

N₂ ガスの電子衝突断面積セットの推定

Estimation of Electron collision cross section set for N₂ 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

電子とガス分子の衝突反応は、放電の生成・維持を担う荷電種を生成するとともに、プラズマ中における化学反応の起点となる。電子衝突断面積は電子とガス分子の衝突確率を表すデータであり、プラズマシミュレーションで必要となる電子輸送係数や反応レート係数の導出にも用いられる。このため、プラズマ応用において用いられる種々の気体に関して、正確な電子衝突断面積セットを整備することが要求されている。

本研究の目的は、N₂ ガスの正確な電子衝突断面積セットを提案することである。これまで、広範囲の換算電界において電子輸送係数(電子ドリフト速度、縦方向拡散係数、電離係数)の実測値を再現する電子衝突断面積セットを推定した^[1]。また、2,000 Td 以上における電離係数の実測値を再現するためには、非弾性衝突後の電子の散乱方向依存性と電離衝突で生成される電子のエネルギー分布の考慮が必要であることを明らかにした。ここでは、Cosby^[2]が実測値を基に推奨した中性解離断面積の総和を考慮した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。

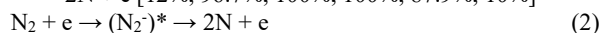
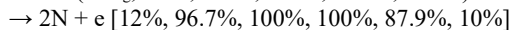
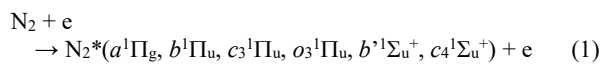
2. 計算方法および電子衝突断面積

Monte Carlo simulation (MCS)によって、N₂ ガス中の電子輸送係数を求める。弾性、回転(脱)励起、振動励起衝突においては等方散乱を仮定し、電離衝突によって生成された電子も等方的に放出されたとする。その他の非弾性衝突においては、衝突後の電子の散乱方向を微分断面積^[4]によって決定する。電離衝突後の残存エネルギーについては、Stojanović and Petrović^[3]が報告した式に従って、生成電子と散乱電子に分配する。回転(脱)励起衝突においては、N₂ 分子の回転励起状態の分布を考慮した次式によって衝突周波数を計算する。ここで、 ε は電子のエネルギー、 v_e は電子の速さ、 N は気体分子数密度、 δJ は規格化された Boltzmann 因子であり、 $N\delta J$ は回転状態 J に存在する N₂ 分子の数密度を表す。

$$\nu_{J \rightarrow J \pm 2} = N \delta J_{J \rightarrow J \pm 2}(\varepsilon) v_e \quad (1)$$

Fig. 1 は推定した N₂ ガスの電子衝突断面積セットを示す。ただし、中性解離断面積 q_{nd} については、総和 Σq_{nd} で示しており、回転励起断面積 $q_{J \rightarrow J \pm 2}$ および回転脱励起断面積 $q_{J \rightarrow J-2}$ に関しては、 δJ を乗じた総和 $\Sigma_{J=0}^{30} \delta J_{J \rightarrow J \pm 2}$ および $\Sigma_{J=2}^{30} \delta J_{J \rightarrow J-2}$ でそれぞれ示している。 $q_{J \rightarrow J \pm 2}$ および $q_{J \rightarrow J-2}$ については、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、Laporta *et al.*^[5]が理論計算によって求めた $v = 0 \rightarrow v = 1, 2, 3, \dots, 10$ に関する 10 種類の断面積を使用した。ただし、 $v = 0 \rightarrow v = 1$ に関する q_{vib} については、Sohn *et al.*^[6]の実測値に基づいて、 $\varepsilon \leq 2$ eV における断面積の形状を修正している。電離断面積 q_i については、Shemansky and Liu^[7]が報告した N₂⁺ ($X^1\Sigma_g^+$), N₂⁺ ($A^2\Pi_u$), N₂⁺ ($B^2\Sigma_u^+$) の生成に関する 3 種類の断面積および Lindsay and Mangan^[8]が報告した N⁺, N²⁺ の生成に関する 2 種類の断面積に基づいて断面積の形状を決定した。弾性衝突運動量移行断面積 q_m に関しては、 q_m と $\Sigma \delta J_{J \rightarrow J \pm 2}$ の和 $q_{vib, mom}$ が実測値として報告されているため、 $q_{vib, mom}$ から $\Sigma \delta J_{J \rightarrow J \pm 2}$ を引くことで求めた。 $q_{vib, mom}$ については、 $\varepsilon < 1.5$ eV においては Alves^[9]の $q_{vib, mom}$ を使用し、その他の範囲では、実測値^[10]を通るように決定した。電子励起断面積 q_{ex} については、17 種類の電子励起 ($A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$, $a^1\Sigma_u^-$, $a^1\Pi_g$,

$w^1\Delta_u$, $C^3\Pi_u$, $E^3\Sigma_g^+$, $a'^1\Sigma_g^+$, $b^1\Pi_u$, $c^3\Pi_u$, $o^3\Pi_u$, $b^1\Sigma_u^+$, $c^4\Sigma_u^+$, $G^3\Pi_u$, $F^3\Pi_u$) に関する実測値^[11]に基づいて断面積の形状を決定した。中性解離断面積に関しては、次の 3 種類の解離反応に関する断面積を考慮した。ただし、丸括弧内に示した各電子励起状態の N₂ 分子が解離する確率(分岐率)を角括弧内にそれぞれ示している。



反応(1)に関する断面積については、 $a^1\Pi_g$, $b^1\Pi_u$, $c^3\Pi_u$, $o^3\Pi_u$, $b^1\Sigma_u^+$, $c^4\Sigma_u^+$ に関する q_{ex} に分岐率を乗じて求め、反応(2)に関する断面積については、Spence and Burrow^[13]の実測値を使用した。反応(3)に関する断面積については、反応(1)–(3)に関する断面積の和が、Cosby が推奨する Σq_{nd} と合うように形状を決定した。

3. 計算結果

推定した電子衝突断面積セットを用いた MCS によって得られた N₂ ガス中の電子輸送係数の計算値は広範囲の換算電界において実測値と一致することがわかり、推定した電子衝突断面積セットの妥当性を確認できた。

本研究は JSPS 科研費 JP17J11124 の助成を受けて実施されたものである。

参考文献

- [1] 川口ら: 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 8p-A402-1 (2017).
- [2] P. C. Cosby: J. Chem. Phys. **98**, 9544 (1993).
- [3] V. D. Stojanović and Z. Lj Petrović: J. Phys. D **31**, 834 (1998).
- [4] E. Gerjuoy and S. Stein: Phys. Rev. **67**, 1671 (1955).
- [5] V. Laporta *et al.*: Plasma Sources. Sci. Technol. **23**, 065002 (2014).
- [6] W. Sohn *et al.*: J. Phys. B **19**, 4016 (1986).
- [7] D. E. Shemansky and X. Liu: J. Geophys. Res. **110**, A07307 (2005).
- [8] B. G. Lindsay and M. A. Mangan: "Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions" (Springer, New York 2003) Vol.1/17C.
- [9] L. L. Alves: J. Phys.: Conf. Ser. **565**, 012007 (2014).
- [10] S. Trajmar *et al.*: Phys. Rep. **97**, 219 (1983); M. J. Brunger *et al.*: Phys. Rev. A **37**, 3570 (1988); L. Campbell *et al.*: J. Phys. B **34**, 1185 (2001); P. V. Johnson *et al.*: J. Geophys. Res. **110**, A11311 (2005); C. P. Malone *et al.*: J. Phys. B **42**, 225202 (2009); C. P. Malone *et al.*: Phys. Rev. A **85**, 062704 (2012).
- [11] S. K. Srivasta *et al.*: J. Chem. Phys. **64**, 1340 (1976); T. W. Shyn and G. R. Carignan: Phys. Rev. A **22**, 923 (1980); W. Sun *et al.*: Phys. Rev. A **52**, 1229 (1995); J. Muse *et al.*: J. Phys. B **41**, 095203 (2008); I. Linert and M. Zubeck: J. Phys. B **42**, 085203 (2009).
- [12] C. P. Malone *et al.*: Phys. Rev. A **85**, 062704 (2012); J. M. Ajello and D. E. Shemansky: J. Geophys. Res. Space Phys. **90**, 9845 (1985); J. M. Ajello *et al.*: Phys. Rev. A **40**, 3524 (1989).
- [13] D. Spence and P. D. Burrow: J. Phys. B **12**, L179 (2005).

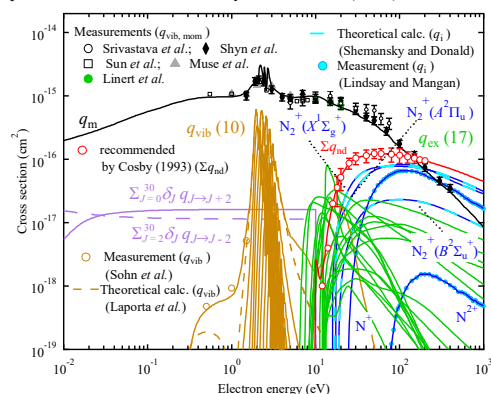


Fig. 1. Electron collision cross section set for N₂ gas.