

不平等磁界下の電子輸送

菅原 広剛

北海道大学大学院情報科学研究科

sugawara@ist.hokudai.ac.jp

講演要旨

- 自己紹介・研究背景：電子スオーム解析、NLDプラズマ解析
- NLDプラズマの解析例：不平等磁界下の電子輸送
- 「不平等磁界下の電子輸送係数」について

原子分子データ応用フォーラムセミナー・

核融合科学研究所 原子分子データと原子分子過程モデルの活用・普及研究会

2011.12.13-14. 於 核融合科学研究所

日本学術振興会科学研究費補助金22540500および(株)アルバックによる支援を受けた研究

自己紹介：研究テーマとシミュレーション技法

プラズマのシミュレーション、モデリング・技法開発
巨視的特性・挙動の微視的電子運動による再現・理解
最近の研究テーマ：誘導結合型磁化プラズマの解析

主な計算手法

プラズマシミュレーション

- モンテカルロ法

電子輸送解析(スオーム解析)

- モンテカルロ法
- プロパゲータ法(ボルツマン方程式直接数値解法)

関心あるデータ

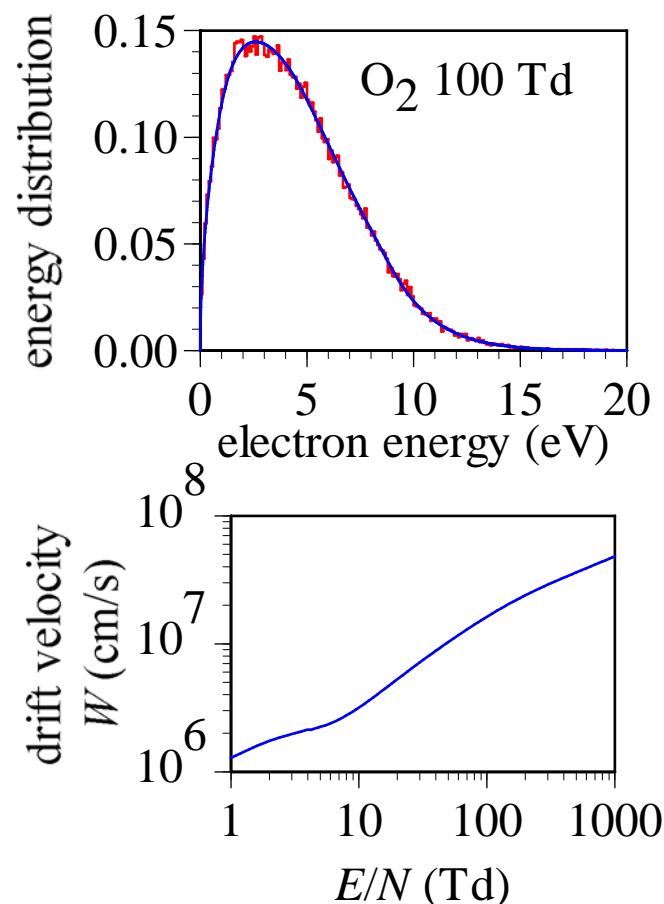
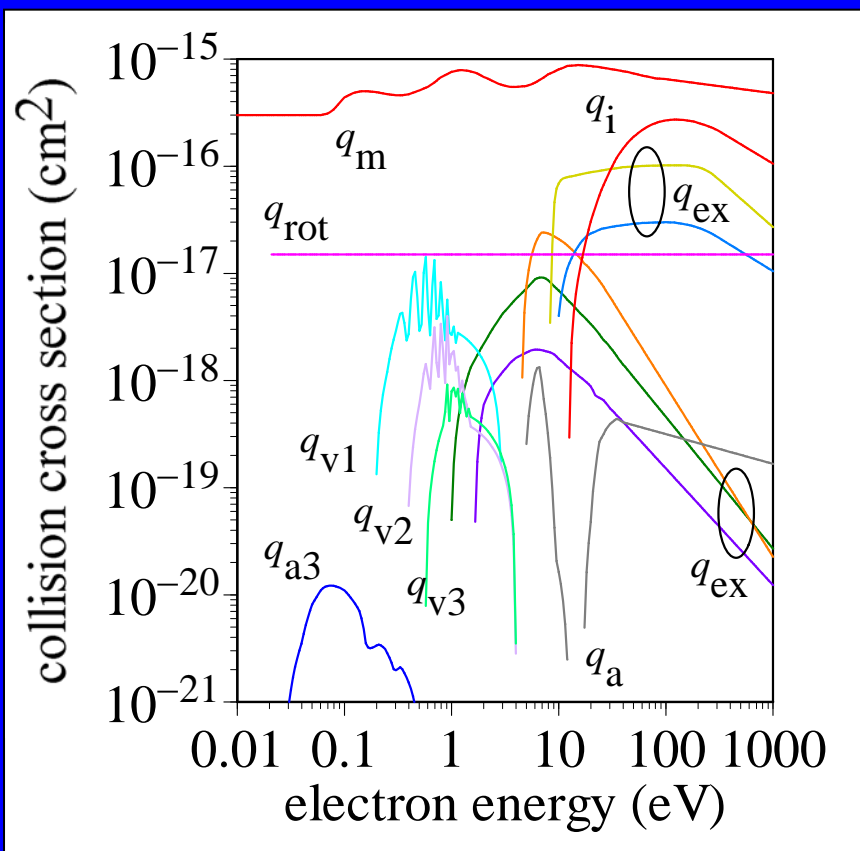
プラズマ：電子エネルギー分布、電子温度、ドリフト速度、
電離・解離レート、プラズマインピーダンス、...

外部条件の影響：磁界、境界(表面反応)、...

自己紹介: 研究テーマとシミュレーション技法

プロパゲータ法による計算例

- 酸素中の電子エネルギー分布、ドリフト速度



谷口敏幸 北海道大学学位論文(1979)

おことわり

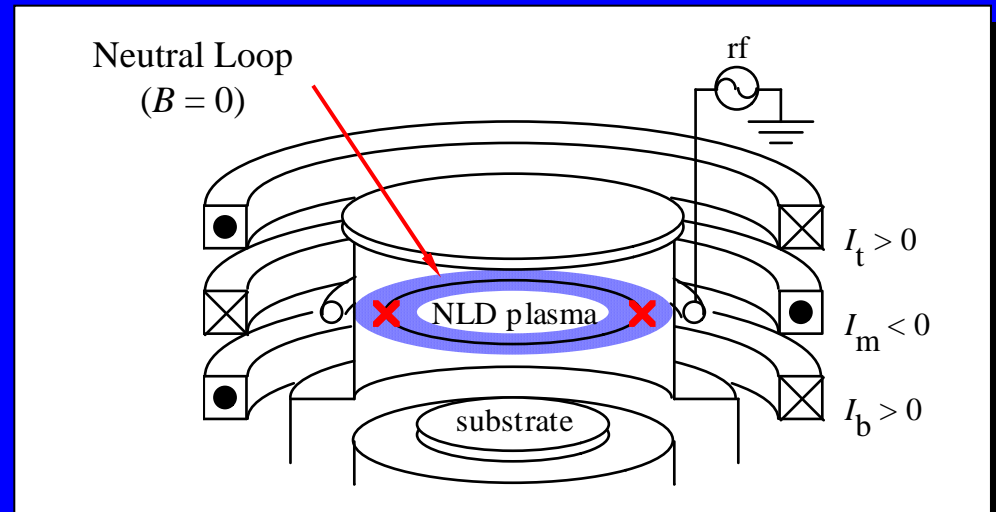
これ以降に紹介する解析結果は
CF₄を媒質に用いたシミュレーションの結果です

しかしながら、電子伝導特性は
主に磁界の形状や及ぼす効果により支配され
ガスにはあまり依存しないものと考えられます
(つまり、酸素でも同様の結果が期待されます)

ガスに依存する定量的な差異は論点とせず
磁界下の電子挙動の特徴に注目願います

研究背景:NLDプラズマ

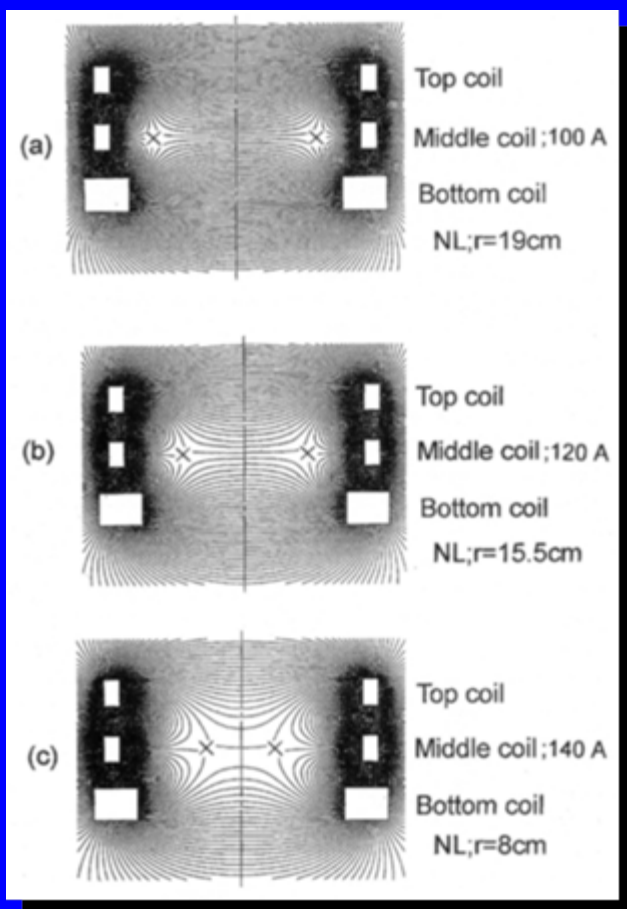
- magnetic Neutral Loop Discharge plasma
 - エッチング用誘導結合型プラズマ
 - 3つの同軸直流コイルで形成した磁気中性線 (NL: neutral loop、磁界ゼロの環状領域) の周囲に生成
 - 高密度 ($\sim 10^{11} \text{ cm}^{-3}$)、低気圧 ($\sim 1 \text{ mTorr}$)
 - NLの周囲は4極磁界 (2組の反平行傾斜磁界)



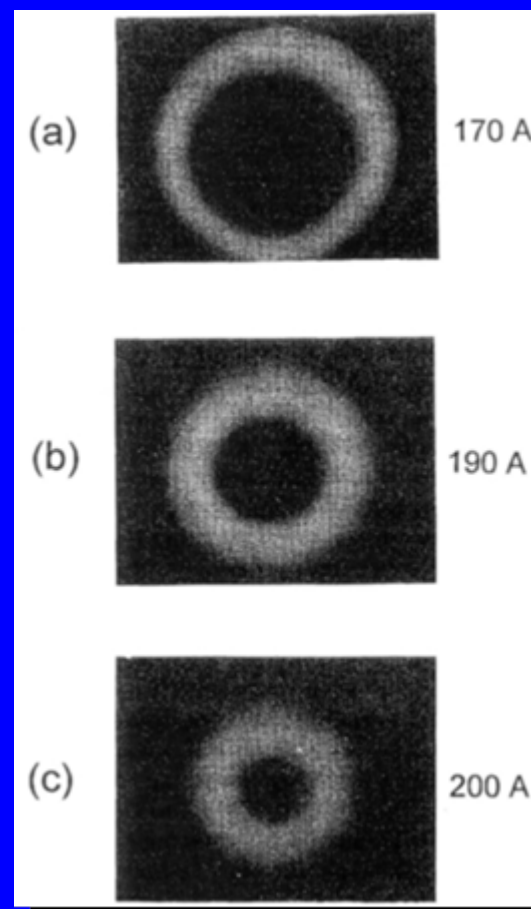
NLD plasma reactor

研究背景:NLDプラズマ

コイル電流によりNL半径が制御可能



B fields formed by 3 coils

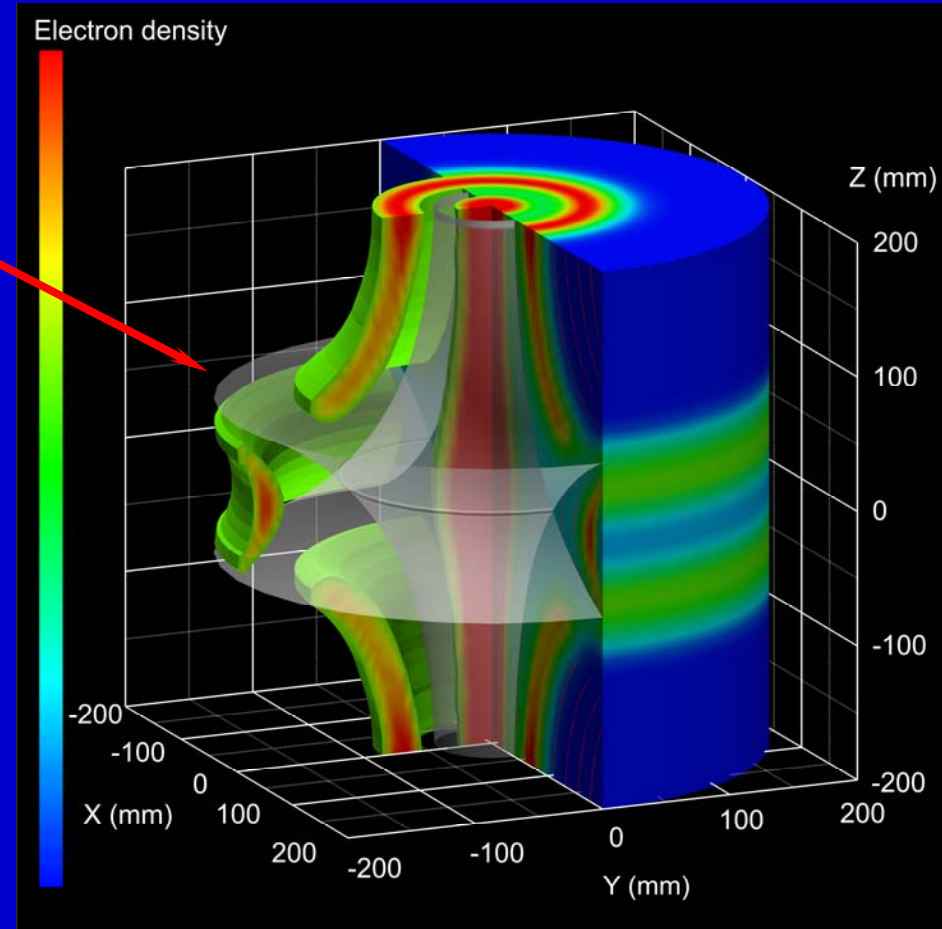
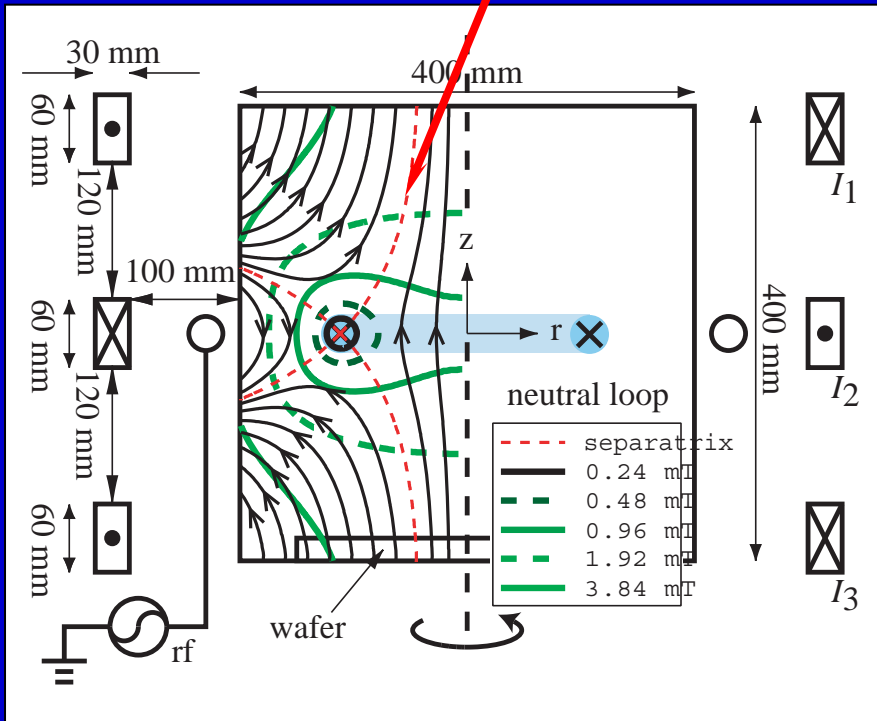


NLD plasmas (top view)

研究例：NLDプラズマの構造解析

分界線 (separatrix) で
分けられた4領域

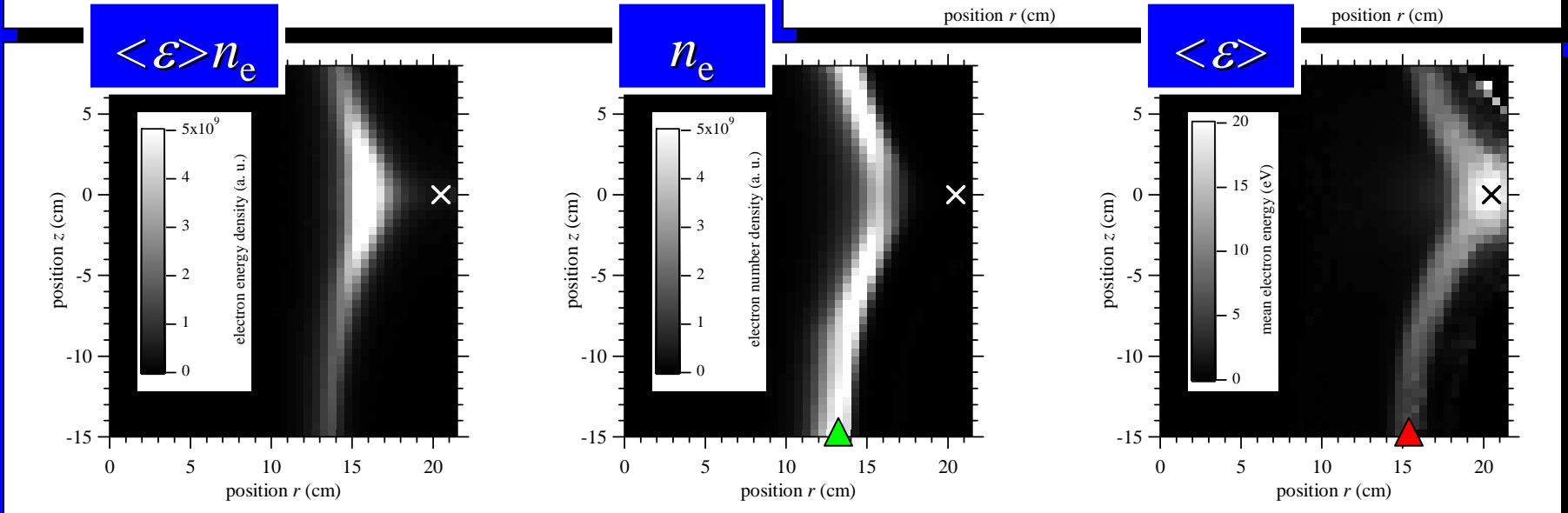
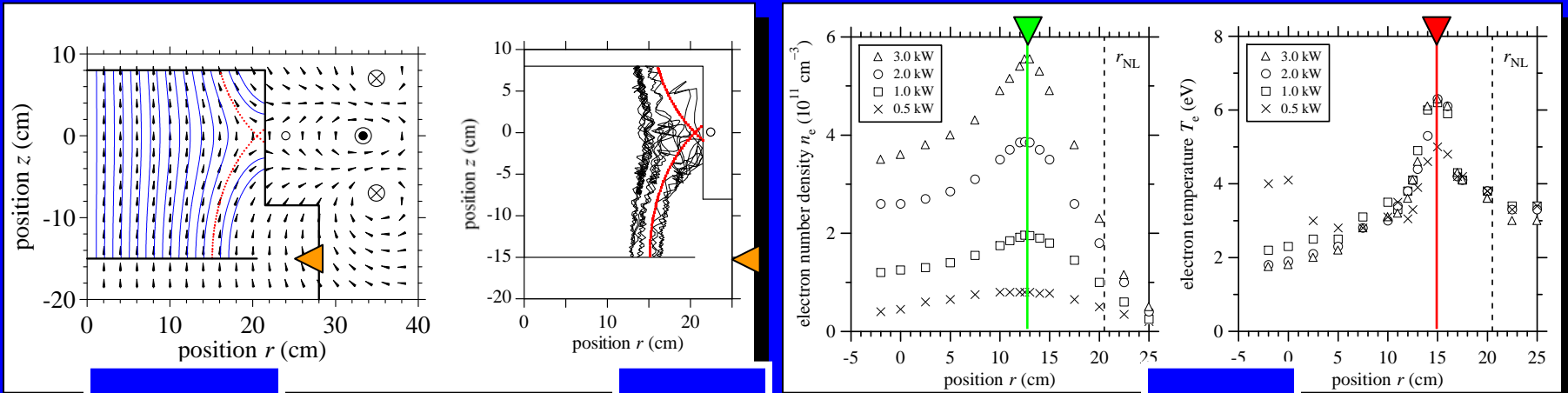
2組の反平行傾斜磁界



CF₄ 5 mTorr, calculated by Monte Carlo
 $I_1/I_2/I_3 = +47.8/-55.75/+47.8$ A ($R_{NL} = 11$ cm)
Osaga et al. (2011) IEEE Trans. Plasma Sci.
39, Pt. 1, 2546-2547

研究例: NLからの電子輸送解析

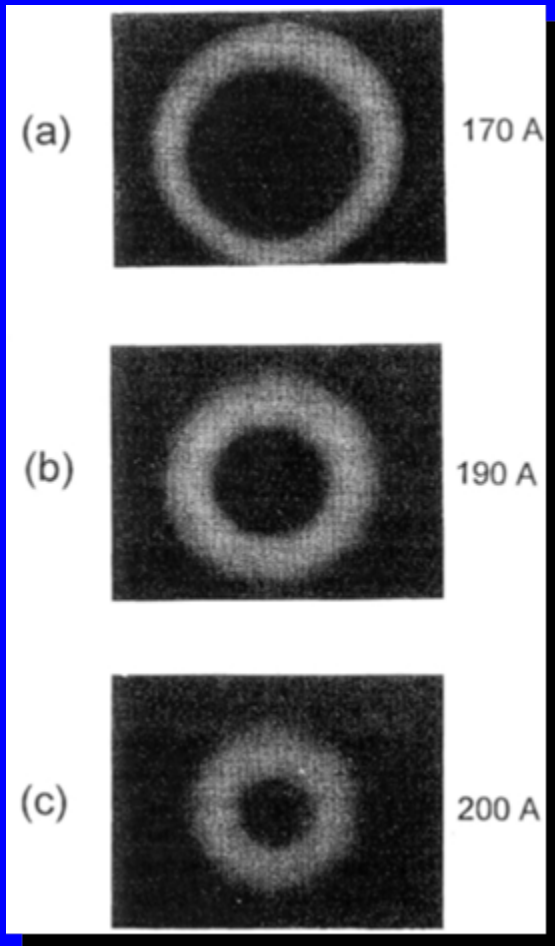
電子数密度 n_e 、平均電子エネルギー $\langle \epsilon \rangle$ 測定位置 $z = -15$ cm



ピーク位置の再現 (Sugawara et al. (2010) Jpn. J. Appl. Phys. **49** 086001)

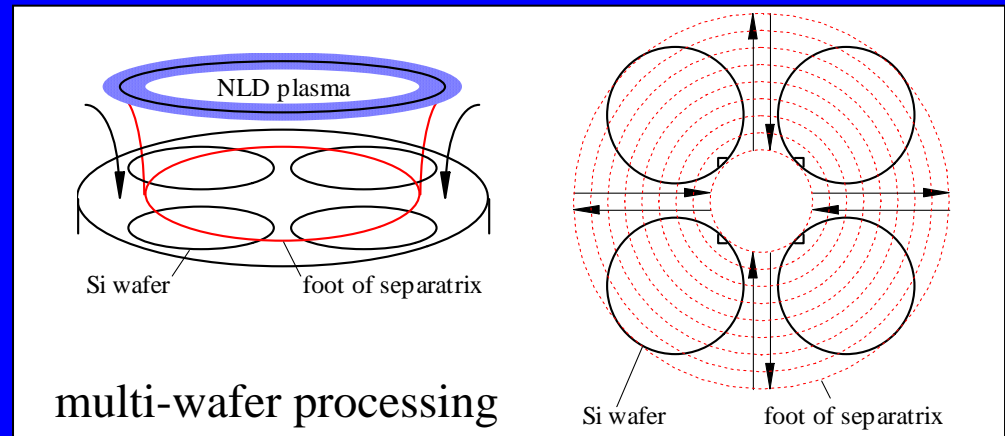
研究例：イオン照射量均一化の試み

NL半径制御に伴うイオン入射位置・量の変化

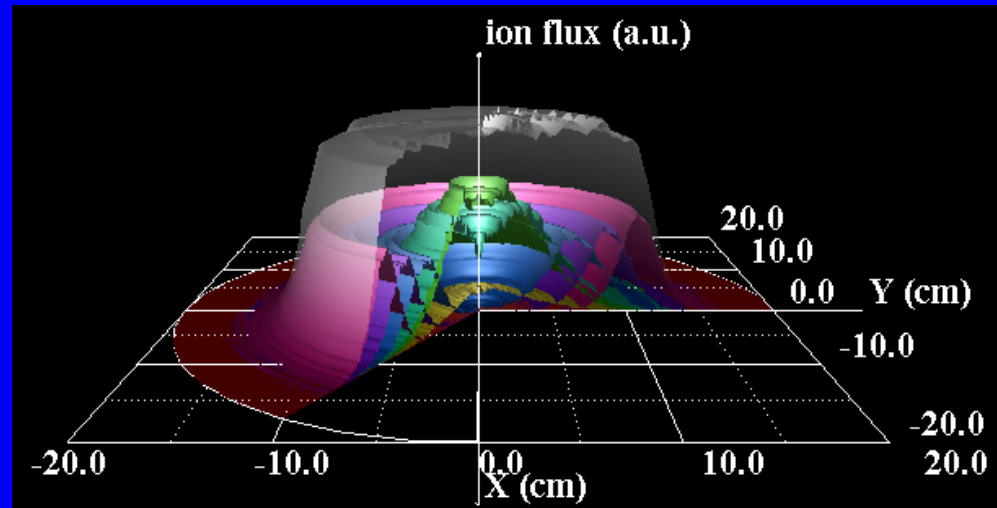


Tsuboi et al. (1995)

Japan. J. Appl. Phys. **34** 2476-81



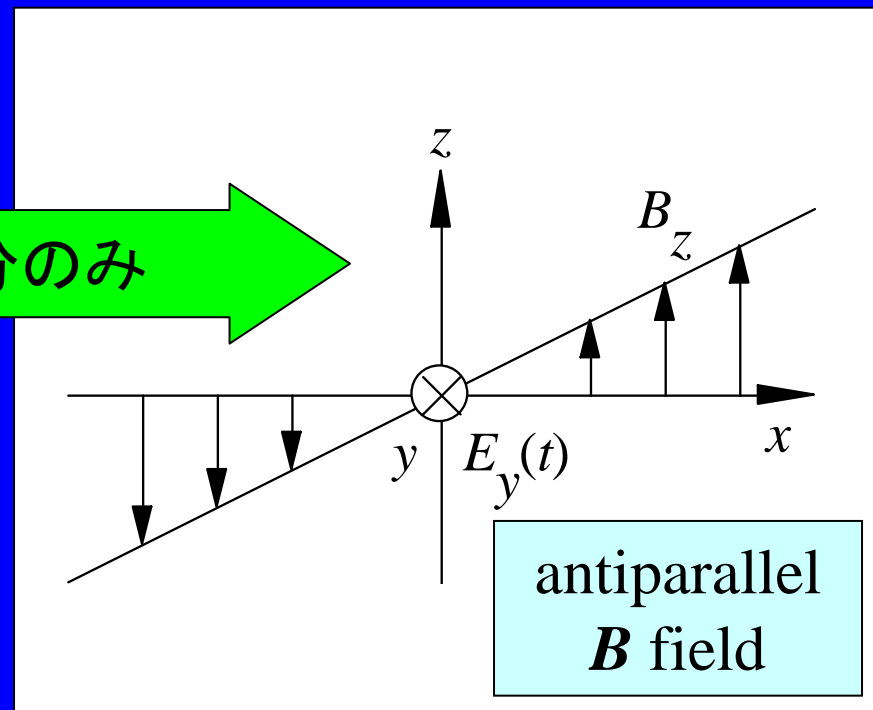
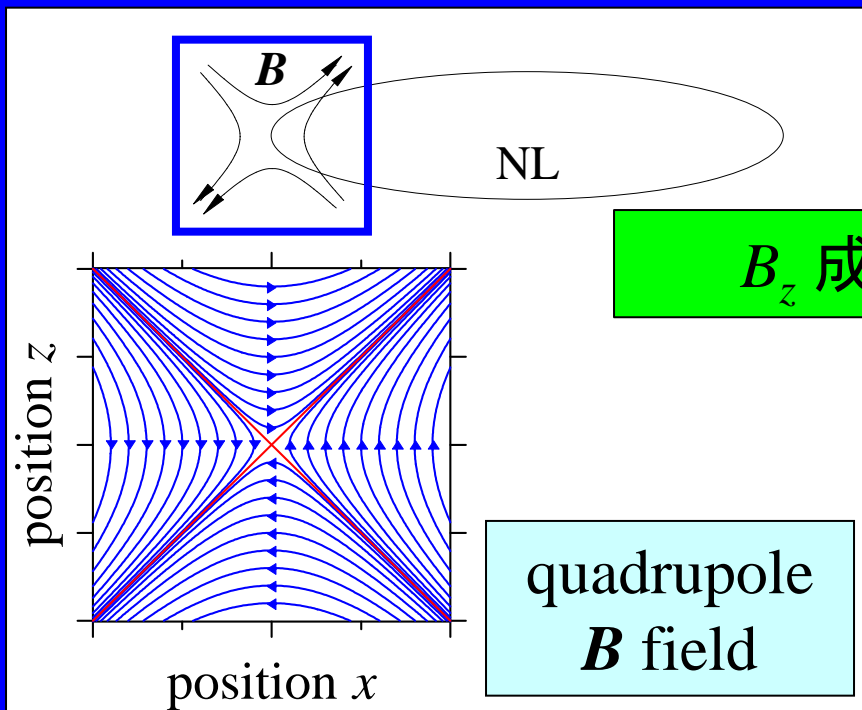
Sugawara (2010) 63. Gaseous Electronics Conf. (Paris)



Sakurai et al. (2011) IEEE Trans. Plasma Sci. (at press)

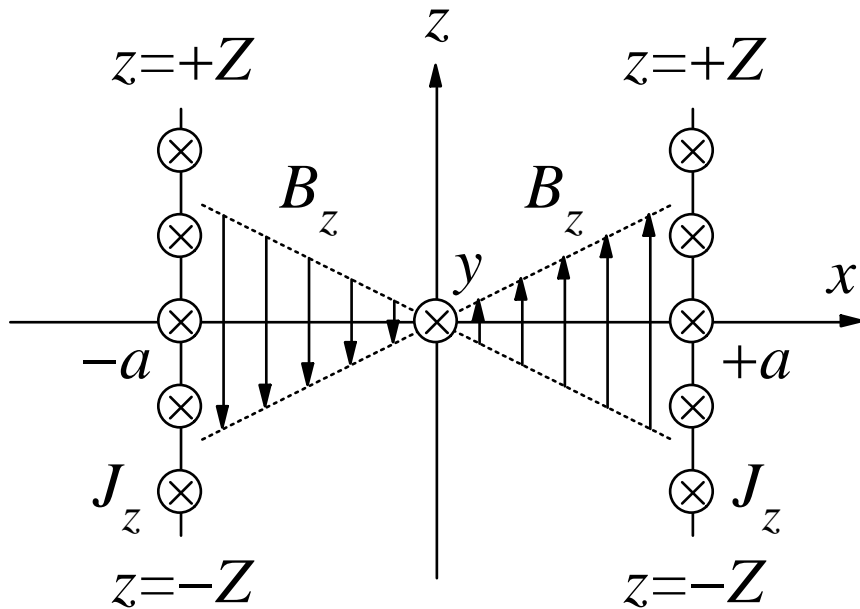
電子輸送解析モデル: 磁界の設定

- NLを直線に展開、電子伝導路を y 軸とする
- 磁界: 静磁界、4極磁界 / 反平行傾斜磁界
 - 中性線 / 中性面から離れるにつれ線形に強まる
- 電界: 一様、 E_y 成分のみ、DC/RF



基礎資料：線形傾斜磁界

面電流間の磁界



$$\begin{aligned}
 B_z(x) &= \frac{\mu_0 J_z}{\pi} \left(\arctan \frac{Z}{a-x} - \arctan \frac{Z}{a+x} \right) \\
 &= \frac{\mu_0 J_z}{\pi} \arctan \frac{2Zx}{Z^2 + a^2 - x^2} \\
 &= \frac{\mu_0 J_z}{\pi} \frac{2Zx}{Z^2 + a^2 - x^2} \\
 &\quad - \frac{1}{3} \frac{\mu_0 J_z}{\pi} \left(\frac{2Zx}{Z^2 + a^2 - x^2} \right)^3 \\
 &\quad + \frac{1}{5} \frac{\mu_0 J_z}{\pi} \left(\frac{2Zx}{Z^2 + a^2 - x^2} \right)^5 - \dots
 \end{aligned}$$

(J_z : current density)

approximated by a linear function when $Z \gg a, x$

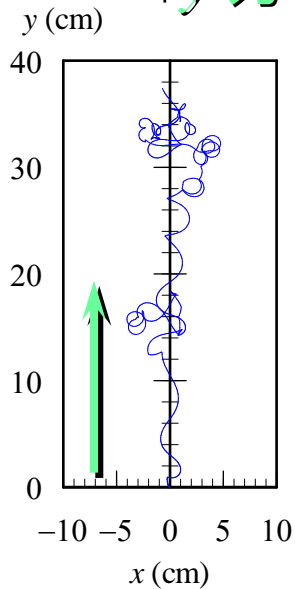
$$B_z(x) \approx \frac{\mu_0 J_z}{\pi} \frac{2x}{Z}$$

Sugawara and Sakai (2008)

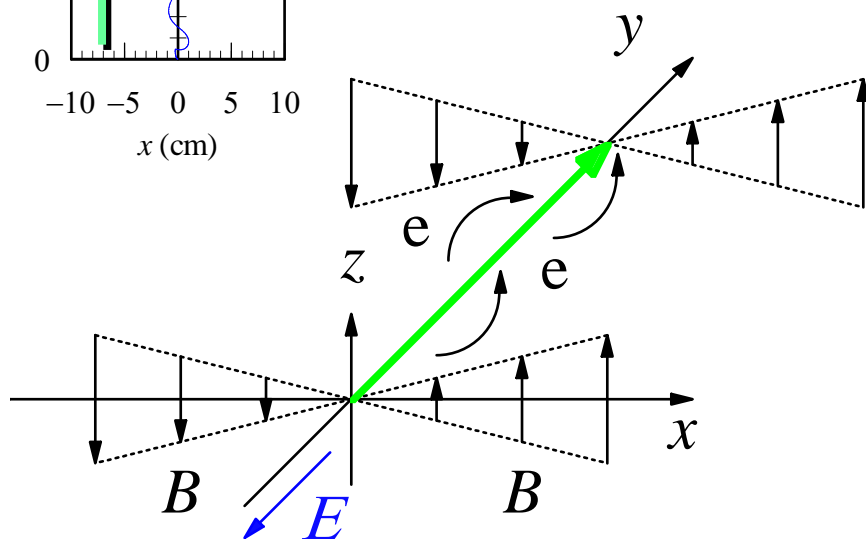
J. Phys. D: Appl. Phys. 41 135208

反平行傾斜磁界の整流効果(DC電界)

+y 方向へのドリフトは可能

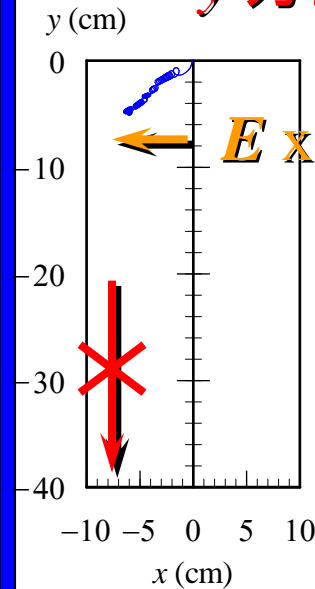


ローレンツ力は
電子を内向きに
曲げる



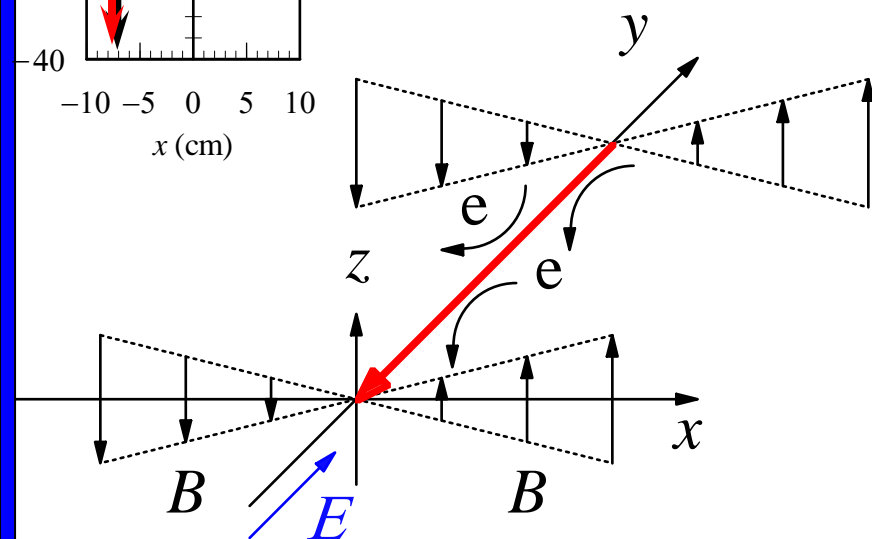
「収束的」電磁界配位

-y 方向へのドリフトは抑制



$E \times B$ drift

ローレンツ力は
電子を外向きに
曲げる

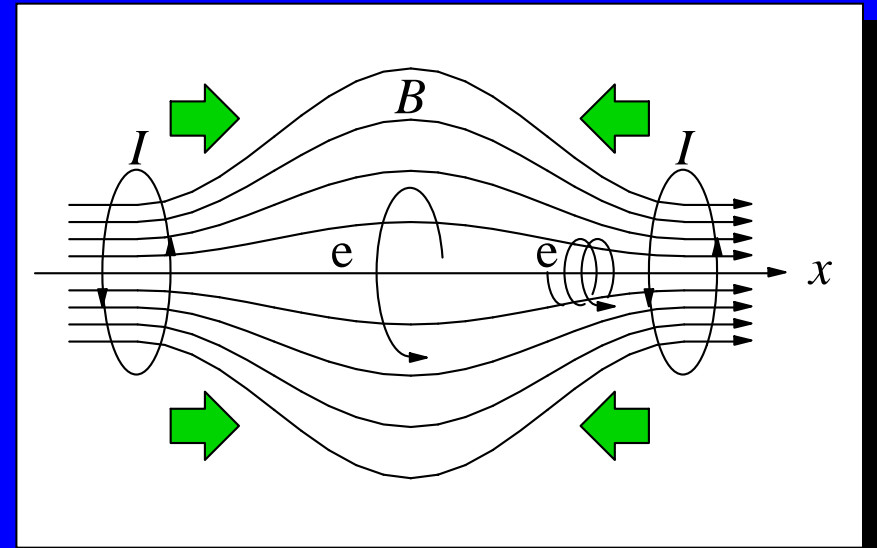
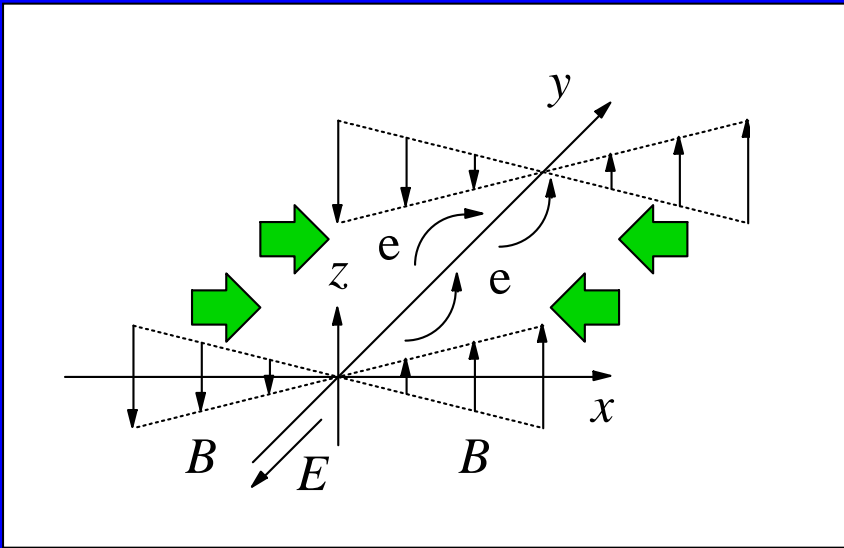


「発散的」電磁界配位

基礎資料：磁気ミラー効果

「閉じ込め」の効果が働く方向

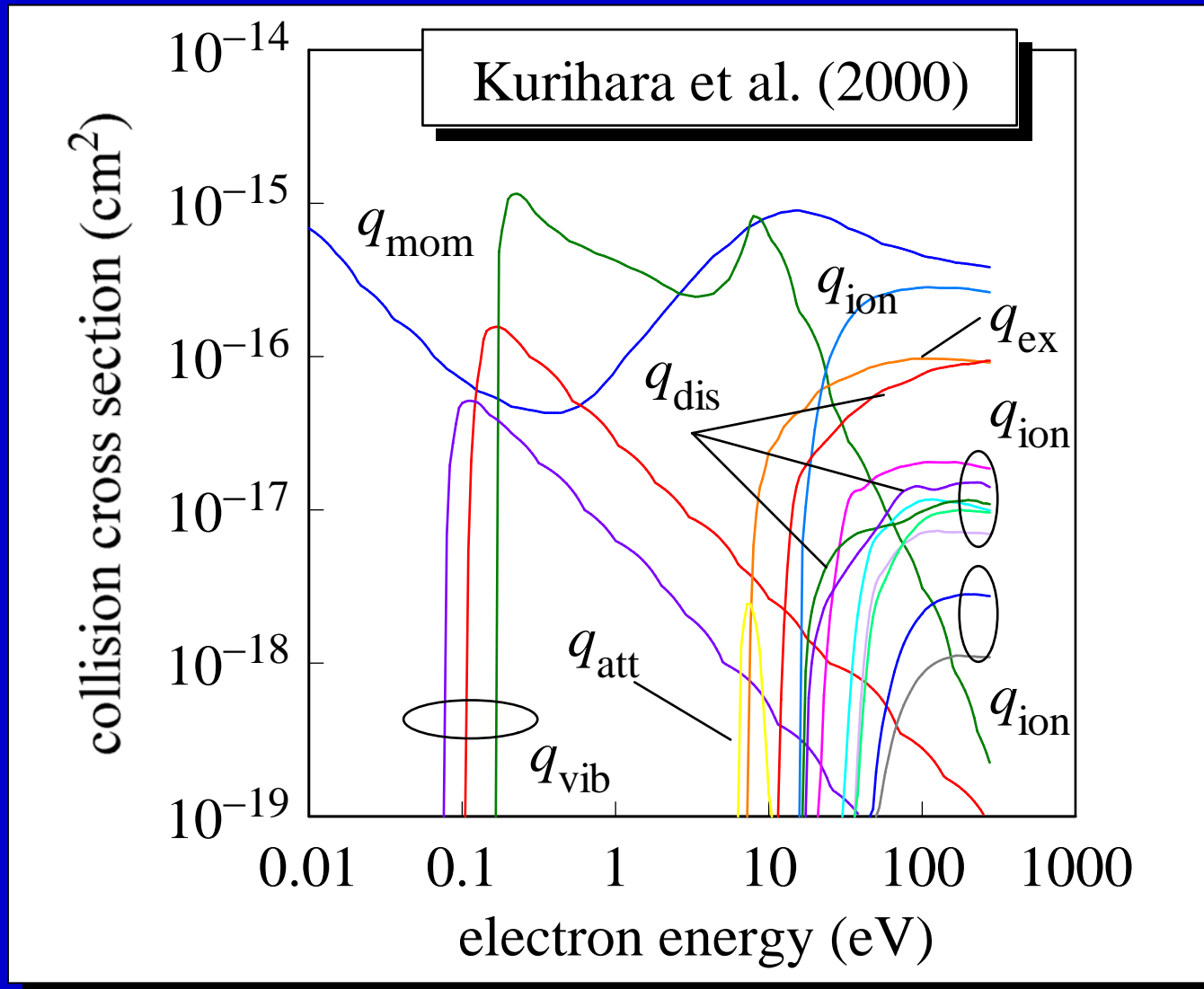
- 反平行傾斜磁界：磁界と磁界勾配に垂直な方向
- ミラー磁界：磁界に沿う方向



反平行傾斜磁界による「閉じ込め」

ミラー磁界による「閉じ込め」

基礎資料: CF_4 の電子衝突断面積



基礎資料: CF₄の電子衝突過程

momentum transfer: $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_4 + e$

vibrational excitation (mode 1, 0.108 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_4^* + e$

vibrational excitation (mode 3, 0.168 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_4^* + e$

vibrational excitation (mode 4, 0.077 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_4^* + e$

electronic excitation (7.54 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_4^* + e$

electron attachment (6.4 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_3 + \text{F}^-$

dissociative ionization (16.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_3^+ + \text{F} + 2e$

dissociative ionization (21.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_2^+ + 2\text{F} + 2e$

dissociative ionization (26.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}^+ + 3\text{F} + 2e$

dissociative ionization (34.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{C}^+ + 4\text{F} + 2e$

dissociative ionization (34.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_3 + \text{F}^+ + 2e$

dissociative double ionization (41.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_3^{2+} + \text{F} + 3e$

dissociative double ionization (42.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_2^{2+} + 2\text{F} + 3e$

neutral dissociation (12.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_3 + \text{F} + e$

neutral dissociation (17.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF}_2 + 2\text{F} + e$

neutral dissociation (18.0 eV): $\text{CF}_4 + e \rightarrow \text{CF} + 3\text{F} + e$

反平行傾斜磁界下電子輸送係数計算条件

ガス、電磁界

- ガス: CF_4 , 5 mTorr (0.67 Pa), 273 K
 - 電子衝突断面積セット: Kurihara et al., J. Phys. D: Appl. Phys., **33**, 2146-53 (2000)
- 磁界: $dB_z/dx = +0.5$ または -0.5 mT/cm
- 電界: $0.1 \sim 3.0$ V/cm ($E/N = 57 \sim 1700$ Td)

計算手法: モンテカルロ法 (Δt 法、 $\Delta t = 3.7$ ps)

- 初期電子: Maxwell 型速度分布で供給
(平均電子エネルギー 1 eV)
- サンプリング: 電子数 $10^6 - 10^7$

反平行傾斜磁界下電子輸送係数の比較

電子輸送係数を比較する条件

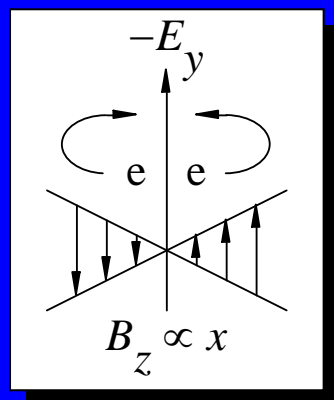
- 反平行傾斜磁界、直流電界
- 直流電界(磁界なし)
 - 1 Torr におけるスオーム解析結果から E/N に基き換算(相似則)

比較した電子輸送係数

- 平均電子エネルギー $\langle \varepsilon \rangle$
- 実効電離周波数 ν_i (ν_i/N)
- ドリフト速度 W
 - W_v (平均速度)、 W_r (重心移動速度)
- 拡散係数 D (ND)
 - D_{ExB} ($= D_x$), D_E ($= D_y$), D_B ($= D_z$)

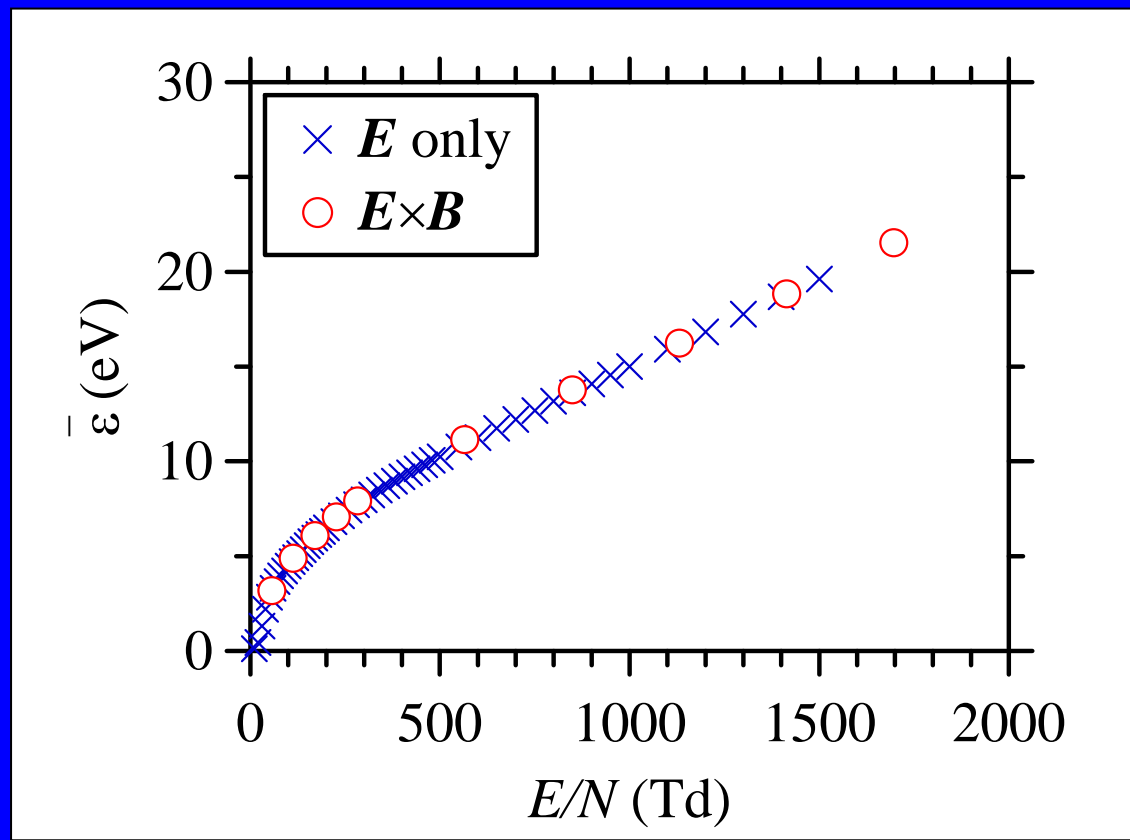
スオームパラメータ計算結果: $\langle \varepsilon_i \rangle$

反平行傾斜磁界・直流電界 / 直流電界・磁界なし



「収束的」
電磁界配位

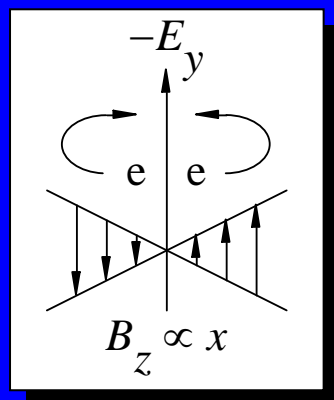
磁界の有無によらず
よく一致



平均電子エネルギー

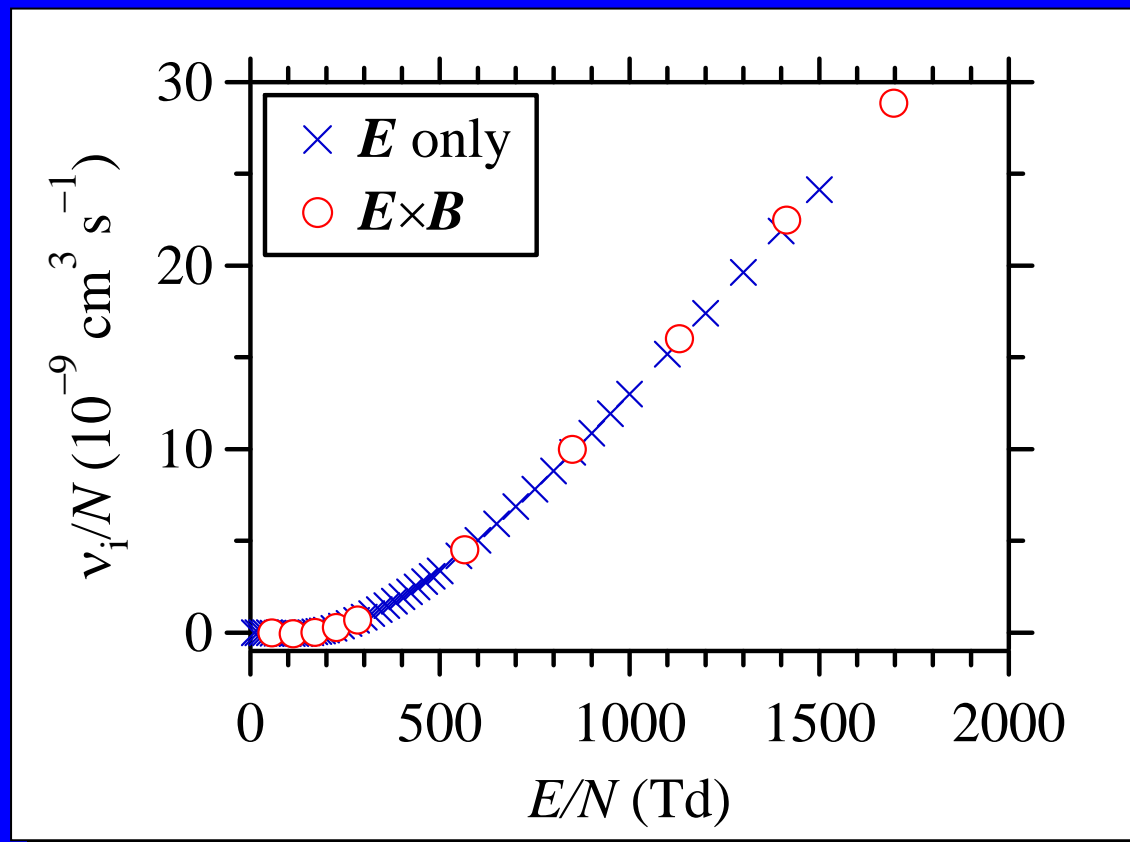
スオームパラメータ計算結果: ν_i

反平行傾斜磁界・直流電界 / 直流電界・磁界なし



「収束的」
電磁界配位

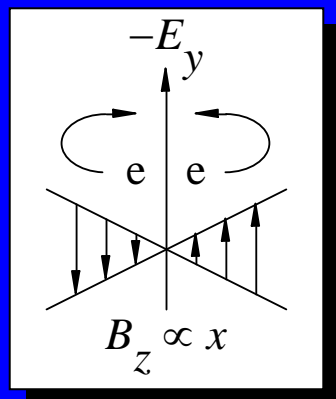
磁界の有無によらず
よく一致



実効電離周波数

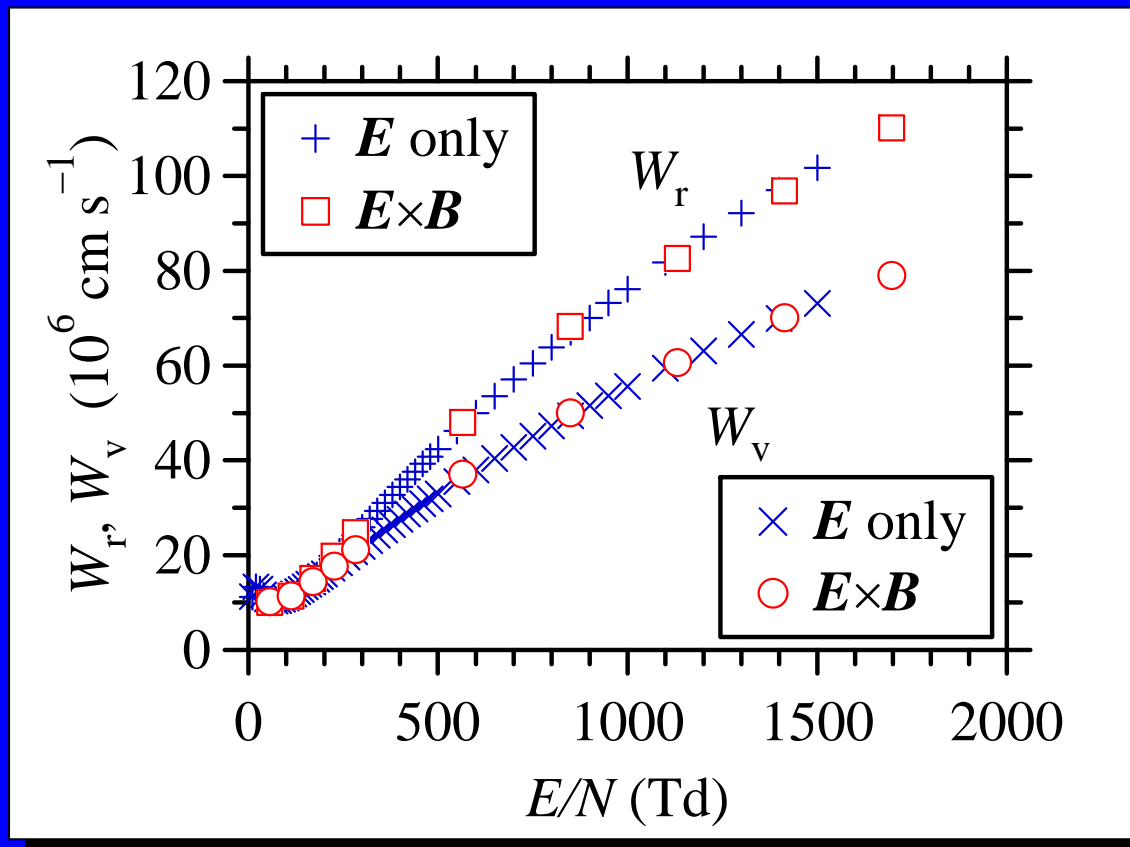
スオームパラメータ計算結果: W_v, W_r

反平行傾斜磁界・直流電界 / 直流電界・磁界なし



「収束的」
電磁界配位

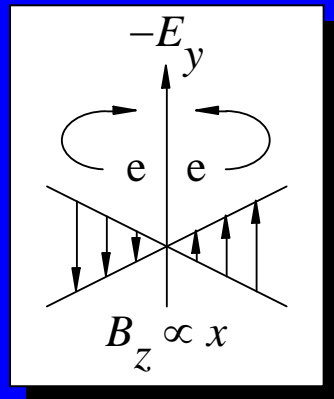
磁界の有無によらず
よく一致



ドリフト速度

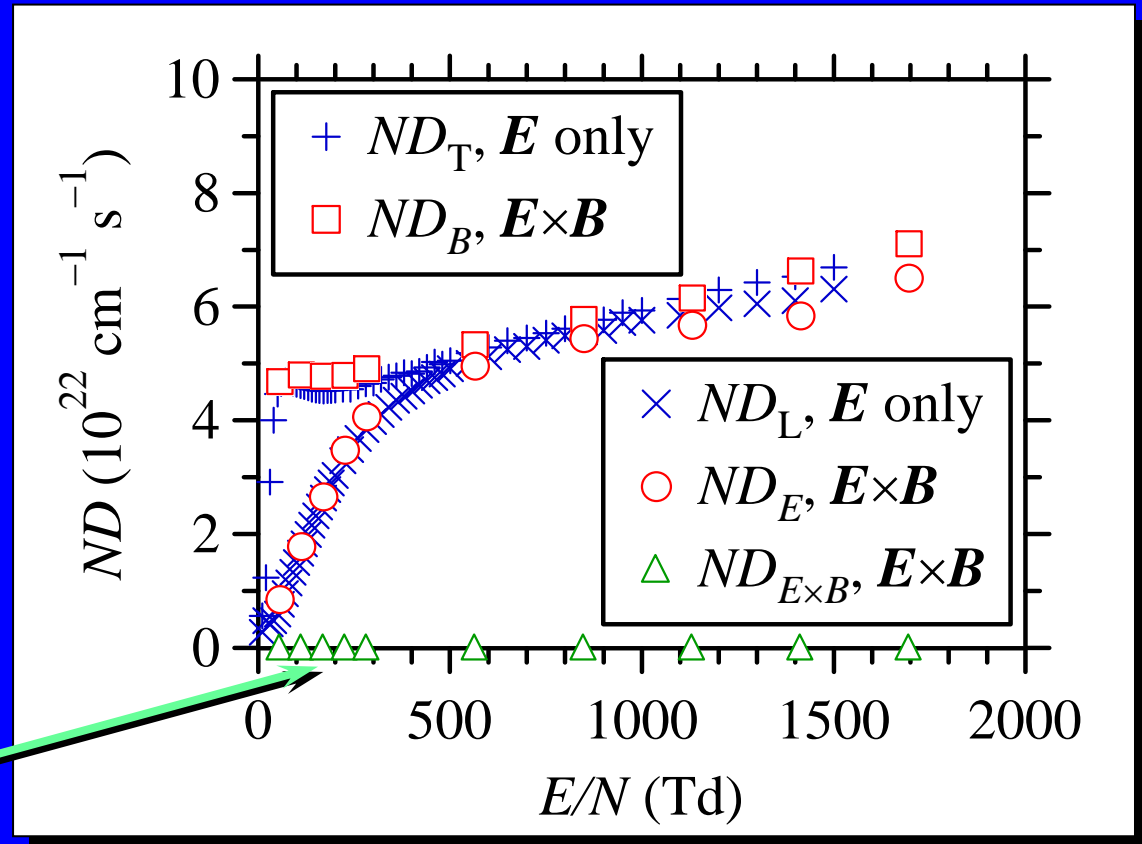
スオームパラメータ計算結果: D_{EXB} , D_E , D_B

反平行傾斜磁界・直流電界／直流電界・磁界なし



「収束的」
電磁界配位

x 方向拡散は抑制
(閉じ込め効果)

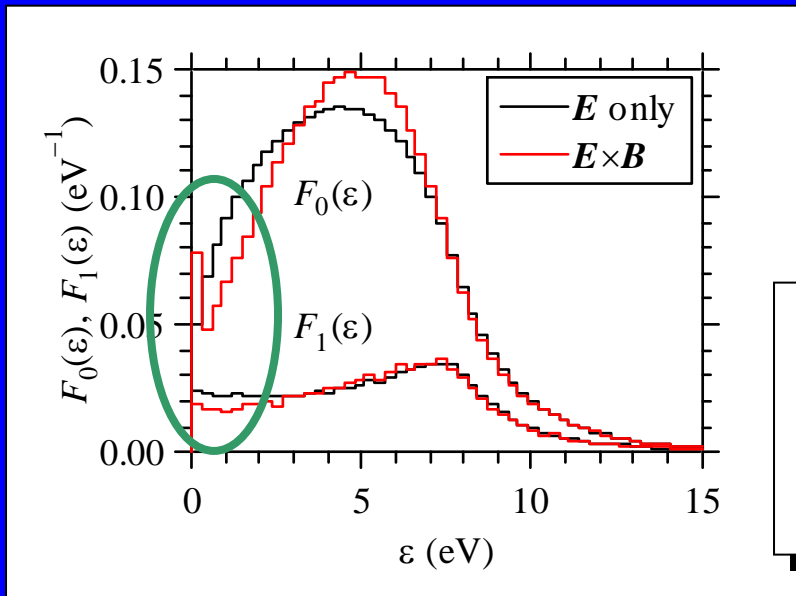


拡散係数

電子エネルギー分布計算結果

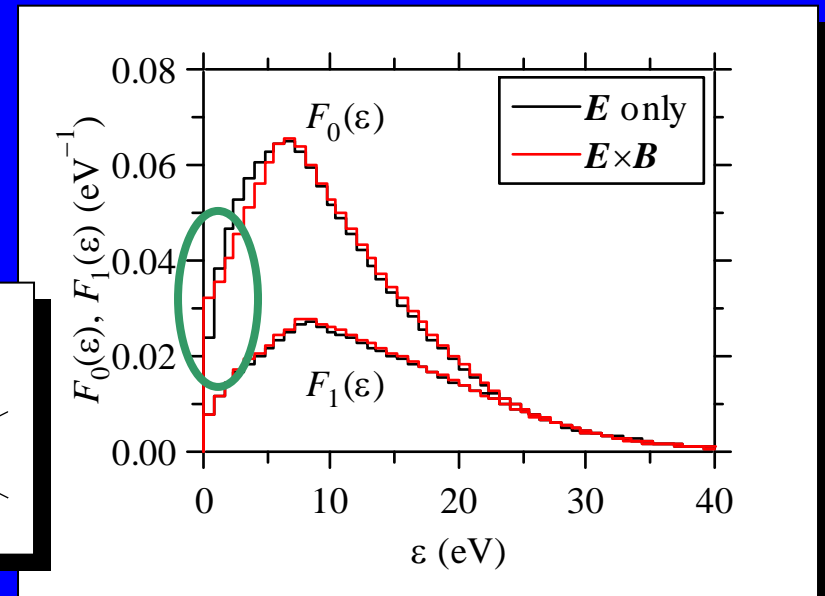
反平行傾斜磁界・直流電界／直流電界・磁界なし

- 低エネルギー電子増（磁界の効果）
- 低 E/N では歪顕著
- 注目点：スオームパラメータのいくつかは変化少



$E/N = 113 \text{ Td}$

「収束的」
電磁界配位

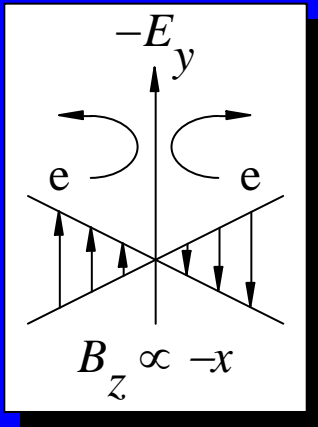


$E/N = 566 \text{ Td}$

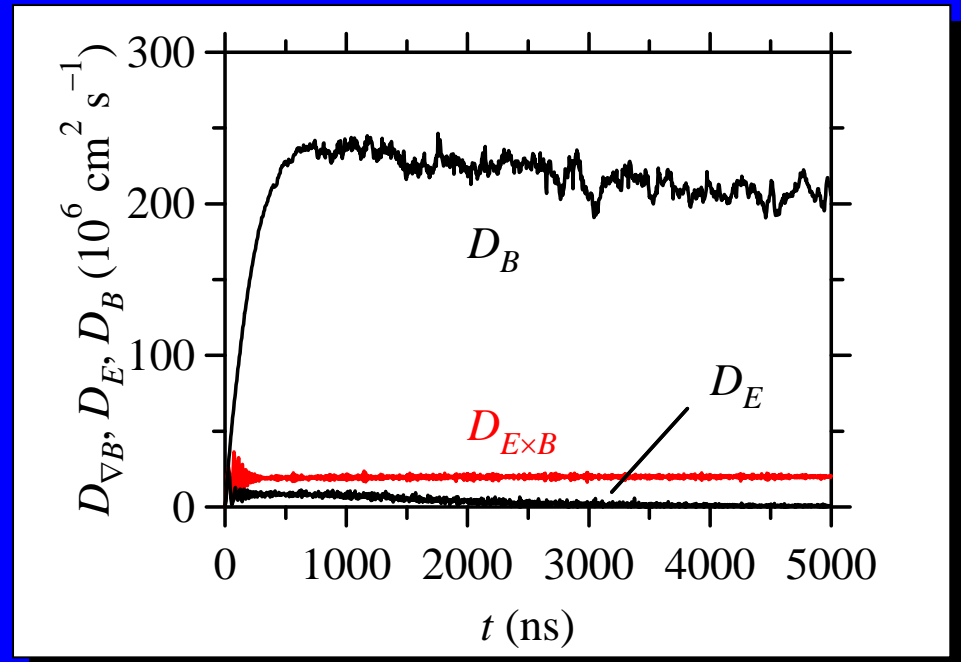
発散的電磁界配位の特徴的電子輸送係数

D_{ExB} の平衡値 $D_{ExB} = E/(dB_z/dx)$

- 低気圧(平均自由時間 \gg サイクロトロン周期、実効的に無衝突)の仮定から解析的に導出



「発散的」
電磁界配位



拡散係数の緩和過程

発散的電磁界配位の特徴的電子輸送係数

D_{ExB} の平衡値 $D_{ExB} = E/(dB_z/dx)$

- 低気圧(平均自由時間 \gg サイクロトロン周期、実効的に無衝突)の仮定から解析的に導出
- D_{ExB} は N に依存しない定数(相似則不適用)
cf. 相似則: 直流電界下では、
与えられた E/N に対して ND が一定値
- ExB ドリフトに基づく拡散
- ExB ドリフト速度 = $E/(-B_z(x)) \propto |1/x|$ 位置依存

反平行傾斜磁界の整流効果 (RF電界)

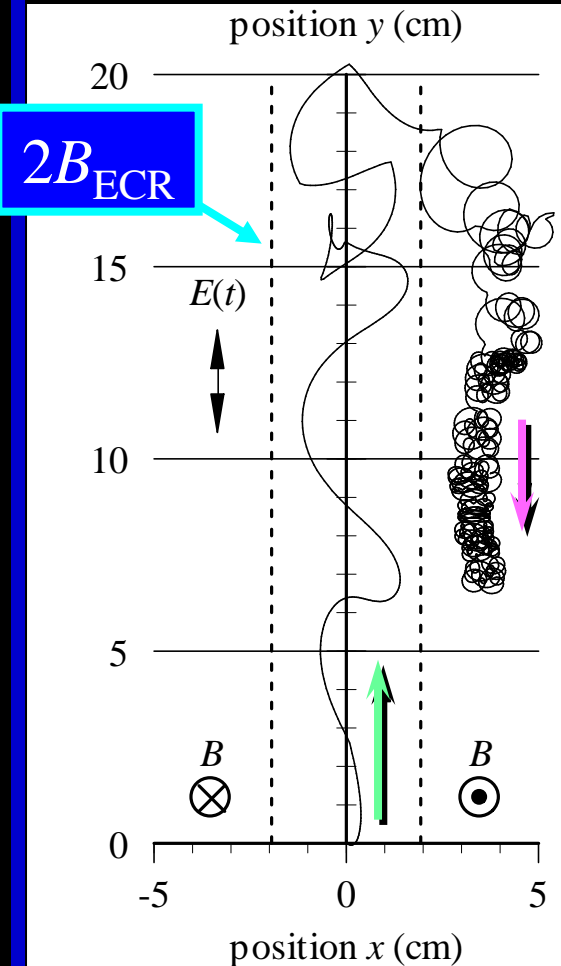
電子運動の指向性

- 蛇行運動: 弱磁界下
 - RF電界に追従 (前後運動)
 - 平均的には $+y$ 方向へ移流
- 旋回運動: 強磁界下
 - 平均的には $-y$ 方向へ移流 (いわゆる grad- B ドリフトの向き)

B_{ECR} : RF共鳴磁界強度、 $2\pi f = eB_{\text{ECR}}/m$
(13.56 MHz においては $B_{\text{ECR}} = 0.48$ mT)

Sugawara H, Osaga T and Yamamoto H (2011)
Plasma Sources Sci. Technol. 20, 055002

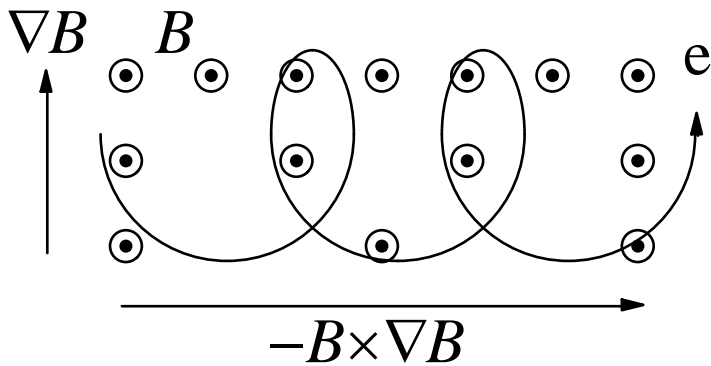
CF₄ 5 mTorr
 $\beta = dB_z/dx = 0.5$ mT/cm
 $E_{\text{rf}} = 10$ V/cm



基礎資料: grad-Bドリフト

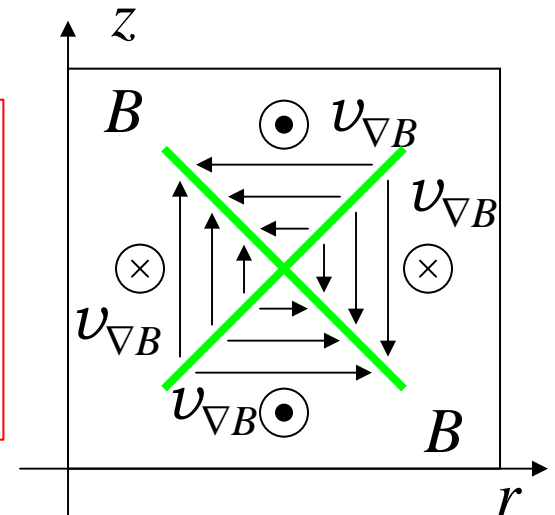
強弱磁界下のジャイロ半径(ラーモア半径)の違いによる旋回中心の移動

- ジャイロ半径 $r_L = v/\omega = mv/eB$
- 弱磁界で半径大
- 強磁界で半径小



grad-B drift

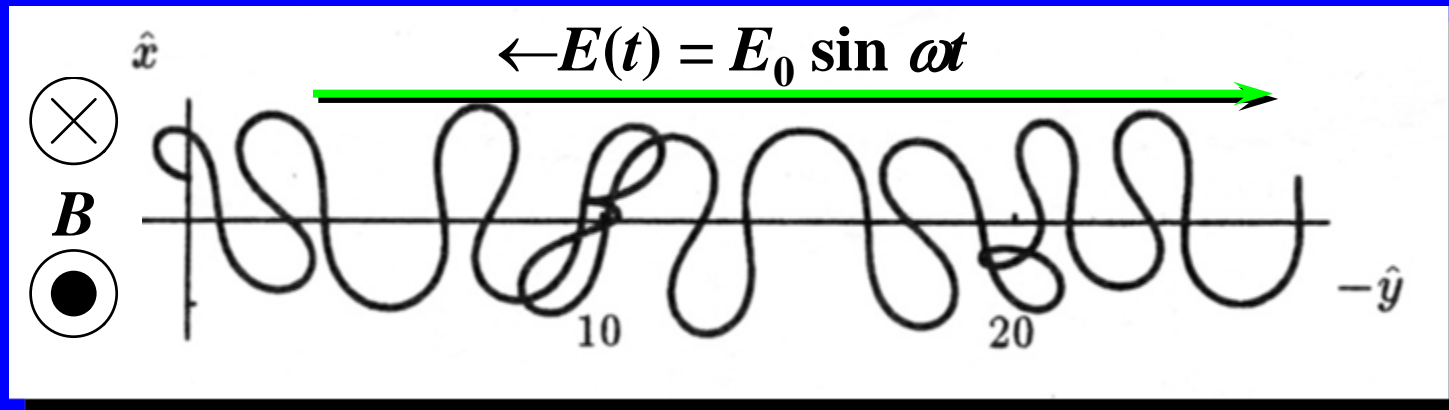
$$\vec{v}_{\nabla B} = \frac{v^2}{2\omega} \frac{\vec{B} \times \nabla \vec{B}}{B^2}$$
$$\omega = \frac{q\langle B \rangle}{m} = \frac{-e\langle B \rangle}{m}$$



整流効果の現れ(初期の研究より)

電子ドリフトの指向性

- 初期(1990年代)の研究例でも移流が見られる
- ただし旋回運動や方向に関する深い議論はない



反平行傾斜磁界・RF電界下の電子蛇行運動に伴う移流
Yoshida et al. (1998) Phys. Rev. Lett. **81** 2458-2461

解析条件: ガス、電磁界、計算手法

ガス、電磁界

- ガス: CF_4 , 5 mTorr (0.67 Pa), 273 K
 - 電子衝突断面積セット: Kurihara et al., J. Phys. D: Appl. Phys., **33**, 2146-53 (2000)
- 磁界: $(B_x, B_y, B_z) = (0, 0, \beta x)$ (反平行傾斜磁界)
 - $\beta = dB_z/dx = 0.25, 0.50, \text{ or } 1.00$ mT/cm
- 電界: $(E_x, E_y, E_z) = (0, E_{y0} \sin 2\pi ft, 0)$ (RF電界)
 - $f = 13.56$ MHz, $E_{y0} = 5.0$ V/cm, $(E/N)_{\text{max}} = 2800$ Td

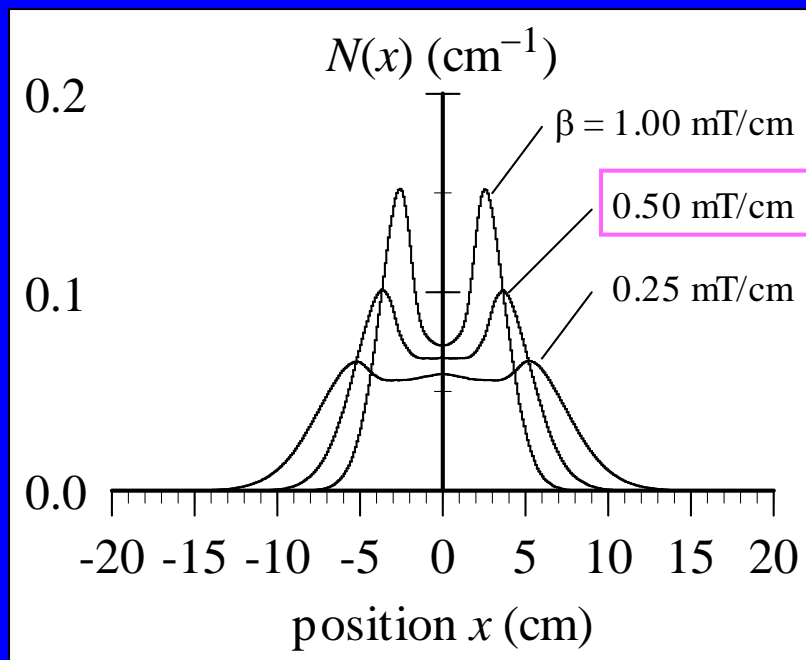
計算手法: モンテカルロ法 (Δt 法、 $\Delta t = 3.7$ ps)

- 初期電子: $(0, 0, 0)$ より Maxwell 型速度分布で供給 (平均電子エネルギー 1 eV)
- 軌道計算: Runge-Kutta法
- サンプリング: 電子数 $10^5 - 10^6$ (電子輸送係数緩和後)

横方向電子分布 (RF電界)

電子分布の構造

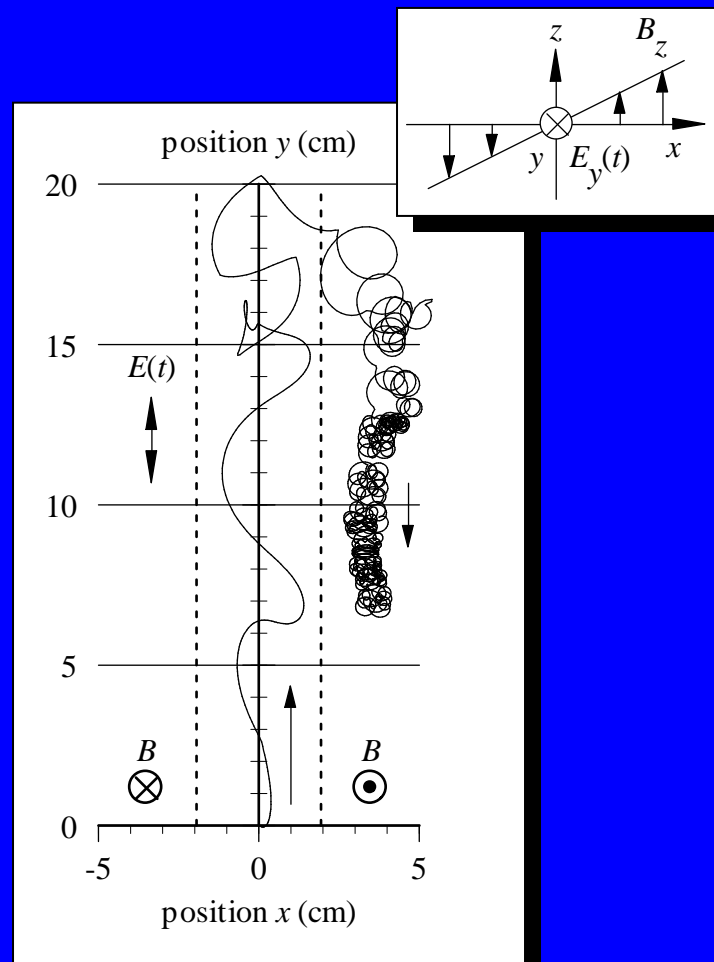
- 旋回運動によるピーク形成
- 幅は $\beta = dB_z/dx$ に依存



$\beta = dB_z/dx$ への依存性

CF_4 5.0 mTorr, 電子数 10^6 , $E = 5$ V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.25, 0.50, 1.00$ mT/cm



蛇行運動と旋回運動

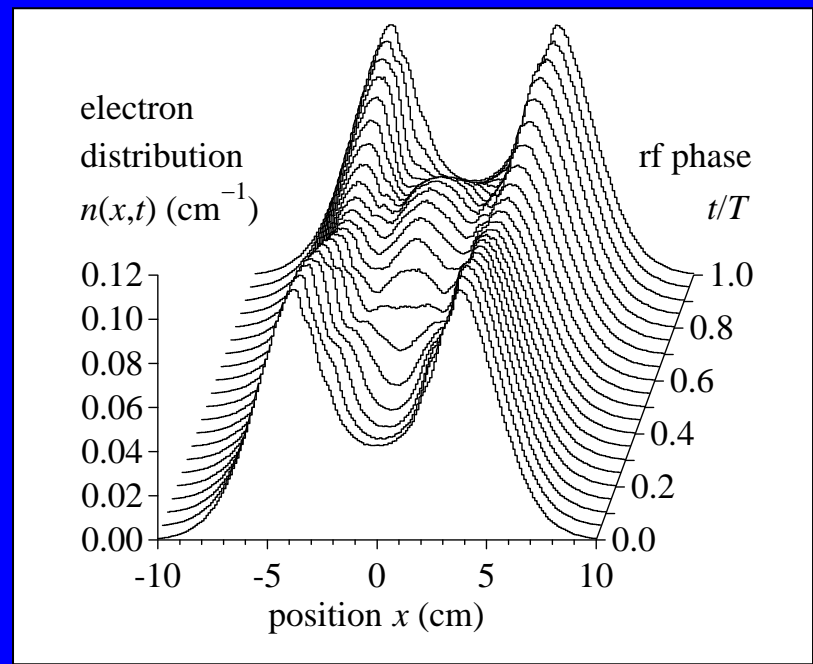
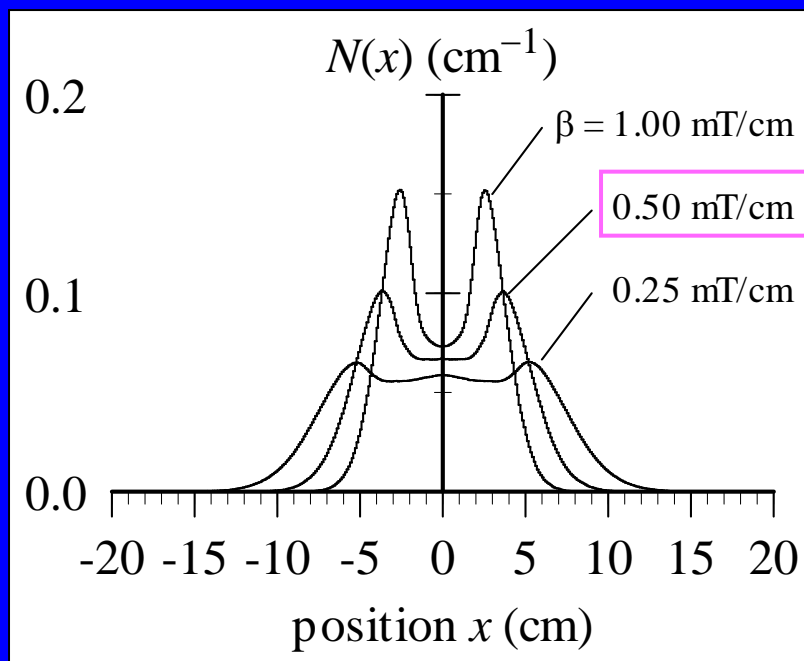
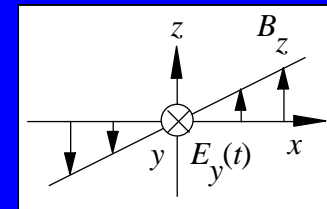
CF_4 5.0 mTorr, 電子数 10^6 , $E = 5$ V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.50$ mT/cm

横方向電子分布(RF電界)

電子分布の位相分解

– ピーク移動(内/外、 $E \times B$ 方向に一致)



$\beta = dB_z/dx$ への依存性

CF_4 5.0 mTorr, 電子数 10^6 , $E = 5$ V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.25, 0.50, 1.00$ mT/cm

位相分解電子分布

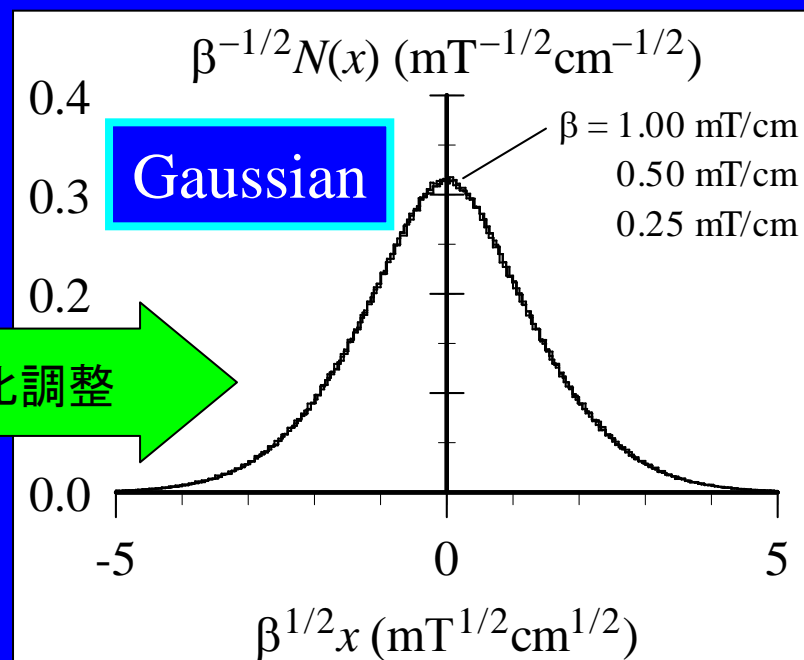
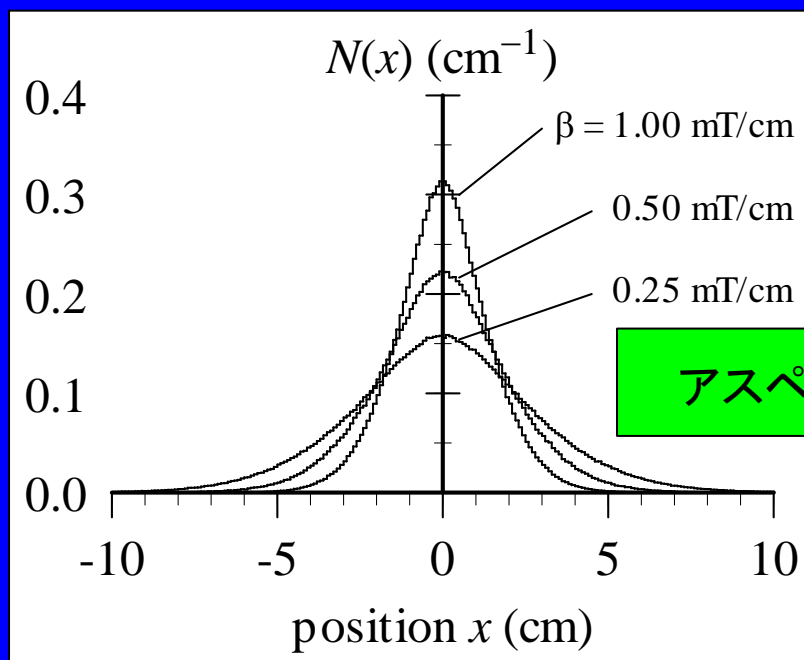
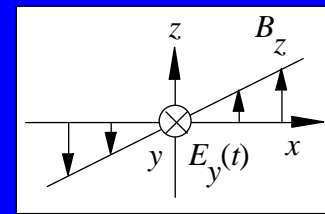
CF_4 5.0 mTorr, 電子数 10^6 , $E = 5$ V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.50$ mT/cm

横方向電子分布(DC電界)

電子伝導路の幅

- $\sqrt{\beta} = \sqrt{dB_z/dx}$ に反比例



$\beta = dB_z/dx$ への依存性

CF_4 0.5 mTorr, 電子数 10^6 , $E = 1$ V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.25, 0.50, 1.00$ mT/cm

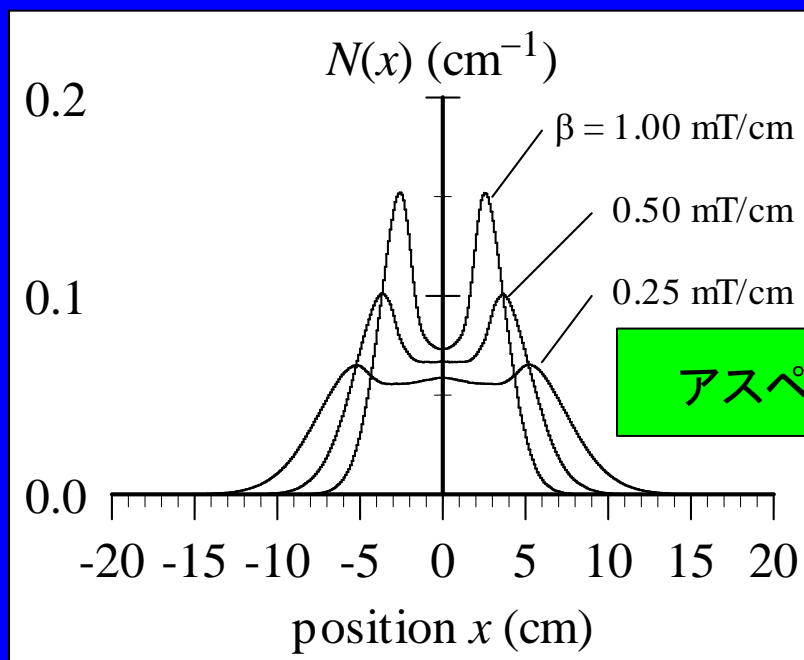
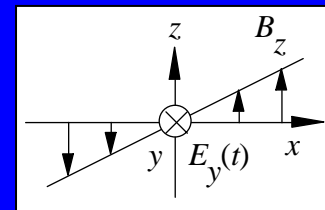
規格化形状の一致 \rightarrow 相似性

(アスペクト比調整倍率 $\sqrt{\beta} = \sqrt{dB_z/dx}$)

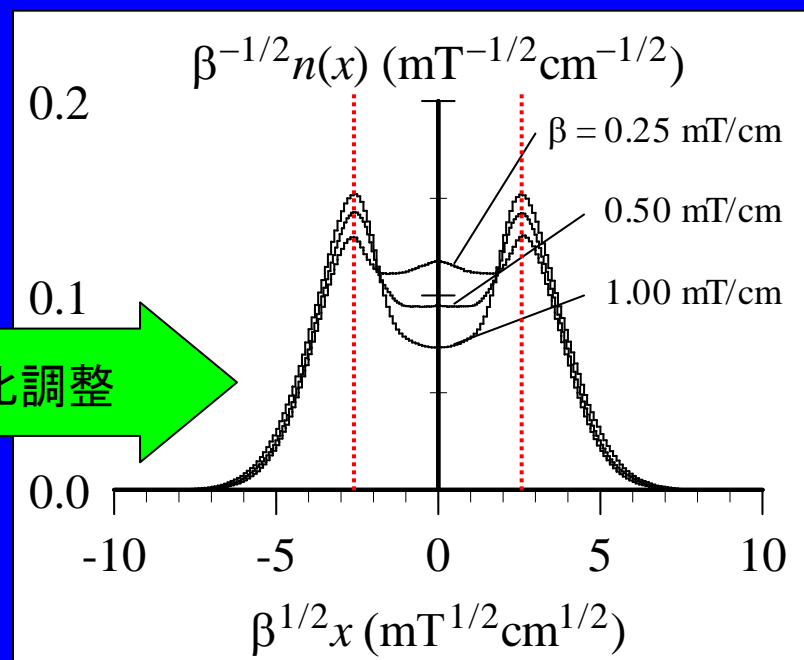
横方向電子分布 (RF電界)

電子伝導路の幅

- $\sqrt{\beta} = \sqrt{(dB_z/dx)}$ に反比例



アスペクト比調整



$\beta = dB_z/dx$ への依存性

CF_4 5.0 mTorr, 電子数 10^6 , $E = 5$ V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.25, 0.50, 1.00$ mT/cm

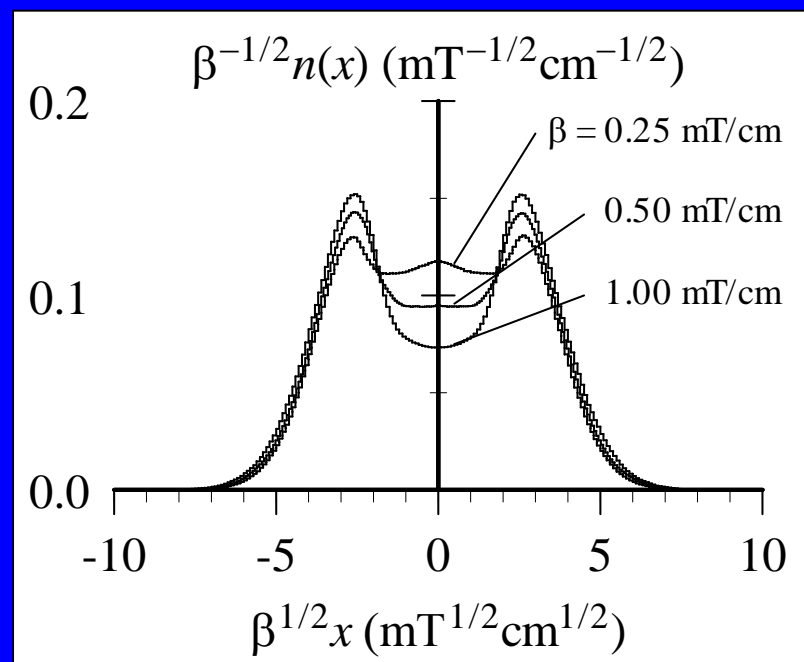
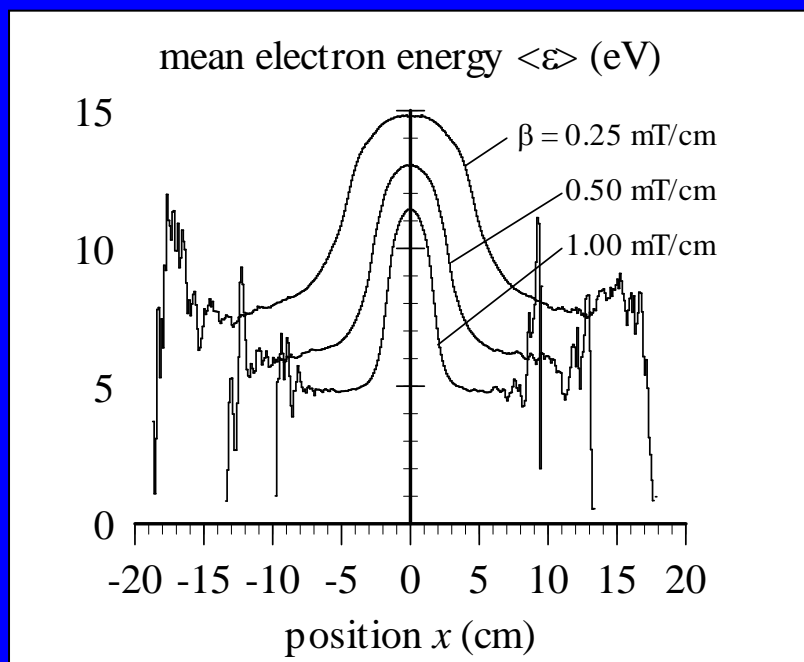
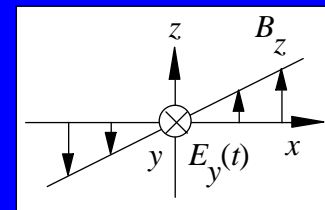
規格化形状の一致 \rightarrow 相似性

(アスペクト比調整倍率 $\sqrt{\beta} = \sqrt{(dB_z/dx)}$)

横方向電子分布 (RF電界)

電子分布中央の窪み

- 弱磁界による電子の散逸
- 電離増倍が増えたと埋まる



$\beta = dB_z/dx$ への依存性

CF₄ 5.0 mTorr, 電子数 10⁶, E = 5 V/cm

$\beta = dB_z/dx = 0.25, 0.50, 1.00$ mT/cm

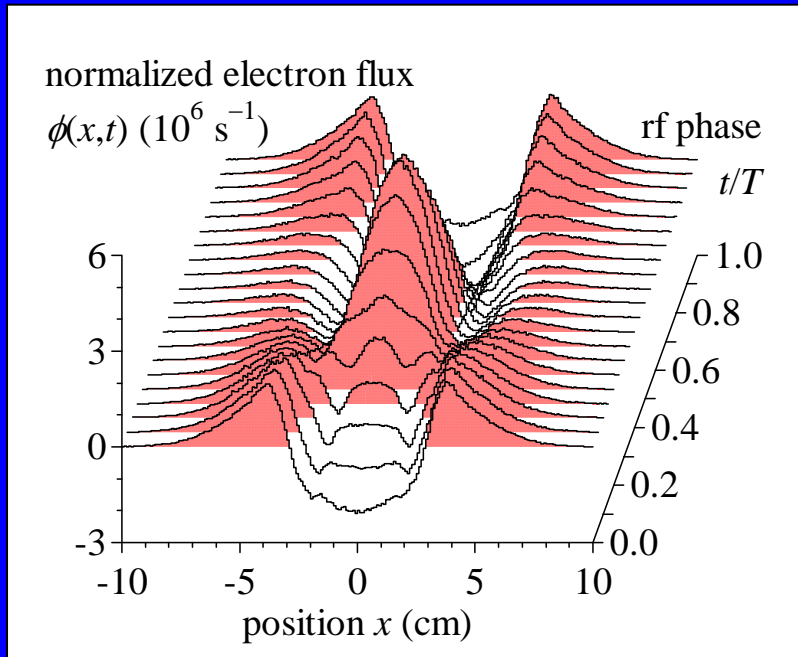
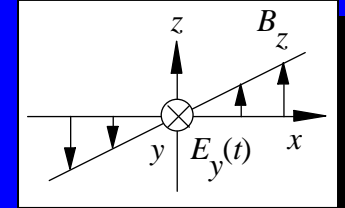
規格化形状の一致 → 相似性

(アスペクト比調整倍率 $\sqrt{\beta} = \sqrt{dB_z/dx}$)

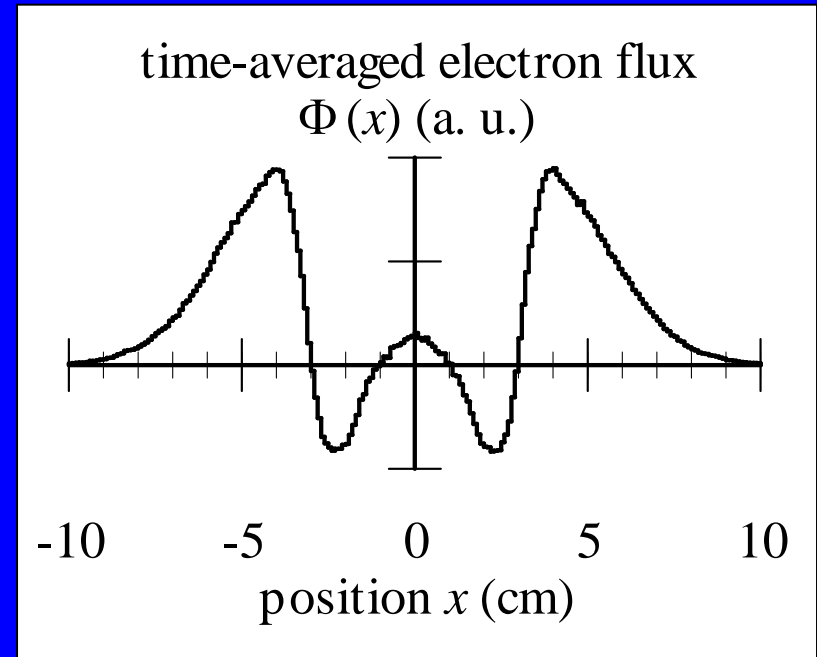
電子フラックス分布

電子伝導路の構造

- 交互に指向性(正味前向き、整流効果)
- x 位置(中性面からの距離)に依存



位相分解電子フラックス分布
CF₄ 5.0 mTorr, 電子数 10⁶, $E = 5$ V/cm
 $\beta = dB_z/dx = 0.50$ mT/cm

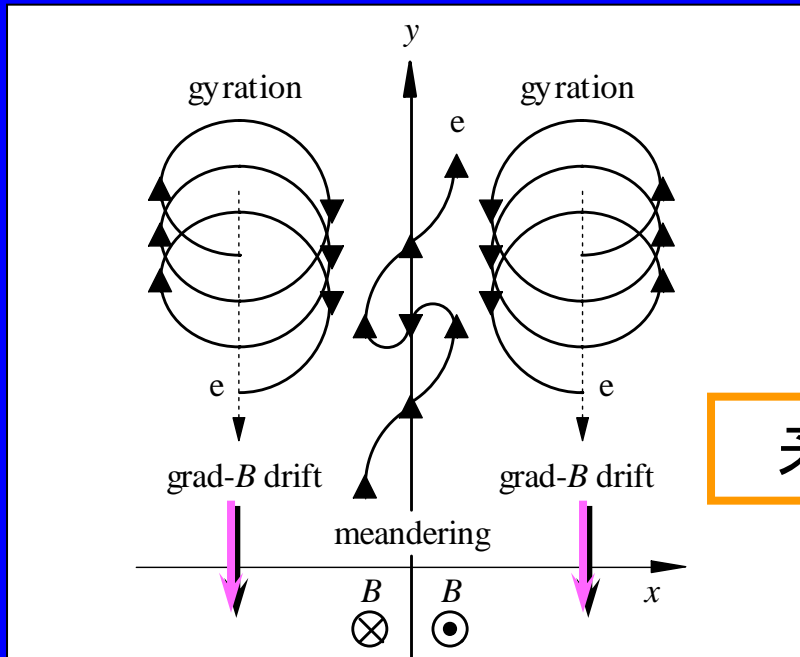


時間平均電子フラックス $n_e v_y$
(内部レーン、中部レーン、外部レーン)
 $\beta = dB_z/dx = 0.50$ mT/cm

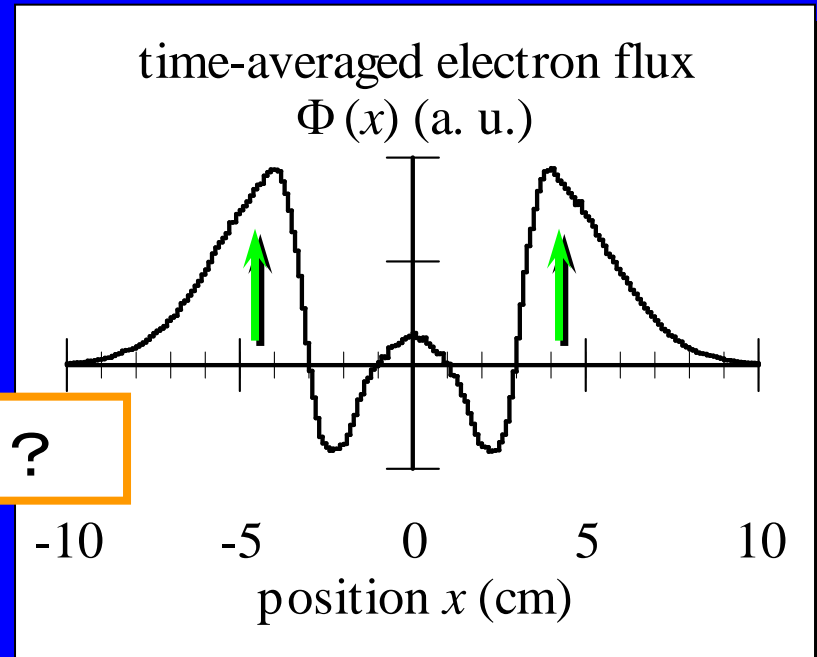
電子フラックス分布

外部レーンにおける電子フラックス $n_e v_y$ の方向

- 電子フラックスは前向き (+y 方向)
- grad-B ドリフトは後向き (-y 方向)



矛盾？



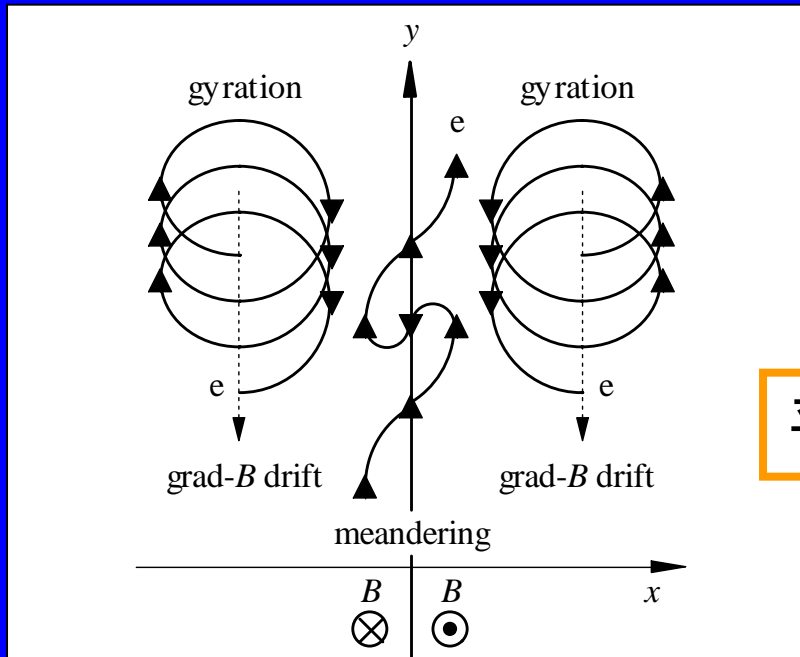
蛇行運動と旋回運動に伴う
ドリフト方向

時間平均電子フラックス $n_e v_y$
(内部レーン、中部レーン、外部レーン)
 $\beta = dB_z/dx = 0.50$ mT/cm

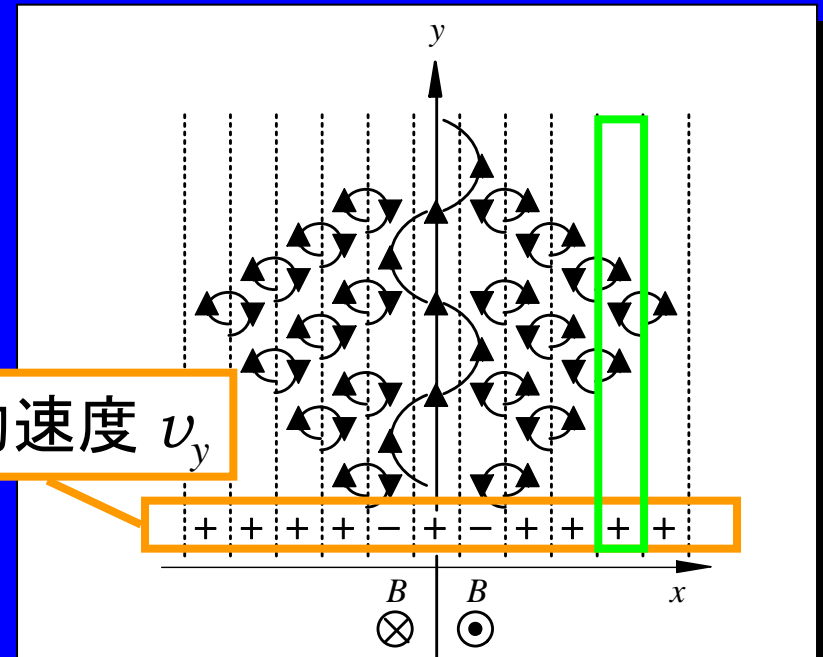
電子フラックス分布

外部レーンにおける電子フラックス $n_e v_y$ の方向

- 電子フラックスは前向き (+y 方向)
- grad-B ドリフトは後向き (-y 方向)



蛇行運動と旋回運動に伴う
ドリフト方向

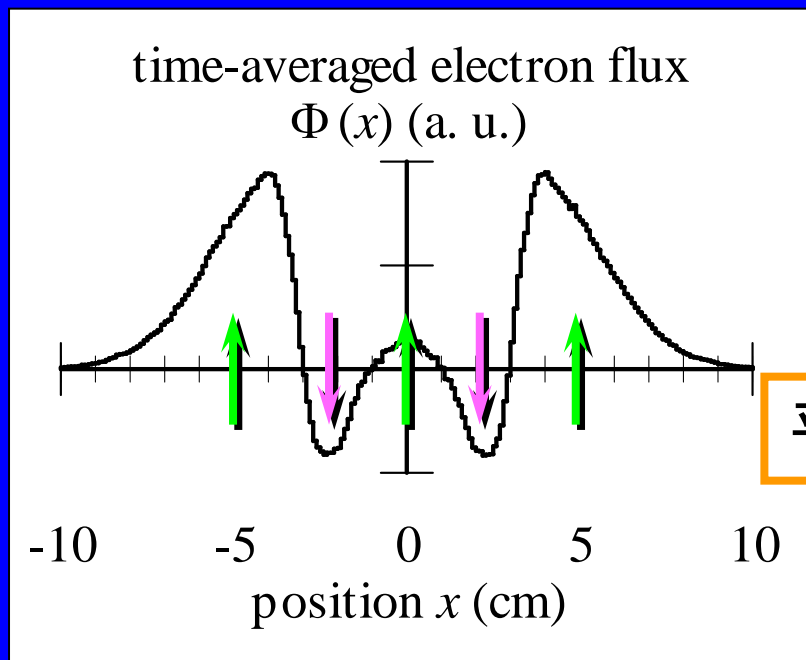


旋回運動をする電子
(電子数密度勾配を伴う場合)

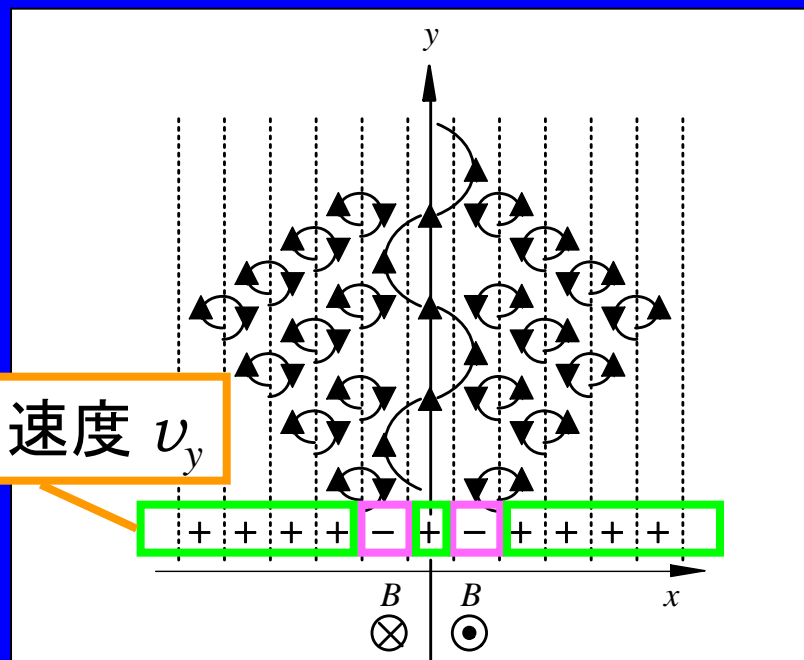
電子フラックス分布

外部レーンにおける電子フラックス $n_e v_y$ の方向

- 電子フラックスは前向き (+y 方向)
- grad-B ドリフトは後向き (-y 方向)



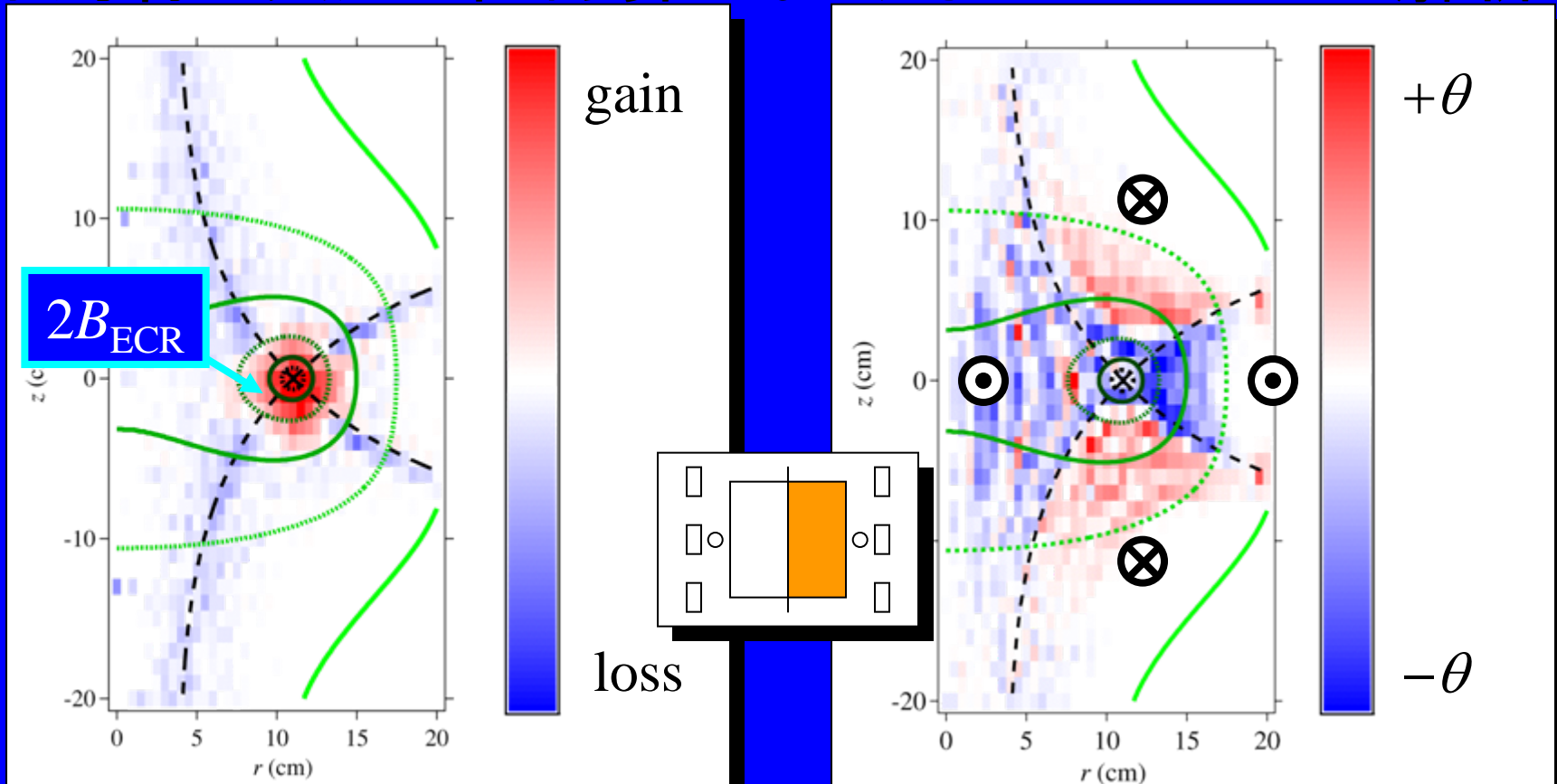
時間平均電子フラックス $n_e v_y$
(内部レーン、中部レーン、外部レーン)



旋回運動をする電子
(電子数密度勾配を伴う場合)

整流効果(4極磁界)

軸対称3次元4極磁界におけるモンテカルロ解析



電子エネルギー利得、損失

周方向電子速度
(時間平均)

まとめ

モンテカルロ法により反平行傾斜磁界下電子挙動を解析

電磁界には順方向(伝導性)と逆方向(阻止性)の配位

順方向直流電界下の電子輸送係数は無磁界の値に近い

- 磁界の弱い領域に集められるため

逆方向直流電界下の電子輸送係数の多くは平衡せず

- 例外は横方向拡散係数($E \times B$ ドリフトによる拡散)

RF電界の場合

- 弱磁界下の蛇行、強磁界下の旋回
- 蛇行と旋回に伴うドリフトに指向性
- 電子伝導路に前向きレーンと後ろ向きレーンが形成

直流・交流電界とも

- 横方向電子分布幅は磁界勾配(dB_z/dx)の平方根に反比例

不平等磁界下電子輸送の定量化、標準化

データの意義、普遍性についての検討

Q.不平等磁界下の電子輸送をどう定義するか?

A.不平等に伴う異方性に基づいて方向を区別し、平等電磁界下と同じ定義を適用

Q.不平等磁界下の電子輸送係数値に意味があるか?

A.不平等磁界を明確に定義でき平衡値が存在するなら他の状況下の値と比較可能、不平等の効果を定量化する意義あり

Q.不平等磁界をどう定義(標準化)するか?

A.本解析(反平行傾斜磁界、4極磁界)の例では、境界なしの状況を設定し、磁界勾配により記述