



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Xeガス中の電子スオームパラメータ : ボルツマン方程式解析
Author(s)	伊達, 広行; 酒井, 洋輔; 田頭, 博昭
Citation	北海道大学医療技術短期大学部紀要, 1, 85-92
Issue Date	1988-10
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/37489
Type	departmental bulletin paper
File Information	1_85-92.pdf



Xe ガス中の電子スオームパラメータ： ボルツマン方程式解析

伊達 広行, 酒井 洋輔*, 田頭 博昭*

Electron Swarm Parameters in Xenon : Boltzmann Equation Analysis

Hiroyuki Date, Yosuke Sakai* and Hiroaki Tagashira*

Abstract

A set of electron collision cross-sections of Xe is determined by the steady-state-Townsend (SST) method of Boltzmann equation. The time-of-flight (TOF) parameters are obtained using density gradient expansion of the distribution function. The ionization coefficient calculated by the TOF parameters is compared with the one by the SST.

要 旨

本解析では, Xe の電子衝突断面積を, 定常タウンゼント (SST) 二項近似ボルツマン方程式解析により, ドリフト速度と電離係数の計算値が実測値と良く一致するように決定した。また, 電子スオームの重心のドリフト速度や縦方向拡散係数などのTOFパラメータを算出した。さらに, その値を用いてSSTパラメータを求め, 先のSST法による値と比較した。

北海道大学医療技術短期大学部診療放射線技術学科

*北海道大学工学部電気工学科

Department of Radiological Technology, College of Medical Technology, Hokkaido University

*Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Hokkaido University

1. はじめに

Xe ガスは、医療用CTをはじめとして、現在 XeCl エキシマレーザーやキセノンフラッシュランプなどに用いられている重要な希ガスである。このガス中における電子衝突断面積や電子スオームパラメータを知るとは、基礎的な物性を知ると共に、マクロな反応過程を定量的に評価する上できわめて重要であると考えられる。

筆者らはこれまで、気体放電中における電子スオームのドリフト速度や電離係数、電子拡散係数などのパラメータを、気体分子と電子のミクロな衝突過程から、ボルツマン方程式を用いて理論的に解析してきた。本研究では、電離が十分に起こる比較的高い換算電界 (E/N) 下において、Xe の電子衝突断面積を、定常タウンゼント法 (SST) 二項近似ボルツマン方程式解析 (Thomas, 1969) によって、ドリフト速度とタウンゼント一次電離係数の計算値が、実測値のそれらと良く一致するように決定する。その後、この断面積を用いて、time-of-flight (TOF) パラメータを求める。さらに、TOFパラメータ解析をもとに、SST法による結果との比較、検討を行う。

2. 理論

2-1 流体力学的近似 (hydrodynamic regime)

位置 $\mathbf{r}$ と速度 $\mathbf{v}$ と時間 t に依存する電子の分布関数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ は、よく知られた以下のボルツマン方程式に従う、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = J(f) \quad (1)$$

ここで、 e/m は電子の比電荷、 $\mathbf{E}$ は電界、 $J(f)$ は、衝突項を表す。また、 $\nabla_{\mathbf{r}}$ と $\nabla_{\mathbf{v}}$ は、次のような演算子を意味する。

$$\nabla_{\mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}, \quad \nabla_{\mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial v_x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial v_y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial v_z} \mathbf{k}$$

流体力学的近似 (例えば Kumar et al., 1980) においては、解 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ に対し次のような形が仮定される；

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = \sum \mathbf{g}^k(\mathbf{v}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}^{(k)} n(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

ここで、 $n(\mathbf{r}, t)$ は電子数密度を表し、 $n(\mathbf{r}, t)$ の密度勾配のべきに係数として乗ぜられる速度分布関数を表す。一方、電子流連続の式の厳密な表式、

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = R_{ia}(\mathbf{r}, t)n(\mathbf{r}, t) - \nabla_{\mathbf{r}}(\mathbf{v}_d(\mathbf{r}, t)n(\mathbf{r}, t)) \quad (3)$$

を Tagashira ら (1977) に従って展開すると、以下ようになる；

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = R_{ia}(t)n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v}_d(t) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) + \mathbf{D}(t) \nabla_{\mathbf{r}}^2 n(\mathbf{r}, t) - + \dots \quad (4)$$

ここで、 R_{ia} は実効電離周波数、 $\mathbf{v}_d$ はドリフト速度（ただし、スオームの重心のドリフト速度）ベクトル、 $\mathbf{D}$ は拡散テンソルを表す。(2)と(4)式を(1)式に代入し、電子密度勾配の各べきについてまとめると、各関数がベクトル速度 $\mathbf{v}$ のみに依存する以下のような階層構造の連立方程式群が得られる。

$$R_{ia} \mathbf{g}^0(\mathbf{v}) + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \mathbf{g}^0(\mathbf{v}) = J(\mathbf{g}^0) \quad (5)$$

$$R_{ia} \mathbf{g}^1(\mathbf{v}) + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \mathbf{g}^1(\mathbf{v}) = J(\mathbf{g}^1) - (\mathbf{v} - \mathbf{v}_d) \mathbf{g}^0(\mathbf{v})$$

$$R_{ia} \mathbf{g}^2(\mathbf{v}) + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \mathbf{g}^2(\mathbf{v}) = J(\mathbf{g}^2) - (\mathbf{v} - \mathbf{v}_d) \mathbf{g}^1(\mathbf{v}) - \mathbf{D} \mathbf{g}^0(\mathbf{v})$$

....

ここで、(4) 式の各パラメータは次のように与えられる。

$$R_{ia} = \int \mathbf{v} N q_{ia}(\mathbf{v}) \mathbf{g}^0(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (6)$$

$$\mathbf{v}_d = \mathbf{W}_r = \int \mathbf{v} \mathbf{g}^0(\mathbf{v}) d\mathbf{v} - \int \mathbf{v} N q_{ia}(\mathbf{v}) \mathbf{g}^1(\mathbf{v}) d\mathbf{v}$$

$$\mathbf{D} = - \int \mathbf{v} \mathbf{g}^1(\mathbf{v}) d\mathbf{v} + \int \mathbf{v} N q_{ia}(\mathbf{v}) \mathbf{g}^2(\mathbf{v}) d\mathbf{v}$$

ここで、 $q_{ia}(\mathbf{v})$ は実効電離断面積を表わす。

2-2 定常タウンゼント (steady state Townsend; SST) 法

今、Z 軸方向に一樣な電界 E を仮定する。Z 軸に対して垂直方向の密度対称性を考慮すると、 x と y に関する積分で、(2), (4) 式は次のようになる。

$$f(\mathbf{v}, z, t) = \sum g^k(\mathbf{v}) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^k n(z, t) \quad (7-1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(z, t)}{\partial z} &= R_{ia}(t) n(z, t) - V_d(t) \frac{\partial}{\partial z} n(z, t) \\ &\quad + D_L(t) \frac{\partial^2}{\partial z^2} n(z, t) - + \dots \end{aligned} \quad (7-2)$$

さらに、空間的位置における電子密度が時間に依存しない定常状態を仮定すると、

$$\frac{\partial n(z, t)}{\partial z} = \alpha n(z, t), \quad \frac{\partial n(z, t)}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

が成立し、

$$0 = R_{ia} - V_d \alpha + D_L \alpha^2 - + \dots \quad (9)$$

が得られる。ここで、 α はタウンゼントの一次 (実効) 電離係数、 D_L は縦方向拡散係数を表す。(9)式に

より、 α は R_{ia} や V_d , D_L などのパラメータを係数とする高次方程式の解となっていることがわかる。

2-3 ルジャンドル（球面調和関数）展開

2-1 における (5) 式は、速度ベクトル $\mathbf{v}$ の関数であるが、電界軸 E に関する対称性を考慮すると、スカラー v とその E に対する方向角 θ の二変数の関数式となる。従来こうした関数は、球対称な v の関数を係数として、 $\cos \theta$ を変数とする多項式（ルジャンドルの多項式）によって展開し、その数項を考慮する近似により解折されてきた（例えば Pichford, 1982）。一方、Segur ら（1984）は、 v と θ の二次元場において、数値的に直接 (5) 式の方程式を解いてその解を得ている。二項展開近似法は、前者のルジャンドル展開法において、最初の二項のみを考慮するものである（以下 TE 法と呼ぶことにする）が、本解折では、これを時間に依存しない定常状態（SST）を仮定した解折に用いる他、電子数の密度勾配（density gradient）のべきで展開した (2) 式（以下 DG 法と呼ぶことにする）を用いて得られる密度の高次微分項の係数としての速度方程式 ((5) 式) にも適用して、TOF パラメータ ((6) 式) を求める。

ルジャンドル展開法によると、(7-1) 式は次式のようにおける、

$$f(\mathbf{v}, z, t) = \sum_k \sum_l g_l^k(v) P_l(\cos \theta) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^k n(z, t) \quad (10)$$

一方、2-2 で示した定常状態での条件を考慮すると、

$$g_{SST}(\mathbf{v}, z) = g_{SST}(\mathbf{v}) n_0 \exp(\alpha z) = g_{SST}(\mathbf{v}) n(z) \quad (11-1)$$

$$g_{SST}(\mathbf{v}) = g^0(v) + \alpha g_z^1(v) + \alpha^2 g_{zz}^2(v) + \dots \quad (11-2)$$

のようになる。 $g_{SST}(\mathbf{v})$ も $g^k(v)$ もルジャンドル展開すると、

$$g_{SST}(\mathbf{v}) = \sum_l g_{SSTl}(v) P_l(\cos \theta) \quad (12-1)$$

$$g^k(v) = \sum_l g_l^k(v) P_l(\cos \theta) \quad (12-2)$$

従って、 g_{SSTl} と g_l^k との関係は

$$g_{SSTl}(v) = \sum_k g_l^k(v) \alpha^k \quad (13)$$

のようになる。SST 法での二項展開近似法は、 $g_{SST}(\mathbf{v})$ のルジャンドル展開の最初の二項をとったものに対応する。

3. 電子衝突断面積

Xe の電子衝突断面積は、他の希ガス (Ne, Ar, Kr など) と同様に比較的多くの報告がなされている。しかし、広い範囲にわたっての電子入射エネルギーに対する断面積値をみた場合、報告者間の

値のバラツキが少なくなく、また断面積値が未知のエネルギー領域もある。運動量移行、電離、励起の各断面積について、本解析で用いたデータを以下に示す。

q_m (運動量移行断面積)

: Frost と Phelps (1964)
 Sin Fai Lam (1982)
 McEachran と Stauffer (1984)
 Register et al. (1986)

q_i (電離断面積)

: Rapp と Englander-Golden (1965)

q_{exm} (準安定励起準位への総和断面積)

: Mason と Newell (1987)

q_{ext} (全励起断面積)

: de Heer et al. (1979)

電離については、Rapp ら (1965) のものをそのまま用いた。励起は、各励起準位個々への励起断面積の報告はみられないが、全励起準位への総和および準安定励起準位への総和断面積の報告があるので、準安定励起準位の総和とそれ以外の準位への総和断面積の二つに分離した。準安定励起準位への総和断面積は、Mason ら (1987) の値を0.6倍して用いた。運動移行断面積は、各報告者の値がなめらかに、かつ計算された電離係数とドリフト速度が実測値のそれらとよく一致するように修正された。計算値との比較に用いた電離係数は、Kruithof (1940), Bhattacharya (1976) 及び Jacques (1986) らの測定値である。また、ドリフト速度の実測値は、Pack (1962), Bowe (1965), Cumpstey (1980) 及び Brooks (1982) らのものを用いた。衝突断面積を求めるための計算は、基本的に Thomas (1969) の方法と同様な、SSTにおけるTE法によって行われた。

4. 結果と考察

本解析で得られた Xe の電子衝突断面積を図1に示す。

SST法で計算されたドリフト速度と電離係数を、図2と図3の実線で示す。

ドリフト速度は報告されている測定値に良く一致していることがわかる。電離係数については、Kruithof (1940), Bhattacharya (1976) 及び Jacques (1986) らの報告値のばらつきの範囲内におさまるように、断面積値が決定された。この解析では、ドリフト速度に対しては、入射電子エネルギーが5～10 eVでの運動量移行断面積の値が、電離係数に対しては、10 eV付近の励起断面積の値が図に示したエネルギー範囲で支配的であり、これを変化させることにより、実測値と良く一致させることができることがわかった。Mason ら (1987) の準安定励起準位への総和断面積は、そのままでは値が大きすぎて他の断面積を変化させても電離係数が小さな値をとるため、その断面積形状を尊重し、形を変えずに全体を0.6倍して用いた。

次に、上で得た衝突断面積を用いて、電離が十分に起きる $E/N = 100 \text{ Td}$ 以上において、(5) 式を解いてTOFパラメータを求めた結果について述べる。3図に、 W_v と W_r の計算値をあわせて載せてある。 W_v は (6-2) 式の右辺第一項に対応したスオーム中の電子の速度空間での平均値として

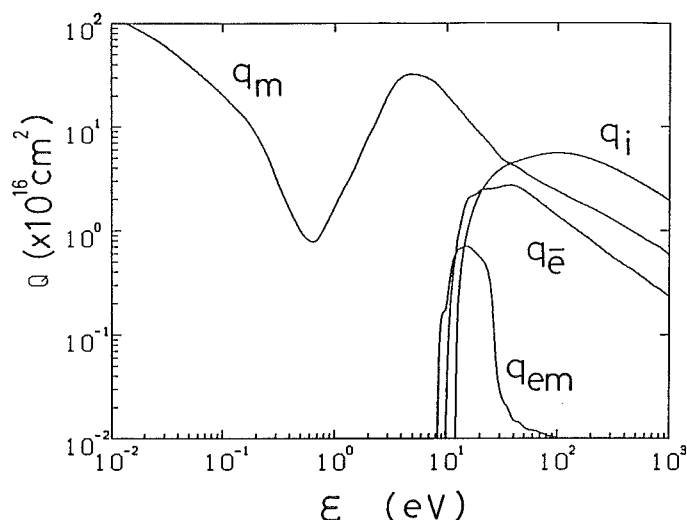


図1 Xeの電子衝突断面積： q_m …運動量移行断面積
 q_i …電離断面積， q_{em} …準安定励起準位への総断面積
 q_{e-} … q_{em} 以外の総励起断面積

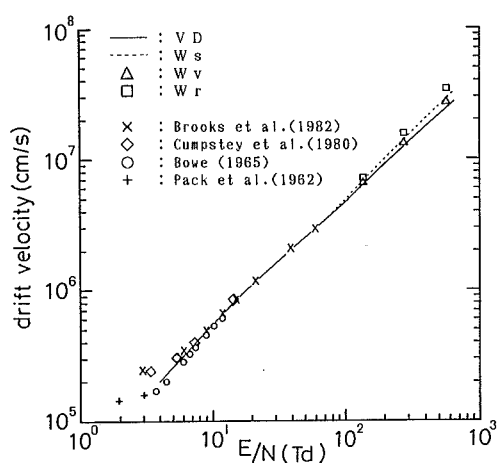


図2 ドリフト速度の計算値と実測値の比較

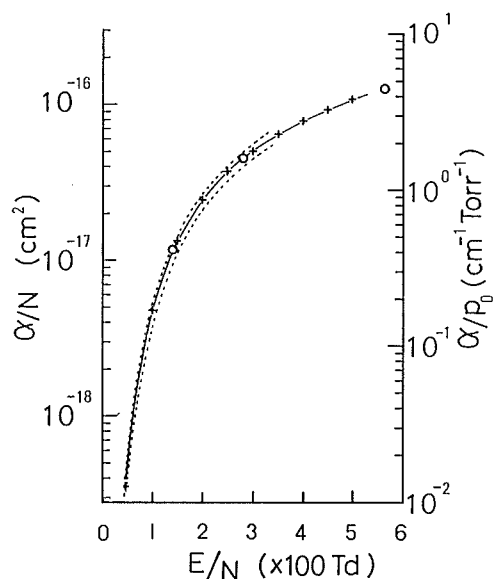


図3 電離係数 α/N の計算値と実測値の比較：
 —X— は SST 法による計算結果
 ○ は TOF 法による計算結果
 点線は，Kruithof (1940)，Bhattacharya (1976) 及び Jacques (1986) らの実測値の範囲

定義されるドリフト速度を表し， W_r は電子スオームの重心の移動速度を表す。(9) 式において，右辺の第三項までを用い，SSTにおける拡散を考慮したドリフト速度VDを求めると，

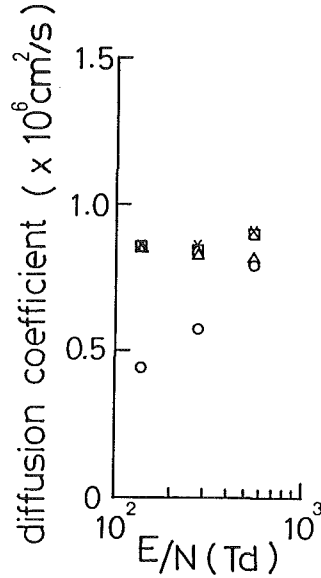


図4 拡散係数の計算値の比較：X…D_s, □…D_{vL}, △…D_v, ○…D_L

$$VD = R_{ia} / \alpha \approx W_r - \alpha D_L \quad (14)$$

のようになる。SST法では、 W_r のかわりに W_s を、 D_L には D_s を用いてVDを求めており、図2が示すように、これらの各ドリフト速度はみな異なっている。 W_s 及び D_s は、(12-1)式から得られるドリフト速度と拡散係数である。拡散係数のSST法による D_s 、DG法による D_v 、 D_{vL} 及び D_L の計算結果を図4に示す。

D_s と D_v 、 D_{vL} は比較的近い値を示すが、 D_L は $E/N=141, 283 \text{ Td}$ で30%~50%程度小さな値となることがわかる。(14)式と同様に(9)式を用いて、電離係数を導出すると

$$\alpha = \frac{W_r - \sqrt{W_r^2 - 4D_L R_{ia}}}{2D_L} \quad (15)$$

のようになる。(15)式を用いた電離係数の計算結果を、図3に○印で示す。SSTではドリフト速度と同様に、上式の W_r と D_L に W_s 、 D_s をそれぞれ用いていたわけであるが、 D_L と D_s の値が図4のように大きく異なっているにもかかわらず、電離係数の値は非常に良く一致していることがわかる。DG法は、電子の空間的密度変化の速度分布への影響をも考慮した、SST法を含む一般的な方法であり、(3)(4)式をもとに導かれる物理的な定義の明確なドリフト速度 (Tagashira et al., 1977) や電離係数の厳密な解析の表現式を与えるもので、実用上極めて重要な方法である。(9)式で α についての3乗以上の項を無視しているなどの近似を行っているが、(9)式の α の3乗以上の係数が極めて小さくなるという報告 (Kitamori et al., 1980) があることなどから、DG法による電離係数の計算値は妥当なものと考えられる。従って、SST法による電離係数との良い一致は、SST法をも含めたDG法の理論体

系に自己矛盾のないことを示すと同時に、SST法を用いて推定した本解析での電子衝突断面積の妥当性を示唆している。

まとめ

Xe の電子衝突断面積を、決定した。また、この断面積をもとに、TOFパラメータを求めた。TOFパラメータを用いて、電離係数を算出した結果は、SST法のもものと非常に良く一致することがわかった。

参 考 文 献

- Bowe J C : 1960 Phys. Rev. 117 1411-1415
Brooks H L, Cornell M C, Fletcher J and. Littlewood I M : 1982 J. Phys. D 15 L 51-53
Cumpstey D E and Vass D G : 1980 Nucl. Instrum. Meth. 53 7-12
de Heer F J, Jansen R H J and van der Kaay W : 1979 J. Phys. B 12 979-1002
Frost L S and Phelps A V : 1964 Phys. Rev. 136 A1538-A1545
Jacques L, Bruynooghe W, Boucique R and Wieme W : 1986 J. Phys. D 19 1731-1739
Kitamori K, Tagashira H and Sakai Y : 1980 J. Phys. D 13 535-550
Kruithof : 1940 Physica 7 519
Kumar K, Skullerud H R and Robson R E: 1980 Aust. J. Phys. 33 343-448
McEachran R P and Stauffer A D : 1984 J. Phys. B 17 2507-2518
Mason N J and Newell W R : 1987 J. Phys. B 20 1357-1377
Pack J L, Voshall R E and Phelps A V : 1962 Phys. Rev. 127 2084
Pitchford L C, ONeil S V and Rumble J R Jr: 1981 Phys. Rev. A 23 294-304
Rapp D and Englander-Golden P : 1965 J Chem. Phys. 43 1464
Register D F, Vuskovic L and Trajmar S: 1986 J. Phys. B 19 1685-1697
Segur P, Vousfi M and Bordage M C: 1984 J. Phys. D 17 2199-2214
Sin Fai Law L T : 1982 J. Phys. B 15 119-142
Tagashira H, Sakai Y and Sakamoto S : 1977 J. Phys. D 10 1051-1053
Thomas W R L : 1969 J. Phys. B 2 551-561