

O₂ ガスの電子衝突断面積

Electron collision cross sections of O₂ gas

室蘭工大¹, 学振特別研究員² °川口 悟^{1,2}, 高橋 一弘¹, 佐藤 孝紀¹

Muroran I.T.¹, JSPS Research Fellow² °S. Kawaguchi^{1,2}, K. Takahashi¹, and K. Satoh¹

E-mail: s2124049@mmm.muroran-it.ac.jp

1. はじめに

電子と気体分子の衝突反応は、放電プラズマの生成・維持において重要な役割を担う荷電種を生成するとともに、各種プラズマ応用技術に寄与する活性な種の生成反応の起点となる。電子衝突断面積は、電子と気体分子の衝突確率を表す最も基礎的な物理量であり、様々な気体に関して、正確な電子衝突断面積を整備することが望まれている。

本研究では、O₂ ガスの正確な電子衝突断面積セットを提案することを目的とする。O₂ ガスの電子衝突断面積セットに関しては、電気学会が推奨する断面積セット^[1], Alves *et al.*^[2]の断面積セットなどが報告されている。これらの断面積セットは、断面積セットを用いて得られる電子輸送係数の計算値と実測値の一致によって妥当性が示されている。一方、電気学会が推奨する断面積セットについては、電離係数 α の計算値を実測値と比較しておらず、Alves *et al.*の断面積セットについては、換算電界 E/N [E :電界, N :気体分子数密度]が 300 Td 以上の範囲における α の計算値を実測値と比較しておらず、断面積セットの妥当性が十分に検証されているとは限らない。ここでは、広範囲の E/N において電子輸送係数の計算値を実測値と比較することで従来の電子衝突断面積セットの妥当性を再評価するとともに、実測値を再現する電子輸送係数が得られる電子衝突断面積セットを推定した結果について報告する。

2. 計算方法および電子衝突断面積

Monte Carlo simulation によって O₂ ガス中の電子輸送係数を正確に導出する。電子励起衝突と電離衝突においては、電子の散乱方向依存性を考慮し、その他の衝突においては等方散乱を仮定する。回転(脱)励起衝突周波数 $\nu_{J \rightarrow J+2}$ の計算においては、回転準位 J に存在する O₂ 分子の数密度を N と $\delta_J = C(2J+1)\exp(-\epsilon_J/k_B T_g)$ [ϵ_J :回転準位 J の回転エネルギー, k_B : Boltzmann 定数, T_g : ガス温度, C : 規格化定数]の積で考慮する。また、電離衝突後に生成される電子 e_{ej} のエネルギーを、Opal *et al.*^[3]が報告した e_{ej} のエネルギー分布の実測値に基づいて決定する。

Fig. 1 は本研究で推定した O₂ ガスの電子衝突断面積セットを示す。回転(脱)励起断面積 $q_{J \rightarrow J+2}$ については、15 種類の回転励起 $J \rightarrow J+2$ [$J = 1, 3, 5, \dots, 29$]と 15 種類の回転脱励起 $J \rightarrow J-2$ [$J = 3, 5, 7, \dots, 31$]を考慮しており、Born 近似による理論計算値^[4]を使用した。振動励起断面積 q_{vib} については、4 種類の振動励起 $v = 0 \rightarrow v' [v' = 1, 2, 3, 4]$ を考慮しており、電気学会が推奨する q_{vib} をそのまま使用した。また、電子付着断面積 q_a についても、電気学会が推奨する q_a を用いた。電子励起断面積 q_{ex} については、7 種類の電子励起 [$a^1\Delta_g$, $b^1\Sigma_g^+$, Herzberg pseudocontinuum ($c^1\Sigma_u^+ + A^6\Delta_u + A^3\Sigma_u^+$), Shumann-Runge continuum, Longest band, Second band, higher levels]を考慮しており、 $a^1\Delta_g$ と $b^1\Sigma_g^+$ に関する q_{ex} については Shyn *et al.*^[5]の実測値, Herzberg pseudocontinuum に関する q_{ex} については, Green *et al.*^[6]の実測値を基にそれぞれの断面積の形状を決定した。Shumann-Runge continuum に関する q_{ex} については、 $\epsilon \leq 300$ eV においては, Wakiya^[7]の実測値を通るように形状を決定し、300 eV $< \epsilon$ においては, Suzuki *et al.*^[8]が報告した BEf-scaling による理論計算値を使用した。Longest band および Second band に関する q_{ex} については、それぞれ Campbell *et al.*^[9]の推定値およ

び Suzuki *et al.*の BEf-scaling による理論計算値を使用した。Second band 以降の電子励起(higher levels)に関する断面積については、しきい値が 10.57 eV の q_{ex} で代表し、電離係数の実測値を再現するように、この断面積の形状を推定した。 q_i については、3 種類の部分電離断面積(O_2^+ , O^+ , O^{2+})を考慮し、それらを断面積の形状を Lindsay and Mangan^[10]の実測値に基づいて決定した。弾性衝突運動量移行断面積 q_m については、電気学会が推奨する q_m をベースとしており、電子ドリフト速度や縦方向拡散係数の実測値を再現するために、 $\epsilon < 0.24$ eV および 7 eV $< \epsilon$ の範囲の q_m を修正している。

3. 計算結果

Fig. 2 は Monte Carlo simulation によって得られた O₂ ガス中の電離係数 α/N の計算値を実測値^[11]と併せて示す。本研究で推定した断面積セットによる計算値は実測値に近い値となっている。一方、電気学会が推奨する断面積セットと Alves *et al.*の断面積セットによる計算値は、それぞれ 200 Td $< E/N < 1,600$ Td と $E/N > 300$ Td において実測値と一致していない。

本研究は JSPS 科研費 JP17J11124 の助成を受けて実施された。

参考文献

- [1] Y. Sakai: Appl. Surf. Sci. **192**, 327
- [2] L.L. Alves *et al.*: Eur. Phys. J. D **70**, 124 (2016)
- [3] C.B. Opal *et al.*: At. Data **4**, 209 (1972)
- [4] M.A. Ridenti *et al.*: Plasma Sources Sci. Technol. **24**, 035002 (2015)
- [5] T.W. Shyn and C.J. Sweeney: Phys. Rev. A **47**, 1006 (1993)
- [6] M.A. Green *et al.*: J. Phys. B **34**, L157 (2001)
- [7] K. Wakiya: J. Phys. B **11**, 3913 (1978)
- [8] D. Suzuki *et al.*: J. Chem. Phys. **134**, 064311 (2011)
- [9] L. Campbell *et al.*: Eur. Phys. J. D **66**, 26 (2012)
- [10] B. G. Lindsay and M. A. Mangan: "Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions" (Springer, New York 2003) Vol.1/17C
- [11] K. Yoshida *et al.*: J. Phys. D **29**, 2124 (1996)

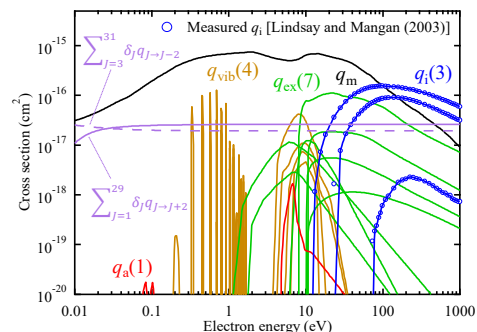


Fig. 1. Electron collision cross sections of O₂ gas.

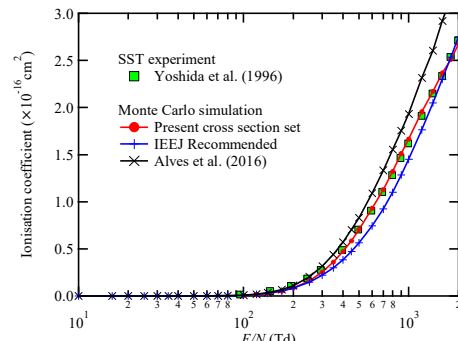


Fig. 2. Ionisation coefficient α/N in O₂ gas as a function of E/N .