

2011年2月4日 「原子分子光の遷移過程とプラズマ分光の研究フロンティア」
「原子分子データ応用フォーラムセミナー」合同研究会

電子と水素分子イオン同位体の衝突過程

北里大 高木秀一

分子イオン・電子 データ

**Molecular assisted recombination in divertor
+ other processes**
 H_2^+ , HeH^+/NeH^+ , CH^+ , H_3^+ ,
their isotopes **D, T**

日本原子力研究機構委託調査
CRP on Light Element Atom, Molecule and Radical Behaviour
in the Divertor and Edge Plasma Regions by IAEA,

データ作成, 収集

ポテンシャル交差の有無

Configuration Interaction

Non-adiabatic Interaction

量子欠損理論

- * 連続状態（電離状態）と束縛状態（リュードベリ状態）の統一
- * 強い非断熱結合の記述
振動回転励起してリュードベリ状態に一時再結合（間接過程）
くっ付くかくっ付かないかは、っ〜と外で考える

Multi-channel Quantum Defect Theory

量子欠損理論に基づく計算

ポテンシャル交差あり

H_2^+

ポテンシャル交差なし

HeH^+, H_3^+

低エネルギー (<1eV)

高エネルギー (>1eV)

量子欠損理論に基づく計算

ポテンシャル交差あり

two-step method (CI + MQDT)

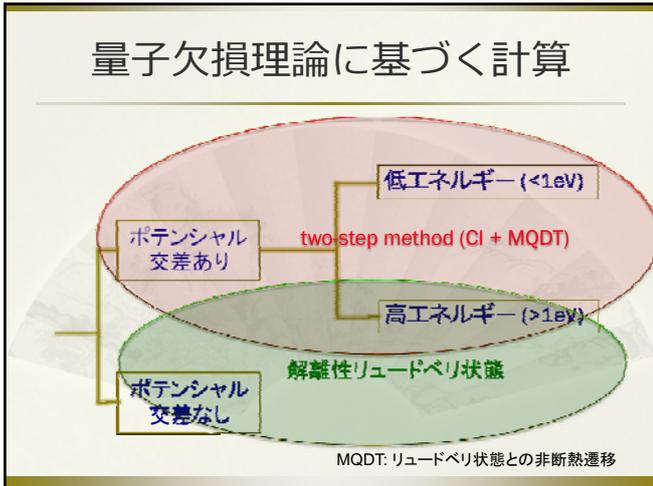
ポテンシャル交差なし

低エネルギー (<1eV)

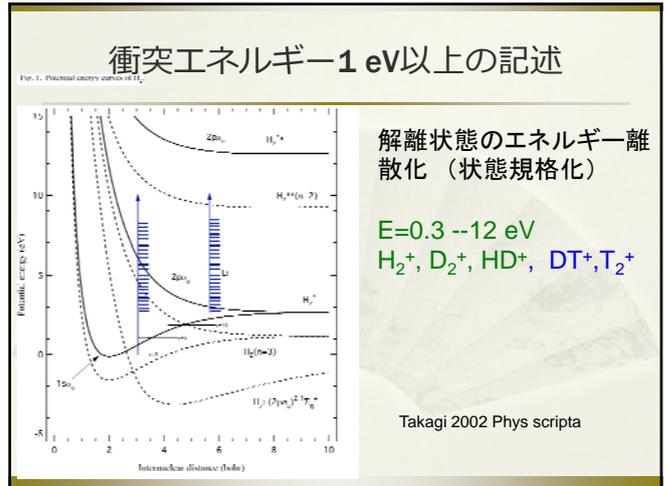
高エネルギー (>1eV)

MQDT: リュードベリ状態との非断熱遷移

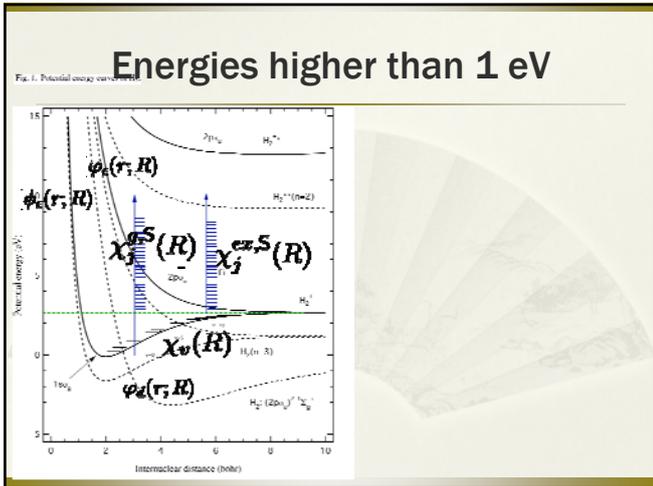
量子欠損理論に基づく計算



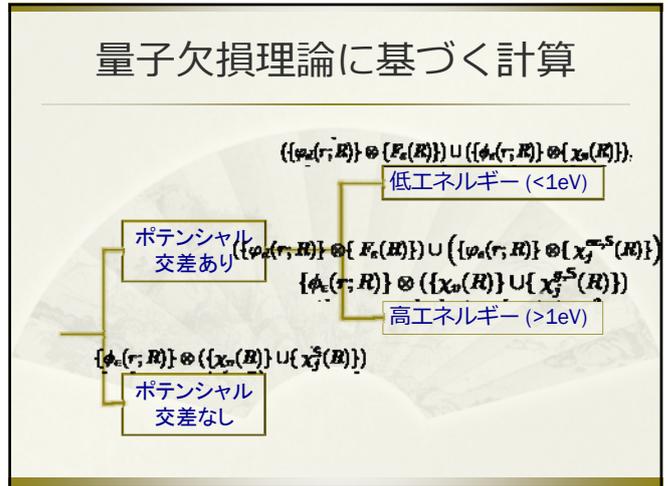
衝突エネルギー1 eV以上の記述



Energies higher than 1 eV



量子欠損理論に基づく計算



Scattering by the CI

Lippman-Schwinger eqn. for K matrix

$$K = V + VG_0K$$

Perturbation (Born series): **not converge generally**

Algebraic method: **Chebyshev quadrature**

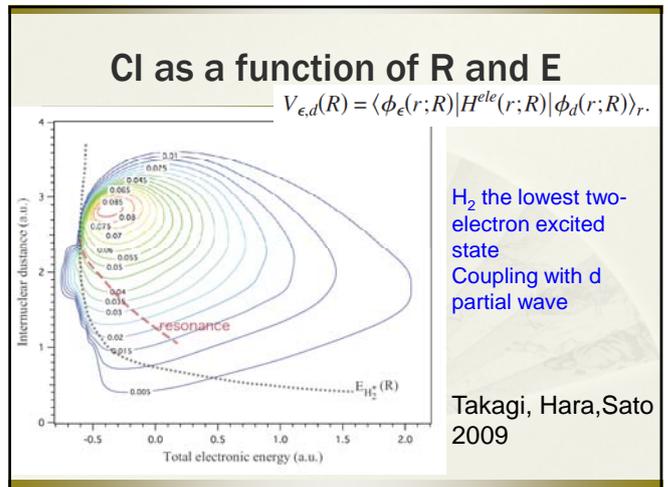
$$V_{v\epsilon,d\epsilon}^{NJ} = \langle \chi_v^N(R) | V_{\epsilon,d}(R) | F_\epsilon^J(R) \rangle_R$$

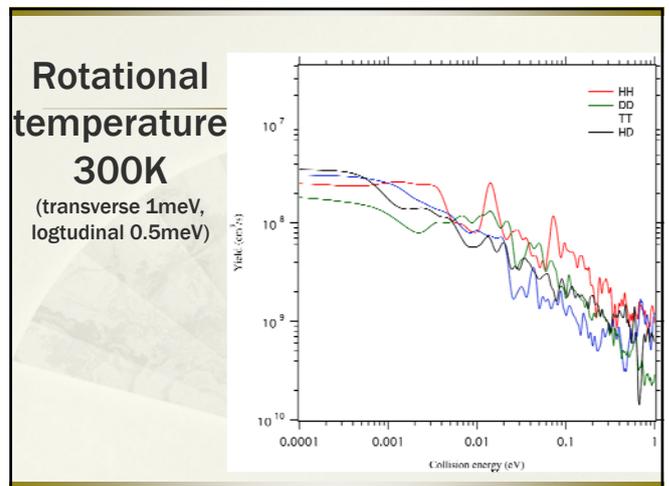
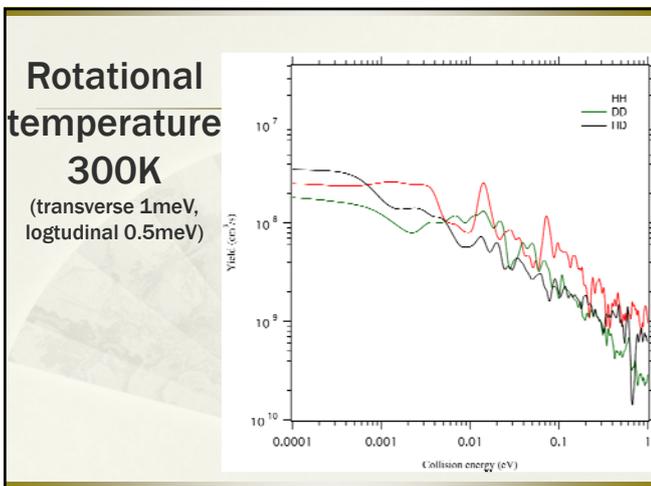
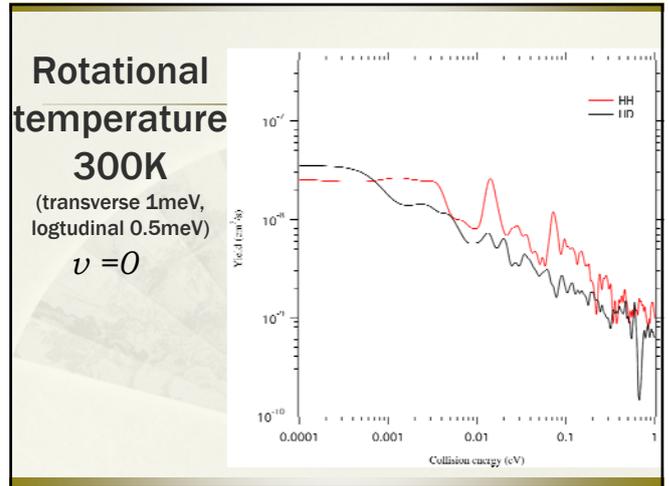
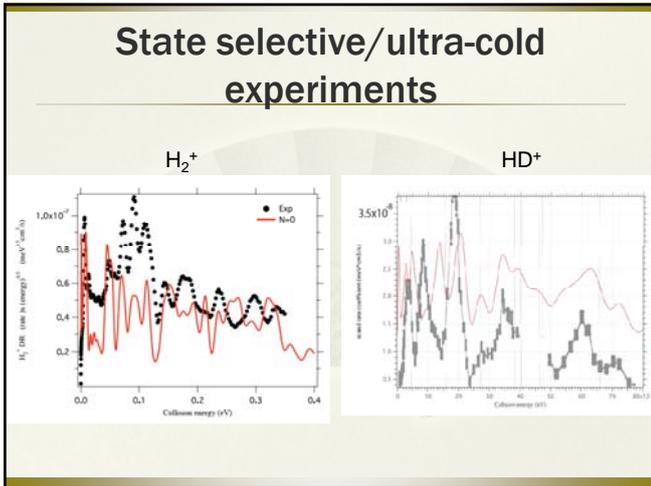
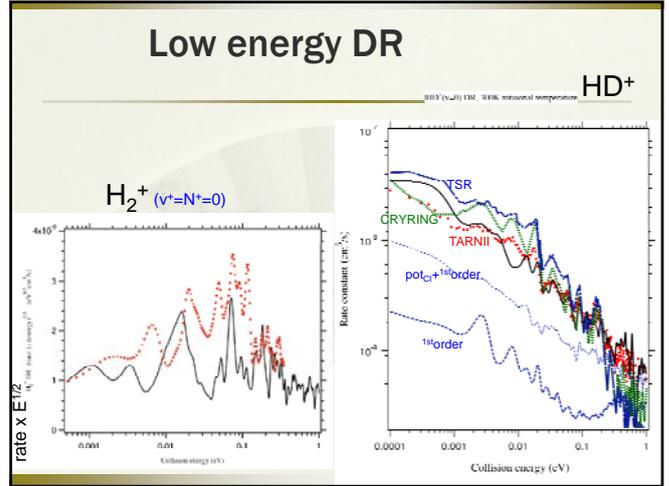
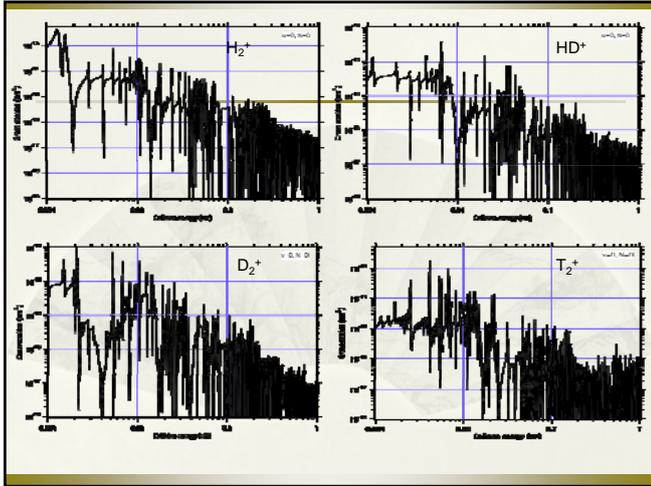
vibration dissociation

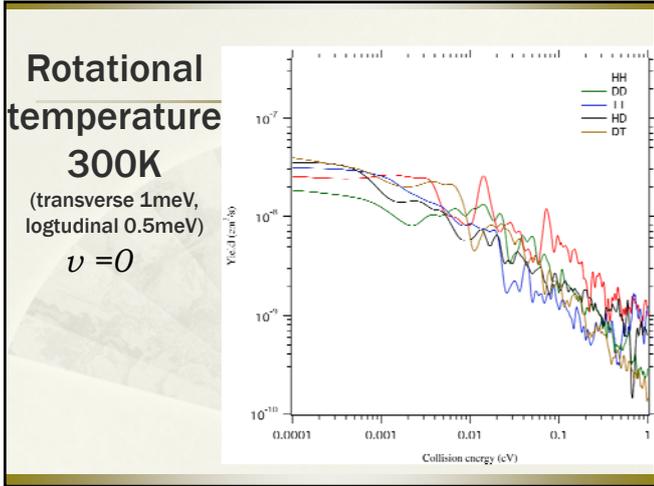
CI at R, Energy $V_{\epsilon,d}(R) = \langle \phi_\epsilon(r;R) | H^{ele}(r;R) | \phi_d(r;R) \rangle_r$

$$VG_0K = \sum_\gamma \int_{-\infty}^{\infty} dE_\gamma \frac{V_{\beta\gamma}(E_\beta, E_\gamma)}{E_\alpha - E_\gamma} K_{\gamma\alpha}(E_\gamma, E_\alpha)$$

CI as a function of R and E





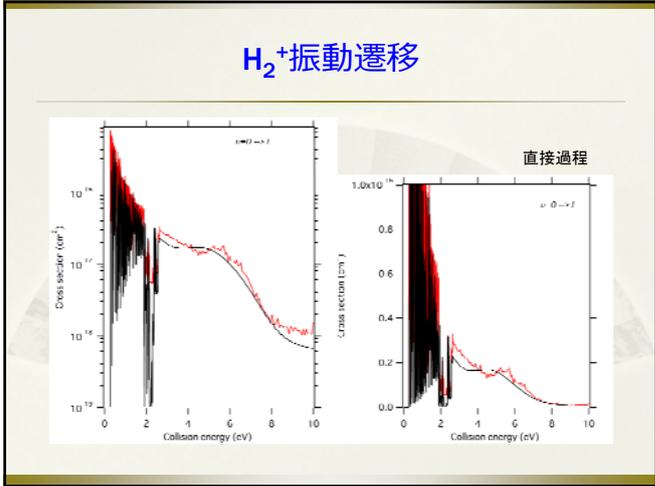
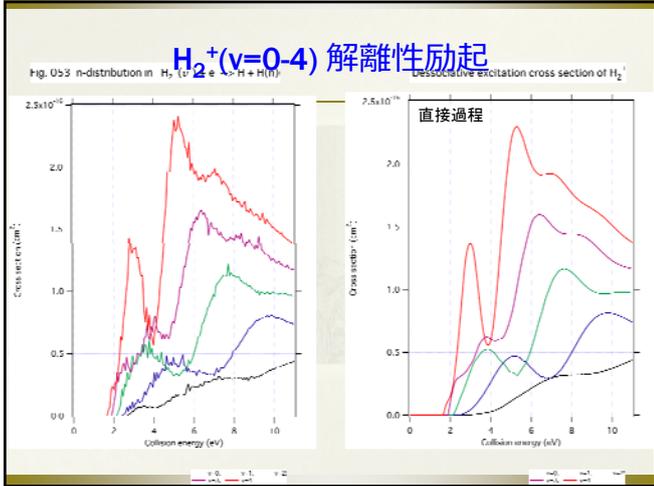
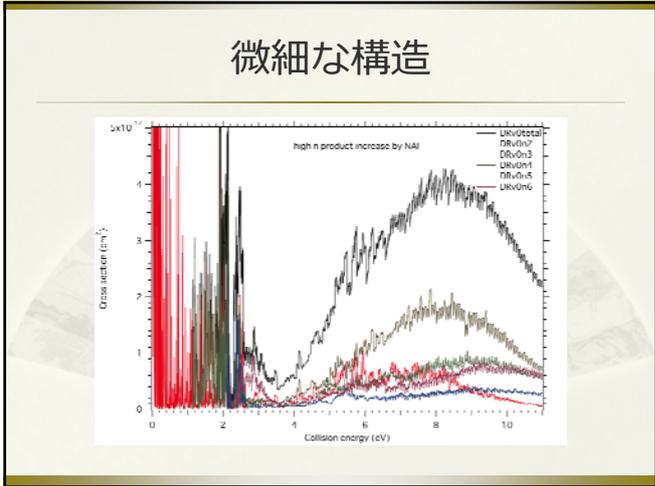
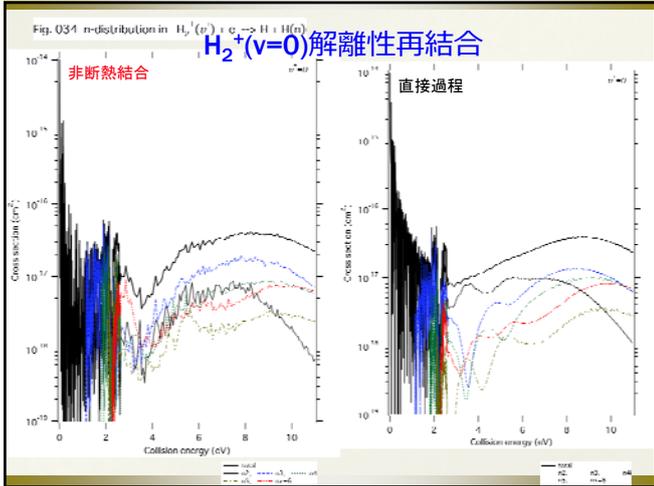


非断熱相互作用 (間接過程)

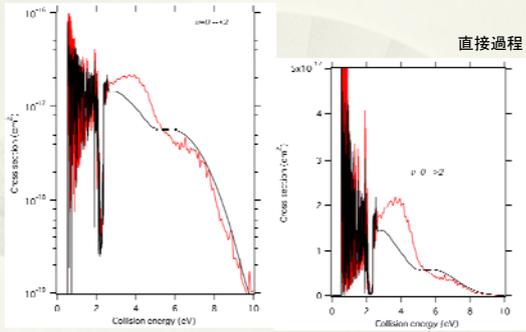
$$C_{j^{\pm}k^{\pm}l^{\pm},\alpha}^{j^{\pm}n^{\pm}A^{\pm}} = \sum_{\alpha'} (\chi_{j^{\pm}k^{\pm}}^{Sj^{\pm}n^{\pm}A^{\pm}} | \cos(\pi \mu_{\alpha}^{\pm}(\mathcal{R})) + \eta_{\alpha}^{\pm} M_{\alpha+\beta}(\mathcal{R}) | \chi_{j^{\pm}l^{\pm}}^{Sj^{\pm}n^{\pm}A^{\pm}} U_{\alpha\beta}^{j^{\pm}n^{\pm}A^{\pm}})$$

非断熱相互作用 間接過程
CI 直接過程

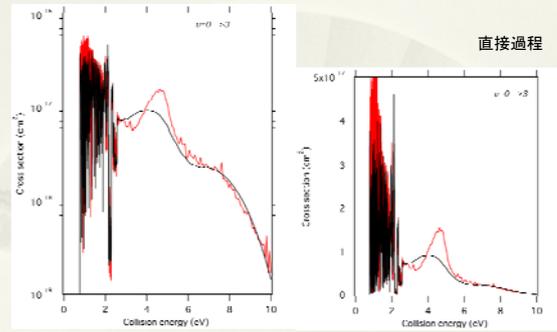
$S: \cos \rightarrow \sin$

$$(\hat{\mathcal{R}})_{j^{\pm}k^{\pm}}^j = \sum_{\Lambda} G(\hat{j}\Lambda) (S C^{-1})_{j^{\pm}k^{\pm}}^{\Lambda} G(\hat{i}\Lambda)$$


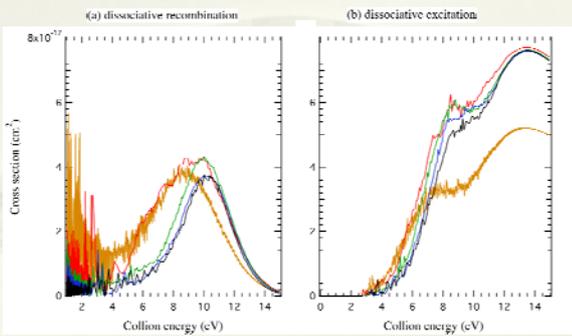
H₂⁺振動遷移



H₂⁺振動遷移



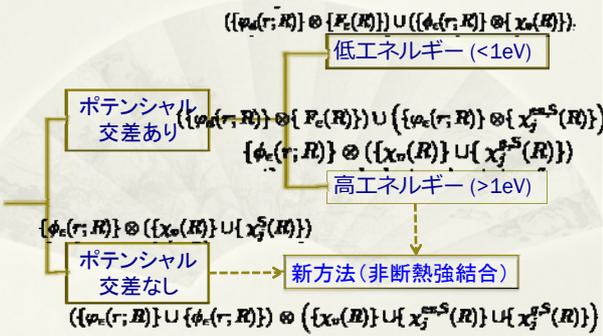
同位体(v=0) 解離性再結合/解離性励起



量子欠損理論に基づく計算



量子欠損理論に基づく計算



(近い) 将来計画

$$R_{\alpha\beta}^{eNN'} = \langle \chi_i^{\alpha NS}(R) | K_{\alpha\beta}(R, \epsilon) | \chi_j^{\beta N' S}(R) \rangle_R$$

α, β : 非弾性散乱チャンネルを含む

断熱的電子散乱状態が解ければ動的過程が解ける

従来と比較

$$C_{j'+l',\alpha}^{jN'+A} = \sum_{n\bar{l}} \langle \chi_{j'+l'}^{S'+A} | \cos(\kappa\mu_{ZA}(R) + \eta_{\alpha}^{IA}) M_{l+\bar{l}}(R) | \chi_j^{S+I} \rangle U_{n\bar{l},\alpha}^{S+I}$$

$$R_{\alpha\beta}^{eNN'} = \sum_{\alpha} U_{i\alpha,\alpha} \langle \chi_i^{\alpha NS}(R) | K_{\alpha}(R) | \chi_j^{\beta N' S}(R) \rangle_R U_{\alpha,j\beta}$$