

レーザープラズマ中における多電子原子の電子構造

(東大院理) ○奥津 浩史 佐甲 徳栄 山内 薫

【序】強レーザー光を固体表面あるいはクラスターに照射することによって、高温(0.1 - 1.0 keV)かつ高密度($10^{20} - 10^{24} / \text{cm}^3$)のプラズマが発生することが報告されている [1]。このようなプラズマ環境下では、荷電粒子間の強い相互作用により、原子、分子の電子構造は大きく影響を受けると考えられる。1980年代には、慣性閉じ込め核融合プラズマの診断手段として、原子発光スペクトル線のシフトを利用する方法が考案されたが、実際の観測は困難であった。しかし近年、均一な密度を持ったプラズマを生成する手法の開発と計測技術の向上により、レーザープラズマ中の原子発光スペクトルのエネルギーシフトが報告されるようになった [2]。このようなエネルギーシフトのメカニズムを解明することは、レーザー光が誘起するプラズマの複雑なダイナミクスを理解するための基礎を与えると考えられる。本研究では、モデルケースとして、He (閉殻)、Li (開殻) に着目し、その電子状態の計算を通してレーザープラズマ中における原子の電子構造を解明することを目指した。

【計算方法】プラズマ中の He 原子および Li 原子を Debye 遮蔽モデル [3] を用いて記述した。すなわち、孤立原子を記述する多電子ハミルトニアン中の、核 - 電子の引力ポテンシャルおよび電子間反発ポテンシャルを、遮蔽された Coulomb 型ポテンシャル(湯川ポテンシャル)によって置き換えた。湯川型ポテンシャルによって表される「非クーロン場中での電子分布」を適切に表現するために、自由度の高いガウス型基底関数系を用いて計算を行った。He については完全 CI 法、Li 原子については multi-reference CI 法を用いた。

【結果と考察】準位エネルギーの変化を、遮蔽パラメータ m の関数として計算した。励起エネルギーの変化を He, Li 原子それぞれについて計算した結果を図 1, 2 に示す。典型的なレーザープラズマ条件 $0 \leq m \leq 0.13$ での計算結果から、遮蔽パラメータ m の増加とともに準位エネルギーが増大し、隣接する準位のエネルギー間隔が狭くなることが示された。

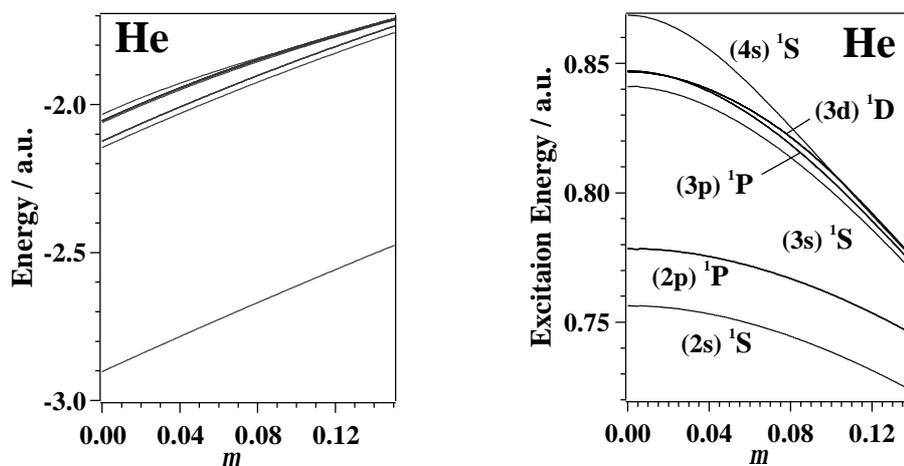


図 1. He のエネルギー準位の m 依存性

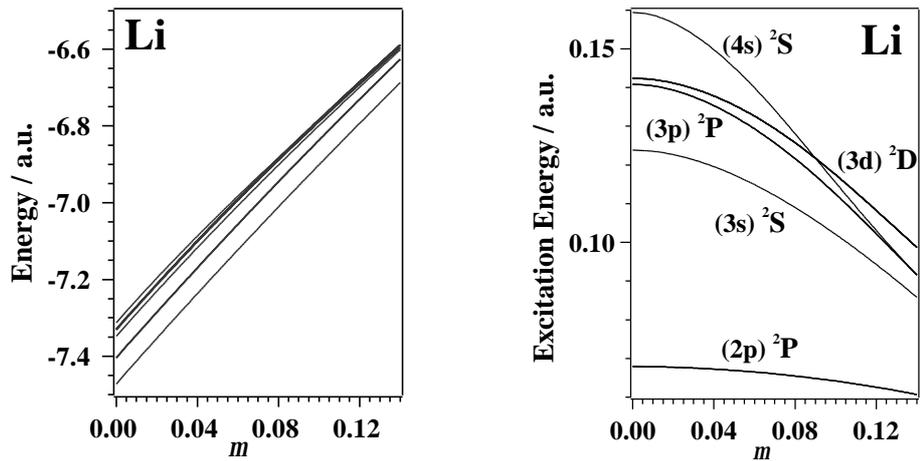


図 2. Li のエネルギー準位の m 依存性

さらに、He の場合 $(3p)^1P$ と $(3d)^1D$ 、 $(3d)^1D$ と $(4s)^1S$ において、また、Li の場合 $(3d)^2D$ と $(4s)^2S$ 、 $(3p)^2P$ と $(4s)^2S$ において、エネルギーの順序が遮蔽パラメータ m の増加に伴って逆転することが示された。その際の電子密度分布変化の一例を図 3 に示す。電子分布は、遮蔽パラメータ m の増加に伴って膨張する傾向を示した。また、 m の増加に伴い、核から遠い軌道 ($(3p)^1P$) ほど、この傾向が顕著であることが示された。以上の結果は、高温プラズマ環境下においては原子の殻構造が特異なものとなることを示している。

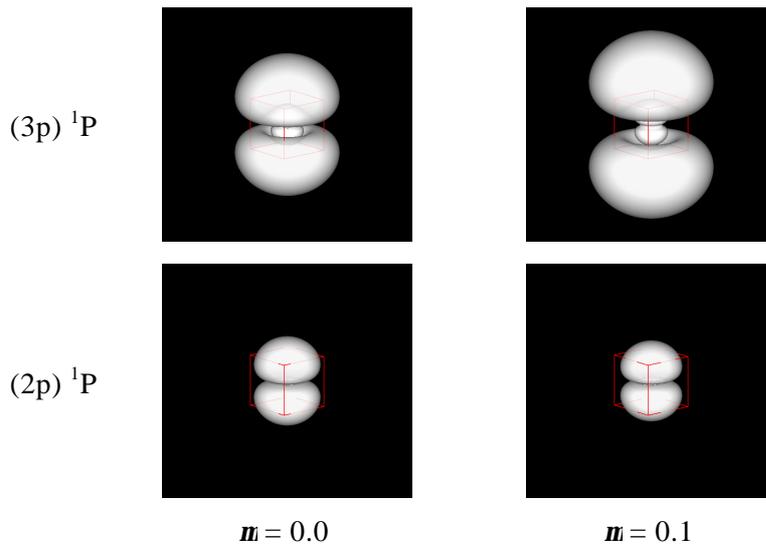


図 3. He p_z 軌道の電子密度分布

図中の赤枠は一辺の長さが 16 a.u. の立方体を表す。

【参考文献】

- [1] D.Attwood, *Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation: principle and application* (Cambridge University Press, 2000)
- [2] K.Eidmann, A.Saemann, U.Andiel, I.E. Golovkin, R.C.Mancini, E.Andersson, E.Förter, *J.Quant.Spectrosc.Radiat.Trans.* **65** (2000) 173.
- [3] P.K. Mukherjee, J. Karwowski, and G.H.F. Diercksen, *Chem. Phys. Lett.* **363** (2002) 323.