НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 1998том 8, № 1-2 с. 27-31

ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

УДК 537.533.3+621.387

О НЕКОТОРЫХ ВОПРОСАХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ СЕТОК ДЛЯ РАСЧЕТА ТРАЕКТОРИЙ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ЭЛЕКТРОННО- И ИОННО-ОПТИЧЕСКИХ ПРИБОРАХ

© С.И.Шевченко

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург.

Поступила в редакцию 10 декабря 1997г.

Анализируются причины, приводящие к потере точности в расчетах траекторий заряженных частиц в электронно- и ионно-оптических приборах. Формулируются алгоритмы проектирования неравномерных сеток, позволяющие учесть эти причины и уменьшить их вклад в ошибку расчетов траекторий.

ВВЕДЕНИЕ

При проектировании особо точных аналитических приборов возникает потребность в особо точных расчетах траекторий заряженных частиц (электронов и ионов). Расчет траекторий осуществляется интегрированием уравнений движения, в которые в качестве параметров входит напряженность электростатического поля (НЭСП) [1, 2]. Ясно, что на точность расчета траекторий, кроме свойств алгоритма решения уравнений движения, влияет точность задания НЭСП в каждой точке, к которой обращается алгоритм расчета траектории. Таких обращений к НЭСП бывает довольно много, а алгоритм прямого расчета НЭСП не является быстрым. Поэтому, при обращении программы расчета траектории к программе вычисления поля, время расчета траектории становится довольно большим.

Другой подход — предварительный расчет значений НЭСП на некотором множестве значений координат (на сетке), а затем интерполяционное нахождение (восполнение) НЭСП в промежуточных точках. При этом время расчета траектории оказывается значительно меньшим.

Однако встает задача обеспечения достаточной точности интерполяционного восполнения значений НЭСП. В этой задаче ясно видны две подзадачи: точность вычисления значений НЭСП на сетке (в узлах сетки) и точность интерполирования.

В работах [3–5] описан алгоритм, позволяющий получать относительную точность вычислений НЭСП в узлах сетки до $10^{-5}\pm10^{-6}$. Поэтому перед нами остается лишь задача получения достаточной точности при интерполяционном вычислении НЭСП.

В тех областях пространства, где электростатическое поле ведет себя гладко, особых проблем с получением достаточной точности интерполяционного восполнения не возникает. Простая полиномиальная интерполяция достаточно высокого порядка дает вполне удовлетворительные результаты.

Совсем по-другому обстоит дело в областях пространства, где изменение электростатического поля имеет резкий характер. К таким областям пространства относятся области, где существует сгущение электродов, области резкого изменения масштаба и области в окрестности изломов и концов электродов. В последнем случае НЭСП имеет сингулярный характер [6] и полиномиальное восполнение допустимо только в пределах радиуса сходимости соответствующего ряда Тэйлора, равного расстоянию от рассматриваемой точки траектории до точки сингулярности.

Отсюда становится ясным, что по мере приближения к точке сингулярности (к концу или излому электрода) радиус сходимости соответствующего ряда Тэйлора уменьшается и, следовательно, величина шаблона, на котором строится полиномиальное восполнение достаточно высокого порядка, также уменьшается.

Т.о. мы приходим к выводу: чтобы не потерять в точности расчета траекторий в окрестности выше упомянутых особых точек, требуется применять неравномерные сетки, имеющие сгущение в окрестности этих точек. Очевидно, что в окрестности таких точек эквипотенциали имеют сильное сгущение. Поэтому, пользователи, которые не обладают достаточным опытом, чтобы по одному виду системы электродов спроектировать сетку, могут сперва задать равномерную сетку, построить вид эквипотенциалей, и затем по виду эквипотенциалей проектировать сетку, задавая сгущение сетки примерно пропорциональное сгущению эквипотенциалей.

В пределах неоднородной сетки возможны следующие участки:

- на участке наблюдается приблизительная однородность эквипотенциалей,
- стыкуются две области поля, где характерные размеры различаются на порядки,

- стыкуются области поля, в которых на обоих краях существует сгущение, а посередине — разрежение эквипотенциалей.

Последовательно рассмотрим эти три случая.

2.УЧАСТОК ОДНОРОДНОЙ СЕТКИ

Этот случай применяется для области пространства, в которой наблюдается приблизительная однородность эквипотенциалей точки сингулярности поля находятся достаточно далеко. В этом случае при проектировании сетки задаются следующие величины: x_n — координата начала участка сетки, x_k — координата конца участка сетки, N — число отрезков (ячеек) сетки, на которые разбивается весь участок, $M = N + 1$ — число узлов сетки, включая начальный и конечный, dx - шаг сетки.

Шаг сетки определяется соотношением:

$$dx = (x_k - x_n)/N,$$

и координаты всех узлов вычисляются по формуле:

$$x(i) = x_n + (i-1)dx,$$

где $i = 1,..., M,$ $x(1) = x_n,$ $x(M) = x_k$.

3. УЧАСТОК СЕТКИ СО СГУЩЕНИЕМ К ОДНОМУ ЕЕ КОНЦУ

Пусть сгущение сетки расположено в начале рассматриваемого участка. Задаем следующие величины: d_n — шаг в начале участка, d_k шаг в конце участка, α — коэффициент сгущения, L — полная длина рассматриваемого участка сетки.

Существует очевидное соотношение, связанное с тем, что длины последовательных ячеек сетки образуют геометрическую прогрессию

$$d_k = d_n\alpha^{N-1}, \tag{1}$$

где N — число ячеек сетки (пока нам неизвестное).

Полная длина участка сгущения L_1 определяется известной формулой для суммы членов геометрической прогрессии

$$L_1 = d_n\frac{\alpha^N - 1}{\alpha - 1}. \tag{2}$$

В общем случае полная длина участка L состоит из длины участка со сгущением L_1 и участка равномерной сетки. Обозначим длину участка равномерной сетки δL, ее шаг d_3, а число таких шагов N_3. Тогда справедливы соотношения:

$$\delta L = L - L_1 = d_3N_3, \tag{3}$$

$$N_3 = \frac{\delta L}{d_3}. \tag{4}$$

Заметим, что число шагов N_3, вычисляемое по формуле (4), практически никогда не бывает целым, если взять $d_3 = d_k$. Поэтому алгоритм вычисления параметров сетки несколько усложняется:

1. Из формулы (1) находим число шагов неравномерной сетки, требующееся, чтобы шаг изменился от d_n к d_k:

$$N_1 = 1 + \frac{(\ln d_k/d_n)}{\ln\alpha}. \tag{5}$$

От получившейся величины берем целую часть.

2. Вычисляем длину, на которой происходит это сгущение по формуле (2), в которой вместо N подставляем N_1.
3. Определяем число шагов равномерной сетки:

$$N_3 = (L - L_1)/d_k. \tag{6}$$

Заметим, что при заданных величинах d_n, d_k, α, L выполнить соотношение (3) можно только при нецелых N_3. Выходом из сложившейся ситуации может служить или изменение величины шага d_n или изменение величины коэффициента сгущения α. Первый путь оказывается значительно проще, поэтому мы осуществим именно его.

Мы отказываемся от идеи точной стыковки с соседними участками сетки. Вместо этого мы делаем d_n изменяемой величиной и находим его, считая, что α фиксировано, а N_1, N_3 уже найдены по формулам (5) и (6) (взяты целые значения):

$$L = L_1 + \delta L = d_n\left(\frac{\alpha^{N_1} - 1}{\alpha - 1} + N_3\alpha^{N_1-1}\right).$$

Отсюда получаем искомое значение d_n:

$$d_n = L\Big/\left[\frac{\alpha^{N_1} - 1}{\alpha - 1} + N_3\alpha^{N_1-1}\right]. \tag{7}$$

При точной стыковке мы имели бы на каждом участке стыковки по две ячейки с одинаковым шагом. При рассматриваемом нами подходе изменение шага (относительно соседнего участка) начинается уже с первой ячейки сетки.

Полная длина рассматриваемого участка L и длина участка сгущения L_1 могут состоять в следующих соотношениях:

1. Полная длина участка сгущения меньше полной длины участка сетки $L_1 < L$.
2. Полная длина участка сгущения равна полной длины участка сетки $L_1 = L$.
3. Полная длина участка сгущения больше полной длины участка сетки $L_1 > L$.

Рассмотрим эти случаи.

1.Первый случай мы уже рассмотрели выше.

2. Второму случаю соответствует равенство $N_3 = 0$, т.е. участок сгущения точно стыкуется с предыдущим и последующим участками сетки без дополнительного (переходного) слоя с однородной сеткой. Понятно, что этот случай практически невероятен.
3. Третий случай означает, что конечный шаг d_k

не достигается на длине участка сетки L. Для определения N_1 мы можем использовать только уравнение (2), в котором вместо L_1 подставлено L. Из этого уравнения получаем:

$$N_1 = \ln\left[1+(\alpha-1)\frac{L}{d_n}\right] / \ln\alpha. \qquad (8)$$

В качестве N_1 берем целую часть от полученного значения и находим новое значение начального шага d_n:

$$d_n = \frac{L(\alpha-1)}{\alpha^{N_1}-1}. \qquad (9)$$

4. ПРОЕКТИРОВАНИЕ УЧАСТКА СЕТКИ СО СГУЩЕНИЕМ К ОБОИМ ЕЕ КОНЦАМ

Существует некоторая область длиной L, которую требуется покрыть неравномерной сеткой со сгущением к ее краям. При этом на краях сетки шаг должен быть d_1 и d_2 (эти условия обеспечивают сшивку сетки на краях с соседними участками), а в середине области шаг сетки не должен превосходить d. Примером такой области может быть область между двумя диафрагмами. На обеих диафрагмах следует установить сгущение сетки с начальным шагом, определяемым из значения толщины соответствующей диафрагмы (например, 1/5 от толщины). Ясно, что идеальной стыковки (точного совпадения) при фиксированных значениях параметров L, d_1, d_2, d_3, α получить практически невозможно.

Рассмотрим одну из возможных ситуаций $L > L_1 + L_2$, т.е. на длине участка сетки умещаются две области сгущения сетки и между ними оказывается некоторый зазор, в котором можно разместить участок равномерной сетки.

Справедливы следующие равенства:

$$L_1 = d_1\frac{\alpha^{N_1}-1}{\alpha-1},$$

$$L_2 = d_2\frac{\alpha^{N_2}-1}{\alpha-1},$$

$$d = d_1\alpha^{N_1-1} = d_2\alpha^{N_2-1},$$

$$L = L_1 + L_2 + dN_3. \qquad (10)$$

Вполне очевидно, что все равенства системы (10) могут удовлетворяться только при нецелых значениях N_3. Найдем N_1, N_2 из третьего уравнения системы (10), предположив, что d_1, d_2, d являются заданными параметрами

$$N_1 = 1+\ln(d/d_1)/\ln\alpha,$$

$$N_2 = 1+\ln(d/d_2)/\ln\alpha. \qquad (11)$$

Берем для величин N_1, N_2 целые части от полученных значений и далее вычисляем размеры областей сгущения:

$$L_1 = d_1\frac{\alpha^{N_1-1}}{\alpha-1},$$

$$L_2 = d_2\frac{\alpha^{N_2-1}}{\alpha-1},$$

Из последнего уравнения системы (10) находим N_3

$$N_3 = \frac{L-L_1-L_2}{d}.$$

Также берем целую часть от полученного значения. Теперь, когда число шагов на каждом участке выбрано, находим такое d, чтобы выполнялось последнее уравнение системы (10):

$$L = \frac{d}{\alpha^{N_1-1}}\frac{\alpha^{N_1}-1}{\alpha-1} + \frac{d}{\alpha^{N_2-1}}\frac{\alpha^{N_2}-1}{\alpha-1} + dN_3. \qquad (12)$$

Отсюда получаем

$$d = L\bigg/\left[N_3 + \frac{1}{\alpha^{N_1-1}}\frac{\alpha^{N_1}-1}{\alpha-1} + \frac{1}{\alpha^{N_2}}\frac{\alpha^{N_2}-1}{\alpha-1}\right].$$

После этого находим начальные шаги в областях со сгущением

$$d_1 = \frac{d}{\alpha^{N_1-1}},$$

$$d_2 = \frac{d}{\alpha^{N_2-1}}. \qquad (13)$$

Теперь все величины определены.

В результате мы получаем алгоритм, в котором α фиксировано, а шаги сетки на концах уже не стыкуются соответственно, с шагами на предыдущем и последующем участках сетки. Но отличие этих шагов от соответствующих шагов на предыдущем и последующем участках сетки не велико.

В этом алгоритме присутствует особенность, связанная с поведением (величиной) N_3:

1. $N_3 \geq 1$ мы уже рассмотрели выше.

2. $N_3 = 0$, т.е. между двумя участками сетки со сгущением нет места для участка однородной сетки. Это приводит к тому, что в соотношении (12) исчезает член, соответствующий области с постоянным шагом:

$$L = \frac{d}{\alpha^{N_1-1}}\frac{\alpha^{N_1}-1}{\alpha-1} + \frac{d}{\alpha^{N_2-1}}\frac{\alpha^{N_2}-1}{\alpha-1}.$$

Отсюда получаем для шага, с которым стыкуются участки со сгущением

$$d = L(\alpha-1)\bigg/\left[\frac{\alpha^{N_1}-1}{\alpha^{N_1-1}} + \frac{\alpha^{N_2}-1}{\alpha^{N_2-1}}\right].$$

нородных сеток были реализованы в пакете прикладных программ "SHIFT" [7]

ЛИТЕРАТУРА

1. *Иванов В.Я.* Методы автоматизированного проектирования приборов электроники. 1986. Новосибирск: Изд. СО АН СССР. 193 с.
2. *Ильин В.П.* Численные методы решения задач электрофизики. 1985. М.: Наука. 336 с.
3. *Шевченко С.И.* // Научное приборостроение. 1996. Т.6, № 1–2. С.44–53.
4. *Шевченко С.И.* // Научное приборостроение. 1997. Т. 7, № 12. С.45–53.
5. *Шевченко С.И.* // Научное приборостроение. 1998. Т. 8, № 1–2. С.2126.
6. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы функций комплексного переменного. 1973. М.: Наука. 736 с.
7. *Шевченко С.И.* Пакет прикладных программ "Shift" для решения уравнений Лапласа и Пуассона. // Материалы Всес. Семинара "Методы расчета электронно-оптических систем". 1992. АлмаАта. С.11.

ON SOME PROBLEMS OF DESIGN OF NON-INIFORM GRIDS TO CALCULATE CHARGED PARTICLE PATHS IN ELECTRON- AND ION-OPTICAL INSTRUMENTS

S.I.Shevchenko

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The reasons of accuracy losses in the calculations of charged particle path in electron and ion-optical instruments are considered. Algorithms for the non-uniform grid design are given, that take into account those reasons and reduce their contribution to the trajectory calculation error.