

用电荷密度法计算静电场的 程序和误差分析*

李明阳 李德明** 董雷 高杰
(清华大学)

电荷密度法是一种数值求解积分方程的方法,用于设计静电透镜系统有很多优点.它避开了真空边界的赋值问题,从而有可能用较少内存、较短机时达到较高精度.如图1所示, I、II、III 分别表示三个旋转对称的电极,阴影区表示待求场区.有限差分法要求事先给出虚线所示真空边界点的电位,作为重复迭代的不变出发值,这是误差的一个重要来源.为了减少这种误差,可把虚线边界扩大到足够远,从而按电位为零处理,但网格点数大大增加,往往达到不能接受的程度.电荷密度法则不需要处理真空边界,也不需要划分网格,因此使用简单,并且精度高.这便是电荷密度法用于设计静电透镜具有较大吸引力的主要原因.

电荷密度法处理电极线度相差悬殊的透镜更为方便.例如液态金属离子源场发射体尖端附近电场的计算一直是一个困难的课题^[1];因为有限差分法或有限元法在尖端附近不便提供足够多的节点,使得分辨率过低;而电荷密度法总可保证每一电极表面(不管其线度大小)的分区数达到预想值,从而易于达到所需的精度.

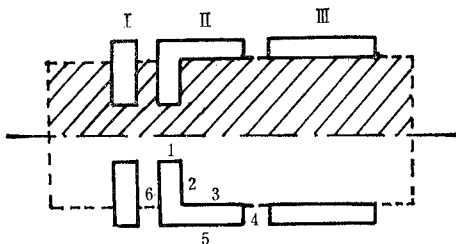


图1 一个典型的三电极透镜系统

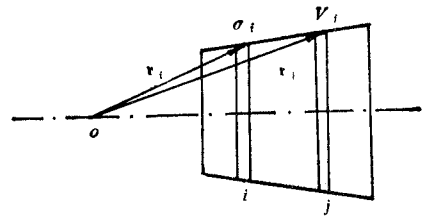


图2 电荷密度法的原理

电荷密度法的基本思想是把连续分布的自由电荷离散化,分为若干子区,假设每个子区内电荷是均匀分布的.这样,场区内任一点的电位可由每个子区上的电荷贡献相迭加而得到.由于自由电荷存在的子区是金属电极表面的一部分,该处电位值是已知的,因此将电位计算点顺次设在子区上,则可得到关于每个子区上待定电荷密度的线性方程组.如果透镜是旋转对称的,则划分出的子区为一个个的圆环.图2中画出了两个这样的环.环*i*上的电荷在环*j*上产生的电位为

* 1985年8月19日收到,1986年4月9日修改定稿.

** 李德明现在在上海核子所工作.

$$\frac{1}{4\pi\epsilon} \int_{s_i} \frac{\sigma_i(\mathbf{y}_i)}{|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j|} ds_i,$$

其中 s_i 为环 i 的面积, σ_i 为环 i 上的平均电荷密度. 对所有的环做迭加, 便得到环 j 中点处的电位

$$V_j = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i=1}^N \int_{s_i} \frac{\sigma_i(\mathbf{r}_i) ds_i}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (1)$$

N 为总环数. 设 $A_{ji} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \int_{s_i} \frac{ds_i}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$, 则

$$V_j = \sum_{i=1}^N A_{ji} \sigma_i. \quad (2)$$

当 j 也从 1 变到 N 时, 上式便表示一个关于 σ_i 的线性方程组. 解这个方程组, 便得到电荷密度分布.

A_{ji} 的计算归结为求椭圆积分^[2]. 当 $i = j$ 时,

$$A_{ii} = \frac{1}{4\pi^2\epsilon r_i} \left[\left(\ln \frac{16r_i}{w_i} + 1 \right) - \frac{w_i^2}{576r_i^2} \left(3 \ln \frac{16r_i}{w_i} + 4 \right) \right], \quad (3)$$

其中 w_i 表示该环的宽度, r_i 为环中点的半径.

得到 σ_i 以后, 只要计算任意一点 j 处的 N 个 A_{ji} 值, 就可由 (2) 式求出该点的电位. 对于轴上点, 公式还可简化. 由电位分布可进一步计算粒子轨迹和各种光学参量.

国外已有人用电荷密度法算出了多种标准透镜的光学参量与物象的关系曲线^[3]. 但随着静电透镜在离子注入、离子曝光、离子刻蚀以及中子物理实验等领域中的应用日益广泛, 需要获得各种特殊结构的透镜的光学参量, 并需要知道当透镜结构作某些变动时, 对光学参量有什么样的影响, 从而进一步实现透镜的优化设计. 为此我们编制了一个程序, 其结构如图 3.

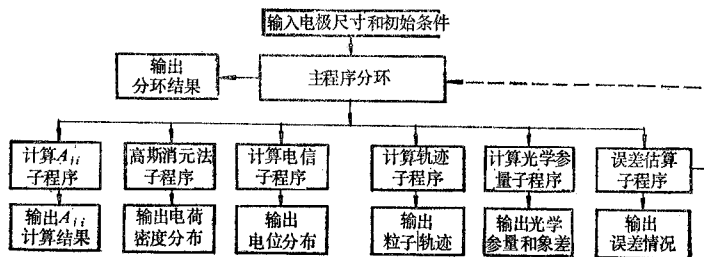


图 3 程序结构图示

本程序使用 FORTRAN 语言, 在 M150 和 DPS-8 中型机和 IBM-PC 微机上运行过. 可计算各种母线为直线或圆弧的旋转对称透镜, 也可计算二维平面对称的透镜或偏转系统. 暂未考虑极化电荷和束流的空间电荷. 根据要求, 可输出分环情况、电荷密度分布 σ_i 、空间电位分布、粒子轨迹以及包括球差和色差在内的光学参量.

电荷密度法在求椭圆积分、解线性方程组和求解轨迹方程等步骤里均会产生误差, 但不难予以减小. 主要的误差来源是分环的离散化. 如何估计分环误差以及怎样减小这一误差, 在文献中尚少见. 以下本文提出一种估计分环误差的方法.

环数 $N_C = 2$, 分别取 $N_L > N_R$, $N_L = N_R$ 和 $N_L < N_R$ 三种情况(见表 1)。每一种情况均对电极表面密布的 100 个固定点求电位, 计算 δ_{rms} 和 δ_{max} , 并计算归一化的轴上电位 ϕ_0 , 以缝中心为 $z = 0$, 取 $z/D = 0.25, 0.5, 1.5$ 三个位置求出轴上电位相对偏差 $\Delta\phi_0/\phi_0$ (D 为圆筒直径)。最后计算象方焦点, 象方焦距和象方球差的相对偏差 $\Delta F_2/F_2, \Delta f_2/f_2, \Delta C_s/C_s$, 结果见表 1。

表 1 合理分环与不合理分环的对比 (I)

总分环数 N_T		16			30		
序 号		I-1	I-2	I-3	II-1	II-2	II-3
$N_L - N_C - N_R$		11-2-3	7-2-7	3-2-11	25-2-3	14-2-14	3-2-25
$\delta_{\text{rms}}(\%)$		3.1	3.7	5.9	1.7	2.0	4.1
$\delta_{\text{max}}(\%)$		27	33	50	14	18	40
$\Delta\phi_0/\phi_0(\%)$	$z/D = 0.25$	0.39	0.59	1.23	0.12	0.20	1.03
	$z/D = 0.50$	0.42	0.65	1.57	0.11	0.21	1.02
	$z/D = 1.50$	0.49	0.67	0.64	0.13	0.25	0.34
$\Delta F_2/F_2(\%)$		2.7	6.1	6.9	0.46	0.89	3.3
$\Delta f_2/f_2(\%)$		0.65	0.76	5.2	0.22	0.35	2.2
$\Delta C_s/C_s(\%)$		0.17	0.06	3.4	0.06	0.19	6.1

由表 1 可清楚地看到, 分环合理的 I-1 和 II-1 的各种偏差都较小; 总分环数多的 II-1 的偏差则更小。同时还可看到, 不论哪种方案, 轴上的电位偏差要比电极上的小一个量级, 这验证了我们前面关于电位分布的最大偏差发生在电极表面上的假设。

为进一步说明选择分环方法的重要性, 表 2 中列出的数据表明, 合理分环与不合理分环相比, 可允许总分环数减少一半而不降低精度。表中光学参量的起止点为 $-2D$ 到 $+2D$ 。

最后, 按合理的分环方法改变总分环数 N_T 分别计算了 δ_{rms} , δ_{max} , $\Delta F_2/F_2$, $\Delta f_2/f_2$, $\Delta C_s/C_s$, 并画成曲线, 如图 6 所示。图中曲线显示出, 当 $N_T > 80$ 时误差随 N_T 的变化就

表 2 合理分环与不合理分环的对比 (II)

N_T		44	30	108	54	122
$N_L - N_C - N_R$		11-22-11	25-3-2	11-86-11	50-1-3	90-2-30
ϕ_0	$z/D = 0.25$	0.57399	0.57386	0.57348	0.57341	0.57324
	$z/D = 0.50$	0.85904	0.85881	0.85809	0.85812	0.85787
	$z/D = 1.50$	0.99980	1.00027	0.99898	0.99932	0.99899
F_2/D		2.518	2.552	2.526	2.526	2.527
f_2/D		1.172	1.175	1.179	1.179	1.180
C_s/D		8.93	8.90	8.92	8.91	8.91

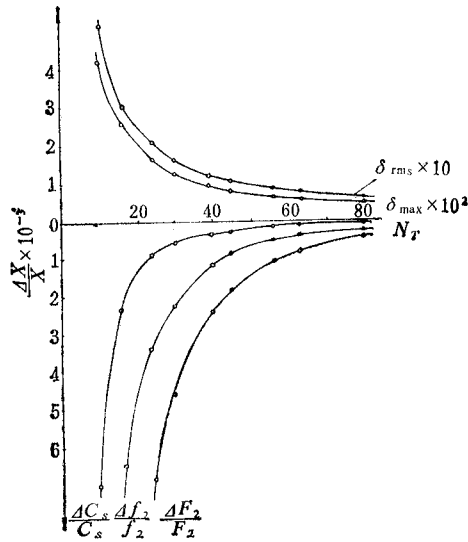


图6 误差与总分环数的关系

很小,足见靠无限增加 N_T 来提高计算精度是不现实的。当 $N_T < 20$ 时,误差随 N_T 的减小上升很快。为了提高计算速度,实现透镜的优化设计,显然应令 N_T 为 20 环左右。若要求更高的计算精度,可适当增加分环数。

对于一个实际电极,总可将其分解为若干等电位的电极表面,在图 1 的电极 II 上标出了六个这样的电极表面。在程序输入时,需要给出电极表面两端的坐标(如果母线是圆弧的还需给出曲率中心的坐标),电极电位和描述端部尖锐程度的角度参量^[2]。另外在本程序中还需给出该电极表面左右端分环数 N_L 和 N_R 。根据上面合理分环的思想,可根据电极系统的结构特点,在电荷密集的一端多分环。例如,可根据该表面端部是否与异性电极毗邻,而在 15-2-3, 9-2-9, 3-2-15 三种典型方式中确定一种。另外,在靠近所求场区的电极表面对场的计算影响较大,应该增加分环数,而离主场区较远的表面可少分环。通过这种方式可在同样内存和计算时间下提高计算精度,使程序更为有效。

本程序计算了文献[2]中的大部分透镜,结果都符合得很好,但分环数比文献[2]少。表 3 为等径薄壁双圆筒轴上电位的计算结果的对比;表 4 是同一透镜的光学参量的对比。图 7 和表 5 是三膜孔透镜的结构和光学参量的对比。图 8 和表 6 为塞普蒂埃(Septier)透镜及其改进型的结构和光学参量的对比,其中文献[6]的计算用的是有限差分法。

以上各组数据都符合得相当好。通过初步的误差分析,认为在一般情况下,本程序计算的精度高于 0.5%。

电荷密度法突出的特点是计算精度高,使用简便。在同样精度下与有限元或有限差分法相比,其所需的内存和 CPU 时间较少。本程序求解电荷密度分布的计算量正比于

$$Q \approx \frac{1}{3} N_T^3 + (28 + 20 |T_Q|) N_T^2, \quad (4)$$

其中 T_Q 为对称因子 ($T_Q = 0, 1$ 或 -1)。在 IBM-PC 微机上, $N_T = 50$, $T_Q = 1$ 时需 7.5 分钟。程序的内存主要由 $N_T \times N_T$ 的系数矩阵决定。

表 3 等径薄壁双筒透镜轴上电位的对比(缝宽与筒径之比 $S/D = 0.1$)

来源	ϕ_0 \n z/D	0.05	0.25	0.50	1.50	2.10
文献[4]		0.130936	0.574062	0.858206	0.998810	0.999934
文献[3]		0.130594	0.573124	0.857794	0.998822	0.999934
本 文		0.13061	0.57318	0.85779	0.99889	1.0000

表 4 等径薄壁双筒透镜的光学参量的对比 ($D = 1$)

V_2/V_1	数据来源	f_1	f_2	F_1	F_2	C_{s0}	C_{s1}	C_{s2}	C_{s3}	C_{s4}
5	文献[4]	-1.7574	3.9296	-2.7683	2.4659	28.8	-74.7	73.9	-32.7	5.45
	文献[3]	-1.77	3.95	-2.78	2.48	27.7	-71.7	70.3	-31.0	5.19
	文献[5]	-1.73	3.87	-2.78	2.47					
	本 文	-1.758	3.931	-2.770	2.467	27.6	-71.4	70.0	-30.9	5.18
10	文献[4]	-0.7993	2.5276	-1.6146	1.1799	3.63	-7.47	5.76	-2.14	0.308
	文献[3]	-0.80	2.54	-1.62	1.19	3.70	-7.54	5.99	-2.21	0.32
	文献[5]	-0.78	2.47	-1.64	1.15					
	本 文	-0.799	2.528	-1.616	1.180	3.67	-7.49	5.96	-2.20	0.319

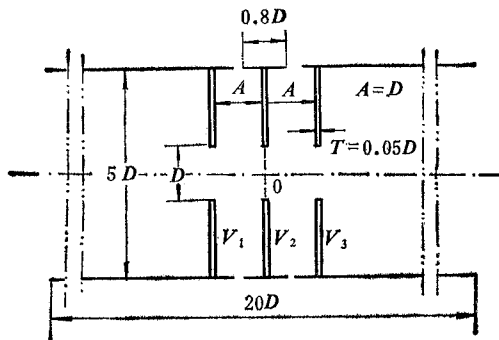


图 7 三膜孔透镜结构图 ($V_1 = V_3$)

对于特殊结构的透镜,可用误差估计子程序估计误差,并指导合理分环。由前面误差沿电极表面分布的特点可知,只要计算出电极上每两环交界点上的误差 δ_i ,就可得到局部最大误差的分布,并由此可得到整个电极系统的 δ_{max} 和 δ_{rms} 。根据这些结果可指导合理分环,以便进行优化计算,并估计误差。也可建立自动调整分环,使每个电极表面误差小于特定值的程序,但这需要多次求解方程组,使机时大大增加,在实际计算中往往是不合算的。

表5 三膜孔单透镜的光学参量的对比 ($D=1$)

V_2/V_1	数据来源	f_1	f_2	F_1	F_2	C_{p0}	C_{s1}	C_{s2}	C_{s3}	C_{s4}
0.1	文献[3]	-3.13	3.13	-3.07	3.07	129	-501	745	-501	129
	本文	-3.123	+3.122	-3.064	3.064	129	-500	743	-500	129
1.2	文献[3]	-188.66	188.66	-188.66	188.66	1.29×10^7	-5.17×10^7	7.76×10^7	-5.17×10^7	1.29×10^7
	本文	-188.53	188.55	-188.53	188.55	1.29×10^7	-5.18×10^7	7.77×10^7	-5.18×10^7	1.29×10^7
10	文献[3]	-1.83	1.83	-1.20	1.20	4.18	-3.44	3.76	-3.44	4.13
	本文	-1.833	1.833	-1.197	1.196	4.18	-3.46	3.77	-3.46	4.18
15	文献[3]	-1.91	1.91	-0.63	0.63	5.53	-3.88	4.17	-3.88	5.53
	本文	-1.903	1.902	-0.633	0.634	5.51	-3.18	4.11	-3.81	5.51

表6 普通薄透镜的光学参量的对比

V_2/V_1	数据来源	原始型						改进型					
		象方		物方		C_s	C_c	象方		物方		C_s	C_c
		F	f	F	f			F	f	F	f		
0.3	文献[6]	34.2	18.6	3.28	16.3	225.1	52.22	59.67	24.20	20.91	22.26	281.8	66.6
	本文	34.25	18.53	3.420	16.86	225.6	51.99	59.72	24.44	20.54	22.53	276.1	67.4
0.5	文献[6]	60.2	43.4	-24.2	43.4	5917	110.3	92.25	54.70	-14.64	54.99	6691	137.7
	本文	60.19	43.33	-24.49	43.30	5937	110.2	92.80	55.49	-15.27	55.48	6555	140.1
2.0	文献[6]	58.2	41.9	-22.7	41.8	4148	53.8	90.30	53.65	-12.50	53.12	4814	68.42
	本文	58.22	41.02	-22.52	41.68	4106	53.7	90.28	53.59	-13.10	53.60	4475	67.93
4.0	文献[6]	29.2	17.8	9.95	18.8	87.39	13.1	52.63	24.40	24.28	25.07	183.1	19.19
	本文	29.37	17.58	10.02	18.78	87.90	13.2	52.61	24.64	28.94	25.55	202.4	20.09

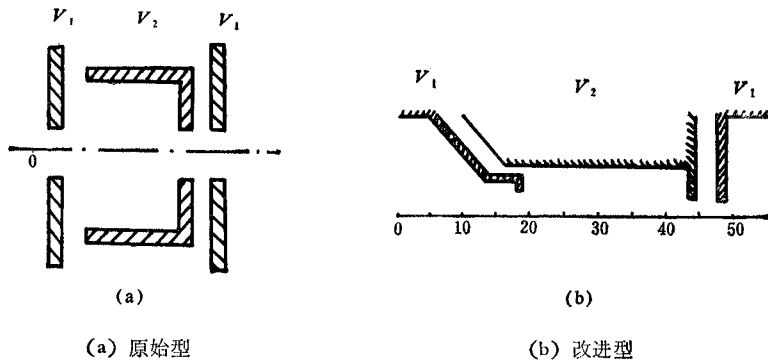


图 8 塞普蒂埃透镜结构图(详见文献[6])

本文的工作得到清华大学物理系王克礼、田嘉禾、张化一等同志的帮助,在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] J. W. Ward and R. L. Seliger, *J. Vac. Sci. Technol.*, **19**(1981), 1082.
- [2] A. Renau, F. H. Read and J. N. H. Brunt, *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, **15**(1982), 347.
- [3] E. Harting and F. H. read, *Electrostatic Lenses*, Amsterdam: Elsevier (1976).
- [4] S. Natali, D. Di Chio and C. E. Kuyatt, *Rev. Sci. Instrum.*, **43**(1972), 80.
- [5] A. B. El-Kareh and J. C. J. EL-Kareh, *Electron Beams, Lenses and Optics*, Academic Press, New York, London, 1970.
- [6] 屠聿善, 电子学通讯, **4**(1982), 372.

CHARGE-DENSITY METHOD FOR SOLVING ELECTROSTATIC FIELD: PROGRAM AND ERROR ANALYSIS

Li Mingyang, Li Deming, Dong Lie, Gao Jie
(Department of Applied Physics, Qinghua University)

The charge-density method is investigated mainly on the errors which arise from the finite segments and their distribution. It is proved that the higher accuracy will reach if more segments are chosen at where the charge density is high and at the region nearby the area where the field is to be calculated. A program is set up. The difference between the calculated data and the published ones given by E. Harting and F. H. Read (1976) is less than 1%.