



解説

部分電離イオンのオパシティー計算

山田 章一

(大阪大学レーザー核融合研究センター)

Calculations of Opacity for Partially Ionized Atoms

YAMADA Shoichi

Institute of Laser Engineering (ILE), Osaka University, Suita 565-0871, Japan

(Received 28 November 2001)

Abstract

In this short article, significant issues related to the calculations of the opacity of partially ionized atoms are explained in detail. We will mainly pay attention to the treatment of the detailed level structure of low and intermediate Z atoms, based on which the authors are currently developing the opacity code. Some recent advanced treatments of high Z atoms as well as major projects in the world are also briefly reviewed.

Keywords:

atomic opacity, detailed configuration accounting, parametric potential, collisional radiative equilibrium

1. はじめに

筆者の専門である宇宙物理の分野では、ニュートリノや重力波で天体現象を観測しようという時代になりつつある。とはいっても、最も詳細な情報をもたらしてくれるのは電磁波であることに異を唱える人はいないだろう。この電磁波を放出している主たる物質は原子である。より正確に言えば、原子が供給する電子の異なる状態間の電磁気力による遷移にともない、電磁波が放出されたり吸収されたりする。当然、この過程は、原子がどういう状態にあるか、すなわちどれぐらいイオン化しているか、どういった励起状態にあるかなどに影響される。逆にそれを通して、電磁場を出しているプラズマの状態が知れるわけである。こうした、いわゆるプラズマ分光の研究は原子物理学の歴史と軌を一にしている。

一方、プラズマにおける原子過程は、こうしたプラズマの状態のプロブとして以外にも重要な役割を果たしている。実験室のプラズマにしても宇宙プラズマにして

も、通常我々が興味があるのは静止した状態ではなくダイナミックに運動した状態である。プラズマの運動にともない温度が不均一になると、一般に熱エネルギーの輸送が起こり、これがダイナミクス自体に影響を与える。このエネルギーの輸送に最も重要な役割を果たしているものの一つが輻射であり、それがどのように輸送されるかを決定しているのが原子過程であり、本解説記事の主題であるオパシティーである。熱伝導があまり重要にならない天体プラズマの場合、ほぼ常に輻射が最も重要なエネルギー輸送手段である。ケフェウス型変光星の光度と変光周期の関係や新星の光度時間変化などは、オパシティーにダイナミクスが大きく左右される天体プラズマの最もよく知られた例である。また、筆者の所属する大阪大学レーザー核融合研究センター(阪大レーザー研)が取り組んでいる慣性核融合においても、そのターゲットデザインなどにおいて原子のオパシティーが重要なインプットの一つになる。

author's e-mail: syamada@ile.osaka-u.ac.jp

Fig. 1 に示したように、オパシティーの計算はいくつかの独立なステップからなっている。まず最初のステップでは、互いに遷移し合う2つの原子状態に対して、その電子の波動関数を決定する。むしろここには、原子番号や目的に応じた近似が入ってくることになる。次にこの波動関数を用いて、双極子行列要素を計算し、電気双極子近似のもとでの線強度 (line strength) を求める。この解説では、オパシティーの計算が主眼なので、電子衝突励起反応率などの計算については触れないが、電子の波動関数が与えられれば原理的にはこうした反応率も同様に計算できる。こうして各遷移ごとの線強度が与えられ、次にそうした遷移の初期状態としての原子のイオン化状態と励起状態の分布を与えられた密度や温度に対して求めることが必要になる。プラズマのダイナミカルな現象に興味がある場合であっても、多くの場合原子過程の反応の方が十分速く起こり、原子状態の分布はある種の定常状態になっている。もし、密度が衝突励起、脱励起を頻繁に起こすぐらい高ければ、いわゆる局所熱平衡分布 (LTE) が実現し、各原子状態のエネルギーと統計重率で決まるボルツマン分布になる。一方、密度が低く輻射脱励起の方が衝突脱励起よりも頻繁に起こる場合はいわゆるコロナ平衡になり、その中間状態は衝突輻射平衡とよばれる。いずれにせよ、LTE の場合を除いていわゆるレート方程式を上で求めた反応率を用いて解き、定常解を求めることが要求される。原子状態の分布の時間変化に興味がある場合や、輻射励起が状態分布に重要な役割を持つ場合はここでは扱わない。

こうして、決まった状態分布にしたがって先に求めた線強度を重ね合わせれば、オパシティーが求まる。必要に応じて波長に関する適当な平均も行う。これらに際して重要なのが、スペクトル線内での強度分布つまり線輪郭 (line profile) である。オパシティーの計算では、最も不定性の大きいものの一つであるが、これを何らかの近似のもとで考慮した後、上の重ねあわせを行えば、オパシティーの計算は終りである。結果は、各密度、温度、原子ごとに波長の関数としてデータに残していき、のちほど輻射流体計算などにインプットとして用いられる。

筆者らは現在阪大レーザー研において、爆縮統合コードの開発をプロジェクトとして進めている。これはレーザー慣性核融合の物理を大規模シミュレーションにより研究し、実験をサポートするために行われているもので、名前の通り流体力学コード、輻射輸送コード、核反応コードなどの要素コードが有機的に組み合わせられたものである。筆者が担当している原子オパシティー、状態

1. Calculations of the Atomic Structures.

- constrain the state vector space.
 - single configuration, configuration interaction, close coupling, etc.
- determine the orbital wave functions.
 - self-consistent method, parametric potential method, etc.
- sort the allowed terms and levels according to the angular momenta.
 - LS coupling, jj coupling, etc.
- diagonalize the Hamiltonian in the constrained state vector space.
 - recouplings with 6j symbols.
 - calculations of matrix elements of irreducible tensor operators with the coefficients of fractional parentage (CFP)
 - calculations of Slater integrals.

2. Calculations of the Radiative Transition Rates.

- the electric dipole approximation.
- calculations of the line strengths on the basis of practical convenience.
- unitary transformations of the line strengths.

3. Calculations of the Population.

- solve the rate equations for the level population.
 - local thermal equilibrium (LTE), collisional radiative equilibrium (CRE), etc.

4. Calculations of the Opacity.

- calculations of the line profiles.
 - Lorentzian profile due to reactions, Doppler broadening, Stark broadening, etc.
- superimpose all the lines.
- calculations of the Rosseland mean opacity, the Planck mean opacity, etc.

Fig. 1 Steps for opacity calculations.

方程式コードもその重要な要素コードの一つである。この解説では、筆者らが用いている近似法に準拠しつつ、上で大まかに述べた各ステップに関して、以下順をおって説明していくことにする。

2. 原子のレベル構造

2.1 コンフィギュレーションとポテンシャル

原子オパシティーの計算でもっとも大きな比重を占めているのが、原子の構造計算であるのはいままでもない。ここで原子の構造とっているのは、部分電離したイオンに残った束縛電子の波動関数のことをさしていると考えればよい。以下の議論では、簡単のため非相対論的電子の場合を例にとって話を進めるが、相対論的な場合への一般化の仕方は明白であろう。

電子の状態を記述するハミルトニアンは (以下 $\hbar = c = 1$ の単位系を用いる),

$$H = - \sum_i \left[\frac{A_i}{2m} + \frac{Ze^2}{|r_i|} \right] + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_i \left[-\frac{e}{2m^2 r_i} \frac{dV(r_i)}{dr_i} \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i \right] \quad (1)$$

である。右辺最後の項は、スピンと軌道の相互作用を表している。右辺第三項は束縛電子間のクーロン相互作用である。この項以外は1粒子演算子であるから、この項がなければ全波動関数は各電子の波動関数の積の形に変数分離ができ問題が簡単化する。逆にこの項があることで、電子が2つ以上ある問題の解析的扱いは困難になる。

こうした多電子系の固有状態の近似計算に対する基本的なアイデアは、解を記述する波動関数の空間を制限することである。ここでよく用いられる便利な概念はコンフィギュレーション(configuration)である。これは、原子の電子状態を主量子数と軌道角運動量で指定される軌道への電子の占拠数で近似するものである。たとえば、炭素の基底状態は $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ というコンフィギュレーションを持つといった時、1s軌道に2個、2s軌道に2個、2p軌道に2個それぞれ電子がいる状態であることを指し、それが1つのコンフィギュレーションである。上述のように、これはあくまで近似である。実際の全波動関数は、各軌道の波動関数の積にはならない。しかし、これは周期律表の存在からもわかるように、それほど悪くない近似である。したがって、波動関数の空間を制限する場合の最も単純な選択は、通常1つのコンフィギュレーションで張られる部分空間のみを取ってくることである。宇宙物理の分野で有名なOPAL[1,2]や筆者等が現在採用している近似法もこれである。軌道角運動量 l をもつ軌道は、異なる $2l+1$ 個の磁気量子数とスピンの向き2通りの合わせて $4l+2$ 個の状態を持っているので、1つのコンフィギュレーションには実際多くの状態が含まれている。上であげた炭素の基底状態の例では、 $6C_2$ 個の状態があることになる。電子間のクーロン相互作用やスピンと軌道の相互作用は、一般に異なるコンフィギュレーションを混合するが、この近似ではそれを無視するわけである。

近似の精度を上げたければ、考慮するコンフィギュレーションの数を増やすのが最も単純である。これは通常配置間相互作用(configuration interaction)の方法といわれるもので、単一のコンフィギュレーションでは考慮されていない電子間の相関を一部取り入れていることになる。Klapischらにより開発され、有料で入手できるHULLAC

コード[3]もこの方法によっている。また、Iron Project[4,5]で用いられている緊密結合(close coupling)の方法では、これをさらにすすめ全波動関数をターゲット波動関数 ψ_i と遷移をする電子の波動関数(チャンネル波動関数) θ_i の積に分け、

$$\Psi = A \sum_i \psi_i \theta_i + \sum_j C_j \Phi_j \quad (2)$$

のように書き、ターゲット波動関数 ψ_i 、全波動関数の短距離相関 Φ_j 双方にコンフィギュレーション相互作用を考慮した波動関数を用いている。一般に考慮するコンフィギュレーションが多い程良い近似であり、あらゆるコンフィギュレーションを考慮に入れた極限では解は厳密なものとなる。

単一のコンフィギュレーションのみを考えるにしろ、配置間相互作用を考慮に入れるにしろ、コンフィギュレーションを与えるための各軌道の波動関数をどう与えるかが次に考えねばならないことになる。原子は通常良い近似で球対称であるから、各軌道の波動関数のうち、角度依存性の部分は球面調和関数で与えられるとしてよい。実際、各軌道に主量子数と軌道角運動量を付与している段階でこのことを暗に仮定しているのである。したがって、動径部分の波動関数を決めることが残された仕事となる。よく取られるのが自己無頓着近似である。これは、各軌道はある中心力ポテンシャルで与えられるが、一方そのポテンシャルはそうして決まった電子の軌道とコンフィギュレーションとによって与えられるというものである。よく知られたHartree-Fock近似やその複数コンフィギュレーションへの拡張(multi-configuration Hartree-Fock method)などが代表例である。こうした方法では、自己無頓着性を得るために、一般に収束するまで反復計算が要求される。

OPAL[1], HULLAC[3]や筆者等が用いているパラメトリックポテンシャルの方法は、非収束問題を起こしやういこの反復計算を避けて波動関数を近似的に得ようとするものである。そこでは、コンフィギュレーションに応じて選ばれるパラメータをいくつか含んだ解析的な球対称ポテンシャルが、上述の自己無頓着に決まるポテンシャルの代わりに用いられる。むしろはこうして得られる波動関数の善し悪しは、採用される近似ポテンシャルのできで決まる。通常こうしたポテンシャルは、物理的考察といくつかの実験データへのフィッティングにより与えられる。OPAL[1]を例にとると、そのパラメトリックポテンシャルは

$$V(r) = \frac{e}{r} \left[(Z-\nu) + \sum_{n=1}^{n^*} N_n e^{-\alpha_n r} \right] \quad (3)$$

で与えられる。ここで、和はすべてのシェルすなわち同じ主量子数を持つ軌道にわたってとる。スクリーン長と解釈されるパラメーター α_n は

$$a_n = (\xi_n + 1) \sum_{j=0}^3 \frac{a_j(\nu_n)}{\xi_n^j} \quad (4)$$

a_j : fitting parameters

という、物理的意味はつけにくい経験則でフィットされている。ただし、 $\nu_n = \sum_{n=1}^n N_n$ (N_n : n 番目のシェルにいる電子数)、 $\nu = \sum_{n=1}^{n^*} N_n$ (n^* : n の最大値)、 $\xi_n = Z - \nu_n$ である。OPAL では、いろいろな基底状態イオンのイオン化エネルギーを 1%程度でフィットするように、このパラメータは決められている。パラメトリックポテンシャルの方法は人為的な感が否めないが、一方いろいろなポテンシャルを試せることやポテンシャルへの密度の効果などが取り込みやすいという利点もある。

重要なことは、各軌道を決める波動関数に何が採用されていても、あらゆるコンフィギュレーションさえ考慮されていれば結果は厳密であるということである。一方、実際の計算では有限のコンフィギュレーション数で近似をしようとするので、どれだけ現実に近い波動関数選ばれているか決定的に重要となるのである。相対論的效果は、 $Z > 10$ ぐらいからすでに出てくるが、一般にこれは Schrödinger 方程式の代わりに Dirac 方程式を解くことにより自然に考慮される。特に、スピンと軌道相互作用がこの場合自然に取り込まれる。このためコンフィギュレーションを決める軌道が、主量子数と軌道角運動量だけでなく、スピンと合成した全角運動量にもよるようになるため(すなわち jj coupling が自然な基底を与える)、若干軌道の扱いが複雑になる。OPAL などでは折衷案として、スピン平均をとった Dirac 方程式を解き、主量子数と軌道角運動量のみによる軌道でコンフィギュレーションを規定し、スピンと軌道相互作用を別途あとから付け加えるという手法をとっている。こうすることにより、相対論的運動学効果は取り込みつつ、より単純な非相対論的定式化を用いることができるようになる。以下の説明は、この非相対論的枠組みで行う。

2.2 角運動量と Wigner-Racah 代数

電子はフェルミ粒子であるから、その全波動関数は粒子の入れ替えに対して反対称である。コンフィギュレー

ションが 1 つ与えられたとき、電子の波動関数はいわゆる Slater 行列式で

$$\Psi = \frac{1}{N^{1/2}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \varphi_1(\mathbf{r}_2) & \varphi_1(\mathbf{r}_3) & \cdots \\ \varphi_2(\mathbf{r}_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_2) & \varphi_2(\mathbf{r}_3) & \cdots \\ \varphi_3(\mathbf{r}_1) & \varphi_3(\mathbf{r}_2) & \varphi_3(\mathbf{r}_3) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \quad (5)$$

と表される。ここで、各軌道に対応する波動関数は動径部分、角度部分、スピン部分の積で表されている。

$$\varphi_i(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{r} P_{n_i, l_i}(r_i) \cdot Y_{l_i, m_i}(\theta_i, \phi_i) \cdot \sigma_{m_i}(\mathbf{s}_i) \quad (6)$$

この波動関数が張る空間にハミルトニアン(1)を制限し、そこで固有値固有ベクトルを求めれば、シングルコンフィギュレーションの近似で原子構造が求まったことになる。このとき、与えられたコンフィギュレーションに含まれる 2 つの状態、ハミルトニアンの行列要素を計算することが必要になるが、これは一般に三次元空間の積分で与えられる。コンピュータの発達により、これを完全に数値的に行うことも可能かも知れないが、通常は角度とスピンの部分を角運動量の合成計算を応用して解析的に行ってしまい、動径部分だけの積分を数値的にやるようにする。

ポテンシャルが球対称の時、より正確にはハミルトニアンが回転に対して不変なとき、固有状態は決まった全角運動量を持つ。したがって、与えられたコンフィギュレーションに含まれる状態を角運動量によってソートしておくことが重要である。異なる全角運動量を持つ状態によるハミルトニアンの行列要素は 0 になることがあらかじめわかっているからである。同様なことは、次章で述べる遷移行列要素の計算に関しても成り立つ。これは、これらの演算子が、回転に対して一定の変換規則を満たす(より正確には既約な演算子になっている)からである。全角運動量を得るまでに、どういった順番で軌道角運動量やスピンを合成していくかをカップリングスキーム(coupling scheme)という。カップリングスキームを変えることは、状態空間を張る基底の取り方を変えることに対応し、2 つのカップリングスキームに対応する 2 つの基底は、互いにユニタリー変換で結ばれている。電子間のクーロン相互作用の計算には、軌道角運動量とスピンを別々に合成してから全角運動量を得るいわゆる LS coupling が便利だし、スピンと軌道の相互作用の計算には粒子ごとに軌道角運動量とスピンを合成して

いく jj coupling が容易である。実際の計算では、どちらがより重要かによりスキームを選ぶことになるが、通常どちらも必要になるため、一方から他方への変換を適宜行わねばならない。これを容易にするのが Wigner-Racah 代数である。

あるカップリングスキームから別のカップリングスキームへのは移行は、(1) 2つの角運動量の合成の順序を変える、(2) 3つの角運動量の合成で先に合成するペアを変える、という 2つの操作を適宜繰り返すことにより得られる。この変換を行うごとに、波動関数は

$$|j_2 j_1 JM\rangle = |j_1 j_2 JM\rangle \times (-1)^{j_1+j_2-J} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} |[(j_1, j_2), j_3] J' J'' JM\rangle &= \sum_{J'} \left[[(j_1 j_2) J', j_3] JM \right] \\ &\times (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \sqrt{(2J'+1)(2J'J''+1)} \times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J' \\ J_3 & J & J'' \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

という変換を受ける。ここで右辺に現れたシンボルが Racah の $6j$ 係数である。以下、式中に $6j$ 係数が出てきたときは、それを得るためにカップリングの変更を行ったからだと理解していただければよい。カップリングの変更には上のような操作の組み合わせをする代わりに、グラフィカルに変換係数を決める方法も考案されており、場合によってはそちらの方が効率が良くなる。

重要なことは、回転と粒子の入れ替えの操作が可換なため、波動関数の反対称化と角運動量による状態の分類が同時にできることである。問題が複雑になるのは、同じ軌道にいくつかの電子が入っている場合である。この時、これらの電子の動径部分の波動関数は共通なため、角度部分とスピン部分だけで反対称性を保証しなければならない。上で取り上げた炭素の基底状態の場合、 $2p$ 軌道にある 2 個の電子がその例である。LS coupling の場合、2 個の電子の全軌道角運動量は 0, 1, 2 の 3 通りで、全スピンは 0, 1 の 2 通りだが、これらあわせて 6 通りの組み合わせすべてが電子の波動関数として許されるわけではなく、反対称に矛盾しないのは $(L, S) = (0, 0), (2, 0), (1, 1)$ の 3 通りだけである。このように、LS coupling で状態を分類していく場合、同じ軌道にある電子に対して許される角運動量状態のみをとってきて、他の軌道とさらに合成していくことが必要になる。こうしたことは、すべて群論の表現論を用いて行われる。許容される状態の生成、電子の数が 1 つ異なる許容状態間を結び付ける係数 (Coefficient of Fractional Par-

entage, CFP と略す)、上述のカップリングスキームの変更や $6j$ 係数の計算などを行うコードは、Computational Physics Communications (CPC) などで入手できる。

以上の考察より、LS coupling に基づき状態を分類する場合、中間角運動量を含め、

$$\begin{aligned} &[(l_1^{w_1} \alpha_1 L_1 S_1, l_2^{w_2} \alpha_2 L_2 S_2) \mathcal{L}_2 \mathcal{S}_2, \\ &l_3^{w_3} \alpha_3 L_3 S_3] \mathcal{L}_3 \mathcal{S}_3, \dots \mathcal{L}_q \mathcal{S}_q \mathcal{J}_q \mathcal{M}_q \end{aligned} \quad (9)$$

に示したような角運動量量子数を各状態が持つことになる。こうした状態でハミルトニアン行列要素を計算すると、

$$\begin{aligned} \Delta H_{bb'} &= \sum_{j=1}^q \left[\sum_{l_j > 0} (f_k(l_j l_j)) F^k(l_j l_j) + (d_j) \xi_j \right] \\ &+ \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{i+1}^q \left[\sum_{l_j > 0} (f_k(l_i l_j)) F^k(l_i l_j) \right. \\ &\left. + \sum_k (g_k(l_i l_j)) G^k(l_i l_j) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

となる。詳細な導出は、Cowan の教科書[6]を参照されたい。ここで、 ΔH と書いたのは、コンフィギュレーションに含まれる全状態による平均値 (コンフィギュレーションアベレージエネルギーという) を差し引いたもののみをとったからである。つまり、1つのコンフィギュレーションからレベル構造を作り出す部分のみを取り出した形にしてあるわけである。OPAL では、コンフィギュレーションアベレージエネルギーは、パラメトリックポテンシャルに対して Dirac 方程式を解いて得られる、遷移に関与する電子の束縛エネルギーで与えられるという立場をとっている (そうなるようにポテンシャルを最適化してあるというほうが正しい)、この ΔH から得られる各レベルのエネルギーの平均からのずれだけを利用している。HULLAC など他の方法では、コンフィギュレーションアベレージエネルギーも含めたエネルギーを求めている。

式(10)で、 F^k や G^k と書いたものはいわゆる Slater 積分で、スピン軌道相互作用からくる ξ_j とあわせて、波動関数の動径部分に関する積分である。また、他の因子 $f_k(l_i l_j)$, $g_k(l_i l_j)$, d_j は、角度およびスピン部分の計算を Wigner-Racah 代数を用いて解析的に行ったことからくる項で、 $6j$ 係数や CFP など表されている。具体的な形は Cowan の教科書[6]を参照されたい。

以上で、原子の構造計算は終了である。比較的軽い原子で、スピンと軌道の相互作用が無視できる場合には、

異なる LS 値を持つ状態は結び付かないので、計算は若干容易になる。

3. 輻射遷移確率の計算

輻射による励起、脱励起過程の単位時間あたりの遷移確率 w_{fi} の計算は、量子力学の摂動理論により与えられる。これを、吸収放出される電磁波の波長が原子の典型的な大きさよりもずっと長いという近似（電気双極子近似）のもと評価すると、輻射の偏光方向に関する平均をとった遷移確率が

$$\langle w_{fi} \rangle = \frac{4\pi^2}{3} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 I(\omega_{fi}) \quad (11)$$

で与えられる。ここで、 ω_{fi} は初期状態と終状態のエネルギーの差、 $\langle f | \mathbf{d} | i \rangle$ は電子の電気双極子ベクトル $\mathbf{d} = e \sum_i \mathbf{r}_i$ を始状態と終状態の波動関数ではさんだ行列要素を表している。また、 $I(\omega_{fi})$ は輻射の強度である。この結果をよりなじみの深い Einstein の B 係数に直すと、

$$B_{if} = \frac{2\pi}{3} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \quad (12)$$

となる。これらの結果は、輻射による励起、脱励起過程の遷移確率の計算が初期状態と終状態とで、電子の電気双極子の行列要素の計算に帰着することを示している。したがって、あとは前章で求めた電子の波動関数を用いてこの行列要素を計算すればよいだけである。ちなみに、遷移の確率は通常、振動子強度 (oscillator strength) という、古典的調和振動子の吸収率 $B_{if}^{cl} = (\pi e^2)/(m_e \omega_{fi})$ で規格化した量で表すことが多い。式(12)より、これは

$$f_{if} = \frac{B_{if}}{B_{if}^{cl}} = \frac{2m_e \omega_{fi}}{3e^2} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \quad (13)$$

で与えられる。

ここから先は、前章で行った原子構造を求める際のハミルトニアン行列要素計算と基本的に同じである。電気双極子が既約なベクトル演算子であることを用いると、行列要素計算に出てくる積分のうち角度部分とスピンの和は解析的に行うことができる。必要に応じてカップリングスキームを変えながら、2つのコンフィギュレーション間の遷移

$$(l_1^{w_1} \dots l_i^n \dots l_j^{k-1} \dots l_q^{w_q}) \rightarrow (l_1^{w_1} \dots l_i^{n-1} \dots l_j^k \dots l_q^{w_q}) \quad (14)$$

に関してこの計算を行うと、最終的に

$$f_{if} = \frac{2m_e \omega_{fi}}{3} \frac{S_{\gamma\gamma'}}{2J'+1} \quad (15)$$

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \langle \gamma J' | \sum_i \mathbf{r}_i | \gamma J' \rangle = Y_{\gamma\beta}^T (S_{LS}^{1/2})_{\beta\beta'} Y_{\beta'\gamma'} \quad (16)$$

$$S_{LS}^{1/2} = \langle \Psi_b | \sum_i \mathbf{r}_i | \Psi_{b'} \rangle = D_1 \cdot D_2 \dots D_7 \cdot \langle l_i | \mathbf{r} | l_j \rangle \quad (17)$$

を得る。ここで、 $S_{\gamma\gamma'}^{1/2}$ を線強度 (line strength) という。 $|\gamma J'\rangle$, $|\gamma J\rangle$ はそれぞれ、初期状態、終状態のコンフィギュレーションに含まれるレベルである。 $\langle \dots | \dots \rangle$ はいわゆる reduced matrix element を表す。行列 Y は、最初に用いた LS coupling による基底と、実際の固有状態の間のユニタリー変換を与えており、これは前章で求まっているものである。式(16)は、行列要素の計算は LS coupling による基底で計算し、あとからユニタリー変換すればよいことを示している。式(17)は、LS coupling による基底で計算した結果を一般的な形で与えている。ここに出てくる D_1 から D_7 の因子は、角運動量のカップリングスキームの変換にともないでてくるもので、 $6j$ 係数や CFP で与えられるものである。具体的な形は、前出の Cowan の教科書[6]を参照されたい。

上で見たシングルコンフィギュレーション間の遷移では、電子の占拠数が一つの軌道ペア（上の例では l_i と l_j ）にのみ変化がある場合（一電子遷移という）以外、行列要素は 0 になる。複数のコンフィギュレーションの相互作用を考慮してある場合は、コンフィギュレーションの混合を通して多電子遷移も一部取り込まれる。以上の結果は、束縛状態間の遷移だけでなく、イオン化率の計算にも使うことができる。

4. レベルの分布とオパシティー計算

前章までで、個別のレベル間の遷移確率の計算は終了した。部分電離プラズマのオパシティーを計算するには、次にこうしたレベルがどういった割合で存在するかを知らねばならない。完全に非平衡な時間発展を追うには、与えられた初期のレベル分布から、上で求めた反応率を用いて、レート方程式

$$\frac{dN_n}{dt} = -N_n \sum_{n'} R_{n-n'} + \sum_{n'} R_{n'-n} N_{n'} \quad (18)$$

を解いて、各時刻でのレベル分布を求め、それをもとにオパシティーの計算をしなくてはならない。式(18)で、 N_n はレベル“ n ”の占拠数で、右辺第一項が、輻射の放出

吸収や非束縛電子との衝突などでレベル“ n ”が減る効果を表し、第二項は同様の過程で他のレベルからレベル“ n ”に移ってくる分を表している。

始めにも述べたように、実際に興味があるのは、プラズマのダイナミカルな発展の時間に比べて原子過程の起こる時間の方が十分に短い場合であることが多い。この場合レベルの分布は、各時間のプラズマの密度・温度に対応する何らかの平衡状態に達していると考えられる。衝突過程が十分頻繁に起こる場合、レベル分布はいわゆる局所熱平衡分布(LTE)になる。これは、式(18)の左辺が0で、右辺で衝突による寄与が支配的なときの定常解である。この場合は、実際にはこの式を解く必要はなく、各レベルの分布はエネルギー E_n と統計重率 g_n で $N_n \propto g_n \exp(-E_n/kT)$ となるように決まる。OPALやOpacity Projectのように、天体プラズマへの応用を目的としたオパシティーの計算では、LTEが仮定されている。

一方、密度の低いプラズマで輻射脱励起が重要な寄与をする場合に実現するのが、いわゆる衝突輻射平衡(Collisional Radiative Equilibrium, CREと略す)である。この場合は、少なくとも輻射脱励起と衝突励起、脱励起を含んだ定常レート方程式を解いて、レベル分布を決めなくてはならない。この平衡状態はいわゆるコロナ平衡とLTEを橋渡す平衡状態である。

次の章で述べるように、重い原子では1つのコンフィギュレーションに含まれるレベルの数は膨大なものとなってくる。もし、1つのコンフィギュレーションに含まれるレベル間のエネルギー差が温度よりも小さければ、同一コンフィギュレーション内のレベル間の分布比は、単に統計重率だけで決まるはずである。今これを仮定すると、すべてのレベルの間のレート方程式を解くのではなく、各コンフィギュレーションの間のレート方程式のみを解けばよくなる。この粗視化によって、連立する方程式の数をぐっと減らすことができる。筆者らが進めているのもこの近似のもとでのオパシティー計算である。

オパシティー計算で最後にしなければいけないのは、各ラインに適切な幅をつけてレベル分布に応じた重ね合わせをすることである。輻射輸送計算では、振動数の関数としてのオパシティーのほか、振動数に関して平均をとった量も重要となる。特に重要なのがロスランド平均オパシティー(Rosseland mean opacity)である。重要なことは、オパシティーの小さいところがこの平均に重要な寄与をするということである。したがってラインの形状、特に裾野をどう表すかが重要な場合がよく起こる。

残念ながら、ライン形状を決める物理は必ずしも十分

にわかっていない。孤立した励起状態にあるイオンが自発的に輻射崩壊することによる自然幅に加え、プラズマ中では熱運動によるドップラー効果、非束縛電子による衝突の寄与、さらには他のイオンによる擾乱がいずれも重要な寄与を与える。特にあとの2つの寄与は、高い励起状態がプラズマ中でどこまで存在できるかという問題ともからんでおり、状態方程式の計算とも関連して重要な問題となっている。多くの場合、反応率によって決まる幅をもったローレンツ型の形状に、ドップラー効果によるガウス型の形状を畳み込んだいわゆるフォクト(Voigt)形状に、経験的な補正をラインの裾野に加えたものを用いているようである。

以上のようにして線輪郭が決まると、その面積が前章で得られた線強度に等しくなるように全体の規格化を決めれば、あるレベル間の遷移に対応するラインが一本最終的に求まったことになる。これを重要なレベルに対して繰り返し重ね合わせれば、振動数の関数としてのオパシティーが求まったことになる。必要ならば、振動数に関する平均もこれをもとに計算すればよい。

5. 高Z原子に対する近似手法

以上は、原子番号が40程度の原子までに適用できる手法である。これより重い原子になると、束縛電子の数が多くなり、1つのコンフィギュレーションに含まれるレベル数も増大する。ラインの数は2つのレベルの組み合わせであるから、おおざっぱに言ってレベル数の2乗で増大することになる。考慮しなければいけないコンフィギュレーションの数自体も温度が高くなれば増加するため、上で述べたような手続は大きな原子番号の原子に対しては実質的に不可能である。この章では、こうした重い原子からなる部分電離プラズマのオパシティー計算に関する、最近の進んだ取り扱いについて簡単に述べる。

基本的なアイデアは前章でも述べた粗視化である。原子番号が大きくなると1つの一電子遷移に対しても非常に多くのラインが現れ、それらはお互いに重なり合い始める。こうした場合、一つ一つのラインを計算してから重ね合わせるのではなく、この一電子遷移に対応するすべてのライン(transition arrayという)を合わせた形状全体を特徴づけることを考えたほうが効率がよい。また、実際に一つ一つのラインを区別することが困難なほどラインが重なっている場合、それは現実の測定にも即した近似といえる。

むしろこうしたことが可能になるのは、粗視化の対象となった詳細部分に対して適当な近似をとるからであ

る。たとえば、UTA (Unresolved Transition Array の略) の近似では[7]、一電子遷移内のレベル分布が各レベルの統計重率に比例すると仮定することにより、transition array の全強度、ラインエネルギーの平均、分散などが Slater 積分を含む解析的な形で評価できる。これをもとに、各 transition array をガウス型の強度分布で近似し、それをコンフィギュレーションの分布に応じて重ね合わせることで、オパシティーを得ることができる。このように、UTA ではコンフィギュレーションが詳細に計算する最小単位となる。詳細な計算方法については、原著論文[8]を参照されたい。

原子番号が大きくなり温度も高くなると、オパシティーに効いてくるコンフィギュレーション数がUTAでさえも手におえなくなるほど多くなり、一層の粗視化が必要になってくる。実際、いくつものUTA どうしさえもが重なりあってくるようになる。STA (Super Transition Array の略) の近似では[8]、いくつもの軌道をまとめたスーパーシェル (super shell) を定義し、それから得られるスーパーコンフィギュレーション (superconfiguration) を最小単位とする。たとえば、部分電離した金の場合を例にとると、

superconfigurations

$$\left\{ \begin{array}{cccc} \overbrace{(1s)^2} & \overbrace{(2s2p)^8} & \overbrace{(3s3p3d)^{18}} & \overbrace{(4s4p4d4f)^6} & \overbrace{(5s5p5d5f5g)^4} \\ (1s)^2 & (2s2p)^8 & (3s3p3d)^{18} & (4s4p4d4f)^6 & (5s5p5d5f5g)^4 \\ (1s)^2 & (2s2p)^8 & (3s3p3d)^{17} & (4s4p4d4f)^7 & \\ & & \vdots & & \end{array} \right.$$

のように、スーパーシェルとその占拠数を与えることによってスーパーコンフィギュレーションを決め、同一スーパーシェル内の電子の配分の仕方の違いで決まるコンフィギュレーションについてはひとまとめにして扱うことを考える。こうすることにより、考慮すべきコンフィギュレーションの数を制限する指針を与えるとともに、ラインもスーパーコンフィギュレーション単位でまとめて考えることにより計算量を減らすことを可能にする。たとえば、前章で述べたレート方程式も、スーパーコンフィギュレーションの分布を解くことにするわけである。

上の例では、スーパーシェルは同じ主量子数を持った通常のシェルに一致するように取ったが、必ずしも常にこうする必要はない。実際、比較的近いエネルギーを持った軌道をまとめてスーパーシェルをつくるというお

おざっぱな指導原理の他には特に選び方に規則はなく、むしろ結果が収束するまでスーパーシェルを細かく分割していくのが普通である。UTA の場合と異なり、こうして選んだスーパーコンフィギュレーション内での各コンフィギュレーションエネルギーの差は、温度に比べて無視できないのが通常である。したがって、コンフィギュレーションに関する平均を取る際には、統計重率のみでなく各コンフィギュレーションエネルギーに対するボルツマン因子 $\exp(-E_c/kT)$ も考慮しなくてはならない。もちろん、この平均が計算できるためには劇的な簡略化が必要である。これはコンフィギュレーションエネルギーが各シェルからのエネルギーの和と定数の補正で $E_c \sim \sum \epsilon_s q_s + E_0$ と近似できるとき可能である。このとき、スーパーコンフィギュレーション間の遷移 (これを super transition array という) の全強度、遷移のエネルギーの平均値、分散の計算がある種の分配関数の計算に帰着し、これが比較的単純な漸化式で求まるからである。詳細は末尾の論文[8]を参照されたい。オパシティーの計算が分配関数の計算に帰着したことは、STA の状態方程式計算への応用を示唆している。上記の補正值 E_0 や各コンフィギュレーション間の遷移のエネルギー等は、先に述べたUTA計算にもとづいて求められるが、この計算に際しては、同一スーパーコンフィギュレーション内のすべてのコンフィギュレーションに対して同一の近似ポテンシャルを仮定することにより、負荷の大きい Slater 積分の回数を減らしているのが STA を効率よい近似法にしているもう一つのカギである。

全軌道を1つのスーパーシェルにまとめてしまうと (つまりもっとも粗い近似をとると)、これはいわゆる平均原子モデルに帰着する。一方、全軌道を別々のスーパーシェルに取れば STA は UTA にほかならないので、STA はまさしく2つの近似を橋渡しするものであることがわかる。STA は現在、LTE にない高Zプラズマのオパシティーの計算などへの拡張が盛んに研究されており、今後のこの分野の一つの発展の方向と目されている [3]。

6. まとめ

本稿では、部分電離イオンからなるプラズマのオパシティーを計算する一般的手順を解説してきた。また、すべてのレベルを詳細に扱うことができないような高Z原子に対する近似の最近の進展についても簡単に触れた。原子オパシティーは、プラズマの分光だけでなく、そのダイナミクスを流体力学シミュレーションなどで研

究する上でも欠くことのできないインプットである。その歴史は原子物理学それ自体と同じぐらい古く、今でも世界の多くのグループがコード開発を行っており、各コードの比較のためのワークショップが定期的に行われている[9]。

文中何度も引用したOPALオパシティーやOPACITY PROJECT (現在はIRON PROJECTに発展)などは、天体プラズマの研究にも広く応用されている。前者はパラメトリックポテンシャルを用いたシングルコンフィギュレーションでの計算、後者は緊密結合法を用いた計算である。計算法としては後者のほうがより精度が高いことはすでに述べたとおりであるが、皮肉なことにその計算の大変さからデータとして世に出るのが遅れ、先に提供されたOPALオパシティーの方が、脈動星の計算、太陽の内部構造や固有振動(日震学)の計算、新星の光度曲線の計算など宇宙物理での主だった応用分野において圧倒的によく使われているようである。スペースの都合で本稿では述べることができなかったが、両プロジェクトともオパシティーだけでなく状態方程式もテーブルとして提供している。日震学のように両者のわずかな差が議論できるような例外的なものを除くと、やはりOPALのものがOpacity Projectのもの(MHD状態方程式)より普及している。Opacity Projectは、ab initioな計算であるがゆえに密度の効果などを取り込みにくく、適用範囲が低密度側だけであると正直に断っているのも、使い勝手が悪い印象を与える一因のようである。しかし、上述の使用頻度の大きな差は、ひとたびコードに組み込まれたものは容易に変更しがたいという使い手側の心理的問題が大きいようである。Opacity Projectに関しては、1993年以降Iron Projectになって、相対論的な定式化を用いるようになってとともに、衝突励起、脱励起反応率の計算も行い、LTEからCREへの拡張をめざしている。最近の進展に関しては、<http://www.usm.uni-muenchen.de/people/ip/iron-project.html>[5]を参照されたい。

最初に述べたように、筆者らは実験室プラズマおよび天体プラズマどちらのシミュレーションにも使えるような統合コードの開発を行っており、そのプロジェクトの一環として、本稿で説明したような方法でオパシティーコードの開発を行っている。本来これは、原子物理を専門とする研究者が行うのがベストであろうが、往々にしてそれを最も必要とするエンドユーザー自身が手がけねばならないことも多い。本稿が、そうした取り組みをされている方々や興味をもたれている方々の参考に少しでもなれば幸いである。

なお最後に、本稿を書くことを奨めてくださった阪大レーザー研高部教授、共同研究においてさまざまな助言をいただいている同Salzmann客員教授にこの場をお借りしてお礼を申し上げたい。また、東北大学の斎尾教授、東京大学の柴橋教授、慶応大学の加藤助教授には、宇宙物理におけるオパシティー、状態方程式データの普及状況等に関し、いろいろ情報をいただいた。ここに感謝して御礼申し上げる。本稿における間違い、誤解等については、筆者が全責任を負うのはいうまでもない。

参考文献

- [1] F.J. Rogers, B.G. Wilson and C.A. Iglesias, *Phys. Rev. A* **38**, 5007 (1988).
- [2] C.A. Iglesias and F.J. Rogers, *Astrophys. J.* **464**, 943 (1996).
- [3] M. Klapisch, A. Bar-Shalom, J. Oreg and D. Colombant, *Phys. Plasma* **8**, 1817 (2001).
- [4] M.J. Seaton, Yu Yan, D. Mihalas and Anil K. Pradhan, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **266**, 805 (1994).
- [5] Anil K. Pradhan, *Proceedings of the Symposium on Atomic Data Needs for X-Ray Astronomy*, NASA GSFC, Dec. 16-17, 1999. See also <http://www.usm.uni-muenchen.de/people/ip/iron-project.html>
- [6] R.D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California Press, Berkeley, 1981).
- [7] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch, *Phys. Rev. A* **20**, 2424 (1979).
- [8] A. Bar-Shalom, J. Oreg, W.H. Goldstein, D. Shvarts and A. Zigler, *Phys. Rev. A* **40**, 3183 (1989).
- [9] F.J.D. Serduke, E. Minguez, S.J. Davidson and C.A. Iglesias, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **65**, 527 (2000).

