

离子透镜程序及其应用

李泉凤, 马 永, 张化一, 汪富生

(清华大学 工程物理系, 北京 100084)

文 摘: 离子透镜程序(LP)用来模拟平面对称或轴对称的静电场作用下的电场分布以及离子在电场中的运动轨迹。作者所开发的 LP, 其电场分布计算采用有限差分法。LP 面向实际应用, 适合于不同电极尺寸、不同初始条件下的静电场分布计算和离子轨迹模拟, 给出系统终点时的束流半径、散角、能量等参数。LP 可用于离子源、电子枪等装置的引出加速系统设计及参数验证。LP 被应用于两个不同系统的静电场计算, 其结果与实际情况符合。

关键词: 束流参数计算; 离子轨迹; 有限差分法

中图分类号: TL 503.3

文献标识码: A

文章编号: 1000-0054(2000)06-0026-03

随着静电透镜, 静电引出加速系统在加速器、离子曝光、离子刻蚀、中子物理实验等领域的日益广泛应用, 计算静电场的程序也逐步发展完善。离子透镜程序(ion lens program, LP)用来模拟平面对称或轴对称的静电场作用下的电场分布以及带电粒子在电场中的运动轨迹; 电场分布计算采用有限差分法, 差分方程采用超松弛迭代法求解; 可以计算粒子到达系统终点时的坐标位置、散角及在系统中的飞行时间等参数; 可用于离子源、电子枪等装置的引出加速系统设计计算、参数验证优化等。

1 程序简介

1.1 程序采用的主要方法及算法改进

大多数电场分布需要用数值方法来解, 其本质是将微分方程离散化。常用的方法有有限元素法、有限差分法、边界元法和电荷密度法。LP 采用有限差分法。

轴坐标系中, 旋转对称静电场电位函数满足 Laplace 方程, 求离散解采用五点差分格式^[1]:

$$V_{i,0} = \frac{1}{6}(V_{i-1,0} + V_{i+1,0}) + \frac{2}{3}V_{i,1}, \quad r_0 = 0;$$

$$V_{i,j} = \frac{1}{4}(V_{i-1,j} + V_{i+1,j} + V_{i,j-1} +$$

$$V_{i,j+1}) + \frac{h}{8r_0}(V_{i,j+1} - V_{i,j-1}), \quad r_0 \neq 0$$

设第 i 个节点经过 k 次迭代后电位值为 $V_i^{(k)}$, 而经过 $k+1$ 次迭代后该点的电位值为 $V_i^{(k+1)}$, 当 k 增加时, 电位值趋向于终值 V 。若 $V_i^{(k)} < V_i^{(k+1)}$, 则可预计 $V_i^{(k+2)}$ 一定会大于 $V_i^{(k+1)}$, 因此计算过程中就不用 $V_i^{(k+1)}$ 代替 $V_i^{(k)}$, 可直接用稍大一点的值去代替 $V_i^{(k+1)}$, 此值为

$$V_i^{(k+1)} = V_i^{(k+1)} + (\omega - 1)(V_i^{(k+1)} - V_i^{(k)}),$$

其中: ω 为超松弛迭代因子, $1 < \omega < 2$ 。考虑到计算的次数可能很大, 在每步计算时均采用重新计算 ω 的方法是非常有必要的, 这样可以提高运算的速度。

粒子在已知电位分布的静电场中的运动轨迹计算采用 Hehtel 级数展开法。在初始条件为:

$$\begin{aligned} z \Big|_{t=0} &= z_0, & r \Big|_{t=0} &= r_0, \\ \frac{dz}{dt} \Big|_{t=0} &= \dot{z}_0, & \frac{dr}{dt} \Big|_{t=0} &= \dot{r}_0 \end{aligned}$$

由级数展开法可得到经过 Δt 后的粒子坐标和速度分量的计算公式为:

$$\begin{aligned} z_1 &= z_0 + \left[\frac{dz}{dt} \right]_0 \Delta\tau + \frac{1}{4} \left[\frac{\partial V}{\partial z} \right]_0 (\Delta\tau)^2 + \\ &\quad \frac{1}{12} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right]_0 \left[\frac{dz}{dt} \right]_0 + \left[\frac{\partial^2 V}{\partial z \partial r} \right]_0 \left[\frac{dr}{dt} \right]_0 (\Delta\tau)^3, \\ r_1 &= r_0 + \left[\frac{dr}{dt} \right]_0 \Delta\tau + \frac{1}{4} \left[\frac{\partial V}{\partial r} \right]_0 (\Delta\tau)^2 + \\ &\quad \frac{1}{12} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \right]_0 \left[\frac{dr}{dt} \right]_0 + \left[\frac{\partial^2 V}{\partial z \partial r} \right]_0 \left[\frac{dz}{dt} \right]_0 (\Delta\tau)^3, \\ \left[\frac{dz}{dt} \right]_1 &= \left[\frac{dz}{dt} \right]_0 + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial V}{\partial z} \right]_0 \Delta\tau + \\ &\quad \frac{1}{4} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \right]_0 \left[\frac{dz}{dt} \right]_0 + \left[\frac{\partial^2 V}{\partial z \partial r} \right]_0 \left[\frac{dr}{dt} \right]_0 (\Delta\tau)^2, \end{aligned}$$

收稿日期: 1999-06-25

作者简介: 李泉凤(1941-), 女(汉), 河南, 教授

$$\left(\frac{dr}{d\tau}\right)_1 = \left(\frac{dr}{d\tau}\right)_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_0 \Delta\tau + \frac{1}{4} \left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\right)_0 \left(\frac{dr}{d\tau}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z \partial r}\right)_0 \left(\frac{dz}{d\tau}\right)_0 \right] (\Delta\tau)^2$$

式中: $\Delta\tau = \Delta t \cdot 2q/m$, q 为粒子的电荷量, m 为粒子的质量。

根据电子光学轨迹相似条件^[12], 将实际的电极尺寸纵向和径向同比例放大, 电位保持不变, 粒子轨迹的尺寸也将同比例放大, 散角保持不变, 因而, 计算长度和直径比较小的加速聚焦系统, 为保证计算精确, 可将其尺寸放大, 在计算输出结果时, 只要同比例缩小尺寸即可。程序容许最大节点数为 6.5×10^4 , 网格由程序自动生成, 步长为 1 mm。实际使用证明, 此种处理方法有利于精确计算尺寸较小的系统(例 1)。有限差分法要求边界封闭, LP 将系统区域扩展为长方形, 边界初始电位赋为零。

LP 首先进行初步计算, 并给出计算的初步结果。这种分步计算的方法有效避免了不必要的时间浪费, 使使用者在初步计算时就可以获得计算的初步结果, 从而判断其正确性。

LP 考虑到软件的使用寿命及其应用的范围, 采用动态计算的技术, 对于不同初始能量、不同初始散角以及不同的离子质量等均单独存储, 便于输入、修改, 因此适用于静电场的各种离子轨迹计算。

基于比较流行的软件设计开放理论, LP 在提供了图形以及文本两种计算结果输出方式后, 还允许在今后的开发中加入其他方式, 如对比图等, 这些功能将随使用者的目的不同而有所区别。

1.2 程序的运行过程及其功能

LP 用 NDP FORTRAN 语言编写, 其运行过程如图 1 所示。在 DOS 下运行离子透镜程序, 输入已经做好的几何参数文件, 屏幕显示电极图; 对待解区域计算电场分布; 输入等位面电位及入射离子

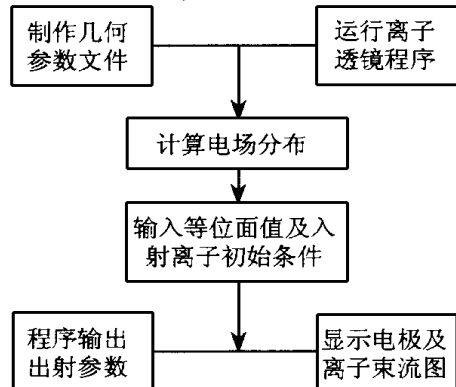


图 1 LP 运行过程框图

参数; 屏幕显示离子通过对称轴的位置及到达终点时的出射参数; 显示离子运动轨迹。

LP 考虑到实际电极的复杂性, 制作几何参数文件时要求把系统电极用长方形和梯形分割, 根据长方形和梯形的坐标值给出电极图。程序并没有限制长方形与梯形的尺寸, 所以对于任何形状的电极, 只要以足够小的图形进行分割, 其误差总是可以很小, 即程序重建的系统电极总是可以充分地接近原电极。

LP 可以计算电子、离子以及中子物理问题。对于采用离子源的静电加速系统, 例如低能质子束装置^[3], 进入吸极的粒子的初始能量, 散角可能不为 0°, 而对于电子枪, 阴极电子的初始能量为 0 eV, 散角也可近似认为 0°。不同的离子具有不同的荷质比, 相同初始条件下, 出口能量和飞行时间等参数不同。LP 允许设置这些参数, 均可输出有效结果, 大大增强了其通用性。

2 应用举例

2.1 电子枪参数设计计算

应用 LP 验证海关大型集装箱检测系统 9 MeV 电子行波直线加速器电子枪参数设计(引出加速系统), 其结构及电子轨迹如图 2 所示。

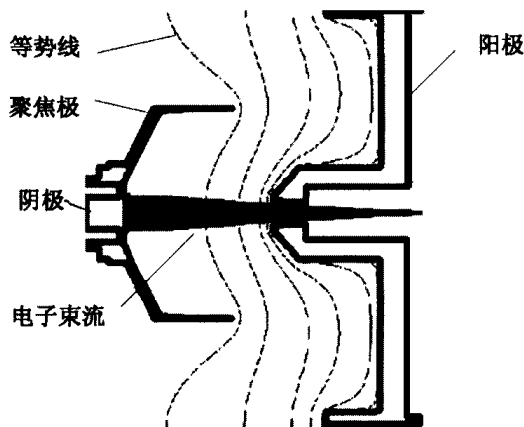


图 2 电子枪静电场部分束流计算图

程序输出结果: 最外层电子仍然在聚焦过程中, 还没有经过对称轴, 得到电子在阳极出口处的半径 $R = 2.17 \text{ mm}$, 散角 $\theta = 2.61^\circ$ 。将此参数配合后续磁场计算, 可以完整描述电子枪的束流状况。

利用 LP 程序对上述系统进行参数优化计算, 选择不同的阴阳极间距以及不同的阴极尺寸, 通过得到的计算结果与原参数比较, 从半径和散角的综合考虑来看, 原参数设计是较为合理的设计。

2.2 低能质子束装置引出加速系统的研制

应用 LP 进行空间模拟用低能质子束装置引出加速系统的研制, 其输出束流如图 3 所示。

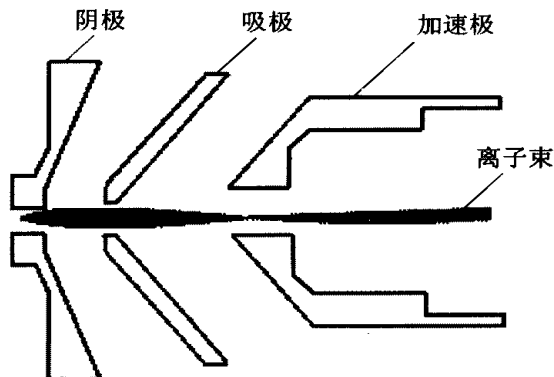


图 3 引出加速系统中不同初始条件下质子轨迹

为比较不同初始条件下的质子轨迹, 我们用从加速电极出来的质子轨迹的最大半散角和最大包络来作比较。初始条件取 3 组情况: 1) 半径 $R = 0 \text{ mm}$, 半散角 θ_2 从 -10° 到 10° 变化; 2) 初始 $\theta_2 = 0^\circ$, 初始半径 R 从 -1.5 mm 到 1.5 mm 变化; 3) R 为 1 mm , θ_2 从 -10° 到 10° 变化。在加速电压为 30 kV 的情况下, 轨迹变化规律类似, 且由于场变化较平稳, 出口的束散角和包络更小, 聚焦效果更好。

以下是选择初始半径 $R = 0 \text{ mm}$, θ_2 为 -10° 至 10° ; 吸极电压为 1 kV , 加速电压为 50 keV 情况, 其输出结果如表 1 所示。从整个情况看, 出口的散角和包络都不是很大, 对整个装置都是合适的。

表 1 不同发射能量(E_e)下的质子束出口散角(θ)及半径(R)分布

E_e/keV	$\theta/^\circ$	R/mm
0.25	2.6	15.0
0.50	3.0	15.0
1.00	3.3	14.2
1.25	3.4	13.8
1.50	2.6	8.0
1.75	2.6	7.5
2.00	2.5	6.0

从计算中可以看出: 随着初始发散能量的增加, 质子的最大散角和束包络将减小; 吸极电压增加, 出口质子束将会聚焦更好, 但当吸极电压接近 10 kV 时, 将产生过聚, 性能变差; 加速电压增大, 质子轨迹聚焦性能会有所下降。

3 小 结

LP 不仅可以计算轴对称电场, 而且可以计算平面对称及非平面对称电场中电子、离子和中子物

理问题等, 并且考虑了程序计算的精确性和效率问题, 在算法上给予了改进; 应用软件设计的理论, 考虑了较多的实际应用情况, 保证了程序的通用性和开放性。计算静电场采用有限差分法, 要给出封闭的边界条件, 而实际应用的电子光学系统电极之间总存在缝隙, 尤其在电极间电位差较大时, 缝隙宽度就更大。处理这类边界条件时只能采用近似方法, 其误差可能很大, 而且计算必须对整个区域剖分求解。这是这种方法本身具有的局限性。

[参考文献] References

- [1] 华中一, 顾昌鑫 电子光学[M] 上海: 复旦大学出版社, 1991.
Hua Zhongyi, Gu Changxin Electron Optics [M] Shanghai: Fudan University Press, 1991. (in Chinese)
- [2] 陈文雄, 西门纪业 电子光学基础[M] 北京: 北京大学出版社, 1986.
Cheng Wenxiong, Ximen Jiye Fundamentals of Electron Optics [M] Beijing: Peking University Press, 1986. (in Chinese)
- [3] 汪富生 空间模拟用低能质子束装置的研制[D] 北京: 清华大学, 1997.
Wang Fusheng Developing of Low Energy Proton Facility for Space Simulation [D] Beijing: Tsinghua University, 1997. (in Chinese)

Ion lens program and its application

LI Quanfeng, MA Yong,

ZHANG huayi, WANG Fusheng

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084, China)

Abstract: The development of electrostatic applications requires a general program to calculate electrostatic fields. The ion lens program (LP) developed by authors can calculate electrostatic field distributions and ion trajectories in symmetric plane or axisymmetric electrode systems. The program input includes the electrode geometry and initial conditions. The program calculates the beam parameters at the end of the system, such as ion radius, divergence angle, energy, etc. The program was applied into two systems with different electrostatic field distributions and gave the results that are consistent with experimental ones.

Key words: ion trajectory calculation; particle beams parameters; finite difference method