

Charge Exchange : 電荷交換, 荷電變換
Charge Transfer : 電荷移行, 電荷移動
Electron Transfer : 電子移行, 電子移動
Electron Capture : 電子捕獲

Single electron capture, SC :



“True” double electron capture, TDC :



Transfer ionization, TI :



多価イオンの電子捕獲研究の歴史：

- プラズマ中の不純物としての重要性
 - 日本では名大プラ研から始まる（NICEグループ）
- 多価イオン生成技術の発展とリンク
 - 加速器利用型からEBIS/TとECRISへ
Electron Beam Ion Source/Trap
Electron Cyclotron Resonance
- 粒子検出技術・信号処理技術
 - 原子核実験からの流用

多価イオンの電子捕獲の特徴：

- 低エネルギー領域での断面積が大きい
- 断面積の衝突エネルギー依存性が小さい
- 状態選択性が強い：NICE実験の成果
 - 古典的オーバーバリア模型（COB, ECBM）

衝突エネルギー (単位 : eV)

$$E = \frac{1}{2}mv^2$$

核子当たりの衝突エネルギー (単位 : eV/u, eV/amu)

$$\frac{E}{A} = \frac{1}{2}m_u v^2$$

A : **質量数**

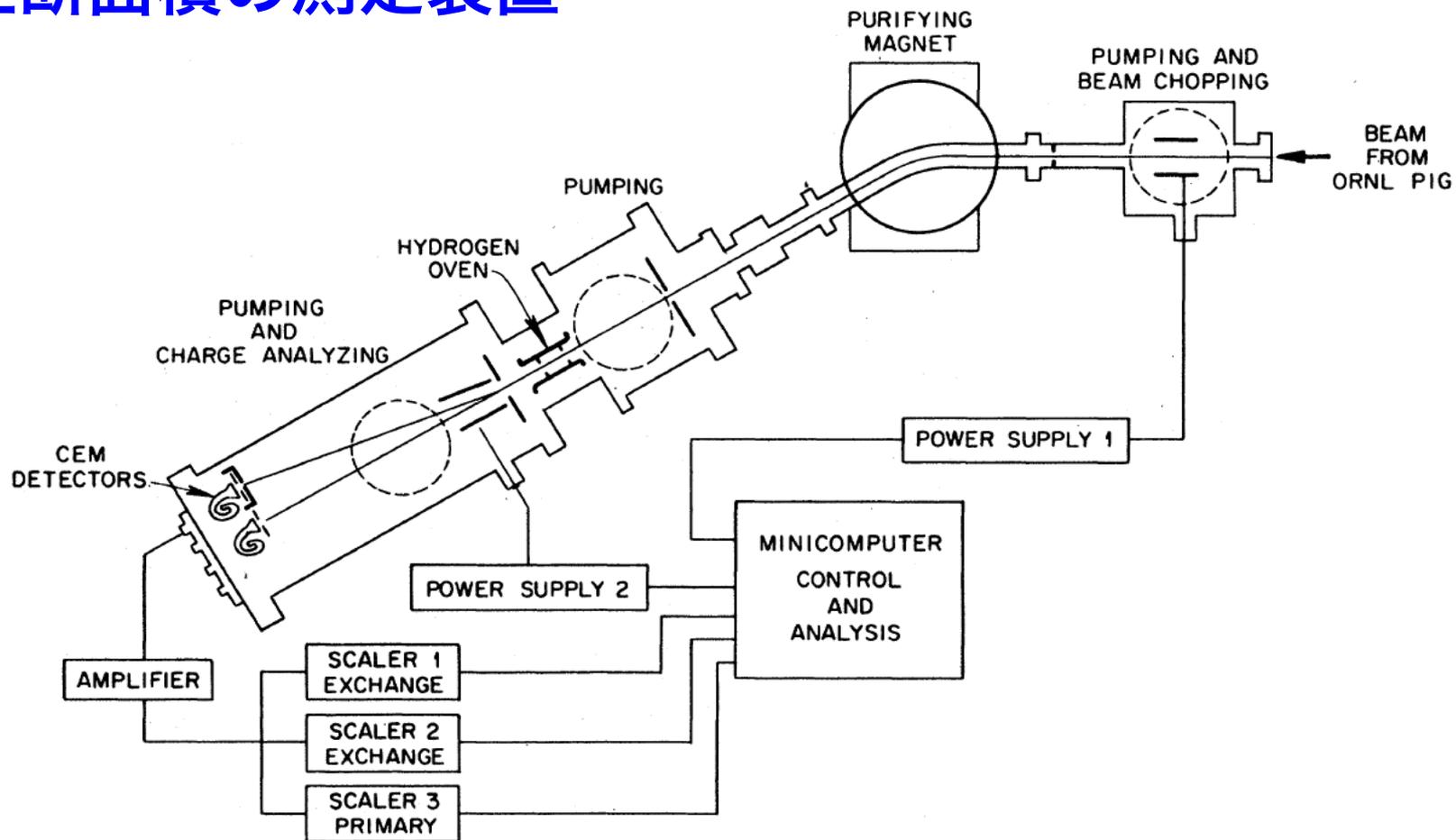
$m = Am_u$, m_u : **原子質量単位 u**

粒子の速度 :

$$v = 1.389 \times 10^4 \sqrt{\frac{E / \text{eV}}{m / u}} \quad \text{m/s}$$

太陽風 : 200 - 900 km/s → 0.2 - 4.2 keV/u

全断面積の測定装置



(D. H. Crandall *et al.*, 1979)

イオンの価数のみを選別して強度を測定

$O^{q+} - He$

(K. Ishii *et al.*, 2004)

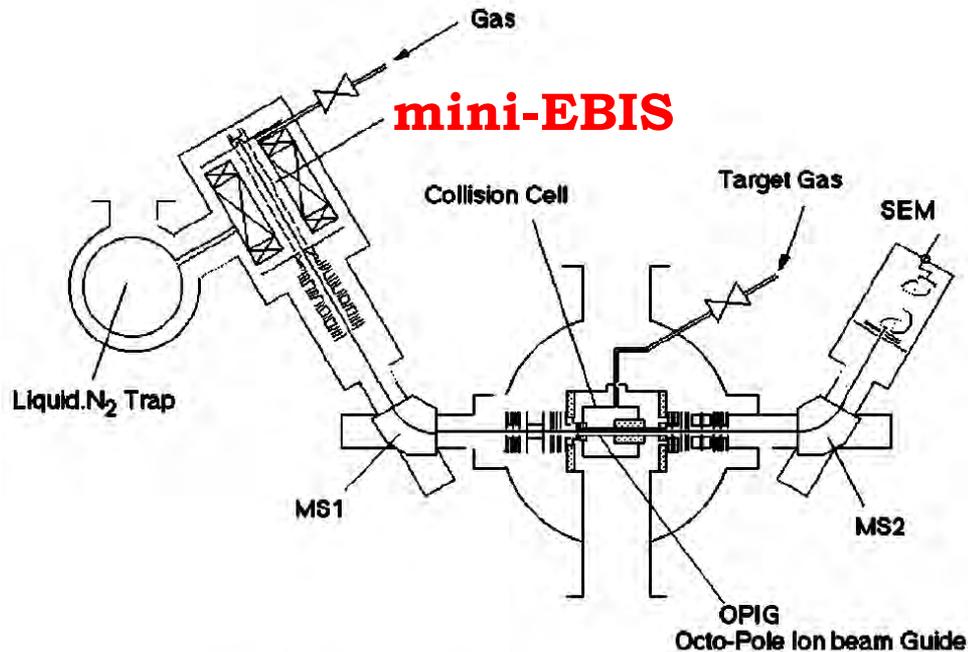
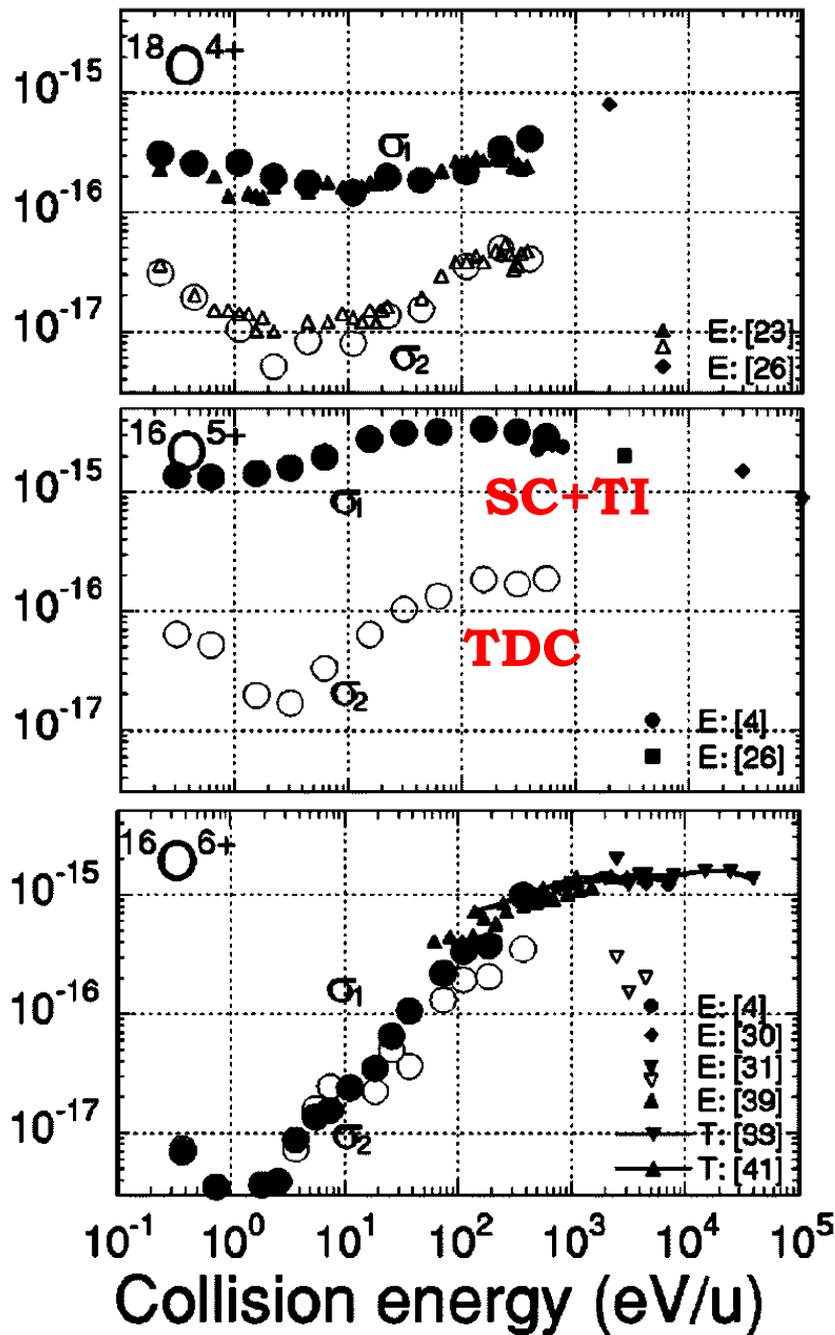
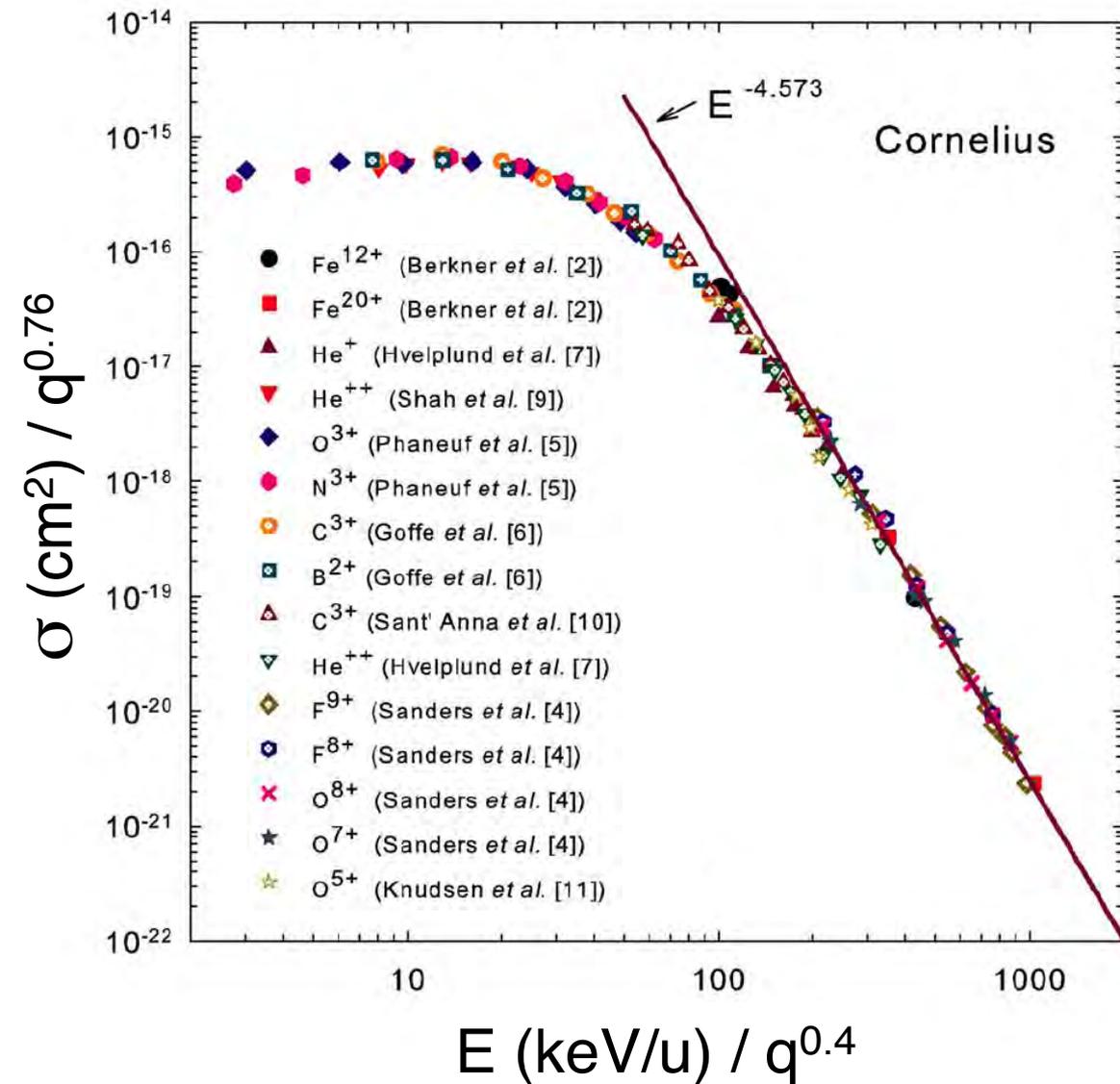


FIG. 1. Schematic diagram of experimental setup.

keV/u 領域 : ほぼ一定

eV/u 領域 : 低いほど増大

一電子捕獲断面積のエネルギー依存性



標的：H₂

価数 q でのスケーリング

- 中エネルギーでは一定
- 高エネルギーでは減少

高エネルギー (MeV領域)
ではイオン化が主要過程

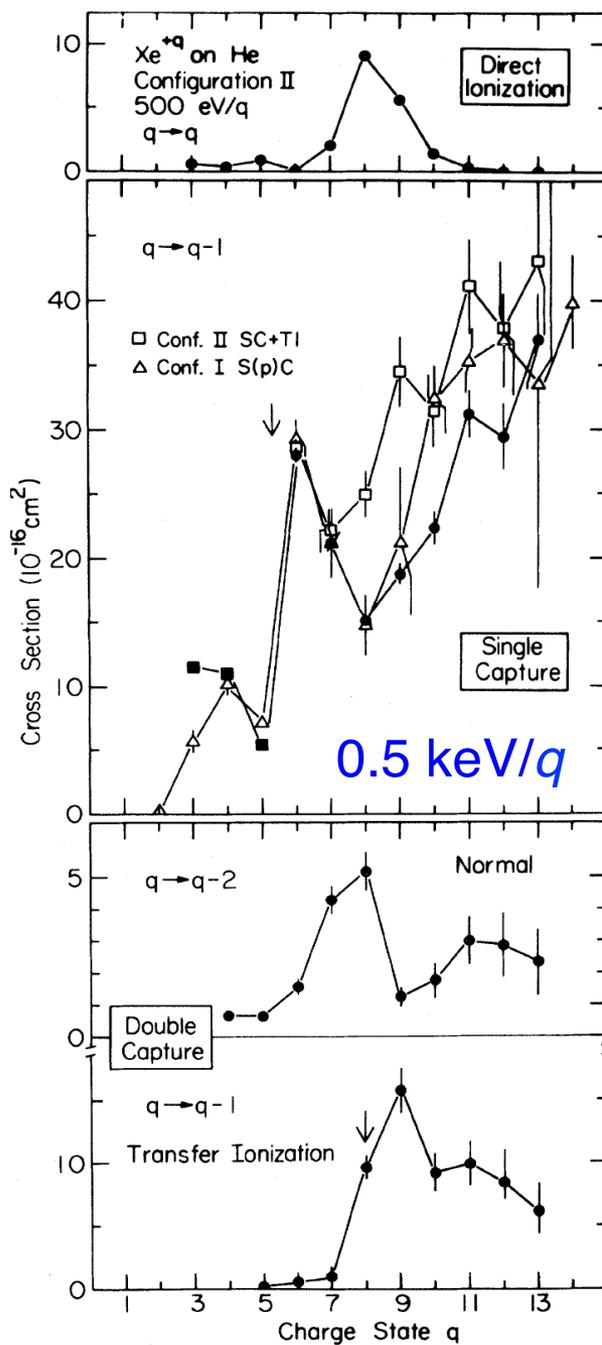
$$v > 1 \text{ au} = \alpha c$$

α : 微細構造定数

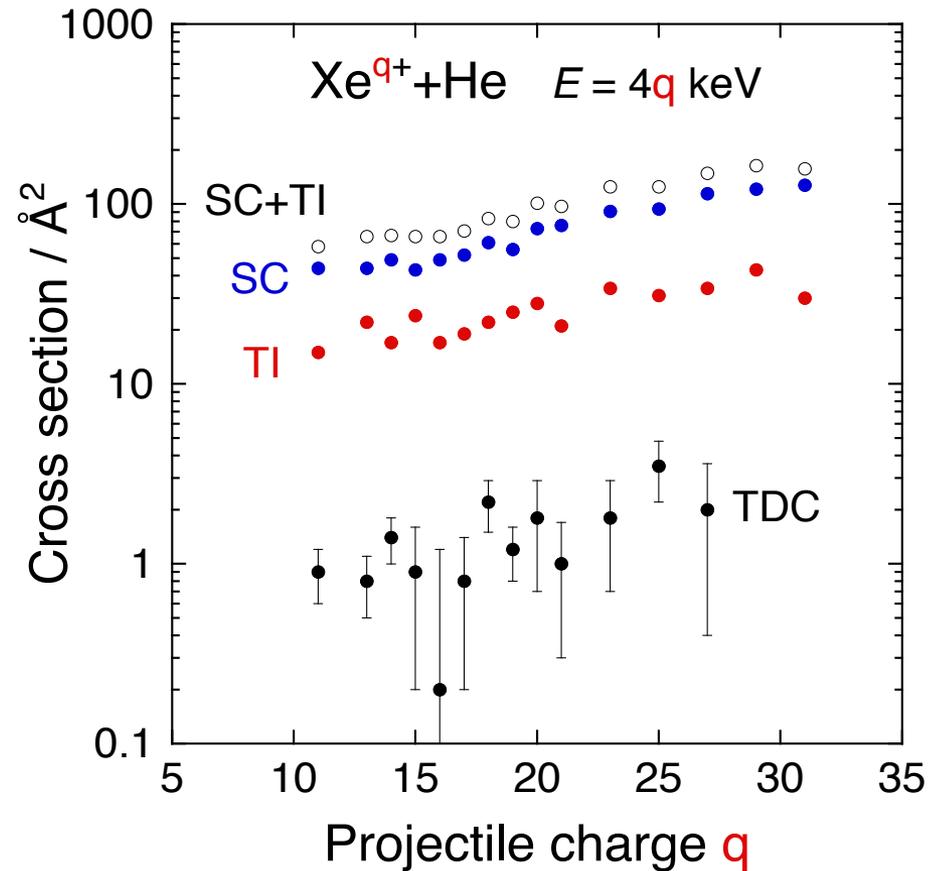
(K. Cornelius, 2006)

電荷移行断面積の測定値

$Xe^{q+}-He$ ($q = 2 - 31$)

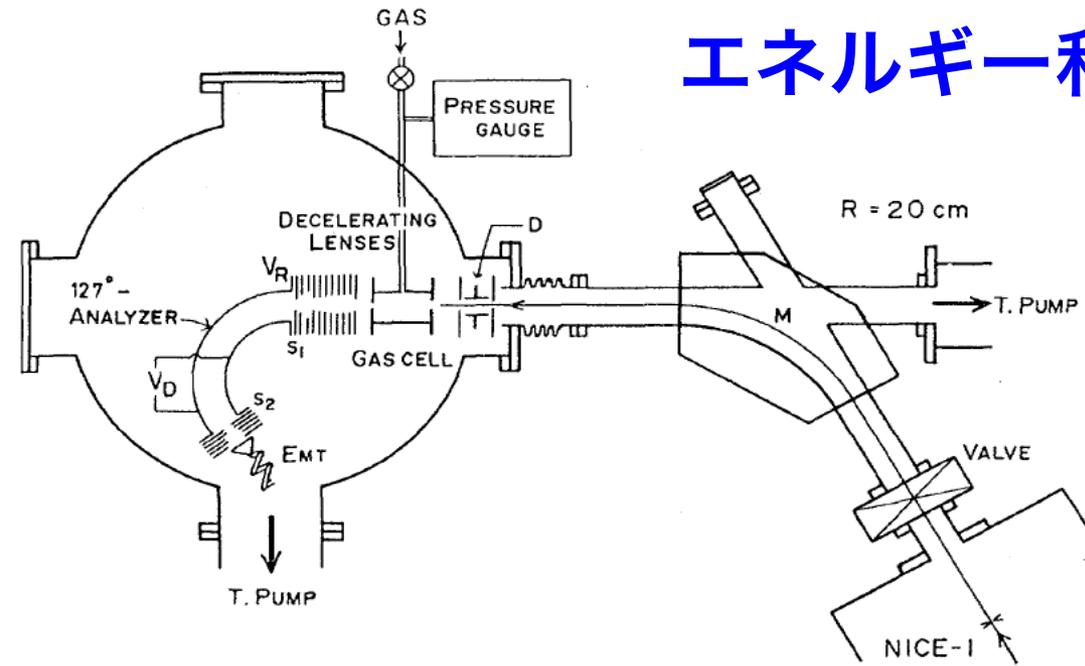


(E. Justiniano *et al.*, 1984)

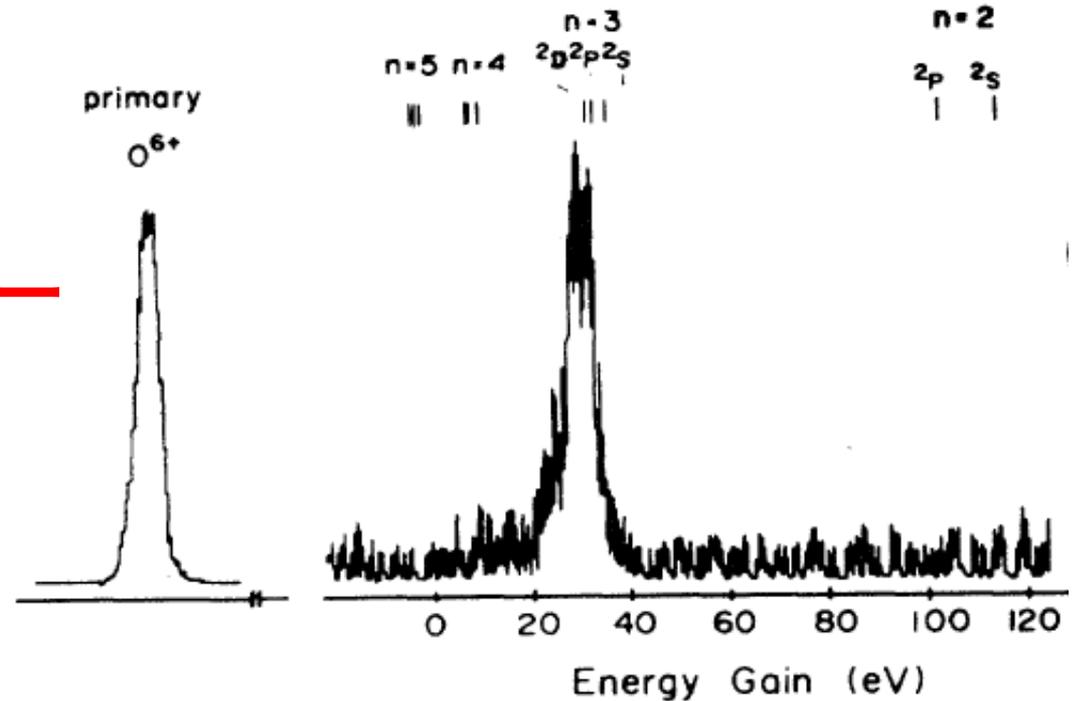


(H. Andersson *et al.*, 1988)

エネルギー利得スペクトルの測定例

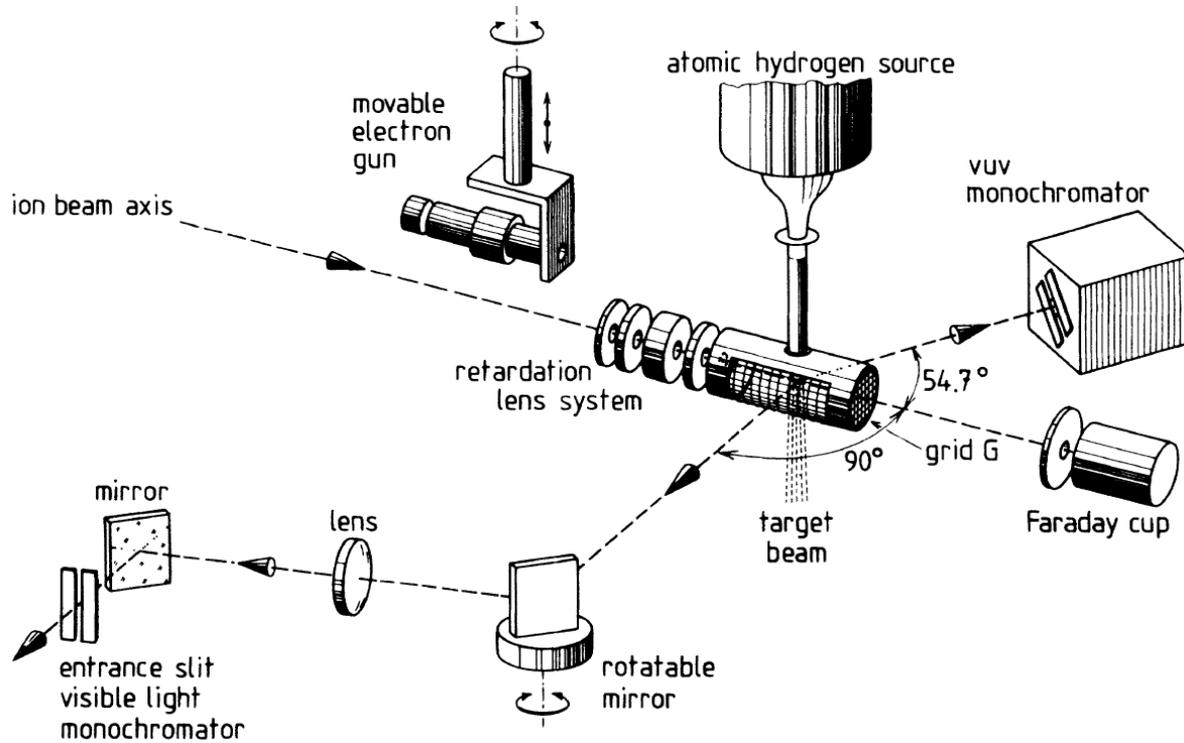


静電型分析器によって
イオンの運動エネルギー
を測定



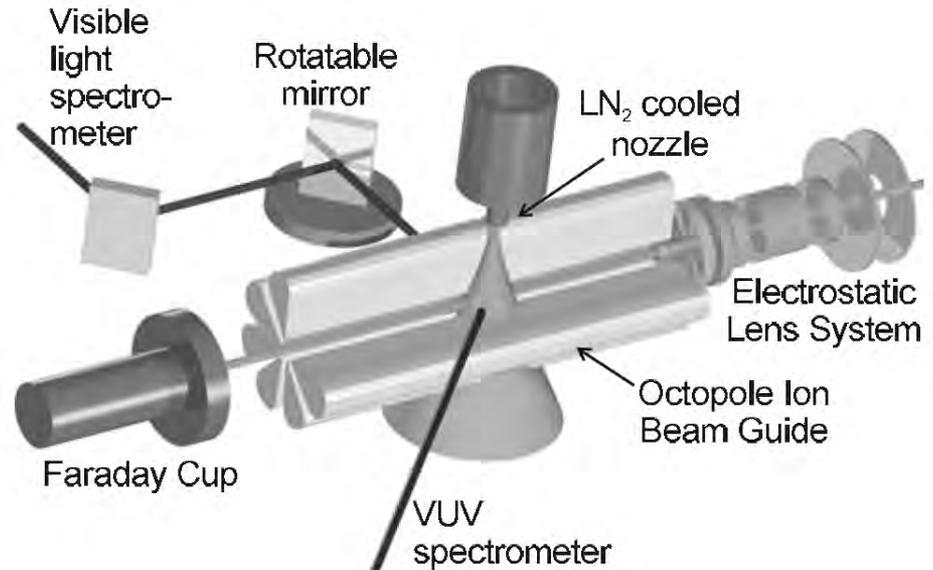
(K. Okuno *et al.*, 1983)

(R. Hoekstra *et al.*, 1990)



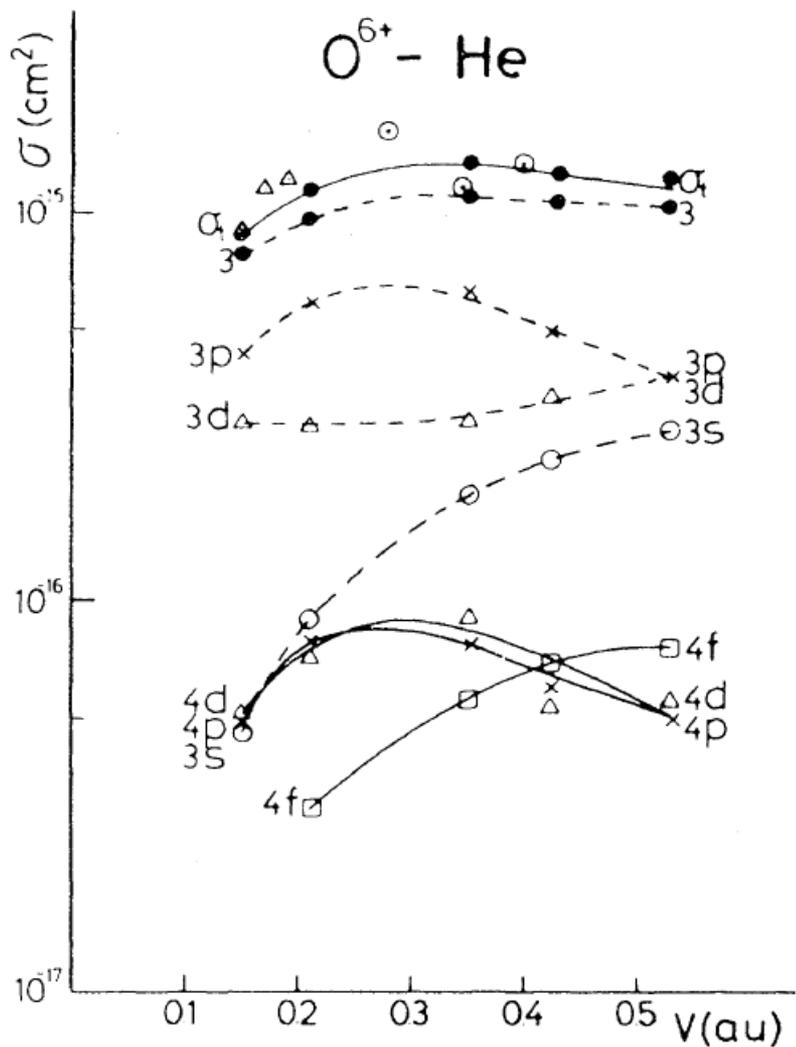
発光スペクトル 測定装置例

▪ **KVI, Netherlands**

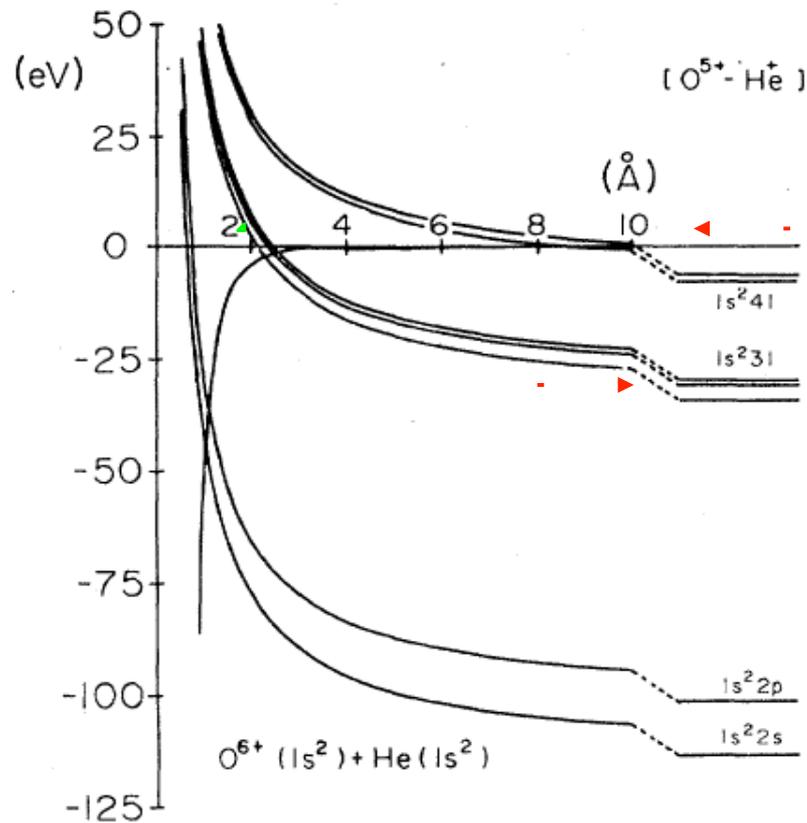


(G. Lubinski *et al.*, 2000)

電荷交換分光法による状態選別断面積



(Yu. S. Gordeev *et al.*, 1983)



粒子間ポテンシャルによる
状態選択性の理解

(K. Okuno *et al.*, 1983)

Landau-Zenerモデルによる電荷移行断面積

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^{b_{\max}} 2p_{\text{LZ}}(b, v) \{1 - p_{\text{LZ}}(b, v)\} b \, db$$

直線軌道を仮定：

$$p_{\text{LZ}}(b, v) = \exp\left(-\frac{2\pi H_{12}^2}{\hbar v_x |F_1 - F_2|}\right) \quad v_x = v \sqrt{1 - \frac{b^2}{R_x^2}}$$

粒子間ポテンシャルを近似：

$$|F_1 - F_2| \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q-1}{R^2} \quad V_1(R) \approx 0 \quad V_2(R) \approx -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q-1}{R}$$

相互作用エネルギーの経験的公式

$$H_{12} = H_{OS} = \frac{9.13}{\sqrt{Z}} \exp\left(-\frac{1.324R_x\sqrt{2I_t}}{\sqrt{Z}}\right)$$

イオンが裸の場合

Z : 核の電荷数

R_x : 交差距離

I_t : 標的のIP

$$H_{12} = H_K = \frac{5.48}{\sqrt{Z}} \exp\left(-\frac{1.324R_x\sqrt{2I_t}}{\sqrt{Z}}\right)$$

$$H_{12} = H_T = \frac{9.13f_{nl}}{\sqrt{q}} \exp\left(-\frac{1.324R_x\sqrt{2I_t}}{\sqrt{q}}\right)$$

q : イオンの価数

$$f_{nl} = (-1)^{n+l-1} \frac{\Gamma(n)\sqrt{2l+1}}{\sqrt{\Gamma(n+l+1)\Gamma(n-l)}}$$

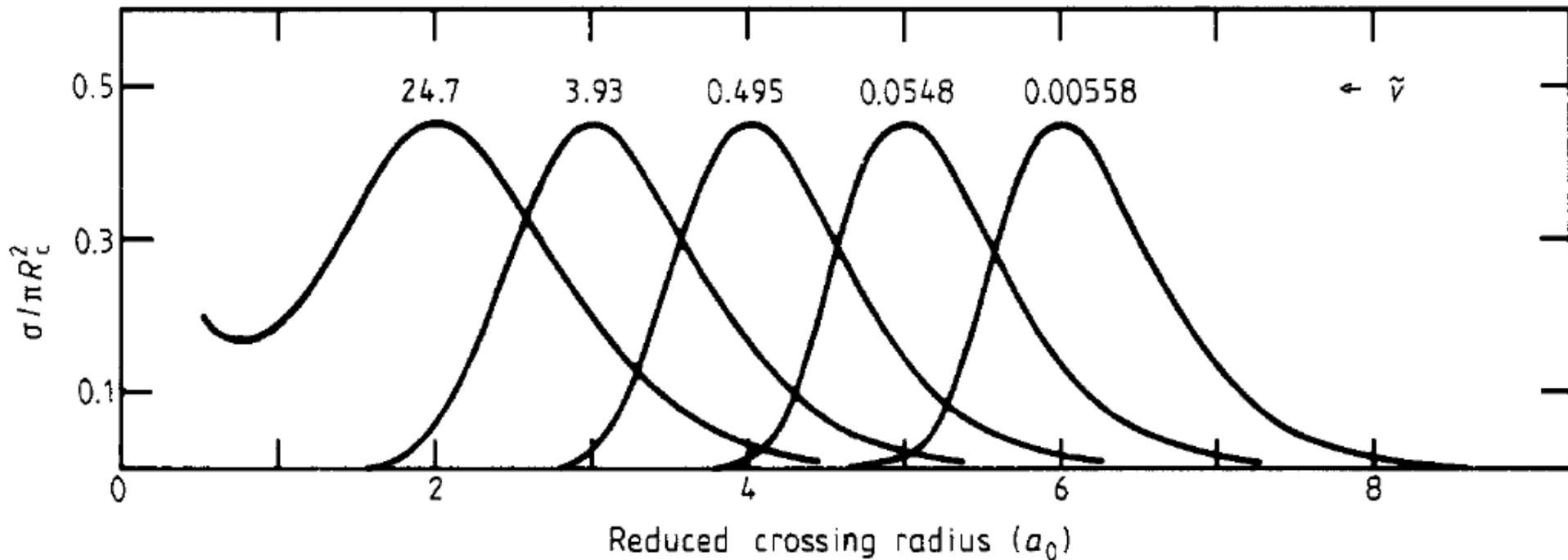
R. E. Olson & A. Salop: Phys. Rev. A **14** (1976) 579.

M. Kimura *et al.* : J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 2224.

K. Taulbjerg : J. Phys. B **19** (1986) L368.

Reaction Window (1)

$$T(R_X; \nu) = \frac{\sigma(R_X; \nu)}{\pi R_X^2}$$



K. Taulbjerg : J. Phys. B **19** (1986) L368.

Reaction Window (2)

$$v = 0.0316 \text{ au}$$

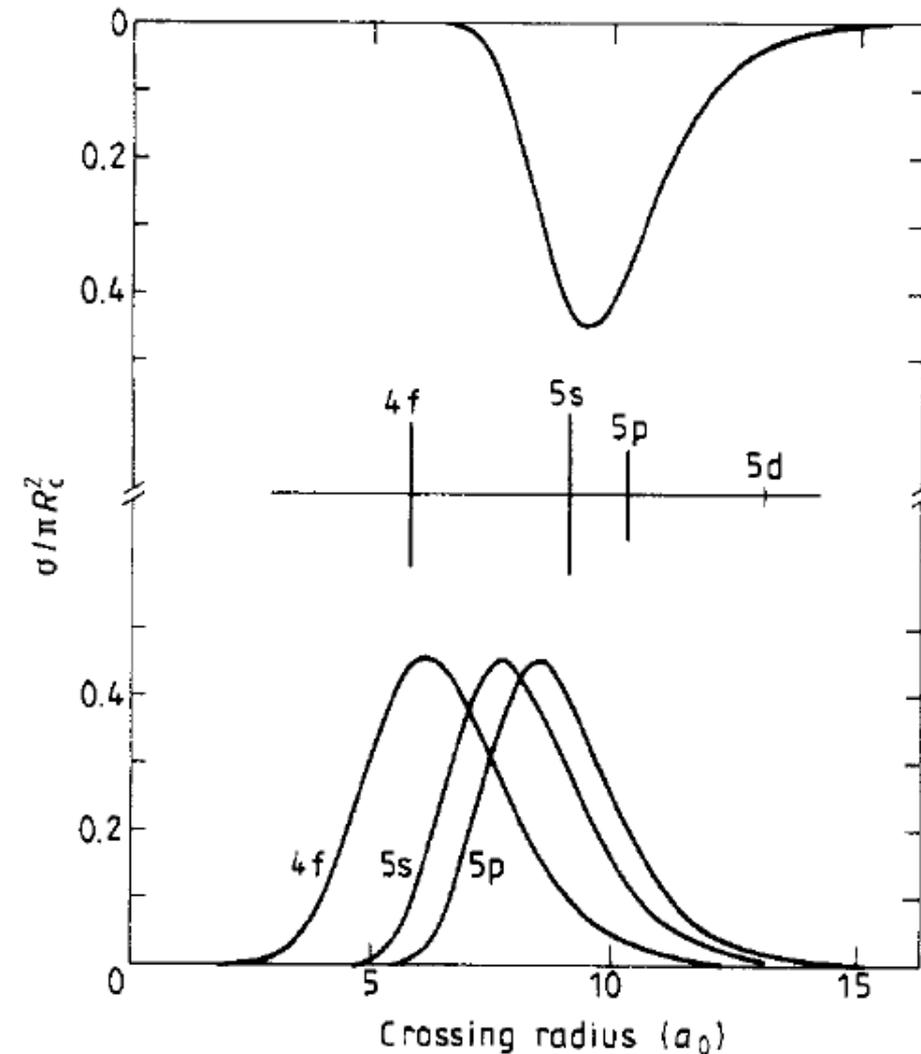
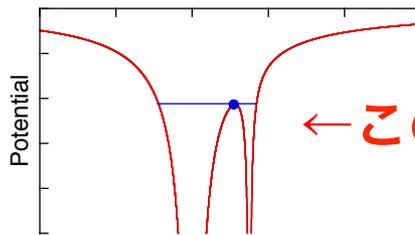
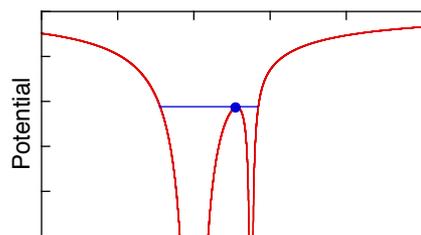
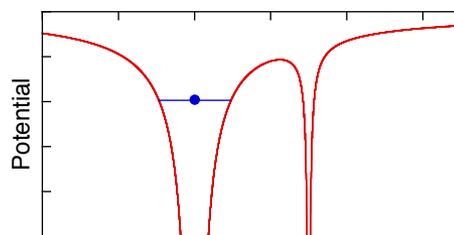
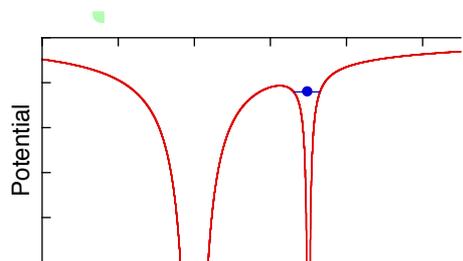
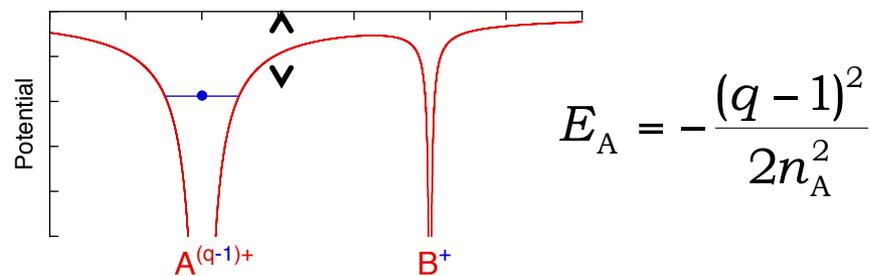
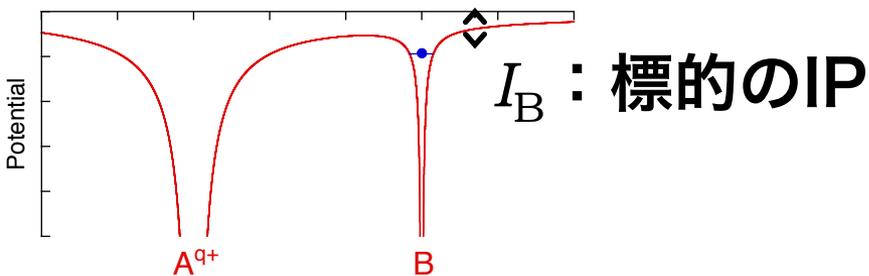


Figure 2. Specific reaction windows for capture to 4f, 5s and 5p in collisions of partly stripped 8+ ions with neon at an impact velocity of 0.158 au. The common reaction window pertaining to fully stripped 8+ ions at the same impact velocity is shown in the upper part. The position of the relevant curve crossings for the Ar^{8+} -Ne system is shown in the centre of the figure. The height of the full bars represents the experimental value of the corresponding partial capture cross sections (Nielsen *et al* 1985).

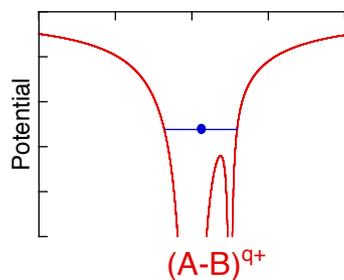
- 捕獲準位の理解が主
- 断面積の値は定性的

Classical over-the-barrier model



$$\sigma = \pi R_C^2 \cdot P$$

←このときの核間距離が重要



主量子数 : $n_A = \left\{ \frac{1 + 2\sqrt{q}}{2I_B(q + 2\sqrt{q})} \right\}^{\frac{1}{2}} q$

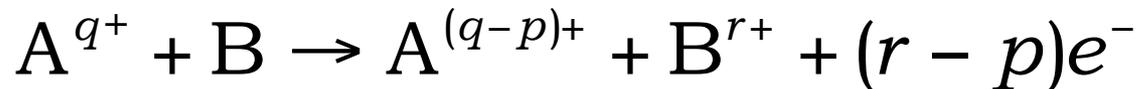
標的によって捕獲準位が異なる

低エネルギー衝突におけるスケージング則

Mueller-Salzborn : Phys. Lett. **62A** (1977) 391.

M. Kimura *et al.* : J. Phys. B **28** (1995) L643.

N. Selberg et al. : Phys. Rev. A **54** (1996) 4127.

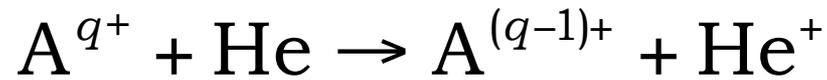


$$\sigma_q^r(\text{cm}^2) = 2.7 \times 10^{-13} qr / \left[I_1^2 I_r^2 \sum_{j=1}^N (j / I_j^2) \right]$$

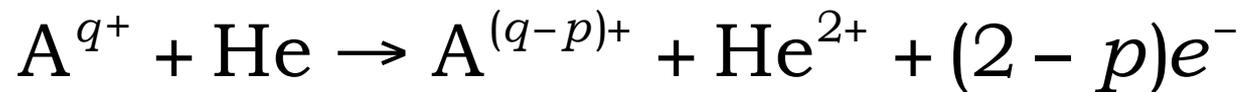
I_j : 標的の第 j イオン化エネルギー (eV単位)

N : 外殻電子数 (2 for He, 8 for Ar and Xe)

He標的の場合 ($I_1 = 24.588$ eV, $I_2 = 54.418$ eV)



$$\sigma_q^1(\text{cm}^2) = 3.2 \times 10^{-16} q$$



$$\sigma_q^2(\text{cm}^2) = 1.3 \times 10^{-16} q$$

一電子捕獲 + 移行電離 ($p = 1$)

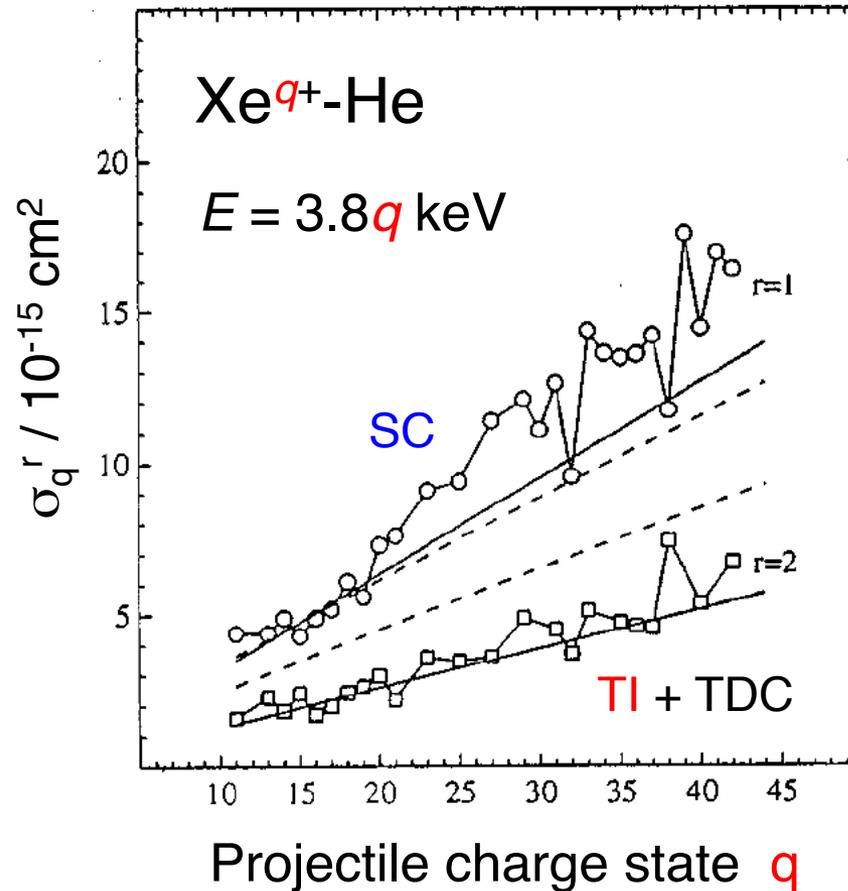
$$\sigma_{q,q-1}(\text{cm}^2) \approx \sigma_q^1 + \sigma_q^2 = 4.5 \times 10^{-16} q$$

二電子捕獲 ($p = 2$)

$$\sigma_{q,q-2}(\text{cm}^2) \approx 0$$

電荷移行断面積の測定値

$\text{Xe}^{q+}\text{-He}$ ($q = 15 - 43$)



(N. Selberg *et al.*, 1996)

多価イオンの特徴

- 価数 q のみで性質がほぼ決まる
 - ∴ 励起電子に対するポテンシャル

$$V(r) \approx -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qe^2}{r}$$

- 電子数が多いと価数 q だけでは決まらない

電荷移行断面積のスケージング則：

一価イオンでない限り，かなり普遍的
少なくとも，桁を見積もるのには使える

捕獲準位に関する予測：

- ・ 古典的オーバーバリアモデル： n のみ
- ・ ポテンシャル交差モデル： n および l

定性的には2つのモデルで説明できる場合が多い

その他の理論：

厳密な理論：緊密結合法 etc.

古典論：Classical Trajectory Monte Carlo

量子論：

完全な量子論は部分波が多すぎるため非現実的

→ 衝突パラメータ法：核の運動は古典的

• 分子軌道緊密結合法 **MOCC**

• 原子軌道緊密結合法 **AOCC**

半古典論：

• ポテンシャル交差モデル：**Landau-Zener**

→ Zhu-Nakamuraの公式を使うべき

古典論：

• **COB**：古典的オーバーバリアモデル

• **CTMC**：**C**lassical **T**rajectory **M**onte **C**arlo

※ 電子を古典力学的に扱う完全な古典論なのに
非常に良く合う (但し, 一電子系)

Ionization Potential :

O ($2p^6 \ ^3P_2$) : IP = 13.62 eV

H ($1s \ ^2S_{1/2}$) : IP = 13.60 eV

CH₄ : IP_V = 13.6 eV

分子の場合 : 断熱遷移と垂直遷移

- 断熱 : MとM⁺の最低エネルギーの差 (異なる構造)
- 垂直 : Mの安定構造のままイオン化

イオン化の時間 < 分子変形的时间 → 垂直遷移が妥当

→ 実験では, O や H の代用に CH₄

→ 理論では, O の代わりに H

Table 1. Charge Exchange Reactions, $L = 6.0$, k_0 [Smith and Strobel, 1985], k_1-k_{16} [McGrath and Johnson, 1989]

Reaction	$k, \text{cm}^3\text{s}^{-1}$
$\text{S}^+ + \text{S}^{++} \rightarrow \text{S}^{++} + \text{S}^+$	$k_0 = 8.1 \times 10^{-9}$
$\text{S} + \text{S}^+ \rightarrow \text{S}^+ + \text{S}$	$k_1 = 2.4 \times 10^{-8}$
$\text{S} + \text{S}^{++} \rightarrow \text{S}^+ + \text{S}^+$	$k_2 = 3 \times 10^{-10}$
$\text{S} + \text{S}^{++} \rightarrow \text{S}^{++} + \text{S}$	$k_3 = 7.8 \times 10^{-9}$
$\text{S} + \text{S}^{+++} \rightarrow \text{S}^+ + \text{S}^{++}$	$k_4 = 1.32 \times 10^{-8}$
$\text{O} + \text{O}^+ \rightarrow \text{O}^+ + \text{O}$	$k_5 = 1.32 \times 10^{-8}$
$\text{O} + \text{O}^{++} \rightarrow \text{O}^+ + \text{O}^+$	$k_6 = 5.2 \times 10^{-10}$
$\text{O} + \text{O}^{++} \rightarrow \text{O}^{++} + \text{O}$	$k_7 = 5.4 \times 10^{-9}$
$\text{O} + \text{S}^+ \rightarrow \text{O}^+ + \text{S}$	$k_8 = 6 \times 10^{-11}$
$\text{S} + \text{O}^+ \rightarrow \text{S}^+ + \text{O}$	$k_9 = 3.1 \times 10^{-9}$
$\text{S} + \text{O}^{++} \rightarrow \text{S}^+ + \text{O}^+$	$k_{10} = 2.34 \times 10^{-8}$
$\text{S} + \text{O}^{++} \rightarrow \text{S}^{++} + \text{O}^+ + e^-$	$k_{11} = 1.62 \times 10^{-8}$
$\text{O} + \text{S}^{++} \rightarrow \text{O}^+ + \text{S}^+$	$k_{12} = 2.3 \times 10^{-9}$
$\text{O}^{++} + \text{S}^+ \rightarrow \text{O}^+ + \text{S}^{++}$	$k_{13} = 1.4 \times 10^{-9}$
$\text{O} + \text{S}^{+++} \rightarrow \text{O}^+ + \text{S}^{++}$	$k_{14} = 1.92 \times 10^{-8}$
$\text{O}^{++} + \text{S}^{++} \rightarrow \text{O}^+ + \text{S}^{+++}$	$k_{15} = 9 \times 10^{-10}$
$\text{S}^{+++} + \text{S}^+ \rightarrow \text{S}^{++} + \text{S}^{++}$	$k_{16} = 3.6 \times 10^{-10}$

2つのコメント：

- ・ 反応速度定数 k と断面積 σ
- ・ 共鳴電荷移行断面積の経験式

反応速度定数 k : 温度 T の関数

断面積 σ : 衝突速度 v の関数

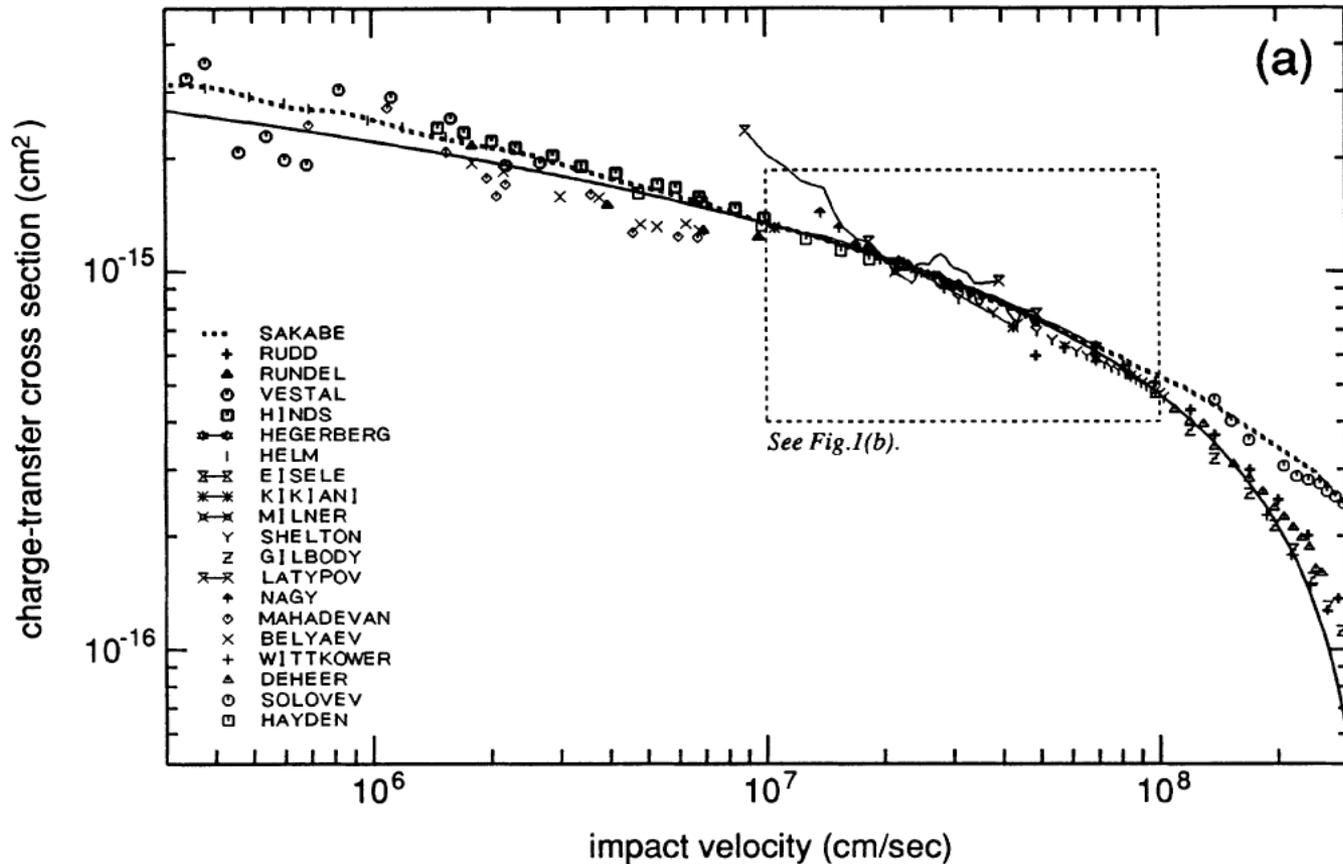
$$k(T) = \int_0^{\infty} \sigma(v) v f(v) dv$$

$$f(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2kT} \right) : \text{速度分布関数}$$

近似的な関係式 :

$$k(T) = \sigma(\bar{v}) \cdot \bar{v}$$

断面積の速度依存性と衝突速度の分布に注意！



S. Sakabe & Y. Izawa : Phys. Rev. A 45 (1992) 2086.

共鳴電荷移行 : $A^+ + A \rightarrow A + A^+$

$$\sigma(v) = \left(A - B \log v \right) \left(\frac{I}{I_H} \right)^{-1.5}$$

$$A = 1.81 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$$

$$B = 2.12 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$$

$$I_H = 13.6 \text{ eV}$$

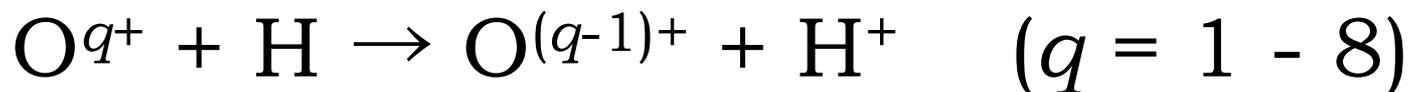
核融合科学研究所のデータベースによる検索：

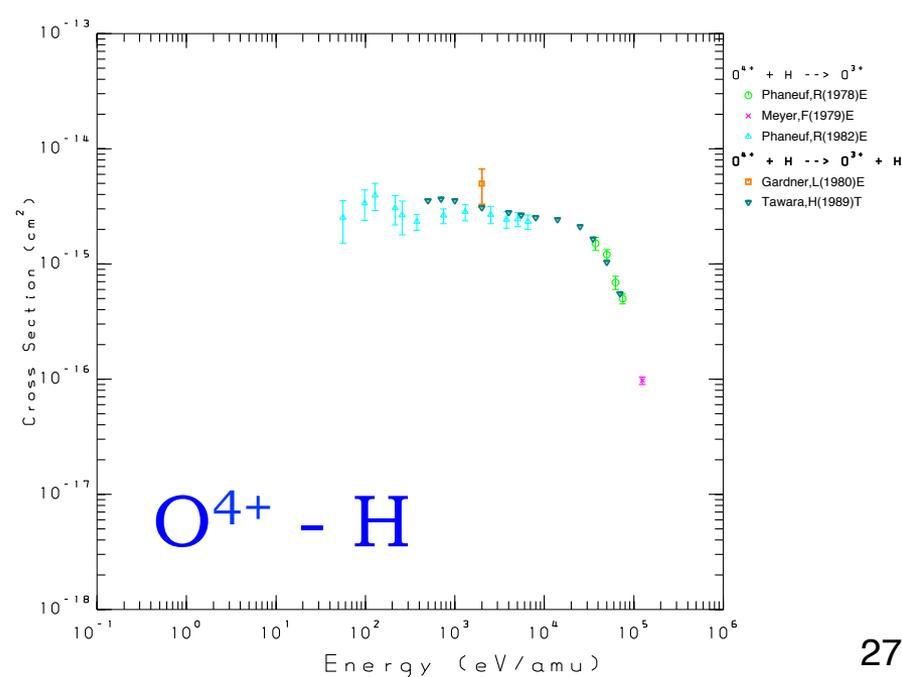
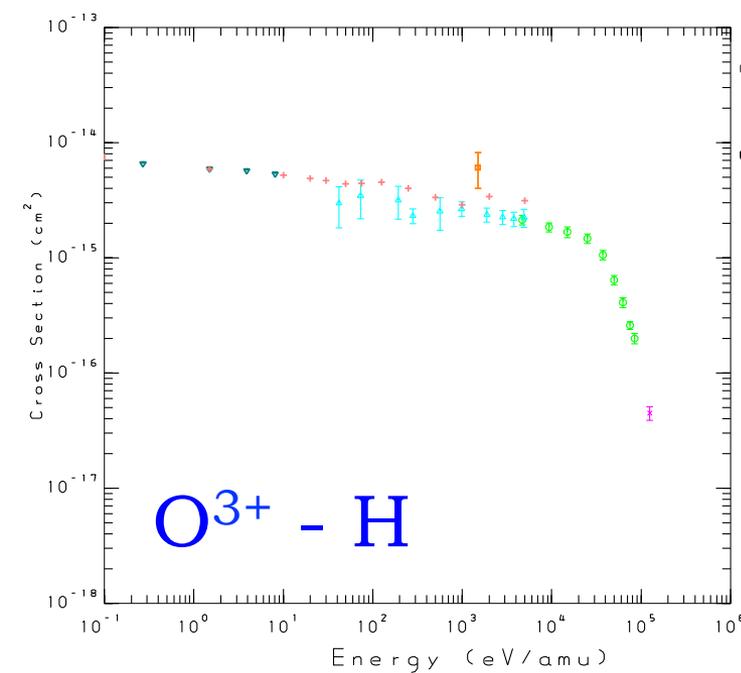
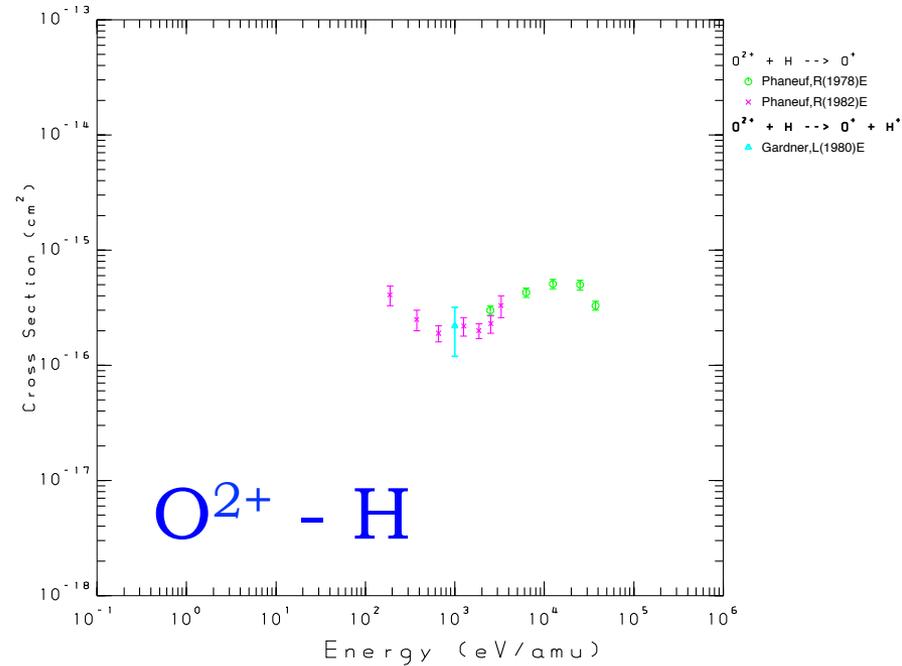
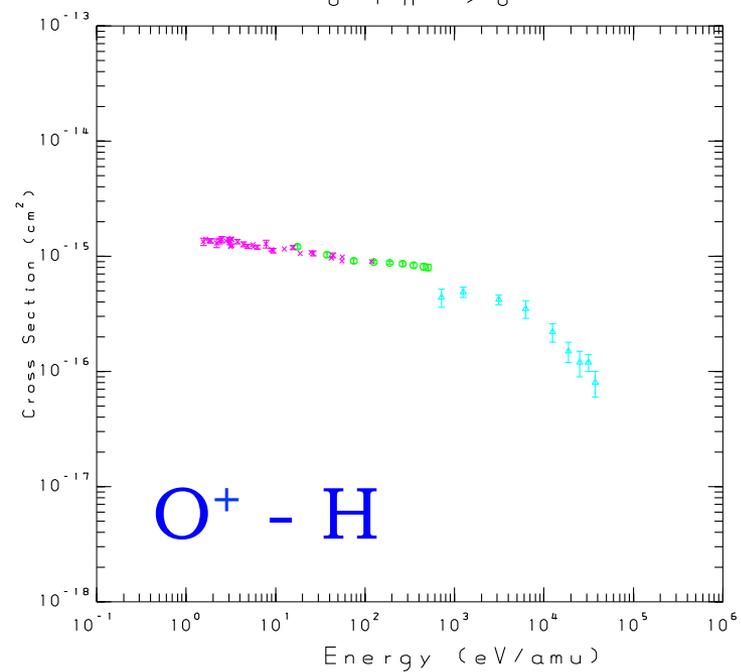
<http://dbshino.nifs.ac.jp/>

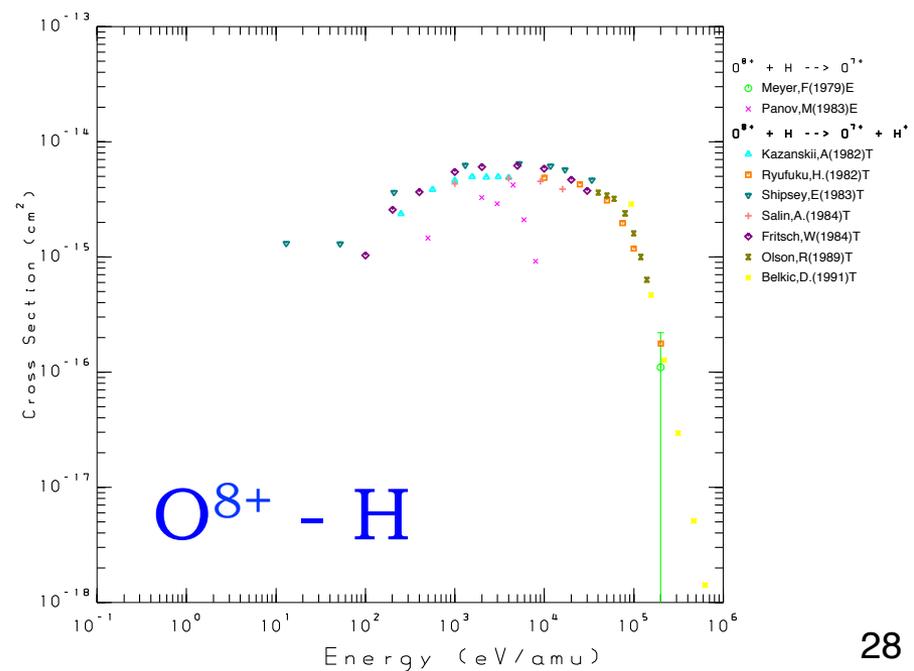
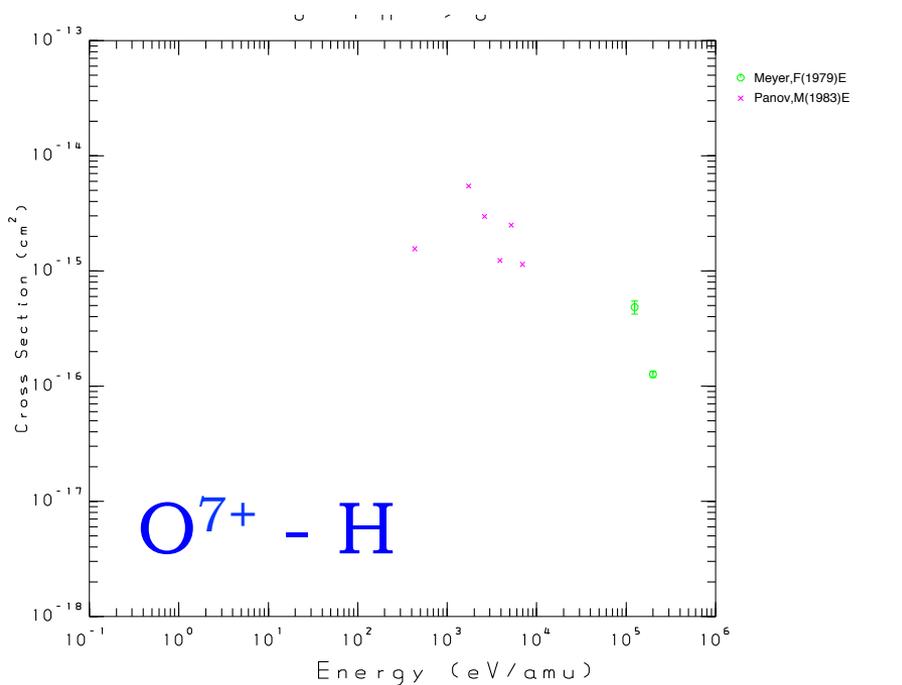
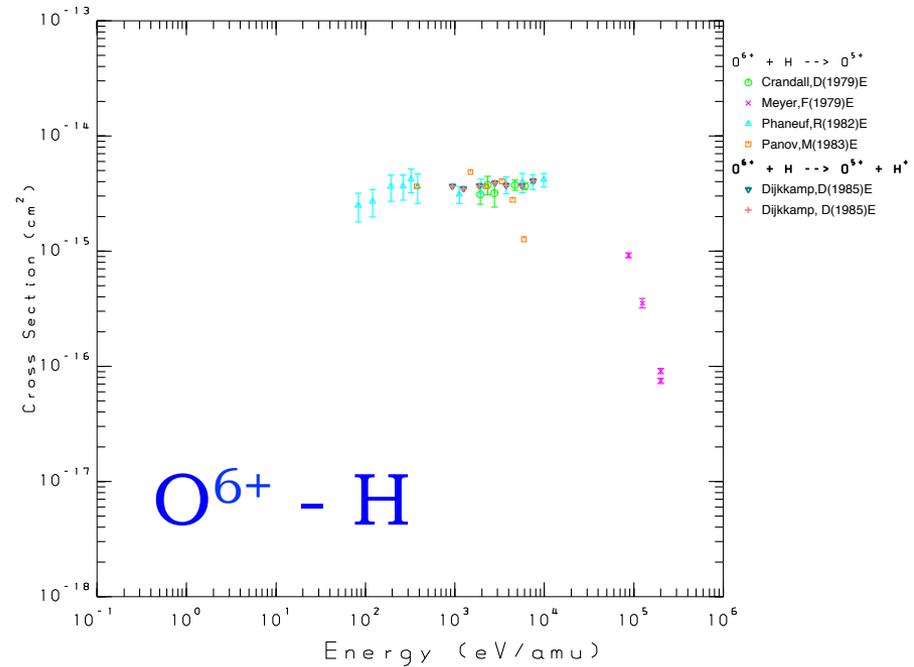
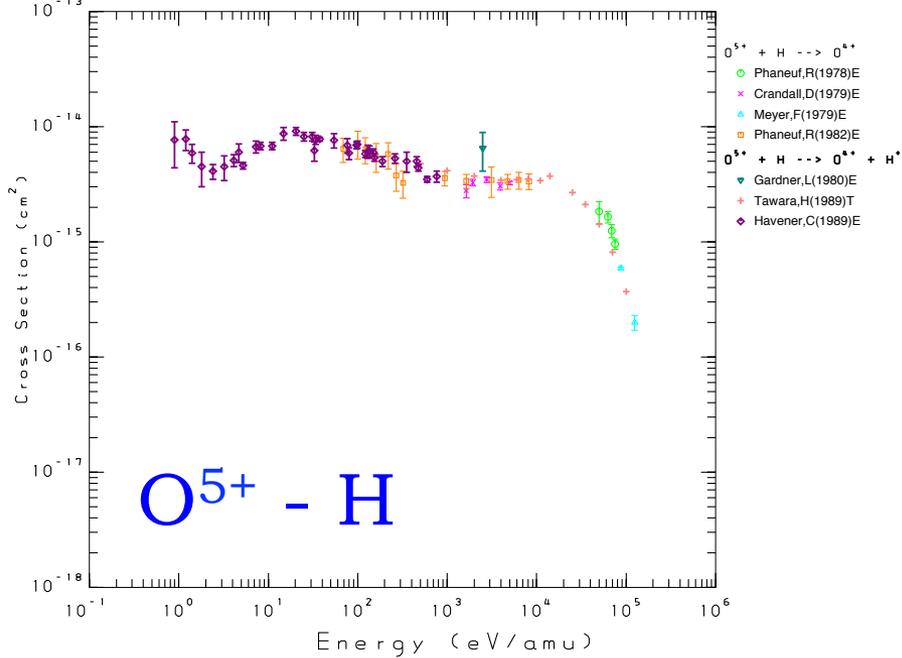
CHART：

文献，断面積，断面積のグラフ

例：







具体例： $C^{5+} - H$

IOP PUBLISHING

JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** (2012) 245202 (9pp)

[doi:10.1088/0953-4075/45/24/245202](https://doi.org/10.1088/0953-4075/45/24/245202)

Final-state-resolved charge exchange in C^{5+} collisions with H

**J L Nolte¹, P C Stancil¹, H P Liebermann², R J Buenker², Y Hui³
and D R Schultz^{3,4}**

¹ Department of Physics and Astronomy and the Center for Simulational Physics, University of Georgia, Athens, GA 30602, USA

² Fachbereich C-Mathematik und Naturwissenschaften, Bergische Universität Wuppertal, Gausstr. 20, D-42119 Wuppertal, Germany

³ Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37831, USA

⁴ Department of Physics, University of North Texas, Denton, TX 76203, USA

低エネルギーでのMOCC計算

他の理論計算の比較：AOCC, CTMC

P. Stancilはこの種の計算では第一人者

断熱ポテンシャル

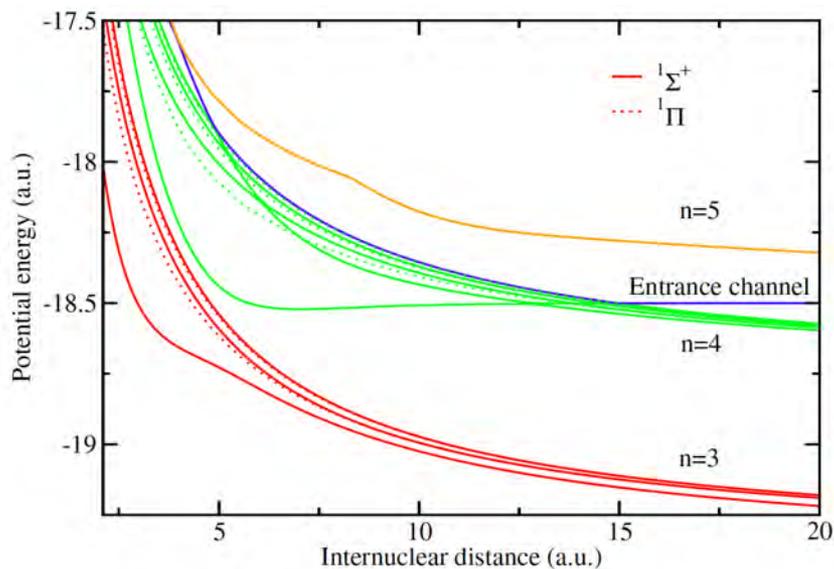


Figure 1. Singlet adiabatic potentials for $[\text{CH}]^{5+}$.

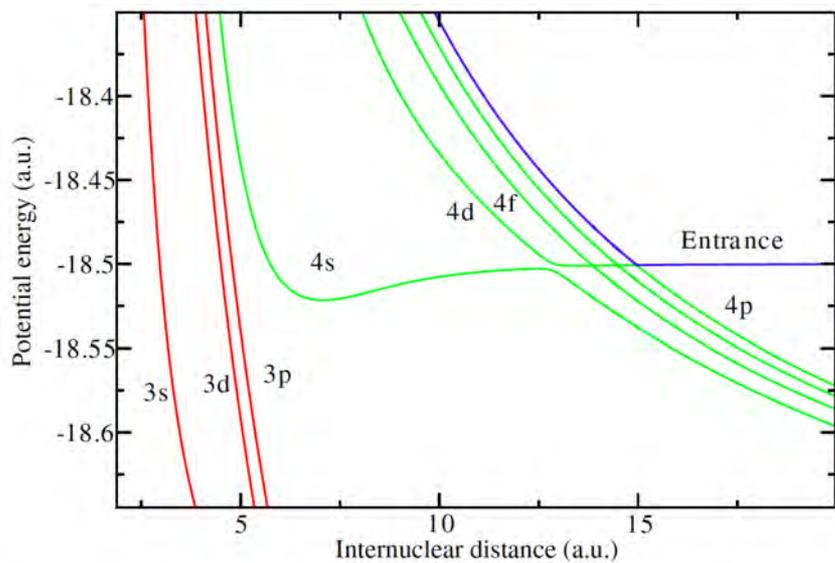


Figure 2. Singlet adiabatic potentials for $[\text{CH}]^{5+}$ (detail; $^1\Sigma^+$ states only).

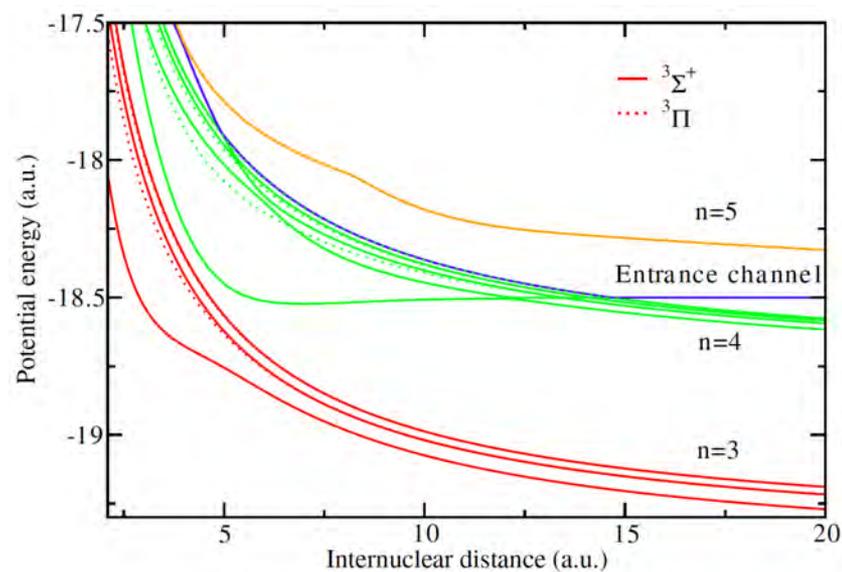


Figure 3. Triplet adiabatic potentials for $[\text{CH}]^{5+}$.

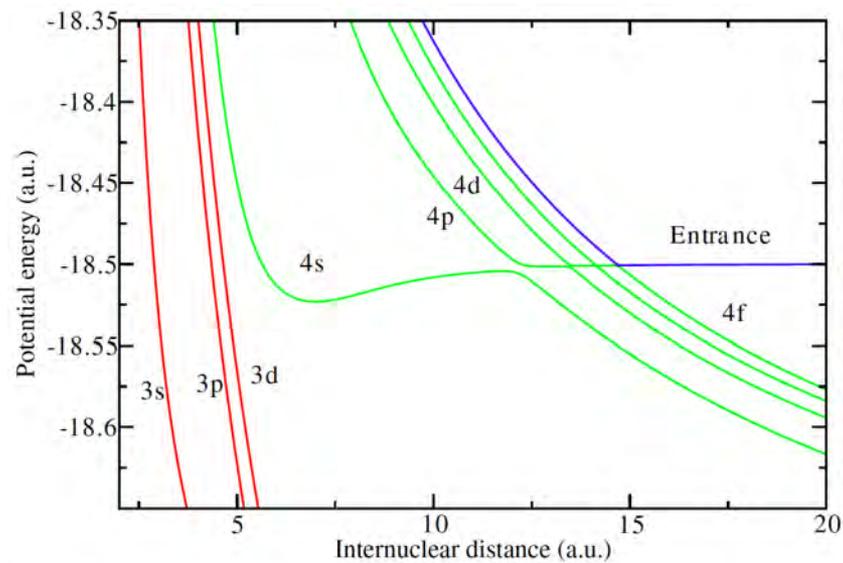


Figure 4. Triplet adiabatic potentials for $[\text{CH}]^{5+}$ (detail; $^3\Sigma^+$ states only).

動径結合

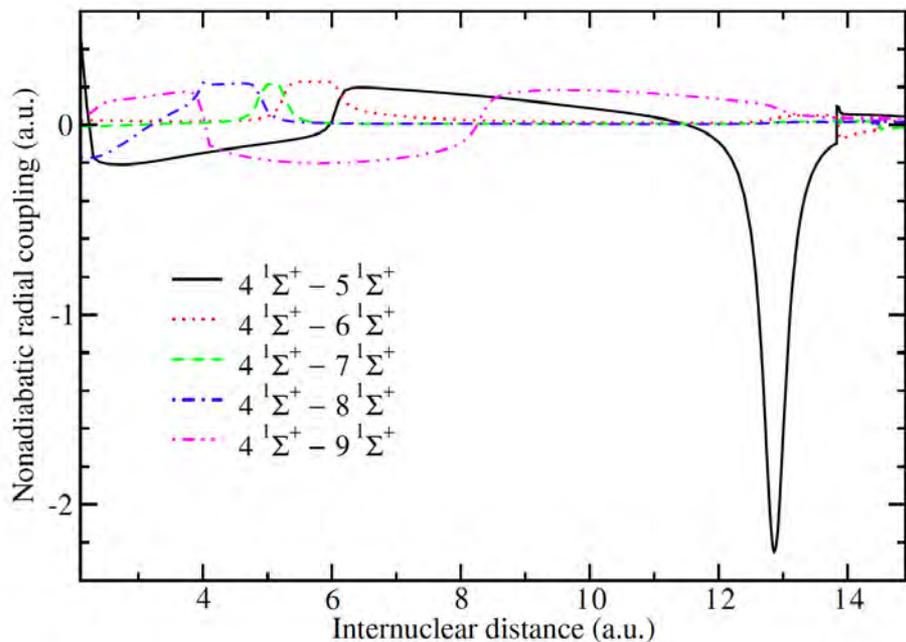


Figure 5. Family of ($4^1\Sigma^+ - N^1\Sigma^+$) nonadiabatic radial couplings for $[CH]^{5+}$.

回転結合

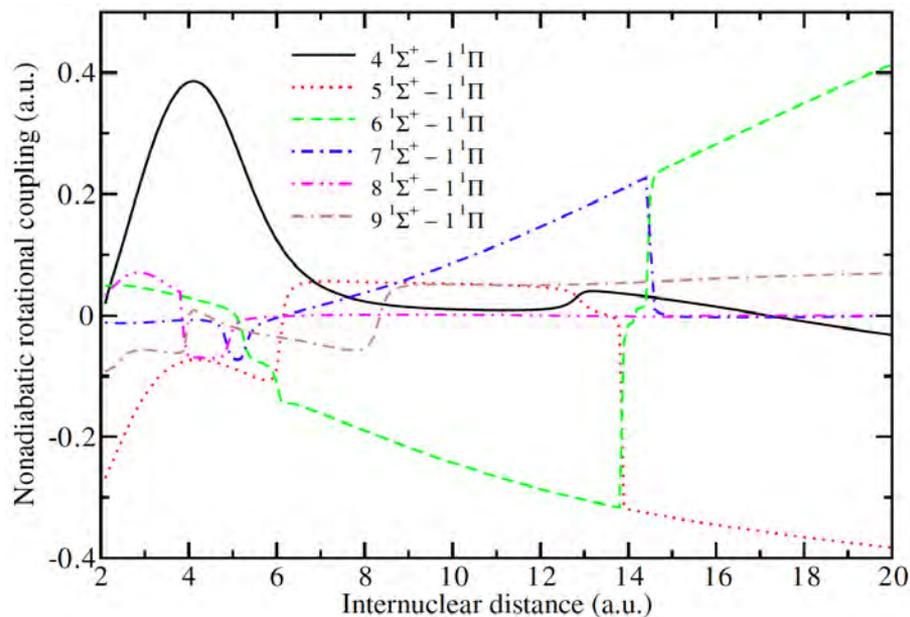


Figure 6. Family of ($N^1\Sigma^+ - 1^1\Pi$) nonadiabatic rotational couplings for $[CH]^{5+}$.

断熱ポテンシャルの計算は量子化学計算コードが廻せれば実験屋でも可能だが、結合項は難しい。

状態選択した捕獲断面積の計算値 (1)

一重項

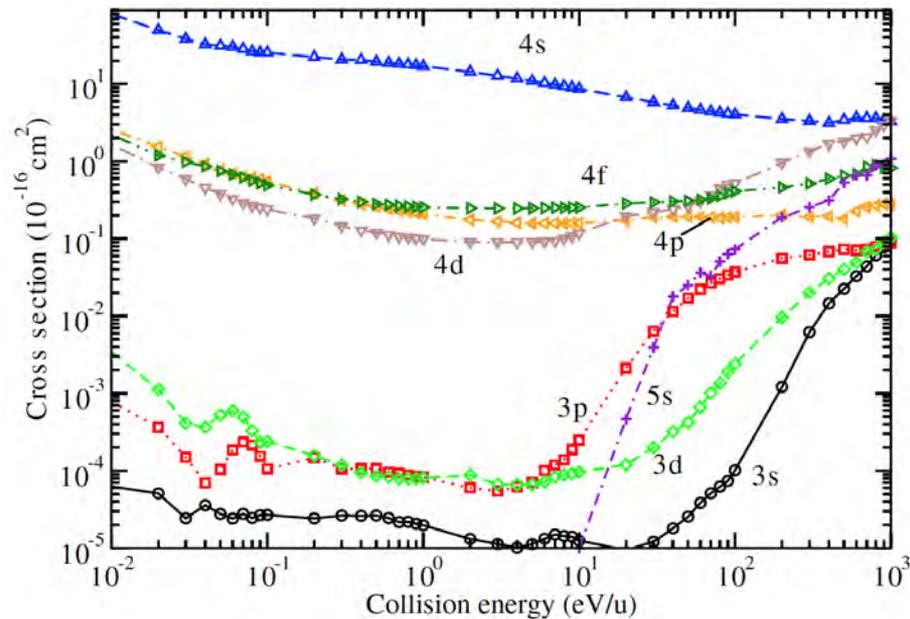


Figure 10. Singlet n, l -resolved QMOCC cross sections for $C^{5+}+H$.

三重項

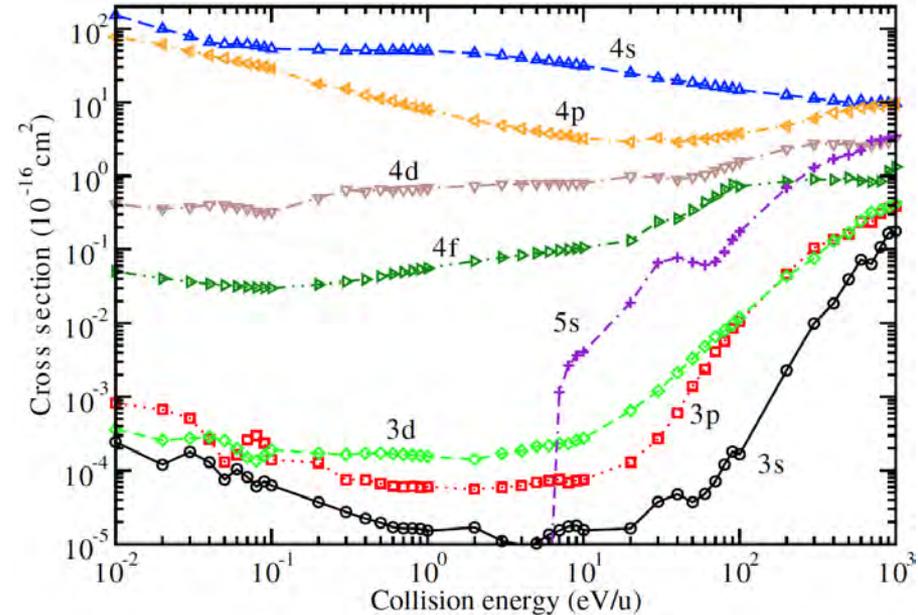


Figure 11. Triplet n, l -resolved QMOCC cross sections for $C^{5+}+H$.

分子基底緊密結合法での衝突エネルギーの上限：
 $10^3 \text{ eV/u} = 1 \text{ keV/u} \rightarrow$ 部分波の数に依る

状態選択した捕獲断面積の計算値 (2)

一重項と三重項の和

三重項と一重項の比

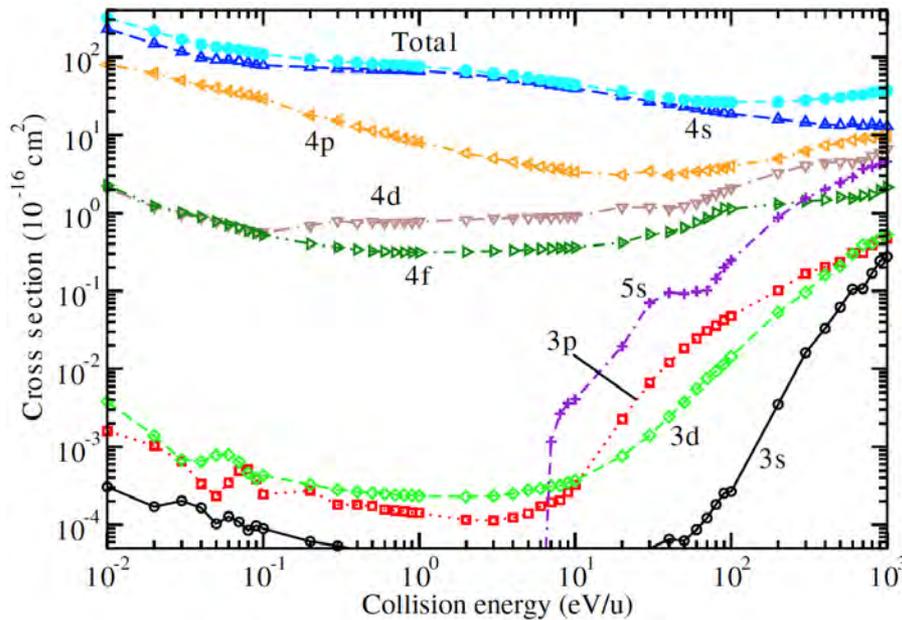


Figure 9. n, l -resolved QMOCC cross sections for $\text{C}^{5+} + \text{H}$.

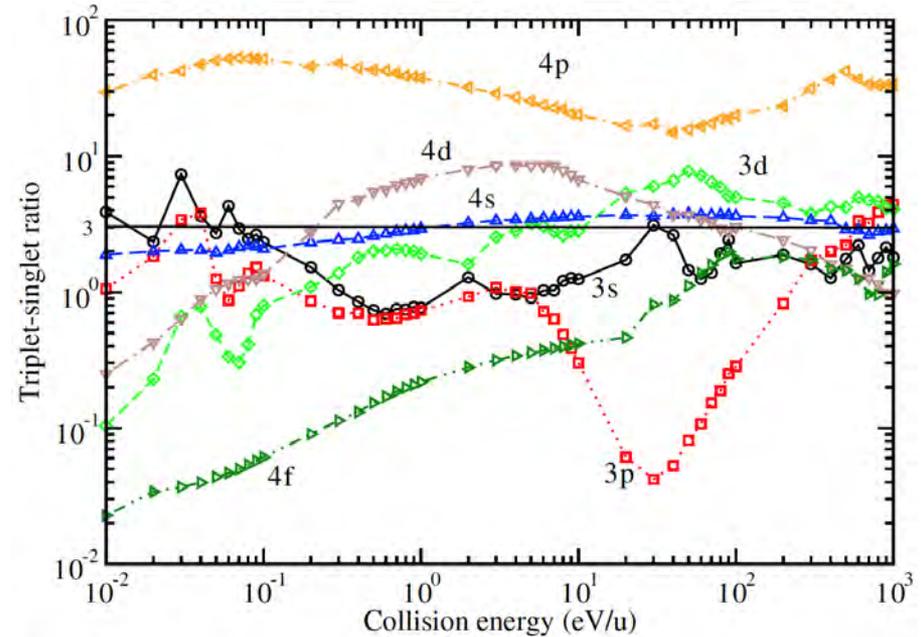


Figure 12. Triplet-singlet ratios obtained from QMOCC results for n, l -resolved cross sections for $\text{C}^{5+} + \text{H}$.

統計重率とは大きく異なる → 単純なモデル化は危険

捕獲断面積の比較

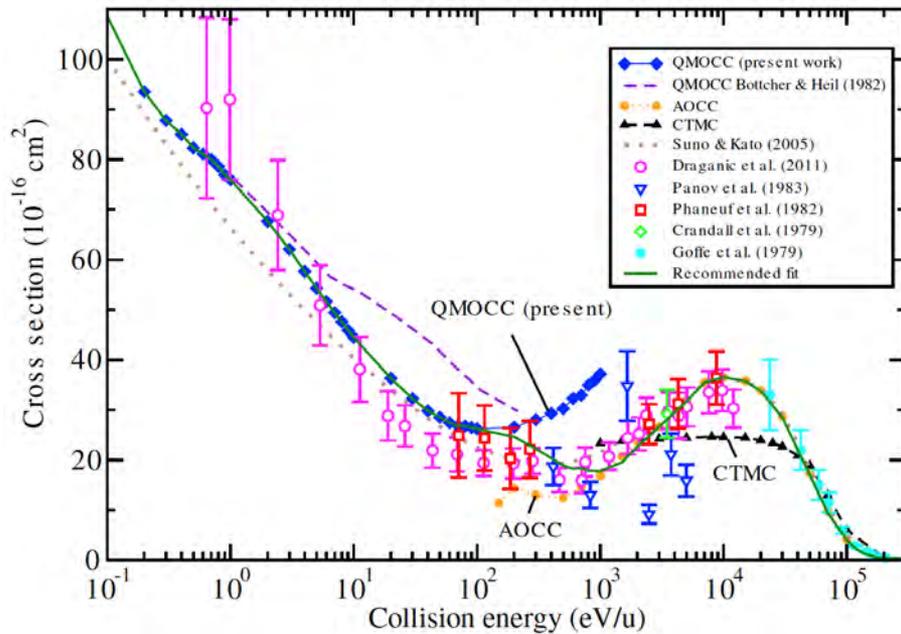


Figure 13. Comparison of the total cross sections for charge exchange in $C^{5+} + H$ collisions using QMOCC, as well as AOCC and CTMC methods. Also included are previous QMOCC results by Botcher and Heil [49], a fit by Suno and Kato [50] based on previous theoretical and experimental results, and experimental results of Draganić *et al* [51], Panov *et al* [52], Phaneuf *et al* [53], Crandall *et al* [54] and Goffe *et al* [55]. Recommended fit based on QMOCC, AOCC and CTMC results in this work.

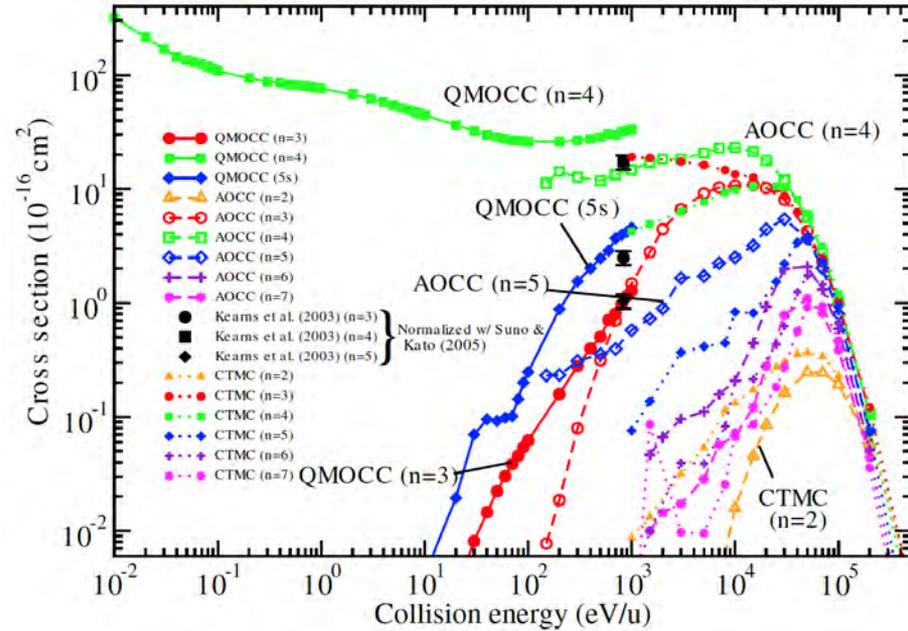


Figure 14. Comparison of n -resolved cross sections for $C^{5+} + H$ for QMOCC, AOCC, CTMC calculations and experimental results of Kearns *et al* [17] (error bars estimated from their $O^{7+} + H$ data).

傾向は似ているが
2-10倍の差

AOCC : > 0.1 keV/u, CTMC : > 1 keV/u

$n = 4$ への捕獲断面積の l 依存性

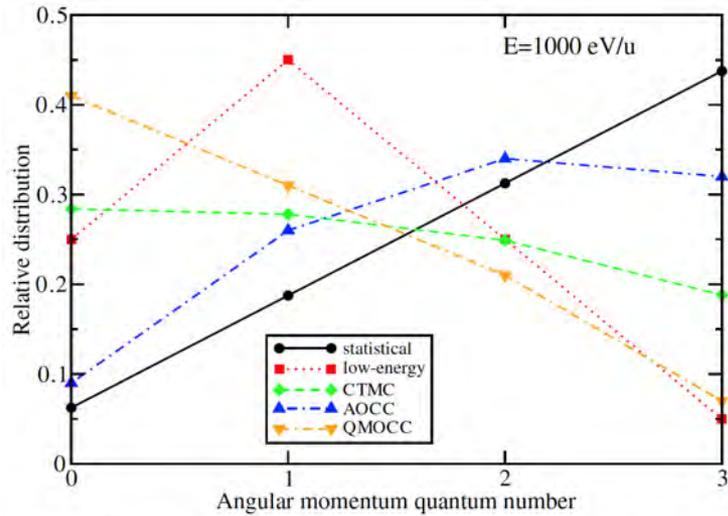


Figure 16. Comparison of $n = 4$ l -distributions for $C^{5+}+H$ for QMOCC, AOCC and CTMC, along with statistical and low-energy distributions at $E = 1000$ eV/u.

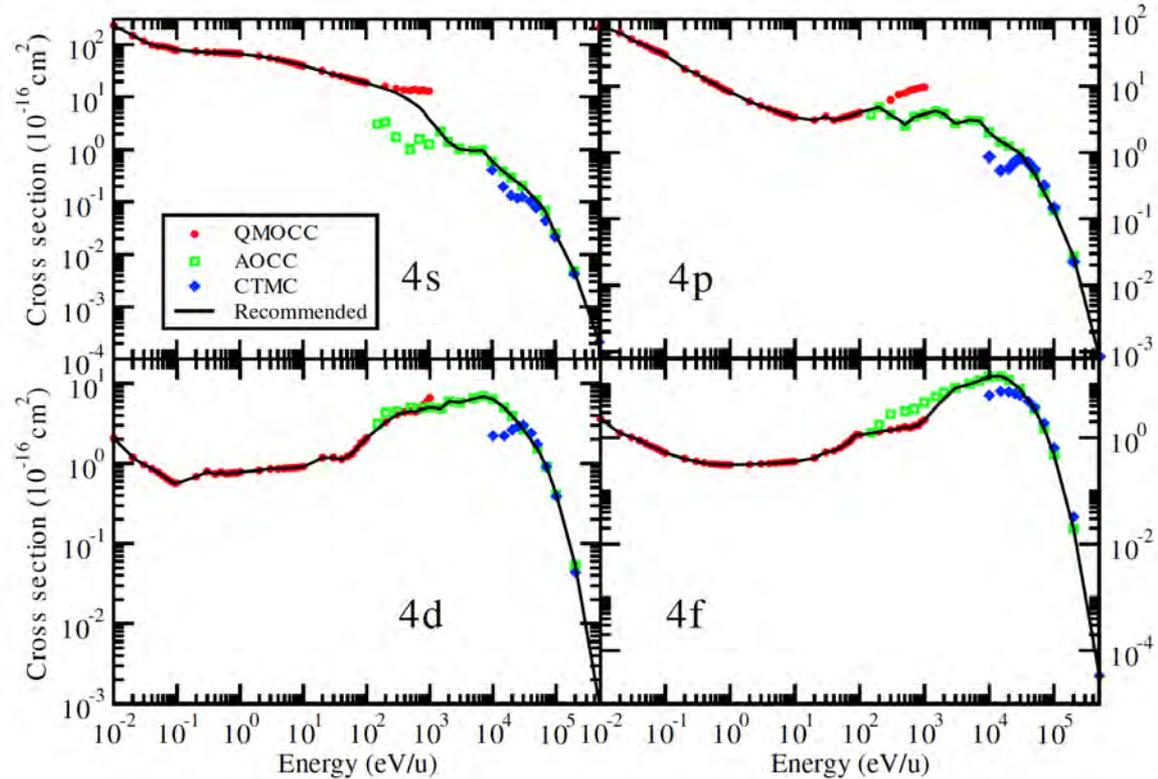


Figure 17. $C^{5+}+H$ l -resolved cross sections for $n = 4$, for QMOCC, AOCC and CTMC.

統計重率とは大きく異なる → 単純なモデル化は危険
 高エネルギーでは l が大きくなるのが一般的傾向

遷移波長・遷移速度に関するデータベース：

<http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>

<http://www-amdis.iaea.org/GENIE/>

完全ではないので論文も必要



ACADEMIC
PRESS

Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE @ DIRECT®

Atomic Data and Nuclear Data Tables 85 (2003) 83–167

Atomic Data
AND
Nuclear Data Tables

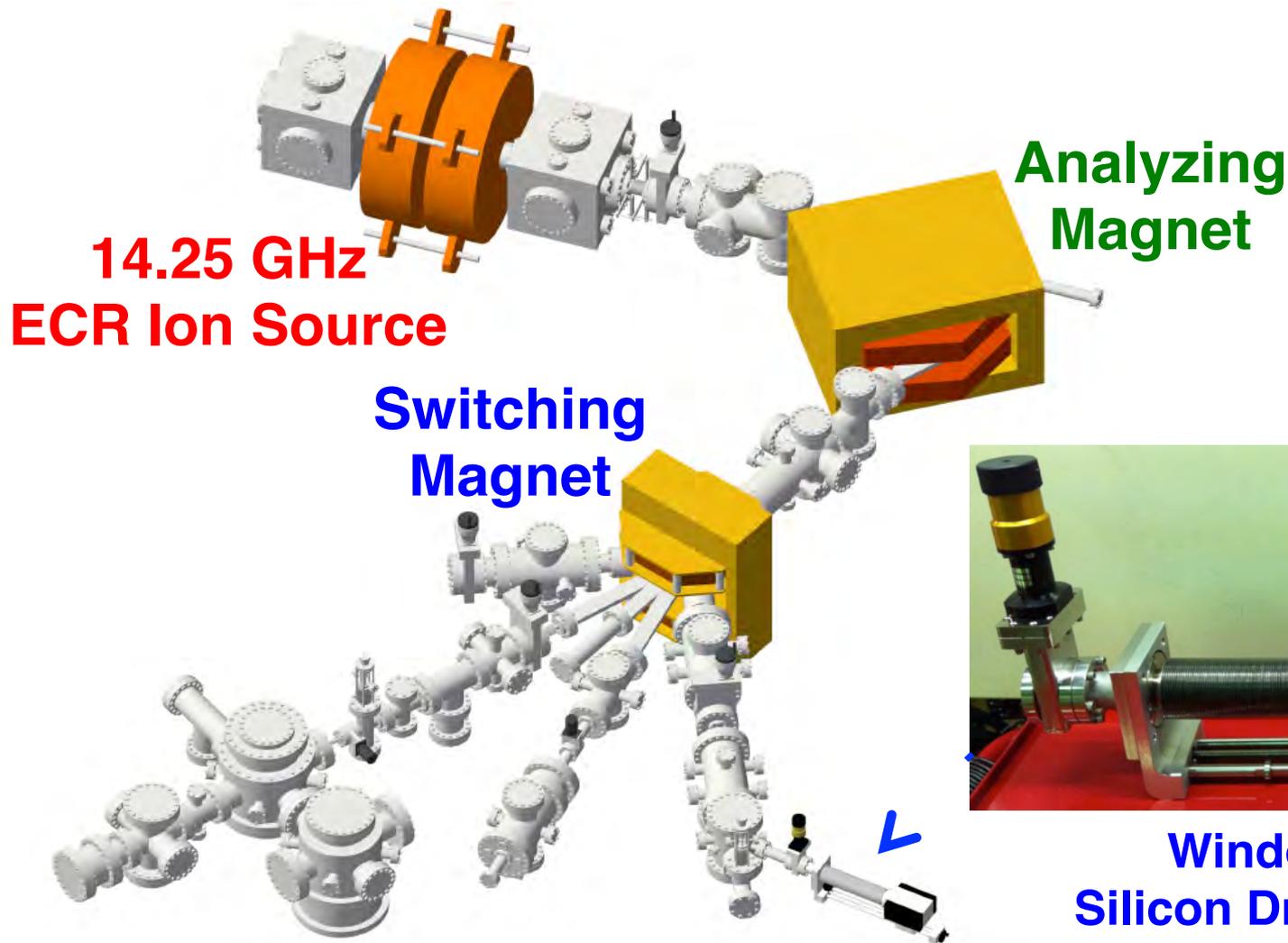
www.elsevier.com/locate/adt

Multipole (E1, M1, E2, M2) transition wavelengths and rates between states with $n \leq 6$ in helium-like carbon, nitrogen, oxygen, neon, silicon, and argon[☆]

I.M. Savukov, W.R. Johnson, and U.I. Safronova*

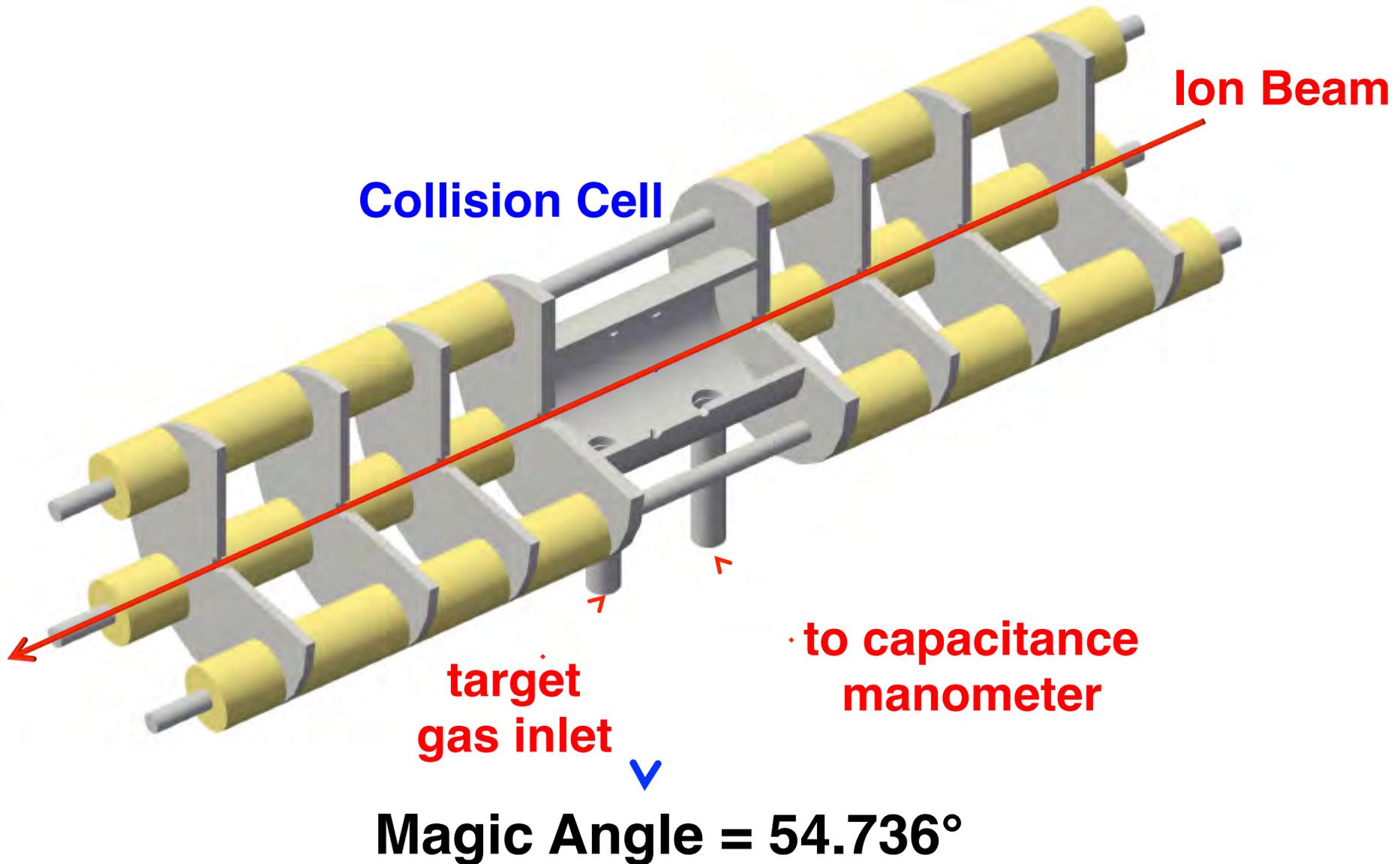
Department of Physics, 225 Nieuwland Science Hall, University of Notre Dame, Notre Dame, IN 46556, USA

New experimental setup (1)



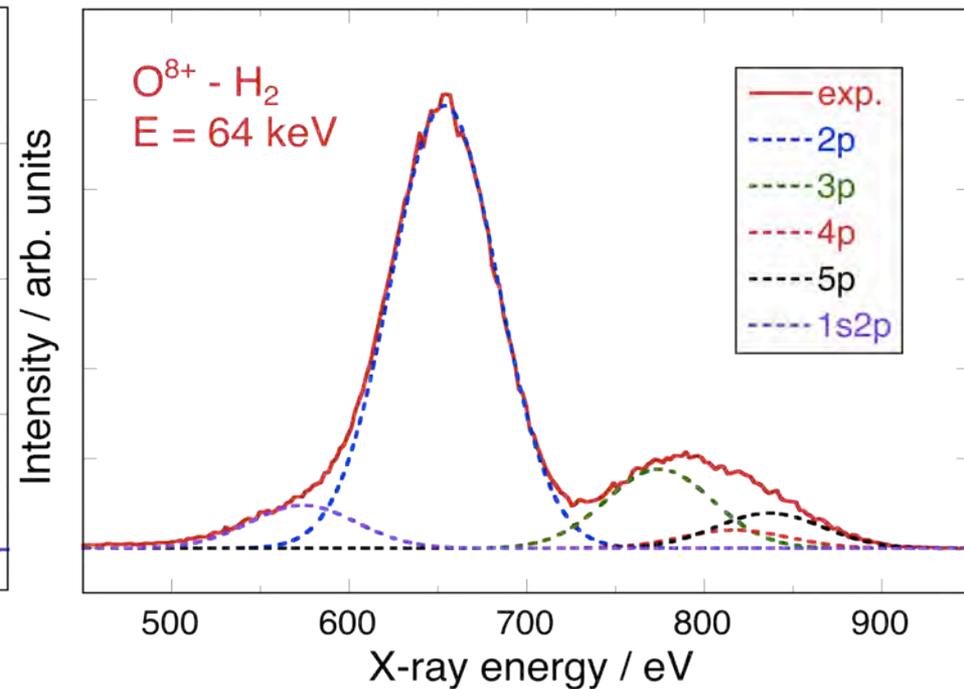
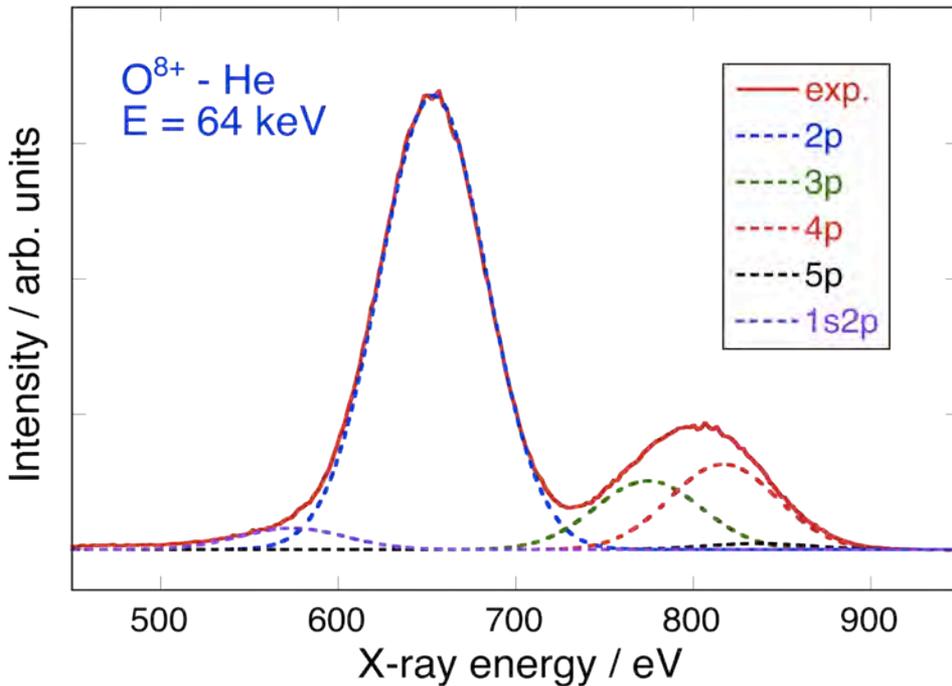
**Window-less
Silicon Drift Detector
(SDD)**

New experimental setup (2)



Experimental spectra
in collisions of O^{8+} ions
with H_2 and He

O^{8+} - He / H_2 collisions



1s- np transitions of O^{7+} , and $1s^2$ - $1s2p$ transition of O^{6+}

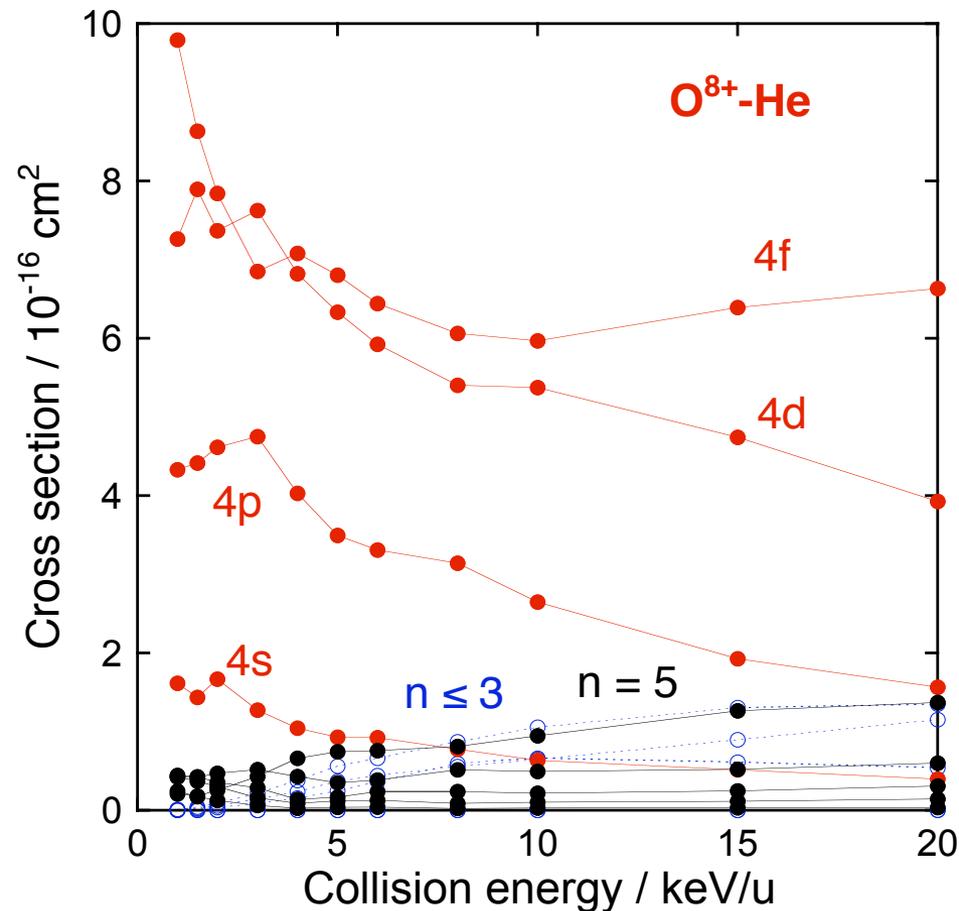
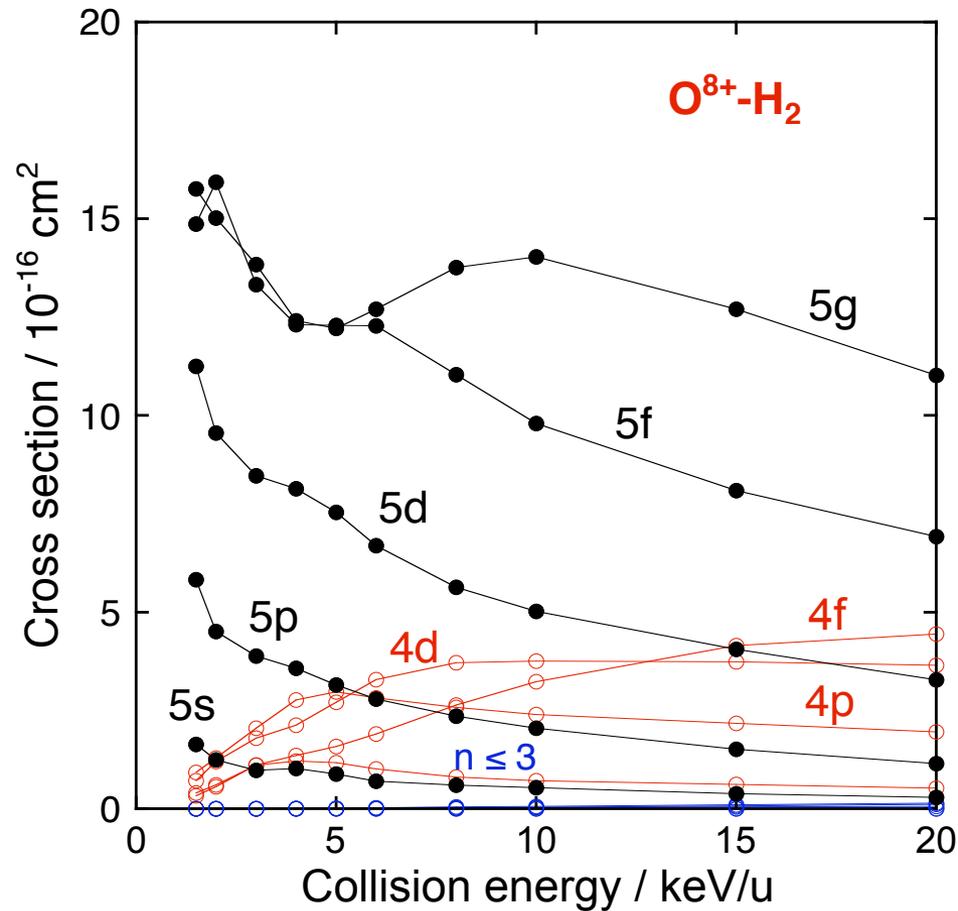
$$2p > 4p > 3p$$

$$2p > 3p > 4p$$

Comparison with theoretical calculations

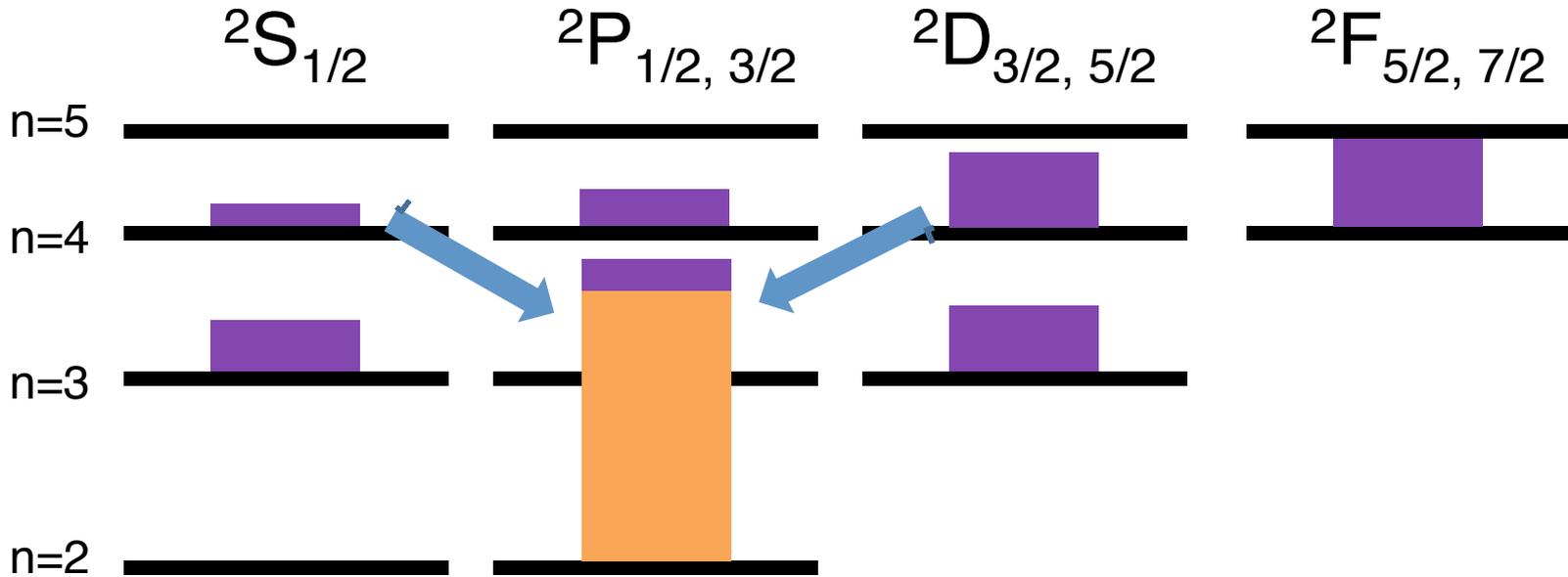
Atomic Orbital Close Coupling calculation
by L. Liu & J. Wang

Partial cross sections

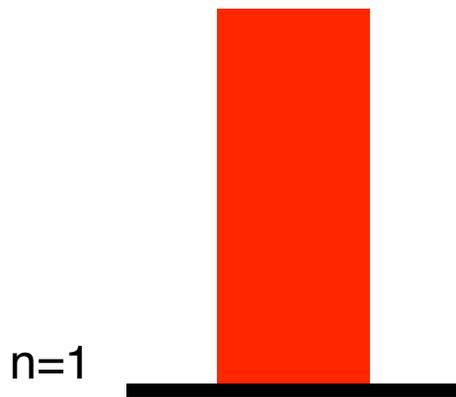


Dominant capture level : $n = 5$ (H_2), $n = 4$ (He)

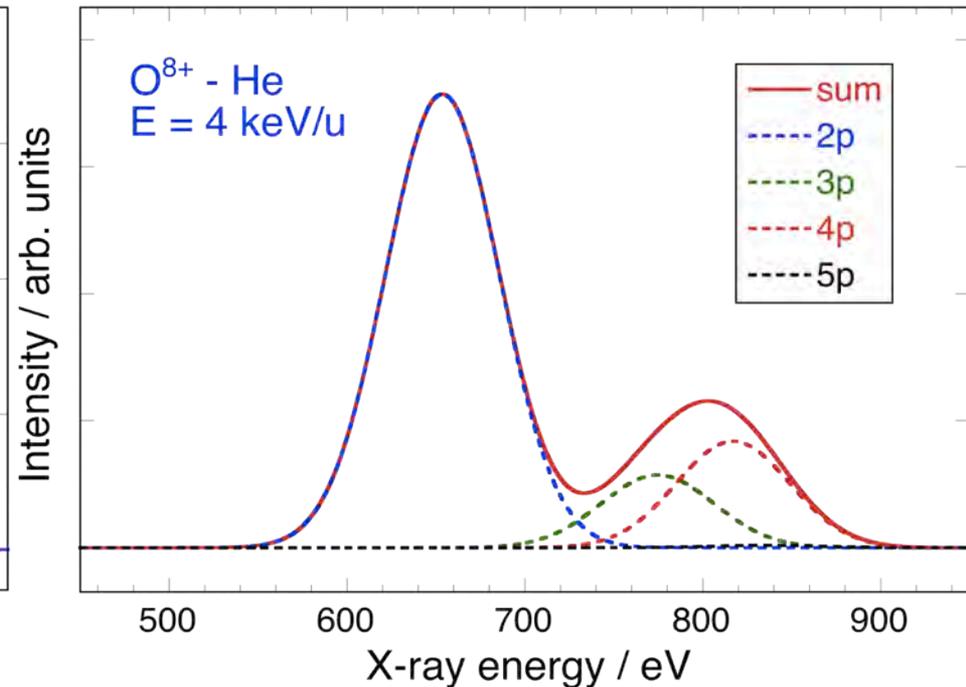
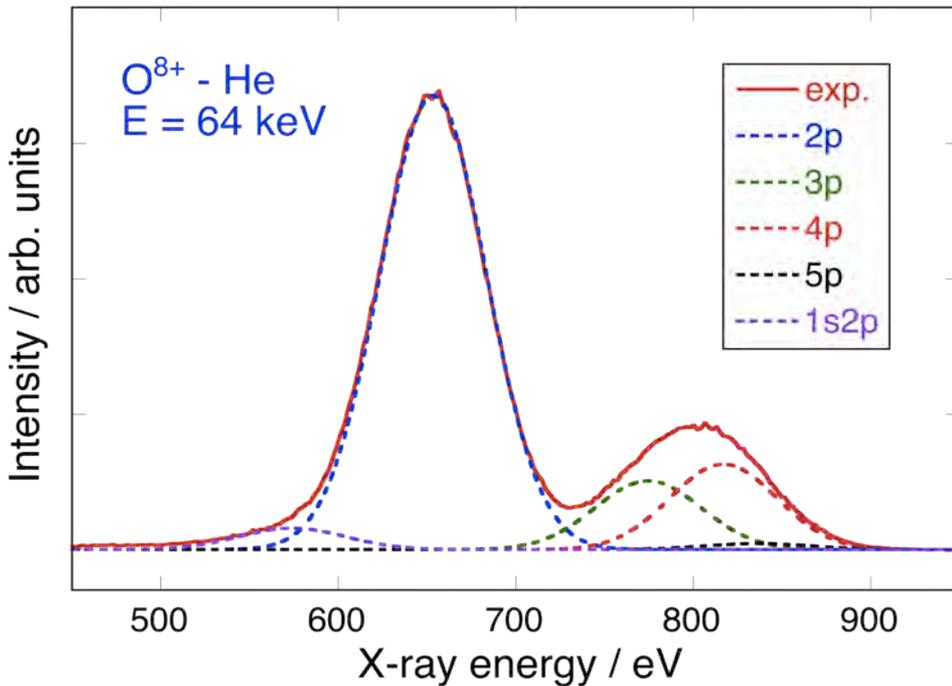
Cascade of transitions



Initial state distribution



O⁸⁺ - He collisions

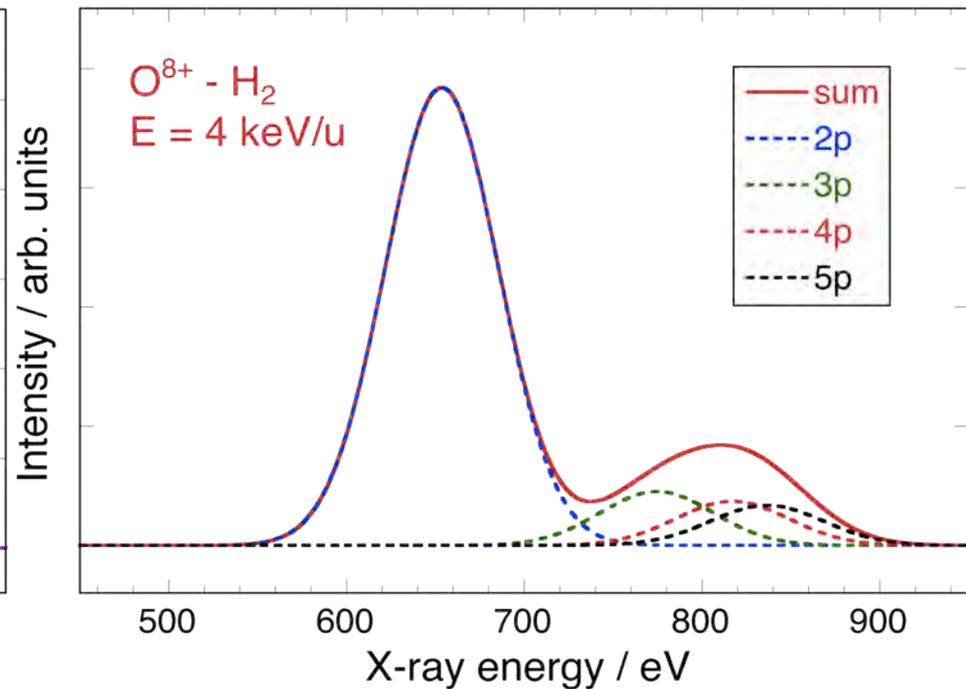
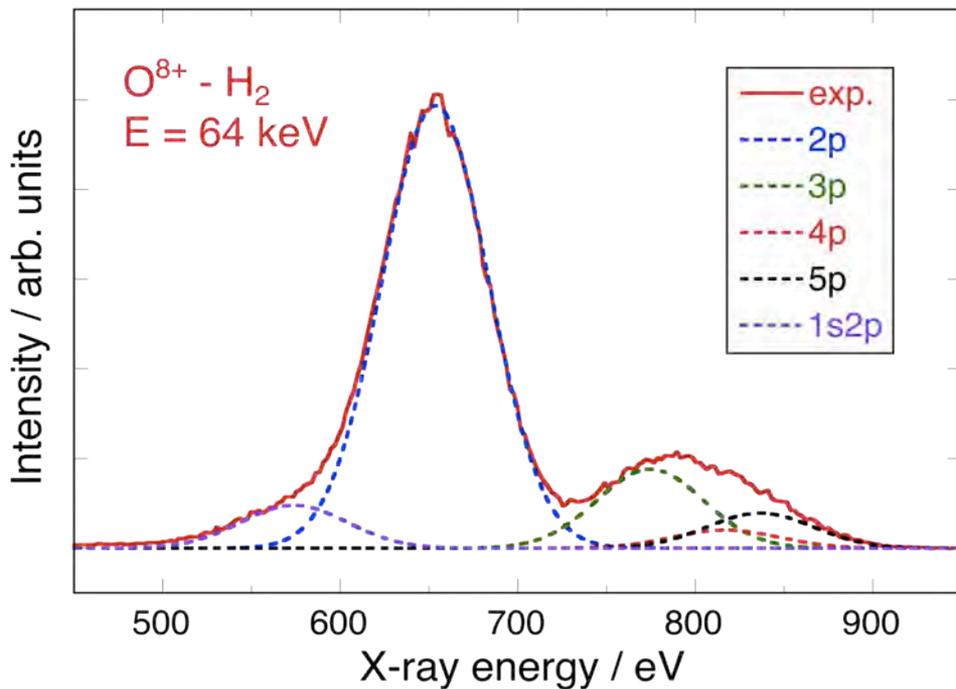


Agreement is almost perfect, except for 1s²-1s2p.

$$2p > 4p > 3p$$

$$2p > 4p > 3p$$

$O^{8+} - H_2$ collisions

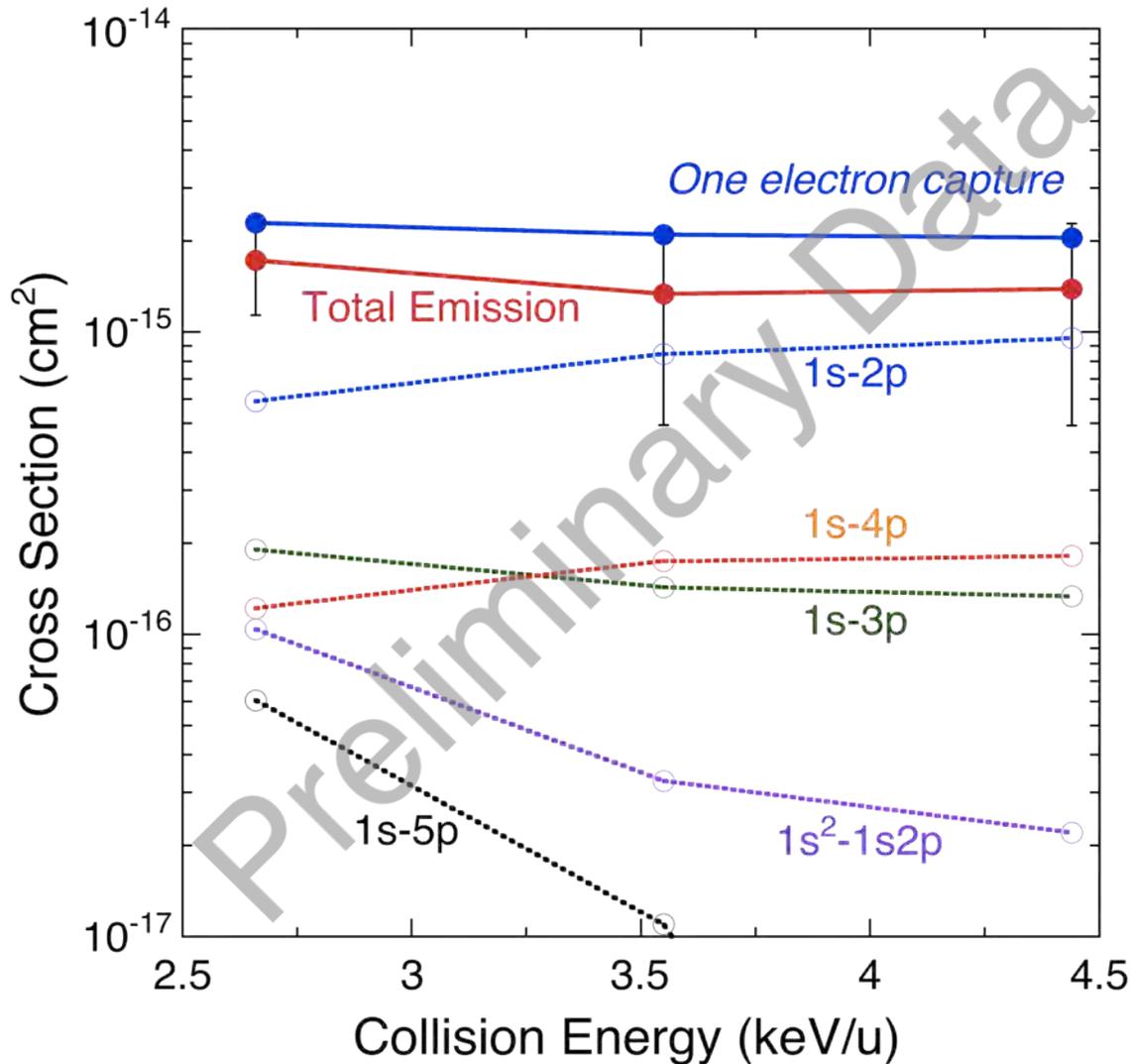


Agreement is not sufficient, due to molecular structure (?)

$$2p > 3p > 5p > 4p$$

$$2p > 3p \sim 5p \sim 4p$$

Cross Sections : O^{8+} - He



◆ difference

1s - 2s : M1, 2E1

1s - np : E1