

Сравнительный анализ различных моделей решения задач электронной оптики

В.Я. Иванов

Институт Ядерной Физики им. Г.И. Будкера СО РАН

Аннотация: В статье дан сравнительный анализ эффективности различных моделей для решения широкого класса задач электронной оптики: матричного метода (ММ), модели «трубок тока» (МТТ), метода «частиц-в-ячейках» (МЧЯ), а также моделей теории аббераций (МТА) для изображающих приборов электронной оптики и для интенсивных пучков заряженных частиц. Эти модели были реализованы в наборе оригинальных пакетов прикладных программ, которые были апробированы при проектировании различных приборов физической электроники: электронных пушек, прецизионных приборов ночного видения, мощных клистронов, времяпролетных масс-спектрометров и других. Результаты расчетов показали высокую эффективность численных решений и хорошее соответствие с экспериментальными данными.

Ключевые слова: электронная оптика, математические модели, теория аббераций, физика ускорителей.

Введение

Многообразие постановок задач электронной оптики позволяет разделить их на три класса в соответствии с целевыми установками получения качества пучков.

Первый класс составляют задачи для интенсивных релятивистских пучков заряженных частиц. Для решения статических задач чаще всего используются МТТ [1], а для нестационарных – МЧЯ [2].

Второй класс образуют задачи времяпролетной масс-спектрометрии. Здесь целью расчетов является определение спектра масс анализируемых частиц пучка. Для решения этих задач требуются использовать МТА. К этому классу относятся масс-спектрометры и зондоформирующие приборы.

Третий класс приложим лишь к задачам, в которых пучки являются средством транспортировки и трансформации изображений объектов. К таковым относятся, например, электронно-оптические преобразователи, электронные и ионные микроскопы, электронно-лучевые трубки, усилители яркости и приборы для регистрации быстропротекающих процессов. Отличительным признаком приборов изображающей оптики является необходимость явного учета системы физически малых параметров. Методика изложена в статьях [3-4] и монографиях [5-10]. Численные алгоритмы прошли серьезную апробацию путем сравнения численных результатов с результатами натуральных испытаний реальных приборов.

2. Математические модели задач электронной оптики

Метод «трубок тока». В траекторном подходе метода «трубок тока» полная система уравнений стационарных задач электронной оптики включает уравнения поля, уравнения движения заряженных частиц, законы сохранения энергии и суммарного заряда системы, а также законы эмиссии частиц. Потенциал φ электростатического поля для кусочно-однородных сред с диэлектрической проницаемостью ε определяется решением уравнения Пуассона с граничными

условиями для потенциала и его производных, заданными на границе проводников и диэлектриков области. Уравнения движения заряженных частиц в форме Лоренца имеют вид $\frac{d\vec{p}}{dt} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}), \vec{p} = m\gamma\vec{v}, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$. Здесь c – скорость света, m – масса

электрона, q – его заряд, p – импульс частицы, v – её скорость, E – напряженность электрического поля, B – индукция магнитного поля. Все векторы зависят от времени t и координат в декартовой $\vec{r} = (x, y, z)$ или цилиндрической $\vec{r} = (r, \varphi, z)$ системах. К указанным уравнениям следует добавить вклад собственных электрических и магнитных полей заряженных частиц. Обычно это делается с помощью добавления законов сохранения полного тока и заряда системы, которые выражаются уравнением непрерывности потока частиц $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j}$. В этом уравнении для функции плотности тока $\vec{j} = \rho \vec{v}$ на поверхности эмиттера S_0 необходимо задать начальные в виде некоторой известной функции j_0 , отражающей законы распределения эмиттируемых или инжектируемых в область частиц по углам и энергиям вылета. Плотность тока

эмиссии определяется законом Чайлдса-Ленгмюра $j_e = \frac{4\epsilon_0}{9} \sqrt{\frac{q}{M_0}} \frac{\delta\varphi}{d^2}$, где $\delta\varphi$ – разность потенциалов эмиттера и точки, находящейся на расстоянии d по нормали от поверхности эмиттера. Ввиду нелинейности задачи самосогласованного поля метод трубок тока является принципиально итерационным. Поверхность эмиттера разбивается на некоторое количество ячеек. Из центра каждой ячейки выпускается по одной «стержневой» траектории, которой приписывается площадь ΔS_k и плотность тока J_k . Используемая нами модель предполагает постоянство сечения трубки вдоль направления движения и пересчёт лагранжевых переменных траектории на неподвижную эйлерову сетку регулярной структуры, покрывающую область прохождения пучка. Объёмный заряд в m -й ячейке сетки определяется суммированием

всех зарядов, внесённых в объём V_m рассматриваемой ячейки $\rho_m = \sum_k \Delta S_k j_k \Delta t_{mk} / V_m$,

где Δt_{mk} – время пролёта k -й траекторией объёма V_m . Величина магнитной индукции в уравнениях движения (2.1) вычисляется интегрированием по объёму V , занятому токами \vec{j} , по формуле $\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}_0(\vec{r}) + \frac{4\pi}{\mu_0} \int_V \frac{[\vec{j}(\vec{r}') \times (\vec{r} - \vec{r}')]}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$, в которой член B_0 описывает внешнее по отношению к пучку поле. Второй член этой формулы соответствует собственному магнитному полю пучка, занимающего объём V . Вклад собственного магнитного поля существенен лишь в релятивистской области энергий пучка. Ввиду нелинейности системы уравнений электронной оптики нахождение плотности эмиссионных токов осуществляется методом релаксации объёмного заряда $\rho^{(n+1)} = \omega \rho_*^{(n+1)} + (1-\omega)\rho^{(n)}, \rho^{(0)} = 0$, а также собственного магнитного поля по этой же схеме. Здесь n – номер итерации, $0 < \omega < 1$ – коэффициент релаксации.

Краткое описание теории аббераций. Теория аббераций представляет собой вариант метода последовательных приближений для решения задач математической физики. Она имеет развитый аналитический аппарат, который достаточно полно описан в классических монографиях В. Глазера [5], а также П. Хокса и Е. Каспера [6-7]. Физико-математическая модель осесимметричных приборов электронной оптики на основе теории аббераций формулируется следующим образом. Уравнения движения заряженной частицы в форме Лоренца имеют вид $\ddot{\vec{r}} = \eta \sqrt{1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}} \left(-\nabla\varphi + \frac{1}{c} [\dot{\vec{r}} \vec{B}] \right)$. Здесь точка над радиус-вектором \vec{r} означает производную по времени, $\eta = e/m$ –

удельный заряд – отношение заряда электрона к его массе, c – скорость света, φ – потенциал электростатического поля, B – индукция магнитного поля. Так как потоки заряженных частиц, создающих изображение объекта, обязаны обладать некоторой регулярной структурой, которая определяется комбинацией фокусирующих и ускоряющих свойств поля, в них всегда можно выделить систему малых параметров, по степеням которых и следует проводить разложение вариационных функций. Конкретное содержание этой системы зависит от специфики постановки задачи, однако всегда присутствует параметр, называемый величиной параксиальности, который определяется отклонением конкретной траектории от оси или плоскости симметрии распространения пучка. Разложение скалярных электрического φ и магнитного φ_m потенциалов в цилиндрической системе координат имеет вид ряда

Шерцера
$$\varphi(r, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k!)^2} \left(\frac{r}{2}\right)^{2k} \Phi^{(2k)}(z).$$
 Абберациями ЭОС называются величины

отклонений общего уравнения Лоренца от решений линеаризованного, или параксиального уравнения. Эти отклонения принято представлять в виде рядов по степеням малых параметров. Для вычисления аббераций третьего порядка достаточно ограничиться разложениями полей до 4-й степени параметра параксиальности. Далее будем рассматривать эмиссионные приборы изображающей оптики. Представляя полную энергию частицы, выраженную в единицах потенциала в виде $U(z) = \Phi(z) + \varepsilon_z$, где $\Phi(z)$ – осевое распределение потенциала, а ε_z – начальная энергия, связанная с продольным движением, выпишем уравнение Шерцера для траекторий, исключив время из уравнения движения

$$\ddot{r}'' + \frac{1 + \dot{r}'(\dot{r}^*)'}{\varepsilon + \varphi - \varphi_0} \left(\frac{\dot{r}'}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{r}^*} \right) + \sqrt{\frac{\eta}{2} \frac{1 + \dot{r}'(\dot{r}^*)'}{\varepsilon + \varphi - \varphi_0}} \left\{ \dot{r}' \frac{\partial \varphi_m}{\partial z} + (\dot{r}')^2 \frac{\partial \varphi_m}{\partial \dot{r}^*} - [2 + \dot{r}'(\dot{r}^*)'] \frac{\partial \varphi_m}{\partial \dot{r}^*} \right\} = 0.$$

Здесь штрих означает производную по независимой переменной, осевой координате z . Разложив в ряды представления осесимметричных потенциалов, получим параксиальное уравнение $U \ddot{u}'' + \frac{1}{2} U' \dot{u}' + \frac{1}{4} \left(U'' + \frac{\rho}{\varepsilon_0} + \sqrt{\frac{\eta}{2} B_z} \right) \ddot{u} = 0$, $\ddot{u} = \ddot{r} e^{i\chi}$. Поскольку

на поверхности эмиттера радиусом R_c величина ε_z становится малым параметром, это решение имеет асимптотику погранслоя, и его фундаментальную систему решений выберем в виде $v(z_0) = 0$, $v'(z_0) \sqrt{\varepsilon_z} = 1$, $w(z_0) = 1$, $w'(z_0) R_c = -1$, а общее решение параксиального уравнения электронной оптики представим суммой $\ddot{u}(z) = \ddot{u}_0 w(z) + (2\eta)^{-1/2} \ddot{u}'_0 v(z) + \Delta \ddot{u}_c + \Delta \ddot{u}_3 + \dots$, где величина $\Delta \ddot{u}_c$ отвечает хроматическим абберациям первого порядка, а величина $\Delta \ddot{u}_3$ выражает геометрические абберации 3-го порядка.

Метод теории аббераций для интенсивных пучков. Данный метод объединяет в себе положительные свойства методов «трубок тока» (МТТ) и теории аббераций. Вначале решается краевая задача для расчета электрического поля, затем рассчитывается осевое распределение потенциала и двух первых его производных, и вместо численного интегрирования уравнений движения производится расчет траекторий v и w параксиального уравнения, после чего на поверхности эмиттера производится расчет плотности тока эмиссии j по закону Чайлдса-Ленгмюра. Таким образом, произвольная траектория частицы вычисляется по простейшей формуле $r(z) = r_0 w(z) + v(z) / \sqrt{2\eta \varepsilon_z}$. Использование этой формулы обусловлено тем, что при моделировании интенсивных пучков вполне достаточно использовать лишь 1-й порядок теории аббераций. Существенным достоинством такой модели в сравнении с МТТ является, то что здесь не требуется производить расчет компонент электрического поля во всех узлах пространственной сетки, а затем интегрировать уравнение движения частиц для всех «трубок тока». Объемный заряд в ячейках

пространственной сетки $q = j \Delta S \Delta t$, ΔS – площадь сегмента поверхности эмиттера, ассоциируемая с траекторией, $\Delta t = h\sqrt{\gamma m/2e\Delta U}$ – время пролета ячейки сетки частицей. Здесь h – размер ячейки сетки, ΔU – разность потенциалов на сторонах ячейки, которые пересекла пролетающая частица. Потенциалы в узлах сетки восстанавливаются из осевого распределения по формуле ряда Шерцера. Весь цикл расчетов повторяется до сходимости итераций с использованием алгоритма релаксации токов эмиссии.

Матричных метод. Современный ускоритель содержит десятки тысяч элементов, управляющих транспортировкой пучков заряженных частиц. Если электромагнитные поля отдельных элементов не перекрываются, расчет траекторий частиц для установки можно представить воздействием полей каждого элемента на частицы пучка. Состояние частицы описывается вектором их шести координат в фазовом пространстве $X = (x, x', y, y', t, \varepsilon)$, прохождение частицей поля элемента можно определить воздействием оператора F на начальное состояние $X(s) = F(X(0))$, где s – длина пути частицы. Проводя разложение этого уравнения в ряд по компонентам начального вектора, получим $X_i(s) = \sum_{k=1}^6 M_{ik}(s)X_k(0) + \sum_{k=1}^6 \sum_{l=1}^6 A_{kl}X_k(0)X_l(0) + \sum_{k=1}^6 \sum_{l=1}^6 \sum_{m=1}^6 B_{klm}X_k(0)X_l(0)X_m(0) + \dots$. Здесь штрих означает дифференцирование по координате s опорной траектории, для которой поперечные координаты x, y и скорости x', y' , а также отклонение энергии частицы от опорной $\varepsilon = E - E_s$ являются малыми параметрами, t – время пролета. Транспортировка пучка через все элементы ускорителя описывается перемножением матриц всех элементов, имеющих аналитическое представление [10].

Метод «частиц-в-ячейках». Компоненты полного электрического и магнитного полей \mathbf{E}, \mathbf{B} представляются суммой нестационарных собственных полей \mathbf{E}, \mathbf{B} , возбуждаемых частицами и внешними токами \mathbf{J} и токами пучка частиц $\mathbf{J}_p = \sum_i q_i n_i \mathbf{V}_i$, а также квазистатических внешних полей \mathbf{E}, \mathbf{B} , обусловленных потенциалами электродов и токами соленоидов. Нестационарные поля описываются системой уравнений Максвелла. Полный ансамбль инжектируемых заряженных частиц группируется в макрочастицы, которые могут иметь разные заряды q_i и число элементарных частиц n_i в макрочастице с номером i .

3. Сравнительный анализ разных моделей

Матричный метод позволяет проводить расчеты сложных ускорителей с десятками тысяч управляющих элементов, что недоступно для других методов. Недостатком метода является требование, чтобы поля отдельных элементов не перекрывались. Его нельзя использовать для расчетов циклотронов, электронных пушек, клистронов, магнетронов и ряда других приборов. Пример сравнительной эффективности показан на Рис. 1, где расчеты проводились для электронной пушки 57-мегаваттного клистрона методом «частиц-в-ячейках» (сетка 400 x 500 разбиений, 3500 макрочастиц, 1200 шагов по времени. Время счета 65 мин на процессоре с частотой 2.3 ГГц) и методом «трубок тока» [1], [11] (на сетке 20 x 100, 10 траекторий, 15 итераций. Время счета 52 сек). Расчет электронно-оптического преобразователя инфракрасного диапазона методом теории аббераций [12] представлен на Рис. 2. Время расчета составляет 0.03 сек. Здесь же представлен расчет электронной пушки клистрона с током 415 А и ускоряющим напряжением 350 кВ методом теории аббераций. Время расчета составляет 0.2 сек.

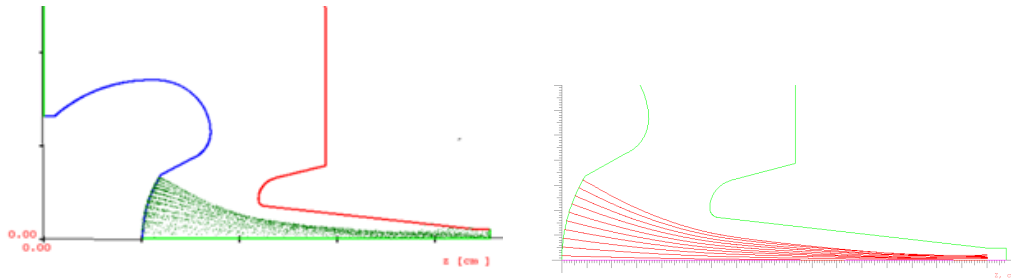


Рисунок 1. Слева: расчет электронной пушки методом частиц-в-ячейке. Справа: Расчет той же пушки методом «трубок тока».

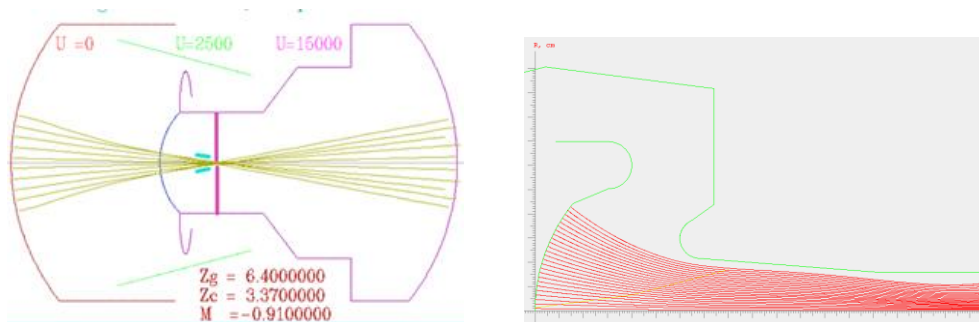


Рисунок 2. Расчет ЭОП (слева) и электронной пушки (справа) методом теории аббераций.

4. Заключение

Разработан набор оригинальных пакетов прикладных программ для расчетов и автоматизированного проектирования широкого класса приборов физической электроники, прошедший систематическую апробацию при решении методических задач, а также сравнением численных расчетов с экспериментальными данными. Разнообразие численных алгоритмов позволяет выбрать наиболее адекватный метод при проектировании конкретного прибора.

Список литературы

1. Астрелин В.Т., Иванов В.Я. Пакет программ для расчета характеристик интенсивных пучков релятивистских заряженных частиц. Автометрия, 1980, №3. - С.92-99.
2. Хокни Р. У.; Джеймс У. И. (1988). Компьютерное моделирование с использованием частиц. CRC Press. ISBN 0-85274-392-0.
3. Иванов В.Я. Метод анализа трехмерных нестационарных потоков заряженных частиц. Тр. Института математики СОАН СССР, Т.15. -Новосибирск, Наука. -1989.-с.172-187.
4. V. Ivanov. New Approach in Aberration Theory for Solving of 3D Electron Optic Problems. Известия ВУЗов, сер. Физика, Т57, №11/3, 2014. - с.136-139.
5. W. Glaser. Grundlagen der Elektronenoptik, Springer, Vienna, 1952.
6. Hawkes P.W., Kasper E. Principles of electron optics. V.1: Basic geometrical optics. -NY: Acad. Press, 1989. -552p.
7. Hawkes P.W., Kasper E. Principles of electron optics. V.2: Applied geometrical optics. -NY: Acad. Press, 1989. -552p.
8. Иванов В.Я., Методы анализа, оптимизации и синтеза приборов физической электроники. - Hmbg: Palmarium Academic Publishing, 2016. -548 с.

9. V. Ivanov. Computational methods, optimization and synthesis in electron optics. -Hmbg: Palmarium Academic Publishing, 2016. -525 pp.
10. N. A. Vinokurov, "Fundamentals of Electron Optics and Physics of Charged Particle Beams", Novosibirsk, Novosibirsk State University, pp.81, 2023.
11. Иванов В.Я., Хавин Н.Г. Численный метод расчета характеристик интенсивных пучков релятивистских заряженных частиц. - Новосибирск, 1977. (Препринт/СО АН СССР. Институт ядерной физики, №114). - 22с.
12. Иванов В.Я. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025669121. Программа «ОПТИКС-2». 23.07.2025.