

Lorentz-2D によるイオンソースモデリング

Dr. Ali Asi, Integrated Engineering Software

要約

Lorentz-2D は Integrated Engineering Software が開発し販売している境界要素法パッケージであり、様々な荷電粒子光学解析に使用することができる。この論文ではそのプログラムを使用して、2種類のタイプの Cs+ スパッタイオンソースの解析をしている。その結果を示して、色々な以前の実験及び数値シミュレーションと比較している。

キーワード: イオンソース、計算機コード、質量分析、荷電粒子ビーム

はじめに

Lorentz は IES 社伝統の境界要素法 (BEM) コードをベースにした、一連の荷電粒子線軌跡パッケージである。現在、Lorentz は4種類の名前で販売されている。

線軌跡パッケージ	問題のタイプ	BEM コード
Lorentz-2D	2D (2次元) 及び RS (軸対称)	Electro
Lorentz-E	3D (静電界)	Coulomb
Lorentz-M	3D (静磁界)	Amperes
Lorentz-EM	3D (静電界及び静磁界のハイブリッド)	Coulomb & Amperes

Lorentz は GUI (グラフィカルユーザーインターフェイス) を備えた MS Windows オペレーティングシステム上でサポートされ、マイクロソフト標準の表示と操作に対応している。ソフトウェアのすべての操作はダイアログボックスとメニューストラクチャで行う。これはユーザーと不便でエラーの起こるアスキーファイルでやり取りする他のパッケージとまったく異なっている。格納している形状モデラーを使用すると、複雑なモデルも時間をかけずに作成することができる。標準の形状表現のライブラリには、ライン、円弧、スプライン、平面、球などを含んでいる。また、様々なプリミティブを掃引することにより、任意の面やボリュームを作成することができる。

Cs+ スパッタイオンソース

1973年に、Middleton と Adams は新しいタイプのイオンソースを開発した。これは Cs+ イオンを固体表面にスパッタリングして負のイオンを生成することをベースにしている。このデザインタイプはエネルギー拡散が少なく保守も容易で、実用上任意の要素に高強度のイオンを生成することができるので広範囲に適用された。原理的には、正に荷電したセシウムイオンが左側の球形のイオン発生器から引き離され、構造の最右端にあるターゲットの方へ加速される。ターゲット表面で重いセシウムイオンと衝突して、負に荷電した炭素イオンがその表面からスパッタリングされる。これらのスパッタリングされたイオンは、形状の最左端にある output window の方へ加速される。

ここで、以前 Brown その他により研究された2つのデザインに集中する。最初のデザインは1989年に CAMS（加速器質量分析装置センター）により設置された General Ionex Corporation 846 Cs スパッタイオンソースへの適用である。2番目の構造は、デバイスをとおる電流を2倍にするように修正したモデルである。

オリジナルイオンソース

オリジナルは、その Ionex 846 Cs スパッタソースは $600 \times 300 = 180,000$ の格子点を持つ有限差分 (FD) メッシュを使ってモデル化された。FD は各座標方向に打ち切りのテーラー展開の利用をベースにしている。この展開式を用いて微分演算子を直交格子の各点で離散化し、関心のある全領域をカバーする。このモデルの最大の利点は具現化の容易さであり、微分演算子は多くの前処理をかけずに容易にモデル化される。もちろん、トレードオフにより精度とスピードは悪くなるし、もっとソフィスティケートされた方法に比べると境界のモデリングが貧弱である。一方 BEM をベースにした Lorentz はストラクチャの境界での電荷分布について解く。これらの電荷が既知になれば、ポテンシャルと場は空間のどこでもダイレクトに計算することができる。ストラクチャに空間電荷がなければ、Lorentz は自動的に境界要素 (図 1 の赤い点) を、境界条件を適用するセグメント上に配置するだけである。

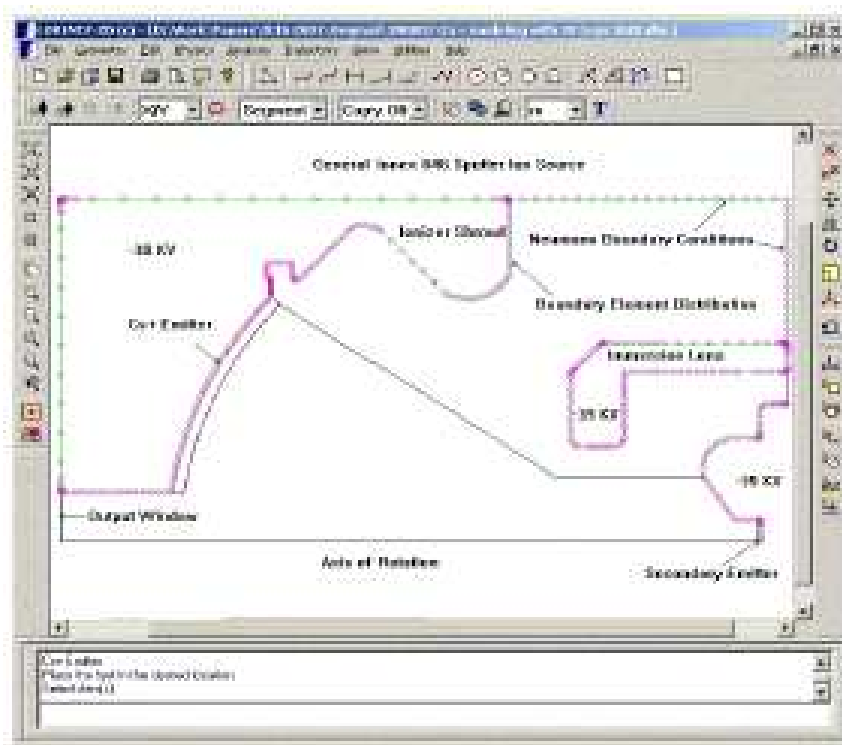


図 1 オリジナルイオンソースでの BEM 境界要素分布

一方、空間電荷解析に主な関心がある状況のときは、図 2 に示すように空間に 2 次元メッシュが空間電荷を置いて貯蔵するために必要になる。

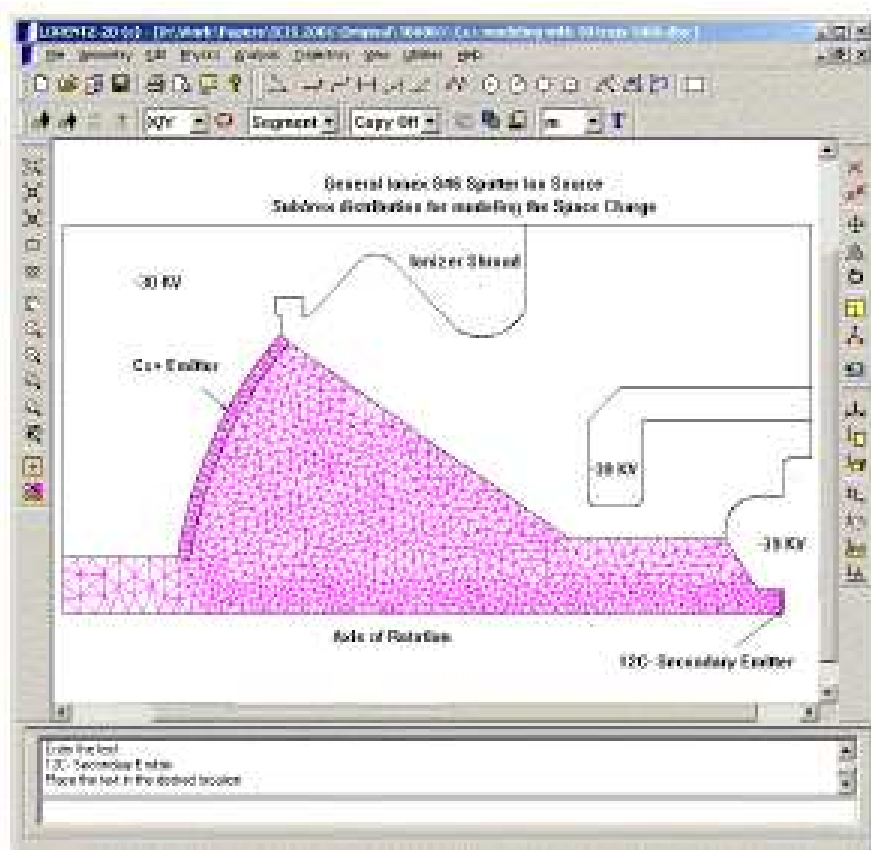


図 2 オリジナルイオンソースのサブエリア分布（空間電荷計算に必要）

各三角形のサブエリアは 3 つのガウス点を含む。粒子軌道がサブエリアを通るときこれらのガウス点に、通過する軌道に関してガウス点の相対的な位置にもとづく適切な量の電荷を置くことになる。

理想的な平面ダイオードの場合、空間電荷分布はエミッタ表面に近づくとき次の方程式に従って無限大に近づく。

$$\rho(z) = \frac{-4\epsilon_0 V_0}{9d^{4/3}} \left(\frac{1}{z^{2/3}} \right) \quad , \quad \text{ここで } z \text{ はエミッタ表面までの法線方向距離} \quad (1)$$

もちろん、これは Child 則を適用するば自然に得られる結果である。エミッタ表面で電荷の法線方向成分を零にする強い逆フィールドを生成するため、定義により空間電荷分布を必要とする。

この不連続性は、取り扱われず残されていれば、数値解析の課題となる問題である。

Lorentzはこの不連続性を空間を(a)近傍、(b)エミッタ表面から遠方という2つの領域に分けて取り扱う。図3と図4に表示しているように、すべてのエミッタの近くに平行なセグメントを置く。この人工的なセグメントを影のエミッタと呼ぶ。その役割はモデル化領域を2つの部分に分割する。このような分割はサブエリアに空間電荷を割り当てるために必要になる。

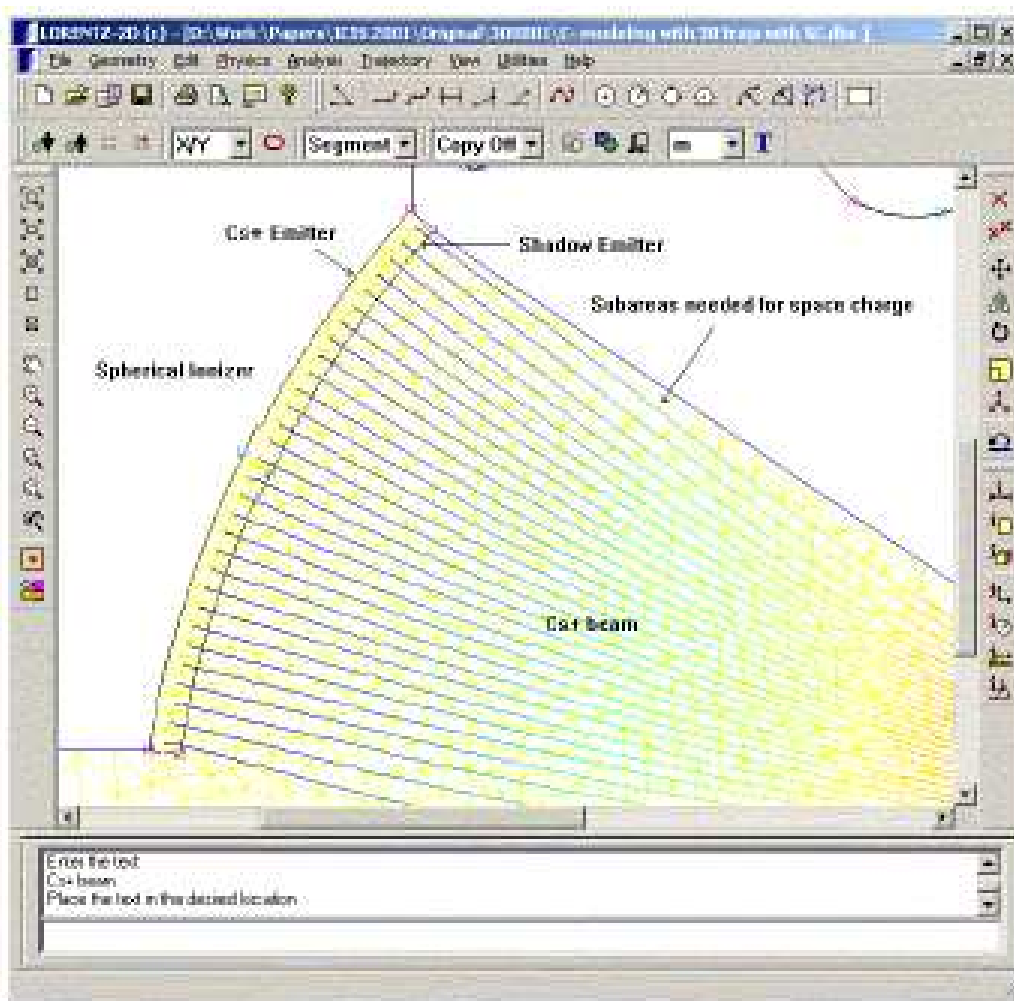


図3 Cs+ 球形イオン発生器の拡大図

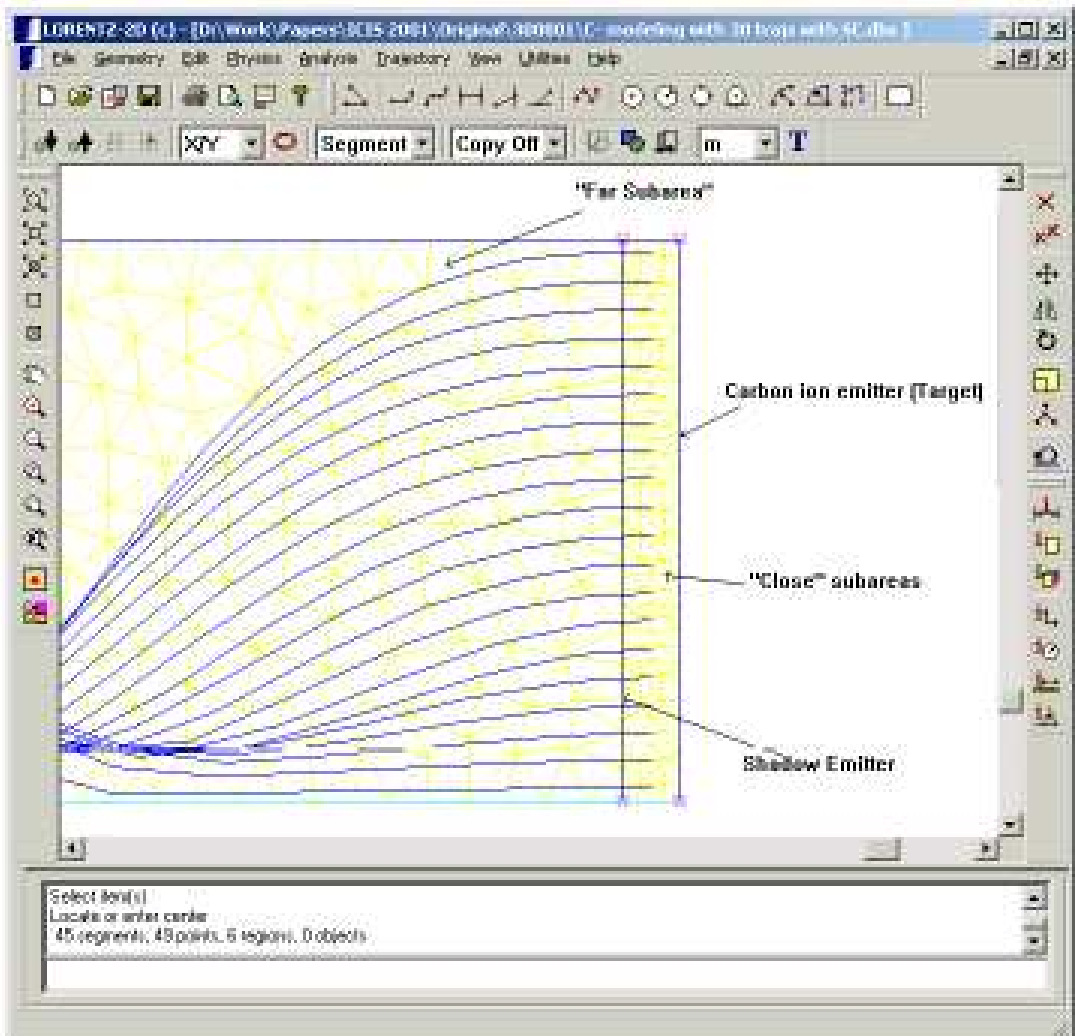


図4 Cイオンのターゲット面の拡大図

Child 則を手計算すると、このデバイスから予想される電流量についていくつかの考えを与える。厳密に言えば Child 則は、平面エミッタで側面にノイマン境界条件を持つときのみ適用できることを強調しておく。それで問題にこの公式を使用することは、厳密な解析解ではなく、参考値としてみるべきである。

$$J = \frac{4\epsilon_0 \sqrt{2\eta} V_0^{3/2}}{9 d^2}, \quad \eta = \frac{q}{m} \quad (2)$$

表 1 Cs+ 飽和電流

イオン	q	m	V_0	d	\tilde{r}	$I_{\text{flat-diode}}$	$I_{\text{Lorentz-2D}}$
Cesium	+e	133	9 KV	26 mm	7.2 mm	+0.96 mA	+1.08 mA

図 5 は飽和した後の正のセシウムイオンの軌道を示している。球形のイオン発生器は空間に 1.08 mA の正電流を供給していることになる。また軌道は対応する粒子のローカル速度に基づいてカラーで塗つぶしている。

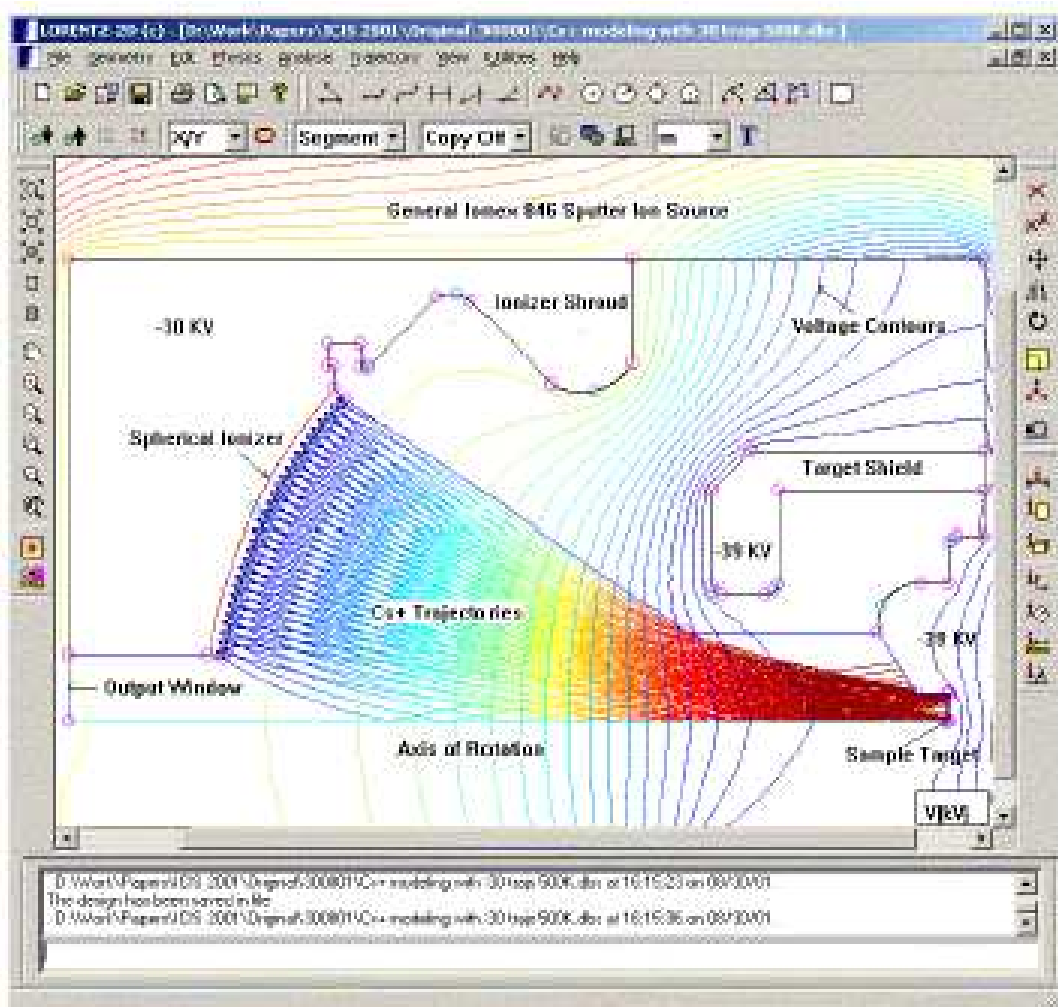


図 5 飽和領域の正のセシウムイオンの軌道

実用上、炭素イオンにより発生する電流は、セシウムイオンによる電流よりも 1 オーダー小さい。そのため球形イオン発生器の飽和電流は、炭素イオンによる空間電荷を考慮せず

に計算できると仮定しても十分である。言うまでもなく、同じ仮定は炭素イオンについては適用できない。言い換えると、ターゲット表面から出る飽和電流の計算は、セシウムイオンによる空間電荷があるとして行うべきである。負の炭素イオンにより生成される電流量は、図6のLorentzは $-135 \mu\text{A}$ と計算する。

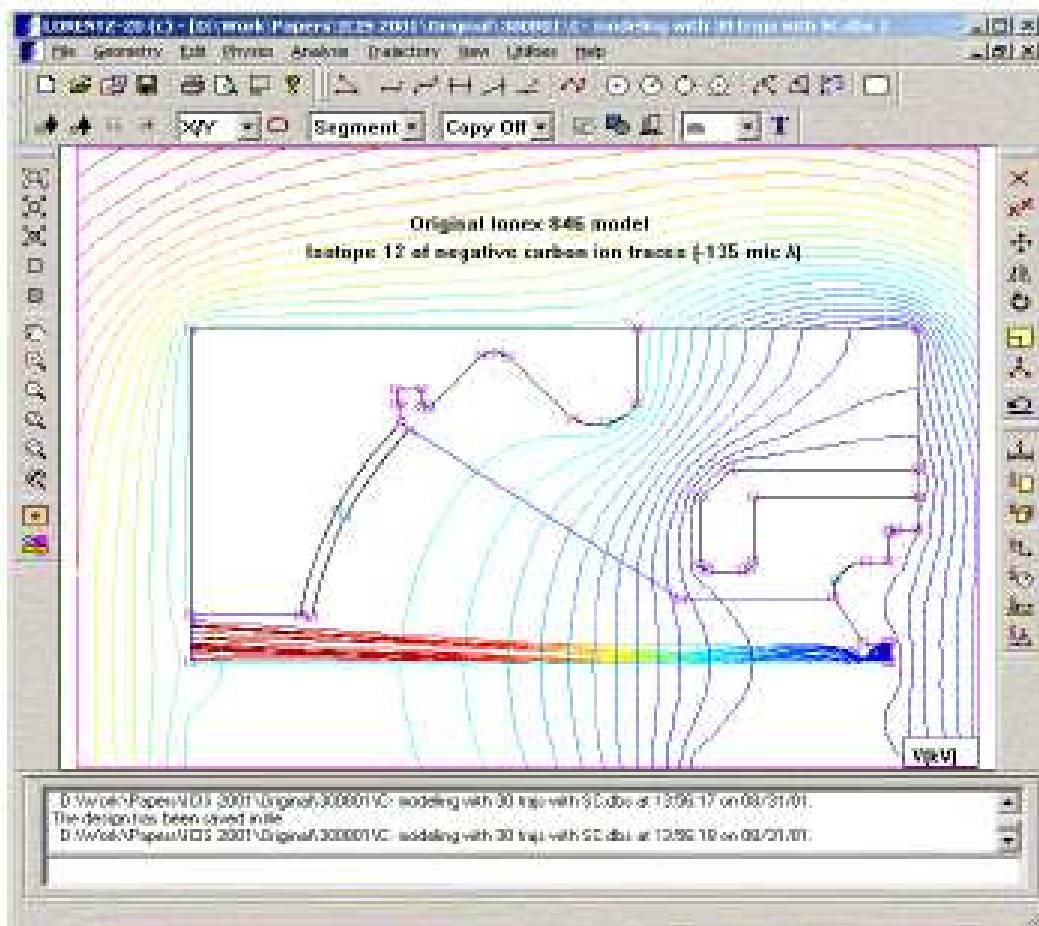


図6 ターゲットからスパッタされる負の炭素イオンの軌道

修正したイオンソース

加速器質量分析装置センターでの General Ionex 846 モデルの解析により、これらのデバイスのパフォーマンスを改善する方法を見出した。これはターゲットシールドの形状変更及びそれを電位 -38.25 kV の外部パワー装置とつなぐことにより達成された。Lorentz-2Dを使用したシミュレーション結果を図7に示している。取り出されたトータル電流量は 2.06 mA となり、これはオリジナル 846 モデルのほぼ2倍になる。ビーム形状もまた良くなったように見える。

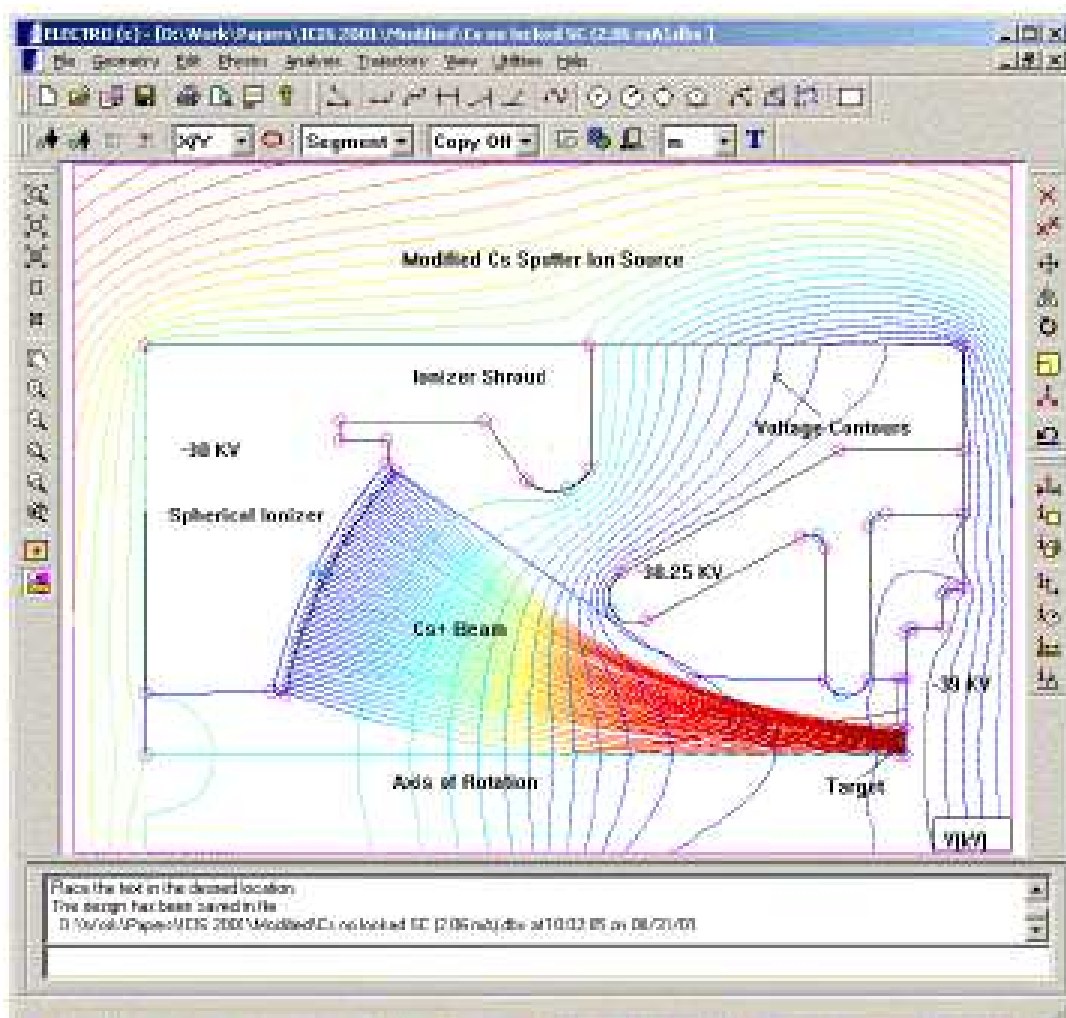


図7 修正した球状イオンソースからのエミッタ Cs+ 軌道

Brown のチームがシミュレーションで報告した困難のひとつは、炭素イオンエミッタ（ターゲット）に Child 則を適用しようとしたときに観測された有限差分の不安定さである。Lorentz-2D を使用すると、図 8 に示すようにいくつかの異なるモードでシミュレーションを実行することができる。



図 8 Lorentz のエミッション様式ダイアログ

実際に異なる設定の効果を示すために、様々なシミュレーション結果をここに示している。

図 9 は炭素イオンについて、それ自身の空間電荷が存在するときに発射された軌道を示している。Cs⁺ イオンによる空間電荷はないとしている。飽和電流の値は $-298 \mu A$ となる。直感的に正の Cs⁺ イオン電荷を考慮すれば、ターゲットから取り出される負の電流量は増加すると思われるし、実際そのようになる。次にターゲットから取り出される電流に及ぼす正の Cs⁺ イオン電荷の効果を検討する。Brown のチームは $400 \mu A$ 位の負電流を報告しているので、負の電流量がこの値になるようにする。図 10 にこのようなシミュレーション結果を示している。見てわかるように、負の炭素イオンは output window 内によく閉じ込められている。また、正イオンの存在が負の空間電荷の反撥効果を打ち消すのに役立つように思える。図 10 のビームがより小さい電流を運んでいる図 9 よりも、もっと小さくまとまっている理由と思われる。最後に、図 11 は Cs⁺ 及び C⁻ が存在する同じシミュレーション結果を示しているが、今回はトータル電流を限定することはしていない。この計算で、デバイスは Child 則で許容される最大電流により飽和される。今回、オリジナルの 846 モデルの 6 倍以上の $-841 \mu A$ の飽和電流が得られた。これはかなりの改善に思えるが、デバイスにこのような大きな負電流が取り出せる要因のひとつは、スパッタリングのプロセスにあることを心に止めておくべきである。それでも、トータル負電流の正確な形に構わなければ、新しいデザインはオリジナルよりも強い負イオンを発生させることができると結論できる。

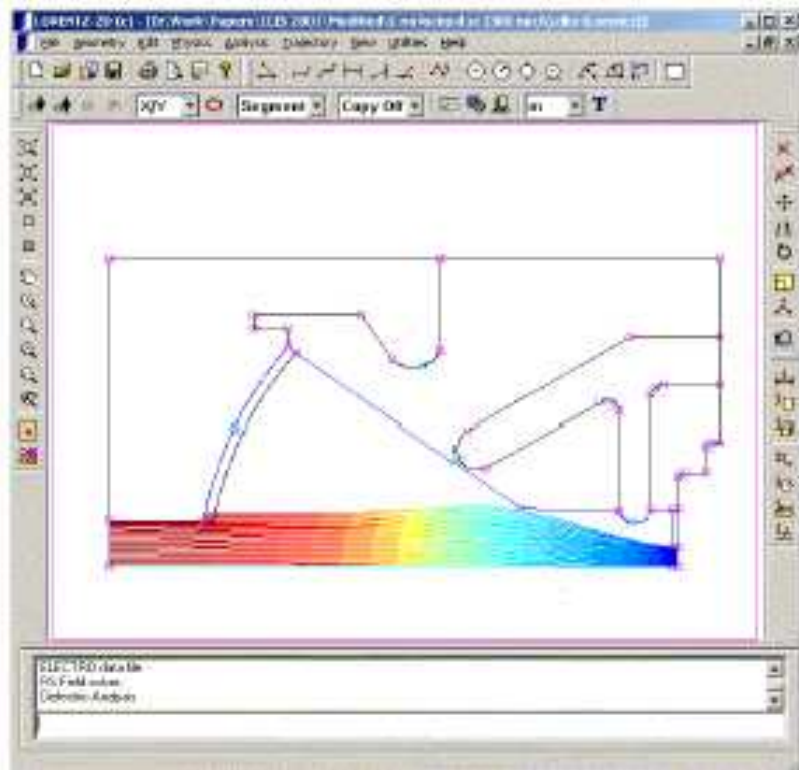


図9 C⁻ 空間電荷のみ (Cs⁺ 電荷なし) 存在するときの炭素イオンの軌道
トータル負電流はChild則で $-298 \mu A$ に制限される。

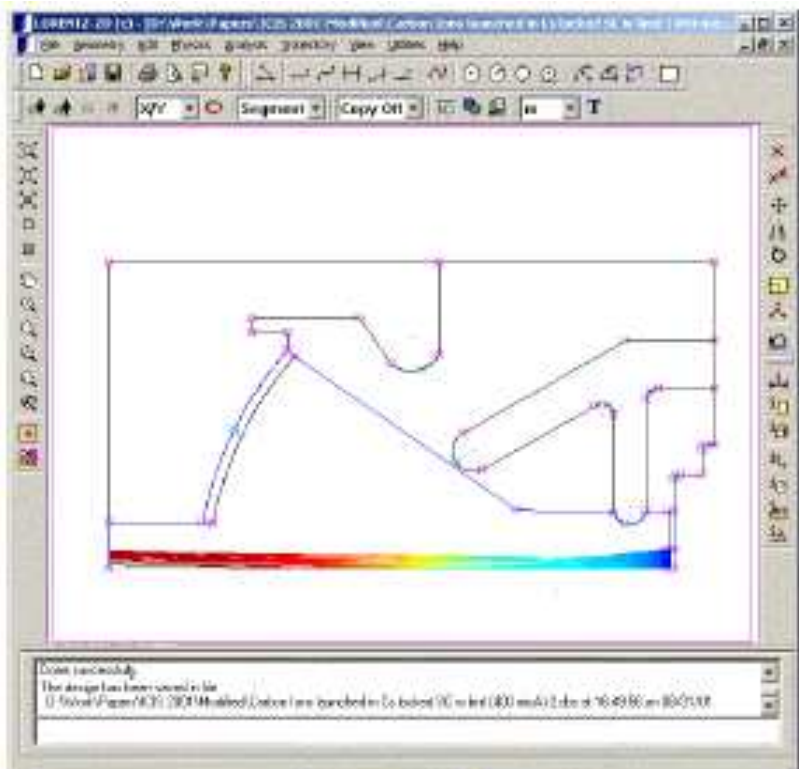


図10 Cs⁺ 及びC⁻ 空間電荷が存在するところの炭素イオンの軌道
トータル負電流は $-400 \mu A$ に制限される。

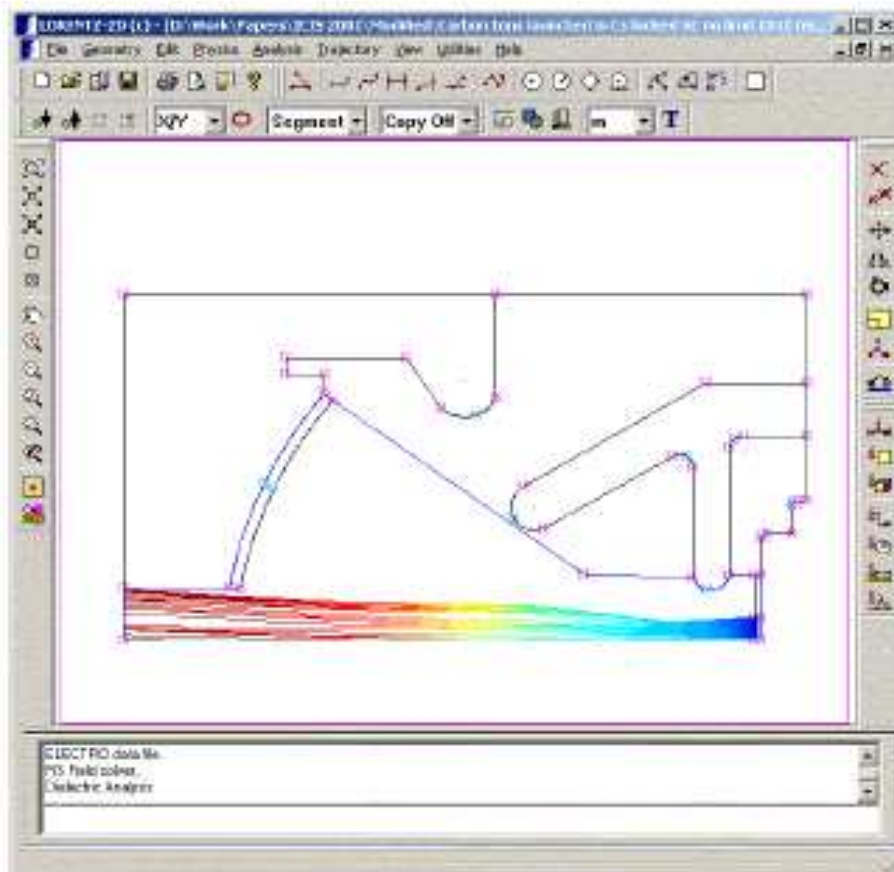


図 11 Cs⁺ 及び C⁻ 空間電荷が存在するところの炭素イオンの軌道
トータル負電流は Child 則で $-841 \mu A$ に制限される。

謝辞

私は Enginia Research Inc. の仲間による助力や貢献に非常に感謝している。彼等の助けがなければ、この仕事は不可能であった。特に D. Craigen にはオリジナル形状を Lorentz に作ることで感謝している。加速器質量分析装置センターの T. Brown 及び Recherches Subatomiques 研究所の F. Oaawald にも、貴重な入力と提案に感謝している。

参考文献

1. A. Asi, "Boundary Element Method (BEM) for Charged Particle Optics, "Proceeding of 46th SPIE Annual Meeting, San Diego, California, 2001.
2. Y. B. Yildir, K. M. Prasad, D. Zheng, "Computer Aided Design in Electromagnetic Systems: Boundary Element Method and Application", Control and Dynamics Systems, vol.59, pp.167-223, 1993
3. TA Brown, ML Roberts and JR southon (2000) Ion source modeling and improved performance of the CAMS high-intensity Cs-sputter ion source, Nucl. Instr. Meth. B172, 338
4. A. Septier, Focusing of Charged Particles, Vol. II, pp.29-35, Academic Press, Inc., 1967.