

重元素プラズマからの複雑な発光スペクトルと統計的解析手法の可能性

Possibility of statistical analysis of complicated emission spectra from heavy ion plasmas

鈴木千尋
Chihiro Suzuki

核融合研
NIFS

プラズマ中の孤立原子・イオンからの放射スペクトルは、始状態または終状態が自由電子状態である遷移に対応する連続スペクトルと、束縛状態間の遷移に対応する離散スペクトルから構成されるが、比較的低密度のプラズマでは、一般に離散スペクトルが支配的である。原子番号が 30 未満の比較的軽い元素の場合は、発光線のデータベースがよく整備されており、素過程の断面積データも信頼性の高いものが利用できる。このため、各発光線を正確に同定し、その強度分布を衝突・輻射モデルによるシミュレーション結果と比較することで、発光位置におけるプラズマパラメータを評価する手法が確立されている。

近年、国際熱核融合実験炉 (ITER) のダイバータ材料であるタングステンや、産業用短波長プラズマ光源の (候補) 材料であるスズ、ランタノイド元素、ビスマスといった、元素周期表の第 5 周期以降に位置するような重元素のプラズマからの放射スペクトルに関する研究が活発化している。このような重元素の多価イオンは、基底状態において 3d、4d、4f といった高軌道角運動量の価電子を持ち、閉殻から遠い電子配置では、非常に多数のエネルギー準位が近接して存在する。その結果、束縛状態間の遷移であっても、膨大な数の発光線がその線幅より狭い間隔で密集することで、一見連続的なバンド状のスペクトルが形成される。このような「擬似」連続的なスペクトルは、通常分光器では分離できない発光線群という意味で、Unresolved Transition Array (UTA) と呼ばれている [1]。上述の重元素の場合、主量子数 4 の価電子を持つイオンの遷移にともなう UTA が、主に極端紫外 (EUV) 領域に現れる。特に、4p-4d や 4d-4f といった、遷移電子の主量子数が遷移前後で変化しない ($n=4-4$) 遷移は、遷移エネルギーの価数依存性が弱いため、同じ波長域に多くの価数の UTA が重畳して強い発光が観測されることが、実験的にも古くから知られている [2]。

イオンの価数が高く (電子数が少なく) なり、価電

子の軌道角運動量が低くなると、エネルギー準位構造は単純になり発光線の数も減少する傾向があることから、電子温度の変化によりプラズマ中のイオン価数分布が変化して、スペクトルの様相が離散的な状態と (擬似) 連続的な状態の間で移り変わることが考えられる。一例として、タングステンの 43 価と 33 価のイオンについて、 $n=4-4$ 遷移に関わるエネルギー準位と、遷移強度の波長分布を FAC コード [3] により計算した結果を図 1 に示す。43 価イオンの基底電子配置は、閉殻に 4p 電子が一個加わった状態 ($[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p$) である。このためエネルギー準位数は少なく、発光線の分布も離散的となる。これに対して、44 価イオンの基底電子配置は閉殻から遠く、4d 軌道に半分空きがある状態 ($[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^64d^5$) である。その結果、エネルギー準位の構造は状態数の激増だけでなく配置間混合の影響も受けて非常に複雑となり、数千本の発光線からなる UTA が形成される。

実際に、核融合科学研究所の大型ヘリカル装置 (LHD) において、タングステンをはじめとする各種重元素をプラズマ中に入射し、加熱パワーの制御により電子温度を広範囲に変化させて EUV スペクトルの観測が行われた。その結果、電子温度が高い状態では離散的であったスペクトルが、電子温度が低下するにつれて連続的な UTA に推移していく様子が観測された [4,5]。また、UTA の形状自体も一定ではなく、電子温度によって変化していることが示された [6]。

このような UTA 形状とプラズマパラメータの相関を定量的な解析に応用するにあたっては、個々の発光線が分離できないという性質上、「各発光線を正確に同定しその強度分布をシミュレーションと比較する」といった従来の手法は本質的に困難である。衝突・輻射モデルによる UTA スペクトルのシミュレーション自体は可能であり、過去にも広く試みられている [7]。しかし、多電子系である重元素イオンに特有の、複雑な電子相関や多重励起状態を含む原子データの不足や不

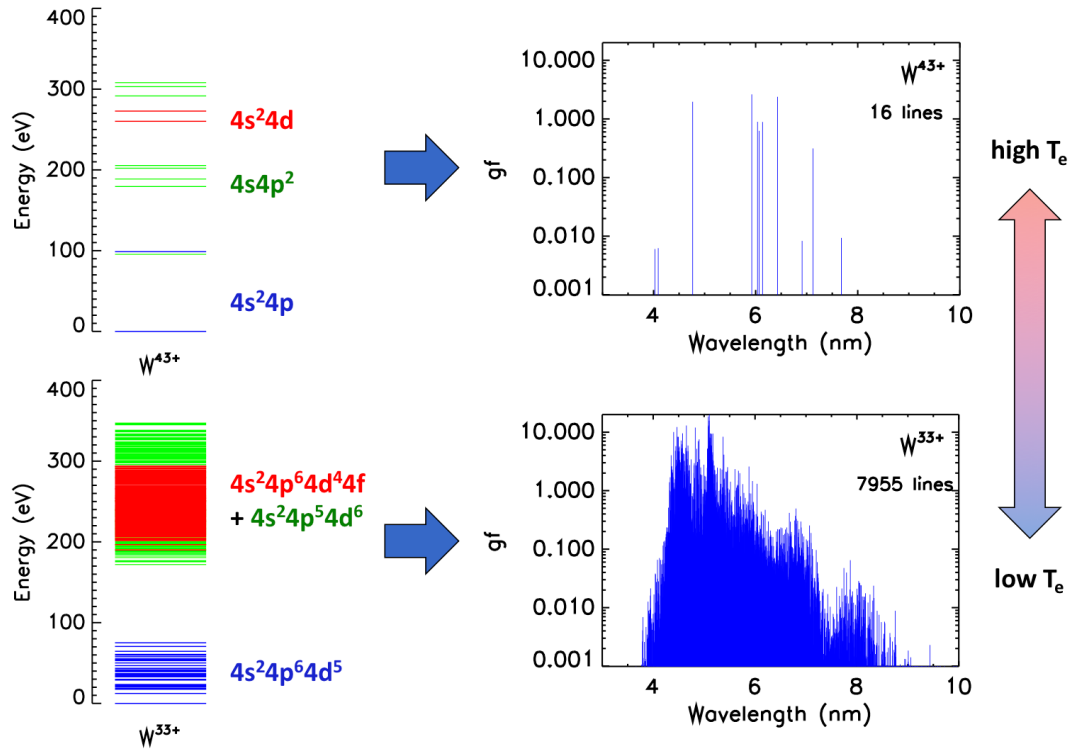


Fig. 1: タングステンの 43 価と 33 価イオンのエネルギー準位（一部）および $n=4-4$ 遷移強度の波長分布（FAC コード [3] による計算）。

確定性も相まって、UTA の位置や形状を正確に再現することは非常に困難であり、実測とモデルの定性的な比較による解析にとどまっているのが現状である。

そこで、多数の発光線からなる UTA に対しては、その微細構造を同定することなく、形状全体としての統計的な構造・性質を抽出し、それがプラズマパラメータによってどのように変化するかに着目する可能性が考えられる。遷移強度分布の平均値周りの 1-4 次のモーメント（平均、分散、歪度、尖度）を、UTA の形状を特徴付ける統計量として取り扱うことが以前から行われており [8]、各価数イオンについてこれらの統計量を理論計算で求めることは容易である [9]。しかし、実測されるスペクトルは多くの価数の UTA の重畳であることが多く、実測との比較には、価数分布の推定といった原子データの信頼性に影響を受ける要素が必要であり、定性的な比較以上の解析は容易ではない。

最近注目されている、データ駆動科学的なアプローチも試みられている。LHD において様々な電子温度条件下で計測された、数千パターンにおよぶタングステン多価イオンの EUV スペクトルデータに対して、非負行列因子分解を適用して、それらの特徴を表す少数の基底関数を抽出する試みが行われた [10]。その結

果、5 つの基底関数の線型結合で全てのパターンがよく近似できることが示された。この解析では原子構造計算は全く用いられていないが、各基底関数の形状としては、UTA 形状の価数依存性の理論計算と関連のあるパターンが結果的に得られている。

このような統計的手法を定量的なプラズマ診断法に展開するには、依然として課題は多いと思われるが、重元素プラズマからの複雑なスペクトル解析への新たなアプローチとして、検討に値するといえる。

- [1] J. Bauche et al., Phys. Scr. **37**, 659 (1988).
- [2] G. O'Sullivan and P. K. Carroll, J. Opt. Soc. Am. **71**, 227 (1981).
- [3] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
- [4] C. Suzuki et al., Phys. Scr. **89**, 114009 (2014).
- [5] C. Suzuki et al., Plasma Phys. Control. Fusion **59**, 014009 (2017).
- [6] S. Morita et al., J. Plasma Fusion Res. **89**, 289 (2013).
- [7] I. Murakami et al., Nucl. Fusion **55**, 093016 (2015).
- [8] A. C. Bauche and J. Bauche, Phys. Scr. **T40**, 58 (1992).
- [9] C. S. Harte et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 205004 (2010).
- [10] T. Esaka et al., Proc. of the 7th Japan-China-Korea Joint Seminar on Atomic and Molecular Processes in Plasmas, July 24-26, 2018, Hefei.