ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

DOI: 10.5862/JPM.230.8 УДК: 537.533.621.3

К.В. Соловьев

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

АЛГОРИТМ ТРАЕКТОРНОГО АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ УГЛОВУЮ ФОКУСИРОВКУ ЗАДАННОГО ПОРЯДКА В ПЛОСКОСТИ СИММЕТРИИ

Изучен класс фокусирующих электростатических полей, построенный путем решения обратной задачи корпускулярной оптики. Предложен и протестирован эффективный алгоритм расчета траекторий в таких полях, базирующийся на параметрическом задании потенциалов. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании новых энергоанализирующих устройств с улучшенными характеристиками

ЭНЕРГОАНАЛИЗ, ЭЛЕКТРОННАЯ ОПТИКА, ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА, УГЛОВАЯ ФОКУСИ-РОВКА.

Решение обратных задач динамики заряженных частиц в электрических и магнитных полях является мощным средством синтеза новых корпускулярно-оптических систем, обладающих требуемыми характеристиками. Среди результатов, полученных в рамках данного подхода, следует отметить, например, построение энергоанализирующей системы с идеальной фокусировкой в плоскости симметрии [1], создание масс-сепарирующих систем с идеальной пространственно-временной фокусировкой пучка [2]. Несмотря на солидный арсенал накопленных аналитических средств (см., например, монографии [3, 4]), количество решенных обратных задач корпускулярной оптики невелико [5], а получение, анализ и приложения новых решений представляют несомненный интерес и не теряют своей актуальности.

Рассматриваемые в данной работе поля с плоскостью симметрии могут служить основой современных приборов дисперсионного анализа пучка заряженных частиц по энергиям. Идея работы таких приборов состоит в дискриминации частиц по энергии и концентрации по другим параметрам (в частности, по углу старта). Об интересе к энергоанализаторам, свидетельствует выход в последнее время ряда монографий и статей [6–8], авторы которых развивают теорию данного вида устройств.

Профессор СПбПУ Ю.К. Голиков предложил следующий подход к постановке задачи поиска симметричных электростатических структур с заданными свойствами [1, 5, 9]. Рассматривается плоскость ZOX, которая далее ассоциируется с плоскостью симметрии системы. Потенциал f зависит лишь от координаты x, зависимость f(x)монотонна и обеспечивает торможение заряженной частицы, движущейся в положительном направлении оси х. Вдоль оси z частица дрейфует, поскольку сила по координате *z* отсутствует. Далее предполагается, что частица, обладающая безразмерной энергией *W* (безразмерные переменные введены согласно [5, 9]), стартует из начала координат под углом θ (0 < θ < π / 2) к оси *z*. Отразившись в поле f(x), частица должна вновь оказаться на оси z в точке финиша z = P(A), где $A = W \sin^2 \theta$. Условие

равенства времен движения по координатам x и z приводит к интегральному уравнению, позволяющему построить по функции прилета P(A) одномерное неявное (в виде зависимости x = F(f)) распределение потенциала, реализующее функцию P(A). Решение данного интегрального уравнения имеет вид

$$x = F(f) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{f} \frac{P(A) \, dA}{\sqrt{(f - A)(W - A)}} \tag{1}$$

и в ряде важных случаев может быть записано в элементарных функциях. В частности, идеальной угловой фокусировке (в диапазоне углов $0 < \theta < \pi$) соответствует случай P(A) = 1,

$$x = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{\sqrt{W} + \sqrt{f}}{\sqrt{W} - \sqrt{f}} = \frac{1}{2\pi} L.$$
 (2)

Если выразить f через x, то получается хорошо известное поле системы «Тутанхамон» [1, 5, 9]:

$$f(x) = \operatorname{th}^2 \pi x. \tag{3}$$

Фокусировке *k*-го порядка соответствует функция

$$P(A) = 1 + g(A)(A - A_0)^{k+1}$$

где значение параметра A_0 определяется углом фокусировки θ_0 , а g(A) — произвольная зависимость, удовлетворяющая условию $g(A_0) \neq 0$.

Приведем для примера потенциалы, реализующие указанную функцию прилета при k = 0, 1, 2 и $g(A) \equiv 1$:

$$x = F_0(f) = \frac{1}{4\pi} (-2\sqrt{fW} - (f + W - 2A_0 + 2)L),$$
(4)

$$x = F_{1}(f) = \frac{1}{16\pi} (-2\sqrt{fW}(3(f+W) - 8A_{0}) - (3f^{2} + 2fW + 3W^{2} - 8A_{0}) - (3f^{2} + 2fW + 3W^{2} - 8A_{0}(f+W) + 8A_{0}^{2} + 8)L,$$
(5)

$$x = F_{2}(f) = \frac{1}{96\pi} (-2\sqrt{fW} (15(f^{2} + W^{2}) + 14fW - 54A_{0}(f + W) + 72A_{0}^{2}) - (6) - (5(f^{3} + W^{3}) + 3fW(f + W) - 12A_{0}fW - 6)$$

$$-2A_0(9(f^2+W^2)-12A_0(f+W)+8A_0^2)+16)L),$$

где *L* определена ранее в формуле (2). Потенциал (4) фокусировки не обеспечивает.

Отметим существенное для дальнейшего

понимания свойство потенциалов (4) — (6). Выбор полиномиальной функции прилета

$$P(A) = 1 + (A - A_0)^{k+1}, A_0^{k+1} \neq 1,$$

приводит к бесконечности производной $x_f = \partial x / \partial f$ при f = 0. Действительно, функция (1) с учетом выбранной P(A) является линейной комбинацией интегралов

$$I_{s} = \int_{0}^{J} \frac{A^{s} dA}{\sqrt{(f-A)(W-A)}}, \quad s = 0, 1, \dots, k+1$$

Очевидно, что

$$\frac{\partial I_0}{\partial f} = \frac{\sqrt{W}}{(W - f)\sqrt{f}} \xrightarrow{f \to 0} \infty.$$

Легко показать, что

$$\begin{aligned} &\frac{\partial I_s}{\partial f} = s \ I_{s-1} - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{s-1} W^m \ I_{s-1-m} + \\ &+ \frac{W^{k-1/2} \sqrt{f}}{W - f} \xrightarrow{f \to 0} 0, \ s > 0, \end{aligned}$$

поскольку для любого неотрицательного *s* при $f \to 0$ и $I_s \to 0$. Соответственно, линейная комбинация интегралов I_s , s = 0, 1, ..., k + 1 бесконечна при f = 0для любого целого неотрицательного *k*.

Предвосхитив возможный вопрос о необходимости построения полей, реализующих фокусировку конечного порядка при наличии поля, обеспечивающего идеальную фокусировку, отметим, что отсутствие каких-либо параметров в структуре поля (3) не позволяет оптимизировать поведение (уже не идеальное) пучка в плоскости, ортогональной плоскости симметрии. В то же время контролируемое снижение качества фокусировки в плоскости *ZOX* обеспечивает существенную свободу в задании потенциала и, соответственно, в управлении поперечным поведением пучка.

Возвращаясь к потенциалам (4) – (6), можно заметить, что, в отличие от потенциала (2), их обращение и запись в форме, аналогичной (3), невозможна. В то же время дальнейший траекторный анализ системы предполагает решение прямой задачи, что, при рассмотрении пока лишь движения в плоскости симметрии, приводит к уравнениям вида

$$\ddot{x} = -f_x \tag{7}$$

или, с учетом особенностей задания потенциала, к уравнениям

$$\ddot{x} = -1 / x_f. \tag{8}$$

Однако, поскольку x_f зависит не от x, а от f, при численном интегрировании (8) возникает необходимость в многократном решении уравнения x = F(f) для определения f по заданному x на каждом шаге интегрирования. При имеющихся выражениях (4) – (6) это приводит как к потере точности, так и неоправданному росту времени вычислений.

С учетом вышеизложенного, представляется логичным применить другой подход. Перейдем к переменной f в качестве независимой. В результате получим уравнение

$$\ddot{f} = -x_{ff} / x_f \cdot \dot{f}^2 - 1 / x_f^2$$
(9)

с начальными условиями

$$f(0) = 0, \ \dot{f}(0) = \dot{x}(0) / x_f(0).$$
 (10)

Но, как показано выше, $x_f(0) = \infty$. Соответственно, $f_x(0) = 0$, и использование второго из начальных условий (10) для однозначного задания траектории становится невозможным.

Выходом из возникшего затруднения может служить введение параметризации. Пусть x = x(p), f = f(p). Тогда из уравнения (7) получаем уравнение для параметра p:

$$\ddot{p} = -(x_{pp} / x_p) \dot{p}^2 - f_p / x_p^2 \qquad (11)$$

с начальными условиями

$$p(0) = 0, \ \dot{p}(0) = \dot{x}(0) / x_p(0).$$
 (12)

Для регуляризации удобно ввести

$$f = p^2, \tag{13}$$

поскольку при этом устраняются дробные степени в структуре выражений (4) — (6). Решение прямой задачи (11), (12) с учетом параметризации (13) демонстрирует совпадение ее результатов с условиями обратной задачи, что и доказывает работоспособность алгоритма (рис. 1).

Следующим этапом исследования является рассмотрение движения заряженной частицы в пространстве трех измерений.

Прежде всего, необходимо построить

потенциал в пространстве при наличии лишь его обратного одномерного представления x = F(f). Задача сводится (ввиду отсутствия зависимости потенциала от z) к задаче аналитического продолжения функции комплексного переменного с прямой на плоскость. Введем комплексный потенциал $\Omega = \psi + i \phi$ и запишем [5]:

$$x + i y = F(-i \Omega) = X(\varphi, \psi) + i Y(\varphi, \psi).$$
(14)

Получаем параметрическое представление

$$x = X(\varphi, \psi) = \operatorname{Re} F(-i\Omega),$$

$$y = Y(\varphi, \psi) = \operatorname{Im} F(-i\Omega),$$
(15)

которое удобно использовать при построении сечений эквипотенциальных поверхностей $\varphi = c = \text{const}$ плоскостями z = const, зафиксировав φ и вариируя ψ .

Уравнения движения в трехмерном случае по-прежнему тривиальны:

$$\ddot{x} = -\phi_x, \ \ddot{y} = -\phi_y, \ \ddot{z} = 0,$$
 (16)

но их прямое решение сталкивается с проблемами, аналогичными описанным для случая одного измерения. Дело в том, что выразить явно φ_x , φ_y через x и y невозможно, а использование x_{φ} , x_{ψ} , y_{φ} , y_{ψ} , через которые представляются функции правой части уравнений (16), приводит к необходимости численного решения системы (15) относительно φ и ψ по ходу процедуры интегрирования. Рассматривать φ и ψ в качестве новых координат нельзя, ввиду неоднозначности задания интегральных кривых набором начальных условий.

К счастью, проверенный на примере плоской задачи метод (11), (12) легко распространяется на случай трех измерений. Итак, вводя для одномерного случая параметр p соотношением f = G(p), мы получили связь

$$x = F(G(p)) = F^*(p).$$

Учитывая представления (14), (15), переходим к комплексной параметризации путем формальной замены x на x + i y, p на p + i q, f на $-i \Omega = \varphi - i \psi$:

$$x + i y = \text{Re } F^*(p + i q) + i \text{Im } F^*(p + i q), (17)$$

$$\varphi - i \psi = \text{Re } G(p + i q) + i \text{Im } G(p + i q). (18)$$





Показано совпадение решения прямой задачи (11), (12) с условиями обратной задачи; $A = W \sin^2 \theta$

Для равенства (13) выражение (18), очевидно, дает следующие соотношения:

$$\varphi = p^2 - q^2, \ \psi = 2pq.$$
 (19)

Отделив вещественную и мнимую части (17), (18), получим параметрическую связь x, y и ϕ, ψ посредством пары p, q.

Приняв p, q за новые координаты, найдем уравнения движения. Согласно равенству (17),

$$x = x(p,q), y = y(p,q).$$
 (20)

Дифференцируя эти функции дважды по времени, а затем, разрешая результат относительно \ddot{p} , \ddot{q} , имеем следующие соотношения:

$$\ddot{p} = ((y_{pp}x_q - y_q x_{pp}) \dot{p}^2 + + 2(x_q y_{pq} - x_{pq} y_q) \dot{p} \dot{q} + + (y_{qq} x_q - x_{qq} y_q) \dot{q}^2 +$$
(21)

+
$$(\ddot{x} y_q - \ddot{y} x_q)) / (x_p y_q - x_q y_p);$$
 (21)

· · · ·

$$q = ((x_{pp}y_p - x_py_{pp})p^2 + + 2(y_px_{pq} - x_py_{pq})\dot{p}\dot{q} + + (x_{qq}y_p - y_{qq}x_p)\dot{q}^2 + + (\ddot{y}x_p - \ddot{x}y_p)) / (x_py_q - x_qy_p).$$
(22)

Входящие в соотношения (21), (22) вторые производные координат *x*, *y* следует заменить домноженными на минус единицу компонентами градиента потенциала, предварительно преобразовав последний с учетом его параметризации. Таким образом, необходимо найти φ_x , φ_y с учетом следующей из (18) параметризации $\varphi = \varphi(p, q)$.

Рассматривая функцию $\varphi = \varphi(p(x, y), q(x, y))$ как сложную и принимая во внимание тождества

$$p(x(p,q), y(p,q)) \equiv p,$$

$$q(x(p,q), y(p,q)) \equiv q,$$

получаем компоненты поля в виде отношений якобианов:

$$\varphi_{x} = \frac{\begin{vmatrix} \varphi_{p} & \varphi_{q} \\ y_{p} & y_{q} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} x_{p} & x_{q} \\ y_{p} & y_{q} \end{vmatrix}}, \quad \varphi_{y} = \frac{\begin{vmatrix} \varphi_{p} & \varphi_{q} \\ x_{p} & x_{q} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} x_{p} & x_{q} \\ y_{p} & y_{q} \end{vmatrix}}.$$
 (23)

Знаменатели в отношениях (23) не равны нулю, по крайней мере в некоторой окрестности плоскости симметрии, ввиду неравенства нулю x_p в одномерном случае.

Результат подстановки ϕ_x , ϕ_y (23) в соотношения (21), (22) имеет вид

$$\ddot{p} = ((y_{pp}x_q - y_q x_{pp}) \dot{p}^2 + 2(x_q y_{pq} - x_{pq} y_q) \dot{p} \dot{q} + 2(x_q y_{pq} - x_{pq} y_q) \dot{p} \dot{q} + (y_{qq} x_q - x_{qq} y_q) \dot{q}^2) / (x_p y_q - x_q y_p) + (24) + (-\phi_p (x_q^2 + y_q^2) + \phi_q (x_p x_q + y_p y_q)) / (x_p y_q - x_q y_p)^2; \\ \ddot{q} = ((x_{pp} y_p - x_p y_{pp}) \dot{p}^2 + 2(y_p x_{pq} - x_p y_{pq}) \dot{p} \dot{q} + 2(y_p x_{pq} - x_p y_{pq}) \dot{p} \dot{q} + (x_{qq} y_p - y_{qq} x_p) \dot{q}^2) / (x_p y_q - x_q y_p) + (25) + (-\phi_q (x_q^2 + y_q^2) + (25))$$

+
$$\varphi_p(x_p x_q + y_p y_q)) / (x_p y_q - x_q y_p)^2$$
. (25)

Начальные условия для уравнений (24), (25) при известных значениях начальных условий $x(0), y(0), \dot{x}(0), \dot{y}(0)$ и с учетом соотношений

$$\dot{x} = x_p \dot{p} + x_q \dot{q}, \ \dot{y} = y_p \dot{p} + y_q \dot{q}$$
 (26)

принимают вид

$$p(0) = 0, q(0) = 0,$$
 (27)

$$\dot{p}(0) = \frac{\dot{x}(0)y_q(0) - x_q(0)\dot{y}(0)}{x_p(0)y_q(0) - x_q(0)y_p(0)},$$
(28)

$$\dot{q}(0) = \frac{x_p(0)\dot{y}(0) - \dot{x}(0)y_p(0)}{x_p(0)y_q(0) - x_q(0)y_p(0)}.$$
 (29)

Уравнения движения (24), (25) и начальные условия (27), (28) получены без учета конкретного вида параметризации. Для произвольного $k \in N$ всегда можно найти поле $x = F_k(f)$ и, используя равенство (17), получить явный вид связи (20). Также легко определить в аналитическом виде все входящие в уравнения (24), (25), (28) производные (20).

С учетом выражений (19) получаем следующие соотношения:

$$\varphi_p = 2p, \ \varphi_q = -2q. \tag{30}$$

Начальные условия (27), (28) полностью определены начальными условиями по координатам *x*, *y*.

Таким образом, задача Коши (24), (25), (27), (28) может быть решена, ее решение — функции p(t), q(t) — найдены. Искомая пространственная траектория определится с учетом (20) как

$$(x(p(t),q(t)), y(p(t),q(t)), \sqrt{2W}\cos\theta \cdot t).$$

Хотя ход решения чрезвычайно прост и прозрачен, подготовительные вычисления требуют достаточно громоздких преобразований, вряд ли возможных за разумное время без применения системы компьютерной алгебры [10].

Тестирование алгоритма проводилось путем сравнения решения задачи для системы «Тутанхамон» [5], заданной параметрически (посредством формул (2), (17)) с результатами прямого интегрирования дви-

жения частицы в поле

$$\varphi(x, y) = \frac{\operatorname{sh}^2 2\pi x - \sin^2 2\pi y}{(\operatorname{ch} 2\pi x + \cos 2\pi y)^2} =$$

$$= \operatorname{Im} i \operatorname{th}^2(x + i y).$$
(31)

Указанные результаты совпали с высокой точностью, что доказывает работоспособность предложенного алгоритма расчета.

Таким образом, в работе исследован класс симметричных электростатических

полей, реализующих фокусировку заданного порядка в их средней плоскости. Предложен эффективный алгоритм расчета траекторий в таких полях, базирующийся на специально введенном параметрическом задании потенциалов. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании новых энергоанализирующих устройств с улучшенными характеристиками.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Галль Л.Н., Галль Р.Н., Голиков Ю.К., Уткин К.Г. Электростатический энергоанализатор. Авторское свидетельство № 544307 СССР. МПК Н 01 Ј 36/26, Н 01 Ј 39/34. Заявители СКБ АП АН СССР, ЛПИ им. М.И. Калинина. № 2091369/25; заявл. 03.01.75; опубл. Бюл. № 3. 1977.

[2] Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др. Времяпролетный масс-спектрометр. Авторское свидетельство № 1247973 СССР. МПК Н 01 Ј 49/40. Заявители СКБ АП АН СССР, ЛПИ им. М.И. Калинина. № 3840525/24-21, заявл. 16.01.85; опубл. Бюл. № 28. 1986.

[3] Галиуллин А.С. Построение систем программного движения. М.: Наука, 1971. 352 с.

[4] Галиуллин А.С. Методы решения обратных задач динамики. М.: Наука, 1986. 224 с.

[5] Голиков Ю.К., Краснова Н.К. Теория синтеза электростатических энергоанализато-

ров. СПб: Изд-во Политехнического университета. 2010. 409 с.

[6] **Gurov V.S., Saulebekov A.O., Trubitsyn A.A.** Analytical, approximate-analytical and numerical methods in the design of energy analyzers. Waltham – San Diego – Oxford – London: Academic Press (Elsevier Inc), 2015. 222 p.

[7] **Yavor M.** Optics of charged particle analyzers. Amsterdam. Academic Press (Elsevier Inc), 2009. 405 p.

[8] **Khursheed A.** Energy analyzer attachments for the scanning electron microscope // Microscopy and Microanalysis. 2015. Vol. 21. No. 4. Pp. 130–135.

[9] Голиков Ю.К., Уткин К.Г., Григорьев Д.В. Обратные задачи теории электростатических энергоанализаторов // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 9. С. 128–131.

[10] Wolfram Mathematica. Сайт производителя программы www.wolfram.com.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 k-solovvev@mail.ru

Solovyev K.V. THE TRAJECTORY ANALYSIS ALGORITHM FOR ELECTROSTATIC FIELDS PROVIDING AN ANGLE FOCUSING OF GIVEN ORDER IN THE PLANE OF SYMMETRY.

A class of focusing electrostatic fields built as inverse corpuscular optics problem solution has been investigated. An effective algorithm to make trajectory analysis of these fields was suggested and tested. The algorithm was based on the special parametric form of potentials representation.

The main complexity of the problem is to treat the result of inverse form of potential representation, where coordinates are functions of the potential and the flux, but it is impossible to give the potential by an explicit function of coordinates. To solve the equations of motion in a direct form, it is necessary to find (numerically) coordinates at every integration step. It reduces the precision and increases the time of the calculations. We suggested using a parametric form of the potential and the relationship between coordinates. Direct equations of motion can be replaced with differential equations for parameters, which can be solved without any difficulty.

The results obtained can be applied to designing of new energy-analyzing devices with enhanced capabilities.

CHARGED-PARTICLE ENERGY ANALYSIS, ELECTRON OPTICS, INVERSE PROBLEM, ANGLE FOCUSING.

REFERENCES

[1] L.N. Gall, R.N. Gall, Yu.K. Golikov, K.G. Utkin, Elektrostaticheskiy energoanalizator [Electrostatic energy analyzer]. Avtorskoye svidetelstvo № 544307 SSSR. MPK H 01 J 36/26, H 01 J 39/34. Zayaviteli SKB AP AN SSSR, LPI im. M.I. Kalinina. No. 2091369/25; zayavl. 03.01.75; opubl. Byul. No. 3. 1977.

[2] L.N. Gall, Yu.K. Golikov, M.L. Aleksandrov, Ye.E. Pechalina, N.A. Kholin, Vremyaproletnyy massspektrometr [Time-of-flight mass spectrometer]. Avtorskoye svidetelstvo № 1247973 SSSR, MPK H 01 J 49/40, Zayaviteli SKB AP AN SSSR, LPI im. M.I. Kalinina, № 3840525/24-21, zayavl. 16.01.85; opubl. Byul. No. 28. 1986.

[3] A.S. Galiullin, Postroyeniye sistem programmnogo dvizheniya [Design of programmed motion systems], Moscow, Nauka, 1971.

[4] **A.S. Galiullin** Metody resheniya obratnykh zadach dinamiki [Methods of inverse dynamics problems solution], Moscow, Nauka, 1986.

[5] Yu.K. Golikov, N.K. Krasnova, Teoriya

sinteza elektrostaticheskikh energoanalizatorov [Theory of energy analyzers synthesis], SPb., Izd-vo Politekhnicheskogo universiteta, 2010.

[6] **V.S. Gurov, A.O. Saulebekov, A.A. Trubitsyn,** Analytical, Approximate-Analytical and Numerical Methods in the Design of Energy Analyzers. Waltham-San Diego-Oxford-London. Academic Press (Elsevier Inc), 2015.

[7] **M. Yavor**, Optics of charged particle analyzers. Amsterdam. Academic Press (Elsevier Inc), 2009.

[8] **A. Khursheed**, Energy Analyzer Attachments for the Scanning Electron Microscope // Microscopy and Microanalysis, 21 (4) (2015) 130–135.

[9] Yu.K. Golikov, K.G. Utkin, D.V. Grigoryev, Obratnyye zadachi teorii elektrostaticheskikh energoanalizatorov [Inverse problems of electrostatic energy analyzers theory], ZhTF. 69 (9) (1999) 128–131

[10] Wolfram Mathematica. Sayt proizvoditelya [Manufacturer site] www.wolfram.com

THE AUTHOR

SOLOVYEV Konstantin V. *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation k-solovyev@mail.ru