

ショートノート

## スpline関数による軸上電位分布の表現†

村上 純‡\* 大岩 元‡

荷電粒子光学系に用いられる電界の計算においては、光学軸と呼ばれる直線の近くのみが興味の対象となる。このような場合には光学軸上のポテンシャル分布がわかれば、その近くの電界を計算することができる。したがって、軸上ポテンシャルを求めるという1次元問題を解けばよい。そこで、スpline関数を用いて軸上ポテンシャルを表現し、各区間の多項式の係数を求めるのに、境界条件と区分点におけるポテンシャル（とその導関数）の連続条件から一次方程式を解いて決めるという新しい解法を試みた。また、この方法を代表的なレンズ電極と偏向電極に適用して、その有効性を確かめた。

### 1. はじめに

電子顕微鏡やCRTなどの荷電粒子光学系に用いられる電界の計算においては、光学軸と呼ばれる直線の近くのみが興味の対象となる。このような場合には光学軸上のポテンシャル分布がわかれば、その近くの電界を計算することができる（2章(2)式参照）。したがって、軸上ポテンシャルを求めるという1次元問題を解けばよい。

そこで、スpline関数を用いて軸上ポテンシャルを表現し、各小区間ににおける多項式の係数を求めるのに、境界条件と区分点におけるポテンシャル（とその導関数）の連続条件から一次方程式を解いて決めるという新しい解法を試みた。

### 2. 軸上ポテンシャルによる軸外ポテンシャルの表現

電界ポテンシャル  $\phi(z, r, \theta)$  はラプラス方程式

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \quad (1)$$

を満足することから、軸上ポテンシャル関数  $\Phi_m(z)$  を用いて次のように表現することができる<sup>1)</sup>。

$$\begin{aligned} \phi(z, r, \theta) &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \Phi_m^{(2j)}(z) r^{2j+m}}{j! (m+1)(m+2)\cdots(m+j)} \cos(m\theta) \\ &\quad (2) \end{aligned}$$

† An Expression of Axial Potential Distribution by Spline Functions by JUN MURAKAMI and HAJIME OHIWA (Department of Information and Computer Sciences, Toyohashi University of Technology).

‡ 豊橋技術科学大学情報工学系

\* 現在 熊本電波工業高等専門学校情報工学科

証明は(2)式を(1)式に代入することによって、容易に行なうことができる。この式から、軸上ポテンシャル関数  $\Phi_m(z)$  が方位角  $\theta$  に関するすべてのフーリエ成分についてわかれば、軸外の任意の点のポテンシャル  $\phi(z, r, \theta)$  を計算することができる。

荷電粒子光学系を設計する場合には  $r$  の小さい、光学軸 ( $z$  軸) の近くだけが問題となる。そこで、(2)式の  $r$  のべき乗に  $m$  があることから高次のフーリエ成分は無視することができる。また、このような系の電極に対称性から少數のフーリエ成分しかもたない場合が多い。

たとえば、荷電粒子を集束するレンズ界は軸対称のため(2)式の中の  $m=0$  の項（フーリエ成分）から成り、次式で表される。

$$\begin{aligned} \phi_0(z, r) &= \phi_0(z) - \frac{r^2}{4} \phi_0^{(2)}(z) + \frac{r^4}{64} \phi_0^{(4)}(z) \\ &\quad - \frac{r^6}{2304} \phi_0^{(6)}(z) + \dots \quad (3) \end{aligned}$$

荷電粒子を偏向するには、 $m=1$  の項が用いられる。

$$\begin{aligned} \phi_1(z, r, \theta) &= r \left[ \phi_1(z) - \frac{r^2}{8} \phi_1^{(2)}(z) \right. \\ &\quad \left. + \frac{r^4}{192} \phi_1^{(4)}(z) - \dots \right] \cos \theta \quad (4) \end{aligned}$$

したがって偏向電極は、この項が主として現れるような対称性をもつように構成される。たとえば、図2(2)に示す八重極偏向電極がその一例である。

そこで、このような光学系の電界を計算する場合には、まず電極によって与えられる境界条件をフーリエ分解し、興味のある成分についてポテンシャルの軸上分布を求める。これさえわかれば、(2)式を用いて軸

外のポテンシャルを計算することができる。

### 3. スプライン関数による軸上ポテンシャルの表現

軸上ポテンシャル分布  $\Phi_m(z)$  を  $n$  次の区分多項式

$$P_i(z) = a_{i0} + a_{i1}z + a_{i2}z^2 + \dots + a_{in}z^n$$

$$(z_i \leq z \leq z_{i+1}, i=0 \sim k-1) \quad (5)$$

によって表現する. ここで  $k$  は区分の数であり, 区分点では隣接する多項式とその  $n-1$  次までの導関数は連続であるとする. このことから  $n(k-1)$  個の方程式

$$P_{j-1}^{(j)}(z_i) = P_j^{(j)}(z_i)$$

$$(j=0 \sim n-1, i=1 \sim k-1) \quad (6)$$

が得られる。また、電極上のポテンシャルをフーリエ分解することによって得られた、点  $(r_i, z_i)$  における境界条件  $\phi_m(z_i, r_i, \theta)$  を (3), (4) 式に代入し (5) 式の表現を用いると、 $m=0$  (レンズ) の場合

$$\phi_0(z_i, r_i)$$

$$\cong P_i(z_i) - \frac{r_i^2}{4} P_i^{(2)}(z_i) + \frac{r_i^4}{64} P_i^{(4)}(z) - \dots \\ (i=0 \sim k-1) \quad (7\text{ a})$$

$$\phi_0(z_k, r_k)$$

$$\cong P_{k-1}(z_k) - \frac{r_k^2}{4} P_{k-1}^{(2)}(z_k) + \frac{r_k^4}{64} P_{k-1}^{(4)}(z_k) - \dots \quad (7b)$$

$m=1$  (偏向器) の場合

$$t_k^4 z_k^4, \quad d_k = z_k^2 - r_k^2/2, \quad e_k = z_k^4 - (3/2)r_k^2 z_k^2, \quad f_k = z_k^4 - 3r_k^2 z_k^2 + (3/8)r_k^4, \quad g_k = z_k^5 - 5r_k^2 z_k^3 + (15/8)r_k^4 z_k$$

図 1 5次のスプライン関数に対する係数行列

Fig. 1 Coefficient matrix for the fifth-order spline function.

$$\begin{aligned} \phi_i(z_i, r_i, \theta) \equiv & r_i \left[ P_i(z_i) - \frac{r_i^2}{8} P_i^{(2)}(z_i) \right. \\ & \left. + \frac{r_i^4}{192} P_i^{(4)}(z_i) - \dots \right] \cos \theta, \\ i(&=0 \sim k-1) \end{aligned} \quad (8\text{ a})$$

$$\phi_i(z_k, r_k, \theta) \equiv r_k \left[ P_{k-1}(z_k) - \frac{r_k^2}{8} P_{k-1}^{(2)}(z_k) + \frac{r_k^4}{192} P_{k-1}^{(4)}(z_k) - \dots \right] \cos \theta \quad (8\ b)$$

が成立する。ここで  $z_i$  は区分点の  $z$  座標,  $r_i$  は  $z_i$  における電極の  $r$  座標である。これらの境界条件式から  $k+1$  個の方程式が得られる。区分多項式の係数を未知数とするとその数は  $(n+1)k$  個となるので、まだ  $n-1$  個の条件が足りない。そこで対象とする区間の両端で  $n-1$  次から  $(n+1)/2$  次までの導関数を零とする条件をつけ加える。

これらの連立一次方程式を解くことにより、(5)式の係数を決めることができるので、軸上ポテンシャル分布が求まる。解法としては、ピボットの部分選択法を行ったガウス消去法を用いた。図1に  $n=5, m=0$  の場合について係数行列を示す。非零量は対角線近くにブロックとして現れるので、記憶容量、計算量の点でも有利である。

この方法の利点は(2)式を用いて軸上のみならず任意の点のポテンシャルが計算できることにある。実際この方法を用いて電極上で境界条件を与えることができた。

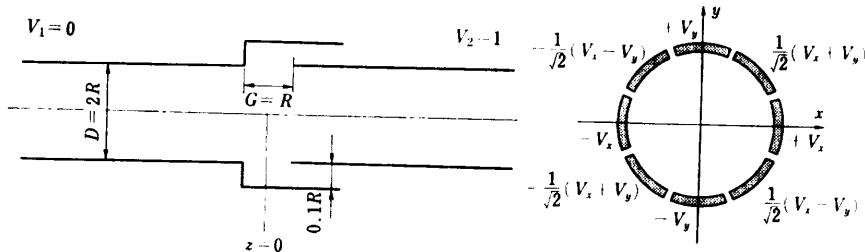


図 2(1) 電極の配置  
Fig. 2(1) An arrangement of electrode.

図 2(2) 八重極偏向器  
Fig. 2(2) Octopole deflector.

#### 4. 適用例

この計算法の有効性を確かめるために、図 2 に示すような電極配置について適用してみた。電極  $V_1, V_2$  が円筒を用いて形成される場合には、これらの電極によって生じる電界には  $m=0$  の成分しか含まれない。したがって  $\Phi_0(z)$  が求まればよいことになる。計算にあたっては、 $z = -10R \sim 10R$  の区間を  $k=324$  区間に分割した。この分割は中心付近で細かくし、端へ行くに従って粗くした。スプライン関数の次数は  $n=5$  とした。この結果、連立一次方程式の元数は 1,944 となつた。得られた軸上ポテンシャル分布を図 3(a)に示す。

この方法の正しさを調べるために、電極上における電位を軸上ポテンシャルから計算してみた。計算結果と電極電位との相対誤差を図 4(a)に示す。境界条件は多項式の区分点 (z) 座標に対応する電極上で与えたが、この点では誤差は約  $E-13$  程度である。これは解いた一次方程式の残差を評価したことにあたる。区分点以外の電極上における誤差は  $V_1, V_2$  電極の境界の両側の区間で最大  $1.0 E-4$  程度となり、境界から遠くなるに従ってしだいに減少している。しかし、きざみ幅が大きくなる区間 ( $z \leq 0.25R$  および  $z \geq 0.75R$ ) に入ると、まん中の区間 ( $0.25R \leq z \leq 0.75R$ ) に比べて誤差も若干大きくなり、再び減少していく。一般に、相対誤差の値はきざみ幅を細かくすることにより、小さくできることがわかった。

次にこの方法を偏向電極の電界にも適用した。電極

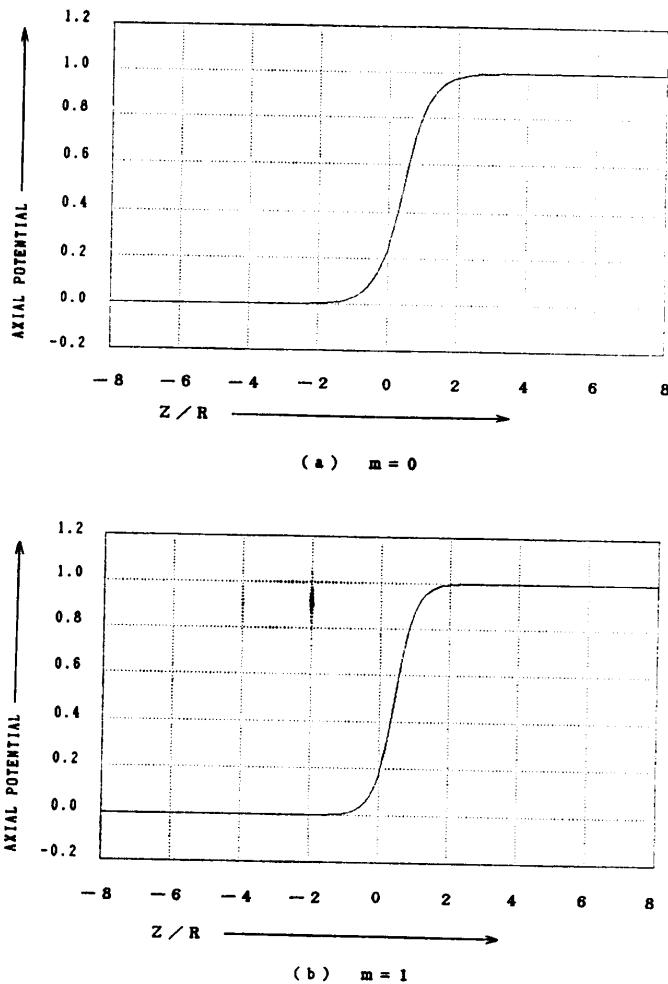


図 3 計算結果の軸上電位分布  
Fig. 3 Calculation result of the axial potential distribution.

が図 2(2)に示すような八重極偏向電極であるとする。この電極は  $m=1, 3, 5, \dots$  の成分を生じる<sup>2)</sup>。(2)式からわかるように、 $m=7$  以上の項は  $r$  の次数が 7 次以上から始まるので、軸の近くではこれらの項

の影響を無視してもかまわない。

図2(1)で  $V_1$  は円筒、  $V_2$  は八重極として  $m=1$  の軸上ポテンシャル  $\phi_1(z)$  を求めた結果を図3(b)に示す。また、これを用いて計算した電極上での電位の相対誤差を図4(b)に示す。この場合も区分点に対応する電極上での相対誤差は  $E-14$  程度であり、それ以外の電極上の点での相対誤差は  $m=0$  の場合と同様に電極の境界の両側で最大となり、 $1.5 E-14$  程度であった。

### 5. おわりに

$z$  軸上のポテンシャルをスプライン関数で表現し、各区分多項式の係数を境界条件と区分点におけるポテンシャルの連続条件から決定する新しい計算法を試みた。この方法では円筒座標系の方位角成分  $\theta$  に関する必要なフーリエ成分に対して1次元問題を解けばよいので能率がよい。軸上ポテンシャル関数がわかれば、軸の近くのポテンシャルは  $r$  座標に関するべき級数展開によって計算できる。そこで、境界条件を与えた点（区分点）以外の点でも電極上の電位を軸上ポテンシャルから計算することにより、計算の精度を容易に確認することができる。

この方法は  $z$  軸から有限の距離に境界条件を与える電極がある場合に有効であるが、この条件は荷電粒子光学系の場合には技術的理由によりつねに満たされている。また、光学特性を評価する目的には軸上ポテンシャル関数さえわかればよいので、この計算法が適している。

今後は実際に光学特性評価に用いて、本方法の有効性を調べる予定である。

謝辞 有益なご討論をいただいた慶應義塾大学理工学部の高橋秀俊教授、福井工業高等専門学校の守川穰教授、有益な助言をいただいた査読者に感謝します。

### 参考文献

- 1) Glaser, W.: *Grundlagen der Elektronen-*

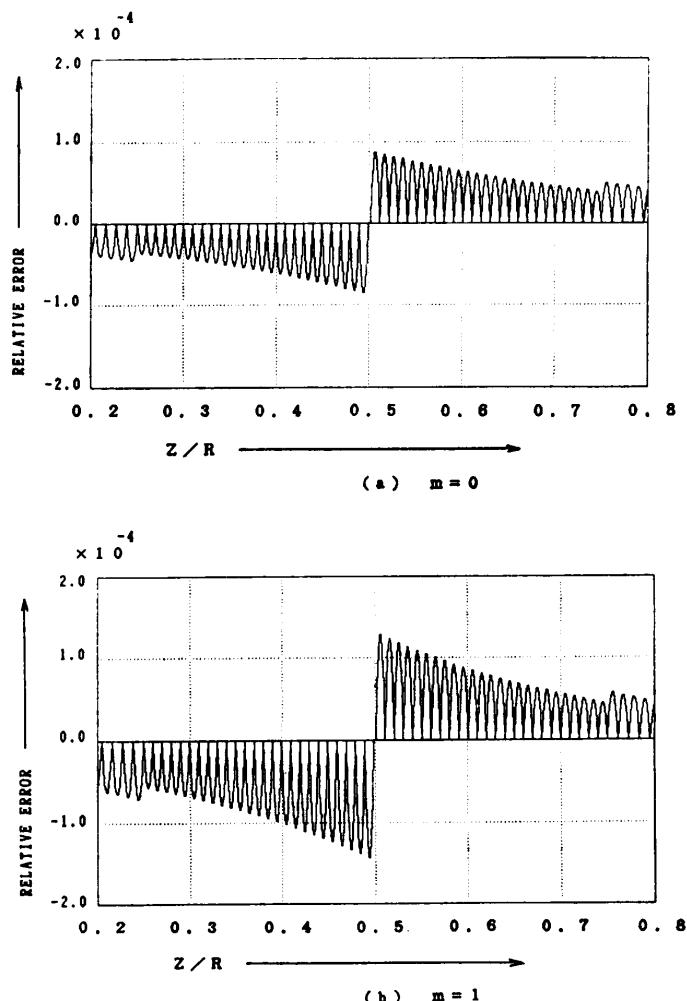


図4 計算結果と電極電位との相対誤差

Fig. 4 Relative error between the calculation result and the electrode voltage.

*Optik*, p. 102, Springer, Wien (1952).

- 2) Ohiwa, H.: Aberrations in Electrostatic Optics for Charged Probe Forming Systems, Proceedings of 9th International Conf. on Electron and Ion Beam Science and Technology, St. Louis, pp. 24-31 (1980).

(昭和59年3月30日受付)

(昭和59年9月20日採録)