

# 3次元PIC解析による重粒子線治療ISOLシステム用1価イオン源の最適化 OPTIMIZATION OF SINGLY CHARGED ION SOURCE WITH 3-D PIC SIMULATION

片桐 健, 野田 章, 永津弘太郎, 涌井崇志, 野田耕司  
量子科学技術研究開発機構 放射線医学総合研究所

Ken Katagiri,\* Akira Noda, Kotaro Nagatsu, Takashi Wakui, and Koji Noda  
QST/NIRS

## Abstract

An electron impact singly charged ion source has been improved to enhance the ionization efficiency with a newly developed 3-D PIC code. The singly charged ion source has realized ionization efficiency of 1% for  $C^+$  ion production to be employed for an ISOL (Isotope Separation On-Line) system, which provides  $^{11}C$  ions to treatment rooms for heavy-ion cancer therapy simultaneously with real-time verification of an irradiation field using PET (Positron Emission Tomography). To realize the ionization efficiency of 1%, effective current in the drift tube of the ion source must be increased more than 100 mA. Electron beam trajectory and design of the electrodes, such as an anode, drift tubes, electron repeller were investigated and optimized by considering distribution of the lost electrons.

## 1. はじめに

放射線医学総合研究所の HIMAC 加速器を用いた重粒子線治療は、1994 年の治療開始から今年で 22 年目を迎え、9000 人以上もの患者に治療が適用されてきた [1]. より高精度な治療照射を行う為に、細い炭素ビームでがんの病巣を塗りつぶすように照射を行うスキヤニング照射法による治療が 2011 年より開始された [2]. さらなる高精度化のために、照射野をリアルタイムに検証する技術の実現が期待されている。現在治療に用いている安定核の  $^{12}C$  ビームの代わりに、陽電子放出核である  $^{11}C$  ビームを用いることができれば、体内での停止位置から放出される消滅  $\gamma$  線を PET 装置により測定することで、随時ビーム位置を検出することができ、その結果として、リアルタイムに照射野を検証することが可能となる。我々は、この重粒子線治療のための照射野検証技術の実現のために、Isotope Separation On-Line (ISOL) 法により  $^{11}C$  ビーム生成し、HIMAC で加速し治療室へと供給することを検討している。この計画の概念図を Fig. 1 に示す。HIMAC シンクロトロンにおける一度の入射-加速-供給シーケンスにて、 $10^9$  個の  $^{11}C$  イオンを治療室に供給することを想定すると、上流のイオン源からは  $10^{10}$  個の供給が必要となる。この  $10^{10}$  個の  $^{11}C$  イオンの生成・加速を目指して ISOL システムの開発を進めている。この ISOL システムは、

小型サイクロトロン、 $^{11}C$  分子生成分離装置 (CMPS)、1 価イオン源と荷電増幅用 EBIS イオン源から構成される。CMPS では、ターゲットにプロトン照射を行い、生成された  $^{11}C$  分子と混入した不純物分子の分離を行う。この CMPS の特徴は、混入する不純物量を可能な限り低減するために、プロトン照射から分離プロセスまでを真空中で行うことである。そのため、プロトン照射のターゲットは固体である必要がある。これまでに、固体のホウ素化合物を照射ターゲットとして用い、プロトン照射 (18 MeV, 18  $\mu A$ ) を 20 分間照射することにより、 $\sim 5 \times 10^{12}$  個の  $^{11}CH_4$  分子を効率的に生成・回収できることが明らかになった [3]. また、CMPS の分離性能評価実験も行われ、不純物と混合した  $CH_4$  分子を高い効率で回収・取出しできることが明らかになった [4].

このような進展のもと、次のステップとして 1 価イオン源のプロトタイプ機の開発を行った [5, 6]. この 1 価イオン源には、(1) 限られた  $^{11}C$  分子の生成量から要求量を賄うために高いイオン化効率であること ( $\sim 1\%$ 、

\* katagiri.ken@qst.go.jp

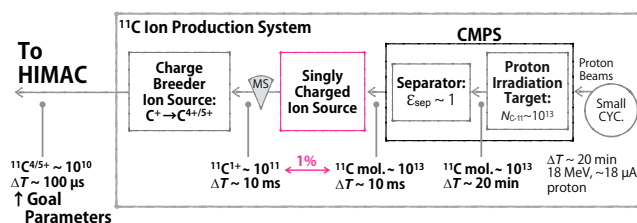


Figure 1: One of the possible schemes for  $^{11}C$  ion production.

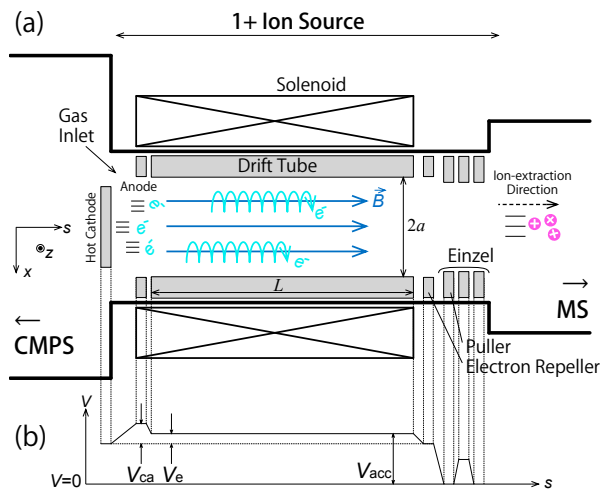


Figure 2: (a) Schematic diagram of the prototype 1+ ion source. (b) Voltage distribution of the ion source.

Fig. 1), また (2) 後段に EBIS イオン源を用いるために高い真空度で動作可能であることが要求される。これらの理由から、イオン源は電子ビームを用いた電子衝撃型とした。この 1 価イオン源プロトタイプ機の模式図を Fig. 2 に示す。熱陰極から放出される電子の実効的な飛行距離を延ばすためにソレノイドにより磁場を印加し、その磁場の向きはイオンの取出しと同方向とした。これまでに、流入/流出する炭素分子、及び炭素イオンのバランスを考慮したイオン化効率の評価を行い、その結果を元に 1 価イオン源内部のドリフトチューブの径、長さ等の幾何パラメータ、要求される電子電流等を決めた [5, 6]。しかしこの方法だけでは、電場/磁場、空間電荷効果による電子ビーム形状/軌道の変化を考慮の上で、達成できる電子電流量を評価することができず、また、それをもとに幾何パラメータを最適化することも出来なかった。

そこで、新たに開発した PIC (Particle in Cell) 法による 3 次元粒子計算コードを用い、イオン源内の電子軌道を計算することで、電極に衝突しロスする電子の分布を導出した。その結果を元に、イオン源内の電極 (アノード, ドリフトチューブ, リペラー) の形状を改良した。本発表では、この最適化を目指した改良の方法と、それにより決定されたイオン源の電極形状を紹介する。

## 2. 計算方法

### 2.1 粒子計算コード

今回開発した PIC 法による粒子計算コードでは、軸対称性を満たさない光学系 (例えば、軸ずれしたソレノイド, LEBT の静電四極等) や現象 (軸ずれした電子ビーム/イオン入射, 電子ビームの不安定性等) を将来的に計算の対象とするために、3 次元の計算を行うことにした。電場の計算は有限差分法により行っている。ラプラス方程式を解くことで静電ポテンシャルを予め求めておき、その解と空間電荷効果を含むポアソン方程式の解を時間発展ごとに重ね合わせることで正味のポテンシャル分布を導出し、それをもとに電場の導出を行っている。格子にはスタガード格子を用い、差分化されたポアソン/ラプラス方程式の解析には、マルチスレッド計算を行うために Red-Black SOR (Successive Over Relaxation) 法を用いている。磁場に関しては、今回の場合は完全な静磁場であるので、2 次元電磁場計算コード Poisson [7] により円柱座標系で計算し、その計算結果を 3 次元に展開して用いている。粒子の運動方程式の解析には、4 次精度の Runge-Kutta 法を用いている。このコードは、電子だけでなくイオンの計算も行える (両方同時には行えない)。また、電子の空間電荷により軸と垂直方向のポテンシャル井戸を形成するイオン源 (EBIS) の解析のために、電子の計算の結果得られるポテンシャル分布を使って、イオンの計算を行うことも可能である。

### 2.2 実効電子電流

イオン化効率は、イオン源に流入/流出する炭素分子、炭素イオンのバランスにより定まる [5, 6];

$$\frac{dN_{\text{in}}}{dt} = \frac{dN_{\text{out}}}{dt} + \frac{dN}{dt} + \frac{dN_{\text{ion}}}{dt}. \quad (1)$$

ここで、 $dN_{\text{in}}/dt$  は単位時間当りにイオン化領域 (ドリフトチューブ) に流入する中性分子の数、 $dN_{\text{out}}/dt$  は、単位時間当りにドリフトチューブから流出する中性分子の数、 $dN/dt$  はドリフトチューブに滞留する中性分子の数の時間変化である。 $dN_{\text{ion}}/dt$  は、単位時間当りに生成される全てのイオンの数 (イオン生成レート) であり、

$$\frac{dN_{\text{ion}}}{dt} = \frac{I_{\text{eff}}N}{eS} \sum_i \sigma_i. \quad (2)$$

(*i*: for all ion species)

ここで、 $\sigma_i$  は、あるイオン  $i$  (中性分子が  $\text{CO}_2$  であれば、 $i = \text{CO}_2^+, \text{CO}^+, \text{C}^+, \text{C}^{2+}$ ) の生成の電離断面積であり、 $N$  はドリフトチューブに滞留する中性分子数、 $S$  はドリフトチューブの断面積 ( $= \pi a^2$ ,  $a$ : 半径) である。 $I_{\text{eff}}$  は、ドリフトチューブ内における実効的な電子電流であり、

$$I_{\text{eff}} = eN_e \bar{v} / L \quad (3)$$

である。但し  $N_e$  はドリフトチューブ内の電子の数、 $L$  はドリフトチューブの長さである。中性分子の電離レートは飛行する電子の方向に依存しないため、例えば、電子リペラー (Fig. 2) で反射し再度ドリフトチューブを逆方向に飛行する電子に関しても、実効的な電流として加味しなければならない。この理由から、 $\bar{v}$  は個々の電子の速さ  $|v_j|$  の平均値とした:

$$\bar{v} = \frac{1}{N_e} \sum_j^{N_e} |v_j|. \quad (4)$$

実効電子電流の導出は、これら Eq. (3) と (4) により行った。イオン化効率の向上のためには、Eq. (2) の示されている通り、この  $I_{\text{eff}}$  を向上させなければならない。 $I_{\text{eff}}$  の低下の原因の一つは、電子が電極に衝突することで生じる電子のロスである。本研究では、電子の軌道を計算することで、イオン源内の電極に衝突し、ロスする電子の分布を導出した。このロスする電子の分布を元に、電極形状の改善を行った。

## 3. 実効電子電流の要求値

これまでホウ素化合物である  $\text{NaBH}_4$  をターゲットとして用い、プロトン照射することで得られる  $^{11}\text{CH}_4$  分子 ( $^{11}\text{B}(p,n)^{11}\text{C}$ ) を 1 価イオン源への入射  $^{11}\text{C}$  分子として検討してきた [3]。  $\text{NaBH}_4$  ターゲットは、高い効率で充分な量の  $^{11}\text{CH}_4$  分子を得られるという利点がある一方で、生成の際に混入する  $^{12}\text{CH}_4$  の数が莫大なこと、沸点が低いために熱によるダメージを受け易く、ターゲットとしての寿命が短いこと等のデメリットがある。このような理由から、ターゲットの材料として  $\text{NaBH}_4$  だけではなく、他のホウ素化合物も検討する。酸化ホウ素の固体である  $\text{B}_2\text{O}_3$  をターゲットとして用い、重陽子ビームの照射により  $^{11}\text{C}$  の生成を試みた実験では、豊富にある酸素原子のために  $^{11}\text{CO}_2$  分子が生成されることが報告されている [8]。そこで、 $^{11}\text{CH}_4$  だけでなく、

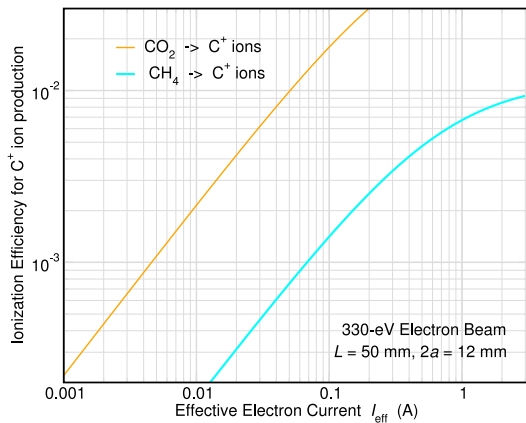


Figure 3: Ionization efficiency for  $C^+$  production from  $CO_2$  and  $CH_4$  molecules.

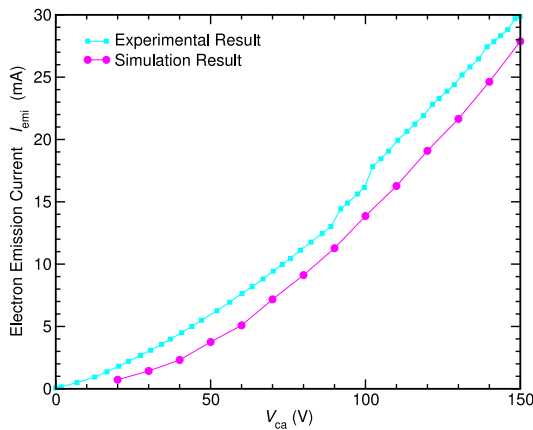


Figure 4: Comparison of space-charge limited current between the simulation and the experiments [6]. The gun perveance estimated from the experimental results is  $16.6 \mu A/V^{3/2}$ .

$^{11}CO_2$  から  $^{11}C^+$  イオンを生成することも合わせて検討する。イオン源に流入/流出する炭素分子/炭素イオンのバランス [5, 6] により見積もった、 $CO_2$ 、及び  $CH_4$  からの  $C^+$  の生成に関するイオン化効率を Fig. 3 に示す。これらは共に、電子ビームのエネルギーを 330 eV、ドリフトチューブの長さ  $L$  を 50 mm、内径を  $2a=12$  mm として計算した。 $CH_4$  からの  $C^+$  の生成では、1%のイオン化効率を得るために、およそ 3 A の実効電子電流が必要であるのに対し、 $CO_2$  からの  $C^+$  の生成では、0.05 A 程度の実効電子電流で十分であることが判明した。この大きな差は、 $CO_2 \rightarrow C^+$  の電離断面積が  $CH_4 \rightarrow C^+$  のそれと比べて 10 倍程度大きいことである [9]。

## 4. 計算結果

### 4.1 実験値と計算値の比較

今回開発した粒子計算コードの数値解の確からしさを確かめるために、空間電荷制限電流の加速電圧  $V_{ca}$  依

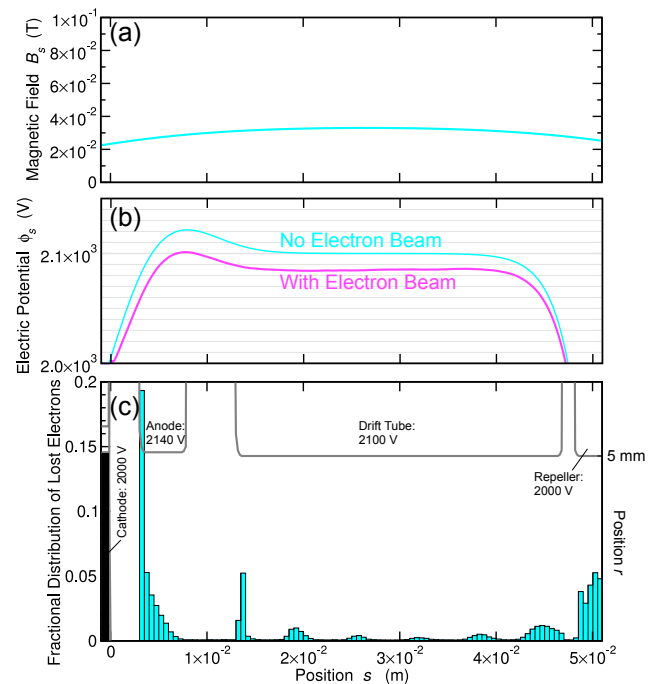


Figure 5: Simulation results for prototype ion source: (a) Axial magnetic field along  $s$ -axis, (b) Potential distribution along  $s$ -axis, and (c) Lost electron distribution and electrode structure. The lost electron distribution is normalized by total number of emitted electrons. Electrons reflected by the repeller are not taken into account.

存性について、1 価イオン源プロトタイプ機の実験結果 [6] と計算結果の比較を行った。この比較を Fig. 4 に示す。二つの差は 10% 程度に収まり、空間電荷効果を含めた計算を適切に行えることが期待できる。

### 4.2 最適化を目指した改良

Table 1 に計算に用いた条件を示す。電子の初期温度の 0.1 eV は、熱陰極の温度 ( $\approx 1000$  K) と電子温度が同等となることを想定して決めた値である。プロトタイ

Table 1: Calculation Conditions: Initial Electron Velocity was Determined by Maxwell-Boltzmann Distribution with the Initial Electron Temperature

Calculation time $t_{calc}$ .	60 ns
Initial electron temperature $T_e$	0.1 eV
Initial electron distribution at cathode	uniform
Num. of total super particles $N_{sp}$	$2 \times 10^5$
Injection rate of super particles	$N_{sp}/t_{calc}$ .
Time step $\Delta t_{stp}$	$\approx 0.01 \times 2\pi/\omega_c$
Mesh size for static field $\Delta_f$	0.2 mm
Mesh size for space charge field $\Delta_{sc}$	0.4 mm

( $\omega_c$ : cyclotron frequency)

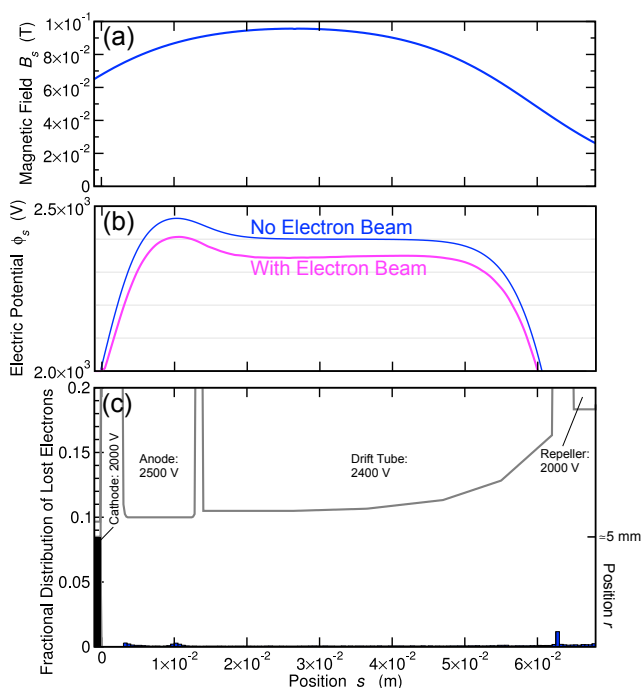


Figure 6: Modified singly charged ion source: (a) Axial magnetic field along  $s$ -axis, (b) Potential distribution along  $s$ -axis, and (c) Lost electron distribution and electrode structure. The lost electron distribution is normalized by total number of emitted electrons. Electrons reflected by the repeller are not taken into account.

ブ機における数値解析結果を Fig. 5 に示す。軸方向磁場強度、電極印加電圧は、実験 [6] での値を用いて計算を行っている。(b) にて、電子ビームありの場合に軸上ポテンシャル分布が低下しているのは、電子ビームの空間電荷効果により  $r$  方向のポテンシャル障壁が形成されているためである。(c) のロスする電子の分布からは、陰極から引き出された全電子のうち、陽極の入り口でおよそ 20%、ドリフトチューブの入り口とリペラーで数%の電子がロスされていることが分かる。また、immersed flow タイプの電子銃に特徴的な現象である、電子ビームの径の変化 [10] により、ドリフトチューブ内部で周期的な電子のロスが生じていることが分かる。

以上の電子のロスを低減させるために、ビーム径に合わせて電極系(陽極、ドリフトチューブ、リペラー)の内径を適切に変更し、また、軸方向磁場強度を増やす (beam stiffness [10] を増やす) ことでビーム径の変化を抑制した。また、これらのロス低減の対策と共に、電子銃から引き出す電子電流を増やすために陰極-陽極間電圧を増加させ、ドリフトチューブに導入する電子電流量を増やす

Table 2: Comparison of Effective Electron Current between the Prototype and the Modified Ion Source ( $t = 60$  ns)

	Prototype	Modified
Effective Electron Current $I_{\text{eff}}$	0.01 A	<b>0.14 A</b>

ために陰極-ドリフトチューブ間電圧も増加させた。これらの改良の結果を Figure 6 に示す。軸方向磁場強度は、現状のソレノイドで励磁可能な最大の値である  $\approx 0.1$  T とした。また、陰極-ドリフトチューブ間電圧は 400 V とした。これは、 $\text{CO}_2$  分子からの  $\text{C}^+$  イオンの生成断面積 [9] はおよそ 140 V でピーク値 ( $\approx 3 \times 10^{17} \text{ cm}^2$ ) となり、その値は 400 eV でも大きくは変わらない ( $\approx 2 \times 10^{17} \text{ cm}^2$ ) ためである。Figure 6(c) に示したとおり、ドリフトチューブは下流ほど内径が大きくなる形状とし、またリペラーも直接電子が衝突することのないように、十分に大きい内径とした。これらの改良の結果、Figure 6(c) に示したロスする電子の分布は、Figure 5(c) に示したプロトタイプ機に比べて大幅に改善されたことが分かる。

以上の改良により得られる実効電子電流  $I_{\text{eff}}$  の数値解析結果を Table 2 に示す。プロトタイプ機に比べて 10 倍以上大きい値を得られることが判明した。この値は、1%のイオン化効率を得るために必要な実効電子電流 (= 0.05 A) を大幅に越える。この改良を行った 1 価イオン源を用い、 $\text{CO}_2$  分子から  $\text{C}^+$  を生成することで、要求されるイオン化効率を達成できると期待できる。

## 5. 結論

新たに 3 次元粒子計算コードを PIC 法により開発し、それにより重粒子せ治療用 ISOL システムに用いる 1 価イオン源の改良を行った。この改良により、 $\text{CO}_2$  分子を  $\text{C}^+$  にイオン化する際に要求される 1%のイオン化効率を達成できることが、この粒子計算コードにより予測された。以上の解析を元に設計を行った改良機の製作が現在進められている。この改良機の性能評価実験は近日中に行う予定である。

## 謝辞

本研究は、公益財団法人 三菱財団の助成により行われたものです。

## 参考文献

- [1] K. Noda *et al.*, Nucl. Instrum. And Meth. B, 6 (2014) 331.
- [2] T. Furukawa *et al.*, Med. Phys., 37 (2010) 5672.
- [3] K. Katagiri, K. Nagatsu *et al.*, Rev. Sci. Instrum., 85 (2014) 02C305.
- [4] K. Katagiri, A. Noda *et al.*, Rev. Sci. Instrum., 86 (2015) 123303-1-7.
- [5] K. Katagiri, A. Noda *et al.*, Rev. Sci. Instrum., 87 (2016) 02B509-1-4.
- [6] K. Katagiri *et al.*, Proceedings of Particle Accelerator Society, Tsuruga, Japan, 2015, pp. 75.
- [7] [http://laacg.lanl.gov/laacg/services/download\\_sf.phtml](http://laacg.lanl.gov/laacg/services/download_sf.phtml)
- [8] J. Steinback, E. Loesel *et al.*, Appl. Radiat. Isot. 40 (1989) 625.
- [9] Y. Itikawa, J. Phys. Chem. Ref. Data, 31 (2002) 749.
- [10] Wenander *et al.* "REXEBIS, the Electron Beam Ion Source for the REX-ISOLDE Project, Design and Simulations" CERN 1999.