



研究最前線 高温プラズマにおける高Z多価イオンの分光と原子構造

8. 高Z多価イオンのモデリングの現状

8. Present Status of the Modeling of High-Z Multiply Charge Ions

佐々木 明

SASAKI Akira

日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門

(原稿受付：2013年2月28日)

磁場閉じ込め核融合のプラズマ対向壁材料として用いられるタングステンを初めとする、高Z多価イオンの衝突輻射モデルの現状について述べる。近年 HULLAC 等の計算コードを用い、エネルギー準位や、電離、励起のレート係数を数値計算で求めて大規模な衝突輻射モデルを構築し、平均価数や輻射損失などのプラズマの特性を求め、さらにそれを用いて応用研究が行われるようになってきた。本章では、複雑なイオンのレベル構造をコンピュータアルゴリズムで解析して原子モデルを構築する方法の研究開発、コード比較国際ワークショップにおける計算の比較、検証などの活動の現状を紹介する。

Keywords:

atomic process, collisional radiative model, multiply-charged ion, plasma spectroscopy, simulation

8.1 はじめに

核融合や極端紫外 (EUV) 光源の研究開発では、与えられたプラズマの温度、密度条件下において、高Z多価電離イオンの平均価数、輻射損失などの特性を評価するため、衝突輻射モデルが用いられる。衝突輻射モデルとは、非局所熱平衡 (non-Local Thermodynamic Equilibrium: nLTE) 状態にあるプラズマ中の高Z多価電離イオンのエネルギー準位の分布、すなわち占有密度を、電子衝突、輻射による、電離、励起過程を考慮して、レート方程式によって計算するシミュレーションモデルである。衝突輻射モデルの計算結果は、発光、吸収スペクトルの計算と組み合わせ、プラズマの分光解析に用いられる他、状態方程式の一部として、プラズマシミュレーションにも活用される。

衝突輻射モデルの構築においては、正しい原子モデル、すなわちエネルギー準位の組を選ぶことと、原子素過程データ、すなわちレベル間の反応の正確なレート係数の値を準備することが重要である。

H, He 様イオンの衝突輻射モデルでは、どのようなエネルギーレベルが大きな占有密度を持ち、発光に寄与するか、あるいは電離、励起を通じ、電離平衡 (イオン化バランス) を決定するために重要ななどはすでに知られ、モデル化の手法は確立されている [1]。それに対して、タングステンやスズなどの高Zイオンの衝突輻射モデルでは、温度、密度条件に応じて、重要となるイオン化状態やエネルギー準位と、それらの間の電離、励起過程が変わり、どのようなモデルを構築するのがよいかはこれまで明らかでなかった。特に、電離平衡の決定のためには、多数の多重・内殻励起状態を中間状態とする、二電子性再結合過程を考

慮することが重要で、モデルは非常に多くのエネルギー準位を含む複雑なものになり、従来モデルの構築は困難であった。近年、HULLAC [2] や FAC [3] などの計算コードが普及し、イオンのエネルギー準位や、電子衝突、輻射による電離、励起過程に関する、原子素過程データを数値計算で求められるようになり、そのような大規模な衝突輻射モデルの開発と、それを活用した研究が行われるようになった [4-8]。

一方、最近のプラズマの科学と技術の進歩は、例えば、EUV 光源の研究開発において、波長 13.5 nm で、200 W 以上の EUV 光を、励起用レーザー光のパワーからの変換効率 3% 以上で、発生させることを要求するようになっている。国際熱核融合実験炉 (ITER) でも、タングステン等の高融点金属をダイバタ材料として活用し、高いプラズマ性能を得ることが期待されている。このように、衝突輻射モデルによるプラズマ原子過程の解析にも、より高い精度が要求されるようになっている。

高Z多価イオンの衝突輻射モデルは、多数のパラメータをもち、ひとつの平均価数や輻射損失の実験結果に対して、それを再現することができる複数のパラメータの組が存在すると考えられる。このため、あるモデルでひとつの実験結果をうまく説明できたとしても、そのモデルで未知の条件における実験結果を正しく予測できるかどうかについては、これまで見解は定まっていなかったと思われる。加えて、プラズマの分光計測においては、プラズマがしばしば時空間の構造をもつことや、放射される光がプラズマ中を伝播する際に自己吸収の影響を受けるために、モデルと実験の定量的な比較や検証自体が困難な場合も多い。

そこで、主に慣性核融合分野の衝突輻射モデルの専門家による、nLTE kinetics workshop が行われ、各参加者が計算を行って結果を持ち寄り、比較、検討を行って、コードの精度、信頼性の向上を試みる活動が行われた。ワークショップに参加するには、少なくとも一つの条件における結果を提供しなければいけないという条件のもとで、1999年の第1回以来、ほぼ2年に1回のワークショップが開かれ[6]、当初は、例えば金プラズマの価数の計算において、コードごとに最大10の相違があったものが2程度まで改善された。ワークショップの結果、コードの精度の向上のために、原子データの精度と、原子モデルの完全性 (completeness) の重要性が明らかになった[7,8]。すなわち、複雑な多電子、多価電離イオンの重要なエネルギー状態の構造を正しく記述すること、その間の電離、励起の素過程のうちの重要なものを見出し、漏れなく取り込むことの重要性が明らかになった。

本章では、著者が、主に EUV 光源の原子過程の解析[9]を目的として行った、衝突輻射モデル (JATOM) の開発において、nLTE kinetics ワークショップへの参加を通じ、モデルの構築をアルゴリズム化し、計算の精度や再現性の向上を行った結果を紹介したい[10]。

8.2 衝突輻射モデルの構築

JATOM コードは、EUV 光源のシミュレーションシステムの一部として、与えられた温度、密度に対する、電離平衡にあるプラズマの平均価数や、輻射放出、吸収係数のスペクトルを計算するために開発された。本コードは、固体 Sn ターゲットにレーザー光を照射して生成する、比較的高密度 ($n_e = 10^{18-22} / \text{cm}^3$) のプラズマを対象とし、非相対論的電子配置 (以下簡単のために電子配置と略す)、すなわち、軌道電子の主量子数 n と方位量子数 l で決まる軌道の占有電子数 m 、 $(n_1 l_1)^{m_1}, (n_2 l_2)^{m_2}, \dots, (n_N l_N)^{m_N}$ による、平均化されたエネルギー準位を用いて、イオン密度、エネルギー準位の占有密度の計算を行う。また輻射流体シミュレーションコードのポストプロセッサとして、配置間相互作用および、エネルギー準位の微細構造を考慮して、輻射放出、吸収スペクトルの計算を行う。本節では、前半の電子配置平均レベルを用いた、衝突輻射モデルの構築の結果と、それを W プラズマのイオン密度、輻射損失率や、衝突輻射電離、再結合レートの計算に応用した結果について示す。

原子の状態を電子配置で表すと、高 Z 原子の多電子、多価電離イオンは、電子が属する軌道の組み合わせにより、非常に多くのエネルギー準位をもつことがわかる。図1に、HULLAC コードを使い、エネルギーを電子配置平均で計算した、Ni 様 W イオンの準位図を示す。図は、基底状態 $3d^{10}$ の一電子励起状態 $3d^9 nl$ 状態とともに、多数の内殻、多重励起状態が存在することを示す。このようなエネルギー準位の構造をもつイオンの占有密度を評価するためには、励起エネルギーが低く、占有密度の多い状態と、電離、励起に重要な過程を漏れなく考慮したモデルを構築することが必要である。特に、 $n_e = 10^{14} / \text{cm}^3$ 程度の核融合プ

ラズマでは、二電子性再結合過程を考慮することが重要である。

Ni 様イオンから Cu 様イオンへの二電子性再結合は、中間状態、すなわち自動電離状態への電子捕獲と、それに続く Cu 様イオンのよりエネルギーの低い状態への緩和、例えば、

$$3d^{10} + e \rightarrow 3d^9 4pnl, \quad (1)$$

$$3d^9 4pnl \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 3d^{10} nl + h\nu \\ 3d^{10} 4p + h\nu' \end{array} \right\}, \quad (2)$$

のような過程を通じて起こると考えられる。JATOM コードでは、二電子性再結合過程は、中間状態を陽に取り入れることで考慮する。電離平衡を正しく計算するためには、重要な中間状態を漏れなく取り入れることが重要である。

今回の提案手法では、アルゴリズムを用いて、計算の対象とするイオンのエネルギー準位を、それよりひとつ価数の高いイオンのエネルギー準位を解析して、自動的に生成する[11]。Cu 様イオンのエネルギー準位は、図1に示す、Ni 様イオンの低いエネルギー準位をコアとして1電子を付与することにより生成する。

具体的には、Ni 様イオンのエネルギー準位を、励起エネルギーの順にソートし、低い状態から順に取って、Cu 様イオンのエネルギー準位を生成する。まず、基底状態 $3d^{10}$ に対し、考慮する軌道の主量子数 n と、方位量子数 l の最大値を与え、可能なあらゆる軌道に電子を付与して、 $3d^{10} nl$ 状態を生成する。これによって、Cu 様イオンの基底状態、 $3d^{10} 4s$ 状態が生成される。続いて、Ni 様イオンの $3d^9 4s$ 状態から Cu 様イオンの $3d^9 4s nl$ 状態、 $3d^9 4p$ 状態から $3d^9 4pnl$ 状態を生成するといった手順を経て、Cu 様イオンのエネルギー準位を共通のコアを持つ一電子励起状態のグループ毎に生成し、電離平衡の計算に十分な数のエネルギー準位のグループを生成する。

図1で太線で示している、 $3d^{10}$ 、 $3d^9 4l$ 、 $3p^5 4l$ 、 $3s 3p^6 4l$ 、 $3d^8 4s$ 、 $3d^8 4p$ 、 $3d^9 5l$ 、 $3d^9 6l$ 、 $3p^5 5l$ 状態は、典型的な30グループを考慮して行う計算において選択され、Cu 様イ

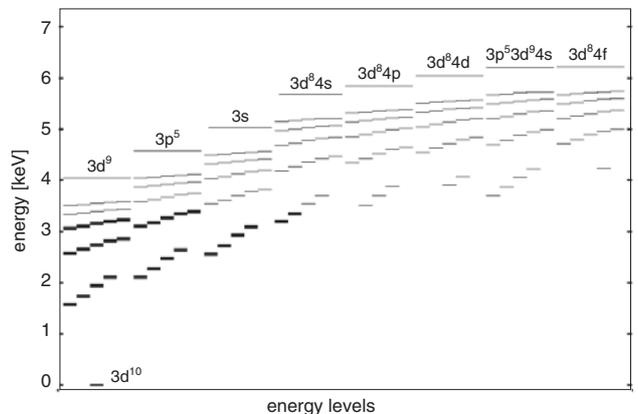


図1 Ni様Wイオンのエネルギーレベル図。一電子励起状態 $3d^9 nl$ と、主要な多重励起状態を含む。太線で示されているレベルは、基底状態から30番目までの、励起エネルギーが低い状態で、標準的な条件で、Cu 様イオンのレベルを生成する際のコアとして扱われる状態を示す。

オンのエネルギー準位のコアとして扱われる状態で、 $3d^9 4nl, 3p^5 4nl, \dots$ 以下の状態が生成されることを示す。状態はエネルギーの順に選択されるので、グループの数をより少なくする時、 $3p^5 4s$ 状態は $3d^9 4f$ 状態よりも先に選択され、同様に $3d^9 6l$ 状態は $3s 3p^6 5l$ 状態よりも先に選択される。あるコア状態から、可能なあらゆる軌道に電子を付与すると、例えば $3d^{10}$ 状態と $3p^5 3d^{10} 4s$ 状態の両方から、重複して $3d^{10} 4s$ 状態が生成される。このような場合、先に生成したものを該当するグループの状態として採用し、後から生成された重複する状態は破棄する。

新しい原子のモデルを構築するには、まず(1)H様イオンのエネルギー準位の計算を行い、次に、(2)与えられたグループ数のエネルギー準位、コア状態をエネルギーの低いものを選ぶ。そして、(3)考慮する最大の n, l を与えて、コア状態をイオン化限界として持つ、コア状態よりも価数が1低いイオンの励起状態を生成する。そして、(4)HULLACコードで、生成した準位のエネルギーや、放射遷移確率、自動化イオン化率を求める。(2)から(4)までの過程を、H様イオンから、考慮する最低価数のイオンまで繰り返すことによって、原子モデルを再帰的に生成する。このような手法によれば、高Z原子の多電子、多価電離イオンの実質的に無数にあるエネルギー準位の中から、重要なものを選択する問題が、軌道電子の主量子数 n 、方位量子数 l および、グループ数などの少数のパラメータを選ぶ問題に帰着される。また、エネルギーの計算の精度の範囲で、再現性を持って準位を選択、生成することができる。

このようにして衝突放射モデルに取り入れるエネルギー状態の組を決定したら、各エネルギー状態について、電子衝突および放射による電離、励起過程を考慮して、レート方程式を立てる。JATOMコードでは、レベルエネルギー、放射遷移確率および自動イオン化率の、電子配置平均についての値を HULLACコードで計算する。電子衝突電離のレートは、Lotzによる経験式[12]、

$$I_{z,n} = 3 \times 10^{-6} \frac{\exp(-u)}{T_e^{3/2} u} \exp(u) E_1(u), \quad (3)$$

によって計算する。ただし、 $u = E_{z,n}/T_e$ 、 $E_{z,n}$ はイオン化ポテンシャル、 T_e は電子温度[eV]、 $E_1(u)$ は第1種積分指数関数である。放射再結合のレートは、

$$R_{z,n} = 1.91 \times 10^{-15} \frac{g_{z+1,1}}{g_{z,n}} \frac{E_{z,n}^{5/2}}{T_e^{3/2} Z} \exp(u) E_1(u). \quad (4)$$

によって求める[13]。ただし、 Z はイオン価数、 g は始状態と終状態の統計重率である。

電子衝突励起のレートは、Meweによる経験式[14]

$$X_{ij} = 1.58 \times 10^{-6} f_{ij} \frac{\exp(-\chi_{ij})}{T_e^{1/2} E_{ij}} \bar{g}_{ij}, \quad (5)$$

で計算する。ここで、 f_{ij} は吸収振動子強度、 E_{ij} は励起エネルギー、 $\chi_{ij} = E_{ij}/T_e$ 、 \bar{g}_{ij} は、Gaunt 因子、

$$\bar{g}_{ij} = A + \left(\frac{B}{\chi_{ij}} + \frac{C}{\chi_{ij}^2} + D \right) \exp(\chi_{ij}) E_1(\chi_{ij}) + C\chi_{ij}. \quad (6)$$

ただし、 $\Delta n \neq 0$ 遷移では、 $A = 0.6$ 、 $\Delta n = 0$ では $A = 0.15$ であり、 $B = C = 0$ 、および $D = 0.28$ である。逆過程である三体再結合、電子衝突脱励起のレートは、詳細釣り合いの原理によって計算する。

提案手法で、十分な数のエネルギー状態を考慮したモデルが構築できるか否かは、専らグループ数の設定による。そこで、電離平衡における、平均価数および放射損失のグループ数に対する収束計算を行った結果を図2に示す。計算に用いた原子モデルでは、各エネルギー状態のグループにおいて、軌道電子の最大主量子数は8、方位量子数は4までを考慮した。

100 eV - 10 keV の電子温度の範囲で、価数は20から60まで変化するが、ひとつの温度条件では、イオン密度は、それが最も大きいイオンとの価数の差が増すに従って急激に減少する。そこで、温度条件毎に、平均価数に対応するイオンを中心に、同時に9種のイオン種を選んで占有密度を計算するようにした。

図2は、グループ数を増し、モデルに取り入れるエネルギー状態を増すに従って、平均価数、放射損失の値が収束する様子を示す。放射損失は、束縛・束縛、束縛・自由、自由・自由遷移の和であるが、計算を行っている条件では、束縛・束縛遷移が大半を占める。平均価数は、グループ数を増やすと、より多くの二電子性再結合チャンネルが考慮されるようになるために、減少する傾向を示す。それに対して、放射損失は、より多くのサテライト線が考慮されるようになるために、増加する傾向を示す。グループ数を増すことによって、どのような状態が取り入れられるかは、各イオンごとによって変わるが、およそ30個のグループを考慮すると結果が収束する。ただし、Ne様(64価)、Ni様(46価)、Pd様(28価)などの、閉殻構造をもつイオンが支配的になる条件では、10グループ程度で収束するのに対し、開殻イオンが支配的になる条件では、より多くのエネルギー状態の考慮を必要とする傾向がある。

同様の収束計算を、取り入れる状態の軌道電子の最大の n, l の値や、同時にモデルに含めて計算するイオン種の数を変えて行った。その結果、平均価数や放射損失の値は、イオン種の数に対して速やかに収束するが、閉殻構造のイオンが支配的になる一部の温度条件では、イオン密度の正

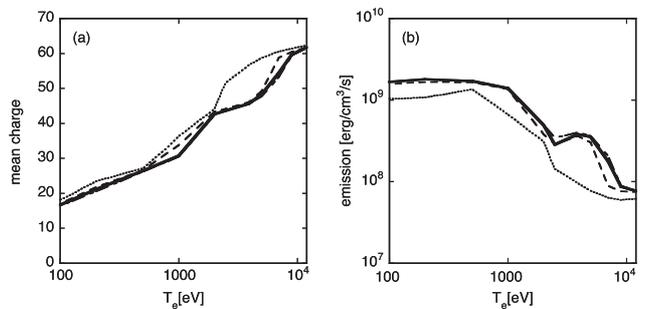


図2 Wプラズマの平均価数(a)と放射強度(erg/cm³/s)(b)の電子温度依存性。電子密度 $n_e = 10^{14}$ /cm³。細かい破線、破線、実線、一点鎖線は、それぞれ各イオン毎に10, 20, 30, 40個の励起状態のグループを考慮した場合を示す。グループ数を増すに従って、結果が収束することを示す。

確な評価のために、標準的な9種以上のイオン種を含む計算が必要なのことがわかった。

8.3 計算結果の検証

図3に、nLTE kinetics ワークショップの web サイトのトップページを示す[15]。最近では第7回のワークショップが、ウィーンで、2011年の12月に開催された。米国標準局 (NIST: National Institute of Standards and Technology) の Ralchenko 博士がオーガナイザーを務め、9カ国の参加者から16のコードの結果が持ち寄られ、比較が行われた。図4に第7回ワークショップで取り上げられたテスト問題を示す。Ne, Ar, Kr, W の指定された温度、密度状態の電離平衡の状態における、イオン密度、エネルギー準位の占有密度の計算を行った。Ar に関しては、光電離プラズマの時間発展の問題も取り上げられ、Kr, W に関しては、スペクトルの計算も課題として取り上げられた。図5に、W プラズマの平均価数と、1イオン、電子あたりの放射損失率 (cooling rate) を示す。図5では、JATOM コードで計算した結果と、nLTE ワークショップで発表された結果、および磁場核融合分野の最近の結果を比較して示す[16]。価数に関しては、nLTE ワークショップで発表された結果のばらつきは2程度であり、JATOM コードの結果はほぼ分布の中心に位置する。放射損失率の結果は、価数の結果はいくらかばらつきが大きい。ここでも JATOM コードの

結果はほぼ分布の中央に位置するが、 $T_e = 9000$ eV の結果は、分布の中心値を下回っている。

このように nLTE ワークショップに参加した衝突放射モデルの結果には、コンセンサスが得られつつある。しかし、磁場核融合プラズマを対象として、Pütterich らが計算した価数の値は、 $T_e = 4000$ eV 程度の Ni 様イオンが支配的になる条件では、nLTE ワークショップに参加したコードの結果とほぼ一致するものの、他の条件では全体的に低い。nLTE ワークショップの対象の条件よりも低温の、 $T_e = 2000$ eV の条件では、JATOM コードの結果との差は10近い。放射損失率においては、JATOM コードと Pütterich らの結果の違いは2倍程度の範囲で一致するが、価数の違いが、閉殻構造のイオンにおいて放射損失率が減少する性質に反映し、極大、極小値をもつ温度が異なっている。唯一の実験結果が、図5 (b) の白丸で示すように $T_e = 2500$ eV において得られているが、これだけではモデルの妥当性を判断することは困難であろう。

図6に、W イオン密度の温度依存性を、Pütterich らの結果[16]と比較して示す。計算されたイオンの分布の違いは、平均価数の違いを反映し、JATOM コードでは、より低い温度で20~40価のイオン密度が最も大きくなる。Püt-

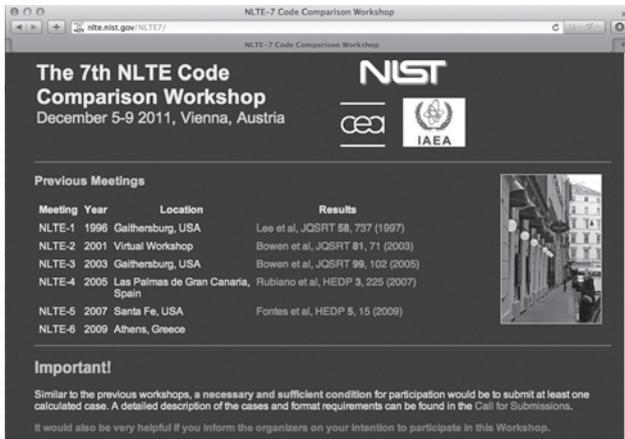


図3 nLTE7ワークショップのトップページ[15].

Element	T_e (eV)	N_e (cm ⁻³)	Spectral ranges	Justification	Additional Info	Case coordinator (to be confirmed)
Ne	10, 30	$10^{14}, 10^{18}, 10^{20}$	E=1-250 eV, dE=0.05 eV	Convergence with n	6 cases: $n_{max}=9, 8, 3, 4, 8, 12, \infty$	C. Bowen
Ar	10, 20, 40, 60, 80, 100	$10^{15}, 10^{20}$		EADR analysis	F. through Mg-like ions only	H.-K. Chung
Ar	50	$10^{14}, 10^{18}, 10^{20}$	$\lambda=4-17.4, 20 \text{ \AA}$, $d\lambda=0.001 \text{ \AA}$, $\lambda=40-50 \text{ \AA}$, $d\lambda=0.01 \text{ \AA}$, $\lambda=400-800 \text{ \AA}$, $d\lambda=0.1 \text{ \AA}$	System relaxation after XFEL photoexcitation	Time-dependent problem; at $t=0$ all population in $1s2s^2 2p^3$ of Ne-like ion $(t)=0, (t)=10^{-16}$ s, $(t)=(-1)^{5t}$ for $t \geq 200$; $\delta n = 1.15$ for 10^{14} , $\delta n = 1.10$ for 10^{18} , $\delta n = 1.08$ for 10^{20}	Yu. Ralchenko
Kr	best fit	best fit	$\lambda=5.5-8.0 \text{ \AA}$, $d\lambda=0.001 \text{ \AA}$	Analysis of experimental spectra and discussion of CR modeling strategies	See the paper, Figs. 4(b), 7, 8	S.B. Hansen
W	2500, 3900, 5000, 9000, 12000	10^{14}	3900 eV: $\lambda=4-8 \text{ \AA}$, $d\lambda=0.001 \text{ \AA}$, 9000 eV: $\lambda=25-33 \text{ \AA}$, $d\lambda=0.004 \text{ \AA}$	MCF problem + EADR analysis		C.J. Fontes

図4 nLTE7ワークショップで比較、検証を行った、テスト問題のリスト。

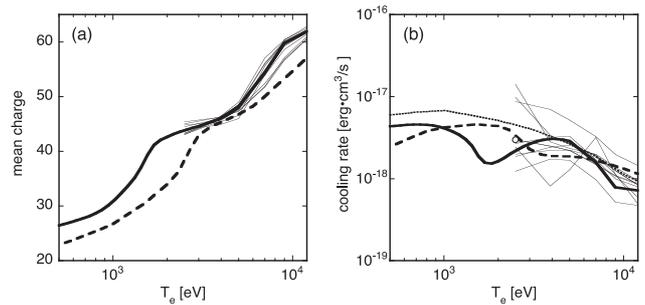


図5 W プラズマの (a)平均価数と (b)放射損失率 (cooling rate $\text{erg} \cdot \text{cm}^3/\text{s}$) で表した放射損失の電子温度依存性。太い実線は JATOM コードの値を、細い実線は、nLTE7ワークショップで発表された各コードの計算結果を示す。太い破線は Pütterich による計算結果[16]を示す。(b)では、同論文にある平均イオンモデルの計算結果を細い点線で、実験値を白丸で示す。

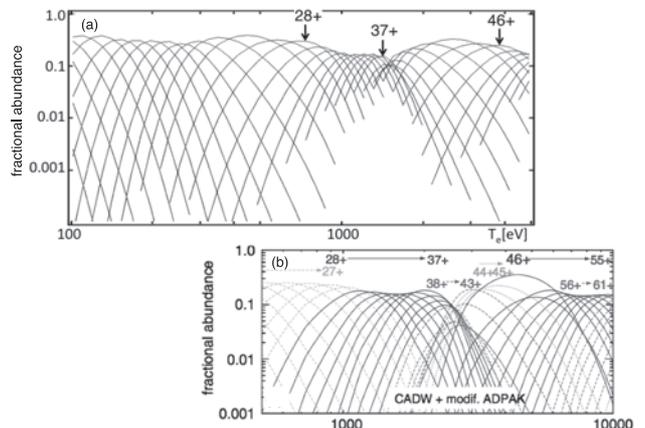


図6 W プラズマの各イオンの相対密度の温度依存性。(a)今回の計算結果と、(b)Pütterich[16]による計算結果との比較。

terichらの結果に見られる、Ni様イオンのアバダンスが広い温度範囲において大きく、Kr様付近のイオンのアバダンスが小さい傾向は、JATOMコードの結果ではあまり目立たない。

なお、この計算からは、イオンの衝突輻射電離、再結合レート \bar{I} 、 \bar{R} を、各イオンに属するレベル i について、ポピュレーション p_i で重みづけして平均化し、電離、再結合の終状態 j 、 k に対して和をとり、

$$\bar{I} = \sum_i p_i \sum_j I_{ij} \quad (7)$$

$$\bar{R} = \sum_i p_i \sum_k R_{i,k} \quad (8)$$

のように計算することができる。図7に、Ni様付近のイオンの衝突輻射電離、再結合レートの計算結果を示す。

8.4 議論

核融合プラズマの研究においては、磁場閉じ込め方式では高Zダイバータの効果の評価のために、慣性閉じ込め方式では間接駆動爆縮方式の評価のために、以前から高Z多価イオンの衝突輻射モデルが用いられてきた。長い間、対象イオンの構造を疑似水素様イオンで近似する平均イオンモデルが用いられてきたが[17]、HULLAC、FAC等の計算コードの進歩と、計算機能力の向上により、1990年代の後半より現実的なイオンの構造に基づいたモデリングができるようになった。しかし、原子モデルの複雑性と、実験的な検証の困難さにより、シミュレーションの精度は制限されていた。コードの相互比較ワークショップの活動は、衝突輻射モデルの計算の問題を専ら理論的に明らかにし、十分多くのエネルギー状態を考慮することで、平均価数や輻射損失において互いに一致する結果が得られるようになった。

本章では、そのような大規模な衝突輻射モデルを構築する手法について述べた。従来は、多電子高Zイオンの多数のエネルギー準位のうちのどれをモデルに取り入れるかについては研究者の判断に委ねられていたが、共通のコアを持つ一電子励起状態の集まりをイオンのエネルギー準位のグループとして定義し、エネルギーの低いものから順に取り入れて収束計算を行うことにより、比較的少数のレベルを用い、かつ再現性を持ってモデルを構築できるようにし

た。そして、nLTEワークショップで他のコードと比較することにより、適切な計算が行えることを確かめた。

衝突輻射モデルを構築するには、事実上は無数個存在するイオンのエネルギー準位を、軌道電子の n 、 l などで打ち切って選択し、エネルギー準位の部分集合を作ることになる。すなわちイオン密度を正しく計算するには、熱平衡状態では隣接する価数のイオンのエネルギー準位の部分集合の分配関数の比が、真のエネルギー状態の集合のその良い近似値になっていればよく、低密度では、隣接する価数のイオンの電離、再結合の比が同様によい近似値になっていればよく、アルゴリズムによる準位の選択はそのために有効な方法になっていると考えられる。

衝突輻射モデルを用いたプラズマの解析は、今後さらに高度なものになると考えられる。その応用の可能性の一つに、詳細な分光解析が考えられる。複雑な高Z多価イオンの発光スペクトルを解析するには、エネルギー準位の微細構造の考慮が必要であり、またレベルエネルギーや遷移確率を高精度で求めるためには、これらの計算において配置間相互作用(Configuration Interaction)を考慮する必要がある。このような計算を行うためには、モデルに取り入れるレベルの数が大幅に増え、原子データ、衝突輻射モデルの計算ともに難しくなる[18]。

レーザー生成プラズマを含む、多くの高密度プラズマの解析では、原子過程と輻射輸送を互いにしつつまが合うように計算する必要がある。現在標準と考えられている計算手法[19]では、輻射を、波長またはエネルギーと、角度方向成分に分解して計算するとされている。また実験の解析のためには、多次元効果を考慮する必要があり、複雑な原子過程と結合した計算を行うことは、現在の計算機の能力をもってしても容易ではない。今後も、原子過程と輻射輸送の粗視化を含む、新しい計算手法の研究開発は重要な課題であり続けると考えられる。

謝辞

本章をまとめるにあたり、核融合科学研究所の村上泉教授、大阪大学レーザーエネルギー学研究中心の西原功修名誉教授との議論に感謝します。本章の内容の研究開発は、科学研究費補助金基盤研究(B)23340185「EUV光源、X線レーザー媒質プラズマ中の原子・輻射過程に起因する相転移現象の解明」および、基盤研究(A)23246165「プラズマ中のタンゲステイオン不純物挙動研究への原子過程からのアプローチ」の支援を受けて行われた。

参考文献

- [1] T. Fujimoto, *Plasma spectroscopy* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
- [2] A. Bar-Shalom *et al.*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 169 (2001).
- [3] M.F. Gu, *Astrophys. J.* **590**, 1131 (2003).
- [4] M. Poirier *et al.*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 482 (2006).
- [5] N.H. Magee *et al.*, *AIP Conf. Proc.* **730**, 168 (2004).
- [6] Yu. Ralchenko *et al.*, *AIP Conf. Proc.*, **1161**, 242 (2009).

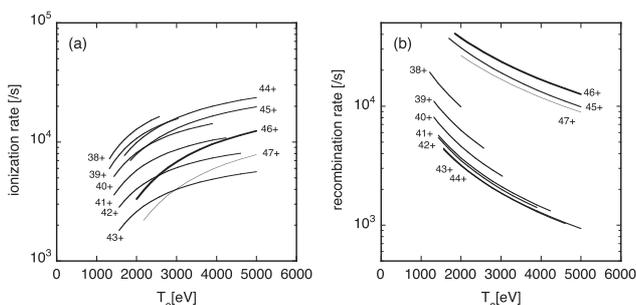


図7 Ni様付近のWイオン(W³⁸⁺ - W⁴⁷⁺)の(a)衝突輻射電離、(b)再結合レート。図中の数字が各イオンの価数に対応する。

- [7] H.A. Scott and S. B. Hansen, *High Energy Density Phys.* **6**, 39 (2010).
- [8] H.-K. Chung *et al.*, *High Energy Density Phys.* **1**, 3 (2005).
- [9] A. Sasaki *et al.*, *J. Appl. Phys.* **107**, 113303 (2010).
- [10] A. Sasaki, *High Energy Density Phys.* **9**, 325 (2013).
- [11] 佐々木 明 他： *プラズマ・核融合学会誌* **84**, 546 (2008)
- [12] W. Lotz, *Z. Phys.* **216**, 241 (1968).
- [13] H. Kramers, *Philos. Mag.* **46**, 836 (1923).
- [14] R. Mewe, *Astron. Astrophys.* **20**, 215 (1972).
- [15] <http://nlte.nist.gov/NLTE7/>.
- [16] T. Pütterich *et al.*, *Nucl. Fusion* **50**, 025012 (2010).
- [17] D.E. Post *et al.*, *At. Data Nucl. Data Tables* **20** 397 (1977).
- [18] J. Abdallah Jr. *et al.*, *J. Phys. B* **44**, 075701 (2011).
- [19] Ya. B. Zel'dovich and Yu. P. Raizer, *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena* (Academic Press, 1966).