

氏 名 鄒 士 陽

学位（専攻分野） 博士(理学)

学位記番号 総研大甲第674号

学位授与の日付 平成15年3月24日

学位授与の要件 数物科学研究科 核融合科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学位論文題目 Collision Processes of Low Charge Ions with Atoms
in Fusion Plasma

論文審査委員 主 査 教授 須藤 滋
教授 More Richard Michael
教授 加藤 隆子
教授 季村 峯生 (山口大学)
教授 河野 明廣 (名古屋大学)
主任研究 久保 博孝 (日本原子力研究所)
員

論文内容の要旨

Collision processes of low charged ions with neutral atomic particles at low to intermediate energies play vital roles in various fields of applied physics such as plasma physics, astrophysics, and radiation physics. In ion-atom collisions, several inelastic processes can take place in addition to elastic scattering. Among these processes, excitation of target, electron capture, and ionization (the ejection of electrons from the target) are considered to be dominate in the energy range concerned fusion research. There is an amount of effort to fully understand the dynamics of ion-atom collisions from both the experimental and theoretical perspectives. As a result of these extensive experimental and theoretical investigations, most of the elastic and inelastic processes involving bound states of target and projectile ions are well described by current theories. However, ionization remains a challenge even for the most basic processes such as proton-hydrogen system especially at low energy. The discrepancy in ionization cross sections between two recent experiments, i.e. Shah et al. (1998) and Pieksma et al. (1994) is as large as a factor of six. Reasonably reliable theoretical studies of Sidky et al. (2001), Toshima (1999) and Kolakowska et al. (1999) predicted about 20% higher value than those of experiments of Shah et al. (1981,1987) at the peak of ionization cross section, and there is a considerable disagreement among theoretical cross sections at low keV energies. The energy dependence of theoretical and experimental results is also different. In the present work, we have aimed to provide more insight into such unresolved problems.

Heavy-particle atomic collision is a complex quantum-mechanical problem. It involves interaction of many states both from the discrete and continuum parts of the energy spectrum and also strong couplings of many reaction channels. Obviously, the understanding of the collisional dynamics of ion-atom system would represent a considerable advance of our basic knowledge on atomic interactions, in general. Besides, this knowledge is essential for the understanding and interpretation of a large variety of phenomena taking part in many non-equilibrium plasmas. The importance of heavy-particle collisions in fusion research applications and the challenges for theory have motivated me to carry out this research.

In the first part of my research, I studied electron emission in $H^+ + H(1s)$, $He^{2+} + H(1s)$ and $He^+(1s) + H^+$ collisions at low energy (below 20 keV/amu), using the electron translation factor corrected molecular orbital close-coupling approach. Selection of the collision partners and energy range studied here ties closely with the application in fusion

plasma experiments. Full convergence of ionization cross sections as a function of H_2^+ or HeH^{2+} molecular basis size was achieved by including up to twenty bound states, and more than three hundred continuum states. The results obtained by our calculation are compared with the available experimental data and various theoretical models. Excellent agreement with the recent experiments is found for the total ionization cross sections where the experimental values are available. This study shows that for the ionization in $He^{2+} + H(1s)$ and/or $He^+(1s) + H^+$ collisions, the higher-level ladder climbing processes (i.e. excitation via a sequence of upper levels) are dominant as compared to direct mechanism, in which the electron is liberated by one step promotion. On the contrary, in the $H^+ + H(1s)$ collision process, H_2^+ is ionized directly, and the higher levels, especially $2p \pi_u$ act as a temporary trap of the ionization flux.

The second part of this thesis is devoted to the calculation of spectral profiles of Li^{2+} ions emitted in magnetically confined plasma. In magnetic confined plasmas, Li^{2+} ions are populated by three kinds of mechanism; excitation from the ground state, electron-ion recombination from Li^{3+} and charge exchange with neutral hydrogen and Li^{3+} . The nI -resolved population densities of excited Li^{2+} ions are calculated up to $n=20$ using a collisional-radiative model including the charge exchange process. Since reliable cross sections for charge exchange processes in $Li^{3+} + H(1s)$ collision are available, instead of attempting recalculations of charge transfer process, I adopt them from the recent literatures. In the calculation, the radiative transition probabilities and wavelengths of Li^{2+} ions are computed by diagonalizing the Hamiltonian including interactions with the magnetic field. This study shows that 1) spectral profiles emitted by excitation, recombination and charge exchange are quite different from each other, which is due to the different n and I -distributions of the rate coefficients of such basic atomic processes (i.e. excitation, recombination and charge exchange); and 2) in order to interpret properly low temperature spectra, the Zeeman effect has to be accounted for, especially for ion temperature diagnostics.

In summary, I have treated heavy-particle atomic collisions, which are typical in plasma, obtaining new cross sections for charge transfer, excitation and ionization at low energies. The detailed discussions are made to collisions involving the partially or fully ionized main component of fusion plasmas (hydrogen and helium). Based on a detailed computation for spectral profiles of Li^{2+} ions, I have analyzed the spectra of hydrogen-like lithium measured from magnetic confinement fusion plasmas.

論文の審査結果の要旨

本学位論文は、イオンと原子・分子との衝突による非弾性衝突に関する研究と磁場閉じこめプラズマ中からのスペクトル線のZeeman効果の研究とから構成されている。

イオンと原子・分子との衝突によるイオン化過程は、様々な基礎科学、応用分野で重要な過程である。核融合科学では、プラズマ中のイオンとH、He原子や不純物原子分子との衝突によるイオン化過程は重要であり、放射線医学では重粒子イオンを用いたガン治療で、分子解離確率やラジカル分子種生成確率の正確なデータが必要である。さらにイオンビームを使った薄膜生成やエッチングなどにおいても重要な過程である。実用上、数keVより低いエネルギーを持ったイオンと原子分子衝突によるイオン化過程は特に重要であるが、測定が困難なため実験はほとんど行われていなかった。イオン化が起きるエネルギー領域では、電子がイオンに移る電子捕獲、又電子が励起される電子励起過程などが強く結合しあい、イオン化、電子捕獲と電子励起を同時に考慮する、いわゆる緊密波法に基づく理論体系を確立させる必要がある。この場合は結合するチャンネル数が数10から数100にもなり理論計算が困難で、理論研究もこの衝突エネルギー領域ではほとんどなかった。最近イギリスとオランダの二つの実験グループが陽子と水素原子との衝突によるイオン化確率を衝突エネルギー1keV程度まで測定したが、この2組の測定値とその値の衝突エネルギー依存性が大きく異なっており、イオン化機構の理解とイオン化断面積の解釈の上で大きな問題となっている。これに鑑み、Zou君はこの問題の解決と、低エネルギーでのイオン化機構の理解とイオン化断面積の高精度の決定のため、100keVより低いエネルギーでの陽子と水素原子との衝突によるイオン化、電子捕獲、電子励起過程の理論的研究を行った。

Zou君は数keVより低い衝突エネルギーで最も信頼性が高い結果を与えると考えられている分子軌道展開緊密波法という方法を用い、イオン-原子の相互作用で起きうるイオン化、電子捕獲、電子励起の全ての過程を同等に考え、イオン化の機構とイオン化断面積決定の研究を行った。数keVより低い衝突エネルギーではこれら3つの過程が強く絡み合い、非常に沢山の状態を同時に考慮する必要があるため理論計算は非常に複雑で大掛かりになる。特にイオン化状態の高精度の記述のためにはイオン化電子状態を300以上もCoupled equationsに入れなければならない、このため、いままで誰もこの問題に手をつけることができなかった。彼は数100を超えるチャンネルを入れたCoupled equationsの数値解を求める新しいアルゴリズムを開発し、計算速度を飛躍的に改良し、また数値解の精度も上げ、300以上のチャンネルを入れて、非常に精度が高い高速計算を実行することに成功し、信頼できるイオン化確率、電子捕獲断面積などを求めた。まず、信頼できる実験・理論結果の存在する数keV以上の中間エネルギー領域での電子捕獲過程の捕獲断面積を求め、結果を総合的に比較評価した。これにより彼の計算精度についての詳細な評価を行っている。これまで理論研究のなかった低エネルギーでのイオン化機構の研究を行い、報告されている2つの実験結果の内、彼の結果はよりイギリスグループの結果に近いことを示した。オランダグループの実験はエネルギー分布及び角度分布を得ることを目的としており、イギリスグループの実験は全断面積を得ることを目的としていたので、イギリスグループの結果の方が信頼性が高いと予想していた。しかし、低エネルギーでの実験ではイオン密度、

エネルギー広がり、水素分子の寄与など多くの効果があり実験的に正確に断面積を求めることは困難であるので、今回の理論値との一致によって実験結果の信頼性がより確かめられたと言える。実験データの信頼性評価に対して理論の側面から貢献したと言える。このようにZou君の研究は数keV以下での衝突によるイオン化過程の機構とイオン化断面積について新しい知識をもたらし、イオン化断面積を使うさまざまな応用分野にも多大な寄与をした。

もう一つの研究としてリチウムペレット入射実験の際に観測されるLiイオンからのスペクトル線に対する磁場の影響を調べた。今までは主量子数(n)が同じで異なった角運動量(l)を持つ準位に対しては統計的重率に従った占有密度が仮定されていたが、衝突輻射モデルにより n, l 分布を励起、再結合、電荷移行成分に分けて調べ各発光機構による占有密度の分布の特徴を見いだした。更に磁場によるZeeman効果を取り入れたエネルギー準位と放射遷移確率を計算しスペクトル線プロファイルを調べた。統計的重率を仮定した場合に得られるイオン温度とスペクトル線のピーク値を比較し異なることを示した。再結合過程の場合は統計的重率と結果はあまり変わらないが、電荷移行、励起過程の場合は統計的重率の場合と比較してスペクトル線のピーク値が短波長側へシフトすることを見いだした。またスペクトル分布も統計的重率と比較し電荷移行の場合は半値幅が広がる結果を得た。応用としてヘリオトロンEで得られた実験結果と比較し磁場のある場合のイオン温度に対する影響及び発光機構による違い等について定量的に調べた。再結合過程の場合Zeeman効果を考慮した場合としない場合でイオン温度が2倍異なることを見いだした。磁場閉じこめプラズマでのスペクトル線強度及びプロファイルを計算するプログラムを完成し、偏光分光にも応用できるようにした。

以上、イオンと原子・分子との低エネルギー域での衝突によるイオン化過程を精密に評価することによりイオン化過程の機構とイオン化断面積について新しい知見をもたらし、また荷電交換光のZeeman効果についても新しく定量的に説明することに成功しており、本論文は学位論文としてふさわしい学術内容を持っていると認められる。