小特集

イオン源の数値シミュレーション技術の進展と応用

Progress and Application of the Numerical Approaches for Ion Sources

1. はじめに

1. Introduction

柴田崇統,吉田雅史^{1)*} SHIBATA Takanori and YOSHIDA Masafumi^{1)*} 高エネルギー加速器研究機構,¹⁾山口大学 (原稿受付:2020年6月20日)

1.1 イオン源の用途・構造と仕組み

1.1.1 イオン源の用途

イオン源は、核融合プラズマ加熱、大型加速器、がん治 療など医療機器、探査衛星のエンジン、イオン注入など半 導体製造など、多分野における粒子源として用いられる. 核融合や医療(陽子線・ホウ素中性子捕捉治療などのがん 治療)分野では、核融合反応を起こすためや、陽子線・中 性子線の生成のために、水素ガスを導入したイオン源が用 いられることが多く、正イオン(陽子)または負イオン ビームが引き出される.加速器の場合、陽子加速器であれ ば、同様に水素イオン源が用いられるが、研究対象となる 反応過程によって多様なガス種が使用される.探査衛星の エンジンなどでは、プラズマ点灯が容易であることから、 アルゴンやキセノンが主に用いられる.イオン注入では、 半導体に不純物として含まれるホウ素やアルミニウム、リ ンなどのイオンビームが生成される.

1.1.2 イオン源の構造・ビーム生成の仕組み

イオン源の構造は用途によっても多様だが,一般的には 金属製のチャンバ,ガス導入系,プラズマ点灯のためのパ ワー入力系(フィラメント,高周波アンテナなど),プラズ マ閉じ込め用の磁石,イオンビーム引出用の孔の空いた電 極によって構成される.

チャンバ内部にガスを導入し,放電開始電圧(アーク電 圧や高周波の電磁場)を印加することでプラズマが生成さ れる.プラズマは,カスプ磁石やコイルなどによる磁場に よってチャンバ内に閉じ込められる.正イオン源などの場 合,プラズマ中には正イオンと電子のみが主として存在す る.イオン源チャンバの一端には,孔が空けられた電極が複 数枚取り付けられており、電極間に(一般的に10-100 kV) の静電圧を印加することで目的のイオンをビームとして引 き出すことができる.図1には、一般的なイオン源の模式 図を示した.

1.2 水素の負イオン(H⁻)

1.2.1 負イオンとは?

水素の場合を例にとると、原子核(陽子)と外殻電子1 つが電気的に釣り合うことで、原子の状態を形成する.こ のとき電子は、水素の基底準位のエネルギーを占め、その エネルギー利得は13.6 eV である(図2).この原子に新た な電子が付着することで、負に帯電したイオン(負イオは 最外殻の電子状態1つに空きがあり、そこに電子が付され ることで全体として比較的に負イオンになりやすい.一 方、水素やアルカリ金属(I族)元素のように、同じ周期の



High Energy Accelerator Research Organization, Tsukuba, IBARAKI 305-0801, Japan *現在の所属:宇部工業高等専門学校

corresponding author's e-mail: takanori.shibata@kek.jp



図2 負イオンの構造とエネルギー準位の概念図.

中で原子核の価数が小さいものでも,最外殻に別の電子が 1つ入ることで,エネルギー的により安定した状態を作る ことができる.新たに1つ電子を付した際のエネルギー利 得を,電子親和力と呼び,これが正の元素は負イオンにな り得る.

1.2.2 なぜ水素負イオンを用いるのか?

核融合の中性粒子ビーム入射(Neutral Beam Injection; NBI)加熱では,数100 keV-1 MeV まで加速したイオン ビームを中性化してコアプラズマ中に入射する.ビーム中 性化は,中性ガスを充填したセル内にビームを通し,イオ ンの運動量を中性粒子に移行させるが,MeVクラスのビー ムの場合,正イオンによる中性化効率は0に近い.負イオ ンの場合は,中性化効率が60%近いため,大強度 NBI では H⁻が採用されている[1].

大型陽子加速器や医療用加速器などでは,線形加速器 (リニアック)で直線的に加速したイオンビームを,シンク ロトロンなど円形加速器内で周回する陽子に加えること で,高輝度のビームバンチを形成する.このとき,周回す る陽子ビームに,新たに陽子を加えようとするとクーロン 反発によって大部分が加速空洞内部に損失してしまう.損 失を防ぐため,最近の大強度加速器ではH⁻のビームをリ ニアックで加速し,周回する陽子ビームと合流させてか ら,ストリッパフォイルなどで電子を剥ぎ取る方式を取る.

このように、H⁻生成の利点は、特に高エネルギーの物理 分野で顕著にみられる.これらの領域では、ビーム大強度 化が目的とされることが多く、負イオン源内部で如何に大 量のH⁻を作り、効率よく引き出すかが、装置全体の性能を 左右する[2].

1.2.3 負イオン源の構造

水素の負イオン源は, 正イオン源(陽子源)と異なり, 水 素原子や正イオンに対して電子付着を行う機構が必要であ る.これを実現するため, 負イオン源にはフィルター磁場 と呼ばれるイオン源チャンバを横切る磁場を印加する.こ の磁場によりイオン源プラズマは2つの領域に分割され る.パワー入力系近傍では, 高温・高密度のドライバ領域 プラズマが生成され, それがフィルター磁場を横切って引 出孔近傍に拡散することで, 低温・低密度の引出領域プラ ズマが形成される. 水素負イオンの生成過程には、(1)体積生成過程[3]、お よび(2)表面生成過程[4]の2通りの方法がある.

反応過程の詳細については第2章で述べるが,(1)H⁻体 積生成では,まず振動励起準位の高い水素分子を生成す る.これは,比較的エネルギーの高い電子と基底状態の分 子の衝突による励起によって積極的に起こる(振動励起過 程).体積生成の2番目の(解離性付着)過程では,振動励 起分子 H₂(v')にエネルギーの低い電子が付着すること で,H⁻が生成される.上記の過程を促進するため,負イオ ン源には高温と低温のプラズマ領域を形成する.**図3**に は,体積生成型負イオン源における H⁻生成機構の模式図 を示した.

一方,図4に示す(2)H⁻の表面生成過程でも,この2温 度領域が活用される.表面生成過程では,セシウム (Cs)などをチャンバ内に導入し,イオン源引出部の電極 (モリブデンなど)に蒸着させることで,金属表面の仕事関 数を低下させる.この表面に,水素原子や正イオンが入射 することで,金属中の自由電子が遷移し,H⁻が生成され る.表面生成H⁻の親粒子である原子や正イオンは,ドライ バ領域の高温・高密度プラズマで積極的に生成される.一



図3 体積生成型イオン源における H⁻生成機構.



図4 表面生成型イオン源における H⁻生成機構.

方,引出孔付近で生成された負イオンは,電子温度が高い と電子衝突によって破壊されるため,引出領域では,プラ ズマが低温である必要がある(表面生成型イオン源の場合 も,体積生成過程は起こるため,引き出されるビーム電流 の数割程度は体積生成由来のH⁻である).

体積生成,表面生成型の負イオン源いずれにしても,ド ライバ領域でプラズマ生成を担うのは主として電子と正イ オンである.そのため,負イオン源のプラズマが特別不安 定ということは無い.しかし,ビーム引出孔近傍の電位分 布には,電子,正イオン,H⁻による空間電荷分布が影響す るため,ビーム品質にはH⁻輸送過程の制御が重要となる.

1.3 負イオン源のシミュレーション

1.3.1 シミュレーション立上げの背景

冒頭でも述べた通り,水素の負イオンは,核融合 NBI のMeVクラスビームや,大強度陽子加速器など,高エネル ギーの物理領域で重要な役割を果たす.これらの分野にお ける大型装置では,ビーム強度の増加や,エミッタンス低 減(ビームの高収束性)などのビーム性能向上がしばしば 目的とされている.上記のために,イオン源内部の物理機 構を定量的に理解し,既存の装置を如何に改良すればよい か指針を得る上で,イオン源のシミュレーションは有効な 手段と言える.本小特集では,核融合分野とも関連が深い 水素の負イオン源を例として,負イオン源内部の物理機構 と対応したシミュレーションモデルを解説していく.

負イオン源のシミュレーションは、1990年代に核融合 NBI装置として、仏Ecole Polytechnique で試験が行われて いた Camembert III イオン源[5]における実験結果を解析 するためにHatayamaらによって立ち上げられた[6,7].こ のとき、核融合ダイバータプラズマの挙動の解明に活用さ れていた中性粒子輸送モデルや Monte-Carlo 法による H⁻ 輸送モデルが初めてイオン源分野に導入された.イオン源 内部の原子・分子および体積生成された H⁻の輸送過程を 解析することで、効率の良いH⁻ビーム引出のためには、引 出孔付近のプラズマ温度が 0.5-1 eV である必要性を数値 的に明らかにした.

1.3.2 イオン源シミュレーションの実践

上記結果を元に、シミュレーションの活用によって装置 設計指針を得るため、2000-2010年ごろまでは、主として 核融合NBI用の水素負イオン源を対象とした種々の計算モ デルが開発され、あるいはダイバータプラズマ解析から導 入された.H⁻の輸送モデルでは、荷電粒子の空間電荷効果 によるポテンシャル場の影響を計算するためのParticle-In-Cell (PIC) 法と、衝突を含めた粒子の輸送過程を扱うため の Monte-Carlo Collision (MCC) 法を統合させた PIC-MCC モデルが開発された[7].また、2006年ごろから、大型イ オン源のプラズマを対象に、ドライバ領域における電子の 輸送モデリングが、日本原子力研究開発機構 (JAEA)、核 融合科学研究所 (NIFS) 協力のもと開発され、上述の中性 粒子輸送、H⁻輸送モデルと統合された[8].H⁻輸送モデ ルは、従来の PIC-MCC モデルにスケーリング則を適用す ることで、計算領域・粒子数が飛躍的に増加した.これに より、イオン源引出孔近傍で生成した表面生成H⁻の電荷 分布を考慮した2次元ポテンシャル場を輸送過程に取り入 れられるようになった[9,10].

2010年以降,核融合用イオン源では、ラングミュアプ ローブや分光計測などのイオン源実験による結果との再現 性を得るため、電子の輸送モデルに実体系情報を取り入れ (後にKEIO-MARC;<u>K</u>inetic model of <u>E</u>lectrons in <u>IO</u>n source with <u>Multi-cusp ARC</u> discharge) コードと命名),また中性 粒子輸送モデルはダイバータ解析に倣い、原子・分子励起 準位を計算する衝突輻射モデルと統合された[11-14].ま た,H⁻輸送モデルでは3次元 PIC-MCC モデルが開発さ れ、プラズマ中のビーム引出境界にあたる等電位面(プラ ズマメニスカス)の形状によって、引き出されるH⁻の発散 (ハロ)成分が形成される機構を解明した[15,16].

核融合用イオン源シミュレーションから得られた知見 は,他分野のイオン源へと応用された.欧州原子核研究機 構(CERN)との共同研究では,大型ハドロン衝突型加速 器(LHC)の線形加速器LINAC4用に開発が進められる高 周波放電型(RF-ICP)イオン源に対し,チャンバ内の時間 変化する電磁場分布の影響を計算可能としたEM(Electro-Magnetic) PIC-MCCモデルが確立された[17,18].ま た,前述のKEIO-MARCコードは,医療応用として,ホウ 素中性子捕捉治療や陽電子断層撮影に用いられる体積生成 型負イオン源のプラズマ分布解析に用いられ,H⁻ビーム 出力増加に向けた設計指針検討に活用されている[19,20]. 上記,近年のシミュレーション応用の成果は,文献[21]に まとめられている.

1.3.3 イオン源物理過程との対応

図5には、イオン源プラズマの主な物理機構・領域と、 対応するシミュレーションモデルを示した.第2章では、 イオン源全体に関わる原子・分子過程のモデリングを紹介 する.ここでは、プラズマの生成に関連する反応過程のほ か、H⁻体積生成過程や分光計測による結果を理解するた めの励起原子・分子に対する解析も説明する.

第3章では、ドライバ領域と呼ばれるアーク電圧や高周 波などを入力してプラズマを生成する領域のシミュレー ションを紹介する.この領域では、放電用のフィラメント や高周波アンテナ、カスプ磁場等の影響で、プラズマのエ ネルギー分布関数は平衡状態のMaxwell分布から逸脱する ため、個々の粒子に着目した解析が行われる.この結果を、 第2章の原子・分子モデルと組み合わせることにより、 H⁻体積生成に必要な振動励起分子や、H⁻表面生成の親粒 子である水素原子・正イオンの粒子束が計算可能である.

表面生成型負イオン源では、イオン源引出部の電極にCs などを蒸着させることで、金属内部の自由電子が外部に遷 移し易い状態を作り出す.H⁻の生成効率は、Csが電極表 面に0.5-0.6 原子分蒸着し、かつCsと電極間に水素原子が 局在化することで促進される.上記、金属表面からプラズ マ中の原子・正イオンへの電子遷移に関するシミュレー ションは、第4章にて解説される.

生成された H⁻は、イオン源静電加速部に印加された高 電圧により、ビームとして引き出される.ビームの初期発



図5 負イオン源内の領域と、本特集におけるモデリング解説の対応.

散角,指向性が電極設計と適合していないと,ビームハロ と呼ばれる周辺部のイオンが電極と衝突し,絶縁破壊や電 極自体の損傷を引き起こす.ビーム発散角は,イオン源内 部におけるプラズマメニスカスの形状によって決まる.こ の形状は,電極間の印加電圧と制限電流と関係を記述した Child-Langmuir 則,およびプラズマ中の空間電荷効果に よって決まる.第5章では,引出孔周辺部のモデリングに より,電位分布とプラズマ輸送,H⁻生成過程を同時に計算 する手法を紹介する.

参考文献

- [1] C.F. Barnett, Atomic Data for Controlled Fusion Research, ORNL-6086 v1 (1990).
- [2] 日本原子力研究所東海研究所大強度陽子加速器施設開 発センター大強度陽子加速器プロジェクトチーム, JAERI-Tech 2003-044 (p.1-788),日本原子力研究所.
- [3] M. Bacal and G.W. Hamilton, Phys. Rev. Lett. 42, 1538 (1979).

- [4] Yu.I. Belchenko *et al.*, Investiya of USSR Academy of Science Ser. Fiz. **37**, 2573 (1973).
- [5] M. Bacal *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **67**, 1138 (1996).
- [6] A. Hatayama et al., Rev. Sci. Instrum. 73, 910 (2002).
- [7] T. Sakurabayashi et al., J.Appl. Phys. 95, 3937 (2004).
- [8] N. Takado et al., J. Appl. Phys. 103, 053302 (2008).
- [9] A. Hatayama, Rev. Sci. Instrum. 79, 02B901 (2008).
- [10] S. Kuppel et al., J. Appl. Phys. 109, 013305 (2011).
- [11] K. Miyamoto et al., J. Appl. Phys. 93, 845 (2003).
- [12] T. Shibata et al., J. Appl. Phys. 114, 143301 (2013).
- [13] T. Yamamoto et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B125 (2014).
- [14] S. Fujita et al., AIP Conf. Proc. 2011, 050016 (2018).
- [15] K. Miyamoto et al., AIP Conf. Proc. 1515, 360 (2013).
- [16] S. Nishioka et al., J. Appl. Phys. 119, 023302 (2016).
- [17] M. Ohta et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B113 (2014).
- [18] K. Nishida et al., J. Appl. Phys. 119, 233302 (2016).
- [19] M. Onai et al., Rev. Sci. Instrum. 87, 02B127 (2016).
- [20] S. Yamada et al., AIP Conf. Proc. 2052, 969994 (2018).
- [21] A. Hatayama et al., New. J. Phys. 20, 065001 (2018).



2. イオン源プラズマの原子・分子過程

2. Atomic and Molecular Processes in Ion Source Plasmas

柴田 崇統,澤田 圭 司¹⁾ SHIBATA Takanori and SAWADA Keiji¹⁾ 高エネルギー加速器研究機構,¹⁾信州大学 (原稿受付:2021年6月20日)

核融合プラズマ加熱や大型陽子加速器・ホウ素中性子捕捉治療機器などに応用される水素負イオン源で は、プラズマパラメータが核融合ダイバータプラズマと近く、電離や解離などの原子・分子過程が類似している ことから、核融合周辺プラズマモデリングで培われた水素原子・分子の衝突輻射モデルや中性粒子輸送コードが 大いに活用されている.本章で解説するイオン源の中性粒子シミュレーションモデルでは、負イオン源に特徴的 な負イオンの体積生成過程・表面生成過程や、それらに影響を与える電子・イオンの電磁場中での輸送・非平衡 エネルギー分布の影響を取り入れるモデル拡張が近年(といっても15年くらい)の間に進められてきた.また、イ オン源分光計測結果を再現するモデル開発を行うことで、シミュレーションからイオン源設計指針を与えること が可能となった.

Keywords:

ion source, negative ion, atomic and molecular processes, collisional radiative model, simulation

2.1 負イオンの体積生成と表面生成

負イオン源プラズマ中の主要な原子・分子過程を表1に 示す.負イオン源におけるH⁻生成方法は、体積生成と表面 生成の2種類に分けられる.体積生成による負イオンのみ をビームとして引き出すイオン源を体積生成型負イオン源 とよび、一方で表面生成によって生成された負イオンを引 き出すものを表面生成型イオン源とよぶ.

2.1.1 体積生成型負イオン源

体積生成型負イオン源では、主に、水素分子への電子の 解離性付着(**表**1の過程(3))により負イオンが生成される [1].振動量子数がv' > 7の高振動励起分子では小さな振 動量子数の分子より解離性付着が数桁も起こりやすい.高 振動励起分子は、電子衝突により電子基底状態 H₂(X¹ Σ_g^+)から生成された励起分子H₂(B¹ Σ_u^+ or C¹ Π_u)が光を放出してH₂(X¹ Σ_g^+)に戻るときに生成さ れる(図1).このためプラズマ生成部では励起分子の生 成が可能となるように10 eV 以上の高い電子温度が実現す るように設計される.

電子の解離性付着は電子のエネルギーが小さいほど起こ りやすい.振動励起分子 H_2 (v' > 7) は電磁場に捉われる ことなく拡散して低電子温度の引出領域に到達し,解離性 付着により H^- が生成される.

2.1.2 表面生成型負イオン源

表面生成型負イオン源の多くにはセシウム(Cs)オーブ ンが取り付けられており、高温蒸気として導入されたCs がイオン源電極(モリブデンなど)に蒸着すると電極金属 表1 負イオン源における主な原子・分子過程(添え字の*は励 起準位を表す).

体積生成型イオン源で特に重要となる反応過程	
$H_2\big(X^1\Sigma_g^+;v\big) + e^- \rightarrow H_2^*(B^1\Sigma_u^+ \text{ or } C^1\Pi_u;v'') + e^-$	(1)
$H_2^*(B^1\Sigma_u^+ \text{ or } C^1\Pi_u;v^{"}) \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+;v^{\prime}) + photon$	
$H_2\big(X^1\Sigma_g^+;v\big)+e^-\to H_2\big(X^1\Sigma_g^+;v'\big)+e^-$	(2)
$H_2(X^1\Sigma_g^+;v'>7) + e^- \rightarrow H^- + H$	(3)
表面生成型イオン源で特に重要となる反応過程	
$H_2\big(X^1\Sigma_g^+;v\big) + e^- \rightarrow H_2^*\big(b^3\Sigma_u^+\big) + e^-$	(4)
$\rightarrow 2H + e^{-}$	
$H_2\big(X^1\Sigma_g^+\big) + e^- \rightarrow H + H^* + e^-$	(5)
$H_2(X^1\Sigma_g^+) + e^- \rightarrow H + H^+ + 2e^-$	(6)
$H + e^- \rightarrow H^+ + 2e^-$	(7)
$H_2 + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$	(8)
$\mathrm{H_2} + \mathrm{H^+} \rightarrow \mathrm{H_2^+} + \mathrm{H}$	(9)
$\mathrm{H_2^+} + \mathrm{e^-} \to \mathrm{H} + \mathrm{H^*}$	(10)
$\mathrm{H_2^+} + \mathrm{e^-} \rightarrow \mathrm{H} + \mathrm{H^+} + \mathrm{e^-}$	(11)
$\mathrm{H_2^+} + \mathrm{H_2} \rightarrow \mathrm{H_3^+} + \mathrm{H}$	(12)
$\mathrm{H_3^+} + \mathrm{e^-} \rightarrow \mathrm{2H} + \mathrm{H^+} + \mathrm{e^-}$	(13)
$H_3^+ + e^- \rightarrow 3H$	(14)
$H_3^+ + e^- \rightarrow H_2 + H$	(15)
$H, H^+, H_2^+, H_3^+ + wall \rightarrow H^-$	(16)

High Energy Accelerator Research Organization, Tsukuba, IBARAKI 305-0801, Japan

corresponding author's e-mail: takanori.shibata@kek.jp



図1 水素分子のポテンシャル曲線、およびH⁻体積生成過程にお ける振動励起分子生成の模式図.

表面の仕事関数が低下する.ここに入射した水素原子や正 イオンが金属中から自由電子を受け取って負イオンが生成 される[2,3](表1の過程(16)).電極金属表面の過程につ いては、本小特集第4章にて詳細な解説がなされている.

2.2 原子・分子過程のモデリング

負イオン生成量の評価のためには、体積生成型では振動 励起分子密度の空間分布、表面生成型では水素原子・各種 正イオンの密度の空間分布とそれら粒子の速度分布が重要 である.表1ではこの観点から反応を整理している.これ らの反応の起こりやすさを表す反応断面積の情報は文献 [4]にまとめられている.ここではこれらの諸量を算出す る際に使われる衝突輻射モデルと中性粒子輸送コードを簡 単に説明する.

2.2.1 水素原子と水素分子の衝突輻射モデル

例えば表1の過程(7)では基底原子からの直接的な電離 に加えて励起原子からの電離もある.この計算では各励起 状態の原子密度を求める必要がある.分子過程でも同様に 励起状態を考慮する必要がある.

水素原子衝突輻射モデルは、電子衝突や光の自然放出に よる励起原子密度の時間変化を記述した連立微分方程式か らなる.これを解くと各励起状態の原子密度が算出され る.また得られた励起原子密度を用いて、励起状態を経由 する電離や再結合の大きさや、励起原子からの発光強度が 計算される.連立微分方程式を解く際、通常は基底原子密 度、電子温度・密度を与え、これらの時間変化に対する励 起原子密度の緩和時間が短いことから、これらのパラメー タの元での定常状態を仮定して励起原子密度を求める(準 定常近似).

核融合分野では、水素プラズマ中の Balmer 線の発光強 度の計算のため、澤田、藤本らによって分子解離に伴う励 起原子生成($H_2+e^- \rightarrow H+H^*+e^-$;添字の*は励起準位 を表す)がモデルに追加された[5].核融合プラズマで計 測された水素原子 Balmer 線発光強度をこのモデルを用い て解析したところプラズマ周辺部に中性水素分子が存在す ることが示唆され[6],水素分子の解離や電離の理解のた め,電子励起状態のみを区別したモデルが開発された[7]. その後,非接触ダイバータプラズマにおける分子活性化再 結合の理解のため,さらに振動励起状態を区別したモデル が開発された[8].分子のモデルの整備はその後 Wünderlich, Fantz らによっても進められている[9].

体積生成過程による負イオン生成では、分子について電 子・振動状態のみを区別した扱いがなされてきたが、解離 性付着による負イオン生成の速度係数は回転状態により数 桁も変化することが知られている.電子・振動・回転状態 を区別するモデルは、最近、澤田らにより開発されている [4].

2.2.2 中性粒子輸送コード

中性粒子輸送コードでは,粒子源から放出された原子や 分子を,表1の反応を考慮しながら追跡する.分子放出の 位置・速度・角度や反応の生起などに乱数を用いて多数個 の粒子の追跡を行い,用意した空間メッシュや速度空間 メッシュを用いての追跡粒子の運動の情報を集計する.こ れにより各種の粒子密度や速度分布を算出する.

従来,負イオンプラズマでは,基底状態原子と電子基底 状態の振動状態v=0の分子を追跡粒子としていたが,畑 山らは核融合用負イオン源Camembert IIIを対象とし て,振動励起分子も追跡粒子とした中性粒子輸送コードの 開発を行い,負イオンの生成を調べた[10].プラズマ中の 原子や分子が感じる電子温度・密度は,それらの空間的な 運動により刻々と変化する.追跡粒子の各位置での励起状 態を経由する生成・消滅は衝突輻射モデルで計算される. 追跡粒子とプラズマ粒子の弾性散乱については,現在コー ドの整備が進められている.

イオン源用途では、柴田らにより、反応レートの計算に 荷電粒子の計算モデル(第3章)から得られたアーク放電 型イオン源の非平衡電子速度分布関数を代入するモデル改 良やイオン源壁表面における粒子反射係数を考慮したモデ ル改良がなされている[11-13].計算機コードの応用例に 興味のある読者は参照されたい.

2.3 高周波放電型・表面生成型イオン源 CERN LINAC4 における分光計測とシミュレーション

これまで負イオン生成を念頭に置いて原子・分子のモデ ルを示したが、これらのモデルは原子・分子の発光強度の 計算にも利用される.ここではその応用について紹介す る.

イオン源のプラズマ挙動解明・装置設計への応用にとし て欧州原子核研究機構(CERN)における大型加速器LHC の線形加速器(LINAC4)用イオン源の解析を紹介する. LINAC4用イオン源は、高周波放電型(Radio Frequency; RF)表面生成型イオン源である.

図2に、LINAC4用に開発が進められている表面生成型 RF 負イオン源の模式図を示す.イオン源チャンバ周囲に 取り付けられた RF アンテナコイル(図では6 turn)に $\omega_{RF} = 2$ MHz,振幅 $V_0 = 100 - 200$ Vの交流電圧を印加する ことで、高周波プラズマを生成する.また、アンテナコイ



図 2 CERN LINAC4用 RFイオン源、および外部 RF アンテナに印 加電流の時間変化と特徴的な位相 A、B.

ルに流れる交流電流の1周期にわたる時間変化と後述の議 論で発光線強度ピークに対応する位相(A, B)を図2下部 に示す.従来,LINAC4イオン源では,RFパワー投入時の プラズマ点灯に関する不安定性があり,連続運転を行う際 の稼働率が8割程度に留められる問題があった.この原因 をシミュレーションから探ることが慶應大グループに依頼 された.

RF イオン源のプラズマ生成機構は、大きく 2 段階に分けられる. 図3 左側に示す「Eモード(容量結合プラズマ)」状態では、アンテナコイルに印加した交流電流 J_{coil} によって、誘導結合型(Inductively Coupled Plasma; ICP)-RF電磁場が形成される.このとき、プラズマ電流 $J_{\text{plasma},\theta}$ は、ICP-RF電場 E_{θ} による荷電粒子の加速を受け、イオン源周(θ)方向に形成される.イオン化が十分起こり、プラズマ密度が成長すると、 $J_{\text{plasma},\theta} \gg J_{coil}$ の状態に移行する.すると、ICP-RF電磁場の形成は、 J_{coil} ではなく $J_{\text{plasma},\theta}$ によって担われる.一方、 $J_{\text{plasma},\theta}$ 自身は ICP-RF電場による加速を受けるために共鳴状態が形成され、プラズマ密度は飛躍的に成長する.これを「Hモード(誘導結合プラズマ)」と呼ぶ.

図2に示すイオン源チャンバ2軸上の分光計測ポートに は、光ファイバ・光学フィルタを介して、光電子増倍管 (PMT)が取り付けられ、その出力を測定することで Balmer-a 光に対する強度とその時間変化を調べた.光学



 図3 RF プラズマEモードおよびHモードにおけるコイル電流, プラズマ電流および電磁場の振動方向.

フィルタは Balmer-a 光波長 650-660 nm のみを透過する ものであり, PMT 入射窓に取り付けた. PMT はオフライ ンで, 複数のレーザー光, タングステン(W) ランプ(発光 強度が既知の光源)を用いた波長校正および絶対感度校正 を行った.絶対感度校正では, 2次電子電流値に対する入 射光子数の依存性グラフを取り,実際のイオン源プラズマ 診断時に PMT に入射する Balmer-a 光子の総数を測定可能 とした.この計測ポートに対し, Balmer 発光線強度を計測 したところ, 図4に示すような,大小の非対称な強度ピー クが RF の1周期の間に現れた.図3に示したように RF プラズマでは1周期の間にICP-RF 電場*E*₀ が2回最大値を 取ることから,プラズマ密度の変化に伴い, Balmer 発光線 も同じ強度の2つのピークを取りそうだが,軸上の分光 ポートからの計測ではそのようになっていない.

2.3.1 RF プラズマシミュレーションモデル

RF イオン源のプラズマ解析では、以下の3つのモデル を同時に扱う必要がある;

(モデル A) ICP-RF 電磁場や外部電磁場の形成過程

(モデル B) 電子・正イオンの輸送過程

(モデルC) 原子・分子の輸送過程

図5はシミュレーションモデルの模式図である.上記, (モデルA),(モデルB)では,第3章で解説されるイオ ン源ドライバ領域の荷電粒子輸送モデルが確立しており, LINAC4では,EM PIC-MCC (Electro-Magnetic Particle-In-Cell with Monte-Carlo Collisions)法に基づいた計算モデ ルが適用された.詳細な説明は第3章および参考文献[14]



図 4 LINAC4 イオン源フォトマル分光計測から得られた Balmer-*α* 線強度の時間構造.



図5 RF プラズマシミュレーションモデルの模式図.

に預けるが、EM PIC-MCC モデルでは、荷電粒子1つ1つ の運動方程式を、衝突過程(電離などの非弾性衝突やクー ロン衝突)を含めて逐次計算を行うと同時に、プラズマ電 流 J_{plasma} によってイオン源各位置に形成される ICP-RF 電 磁場を、時間変化を考慮した Maxwell 方程式より計算す る.その結果、イオン源の各位置における電子と正イオン の平均エネルギーと密度の分布を求めることができる.

(モデルC)の原子・分子の輸送過程は,前述のとおり,原子・分子の衝突輻射モデルと中性粒子輸送コードにより扱われる. EM PIC-MCC モデルから得られた電子・正 イオンの平均エネルギーと密度の空間分布をこれらに代入 することで,原子・分子密度の空間分布を求めることがで きる.この情報を再度 EM PIC-MCC モデルに代入すること で逐次計算を行う.原子・分子モデルから,さらにイオン 源各位置における Balmer-a線発光強度を算出し,分光計測 結果の解明を試みた.

分光計測で得られた Balmer 強度のピーク構造の解明の ため、軸方向(図2のZ方向)への輸送機構の可能性を検 討した.高周波アンテナコイルの端子間に印加する電圧を シミュレーション体系に取り入れ、それによってイオン源 内部に形成される容量性電場(E_2)(図6)をシミュレー ションに取り入れた[14].その結果、RFプラズマ中の電 子がZ軸方向加速され、図3に示した θ 方向のプラズマ電 流が損なわれるため、プラズマ不安定性によって点火効率 が低くなることが示唆された.図7は、イオン源に印加し た RF 1周期中のある位相 A とその逆相(位相 B)におけ る、イオン源内部の電子平均エネルギーの空間分布(計算 領域は、図2における R > 0, Z > 0領域)である.

2.3.2 水素原子密度・Balmer-α 光子生成量の空間分布シ ミュレーション

上述の中性粒子輸送コードにより,原子・分子密度の空間分布を算出した.さらに水素原子衝突輻射モデルを用いて主量子数n=3の励起原子密度を求め,Balmer-a(n=3からn=2への遷移)発光強度を算出した[15].図8に, 図7の位相A,Bにおける基底原子密度の空間分布を示す. また,図9には,イオン源各位置におけるBalmer-a発光強度分布(単位時間・単位体積当たりの光子放出)を示す. RFプラズマ中のBalmer線発光強度は,中性粒子輸送コー



図 6 RF アンテナコイルへの印加電圧によってイオン源チャン バ内部に生じる容量性電場 (*E*z)の解析結果.

ドから得られた原子密度と分子密度を用いて,電子衝突に よる基底原子からの励起原子生成および分子解離に伴う励 起原子生成を考慮した水素原子衝突輻射モデルにより計算 される.図7-9より,実験のBalmer-a線発光強度の増加 は電子の平均エネルギーの増加によることが明らかになっ た.発光強度が変化しているのは,電子温度(平均エネル ギー)とそれに伴う電離による電子密度の変化による.原 子・分子密度はこの間一定とみなせる.図10は,ビュー ポートから観測されるBalmer-a線強度のRF2周期間にわ



図7 RF プラズマシミュレーションから予測された位相 A、B における電子平均エネルギーの空間分布. 図の R=0 はイオ ン源中心軸、Z=0 は天板位置に対応する.



図 8 位相 A, B における RF イオン源内部の Balmer-*a* 線光子生 成レートの空間分布.



図 9 位相 A, B における RF イオン源内部の Balmer-α 線光子生 成レートの空間分布.

たる時間変化の計算結果である. 位相 A, B において発光 線強度ピークが現れる時間構造が実験とシミュレーション でおおよそ一致したことから, 2.3.1節末部に述べた, 容量 性電場による Z 軸方向へのプラズマ加速による RF プラズ マ H モード形成が損なわれる機構の妥当性が確認され た.本結果を踏まえ, LINAC4 イオン源では,ガス流量調 整等によるプラズマ点火効率の増強や,コイル巻き数・構 造の見直しによる容量性電場緩和対策が進められた[16].

2.4 おわりに

負イオン源における負イオン体積生成量および表面生成 量を解析する上で,原子の衝突輻射モデルおよび電子状 態・振動状態分子を扱う衝突輻射モデル,および中性粒子 輸送コードの活用は極めて重要である.このような中性粒 子に対するモデルの信頼性を得るためには,実験による測 定結果と計算結果を直接比較し,仮定した物理モデルを確 認する必要がある.本章で紹介した例では,近年核融合や 加速器分野で多く活用されるRF型負イオン源に対して分 光計測を行うとともに,衝突輻射モデル・中性粒子輸送 コード(本章)+荷電粒子輸送モデル(第3章)による計算 を行った.測定および計算結果の比較から,これらによる 計算が実験結果をおおむね再現することを確認した.

このような成果は,最近の計算機性能向上によるところ もあるが,近年の中性粒子と荷電粒子モデリング双方にお ける1つ1つのモデリング改善の積み重ねが大きく貢献し ている.

参考文献

- [1] M. Bacal and G.W. Hamilton, Phys. Rev. Lett. 42, 1538 (1979).
- [2] Yu.I. Belchenko et al., Investiya of USSR Academy of Sci-



 図10 シミュレーションによる RF サイクル 2 周期の Balmer-a 線強度の計算結果.

ence Ser. Fiz. 37, 2573 (1973).

- [3] M. Bacal and M. Wada, AIP Conf. Proc. 1515, 41 (2013).
- [4] K. Sawada and M. Goto, Atoms 4, 29 (2016).
- [5] T. Fujimoto et al., Nucl. Fusion 29, 1519 (1989).
- [6] T. Fujimoto et al., J. Appl. Phys. 66, 2315 (1989).
- [7] K. Sawada and T. Fujimoto, J. Appl. Phys. 78, 2913 (1995).
- [8] K. Sawada and T. Fujimoto, Contrib. Plasma Phys. 42, 603 (2002).
- [9] D. Wünderlich and U. Fantz, Report IPP 10/18 (2001).
- [10] A. Hatayama et al., Rev. Sci. Instrum. 73, 910 (2002).
- [11] T. Shibata et al., J. Appl. Phys. 114, 143301 (2013).
- [12] T. Shibata et al., Plasma Fusion Res. 9, 1401011 (2014).
- [13] M. Onai et al., AIP Conf. Proc. 1869, 030043 (2017).
- [14] S. Mattei et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B115 (2014).
- [15] T. Shibata et al., AIP Conf. Proc. 1655, 020008 (2015).
- [16] J. Lettry et al., AIP Conf. Proc. 1655, 030005 (2015).

●●● 小特集 ィオン源の数値シミュレーション技術の進展と応用

3. ドライバ領域におけるモデリング

3. Modeling in Driver Region

星野一生 HOSHINO Kazuo 慶應義塾大学理工学部 (原稿受付:2021年6月28日)

負イオン源内部では、アーク放電や高周波放電によりプラズマは高エネルギーテールを持った非平衡状態に ある.さらにカスプ磁場、フィルター磁場による、複雑な磁場形状における輸送を考える必要がある.そのため、 負イオン源内のプラズマ解析には運動論的シミュレーションが有効である.本章では、このような運動論的シ ミュレーションコードとして、アーク放電型マルチカスプ負イオン源を対象としたKEIO-MARCコード、RF-ICP 負イオン源を対象とした EM-PIC-MCCコードについて、モデル概要を解説し、それらを使った解析例について紹 介する.

Keywords:

negative ion source, kinetic simulation, KEIO-MARC, ion source with multi-cusp Arc-discharge, EM-PIC-MCC, RF-ICP

3.1 はじめに

第1章で述べられたように,負イオン源装置内はフィル ター磁場によりドライバ領域と引出領域に分けられてい る.ドライバ領域では,アーク放電や高周波放電によりプ ラズマが生成される.生成されたプラズマは,Maxwell 分布から逸脱した非平衡状態となり,高エネルギーテール を持つ.この高エネルギーテールは,水素負イオン生成に 必要な振動励起分子の生成等において重要な役割を果た す.また,フィルター磁場やカスプ磁場が存在する場合, プラズマの輸送過程や壁への損失過程は複雑になる.

このような系では、個々の荷電粒子による運動論的な振る舞いが重要となる.そこで、本章では、主にドライバ領域におけるプラズマを解析するために開発された運動論的シミュレーションコードとして、アーク放電型イオン源を対象とした KEIO-MARC コード[1-3]、高周波放電型(RF-ICP)イオン源を対象とした EM-PIC-MCC コード[4,5]について、その概略とシミュレーション例について紹介する.

3.2 アーク放電型イオン源のモデリング

3.2.1 シミュレーションモデル

3.2.1.1 電子輸送及び電子エネルギー分布関数解析モデル KEIO-MARC コード (<u>Kinetic model of Electrons in IOn</u> source with <u>Multi-cusp ARC</u> discharge) [1-3] は, テスト粒 子モンテカルロコードであり, 3次元の実空間および速度 空間で荷電粒子の軌道追跡を行う.実形状で,カスプ磁場 を含む実磁場形状を考慮可能である.アーク放電型イオン 源のモデリングでは,準中性を仮定し,主に電子の軌道解 析,電子エネルギー分布関数 (EEDF: Electron Energy Distribution Function) 解析に用いる.

粒子軌道は以下の運動方程式により追跡する.

$$m\frac{\mathrm{d}\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = q\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}\right) + m\left(\frac{\delta \mathbf{v}}{\delta t}\right)_{\mathrm{coll}} \tag{1}$$

ここで, m, v, q, E, Bは, それぞれ, 質量, 粒子速度, 電荷, 電場, 磁場である. 右辺の最終項は弾性・非弾性衝 突による運動量変化を表す. 装置内のほとんどの空間では 準中性条件が成り立つとし, 通常の解析では電場について は無視する. 実磁場配位のデータを与えることで, カスプ 磁場によるミラー効果も含め軌道追跡が行われる. ローレ ンツ力による旋回運動は数値計算上誤差を生みやすいが, Buneman-Boris 法[6]を用いることで精度良く粒子軌道を 追跡する. カスプ磁場を越えて壁境界に到達した粒子につ いては, シース電位より高いエネルギーの粒子は損失し, エネルギーの低い粒子は反射される.

衝突過程はモンテカルロ法を用いて模擬する.電子 - 電 子間および電子 - H⁺間のクーロン衝突は,2体衝突モデル [7]により模擬する.電子とその他の水素粒子(H, H₂, H₂, H₃)との衝突については,およそ540種の反応を考慮 可能であり,ヌル衝突法[8]により多数の反応を計算リ ソース的に効率よく取り扱うことができる.背景粒子(H, H₂, H⁺, H₂, H₃)の密度,温度については入力データとし て与える.

フィラメントから発生した熱電子は、シース領域で即座 にアーク電圧まで加速されるとして、1次電子の初速度を 与える.その後、中性粒子との衝突によりイオン化が起き、

Faculty of Science and Technology, Keio University, Yokohama, KANAGAWA 223-8522, Japan

author's e-mail: hoshino@appi.keio.ac.jp

発生した2次電子と合わせ,系内が定常状態になるまで計 算を行う.

以上の一連の計算で得られた粒子情報を統計処理することで, EEDF の他,電子密度分布,電子温度分布,装置内の平均流速分布などを評価することができる.

3.2.1.2 振動励起分子および負イオンの評価

KEIO-MARC では電子輸送の解析のみ行うため, 負イオ ンの生成については直接評価できない. 負イオン生成量の 評価には、さらに2段階の解析を行う[9].

まず、負イオンの生成に重要となる振動励起分子密度に ついては、レート方程式を用いて評価する.v=0~14の 準位の振動励起分子に対する合計15本のレート方程式を連 立して解くことで、各振動励起準位の密度を得る.通常、 レート方程式で用いる反応レート係数には、Maxwell分布 で積分された平均的な係数が用いられることが多い. 一 方、前述のとおり、イオン源内では電子は非平衡状態であ り、高エネルギーテールが原子・分子過程において重要な 役割を果たす.そこで、各種過程の反応レート係数 R_{reac} は、KEIO-MARC で評価したドライバ領域のEEDF ($f_e(\varepsilon), \varepsilon$ はエネルギー)を用いて、以下により評価する.

$$R_{\text{reac}} = \int f_{e}(\varepsilon) \sigma_{\text{reac}}(\varepsilon) v_{e}(\varepsilon) d\varepsilon \qquad (2)$$

ここで、 $\sigma_{\text{reac}}(\epsilon)$ はは各種反応過程の反応断面積、 $v_{e}(\epsilon)$ は ϵ に対応する電子の速度である.

次に, KEIO-MARC で得られた引出領域の EEDF 及び レート方程式により評価した振動励起分子密度を用いて, 粒子バランスから水素負イオン密度を評価する.生成項 は,各振動励起状態の分子と電子による解離性付着反応と なる.消滅項としては,電子脱離反応,相互中性化反応,結 合性脱離反応,非結合性脱離反応に加え,輸送損失項を加 えている.これら,生成項と消滅項のバランスから,負イ オン密度を評価する.

3.2.2 シミュレーション例

KEIO-MARCを使った EEDF 解析の例として、中性子補 足療法(BNCT: Boron Neutron Capture Therapy)による ガン治療で用いられる水素負イオン源(住友重機械工業株 式会社)の解析結果[9]を紹介する.このイオン源は、円筒 形のマルチカスプアーク放電型のイオン源であり、その概 略図を図1に示す.ビーム引出軸方向をzとし、z=0 mmがプラズマ電極である.解析では、アーク電流を2240 W、 アーク電圧 80 V、水素ガス圧 1.6 Pa としている.

解析の結果得られた各z位置におけるEEDFを図2に示 す.全体的に熱緩和した低温成分と、そこから逸脱した高 エネルギー成分を持ち、電子が非平衡状態であることがわ かる.特に、フィラメントに近いz=120~80 mm では、 フィラメントから発生した高エネルギーの1次電子の寄与 が大きく、1次電子の初期エネルギーである 80 eV 付近に ピークを持つ.また、65 eV 付近にもピークが見られる.電 子の非弾性衝突の中で最も頻度の高い分子のイオン化反応 (非解離性イオン化)の閾エネルギーは約 15 eV であり、こ の反応により初期の80 eV に加え、65 eV にもピークが見ら



図1 アーク放電型マルチカスプ負イオン源モデル[9].



図2 KEIO-MARC で得られた EEDF 及びその z 位置依存性[9].

れると考えられ,イオン源内の EEDF に対して中性粒子と の非弾性衝突が重要な役割を果たしていることが示唆され る.

その後, z=40 mm 付近まで進むと衝突・緩和過程によ りピークは小さくなっていくが,高エネルギー成分は残っ たままである.さらに引出方向へ進み,プラズマ電極付近 (z=10 mm)になると電子密度が大幅に減少し,特に高エ ネルギー成分が著しく減少する.これは,z=40 mm 付近 から引出領域に向けて存在するフィルター磁場の影響であ る.フィルター磁場領域では,高エネルギー電子は透過し にくく,フィルター磁場領域を横切る前に磁力線に沿って 壁へと損失する.この結果,高エネルギー成分が低減する ので,引出領域では低温電子領域が形成され,効率的な負 イオン体積生成を実現している.

次に,3.2.1.2節の手順により評価された負イオン密度 を図3に示す[10].ここでは、モデルの中で大きな仮定の 一つである負イオンの閉じ込め時間を横軸に、縦軸に負イ オン密度をプロットしている.また、異なる3ケースの フィルター磁場強度の結果が比較されている.フィルター 磁場強度はAからB,Cと進むにつれ強くなっており、フィ ルター磁場強度が強くなるほど負イオン密度が減少してい ることがわかる.これは、主にフィルター磁場により電子 密度が減少したことに起因している.本モデルでは、負イ オン密度を評価するために粒子バランスモデルを用いてい るが、そこで仮定する閉じ込め時間に対して、負イオン密 度が強く依存していることがわかる.より適切な閉じ込め



図 3 H⁻の閉じ込め時間及びフィルター磁場強度に対する H⁻密 度依存性[10].

時間については、外部からの引出電場のしみ込みや、負イ オンを含むシース形成(イオン-イオンシース)など、複雑 な物理過程が寄与する.第5章で述べられる引出領域のシ ミュレーション結果等に基づいて、適切なモデル化が必要 である.

3.3 高周波放電型イオン源のモデリング

3.3.1 シミュレーションモデル

高周波放電型(RF-ICP)イオン源におけるプラズマの挙 動を解析するためには、1)電磁場中における荷電粒子の 軌道解析、2)RFコイルによる時間変動する電磁場とプラ ズマ自身により発生する電磁場の解析、3)イオン化反応 等をはじめとする各種衝突過程、を自己無撞着に解析する 必要がある.この様な解析を行うために、3次元空間の軌 道追跡モデル、軸対称を仮定した2次元空間における電磁 場解析、そして、各種衝突過程を扱うモンテカルロモデル を結合した、2.5次元EM-PIC-MCCコード(Electro-Magnetic Particle-In-Cell with Monte-Carlo method for Collision processes)が開発された[4,5].以下、このEM-PIC-MCCモデルの概略について述べる.

(1) 電磁場解析モデル

ここでは、図4に示すような欧州原子核研究機構 (CERN)の線形加速器 Linac4 で用いられる円筒形の RF-ICP イオン源を想定する.電磁場解析では、プラズマが作 る電磁場と RF ソレノイドアンテナが作る電磁場とを分け て個別に解析する.

まず,プラズマが作る電磁場 (\mathbf{E}_{pl} , \mathbf{B}_{pl}) については,軸 対称 ($\partial/\partial \theta = 0$)を仮定し,2次元円筒座標系 (r-z平面) で 以下の電磁場解析を行う.

$$\nabla \times \mathbf{E}_{\mathbf{pl}} = -\frac{\partial \mathbf{B}_{\mathbf{pl}}}{\partial t} \tag{3}$$

$$\nabla \times \mathbf{B}_{\mathbf{p}\mathbf{l}} = \mu_0 \mathbf{j}_{\mathbf{p}\mathbf{l}} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}_{\mathbf{p}\mathbf{l}}}{\partial t} \tag{4}$$

ただし、 ϵ_0 及び μ_0 は、それぞれ真空中の誘電率及び透磁率 である.プラズマ電流 $\mathbf{j}_{\mathbf{pl}}$ は、粒子輸送解析により各格子点 に割り付けられた電流値を用いる.これを時間領域差分法 (Finite Difference Time Domain Method: FDTD 法) [6,12] により解く、軸方向 (z 方向)の境界条件には、Mur の吸収



図4 RF-ICP イオン源のシミュレーションモデル例[11].

境界条件[13]を用いる.半径方向(r方向)については, Bayliss Turkelの放射境界条件[14]を用い, r=0では軸対 称により境界条件を定めている.

次に、RF ソレノイドアンテナが作る電磁場 (\mathbf{E}_{RF} , \mathbf{B}_{RF}) については、3次元実形状において高周波3次元電磁界解 析ソフトウェア ANSIS HFSS を用いた計算を行う[15]. 得られた電磁場分布は θ 方向に平均化する.

プラズマ電流と RF ソレノイドアンテナが作る電磁場の 寄与を足し合わせ,軸対称 2 次元の電磁場分布として次に 説明する粒子輸送解析で用いる.

(2) 粒子輸送解析モデル

上記で求めた電磁場中における荷電粒子 (e, H⁺, H₂⁺) の輸送解析を3.2.1節で述べた KEIO-MARC と同様の手順 で行う.電磁場中の荷電粒子の運動方程式は Buneman-Boris 法を用いて解く.背景中性粒子との衝突については ヌル衝突法 [8] を用い,弾性衝突, H, H₂のイオン化, 解 離性イオン化, 解離性再結合を考慮する.一方,荷電粒子 間のクーロン衝突については,現在のモデルでは無視して いる.これは, RF-ICP イオン源では H₂ガス圧が高い (1-10 Pa) 一方,プラズマ密度が低く (<10¹⁶ m⁻³)[16], クーロン衝突よりも中性粒子との衝突が支配的となるため である.

この軌道追跡では、荷電粒子を超粒子として扱い、得ら れた位置・速度から、各超粒子(イオン、電子)が作る電 流を空間格子点へ割り付ける.さらに θ 方向に平均化する ことで、(1)電磁場解析で必要となるプラズマ電流 **j**_{pl} の空 間分布が得られる.

ここで得られた \mathbf{j}_{pl} を用いて(1)の電磁場解析を行い,求 まった電磁場分布を用いて(2)の粒子輸送解析を行う.こ のステップを繰り返すことで,電磁場と粒子輸送の自己無 撞着な解析を行う.

3.3.2 シミュレーション例

RF-ICP イオン源では、2つの運転モードがある.一つ は、低密度状態で RF ソレノイドコイルを横切る高い電位 による容量結合プラズマ状態(Eモード)である.これに対 し、プラズマ密度が高くなると、RF電流に誘起される電場 により放電が維持されるようになる(Hモード).プラズ マ密度の増加により、EモードからHモードへとE-H遷移 が起こる.この E-H 遷移の前後でプラズマの特性が大きく 変わるため、その理解は、特にRFシステムとプラズマ負荷 のインピーダンスマッチングに対して重要な課題となって いる.

このような E-H 遷移を理解するために, CERN の Linac4 イオン源を対象とした EM-PIC-MCC コードを用いたシ ミュレーション解析が行われた[5,17]. 従来の解析は,流 体モデルや等価回路モデルによる解析が主であり,運動論 的シミュレーションとしては初めての試みであった. 解析 の結果, Eモードでは, RF コイルが作る軸方向 (z方向)の 強い電場 E_{RF}^{z} により,質量の軽い電子が電場と逆方向へ移 動する一方,イオンは慣性により余り動かないことがわ かった. この電子の挙動により, E_{RF}^{z} と逆方向にプラズマ が作る電場 E_{pl}^{z} が形成される. この E_{RF}^{z} と軸方向の電子の運 動が, Eモードプラズマにおける重要な特徴となる.

プラズマ密度が高くなり、この E_{pl}^{z} が E_{RF}^{z} と同程度の大き さになってくるとz方向の電場が弱まり、 θ 方向のRF電場 E_{RF}^{θ} が支配的になる、プラズマはRFコイルの巻かれた領域 に局在化するようになり、容量結合プラズマから誘導結合 プラズマへの遷移(E-H 遷移)がシミュレーション上で確 認された.

このように、RF-ICPイオン源のプラズマ解析にEM-PIC-MCC モデルが有用であることが示されたが、高い計 算コストが課題である. 例えば, RF-ICP イオン源では, 効 率的に電力を注入するために、RFシステムとRF-ICPのイ ンピーダンスマッチングが重要となるが、EM-PIC-MCC モデルは計算コストが高いため, RF システムモデルを組 み込み,パラメータサーベイによりその最適化を検討する ことは難しい. そこで、このような目的のために、整合回 路の等価回路モデルを用いた0次元モデルも開発されてい る[11,18]. プラズマ部分については Maxwell 分布を仮定 した流体モデルであるが,計算コストが低く,パラメータ サーベイに適している. この0次元モデルとEM-PIC-MCC シミュレーションの比較が行われた[11]. 定常状態では両 モデルでプラズマインピーダンスはよく一致し、プラズマ インピーダンスのパラメータサーベイ等では非常に有用な ツールとなることが示された. 実際, プラズマインピーダ ンスの各種回路パラメータ依存性の解析などが行われてい る[19]. 一方で、プラズマ着火直後は、プラズマは非平衡 状態であり、両モデルで結果は大きく異なってしまうた め,解析目的に合わせ,適切にモデルを選択する必要があ る.

3.4 おわりに

本章では、主にドライバ領域を対象とした運動論的シ

ミュレーションモデルである KEIO-MARC コードおよび EM-PIC-MCC コードについて,モデル概要とシミュレー ション例についてまとめ,医療用負イオン源や加速器用負 イオン源のシミュレーション例について紹介した.ここで 紹介した以外にも,中性粒子輸送コードや分光データとの 比較のための衝突輻射モデルなどの開発も進められてい る.また,核融合プラズマ加熱用の負イオン源シミュレー ションを始め,様々なシミュレーション解析が行われ,実 験との比較によるモデル妥当性の検証や,多くの重要な知 見が得られている.(例えば,[20-23])

参考文献

- [1] I. Fujino et al., Rev. Sci. Instrum. 79, 02A510 (2008).
- [2] R. Terasaki et al., Rev. Sci. Instrum. 81, 02A703 (2010).
- [3] T. Shibata et al., J. Appl. Phys. 114, 143301 (2013).
- [4] T. Hayami et al., AIP Conf. Proc. 1390, 339 (2011).
- [5] S. Mattei et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B115 (2014).
- [6] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (New York: McGraw-Hill, 1985).
- [7] T. Takizuka and H. Abe, J. Comput. Phys. 25, 205 (1977).
- [8] K. Nanbu *et al.*, Proc. Soviet Union-Japan Symp. Comput. Fluid Dynamics, (Computing Center of the USSR Academy of Sciences), 2, pp.126-132 (1989).
- [9] S. Yamada et al., AIP Conf. Proc. 2052, 060004 (2018).
- [10] S. Yamada et al., Plasma Fusion Res. 14, 3401160 (2019).
- [11] W. Kobayashi et al., AIP Conf. Proc. 2052, 050009 (2018).
- [12] R.W. Hokney and J.W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles (Bristol: IOP Publishing, 1988).
- [13] G. Mur, IEEE Trans. Electromagn. Comput. 23, 377 (1981).
- [14] A. Bayliss and E. Turkel, Commun. Pure Appl. Math. 33, 707 (1980).
- [15] A. Grudiev et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B134 (2014).
- [16] S. Mochizuki et al., AIP Conf. Proc. 1655, 020016 (2015).
- [17] S. Mattei *et al.*, Plasma Sources Sci. Technol. 25, 065001 (2016).
- [18] K. Nishida et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B117 (2014).
- [19] W. Kobayashi et al., Plasma Fusion Res. 14, 3401094 (2019).
- [20] N. Takado *et al.*, J. Appl. Phys. **103**, 053302 (2008).
- [21] T. Shibata et al., AIP Conf. Proc. 1515, 177 (2013).
- [22] T. Shibata et al., Plasma Fusion Res. 9, 1401011 (2014).
- [23] 矢口真子 他:第36回プラズマ・核融合学会年会, 02P24(春日井, 2019年12月).



4. プラズマとイオン源壁面との相互作用

4. Plasma-Wall Interactions in Ion Sources

和田 元, 剣持貴弘¹⁾
WADA Motoi and KENMOTSU Takahiro¹⁾
同志社大学 理工学部,¹⁾同志社大学 生命医科学部
(原稿受付:2021年6月11日)

イオン源の壁面状態はイオン源プラズマ中のイオン種比率を決定する上で重要な役割を演じる.特に金属壁の仕事関数は二次電子放出や負イオン生成量を大きく左右する.イオン源プラズマ-壁面相互作用を模型化するのに必要となる素過程データは実験的に採取するのが難しいことが多く,表面反応シミュレーションが有効な ツールとなるが実験と同様,低エネルギー領域においては数値シミュレーションを行うことも難しくなる.本章 では負イオン源プラズマと壁面の相互作用に関するシミュレーション研究について概略を纏める.

Keywords:

negative ion, surface production, particle reflection, ion induced desorption, sputtering

4.1 はじめに

プラズマ---固体壁相互作用と言われると、多くの読者は 核融合プラズマ閉じ込め装置のリミターやダイバーター等 の損耗現象を思い浮かべることであろう、もともと装置自 体の容積/内壁表面積比の小さなイオン源性能は、壁面状 態に大きな影響を受ける. 正イオン源を用いてトカマクプ ラズマの中性粒子加熱を行っていた1980年代から、イオン 源プラズマの数値シミュレーションは行われていた[1]. この中でイオン源壁面での水素原子再結合係数がイオン源 から引き出されるイオン種を決定する重要な因子として扱 われていた. 負イオン源については, 壁面状態がさらに直 接的にイオン源の性能を決定する因子になると考えられ た. これは1974年にBelchenkoら[2]が小型イオン源にセシ ウム (Cs) を添加して3A/cm²を超える電流密度で水素負 イオン (H⁻) が引き出せ得ることを実証し,引出電極に対 向した陰極表面での高効率負イオン生成の可能性を指摘し たためである.

当初からCsの役割は電極表面の仕事関数を低下させ、電 極金属から水素原子への電子移行率を増大させることであ ろうと予想された. Kishinevskii[3]は単純な表面ポテン シャルモデルにもとづいて表面での水素原子負イオン化率 を計算し、表面仕事関数の低下が負イオン化率を指数関数 的に増大させることを示した. Belchenkoらの成功に触発 され、BNL (Brookhaven National Laboratory)[3]や LBL (Lawrence Berkeley Laboratory)[4]で表面生成型の負イ オン源が開発されるとともに、水素負イオン生成電極表面 の素過程に関する研究も開始された. 同時にプラズマ一固 体壁相互作用の研究のために開発されたシミュレーション モデルも、表面で負イオン化される水素原子の速度分布を 計算するために用いられることになる.

4.2 イオン源プラズマー壁面相互作用シミュ レーションの現状

4.2.1 負イオン生成電極の水素反射シミュレーション

Schneiderら[5]はエネルギーの揃った水素・重水素の 原子・分子イオンを金属表面に打ち込み、負イオン表面放 出係数として測定した. Cs付着量を変化させて仕事関数と 重水素負イオン収率の変化を測定するとともに、厚いアル カリ金属表面での水素負イオン化収率を測定した. Hiskes [6]らは表面で水素粒子の後方散乱過程によって形成され るH⁻の生成率を計算するため, Oen と Robinson [7] が作成 した MARLOWE コードを用いることにより、反射粒子の 速度分布関数を計算した. 1980年代当時の計算機能力では 時間のかかる計算であり、使用された粒子数はわずか10⁶ であった.図1にHiskesの論文に掲載された表面反射水素 原子のエネルギー分布を示す.表面生成負イオンのエネル ギー分布実測データと直接比較するには精度的に問題が あったが、水素負イオン収率をエネルギーの関数として理 論計算する上で、強力なツールとなり実験データを良く説 明した. その後核融合プラズマ研究のプラズマと壁相互作 用分野で粒子反射のみならずスパッタリングを計算するた め、TRIM/SRIM[8]やACAT[9]などの二体衝突近似 (BCA: Binary Collision Approximation) シミュレーション コードが利用されるようになった.

表面生成型負イオン源の、コンバーターと呼ばれる H⁻ 生成電極表面からの負イオン放出シミュレーションは、コ ンバータータイプの H⁻源が LANSCE (Los Alamos Neutron Science Center) でしか使用されなくなったこともあ

Doshisha University, Kyotanabe, KYOTO 610-0321, Japan

corresponding author's e-mail: mwada@mail.doshisha.ac.jp



図1 Hiskes らが水素表面負イオン化率計算に使用した MAR-LOWE により求めた Na (点線) と Cs (実線) に対する反射 水素の角度分布 (左) とエネルギー分布 (右). 粒子数は 10⁶ 個. [6]より引用. Reproduced from J.R. Hiskes and P.J. Schneider, Phys. Rev. B **23**, 949 (1981), with the permission of American Physical Society.

り[10],表面生成型負イオン源から生成されるH⁻イオン のエネルギー分布・角度分布のシミュレーション結果は Hiskes の報告から30年後に,漸く Kenmotsu ら[11]によっ て高精度化されたものが報告されることになる.シミュ レーション粒子数は必要精度に応じて10⁷から10⁸にまで増 加している.負イオンのエネルギー分布を詳細に計算する には,特に表面負イオン化率のエネルギー依存性を明らか にしておく必要がある.Seidl[12]らは半理論,半実験的に 最小仕事関数付近の金属表面負イオン化率を与える簡略モ デルを提案しており,詳細な理論解析を行った Rasser ら [13]のモデルと共に良く用いられる.さらに Rasser らに よって紹介された Blandin ら[14]の低脱出速度近似式も, 表面生成される一般の負イオンのエネルギー・角度分布を 計算するモデルに組み込まれることが多い.

粒子反射模型と負イオン化率を組み合わせることによっ て, 表面生成 H⁻のエネルギー分布を計算した結果の一例 を図2に示す.比較のために同一条件で採取した実測デー タ[15]を合わせて示す.実測データはCs導入前の高仕事関 数表面で生成される H⁻電流のエネルギースペクトルを示 すものであり,入射 H⁺, H⁺₂, H⁺₃の表面反射により生成さ れたH⁻の成分が分離されて、シミュレーション計算の有 効性が確認できる.なお図2の結果では、表面に吸着され た水素が入射イオンに弾き出されてH-として放出される, "イオン衝撃脱離"成分がグラフ上に現れるレベルをはる かに下回っている.同様の実測結果とSRIM シミュレー ション結果との比較は、Cartry[16]らによって黒鉛表面に 対して行われている.黒鉛の場合は表面に吸着された水素 がイオン衝撃脱離によってH⁻として放出される成分が大 きいことが実験的に観測されている.表面生成型水素負イ オン源においても仕事関数極小条件においては、表面吸着 水素のイオン衝撃により生成されるH-が負イオン電流の 大部分を占めるエネルギースペクトルが観測される[17].



 図2 水素プラズマ中 200 V にバイアスされた Mo 表面から放出 される負イオンのエネルギースペクトル. (a) ACAT に Rasser[13] らによって計算された表面負イオン生成率を組 み合わせたシミュレーション結果. (b) 対象とした実験条 件での測定結果. (b) は[15] より引用. Reproduced from M. Wada, LBL-Report, LBL-15800, Copyright (1983) U.S. DOE.

ただし、ビームとして引き出された電流にはイオン衝撃脱 離成分が大きく現れるものの、表面から放出される負イオ ンの角度分布を積分すると、負イオン生成率の高い反射成 分の方が脱離成分に比べて大きいことが実験的に確認され ており[18]、理論予測と良く一致する.

4.2.2 プラズマグリッドでの水素負イオン表面生成

Okumuraら[19]は、磁気フィルターを用いた体積生成 型負イオン源にCsを導入して使用すると、通常の体積生成 の数倍のH⁻電流が得られるのと同時に、H⁻とともに引き 出される電子電流量が低減されることを、大型負イオン源 を用いて実証した.プラズマグリッド(PG)と呼ばれ る、イオン源プラズマと対向する引出孔の開けられた電極 温度に対応して引出H⁻電流量が変化したことから、PG 表面の仕事関数低下に伴い、水素負イオンはPG表面で生 成されていると考えられた.実際にLeungら[20]はBa を添加した小型のイオン源を用いた実験で、プラズマ電極 電位で生成されたと考えられるH⁻イオン成分を観測して いる.

水素負イオンが壁から連続的に供給される状態になる と、壁の近傍では正イオンと負イオンにより、電子の少な いイオン―イオンプラズマが形成されることになる.水素 を吸着した低仕事関数表面に水素正イオン・原子が入射す る際の表面生成H-のエネルギー分布,及び角度分布が BCA に表面負イオン化率を組み合わせたモデルで計算さ れている. その結果, 表面に斜入射する水素正イオン・原 子に対して負イオン転換率が高く、吸着水素がイオン衝撃 脱離過程によりH⁻として放出される量が、図3に示すよ うに低エネルギー部分で大きいことが示された[21]. 計算 された表面生成H⁻のエネルギー,角度分布によればH⁻の 表面脱出速度の垂直方向成分は小さく, PG 表面近傍で H⁻ 密度が局所的に増加する. PG 表面からは水素放電からの 光子により光電子が放出されることから[22],実際のPG 近傍のH⁻対電子比は電子偏向磁場構造などにより大きな 影響を受けるものと考えられる. イオン源から引き出され る H⁻電流対電子電流比を低減するなどの性能最適化のた



図 3 10 eV の水素原子入射により放出される水素原子(破線)と 水素負イオン(実線)のエネルギー分布.[21]より引用. Reproduced from M. Wada et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B114 (2014), with the permission of American Institute of Physics.

め、今後さらに詳細な PG 表面負電荷生成モデルが構築・ 応用されるものと期待される.

4.2.3 Cs リサイクリング計算

2021年時点での ITER 実験計画では、中性粒子入射加熱 用水素負イオン源に Cs を導入して運転することが計画さ れており、イオン源には制御性の高いオーブンからCsが供 給され[23]、イオン源運転の最適化が図られる.本来必要 となる Cs量は PG表面に半単原子層を形成するだけの量で 良く、最小仕事関数状態に対して 0.5 mg/m² 程度しか必要 でないことになるが、実際のイオン源の運転ではCsを導入 後負イオン電流が減少するので、Csを追加導入することに よって水素負イオン電流を維持している.フィラメントカ ソードを用いたアーク型イオン源の場合はカソードから蒸 散されたカソード金属が Csを覆い、PG上Csが失われると 考えられているが、同様の Cs 追加導入はカソードが無い RF 負イオン源でも必要であり、また重水素で特に必要な Cs 導入量が多くなると報告されている[24].

そこで水素放電に対向する PG 表面から, 吸着 Cs がどの ように失われるかについて, Cs 層-水素(重水素)層-Mo バルクの構造を作って BCA を用いた計算を行った. Cs と水素の同時吸着表面の構造とその仕事関数については比 較的古くから研究されており[25],報告されている最小仕 事関数状態に近い表面構造:Cs が最上部に吸着し, Cs と 母材金属原子の間に水素同位体の層が形成される構造に対 して計算を行った.図4に結果の一例を示す[26].図4の 水素一重水素の比較で,重水素運転時には PG 表面の Cs が,より失われやすいことがわかる.これは質量効果に よって衝突カスケードの最終段階で表面 Cs を叩き出す際 の運動量が大きいためだけでなく,バルク層とCsの間にあ る水素同位体が運動量ベクトルの向きを変えるのに寄与し ているためと考えられる.同様の同位体効果は,酸素不純 物に対して行った計算結果に対しても見られた(図5).

中性粒子加熱用の負イオン源の運転では真空度も良く, 大きな量の不純物イオンがプラズマ中にあるとは予想でき ないものの,逆流正イオンなどによってイオン源構成要素 が加熱するなどした際に,少量の不純物イオンがイオン源 プラズマ内に生成される可能性がある.図5は酸素不純物 イオンに対するPG表面のCs損失率を計算した結果を示し たものである.図4と比較して、Cs損失の立ち上がるエネ ルギーが低く,損失率が大きいことがわかる.したがって 実際のイオン源運転において,真空リークなどがあるとCs 消費量が増大するものと予想される.

4.3 詳細モデルの研究

4.3.1 低エネルギー領域への対応

プラズマ一固体壁相互作用に詳しい読者の中には図3の エネルギー範囲を見て、二体衝突近似を用いるには無理が あることに気づかれた方も多いと思う.ところが、結果が 妥当かどうかを検証しようにもこのエネルギー範囲の表面 素過程データを実験的に採取することは困難である.そこ で核融合装置のプラズマ一壁面相互作用の研究グループで 行われている MD (Molecular Dynamics:分子動力学)計 算を行い、数 eV の H⁻の表面生成についてのシミュレー ション結果を Rutglianoら[27]が報告している.ただし、計 算に時間がかかることから、必ずしも統計的に十分な精度 までデータを蓄積できていない状況である.また、基本的 に入射イオン(原子)の反射としての負イオン化であり、 吸着水素の脱離までを計算するには、さらに計算対象の粒 子数が増えることから、すぐには結果が得られないと予想 される.それでも Damone ら[28]による2015年のポテン



図4 Mo 製 PG 上に吸着した Cs のスパッタリング率.重水素に 対して Cs の損失率が大きくなることがわかる. Reproduced from M. Wada, Rev. Sci. Instrum. 89, 052103 (2018), with the permission of American Institute of Physics.



図5 Mo 製 PG 上に吸着した酸素正イオンによる Cs のスパッタ リング率.軽水素吸着層と比較して重水素吸着層の方が大 きな Cs 損失率を示す. Reproduced from M. Wada, Rev. Sci. Instrum. 89, 052103 (2018), with the permission of American Institute of Physics. シャルの提案と Cs-Mo 表面構造の計算以降, 着実に計算を 進めており, 今後信頼性の高い表面生成 H⁻のエネルギー 分布と放出角度分布が得られるものと期待される.

4.3.2 表面電子状態密度計算

表面の電子状態密度分布は、本質的に3次元であって水 素原子への電荷移行を詳細に計算するためには表面構造の 正確な情報が必要となる. Padamaら[29]はCs-W系に水素 原子が吸着すると Cs の吸着エネルギーがどのように変化 するかを計算し、水素吸着が全体としてのCsの吸着エネル ギーを下げることを明らかにしている. Csの表面吸着エネ ルギーはPG表面からのCs損失率を計算する上で重要なパ ラメータであり[26],水素負イオン源内のCsリサイクリ ングをモデル化するのに不可欠なデータである.また水素 プラズマの原子・分子イオン・中性粒子照射を受けた Cs 吸着表面がどのように自己組織化し、粒子バランスが形成 されるのかを知るためには、大規模な表面反応シミュレー ションを行うしか方法がない. 階層に分けて得られた結果 を数値データ化して, 負イオン源プラズマ全体のシミュ レーションモデルに組み込む作業が、今後必要となるもの と予想される.

4.4 イオン源寿命評価シミュレーション 4.4.1 グリッド損耗

ITER の建設が進められる中,核融合発電商用化実現の ための次ステージとしてデモ炉の仕様検討が進められてい る.デモ炉のシステム検討にあたっては機器寿命の評価が 不可欠であり,装置壁面の損耗率などが候補材料に対して 再評価されることになるものと考えられる.イオン源の寿 命と言えば,宇宙探査衛星に使用されるイオンエンジンの グリッド損耗[30]が連想されようが,同様の損耗過程がデ モ炉の場合には問題となり得る.特に中性粒子加熱の場合 は運転期間を通じてビーム集束性を担保する必要があるの で,イオンエンジンと同等レベルでの寿命評価シミュレー ションが行われる必要があろう.

4.4.2 逆流イオンによる損傷

光中性化セルなどの使用により,DEMO炉設計では中性 粒子入射用負イオン源の運転ガス圧は低くなるものと予想 される.しかし,それでも下流側での正イオン発生を0に することは難しいので,逆流正イオンがイオン源のPG対 向側端板に衝突することが予想される.1 MeV 以上の重水 素であるので,逆流正イオン損傷防止用に端板に取り付け られる予定の Mo アーマータイルにインプランテーション (イオン注入)されることになるため,大きなスパッタリン グが生じるとは予想されない.しかしながら,水素吸蔵が 進んで材料が脆化することも危惧されるので,内部応力の 発生に伴う剥がれ等の損傷可能性などについて,シミュ レーション計算にもとづいて十分に検討しておく必要があ ろう.

4.5 おわりに

計算機能力の飛躍的進歩により,以前は計算不可能と考 えられていた表面素過程がシミュレーション可能となって きた.二体衝突近似が使える入射粒子エネルギー領域に対 しては表面生成H⁻スペクトルや角度分布として妥当な結 果が得られ,実験データも得やすいことから実測結果と直 接比較可能である.例としてCsを用いない負イオン源運転 を可能とすると期待され,研究が推進されているC12A7 (12CaO-7Al₂O₃)エレクトライド材料を水素プラズマ中に 保持して-80Vに保持した場合に表面から生成されるH⁻ のうち,前方に放出されるエネルギースペクトルを計算し た結果を図6に示す.この計算においても,低エネルギー 側においては表面に吸着されている水素,エレクトライド の籠構造にある水素が叩き出されてH⁻となる成分が含ま れるため,エネルギー分布・角度分布の精度が疑問視され る.それでも図6の結果は,実験で報告されたスペクトル [31]に近い形状を示している.

低エネルギー領域におけるエネルギー分布、および角度 分布シミュレーションの研究は、今後も高精度化を目指し た進展が続くものと予想されるが、現在の計算精度でも負 イオン源シミュレーションモデル全体の信頼性に大きな影 響を与えないのでは無いかと考えられる.そもそも PG 表 面を離れるときのH⁻運動エネルギーは小さく、またCs の PG からの損失は高エネルギー粒子や不純物の寄与が大 きいので、こちらも低エネルギー側モデルの高精度化に よって大きな誤差は生じないと予想される. ではイオン源 プラズマ,シース領域,引出領域のモデルが完成しつつあ る状況下で、プラズマ―壁面相互作用のパートが為すべき ことは無いのかと言われると、全くの逆で、多くのことに 取り組む必要があると考えている.筆者らが負イオン源プ ラズマと固体壁面の相互作用研究を開始したころ、国際会 議の場で ITER 用 RF 負イオン源の研究開発を指揮する Fantz 氏に「表面シミュレーションでは綺麗な表面を対象 としているが、実際の負イオン源の中のCs はもっと汚 い.」と指摘を受けた.我々も基礎過程の実験でCsと格闘 することが多く,確かにイオン源内に理想的な表面状況が 実現されているとは考えていない. Yoshida ら[32]の行う 負イオン源内 Cs 輸送計算に利用可能な精度の基礎データ として供出するため,表面素過程実験と実イオン源実験結



図6 C12A7エレクトライド表面から放出される水素負イオンの エネルギースペクトルをシミュレーションで計算した結 果.角度分布を考慮すると反射成分の寄与が小さくなり, 観測されたスペクトル[31]を再現する.

果をもとにした検証を、今後もさらに進めていく必要があ る.

参 考 文 献

- [1] C.F. Chan et al., J. Appl. Phys. 54, 6119 (1983).
- [2] Yu. I. Belchenko et al. Nucl. Fusion 14, 113 (1974).
- [3] K. Prelec, Nucl. Instum. Methods 144, 413 (1977).
- [4] K.W. Ehlers and K.N. Leung, Rev. Sci. Instrum. 51, 721 (1980).
- [5] P.J. Schneider et al., Phys. Rev. B 23, 941, (1981).
- [6] J.R. Hiskes and P.J. Schneider, Phys. Rev. B 23, 949 (1981).
- [7] O.S. Oen and M.T. Robinson, J. Nucl. Mater. 76-77, 370 (1978).
- [8] J.F. Zeagler, Nucl. Instrum. Methods B 136-138, 141 (1998)
- [9] Y. Yamamura, Nucl. Instrum. Methods B 28, 17 (1987).
- [10] R. Keller et al., AIP Conf. Proc. 1097, 161 (2009).
- [11] T. Kenmotsu et al., AIP Conf. Proc. 1390, 134 (2011).
- [12] M. Seidl et al., J. Appl. Phys. 79, 2896 (1996).
- [13] Rasser et al., Surf. Sci. 118, 697 (1982).
- [14] A. Blandin et al., J. Physique 37, 369 (1976).

- [15] M. Wada, LBL Report, LBL-15800 (1983).
- [16] G. Cartry et al., Phys. Plasma 19, 063503 (2012).
- [17] M. Wada et al., J. Appl. Phys. 67, 6334 (1990).
- [18] M. Wada et al., AIP Conf. Proc. 111, 247 (1984).
- [19] Y. Okumura et al., AIP Conf. Proc. 210, 169 (1990).
- [20] K.N. Leung et al., Phys. Rev. Lett. 62, 764 (1989).
- [21] M. Wada et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B114 (2014).
- [22] J. Lulainen et al., Phys. Plasma 24, 103502 (2017).
- [23] M. De Muri et al., Fusion Eng. Des. 167, 112331 (2021).
- [24] B. Heinemann et al., New J. Phys. 19, 015001 (2017).
- [25] C.A. Papageorgpoulus and J.M. Chen, Surf. Sci. 39, 283 (1973).
- [26] M. Wada, Rev. Sci. Instrum. 89, 052103 (2018).
- [27] M. Rutigliano et al., Surf. Sci. 693, 121545 (2020).
- [28] A. Damone *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion 57, 035005 (2015).
- [29] A.A. Pdama et al., e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 16, 391 (2018).
- [30] I. Funaki *et al.*, 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf. AIAA 2011-5734 (2011).
- [31] M. Sasao et al., Appl. Phys. Express 11, 066201 (2018).
- [32] M. Yoshida et al., Rev. Sci. Instrum. 91, 033313 (2020).

小特集 ィォン源の数値シミュレーション技術の進展と応用 引出領域プラズマと負イオンビーム引出のモデリング

5. Modeling of Extraction Region Plasma and Negative Ion Beam Extraction

宮本賢治 MIYAMOTO Kenji 鳴門教育大学 (原稿受付:2021年6月17日)

負イオン源の引出部における電位構造や負イオンの引出・輸送過程のモデリング・解析の多くは、PICシ ミュレーションにモンテカルロ計算が付加されたPIC-MCC (Particle in Cell with Monte Carlo Collision)を用いて いる.本章は PIC-MCC シミュレーションによる、プラズマメニスカス (負イオン引出界面;以下、メニスカス) からの負イオンの引出過程とビーム光学特性に関する計算結果例を紹介する.また表面生成負イオンが存在する 場合に、イオン性プラズマが形成される物理機構についての計算結果も紹介する.

Keywords:

plasma, negative ion, simulation, extraction, PIC, Monte Carlo, beam optics, Coulomb collision, plasma meniscus

5.1 引出領域プラズマのモデリング

本負イオン源の引出領域では、フィルター磁場や電子抑 制磁場のような強い横磁場や、引出静電場の浸透、プラズ マ自身の空間電荷効果、正・負イオンと中性粒子との衝突 過程など多くの物理過程が混在するプラズマを解析する必 要がある.現在、負イオン源の引出領域の数値計算モデル の多くは、PIC (Particle-In-Cell) 法、特に explicit PIC 法 [1-3]を用いている.

5.1.1 スケーリング

explicit PIC 法を用いる場合,安定な数値解を得るため に、メッシュ幅はデバイ長以下にする制約がある[2].負 イオン源の典型的な電子密度はオーダーで10¹⁷~10¹⁸ m⁻³ なので、デバイ長はµmのオーダーとなる.一方,負イオン 源の引出・加速部のサイズは数10 cm もあり、実サイズで モデリングすると莫大なメッシュ数を要することになる. そのため計算資源の制約から、PIC 法を用いた数値シミュ レーションではサイズがスケーリングされている.またこ れに伴って、引出・加速部での電圧や磁場の値もスケーリ ングする必要がある[4].

電圧や磁場の値のスケーリングの方法については、以下 の通りである.まず電圧については、負イオンの電流密度 とパービアンスが、スケーリングしたシミュレーション上 の値と実際の値とが同一にするように設定する.パービア ンスとは、空間電荷制限電流と引出電圧の 3/2 乗の比であ り、荷電粒子ビームの光学的な性能に対する指標の1つで ある[5].すなわち次式が成り立つ.

$$\frac{\pi (r_{\rm PG})_{\rm sim}^2 J_{H^-}}{(V_{\rm ext})_{\rm sim}^{\frac{3}{2}}} = \frac{\pi (r_{\rm PG})_{\rm real}^2 J_{H^-}}{(V_{\rm ext})_{\rm real}^{\frac{3}{2}}}$$
(1)

Naruto University of Education, Naruto, TOKUSHIMA 772-8502, Japan

(1)式において、 r_{PG} , V_{ext} , J_{H-} はそれぞれプラズマ電極 (PG)の引出孔の半径,引出電圧,負イオン電流密度を表 す.また下付きの添え字 sim と real はそれぞれスケーリン グしたシミュレーション上の値と実際の値である.スケー リング率をsとすると、 $(r_{PG})_{sim} = s(r_{PG})_{real}$ となり、これを (1)式に代入すると、 $(V_{ext})_{sim}$ がsを用いて表される.加 速電圧 V_{acc} については、加速電圧/引出電圧の比が、ス ケーリングしたシミュレーション上の値と実際の値とが同 ーにするように設定する.すなわち、

$$(V_{\text{ext}})_{\text{sim}}: (V_{\text{acc}})_{\text{sim}} = (V_{\text{ext}})_{\text{real}}: (V_{\text{acc}})_{\text{real}}$$
(2)

次に磁場の値 B については、ラーマー半径 r_L について $(r_L)_{sim} = s(r_L)_{real}$ となるので、次式が成り立つ.

$$B_{\rm sim} = \frac{v_{\rm sim}}{s v_{\rm real}} B_{\rm real} \tag{(3)}$$

(3)式には速度vが含まれているが、これはエネルギー保存則

$$\frac{1}{2}mv_{\rm sim}^2 = qV_{\rm sim}, \qquad \frac{1}{2}mv_{\rm real}^2 = qV_{\rm real} \tag{4}$$

を用いて消去することができる.(4)式で V_{sim} , V_{real} を $(V_{ext})_{sim}$, $(V_{ext})_{real}$ に置き換えて(1)式と連立すると

$$B_{\rm sim} = s^{-1/3} B_{\rm real} \tag{5}$$

が得られる.

サイズ以外にも電子密度や真空中の誘電率をスケーリン グする方法がある[6].いずれも同等であることが示され ている.これまでに、スケーリングを用いた数値シミュ

author's e-mail: kmiyamot@naruto-u.ac.jp

レーション結果は実験結果と定性的に傾向が一致すること が確認されており[7,8], 負イオン源の引出領域における 電位構造解析や負イオンの引出の物理機構の解析へ十分に 適用可能である.

5.1.2 PIC-MCC について

クーロン衝突や荷電粒子と中性粒子の衝突過程について は、モンテカルロ法を用いて計算する.このように PIC シミュレーションにモンテカルロ計算が付加されたシミュ レーションは PIC-MCC と呼ばれる.

5.1.2.1 衝突過程のモデリング

まず、クーロン衝突においては2体衝突モデル(BCM: Binary Collision Model) [9] が用いられる. BCM では、セル 中における2つの荷電粒子をランダムに選択し、運動量保 存則,エネルギー保存則から衝突後の速度を求める.クー ロン衝突前後における速度変化は(6a)式~(6d)式で表さ れる.

$$\Delta u_{\rm x} = \frac{u_{\rm x}}{u_{\perp}} u_{\rm z} \sin \theta \, \cos \Phi - \frac{u_{\rm y}}{u_{\perp}} u_{\rm z} \sin \theta \, \sin \Phi \\ - u_{\rm x} \left(1 - \cos \theta \right) \tag{6a}$$

$$\Delta u_{\rm y} = \frac{u_{\rm y}}{u_{\perp}} u_{\rm z} \sin \theta \, \cos \Phi - \frac{u_{\rm x}}{u_{\perp}} u_{\rm z} \sin \theta \, \sin \Phi - u_{\rm y} \left(1 - \cos \theta\right) \quad (6h)$$

(6c) $\Delta u_z = -u_\perp \sin\theta \cos\phi - u_z (1 - \cos\theta)$

$$u_{\perp} = \sqrt{u_{\rm x}^2 + u_{\rm y}^2} \tag{6d}$$

 θ , ϕ は図1に示す散乱角で, $0 \le \delta_1$, $\delta_2 < 1$ の範囲の一様 乱数を用いて次式で与えられる.

$$\Phi = 2\pi\delta_1, \quad \theta = 2 \arctan \delta_2 \tag{7}$$

ただし一様乱数δ2の平均値と分散は正規分布を仮定した 場合、クーロン衝突の理論から次式を満たす必要がある.

$$\langle \delta_2 \rangle = 0, \qquad \langle \delta_2^2 \rangle = \frac{n_\beta (q_a q_\beta)^2 \ln \Lambda}{8\pi \varepsilon_0^2 m_r^3 u^3} \varDelta t \tag{8}$$

 n_{R}, q_{R} は場の粒子の密度と質量を, q_{α} はテスト粒子の質量 である. また mr は場の粒子とテスト粒子の換算質量であ る.

次に荷電粒子と中性粒子の衝突過程については、ヌル衝 突法[10,11]を用いる. ヌル衝突法の概要は以下の通りで ある. 例えば負イオンと中性粒子の弾性衝突や励起衝突,



クーロン衝突後の散乱角.

荷電交換衝突等の衝突断面積の総和を

$$\sigma_{\rm T} = \sigma_{\rm a} + \sigma_{\rm b} + \sigma_{\rm c} + \cdots \tag{9}$$

とする. ただし, σ_a , σ_b , σ_c ··· はそれぞれ衝突 a, 衝突 b, 衝突 c…の断面積とする. 衝突断面積の総和 or の内, 最大 となる衝突断面積を oT.max とし、下の式で定義される偽の 衝突断面積 o_{null} を導入する.

$$\sigma_{\rm null} = \sigma_{\rm T,\,max} - \sigma_{\rm T} \tag{10}$$

この onull を用いて、新たな衝突断面積の総和を次式で定義 する.

$$\sigma_{\rm T}' = \sigma_{\rm T} + \sigma_{\rm null} \tag{11}$$

 σ_{T} は負イオンのエネルギーに依存しない. $0 \leq R < 1$ の範囲 の一様乱数を発生させて、もし $R < \frac{\sigma_{null}}{\sigma_{null}}$ ならば、衝突しな かったとする. もし $\frac{\sigma_{\text{null}}}{\sigma_{\text{T}}'} \leq R < \frac{\sigma_{\text{null}} + \sigma_{\text{a}}}{\sigma_{\text{T}}'}$ ならば, 衝突a が発生したとする.また、もし $\frac{\sigma_{\text{null}} + \sigma_{\text{a}}}{\sigma_{\text{r}}'} \leq R < \frac{\sigma_{\text{null}} + \sigma_{\text{a}} + \sigma_{\text{b}}}{\sigma_{\text{r}}'}$ ならば、衝突bが発生し、以降も同様である.

なお前節1.2で述べたスケーリングを適用する場合、衝 突過程についても衝突周波数 nov を実サイズと同じ値にな るようにする必要がある.この場合,衝突断面積 σ や時間 ステップ幅 Δt ($v = L/\Delta t$)をスケーリングすることが挙げ られる.

5.1.2.2 負イオンのエネルギー緩和過程のシミュレー ション

クーロン衝突や荷電交換衝突による表面生成負イオンの エネルギー緩和過程が負イオンビームの光学特性に及ぼす 影響について検討した[12]. 負イオン源の引出領域をモデ ル化した. プラズマ電極表面から放出される表面生成負イ オンの初速度分布として、1.5 eVの初期温度の半マクス ウェル分布を仮定した.これは、水素のフランクコンドン 原子の入射エネルギーを 2~3 eV とし、プラズマ・壁相互 作用計算コード (ACAT: Atomic Collision in Amorphous Target, 第4章参照) での計算結果を外挿すると、エネル ギー反射係数が0.5程度[13]と見積られることによる.ま た, 正イオンと水素原子の温度はそれぞれ0.25, 0.1 eVとし た.

図3は負イオンのエネルギー分布の時間発展である.時 間の経過と共に、負イオンエネルギー分布のピークが低い 方へ移動しており、クーロン衝突により負イオンのエネル ギーが緩和されることがわかる.

引出部における引出電極 (Extraction Grid: EXG) 出口と 電子抑制電極(Electron Suppression Grid: ESG)出口での 負イオンビームのエミッタンス図を、エネルギー緩和過程 が無/有についてそれぞれ図4,図5に示した(EXG, ESGについては図2を参照).一般的にエミッタンス図は, 楕円の形状をし、この面積 (エミッタンス) が小さいほど、 負イオンビームの光学特性は良好である.エネルギー緩和 過程がある場合の方が,エミッタンスは小さい.よって, エネルギー緩和過程により、負イオンビームの光学特性が 改善することが分かる.

5.2 イオン性プラズマの形成要因

多量の表面生成負イオンが存在する場合,プラズマ電極 近傍に正・負イオンのみから成り,電子がほとんど存在し ないペアプラズマ(イオン性プラズマ)が観測されている



図 2 負イオンのエネルギー緩和過程のシミュレーションにおけ る引出領域のモデル概要図[12].



図3 負イオンのエネルギー分布の時間発展[12].



図4 引出部での負イオンビームのエミッタンス図(エネルギー 緩和過程を考慮しない場合)[12].



図5 引出部での負イオンビームのエミッタンス図(エネルギー 緩和過程を考慮した場合).

[14]. このイオン性プラズマの理解は,負イオンビームの 大電流化やメニスカス構造の理解と負イオンビームの光学 特性の向上を図る上で,非常に重要である.

PIC-MCC シミュレーションにより、イオン性プラズマ の検証を行った[15]. 負イオンの引出し方向を x 軸に、ま たフィルター磁場の方向を y 軸に取った.

電子はクーロン衝突や中性粒子との衝突によって,(12) 式で表されるステップ幅で,フィルター磁場を横切って拡 散するようにモデル化した.

$$\Delta \widetilde{x_d} = \sqrt{2\tilde{D}} \,_\perp \Delta \tilde{t} \times \xi_x \times \sqrt{\tau_{\parallel} \tau_\perp} \tag{12}$$

ただし \hat{D}_{\perp} , Δi , ξ_x はそれぞれ拡散係数,時間ステップ 幅, 0~1の一様乱数である. (12)式は拡散方程式から求 められ, τ_{\parallel} はフィルター磁場に沿って電子が壁で損失する に要する時間を,また τ_{\perp} は電子がフィルター磁場を横切っ て拡散するのに要する時間に相当する.すなわち $\sqrt{\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}}$ は,電子の実効的な閉じ込め性能を示すパラメータで,こ の値が大きいほど電子の閉じ込め時間が長い.

なお, 5.1.2.1節で述べたような2体衝突モデルやヌル 衝突法を考慮すると,自然に荷電粒子とのクーロン衝突や 中性粒子との衝突の効果が電子軌道に反映されるが,ここ では,パラメータの $\sqrt{\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}}$ がイオン性プラズマの形成への 寄与について検討するために,(11)式で表される $\left[\sqrt{\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}}$ モデル」を用いた.

図 6 は (a) $\sqrt{\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}} = 0.08$, (b) $\sqrt{\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}} = 1.0$ に対する, PG 近傍での n_{H-}/n_e 分布である. 図 6 で, x = 9 mm の位置が PG 入口である. n_{H-}/n_e の値が40以上の領域がイオン性プ ラズマ層に相当する. すなわち, 電子の閉じ込め時間が短 いと電子密度は低下するが, 代わりに準中性条件を保持す るように負イオン密度が高くなり, イオン性プラズマ層が



図 6 PG 近傍での $n_{\text{H}^-} / n_{\text{e}}$ 分布. (a) $\sqrt{\tau_{\parallel} / \tau_{\perp}} = 0.08$, (b) $\sqrt{\tau_{\parallel} / \tau_{\perp}}$ = 1.0[15].

形成されやすいことが言える.

イオン性プラズマの生成機構については他に,アーク チャンバーとプラズマ電極の間に印加するバイアス電圧に よる電子の選択的な引き込みが原因であるとも考えられ る.表面波プローブを用いた PG 近傍の電子密度測定によ り,体積生成負イオンのみの場合,電子密度はバイアス電 圧に大きく依存するが,多量の表面生成負イオンが存在す る場合はあまり依存しないことが示されている[16].この 実験結果からも,特に表面生成負イオンが存在する場合, 電子の閉じ込め時間がイオン性プラズマの形成に寄与する ことが示唆される.

5.3 負イオンビーム光学特性の引出電圧依存性

一般的に安定かつ効率よく負イオンを加速・輸送するために,発散角の小さい収束性の良い負イオンビームが要求される.そのため, PIC-MCC シミュレーションによる負イオンビームの光学特性の研究が行われている.

負イオンビームの光学特性の引出電圧依存性について検 討した[17]. CERN 研究所の Linac 4 用負イオン源[18]を 対象とした.負イオン源の断面図と数値計算領域を図7に 示す.負イオンの引出し方向をx軸に,フィルター磁場に 平行な方向をy軸とした.プラズマ電極PG(ただし図7で はPEと表記)は,表面生成された負イオンを効率よく引き 出すためにテーパー形状となっている.また,ここでは体 積生成負イオンのみを考慮した.

引出電圧を変えた場合の負イオンビームの発散角とメニ スカス形状を図8,図9にそれぞれに示す.引出電圧が 10.7 kVにおいて発散角は最小になる.これは実験結果と 一致する.この場合,メニスカス形状はほぼ平坦である. 引出電圧が低い場合(7 kV)には,メニスカス形状は引出 側へ突出した凸形状に対し,引出電圧が高い場合(14 kV) には、メニスカス形状はプラズマ側へ入り込んだ凹形状に









なる.このように、メニスカス形状は引出電圧に依存する.

 一般的に荷電粒子ビームの光学特性と、Child Langmuir 則から求めた空間電荷制限電流と引出電圧の3/2乗の比 ((13)式参照)であるパービアンス値Pとの間には相関性 がある。

$$P = \frac{I}{V^{3/2}} d^2$$
(13)

ただし, d はメニスカスと引出電極との距離である.パー ビアンス値 P の引出電圧依存性を図10に示す.負イオン ビームの発散角が負イオンビームの発散角が最小となる電 圧 10 kV 付近で,パービアンス値は最小になり,これが最 適なパービアンス値に相当する.この条件よりも引出電圧 を低くすると,(13)式の分母の V²_{ext} が小さくなり,パービ アンス値は増大する.一方,この条件よりも引出電圧を高 くすると,メニスカスと引出電極との距離が大きくなるの で,(13)式の分子のd²が大きくなり,パービアンス値は増 大する.

最適パービアンス値においてメニスカス形状はほぼ平坦 であるが、PG 孔端部では湾曲している.メニスカス端部か ら引出された負イオンは、この湾曲によりビームハロにな りやすいことが、これまでの先行研究から明らかにされて いる.図11に負イオンビームの電流密度と発散角の y 方向 の空間分布を示す.図11(b)において、負イオンビームの コアの部分(-1.5 mm< y < 0.8 mm)は発散角が小さいに もかかわらず、ハロの部分は(y<-1.5 mm, 0.8 mm< y) は、発散角は大きい.PG 孔端部でのメニスカスの曲率は、 図7に示す、引出部側テーパーの開口角度に依存する.す なわち、この開口角度が大きい程、PG 孔端部でのメニスカ スの曲率は大きくなる.したがって、負イオンビームハロ を抑制するには、なるべくこの開口角度を小さくする必要









図11 負イオンビームの電流密度と発散角の y 方向の空間分布 [17].

があると考えられる.

5.4 表面生成負イオンが存在する場合のメニス カスと負イオンビームの光学特性

前章で体積生成による負イオンビーム軌道は,メニスカ ス形状に左右されることを示した.これは表面生成負イオ ンの場合についても同様である.

表面生成負イオンが存在する場合の電子抑制磁場に垂直 な平面での電子密度と負イオン密度の空間分布を図12に示 す[18].負イオン引出用の電界と電子抑制磁場による *E×B*ドリフトの影響で,PG近傍ではフィルター磁場と垂 直な平面において,電子の空間分布が非対称性となる.こ れに伴って図12(b)に示すプラズマメニスカスの形状,ま たはプラズマ中へ浸透する電場(図13参照)は非対称にな る.したがって,負イオン密度の空間分布も非対称になる.



図12 電子抑制磁場に垂直な平面での(a)電子密度と(b)負イオン 密度の空間分布[19].



図13 電子抑制磁場に垂直な平面でのプラズマ中へ浸透する電場 の空間分布[19].

プラズマメニスカス付近における負イオン密度の空間的 な非対称については、エミッタンス測定結果を基に、測定 位置(加速部出口から約1m下流)から負イオンプラズマ 側へ逆方向に負イオンビームの軌道計算した結果[20]とも 傾向が一致している.

5.5 おわりに

引出領域に表面生成負イオンが多量に存在するイオン性 プラズマにおいて、PIC-MCCシミュレーションは負イオ ンプラズマ中の電位構造やメニスカスを自己矛盾なく求め ることができるため、負イオンの引出・輸送過程の解析に 非常に有効である。特にメニスカスについては、従来の正 イオンと電子から成るプラズマにおける Child-Langmuir 則が必ずしも成立するとは限らないため、これに基づいて 負イオン源でのメニスカスを求めることは正しくない.

負イオンビームの光学特性はメニスカス形状に依存す る.したがって引出領域に加速部を追加したモデリングに より負イオンビームの軌道計算を行うことで,PIC-MCC シミュレーションは負イオンビームの光学特性の解明への Special Topic Article

強力なツールとなり得る. PIC-MCC を用いた負イオン ビームの加速に関するシミュレーション例については,文 献[21]等を参照していただきたい.

参考文献

- [1] C.K. Birdsall and A. B. angton: *PLASMA PHYSICS VIA COMPUTER SIMULATION* (Taylor & Francis, 2005).
- [2] 内藤裕史: プラズマ・核融合学会誌 74,470 (1998).
- [3] 石黒静司:プラズマ・核融合学会誌 74,591 (1998).
- [4] K. Miyamoto *et al.*, AIP Conference Proc. **1515**, 22 (2013).
- [5]高木俊宜:電気学会大学講座 電子・イオンビーム工 学,電気学会 p.48 (2005).
- [6] G. Fubiani et al., New J. Phys. 19, 015002 (2017).
- [7] S. Kuppel et al., J. Appl. Phys. 109, 13305 (2011).
- [8] K. Miyamoto et al., Appl. Phys. Lett. 102, 023512 (2013).
- [9] T. Takizuka and H. Abe, J. Comput. Phys. 25, 205 (1977).

- [10] V. Vahedi, M. Surendra, Comput. Phys. Commun. 87, 179 (1995).
- [11] 小越澄雄:プラズマ工学(電気書院, 2010, p.131).
- [12] K. Miyamoto *et al.*, AIP Conference Proc. **1869**, 020002 (2017).
- [13] M. Wada et al., AIP Conference Proc. 1515, 59 (2013).
- [14] K. Tsumori et al., Rev. Sci. Instrum. 83, 02B127 (2012).
- [15] S. Nishioka et al., J. Appl. Phys. 119, 023302 (2016).
- [16] M. Kisaki et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B131 (2014).
- [17] M. Lindqvist et al., J. App. Phys. 126, 123303 (2019).
- [18] J. Lettry et al., Rev. Sci. Instrum. 85, 02B122 (2014).
- [19] K. Miyamoto *et al.*, AIP Conference Proc. **1655**, 050004 (2015).
- [20] K. Nagaoka *et al.*, The 7th International Symposium on Negative Ions, Beams and Sources, 1-11 Sept., videoconference (2020).
- [21] 池田勝則 他: プラズマ・核融合学会誌 95, 327 (2019).



6. まとめ

6. Summary

宮本賢治,吉田雅史¹⁾*,畑山明聖²⁾ MIYAMOTO Kenji, YOSHIDA Masafumi¹⁾* and HATAYAMA Akiyoshi²⁾ 鳴門教育大学,¹⁾山口大学,²⁾慶應義塾大学 ^(原稿受付:2021年6月17日)

6.1 イオン源プラズマシミュレーションモデル の統合による将来的なイオン源開発の発展 性への貢献

1980年~1990年代における負イオン生成部の解析には, プラズマ中の各粒子密度・温度を空間的に一様であるとし て,それらの時間変化を反応のレート方程式により求める "0次元モデル"を用いることで,負イオン電流の運転ガス 圧依存性やアークパワー依存性等の実験結果を定性的に説 明できた[1,2].その後,モンテカルロ法などの導入により 負イオン生成部の数値計算コードが進展し,電子エネル ギー分布関数や粒子密度の空間分布を求められるように なった.その結果,例えば負イオン源プラズマの非一様性 などのような,空間分布を要する物理現象への適用が可能 になった.

また負イオンの引出・加速については、従来の数値計算 コードは初期のメニスカス形状を仮定して、負イオンビー ム軌道を計算していた.しかし PIC-MCC (Particle-In-Cell with Monte-Carlo Collision)の導入により、負イオンビーム 軌道を決定するプラズマメニスカス形状を仮定せずに自己 矛盾なく解けることができるようになった[3].その結果、 従来の数値計算コードでは再現できなかったビームハロを シミュレーションで再現することができるようになった [4]等、負イオンの引出・輸送の物理メカニズムの解明へ 貢献することが可能になった.

このようにコンピュータの性能向上に伴い,特に運動論 的モデリングを土台としたイオン源プラズマシミュレー ションの手法・モデルの進展により,シミュレーションは 負イオン源内で生じる複雑かつ多層的な物理現象を明らか にし,実験結果を定性的に十分,説明することが可能に なってきた.以下では,第1~5章までで解説したイオン 源プラズマシミュレーションモデル及びその統合による将 来的なイオン源開発の発展性や課題,及び個々の計算技法 の他分野への応用性について議論する.

6.1.1 重水素負イオン源開発

核融合炉における負イオンを用いた中性粒子入射装置 (負イオン NBI;Neutral Beam Injection)用の負イオン源に *Naruto University of Education, Naruto, TOKUSHIMA 772-8502, Japan* *現在の所属:宇部工業高等専門学校 おいては, ITER や原型炉等の将来的な実機負イオン NBI における重水素負イオン源開発への貢献が挙げられる. 安 定な負イオン生成や高エネルギー加速を図るために解決す べき課題の1つとして, 電子電流を低減する必要がある. 負イオン源ではいわゆる"セシウム(Cs)効果"により, 負 イオン電流密度の増大と同時に電子電流密度の低下を図 る.

しかしCs効果にもかかわらず,重水素放電は水素放電に 比べて,負イオンと同時に引き出される電子電流が多いこ とが実験的に報告されている[5,6].負イオンビームの安 定な加速や長時間運転を実現する上で,引き出される電子 電流の抑制は克服すべき課題の1つである.そのために, 重水素の場合,水素よりも電子電流が増大する物理メカニ ズムを解明することが必須である.現在,重水素実験結果 と KEIO-MARC (Kinetic model of Electrons in IOn source with Multi-cusp ARC discharge) コードやPIC-MCCコード との比較・検討による解析が進められている[7].

また重水素の方が水素よりも、Cs効果の持続時間が短い ことが実験的に報告されている[8].これもまた実機の長 時間運転を実現する上で克服すべき課題の1つである.

Cs 効果の持続時間が短くなる理由として, i)引出・加 速部から逆流した正イオンによるプラズマ電極 (PG) 表面 のCs吸着層への直接的な剥離[9]や、またはii)アーク チャンバー壁表面に吸着したCs原子のPGへの堆積による 仕事関数の増加[10]などが挙げられる.シミュレーション により上述のような Cs 輸送現象等を解析し、Cs 効果の持 続性に関する実験結果についての物理的メカニズムの詳細 な検討を行う. それにより, Csの有効利用・最適な導入条 件の導出や引出・加速部への漏洩量低減の手法の確立に貢 献ができると考えられる. 核融合ダイバータ物理の解析用 に開発した、モンテカルロ計算による不純物輸送コード [11-13]をCsの挙動解析に適用することが挙げられる.た だしCsの質量数が大きく,運動の時間スケールが電子と大 きく異なるため、バルクプラズマを含めて運動論的モデリ ングで自己矛盾なく、同時に解くことは計算コストの観点 から現状では難しい. そのため不純物輸送コードにおいて

corresponding author's e-mail: kmiyamot@naruto-u.ac.jp

Csの運動を計算する際には,バルクプラズマについては流体的モデリング[14,15]から計算し,バルクプラズマを背景として与える方法が現実的である.

6.1.2 高周波放電型(RF)負イオン源の負イオンビーム の光学特性の改善

核融合用,加速器用の RF 負イオン源に共通して, RF 負イオン源で生成された負イオンビームの発散角は大きい ことが実験的に報告されている[16].その原因の1つとし て, RF 揺動電場によるメニスカス形状の揺動が指摘され ている[17].この物理現象の解明と負イオンビームの光学 的特性の改善に向けた指針を示す上で,例えば PIC-MCC コードによる検討が有効であると考えられる.

6.1.3 Cs フリー負イオン源の開発

負イオン電流値を増大させると共に電子電流値を抑制す るために,負イオン源にCsを添加し,PG表面での表面生 成を促進させる方法が一般的である.しかしこの方法 は,6.1.1でも述べたようなプラズマや引出・加速部から の逆流イオンによるCs効果の劣化や引出・加速部へのCs 流入による耐電圧の劣化等の解決すべき問題がある.その ため現在,負イオン源へCs添加をしないで高電流密度の負 イオン生成を行うために,"Csフリー負イオン生成"の研 究が勢力的に行われている.現存するCsフリー負イオン生 成には,国内で以下の5つの方法が提案されている.

- (a) シートプラズマを用いた体積生成法[18]
- (b) Ta フィラメントを用いた体積生成法[19]
- (c) C12A7 エレクトライド製プラズマグリッドを用いた 表面生成法[20]
- (d) Al 製プラズマグリッドを用いた表面生成法[21]
- (e) ヘリコン波負イオン源[22]

(a)については、厚さ数ミリメートルのシート状の狭い 領域で高密度のプラズマや励起子を生成して、シート近傍 での体積生成により負イオン生成する.(b)については、 Taフィラメントによる壁表面への蒸着により、水素振動 励起分子の高い振動励起準位 ($v \ge 4$)のポピュレーション を増大させて、負イオンの体積生成を増大させる方法であ る.(c)については、C12A7 electride 表面の仕事関数を 2.4 eV 近くまで下げることで負イオンを生成する方法で、 Csを用いた表面生成と原理的には近い.(d)については、 AI 表面上で負イオンを生成する方法で、仕事関数に強く依 存せずに生成が可能である.現在は生成機構の解明を図っ ている.(e)についてはヘリコン波で高密度プラズマを生 成し、体積生成により負イオンを生成する.

これらの Cs フリー負イオン生成による負イオン源の開発においても、今後シミュレーション側からの貢献が期待 される.

6.1.4 その他

その他としては、大面積負イオン源の更なるビーム一様 性の改善で、長手端部のビーム電流向上[23]や、アーク放 電式でのフィラメントアーキング低減と放電効率の改善 [24]への貢献が考えられる.

6.2 個々のモデリング・計算技法の課題

イオン源プラズマシミュレーションのモデリングにおけ る課題の1つにとして,空間スケールや時間スケールが, オーダーで広範囲に渡って変化する物理現象のモデリング をどうするか?というマルチスケーリングの問題が挙げら れる.空間スケールについて,例えば核融合用負イオン NBIの負イオン源の実サイズは,実機だと数10 cm~数 m のオーダーに対し,シース長は10 μm~数100 μm のオー ダーである.時間的スケールについては,シース内の正・ 負イオンの運動は数nsのオーダーだが,表面生成過程は数 ps~数 fs のオーダーである.

そのため例えば第5章で述べたように、PIC-MCCでは スケーリングにより引出領域をモデリングする.しかしこ の場合、バルクプラズマ中のポテンシャルと引出電圧をス ケーリングして求めたポテンシャルとの整合性が必ずしも 取れてない.そのためにimplicit PIC法[25]などの適用によ る実サイズでのモデリングを進めることが考えられる.実 際 RF イオン源については、implicit PIC 法を CERN の Linac4負イオン源のモデリングへ既に適用した事例がある [26].しかし、空間スケールや時間スケールがオーダーで 広範囲に渡って変化する物理現象を、運動論的方法のみで モデリングするのは難しい場合もあり得る.その場合は流 体モデルとの併用などが考えられる.

また他の課題として、バルクプラズマ-表面間の相互作 用のモデリングが挙げられる。例として、1~2 eV 程度の 運動エネルギーでフランクコンドン原子が PG 表面に入射 して、H⁻が表面生成される過程をモデリングする際に、こ のような低いエネルギー領域では量子力学的な効果が重要 になる。そのため従来の二体衝突近似(BCA:Binary Collision Approximation)に基づく数値シミュレーションコー ド(代表的なものとして、TRIM[27]やACAT[28]がある) の適用妥当性が問題となる。バルクプラズマ-表面間の相 互作用のモデリングにおいては、分子動力学シミュレー ションの適用が考えられる[29].

6.3 モデリング・計算技法の他分野への応用性

第1章で述べられているように、イオン源は、核融合プ ラズマ加熱、大型加速器、がん治療など医療機器、探査衛 星のエンジン、イオン注入など半導体製造など、多分野に おける粒子源として用いられており、本特集で紹介したシ ミュレーションもまたこれらの分野での研究開発で適用さ れている.他分野への応用性については、例えば質量分析 器のイオン源やイオン光学系への適用が考えられる.質量 分析の分野では、イオンビーム軌道計算用にSimionという 市販の計算コードがよく用いられる[30].Simionはラプ ラス方程式を差分法で解いて、ポテンシャルを求める.イ オンビームの軌道計算では、クーロン衝突や中性粒子との 衝突を考慮しない.

質量分析においてイオンビームの収束性を良くするため に、イオン源にXeなどのガスを外部から導入して、ガス分 子とイオンとの衝突によりイオン温度を冷却する方法があ る[31].ただし、ガス流量が多すぎると、イオンを散乱さ せて、かえってイオンビームの発散角が大きくなる.その ため適切なガス流量が存在するが、設計計算を行う際に Simion ではシミュレーションできない.そのため、例えば PIC-MCC の適用により、ガス分子とイオンとの衝突過程 を考慮したシミュレーションを行うことが考えられる.

また質量分析では, 土壌に含まれるダイオキシンや生物 の体内における代謝物などの絶縁物を測定試料としてす る. 質量分析器を長時間使用すると,分解能や感度といっ た性能が劣化するため,イオン源や電極を洗浄しなければ ならない.この性能劣化の原因として,絶縁物がイオン源 や電極に付着すると帯電し,局所的に不適切な電場を形成 することが考えられるが,今のところ物理メカニズムは解 明されていない.PIC-MCCの適用による解析が考えられ るが,測定試料となる有機化合物の原子・分子データの拡 張や表面での誘電体の帯電現象のモデリングを行う必要が ある.

その他の他分野への応用性としては,正・負荷電粒子数 の比が1に近いペアプラズマにおけるプラズマ振動周波数 やプラズマの分散関係などの物性解明が挙げられる.銀河 中心核,パルサー磁気圏に存在する電子・陽電子プラズマ の理解は,宇宙プラズマ物理の重要な課題であり,ペアプ ラズマの分散関係など諸特性はこれまでほとんど未解明で ある.一方,負イオン源のプラズマ電極近傍には,表面生 成により多量の負イオンが存在し,正・負イオンから成る ペアプラズマ(イオン性プラズマ)が存在する[32].その ため,負イオン源の開発への直接的な寄与ではないが,実 験室プラズマ研究から宇宙プラズマ研究への新たな貢献と いう観点から,基礎研究への貢献が期待される.

6.4 最後に

シミュレーションのモデリングにおいては,次の2点が 重要である.まず1つ目は,適材適所なモデリングを行う ことである.冒頭で述べたが,最近の負イオン源のシミュ レーションにおいては特に運動論的モデリングを土台とし て,シミュレーションの手法・モデリングが進展してき た.しかしながら6.2でも述べたように,イオン源プラズマ には空間的・時間的にマルチスケーリングの物理現象が多 く存在する.そのため,運動論的モデリングでは上で述べ たようなスケーリングなどの工夫なしには,計算コストの 観点から実質的にシミュレーションが不可能な場合も多く ある.したがって運動論的な効果は犠牲にし,流体モデル による解析を選択することが望ましい場合もある.例え ば,

- i)先に述べたように、背景となるバルクプラズマには、 流体モデルを適用し、対象粒子(例えば Cs のみ)の運 動は運動論的モデルを用いる
- ii) いわゆる heat flux limit [33] を磁力線方向の輸送係数に 採用する

など、できる限り運動論的な効果を取り入れた流体モデル を開発する、など柔軟な対応が求められる.

また3次元のシミュレーションコードと0次元モデルと の併用により,複雑かつ多層的な物理現象から本質的な物 理メカニズムを抽出することが大事である. 0次元モデル はモデルとしては簡易ではあるが,これまでの負イオン生 成部の解析において有効性を示してきた. 他方,3次元の シミュレーションコードはモデリングが複雑なため,得ら れた結果が真に物理的に意味のある結果なのか,あるいは 数値計算上のエラーから発生した"人工的な"結果を識別 しにくくなる.計算結果の解釈を誤らないためには,0次 元モデルの併用による計算結果の物理的な検討は必須であ るといっても過言ではない.また,計算コストがかかる2 次元や3次元モデルのシミュレーションの解析方針の策定 や計算ケースの選択などのためにも,0次元モデルによる 幅広いパラメータ・サーベイは極めて有効な手段になる.

2つ目として,数値計算技法にとらわれた"シミュレー ションのためのシミュレーション"ではなく,実験との比 較・検討によるモデリングの検証・改善である.そのため にも,国内・国外との実験研究者と連携して研究を進める べきである.また,例えば表面物理などこれまでとは異な る専門分野の研究者との連携により,今後のイオン源プラ ズマのシミュレーション手法・モデリングのさらなる発展 が望まれる.

参 考 文 献

- [1] O. Fukumasa, J. Phys. D: Appl. Phys., 22, 1668 (1989).
- [2] M. Ogasawara et al., Fusion Eng. Des. 26, 507 (1995).
- [3] K. Miyamoto et al., Appl. Phys. Lett. 100, 233507 (2012).
- [4] K. Miyamoto et al., Appl. Phys. Lett. 102, 023512 (2013).
- [5] H. Nakano et al., Jpn. J. App. Phys. 59, SHHC09 (2020).
- [6] B. Heinemann et al., New J. Phys. 19, 015001 (2017).
- [7]加藤 凌:NIFS 重水素負イオン源における電子輸送の数 値解析,第37回プラズマ・核融合学会年会(2020.12.1-12.4 中継本部:愛媛大学常北キャンパス).
- [8] P. Franzen *et al.*, Nucl. Fusion 55, 053005 (2015).
- [9] A. Mimo et al., AIP Conf. Proc. 2052, 040009 (2018).
- [10] M. Yoshida et al., Rev. Sci. Instrum. 91, 033313 (2020).
- [11] Y. Homma, A. Hatayama, J. Comput. Phys. 231, 3211 (2012).
- [12] Y. Homma, A. Hatayama, J. Comput. Phys. 250, 206 (2013).
- [13] S. Yamoto et al., Comp. Phys. Comm. 248, 106979 (2020).
- [14] T. Mizuno et al., Rev. Sci. Instrum. 75, 1760 (2004).
- [15] S. Lishev *et al.*, Plasma Sources Sci. Technol. 27, 125008 (2018).
- [16] W. Kraus et al., AIP Conf. Proc. 2052, 040004 (2018).
- [17] Y. Haba et al., Jpn. J. Appl. Phys. 59, SHHA01 (2020).
- [18] H. Kaminaga et al., Rev. Sci. Instrum. 91, 113302 (2020).
- [19] S. Masaki et al., AIP Conf. Proc. 2052, 020002 (2018).
- [20] M. Sasao et al., Appl. Phys. Express 11, 066201 (2018).
- [21] M. Yoshida et al., Phys. Plasma, 28, 033512 (2021).
- [22] 負イオン研究会2018「負イオンの基礎と実践の最前線」 https://workshop.nifs.ac.jp/n-ion2018/
- [23] M. Yoshida et al., Fusion Eng. Des. 96-97, 616 (2015).
- [24] M. Ichikawa et al., Plasma Fusion Res. 11, 2405108 (2016).
- [25] J.U. Brackbill and D. W. Forslund, J. Comput. Phys. 46, 271 (1982).
- [26] S. Mattei et al., J. Comput. Phys. 350, 891 (2017).
- [27] W. Eckstein et al., J. Appli. Phys. 51, 1194 (1980).
- [28] W. Takeuchi, Y. Yamamura, Rad. Effects 71, 53 (1983).

- [29] M. Warrier et al., J. Nucl. Mater. 467, 457 (2015).
- [30] SIMION, https://simion.com/
- [31] A.V. Tolmachev *et al.*, Rapid Commun. Mass Spectrom. 14, 1907 (2000).
- [32] K. Tsumori et al., Rev. Sci. Instrum. 83, 02B127 (2012).
- [33] P.C. Stangeby, The Plasma Boundary of Magnetic Fusion Devices (Taylor & Francis Group, New York), Chap. 26, pp.656-666 (2000).

∞ √∞ 小特集執筆者紹介



柴田崇統

高エネルギー加速器研究機構(KEK)加速器 研究施設・助教.2014年慶應義塾大学大学院 理工学研究科・後期博士課程修了,博士(工 学).2015年 KEK 特別助教を経て,現職.主と

して J-PARC 加速器用のイオン源開発に従事しています. 最近 インターンシップ用にイオン源の紹介・組立て動画を制作し たのですが, BGM 選定が難しく, どうやっても YouTubeの クッキング動画風になる問題に直面しています.



吉田雅史

宇部工業高等専門学校 電気工学科 准教授. 2011年に九州大学大学院総合理工学府・博士 (工学).日本原子力研究開発機構,量子科学 技術研究開発機構,山口大学を経て,今年9月

より現職. 核融合プラズマ壁相互作用に始まり, 現在はプラズ マ加熱用 NBI の負イオン生成とその引出加速に関わっていま す. 4年ほど前からソフトバレーボールをはじめました. 今は サーブとレシーブにはまっています.



さお だ けい じ

信州大学工学部教授.主な研究分野はプラズ マ分光学.しばらくぶりに野球と空手で動け るようにしたいなあと思いつつ,鍛錬のため 近所の善光寺とか戸隠とかのお散歩をしてい

ます.



ほの かず お

慶應義塾大学理工学部・准教授.2008年に慶 應義塾大学大学院理工学研究科・後期博士課 程を修了(博士(工学)).日本原子力研究開 発機構,量子科学技術研究開発機構を経て

2018年4月より現職. 周辺・ダイバータプラズマおよびイオ ン源プラズマのモデリング・シミュレーション研究を行って います. 昨年からの新型コロナで在宅が増え,家中のスマート 化がだいぶ進みました (ただし体型を除く). 最初は興味本位 でしたが,今や頼りっきりの生活です.



和田元

-00

00

同志社大学理工学部・教授.1983年カリフォ ルニア大学バークレー校 Ph. D.取得,日立製作 所を経て1987年同志社大学着任.専門は弱電 離プラズマと固体壁の相互作用.講義が多す

ぎて自分の研究は殆どさせて貰えないので、学生さんの研究 のお手伝いをしています.感染症対策で毎日がビデオ教材づ くり、ゴールデンウィークもお盆休みもありませんでした.



剣 持 貴 弘

同志社大学生命医科学部 教授 博士(理学)こ こ10年ほど, PWI研究から離れて, 生命科学分 野で研究を進めております. 昨今のエネル ギー問題や SDGs に関連して, 核融合エネル

ギーに対する社会的な期待が高まっておりますので、核融合 コミュニティの研究者の皆様方の研究成果が身を結ぶことを 願っております.



客本賢治

鳴門教育大学大学院学校教育研究科 教授. 博士(工学)(慶應義塾大学大学院理工学研究 科).旧日本原子力研究所(現QST)では,

ITER等におけるNBI用負イオン源の開発に従 事してきました.大学では負イオン源の数値計算シミュレー ションの他,学校教育に関する授業や研究も行っています.今 年6歳になる息子がいますが,最近,将棋を覚えたり,プール で水に顔つけができるようになったりと日々の成長に驚かさ れます.



畑山明聖

慶應義塾大学 名誉教授,主な研究分野:プラ ズマ物理,ダイバータプラズマ,負イオン源プ ラズマ,数値シミュレーション.私事恐縮です が,退職直前(2019年1月)不覚にも心不全で

倒れ, ICU で生死の淵を彷徨いました. これは, そろそろ若手 に任せてフェードアウトしろとのサインだったようにも思い ますが, 家族, そして皆さんのお蔭で何とか再起することがで きました. 現在, 生きていることの喜びを感じています. この 小特集についても, 執筆者の皆様, 特に若手研究者の皆様との 議論を通していっぱい元気をもらいました. 大変, 感謝してい ます.