

高温プラズマの詳細原子モデルの研究

Study of detailed atomic processes in high temperature plasmas

佐々木 明 [1]

Akira Sasaki[1]

[1] 原研関西

[1] KPSI, JAEA

多価電離イオンの原子モデルの研究について報告する。温度数 10eV から数 10keV のプラズマの電離度や発光、スペクトルの計算を行い、実験室でレーザー照射や放電によって生成されるプラズマからのスペクトルの同定を行い、また計算されたプラズマの輻射放出、吸収係数 (emissivity, opacity) を用いた輻射流体シミュレーションによる X 線レーザー、X 線源の最適化を進めている。

高温プラズマの原子過程のシミュレーションは、中性原子から完全電離イオンに至る多価電離イオンの基底状態と励起状態についてのレート方程式 (衝突輻射モデル) を解くことによって行う。この際、多価電離イオンのエネルギーレベルと衝突、輻射を介した電離、励起過程のレート係数などの原子素過程データが必要である。内部構造が簡単な水素原子の場合は、解析的にエネルギーレベルやレート係数を求めることができる。これに対して、鉄をはじめとする多電子イオンでは、無数と言って良いほど多くのエネルギーレベルと、その間で起こる素過程のレートを考慮する必要があり、データは多くの場合数値シミュレーションに依存する。

本研究では HULLAC コード [1] により計算した原子素過程データに基づく、衝突輻射モデルの研究を行った。多電子イオンの構造の特徴は、基底状態とそれからの一電子励起状態だけでなく、多くの内殻励起、多電子励起状態が存在することである。特に、イオン化エネルギーより低い位置に存在するレベルにはしばしば大きなポピュレーションが存在し、それらを介した励起・自動電離過程 (EA) や二電子性再結合過程 (DR) が加わることにより、イオンアバンスや平均価数が影響を受ける。一方、レベルのエネルギーが高くなるに従ってポピュレーションは急激に減少し、ある限界以上高いエネルギーのレベルが平均価数やスペクトルに与える影響は無視できるものになると考えられる。

本研究では、C、Al、Fe、Sn、Xe、Au の原子モデルを開発した。そして、各イオンの一電子励起状態に加えて、それらをコアとする二電子励起状態をエネルギーの低い順に追加したモデルによってそれぞれ計算される平均価数の収束を調べることにより、平均価数やポピュレーションの正確な計算をするために原子モデルに含めるべきエネルギーレベルの組を決定することを試みた。

多価電離イオンのスペクトルは、しばしば H、He 様や Ne 様などの閉殻イオンの低い励起状態から放出される鋭い線スペクトル、放射再結合による連続スペクトルの他、幅の広いピークとして現れる疑似連続スペクトル成分から構成される。最後のものは、電子軌道が部分的に満たされた (half-filled) 状態、高励起状態からの発光、内殻励起・多電子励起状態からのサテライト線放射などに起因し、非常に多数の微細構造スペクトルが重畳して疑似連続スペクトルとして観測される。その強度は一般に鋭い線スペクトルに比べて小さいが、プラズマのオパシティを通じ、輻射輸送に影響を与える。今回開発したモデルでは、鋭い線スペクトルについてはエネルギーレベルの微細構造を考慮する一方で、その他の遷移についてはレベルを電子配置やその集合を単位として平均化する UTA(Unresolved Transition Array) モデル [2] を用いるようにして、観測されるスペクトルの特徴をより良く再現できるようにした。

ポピュレーションやスペクトルなどの計算結果は、原子モデル (エネルギーレベル) の選択、素過程データの精度など多くの要因によって変化するので、正しさの検証が重要な課題である。そこで、原子過程コードの相互比較を行ったところ [3]、原子モデル (エネルギーレベルの分布) が同じ計算の電離度やイオンアバンスはほぼ一致すること、今回のシミュレーションによる詳細な原子データを用いたモデルは、全てのイオンを疑似水素様イオンと考える従来のモデル (遮蔽水素モデル) [4] よりも、平均価数やスペクトルの振る舞いを良く再現することが分かった。

そして、Fe についての結果を Arnaud & Raymond[5] と比較したところ、温度 15-300eV (平均価数 6 - 15) の範囲で、今回計算された平均価数と文献値の違いは 1.5 以下であることが分かった。相違の原因は、各イオンの励起状態の微細構造における準安定励起状態の影響と考えられる。

[References]

[1] A. Bar-Shalom, et al., Phys. Rev. E56, R70 (1997).

[2] C. Bauche-Arnoult, et al., Phys. Rev. A31, 2248 (1985).

[3] C. Bowen, et al., J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 99, 102 (2006).

[4] D. E. Post, et al., ADANDT, 20, 397 (1977).

[5] M. Arnaud, et al., ApJ, 398, 394 (1992).