

*The peculiarity of the numeric simulation of the thermoemission electron guns consists in the principal necessity of taking into account the contribution of the electrons' charge into the potential distribution in the beam formation region. This fact makes the mathematical model essentially nonlinear especially in the high-perveance operation mode. Moreover, the charge density is extremely high in the vicinity of emitting surfaces, rising infinitely in the limit of zero initial velocities. A special semi-analytical approach has been applied to deal with the charge singularity. Being combined with traditional finite-element numerical techniques, this approach provides an efficient way to simulate thermoemission electron guns.*

УДК 537.533

## Методы возмущений в задачах вычислительной оптики заряженных частиц

Д. Э. Гринфельд

ФГУП "Научно-производственное объединение "Орион" — Государственный научный центр РФ, Москва, Россия

М. А. Монастырский, В. А. Тарасов

Институт общей физики РАН им. А. М. Прохорова, Москва

*На основе теории возмущений рассмотрены решения ряда важных проблем вычислительной оптики заряженных частиц. Среди них вычисление возмущений электрических и магнитных полей, вызванных малыми отклонениями формы электродов или магнитных полюсов от вращательной или планарной симметрии, включая краевые эффекты. В общем тензорном виде рассмотрен абберрационный анализ пучков заряженных частиц. Показано, что методы теории возмущений в сочетании с другими численными подходами, такими как метод тау-вариаций и обобщенный метод варьирования начальных параметров, оказываются эффективными в задачах расчета механических допусков, а также моделирования кулоновского расталкивания и рассеяния частиц на сетках.*

Общая постановка задачи расчета возмущений потенциала.

Интегральные уравнения в вариациях

Задача расчета возмущений потенциала, обусловленных малыми отклонениями размеров и потенциалов граничных электродов от номинальных, занимает важное место в вычислительной оптике заряженных частиц. Указанная проблема является ключевой для абберрационного анализа траекторий, расчета допусков корпускулярно-оптических приборов, оптимизации и синтеза электронных линз и т. д.

Ограничимся для простоты случаем потенциальной краевой задачи и сформулируем ее как задачу Дирихле для уравнения Лапласа

$$\Delta\varphi_P = 0; \quad P \in \Omega; \quad \varphi|_{\Gamma} = U_Q; \quad Q \in \Gamma \quad (1)$$

в области  $\Omega$  с границей  $\Gamma$  (рис. 1).

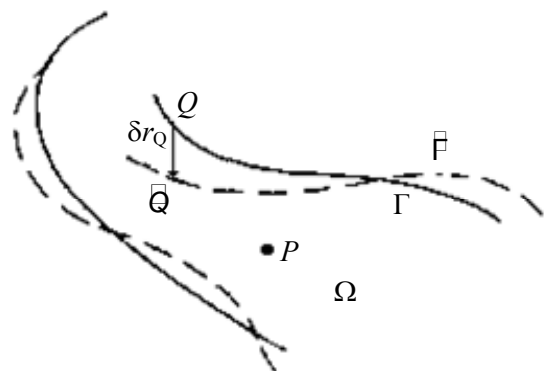


Рис. 1. К формулировке проблемы возмущений границы

Область  $\Omega$  может быть неограниченной и иметь границу  $\Gamma$  в виде конечного множества связанных компонент  $\Gamma_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , так, что  $\Gamma = \bigcup \Gamma_i$ . В случае неограниченности области  $\Omega$  краевая задача (1) должна быть дополнена условием на бесконечности  $\varphi_P \rightarrow \infty$  при  $P \rightarrow \infty$ .

Будем считать, что граница  $\Gamma$  области  $\Omega$  может быть задана кусочно-гладкой вектор-функцией  $\vec{r}(u, v)$ , определенной в плоской области  $D$  параметров  $\{u, v\}$ ,

которые будем рассматривать как криволинейные лагранжевы координаты на  $\Gamma$ . Предположим также, что граничное распределение потенциала  $U_P(u, v)$ ,  $P \in \Gamma$  является ограниченной измеримой функцией в области  $D$ .

Рассмотрим класс достаточно гладких (на каждой связной компоненте  $\Gamma_i$ ) граничных возмущений  $\{\delta\vec{r}_Q, \delta U_Q\}$ , соответствующих смещению точки  $Q(u, v) \in \Gamma$  на малый вектор  $\delta\vec{r}_Q(u, v)$  таким образом, что радиус-вектор, принадлежащий возмущенной поверхности  $\tilde{\Gamma}$  произвольной точки  $\tilde{Q}$ , может быть представлен как

$$\tilde{r}_{\tilde{Q}}(u, v) = \vec{r}_Q(u, v) + \delta\vec{r}_Q(u, v); \quad (u, v \in D) \quad (2)$$

с граничным потенциалом в точке  $\tilde{Q}$

$$\tilde{U}_{\tilde{Q}}(u, v) = U_Q(u, v) + \delta U_Q(u, v); \quad (u, v \in D). \quad (3)$$

Мы "погрузили" исходную невозмущенную краевую задачу (1) в семейство возмущенных задач

$$\Delta\tilde{\varphi}_P = 0; \quad P \in \tilde{\Omega}; \quad \tilde{\varphi}|_{\tilde{\Gamma}} = \tilde{U}_{\tilde{Q}}; \quad \tilde{Q} \in \tilde{\Gamma} \quad (4)$$

таким образом, что соответствие между точками невозмущенной и возмущенной границ дается соотношениями (2) и (3). Важно, что все возмущенные краевые задачи (4) параметризованы в одной и той же области  $D$ .

Получим теперь интегральные соотношения между малыми возмущениями границы  $\{\delta\vec{r}_Q, \delta U_Q\}$  и возмущением потенциала  $\delta\varphi_P$  в заданной точке  $P$  области  $\Omega$ . Используя потенциал простого слоя, представим решение краевой задачи (4) с фиксированными возмущениями границы  $\{\delta\vec{r}_Q, \delta U_Q\}$  в форме

$$\tilde{\varphi}_P = \int_{\tilde{\Gamma}} \frac{\tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}}{r_{P\tilde{Q}}} d\tilde{S}_{\tilde{Q}}; \quad P \in \Omega; \quad \tilde{Q} \in \tilde{\Gamma}, \quad (5)$$

где возмущенная поверхностная плотность заряда  $\tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}$  удовлетворяет интегральному уравнению Фредгольма первого рода

$$\int_{\tilde{\Gamma}} \frac{\tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}}{\tilde{r}_{\tilde{P}\tilde{Q}}} d\tilde{S}_{\tilde{Q}} = \tilde{U}_{\tilde{P}}; \quad \tilde{P} \in \tilde{\Omega}; \quad \tilde{Q} \in \tilde{\Gamma}. \quad (6)$$

Будучи преобразованным к лагранжевым координатам  $\{u, v\}$ , уравнение (5) принимает вид

$$\int_D \tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}(u', v') \tilde{G}_{\tilde{P}\tilde{Q}}(u, v, u', v') du' dv' = \tilde{U}_{\tilde{P}}(u, v), \quad (7)$$

$$\tilde{P}(u, v) \in \tilde{\Gamma}, \quad \tilde{Q}(u', v') \in \tilde{\Gamma}.$$

Аналогично соотношение (6) для возмущенного потенциала в точке  $P$  записывается в виде

$$\tilde{\varphi}_P = \int_D \tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}(u, v) \tilde{G}_{\tilde{P}\tilde{Q}}(u, v) dudv, \quad (P \in \Omega, \quad \tilde{Q}(u, v) \in \tilde{\Gamma}). \quad (8)$$

Ядро  $\tilde{G}_{\tilde{P}\tilde{Q}}$  выражается формулой

$$\tilde{G}_{\tilde{P}\tilde{Q}} = \frac{\tilde{J}_{\tilde{Q}}}{\tilde{r}_{\tilde{P}\tilde{Q}}},$$

где  $\tilde{J}_{\tilde{Q}} = \tilde{J}_{\tilde{Q}}(u, v)$  — якобиан возмущенного преобразования  $(u, v) \rightarrow \tilde{r}(u, v)$ ,  $(u, v) \in D$ .

Таким образом, элемент возмущенной поверхности есть  $d\tilde{S}_{\tilde{Q}}(u, v) = \tilde{J}_{\tilde{Q}}(u, v) dudv$ .

Существенно, что точка  $P$  в (5) и (8) — одна и та же для всех возмущенных границ  $\tilde{\Gamma}$ . Мы предполагаем, что возмущения границы  $\{\delta\vec{r}_Q, \delta U_Q\}$  достаточно малы, а множество точек  $\{P\}$  расположено достаточно далеко от возмущенных границ  $\tilde{\Gamma}$ . В рамках этих предположений представляя поверхностную плотность заряда  $\tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}(u, v)$  на возмущенной поверхности  $\tilde{\Gamma}$  в виде суммы

$$\tilde{\sigma}_{\tilde{Q}}(u, v) = \sigma_Q(u, v) + \delta\sigma_Q(u, v)$$

и ограничиваясь вариациями первого порядка  $\delta\vec{r}_Q, \delta U_Q, \delta\sigma_Q$ , из (7) получаем интегральное уравнение в вариациях:

$$\int_D \delta\sigma_Q(u', v') G_{PQ}(u, v, u', v') du' dv' = - \int_D \sigma_Q(u', v') \delta G_{PQ}(u, v, u', v') du' dv' + \delta U_P(u, v);$$

$$P(u, v) \in \Gamma; \quad Q(u', v') \in \Gamma,$$

определяющее вариацию первого порядка  $\delta\sigma_Q$  поверхностной плотности заряда  $\sigma_Q$ .

Аналогично вариация первого порядка возмущения потенциала в заданной точке  $P \in \Omega$  принимает вид

$$\delta\varphi_P = \int_D [\delta\sigma_Q(u, v) G_{PQ}(u, v) + \sigma_Q(u, v) \delta_Q G_{PQ}(u, v)] dudv,$$

$$P \in \Omega, \quad Q(u, v) \in \Gamma.$$

Выражая вариации ядра  $\delta G_{PQ}$ ,  $\delta_Q G_{PQ}$  через возмущения границы  $\{\delta\vec{r}_Q\}$ , которые предполагаются заданными, получаем полностью детерминированный алгоритм численной оценки возмущений потенциала в общем трехмерном случае. Необходимые детали можно найти в работе [1], где рассмотрен и частный случай возмущений осевой симметрии.

### Возмущения плоской симметрии

Плоскосимметричные системы, геометрия электродов которых инвариантна по отношению к сдвигам вдоль некоторой оси, широко используются во многих

аналитических электронно-, ионно-оптических приборах. Так, например, квадрупольные ионные ловушки служат ячейками накопления ионов в масс-анализаторах [1], плоскосимметричные линзы и зеркала применяются в многоотражательных времяпролетных масс-спектрометрах [2, 3] для формирования ленточных пучков, мультипольные радиочастотные ионно-оптические системы — для транспортировки охлажденных ионов [4].

Поля плоских систем достаточно легко рассчитывать с высокой точностью, поскольку в данном случае требуется решение двумерного уравнения Лапласа. Тем не менее, указанная простота немедленно исчезает, как только геометрия системы оказывается нарушенной.

В данной работе рассматриваются два класса таких возмущений. К первому классу относятся возмущения, обусловленные деформацией электродов (изгибанием, скручиванием, наклоном) в результате ошибок изготовления, а также механических или термических напряжений. Второй класс содержит возмущения, связанные с наличием краевых эффектов, которые являются неустранимыми в любой практической системе конечных размеров. Как правило, наличие краевых эффектов приводит к тому, что часть системы оказывается невозможной использовать для практических приложений.

Таким образом, корректная оценка этих эффектов является важной задачей.

Возмущения обоих классов выводят нас за пределы двумерной постановки проблемы и, на первый взгляд, заставляют применять общие трехмерные алгоритмы, которые, как известно, обладают меньшей точностью и требуют значительно больших вычислительных ресурсов. Теория возмущений позволяет предложить другой, более аналитически развитый подход, в рамках которого возмущенные трехмерные поля рассматриваются как малые поправки к идеальным двумерным полям, что существенно упрощает вычисления и повышает их точность.

Представим возмущения плоской геометрии и граничного потенциала в виде

$$\mathbf{R}_0(s) + \delta\mathbf{R}(s, z) = \left\| \begin{array}{l} x_0(s) \\ y_0(s) \end{array} \right\| + \left\| \begin{array}{l} \delta x(s, z) \\ \delta y(s, z) \end{array} \right\|;$$

$$U = U_0(s) + \delta U(s, z).$$

Здесь независимые от  $z$  функции с нулевыми индексами соответствуют плоской невозмущенной геометрии. Параметр  $s$ , представляющий собой длину дуги, изменяется в интервале  $[0, s_{\max}]$ , где  $s_{\max}$  — полная длина электродов в сечении  $XY$ .

Представим граничные возмущения в виде суммы гармоник

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{R}(s, z) &= \delta\mathbf{R}_0(s) + \operatorname{Re} \sum_{\xi>0} \delta\mathbf{R}_\xi(s) e^{i\xi z}; \\ \delta U(s, z) &= \delta U_0(s) + \operatorname{Re} \sum_{\xi>0} \delta U_\xi(s) e^{i\xi z}, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\xi$  "пробегают" множество положительных волновых чисел.

Очевидно, в первом приближении любая индивидуальная гармоника в (9) генерирует периодическое поле с тем же волновым числом  $\xi$ , а вклад таких гармоник является аддитивным. Вариация поверхностной плотности заряда  $\delta\sigma$  может быть представлена с использованием того же множества волновых чисел

$$\delta\sigma(s, z) = \delta\sigma_0(s) + \operatorname{Re} \sum_{\xi>0} \delta\sigma_\xi(s) e^{i\xi z}.$$

В терминах введенных возмущений границы возмущенное интегральное уравнение Фредгольма первого рода принимает вид

$$\begin{aligned} &\int_0^{s_{\max}} ds_0 \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 \times \\ &\times \left[ \frac{\sigma_0(s_0) + \delta\sigma(s_0, z)}{\sqrt{|\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_0) + \delta\mathbf{R}(s_1) - \delta\mathbf{R}(s_0)|^2 + (z_1 - z_0)^2}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sigma_0(s_0) + \delta\sigma_0(s_0)}{\sqrt{1 + z_0^2}} \right] = \\ &= U_0(s_1) + \delta U(s_1, z_1). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь первый член в квадратных скобках представляет закон Кулона, в то время как вычитание второго члена позволяет избежать расходимости при интегрировании по  $z_0$ . Второй член, будучи независимым от координат  $(s_1, z_1)$  и не содержащим особенностей, обеспечивает

сохранение функции Грина при переходе от трехмерной геометрии к двумерной путем интегрирования по  $z_0$ . Именно благодаря такой регуляризации ядра мы получаем обычное интегральное уравнение с логарифмической особенностью для невозмущенной геометрии:

$$- \int_0^{s_{\max}} \sigma_0(s_0) \cdot \ln |\mathbf{R}_{01}| ds_0 = \frac{1}{2} U_0(s_1),$$

$$\text{где } \mathbf{R}_{01} = \mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_0). \quad (11)$$

Это уравнение справедливо для всех  $s_1$  и позволяет найти невозмущенную плотность поверхностного заряда на плоскосимметричных электродах. Путем линеаризации (10) по отношению к граничным возмущениям (9) и интегрирования по  $z_0$ , получаем интегральное уравнение в вариациях для  $\delta\sigma_0$  и  $\delta\sigma_\xi$ :

$$\begin{aligned} &\int_0^{s_{\max}} \delta\sigma_0(s_0) (-\ln |\mathbf{R}_{01}|) ds_0 = \\ &= \int_0^{s_{\max}} \sigma_0(s_0) \cdot \frac{\mathbf{R}_{01}}{|\mathbf{R}_{01}|^2} (\delta\mathbf{R}_0(s_1) - \delta\mathbf{R}_0(s_0)) ds_0 + \frac{1}{2} \delta U_0(s_1); \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{\xi_{\max}} \delta\sigma_{\xi}(\xi) K_0(\xi |R_{01}|) d\xi = \\ & = \int_0^{\xi_{\max}} \sigma_0(\xi) \frac{R_{01}}{|R_{01}|^2} \times \\ & \times [\delta R_{\xi}(\xi) - \delta R_{\xi}(\xi_0) (\xi |R_{01}|) K_1(\xi |R_{01}|)] \times \\ & \times d\xi + \frac{1}{2} \delta U_{\xi}(\xi), \end{aligned} \quad (13)$$

где  $K_0$  и  $K_1$  — соответственно, модифицированные функции Бесселя второго рода (или так называемые функции Мак-Дональда).

Уравнение (12) является предельным случаем (13) при  $\xi \rightarrow 0$ . Правые части (12) и (13) содержат невозмущенную плотность поверхностного заряда  $\sigma_0$ , которая должна быть предварительно вычислена из уравнения (11). Можно показать, что интегралы в (12), (13) сходятся при  $\xi \rightarrow \xi_0$ , если граничные возмущения сохраняют гладкость в пределах одного электрода. Возмущенный потенциал в точке  $r(x,y),z$  принимает вид

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, z) = & -2 \int_0^{\xi_{\max}} [\sigma_0(s) + \delta\sigma_0(s)] \ln |\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)| ds + \\ & + 2 \int_0^{\xi_{\max}} \sigma_0(s) \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) \delta \mathbf{R}_0(s)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)|^2} ds + \\ & + 2 \operatorname{Re} \sum_{\xi > 0} e^{i\xi z} \int_0^{\xi_{\max}} \left\{ \delta\sigma_{\xi}(s) K_0(\xi |\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)|) + \right. \\ & \left. + \sigma_0(s) \delta R_{\xi}(s) \frac{\xi}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)|} K_1(\xi |\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)|) \right\} ds \end{aligned} \quad (14)$$

Множество волновых чисел  $\xi$  может быть выбрано произвольно, хотя в практических вычислениях удобно использовать арифметическую прогрессию  $\xi_n = (2\pi/L)n$ , что соответствует ряду Фурье на интервале  $[-L/2, L/2]$ . Для того чтобы избежать ошибок, связанных с конечностью характерной длины  $L$ , эта длина должна в несколько раз превышать характерную ширину двумерного сечения электродов.

Чтобы проиллюстрировать применение развитого подхода, рассмотрим цилиндрический конденсатор, состоящий из двух коаксиальных цилиндров достаточной большой длины с внутренним  $R_1 = 1$  и внешним  $R_2 =$

2 радиусами. Граничные потенциалы равны единице и нулю, соответственно. Как известно, в пределе бесконечной длины электродов электрическое поле между ними имеет вид

$$\Phi_0(R) = 1 - \frac{\ln(R/R_1)}{\ln(R_2/R_1)}.$$

Рассмотрим возмущение границы, состоящее в искривлении оси симметрии цилиндрического конденсатора таким образом, что она переходит в дугу радиуса  $R_0 \gg R_2$  (рис. 2).

В приближении первого порядка по отношению к малому параметру  $1/R_0$  такое возмущение полностью определяется вектором  $\delta \mathbf{R}(s, z) = \{-z^2 / 2R_0, 0\}$ .

Обозначая  $R = \sqrt{x^2 + y^2}$  и  $\cos\theta = x/R$ , мы можем представить возмущенный потенциал в области между электродами формулой

$$\Phi(R, \theta, z) = \Phi_0(R) + \Phi_1(R, \theta, z) \frac{1}{R_0} + O(R_0^{-2}),$$

где коэффициент первого порядка  $\Phi_1(R, \theta, z)$  в центральной плоскости  $z = 0$  допускает аналитическое представление

$$\Phi_1(R, \theta, 0) = \left[ \frac{\ln(R/R_1)}{\ln(R_2/R_1)} \frac{R}{2} - \frac{1}{2} \frac{R_2^2}{R_2^2 - R_1^2} \left( R - \frac{R_1^2}{R} \right) \right] \cos\theta. \quad (15)$$

Функция  $\Phi_1(R, \theta, z)$  на сегменте  $[-L/2, L/2]$  представляется рядом Фурье

$$\Phi_1(R, \theta, z) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m P_m(R) \cos\left(\frac{2\pi m}{L} z\right) \cos\theta, \quad (16)$$

где  $C_m$  — коэффициенты Фурье функции граничного возмущения  $-z^2 / 2R_0$  на том же сегменте, а функции  $P_m(R)$  удовлетворяют уравнению Бесселя

$$\frac{d^2}{dR^2} P_m + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} P_m - \frac{P_m}{R^2} - \left(\frac{2\pi m}{L}\right)^2 P_m = 0$$

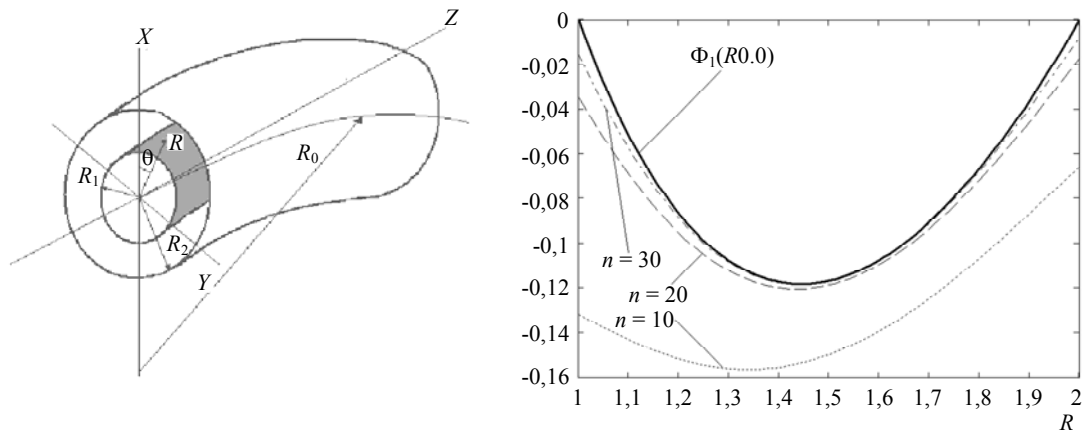


Рис. 2. Тестовая задача о возмущении геометрии цилиндрического конденсатора. Сходимость конечных сумм из  $n$  гармоник (16) к аналитическому решению  $\Phi_1(R, 0, 0)$  (15)

с граничными условиями

$$P_m(R_1) = -\left. \frac{d\Phi_0}{dR} \right|_{R=R_1}; \quad P_m(R_2) = -\left. \frac{d\Phi_0}{dR} \right|_{R=R_2},$$

вытекающими из известной теоремы Брунса-Бертена.

Функции  $P_m(R)$  могут быть выражены через линейные комбинации модифицированных функций Бесселя первого и второго родов, а коэффициенты этих линейных комбинаций (а также и коэффициенты  $C_m$ ) могут быть определены численно для заданных  $R_1, R_2, L$ .

Рассматриваемая задача была численно решена с использованием интегральных уравнений в вариациях (12)–(14) при  $L = 20$  и количестве разбиений границы на каждом из электродов, равным 40.

Данные таблицы позволяют сравнить значения возмущенного потенциала и его производных, рассчитанные аналитически согласно (15) в точке  $x = 1,4; z = 0; y = 0$  с соответствующими значениями, рассчитанными в той же точке как:

- 1) конечная сумма первых 40 гармоник в соответствии с (16);
- 2) как конечная сумма тех же гармоник, рассчитанных путем численного решения интегральных уравнений в вариациях (12)–(14).

Результаты тестирования расчета квазидвухмерного возмущения

Возмущенный потенциал и его производные	Аналитически (формула (15))	Аналитически (конечная сумма Фурье из 40 гармоник)	Численно (интегральные уравнения в вариациях)
$U$	0,117344	0,117286	0,117289
$\partial U / \partial x$	0,042741	0,043402	0,043404
$\partial^2 U / \partial x^2$	1,001156	1,010589	1,010618
$\partial^2 U / \partial z^2$	0,029339	0,028838	0,028808

**Расчет краевых полей**

Другой класс граничных возмущений, рассматриваемый в данном разделе, представляет собой краевые поля, обусловленные конечностью электродов любой практической плоскосимметричной системы. Возмущения этого типа обычно сосредоточены вблизи краев системы электродов или в любом другом месте, где нарушается плоская симметрия. В противоположность рассмотренным выше возмущениям границы краевые возмущения поля весьма велики в окрестности самих краев, где возмущенное поле носит резко выраженный трехмерный характер, однако во внутренней области системы возмущенное поле может рассматриваться как малая поправка к идеальному двумерному полю. Такие внутренние области "квазидвухмерных" систем представляют интерес с точки зрения формирования пучков заряженных частиц, и задачей исследователя является численная оценка возмущений потенциала в них.

Наш подход основан на выделении в основной расчетной области двух подобластей с последующим гладким сопряжением результатов расчета поля в каждой из них. Пример такой операции показан на рис. 3. Подобласть 1, ограниченная справа виртуальной плоскостью  $z = Z_2$ , обладает преобладающей плоской симметрией, в то время как подобласть 2, ограниченная слева виртуальной плоскостью  $z = Z_3$ , имеет выраженный трехмерный характер.

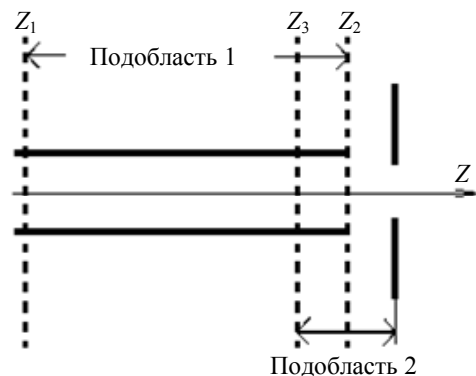


Рис. 3. К алгоритму расчета краевых полей в системах с преобладающей осевой симметрией

Пусть  $\Phi_1^{(0)}(x, y)$  — распределение потенциала, рассчитанное в подобласти 1 как в идеально плоско-симметричной, а  $\Phi_2(x, y, Z)$  — трехмерное распределение потенциала, рассчитанное в подобласти 2 с использованием граничного условия  $\Phi_2(x, y, Z_3) = \Phi_1^{(0)}(x, y)$  в плоскости  $z = Z_3$ . Построим невязку  $\Delta\Phi(x, y) = \Phi_2(x, y, Z_2) - \Phi_1^{(0)}(x, y)$  в плоскости  $z = Z_2$  и введем трехмерную поправку к двумерному полю  $\Phi_1^{(0)}(x, y)$ , положив

$$\Phi_1(x, y, z) = \Phi_1^{(0)}(x, y) + \sum_{\chi} C_{\chi} \Phi_{\chi}(x, y) e^{\chi(z-Z_2)}, \quad (17)$$

где  $\{\Phi_{\chi}\}$  — набор собственных функций, отвечающих задаче на собственные значения

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Phi_{\chi} + \chi^2 \Phi_{\chi} = 0 \quad (18)$$

с дополнительным условием  $\Phi_{\chi} = 0$  на сечениях электродов подобласти 1.

Если такая "квазидвухмерная" область является незамкнутой (в том смысле, что она не ограничена по своему периметру электродами без отверстий), то спектр  $\{\chi\}$  является непрерывным. Чтобы избежать этой дополнительной трудности, следует сначала "погрузить" расчетную под-область во вспомогательный "ящик" с нулевым потенциалом на его границах. Размеры такого ящика должны быть выбраны так, чтобы его наличие не приводило к значительным возмущениям поля в рассматриваемой области. В (17) достаточно ограничиться несколькими членами с наименьшими значениями  $\chi$ , поскольку поправочные члены экспоненциально убывают с удалением от краев.

Коэффициентами  $C_{\chi}$  можно распорядиться так, чтобы удовлетворить граничному условию

$$\Phi_1(x, y, Z_2) = \Phi_2(x, y, Z_2) = \Delta\Phi(x, y) + \Phi_1^{(0)}(x, y).$$

Если при этом система собственных функций  $\{\Phi_{\chi}\}$  является ортонормированной в  $L_2$ , то получаем  $C_{\chi} = \iint \Delta\Phi \Phi_{\chi} dx dy$ .

Следующий шаг состоит в пересчете трехмерного поля в подобласти 1 с учетом скорректированного граничного условия  $\Phi_1(x, y, Z_3)$ . Процедура повторяется до достижения заданной относительной погрешности  $\varepsilon$ . Можно показать, что такой итерационный процесс требует  $N \approx |\ln \varepsilon| / (\chi_m |Z_2 - Z_3|)$  шагов, где  $\chi_m$  — минимальное собственное число спектральной задачи (18).

Для построения спектра оператора Лапласа используем метод конечных элементов. Поперечное сечение подобласти 1 разбивается на некоторое число треуголь-

ных элементов, на каждом из них искомая собственная функция представляется в виде квадратичного полинома с неопределенными коэффициентами. Минимальная собственная функция находится путем численной минимизации функционала энергии  $\chi^2 = \iint (\nabla \Phi_{\chi})^2 dx dy$  при наличии условия нормировки  $\iint \Phi_{\chi}^2 dx dy = 1$ . Вторая собственная функция вычисляется аналогично, но с дополнительным условием ортогональности по отношению к уже найденной первой собственной функции, и т. д.

На рис. 4 приведен пример применения разработанного подхода к расчету возмущения поля при сопряжении двух квадруполов. Показаны эквипотенциалы трех из пятнадцати собственных функций, рассчитанных в двухмерном сечении квадруполов, а также эквипотенциалы результирующего поля в области сопряжения.

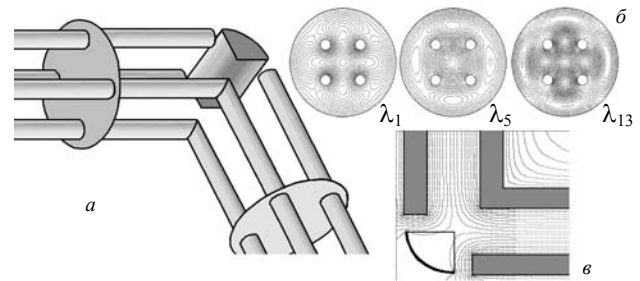


Рис. 4. К расчету краевых эффектов:

- a — трехмерное сопряжение двух двухмерных квадруполов;
- б — эквипотенциалы трех наиболее существенных собственных функций, рассчитанных в квазидвухмерной области;
- в — эквипотенциалы, рассчитанные в области сопряжения

### Аберрационные уравнения в тензорной форме

Выше мы обсудили некоторые численные процедуры расчета возмущений электрических и магнитных полей. Тем не менее, главной целью исследования является определение степени влияния таких возмущений на выходные характеристики электронно-, ионно-оптического прибора, а говоря об аналитических приборах — на пространственно-временное разрешение или разрешение по массе и энергии заряженных частиц. Цель данного раздела — кратко изложить подход к построению теории аберраций на основе метода тау-вариаций в наиболее общей тензорной форме.

Наиболее важные преимущества такого подхода в сжатом виде можно изложить следующим образом:

универсальность: численные процедуры метода тау-вариаций могут быть применены к любому электромагнитному полю (стационарному или нестационарному, обладающему каким-либо типом симметрии или нет, и т. д.);

численная устойчивость: одна из важных особенностей метода состоит в том, что расчет регулярных компонент аберрационных коэффициентов происходит отдельно от сингулярных, что весьма важно для расчета эмиссионных систем и электронных зеркал;

простота программной реализации: численные алгоритмы метода могут быть легко сопряжены с любым достаточно точным методом расчета поля.

Рассмотрим движение заряженных частиц, описываемое уравнениями Лоренца в тензорной форме

$$\ddot{x}^i = \frac{q}{m} \left( E^i + \varepsilon^{ijk} \dot{x}^k B^j \right), \quad (19)$$

где  $x^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) — декартовы координаты;

$t$  — время;

$q/m$  — отношение заряда к массе;

$E^i, B^j$  — компоненты, соответственно, электрического и магнитного полей;

$\varepsilon^{ijk}$  — полностью антисимметричный тензор с  $\varepsilon^{123} = 1$ .

Здесь и далее суммирование производится по всем повторяющимся индексам  $i, j, k, \dots$

Предположим, что траектории заряженных частиц  $x^i = x^i(t, \xi_\alpha)$  однозначно определяются множеством начальных параметров  $\xi = \{\xi_\alpha\}$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots$ , характеризующих либо начальный разброс начальных условий образующих пучок заряженных частиц (начальных координат, скоростей, моментов старта с эмиттера и т. д.), либо отклонение значений структурных параметров рассматриваемой системы (геометрии электродов, напряжений, токов и т. д.) от номинальных. Траекторию  $x_0^i(t) = x^i(t, 0, 0, \dots)$ , на которой все  $\xi_\alpha$  равны нулю, назовем главной траекторией пучка. Обозначая частные производные

$$x_{\alpha\beta\dots}^i(t) \equiv \left. \frac{\partial^n x^i(t, \xi)}{\partial \xi_\alpha \partial \xi_\beta \dots} \right|_{\xi=0},$$

вычисленные на главной траектории в фиксированный момент времени  $t$  и последовательно варьируя уравнение (19) по  $\xi_\alpha$ , приходим к следующим уравнениям для тау-вариаций в тензорной форме:

$$\dot{x}_\alpha^i = \frac{q}{m} \left[ D_\alpha E^i + \varepsilon^{ijk} \left( \dot{x}^k D_\alpha B^j + \dot{x}_\alpha^k B^j \right) \right]; \quad (20)$$

$$\ddot{x}_{\alpha\beta}^j = \frac{q}{m} \left[ D_{\alpha\beta} E^j + \varepsilon^{ijk} \times \left( \dot{x}^k D_{\alpha\beta} B^j + \dot{x}_\beta^k D_\alpha B^j + \dot{x}_\alpha^k D_\beta B^j + \dot{x}_{\alpha\beta}^k B^j \right) \right]; \quad (21)$$

$$\ddot{x}_{\alpha\beta\gamma}^j = \frac{q}{m} \left[ D_{\alpha\beta\gamma} E^j + \varepsilon^{ijk} \left( \dot{x}^k D_{\alpha\beta\gamma} B^j + \dot{x}_\gamma^k D_{\alpha\beta} B^j + \dot{x}_\beta^k D_{\alpha\gamma} B^j + \dot{x}_\alpha^k D_{\beta\gamma} B^j + \dot{x}_{\beta\gamma}^k D_\alpha B^j + \dot{x}_{\alpha\gamma}^k D_\beta B^j + \dot{x}_{\alpha\beta}^k D_\gamma B^j + \dot{x}_{\alpha\beta\gamma}^k B^j \right) \right], \quad (22)$$

в которых символы  $D_\alpha E^i, \dots$  означают полные производные поля по параметрам  $\xi_\alpha$ :

$$D_\alpha E^i = E_\alpha^i + E^{ij} x_\alpha^j;$$

$$D_{\alpha\beta} E^i = E_{\alpha\beta}^i + E_\alpha^{ij} x_\beta^j + E_\beta^{ij} x_\alpha^j + E^{ij} x_{\alpha\beta}^j + E^{ijk} x_\alpha^j x_\beta^k;$$

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta\gamma} E^i = & E_{\alpha\beta\gamma}^i + (E_{\alpha\beta}^{ij} x_\gamma^j + E_{\alpha\gamma}^{ij} x_\beta^j + E_{\beta\gamma}^{ij} x_\alpha^j) + \\ & + (E_\alpha^{ij} x_{\beta\gamma}^j + E_\beta^{ij} x_{\alpha\gamma}^j + E_\gamma^{ij} x_{\alpha\beta}^j) + \\ & + (E_\alpha^{ijk} x_\beta^j x_\gamma^k + E_\beta^{ijk} x_\alpha^j x_\gamma^k + E_\gamma^{ijk} x_\alpha^j x_\beta^k) + \\ & + (E_\alpha^{ijk} x_\beta^j x_\gamma^k + E_\beta^{ijk} x_\alpha^j x_{\beta\gamma}^k + E_\gamma^{ijk} x_{\alpha\gamma}^j x_\beta^k) + \\ & + E_\alpha^{ij} x_{\alpha\beta\gamma}^j + E^{ijkm} x_\alpha^j x_\beta^k x_\gamma^m. \end{aligned}$$

Полные производные магнитного поля  $D_\alpha B^i, \dots$  определяются аналогично.

Тау-вариации  $x_\alpha^i, x_{\alpha\beta}^i, x_{\alpha\beta\gamma}^i$  вычисляются путем численного интегрирования уравнений (20)—(22) с начальными условиями, которые получаются из начальных условий для уравнения (19) с помощью той же операции варьирования по параметрам  $\xi_\alpha$ .

Обозначим как  $t_S^0$  время прихода главной траектории на коллектор частиц (экран)  $S$ , который для простоты будем считать плоскостью  $Z = x_3 = \text{const}$ , перпендикулярной главной оптической оси прибора. Соответствующее время прихода  $t_S(\xi) = t_S^0 + \Delta t_S(\xi)$  произвольной близкой траектории с ненулевым вектором  $\xi$  отличается от  $t_S^0$  на малую величину  $\Delta t_S(\xi)$ , зависящую от  $\xi$  так, что уравнение

$$x_S^3(\xi) = x^3[t_S(\xi), \xi], \quad \xi] = Z_S = \text{const} \quad (23)$$

удовлетворяется тождественно для достаточно малых  $\xi$ , а уравнение

$$x_S^i(\xi) = x^i[t_S(\xi), \xi], \quad (i = 1, 2) \quad (24)$$

определяет положение заряженных частиц на плоскости  $S$ .

Теперь мы можем получить алгебраические соотношения, связывающие тау-вариации  $x_\alpha^i, x_{\alpha\beta}^i, x_{\alpha\beta\gamma}^i, \dots$ , представляющие собой частные производные возмущенной траектории  $x^i = x^i(t, \xi_\alpha)$  по параметрам  $\xi_\alpha$  в фиксированный момент времени, с соответствующими производными  $x_{S,\alpha}^i, x_{S,\alpha\beta}^i, x_{S,\alpha\beta\gamma}^i, \dots$  на плоскости  $S$ .

Последовательное варьирование выражений (23), (24) по  $\xi$  дает производные времени прихода  $t_S(\xi)$ :

$$t_{S,\alpha} = -\frac{x_\alpha^3}{\dot{x}^3}; \quad t_{S,\alpha\beta} = -\frac{x_{\alpha\beta}^3 + D_{\alpha\beta}^S x^3}{\dot{x}^3};$$

$$t_{S,\alpha\beta\gamma} = -\frac{x_{\alpha\beta\gamma}^3 + D_{\alpha\beta\gamma}^S x^3}{\dot{x}^3}$$

и пространственные производные  $x'_{S,\alpha}, x'_{S,\alpha\beta}, x'_{S,\alpha\beta\gamma}, \dots$  на  $S$ :

$$\begin{aligned} x'_{S,\alpha} &= x'_{\alpha} + \dot{x}'^i t_{S,\alpha}; & x'_{S,\alpha\beta} &= x'_{\alpha\beta} + \dot{x}'^i t_{S,\alpha\beta} + D_{\alpha\beta}^S x^i; \\ x'_{S,\alpha\beta\gamma} &= x'_{\alpha\beta\gamma} + \dot{x}'^i t_{S,\alpha\beta\gamma} + D_{\alpha\beta\gamma}^S x^i, & (i = 1, 2), \end{aligned} \quad (25)$$

которые, в свою очередь, полностью определяют абберационные коэффициенты в пространственно-временном абберационном разложении:

$$\begin{aligned} t_S(\xi) &= t_S^{(0)} + \sum_{\alpha} t_{S,\alpha} \xi_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} t_{S,\alpha\beta} \xi_{\alpha} \xi_{\beta} + \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} t_{S,\alpha\beta\gamma} \xi_{\alpha} \xi_{\beta} \xi_{\gamma} + \dots, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} x^i(\xi) &= x^i(0) + \sum_{\alpha} x'_{S,\alpha} \xi_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} x'_{S,\alpha\beta} \xi_{\alpha} \xi_{\beta} + \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} x'_{S,\alpha\beta\gamma} \xi_{\alpha} \xi_{\beta} \xi_{\gamma} + \dots, \quad (i = 1, 2). \end{aligned}$$

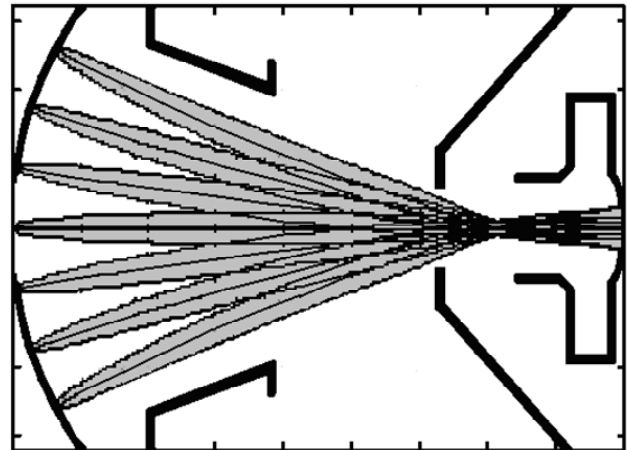
Для упрощения записи в (25) и (26) используем символы  $D_{\alpha\beta}^S x^i, D_{\alpha\beta\gamma}^S x^i$ , обозначающие операторы:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^S x^i &= \ddot{x}'_{\alpha} t_{S,\beta} + \ddot{x}'_{\beta} t_{S,\alpha} + \ddot{x}'^i t_{S,\alpha} t_{S,\beta}; \\ D_{\alpha\beta\gamma}^S x^i &= (\ddot{x}'_{\gamma} t_{S,\alpha\beta} + \ddot{x}'_{\alpha} t_{S,\beta\gamma} + \ddot{x}'_{\beta} t_{S,\alpha\gamma}) + \\ &+ (\ddot{x}'_{\beta\gamma} t_{S,\alpha} + \ddot{x}'_{\alpha\beta} t_{S,\gamma} + \ddot{x}'_{\alpha\gamma} t_{S,\beta}) + \\ &+ \ddot{x}'^i (t_{S,\alpha\beta} t_{S,\gamma} + t_{S,\alpha\gamma} t_{S,\beta} + t_{S,\gamma\beta} t_{S,\alpha}) + \\ &+ (\ddot{x}'_{\gamma} t_{S,\alpha} t_{S,\beta} + \ddot{x}'_{\alpha} t_{S,\beta} t_{S,\gamma} + \ddot{x}'_{\beta} t_{S,\alpha} t_{S,\gamma}) + \\ &+ \ddot{x}'^i t_{S,\alpha} t_{S,\beta} t_{S,\gamma}, \quad (i = 1, 2). \end{aligned}$$

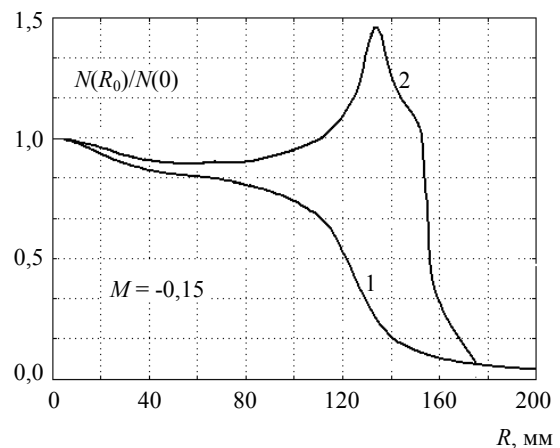
При заданных начальных распределениях частиц абберационные разложения (26) позволяют вычислить пространственно-временной отклик любой электронно-, ионно-оптической системы. Во многих случаях для того чтобы с достаточной точностью покрыть всю область начальных параметров  $\{\xi_{\alpha}\}$ , может потребоваться не одна, а несколько главных траекторий с построенными на каждой из них абберационными разложениями. Такой комбинированный подход, состоящий в расчете определенного числа лоренцевых траекторий и соответствующих абберационных разложений, мы называем методом главной траектории.

• Первый из представленных ниже примеров иллюстрирует применение метода главной траектории для расчета разрешающей способности в рентгеновском преобразователе с сильным сжатием изображения, схематически изображенном на рис. 5, а. Суть проблемы заключается в том, что в рассматриваемом случае не-

возможно правильно описать распределение пространственной разрешающей способности по рабочему полю, используя лишь одно "центральное" (т. е. построенное для главной оптической оси) абберационное разложение. Из рис. 5, б видно, что расчет стартовых из разных точек фотокатода десяти главных траекторий существенно увеличивает точность определения разрешения на краю рабочей области прибора.



а



б

Рис. 5. Расчет разрешающей способности в рентгеновском преобразователе:

а — геометрия электродов и фокусировка электронных пучков в рентгеновском преобразователе с сильным сжатием изображения; б — нормализованное распределение по рабочему полю пространственной разрешающей способности в меридианном направлении: 1 — рассчитанное на основе "центрального" абберационного разложения третьего порядка; 2 — рассчитанное на основе метода главной траектории

• Второй пример иллюстрирует применение обобщенного абберационного подхода к расчету механических допусков на изготовление объективной линзы сканирующего электронного микроскопа, изображенной на рис. 6, а. Магнитное поле, сконцентрированное между двумя полюсными наконечниками, фокусирует на поверхности образца первоначально параллельный пучок электронов энергией 30 кэВ. Вариации начального положения электрона определяются в декартовой системе координат  $(x_0, y_0)$ . Координаты же точки падения элек-



трона на поверхность образца определяются с помощью другой системы координат  $(x_s, y_s)$ , повернутой относительно первой на угол поворота изображения магнитным полем. Будем рассматривать малое, перпендикулярное оптической оси, смещение верхнего полюсного наконечника  $\Delta$  наряду с параметрами начального внеосевого смещения траектории электрона и построим абберрационные разложения координат точки падения электрона на образец с точностью до третьих порядков по совокупности трех малых параметров  $\xi_1 = x_0, \xi_2 = y_0, \xi_3 = \Delta$ :

$$\begin{aligned} x_s &= X_{111}x_0^3 + (X_3 + X_{13}x_0 + X_{23}y_0)\Delta + \\ &+ [X_{113}x_0^2 + X_{123}x_0y_0 + X_{223}y_0^2]\Delta; \\ y_s &= Y_{222}y_0^3 + (Y_3 + Y_{13}x_0 + Y_{23}y_0)\Delta + \\ &+ [Y_{113}x_0^2 + Y_{123}x_0y_0 + Y_{223}y_0^2]\Delta. \end{aligned} \quad (27)$$

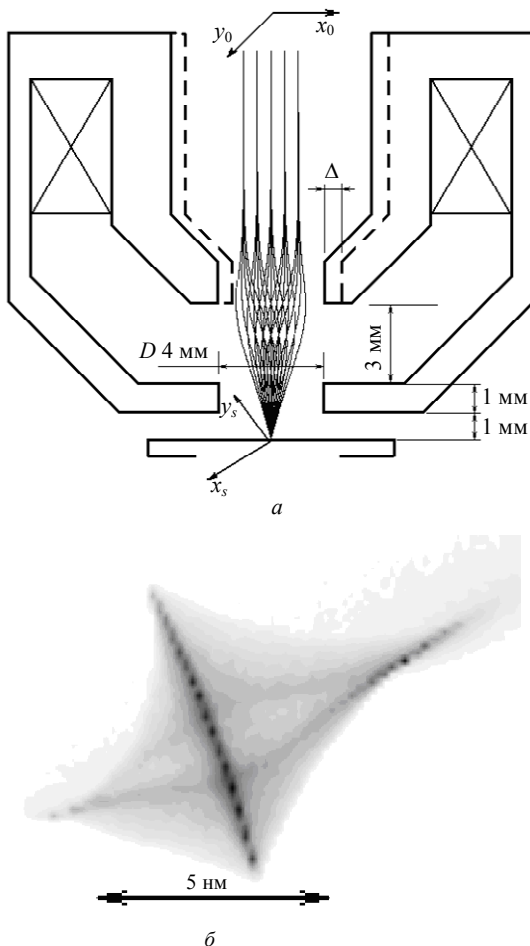


Рис. 6. Расчет механических допусков:

*a* — конструкция магнитной объективной линзы, пунктирными линиями показано смещение полюсного наконечника; *b* — плотность распределения электронов зонда, искаженного смещением полюсного наконечника на 15 мкм

Компьютерный расчет дает численные значения для всех абберрационных коэффициентов, входящих в (27). Коэффициент  $C_s = X_{111} = Y_{111} = -0,136 \text{ мм}^{-2}$  характеризует сферическую абберрацию, которая огра-

ничивает разрешение электронного микроскопа в случае идеальной вращательной симметрии полюсных наконечников. Например, если необходимо получить диаметр зонда  $\delta_0 = 10 \text{ нм}$ , то диаметр электронного пучка на входе в линзу не должен превосходить  $d_0 = 2\sqrt{\delta_0 / 2|C_s|} = 6,5 \cdot 10^{-2} \text{ мм}$ . Остальные члены абберрационного разложения (27) описывают влияние на электронный зонд нарушения вращательной симметрии.

Два коэффициента  $S_0 = -0,32$  и  $S_1 = 1,35$  описывают сдвиг зонда как целого без изменения его размера; таким образом, их наличие не приводит к падению разрешения. Матрица коэффициентов

$$A = \begin{vmatrix} X_{13} & X_{23} \\ Y_{13} & Y_{23} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -9,5 \cdot 10^{-3} & -5,1 \cdot 10^{-3} \\ -4,9 \cdot 10^{-3} & -1,0 \cdot 10^{-2} \end{vmatrix} \text{ мм}^{-1} \quad (28)$$

описывает астигматизм.

Главные оси эллипса астигматизма могут быть повернуты на некоторый угол относительно выбранной системы координат. Поэтому для оценки величины астигматизма необходимо диагонализировать матрицу (28), помножив ее слева и справа на некоторые унитарные матрицы  $U_1$  и  $U_2$ . Разность  $|\tilde{X}_{13} - \tilde{Y}_{23}| = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ мм}^{-1}$  между элементами диаго-

нализированной матрицы  $\tilde{A} = U_1 A U_2$  после умножения на величину  $\Delta$  дает величину абберрации астигматизма. Известно, что астигматизм может быть скорректирован размещенным перед объективной линзой стигматором. Абберрацию же кóмы, описываемую коэффициентами ряда (27) в квадратных скобках, устранить невозможно. Это обстоятельство делает кóму наиболее существенным фактором, снижающим разрешение прибора. Наш расчет дает для наибольшего по модулю из собственных значений матриц  $X_{ij3}$  и  $Y_{ij3}$  значение  $\lambda_{\max} = 0,33 \text{ мм}^{-2}$ .

Таким образом, влияние кóмы на размер зонда можно оценить как  $\Delta r \approx \lambda_{\max} (d_0 / 2)^2 \Delta$ . Отсюда можно заключить, что абберрация кóмы не будет превосходить радиус "идеального" зонда  $\delta_0/2$  в том случае, если смещение  $\Delta$  будет не более 14 мкм. Это ограничение можно рассматривать как механический допуск на несоосность полюсных наконечников рассмотренной объективной линзы.

Техника, основанная на теории возмущений, позволяет численно получить наиболее гладкие распределения частиц. На рис. 6, б представлена форма электронного зонда при несоосности полюсных наконечников 15 мкм при условии компенсации астигматизма. Для ее получения были рассчитаны 9 млн траекторий, что заняло всего несколько минут.

#### Устранение силы внешнего поля в задаче расчета эффекта пространственного зряда

Покажем, как теорию возмущений можно применить для упрощения и значительного повышения точности расчета вклада пространственного заряда в динамику пучка заряженных частиц. Если известна плотность распределения составляющих пучок частиц  $f_0(\vec{r}_0, \vec{v}_0)$  в момент времени  $t = 0$  как функция начального радиуса-вектора частицы  $\vec{r}_0$  и начальной скорости  $\vec{v}_0$ , то распределение пространственного заряда в пучке в любой момент времени  $t > 0$  можно представить как

$$\rho(\vec{r}, t) = e \int f_0(\vec{r}_0, \vec{v}_0) \delta[\vec{r} - \vec{r}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0)] d^3\vec{r}_0 d^3\vec{v}_0,$$

где  $\vec{r}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0) = \{x^i(t, \alpha)\}$  — набор траекторий частиц, составляющих пучок;

$\delta$  — дельта-функция Дирака.

Обозначив внешнюю электромагнитную силу (т. е. силу полей, созданных электродами и токами) как  $\vec{F}_{ext}(t, \vec{r}, \vec{v})$ , и введя внутреннюю силу коллективного взаимодействия частиц  $\vec{F}_{int}(t, \vec{r})$ , определяемую кулоновским потенциалом

$$\Phi_C(t, \vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}'$$

по формуле  $\vec{F}_{int} = -(e/m)\nabla\Phi_C$ , мы можем записать уравнения движения частицы в виде

$$\begin{cases} \dot{\vec{r}} = \vec{v}, \\ \dot{\vec{v}} = \vec{F}_{ext}(t, \vec{r}, \vec{v}) + \vec{F}_{int}(t, \vec{r}). \end{cases} \quad (29)$$

Уравнения (29) нужно дополнить начальными условиями  $\vec{r}|_{t=0} = \vec{r}_0$ ,  $\vec{v}|_{t=0} = \vec{v}_0$  на эмиттере.

Теперь можно видеть все сложности численного решения задачи. Во-первых, фактически мы не можем говорить об интегрировании отдельных траекторий, поскольку для определения кулоновских сил необходимо рассматривать пучок в целом. Во-вторых, невозможно применить абберационный подход непосредственно к уравнениям (29), поскольку действие сил  $\vec{F}_{ext}(t, \vec{r}, \vec{v})$  и  $\vec{F}_{int}(t, \vec{r})$  на пучок весьма различается. Действительно, при рассмотрении коротких пучков можем полагать, что внешняя сила слабо меняется на характерной длине пучка, в то время как кулоновская сила в пределах этого пучка сильно неоднородна.

На первый взгляд эти трудности отбрасывают нас назад к общему методу макрочастиц, когда мы должны интегрировать уравнения движения для всех частиц пучка индивидуально, вычисляя при этом кулоновские силы на каждом шаге численного интегрирования. В задачах динамики пучков необходимое число макрочастиц может составлять сотни тысяч и даже миллионы, что очень замедлит вычисления, особенно если мы хотим сохранить высокую точность, необходимую для вычисления оптических характеристик. Выход лежит в

применении одного из подходов в теории возмущений, а именно метода вариации постоянных в его обобщенном виде для разделения уравнений движений на два набора дифференциальных уравнений. Причем первые будут содержать в правой части только внешние силы  $\vec{F}_{ext}(t, \vec{r}, \vec{v})$ , а вторые — только внутренние силы  $\vec{F}_{int}(t, \vec{r})$ . С этой целью введем обозначения  $\vec{R}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0)$ ,  $\vec{V}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0)$  для решения "невозмущенных" уравнений движения

$$\begin{cases} \dot{\vec{R}} = \vec{v} \\ \dot{\vec{V}} = \vec{F}_{ext}(t, \vec{R}, \vec{V}), \end{cases} \quad (30)$$

описывающие движения частиц с различными начальными параметрами  $\vec{r}_0, \vec{v}_0$  без учета кулоновских сил, и будем искать такие функции  $\vec{r}_0(t)$  и  $\vec{v}_0(t)$ , чтобы комбинация  $\{\vec{R}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)), \vec{V}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t))\}$  удовлетворяла уравнениям (29). Подставив эту комбинацию в (29), получаем

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{R}}{\partial t}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{r}_0}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) \dot{\vec{r}}_0(t) + \\ + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{v}_0}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) \dot{\vec{v}}_0(t) = \vec{V}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)); \\ \frac{\partial \vec{V}}{\partial t}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) + \frac{\partial \vec{V}}{\partial \vec{r}_0}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) \dot{\vec{r}}_0(t) + \\ + \frac{\partial \vec{V}}{\partial \vec{v}_0}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) \dot{\vec{v}}_0(t) = \\ = \vec{F}_{ext}(t, \vec{R}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)), \vec{V}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)) + \\ + \vec{F}_{int}(t, \vec{R}(t, \vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t))). \end{cases}$$

Принимая во внимание, что пары функций  $\{\vec{R}, \vec{V}\}$  удовлетворяют уравнениям (30) при всех значениях  $\vec{r}_0, \vec{v}_0$ , и введя обозначение для матрицы Якоби

$$M(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0) = \begin{pmatrix} \partial \vec{R} / \partial \vec{r}_0 & \partial \vec{R} / \partial \vec{v}_0 \\ \partial \vec{V} / \partial \vec{r}_0 & \partial \vec{V} / \partial \vec{v}_0 \end{pmatrix},$$

приходим к паре уравнений первого порядка относительно неизвестных функций  $\vec{r}_0(t), \vec{v}_0(t)$ :

$$\begin{pmatrix} \dot{\vec{r}}_0 \\ \dot{\vec{v}}_0 \end{pmatrix} = M^{-1}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0) \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{F}_{int}(t, \vec{R}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0)) \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Правые части этого уравнения полностью определены при условии, что решения невозмущенной задачи  $\vec{R}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0)$  и  $\vec{V}(t, \vec{r}_0, \vec{v}_0)$  известны при любых начальных параметрах и зависят от них. Обратимость матрицы  $M$  размера  $6 \times 6$  гарантируется законом сохранения фазового объема, вследствие которого  $\det M \equiv 1$ .

Таким образом, мы разделили исходные уравнения движения (29) на две части, определяющие вклад

внешних и внутренних сил, соответственно. Геометрический смысл этого разделения поясняется на рис. 7.

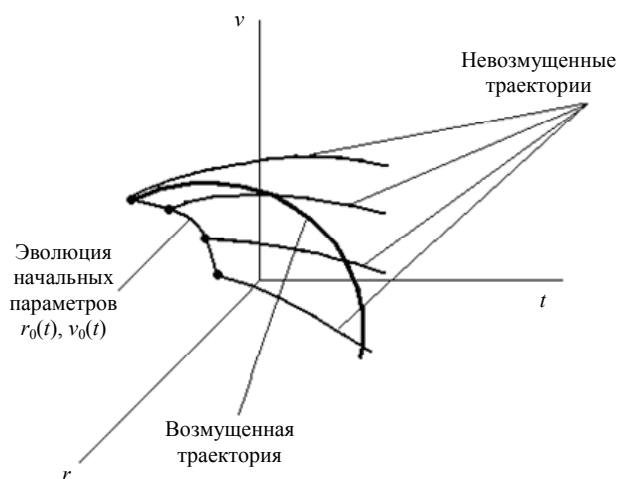


Рис. 7. К методу исключения внешнего поля

Теперь остается только коснуться некоторых важных деталей вычислительной процедуры, позволяющей численно решить полученные уравнения. Во-первых, применяя теорию аббераций, мы можем ограничиться строгим расчетом невозмущенных траекторий лишь ограниченного числа макрочастиц для некоторых значений  $\vec{r}_0, \vec{v}_0$ , рассматривая эти траектории как главные с соответствующими абберационными разложениями третьего порядка (26) в их окрестностях.

После этого для всей совокупности макрочастиц можно численно проинтегрировать уравнения (31), описывающие эволюцию начальных параметров. Эта задача сильно облегчается тем, что эволюция начальных параметров оказывается намного медленнее, чем изменение реальных фазовых координат.

Аналогичный подход можно применить для упрощения и ускорения моделирования рассеяния частиц мелкоструктурной сеткой, размер ячеек которой не превышает сечения пучка частиц. С достаточной точностью можно полагать, что вектор скорости частицы при прохождении сетки внезапно изменяется на конечную величину  $\Delta\vec{v}$ , которую, в свою очередь, можно рассматривать как случайную величину, подчиняющуюся некоторой плотности распределения вероятности  $\rho(\Delta\vec{v}, \vec{R}, \vec{V}, t)$ . Опишем такие случайные изменения скорости макрочастиц методом Монте-Карло. В рамках рассматриваемого подхода эффект рассеяния можно

интерпретировать как действие приложенной к частице мгновенной силы

$$F_{int} = \Delta v \delta [t - t_S(\vec{r}_0, \vec{v}_0)],$$

где  $t_S(\vec{r}_0, \vec{v}_0)$  — момент прохождения индивидуальной частицы через поверхность сетки.

В соответствии с (31) дискретное изменение начальных условий можно вычислить как

$$\begin{pmatrix} \Delta\vec{r}_0 \\ \Delta\vec{v}_0 \end{pmatrix} = M^{-1} [t_S(\vec{r}_0, \vec{v}_0), \vec{r}_0, \vec{v}_0] \begin{pmatrix} 0 \\ \Delta\vec{v} \end{pmatrix}.$$

Функцию  $t_S(\vec{r}_0, \vec{v}_0)$  можно получить в виде абберационного разложения (26).

Таким образом, предварительно рассчитав главную траекторию или набор таких траекторий, а также абберационные коэффициенты, можно легко вычислить рассеяние на сетке, не прибегая к численному интегрированию уравнений движения для каждой макрочастицы в отдельности.

## Выводы

Показано, что применение методов теории возмущений позволяет эффективно решать различные задачи численного моделирования в оптике пучков заряженных частиц, включая расчет возмущений электрических и магнитных полей, абберационный анализ пучков, расчет механических допусков, а также эффектов кулоновского взаимодействия и рассеяния на сетках.

Работа частично поддержана грантом  
МНТЦ № 2643.

## Литература

1. Il'in V. P., Kateshov V. A., Kulikov Yu. V., Monastyrskiy M. A. Emission Imaging Electron-Optical System Design// Advances in Electronics and Electron Physics: Academic Press Publishers, 1990. № 78. P. 155—278.
2. Вереников А. Н., Краснов Н. В., Галл Л. Н. Тандемная масс-спектрометрия в биохимии// Научное приборостроение. 2004. Т. 14. № 2. С. 4—23.
3. Zajfman D. et al. High resolution mass spectrometry using a linear electrostatic ion beam trap// International Journal of Mass Spectrometry, 2003. V. 229. P. 55—60.
4. Aleksey V. Tolmachev et al. Charge Capacity Limitations of Radio Ion Guides in Their Use for Improved Accumulation and Trapping in Mass// Anal. Chem, 2000. V. 72. P. 970—978.

## Perturbation techniques in the problems of computational charged particle optics

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2005 г.

D. E. Greenfield

ORION Research-and-Production Association, Moscow, Russia

M. A. Monastyrskiy, V. A. Tarasov

A. M. Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Sciences

*Basing on perturbation technique, discussed are some urgent problems of computational charged particle optics including numerical evaluation of fringe fields and field perturbations caused by small deviation of the shape of electrodes from rotational or planar symmetry as well as aberrational*

*analysis of charged particle beams in the most general tensor form. It is shown that perturbation technique, being combined with other numerical approaches such as the tau-variations method and generalized method of initial parameters variation, proves to be most promising for evaluation of mechanical tolerances and simulation of Coulomb repulsion effects and charged particles scattering upon a fine-structure grid.*

УДК 537.533

## Электронно-зондовый контроль мостовых структур микроболометрических матриц

*Н. Б. Каган, Г. В. Либерова, С. Н. Якунин*

ФГУП «Научно-производственное объединение "Орион"» — Государственный научный центр РФ, Москва, Россия

*Представлены результаты разработки и практического применения методик контроля с помощью растровых электронных микроскопов (РЭМ) технологических процессов изготовления приборов микрофотоэлектроники. Разработанные методики, базирующиеся на стандартной технике эксплуатации РЭМ в режимах формирования изображений во вторичных и отраженных электронах, были использованы для решения задач, связанных с отработкой и оптимизацией режимов технологических процессов изготовления мостовых структур микроболометрических матриц. На ряде конкретных примеров продемонстрирован положительный эффект применения РЭМ-контроля.*

Растровая электронная микроскопия в сочетании с энергодисперсионным рентгеноспектральным микроанализом широко и успешно используется в технологии изделий микрофотоэлектроники как метод контроля микротопографии поверхности приборных структур и анализа элементного состава материалов при отработке режимов технологических процессов и установлении причин технологического брака изделий. Опыт работы с реальными структурами приборов микрофотоэлектроники показал, что для эффективного использования многообразных диагностических возможностей современных аналитических РЭМ требуется детальная разработка специальных методик анализа и контроля применительно к основным наиболее распространенным категориям задач.

Цель настоящей работы — разработка простых методик контроля на базе РЭМ, позволяющих использовать последние в качестве инструмента экспресс-контроля как на этапе отработки технологии изготовления микроболометрических матриц (МБМ), так и в процессе их производства для отбраковки промежуточных структур, а также при анализе причин технологического брака. Опыт работы с МБМ убедительно продемонстрировал целесообразность использования РЭМ в качестве инструмента межоперационного контроля.

Первая и основная задача, которая может быть успешно решена с помощью РЭМ, сводится к анализу полной конфигурации чувствительного элемента. Цель такого контроля — выявление имеющихся и потенциальных термических утечек, создающих неконтролируемый теплоотвод от чувствительного элемента.

Вторая группа задач, решаемых с помощью РЭМ, — анализ микроморфологии и оценка толщины отдельных слоев приборной структуры, т.е. чувствительных слоев, контактных покрытий, диэлектрических слоев, пленок-зеркал и жертвенных слоев. Цель этих исследований — контроль результатов операций химического и плазмохимического травления, напыления, осаждения, вскрытия окон и других операций, используемых в технологическом процессе формирования приборных структур.

Отдельное третье направление составляют задачи контроля профиля слоев фоторезистов и технологии удаления фоторезистивных масок.

В связи с тем, что МБМ в целом (рис. 1) и каждый отдельный чувствительный элемент имеют довольно сложную конфигурацию, для анализа такого объекта в РЭМ требуется разработка специальной методики, которая обеспечивает формирование наиболее информативных изображений с учетом морфологических особенностей изучаемых структур. Как известно, информация о морфометрических параметрах исследуемого объекта, получаемая с помощью РЭМ, существенным образом зависит от взаимной ориентации этого объекта, электронного зонда и системы детектирования сигнала. Это означает, что достоверное описание морфологии объекта по изображению случайной проекции в принципе невозможно. В связи с этим основная задача, стоящая перед разработчиком методики, сводится к нахождению такой геометрии съемки, которая обеспечивает максимально возможную информативность и достоверность изображений.

Чувствительный элемент МБМ представляет собой многослойную структуру, имеющую кон-