

## SP-DQMSSC (State-Prediction Dressed Quasi-Molecular State Close-Coupling) 法の開発と(He<sup>2+</sup>+H)衝突系への適用

新潟大院自<sup>1</sup>、新潟大理<sup>2</sup> ○武井将義<sup>1</sup>、島倉紀之<sup>2</sup>

### 【1. 序】

近年、レーザー技術は目覚ましい進歩を遂げ、情報通信技術、医療技術、バイオテクノロジー等の様々な分野において幅広く利用されている。また、今までにないような非常に大きな強度のレーザーを出力する事が可能になり、レーザー核融合にも応用されるようになった。レーザー核融合は強力なレーザー光を、直径わずか数ミリの燃料球に照射することで内部を急激に圧縮し、超高密度状態中で核融合反応を起こすものである。この場合、燃料球内部ではイオンや原子の衝突が頻繁に起きていると考えられ、その反応機構の解明が必要である。そのため、強レーザー場中のイオン、原子衝突に関する研究が注目されている。我々の研究室でも、超強レーザー場中での衝突を扱える DQMSSC 法が開発され、研究が行われてきた。この方法には、反応の物理的イメージが得やすいという利点がある。一方で扱う状態数が増えると、計算に莫大な時間を費やしてしまうという欠点もある。そこで本研究では、実際に DQMSSC 法を用いて計算を行い、改良の余地がないか考えた。

### 【2. DQMSSC 法】

レーザー場の働いていない(HeH)<sup>2+</sup>系の断熱ポテンシャルエネルギー曲線を図1に、レーザー場中の DQMS ポテンシャルエネルギー曲線を図2に示す。核間距離  $R = 6$  au 付近で擬似交差点が見られ、この部分で状態間の遷移が起こる事が予想される。このように、DQMSSC 法ではレーザー場中の反応をレーザーの衣を着た状態間の遷移として扱う事ができる。DQMSSC 法を用いて、実際に(He<sup>2+</sup>+H)衝突系の計算を行った。

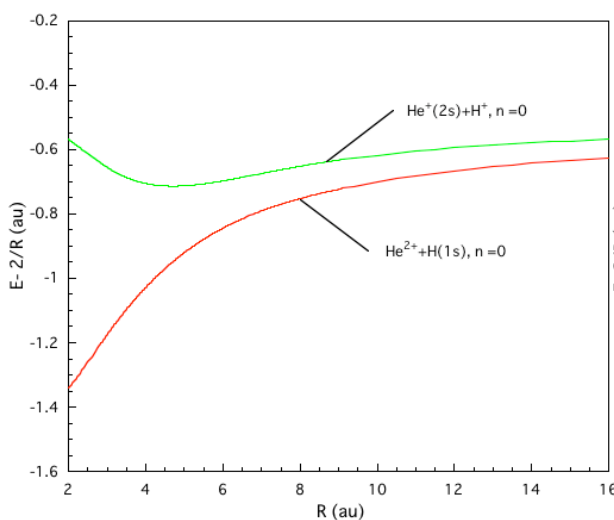


図1 (HeH)<sup>2+</sup>分子イオンの断熱ポテンシャルエネルギー曲線

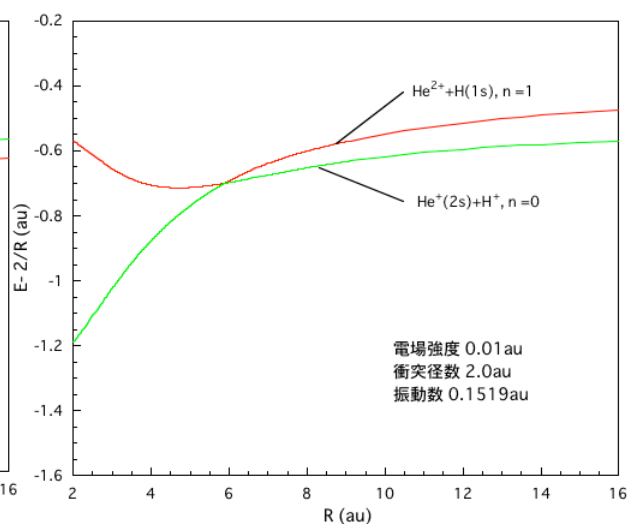


図2 (HeH)<sup>2+</sup>分子イオンのDQMSポテンシャルエネルギー曲線

状態数を14にした場合のDQMSポテンシャルエネルギー曲線を図3に、その場合の遷移確率の核間距離依存性を図4に示す。図4で始状態と $(\text{He}^+(2s)+\text{H}^+, n=-1)$ の状態との間に遷移が見られることから、図3で点線内部の擬似交差点で状態間の遷移が起こる事がわかる。一方で、その他の状態間ではほとんど遷移が起きず、遷移確率を計算しても結局は0に近い値となる。ところがDQMSSC法では、遷移しないDQMSポテンシャルとカップリングも含めて遷移確率を計算するため、意味のない計算に多くの時間を費やしていることになる。そこで、遷移が起こらないと予測される部分を省くことができれば、計算時間を大幅に短縮できると考えられる。

### 【3. SP-DQMSSC法】

DQMSポテンシャルとカップリングは電場強度及び衝突径数によって変化するため、それに伴って遷移の起こる擬似交差点の位置も遷移する状態も変化する。遷移の起こらない状態は、始状態と形成する疑似交差や、核間距離の小さい所での始状態とのエネルギー差から総合的に判断した。この方法で、電場強度  $I \geq 0.5 \text{ au}$  の場合について電子捕獲断面積を計算した結果を図5に示す。14状態のDQMSポテンシャル中で始状態からの遷移が予想される10状態を選んだ場合と、もとの14状態の場合では電子捕獲断面積が一致していることがわかる。また、14状態のDQMSポテンシャルの中で始状態からの遷移が予想される6状態を選んだ場合と、14状態の場合を比べると同様に電子捕獲断面積が一致している。このことから14状態の計算を、考慮する状態数6程度で行うことができると考えられる。ポスター発表では電場強度  $I \leq 0.5 \text{ au}$  の場合や、考慮する状態数をどこまで減らす事ができるか、また14よりも状態数の多い場合についても議論する。

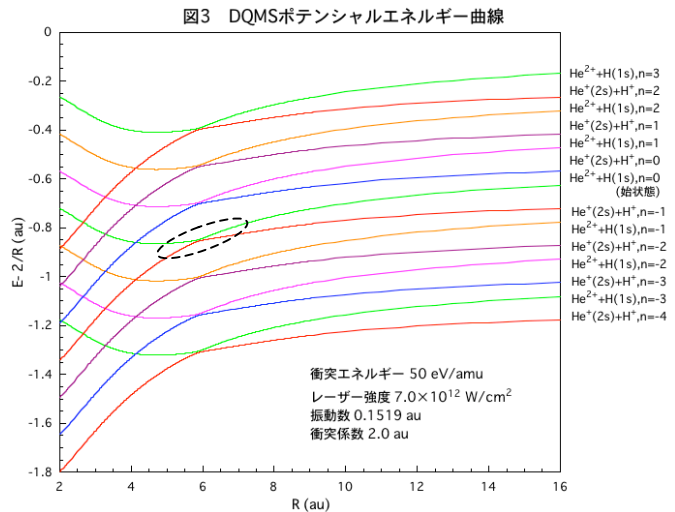


図3 DQMSポテンシャルエネルギー曲線

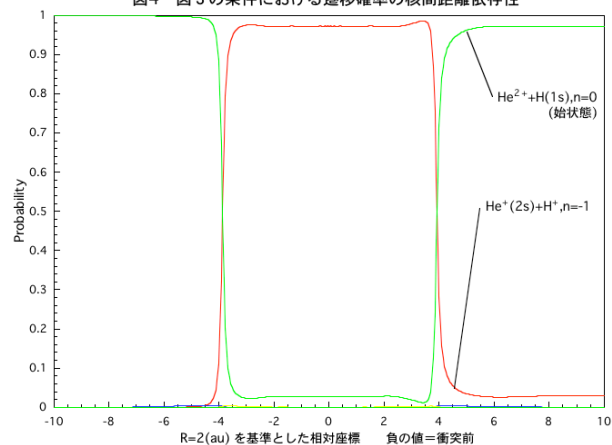


図4 図3の条件における遷移確率の核間距離依存性

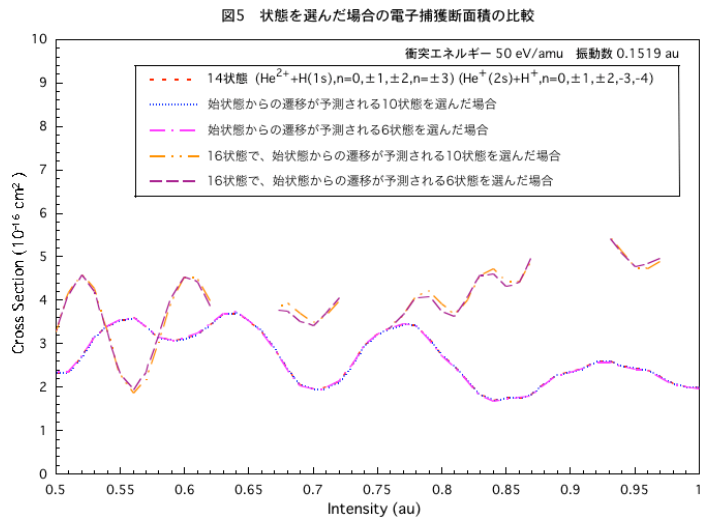


図5 状態を選んだ場合の電子捕獲断面積の比較