05aE18P

時間依存シュレディンガー方程式による水素原子の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

鈴木敬弘，澤田圭司，出井諒

Takahiro Suzuki，Keiji Sawada，Ryo Idei

信州大学大学院理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, Japan, 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，主量子数，方位量子数を区別した準位間の断面積は計算されていない．また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．我々は，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を計算する計算コードを開発している．

2. 計算方法

入射電子と標的原子内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，

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

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

である．波動関数$\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2},t)$を標的原子の固有関数$\psi_\alpha$で展開し，

$$\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2},t) = \sum_\beta F_\beta(\vec{r_2},t)\psi_\beta(\vec{r_1})e^{-i\frac{E_\beta}{\hbar}t} \tag{2}$$

これを式(1)に代入し，特定の$\psi_\alpha^*(\vec{r_1})$をかけて$\vec{r_1}$で積分すると，

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\alpha(\vec{r_2},t)}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 F_\alpha(\vec{r_2},t) - \frac{1}{i\hbar}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{F_\alpha(\vec{r_2},t)}{r_2} \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\sum_\beta F_\beta(\vec{r_2},t)e^{-i\frac{(E_\beta-E_\alpha)t}{\hbar}}\int\psi_\alpha^*(\vec{r_1})\frac{1}{r_{12}}\psi_\beta(\vec{r_1})d\vec{r_1} \end{aligned} \tag{3}$$

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．

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\alpha^R}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2 F_\alpha^I + \frac{1}{\hbar}\sum_\beta(V_{\alpha\beta}^R F_\beta^I + V_{\alpha\beta}^I F_\beta^R) \\ i\frac{\partial F_\alpha^I}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 F_\alpha^R - \frac{i}{\hbar}\sum_\beta(V_{\alpha\beta}^R F_\beta^R - V_{\alpha\beta}^I F_\beta^I) \end{aligned} \tag{4}$$

$$V_{\alpha\beta} \equiv -\delta_{\alpha\beta}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}e^{-i\frac{(E_\beta-E_\alpha)t}{\hbar}}\int\psi_\alpha^*(\vec{r_1})\frac{1}{r_{12}}\psi_\beta(\vec{r_1})d\vec{r_1}$$

これらの式をRunge-Kutta法を用いて解いた．

3. 結果

水素原子の始状態を2sとした場合の計算結果をFig.1示す．3次元空間の原点にある水素原子の原子核に，入射電子として，0.5±0.05 eVのエネルギーをもつガウス型の波束を入射させた．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．Fig.1は2p(m=-1)，2p(m=0)，2p(m=+1)のF_αを2乗した値の，入射軸を含む面での分布である．学会では，モデルおよび計算結果の詳細について報告する．

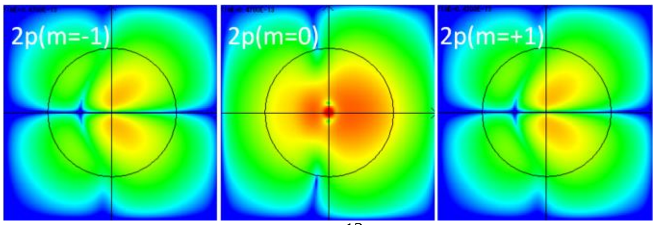

Fig.1 $t = 0.47\times10^{-13}$ sec おける様子
領域は縦軸，横軸共に$-25a_0\sim25a_0$.
図の左方向から電子が入射される．

参考文献

[1] K.Sawada, J. Plasma Physics **72**, 1025 (2006).

[2] A.Askar, A.S.Cakmak, J. Chem. Phys. **68**, 2794 (1977).