

4P070

H^+ - SiH_4 衝突による電子捕獲ダイナミクス

(九州大院・理¹, 国際基督教大院・理², Bergische Universität Wuppertal³)

○深田翔¹, 田中真理子¹, Lukas Pichl²,

Heinz-Peter Liebermann³, Robert Buenker³, 季村 峯生¹

[序論]

イオン-分子衝突による電子捕獲過程の研究は、イオン-原子衝突の場合に比べ非常に少ない。我々は過去数年イオン-多原子分子衝突による電子捕獲・イオン化の研究を行ってきた。特に様々な炭化水素分子標的の研究から、keV衝突エネルギー領域でも、(i)標的分子の振動励起効果、(ii)同位体効果、(iii)異性体効果、(iv)分子の配向効果、の重要性を指摘してきた。この分子標的研究プロジェクトの一貫として、プロトンとシラン(SiH_4)のkeV/u領域における衝突による電子捕獲過程の研究を実施した。 SiH_4 分子はプラズマプロセスガスとして重要で、イオン照射によるエッチングや薄膜生成技術の基礎をなす。さらに、最近では核融合炉中にシランガスを注入し、プラズマモデリングの実験も行われており、プラズマ(陽子、電子)とシラン分子との衝突過程の知見が重要となっている。また、標的分子の振動状態による電子捕獲・電子励起・イオン化過程への依存性も詳細に調べる必要がある。この振動効果も今回考慮した。

[理論モデル]

陽子-シラン分子衝突過程の計算は半古典論的分子軌道展開法(MOCC)[1]を用いた。この方法は核の運動は古典力学で記述し、電子状態は量子力学的に求める。衝突エネルギーが keV 領域なので、核の取る軌道は直線軌道と仮定した。現在考えている衝突エネルギー範囲では、衝突時間に比べ標的分子の振動回転運動は遥かに遅く、衝突中分子の平衡核間配置が固定されたまま保たれているという固定核配置近似は成り立っていると考えても良いであろう。したがって、標的分子の核配置は固定し入射粒子との相互作用エネルギー(断熱ポテンシャル)を求めた。[陽子+シラン分子]複合系の電子構造は Buenker 教授グループが開発した量子化学計算法、MRDCI 法[2,3]で求めた。電子捕獲や電子励起を起こす相互作用は非断熱相互作用である。これら断熱ポテンシャルと相互作用カップリングを用い散乱ダイナミクス計算を行った。

[結果]

求めた断熱ポテンシャルを入射粒子と標的分子間の距離を関数として図1に示す。ポテンシャルが一番下の基底状態は $[H+SiH_4^+]$ の電子捕獲状態に対応しており、下から2番目の準位が $[H+ + SiH_4]$ 初期状態となっている。3番目より高い順位は電子捕獲と電子励起に対応した準位となっている。これら分子状態を6-8準位考慮したMOCC計算を実行し電子捕獲・電子励起断面積を求めた。R.K.JanevとD.Reiterによるレポート[4]により指摘されたように、電荷移行断面積や反応速度定数データにおける実験と理論双方のデータが極端に不足している。今回の研究は電子捕獲と衝突励起の衝突ダイナミックスの知見を与えstate-resolveな衝突断面積の理論値を与えることができ、さらにkeV領域衝突エネルギーにおける標的分子の振動効果への見識を与える。

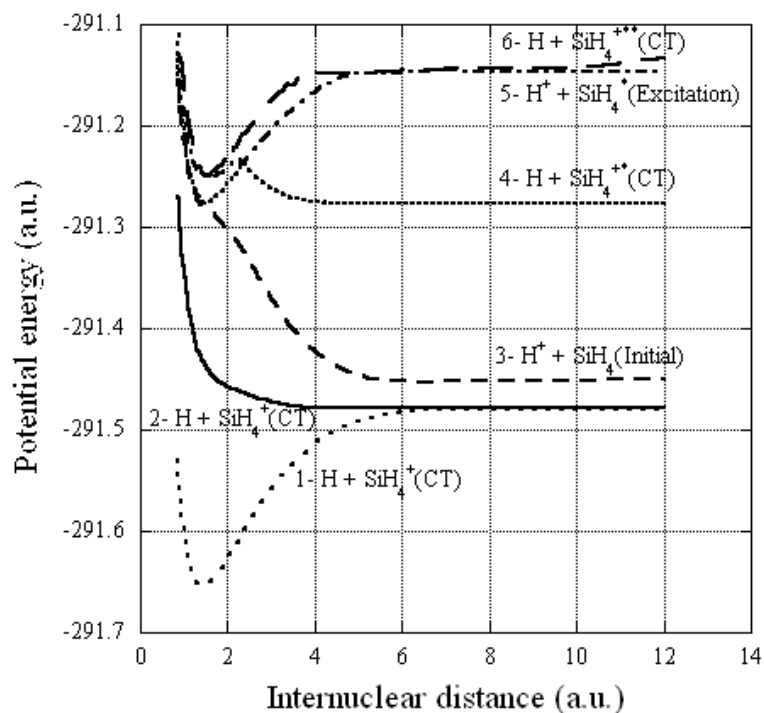


Fig.1 衝突における SiH_5^+ 系の断熱ポテンシャル曲線

[参考文献]

- [1] M.Kimura and N.F.Lane, in *Advances for Atomic, Molecular and Optical Physics*, edited by D.R.Bates and B.Bederson (Academic, New York, 1989), Vol.26, p.76.
- [2] R.J.Buenker, *Proceedings of the Workshop on Quantum Chemistry and Molecular Physics*, edited by P.G.Burton, University of Wollongong Press, Wollongong, (1980), 1.5.1.
- [3] S.Krebs and R.J.Buenker, *J.Chem.Phys.*, **103**, 5613,(1995)
- [4] Ratko K.Janev, Detlev Reiter, *Collision Processes of Hydrocarbon Species in Hydrogen Plasmas:III. The Silane Family*(Institute for Plasmaphysik, EUROATOM Association,2003)