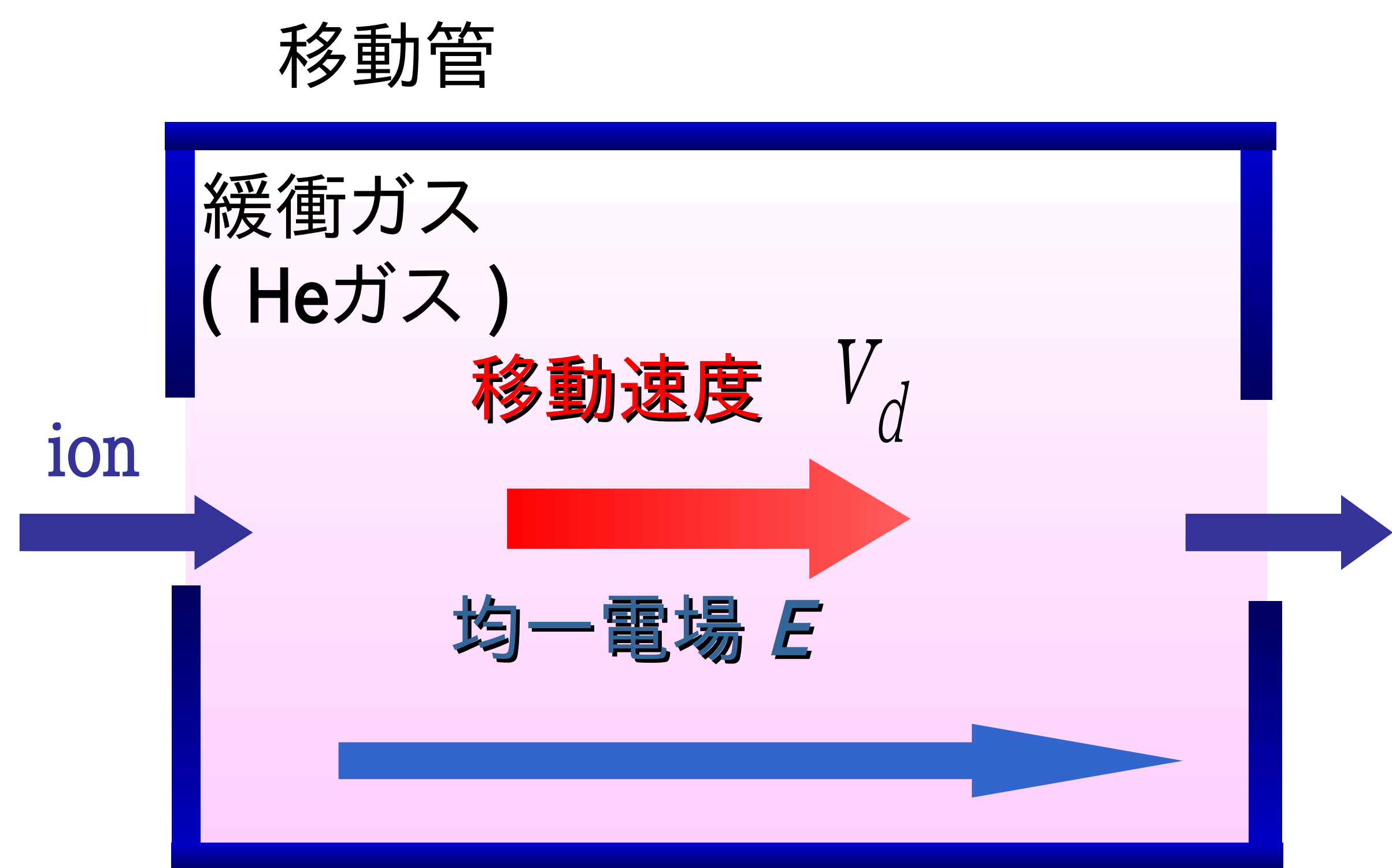


1. イオン移動度とは何か？

移動管中を進むアルカリイオンは

- ・電場による**加速**
 - ・緩衝ガス(Heガス)との衝突による**減速**
- を繰り返して、いずれ一定の速度に到達する。
その時の移動速度 v_d と均一電場 E の比例係数が**移動度 K** と呼ばれるものである。



さらにその値を標準状態の値に換算する

$$v_d = KE = n_0 K_0 \frac{E}{N}$$

K : 移動度
 K_0 : 換算移動度
 n_0 : 標準状態での緩衝気体の数密度
 N : 緩衝気体の数密度

一般にはこの K_0 を移動度と呼び
下記の実行温度の関数として表される。

・実効温度 T_{eff}

$$\frac{3}{2} kT_{eff} \equiv \overline{\varepsilon} = \frac{3}{2} kT + \frac{1}{2} Mv_d^2$$

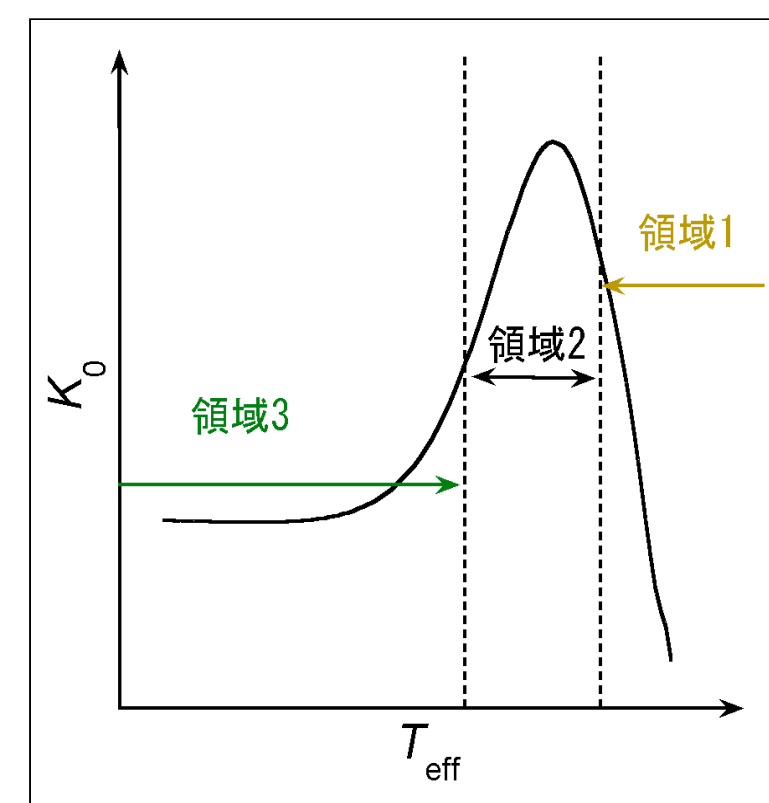
2. 移動度の計算方法

- ・偏向関数 $\Theta(\varepsilon, b) = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{b}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{\varepsilon}}} \frac{dr}{r^2}$
- ・運動量以降断面積 $Q_D(\varepsilon) = 2\pi \int_0^{\infty} (1 - \cos \Theta(\varepsilon, b)) b db$
- ・衝突積分 $\Omega(T_{eff}) = \frac{1}{2} (kT)^{-3} \int_0^{\infty} Q_D(\varepsilon) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right) \varepsilon^2 d\varepsilon$
- ・換算移動度 $K_0 = \frac{3e}{16n_0} \left(\frac{2\pi}{\mu T_{eff}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1 + \alpha}{\Omega(T_{eff})}$

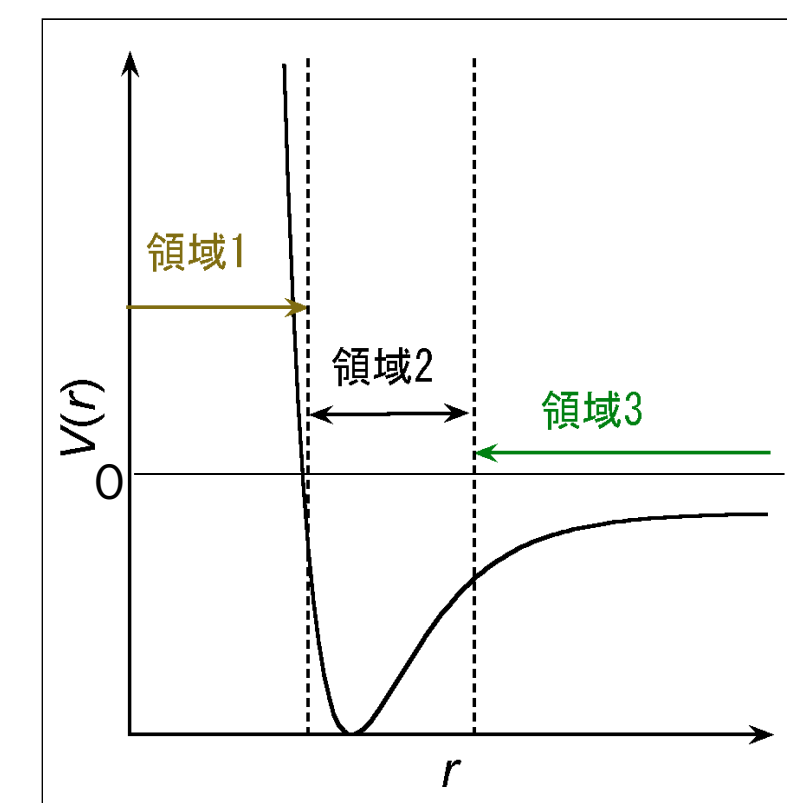
$V(r)$ を関数として求めることができれば
すべての温度領域での K_0 の値を知ることができる

3. 一般的な移動度と相互作用ポテンシャル

典型的な移動度



相互作用ポテンシャル



$$V(r) = \text{斥力項} - \left(\frac{C_4}{r^4} + \frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \dots \right)$$

電荷 - 誘起双極子 (分極力) に由来する項

電荷 - 誘起四重極子 に由来する項

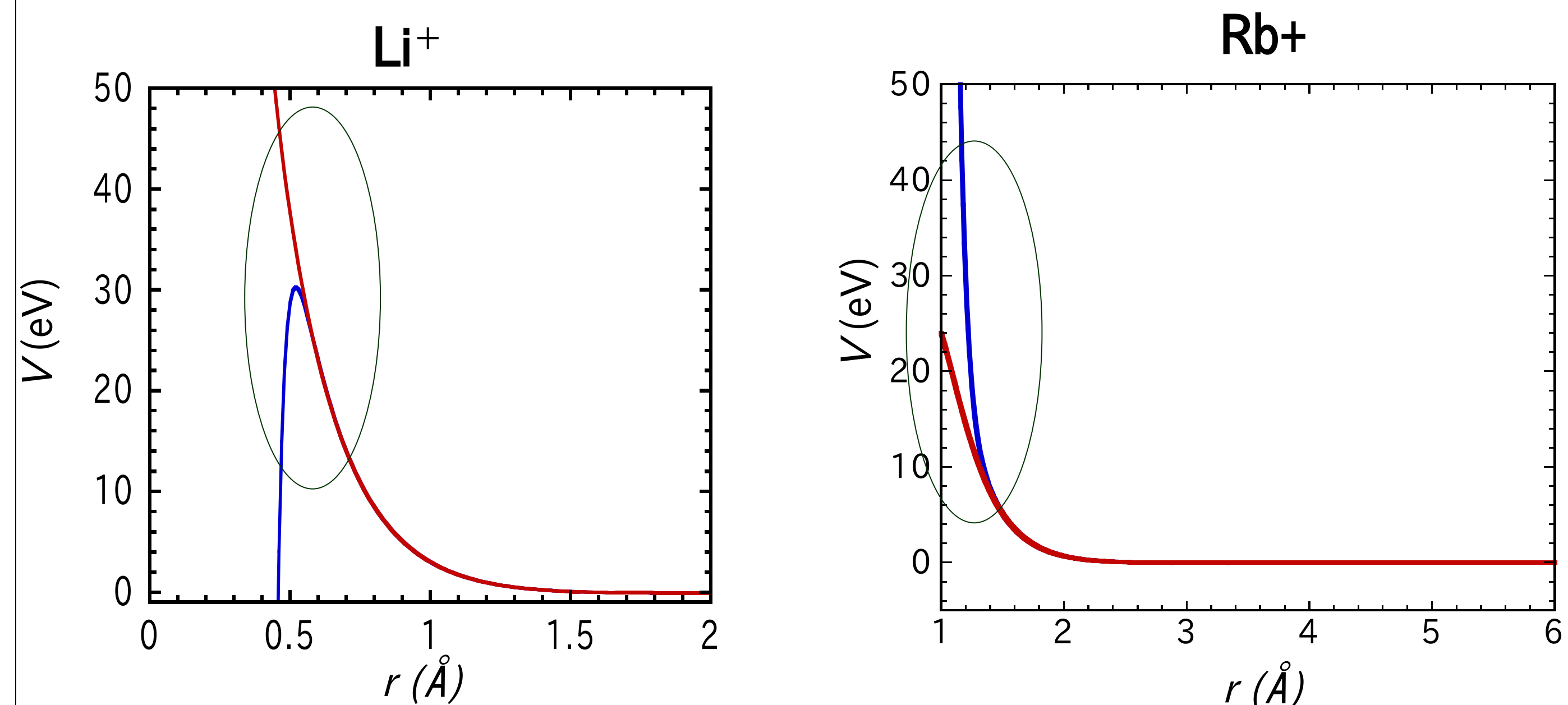
4. ポテンシャルのフィッティング → 移動度の計算

非経験論的配置間相互作用法計算 (CI計算) で計算されたポテンシャルに関数をフィッティング
→ 以下の関数を使用

$$V(r) = \text{斥力項} - \left(\frac{C_4}{r^4} + \frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \dots \right) \left(1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{r-a}{b}\right) + 1} \right)$$

近距離において引力項の影響を消す
以前は導入されていなかった

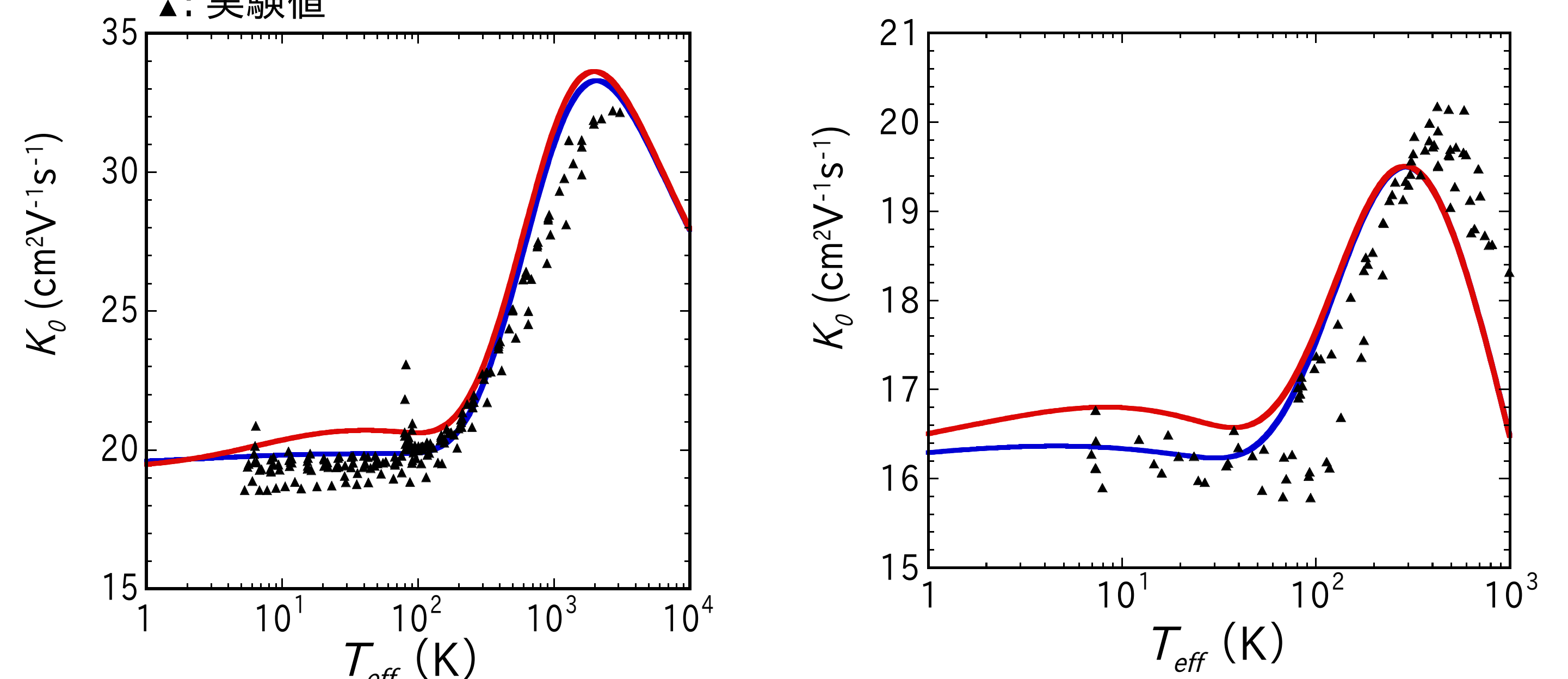
- 今回私がフィッティングした結果
- 以前他の人がフィッティングした結果



○ に違いが現れた

移動度を計算

- : 私がフィッティングした関数を用いて計算された移動度
- : 以前他の人がフィッティングした関数を用いて計算された移動度
- ▲: 実験値



5. まとめ

- ・ r の小さい領域 (原子間距離の近い領域) におけるポテンシャルの落ち込みは解消できた。
- ・ 移動度に以前の結果との違いは見られたのだが実験値に合う値にはならなかった。
- ・ 今回は引力項の影響を消すための関数を用いて近距離領域のポテンシャルの落ち込みを防ぐことができた。
- ・ しかし移動度については実験値に合うとは言えない結果が得られた。