

JAERI-Research

98-034



JP9808032



ナトリウム原子、炭素原子の内殻電離
X線発生法における超高速原子過程

1998年7月

森林健悟・佐々木明・田島俊樹

29-43

日本原子力研究所

Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の間合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1998

編集兼発行 日本原子力研究所

ナトリウム原子、炭素原子の内殻電離X線発生法における超高速原子過程

日本原子力研究所関西研究所光量子科学センター

森林 健悟・佐々木 明・田島 俊樹

(1998年6月9日受理)

高輝度短パルスX線によって誘起される超高速内殻電離過程について考察する。炭素原子とナトリウム原子をターゲット原子としてX線レーザー利得の評価を行ったところ、ターゲットとして用いる原子、その原子過程によってX線レーザーの波長、持続時間だけでなく、X線レーザー発振に必要なX線の輝度が決まることがわかった。さらに、そのX線の輝度は初期原子密度にも依存する。X線の輝度が大きくなると多重内殻電離が起こり、中空原子を形成する。この中空原子はX線レーザー源として十分に機能するだけでなく、高輝度X線観測にも有用である。さらに、X線観測とX線レーザーの新しい実験系の提案も行う。

Ultrafast Atomic Process in X-ray Emission by Using Inner-shell
Ionization Method for Sodium and Carbon Atoms

Kengo MORIBAYASHI, Akira SASAKI and Toshiki TAJIMA

Advanced Photon Research Center
Kansai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Mii-minami-cho, Neyagawa-shi, Osaka-fu

(Received June 9, 1998)

An ultrafast inner-shell ionization process with X-ray emission stimulated by high-intensity short-pulse X-ray is studied. Carbon and sodium atoms are treated as target matter. It is shown that atomic processes of the target determine the necessary X-ray intensity for X-ray laser emission as well as the features of X-ray laser such as wavelength and duration time. The intensity also depends on the density of initial atoms. Furthermore, we show that as the intensity of X-ray source becomes high, the multi-inner-shell ionization predominates, leading to the formation of hollow atoms. As the density of hollow atoms is increased by the pumping X-ray power, the emission of X-rays is not only of significance for high brightness X-ray measurement but also is good for X-ray lasing. New classes of experiments of pump X-ray probe and X-ray laser are suggested.

Keywords: Ultrafast Atomic Process, X-ray Laser, Femto-second Science, X-ray Measurement,
High-brightness Short -pulse X-ray, Hollow Atoms, Carbon Atom, Sodium Atom,
Photo-inner-shell-ionization

目 次

1. はじめに	1
2. 原子過程	3
3. 高速X線観測	7
4. X線レーザー	10
4.1 実験系の提案	10
4.2 内殻電離法	10
4.3 中空原子法	12
4.4 シミュレーション	14
5. まとめ	16
謝 辞	16
参考文献	17
付録1 (14)及び(15)式の導出	19
付録2 (21)及び(22)式の導出	20

Contents

1. Introduction	1
2. Atomic Processes	3
3. Fast X-ray Measurement	7
4. X-ray Laser	10
4.1 Proposal of A New Class of Experiment	10
4.2 Inner-shell Ionization Method	10
4.3 Hollow Atoms Method	12
4.4 Simulation	14
5. Conclusion	16
Acknowledgement	16
References	17
Appendix 1 Derivation of Equations (14) and (15)	19
Appendix 2 Derivation of Equations (21) and (22)	20

Figure captions

- Fig. 1* (a) Atomic processes in X-ray emission by (a) inner-shell ionization of carbon atoms, (b) hollow atoms of carbon atoms, and (c) hollow atoms of sodium atoms.
- Fig. 2* Total X-ray emission from multi-inner-shell excited states of sodium atoms.
- Fig. 3* A class of experimental of (a) X-ray measurement and (b) X-ray laser.
- Fig. 4* (a) Gain vs. time in X-ray by inner-shell ionization of solid density of carbon atoms; electron impact ionization processes are ignored. The intensities of X-ray are distinguished by types of lines. (b) The same as Fig. 4(a) for the case where the electron impact ionization processes are considered. (c) The same as Fig. 4(b) but for various density values of initial atom and X-ray intensity $I=10^{17}\text{W/cm}^2$. (d) The same as Fig. 4(b) but for sodium atoms. (e) The same as Fig. 4(d) but for sodium vapor.
- Fig. 5* Population vs. time (1/cm) for atomic state of carbon atom, inner-shell excited states, lower states, and autoionization states. The X-ray intensity values are (a) $I=10^{17}\text{W/cm}^2$, and (b) 10^{18}W/cm^2 .
- Fig. 6* (a) The same as Fig. 4(a) but for hollow atoms method. (b) The same as Fig. 6(a) but for sodium atoms.
- Fig. 7* (a) Population for upper states of hollow atoms of sodium atoms as a function of time. The X-ray intensity $I=10^{15}\text{W/cm}^2$. The figure expresses the number of 2p electrons. (b) The same as Fig. 7(a) but for $I=10^{17}\text{W/cm}^2$, (c) The same as Fig. 7(a) but for lower states. (d) The same as Fig. 7(b) but for lower states. (e) The same as Fig. 7(a) but for carbon atoms and $I=10^{18}\text{W/cm}^2$. The figures express the number of 1s electrons. (f) The same as Fig. 7(e) but for lower states.
- Fig. 8* Gain vs. time for time-dependent intensity of X-ray.

List of Tables

Table 1(a) Ionization energies E_{ION} (in the unit of eV) of 2p and 1s electron, and wavelength of the X-ray laser for the multi-inner-shell excited states of carbon atoms.

Table 1(b) Ionization energies E_{ION} (in the unit of eV) of 3s and 2p electron, and wavelength of the X-ray laser for the multi-inner-shell excited states of sodium atoms.

記号表

- I (W/cm²): X線の強度
 I_{PE} (W/cm²eV): 単位エネルギー当たりのX線強度
 ω (s): レーザー周期
 a_0 : レーザー場の規格化
 n_e (1/cm³): 電子密度
 n_{ePE} (1/cm³eV): 単位エネルギー当たりの電子密度
 λ_L (cm): レーザー波長
 Z_R (cm): レーザーの伝搬長
 σ^P (cm²): 光電離断面積
 σ^e (cm²): 電子衝突電離断面積
 R^P (1/s): 光電離レート
 R^e (1/s): 電子衝突電離レート
 A_r (1/s): 輻射遷移確率
 A_a (1/s): 自動イオン化率
 N_i (1/cm³): i 状態のポピュレーション
 N_{00} (1/cm³): 初期原子密度
 Γ (1/cm): 利得係数
 P (1/cm³): 反転分布ポピュレーション
 N_{up} (1/cm³): レーザー発振の上位のレベルのポピュレーション
 N_{low} (1/cm³): レーザー発振の下位のレベルのポピュレーション
 g_{up} : レーザー発振の上位のレベルの統計重率
 g_{low} : レーザー発振の下位のレベルの統計重率
 g : g_{low} と g_{up} の比
 f_{ul} : 振動子強度
 PN : X線放射量
 v_e (cm/s): 電子速度
 D_k (1/s): 状態 k の全減衰レート

1 はじめに

高出力短パルスレーザーの技術の進歩は、最近めざましいものがある。この進歩に伴って高輝度短パルス X 線放射の研究は非常に注目されている [1, 2, 3, 4, 5]。この論文では、高輝度短パルス X 線と原子との相互作用によって生じる原子過程、X 線生成過程、および、その X 線を用いた応用に関する研究報告を行う。この相互作用は超高速原子過程を起こし、この超高速原子過程によって大量の中空原子を生成すること、さらに、この中空原子が化学や生物学の超高速反応に対する高輝度 X 線測定に有用なだけでなく、X 線レーザー源としても十分に機能することを述べる。

最近の高強度短パルスレーザーが非常に進歩したために、レーザーで引き起こされる周期制動輻射に基づいた高調波発生のような新しい高強度 X 線源が考え出されている [1]。低 Z 物質への高強度レーザー照射による X 線生成過程のうちで、レーザー電磁場中での電子の加速によるラーモア輻射は内殻電離を含む超高速光学過程に非常に重要である。この高強度短パルスレーザーによって起こるラーモア輻射には次のような特徴がある。(1) 制動輻射の X 線放射スペクトル分布がフラットなのに対してラーモア X 線の場合は $\omega = a_0^3 \omega_0$ でピークを持つ。ここで ω_0 、 a_0 は、それぞれ、レーザー周期、規格化されたレーザーの電場強度 ($a_0 = \frac{eE_0}{m\omega_0 c}$) を表す。レーザー強度が相対論的領域 ($a_0 \geq 1$) になってはじめて X 線を放射し始める。(2) 制動輻射強度はレーザー強度の 1.5 のべき乗および電子密度の平方根の割合で増加する。一方、ラーモア X 線の放射強度 [5]

$$I_{LX}(\text{W}/\text{cm}^2) \sim 0.91 \times 10^{15} a_0^2 \frac{a_0^2 + 8}{2a_0^2 + 8} \left(\frac{1\mu\text{m}}{\lambda_L}\right)^2 \left(\frac{n_e}{10^{21}\text{cm}^{-3}}\right) Z_R, \quad (1)$$

はレーザー強度と電子密度に比例する。ここで、 n_e 、 λ_L 、 Z_R は、それぞれ、電子密度、レーザー波長、伝搬長を表す。(3) X 線出力はレーザーパルス長と比較してとても鋭く、レーザーのパルスと同じパルスの X 線出力が得られる。すなわち、フェムト秒のパルスのレーザーを照射するとフェムト秒のパルスの X 線が得られることになる。

このような性質をもつラーモア輻射は、この論文で取り上げる内殻電離の励起源に次の点で適している。(1) 内殻電離エネルギーとほぼ同じエネルギーを持つ X 線がもっとも吸収されやすく、ラーモア X 線ではこのエネルギーをピーク値にすることができる。(2) 励起 X 線源はほとんど一瞬に標的を内殻電離すると共に内殻電離しているときのみ存在するほうが良い。(内殻電離が遅いと他の原子過程の効果が大きくなり、効率が悪くなる。また、内殻励起状態から蛍光 X 線を放射しているときに X 線励起源が存在することは原子状態をみだすだけである)。すなわち、ラーモア X 線のような X 線の強度は強くパルスは短い方が向いている。例えば、30TW のレーザーを $3\mu\text{m} \times 10\mu\text{m}$ の標的に焦点を合わせ、 $a_0 = 6$ 、 $\lambda_L = 1\mu\text{m}$ 、 $n_e = 3 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}$ 、 $Z_R = 100\mu\text{m}$ とパラメータ値を決めると、ラーモア輻射による X 線強度は $10^{16}\text{W}/\text{cm}^2$ 、ピークエネルギー値は約 200eV である。高輝度 X 線源を得るためには、そのほかに高エネルギー電子と固体表面との相互作用、または、高 Z 物質への高強度レーザー照射による制動輻射が考えられる。これらのうちのいずれかの選択により、高輝度 X 線源は得られる。このような X 線源を適当な条件で、ある原子に照射することにより超高速内殻電離過程が生じる。

Guo らは GaAs の格子欠陥の実験の中で指摘している [11] ように、高強度短パルス X 線源を用いたポンプ X 線プローブ測定は化学、生化学、生物学、表面科学での超高速過程の観測を進展させるのに必要不可欠なものである。フェムト (10^{-15}) 秒分光においては、フェムト秒レーザー技術の発展にともなって開発されたポンププローブ測定法により、化学反応の変化過程をフェムト秒単位で測定することが可能になった

[12]。また、最近、目の光を認識する機構 [13, 14, 15] や光合成の機構 [16, 17, 18] などを観測するのに成功し、生体の機構を理解することができるようになった。ラーモア輻射から生じる高輝度 X 線フェムト秒パルスを観測手段に用いれば、このようなフェムト秒過程を理解するのに非常に役に立つことをこの論文で述べる。すなわち、この方法を用いれば、化学、生体でのフェムト秒過程における成分、状態、構造等を観測することが可能になる。電子数が少ないイオンが遅い速度で固体表面と相互作用したときに生じる中空原子からの X 線検出 [19, 20, 21] もまた、注目すべきトピックスの 1 つである。

原子の内殻電離過程は、短パルス X 線レーザー発振の有用な方法の 1 つであると考えられている [22, 23, 24, 25, 26, 27]。この方法は最初に Duguay と Rentzepis によって提唱された [22] が、今までのところこの方法の実験は、我々が知る限り存在しない。Kapteyn [24] と Moon ら [25] とはネオンまたは炭素原子に $10^{14} \sim 10^{15} \text{ W/cm}^2$ の強度で 50fs のパルス幅の X 線を照射して利得係数を計算した結果、約 10 cm^{-1} の値が算出された。これらのシミュレーションでは「水の窓」の領域の波長 (2.5~4nm) を達成するために $K\alpha$ 遷移を考慮し、さらに、二次電子衝突電離過程を避ける [23] ために低密度 (10^{20} cm^{-3} 以下) を取り扱った。この低密度では、当然の事ながら、利得係数の値も小さくなる。我々の前の論文 [27] では中空原子である、 $2p$ 電子のないナトリウム原子の $3s \rightarrow 2p$ 輻射遷移と $1s$ 電子のない炭素原子の $2p \rightarrow 1s$ 輻射遷移に対する二次電子効果を調べ、中空原子の形成がこの二次電子電離の効果を克服することが可能であること、また、ナトリウムのような低 Z 物質の $3s \rightarrow 2p$ 輻射遷移を用いると炭素原子の $2p \rightarrow 1s$ 輻射遷移と比較して弱い強度の X 線で十分な利得を得ることが可能であることを示した。これは、炭素原子の $1s$ 電子の光電離断面積と比較するとナトリウム原子の $2p$ 電子の光電離断面積のほうが非常に大きいためである。ナトリウム原子を取り上げた理由は、内殻励起状態、中空原子ともに自動イオン化状態ではないために、モデルが単純になり、シミュレーションが簡単になるばかりでなく、自動イオン化状態ではないことにより寿命が長くなり、初期実験に向いていると考えたからである。

ナトリウムの固体は金属であるので、原子内 $3s$ 電子は自由電子になっており、 $3s \rightarrow 2p$ 輻射遷移は起こらない。そこで、分子性結晶 NaH と固体の 6 分の 1 の密度をもつナトリウム蒸気 [28] の選択肢のうち、この論文では、分子性結晶 NaH を対象にする。分子性結晶 NaH 中にある $2p$ 電子の存在しないナトリウム原子の $3s$ 電子は孤立した原子状態として取り扱えられそうである。この理由としては、中空原子では、ナトリウム原子の $2p$ 電子によるスクリーニングがなくなるために、 $3s$ 電子はナトリウムの原子核から非常に強い引力 (クーロン力) をうけるため、水素原子の原子核の影響をほとんど受けないと考えられる。さらに、50-500eV の光エネルギーをもつ X 線源を使用するとき、水素原子の光電離断面積はナトリウムの内殻電離断面積よりも非常に小さい [29] ので、水素原子の存在は無視できそうである。この論文では、固体ナトリウム原子だけでなく、ナトリウム蒸気を取り扱う。蒸気を標的として用いると固体を用いた場合よりも X 線レーザーの利得係数は小さくなるが、長く発振することがわかる。すなわち、必要な X 線強度が初期原子密度に強く依存することを示す。さらに、 $1s$ 電子の内殻電離によって起こる炭素原子からの X 線レーザー過程も取り扱う。炭素原子とナトリウム原子の媒質の違いによる X 線レーザーの特性を示すと共に、この系を取り扱うのに原子過程を十分に知る必要があることを示す。

この論文の目的は (i) 新しい X 線レーザー源の設計案を提案すること、(ii) その X 線レーザー源が十分に機能することをシミュレーションで確かめること、(iii) 従来の内殻電離法に比べて利点を示すことである。二節では、内殻電離法、中空原子法の原子過程を説明する。まず、取り扱う原子過程の断面積、反応確率などの説明を行い、次に、それらを用いて炭素原子、ナトリウム原子、それぞれの系に対して、レート方程式を示し、最後に利得係数の定義式を記す。三節では、中空原子が高輝度短パルス X 線観測に重要であることを示し、実験系を提案する。四節では、X 線レーザーについて考察する。まず、新しい実験系を提案し、内殻電離法、中空原子法の特徴を示し、最後にシミュレーションを行い、その特徴の裏付けを行い、中空原子が X 線レーザー発振法として十分に機能し、優れた方法であることを示す。最後に五節でこの論文をまとめる。

2 原子過程

この節では、炭素原子、ナトリウム原子それぞれの場合の内殻励起状態、中空原子からの X 線レーザー発振の原子過程を説明する。考慮した原子過程は、光電離、電子衝突電離、輻射遷移、自動イオン化である。実際には、これらの過程の他に電子衝突励起、shake-up、shake-off など多くの過程が起こっており、精密に計算するには、これらの原子過程を考慮する必要がある。ここでは、モデル提唱が目的のために遅い過程を無視し、速い過程のみを取り扱った。このモデルは文献 [24, 25] のモデルの拡張である。エネルギーレベル、輻射遷移確率、自動イオン化率は、Cowan のコード [33, 34] を用いて求めた。Table 1 に初期原子、内殻励起状態、多重内殻励起状態の電離エネルギー、および、その状態からの放射される X 線の波長の値を示す。光電離断面積 (σ^P)、電子衝突電離断面積 (σ^e) はそれぞれ、文献 [29, 30]、[31, 32] に記述してある断面積や経験則を用いた。初期原子の光電離断面積は、文献 [29] で記述されている断面積を使い、イオンの光電離断面積は、この断面積を文献 [30] の経験則でスケールリングする。すなわち、

$$\sigma_i^P(E_i) = \sigma_0^P(E_0) \times \frac{n_i}{6} \left(\frac{E_i}{E_{i0}} \right)^2 \quad (2)$$

となる。ここで、 i はイオンの電子状態を表し、 E_0 と E_i との関係は

$$E_0 = E_i \times \frac{E_{00}}{E_{i0}} \quad (3)$$

と定義する。 E_i 、 E_{00} 、 E_{i0} は、それぞれ、光エネルギー、初期原子状態の電離する電子の閾値のエネルギー、イオンの電離する電子のしきい値のエネルギーを表し、 n_i は i 状態に存在する電離される電子の個数を表す。電子衝突電離断面積は、Lotz の公式 [31]

$$\sigma^e(E) = \sum_{i=1}^N a_i q_i \frac{\ln(E/P_i)}{EP_i} \{1 - b_i \exp[-c_i(E/P_i - 1)]\} \quad (4)$$

を用いる。ここで、 P_i は i 番目の殻にある電子の束縛エネルギーを表し、 a_i 、 b_i 、 c_i は文献 [31] 中の表の値を用いる。 q_i は i 番目の殻にある同種の電子数を表す。この論文では、断面積に対して上の経験則を用いたが、実験との比較を行うときには、これらの断面積も精密に求める必要があり、これは、今後の課題である。

Fig.1(a) は炭素原子の従来の内殻電離法による X 線生成における原子過程を示す。そのとき、レート方程式は

$$\dot{N}_0 = -(R_{01} + R_{03})N_0,$$

$$\begin{aligned}\dot{N}_1 &= R_{01}N_0 - (A_{r1} + A_{a1})N_1, \\ \dot{N}_3 &= R_{03}N_0 + A_{r1}N_1,\end{aligned}\quad (5)$$

となる。ここで、状態の番号 0、1、3 はそれぞれ、炭素原子、内殻電離状態、内殻励起状態のレーザー発振における下位のレベル ($1s^22s^22p$)、を表す。 $R_{i,j} = R_{i,j}^e + R_{i,j}^P$ であり、 R^P 、 R^e は、それぞれ、

$$R^P = \int_{E_{Iion}}^{\infty} \frac{I_{PE}\sigma^P}{h\nu_{IPE}} d(h\nu_{IPE}), \quad (6)$$

$$R^e = \int_{E_{eion}}^{\infty} v_e \sigma^e n_{ePE} dE_e, \quad (7)$$

と定義された光電離レート、電子衝突電離レートである。ここでは、次の中空原子法と整合性をもたせるために下位のレベルの番号を 2 ではなく、3 にした。 E_e は電子衝撃エネルギー、 E_{Iion} と E_{eion} は光電離、および、電子衝突電離のための電離エネルギーであり、 A_r 、 A_a 値は、輻射遷移確率、自動イオン化率である。 n_{ePE} 、 I_{PE} は、単位エネルギー当たりの電子密度、及び、X 線強度を表す。そのとき、全電子密度 n_e 、全 X 線強度 I は

$$n_e = \int_0^{\infty} n_{ePE}(E_e) dE_e \quad I = \int_0^{\infty} I_{PE}(E_I) dE_I \quad (8)$$

となる。

Fig.1(b) には炭素原子での中空原子からの X 線レーザー発振の原子過程が示されている。そのときのレート方程式は以下ようになる。

$$\begin{aligned}\dot{N}_0 &= -(R_{01} + D_0)N_0, \\ \dot{N}_1 &= R_{01}N_0 - (R_{12} + D_1)N_1, \\ \dot{N}_2 &= R_{12}N_1 - D_2N_2, \\ \dot{N}_3 &= R_{03}N_0 + A_{r1}N_1 - (R_{34} + D_3)N_3, \\ \dot{N}_4 &= R_{34}N_3 + A_{r2}N_2 - (R_{46} + D_4)N_4 + R_{14}N_1,\end{aligned}\quad (9)$$

状態の番号 0、1、3 はそれぞれ、(5) 式、および、Fig.1(a) の場合と同じであり、状態の番号 2、4、5、6 はそれぞれ、中空原子 ($2s^22p^2$)、中空原子の下位のレベル ($1s2s^22p$)、 $2s^22p$ 、 $1s2s^2$ 状態を表す。 Fig.1(b) か

らわかるように原子、イオンを消滅させる多くの過程が存在するが、そのうち、この論文では、内殻電離過程の役割を考察することが必要である。内殻電離過程の役割をわかりやすく説明するために内殻電離過程を除いた消滅させる過程の全レート D_i を用いる。(9) 式の場合、 D_i は

$$\begin{aligned} D_0 &= R_{0,3}, & D_1 &= A_{r1} + A_{a1} + R_{1,4}, \\ D_2 &= A_{r2} + A_{a2} + R_{2,6}, & D_3 &= R_{3,5}, \\ & & D_4 &= A_{r4} + A_{a4} + R_{4,7}, \end{aligned} \tag{10}$$

となる。ナトリウム原子の場合は、原子過程は Fig.1(c) のようになり、そのレート方程式は

$$\begin{aligned} \dot{N}_0 &= -(R_{0,1} + D_0)N_0, \\ \dot{N}_1 &= R_{0,1}N_0 - (R_{1,2} + D_1)N_1, \\ &\dots\dots\dots \\ &\dots\dots\dots \\ \dot{N}_{n-1} &= R_{n-2,n-1}N_{n-2} - (R_{n-1,n} + D_{n-1})N_{n-1}, \\ \dot{N}_n &= R_{n-1,n}N_{n-1} - D_n N_n, \\ \dot{N}_{n+1} &= R_{0,n+1}N_0 + A_{r1}N_1 - R_{n+1,n+2}N_{n+1}, \\ \dot{N}_{n+2} &= R_{1,n+2}N_1 + A_{r,2}N_2 + R_{n+1,n+2}N_{n+1} - R_{n+2,n+3}N_{n+2}, \\ &\dots\dots\dots \\ &\dots\dots\dots \\ \dot{N}_{2n} &= R_{n-1,2n}N_{n-1} + A_{r,n}N_n + R_{2n-1,2n}N_{2n-1} - R_{2n,2n+1}N_{2n} \end{aligned} \tag{11}$$

となる。この場合、 n は初期原子状態での $2p$ の電子数を表す。ナトリウム原子の場合は $n = 6$ である。状態の番号 $0, 1, \dots\dots n, n+1, \dots\dots 2n$ は、それぞれ、ナトリウム原子 ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$)、内殻励起状態 ($1s^2 2s^2 2p^5 3s$)、 $\dots\dots$ 、中空原子 ($1s^2 2s^2 3s$)、内殻励起状態の下位のレベル ($1s^2 2s^2 2p^6$)、 $\dots\dots$ 、中空原子の下位のレベル ($1s^2 2s^2 2p$) を表す。このとき、 D_i 値は

$$\begin{aligned} D_0 &= R_{0,n+1}, & D_1 &= A_{r1} + R_{1,n+2}, \\ &\dots\dots\dots \\ &\dots\dots\dots \\ D_n &= A_{rn} + R_{n,2n+1}, \\ D_{n+1} &= \dots\dots\dots = D_{2n} = 0 \end{aligned} \tag{12}$$

となる。ナトリウム原子の場合、前述のように自動イオン化状態は存在しないので、 D_i の中に A_a の項は存在しない。さらに、レーザー発振の下位のレベルは、イオンの基底状態であるので Fig.1(c) のモデルでは $2p$ 電子の電離過程以外の消滅過程は存在しない。

これらのレート方程式から上位のレベルと下位のレベルのポピュレーションを求め、次に与える式で利得係数 Γ を求める。

$$\Gamma = 2.7 \times 10^{-2} \phi_i \frac{P}{g} f_{ul}, \quad \text{with } P = N_{up} - gN_{low}, \quad \text{and } g = g_{low}/g_{up}, \quad (13)$$

ここで ϕ_i はドップラー、または、Voigt の上位のレベルのエネルギーの広がりを表す。Figs.1 のモデルでは上位のレベルの寿命に相当する。また、 $N_{up(low)}$, $g_{up(low)}$, f_{ul} はそれぞれ、上位(下位)のレベルの密度、統計重率、および、振動子強度を表す。

3 高速 X 線観測

高輝度短パルス X 線源は生体、表面、化学の X 線観測に新しい道を開くことが期待できる [11]。この節では、大量の中空原子がこのような X 線源照射によって生産され、この中空原子が X 線観測に影響を与えることをナトリウム原子を例にとって示す。電子の密度は原子、イオンが電離された密度で決まることから、電子衝突電離レートは時間に依存するものであるが、実際にはこの過程がこのモデルに効果的になるのは十分に飽和した後であるので、 D_k は時間に依存しないものと近似する。

この近似を用いると式 (9) と (11) の解析解は以下のように与えられる。

$$\begin{aligned}
 N_0 &= N_{00} e^{-(R_{0,1}+D_0)t}, & N_1 &= \frac{R_{0,1} N_{00}}{(R_{0,1}+D_0) - (R_{1,2}+D_1)} (e^{-(R_{1,2}+D_1)t} - e^{-(R_{0,1}+D_0)t}), \\
 & \dots \dots \dots \\
 N_k &= (C_0^k e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \sum_{l=1}^k C_l^k e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t}) N_{00} \quad \text{for } k \neq n \\
 & \dots \dots \dots \\
 N_n &= (C_0^n e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \sum_{l=1}^{n-1} C_l^n e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t} + C_n^n e^{-D_n t}) N_{00} \quad (14)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_0^0 &= 1, & C_l^k &= \prod_{j=l+1}^k \frac{R_{j-1,j}}{(R_{j,j+1}+D_j) - (R_{l,l+1}+D_l)} C_l^l \quad \text{for } l < k \\
 & & C_k^k &= - \sum_{l=0}^{k-1} C_l^k, \quad (15)
 \end{aligned}$$

ここで、 N_{00} は時間 $t=0$ のときの原子の密度を表している。この解の導出は付録 1 に記す。

通常使われている弱い強度の X 線をポンプ源として使用する場合 $R_{k,k+1} \ll D_k$ の条件が成り立つ。(14) 式で $1/D_k \ll t \ll 1/R_{k,k+1}$ の時間の間、(14) 式の中で

$$e^{-R_{k,k+1}t} \sim 1 \quad \text{and} \quad e^{-D_k t} \sim 0 \quad (16)$$

が成立している。すなわち、 N_k 値は

$$N_k \sim C_0^k N_{00} \quad \text{with } C_0^0 = 1, \quad C_0^k \sim \prod_{j=1}^k \frac{R_{j-1,j}}{D_j}. \quad (17)$$

と近似できる。ただし、 $D_0 \ll D_j$ を仮定した。 D_0 で大きな値になりうるのは電子衝突電離レートであり、これは、二次過程であり、100fs以下ではこの仮定は成り立つと考えられる。式(17)から多重内殻励起状態のポピュレーションは内殻電子の数が少なくなるにつれて減少することが分かる。

一方、 $R_{k,k+1}^P \gg D_k$ の条件が満たされる高輝度 X 線源を利用すると(16)式は

$$e^{-R_{k,k+1}^P t} \sim 0 \quad \text{and} \quad e^{-D_k t} \sim 1 \quad (18)$$

となる。ここでは、すべての原子過程の中で光内殻電離過程だけが非常に速いと仮定するために $R_{k,k+1}^P \gg R_{k,k+1}^e$ の条件も成り立つので、 $R_{k,k+1}$ ではなく、あえて、 $R_{k,k+1}^P$ を用いた。そのとき、 N_k 値は

$$\begin{aligned} N_k &\sim 0 \quad \text{for } k \neq n \\ N_n &\sim C_n^n N_{00} \sim N_{00}. \end{aligned} \quad (19)$$

となり、中空原子のみポピュレーションを持つことになる。

ナトリウム原子(イオン)の $1s^2 2s^2 2p^6 3s$, $1s^2 2s^2 2p^5 3s$, \dots , $1s^2 2s^2 3s$ 状態に対する 2p 電子と 3s 電子に対する電離エネルギー値、および、 $3s \rightarrow 2p$ の波長を Table 1(b)に示した。2p 電子の光吸収断面積は 2s と 3s 電子の光吸収断面積より非常に大きいので [29]、広範囲の光エネルギーを持つ軟 X 線が 2p 電子の内殻電離過程に伴っておもに吸収される。Table 1(b)からわかるように 30eV~190eV の間に 6 個の光吸収エネルギー値があり、蛍光 X 線の波長に対して 10nm~39nm の波長の上に 6 個の波長が存在する。このことから、高輝度 X 線を使用すると、これらすべての光吸収エネルギーと蛍光 X 線を考慮しなければならなくなることがわかる。この解析は、低 Z 物質中の高 Z 物質成分や結晶、生体での分子性を X 線測定するときに適用できる。これらの研究では精度良い測定をするために、高輝度 X 線源が使用される。中空原子は、軟 X 線の吸収がほとんどないので、高輝度 X 線を用いた蛍光 X 線測定が厚い物質にも適用可能かもしれない(この方法は現在は、内殻励起、電離過程を通して光吸収されたので、薄い物質のみに適用している)。

Fig.2 は $I=10^{10}$, 10^{13} , 10^{16} W/cm²の強度をもつ X 線源を使用した場合の全 X 線放射量を描いている。全放射量は、 N_k の波長に対して

$$PN = \int_0^{t_{max}} N_k A_{rk} dt \quad (20)$$

と定義される。ここでは、 $t_{max}=800\text{fs}$ とした。内殻励起状態からの PN 数は I 値が変わっても、ほぼ一定なのに対して、中空原子からの PN 数は I の値が増えると急激に大きくなる。(17)式が成立する $I = 10^{10}\text{W/cm}^2$ の強度では中空原子からの X 線と X 線放射はほとんどない。一方、 $I \sim 10^{13}\text{W/cm}^2$ ($R_{k,k+1}^P \sim D_k$)の場合には、中空原子からの X 線放射量は内殻励起状態からの放射量と同程度で、 $I \sim 10^{16}\text{W/cm}^2$ ($R_{k,k+1}^P \gg D_k$)の場合には前者は後者より非常に大きくなる。このことは、 X 線吸収測定や蛍光 X 線解析を行うとき、 $I \geq 10^{13}\text{W/cm}^2$ の強度を使用すれば多重内殻励起状態は無視できなくなることを意味する。

一節で述べたように、高輝度フェムト秒短パルス X 線源は化学、生体の分野でのフェムト秒の過程に対して成分、状態、構造の測定に適用される。しかしながら、現在の X 線検出器の時間分解能は 2ps しかないのでこのような観測に使用することは適しない。そこで、高輝度フェムト秒パルス X 線を使用したポンプ X 線プローブ技法を Fig.3(a)に提案する。その手順は次のとおりである。(i) 弱出力長パルスレーザーを用いて標的の配向を整える。(ii) 標的物質をフェムト秒パルスのレーザーを用いて、ポンプ励起させる。(iii) T_0 フェムト秒後、高輝度フェムト秒パルスの X 線を用いて、 X 線観測を行う。(iv) 手順 (i)-(iii)をいろいろな T_0 の値に対して観測することにより、 T_0 の関数として反応過程を理解する。ここで、ポンプ用レーザーと高輝度 X 線生成のためのレーザーに対して同じレーザーを用いる。これによりミラーなどで光路差を制御し T_0 の値をコントロールすることができる。この測定法を用いるとフェムト秒で起こる反応物の成分、構造、状態を知ることができる。

4 X線レーザー

4.1 実験系の提案

ここでは、内殻電離、中空原子 X 線レーザー法の実験系を提案する。重要なことは、反転分布を形成すること、および、高利得状態を長時間維持し、X 線レーザーを発振し続けることである。すなわち、下位レベルのポピュレーションを減らし、上位のレベルのポピュレーションを増やすようにすることである。

これらの X 線レーザー設計の最初の鍵となるのは、内殻電子の光電離のしきい値より少し大きいエネルギーをもつ高出力 X 線を用いてポンピングすることである。このエネルギーでは、内殻電子の光電離断面積はそれより外殻にある電子の光電離断面積より非常に大きい。その結果、内殻への輻射遷移に対して反転分布が形成される。文献 [29] で見られるように低エネルギー光は X 線レーザー発振の下位レベルの生成過程のみに寄与する。それゆえに、高エネルギー光のみがポンプ源として使用できるようにフィルターを用いて低エネルギー成分を除く。

以前の研究から内殻電離過程で生じる二次電子の電子衝突電離は内殻電離による X 線レーザー法に決定的な影響があると考えられている [22, 23, 24, 25, 26]。この二次電子衝突の密度が大きくなると電子衝突による初期原子 (炭素原子の場合は $1s^2 2s^2 2p^2$ 状態) の最外殻電子電離過程のレートは非常に大きくなる。そのために電子衝突電離過程はレーザー発振の下位レベル ($1s^2 2s^2 2p$) のポピュレーションを増やす働き、すなわち、反転分布を無くし、利得係数を減らす働きがある。それゆえに、この過程の起きるレートを減らす必要がある。電子衝突電離レート R^e は電子密度 n_e と電子衝突電離レート係数 $\langle v_e \sigma^e \rangle$ の積の形で与えられる。 n_e は照射時間に比例し、 $\langle v_e \sigma^e \rangle$ は電子の速度 v_e に反比例している。それゆえに、照射時間 t をできる限り短くし、 v_e を速くするべきである。照射時間を減らすために高輝度短パルス X 線源をポンピングに使うべきである。そうすれば、一瞬にして、すべての原子は内殻電離を起こし、電子衝突電離過程は起こらなくなる。このアイデアは 4.3 節で説明する中空原子を用いた X 線レーザー法へと結び付けてゆく。

高輝度 X 線が励起源として使われると、内殻電離イオンの連続的な内殻光電離は、内殻のすべての電子が電離し、中空原子が形成するまで起きる。驚くべきことに、初期原子の大部分が中空原子状態になれば、すべてのポピュレーションは中空原子に集中し、原子過程の取扱いはより簡潔に考えることが可能になる。さらに、これは大きな利得係数を作り出す。そのうえ、X 線レーザーの下位レベルのポピュレーションを取り除くこともできる。それゆえに、この方法では、高利得係数状態を比較的長い間維持し、X 線レーザーを発振させることが可能な方法である。4.3 節では、超高速原子過程の使用による光ポンプ X 線レーザーの利得係数に意義のある改良を提唱する。

Fig.3(b) には、X 線レーザーの実験系を提案する。まず、高出力短パルスレーザーとプラズマとの相互作用によって生じるラーモア輻射過程を通して高輝度短パルス X 線が放射される。次に、任意のフィルターを使って高エネルギー光のみを選択する。この X 線とナトリウムや炭素原子との相互作用により、内殻励起状態、中空原子状態が生成し、X 線レーザー発振源として機能する。短パルスレーザーと原子との相互作用を取り除くために他のフィルターを使う。この相互作用により光場電離 (optical field ionization) 過程が起こり、内殻励起状態、中空原子が崩壊する可能性がある。

4.2 内殻電離法

ここでは、従来考えられてきた内殻電離による X 線レーザー法の説明を炭素原子、ナトリウム原子に対して行う。この節と次の 4.3 節ではこの論文のテーマである高輝度 X 線照射による超高速原子過程を取りあげるので、3 節の (18) 式で述べたように内殻電離レートは $R_{k,k+1}$ ではなく、 $R_{k,k+1}^P$ の表現を用いる。炭素原子、ナトリウム原子に対して輻射遷移過程は、それぞれ、 $1s 2s^2 2p^2 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p$ 、 $1s^2 2s^2 2p^5 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$ であり、X 線レーザーの波長は 4nm、40nm である。発振の持続時間が数 fs 以下の非常に短い時

間では N_1 値は低次の過程で展開できる。そのとき、(14) 式に与えられている上位のレベルのポピュレーション (N_1) をテーラー展開すると次の式になる。

$$N_1 \sim R_{0,1}^P N_{00} \{t - (R_{0,1}^P + R_{1,2}^P)t^2/2\}, \quad (21)$$

一方、レーザー発振の下位レベルのポピュレーション (N_3) (この節では (9) 式に従って下位レベルを N_3 とする) は、光電離、および、二次電子衝突電離の両方に影響される。そのとき N_3 は

$$N_3 \sim \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle R_{0,1}^P N_{00}^2 t^2/2, \quad (22)$$

と展開できる。(21,22) 式の導出は付録 2 で行う。その時、(13) 式の反転分布ポピュレーションは次のように書ける。

$$P = R_{0,1}^P N_{00} (t - (R_{0,1}^P + R_{1,2}^P + g \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle N_{00})t^2/2), \quad (23)$$

ここでは、 $R_{0,1}^P$, $R_{1,2}^P$, $g \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle$ の光内殻電離過程と比較できる速い過程のみを取り扱った。

一般的に X 線の強度、および、初期原子密度が大きくなるほど P 値、すなわち、ゲイン値は大きくなる。ところが、X 線の強度、および、初期原子密度の値がある値より大きくなると P 値は飽和するために X 線の強度、および、初期原子密度に依存せずにほぼ、一定の値を示す。すなわち、飽和値を越えることは効率を悪くすることを意味する。ここでは、その飽和がおこる X 線の強度、および、初期原子密度を求める。 P の最大値、および、そのときの時間は

$$\begin{aligned} P_{max} &= \frac{R_{0,1}^P N_{00}}{2(R_{0,1}^P + R_{1,2}^P + g \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle N_{00})} \\ &= \frac{\sigma_{0,1}^P N_{00} I}{\{2(\sigma_{0,1}^P + \sigma_{1,2}^P)I + g \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle N_{00} h\nu_I\}}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$t_{max} = \{R_{0,1}^P + R_{1,2}^P + g \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle N_{00}\}^{-1}. \quad (25)$$

(24, 25) 式から $R_{0,1}^P \sim g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00}$ の条件で P_{max} 値は飽和する。飽和したとき、X線の強度 (I_{sat}) と初期原子密度 ($N_{00,sat}$) は

$$I_{sat} = \frac{h\nu_I g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00}}{2(\sigma_{0,1}^P + \sigma_{1,2}^P)}, \quad P_{max,sat,I} = \frac{N_{00} \sigma_{0,1}^P}{2(\sigma_{0,1}^P + \sigma_{1,2}^P)}, \quad (26)$$

$$N_{00,sat} = \frac{2(\sigma_{0,1}^P + \sigma_{1,2}^P)I}{g < v_e \sigma_{0,3}^e > h\nu_I}, \quad P_{max,sat,N} = \frac{I \sigma_{0,1}^P}{g < v_e \sigma_{0,3}^e > h\nu_I}. \quad (27)$$

となる。ここで、 $P_{max,sat,I}$ と $P_{max,sat,N}$ は、それぞれ、 I と N_{00} の飽和状態での P_{max} 値を表す。 I_{sat} の値を炭素原子、ナトリウム原子に対しておおざっぱに見積もってみる。例えば、炭素では $E_p \sim 600\text{eV}$ で $g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00} \sim 10^{14}/\text{s}$ とすると、 $\sigma_{0,1}^P \sim \sigma_{1,2}^P \sim 10^{-19}\text{cm}^2$ である。一方、ナトリウムでは $E_p = 100\text{eV}$ で $g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00} \sim 10^{14}/\text{s}$ とすると、 $\sigma_{0,1}^P \sim \sigma_{1,2}^P \sim 10^{-17}\text{cm}^2$ となる。それゆえに、 I_{sat} は炭素原子に対して $10^{16}\text{W}/\text{cm}^2$ 、ナトリウム原子に対して $10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ となる。実際には電子衝突電離レートは時間、電子密度、X線の強度などとともに変わるので見積もりは、これほど単純にはできない。

4.3 中空原子法

ここでは、4.2節の内殻電離法を改良し、新たにこの論文で提案する中空原子からのX線レーザーの説明を行う。炭素原子、ナトリウム原子に対して輻射遷移過程は、それぞれ、 $2s^2 2p^2 \rightarrow 1s 2s^2 2p$ 、 $1s^2 2s^2 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p$ であり、X線の波長はそれぞれ、3.5nmと10nmである。前節で述べたように超高速内殻電離過程を用いれば、中空原子が大量に生成し、その中空原子から高利得係数のX線レーザーが比較的長い間発振する。これは、(i) 上位レベルのポピュレーションが大きく、(ii) ポピュレーションの反転分布が正值(13)式で $P > 0$) であるからである。この超高速内殻電離過程 ($R_{i,i+1}^P \gg D_i$ 、ここで、 $i \leq n-1$) においては、光内殻電離過程 ($R_{i,i+1}^P$) のみ取り扱えばよい。さらに、光内殻電離過程以外の原子過程は非常に遅い過程として取り扱えるのでフェムト秒内の現象としてはほとんど起こらないと考えられ、下位レベルのポピュレーションを生成する過程も無視できる。(19)式から上位レベルのポピュレーションには $N_0 \sim N_n$ の関係式が成立する。それゆえに、中空原子のポピュレーションは $1/R_{i,i+1}^P \ll t \sim 1/(R_{i,2i-1}^e + A_{ri} + R_{i,2i-1}^P)$ の間、大きな値を持ち続ける。(この条件は炭素原子に対して $I \geq 10^{16}\text{W}/\text{cm}^2$ 、ナトリウム原子に対しては $I \geq 10^{18}\text{W}/\text{cm}^2$ で成立する。)

炭素原子の場合、 $I \geq 10^{18}\text{W}/\text{cm}^2$ の値は、のちに述べるシミュレーション値と一致する。一方、ナトリウム原子の場合、シミュレーションでは $I = 10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ で中空原子法は発振する (Fig.6(a))。このことは、上位レベル (N_n) の寿命が下位レベル (N_{2n-1}) の寿命より非常に長いために起きる。すなわち、 $I = 10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ 、 $E_p = 50 \sim 500\text{eV}$ のX線源の使用したとき、 $R_{0,n+1}^e \sim R_{0,1}^P$ であるにもかかわらず、 $A_{rn} + R_{n,2n}^P < R_{n,2n}^e$ ($\sim 10^{13}/\text{s}$) $\ll R_{2n-1,2n}^P$ ($\sim 10^{14}/\text{s}$) でもある。 R^e 値はX線源の光エネルギー分布でコントロールできる。というのは、電子衝突電離断面積は $E_e > E_{eion}$ に対してのみ $E_e (= E_p - E_{eion})$ の関数である。ポンプ用X線源の光エネルギーを最適にすれば、 $I = 10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ より弱い強度で中空原子X線レーザーが発振するかもしれない。

炭素原子では、中空原子に対して上位レベルのポピュレーション (N_2) と下位レベルのポピュレーション (N_4) はそれぞれ、

$$N_2 \sim R_{0,1}R_{1,2}N_{00}(t^2/2 - A_{a3}t^3/6), \quad (28)$$

$$\begin{aligned} N_4 &\sim R_{0,1}R_{3,4} < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00}^2 t^3 / 3 \\ -\frac{1}{12} R_{3,4} R_{0,1} < v_e \sigma_{0,3}^e > &> N_{00}^2 (R_{0,1} + R_{1,2} + R_{3,4} + R_{4,6}) t^4. \end{aligned} \quad (29)$$

と展開できる。中空原子 (X 線レーザー発振の上位レベル) を生成する過程は 2 回の内殻電離が必要なので 2 次の過程が、この中空原子が壊れるのは、3 次の過程が重要な働きをする。一方、内殻電離法の下位レベル (N_3) の生成は主に、二次電子衝突電離から起こるので、二次の過程で決まり、中空原子法の下位レベルは主にこの N_3 のレベルの内殻電離が生じるので三次の過程で決まる。その崩壊過程は四次の過程で決まる。それゆえに、中空原子法では二次から四次までの過程が重要であることがわかり、このことは (28) 式、および、(29) 式を求めるときに用いた。そのとき、(13) 式は

$$\begin{aligned} P = N_2 - gN_4 &\sim \frac{1}{12} R_{3,4} R_{0,1} g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00}^2 (R_{0,1} + R_{1,2} + R_{3,4} + R_{4,6}) t^2 \\ &\quad \left(t - \frac{2}{R_{0,1} + R_{1,2} + R_{3,4} + R_{4,6}} \right)^2 + R_{0,1} R_{1,2} N_{00} t^2 / 2 \\ &\quad - g < v_e \sigma_{0,3}^e > R_{3,4} R_{0,1} N_{00}^2 \frac{1}{R_{0,1} + R_{1,2} + R_{3,4} + R_{4,6}} t^2 / 3. \end{aligned} \quad (30)$$

となる。ここで、 $l \leq n-1$ に対して $R_{i,l+1}^P \gg D_l$ であるので、 $R_{i,l+1}$ のみを考慮する。さらに、すべての t 値に対して必ず $P > 0$ となる条件は次の関係式によって決定される。

$$R_{1,2cr}^P \sim \frac{1}{6} g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00}, \quad (31)$$

または、

$$I_{cr} \sim \frac{1}{6} \frac{g < v_e \sigma_{0,3}^e > N_{00} h \nu}{\sigma_{1,2}^P}. \quad (32)$$

ここで、 $R_{0,1} \sim R_{1,2} \sim R_{3,4} \sim R_{4,6}$ と近似した。 $E_p=600\text{eV}$ で $N_{00}=10^{22}/\text{cm}^3$ のとき、 $g < v_e \sigma_{0,3}^e >$

$N_{00} \sim 2 \times 10^{15}/s$ であり、 $\sigma_{1,2}^p \sim 10^{-19} \text{cm}^2$ である。それゆえに、 I_{cr} は炭素原子の場合、 $2 \times 10^{17} \text{W/cm}^2$ より大きな値になる。

中空原子法には従来の内殻電離法と比較して、以下のような特徴がある。(1) 上位レベルが大きなポピュレーションを得られること ((19) 式参照)。(2) 下位レベルのポピュレーションが超高速内殻電離過程により非常に速く減衰し、二次電子衝突が無視できように取り扱えること。(3) 高密度の原子を使うと高利得係数状態が比較的長く持続する。これは、(1) と (2) の性質から起きる。(4) 従来の内殻電離法のときより X 線レーザーに使う X 線が短波長になること。(5) 分子性 NaH 結晶の中でもナトリウムを原子として取り扱えて、ナトリウムの原子過程が使えること。(6) 内殻電子が存在しないので、X 線吸収がほとんど起こらないこと。(7) 広範囲のエネルギーを持つ高輝度 X 線が必要なこと。

4.4 シミュレーション

今までは物理過程を解析的に議論してきた。ここでは、コンピューターシミュレーションを行い、今までの物理的イメージをより検証するとともに読者によりわかりやすく説明し、この論文で提案する中空原子法が X 線レーザーの発振法として十分に機能し、従来の内殻電離法よりも優れていることを示す。今までの取扱いは、遅い過程を無視するなど、いくつかの近似を用いたが、このシミュレーションでは Fig.1 のすべての過程を考慮して行った。Figs.4(a) と (b) は炭素原子の従来の内殻電離法での利得係数を時間の関数として描いたものである。Fig.4(a) では二次電子衝突を無視しており、Fig.4(b) は二次電子衝突を考慮している。この二つの結果の間に非常に相違が見られることから二次電子衝突電離は内殻電離法では非常に大きな効果があることがわかった。これは、今までの研究 [22, 23, 24, 25, 26] の結果と一致する。この効果を考慮すると X 線レーザーの持続時間は 1fs 程度になり、現在の技術では、現実の実験に適用できないことがわかる。(Fig.4(b) で 10^{18}W/cm^2 のときのみ、持続時間が 5fs 程度と少し長くなっているが、これについてはのちに Fig.5 を用いて説明する) 文献 [24, 25] で示されたように初期原子密度を減らすとレーザー発振の持続時間は長くなる (Fig.4(c) 参照)。しかしながら 10^{20}W/cm^2 の密度を作るには常温で 10 気圧必要で、これも現在の実験系では困難である。さらに、 10^{19}W/cm^2 (1 気圧での気体密度) には、利得係数は小さくなり、非効率であることがわかる。Fig.4(d) はナトリウム原子の固体密度での内殻電離法での利得係数を描いた。この場合も持続時間は非常に短い。ナトリウム原子の場合、蒸気密度 ($10^{19}/\text{cm}^3$) と低い密度にしても炭素原子の場合とは異なり、低い輝度の X 線で十分に、比較的長い間 ($\sim 100\text{fs}$)、X 線レーザーが発振する (Fig.4(e) 参照)。炭素原子の内殻励起状態が自動イオン化状態であり、上位レベルの寿命が短いのに対して、ナトリウム原子の場合は、自動イオン化状態でないため、長い寿命を持つ。そのために (13) 式からわかるようにナトリウム原子の場合は、低い輝度の X 線で高い利得係数が得られる。

Fig.5 は、炭素原子の内殻電離法の場合の原子、内殻励起状態、内殻電離法の下位レベル ($1s^2 2s^2 2p$)、自動イオン化状態のポピュレーションを描いたものである。Figs.5(a), (b) は、それぞれ、 10^{17}W/cm^2 、 10^{18}W/cm^2 の強度をもつ X 線源を使用した際のポピュレーションである。 10^{17}W/cm^2 のときは、比較的ゆっくりと初期原子は内殻励起状態になり、さらに、少し時間がたつと、下位レベルのポピュレーションが大きくなり、数 fs で内殻励起状態のポピュレーションを追い抜く。そのために、発振時間は非常に短くなる。X 線の強度が 10^{18}W/cm^2 に上がると、ほとんど 1fs で初期原子のほとんどが、内殻電離を起こし、内殻励起状態になっていることがわかる。これを我々は「超高速内殻電離過程」と名付ける。この場合、下位レベルのポピュレーションは、 10^{17}W/cm^2 の場合と比べると大きくなる。これは、下位レベルは初期原子の二次電子衝突電離過程から生じるが、一瞬で、初期原子が内殻電離を起こし、初期原子がほとんど存在しないためである。これにより、Fig.4(b) に示されるように 10^{18}W/cm^2 の強度のとき、その他の場合と比べて持続時間が長くなる。

Figs.6(a) と (b) は炭素原子とナトリウム原子の場合の中空原子法の利得係数を描いた。この方法を用いて、X 線レーザーが発振する条件は、それぞれ、 10^{18}W/cm^2 、 10^{15}W/cm^2 の強度を持つ X 線源が必要で

ある。そのときの利得係数は $10^4/\text{cm}$ ぐらいあり、非常に高利得係数が期待できる。持続時間も内殻電離法の場合と比べると、非常に長くなっており、炭素原子、ナトリウム原子、それぞれの場合に対して 10fs、数 100fs の持続時間が見積もれた。この持続時間は上位レベルの寿命によって決まっており、炭素の場合は自動イオン化、ナトリウムの場合は先程述べたように自動イオン化状態ではないので、電子衝突電離過程できまる。

Figs.7(a) と (b) はナトリウム原子の場合の原子密度、内殻励起状態、多重内殻励起状態、中空原子のポピュレーションを $I = 10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ と $10^{17}\text{W}/\text{cm}^2$ の X 線強度に対して描いたものである。 $I = 10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ のとき中空原子のポピュレーションは初期原子密度の 4% 程度しかないのに対して、 $10^{17}\text{W}/\text{cm}^2$ のときには、60% ぐらい中空原子になる。すなわち、(19) 式が成立するのは $I \geq 10^{17}\text{W}/\text{cm}^2$ の場合である。 $I = 10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ で中空原子法が発振する理由は 4.3 節で述べた。Figs.7(c) と (d) は $1s^22s^22p^6$ (内殻励起法の下位レベル) …、 $1s^22s^22p$ (中空原子法の下位レベル) のポピュレーションを描いたものである。内殻電離法の時 (Fig.5 参照) は下位レベルのポピュレーションは減衰しなかったのに対して、この場合は非常に速く減衰していることがわかる。これは、前に述べたように下位レベルが内殻電子を持っているために起こる超高速内殻電離過程によるものである。Figs.7(a)-(d) より最後に残る状態は中空原子だけであり、この中空原子の寿命が発振時間である。Fig.7(e) は炭素原子の場合の原子密度、内殻励起状態、中空原子のポピュレーションを Fig.7(f) は $1s^22s^22p$ (内殻励起法の下位レベル)、 $1s2s^22p$ (中空原子法の下位レベル) のポピュレーションを描いたものである。この図からもナトリウム原子と同じ傾向が見られる。すなわち、最終的に中空原子のみが残ること、下位レベルのポピュレーションが非序に速く減衰することがいえる。ただ、中空原子の寿命はナトリウムの場合と比較すると非常に短くなっている。この相違は、炭素原子の場合、中空原子が自動イオン化状態であり、寿命が短くなるのに対して、ナトリウム原子の場合は、前述のように単なる励起状態で長い寿命を持つためである。

Fig.8 は炭素原子の場合に X 線の強度が時間に依存する X 線源を使用したことを想定した計算結果である。X 線源の時間依存性は次の式で与えられる。

$$I(t) = I_0 \exp(-a(t - t_{peak})^2) \quad (33)$$

$I_0=10^{18}\text{W}/\text{cm}^2$, $t_{peak}=10\text{fs}$ とし、 a の値は Figs.7(a), (b) に対して、 $a = 0.05, 0.1$ を想定した。すなわち、Fig.7(a) はゆっくりと X 線がちあがり、7(b) では、すぐに立ち上がる X 線源である。二つの図を比較すると、内殻電離法の場合は、利得係数が非常に差がでるのに対して中空原子法では、ほとんど利得係数が変わらないことがわかる。すなわち、内殻電離法は、非常に速くちあがる X 線が必要であるのに対して、中空原子法では時間依存性をあまり考慮する必要がないかもしれない。

5 まとめ

この論文では、炭素原子とナトリウム原子に高輝度短パルス X 線源を照射して作られる超高速原子過程に関して考察した。この過程により多重内殻電離を起こし、中空原子を生成することをシミュレーションし、この中空原子から放射される X 線が X 線レーザー発振法に十分に機能することがわかった。この中空原子法には従来の内殻電離法の欠点を克服した明らかな長所があることが分かった。まず、下位レベルのポピュレーションが非常に速く減衰すること、および、上位レベルである中空原子に非常に大きなポピュレーションが得られること、そのために、高利得係数が比較的、長時間持続することである。さらに、X 線レーザーの波長が短くなっている。ナトリウム原子と炭素原子とを比較すると必要な X 線の強度はナトリウムの場合の方が非常に小さくてすむ。特に、ナトリウム蒸気を用いると、低い輝度の X 線を用いて十分な利得係数が得られる。しかしながら、X 線レーザーの波長は炭素原子の方が短い。このように、これらの方法を使うとき原子過程は非常に重要であることが主張できた。そのうえ、この高輝度短パルス X 線源が化学、生化学、生体、物質などの X 線観測に非常に有用であることも示した。超高速 X 線観測と X 線レーザーの実験系の提案も行った。

謝辞

この研究を行うにあたって、いろいろ助言していただいた上島豊博士、千原順三博士、井原均博士、宅間宏博士、有沢孝博士、加藤隆子博士(核融合科学研究所)、加藤義章博士(大阪大学レーザーセンター)、松沢通生博士(電気通信大学)、白井稔三博士に感謝いたします。

参考文献

- [1] P.Gibbon, *Phys.Rev.Lett.*, 76, 50(1996).
- [2] J.J. Macklin, J.D. Kmetec, and C.L. Gordon, *Phys.Rev.Lett.*, 70, 766(1993).
- [3] T.D. Donnelly, T.Ditmire, K.Neuman, M.D. Perry, and R.W. Falcone, *Phys.Rev.Lett.*, 76, 2472(1996).
- [4] J.D.Kmetec, C.L. Gordon III, J.J. Macklin, B.E. Lemoff, G.S.Brown, and S.E.Harris, *Phys.Rev.Lett.*, 68, 1527(1992).
- [5] Y.Ueshima, Y.Kishimoto, A.Sasaki, Y.Sentoku, and T. Tajima, to be published in Proceeding of Joint ICFA/JAERI-Kansai International Workshop '97. (JAERI, Tokai, 1997).
- [6] M.D. Perry and G.Mourou, *Science*, 264, 917(1994).
- [7] C.P.J.Barty, *Laser Focus World*, 32, 93(1996).
- [8] C.P.J.Barty, T.Guo, C.Le Blanc, F.Raksi, C. Rose-Petruck, J.A.Squier, K.R.Wilson, V.V. Yakovlev, and K.Yamakawa, *Proc.SPIE-Int.Soc.Opt.Eng.*, 2701, 84(1996).
- [9] K.Yamakawa, T.Guo, G.Korn, C.Le Blanc, F.Raksi, C. Rose-Petruck, J.A.Squier, V.V. Yakovlev, and C.P.J.Barty, *Proc.SPIE-Int.Soc.Opt.Eng.*, 2701, 198(1996).
- [10] F.Brunel, *Phys.Rev.Lett.*, 59, 52(1987).
- [11] T.Guo, C.Rose-Petruck, R.Jimenez, F.Raksi, J.Squier, B.Walker, K.R.Wilson, and C.P.J.Barty, to be published in Proceeding of Joint ICFA/JAERI-Kansai International Workshop '97. (JAERI, Tokai, 1997).
- [12] G.R. Fleming, "Chemical applications of ultrafast spectroscopy", Oxford University Press, New York, (1996).
- [13] R.W. Schoenlein, L.A. Peteanu, R.A. Mathies, and C.V.Shank, *Science*, 254, 412(1991).
- [14] M.H.Vos, F.Rappaport, J.-C. Lambry, J.Breton, and J.-L. Martin, *Nature*, 363, 320 (1993).
- [15] H.Kandori, H.Sasabe, K.Nakanishi, T.Yoshizawa, T.Mizukami, and Y.Shichida, *J.Am.Chem.Soc.* 118, 1002(1996).
- [16] P.O. Andersson, R.J. Cogdell and T.Gillbro, *Chem.Phys.*, 210, 195 (1996).
- [17] M. Ricci, S.E. Bradforth, R.Jimenez and G.R.Fleming, *Chem.Phys.Lett.*, 259, 381 (1996).
- [18] S. Akimoto, S.Takaichi, T.Ogata, Y.Nishimura, I.Yamazaki, and M. Mimuro, *Chem.Phys.Lett.*, 260, 147 (1996).
- [19] J.P.Briand, B.d'Etat, D.Schneider, M.Clark, and V,Decaux, *Nucl.Instrum.Methods Phys.Res.B*, B87, 138(1994).
- [20] Y.Yamazaki, S.Ninomiya, F.Koike, H.Masuda, T.Azuma, K.-I.Komaki, K.Kuroki, and M.Sekiguchi, *J.Phys.Soc.Jpn.*, 65, 1192(1996).

- [21] J.P.Briand, B.d'Etat, D.Schneider, M.A. Briere, V.Decaux, J.W.McDonald, S.Bardin, *Phys.Rev.A*, 53, 2194(1996).
- [22] M.A.Duguay and M.Rentzepis, *Appl.Phys.Lett.*, 10, 350(1967).
- [23] T.S. Axelrod, *Phys.Rev.A*, 13, 376(1976).
- [24] H.C.Kapteyn, *Applied Optics*, 31, 4391(1992).
- [25] S.J.Moon, D.C.Eder, and G.L. Strobel, *AIP Conference Proceedings*, 332, 262(1994).
- [26] G.L. Strobet, D.C. Eder, and P.Amendt, *Applied Physics B*, B58, 45(1994).
- [27] K.Moribayashi, A.Sasaki, Y.Ueshima, and T.Tajima, submitted to *J. Phys. Soc. Jap.*, and *Phys.Rev.A*, in press.
- [28] J.Chihara, private communications.
- [29] J.J.Yeh and I.Lindau, *Atomic Data and Nucl. Data Tables*, 32, 1(1985).
- [30] Y.B. Zel'dovich and Y.P. Raizer, "Physics of Shock waves and high temperature hydrodynamic phenomena" Academic Press, New York, 265(1966).
- [31] W.Lotz, *Z.Phys.*, 232, 101(1970).
- [32] L.B.Golden and D.H. Sampson, *J.Phys.B*, 10, 2229(1977).
- [33] R.D. Cowan, *J.Opt.Soc.Am.*, 58, 808(1968).
- [34] R.D. Cowan, "The theory of atomic structure and spectra", University of California Press, Berkeley, (1981).

付録1 (14) 及び (15) 式の導出

状態 $k-1$ 、および、 k のポピュレーション N_{k-1} 、および、 N_k はレート方程式 (11) から求まる。そのときの一般解は

$$N_{k-1} = N_{00} \{ C_0^{k-1} e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \dots + C_l^{k-1} e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t} + \dots + C_{k-1}^{k-1} e^{-(R_{k-1,k}+D_{k-1})t} \} \quad (34)$$

$$N_k = N_{00} \{ C_0^k e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \dots + C_l^k e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t} + \dots + C_k^k e^{-(R_{k,k+1}+D_k)t} \} \quad (35)$$

である。これらのポピュレーションを N_k 状態に対するレート方程式、すなわち、

$$\dot{N}_k = R_{k-1,k} N_{k-1} - (R_{k,k+1} + D_k) N_k \quad (36)$$

代入する。

$$\begin{aligned} \text{左辺} = & -N_{00} \{ (R_{0,1} + D_0) C_0^k e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \dots + (R_{l,l+1} + D_l) C_l^k e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t} + \\ & \dots + (R_{k,k+1} + D_k) C_k^k e^{-(R_{k,k+1}+D_k)t} \} \end{aligned} \quad (37)$$

一方、

$$\begin{aligned} \text{右辺} = & R_{k-1,k} N_{k-1} - (R_{k,k+1} + D_k) N_k \\ = & R_{k-1,k} N_{00} \{ C_0^{k-1} e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \dots + C_l^{k-1} e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t} + \dots + C_{k-1}^{k-1} e^{-(R_{k-1,k}+D_{k-1})t} \} \\ & - (R_{k,k+1} + D_k) N_{00} \{ C_0^k e^{-(R_{0,1}+D_0)t} + \dots + C_l^k e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t} + \dots + C_k^k e^{-(R_{k,k+1}+D_k)t} \} \end{aligned} \quad (38)$$

この2つの式から $l < k$ に対して $e^{-(R_{l,l+1}+D_l)t}$ の項の係数は等しいので

$$-(R_{l,l+1} + D_l) C_l^k = R_{k-1,k} C_l^{k-1} - (R_{k,k+1} + D_k) C_l^k \quad (39)$$

となる。ゆえに、

$$C_l^k = \frac{R_{k-1,k} C_l^{k-1}}{(R_{k,k+1} + D_k) - (R_{l,l+1} + D_l)} = \prod_{j=l+1}^k \frac{R_{j-1,j}}{(R_{j,j+1} + D_j) - (R_{l,l+1} + D_l)} C_l^l \quad (40)$$

であり、 $t=0$ のとき $N_0 = N_{00}$ 、 $N_1 = N_2 = \dots = N_n = 0$ なので

$$C_0^0 = 1, \quad C_l^l = - \sum_{j=0}^{l-1} C_j^l \quad (41)$$

となる。

付録2 (21) 及び (22) 式の導出

(14) 式より N_1 は以下のようにテーラー展開できる。

$$N_1 = \frac{R_{0,1} N_{00}}{(R_{0,1} + D_0) - (R_{1,2} + D_1)} \{ [1 - (R_{1,2} + D_1)t + (R_{1,2} + D_1)^2 t^2 / 2 + \dots] - [1 - (R_{0,1} + D_0)t + (R_{0,1} + D_0)^2 t^2 / 2 + \dots] \} = R_{0,1} N_{00} \{ t - (R_{0,1} + D_0 + R_{1,2} + D_1) t^2 / 2 + \dots \} \quad (42)$$

高輝度な X 線を使用したとき短い時間内では内殻電離過程 R^P のみが寄与すると考えられる。他の過程を無視し、二次の項までとるとこの式は (21) 式になる。

一方、レーザー発振の下のレベルのポピュレーション N_3 は、次のレート方程式によって求まる。

$$\dot{N}_3 = R_{0,3} N_0 + A_{r1} N_1, \quad (43)$$

この場合、初期原子の二次電子衝突電離 ($R_{0,3}^e$) のみが重要になる。非常に短い時間では n_e は内殻光電離過程によって原子から放出された電子のポピュレーションであると近似できる。すなわち、

$$n_e \sim \sum_i N_i \sim N_1. \quad (44)$$

とおける。そのとき、 $R_{0,3}^e$ は (7) 式を用いると

$$R_{0,3}^e = \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle n_e \sim \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle N_1 \quad (45)$$

と書ける。さらに上のレート方程式は

$$\dot{N}_3 = \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle N_1 N_0, \quad (46)$$

と書き直すことができる。同様に N_0 、および、 N_1 に対しても

$$N_0 = N_{00} e^{-(R_{0,1} + D_0)t} \sim N_{00} e^{-R_{0,1}^P t}$$

$$N_1 = \frac{R_{0,1} N_{00}}{(R_{0,1} + D_0) - (R_{1,2} + D_1)} (e^{-(R_{1,2} + D_1)t} - e^{-(R_{0,1} + D_0)t})$$

$$\sim \frac{R_{0,1}^P N_{00}}{R_{0,1}^P - R_{1,2}^P} (e^{-R_{1,2}^P t} - e^{-R_{0,1}^P t}) \quad (47)$$

と近似できる。これを上のレート方程式に代入すると

$$\dot{N}_3 = \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle \frac{R_{0,1}^P N_{00}^2}{R_{0,1}^P - R_{1,2}^P} (e^{-(R_{1,2}^P + R_{0,1}^P)t} - e^{-2R_{0,1}^P t}) \quad (48)$$

となる。この微分方程式の解析解は

$$N_3 = \langle v_e \sigma_{0,3}^e \rangle \frac{R_{0,1}^P N_{00}^2}{R_{0,1}^P - R_{1,2}^P} \left\{ -\frac{1}{R_{0,1}^P + R_{1,2}^P} e^{-(R_{1,2}^P + R_{0,1}^P)t} + \frac{1}{2R_{0,1}^P} e^{-2R_{0,1}^P t} \right\} \quad (49)$$

であり、これをテーラー展開し、二次の項までもとめると (22) 式になる。

Table 1(a) Ionization energies E_{Ion} (in the unit of eV) of the 2p and 1s electron, and wavelength of the X-ray laser for the multi-inner-shell excited states of Carbon atom.

Ion	E_{Ion} (eV) for 1s	E_{Ion} (eV) for 2p	wavelength(nm)	
$1s^2 2s^2 2p^2$	300	10		
$1s 2s^2 2p^2$	350	25	4	10^{14}
$2s^2 2p^2$		50	3.5	2×10^{14}

Table 1(b) Ionization energies E_{Ion} (in the unit of eV) of the 3s and 2p electron, and wavelength of the X-ray laser for the multi-inner-shell excited states of Na atom.

Ion	E_{Ion} (eV) for 2p	E_{Ion} (eV) for 3s	wavelength(nm)
$1s^2 2s^2 2p^6 3s$	36	5	
$1s^2 2s^2 2p^5 3s$	58	14	39
$1s^2 2s^2 2p^4 3s$	95	25	27
$1s^2 2s^2 2p^3 3s$	110	39	20
$1s^2 2s^2 2p^2 3s$	155	54	15
$1s^2 2s^2 2p 3s$	190	70	12
$1s^2 2s^2 3s$		90	10

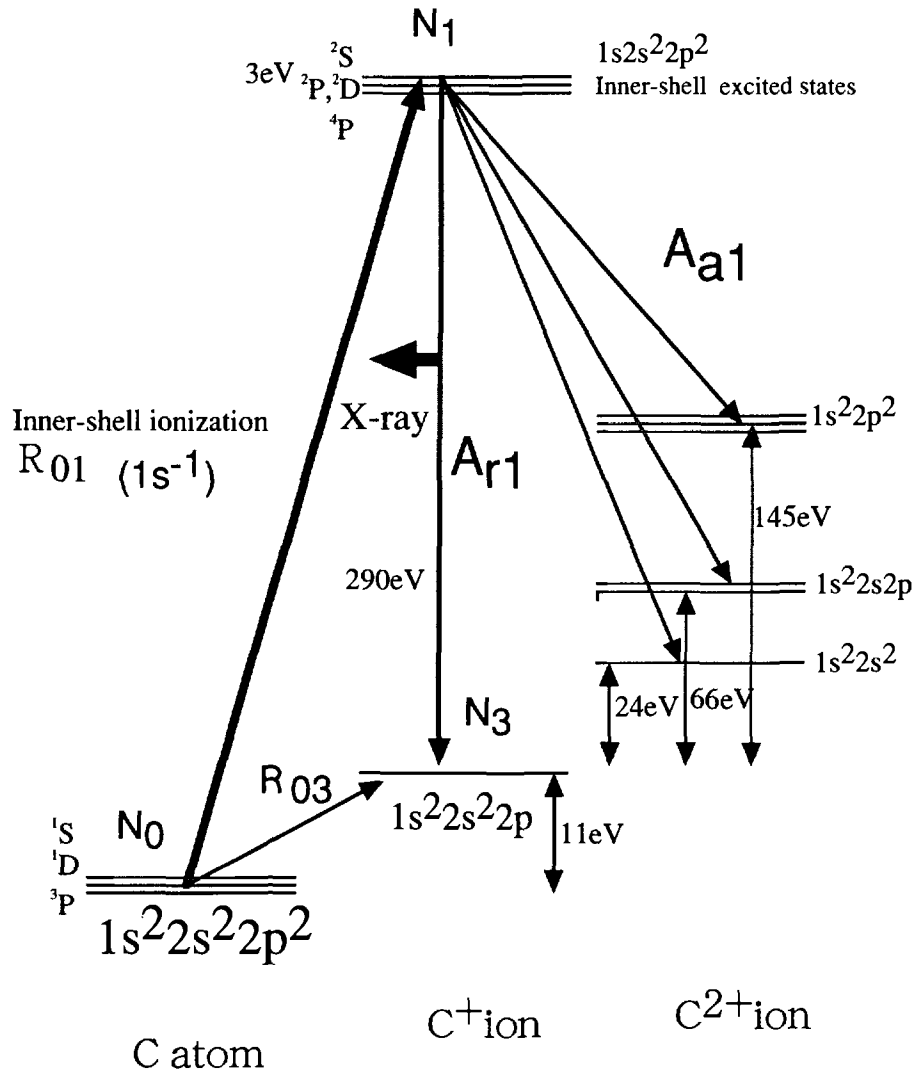


Fig. 1 (a) Atomic processes in X-ray emission by inner-shell ionization of carbon atoms

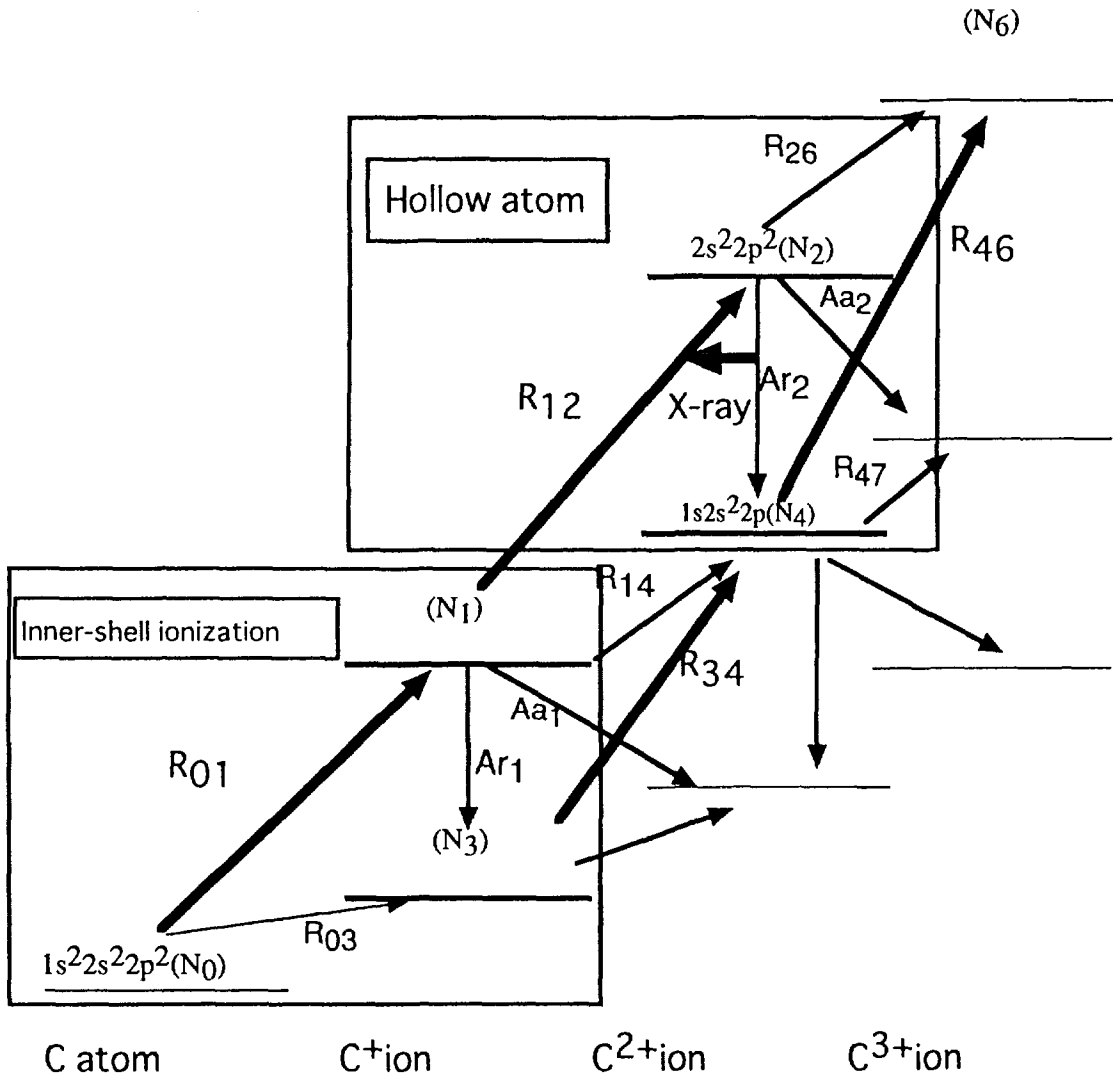


Fig.1(b) Atomic processes in X-ray emission from hollow atoms

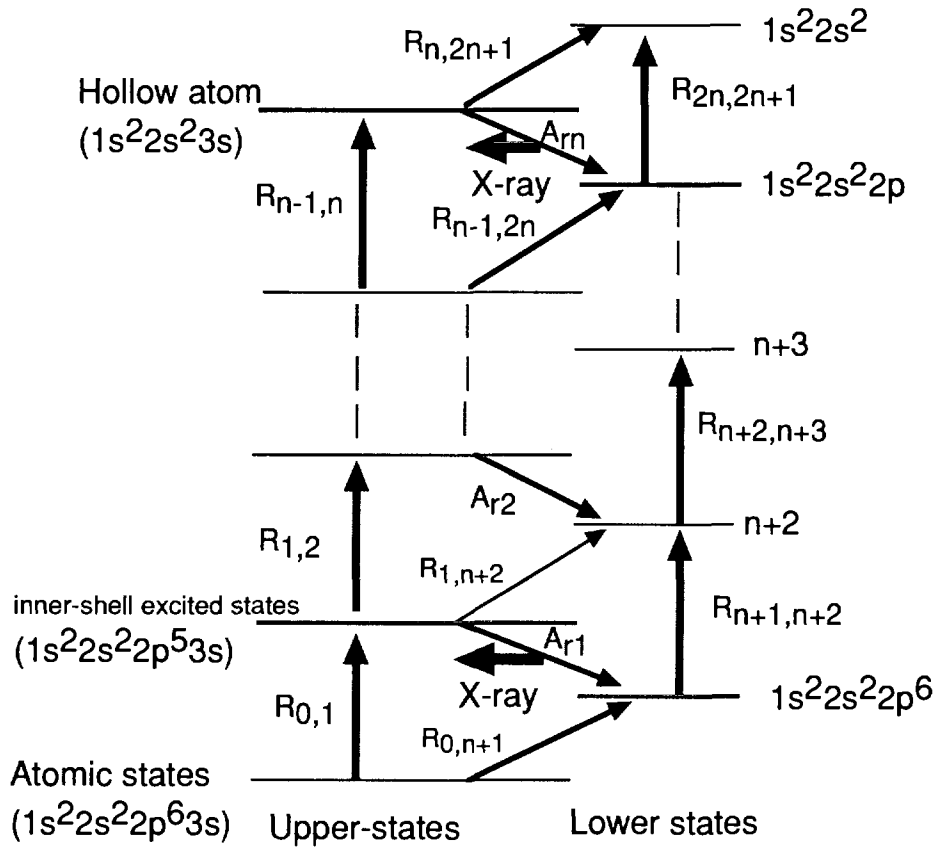


Fig.1(c) Atomic processes in X-ray emission from hollow atoms and inner-shell excited states of sodium atoms.

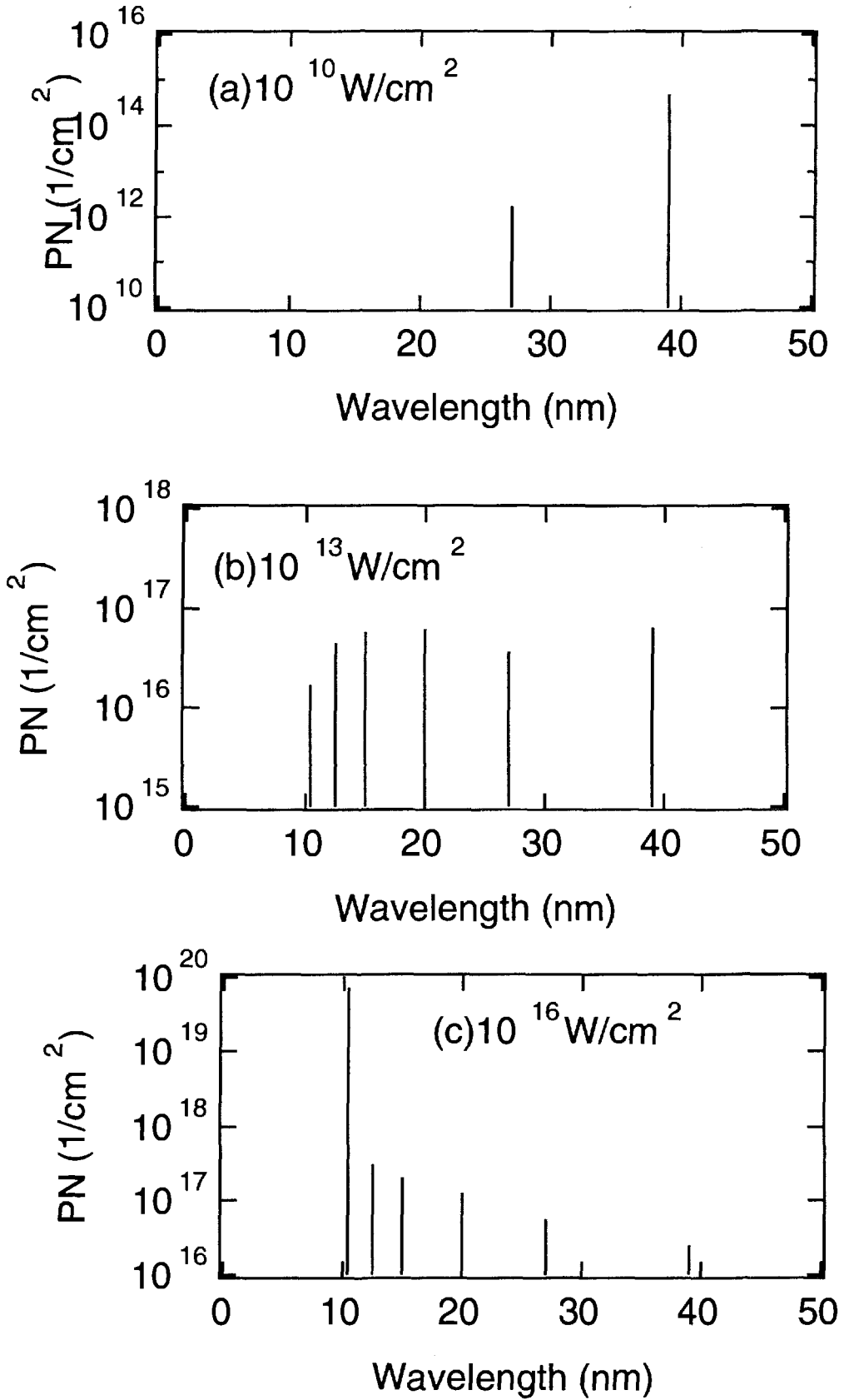


Fig.2 Total X-ray emission from multi-inner-shell excited states of sodium atoms.

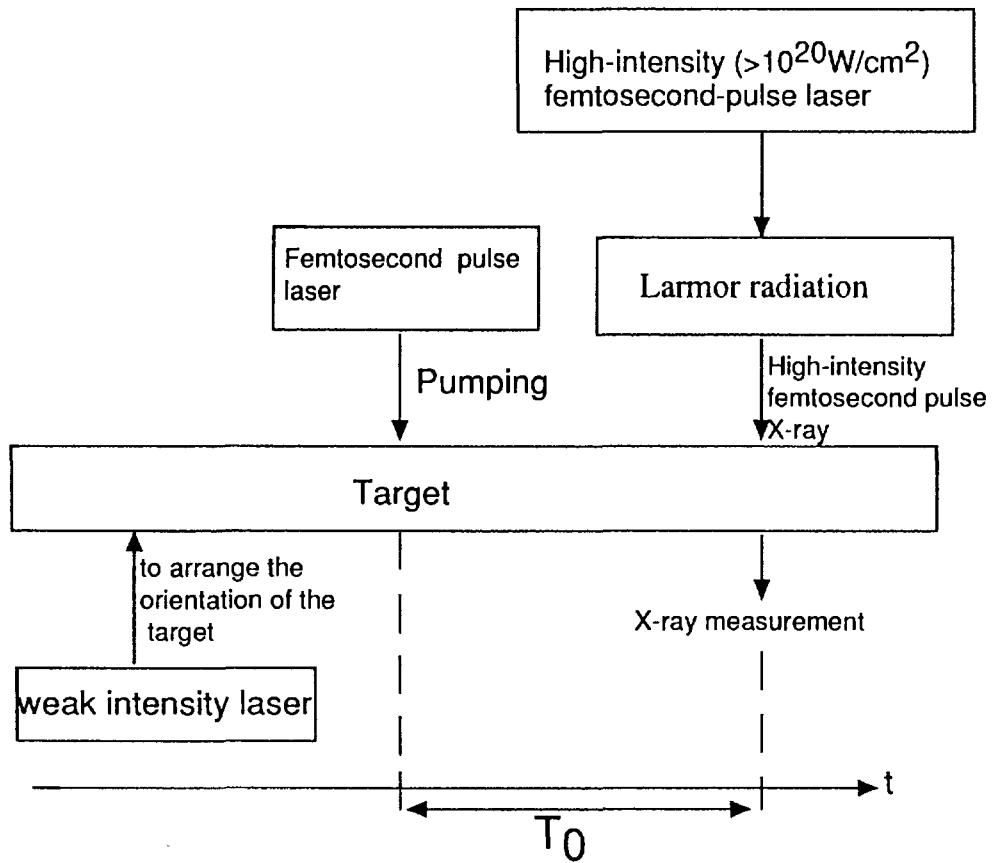


Fig.3(a) A class of experiment of X-ray measurement

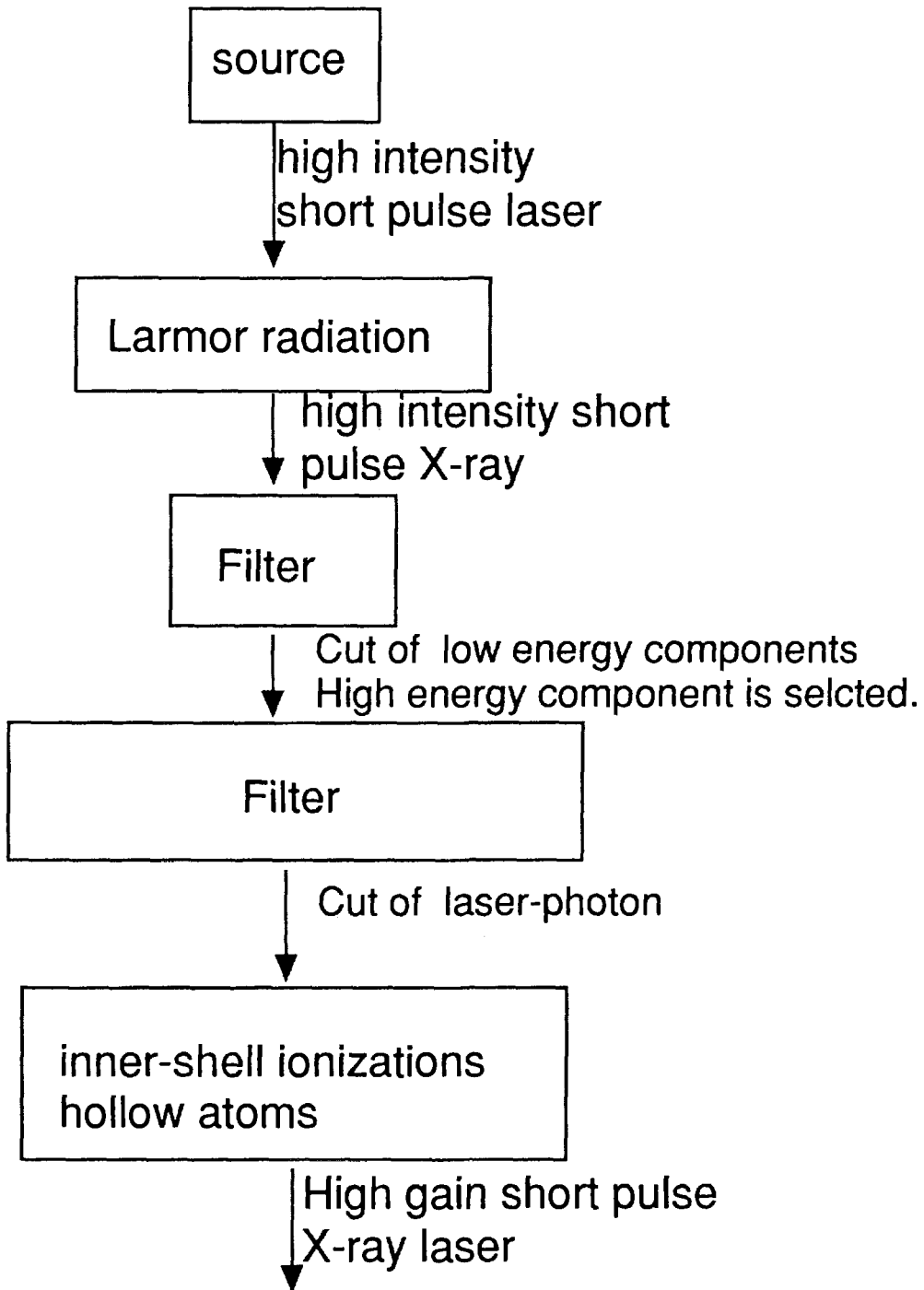


Fig.3(b) A class of experiment of X-ray laser.

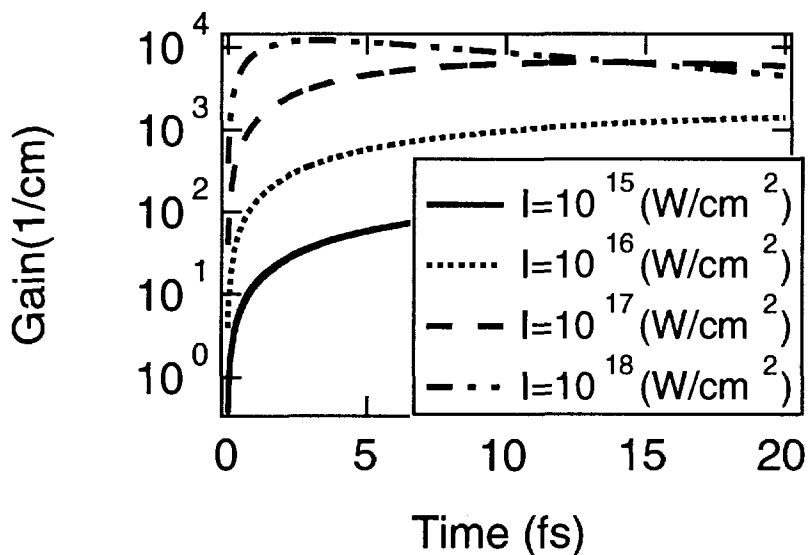


Fig.4(a) Gain vs. time in X-ray by inner-shell ionization of solid density of carbon atoms; electron impact ionization processes are ignored. The intensities of X-ray are distinguished by types of lines.

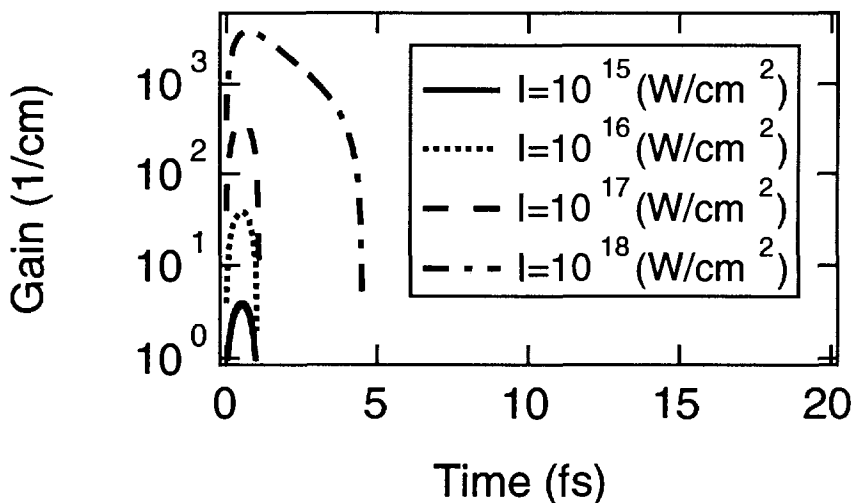


Fig.4(b) The same as Fig.4(a) but for the case where the electron impact ionization processes are considered.

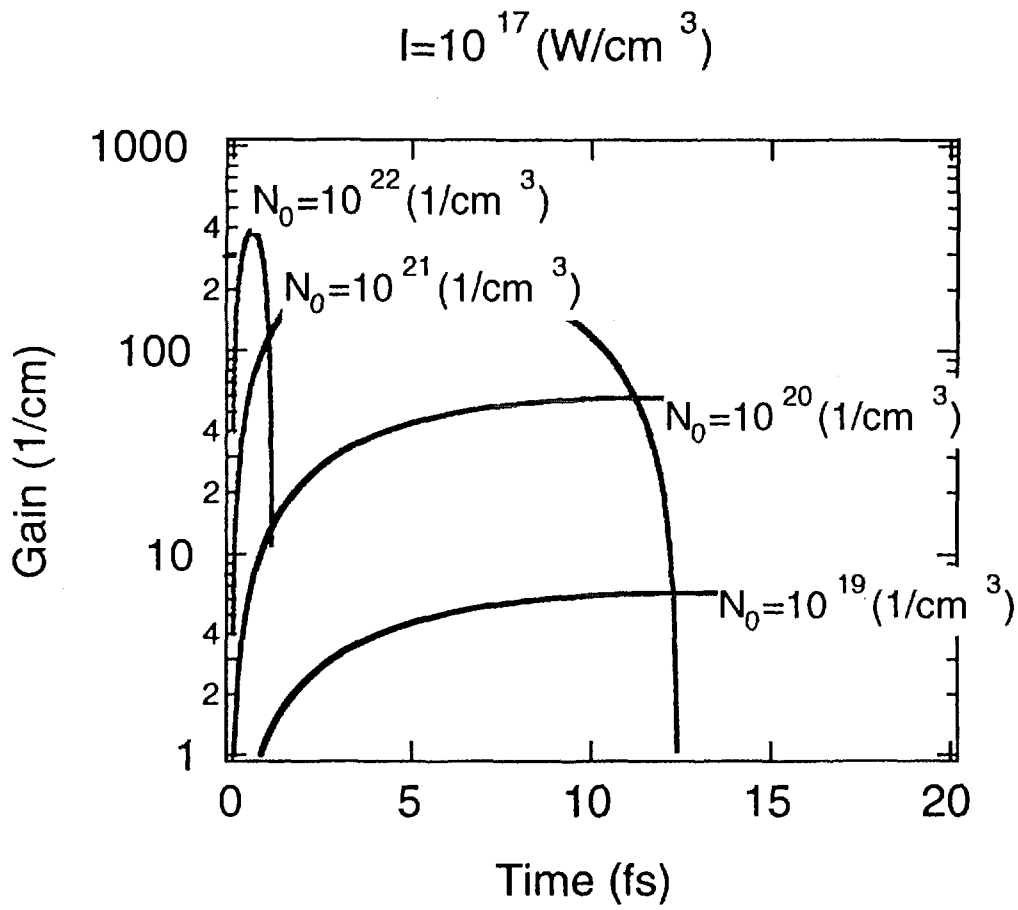


Fig.4(c) The same as Fig.4(b) but for various N_0 values and $I=10^{17} \text{ W/cm}^2$.

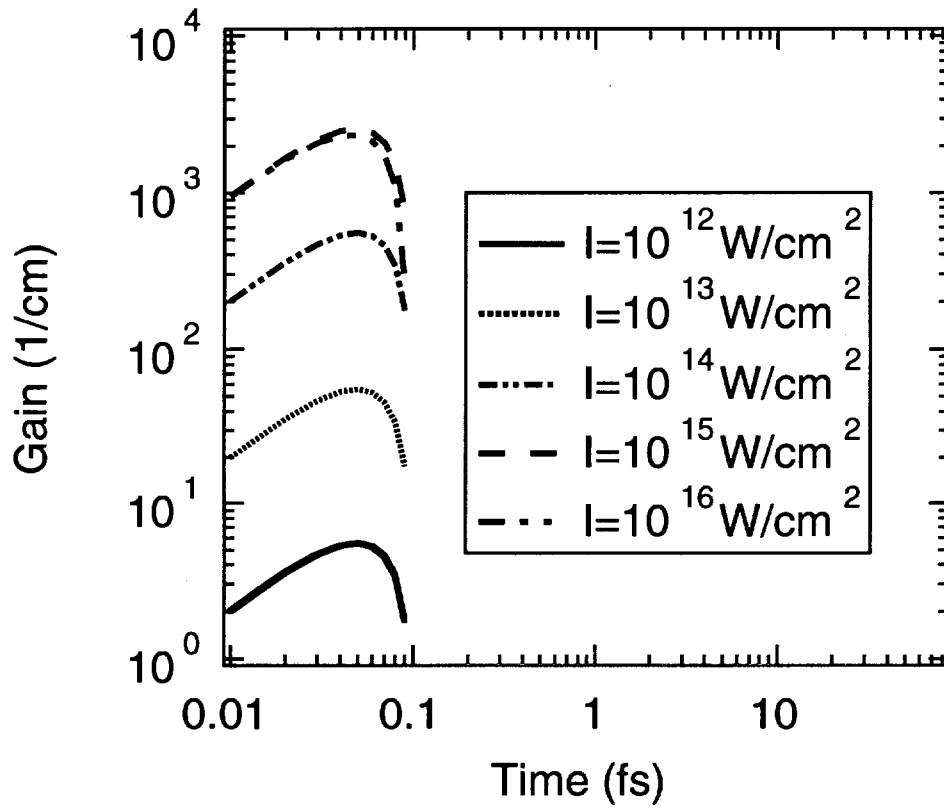


Fig.4(d) The same as Fig.4(b) but for sodium atoms.

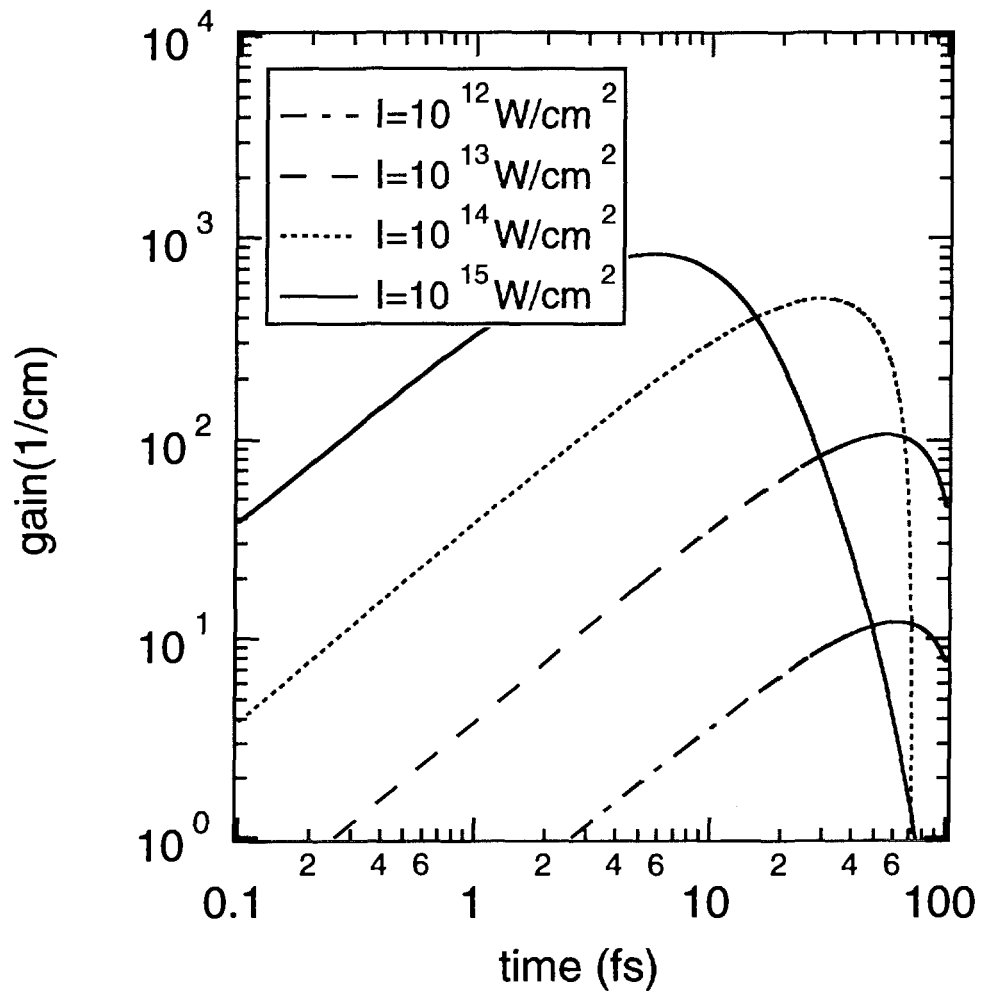


Fig.4(e) The same as Fig.4(d) but for sodium vapor.

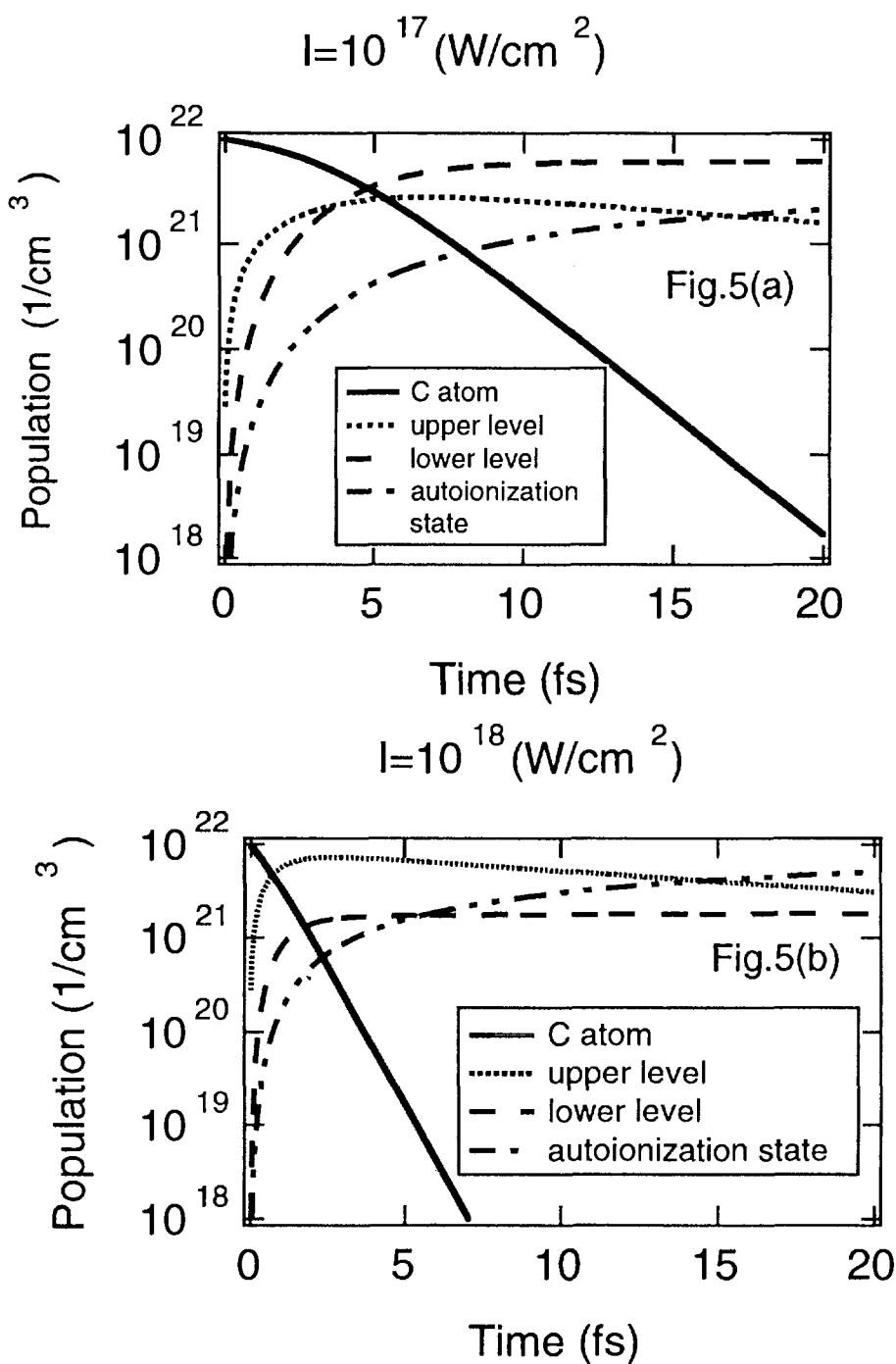


Fig.5 Population vs. time (1/cm) for atomic state of carbon atom, inner-shell excited states, lower states, and autoionization states. The X-ray intensity values are (a) $I=10^{17} \text{ W/cm}^2$ and (b) 10^{18} W/cm^2 .

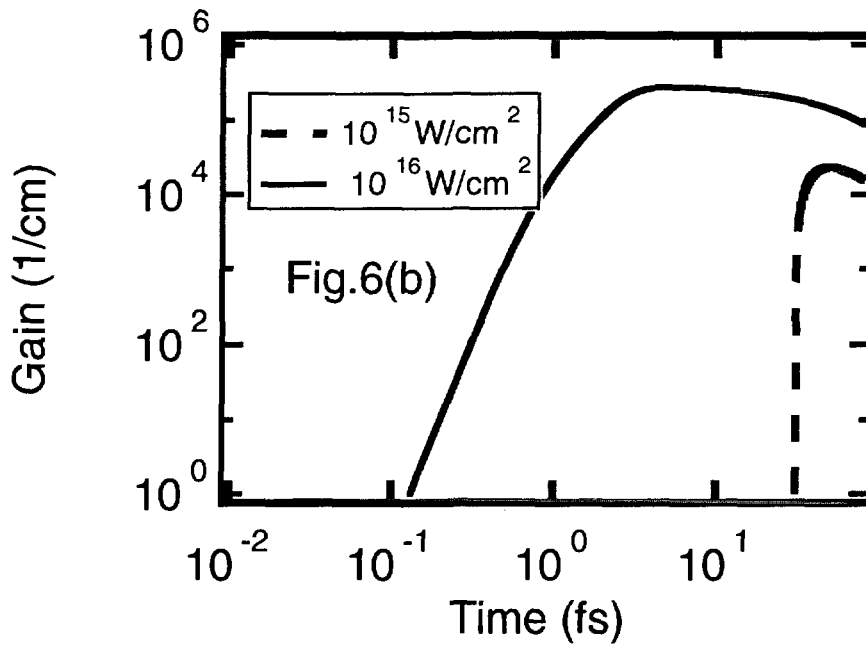
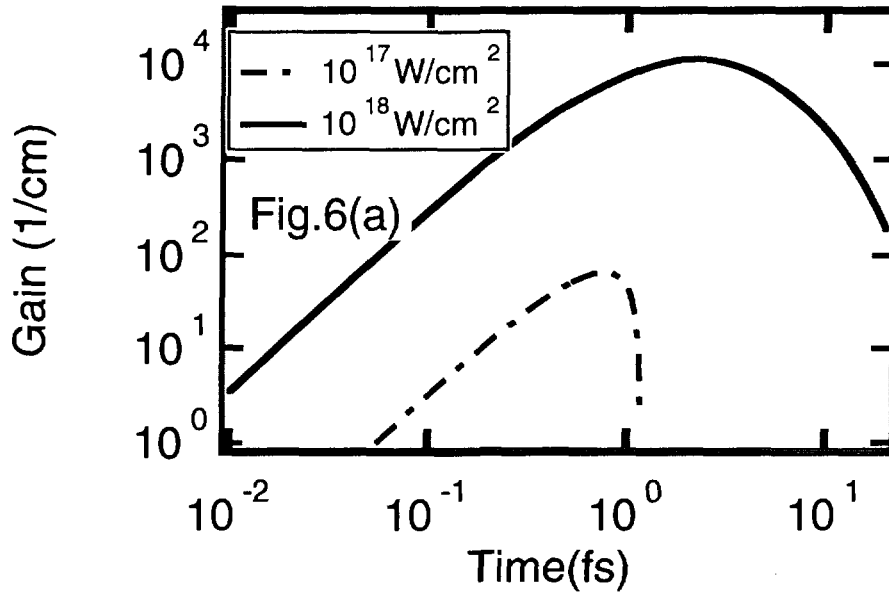


Fig.6(a) The same as Fig.4(a) but for hollow atoms method. (b) The same as Fig.6(a) but for sodium atoms.

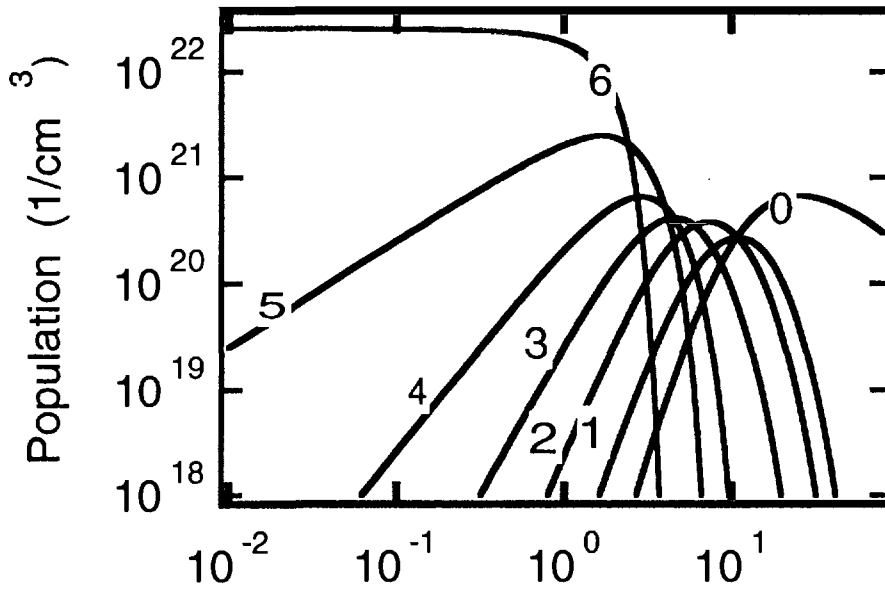


Fig.7(a) Population for upper states of hollow atoms of sodium atoms as a function of time. The X-ray intensity $I=10^{15}$ W/cm². The figure corresponds to the number of 2p electrons.

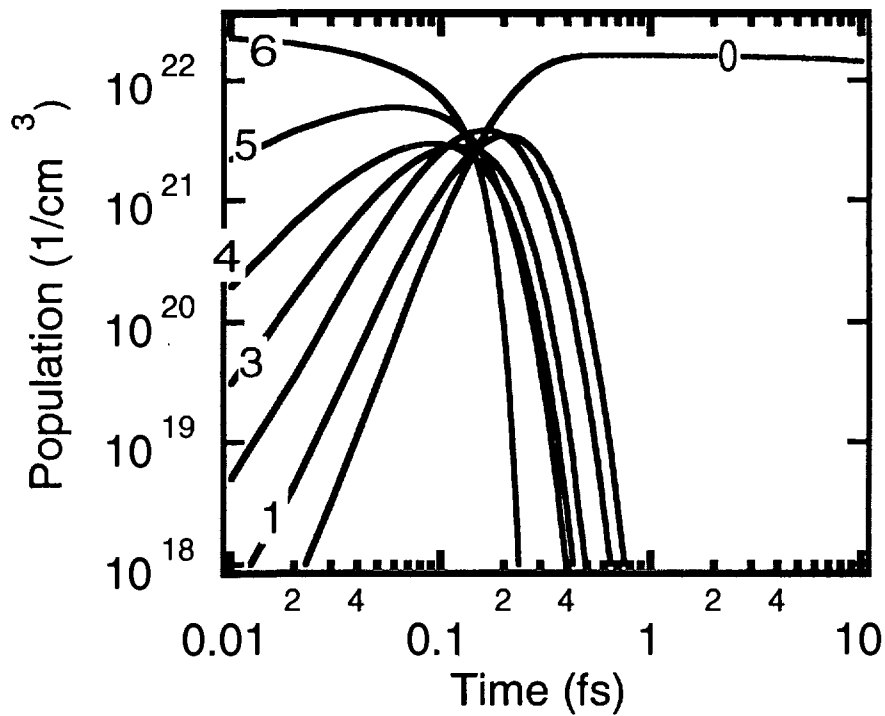


Fig.7(b) The same as Fig.7(a) but for $I=10^{17}$ W/cm²

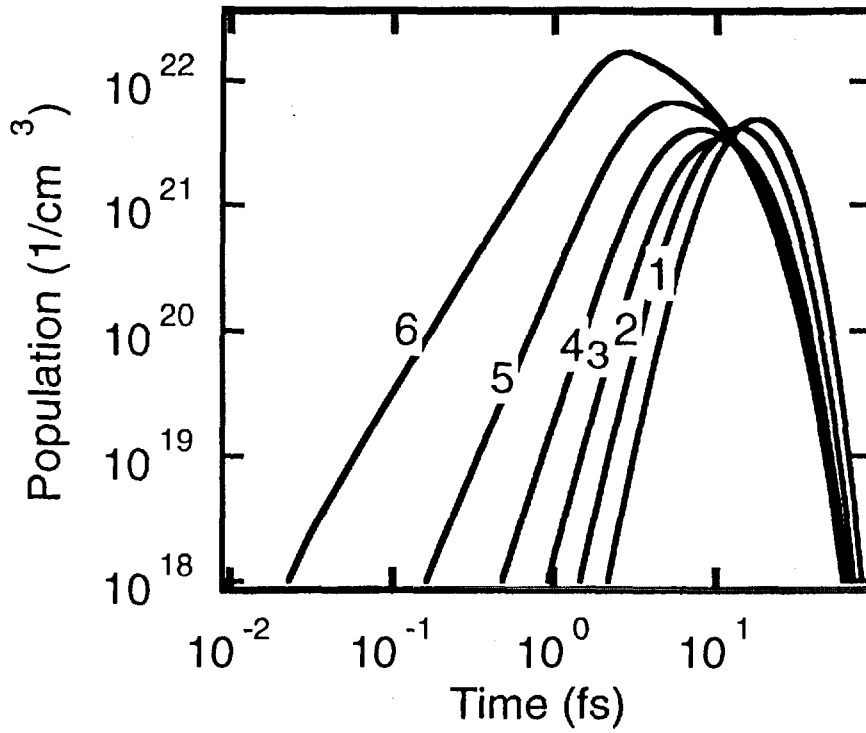


Fig.7(c) The same as Fig.7(a) but for lower states.

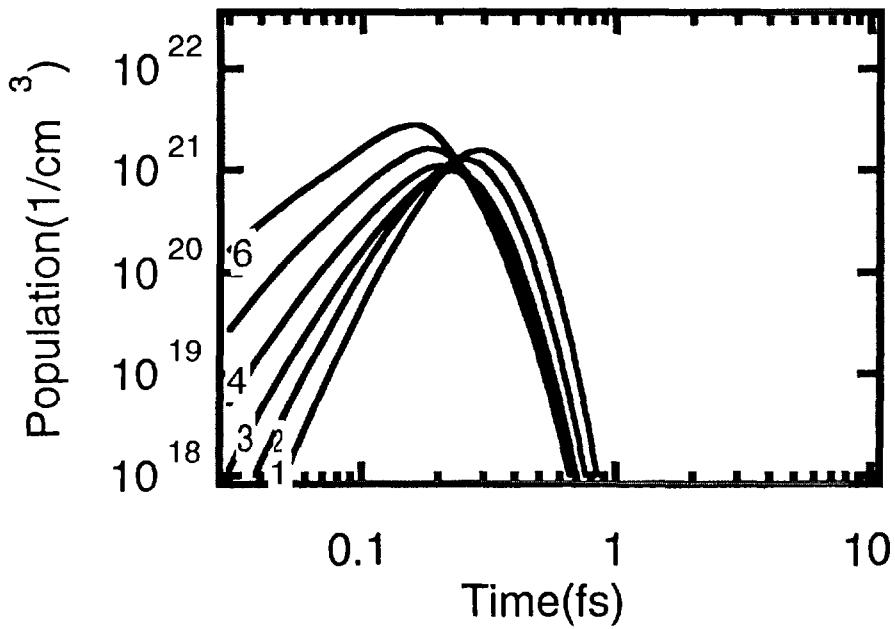


Fig.7(d) The same as Fig.7(b) but for lower states.

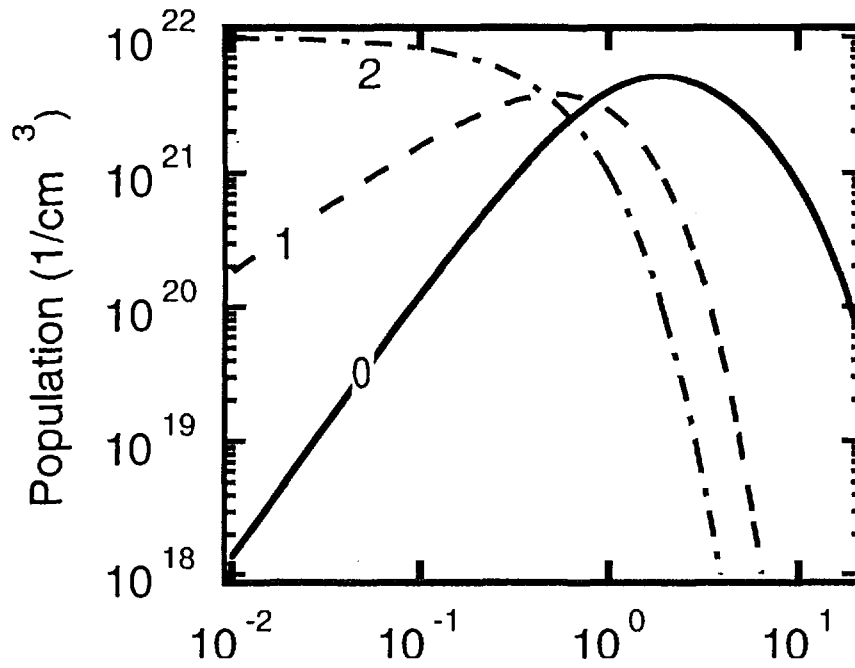


Fig.7(e) The same as Fig.7(a) for carbon atoms and $I=10^{18}$ W/cm². The figures correspond to the number of 1s electrons.

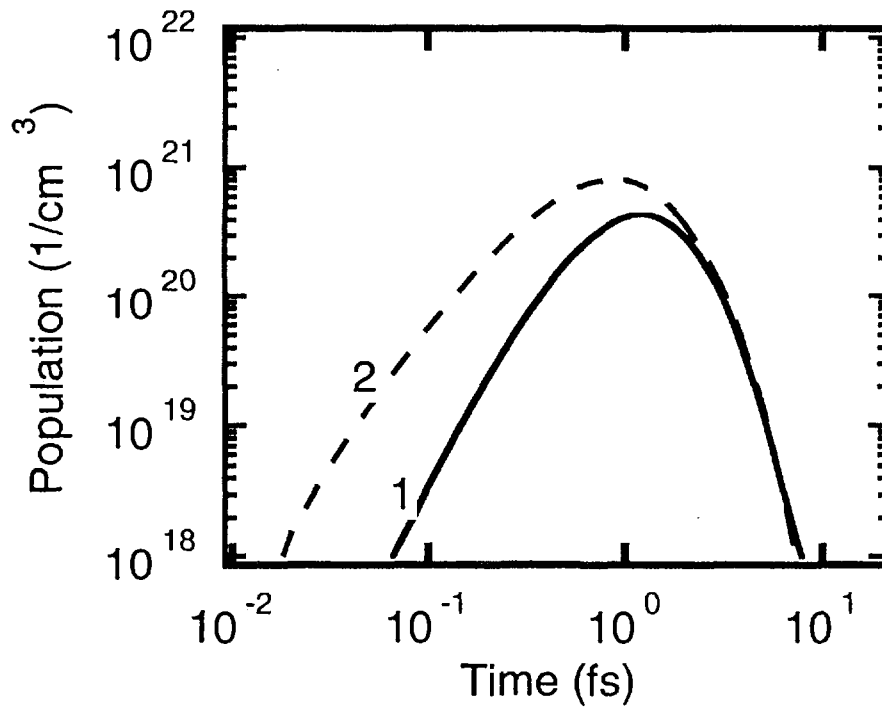


Fig.7 (f) The same as Fig.7(e) but for lower states.

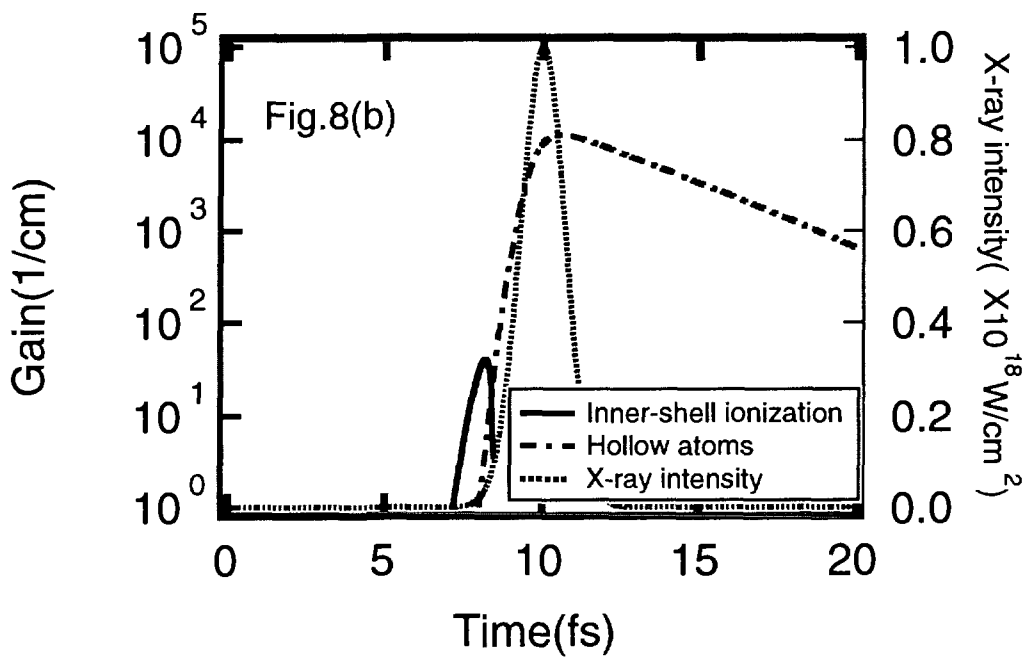
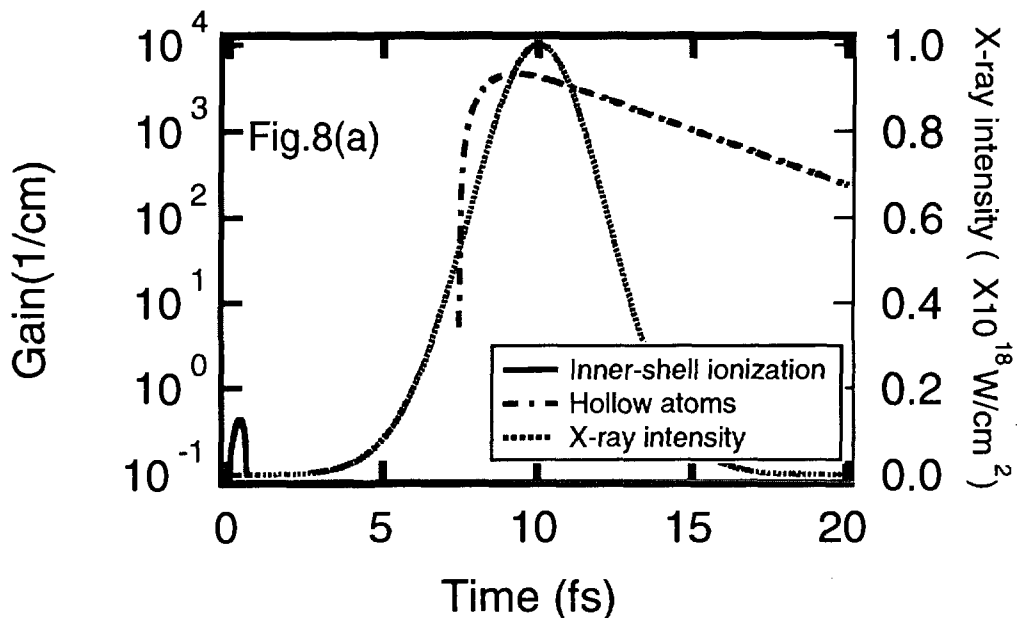


Fig.8 Gain vs. time for time-dependent intensity of X-ray.

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N·m
工率, 放射束	ワット	W	J/s
電気量, 電荷	クーロン	C	A·s
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラド	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束度	ルーメン	lm	cd·sr
照射度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量等量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

1 eV=1.60218×10⁻¹⁹J
1 u=1.66054×10⁻²⁷kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バーン	b
バル	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

1 Å=0.1nm=10⁻¹⁰m
1 b=100fm²=10⁻²⁸m²
1 bar=0.1MPa=10⁵Pa
1 Gal=1cm/s²=10⁻²m/s²
1 Ci=3.7×10¹⁰Bq
1 R=2.58×10⁻⁴C/kg
1 rad=1cGy=10⁻²Gy
1 rem=1cSv=10⁻²Sv

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版, 国際度量衡局1985年刊行による。ただし, 1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里, ノット, アール, ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは, JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- E,C関係理事会指令では bar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換算表

力	N(=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘度 1 Pa·s(N·s/m²)=10 P(ポアズ)(g/(cm·s))

動粘度 1 m²/s=10⁴St(ストークス)(cm²/s)

圧	MPa(=10bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
	1	10.1972	9.86923	7.50062×10 ³	145.038
力	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322×10 ⁻⁴	1.35951×10 ⁻³	1.31579×10 ⁻³	1	1.93368×10 ⁻²
	6.89476×10 ⁻³	7.03070×10 ⁻²	6.80460×10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft·lbf	eV
	1	0.101972	2.77778×10 ⁻⁷	0.238889	9.47813×10 ⁻⁴	0.737562	6.24150×10 ¹⁸
	9.80665	1	2.72407×10 ⁻⁶	2.34270	9.29487×10 ⁻³	7.23301	6.12082×10 ¹⁹
	3.6×10 ⁶	3.67098×10 ⁵	1	8.59999×10 ⁵	3412.13	2.65522×10 ⁶	2.24694×10 ²⁵
	4.18605	0.426858	1.16279×10 ⁻⁶	1	3.96759×10 ⁻³	3.08747	2.61272×10 ¹⁹
	1055.06	107.586	2.93072×10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515×10 ²¹
	1.35582	0.138255	3.76616×10 ⁻⁷	0.323890	1.28506×10 ⁻³	1	8.46233×10 ¹⁸
	1.60218×10 ⁻¹⁹	1.63377×10 ⁻²⁰	4.45050×10 ⁻²⁶	3.82743×10 ⁻²⁰	1.51857×10 ⁻²²	1.18171×10 ⁻¹⁹	1

1 cal= 4.18605J (計量法)
= 4.184J (熱化学)
= 4.1855J (15°C)
= 4.1868J (国際蒸気表)
仕事率 1 PS(仏馬力)
= 75 kgf·m/s
= 735.499W

放射能	Bq	Ci
	1	2.70270×10 ⁻¹¹
	3.7×10 ¹⁰	1

吸収線量	Gy	rad
	1	100
	0.01	1

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58×10 ⁻⁴	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

ナトリウム原子、炭素原子の内殻電離X線発生法における超高速原子過程