

小特集 帯電事故防止のための宇宙環境・衛星帯電数値シミュレーション

4. 衛星材料内部の電子軌道解析と蓄積電荷分布解析

安田 雅昭, 渡邊 力夫¹⁾

大阪府立大学大学院工学研究科, ¹⁾東京都市大学工学部機械システム工学科

(原稿受付: 2012年 1月16日)

衛星材料内部の帯電解析手法としての電荷蓄積シミュレーションを概説する。電子線入射を対象に、はじめにモンテカルロ法に基づく電子軌道解析法を説明し、次に誘電体内部における蓄積電荷輸送の解析法を述べる。解析例として電子線照射下のポリマー薄膜内部の蓄積電荷分布解析を紹介し、実験との比較による本解析手法の精度評価について述べる。

Keywords:

Monte Carlo simulation, electron trajectory, radiation induced conductivity, charge distribution, polymer

4.1 はじめに

宇宙機の帯電解析を行う上では、宇宙機表面の電位を知ることが重要である[1]。宇宙機表面電位は、宇宙機周囲環境との電流収支によって決定されるが、プラズマ中の電子やイオンが宇宙機表面の誘電体および非接地導体に入射して蓄積した場合には、宇宙機表面に異なる電位箇所が現れ、放電を起こす可能性がある[1]。これを表面帯電 (Surface charging) とよび、問題となる電子のエネルギーは 0~50 keV 程度である[2]。一方、地球磁場に捕獲された荷電粒子の帯 (ヴァンアレン帯) には 100 keV~3 MeV の電子が含まれ、宇宙機表面材を通過し、宇宙機内部の誘電体 (プリント基板やケーブル) に電荷蓄積を誘発する[2]。これを内部帯電 (Internal charging) と呼び、材料の絶縁破壊電界を越える内部電界が発生するような過剰な電荷蓄積が発生することがある。表面帯電および内部帯電の解析においては、電子やイオン (主に陽子) が誘電体材料内部にどのように蓄積し、どのような表面電位が誘起されるかを把握することが重要であり、実験的かつ数値的な解析を行う必要性が生ずる。地球周回軌道上環境におけるプラズマ荷電粒子流束は、電子は nA/cm² 程度、陽子は pA/cm² であるため[2]、誘電体帯電を解析する上では、第一義的には電子線の入射を問題とする。本章では、電子が誘電体内部にどのように蓄積するかを数値的に再現し、宇宙機の帯電解析に役立てる手法を概説する。

誘電体内部に入射した荷電粒子の軌跡を追跡するコードとして代表的なものは Geant[3]、EGS[4]、ITS[5]、MCNP[6] などがあり、なかでも Geant は ESA がユーザーグループを結成し[7]、宇宙科学へ広く適用している。これらのコードは、荷電粒子が各種材料中にどのように蓄積するかを解析するツールであるが、主に対象としているエネルギー範囲が MeV から GeV であり、誘電体帯電で重要

な keV 電子に対する応用例は少ない。また、蓄積した電荷により誘起された電界の効果や放射線誘起導電率 (Radiation Induced Conductivity) [8] の効果も取り込まれておらず、宇宙機用誘電体帯電解析適用には注意を要する[2]。

4.2 入射電子の軌道解析

固体中に入射した電子は固体を構成する原子と衝突を繰り返し、固体中を散乱していく。モンテカルロ法はこの衝突による確率過程からできあがる無数に存在する電子軌道の中から乱数による無作為抽出を行い、統計的な結果を導く手法である。固体中を走行する電子のエネルギー損失過程の記述の仕方により種々のモデルに分類できる。

最も簡単なモデルは阻止能式を用いて走行距離に対する電子の減速を連続的なものとして近似するモデルである[9]。固体中を走行する電子は原子核との弾性衝突により方向を変え、衝突と衝突の間の軌道は直線的に近似される。弾性衝突の断面積には遮蔽 Rutherford の断面積[10] や Mott の断面積[11] が用いられ、散乱角度が確率的に決定される。衝突間のステップ距離には通常は弾性衝突の平均自由行程が用いられる。各ステップにおけるエネルギー損失量は Bethe の式[12] で与えられる阻止能とステップ距離の積として求められる。

この連続減速近似では入射電子の軌道のみが追跡されるため、二次電子の軌道解析のためには二次電子の発生と散乱のモデルを導入する必要がある。各ステップにおいて発生する二次電子数はそのステップにおけるエネルギー損失量に比例させて求められ、この比例係数を固体表面から放出される二次電子収率を調整するためのパラメータとすることができる。固体中で発生した二次電子はカスケードな衝突過程を経て、固体表面から脱出するか、固体中で全エネルギーを失うまで追跡される。金属の場合、各ステップ

における生成二次電子のエネルギー分布は Streitwolf の分布式[13]により与えられる。また、カスケード衝突過程は球対称散乱を仮定した Wolff の理論[14]を用いてモデル化される。二次電子の非弾性散乱平均自由行程には Seah と Dench の経験式[15]などが用いられる。誘電体の場合、これらの過程のモデル化には構成元素の外殻電子のイオン化断面積を用いるなどの工夫が必要である。このモデルを用いて 1 keV 入射電子の PMMA (Poly Methyl Meth Acrylate) 中における軌道を求めた結果の例を図 1 に示す[16]。

現在、最も精度の高いモデルは、電子と対象材料を構成する原子との散乱現象すべてに関して散乱モデルを導入し、散乱前後の電子速度ベクトルの変化を計算するモデルである。例えば、電子が PTFE (Poly Tetra Fluoro Ethylene) に入射した場合の解析モデル[17, 18]においては、PTFE を構成する炭素 C およびフッ素 F 原子のポテンシャルを厳密に計算し、散乱後の電子の速度ベクトルを計算する。また、非弾性散乱として電離、フォノン干渉、ポーロン効果による電子捕獲など、誘電体固有の散乱現象の効果も取り入れている。図 2 に反応断面積の電子エネルギー依存性を示す。電子エネルギーとしては 1 eV ~ 35 keV をとり、この範囲における散乱現象の発生確率を反応断面積で表している。図から、35 keV から 100 eV 程度までは弾性散乱と内殻電離反応が大勢を占めるが、20 eV 以下になるとフォノン干渉や電子捕獲反応が多く発生する。

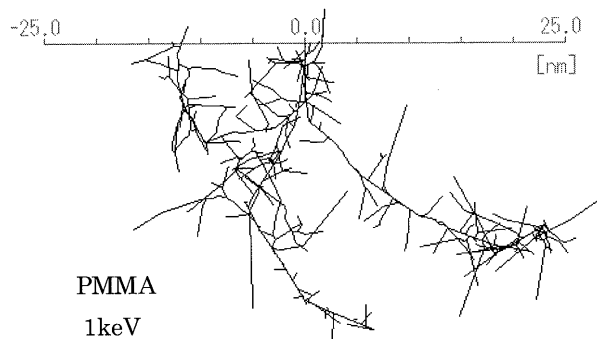


図 1 PMMA 中における 1 keV 入射電子軌道の例。

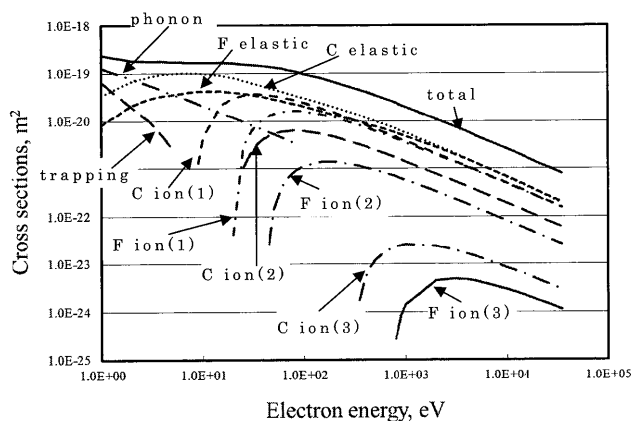


図 2 1 eV-35 keV 電子と PTFE 構成原子 (C&F) との反応断面積のエネルギー依存性。

散乱現象すべてを導入するモデルは個々の反応断面積が必要となるため、試料によってはこれが利用できないことがある。そこで、連続減速近似に非弾性散乱過程を一部組み込んだハイブリッドモデルも提案されている[19]。モンテカルロモデルの詳細については参考文献[20, 21]を参照したい。

4.3 電荷輸送の解析モデル

誘電体試料の場合、モンテカルロ法により固体中の入射電子と生成二次電子の軌道が求まると、二次電子の発生した位置に正電荷を、電子が全エネルギーを失い静止した位置に負電荷を蓄積させることで蓄積電荷の分布を求めることが可能となる。

蓄積電荷は試料内部電界により移動する。この蓄積電荷の輸送を再現するモデルには GR (generation-recombination) モデルと RIC (radiation-induced conductivity) モデルがある[22]。

GR モデルでは入射電子により生成された電子と正孔の分布を求め、内部電界による電荷の移動、再結合、捕獲等を考慮することにより、蓄積電荷分布の時間変化を求める。帯電現象を電荷輸送の機構に基づく観点から解析可能であるが、電荷の移動度、再結合確率、トラップ確率などの解析に必要なパラメータが容易に得られないという困難さがある。

RIC モデルでは電子照射による試料の導電率変化を試料に吸収されるエネルギーの関数として経験式で与え、内部電界により試料の各部に流れる電流を計算することで、蓄積電荷分布の時間変化を求める。経験式を用いるため帯電現象の機構の理解は難しいが、必要なパラメータが導電率に関するものだけであるため、GR モデルに比べて解析が容易である。

以下、本稿の解析に用いた RIC モデルの詳細を説明する。蓄積電荷分布 $N(z, t)$ の時間変化は次の電荷連続の式を解くことにより与えられる。

$$\frac{dN(z, t)}{dt} = G(z, t) - \frac{1}{q} \text{div} J(z, t) \quad (1)$$

ただし、 $G(z, t)$ は電子線照射により蓄積する電荷の分布、 q は電子電荷、 $J(z, t)$ は試料内部電界によるドリフト電流密度である。 $G(z, t)$ が電子散乱のモンテカルロ法により求められた蓄積電荷分布に対応する。蓄積電荷による試料内部の電位分布 $V(z, t)$ は次の Poisson の式を解くことで求められる。

$$\nabla^2 V(z, t) = -\frac{q \cdot N(z, t)}{\epsilon} \quad (2)$$

ただし、 ϵ は試料の誘電率である。また、電流密度 $J(z, t)$ は次の式から計算される。

$$J(z, t) = \sigma(z, t) \cdot E(z, t) \quad (3)$$

ただし、 $\sigma(z, t)$ は試料の導電率であり、 $E(z, t)$ は試料内部の電界である。

電子線照射による試料の導電率変化，すなわち誘起導電現象は，簡単には次のように試料中の蓄積エネルギー量を用いて導入することができる[23]．

$$\sigma(z, t) = kD(z, t)^{\Delta} \quad (4)$$

ここで， $D(z, t)$ は電子線照射により試料に蓄積されるエネルギーであり， k と Δ は定数である． $D(z, t)$ は電子散乱のモンテカルロ法において蓄積電荷分布と同時に求めることができる．また， k と Δ は Kapton[®] については Yang ら [24] が，PMMA については Tanaka ら [25] が求めた値などが報告されている．

4.4 ポリマー中の蓄積電荷分布の解析例

ここではモンテカルロ法により求めたポリマー中の蓄積電荷分布を基に，RIC モデルを用いてその時間変化を解析した結果を紹介する．図 3 に解析対象とした試料構成を示す．ポリマー試料は PTFE 薄膜とポリイミド (Kapton[®]) 薄膜とし，試料上部と下部は金属電極による接地を仮定している．この試料構成は圧電素子誘起圧力波法 (PIPWP 法: Piezo-induced pressure wave propagation method) [26] の測定系と同じであり，PIPWP 法で測定された結果との比較によりシミュレーション解析の精度を評価することを目的として採用した．

まず，内部電界による蓄積電荷の移動が小さい場合の解析例を示す．RIC モデルを導入せずに得られたシミュレーション結果を PIPWP 法によって得られた試料内部電荷分布と比較した結果を図 4 に示す．図 4 (a) の実験結果 [27] は，厚さ 42 μm の PTFE 薄膜に 30 keV の電子線を照射した場合の内部電荷蓄積分布であり，電子線は図の右側から照射されている．この実験では，両面とも接地しているため，表面では正の電荷蓄積が起こっている．図 4 (b) はシミュレーション結果であり，50 μm の PTFE 薄膜に 30 keV の電子線を照射した結果である．PTFE 薄膜に対するこの実験では蓄積電荷移動が小さく，RIC モデルを導入せずにシミュレーションで分布形状がよく再現できている．負電荷のピーク値は，実験では表面から 6 μm の位置に，シミュレーションでは 5 μm の位置に見られる．照射面の正電荷

やなだらかに試料深部まで電荷が蓄積している様子が実験結果をよく表しており，適切なシミュレーションができている．ただし，電荷の絶対値に関しては計算粒子数の制限 (計算機のメモリ容量の制限) から，十分な値とはなっていない．

次に内部電界による蓄積電荷の移動が大きい場合の解析例 [28] を示す．図 5 は 60 keV で電子線照射中のポリイミド薄膜 (膜厚 50 μm) 内部の蓄積電荷分布と電位分布の時間変化をシミュレーションにより求めた結果である．照射電子線の電流密度は 33 nA/cm² とした．照射時間の増加に伴い試料中の蓄積負電荷と負電位が増加している．上下電極部には正の誘導電荷が見られ，試料中に蓄積された負電荷の増加にともない増加している．試料中央付近に電位の谷があり，両電極から試料中央に向かう電界が試料中に存在する．試料内部に蓄積された負電荷はこの試料内部に形成された電界により電極の方にドリフトされる．電子線照射によるエネルギー吸収は試料上部の方が試料下部に比べて大きく，誘起導電の効果も試料上部の方が大きくなる．そのため，負電荷の電極への流入は導電率の大きい試料上部の方が顕著になる．また，試料膜厚に比べ入射電子の飛程が小さいため，下部電極付近は誘起導電の効果がほとんどなく，導電率は小さい．中央からドリフトされてきた負電荷は電子飛程付近で停滞することになり，下部電極側の

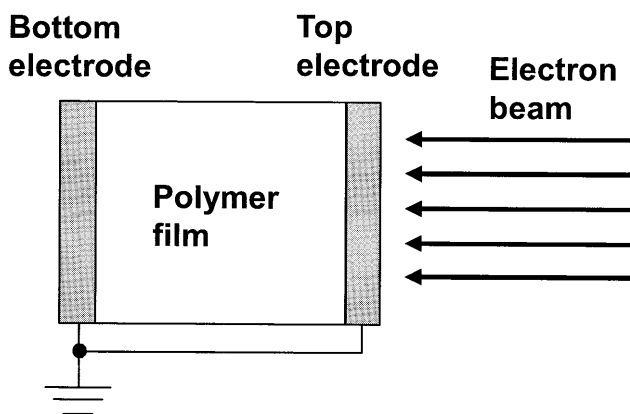


図3 解析に用いた試料構成。

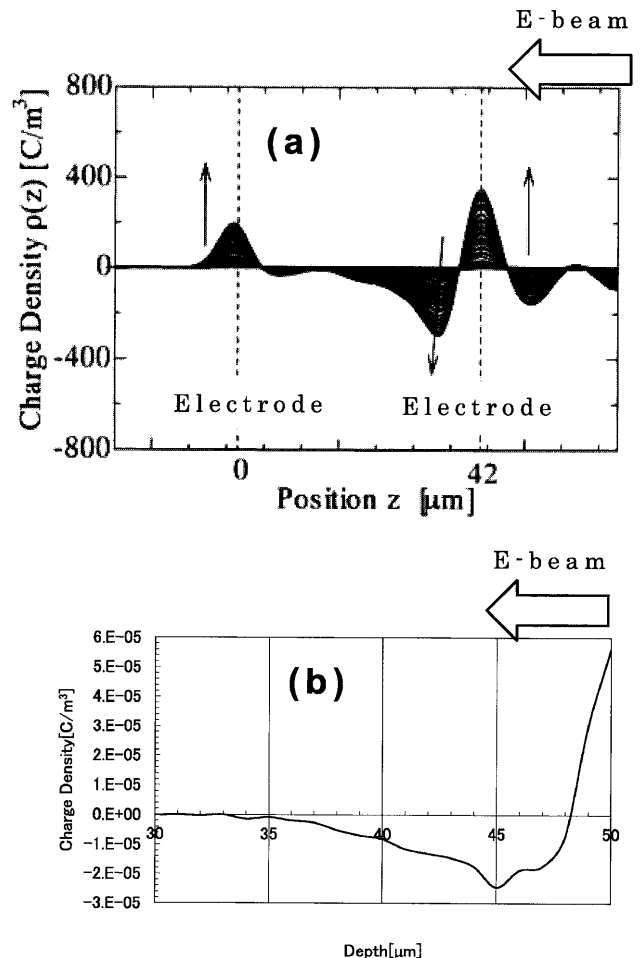


図4 PTFE薄膜中における蓄積電荷分布。(a) PIPWP法による測定結果と(b)シミュレーション解析の比較。

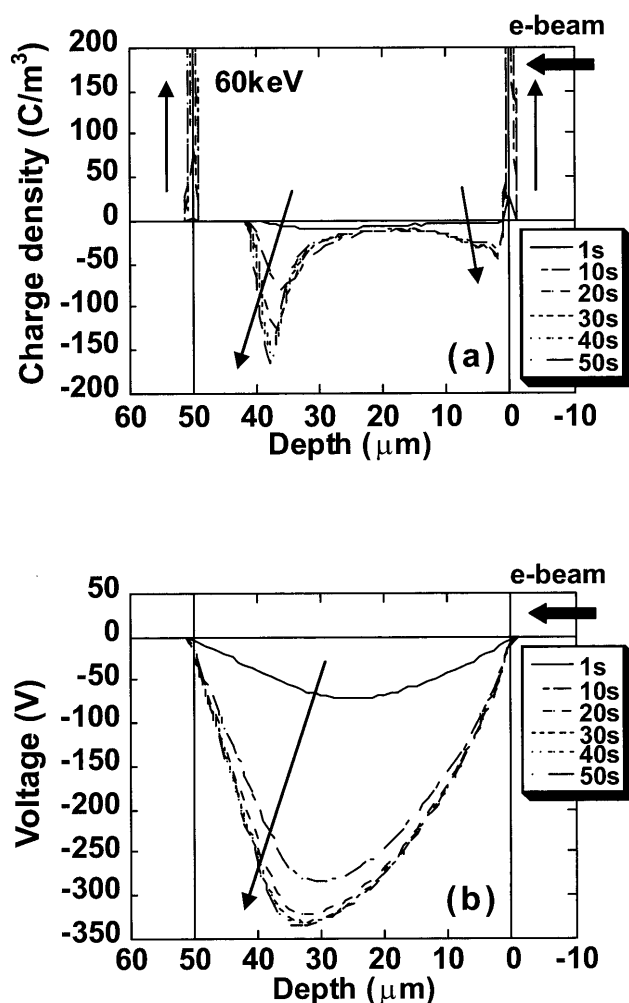


図5 60 keV 電子線照射下の Kapton[®]薄膜中における(a)蓄積電荷分布と(b)電位分布の時間変化。

蓄積電荷量は大きくなる。結果として蓄積電荷の分布は非対称な二つのピークをもつ形となる。初期分布のピークは試料表面から $28\mu\text{m}$ の位置にあるが、飽和した時点でのピーク位置は $2\mu\text{m}$ と $38\mu\text{m}$ に分裂している。電位分布のピーク位置は負電荷の移動に伴い試料深部へと向かう。飽和時のピーク位置は $33\mu\text{m}$ であり、ピーク電位は -330V である。

照射エネルギーによる蓄積電荷分布の違いを解析した結果を図6に示す。飽和時の分布を示している。図5に示した60 keVの結果に比べ、40 keVにおける負電荷蓄積は電子飛程が小さいために上部電極近傍にのみ見られる。60 keVの場合と同じく2つのピークをもつ分布形状を示しているが、蓄積位置が上部電極に近いために、上部電極付近で形成される内部電界がより強くなり、多くの蓄積負電荷が上部電極に向かってドリフトされる。60 keVに比べて電荷が流出する上部電極に近い位置にあるため、蓄積された負電荷の総量も小さくなっている。80 keVでは電子飛程がポリミド薄膜の膜厚よりも大きくなるため、蓄積電荷は上部電極だけでなく下部電極からも流出し、結果として蓄積電荷量は最も小さくなった。

シミュレーションの精度評価のために PIPWP 法により測定された分布と比較を行った。図7がその結果を示した

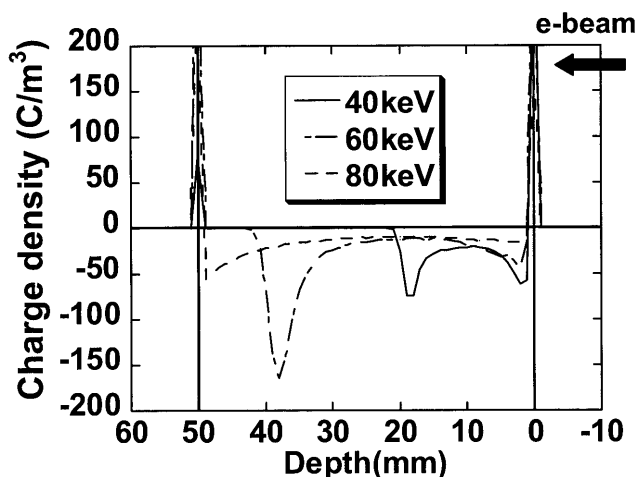


図6 Kapton[®]薄膜中における飽和蓄積電荷分布の電子照射エネルギー依存性。

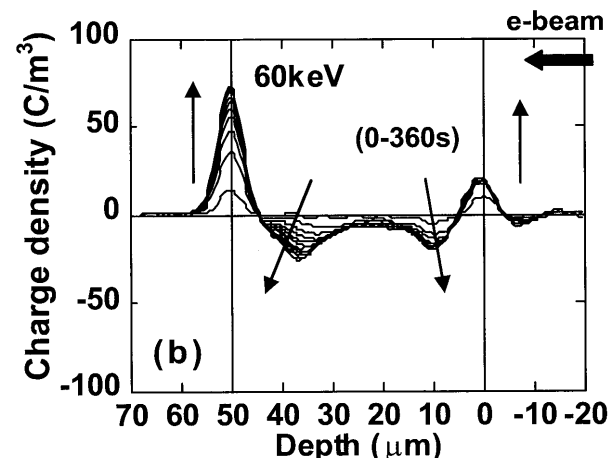
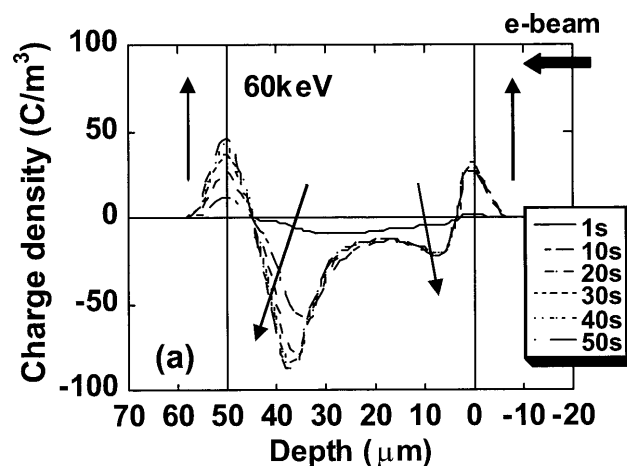


図7 60 keV 電子線照射下の Kapton[®]薄膜中における蓄積電荷分布の時間変化。(a)シミュレーション解析と(b)PIPWP法による測定結果の比較。

ものである。図7(a)は図5(a)と同じ条件で解析した結果であるが、PIPWP法で測定される分布は圧力波のパルス幅だけ広がったものとなるため、シミュレーション結果にも半値幅 $4\mu\text{m}$ のガウス分布を重畳して示している。同じ照射条件と試料構成で PIPWP 法により測定された分布が図7(b)である。定性的には両者は非常に良い一致を示しており、どちらも電荷のドリフトによって時間経過とともに

に分布が二つに分裂している。下部電極側のピーク強度に大きな違いは見られるが、両者のピーク位置はほぼ一致している。最も大きな違いは電荷が蓄積する時間であり、シミュレーションでは50秒で蓄積電荷量が飽和しているが、実験では360秒も要している。また、ここには示していないが、実験ではこの後、電子照射が継続しているにもかかわらず蓄積電荷の減少が見られており、シミュレーションではこのような現象は再現できていない。

次に誘起導電の効果を確認するため、同じ条件での解析を誘起導電の効果を入れずに行った。すなわち、(4)式で与えられる蓄積エネルギーの関数としての導電率変化を導入せず、試料の導電率を初期値のまま一定として蓄積電荷分布を求めた。結果を図8に示す。PIPWP法の結果に見られた分布の分裂は見られず、初期分布の形状を保ったまま照射時間に比例して蓄積電荷は増加して行った。電荷蓄積は飽和せず、50秒の電子照射で測定結果よりもはるかに大きな電荷蓄積量となった。また、ピーク位置は初期位置から変わらなかった。この結果よりポリマーへの電子照射では誘起導電現象が蓄積電荷分布の形成において支配的であることが示された。

紙面の都合により照射終了後の電荷減衰過程の解析については述べるができなかった。これについては参考文献[28]を参照願いたい。

4.5 まとめ

電子線照射下の誘電体内部の電荷蓄積分布については多くの理論解析が報告されてきたが、計測が難しいために実験との比較による解析精度の評価はほとんど報告されていない。本章ではPTFEとKapton®についてPIPWP法による測定結果と比較を行うことにより、モンテカルロ法に基づくシミュレーション解析の精度評価を行った。また、電子照射によるポリマーの電荷蓄積過程では誘起導電現象が蓄積電荷分布の形成において支配的であることを示した。シミュレーション解析の有効性は示せたが、誘起導電を表すモデルについてはまだまだ改善を要する状況である。多種のポリマーに対して電子照射による電気特性の変化も多様であり、これらについて高精度なモデルを構築することが今後の重要な課題である。

参考文献

- [1] D. Hastings and H. Garrett, *Spacecraft-Environment Interactions* (Cambridge University Press, 2000).
- [2] NASA-HDBK-4002A (2011).
- [3] S. Agostinelli *et al.*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., A **506**, 250 (2003).
- [4] W.R. Nelson, SLAC-265 (1985).
- [5] B.C. Franke *et al.*, SAND2004-5172 (2005).
- [6] J.F. Briesmeister, Ed., LANL report LA-1265-M (1997).
- [7] E. Daly *et al.*, INFN/AE-00/09 (2000).
- [8] B. Gross, Radiation-induced Charge Storage and Polariza-

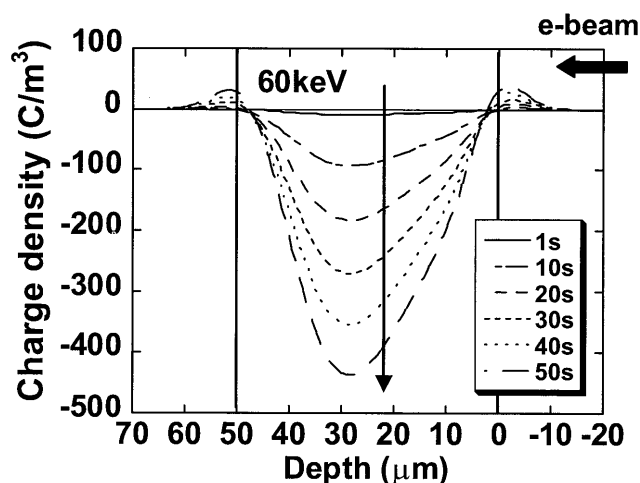


図8 60 keV 電子線照射下の Kapton® 薄膜中における蓄積電荷分布の時間変化。誘起導電の効果をなくした解析結果。

- tion Effects", in *Electrets*, G.M. Sessler(Ed.) (Springer, 1980).
- [9] K. Murata, T. Matsukawa and R. Shimizu, Jpn. J. Appl. Phys. **10**, 678 (1971).
- [10] G. Wentzel, Z. Phys. **40**, 590 (1927).
- [11] N.F. Mott, Proc. R. Soc. (London) A **124**, 425 (1929).
- [12] H.A. Bethe, Ann. Phys. **5**, 325 (1930).
- [13] H.W. Streitwolf, Ann. Phys. **3**, 183 (1959).
- [14] P.A. Wolff, Phys. Rev. **95**, 56 (1954).
- [15] M.P. Seah and W.A. Dench, Surf. Interf. Anal. **1**, 2 (1979).
- [16] M. Yasuda, T. Nobuo and H. Kawata, Jpn. J. Appl. Phys. **43**, 4004 (2004).
- [17] A. Palov, H. Fujii and S. Hiro, J. Appl. Phys. **37**, 6170 (1998).
- [18] R. Watanabe, M. Ota and Y. Tanaka, AIAA-2007-0096 (2007).
- [19] M. Yasuda, H. Kawata and K. Murata, J. Appl. Phys. **77**, 4706 (1995).
- [20] 日本表面科学会：表面分析技術選書 計算シミュレーションと分析データ解析 (丸善, 2008) 79.
- [21] 日本表面科学会：表面分析技術選書 ナノテクノロジーのための走査電子顕微鏡 (丸善, 2004) 29.
- [22] G.M. Sessler, M.T. Figueiredo and G.F.L. Ferreira, IEEE Trans. DEI-11, 192 (2004).
- [23] S. Matsuoka, H. Sunaga, R. Tanaka, M. Hagiwara and K. Araki, IEEE Trans. NS-23, 1447 (1976).
- [24] G.M. Yang and G.M. Sessler, IEEE Trans. Electr. Insul. **27**, 843 (1992).
- [25] R. Tanaka, H. Sunaga and N. Tamura, IEEE Trans. NS-26, 4670 (1979).
- [26] Y. Tanaka, F. Fukuyoshi, N. Osawa, H. Miyake, T. Takada, R. Watanabe and N. Tomita, Proc. 2004 Int. Conf. on Solid Dielectrics 940 (2004).
- [27] F. Fukuyoshi, D. Gotoh, Y. Tanaka, T. Takada, R. Watanabe, N. Tomita and R. Liu, Proc. Int. Symp. Electr. Insul. Mater. **2**, 328 (2005).
- [28] M. Yasuda, Y. Kainuma, H. Kawata, Y. Hirai, Y. Tanaka, R. Watanabe and M. Kotera, J. Appl. Phys. **104**, 124904 (2008).