

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**

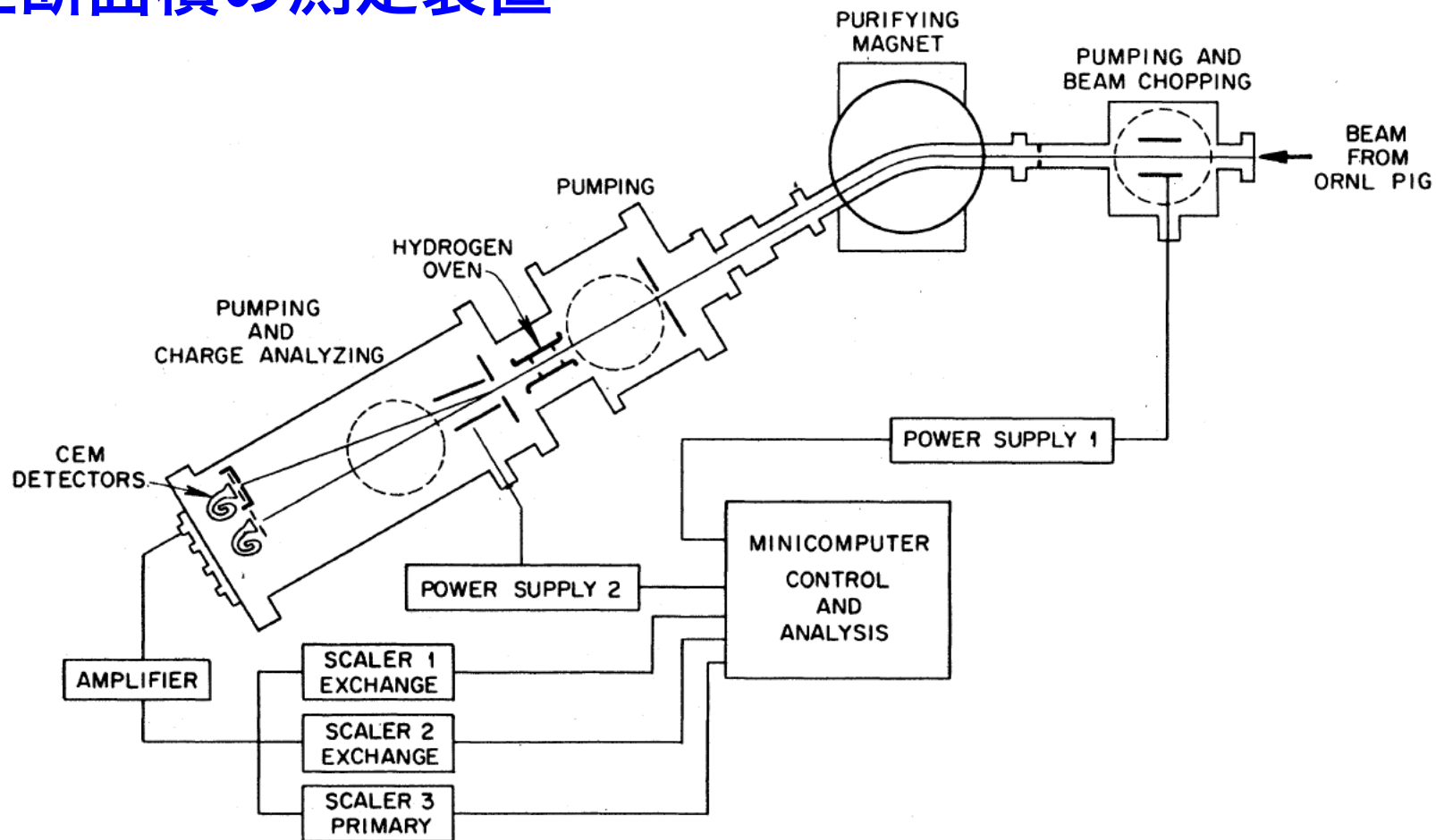
$m = Am_u$  ,  $m_u$  : **原子質量単位 u**

## 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)

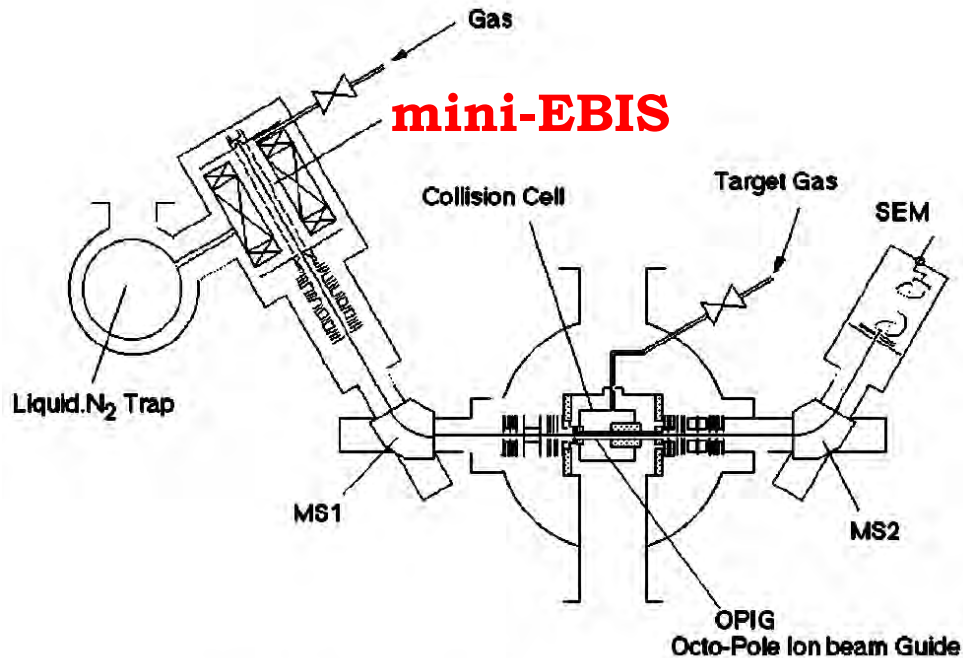
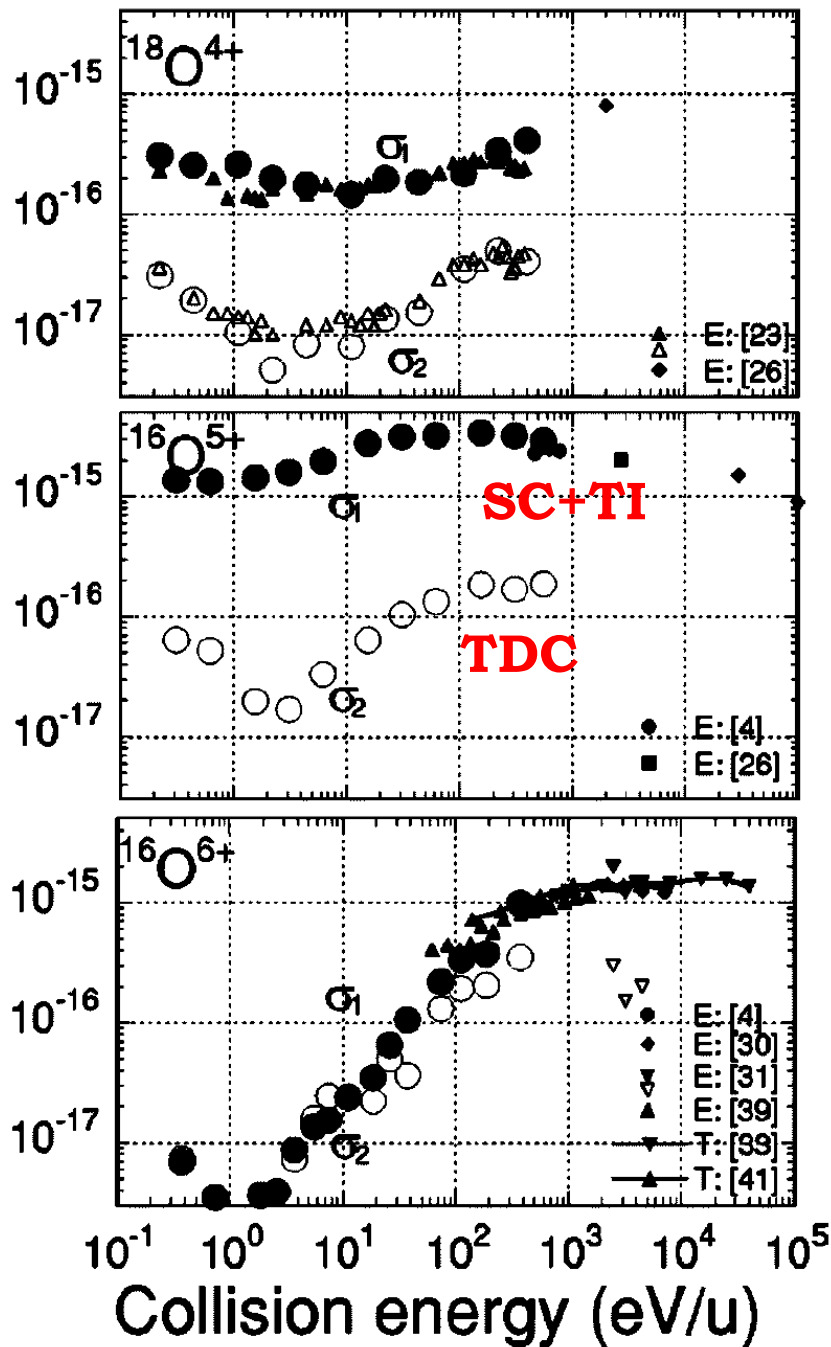
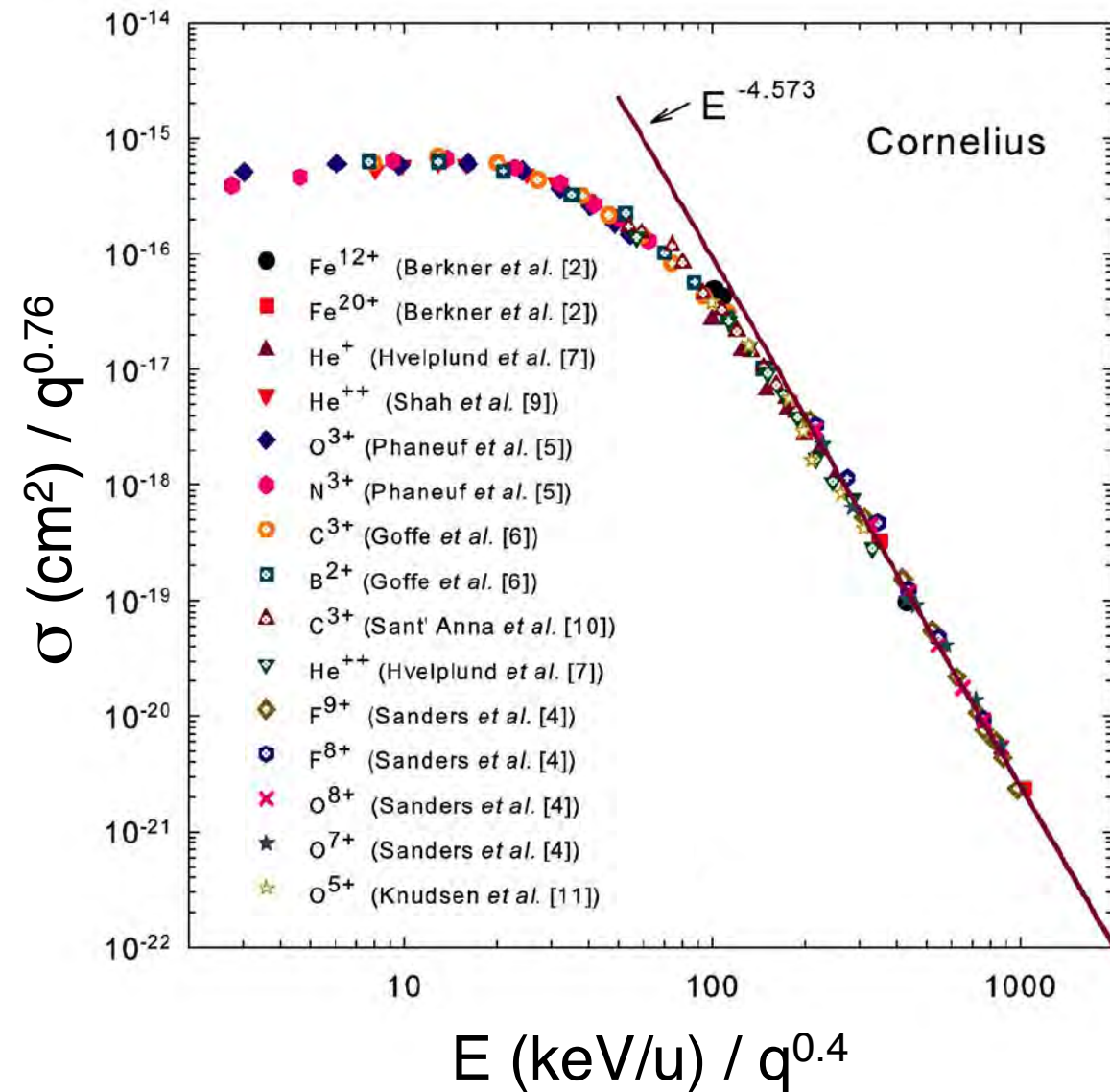


FIG. 1. Schematic diagram of experimental setup.

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：H<sub>2</sub>

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

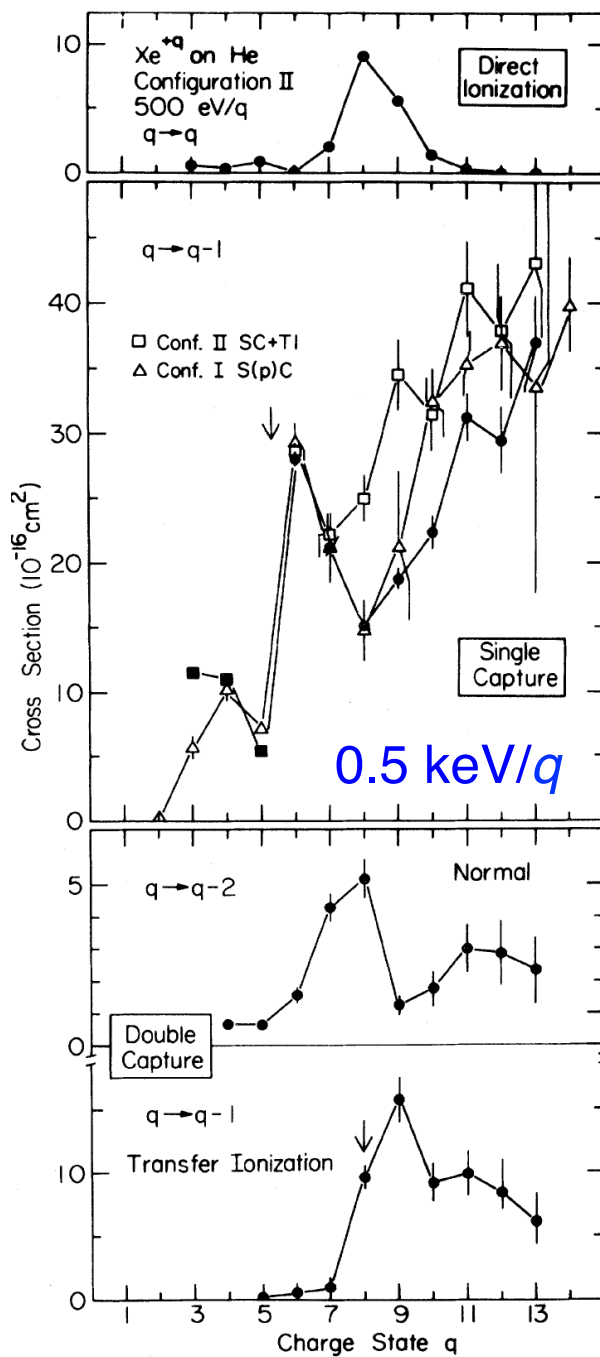
$$v > 1 \text{ au} = \alpha c$$

$\alpha$  : 微細構造定数

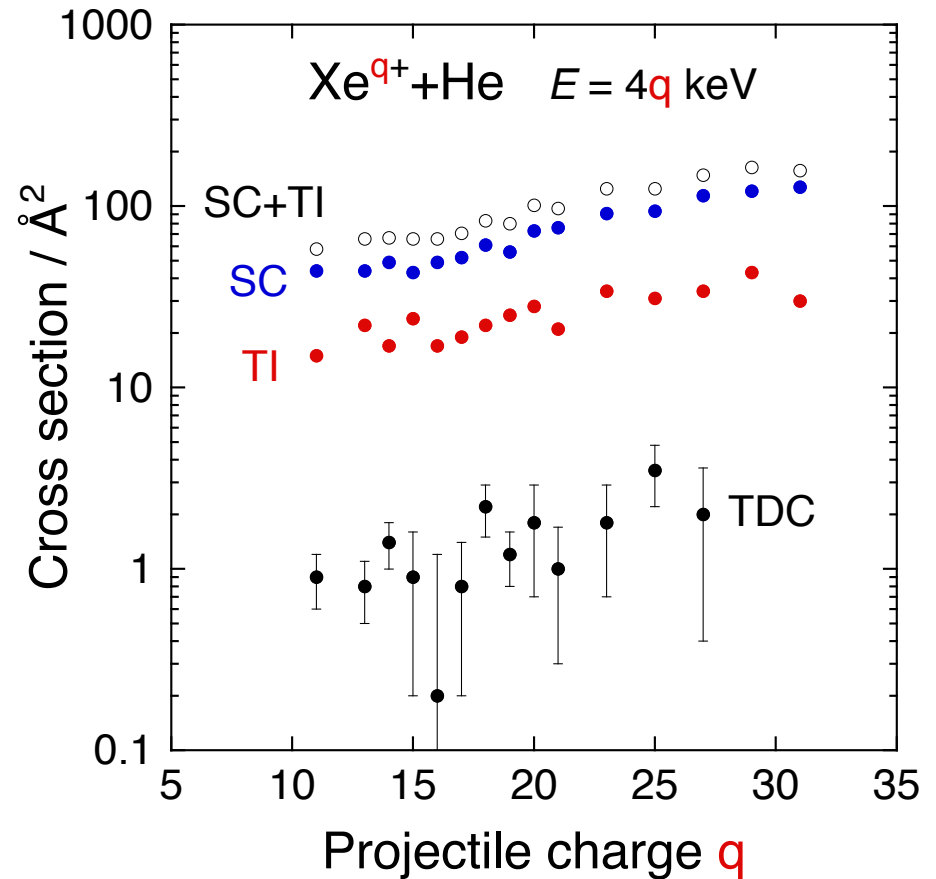
( K. Cornelius, 2006 )

# 電荷移行断面積の測定値

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

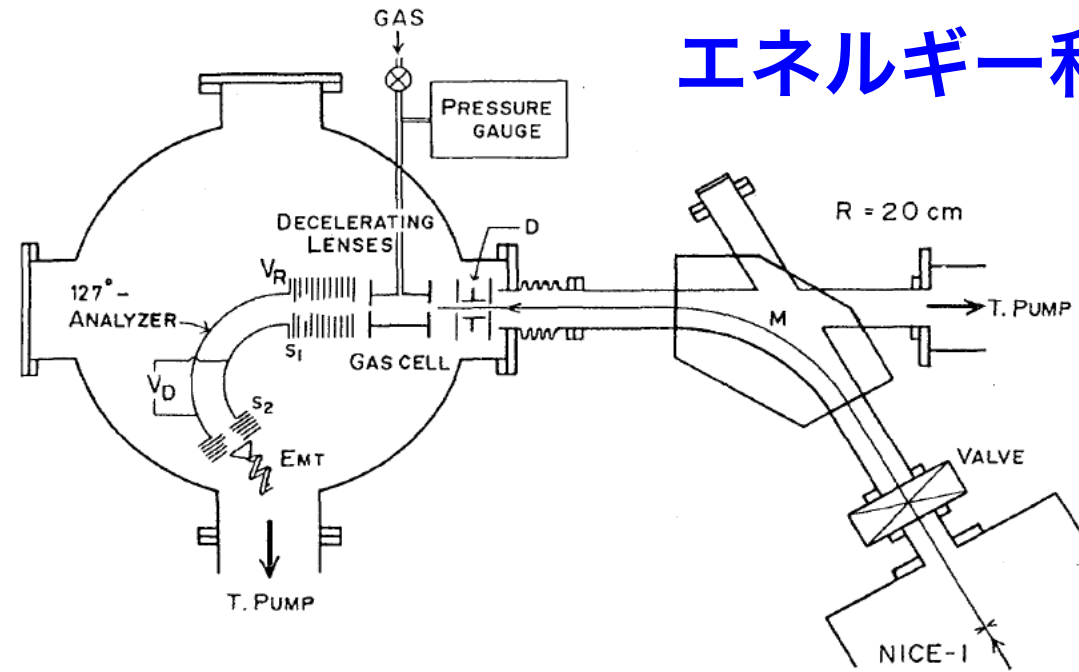


( E. Justiniano *et al.*, 1984 )

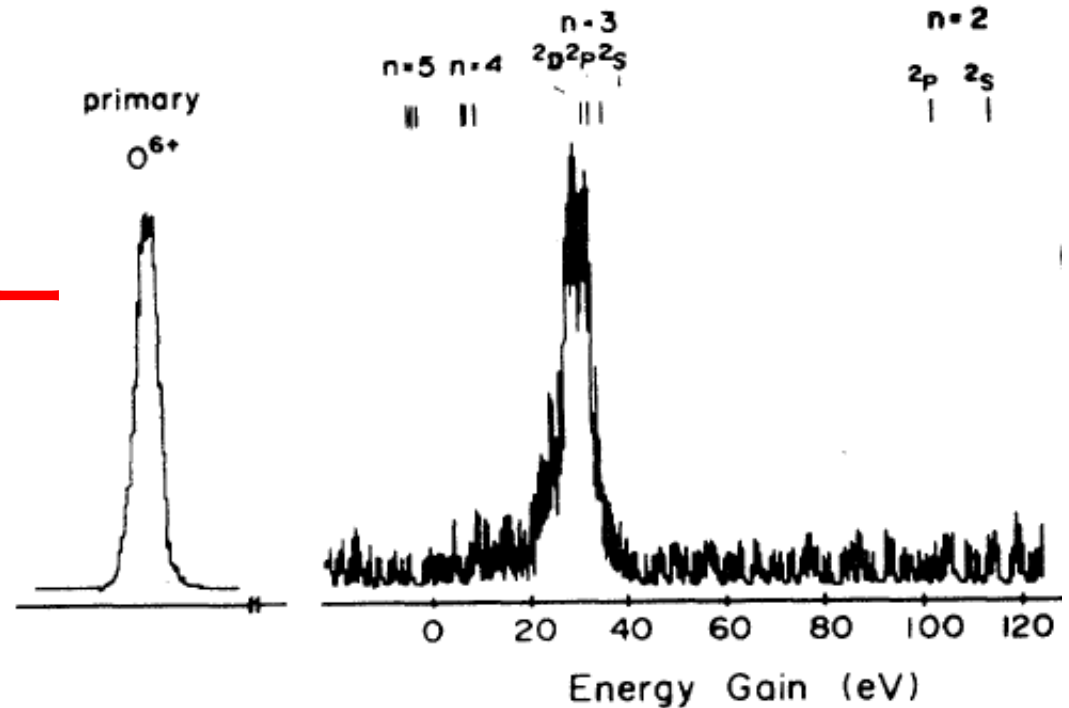


( H. Andersson *et al.*, 1988 )

# エネルギー利得スペクトルの測定例



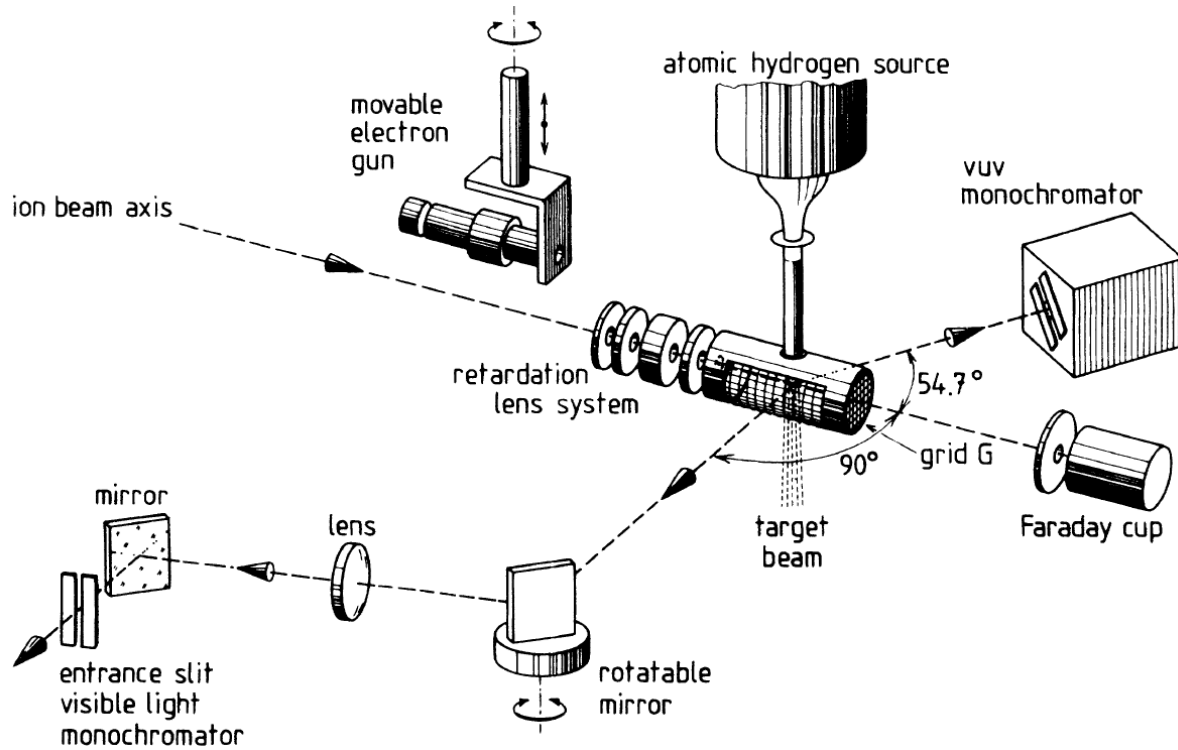
静電型分析器によって  
イオンの運動エネルギー  
を測定



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

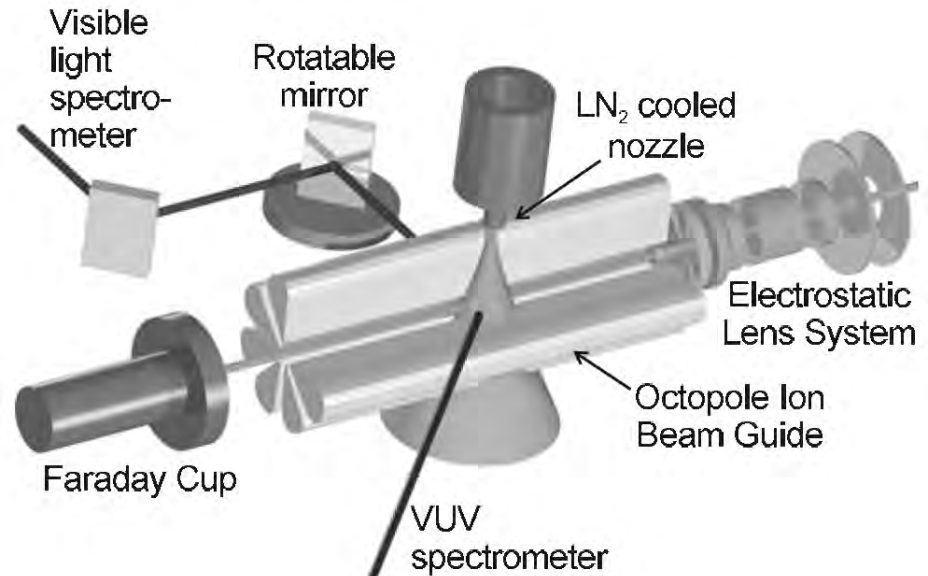


(R. Hoekstra *et al.*, 1990)



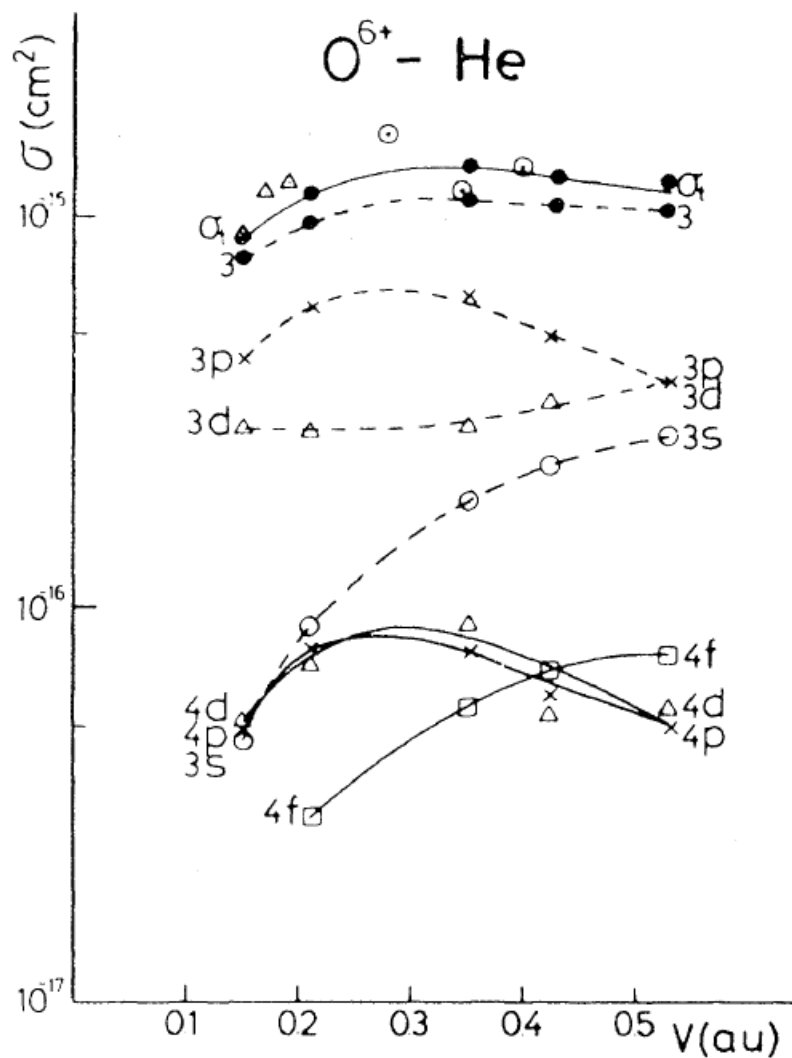
## 発光スペクトル 測定装置例

▪ **KVI, Netherlands**

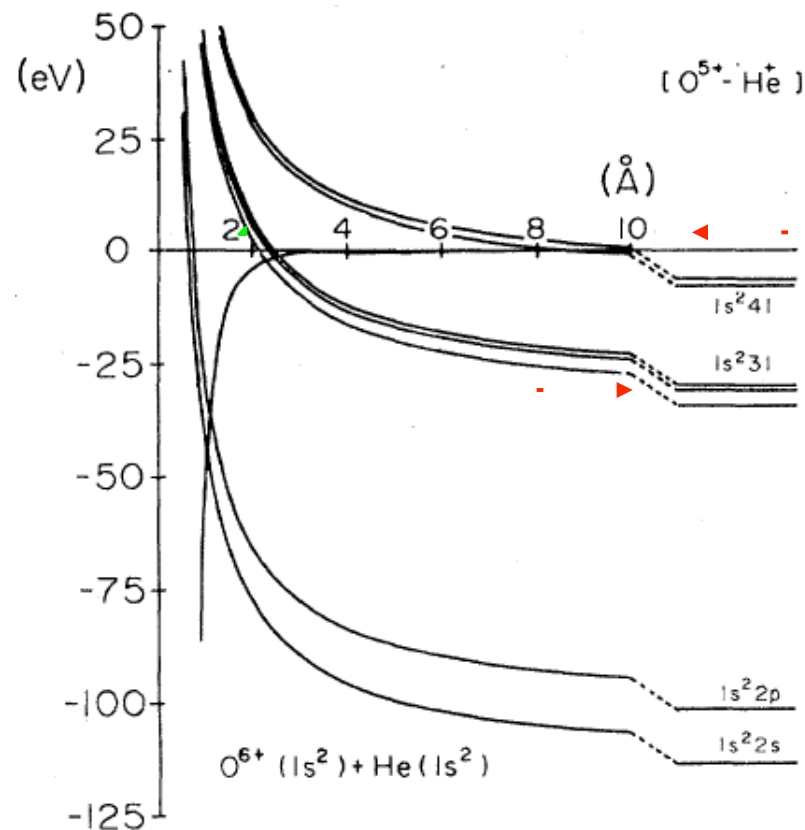


(G. Lubinski *et al.*, 2000)

# 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

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

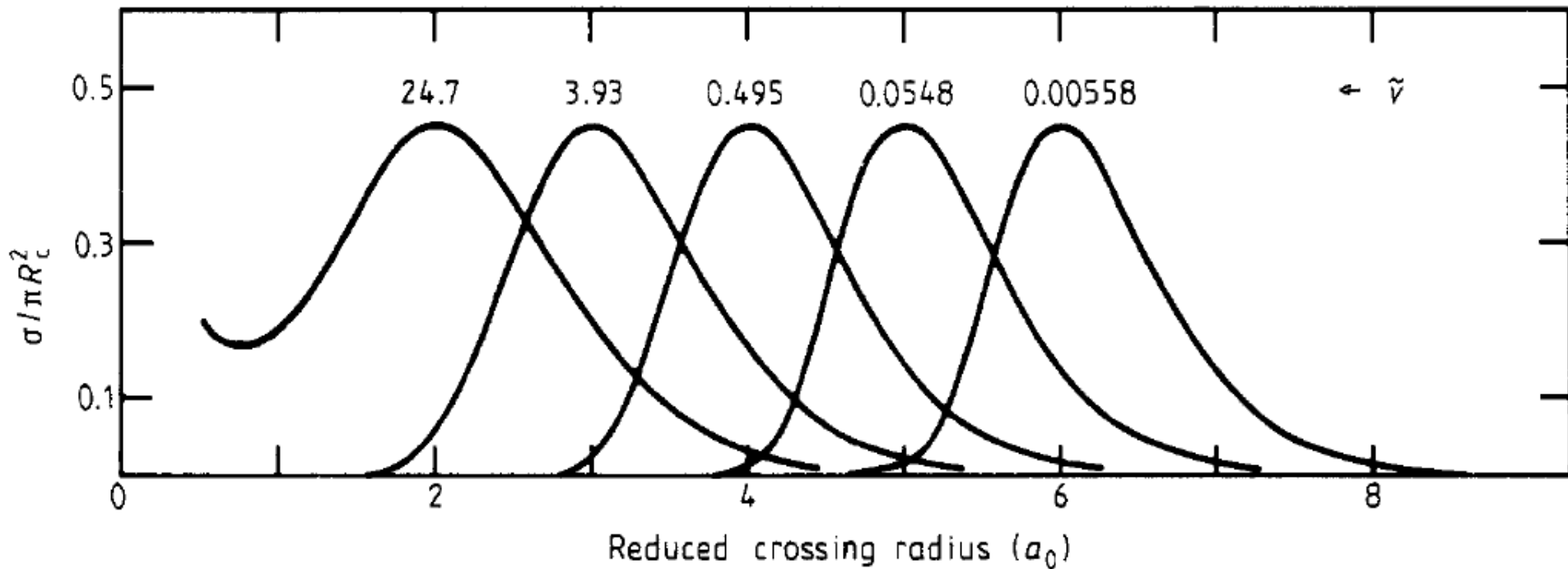
R. E. Olson & A. Salop: Phys. Rev. A **14** (1976) 579.

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

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

# Reaction Window (1)

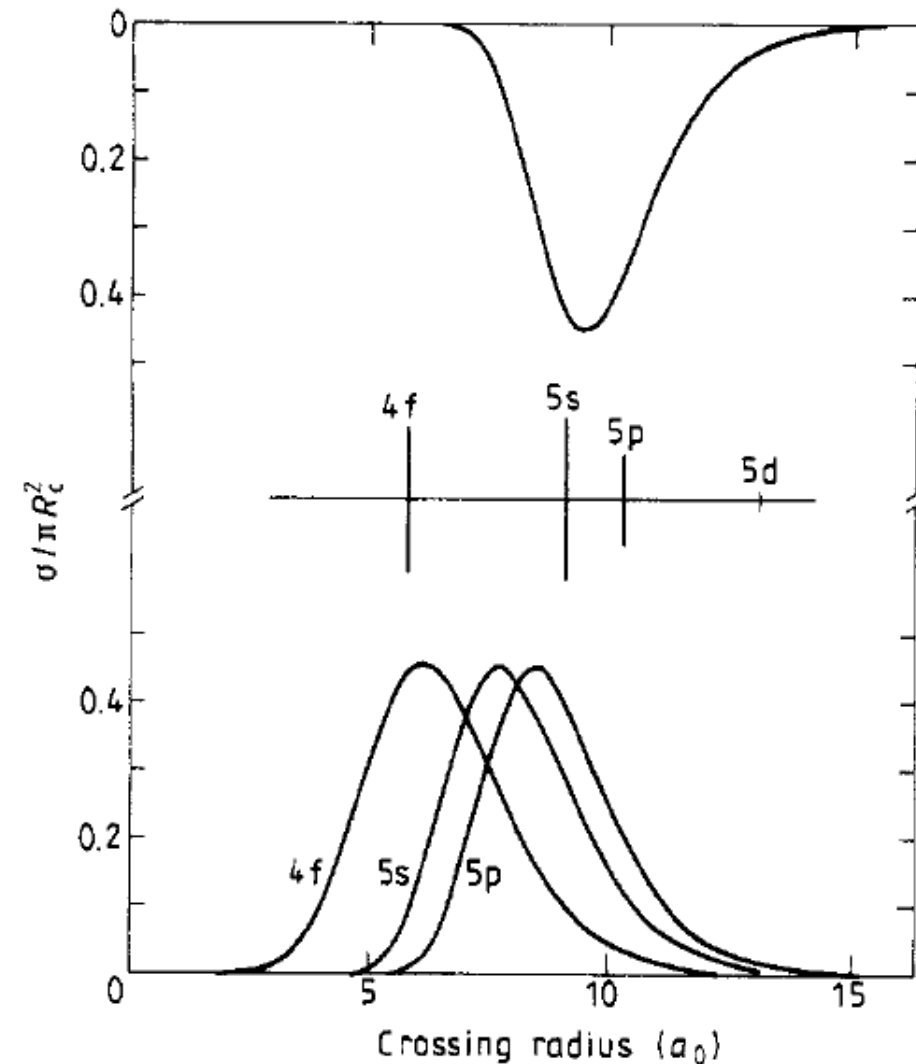
$$T(R_X; \nu) = \frac{\sigma(R_X; \nu)}{\pi R_X^2}$$



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

# Reaction Window (2)

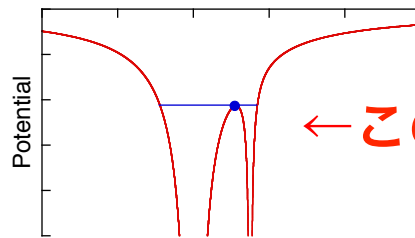
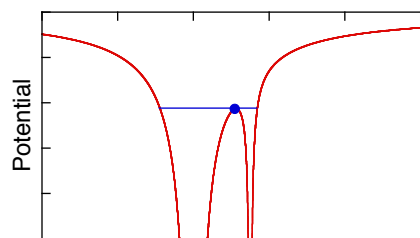
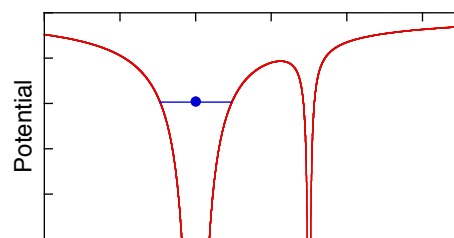
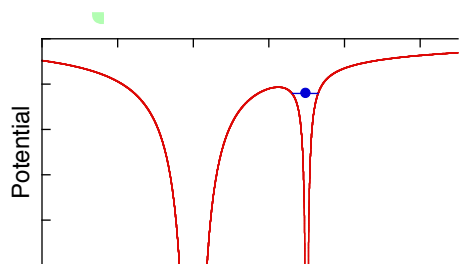
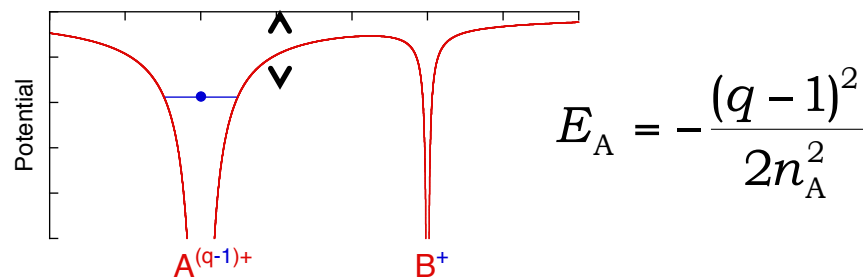
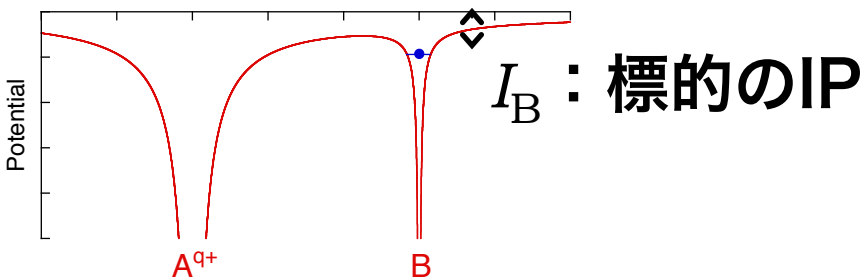
$$v = 0.0316 \text{ au}$$



**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  $\text{Ar}^{8+}$ -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).

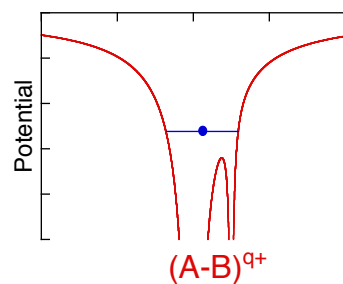
- 捕獲準位の理解が主
- 断面積の値は定性的

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

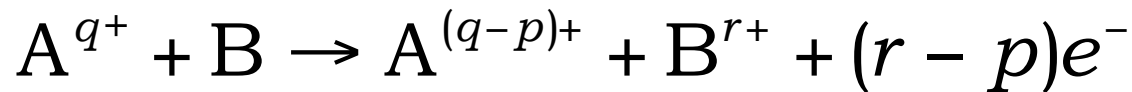
標的によって捕獲準位が異なる

# 低エネルギー衝突におけるスケーリング則

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.



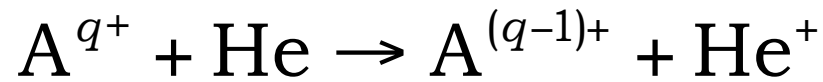
$$\sigma_q^r(\text{cm}^2) = 2.7 \times 10^{-13} qr / \left[ I_1^2 I_r^2 \sum_{j=1}^N (j / I_j^2) \right]$$

$I_j$  : 標的の第  $j$  イオン化エネルギー (eV単位)

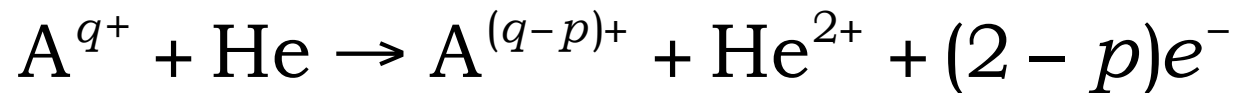
$N$  : 外殻電子数 (2 for He, 8 for Ar and Xe)



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 ( $p = 1$ )**

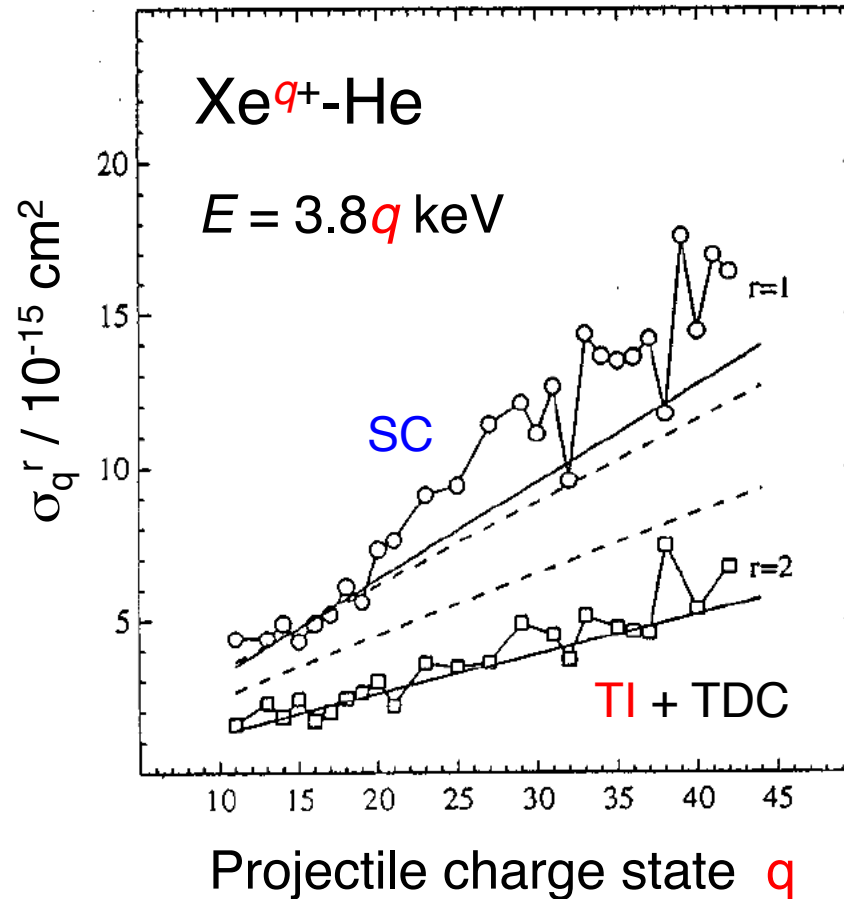
$$\sigma_{q,q-1}(\text{cm}^2) \approx \sigma_q^1 + \sigma_q^2 = 4.5 \times 10^{-16} q$$

**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リング則：

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**：Classical Trajectory Monte Carlo

※ 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

CH<sub>4</sub> : IP<sub>V</sub> = 13.6 eV

## 分子の場合 : 断熱遷移と垂直遷移

- 断熱 : MとM<sup>+</sup>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 **CH<sub>4</sub>**

→ 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  $\sigma$
- ・ 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  $\sigma$  : 衝突速度  $v$  の関数

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

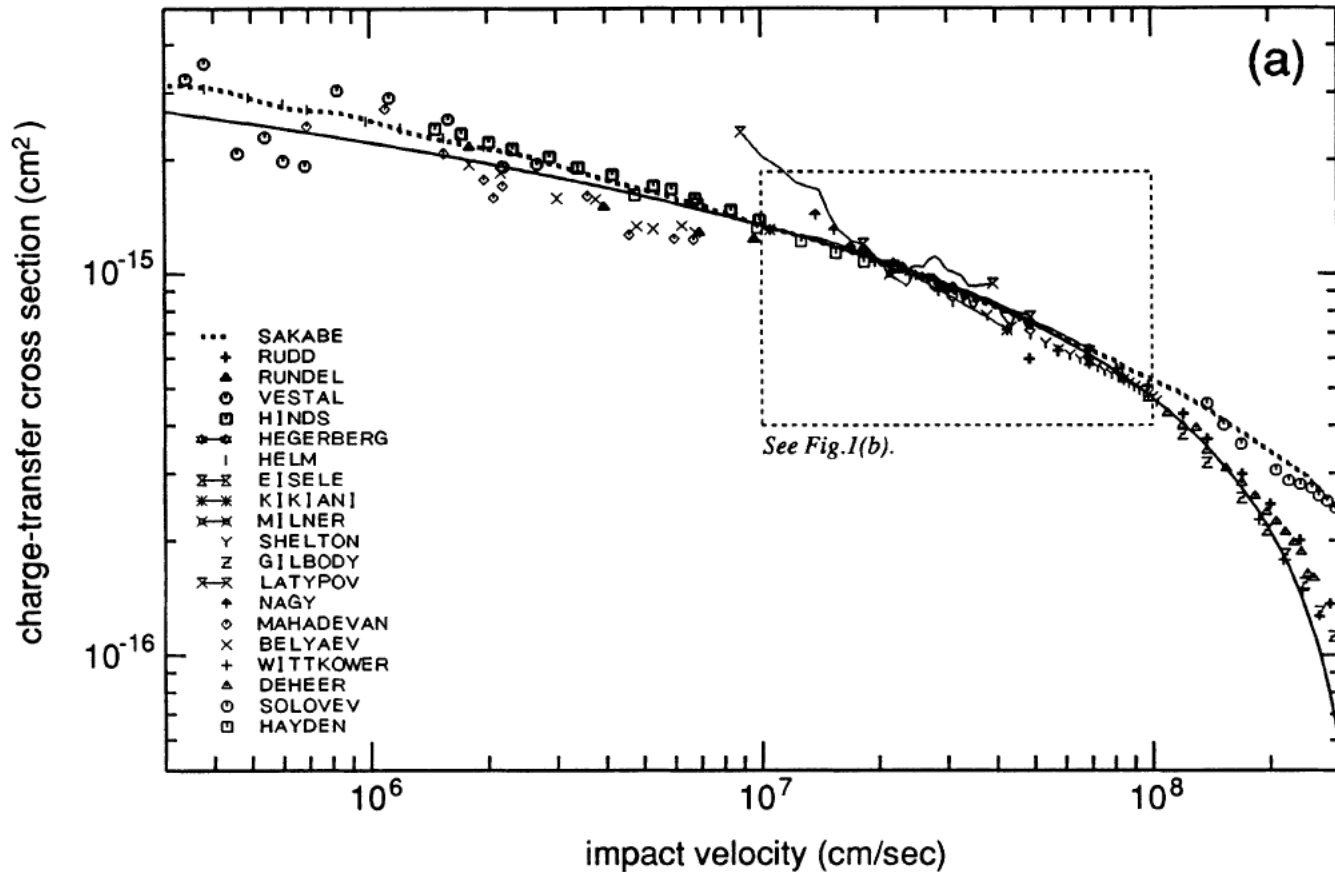
$$f(v) = 4\pi v^2 \left( \frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{\mu v^2}{2kT} \right) : \text{速度分布関数}$$

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 :  $A^+ + A \rightarrow A + A^+$

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

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

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

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

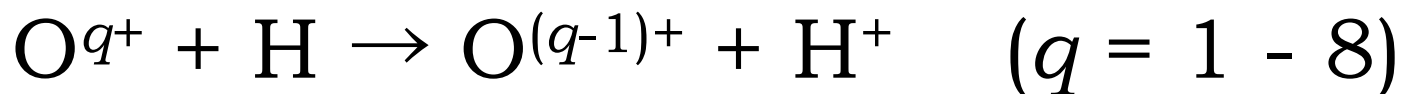
## 核融合科学研究所のデータベースによる検索：

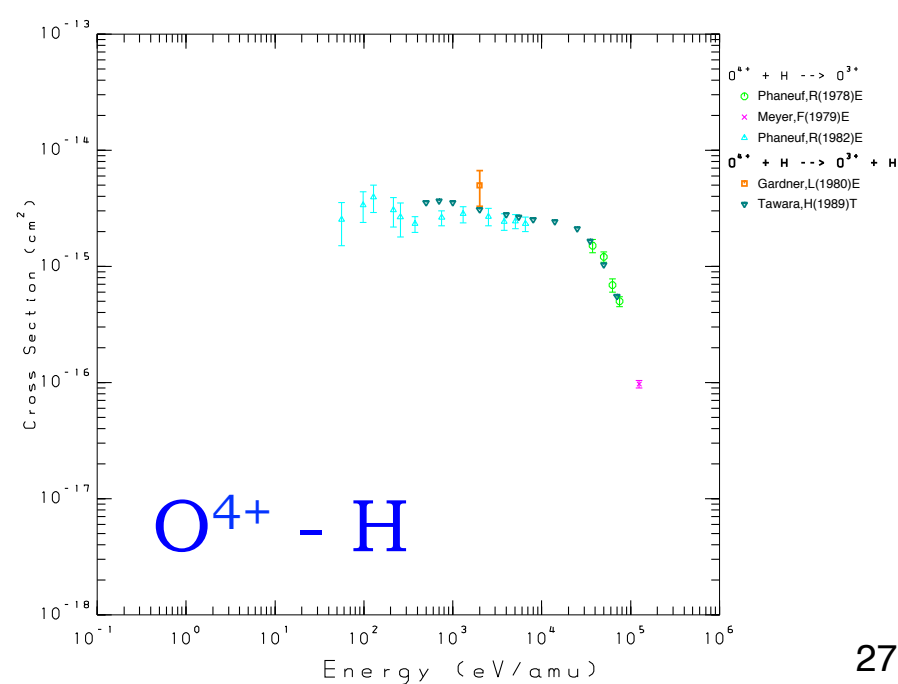
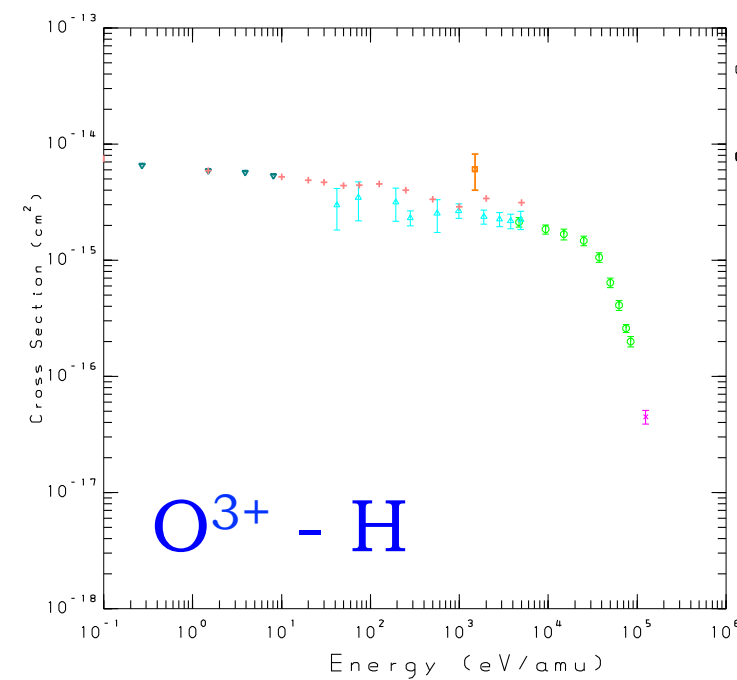
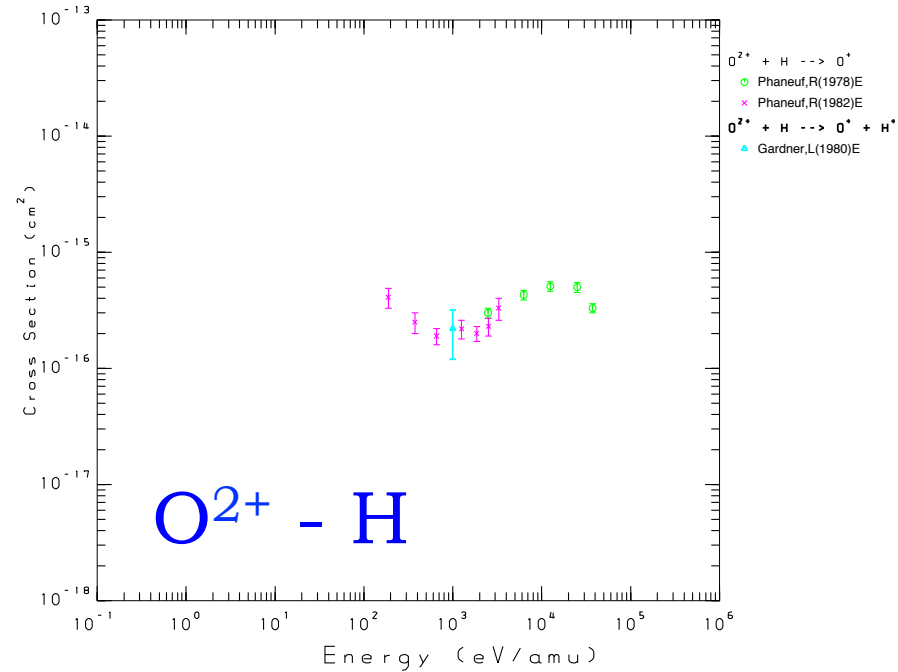
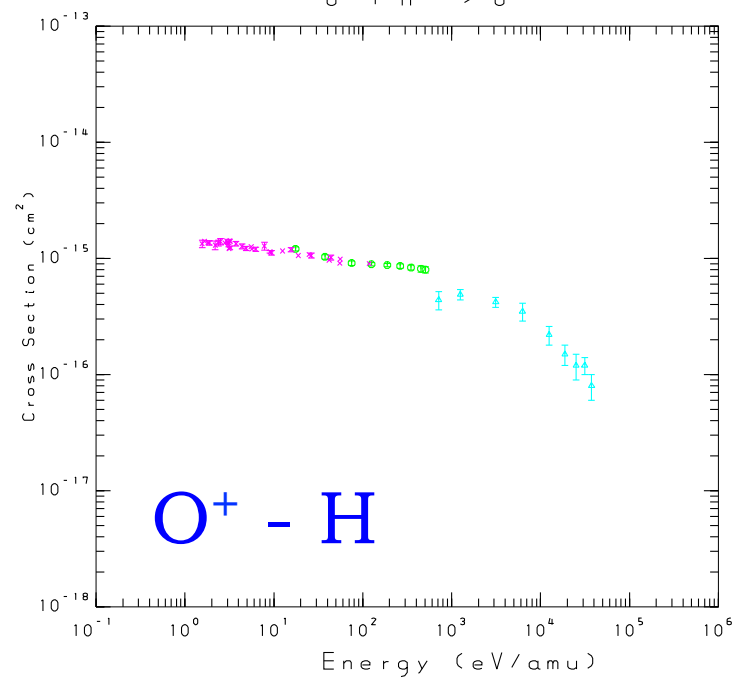
<http://dbshino.nifs.ac.jp/>

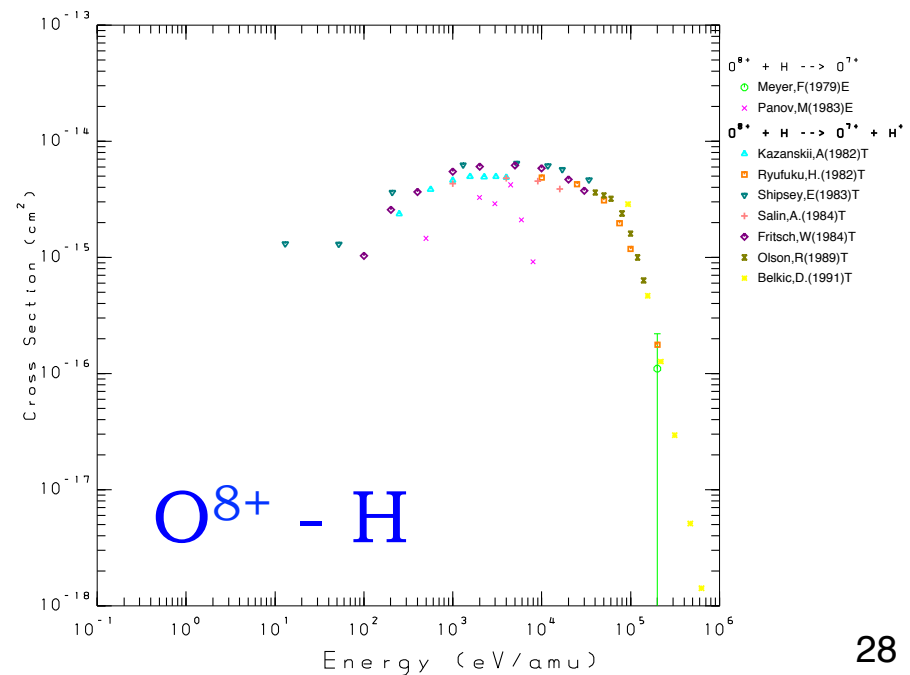
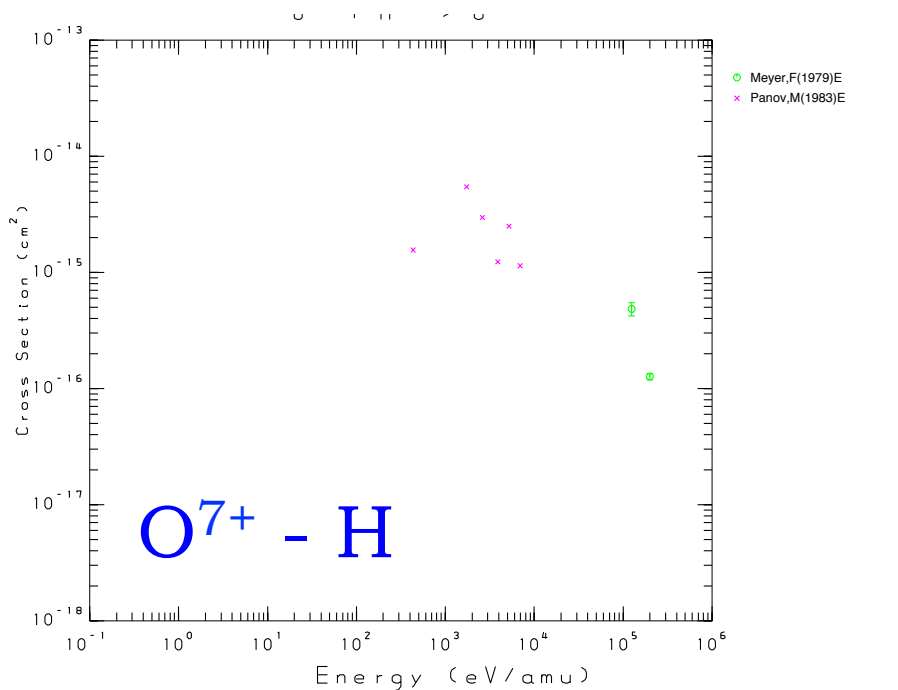
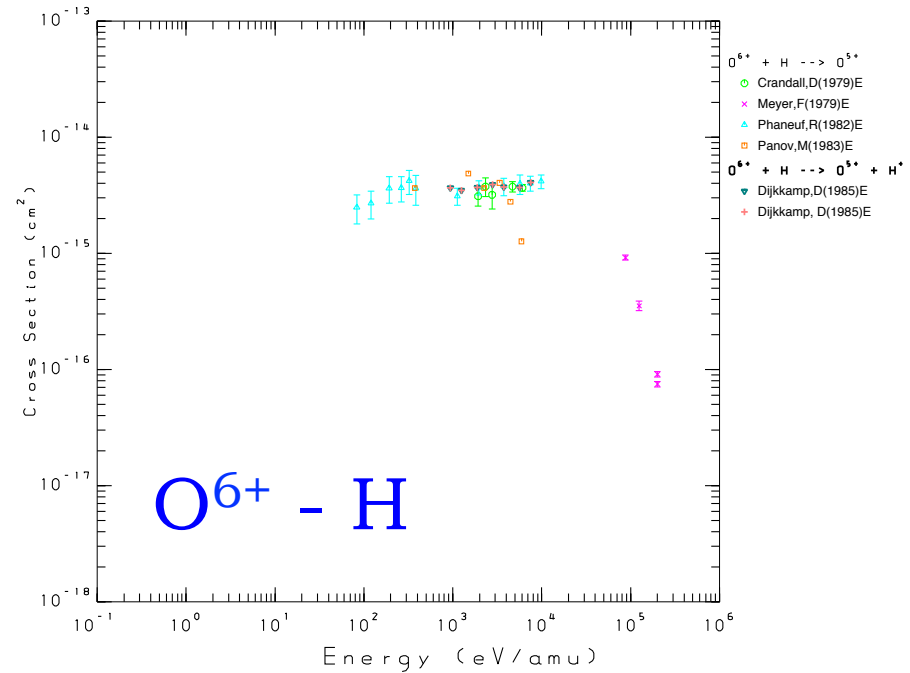
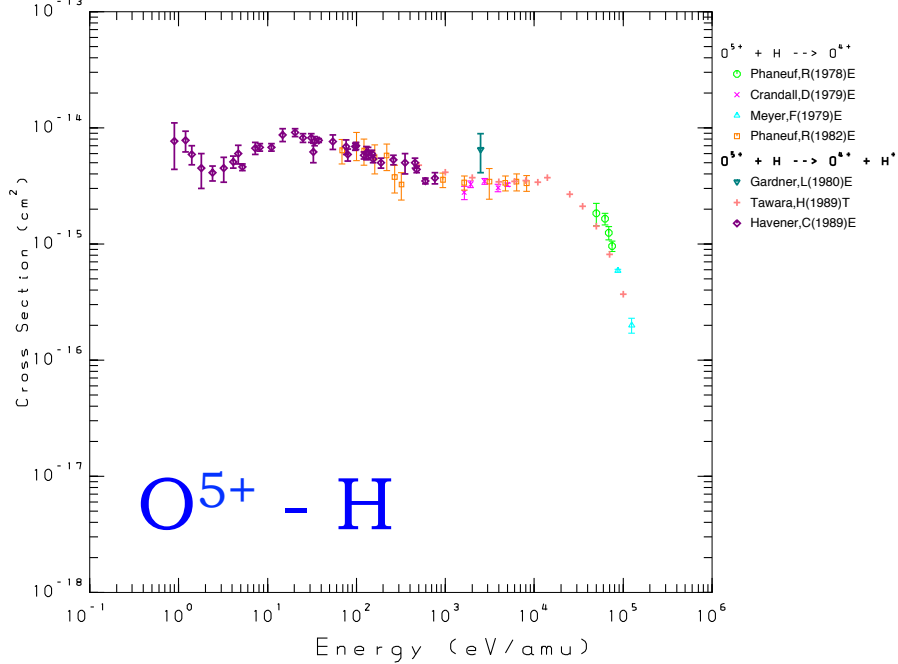
CHART：

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 Nolte<sup>1</sup>, P C Stancil<sup>1</sup>, H P Liebermann<sup>2</sup>, R J Buenker<sup>2</sup>, Y Hui<sup>3</sup>  
and D R Schultz<sup>3,4</sup>**

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

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

<sup>3</sup> Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37831, USA

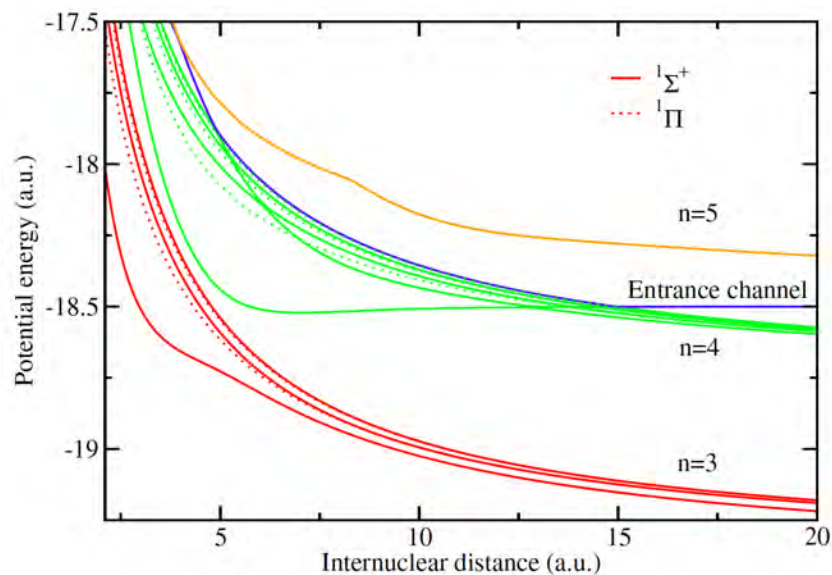
<sup>4</sup> Department of Physics, University of North Texas, Denton, TX 76203, USA

低エネルギーでのMOCC計算

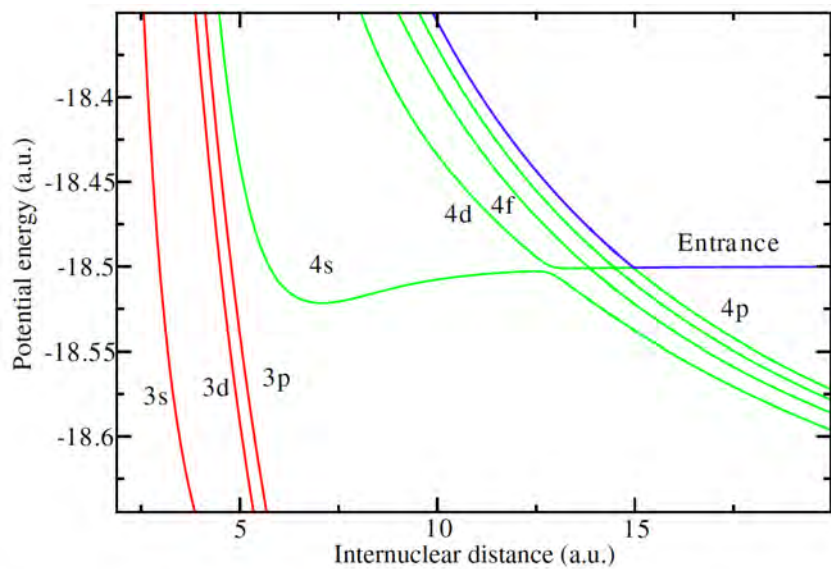
他の理論計算の比較：AOCC, CTMC

P. Stancilはこの種の計算では第一人者

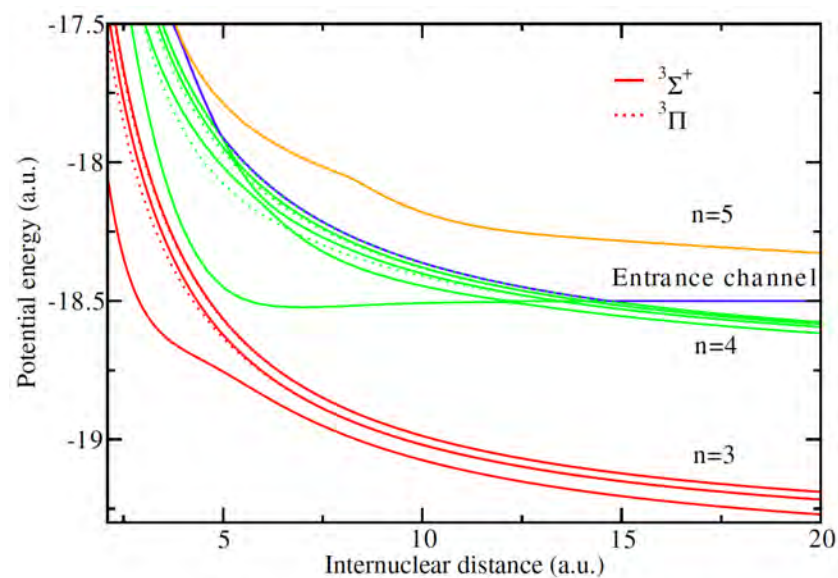
# 断熱ポテンシャル



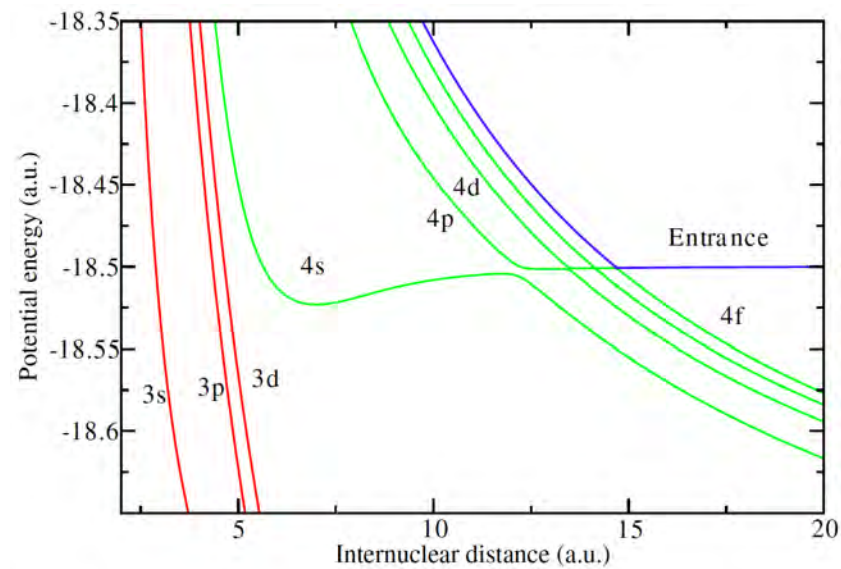
**Figure 1.** Singlet adiabatic potentials for  $[\text{CH}]^{5+}$ .



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

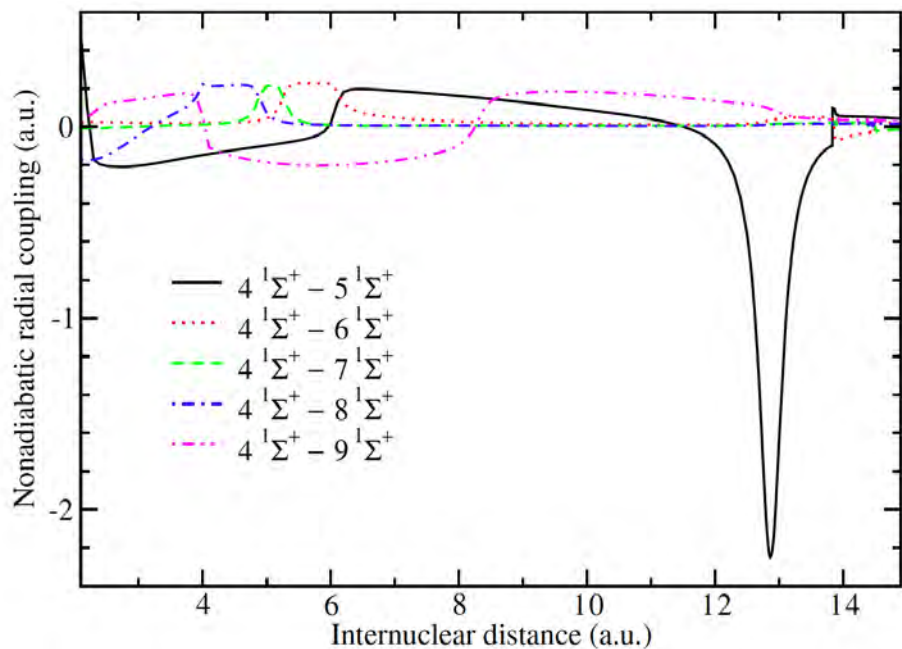


**Figure 3.** Triplet adiabatic potentials for  $[\text{CH}]^{5+}$ .



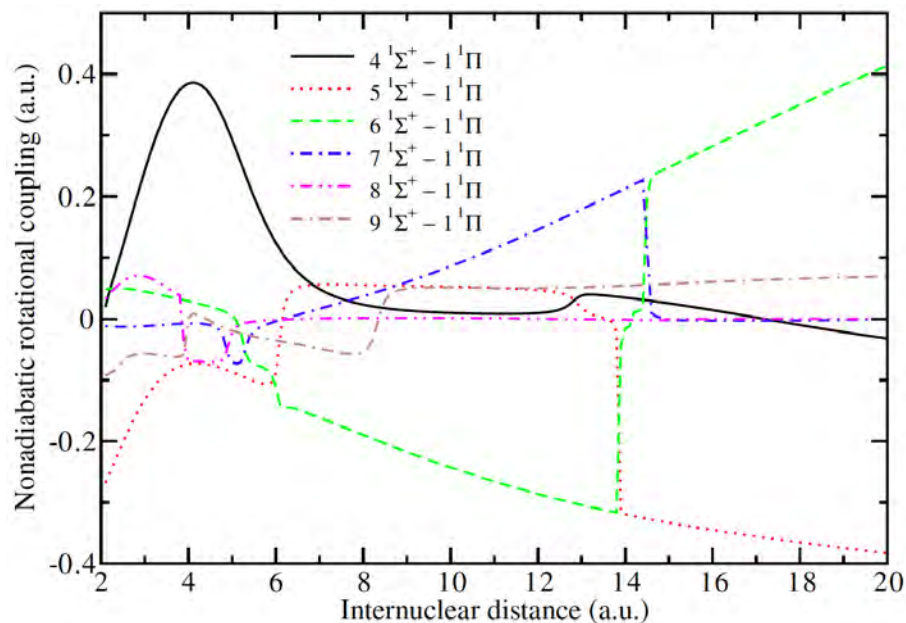
**Figure 4.** Triplet adiabatic potentials for  $[\text{CH}]^{5+}$  (detail;  $^3\Sigma^+$  states only).

## 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

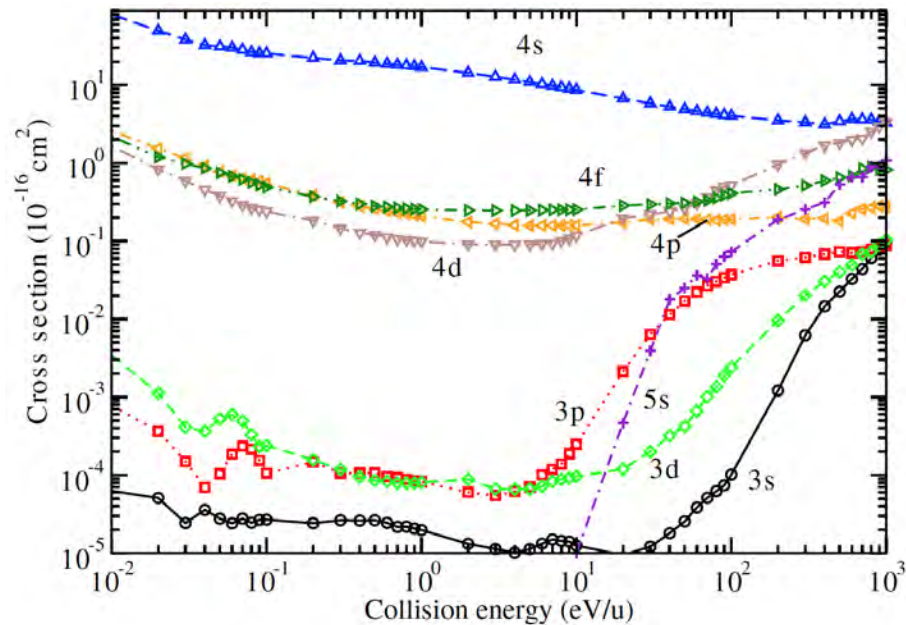


Figure 10. Singlet  $n, l$ -resolved QMOCC cross sections for  $C^{5+}+H$ .

## 三重項

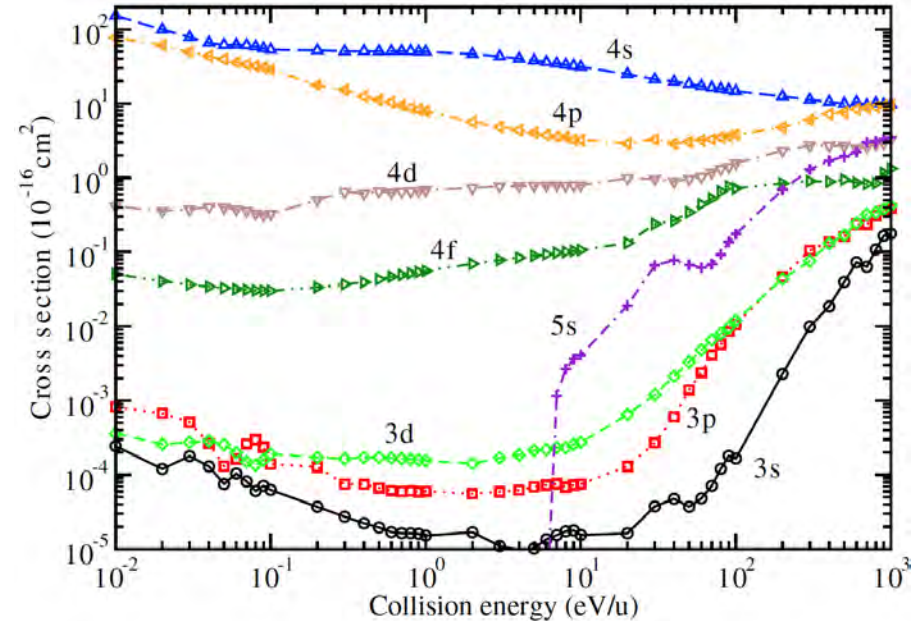


Figure 11. Triplet  $n, l$ -resolved QMOCC cross sections for  $C^{5+}+H$ .

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

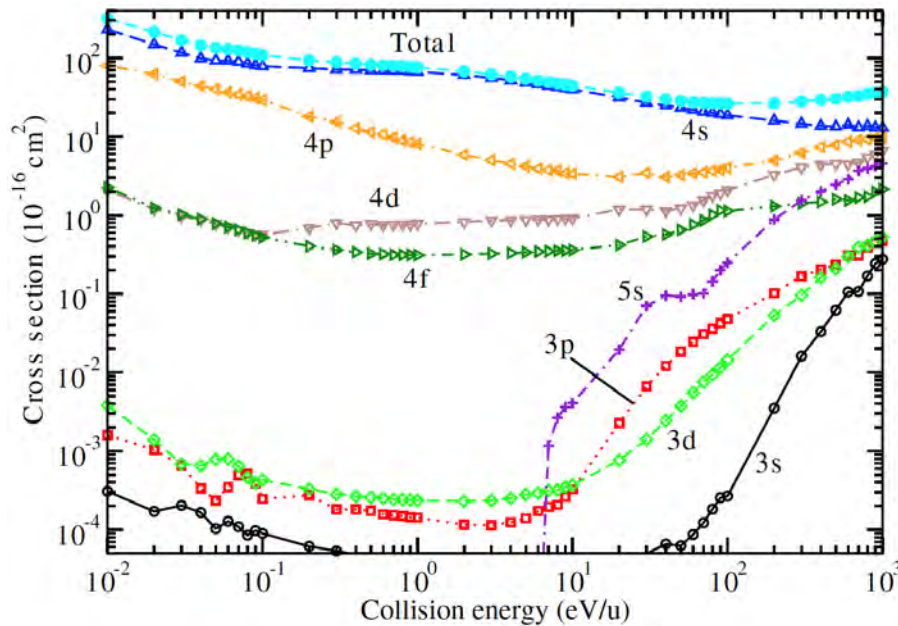


Figure 9.  $n, l$ -resolved QMOCC cross sections for  $\text{C}^{5+} + \text{H}$ .

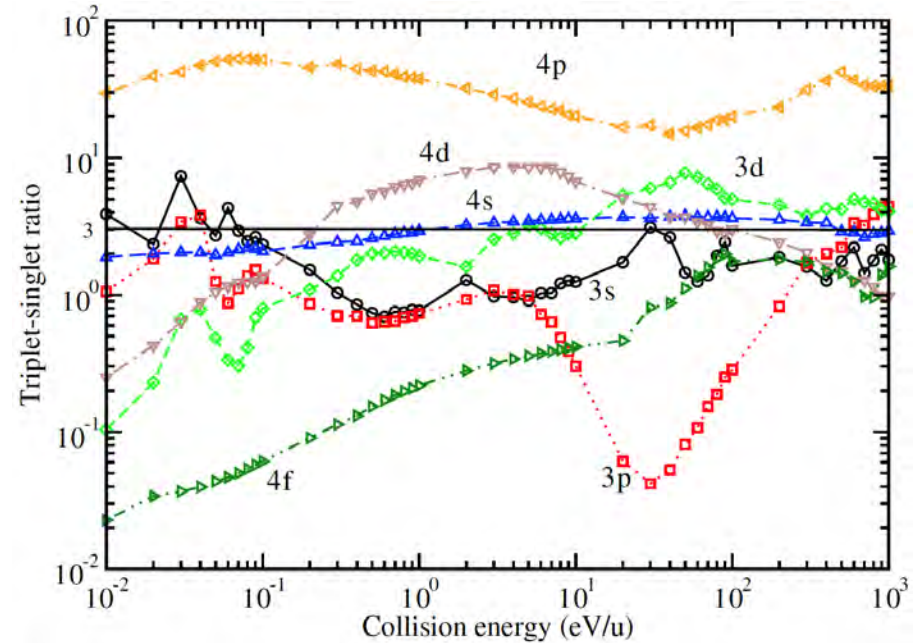
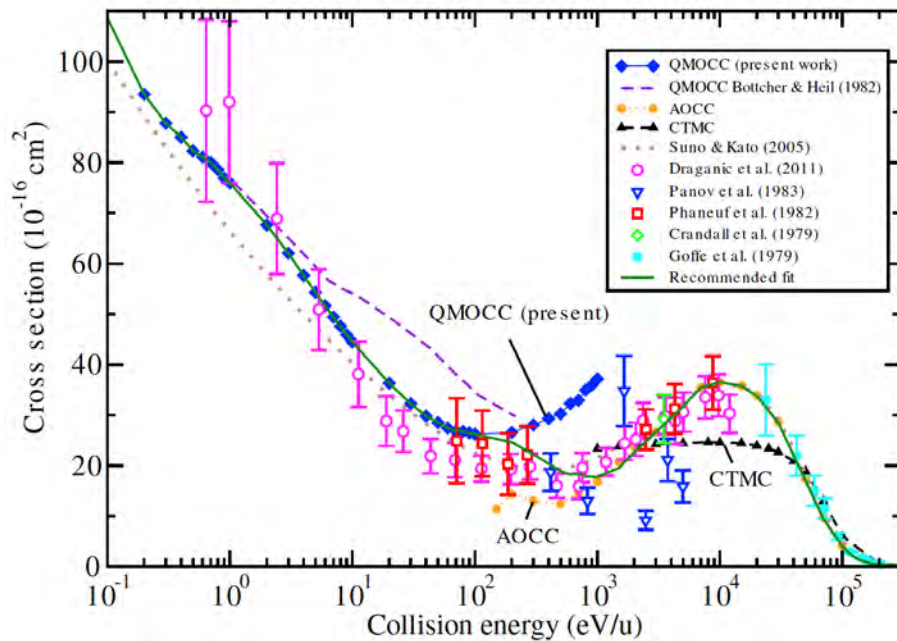


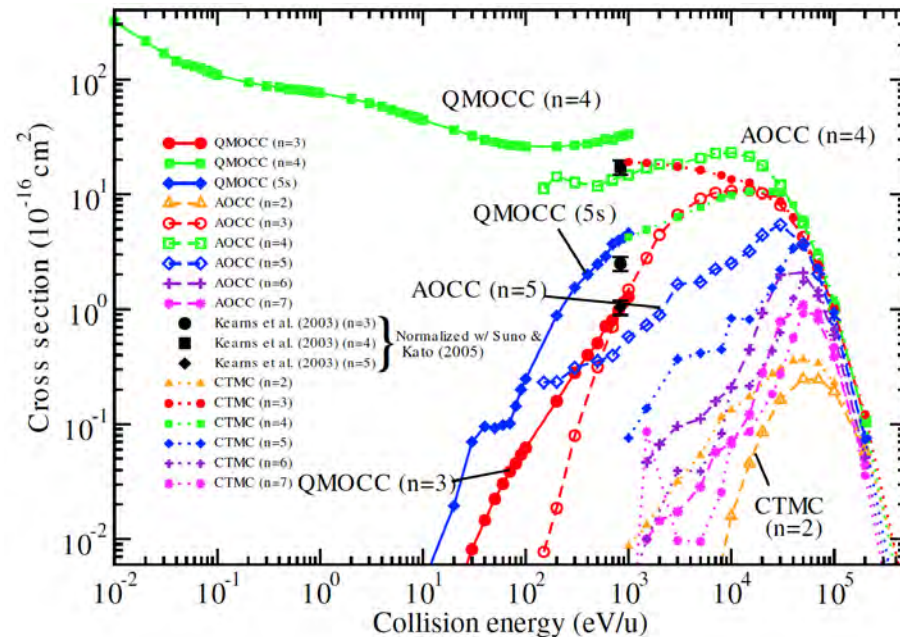
Figure 12. Triplet-singlet ratios obtained from QMOCC results for  $n, l$ -resolved cross sections for  $\text{C}^{5+} + \text{H}$ .

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

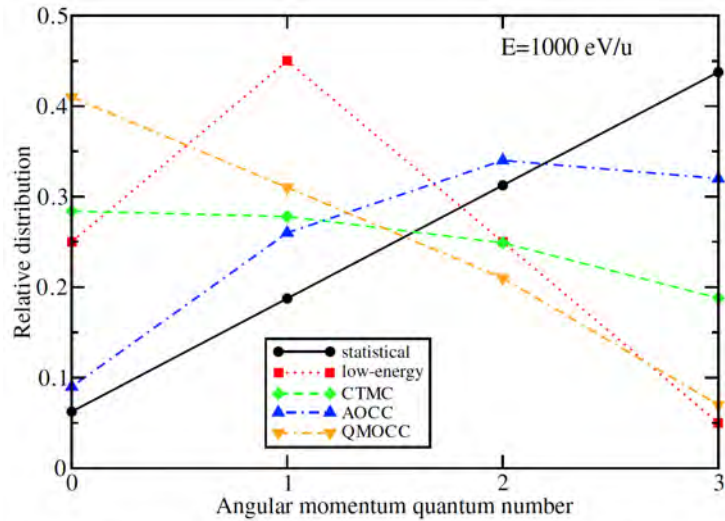


Figure 16. Comparison of  $n = 4$   $l$ -distributions for  $C^{5+}+H$  for QMOCC, AOCC and CTMC, along with statistical and low-energy distributions at  $E = 1000$  eV/u.

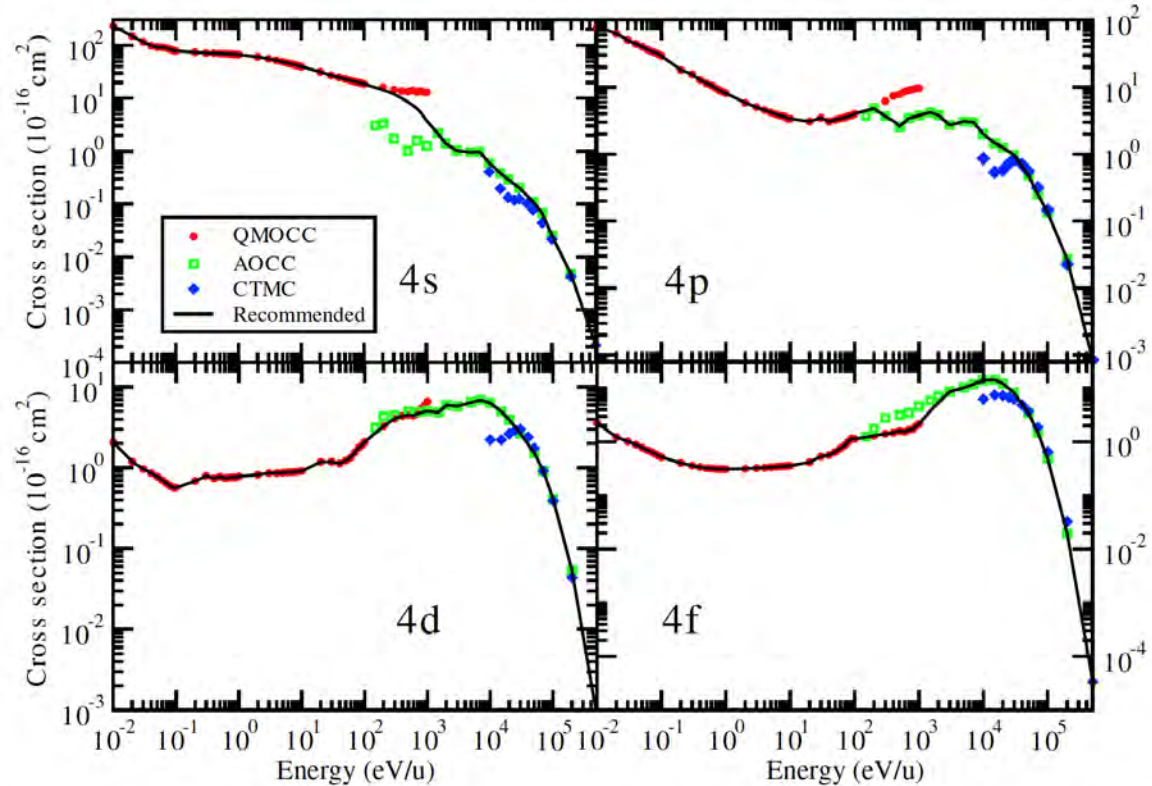


Figure 17.  $C^{5+}+H$   $l$ -resolved cross sections for  $n = 4$ , for QMOCC, AOCC and CTMC.

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/>

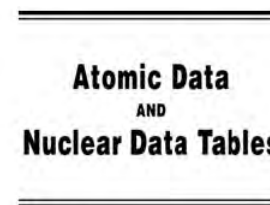
完全ではないので論文も必要



Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)



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



[www.elsevier.com/locate/adt](http://www.elsevier.com/locate/adt)

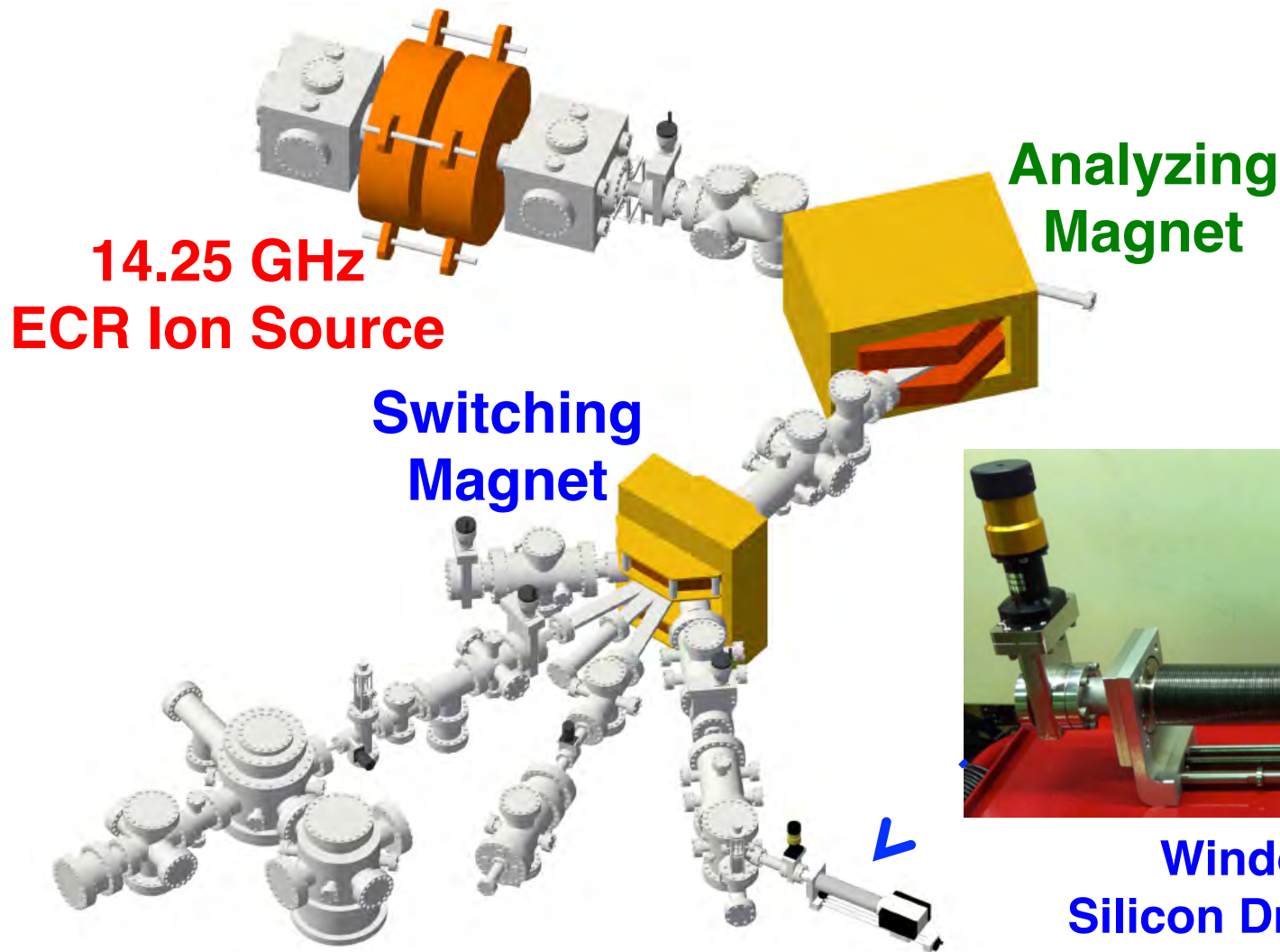
Multipole (E1, M1, E2, M2) transition wavelengths and rates between states with  $n \leq 6$  in helium-like carbon, nitrogen, oxygen, neon, silicon, and argon<sup>☆</sup>

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*

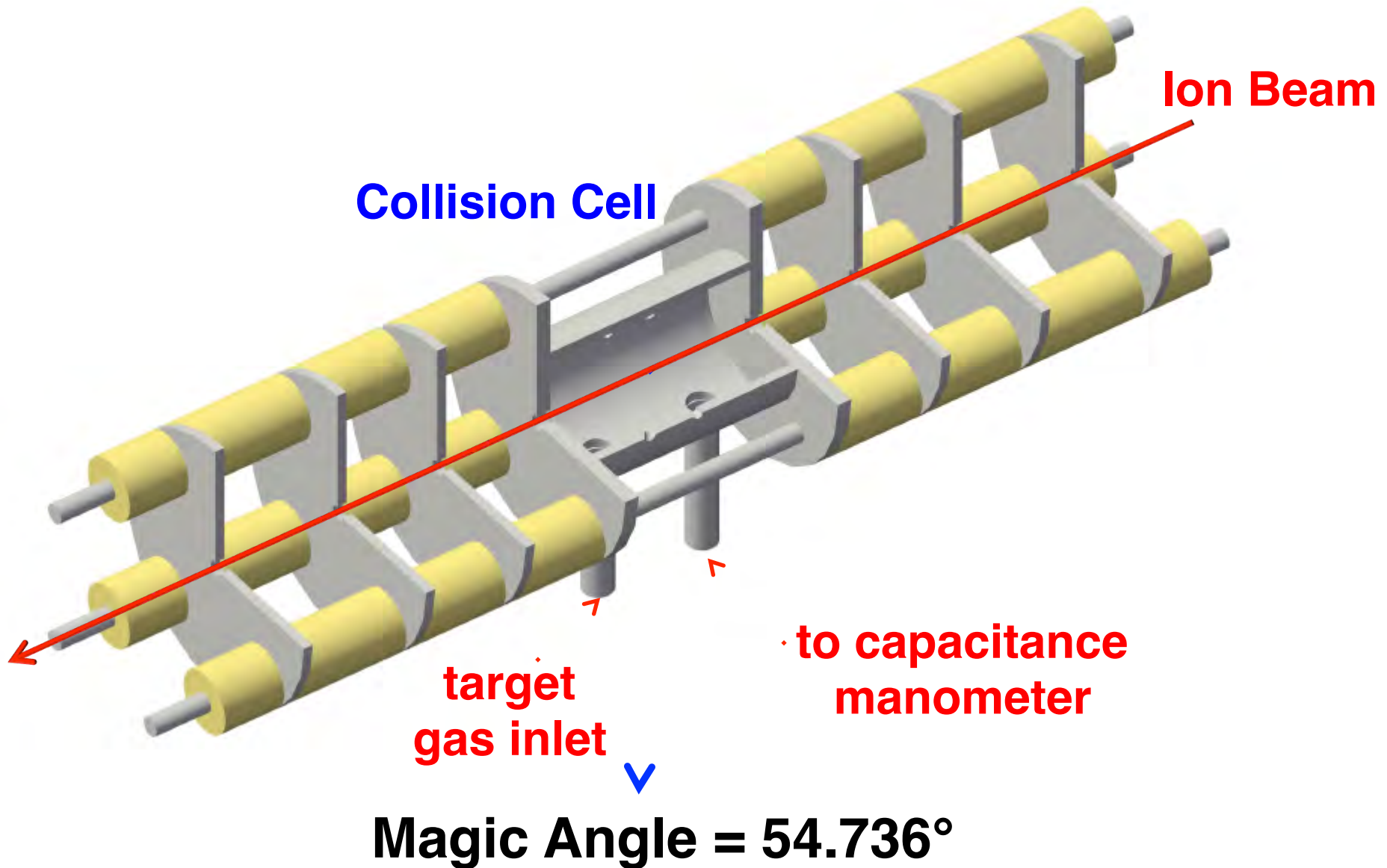


# New experimental setup (1)



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

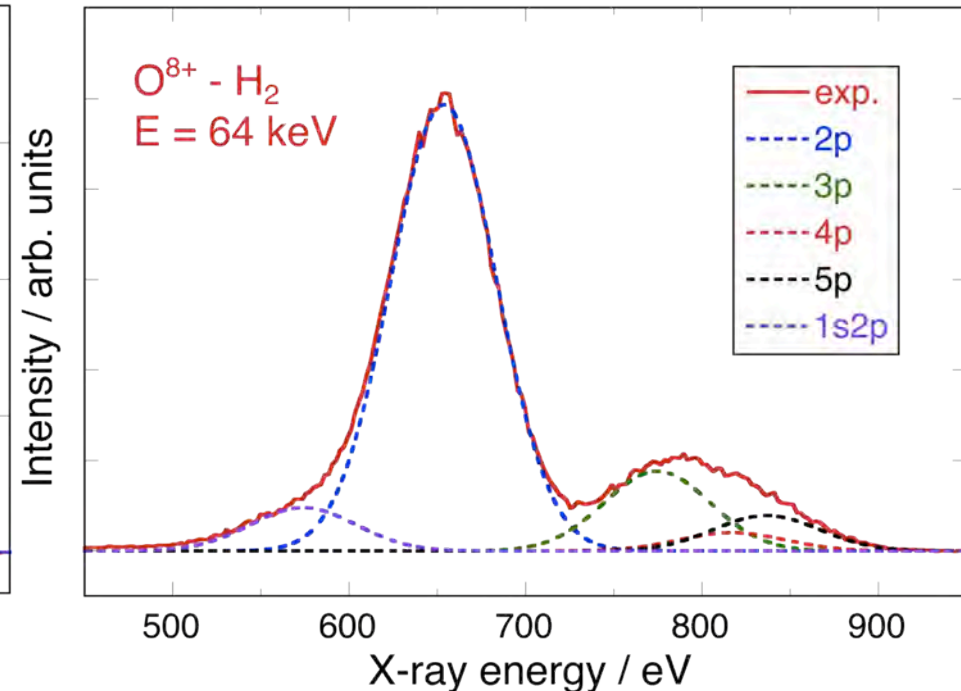
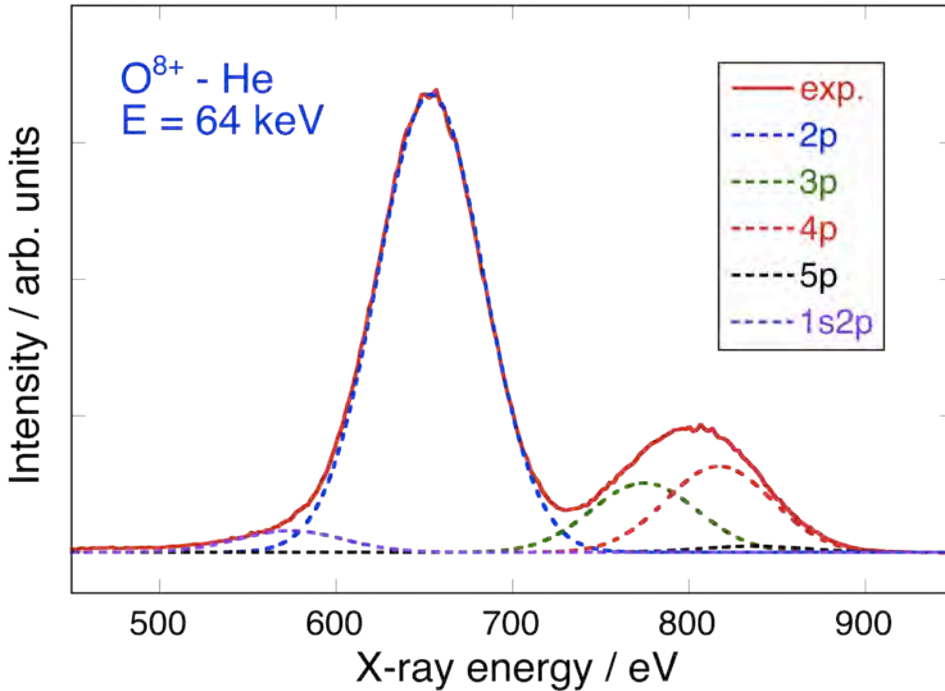
# New experimental setup (2)



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



# O<sup>8+</sup> - He / H<sub>2</sub> collisions



1s-*np* transitions of O<sup>7+</sup>, and 1s<sup>2</sup>-1s2p transition of O<sup>6+</sup>

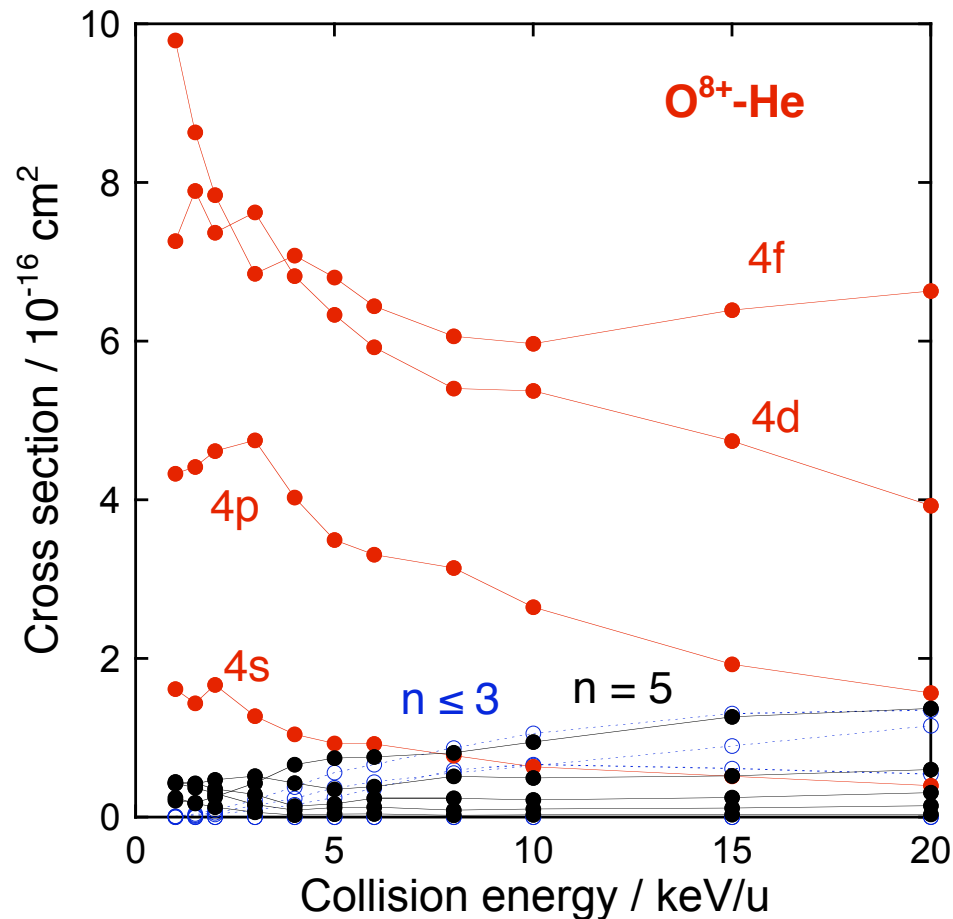
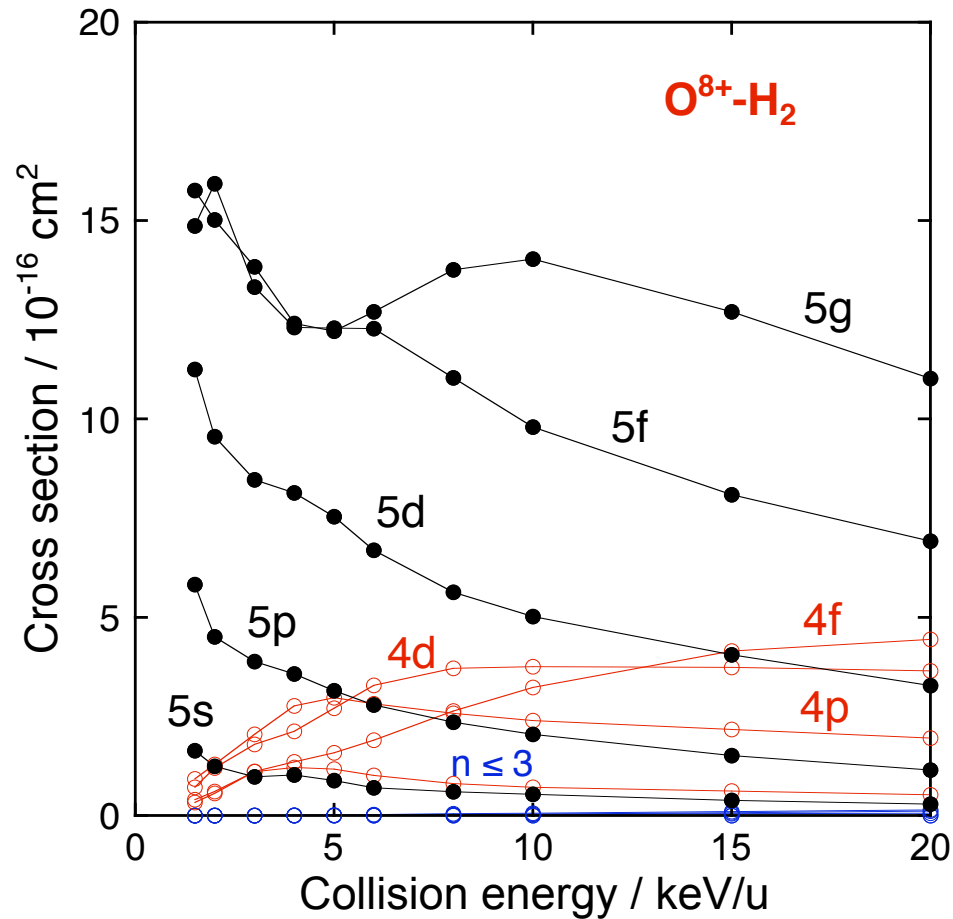
$$2p > 4p > 3p$$

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

# Comparison with theoretical calculations

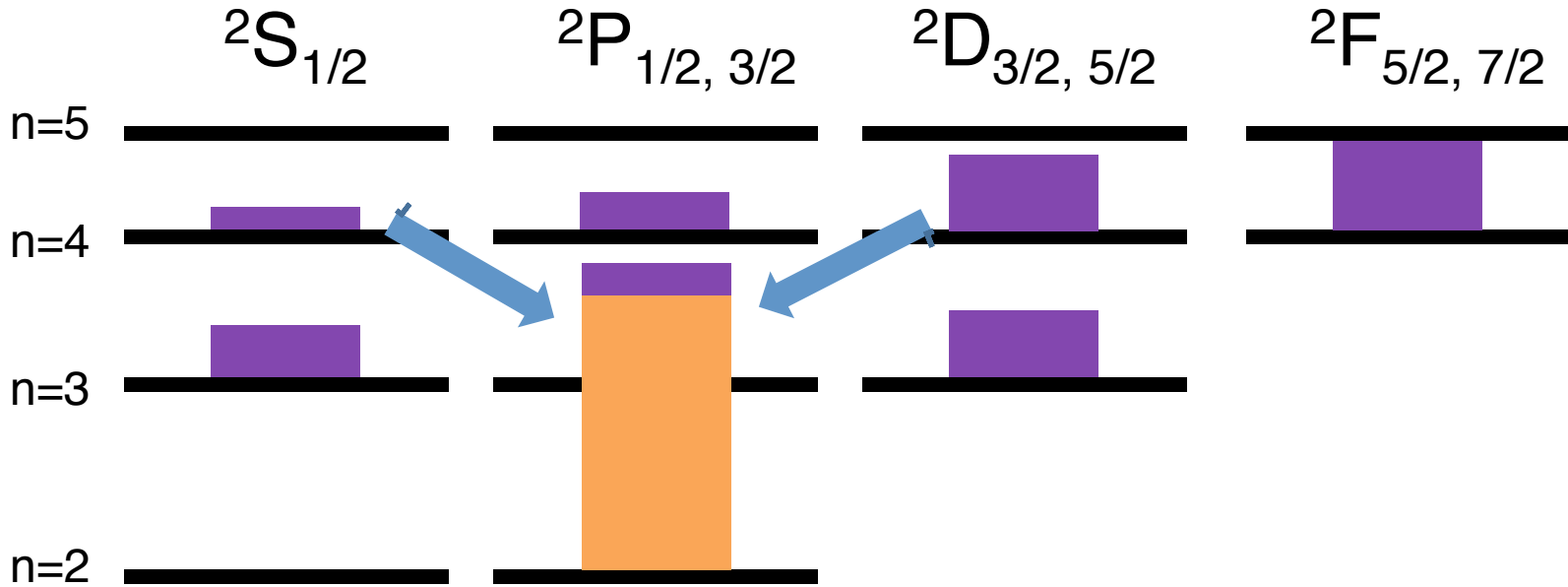
Atomic Orbital Close Coupling calculation  
by L. Liu & J. Wang

# Partial cross sections

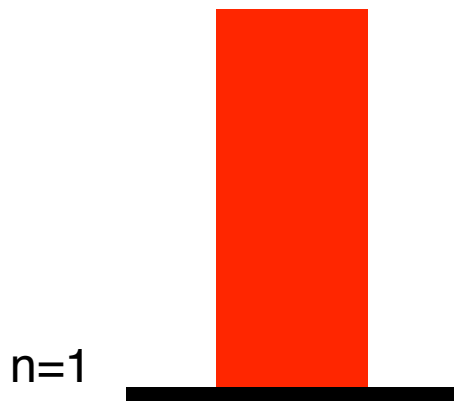


Dominant capture level :  $n = 5$  ( $H_2$ ),  $n = 4$  (He)

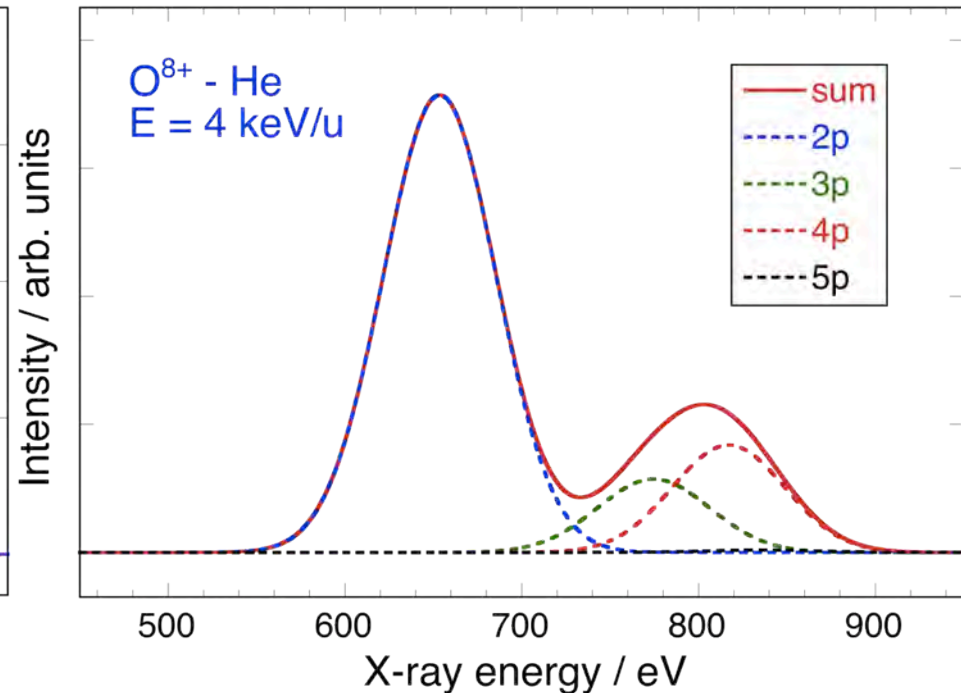
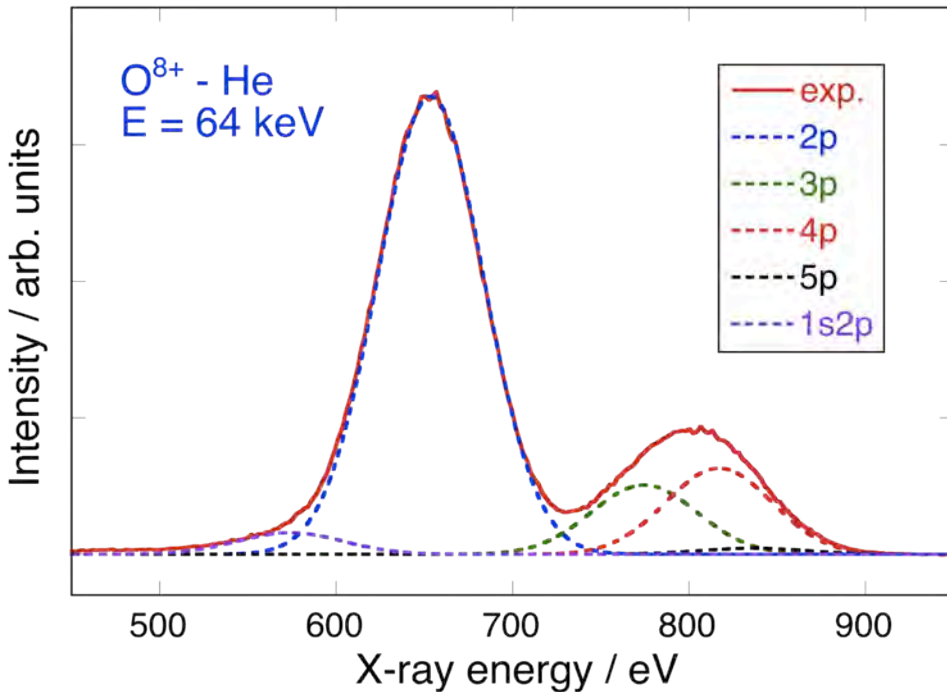
# Cascade of transitions



Initial state distribution



# O<sup>8+</sup> - He collisions

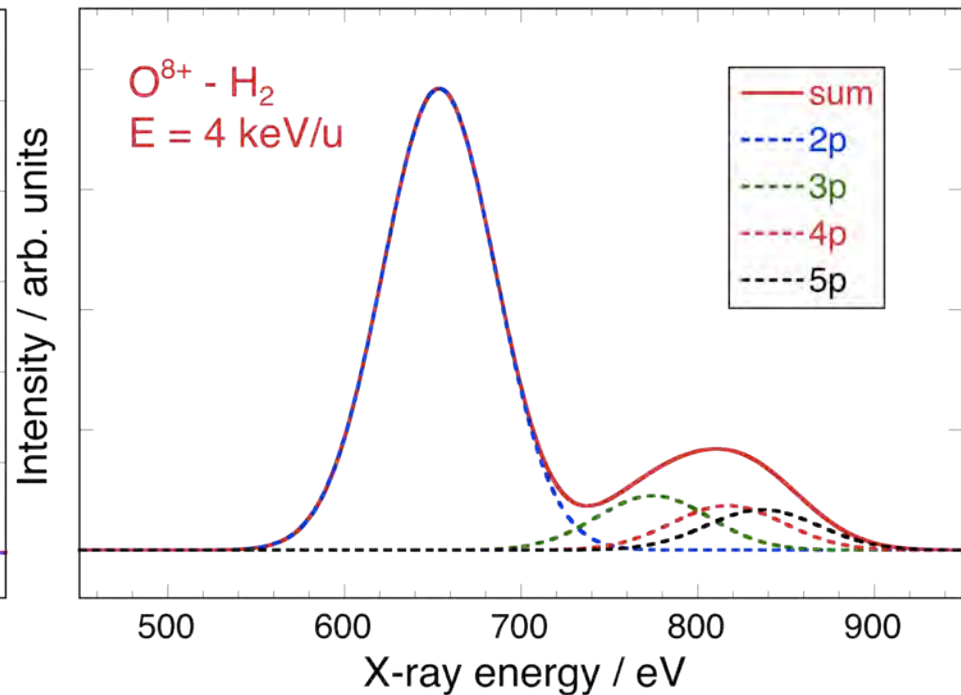
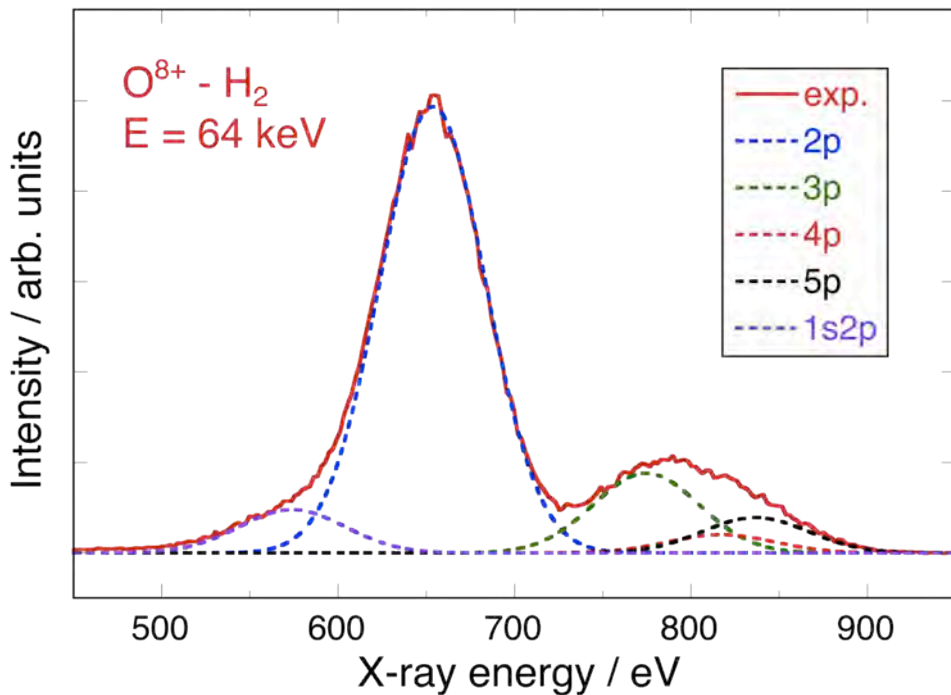


Agreement is almost perfect, except for 1s<sup>2</sup>-1s2p.

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

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

# $O^{8+}$ - $H_2$ collisions

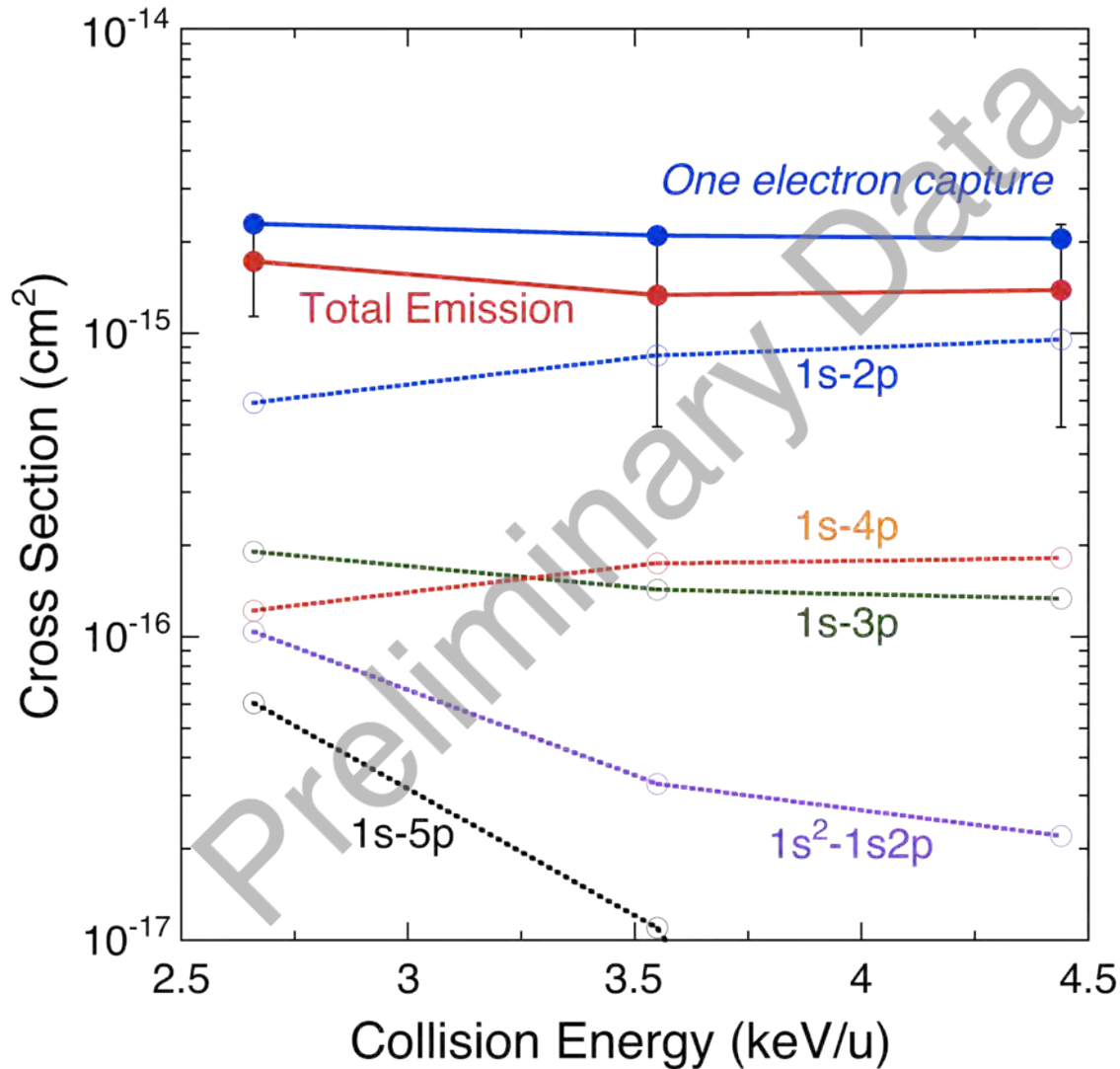


Agreement is not sufficient, due to molecular structure (?)

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

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

# Cross Sections : $O^{8+}$ - He



◆ difference

1s - 2s : M1, 2E1

1s - np : E1