \nu_{e \rightarrow e}$ 。ここで、 $\nu_{e \rightarrow e}$ は電子 - 電子衝突周波数を示す。また、自由電子によるマイクロ・フィールドの揺らぎの周波数は、発光イオンと自由電子の衝突周波数 $\nu_{e \rightarrow i}$ 程度と見積もることができる。 $\nu_{e \rightarrow e} \approx \nu_{e \rightarrow i} \approx (\omega_p/n_e \lambda_d^3)$ から、イオンによる揺らぎが $10^{12} \sim 10^{13} \text{sec}^{-1}$ 程度であり、自由電子による揺らぎが $10^{15} \sim 10^{16} \text{sec}^{-1}$ 程度となる。一方、発光イオンの束縛電子が脱励起するまでの寿命は Einstein の A 係数で決まり、例えば、共鳴線 He- β の場合には、およそ 10^{-14}sec 程度で

ある。従って、発光イオンの寿命より長い時間スケールのイオンの摂動に対しては、発光イオンが光子を放出している間はほぼ一定とする準静的な取り扱いが近似的に可能となる。一方、自由電子の摂動の時間スケールは、発光イオンの寿命より短いために、発光イオンが光子を放出している間、多数回の電子衝突によって波動関数が擾乱を受け、スペクトル線に広がりを生じる。これを衝突広がりという。また、イオンの摂動によって、発光電子が束縛される軌道は、分裂を伴うエネルギー準位のシフトが起こる。このように、一般的に Stark 広がりの計算には、イオンによる摂動と自由電子による摂動を別々に切り離して、それぞれ異なった近似によって評価する方法が取られている。

5.4 基礎方程式

前の節では、発光電子を取り囲むイオンと自由電子の摂動の取り扱いについて論じた。電子衝突広がりには、Lorentz 形のスペクトル形状で与えられ（補遺 H 参照）、一方、第4章で述べたようにイオンのマイクロ・フィールドの強さは、プラズマ・パラメーターに依存した確率分布関数 $Q(\epsilon)$ を持っている。マイクロ・フィールドによる広がり、電子衝突広がりを評価するには、確率分布 $Q(\epsilon)$ を用いて、マイクロ・フィールドの強さ ϵ 毎に、スペクトル形状を平均化する必要がある。Stark 効果によるエネルギー準位のシフト量 $\Delta\nu_{\text{Stark}}(\epsilon)$ [Hz] は、電子衝突広がりの項の分母にあるエネルギー項 $\Delta\nu$ [Hz] に付け加えてやれば良い [8]。

$$\phi(\Delta\nu) = -\frac{1}{\pi} \text{Re Tr} \int_0^\infty d\epsilon Q(\epsilon) D [\psi + i(\Delta\nu - \Delta\nu_{\text{Stark}}(\epsilon))]^{-1} (1/\text{Hz}). \quad (5.3)$$

上式において、最後の Lorentz 形を示す関数の項が、電子衝突によるスペクトル広がりを表わす項であり、分母にはイオンのマイクロ・フィールドの Stark 効果による、エネルギー準位のシフト分が補正されている。 ψ は電子衝突広がりを示すオペレーターである。 D は、各 Stark コンポーネントの始状態 i から基底終状態 j への遷移行列を示しており、各対角要素の値は、全対角要素の和に対する比になっている。 Tr は、それら行列成分について、対角要素の和を取ることを表している。また $\Delta\nu = \nu - \nu_{ij}$ であり、中心エネルギー ν_{ij} からの差を示している。

実際の計算では、Tarter によって導出された展開係数を用いて、励起準位 (nlm) から基底準位 $(1s)$ への遷移行列要素を、各 Stark コンポーネント k (放物量子数 (parabolic quantum number) n_1, n_2 で表される波動関数、第4章 4.2.2 参照) の成分に展開している [9]。この係数は、外場が無い場合の2つの量子状態間の展開係数であり、外場が無い時の電子衝突広がりの行列要素 ψ_{nl} を放物量子数の各成分に展開する。基底準位 $(1s)$ は、Stark 効果によって準位分裂しないので、始状態 (nlm) の量子状態で表される励起準位を成分展開すれば良い。

$$\langle k' | D | k \rangle = \frac{1}{2l+1} \langle k' | nlm \rangle \langle k | nlm \rangle, \quad (5.4)$$

但し、

$$\langle k | nlm \rangle = (-1)^{l-m} \frac{(n-m-1)!}{m!}$$

$$\begin{aligned} & \times \left(\frac{(2l+1)(l+m)!(n_1+m)!(n_2+m)}{(n+l)!(l-m)!n_1!n_2!(n-l-1)!} \right)^{1/2} \\ & \times {}_3F_2 \left(\begin{matrix} m+l+1, & -(l-m), & -n_2; & 1 \\ m+1, & -(n-m-1); & & \end{matrix} \right), \end{aligned} \quad (5.5)$$

である。右辺の因子 $1/(2l+1)$ は、方位量子数 l について縮退する状態数で平均することを示している。則ち、磁気量子数 $m = 0, \pm 1, \dots, \pm(n-1)$ 毎に足しあげ、平均を取って遷移行列要素を評価する [8]。

尚、上記の Stark コンポーネント k への展開係数には次に示す関係がある。

$$\sum_k |\langle k|nlm\rangle|^2 = 1, \quad (5.6)$$

$$\sum_{l=m}^{n-1} |\langle k|nlm\rangle|^2 = 1. \quad (5.7)$$

同様に、量子状態 nlm に発光電子を束縛する時の電子衝突広がり半値半幅 ψ_{nl} も、上の変換係数を用いて、各 Stark コンポーネント k に成分変換する。

$$\psi_{k'k}(m) = \sum_l \langle k'|nlm\rangle \langle k|nlm\rangle \psi_{nl} \quad (1/\text{sec}). \quad (5.8)$$

$k' = k$ のとき、電子衝突オペレーター ψ の対角成分を示し、 $k' \neq k$ のとき非対角成分を表す [8]。

電子衝突広がり半値半幅 ψ_{nl} は、Griem らによって以下に示す半古典解が得られている [10]。

$$\begin{aligned} \psi_{nl} &= -\frac{3}{2} \left(\frac{2m_e}{\pi k_B T_e} \right)^{1/2} \left(\frac{h}{2\pi m_e} \right)^2 n_e \left(\frac{n}{z} \right)^2 (n^2 - l^2 - l - 1) \\ &\times \left(C_{nl} + 0.5 \int_y^\infty \frac{\exp(-t)}{t} dt \right) \quad (1/\text{sec}). \end{aligned} \quad (5.9)$$

ここで、第一種の積分指数関数 (exponential integral) の積分範囲の下限 y は以下の式で示される。

$$y = \left(\frac{hn^2}{4\pi z} \right)^2 \frac{\omega_p^2}{E_H k_B T_e}. \quad (5.10)$$

E_H は、水素イオンのイオン化エネルギーを示す。また、 C_{nl} は “Strong collision constant” と呼ばれている定数であり、衝突パラメータの小さな近接衝突の寄与を表している。この値は、発光電子の束縛軌道及びプラズマ・パラメータ依存性があり、特に、電子温度の上昇とともに大きくなる傾向がある。H 様イオンに対する “Strong collision constant” は、Nguyen らによって、有効核電荷 Z_{eff} と電子温度 T_e の比でスケールされた値が、 $2s \sim 4f$ 軌道まで与えられている [11]。また、He 様 Ar イオンに対する “Strong collision constant” は、Griem らによって解析されており、主量子数 $2 \sim 4$ の軌道に対して、電子密度 $n_e = 10^{21} \sim 10^{25} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 400 \text{eV} \sim 2.0 \text{keV}$ のプラズマ・パラメータに対して与えられている [10]。本解析においても、彼らによって得られた原子データを用いて理論計算を行っている。

5.5 高次サテライト線のスペクトル広がりに対する寄与

前節で論じたように、一般的にはスペクトル線の Stark 広がり、式(5.3)によって求められる。しかし、これは高励起準位にスペクテーター電子を束縛せず、且つ、発光電子も深いエネルギー準位の軌道に束縛されているようなイオンに対して成り立つ。第4章において論じたように、高密度プラズマでは、高励起準位の存在確率は、密度の増加と共に急激に小さくなる。この時の存在確率は、束縛準位が存在し得る臨界電界 ϵ_c によって決まり、第4章の式(4.2)に示されているように、マイクロ・フィールドの確率分布関数を、臨界電界 ϵ_c まで積分すれば求めることができる。臨界電界 ϵ_c は、深いエネルギー準位にある束縛軌道ほど大きく、連続準位に近い Rydberg 軌道ほど小さくなる。本来なら、式(5.3)のマイクロ・フィールドの積分の上限は、その励起準位が、束縛状態を維持可能な臨界電界 ϵ_c でなければならない。しかし、深いエネルギー準位にのみ励起電子を持つイオンの場合には、積分の上限を ∞ 又は ϵ_c としても、束縛状態の存在確率を示す式(4.2)の値は、ほぼ1になる。実際、第4章の図4.6を見ても分かるように、主量子数 $n \leq 4$ の軌道は、その存在確率がほぼ1になることが示されている。しかし、発光電子の束縛される軌道が、主量子数 $n \leq 4$ のようなエネルギー準位の軌道であっても、高励起準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンの存在確率は、連続準位に近いスペクテーター軌道によって決まる。

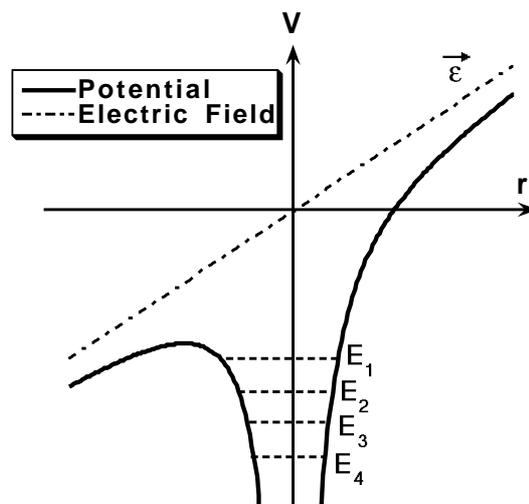


図 5.2: 摂動電界によって擾乱を受けたポテンシャル中の束縛軌道のエネルギー準位
 摂動電界によって擾乱を受けたポテンシャル中の束縛状態のエネルギー準位。臨界電界 ϵ_c は、連続準位にもっとも近い軌道に束縛される電子によって決まる。

一般的に、プラズマ中において、イオンがその電子配置を維持することのできる確率は、そのイオンが束縛する最外殻電子によって決まると言える(図5.2)。ゆえに前節で述べた式(5.3)は以下のように書き換える必要がある。

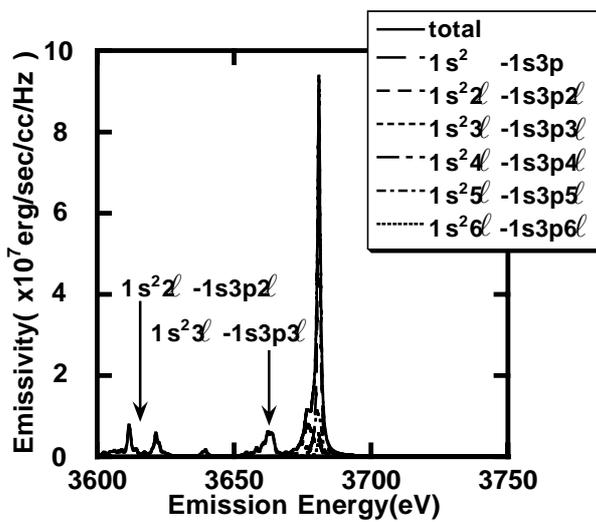
$$\begin{aligned} \phi(\Delta\nu) &= -\text{Const.} \frac{1}{\pi} \text{Re Tr} \int_0^{\epsilon_c} d\epsilon Q(\epsilon) \\ &\times D[\psi + i(\Delta\nu - \Delta\nu_{\text{Stark}}(\epsilon))]^{-1} \quad (1/\text{Hz}). \end{aligned} \quad (5.11)$$

ここで、Const. はマイクロ・フィールドの確率分布関数による重み積分が、 ∞ から有限値の臨界電界 ϵ_c になったことにより必要となる規格化定数で、以下の式で示される。

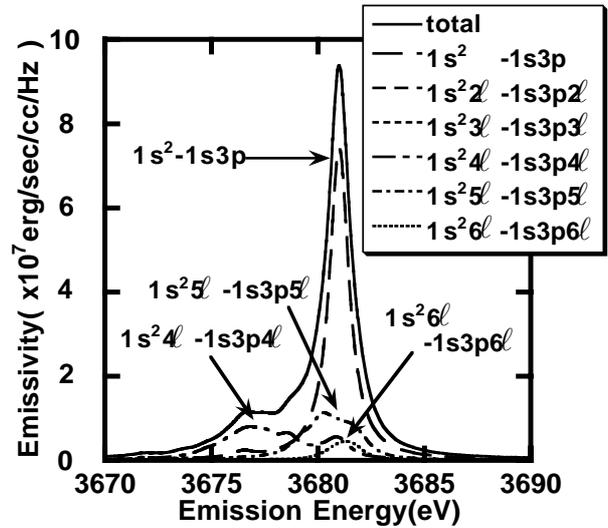
$$\text{Const.} = \left(\int_0^{\epsilon_c} Q(\epsilon) d\epsilon \right)^{-1}. \quad (5.12)$$

このことによって、スペクテーター電子を束縛しない一電子励起イオンは、臨界電界 ϵ_c が大きいために、高励起準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンと比較して、Stark 広がりが顕著に現れ、スペクトルの広がりと共にそのピーク値が落ちる一方、高次サテライト線は、共鳴線ほどスペクトルが広がらないために、そのピーク値もまた共鳴線ほど落ちず、結果として両者のスペクトル・ピーク値が同程度になる可能性があることが推測される。その場合、高次サテライト線のスペクトル形状に対する寄与は大きなものになると考えられる。

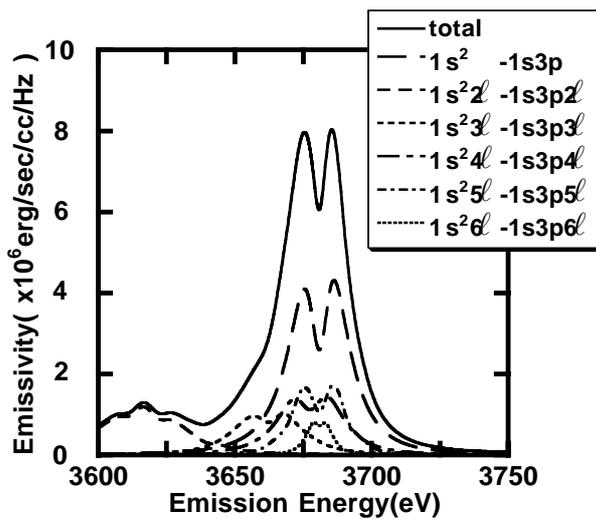
図 5.3(a)-(c) は、イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ の時の共鳴線 He- β と、その近傍のサテライト線の分布を示したものである。図 5.3(a)(b) は、スペクトル広がりとして、自然広がり と Doppler 広がりのみを考慮したもので、図 5.3(c) は、Stark 広がりを考慮したものである。これを見ても分かるように、Stark 広がりを考慮する前のスペクトルでは、各高次サテライト線のスペクトルのピーク値は、共鳴線のそれと比較して約 1 桁弱ほどの違いがあり、発光量の寄与は無視できないものであったにも関わらず、スペクトル形状そのものに対しては大きな寄与は見られない。しかし、Stark 広がりを考慮に入れ、再度、スペクトル形状に対する寄与を評価すると、図 5.3(c) に示されるように、共鳴線 He- β と高次サテライト線のスペクトル・ピーク値は同程度になる。その結果、全スペクトルを合成した実線の図が示すように、見かけ上、共鳴線を大きくエンハンスする。サテライト線の寄与が小さくなる高温領域、例えば電子温度 $T_e = 1 \text{keV}$ においても、図 5.3(d) が示すように、高次サテライト線のスペクトル形状に対する寄与は無視できない。



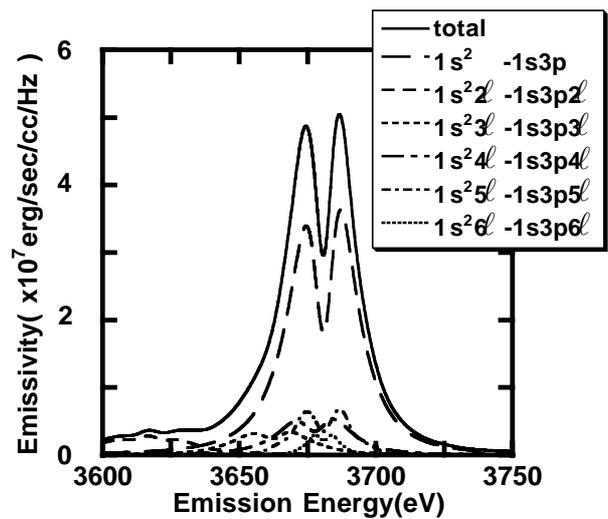
(a) 自然広がり と Dopple 広がりのみとした時の Ar の共鳴線 He- β と高次サテライト線の分布 . イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$



(b) (a) において 3670 ~ 3690eV のエネルギー領域のスペクトルの拡大図 .



(c) Stark 広がりを考慮した時の Ar の共鳴線 He- β と、高次サテライト線の分布 . イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$



(d) 電子温度 $T_e = 1 \text{keV}$ の時のスペクトル分布 . 他の計算条件は (c) に同じ .

図 5.3: He 様 Ar イオンの共鳴線 He- β とその高次サテライト線の X 線スペクトル (その 1)

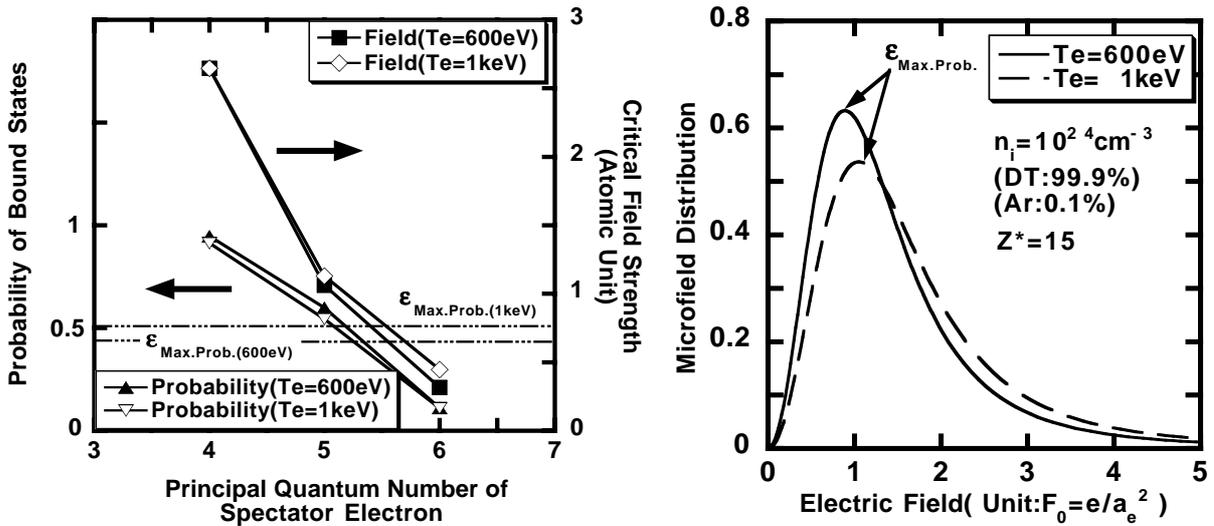
実線 : 全 Emissivity (自由-自由遷移及び自由-束縛遷移を含む .)

破線 (長): 共鳴線 He- $\beta(1s^2 - 1s3p)$ 、破線 (中): サテライト線 $1s^2 2l - 1s3p 2l$ 、

破線 (短): サテライト線 $1s^2 3l - 1s3p 3l$ 、

一点鎖線 (長): サテライト線 $1s^2 4l - 1s3p 4l$ 、一点鎖線 (短): サテライト線 $1s^2 5l - 1s3p 5l$ 、

点線 : サテライト線 $1s^2 6l - 1s3p 6l$.



(a) Li 様 Ar イオン (有効電荷 $z^* = 15$) の高励起準位 $n \geq 4$ に対する臨界電界と存在確率．イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ ．

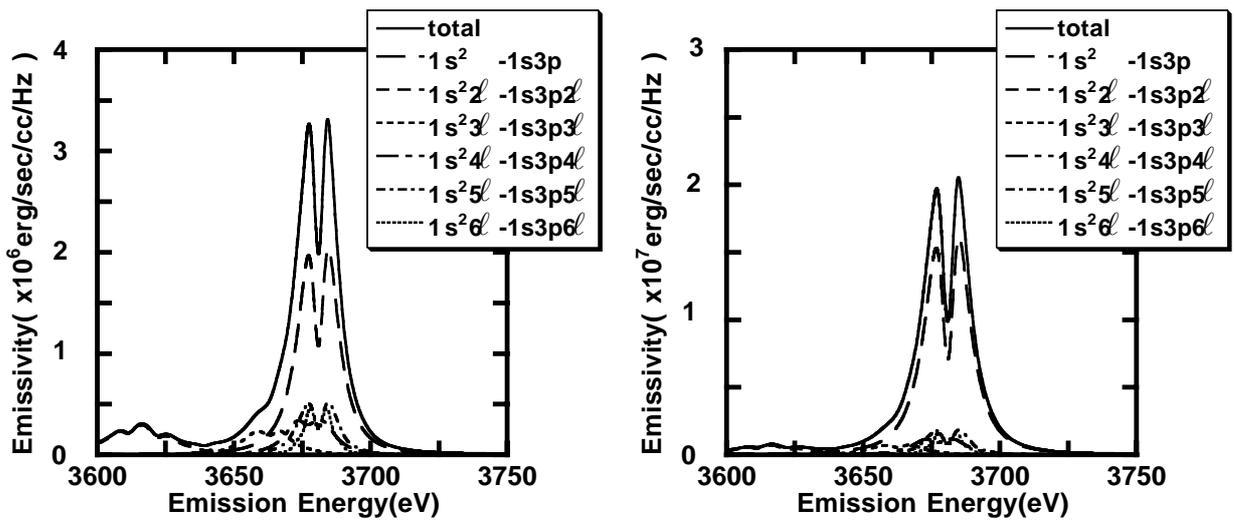
(b) Li 様 Ar イオン (有効電荷 $z^* = 15$) に対するマイクロ・フィールドの確率分布関数．イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ ．

図 5.4: Li 様 Ar イオン (有効電荷 $z^* = 15$) の高励起準位 $n \geq 4$ に対するプラズマ・パラメーター依存性

図 5.4(a) は、イオン密度 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ 、 1keV の時の Li 様 Ar イオンの主量子数 $n \geq 4$ の臨界電界 ϵ_c と、その束縛状態の存在確率を図示したものである．図中、三点鎖線で示した電界値は、図 5.4(b) のマイクロ・フィールドの確率分布において、その確率が最も高い電界値 $\epsilon_{\text{Max.Prob.}}$ を示した．

図からも分かるように、束縛準位が高励起になるほど、高密度領域ではその存在確率は小さくなる．例えば、主量子数 $n = 5$ における臨界電界 ϵ_c は、 $\epsilon_{\text{Max.Prob.}}$ 以上の値を示しているが、その存在確率が $0.5 \sim 0.6$ であるために、存在確率がほぼ 1 になるような $n \leq 3$ の深いエネルギー準位の軌道に比較すると、高電界の寄与が無いために、その分 Stark 広がり小さくなる．

以上の理由により、Stark 広がりを考慮しない場合には、共鳴線との間で、スペクトル・ピーク値で約 1 桁弱ほどの差があった高次サテライト線の発光も、Stark 広がりを考慮することによって、そのピーク値が共鳴線と同程度の大きさになり、結果として合成スペクトルは見かけ上、共鳴線スペクトルをエンハンスするように変化する．



(a) Stark 広がりを考慮した時の Ar の共鳴線 He- β と高次サテライト線の分布．イオン密度 $n_i = 5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ ．

(b) 電子温度 $T_e = 1 \text{keV}$ の時のスペクトル分布．他の計算条件は (a) に同じ．

図 5.5: He 様 Ar イオンの共鳴線 He- β とその高次サテライト線の X 線スペクトル (その 2)

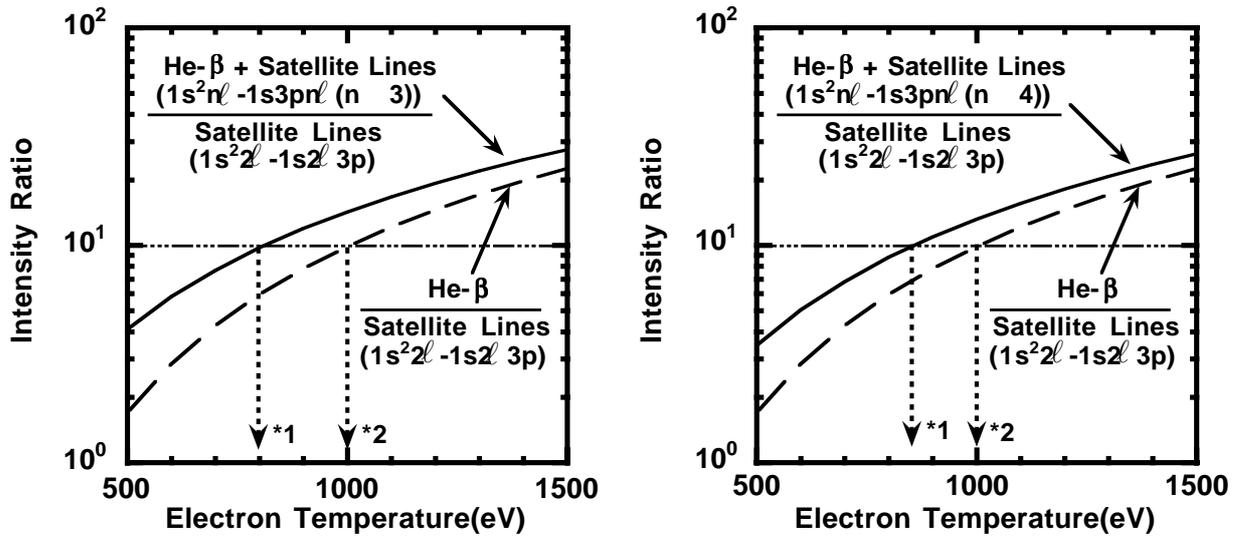
最後にイオン密度 $n_i = 5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ 、 1keV における共鳴線 He- β とその高次サテライト線の X 線スペクトルを図 5.5 に示す．

5.6 実験解析への応用

第 1 章でも述べたように、爆縮プラズマの解析精度向上を狙って、共鳴線近傍のサテライト線、特に、分解観測可能なサテライト線の解析が進んできた．しかし、本論文の解析結果が示すように、共鳴線から分解観測不可能な高次サテライト線は、最終的に得られる発光スペクトルに大きく寄与することが明らかになった．この節では、本論文で得られた知見をプラズマ・パラメーター解析に応用した場合に、従来の高次サテライト線を考慮しない解析と比較して、問題になるとと思われる影響について考察する．

図 5.6 は、共鳴線 He- β と、その近傍のサテライト線の発光強度比から電子温度を推定する際に、高次サテライト線の存在を考慮に入れた場合と、入れない場合における推定結果の差を示している．

イオン密度は、 $n_i = 10^{24} \text{cm}^{-3}$ で、Ar の割合は今までの解析と同じく、0.1% である．図からも分かるように、例えば、共鳴線が、サテライト線 $1s^2 2l - 1s 2l 3p$ の 10 倍の発光強度になる電子温度を求めようとする場合、約 $150 \sim 200 \text{eV}$ の差が生じる．高次サテライト線 $1s^2 n l - 1s 3 p n l (n \geq 4)$ は、図 5.3(c)(d) で示されているように、共鳴線の発光のように見える．このため、得られた発光スペクトルを全て純粋な共鳴線として解析する場合には、高次サテライト線の寄与を共鳴線で補って強度比を算出することになるために、電子温度を高く見積もる結果となる．



(a) 共鳴線と分解観測不可能なサテライト線として $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n \geq 3$) を共鳴線と一緒に積分した場合 .

(b) 共鳴線と分解観測不可能なサテライト線として $1s^2nl - 1s3pnl$ ($n \geq 4$) を共鳴線と一緒に積分した場合 .

図 5.6: 高次サテライト線を考慮に入れた場合と、入れない場合における電子温度の推定結果の差

例えば、共鳴線が、サテライト線 $1s^22l - 1s2l3p$ の 10 倍の強度になるようなプラズマ・パラメーターを求める時に、高次サテライト線を考慮しないで計算をした場合 (*2) には、考慮した場合 (*1) に比較して、電子温度が約 150 ~ 200eV 高く見積もられる . イオン密度は 10^{24}cm^{-3} .

一方、スペクトル広がりによるイオン密度 (\approx 電子密度) の推定には、前節において述べたように、高次サテライト線は、共鳴線と比較して Stark 広がりが小さいため、共鳴線に対するその寄与は殆ど見られない . しかし、それゆえに最終的に得られるスペクトル形状が大きく変化する . 先の発光強度による電子温度の推定では、形状の情報を落としてしまっているが、現在、解析方法として主流になりつつある、スペクトルパターン・マッチングによる爆縮プラズマのパラメーター推定には、これら高次サテライト線の存在は無視できない .

5.7 第5章まとめ

本章では第4章までの知見から、高次サテライト線の Stark 広がりを含めた X 線スペクトルの理論解析を行った。以下にその結果得られた知見をまとめる。

- (1) 高次サテライト線の Stark 広がり大きさは、高励起準位に束縛されたスペクテーター電子の臨界電界の大きさ、言いかえると最外殻電子が、どの軌道に束縛されているのかによって決まり、その値は、深いエネルギー準位に束縛された発光電子よりも小さい。従って、このような二電子励起イオンから発光される高次サテライト線は、深いエネルギー準位に発光電子を持つ共鳴線と比較して、Stark 効果によるスペクトル広がりが小さいことが明らかになった。
- (2) 上記の結果、He 様 Ar イオンの共鳴線 He- β に関連して、特にイオン密度 $n_i \geq 5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e \leq 1 \text{keV}$ において、Stark 広がりを考慮した時の高次サテライト線のスペクトル・ピークの値は、共鳴線のピーク値とほぼ同じオーダーになり、結果として得られる合成スペクトルは見かけ上、共鳴線スペクトルを大きくエンハンスするように変化することが明らかになった。
- (3) 共鳴線とその近傍のサテライト線の強度比から電子温度を推定する場合において、高次サテライト線の存在を無視した電子温度の推定は、高次サテライト線の発光量の寄与を共鳴線で補わなければならないために、高い電子温度の結果を与える。

参考文献

- [1] Hans. R. Griem and Alan C. Kolb: Phys. Rev. **116**, 4(1959).
- [2] Richard J. Tighe and C. F. Hooper, Jr.: Phys. Rev. A **14**, 1514(1976); *ibid.* **17**, 410(1978).
- [3] B. Held, C. Deutsch and M.-M. Gombert: Phys. Rev. A **29**, 896(1984).
- [4] L. Godbert, A. Calisti, R.Stamm and B. Talin: Phys. Rev. E **49**, 5644(1994).
- [5] Roland Stamm and Earl W. Smith: Phys. Rev. A **30**, 450(1984); R.Stamm, E. W. Smith and B. Talin: Phys. Rev. A **30**, 2039(1984).
- [6] R. Stamm, Y. Botzanowski, V. P. Kaftandjian and B. Talin: Phys. Rev. Lett. **52**, 2217(1984); R. Stramm, B.Talin and E. L. Pollock and C.A. Iglesias: Phys. Rev. A **34**, 4144(1986).
- [7] 例えば、山本 学、村山精一、プラズマ分光計測、－日本分光学会 測定法シリーズ 29－（学会出版センター、1995）第3章。
- [8] H. R. Griem: *Spectral Line Broadening by Plasmas*, (Academic Press, New York and London, 1974), p.66-p72.
- [9] C. Bruce Tarter: J. Math. Phys. **11**, 3192(1970).
- [10] Hans. R. Griem, Milan Blaha and Paul C. Kepple: Phys. Rev. A **41**, 5600(1990).
- [11] Hoe Nguyen, Michel Koenig, Djamel Benredjem, Monique Caby and Gérard Couland: Phys. Rev. A **33**, 1279(1986).

第6章 結論

これまで5章にわたり、主として爆縮プラズマに見られるような高温高密度プラズマにおける原子過程と、それに関わる原子物理についての本研究の成果を述べてきた。高密度プラズマにおける原子過程は、長い間多くの先人らによって研究されてきたが、まだ明らかになっていない点も数多い。本論文における高励起束縛準位の高密度プラズマ中における存在確率もその1つであり、本研究のメイン・テーマである高次サテライト線の研究には必要不可欠の知見である。この存在確率を明らかにすることによって、高励起スペクテーター軌道に電子が束縛される確率が評価可能となり、ひいては高次サテライト線の寄与を解析することを可能にする。高次サテライト線は、今まで考慮されてこなかった線スペクトルであり、爆縮プラズマの計測実験や理論の両サイドにおいて、今まで暗黙の内にその寄与は無視されてきた。高次サテライト線の特徴の1つに、共鳴線と分解観測不可能なエネルギー位置に発光スペクトルが現れることが挙げられ、そのため実験的に確認する事は實際上、不可能であった。ゆえに理論解析によって、その寄与を評価する必要があった。

本研究による成果は2つある。一つは物理の新たな知見としての成果であり、もう1つは工学の面における成果である。

前者の物理としての成果は、先にも述べた高次サテライト線の寄与についての知見であり、それは発光量、スペクトル形状の両方の点で大きな寄与があることを明らかにした。これは、爆縮プラズマを診断する一つの方法として位置付けられているX線スペクトル解析に関連して重要な知見となる。また後者の工学としての成果としては、これまでにない高次サテライト線の寄与を取り入れたX線スペクトル解析コードを開発したことである。まだ課題とする点は残されているものの、先の知見を考慮した解析コードは、実験解析する上で必要不可欠なツールとなる。まずはそのプロトタイプの開発に成功した。

以下に本研究で得られた成果を章ごとに総括する。

第1章 序論

第1章では、レーザー核融合の原理について述べるとともに、本研究テーマの位置付けを明らかにした。また本分野における研究動向を述べ、現在進みゆく方向性を指摘し、本研究の目的を明らかにした。

第2章 高密度レーザープラズマにおける原子過程

第2章では、高密度プラズマ中の原子過程に関連して、その予備知識として、電離、

再結合、励起・脱励起などの各素過程を説明するとともに、プラズマ中の原子過程を解析する上で有用な近似法の紹介を行った。また最後に X 線放射・吸収過程を評価する上で不可欠な放射・吸収係数の導出を行った。

第3章 高次サテライト線の考察と高励起準位の存在確率に対する問題提起

第3章では、高次サテライト線の寄与を考察するにあたって、まず高励起準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンのポピュレーションを求解する理論モデルを提案し、その妥当性を検証した。また、高次サテライト線の評価には不可欠な、高密度プラズマ中における高励起準位の存在確率を評価するために、これまで広く利用されてきた More らの経験式について考察し、その問題点を指摘した。

- (1) スペクテーター電子を束縛した二電子励起イオンからの発光スペクトルは、共鳴線の近傍に分布し、特に、スペクテーター電子を発光電子の軌道よりも高い励起準位に束縛した二電子励起イオンからの発光スペクトルは、共鳴線と分解観測不可能なエネルギー位置に分布することを示した。
- (2) 高次サテライト線を発光する二電子励起イオンのポピュレーションは、「Griemの境界」の評価によって、電子温度 $T_e = 0.5 \sim 2\text{keV}$ 、電子密度 $n_e = 10^{23} \sim 10^{24}\text{cm}^{-3}$ (本解析では、電子密度 $n_e \approx$ イオン密度 n_i) のような高温高密度プラズマにおいて、一電子励起イオンとの LTE によって評価可能であることが明らかになった。
- (3) 高次サテライト線の寄与を評価するには、高密度プラズマ中における高励起スペクテーター軌道の存在確率の評価が重要である。これまで用いられてきた More の経験式を、Tsakiris らのパラメーターで表した束縛状態の存在確率は、H 様又は He 様 Ar イオンが顕著な高温領域では、主量子数 $n = 1, 2$ などの低い(深い)エネルギー準位の存在確率の評価には適用可能だが、高励起束縛状態の存在確率の評価には適していないことが明らかになった。むしろ More らの経験式は、高励起束縛状態の存在確率を過小評価する傾向にあることが推察された。

第4章 高密度プラズマにおける高励起束縛状態の存在確率

第4章では、先の章で懸案事項になっていた高励起束縛状態の存在確率について、経験的因子を含まない第一原理に基づいた解析を行った。過去の研究報告には、等方的な核ポテンシャルの遮蔽効果を取り入れた解析が幾つか存在するものの、非等方性を示す Stark 効果を含めた解析は未だない。この解析によって、高励起束縛状態の存在確率を理論的に評価をし、この知見を受けて高励起準位にスペクテーター電子を束縛する二電子励起イオンのポピュレーションを再評価し、高次サテライト線の共鳴線に対する発光量の寄与を評価した。

- (1) 微量混入された Ar イオンと周囲の D(T) イオン又は他の Ar イオン間の二体分布関数は、本解析の対象とするプラズマ・パラメーターでは、Debye-Hückel 理論が成立する弱結合プラズマとして解析可能であることを示した。
- (2) マイクロ・フィールドの確率分布関数の解析を実施した結果、最も確率が高くなる電界の強さは、ほぼ Holtsmark の基準電界であることを示した。
- (3) イオン密度 $n_i = 10^{23} \sim 10^{24}\text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 500\text{eV} \sim 1\text{keV}$ において、微

少量混入された H 様 Ar イオンに対する Stark 効果は、その線形効果が顕著であり、非線形効果はわずかの寄与でしかないことを示した。例えば、本解析において、主量子数 $n = 7$ の軌道が消失する直前のイオン密度 $n_i = 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e = 600 \text{eV}$ において、全 Stark 分裂幅 40eV の内、線形 Stark 効果による分裂幅は 33eV であり、非線形 Stark 効果は 7eV ほどの寄与しかない。

- (4) More の経験式を Tsakiris らのパラメーターで表した束縛状態の存在確率の評価結果は、高励起準位になるに従って過小評価されることが明らかになった。これにより、第 3 章における推察が正しかったことが証明された。
- (5) 本章における高励起準位の存在確率の知見から、高次サテライト線の発光量に関する寄与を再評価した。その結果、共鳴線に対して無視できない発光量の寄与があることが明らかになり、最終的にスペクトル形状への寄与を含めた解析の必要性がより鮮明になった。

第 5 章 高次サテライト線の Stark 広がりを考慮した X 線スペクトルの理論解析

第 5 章では、高次サテライト線の X 線発光スペクトルの形状に対する寄与を評価するために、Stark 広がりを含めたスペクトル形状の理論解析を行った。

- (1) 高次サテライト線の Stark 広がり的大小は、高励起準位に束縛されたスペクテーター電子の臨界電界の大きさ、言いかえると最外殻電子が、どの軌道に束縛されているのかによって決まり、その値は、深いエネルギー準位に束縛された発光電子よりも小さい。従って、このような二電子励起イオンから発光される高次サテライト線は、深いエネルギー準位に発光電子を持つ共鳴線と比較して、Stark 効果によるスペクトル広がりが小さいことが明らかになった。
- (2) 上記の結果、He 様 Ar イオンの共鳴線 He- β に関連して、特にイオン密度 $n_i \geq 5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ 、電子温度 $T_e \leq 1 \text{keV}$ において、Stark 広がりを考慮した時の高次サテライト線のスペクトル・ピークの値は、共鳴線のピーク値とほぼ同じオーダーになり、結果として得られる合成スペクトルは見かけ上、共鳴線スペクトルを大きくエンハンスするように変化することが明らかになった。
- (3) 共鳴線とその近傍のサテライト線の強度比から電子温度を推定する場合において、高次サテライト線の存在を無視した電子温度の推定は、高次サテライト線の発光量の寄与を共鳴線で補わなければならないために、高い電子温度の結果を与える。

筆者は、後期課程の 3 年間、一貫して高密度プラズマにおける原子過程の理論的研究を行った。最後に筆者の願いとして、これらの知見が今後のレーザー核融合研究の進展の一助になること切に願って本論文を締めくくりにする。

補遺 A GRASP コード

Oxford 大学の I.P.Grant らのよって開発された GRASP コードは、“a General purpose Relativistic Atomic Structure Program” の頭文字から名付けられた相対論的原子構造解析コードである。GRASP コードは、MCDF(Multi Configuration Dirac-Fock) 法と呼ばれる計算手法を用いて、孤立イオンのエネルギー準位、振動子強度等を高精度に計算することに用いられる。

尚、このコードは、“Computer Physics Communication 55, p425-456(1989)” にて一般に公開されている。

コードの詳細は、先の文献を参照してもらうことにして、ここでは、GRASP コードで用いられている MCDF 法について解説する。尚、用いる単位系は、原子単位系とする。

N 電子系原子の Dirac-Coulomb ハミルトニアン \hat{H}^{DC} は、以下のように表すことができる。

$$\hat{H}^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (\text{A.1})$$

上式において第一項目は、1 電子系 Dirac-Coulomb ハミルトニアンを表し、核との相互作用エネルギーと運動エネルギーの和で示される。

$$\hat{H}_i = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{nuc}}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.2})$$

ここで、 c は光速を示し、 $V_{\text{nuc}}(\mathbf{r})$ は原子番号 Z の原子核との Coulomb ポテンシャルを示す。 α 、 β は、Dirac 行列と呼ばれ、以下の行列式で表すことができる。

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2, 3) \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

また、 σ_i は Pauli 行列を表しており、 \mathbf{I} は単位行列を表している。

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

上式から、球対称ポテンシャルにおける 1 電子系 Dirac 方程式の波動関数を次のような形で得ることができる。

$$\psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) \\ iQ_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

$(n\kappa m)$ は各々、主量子数、 $\kappa = \pm(j + 1/2)$ 、磁気量子数を示す。また、 j は全角運動量を表している。 $P_{n\kappa}(r)$ 及び $Q_{n\kappa}(r)$ は各々、“Large component”、“Small component” と呼ばれる動径方向の波動関数を示し、また $\chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r)$ は、球面調和関数で表される角度方向の波動関数を示している。

N 電子系の原子における配置関数 (Configuration State Function:CSF) は、式 (A.5) で表されるような 1 電子軌道を表す波動関数から構成され、且つ、全角運動量に関する演算子 J^2 及び、 J_z の固有値が各々、 $J(J+1)$ 、 M になるような N 次の Slater 行列式 Ψ の線形結合によって求めることができる (但し、 $\langle JM|JM\rangle = 1$)。

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathbf{P}} (-1)^P \mathbf{P}[\psi_1(\tau_1) \psi_2(\tau_2) \cdots \psi_N(\tau_N)] \quad (\text{A.6})$$

式中、 τ_i は、位置座標 \mathbf{r}_i とスピン座標 σ_i をあわせた座標を表し、 \mathbf{P} は、その右側の N 個の $\psi_1(\tau_1) \cdots \psi_N(\tau_N)$ の順序を入れかえる $N!$ 個の置換を表す。 $(-1)^P$ は、その置換 \mathbf{P} が偶置換なら $+1$ 、奇置換なら -1 を掛ける演算子を表している。解析の対象としている原子が閉殻構造を持つならば、電子状態は 1S_0 のみであるため、求める Slater 行列式は 1 つで良い。しかし、開殻構造を持つ原子の場合は、以下の式で示される数の Slater 行列式の線形結合を取る必要がある。

$$\prod_i \binom{2j_i + 1}{q_i}. \quad (\text{A.7})$$

ここで、 q_i は i 番目の殻に束縛される電子数を表している。

1 電子軌道を表す波動関数を改良するため、配置混合 (Configuration Interaction:CI) の方法をとる。則ち、同じ角運動量 (JM) を持つ、異なった CSF との線形結合によって、配置間相互作用の効果を取り入れる。この線形結合を取った波動関数 $\Phi_S(JM)$ を原子構造関数 (Atomic State Function:ASF) と呼んでいる。

$$\Phi_S(JM) = \sum_{i=1}^{n_C} C_i(S) \phi_i(JM). \quad (\text{A.8})$$

但し、 $\langle \Phi_S(JM) | \Phi_S(JM) \rangle = 1$ である。 S は、求めようとしている電子配置を示し、 n_C は線形結合をとる CSF の数を表している。また、 $C_i(S)$ は、電子配置 S の波動関数を求める際の各 CSF に対する重み係数を表している。このように、複数の CSF との CI を取ることによって、1 つの配置関数のみを用いた波動関数 (Single Configuration Dirac-Fock:SCDF) の近似の精度を向上させ、相関エネルギーを正確に計算しようとする方法を MCDF 法と言う。

補遺 B 自動電離係数の導出

ここでは先の第 2 章の式 (2.20) 及び、第 3 章の式 (3.5) に示した自動電離係数の導出を行う。

自動電離係数は、二電子性捕獲 (dielectronic capture) 過程の逆過程として表わすことができる。今、二電子性捕獲断面積を $\sigma_{\text{exc}}[\text{cm}^2]$ とすれば、束縛準位 ($n'l'$) への二電子捕獲過程のレート係数 $\alpha_c(n'l')[\text{cm}^3/\text{sec}]$ は、以下のようにして表わすことができる。

$$\alpha_c(n'l') = \int_{n'l' \text{ resonance}} v \sigma_{\text{exc}}(E, n'l') f(v) 4\pi v^2 dv \quad (\text{cm}^3/\text{sec}). \quad (\text{B.1})$$

ここで、 E は捕獲される自由電子の運動エネルギーを示し、 $f(v)$ は Maxwell 速度分布関数を表わしている。式 (B.1) の積分範囲は、束縛準位 ($n'l'$) のエネルギー準位 $E_{n'l'}$ に共鳴するエネルギー幅 $\delta E_{n'l'}$ で積分する。則ち、

$$\begin{aligned} E_{\text{Lower}} &= E_{n'l'} - \frac{1}{2} \delta E_{n'l'}, \\ E_{\text{Upper}} &= E_{n'l'} + \frac{1}{2} \delta E_{n'l'}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

式 (B.1) を式 (B.2) で示される範囲で積分を実行すれば、二電子捕獲過程のレート係数 $\alpha_c(n'l')$ は以下のように表わすことができる。

$$\begin{aligned} \alpha_c(n'l') &= \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{n'l'}}{k_B T}\right) \\ &\times \left(\frac{\kappa^2 \sigma_{\text{exc}}}{\pi} \right) \left(\frac{\delta E_{n'l'}}{h} \right) \quad (\text{cm}^3/\text{sec}). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

ここで、

$$\begin{aligned} \kappa^2 &= \frac{m_e^2 v^2}{\hbar^2} \\ &= \frac{2m_e E_{n'l'}}{\hbar^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

である。

自動電離係数 A_a は、二電子性捕獲過程との詳細釣り合いによって求めることができ、その関係式は以下のように表わすことができる。

$$\alpha_c(n'l') = \frac{g_a}{2g_i} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{n'l'}}{k_B T}\right) A_a \quad (\text{cm}^3/\text{sec}). \quad (\text{B.5})$$

g_a と g_i は各々、自動電離前後のイオンの状態数である．これを整理して、

$$A_a = \frac{2g_i}{g_a} \left(\frac{\kappa^2 \sigma_{\text{exc}}}{\pi} \right) \left(\frac{\delta E_{n'l'}}{h} \right) (\text{sec}^{-1}). \quad (\text{B.6})$$

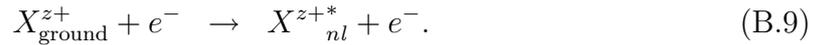
ここで、 $\delta E_{n'l'}$ は、 $E_{n'l'}$ の変分を取って、

$$\delta E_{n'l'} = \frac{2q_{n'l'}^2 E_H}{n^3}, \quad (\text{B.7})$$

となる． $E_H = e^2/2a_0$ は、水素イオンのイオン化エネルギーを示し、 $q_{n'l'}$ は、捕獲される電子に対する核の有効電荷を示す．Bohr 半径 $a_0 = \hbar^2/e^2 m_e$ より、上式を整理すると以下のようなになる．

$$A_a = \frac{2q_{n'l'}^2 E_{n'l'}}{\hbar n^3} \frac{1}{\pi^2 a_0^2} \frac{g_i}{g_a} \sigma_{\text{exc}} (\text{sec}^{-1}). \quad (\text{B.8})$$

今、改めて二電子性捕獲断面積 σ_{exc} について考察するために、以下のような非弾性衝突過程を考える



この遷移は、基底状態の X_{ground}^{z+} が、自由電子との衝突によって、 nl に電子が励起され、一電子励起状態になる過程を示したものである．この時の励起断面積は、自由電子の運動エネルギーに対してある閾値を持っている．その値は、束縛電子の励起エネルギー $E_{g \rightarrow nl}$ に等しく、その値以上のエネルギーを持つ自由電子との衝突によって、はじめて上に示した励起過程が起こる．

二電子性捕獲過程は、 X_{ground}^{z+} イオンと自由電子の衝突によって、基底状態状態にあった束縛電子がエネルギーを得て、 nl に励起されると共に、エネルギーを失った自由電子が $n'l'$ に捕獲される過程である．今、この2つの束縛電子の電子相関を無視するのであれば、二電子性捕獲断面積 σ_{exc} は、先の基底状態から一電子励起状態への励起断面積曲線を、その閾値励起エネルギー以下に補間することによって評価可能である．則ち、 $E_a = E_{g \rightarrow nl} - (q_{n'l'}^2 E_H/n^2)$ のエネルギー値における断面積を補間によって求めれば良い．

自動電離係数 A_a は、上に示したように、自由電子を捕獲する準位の量子数 n' の3乗に逆比例する．また二電子性捕獲によって、基底状態の電子が励起される準位 n についても同様の依存性がある．なぜなら二電子性捕獲過程の断面積 σ_{exc} は、自由電子との衝突によって、束縛電子が励起される時の振動子強度にほぼ比例する．また振動子強度は、遷移の終状態の量子数 n のほぼ3乗に逆比例するため（補遺 C 参照）結局、自動電離係数 A_a は、両方の束縛電子の主量子数の3乗に逆比例する依存性を持つことになる．

補遺 C Griem の境界

「Griem の境界」は、原子の束縛軌道において、部分的熱平衡状態が成立する領域と熱平衡が成立しない領域の境界を与える。則ち、第 2 章の式 (2.1) において、衝突過程が放射過程よりも顕著になる境界を与える式である。もともとは、一電子励起イオンに対して導出された関係式ではあるが、本論文では第 3 章の式 (3.2) にて二電子励起イオンの場合に拡張して用いている。

一電子励起イオンに対して、衝突過程が放射過程よりも顕著になる条件は以下の式で示される。

$$\sum_{n'(>n)} C_e(n \rightarrow n') n_e + \sum_{n''(<n)} D_e(n \rightarrow n'') n_e + I^c(z, n) n_e \geq \sum_{n''(<n)} A_r(n \rightarrow n''). \quad (\text{C.1})$$

電子衝突励起係数 C_e は、第 3 章 3.2.2 節より、

$$C_e(n \rightarrow n') = \frac{8.7 \times 10^{-8}}{q_n^3} f_{nn'} \left(\frac{q_n^2 E_H}{E_{nn'}} \right) \left(\frac{q_n^2 E_H}{T_e} \right)^{1/2} \times \exp\left(-\frac{E_{nn'}}{T_e}\right) \text{ (cm}^3/\text{s)}, \quad (\text{C.2})$$

となる。式中の状態数あたりの吸収の振動子強度 $f_{nn'}$ は、以下のように近似できる (第 3 章の参考文献 [19]p269 参照)。

$$f_{nn'} = \frac{2^6}{3\sqrt{3}\pi} \frac{1}{g_n} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n^3} \frac{1}{n'^3}. \quad (\text{C.3})$$

上式より、振動子強度 $f_{nn'}$ が、遷移エネルギーの 3 乗に逆比例し (3 つ目の項が遷移エネルギーの表式と同じ) さらに遷移前後の量子数 n 、 n' について各々、 n^5 及び n'^3 に逆比例することから、電子衝突励起係数 C_e には以下のような依存性がある (注: $g_n = 2n^2$ であることに注意する)。

$$C_e(n \rightarrow n') \propto \frac{1}{n^5 n'^3} \frac{1}{E_{nn'}^4}. \quad (\text{C.4})$$

ゆえに、式 (C.1) の左辺における電子衝突励起係数 $C_e(n \rightarrow n')$ は、主量子数 $(n+1)$ への遷移による寄与がもっとも大きく、

$$C_e(n \rightarrow n+1) \gg \sum_{n'>(n+1)} C_e(n \rightarrow n'). \quad (\text{C.5})$$

また、電子衝突電離係数 $I^c(z, n)$ は、見方を変えれば連続準位への電子衝突励起係数 $C_e(n \rightarrow c)$ と見なせるため、 $C_e(n \rightarrow n+1)$ に比較して寄与が小さいものとして無視できる。

主量子数 n から下準位 n'' への電子衝突脱励起係数 $D_e(n \rightarrow n'')$ は、下準位 n'' から n への電子衝突励起係数 $C_e(n'' \rightarrow n)$ (但し、 $n'' < n$) との詳細釣り合いから求めることができ、先と同様に主量子数 $(n-1)$ から n への成分の寄与が最も大きい。

$$D_e(n \rightarrow n'') \propto \frac{1}{n''^3 n^5} \frac{1}{E_{n''n}^4}, \quad (\text{C.6})$$

$$D_e(n \rightarrow n-1) \gg \sum_{n'' < (n-1)} D_e(n \rightarrow n''). \quad (\text{C.7})$$

更に、衝突励起係数 C_e と脱励起係数 D_e の間には、主量子数について以下のような関係式が成り立つ。 $E_{nn+1} \approx 2q_n^2 E_H / n^3$ を利用して、

$$\begin{aligned} \frac{C_e(n \rightarrow n+1)}{D_e(n \rightarrow n-1)} &\approx \frac{n^{12}}{(n+1)^3 (n-1)^3} \frac{1}{(n-1)^6} \\ &\approx \frac{(n-1)^6 (n+1)^6}{(n+1)^3 (n-1)^3} \frac{1}{(n-1)^6} \\ &= \left(\frac{n+1}{n-1} \right)^3. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

従って、 $C_e(n \rightarrow n+1) > D_e(n \rightarrow n-1)$ となる。

また主量子数 n からの全放射性脱励起係数は、核電荷を z とすれば、

$$\begin{aligned} \sum_{n'' < n} A_r(n \rightarrow n'') &= \sum_{n'' < n} \frac{8\pi^2 e^2}{m_e c^3} \frac{E_{nn''}^2}{h^2} \frac{g_{n''}}{g_n} f_{n''n} \\ &\approx \frac{4\pi^2 e^2}{m_e c^3} \frac{q_n^4 E_H^2}{h^2} \frac{2^6}{3\sqrt{3}\pi n^5} \sum_{n'' < n} \frac{1}{n''^3 (n''^{-2} - n^{-2})} \\ &\approx \frac{2^8}{3\sqrt{3}} \frac{\pi e^2}{m_e c^3} \frac{q_n^4 E_H^2}{h^2} \frac{\ln n}{n^5} \\ &\approx 1.62 \times 10^{10} \frac{q_n^4}{n^{9/2}} \quad (1/\text{s}), \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

と表せる (第3章の参考文献 [9] 及び [12] 参照)。

以上の事から衝突過程としては、 $C(n \rightarrow n+1)$ のみ考慮し、また指数関数の項を無視して全放射性脱励起係数と釣り合う主量子数 n を求めると以下ようになる。

$$n \geq 137.4 \times \frac{q_n^{14/17}}{n_e^{2/17}} \left(\frac{T_e}{q_n^2 E_H} \right)^{1/17}. \quad (\text{C.10})$$

上記の式で示される量子数は、衝突過程が放射過程よりも顕著な領域を示し、量子数が大きくなるほど近似的に LTE に近づく。これを「Griem の境界」という。

補遺 D Thomas-Fermi モデル

Thomas-Fermi モデル (以後、TF モデルと略す) は、束縛電子と自由電子の区別を無くして、原子核の周りの空間が、「電子ガス」によって満たされているかのように電子の空間分布を近似する。則ち、原子の殻 (shell) 構造は無視されている。それでも、プラズマ中の原子状態を解析するには有用なモデルであり、高密度になるほど (イオン球半径内の電子密度が高くなるほど) 近似の精度は良くなる。

TF モデルでは、電子の空間分布関数 $n_e(r)$ を Fermi-Dirac 統計により近似する。これによって高密度の極限において電子縮退の効果を取り入れる事ができる。

$$\begin{aligned} n_e(r, \mu) &= 2 \int_0^\infty \frac{d^3 p}{h^3} f(r, p) \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \left[\frac{2m_e k_B T_e}{\hbar^2} \right]^{3/2} F_{1/2} \left[-\frac{\mu + e\Phi(r)}{k_B T_e} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

ここで、

$$f(r, p) = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{1}{T_e} \left\{ \frac{p^2}{2m_e} - e\Phi(r) - \mu \right\} \right]}, \quad (\text{D.2})$$

は、Fermi-Dirac 統計を表わしており、 μ は化学ポテンシャル、 p は電子の運動量を示している。また、関数 $F_j(x)$ は Fermi-Dirac 積分と呼ばれており、次式のように表される。

$$F_j(x) = \int_0^\infty \frac{y^j dy}{1 + \exp(x + y)}. \quad (\text{D.3})$$

化学ポテンシャルは、Fermi エネルギーとも呼ばれ、以下に示す境界条件 (イオン球半径 a_i 内の電子によって、原子核の電荷 Z が中和される) によって求められる。

$$Z = \int_0^{a_i} n_e(r, \mu) 4\pi r^2 dr. \quad (\text{D.4})$$

これまでの式と、以下に示す Poisson 方程式から Self-consistent にポテンシャルを計算することが可能になる。

$$\nabla^2 \Phi(r) = 4\pi e \{ n_e(r, \mu) - Z\delta(r) \}. \quad (\text{D.5})$$

このモデルによってイオンの平均電離度 Z^* を求めるには、イオン球半径内の自由電子の個数を計算すれば良い (核電荷 $Z =$ 束縛電子数 $Z_b +$ 自由電子 Z_f)。則ち、

$$Z^* = \int_0^{a_i} n_{e,f}(r, \mu) 4\pi r^2 dr, \quad (\text{D.6})$$

と表すことができる。

自由電子密度 $n_{e,f}(r, \mu)$ は、正エネルギーを持つ電子 ($p^2/2m_e - e\Phi(r) \geq 0$) について積分すれば得ることができる。

$$n_{e,f}(r, \mu) = \frac{1}{2\pi^2} \left[\frac{2m_e k_B T_e}{\hbar^2} \right]^{3/2} F_{1/2} \left[-\frac{\mu + e\Phi(r)}{k_B T_e}; \left| \frac{e\Phi(r)}{k_B T_e} \right| \right], \quad (\text{D.7})$$

$$F_j(x; \beta) = \int_{\beta}^{\infty} \frac{y^j dy}{1 + \exp(x + y)}. \quad (\text{D.8})$$

$F_j(x; \beta)$ は不完全 Fermi-Dirac 積分と呼ばれている。

先の第 3 章 3.5 で述べたように Tsakiris、Eidmann らは、More の経験式のパラメータを決定する際に、式 (D.6) から得られる平均電離度 Z^* を基準にして決めた。

以下に TF モデルの特徴を挙げておく。

- (1) 束縛電子と自由電子を統計的に取り扱われているものの、両電子の効果を含むポテンシャルを Self-consistent に決めることができる。また Pauli の排他原理は、Fermi-Dirac 統計によって考慮される。
- (2) イオン球半径内の電子 (束縛電子 + 自由電子) によって、核電荷が中和されるとする仮定のもとで計算が行われる。
- (3) 全ての電子 (束縛電子、自由電子) は Fermi-Dirac 統計により記述されているため、束縛電子に見られる殻 (shell) 構造は無視されている。
- (4) プラズマ中に存在する様々なイオンの状態を平均したただ 1 つの状態が求解される。

補遺 E 原子単位 (Atomic Unit)

本論文において用いられている単位系は、原則的に cgs 単位系を用いて各章の式を記述しているが、第 4 章のように、束縛状態の固有状態を解析するような場合には、cgs 単位系を用いるよりも、式の記述や実際の数値計算コード作成においても、原子単位系を用いる方が便利である。これは、

- (1) 電子の電荷の絶対値 $e = 4.803 \times 10^{-10} \text{esu} = 1.602 \times 10^{-19} \text{C}$
- (2) 電子の静止質量 $m_e = 9.109 \times 10^{-28} \text{g} = 9.109 \times 10^{-31} \text{kg}$
- (3) Planck 定数/ 2π $\hbar \equiv h/2\pi = 1.055 \times 10^{-29} \text{erg} \cdot \text{sec}$

がいずれも 1 になるような単位系であり、この原子単位系での長さ、エネルギー、速度、時間の 1 単位はそれぞれ次のようになる。

- (1) $a_0 \equiv \hbar^2/m_e e^2 = 5.292 \times 10^{-9} \text{cm}$ (Bohr 半径)
- (2) $e^2/a_0 = m_e e^4/\hbar^2 = 4.360 \times 10^{-11} \text{erg} = 27.21 \text{eV}$
- (3) $e^2/\hbar = 2.188 \times 10^8 \text{cm/sec}$
- (4) $\hbar^3/m_e e^4 = 2.419 \times 10^{-17} \text{sec}$

これらは原子の中の電子 (多数の電子をもつ原子では外側に近い電子) の軌道の広がり、運動エネルギー、速度、軌道を 1 周する時間のおおよその目安を与えてくれる量である。なお、エネルギーについては、 $1/2$ 原子単位 ($= e^2/2a_0 = 13.6 \text{eV}$) が水素原子のイオン化エネルギーになっている。

補遺 F 束縛エネルギー準位の求解方法 (Pankratov, Meyer-ter-Vehn の方法)

第 3 章では、H 様、He 様 Ar イオン及び、サテライト線を発光する二電子励起イオンは、GRASP (a General purpose Relativistic Atomic Structure Program) を用いてエネルギー準位と振動子強度の計算を行ったが、全てのイオンについてそれを行うのは多くの労力と時間を要する。それ以外のイオン種については、これから述べる Pankratov、Meyer-ter-Vehn の方法によって求解した。尚、詳細は第 3 章の参考文献 [20] を参照されたい。ここでの各物理量の記述には、彼らの文献と同じ原子単位系を採用している。

量子数 nl に束縛された一電子状態のエネルギー準位は、「Bohr-Sommerfeld の量子化条件」より求解できる。則ち、

$$\int_a^b P_{nl}(r) dr = \pi(n - l - 1/2). \quad (\text{F.1})$$

ここで a, b は、 $P_{nl}(a) = P_{nl}(b) = 0$ が成立する回帰点 (turning Point) を示している。 P_{nl} は運動量を表し、以下のように書くことができる。

$$P_{nl}(r) = \sqrt{2E_{nl} - 2V(r) - \frac{(l + 1/2)^2}{r^2}}. \quad (\text{F.2})$$

本節の最終目標は、上式におけるポテンシャル $V(r)$ の解析解を導出することである。それによって、エネルギー準位 E_{nl} を収束計算により求めることが可能になる。

今、着目しているイオンの電荷を Z_{ion} とし、束縛電子の軌道を $n_0 l_0$ としよう。求めるべきポテンシャルは、軌道 $n_0 l_0$ に作用するポテンシャル $V_{n_0 l_0}$ であり、それは原子核の価数を Z とすると、束縛電子 $n_0 l_0$ を除く、 $(Z - Z_{\text{ion}} - 1)$ 個の他の束縛電子によって遮蔽されたポテンシャルである。 $V_{n_0 l_0}$ は、その成分として静電ポテンシャルと交換ポテンシャルに分けることができる。静電ポテンシャルの成分 $V_{n_0 l_0}^{\text{el}}$ は、Poisson 方程式を用いて以下のように表すことができる。

$$\nabla^2 V_{n_0 l_0}^{\text{el}}(r) = 4\pi e \{ \rho^{n_0 l_0}(r) - Z\delta(r) \}. \quad (\text{F.3})$$

ここで、

$$\rho^{n_0 l_0}(r) = \sum_{n,l} N_{nl}^{n_0 l_0} \rho_{nl}(r), \quad (\text{F.4})$$

である。

$N_{nl}^{n_0 l_0}$ は、軌道 $n_0 l_0$ 以外の軌道に束縛されている電子の数を表している。また、各々の軌道 nl の平均電子密度 $\rho_{nl}(r)$ は、WKB 解から得られる波動関数 R_{nl} を用いて以下のように表すことができる。

$$\rho_{nl}(r) = \frac{R_{nl}^2(r)}{4\pi}, \quad (\text{F.5})$$

$$R_{nl}(r) = \frac{A_{nl}}{r P_{nl}^{1/2}(r)} \cos \left[\int_a^r P_{nl}(r) dr - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (\text{F.6})$$

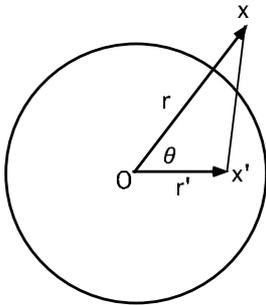
今、静電ポテンシャル $V_{n_0 l_0}^{\text{el}}(r)$ を原子核による成分 $V_N^{\text{el}}(r)$ と、束縛電子 $V_b^{\text{el}}(r)$ に分けて書く。原子核によるポテンシャルは $V_N^{\text{el}}(r) = -Z/r$ と書ける。一方、束縛電子による成分は、Poisson 方程式を積分して得られる以下の特解を求めれば良い。

$$V_b^{\text{el}}(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho^{n_0 l_0}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x'. \quad (\text{F.7})$$

各軌道の束縛電子は、原点 O の周りに球対称に分布しており、原点からの距離 r の関数になっている。上式の積分変数を変数変換して積分を実行すると、以下ようになる。

$$V_b^{\text{el}}(r) = \int \frac{\rho^{n_0 l_0}(\mathbf{x}')}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}} r'^2 dr' \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (\text{F.8})$$

φ の積分はすぐできて 2π である。一方、 θ の積分は、



$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}} &= \frac{1}{rr'} \left[\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta} \right]_0^\pi \\ &= \frac{1}{rr'} (r + r' - |r - r'|) \\ &= \begin{cases} \frac{2}{r} & (r > r') \\ \frac{2}{r'} & (r \leq r') \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

となる。従って、最終的に得られる静電ポテンシャル $V_{n_0 l_0}^{\text{el}}$ は、以下のように表すことができる。

$$\begin{aligned} V_{n_0 l_0}^{\text{el}}(r) &= -\frac{Z}{r} + \frac{4\pi}{r} \int_0^r \rho^{n_0 l_0}(r') r'^2 dr' \\ &\quad + 4\pi \int_r^\infty \rho^{n_0 l_0}(r') r' dr'. \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

収束計算の試行値として、SHM (Screened Hydrogenic Model) によって与えられるエネルギー準位を 0 次の解として用いる。SHM は、以下に示す各式から各軌道のエネルギー準位 $E_{nl}^{(0)}$ 及び有効電荷 Q_n を Screening Constant $\sigma(n, m)$ を用いて計算するモデルであり、その簡便性により爆縮プラズマのシミュレーション等でも良く利用されている。

$$E_{nl}^{(0)} = E_n = W_n - \frac{Q_n^2}{2n^2}, \quad (\text{F.11})$$

$$Q_n = Z - \sum_{m(\leq n)} \sigma(n, m) N_m, \quad (\text{F.12})$$

$$W_n = \sum_{m(\geq n)} \frac{N_m Q_m}{m^2} \sigma(m, n). \quad (\text{F.13})$$

上式において $N_n = \sum_l N_{nl}^{n_0 l_0}$ を示す.

これより得られる 0 次の試行値ポテンシャルは、 $V^{(0)}(r) = W_n - Q_n/r$ である. また、0 次の試行値運動量 $P_{nl}^{(0)}$ は以下のように表すことができる.

$$P_{nl}^{(0)} = \left[-\frac{Q_n^2}{n^2} + \frac{2Q_n}{r} - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \right]^{1/2}. \quad (\text{F.14})$$

式 (F.6) における規格化定数 A_{nl} は、 $\cos^2(\dots)$ の積分を $1/2$ と近似し、また以下のように、式 (F.1) を主量子数 n で微分すると、 $1/P_{nl}(r)$ の回帰点間積分の値が得られる. それを式 (F.6) の空間積分の計算式に代入すると、規格化定数 A_{nl} が得られる. 則ち、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dn} \int_a^b P_{nl}(r) dr &= \int_a^b \frac{1}{2P_{nl}(r)} \frac{2Q_n^2}{n^3} dr \\ &= \pi. \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

これを、以下の式に代入する.

$$\begin{aligned} \int R_{nl}^2(r) r^2 dr &\approx \frac{A_{nl}^2}{2} \int_a^b \frac{1}{P_{nl}(r)} dr \\ &= \frac{A_{nl}^2}{2} \frac{\pi n^3}{Q_n^2} \\ &= 1. \end{aligned} \quad (\text{F.16})$$

ゆえに規格化定数 A_{nl} は以下のように得ることができる.

$$A_{nl}^2 = \frac{2Q_n^2}{\pi n^3}. \quad (\text{F.17})$$

またこれより、各軌道の平均電子密度 $\rho_{nl}(r)$ は、次のように書き表すことができる.

$$\begin{aligned} \rho_{nl}(r) &\approx \left\langle \frac{R_{nl}^2(r)}{4\pi} \right\rangle \\ &= \frac{Q_n^2}{4\pi^2 n^3 r^2 P_{nl}^{(0)}(r)}. \end{aligned} \quad (\text{F.18})$$

ここまできて始めて式 (F.4) と式 (F.18) によって、式 (F.10) の積分が実行可能となる. 静電ポテンシャル成分 $V_{n_0 l_0}^{\text{el}}$ を求めると、

$$V_{n_0 l_0}^{\text{el}}(r) = -\frac{1}{r} \left[Z - \frac{1}{\pi} \sum_{n,l} \frac{N_{nl}^{n_0 l_0}}{n^2} \Omega_{nl}(r) \right], \quad (\text{F.19})$$

となる．ここで、

$$\Omega_{nl}(r) = \begin{cases} \pi n^2 & (\Theta_{nl} < -1) \\ -nrP_{nl}^{(0)}(r) + (Q_n r - n^2) \arcsin \Theta_{nl}(r) + \frac{\pi}{2}(Q_n r + n^2) & (|\Theta_{nl}| \leq 1) \\ \pi Q_n r & (\Theta_{nl} > 1) \end{cases} \quad (\text{F.20})$$

$$\Theta_{nl}(r) = \left[1 - \frac{Q_n r}{n^2} \right] / \left[1 - \frac{(l + 1/2)^2}{n^2} \right]^{1/2}, \quad (\text{F.21})$$

である．

一方、交換ポテンシャル成分 $V_{n_0 l_0}^{\text{ex}}(r)$ は、Slater 型の交換ポテンシャルを用いると、

$$V_{n_0 l_0}^{\text{ex}}(r) = \alpha \left[\frac{3}{\pi} \rho^{n_0 l_0}(r) \right]^{1/3}, \quad (\text{F.22})$$

と表すことができる． α は一般的に用いられている値 $\alpha = 1$ よりも、 $\alpha = 0.5$ がこの計算では良い結果を与える．

従って、全ポテンシャルは、

$$V_{n_0 l_0}^{\text{total}}(r) = V_{n_0 l_0}^{\text{el}}(r) + V_{n_0 l_0}^{\text{ex}}(r), \quad (\text{F.23})$$

で表される．これを式 (F.2) に代入し、式 (F.1) の条件が成立するようにエネルギー固有値 $E_{nl}^{(1)}$ を求め、先の $E_{nl}^{(0)}$ との差が、予め設定された ϵ 未満であれば計算を終了し、 ϵ 以上であれば、求めた $E_{nl}^{(1)}$ を $E_{nl}^{(0)}$ として、運動量 $P_{nl}^{(0)}$ の計算を式 (F.2) を用いてやり直し、更にこの運動量 $P_{nl}^{(0)}$ の値を用いて新たなポテンシャル $V_{n_0 l_0}^{\text{total}}(r)$ を計算する．以下、同じ事を繰り返し、エネルギー値が収束するまで計算を行う．

補遺 G Stewart-Pyatt ポテンシャル

ここでは、第 4 章にて束縛軌道のエネルギー・シフトの等方成分を求める際に使ったモデル・ポテンシャルの導出を行う。このポテンシャルは、1966 年に Stewart と Pyatt によって導出されたポテンシャルである。

核電荷 Z の原子核が、温度 T (ここではイオンと電子の温度の区別はなく両者は等しいと仮定している。) のプラズマの中にあると仮定すると、その時の静電ポテンシャル $\Phi(r)$ は Poisson 方程式より、以下のように書ける。

$$\nabla^2 \Phi(r) = 4\pi e \left[n_e(r, \mu) - \sum_i z_i n_i(r) \right]. \quad (\text{G.1})$$

ここで $n_e(r, \mu)$ は電子密度であり、 n_i は、電荷が ez_i であるようなイオンの密度を表わしている。

また、それぞれの分布関数は以下に示すように、Fermi-Dirac 統計及び Maxwell 分布で表すことができる。

$$n_e(r, \mu) = n_e(\infty, \mu) \frac{F_{1/2}[-\{\mu + e\Phi(r)\}/k_B T]}{F_{1/2}[-\mu/k_B T]}, \quad (\text{G.2})$$

$$n_i(r) = n_i(\infty) \exp \left[-z_i \frac{e\Phi(r)}{k_B T} \right]. \quad (\text{G.3})$$

また無限遠点における電子密度 $n_e(\infty, \mu)$ は、Fermi エネルギー μ と以下の関係式で結び付けることができる。

$$n_e(\infty, \mu) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e k_B T_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} F_{1/2} \left[-\frac{\mu}{k_B T} \right]. \quad (\text{G.4})$$

式 (G.1) に $x \equiv r/\lambda_d$ 、 $1/\lambda_d \equiv (4\pi e^2/k_B T) \sum_i (z_i^2 + z_i) n_i(\infty)$ 、 $\alpha \equiv -\mu/k_B T$ 、 $y \equiv e\Phi(r)/k_B T$ 、を代入すると、以下に示される規格化された式 (non-dimensional form) が得られる。

$$\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2}(xy) = \frac{1}{z^* + 1} \left[\frac{F_{1/2}(\alpha - y)}{F_{1/2}(\alpha)} - \frac{\langle z \exp(-zy) \rangle}{\langle z \rangle} \right]. \quad (\text{G.5})$$

ここで、 $\langle \rangle$ は、 n_i で重みを付けたイオン種全体での平均を表している。

例えば、 $\langle z \exp(-zy) \rangle \equiv \sum_i z_i n_i \exp(-z_i e\Phi(r)/k_B T)$ で、また $z^* \equiv \langle z^2 \rangle / \langle z \rangle$ である。

式 (G.5) の右辺第 2 項目を Taylor 展開し、 $y \equiv e\Phi(r)/k_B T \ll 1$ として展開係数の第 2 項目までを取ると、

$$\begin{aligned} \frac{\langle z \exp(-zy) \rangle}{\langle z \rangle} &\simeq \frac{\langle z(1 - zy + \dots) \rangle}{\langle z \rangle} \\ &= 1 - z^* y + \dots \\ &\simeq \exp(-z^* y), \end{aligned} \quad (\text{G.6})$$

となり、最終的に解くべき微分方程式は、以下ようになる。

$$\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2}(xy) = \frac{1}{z^* + 1} \left[\frac{F_{1/2}(\alpha - y)}{F_{1/2}(\alpha)} - \exp(-z^* y) \right]. \quad (\text{G.7})$$

この微分方程式を解く時の近似として、Fermi-Dirac 統計に含まれる束縛電子の成分を原点に置かれた点電荷と近似し、正味の核電荷に対するポテンシャルを求めることにする。また Fermi-Dirac 積分を近似するには以下の近似式を用いると便利である。

$$\frac{F_{1/2}(\alpha - y)}{F_{1/2}(\alpha)} = \exp(y) \left[1 - 2^{-3/2} \{1 - \exp(-y)\} \exp(y - \alpha) + \dots \right] \quad (y \ll \alpha). \quad (\text{G.8})$$

式 (G.7) の微分方程式において 2 つの解を考察する。まず $y \ll 1/z^*$ 、 $\alpha \gg 1$ (非縮退) の時、先の近似式を用いると以下ようになる。

$$\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2}(xy) = y. \quad (\text{G.9})$$

また、 $1/z^* \ll y \ll 1$ の領域 (先の領域の位置的に内側) では、式 (G.7) は、以下のようなようになる。

$$\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2}(xy) = \frac{1}{z^* + 1}. \quad (\text{G.10})$$

上記の 2 つの領域の遷移点を x_1 とし、微分方程式を各々の領域について解くと、下に示すような解が得られる。

$$\begin{aligned} y &= \frac{C}{x} \exp(-x) && (x \geq x_1), \\ &= \frac{K}{x} - J' + \frac{x^2}{6(z^* + 1)} && (x < x_1). \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

領域 ($x \geq x_1$) におけるポテンシャルは Debye-Hückel 型ポテンシャルであり、領域 ($x < x_1$) におけるポテンシャルは、高密度の極限でイオン球モデルのポテンシャルになる。一方、 $C = K = Ze^2/\lambda_d k_B T$ 。また、この 2 つのポテンシャルは $x = x_1$ で連続でなければならない。この条件より、

$$\begin{aligned} J' &= \frac{1}{2(z^* + 1)} \left[(x_1 + 1)^2 - 1 \right], \\ K &= \frac{1}{3(z^* + 1)} \left[(x_1 + 1)^3 - 1 \right]. \end{aligned} \quad (\text{G.12})$$

これより J' 及び、 x_1 を求めると、次のようになる。

$$J' = \frac{1}{2(z^* + 1)} \left[\{3(z^* + 1)K + 1\}^{2/3} - 1 \right], \quad (\text{G.13})$$

$$x_1 = \{3(z^* + 1)K + 1\}^{1/3} - 1. \quad (\text{G.14})$$

更にイオン球半径を a_i を用いて式変形を行うと、

$$\begin{aligned} 3(z^* + 1)K &= 3(z^* + 1) \frac{Ze^2}{\lambda_d k_B T} \\ &= \frac{3Z}{4\pi\lambda_d^3 n_e(\infty, \mu)} \\ &= \left(\frac{a_i}{\lambda_d} \right)^3 \\ &= \left(\frac{\text{Ion Sphere Volume}}{\text{Debye Sphere Volume}} \right), \end{aligned} \quad (\text{G.15})$$

が成り立つ。但し、 $a_i = (3Z/4\pi n_e(\infty, \mu))^{1/3}$ である。そしてこれらの関係式を用いると、 J' は次のように整理することができる。

$$J' = \frac{3K}{2} \left(\frac{\lambda_d}{a_i} \right) \left[\left\{ 1 + \left(\frac{\lambda_d}{a_i} \right)^3 \right\}^{2/3} - \left(\frac{\lambda_d}{a_i} \right)^2 \right]. \quad (\text{G.16})$$

従って、最終的に規格化定数はずして整理すれば、

$$\begin{aligned} e\Phi(r) &= Ze^2/r \exp(-r/\lambda_d) \quad (r \geq r_1), \\ &= Ze^2/r - J + (2/3)\pi e^2 n_e(\infty, \mu) r^2 \quad (r < r_1). \end{aligned} \quad (\text{G.17})$$

但し、

$$\begin{aligned} J &= J' \cdot (k_B T) = \frac{3Ze^2}{2a_i} \left[\left\{ 1 + \left(\frac{\lambda_d}{a_i} \right)^3 \right\}^{2/3} - \left(\frac{\lambda_d}{a_i} \right)^2 \right], \\ r_1 &= x_1 \cdot \lambda_d = \lambda_d \left[\left\{ 1 + \left(\frac{a_i}{\lambda_d} \right)^3 \right\}^{1/3} - 1 \right], \end{aligned} \quad (\text{G.18})$$

となる。ここで、電子密度の低い極限と高い極限について考察してみよう。低密度の極限では、Debye 長 $\lambda_d \gg$ イオン球半径 a_i であり、従って2つのポテンシャルの境界を示す r_1 は、以下に示すように0となる。

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda_d \rightarrow \infty} r_1 &= \lambda_d \left[\{1 + 0^3\}^{1/3} - 1 \right] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{G.19})$$

則ち、全ての領域において、Debye-Hückel 型ポテンシャルが成立するようになる。一方、高密度の極限では、 $a_i \gg \lambda_d$ であるため、 r_1 は以下に示されるようにイオン球半径

a_i に等しくなる .

$$\begin{aligned}\lim_{a_i \rightarrow \infty} r_1 &= \lambda_d \left[\left(\frac{a_i}{\lambda_d} \right) - 1 \right] \\ &\approx \lambda_d \left(\frac{a_i}{\lambda_d} \right) \\ &= a_i.\end{aligned}\tag{G.20}$$

また、ポテンシャル・エネルギーの低減を表す J の値は、 $J \rightarrow 3Ze^2/2a_i$ に漸近し、イオン球モデルによる値に漸近する .

補遺 H 電子衝突広がりの特クトル形状の 導出

本補遺では、第 5 章で扱った電子衝突広がりの特クトル形状が、Lorentz 広がりになること示す。導出にはその利便性から、相互作用表示を用いている。最初の節では先ず、相互作用表示の解説から行う。尚、参考文献として、第 5 章の [8]Chap.II を挙げておく。

H.1 相互作用表示

時刻 t_0 の波動関数 $\phi(t_0)$ と、任意の時刻 t における波動関数 $\phi(t)$ は、

$$\phi(t) = \exp\left\{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right\}\phi(t_0), \quad (\text{H.1})$$

という関係で結ばれている。このように系の波動関数が、時刻 t ともに変化するという考え方を Schrödinger 表示と呼ぶ。この表示では、任意の物理量の時刻 t における期待値は、この物理量を表す演算子を A とすると、

$$\overline{A(t)} = \langle \phi(t) | A | \phi(t) \rangle, \quad (\text{H.2})$$

で与えられる。式 (H.1) において、 $t_0 = 0$ として式 (H.2) に代入すると、

$$\overline{A(t)} = \langle \phi(0) \exp(iHt/\hbar) | A | \exp(-iHt/\hbar) \phi(0) \rangle. \quad (\text{H.3})$$

が得られる。これに対して、波動関数は、時間に対して変化せず、演算子 (物理量) が変化する見方を Heisenberg 表示という。この表示での波動関数や演算子には H をつけて Schrödinger 表示と区別すると、両者の間には次のような関係式がある。

$$\begin{aligned} \phi_H &= \exp\left(i\frac{Ht}{\hbar}\right)\phi(t), \\ A_H &= \exp\left(i\frac{Ht}{\hbar}\right)A\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (\text{H.4})$$

これら 2 つの表示方法に対して、本節において用いる相互作用表示がある。これはハミルトニアン H が、 $H = H_0 + H_1$ のように 2 つの部分に分かれ、 H_0 の下での運動が正確に求められる場合に便利である。ここで H_0 は独立した粒子の運動を表し、 H_1 は

粒子間の相互作用を表すハミルトニアンである．相互作用表示における波動関数と演算子を各々、 $\phi_I(t)$ 、 $A_I(t)$ と書くと、

$$\begin{aligned}\phi_I(t) &= \exp\left(i\frac{H_0t}{\hbar}\right)\phi(t) = \exp\left(i\frac{H_0t}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)\phi_H, \\ A_I(t) &= \exp\left(i\frac{H_0t}{\hbar}\right)A\exp\left(-i\frac{H_0t}{\hbar}\right) \\ &= \exp\left(i\frac{H_0t}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)A_H\exp\left(i\frac{Ht}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{H_0t}{\hbar}\right),\end{aligned}\quad (\text{H.5})$$

で定義される．

今、この表示での2つの時刻 t_0 、 t における波動関数は、次のような関係にある．

$$\begin{aligned}\phi_I(t) &= U(t, t_0)\phi_I(t_0) \\ U(t, t_0) &= \exp\left(i\frac{H_0t}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{H_0t_0}{\hbar}\right).\end{aligned}\quad (\text{H.6})$$

この $U(t, t_0)$ を変換関数と呼び、これは次のような性質を持っている．

$$(1) \quad U(t_0, t_0) = 1 \quad (\text{H.7})$$

$$(2) \quad U(t, t_0) \text{ は、ユニタリー演算子である．則ち、} \\ U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (\text{H.8})$$

$$(3) \quad U(t_1, t_3)U(t_3, t_2) = U(t_1, t_2) \quad (\text{H.9})$$

故に

$$U(t, t_0)U(t_0, t) = 1 \quad (\text{H.10})$$

(2) と組み合わせて

$$U^\dagger(t, t_0) = U(t_0, t) \quad (\text{H.11})$$

$$(4) \quad i\hbar\frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = (H_1)_I(t)U(t, t_0) \quad (\text{H.12})$$

これらの性質は、すべて定義式 (H.6) から導出可能である．式 (H.12) を解いて、積分方程式の形にすると、

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' (H_1)_I(t') U(t', t_0), \quad (\text{H.13})$$

となる．この式を逐次解いてゆくと、 $U(t, t_0)$ を H_1 のべき級数の形に書くことができる．

$$\begin{aligned}U(t, t_0) &= 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt_1 (H_1)_I(t_1) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 (H_1)_I(t_1) (H_1)_I(t_2) \\ &+ \cdots.\end{aligned}\quad (\text{H.14})$$

H.2 衝突近似

一般的に、スペクトル関数 $\phi(\omega)$ は、次のような表式で表すことができる。

$$\phi(\omega) = \sum_{i,f} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f|\mathbf{r}|i\rangle|^2 \rho_i. \quad (\text{H.15})$$

ここで、 $\omega_{if}(= 2\pi\nu_{ij})$ は、量子状態 $i - j$ 間の角周波数 [rad/sec] を示す。また、 ρ_i は、発光イオンが初期状態 i にある確率を示し、行列要素 $\langle f|\mathbf{r}|i\rangle$ との間には、以下のような条件が存在する。

$$\sum_{i,f} |\langle f|\mathbf{r}|i\rangle|^2 \rho_i = 1. \quad (\text{H.16})$$

Wiener-Khintchine の定理によれば、自己相関関数 $C(t)$ とスペクトル関数 $\phi(\omega)$ とは、互いに Fourier 変換によって結び付けられている。

$$\begin{aligned} C(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega t) \phi(\omega) d\omega \\ &= \sum_{if} \exp(-i\omega_{if} t) |\langle f|\mathbf{r}|i\rangle|^2 \rho_i. \end{aligned} \quad (\text{H.17})$$

ここで自己相関関数は、 $C(-t) = C(t)^*$ であり、これを用いてスペクトル関数 $\phi(\omega)$ を Fourier 逆変換によって求めると、

$$\phi(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} \exp(i\omega t) C(t) dt. \quad (\text{H.18})$$

また、 $\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$ より、自己相関関数 $C(t)$ は、以下のように書き換えることができる。

$$C(t) = \sum_{if} \langle i|\mathbf{r}|f\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_f t\right) \langle f|\mathbf{r}|i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_i t\right) \rho_i. \quad (\text{H.19})$$

更に、以下に示すような時間発展演算子 $T(t)$ を導入する ($t_0 = 0$)。

$$T(t, 0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right), \quad (\text{H.20})$$

$$T^\dagger(t, 0) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar} E t\right). \quad (\text{H.21})$$

上式を用いると、自己相関関数 $C(t)$ は、以下ようになる。

$$C(t) = \sum_{if} \langle i|\mathbf{r}|f\rangle \langle f|T^\dagger(t, 0)|f\rangle \langle f|\mathbf{r}|i\rangle \langle i|T(t, 0)|i\rangle \rho_i. \quad (\text{H.22})$$

エネルギー準位の基準を終状態 f にすると ($E_f = 0$) 更に簡単な表式になる。

$$C(t) = \sum_{if} \langle i|\mathbf{r}|f\rangle \langle f|\mathbf{r}|i\rangle \langle i|T(t, 0)|i\rangle \rho_i. \quad (\text{H.23})$$

ρ_i (発光イオンが初期状態 i にある確率) を $T(t, 0)$ に組み入れ、発光イオンに対して、擾乱を及ぼす全荷電粒子について平均を取った演算子 $T_{\text{ave}}(t, 0)$ を定義し、自己相関関数 $C(t)_{\text{ave}}$ を定義する .

$$\begin{aligned} C(t)_{\text{ave}} &= \sum_{if} \langle i | \mathbf{r} | f \rangle \langle f | \mathbf{r} | i \rangle \langle i | T_{\text{ave}}(t, 0) | i \rangle \\ &\equiv \text{Tr} D T_{\text{ave}}(t, 0). \end{aligned} \quad (\text{H.24})$$

さて、いよいよ前節で説明した相互作用表示を用いて $T_{\text{ave}}(t, 0)$ を求める . 相互作用を含まないハミルトニアン H_0 を用いて、変換関数 $U(t, 0)$ を定義すると、以下のように表すことができる .

$$U(t, 0) = \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) T(t, 0). \quad (\text{H.25})$$

今、 $T(t, 0)$ の平均的な時間依存性を求めるために、変換関数 $U(t, 0)$ の平均的な時間依存性を以下のようにして求める .

$$\begin{aligned} \Delta U_{\text{ave}}(t, 0) &= U_{\text{ave}}(t + \Delta t, 0) - U_{\text{ave}}(t, 0) \\ &= [\{U(t + \Delta t, t) - 1\} U(t, 0)]_{\text{ave}}. \end{aligned} \quad (\text{H.26})$$

式 (H.14) より、変換関数 $U(t + \Delta t, t)$ を展開すると、

$$\begin{aligned} U(t + \Delta t, t) - 1 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_t^{t+\Delta t} dt_1 (H_1)_I(t_1) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 (H_1)_I(t_1) (H_1)_I(t_2) \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (\text{H.27})$$

求めるべき解は、上式の演算子の期待値である . 二つの粒子が散乱する過程を記述する場合には、 $t = \pm\infty$ で相互作用しない場を基準として、 $t = -\infty \sim \infty$ の間で、二つの粒子がどのような相互作用を起こすのかを議論することが多い . このような場を漸近場 (asymptotic field) とする . 則ち、式 (H.14) において、時間に関する積分を $t \rightarrow \pm\infty$ として、その間の平均的な値を求める .

$$\begin{aligned} [U(t + \Delta t, t) - 1]_{\text{ave}} &\approx \sum_j \nu_j \Delta t \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \left\{ -\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 (H_1)_I(t_1) \right. \\ &+ \left. \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 (H_1)_I(t_1) (H_1)_I(t_2) \dots \right\} \\ &\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \left\{ \sum_j \nu_j (S_j - 1) \right\} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \Delta t \\ &\equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \psi' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \Delta t \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) H_1^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \Delta t. \end{aligned} \quad (\text{H.28})$$

ここで \sum_j は、周波数 ν_j で起こる全ての衝突過程について総和することを示している。 S_j は散乱行列を示し、最後から 2 行目の式変形において、衝突広がりオペレーター ψ' を定義した。また最後の式変形において、二粒子の相互作用ハミルトニアン $H_1^{\text{eff}} \equiv i\hbar\psi'$ を定義した。式 (H.26) より、

$$i\hbar \frac{dU_{\text{ave}}(t, 0)}{dt} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t\right) H_1^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t\right) U_{\text{ave}}(t, 0), \quad (\text{H.29})$$

が得られる。更に式 (H.25) より、 $T_{\text{ave}}(t, 0)$ についての Schrödinger 方程式を得ることができる。

$$i\hbar \frac{dT_{\text{ave}}(t, 0)}{dt} = (H_0 + H_1^{\text{eff}})T_{\text{ave}}(t, 0), \quad (\text{H.30})$$

これを解いて、

$$T_{\text{ave}}(t, 0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H_0 + H_1^{\text{eff}})t\right], \quad (\text{H.31})$$

が得られる。これを式 (H.24) に代入し、式 (H.18) を実行すると、電子衝突広がりスペクトル関数を得ることができる。

$$\begin{aligned} \phi(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Re Tr} \left\{ D \frac{1}{i\omega - \left(\frac{i}{\hbar}\right)(H_0 + H_1^{\text{eff}})} \right\} \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Re Tr} \left\{ D \frac{1}{i\omega - \left(\frac{i}{\hbar}\right)(H_i - H_f) + \psi'} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{H.32})$$

尚、式変形には、 $H_0 \equiv H_i - H_f$ 、 $H_1^{\text{eff}} \equiv i\hbar\psi'$ を利用した。更に $H_i - H_f = E_i - E_f$ より、

$$\phi(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Re Tr} D [\psi' + i(\omega - \omega_{ij})]^{-1} \quad (1/\text{rad/Hz}). \quad (\text{H.33})$$

角周波数 ω を周波数 ν に書き換え、また、 $\psi' \equiv 2\pi\psi$ より、

$$\phi(\nu) = -\frac{1}{\pi} \text{Re Tr} D [\psi + i(\nu - \nu_{ij})]^{-1} \quad (1/\text{Hz}). \quad (\text{H.34})$$

が得られる。これによって、電子衝突広がり関数は Lorentz 関数で表されることが示された。

謝辞

本研究の遂行に際し、終始懇篤なる御指導、御鞭撻を賜りました大阪大学レーザー核融合研究センター三間囿興教授に深厚なる謝意を表します。センター長の要職にありながら、貴重な時間を割いての直接の御指導、御討論に対して心より感謝の意を表します。

本論文作成にあたり貴重な御指導と御助言を戴きました、電子情報エネルギー工学専攻西川雅弘教授、西原功修教授に深く感謝致します。

本研究を行う機会を与えて戴くと共に、研究に対する深い御理解と御支援を賜りました中井貞雄教授に厚く感謝致します。

大阪大学大学院後期課程在学中において、御指導、御教示戴きました堀池寛教授、飯田敏行教授、権田俊一教授に深く感謝します。

本研究を通じて弛まぬ御指導、御鞭撻を戴きました北里大学医学部小池文博助教授に厚く感謝いたします。

本研究は同学レーザー核融合研究センターで行われたものであり、研究を進めるにあたり終始変わらぬ御指導、討論、助言、激励を戴きました山中龍彦教授、井澤靖和教授、中塚正大教授、高部英明教授、加藤義章教授（現日本原子力研究所）、畦地宏助教授、宮永憲明助教授、西村博明助教授、山中正宣助教授、北川米喜助教授、田中和夫助教授、乗松孝好助教授、藤田尚徳助教授、實野孝久助教授、大道博行助教授、阪部周二助教授、神前康次助教授、白神宏之講師、村上匡且講師、中井光男講師、兒玉了祐講師、金邊忠講師に厚く感謝いたします。

大阪大学大学院後期課程在学中において、数々の熱心な御指導、討論、助言、激励を戴きました摂南大学田口俊弘助教授、レーザー核融合研究センター長友英夫助手、レーザー技術総合研究所車信一郎研究員、並びに古河裕之研究員、橋田昌樹研究員、レーザー核融合研究センター砂原淳研究員、盛政明研究員、電子情報エネルギー工学専攻宮本斉児助手、核融合科学研究所石崎龍一助手、本田満博士（現 Max-Planck-Institut für Quantenoptik）に心より謝意を表します。

本研究を進めるにあたり活発な議論、惜しみない御協力を戴きました、同じ理論・シミュレーショングループの千徳靖彦氏、後藤道夫氏、プラズマ計測研究グループ本田博史博士（現筑波大学先端学際領域研究センター）、藤田和久博士、越智義浩氏、仁木勇氏、船倉治朗氏、部谷学氏、計算機管理室福田優子教務員、斉藤昌樹氏、岡本匡代女史、田村篤和氏、計算機技術室の方々に感謝致します。

このような研究活動に進むことに深い理解を示して下さいました、三菱電機株式会社南部元氏、中島邦男氏、依田文夫氏、松本明氏、岡田康裕氏、川又武典氏に厚く感謝致します。

研究生活を共にしたレーザー核融合研究センターの方々、特に、理論・シミュレーショングループ本田孝二氏（現松下電器産業株式会社）、石飛啓明氏（現株式会社明電舎）、岡本隆氏（現ソニー株式会社）、竹内源氏（現野村総合研究所）、八木禎彦氏（現シャープ株式会社）、鳴尾秀二氏（現松下電工株式会社）、Abdel Rahman Ibrahim Mahdy 氏、大西直文氏、依田嘉明氏、中島健一氏、大下晃嗣氏、本多哲也氏、山口鉄蔵氏、小嶋進一氏、武田哲史氏、池川恭史氏、川田芳民氏、LD 励起固体レーザー開発グループ松井宏記氏、レーザープラズマ相互作用研究グループ高橋謙次郎氏、自由電子レーザー開発グループ文雅司氏、レーザー応用研究グループ川戸栄研究員、林昶煥氏、上山宏樹氏（現三菱電機株式会社）に感謝致します。併せて、企画室、事務室、電子情報エネルギー工学専攻事務室の方々に謝意を表します。

最後になりますが、私のこのような人生の選択に深い理解を示して戴き、またこの3年間の研究生活を気付かぬところで励まし、精神的に支えてくださいました母と弟、そして2年前に他界した父に感謝いたします。

業績目録

主要論文

- (1) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Analysis of X-ray spectra of laser-produced Ar plasmas -effects of spectator electrons”, to be published in Fusion Engineering and Design **44**, 195(1999).
- (2) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Effects of Spectator Electrons on X-ray Spectra of Impurity Ar in High Density Plasmas”, to be published in Journal of the Physical Society of Japan **68**, 104(1999).
- (3) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Effective Statistical Weight of Rydberg Orbitals of Dopant Ar in Dense Plasmas and its Effects on Higher Order Satellite Lines”, submitted to Physics of Plasmas.
- (4) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Analysis of Highly Excited States of Dopant Ar in Dense Hydrogen Plasmas and Contribution of Higher Order Satellite Lines”, submitted to Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.
- (5) Fumihiro Koike, K.Honda, T.Kawamura and K.Mima, “Analysis of X-ray spectra of laser-produced high density plasmas”, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **58**, 699(1997).

その他の発表論文

- (1) T.Kawamura, K.Mima and A.Nishiguchi, “Effects of Compressibility on the Kelvin-Helmholtz Instability and Turbulent Viscosity”, ILE Quarterly Progress Report, Institute of Laser Engineering, Osaka University, **90-35**, 45(1991).
- (2) Tohru Kawamura, Fumihiro Koike and Kunioki Mima, “Analysis of X-ray Spectra of Laser-Produced Ar plasmas”, Annual Progress Report, Institute of Laser Engineering, Osaka University, 247(1996).
- (3) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Effects of Spectator Electrons on X-ray Spectra of Impurity Ar”, Annual Progress Report, Institute of Laser Engineering, Osaka University, 174(1997).
- (4) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Effective Statistical Weight of Highly Excited States of Hydrogen-like Ar-ion in Dense Plasmas”, Annual Progress Report, Institute of Laser Engineering, Osaka University, 147(1998).

国際会議発表

- (1) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Analysis of X-ray Spectra of Laser-Produced Ar Plasmas -Effects of Spectator Electrons-”, IAEA Technical Committee Meeting on Drivers and Ignition facilities for Inertial Fusion, 10-14 March 1997, Osaka University, Osaka, Japan.
- (2) Tohru Kawamura, Kunioki Mima and Fumihiro Koike, “Analysis of X-ray Spectra of Impurity Ar in High Density Hydrogen Plasmas”, 8th International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter, 26-30 October 1998, Sarasota Florida, USA.

国内学会発表

- (1) 河村 徹、西口彰夫、高部英明、三間囿興、“ケルビン・ヘルムホルツ不安定性における流体の圧縮性の効果”、日本物理学会、(大阪大学) 1990年4月。
- (2) 河村 徹、西口彰夫、高部英明、三間囿興、“非一様爆縮に伴う shear-flow による不安定性のシミュレーション”、日本物理学会、(岐阜大学) 1990年10月。
- (3) 河村 徹、三間囿興、小池文博、“グラントコードによるレーザー生成プラズマ中 Ar の H 様、He 様イオンからの X 線スペクトルの解析”、日本物理学会、(名城大学) 1997年3月。
- (4) 河村 徹、三間囿興、小池文博、“レーザー生成プラズマの温度密度計測における Ar の X 線スペクトルの解析 -スペクテータ電子の影響-”、プラズマ核融合学会、(大阪大学) 1997年11月。
- (5) 河村 徹、三間囿興、小池文博、“高密度レーザープラズマ中での不純物 Ar イオンの束縛状態密度”、日本物理学会、(日本大学) 1998年3月。
- (6) 長友英夫、鈴東 新、高部英明、三間囿興、河村 徹、“遺伝的アルゴリズムによるレーザー核融合のレーザーパルス波形最適化”、日本流体力学会年会、(工学院大学) 1998年7月。
- (7) 河村 徹、三間囿興、小池文博、“高密度レーザープラズマ中での不純物 Ar イオンの束縛状態密度 II -Stark 効果による影響-”、日本物理学会、(琉球大学) 1998年10月。
- (8) 長友英夫、鈴東 新、武田哲史、河村 徹、高部英明、三間囿興、“遺伝的アルゴリズムによるレーザー核融合ターゲットの最適化設計”、日本物理学会、(琉球大学) 1998年10月。
- (9) 河村 徹、三間囿興、小池文博、“レーザー生成プラズマの温度密度計測における Ar の X 線スペクトルの解析 II -高励起スペクテータ軌道の存在確率-”、プラズマ核融合学会、(筑波大学) 1998年12月。

研究会発表

- (1) 河村 徹、三間囿興、小池文博、“高密度プラズマ中 Ar からの X 線スペクトル -スペクテータ電子の効果-”、素過程データ作業会「高温、高密度プラズマ中の複雑なイオンの原子過程モデルの構築」及び「極限プラズマ中の電磁・量子過程の

- 研究」、名古屋大学シンポジオン会議室、1997年1月29日～30日。
- (2) 河村 徹、三間園興、小池文博、“高温高密度プラズマ中、不純物 Ar からの X 線スペクトル -高励起束縛状態の存在確率に対する一考察- ”、素過程データ作業会「プラズマ原子過程の展望」、核融合科学研究所、1998年6月18日～19日。