

スーパーコンピュータによる物理現象シミュレーション 三次元荷電粒子軌道解析による 電子機器の電極構造最適化

Optimization of the Electrode Configuration of Electron Devices Using 3-D Charged Particle Beam Trajectory Analysis

カラーブラウン管電子銃や質量分析装置などの電極系の開発には、複雑な電極形状を正確に扱いビームフォーカス特性を定量的に評価できる三次元の荷電粒子軌道解析技術が不可欠である。従来、有限要素法などを用いた種々の解析手法が報告されているが、膨大な主記憶容量と計算時間のために、実際の非軸対称電極系を解析した例は少ない。

一方、スーパーコンピュータの発達とベクトル演算を利用した数値計算アルゴリズムの開発により、従来困難であった大規模な数値シミュレーションが可能になってきた。今回複雑形状の取り扱いに適したBoundary-Fit曲線座標変換法を用いた三次元解析手法を新たに開発し、質量分析装置や電子顕微鏡への適用により、電子機器の性能向上のための有効な技術であることを確認した。

小瀬洋一* *Yōichi Ose*
三木一克** *Kazuyoshi Miki*
広瀬博*** *Hiroshi Hirose*
宮崎正広**** *Masahiro Miyazaki*

1 緒言

質量分析装置、電子顕微鏡、カラーブラウン管などの電子機器では、近年、要求性能が高まるにつれて、非軸対称な電極系が広く使用されるようになった。このため、電極形状を正確に扱える三次元の荷電粒子軌道解析を用いて、ビームフォーカス特性を定量的に評価したいとの要求が強まっている。これまでも、差分法、有限要素法あるいは境界要素法による解析手法が報告されている^{1)~3)}。しかし、三次元形状の取り扱いには、大きな主記憶容量と長い計算時間を要し、実際に複雑な形状の電極系を解析した例は少ない。

このため、複雑形状の取り扱いに適したBoundary-Fit曲線座標変換法を用いた三次元荷電粒子軌道解析を開発した。以下では、Boundary-Fit曲線座標変換法⁴⁾とスーパーコンピュータ向き的高速な電位計算および軌道計算法ならびに電子機器への適用結果について述べる。

2 荷電粒子軌道解析

2.1 基礎式

三次元電界中の荷電粒子の軌道は、次の電位のポアソン方程式と運動方程式によって記述することができる⁵⁾。

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \dots \dots \dots (1)$$

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -\eta \nabla \phi \dots \dots \dots (2)$$

ここで、 ϕ は電位、 ρ は空間電荷密度、 ϵ_0 は真空の誘電率、 r は座標、 η は比電荷である。

荷電粒子の出射条件は、陰極など固体の放出源の場合、Child-Langmuirの式で求める。一方、プラズマイオン源から正イオンを引き出す場合、プラズマ表面からしみ出す電子による空間電荷の緩和を考慮する⁶⁾。

計算の手順を図1に示す。まず、前記(1)式で $\rho=0$ とおいたラプラス方程式を解き、電位分布を求める。次に、放出電流密度を計算し、(2)式を解いて荷電粒子の軌道を求める。計算された空間での軌道をもとに空間電荷密度 ρ を求め、(1)式のポアソン方程式を解き、再び電位分布を計算する。その際、プラズマイオン源では、電子密度によって空間電荷密度 ρ を補正する。以上の計算を電位分布が収束するまで繰り返す。なお、(2)式を用いた軌道計算では、格子分割された放出面の一つの格子の重心から放出される荷電粒子をマクロ粒子と考え、そ

* 日立製作所 エネルギー研究所 ** 日立製作所 エネルギー研究所 工学博士 *** 日立製作所 那珂工場 **** 日立製作所 茂原工場

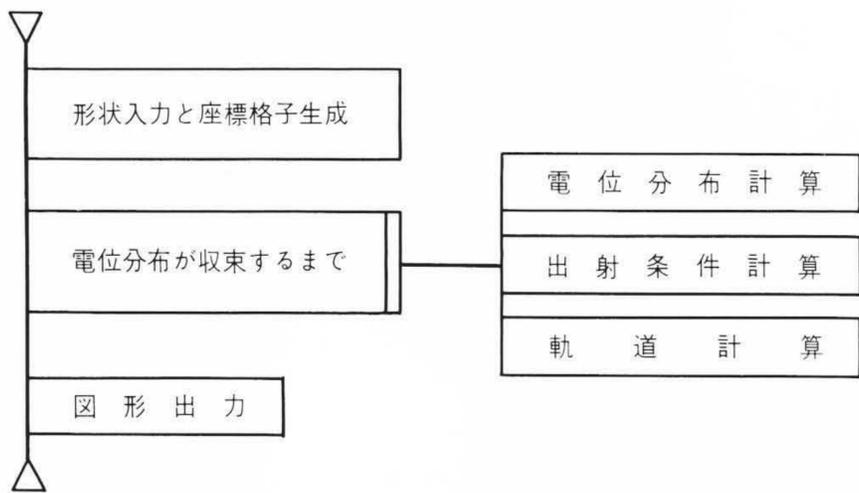
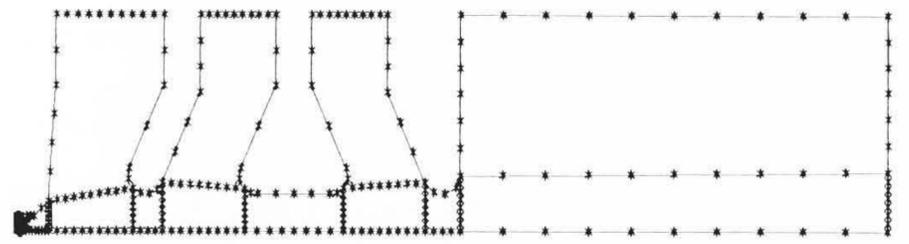
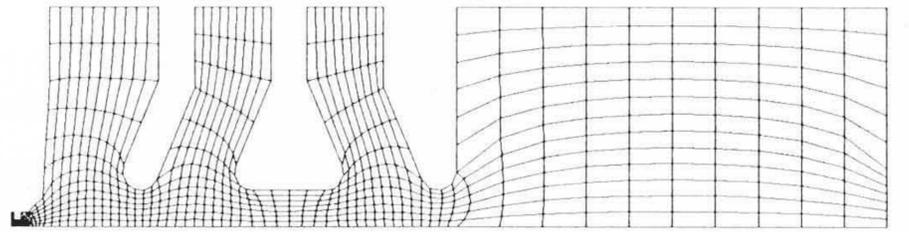


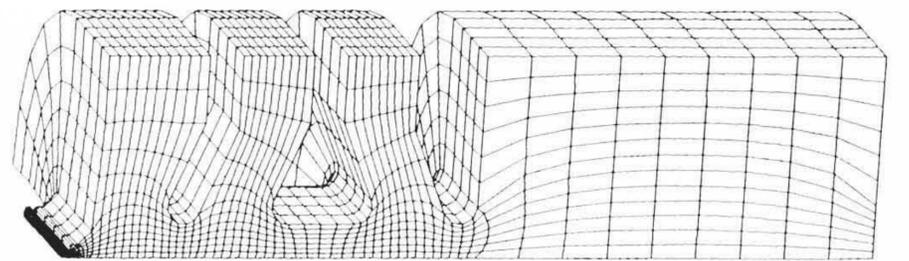
図1 軌道計算の手順 荷電粒子の空間電荷を考慮するため、電位分布と軌道の反復計算が必要となる。



(a) ワイヤフレームモデル



(b) 二次元座標格子



(c) 三次元座標格子

図3 対話による形状入力と座標格子生成 Boundary-Fit曲線座標変換法と汎(はん)用形状入力システムを組み合わせることにより、対話的に座標格子が生成できる。

の格子から放出される全電流を運ぶものとして、マクロ粒子の軌道を求める。マクロ粒子は飛行の途中で分割されないため、電荷保存は自動的に満たされることになる。

2.2 形状入力と座標格子生成法

Boundary-Fit曲線座標変換法は、図2に示すように任意の形状で囲まれた体系での曲線座標系を、単純な直交座標系に変換し、写像空間で物理現象を支配する偏微分方程式を解く方法である。この方法では、物理空間上の境界格子座標を固定境界条件としてだ円形偏微分方程式を数値的に解くことにより、物理空間上の曲線座標格子と写像空間上の直交格子とを1対1に対応づけることができる。

Boundary-Fit曲線座標変換法と対話形形状入力機能を組み合わせたCADシステムHIGES⁷⁾(Hierarchical Geometric Data Extraction System)を用いた座標格子の生成例を図3に示す。まず、(a)電極の二次元断面形状をワイヤフレームで生成し、分割点を入力する。次に、(b)二次元Boundary-Fit曲線座標変換法によって二次元座標格子を生成する。最後に、(c)移動または回転によって三次元座標格子を生成し、三次元Boundary-Fit曲線座標変換法によって座標格子を集中および直交化する。

2.3 電位計算法

Boundary-Fit曲線座標変換法を用いて、前記(1)式を写像空間で離散化したときに関連する格子点を図4に示す⁸⁾。直交座標格子を使用する差分法では、三次元の場合、7点差分式となるのに対し、曲線座標格子を使用するBoundary-Fit曲線座標変換法では、クロス微分項が存在するため、19点差分式となる。19点差分式を使用すると、連立一次方程式の係数行列Aが非対称となり、かつ非零成分が増すため、計算時間および記憶容量上好ましくない。このため、同図に●で示した12個の格子点での電位 ϕ の値を、反復計算の1回前の値 ϕ_0 を用いて

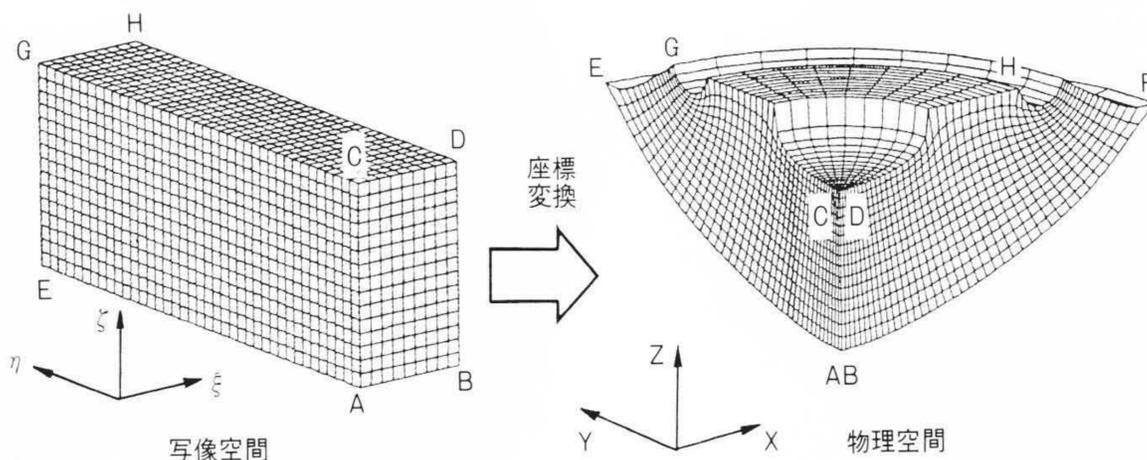
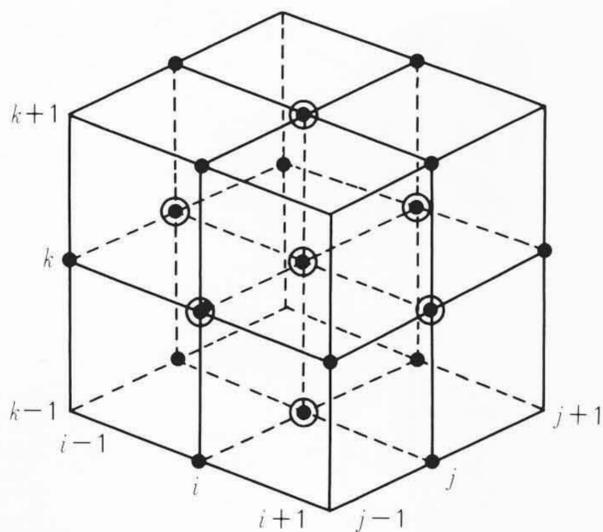


図2 Boundary-Fit曲線座標変換法 写像空間と物理空間を一对一に対応づけることにより、任意形状の体系内に滑らかな曲線座標格子を生成する。



注：●(7点差分式による計算点), ●●(19点差分式による計算点)

図4 写像空間での座標格子 直交座標系の差分法では7点差分式に離散化されるが、曲線座標系では19点差分式となる。

既知項として取り扱う。●印の格子点からの寄与は右辺の***b***の中に含める。これにより、係数行列が対称な帯行列***A'***となる次の連立一次方程式が得られる。

$$A'\phi = b - A'\phi_0 \dots\dots\dots(3)$$

ここで***A'***はクロス微分項から成る非対称行列である。

対称帯行列の解法としては、差分法などに使用されるベクトル化された汎(はん)用のMICCG(Modified Incomplete Cholesky Conjugate Gradient)法をそのまま利用できる⁹⁾。

2.4 部分構造分割法

実際の電極形状は、複数の基本立体から構成された複合立体形状をしている場合が多い。そこで、解析領域をいくつかの部分領域に分け、部分領域ごとに曲線座標格子を生成する部分構造分割法を開発した⁸⁾。

三次元領域を複数の部分領域に分割し、個々の部分領域ごとに作成した曲線座標格子を合成することにより、図5に示すように領域全体の座標格子を生成する。その際、部分領域間に重複領域を設定し、一方の領域の内部格子を他方の領域

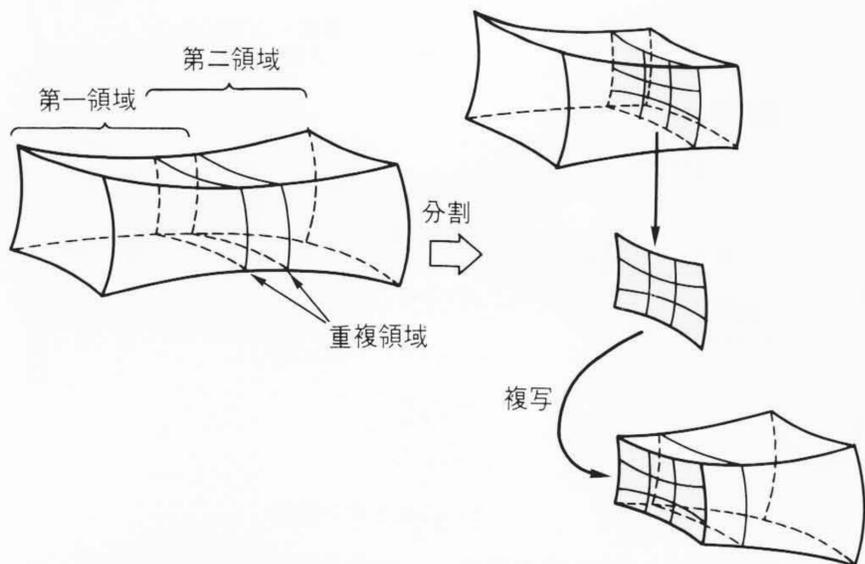
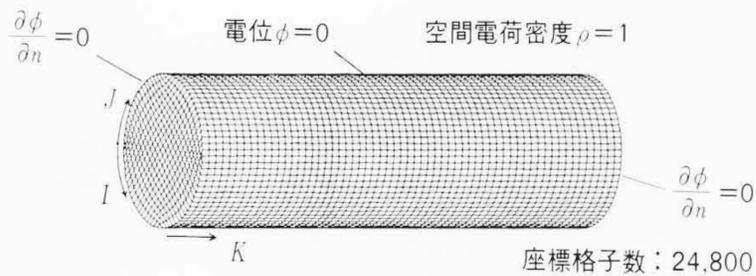
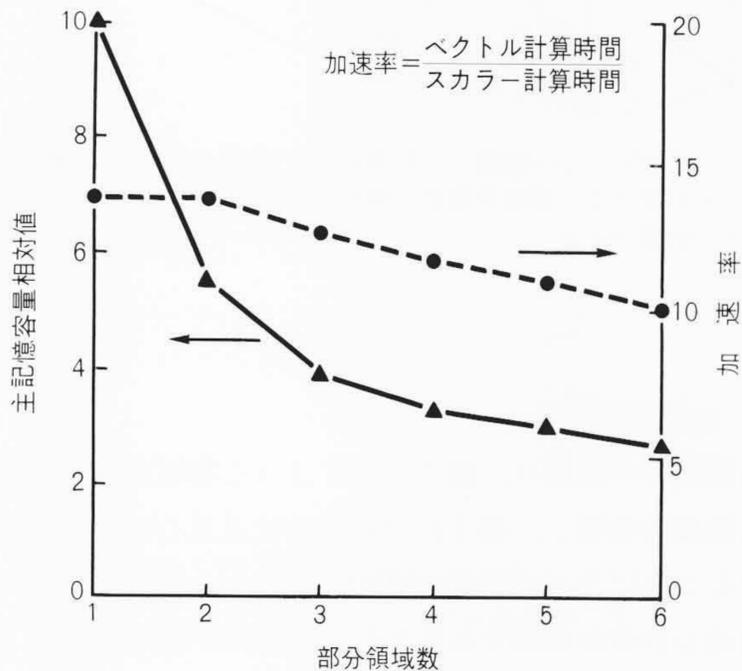


図5 部分構造分割法 複合立体形状を、単純形状の部分領域に分割して解析する。



(a) 座標格子および計算条件



(b) 主記憶容量と加速率

図6 円筒内の電位計算例 部分構造分割によって主記憶容量を大幅に削減でき、ベクトル化による加速率の低下も少ない。

の境界上の格子に一致させる。部分領域内の座標格子は、重複領域にある隣接する部分領域の内部格子を境界条件として再生成する。

部分構造分割法は、三次元の曲線座標格子生成だけでなく、物理量計算、すなわち電位計算および軌道計算にも適用する。電位計算の場合、分割された部分領域を計算の基本として、(3)式を用いて部分領域内の電位分布を計算する。隣接した部分領域との重複領域での電位は固定境界条件として、(3)式の既知項***b***の中に取り込む。この既知項***b***は隣接部分領域の電位分布の変化に伴って変化する。したがって、部分構造分割法では、部分領域間の相互作用を考慮するための反復計算が必要となるが、この反復計算を利用することによって、前述した19点差分式を7点差分式に近似したときの12個の格子点からの寄与を同時に考慮できる。

部分領域数と主記憶容量および計算速度の関係を調べるため、図6(a)に示すような、一様分布な空間電荷を含む円筒内の電位分布を解析した。部分領域数を1から6へ増加させたときの主記憶容量と、スーパーコンピュータHITAC S-820/60での加速率を同図(b)に示す。この際、外部記憶には高速な拡張記憶装置を用いた。部分領域数を6にすることによって主記憶容量を1/3以下にできる一方、加速率は10倍強でほぼ一定であった。

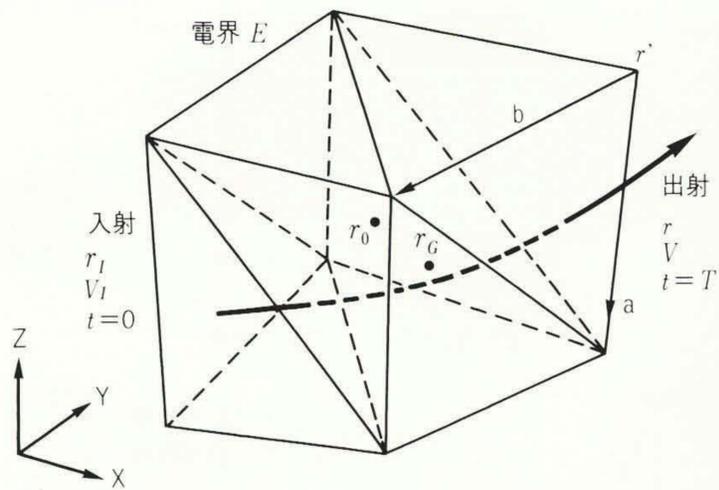


図7 12面格子内の軌道 計算格子を12面体で表現し、軌道と各面の交点を計算する。運動方程式を解析的に解くので、入射から出射までを1回で計算できる。

2.5 軌道計算法

荷電粒子の軌道は、図7に示すように物理空間で座標格子を12面体で表現し、格子内の電界を軌道重心の値で一定と仮定することによって(2)式を解析的に解いて求める¹⁰⁾。この際、軌道重心自身が未知であるため反復計算が必要となる。また、1本ごとの軌道の追跡は逐次計算となるためベクトル化できない。そこで一つの部分領域に属する100~1,000本のビームをまとめて取り扱い、各ビームについて一座標格子だけ軌道を追跡することでベクトル化している。

3 適用例

上述した方法をもとに、任意の形状をした三次元電極形状内の軌道を解析する計算プログラムを開発した。以下では、このプログラムの適用例について述べる。

3.1 イオンマイクロアナライザ二次イオン引出部

IMA(イオンマイクロアナライザ)の全体図を図8に示す。IMAは、二次イオン質量分析装置の一種であり、イオン源から引き出した一次イオンビームを μm オーダーまで細束化して固体試料に照射し、試料が放出する二次イオンを質量分析する。二次イオン引出部は軸対称で、シールド電極、引出電極、集束レンズおよびスリットから成り、二次イオンを取り込み、加速、集束して、質量分析部へ輸送する。二次イオン引出部の電極配置とX軸方向に100倍拡大したイオン軌道を図9に示す。イオンは $X=200\ \mu\text{m}$ と $400\ \mu\text{m}$ の位置から、Z軸に対して $2^\circ\sim-2^\circ$ の角度で出射した。実験による最適電圧条件は、試料、引出電極および集束レンズについてそれぞれ3.0 kV, 2.48 kV, 2.65 kVである。一方、解析による集束レンズ最適電圧は2.68 kVであり、実験値とよく一致した。この結果、レンズの最適設計に適用可能なことを確認した。

3.2 後段加速検出器

後段加速検出器は低エネルギー荷電粒子ビームを加速することにより、感度を向上した検出器である。電極と二次イオ

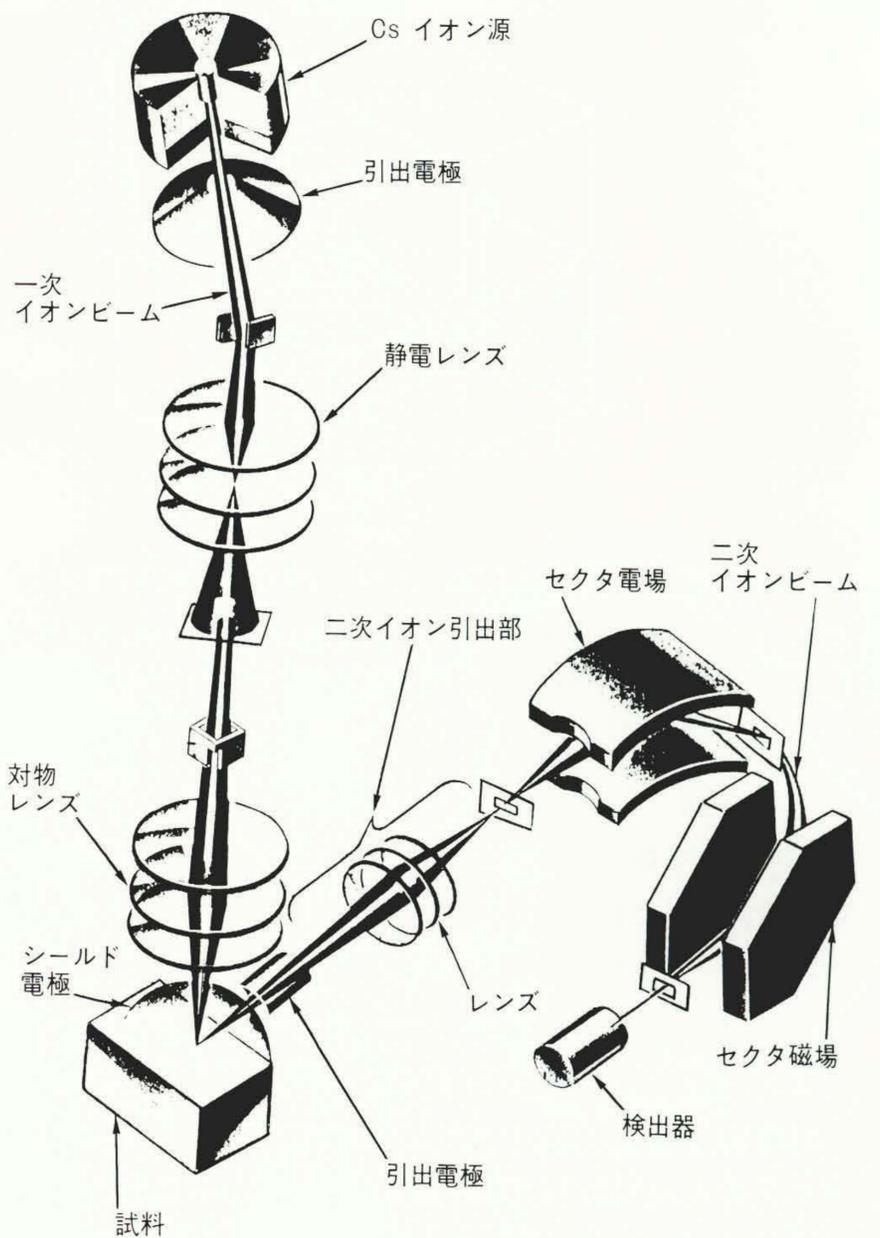


図8 イオンマイクロアナライザ 一次イオンを試料に照射し、発生した二次イオンを質量分析する。

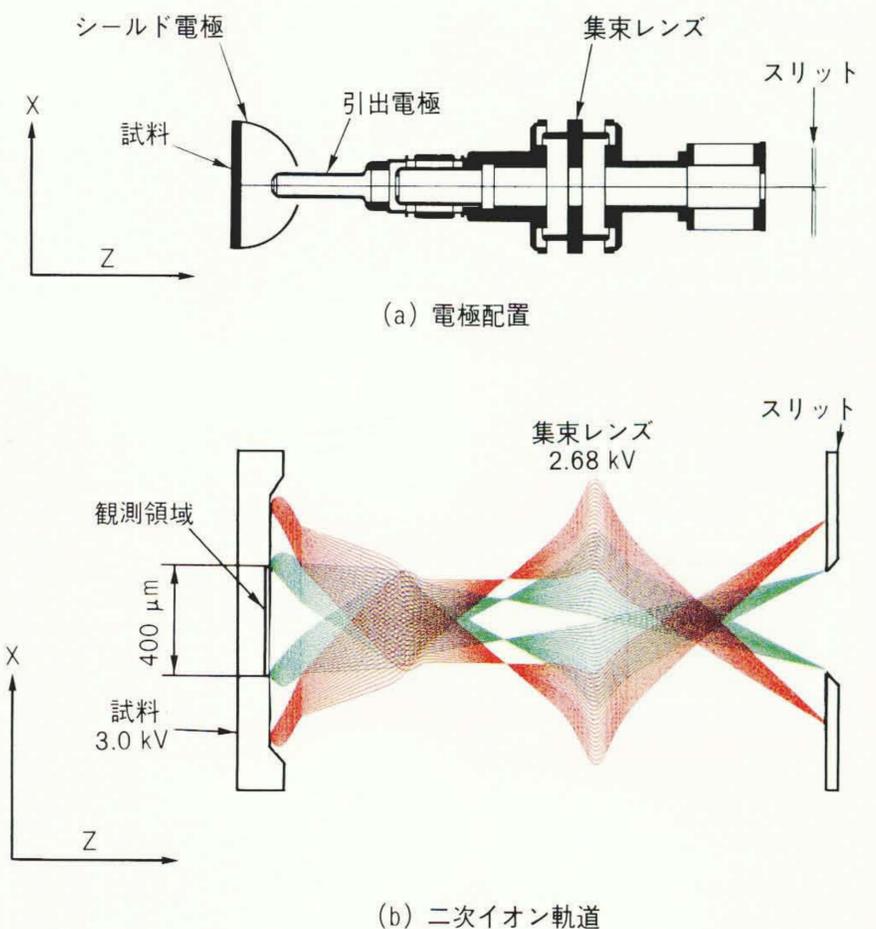


図9 二次イオン引出部の解析 試料上で発生した二次イオンは、引出電極内に引き込まれ、集束されてスリット上に結像する。電圧条件は、実験とよく一致している。

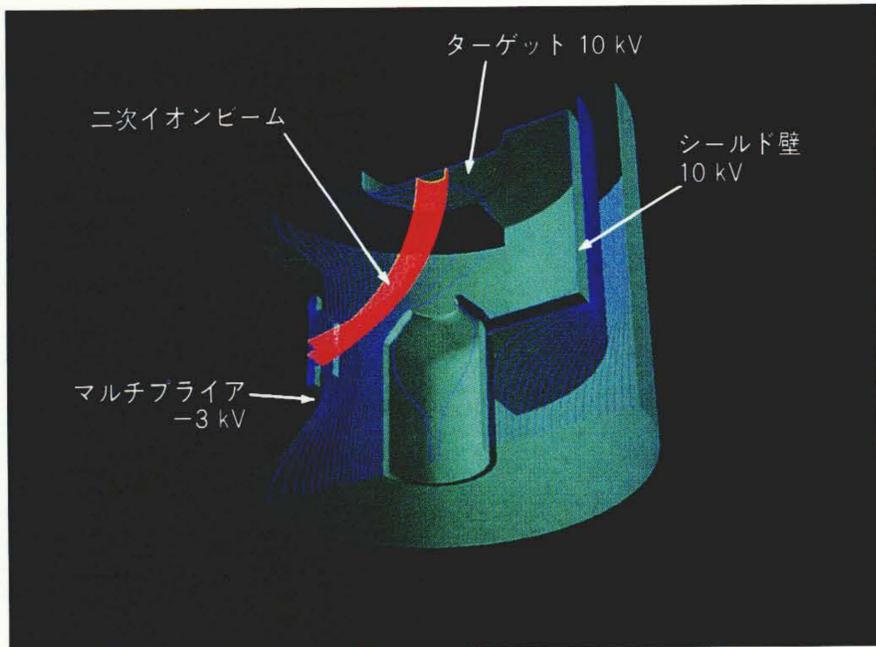


図10 後段加速検出器の解析 低エネルギー荷電粒子をいったん加速し、ターゲットに当てる。ターゲット上で発生した二次イオンを検出することにより、高感度化している。

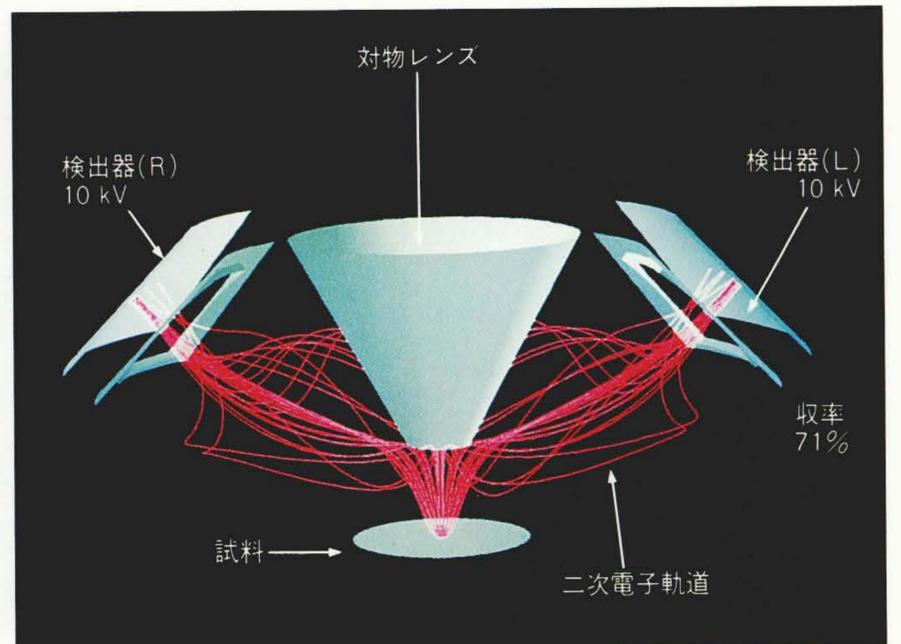
ン軌道の鳥観図を図10に示す。この検出器は、マルチプライアの存在によって、非軸対称形状となっている。解析した電圧条件は、一次負イオンビームをターゲットに当て、二次正イオンをマルチプライアに取り込む場合である。二次正イオンはターゲットの中心より、半径7 mmの範囲から垂直に5 eVで出射するとした。また、面对称性を利用し $\frac{1}{2}$ セクタを解析した。この結果、二次正イオンは、効率よく偏向、収束し、収率を100%にできることがわかった。

3.3 走査電子顕微鏡の二次電子検出部

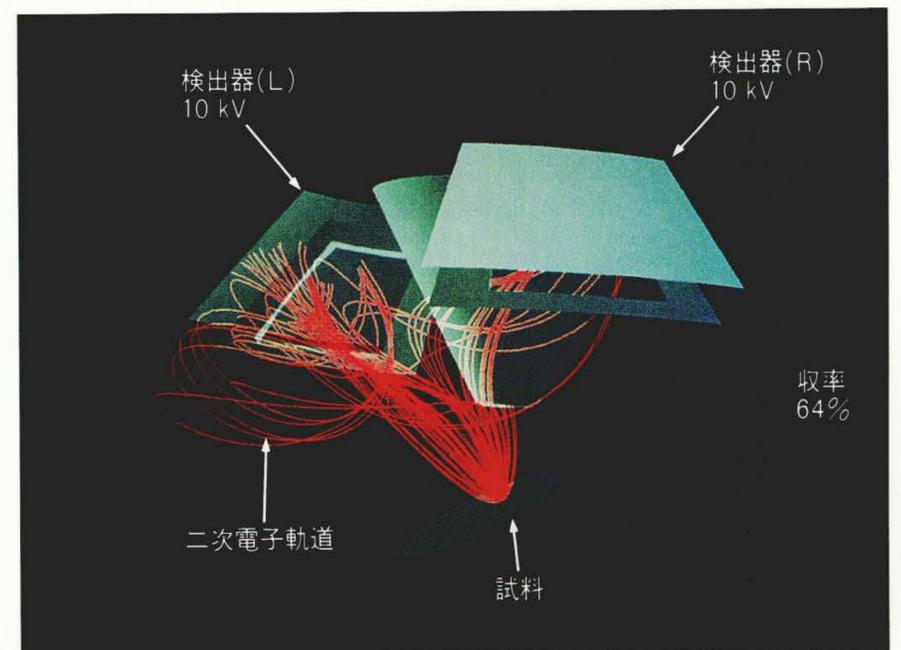
SEM(走査電子顕微鏡)は、応用分野の拡大に伴い、市場ニーズも多様化しており、その一つに半導体のサブミクロン加工プロセス用外観評価・寸法評価装置がある。この装置は、通常のSEMと同様にナノメートルオーダまで細束化した一次電子ビームを走査しながら試料に照射し、発生した二次電子を二次電子検出器でとらえる。特に各種パターンを三次元的に評価するため、2個の二次電子検出器を備え、一次電子ビームに対して試料を傾斜する機能を持つが、傾斜とともに二次電子の収率が低下する。解析結果を図11に示す。二次電子は試料の中心から初期エネルギー5.0 eVで角度分布を持って出射するとした。試料を傾斜しない場合〔同図(a)〕の収率71%に対し、30°傾斜した場合〔同図(b)〕、左右対称に取り付けた検出器からの電界が打ち消し合う対称面付近から二次電子が散逸し、64%まで低下することがわかった。対称面付近に-200 Vを印加した反射電極を取り付けた場合〔同図(c)〕では、対称面付近の二次電子が反射電極で反射されて検出器に取り込まれ、収率が90%まで向上できる見通しを得た。

3.4 カラーブラウン管電子銃

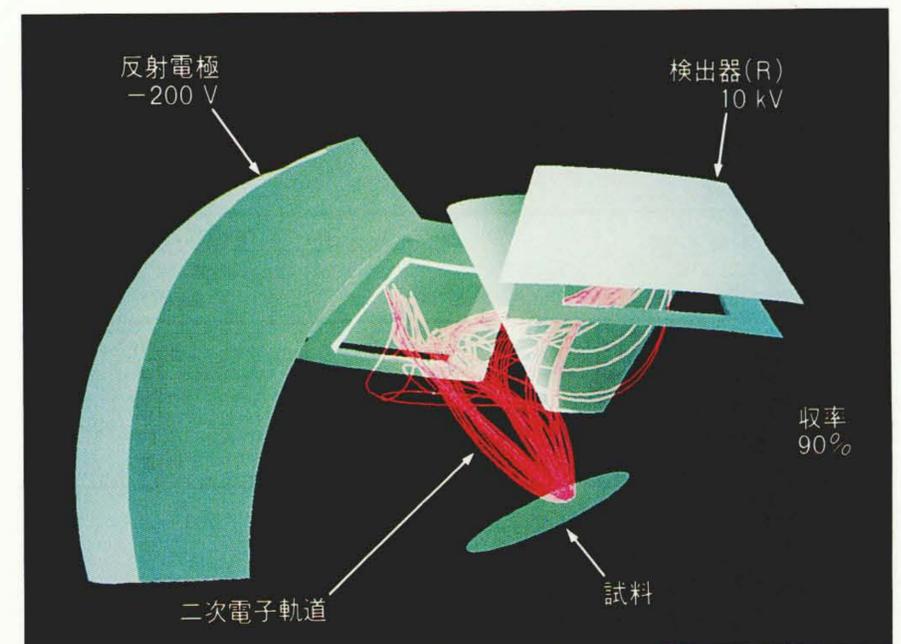
B-UPF形軸対称電子銃の電極配置およびカソード電流2 mA時の電子銃内部と偏向領域の軌道解析結果を、それぞれ図12(a), (b), (c)に示す。カソードから出射したビームは、プ



(a) 試料の傾斜がない場合



(b) 30°傾斜した場合



(c) 反射電極を設置した場合

図11 走査電子顕微鏡の解析 試料を傾斜させると二次電子の収率が低下する。反射電極の設置によって収率を向上できる。

リフォーカスレンズと主レンズにより画面上にスポットを形成する。この解析では、最大電流密度の1%から3%程度のハローの生成消滅が定量的に再現された。表1に示すように、最小スポット径の計算値は実験値と15%以内で一致した^{11), 12)}。

また、このプログラムの計算時間を表2にまとめて示す。使用計算機はHITAC S-820/60, 格子点数は 3.3×10^5 , 軌道本数は約9,600本であり、電位計算と軌道計算の反復は7回である。ベクトル化によって計算時間を約 $\frac{1}{17}$ に短縮した。

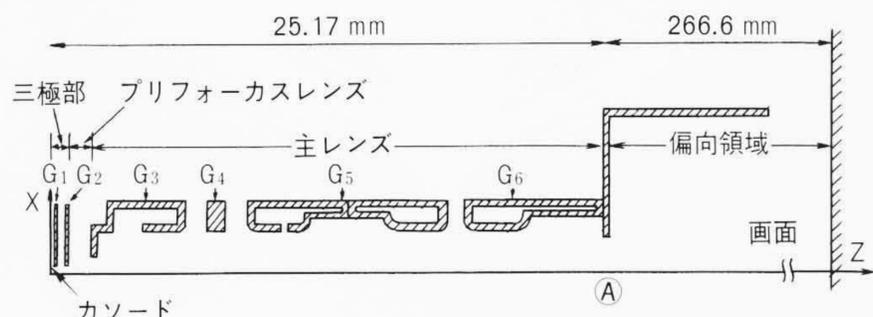
4 結 言

複雑形状の取り扱いが容易なBoundary-Fit曲線座標変換法に基づいて開発した、三次元荷電粒子軌道解析手法について述べた。スーパーコンピュータ向けの電位計算、軌道計算アルゴリズムの開発により、従来、解析が困難であった複合立体形状の電極系が、実用的な主記憶容量と計算時間内で解析できるようになった。

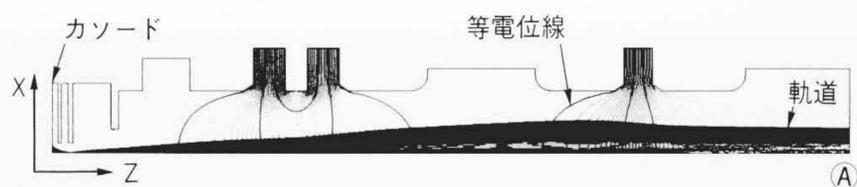
今後、操作性、汎用性を向上した解析システムの構築により、適用製品の拡大を図っていく考えである。

参考文献

- 1) J.H. Whealton, et al. : A Finite Difference 3-D Poisson-Vlasov Algorithm for Ions Extracted from a Plasma, J. Comput. Phys., 63, pp.20~32(1986)
- 2) 太田, 外 : イオンビームの三次元コード, 核融合研究52, No.1, 54~66(1984)
- 3) 関原, 外 : 境界要素法による電子軌道解析, 境界要素法論文集, Vol.1, 151~156(1984)
- 4) J.f. Thompson, et al. : Automatic Numerical Generation of Body-Fitted Curvilinear Coordinate System for Field Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies, J. Comput. Phys. 15, pp.299~319(1974)
- 5) 村田, 外 : 工学における数値シミュレーション, 166~178, 丸善(1988)
- 6) 小瀬, 外 : プラズマイオン源ビーム引出し系の三次元イオン軌道解析手法, 電気学会論文誌107-A, No.7, 323~330(1987)
- 7) 上西, 外 : 半導体設計用ビジュアルシミュレーションシステム, 電気学会 回路とシステム研究会, NA61-9-5(Sep. 1986)
- 8) K. Miki, et al. : Numerical Solution of Poisson's Equation with Arbitrarily Shaped Boundaries Using a Domain Decomposition and Overlapping Technique, J. Comput. Phys., 67, 2, pp.263~278(Dec. 1986)
- 9) 村田, 外 : スーパーコンピュータ, 147, 丸善(1985)
- 10) 小瀬, 外 : Boundary-Fit曲線座標変換法による三次元ビーム軌道解析, 電気学会 静止器高電圧合同研究会資料, SA-89-28(1989)
- 11) T. Takagi, et al. : A New Approach to Electron Beam Analysis Using a Domain Decomposition and Overlapping Method in a Three-Dimensional Boundary-Fitted Coordinate System, Applied Numerical Mathematics 3, pp.305~316(1987)
- 12) Y. Ose, et al. : 3-D Electron Optics Simulation Method for Cathode Ray Tube, IEEE Trans. on Mag. Vol.24, No.1, pp.552~555(1988)
- 13) 樋口, 外 : Boundary-Fit曲線座標変換法による三次元荷電粒子軌道解析, シミュレーション学会 第11回計算電気電子工学シンポジウム(1990)



(a) 電極配置



(b) 電子銃内部の軌道



(c) 偏向領域の軌道

印加電圧
カソード(60 V), G₁(0 V), G₂(662 V), G₃(7,500 V)
G₄(23,000 V), G₅(7,500 V), G₆(23,000 V)

図12 カラーブラウン管電子銃の解析 カソード面から画面までの一貫した解析により、電子ビームの最小スポット径の評価が可能となった。

表1 ビームスポット径の比較 最小スポット径の計算値は実験値と15%以内で一致した。

カソード電流量 (mA)	ビームスポット径(mm)	
	実験値	計算値
4.0	3.1	3.0
2.0	2.0	2.3
0.5	0.9	0.8

表2 スカラーとベクトル計算時間の比較 ベクトル化により、計算時間を約 $\frac{1}{17}$ 以下に短縮している。

	スカラー計算 時間S (min)	ベクトル計算 時間V (min)	加速率 S/V
電位計算	452.4	25.5	17.7
軌道計算	18.5	2.7	6.9
合計	470.9	28.2	16.7