

荷電粒子光学における境界要素法 (BEM)

Ali Asi, Integrated Engineering Software

要約

境界要素法を荷電粒子の光線軌道の計算に使用する。ここに示した結果は、Integrated Engineering Software 社の商用パッケージ Lorentz をベースにしている。最初いくつかの数値解法について簡単に説明し、つぎに理論値が既知の例を説明する。すべての場合について、理論値と計算値は良く一致している。いくつかの例題は空間電荷に関係している。Child と Langmuir-Blodgett 則をこれらの結果を評価するために使用した。また、不連続なフィールドの近くから粒子を発射する例題 743 Test を載せて、デバイス内で極端なサイズ比 ($>10^6$) を取り扱うときの BEM 解法のパワーを示している。

キーワード : Lorentz、電子銃、イオンビーム、荷電粒子光学、線軌道、Child、Pierce、Langmuir-Blodgett

数値解法

商用パッケージのほとんどは、次の 3 つの数値解法のひとつをベースにしている。

1. **FDM** (有限差分法)
2. **FEM** (有限要素法)
3. **BEM** (境界要素法)

FDM は各座標系方向でテイラー級数展開を打ち切ったものの使用を基礎にしている。この展開式を使って、微分演算子は関心のある全領域をカバーする矩形の格子の各点で離散化される。この方法の最大の利点は、微分演算子がメッシュ生成なしに簡単にモデル化できるという具現化の容易さである。もちろん、打ち切りは精度と計算速度の代価を支払うし、他の 2 つの方法に比べて境界のモデル化が貧弱である。

FEM は変分原理の定式化を用いて、要素という指定された形状をもつサブエリアで、全領域を重なりや切れめなく覆う。最小にする変分量は領域のトータル静電界又は静磁界エネルギーである。要素形状と未知数は節点値を係数とする多項式で表される。これらの近似式をエネルギー関数を最小にする作用方程式に適用して節点での解を求める。この方法は FDM より優れていると考えられるが、いくつかの欠点もある。

- FEM は電界及び磁界ポテンシャルを解いている。直射光線軌跡では電場及び磁場の値を知ることが必要になるので、これらの値を FEM の解に数値的な微分演算をして取り出す必要がある。数値的な微分演算は数値、打ち切り及び丸め誤差に非常に敏感である。
- 要素数に制限があるため、シミュレーション空間はどこかで打ち切る必要がある。これに関して多くの方法が提案されているが、FEM には開領域問題はいつも問題になる。
- 最小と最大の大きさに数オーダー ($\sim 10^6$) の違いのある問題では、例えば Fowler-Nordheim field emission 銃、FEM 要素は極めて小さい要素から始めて、次第に大きくなるようにしなければならない。この結果、未知数は増大する。

一方 BEM は構造の境界における電荷分布について解く。これらの電荷が既知になると、ポテンシャルと場は空間のどこでも直接計算できる。次がこの方法のハイライトである。

- ・積分形の定式化をしている。これは数値的に微分演算を離散化するよりも好ましい方法である。
- ・要素は構造の境界上に置かれる。これで FDM や FEM に比べて問題の次元をひとつ下げることになる。また問題のモデル化を容易にし、取り扱い易くする。その代わりに、BEM で作成されるマトリックスは小さいが密になり、他の 2 つの方法は大きくて疎になる。
- ・開領域問題について BEM はもともと容易であり、要素は物理的な境界にのみ設定する。
- ・構造の最小と最大部分に比が極端な問題でも、BEM は選択される方法である。通常このような問題では、最小部分 (field emission 銃のチップ) のセグメントは電氣的に構造の他の部分と孤立している。そのためチップの要素分布は他の要素分布と無関係に細かくすることができる。
- ・最後に、空間のどこでも場やポテンシャルを境界上の電荷分布から計算されるので、この方法を粒子光線軌跡に用いると極めて精確な解が得られる。

境界要素法

ラプラス方程式から出発する。

$$\nabla^2 \Phi = 0 \quad (1)$$

2次元の場合、次のようなグリーン関数が導入できる。

$$\nabla^2 G = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2)$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{2\pi} \ln |\vec{r} - \vec{r}'| \quad (3)$$

考慮する 3 種類の境界条件

$$\text{ディレクレ} \quad \Phi(\vec{r}) = \int_{\partial B} G(\vec{r}, \vec{r}') \sigma(\vec{r}') dr' \quad (4)$$

$$\text{ノイマン} \quad \Phi'(\vec{r}) = \int_{\partial B} G'(\vec{r}, \vec{r}') \sigma(\vec{r}') dr' + \frac{\sigma(\vec{r})}{2} \quad (5)$$

$$\text{インターフェイス} \quad (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int G'(\vec{r}, \vec{r}') \sigma(\vec{r}') dr' + (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \frac{\sigma(\vec{r})}{2} = 0 \quad (6)$$

境界条件がわかっていると、3種類の境界条件を満足する σ 分布を計算することになる。一般にポテンシャル Φ は電荷密度分布 σ に積分演算子 L を関係づけることができる。

$$L\sigma = \Phi \quad (7)$$

この演算子方程式をガラーキン法で解くことができる。

軌道計算例（空間電荷なし）

743 Test

743 Test は粒子軌道及び場の計算において（図1）、LORENTZ の強力さと精度を説明する最もふさわしいテストのひとつである。他の有限要素法のパッケージはこのテストがうまくいくかどうかは非常に疑問である。テストは同一平面上にある、数値が同じで符号が逆のポテンシャルを持つ2つの半無限板で始める。反発する電子が、ひとつの板（左側）の結合点（ギャップ零）から1単位の距離からリリースされて、もうひとつの板（右側）の743の距離のところに着地する。



図1 (a) 743 Test のレイアウト、(b) 境界要素分布

この場合、極座標系のラプラス方程式を解くことによりポテンシャルの解析解を容易に求めることができる。

$$\Phi = \frac{2V}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{x}{y} \right) = V \left(1 - \frac{2\theta}{\pi} \right) \quad (8)$$

ここで、 $0 \leq \theta = \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) \leq \pi$ 及び $V=1$ 。これから、電場は $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$ を用いて求めることができ、結果として運動方程式を数值的に解くことができる。これにより、粒子の衝突点が右側の板の743であることが示される。数値シミュレーション及びまた実用上、異なるポテンシャルを持つ2つのセグメントを接触させることはできない。そこで、シミュレーションでは2つのセグメントを 2×10^{-6} だけ離している。このシミュレーション結果を図2と表1に示している。

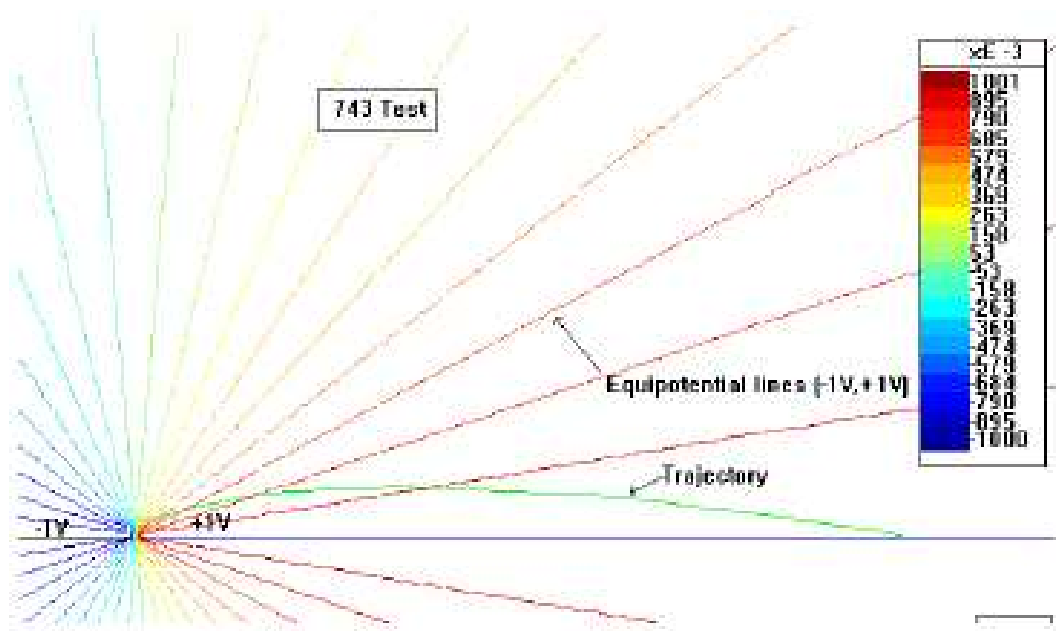


図2 等ポテンシャル線と電子軌跡を表示した 743 Test シミュレーション結果

	着地 X 座標	誤差
Lorentz-2D	741	0.27 %
半解析解	743	

表1 743 Test シミュレーション結果

古典力学 対 相対論 の軌道

ここでは正の原子核まわりの電子軌道のいくつかの例を示している。ガウスの法則を用いると、電荷密度 ρ_L の無限円筒の電場は次のようになる。

$$E_r = \frac{\rho_L}{2\pi\epsilon_0 r} \quad (9)$$

円軌道に対して、次の関係式が成立しなければならない。

$$eE_r = \frac{mv^2}{r} = \frac{2E_e}{r} \quad (10)$$

ここで、 E_r と E_e はそれぞれ原子核と電子のエネルギーから得られる半径方向の電場である。(9)式の E_r を(10)式に代入して、 $\rho_L=1$ と仮定すると次のようになる。

$$E_r = \frac{\rho_L}{4\pi\epsilon_0} e = 9 \times 10^9 e [\text{Joules}] = 9 [\text{GeV}] \quad (11)$$

示したように、表面電荷 1 [C/m] のまわりの円軌道に必要な発射エネルギーは 9 [GeV] であり、それは軌道 (図 3: (a) の円形のカラー軌道) の半径には無関係である。この例ではニュートンの古典力学を用いた 9 GeV のエネルギーを持つ電子の発射を教育目的で供している。通常は、このエネルギーレベルでは Lorentz-2D のアルゴリズムスイッチを“アインシュタイン”モード (デフォルト) にセットしなければならない。これをして、同じ 9 GeV のエネルギーを持つ電子を発射する。驚きはないが、この 2 番目の粒子は同じ円軌道をたどらない (図 3: (a) の動きのある円軌道)。この理由は、前の解析は粒子の質量が不変のパラメータであるとする古典力学をベースにしていたからである。円軌道にもどすためには、解析に相対論的な効果を入れなければならない。相対論的速度での円軌道について、

$$eE = \frac{\gamma m_0 v^2}{r} ; \frac{e\rho_L}{2\pi\epsilon_0 r} = \frac{\gamma m_0 v^2}{r} \quad (12)$$

ここで、 $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ であり、それで $v = \beta c$ 。

$$\frac{e\rho_L}{2\pi\epsilon_0} = \frac{m_0 \beta^2 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (13)$$

$$\frac{e\rho_L}{2\pi m_0 \epsilon_0 c^2} = \frac{e\rho_L \mu_0}{2\pi m_0} = \frac{\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2}} ; 0 \leq \beta < 1 \quad (14)$$

粒子が $\rho_L=1$ のとき、この最後の式を満足することは容易に示すことができる。 β は 1 より大きくなならない。そうでないと速度は光速より大きくなり、不可能だからである。さて電子が光速の 90% の速度で動くときの円軌道を求めよう。最後の式より ρ_L について解く。

$$\rho_L = 52.82768829 \frac{\mu c}{m} \quad (15)$$

円軌道に少し厚み (図 3(b)) がある理由は表示技術であり、結果の精度の問題ではない。

Lorentz-2D はその ODE ソルバーの結果を一連の計算点として引き渡す。空間上の連続運動を視覚的な表現を与えるために、これらの個々の点を直線で結合する。それゆえ、各ラインセグメントの端部の点のみが、百万分の 1 すなわち 0.0001%の精度を持つ実際の計算点を表している。

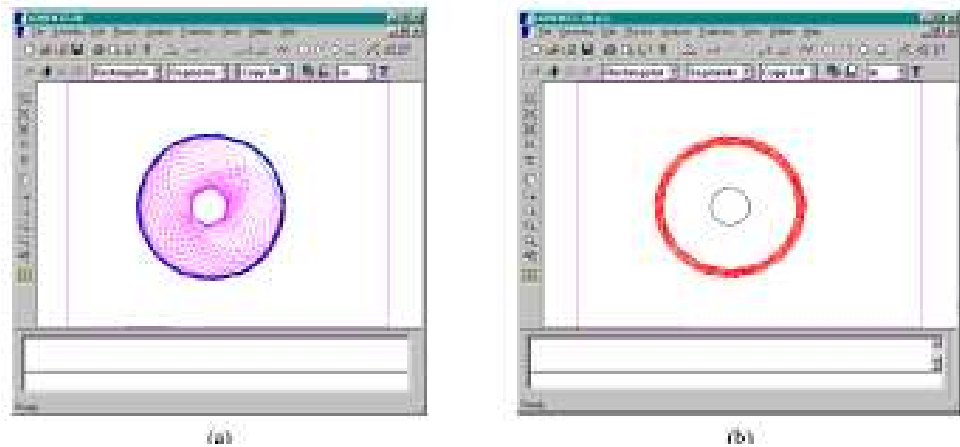


図 3: (a) 古典力学を使用した 1 C/m 原子核まわりの 9 GeV を持つ電子の円軌道、及び同じ粒子を相対論的力学を用いて解析した動く円軌道。(b) 原子核の電荷を $52.82768829 \mu \text{ C/m}$ に減らして求めた同じ粒子の円軌道

Runge-Kutta 及び Bulirsch-Stoer 法を用いた円錐断面軌道

ここではいくつかの円錐断面の軌道を示している。Lorentz-2D にある 2 つの異なるアダプティブ ODE ソルバーを使用した (図 4a 及び b)。これらの例では、原子核として $0.01 \mu \text{ C/m}$ の電荷を設定した。異なる円錐断面を得るために、 8.987713 eV の一定のエネルギーを持つ電子を原子核から異なる距離で発射した。原子核は座標 $(0, 0)$ に置かれ、 $(0, 5)$ 、 $(0, 9)$ 、 $(0, 10)$ からそれぞれ円形、楕円形及び放物形断面 (図 4c) を動くように発射する。いずれのケースも誤差は 10^{-5} または 0.001% より小さくなった。

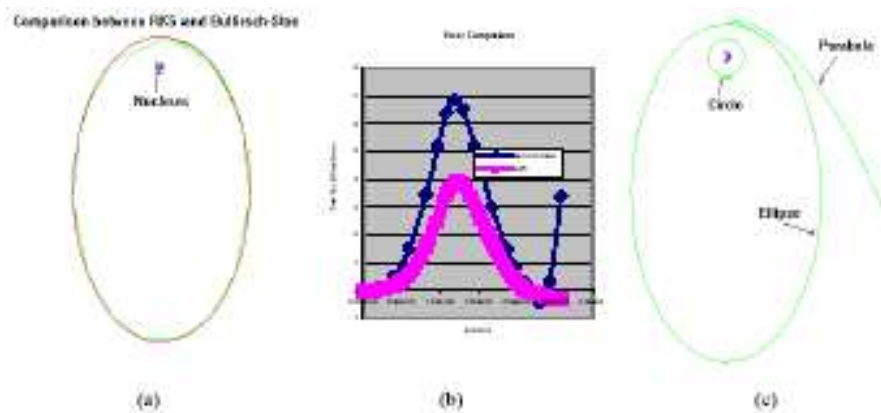


図 4: (a) 同じ粒子を RK5 (実線) 及び Broken Bulirsch-Stoer 法 (破線) で解析したときの比較、(b) RK5 対 BS の誤差 (百万当たり)、(c) 円錐断面

Child 則

飽和様式の 1 次元電子流を、1911 年に始めて解析したのは Child であった。彼は基本的なポアソン方程式の解を求めた。

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (16)$$

境界条件に関して： $z=0$ で $V=0$ 、 $z=d$ で $V=V_0$ 、及び $z=0$ で $dV/dz=0$ 。z 方向の 1 次元流では、ポアソン方程式は次のようになる。

$$\frac{d^2 V}{dz^2} = \frac{J}{\epsilon_0 (2\eta V)^{1/2}} \quad ; \quad \eta = \frac{e}{m} \quad (17)$$

ここで、

$$\frac{dV}{dx} = \frac{dV}{dy} = 0 \quad (18)$$

がどこでも成立すると仮定する。これらの条件の下で、Child は次のようなポアソン方程式の解を見つけた。

$$V = Az^{4/3} \quad \text{ここで、} \quad A = \left[\frac{9J}{4\epsilon_0 (2\eta)^{1/2}} \right] \quad (19)$$

さて簡単な 1 次元モデルをセットアップして、Lorentz-2D の結果が Child 則と一致しているかどうかを調べよう。数学的に 1 次元モデルは、距離 d だけ離れた 2 つの無限平板、それぞれ電位 0 と V_0 に設定されたものと等価である。しかし数値計算では、無限平板をモデル化できない。その代わりに、この平行平板の円筒形にカットした図 5(a) でモデル化し、まわりの壁をノイマン境界条件 $dV/dn = 0$ とセットする。Lorentz-2D においては、これを図 5(b) で説明しているように矩形を定義することで達成し、回転軸を $x=0$ にする。

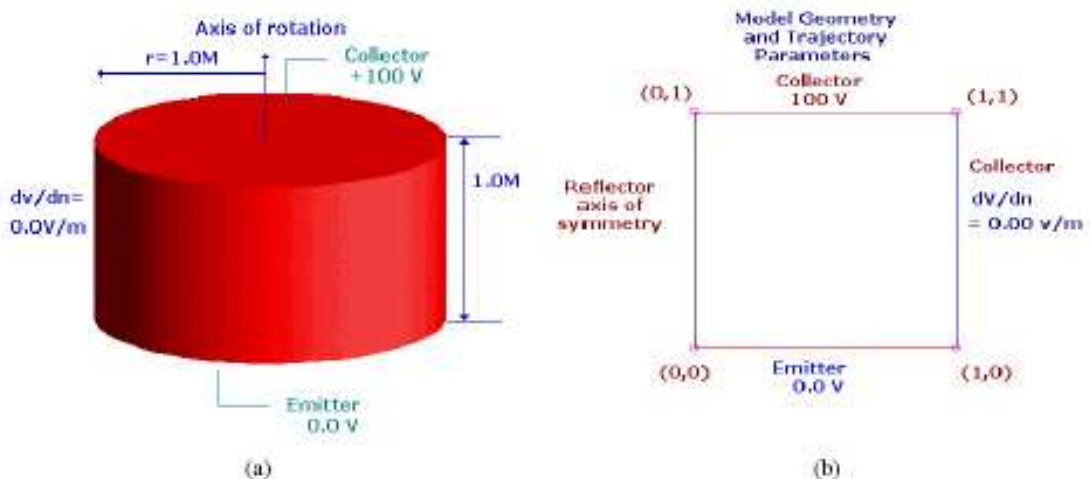


図 5: (a) 1 次元平面ダイオードのソリッド、(b) Lorentz-2D で具体化した形状

図 6(a) はこの問題を精確にモデル化するために必要な境界要素分布を示している。空間電

荷の効果をモデル化するために、図 6(b)に示す三角形のサブエリアのメッシュを、粒子が通過する領域全体に置く必要がある。別の人工的なセグメントである影のエミッタも設定する。このセグメントは領域を2つの分割する。小さな領域はエミッタに近接して設置して、他の領域とは異なる取り扱いをする。これは Child 則が満足される時、すなわちデバイスが飽和し、エミッタ表面近傍の空間電荷密度が無限大になることのためである。数値的に、その領域に特異関数をモデル化することで達成できる。影のエミッタをつけることで、ソフトウェアがこの現象を解くことができる。

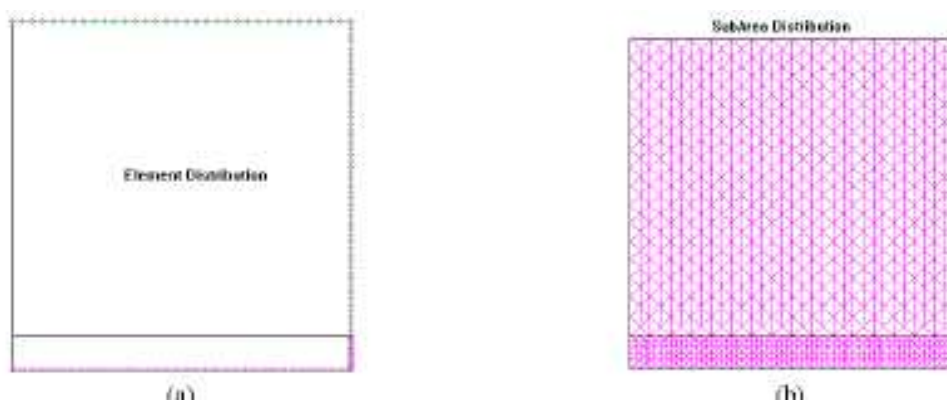


図 6: (a) 境界要素分布。(b) 空間電荷をモデル化するためのサブエリア分布
解析結果を図 7 と表 2 に示すが、計算結果と Child 則の予測値は良く一致している。

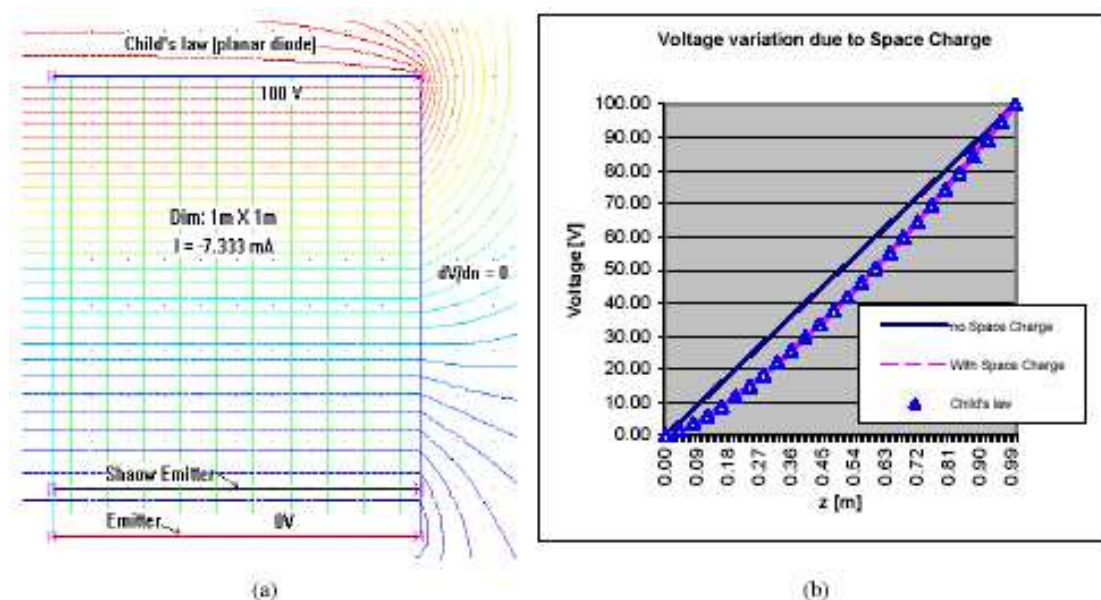


図 7: (a) 電位のコンター図と軌道 (b) ライン[(0.5, 0) - (0.5, 1)]に沿う電位降下

表 2 平面ダイオード電流と電流密度結果

	J [mA/m^2]	I [mA]	Error
Lorentz (RS)	-2.33	-7.333	0.14 %
Theory (RS)	-2.33	-7.322	

LANGMUIR-BLODGETT (ラングミュア-プロジェクト)

Child 則は電子銃デザインにおける多くの開発の基礎になっているが、それは1次元平面ダイオードの場合や、そのように近似できる限られた問題にのみ適用できる。文献で特別な取り扱いを受けているが、それ以外の場合は球形ダイオード構造であり、LANGMUIR-BLODGETT 方程式で定式化される。再び Lorentz-2D を使って球形ダイオード構造を解析し、結果を理論値と比較する。

$$\frac{I}{V^{3/2}} = \frac{16\pi\epsilon_0\sqrt{2\eta}}{9\alpha^2}; \alpha = \gamma - 0.3\gamma^2 + 0.075\gamma^3 - 0.001432\gamma^4 + 0.002161\gamma^5 - 0.00035\gamma^6; \gamma = \ln\left(\frac{r}{r_c}\right) \quad (20)$$

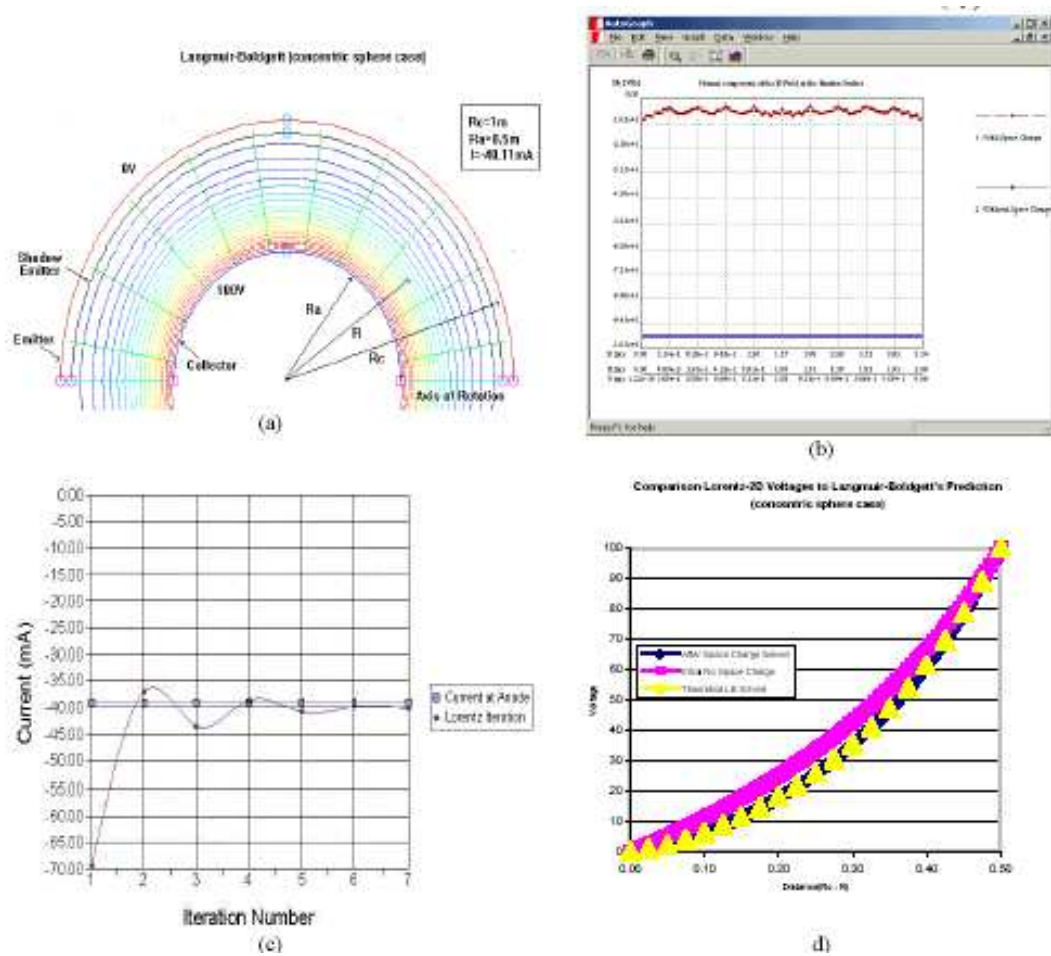


図 8: (a) 球形ダイオードの電位コンター図と軌道 (b) 空間電荷があるときとないときのエミッタ表面での電場の法線成分 (c) イタレーション数によるトータル計算電流の収束 (d) エミッタとコネクタを結ぶ半径方向ライン上の電位降下

表 3 球形ダイオードの電流計算値

	$J [mA/m^2]$	$I [mA]$	Error
Lorentz (RS)	-3.25	-40.11	2.7 %
Theory (RS)	-3.11	-39.06	

PIERCE 銃

ここでは、Pierce 銃の結果と既知の理論解を示している。Pierce に従って、空間電荷があるときに平行な電子流にするために、集中させるための電極をエミッタ表面に取り付けなければならない。この表面とエミッタとの角度は厳密に 67.5 度である。

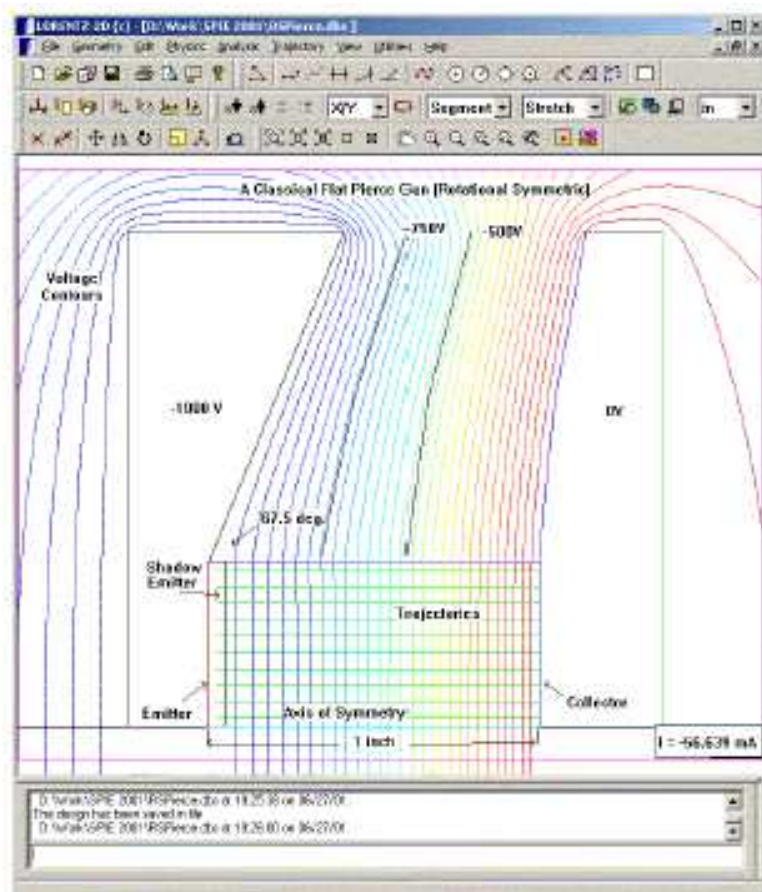


図9 古典的な Pierce 銃の等電位線と軌道

ここで、Lorentz-2D をこのモデルを 2 次元 (2D) 及び軸対称 (RS) のケースのモデル化に使用した。またもどちらの結果も理論値と非常に良く一致している。

表4 トータルエミッタ電流 (2次元)

	J [A/m ³]	I [A/m]	Error
Lorentz (2D)	-113.37	-1.440	0.76 %
理論値 (2D)	-114.24	-1.451	

表5 トータルエミッタ電流 (軸対称)

	J [A/m ³]	I [A/m]	Error
Lorentz (RS)	-112.52	-56.639	1.5 %
理論値 (RS)	-114.24	-57.887	

組み込みのプロットパッケージ AutoGraph を使用して、空間電荷がないときとあるときの電場の法線方向成分をプロットした。予想通り、電場の法線方向成分の大きな降下がある。また注目すべきことは、pierce 形状がエミッタ表面でほぼ一樣な電場を作ることになっていることである。これは Pierce 銃は粒子の一樣流を作るようにデザインされていると思われる。

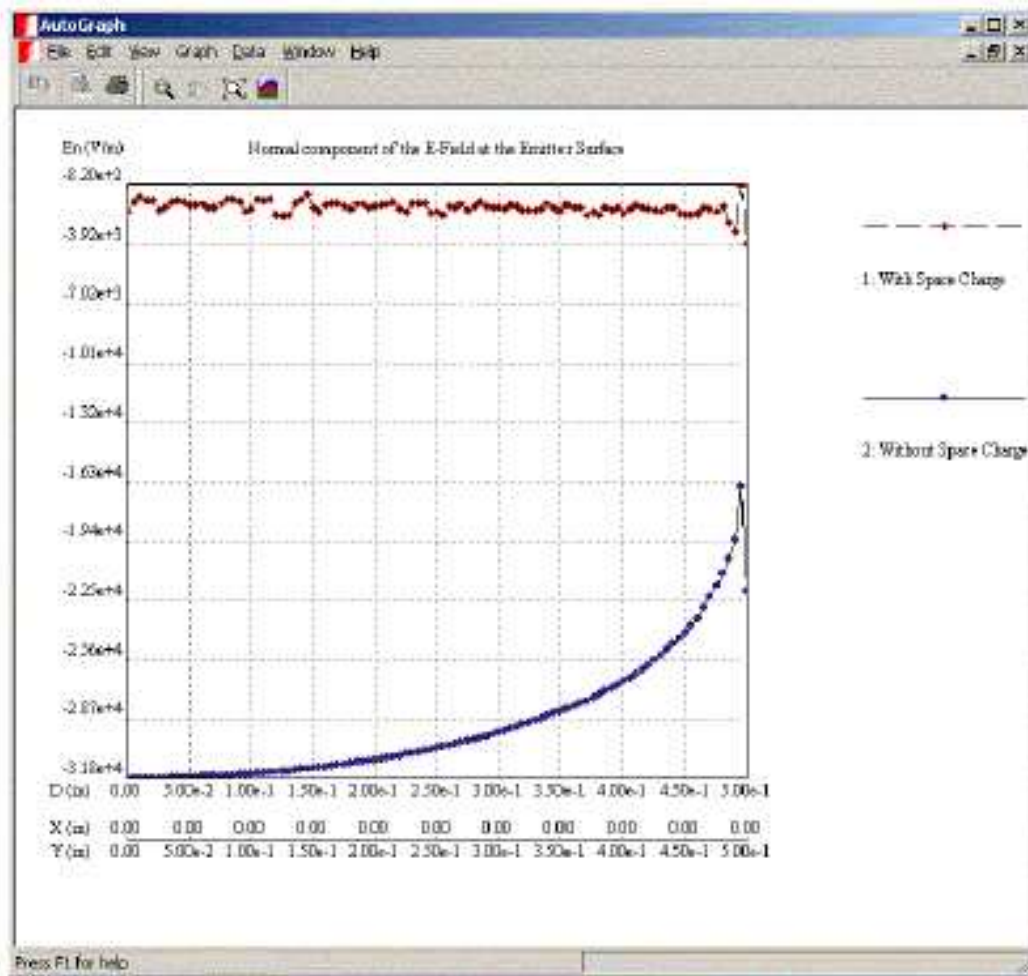


図 10 空間電荷のないときとあるときの電場の法線方向成分（エミッタ表面）

謝辞

私は Enginia Research Inc. の仲間から受けた助力や貢献に非常に感謝している。この仕事は彼等の助力なしでは不可能であった。特に D. Owsianyk, J. Dietrich 及び G. Bilbrough の、表示したデータの作成への助力に感謝する。また Pierce 銃テストでの Newton Scientific Inc. 社の Bob Klinkowstein にも感謝している。

参考文献

1. Y.B.Yildir, K.M.Prasad, D.Zheng, "Computer Aided Design in Electromagnetic Systems: Boundary Element Method and Applications, "Control and Dynamics Systems, vol. 59, pp.167-223, 1993
2. A.Septier, Focusing of Charged Particles, Vol. II, pp.29-35, Academic Press, Inc., 1967