

## 小特集 IAEA における原子分子データ Coordinated Research Projects (CRP)

### 3. 原子分子データの評価とコード比較

#### 3. Data Evaluation and Code Comparison Activities

市川行和<sup>1)</sup>, 高木秀一<sup>2)</sup>, 中村義春<sup>3)</sup>, 今井 誠<sup>4)</sup>, 佐々木明<sup>5)</sup>

ITIKAWA Yukikazu<sup>1)</sup>, TAKAGI Hidekazu<sup>2)</sup>, NAKAMURA Yoshiharu<sup>3)</sup>, IMAI Makoto<sup>4)</sup> and SASAKI Akira<sup>5)</sup>

<sup>1)</sup>宇宙科学研究所, <sup>2)</sup>北里大学, <sup>3)</sup>慶應義塾大学, <sup>4)</sup>京都大学, <sup>5)</sup>日本原子力研究開発機構

(原稿受付: 2013年8月21日)

原子分子データベース上で、同一の過程に対する複数の論文データセットを比較すると、それぞれの論文で報告された誤差以上の差異を生じることがある。論文中に誤差が報告されていない場合もある上、第1章で紹介したオンラインコードの登場は、他分野の研究者向けに提供される原子分子データセットの精度保証という問題をあらためて浮き彫りとした。ここではIAEA原子分子データユニットが自らあるいは他機関と協調して進めている原子分子データ評価に関する国際協力につき、同活動に参加している日本人研究者の取り組みを通じて概説する。内容は、IAEAによるデータ評価活動以前より行われていたデータ評価の取り組み(3.1節, 3.3節)、Coordinated Research Project 活動参加者による同活動関連データの評価に基づく取り組み(3.2節, 3.4節)の他、原子コードによるデータセットを用いた衝突輻射モデルコードの計算結果を比較して原子コード、衝突輻射モデル双方の精度を高めることをめざす非局所熱平衡(NLTE)コード比較ワークショップ参加の取り組み(3.5節)である。またデータセンターネットワークに参加している核融合科学研究所における取り組みについても、次章(4.2節)で取り上げる。

#### Keywords:

atomic and molecular data, data evaluation, dissociative recombination, multi-channel quantum defect theory, storage ring experiment, electron swarm parameter, electron collision cross section, electron capture, scaling formula, plasma atomic and molecular processes, collisional-radiative model, simulation, benchmark

### 3.1 原子分子データの評価

#### 3.1.1 序文

原子分子データを集めデータベースをつくる活動は古くから行われてきた。現在では、インターネットを通じてアクセスできるデータベースもあり、ものによっては手軽にデータが手に入る。ただ、利用者は入手したデータをそのまま使えばよいかという必ずしもそうではない。そのデータの信頼度を吟味してから使うことが望ましい。実験的にしろ、理論的にしろ、得られた原子分子データには不確かさがつきものである。そのことを考慮してデータを使うべきである。すなわち、データの評価が重要になる。基本的にはデータの利用者が自分の目的に照らしてデータ評価を行う。しかし、データベースの作成者がそれをつくるにあたって責任をもってデータの評価を行い、その結果を明示してあれば、利用者は安心してデータを使うことができる。本章の主題は、そのようなデータ活動の一環としてのデータ評価である。

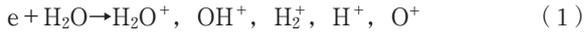
データベースをつくる際に、集めたデータをただ並べるだけではなく、何らかの評価をし精度の高いものを集めて「推奨値」を提案することがある。ただその際、評価の仕方の詳細が明らかにされることは少ない。そもそも評価というものは多分に主観的な行為であり、その詳細を述べるのは困難なことが多い。言い換えれば、評価はそれをする人によって結果が異なる恐れがある。しかし、データを使う

人にとってはそれでは困る。そこでできるだけ客観的に評価をするためにその手法を標準化しようと努力することが最近の傾向である。そのあたりのことを踏まえて以下の文章を読んでほしい。

#### 3.1.2 実験値の評価

データが実験値の場合、ほとんどはその実験を行った人により誤差(正しくは「不確かさ」というべきであるが、習慣によってこの言葉を使う)が評価されている。ただし、それは多くの場合、統計誤差であり、実験手法や装置に固有の系統誤差は含まれていない。系統誤差を見積もる一つの方法は、異なる装置を用いて得られた結果を比べることである。それらが一致すれば信用のおけるデータだとみなす。ただ両者の数値がぴったり一致することはなくそれぞれの誤差の範囲で一致するのがふつうである。その際どうするか?(1)何らかの基準(たとえば、新しさ)を設けてどちらかを選択する、あるいは(2)両者の平均をとる、などが行われる。どちらにしても誤差の範囲内での違いしかないが、数値は異なる。このあたりの処理は評価者によってわかるところである

また互いに密接な関係があるが測定原理の異なる物理量を測って、その関係が成り立つかどうかを調べることも評価に使える。例を示そう。電子衝突による分子のイオン化を考える。電子のエネルギーがある程度高いと解離が起り、解離生成物のイオンもできる。たとえば



のようになる。それぞれのイオンの生成断面積（部分断面積と呼ばれる）はイオンを区別して検出すれば得ることができる。（図1）一方、全イオン化断面積は部分断面積の総和で定義されるが、それはイオン電流を測ることで決めることができ、部分断面積の測定とは全く独立に行える。そこで、部分断面積の総和と直接測った全断面積とを比べ、両者が一致すればそれぞれ信頼のおける結果であるとみなすことができる。比較の例が図2である。この場合には誤差の範囲内で両者が一致する。このようにデータを測定した論文の内容を十分に吟味するだけでなく、関連する論文を広く集めて互いの整合性を吟味するのもデータ評価の重要な手法である。

3.1.3 理論値の評価

世の中には実験が非常に困難な場合がある。そのときは理論に頼るしかない。そもそも理論値は「データ」ではない、という人がいる。これは一理ある。すなわち、どのような理論でも必ず何かのモデル（仮定）のもとで、式をたてそれを解く。すなわち厳密な意味での真実を表していない。もし実験がなかったら、仮にかなり正確な（と思われる）計算があって、数値が求められていても、その精度を確かめるすべがない。すなわち、理論値の評価は原理的に困難である。しかしそれではデータを使いたい人にとって不便なので、何とかしようということになっている。後述するIAEAのプロジェクトの最大の課題は理論値の評価法を確立することである。

3.1.4 評価済みデータ（あるいは推奨値）の評価

上述のように、今のところデータの評価手法として定まったものはない。ということは、評価する人によって結果が異なることがあるということである。それではデータ

の利用者が困ってしまう。そこで評価済みデータ、あるいは推奨値の信頼度を評価することがあらためて必要になる。一つの方法として、それらのデータを使って何かを計算し、実験と比べてみる。たとえば、プラズマ中の電子衝突の場合、さまざまな電子衝突過程を考慮して電子の速度分布関数を計算し輸送係数（移動度など）を求める。これを実験から求めたものと較べることにより計算に使われた断面積の良否を判断する（3.3節参照）。そのほかいろいろ考えられるが、この件については最近筆者の考えをまとめたものがあるのでそれを参照してほしい[4]。

3.1.5 IAEAの取り組み

本小特集の他の記事にあるように、IAEAでは様々な会合を組織して、原子分子データの収集や生産の促進を図ってきた。それらの会合でしばしば話題になるのがデータの評価である。IAEAは、利用者が安心して使える「評価済みデータ」を集めた「標準データライブラリー」の確立を目標にしている。そのためにはデータ評価の手法を確立したい。そこでデータ評価を主題とした技術委員会が昨年9月に韓国のNFRIで開催された[5]。そこでは「標準データライブラリー」設立へ向けてのロードマップが示され、具体的な作業の分担が決められた。今後どのように発展するか興味深い。一番の問題は人であろう。私見では3種類の人が必要である。実際に評価を実行する人、評価は複数の人間するのでそれを取りまとめる人、さらにできれば完成した「評価済みデータライブラリー」を検証してお墨付きを与える人が必要だろう。これらはすべて研究者がボランティアとして行うのだが、どこまで熱心に仕事をしてくれるかは未知数である。何らかのincentiveが必要であろう。特に重要なのはとりまとめる人である。皆を働かせ、しかもその成果の質をそろえる必要がある。このような分

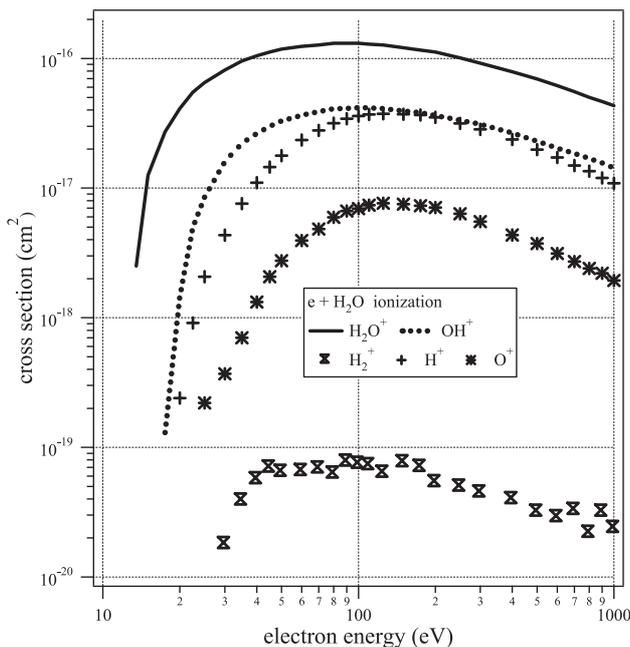


図1 電子衝突による水分子のイオン化の部分断面積。文献[1]のデータを作図。

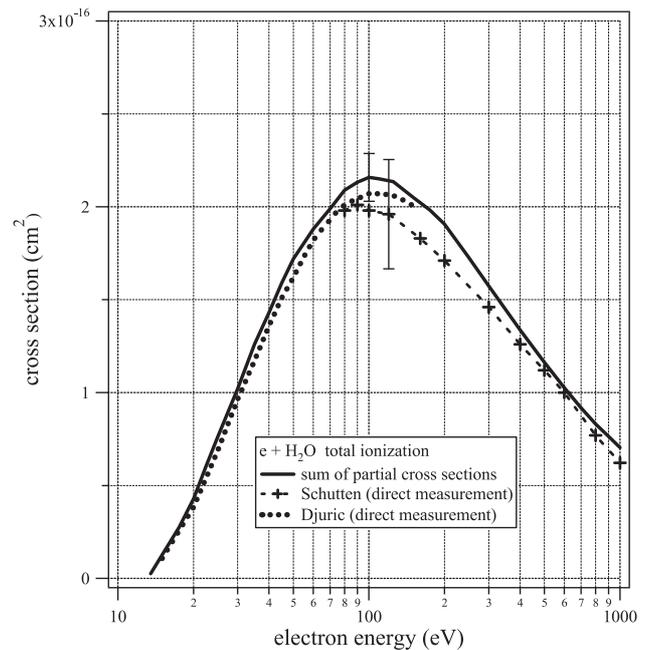


図2 電子衝突による水分子のイオン化の全断面積。図1の部分断面積の総和（実線）と直接測定の結果[2, 3]との比較。代表的な誤差の値を示してある。

野（原子分子データの評価）でリーダーシップを発揮できる人がいるのかどうか、今後注目したい。

（市川行和）

## 3.2 $H_2^+$ , $HeH^+$ およびそれらの同位体と電子の衝突に係る反応断面積の評価

### 3.2.1 理論計算の必要性

分子イオンと電子の衝突に伴う諸過程の断面積は、分子イオンの電子、振動、回転状態に依存する。全ての状態を指定した断面積がわかれば、プラズマのより信頼性の高いシミュレーションができると考えられる。しかし、そのような状態選別断面積は  $H_2^+$  の基底状態の解離性再結合（DRと略す）一例しか、実験的に測定されていない。その他の膨大な断面積は、現在のところ数値計算に頼るほかない。分子イオンと電子の諸過程と数値計算法の概要は、本小特集の2.1節で紹介がある。ここでは、計算結果とその信頼性の評価を報告する[6]。

### 3.2.2 実験との比較

理論計算の信頼性の評価は、実験と比較することが第一に考えられる。両者の一致の程度が、理論計算の正確さの目安である。もちろん、実験にも誤差はあり、しかも厳密な状態選別断面積は1例しかない[7]。その1例の、振動回転電子状態全てが基底状態の  $H_2^+$  の DR 断面積の比較が2.1節の図2(b)に示されている。衝突エネルギー  $E$  に対して、低エネルギーでは断面積は共鳴構造を除き  $E^{-1}$  に比例する。そこで、(断面積)  $\times E$  を示すことにより、幅広いエネルギーについて詳細に比較できる。計算値は実験の衝突エネルギーの熱揺らぎで平均してある。この図のエネルギー分解能は低エネルギーで meV 程度であることを留意して欲しい。衝突エネルギー3桁にわたり、差の大きなところで2倍程度の開きがある。0.15 eV以上で一致がよいようにみえるのは、図の上でエネルギー分解能が低いことが一因としてある。エネルギー分解能を0.1 eV程度に落としてみれば、実験値との差は20~30%と言える。実験との比較一つとっても、シミュレーションで問題となるエネルギー分解能しだいで、データの信頼性は異なる。モデラーとの情報交換がデータの評価に影響し、計算自体の絶対的な評価は実用的でない。

分子イオンの回転状態を特定しない測定はいくつかある。図3に振動基底状態にある  $HD^+$  の DR の計算と実験の比較を示す。縦軸はイオン蓄積リングで計測される DR 速度係数を採用している。速度係数とは断面積に衝突速度を掛けた量であり、熱平均はしていない。速度係数は共鳴構造を取り去れば、 $E^{-1/2}$  に比例するので、両対数グラフで示す。実験の  $HD^+$  振動状態は基底状態であることは確実であるが、回転状態には励起状態が混ざっている。計算は回転状態については、室温(300 K)の熱分布を仮定し平均してある。正確な比較が難しい両対数グラフを用いるのは、理論計算の精度を上げた時の変化を示すためである。精度を上げるに従い実験値に近づけば信頼性は高い。ここで問題とするのは始状態と解離状態との間の配置間相互作用(CI)の取り扱い方の精度である。2.1節の(1)式右辺を第

一項だけ残す近似は一次摂動近似であり(a太い破線)、理論計算ではよく用いられる。同じ一次摂動近似でも、高次CIを含む断熱電子状態を使うと、解離ポテンシャルエネルギー曲線のCIによるシフトとして計算に含めることができる(b細い破線)。さらに、数値的に2.1節の(1)式を解く場合も、CIの off-the-energy-shell 強度を忠実に再現した場合と(c太い実線)、on-the-energy-shell の強度は同じでも解析関数で外挿した信頼性の低い場合(d細い実線)を比較してある。比較では信頼性の順番に(a)-(b)-(d)-(c)と実験値(図中の点)に近づいている。ただし対数グラフであるので、(c)と実験値の差は2倍程度ある。この程度の低エネルギーの衝突ではCIの高次効果が速度係数の桁を変えるほどの影響があるが、1 eVに近づくに従い、何らかの形でCIを考慮していればその取り扱い方による影響はほとんどないことが確認できる。このことは、1 eV以上での計算で重要である。

### 3.2.3 計算の収束性と評価

前項でCIを摂動展開した時の高次の取り扱いの収束性の一端を示した。数値計算で重要になるのは、状態を表すための展開基底関数を増やしていった時の収束性である。いま問題とする状態は、分子イオンの回転状態、解離を含む振動状態、それに電子状態である。電子状態は、入射電子の部分波(角運動量)展開と、イオン分子の電子励起状態に分けられる。無限個あるこれらの状態を表すため、基底関数を増やして最終結果が収束しているか確かめる必要がある。

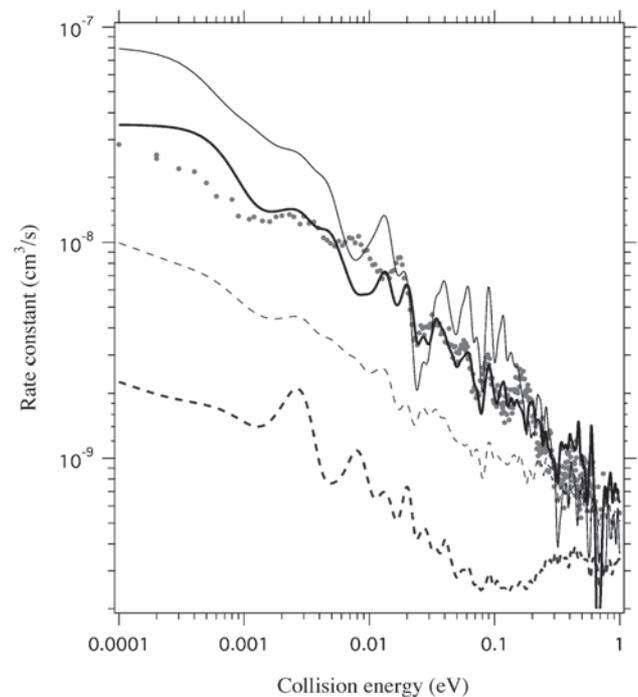


図3 振動基底状態の  $HD^+$  の DR 速度係数。計算値は回転状態について温度300Kの熱分布で平均してある。太い波線：CI一次摂動、細い波線：CIを含む断熱電子状態を用いた一次摂動、太い実線：CI強度 off-the-energy-shell 全域をスプライン関数で表した数値解、細い実線：on-the-energy-shell 近傍を解析関数で近似した数値解、点：実験値[8]。計算値は実験と同じ衝突エネルギー熱揺らぎで平均化してある。

回転状態と解離、振動状態の基底関数を増やすことは、2原子分子では容易で、いま扱っている諸過程について収束した結果が得られる。このことは、状態選別断面積の振動回転状態については、一つの状態について精度が確認できれば、断熱的電子状態が共通な他の振動回転状態についても同じ精度が保証されることを意味する。同じことが同位体の諸過程についても言え、共通の断熱的電子状態をもち、構成原子の質量が違うだけの同位体分子イオンでは、一つの分子イオンについて精度が確定できれば、同じ精度が他の同位体に対しても保証される。この点は、数値計算の利点といえる。2.1節の図3に振動基底状態にある水素分子イオンのDRと解離性励起(DE)の同位体効果を示した。エネルギーが高いので、回転状態は無視している。図中の実験値は $\text{HD}^+$ のものが示してあり、他の同位体の計算値も、もし実験値があれば、同程度の一致が得られると考えられる。

回転、解離、振動状態に関する問題として、非断熱相互作用(NAI)を計算可能にしている多チャンネル量子欠損理論(MQDT)の有効性、特に解離過程を含むよう拡張した部分について評価に問題を残している。2.1節で導入した「閉じた解離チャンネル」を使うと、 $\text{HD}^+$ のDR、DEともに実験との一致が大きく改善され、差が20%程度になる[9]。閉じた解離チャンネルの考えはMQDTの考え方と一致するが、クーロン力以外の力に拡張して意味があるか、いまだ評価は定まっていない。

電子状態の基底関数の数は、数値計算の精度を大きく左右するし、計算の限界を決定する。水素分子イオンの励起状態は第3励起状態まではエネルギー差もあり、擬交差も起きず単純なポテンシャルエネルギー曲線をもつ。しかしそれ以上の状態は、狭いエネルギー領域に複雑なポテンシャルエネルギー曲線の状態が無数あり、現状では無視されている。電子衝突を考えると、第3励起状態をイオンコアとする最も低いRydberg状態が、電子衝突エネルギーにして11 eVあたりにある。つまり、第3励起状態以上を無視している現在の計算では、衝突エネルギー11 eV位までしか正しくない。低エネルギーのデータを11 eV以上に外挿することはできない。

計算ではDRにおける解離原子の各電子励起状態への部分断面積を与えている。このデータは再結合が起きる領域における分子の電子励起状態の主量子数がそのまま原子の励起状態の主量子数になるという仮定に基づいており、核間距離の大きな所(10ボーア半径程度以上)での相互作用は無視している。近似の定量的評価は不能であるが、モデラーが必要とするデータであり、実験的検証が期待される。

入射電子の部分波を増していった時の収束性は完全に把握できていない。水素分子イオンの1 eV以下のDRは、ほとんどの寄与は $d\sigma$ 波によることはわかっており、高エネルギーにおいても主要な部分波が対称性から決まっている。しかし、電子衝撃による振動回転励起には共鳴散乱以外の部分波も評価しなくてはならない。収束性の検証はいまだなされていない。NAIのみでDRが起きる $\text{HeH}^+$ が

部分波の収束およびMQDTの検証に最も適しているが、現状では回転状態を特定した実験がないこともあり、実験との差は水素分子イオン以上にある[10, 11]。最近、部分波展開の中心の取り方が収束性に大きく影響することが指摘されている。

### 3.2.4 まとめ

数値計算による水素分子イオンおよび水素化ヘリウムイオンと電子との衝突に係る状態選別断面積の信頼性の評価について紹介した。振動回転基底状態の水素分子イオンのDR、DEでは、衝突エネルギーが11 eV以下に限られるが、数十%の実験との差が議論の対象となる状況である。他の振動回転状態についても、また、別の同位体分子イオンについても、同程度の信頼性が予想される。低エネルギー水素化ヘリウムイオンのDRでは、信頼性は水素分子イオンほどはない。データの信頼性はエネルギー分解能に依存しており、また評価が定まっていないデータでもシミュレーション上重要なものもあり、モデラーからのフィードバックによる利用目的をふまえたデータ整備が必要である。(高木秀一)

## 3.3 電子スオームパラメータと電子衝突断面積

電子と原子・分子の間の衝突とそれに続くさまざまな反応過程からプラズマ現象を理解するためにはそのプラズマの詳細なモデルを構築しなければならない。そしてこのモデルに基づくシミュレーションの結果に定量性をもたせるためには、プラズマを構成する原子・分子の電子衝突断面積データは必要な電子エネルギー範囲におけるすべての弾性・非弾性衝突過程を完備し、かつ、そのおのおのが十分な信頼性を備えていなければならない。本節ではこの要件を備えた断面積データを供給できる手法(電子スオーム法)について述べる。

ほとんどの電子衝突断面積データは単色エネルギーの電子ビームを用いる電子散乱実験から得られる(電子ビーム実験)。しかしながら、報告例はいずれも限られた衝突過程についての限られたエネルギー範囲での測定の結果であり、したがって、どの原子分子についても、シミュレーションに必要な完備した一組の断面積データ(断面積セット)を用意するためには様々な文献に報告されている様々な精度をもつデータを収集・評価する作業が不可欠になる。なかには完全に欠落した断面積データもあり、また、従来型の電子ビーム実験では0.5 eV以下のエネルギー範囲の単色電子ビームの発生には困難が伴うためにこのエネルギー範囲のデータは少ない。電子ビーム実験による断面積データの精度は典型的にはおよそ20%といわれるが、一方、全衝突電離断面積と全衝突断面積は例外的に精度が高く、およそ6-8%である。

一方、気体中における電子のドリフト速度や拡散係数のような電子スオームパラメータの測定精度は一般に高く、特に、ドリフト速度のそれは1-2%、あるいはそれ以下である。したがって、様々なデータソースから用意した断面積セットはそれを使ったスオーム解析(たとえばボルツマン方程式解析)の結果を実測スオームパラメータと比較

することにより評価することができる。その差が小さくなるように断面積データに試行錯誤的に修正を加えながら比較を繰り返すことで実測スオームパラメータと矛盾のない断面積データを決定することも可能になる（電子スオーム法）。

上記の電子ビーム実験と電子スオーム法の得失は互いに相補的であることはよく知られていて、この2つの研究分野の緊密な協力が必要とされている[12]。電子スオーム法の最大の弱点はそれがいわゆる逆問題に分類されていて結果として求めた断面積の唯一性が原理上保証できない点にある。この短所は気体中の電子スオームパラメータを支配する2つ以上の衝突過程が共存するときより深刻になる。一般的な分子気体中の広い $E/N$  ( $E$ と $N$ はそれぞれ電界と気体粒子密度で換算電界とも呼ばれ、慣例的に $10^{-17} \text{ V} \cdot \text{cm}^2 = 1 \text{ Td}$ を用いる)での支配的な衝突過程は弾性運動量移行断面積と振動励起断面積であることが知られている。そして、これらの断面積データの複数の異なる組み合わせで等しいドリフト速度を得る可能性は容易に想像できる。

これまで分子気体中のスオーム測定はほとんど純粋気体中に限られてきた。他方、アルゴンなどのRamsauer極小をもつ希ガスに微量の不純物分子が混入すると電子ドリフト速度が大きく変化する事実は古くから観測されており、それが混入した微量の分子の振動励起過程に因ることも知られていた[13]。さらに、この大きな変化はアルゴン原子の運動量移行断面積のRamsauer極小により増幅される[14]。このことは簡単には以下のように理解できる。すなわち、混合気体中で振動励起によりエネルギーを失った電子は大多数を占めるアルゴン原子のRamsauer極小に相当するエネルギー範囲に移り、したがって、長い自由行程と高い移動性をもつにいたる。混合気体中の分子密度は低く、したがって、そこでの分子への弾性運動量移行がスオームパラメータに及ぼす影響もアルゴン原子へのそれに比べてはるかに小さい。

筆者らが最も初期に経験した混合気体中の特徴的なドリフト速度は $\text{SiH}_4\text{-Ar}$ 混合気体の例である[15]。純粋アルゴン中のドリフト速度の $E/N$ 依存特性は比較的単調であるが、微量（およそ0.5%および5%）の $\text{SiH}_4$ 分子をそこに混合するとドリフト速度の $E/N$ 依存には2つの極大が出現し、また、純アルゴン中に比して最大1.5桁程度のドリフト速度の増強が観測される。この混合気体中のドリフト速度にみられる特異な $E/N$ 依存は $\text{SiH}_4$ 分子の振動励起断面積のエネルギー依存性の影響を強く受けており、振動励起断面積の閾値と2.5 eV付近に共鳴ピークを与えることでその $E/N$ 依存特性はボルツマン方程式解析で完全に再現することができた[16]。また、2.5 eV付近の共鳴ピークは電子ビーム実験によっても直後に確認された[17]。 $\text{SiH}_4\text{-Ar}$ 混合気体中のスオーム特性から得た $\text{SiH}_4$ 分子の振動励起断面積の特徴を維持しながら、次に、純粋 $\text{SiH}_4$ 中のスオーム特性の実測値に矛盾しないように振動励起以外の断面積を決めることで $\text{SiH}_4$ 分子の断面積セットを決定することができた[18]。特筆に値するのは、当時、純粋 $\text{SiH}_4$ 中で測定されたスオーム特性のみから求められた断面積セットは報

告されており、それはもちろん純粋気体中の正しいスオーム特性を与えるが、しかしながら、 $\text{SiH}_4\text{-Ar}$ 混合気体中で測定されたスオームパラメータを正しく予測するものではなかったことである。つまり、純粋 $\text{SiH}_4$ 中のスオーム特性には分子の運動量移行断面積と振動励起断面積が共に支配的であるために、そのスオーム特性から両断面積を区別して一意的に決めることができなかつたといえる。その一方で、 $\text{SiH}_4\text{-Ar}$ 混合気体中のスオーム特性に対しては、混合比の極端に小さい $\text{SiH}_4$ の運動量移行断面積の寄与は小さいが、振動励起に伴う大きな非弾性エネルギー損失のために振動励起断面積の寄与は大きく、そしてアルゴンのRamsauer極小によりその影響が増幅されることから、実質的にこの混合気体中のスオーム特性には振動励起断面積のみが大きく寄与することになる。そしてこのことは、分子の電子衝突断面積セットの評価または導出にあたっては、純粋分子気体中のスオーム特性のみならず、同時に、それとアルゴンとの混合気体中の特性も合わせて用いることがきわめて有効であることを示している。

上述したことから、分子の電子衝突断面積を求める電子スオーム法のために有効な一連の手順を確立することができた。断面積推定の手順を実行する前に、Ramsauer極小有り断面積が既知の希ガス（アルゴン）に試料分子気体を数パーセント程度混合した気体中および純粋試料分子気体中での電子スオームパラメータの測定値を用意する。また、さまざまな資料を参照して当該試料分子の初期断面積セットを作成する。

手順は、最初に初期断面積の振動励起断面積に試行錯誤的に修正を加えることで混合気体中のスオーム特性の解析結果を実測値に近づくようにする（ステップ1）。次に、ステップ1で振動励起断面積に修正を加えた断面積セットの運動量移行断面積に試行錯誤的に修正を加えることで純粋気体中のスオーム特性の解析結果が実測値に近づくようにする（ステップ2）。この2つのステップを低エネルギーの断面積データから順次高エネルギー側へ向けて交互に繰り返し、それをエネルギー全域にわたって断面積セットが十分に収束し、かつ、すべてのスオームパラメータの計算結果が全 $E/N$ 域で実測値に十分近づくまで続ける。容易に想像できるように、この手順による断面積の決定には時間と労力、そして経験が必要になる。逆問題の解法に広く用いられる最適化の手法を応用した経験に依らない断面積決定の試みはまだ満足できる段階には達していない。しかしながら、時間と労力を大幅に省くことを可能にする特別の計算機プログラムは有効である。

上記の手順でこれまでいくつかの分子の断面積セットを決定してきたが、その最新の例が $\text{C}_2\text{H}_4$ である。図4と図5のスオームパラメータを測定し、さらに図6の破線で示す初期断面積を準備した上で前記の手順に従って図6の実線の断面積セットを決定した[19]。ここで、特に信頼できると考えられる一重項-三重項遷移電子励起断面積( $Q_{\text{ex1}}$ )と全電離断面積( $Q_i$ )の電子ビーム実験からのデータには修正を加えていない。一方、断面積データの全くない $Q_{\text{ex1}}$ 以外の電子励起断面積はまとめて $Q_{\text{ex2}}$ として、実測電離係数

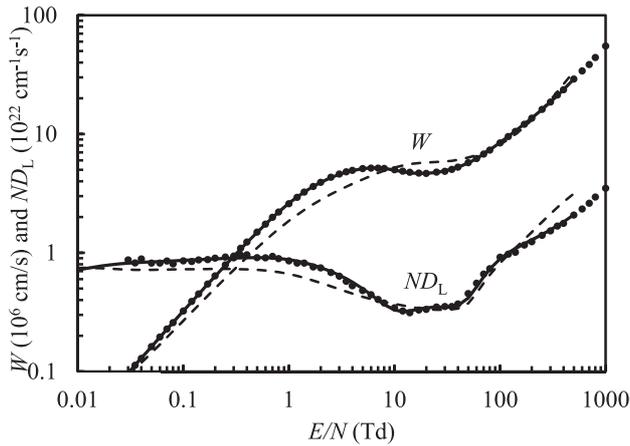


図4 純粋C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>中の電子スウォームパラメータ。プロットは実測結果、破線と実線はそれぞれ図6の初期断面積と最終断面積を使ったボルツマン方程式解析の結果。

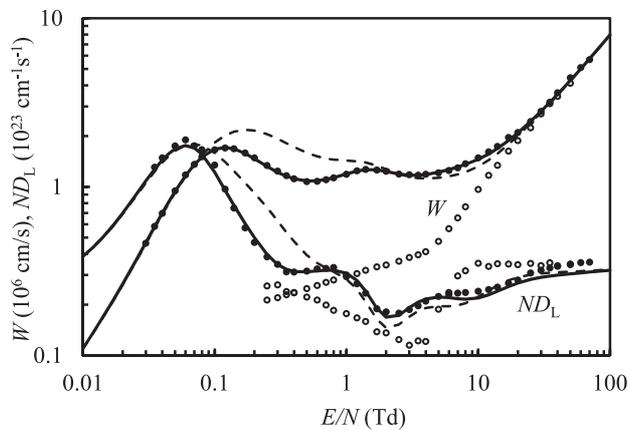


図5 0.5% C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-Ar 混合気体中の電子スウォームパラメータ。○は純粋アルゴン中の実測値で、それ以外は図4と同じ。

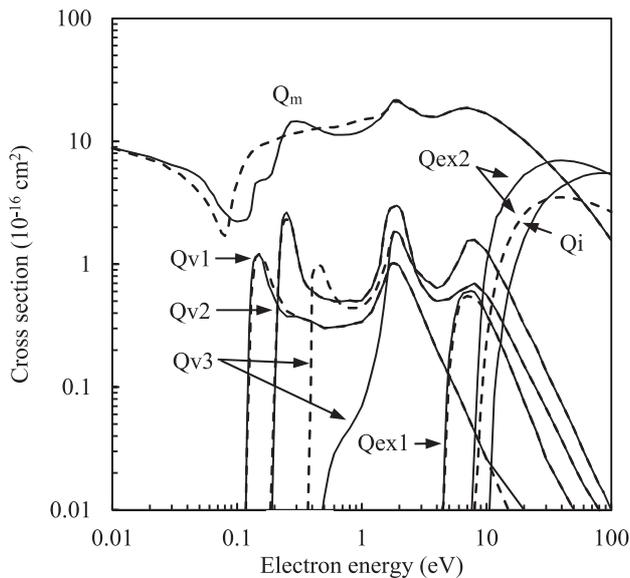


図6 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>分子の初期断面積(破線)と最終断面積(実線)。Q<sub>m</sub>:運動量移行断面積; Q<sub>v1</sub>~Q<sub>v3</sub>:振動励起断面積; Q<sub>ex1</sub>, Q<sub>ex2</sub>:電子励起断面積; Q<sub>i</sub>:全電離断面積。

(精度3%)に矛盾しないようにその絶対値を決定している。また、1.8eV以上のエネルギー域の運動量移行断面積Q<sub>m</sub>はビーム実験の主張するエラーバーの範囲内で一致し

ている。1 eV以下のエネルギー域にみられるQ<sub>m</sub>の構造は初めての知見で振動励起断面積の閾値ピークに関連していると考えられるが、純粋C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>中のドリフト速度の実測値を1%以内の精度で再現するために必要になる。

電子スウォームパラメータを使って分子の電子衝突断面積の評価または決定をする場合、その純粋な気体中だけでなくそれを微量にアルゴンに混合した気体中で測定したスウォームパラメータも併用することの意味とその重要性について述べた。(中村義春)

### 3.4 重粒子衝突断面積実験データの評価 —評価例とスケールング—

第1章でも述べられているように、IAEAにおける原子分子データ活動は、磁場閉じ込め核融合プラズマに関連する過程を対象とする。光子および電子衝突以外の重粒子衝突に関しては、具体的に表1に示す原子・分子とそのイオンが関係する過程が対象となっている。ただし、これらの原子・分子とそのイオンすべての衝突過程が対象となっているわけではなく、それぞれの粒子の核融合プラズマ中の存在密度や運動量を考慮し、表2の衝突粒子マトリックスに示す衝突エネルギーをもつ過程が対象となる。(表2には参考として光子および電子衝突についても含めた。)核融合燃料となるH, D, T原子・分子(Primary atoms, molecules)と燃焼灰であるHe相互間の衝突に加え、これら3種の粒子と不純物粒子(Common, Other, Less common impurities)、関連原子(Related atoms)、分子(Molecules)との衝突が対象であることがわかる。これらの表中 Related atomsに挙げられた元素は、核融合プラズマ中の過程に直接関連するわけではないが、これらのデータから Common, Other, Less common impuritiesに関する過程につき類推できることから含まれている。例外的に、比較的低頻度の Common impurities 同士の衝突が対象となっているが、これは特に低エネルギー衝突において、同種元素粒子同士が衝突する対称衝突過程の電荷変換断面積が非対称衝突に比して大きくなるためである。もちろん表2のエネルギー範囲を超える衝突も起こっているが、その頻度は十分低い。対象とする衝突エネルギー上限は、Primary atoms, moleculesについてはNBI照射、He灰についてはDT核融合反応における反跳エネルギーを反映して決められているが、前者に関しては、核融合装置の大型化に伴い<1 MeV程度のより高いエネルギーが必要となっており、実際に、現行CRP:Spectroscopic and Collisional Data for Tungsten from 1 eV to 20 keVにおいては、本節筆者らにより Other impuritiesに含まれるWのイオンと~1.0 MeVのNBI中性水素ビームとの電荷変換衝突過程につき研究が行われている。また、これらの広範な過程のうち、現時点で優先度が高いものは何か、DCNにおいて定期的に確認されている[20]。

IAEA-NFRI技術委員会では、重粒子衝突断面積実験データの評価に関して、次のような議論がなされた[21, 22]。

・データ評価では、測定誤差(uncertainty)の評価・見積

表1 対象原子分子一覧.

Primary atoms	H, D, T
Helium	He
Primary molecules	H <sub>2</sub> , H <sub>3</sub> および同位体置換分子 (HD, HT, D <sub>2</sub> , ...)
Common impurities	C, O, Ti, Cr, Fe, Ni
Other impurities	Be, B, N, Al, Si, V, Mo, W
Less common impurities	Li, F, Ne, Na, Mg, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Sc, Mn, Co, Cu, Zn, Kr, Zr, Nb, Ag, In, Xe, Cs, Ta, Pt, Au, Hg
Related atoms	Ga, Ge, As, Se, Br, Rb, Sr, Y, Tc, Ru, Rh, Pd, Cd, Sn, Te, I, Ba, Hf, Re, Os, Ir, Tl, Pb
Molecules	H <sub>2</sub> O, OH, H <sub>3</sub> O, O <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, CN, N <sub>2</sub> , He <sub>2</sub> <sup>+</sup> , HeH <sup>+</sup> , HeH <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CH <sub>4</sub> , CH <sub>3</sub> , CH <sub>2</sub> , CH, C <sub>n</sub> H <sub>m</sub> および水素同位体置換分子

表2 対象衝突粒子マトリックス.

	Primary atoms	Helium	Primary molecules	Common impurities	Other impurities	Less common impurities	Related atoms	Molecules
Photons	< 30 keV	< 30 keV	< 30 keV	< 30 keV	< 30 keV	< 30 keV	< 30 keV	< 30 keV
Electrons	< 100 keV	< 100 keV	< 100 keV	< 100 keV	< 100 keV	< 100 keV	< 100 keV	< 100 keV
Primary atoms	< 500 keV	< 5 MeV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV
Helium	< 5 MeV	< 5 MeV	< 5 MeV	< 5 MeV	< 5 MeV	< 5 MeV	< 5 MeV	< 5 MeV
Primary molecules	< 500 keV	< 5 MeV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV	< 500 keV
Common impurities	< 500 keV	< 5 MeV	< 500 keV	< 100 keV	対象外	対象外	対象外	対象外

もりと、ミスによる誤差(error)の評価が必須である。

- ・データ評価を経て、可能な限り推奨データを整える。
- ・データの整合性、例えば部分断面積の和と全断面積の整合性、微分断面積と積分断面積の整合性などもチェック対象とする。
- ・回転振動励起状態や励起（準安定）状態の存在などによる誤差も考慮する必要がある。
- ・実験データ再現性や、実験方法自体も評価対象となり得る他、実験者の経験と実績も参考とすべきである。
- ・データ生産量が比較的少ないので、理論データとの比較、半経験式の活用も必要となるが、半経験式自体の評価も必要である。
- ・データ評価をオープンかつ正当に行うために、評価は十分な実績のある経験者のグループにより行われることが望ましい。
- ・活発なデータ評価活動により、原子分子衝突科学の知見拡大と発展が期待できる。

本節では、筆者が同会議で発表した低エネルギー（4–25 keV）Be<sup>q+</sup>, B<sup>q+</sup>, C<sup>q+</sup>, Fe<sup>q+</sup>, Ni<sup>q+</sup>, W<sup>q+</sup>イオン（ $q = 1, 2$ ）–気体標的衝突における電子捕獲断面積測定とスケーリング[23, 24]につき、以上の観点からまとめる。これらの入射イオンに関しては、C<sup>q+</sup>を除き既存データが極めて少ないか、まったくなく、既発表の理論計算も Be, B イオン衝突系に限られる。また、気体標的を用いて断面積絶対値を測定する際には、気体標的の圧力と衝突長を正確に求める必要があるが、ガスセルからの標的ガス吹き出しや正確な圧力測定の高難しさから測定誤差を抑えることが難しく、～50%の系統誤差を生ずることすらある。このような状況

で、既存のデータに依存することなく（規格化など行わず）信頼に足る断面積絶対値を得るため、あらかじめ（その後も折をみて）ベンチマーク測定を実施している。ベンチマーク測定では、例えば既存データが豊富な 7.5 keV H<sup>+</sup>イオン–H<sub>2</sub> 気体標的衝突系を選び、筆者らの実験装置と方法により独立に測定した断面積値を既存データと比較して、装置と実験方法の精度を確認する。もちろん既存データも誤差を含んでいるが、このような“こなれた”衝突系に関しては、10例以上の測定結果が蓄積され[25]、IAEAによる推奨断面積[26]も整備されている。図7をみると、既存データに幾分かのばらつきはあるものの、7.5 keV付近では大半のデータがよい一致を示しており、筆者らのベンチマーク測定結果もよく一致している。系統誤差は、本来異なる装置・方法による断面積測定結果を比較して評価されるもので、単一（装置）の測定で系統誤差を議論すべきではないが、筆者らはこのベンチマーク測定と、既存データが存在する C<sup>q+</sup>イオン測定結果から、系統誤差を含めた測定誤差（不確かさ uncertainty）を 9～20%としている。重粒子（イオン）入射においては、入射イオンが基底状態にあるか、励起状態にあるかで電子捕獲断面積が異なり、これを区別しない（できない）実験では、励起状態の混合率が誤差の大きな原因となるが、H<sup>+</sup>入射イオンに関してはこの心配がない。特別な手法を用いて入射イオンの電子状態などを特定した断面積は部分断面積と呼ばれるが、この辺りの詳細については文献を参照願いたい[27]。

測定値は、まず既存の同種衝突系データ（理論・実験）と比較して評価を行う。場合によっては、次に示す[28]のように未出版データも比較対象としなければならない。筆者らの測定に対しては、図8に示すように、Be<sup>q+</sup>イオンに

つき比較すべき理論値[28-32], Fe<sup>+</sup>イオンにつき実験値[33]が存在するが, 理論値は (IAEA-NFRI委員会の主議題の一つとなっているように) 誤差の評価を伴わないことが多い. 実験値との比較については, 測定エネルギーが異なるものの互いに接続する傾向が見られ, 既存値の方が全体的に低いのは, イオン生成方法を工夫し, 基底状態イオンのみ入射した実験方法によると説明できる. 同種衝突系データとの比較ができない場合は, 異種衝突系データとの傾向比較や, 入射イオン価数, エネルギー, 標的のイオン化エネルギーなどのパラメータで換算した換算断面積による比較を試みる. このとき, 実験結果や理論から導かれた, 断面積のパラメータ依存性を表す経験式や半経験式が役に立つが, その適応範囲や誤差については細心の注意が必要である[27, 34]. 図9に, 10 keV W<sup>+</sup>イオン-各種気体標的衝突の1電子捕獲断面積測定値を標的のイオン化エネルギーに対して示す. これらの衝突系では, このような低エネルギー領域での既存理論・実験データは存在しない. 図9より, 希ガス標的と分子ガス標的で傾向が異なるものの, 系統的な相関を示していることがわかる. H<sub>2</sub>標的に対して値が二つあるのは, 数年おいて繰り返した二つの値を示しており, 系統誤差の目安となる. 図9中, N<sub>2</sub>, Ne標的の値がそれぞれ分子ガス標的・希ガス標的全体の傾向から若干外れるが, N<sub>2</sub>に関しては他の分子ガスがアルカン系C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>であること, Neに関しては衝突エネルギーが7.5 keVと異なるためと説明できる. このような事由がないのに, ある値だけが全体の傾向から大きく外れるような場合, その値の信頼性は低いと考えなければならない. MüllerとSalzbornは+q価の入射イオンが, イオン化エネルギーI (eV)である標的から1電子捕獲する発熱過程の断面積経験式として,

$$\sigma_{q,q-1} \text{ (cm}^2\text{)} = (1.43 \pm 0.76) \times 10^{-12} q^{1.17 \pm 0.09} I^{-2.76 \pm 0.19}, \quad (2)$$

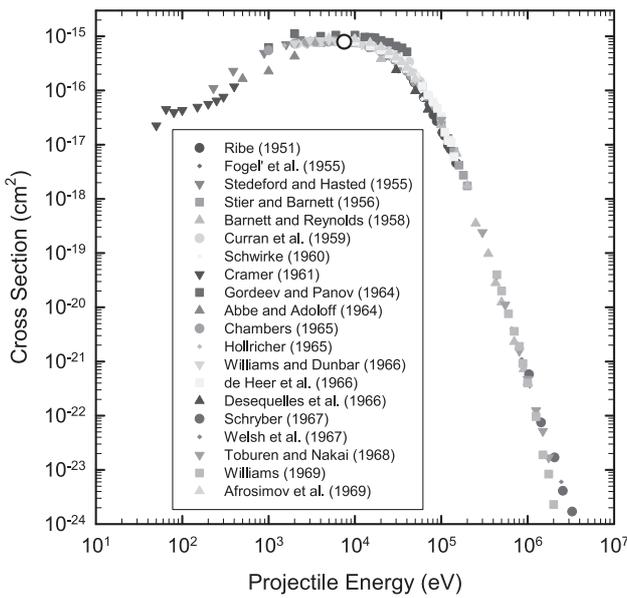


図7 H<sup>+</sup>イオン-H<sub>2</sub>ガス衝突における1電子捕獲断面積. ○: 筆者らのベンチマーク測定 (7.5 keV) [24]. 他の記号: 既存実験値 [25].

を導出している [35]. 図9の断面積は, このスケールリングが示す  $I^{-2.76 \pm 0.19}$  依存から大きく外れているが, W<sup>+</sup>イオン衝突系では1電子捕獲過程が吸熱反応となるためであり, 経験式の適用範囲を示す好例であろう. 実際, 2価イオン入射など反応が発熱過程となる衝突系では, I依存性は式(2)に近くなる. このような吸熱反応を含む1電子捕獲断面積値は, 標的のイオン化エネルギーではなく, 標的と(電子捕獲後の)入射イオンのイオン化エネルギーの差  $\Delta IP$  (eV)でプロットすれば, 図10に示すように一定の相関

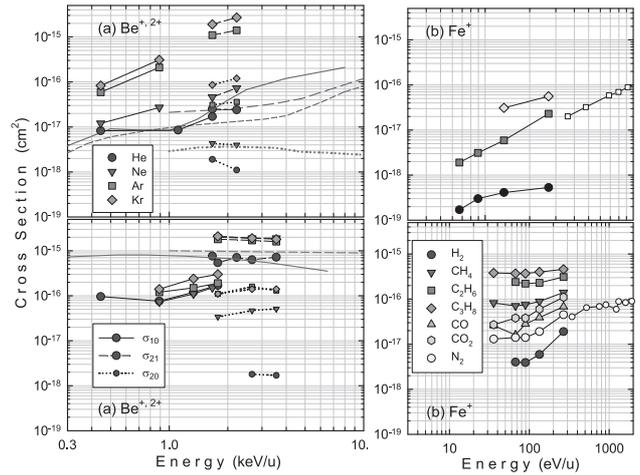


図8 (a) Be<sup>+</sup>, Be<sup>2+</sup>, (b) Fe<sup>+</sup>イオン (上図) 希ガス, (下図) 分子ガス標的との衝突における1電子捕獲断面積  $\sigma_{10}$ ,  $\sigma_{21}$  と2電子捕獲断面積  $\sigma_{20}$ . 記号でプロットした値が実験値 [23]で, 実線, 破線, 点線がそれぞれ  $\sigma_{10}$ ,  $\sigma_{21}$ ,  $\sigma_{20}$  に対応する. 左上図の記号なし曲線はHe標的に対する理論断面積で, 実線 [28], 破線 [29, 30], 点線 [29] がそれぞれ  $\sigma_{10}$ ,  $\sigma_{21}$ ,  $\sigma_{20}$  に対応する. 左下図の記号なし曲線はH<sub>2</sub>標的に対する理論断面積で, 実線 [31], 破線 [32] とともに  $\sigma_{21}$  に対応. 右上図, 右下図でエネルギー 350 eV/u 以上の実験値は, それぞれ Ar, N<sub>2</sub> 標的に対する既存データ [33] を示す.

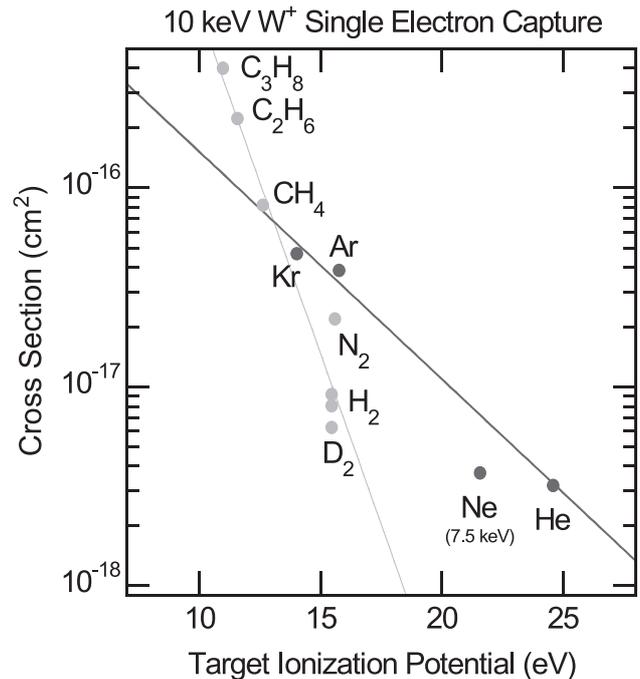


図9 10 keV W<sup>+</sup>イオン-各種ガス標的の衝突における1電子捕獲断面積.

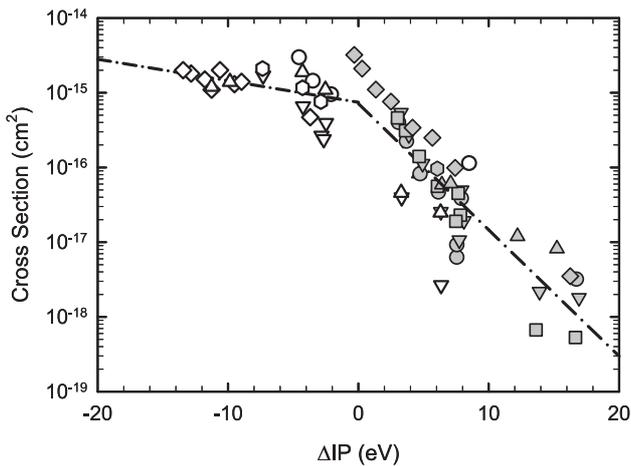


図10 低エネルギー○: Be<sup>9+</sup>, △: B<sup>8+</sup>, ◇: C<sup>7+</sup>, □: Fe<sup>9+</sup>, ▽: Ni<sup>9+</sup>, ○: W<sup>9+</sup>イオン ( $q=1,2$ ) 一気体標的衝突における1電子捕獲断面積[24]. 塗りつぶし記号は  $q=1$ , 白抜き記号は  $q=2$ に対応し, 一点破線は  $\Delta IP$ によるスケーリングを示す.

を示すようになる.  $\Delta IP$  は, 衝突系の反応前後の内部エネルギー差であり, 反応前後の入射・標的粒子がすべて基底状態にあるとすると, 反応の  $Q$  値に相当する量である. 図中の一点破線は, 発熱過程と吸熱過程ごとに測定値を再現する直線であり, それぞれ

$$\sigma_{q,q-1}(\text{cm}^2) = 7.45 \times 10^{-16} \times 10^{-0.029\Delta IP(\text{eV})}, \quad (3)$$

$$\sigma_{q,q-1}(\text{cm}^2) = 7.13 \times 10^{-16} \times 10^{-0.17\Delta IP(\text{eV})}, \quad (4)$$

で表され, 測定結果を発熱領域で  $-0.57 \sim 0.62$  桁, 吸熱領域で  $-1.36 \sim 0.64$  桁の範囲で再現している. さらなる詳細や標的や入射イオン価数を限定したスケーリングについては, 文献[24]を参照願いたい. (今井 誠)

### 3.5 原子分子データの評価とコード比較 NLTE コード比較ワークショップ

本節では, IAEA によるコードセンターネットワークに関連する活動として, NLTE (non local thermodynamic equilibrium), 非局所熱平衡における原子過程の衝突輻射モデルの相互比較ワークショップの活動について紹介する.

IAEA による原子分子データ協働作業では, プラズマ中の原子分子素過程データの収集, 評価, データベース化が行われている. しかしながら, 例えば原子分子素過程データを用いてプラズマの分光解析を行うためには, 衝突輻射モデル (原子分子過程モデル) が必要である. 衝突輻射モデルとは, プラズマ中に存在するイオンの各状態について, 電子衝突や輻射による電離, 励起の効果によってそれらが生成, 消滅する過程を考慮し, レート方程式 (速度方程式) を立てて解き, イオン比や, 状態占有密度を求めるモデルである[36]. このような衝突輻射モデルは, 発光スペクトルの評価や, 電離度, 輻射放出・吸収係数などの, プラズマの状態方程式に関係する量を求めるために用いられ, 最近では, プラズマプロセス, 環境汚染物質処理, 光源などの様々な応用分野でも, 実験解析, 装置の最適化のために利用されている.

本節では, 高温プラズマの原子の衝突輻射モデルの検証のためのワークショップ活動を取り上げる. 高温プラズマ中では, 原子は多価イオンとなり, 複雑な発光スペクトルを示すことが知られているが, プラズマ中に存在するのは, もっぱら原子, イオンとその電子励起状態であり, その間で起こる過程は, 電子衝突や輻射による電離, 再結合, 励起, 脱励起に限られるので, モデルは比較的単純になると考えられる. また, 現在では理論計算によって, 原子エネルギー準位や, レート係数のデータが得られるので, 比較的容易にモデルを構築できると考えられる. にもかかわらず, 空間的に広がりを持ち時間的にも変化する現実のプラズマ中の原子過程は, プラズマの流体運動や, 輻射輸送の影響を受けるので, 計算の精度を高めるためや, そのためのモデルの検証を行うためにも, さまざまな課題があると考えられる.

EUV光源のようなプラズマの応用分野では, 発光効率の1%の差異が技術の成否を決定するので, 衝突輻射モデルの精度は重要である[37]. 最近の米国リバモア研のNIF (National Ignition Facility) での慣性核融合の点火実験でも, レーザー光からX線への変換効率の予測からのずれが問題になっているとされる[38].

プラズマの衝突輻射モデルの研究は, 1980年代から行われ, HやHe様イオンに対しては計算手法が確立され, 分光解析への応用が行われている[39]. 一方, 磁場閉じ込め核融合では, 高Zプラズマの輻射損失が, 慣性閉じ込め核融合では, ドライバーレーザーのエネルギーの輻射への変換効率が重要と考えられ, 高Z多価電離イオンの衝突輻射モデルの研究が行われるようになった[40]. 当時はその原子データが入手困難なことが問題と考えられ, 対象イオンの構造を水素様イオンで近似するモデルが用いられていたが, 1990年代以降, COWAN[41], HULLAC[42], FAC[43]などの原子エネルギー準位, 電離, 励起のレート係数を計算するコードが発展し, 現実に近いモデリングができるようになった. しかし, 複雑な原子過程を含むモデルによる計算が, 応用研究における, 装置設計や最適化などに利用可能な信頼性をもちえるかは議論になっていた.

一般に, 理論モデルの精度を確認するためには, モデルを実験と比較して検証する必要がある. しかし, 衝突輻射モデルの場合は, それに含まれる多くのエネルギー状態, 原子分子素過程のデータをひとつひとつ検証することは困難な上, それらを考慮したモデルが全体として妥当な結果を与えるかも明らかではない. 分光計測との比較においても, プラズマがしばしば時間, 空間的な不均一性を持ち, 観測されるプラズマの発光が自己吸収の影響を受けることに起因した, 不確実性があり, 定量的な検証を行うことが困難である.

このようなプラズマのモデリングの検証のため, 主に慣性核融合プラズマ分野の研究者が中心となり, 1989年から1994年にかけて, 局所熱平衡 (LTE) 状態にあるプラズマの輻射吸収係数 (opacity) の相互比較のための, opacity workshop が実施された[44]. それに続いて, 1996年からNLTE コード比較ワークショップが企画されて, 現在まで

ほぼ隔年、計7回開催されている。

NLTEコード比較ワークショップは米国標準局（NIST: National Institute of Standard and Technology）のYu. Ralchenko博士がオーガナイザーを務め、2011年にウィーンで開催された第7回ワークショップでは、IAEAとフランスCEA（Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives）の後援によって実施されている。これまでのワークショップの結果は、Radiative Properties of Hot Dense Matter 会議等で報告されている[45,46]。また、本誌でもタングステンプラズマのモデリングに関する紹介を行っているので参照されたい[47]。

2011年に行われた第7回ワークショップでは、webサイトに公開されているように[48]、Ne, Ar, Kr, Wを対象として、コードの相互比較が行われた。具体的には、温度、密度を与えた、定常状態（衝突輻射平衡：CRE: Collisional Radiative Equilibrium）にあって、光学的に薄いプラズマにおける、平均価数、輻射損失、イオン密度、占有密度等を主な対象として計算結果の比較が行われたが、Arについては強い輻射で励起されたプラズマにおける占有密度の時間発展、KrとWについては詳細なスペクトルについても比較が行われた。

ワークショップの実施の手順は以下の通りである。開催の半年前にテスト問題がアナウンスされる。参加者はそれをもとに計算を行い、指定されたフォーマットでデータを作成する。そして、開催の1ヶ月半くらい前までにftpによって所定のサイトに結果をアップロードすると、ワークショップのwebサイトのデータベースに登録され、webサイト上のツールを用いて、解析、他の結果との比較ができるようになる。ワークショップ当日は、各コードについての議論と、各テスト問題についての結果の比較を行う。ワークショップの終了後、見出された問題について修正を行い、3ヶ月後をめどに最終的な結果をアップロードする。このワークショップに参加するための必要十分条件は、指定されたテスト問題の少なくとも一つに対して計算を行い、結果を提供することである。それによって、ワークショップに出席できるようになるとともに、webサイト上のデータベースにアクセスできるようになる。

提出するデータは、平均価数、輻射損失、イオン密度、占有密度、発光スペクトル等からなり、詳細なモデルでは、 $10^6$ 個以上のエネルギー準位を考慮して計算するの

で、提出するデータのサイズはGBオーダーになる。データを準備するためには、原子データの計算、衝突輻射モデルの計算を含め、相当の作業が必要である。

表3にワークショップで比較を行った主なコードを示す。それぞれのコードは、それぞれ違った原子データを用い、原子モデルの構築方法を用いているが、エネルギー準位の取り扱い方において、電子配置ごとに扱うものと、微細構造レベルを扱うもの、その計算方法として、遮蔽水素モデルによるものと、原子物理の計算コードを用いるものなどに大別される。複雑なイオンを取り扱うために、平均化したエネルギー準位を考慮するモデルや、エネルギー準位の一部について微細構造を考慮するハイブリッドモデルも用いられている。各コード間で、使用する原子データは共通の場合があるが、衝突輻射モデルのソルバーは、ほぼ独立に開発されている。

初期のワークショップでは、各コードの計算結果の間に大きな違いがあり、例えばAuについての計算で、価数の計算結果に10以上の違いがあった。エネルギー準位の計算方法として、遮蔽水素モデルを用いるコードと、原子物理の計算コードを用いるコードの間で結果が異なることが認識され、原子構造を適切に扱うことが重要なことがわかった。電離、励起のレート係数の取り扱いについても、ワークショップを重ねるごとに、改良が進み、同じエネルギー準位の組を用いれば、各コードの計算結果がほぼ一致するようになった。正確なレート係数を用いることは重要なことはいままでもないが、多数ある電離、励起過程のレートについて全体的な整合性が重要なことも示された。

Wは、磁場閉じ込め核融合で重要なことから、初期のワークショップから引き続き比較の対象として選ばれている。コードの改良が進んだ最近のワークショップでは、コード毎で計算された価数の差異が2~5以内、輻射損失も2倍程度以内に一致するようになった。これらの計算においては、十分多くのエネルギー準位を考慮して、重要な二電子性再結合チャンネルを漏れなく考慮する、モデルの完全性（completeness）が重要なことが示された。計算結果の差異は、Ni様やNe様のような閉殻イオンが支配的になる条件では少なく、開殻イオンが存在する条件では大きくなる傾向があり、構造が複雑なイオンのエネルギー準位の構造を適切に考慮することが重要なことが示されている。

ワークショップを通じ、衝突輻射モデルの精度、信頼性

表3 nLTEコード比較ワークショップで発表された衝突輻射モデル（一部）。CAはconfiguration average（電子配置単位でエネルギー準位を考えるモデル）の略。

コード	著者	研究機関	特徴	
ATOMIC	J. Abdallah	Los Alamos/USA	CA, level-by-level	[49]
	J. Colgan		原子データはCowanコードによる	
	C. Fontes			
AVERROES	O. Peyrusse	CELIA/France	super configuration モデル	[50]
CRETIN	H. Scott	LLNL/USA	水素様近似モデル	[51]
FLYCHK	H.-K. Chung	LLNL/USA	水素様近似モデル	[52]
SCRAM	S. Hansen	Sandia/USA	level-by-level, Hybrid 原子データはFACによる	[53]
JATOM	A. Sasaki	JAEA/Japan	CA, 原子データはHULLACによる	[54]

は高まったと考えられるが、現在の結果のばらつきに照らして、一定の誤差は避けられないと考えられる。EUV リソグラフィ光源や慣性核融合などの応用のためにはさらに精度を高める必要があると考えられる。そのためには、計算結果の比較においては、データベースの活用をより進めるなどして、計算の精度に大きな影響を与えるエネルギー準位や、電離、励起の素過程を特定した上で、原子データの精度の向上を図ることが、今後重要になると考えられる。一方、これまで限られている、実験結果との比較による検証を充実させることは重要であり、プラズマの不均一性や、輻射の自己吸収に起因する結果の不確定性を回避、克服するような実験方法、これらの効果を適切に考慮するモデリングの方法、比較の方法が必要となると考えられるが、これらは高Zプラズマに本質的な現象であるとも考えられ、プラズマの特性のより進んだ理解に基づく、新しい実験、モデリングとそれらの相互の比較が必要になるのではないかと考えられる。

(佐々木 明)

### 参考文献

- [1] Y. Itikawa and N. Mason, J. Phys. Chem. Ref. Data **34**, 1 (2005).
- [2] J. Schutten *et al.*, J. Chem. Phys. **44**, 3924 (1966).
- [3] N.Lj. Djuric *et al.*, Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes **83**, R7 (1988).
- [4] Y. Itikawa, Fusion Sci. Technol. **63**, 333 (2013). この論文は下記の IAEA 会合での話をまとめたものである。
- [5] Joint IAEA-NFRI Technical Meeting on Data Evaluation for Atomic, Molecular and Plasma Material Interaction Processes in Fusion (September 4-7, 2012, Daejeon, Korea).
- [6] H. Takagi, Fusion Sci. Technol. **63**, 406 (2013).
- [7] V. Zhaunerchyk *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 013201 (2007).
- [8] T. Tanabe *et al.*, Dissociative Recombination, Theory, Experiment, and Application IV 170 (2000) World Scientific.
- [9] H. Takagi, Phys. Scr. **T96**, 52 (2002).
- [10] H. Takagi, Phys. Rev. A **70**, 022709 (2004).
- [11] D.J. Haxton and C.H. Greene, Phys. Rev. A **79**, 022701 (2009).
- [12] L.G. Huxley and R.W. Crompton, *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases* (John-Wiley & Sons, New York, 1974) p. 523.
- [13] W.H. Long *et al.*, Phys. Rev. A **13**, 471 (1976).
- [14] J.F. Nolan and A.V. Phelps, Phys. Rev. **140A**, 729 (1965).
- [15] M. Kurachi and Y. Nakamura, J. Phys. D: Appl. Phys. **21**, 602 (1988).
- [16] M. Kurachi and Y. Nakamura, J. Phys. D: Appl. Phys. **22**, 107 (1989).
- [17] H. Tanaka *et al.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **23**, 577 (1990).
- [18] M. Kurachi and Y. Nakamura, IEEE Trans. Plasma Sci. **19**, 262 (1991).
- [19] Y. Nakamura, Fusion Sci. Technol. **63**, 378 (2013).
- [20] [http://www-amdis.iaea.org/DCN/fusion\\_data.php](http://www-amdis.iaea.org/DCN/fusion_data.php)
- [21] <http://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0627/>
- [22] 今井 誠: プラズマ・核融合学会誌 **88**, 628 (2012).
- [23] M. Imai *et al.*, J. Plasma Fusion Res. Ser. **7**, 323 (2006).
- [24] M. Imai *et al.*, Fusion Sci. Technol. **63**, 392 (2013) and *references therein*.
- [25] Y. Nakai *et al.*, At. Data Nucl. Data Tables **37**, 69 (1987).
- [26] <http://www-amdis.iaea.org/ALADDIN/>
- [27] 浜口智志他 編: プラズマ原子分子過程ハンドブック (大阪大学出版会, 2011).
- [28] N. Shimakura, *private communication*.
- [29] W. Fritsch, Phys. Scr. **T62**, 59 (1996).
- [30] S. Suzuki *et al.*, J. Phys. B **33**, 3307 (2000).
- [31] M. Kimura and N.F. Lane, Adv. At. Mol. Phys. **26**, 79 (1989).
- [32] D.R. Schultz *et al.*, Phys. Scr. **T62**, 69 (1996).
- [33] J.K. Layton *et al.*, Phys. Rev. **161**, 73 (1967).
- [34] M. Imai, in "Atomic Processes in Basic and Applied Physics," p.455, eds. V. Shevelko and H. Tawara, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, 68, (Springer-Verlag, 2012).
- [35] A. Mueller and E. Salzborn, Phys. Lett. A **62**, 391 (1977).
- [36] 蓮尾昌裕 他: プラズマ・核融合学会誌 **89**, 273 (2013).
- [37] 砂原 淳: プラズマ・核融合学会誌 **89**, 416 (2013).
- [38] [https://lasers.llnl.gov/workshops/science\\_of\\_ignition/pdfs/science\\_of\\_fusion\\_ignition\\_on\\_NIF.pdf](https://lasers.llnl.gov/workshops/science_of_ignition/pdfs/science_of_fusion_ignition_on_NIF.pdf)
- [39] D.E. Post *et al.*, At. Data Nucl. Data Tables **20**, 397 (1977).
- [40] T. Fujimoto, *Plasma Spectroscopy* (Oxford science publications, 2004).
- [41] R.D. Cowan, *The theory of atomic structure and spectra* (University of California press, 1981).
- [42] A. Bar-Shalom, M. Klapisch and J. Oreg, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **71**, 169 (2001).
- [43] M.F. Gu, Astrophys. J. **590**, 1131 (2003).
- [44] A. Rickert, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **54**, 325 (1995).
- [45] Yu. Ralchenko *et al.*, AIP Conf. Proc. **1161**, 242 (2009).
- [46] C. Fontes, High Energy Density Phys. **5**, 15 (2009).
- [47] 佐々木 明: プラズマ・核融合学会誌 **89**, 308 (2013).
- [48] <http://nlte.nist.gov/NLTE7/>
- [49] J. Abdallah *et al.*, AIP Conf. Proc. **381**, 131 (1996).
- [50] O. Peyrusse, J. Phys. B **32**, 683 (1999).
- [51] H. A. Scott and S. B. Hansen, High Energy Density Phys. **6**, 39 (2010).
- [52] H.-K. Chung *et al.*, High Energy Density Phys. **1**, 3 (2005).
- [53] S. B. Hansen *et al.*, High Energy Density Phys. **3**, 109 (2003).
- [54] A. Sasaki, High Energy Density Phys. **9**, 325 (2013).