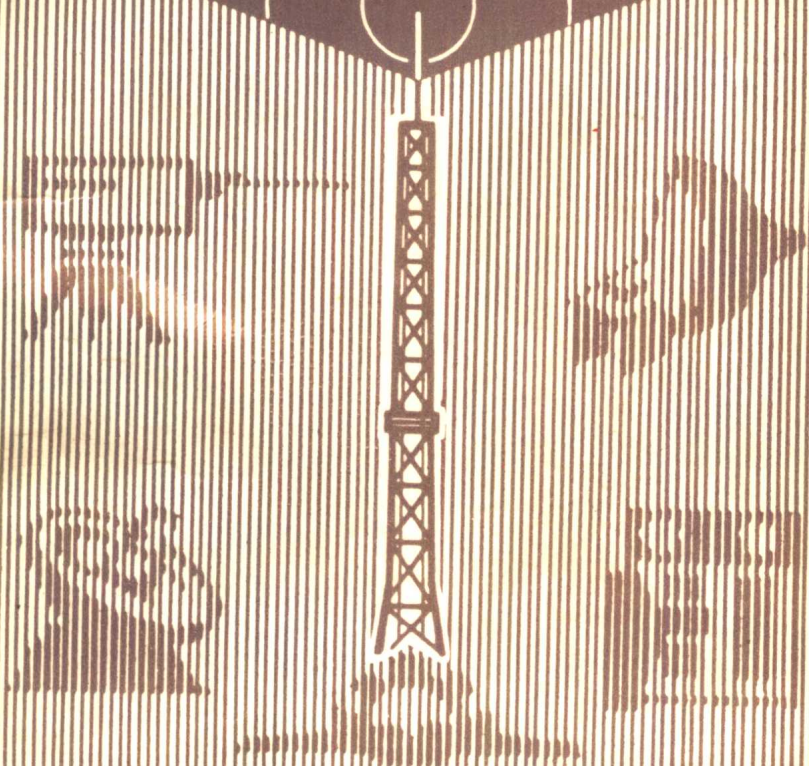


高等学校教材

电子离子光学 计算机辅助设计

孙伯尧 汪健如



清华大学出版社

电子离子光学计算机辅助设计

孙伯尧 汪健如

清华大学出版社

内 容 简 介

本书全面地介绍了电子离子光学计算机辅助设计中所应用的数值计算方法,主要叙述各种数值方法的基本原理、使用范围与使用技巧。

本书分为六章,分别介绍了电子离子光学系统中电场、磁场空间分布的几种基本计算方法;电子或离子在透镜空间和漂移空间中运动轨迹的计算方法;在电子枪区、离子源区电子轨迹或离子轨迹的计算以及考虑空间电荷时的电子轨迹的计算方法;光学参量和象差系数的计算,并对电子离子光学系统设计中的优化方法作了初步介绍。

本书为全国高等工科院校电子物理与器件专业的规划教材,也可以用作物理电子技术、束流物理、表面科学及表面分析仪器等专业的教学参考书,也可以供从事电子束器件、电子束离子束技术、表面分析仪器等领域中设计、制造的技术人员参考。

电子离子光学计算机辅助设计

孙伯尧 汪健如

☆

清华大学出版社出版

北京 清华园

中国科学院印刷厂印刷

新华书店总店科技发行所发行

☆

开本: 850×1168 1/32 印张: 11 3/8 字数: 295 千字

1991年8月第1版 1991年8月第1次印刷

印数: 0001—3000

ISBN 7-302-00830-2/TN·24

定 价: 3.75 元

出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定，我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978年至1985年，已编审、出版了两轮教材，正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻“努力提高教材质量，逐步实现教材多样化，增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神，我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会，在总结前两轮教材工作的基础上，结合教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1986~1990年的“七五”（第三轮）教材编审出版规划。列入规划的教材、实验教材、教学参考书等近400种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿，是从通过教学实践、师生反应较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会（小组）评选择优产生出来的。广大编者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部教材办公室

• 1 •

2002/3/06

引 言

计算机辅助设计 (Computer Aided Design, 缩写为 CAD) 技术已应用于各个学科领域。在电子光学和离子光学设计中应用 CAD 技术不但解决了过去不易解决的问题,而且还促进电子和离子光学器件、仪器的发展。之所以称为辅助设计是因为它仅参与设计过程中的数值计算,而设计中初始结构尺寸、技术参量的选定,以及结果数据的分析、综合,方案的取舍判断还需由设计者来进行。当设计方案成立后,根据方案制造的实物样品,其技术性能、技术参数往往还不能和设计方案一致,有时可能相差较大,根据实物样品技术参量、性能的测量结果对设计方案进行反复修改,才能得到最终的设计方案。

电子和离子光学系统的设计常由选择和确定电、磁透镜以及电、磁偏转器等部件的结构尺寸、光学参数、象差系数开始,再由这些部件组成完整的电子或离子光学系统。电子光学部件的光学参数和象差系数取决于部件空间的电位(电场)分布或磁场分布。正如大家所熟悉的那样,只有很少数的电极结构或磁极靴结构所形成的场(位)分布可以用解析式来表达。因而设计者首先面临的问题是如何找到与电极结构或磁极结构相应的场(位)分布,也就是首先要求解给定边界条件下的拉普拉斯方程、泊松方程或二阶线性偏微分方程。随后设法得到电子或离子在该结构空间中运动的轨迹,根据电子轨迹和轴上的场(位)分布就可以确定其光学参量和计算象差系数。求解偏微分方程、电子轨迹方程以及计算象差系数的数值计算工作量很大,没有适当的计算工具就不能实现数值计算,这些计算工作早期求助于模拟方法和制作实物进行测量的

实验方法。

自 50 年代发明数字式电子计算机以来,这一划时代的计算工具使得数值计算方法得以迅速发展并应用于各个科学技术领域。60 年代初期在微波器件的电子枪设计中使用电子计算机作为辅助设计手段取得很大成功,继而在电子光学部件设计乃至电子(离子)光学系统整体的设计中也取得显著成效。自 70 年代以来,随着数字式电子计算机的发展,尤其是微机的普及,设计者们越来越多地用电子计算机进行空间场(位)分布、电子轨迹的数值求解以及光学参数和象差系数的计算,并把这个方法作为设计工作的主要辅助手段。近 10 年来科学技术的发展对电子光学或离子光学仪器、器件提出了更高的要求,即要求它们有高的分辨率、亚微米级的束径和尽可能小的各种象差。要实现高技术性能的设计不以电子计算机作为辅助设计手段是不可能完成的。80 年代中期国外已有较成熟的电子光学设计专用软件作为商品出售,一些著名的厂家都有自己的设计专用软件用于设计和研制新型号的仪器和器件。

我国的专家学者和科技工作者也早已注意到用计算机进行数值计算作为设计辅助手段的优越性和必要性,从 70 年代就开展这方面的工作,取得不少成果并在出版的电子光学书籍中加以介绍,或将研究成果发表在国内外的期刊上。自执行开放政策以来,我国引进了电子光学器件和仪器的生产设备、生产工艺,并依靠它们生产产品。但在改进产品性能、设计和开发新产品等方面还没有足够的力量。为了满足我国经济建设和科技进步的需要,专业技术人员应当了解和掌握电子和离子光学计算机辅助设计技术。

我国已出版了多种讲述数值计算方法的专著和教科书,它们大多不是针对某个学科的,编写一本结合电子和离子光学设计问题的数值计算方法的教科书势在必行。为此,编者在给电子物理与器件专业高年级学生和研究生讲授《电子光学 CAD》课程的讲

义基础上整理和编写成本书,希望有助于此专业的学生、研究生以及有关科技人员掌握电子离子光学 CAD 必备的基础知识。

本书分为六章,分章的顺序是按照计算机辅助设计的步骤安排的。第一章、第二章分别介绍求解旋转轴对称场和平面对称场空间场分布的几种常用数值计算方法;第三章讨论电子轨迹的计算;第四章内容是考虑空间电荷影响及电子热初速时电子轨迹的计算;第五章叙述电子光学参数及象差系数的计算;第六章介绍在电子光学系统设计中使用的几种最优化方法。作为教科书,各章内容的取舍着眼于基本的和较成熟的数值计算方法,对它们的计算原理、计算步骤叙述得比较详细,以期读者能充分掌握它们。有了这样的基础,读者就容易了解在辅助设计技术中的新进展。设计工作是一项实践性很强的工作,在有限的学时中多安排一些实践环节是有益的。在各章中没有列出具体的计算程序,因为读者一般已具有编写上机程序的能力。本书第一章、第二章由汪健如编写,其余各章由孙伯尧编写,全书由孙伯尧负责统编。

南开大学丁守谦教授、西安交通大学唐天同教授在百忙中审阅了本书的全稿,提出了很多宝贵意见和建议,丁守谦教授还再次审阅了本书的修改稿。本书在编写过程中得到机电部《电子物理与器件》教材编审委员会的指导、应根裕副教授的支持、清华大学出版社有关同志的热情帮助,编者谨向他们表示衷心感谢。

由于编者水平所限,书中论述不妥之处在所难免,恳请专家和读者指正。

编者

1990年8月

• • •

目 录

绪论	1
第一章 电子光学离子光学系统中场分布的计算	6
§ 1.1 有限差分法	6
1.1.1 电磁场基本方程和边值问题	6
1.1.2 有限差分原理	8
1.1.3 差分方程的求解方法	31
1.1.4* 差分方程收敛性分析	34
1.1.5 实际计算中的一些问题	42
1.1.6 等径双圆筒淹没透镜电场分布的分析示例	49
§ 1.2 有限元素法	52
1.2.1 变分原理	53
1.2.2 剖分原理	61
1.2.3 电磁场的有限元素法	66
1.2.4 有限元素法中线性方程组的解法	86
1.2.5 高阶有限元	98
1.2.6 等参有限元	103
§ 1.3 电荷密度法	112
1.3.1 电场的积分形式	112
1.3.2 积分方程的离散化	117
1.3.3 轴对称系统的电荷密度法	119

* 此节可以不讲授,只作参考。

1.3.4	平面对称系统的电荷密度法	123
1.3.5	系数矩阵中积分的解法	124
1.3.6	模拟电荷密度法简介	133
§ 1.4	积分方程法和磁荷密度法	136
1.4.1	等效磁荷	137
1.4.2	磁化强度积分方程	139
1.4.3	磁标位积分方程	142
1.4.4	边界积分法	144
1.4.5	磁荷密度法	154
§ 1.5	混合方法	157
1.5.1	有限差分 and 积分方程的混合使用	158
1.5.2	有限元素法与积分方程法混合使用	161
第二章	多极系统和偏转系统中场分布的计算	174
§ 2.1	圆柱坐标系中的场分布	174
§ 2.2	电多极场场分布的计算	177
2.2.1	有限差分法	177
2.2.2	有限元素法	180
2.2.3	电荷密度法	182
§ 2.3	磁偏转场的计算	188
2.3.1	有限元素法	189
2.3.2	磁荷密度法	193
第三章	电子在电磁场中运动轨迹的计算	202
§ 3.1	劳仑兹方程的数值解法	203
3.1.1	台劳级数方法	203
3.1.2	龙格-库塔方法	206
3.1.3	哈密方法	211
3.1.4	任意点电场的求法	215
§ 3.2	傍轴轨迹方程的数值解法	220

第四章 电子枪区中电子轨迹的计算	226
§ 4.1 考虑空间电荷和横向热初速影响的电子束计算...	228
4.1.1 曲轴傍轴运动方程.....	229
4.1.2 曲轴细电子束及电流密度分布.....	236
4.1.3 旋转坐标系中的曲轴细电子束和空间电荷密度分布.....	242
4.1.4 电子枪区电子轨迹的计算.....	246
§ 4.2 考虑纵向热初速的计算.....	255
4.2.1 考虑纵向热初速的二极管理论.....	255
4.2.2 计算中的一些问题和方法.....	261
4.2.3 计算的步骤.....	265
§ 4.3 点状阴极电子枪的计算.....	267
§ 4.4 电子束中空间电荷效应的蒙特卡罗模拟方法.....	271
4.4.1 Boersch 效应的物理模型.....	272
4.4.2 蒙特卡罗方法.....	276
4.4.3 离散空间电荷效应的蒙特卡罗模拟.....	278
第五章 电子光学参量和象差系数的计算	284
§ 5.1 电子光学参量的计算.....	285
§ 5.2 象差系数的计算.....	287
§ 5.3 用实际轨迹计算电子光学参量及象差系数.....	294
§ 5.4 用样条函数进行数值微分.....	297
§ 5.5 偏转系统象差系数的计算.....	300
§ 5.6 偏转磁场场参数的计算.....	306
第六章 最优化设计简介	320
§ 6.1 动态规划方法.....	324
§ 6.2 阻尼最小二乘法.....	333
§ 6.3 单纯形方法和复形方法.....	340
参考文献	350

结 论

电子光学或离子光学系统的设计过程大体可分成下面几个步骤。首先根据对部件或系统的技术性能要求,设计人员凭借经验或参照已有的结构选定新的结构尺寸和电气参量。然后用各种办法去得到该结构空间的电位分布或磁场(磁感应强度)分布、电子或离子在该空间的运动轨迹或傍轴轨迹;确定该结构的光学参量和象差系数;对所得到的数据进行分析和综合。如果这些数据表明所选定的结构尺寸和电气参量不满足对系统或部件的技术要求,就需要对结构尺寸或电气参量作进一步的修改或调整,直到满意为止。最后根据所拟定的结构尺寸制作实物,并在工作状态下对实物的技术性能进行量测,由量测结果可以判断设计方案的优劣。

虽然早已知道可用数值计算方法去近似地求解和场(位)空间分布相联系的二阶偏微分方程、描述电子运动的轨迹方程以及计算象差系数表达式中的定积分,但是由于没有合适的计算工具,不能实施数值计算,于是只能求助于模拟方法或实验方法。所谓实验方法是把初步设计的结构做成实物,对实物在工作状态下进行技术性能和参数的测量,再根据测量结果修改所设计的结构,反复进行直到实物能够达到或接近预期的技术指标为止。由此可见,用实验方法需要制作相当数量的实物样品才行,物资和财力耗费较大,实验周期较长。模拟方法是用类似的物理现象来代替制作实物,但需要制作和实物结构相当的结构模型和专用的模拟设备,进行场(位)分布的求解模拟设备有电解槽、电阻网等。自动电子轨迹仪是用以求解场(位)分布和电子运动轨迹的综合模拟设备。这

两种方法在早期电子光学系统设计中都起过极为重要的作用。为了便于进行工程设计,很多学者和专家从大量的实验数据中归纳出一些经验公式、设计曲线或数表供设计者们使用和参考。直到现在这些经验公式和数表还很有参考价值。

静电场和静磁场的空间分布可由描述电磁场的偏微分方程和给定的封闭边界条件用解析方法精确求解,但在电子光学和离子光学设计问题中,大多数的问题需要应用数值近似方法求解。有限差分方法(Finite Difference Method, 缩写为 FDM)是在电磁场数值分析的方法中应用最早的一种方法,它的特点是直观、计算公式简单,对整齐简单的边界和网格节点不多的情况,计算工作量不大(甚至用手算都可以进行),一直到现在还是经常使用的方法。由于电子光学和离子光学中旋转对称的结构使用得比较广泛,电磁场求解常常是二维问题,应用有限差分方法时初始数据准备的工作量不大。有限差分方法的主要缺点是对复杂形状的边界条件不容易处理,并且误差较大。当需要提高计算精度(尤其是对轴上场分布的计算精度)时,计算工作量迅速增加。1973年 E. Munro 把有限元素方法(Finite Element Method, 缩写为 FEM)引入电子光学和离子光学的设计中。有限元素方法是把待解区域用不规则的三角形剖分成有限个元素的集合,在变分原理的基础上把偏微分方程离散成代数方程组。因而有限元素法适应于复杂形状的边界条件和带有不同介质的励磁结构。E. Munro 编写的计算程序得到普遍的承认,并被国内外广泛采用。有限元素方法与有限差分方法相比较,初始数据准备的工作量稍大,所求得的轴上电位分布或磁感应强度分布的精度较高。这两种方法都需要封闭状的边界,如果所选用的结构不是封闭状边界,就要求人为地设置封闭边界,这样自然会引入人为封闭边界的误差。1970年 B. Singer 首次在电子光学问题中使用了积分方程方法(Integral Equation Method, 缩写为 IEM),1971年 F. E. Read 使用电荷密度方法

(Charge Density Method, 缩写 CDM)计算静电透镜空间的电位分布,稍后 B. Singer 又用模拟电荷方法 (Charge Simulation Method, 缩写为 CSM) 计算了高压静电场的场分布。这些方法都是根据静电场唯一性定理,利用边界上的已知电位或磁位求出边界上的等效电荷密度或等效磁荷密度,再根据所求出的等效电荷密度或磁荷密度去计算空间的电位分布或磁场分布。这种方法的特点是不需要封闭边界而适用于不能封闭边界的结构和带有磁介质的励磁线圈所形成的空间电(磁)场。这些方法的计算工作量大,并且需要解决奇异积分的问题。如果按有限元素法的概念,可以把 IEM 和 CDM 归结为边界元素方法 (Boundary Element Method, 缩写为 BEM)。BEM 是把边界用矩形、条形剖分成有限个元素的集合,然后把积分方程离散成代数方程组。可以说 FDM、FEM、BEM (包括 IEM 和 CDM)、CSM 已经成为电子光学系统设计中求解场分布的四种基本方法。显然它们各有优劣,针对不同的问题可以选择不同的方法。为了提高计算结果的精度和计算速度,目前常常把几种方法混合起来使用,例如用 BEM 求出需要封闭边界处的位分布数值,再用 FEM 求解封闭边界内的空间分布。

计算电子轨迹一般都采用四阶龙格-库塔方法或预估-校正方法,由于轨迹的计算精度除依赖于轨迹的计算公式外还有赖于空间电位分布或磁感应强度分布的计算精度,如果这两种分布的计算精度不高,无论采用什么方法也不可能得到高精度的轨迹计算。

在电子枪或离子枪区内场分布的计算和轨迹的计算到目前为止还不能认为已经找到满意的计算方法。因为这时电子或离子刚从源体上发射出来,它们的速度很低而且可能有大量的电子或离子被堆积,速度低很易受到场的影响,不能较精确的计算。电子或离子的堆积要产生空间电荷效应,而电子(离子)相互碰撞,则会产生能量交换的效应。1967年 C. Weber 提出利用曲轴傍轴电子轨

迹方程来计算电子束器件(如显象管等)中电子枪区的电子轨迹和空间电荷的分布,在计算中也考虑了电子横向热初速的影响。在这个基础上日本的二宫敬虔增添了纵向热初速的考虑,到目前为止 Weber 这个计算方案仍是唯一的一个方案。用于聚焦离子束装置中的液态金属离子源是一个点状阴极,康念坎等提出了用球坐标变间距的有限差分方法来计算源区的电位分布和离子轨迹。对于电子由于碰撞而引起能量交换的物理现象及空间电荷效应,唐天同用蒙特卡罗方法进行过模拟。

电子光学参量的计算用插值方法和数值微分方法很容易进行,而象差系数的数值计算主要依靠已推导出的象差系数计算公式,因而计算象差系数的困难在于推导象差系数的数学表达式。近年来发展的人工智能用计算机语言能够进行代数运算,它可以用来帮助我们推导象差系数的表达式。目前我国的这一类软件尚未普及,使用它们进行工作的条件不够成熟,国外已开展工作,国内也开始探索。

数字式电子计算机的数据处理速度越来越高,储存容量越来越大,给我们提供一个良好的条件。用计算机帮助我们选择最好的电子光学部件的结构,使它在满足一定光学性能的前提下有最小的象差系数,这就是最优化问题。国内外的学者和科技工作者已在这方面开展了相当数量的工作,取得了令人鼓舞的结果。在本书最后一章我们将介绍几个例子,以期引起读者的注意和兴趣。

计算机辅助设计技术已经使我们把设计过程中的计算工作周期从几十天缩短到几十分钟甚至几分钟,这在技术上不能不说是一个巨大的进步。进一步提高计算精度和计算速度就需要寻找更好的计算方法,但这不能使电子光学系统辅助设计技术有所突破。目前的电子光学设计方法是由选定结构再计算参量、象差,从而判断设计是否合适的这样一条路线,我们不妨称它为“逆设计”。如果我们能够实现由给定光学参量、象差、电气参数去寻找轴上位分

布或场分布,再由位分布或场分布去确定结构这样一条设计路线,即实现称之为“正设计”的路线,将会使电子光学或离子光学的设计有新的突破。这一设想的实现有可能借助于最优化方法。“正设计”的实现将形成电子光学或离子光学系统设计的自动化。

第一章 电子光学离子光学系统中场分布的计算

§ 1.1 有限差分法

1.1.1 电磁场基本方程和边值问题

电磁场的基本性质用麦克斯韦 (Maxwell) 方程组来描述。在静电磁场中,麦克斯韦方程组可以写成:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho & \nabla \times \mathbf{E} &= 0 & \mathbf{D} &= \varepsilon \mathbf{E} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} & \mathbf{B} &= \mu \mathbf{H}\end{aligned}$$

式中: \mathbf{D} 为电感应强度, \mathbf{E} 为电场强度, ε 为介质的介电常数, ρ 为电荷的体密度, \mathbf{B} 为磁感应强度, \mathbf{H} 为磁场强度, μ 为介质的导磁率, \mathbf{J} 为电流密度。从上述方程组可以看出,静电场和静磁场是互相独立的,因此可以分别讨论。

由于静电场是有源无旋的场,因此我们可以引入一个位函数 ϕ 来描述它。 ϕ 是一个标量,它和电场强度 \mathbf{E} 的关系是:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi$$

将此式代入麦克斯韦方程,得

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla\phi) = -\rho$$

$$\text{即} \quad \nabla\varepsilon \cdot \nabla\phi + \varepsilon \nabla^2\phi = -\rho \quad (1.1-1)$$

1.1-1 式只能描述充分光滑的场,即介质中不能有突变。如果介质出现突变,则 $\nabla\varepsilon$ 或是无穷大,或没有固定值,这个方程就不适用。在介质是均匀的情况下, $\nabla\varepsilon = 0$ 。在有几种介质存在的情况下运用高斯定律,可求出介质分界面处的边界条件:

$$\begin{cases} \mathbf{n} \times (\mathbf{E}^+ + \mathbf{E}^-) = 0 \\ \mathbf{n} \cdot (\epsilon_1 \mathbf{E}^+ - \epsilon_2 \mathbf{E}^-) = \rho_s \end{cases} \quad (1.1-2)$$

式中, \mathbf{E}^+ 与 \mathbf{E}^- 表示介质面两侧的电场强度, ρ_s 表示该面的面电荷密度。式 (1.1-1) 与 (1.1-2) 完整地描述了一个静电场的性质。在大多数电子光学问题中, 介质是均匀的, 即介质没有断裂状况, 也不连续变化, 于是 (1.1-1) 式可以简化成

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad (1.1-3)$$

方程 (1.1-3) 是以后我们讨论问题的出发点。

由于静磁场是有旋无源场, 因此可以引一个矢势 \mathbf{A} 来描述它。 \mathbf{A} 是一个势量, 并令

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.1-4)$$

由于 $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \equiv 0$, 必有 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 。由矢量分析可知, 上式不能唯一地确定矢势 \mathbf{A} , 故我们再规定

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.1-5)$$

为了考察 \mathbf{A} 的物理意义, 我们将式 (1.1-4) 两边取积分, 得

$$\int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S} = \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$$

S 是一个面, Γ 是这个面的边界。方程的左边表示穿过 S 面的磁通量。所以矢势 \mathbf{A} 沿任一闭合回路 Γ 的环量表示通过以该回路为界的任一 S 面的磁通量。

将 $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu}$ 代入麦克斯韦方程, 则得

$$\nabla \times \left(\frac{\mathbf{B}}{\mu} \right) = \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{B} + \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) \times \mathbf{B} = \mathbf{J}$$

将 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 代入上式, 得