

УДК 537.534.3

Алгоритмы решения задач транспортировки заряженных частиц с помощью функции распределения. Бердников А.С.//Научное приборостроение. Формирование пучков заряженных частиц. Л.:Наука, 1990. - С. 37-43.

Рассмотрены приложения уравнения Лиувилля к практическим расчетам ионно-оптических систем. Показано, что для усредненных характеристик распределения частиц в фазовом пространстве можно значительно уменьшить затраты памяти за счет использования приближенной цепочки уравнений относительно моментов и семиинвариантов. Рассматривается некорректность (отсутствие существования и единственности решения) постановки задачи Коши для стационарного уравнения Лиувилля. Показано, что за счет специальной замены переменных и интегрирования уравнения вдоль эквидистантных относительно стартовой поверхности сечений фазового пространства некорректность задачи Коши устраняется. Лит. - 10 назв., ил. - 1.

А.С.Бердников (НТО АН СССР)

АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ТРАНСПОРТИРОВКИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Представления о фазовом пространстве и связанные с этим понятия (эмиттанс, аксептанс и т.д.) давно и плодотворно используются в электронной и ионной оптике [1-5]. Применение этих понятий связано прежде всего с фундаментальными результатами типа теоремы Лиувилля. На практике расчет электронно- или ионно-оптической системы проводится преимущественно путем расчета траекторий, а распределение частиц в фазовом пространстве привлекается только для более наглядного представления результатов. Безусловно, расчет траекторий (численный или аналитический) дает наиболее исчерпывающую информацию о движении заряженных частиц, однако получение этой информации требует огромных затрат человеческого и машинного времени. Для многих приложений информация о том, в какую точку из какой и с какой скоростью пришла частица, оказывается избыточной. При решении таких задач существенны только начальные и конечные характеристики пучка, т.е. распределения в фазовом пространстве. Представляется соблазнительным получать эти фазовые характеристики пучка непосредственно, т.е. без интегрирования уравнений движения. Возможности получения фазовых характеристик пучка на основании уравнения Лиувилля рассматриваются в данной статье.

Рассмотрим двухмерную плоскую модель движения заряженных частиц. Пусть $P(x, y, v_x, v_y, t)$ - плотность распределения частиц в фазовом пространстве в момент времени t , так что число частиц в элементе объема фазового пространства равно $P(x, y, v_x, v_y, t) dx dy dv_x dv_y$. Если движение частиц происходит в чисто электростатическом поле с потенциалом $U(x, y)$, то функция P должна удовлетворять уравнению Лиувилля:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} v_x + \frac{\partial P}{\partial y} v_y + \frac{\partial P}{\partial v_x} \left(-\frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial P}{\partial v_y} \left(-\frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial y} \right) = 0. \quad (1)$$

Если к уравнению (1) добавить условия для задачи Коши

$$P(x, y, v_x, v_y, t)|_{t=0} = P_0(x, y, v_x, v_y), \quad (2)$$

то с физической точки зрения уравнения (1) и (2) будут описывать эволюцию во времени ансамбля частиц с заданным начальным распределением. Теорема существования и единственности [6] гарантирует математическую корректность задачи (1), (2) (здесь и далее корректность понимается в смысле существования и единственности решения).

Прямому численному решению задачи (1), (2) мешает большая размерность задачи:

для представления среза функции распределения в момент времени $t = \text{const}$ необходимо использовать четырехиндексную матрицу. Но для большинства приложений детальное знание плотности распределения не нужно — достаточно знать некоторый набор интегральных характеристик типа среднего значения, дисперсии и т.д. Это позволяет заменить уравнение (I) несколькими приближенными уравнениями меньшей размерности.

Рассмотрим преобразование Фурье от функции P по переменным v_x, v_y (преобразование заведомо существует, если функция P финитна в пространстве скоростей):

$$F(x, y, \omega_x, \omega_y, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dv_x dv_y P(x, y, v_x, v_y) \exp(-i(\omega_x v_x + \omega_y v_y)). \quad (3)$$

Из уравнения (I) следует, что функция F , определенная согласно (3), удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial F}{\partial t} + i \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial \omega_x} + \frac{\partial^2 F}{\partial y \partial \omega_y} \right) + i \left(-\frac{e}{m} \right) \left(\frac{\partial U}{\partial x} \omega_x + \frac{\partial U}{\partial y} \omega_y \right) F = 0. \quad (4)$$

Поскольку вероятностные моменты от функции распределения P по переменным v_x, v_y совпадают со значениями производных от F по переменным ω_x, ω_y при $\omega_x = 0, \omega_y = 0$, то из уравнения (4) легко получается бесконечная цепочка уравнений для моментов:

$$\left\{ \begin{aligned} M_{nk}(x, y, t) &= \int dv_x dv_y (v_x)^n (v_y)^k P(x, y, v_x, v_y, t) = \\ &= (i)^{n+k} \frac{\partial^{n+k} F(x, y, \omega_x, \omega_y)}{(\partial \omega_x)^n (\partial \omega_y)^k} \Big|_{\omega_x=0, \omega_y=0} \\ \\ \frac{\partial M_{00}}{\partial t} + \frac{\partial M_{10}}{\partial x} + \frac{\partial M_{01}}{\partial y} &= 0 \\ \\ \frac{\partial M_{10}}{\partial t} + \frac{\partial M_{20}}{\partial x} + \frac{\partial M_{11}}{\partial y} + \frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial x} M_{00} &= 0 \\ \\ \frac{\partial M_{01}}{\partial t} + \frac{\partial M_{11}}{\partial x} + \frac{\partial M_{02}}{\partial y} + \frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial y} M_{00} &= 0 \\ \\ \frac{\partial M_{20}}{\partial t} + \frac{\partial M_{30}}{\partial x} + \frac{\partial M_{21}}{\partial y} + \frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial x} M_{10} &= 0 \\ \\ \frac{\partial M_{02}}{\partial t} + \frac{\partial M_{12}}{\partial x} + \frac{\partial M_{03}}{\partial y} + \frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial y} M_{01} &= 0 \\ \\ \frac{\partial M_{11}}{\partial t} + \frac{\partial M_{21}}{\partial x} + \frac{\partial M_{12}}{\partial y} + \frac{e}{m} \left(\frac{\partial U}{\partial x} M_{01} + \frac{\partial U}{\partial y} M_{10} \right) &= 0 \\ \\ \dots \dots \dots \end{aligned} \right. \quad (5)$$

Полученная бесконечная цепочка уравнений оказывается эквивалентной исходному уравнению (I), поскольку при не слишком обременительных предположениях по последовательности моментов однозначно восстанавливается функция распределения P [7].

Оборвем на некотором шаге бесконечную систему уравнений (5), дополнив ее алгебраическими уравнениями, выражающими старшие моменты через младшие (прием, применяемый в статистической физике [8] при построении цепочек уравнений ББГКИ (Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона)). Полученная приближенная система будет требовать вместо одной четырехиндексной матрицы несколько двумерных матриц, так что она вполне может быть решена на ЭВМ средней мощности.

Заменяем функцию F на ее логарифм:

$$G(x, y, \omega_x, \omega_y, t) = \ln(F(x, y, \omega_x, \omega_y, t)).$$

Поскольку при $\omega_x = 0, \omega_y = 0$ функция $F = \int P dx dy > 0$, то функция G корректно определена в окрестности точки $\omega_x = 0, \omega_y = 0$. По ряду причин функция G оказывается более удобной для использования, чем исходная функция F . Функция G удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} + i \left(\frac{\partial G}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial \omega_x} + \frac{\partial G}{\partial y} \frac{\partial G}{\partial \omega_y} + \frac{\partial^2 G}{\partial x \partial \omega_x} + \frac{\partial^2 G}{\partial y \partial \omega_y} \right) = \\ = i \left(\frac{e}{m} \right) \left(\frac{\partial U}{\partial x} \omega_x + \frac{\partial U}{\partial y} \omega_y \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Производные от функции G , называемые семиинвариантами, также образуют полную систему статистических характеристик функции распределения [9]. Из уравнения (6) следует, что семиинварианты удовлетворяют цепочке уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} S_{nk}(x, y, t) &= (i)^{n+k} \frac{\partial^{n+k} G(x, y, \omega_x, \omega_y, t)}{(\partial \omega_x)^n (\partial \omega_y)^k} \Big|_{\omega_x=0, \omega_y=0} \\ \frac{\partial S_{00}}{\partial t} + \frac{\partial S_{00}}{\partial x} S_{10} + \frac{\partial S_{00}}{\partial y} S_{01} + \frac{\partial S_{10}}{\partial x} + \frac{\partial S_{01}}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial S_{10}}{\partial t} + \frac{\partial S_{00}}{\partial x} S_{20} + \frac{\partial S_{00}}{\partial y} S_{11} + \frac{\partial S_{10}}{\partial x} S_{10} + \frac{\partial S_{10}}{\partial y} S_{01} + \\ &+ \frac{\partial S_{20}}{\partial x} + \frac{\partial S_{11}}{\partial y} = \left(-\frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial S_{01}}{\partial t} + \frac{\partial S_{00}}{\partial x} S_{11} + \frac{\partial S_{00}}{\partial y} S_{02} + \frac{\partial S_{01}}{\partial x} S_{01} + \frac{\partial S_{01}}{\partial y} S_{01} + \\ &+ \frac{\partial S_{11}}{\partial x} + \frac{\partial S_{02}}{\partial y} = \left(-\frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial y} \right) \end{aligned} \right. \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\partial S_{20}}{\partial t} + \frac{\partial S_{20}}{\partial x} S_{10} + 2 \frac{\partial S_{10}}{\partial x} S_{20} + \frac{\partial S_{00}}{\partial x} S_{30} + \frac{\partial S_{20}}{\partial y} S_{01} + 2 \frac{\partial S_{10}}{\partial y} S_{11} + \\
& + \frac{\partial S_{00}}{\partial y} S_{12} + \frac{\partial S_{30}}{\partial x} + \frac{\partial S_{21}}{\partial y} = 0 \\
& \frac{\partial S_{11}}{\partial t} + \frac{\partial S_{11}}{\partial x} S_{10} + \frac{\partial S_{10}}{\partial x} S_{11} + \frac{\partial S_{01}}{\partial x} S_{20} + \frac{\partial S_{00}}{\partial x} S_{21} + \frac{\partial S_{11}}{\partial y} S_{01} + \\
& + \frac{\partial S_{10}}{\partial y} S_{02} + \frac{\partial S_{10}}{\partial y} S_{11} + \frac{\partial S_{00}}{\partial y} S_{12} + \frac{\partial S_{21}}{\partial x} + \frac{\partial S_{12}}{\partial y} = 0
\end{aligned}$$

В отличие от моментов M_{nk} , которые неограниченно возрастают с ростом номера, последовательность семиинвариантов S_{nk} достаточно быстро сходится к нулю для "обычных" распределений и легко обрывается, начиная с некоторого номера. Так, для гауссовского распределения все семиинварианты выше второго порядка тождественно равны нулю (однако гауссовское распределение – единственное, обладающее конечным рядом ненулевых семиинвариантов). Бесконечная цепочка уравнений (7) эквивалентна бесконечной цепочке уравнений (5), поскольку между семиинвариантами и моментами существует однозначная связь.

Уравнение (1) используется в самых различных областях (уравнения Лиувилля, Больцмана, Власова и т.д.) и в силу этого довольно хорошо исследовано. Большинство приближенных методов решения уравнения (1) можно интерпретировать как более или менее удачную аппроксимацию характеристической функции (т.е. преобразования Фурье F от плотности распределения P). Так, разложение функции F в ряд Тейлора в окрестности нуля эквивалентно нахождению первых моментов от функции распределения. Разложение функции P в ряд из комплексных экспонент соответствует представлению плотности распределения в виде ряда из дельта-функций, т.е. прямому моделированию методом Монте-Карло. При решении уравнения Больцмана методом Чепмена-Энскога, когда функция распределения представляется через многочлены, ортогональные с весом $x^{\alpha} \exp(-\beta^2 x^2)$ [10], аппроксимация функции F принимает вид:

$$F(\omega) = \exp(-\omega^2/\beta^2) (H_0 + H_1(-i\omega) + H_2(-i\omega)^2 + \dots).$$

Наконец, представлению функции плотности через семиинварианты соответствует представление функции F в виде

$$F(\omega) = \exp(S_0 + S_1(-i\omega) + S_2(-i\omega)^2 + S_3(-i\omega)^3 + \dots).$$

Из последнего представления, в частности, следует, что для хорошей сходимости необходимо обрывать ряд для семиинвариантов для номеров вида $4k+2$ или $4k+3$ (иначе функция F не будет стремиться к 0 на бесконечности).

Задача решения уравнения Лиувилля в стационарном случае (т.е. когда электростатический потенциал $U(x, y)$ и плотность распределения $P(x, y, v_x, v_y)$ не зависят от времени t) оказывается более сложной. В этом случае уравнение (1) принимает вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} v_x + \frac{\partial \rho}{\partial y} v_y + \frac{\partial \rho}{\partial v_x} \left(-\frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial v_y} \left(-\frac{e}{m} \frac{\partial U}{\partial y} \right) = 0, \\ \rho(x, y, v_x, v_y) \Big|_{x=0} = \rho_0(y, v_x, v_y). \quad (8)$$

Физически уравнение (8) с начальным условием задачи Коши описывает транспортировку пучка в статическом поле при заданном начальном эмиттансе (здесь и далее под эмиттансом понимается срез функции распределения по фиксированной координате, а не геометрическая область, внутри которой функция распределения отлична от нуля).

Сделаем замену переменных $(v_x, v_y) \rightarrow (E, \alpha)$:

$$\begin{cases} E = m \frac{(v_x)^2 + (v_y)^2}{2} + eU(x, y) \\ \alpha = \arctg(v_y/v_x) \end{cases}$$

В новых переменных уравнение для функции $\rho(x, y, E, \alpha)$ имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} \cos \alpha + \frac{\partial \rho}{\partial y} \sin \alpha + \frac{2}{E - eU(x, y)} \frac{\partial \rho}{\partial \alpha} \left(\frac{dU}{dy} \cos \alpha - \frac{\partial U}{\partial x} \sin \alpha \right), \\ \rho(x, y, E, \alpha) \Big|_{x=0} = \rho_0(y, E, \alpha). \quad (9)$$

В результате число активных переменных в уравнении (9) уменьшилось. Если ввести вероятностные характеристики (моменты, семинварианты), рассматривая преобразование Фурье по переменным $\frac{1}{E - eU(x, y)}$ и $\frac{1}{E - eU(x, y)}$, (т.е. по тангенсу угла наклона вектора скорости и по обратной кинетической энергии), то получаемая цепочка уравнений при своем решении будет требовать использования лишь одномерных массивов.

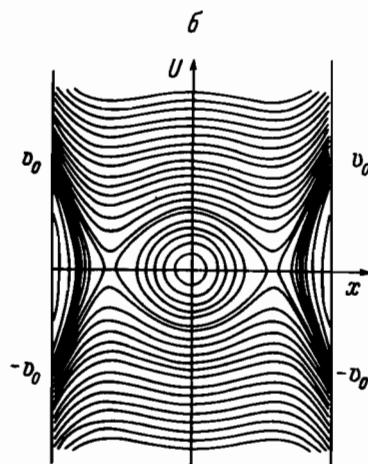
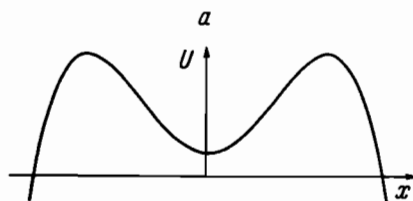
Существенное отличие уравнений (1), (2) от уравнений (7), (8) состоит, однако, в том, что задача Коши перестает быть корректной, т.е. решение задачи не всегда существует, а если и существует, то не всегда единственно. Формально эта некорректность связана с тем, что коэффициент при $\partial \rho / \partial x$ обращается в ноль [6]. С физической точки зрения некорректность возникает из-за возможности возвратных траекторий.

На рисунке показана одномерная модель движения с потенциалом $U(x, y) = Ax^2 - Bx^4$ и фазовые траектории в плоскости (x, v) , являющиеся линиями уровня функции $\rho(x, v)$ и характеристиками для уравнения (8). Отсюда ясно, что:

начальное значение функции $\rho(x, v)$ при $x = x_0$ не может быть произвольным: значения ρ при $x = x_0$ и $v \in [0, V_0]$ совпадают со значениями ρ при $x = x_0$ и $v \in [-V_0, 0]$; значения функции ρ в конечной плоскости $x = x_1$ при $v \in [-V_0, V_0]$ никак не связаны с начальными значениями ρ при $x = x_0$ и могут быть произвольными при заданных начальных условиях;

существует область фазовой плоскости, в которой функция распределения определяется не краевыми (при $x = x_0$, $x = x_1$) условиями, а предысторией ансамбля заряженных частиц.

Указанную некорректность задачи Коши можно исправить, если модифицировать постановку задачи. Заменим переменную x на новую переменную $\ell = \ell(x, y, v_x, v_y)$,



Движение заряженных частиц в одномерном модельном поле:

а - одномерный потенциал $U(x, y) = Ax^2 - Bx^4$; б - фазовые траектории в плоскости (x, v)

где функция L должна удовлетворять уравнению

$$-\frac{\partial L}{\partial x} \cos \alpha + \frac{\partial L}{\partial y} \sin \alpha + \frac{\partial L}{\partial \alpha} \cdot \frac{2}{E - eU(x, y)} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \cos \alpha - \frac{\partial U}{\partial x} \sin \alpha \right) = 1. \quad (10)$$

В таком случае уравнения для функции $P(\ell, y, E, \alpha)$ и для обратной замены переменных $X(\ell, y, E, \alpha)$ имеет вид:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial y} \sin \alpha + \frac{\partial P}{\partial \alpha} \frac{2}{E - eU(x, y)} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \cos \alpha - \frac{\partial U}{\partial x} \sin \alpha \right) = 0 \\ & \frac{\partial X}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial y} \sin \alpha + \frac{\partial X}{\partial \alpha} \frac{2}{E - eU(x, y)} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \cos \alpha - \frac{\partial U}{\partial x} \sin \alpha \right) = \cos \alpha \\ & P(\ell, y, E, \alpha)|_{\ell=0} = P_0(y, E, \alpha) \\ & X(\ell, y, E, \alpha)|_{\ell=0} = X_0(y, E, \alpha) \end{aligned} \right. \quad (11)$$

В такой постановке задачи Коши для системы уравнений (11) она становится корректной, т.е. при любых функциях P_0, X_0 решение существует и единственно.

Рассмотрим физический смысл проделанных преобразований. Если в фазовом пространстве задано множество точек, являющихся стартовой поверхностью для заряженных частиц, и если мы потребуем, чтобы функция $L(x, y, E, \alpha)$ обращалась в ноль для этих точек, то значение $L(x, y, E, \alpha)$ для точки фазового пространства будет равно длине траектории, проведенной из данной точки до пересечения со стартовой поверхностью. Таким образом, функция L будет определена для всех точек фазового пространства, через которые проходят траектории, выходящие со стартовой поверхности.

В силу такого физического смысла функции L решение задачи (11) будет эквивалентно расчету функции распределения вдоль последовательных равноудаленных от стартовой поверхности (в смысле длины соединяющих траекторий) поверхностей фазового пространства. Значение эмиттанса в выходном сечении получается в результате определения точек пересечения последовательных фазовых поверхностей и сечения фазового пространства, соответствующего выходному сечению ионно-оптической системы. Если для каких-то точек выходного сечения не найдется пересекающей фазовой поверхности, то это будет означать, что для данной точки не существует траектории, проходящей через стартовую поверхность. Значение эмиттанса, т.е. функции $P(x, y, E, \alpha)$ в такой точке следует положить равным нулю.

Данный метод модификации задачи Коши можно назвать методом эквидистантных фазовых поверхностей в силу физического смысла функции $L(x, y, E, \alpha)$. В случае возвратных или замкнутых траекторий функция $L(x, y, E, \alpha)$ может перестать быть однозначной функцией точки фазового пространства, однако корректность задачи Коши

(11) сохранится. Отметим, что в правой части уравнения (10) может стоять любая гладкая, не обращающаяся в ноль, функция. Новая функция $L^*(x, y, E, \alpha)$ будет равна интегралу от этой функции вдоль фазовой траектории, а промежуточные поверхности в фазовом пространстве будут равноудаленными в новой метрике.

В заключение надо отметить, что данная работа была бы невозможна без внимания и полезных обсуждений со стороны Ю.К.Голикова, Л.Н.Галля и А.П.Щербакова, которым автор выражает искреннюю благодарность за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лоусон Дж. Физика пучков заряженных частиц. - М.: Мир, 1980.
2. Лихтенберг Л. Динамика частиц в фазовом пространстве. - М.: Мир, 1972.
3. Баранова Л.А., Явор С.Я. Электростатические электронные линзы. - М.: Наука, 1986.
4. Бенфорд А. Транспортировка пучков заряженных частиц. - М.: Атомиздат, 1969.
5. Галль Л.Н., Голиков Ю.К./Ахроматические электростатические транспортирующие элементы с плоскостью симметрии/Научное приборостроение: Сб. научн. тр. Л.: Наука, 1987.
6. Гюнтер Н.М. Интегрирование уравнений первого порядка в частных производных. - М.-Л.: ОНТИ-ГТТИ, 1936.
7. Ахиезер Н.И. Классическая проблема моментов. - М.: ГИФМЛ, 1961.
8. Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. - М.: Мир, 1965.
9. Ширяев В.П. Вероятность. - М.: Наука, 1982.
10. Елецкий А.В. и др. Явления переноса в слабоионизированной плазме. - М.: Атомиздат, 1975.

М.И.Явор (НТО АН СССР)

КРАЕВОЕ ПОЛЕ ТОРОИДАЛЬНОГО ЭНЕРГОАНАЛИЗАТОРА

Краевые поля оказывают существенное влияние на параметры ионно-оптических систем. В электростатических системах их учет особенно важен в случаях, когда ввод пучка заряженных частиц в устройство производится в зазор между электродами, имеющими различные потенциалы. Такая ситуация имеет место в секторных электростатических энергоанализаторах, в некоторых конструкциях зеркальных энергоанализаторов и т.д. [1, 2]. Простейшей моделью краевого поля секторного дефлектора является поле плоского конденсатора с экранирующей диафрагмой [3]. Эта модель позволяет правильно описать воздействие краевого поля на пучок заряженных частиц в параксиальном приближении. Однако для достаточно точного расчета коэффициентов aberrаций второго порядка и вычисления aberrаций более высоких порядков необходимо учитывать влияние на краевое поле кривизны электродов конденсатора. Потенциал краевого поля цилиндрического дефлектора может быть найден методом конформных отображений [4]. Для систем, электроды которых искривлены в аксиальном направлении (тороидальный анализатор, цилиндрическое зеркало), ситуация является более сложной. Попытка по-