

ビーム・プラズマシミュレーションにおける粒子発生の取り扱い

PARTICLE EMISSION IN CHAGED PARTICLE DYNAMICS SIMULATION

菅野浩一[#]
Koichi Kanno[#]
AET, Inc.

Abstract

Numerical simulations enable us to understand complicated particle beam dynamics and plasma properties. These simulations require an accurate model of charged particle generation by different physical processes. This paper reviews the physical processes and the latest charged particle dynamics simulations for emissions from solid surface and neutral gases.

1. はじめに

荷電粒子はさまざまな機構によって空間中に放出される。その機構を理解し制御することで荷電粒子ビームやプラズマを用いた先端的な装置が開発されてきた。ビーム・プラズマ装置の発展は学術研究から産業や医療にいたる広範囲かつ高度なニーズに対応してきたが、その技術的要求はさらに高まっている。それに伴い、今まで以上に実際的なシミュレーションが期待されるようになってきている。荷電粒子シミュレーションにおいては、粒子発生の機構を正しく取り扱い、モデルとして組み込むことは重要である。また、シミュレーションを行う際にもその機構の理解が必要となる。本発表では、荷電粒子シミュレーションにおける粒子発生の取り扱いと実際の粒子放出機構を述べ、シミュレーション例を挙げる。ただし、対象とする応用範囲はソフトウェアで異なり、各機能の実装状況はそれぞれで異なる。また、プラズマに関しては粒子モデルを前提とし、流体モデルを用いる方法は想定しないこととする。

2. シミュレーションにおける粒子設定

荷電粒子シミュレーションでは、対象となる粒子種(電荷と質量)の選択とビームまたはプラズマとしての特性を設定する必要がある。この際、ある所定の値や特性を与えるか、粒子放出を支配する物理現象を説明する放出機構によるモデルから決められることになる。ただし、ビームやプラズマ中には膨大な数の荷電粒子があり、そのすべてを計算することは現在でも非現実的である。そのため複数の荷電粒子をマクロ粒子と呼ぶひとつの計算粒子で表現する。多数ではあるが実際の粒子よりは少なく、計算上現実的な個数のマクロ粒子に関して運動方程式を解いて位置や速度(もしくは運動量)を計算し、電荷密度や電流密度、電磁場分布などを得る。マクロ粒子の電荷は、ビームでは放出電流や放出電流密度、バンチ当たりの電荷、プラズマではその密度を与えることで決まる。初期条件として位置と速度の指定も必要である。ただし、必ずしもすべての粒子が同じ速度を持つわけではなく、分布を持つことが考えられたため、各座標成分に対し平均速度と熱速度で与える場合もある。ビームライン

設計を意識したソフトウェアではエミッタンスの指定も通常可能となっている。また、すべてのマクロ粒子の情報をテキストデータとして記述し、それを読み込む機能も多くのソフトウェアで組み込まれている。このような粒子の任意設定は、ビームやプラズマの素性がわかっている場合に使うだけでなく、ある仮定に対する条件においてどのような現象が起きうるかの予測にも使うことができ、シミュレーションに期待される重要な役割のひとつとして大きな意義がある。

シミュレーションにおける粒子設定は上記の内容でほぼ揃うが、低エネルギー粒子や大電流密度ビームは荷電粒子の電荷による反発力の影響が大きい。固体表面からの粒子放出では、その反発力によって放出電流密度 J_{scl} が制限される空間電荷制限領域と呼ばれる状態になり、Child-Langmuir の式

$$J_{scl} = \frac{4\epsilon_0}{9} \left(\frac{2q}{m}\right)^{1/2} \frac{V^{3/2}}{d^2} \quad (1)$$

で表される。この式は2枚の電極で構成された平行平板を仮定しており、 ϵ_0 は真空の誘電率、 q は荷電粒子の電荷は、 m は質量、 V は電極間の電位差、 d は電極間距離である。粒子源として規定されている放出電流密度を $J_{emitter}$ とすると、 $J_{emitter}$ よりも J_{scl} が小さいときにこの領域となる。 $J_{emitter}$ は次章で述べる発生機構によって決まる。Equation. (1)からわかるように、空間電荷制限領域での放出電流は引き出し電圧に依存する。つまり、この領域では、粒子源が持つ最大の粒子放出能力は得られず、引き出し電圧もしくは放出面の電界によって制限されてしまう。空間電荷を無視できるような低電流ビームなどの場合を除けば、当然ながら荷電粒子シミュレーションでは電荷を考慮してその運動解析を行うので、シミュレーション結果にもこのような電荷による粒子放出の制限が現れる。粒子運動解析の手法によっては、Eq. (1)を組み込んだ粒子放出モデルを使用してシミュレーションを行う必要がある。このため、荷電粒子放出を取り扱う議論では、実際の装置内で起こる現象においてもシミュレーション上での粒子の挙動であっても、空間電荷制限領域にあるか否かを把握しておくことは大切である。

[#]kanno@aetjapan.com

3. 粒子発生機構

3.1 固体表面からの放出

空間電荷制限領域ではない場合、固体表面からの電子放出は、固体内部にある電子へどのように仕事関数以上のエネルギーを与えたかで決まる。

熱電子放出は最も一般的でタングステンや LaB₆、含浸型など多様な種類があるが、その放出電流密度 J_{therm} は温度に依存し、Richardson-Dushman の式

$$J_{therm} = \frac{4\pi mek^2}{h^3} T^2 \exp\left(-\frac{\phi}{kT}\right) \quad (2)$$

で表される。ここで e は電気素量、 k はボルツマン定数、 h はプランク定数、 ϕ は仕事関数、 T は温度を示す。Equation. (2) に支配される領域にあるときは、空間電荷制限領域に対して温度制限領域と呼ばれる。

光電子放出は、入射光子数に対する放出電子の数で決まる量子効率 η で電子の放出しやすさが示され、以下の式で表すことができる。

$$\eta = \frac{hc Q[nC]}{100e \lambda[\mu m] W[\mu J]} \quad (3)$$

ここで、 c は光速、 Q は電子の放出電荷量、 λ は入射光の波長、 W は入射光のエネルギーである。レーザー励起の高輝度電子源で適用されているが、電子放出電荷 Q は照射レーザー入射角、波長、仕事関数、陰極温度、印加電場、表面状態などに依存する。

二次電子放出において、一次粒子が電子の場合では入射電子によって固体内から弾き出される真の二次電子だけではなく、一次電子の後方散乱と再拡散も含まれる。この詳細モデルとアルゴリズムは Furman と Pivi によって開発されている[1]。また、真の二次電子のみを考慮するモデルを適用することもある[2]。

電界電子放出は、固体表面に高電界を印可することで起きるトンネル効果によってポテンシャル障壁を超えた電子の放出であり、電界電子放出の電流密度 J_{field} は Fowler-Nordheim の式

$$J_{field} = \frac{e^3 E^2}{8\pi h \phi} \exp\left(-\frac{8\pi\sqrt{2m} \phi^{3/2}}{3he E}\right) \quad (4)$$

で表される。ここで E は電界である。カーボンナノチューブ (CNT) に注目が集まりがちだが、ニードル型も使用されており、また Spindt タイプで知られるようなアレイ状のチップ型電子源への期待も高い[3]。

イオンに関しても表面効果による固体表面からの放出が考えられるが、表面近傍の原子や分子のイオン化を通常考える。表面電離型や強電界印可型などのイオン源がある。また、イオン衝撃で固体原子を弾き出すスパッタリングも関心の高い現象であり、Yamamura のモデル[4]などに基づいて記述されることがある。

実際の固体表面からの粒子放出特性は、表面状態や真空の質などの影響を受け、期待した電流が得られないことやトラブルの原因となり得る不要な粒子放出を起こす

ことがあり、シミュレーションの設定にも注意が必要である。

3.2 気体からの放出

気体からの粒子放出は、気体原子・分子の電離電圧を超えるエネルギーを与えることで得られる。電離には、粒子間の衝突による衝突電離や光子のエネルギーを吸収することによる光電離、気体原子・分子の運動エネルギーが電離エネルギー以上になることによる熱電離が考えられる。電荷交換や電子付着などの粒子衝突反応によっても荷電粒子の生成と消滅が起きており、粒子放出を起こす現象として考慮する必要がある。また、励起や弾性散乱のような荷電粒子の生成と消滅が起きない粒子衝突反応に関しても荷電粒子シミュレーションにおいて無視できない物理現象である。以下に VSim[5] で考慮できる衝突反応の一例を示す。

衝突電離	$A + B \rightarrow A + B^+ + e^-$
電子衝突電離	$A + e^- \rightarrow A^+ + 2e^-$
電荷交換	$A^+ + B \rightarrow A + B^+$
電子付着	$e^- + A \rightarrow A^-$
解離性電離	$AB + e^- \rightarrow A^+ + B + 2e^-$
	$AB + e^- \rightarrow A^+ + B^+ + 3e^-$
電界電離	$A + E\text{-field} \rightarrow A^+ + e^-$
再結合	$A^+ + e^- \rightarrow A$
三体再結合	$A^- + e^- \rightarrow A + 2e^-$
解離性再結合	$AB^+ + e^- \rightarrow A + B$

粒子衝突の計算には、粒子と中性粒子の両方をマクロ粒子で表現する Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) 法や気体中の中性粒子を流体として仮定する Monte Carlo Collision (MCC) 法[6]が使用される。粒子衝突反応の起こりやすさは衝突断面積で議論され、衝突エネルギーに依存する。シミュレーションにおいてはこの衝突断面積を与える必要がある。

実際のプラズマの生成や放電は宇宙線などの自然放射線による気体の自然電離や装置内の構造表面からの電子放出が前駆となる。その過程で生じた電子が、電場によって加速されて高エネルギーとなり衝突電離を起こす。その結果、電子とイオンが雪崩的に増加して最終的にプラズマや放電にいたる。シミュレーションでは、ある程度電離が進んで低密度のプラズマになった状態から開始し、定常状態になるまで計算を続けることが多い。ただし、プラズマや放電の維持には粒子衝突過程だけでなく、直流電圧やマイクロ波・RF などの供給電力の条件も関係し、さらにイオンによる二次電子放出 (タウンゼントの理論における γ 作用) などが複雑に関係している。そのため、シミュレーションは気体中の粒子衝突反応だけではなく、前節で述べた固体表面からの粒子放出なども含む複合的な取り扱いが必要となる。

プラズマからイオンを引き出す気体放電型イオン源は多種多様であるが、プラズマ密度で放出面の形状が変わることに注意が必要となる。シミュレーションをする場合は、イオン源プラズマのシミュレーションとあわせてイオン引き出しシミュレーションを行うか、プラズマシースを解析モデルに基づいて計算する必要がある。後者の手法は IGUN[7]などいくつかのソフトウェアで適用されている。

4. シミュレーション例

4.1 固体表面からの放出(電子銃)

熱陰極電子銃では陰極温度で放出電流を制御できるが、三極管型としてグリッド電圧を用いたほうが制御性は高い。三極管型電子銃の EGUN[7]による計算例を Fig. 1 に示す。加速電圧は 12kV である。空間電荷制限領域のため、放出電流はグリッド電圧に依存している。ただし、いくらグリッド電圧を高くしても、実際には熱電子放出モデルである Eq. (2)が決める性能 J_{therm} 以上には電流を得られないことに注意が必要である。また、グリッド電圧が変わったことでビーム軌道にも変化が表れている、これはグリッドのレンズ効果と考えられる[8]。そのため電子銃出口で得られるエミッタンスにも変化が現れる。空間電荷の影響が少ない低電流ビームだとしても、グリッドの設計のみならず動作電圧もビームの品質に影響を与えうると考えられる。

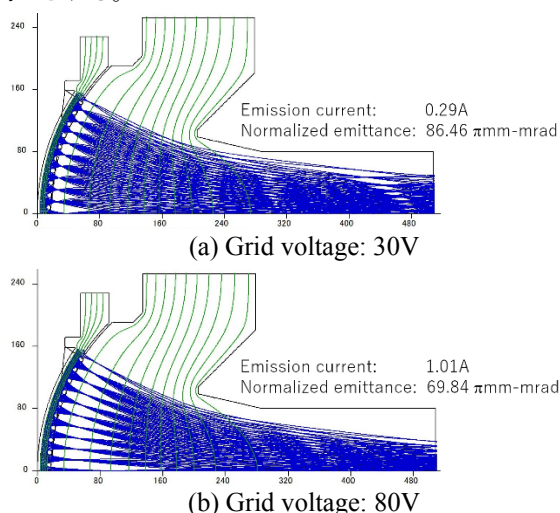


Figure 1: Trajectories and equipotential lines for the triode electron gun.

4.2 固体表面からの放出(マルチパクタ放電)

マルチパクタ放電はマイクロ波・RF 電場とデバイスからの二次電子放出との同期によって電子数が指数関数的に増大して起こる真空放電である。従って、純粋なマルチパクタ放電の現象に対しては気体の電離現象を考慮せず、放電の前駆となる初期電子を配置する。860 MHz の信号を入力した単純な同軸伝送線路におけるマルチパクタ放電の VSim による計算結果を Fig. 2 に示す。材質はステンレスを仮定し、伝送線路の中心付近にわず

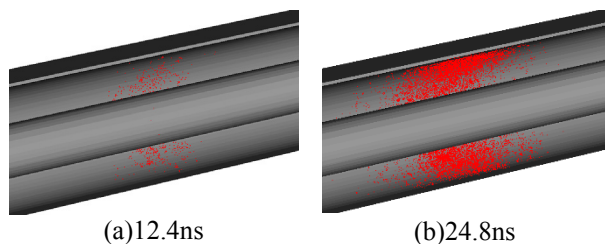


Figure 2: Multipactor electron distribution at a frequency 860 MHz after 12.4 ns and 24.8 ns.

かな数の前駆電子を配置している。Figure. 3 に示すように周波数が変わると、粒子数の推移も変わる。890 MHz では電子の増加がみられなくなり放電が起これないことが予想される。

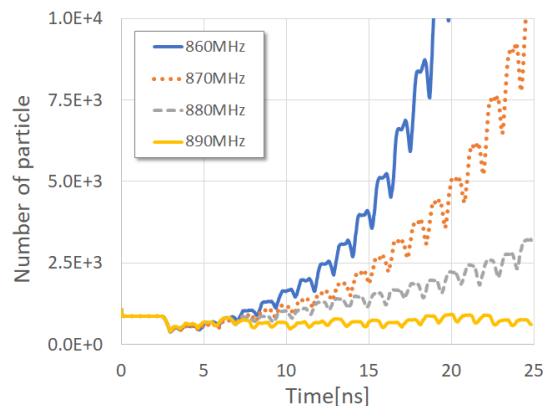


Figure 3: The growth of the electrons due to multipacting.

4.3 気体からの放出(ビームによる気体の電離)

水素ガス雰囲気下(圧力 1.0 mTorr、温度 300K)に 50 keV、10 mA の陽子ビームを入射した VSim での計算結果を Fig. 4 に示す。陽子が水素分子に衝突することで衝突電離や電荷交換が起こり、電子や H_2^+ が生成される。衝突電離によって生じた電子が解離性電離($H_2 + e^- \rightarrow H^+ + H + 2e^-$)を起こし、H が生成される。また、 H_2^+ と H_2 の衝突によって H_3^+ も生成される ($H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$)。弾性衝突も考慮しておりビームの散乱に寄与している。Figure.5 には非弾性散乱の粒子衝突反応の衝突断面積を示す。

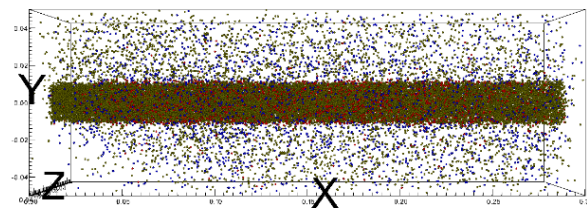


Figure 4: Proton beam into a column of neutral H_2 gas and scattered particles.

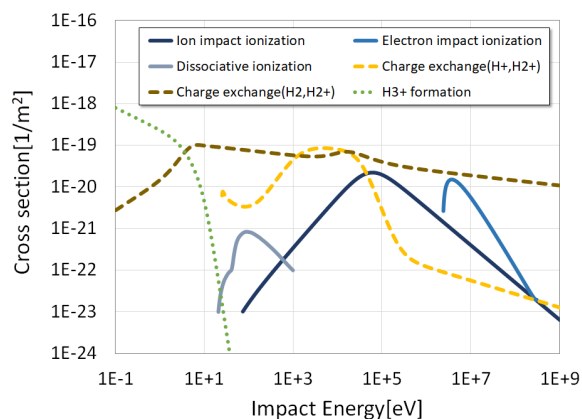


Figure 5: Cross sections for the collisions.

4.4 気体からの放出(プラズマ)

軸対称構造を持つ容量性結合プラズマに関する VSim によるシミュレーションによって得られた電位分布を Fig. 6 に示す。この図では縦軸を半径方向、横軸を長さ方向としている。図の上側と右側の電極は接地している。左側の電極は接地電極との間にギャップを設け、50 MHz、300V の RF 電位を印加した。電極間に $1.0 \times 10^{20} \text{ 1/m}^3$ (約 3mTorr) のアルゴンガスが満たされているとして設定した。この例では、中性ガスであるアルゴンと電子との弾性衝突や衝突電離、励起が考慮されている。衝突電離によって電極間のアルゴンイオンと電子の数が増える。また、アルゴンイオンが電極に衝突することで得られる二次電子も考慮されており、その電子がチャンバー内に供給されていく。Fig. 7 に示すように 1 次元グラフによるプラズマシースの評価も行った。

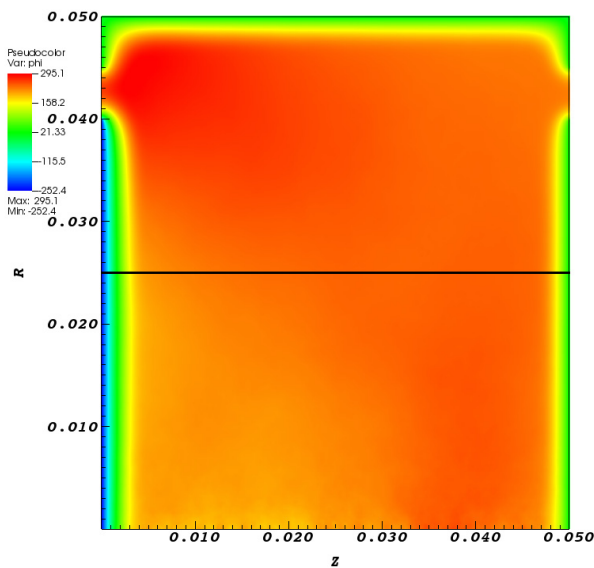


Figure 6: The electric potential inside the capacitively coupled plasma (CCP).

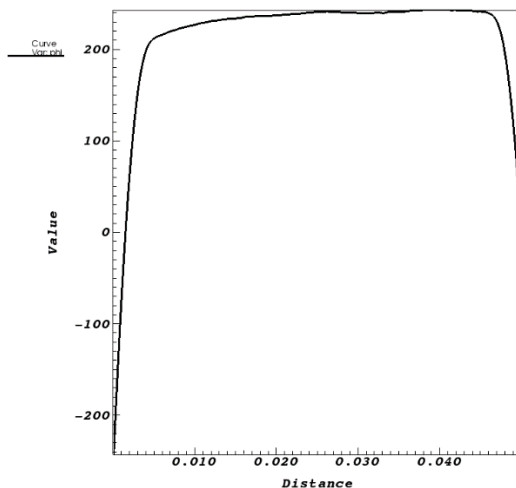


Figure 7: The sheath structure inside the capacitively coupled plasma (CCP).

5. まとめ

ビームやプラズマの発生、放電や暗電流の抑制のために、設計の最適化や改善を進め適切なパラメータを見出すには、荷電粒子の放出機構を踏まえた考察が欠かせない。しかし、測定データによる粒子放出の直接的な考察は必ずしも容易ではない。装置内で起きている現象や反応は一つとは限らず、さらに装置の設計項目や運転パラメータは多数に及んでいる。荷電粒子シミュレーションはそういった複雑な動きをする粒子の挙動や電磁場との相互作用を視覚的に示すことができ、研究や開発、設計における複雑な現象の議論を支援する。

参考文献

- [1] MA Furman and MTF Pivi. Probabilistic model for the simulation of secondary electron emission. Phys. Rev. ST Accel. Beams, 5:124404, 2002.
- [2] J. R. Vaughan. Secondary Emission Formulas. IEEE Transactions on Electron Devices, 40(4), 1993.
- [3] 真空ナノエレクトロニクス第 158 委員会、第 16 回真空ナノエレクトロニクスシンポジウム予稿集.
- [4] Y. Yamamura, H. Tawara, Atomic Data and Nuclear Data Tables Vol 62, “Energy Dependence of Ion-induced Sputtering Yields From Monatomic Solids at Normal Incidence” p. 149-253 (1996).
- [5] <https://www.txcorp.com/>
- [6] Birdsall C K 1991 Particle-in-cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC IEEE Trans. Plasma Sci., 19 65.
- [7] <http://www.egun-igun.com/>
- [8] K. Kanno *et al.*, “3D electromagnetic field and electron beam trajectory simulation and analysis considering grid geometry of triode type electron gun”, Proceedings of the 4th Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan and the 32nd Linear Accelerator Meeting in Japan, Wako, August 1-3, 2007, pp. 691-693.