

有限要素法を用いた3次元荷電粒子軌道解析†

藤 本 穰*・前 田 竜 五*・岩 田 昭 彦*
熊 代 州 三 夫*・田 中 義 章**

ABSTRACT A three dimensional raytracing program using finite element method is developed, which is applicable to the analysis of the focusing beams of charged particles. Especially, the following two special features are taken into consideration. (1) In order to calculate the potential distribution with high accuracy, the test function of higher-order polynomials is used for the finite elements. (2) The space charge distribution is calculated from the ray tracing of the charged particles, which is weighted with a proper function to give reasonable distribution. Accuracy is demonstrated in comparison with some theoretical and experimental results.

1. はじめに

材料科学の進歩に伴い、材料の分析・加工技術の高精度化への要求が高まっており、荷電粒子を利用した電磁気分析・加工装置、例えば、電子顕微鏡、質量分析計、半導体製造装置等の性能向上のため、3次元電磁場荷電粒子の高精度な軌道解析が要求されている。

従来から、差分法・有限要素法・境界要素法等による電磁場解析を用いた荷電粒子軌道計算が行なわれている。しかるに、差分法は、境界形状の正確なシミュレートが困難であり、また境界要素法は空間電荷を考慮した電磁場計算に不向きである。著者等は、市販の有限要素法プログラム(MAGNA/FIM)に高次要素を追加して、荷電粒子軌道計算を試みた。

本手法の特徴はつぎの2点にある。

(1) 有限要素解析に高次要素を用いることにより、電磁場分布を高精度で求める。

(2) 軌道解析の結果から空間電荷分布を求める際、空間電荷密度を重み関数を考慮して算出する。

上記の解析手法を近軸解析結果の分かっている静電レンズに適用し、本手法の精度を示すとともに、空間電荷を考慮した解析を行ないその結果についても述べる。

2. 有限要素法による軌道解析法

3次元電磁場中の荷電粒子の運動方程式は次式で与えられる。

$$d\vec{v}/dt = Ze/m \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2-1)$$

\vec{E} : 電場の強さ \vec{B} : 磁束密度
 \vec{v} : 荷電粒子の速度 m : 荷電粒子の質量
 Ze : 荷電粒子の電荷

上式は空間的には有限要素法により離散化、時間的には6段5次のルンゲクッタ法を用いて解き、離散的な軌道上の点を得る。これを軌道点と定義する。

電磁場解析は、1次、2次及び3次のアイソパラメトリック要素を用いた有限要素法を使い、任意の位置での電場は次式で求めた。

$$E_{x_j} = - \sum_{i=1}^n (\partial N_i / \partial x_j) \phi_i \quad (2-2)$$

E_{x_j} : 電場の x_j 成分 $j=1, 2, 3$
 ϕ_i : i 番目の節点の電位 N_i : 形状関数
 n : 要素の節点数

3. 空間電荷の定式化

従来の空間電荷密度を考慮した解析^{1),2)}においては、軌道解析によって求めた軌道点を含む有限要素のみに空間電荷を配分していたため、荷電ビーム束の通過する全ての有限要素に対して、必ずいくつかの軌道を通させる必要があり、3次元解析を行なう場合は軌道本数を非常に多く必要とした。この問題点を解決するために、少ない軌道本数で正確な空間電荷密度を求める手法として、各軌道相互間の位置関係を考慮する以下のような定式化を行なった。

Three Dimensional Analysis of Charged Particle Trajectories by using Finite Element Method. By M. Fujimoto, R. Maeda, A. Iwata and S. Kumashiro (Shimadzu Corporation, Analytical Instrument Research Laboratory), Y. Tanaka (Century Research Center Corporation).

*島津製作所 科学計測機器研究所

**センチュリリサーチセンタ(株)

†1990年11月28日受付 1991年3月8日再受付

荷電粒子放出面上の微小面積 Δs から放出する電流を1本の軌道で代表する。軌道点の担う電荷 Q_B は次式で表わされる。

$$Q_B = J \cdot \Delta s \cdot \Delta t_B \quad (3-1)$$

Δt_B : 時間刻み幅 J : 電流密度

さらに点電荷近似により位置 r における電位 ϕ は次式で算出できる。

$$\phi = \sum_{B=1}^N \frac{Q_B}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_B|} \quad (3-2)$$

\vec{r}_B : 軌道点の座標

N : 軌道点数

ϵ_0 : 真空の誘電率

空間電荷密度 ρ は、次式で表わされる。

$$\rho = -\epsilon_0 \Delta \phi \quad (3-3)$$

(3-3)式に、重み関数 w を使用すると、次式のようになる。

$$\rho \approx \epsilon_0 \int (-w \Delta \phi) dV / \int w dV \quad (3-4)$$

重み関数は分子を部分積分した際の境界積分項が消えるように選ぶ必要がある。我々は、数式として扱いやすいガウス分布を選んだ。

$$w = \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_c|^2 / 2\sigma^2) \quad (3-5)$$

\vec{r}_c : 空間電荷密度算出点の位置

σ : 分散

すると、式(3-4)は最終的に次式で表わされる。

$$\rho = (1/2\pi\sigma)^{3/2} \sum_{B=1}^N Q_B \exp(-r_{cB}^2 / 2\sigma^2) \quad (3-6)$$

$$r_{cB} = |\vec{r}_c - \vec{r}_B|$$

以上のことを考慮して、図1に示す簡単な2次元モデルのシミュレーションを行った。モデルとしては、陰極の電位を ϕ_0 、陽極の電位を ϕ_1 、陰極-陽極間の距離を L とする。出射する電子の初期エネルギーを ϕ_i とし、図中の矢印の方向へ出射する2本の軌道でシミュレートした。位置 x における電位 ϕ は、次式で表わされる1次元電位モデルを仮定する。

$$\phi = (\phi_1 - \phi_0)x/L + \phi_0 \quad (3-7)$$

ここで電子ビームは電荷保存の式を満たすので、空間電荷密度は次のように表わされる。

$$\rho = J / (ax + b)^{1/2} \quad (3-8)$$

ただし、

$$a = (2e/m) (\phi_1 - \phi_0) / L$$

$$b = (2/m) \phi_i$$

e : 電子の電荷量 m : 電子の質量

この理論値に対して次の2つの手法を用いた結果を比較した。

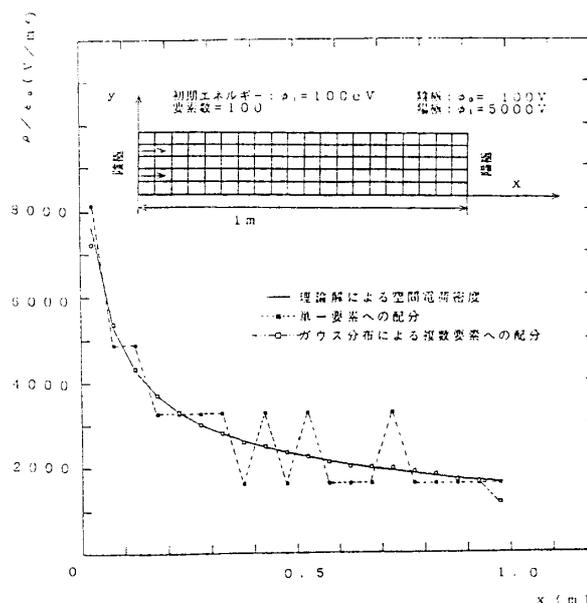


図1 2次元モデルのx方向の空間電荷密度分布

1) 軌道点の存在する要素に配分する手法(従来の方法)
軌道点の存在する有限要素のガウス点へ、空間電荷密度を配分する。

2) ガウス分布により複数の要素に配分する手法
軌道点付近の複数の有限要素のガウス点へ、ガウス分布で空間電荷密度を配分する。分散 σ は次式で求めた。

$$\sigma = \{R / (N \cdot 2 \ln 2)\} \quad (3-9)$$

R : 軌道間距離 N : 軌道本数

すなわち、空間電荷密度分布の半価幅が、軌道間距離の半分となるように σ を決めた。

上記のシミュレーションにおいては、軌道点が1要素に最低1点存在するように時間刻み幅を 1.2×10^{-9} 秒に決めた。結果は、図1に示す。これらの結果より、軌道点の存在している要素のみに配分する方法は、電荷の総量は正しいが、連続性がなく理論値から離れた値を示すことがわかる。他方、ガウス分布を使用した場合は、理論値を正確にシミュレートすることができた。以上の結果から、ガウス分布を用いた配分方法は、少ない軌道点数で正確な空間電荷密度を求め方法として有効な解析手法と考えられる。

4. エミッタ部計算を含むフローチャート

ビーム引出し系を含む軌道解析の流れを図2に示す。図中①では空間電荷分布に必要な各軌道の電流を次の Langmuir-Child の関係式で表わされる空間電荷制限電流密度 J_{sp} を用いて決定する。

$$J_{sp} = C \cdot (\phi_0 - \phi_d)^{3/2} / d^2 \quad (4-1)$$

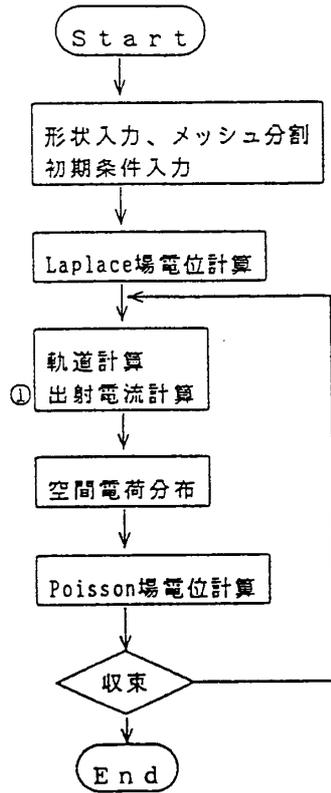


図2 軌道計算のフローチャート

ただし

$$C = 4\epsilon_0/9 \cdot (2Ze/m)^{1/2}$$

d : 境界面よりの微小距離 ϕ_0 : 境界面電位

ϕ_d : 境界面から d の位置での電位

空間電荷の影響を考慮するため、軌道は反復計算をして求める必要がある。次の2種類の収束計算法を用いた。

(1) i 回目の反復で用いる電流密度 J_i を前回の値 J_{i-1} と(4-1)式より求められる \bar{J}_i を用いて決定する方法。

(β : 加速係数, $0.5 < \beta < 0.8$)

$$J_i = J_{i-1} + \beta(\bar{J}_i - J_{i-1}) \quad (4-2)$$

(2) 空間電荷密度を考慮した電位降下率を用いる方法³⁾。

本解析においては、反復計算の1回目には上記(2)の方法を用い、2回目以降は上記(1)の方法で加速係数 $\beta=0.7$ として計算した。

5. 解析結果

(1) 典型的なアインツェルレンズを例にとり、近軸軌道解析との比較のもとで解析を行なった。ここで近軸軌道解析とは、軸上電位を求め近軸軌道方程式を解く手法⁴⁾⁵⁾であり、軸近傍で精度良く軌道を求められる手法である。軸上電位は、有限要素法により求めた。

レンズの倍率 M 、球面収差係数 C_s 及び色収差係数 C_c はそれぞれ次式の関係がある。

$$r_i = M \cdot r_o \quad (5-1)$$

r_i : 像面でのビーム位置

r_o : 物面でのビーム位置

$$\Delta r = C_s \cdot \alpha^3 \quad (5-2)$$

Δr : 球面収差 α : ビームの開き角

$$\Delta z = C_c \cdot (\Delta E/E) \quad (5-3)$$

Δz : 色収差 $\Delta E/E$: エネルギーのずれ

図3において、軸付近のデータ5点より倍率 M を求めたが、軸から離れると高次収差の影響で倍率の値が

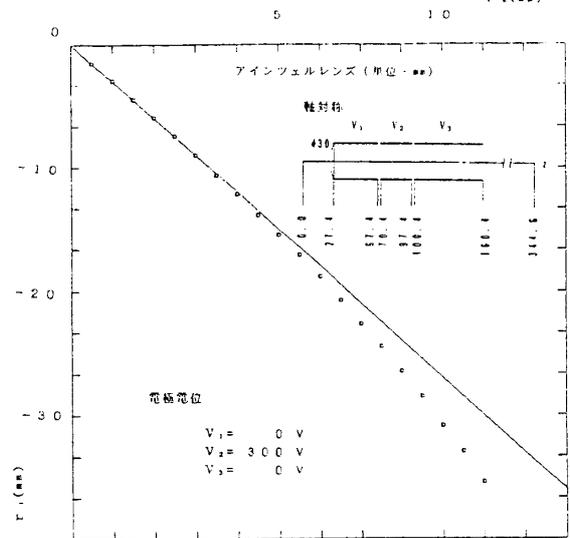


図3 r_i-r_o プロットによる倍率
近軸解より求まる $M = -2.9588$
グラフより求まる $M = -3.0166$

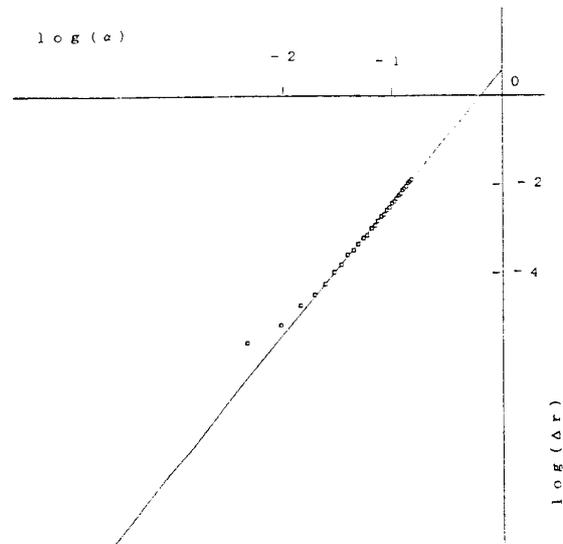


図4 $\log(\Delta r) - \log(\alpha)$ プロットによる球面収差係数
近軸解より求まる $C_s = 3.3299 \text{ m}$
グラフより求まる $C_s = 3.4188 \text{ m}$

近軸解から離れていくことがわかる。球面収差係数 C_s は、図4において $\log(\alpha)=0$ の値から求まるが、図からわかるように近軸解と良い一致を示している。さらに図5の傾きは、色収差係数 C_c を示しているが、この図から3次要素を採用した場合は2次要素に比べ

て、精度が高いことが分かる。

(2) Frost等によって報告されている5B型電子銃⁶⁾の解析を行なった。図6に2種類の空間電荷分布方法でのパービアンズ値の収束状況を示す。ともに実験値に収束していることが分かるが、図より分かるように、軌道を中心としたガウス分布で複数要素へ配分す

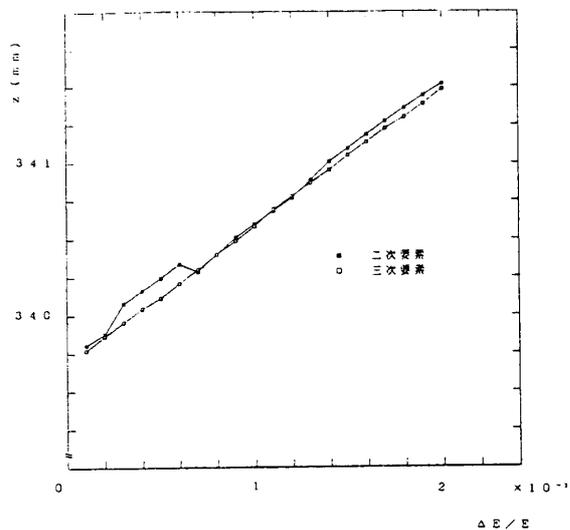


図5 $z-\Delta E/E$ プロットによる色収差係数
 近軸解より求まる $C_c=0.8752$ m
 グラフより求まる $C_c=0.8324$ m (2次要素)
 グラフより求まる $C_c=0.8501$ m (3次要素)

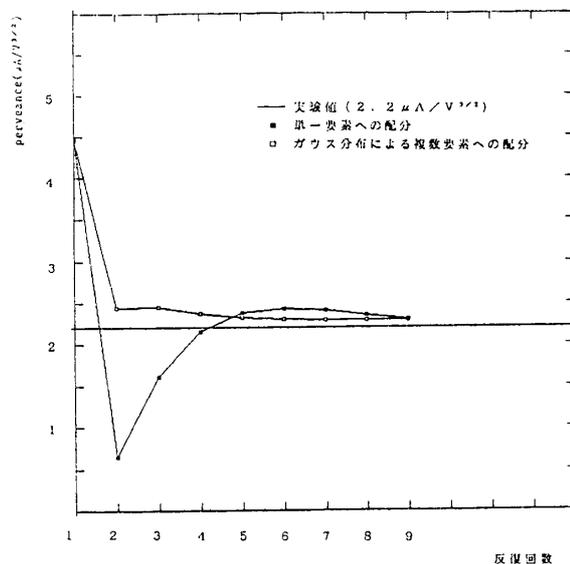


図6 5B型電子銃の反復回数とパービアンズ値の変化

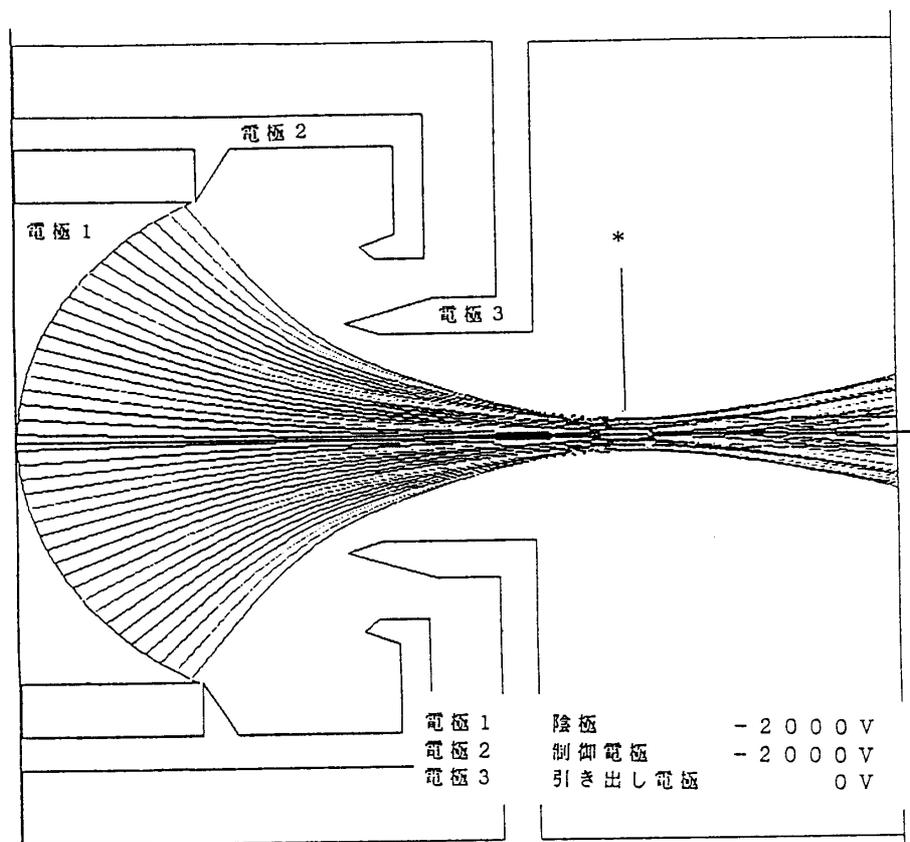


図7 5B型電子銃の軌道図 (軸対称, 磁場無し)

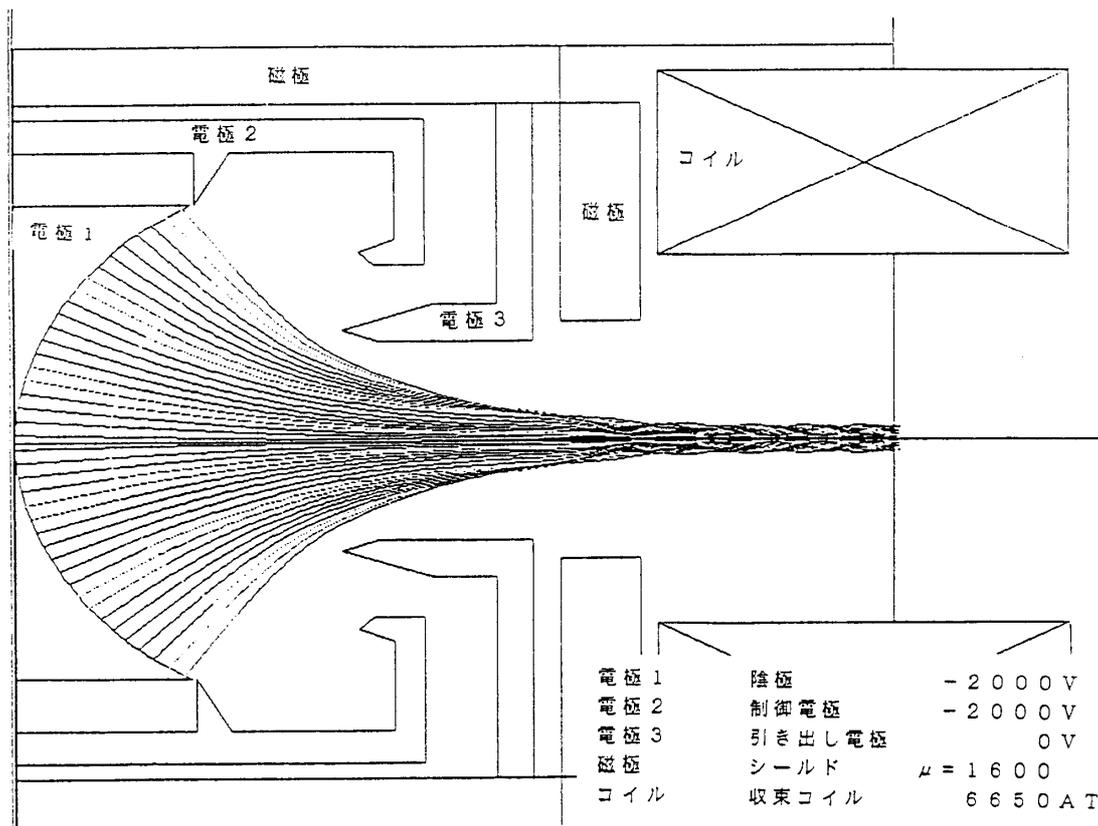


図8 5B型電子銃の軌道図(軸対称, 磁場有り)

る手法のほうが, 収束が良好である。一方, 単要素へ配分する手法は繰り返し計算の初期において軌道の変化が激しく, 軌道形状の収束が遅かった。図7に軌道図を示す。図中で電極3の端から2.28 mmの位置(図中*)において最小ビーム径約1 mmを示すことが実験により報告されている。我々の計算結果はビーム径1.062 mmであり, 実験値と良い一致を示している。ただし仮想面-陰極間距離は, Hamzaの報告⁷⁾をもとに設定した。さらに, 5B型電子銃に磁場を重畳させて, ビームを集束させる Brillouin 流モデルを解析した。図8に軌道図を示す。従来の報告⁸⁾によると Brillouin 集束可能なパービアンスの最大値は, $25.4 \mu\text{A}/\text{V}^{3/2}$ であるが, 本解析によって求められたパービアンスは, $2.215 \mu\text{A}/\text{V}^{3/2}$ であるため, 図に示すような直径約1 mmの集束ビームが得られた。

6. まとめ

今回の解析で以下の結果を得た。

- (1) 有限要素法に高次のアイソパラメトリック要素を

導入することにより, 軌道解析の精度の向上が図られた。

- (2) 空間電荷密度の配分に, ガウス分布を重み関数として使用することにより良好な結果が得られた。なお, この手法によると従来報告されている軌道解析よりも少ない軌道点数で正確な空間電荷密度を求められるため, より正確な軌道解析が可能となる。

- (3) アインツェルレンズ, 5B型電子銃に本プログラムを応用し, 良好な結果が得られた。

参考文献

- 1) 小瀬, 高木, 三木: 電学論 107.7 323/330 (1987)
- 2) X. Zhu and E. Munro: J. Vac. Sci. Technol. B7 1862/1869 (1989)
- 3) 森住: 信学誌 50.4 664/671 (1967)
- 4) E. Harting and F. H. Read: "Electrostatic Lenses" (1976)
- 5) O. Klenperer: "Electron Optics" (1971)
- 6) R. D. Frost, O. T. Purl and H. R. Johnson: proc. IRE., 50 1800/1807 (1962)
- 7) V. Hamza, IEEE Trans.: ED-13, 485/493 (1966)
- 8) 裏 克己: 電子・イオンビームハンドブック, 学振132委 22/25 (1986)