0.1 イオン化エネルギー

高校物理の完全な復習なので式のみ示す．古典的な円運動は,

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \tag{0.1.1}$$

量子化条件は

$$m_e v r = n\frac{h}{2\pi} \tag{0.1.2}$$

許される軌道半径は

$$r_n = n^2\frac{h^2\varepsilon_0}{\pi m_e e^2} \tag{0.1.3}$$

$n = 1$ のときの軌道半径を Bohr 半径と言い，5.3×10^{-11} m である．各軌道に対する電子の全エネルギーは

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\pi\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \tag{0.1.4}$$

$n = 1$ のとき，-13.6 eV である．イオン化エネルギーの定義は

$$\Delta E = E_\infty - E_1 = 13.6 \text{ eV} \tag{0.1.5}$$

であるから，水素原子のイオン化エネルギーは 13.6 eV である．常温・常圧では 2 原子あるいはそれ以上の原子が結合して分子の状態にあることが多い．この場合には，解離課程を経て原子になり，その後，電離することが多い．

0.2 解離過程

では，どのようにして電離に必要なエネルギーを与えるのだろうか．主に，電子による衝突電離と光電離がある．

0.2.1 衝突電離

イオン化エネルギー以上のエネルギーを衝突によって与えて中性粒子を電離させる方法が衝突電離である．1 個の原子を電離するには 5 eV から 25 eV のエネルギーが必要である．

衝突させる粒子としては荷電粒子が用いられる．なぜなら，電圧により容易に加速させられるからである．電子を使ったものを**電子衝突電離** (electron impact ionization) という．電子はイオンに比べ，「種」になる電子が作りやすく，衝突によるエネルギーの授受の効率が良い，という特徴がある．

0.2.1.1 弾性衝突と非弾性衝突

弾性衝突 (elastic collision) はでは，衝突前後で粒子の運動エネルギーが保存する．**非弾性衝突**では，運動エネルギーは保存しない．しかし，全エネルギーは保存されるため，運動エネルギーの一部が粒子の内部状態の変化に使われる．例えば，衝突電離過程や衝突励起過程に使われる．つまり,

$$\frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} = \frac{m_1 v_1'^2}{2} + \frac{m_2 v_2'^2}{2} + \Delta U \tag{0.2.1}$$

であり，ΔU が粒子の内部状態変化に使われたエネルギーである．まとめると，弾性衝突は内部状態の変化を伴わず，粒子の軌道を変えるだけである．よって，粒子拡散や熱伝導など輸送過程で重要となる．一方，非弾性衝突では内部状態の変化を伴う．よって，プラズマ生成・消滅過程で重要となる．

0.2.1.2 衝突断面積

衝突過程を記述する物理量として**衝突断面積** (cross section of collision) がある．これは衝突のしやすさを示すパラメータである．例えば，半径 r_1 の粒子と半径 r_2 の粒子の衝突を考える．粒子は剛体球とみなすと，中心間距離が $r_1 + r_2$ 以下のときに衝突する．よって，半径 $r_1 + r_2$ の円の面積が衝突を表すパラメータとして有用である．したがって，衝突断面積は

$$\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2 \tag{0.2.2}$$

である．この剛体球モデルが使えるのは，中性原子-中性原子の衝突や荷電粒子-中性原子の衝突である．これらは原子半径程度まで接近したときに力を及ぼしあう．一方，荷電粒子-荷電粒子は，Coulomb 力が遠距離まで及ぶため，剛体球として扱えない．

剛体球モデルでは，原子内の最外殻電子の軌道半径を球の半径とみなす．原子番号が大きくなるほど衝突はしやすくなる．また，電子の de Broglie 波長は

$$\lambda_{\mathrm{d}} = \frac{h}{m_e v_e} \tag{0.2.3}$$

である．電子の速度やエネルギーが十分大きい時は電子の波動性を考慮する必要はなく，衝突断面積は原子半径程度と考えることができる．

一方，電子のエネルギーが低く，

$$\lambda_{\mathrm{d}} \simeq (\text{原子半径}) \tag{0.2.4}$$

となると量子力学的な扱いが必要である．

非弾性衝突 (例えば電離反応) が起こるためには，衝突する粒子はイオン化エネルギー以上の運動エネルギーを持つ必要がある．イオン化エネルギー以下では衝突してもイオン化は起こらず，断面積は 0 である．よって，断面積にエネルギーの閾値があることがわかる．また，これらの断面積は反応断面積や電離断面積と呼ばれることもある．

0.2.1.3　平均自由行程

平均自由行程 (mean free path) は，衝突と衝突の間の平均的な飛行距離である．位置 $x = 0$，面積 S の面から，同じ速度 v を持つ粒子 A のビームを一様に入射する．$x = 0$ で未衝突の粒子 A の個数を N_{A0} とする．位置 x での個数を $N_{\mathrm{A}}(x)$ とする．簡単のため粒子 B は止まっているとする．粒子 A と粒子 B の衝突断面積を σ_{AB} とすると，粒子 A が $[x, x + \mathrm{d}x]$ の微小区間で粒子 B と衝突する確率は

$$P_{\mathrm{AB}} = \frac{\sigma_{\mathrm{AB}} N_{\mathrm{B}}}{S} \tag{0.2.5}$$

である．N_{B} は $\mathrm{d}x$ に含まれる粒子 B の個数である．粒子 B の密度を n_{B} とすると，

$$N_{\mathrm{B}} = n_{\mathrm{B}} \cdot S \,\mathrm{d}x \tag{0.2.6}$$

である．よって，衝突確率は

$$P_{\mathrm{AB}} \sim \sigma_{\mathrm{AB}} n_{\mathrm{B}} \,\mathrm{d}x \tag{0.2.7}$$

である．衝突した粒子の数だけビーム粒子の数は減ると考えると，

$$\mathrm{d}N_A = -n_A \sigma_{\mathrm{AB}} n_B \,\mathrm{d}x \tag{0.2.8}$$

である．よって，

$$\frac{\mathrm{d}N_{\mathrm{A}}}{N_{\mathrm{A}}} = -\sigma_{\mathrm{AB}} n_{\mathrm{B}} \,\mathrm{d}x \tag{0.2.9}$$

$$\Rightarrow N_{\mathrm{A}}(x) = N_{\mathrm{A0}} \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{\mathrm{AB}}}\right) \tag{0.2.10}$$

であり，平均自由行程は

$$\lambda_{\mathrm{AB}} = \frac{1}{n_{\mathrm{B}} \sigma_{\mathrm{AB}}} \tag{0.2.11}$$

となる．粒子 A が距離 x だけ自由に飛行できる確率を求める．$x = 0$ から x まで衝突を受けない確率は

$$P_{\mathrm{A}}(x) = \frac{N_A(x)}{N_{A0}} = \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{\mathrm{AB}}}\right) \tag{0.2.12}$$

である．$[x, x + \mathrm{d}x]$ の範囲で衝突を受ける確率は

$$\mathrm{d}P_{\mathrm{A}}(x) = \left|\frac{\mathrm{d}N_A}{N_A}\right| = \sigma_{AB} n_{\mathrm{B}} \,\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}x}{\lambda_{\mathrm{AB}}} \tag{0.2.13}$$

である．よって，x だけ自由に飛行できる確率は

$$P_{\mathrm{A}} \times \mathrm{d}P_{\mathrm{A}} = \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{\mathrm{AB}}}\right)\frac{\mathrm{d}x}{\lambda_{\mathrm{AB}}} \tag{0.2.14}$$

である．よって，自由に飛行できる距離 x の平均値は

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty x \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{\mathrm{AB}}}\right)\frac{\mathrm{d}x}{\lambda_{\mathrm{AB}}} = \lambda_{\mathrm{AB}} \tag{0.2.15}$$

である．λ_{AB} はまさしく平均移動距離を表している．

0.2.1.4　衝突時間と衝突周波数

衝突と衝突の間の平均的な経過時間を**衝突時間** τ_{AB} という．これは平均自由行程を飛行するのに要する時間である．

$$\tau_{\mathrm{AB}} = \frac{\lambda_{\mathrm{AB}}}{v} \tag{0.2.16}$$

で与えられる．また，単位時間当たりの平均的な衝突回数を**衝突周波数** ν_{AB} という．

$$\mu_{\mathrm{AB}} = \frac{1}{\tau_{\mathrm{AB}}} = n_B \sigma_{\mathrm{AB}} v \tag{0.2.17}$$

で与えられる．**式** (0.2.17) は粒子 1 個当たりの平均的な衝突回数である．粒子 A の密度を n_A とすると，単位体積単位時間当たりのイオンの生成量 S は

$$S_{\mathrm{AB}} = n_A n_B \sigma_{\mathrm{AB}} v \tag{0.2.18}$$

である．

0.2.1.5　速度係数

速度係数 (rate coefficient)

実際には，速度分布は一様ではない．衝突周波数の速度分布に関する平均値は

$$\langle v_{en} \rangle = n_n \langle \sigma_{en}(v) v \rangle \tag{0.2.19}$$

である．ここで，

$$\langle \sigma_{en}(v) \rangle = \int_0^\infty \sigma_{en}(v) f(v)\, \mathrm{d}v \tag{0.2.20}$$

を**速度係数** (反応速度係数) という．単位は m^3/s である．これを使うと，単位体積単位時間当たりの衝突回数は

$$S_{en} = n_e n_n \langle \sigma_{en}(v) v \rangle \tag{0.2.21}$$

と表される．

0.2.2　光電離