

应用带电粒子光学

(下册)

唐天同

西安交通大学

电子工程系物理电子技术教研室

一九八五年二月

目 录

第九章 带电粒子光学中的计算机辅助设计方法

§1. 拟解析法求解电场和磁场	9-1
§2. 有限差分法	9-15
§3. 有限元素法	9-28
§4. 偏转场和多视场的计算	9-51
§5. 表面电荷法	9-61
§6. 计算磁场的边界元方法	9-76
§7. 旁轴轨迹的计算	9-91
§8. 一般轨迹的计算	9-104
§9. 电子离子光学参数的计算	9-115

参考资料

第九章 带电粒子光学中的计算机 辅助设计计算方法

§1. 拟解析法求解电场和磁场

与数值方法相比，解析法具有明显的优点：解析法的解具有普遍意义。解析法没有数值方法常有的稳定性问题，其解具有平滑的分布，可以作为数值和实验方法的检验标准。但解析法通常只能用到为数不多的几种简单的电极磁极（边界）形状的情形。本节的拟解析法是试图将解析法和解析解推广到更复杂的问题的技术，在某些电子光学问题已获得了很大成功。虽然总的说应用还不普遍，但近年来有相当发展。这里在其他主要数值方法之前，作一简单介绍。

(1). 模拟电荷法

任何静电场，都是由电荷产生的，在不考虑空间电荷的情况，由导体电极上的表面电荷产生。一般情况下，这一表面电荷分布是未知的，但这一电荷分布所产生的电场应在电极表面有给定的恒定电位。如果我们把包括导体表面而不包括导体内部在内的区域作为求解拉普拉斯方程的区域，则根据静电场的唯一性原理，任何一种电位分布，只要在边界（导体表面）上有电极的电位值，则该电位分布就是该问题电位分布的唯一的解。

模拟电荷法就是一种这样的拟解析方法，最初用于电力系统问题的计算。模拟电荷法的实质是将导体表面的连续分布面电荷用位于导体外部（因而在求解场域以外）的一些离散的集中电荷代替。这些离散的集中电荷的电场是可以解析计算的。只要这些离散集中的电荷场叠加后的合成电场的电位在电极表面近似为一常数，且等于该电极电位，则电极系统的电场可以用这些离散的集中电荷场的解析解来表示。

以电子离子光学中最常用的圆透镜—轴对称电场为例，设有一些厚的旋转对称电极。旋转对称电极表面电荷是连续的旋转对称的（图9-1）。设在电极内部有 N 个旋转对称的集中电荷线环，线

环位置在图上用圆圈表示，第 i 个线环的电荷为 q_i ，线环在子午面上坐标为 r_i, z_i ，带均匀线电荷的圆环的电场分布有解析解：电位及其导函数为 ($z' = z - z_i, a = r_i$)

$$u_i(z', r) = \frac{q'}{S_1} K(k) \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial z} = - \frac{q' z'}{S_1^2 S_2} E(k) \quad (2)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial r} = \frac{q'}{2rS_2} \left[\frac{z'^2 + a^2 - r^2}{S_1^2} E(k) - K(k) \right] \quad (3)$$

式(1)–(3)中 $K(k)$ 和 $E(k)$ 分别为第一类及第二类完全椭圆积分

$$K(k) = \int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{2 \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} \quad (4)$$

$$E(k) = \int_0^{\pi} \frac{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi} d\varphi}{2} \quad (5)$$

式中 $k = 2 \sqrt{\frac{r r_i}{S_2^2}}$ (6)

$$S_1 = \sqrt{z'^2 + (r - r_i)^2} \quad (7)$$

$$S_2 = \sqrt{z'^2 + (r + r_i)^2} \quad (8)$$

$$q' = \frac{q_i}{2\pi^2 \epsilon_0} \quad (9)$$

$$z' = z - z_i \quad (10)$$

为了使 N 个电荷线环的电场叠加后导体表面上的电位正好为电极电位。在导体表面取 N 个参考点 ($j = 1$ 到 N)。若这 N 个点的坐标分别为 z_j, r_j 。则利用(1)式,第 j 个参考点上电位可表为

$$V_j = \sum_{i=1}^N A_{ij} q_i \quad (11)$$

$$A_{ij} = \frac{q_i'}{S_2} K(k) \quad (12)$$

(12) 式中 k, S_2, q_i' 可由(6)——(9)式算出。但式中 r 代以 r_j , z' 代以 $z_j - z_i$, $q_i' = \frac{q_j}{2\pi z \epsilon_0}$ 。 A_{ij} 是 z_i, r_i, z_j, r_j 的函数。计算出后可认为已知。故(11)式是对 q_i ($i = 1, N$) 的代数方程。对于 N 个参考点, 构成了 N 个未知数的线性方程组。原则上可用任何线代数数值方法来解出 q_1, q_2, \dots, q_N 。已知 $q_1 - q_N$ 后, 则电极系统的电位及其偏导数可用(1)——(3)式给出

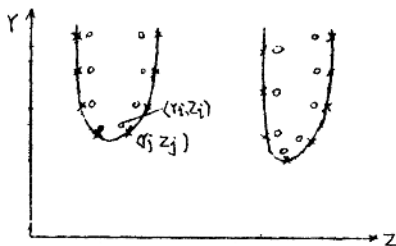


图 9-1 模拟电荷法

$$u(r, z) = \sum_{i=1}^N u_i(r, z) \quad (13)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial u_i}{\partial r}, \quad \frac{\partial u}{\partial z} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial u_i}{\partial z} \quad (14)$$

(13)和(14)中 $u_i(r, z)$ 和 $\frac{\partial u_i}{\partial r}, \frac{\partial u_i}{\partial z}$ 见(1)-(3)式

为了计算高斯光学性质，三级几何像差及一级色差，只要计算轴上电位分布 $\phi(z)$ 及其导函数即可。对于一个线电荷环，这些分布为

$$\phi(z) = \frac{d}{s} \quad (15)$$

$$\phi'(z) = -\frac{dz'}{s^2} \quad (16)$$

$$\phi''(z) = \frac{1}{s^3} d(2z' - r_i^2) \quad (17)$$

$$\phi'''(z) = -\frac{1}{s^3} 3dz'(2z'^2 - 3r_i^2) \quad (18)$$

$$\phi^{(4)}(z) = \frac{1}{s^3} 3d(8z'^3 - 24z'z_i^2 r_i^2 + 3r_i^4) \quad (19)$$

(15)-(18)式中

$$z' = z - z_i \quad (20)$$

$$s = \sqrt{r_i^2 + (z - z_i)^2} \quad (21)$$

$$d = \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \quad (22)$$

在计算线代数方程组的系数矩阵 A_{ij} 时, 按计算第一类及第二类完全椭圆积分。这种积分的计算, 在很多计算机数学库中可找到, 这里给出一套近似计算公式^{*}) :

$$K(k) = [a_0 + a_{1,m} + \dots + a_{l,m}] - i_{nm} [b_0 + b_{1,m} + \dots + b_{l,m}] \quad (23)$$

(23) 式误差不超过 2×10^{-2} , 式中

$$m = l - k$$

$a_0 = 1.38629436112$	$b_0 = 0.5000000000$
$a_1 = 0.09666344259$	$b_1 = 0.12498593597$
$a_2 = 0.03590092383$	$b_2 = 0.06880248576$
$a_3 = 0.03742563713$	$b_3 = 0.03328355346$
$a_4 = 0.01451196212$	$b_4 = 0.00441787012$

$$E(k) = [1 + a_{1,m} + \dots + a_{l,m}] - [b_{1,m} + \dots + b_{l,m}] i_{nm} \quad (24)$$

同样误差小于 2×10^{-2} , $m = l - k$

$a_1 = 0.44325141463$	$b_1 = 0.24998368310$
$a_2 = 0.06260601220$	$b_2 = 0.09200180037$
$a_3 = 0.04757383546$	$b_3 = 0.04069697526$
$a_4 = 0.01736506451$	$b_4 = 0.00526449639$

线代数方程可用常用数值方法—例如列主元高斯消去法求解。

^{*}) C. Hastings, Approximations for Digital Computers, Princeton Univ. Press, Princeton, N.J.

电子离子光学圆电透镜常由圆孔膜片，圆筒等构成。单纯用圆环线电荷，常要用到相当大的圆环（很多的未知数 q_i ）。由于实际电极加工方便，总是主要部份由平面、圆柱面等构成，只是端面或孔附近有不规则的形状。因而我们还可以利用其他的已知解析解。例如，当电极是圆的圆孔膜片时，可以利用无限薄的圆孔膜片的解析解。

一个处于 $z=0$ 平面上的，具有半径为 R 的圆孔的无限大导体薄片，当其电位为 P 。膜片两侧足够远处轴向电场分别为 E_L （左）及 E_R （右）时，其电位分布为**）

$$u(r, z) = P + v \left[-\frac{1}{2} R u(E_L + E_R) + \frac{R}{\pi} (E_L - E_R) (1 + u t g^{-1} u) \right] \quad (25)$$

式中 $u = \frac{\text{sign}(z)}{\sqrt{2R}} \sqrt{z^2 - r^2 - R^2 + \sqrt{(z^2 + r^2 - R^2)^2 + 4r^2 z^2}}$ (26)

$$v = \frac{1}{\sqrt{2R}} \sqrt{R^2 - r^2 - z^2 + \sqrt{(z^2 + r^2 - R^2)^2 + 4r^2 z^2}}$$

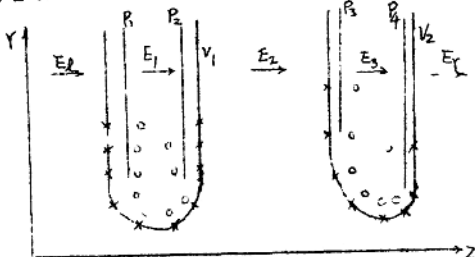


图9-2

- **）一般电子光学书中均有此问题介绍，例如见 A. B. El-Kereb 等，Electron Beams, Lenses and Optics, Vol. 1.

图 9-2 中, 对于两个厚电极选用了四个膜片电极, 膜片电极实际电极表面很接近而且平行, 因而用这样的虚拟膜片电极的电场作为叠加的分量, 易于在电极表面上实现等位面, 只需要在不规则的孔附近加集中的圆环线电荷 (图 9-2) *)。 (25) 式和 (1) 式显然都满足拉普拉斯方程, 可以用它们的组合以实现满足边界条件的近似解。

第一个膜片设电位为 P_1 , 两边电场为 E_1 及 $E_{1'}$, 第二膜片电位为 P_2 , 两边电场分别为 E_2 及 $E_{2'}$, 依此类推。 P_i , E_i 并非实际的电位及电场, 它们选取的原则是使在大于膜孔半径的地方, 使诸膜孔的场叠加结果接近于实际的电场。可以按下表选取每一虚拟膜片的参量 (M 为膜片个数)

	P_i	E_i	E_{i+1}
1	V_1	E_1	F_1
i	0	0	$F_i - F_{i-1}$
M	0	0	$E_T - F_{M-1}$

$$F_i = - \frac{V_{i+1} - V_i}{Z_{i+1} - Z_i} \quad (28)$$

式中 Z_i 为第 i 个膜片的孔半径。不难证明, 每个膜片有这样的电位及电场时,

$$u_b = \sum_{i=1}^M u_i(r, z) \quad (28)$$

*) H. Hoch, E. Kasper and D. Kern, *Optik*, 50
(1978), P413-425

(式中 $u_{\xi}(r, z)$ 按 (25) 式计算), 至少在 $r > R_{\xi}$ 时 u_D 接近于实际的电场。只是在 $r \leq R_{\xi}$ 的孔边缘部份要如图 9-2 所示再加圆环线电荷作修正。对每一膜片用 (25) 式计算时, P 及 R 应当代以 P_{ξ} 及 R_{ξ} , z 应代之以 $z - z_{\xi}$ 。

用了虚设的 M 个膜片和 N 个圆环线电荷后, 总的电场电位为

$$u(r, z) = u_D(r, z) + \sum_{k=1}^N q_k u_{\xi}(r, z) \quad (29)$$

式中 u_D 为总的膜片电场, 已可按 (28) 式计算出而为已知量; $u_{\xi}(r, z)$ 可按 (1) 式计算。同样取 N 个导体表面的参考点, 对任一参考点可列出方程 (参考点 ξ)

$$\sum_{k=1}^N u_k(z_{\xi}, r_{\xi}, z_k, r_k) \cdot q_k = V_{\xi} - u_D(z_{\xi}, r_{\xi}) \quad (30)$$

(30) 中 u_k 为第 k 个线环有单位电荷时的电位分布函数。由 N 个线性方程 (30) 可解出 $q_1 \cdots q_N$, 从而可按 (29) 式计算出电位分布。以下再列出一个膜片的电位的偏导数公式。对 (25) 式求偏导数, 可得

$$\frac{\partial u}{\partial z} = - \frac{E_l + E_r}{2} + \frac{E_l - E_r}{\pi} \left(\operatorname{tg}^{-1} u + \frac{u}{u^2 + v^2} \right) \quad (31)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = - \frac{(E_l - E_r) v \sqrt{1 - v^2}}{\pi (u^2 + v^2) \sqrt{1 + u^2}} \quad (32)$$

而轴上电位分布及其导函数则为

$$\phi(z) = P + bz + c \left(R + z \operatorname{tg}^{-1} \frac{z}{R} \right) \quad (33)$$

$$\phi'(z) = b + ctg^{-1} \frac{z}{R} + c \frac{zR}{R^2 + z^2} \quad (34)$$

$$\phi''(z) = 2c \frac{R^2}{(R^2 + z^2)^2} \quad (35)$$

$$\phi'''(z) = -8c \frac{R^2 z}{(R^2 + z^2)^3} \quad (36)$$

$$\phi^{(4)}(z) = cR^2 \frac{4z^2 - 8R^2}{(R^2 + z^2)^4} \quad (37)$$

式中

$$b = -\frac{E_i + E_r}{2} \quad (38)$$

$$c = \frac{E_i - E_r}{\pi} \quad (39)$$

图 9-3 是利用上述虚拟的圆孔膜片加上虚设的圆环线电荷的一个厚膜片的电场等位面分布图。这种拟解析法可能有相当高的精确度。

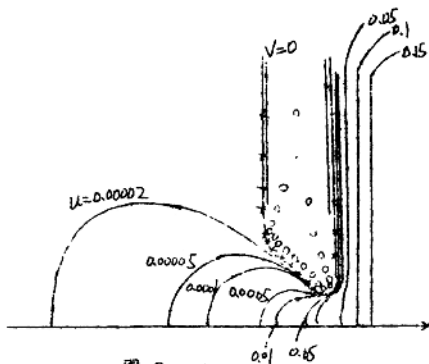


图 9-3

上述拟解析法还被成功的推广到场发射枪的数值计算上。由于场发射尖的特殊形状(见第八章)。经研究发现*)，用位于旋转对称轴(z 轴)上的均匀分布的线电荷，其产生的电场在场发射尖表面上电位大致为常数。对于图9-4这样的场发射尖(尖端为曲率半径很小的球面，接着是一段圆锥面，再过渡到一个较粗的圆柱面)形状，用两个线电荷段即可，其中一段线电荷密度为 τ ，分布在尖锥球面的球心($z=0$)到锥面与圆柱面过渡处($z=-S$)另一段线电荷密度为 τ' ，分布在 $z=-S$ 到 $z=z_L$ 之间(见图9-40)，再加上一个位于球心的点电荷，其电荷量为 Q_S 。

点电荷产生的电场电位分布为读者熟知，而位于轴上 $z=z_0$ 到 $z=z_1$ 的均匀带电的线电荷，其电场电位分布为

$$u = \frac{\tau}{4\pi\epsilon_0} \{ \ln [z_1 - z + \sqrt{r^2 + (z_1 - z)^2}] - \ln [z_0 - z + \sqrt{r^2 + (z_0 - z)^2}] \} + C \quad (40)$$

利用边界条件定出 τ ， τ' ， C ， Q_S ，曾成功地模拟了场发射枪的电场。其场发射尖附近的电位分布图见图9-4b。*)

图中 ϵ 为场发射尖的形状系数。

另一个值得注意的拟解析法是傅立叶—白塞尔级数法。此法曾被用于研究某些静电圆透镜并获得精确度尺较高的结果。**))

这一方法的基本思想是，基于分离变量法所得到的拉普拉斯方程通解(即圆柱坐标系的傅立叶—白塞尔级数)，虽然一般只能用

*) E. Kasper, Optik, 54(1979), 135

**) F. H. Read, Jour. Phys. E2(1969), 165; E2(1969), 679; E3(1970), 127

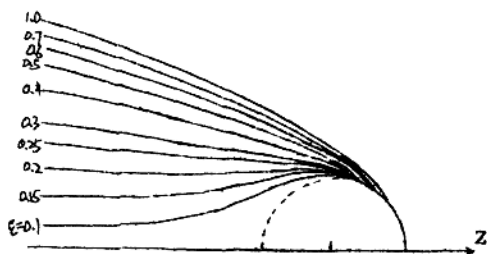
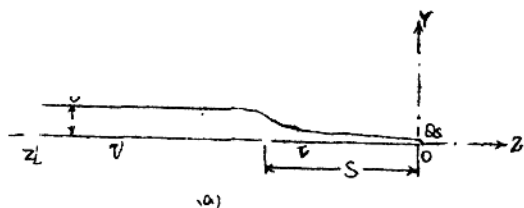


图9-1

在极简单的，与坐标面相重合的边界上给出电位的问题，但对实际的较复杂的问题，可以把问题的域分成若干小区域，每一个区域有简单的边界；然后把各小区域的傅立叶—白塞尔级数匹配起来，便得到所要求的近似解析解。

例如，要求解一个双圆孔膜片系统（图9-5）。为说明简单，两个膜片半径均为 R ，位于 $z = \pm a$ 处，电极电位分别为 V_1 及 V_2 。与求解所有边值问题一样，我们人为的取一个外边界（圆柱面） $r = R'$ ， $R' \gg R$ ，以致可以认为在两膜片以上区域，柱面上电位为常数（ V_1 及 V_2 ），而在膜片之间则电位线性变化

$$u(R', z) = \frac{V_1 + V_2}{2} + \frac{(V_2 - V_1)z}{2a} \quad (41)$$

当 $z \rightarrow \pm\infty$, 当然电位分别趋近于 V_2 及 V_1 . 一般取 $R' = 3R$ 已可保证足够的精度.

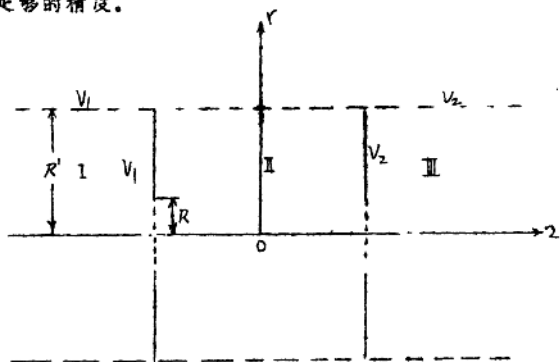


图 9-5

按图 9-5 那样将场域分为 I, II, III 三个子区域, 则每个子区域电位均可用傅立叶-白塞尔级数表示:

$$u_{\text{I}}(z, r) = V_1 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{k_n z} J_0(k_n r) \quad (42)$$

$$u_{\text{II}}(z, r) = \frac{V_1 + V_2}{2} + \frac{z(V_2 - V_1)}{2a} + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \text{sh}(k_n z) J_0(k_n r) \quad (43)$$

$$u_{\text{III}}(z, r) = V_2 - \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-k_n z} J_0(k_n r) \quad (44)$$

以上诸式中 $J_0(x)$ 为零阶贝塞尔函数, A_n, B_n 为特定的级数系数, (42) 及 (44) 式各只取 $e^{k_n z}$ 及 $e^{-k_n z}$ 项是为了让 $z \rightarrow \pm\infty$ 时电位值保持有限并趋于 V_2 及 V_1 ; 同样 (43) 式中只取 $\text{sh}(k_n z)$ 项是因为 u_{I} 的反对称性质, k_n 应选取得使 $r = R'$ 圆柱面上 $u_{\text{I}}, u_{\text{II}}$ 取 V_1 及 V_2 值, u_{I} 取 (41) 式的值, 即应使

$$J_0(k_n R') = 0 \quad (45)$$

即 $k_n R' = 2.40483, 5.52008, 8.65373, 11.79153, 14.93092, \dots$ *)

$u_{\text{I}}, u_{\text{II}}$ 及 u_{III} 应在子区域的界面 ($z = \pm a$) 上电位值及法向偏导数均保持连续, 例如在 $z = -a$ 平面, 对于所有 n 值, 应有

$$A_n e^{-k_n a} = B_n \text{sh}(-k_n a) \quad (46)$$

$$\text{及 } \sum_{n=1}^{\infty} k_n A_n e^{-k_n a} J_0(k_n r_1) = \frac{V_2 - V_1}{2a} + \sum_{n=1}^{\infty} k_n B_n \text{ch} \cdot (-k_n a) J_0(k_n r_1) \quad (47)$$

(47) 式中 r_1 为 $0 \rightarrow R$ 之间的任意值, 表示在膜孔处的 $\frac{\partial u}{\partial z}$ 连续.

(46) 式代入 (47) 式, 可得

$$\frac{V_2 - V_1}{2a} + \sum_{n=1}^{\infty} k_n B_n e^{-k_n a} J_0(k_n r_1) = 0, \quad 0 < r_1 < R$$

*) M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions.

在 $R < r < R'$ 区域, $z = -a$ 时 u_I 及 u_{II} 均应等于 V_I , 因而要求

$$\sum_{n=1}^{\infty} B_n \operatorname{sh}(k_n a) J_0(k_n r_2) = 0, \quad R < r_2 < R' \quad (49)$$

为了作数值处理, 级数式(42) — (44) 只能取有限的项数, 只要舍去的项比级数和小得可以忽略即可。若取 N 项, 则有 N 个未知数 B_n ($n=1 \rightarrow N$), 应分别对不同的 r_1 及 r_2 值使(48)及(49)式成立。为此, 可以在边界 $z = -a$ 上选取 N 个“匹配点”。这样可列出 N 个方程的线性代数方程组, 原则上可以用数值方法求出 N 个 B_n 值, 从而可以利用(42) — (44) 式(当然, 级数均只取 N 项)用解析式近似的表述电位分布。

计算时发现当 N 值较大时方程的矩阵系数结构使 B_n 不易得到稳定的收敛解, 而且“最小二乘法”的方法可以克服这一困难。即对每一匹配点的函数的误差求平方和

$$S = \sum_{i=1}^{N_1} \left[\frac{V_I - V_{I_i}}{2a} + \sum_{n=1}^N k_n B_n e^{-k_n a} J_0(k_n r_{1i}) \right]^2 + \sum_{i=N+1}^M \left[\sum_{n=1}^N B_n \operatorname{sh}(k_n a) J_0(k_n r_{2i}) \right]^2 \quad (50)$$

式中 N_1 为 $0 < r_1 < R$ 区域匹配点个数。为了使平方和误差最小, 即 S 取极值, 应对 M 个参考点 ($i=1 \rightarrow M$), 使

$$\frac{\partial S}{\partial B_n} = 0 \quad (51)$$

(51) 式同样产生 N 个关于 B_n 的线性方程。这种方法的参考点数目

大于 N (如取 $M = 3N$)，当 N 足够大时，傅立叶—白塞尔级数方法计算出的结果有足够的精确度。傅立叶—白塞尔级数法曾被改进用于更复杂的问题。*)

§2 有限差分法

在不考虑空间电荷的情况，静电场的电位满足拉普拉斯方程

$$\nabla^2 u = 0 \quad (1)$$

在电子离子光学中应用得最多的旋转对称电场，应用圆柱坐标系 (z, r, ψ) ，由于电位与方位角 ψ 无关，(1)式成为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} = 0 \quad (2)$$

对于没有传导电流的空间，应用标量磁位，磁场的标量磁位 u_m 也满足同样的方程 (即方程(1)和(2))。

求解电位和磁位的拉普拉斯方程，通常都限定了一个封闭的区域 Ω ，而给定区域的边界 G 上的电位或标量磁位值 (以后均只讨论电位，标量磁位计算法与之全同)，而求解区域内的电位分布，即求解狄里赫利问题。用有限差分法求狄里赫利问题的数值解的基本思想是，在区域内选取有限个离散点，而将拉普拉斯偏微分方程中的偏导数化为相邻节点电位的差值的关系 (差分)，从而把微分方程代之以各离散点电位之间差值关系的代数方程—即差分方程。再用数值方法求解差分方程组，得到各离散点的电位。

我们首先用泰勒级数法来推导旋转对称场等间距离散点的差分方程 (见图 9-6)。场域 Ω 用等距的网格划分为节点。任取一节点 $O(z_0, r_0)$ ，利用泰勒级数展开，可得 O 点周围四个节点的

*) A.B. Wittles and Jacobsen, Jour. Applied Physics, 47 (1976), 2716.