1. 励起準位ポピュレーションと原子過程

藤 本 孝

(京都大学工学部)

(1990年 8 月 1 日受理)

Excited-Level Population and Atomic Processes in Plasma

Takashi Fujimoto

(Received August 1, 1990)

Abstract

Spectroscopic characteristics of atoms and ions in plasma are conveniently understood when we classify these atoms and ions into the ionizing plasma, recombining plasma and ionization-balance plasma, according to their ionization ratios. For each class the population characteristics are reviewed together with the dominant populating and depopulating processes for excited levels. For some of the low density conditions, the excited-level populations tend to be very close to the thermal equilibrium values. This fact is contrary to the general expectation. Relationships between the atomic processes responsible to these populations are discussed. For high-density ionizing plasma the population density distribution is established that is inversely proportional to p^{-6} where p is the (effective) principal quantum number of the level. The origin of this distribution is explained for hydrogenic cases, but is not known for other atoms and ions having more complicated energy-level structures.

Keywords :

atomic process, excited-level population, thermodynamic equilibrium.

1. はじめに

この講座の表題である「プラズマ中の原子過程」といふとき、「プラズマ」と「原子過程」の関連にはいろいろ考えられる。例えば、対象としているプラズマの現象の本質が原子過程そのものである場合(X線レーザーなど)とか、外部に対するプラズマの表現としての現象に原子過程が関与する(多くのプラズマ診断はそれにあたる)とか、はたまた原子

過程の研究手段としてプラズマを利用する(イオンの遷移波長, 寿命, さらに電子衝突電離の速度係数を決定するのにプラズマが使われる)などがある。おそらくこの講座ではそれらすべてが網羅されるわけではなく,むしろ各著者が現在興味を持っておられる最先端のトピックスが紹介されるであろう。本講ではそのための準備という意味もふくめて読者の道案内をしつつ, 若干の「原子過程」の紹介を行う。

Department of Engineering Science, Faculty of Engineering, Kyoto University, Kyoto 606.

プラズマは輻射場までふくめ、多くの構成要素を持ち、さらにそれらが熱的（または非熱的）分布をしているために、そのなかで生じている原子過程は単純ではない。したがって、特定の原子過程が単独で表に現れることはまれで、物理学で複雑な現象を理解するための常道の一つである「要素還元主義」が成功しないことが多い。ふつうは、多くの原子過程の複合、またはそれらの統計的帰結（例えば熱平衡分布）としてプラズマ現象が現れる。それにもかかわらず、その場合でも個々の原子過程の知識なくしては多くのプラズマ現象が理解できないというのが我々のおかれた一般的な状況である。

本講では、どのような場合に「要素還元主義」的な考え方が近似的にせよ成立するか、またそうでない場合には原子過程の統計的帰結がどのようなになるかを概観する。そのために、中性水素原子または水素イオンと電子のみで構成される「プラズマ」を取り上げる。現実にはこのようなプラズマは存在しないが、それについて考察することは、マックス・ウェーバー（『プロテスタンティズムの倫理と資本主義の精神』などで有名なドイツの社会学者・経済学者）のいう「理念型」を研究することに対応して、物事を理解するために有効である。

2. 『電離プラズマ』、『再結合プラズマ』そして『電離平衡プラズマ』

考察の対象とするのは水素原子または水素様イオンなので、原子準位はその主量子数 p で表される。単位体積当たりのポピュレーションを $n(p)$ とする。考慮する原子過程は電子衝突による励起、脱励起、電離、三体再結合および輻射の自然放出と輻射再結合のみである。（図1・1）プラズマが時間的に

図1・1. 本講で考慮する原子過程。A(q, p): 輻射自然放出, C(p, q): 電子衝突励起, F(q, p): 電子衝突脱励起, S(p): 電子衝突電離, $\alpha(p)$: 三体再結合, $\beta(p)$: 輻射再結合。

わめて速く変化しているとか、固体表面の影響が大きいとかの特殊な場合を除き、励起準位のポピュレーションはつぎのように2つの項の和で与えられる。¹⁾

$$n(p) = r_0(p) Z(p) n_2 n_e + r_1(p) [Z(p) / Z(1)] n(1) \quad (p \geq 2) \quad (1)$$

ここで、 n_2 は完全電離イオンの密度、 n_e は電子密度である。サハーボルツマン係数は

$$Z(p) = \frac{g(p)}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T_e} \right)^{3/2} \times \exp \left[\frac{x(p)}{k T_e} \right] \quad (2)$$

で与えられる。ここで $g(p) = 2 p^2$, $x(p) = R/p^2$ ($R = 13.6 \text{ eV}$) は準位 p のそれぞれ統計的重み、電離ポテンシャルである。また h はプランク定数、 m は電子質量、 k はボルツマン定数、 T_e 電子温度。

式(1)は熱平衡関係からのズレとして表現されており、ポピュレーション係数と呼ばれる $r_0(p)$ と $r_1(p)$ はプラズマ中で生起している種々の原子過程の統計的帰結を表し、 n_e と T_e の関数である。もし式(1)右边で第2項が無く、かつ $r_0(p)=1$ であれば式(1)はサハ・ボルツマン分布を表し、準位 p は連続状態電子と熱平衡にあることを示す。もし第1項が無く、かつ $r_1(p)=1$ であればポピュレーションは基底準位のそれとボルツマン分布にあり、この準位が基底準位と熱平衡にあることを示す。第1項を $n_0(p)$ 、第2項を $n_1(p)$ と表して、式(1)を模式的に描いたのが図1・2

図1・2. プラズマ中原子・イオンの励起準位ポピュレーション構成の模式図。

である。我々は第1項を「再結合プラズマ」の成分、第2項を「電離プラズマ」の成分と呼ぶ。

もし、いま考えているプラズマが時間的に定常であり、かつ空間的に一様であれば、このプラズマの「電離度」（ここではこの言葉を便宜的に使う） $[n_z/n(1)]$ はプラズマ自身のもつ電離、再結合の速度係数のみで決まり、したがって n_e 、 T_e のみの関数である。このようなプラズマを「電離平衡プラズマ」と呼び、その「電離度」を $[n_z/n_{IB}(1)]$ と表すことにする。この時は、式(1)右边の第1項と第2項のいずれも無視できず、励起準位のポピュレーションは現実にも図1・2に描かれたように両方の成分が同程度の大きさになり得る。²⁾ 現実には存在す

る多くのプラズマは定常でも一様でもなく、したがって「電離平衡プラズマ」は例外的な存在だといってよい。不等式 $[n_z/n(1)] \ll [n_z/n_{IB}(1)]$ の成立する一群のプラズマがあり、そのようなプラズマでは上の議論からすぐに理解できるように、式(1)右边第1項がほとんど無視できるほど小さく、ポピュレーションは第2項のみで決まる。このようなプラズマを「電離プラズマ」と呼ぶ。逆に $[n_z/n(1)] \gg [n_z/n_{IB}(1)]$ が成立するようなプラズマのグループもあり、それらを「再結合プラズマ」と呼ぶ。この種のプラズマでは励起準位のポピュレーションは式(1)の右边第1項のみで決まる。

「電離プラズマ」と「再結合プラズマ」について、励起準位のポピュレーションがどのような状況になっているかを模式的に表したのが図1・3である。³⁾

図1・3. 電離プラズマ、再結合プラズマにたいする「相」図。³⁾

横軸は換算電子密度 n_e/z^7 (z はイオンを構成している電子が感ずる核電荷で、水素原子の場合は $z=1$ 、電子密度などは CGS 単位系で測られるとする)、縦軸は注目している励起準位の主量子数である。どちらの場合にも両者に共通の境界 “Griem” と

“Byron” でこの平面は 3 つの領域 (または相) に分けられる。境界 “Griem” はある特定の準位にたいしてはそのプラズマの電子密度が低いか高いかの、またある電子密度を持ったプラズマに対しては低励起準位 - 高励起準位の境界を与える。数値的には次のように近似される。

$$p_g \simeq 95 (n_e/z^7)^{-2/17} \quad (3)$$

“Griem” の境界よりも高密度では、励起準位は “Byron” の境界によって 2 分される。この境界よりも上の準位では電子衝突による depopulation 過程のうちでエネルギー的に上向きである励起、とくにすぐ上の準位への励起が、下向きである脱励起よりも起こりやすい。逆にこの境界よりも下の準位では下向きの脱励起、とくにすぐ下の準位への脱励起が主要になる。この境界は近似的に次式で与えられる。³⁾

$$p_b \simeq (z^2 R / 3 k T_e)^{1/2} \quad (4)$$

「電離プラズマ」ではこの図における “Griem” の境界より左下の領域はコロナ相と呼ばれ、常識的なコロナ平衡が成立する。右上の高密度領域では 2 つの相が存在し得るが、ふつう、現実には存在する「電離プラズマ」の電子温度は高く、 $p_b \ll 2$ となるので “Byron” の境界は図 1・1 の画面上には現れ

ない*)。従って、高密度領域ではすべての励起準位が単一の相に入り、そこではハシゴ様励起・電離の機構がすべての励起準位にたいして成立して、

$$n(p)/g(p) \propto p^{-6} \quad (5)$$

という非常に単純な分布となる。⁴⁾

一方、「再結合プラズマ」では “Griem” の境界より低密度の領域は CRC 相 (Capture-Radiative-Cascade) と呼ばれ、換算電子温度 T_e/z^2 の値の大小で様相がいささか異なる。後でもう一度触れるが、このように低密度でも高温ではポピュレーションは熱平衡 (サハ・ボルツマン平衡) から与えられる値に近い。すなわち、 $r_0(p) \simeq 1$ である。⁵⁾ 低温では逆転分布を生ずる。³⁾ “Griem” の境界よりも高密度の領域で、かつ “Byron” の境界よりも上にある準位は連続状態電子と熱平衡関係に入り、ポピュレーションはサハ・ボルツマン分布で与えられる。すなわち、 $r_0(p) \simeq 1$ である。それよりも下にある準位では、ハシゴ様脱励起の機構が成立し、エネルギー的に下向きの電子の流れができあがる。ポピュレーション分布は再び式(5)で与えられる。³⁾

3. 原子過程

プラズマ分光の実験では、プラズマからの発光線強度を観測して、上準位ポピュレーション $n(p)$ を決定し、上に述べたポピュレーションの一般的性質と関連付けることになる。前節の議論からわかるように、ポピュレーションの決定には少なくとも 2 つ以上の過程が関与しており、実験的に求められた $n(p)$ と何かひとつの原子過程を単純には結び付けられない。

*) 電子温度の低い「電離プラズマ」も考えることはできる。高密度領域で “Byron” の境界より低い準位はすぐ下の準位と熱平衡になり、電子の密度が十分に高いとその熱平衡は基底準位まで届く。すなわち、 $r_1(p)=1$ となる。

しかしながら, “Griem”の境界よりも低密度の領域では曲がりなりにも「要素還元主義」が成功する。

「電離プラズマ」ではコロナ平衡が成立し, 20%程度のカスケードを無視すれば, ポピュレーションは

$$n_1(p) = C(1, p) n(1) n_e / \sum_{q < p} A(p, q) \quad (6)$$

で与えられて, 基底状態からの励起速度係数 $C(1, p)$ と関係付けられる。ここで, $A(p, q)$ は $p \rightarrow q$ の自然放出確率である。

「再結合プラズマ」ではカスケードの寄与はもうすこし大きく, それも含めて

$$n_0(p) = [\beta(p) n_z n_e + \sum_{q > p} n_0(q) A(q, p)] / \sum_{q < p} A(p, q) \quad (7)$$

と表される。ここで, $\beta(p)$ は輻射再結合の速度係数である。

温度が高く, 十分に大きい p にたいしては, 次の近似が成立する。

$$\beta(p) \sim 2 Z(p) K \ln p/p^5 \quad (8)$$

ここで

$$K = \frac{2^7}{3\sqrt{3}} \frac{\pi e^2}{h^2 m c^3} R^2 z^4 \quad (9)$$

一方, 今からの議論の結果を先取りすれば, $q > p$ である準位のポピュレーションがサハ・ボルツマンの関係式で近似的に与えられるので, (7)式の分子第2項は

$$\sum_{q > p} Z(q) A(q, p) n_z n_e \simeq n_z n_e Z(p) K \ln p/p^5 \quad (10)$$

とかける。さらに, 分母は $A(p, q)$ にたいする近似式を因数分解して

$$\sum_{q < p} A(p, q) \simeq 3 K \ln p/p^5 \quad (11)$$

と表すことができる。これら3つの近似式(8), (10), (11)から,

$$n_0(p) \simeq Z(p) n_z n_e \quad (12)$$

または

$$r_0(p) \simeq 1 \quad (12')$$

が得られ, ここではポピュレーションはサハ・ボルツマン分布に近いことが期待される。数値計算によれば, 確かにそうで, とくに換算電子温度 $T_e/z^2 \sim 2.5 \times 10^5$ K のときには近似式(12)が殆ど正確に成立する。

さて本来, 「熱平衡」とはある過程とその逆過程がつりあって初めて成立するものである。今の場合の「見かけ上」の熱平衡は, その状況とはまったく異なって, 関係する異種の原子過程相互の組み合わせの結果である。この見かけ上の「熱平衡」はプラズマ分光的に重要であるばかりでなく, 原子過程相互の関連としても興味ある現象である。

プラズマ中では, 電子衝突による励起と電離は最も重要な過程である。いま, 基底状態からの非弾性衝突のうち, 電離ポテンシャルに近い束縛準位(マイナスのエネルギー)への励起と, 同じく連続状態(プラスのエネルギー)への電離を考える。電離ポテンシャルのごく近傍のエネルギー範囲のみを考え

れば励起断面積は一定 $\sigma_{\text{exc}}(1, p) = \sigma_0 (\propto p^{-3})$ と近似され、電離断面積は余剰エネルギーに比例する $\sigma_{\text{ion}} = \alpha (E - R)$ と近似できる (図 1・4) .

図1・4. 水素原子の電離限界近くのエネルギー領域における励起断面積、電離断面積の模式図。電離断面積は10倍して描いてある。

これらの原子状態の性質はそのエネルギーと共に連続的にゆっくりと変わることが期待されるので、衝突電子のエネルギーの変化と共に、単位エネルギー幅中に存在する状態の電子が作られる割合も、連続的に変わるであろう。従ってこれらの断面積の間には次の関係が成立しなくてはならない。

$$\alpha = \sigma_0 / (2R / p^3) \quad (13)$$

最近、電離過程にたいするWannierの古典的な取扱を励起過程にまで拡張してそれぞれに対する断面積の計算が行われた。⁶⁾ また、それに対応する実験も行われた。⁷⁾ それらによれば、上の近似は完全には正確ではないが、大まかな性質は正しく記述していることが明かとなった。(実際は束縛状態電子生成

の能率の方が少し悪い.)

電子温度がきわめて低く、かつ電子密度も低いという、半ば仮想的な「電離バランス・プラズマ」を取り上げる。その条件のもとでは、上の近似によって励起の速度係数と電離の速度係数 $S(1)$ の間に次の関係がある。

$$\begin{aligned} & [C(1, p) / 2 p^{-3}] / S(1) \\ &= (R / k T_e) \exp(R / p^2 k T_e) \end{aligned} \quad (14)$$

一方、電離バランスの関係

$$n_z = S(1) n(1) n_e / \sum_{q \geq 1} \beta(q) n_e \quad (15)$$

と式(6), (14) から

$$\begin{aligned} n_1(p) &= n_z n_e \left[\sum_{q \geq 1} \beta(q) / \sum_{q < p} A(p, q) \right] \\ &\times (2R / p^3 k T_e) \exp(R / p^2 k T_e). \end{aligned} \quad (16)$$

さて、再結合速度係数はガウント・ファクターを1とした近似のもとで

$$\begin{aligned} \beta(p) &= \frac{2^6}{3\sqrt{3}} \frac{\sqrt{\pi} e^4}{m^2 c^3} \frac{z}{p^3} \left(\frac{z^2 R}{k T_e} \right)^{3/2} \\ &\times \exp \left[\frac{x(p)}{k T_e} \right] \left[-E_i \left(-\frac{x(p)}{k T_e} \right) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

で表される。

いま、われわれは低温度の場合を考えているので指数積分は次のように近似される：

$$-E_i(-x) \xrightarrow{x \gg 1} e^{-x} / x \quad (18)$$

従って,

$$\sum_{q \geq 1} \beta(q) = (2^6 / 3\sqrt{3}) (e^4 / m^2 c^3) \times (\pi R / k T_e)^{1/2} \delta \quad (19)$$

と表される。ここで

$$\delta = \sum_{q=1}^{10} \sim \sum_{q=1}^{20} q^{-1} \quad (20)$$

は3程度の大きさである。また、我々はかなり大きい p を考えているので、式(11)中の

$$\ln p = \int_1^p q^{-1} dq \quad (21)$$

もやはり3程度の大きさである。以上のことから、式(16)で与えられる $n_1(p)$ の大きさが $(2/3) Z(p) n_z n_e$ と近似できる。さらに、この条件のもとでは式(7)によって与えられる $n_0(p)$ が $(1/3) Z(p) n_z n_e$ から大きく変わらないことも示される。よって、最終的なポピュレーションは再び熱平衡関係から与えられるものに近いはずである:

$$n(p) = n_0(p) + n_1(p) \simeq Z(p) n_z n_e. \quad (22)$$

図1・5は $T_e = 4 \times 10^3$ Kの水素プラズマに対しての数値計算結果である。上に述べたことが実現しているのが見られる。(例えば、 $n_e = 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $10 \lesssim p \lesssim 20$ の場合) 今度の場合は、見かけ上の「熱平衡」は上に述べたようにいくつかの原子過程の間の関連の結果であり、式(12)の場合も含め、自然界の構造の現れであるのかも知れない。

4. 統計的帰結

“Griem”の境界よりも高密度のプラズマについては上にのべた「要素還元主義」的見方よりも統計

図1・5. $T_e = 4000$ Kの水素プラズマの励起準位ポピュレーション分布。縦軸はポピュレーション係数 $r_0(p)$ (細線), 電離バランス・プラズマのポピュレーション $b_{IB}(p) = n_{IB}(p) / Z(p) n_z n_e$ (太線)。図中の数字は電子密度 (cm^{-3}) の10のべきを表す。

的見方が適している。その典型的な例は「再結合プラズマ」のサハ・ボルツマン分布, 低温「電離プラズマ」のボルツマン分布である。この熱平衡のもとになっているのは、たがいに逆過程の関係にある原子過程相互の間の詳細つりあいの原理である。もうひとつの著しい分布形態は式(5)で与えられる「マイナス6乗分布」であり、「電離プラズマ」「再結合プラズマ」の両方で実現する。図1・6は高密度「電離プラズマ」中の励起準位のポピュレーションがどのように決まっているかを描いたもので、矢印の太さが電子衝突による励起, 脱励起の流れの大きさを表している。「ハシゴ様励起」という言葉は電子が準位という「ハシゴ」を一段ずつ登っていく, すなわち,

$$n(p-1)C(p-1, p)n_e = n(p)C(p, p+1)n_e \quad (23)$$

図1・6. 高密度電離プラズマのポピュレーションの「流れ」図。
 $T_e = 1.28 \times 10^5 \text{K}$, $n_e = 1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 。

という等式が(近似的に)成立する, ということからきている。電気双極子遷移にたいする励起断面積から計算される速度係数は, 大ざっぱにいて

$$C(p, p+1) \propto p^4 \quad (24)$$

であるという近似から式(5)が導かれる。(つまり $n(p)C(p, p+1)$ が p に依存しない。)しかしながら, 図1・6からも想像されるように, 式(23)はポピュレーションの流れ全体の約半分しか記述せず, ($p=5$ の準位については詳しく描いてある。)残り半分はそれ以外の過程によっている。従って, 上の議論は「マイナス6乗分布」の説明としてはきわめて不十分である。さて, 残りの過程の内もっとも主要なものは, すぐ上の準位からすぐ下の準位への脱励起である。もし「マイナス6乗分布」が成立していれば, 図1・6からも示唆されるように

$$n(p+1)F(p+1, p)n_e = n(p)F(p, p-1)n_e \quad (25)$$

が近似的に成立することが証明できる。ここで,

$F(p, q)$ は脱励起の速度係数である。さらに, 同じ条件のもとで

$$\sum_{q < p-1} n(q)C(q, p)n_e = n(p) \sum_{q > p+1} C(p, q)n_e \quad (26)$$

が成り立つ。(図1・6において, $n(3)C(3, 5)$

$n_e \approx n(5)C(5, 7)n_e$ が成立している.)

このように「マイナス6乗分布」は式(23)

のみならず, もっと深い根を持っている。

5. 水素様でない原子・イオンの場合

今までは, 水素様イオンのプラズマという

「理念型」を考えてきた。現実には, たとえトカマクプラズマといえども, 水素分子の解離性励起による励起原子生成が無視できないように⁸⁾ 上の議論はそのままでは成り立たないことが多い。しかしながら, “Griem”の境界はそのようなときにも意味を持つ。つまり, プラズマがそれよりも低密度であれば励起原子を生成する原子過程(例えば, 解離性励起やイオンにたいする荷電交換励起)が表に現れるが, 高密度であれば, その影響は直接的には消えてしまう。換算電子密度がイオン価のマイナス7乗に比例することから, 高電離イオンにたいしては「コロナ相」, 「CRC相」の領域は比較的広い。

水素様でない原子・イオンはその原子構造が水素様から異なるので, 今までの議論はそのままでは成立しない。しかしながら, 配位間相互作用が重要でないような単純な原子・イオンにたいしては, 上の議論は程度の差はあれ成り立つ。例えば, 式(22)は本質的には, 電離ポテンシャルの上下にある電子状態の連続性しか用いていないので, かなりの普遍性を持つことが期待される。

図1・7. 「電離プラズマ」で観測されるマイナス6乗分布⁹⁾.

図1・7は van der Mullen という人の Ph. D thesis⁹⁾ から転載したものであるが、種々の高密度「電離プラズマ」でのポピュレーション分布がまとめてある。ヘリウム・イオンでの「マイナス6乗分布」は今までの議論から理解できるが、アルゴンとナトリウムでも同様の分布が見られることは注目し値する。このほかにも「マイナス6乗分布」は中性ヘリウム¹⁰⁾、アルゴン¹¹⁾、水銀¹²⁾ で見いだされており、このような実験結果は単なる偶然で生じているとは思えない。この「マイナス6乗分布」がこれら複雑な原子構造を持っている原子においても成

立しているという事実は、この分布が熱平衡分布に対応するような一般性を持っていることを意味するのかも知れない。もしそうだとすれば、そのもとになっている電子衝突過程に何らかの規則性（水素様イオンに対する式(23)～(26)に対応するもの）があるはずであるが、それがどんなものかは未だ不明である。

参 考 文 献

- 1) D.R. Bates, A.E. Kingston and R.W.P. McWhirter: Proc. R. Soc. **267** (1962) 297; D.R. Bates and A.E. Kingston: Planet. Space Sci. **11** (1963) 1; R.W.P. McWhirter and A.G. Hearn: Proc. Phys. Soc. **82** (1963) 641.
- 2) T. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **47** (1979) 265.
- 3) T. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **49** (1980) 1569.
- 4) T. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **47** (1979) 273.
- 5) T. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **49** (1980) 1561.
- 6) F.H. Read: J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17** (1984) 3965.
- 7) P. Hammond, F.H. Read, S. Cvejanovic and G.C. King: J. Phys. B: At. Mol. Phys. **18** (1985) L141.
- 8) T. Fujimoto K. Sawada, K. Takahata, K. Eriguchi, H. Suemitsu, K. Ishii, R. Okasaka, H. Tanaka, T. Maekawa, Y. Terumichi and S. Tanaka: Nucl. Fusion **29** (1989) 1519.
- 9) Jan-Joseph Alphonse Marie van der Mullen: *Excitation Equilibria in Plasmas* (Eindhoven, 1986).
- 10) A. Hirabayashi, Y. Nambu, M. Hasuo and T. Fujimoto: Phys. Rev. A **37** (1988) 77.
- 11) K. Tachibana and K. Fukuda: Jpn. J. Appl. Phys. **12** (1973) 895.
- 12) M. Aono: (私信).