

カソードレンズ解析のための表面電荷法による 電界計算精度の検討

Studies on Accuracy of Electric Field Calculation by Surface Charge Method for Cathode Lens Analysis

坂田拓哉†, 日比野倫夫††
Takuya SAKATA, Michio HIBINO

Abstract: The accuracy of the electric field calculated by the surface charge method was investigated for the analysis of the cathode lens of the emission electron microscope. The surface charge density and the electric field were calculated for a system consisting of a large plate electrode and a point charge and the accuracy was examined in comparison with the theoretical values. The calculation revealed that a large calculation error arises for the electric field close to the electrode surface and that the error is caused by the singularity of the electric field calculation. It is found that this error is excluded when the surface of the electrode is appropriately divided in accordance with the point of electric field calculation, resulting in an improvement in the accuracy of the electric field calculation.

1. はじめに

放射型電子顕微鏡は、物体表面の凹凸構造に加えて、結晶構造や方位、電子状態などの情報を得ることができる特徴をもつ電子顕微鏡である。そのため、放射型電子顕微鏡は、結晶成長過程、相転移、吸着、拡散、化学反応などの諸表面現象の研究など、材料の開発研究、電子デバイスの評価などに使われている。電子デバイスの集積度はナノテクノロジーの進歩とともに年々高まり、材料もバルクの性質から表面や界面、薄膜の性質が重要となってきた。そのため、これを評価する放射型電子顕微鏡の分解能の向上が望まれる状況となっている。放射型電子顕微鏡の分解能は、試料近傍に形成される電界レンズであるカソードレンズ¹⁾の性能によって決まるので、放射型電子顕微鏡の分解能向上にはカソードレンズの改善が不可欠である。

カソードレンズの改善のためには放出された電子の軌道解析を行なってカソードレンズの結像特性を調べる必要がある。そのためには中心軸付近の mm 程度の範囲の電界を正確に知る必要がある。そこで、まず第1段階として、電界計算精度の検討を行った。電界計算法としては表面電荷法を使用した。この方法は様々な電極形状の電界計算を高精度で計算できるという特徴を持つ。

本研究では、解析的に理論値が求められる電極形状に対して表面電荷法を使用した電界計算の精度を調べ、シミュレーションに必要な条件を求めた。解析的に理論値が求められる形状としては、十分に大きな平板電極と点電荷の系を使用した。電界計算精度としては、相対誤差が約 1×10^{-4} 程度を目安とした。

2. カソードレンズ

2・1 カソードレンズとその重要性

カソードレンズ（陰極レンズ）は、試料を陰極とし、その近くに配置された電極とで構成される電界レンズである(図1)。放射電子顕微鏡の構造の概略を図2に示す²⁾。

試料になんらかの方法でエネルギーを与え、試料から放出された電子をカソードレンズで加速、収束して結像する。その像をいくつかの磁界レンズを使用して順次拡大し、最終像をつくる。磁界レンズは最初にできた像を拡大する役割を果たすため、カソードレンズが作る像の分解能がよくなければ、いくら磁界レンズで大きく拡大しても試料表面の詳しい情報を正しく得ることができない。ゆえに、カソードレンズの特性が放射型電子顕微鏡の分解能を決めることになる。

2・2 カソードレンズ内の電子の軌道

カソードレンズの特性（例えば、カソードレンズの収差特性など）を解析するためには試料から放出された電子の軌道を計算

† 愛知工業大学大学院
工学研究科電気電子工学専攻(豊田市)
†† 愛知工業大学 電気学科 電子工学専攻(豊田市)

する必要がある。

試料から放出された電子は図 1 のように、電界 E による力 $F = -eE$ [N] をうける。したがって、円筒座標系で考えると、電子は r 方向へ大きく広がることはなく、 z 軸付近を加速・減速しながら通過することになる。そのため、電子の軌道解析を行ってカソードレンズの特性を調べるには、 z 軸付近の mm 程度の電界を正確に知る必要がある。

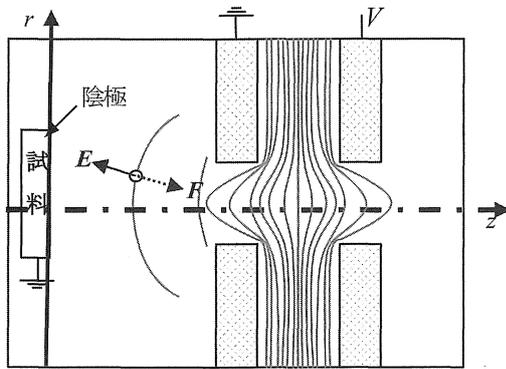


図 1 カソードレンズと電子に加わる力

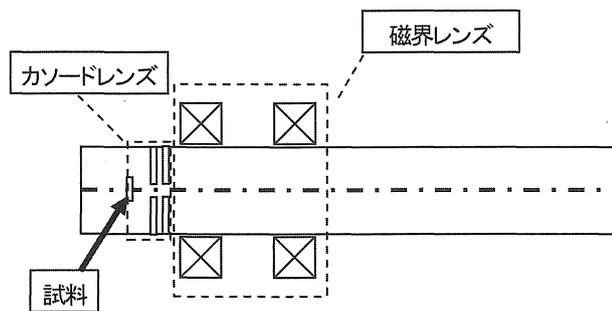


図 2 放射型電子顕微鏡の構造

3. 表面電荷法による電界計算

電位及び電界計算の基本は、適当な境界条件のもとにラプラスの方程式を満足する電位 ϕ を求めることである。電位、電界は場所とともに連続的に変化するが、数値計算によってラプラスの方程式を解くためには、連続的に変わる量を離散化して取り扱う必要がある。

離散化して取り扱えるようにする方法は、領域を分割する「領域分割法」と、境界を分割する「境界分割法」に大別できる。領域分割法は、領域を有限個に分割して分割点の電位を未知数とする方法で、差分法と有限要素法がこれに属する。カソードレンズの結像特性を調べるためには電子軌道を計算する必要があり、領域の電界が重要である。領域分割法により領域の電界の値を得るには、電位を数値微分することになるので、桁落ち誤差により領域の電界の計算の精度が悪くなる恐れがある。一方、境界分割法は、境界と境界上に存在する電荷を分割することによって領域の電界を求める方法で、電荷重畳法と表面電荷法がこれに属する。したがって、電界は境界上の電荷の影響の総和として計算されるので、桁落ち誤差の心配はない。また、解析対象が境界のみであり、領域分割法に比べると一次元分未

知数の数が少なくすむ。したがって、複雑な形状に対しても、より精緻なモデル化が可能である。このような特徴から、境界分割法のほうが原理的に高精度計算向きの手法であると言える。

境界分割法の中で、電荷重畳法は、境界上での電位の条件が満足されるように電荷を仮想的に配置し、その仮想電荷から電界を計算する手法である。それゆえ、電荷の配置さえ誤らなければ、高い精度の電界計算が可能である。しかし、仮想電荷の配置の仕方は一義的に決まらないので、高い精度を得るためには、非常に簡単なモデルの解析に限定せざるを得ない。一方、表面電荷法は積分方程式の数値解析法の一つである。表面電荷法は、境界条件として与えられた電位から電荷を求める方法を用いる。表面電荷法では、積分方程式を解いて境界上の電荷分布を直接求めるため、電荷重畳法のような解析対象に依存した電荷の配置の仕方に関する曖昧さは生じない³⁾⁴⁾。これらのことから、様々な電極形状を計算することを考え、本研究の電界計算に使用する数値計算法としては表面電荷法を使用する。

4. 平板電極と点電荷の系

本研究では、電極形状として「十分に大きな平板電極と点電荷」の系(図 3)を使用した。この系については映像法によって表面電荷密度、領域の電界の値を解析的に求めることができる。そこで、表面電荷法によってシミュレーションした表面電荷密度と領域の電界の値を映像法によって求められる理論値⁵⁾と比較し、シミュレーションに必要な条件(電極表面の分割)について検討する。

4.1 電極形状

実際のカソードレンズの電極のサイズが数 mm のオーダーであることを考慮して、図 3 のように平板電極と点電荷の距離を 10mm とする。平板電極としては、映像法が適用できるように、平板電極と点電荷の距離に対して十分に大きい 1000mm の半径の円板とした。円板の厚みは 5mm とする。点電荷としては、半径の小さい球で近似をする。これまでの研究から、半径を 5.0×10^{-6} mm の小球とすれば点電荷と近似できることが分かっているので、この値を用いた。

電極に与える電位としては、平面電極の電位を 0V とし、中心軸(z 軸上)の点電荷(小球電極)の電位を 100V とした。

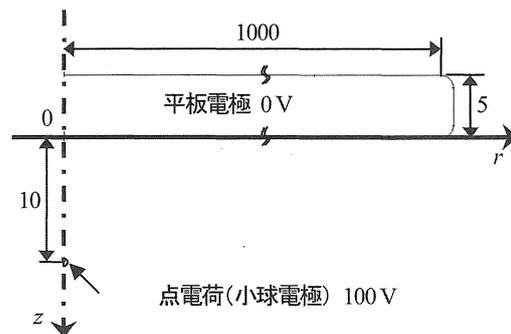


図 3 平板電極と点電荷(小球電極)の電極形状 (単位は mm)

4・2 分割条件

電極表面の分割条件については、主分割を2個とし、中心軸の近くは電荷密度が大きいいため分割幅を小さくし、中心軸から離れたところでは表面電荷密度が小さいため分割幅を大きくする。なお、電界計算精度を評価する範囲としては、カソードレンズの陰極から放出する電子の電子軌道を計算する上で重要となる範囲として $r_0=0\sim 10\text{mm}$ 、 $z_0=0\sim 10\text{mm}$ とする。

実際に、表面電荷密度を計算してみると、主分割境界で大きな誤差が出ることが分かった。そこで、主分割境界での誤差の影響を受けないように、図4のように、平板電極表面の $r=0\sim 30\text{mm}$ の範囲の分割幅(分割数)は、計算精度を調べるために種々の値に変え、 $r=30\sim 1000\text{mm}$ の範囲については分割幅 10mm (分割数は97)の一定値とする。平板電極の点電荷に対して裏側の表面については、表面電荷密度は非常に小さく、その影響も小さいので、 $r=0\sim 1000\text{mm}$ の範囲の分割幅は 10mm(分割数は100)とする。なお、単に平板電極表面と記すときは、点電荷側の表面を意味するものとする。点電荷(小球電極)は分割幅 18° (分割数は10)とした。これらの分割条件を使用し、表面電荷密度、電界計算を行った。

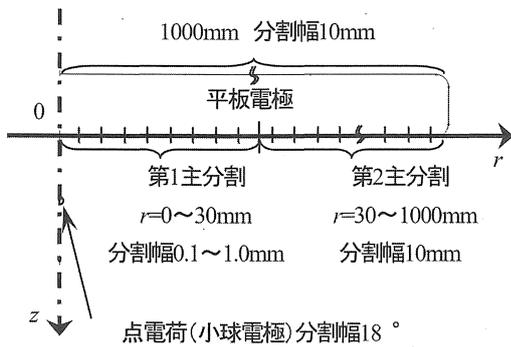


図4 平板電極と点電荷(小球電極)の系の分割条件

5. 表面電荷密度計算の精度

$r=0\sim 10\text{mm}$ の範囲の種々の分割幅に対する表面電荷密度の平均2乗誤差を図5に示す。ここで、平均2乗誤差は相対誤差の平均2乗値である。この図から、表面電荷密度の誤差は、分割幅が小さい程小さくなるのがわかる。分割幅を 0.5mm 以下とすれば、 1×10^{-4} オーダーの誤差にすることができ、領域の電界計算に必要な表面電荷密度の精度が得られることが分かる。したがって、この分割条件を使用して電界計算の検討を行なった。

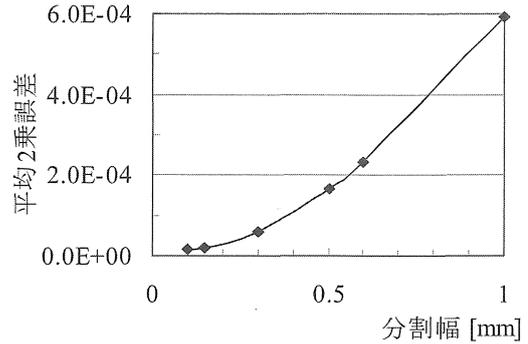


図5 種々の分割幅に対する表面電荷密度の誤差

6. 電界計算

6・1 表面電荷法による電界計算の誤差

電界を求める範囲 $r_0=0\sim 10\text{mm}$ 、 $z_0=0\sim 10\text{mm}$ の、 $z_0=0\sim 10\text{mm}$ の 1mm 間隔の各 z_0 について、 $r_0=0\sim 10\text{mm}$ の間の 1mm 間隔の各点での計算値の誤差を映像法によって得られる理論値と比較して調べた。その結果を図6に示す。

平板電極から 1mm 以上離れた $z_0=1\sim 10\text{mm}$ の範囲ではどの分割幅の場合でも誤差は 2.0×10^{-5} 以下となり、誤差は十分小さくなる。しかし、平板電極に近い $z_0<1\text{mm}$ での電界精度は著しく悪くなるのが分かる。

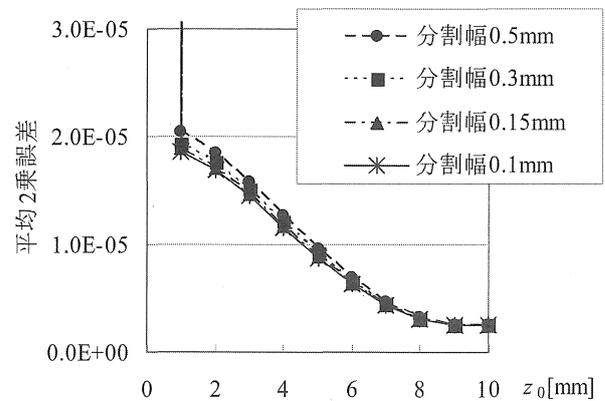


図6 z_0 に対する電界の平均2乗誤差

6・2 平板電極近傍の電界の誤差

カソードレンズにおいて、陰極から放出する電子のエネルギーは小さく電子の速度が遅いため、陰極近傍の電界が電子軌道に与える影響は大きい。そのため、陰極近傍の電界はカソードレンズ特性において重要である。本研究の電極系の平板電極がカソードレンズの陰極に対応するため、特に平板電極近傍の電界の精度が重要である。そこで、平板電極近傍の電界精度を詳しく調べることにする。平板電極近傍として $z_0=0\sim 0.6\text{mm}$ の範囲の電界の誤差を調べた結果を図7に示す。

一般に、電極上の分割幅を小さくすればするほど、正確な電界分布となるはずであるが、この図から、分割幅が小さい0.3mmの場合のほうが、分割幅0.5mmの場合より誤差が大きくなっている。そこで、このような結果が起こる原因を調べるため、 $z_0=0.001\text{mm}$ における分割幅0.3、0.5mmの場合の電界の r 成分 E_r 、 z 成分 E_z 、電界強度 E を計算し、理論値と比較した。理論値を図8に、計算値を図9、10に示す。これらの図から分割幅が0.5mmの場合の E_r 、 E_z 、 E が理論値に近いのに対し、分割幅0.3mmの場合は E_r が激しく振動し、 E_z も振動することが分かる。そのため電界の精度が悪くなる。振動する原因は、電界計算する際の計算式の被積分関数に特異点が存在するからであると考えられる。

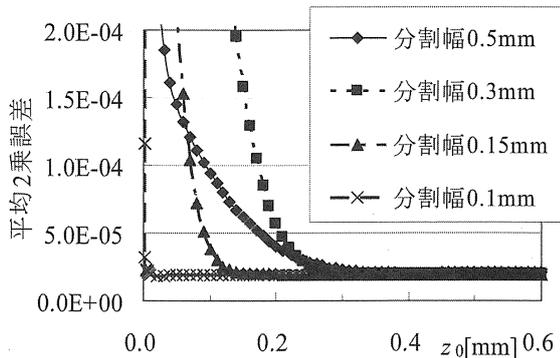


図7 平板電極近傍の $r_0=0\sim 10\text{mm}$ の範囲の電界の誤差

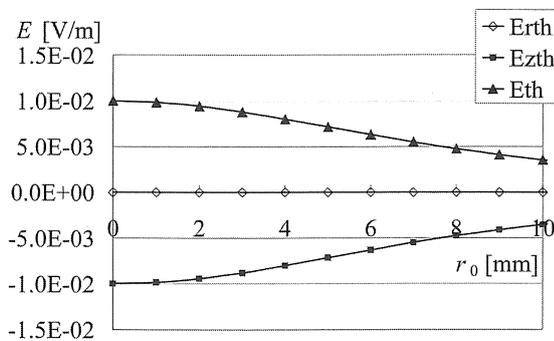


図8 $z_0=0.001\text{mm}$ における電界の理論値

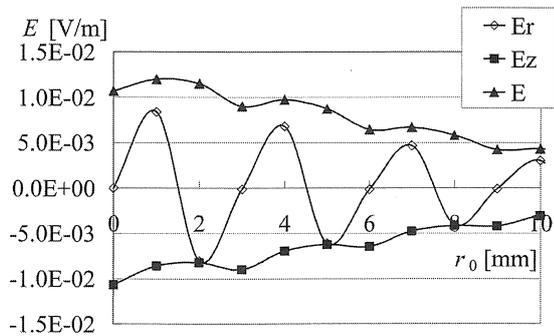


図9 $z_0=0.001\text{mm}$ における電界 (分割幅0.3mmの場合)

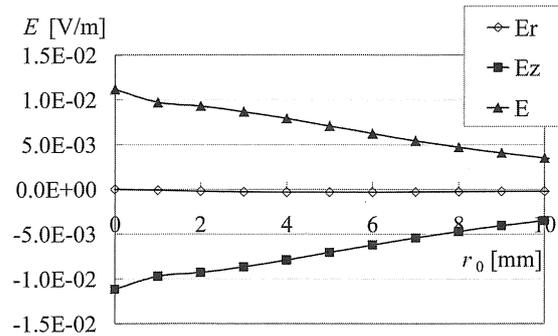


図10 $z_0=0.001\text{mm}$ における電界 (分割幅0.5mmの場合)

6・3 電界計算式の特異点

領域の電界の r 成分 E_r 、 z 成分 E_z の計算式は次式で表される。

$$E_r(r_0, z_0) = -\frac{1}{\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^n \left(\frac{\Delta s_j}{2} \right) \sigma_j \int_{-1}^{+1} \frac{r_j(t)}{2r_0\sqrt{H_j}} \left\{ E(k_j) \left(\frac{r_j(t)^2 - r_0^2 + (z_j(t) - z_0)^2}{(r_j(t) - r_0)^2 + (z_j(t) - z_0)^2} \right) - K(k_j) \right\} dt \quad \dots\dots(1)$$

$$E_z(r_0, z_0) = \frac{1}{\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^n \left(\frac{\Delta s_j}{2} \right) \sigma_j \int_{-1}^{+1} \frac{r_j(t)}{\sqrt{H_j}} \left\{ E(k_j) \left(\frac{z_j(t) - z_0}{(r_j(t) - r_0)^2 + (z_j(t) - z_0)^2} \right) \right\} dt \quad \dots\dots(2)$$

式(1), (2)には特異点が含まれる。式(1), (2)の式の被積分関数で特異性を持つ部分は、第一種完全楕円積分 $K(k_j)$ と

$$[(r_j(t) - r_0)^2 + (z_j(t) - z_0)^2]^{-1} \quad \dots\dots(3)$$

である。第一種完全楕円積分 $K(k_j)$ の特異点については、プログラム上で特異点を除いている。したがって、 E_r 、 E_z が振動する原因は式(3)の特異点の影響と考えられる。式(3)が特異点となるのは、 $r_j=r_0$ 、 $z_j=z_0$ である。 $r_j(t)$ 、 $z_j(t)$ は電荷が存在している電極表面の点で、各分割区間の中点である。 r_0 、 z_0 は電界を求める領域の点である(図9)。したがって、電界を求める領域の点の電荷が存在している点(各分割区間の中点)に近いとき特異となり、電界の精度が悪くなると考えられる。

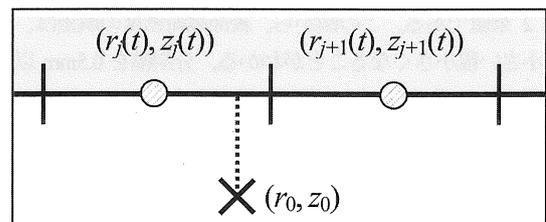


図11 電荷が存在している電極表面の点(各分割区間の中点) $r_j(t)$ 、 $z_j(t)$ (O)と電界を求める領域の点 r_0 、 z_0 (X)

6・4 分割幅による平板電極近傍の特異性

$z_j(t) \doteq z_0$ のとき、すなわち電極表面近くを考えると、 $E_z(r_0, z_0)$ の被積分関数の特異性は、次の式であらわされる。

$$\frac{r_j(t)^2 - r_0^2 + (z_j(t) - z_0)^2}{(r_j(t) - r_0)^2 + (z_j(t) - z_0)^2} \doteq \frac{r_j(t) + r_0}{r_j(t) - r_0} \quad \dots\dots(4)$$

したがって、 $r_j(t) \doteq r_0$ の点で特異性を示す。

また、 $E_z(r_0, z_0)$ については

$$\frac{z_j(t) - z_0}{(r_j(t) - r_0)^2 + (z_j(t) - z_0)^2} = \frac{1}{\frac{(r_j(t) - r_0)^2}{z_j(t) - z_0} + z_j(t) - z_0}$$

の関係であらわされるように、 $z_j(t) \doteq z_0$ であり、しかも $(r_j(t) - r_0)^2 \ll z_j(t) - z_0$ のときに特異性を示すことになり、 E_z に比べると特異性は小さい。

式(4)から、図 11 の電界を求める点の r 座標が、隣接する電極表面の分割の電荷の r 座標 r_j, r_{j+1} の中間点(すなわち分割境界の r 座標)に対して左側にあるとき負に特異性を、右側にあるとき正の特異性を、また中間点すなわち分割境界上にある時には互いの特異値を打ち消し合い、特異性がなくなることが分かる。

図 9、10 の場合の分割数が 03、0.5mm のときの $r_j(t), r_0$ の位置関係を図 12、13 に示す。6.2 で述べた E_r が激しく振動していた分割幅が 0.3mm の場合は電界を求める点の r 座標が、分割境界の r 座標と等しくないため、特異性があらわれることが分かる。また、分割幅が 0.5mm の場合は特異性を打ち消しあうことが分かる。

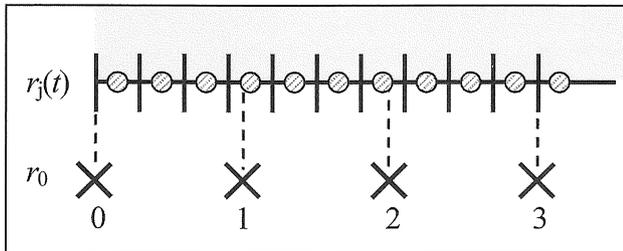


図 12 分割幅が 0.3mm のときの点 $r_j(t)$ (○)、 r_0 (×) (単位は mm)

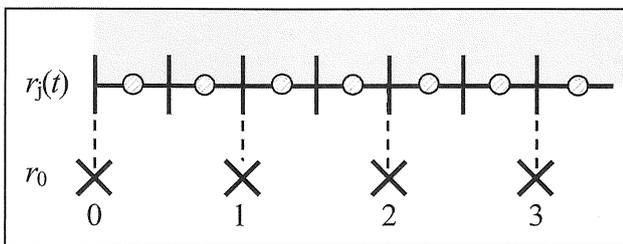


図 13 分割幅が 0.5mm のときの点 $r_j(t)$ (○)、 r_0 (×) (単位は mm)

6・5 特異性を打ち消しあう分割条件

電界を求める点と電極条件が適切であり、被積分関数の特異性が打ち消し合うときの、平板電極近傍の電界の誤差の分割幅依存性を図 14 に示す。これから、分割幅を狭くする程誤差は小さくなること

が分かる。また、電極表面直近の誤差は大きい、分割幅を 0.3mm とすれば、電極表面から 0.01mm 以上、また分割幅を 0.1mm とすれば、電極表面から 0.002mm 以上離れれば、誤差は 1.0×10^{-4} 以下にできることもわかる。

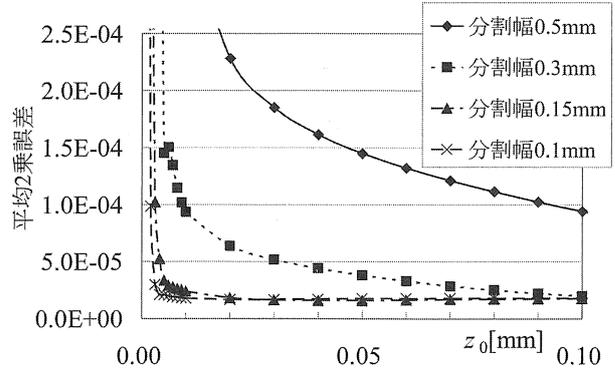


図 14 平板電極近傍の電界の誤差 ($r_0=0 \sim 10.2$ mm の範囲)

7. まとめ

本研究では、解析的に理論値が求められる平板電極と点電荷の系に対して、表面電荷法により表面電荷密度と電界の計算精度の検討を行い、電界計算のシミュレーションに必要な条件を求めた。

7・1 表面電荷密度計算

電極の分割条件を、平板電極表面の中心軸まわりの $r=0 \sim 30$ mm までを第 1 主分割(分割幅変化)、 $r=30 \sim 1000$ mm までを第 2 主分割(分割幅 10mm と固定)として、電界計算に必要な $r=0 \sim 10$ mm の範囲の表面電荷密度の精度を検討したところ、第 1 主分割の分割幅を 0.5mm 以下とすれば、領域の電界計算に必要な表面電荷密度の精度が満足される。

7・2 電界計算

表面電荷密度計算で得られた分割条件を用いて中心軸のまわり 10mm 範囲の電界を計算したところ、平板電極近傍の電界計算に大きな誤差が生ずることが分かった。この原因を調べたところ、分割条件によっては電界計算式の特異性から電界計算の誤差が大きくなること、また電界を求める点と電極の分割条件を適切に選べば、特異性に起因する誤差を除くことができることが明らかとなった。そのときの電極の分割条件は、電界を求める点の r 座標と、副分割の分割境界点の r 座標が同じになるような分割幅にするという条件である。この分割条件を満たすならば、分割幅が狭い程電界の精度は上がり、分割幅を 0.3mm 以下とすれば電極表面から 0.01mm 以上離れれば誤差は 1.0×10^{-4} 以下にできる。

電界計算の特異性を除くことにより電界計算精度を向上することができたが、電極表面直近(表面から 0.01mm までの範囲)の誤差はまだ大きい。この誤差の原因を解明するのが今後の課題の一つである。また、陰極から放出する電子軌道のシミュレーション方法を確立し、種々の電極配置に対してカソードレンズの結像特性を解析して、カソードレンズの改善を図ることが必要である。

謝辞

本研究を行なうにあたり、表面電荷法のプログラムを提供して頂き、種々のご助言を頂いた本学飯吉僚教授、修士1年牧野芳明君に感謝申し上げます。

参考文献

- 1) 菅田榮司：電子顕微鏡(2), p.62, オーム社, 1956.
- 2) 上田良二：実験物理学講座 23 電子顕微鏡, p.8, 共立出版社 1982
- 3) 河野照哉, 宅間薫：数値電界計算法, pp.10-11,60-61, コロナ社, 1980.
- 4) 久野裕司：[学位論文] 境界要素法による三次元電界計算の基礎的研究, pp.4-5, 1989.
- 5) 山田直平：電気学会大学講座 電気磁気学 (第二次改訂版), p.110, 電気学会, 1999.

(受理 平成 17 年 3 月 17 日)