新電解めっき技術による電気二重層の電位シミュレーション

Potential Simulation of Electric Double Layer by New Electroplating Technology

熊本大院先端[1]，熊本大院先導[2]　○松島　章[1]，岩津 春生[2]
FAST, Kumamoto Univ.[1], POIE, Kumamoto Univ.[2]　○Akira Matsushima[1], Haruo Iwatsu[2]
E-mail: matsua@cs.kumamoto-u.ac.jp

1. まえがき

電気めっきの過程においては，電解液中の陽イオンと陰極の電子との間に働くクーロン力の作用で電気二重層が形成され，両電荷が陰極表面で接触して還元が生じる。微細配線の形成技術を高度化するためには，還元開始直前のイオン分布を電極形状に対応させて把握することが重要となる。本研究では計算電磁気学の観点から，ポアソン・ボルツマン方程式を有限差分法により解き電位分布を求める。

2. モデリング

紙面垂直方向に一様な二次元系において，電位 V とイオン密度 ρ を含むポアソン方程式

$$\nabla^2 V(x,y) = \begin{cases} -\rho(x,y)/\varepsilon_e & (\text{電解液中}) \\ 0 & (\text{誘電体中}) \end{cases} \quad (1)$$

を解く。イオンがボルツマン分布し，電解液濃度が小さいものとすれば，デバイ・ヒュッケル近似 $\rho \approx -\kappa^2\varepsilon_e(V - V_r)$ が成り立つ [1]。ここで $1/\kappa$ は電気二重層の厚さを与えるデバイ長，V_r は正負イオンの境界における基準電位である。

領域を図 1 のように離散化し，解 $V(i\Delta w, j\Delta w)$ に対応する差分解 $\hat{V}_{i,j}$ に関する反復式 [2] $\hat{V}_{i,j} = [\hat{V}_{i+1,j} + \hat{V}_{i-1,j} + \hat{V}_{i,j+1} + \hat{V}_{i,j-1} + (\kappa\Delta w)^2\hat{V}_r] / [4 + (\kappa\Delta w)^2]$ を得る (誘電体中では $\kappa = 0$)。

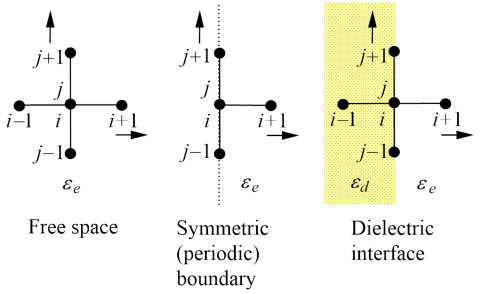

図 1: Discretization nodes in the xy plane with $x = i\Delta w$ and $y = j\Delta w$. The permittivity is ε_e (ε_d) for electrolyte (dielectric).

3. シミュレーション結果

図 2 は溝形陰極における電位とイオンの個数分布であり，イオンは壁際と底部に集中する。

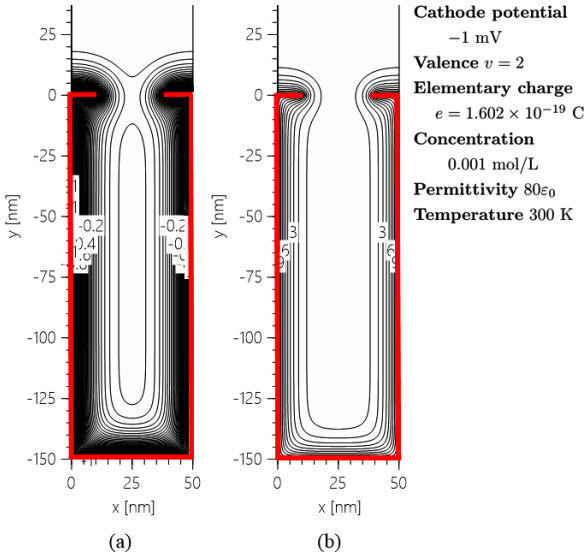

図 2: Electric potential $V(x,y)$ [mV] (a), and ion concentration $\rho(x,y)/ve$ [1/(50 nm)^3] (b), for a unit cell of periodic cathode grooves.

図 3 では誘電体を導入し，溶液内の電位変動を電極間の電位差 V_0 の 1%程度に抑制した。

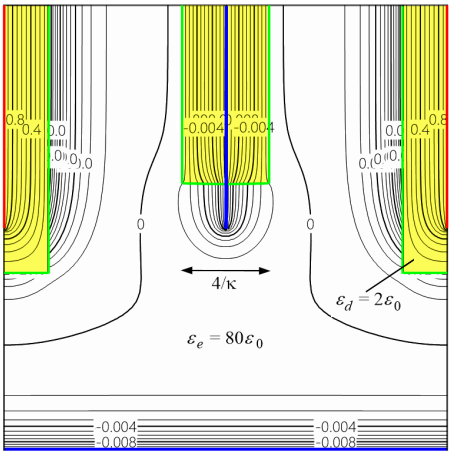

図 3: Electric potential $[V(x,y) - V_r]/V_0$. The red, blue, green lines are the anode ($V = V_0$), cathode ($V = 0$), and dielectric surface, respectively.

文献 [1] J. N. イスラエルアチヴィリ (大島訳)：「分子間力と表面力」，朝倉書店，2013 年
[2] 宅間，濱田：「数値電界計算の基礎と応用」，東京電機大学出版局，2006 年