小特集

プラズマ再結合

1．再結合プラズマ

藤本　孝

（京都大学大学院工学研究科）

Collisional-Radiative Recombination

FUJIMOTO Takashi

Department of Engineering Physics and Mechanics, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Kyoto 606-8501, Japan

(Received 10 April 1998)

Abstract

Ions and electrons in plasma recombine to become atoms in the ground state. The effective rate of recombination is determined by a complex of collisional and radiative processes. For the system of protons and electrons, details of the recombination process are explained, and an approximate expression of the effective rate of recombination, or the collisional-radiative recombination rate coefficient, is given.

Keywords:

recombining plasma, radiative recombination, three-body recombination, collisional-radiative recombination

1.1　はじめに

本小特集のはじめに述べたことにもかかわらず，「消滅するプラズマ」がまったくなおざりにされてきたわけでもない．ひとつは天体で観測される「星雲」のような希薄なプラズマにおいて再結合がどのように生ずるのか，といった興味からの研究によって，励起状態への輻射再結合とそれに引き続く輻射脱励起によって再結合の「速さ」と励起準位のポピュレーションが決まっている，という認識は早くからあった．実験室でのアフターグロープラズマに対する測定から，再結合の速さ（速度係数）は 10^{-16} m^{3}s^{-1} 程度であることがわかっていたが，（のちに述べるようにこの速さは原子種にはほとんど依存しない）上に述べた輻射再結合のみからは2桁も小さな速度係数の値しか得られず，その不一致は長い間ミステリーとなっていた．1960年代に入って3体再結合の重要性が認識されるようになり，その過程によって生成される高い励起状態原子が関与する複合過程によって実効的に大きな「速さ」が生ずることが徐々に認識されるようになった．ここでは，このことと，その時代に計算機が実用に耐えるようになっていくのとが軌を一にしているのが興味を引くところである．事実，この進歩に大きく貢献した Bates, McWhiter, Kingston などは，真空管（電子管）式の計算機を用いて連立方程式を一晩かかって解いたという．

本節では，このように3分の1世紀前に明らかとなった再結合の真の姿をもう一度確認する．その理由は本小特集の冒頭に述べた．

1.2　輻射再結合，3体再結合

本節では議論を単純化するために，プラズマ中での水素イオン（プロトン）の再結合を取り扱う．また，電子の速度分布関数には電子温度 T_e で定義されるマクスウェル分布を仮定する．直接的な再結合過程はいうまでもなく2体の輻射再結合

author's e-mail: fujimoto@kues.kyoto-u.ac.jp

$$z+\mathrm{e}(E_1)\to p+h\nu \quad (1)$$

と3体再結合である．

$$z+\mathrm{e}(E_1)+\mathrm{e}(E_2)\to p+\mathrm{e}(E) \quad (2)$$

ここで，zはプロトン，eは電子で，始状態では運動エネルギーE_1ないしE_2を，終状態ではEを持っているとする．pは再結合によって生成された中性水素原子の状態，$h\nu$は余分のエネルギーを持ち去る光子を表す．この節の議論では同一の主量子数を持つ原子状態にはその統計的重みにしたがってポピュレーションが分布する，と仮定するので，pはその準位の主量子数であるとしてよい．式(1)は光吸収電離の逆過程であり，その断面積は

$$\sigma_{\varepsilon,\mathrm{p}}(E_1)=\alpha\pi a_0^2\frac{2^6}{3\sqrt{3}} \times\frac{R}{mc^2}\frac{1}{1+E_1/(R/p^2)}\frac{1}{E_1/(R/p^2)}p\,g_{\mathrm{bf}} \quad (3)$$

である．ここで，αは微細構造定数，a_0は第1ボーア半径，mは電子質量，cは真空中の光速，Rは1リドベルグ（13.6 eV）である．また，g_{bf}は古典論の量子補正でガウントファクタと呼ばれ，1程度の量である．以下の議論で重要となる低エネルギー（$E_1\ll R$）ではこの断面積は$p^{-1}E_1^{-1}$に比例する．（式(3)に対する疑問が提出されていることが，本小特集の**2.2**において紹介されている．）温度T_eのマクスウェル分布を持つ電子が再結合する速さは速度係数によって与えられる．vを電子の速さとして，

$$\beta(p)=\int_0^\infty\sigma_{\varepsilon,\mathrm{p}}(E_1)f(E_1)v\mathrm{d}E_1 \simeq\frac{2^8}{3\sqrt{3}}\sqrt{\pi}\,a_0^2c\left(\frac{R}{mc^2}\right)^2\left(\frac{R}{p^2kT_\mathrm{e}}\right)^{3/2} \times\exp\left[\frac{R}{p^2kT_\mathrm{e}}\right]\left[-\mathrm{Ei}\left(-\frac{R}{p^2kT_\mathrm{e}}\right)\right]. \quad (4)$$

ここで，$f(E_1)$は電子のエネルギー分布関数であり，指数積分は

$$-\mathrm{Ei}(-x)=\int_0^x\frac{\mathrm{e}^{-t}}{t}\mathrm{d}t \quad (5)$$

である．式(4)はガウントファクタを1と置いた近似である．低温のとき，つまり$x\gg1$に対しては$-\mathrm{Ei}(-x)\to\mathrm{e}^{-x}/x$と近似され，そのときは$\beta(p)\propto p^{-1}T_\mathrm{e}^{-0.5}$である．他方，高温の場合は$\beta(p)\propto p^{-2.5}T_\mathrm{e}^{-1.5}$がよい近似となる．

普通のプラズマ分光学の教科書では，式(2)は電子衝突電離の逆過程であるとして，直接に速度係数（rate coefficient：この場合の単位は$\mathrm{m^6s^{-1}}$）を導出し，この再結合の衝突断面積を議論しない．この「断面積」については別の機会に述べる．ここでは常識的なやり方に従う．準位pにある原子の電子衝突による電離の断面積を$\sigma_{p,z}(E)$とすれば，電離の速度係数は次式で与えられる．

$$S(p)=\int_{\chi(p)}^\infty\sigma_{p,z}(E)f(E)v\mathrm{d}E \quad (6)$$

ここで，$\chi(p)$はこの準位の電離ポテンシャルである．断面積としては高励起状態（$p\gg1$）の古典軌道に対するモンテカルロ計算に基づく経験式[1]を採用すれば速度係数は

$$S(p)\simeq1.6\times10^{-14}p^{3.33}(kT_\mathrm{e}/R)^{0.17} \times\exp(-R/p^2kT_\mathrm{e})\ \ [\mathrm{m^3s^{-1}}] \quad (7)$$

である．3体再結合の速度係数は詳細釣り合いの原理から与えられ，

$$\alpha(p)=Z(p)S(p) \quad (8)$$

ここで，サハ・ボルツマン係数は

$$Z(p)=p^2\left(\frac{h^2}{2\pi mkT_\mathrm{e}}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{R}{p^2kT_\mathrm{e}}\right] \quad (9)$$

$$=6.7\times10^{-30}p^2(R/kT_\mathrm{e})^{1.5}\exp(R/p^2kT_\mathrm{e})\ \ [\mathrm{m^3}] \quad (9')$$

である．3体再結合の速度係数はしたがって

$$\alpha(p)\simeq1.1\times10^{-43}p^{5.33}(R/kT_\mathrm{e})^{1.33}\ \ [\mathrm{m^6s^{-1}}] \quad (10)$$

と表される．$\alpha(p)\propto p^{5.33}T_\mathrm{e}^{-1.33}$であり，$\beta(p)\propto p^{-1}T_\mathrm{e}^{-0.5}$と大きく異なった$p$依存性を持つ．

1.3　衝突輻射再結合

電子密度n_eが低くなければ，このようにして再結合した電子は通常，高い励起状態にあり，以後，電子衝突による脱励起，励起を繰り返す．種々の衝突遷移のうち，あとで述べるように，エネルギー的に隣り合わせの準位への遷移が最も起こりやすく，その速度係数はやはりモンテカルロ計算と実験[2]から，脱励起に対して

$$F(p,p-1)\simeq1.2\times10^{-14}p^3(R/p^2kT_\mathrm{e})^{0.17}\ \ [\mathrm{m^3s^{-1}}] \quad (11)$$

がよい近似となる．

プラズマ中でのイオンの「再結合」は，連続状態にあった電子とイオンから出発して，最終的にそれらが基底状態原子となって完結する．そのような現実の再結合過程は上の6種類の過程（輻射再結合，3体再結合，電離，脱励起，励起，輻射脱励起）の複合過程として実現する．その実効的な速度係数をFig. 1 [3]に示す．アフターグローでの電子密度 $10^{17-19}\ \mathrm{m^{-3}}$，温度 $1-4\times10^3$ Kでは速度係数はたしかに $10^{-16}\ \mathrm{m^3s^{-1}}$ 程度の値をとる．$T_e=10^3$ Kの場合についてみれば，$n_e=10^{18}\ \mathrm{m^{-3}}$ あたりを境として低密度，高密度領域に大別できる．後者の領域では速度係数は正確に n_e に比例する．この高密度極限値をプロットしたのがFig. 2であり，ここには高温の場合も含まれている．ここしばらくは低温においてこの極限値（n_e に比例する）がどのように決まっているのかを見る．

Fig. 3に $T_e=10^3$ Kの場合の励起準位ポピュレーション分布を示す．$n_e\to\infty$ に対して実線で近似が与えられている．n_z をイオン（プロトン）密度として，$p\geqq7.25$ での曲線は

$$n(p)=Z(p)n_zn_e \tag{12}$$

により，またそれ以下の準位には式(12)の外挿として

$$n(p)/2p^2\propto p^{-6} \tag{13}$$

の近似が成立する．また $p=7.25$ では近似(12)と(13)はなめらかにつながることが証明されている[4]．さて，式(12)はサハ・ボルツマン分布として知られているもので，この準位のポピュレーションがイオン・連続状態電子と熱平衡にあることを意味する．つまり，これらの準位は連続状態と強く結びついている．この状況は局所熱平衡（Local Thermodynamic Equilibrium, LTE）と呼ばれる．

Fig. 4にこの状態（$n_e\to\infty$）での電子（ポピュレーション）の「ながれ」の概略を示す．矢印の太さが流れの大きさを表している．たとえば，$p=8$ 準位のポピュレーションは，主としてとなりあわせの準位 $p=9$ との行き来でバランスが決まっている．もう少し正確に言えば，9→8の脱励起とその逆過程である8→9の励起がほぼバランスしながらこの準位のポピュレーションを規定している．$p=10$ や7との行き来も無視はできないが，それらもそれぞれほぼ正確にバランスしている．これら逆過程同士のバランスがこれら準位のポピュレーションにボルツマン分布を成立させる．(Fig. 3) ここで，つぎの2点に注意されたい．第1は，これらポピュレーションの元となっているのは連続状態電子（とイオンのシス

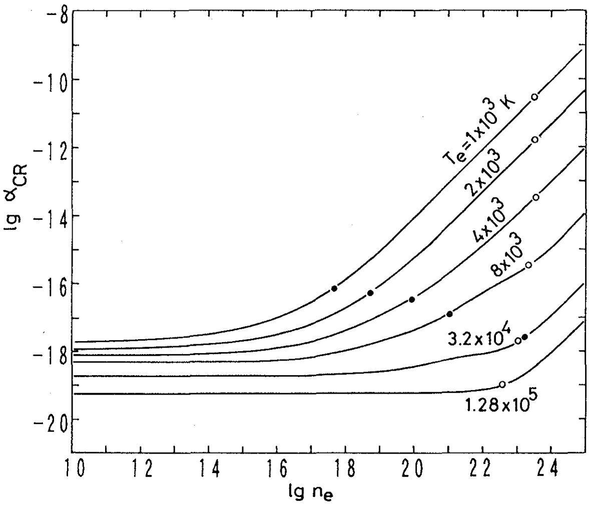

Fig. 1　Effective (collisional-radiative) recombination rate coefficient. The closed circles show the lower limit of the high-density region given by Eq.(18). The situation is different in high temperatures (quoted from [3]).

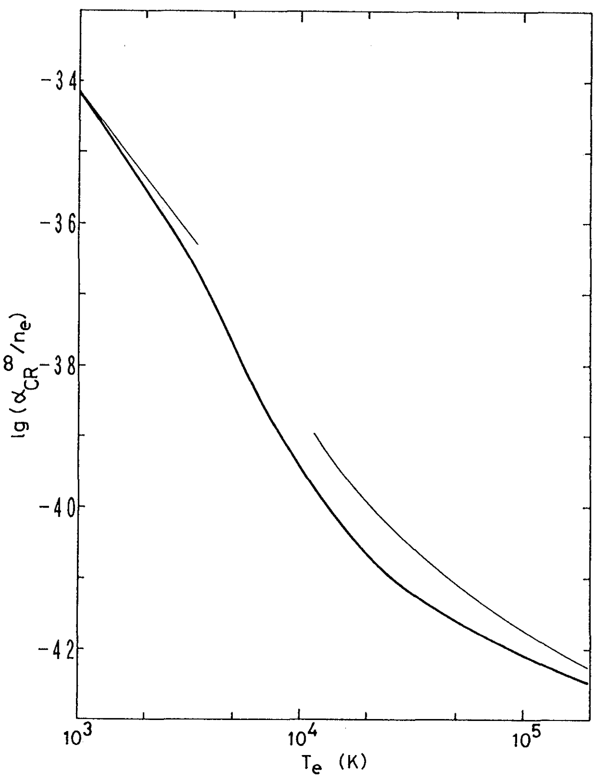

Fig. 2　The high-density-limit value of the collisional-radiative recombination rate coefficient (divided by n_e) in Fig. 1. The solid line in the low temperatures is given by the approximate expression, Eq.(16) (quoted from [3]).

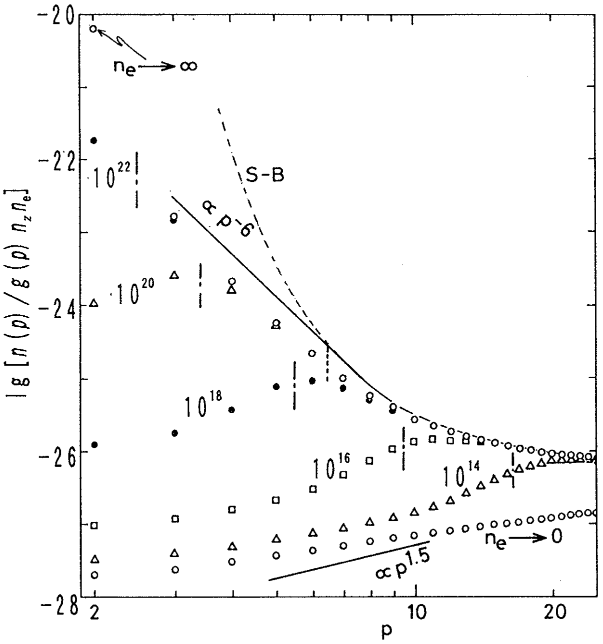

Fig. 3　Population density distribution among the excited levels in the recombining plasma. T_e = 10^3 K (quoted from [3]).

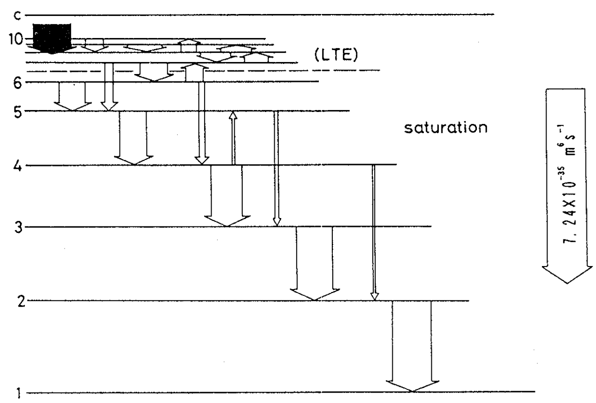

Fig. 4　Schematic diagram of the flow of electrons (populations) among the excited levels and the ground state for the recombining plasma. T_e =10^3 K and n_e → ∞ . All the arrows represent collisional transitions, and the width of an arrow indicates the magnitude of the flow. The downward arrow on the right represents the magnitude of the collisional-radiative recombination flow. The filled arrow at the left-top corner represents the net downward flow through a high-lying level, p = 10 in this example. The dashed line between p = 6 and 7 represents Byron's boundary (quoted from [3]).

テム）であること，第2は，電離と3体再結合の過程が顔を出さないことである．つまり，これら準位と連続状態電子との直接的な結びつきは強くない．実際，直接電離（式(7)）のながれは（したがって，それとほぼバランスしている3体再結合（式(10)）のながれも）8から9へ（9から8へ）の励起（脱励起）ながれの1桁以下の大きさしかない．しかし，これら準位のポピュレーションは式(12)に従う，すなわち，連続状態電子と強く結びついている．この状況は以下のように説明される．すなわち，個々の準位としては連続状態と弱い結びつきしか与えない電離，3体再結合過程が，相互に強く結びついているこれら準位を全体としてLTEにおき，そのポピュレーションにサハ・ボルツマン分布を成立させる．

Fig. 4の$p≧7$ではその準位からの主要な励起（速度係数を$C(p,p+1)$とする），脱励起のうち，上向きの方が大きい（$C(p,p+1)>F(p,p-1)$）が，$p≦6$ではその関係は逆になる（$C(p,p+1)<F(p,p-1)$）．この違いは大ざっぱにいって，電子の持っているエネルギー（$\sim kT_e$）と準位間のエネルギー差（$\sim 2R/p^3$）との大小関係から説明される．したがって，$p≦6$の低励起準位では，エネルギー差が大きくなりすぎたために励起が生じにくくなって，上に述べたポピュレーションながれのバランスが崩れ，結局下向きの多段階の（ハシゴ様）脱励起が支配的になる．その結果，ポピュレーションの分布は式(13)に従うようになる．このLTEとハシゴ様脱励起過程の境界となる準位は$C(p_B, p_B+1)=F(p_B, p_B-1)$で与えられて，バイロンの境界と呼ばれ[5]，近似的に

$$p_B=(R/3kT_e)^{1/2} \tag{14}$$

で与えられる．$T_e=10^3$ K では，実際のp_Bは6と7の間にあるが，式(14)は$p_B=7.25$を与える．先ほどのFig. 3における境界はこのp_Bであった．Fig. 4にはイオン全体としての実効的な再結合のながれの大きさ（数値としては速度係数をn_eで割ったもの）が右側の矢印で示されている．これがFigs. 1, 2における高密度極限値に他ならない．また，左上には高い励起状態（この図では$p=10$が選んである）を通過する下向きの正味のながれの大きさが黒塗りの矢印で与えられている．この両者がほとんど同じ大きさであることに注意されたい．

ではこの大きさを決定している素過程は何であろうか．まず，高い準位は連続状態電子と熱平衡にあり，個々の励起，脱励起過程や電離，再結合過程は十分速く互いにバランスしているので，そのどれもが実効的な再結合の速さを規定する律速過程にはなり得ない．他方，低い準位はそのポピュレーションがすぐ上の準位から供給され，そのすべてをその準位からの脱励起でもうひとつ下の準位

へ移送する．したがってそのながれ，$n(p)F(p,p-1)n_e$，が実効的な再結合の速さを与えていることには間違いないが，これもやはり律速過程ではない（上から落ちてきた量すべてを下に落とすだけ）．結局のところ，この両者の境界，すなわち，バイロンの境界 p_B におけるながれ $n(p_B)F(p_B,p_B-1)n_e$ が再結合のながれの大きさを決めている．そういった意味でこの境界は bottle neck と呼ばれる．Figs. 3, 4 においてこの境界が点線で示されている．この bottle neck 準位においては $n_i n_e Z(p)F(p,p-1)n_e$ が極小値をとる．

バイロンの境界の準位は LTE の下限でもあり，したがってそのポピュレーションは近似的に式(12)によって与えられる．(Fig. 3) したがって，この再結合ながれの大きさは

$$\alpha_{CR}{}^{\infty} n_i n_e = Z(p_B) n_i n_e \cdot F(p_B, p_B-1) n_e \qquad (15)$$

と近似できて，実効的な再結合速度係数は式(14)，(9')，(11) から

$$\alpha_{CR}{}^{\infty} \simeq 1.1\times10^{-43}(R/kT_e)^4 n_e \quad [\mathrm{m^3\,s^{-1}}] \qquad (16)$$

で与えられる．この近似は $(\alpha_{CR}{}^{\infty}/n_e)$ として Fig. 2 に直線で示されている．

この再結合速度係数が n_e に比例することから，この過程を3体再結合と呼ぶ人がある．この比例関係は式(15)右辺において n_e が二度現われるためであり，この複合的な再結合過程は直接的な3体再結合過程(式(2))とはほとんど無縁である．

電子密度が低くなると，Fig. 4 の中の衝突遷移が徐々に輻射遷移に置き代わる．Fig. 5 は $n_e=10^{20}\ \mathrm{m^{-3}}$ における「ながれ」図である．この場合高密度極限と異なり，たとえば，p が3以下の準位からの遷移は輻射脱励起が主要となっている．しかし，Fig. 1 が示すように，このかなりの低密度でも，実効的な再結合速さは高密度極限値を保っている．その理由は，低い励起準位における事情がこのように変化しても，再結合の律速過程には何の変化もない，すなわち，バイロンの境界準位あたりの事情は高密度極限と本質的には同じ状況にある，ためである．Fig. 5 を Fig. 4 と比較されたい．別の言い方をすれば，bottle neck より下では何かが変化しても大勢には影響しない．Fig. 6 にはこの2種類の境界が示されている．主要な遷移が衝突遷移から輻射遷移へ移り変る「グリームの境界」p_G [6]では

$$\sum_{q<q_G} A(p_G,q) = \Big[\sum_{q>q_G} C(p_G,q) + \sum_{q<q_G} F(p_G,q) + S(p_G)\Big] n_e \qquad (17)$$

が成立する．上の例では p_G は3と4の間にある．すなわち $p_B > p_G$ である (Figs. 5 と 6)．

さらに電子密度が低下すると，p_G が高励起準位に上がっていくが，p_G が p_B に達するまで再結合についての事情は変わらない．p_G が p_B に達すると，準位 p_B が熱平衡から外れてきて再結合の律速過程が変わり，速度係数が高密度極限から離れてくる．この境界の密度は

$$p_G = p_B \qquad (18)$$

で与えられる．Fig. 1 にはこの境界が黒丸で示されている．

さらに電子密度が下がって $p_G > p_B$ となると，実効的な再結合は，p_G よりも高く LTE にある準位から p_G よ

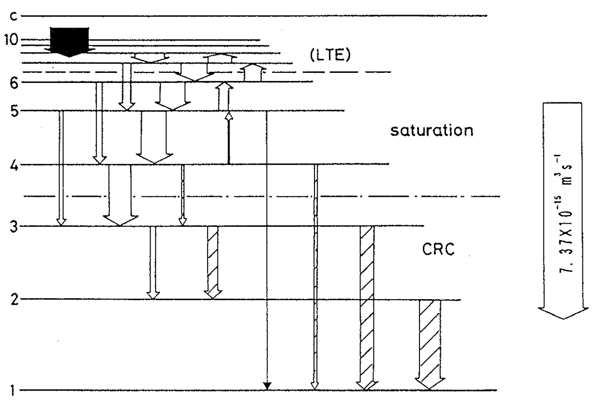

Fig. 5 Similar figure to Fig. 4, except that $n_e = 10^{20}\ \mathrm{m^{-3}}$. The hatched arrows represent radiative transitions. The dashed line between p = 3 and 4 represents Griem's boundary (quoted from [3]).

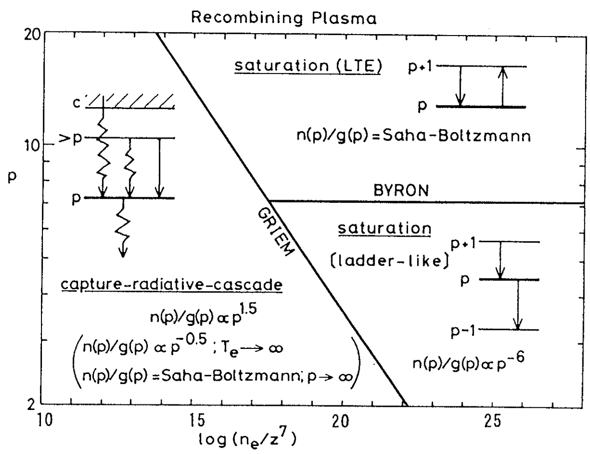

Fig. 6 The phase diagram of the recombining plasma (quoted from [3]).

りも下の準位への輻射脱励起とイオンからの輻射再結合の和がその速さを与えるようになる．低密度の極限では常識的に輻射再結合の単なる総和となる．

今まで述べたような実効的な再結合速さを与える複合過程は「衝突輻射再結合」とでも呼ぶほかはない．

よく知られているように，電離限界近くの高励起状態は水素様としてよく近似される．再結合の実効的な速さの律速過程がこのような高い励起準位の間の過程であれば，上の議論から明らかなように，その速さは原子種にほとんどよらない．電子温度が上がったり，電子密度が下がると原子種の個性が現われる．

1.4　おわりに

今までは電子の速度分布関数にはマクスウェル分布を仮定してきた．しかしながら，現実のプラズマではかならずしもその仮定は成立しない．たとえば，OFI プラズマではその速度分布はマクスウェル的ではなく，とくにプラズマ生成直後は三次元速度空間での分布は非等方的でさえある．そのような場合には，3体再結合の速度係数として式(10)に頼ることはできない．そのような場合に対して有効な再結合「断面積」が提出された[7]．しかしながら，この定式化は一般的に成立しない2つの仮定の上にたっており，しかもその論文中にはそのことが明記されていない．また，再結合したあとの衝突過程についても式(11)などに頼れない．これらについてはべつの機会に述べることとしたい．

本節では，原子イオンと電子の常識的な再結合過程について見た．もし，プラズマ中に分子イオンがあるとか，中性分子があるとそれらが関与する再結合も生ずる．たとえば，分子イオンからは上に述べたのと類似の衝突輻射再結合に加え，解離性再結合が生ずる．ネオンなどの希ガス分子イオンからの解離性再結合でいままで予想されなかったような原子状態への再結合が生じているらしいことがわかってきた[8]．また，中性水素分子が再結合を促進する，分子活性化再結合（Molecule Activated Recombination）の過程があると提唱されている[9]．

参考文献

[1] P. Mansbach and J.C. Keck, Phys. Rev. **181**, 275 (1969).
L. Vriens and A.H.M. Smeets, Phys. Rev. A **22**, 940 (1980).

[2] F. Devos, J. Boulmer and J.-F. Delpech, J. Phys. (France) **40**, 215 (1979).

[3] T. Fujimoto, J. Phys. Soc. Japan **49**, 1561 (1980); J. Phys. Soc. Japan. **49**, 1569 (1980).

[4] T. Kawachi and T. Fujimoto, Phys. Rev. E **51**, 1440 (1995).

[5] S. Byron, R.C. Stabler and P.I. Bortz, Phys. Rev. Lett. **8**, 376 (1962).

[6] H.R. Griem, *Plasma Spectroscopy* (McGraw-Hill, New York, 1964).

[7] T. Ditmire, Phys. Rev. E **54**, 6735 (1996).

[8] G.B. Ramos, M. Schlamkowitz, J. Sheldon, K. Hardy and J.R. Peterson, Phys. Rev. A **52**, 4556 (1995).

[9] S.I. Krasheninnikov *et al.*, Phys. Lett. A **214**, 285 (1996).