

УДК 519.632; 518.517

Программный комплекс "Focus Planar System" для моделирования планарных электронно- и ионно-оптических систем

В. И. Астахов, А. А. Дягилев, А. А. Трубицын

В работе развита методика численного моделирования планарных электронно- и ионно-оптических систем с практически произвольной конфигурацией электродов, предложены алгоритмы и методы обеспечения высокой точности вычислений функции распределения и градиента потенциала методом граничных элементов. На базе данных методов создано программное обеспечение для траекторного анализа систем электронной оптики, проведены исследование погрешностей вычислений и детальное тестирование на модельных схемах.

PACS: 11.10.-z; 41.20.Cv

Ключевые слова: моделирование, ЭОС, метод граничных элементов, задача Дирихле.

Введение

Практика современного эксперимента требует предельно точных оценок выходных параметров проектируемых устройств. Положительное решение указанной проблемы во многом определяется состоянием и возможностями соответствующих математических методов. В электронной оптике, являющейся базой аналитического приборостроения, на передний план выдвинулась проблема численного анализа электрических полей в системах со сложной конфигурацией электродов. На данный момент одним из наиболее продвинутых численных методов решения задач теории потенциала является метод граничных элементов. При этом решение внешней задачи Дирихле, в отличие от внутренней, позволяет прогнозировать параметры схем, максимально приближенных к реальным устройствам. Широкий класс электронно-оптических систем (ЭОС) на этапе проектирования с высокой степенью достоверности может быть описан в рамках двумерных моделей.

Формализация метода граничных элементов

Решение задачи Дирихле состоит в отыскании потенциала $u(\xi)$ в области Ω ($\xi \in \Omega$) при заданном

распределении потенциала на границе области Γ (рис. 1). В случае внешней задачи Дирихле граница Γ исследуемой области представляется совокупностью замкнутых контуров (электродов реальной толщины и конфигурации), на каждом из которых фиксируется потенциал.

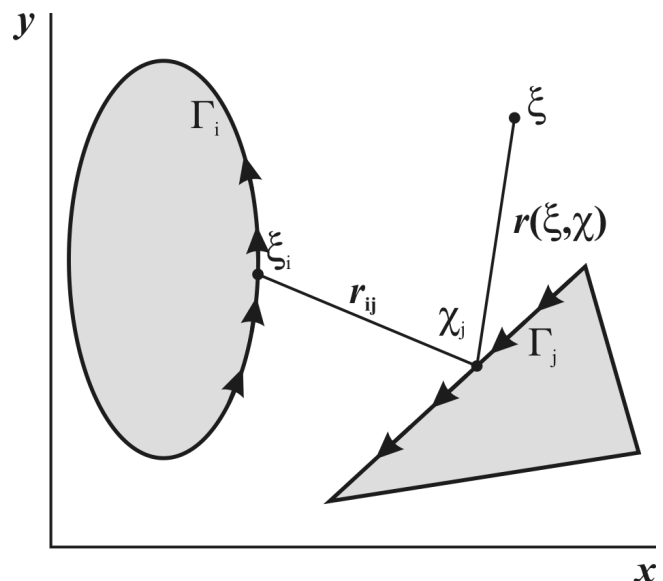


Рис. 1. Представление границы области совокупностью замкнутых контуров и разбиение ее на граничные элементы

Получаемые интегральные соотношения базируются на второй формуле Грина [1], позволяющей формализовать внешнюю плоскую задачу Дирихле в случае отсутствия объемных зарядов следующим образом:

$$\begin{aligned} \gamma(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(\chi)Q^*(\xi, \chi)d\Gamma(\chi) = \\ = \int_{\Gamma} q(\chi)U^*(\xi, \chi)d\Gamma(\chi), \end{aligned} \quad (1)$$

Астахов Владимир Игоревич, аспирант.
Дягилев Александр Александрович, старший преподаватель.
Трубицын Андрей Афанасьевич, профессор.
Рязанский государственный радиотехнический университет.
Россия, 390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.
Тел.: 8 (906) 547-04-76.
E-mail: VIAstakhov@tnk-bp.ru; assur@bk.ru

Статья поступила в редакцию 15 октября 2009 г.

где $Q^*(\xi, \chi) = \partial U^* / \partial n$, $q(\chi) = du(\chi) / dn$, $\xi \in \Omega \cup \Gamma$, функция $\gamma(\xi) = 2\pi$ для $\xi \in \Omega$ и определяется в общем случае конфигурацией границы в точке ξ для $\xi \in \Gamma$. Здесь n — модуль внешней нормали к границе, U^* — фундаментальное решение уравнения Лапласа.

Физически уравнение (1) интерпретируется как комбинация двойного (первый интеграл) и простого (второй интеграл) заряженных слоев.

Преимущество такой формулировки задачи по сравнению с формулировкой на базе потенциала простого слоя заключается в значительном ослаблении требований к гладкости границы [2], что на практике приводит к отсутствию необходимости борьбы с особенностями плотности заряда на изломах граничного контура.

Фундаментальное решение в двумерном случае представляется натуральным логарифмом от расстояния между точками ξ и χ (см. рис. 1)

$$U^*(\xi, \chi) = -\ln r(\xi, \chi) = -\frac{1}{2} \ln \left([x(\chi) - x(\xi)]^2 + [y(\chi) - y(\xi)]^2 \right).$$

Производная фундаментального решения $Q^*(\xi, \chi) = \frac{dU^*(\xi, \chi)}{dn}$ по внешней нормали $\vec{n}(n_x, n_y)$ к границе Γ определяется последовательностью следующих формул:

$$\begin{aligned} \frac{dU^*(\xi, \chi)}{dn} &= \text{grad} U^* \cdot \vec{n}; \\ \text{grad} U^* &= \frac{\partial U^*}{\partial x(\chi)} \vec{i} + \frac{\partial U^*}{\partial y(\chi)} \vec{j}; \\ \vec{n} &= n_x \vec{i} + n_y \vec{j}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\frac{\partial U^*}{\partial x} = -\frac{x(\chi) - x(\xi)}{r^2(\xi, \chi)}$, $\frac{\partial U^*}{\partial y} = -\frac{y(\chi) - y(\xi)}{r^2(\xi, \chi)}$.

Для численного решения задачи Дирихле уравнению (1) придается дискретная форма, для чего граница Γ разбивается на N граничных элементов Γ_j (см. рис. 1). С учетом постоянства потенциала на каждом контуре (электроде) и при предположении постоянства нормальной производной потенциала на каждом граничном элементе уравнение записывается в виде

$$\gamma u(\xi) + \sum_{j=1}^N u_j H_j(\xi) = \sum_{j=1}^N q_j F_j(\xi). \quad (3)$$

Для случая аппроксимации границы Γ отрезками прямых линий (векторами $\vec{\Gamma}_j$) формулы вычисления функций $F_j(\xi)$ и $H_j(\xi)$ приобретают вид:

$$F_j(\xi) = \Delta \chi_j \int_0^1 U^*(\xi, \Delta \chi_j \tau + \chi_j) d\tau = \Delta \chi_j \int_0^1 U_j^*(\xi, \tau) d\tau, \quad (4)$$

$$H_j(\xi) = \Delta \chi_j \int_0^1 Q^*(\xi, \Delta \chi_j \tau + \chi_j) d\tau = \Delta \chi_j \int_0^1 Q_j^*(\xi, \tau) d\tau, \quad (5)$$

где для удобства вычислений введена нормированная координата $\tau \in [0, 1]$. Здесь $\Delta \chi_j$ — длина прямолинейного граничного элемента Γ_j ; χ_j — положение начала граничного j -го элемента на контуре электрода.

Ниже будет показано, что указанные интегралы для двумерного случая имеют аналитическое выражение, в отличие, например, от аксиально-симметричных задач, где для их оценки используют квадратуры Гаусса [3].

Вычисление регулярного интеграла $F_j(\xi)$

Декартовы координаты для внутренних точек j -го граничного элемента через нормированную координату τ интегрирования могут быть выражены как

$$x_j(\tau) = a_j \tau + b_j, \quad y_j(\tau) = c_j \tau + d_j, \quad (6)$$

где $a_j = \cos(\phi_j) \Delta \chi_j$;
 $c_j = \sin(\phi_j) \Delta \chi_j$;
 b_j и d_j есть x - и y -координаты начала элемента Γ_j ;
 ϕ_j — угол его наклона к оси x .
 В таком случае имеем:

$$\begin{aligned} U_j^*(\xi, \tau) &= -\frac{1}{2} \ln \left([x_j(\tau) - x(\xi)]^2 + [y_j(\tau) - y(\xi)]^2 \right) = \\ &= -\frac{1}{2} \ln [T_j \tau^2 - 2D_j(\xi) \tau + P_j(\xi)], \end{aligned}$$

где $T_j = a_j^2 + c_j^2$; $D_j(\xi) = a_j [x(\xi) - b_j]$;

$$P_j(\xi) = [x(\xi) - b_j]^2 + [y(\xi) - d_j]^2.$$

Интегрирование функции $U_j^*(\xi, \tau)$ по τ (см. (4)) дает выражение для $F_j(\xi)$

$$F_j(\xi) = \Delta \chi_j \times \left\{ 0,5 \left[\left(\frac{D_j(\xi)}{T_j} - 1 \right) \ln (T_j - 2D_j(\xi) + P_j(\xi)) - \frac{D_j(\xi)}{T_j} \ln P_j(\xi) \right] - \left[-\frac{Z_j(\xi)}{T_j} \left[\arctg \frac{D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} + \arctg \frac{T_j - D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \right] + 1 \right] \right\}, \quad (7)$$

где $Z_j(\xi) = \sqrt{T_j P_j(\xi) - D_j^2(\xi)}$.

Вычисление регулярного интеграла $H_j(\xi)$

С учетом выражений (2) и (6) нормальная производная фундаментального решения может быть записана в виде

$$Q_j^*(\xi, \tau) = \frac{dU_j^*}{dn} = -\frac{(a_j n_x + c_j n_y)\tau + [b_j - x(\xi)]n_x + [d_j - y(\xi)]n_y}{T_j \tau^2 - 2D_j(\xi)\tau + P_j(\xi)}.$$

Поскольку сумма $(a_j n_x + c_j n_y)$ представляет собой скалярное произведение в координатной форме двух взаимно перпендикулярных векторов — граничного элемента $\vec{\Gamma}_j(a_j, c_j)$ и его нормали $\vec{n}_j(n_x, n_y)$ — и равняется нулю, то интегрирование нормальной производной Q_j^* дает следующее выражение для вычисления интеграла $H_j(\xi)$

$$H_j(\xi) = \Delta\chi_j G_j(\xi) \int_0^1 \frac{d\tau}{T_j \tau^2 - 2D_j(\xi)\tau + P_j(\xi)} = \Delta\chi_j \frac{G_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \left[\operatorname{arctg} \frac{D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} + \operatorname{arctg} \frac{T_j - D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \right], \quad (8)$$

где $G_j(\xi) = [x(\xi) - b_j]n_x + [y(\xi) - d_j]n_y$.

Вычисление функции распределения потенциала

Вычисление электростатического поля проводится в два этапа. Сначала с помощью уравнения (3) рассчитывается неизвестный вектор q_j по известному граничному распределению потенциала ($\xi \in \Gamma$), т. е. решается "обратная" задача. Затем используются найденные значения q_j и заданные u_j для определения из уравнения (3) функции $u(\xi)$, $\xi \in \Omega$, т. е. решается "прямая" задача.

Для решения **обратной задачи** используется метод коллокаций, согласно которому точки ξ_i определяются в середине ($\xi_i = 1/2$) каждого *прямолинейного* (тогда $\gamma(\xi) = \pi$) элемента Γ_i и для всей N -совокупности точек ξ_i записывается система N уравнений (3)

$$\pi u(\xi_i) + \sum_{j=1}^N u_j H_{ij} = \sum_{j=1}^N q_j F_{ij}, \quad i=1, 2, \dots, N, \quad (9)$$

где $H_{ij} = H_j(\xi_i)$, $F_{ij} = F_j(\xi_i)$.

Однако здесь возникает присущая интегральным методам теории потенциала проблема сингулярности подынтегральных функций. Интегралы (4), (5) с сингулярными ядрами имеют место при $i=j$, т. е. в том случае, когда интегрирование проводится по элементу Γ_j (назовем его сингулярным), содержащему текущий узел коллокации ξ_i .

Вычисление H_{ii} . Поскольку для сингулярных плоских граничных элементов в трехмерных задачах или для сингулярных прямолинейных элемен-

тов в двумерных задачах $\operatorname{grad}U^*(\xi, \chi) \perp \vec{n}$, то $Q^*(\xi, \chi) = \partial U^*/\partial n = \operatorname{grad}U^*(\xi, \chi) \cdot \vec{n} = 0$. Откуда для внутренней задачи Дирихле $H_{ii} = 0$ [4]. Вследствие скачка потенциала двойного слоя при пересечении границы области изнутри наружу [1] будем иметь следующее значение интеграла H_{ii} для внешней задачи:

$$H_{ii} = 2\pi. \quad (10)$$

Вычисление F_{ii} . С учетом значения $\xi_i = 1/2$ и выражений (6) для координат точек i -го граничного элемента сингулярное фундаментальное решение может быть преобразовано к следующему виду:

$$U_i^*(\xi_i, \tau) = U_{ii}^*(\tau) = -\ln \sqrt{[x_i(\tau) - x(\xi_i)]^2 + [y_i(\tau) - y(\xi_i)]^2} = -\ln \sqrt{[a_i(\tau - 1/2)]^2 + [c_i(\tau - 1/2)]^2} = -\ln(|\tau - 1/2| \sqrt{T_i}).$$

Полученное выражение позволяет получить окончательную формулу для вычисления интеграла (4) по сингулярному граничному элементу

$$F_{ii} = -\Delta\chi_i \int_0^1 U_{ii}^*(\tau) d\tau = \Delta\chi_i \left(1 + \ln \frac{2}{\sqrt{T_i}} \right). \quad (11)$$

Таким образом, решение q_j обратной задачи в соответствии с уравнением (9) может быть получено из системы линейных уравнений

$$b_i = F_{ij} q_j,$$

где $b_i = \sum_{j=1}^N H_{ij}^* u_j$, $i, j = 1, 2, \dots, N$; $H_{ij}^* = H_{ij}$ и вычисляется по формуле (8) для $i \neq j$; $H_{ii}^* = \pi + H_{ii} = 3\pi$; F_{ij} вычисляется по формуле (7) для $i \neq j$ и по формуле (11) — для $i = j$.

Для решения **прямой задачи** используется очевидная формула (см. уравнение (3))

$$u(\xi) = \frac{1}{2\pi} \left[\sum_{j=1}^N u_j H_j(\xi) - \sum_{j=1}^N q_j F_j(\xi) \right], \quad \xi \in \Omega. \quad (12)$$

Расчет напряженности поля

Решение большого количества задач электронной оптики, например траекторный анализ, требует знания градиента потенциала, который стандартно определяется по формулам численного дифференцирования, имеющим существенные ограничения на точность вычислений.

В случае плоского электрического поля метод граничных элементов позволяет получить аналитические выражения (конечные ряды) для составляющих градиента E_x и E_y (см. уравнение (12)):

$$E_x = \frac{\partial u(\xi)}{\partial x} = \frac{1}{2\pi} \left[\sum_{j=1}^N q_j \frac{\partial F_j(\xi)}{\partial x} - \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial H_j(\xi)}{\partial x} \right],$$

$$E_y = \frac{\partial u(\xi)}{\partial y} = \frac{1}{2\pi} \left[\sum_{j=1}^N q_j \frac{\partial F_j(\xi)}{\partial y} - \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial H_j(\xi)}{\partial y} \right].$$

При этом входящие под знаки сумм производные $\frac{\partial H_j(\xi)}{\partial x}$, $\frac{\partial H_j(\xi)}{\partial y}$, $\frac{\partial F_j(\xi)}{\partial x}$ и $\frac{\partial F_j(\xi)}{\partial y}$ вычисляются по формулам

$$\frac{\partial H_j(\xi)}{\partial x} = \frac{n_x \cdot Z_j^2(\xi) - G_j(\xi) \cdot V_{xy}(\xi)}{Z_j(\xi)} \times \left[\arctg \frac{D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} + \arctg \frac{T_j - D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \right] + G_j(\xi) \cdot W_{xy}(\xi);$$

$$\frac{\partial H_j(\xi)}{\partial y} = \frac{n_y \cdot Z_j^2(\xi) - G_j(\xi) \cdot V_{xy}(\xi)}{Z_j(\xi)} \times \left[\arctg \frac{D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} + \arctg \frac{T_j - D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \right] + G_j(\xi) \cdot W_{xy}(\xi);$$

$$\frac{\partial F_j(\xi)}{\partial x} = \frac{1}{2} a_j \ln \frac{S_j(\xi)}{P_j(\xi)} - \frac{[T_j - D_j(\xi)][x(\xi) - b_j - a_j]}{S_j(\xi)} - \frac{V_{xy}(\xi)}{Z_j(\xi)} \left[\arctg \frac{D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} + \arctg \frac{T_j - D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \right] - \frac{D_j(\xi)[x(\xi) - b_j]}{P_j(\xi)} - W_{xy}(\xi);$$

$$\frac{\partial F_j(\xi)}{\partial y} = \frac{1}{2} c_j \ln \frac{S_j(\xi)}{P_j(\xi)} - \frac{[T_j - D_j(\xi)][y(\xi) - d_j - c_j]}{S_j(\xi)} - \frac{V_{xy}(\xi)}{Z_j(\xi)} \left[\arctg \frac{D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} + \arctg \frac{T_j - D_j(\xi)}{Z_j(\xi)} \right] - \frac{D_j(\xi)[y(\xi) - d_j]}{P_j(\xi)} - W_{xy}(\xi);$$

где $S_j(\xi) = P_j(\xi) - 2D_j(\xi) + T_j = [x(\xi) - b_j - a_j]^2 + [y(\xi) - d_j - c_j]^2;$

$$V_{xy}(\xi) = T_j [x(\xi) - b_j] - a_j D_j(\xi);$$

$$V_{xy}(\xi) = T_j [y(\xi) - d_j] - c_j D_j(\xi);$$

$$W_{xy}(\xi) = \frac{1}{T_j} \left[\frac{a_j Z_j^2(\xi) - D_j(\xi) V_{xy}(\xi)}{P_j(\xi)} - \frac{a_j Z_j^2(\xi) + [T_j - D_j(\xi)] V_{xy}(\xi)}{S_j(\xi)} \right];$$

$$W_{xy}(\xi) = \frac{1}{T_j} \left[\frac{c_j Z_j^2(\xi) - D_j(\xi) V_{xy}(\xi)}{P_j(\xi)} - \frac{c_j Z_j^2(\xi) + [T_j - D_j(\xi)] V_{xy}(\xi)}{S_j(\xi)} \right].$$

Тестирование методики решения полевой задачи

На базе рассмотренных формализованных алгоритмов решения внешней плоской задачи Дирихле методом граничных элементов разработан модуль расчета электростатических полей, являющийся ядром авторского программного комплекса "Focus Planar System" по моделированию планарных систем электронной и ионной оптики. Тестирование предложенной методики на модельных задачах позволило сделать следующие заключения:

- гарантирования точность вычисления потенциала и напряженности поля составляет $\sim 10^{-4} - 10^{-3} \%$;
- для ЭОС с прямолинейными сечениями электродов погрешность вычислений в пределе лимитирована лишь ошибками округления (см. рис. 2);

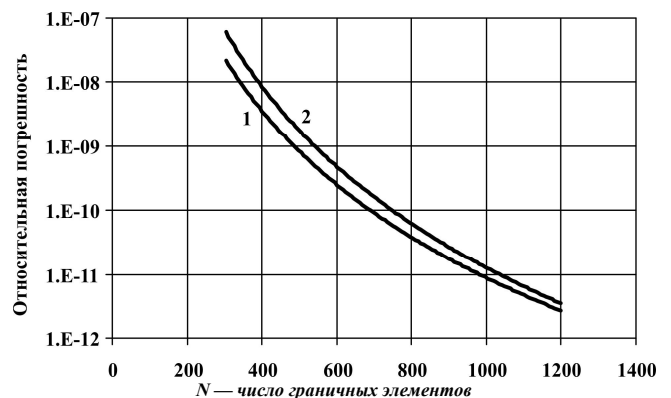


Рис. 2. Зависимость относительной погрешности вычисления потенциала (кривая 1) и напряженности электрического поля (кривая 2) от числа граничных элементов (N) в центральной точке плоского конденсатора с отношением расстояния между пластинами к их длине 1:20, рассчитанным методом граничных элементов

- для ЭОС с криволинейными электродами погрешность расчетов определяется точностью аппроксимации границы прямолинейными отрезка-

ми и не превышает в описываемой программной реализации $\sim 10^{-3}$ % (см. рис. 3).

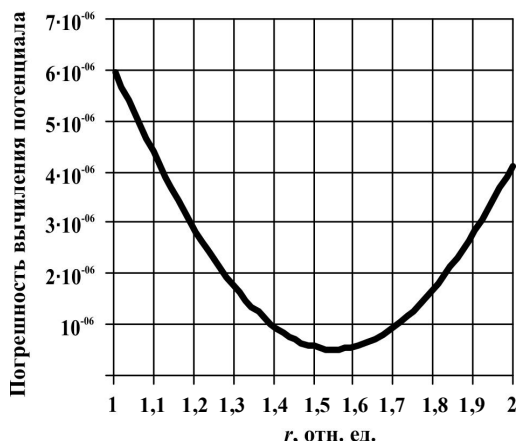


Рис. 3. Радиальная зависимость относительной погрешности вычисления потенциала в цилиндрическом конденсаторе

Траекторный анализ и анализ фокусирующих свойств электронно-оптических систем

Для расчета траектории движения заряженных частиц в программе "Focus Planar System" используется алгоритм Рунге-Кутты-Фельберга [5], который адаптирован к решению систем трехмерных уравнений движения в переменных электромагнитных полях общего вида. При этом обеспечивается контроль задаваемой точности вычислений за счет автоматического изменения шага интегрирования на участках траектории с различной степенью гладкости.

В качестве примера на рис. 4 представлены результаты траекторного анализа времяпролетного масс-анализатора с дискретно-линейным граничным распределением потенциалом и высокочастотным синусоидальным питающим напряжением.

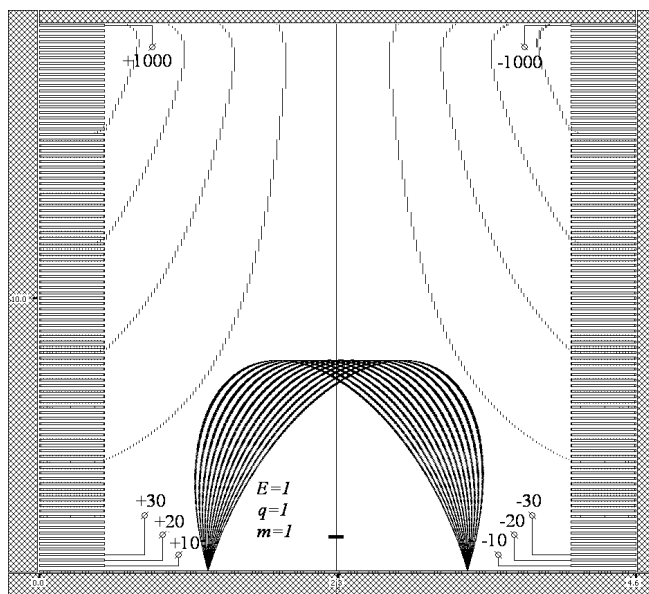


Рис. 4. Траектории ионов с различными начальными углами в динамическом масс-анализаторе. Заряд иона $q = 1$, масса $m = 1$, начальная энергия $E = 1$

В целях повышения информативности визуализируемых данных траекторного анализа средствами среды 3D OpenGL разработан и интегрирован в программу модуль трехмерного отображения информации (рис. 5).

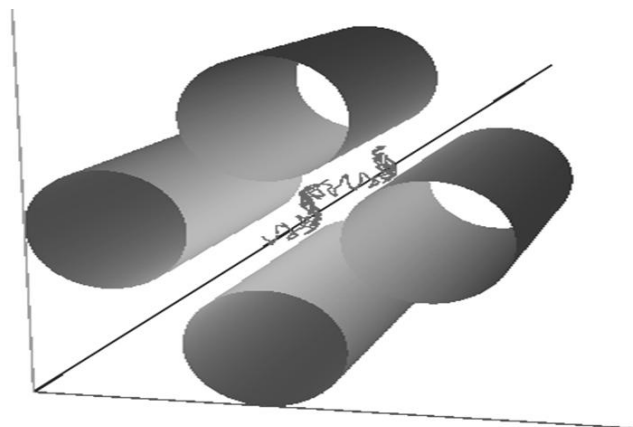


Рис. 5. Траектория иона в квадрупольном фильтре масс

В программе реализованы методы поиска условий угловой [6], пространственной [7] и времяпролетной [8] фокусировок высших (второго и более) порядков, базирующиеся на оценке корреляции некоторой функции, описывающей связь входных и выходных параметров траекторного анализа и степенной по отношению к начальному углу или координате функции.

Модули миграции данных

В представляемом программном комплексе "Focus Planar System" предусмотрены возможности импорта и экспорта файлов описания электродных систем, что обеспечивает совместимость с САПР SIMION (рис. 6, а), и миграции данных (электродная система, траектории частиц) из "Focus Planar System" в САПР AutoCAD с помощью COM-интерфейсов (см. рис. 6, б).

Заключение

Создан программный комплекс по моделированию в условиях максимального приближения проектируемых конструкций к реальным и высокой надежности прогнозирования параметров планарных электронно-оптических систем с практически произвольной конфигурацией электродов.

Разработанное программное обеспечение "Focus Planar System" обеспечивает широкий набор пользовательских функций и ориентировано на решение исследовательских задач в области разработки физико-аналитического оборудования.

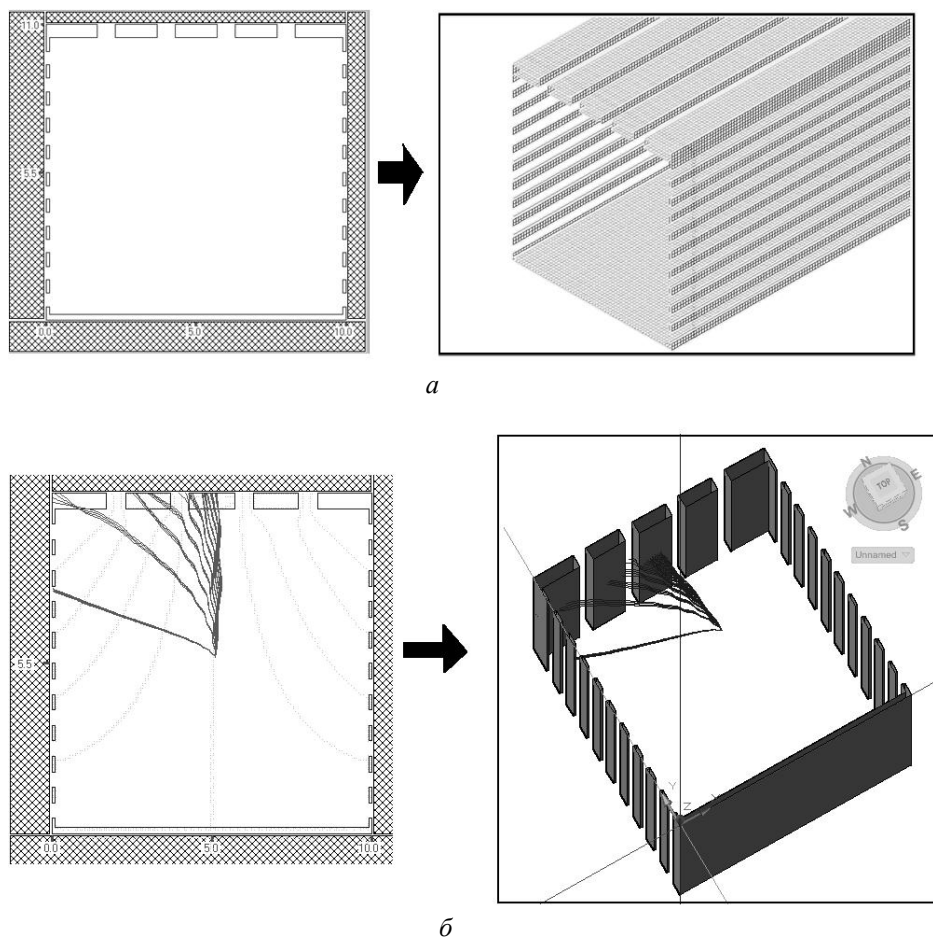


Рис. 6. Экспорт электродной системы из "Focus Planar System" в "SIMION" (а); миграция результатов моделирования ЭОС из "Focus Planar System" в "AutoCAD" (б)

Л и т е р а т у р а

1. Арсенин В. Я. Методы математической физики и специальные функции. — М.: Наука, 1974.
2. Бреббия К., Телес Ж., Вроубель Л. Методы граничных элементов. — М.: Мир, 1987.
3. Трубицын А. А. Программа "Фокус" моделирования аксиально-симметричных электронно-оптических систем: алгоритмы и характеристики // Прикладная физика. 2008. № 2. С. 56.
4. Власова Е. А., Зарубин В. С, Кувыркин Г. Н. Приближенные методы математической физики: Учеб. для вузов. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001.
5. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. — М.: Мир, 1980. С. 277.
6. Трубицын А. А. Корреляционный метод поиска угловой фокусировки высших порядков // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 5. С. 126.
7. Скунцев А. А., Трубицын А. А. Численный метод поиска условий пространственной фокусировки высших порядков // Вестник РГРТУ. — Рязань, РИЦ РГРТУ. 2009. № 4. Вып. 30. С. 40.
8. Trubitsyn A. A., Astakhov V. I., Grachev E. Yu. The numerical technique of conditions search of high order time-of-flight focusing // Abstracts of CPO-8 — 8th International Conference in Charged Particle Optics. — Singapore, 2010 (will be published).

The software application "Focus Planar System" for modeling of planar electron- and ion-optical systems

V. I. Astakhov, A. A. Dyagilev, A. A. Trubitsyn
 Ryazan State Radio Engineering University, 59/1 Gagarin str., Ryazan, 390005, Russia
 E-mail: rgrta@rgrta.ryazan.ru

We developed methods of numerical simulation of planar electron- and ion-optical systems with nearly arbitrary configuration of electrodes, the algorithms and methods for high precision calcula-

tions assuring the distribution and gradient of the potential boundary element method are proposed. On the basis of these methods, the software for trajectory analysis of electron-optical systems has been created. The study of accuracy and errors of calculation has been made. Detailed testing of the model schemes comes into play.

PACS: 11.10.-z; 41.20.Cv

Keywords: modeling, EOS, boundary element method, problem of Dirihle.

Bibliography – 8 references.

Received October 15, 2009

* * *