

[講演題目] R行列法によるBH分子の電子衝突励起・解離断面 積計算

[著者名] 川手朋子^{1,2}、村上泉^{1,2}

[所属略称]¹核融合研、²総研大

[研究室 Web ページ URL (任意)]

水素化ホウ素 (BH) 分子は環状磁場閉じ込め装置において、ポロニゼーションによる壁コンディショニング直後に確認されており、プラズマ対向壁におけるホウ素堆積量の指標となる [1]。一方これまで BH 分子の電子衝突励起断面積のデータはなく、計測された発光線強度を BH 分子密度に変換する場合は D/XB の実験結果に頼っていた。本研究では Quantemol-EC ソフトウェアパッケージ [2] を用いることにより、Molpro [3] による分子構造計算、UKRMol+ [4] による BH 分子の電子衝突励起断面積計算を行った。

分子軌道計算ではガウス型軌道、cc-pVQZ 基底関数系を用いた。完全活性空間自己無撞着場を仮定し、内殻 2 電子を固定、残り 4 電子で活性空間を成す条件で計算をおこなった。また断面積計算では R 行列法を用いた。標的となる状態の数を上げるほど計算精度は向上するが計算コストも上昇する。本研究では標的状態数を 15, 25, 35, 40, 45 と変化させながら、弾性散乱断面積の収束性を確認することにより、計算精度を見積もった。標的状態数 45 の計算で得られた各電子衝突励起断面積を図 1 に示す。さらに励起断面積と共に、電子衝突解離断面積の導出をおこなった。本講演では得られた励起・解離断面積を示し、過去の D/XB の実験値との比較を行う。

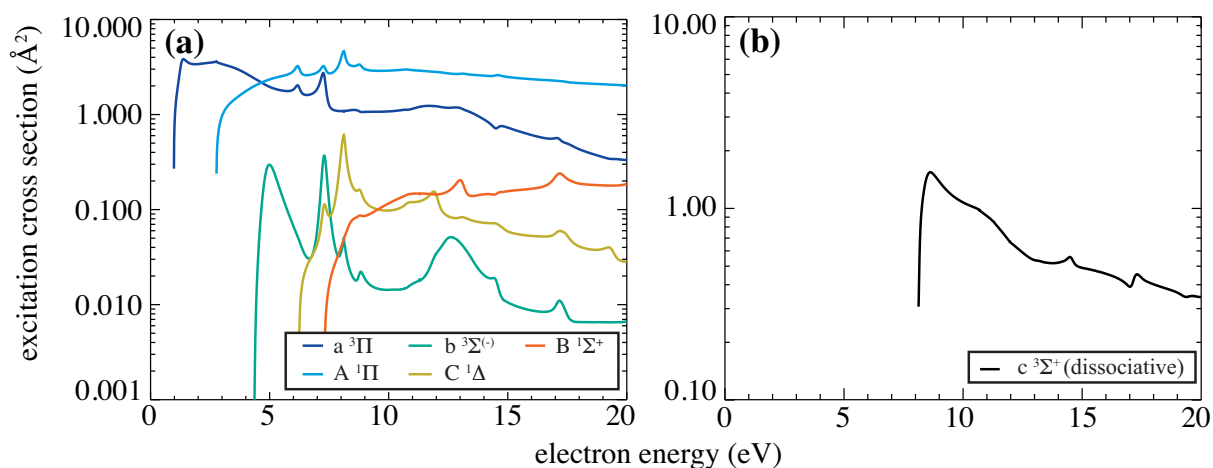


図 1: 基底状態から各準位への電子衝突励起断面積。(a) 結合性軌道への励起断面積、(b) 解離性軌道への励起断面積

[1] T. Kawate et al. Nucl. Fusion 62 126052 (2022)

[2] B. Kooper et al. Atoms 7, 97 (2019)

[3] H. Werner et al. WIREs Comput. Mol. Sci. 2, 242 (2012)

[4] Z. Mašín et al. Comp. Phys. Comms 249, 107092 (2020)