

有限要素法を用いた高周波プラズマ生成の ハイブリッドシミュレーション

Hybrid Simulation of RF Plasma Production Using FEM

福山 淳 (京大工)

- 有限要素法プラズマ解析統合コード : **PAF**
- 3次元波動伝播解析 : **PAF/WF**
- 2次元拡散型輸送解析 : **PAF/TF**
- 任意形状境界の粒子シミュレーション : **PAF/PF**
- まとめと今後の課題

高周波プラズマ生成解析コード：PAF

- 目的：有限要素法を用いた高周波プラズマ生成の自己完結的な解析
 - 任意の装置形状
 - 現実的な高周波励起
 - 流体・粒子ハイブリッドモデル
 - 並列化による高速計算
- **PAF: Plasma Analysis with Finite element method**
 - **WF**: 定常波動解析
 - **WF2**: (2D)
 - **WF3**: (3D)
 - **MF**: 時間発展波動解析 [計画中]
 - **TF**: 拡散型輸送解析 (2D)
 - **FF**: 流体型輸送解析 [計画中]
 - **PF**: 粒子シミュレーション (2D)
 - **MG**: 要素分割
 - **MX**: 並列型行列方程式解法

PAF/WF: 3次元波動解析コード

- 周波数 ω の波動電場: $\tilde{E}(r, t) = E(r) e^{-i\omega t}$

- マクスウェル方程式:

$$\nabla \times \nabla \times E - \frac{\omega^2}{c^2} \overleftrightarrow{\epsilon} \cdot E = i\omega\mu_0 \mathbf{j}_{\text{ext}}$$

- $\overleftrightarrow{\epsilon}$: 誘電率テンソル (衝突を含めた冷たいプラズマ近似)

- 励起:

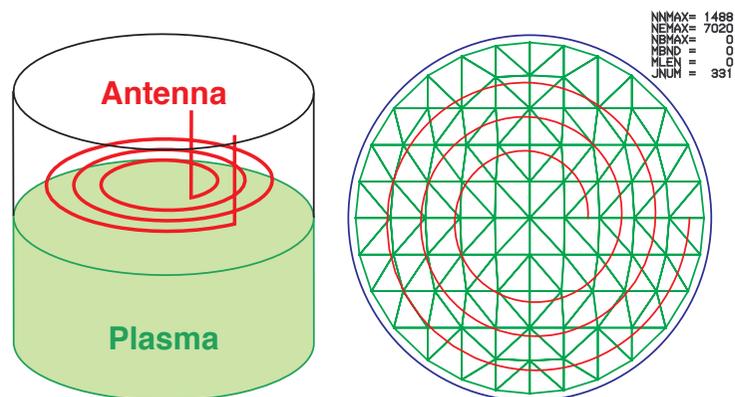
- (電流分布の与えられた) アンテナ
- (同軸, 円形, 矩形) 導波管
- 電極

- 数値解法

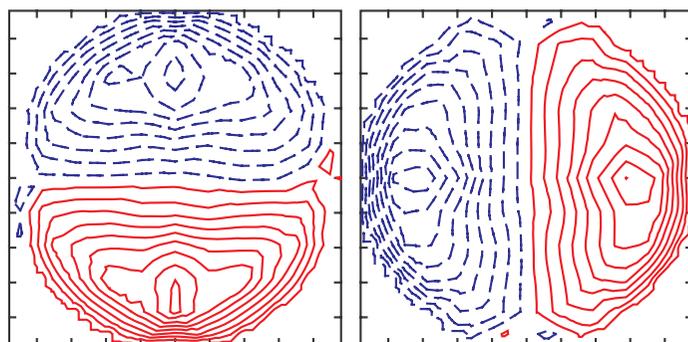
- 四面体要素を用いた有限要素法
- 変数: 辺上の電界の接線成分

3次元波動伝播・吸収解析 (1)

- らせんアンテナを用いた ICP プラズマ配位



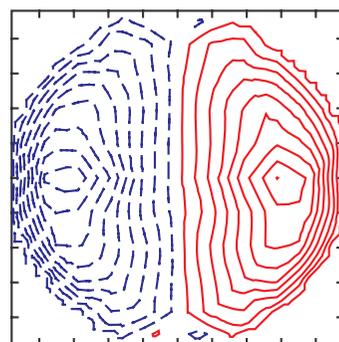
- 波動電界と吸収パワーの空間分布



EXI(XY) Z=0.16
MAX= 8.89E-01
MIN=-8.00E-01
STP= 1.00E-01

$\text{Im } E_x$

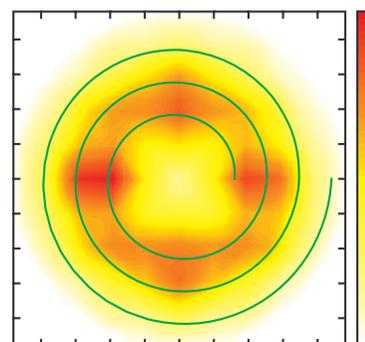
on $z = 0.16$ m plane



EYI(XY) Z=0.16
MAX= 8.53E-01
MIN=-9.14E-01
STP= 1.00E-01

$\text{Im } E_y$

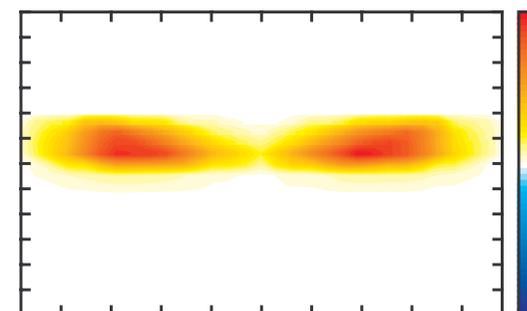
on $z = 0.16$ m plane



P1C(XY) Z=0.16
MAX= 2.15E+00
MIN= 0.00E+00
TOP= 0.00E+00

P_{abs}

on $z = 0.16$ m plane



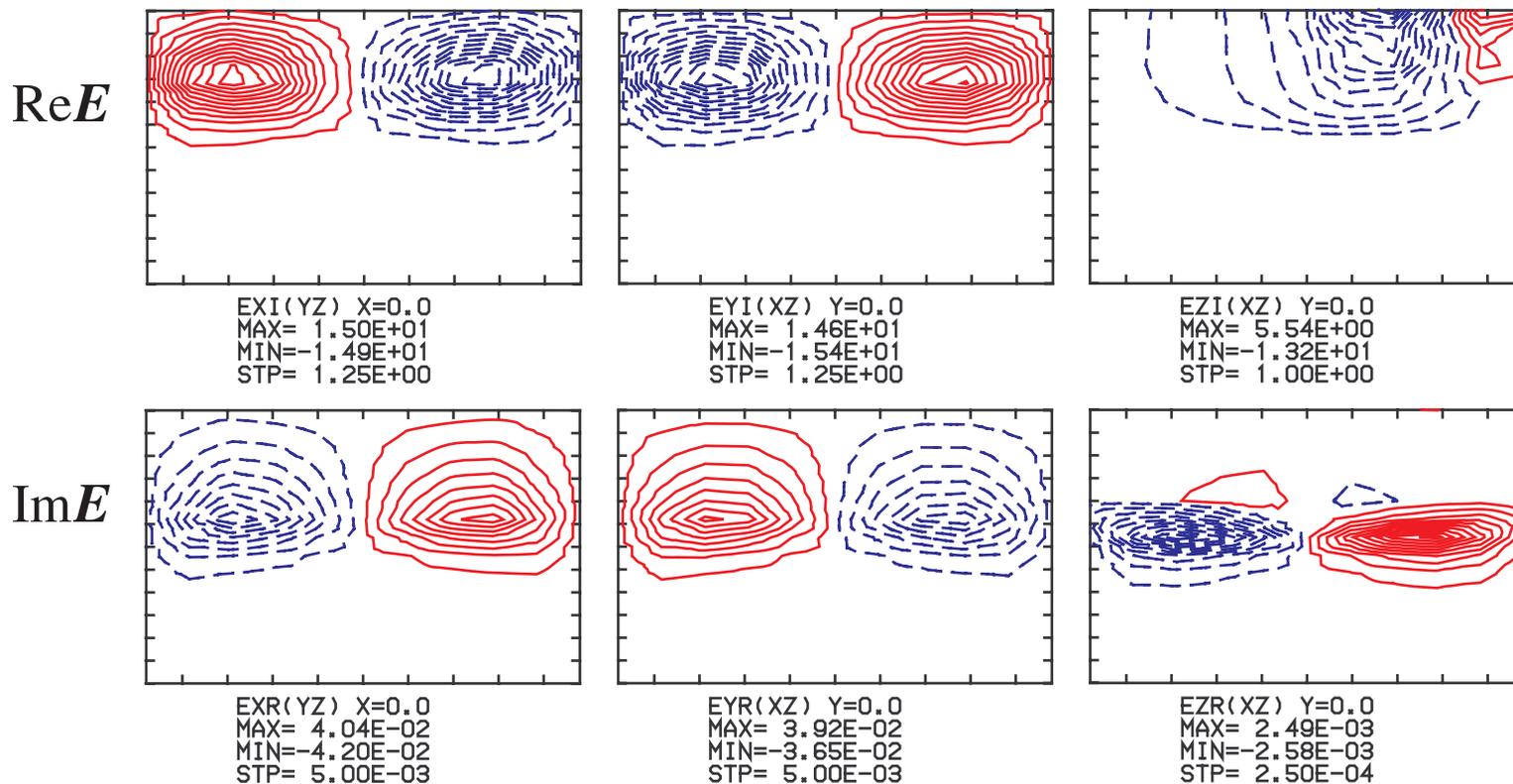
P1C(YZ) X=0.0
MAX= 1.81E+00
MIN=-1.40E-15
TOP= 1.81E+00

P_{abs}

on $x = 0$ plane

3次元波動伝播・吸収解析 (2)

- 波動電界の空間分布



E_x
on $x = 0$ plane

E_y
on $y = 0$ plane

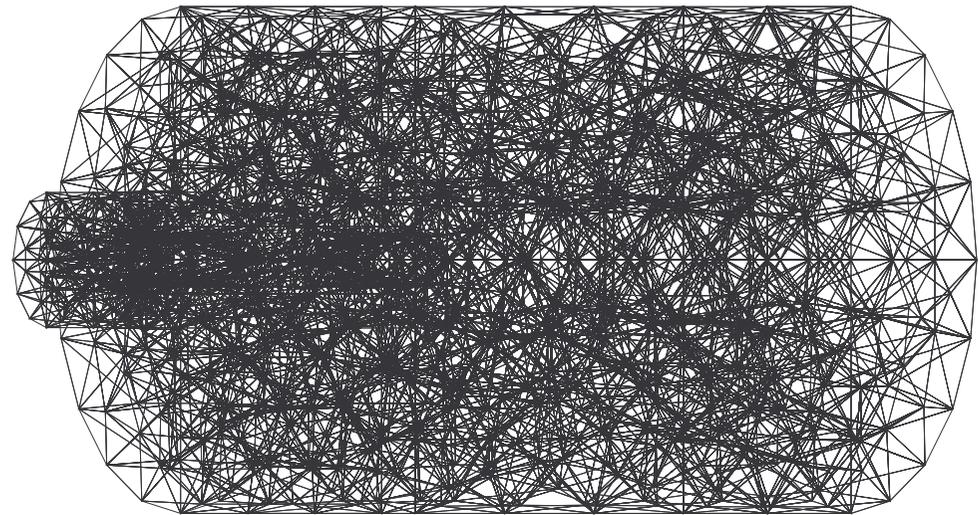
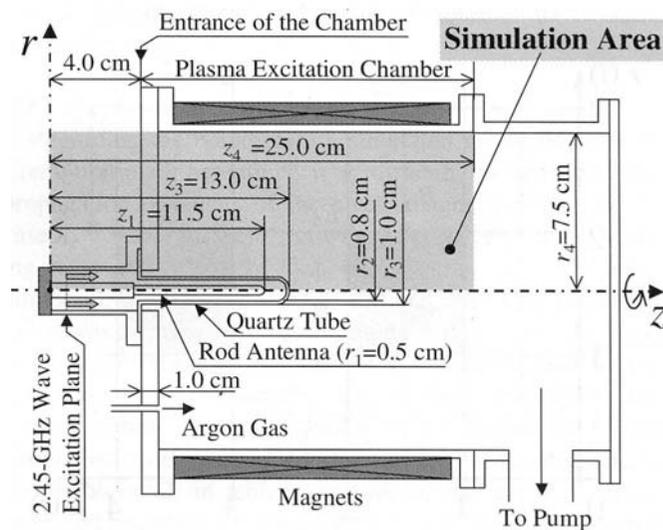
E_z
on $y = 0$ plane

軸対称表面波の励起

- 2次元解析

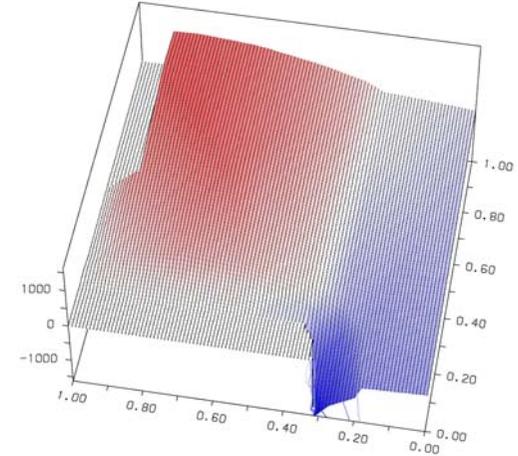
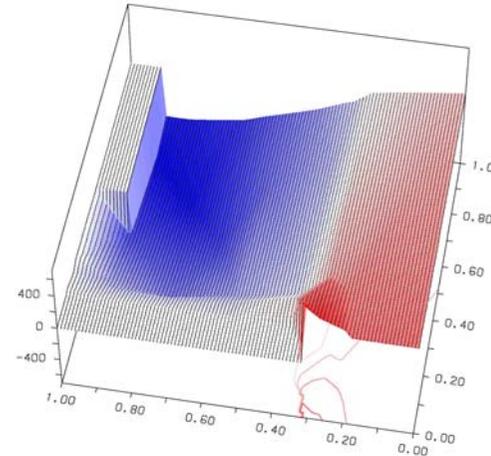
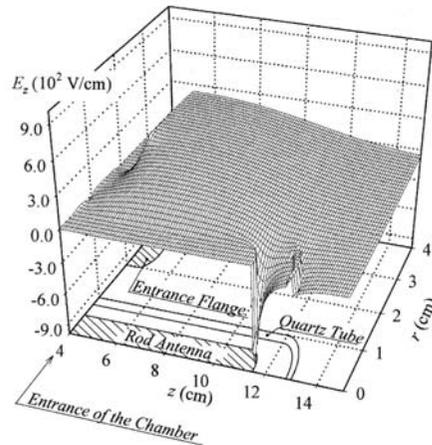
- H. Kousaka and K. Ono: JJAP 41 (2002) 2199
- マイクロ波プラズマ源内の軸対称 2次元電磁場解析
- **FDTD**: 時間領域有限差分
- 同軸導波管による励起: $f = 2.45 \text{ GHz}$

3次元解析における要素分割

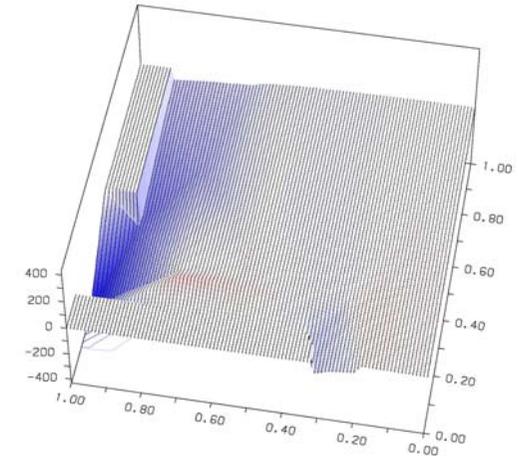
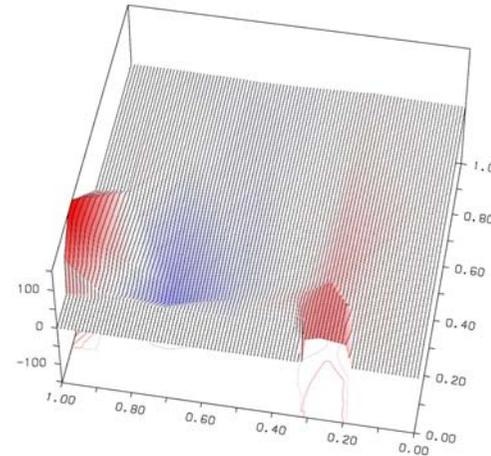
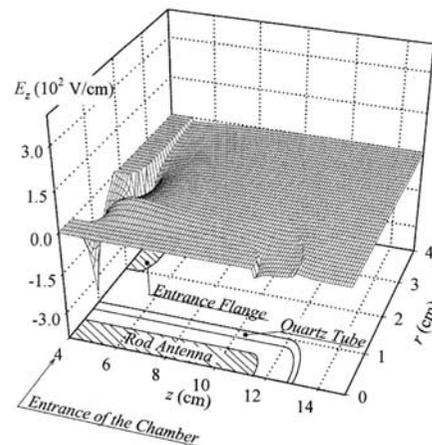


2次元解析と3次元解析の比較： $E_z(r, z)$

$$n_e = 10^{16} \text{ m}^{-3}$$



$$n_e = 10^{17} \text{ m}^{-3}$$



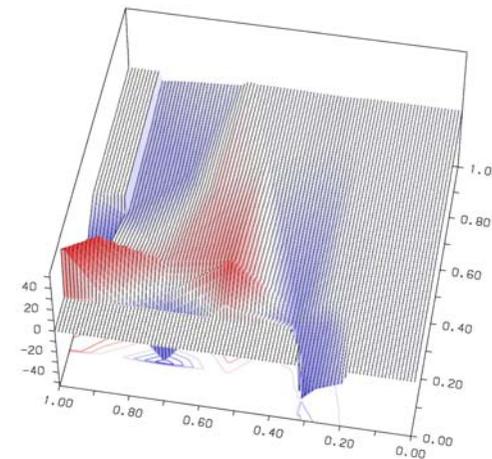
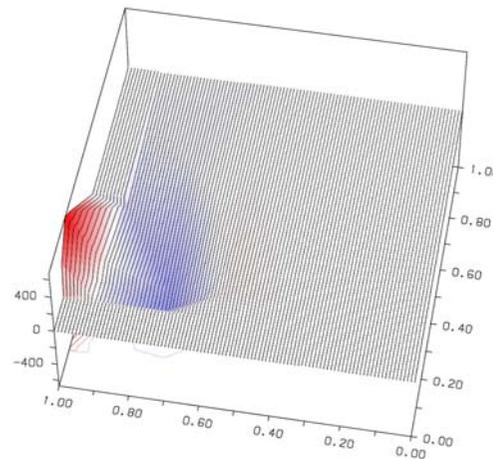
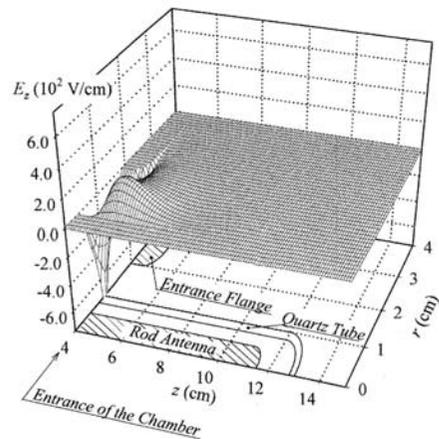
2D

3D (Real part)

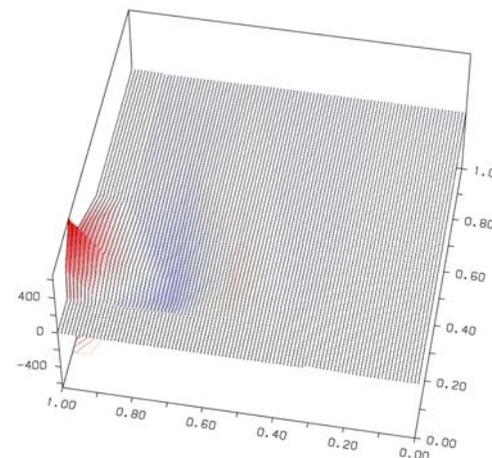
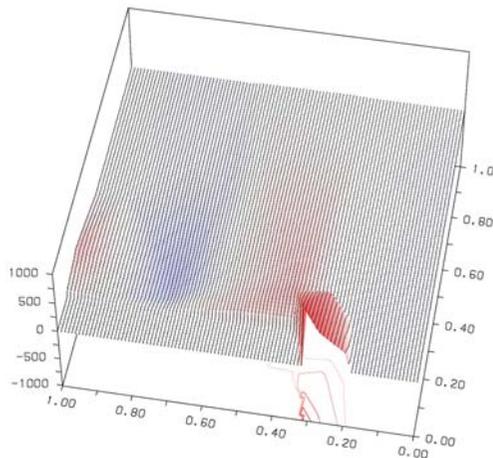
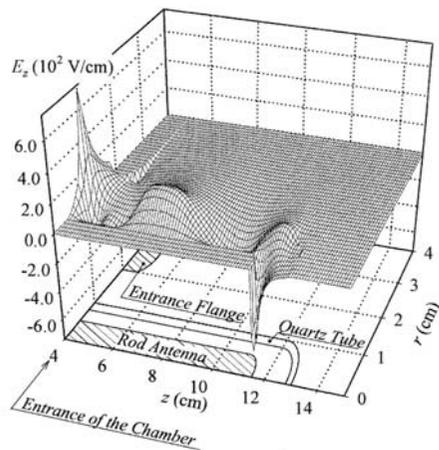
3D (Imag part)

2次元解析と3次元解析の比較： $E_z(r, z)$

$$n_e = 2 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$$



$$n_e = 3 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$$



2D

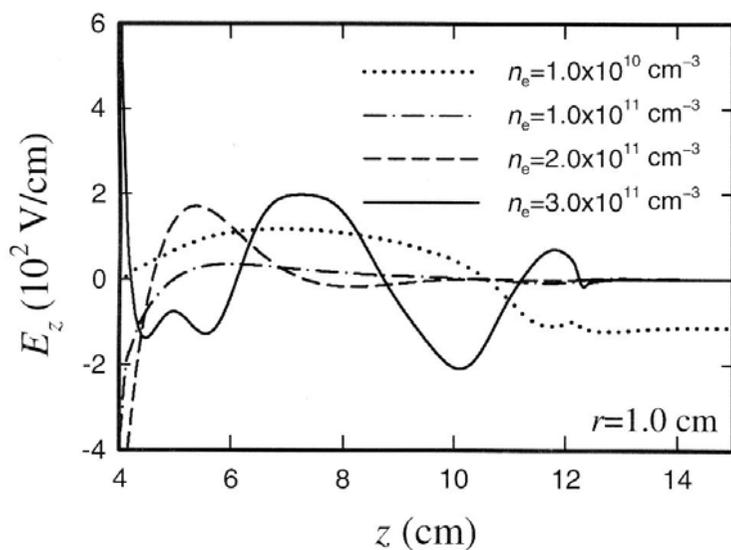
3D (Real part)

3D (Imag part)

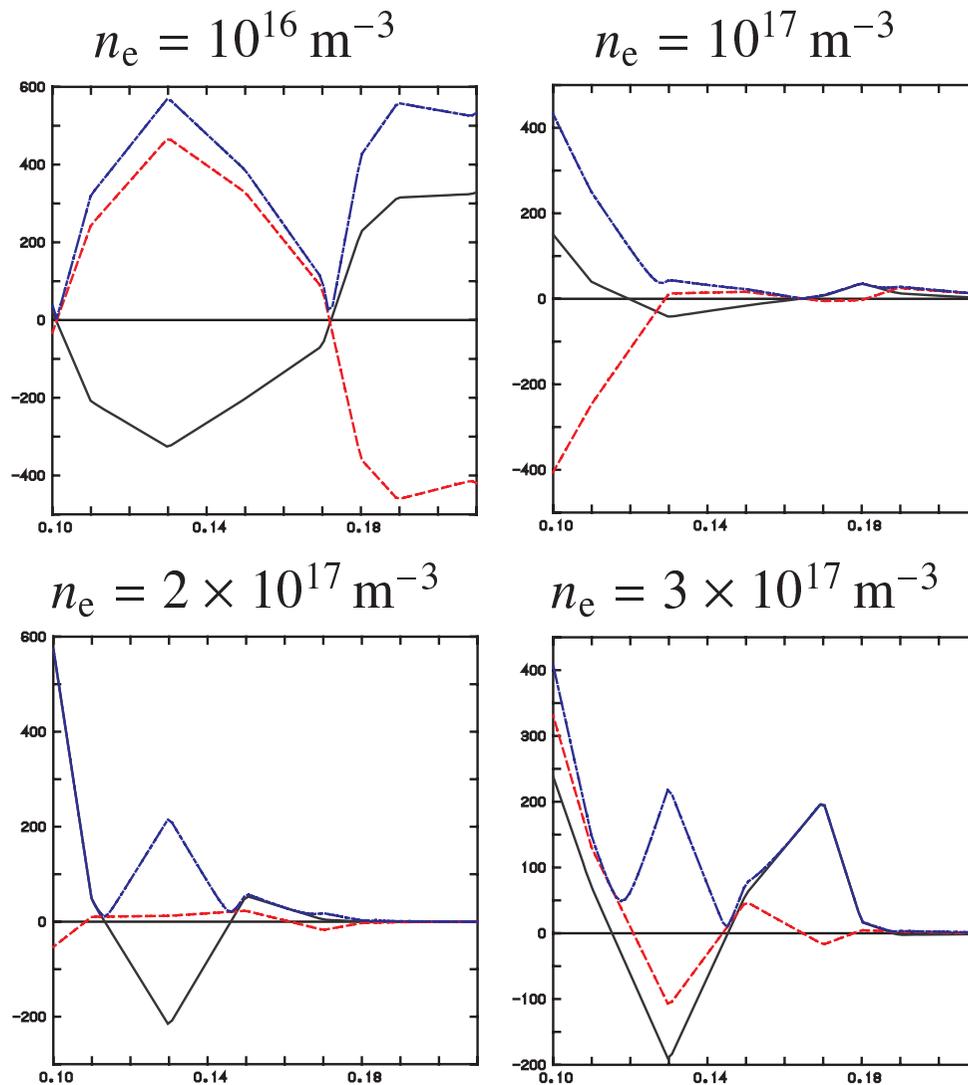
2次元解析と3次元解析の比較： $E_z(z)$

2D Analysis

Ref.: H. Kousaka and K. Ono
JJAP 41 (2002) 2199



3D Analysis



- 高密度の場合には，空間解像度が不足

拡散型プラズマ輸送解析 PAF/TF

- プラズマモデル

- 拡散型輸送方程式（衝突が支配的）
- 密度 n_s , 温度 T_s , 静電ポテンシャル ϕ ($s = \text{electron, ion}$) の時間発展
- 軸対称 2次元解析
- 高周波電離, 高周波加熱, 衝突輸送

- 数値手法

- 空間構造：有限要素法
- 時間発展：完全陰解法
- 各時間ステップで波動伝播を解く
（プラズマの時間発展は波動伝播よりも遅いことを仮定）

拡散型輸送方程式

- 密度 n_s , 温度 T_s , 静電ポテンシャル Φ

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s = \nabla \cdot \left[n_s \overleftrightarrow{\mu}_s \cdot \nabla \Phi + \overleftrightarrow{D}_s \cdot \nabla n_s \right] + \nu_{Is} n_s$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \frac{3}{2} n_s T_s = \nabla \cdot \left[\frac{5}{2} T_s \left(n_s \overleftrightarrow{\mu}_s \cdot \nabla \Phi + \overleftrightarrow{D}_s \cdot \nabla n_s \right) + \frac{3}{2} n_s \overleftrightarrow{\chi}_s \cdot \nabla T_s \right] \\ - \frac{3}{2} \nu_{sn} n_s (T_s - T_n) - \frac{3}{2} \sum_{s'} \nu_{ss'} n_s (T_s - T_{s'}) + P_s \end{aligned}$$

$$-\nabla^2 \Phi = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s Z_s e n_s$$

$\overleftrightarrow{\mu}_s$: 移動度テンソル

$\overleftrightarrow{\chi}_s$: 熱拡散テンソル

P_s : 加熱パワー密度

ν_{sn} : 中性粒子との衝突周波数

\overleftrightarrow{D}_s : 粒子拡散テンソル

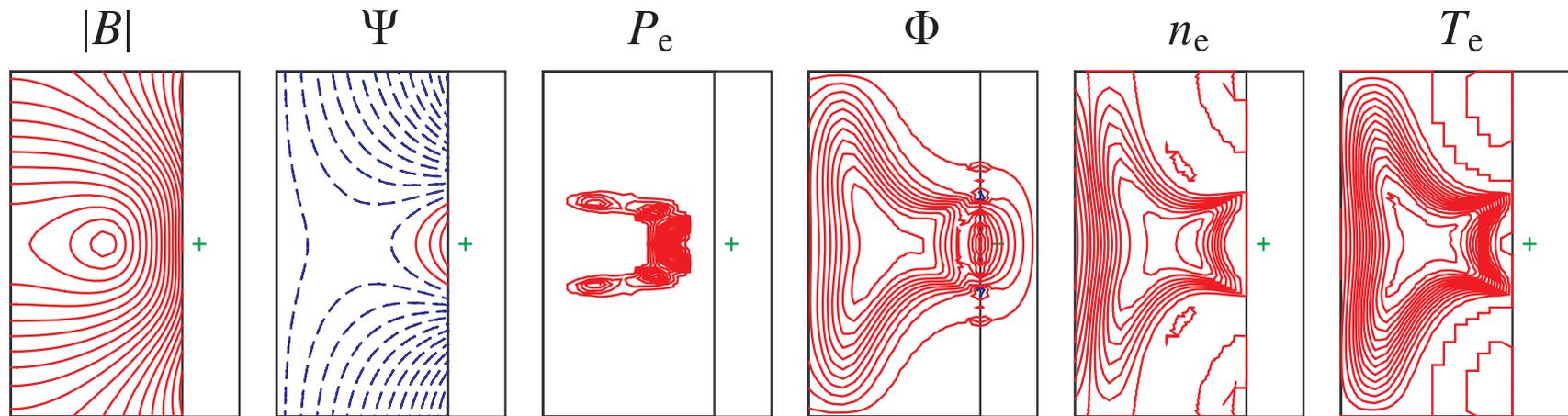
Z_s : 電荷数 s

ν_{Is} : 電離周波数

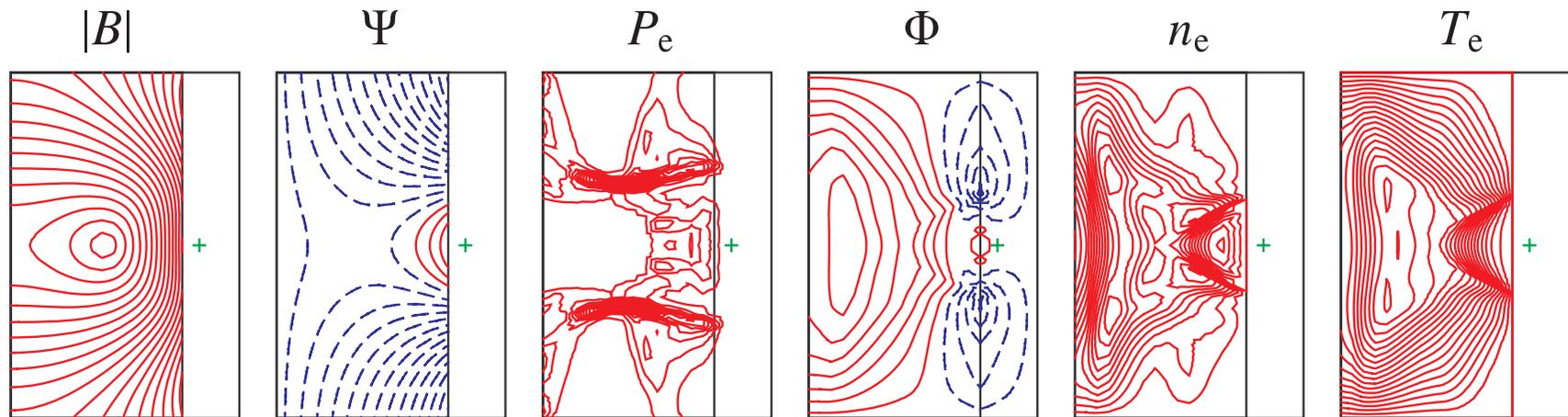
$\nu_{ss'}$: クーロン衝突周波数

プラズマ生成の解析 (磁気中性点プラズマ)

- 低密度 ($n_e = 10^{12} \text{ m}^{-3}$)



- 高密度 ($n_e = 10^{14} \text{ m}^{-3}$)

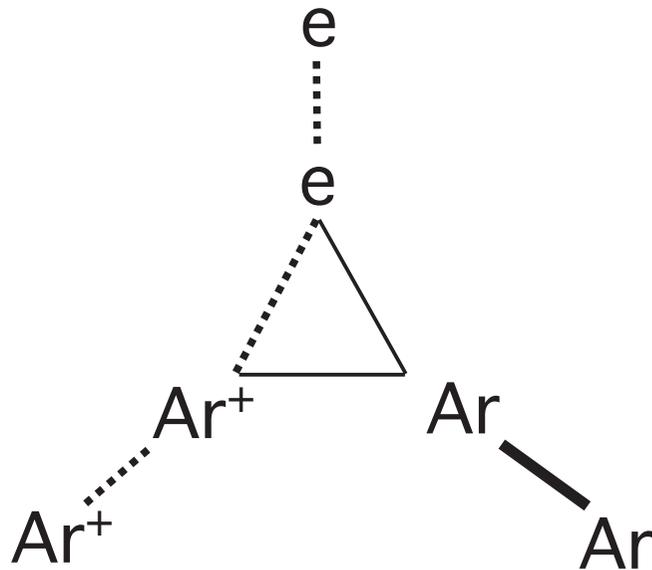


PAF/PF: 粒子シミュレーションコード

- 任意の境界形状をもつプラズマの粒子シミュレーション
- 一般的なPICシミュレーション
 - 長方形格子
 - 粒子の位置判定が容易
 - FFTの使用により計算が高速
 - 単純な境界のみに適用可能
- 本研究の内容
 - 三角形有限要素を用いた粒子シミュレーション
 - 任意の境界形状に適応可能
 - 粒子運動を記述するための新しいアルゴリズムの開発
 - FEMを用いた静電場の解析
 - 中性粒子との相互作用，原子・分子過程を考慮に入れたシミュレーション

衝突の種類

- Ar プラズマにおける例



- 同種粒子間の短距離衝突 [太線]

- 中性粒子 - 中性粒子間衝突; Ar - Ar
- 弾性衝突

- 異粒子間の短距離衝突 [実線]

- 電子 - 中性粒子間衝突; e - Ar
- 弾性衝突, 励起衝突, 電離衝突
- イオン - 中性粒子間衝突; Ar⁺ - Ar
- 弾性衝突, 荷電交換衝突

- クーロン衝突 [点線]

- デバイ長内にある全ての粒子と相互作用
- 同種粒子間; e - e, Ar⁺ - Ar⁺
- 弾性衝突
- 異粒子間; e - Ar⁺
- 弾性衝突

静電モデルの PIC

- 運動方程式

$$\frac{d\mathbf{r}_j}{dt} = \mathbf{v}_j$$

$$\frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = \frac{q}{m}[\mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t) + \mathbf{v}_j \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_j)]$$

- ポアソン方程式

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t)$$

- 規格化

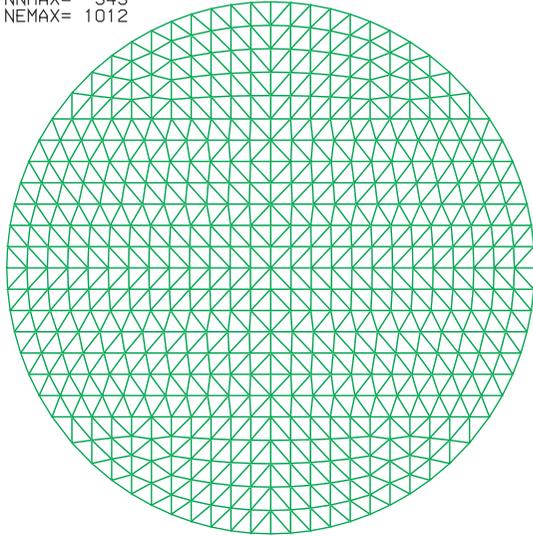
- 時間をプラズマ周波数の逆数，距離は電子デバイ長でそれぞれ規格化

- 手順

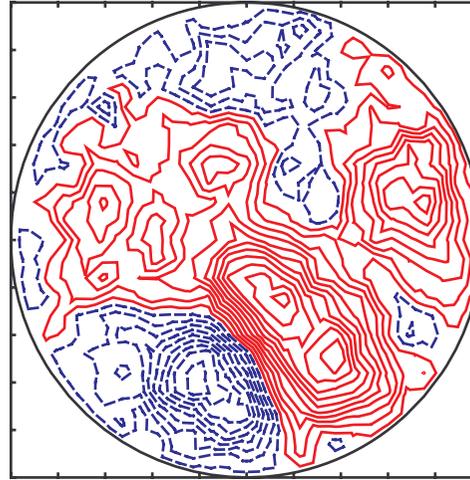
1. 粒子の電荷を要素の3節点に線形的に振り分け
2. FEMでポアソン方程式を解く
3. 粒子の感じる電界を計算
4. 運動方程式を解き，電場，磁場から粒子が受ける力により粒子を移動
5. 衝突効果により粒子の速度を変化

円形境界プラズマにおける粒子シミュレーション

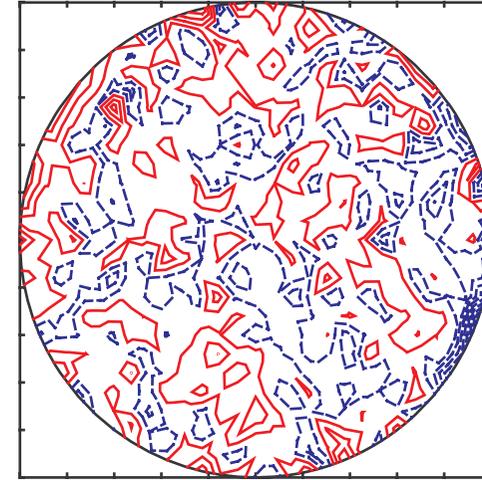
NNMAX= 543
NEMAX= 1012



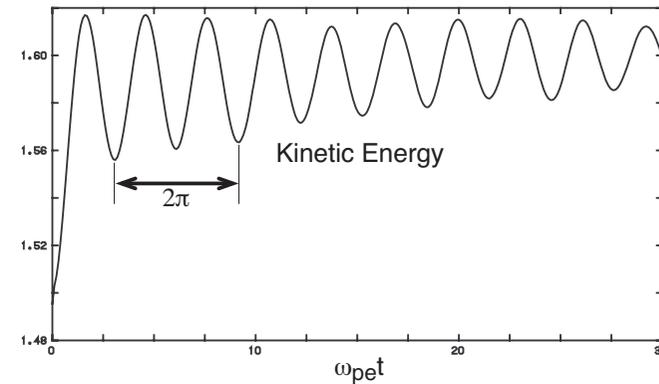
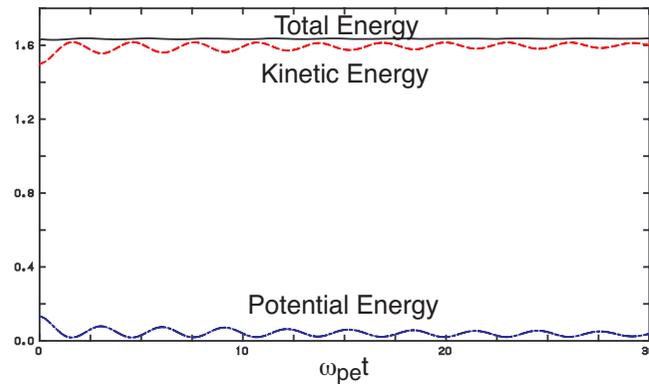
要素分割



ポテンシャル分布



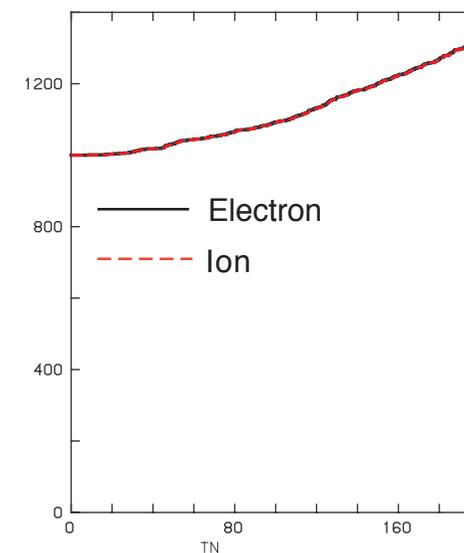
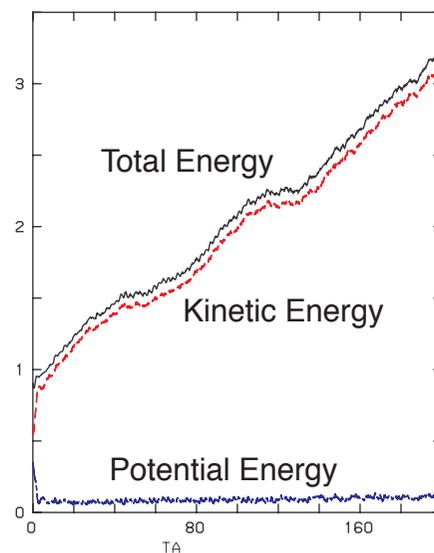
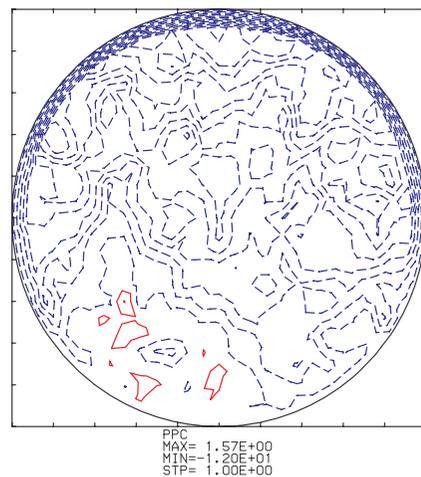
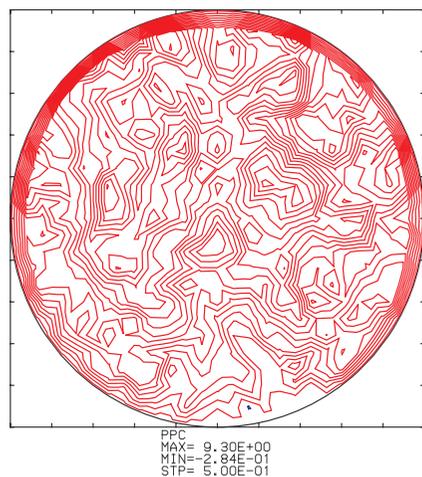
電荷密度分布



エネルギーの時間発展

高周波プラズマ生成の粒子シミュレーション (1)

- 粒子種 : Ar , 初期粒子数 : 電子 , イオン , 中性粒子 , 各 1000 ずつ
- システムサイズ : $100\lambda_D \sim 7.4\text{mm}$, 要素数 : 1012 , 節点数 : 543
- 粒子密度 : $n_e = n_i = 10^{16} \text{ m}^{-3}$, $n_g = 10^{22} \text{ m}^{-3}$
- 粒子温度 : $T_e = 1 \text{ eV}$, $T_i = T_g = 0.03 \text{ eV}$, 中性粒子圧力 : 300 mTorr
- 周波数 : 2.45 GHz , 電極電圧 : $10(1 + \sin \theta)/2 \text{ V}$, 計算時間 : $T_{\text{max}} = 200\omega_{pe}^{-1} \sim 35 \text{ ns}$

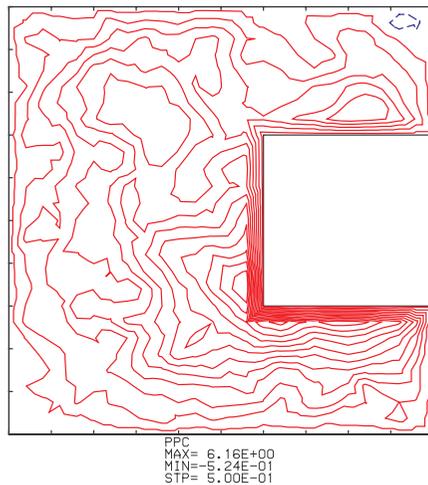


ポテンシャル分布 ポテンシャル分布
($V = V_{\text{max}}$) ($V = V_{\text{min}}$)

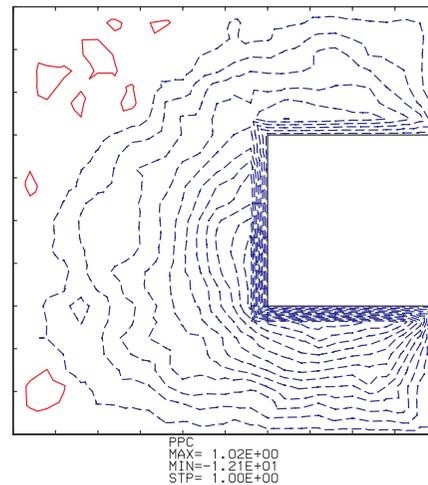
エネルギーと粒子数の
時間発展

高周波プラズマ生成の粒子シミュレーション (2)

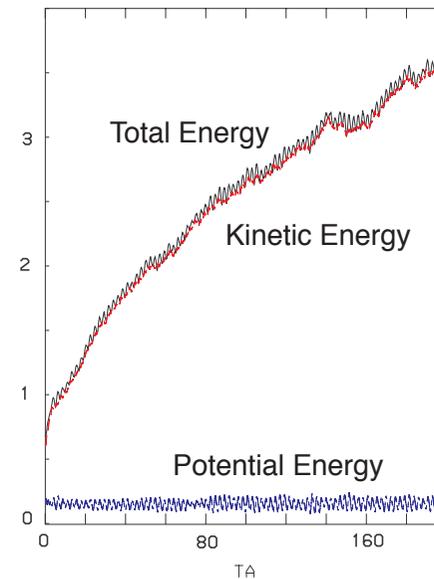
- 粒子種 : Ar , 初期粒子数 : 電子 , イオン , 中性粒子 , 各 1000 づつ
- システムサイズ: $100\lambda_D \sim 7.4 \text{ mm}$, 要素数 : 1100 , 節点数 : 612
- 粒子密度 : $n_e = n_i = 10^{16} \text{ m}^{-3}$, $n_g = 10^{22} \text{ m}^{-3}$
- 粒子温度 : $T_e = 1 \text{ eV}$, $T_i = T_g = 0.03 \text{ eV}$, 中性粒子圧力 : 300 mTorr
- 周波数 : 2.45 GHz , 電極電圧 : 10 V , 計算時間 : $T_{\text{max}} = 200\omega_{pe}^{-1} \sim 35 \text{ ns}$



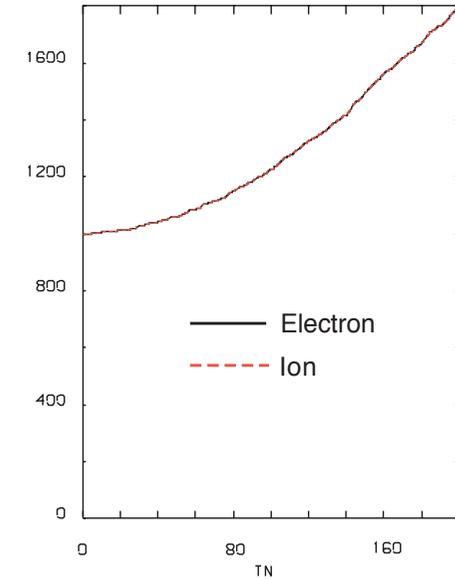
ポテンシャル分布
($V = V_{\text{max}}$)



ポテンシャル分布
($V = V_{\text{min}}$)



エネルギーと粒子数の
時間発展



まとめ

- 有限要素法を用いた高周波プラズマ生成解析コード **PAF** を開発中．
- 波動伝播解析は 3 次元に拡張され，辺上の電界を変数とする手法により，低密度時の非物理的な解が現れなくなった．
- 拡散型輸送方程式によるプラズマ生成の解析がさまざまな配位に適用されている．
- 任意の境界形状に対応するため，有限要素法による粒子シミュレーションコードを開発した．現在は，衝突過程を含めて高周波プラズマ生成の解析が可能になっている．
- 今後の課題
 - 波動解析の高精度化を 2 次元解析に適用
 - 3 次元要素分割コードの開発
 - 輸送解析コードの数値安定性向上（風上差分の導入）
 - 粒子シミュレーションの本格的な計算（電磁的解析）
 - 流体モデルと粒子モデルを組み合わせたハイブリッドシミュレーション