

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年5月30日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2010～2011

課題番号：22740362

研究課題名（和文）ゼーマン効果を利用した二原子分子発光スペクトル局所計測法の開発

研究課題名（英文）Development of a spectroscopy technique to measure local emission spectra of diatomic molecules by using the Zeeman effect

研究代表者

四竈 泰一（SHIKAMA TAIICHI）

京都大学・大学院工学研究科・講師

研究者番号：80456152

研究成果の概要（和文）：磁場を印加したプラズマ中において二原子分子発光スペクトルのゼーマン分裂を利用することで、受動的な発光分光法単独で二原子分子の局所発光スペクトルを測定するための手法を開発した。手法の開発のために2つの研究課題を実施した：(1) 外部磁場中における二原子分子発光スペクトル形状の評価手法の確立，(2) 磁場閉じ込め装置における二原子分子発光スペクトルの局所計測。(1)については研究目的で想定した成果を得た。(2)については測定を実施したが波長分解能の不足により当初目的を達成するには至らなかった。副次的な成果として水素同位体原子を含む二原子分子の振動回転分子定数評価を行った。

研究成果の概要（英文）：We have developed a spectroscopy technique to measure local emission spectra of diatomic molecules by using the Zeeman effect in plasmas with the external magnetic field. In order to develop this technique, two research topics were investigated: (1) Establishment of a method to evaluate the spectral line shapes of diatomic molecules in plasmas with the external magnetic field, (2) Application of the spectroscopy technique to a magnetic confinement fusion experimental device. Topic (1) was accomplished as expected in the research proposal. For topic (2), the spectra were measured, but we have not succeeded to resolve the magnitudes of the Zeeman effect because of the lack of the wavelength resolution. As an additional achievement, the ro-vibrational molecular constants of diatomic molecules which contains hydrogen isotopes were evaluated.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2011年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：プラズマ科学

キーワード：プラズマ，核融合，プラズマ壁相互作用，プラズマ分光，ゼーマン効果，炭化水素分子，二原子分子

1. 研究開始当初の背景  
磁場閉じ込め型のプラズマ核融合実験装

置では，ELM (Edge Localized Mode) やブ

ラズマブロップにより生じる突発的な粒子輸送時のプラズマ対向壁の熱負荷低減が研究課題となっている。国際熱核融合炉 ITER の運転シナリオでは、ダイバータ領域へ比較的小さい原子番号を持つネオンなどの希ガスや、水素、窒素、炭化水素などの分子ガスを外部から導入し、放射損失と分子活性化再結合を組み合わせた局所的な熱負荷低減が検討されている。原子分子の能動的な導入は、対向壁の損耗、再堆積過程の変化に加え、炉心部への不純物流入などの粒子輸送の変化を生じさせる。さらに、定常運転時の長い時間スケールでは対向壁表面からのリサイクリング流束にも影響を与える可能性がある。このような観点から、原子分子の動的挙動を制御し安定した放電を維持する上で、原子分子の動的挙動を表す物理量である温度、流速および密度を測定することが重要となる。

原子分子は電荷を持たないため、プラズマ中での測定には励起状態間の遷移に伴う発光スペクトルがしばしば利用される。通常、発光スペクトルデータは観測視線上に存在する発光の線積分値となるため、局所的な発光強度を得るには、アーベル逆変換法や複数方向からの観測視線を利用したトモグラフィ法が適用される。しかし、これらの手法ではスペクトル線の広がりやシフトの情報を空間分解することが困難である。これに対して、核融合実験装置で想定されるような強磁場かつ観測視線方向に磁場強度が分布を持つような条件下では、発光位置に応じたスペクトル線のゼーマン分裂の違いを利用することで局所計測が可能となる。

研究代表者はこれまでに、上記原理にもとづく原子発光スペクトルの局所計測実験を九州大学 TRIAM-1M トカマクにおいて行った。ゼーマン分裂の大きさが異なる $\pi$ 、 $\sigma$ 偏光成分を分離計測することで計測精度を向上させるとともに、スペクトル線のゼーマン分裂形状を評価するための摂動計算コードを開発し、スペクトル線形状と磁場強度との対応付けを行った。その結果、水素原子  $H\alpha$ 線、ヘリウム原子  $2^3P - 3^3D$  線、モリブデン原子  $5^7S_3 - 5^7P_3$  線に対して発光強度、温度、流速の局所計測を行うことに成功した。その後、可視域の発光線を持つ二原子分子への適用を目指し研究を進めている。これまでに視線上の発光位置が1箇所と仮定できる簡単な場合に、水素分子  $d^3\Pi_u - a^3\Sigma_g^+$  遷移発光スペクトルの発光強度、電子基底準位 ( $X^1\Sigma_g^+$ ) の振動回転温度の局所計測に成功している。

## 2. 研究の目的

本研究課題の目的は、研究代表者のこれまでの研究をさらに進め、核融合実験装置で観測される可能性のある水素以外の二原子分子発光スペクトルに対しても一般的に適用可能なように上記局所計測手法を拡張し、分子の温度、流速、密度の局所計測法として確立することである。このために具体的に以下の2つの課題を実施することを目的とする。

- (1) 外部磁場中における二原子分子発光スペクトル形状の評価手法の確立
- (2) 磁場閉じ込め装置における二原子分子発光スペクトルの局所計測

課題(1)については二原子分子発光スペクトルのゼーマン分裂と発光の空間分布とを対応付けるために、磁場中でのスペクトル形状の計算コードを開発する。強磁場を発生可能なグロー放電実験装置においてスペクトルを実測し、実測値と計算値とを比較することで計算コードの信頼性を検証する。

課題(2)については、核融合科学研究所 LHD (Large Helical Device) を利用し、実験での局所計測の検証実験を行う。

## 3. 研究の方法

### (1) 外部磁場中における二原子分子発光スペクトル形状の評価手法の確立

二原子分子発光スペクトル形状と外部磁場強度との対応付けを行うための計算コードを以下のように構築した。

- ① ハミルトニアンとして電子エネルギー、振動エネルギー、回転エネルギー、遠心力歪みエネルギー、スピン軌道相互作用、スピン回転相互作用、 $\Lambda$ 型2重分離、ゼーマン効果、シュタルク効果を考慮する。
- ② 基底波動関数の角運動量量子数表示として、軽元素二原子分子の角運動量の結合状態を良く近似するフントのケース (b) を利用し、ハミルトニアン行列要素を対角化計算する。
- ③ 対角化計算により求まる磁気副準位のエネルギー固有値から励起上準位・下準位の磁気副準位間の発光波長を、また、波動関数 (非摂動状態の波動関数の線形結合に対する係数) から発光強度を評価する。

①に記した個々の相互作用の大きさは角運動量量子数を用いた表式に対する係数としてデータ化されており、それらを計算に利用した。

核融合実験装置内で観測される二原子分

子スペクトルのうち、水素分子以外のスペクトルは複数の振動回転遷移スペクトルが重畳した連続スペクトルとなるため、磁場強度に応じてスペクトル形状の複雑な変化が予想される。計算コードの信頼性を検証するために、強磁場を印加可能な放電実験装置を用いてスペクトルを実測した。

- ① 無冷媒式超伝導コイル(GRYOGENIC 社 1721, 磁場強度 0.0 - 7.0 T) 内にガラス製の放電管を設置しグロー放電プラズマを生成した (図 1)。
- ② メタンガスを利用し、解離によって生じる  $CH A^2\Delta-X^2\Pi$  遷移発光を磁場強度 0, 1.5, 4.0 T の条件下で磁場に垂直な方向から観測した。観測にはレンズとグラントムソンプリズムを利用し、発光を  $\pi$ ,  $\sigma$  偏光に分離して集光した。集光した光は偏光成分ごとに光ファイバにより伝送し、ツェルニ-ターナ型可視分光器 (焦点距離 1 m, 回折格子 2400 本/mm) を用いて分光した。測定の本長分解能 (装置関数の半値全幅) は 9.7 pm である。分光したスペクトルは冷却 CCD 検出器を用いて検出した。

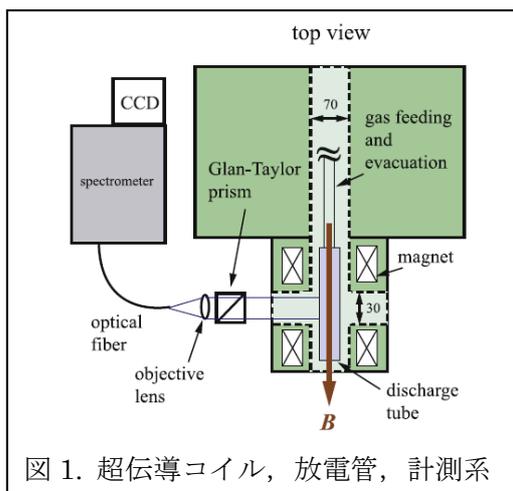


図 1. 超伝導コイル, 放電管, 計測系

## (2) 磁場閉じ込め装置における二原子分子発光スペクトルの局所計測

核融合科学研究所 LHD において実験を行った。径方向の観測視線を用いてダイバータタイルに利用されている炭素繊維複合材に起因すると推測される  $CH A^2\Delta-X^2\Pi$ ,  $C_2 d^3\Pi-a^3\Pi$  遷移発光を観測した。集光した光はツェルニ-ターナ型可視分光器 (焦点距離 1.33 m, 回折格子 1800 本/mm) を用いて分光し、冷却 CCD により検出した。測定の本長分解能 (装置関数の半値全幅) は約 50 pm である。

## 4. 研究成果

### (1) 外部磁場中における二原子分子発光スペクトル形状の評価手法の確立

開発した摂動計算コードを用いて核融合実験装置内での存在が予想される  $H_2$ ,  $CH$ ,  $C_2$ ,  $BeH$  分子のスペクトル形状を計算した。計算結果から、これらの分子発光スペクトルは  $\pi$ ,  $\sigma$  偏光に対するゼーマン分裂の大きさが異なり、偏光分離計測を行うことでゼーマン効果の大きさを測定する際の精度を向上させられることが分かった。異核二原子分子については一般に等核二原子分子よりも外部電場によるシュタルク効果が大きくなるため外部磁場と外部電場の両方が存在する場合のスペクトル形状の変化を計算した。核融合実験装置内で想定される電場強度ではシュタルク効果によるスペクトル形状変化は無視できる程度であるという結論を得た。

開発した計算コードの妥当性を検証するために、超伝導コイル内に設置したグロー放電管を用いて  $CH A^2\Delta-X^2\Pi$  遷移発光スペクトルを測定した (図 2)。図中赤い点および線が実測値、青い点線が計算結果を示す。図には 4 つのスペクトルを同時にプロットしてあり、上から順に  $\pi$  成分 (4.0 T),  $\pi$  成分 (1.5 T),  $\sigma$  成分 (4.0 T),  $\sigma$  成分 (1.5 T) を表す。前者 3 つについては発光強度のゼロ点をずらしてプロットしてある。計算結果は  $A^2\Delta$  準位の振動回転温度をパラメータとして実験結果に対してフィッティングした。これらの結果から計算結果と実験結果がよく一致することが確認できた。短波長側で実測値と計算値のずれが見られるが、これは  $A^2\Delta$  準位の振動回転占有密度のボルツマン分布からのずれに起因すると考えられる。

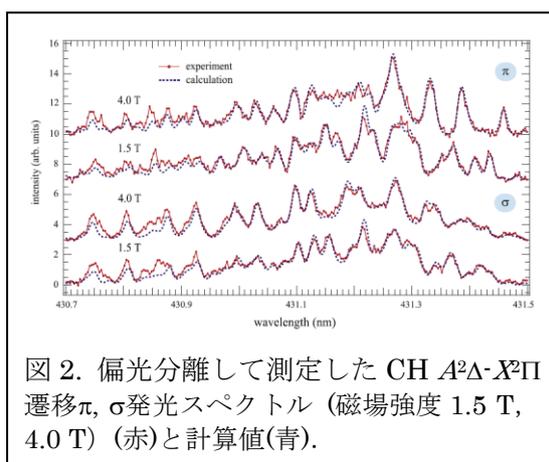


図 2. 偏光分離して測定した  $CH A^2\Delta-X^2\Pi$  遷移  $\pi$ ,  $\sigma$  発光スペクトル (磁場強度 1.5 T, 4.0 T) (赤) と計算値(青)。

### (2) 磁場閉じ込め装置における二原子分子発光スペクトルの局所計測

測定した  $CH$  分子  $A^2\Delta-X^2\Pi$ ,  $C_2$  分子  $d^3\Pi-a^3\Pi$  遷移発光スペクトルに対して、開発した計算コードを利用し磁場強度特定を試

みたが、光量を得るためにスリット幅を広げたことで波長分解能が不足し、有意な結果を得るまでには至らなかった。課題(1)の計算結果から、上記スペクトルのゼーマン分裂は原理的に磁場閉じ込め装置内でも観測可能であると考えられるため、今後、波長分解能を向上させた測定を試みることを検討している。

### (3) 水素同位体原子を含む二原子分子の振動回転分子定数評価

当初目的以外の副次的な成果として、水素同位体原子を含む二原子分子の振動回転分子定数評価を行った。核融合装置では重水素、トリチウムの利用により水素同位体原子を含んだ二原子分子が生じるが、これらの分子の多くに関しては精度の良い分子定数データが存在せずデータ整備が課題となっている。そこで課題(1)で開発した計算コードによる計算スペクトルと測定スペクトルとを比較することで振動回転分子定数の評価を行った。

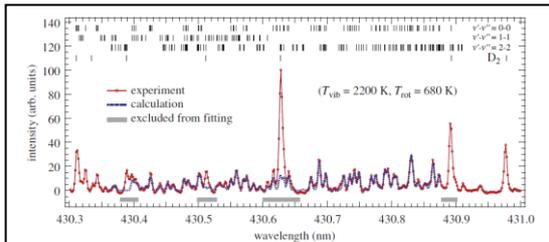


図 3. CD  $A^2\Delta-X^2\Pi$  遷移発光スペクトルの測定値(赤)と計算値(青).

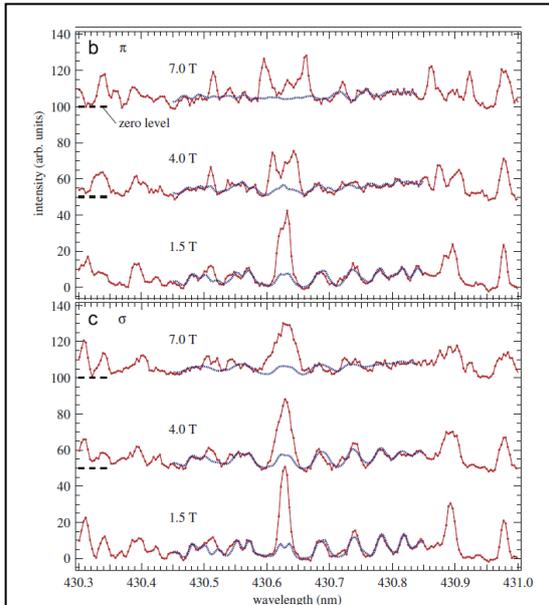


図 4. 偏光分離して測定した CD  $A^2\Delta-X^2\Pi$  遷移  $\pi$ ,  $\sigma$  発光スペクトル (磁場強度 1.5 T, 4.0 T, 7.0 T) (赤)と計算値(青).

重水素化メタンガスを封入したグロー放電管を用いて磁場を印加しない条件下で CD 分子  $A^2\Delta-X^2\Pi$  遷移発光スペクトルを高分解能可視分光器 (焦点距離 1.5 m, 回折格子 2400 本, 2 回分散) により測定した。測定の波長分解能 (装置関数の半値全幅) は 3.7 pm である。測定したスペクトルを図 3 に示す。図中赤い点および線が実測値, 青い点線が計算結果を示す。図上部に記載した線は計算結果にもとづく振動回転遷移の波長を示す。 $A^2\Delta$  準位の振動回転温度, 振動回転分子定数をパラメータとして, 実験スペクトルに対して計算スペクトルをフィッティングすることで振動回転分子定数を求めた。観測した波長領域では CD スペクトルに  $D_2$  スペクトルが重畳しているため重畳領域 (図中の灰色四角で示す波長領域) を除外してフィッティングした。

求めた分子定数の妥当性を確認するために, 図 1 の実験系を用いて 1.5 T, 4.0 T, 7.0 T の磁場を印加した条件下でのスペクトルを偏光分離して測定し, 求めた分子定数を利用した計算結果と比較した。結果を図 4 に示す。4.0 T 以下の場合に両者が良く一致することを確認した。7.0 T の場合は測定スペクトルの S/N 比が十分ではなく一致, 不一致を判断することができなかった。本手法による分子定数測定は CD 以外の分子についても同様に行うことができるため, 今後実施することを検討している。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 4 件)

① T. Shikama, N. Naka, and M. Hasuo, Observation of the  $A^2\Delta-X^2\Pi$  transition spectra of CD molecules under a magnetic field relevant to fusion plasmas, *J. Quant. Spec. Rad. Trans.*, 査読有, **113**, 2012, 294-298, doi:10.1016/j.jqsrt.2011.11.012.

② T. Shikama, K. Fujii, S. Kado, H. Zushi, M. Sakamoto, A. Iwamae, M. Goto, S. Morita, and M. Hasuo, Plasma polarization spectroscopy of atomic and molecular emissions from magnetically confined plasmas, *Can. J. Phys.*, 査読有, **89**, 2011, 495-501, doi:10.1139/P10-118.

③ T. Shikama and M. Hasuo, Observation of the polarization resolved  $A^2\Delta-X^2\Pi$  transition spectra of CH under a strong magnetic field relevant to a fusion plasma,

*J. Nucl. Mater.*, 査読有, **415**, 2011, S1159-S1161,  
doi:10.1016/j.jnucmat.2010.11.087.

④ T. Shikama, S. Kado, Y. Iida, and K. Suzuki, Construction of coronal models for  $H_2$   $d^3\Pi_u^- - a^3\Sigma_g^+$  and  $P^1\Pi_g^- - B^1\Sigma_u^+$  transitions for the evaluation of ro-vibrational temperatures, *Nucl. Instrum. Methods A*, 査読有, **623**, 2010, 744-746,  
doi:10.1016/j.nima.2010.02.135.

[学会発表] (計5件)

① 四竈泰一, 中暢子, 蓮尾昌裕, CD 分子 A-X 遷移発光スペクトルへの磁場効果の観測, 日本物理学会秋季大会, 2012 年 9 月, 横浜国立大学 (予定).

② 四竈泰一, 蓮尾昌裕, CD 分子 A-X 遷移発光スペクトルにおける磁場効果, 日本物理学会年会, 2011 年 3 月 28 日, 新潟大学.

③ 四竈泰一, 蓮尾昌裕, CH A-X 帯発光スペクトルへの磁場効果の観測, 日本物理学会秋季大会, 2010 年 9 月 25 日, 大阪府立大学.

④ T. Shikama, K. Fujii, S. Kado, H. Zushi, M. Sakamoto, A. Iwamae, M. Goto, S. Morita, and M. Hasuo, Plasma polarization spectroscopy of atomic and molecular emissions from magnetically confined plasmas, 10<sup>th</sup> International colloquium on atomic spectra and oscillator strengths for astrophysical and laboratory plasmas, 2011, August 4, 2010, San Francisco, CA, USA.

⑤ T. Shikama and M. Hasuo, Observation of a magnetic field effect on CH A2D-X2P band spectra for the local diagnostics of hydrocarbon molecules in a magnetically confined plasma, 19<sup>th</sup> International conference on plasma surface interactions in controlled fusion device, May 25, 2010, San Diego, CA, USA.

[その他]

ホームページ等

<http://oel.me.kyoto-u.ac.jp>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

四竈 泰一 (SHIKAMA TAIICHI)

京都大学・大学院工学研究科・講師

研究者番号：80456152

### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：