

УДК 537.2

Расчет трехмерных электростатических полей с универсальным алгоритмом выделения особенностей поверхностного заряда на основе метода Фикеры

Д. Э. Гринфельд

ФГУ ДП НИИ Электронной и ионной оптики, Москва, Россия

М. А. Монастырский

Институт общей физики РАН, Москва, Россия

Предложен алгоритм расчета трехмерных электростатических полей, основанный на методе интегральных уравнений Фредгольма первого рода и конечно-элементной аппроксимации поверхности и поверхностной плотности заряда на треугольных сетках. Применение теорем Г. Фикеры для специального выделения особенностей поверхностной плотности заряда вблизи особых точек и линий границы обеспечивает высокую (пять значащих цифр) точность расчета потенциала при приемлемых затратах машинного времени, что позволяет эффективно использовать предложенный алгоритм для решения задач прецизионной оптики заряженных частиц.

Задачи компьютерного моделирования в оптике заряженных частиц часто приводят к необходимости численного анализа обширного класса электронно- и ионно-оптических элементов, не обладающих вращательной или плоской симметрией. В частности, к таким элементам относятся отклоняющие системы, квадрупольные линзы, стигматоры и т. п., для расчета электрических и магнитных полей которых необходимо численно решать уравнение Лапласа в трехмерной области произвольной конфигурации. Для подобных задач применяются различные алгоритмы, основанные на методах конечных разностей [1–3], конечных объемов и интегральных уравнений [4–6]. Каждый из этих методов имеет определенные достоинства и недостатки [7]. Так, метод конечных разностей относительно прост в реализации, поэтому он положен в основу многих программ, предназначенных для трехмерных расчетов электростатических полей. Однако для достижения практически приемлемой точности этот метод требует построения регулярной трехмерной сетки, содержащей до нескольких миллионов узлов. Решение получаемого конечно-разностного уравнения требует больших вычислительных затрат, при этом точность результата вблизи электродов остается низкой. Последний недостаток может быть устранен при применении метода конечных объемов, форма которых адаптирована к конфигурации электродов рассчитываемой системы, однако достаточно универсальный алгоритм построения трехмерных конечно-элементных сеток оказывается весьма сложным, что существенно ограничивает применимость этого метода для решения практических задач.

Третий метод — метод интегральных уравнений — предполагает дискретизацию не всего объема, а лишь поверхности электродов, из чего и вытекают его основные преимущества. Во-первых, значительно сокращается число узлов и размерность решаемой системы уравнений, во-вторых, на поверхностях электродов удается построить конечно-элементную сетку, адаптированную к

их форме. Это делает метод интегральных уравнений перспективным для трехмерных электростатических расчетов произвольных трехмерных электронно- и ионно-оптических систем. Все же практическая реализация метода сопряжена с существенными трудностями: уменьшение числа элементов разбиения должно быть скомпенсировано более точной аппроксимацией искомой функции на них, в данном случае — поверхностного электрического заряда. В настоящей работе предложен способ преодоления указанных трудностей, позволивший произвести расчет трехмерного электрического поля с точностью, требуемой для моделирования прецизионных устройств электронной и ионной оптики.

Математическая формулировка метода интегральных уравнений первого рода

Рассмотрим систему $\Gamma = \bigcup_k \Gamma_k$ проводников конечных размеров и предположим, что на k -м электроде задан постоянный потенциал V_k . Электрический потенциал в пространстве между электродами есть гармоническая функция, удовлетворяющая условию Дирихле на границе электродов Γ_k :

$$\Delta\Phi(x, y, z) = 0, \quad (1)$$

$$\Phi(x, y, z) = V_k \quad \text{при} \quad (x, y, z) \in \Gamma_k. \quad (2)$$

Граничные условия (2) также дополняются условием на бесконечности:

$$\Phi(\mathbf{P}) = \Phi_\infty(\mathbf{P}) + O\left(\frac{1}{|\mathbf{P}|}\right), \quad (3)$$

где вектор \mathbf{P} обозначает совокупность трех координат, а функция Φ_∞ определена и гармонична во всем пространстве. В частном случае изолированной системы $\Phi_\infty \equiv 0$.

На поверхности любого проводника, помещенного в электрическое поле, индуцируется электрический заряд, причем потенциал электрического поля, как вне электродов, так и внутри них, дается кулоновским интегралом вида:

$$\Phi(\mathbf{P}) = \int_\Gamma \frac{\sigma(\mathbf{Q})}{|\mathbf{P} - \mathbf{Q}|} dS_Q + \Phi_\infty(\mathbf{P}), \quad (4)$$

где интегрирование ведется по объединению поверхностей электродов $\Gamma = \bigcup_k \Gamma_k$.

Определенный так потенциал автоматически удовлетворяет условиям (1) и (3). Таким образом, задача нахождения потенциала в трехмерной области сводится к нахождению такого двумерного распределения поверхностного заряда $\sigma(\mathbf{Q})$, при котором удовлетворялось бы также и условие (2). Иными словами, мы приходим к интегральному уравнению вида

$$\int_\Gamma \frac{\sigma(\mathbf{Q})}{|\mathbf{P} - \mathbf{Q}|} dS_Q \Big|_{\mathbf{P} \in \Gamma_k} = V_k - \Phi_\infty(\mathbf{P}), \quad (5)$$

которое должно удовлетворяться на всех точках $\mathbf{P} \in \Gamma$.

Аппроксимация поверхности

Как мы видим, в методе интегральных уравнений ключевую роль играет поверхность электродов. Поэтому ее адекватное математическое представление крайне важно. В практически важных случаях эта поверхность является кусочно-гладкой и в принципе может быть задана аналитически. Авторы ряда публикаций, посвященных решению трехмерной задачи электростатики, идут именно этим путем: каждый электрод представляется одной из простых фигур (примитивов) с априорно заданным разбиением на элементы, "естественным" для каждого вида поверхности [5, 6]. Сложные электроды могут задаваться комбинацией нескольких примитивов, среди которых, как правило, присутствуют прямоугольники, овалы, сферические и эллиптические сегменты, цилиндрические, конические и тороидальные поверхности и т. п. Такой подход весьма прост, но имеет ряд существенных недостатков. Во-первых, электроды не всегда имеют простую форму, например, часто ее задают в виде эквипотенциали некоторого желаемого распределения электрического поля. Во-вторых, в случае поверхностей, составленных из нескольких примитивов, линии их пересечения отнюдь не всегда описываются простыми аналитическими выражениями. Далее будет показано, что точное знание линий пересечения крайне важно, поскольку плотность заряда на них может обращаться в бесконечность, давая существенный вклад в кулоновский интеграл в левой части (5).

Исходя из приведенных соображений, мы сочли целесообразным отказаться от традиционного подхода, связанного с представлением поверхности электрода в виде единой аналитической формулы, и перейти к разбиению этой поверхности на отдельные малые элементы, внутри которых поверхность задается несложным полиномиальным выражением со своим набором коэффициентов для каждого элемента. Простейшим случаем такого локального представления поверхности является ее разбиение на треугольники, соприкасающиеся своими сторонами. Внутри каждого треугольника вводится локальная система координат, как показано на рис. 1, а. В пределах элемента локальные координаты пробегают диапазон значений, ограниченный неравенствами

$$u \geq 0, \quad v \geq 0, \quad u + v \leq 1. \quad (6)$$

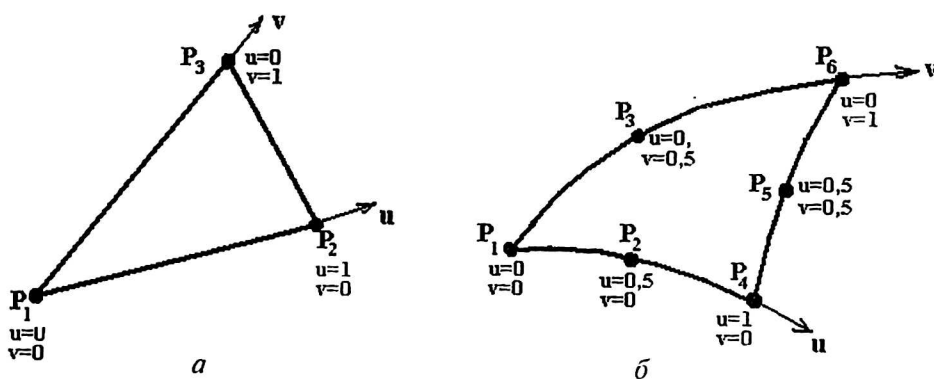


Рис. 1. Локальная параметризация элементов:
а — плоского; б — искривленного

Тогда координаты любой точки внутри элемента выражаются через координаты вершин треугольника линейными функциями:

$$P(u, v) = \Psi_1^{(1)}(u, v) P_1 + \Psi_2^{(1)}(u, v) P_2 + \Psi_3^{(1)}(u, v) P_3, \\ \Psi_1^{(1)} = u; \quad \Psi_2^{(1)} = v; \quad \Psi_3^{(1)} = 1 - u - v. \quad (6)$$

Верхний индекс 1 у функций Ψ подчеркивает, что это функции первого порядка по локальным переменным. Для описания искривленных поверхностей удобно использовать аналогично построенный искривленный элемент второго порядка, сохраняющий, однако, "топологию" треугольника (см. рис. 1, б):

$$P(u, v) = \sum_{m=1}^6 \Psi_m^{(2)}(u, v) P_m,$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(2)} &= (1-u-v)(1-2u-2v); & \Psi_4^{(2)} &= u(2u-1); \\ \Psi_2^{(2)} &= 4u(1-u-v); & \Psi_5^{(2)} &= 4uv; \\ \Psi_3^{(2)} &= 4v(1-u-v); & \Psi_6^{(2)} &= v(2v-1). \end{aligned} \quad (7)$$

Три точки P_1 , P_4 и P_6 представляют углы элемента, а точки P_2 , P_3 и P_5 лежат на его ребрах. Аналогично можно построить локальную аппроксимацию поверхности третьего и более высокого порядка. Одна и та же поверхность может содержать элементы с различным порядком аппроксимации.

Локальное представление поверхности позволяет автоматизировать процесс ввода трехмерной геометрии, что очень важно при построении систем автоматизированного проектирования. Пусть электрод можно представить как объединение или пересечение отдельных примитивов. Алгоритм ввода такой геометрии следующий: пользователь указывает тип, размеры и относительное положение (сдвиг и поворот) каждого из примитивов, а также густоту их разбиения на элементы; программа по отдельности производит разбиение поверхности каждого примитива на плоские или искривленные элементы; автоматически определяются линии пересечения элементов попарно между собой; производится дополнительное подразбиение пересекающихся элементов для того, чтобы линия пересечения проходила по границам элементов; пользователь указывает, какие части разбитых поверхностей следует удалить. Рис. 2 иллюстрирует подразбиение элементов поверхности при обработке линий пересечения.

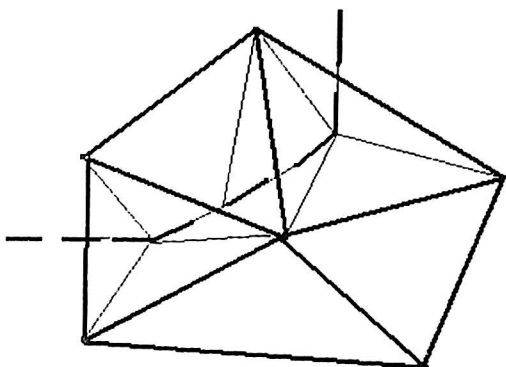


Рис. 2. Дополнительное разбиение элементов поверхности:
ломаная пунктирная линия — линия пересечения поверхностей;
толстые линии — границы элементов до пересечения

Аппроксимация поверхностного заряда

Для численного решения задачи нахождения поверхностной плотности заряда из интегрального уравнения (5) неизвестная функция σ должна быть аппроксимирована функцией из конечномерного пространства Σ кусочно-гладких скалярных функций, определенных во всех точках границы Γ . В качестве функционального пространства Σ естественно выбрать линейное пространство, натянутое на конечный набор базисных функций, обладающих следующими свойствами:

1) базисные функции должны быть непрерывными во всех точках, в которых граница является гладкой, что обеспечивает непрерывность напряженности электрического поля вблизи границы (по одну сторону от нее);

2) в точках нарушения гладкости границ базисные функции должны иметь особенности того же типа, который имеет аппроксимируемая с их помощью поверхностная плотность заряда.

Сначала построим набор регулярных базисных функций, носитель которых представляет собой гладкий участок поверхности. Мы применили набор базисных функций, определенных на треугольных элементах и одновременно используемых для аппроксимации границы Γ . Каждая из базисных функций пространства Σ привязана к определенной точке поверхности, называемой узловой точкой, и отлична от нуля только на элементах, включающих в себя эту точку. В локальных координатах элемента (u, v) узловые точки расположены, как изображено на рис. 3, их число определяется используемым порядком аппроксимации поверхностного заряда $1 \leq M \leq 3$.

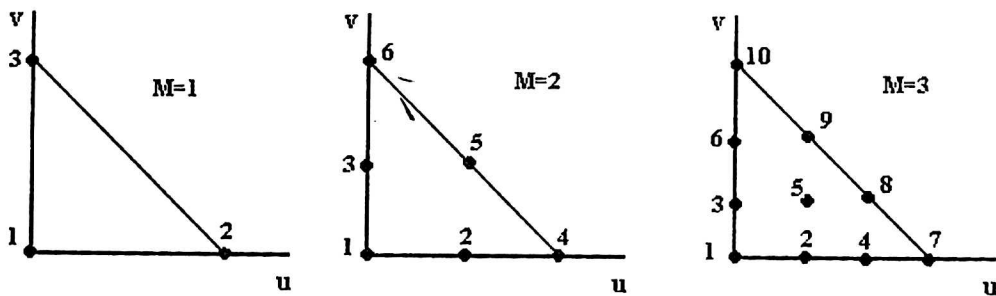


Рис. 3. Узловые точки для базисных функций первого, второго и третьего порядков

Узловые точки, лежащие на ребрах и вершинах элементов, считаются принадлежащими одновременно двум или нескольким из них. Каждой узловой точке i сопоставляется базисная функция $\Psi_i(\mathbf{Q})$, отличная от нуля только на тех элементах, которые непосредственно примыкают к данной узловой точке.

На треугольном элементе, примыкающем к узлу i , базисная функция порядка M однозначно определяется тем, что она представляет собой полином степени M относительно локальных координат, равна единице в узле i и обращается в нуль во всех остальных узлах. Три базисные функции первого порядка и шесть базисных функций второго порядка даются выражениями (5) и (6), соответственно. Приведем также десять полиномов для $M = 3$:

$$\begin{aligned}
 \Psi_1^{(3)} &= (1-u-v)(1-1,5u-1,5v)(1-3u-3v); & \Psi_6^{(3)} &= 4,5v(3v-1)(1-u-v); \\
 \Psi_2^{(3)} &= 9u(1-1,5u-1,5v)(1-u-v); & \Psi_7^{(3)} &= u(3u-1)(1,5u-1); \\
 \Psi_3^{(3)} &= 9v(1-1,5u-1,5v)(1-u-v); & \Psi_8^{(3)} &= 4,5uv(3u-1); \\
 \Psi_4^{(3)} &= 4,5u(3u-1)(1-u-v); & \Psi_9^{(3)} &= 4,5uv(3v-1); \\
 \Psi_5^{(3)} &= 27uv(1-u-v); & \Psi_{10}^{(3)} &= v(3v-1)(1,5v-1).
 \end{aligned}$$

При таком определении базисные функции пространства Σ автоматически непрерывны. Отметим, что порядок аппроксимации заряда на элементе должен быть одним и тем же на всей поверхности электрода. При этом он никак не связан с порядком аппроксимации поверхности на этом элементе.

Теперь перейдем к построению сингулярных базисных функций, обладающих свойством 2. Для правильного учета особенностей поверхностной плотности электрического заряда вблизи острых углов электродов пространство непрерывных базисных функций должно быть дополнено функциями, обращающимися в бесконечность соответствующего порядка на ребре элемента (сингулярные функции первого типа) или в вершине элемента (сингулярные функции второго типа). Сингулярные функции первого типа первого порядка имеют вид:

$$\begin{aligned}
 &\Psi_0^{(1)}u^{-\alpha}, & \Psi_0^{(1)}v^{-\alpha}, \\
 &\Psi_1^{(1)}v^{-\alpha}, & \Psi_1^{(1)}(1-u-v)^{-\alpha}, & (0 < \alpha \leq \frac{1}{2}). \\
 &\Psi_2^{(1)}u^{-\alpha}, & \Psi_2^{(1)}(1-u-v)^{-\alpha},
 \end{aligned} \tag{8}$$

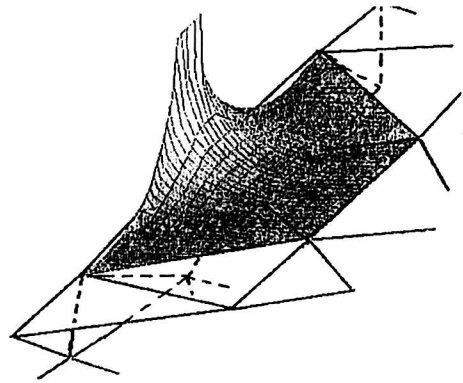
Сингулярные функции второго типа (также первого порядка) имеют вид:

$$\begin{aligned}
 &\Psi_0^{(1)}(u+v)^{-\alpha}, \\
 &\Psi_1^{(1)}(1-u)^{-\alpha}, & (0 < \alpha < 1). \\
 &\Psi_2^{(1)}(1-v)^{-\alpha},
 \end{aligned} \tag{9}$$

Сингулярные функции второго и третьего порядка строятся аналогично: каждому вершинному узлу соответствуют две функции первого типа и одна функция второго типа, а каждому узлу на ребре элемента соответствует только одна сингулярная базисная функция первого типа. Для внутреннего узла 5 (см. рис. 3) при аппроксимации третьего порядка сингулярная базисная функция отсутствует. На рис. 4 показан пример составления сингулярной базисной функции на трех смежных элементах разбиения поверхности.

Рис. 4. Сингулярная базисная функция второго порядка, соответствующая узлу сетки, лежащему на линии пересечения двух поверхностей.

Функция составлена из двух сингулярных функций первого типа и одной — второго типа на смежных треугольных элементах



С использованием базисных функций распределение электрического заряда на поверхности электродов можно аппроксимировать их линейной комбинацией:

$$\sigma(P) = \sum_i \sigma_i \Psi_i(P), \tag{10}$$

где σ_i — коэффициент, соответствующий i -му узлу сетки, а суммирование производится по всем базисным функциям. Поскольку все базисные функции отличны от нуля только на элементах, примыкающих к одному узлу, то в формуле (10) суммирование реально проводится только по узлам того элемента, которому принадлежит точка P . Таким образом, при вычислении заряда в конкретной точке число суммируемых членов равно числу узлов на элементе $(M + 1)(M + 2)/2$. Для внутренних узлов поверхности коэффициент σ_i , очевидно, представляет собой непосредственно значение поверхностной плотности заряда в этом узле, в то время как для сингулярных граничных узлов это коэффициент при члене, обращающемся в бесконечность по степенному закону.

Разложение (10) позволяет представить интегральное уравнение (5) в дискретной форме. При этом функция невязки, определенная на поверхности электродов, имеет вид:

$$R(P \in \Gamma_k) = \sum_i \sigma_i \int_{\Gamma} \frac{\Psi_i(Q)}{|P-Q|} dS_Q - (V_k - \Phi_{\infty}(P)).$$

Выбор коэффициентов σ_i должен минимизировать норму $R(P)$. В качестве нормы невязки мы приняли ее максимальное по модулю значение по всем узловым точкам: $\|R\| = \max_j |R(P_j)|$. Поскольку число узловых точек равно числу неизвестных коэффициентов, мы можем потребовать точного равенства $\|R\| = 0$, т. е. обращения невязки в нуль во всех узловых точках:

$$\sum_j G_{ij} \sigma_j = V_{k[i]} - \Phi_{\infty}(P_i), \tag{11}$$

где

$$G_{ij} = \int \frac{\Psi_j(Q)}{|P_i - P_j|} dS_Q. \tag{12}$$

Здесь $k[i]$ — номер электрода, содержащего узловую точку P_i , а интегрирование в (12) проводится по всем элементам, содержащим узловую точку P_j .

После численного решения системы линейных уравнений (11) потенциал в любой точке пространства вычисляется по формуле (4).

Вычисление показателей особенностей поверхностного заряда

Величину показателя степени α в (8) и (9) следует определить из геометрии системы электродов так, чтобы эти выражения правильно отражали главную часть особенности плотности поверхностного заряда вблизи ребер и вершин электродов. Методом конформных отображений комплексной плоскости можно показать [8], что если две поверхности электрода составляют между собой угол $\gamma \in [0; \pi]$, а потенциал на них есть непрерывная функция, то плотность электрического заряда на линии пересечения имеет асимптотику

$$\sigma \sim \frac{1}{h^\alpha}, \quad \alpha = \frac{\pi - \gamma}{2\pi - \gamma},$$

а h — расстояние до линии пересечения. В частном случае края одиночной поверхности имеем $\gamma = 0$ и $\sigma = 1/2$.

Случай вершины, составленной тремя или более гранями, существенно более сложен. Особенности распределения плотности электрического заряда вблизи таких вершин были исследованы в работах [9—11]. Среди них следует отметить статью Фикеры [11], в которой рассмотрен наиболее общий случай. Метод исследования особенностей плотности заряда, предложенный автором этой статьи, позволяет вычислить показатель степенной особенности α путем решения вспомогательной задачи на собственные значения оператора Бельтрами Лапласа на сфере. Рассмотрим этот метод более подробно.

Пусть многогранный угол образован несколькими плоскостями, как изображено на рис. 5. Без ограничения общности предположим, что электрический потенциал на электроде равен нулю. Введем сферическую систему координат (r, Θ, ϕ) с центром в вершине угла. Потенциал в пространстве удовлетворяет уравнению Лапласа, которое в сферических координатах записывается в виде

$$\Delta\Phi \equiv \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Phi) + \frac{1}{r^2} L[\Phi] = 0, \quad (13)$$

где L — оператор Бельтрами-Лапласа на сфере:

$$L = \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

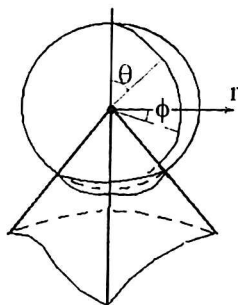


Рис. 5. К расчету показателя степенной особенности

Будем искать электрический потенциал в окрестности вершины методом разделения переменных в виде ряда:

$$\Phi = \sum_{m=0}^{\infty} R_m(r) Y_m(\Theta, \varphi). \quad (14)$$

Здесь зависящие от угловых координат функции Y_m есть собственные функции оператора L на части сферы, внешней по отношению к углу, и обращаются в нуль на его гранях:

$$L[Y_m] + \gamma_m Y_m = 0.$$

Предположим, что собственные значения расположены в порядке возрастания, причем наименьшее из них положительно в силу самосопряженности оператора Бельтрами-Лапласа:

$$0 < \gamma_0 < \gamma_1 \dots$$

Подставляя ряд (14) в уравнение (13) получаем набор обыкновенных дифференциальных уравнений для $R_m(r)$:

$$\frac{\partial^2 (rR_m)}{\partial r^2} - \frac{\gamma_m}{r} R_m = 0$$

с граничным условием $R_m(0) = 0$. Его линейно независимыми решениями являются степенные функции вида $R(r) = r^{p_m}$ с показателями

$$p_m^{(+)} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\gamma_m}}{2}, \quad p_m^{(-)} = \frac{-1 - \sqrt{1 + 4\gamma_m}}{2}.$$

Очевидно, граничному условию в нуле соответствует только первое значение показателя $p_m^{(+)}$, причем наибольший вклад в сумму (14) вблизи вершины дает член с минимальным показателем степени, соответствующий минимальному собственному значению оператора L .

Плотность поверхностного заряда пропорциональна нормальной производной потенциала на границе:

$$\sigma \cong \frac{1}{4\pi r} \frac{\partial Y_0}{\partial \vec{n}} \Big|_{\Gamma} R_0(r) \sim r^{-\alpha},$$

где

$$\alpha = -p_0^{(+)} + 1 = \frac{3 - \sqrt{1 + 4\gamma_0}}{2}.$$

Таким образом, для определения показателя степенной особенности поверхностного заряда в вершине электрода нужно решить вспомогательную задачу на собственные значения оператора Бельтрами-Лапласа на внешней части сферы с центром в вершине угла. Для каждой из вершин эта задача может быть с удовлетворительной точностью (порядка 10^{-2}) решена численно методом конечных элементов.

Тестирование программного обеспечения

Для оценки точности решения задач предложенным методом проведены расчеты нескольких конфигураций электродов, для которых известно точное аналитическое решение.

Первой тестовой электростатической системой является сфера единичного радиуса, находящаяся под потенциалом $\varphi = 1$. Точное решение задачи дается формулой:

$$\varphi = \begin{cases} 1 & , r \leq 1 \\ 1/r & , r > 1 \end{cases} \quad \text{где} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Данной геометрии соответствует постоянная по всей поверхности плотность заряда, поэтому точность численного решения определяется только точностью аппроксимации самой поверхности искривленными элементами. В табл. 1 приведены точные значения потенциала, а также расчетные значения для двух разбиений различной мелкости при втором порядке аппроксимации заряда.

Таблица 1

Координаты точки			Точное значение потенциала	Результат численного расчета	
X	Y	Z		128 элементов	512 элементов
0	0	0	1	0,999982	0,999987
0	0,5	0	1	0,999982	0,999988
0	0	2	0,5	0,4998	0,499983
0	0	5	0,2	0,19993	0,199993
4	3	0	0,2	0,199927	0,199993

Как видно из табл. 1, точность расчета внутри сферы составляет пять значащих цифр для обоих случаев — она определяется точностью вычисления интегралов (12). Вне сферы при увеличении числа элементов разбиения в четыре раза точность расчета возрастает на порядок.

В следующей тестовой задаче рассматривается проводящий диск единичного радиуса, с центром в начале координат и лежащий в плоскости (X, Y). Поверхность диска была разбита на 354 элемента. В этом случае плотность заряда уже не постоянна, более того, она имеет особенность на краю диска. Точное решение дается выражением [8]:

$$\varphi = \frac{2}{\pi} \arcsin \left(\frac{2}{\left[\left(\sqrt{x^2 + y^2} + 1 \right)^2 + z^2 \right]^{1/2} + \left[\left(\sqrt{x^2 + y^2} - 1 \right)^2 + z^2 \right]^{1/2}} \right).$$

Результаты сравнения точного и численного решений приведены в табл. 2.

Таблица 2

Координаты точки			Точное значение потенциала	Результат численного расчета
X	Y	Z		
1,01	0	0	0,9103411	0,90934
1,1	0	0	0,7264447	0,72632
2	0	0	0,3333333	0,333309
1	0	0,1	0,8003974	0,800339
1	0	0,5	0,5703524	0,570333
0	0	1	0,5	0,499978
0	0	2	0,2951672	0,295147
1	1	0	0,5	0,499945

Как видно из табл. 2, на расстоянии 0,01 от края диска точность составляет около 1 %, на расстоянии 0,1 — около 0,1 %, а вдали от особенности верными оказываются пять значащих цифр.

На рис. 6, 7 и 8 представлены примеры использования программы для вычисления электрического поля квадрупольной системы [12] с учетом ограничивающих диафрагм, трехканальной электростатической линзы и прямоугольной ячейки сетки.

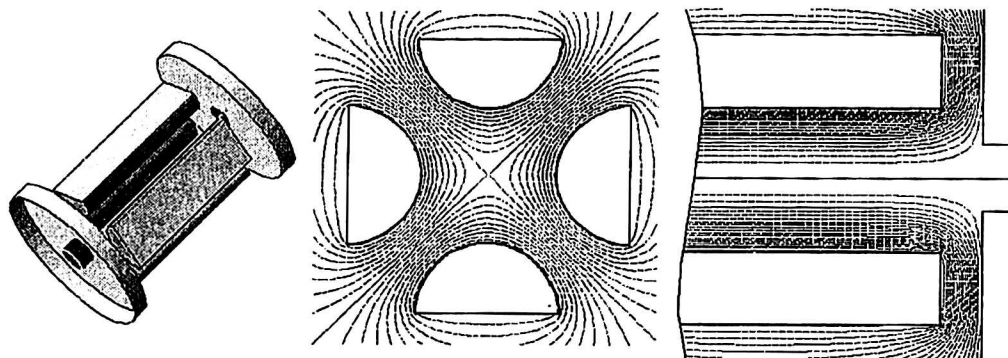


Рис. 6. Квадрупольная система с диафрагмами

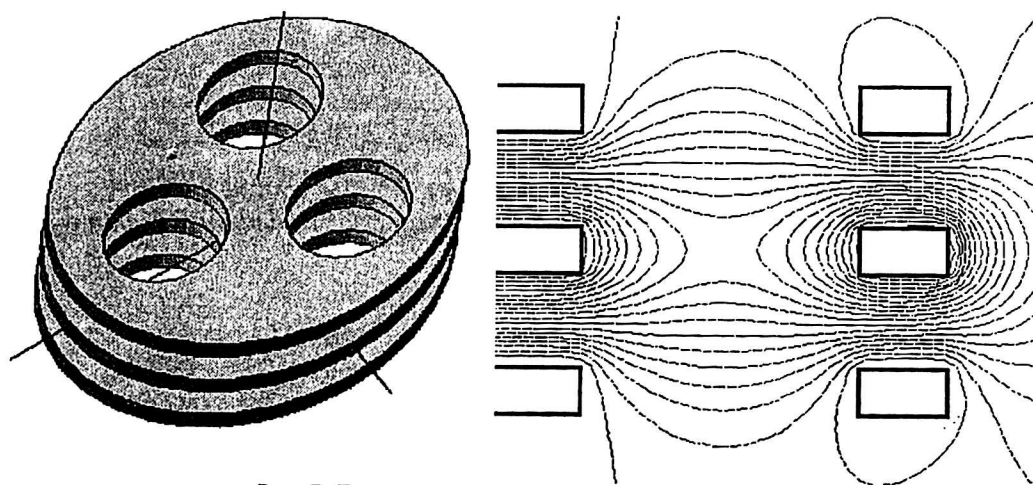


Рис. 7. Трехканальная электростатическая линза

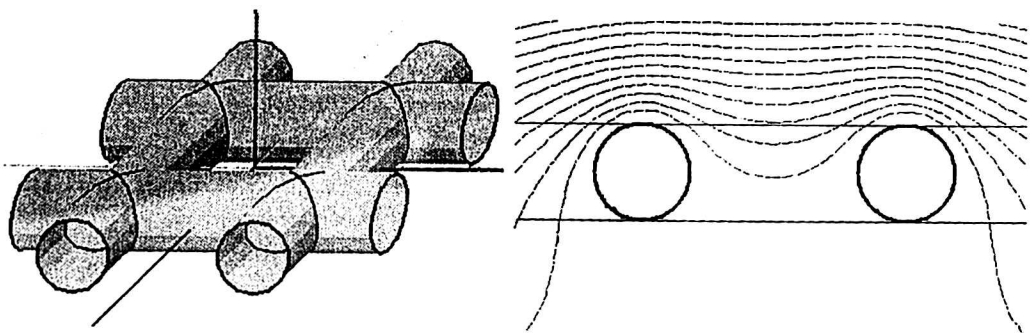


Рис. 8. Ячейка сетки

Заключение

Расчет трехмерного электростатического поля может быть выполнен в рамках метода интегральных уравнений первого рода с относительной погрешностью до 10^{-5} (вдали от острых вершин и ребер электродов). Для достижения высокой точности принципиально важным является выделение особенностей распределения поверхностного заряда вблизи вершин и ребер.

Корректное выделение особенностей требует аппроксимации поверхностного заряда на сетке, согласованной с геометрией электродов. В статье предложен метод автоматизированного построения таких сеток. Предложен также набор базисных функций для аппроксимации поверхностного заряда, включающий как гладкие полиномиальные функции первого, второго и третьего порядков, так и функции, обладающие степенными особенностями на ребрах и вершинах электродов.

Показатель степени для сингулярных базисных функций может быть выражен через наименьшее собственное значение оператора Бельтрами-Лапласа на сегменте сферы, заключенном в телесном угле, внешнем по отношению к электроду (метод Г. Фикеры). Таким образом, решение задачи электростатики методом интегральных уравнений требует предварительного решения ряда спектральных задач для всех вершин электродов в целях нахождения степени особенности электрического заряда в их окрестности.

*Авторы благодарны В. А. Тарасову и И. С. Гайдуковой
за плодотворное участие в дискуссиях по представленной работе.*

Литература

1. Rouse J. Three dimensional computer modeling of electron optical systems//Advances in Optical and Electron Microscopy. 1994. V. 13. P. 1.
2. Dahl D. A., Delmore J. E., Appelhans A. D.//Rev. Sci. Instr. 1990. V. 61. P. 607.
3. Yamamoto Keizoh, Nagami Koichi. Difference method for electrostatic field equation in general orthogonal curvilinear coordinates system//Optic. 1977. V. 48. № 1. P. 69—82.
4. Harting E., Read F. H. Electrostatic lenses//Elsevier, Amsterdam. 1976.
5. Read F. H. CPO-3D User Guide//Available from <http://cpo.ph.man.ac.uk>.
6. Murata Hidekazu, Ohye Toshimi, Shimoyama Hiroshi. Improved 3-D boundary charge method//Proc. SPIE. V. 2858. P. 103—114.
7. Cubric D., Lencova B., Read F. H., Zlamal J. Comparison of FDM, FEM and BEM for electrostatic charged particle optics//Nucl. Instr. & Meth. in Phys. Res. Section A. 1999. V. 427. P. 357—362.
8. Ландау Л. Д., Лифушиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982. Т. 8.
9. Morrison J. A., Lewis J. A. Charge singularity at the corner of a flat plate//Sep. J. Appl. Math. 1976. V. 31. № 2. P. 233—250.
10. Meixner J. The Behavior of Electromagnetic Fields at Edges // July IEEE transactions. V. AP-20. 1972. № 4. P. 442—446.
11. Фикера Г. Асимптотическое поведение электрического поля и плотности электрического заряда в окрестности сингулярных точек проводящей поверхности//Успехи матем. наук. 1975. Т. XXX. Вып. 3 (183). С. 105—124.
12. Yoshinari K., Ose Y., Nakajima F.// Nucl. Instr. & Meth. in Phys. Res. Section A. 1995. V. 363. P. 429—434.

Three-dimensional electric field numeric calculation with universal algorithm of surface-charge singularities treatment based on Fikera's method

D. E. Greenfield

Research Institute for Electron & Ion Optics, Moscow, Russia

M. A. Monastyrskii

General Physics Institute, Moscow, Russia

The algorithm of three-dimensional numeric computation of electrostatic fields based on solving first-kind Fredholm's integral equations with finite element approximation of surface geometry and surface charge distribution on a triangular mesh is proposed. Using Fikera's theorems for special treatment of surface charge singularities in the vicinity of electrodes' vertexes and edges provides high calculation accuracy (up to five correct decimal digits) with acceptable CPU time consumption. It makes the software based on the proposed algorithm effective for solving the problems of precise charge particle optics.