

プラズマ中の分子過程とその計測



The University of Tokyo

東大高温プラズマ研究センター

門 信一郎

1. 背景：プラズマ中の水素分子
2. 分子のエネルギー準位と分光記号
3. 水素分子Fulcher- α 帯分光
4. Fulcher- α 帯からわかること
5. まとめ

分子の量子力学は完全には理解してなくても、まあなんとかなります（笑）。

→でも、ある程度（少し？）知っていれば考える指針になるとおもいます。

2006.08.24 研究会「核融合プラズマからプラズマプロセスまで- プラズマ中の原子過程-」(NIFS)

背景：プラズマ中の水素分子とその計測



フランク・コンドン過程による水素原子のエネルギー

→ 燃料浸透長

ダイバータにおけるプラズマの再結合促進への触媒効果

リサイクリング粒子束 → 境界層プラズマの粒子制御

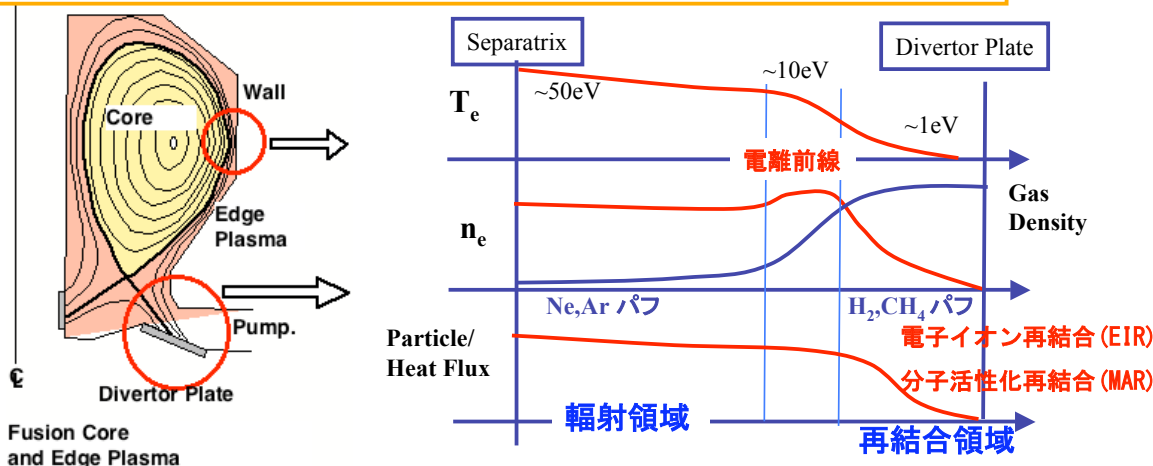
負イオン源プラズマにおける水素負イオン生成過程

H $_{\alpha}$ 等原子線モニタへの影響

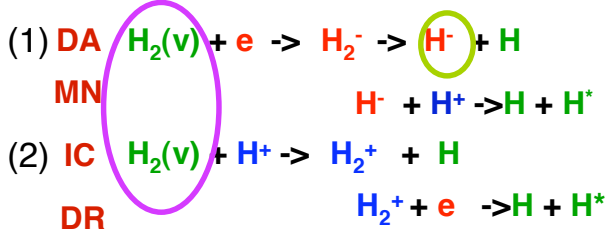
プラズマと壁とを引き離す非接触化（デタッチメント）



ガス入射による非接触化が壁材料への熱流低減の有効なシナリオ。

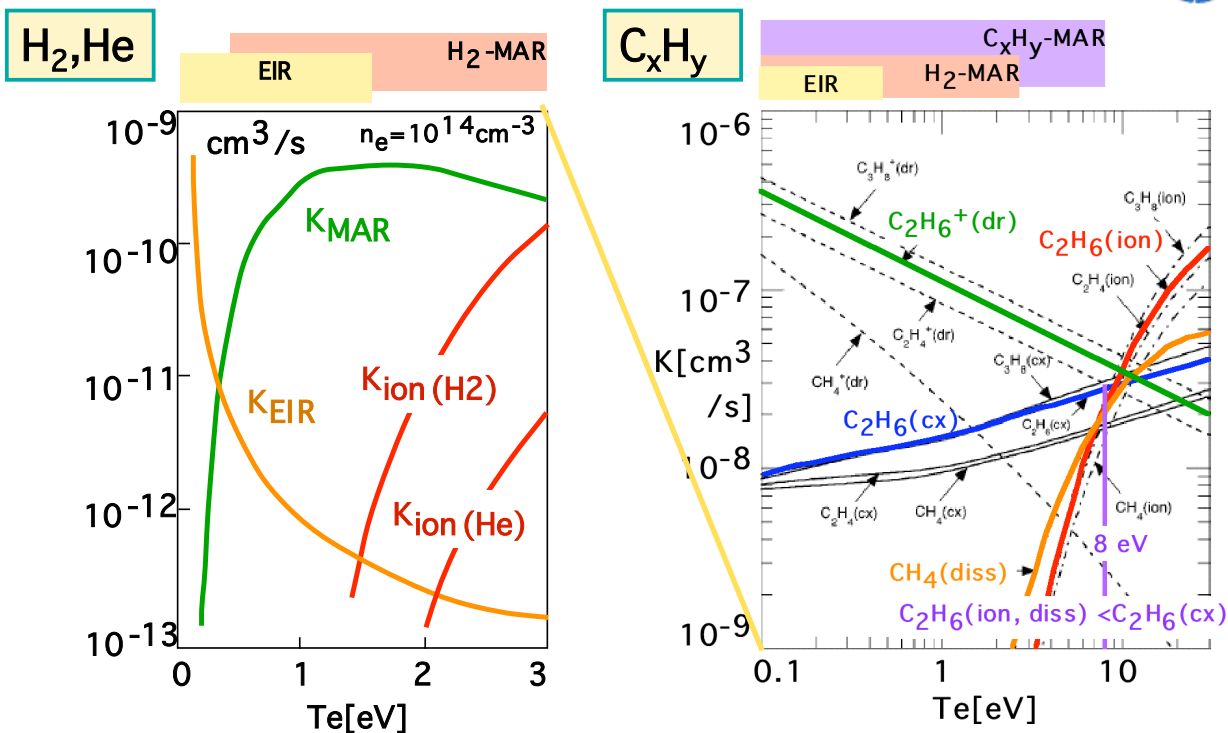


分子ガス入射により誘起される分子活性化再結合 (MAR) が注目



Molecular Assisted Recombination (MAR) の反応率は $v \geq 4$ で増大
 → 振動励起水素分子の測定が望まれる。

体積再結合に寄与する速度係数



Krashennnikov et al. Phys.Plasmas(1997)1638

Janev et al. Phys.Plasmas(2000)4364

復習：角運動量の量子力学的表現



2原子分子のシュレディンガー方程式の変数分離（振動・回転）

$$\frac{1}{|rot\rangle} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\} |rot\rangle = \frac{1}{|vib\rangle} \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - V(r) + E \right\} |vib\rangle = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu r^2}$$

角度方程式（回転）
解は球面調和関数.

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu r^2}$$

$$|rot\rangle = Y_{JM}(\theta, \phi)$$

回転波動関数の対称性は球面調和関数による.

動径方程式（振動）
Vは核間距離を固定した電子のシュレディンガー方程式の解として得られる断熱ポテンシャル.

回転エネルギー
水素原子同様、量子力学より.

ボルン・オッペンハイマー(BO)近似
(断熱近似)

核の運動をとめて、電子の状態を記述、
そうしてできた場中の核の運動を求める
振動回転運動 $\sim 1\sim 10$ ps
電子の運動 $\sim 0.1\sim 1$ fs

分子のエネルギー準位



無摂動の分子ハミルトニアン(電子項+振動項+回転項)

$$H_0 = H_{el} + H_{vib} + H_{rot}$$

$$H_{el} = T_{el}(r) + V(r, R)$$

縮退をとく摂動
 $H = H_0 + H_{SO} + H_B + \dots$
ゼーマン効果
スピン-軌道

ボルン・オッペンハイマー(BO)近似：断熱近似

$$|\varphi\rangle = |elec\rangle \frac{|vib\rangle}{r} |rot\rangle$$

$$\langle\varphi|H_{el}|\varphi\rangle = E_{el}(R) \quad \text{断熱ポテンシャル曲線（あくまでBO近似の帰結）}$$

$$\langle v|H_{vib}|v\rangle = \omega_e(v+1/2) - \omega_e x_e(v+1/2)^2 + \omega_e y_e(v+1/2)^3 + \dots$$

$$\langle rot|H_{rot}|rot\rangle = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + H_v J^3(J+1)^3$$

調和振動子 Morse型
剛体回転 遠心力による歪み

$$B_v = B_e - \alpha_e(v+1/2) + \gamma_e(v+1/2)^2 + \dots$$

$$D_v = D_e + \beta_e(v+1/2) + \dots$$

分子定数：データベースより

ハミルトニアンに対角化とは？



ハミルトニアンを行列表示したとき、固有値はエネルギーを与え、そのときの固有ベクトルが状態(波動関数)を表す。

$$H\psi = E\psi$$

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

ハミルトニアンに摂動項(微小変化)が加わったとき、無摂動の場合の固有関数があるまま摂動を含んだ全ハミルトニアンの固有関数になるとは限らない。しかし、無摂動の固有関数の線型結合で表すことができる(摂動論)。従って、**エネルギーを求める問題は行列の対角化に、波動関数を求める問題は既知の波動関数の線型結合の係数を求める問題に**帰着できる。

摂動項 H' と H_0 が可換であれば、同時固有関数を持つので、全ハミルトニアンを対角化するユニタリー変換行列 T を求め、固有値固有ベクトルを求めることができる。

分子のエネルギー準位の詳細な取り扱いは、摂動法による。

電子項の非対角成分：— 静電的摂動

振動項の非対角成分：— 非断熱ポテンシャル,

回転項の非対角成分：— 回転摂動

微小項：— スピン軌道, スピンスピン相互作用, ゼーマン効果等

基底の取り方に関連する物理的描像・・・
Hundの結合case (a-e)

分子の量子数(核スピンを除く)



電子全軌道角運動量 L

分子軸射影成分 Λ

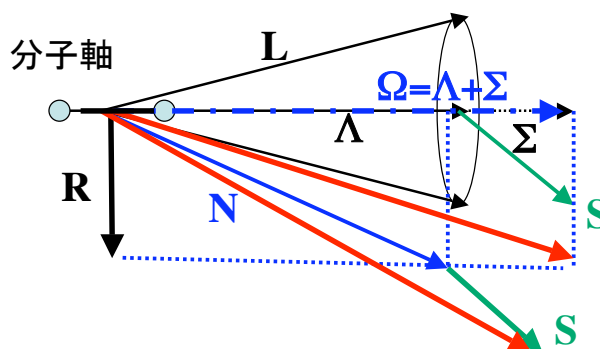
電子全スピン角運動量 S

分子軸射影成分 Σ

スピン排した全角運動量 N

電子全角運動量 $L+S$

全角運動量 $L+S+R$



Λ 型 2重分離： Λ -doubling

$\Lambda \neq 0$ (Σ 項以外) では、 L の分子軸成分 Λ と $-\Lambda$ が縮退している。これは分子回転が速くなると、 L が分子軸とuncoupleし、分離する。 $\Pi^{+/-}$ 等。

注：本講義にては核スピンは縮退度にもみ効く(強度交代)

分子の分光記号



原子 $n^{2S+1}L_J$

$2S+1$: スピン多重度
 $L = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$
 項: S, P, D, F, G, ...

分子 $[XABCD \dots abcd \dots]^{2S+1} \Lambda^{\pm} \Omega(g/u)$

異なる多重度
 基底と同じ多重度
 電子基底準位
 スピン多重度

$\Lambda = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$
 項: $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \Gamma, \dots$

偶奇性

Lは良い量子数ではない
 分子軸周りを歳差運動

Hund's case (a)
 $\Omega = \Lambda + \Sigma$
 $J = \Omega + R$

Hund's case (b)
 $N = R + \Lambda$
 $J = N + S$

分子軸

R

$\Omega = \Lambda + \Sigma$

Λ

Σ

S

N

S

数学的には異なるcaseでも基底の変換を行えば同等になる。
 → Clebsch-Gordan係数, Wigner symbol

パリティ, シンメトリー



$|el\rangle$ と $|rot\rangle$ できまる

$|el\rangle$ の対称性

- 2原子分子・・・分子軸を含む任意の面鏡映について,
 $\Lambda=0$ (Σ 項)・・・不変(右肩+)か符号反転(右肩-)かいずれか
 Λ 型2重項の場合, 片方が(右肩+)もう片方が(右肩-)
- 等核2原子分子・・・すべての電子を原点に関して反転するとき.
 $|el\rangle$ の符号が変わらない 偶状態(even) = g (gerade)
 符号が変わる 奇状態(odd) = u (ungerade)
 Σ_g, Π_u 等

$|rot\rangle = Y_{JM}(\theta, \varphi)$ より, 座標反転についてはJごとに交代する. $J=0$ では不変.

座標反転 = z軸回転($|el\rangle$ 不変) → 分子軸を含む面反転; (偶数J)右肩+/- と同じ
 等核2原子分子の核交換 (=全粒子原点反転 → 電子のみ原点反転) について

$|el\rangle |rot\rangle$ の符号不変 → sym. $\{(+), g\} \{(-), u\}$

符号反転 → antisym. 上以外

e-parity : $(-1)^J$ f-parity $-(-1)^J$ で識別する記法も



水素分子Fulcher- α 帯の振動回転構造

電子遷移(輻射遷移)の振動回転構造



$$(n', v', J') \rightarrow (n'', v'', J'')$$

$$I = h\nu \cdot N' A_{n' \rightarrow n''}$$

$$A_{n' \rightarrow n''} = 2.026 \times 10^{-6} \nu^3 \frac{|\langle n'v'J' | \mu_e | n''v''J'' \rangle|^2}{2J' + 1}$$

$$|\langle n'v'J' | \mu_e | n''v''J'' \rangle|^2 = |\langle v' | \langle n' | \mu_e | n'' \rangle | v'' \rangle|^2 |\langle J' | J'' \rangle|^2 = |\langle v' | R_e(r) | v'' \rangle|^2 |\langle J' | J'' \rangle|^2$$

電子遷移モーメントの変化が“緩やか”な場合,

$$|\langle v' | R_e(r) | v'' \rangle|^2 = R_e^2(\bar{r}_{v',v''}) |\langle v' | v'' \rangle|^2 = R_e^2(\bar{r}_{v',v''}) q_{v',v''}$$

$$A_{n' \rightarrow n''} = \alpha \nu^3 R_e^2 q_{v',v''} \frac{S_{JJ''}}{2J' + 1}$$

$$\sum_{J'} S_{JJ''} = 2J' + 1$$

Hönl-London 因子

$$\sum_{v',v''} q_{v',v''} = 1$$

Franck-Condon 因子

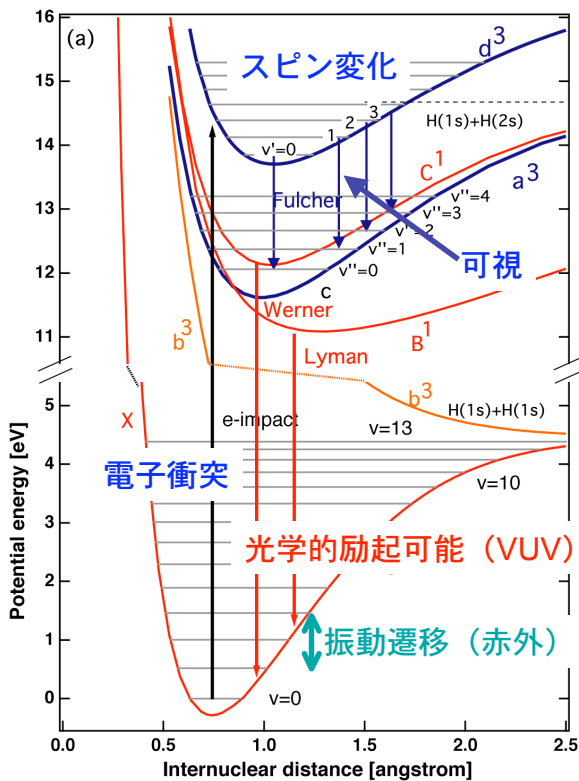
P枝(branch) $J' - J'' = -1$

Q枝(branch) $J' - J'' = 0$

R枝(branch) $J' - J'' = +1$



水素分子励起・発光過程の振動回転構造



宇宙プラズマ

■ 振動遷移 (赤外, 2.12μm 禁制遷移等)

■ Lyman, Werner帯: 真空紫外 (光励起)

[△核融合プラズマでは光学的に厚い]

[△ポートアクセスがわるい]

[△システムが高価]

核融合境界層

■ Fulcher帯 (可視) 3重項 (電子衝突)

[○ 上準位d³への励起は電子衝突のみ]

[○ 下準位がa³のみ: 2準位系]

[○ 光学的に薄い]

[○ 計測が容易, 光ファイバー使用可]

[× 前期解離のため振電準位が少ない]



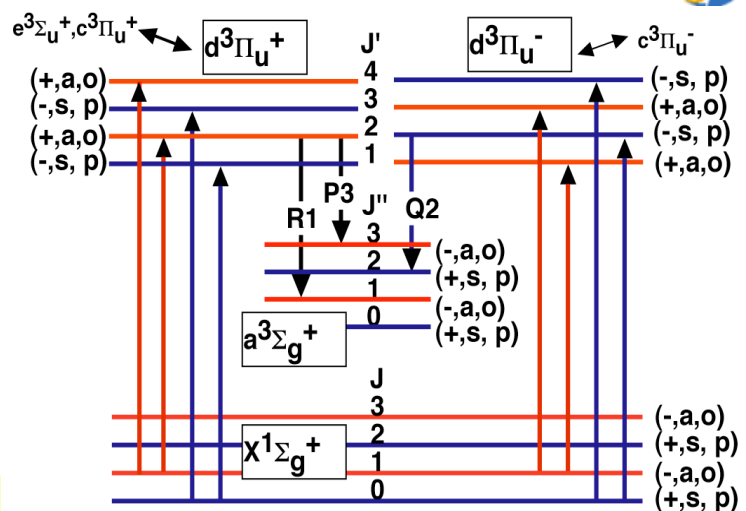
Fulcher-α 帯の振動・回転構造, 解析の指針と留意点

強度交替 (オルト・パラ比)
degeneracy of nuclear spin g_{as}

$H_2: I = 1/2$ (Fermion)

$$g_{as}^J = g_s^a = (2I + 1)(I + 1) = 3$$

$$g_{as}^J = g_a^s = (2I + 1)I = 1$$



電子基底X準位の振動・回転温度

$$N_{v^J}^X = C_v(2J + 1)g_{as}^J \exp\left[-\frac{F_X(J, v)}{kT_{rot}^X} - \frac{G_X(v) - G_X(0)}{kT_{vib}^X}\right]$$

$T_{vib} \rightarrow$ 負イオン生成, $T_{rot} \rightarrow$ ガス温度

上準位のボルツマンプロット



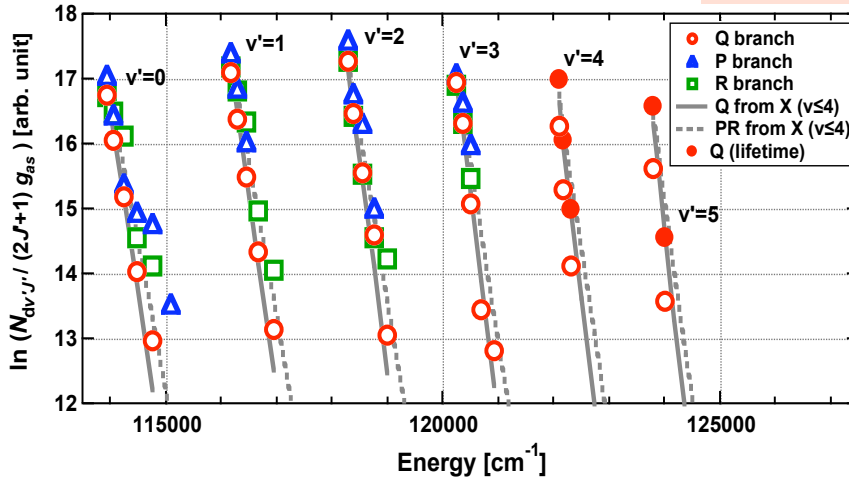
上準位回転励起分布にボルツマン分布を仮定すると

$$N_{dv',J'} = C_{dv'}(2J'+1)g_{as}^{J'} \exp\left[-\frac{F_d(J',v')}{kT_{rot}^{dv'}}\right] = \frac{N_{dv'}(2J'+1)g_{as}^{J'} \exp\left[-\frac{F_d(J',v')}{kT_{rot}^{dv'}}\right]}{\sum_J (2J'+1)g_{as}^{J'} \exp\left[-\frac{F_d(J',v')}{kT_{rot}^{dv'}}\right]}$$

$$A_{n' \rightarrow n''} = \alpha v^3 R_e^2 q_{v',v''} \frac{S_{J',J''}}{2J'+1}$$



$$\ln\left(\frac{I_{av''J''}(\lambda_{av''J''})^4}{g_{as}^{J''} S_{J',J''}}\right) = const - \frac{F_d(J',v')}{kT_{rot}^{dv'}}$$



・ 振動準位毎に回転温度が異なる

(物理的意味は間接的)

・ 厳密には複数の振動準位からの励起があるので直線にはならない。

・ P,R枝はアノマリ

Fulcher α 帯の特徴



選択規則

$a \leftarrow \dots \rightarrow a, s \leftarrow \dots \rightarrow s,$

$\Delta J = 0$ (Q), $-\Pi^-$,

$\Delta J = -1$ (P), 1 (R), $-\dots \Pi^+$

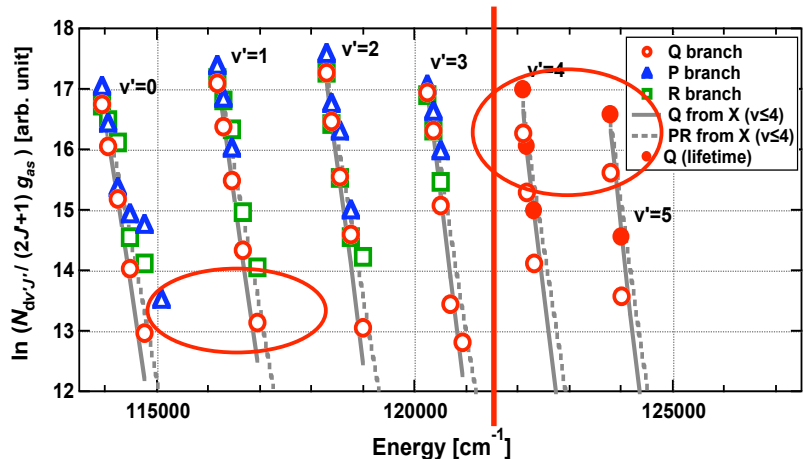
前期解離

$u \leftarrow \dots \rightarrow u$

$d(+/-, v' \geq 3) \sim H(1s) + H(2s)$

非断熱的摂動

$d(+, v' = 1) \sim e(v'' = 3)$



● 前期解離によるDiffuseが見られる

● HL因子: Q枝: P枝+R枝 = 1:1

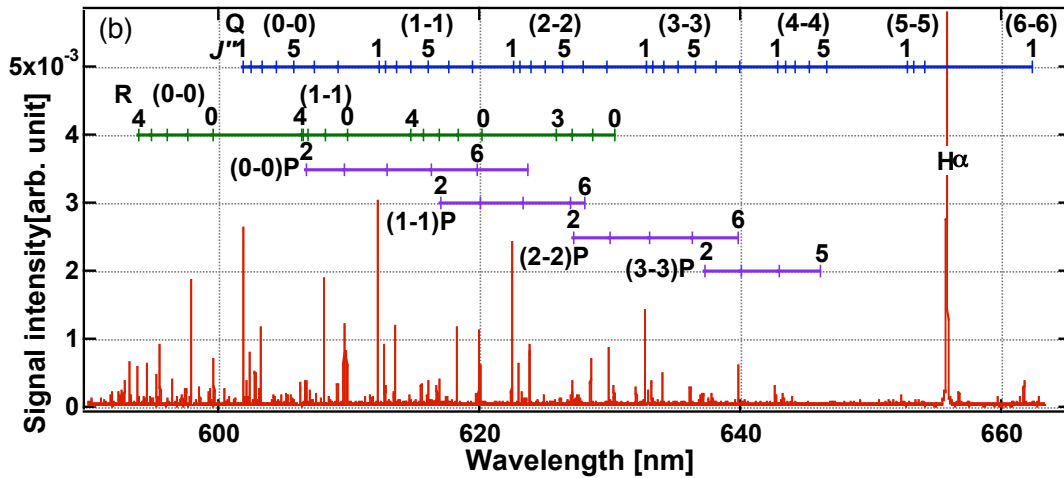
しかし, Q枝がやや小さい

→ Λ 型2重項は熱平衡に達していない

基底とのコロナ平衡が別々に成り立っている

(低気圧放電プラズマでは解釈に注意)

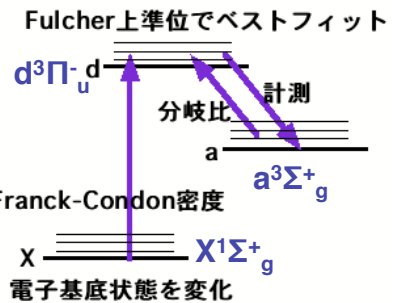
Fulcher Band Spectra



1m-Czerny-Turner (2400 G/mm), PMT(Hamamatsu R928)
Wavelength resolution(FWHM) < 0.03 nm @50 μm slit

原子分子データ, 近似値の検討

振動励起した水素分子→負イオン生成, 分子活性化再結合(MAR)
 水素分子からの発光 (Fulcher-αバンドスペクトル) から求める。



従来研究の方法による仮定 (Fantz 他)。

- ・ 回転励起分布は無視, ないし上準位を用いる
- ・ 発光の分岐比はFranck-Condon原理に従う--
- ・ 電子衝突励起にFranck-Condon原理を仮定--

$$A_{a,v'}^{d,v} \propto q_{vv'}^{d-a}$$

$$R^2(X-d) = R_e^2 \cdot q_{vv'}^{X-d} \cdot S_{JJ'}^{X-d}$$

$$R_{X,v}^{d,v'} \propto q_{vv'}^{X-d} \exp\left\{\frac{-E_v(0) + E_v(v)}{kT_e}\right\}$$

・ 近年の報告 : Fulcher-αでF-C原理が成り立たない。

case: d -> a : G Staszwska 1999

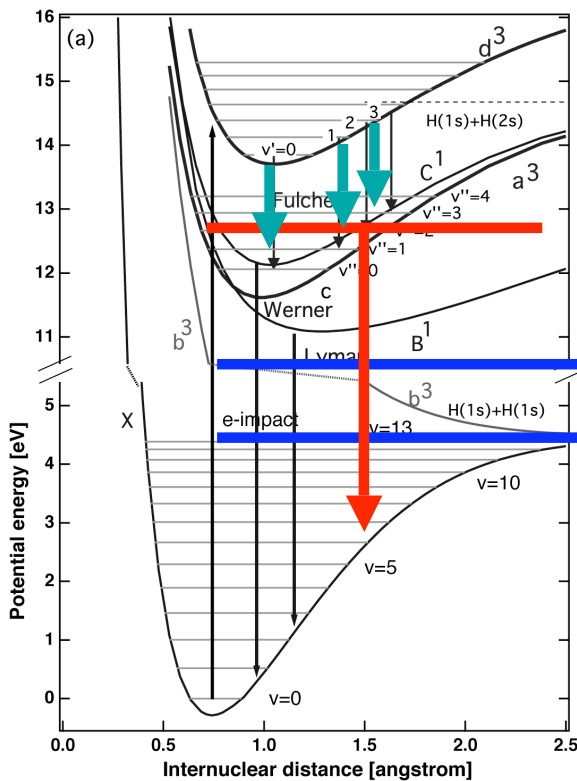
case: X -> d: Meneses, 1995

- ・ 電子励起準位の回転励起は一般に基底と異なる。

- ・ 励起係数, 遷移モーメントを直接計算する必要がある。
- ・ スピン変化を扱う必要。



Flanck-Condon 原理



フランク・コンドン(FC)原理
(励起・解離を記述する)

Fulcher帯は対角遷移(v'=v'')

v=2に行きやすい

H(1s)+H(1s)
FCアトム

フランク・コンドン仮定の是非

遷移モーメントが緩やかかどうか、断熱ポテンシャル曲線の形状等による。

→古典的描像ではイメージしにくい



自然放出遷移確率 A係数 : $d^3\Pi_u - a^3\Sigma_g$ (vibronic)

$A = R^2$ - 双極子遷移確率

$$R = \int \psi^* M \psi d\tau \quad \psi = \frac{1}{r} \psi_e \psi_v \psi_r$$

$$R = \underbrace{\int \psi_v' \psi_v'' dr}_{q_{v'v''}^{1/2}} \underbrace{\int \psi_r' \psi_r'' \cos\theta \sin\theta d\theta d\phi}_{S_{J'J''}^{1/2}} \underbrace{\int \psi_e' \bar{M}_e \psi_e'' d\tau}_{R_e(r)}$$

Franck-Condon 原理が成り立つ場合:

$$R^2(d-a) = R_e^2 \cdot q_{v'v''}^{d-a} \cdot S_{J'J'}^{d-a}$$

$R_e(r)$ のr依存性は緩やかでない(G Staszwska 1999)

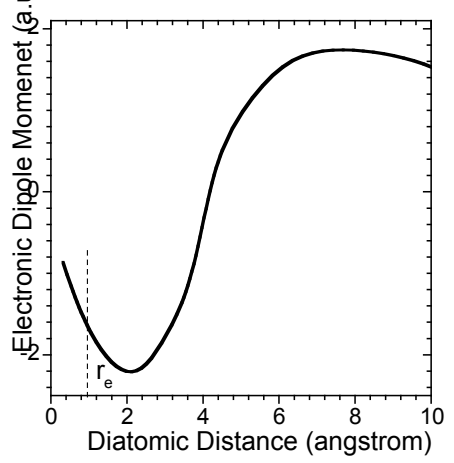
振動の波動関数を動径方向Schrödinger 方程式

$$\frac{\partial^2 \Psi_v}{\partial r^2} + V(r) \Psi_v = E \Psi_v$$

の解から直接求める必要がある。



Fulcher- α の遷移モーメント $R_e(r)$



Franck-Condon原理を仮定した場合の遷移確率(F-C因子)と比較を行う。

d³Π_u - a³Σ_g 双極子振動 (vibronic) 遷移確率とF-C 因子との比較



The comparison of $q_{v,v'}/R^2$ for d³Π_u - a³Σ_g

a \ d	v''=0	v''=1	v''=2	v''=3	v''=4
v'=0	.93/.93 100%	.069/.105 66%			
v'=1	.064/.04 160%	.79/.84 94%	.137/.213 64%		
v'=2		.115/.08 144%	671/.743 90%	.204/.323 63%	.003/.007 43%
v'=3		.015/.006 250%	.154/.117 137%	.555/.643 86%	.268/.432 61%

非対角成分の差
が大きい

動径方向のSchrödinger方程式の数値解はほぼ厳密。

Franck-Condon因子は Spindler(1971)のデータに一致する。

対角遷移への影響は少ないが、若干の誤差を与えている可能性がある。

励起係数の評価 [門, 稜原]



励起準位間の励起係数のデータはない(特に3重項)。

Gryzinski's 半古典近似

$$Q^{\text{Gry}}(E_i) = \int_{E_1}^{E_2} \sigma(\Delta E) d(\Delta E),$$

$$\sigma(\Delta E) = \frac{N_{\text{elec}} \times 6.56 \times 10^{-14}}{\Delta E^2} \sqrt{\frac{E_i + E_{\text{ion}}}{(E_t + E_i + E_{\text{ion}})^3}}$$

$$\times \left[1 - \frac{E_t}{E_i + E_{\text{ion}}} + \frac{4E_t}{3\Delta E} \ln \left(2.7 + \sqrt{\frac{E_i + E_{\text{ion}} - \Delta E}{E_t}} \right) \right]$$

$$\times \left(1 - \frac{\Delta E}{E_i + E_{\text{ion}}} \right)^{E_i/(E_i + \Delta E)} \quad [\text{cm}^2/\text{eV}],$$

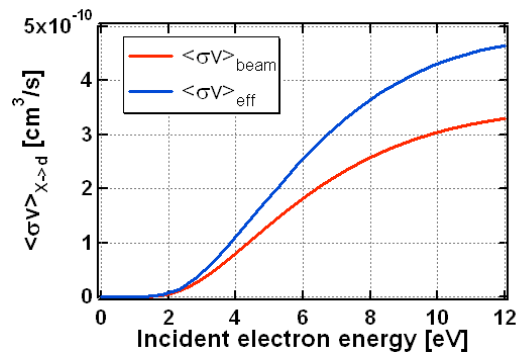
$$E_1 = \max(E_i + E_{\text{ion}} - U_{n+1}, E_{\text{ion}}),$$

$$E_2 = \max(E_i + E_{\text{ion}} - U_n, E_{\text{ion}}).$$

$N_{\text{elec}}=1$ 程度とすると電子ビーム実験(v=0 -> all v')にあうことが知られていた

→ 振動励起分布も含め実効的値を求めた。

$$\sum_{vJ} \left\{ R_{X,vJ}^{d,v'J'} N_{vJ}^X \right\} = \left\langle R_X^d \right\rangle_{\text{eff}} N^X$$



We normalize the effective excitation rate to agree with the experimental value by beam experiment**



$$N_{\text{elec}} = 0.7256$$

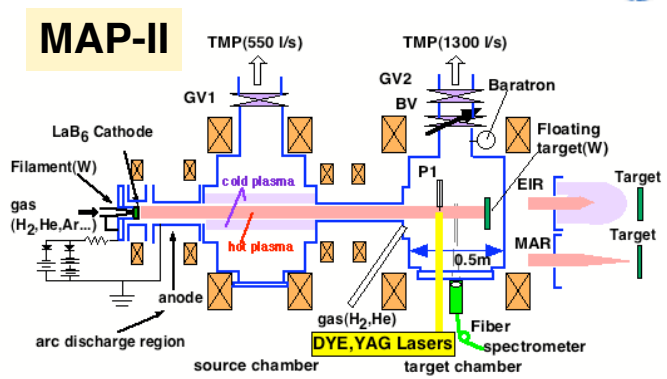
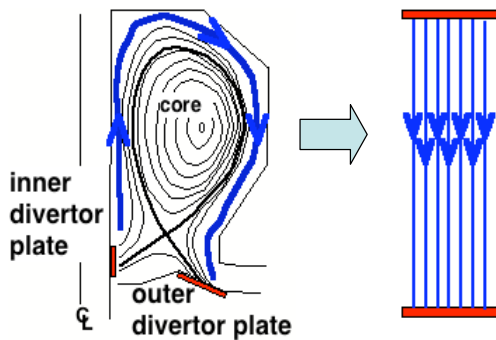
*M. Gryzinski, Phys. Rev., **138**, A305 (1965).

G. R. Möhlmann and F. J. De Heer, Chem. Phys. Lett., **43, 240 (1976).



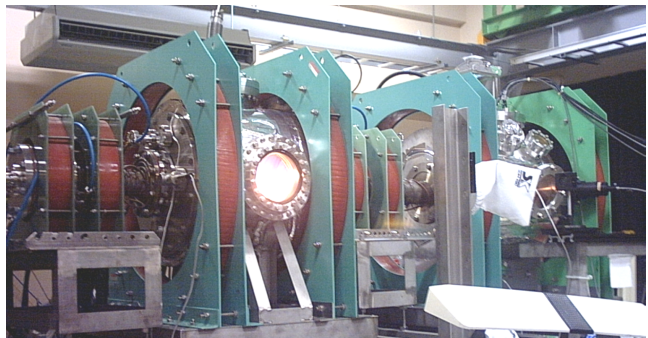
Fulcher- α 計測の実際

ダイバータ模擬装置MAP-IIによる研究

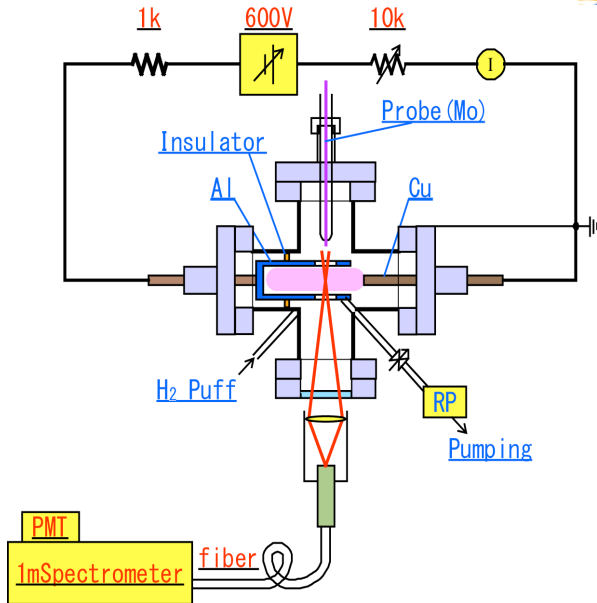
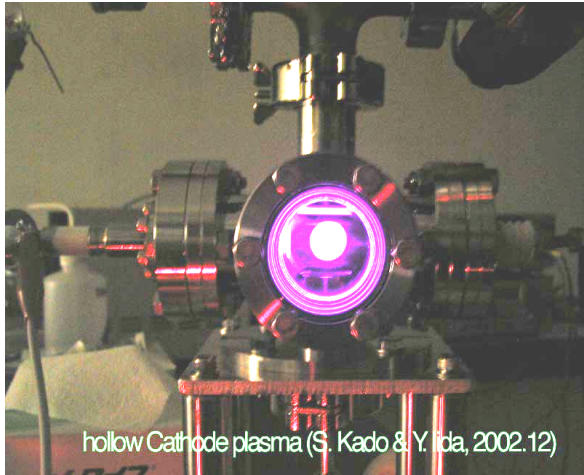


Arc discharge: 70-100V, 30-45A
 B = 0.02T
 $n_e \sim 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $T_e \sim 0.05-15 \text{ eV}$
 $T_i \sim 0.5 \text{ eV}$ (@target chamber)

差動排気:
 on--> アタッチ運転
 off --> デタッチ可能



目的: 体積再結合・非接触プラズマに寄与する原子分子過程を解明する。



Discharge Condition:

230-270 V, 70 mA, 20-3000 Pa(300 Pa in this work)

$n_e \sim 10^9 \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 2-5 \text{ eV}$

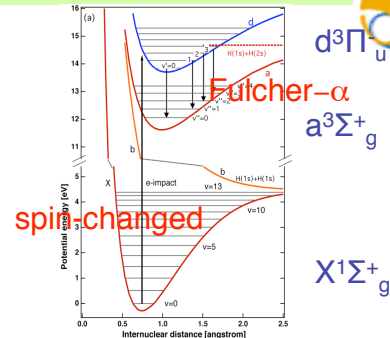
Fulcher- α ($d^3\Pi^-_{u-} - a^3\Sigma_g^+$) for the $X^1\Sigma_g^+(v, J)$ measurement

Assuming $X(vJ)$ is characterized by Boltzmann T_{vib}, T_{rot}

$$N_{v'J'}^X = C_v (2J+1) g_{as}^J \exp\left[-\frac{F_X(J, v)}{kT_{rot}^X} - \frac{G_X(v) - G_X(0)}{kT_{vib}^X}\right]$$

Coronal equilibrium • $d \leftarrow X$: $\sum_v \sum_J \{R_{X, vJ}^{d, v'J'} N_{vJ}^X\} = N_{v'J'}^d \sum_{J'} A_{d, v'J'}^{a, v''J''}$

• $d \rightarrow a$: $I_{d, v'J'}^{a, v''J''} = h\nu \cdot A_{dv'J'}^{av''J''} N_{vJ}^d$



→ $I_{av''J''}^{dv'J'} = \frac{hc}{\lambda_{av''J''}^{dv'J'}} \sum_{v''J''} A_{av''J''}^{dv'J'} \times n_e \sum_{v, J} \left\{ R_{XvJ}^{dv'J'} C_v (2J+1) g_{as}^J \exp\left[-\frac{F_X(J, v)}{kT_{rot}^X} - \frac{G_X(v) - G_X(0)}{kT_{vib}^X}\right] \right\}$

measurement v'', J'' Reliable database required Fitting Parameter

Radiative transition ratio

Hönl-London factor

$$S_{J'J''}^Q = \frac{2J'+1}{2}$$

$$S_{J'J''}^P + S_{J'J''}^R = \frac{J'}{2} + \frac{J'+1}{2} = \frac{2J'+1}{2}$$

Excitation rate (adiabatic)

$$R_{XvJ}^{dv'J'} = q_{Xv}^{dv'} < Q_{v' \leftarrow v}^{Gryzinski} v_e > a_{0J}^{1J'} \delta_{g_{as}}^{g'_{as}}$$

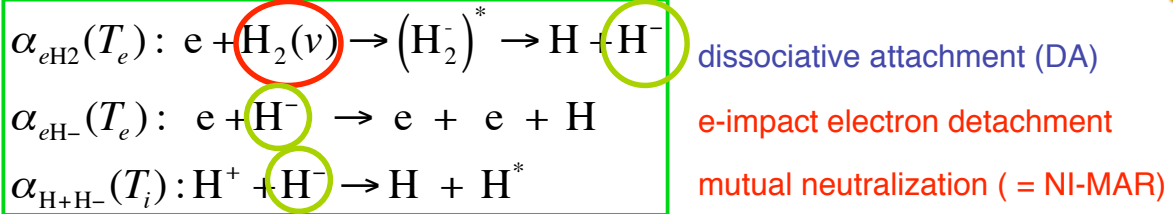
$$\sum_{K'} a_{\Lambda K}^{\Lambda' K'} = \sum_{K'} \sum_r \bar{Q}'_r (2K'+1) \begin{pmatrix} K' & r & K \\ \Lambda' & \Lambda - \Lambda' & -\Lambda \end{pmatrix}^2 = 1$$

Multi-polar $Q'_{r=1,4} : \{0.76, 0.122, 0.1, 0.014\}$.

$r = 1 \rightarrow$ dipolar = Hönl-London factor

P,R枝はHL比に従わない : Anomaly

(1) Fulcher α 計測による負イオン密度の推定 [門, 梶田]



$$0 = \frac{d[H^-]}{dt} = n_e \sum_{0 \leq v \leq 9} [H_2(v)] \alpha_{eH_2} - [H^-] (n_e \alpha_{eH^-} + [H^+] \alpha_{H^+H^-}) - [H^-] / \tau$$

production
depletion
transport

vibrational distribution of H₂

$$[H_2(v)] = N_0 \exp\left[-\frac{G(v) - G(0)}{kT_{vib}}\right]$$

- T_{vib} : Fulcher-band spectroscopy
- T_e : double probe
- n_e : double probe
- $[H^-]$: Laser photodetachment
- deg. dissociation : H-H₂ intensity ratio

4 ≤ v ≤ 9: 80-90% production
v < 4 small DA rates,
v > 9 low H₂(v) population

We first discuss w/o transport.

(2) Loss-event / photon



H_αに代表される原子スペクトルへの分子の寄与

体系に流入してくる原子Γ_H・分子束Γ_{H₂}
 発光 ε(H:H_α), ε(H₂:H_α), ε(H₂:Fulcher-α)

$$\frac{H_2 - Loss - events}{H_\alpha - photon} = \frac{\Gamma(H_2 - Loss)}{\varepsilon(H_\alpha)} = \frac{n_e [H_2] (S + D + CX + D_A)}{n_e [H_2] (X_{1 \rightarrow 3}^{diss} + FX_{1 \rightarrow 3}^{dir}) B(H_\alpha)} \quad F = [H]/[H_2]$$

$$\frac{H_2 - Loss - events}{Fulcher - photon} = \frac{\Gamma(H_2 - Loss)}{\varepsilon(H_2(d \rightarrow a))} = \frac{n_e [H_2] (S + D + CX + D_A)}{n_e [H_2] X_{d \leftarrow X}(T_e)}$$

■ 強度比の利用

低密度極限
F=0

$$\frac{\varepsilon(H_2(d \rightarrow a))}{\varepsilon(H_\alpha)} = \frac{X_{d \leftarrow X}(T_e)}{X_{1 \rightarrow 3}^{diss}(T_e) B(H_\alpha)}$$

グロー放電等において強度比からT_eを得る。

F計測

$$\frac{\varepsilon(H_\beta)}{\varepsilon(H_\alpha)} = \frac{(X_{1 \rightarrow 4}^{diss} + FX_{1 \rightarrow 4}^{dir}) B(H_\beta)}{(X_{1 \rightarrow 3}^{diss} + FX_{1 \rightarrow 3}^{dir}) B(H_\alpha)}$$

高密度で解離励起が小さくなると感度が落ちる

(3) He+H2混合ガスプラズマの解離度 (MAP-II) [門]



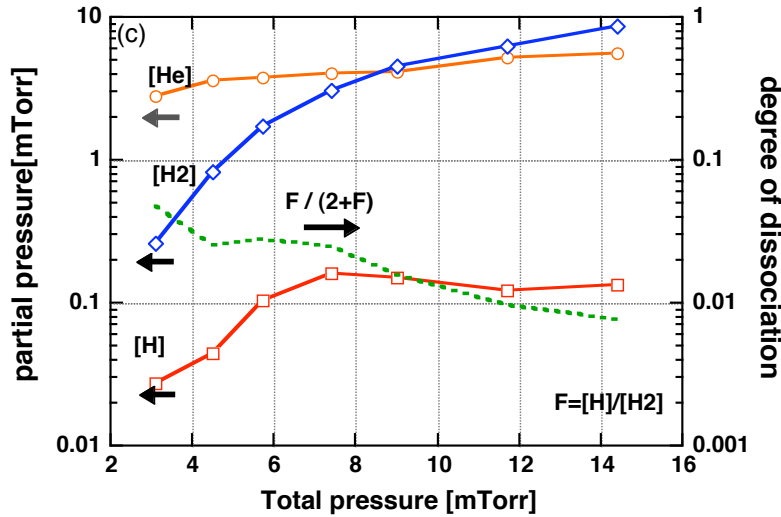
$$F = [H]/[H_2]$$

Kado et. al., Journal of Nuclear Materials 337-339 (2005)116.

$$\text{解離度 } F/(2+F) = \frac{\varepsilon(H_\delta)}{\varepsilon(H_2(d \rightarrow a))} = \frac{n_e [H] X_{1 \rightarrow 6}^{eff}(n_e, T_e) B(H_\delta)}{n_e [H_2] X_{d \leftarrow X}(T_e)}$$

注：やや誤差あり

実験：Heプラズマ3.1 mTorrにH₂ガスをパフ (n_e<10¹²cm⁻³, T_e~2-4eV)



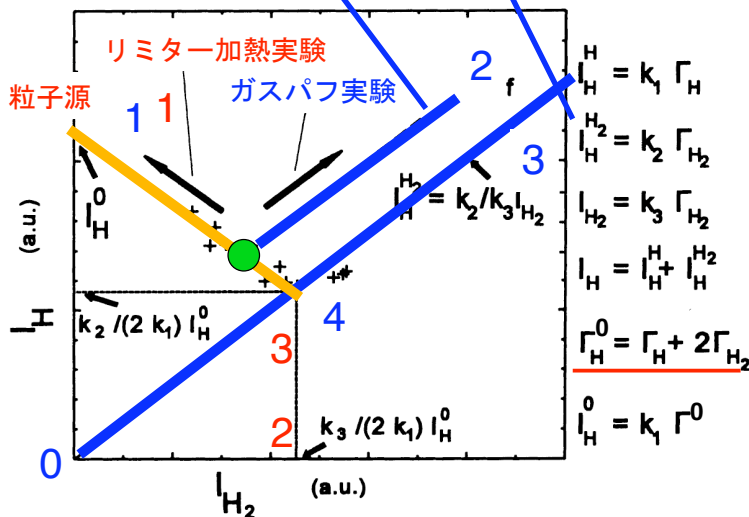
高解離度領域で検証中

(4) リミターからのリサイクリング粒子束計測 (TEXTOR)



A. Pospieszczyk et. al., Journal of Nuclear Materials 266-269 (1999) 138

一部原子としてリリース すべて分子として供給されているとき



$$k_1^{-1} = \frac{\Gamma(H)}{\varepsilon(H : H_\alpha)}$$

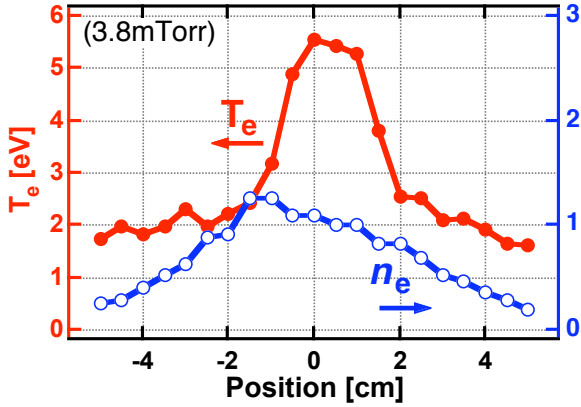
$$k_2^{-1} = \frac{\Gamma(H_2)}{\varepsilon(H_2 \rightarrow 2H : H_\alpha)}$$

$$k_3^{-1} = \frac{\Gamma(H_2)}{\varepsilon(\text{Fulcher})}$$

k₂, k₃ がわかれば
リサイクル粒子の原子分子比がわかる

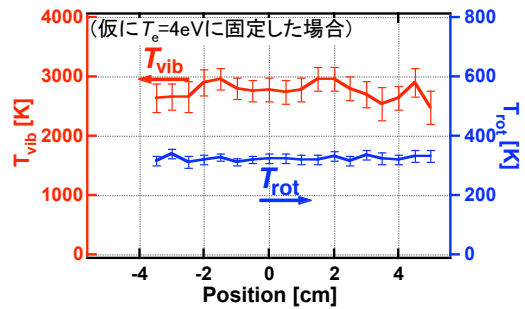
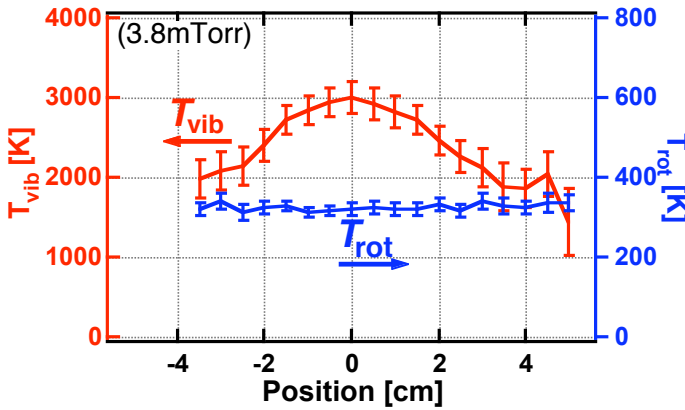
- k₁のみ既知：[加熱]→測 I_H⁰→(k₁)→(1)求 Γ_H⁰→[ガスパフ]
→(2)求傾(k₂/k₃)→(3,4)求座標(k₂/2k₁, k₃/2k₁)→得：k₂, k₃, 絶対値 I_{H2}
- k₁, k₃, I_{H2} 既知：[加熱]→求 I_H⁰→(k₁)→(1)求 Γ_H⁰→(k₃)
→(2)求座標(k₃/2k₁)→(3)加熱曲線の基点→得：k₂

(5) 振動温度・回転温度の空間分布 (線積分量) [門]



- 水素分子の滞在時間
[熱速度 1 km/s]/[体系 10 cm] = 100μs
- 振動励起再分配の素過程の特性時間
1/[H₂, n_e] <σv> ~ 10 ms
- 基底準位(X)の振動励起は一樣のはず?
- 上準位の寿命は40 ns 程度
→ その場の発光である。
- 振動励起分布がボルツマン分布で空間一樣であれば, T_eが一樣でないといけない (下図) → T_eの実測値に矛盾。

T_{vib} の非熱平衡性 (2 温度分布等) の可能性を検討している。



(6) 前期解離係数 D_{pre} の実験的決定 [山崎, 門]



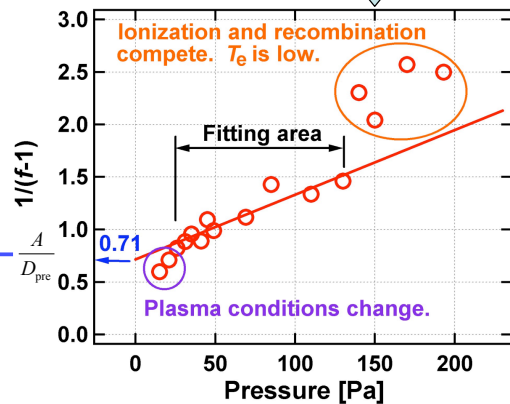
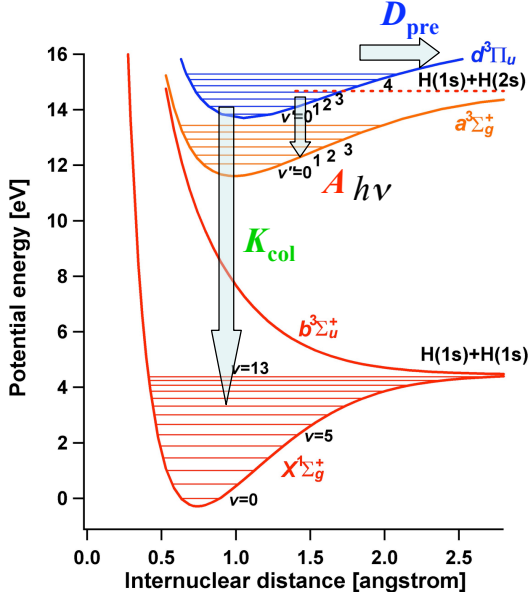
v'=4 に関して

前期解離 D_{pre}, 中性ガスとの衝突脱励起 K_{col}

$$\text{補正係数 } f = \frac{N^{Xfit}}{N^{exp}} = \frac{\tau_{v'=0-3}}{\tau_{v'=4}} = \frac{A + D_{pre} + K_{col}}{A + K_{col}}$$

自然放出のみ考慮に入れた分布

$$\frac{1}{f-1} = \frac{A + K_{col}}{D_{pre}}$$



衝突による脱励起が **中性粒子の密度に比例**する領域でフィッティング

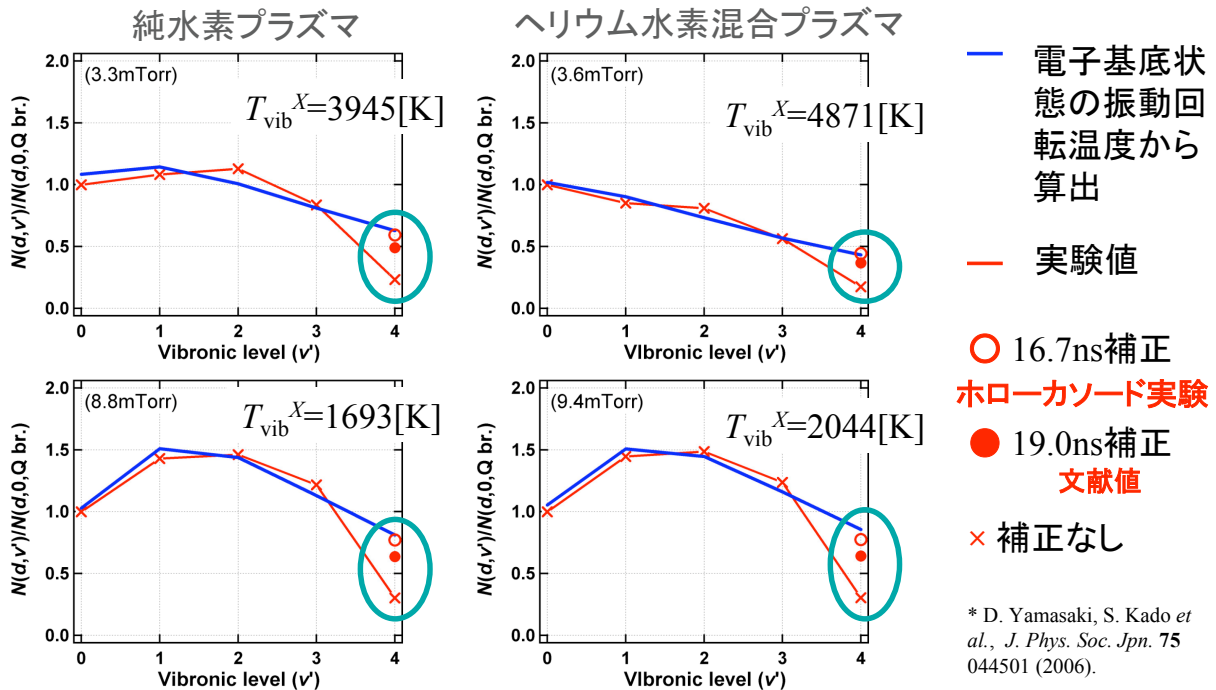
$$\frac{\tau_{v'=0-3}}{\tau_{v'=4}} = \frac{A + D_{pre}}{A} = 2.40 = \frac{40.0\text{ns}}{16.7 \pm 0.8\text{ns}}$$

* M. L. Burshtein et al., Opt. Spectros. (USSR) 68, 166 (1990).

補正係数の検証_[山崎, 門]



K_{col} を無視できるMAP-IIの低圧プラズマに補正係数を適用



まとめ



- 水素分子の振動励起状態は、負イオン生成、および負イオンを通じた再結合による**デタッチ状態**の達成により、炉心から境界層に漏れ出したプラズマの**熱流低減**に寄与する可能性がある。
- 可視領域の**Fulcher- α 帯**(Q枝)は計測が容易である利点がある。
- データベースはやや乏しいが、おおむね悪くない近似法が整ってきている。
- **Fulcher- α 帯**(P,Q,R枝)の分光は未開の様々な応用の可能性を有している。

今後の課題

- 分子の励起モデルとFulcher帯との比較
- 非熱平衡性(**冷たい入射ガスの存在**)の評価、空間構造の導出。
- 真空紫外スペクトル(Lyman, Werner帯)との比較など

参考文献



- [-] S. Kado, Y. Iida, S. Kajita, D. Yamasaki, A. Okamoto, B. Xiao, T. Shikama, T. Oishi and S. Tanaka,
 “Diagnostics of Recombining Plasmas in Divertor Simulator MAP-II” (Review)
 J. Plasma Fusion Res. **81**, 810 (2005) .
- [-] S. Kado, S. Kajita, D. Yamasaki, Y. Iida, B. Xiao, T. Shikama, T. Oishi, A. Okamoto and S. Tanaka
 “Experimental study of negative ion profiles in H₂-MAR plasmas in divertor simulator MAP-II”
 J. Nucl. Mater. **337-339**, 166-170 (2005).
- [-] B. Xiao, S. Kado, S. Kajita and D. Yamasaki,
 “Rovibrational distribution determination of H₂ in low temperature plasmas by Fulcher- α band spectroscopy”
 Plasma Physics and Controlled Fusion **46**, 653-668 (2004).
- [-] 門信一郎：
 「核融合境界層プラズマの分子分光 ～可視領域の水素分子スペクトル～」
 プラズマ・核融合学会誌**80**, 749-756 (2004)
- [-] 門信一郎, 山崎大輔, 飯田洋平, 肖炳甲,
 「水素分子Fulcher帯発光におけるP,R枝の異常性」 誤植：式(8), (15)
 プラズマ・核融合学会誌**80**, 783-791(2004).
- [-] B. Xiao, S. Kado, S. Kajita, D. Yamasaki and S. Tanaka,
 “Rovibrational distribution of H₂ in low temperature plasma: the dependence on plasma parameters”
 J. Nucl. Mater. **337-339**, 1082-1086(2005) .
- [-] S. Kado, D. Yamasaki, B. Xiao, Y. Iida, A. Okamoto, S. Kajita, T. Shikama and S. Tanaka,
 “On the Anomalous Characteristics in the P and R Branches in a Hydrogen Fulcher Band”
 J. Plasma Fusion Res. SERIES, **7**, 54 (2006) .
- [-] Daisuke Yamasaki, Shinichiro Kado, Bingjia Xiao, Yohei Iida, Shin Kajita and Satoru Tanaka,
 “Experimental Evaluation of Predissociation Rate in $v = 4$ State Usable for Analysis of H₂ Fulcher-”
 J. Phys. Soc. Japan, **75**, 044501 (2006).