FTI 法の理論と荷電粒子輸送特性の解析法

正員 生田 信 皓 (徳島大)

正員 中 島 貞之丞 (徳島大)

Theory of Flight Time Integral Method for the Analysis of Transport Property of Charged Particles

Nobuaki Ikuta, Member, Sadanojo Nakajima, Member (Tokushima University)

Theory of formerly proposed “flight time integral method” for the rigorous analyses of transport property of charged particles in gas under electric and magnetic fields is derived using the path integral formulation of the Boltzmann equation. Fundamental formulae in the FTI procedure to obtain the velocity distribution and transport coefficients are presented in comparison with those of the path integral method. Under arbitrary conditions of fields and cross sections, this method is quite stable and accurate, due to the procedure based on the normalized starting rate distribution from which the flight behavior is calculated through the time.

キーワード：積分方程式，速度分布，速度分散関数，輸送特性，輸送関数，緩和法

1. はじめに

電離気体中の荷電粒子の，平衡状態における速度分布や輸送係数を厳密に解析する方法として，先年，flight time integral (FTI) 法を提案した⁽¹⁾。本論文はその理論的導出を目的とし，まずボルツマン方程式の path integral (PI) solution を示し，次いで FTI 法における表式を理論的に導出整理して，各輸送特性の解析法を詳述するとともに PI 法との比較を行い，FTI 法の特徴と有効性を示したものである。

FTI 法は平衡状態における電子やイオンの，速度空間における飛行と衝突による速度変化を，速度の分散確率を表す速度分散関数で規定し，まず，衝突後の出発レート分布を緩和的手法によって求め，この分布から飛行中の速度分布や輸送係数を厳密に計算する方法である。緩和的手法を用いている点で，Budd⁽²⁾，Rees⁽³⁾，Kleban ら⁽⁴⁾⁽⁵⁾の方法，あるいは Skullerud ら⁽⁶⁾の Path integral 法と数学的に共通点をもつが，彼らの方法がすべて飛行中の速度分布を主未知関数として扱っているのに対し，FTI 法では規格化出発レート分布を主未知関数とし，この分布と粒子の飛行特性とから，全輸送特性を求めている点で異なり，それ

がユニークな特徴となっている。

従って輸送係数も，実空間での輸送量を所要時間で割るという具体的な形で与えられる。級数展開や近似はいっさい用いない。従って，電界の強さや非等方性，衝突断面積のいかんにかかわらず，電子やイオンの速度分布や輸送特性を，極めて安定にかつ厳密に解析することができる。FTI 法では，一般に電子についてほぼ妥当と判断される実験室系等方散乱を仮定する。

この仮定を除いてより厳密に解析することも可能であるが，ここでは複雑化を避けるため実験室系等方散乱を前提として FTI 法の理論を導出し，それを用いた具体的計算法について述べる。

2. Path integral solution

FTI 法の理論は，ボルツマン方程式の形式解である path integral solution に依存している。このためまず path integral solution を求め，これから FTI 法の基礎式を導出する。

外力の存在する場における電子，イオン（以下，電子と略記）の速度空間における挙動を記述するボルツマン方程式は

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_v\right) f(\mathbf{v}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{coll}} \quad \dots\dots\dots (1)$$

で与えられる。ここでは、速度、位置空間における分布の一般的表示 $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ を位置空間で積分した表示 $f(\mathbf{v}, t)$ を用いているため、 $\mathbf{v} \cdot \nabla_r$ の項は除かれている。 $f(\mathbf{v}, t)$ は、注目する速度空間の速度 $\mathbf{v}$ における微小速度領域 $d\mathbf{v}$ (以下、 $\mathbf{v}d\mathbf{v}$ と書く) における電子密度を表す分布であり、 $\mathbf{F}$, m は電子に働く外力および電子の質量である。また上式の右辺は衝突項で、

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{coll}} = -\phi_c(\mathbf{v}, t) + \phi_s(\mathbf{v}, t) \quad \dots\dots\dots (2)$$

のように $\mathbf{v}d\mathbf{v}$ からの流出レート $\phi_c(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v}$ と、流入レート $\phi_s(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v}$ との和で与えられる。 $\phi_c(\mathbf{v})$ は

$$\phi_c(\mathbf{v}, t) = \nu_T(\mathbf{v})f(\mathbf{v}, t) \quad \dots\dots\dots (3)$$

で与えられ、 $\phi_s(\mathbf{v}_0)$ は

$$\phi_s(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v} = \int_{\mathbf{v}'} S(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) \nu_T(\mathbf{v}') f(\mathbf{v}', t) d\mathbf{v}' \quad \dots\dots\dots (4)$$

$$S(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \sum_k S_k(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) \quad \dots\dots\dots (5)$$

のように書ける。 $\nu_T(\mathbf{v})$ は全衝突周波数、 $S(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ は、 $\mathbf{v}'d\mathbf{v}'$ における種々の種類の衝突によって、速度領域 $\mathbf{v}'d\mathbf{v}'$ から速度領域 $\mathbf{v}d\mathbf{v}$ への電子の分散確率を与える分散関数である。

さて、(1)~(3)式を組合せると(6)式が得られる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_v\right) f(\mathbf{v}, t) \\ = \phi_s(\mathbf{v}, t) - \nu_T(\mathbf{v})f(\mathbf{v}, t) \quad \dots\dots\dots (6) \end{aligned}$$

外力による加速 $\partial\mathbf{v}/\partial t = \mathbf{F}/m$ を受け、時刻 t に速度 $\mathbf{v}$ を通る軌道 $\bar{\mathbf{v}}(t; \mathbf{v}, t)$ に沿った微分を

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_{\text{path}} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}\right) \quad \dots\dots\dots (7)$$

で表すと、(6)式は次式のように書ける。

$$\left(\frac{d}{dt} + \nu_T(\mathbf{v}, t)\right) f(\mathbf{v}, t) = \phi_s(\mathbf{v}, t) \quad \dots\dots (8)$$

この非同次方程式には、時刻 t_0, t_1 における初期条件を満たす一般解 g_0, g_1 が存在する。

$$\left(\frac{d}{dt} + \nu_T(\mathbf{v}, t)\right) g_0(t_0; \mathbf{v}, t) = 0 \quad \dots\dots\dots (9)$$

初期条件: $g_0(t_0; \mathbf{v}, t) = f(\bar{\mathbf{v}}(t_0; \mathbf{v}, t), t_0)$

$$\left(\frac{d}{dt} + \nu_T(\mathbf{v}, t)\right) g_1(t_1; \mathbf{v}, t) = 0 \quad \dots\dots\dots (10)$$

初期条件: $g_1(t_1; \mathbf{v}, t) = \phi_s(\bar{\mathbf{v}}(t_1; \mathbf{v}, t), t_1)$

ここで、 $\bar{\mathbf{v}}(t; \mathbf{v}, t)$ は時刻 t に速度 $\mathbf{v}$ を通る軌道上の時刻 t_1 における速度、 $g_0(t_0; \mathbf{v}, t), g_1(t_1; \mathbf{v}, t)$ は現在の時刻 t を基準として表示した初期条件である。

(8)式の一般解は次のように書ける。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{v}, t) &= g_0(t_0; \mathbf{v}, t) + \int_{t_0}^t g_1(t_1; \mathbf{v}, t) dt_1 \\ &= f(\bar{\mathbf{v}}(t_0; \mathbf{v}, t), t_0) \\ &\quad \times \exp\left[-\int_{t_0}^t \nu_T\{\bar{\mathbf{v}}(t'; \mathbf{v}, t), t'\} dt'\right] \\ &\quad + \int_{t_0}^t \phi_s\{\bar{\mathbf{v}}(t_1; \mathbf{v}, t), t_1\} \\ &\quad \times \exp\left[-\int_{t_1}^t \nu_T\{\bar{\mathbf{v}}(t'; \mathbf{v}, t), t'\} dt'\right] dt_1 \\ &\quad \dots\dots\dots (11) \end{aligned}$$

これらの式で、 $\bar{\mathbf{v}}(t'; \mathbf{v}, t)$ は時刻 t に速度 $\mathbf{v}$ を通る電子の時刻 t' における速度を表す。ここで出発時を基準として表示するため、過去の出発時刻 t_0, t_1 を基準にした初期条件を $f(\mathbf{v}_0, t_0), \phi_s(\mathbf{v}_1, t_1)$ で表し、上と同じ軌道上、時刻 t_1 に $\mathbf{v}_1$ から出発した電子の速度 $\mathbf{v}' = \mathbf{v}_1 + (\mathbf{F}/m)(t' - t_1)$ を $\bar{\mathbf{v}}(t'; \mathbf{v}_1, t_1)$ のように表示すると、現在の時刻 t における速度 $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}}(t; \mathbf{v}_1, t_1)$ を指定するためにデルタ関数が、また速度変化による速度空間の微小体積変化を考慮するために Jacobian が必要となって、(11)式は

$$\begin{aligned} f(\mathbf{v}, t) &= \int_{\mathbf{v}_0} f(\mathbf{v}_0, t_0) \\ &\quad \times \exp\left[-\int_{t_0}^t \nu_T\{\bar{\mathbf{v}}(t'; \mathbf{v}_0, t_0), t'\} dt'\right] \\ &\quad \times \delta\{\bar{\mathbf{v}}(t; \mathbf{v}_0, t_0) - \mathbf{v}\} \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{v}_0} d\mathbf{v}_0 \\ &\quad + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{\mathbf{v}_1} \phi_s(\mathbf{v}_1, t_1) \\ &\quad \times \exp\left[-\int_{t_1}^t \nu_T\{\bar{\mathbf{v}}(t'; \mathbf{v}_1, t_1), t'\} dt'\right] \\ &\quad \times \delta\{\bar{\mathbf{v}}(t; \mathbf{v}_1, t_1) - \mathbf{v}\} \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{v}_1} d\mathbf{v}_1 \\ &\quad \dots\dots\dots (12) \end{aligned}$$

のように書き直される。また時刻 t_1 における初期分布 $\phi_s(\mathbf{v}_1, t_1)$ は(4)、(5)式から、散乱による速度分散 ($\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}_1$) を指定する関数 $\delta(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}_1)$ を用いて次のように書き表しておく。

$$\begin{aligned} \phi_s(\mathbf{v}_1, t_1) d\mathbf{v}_1 &= \int_{\mathbf{v}'} S(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}_1) \nu_T(\mathbf{v}') f(\mathbf{v}') \\ &\quad \times \delta(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}_1) d\mathbf{v}' \quad \dots\dots\dots (13) \end{aligned}$$

(11)、(12)式は、(7)式で与えられたボルツマン微積分方程式の path integral solution である⁽⁶⁾。この表式では、 t 以前の時刻 t_0 から、 t_1 の経過とともに dt_1 ごとに $\phi_s(\mathbf{v}_1, t_1)dt_1$ の割合で飛行に加わっている粒が子群のうち、時刻 t まで衝突せずに飛行している成分の連続的加算和として、完全に積分形で $f(\mathbf{v}, t)$ と与えられている点に大きい特徴がある。この表式は、

時々刻々変化する外力, 例えば高周波電磁界下における時間依存速度分布を解析する場合にも, 有効に利用できる⁽⁷⁾⁽⁸⁾。

3. FTI法基本公式の導出

FTI法の基本公式を導出するに先立って, 速度領域変化の際のJacobianの支配から逃れるために, 速度分布を密度表示 $f(v, t)$ から数表示 $F(v, t)$ に変換する。例えば, 電界のみ存在する場合, 方位角方向の等方性を仮定し, 電界軸から測ったpolar angle θ を用いて

$$F(v, t)dv = 2\pi v^2 f(v, \theta, t) \sin \theta d\theta dv \cdots (14)$$

のように表し, また計算を簡単に行うため次のように規格化する。

$$\int_v F(v, t)dv = \int_0^\infty \int_0^\pi 2\pi v^2 f(v, \theta, t) \sin \theta d\theta dv = 1 \cdots \cdots \cdots (15)$$

衝突レート分布については

$$\Psi_c(v', t)dv' = 2\pi v'^2 \psi_c(v', \theta', t) \sin \theta' d\theta' dv' \cdots \cdots \cdots (16)$$

実験室系等方散乱を仮定しているから, 出発レート分布は等方となり

$$\Psi_s(v_0, t)dv_0 = 2\pi v_0^2 \psi_s(v_0, t) \sin \theta_0 d\theta_0 dv_0 \cdots \cdots \cdots (17)$$

と書ける。このように“数”分布表示を用いることにより, 飛行による速度変化のいかにかわらず, また電離, 付着のない粒子保存条件では, 衝突前後の速度変化のいかにかわらず粒子数は保存されるから, Jacobianは不要となり, 微小速度空間相互間での粒子の移動を容易に記述できる。逆にいえば, Jacobianは粒子保存条件を「密度分布」で表示するための手段として用いられていたのである。これにより(13)式は,

$$\Psi_s(v_0, t) = \int_{v'} S(v' \rightarrow v_0) \nu_T(v', t) \times F(v', t) \delta(v' \rightarrow v_0) dv' \cdots \cdots (18)$$

と表すことができる。また衝突における速度分散($v' \rightarrow v_0$)をデルタ関数的に指定して分散確率を与える速度分散関数を $S(v_0, v')$ で表せば, $\Psi_s(v_0, t)$ は全域重ね積分を用いて次のように書ける。

$$\Psi_s(v_0, t) = S(v_0, v') \otimes \nu_T(v') F(v', t) = S(v_0, v') \otimes \Psi_c(v', t) \cdots \cdots (19)$$

記号 $\otimes$ は速度空間全域にわたる重ね積分を表す。

ここで, FTI法の基本公式を導出する。先の(12)式で, $f(v, t)$ を $F(v, t)$ に変換し, $t_0 = -\infty$ と置いて long time solution を求めると, 次式のように第1

項は消滅し, 第2項の t に近い部分だけが残る。

$$F(v, t) = \int_0^\pi \int_{-\infty}^t \Psi_s(v_1, t_1) \times \exp \left[- \int_{-\infty}^\tau \nu_T \{ \bar{v}(t'; v_1, t_1), t' \} dt' \right] \times \delta \{ \bar{v}(\tau; v_1, t_1) - v \} \times \delta(\tau - t) d\tau \times (1/2) \sin \theta_1 d\theta_1 \cdots \cdots (20)$$

この式で, $F(v, t)$ は t_0 から t まで t_1 の経過とともに, $\Psi_s(v_1, t_1)$ のレートで連続的に出発した電子群のうち, 時刻 t まで衝突せずに飛行を続けている, すなわち生き残っている成分の和で与えられている。

ここで, 時間積分の変数を $t_1(t_0 \sim t)dt_1$ から $t(0 \sim t)dt$ に置き換える($dt_1 = dt$)。そうすると, 変換前, 各 $t_1 dt_1$ に出发した粒子群の時刻 t における生き残り成分和が, 変換後の表示では, 時刻 $0dt$ に同時に出发した粒子群のうち, 時刻 $t(dt)$ に生き残っている成分の連続和として与えられる。和をとるべき各成分の指定時刻 $t dt$ が連続的に変わるため, デルタ関数を用いて時刻を指定することが必要になる。

更に, 定常状態を考えると, $F(v, t)$, $\Psi_s(v_1, t_1)$ ともに時間的に変化しなくなるので, これら定常分布を $F(v)$ と $\Psi_s(v_1)$ で表し, v_1 を v_0 に置き換えて $\Psi_s(v_0)$ と書くと,

$$F(v) = \int_0^\pi \int_0^\infty \Psi_s(v_0) \times \exp \left[- \int_0^\tau \nu_T \times \{ \bar{v}(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] \times \delta \{ \bar{v}(\tau; v_0, 0) - v \} \delta(\tau - t) d\tau \times (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 = \int_0^\pi \int_0^\infty \Psi_s(v_0) g_f \{ \bar{v}(\tau; v_0, 0), \tau \} \times \delta \{ \bar{v}(\tau; v_0, 0) - v \} \delta(\tau - t) d\tau \times (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 \cdots \cdots (21)$$

のように表される。ここで,

$$g_f(v, t; v_0, 0) = \exp \left[- \int_0^\tau \nu_T \{ v(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] \cdots \cdots \cdots (22)$$

は, $t=0$ に v_0 から出発した電子が時刻 $t dt$ に $v dv$ で飛行している確率を表す状態関数(グリーン関数)であって, デルタ関数によって速度および時刻を指定して用いる。

すなわち, 定常状態における速度分布 $F(v)$ は, 定常出発レート分布 $\Psi_s(v_0)$ で時刻 $0 dt$ に出发し, 次々に衝突して減少しながら飛行を続けている電子群のうち, 速度 $v dv$ での $t dt: 0 \sim \infty$ にわたる生き残り成分和で与えられる。FTI法では計算の便宜上速度(エ

エネルギー) 等分割, $dv = dv_0(d\varepsilon = d\varepsilon_0)$ を採用する。

ここで, 時刻 0 に速度 v_0 で出発した電子が時刻 t に, 速度, v で飛行している生き残り確率 $g_f(v, t; v_0, 0)$ を, その時刻とともに指定するデルタ関数機能を備え, 積分表示した速度分散関数 $H_f(v, v_0)$ を定義する。等方散乱を仮定しているから $H_f(v, v_0)$ は $H(v, v_0)$ と書ける。

$$H_f(v, v_0) \equiv \int_0^\pi \int_0^\infty g_f(\bar{v}(\tau; v_0, 0), \tau) \\ \times \delta\{\bar{v}(\tau; v_0, 0) - v\} \\ \times \delta(\tau - t) d\tau \\ \times (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0$$

ここで, 時刻 t のみ指定すれば, $v = \bar{v}(t; v_0, 0)$ は指定できるので, 以後は次のように簡単に記述する。

$$H_f(v, v_0) \equiv \int_0^\pi \int_0^\infty \\ \times \exp\left[-\int_0^\tau \nu_T\{\bar{v}(t'; v_0, 0), t'\} dt'\right] \\ \times \delta(\tau - t) d\tau (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 \\ \dots\dots\dots (23)$$

従って, 飛行中の粒子の分布関数 $F(v)$ は, 重ね積分で表示できて,

$$F(v) = H_f(v, v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \dots\dots\dots (24)$$

このように $F(v)$ の定常解が表示できれば, 衝突レート分布は $\Psi_c(v') = \nu_T(v') F(v')$ で与えられるから, $\Psi_s(v_0)$ から直接 $\Psi_c(v')$ を与える速度分散関数, すなわち飛行による速度分散関数 $H(v', v_0)$ を

$$H(v', v_0) \equiv \int_0^\pi \int_0^\infty \nu_T\{\bar{v}(\tau; v_0, 0), \tau\} \\ \times \exp\left[-\int_0^\tau \nu_T\{\bar{v}(t'; v_0, 0), t'\} dt'\right] \\ \times \delta(\tau - t) d\tau (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 \quad (25)$$

のように定義することができる。すなわち $\Psi_c(v')$ は

$$\Psi_c(v') = H(v', v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \dots\dots\dots (26)$$

と書ける。更に (19) 式を用いると

$$\Psi_s(v_0') = S(v_0', v') \otimes H(v', v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \dots\dots (27)$$

となって, $\Psi_s(v_0)$ は 1 回の飛行衝突を経ると新しい出発レート分布 $\Psi_s(v_0')$ となって帰ってくることがわかる。ここでは 1 回の飛行衝突を経た分布を, 元の分布と区別するために, $\Psi_s(v_0')$ と表示してある。このように, energy の gain と loss を伴う 1 回の飛行と衝突の過程による速度分散 (電子の速度変化) を与える分散関数として, ループ分散関数

$$L(v_0', v_0) \equiv S(v_0', v') \otimes H(v', v_0) \dots\dots\dots (28)$$

を定義すれば, $\Psi_s(v_0')$ は簡単に次のように書くことができる。

$$\Psi_s(v_0') = L(v_0', v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \dots\dots\dots (29)$$

(27), (29) 式は, Fredholm の第一種の積分方程式であり, 重ね積分を繰返し実行, すなわち分散関数を繰返し適用することにより, $\Psi_s(v_0)$ を次第に正しい分布に近づけていくことができる。

実際には, 時々刻々出発する電子群が長短様々な時間飛行しては衝突するなかで, 電子群全体として時間的に変化しない特定の定常出発レート分布 $\Psi_s(v_0)$ が自然に形成される。このレート分布の自然形成を, (28) 式で積分表示されるループ分散関数 $L(v_0', v_0)$ を, 任意の初期分布に繰返し作用させることにより等価的に実現し, 過不足なく定常状態の出発レート分布 $\Psi_s(v_0)$ を求める方法が, 粒子数保存条件における FTI 法の基本となっている。従って, 出発レート分布が自然に形成される条件がある限り, どのように過酷な衝突断面積条件, 電界条件においても, 常に安定な解析が可能である。

Path integral (PI) 法と FTI 法との間には, 数学的には大きい相違はない。しかし両者の機能にはかなりの開きがある。PI 法では, 飛行中の分布 $F(v)$ を主未知関数としたため, 高次の輸送係数には十分な精度が得られない。これに対して FTI 法では積分操作を分散関数を用いて operator 化した点, また規格化 (後述) 出発レート分布を主未知関数として構成した点に大きいメリットがある。規格化出発レート分布をまず求めることにより, すべての輸送特性を, 電子の出発から衝突までの加速度運動の結果を, “時間” に対して極めて明確に定義し, 正確に求めることが可能となった。FTI の名称の意味もこの点にある。

4. FTI 法の機能

〈4・1〉 出発レート分布の規格化 速度分散関数 $H(v', v_0)$, $L(v_0', v_0)$ は 1 個の電子の分散確率として定義されているから, 電離, 付着などの起こらない, すなわち粒子数が保存される場合には, その分散先の全速度領域にわたる積分が 1 になるはずである。

$$\int_{v'} H(v', v_0) dv' = 1 \dots\dots\dots (30)$$

$$\int_{v_0'} L(v_0', v_0) dv_0' = 1 \dots\dots\dots (31)$$

一方, $\Psi_s(v_0)$ や $\Psi_c(v')$ は一般に極めて大きい値をもつ未知のレート分布である。当然, これらの分布の大きさの程度も不明のとき, その取扱いに困難を生じる。これを解消するため, これらを全衝突 (出発) 周波数,

$$\nu_c = \int_{v'} \Psi_c(v') dv' = \nu_s = \int_{v_0} \Psi_s(v_0) dv_0 \quad (32)$$

で規格化して、規格化出発レート分布 $\Psi_{sn}(v_0)$ 、規格化衝突レート分布 $\Psi_{cn}(v')$ を定義する。

$$\Psi_{sn}(v_0) dv_0 \equiv \Psi_s(v_0) dv_0 / \nu_s \quad (33)$$

$$\Psi_{cn}(v') dv' \equiv \Psi_c(v') dv' / \nu_c \quad (34)$$

$$\int_{v_0} \Psi_{sn}(v_0) dv_0 = \int_{v'} \Psi_{cn}(v') dv' = 1$$

これら規格化レート分布は、既に実質はレート分布ではなく出発あるいは衝突数の相対比を表す分布となる。しかし規格化特性を利用して、全分散確率1のループ分散関数 $L(v_0', v_0)$ を繰返し適用すれば、規格化出発レート分布 $\Psi_{sn}(v_0)$ は容易に決定できる。

$$\Psi_{sn}(v_0') = \lim_{m \rightarrow \infty} [L(v_0', v_0)]^m \otimes \Psi_{sn}(v_0) \quad (35)$$

この規格化レート分布は、衝突時、出発時の平均エネルギー計算などにも効果を発揮する。例えば、1個の電子の衝突時の平均エネルギー $\langle \epsilon' \rangle$ 、出発時の平均エネルギー $\langle \epsilon_0 \rangle$ は次のように求められる。

$$\langle \epsilon' \rangle = \int_{v'} \epsilon' \Psi_{cn}(v') dv' \quad (36)$$

$$\langle \epsilon_0 \rangle = \int_{v_0} \epsilon_0 \Psi_{sn}(v_0) dv_0 \quad (37)$$

これら $\langle \epsilon' \rangle$ 、 $\langle \epsilon_0 \rangle$ の値は、一般に飛行中の平均エネルギー $\langle \epsilon \rangle$ とは異なる値をとる。常識的には $\langle \epsilon_0 \rangle < \langle \epsilon \rangle < \langle \epsilon' \rangle$ であろうが、 $\langle \epsilon_0 \rangle > \langle \epsilon \rangle$ の場合さえあることに注意を要する。

〈4・2〉 速度分布の表示法 FTI法では速度分布を Legendre 展開して解く必要はない。しかし求めた分布を Legendre 展開表示することは、各項のもつ意味が一般によく理解されており、メモリー量を節約することができる点で便利である。

Legendre 展開した速度分布を

$$\begin{aligned} \Psi_{cn}(v') &= \Psi_{cn0}(v') + \Psi_{cn1}(v') \cos \theta' \\ &\quad + \Psi_{cn2}(v') (1/2)(3 \cos^2 \theta' - 1) + \dots \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} F(v) &= F_0(v) + F_1(v) \cos \theta \\ &\quad + F_2(v) (1/2)(3 \cos^2 \theta - 1) + \dots \end{aligned} \quad (39)$$

のように書くと、Legendre 展開の各項を求めるために必要な速度分散関数は、下記のように定義される。

$$\begin{aligned} H_l(v', v_0) &\equiv \int_0^\pi \int_0^\infty (2l+1) P_l(\cos \theta) \\ &\quad \times \nu_\tau \{ \bar{v}(\tau; v_0, 0), \tau \} \\ &\quad \times \exp \left[- \int_0^\tau \nu_\tau \{ \bar{v}(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] \end{aligned}$$

$$\times \delta(\tau - t) d\tau (1/2) \sin \theta d\theta \quad (40)$$

$$\begin{aligned} H_f(v, v_0) &\equiv \int_0^\pi \int_0^\infty (2l+1) P_l(\cos \theta) \\ &\quad \times \exp \left[- \int_0^\tau \nu_\tau \{ \bar{v}(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] \\ &\quad \times \delta(\tau - t) d\tau (1/2) \sin \theta d\theta \quad (41) \end{aligned}$$

ここで $\cos \theta = \{v_0 \cos \theta_0 + (F/m)t\} / v(t)$ であることはいうまでもない。上式のように分散関数 $H_l(v', v_0)$ 、 $H_f(v, v_0)$ は、時刻 $t dt$ に電子が衝突、あるいは飛行している確率にその時刻における $(2l+1) P_l(\cos \theta)$ を乗じた値を、電子が占める速度領域 $v dv$ にそれぞれ分配して得られる。分布 $\Psi_{cn}(v')$ 、 $F_l(v)$ は次の関係式で与えられる。

$$\Psi_{cn}(v') = H_l(v', v_0) \otimes \Psi_{sn}(v_0) \quad (42)$$

$$F_l(v) = H_f(v, v_0) \otimes \Psi_{sn}(v_0) \quad (43)$$

$$H_f(v, v_0) = \nu_s H_{fnl}(v', v_0) \quad (44)$$

ν_s は、 H_f が飛行時間積分した飛行確率の形で定義されているため、 $\Psi_{sn}(v_0)$ に対して飛行中の規格化速度分散関数 H_{fnl} を与えるための補正係数として用いている。一般に、速度分布の Legendre 級数展開各項は

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \int_0^\pi P_l(\cos \theta) F_l(v) (1/2) \sin \theta d\theta dv \\ &= 1 \quad (l=0) \\ &= \theta \quad (l=1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (45)$$

のように規格化される。更に特定の分布、例えば $F(v_x)$ 、 $F(v_y)$ などを

$$F(v_x) = H_f(v_x, v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \quad (46)$$

$$F(v_y) = H_f(v_y, v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \quad (47)$$

のように求めることもできる。 $H_f(v_x, v_0)$ は、時刻 $t dt$ における飛行確率を、電子がその時刻に存在する $v_x dv_x$ に分配することにより得られる。

以上のように、FTI法における計算はすべて積分のみを用いている。このため、エネルギーに対して極めて急峻に変化する衝突断面積が与えられ他の方法では不安定になるような条件でも、常に安定な解析が可能である。しかし積分で与えられる上記各分散関数は FTI法を厳密に適用する基本となるので、その精度が解析結果に重大な影響をもつことに注意したい。

更に、計算機のメモリー容量が十分あれば、速度分散関数 $H_f(v_x, v_y; v_0)$ 、 $H_f(v, \theta)$ を用意して、速度分布 $F(v_x, v_y)$ 、 $F(v, \theta)$ を直接求めることも可能である。座標軸を適当にとつて、電界、磁界共存下の電子の速度分布や輸送特性を厳密に解析した例もある⁽¹⁰⁾。

〈4・3〉 ループエネルギーゲイン関数 速度 v_0 から出発した電子の、一回の飛行-衝突というループ動作における正味のエネルギーゲインを表すループエネルギーゲイン関数 $LG\epsilon(v_0)$ を考える。

$$LG\epsilon(v_0) = \int_0^\infty (\epsilon_0' - \epsilon_0) L(v_0', v_0) dv_0' \quad \cdots (48)$$

ループエネルギーゲイン関数 $LG\epsilon(v_0)$ は、普通低 v_0 域で正、高 v_0 域で負値をとる。これは、低 v_0 域から出発した電子は比較的長時間飛行して大きいエネルギーを得るが、高 v_0 域から出発した場合には飛行時間が短くて、平均して飛行中に余りエネルギーを得ることができず、また衝突時に励起、電離などで大きいエネルギーを失うことによる。この効果が飛行-衝突を繰返すうちに、電子を自然にその中間の v_0 領域に収束させるように作用し、出発レート分布 $\Psi_{s0}(v_0)$ を安定に形成させる。同時に、エネルギーバランス

$$\int_0^\infty LG\epsilon(v_0) \Psi_{s0}(v_0) dv_0 = 0 \quad \cdots (49)$$

も成立する。もし、粒子数保存が成立しなければ常にエネルギーの流れを生じ、上式には平衡状態は存在しない。補正因子を用いる厳密解法は別の機会に記すことにするが、簡略法については後で述べる。

高 v_0 域でループゲイン $LG\epsilon(v_0)$ が負値をもたなければ、飛行、衝突を繰返す電子は次々に高 v_0 側へ移り、 $\Psi_{s0}(v_0)$ は収束せずに発散する。もし飛び飛びにでも、 $LG\epsilon(v_0)$ に正値をとる島状領域が存在すれば、粒子は部分的にはあっても、その島伝いに高 v_0 方向に逸走する (runaway)。これを許さないためには、ループゲイン関数 $LG\epsilon(v_0)$ は高 v_0 側で連続的に負であることが必要である⁽¹¹⁾。しかし、たとえループゲイン関数が負であっても、部分的な電子の逸走

(runaway) を発見することは困難である。部分的逸走については、やはりループ分散関数 $L(v_0', v_0)$ を用いて高速度側への電子の速度分散が存在しないことを確認することが必要である。すなわち、ループゲイン関数の高域負条件は必要条件であって十分条件ではない。

〈4・4〉 輸送関数と輸送係数 本来、電子の輸送特性は、個々の電子の飛行における輸送量の時間に対する比率から求めるのが本質的な方法であり、FTI法ではこの本質的な求め方ができる。まず速度 v_0 から出発する電子について、次のような輸送関数を定義する。

$$Gz(v_0) \equiv \int_0^\pi \int_0^\infty z \nu_T \{ \bar{v}(t; v_0, 0), t \} \times \exp \left[- \int_0^t \nu_T \{ \bar{v}(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] dt \times (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 \quad \cdots (50)$$

$$Gfz(v_0) \equiv \int_0^\pi \int_0^\infty z \times \exp \left[- \int_0^t \nu_T \{ \bar{v}(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] dt \times (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 \quad \cdots (51)$$

ここで $Gz(v_0)$ は、 v_0 から等方に出発した1個の電子が衝突したときにもっている z の値の、衝突確率重みつき平均値である。 $Gfz(v_0)$ は v_0 から等方に出発した1個の電子が時刻 t にもっている値 z の飛行確率、すなわち生き残り確率の重み付き飛行時間積分値である。例えば $G\epsilon(v_0)$ および $Gf\epsilon(v_0)$ は、 v_0 から出発した1個の電子の衝突時の平均エネルギーおよび飛行中のエネルギーの時間積分値で、 $Gx(v_0)$ および $Gfx(v_0)$ は1回の飛行による x 方向変移を表す。 $Gz(v_0)$ および $Gfz(v_0)$ は、各輸送量の出発速度依存性を示す重要な役割をもっている⁽¹¹⁾。

$Gz(v_0)$, $Gfz(v_0)$ に $\Psi_{s0}(v_0) dv_0$ を乗じて積分した値を平均輸送関数と呼び $\langle Gz \rangle$, $\langle Gfz \rangle$ のように書く。

$\langle Gz \rangle$, $\langle Gfz \rangle$ は、一つの電子群の1回の飛行における輸送量 z の平均値を意味する。

$$\langle Gz \rangle = \int_0^\infty Gz(v_0) \Psi_{s0}(v_0) dv_0 \quad \cdots (52)$$

$$\langle Gfz \rangle = \int_0^\infty Gfz(v_0) \Psi_{s0}(v_0) dv_0 \quad \cdots (53)$$

これら平均輸送関数から輸送係数や関係諸量が得られる。例えば移動速度 W は、

$$W = \langle Gx \rangle / \langle Gt \rangle = \langle Gfv_x \rangle / \langle Gf1 \rangle \quad \cdots (54)$$

のように求められる。 $\langle Gt \rangle$ および $\langle Gf1 \rangle$ は単純平均飛行時間である。このとき $W = \langle Gfv_x(v_0) \rangle / \langle Gf1(v_0) \rangle$ のようにはならないことに注意する必要がある。平均輸送関数 $\langle Gz \rangle$, $\langle Gfz \rangle$ の例を表1に、また、それらから

表1 種々の平均輸送関数
Table 1. Average transport functions.

$\langle Gz \rangle$: 衝突時の z 値		$\langle Gfz \rangle$: z 値の飛行時間積分値	
$\langle G1 \rangle$	全衝突確率	$\langle Gfv \rangle$	
$\langle Gt \rangle$	単純平均飛行時間	$\langle Gf1 \rangle$	
$\langle Gt^2/2 \rangle$	時間積分飛行時間	$\langle Gft \rangle$	
$m \langle Gv_x \rangle$	前方向運動量(衝突時)		
$\langle Gx \rangle$	前方向変移	$\langle Gfv_x \rangle$	
$\langle Gy \rangle$	横方向変移	$\langle Gfv_y \rangle$	
	軸方向積分変位	$\langle Gfx \rangle$	
$\langle Gx^2/2 \rangle$	軸方向2乗変移	$\langle Gfxv_x \rangle$	
$\langle Gy^2/2 \rangle$	横方向2乗変移	$\langle Gfyv_y \rangle$	
$\langle G\lambda \rangle$	平均自由行程	$\langle Gfv \rangle$	
$\langle G\lambda^2/2 \rangle$	平均2乗変移	$\langle Gf\lambda v \rangle$	
$\langle G\epsilon \rangle$	平均エネルギー(衝突時)		
	飛行時間積分エネルギー	$\langle Gf\epsilon \rangle$	

表 2 平均輸送関数 $\langle Gz \rangle$, $\langle Gfz \rangle$ から導いた輸送係数.
Table 2. Transport coefficients derived from average transport functions.

$\langle Gz \rangle$ による表示	輸送係数名および記号	$\langle Gfz \rangle$ による表示
$\langle Gt \rangle$	単純平均飛行時間 $\langle \tau \rangle$	$\langle Gf1 \rangle$
$1/\langle Gt \rangle$	平均衝突周波数 ν_c	$\langle Gf \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$\langle GA \rangle$	平均自由行程 $\langle Gf \rangle$	
$\langle Gt^2 \rangle / \langle Gt \rangle$	時間平均飛行時間 $\langle \bar{t} \rangle$	$\langle Gf \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$\langle Gx \rangle / \langle Gt \rangle$	移動速度 W	$\langle Gf v_x \rangle / \langle Gf1 \rangle$
	平均エネルギー $\langle \epsilon \rangle$	$\langle Gf \epsilon \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$\langle G\lambda \rangle / \langle Gt \rangle$	平均速度 (速さ) $\langle v \rangle$	$\langle Gf v \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$E \langle Gx \rangle / \langle Gt \rangle$	エネルギーゲインレート	$E \langle Gf v_x \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$m \langle Gv_x \rangle / \langle Gt \rangle$	軸方向運動量ゲインレート	
	飛行中の平均位置変位	$\langle Gf_x \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$\langle G\lambda^2 \rangle / 2 \langle Gt \rangle$	全方向拡散係数 D_0	$\langle Gf \lambda \rangle / \langle Gf1 \rangle$
$\langle Gy^2 \rangle / 4 \langle Gt \rangle$	横方向拡散係数 D_T	$\langle Gf v_y \rangle / 2 \langle Gf1 \rangle$

註) 時間関数は例えば $v(t) = (v_0^2 + (at)^2)^{1/2}$, $x(t) = v_0 \cos \theta_0 t + (1/2)at^2$, $\epsilon(t) = \epsilon_0 + Ex(t)$, $v_y(t) = v_0 \sin \theta_0$, $y(t) = v_0 \sin \theta_0 t$, $\lambda(t) = \int v(t) dt$ のように計算している。

ら導出される輸送係数を表 2 に示す。

〈4・5〉 衝突種類別速度分散関数 飛行中の電子の全衝突確率に対する速度分散関数は (25) 式で得られるが、飛行中に種類 k の衝突をする確率を与える速度分散関数は、次のように書ける。

$$\begin{aligned}
 H_k(v', v_0) &\equiv \int_0^\pi \int_0^\infty \nu_k \{ \bar{v}(\tau; v_0, 0), \tau \} \\
 &\quad \times \exp \left[- \int_0^\tau \nu_T \{ \bar{v}(t'; v_0, 0), t' \} dt' \right] \\
 &\quad \times \delta(\tau - t) d\tau (1/2) \sin \theta_0 d\theta_0 \\
 &\quad \dots \dots \dots (55)
 \end{aligned}$$

従って、種類 k の衝突レート分布 $\Psi_{ck}(v')$ は

$$\Psi_{ck}(v') = H_k(v', v_0) \otimes \Psi_s(v_0) \dots \dots \dots (56)$$

$$\Psi_c(v') = \sum_k \Psi_{ck}(v') \dots \dots \dots (57)$$

となる。

衝突における速度分散関数 $S(v_0', v')$ の具体的計算法について述べる。電子の場合には、衝突時のエネルギー授受が励起、電離エネルギーなどの形で与えられているデータを使うことが多いため、エネルギーを変数として計算する方が便利である。弾性衝突と励起衝突においては、それぞれの衝突数に対して

弾性衝突

$$S(\epsilon_0', \epsilon') = S\{(1-2m/M)\epsilon', \epsilon'\} \dots \dots \dots (58)$$

励起衝突

$$S(\epsilon_0', \epsilon') = S(\epsilon' - \epsilon_{ex}, \epsilon') \dots \dots \dots (59)$$

で与えられる。

上記いずれの衝突においても、数保存条件では、

$$\int_0^\infty S(\epsilon_0', \epsilon') d\epsilon_0' = 1 \dots \dots \dots (60)$$

が成立することに注意する。

付着、電離衝突を起こした場合には、以下のような処理をする。電離において一般に使われるエネルギー分配比 $\Delta (\Delta \leq 1)$ を用いれば

付着衝突

$$S_a(\epsilon_0', \epsilon') = 0 \dots \dots \dots (61)$$

電離衝突

$$\begin{aligned}
 S_i(\epsilon_0', \epsilon') \\
 = S_1(\epsilon_0', \epsilon') + S_2(\epsilon_0'', \epsilon') \dots \dots \dots (62)
 \end{aligned}$$

$$S_1(\epsilon_0', \epsilon') = S_1\{\Delta(\epsilon' - \epsilon_i), \epsilon'\} \dots \dots \dots (63)$$

$$S_2(\epsilon_0', \epsilon') = S_2\{(1-\Delta)(\epsilon' - \epsilon_i), \epsilon'\} \dots \dots \dots (64)$$

となる。もちろん、これら S_k 関数の計算も、 $\epsilon \rightarrow v$ の換算をすれば速度表示のままでも可能である。 H_k 関数との重ね積分で衝突 k に対するループ分散関数

$$L_k(v_0' v_0) = S_k(v_0', v') \otimes H_k(v', v_0)$$

が得られる。粒子数が保存されている場合は全ループ分散関数

$$L(v_0', v_0) = \sum_k L_k(v_0', v_0) \dots \dots \dots (65)$$

の、全 v_0' 域での積分は 1 になる。しかし付着、電離を含む粒子数非保存条件での $S(v_0', v')$, $L(v_0', v_0)$ は、その全 v_0' 領域での積分が 1 にならない。この場合には、ループ分散関数 $L(v_0', v_0)$ を繰返し作用させて規格化出発レート分布を求める過程において、1 回適用ごとに分布の総数が増加することになる。この場合分散関数 $L(v_0', v_0)$ を 1 回適用するたびに、得られた $\Psi_{sn}(v_0')$ を規格化し直し、これを新しい出発レート分布 $\Psi_{sn}'(v_0)$ として繰返し適用する。こうして得られる $\Psi_{sn}'(v_0)$ は、電離や付着のある、粒子数非保存条件における厳密な規格化出発レート分布ではないが極めて近い。しかし、一般に粒子数非保存条件では、エネル

ギー、運動量その他すべての量について保存が成立しない。それらのより厳密な取扱いや、粒子数非保存条件において位置空間で定義される輸送特性の厳密な表示法などについては別の機会に譲る。

これまでは、主として電子の場合を想定して記述してきた。ガス原子(分子)やイオンの場合には、Maxwell 分布するガス分子との平均相対速度 $\langle v_r \rangle$ に依存して衝突周波数 $\nu_r\{v_r(v)\}$ が決まり、また弾性衝突における速度の分散にガス分子を含めて運動量およびエネルギーの保存を考慮しなければならない。このため、衝突における速度分散などの取扱いがやや面倒である⁽¹²⁾。しかし、FTI 法はイオンのように衝突損失エネルギーの大きい、非等方性の強い速度分布をもつ場合を扱うにも極めて適当な方法である。最近、イオン輸送特性の解析に興味深い結果が得られている⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾。

これまでに記した飛行、衝突における速度分散関数は、すべて不可逆である。これは二体衝突という可逆過程を経由しながら、多数回の飛行、衝突の結果が必ず確率的に分散することによる。分散特性の不可逆性については別の機会に詳しく述べる。

5. おわりに

以上、全く近似を用いずに、厳密に電子、イオンの輸送特性を解析できる FTI 法の理論と計算法について述べた。FTI 法では、ガス中で実際に飛行、衝突を繰返している電子、イオンの挙動を、分散関数を用いて詳細に描き出し、一つの規格化出発レート分布から任意の分布関数、全輸送特性を厳密に統一的に求めている。このように実際の運動を再現している点では、マクロスコピックなモンテカルロシミュレーションと考えてよい。力学法則と確率則に従って正しく計算されたモンテカルロシミュレーションの結果を疑うことができないのと同様に、厳密に計算された FTI 解析の結果も否定することはできない。この点も他の解析方法にはない特徴である。FTI 法、あるいは関連する方法を用いた解析例については、文献(1)および(7)~(14)を参照されたい。

最後に、実際に重要な、解析に要する計算機時間について述べる。簡単な断面積で、あまり高い精度を必要としなければ、一つの条件での解析が普通速度の Work Station で、10~20 分程度、分子系のガス条件

で、すべての輸送係数、分布関数を厳密に求めても 1~2 時間で解析が可能で十分実用の領域にある。解析を希望される方にはプログラム、計算上のアドバイスを提供できることを付記する。

(平成 4 年 5 月 25 日受付)

文 献

- (1) N. Ikuta & Y. Murakami: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **56**, 115 (1987)
- (2) H. Budd: *Phys. Rev.*, **158**, 798 (1967)
- (3) H. D. Rees: *J. Phys. Chem. Solids*, **30**, 643 (1969)
- (4) P. Kleban & H. Ted Davis: *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 456 (1977)
- (5) P. Kleban & H. Ted Davis: *J. Chem. Phys.*, **68**, 2999 (1978)
- (6) H. R. Skullerud & S. Kuhn: *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **16**, 1225 (1983)
- (7) N. Ikuta, S. Nakajima & M. Fukutoku: *Proc. Jpn. Symp. Plasma Chem.*, **2**, 287 (1989)
- (8) S. Nakajima, Y. Seki & N. Ikuta: *Bulletin of Faculty of Engineering, The University of Tokushima*, **27**, 49 (1990)
- (9) N. Ikuta, A. Takeda & K. Yamamoto: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **57**, 2401 (1988)
- (10) N. Ikuta & Y. Sugai: *ibid.*, **58**, 1228 (1989)
- (11) M. Fukutoku & N. Ikuta: *ibid.*, **59**, 2727 (1990)
- (12) N. Ikuta, S. Nakajima, H. Morikawa & E. Nishi: *ibid.*, **61**, 2779 (1992)
- (13) N. Ikuta & E. Nishi: *ibid.*, **61**, 1132 (1992)
- (14) N. Ikuta & E. Nishi: *ibid.*, **61**, No. 12 (1992), to appear

生 田 信 皓 (正員)

昭和 4 年 10 月 22 日生。26 年徳島工業専門学校電気科卒業。28 年工業高校教諭, 39 年徳島大学工学部助手, 同工業短期大学部を経て, 現在同工学部教授。工学博士。主として, 放電現象の基礎過程および気体電子工学分野の研究に従事。47 年電気学会論文賞受賞。物理学会, 応用物理学会会員。

中 島 貞之丞 (正員)

昭和 35 年 9 月 24 日生。58 年 3 月京都大学工学部電子工学科卒業。60 年同大学大学院工学研究科修士課程修了, 63 年同博士課程退学。同年 4 月徳島大学工学部助手, 平成 2 年同工業短期大学部講師, 現在に至る。主として, プラズマ, 固体中の素励起の研究に従事。物理学会会員。