

Flight Time Integral 法の理論

武田 章 秀

Theory of Flight Time Integral method

Akihide TAKEDA

ABSTRACT

It is important to understand electron and ion flight behavior in gas under an electric field as the basis for the research of gas discharge phenomena. This paper introduces a method to calculate the behavior of electrons following their trajectory motion. Some results in Ne gas obtained by this method will also be explained.

1. まえがき

電界を加えたガス中の電子の振る舞いを詳細に知ることは放電現象の基礎として重要である。例えば、ある電界下、陰極をある初期エネルギー分布で出発した電子群は、陽極に達するまでにエネルギー分布をどのように変化させていくかとか、陽極に到達したときは何倍に電離増倍しているかといった問題は、平等電界であれば、また電子衝突断面積が正しく与えられていれば、簡単に正確に計算できる。このように、電子が電界の中でどのように運動しどのようなエネルギー分布を形成していくかを調べる方法として、モンテカルロシミュレーション(MCS)とボルツマン方程式解析(BEA)が一般に用いられている。

ボルツマン方程式を用いた電子の速度分布や輸送係数の解析は最も広く行なわれている。最も基本的な BEA では、電界下の電子の飛行及びガスとの衝突による速度空間の狭い領域への出入りがバランスするように速度(エネルギー)分布を決めていく。ここで得られるのは定常(stationary)状態の速度(エネルギー)分布であって、これからは電子の輸送特性を詳細に決める出発レートの

受理日：平成16年9月16日

エネルギー分布や、飛行時間、飛行距離、エネルギーゲインというような電子の飛行の始めから終わりまでを直接表すデータは得られない。一方、確率法則にしたがって飛行・衝突を繰り返している電子の振る舞いをありのままに確率的な手法で再現して、そのデータをサンプリングする方法が MCS である。一個ずつ追いかけるので時間がかかる上結果にばらつきも生じ易いが、時間的、位置的あるいはエネルギー的に分離したあらゆる情報を直接サンプリングできるという点で、現在これに勝る方法は見当たらない。

ところで、MCS のように電子を1個ずつ追跡するのではなく、同時にあらゆる方向に出発した電子が、どこまで飛行してどれだけのエネルギーを得て衝突するかという確率分布を求めておけば、それを利用して飛行特性をもっと簡単にばらつきなしに計算できるのではないかという考え方があ。この考え方によって開発されたのが Flight Time Integral (FTI) 法である [1]~[3]。MCS と FTI 法は電子が軌道に沿って実際に飛んでいく様子を確率的手法で再現して解析する軌道解析 (trajectory analysis) であるという共通点を持ち、この点でボルツマン方程式解析とは一線を画する

ものである。

電子は同じ初速度で飛行を始めても、個々の電子が衝突するまでの時間、衝突した位置、エネルギーは大きく変化する。このように広がった値をとることを飛行による位置・エネルギーの分散と呼ぶ。また衝突の種類によっても散乱後のエネルギー値は分散する。このような飛行及び衝突におけるエネルギー分散の確率をあらかじめ分散関数として求めておいて、この分散関数を作用させることにより飛行・衝突の結果を一括して求めようというのがFTI法の考え方である。この意味で電子を個々に追いかけるMCSはmicroscopic simulationであり、FTI法はmacroscopic simulationであると言えよう。電子輸送特性を求める際のFTI法の特徴は、主未知関数が飛行中の電子エネルギー分布 $F(\epsilon)$ ではなく、出発レートのエネルギー分布 $\Psi_s(\epsilon_0)$ である点にある。飛行及び衝突におけるエネルギー分散特性を記述して定常状態での $\Psi_s(\epsilon_0)$ を決めれば、 $\Psi_s(\epsilon_0)$ で出発する電子の平均的飛行特性や輸送特性を明確に求めることができる。

2. 電子輸送特性の観測方法

田頭らは1977年電子の輸送特性を観測する方法をPulsed Townsend(PT),Time of Flight(TOF)およびSteady State Townsend(SST)に分類し、ボルツマン方程式解析とモンテカルロシミュレーションによって求めたデータから、観測法によってまた電離・付着等の有無によって、輸送係数が異なる値を持ち得ることを示した2編の論文を発表した[4],[5]。PTでは電子の一群(スォーム)全体を一まとめにして時間のみの関数として取り扱い、エネルギー分布や輸送関数が時間と共に平衡状態に落ち着いていく様子をしらべる。一般に電子の輸送係数といえばこのPTの平衡状態に落ち着いた値を示す。TOFでは進展する電子スォームを、時間だけでなく位置的にも分解して時間および位置の関数として取り扱う。位置分解しているので重心移動速度、拡散係数などを求めること

ができるが、解析はやや困難となる。SSTでは電界軸方向に定常的に通過していく電子群を横から見ていて、観測位置(1次元)が変わるとエネルギー分布や輸送係数がどのように変化するかというような局所的情報を求める。単位距離当たりの電離増倍率、すなわち電離係数はこの観測法における代表的輸送量である。しかし定常的な流れを観測することと、通過していく一群の電子を初めから終わりまで時間積分的に観測するのは全く等価であるので、時間積分観測法を用いる方が便利である。ただし電子増倍率が大きくなって空間電荷を生じるようになると、当然ながら計算は簡単にはできなくなる。

以下では、特にPT観測とSST観測に対応したFTI法による電子輸送特性の解析について説明する。

3. PT解析

3.1 電子の衝突周波数

電子とガス粒子との衝突周波数は相対速度に比例するが、ガスの熱速度が電子の速度 $v(\epsilon)$ に対して極めて低いので相対速度=電子速度と置くことができる。そこで、電子衝突全断面積を $q_T(\epsilon)[\text{cm}^2]$ 、電子の速度を $v(\epsilon) = V_1 \sqrt{\epsilon} [\text{cm s}^{-1}]$ 、 $V_1 = \sqrt{2e/m} = 5.931 \times 10^7 [\text{cm s}^{-1} \text{V}^{-1/2}]$ 、ガス密度を $N [\text{cm}^{-3}]$ で表すと、電子の衝突周波数は $\nu(\epsilon) = N q_T(\epsilon) v(\epsilon) [\text{s}^{-1}]$ と表示される。しかし電界中を飛行する電子の速度、エネルギー、衝突周波数等は時間と共に変わるので $\nu(t), \epsilon(t), v(t)$ として表記する。 $t=0$ に初期エネルギー ϵ_0 で出発した電子が、時刻 t まで衝突せずに飛行を続けている確率(生き残り確率)は $\exp[-\int_0^t \nu(t') dt']$ 、時刻 $t \sim t+dt$ 間に衝突する確率は $\nu(t) \exp[-\int_0^t \nu(t') dt'] dt$ のように、軌道運動する電子の衝突時刻に対応して決まるエネルギー・位置分散は、衝突周波数 $\nu(t)$ の飛行時間積分を用いると精度高く計算できることが確かめられている。この飛行時間積分を用いたことがFTI法という名の由来である。

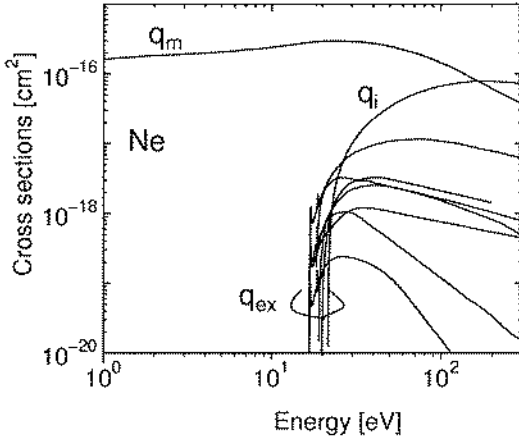


図1 Neの電子衝突断面積
Fig. 1 Electron collision cross sections of Ne

3. 2 エネルギー分散関数

FTI法においては、電子の飛行・衝突に伴うエネルギーの分散は出発エネルギー ε_0 、衝突エネルギー ε' 、損失後のエネルギー ε'_0 の3本のエネルギー軸に記録する。出発する電子のエネルギー分布はまず ε_0 軸に与え、飛行、衝突、エネルギー損失によるエネルギー分散は、順次各エネルギー軸上への分散確率の振込みで実行される。

エネルギー ε_0 で出発した規格化電子が飛行してエネルギー ε' で衝突する確率、すなわち ε_0 から ε' への分散確率、を表す関数 $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ を、飛行によるエネルギー分散関数と呼んでいる。

$$H(\varepsilon', \varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty v_T(t) \exp\left[-\int_0^t v_T(t') dt'\right] \times \delta(t-\tau) dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0 \quad (1)$$

$$\varepsilon'(t) = \varepsilon_0 + E(v_0 \cos \theta_0 t + \frac{eE}{2m} t^2), \quad \frac{1}{2} m v_0^2 = e\varepsilon_0$$

等方散乱を仮定すると、衝突・散乱後の電子の再出発は入射方向に関わらず等方となるので、 $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ には出発速度の電界軸からの偏向角 θ_0 方向の重み $1/2 \sin \theta_0 d\theta_0$ がついている。この重みの積算値は1である。また(1)式においてデルタ関数 $\delta(t-\tau) dt$ は、時刻 $t=\tau$ における dt 間に衝突する確率値をエネルギー $\varepsilon'(\tau)$ に落としていく“振込み”操作を表している。

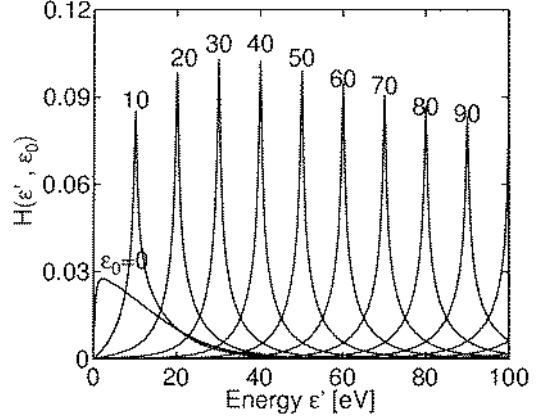


図2 一回の飛行による電子のエネルギー分散関数
Fig. 2 Electron energy dispersion functions $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ through a flight in Ne ($E = 300 \text{ Vcm}^{-1}$ $E/N = 300 \text{ Td}$).

図1に示す電子衝突断面積を持つNeガス中 $E/N = 300 [\text{Td}]$ での $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ を図2に示す。

3. 3 ループエネルギー分散関数

衝突における電子のエネルギー損失 ε_k は、衝突の種類に依存するので、衝突の種類別に分散関数を用意する必要がある。このため種類 k の衝突をする衝突周波数 $\nu_k(t) = Nq_k(t)v(t)$ を用いて、衝突 k についてのエネルギー分散関数 $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ を求める。

$$H_k(\varepsilon', \varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty \nu_k(t) \exp\left[-\int_0^t \nu_T(t') dt'\right] \times \delta(t-\tau) dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0 \quad (2)$$

なお、 $\sum \nu_k(\varepsilon) = \nu_T(\varepsilon)$ であるから $\sum H_k(\varepsilon', \varepsilon_0)$ は $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ に等しくなる。

$H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ を求める際、励起衝突では、衝突による損失を考慮したエネルギー $\varepsilon'_0 = \varepsilon' - \varepsilon_k$ に、 ε' で k 衝突する確率 $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ を振り込む。また、付着衝突では $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ の0倍を振り込み、電離衝突で散乱電子と放出電子に異なるエネルギーを与える場合は、 $\varepsilon'_0 = s(\varepsilon' - \varepsilon_i)$ および $(1-s)(\varepsilon' - \varepsilon_i)$ それぞれに $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$ を振り込むことになる。これらをすべての衝突 k について実行すると、一回の飛行・衝突後のエネルギー ε'_0 への分散特性、すなわちループエネルギー分散関数 $L(\varepsilon'_0, \varepsilon_0)$ が得られる。衝突損失によるエネル

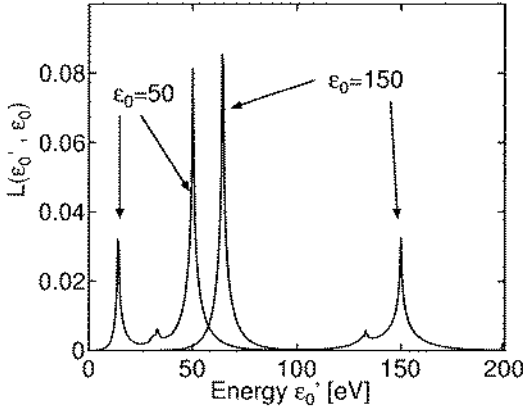


図3 ループエネルギー分散関数

Fig. 3 Examples of loop energy dispersion functions for $\varepsilon_0 = 50$ and 150 [eV] in Ne at 300 Td.

ギー分散特性だけを分散関数 $S(\varepsilon'_0, \varepsilon')$ で表すと、

$$L(\varepsilon'_0, \varepsilon_0) = S(\varepsilon'_0, \varepsilon') \otimes H(\varepsilon'_0, \varepsilon_0) \quad (3)$$

のように表示できる。(3)式で \otimes は重ね積分と呼んでいる。

図3に、Neガス中での $L(\varepsilon'_0, \varepsilon_0)$ の一例を示す。

3. 4 飛行中の分布を与えるエネルギー分散関数

$t = 0$ にエネルギー ε_0 で等方に出発した規格化電子が衝突せずに $t = \tau$ にエネルギー $\varepsilon(\tau)$ で飛行を続けている確率を与える分散関数は

$$H_f(\varepsilon, \varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty \exp\left[-\int_0^t v_T(t') dt'\right] \times \delta(t - \tau) dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0 \quad (4)$$

で与えられる。 $H_f(\varepsilon, \varepsilon_0)$ [eV⁻¹s] は飛行中の分布を与えるエネルギー分散関数と呼ばれ、その数値は $d\varepsilon$ あたり dt を単位とする飛行(滞在)時間を表す。したがって $H_f(\varepsilon, \varepsilon_0)$ は規格化された分散関数ではない。図4に、図2と同じ条件での $H_f(\varepsilon, \varepsilon_0)$ を示した。低エネルギーで出発した電子ほど、ガス空間に長く滞在できることが理解される。

3. 5 非等方成分の表示

上記のエネルギー分散関数 $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$, $H_f(\varepsilon, \varepsilon_0)$ は、衝突時および飛行中の分散成分の“大

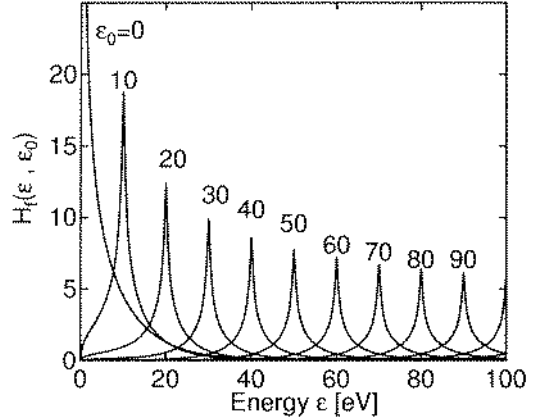


図4 飛行中の電子エネルギー分散関数

Fig. 4 Electron energy dispersion functions in a flight $H_{f0}(\varepsilon, \varepsilon_0)$ in Ne at $E/N = 300$ Td.

きさ”を表しているという意味で、衝突時あるいは飛行中の電子速度の Legendre 展開 0 次成分 $H_0(\varepsilon', \varepsilon_0)$, $H_{f0}(\varepsilon, \varepsilon_0)$ を意味する。その非等方成分、1 次、2 次、…成分を求めるには、衝突時、飛行中の電子速度の電界軸からの偏向角 θ', θ における Legendre 係数 $(2\ell + 1)P_\ell(\cos \theta')$, $(2\ell + 1)P_\ell(\cos \theta)$ をそれぞれ分散値に乘じればよい。

$$H_\ell(\varepsilon', \varepsilon_0) = (2\ell + 1)P_\ell(\cos \theta') H(\varepsilon', \varepsilon_0) \quad (5)$$

$$H_{f\ell}(\varepsilon, \varepsilon_0) = (2\ell + 1)P_\ell(\cos \theta) H_f(\varepsilon, \varepsilon_0) \quad (6)$$

得られた $H_\ell(\varepsilon', \varepsilon_0)$, $H_{f\ell}(\varepsilon, \varepsilon_0)$ は軌道運動する電子の Legendre 展開成分を厳密に与える分散関数である。

3. 6 輸送関数

軌道運動している電子の輸送特性の直接資料となる諸量を求めるには、

$$G_z(\varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty z v_T(t) \exp\left[-\int_0^t v_T(t') dt'\right] dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0 \quad (7)$$

$$G_{fz}(\varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty z \exp\left[-\int_0^t v_T(t') dt'\right] dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0 \quad (8)$$

のようにエネルギー分散関数 $H(\varepsilon', \varepsilon_0)$, $H_f(\varepsilon, \varepsilon_0)$ の被積分関数に輸送量 z を乗じ、振込み関数 $\delta(t - \tau)$ を除いて積分すると、エネルギー ε_0 で出発した規格化電子が衝突した時の輸送量 z の積算値 $G_z(\varepsilon_0)$, および飛行中の輸送量 z の飛行時間積分値 $G_{fz}(\varepsilon_0)$ が得られる。

例えば $G1(\epsilon_0)$ はエネルギー ϵ_0 から出発した電子の全衝突数 (= 1) を意味し, $G\tau(\epsilon_0) = G_f1(\epsilon_0)$ は平均飛行時間, $Gx(\epsilon_0) = G_f v_x(\epsilon_0)$ は電界 (前) 方向平均変位, $G\epsilon(\epsilon_0)$ は衝突時の平均エネルギー, $G\lambda(\epsilon_0) = G_f v(\epsilon_0)$ は平均自由行程となる。これらをまとめて輸送関数と呼ぶ。

3. 7 エネルギー分布の決定

FTI法では, 主未知数である出発レートのエネルギー分布 $\Psi_S(\epsilon_0)$ の他に, 衝突レートのエネルギー分布 $\Psi_C(\epsilon')$, 飛行中のエネルギー分布 $F(\epsilon)$ を取り扱うことになる。これらの関係は

$$F(\epsilon) = H_f(\epsilon, \epsilon_0) \otimes \Psi_S(\epsilon_0) \quad (9)$$

$$\Psi_C(\epsilon') = H(\epsilon', \epsilon_0) \otimes \Psi_S(\epsilon_0) \quad (10)$$

$$\Psi_S(\epsilon_0) = S(\epsilon'_0, \epsilon') \otimes \Psi_C(\epsilon') \quad (11)$$

となる。(10) 式と (11) 式から,

$$\begin{aligned} \Psi_S(\epsilon_0) &= S(\epsilon'_0, \epsilon') \otimes H(\epsilon', \epsilon_0) \otimes \Psi_S(\epsilon_0) \\ &= L(\epsilon'_0, \epsilon_0) \otimes \Psi_S(\epsilon_0) \quad \epsilon'_0 \rightarrow \epsilon_0 \end{aligned} \quad (12)$$

となり, $\Psi_S(\epsilon_0)$ は 1 回の飛行・衝突の後新しい出発レート分布となって帰ってくるのがわかる。この重ね積分を繰り返し実行, つまり $L(\epsilon'_0, \epsilon_0)$ を繰り返し作用することにより, PT 条件で十分に時間経過した後, すなわち平衡状態での定常規格化出発レート分布が得られる。

得られた規格化定常レート分布 $\Psi_S(\epsilon_0)$ に飛行中のエネルギー分散関数 $H_f(\epsilon, \epsilon_0)$ を一回だけ作用させることによって得られる $F_f(\epsilon)$ は dt を単位とする飛行中の滞在時間エネルギー分布であり, これを ϵ について積分すると, 一回の飛行における平均滞在時間が得られる。 $F_f(\epsilon)$ を平均滞在時間で規格化すると一般に用いられている規格化エネルギー分布 $F(\epsilon)$ が得られる。図 5 に Ne 中 300Td における各種エネルギー分布を示す。

3. 8 平均輸送量

FTI法の利点の一つは, 輸送関数を用いて極めて詳細な輸送データ, 例えば任意の方向への 1 次変位, 2 次 (2 乗) 変位, また電離衝突あるいは付着衝突した電子の電界方向変位など欲しい量

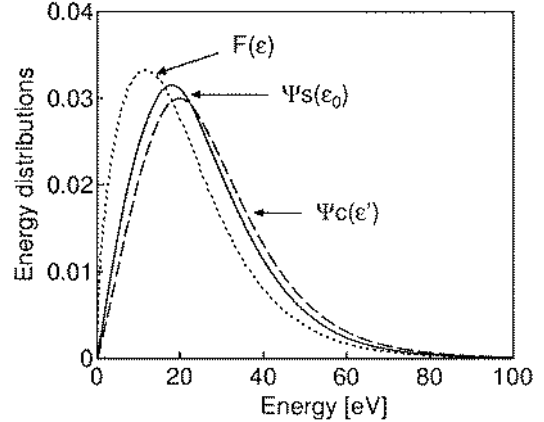


図 5 各種エネルギー分布関数

Fig. 5 Normalized starting rate distribution $\Psi_S(\epsilon_0)$, normalized colliding rate distribution $\Psi_C(\epsilon')$ and energy distribution function in a flight $F(\epsilon)$ in Ne at $E/N = 300$ Td

はすべて計算できる点にある。式 (13), (14)

$$G_z = \int_0^\infty G_z(\epsilon_0) \Psi_S(\epsilon_0) d\epsilon_0 \quad (13)$$

$$G_{fz} = \int_0^\infty G_{fz}(\epsilon_0) \Psi_S(\epsilon_0) d\epsilon_0 \quad (14)$$

のように輸送関数 $G_z(\epsilon_0)$, $G_{fz}(\epsilon_0)$ に $\Psi_S(\epsilon_0)$ を乗じて積分すると, $\Psi_S(\epsilon_0)$ で出発した PT 規格化電子が一回飛行したときの平均輸送量 G_z, G_{fz} が得られる。例えば $G\tau = G_f1$ は平均飛行時間であり, $G_f v / G_f1$ は平均衝突周波数 $\langle \nu \rangle$ であるから, $\langle \nu \rangle = 1/\langle \tau \rangle$ が厳密に証明できる。また Gv は衝突時の平均速度であり $G_f v$ は平均自由行程となる。これら平均量間の関係から輸送係数が求められる。例えば $G_f v_x / G_f1 = Gx / G\tau$ は速度空間で定義される移動速度 Wv であり, $Gy^2 / 4G\tau$ は横拡散係数 D_T である [6], [7]。

$$Wv = G_f v_x / G_f1 = Gx / G\tau \quad (15)$$

$$D_T = Gy^2 / 4G\tau \quad (16)$$

表 1 に, 輸送量の一例を示す。

表1 PT electron transport coefficient in Ne at 300Td.

平均飛行時間	$G\tau$	$[10^{-10}\text{s}]$	1.37
前方向変位	Gx	$[10^{-3}\text{cm}]$	7.49
電離電子変位	Gx_i	$[10^{-4}\text{cm}]$	7.16
移動速度	Wv	$[10^7\text{cms}^{-1}]$	5.47
エネルギー利得	$G\varepsilon$	$[\text{eV}]$	2.25
エネルギー損失	$L\varepsilon$	$[\text{eV}]$	1.37
エネルギー純利得	$\Delta G\varepsilon$	$[\text{eV}]$	0.877
電離衝突周波数	$\langle v_i \rangle$	$[10^8\text{s}^{-1}]$	2.55
電離係数	$\langle v_i \rangle / Wv$	$[\text{cm}^{-1}]$	4.66
平均エネルギー	$\langle \varepsilon \rangle$	$[10^1\text{eV}]$	2.11
全衝突周波数	$\langle v_T \rangle$	$[10^9\text{s}^{-1}]$	7.31

4. SST 解析

4. 1 位置・エネルギー分散関数

FTI法によるSST解析では、陰極から放出される電子の挙動を連続的に追跡する代わりに、時刻 $t = 0dt$ に位置 x_0 から出発した規格化電子 $\Psi_S(x_0, \varepsilon_0)$ についての解析結果を、確率関数で表示してこれを繰り返し用いる。位置 x_0 からエネルギー ε_0 で出発した電子が、陰極からの距離 x' 、エネルギー ε' で衝突する確率を表す位置・エネルギー分散関数 $H(x', \varepsilon'; x_0, \varepsilon_0)$ は

$$H(x', \varepsilon', x_0, \varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty v_T(t) \exp[-\int_0^t v_T(t') dt'] \quad (17)$$

$$\times \delta[x(\tau) - x'] dx(\tau) \cdot \delta[\varepsilon(\tau) - \varepsilon'] d\varepsilon(\tau) dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0$$

のように記述できる。ここで、 $E(x' - x_0) = \varepsilon' - \varepsilon_0$ の関係がある。衝突では位置の情報は変化しないので $S(\varepsilon_0', \varepsilon')$ 関数をそのまま用いると、エネルギー損失後位置 $x'_0 (= x')$ 、エネルギー ε'_0 へ分散する確率を与えるループ位置・エネルギー分散関数 $L(x'_0, \varepsilon'_0; x_0, \varepsilon_0)$ は

$$L(x'_0, \varepsilon'_0; x_0, \varepsilon_0) = S(\varepsilon'_0, \varepsilon') \otimes H(x', \varepsilon'; x_0, \varepsilon_0) \quad (18)$$

として与えられる。境界面からの等方出射、反射を考慮する場合は、出発速度の偏角 $\theta_0 = 0^\circ \sim 90^\circ$ の陰極出射用分散関数 $H_C(x', \varepsilon'; x_0, \varepsilon_0)$ 、 $L_C(x'_0, \varepsilon'_0; x_0, \varepsilon_0)$ 、 $90^\circ \sim 180^\circ$ の陽極出射用分散関数 $H_A(x', \varepsilon'; x_0, \varepsilon_0)$ 、 $L_A(x'_0, \varepsilon'_0; x_0, \varepsilon_0)$ を用意する。

一方飛行中の位置・エネルギー分散関数 $H_f(x, \varepsilon; x_0, \varepsilon_0)$ は

$$H_f(x, \varepsilon, x_0, \varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty \exp[-\int_0^t v_T(t') dt'] \quad (19)$$

$$\times \delta[x(\tau) - x] dx(\tau) \cdot \delta[\varepsilon(\tau) - \varepsilon] d\varepsilon(\tau) dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0$$

で与えられ、 k 種の衝突を与える分散関数は次のようになる。

$$H_k(x', \varepsilon', x_0, \varepsilon_0) = \int_0^\pi \int_0^\infty v_{k}(t) \exp[-\int_0^t v_T(t') dt'] \quad (20)$$

$$\times \delta[x(\tau) - x'] dx(\tau) \cdot \delta[\varepsilon(\tau) - \varepsilon'] d\varepsilon(\tau) dt \frac{1}{2} \sin \theta_0 d\theta_0$$

4. 2 位置・エネルギー分布の決定

位置 x_0 、エネルギー ε_0 に規格化初期エネルギー分布 $\Psi_{S0}(x_0, \varepsilon_0)$ を与え、これに $L(x'_0, \varepsilon'_0; x_0, \varepsilon_0)$ を作用させ、 $x'_0 \rightarrow x_0$ 、 $\varepsilon'_0 \rightarrow \varepsilon_0$ 変換を経て、一回の飛行・衝突後の出発レート分布 $\Psi_{S1}(x_0, \varepsilon_0)$ を求める。

$$\Psi_{S1}(x_0, \varepsilon_0) = L(x'_0, \varepsilon'_0; x_0, \varepsilon_0) \otimes \Psi_{S0}(x_0, \varepsilon_0) \quad (21)$$

この操作を全ガス空間において $\Psi_{Sn}(x_0, \varepsilon_0)$ が実効的に0になるまで繰り返す。こうして得られた $\Psi_{Sn}(x_0, \varepsilon_0)$ をすべての n について加算して、位置領域全域における出発電子分布 $\Psi_S(x_0, \varepsilon_0)$ [$\text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$] を求める。

$$\Psi_S(x_0, \varepsilon_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_{Sn}(x_0, \varepsilon_0) \quad (22)$$

この $\Psi_S(x_0, \varepsilon_0)$ に $H_k(x', \varepsilon'; x_0, \varepsilon_0)$ を作用させると、 k 種衝突の位置・エネルギー分布 $\Psi_{Ck}(x', \varepsilon')$ [$\text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$] が得られる。 $\Psi_{Ck}(x', \varepsilon')$ をエネルギー ε' で積分すると設定空間全域にわたる衝突の種類別位置分布 $\Psi_{Ck}(x')$ [cm^{-1}] が求められる。また $\Psi_S(x_0, \varepsilon_0)$ に $H_\ell(x, \varepsilon; x_0, \varepsilon_0) = (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) H_f(x, \varepsilon; x_0, \varepsilon_0)$ を一回作用させると、飛行中の位置・エネルギー分布の Legendre 展開第 ℓ 項 $F_\ell(x, \varepsilon)$ [$\text{scm}^{-1} \text{eV}^{-1}$] が得られる。 $F_\ell(x, \varepsilon)$ は位置 $x dx$ 、エネルギー $\varepsilon d\varepsilon$ における電子の飛行(存在)確率を dt を単位とする時間で表示している。図6に Ne 中 $E/N = 300$ [Td] で、 $x = 0.2$ [cm] に一定初期エネルギー $\varepsilon_0 = 20$ [eV] の電子を注入したときの $F_\ell(x, \varepsilon)$ を示す。

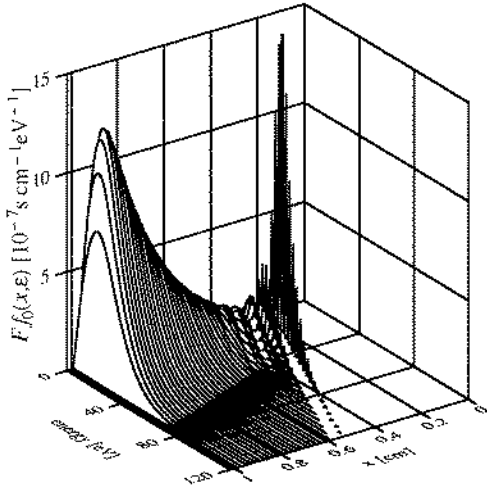


図6 定常位置分解電子エネルギー分布
Fig. 6 Spatial variation of local energy distribution $F_{f0}(x, \epsilon)$ in Ne at $E/N = 300\text{Td}$.

4. 3 局部輸送係数の決定

SST 解析では位置分解された特性を取り扱うので、局部エネルギー分布 $F_{f0}(x, \epsilon)[\text{s cm}^{-1} \text{eV}^{-1}]$ を用いて局部輸送係数を、衝突の種類別位置分布 $\Psi_{ck}(x)[\text{cm}^{-1}]$ を用いて局部エネルギー損失を決定することになる。

以下に、注入された規格化電子1個に対する SST 局部諸量の表示式を示す[8]～[11]。

電子滞在密度 $[\text{cm}^{-1} \text{s}]$

$$n(x) = \tau(x) = \int_0^\infty F_{f0}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (23)$$

エネルギー滞在密度 $[\text{eV cm}^{-1} \text{s}]$

$$\rho\epsilon(x) = \int_0^\infty \epsilon F_{f0}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (24)$$

規格化エネルギー分布 $[\text{eV}^{-1}]$

$$F_s(x, \epsilon) = F_f(x, \epsilon)/n(x) \quad (25)$$

平均エネルギー $[\text{eV}]$

$$\langle \epsilon \rangle = \rho\epsilon(x)/n(x) = \int_0^\infty \epsilon F_{s0}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (26)$$

電子束 [無名数]

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty \frac{1}{3} v F_{f1}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (27)$$

表2 SST electron transport coefficient at 300Td in Ne.

平均エネルギー $\langle \epsilon \rangle(x)$	$[10^1 \text{eV}]$	1.91
全衝突周波数 $\langle \nu_r \rangle(x)$	$[10^9 \text{s}^{-1}]$	6.89
電離衝突周波数 $\langle \nu_i \rangle(x)$	$[10^8 \text{s}^{-1}]$	1.93
移動速度 $\langle v_x \rangle(x) (= Vd)$	$[10^7 \text{cm s}^{-1}]$	4.57
電子束 $\Gamma(x)$		12.4
電離係数 $d[\log \Gamma(x)]/dx$	$[\text{cm}^{-1}]$	4.23
エネルギー利得 $G\epsilon$	$[10^2 \text{eV cm}^{-1}]$	2.12
エネルギー損失 $L\epsilon$	$[10^2 \text{eV cm}^{-1}]$	1.23
エネルギー純利得 $\Delta G\epsilon$	$[10^1 \text{eV cm}^{-1}]$	8.83

移動速度 $[\text{cm s}^{-1}]$

$$\langle v_x \rangle(x) = \int_0^\infty \frac{1}{3} v F_{s1}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (28)$$

エネルギー流 $[\text{eV}]$

$$Q\epsilon(x) = \int_0^\infty \frac{1}{3} \epsilon v F_{f1}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (29)$$

エネルギー利得 $[\text{eV cm}^{-1}]$

$$G\epsilon(x) = E\Gamma(x) \quad (30)$$

エネルギー損失 $[\text{eV cm}^{-1}]$

$$L\epsilon(x) = \sum_k \int_0^\infty \epsilon_k \Psi_{ck}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (31)$$

電離周波数 $[\text{s}^{-1}]$

$$\nu_i = \int_0^\infty N q_i v F_{s0}(x, \epsilon) d\epsilon \quad (32)$$

電離(付着)係数 $[\text{cm}^{-1}]$

$$\alpha(-\eta) = d[\ln \Gamma(x)]/dx \quad (33)$$

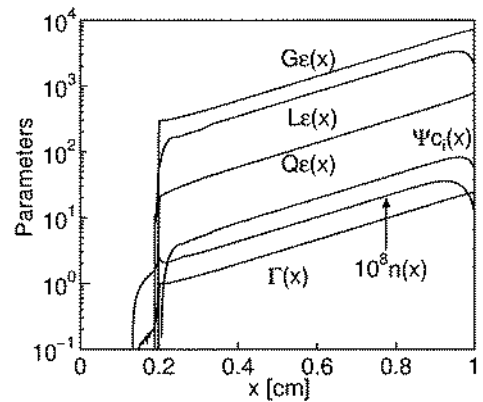


図7 各種輸送量の空間分布

Fig. 7 Local transport quantities of electrons in Ne at $E/N = 300\text{Td}$

Ne 中 $E/N = 300$ [Td] でのこれらの輸送量の値を表 2 に, 空間分布を図 7 に示す。

5. あとがき

上に記したように, FTI 法は飛行確率, 衝突確立を前提とした trajectory simulation であって, 軌道運動に関する明確な意味を持つデータが厳密に得られるという他の方法にない特徴をもっている。

文献

- [1] N.Ikuta and Y.Murakami: Elementary Theory of Transport Phenomena in Charged Particle System under Electric Field, J. Phys. Soc. Jpn. 56, 115-127 (1987).
- [2] 生田, 中島: FTI 法の理論と荷電粒子輸送特性の解析法, 電学論 113-A, 83-90 (1993).
- [3] N. Ikuta and S. Nakajima: Theory of FTI Method for the Analysis of Electron and Ion Transport Properties, J. Phys. Soc. Jpn. 64, 1148-1163 (1995).
- [4] Y. Sakai, H. Tagashira and S. Sakamoto: The Development of Electron Avalanches at High E/N values in Ar, Part I Monte-Carlo Simulation, J. Phys. D: Appl. Phys. 10, 1035-1050 (1977).
- [5] H. Tagashira, Y. Sakai and S. Sakamoto: The Development of Electron Avalanches in Ar: II. Boltzmann Equation Analysis, J. Phys. D: Appl. Phys. 10, 1051-1063 (1977).
- [6] A. Takeda and N. Ikuta: Mobility Analysis of Electrons in CF_4 by FTI Method, J. Phys. Soc. Jpn. 62, 2368-2381 (1993).
- [7] A. Takeda and N. Ikuta: Comparison of Electron Diffusion Coefficient Defined in Velocity and Position Spaces Dv and D_r in CF_4 , J. Phys. Soc. Jpn. 63, 2986-2992 (1994).
- [8] 武田章秀, 生田信皓: FTI 法による SST 速度分布, 輸送係数の解析, 電学論 113-A, 618-625 (1993).
- [9] A. Takeda and N. Ikuta: Analysis of Spatially Resolved Electron Energy Distribution and Transport Properties in CF_4 , J. Phys. Soc. Jpn. 66, 1672-1687 (1997).
- [10] 武田章秀, 生田信皓: SST 条件における電子のエネルギーバランス, 電学論 121 - A, 429-434 (2001).
- [11] A. Takeda and N. Ikuta: Spatially Resolved Electron Swarm Behavior in Steady State Townsend Condition, J. Phys. Soc. Jpn., 70, 678-688 (2001).

(武田 章秀: 四国大学 情報システム研究室)