

時間依存シュレディンガー方程式による水素原子電子衝突励起断面積の計算 Calculation of electron impact excitation cross section of atomic hydrogen based on the time-dependent Schrödinger equation

中根 啓太¹, 澤田 圭司¹
Keita Nakane, Keiji Sawada

¹信州大学大学院工学系研究科機械システム工学専攻 〒380-8553 長野市若里 4-17-1
Graduate School of Sci. and Tec., Shinshu University, 4-17-1 Wakasato Nagano, 380-8553

1. 緒言

核融合プラズマの水素原子発光線解析のために、我々は主量子数 n によって準位を区別した水素原子衝突輻射モデル[1]を構築した。このモデルでは、同じ主量子数で異なる方位量子数をもつ原子の密度分布が統計重率に従うと仮定されている。しかし、核融合プラズマにおいては、水素原子ライマン線の輻射輸送を考慮するとこの仮定が正しくない可能性がある。輻射輸送を正しく考慮するには、方位量子数まで扱うモデルが必要である。方位量子数まで区別した場合、 $n < 6$ の準位間では R-matrix 法で計算された信頼性の高い電子衝突励起断面積を利用できるが、同じ主量子数で異なる方位量子数をもつ準位間の断面積は計算されていない。 $n > 5$ の準位に関しては、R-matrix 法等の信頼性の高い断面積データがない。本研究では、時間依存シュレディンガー方程式に基づき、水素原子の電子衝突励起断面積の計算コードを構築した。

2. 計算方法

入射電子と標的原子内の電子の原子核からの相対座標をそれぞれ \vec{r}_1, \vec{r}_2 とすると時間依存シュレディンガー方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= H\Psi \\ H &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \\ &= H_1 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \end{aligned} \quad (1)$$

波動関数 $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ を標的原子の固有関数 ψ_α で展開して

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \sum_{\beta} F_{\beta}(\vec{r}_2, t) \psi_{\beta}(\vec{r}_1) e^{-i\frac{E_{\beta}}{\hbar}t} \quad (2)$$

式(1)に代入し、特定の $\psi_{\alpha}(\vec{r}_1)$ を掛けて \vec{r}_1 で積分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{\alpha}(\vec{r}_2, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 F_{\alpha}(\vec{r}_2, t) - \frac{1}{i\hbar} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{F_{\alpha}(\vec{r}_2, t)}{r_2} \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\beta} F_{\beta}(\vec{r}_2, t) e^{-i\frac{(E_{\beta}-E_{\alpha})}{\hbar}t} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_{\beta}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \end{aligned} \quad (3)$$

となる。式(3)から得られた展開係数 F_{α} から電子衝突励起断面積を求める。この方程式を、実部と虚部

を異なる時間で定義して差分法により解く手法[2]を採用した。 F_{α} を

$$F_{\alpha}(t, x, y, z) = F_{\alpha}^R(t, x, y, z) + iF_{\alpha}^I(t, x, y, z)$$

のように分離して式(3)に代入すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{\alpha}^R}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2\mu} \nabla^2 F_{\alpha}^I + \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta} (V_{\alpha\beta}^R F_{\beta}^I + V_{\alpha\beta}^I F_{\beta}^R) \\ i \frac{\partial F_{\alpha}^I}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2\mu} \nabla^2 F_{\alpha}^R - \frac{i}{\hbar} \sum_{\beta} (V_{\alpha\beta}^R F_{\beta}^R - V_{\alpha\beta}^I F_{\beta}^I) \\ V_{\alpha\beta} &\equiv -\delta_{\alpha\beta} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} e^{-i\frac{(E_{\beta}-E_{\alpha})}{\hbar}t} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_{\beta}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \end{aligned} \quad (4)$$

これらの式を Runge-Kutta 法を用いて解いた。

3. 結果

3次元空間の中心に水素原子の核を設定し、 F_{α} を計算した。主量子数 2 までの 5 つの準位 1s, 2s, 2p(m=-1), 2p(m=0), 2p(m=+1) を考慮した。1s を始状態として入射電子の波動関数を設定した。入射電子の初期波形は、半値幅 FWHM=12 a_0 (a_0 :ボーア半径)、5eV のエネルギーを持つガウス型の波束とした。 F_{α} を 2 乗した値の入射軸を含む面での分布を Fig.2 に示す。粒子の全空間での存在確率は、時間的に保存することが確認されている。今後、高励起状態を考慮したコードを構築し、励起断面積の算出を行う。

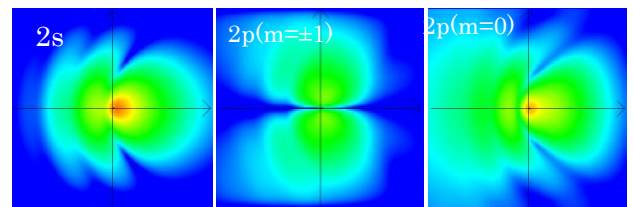


Fig.2 2s, 2p(m=±1), 2p(m=0) の計算結果。領域は縦軸、横軸方向共に -15 a_0 ~ 15 a_0 。図の左方向から電子が入射される。

- [1] K.Sawada, J. Plasma Physics **72**, 1025 (2006).
- [2] A.Askar, A.S.Cakmak, J. Chem. Phys. **68**, 2794, (1977).