2C19　　**レーザープラズマ中の多価イオンの電子構造の解明**

(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やクラスターに集光することによって生成する高温かつ高密度のプラズマ(レーザープラズマ)においては、荷電粒子間の強い相互作用により、原子の電子構造は孤立原子の状態から大きく変化する。実際、レーザープラズマ中の原子の発光スペクトルにおいて、顕著なエネルギーシフトが観測されている [1]**。我々は、このような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的として、**Debye **遮蔽モデルに基づくハミルトニアンを構築し、原子および原子イオンのエネルギー構造、および、振動子強度の計算を行ってきた** [2]**。**

本研究では、レーザープラズマ中の多価原子イオンの電子状態を明らかにするために、「相対論的 Debye **遮蔽モデル」を構築し、**2 **電子系、**3 **電子系、**4 **電子系の多価イオン** (Z = 2 – 40) **について、エネルギースペクトルおよび振動子強度の計算を行った。**

【計算方法】非相対論的 Debye **遮蔽モデルハミルトニアンを以下に示す**:

$$\hat{H} = -\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N}\frac{Z}{r_i}\exp(-\mu r_i) + \sum_{i>j}^{N}\frac{1}{r_{ij}}\exp(-\mu r_{ij})\,. \qquad (1)$$

式 (1) **においては、プラズマ中におけるクーロンポテンシャルの遮蔽を表現するために、核－電子の引力ポテンシャルおよび電子間の反発ポテンシャルが、遮蔽されたクーロン型ポテンシャル(湯川ポテンシャル)** [3] **によって置き換えられている。本研究では、核電荷が大きい多価イオンにおける相対論効果を取り入れるために、**2 **次の** Douglas-Kroll **変換に基づく定式化** [4] **をハミルトニアン** (1) **に導入した。なお、この「非クーロン場中での電子分布」を適切に表現するために、ユニバーサル基底関数法に基づく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。**2 **電子系については完全** CI **法、**3 **電子、**4 **電子系については多参照** CI **法を用いた。**

【結果と考察】 3 **電子系多価イオン** (Li **様原子) について、**(2s) ^{2}S – (2p) ^{2}P **遷移の振動子強度を計算した。**Li **原子に関する以前の計算結果と同様、**μ **の増加にともなって振動子強度が増加する傾向が見られた。また、核電荷** Z **が増加するにつれて、**(i) **振動子強度の絶対値が急激に減少すること、そして、**(ii) μ **の増加に伴う変化が小さくなることが示された。**Z = 3 **および** 10 **の場合について、**(2s) ^{2}S **状態と**(2p) ^{2}P **状態の動径電子密度分布を図** 1 **に示す。**Z = 3 **の場合には、**(2s) ^{2}S **状態と**(2p) ^{2}P **状態の電子密度分布は空間的に大きな広がりを持ち、**μ **の増加とともに分布はさらに広がる傾向を持つことが見られる。この傾向は、**Z = 3 **の振動子強度の増加を説明する。すなわち、電子分布の増大によって遷移モーメントが増加し、それによって振動子強度が増加する。一方、**Z = 10 **の場合には、電子密度分布は** r **の小さな領域のみに分布を持ち、**μ **の増加に対してほとんど変化を受けないことが示されている。この傾向は、核電荷の増大によって原子軌道が収縮し、プラズマ環境の影響を受けにくくなったためと考えられる。このため、振動子強度の絶**

対値は減少し、平坦な μ 依存性を示す。また、相対論効果を取り入れた場合の振動子強度と非相対論による計算結果を比較した結果、$Z = 5$ の場合は相対論の補正は 0.1 %程度となるが、$Z = 40$ の場合では 48 %にも達した。本研究で導入された相対論的 Debye 遮蔽モデルによって、レーザープラズマ中多価イオンの電子状態計算が初めて可能となった。

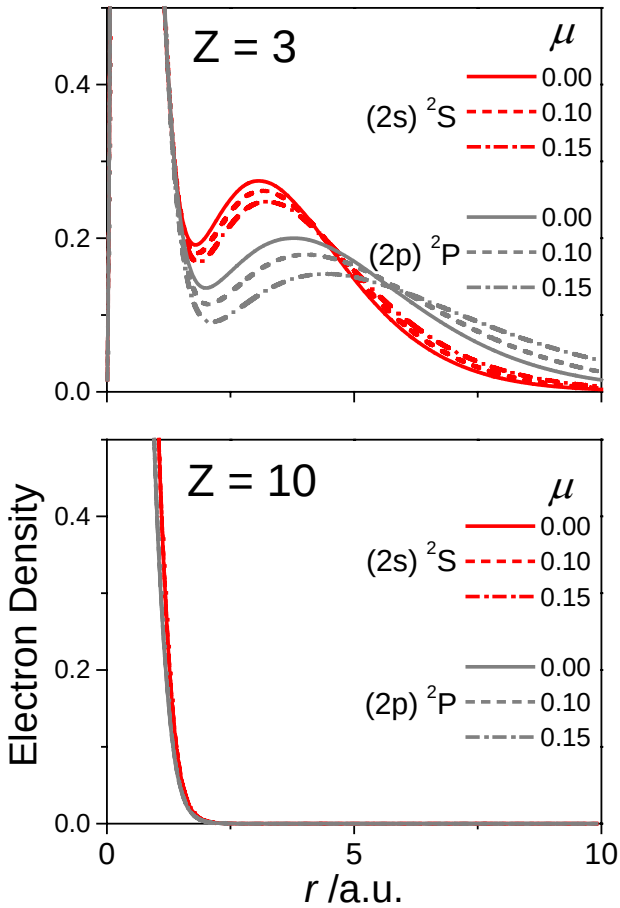

図 1. Li 様原子の (2s) ^{2}S および (2p) ^{2}P 状態の動径電子密度分布

【参考文献】

[1] K.Eidmann, A.Saemann, U.Andiel, I.E. Golovkin, R.C.Mancini, E.Andersson and E.Förster, *J.Quant.Spectrosc.Radiat.Trans.* **65** (2000) 173.

[2] H.Okutsu, T.Sako, and K.Yamanouchi, to be published.

[3] P. Debye and E. Hückel, *Physikalische Zeitschrift* **24** (1923) 185.

[4] B.A.Hess, *Phys.Rev.*A **33** (1986) 3742.