

微分代数方法在静电电子透镜任意 高阶像差分析中的应用

程 敏, 唐天同, 姚振华

(西安交通大学电子与信息工程学院, 陕西西安 710049)

摘 要: 微分代数是计算机数值分析领域中的一个非常有效的方法, 它以非标准分析理论为基础, 可以实现任意高阶微分的准确计算. 本文根据微分代数方法的基本原理, 将其引入到静电电子透镜的任意阶像差分析的计算中. 通过计算例子, 可以看出微分代数方法的计算结果非常精确, 精度仅受限于机器精度和算法误差. 同时结合微分代数方法可以很方便地计算到任意高阶像差的特性, 给出了所研究的透镜全部五阶像差的分布图形.

关键词: 微分代数; 静电电子透镜; 像差分析

中图分类号: O463.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2002) 12-1800-04

Differential Algebraic Method for Arbitrary High Order Aberration Analysis of Electrostatic Electron Lens Systems

CHENG Min, TANG Tian-tong, YAO Zhen-hua

(School of Electronics and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Shaanxi 710049, China)

Abstract: Differential algebraic method is an effective technique in computer numerical analysis. It can exactly implement differentiation up to arbitrary high order based on the nonstandard analysis theory. The principle of differential algebraic method is applied to calculate arbitrary high order aberrations of electrostatic electron lens systems. An example is given to show that the numerical results have excellent accuracy, and the accuracy is limited only by the machine precision and the arithmetic errors. The arbitrary high order aberrations are conveniently calculated by differential algebra method and the fifth-order aberration diagrams are given.

Key words: differential algebra; electrostatic electron lens; aberration analysis

1 引言

随着高清晰度显示技术和现代电子束曝光技术的不断发展, 对关键的电子光学器件和仪器装置的光学性能提出了越来越高的要求, 对其中电子光学系统的像差分析及校正是其中的焦点课题之一. 研究表明, 为达到高分辨、小的光栅与拼合失真及在特殊曲面上会聚等要求, 都必须计算及校正系统的五阶乃至更高阶的聚焦与偏转像差. 虽然目前许多求解像差的方法如传统的逐次近似理论^[1], 正则理论^[2], Lie 代数方法^[3]等简化了复杂系统高阶像差的推演和表述, 但是在数值计算及计算机实现上像差计算仍很复杂和繁冗. 在 1994 年第四届国际带电粒子光学会议上, 有学者报告了关于扫描探针系统的五阶像差计算研究, 已被评议为过于繁琐. 本文采用的微分代数方法, 为带电粒子光学系统的高阶像差分析计算提供了一个非常有效的工具.

微分代数是 A Robinson 所提出的“非标准分析”理论和简正级数理论为基础^[4], 结合计算机技术形成的一种崭新的“自动微分”技术^[5], 使得微分运算作为一种代数算子而实现.

这样对于任意光滑的函数, 无论是否能解析表达, 在对其数值运算求解的同时可将其任意阶导数“自动”求出, 而没有截断误差和舍入误差. 基于这一特点, 我们求解描述电子光学系统的传递映射方程, 即可得出该系统的任意高阶像差性质. 此外, 利用微分代数方法, 各个电子光学元件的传递映射方程很容易级联.

本文根据微分代数方法的基本原理, 研究了它在静电电子透镜高阶像差分析中的应用. 针对一种轴上场分布具有解析表达式的 Schiske 型静电透镜, 利用微分代数方法对其进行了计算, 计算的结果同解析解相比较, 其数值精确度非常高; 同时, 基于微分代数还可以计算任意高阶像差的特性, 文中也给出了 Schiske 型静电透镜的五阶像差分布图形.

2 微分代数的基本原理

微分代数是以前非标准分析和简正技术理论为基础的, 非标准分析的独特性之一就是在分析理论中引入了无穷小量和无穷大量.

收稿日期: 2001-07-07; 修回日期: 2002-01-05

基金项目: 国家自然科学基金 (No. 69971019)

对于有 v 个变量 x_1, x_2, \dots, x_v 的任意一个光滑的函数 $f(x_1, x_2, \dots, x_v)$, 其 $0 \sim n$ 阶导数在微分代数中可用 ${}_n D_v$ 结构来表示, 这些导数以特定的顺序排列, 记为 DA 矢量 $\mathbf{h} = (a_1, a_2, \dots, a_N)$. 根据级数理论, 一个函数在某点附近可级数展开为:

$$f = f_0 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)x_1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)x_2 + \dots + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}\right)x_1^2 + \dots + \left(\frac{\partial^v f}{\partial x_1 \partial x_2 \dots \partial x_v}\right)x_1 x_2 \dots x_v + \dots \quad (1)$$

其中各单项式的系数就对应着 DA 矢量的各个分量. 因此 ${}_n D_v$ 的维数 N 就是 v 个变量 $0 \sim n$ 次单项式的个数, 即为:

$$N(n, v) = (n+v)! / (n! v!) = C(n+v, v) \quad (2)$$

设第 I 个单项式为 $M_I = x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_v^{i_v}$, 定义系数 $F_I = i_1! i_2! \dots i_v!$, 则在 ${}_n D_v$ 中定义加法、数乘及乘法为:

$$\begin{aligned} (a_1, a_2, \dots, a_N) + (b_1, b_2, \dots, b_N) &= (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots, a_N + b_N) \\ t \cdot (a_1, a_2, \dots, a_N) &= (t \cdot a_1, t \cdot a_2, \dots, t \cdot a_N) \\ (a_1, a_2, \dots, a_N) \cdot (b_1, b_2, \dots, b_N) &= (c_1, c_2, \dots, c_N) \end{aligned} \quad (3)$$

其中 t 为任意实数, 系数 c_I 为:

$$c_I = F_I \cdot \sum_{\substack{0 \leq J, K \leq N \\ M_J M_K = M_I}} \frac{a_J \cdot b_K}{F_J \cdot F_K}, I = 1, 2, \dots, N \quad (4)$$

在 ${}_n D_v$ 中还可以定义“求偏导”的运算, 如一阶偏导可定义为:

$$\partial_j (a_1, a_2, \dots, a_N) = (d_1, d_2, \dots, d_N), j = 1, 2, \dots, v \quad (5)$$

其中:

$$d_I = \begin{cases} 0, & \text{若 } M_I \text{ 为 } n \text{ 次单项式} \\ a_j, & \text{若 } M_I \text{ 为低于 } n \text{ 次的单项式} \end{cases} I = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

(J 为 $M_I \cdot x_j$ 的序号)

可以证明 ∂_j 运算满足微分算子的乘法规则:

$$\partial(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = (\partial \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} + \mathbf{a} \cdot (\partial \mathbf{b}) \quad (7)$$

正是由于求偏微分 ∂_j 运算的存在, 使得 ${}_n D_v$ 结构被称为微分代数. 在微分代数中, 微分的“微商极限”定义与“ ϵ - δ ”定义是一致的.

任意实数 r 在 ${}_n D_v$ 结构中表示为 $(r, 0, \dots, 0)$, 在微分代数中存在一系列第一个分量为 0, 而以后各分量不全为 0 的 DA 矢量 $(0, q_2, \dots, q_N)$, 它们满足:

$$(0, 0, \dots, 0) < (0, q_2, \dots, q_N) < (r, 0, \dots, 0), \text{ 当 } r > 0 \text{ 时} \quad (8)$$

因此 $(0, q_2, \dots, q_N)$ 在 0 和任意正实数之间, 也就是说, $(0, q_2, \dots, q_N)$ 是“无穷小”量或称之为“微分”量. 其中有一些特殊的“无穷小”量, 它们对应于 $x_i (i = 1, 2, \dots, v)$ 的分量分别为 1, 而其它分量为 0, 我们把它们称为“微分单元”. 任意一个 DA 矢量, 它的第一个分量叫做“实部”, 而其它分量叫做“微分部”. “无穷小”量有一个重要的性质, 即“幂零”性, 就是对 ${}_n D_v$ 中的“无穷小”量求高于 n 次的幂, 其结果为零, 公式表示为:

$$(0, q_2, \dots, q_N)^m = (0, 0, \dots, 0), \text{ 当 } m > n \text{ 时} \quad (9)$$

数学基本函数(如三角函数、指数函数、对数函数等)都可以通过级数展开推广到微分代数中^[6], 而且由于微分代数中的“无穷小”的幂零性, 只需将级数展开有限项即可, 而不会有截断误差和舍入误差. 例如:

$$\log[(a_1, a_2, \dots, a_N)] = \log\{a_1 \cdot [1 + (0, \frac{a_2}{a_1}, \frac{a_3}{a_2}, \dots, \frac{a_N}{a_1})]\}$$

$$\begin{aligned} & \log(a_1) + \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i+1} \frac{1}{i} (0, \frac{a_2}{a_1}, \frac{a_3}{a_2}, \dots, \frac{a_N}{a_1})^i \\ &= \log(a_1) + \sum_{i=1}^n (-1)^{i+1} \frac{1}{i} (0, \frac{a_2}{a_1}, \frac{a_3}{a_2}, \dots, \frac{a_N}{a_1})^i, \end{aligned} \quad a_1 > 0 \quad (10)$$

3 微分代数在静电电子透镜高阶像差分析中的应用

任何一个带电粒子光学系统的聚焦和成像等性质均可用一个传递映射来描述, 表示为:

$$\mathbf{r}_f = \mathcal{R}(\mathbf{r}_i, \delta) \quad (11)$$

其中 \mathbf{r}_f 是粒子轨迹的末坐标(包括位置和斜率), \mathbf{r}_i 粒子的初始坐标, δ 代表系统的参量. $\partial \mathcal{R} / \partial \mathbf{r}$ 对应着系统的像差, $\partial \mathcal{R} / \partial \delta$ 称之为系统的灵敏度. 除非极简单的情况, 传递映射一般是无法写出其解析式的, 通常将 \mathcal{R} 沿着一条“参考轨迹”展开为泰勒级数, 线性项称为一阶高斯光学性质, 三次方项称为三阶像差, 以此类推. 随着映射展开的阶数越高, 映射求解越精确, 但求解的复杂度也急剧变大, 甚至到了难以使用的程度. 而根据微分代数的原理可知, 它可以不推导像差的具体表达式, 而是只要计算一条“参考轨迹”, 即可自动得出系统的高斯光学性质和各阶像差系数的大小, 其复杂度完全与计算阶数无关, 并且没有截断误差, 计算精度仅受限于机器精度. 因此将微分代数方法引入求解像差的领域, 将是一个很好的解决方案.

在直角坐标系 (x, y, z) 中, 电子在电场中的运动方程可表达为^[7]:

$$\begin{cases} x'' = \frac{1}{2u}(1+x'^2+y'^2)\left(\frac{\partial u}{\partial x} - x' \frac{\partial u}{\partial z}\right) \\ y'' = \frac{1}{2u}(1+x'^2+y'^2)\left(\frac{\partial u}{\partial y} - y' \frac{\partial u}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (12)$$

旋转对称系统中, 电场 u 可由轴上电位 ϕ 延拓确定, 经过推导得^[8]:

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= \phi(z) - \frac{(x^2+y^2)}{4} \phi''(z) + \frac{(x^2+y^2)^2}{64} \phi^{(4)}(z) \\ &\quad - \dots + \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \phi^{(2n)}(z) \frac{(x^2+y^2)^n}{4} + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

由于“无穷小”量的幂零性, 可将上述级数截断到所需的阶数, 而不会引入截断误差. 这样, 就可以利用现有的算法如龙格-库塔法, 哈密预测校正法等编程计算式(12)表示的电子运动方程, 同时将算法中相应的量转化成微分代数量. 运动方程求解后, 该系统的高斯光学性质及各阶像差性质就随之得出, 所得计算结果误差仅受限于机器精度和所采用的求解轨迹方程算法的误差.

为了清楚的展现微分代数在静电场高阶像差求解过程中的正确性、有效性和简洁性, 我们以一个例子说明. 这里计算的例子是以 Schiske 提出的 Schiske 型静电透镜为例^[9], 它是一种被广泛研究的重要模型, 其轴上电场分布具有以下解析形式:

$$\phi(z) = \phi_0 \left(1 - \frac{k^2}{1+(z/a)^2}\right) \quad (14)$$

将式(14)代入旁轴轨迹方程,并令:

$$z = : a \cot \Psi, \zeta = \sqrt{\phi_0} \int \frac{d\Psi}{\sqrt{\phi}} = \int_0^\psi \frac{d\theta}{(1 - k^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}} \\ = F(\Psi, k), \omega^2 = 1 - \frac{k^2}{2} \quad (15)$$

这里 $F(\Psi, k)$ 是第一类椭圆积分.

若物平面位于 $z = z_0$ 处,则经过计算,与之共轭的像平面位于^[9]:

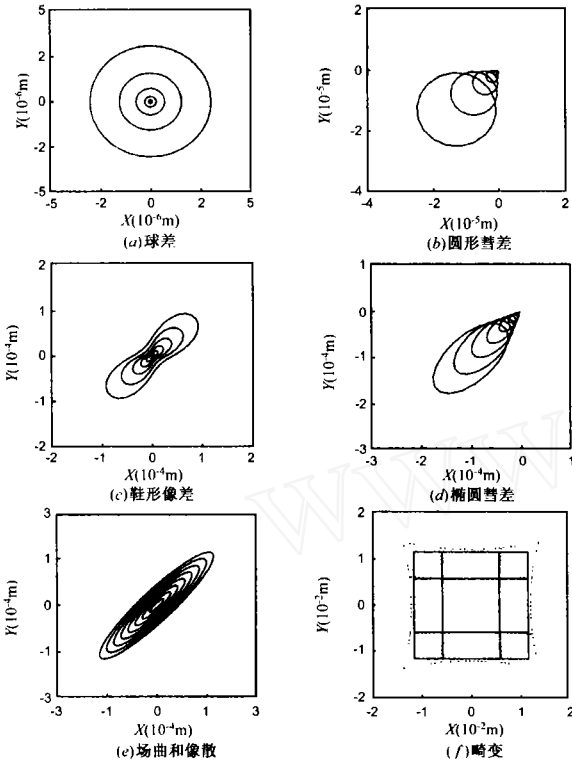


图 1 (a)中, $x_0 = 0, y_0 = 0, r'_0 = 0 \sim 5 \text{ mrad}$; (b) ~ (e)中, $r_0 = 5 \text{ mm}, \phi_0 = 450, r'_0 = 0 \sim 5 \text{ mrad}$; (f)中, 实线为高斯图像, 虚线为高斯图像和五阶畸变的叠加

$$\zeta_i = \zeta_0 - n \frac{\pi}{\omega} \quad (16)$$

表 1 Schiske 静电电子透镜的高斯性质的理论解和微分代数所得结果比较

	M	M_s	$-1/f_i$	C_s
解析解	-1.633299180136	-0.612018921815	-3.217556194266	-1198.665836584
微分代数结果	-1.633299180119	-0.612018921804	-3.217556194246	-1198.665836548
相对误差	1.04084×10^{-11}	1.79733×10^{-11}	6.21590×10^{-12}	3.00334×10^{-11}

($\phi_0 = 5 \text{ V}, k^2 = 0.5, a = 0.025 \text{ m}, z_0 = -0.5 \text{ m}$)

从表中两种方法的相对误差大小可看出微分代数方法在求解高斯性质时具有很高的精度,此外由前面所述,应用微分代数方法在求出高斯性质的同时,还计算了全部五阶像差系数.下面给出 Schiske 静电透镜的全部五阶像差分布图形.

应用微分代数方法和我们的电子光学微分代数软件,很容易把高阶像差计算推广到七阶或更高阶像差的计算.

4 结论

随着高清晰度显示技术和现代电子束曝光技术的不断发

展,五阶以至更高阶像差的研究与校正成为必需.利用微分代数独有的特点,可以使得任意高阶像差的计算变得非常简洁、精确和有效.本文应用了微分代数的基本原理,将其引入到静电电子透镜的任意高阶像差的分析计算中.通过计算具有解析解的 Schiske 型静电电子透镜,可以看出微分代数的计算结果非常精确,精度仅受限于计算机的机器精度和求解轨迹方程的算法误差.同时结合微分代数方法可以很方便地计算到任意高阶像差的特点,计算了这一透镜的全部五阶像差系数,给出了其五阶像差的分布图形.本文将微分代数方法引入到

还可以推导得到尺寸放大率 M 和 f_i 为:

$$M = (-1)^n \frac{\sin \Psi_0}{\sin \Psi_i} \quad (17)$$

$$\frac{1}{f_i} = \frac{1}{a} \frac{\sqrt{\phi_0}}{\phi_i} (\sin \Psi_0 \cos \Psi_i \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \Psi_i} \cos \Psi_i - \cos \Psi_0 \sin \Psi_i \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \Psi_0}) \quad (18)$$

相应的三阶球差系数为:

$$C_s = Ma \frac{(1 - k^2 \sin^2 \Psi_0)^{\frac{3}{2}}}{2 \sin^4 \Psi_0} \left\{ \frac{E_0(k) - E_i(k)}{k^2(1 - k^2)} - \frac{n\pi}{\omega} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{8 - k^2}{16\omega^4} \right) - \frac{1}{2(1 - k^2)} \left[\frac{\sin 2\Psi_0}{(1 - k^2 \sin^2 \Psi_0)^{\frac{1}{2}}} - \frac{\sin 2\Psi_i}{(1 - k^2 \sin^2 \Psi_i)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\} \quad (19)$$

其中 $E(k)$ 代表第二类椭圆积分:

$$E_0(k) = \int_0^{\Psi_0} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta, E_i(k) = \int_0^{\Psi_i} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (20)$$

在旋转坐标系中,通过传递映射的概念,可将此静电透镜的高斯性质表示为^[10]:

$$\begin{bmatrix} x_g \\ y_g \\ x'_g \\ y'_g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M & & & \\ & M & & \\ & -\frac{1}{f_i} & & \\ & & M_s & \\ & & -\frac{1}{f_i} & M_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \\ x'_0 \\ y'_0 \end{bmatrix}$$

其中 (x_g, y_g, x'_g, y'_g) 为高斯像点的位置和斜率坐标, (x_0, y_0, x'_0, y'_0) 为物点的位置和斜率坐标, M_s 为角放大率的负数^[7]:

$$M_s = \frac{1}{M} \frac{\sqrt{\phi_0}}{\sqrt{\phi_i}} \quad (21)$$

运用微分代数方法,就不需要如上繁琐的理论推导计算,在直接计算轨迹方程(12)的同时即可得到透镜的高斯光学性质和各阶像差性质.应用我们课题组编写的电子光学微分代数软件^[11],对于式(14)所示的静电电子透镜的轴上电位分布取如下实际的参量: $\phi_0 = 5 \text{ V}, K^2 = 0.5, a = 0.025 \text{ m}$, 计算的物平面位于 $z_0 = -0.5 \text{ m}$.表 1 给出解析解和微分代数方法的计算结果:

静电电子透镜的像差分析计算中,并可进一步将其推广到其它带电粒子光学系统的高阶像差计算即非线性传递性质的分析中。

参考文献:

- [1] Soma T. Relativistic aberration formulas for combined electric-magnetic focusing-deflection system [J]. *Optik*, 1977, 49: 255 - 262.
- [2] 西门纪业. 电子光学正则理论与束流计算 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1994.
- [3] Dragt J Forest E Lie. Algebra Theory of Charged-particle Optics and Electron Microscopes [J]. *Adv in Electronics and Electron Phys* 1986, 67: 65 - 120.
- [4] Robinson A. Nonstandard analysis [A]. *Proceedings of the Royal Academy of Sciences Ser A64* [C]. Amsterdam: North-Holland, 1961, 64: 432 - 440.
- [5] Iri M. History of automatic differentiation and rounding error estimation [A]. *Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation and Application* [C]. The first SIAM Workshop on Automatic Differentiation, Breckenridge, Colorado, 1991. 3 - 16.
- [6] Berz M. Differential algebraic description of beam dynamics to very high orders [A]. *Particle Accelerators* [C]. 1989, 24, 109 - 124.
- [7] 唐天同. 高等电子光学 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1996.
- [8] Glaser W. *Grundlagen der Elektronenoptik* [M]. Springer-Verlag, Wien, 1952.
- [9] Hawkes P W, Kasper E. *Principles of Electron Optics Volume 2* [M]. London, Academic Press, 1989.

- [10] Hawkes P W, Kasper E. *Principles of Electron Optics Volume 1* [M]. London, Academic Press, 1989.
- [11] Wang L P, Tang T T, Cai J. Study on the object oriented implementation of automatic differentiation technique [J]. *Optik*, 1999, 110: 449 - 454.

作者简介:



程 敏 女, 1975 年 8 月出生于山东临沂市, 1997 年毕业于西安交通大学电子工程系并获学士学位, 现为西安交通大学电子科学与技术系博士研究生, 主要研究方向为 ULSI 电子束曝光系统的场数值计算和有关带电粒子光学领域的理论计算。



唐天同 男, 1938 年 10 月出生于四川成都市, 1961 年毕业于北京清华大学无线电电子学系, 现为西安交通大学电子与信息工程学院教授、物理电子学学科首位博士生导师, 主要从事有关带电粒子光学、光电子技术与电子、离子与光子束和纳米加工技术等方面的教学与科学研究工作, 在国内外重要期刊和会议上发表论文

150 余篇, 专著 4 本。