

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Departamento de Electricidad y Electrónica



TESIS DOCTORAL

**Aplicación del método de densidades de carga al diseño de
sistemas de generación y enfoque iónico**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR

Genoveva Martínez López

Madrid, 2015

Genoveva Martínez López

TP
1981
056



* 5 3 0 9 8 5 5 3 1 2 *
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE

x-58-031472-9

APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA AL DISEÑO DE SISTEMAS
DE GENERACION Y ENFOQUE IONICO

Departamento de Electricidad y Electrónica
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense de Madrid
1981



BIBLIOTECA

© Genoveva Martínez López
Edita e imprime la Editorial de la Universidad
Complutense de Madrid. Servicio de Reprografía
Noviciado, 3 Madrid-8
Madrid, 1981
Xerox 9200 XB 480
Depósito Legal: M-6005-1981

GENOVEVA MARTINEZ LOPEZ

APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA AL DISEÑO
DE SISTEMAS DE GENERACION Y ENFOQUE IONICO

Director: Miguel Sancho Ruiz
Doctor en Ciencias Físicas

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
Facultad de Ciencias Físicas
Departamento de Electricidad y Electrónica

1980

Memoria presentada por
GENOVEVA MARTINEZ LOPEZ
Para optar al grado de
DOCTOR EN CIENCIAS FISICAS

Deseo expresar mi agradecimiento a todas aquellas personas que directa o indirectamente han contribuido en la realización del presente trabajo. En particular al Profesor Dr. D. Maximino Rodríguez Vidal en cuya Cátedra me incorporé a la tarea universitaria y que, con el apoyo y medios ofrecidos, estimuló siempre el desarrollo de esta investigación.

A Miguel Sancho Ruiz, cuya labor tanto de orientación como crítica han constituido una valiosísima dirección. José Antonio Vallés Abarca y Francisco Sánchez Quesada contribuyeron de un modo especial en mi formación y en las etapas iniciales del estudio. Quiero agradecer asimismo a todos los componentes de esta Cátedra de Electricidad y Magnetismo su colaboración e interés en las discusiones mantenidas.

Por último hacer constar mi reconocimiento al Ministerio de Educación y Ciencia por la concesión de una Beca de Formación de Personal Investigador, así como a la Dirección y personal de la Junta de Energía Nuclear por los equipos y medios puestos a mi disposición. Sin ellos difícilmente hubiera podido desarrollar este trabajo.

INDICE

	<u>Página</u>
INTRODUCCION	iv
CAPITULO I	
I.1.- METODO DE DENSIDADES DE CARGA EN SISTEMAS CON SIME- TRIA ROTACIONAL	1
I.1.1.- Estudio del Método de Densidades de Carga.	5
I.1.2.- Cálculo de los Coeficientes de Potencial para Problemas con Simetría Axial	12
I.2.- APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA A LA RE- SOLUCION DE ALGUNOS PROBLEMAS	18
I.2.1.- Disco Circular	22
I.2.2.- Caja Cilíndrica	30
I.3.- APROXIMACION DE CARGA LINEAL	35
CAPITULO II	
II.1.- PROPIEDADES OPTICAS DE LAS LENTES ELECTROSTATICAS ...	39
II.1.1.- Aproximación Gaussiana. Elementos Cardina- les	42
II.1.2.- Determinación Numérica de Trayectorias ...	49
II.2.- DEFECTOS EN LENTES	57
II.2.1.- Aberraciones de Tercer Orden	58

	<u>Página</u>
II.2.2.- Aberración Cromática	67
II.2.3.- Defectos Mecánicos	71
CAPITULO III	
III.1.- LENTE EINZEL	75
III.1.1.- Métodos Analíticos para la Obtención del Potencial en el Eje	78
III.1.2.- Métodos Numéricos para la Obtención del Potencial en el Eje	89
III.2.- APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA AL ES- TUDIO DE LA LENTE EINZEL	93
III.2.1.- Precisión del Cálculo de Potenciales ...	94
III.2.2.- Distancias Focales	97
III.2.3.- Aberración Esférica y Cromática	108
III.2.4.- Diseño de una Lente con Aberración Cro- mática Mínima	113
III.2.5.- Discusión de los Resultados y Conclusio- nes	117
CAPITULO IV	
IV.1.- FUENTES DE IONES	121
IV.1.1.- Parámetros Característicos de una Fuente de Iones	122
IV.1.2.- Ionización por Impacto Electrónico	125

	<u>Página</u>
IV.1.3.- Estudio de una Fuente Nier	132
IV.2.- APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA AL ESTUDIO DE UNA FUENTE NIER CON ABERTURAS CIRCULARES .	138
IV.2.1.- Precisión del Cálculo de Potenciales ...	141
IV.2.2.- Trayectorias Electrónicas en la Cámara de Ionización	144
IV.2.3.- Caracterización de la Fuente en la Zona Paraxial	149
IV.2.4.- Zona no Paraxial: Estudio de la Aberración Esférica	156
IV.2.5.- Corriente Iónica. Curva $I_{ci}-V_r$	158
IV.3.- ESTUDIO EXPERIMENTAL DE UNA FUENTE DE IONES NIER ..	167
IV.3.1.- Diseño y Montaje Experimental	167
IV.3.2.- Medida Experimental de la Curva $I_{ci}-V_r$.	171
IV.3.3.- Distribución en Energía. Analizador de Campo Retardador	174
IV.3.4.- Discusión de los Resultados. Comparación con la Simulación Numérica	177
CONCLUSIONES	181
APENDICE	188
BIBLIOGRAFIA	196

I N T R O D U C C I O N

La esfera de aplicación de la óptica de partículas cargadas se ha extendido recientemente con el desarrollo de técnicas experimentales del Estado Sólido. El diseño de lentes, fuentes y analizadores de diverso tipo, requieren el empleo de métodos cada vez más eficaces y precisos.

La caracterización del comportamiento óptico de un sistema electrostático, comprende dos aspectos básicos: en primer lugar hay que resolver el problema de la distribución de campos en la región de interés; en segundo, es necesario efectuar el cálculo de las trayectorias de las partículas moviéndose bajo la acción de estos campos.

Una de las técnicas más potentes para la resolución de problemas electrostáticos es, a nuestro juicio, el Método de Densidades de Carga; entre sus características destacan la flexibilidad, ya que se aplica a cualquier geometría, y el ser especialmente adecuado para el cálculo de trayectorias. Sin embargo a nivel práctico presenta un inconveniente que puede situarlo en desventaja frente a otros métodos numéricos: en el cálculo de los coeficientes de potencial -y del potencial en un punto cualquiera- resultan expresiones muy complejas y, en general, es preciso recurrir a la integración numérica.

Para obviar este inconveniente proponemos la división de la

v.

geometría en dos tipos de subelectrodos para los cuales hemos obtenido expresiones analíticas en el cálculo de los coeficientes de potencial. En la presente memoria describimos el proceso seguido hasta lograr una completa optimización del método.

El bloque de cálculos preparado tanto para la resolución del problema electrostático como para la integración de trayectorias es absolutamente general y en principio con él se puede analizar cualquier sistema con simetría rotacional; nosotros lo hemos aplicado al estudio de dos configuraciones que, en conjunto, forman un sistema completo de generación y enfoque de partículas cargadas.

La lente einzel de electrodos planos es una de las más utilizadas como sistema de enfoque especialmente en microscopía electrónica y en fuentes de iones, por ello nos parece interesante su estudio. En la memoria presentamos las curvas que caracterizan su comportamiento en la zona paraxial, así como las de aberración esférica y cromática. Variando la separación interelectródica diseñamos una lente con aberración cromática mínima.

La fuente de iones tipo Nier presenta una característica de baja dispersión en energía -si bien la densidad de corriente es pequeña- que la hacen muy adecuada para algunas aplicaciones prácticas, como espectroscopía de análisis de superficies por haces de iones. Nosotros hemos abordado su estudio tanto desde el punto de vista teórico, elaborando un modelo de simulación numérica, como experimental obte-

tiendo las curvas más representativas de la fuente; el estudio experimental se completa con un análisis de la distribución en energía del haz de iones.

CAPITULO I

I.1.- METODO DE DENSIDADES DE CARGA EN SISTEMAS CON SIMETRIA AXIAL.

En el estudio de las propiedades ópticas de un sistema electrostático, el primer problema que se plantea es el cálculo de la distribución de potencial en la región de interés; ello implica la resolución de la ecuación de Poisson o de Laplace correspondiente, sujeta a las condiciones de contorno impuestas por la geometría del problema. Una vez conocida esta distribución, el paso siguiente es abordar el cálculo de las trayectorias de las partículas que se mueven bajo la acción del campo y determinar los parámetros que caracterizan su comportamiento desde el punto de vista de la Óptica Electrónica.

Los primeros estudios realizados proponen la representación aproximada de la geometría del sistema o de la forma de la distribución. Así Archard (1954), en sistemas trielectrodo con simetría planar, representa cada electrodo por planos indefinidos con aberturas de longitud infinita; este tipo de problemas puede resolverse imponiendo ciertas restricciones en la geometría- por el método de transformación conforme. Para sistemas trielectrodo con simetría rotacional Regens-treif (1951), obtiene el potencial en el eje por superposición del que crean tres planos indefinidos con aberturas circulares, si bien la expresión resultante contiene parámetros no ajustables y el comportamiento asintótico, en puntos infinitamente alejados, no es correcto. Glaser y Shiske (1954, 1955), elaboran una aproximación analítica para -

el potencial en este tipo de lente representándolo por una distribución en forma de campana, lo que permite una elegante formulación de los parámetros ópticos. El método de separación de variables es aplicado por Bertram (1940) y Ramberg (1942), al estudio de dos cilindros coaxiales separados por un intervalo aunque los resultados que obtienen son correctos solo cuando el intervalo es mucho menor que el radio de los cilindros. Paralelamente a estos trabajos se aplicaron algunas técnicas de simulación analógica al estudio de las lentes; entre ellas cabe destacar por su importancia la cuba electrolítica. Malavard (1956) y la red resistiva. Liebmann (1949), que aún hoy se siguen utilizando.

En los últimos años, la posibilidad de disponer de ordenadores de gran capacidad y rapidez de cálculo ha permitido mejorar estos modelos, así Kanaya et al. (1966), utilizan el potencial de Regenstreif perfeccionando el estudio de la lente trielectrodo y proponen la aproximación de doble campana en el caso de que el electrodo intermedio sea muy grueso. Wallington (1970), desarrolla un nuevo proceso iterativo que hace posible extender el estudio de sistemas con simetría planar a un número cualquiera de electrodos. Hemos de señalar que en general, estos análisis solo proporcionan información directa sobre el valor del potencial en el eje de simetría; en sistemas con simetría rotacional la distribución en puntos fuera del eje puede obtenerse por desarrollo en serie del potencial axial y sus derivadas aunque el error aumenta rápidamente con la distancia radial, Olsen et al. (1966), lo que limita su utilidad a una zona relativamente pequeña en torno al eje. Recientemente Skollermo (1976), propone como alternativa un interesante método integral, más exacto que el desarrollo en serie si bien

no lo aplica al estudio de ninguna lente concreta. También es posible obtener el potencial en un punto cualquiera mediante la resolución numérica de la ecuación de Poisson o de Laplace; los métodos numéricos generalmente permiten un planteamiento relativamente simple del problema, aunque para la obtención de resultados se requiera un gran número de operaciones. Uno de los más utilizados por su sencillez es el método de diferencias finitas, Durand (T. III, 1966), Natali et al. (1972), aunque en algunos casos resulta difícil de aplicar y ha hecho que se busquen otras técnicas más apropiadas tales como el método de elementos finitos, Munro (1971), y el de densidades de carga, Read et al. (1971). Con todos ellos puede alcanzarse un grado de precisión solo limitado por los errores de redondeo en el cálculo, o por unas exigencias de memoria y tiempo de computación no rentables e incluso fuera de las posibilidades existentes.

Una revisión detallada de estos trabajos queda fuera de nuestros objetivos; en los capítulos siguientes analizaremos sin embargo aquellos que estén más directamente relacionados con el nuestro y que sean de interés a la hora de comparar resultados.

Tras realizar un análisis de los distintos procedimientos nos planteamos la elección del método más adecuado para nuestros fines; pensamos que teniendo en cuenta las características del sistema el método elegido debería reunir las siguientes condiciones:

- a) Generalidad en cuanto a la geometría del problema.
- b) Posibilidad de hacer directamente el análisis de regiones muy concretas sin necesidad de tratar simultáneamente la

totalidad del espacio en estudio.

- c) Aplicación a dominios de cálculo no cerrados.
- d) Economía en memoria y tiempo de computación para una precisión dada.

Teniendo en cuenta todas estas consideraciones llegamos a la conclusión de que el método más conveniente sería el de densidades de carga, éste permite obtener la distribución aproximada de carga en un sistema dado de conductores, mediante la resolución de una serie de ecuaciones que relacionan el potencial y la carga sobre la superficie de los conductores. Entre las ventajas que presenta esta técnica de resolución destacaremos las siguientes:

- 1) Es aplicable a cualquier tipo de geometría y admite la posibilidad de tratar problemas en los que el contorno no esté totalmente cerrado, lo que supondría un serio inconveniente, por ejemplo, en un método de diferencias finitas.
- 2) Una vez conocidas las densidades de carga en el contorno, se pueden obtener el potencial y el campo en cualquier punto que interese mediante superposición. Esta particularidad será de enorme importancia cuando tengamos que determinar numéricamente la trayectoria de una partícula sometida a la acción de un campo electrostático. Es tal vez en este aspecto, y para nuestros objetivos concretos, donde aparece más marcada la superioridad del método de densidades de carga frente a otros, señalemos que el mé-

todo de diferencias finitas además de obligarnos a un tratamiento simultáneo de todos los puntos solo nos da información directa sobre los puntos que son nudos del mallado de cálculo, para conocer el potencial en cualquier otro tendríamos que proceder a interpolar o construir un nuevo mallado.

- 3) Al reducir en un grado las dimensiones del problema se tiene, evidentemente, una economía en la memoria utilizada y en el tiempo de cálculo.

Parece pues, que el método propuesto es el más apropiado para abordar nuestro problema, lo que resta el capítulo estará dedicado a una revisión del fundamento matemático del mismo y a presentar su posible utilización en la resolución de problemas electrostáticos con simetría axial.

I.1.1.- Estudio del Método de Densidades de Carga.

El método que vamos a analizar es una de las técnicas para la resolución de ecuaciones funcionales que Harrington (1968), en un intento de unificación quizá excesivo, engloba con el nombre genérico de Método de Momentos. En esencia se trata de reducir una ecuación funcional a una ecuación matricial utilizando algunas aproximaciones, y resolver el sistema resultante por los procedimientos usuales. La forma más apropiada de presentar el estudio es por medio de la teoría de espacios y operadores lineales que nosotros supondremos conocida.

Vamos a discutir en primer lugar un caso general y después aplicaremos el análisis a nuestro problema concreto. Sea la ecuación no homogénea

$$L(f) = g \quad (I.1)$$

donde L es un operador lineal, g una función conocida y f la función que deseamos determinar. Supongamos que f puede desarrollarse en serie de funciones base f_1, f_2, \dots en el dominio de L , es decir

$$f = \sum_j \alpha_j f_j \quad (I.2)$$

donde los coeficientes α_j son constantes; sustituyendo (I.2) en (I.1) se tiene

$$\sum_j \alpha_j L(f_j) = g \quad (I.3)$$

Supongamos que se ha definido un producto interior $\langle f, g \rangle$ apropiado para el problema que estamos tratando. Definimos unas funciones de prueba w_1, w_2, \dots en el rango de L y efectuamos el producto de (I.3) con cada una de ellas; el conjunto de ecuaciones que resulta puede expresarse en forma matricial como

$$|P_{ij}| \cdot |\alpha_j| = |g_i| \quad (I.4)$$

siendo

$$|P_{ij}| = \begin{vmatrix} \langle w_1, Lf_1 \rangle & \langle w_1, Lf_2 \rangle & \dots \\ \langle w_2, Lf_1 \rangle & \langle w_2, Lf_2 \rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (I.5)$$

$$|\alpha_j| = \begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{vmatrix} \quad (I.6)$$

$$|g_i| = \begin{vmatrix} \langle w_1, g \rangle \\ \langle w_2, g \rangle \\ \vdots \end{vmatrix} \quad (1.7)$$

Para hallar los coeficientes α_j multiplicamos los dos miembros de (1.4) por la matriz $|p_{ij}|^{-1}$

$$|\alpha_j| = |p_{ij}|^{-1} |g_i| \quad (1.8)$$

Una vez calculados los α_j es inmediato hallar f mediante la ecuación (1.2). Para que la función f sea una solución exacta, las f_j deben constituir un conjunto completo; en la práctica solo se utilizan un cierto número de ellas obteniendo soluciones más o menos aproximadas. Notemos que uno de los puntos más importantes en el tratamiento del problema es la elección adecuada de las funciones de prueba y de las funciones base; entre los factores a tener en cuenta figurarán el grado de exactitud que precisemos, facilidad de cálculo de los elementos de la matriz $|p_{ij}|$, etc.

Analicemos ahora el caso concreto de una superficie conductora de área S y espesor despreciable frente a las restantes dimensiones. Si llamamos $\sigma(\bar{r}')$ a la densidad de carga sobre el conductor, el potencial $\phi(\bar{r})$ en cualquier punto del espacio vendrá dado por

$$\phi(\bar{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_S \frac{\sigma(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} dS \quad (1.9)$$

donde $|\bar{r} - \bar{r}'|$ es la distancia del elemento dS al punto definido por el vector posición \bar{r} . La condición de contorno en este caso es que el potencial sea constante sobre el conductor; si llamamos V al potencial

al que se encuentra éste, suponiendo nulo el potencial a una distancia infinitamente alejada, se tendrá entonces

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_S \frac{\sigma(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} dS \quad (I.10)$$

siendo \bar{r} un punto perteneciente a S .

Nuestra incógnita es la función $\sigma(\bar{r}')$ y necesitamos seleccionar unas funciones base apropiadas para su desarrollo en serie. Vamos a introducir una aproximación que nos permitirá evaluar fácilmente la matriz $|P_{ij}|$; la aproximación consiste en utilizar unas f_j que solo tienen existencia en una parte del dominio de la función incógnita. Suponiendo que se divide el conductor en N subsecciones de área S_j , definimos las f_j como

$$f_j = 1 \quad \text{sobre } S_j \quad (I.11)$$

$$f_j = 0 \quad \text{sobre las restantes } S_i$$

Podemos expresar entonces la densidad de carga como

$$\sigma(\bar{r}') = \sum_{j=1}^N \alpha_j f_j \quad (I.12)$$

Otro aspecto importante es la elección de las funciones de prueba; llamamos \bar{r}_{mi} al vector que define el punto medio de S_i , definimos como funciones de prueba las funciones w_i tales que

$$w_i = \delta(\bar{r} - \bar{r}_{mi}) \quad (I.13)$$

es decir, se trata de funciones delta de Dirac. Puede verse fácilmente que esta elección es equivalente a hacer una aproximación de tipo "point matching" en la resolución del problema.

Por último nos queda definir un producto interior, en este caso parece conveniente definirlo en la forma

$$\langle f, g \rangle = \int_S f(\bar{r}) g(\bar{r}) dS \quad (I.14)$$

Para este producto los coeficientes vienen dados por

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{S_j} \frac{dS_j}{|\bar{r}_{mi} - \bar{r}'|} \quad (I.15)$$

y la ecuación (I.10) puede expresarse en forma matricial como

$$|P_{ij}| |\alpha_j| = |V_i| \quad (I.16)$$

con ello queda planteada una ecuación análoga a (I.4) que puede ser resuelta por el procedimiento descrito anteriormente.

Intentemos ahora ver qué representan físicamente los términos de la matriz $|P_{ij}|$, para ello necesitamos introducir la definición de coeficientes de potencial. Consideremos un sistema de N conductores en equilibrio electrostático, limitados por las superficies S_1, S_2, \dots, S_N y sean $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ las densidades de carga sobre dichas superficies; el potencial en un punto cualquiera, \bar{r}_i , de la superficie del i -ésimo conductor puede expresarse como (e.g. Durand, T. II. 1966),

$$V_i = \sum_{j=1}^N P_{ij} Q_j \quad (I.17)$$

siendo

$$Q_j = \int_{S_j} \sigma_j dS_j \quad (I.18)$$

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 Q_i Q_j} \int_{S_i} \int_{S_j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} dS_i dS_j \quad (1.19)$$

Los términos definidos por (1.19) se denominan "coeficientes de potencial" y es inmediato verificar que P_{ij} es el potencial que crea en el i -ésimo conductor una carga unidad sobre el j -ésimo conductor cuando los restantes tienen una carga total nula. De la ecuación (1.19) se deduce que $P_{ij} = P_{ji}$, también es fácil ver que $P_{ii} > P_{ij}$ y que todos los coeficientes son positivos.

Supongamos que las superficies S_i y S_j se han elegido de tal forma que sea posible hacer las siguientes simplificaciones:

- a) Las densidades de carga son aproximadamente constantes sobre ellas.
- b) La distancia $|\bar{r}_i - \bar{r}_j|$ puede sustituirse a efectos de integración, por su valor promediado respecto al conductor i , esto es $|\bar{r}_{mi} - \bar{r}_j|$

entonces la expresión de los coeficientes de potencial se reduce a

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 S_j} \int_{S_j} \frac{1}{|\bar{r}_{mi} - \bar{r}_j|} dS_j \quad (1.21)$$

esta expresión es la misma, salvo el factor $1/S_j$, que obtuvimos para los coeficientes de la matriz $|P_{ij}|$ por tanto concluimos que éstos representan, aproximadamente, el potencial que crearía en el conductor i la densidad de carga unidad sobre el conductor j cuando los demás tienen una carga nula. Este resultado se podría haber obtenido también a partir de la ecuación (1.15) con las aproximaciones indicadas. Hemos de señalar que en general se tendrá $P_{ij} \neq P_{ji}$ salvo en el caso de que

S_i y S_j sean iguales; tampoco se verificará necesariamente que $P_{ij} > P_{ji}$. En adelante nos referiremos a ellos con el nombre de coeficientes de potencial, si bien quedan claramente establecidas las diferencias entre estos términos y los que usualmente se definen como tales.

Hemos de señalar que hicimos algunos estudios utilizando la ecuación (I.19) para el cálculo de los coeficientes de potencial; el uso de esta ecuación presenta una ventaja evidente pues al ser $P_{ij} = P_{ji}$ solo hay que calcular una parte de los elementos de la matriz, lo cual implica un ahorro en el tiempo de computación, sin embargo esta ventaja puede ser contrarrestada ampliamente por el hecho de que la integración a la superficie S_i casi siempre tendrá que hacerse numéricamente, o bien, como sucedía en nuestro caso, las expresiones obtenidas son tan complejas que los resultados son menos precisos que los que se tienen utilizando la forma simplificada (I.21) para los coeficientes.

Una vez calculados los coeficientes de potencia podemos obtener las densidades de carga; de acuerdo con (I.12) se tiene

$$|\sigma_i| = \sum_{j=1}^N |P_{ij}|^{-1} |V_j| \quad (I.22)$$

queda pues resuelto el problema que inicialmente nos planteamos. Conocida la distribución aproximada de carga en el sistema, estamos en condiciones de abordar el cálculo de potenciales y campos en cualquier punto del espacio, según veremos más adelante.

I.1.2.- Cálculo de los Coeficientes de Potencial para Problemas con Simetría Axial.

En la ecuación (I.21) puede verse que el cálculo de los coeficientes de potencial dependen exclusivamente de la geometría de las subsecciones. En muchos casos la integración no podrá realizarse analíticamente y será preciso recurrir a la integración numérica. Mautz et al. (1970), han hecho un estudio aplicable a cualquier sistema que tenga simetría rotacional; de acuerdo con la Figura I.1. los coeficientes de potencial para el caso en que los subelectrodos sean superficies laterales de troncos de cono, vienen dados por

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^{2\pi} \frac{\rho'}{\{(z-z')^2 + (\rho+\rho')^2 - 4\rho\rho'\cos^2(\phi'/2)\}^{1/2}} d\phi' \quad (I.23)$$

integrando en la variable ϕ' queda

$$P_{ij} = \frac{1}{2\pi\epsilon_0(\rho)^{1/2}} \int_{t_1}^{t_2} k(\rho')^{1/2} K(k) dt \quad (I.24)$$

donde K es la integral elíptica completa de primera especie (ver Apéndice) cuyo módulo k está dado por

$$k^2 = \frac{4\rho\rho'}{(z-z')^2 + (\rho+\rho')^2} \quad (I.25)$$

la integración de (I.24) se hace numéricamente. Otra alternativa es integrar primero analíticamente en t y efectuar la integración numérica en la variable angular, Birtles (1972). En cualquier caso pensamos que el método de densidades de carga es realmente útil cuando para los -

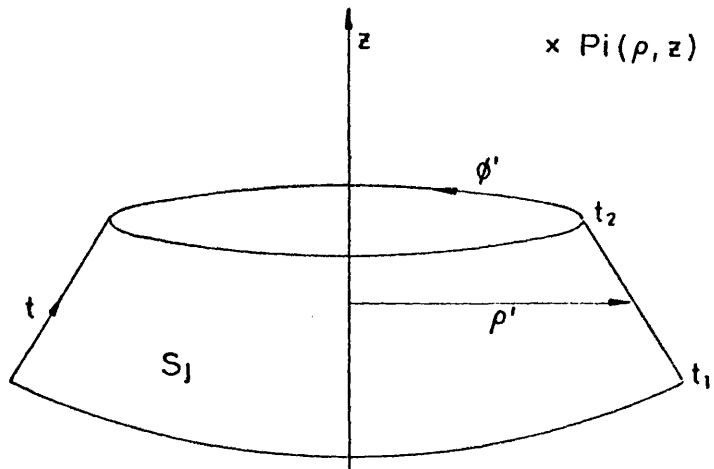


Figura I.1.- Geometría para el cálculo de coeficientes de potencial en sistemas con simetría rotacional.

coeficientes exista una expresión analítica, de lo contrario el tiempo de computación será grande y puede quedar en desventaja frente a otras técnicas. Birtles et al. (1973), analizan los coeficientes de potencial en subelectrodos rectangulares y triangulares para los que se tienen expresiones analíticas relativamente simples, sobre todo en el primer caso. Nosotros intentamos en un principio generar, aproximadamente, nuestra geometría con este tipo de subsecciones y, si bien se tenía un tiempo de cálculo bajo, la precisión de los resultados no era del todo satisfactoria; por ello nos decidimos a preparar los cálculos para los dos tipos de subelectrodos que pueden generar el sistema exactamente, es decir, coronas circulares y superficies cilíndricas; vamos

a detallar los procesos seguidos.

1.- Coefficientes de potencial para coronas circulares.

Consideremos el potencial creado en el punto $P(\rho, z)$ por un disco de radio a , cargado con una densidad de carga σ uniforme; este potencial viene dado por (e.g. Durand, T. I - 1966)

$$\phi(\rho, z) = \frac{\sigma}{2\pi\epsilon_0} \left\{ -\mu(1-\mu') \frac{\pi}{2} z + r_1 E(k) + \frac{a^2 - \rho^2}{r_1} K(k) + \frac{z^2}{r_1} \frac{a-\rho}{a+\rho} \Pi(k, m) \right\} \quad (1.26)$$

en donde K , E y Π son las integrales elípticas completas de primera, segunda y tercera especie respectivamente, (ver Apéndice),

$$r_1 = \left\{ (a+\rho)^2 + z^2 \right\}^{1/2} \quad (1.27)$$

$$k = \frac{2(a \cdot \rho)^{1/2}}{r_1} \quad (1.28)$$

$$m = \frac{2(a \cdot \rho)^{1/2}}{a + \rho} \quad (1.29)$$

$$\mu = \begin{cases} -1 & \text{si } z < 0 \\ 0 & \text{si } z = 0 \\ 1 & \text{si } z > 0 \end{cases} \quad (1.30)$$

$$\mu' = \begin{cases} -1 & \text{si } \rho < a \\ 0 & \text{si } \rho = a \\ 1 & \text{si } \rho > a \end{cases} \quad (1.31)$$

Para $\rho = 0$, $\rho = a$ ó $z = 0$, la expresión (1.26) se reduce a otras más simples y que nosotros utilizaremos frecuentemente, así para puntos situados en el plano del disco

$$\phi(\rho, 0) = \frac{\sigma}{2\pi\epsilon_0} \{ (a+\rho) E(k) + (a-\rho) K(k) \} \quad (I.32)$$

En puntos sobre el eje se tiene

$$\phi(0, z) = \frac{\sigma}{2\epsilon_0} \{ r_1 - |z| \} \quad (I.33)$$

Para $\rho = a$ la integral π desaparece de la expresión (I.26) y queda

$$\phi(a, z) = \frac{\sigma}{2\pi\epsilon_0} \left\{ -\frac{\pi}{2} |z| + r_1 E(k) \right\} \quad (I.34)$$

El potencial ϕ_c , que crearía en P una corona circular de radio exterior a_{0j} y radio interior a_{ij} , cargada con σ_j constante puede obtenerse a partir de (I.26) por superposición, ésto es

$$\phi_c = \phi(\rho, z, a_{0j}) - \phi(\rho, z, a_{ij}) \quad (I.35)$$

Haciendo $\sigma = \sigma_j = 1$ y asignando a ρ y z las coordenadas del elemento - medio representativo del subelectrodo i -en este caso una circunferencia de radio $(a_0 + a_i)/2$ - tendremos todo dispuesto para el cálculo del coeficiente P_{ij} .

2.- Coefficientes de potencial para superficies cilíndricas.

El proceso es análogo al que hemos seguido anteriormente. El punto de partida es el potencial debido a un semicilindro de radio a , que se aleja al infinito en el sentido de las z negativas, cargado uniformemente. Este potencial ha sido calculado por Gélard (1962), mediante un desarrollo en serie a partir del potencial en el eje,

$$\phi(0, z) = \frac{-\sigma a}{2\epsilon_0} \ln \{ (a^2 + z^2)^{1/2} + z \} \quad (I.36)$$

y tiene diferentes expresiones dependiendo de la región en que se encuentre el punto campo.

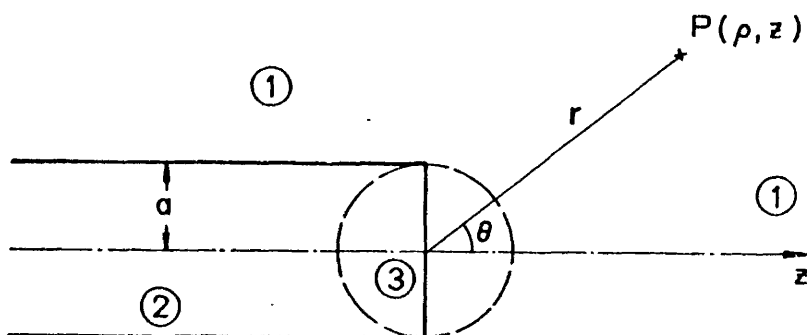


Figura I.2.- Semicilindro indefinido cargado uniformemente.

Región 1	$r \geq a,$	$z \geq 0$
	$\rho \geq a,$	$z \leq 0$
Región 2	$r \geq a,$	$\rho \leq a, \quad z \leq 0$
Región 3	$r \leq a,$	

Con relación a la Figura I.2 éstas son:

Región 1.

$$\phi(r, \theta) = -\frac{\sigma a}{2\epsilon_0} \left\{ \ln \{r(1+\cos\theta)\} - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_{-1/2}^n}{n} \left(\frac{a}{r}\right)^{2n} P_{2n-1}(\cos\theta) \right\} \quad (I.37)$$

Región 2.

$$\phi(r, \theta) = -\frac{\sigma a}{2\epsilon_0} \left\{ 2 \ln a - \ln \{r(1-\cos\theta)\} - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_{-1/2}^n}{n} \left(\frac{a}{r}\right)^{2n} P_{2n-1}(\cos\theta) \right\} \quad (I.38)$$

Región 3.

$$\phi(r, \theta) = -\frac{\sigma a}{2\epsilon_0} \left\{ \ln a + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_{-1/2}^n}{2n+1} \left(\frac{r}{a}\right)^{2n+1} P_{2n+1}(\cos \theta) \right\} \quad (I.39)$$

donde $P_n(\cos \theta)$ es el polinomio de Legendre de orden n , Magnus (1966), y los coeficientes $C_{-1/2}^n$ están dados por

$$C_{-1/2}^n = (-1)^n \frac{1.3 \dots (2n-1)}{2.4 \dots (2n)}; \quad C_{-1/2}^0 = 1 \quad (I.40)$$

Para $z = 0$ las expresiones anteriores se simplifican

Región 1.

$$\phi(r, \pi/2) = -\frac{\sigma a}{2\epsilon_0} \ln(r) \quad (I.41)$$

Región 3.

$$\phi(r, \pi/2) = -\frac{\sigma a}{2\epsilon_0} \ln(a) \quad (I.42)$$

El potencial ϕ_s , debido a una superficie lateral cilíndrica puede obtenerse, como hicimos antes para corona circular, por superposición de dos contribuciones

$$\phi_s = \phi(r_2, \theta_2) - \phi(r_1, \theta_1) \quad (I.43)$$

siendo r_1 la distancia del punto P al centro de la base inferior, r_2 la distancia al centro de la base superior y θ_1 , θ_2 los ángulos correspondientes.

En los desarrollos anteriores la suma se extiende a infinitos términos, pero puede pararse el desarrollo cuando se alcance el grado de precisión deseado; nosotros hemos impuesto que el error relativo sea inferior a 10^{-6} . Se observa en general una convergencia rápida salvo en los casos en que el valor de r difiere poco del radio del cilindro.

I.2.- APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA A LA RESOLUCION DE ALGUNOS PROBLEMAS.

En la ecuación (I.22) hemos llegado a obtener la distribución aproximada de carga, inducida en un sistema de conductores por los potenciales de excitación. Este resultado nos permitirá hallar de una forma relativamente simple, el potencial y campo eléctrico en un punto cualquiera de la región de interés; para nosotros esta posibilidad es importante sobre todo con vistas a seguir la trayectoria de partículas cargadas sometidas a la acción de estos campos. Vamos pues a describir el proceso.

El potencial en P debido a la subsección j será

$$V_j(\rho, z) = \frac{\sigma_j}{4\pi\epsilon_0} \int_{S_j} \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|} dS \quad (I.44)$$

Las componentes del campo se obtienen por derivación de (I.44) con respecto a la variable espacial correspondiente. Los cálculos necesarios para obtener estos valores son completamente análogos a los descritos en el apartado anterior al hallar los coeficientes de potencial; nos limitaremos por tanto a dar las expresiones de los campos creados por un disco y un semicilindro cargados uniformemente,

Disco

$$E_\rho(\rho, z) = - \frac{\partial V}{\partial \rho} = \frac{\sigma}{2\pi\epsilon_0} \frac{r_1}{\rho} \left\{ \left(1 - \frac{k^2}{2}\right) K(k) - E(k) \right\} \quad (I.45)$$

$$E_z(\rho, z) = - \frac{\partial V}{\partial z} = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \mu(1-\mu')\pi + \frac{2z}{r_1} \left\{ \mu' (1-m^2)^{1/2} \pi(k, m) - K(k) \right\} \right\} \quad (I.47)$$

Semicilindro indefinido

$$E_{\rho}(\rho, z) = \frac{\sigma}{2\pi\epsilon_0} \frac{a}{\rho} \left\{ (1+\mu') \frac{\pi}{2} - \frac{z}{r_1} \left\{ \mu' (1-m^2)^{1/2} \Pi(k, m) + K(k) \right\} \right\} \quad (I.47)$$

$$E_z(\rho, z) = \frac{\sigma a}{\pi\epsilon_0} \frac{K(k)}{r_1} \quad (I.48)$$

todas las variables tienen el mismo significado que les dimos anteriormente.

El potencial y el campo creado por la totalidad del sistema puede obtenerse ahora mediante superposición, es decir

$$\begin{aligned} \phi(\rho, z) &= \sum_{j=1}^N V_j(\rho, z) \\ E_{\rho}(\rho, z) &= \sum_{j=1}^N E_{\rho j}(\rho, z) \\ E_z(\rho, z) &= \sum_{j=1}^N E_{z j}(\rho, z) \end{aligned} \quad (I.49)$$

quedan pues establecidas las ecuaciones que resuelven totalmente el problema electrostático que habíamos planteado.

Nos parece adecuado en este punto, mostrar un esquema del proceso seguido hasta la obtención de la distribución creada por un sistema de conductores; en resumen los pasos necesarios serían:

- a) División de la geometría en un número de subelectrodos suficiente, a fin de que las hipótesis de simplificación realizadas sean razonablemente aplicables.
- b) Obtención de los coeficientes de potencial a partir de

la ecuación (1.15) aplicando en cada tipo de subelectrodos las expresiones correspondientes, esto es, la ecuación (1.35) para coronas circulares y la (1.43) para superficies laterales cilíndricas.

- c) Resolución del sistema de ecuaciones lineales resultante; nosotros concretamente lo haremos por el método de reducción de Crout, Gerald (1973), que efectúa la inversión de la matriz mediante triangulación.
- d) Obtención de la densidad de carga en los subelectrodos por medio de la ecuación (1.22).
- e) Cálculo del potencial y del campo eléctrico en el punto deseado, utilizando las expresiones (1.49), como suma de todas las contribuciones.

Nos gustaría señalar otra de las interesantes aplicaciones del Método de Densidades de Carga. Puesto que con este método se obtiene la distribución de carga sobre la superficie de los conductores en función de los potenciales de excitación, es posible a partir de ella calcular la capacidad del sistema en estudio. La relativa facilidad de los cálculos para algunas geometrías, ha hecho que fuera bastante utilizado con esta finalidad. Así Reitan et al. (1951), lo emplean para hallar la capacidad de un cubo, Higgins et al. (1951) obtienen una curva universal para la capacidad de una corona circular, Reitan (1959) estudia el condensador de armaduras rectangulares paralelas. Los resultados que obtienen son bastante aproximados a pesar de que, para facilitar los cálculos, utilizan expresiones muy simplificadas en la deter

minación de los coeficientes de potencial y un número pequeño de subsecciones. Más recientemente Birtles et al. (1973) analizan la capacidad de una placa rectangular para mostrar las ventajas de una elección adecuada de los subelectrodos. Nosotros hemos estudiado algunos sistemas con simetría rotacional; un caso que es interesante es el del disco circular ya que tiene solución analítica y permite comprobar el error que se comete en el cálculo numérico. Para un disco de radio a la capacidad viene dada por $C_a = 8 \epsilon_0 a$. En la Tabla I.1 se muestra el valor de la capacidad C en función del número de subelectrodos para un disco de 2 cm de radio, así como el error relativo de este valor.

N	C (pF)	$(C_a - C) \times 100 / C_a$
10	1.414410	0.159
15	1.416351	0.022
20	1.416413	0.020
23	1.416440	0.016
28	1.416447	0.015

Tabla I.1.- Capacidad de un disco, calculada por el Método de Densidades de Carga, en función del número de subelectrodos. Valor analítico $C_a = 1.416669$ pF.

El error en los valores de C con respecto a C_a es siempre por defecto, ello es consecuencia de un conocido teorema de electrostática el cual establece que la distribución de carga en la superficie de un conductor es tal que, en el equilibrio, la energía del conductor

es mínima; puesto que nosotros partimos de la hipótesis de que la densidad de carga es uniforme en cada subsección, es claro que la distribución no es la de equilibrio, por tanto la energía asociada a ella será mayor y en consecuencia el valor de la capacidad ($C \propto 1/\text{energía}$) será inferior al valor exacto; sin embargo pueden obtenerse valores con un error cada vez menor aumentando N , o lo que es equivalente, aproximando la distribución de carga a la verdadera. Notemos que para $N = 28$ el error en C es del 0.15 por mil lo que nos da idea de la buena precisión que se puede obtener con este método.

Para hallar la capacidad se ha hecho una división de la geometría de tal forma que las coronas circulares se estrechan a medida que se encuentran más próximas al borde; más adelante analizaremos con detalle las ventajas de esta elección.

El método lo hemos extendido al cálculo de capacidades de condensadores que incluyen medios dieléctricos, siguiendo la formulación integral del problema electrostático en presencia de dieléctricos, Van Bladel (1964, pág. 73).

Con objeto de estudiar también el error que cometemos en el cálculo de potenciales y campo, hemos elegido dos casos con solución analítica conocida, el disco circular y la caja cilíndrica, con la que compararemos los resultados numéricos.

1.2.1.- Disco Circular.

Este problema es fácil de tratar tanto desde el punto de vista numérico como analítico; por ello además de servirnos para compro-

bar la validez del Método de Densidades de Carga, lo utilizaremos para mostrar una posible optimización en la forma de aplicarlo.

Supongamos un disco de radio a , espesor despreciable y que se encuentra a un potencial unidad, si el origen de coordenadas lo situamos en el centro del disco el potencial en el punto $P(\rho, z)$ está dado por (e.g. Jeans, 1927)

$$\phi(\rho, z) = \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{a}{\sqrt{\lambda}} \right) \quad (1.50)$$

siendo λ la raíz positiva de la ecuación

$$\frac{z^2}{\lambda} + \frac{\rho^2}{a^2 + \lambda} = 1 \quad (1.51)$$

las componentes del campo eléctrico son

$$E_{\rho}(\rho, z) = \frac{\rho}{\pi\sqrt{\lambda}(\lambda+1)} \left\{ 1 + \frac{b}{\sqrt{b^2+4z^2}} \right\} \quad (1.52)$$

$$E_z = \frac{z}{\pi\sqrt{\lambda}(\lambda+1)} \left\{ 1 + \frac{2+b}{\sqrt{b^2+4z^2}} \right\} \quad (1.53)$$

con

$$b = \rho^2 + z^2 - 1 \quad (1.54)$$

Por otra parte, la densidad de carga sobre el disco varía con la distancia al eje del mismo según la ecuación

$$\sigma(\rho) = \frac{2\epsilon \cdot a}{\pi} \frac{1}{\sqrt{a^2 - \rho^2}} \quad (1.55)$$

Notemos que el valor de σ varía poco hasta una distancia del orden de $a/2$ y después empieza a crecer más rápidamente, haciéndose infinito -en un caso ideal- en el borde del disco, este resultado pro-

viene de suponer un espesor nulo, en la práctica el valor de $\sigma(a)$ será grande pero no infinito y dependerá del acabado mecánico. Este análisis cualitativo puede extenderse a cualquier superficie y siempre en las proximidades de los bordes de un conductor la carga varía más rápidamente que en las regiones alejadas de aquellos. Esto nos sugiere que se pueden obtener mejores resultados si se hace una elección de los subelectrodos que tenga en cuenta esta variación de la carga. Harrington (1968) y con anterioridad otros autores utilizan una división uniforme, así, una placa cuadrada se divide en 4, 9, 16, etc., subelectrodos iguales. Birtles et al. (1973), muestran cómo se obtiene un mejor valor de la capacidad de esta geometría si se emplea una división no uniforme, es decir, los subelectrodos se estrechan al aproximarse al contorno de la placa; nosotros hemos verificado que esto es cierto en el cálculo de la capacidad de un disco, ahora podremos ver que también disminuye el error en el potencial y en el campo para el disco. Es claro que caben muchas formas de generar los subelectrodos, nosotros hemos preparado una que resulta cómoda de programar; una parte del disco -la más próxima al centro- se divide en coronas circulares de la misma anchura y el resto se genera con coronas circulares cuya anchura disminuye en progresión geométrica de razón dos; esta elección tiene en cuenta como se distribuye aproximadamente la carga en el disco y además, si el número de subelectrodos es suficientemente grande, cumple también la segunda hipótesis (pág. 10) que hicimos al establecer la ecuación (I.21) para el cálculo de los coeficientes de potencial.

En la Figura I.3 se muestra este tipo de división para las geometrías que utilizaremos en nuestro trabajo.

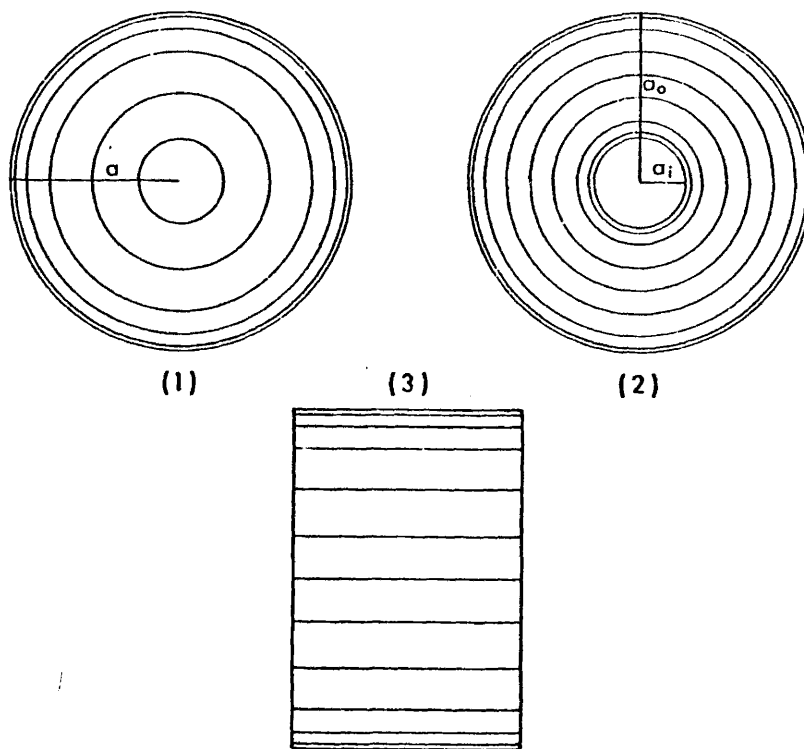


Figura 1.3.- División no uniforme de los tres tipos de electrodos utilizados para generar sistemas con simetría rotacional (1) Disco circular. (2) Corona circular. (3) Superficie cilíndrica.

Con el fin de analizar la influencia del valor de N y las ventajas de la división no uniforme hemos hecho un estudio comparativo en una red de puntos del espacio. En las Tablas 1.2, 1.3 y 1.4 se muestra el error absoluto del potencial y las componentes del campo eléctrico en algunos de estos puntos, situados muy cerca del borde del disco, que es la región en la que presumiblemente los resultados son más inexactos. Para puntos en los que $\rho < a$ se observa que el error en ge-

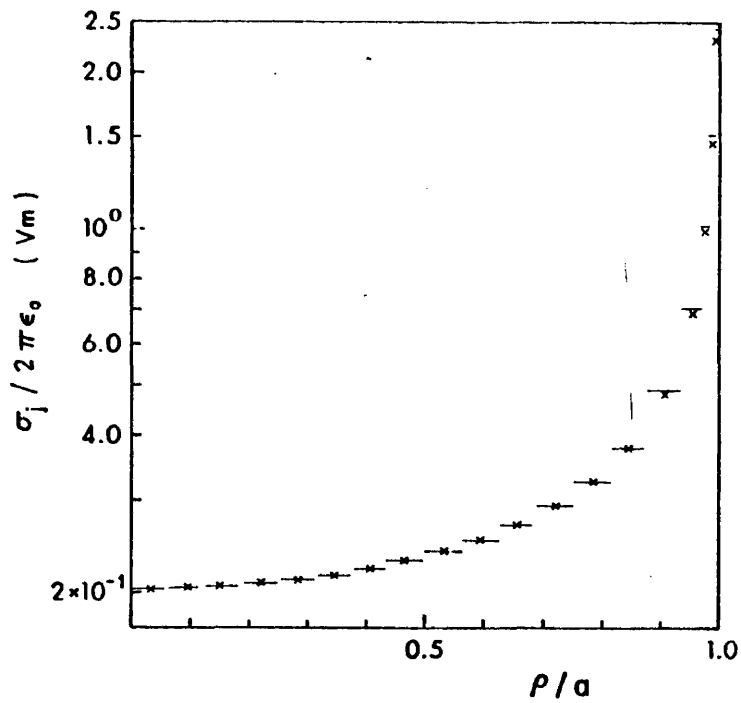


Figura I.4.- Distribución de carga en un disco a potencial unidad.

x Valor exacto en el centro del subelectrodo.

- Valor numérico. Método de Densidades de Carga.

En la Figura I.4 se representa la densidad de carga en cada subsección obtenida para un disco de radio unidad con $N = 20$ y división no uniforme; por comodidad en la representación no se incluye el valor de σ_j en el subelectrodo cuyo radio exterior coincide con el borde del disco. También se compara σ_j con el valor analítico que corresponde al punto medio de la subsección j , éste vendrá dado por el doble del número que se obtenga en la ecuación (I.55) ya que σ_j equivale a la suma de las densidades en ambas caras del disco.

p/a	0.900	0.947	0.986	1.002	1.056	1.150
Potencial Analítico	0.98541	0.98029	0.96391	0.93128	0.79050	0.67103
N = 29 d.n.u.	-0.00029	-0.00005	0.00025	0.00028	0.00016	0.00010
N = 29 d.u.	-0.00029	0.00047	0.00100	0.02263	0.00870	0.00671
N = 25 d.n.u.	-0.00001	0.00020	0.00030	0.00033	0.00026	0.00019

Tabla I.2.- Error absoluto de la distribución de potencial, obtenida numéricamente, creada por un dis
co a potencial unidad; $z/a = 0.01$; d.u. división uniforme; d:n.u. división no uniforme.

p/a	0.900	0.947	0.986	1.002	1.056	1.150
Potencial Analítico	0.807515	0.78305	0.75856	0.74776	0.70712	0.63726
N = 29 d.n.u.	0.00006	0.00007	0.00008	0.00013	0.00009	0.00007
N = 29 d.u.	0.00331	0.00411	0.00507	0.00500	0.00543	0.00519
N = 25 d.n.u.	0.00020	0.00021	0.00021	0.00021	0.00020	0.00017

Tabla I.3.- Error absoluto de la distribución de potencial, obtenida numéricamente, creada por un disco a potencial unidad; $z/a = 0.16$.

ρ/a	0.900	0.947	0.986	1.002	1.056	1.150
E_ρ Valor analítico	0.06872 0.45346	0.17719 0.57657	1.03613 0.67456	3.37106 0.70656	1.75053 0.76477	0.97295 0.70330
E_o Error absoluto	-0.00567 -0.00037	-0.01357 0.00036	0.00290 -0.00025	-0.00243 -0.00019	0.00117 -0.00001	0.00036 0.00011
E_z Valor analítico	1.45486 0.90591	1.95340 0.87220	3.27339 0.79865	2.89985 0.75784	0.15868 0.58767	0.03466 0.33624
E_z Error absoluto	-0.03273 -0.00002	-0.03320 0.00017	0.00121 0.00029	0.00681 0.00032	0.00024 0.00031	0.00003 0.00018

Tabla 1.4.- Error absoluto de las componentes del campo, obtenidas numéricamente, creado por un disco a potencial unidad.

Los valores superiores corresponden a $z/a = 0.01$, los inferiores a $z/a = 0.16$; $N = 29$; división no uniforme.

neral aumenta al aproximarse al borde, sin embargo en puntos cuya altura relativa es pequeña se observa un comportamiento oscilatorio pensamos que es debido a que por estar tan próximos al disco tiene gran influencia la posición del punto respecto de los subelectrodos más cercanos ya que en la integral se está suponiendo constante una distribución de carga que en realidad varía rápidamente en esta región. Para puntos $\rho > a$ el error absoluto disminuye al alejarse del disco tanto en la dirección radial como en la axial.

Del análisis de las tablas se desprende que el error disminuye al aumentar el número de subelectrodos, sin embargo en sistemas más complejos habrá que tener en cuenta que se pueden tener errores de redondeo por aumentar considerablemente el número de operaciones y en consecuencia habrá que trabajar con el menor número posible de ellos. Puede verse también que para un mismo número de subelectrodos es mucho más exacta la distribución que se obtiene con una división no uniforme de la geometría, los errores son inferiores en un orden de magnitud al menos con respecto a la división uniforme.

1.2.2.- Caja Cilíndrica.

El estudio de esta geometría es de importancia para nosotros por dos motivos: en primer lugar porque intervienen los dos tipos de subelectrodos para los que hemos preparado el cálculo de los coeficientes de potencial; en segundo lugar porque nos permite estudiar la distribución de potenciales en la cámara de ionización de una fuente de iones, cuando se ignora el efecto de los orificios y la penetración de

los campos creados por los electrodos exteriores; nos basaremos en esta distribución para justificar posteriormente algunas simplificaciones.

Supongamos una caja cilíndrica, Figura I.5, en la que el electrodo inferior y el lateral se encuentran a potencial cero y el electrodo superior a potencial V .

El problema tiene solución analítica por el método de separación de variables en forma de una serie (e.g. Durand, T. II. 1966)

$$\phi(\rho, z) = \frac{2V}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{p_n J_1(p_n a) \operatorname{sh}(p_n c)} \operatorname{sh}(p_n z) J_0(p_n \rho) \quad (\text{I.56})$$

siendo J_k las funciones de Bessel de primera especie y orden k , Magnus (1966), y p_n los ceros sucesivos de la función $J_0(p_n a)$.

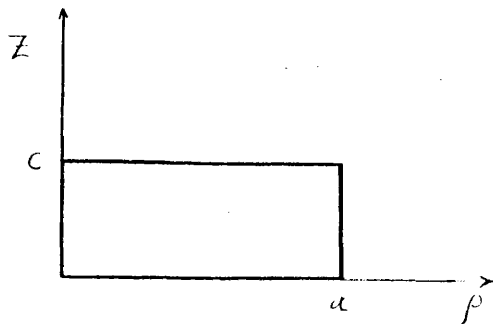


Figura I.5. Sección transversal de una caja cilíndrica.

La solución de esta sêrie la hemos llevado a cabo para un conjunto de puntos, vértices de un mallado regular, mediante un programa que calcula los términos sucesivos de la serie, empleando una subrutina standard para el cálculo de las funciones de Bessel con doble precisión, hasta términos de una aportación relativa del 0,1%. La convergencia de la serie es buena en general, salvo en los puntos próximos al electrodo superior en que los 60 términos establecidos en principio como máximo -por razones de limitación en el argumento de las exponenciales del seno hiperbólico- no fueron suficientes para alcanzar la convergencia exigida. Esta falta de convergencia se debe evidentemente a que en la serie (I.56) el factor $\text{sh}(p_n c)$ en el denominador queda prácticamente compensado para esos puntos, y el factor que domina el decrecimiento de los términos es simplemente $1/p_n$, que hace la convergencia relativamente lenta. Este inconveniente lo hemos resuelto incluyendo un mayor número de ceros, hasta 100, y evitando la saturación de las exponenciales mediante la aproximación

$$\left. \frac{\text{sh}(p_n z)}{\text{sh}(p_n c)} \right|_{p_n z \gg} = e^{-p_n(c-z)} \quad (\text{I.57})$$

En la Tabla I.5 se dan los resultados obtenidos para el potencial $V(\rho, z)$ en un mallado de 11×6 puntos a intervalos regulares entre $\rho = 0$, $\rho = a$ y $z = 0$, $z = c$ respectivamente. Los resultados están de acuerdo con la forma que cabe esperar para las equipotenciales. En la parte central coinciden con los potenciales para un condensador plano, pues al ser grande el radio del cilindro frente a la altura, el efecto de apantallamiento de la superficie lateral a potencial cero es pequeño sobre una amplia zona central.

5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
0.0	3.28	3.82	3.95	3.98	3.99	3.99	4.0	4.0	4.0	4.0
0.0	2.03	2.72	2.91	2.97	2.99	2.99	3.0	3.0	3.0	3.0
0.0	1.18	1.73	1.91	1.97	1.99	1.99	2.0	2.0	2.0	2.0
0.0	0.54	0.84	0.95	0.98	0.99	0.99	1.0	1.0	1.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Tabla I.5.- Distribución de potencial en la caja cilíndrica. $V(\rho, 0) = 0$, $V(0, z) = 0$, $V(\rho, c) = 5$.

Las componentes del campo se obtienen a partir de (I.56) teniendo en cuenta que $d J_0(x)/dx = -J_1(x)$,

$$E_\rho(\rho, z) = \frac{2V}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{J_1(p_n a) \operatorname{sh}(p_n c)} \operatorname{sh}(p_n z) J_1(p_n \rho) \quad (\text{I.53})$$

$$E_z(\rho, z) = -\frac{2V}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{J_1(p_n a) \operatorname{sh}(p_n c)} \operatorname{ch}(p_n z) J_0(p_n \rho) \quad (\text{I.59})$$

La convergencia en estas series es todavía más lenta siendo necesarios hasta 300 términos en algunos casos, ello alarga considerablemente el tiempo de cálculo y probablemente se tienen resultados menos exactos por acumulación de errores.

En la Tabla I.6 se presentan algunos de los resultados de este estudio.

ρ/a	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9
ϕ	1.568	2.412	2.491	2.499	2.500
Error Absoluto	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.0001
E_p	529.2	52.10	4.896	0.485	0.046
Error Absoluto	-3.4	0.42	0.133	0.024	0.003
E_z	841.81	998.72	1000.00	1000.00	1000.00
Error Absoluto	0.04	-0.30	-0.03	-0.02	-0.01

Tabla I.6.- Error absoluto del potencial y campo, calculados numéricamente de una capa cilíndrica. La polarización de los electrodos es la que se da en la Tabla I.5. Los valores superiores corresponden a los obtenidos por desarrollo en serie los inferiores al error absoluto de la distribución numérica con $N = 50$; $z = c/2$.

I.3.- APROXIMACION DE CARGA LINEAL.

Es frecuente que para puntos suficientemente alejados de los subelectrodos, o bien cuando la superficie de éstos es pequeña frente a las dimensiones del sistema, se sustituya el potencial que crean - por el de una distribución equivalente que simplifique los cálculos a efectuar. Harrington (1968), en la obtención de la capacidad de una - placa cuadrada utiliza para hallar los coeficientes P_{ij} , $i \neq j$, la - aproximación de carga puntual, es decir, supone que la carga distribui da uniformemente en el subelectrodo, es vista desde el punto campo co mo una carga puntual situada en el centro del mismo; la aproximación supone un error máximo del 3.8% para subelectrodos adyacentes en el - caso que estudia. Singer et al. (1970), en su trabajo sustituyen la - carga superficial por distribuciones lineales equivalentes tales como rectas o circunferencias y Harting y Read (1976) utilizan este tipo - de aproximación en el estudio de diversos tipos de lentes con un error del 1%.

Nos ha parecido interesante examinar este tipo de aproxima ción para sistemas con simetría rotacional, ya que posteriormente se rá objeto de discusión en nuestro estudio. Así, el potencial y el cam po creados por una corona circular con una carga total $q = \sigma\pi(a_0^2 - a_i^2)$ pueden sustituirse por la distribución que crea una circunferencia - cargada con una densidad lineal uniforme, λ_e , tal que

$$\lambda_e = \frac{q}{2\pi a} = \frac{\sigma(a_0^2 - a_i^2)}{2a} \quad (1.60)$$

siendo a el radio medio de la corona. Para las superficies cilíndricas se tendría una expresión análoga.

El potencial y el campo creados por esta distribución equivalente son (e.g. Durand, T.I. 1966)

$$\phi(\rho, z) = \frac{\lambda_e a}{\pi \epsilon_0} \frac{K(k)}{r_1} \quad (I.61)$$

donde k y r_1 vienen dados por (I.28) y (I.27) respectivamente,

$$E_\rho(\rho, z) = \frac{\lambda_e}{\pi \epsilon_0} \frac{1}{2\rho r_1} \left\{ K(k) - \frac{a^2 - \rho^2 + z^2}{r_1^2} \frac{E(k)}{k'^2} \right\} \quad (I.62)$$

$$E_z(\rho, z) = \frac{\lambda_e a}{\pi \epsilon_0} \frac{z}{r_1^3} \frac{E(k)}{k'^2}$$

siendo k' el módulo complementario definido como

$$k'^2 = 1 - k^2 \quad (I.63)$$

en algunos puntos estas expresiones se simplifican bastante, por ejemplo en el eje se tiene

$$\phi(0, z) = \frac{\lambda_e}{2\epsilon_0} \frac{1}{((z/a)^2 + 1)^{1/2}} \quad (I.64)$$

$$E_\rho(0, z) = 0 \quad (I.65)$$

$$E_z(0, z) = \frac{\lambda_e a}{2\epsilon_0} \frac{z}{(a^2 + z^2)^{1/2}} \quad (I.66)$$

En el plano de la circunferencia

$$\phi(\rho, 0) = \frac{\lambda_e}{\pi \epsilon_0} \frac{1}{1 + (\rho/a)} K(k) \quad (I.67)$$

$$E_{\rho}(\rho, 0) = \frac{\lambda e^a}{\pi \epsilon_0} \frac{1}{2r_1 \rho} \left(K(k) - \frac{a-\rho}{a+\rho} \frac{E(k)}{k'^2} \right) \quad (1.68)$$

$$E_z(\rho, 0) = 0 \quad (1.69)$$

Tanto la expresión del potencial como la de las componentes del campo son mucho más simples que las correspondientes a los cálculos no aproximados, lo que puede traducirse en una economía de tiempo sin que los resultados se modifiquen sustancialmente.

Hemos hecho un estudio con el fin de analizar con detalle el error que puede introducir esta aproximación en diferentes casos. Para ello hemos comparado la distribución que crea una circunferencia, uniformemente cargada, con las de una corona circular de anchura DR y una superficie cilíndrica de altura DZ, ambas con una densidad de carga uniforme; el radio de la circunferencia y la superficie cilíndrica, así como el radio medio de la corona circular son igual a la unidad. Como resumen de estos resultados hemos llegado a las siguientes conclusiones:

- 1) Para intervalos DR y DZ pequeños, los resultados prácticamente no difieren para la mayor parte de la región en estudio. Como ejemplo daremos el caso $DR/a = DZ/a = 0.01$; en el punto $\rho/a = 0.5$, $Z/a = 0.01$ los valores obtenidos son

	ϕ	E_{ρ}	E_z
Circunferencia	3.371×10^{-2}	-1.083×10^{-2}	5.938×10^{-6}
Corona circular	3.371×10^{-2}	-1.083×10^{-2}	5.938×10^{-4}

	ϕ	E_{ρ}	E_z
Circunferencia	3.871×10^{-2}	-1.082×10^{-2}	5.940×10^{-4}
Superf. Cilínd.	3.871×10^{-2}	-1.082×10^{-2}	5.938×10^{-4}

- 2) En puntos muy próximos a las geometrías las diferencias para los campos pueden ser apreciables incluso con valores de DR y DZ pequeños; para $\rho/a = 0.99$ y las restantes magnitudes iguales a las del apartado anterior se tiene

	ϕ	E_{ρ}	E_z
Circunferencia	6.365×10^{-2}	-4.755×10^{-4}	5.026×10^{-1}
Corona Circular	6.364×10^{-2}	-4.532×10^{-1}	5.216×10^{-1}
Circunferencia	6.365×10^{-2}	-4.755×10^{-1}	5.025×10^{-1}
Superf. Cilínd.	6.365×10^{-2}	-5.295×10^{-4}	4.044×10^{-1}

- 3) En puntos del eje o paraxiales, la aproximación es en general buena y solo para valores DR y DZ relativamente grandes, los resultados difieren. Así, en la zona más crítica -z pequeños- la separación empieza a ser apreciable para DR y DZ del orden de $a/10$. Haciendo $DR/a = DZ/a = 0.1$ en el punto $\rho/a = 0.1$, $z/a = 0.1$ los valores son

	ϕ	E_{ρ}	E_z
Circunferencia	3.134×10^{-1}	-1.517×10^{-2}	3.164×10^{-2}
Corona Circular	3.134×10^{-1}	-1.521×10^{-2}	3.172×10^{-2}
Circunferencia	3.133×10^{-1}	-1.517×10^{-2}	3.164×10^{-2}
Superf. Cilínd.	3.128×10^{-1}	-1.496×10^{-2}	3.116×10^{-2}

CAPITULO II

II.1.- PROPIEDADES OPTICAS DE LAS LENTES ELECTROSTATICAS.

Poco tiempo después del descubrimiento del electrón y de otras partículas cargadas comienza a desarrollarse una nueva rama de la Física: la Óptica Electrónica. Se hicieron diversos estudios en el campo teórico en un intento de llegar a comprender las propiedades de los rayos catódicos y su posible afinidad con los rayos luminosos. Se encuentra, sin embargo, una diferencia fundamental ya que se observó que los rayos catódicos son desviados por los campos electromagnéticos; posteriormente se vió que este fenómeno puede considerarse como una propiedad óptica. En el campo práctico el desarrollo comenzó en los años veinte; Busch es el primero en utilizar el término "lente electrónica" para su dispositivo de enfoque de tipo magnético, y Davisson y Calvick son los pioneros de las lentes electrostáticas; a partir de entonces los avances han sido constantes y hoy día podemos contar con instrumentos tan sofisticados como los tubos de imagen o el microscopio electrónico.

El objetivo de la Óptica Electrónica es estudiar las leyes que gobiernan el comportamiento de las partículas cargadas bajo la acción de un sistema de enfoque, desde que parten del plano objeto hasta que salen de la lente dando lugar a la formación de una imagen, real o virtual, en el plano imagen. Existen dos métodos para realizar dicho estudio. En el primero se define un índice de refracción -por

analogía con los rayos luminosos- de tal forma que la trayectoria de la partícula cumpla las leyes de la refracción; una vez que se ha determinado éste pueden tabularse las propiedades de las lentes a partir de sus correspondientes modelos ópticos; este método fue desarrollado por de Broglie con una elegante formulación, de Broglie (1950), que muestra la potencia del mismo. A efectos prácticos, sin embargo, es mucho más utilizado el método de trayectorias basado en el formalismo clásico de las leyes de la Mecánica y el Electromagnetismo, Cosslett (1946); el hecho de que se prefiera este método, siendo menos potente que el anterior, se debe a que relaciona más directamente las propiedades ópticas con los aspectos de diseño del dispositivo experimental. Este será pues el que nosotros emplearemos en nuestro estudio.

El esquema de un posible dispositivo de enfoque electrostático se representa en la Figura II.1. Un cañón de electrones compuesto por un cátodo C y una rejilla aceleradora A, suministra un haz. La velocidad al pasar por A viene impuesta por la conservación de la energía y, si suponemos despreciable la velocidad con que son emitidos los electrones, ésta será (potenciales no relativistas)

$$v_1 = \left(2 \frac{e V_1}{m}\right)^{1/2} \quad (II.1)$$

El haz ilumina al objeto D_1 , pasa a través de la lente L y finalmente produce una imagen en D_2 . El campo queda prácticamente confinado entre H y H' (realmente la penetración será de una o dos veces el diámetro de la abertura de los electrodos exteriores) y en el resto de la región el potencial es constante e igual a V_1 .

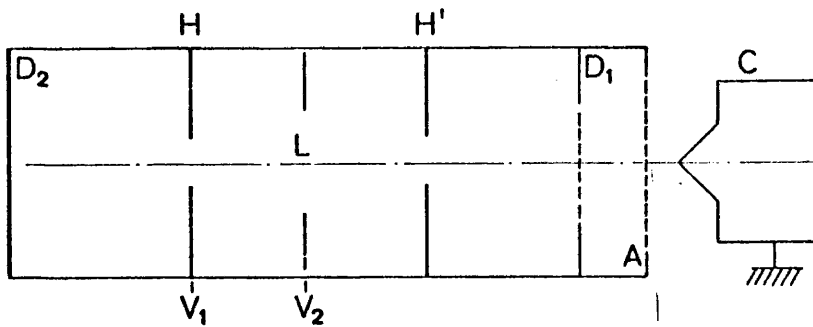


Figura II.1. Esquema de un dispositivo de enfoque electrostático. C Cátodo emisor de electrones, A rejilla aceleradora; D_1 plano objeto; L lente, D_2 plano imagen (pantalla fluorescente).

A lo largo de este capítulo se va a realizar un estudio de los principales aspectos teóricos relativos a las propiedades de enfoque y aberraciones dentro de la Óptica Electrónica. Dado que existe una abundante bibliografía sobre el tema, Grivet (1972), Septier (1967), Harting y Read (1976), hemos procurado restringirnos sólo a aquellos puntos que nos parecen más importantes a la hora de hacer comprensibles los resultados y discusiones que, sobre los sistemas en estudio, presentaremos en los capítulos siguientes.

II.1.1.- Aproximación Gaussiana. Elementos Cardinales.

En los trabajos experimentales que utilizan lentes electrostáticas, se necesita frecuentemente la obtención de imágenes de gran nitidez y desprovistas en lo posible de distorsiones; ello obliga a que sólo se utilice la parte del haz electrónico más próxima al eje de la lente. En esta región se pueden desprestigiar los términos en ρ y $d\rho/dz$ de orden mayor que la unidad en las ecuaciones de las trayectorias, con lo que el estudio de las mismas se va a simplificar notablemente. El análisis de las características de la lente para la aproximación de primer orden se conoce como Optica Gaussiana y la región en la que ésta es aplicable recibe el nombre de zona paraxial.

Analicemos la ecuación paraxial de los rayos para una lente con simetría rotacional. En este tipo de configuración electrostática, el potencial en un punto cualquiera puede obtenerse a partir del potencial axial, $V(z)$, y sus derivadas mediante el siguiente desarrollo en serie (e.g. Olsen et al., 1966)

$$\phi(\rho, z) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n v^{(2n)} \rho^{2n} / (n! 2^n)^2 \quad (\text{II.2})$$

siendo

$$v^{(2n)} = \frac{d^{2n}}{dz^{2n}} V(z) \quad (\text{II.3})$$

Así, para la aproximación Gaussiana el potencial y las componentes del campo eléctrico serán

$$\begin{aligned}\phi(\rho, z) &= V - \frac{\rho^2}{4} V'' \\ E_\rho(\rho, z) &= \frac{\rho}{2} V'' \\ E_z(\rho, z) &= -V'\end{aligned}\tag{II.4}$$

en donde hemos utilizado las primas para denotar las derivadas del potencial en el eje respecto de la variable z . La obtención de dicho potencial y sus derivadas por el método de Densidades de Carga (y en general por otros métodos), supone un tiempo de cálculo mucho menor que si se hace para puntos no axiales; ello es debido a que en este caso las ecuaciones a utilizar son del tipo (I.33), (I.41) etc, que son expresiones muy simples. Es evidente pues el interés que tiene para nosotros introducir la aproximación Gaussiana en los cálculos.

De acuerdo con (II.4) la ecuación de movimiento en la dirección radial se expresará en la forma

$$F_\rho = -\frac{e\rho}{2} V'' = m \frac{d^2 \rho}{dt^2}\tag{II.5}$$

m es la masa del electrón y $-e$ su carga. Para el movimiento en la dirección axial podemos obtener una ecuación diferencial de primer orden imponiéndola conservación de la energía

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dz}{dt}\right)^2 = e V\tag{II.6}$$

donde se ha despreciado la energía correspondiente a la componente radial de la velocidad; esto es razonable teniendo en cuenta que la trayectoria va a formar siempre ángulos muy pequeños con el eje y por ello dicha componente va a ser mucho menor que dz/dt . Eliminando el tiempo

entre las dos ecuaciones anteriores resulta

$$V^{1/2} \frac{d}{dz} \left\{ (V)^{1/2} \frac{d\rho}{dz} \right\} = - \frac{\rho}{4} V'' \quad (\text{II.7})$$

o bien

$$\frac{d^2 \rho}{dz^2} + \frac{V'}{2V} \frac{d\rho}{dz} + \frac{V''}{4V} \rho = 0 \quad (\text{II.8})$$

que es la ecuación para una trayectoria gaussiana. Esta ecuación resulta a veces poco útil debido a la presencia del término en V'' , ya que si se ha determinado V por algún método aproximado, V'' se obtendría en general por diferenciación numérica (si bien éste no sería - nuestro caso) y puede ir afectada de un gran error; por ello se suele transformar (II.8) mediante el cambio

$$R = \rho V^{1/4} \quad (\text{II.9})$$

La curva $R(z)$ se denomina rayo reducido; la ecuación (II.8) queda ahora en la forma

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{3}{16} \left(\frac{V'}{V} \right)^2 R = 0 \quad (\text{II.10})$$

que constituye la ecuación reducida o ecuación de Picht de la trayectoria.

Notemos que (II.8) y (II.10) son ecuaciones lineales y por tanto, conocidas dos soluciones particulares independientes, $r_1 = X(z)$ y $r_2 = Y(z)$, podemos obtener cualquier trayectoria mediante la adecuada combinación lineal de éstas, es decir

$$r = \lambda X(z) + \mu Y(z) \quad (\text{II.11})$$

siendo λ y μ constantes.

Aunque en principio r_1 y r_2 pueden ser dos trayectorias arbitrarias, en Optica Electrónica suelen utilizarse dos rayos típicos: $X(z)$ corta al eje en $z = z_0$ (plano objeto), formando 45° con aquél, ésto es $(\frac{dX}{dz})_{z=z_0} = 1$; $Y(z)$ pasa por el plano objeto a una distancia - unidad del eje y corta al mismo en el plano central de la lente. De (II.11) podemos concluir que a cada punto objeto situado en el plano $z = z_0$ le corresponde un punto imagen situado en el plano perpendicular al eje y que pasa por el punto z_i , tal que $X(z_i) = 0$; la imagen reunirá pues dos cualidades importantes: fidelidad, es decir será similar al objeto, y nitidez.

Vamos a determinar una relación entre $X(z)$ e $Y(z)$ que necesitaremos posteriormente para determinar el coeficiente de aberración esférica. Tanto $X(z)$ como $Y(z)$ verifican la ecuación (II.7); se puede eliminar el término en V'' multiplicando las ecuaciones por $Y(z)$ y $X(z)$ respectivamente y restándolas, queda entonces

$$\frac{d}{dz} \{ V^{1/2} (Y \frac{dX}{dz} - X \frac{dY}{dz}) \} = 0 \quad (II.12)$$

integrando

$$V^{1/2} (Y \frac{dX}{dz} - X \frac{dY}{dz}) = V_0^{1/2} \{ Y_0 (\frac{dX}{dz})_0 - X_0 (\frac{dY}{dz})_0 \} \quad (II.13)$$

en donde el subíndice 0 se refiere al punto objeto en estudio. Teniendo en cuenta las características de $X(z)$ e $Y(z)$ resulta finalmente la relación

$$Y \frac{dX}{dz} - X \frac{dY}{dz} = (\frac{V_0}{V})^{1/2} \quad (II.14)$$

Resumiendo lo expuesto podemos concluir que, conocida la distribución del potencial y sus derivadas en el eje de la lente es -

posible determinar cualquier trayectoria de una partícula cargada en la región paraxial; sin embargo, al igual que se hace en Óptica Geométrica, el estudio de esta zona puede reducirse a la definición de una serie de parámetros que caracterizan completamente el comportamiento de la lente en aquella zona. En la práctica las lentes tendrán un "espesor" bien definido, en el que el campo afecta de forma apreciable a las trayectorias, pero la Óptica Electrónica no trata éstas sino sus asíntotas. Al hacer el estudio teórico se supone que el objeto y la imagen se sitúan en regiones donde el campo es nulo, por tanto en la región de campo apreciable solo podremos tratar con objetos e imágenes virtuales; aunque ello suponga en principio una restricción ésta no es importante porque en la mayoría de las aplicaciones prácticas no interesan objetos e imágenes reales inmersos en la lente.

Supongamos dos rayos paraxiales, que entran en la lente paralelos al eje por ambos lados, según se muestra en la Figura II.2; en ella puede verse como se obtienen los elementos cardinales de una lente gruesa.

Algunos autores definen la distancia focal objetiva trazando la tangente en los puntos C ó C' de corte de la trayectoria con el eje. Nosotros, mientras no se indique lo contrario, nos referimos siempre a la distancia focal asíntótica o proyectiva definida por el corte de la asíntota. A medida que la lente se va haciendo más débil - ambas distancias tienden a coincidir. Como criterio de signo hemos adoptado el siguiente: se toman como origen los puntos principales, las distancias focales son positivas si el segmento $z_p - z_f$ sigue el sentido de la trayectoria de las partículas y negativas en caso con-

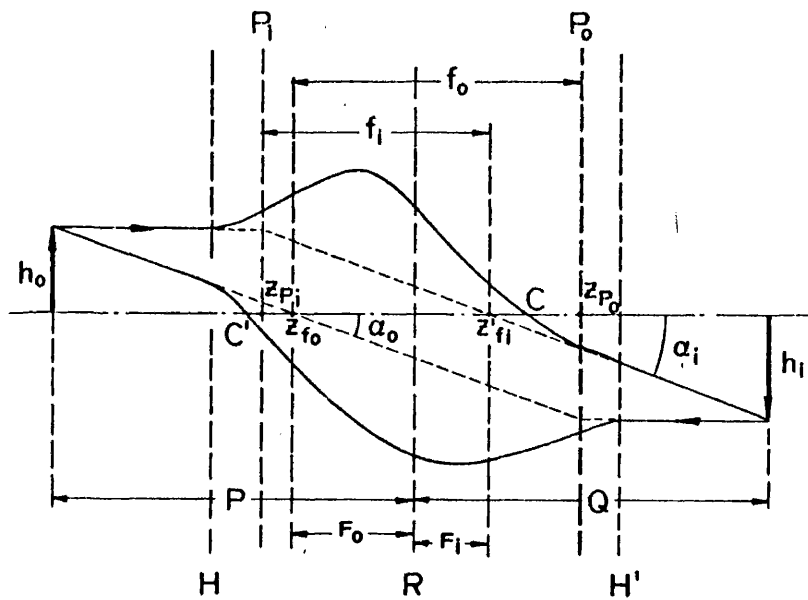


Figura II.2. Elementos cardinales de una lente electrostática. R es el plano de referencia de la lente (generalmente el plano medio). Los planos H y H' delimitan la región de campo no nulo. Las coordenadas de los planos principales z_{p0} , z_{pi} , las de los planos focales z_{f0} , z_{fi} y las correspondientes distancias focales objeto e imagen f_o , f_i , constituyen los elementos cardinales de la lente.

trario. En la Figura II.2 se ha representado una trayectoria que solo corta al eje una vez, se dice que la lente opera en el primer rango; según nuestro criterio de signos será $f_i > 0$, $f_o > 0$. Puede ocurrir que haya dos, tres cortes y la lente operará en el segundo o tercer rango; en el segundo rango las distancias focales son negativas.

A partir de las magnitudes representadas en la Figura II.2 se pueden definir otras de interés tales como las distancias focales medias $F_o = f_o - z_{p0}$, $F_i = f_i - z_{pi}$; el aumento lateral o magnificación definido por el cociente h_i/h_o ; el aumento angular $\gamma = \alpha_i/\alpha_o$ y la potencia de la lente dada por $K = \pm 1/(f_o f_i)^{1/2}$ signo más para $f_o/f_i > 0$. Comparando triángulos semejantes en la Figura II.2 puede verse que la relación de Newton para lentes gruesas es válida en el caso de objetos formados por rayos paraxiales, así se verifica

$$(P - F_o) (Q - F_i) = f_o f_i \quad (II.15)$$

y el aumento lateral puede obtenerse como

$$M = \frac{-f_o}{P - F_o} = \frac{Q - F_i}{-f_i} \quad (II.16)$$

Entre las distancias focales y la energía cinética de la partícula W_o , W_i antes y después de atravesar la lente, existe una relación fundamental, (e.g. Sptier, 1967)

$$\frac{f_i}{f_o} = \left(\frac{W_i (1 + W_i / 2W)}{W_o (1 + W_o / 2W)} \right)^{1/2} \quad (II.17)$$

siendo W la energía de la partícula en reposo, $m_o c^2$. Para el caso no relativista ($W_i, W_o \ll W$) la expresión se reduce a

$$\frac{f_i}{f_o} \approx \left(\frac{W_i}{W_o} \right)^{1/2} \quad (\text{II.18})$$

Si se trata de una lente simétrica $W_i = W_o$ y las distancias focales objeto e imagen coinciden en este caso.

Cuando el objeto o la imagen están inmersos en la lente, - las relaciones que hemos visto no son válidas y si se quiere analizar la formación de imágenes reales es preciso recurrir a otros procedimientos -ver por ejemplo Grivet (1972), pág. 105 y siguientes-.

II.1.2.- Determinación Numérica de Trayectorias.

La obtención de las distancias focales y de otros parámetros de la lente, exige el cálculo de determinadas trayectorias mediante la integración de las ecuaciones de movimiento. En general, una partícula de carga q y masa m que se mueve en un campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r})$, está sometida a una fuerza $\vec{F} = q \vec{E}(\vec{r})$; la ecuación de movimiento será

$$\vec{F}(\vec{r}) = m \ddot{\vec{r}} \quad (\text{II.19})$$

sujeta a la condición de conservación de la energía en todo instante. Ya hemos visto que al tratar con trayectorias paraxiales, esta ecuación puede reducirse a otras más sencillas que dependen solo del potencial en el eje y sus derivadas. Salvo en el caso de distribuciones muy simples, la resolución de estas ecuaciones diferenciales no puede efectuarse analíticamente y es preciso recurrir a las técnicas de integración numérica. Existen diversos métodos de integración -Gérald (1973), Mineur (1966)- si bien nosotros nos limitaremos a analizar -

los que hemos puesto a punto para nuestro estudio. En la elección de los mismos se ha tenido en cuenta la sencillez con que plantean la resolución del problema y, como veremos más adelante, se han preparado de forma que para un error prefijado calculen la trayectoria en un tiempo mínimo.

Método de Diferencias Centrales.-

Por comodidad analizaremos el problema en una dimensión; la ecuación (II.19) puede ponerse entonces como

$$F \{ x(t) \} = m \dot{v}(t) \quad (\text{II.20})$$

siendo

$$a(t) = \dot{v}(t) = dv(t)/dt \quad (\text{II.21})$$

$$v(t) = \dot{x}(t) = dx(t)/dt \quad (\text{II.22})$$

El cálculo de la posición en un instante se hace por desarrollo en serie de primer orden a partir de la posición anterior, haciendo uso de la velocidad definida como una diferencia central; expresando las ecuaciones (II.20) - (II.22) en forma de diferencias finitas y combinando las dos últimas resulta

$$m^{-1} F \{ x(t) \} \approx \{ v(t+\Delta t/2) - v(t-\Delta t/2) \} / \Delta t \quad (\text{II.23})$$

$$v(t+\Delta t/2) = \dot{x}(t+\Delta t/2) \approx \{ x(t+\Delta t) - x(t) \} / \Delta t \quad (\text{II.24})$$

De la ecuación (II.23) se deduce inmediatamente que

$$v(t+\Delta t/2) = v(t-\Delta t/2) + m^{-1} F \{ x(t) \} \Delta t \quad (\text{II.25})$$

y llevando este resultado a (II.24) queda finalmente para la posición en el instante $t + \Delta t$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t - \Delta t/2) \Delta t + F \{ x(t) \} m^{-1} \Delta t^2 \quad (\text{II.26})$$

Así pues, fijando un intervalo de tiempo Δt , apropiado, la posición en $t = t_0$ y la velocidad es $t = t_0 - \Delta t/2$, las ecuaciones (II.25) y (II.26) definen los puntos sucesivos de la trayectoria y la velocidad correspondiente.

Notemos que el desarrollo (II.26) es correcto hasta el término de 2º orden ya que

$$x(t - \Delta t/2) = \dot{x}(t) - \ddot{x}(t) \Delta t/2 + \dddot{x}(t) (\Delta t/2)^2 / 2 - \dots \quad (\text{II.27})$$

y por lo tanto

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \dot{x}(t) \Delta t + \ddot{x}(t) \Delta t^2/2 + \dddot{x}(t) \Delta t^3/8 + \dots \quad (\text{II.28})$$

el error en cada paso es del orden de Δt^3 y el error en todo el intervalo del orden de Δt^2 , Gérald (1973).

Método de la Fuerza Promediada.-

El método de Diferencias Centrales resulta muy sencillo en su utilización práctica pero presenta el inconveniente de que no determina simultáneamente la velocidad y posición. Se supone explícitamente que $v(t + \Delta t/2)$ es, de alguna forma, una velocidad media entre $v(t)$ y $v(t+\Delta t)$ y este valor promediado se usa para calcular el desplazamiento $\Delta x = x(t + \Delta t) - x(t)$. El método de la Fuerza Promediada, Harrison et al. (1969), que vamos a describir también hace uso de valores "promediados" de las diferentes magnitudes que intervienen en la

integración pero de tal forma que elimina la desventaja antes citada.

Desarrollemos en serie de Taylor la posición $x(t + \Delta T)$ en torno a $x(t)$, se tiene

$$x(t + \Delta T) = x(t) + v(t) \Delta T + a(t) \Delta T^2 + \frac{a(t)}{2} \Delta T^3 + \dots \quad (\text{II.29})$$

En un problema en el que la fuerza sea constante todos los coeficientes de ΔT^n con $n > 2$ se anulan. Podemos tener también un desarrollo exacto con tres términos definiendo $\langle F \rangle$ de forma que

$$x(t + \Delta T) = x(t) + v(t) \Delta T + \langle F \rangle m^{-1} \Delta T^2 / 2 \quad (\text{II.30})$$

De acuerdo con esta definición $\langle F \rangle$ es la fuerza media en el intervalo ΔT . Tendremos entonces

$$v(t + \Delta T) = v(t) + \langle F \rangle m^{-1} \Delta T \quad (\text{II.31})$$

$$x(t + \Delta T) = x(t) + \{ v(t) + \langle F \rangle m^{-1} \Delta T / 2 \} \Delta T \quad (\text{II.32})$$

Estas ecuaciones son equivalentes a (II.25) y (II.26) del método de Diferencias Centrales, si bien en este caso la posición y velocidad están calculadas en el mismo punto. En efecto, la ecuación (II.26) puede transformarse en otra formalmente igual a la (II.32); para ello desarrollamos $v(t - \Delta t/2)$ hasta el segundo término y teniendo en cuenta (II.20) resulta

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \{ v(t) + F \{ x(t) \} \Delta t / 2m \} \Delta t \quad (\text{II.33})$$

Esta ecuación es equivalente a (II.32) aunque $\langle F \rangle$ y $F\{x(t)\}$ deben interpretarse de diferente manera. Para determinar $\langle F \rangle$ calculemos primero una "posición virtual" definida por el desarrollo de segundo orden

$$x^*(t + \Delta T) = x(t) + v(t) \Delta T + F(x(t)) \Delta T^2 / 2m \quad (\text{II.34})$$

Esta sería la posición de la partícula en el instante $t + \Delta T$ si la fuerza permaneciera constante en el intervalo ΔT . Definimos a partir de ella Δv como

$$\Delta v = \{ F(x^*(t + \Delta T)) + F(x(t)) \} / 2m \quad (\text{II.35})$$

lo cual es equivalente a tomar para $\langle F \rangle$ el valor

$$\langle F \rangle = \{ F(x^*(t + \Delta T)) + F(x(t)) \} / 2 \quad (\text{II.36})$$

En resumen, el proceso de integración en el método de la Fuerza Promediada requiere en cada paso:

- a) Calcular una posición virtual mediante la ecuación (II.34).
- b) Determinar el valor de la fuerza en dicha posición.
- c) Efectuar un promedio entre $F(x(t))$ y $F(x^*(t + \Delta T))$.
- d) Utilizar el valor de $\langle F \rangle$ obtenido en c) para hallar $x(t + \Delta T)$ y $v(t + \Delta T)$ de las ecuaciones (II.32) y (II.31) respectivamente.

Se trata, en definitiva, de un método del tipo de los de "predicción-corrección" que calcula en primer lugar una posición virtual como primera aproximación y utiliza la fuerza media $\langle F \rangle$ para obtener la posición y velocidad finales.

Analicemos el orden de aproximación de este método. El desplazamiento de la partícula al pasar a la posición $x^*(t + \Delta T)$ es $\Delta x = x(t) \Delta T + \dot{x}(t) \Delta T^2 / 2$ y el valor de la fuerza en esta posición se puede obtener como

$$F(x(t + \Delta T)) = F(x(t)) + F_x \Delta x \quad (II.37)$$

siendo F_x la derivada de la fuerza respecto de la posición en $x(t)$.

Llevando este resultado a (II.32) queda

$$x(t + \Delta T) = x(t) + \dot{x}(t) \Delta T + \ddot{x}(t) \Delta T^2/2 + F_x m^{-1} \ddot{x}(t) \Delta T^3/4 + \dots \quad (II.38)$$

el error es por tanto del orden de ΔT^3 , al igual que en el método anterior, en cada paso, y el error en toda la trayectoria del orden de ΔT^2 .

Método de Runge - Kutta.-

Los métodos descritos anteriormente, utilizan el valor de las componentes del campo eléctrico a cada punto para integrar las ecuaciones y pueden ser utilizados para trayectorias situadas en cualquier región en la que la distribución sea conocida; en concreto nos puede interesar para trayectorias no paraxiales. El método que analizaremos ahora resulta particularmente adecuado para la resolución de ecuaciones diferenciales de segundo orden sin derivada primera; a este tipo pertenece la ecuación (II.10) de la trayectoria paraxial de un electrón en un sistema con simetría rotacional. Se trata pues de resolver una ecuación de la forma

$$y'' + f(x)y = 0 \quad (II.39)$$

siendo $f(x)$ una función relacionada con la distribución de campos en el sistema. Suponiendo conocidas las condiciones iniciales del problema, $y(x_0) = y_0$, $y'(x_0) = y'_0$, es posible obtener los puntos sucesivos de la trayectoria mediante la aplicación de las siguientes fórmulas -

generales (e.g. Lapeyre y Laudet, 1960)

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n + \frac{h^2}{2} \sum_{j=0}^{q-1} B_{qj} y''_{nj} \quad (II.40)$$

$$y'_{n+1} = y'_n + h \sum_{j=0}^q A_j y''_{nj} \quad (II.41)$$

los términos y''_{nj} se obtienen considerando en el intervalo cerrado (x_n, x_{n+1}) , $q - 1$ valores intermedios tales que

$$y_{ni} = y_n + h \theta_i y'_n + \frac{h^2}{2} \sum_{j=0}^{i-1} B_{ij} y''_{nj} \quad 0 < i < q \quad (II.42)$$

siendo

$$\begin{aligned} x_{ni} &= x_n + \theta_i h; & y''_{nj} &= -f(x_{nj}) y_{nj} \\ x_{n0} &= x_n; & y_{n0} &= y_n; & y''_{n0} &= y''_n \end{aligned} \quad (II.43)$$

El valor de q determina el orden del método; A_i , B_{ij} y θ_i son parámetros que pueden ajustarse a partir de las condiciones de precisión que se impongan en los cálculos. Sea α el orden del término del desarrollo de y_{n+1} que difiere del de Taylor y β el correspondiente en el desarrollo de y'_{n+1} . Lapeyre y Laudet (1960), han analizado (II.40) y (II.41) para $q = 2$ en algunos casos. Así, para $\alpha = 4$ y $\beta = \alpha - 1 = 3$ se tiene

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{1}{2}; & A_1 &= \frac{1}{2}; & \theta_1 &= 1 \\ B_{10} &= 0; & B_{20} &= \frac{2}{3}; & B_{21} &= \frac{1}{3} \end{aligned} \quad (II.44)$$

y las expresiones que resultan son

$$y_{n+1} = y_n \{1 - h^2(2f_n + f_{n+1})/6\} + y'_n h \{1 - h^2 f_{n+1}/6\} \quad (II.45)$$

$$y'_{n+1} = -y_n h(f_n + f_{n+1})/2 + y'_n \{1 - h^2 f_n / 2\} \quad (II.46)$$

con una precisión de una parte en 10^3 . Si se requiere una precisión mayor puede tomarse $\alpha = 5$, $\beta = \alpha - 1 = 4$, resultando entonces

$$y_{n+1} = y_n \left\{ 1 - h^2 \left(f_n + 2f_{n+\frac{1}{2}} - h^2 f_n f_{n+\frac{1}{2}}/4 \right) / 6 \right\} + y'_n h \left\{ 1 - h^2 f_{n+\frac{1}{2}} / 6 \right\} \quad (II.47)$$

$$y'_{n+1} = -y_n h \left\{ f_n + 4f_{n+\frac{1}{2}} - h^2 f_n f_{n+\frac{1}{2}}/2 \right\} / 6 + y'_n \left\{ 1 - h^2 f_{n+\frac{1}{2}}/3 \right\} - h f_{n+1} y_{n+1} / 6 \quad (II.48)$$

con un error menor que una parte en 10^6 . En el primer caso únicamente se necesita conocer $f(x)$ en x_n y x_{n+1} , en este segundo es preciso calcular además $f_{n+\frac{1}{2}} = f(x_n + h/2)$.

Elección del Paso de Integración.-

En el cálculo práctico de trayectorias hay que imponer un valor para el desplazamiento en cada paso de la integración. Es claro que conviene optimizar esta elección a fin de realizar los cálculos en un tiempo mínimo y conservando la mayor precisión posible -ver por ejemplo Septier (1967), pág. 82 y siguientes-. Nosotros hemos elegido un criterio único que se aplica a cualquiera de los métodos de integración estudiados. Supongamos que se tiene una trayectoria de la forma

$$y_{n+1} = y_n + y'_n h + Ah^2 + Bh^3 \quad (II.49)$$

$$y'_{n+1} = y'_n + Dh + Eh^2 \quad (II.50)$$

siendo los restantes términos de los desarrollos despreciables. Calculamos los números

$$\begin{aligned} C1 &= | A/B/m | \\ C2 &= | D/E/m | \end{aligned} \quad (II.51)$$

y hagamos el intervalo h igual al mínimo de estos dos números; ello implica que el término en h^3 de (II.49) es por lo menos m veces inferior al término en h^2 y lo mismo sucede en el desarrollo de y'_{n+1} .

II.2.- DEFECTOS EN LENTES.

Hasta ahora hemos considerado únicamente la formación de imágenes de haces monoenergéticos mediante la teoría Gaussiana. En la práctica, si se analiza con detalle la imagen se encuentra que no es exactamente la esperada, es decir, a un punto objeto no le corresponde un punto imagen sino una pequeña mancha que es provocada por los defectos inherentes al sistema de enfoque. Estos defectos o aberraciones tienen, en su mayor parte, un origen similar a los que presentan los sistemas ópticos de luz. Así, fluctuaciones en los potenciales de aceleración, la extracción de partículas de regiones no equipotenciales, etc., van a provocar una aberración cromática. Cuando se utiliza una aproximación más exacta -incluyendo los términos en ρ^3 - se encuentra que las aberraciones geométricas deterioran la calidad y fidelidad de la imagen gaussiana. Por otra parte la construcción y el alineamiento del sistema no son perfectos y por lo tanto se presentan aberraciones de tipo mecánico. En casos en los que se trabaja con poten-

ciales muy elevados (~ 100 kV) las discrepancias entre los resultados correctos y los obtenidos utilizando la aproximación no relativista - pueden interpretarse como una aberración relativista. Cuando el haz es intenso aparecen los efectos de repulsión coulombiana y podemos hablar de una aberración de carga espacial. Estos dos últimos tipos - que no tienen equivalencia en la Óptica Clásica- quedan fuera de nuestro campo y no los consideraremos.

II.2.1.- Aberraciones de Tercer Orden.

La aproximación gaussiana deja de ser válida a medida que las trayectorias van formando ángulos mayores con el eje de rotación; en la zona inmediata a la de Gauss, denominada área de Seidel, hay que incluir los términos de tercer orden para obtener los valores de las magnitudes con una precisión aceptable. De acuerdo con (II.2) el potencial y el campo en esta zona serán

$$\begin{aligned} \phi(\rho, z) &= V - \frac{\rho^2}{4} V'' + \frac{\rho^4}{64} V^{IV} \\ E_\rho(\rho, z) &= \frac{\rho}{2} V'' - \frac{\rho^3}{16} V^{IV} \\ E_z(\rho, z) &= -V' + \frac{\rho^2}{4} V''' \end{aligned} \quad (II.52)$$

Al introducir estos valores en las ecuaciones de las trayectorias se tiene que para un punto objeto dado, $O(x_0, y_0)$, el punto imagen no se encuentra situado en $I(x_i, y_i)$ que correspondería a la trayectoria gaussiana sino que se encuentra desplazada en el punto $I'(x'_i, y'_i)$. Sea $N(x_d, y_d)$ el punto por el que el rayo pasa a través del diafragma D que limita la extensión del haz; el vector $\vec{II}'(\xi, \eta)$ que caracteriza

la aberración es entonces función del punto objeto y de N

$$\begin{aligned}\xi &= x'_i - x_i = f(x_0, y_0, x_d, y_d) \\ \eta &= y'_i - y_i = g(x_0, y_0, x_d, y_d)\end{aligned}\quad (II.53)$$

si desarrollamos en serie hasta tercer orden teniendo en cuenta que - una rotación de 180° cambia los signos de x_0, y_0, x_d, y_d , y por tanto los términos pares deben anularse, queda una expresión que contiene - veinte coeficientes para ξ y otros tantos para η (ver por ejemplo Gri^uvet 1972).

Hagamos los cambios de variable

$$\begin{aligned}u &= x_0 + j y_0 = \rho e^{j\theta} \\ v &= x_d + j y_d = \rho e^{j\phi} \\ w &= \xi + j\eta\end{aligned}\quad (II.54)$$

en donde w va a ser función de u, v y de sus conjugados $\bar{u} = x_0 - j y_0, \bar{v} = x_d - j y_d$. Teniendo en cuenta la simetría de rotación y el teorema de Malus-Dupin que establece que todos los rayos son normales a las superficies de onda, se llega a que el número total de coeficientes - para este tipo de sistemas se reduce a cinco, esto es

$$w = A v^2 \bar{v} + B u^2 \bar{v} + C u \bar{u} v + D v (\bar{u} v + 2 y \bar{v}) + F u^2 \bar{u} \quad (II.55)$$

Si todos los sumando de (II.55) son del mismo orden resulta muy difícil analizar la forma de la figura de aberración; sin embargo es posible imaginar condiciones experimentales ideales en las que sólo algunos de los términos sean significativos. Veamos cada una de estas condiciones:

Aberraciones producidas por la abertura.

Supongamos que el objeto se encuentra muy próximo al eje e ilumina totalmente el diafragma; para simplificar haremos $\theta = 0$.

a) Aberración esférica.- Cuando el punto objeto se encuentra en el eje se tiene $u = 0$ y la ecuación (II.54) se reduce a

$$w = A \rho^3 e^{j\phi} \quad (\text{II.56})$$

En este caso es sencillo analizar la figura de aberración. Si imaginamos un pincel de rayos que parte de O y ocupa una circunferencia de radio ρ en el diafragma el ángulo ϕ habrá variado entre 0 y 2π ; ello implica que el punto I' se mueve en una circunferencia de centro I y radio $A \rho^3$; si consideramos la totalidad del diafragma con un radio R la figura de aberración será pues un círculo de radio $A R^3$. La constante A se denomina coeficiente de aberración esférica.

Este defecto es producido por los campos que son siempre más intensos cerca de los electrodos lo que obliga a los rayos marginales a cortar al eje antes que los paraxiales, dando lugar a que la imagen de un punto se difumine en un disco. Un análisis posterior, Sturrok (1955), muestra que el pincel pasa por un plano en el que su radio es mínimo e igual a $A R^3/4$; el disco de aberración en este plano se llama círculo de máxima nitidez.

b) Coma.- Supongamos ahora que la aberración esférica es despreciable para un par de planos conjugados z_0, z_1 . Si el objeto está suficientemente próximo al eje de forma que los términos en u^2 y u^3 sean despreciables, la aberración queda en la forma

$$w = D \rho^2 \beta (e^{2j\phi} + 2) \quad (\text{II.57})$$

Para un pincel que pase con un radio ρ por el diafragma, la figura de aberración es una circunferencia de radio $D \rho^2 \beta$ centrada en un punto que dista $2D \rho^2 \beta$ del punto imagen gaussiano; esta circunferencia es barrida dos veces al variar ϕ entre 0 y 2π . La imagen de 0 que resulta al barrer todo el diafragma es una figura que recuerda la forma de un cometa (de ahí el nombre de esta aberración) siendo las envolventes de las circunferencias dos rectas que forman 60° entre sí; esta imagen se encuentra en el plano z_1 . La constante D que caracteriza la aberración se llama coeficiente de coma.

En los sistemas ópticos de luz es posible observar coma puro si se ha corregido totalmente la aberración esférica; en los sistemas electrostáticos no se puede eliminar nunca ésta última, siendo en general bastante más significativa que el coma.

Aberraciones de campo.

Estas aberraciones son producidas por objetos que se encuentran alejados del eje pero la abertura del diafragma es lo suficientemente pequeña como para que todos los términos de v con exponente mayor que la unidad sean despreciables. Trabajamos pues con un pincel - infinitesimal y la ecuación (II.55) queda reducida a

$$w = B \beta^2 \rho e^{-j\phi} + C \beta^2 \rho e^{j\phi} + f \beta^3 \quad (\text{II.58})$$

a) Distorsión. - El último término de (II.58) es independiente de la posición del rayo al pasar por el diafragma y por tanto no

produce una mancha en el plano imagen sino un desplazamiento de la imagen que dependerá de la magnitud y el signo del coeficiente de distorsión F. Este resultado muestra la incapacidad del sistema para mantener constante el aumento lateral.

b) Astigmatismo y Curvatura de imagen.- Si suponemos implícita la traslación de la imagen debida a la distorsión el término restante que caracteriza la aberración será

$$w = \beta^2 \rho (B e^{-j\phi} + C e^{j\phi}) \quad (II.59)$$

Un pincel de rayos que pase a través del diafragma con un radio ρ describirá en el plano imagen una elipse de eje mayor $2\beta^2 \rho (B + C)$ y eje menor $2\beta^2 \rho (B - C)$ y si se ilumina todo el diafragma la imagen resultante será elíptica, excepto en dos planos -donde se encuentran los centros de curvatura de la superficie de onda- que degenera en dos segmentos de recta; estas dos imágenes se denominan imágenes astigmáticas y puede demostrarse (ver por ejemplo J. Casas, Optica) que la distancia axial que las separa depende sólo del término B denominado coeficiente de astigmatismo.

Las imágenes astigmáticas sólo interesan en el caso de objetos rectilíneos; en los restantes la mejor imagen corresponde a una entre todas las elípticas que es circular. La distancia entre este círculo de mínima confusión y el plano imagen gaussiano depende exclusivamente de la constante C o coeficiente de curvatura de imagen. Su presencia en (II.59) implica que la mejor imagen se tiene en una pantalla de curvatura cóncava y no en una plana.

Cálculo de los Coeficientes de Aberración. Método de la Trayectoria.

Se han desarrollado diversos procedimientos matemáticos para calcular los coeficientes de aberración anteriormente vistos. Citaremos por su interés el método de la Función Característica, Hawkes (1967), y el método de la Trayectoria; Grivet (1972). El primero de ellos se basa en la utilización del índice de refracción y, como ya dijimos, se presta a elegantes formulaciones matemáticas basadas en el aspecto ondulatorio del problema. El segundo método se adapta sin embargo mejor al enfoque que hasta ahora hemos dado al desarrollo teórico y es el que vamos a emplear nosotros; una desventaja de este método frente al anterior es la de que no resulta fácil demostrar cualquier interrelación que exista entre los coeficientes.

Vamos a ver con detalle el cálculo del coeficiente de aberración esférica para un sistema con simetría axial. Las ecuaciones de movimiento deben incluir los términos de tercer orden y por tanto serán

$$m \frac{d^2 \rho}{dt^2} = e \left(\frac{\rho}{2} V'' - \frac{\rho^3}{16} V^3 V \right) \quad (II.60)$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = e \left(V' - \frac{\rho^2}{4} V'' \right)$$

Imponiendo la condición de conservación de la energía que ahora incluye la correspondiente a la componente radial de la velocidad, y combi-
nándola con II.60, se tiene para la trayectoria de un electrón en la zona de Seidel

$$\frac{d^2 \rho}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \frac{d\rho}{dz} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \rho = \left\{ \frac{1}{32} \frac{V^{IV}}{V} - \frac{1}{16} \left(\frac{V''}{V} \right)^2 \right\} \rho^3 +$$

$$+ \frac{1}{8} \left\{ \frac{V'''}{V} - \frac{V'' V'}{V^2} \right\} \rho^2 \rho' - \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \rho \rho'^2 - \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \rho'^3 + \dots \quad (\text{II.61})$$

Puesto que los términos de aberración son pequeños puede resolverse (II.61) por un método perturbativo. Así, hacemos

$$\rho = \rho_0 + \epsilon \quad (\text{II.62})$$

en donde ρ_0 representa la trayectoria gaussiana y ϵ la perturbación que suponemos lo suficientemente pequeña como para que las potencias mayores que la unidad sean despreciables. Llevando (II.62) a (II.61) la ecuación resultante para la perturbación es

$$\frac{d^2 \epsilon}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \frac{d\epsilon}{dz} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \epsilon = \left\{ \frac{1}{32} \frac{V^{IV}}{V} - \frac{1}{16} \left(\frac{V''}{V} \right)^2 \right\} \rho_0^3 +$$

$$+ \frac{1}{8} \left\{ \frac{V'''}{V} - \frac{V'' V'}{V^2} \right\} \rho_0^2 \rho_0' - \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \rho_0 \rho_0'^2 - \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \rho_0'^3 \quad (\text{II.63})$$

Se trata pues de una ecuación diferencial de 2° orden con un término independiente de ϵ . Puede resolverse por el método de variación de parámetros, Ayres (1969), si se conocen dos soluciones de la ecuación homogénea que no es otra que la de las trayectorias gaussianas y, por consiguiente, podemos hacer uso de los rayos $X(z)$ e $Y(z)$ definidos anteriormente.

Supongamos un rayo paraxial que parte de un punto z_0 , situado en el eje con una pendiente α , de forma que

$$\rho_0 = \alpha X(z) \quad (\text{II.64})$$

Supongamos también que la perturbación se puede escribir en la forma

$$\epsilon = \alpha(z) X(z) + \beta(z) Y(z) \quad (\text{II.65})$$

Es evidente que se ha de verificar $\epsilon(z_0) = \epsilon'(z_0) = 0$ ya que en ese punto la trayectoria coincide con la gaussiana.

Aplicando a (II.65) el método de variación de parámetros se tiene

$$\alpha'(z) X(z) + \beta'(z) Y(z) = 0 \quad (\text{II.66})$$

$$\alpha'(z) X(z) + \beta'(z) Y'(z) = \alpha^3 P(X, X', \phi)$$

P representa el término independiente de la ecuación (II.63) en donde se ha sustituido ρ_0 por su valor de acuerdo con (II.64).

La aberración esférica representa el valor de ϵ en el plano imagen gaussiano, es decir en $z = z_i$; pero $X(z_i) = 0$ y por tanto de (II.65)

$$|w| = \epsilon(z_i) = \beta(z_i) Y(z_i) \quad (\text{II.67})$$

Resolviendo el sistema (II.66) se tiene

$$\beta'(z) = \frac{\alpha^3 X P}{X'Y - XY'} \quad (\text{II.68})$$

pero de acuerdo con la ecuación (II.14) podemos simplificar la expresión anterior quedando

$$\beta'(z) = \alpha^3 \left(\frac{Y}{V_0}\right)^{1/2} X P \quad (\text{II.69})$$

integrando entre el punto objeto y el imagen y teniendo en cuenta que al ser $\epsilon(z_0) = 0$, $X(z_0) = 0$ el valor de $\beta(z_0)$ es nulo también, se tiene para la aberración esférica

$$|w| = \frac{\alpha^3 Y(z_i)}{(V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} X(V)^{1/2} p \, dz \quad (II.70)$$

A fin de relacionar w con las magnitudes que definimos anteriormente al estudiar la aberración introducimos un diafragma de radio R en la región de campo nulo para limitar la abertura del haz. Si la distancia entre z_0 y el diafragma es δ se tendrá $R = \alpha\delta$; ya que $|w| = AR^3$ y por otra parte al ser $Y(z_0) = 1$, $Y(z_i)$ representa el aumento lateral M , podemos expresar el coeficiente de aberración A en la forma

$$A = \frac{M}{\delta^3 (V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} X^4(V)^{1/2} \left\{ \frac{1}{32} \frac{V^{IV}}{V} - \frac{1}{16} \left(\frac{V''}{V}\right)^2 + \frac{1}{8} \left(\frac{V'''}{V} - \frac{V'V''}{2}\right) \right. \\ \left. - \frac{X'}{X} - \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \left(\frac{X'}{X}\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \left(\frac{X'}{X}\right)^3 \right\} dz \quad (II.71)$$

integrando por partes pueden eliminarse términos en V''' , V'' y V' quedando finalmente

$$A = \frac{M}{\delta^3 (V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} X^4(V)^{1/2} \left\{ \frac{1}{32} \frac{V^{IV}}{V} - \frac{1}{32} \left(\frac{V''}{V}\right)^2 - \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \left(\frac{X'}{X}\right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{X'}{X}\right)^4 \right\} dz \quad (II.72)$$

Con frecuencia se emplea un coeficiente de aberración C_s , definido mediante la relación

$$|w| = M C_s \alpha^3 \quad (II.73)$$

Es inmediato ver que $C_s = R^3 A/M \alpha^3$ y por tanto se puede calcular a partir de (II.72) sin embargo puede usarse otra expresión más simple que no contiene términos en V^{IV} , (e.g. Grivet, 1972)

$$C_s = \frac{1}{64(V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} x^4 (V)^{1/2} \left(3T^4 - \frac{9}{2} T^2 T' + 5T'^2 \right) + 4T T' \frac{x'}{x} \, dz \quad (II.74)$$

en donde se ha introducido la función $T(z) = V'/V$ y su derivada $T'(z)$. Para caracterizar la aberración esférica de las lentes nosotros hemos utilizado el coeficiente C_s obteniendo a partir de una modificación de (II.74) en la que se sustituye el rayo normal x por el rayo reducido x_R definido en la ecuación (II.9), quedando C_s en la forma

$$C_s = \frac{1}{64(V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} V^{-1/2} \left(x_R^4 (3T^4 + 5T'^2 - \frac{11}{2} T^2 T') + 4 x_R^3 x'_R T T' \right) dz \quad (II.75)$$

Esta fórmula tiene la ventaja de que permite obtener C_s al mismo tiempo que otros parámetros de la lente.

Varios autores han realizado el cálculo de otros coeficientes de aberración de tercer orden, destacando los trabajos de Glaser (1956) y de Sturrock (1951). Un estudio detallado de los mismos queda fuera de nuestros propósitos y por ello nos remitimos a los trabajos originales. Puede encontrarse un buen resumen de los mismos en Grivet (1972), Cap. 7.

II.2.2.- Aberración Cromática.

En la discusión de las aberraciones de tercer orden hemos supuesto que el haz de electrones era monoenergético. En la práctica se trabaja con haces que por la forma en que son obtenidos y por las

fluctuaciones de los potenciales aceleradores, siempre van a tener una dispersión en energía y por tanto van a presentar un comportamiento diferente bajo la acción de los campos. Así, en un haz incidente paralelo al eje de una lente positiva los electrones rápidos son menos desviados que los lentos y su foco se encuentra más alejado de aquella. Resultan pues varios focos y la distancia entre el foco de los más rápidos f_r , y el de los más lentos f_l , depende de la dispersión en velocidades y del campo aplicado.

La aberración cromática provocada por este comportamiento, es completamente independiente de los otros defectos y se da siempre aún en el caso de que las trayectorias se encuentren en la zona paraxial, ya que es una propiedad intrínseca al medio focalizador y no fijada por el tamaño de la abertura o la distancia al eje. La aberración puede caracterizarse por diferentes criterios como la distancia axial $f_r - f_l$, el radio del disco de mínima confusión o el radio del disco en el plano focal imagen correspondiente a una determinada velocidad. Para propósitos prácticos se suele tomar el potencial acelerador V , como potencial de referencia y medir la aberración como la diferencia entre distancias focales. Por otra parte los puntos fuera del eje están sujetos a una aberración lateral que se traduce en una variación de la magnificación M con la velocidad.

El cálculo de la magnitud de la aberración cromática se puede hacer por un método perturbativo similar al que se ha empleado para la aberración esférica; vamos a dar una idea de como puede plantearse. Cuando en una lente electrostática con simetría rotacional el potencial V se incrementa en una pequeña cantidad ϵ , la ecuación (II.8)

de la trayectoria gaussiana pasa a la forma

$$\frac{d^2 \rho}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{V'}{V+\epsilon} \frac{d\rho}{dz} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V+\epsilon} \rho = 0 \quad (\text{II.76})$$

Desarrollando en serie el término $(V+\epsilon)^{-1}$ y despreciando las potencias de ϵ mayores que la unidad la ecuación anterior queda

$$\frac{d^2 \rho}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \frac{d\rho}{dz} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \rho = \epsilon \left(\frac{1}{2} \frac{V'}{V^2} \rho' + \frac{1}{4} \frac{V''}{V^3} \rho \right) \quad (\text{II.77})$$

Para intentar resolverla hacemos el cambio

$$\rho = \rho_0 + \xi \quad (\text{II.78})$$

en donde ξ es un término de corrección pequeño de forma que el producto $\epsilon \cdot \xi$ resulta despreciable frente a otros términos y ρ_0 es la trayectoria gaussiana obtenida por combinación de las ya conocidas $X(z)$ e $Y(z)$. Sustituyendo (II.78) en (II.77), el término de corrección - satisface la igualdad

$$\frac{d^2 \xi}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{V'}{V} \frac{d\xi}{dz} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V} \xi = \epsilon \left(\frac{1}{2} \frac{V'}{V^2} \rho_0' + \frac{1}{4} \frac{V''}{V^3} \rho_0 \right) \quad (\text{II.79})$$

que es una ecuación diferencial lineal de segundo orden con un término que no depende de ξ . Puesto que conocemos dos soluciones de la homogénea la ecuación puede resolverse fácilmente. No entraremos en los detalles de este cálculo limitándonos a dar los resultados. Así, el efecto de una perturbación ϵ en el potencial del sistema es desplazar el plano imagen gaussiano z_i , una distancia Δz_i y modificar el aumento lateral M en ΔM ; el valor de estas magnitudes está dado por (e.g. Grivet, 1972)

$$\Delta z_i = \frac{M\epsilon}{V_0} (V_i)^{1/2} \int_{z_0}^{z_i} \left\{ \frac{1}{2} \frac{V'}{V^2} \frac{X'}{X} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V^2} \right\} X^2 (V)^{1/2} dz \quad (\text{II.80})$$

$$\Delta M = \frac{M\epsilon}{(V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} \left\{ \frac{1}{2} \frac{V'}{V^2} \frac{Y'}{Y} + \frac{1}{4} \frac{V''}{V^2} \right\} X Y (V)^{1/2} dz \quad (\text{II.81})$$

En la práctica, ϵ tiene un rango continuo de valores y por tanto el efecto total de la aberración es bastante complejo de analizar. Si se coloca una pantalla fluorescente en el plano imageh que corresponde a $\epsilon = 0$, la aparición de una variación ϵ en el potencial da lugar a un disco de aberración, el radio r_c de este disco viene dado por

$$r_c = \alpha_i \Delta z_i \quad (\text{II.82})$$

siendo α_i la apertura angular del haz en el espacio imagen. La apertura angular en el espacio objeto α_0 está relacionada con α_i mediante la ecuación de Lagrange-Helmholtz $\alpha_0 = (V_i/V_0)^{1/2} M \alpha_i$, y el radio del disco se puede expresar en la forma

$$r_c = \alpha_0 \left(\frac{V_0}{V_i} \right)^{1/2} \frac{\Delta z_i}{M} = C_c \alpha_0 \frac{\epsilon}{V_0} \quad (\text{II.83})$$

El coeficiente C_c que se ha introducido en (II.83) se denomina coeficiente de aberración cromática axial y es el que suele darse con mas frecuencia en los trabajos para caracterizar esta aberración.

El valor de C_c puede obtenerse fácilmente a partir de (II.80) la expresión queda mas simple si se integra por partes, resultando

$$\begin{aligned} C_c &= \frac{(V_0)^{1/2}}{4} \left\{ \left| V^{-3/2} V' X^2 \right|_{z_0}^{z_i} + \frac{2}{3} \int_{z_0}^{z_i} \frac{V'^2}{V^{5/2}} X^2 dz \right\} = \\ &= \frac{3}{8} (V_0)^{1/2} \int_{z_0}^{z_i} \frac{V'^2}{V^{5/2}} X^2 dz \quad (\text{II.84}) \end{aligned}$$

en donde se ha tenido en cuenta que $X(z_0) = X(z_i) = 0$. Nos interesa pasar a la variable reducida $X_R = X V^{1/4}$, quedando entonces para C_c la expresión

$$C_c = \frac{3}{8} (V_0)^{1/2} \int_{z_0}^{z_i} \frac{V^{1/2}}{V^3} X_R^2 dz \quad (11.35)$$

Esta integral lo mismo que la obtenida para C_s puede evaluarse al mismo tiempo que la distancia focal y otros parámetros de la lente que necesitan los valores de $V(z)$ y $V'(z)$ a lo largo de la trayectoria.

II.2.3.- Defectos Mecánicos.

Hasta ahora en todos los cálculos hemos supuesto que los campos tenían una simetría rotacional perfecta; ello implica unos electrodos con aberturas circulares, perfectamente alineados y además que no exista ningún aislante o zona en la que una acumulación de cargas perturbe los campos. Estas condiciones son totalmente ideales y de hecho los defectos en la construcción y montaje de los sistemas puede llegar a limitar las cualidades de éstos como sucede por ejemplo con el poder de resolución del microscopio. Vamos a considerar brevemente este tipo de defectos.

a) Astigmatismo de elipticidad.

Es provocado por la falta de simetría de las aberturas. El modelo más simple para su estudio supone que la abertura del electrodo central es una elipse; el potencial ya no tiene simetría rotacional pero sí la conserva respecto a los dos planos que contienen los ejes de la elipse; entonces puede expresarse mediante el desarrollo

$$V(\rho, \theta, z) = V(z) - \frac{1}{4} V''(z) \{ 1 - \epsilon(z) \cos 2\theta \} \rho^2 + \dots \quad (\text{II.86})$$

siendo $\epsilon(z)$ la función que tiene en cuenta la elipticidad de los electrodos. El resultado que este potencial produce en la formación de imágenes es similar al debido al astigmatismo que ya hemos visto en las aberraciones de tercer orden, esto es, se forman dos imágenes lineales situadas en planos perpendiculares al eje de la lente y la mejor imagen corresponde al círculo de mínima confusión situado entre ellas. El radio del círculo nos da una medida de la magnitud de esta aberración y viene dado por

$$d_e = C_e \alpha_i \quad (\text{II.87})$$

donde C_e es la constante de aberración de elipticidad que ha sido calculada por diversos autores, Sturrock (1951), Grivet y Bruck (1947) y está relacionada con $\epsilon(z)$ por la igualdad, (e.g. Grivet, 1972)

$$C_e = \frac{1}{4\rho_0^2 (V_0)^{1/2}} \int_{z_0}^{z_i} \frac{V'' \epsilon \rho^3}{(V)^{1/2}} dz \quad (\text{II.88})$$

Señalaremos que el orden de magnitud de este coeficiente es aproximadamente la diferencia entre los ejes de la elipse de la abertura del electrodo.

Se han diseñado diversos sistemas correctores (stigmators) que intentan compensar de alguna forma la asimetría de la distribución, -ver por ejemplo Grivet (1972), pág. 551 y siguientes-.

b) Defectos producidos por desalineación de los electrodos.

Estos defectos son menos importantes que el anterior ya que

puede lograrse que su magnitud sea despreciable con un montaje cuidadoso del sistema; existen dos tipos diferentes uno debido a un posible desplazamiento lateral de los electrodos respecto al eje de simetría y otro debido a la posible inclinación de los mismos respecto a un plano perpendicular al eje.

Si el desplazamiento lateral de un electrodo es Δe se produce un astigmatismo con un coeficiente C_e dado por

$$C_e = C_s \left(\frac{\Delta e}{f} \right)^2 \quad (\text{II.89})$$

siendo f la distancia focal de la lente (suponiendo que es simétrica).

Para una placa con una abertura circular cuyo eje forma un ángulo β respecto del eje óptico se produce un astigmatismo caracterizado por

$$C_e = C_s \beta^2 \quad (\text{II.90})$$

Como ejemplo puede considerarse una lente que tenga $f = 5$ cm, $C_s/f = 66$, $\alpha_1 = 10^{-3}$ rad, para un desplazamiento $\Delta e = 25 \mu\text{m}$ se obtiene un radio $d_e = 8 \text{ \AA}$ que es francamente despreciable; algo más influyente puede ser el otro tipo, así para $\beta = 2 \times 10^{-2}$ rad se tiene $d_e = 1,32 \mu\text{m}$ lo que supone una limitación en el tamaño del haz del orden de los micrones.

c) Campos parásitos.

Una vez que el sistema se pone en funcionamiento se va acumulando carga en las partes aislantes del mismo, dando lugar a la aparición de campos parásitos cuya forma y variación con el tiempo es totalmente aleatoria. La formación de regiones aislantes es consecuencia

de la contaminación que se produce en todo aparato; pueden ser por ejemplo fragmentos del objeto que caigan en la lente, depósitos aislantes que se forman en las superficies metálicas, etc. En algunos aparatos de alta precisión, tales como el microscopio electrónico, estos efectos pueden perturbar de forma apreciable su funcionamiento y exigen que periódicamente se deba proceder a una limpieza de los mismos.

CAPITULO III

III.1.- LENTE EINZEL

Los cálculos puestos a punto en los capítulos anteriores nos permiten, en principio, abordar el análisis de cualquier configuración de lentes con simetría rotacional. Sin perder de vista esas posibilidades pero intentando centrarnos en un tipo concreto hemos elegido la denominada lente einzel de tres aberturas circulares. Esta lente se encuentra con frecuencia en los osciloscopios, fuentes de iones, microscopio electrónico, etc., por lo que nos pareció interesante su estudio. Aunque a lo largo del capítulo nos referiremos siempre al enfoque de electrones, el análisis es aplicable a todo tipo de partículas cargadas con la salvedad de que los voltajes deben cambiar de signo si se trata de cargas positivas; ello es consecuencia de que la ecuación de movimiento (II.8) no contiene la carga ni la masa de la partícula y la lente no cambia sus propiedades de enfoque si se sustituye la fuente de electrones por una de iones.

El sistema se compone de tres electrodos planos con aberturas circulares, Figura III.1. Las placas exteriores se encuentran al mismo potencial y por tanto el haz de partículas es enfocado sin modificarse su energía; el potencial del electrodo intermedio puede ser positivo o negativo respecto de los exteriores, dando lugar a dos regiones bien diferenciadas en el comportamiento de la lente.

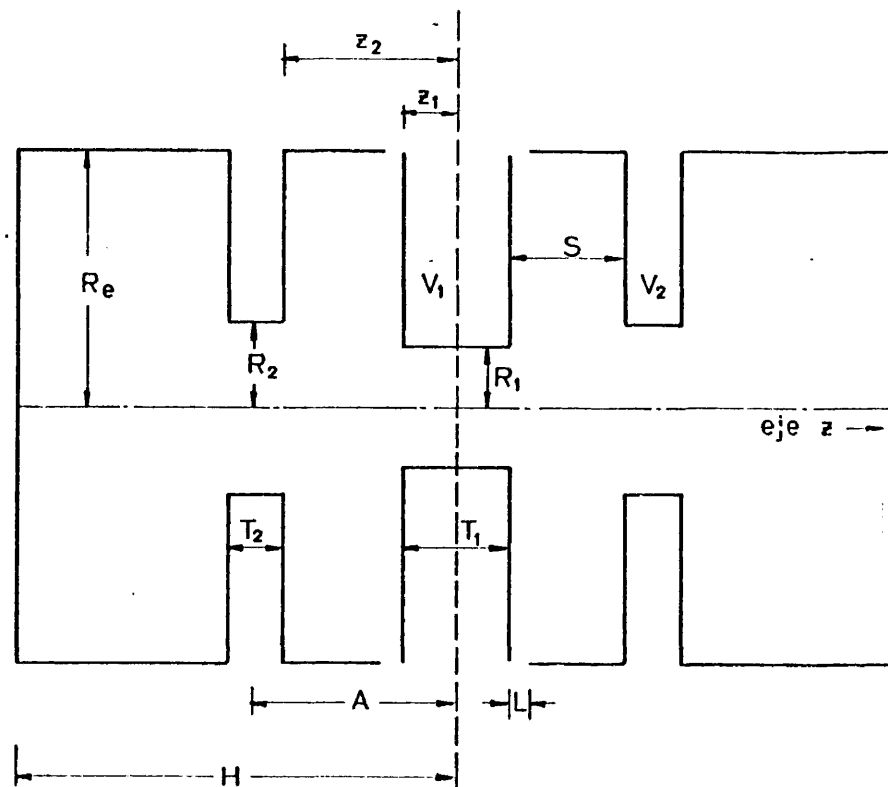


Figura III.1.- Diagrama de una lente einzel de tres aberturas.

Los parámetros más característicos de esta lente son: a) la separación interelectródica S , b) el espesor del electrodo central $T_1 = 2z_1$, c) el diámetro del diafragma del electrodo central $D_1 = 2R_1$ y d) el diámetro de los diafragmas de los electrodos exteriores $D_2 = 2R_2$.

En la Figura III.1 se muestra un esquema de las dimensiones más características; en algunos casos la representación está sobredeterminada, ello se ha hecho para poder comparar más tarde nuestros resultados con diferentes autores. Aparte de los parámetros más característicos hay otros cuya influencia en la lente es menor, tal es el radio de curvatura del borde del diafragma intermedio (representado en la figura en ángulo recto) y el espesor de los electrodos exteriores T_2 . Por último el radio exterior de las placas R_e , la altura del cierre H y la separación L , no intervienen más que en la configuración del contorno y su influencia en los resultados debe ser nula.

La primera parte de este capítulo la hemos dedicado a una revisión de los trabajos más importantes que se han publicado sobre este tipo de lente. Dado que existe bibliografía en la que se puede encontrar una relación exhaustiva de ellos -véase por ejemplo Hawkes (1967), Grivet (1972), Harrington (1973)- nos hemos limitado a presentar sólo aquellos que en su día tuvieron una gran importancia por el avance que suponían en este campo, así como los trabajos más recientes destacando los que nos interesan para confrontar con nuestros resultados. Hemos hecho una clasificación en dos grupos; en el primero de ellos se encuentran aquellos trabajos que proponen un tratamiento analítico para la resolución aproximada del problema electrostático y en el segundo hemos incluido los que utilizan algún método numérico.

III.1.1.- Métodos analíticos para la obtención del potencial en el eje.

Los primeros intentos de llegar a una caracterización de la lente einzel de tres aberturas, se basan en una resolución analítica de la ecuación de Laplace para una geometría que simule aproximadamente dicho sistema, ya que al carecer de computadores resultaba imposible atacar el problema por métodos que precisan de cálculos costosos. Los principales inconvenientes de la mayor parte de estos análisis son, por un lado que tienen comportamientos asintóticos incorrectos y por otro que su aplicación se restringe a un rango de geometrías relativamente pequeño.

El primer estudio importante sobre el potencial de la lente trielectrodo se debe a Regenstreif (1951). Parte de la expresión del potencial en el eje de un diafragma circular de radio R , situado en un campo eléctrico uniforme

$$V(z) = a_1 + b_1 z + c_1 z \operatorname{tg}^{-1} (z/R) \quad (\text{III.1})$$

Regenstreif demostró que el potencial en el eje de la lente, puede aproximarse por la combinación lineal de tres funciones de la forma (III.1) referidas a electrodos situados en $z = 0$ y $z = \pm z_2$, resultando

$$V(z) = A + Bz + Cz \operatorname{tg}^{-1}(z/R_1) + D(z-z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z-z_2}{R_2} \right) + E(z+z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z+z_2}{R_2} \right) \quad (\text{III.2})$$

Esta función satisface la ecuación de Laplace exactamente pero no pueden ajustarse más que de una manera aproximada las condiciones de contorno. La simetría impone $B = 0$, $D = E$ y puesto que $V(z)$ debe tender a un valor constante para z tendiendo a infinito, se cumple $C + 2D = 0$.

La ecuación (III.2) queda entonces en la forma

$$V(z) = a + b \left\{ (z+z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z+z_2}{R_2} \right) + (z-z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z-z_2}{R_2} \right) - 2z \operatorname{tg}^{-1} \frac{z}{R_1} \right\} \quad (\text{III.3})$$

Para determinar las constantes a y b Regenstreif impone las condiciones de contorno $V_1 = V(0)$, $V_2 = V(z_2) = V(-z_2)$ así como las siguientes relaciones aproximadas

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow 0} z \operatorname{tg}^{-1} (z/R_1) &= -R_1 \\ \lim_{z \rightarrow z_2} (z - z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z-z_2}{R_2} \right) &= -R_2 \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$

obteniendo para a y b los valores

$$\begin{aligned} a &= V_1 - 2b \left\{ R_1 + z_2 \operatorname{tg}^{-1} (z_2/R_2) \right\} \\ b &= \frac{V_2 - V_1}{2R_1 + 2z_2 \operatorname{tg}^{-1} (z_2/R_1)} \end{aligned} \quad (\text{III.5})$$

Además de la forma un tanto arbitraria en la que son obtenidas estas constantes hemos de señalar otras limitaciones. Así la ecuación (III.3) no tiene en cuenta el espesor del electrodo central, no puede aplicar

se a geometrías en las que el diámetro de las aberturas sea grande - comparado con la separación interelectrónica -ver por ejemplo Grivet (1972), pág. 215- y las distancias focales que se obtienen a partir - de esta distribución, solo concuerdan con las experimentales para lentes débiles.

Otro modelo que representa de manera aproximada el potencial en el eje es el propuesto por Glaser y Schiske (1954, 1955). La función que utilizan es la complementaria, respecto del potencial acelerador del haz V_0 , de una distribución en forma de campana, esto es,

$$V(z) = V_0 \left\{ 1 \pm \frac{k^2}{1 + (z/d)^2} \right\} \quad (\text{III.6})$$

siendo

$$k^2 = \pm \frac{V_0 - V(0)}{V_0} \quad (\text{III.7})$$

Generalmente el potencial acelerador coincide con el que se aplica a los electrodos externos. El signo menos corresponde al caso en que la lente retarda primero el haz y después lo acelera, siendo $k^2 > 0$. El parámetro representa la semianchura de la distribución y depende de la geometría y polarización del sistema. Una característica importante de la expresión (III.6) para $V(z)$ es que al ser introducida en la ecuación (II.8) de la trayectoria gaussiana, ésta puede integrarse analíticamente, resultando

$$\rho(z) = \frac{C_1 d \operatorname{sen} \omega(\xi + C_2)}{\operatorname{sen} \phi} \quad (\text{III.8})$$

en donde

$$\omega = 1 \mp \frac{k^2}{2}, \quad \frac{z}{d} = \cot \phi$$

$$\xi = \int_0^\phi \frac{d\phi}{(1 \mp k^2 \sin^2 \phi)^{1/2}} \quad (\text{III.9})$$

Las constantes C_1 y C_2 se determinan a partir de los valores iniciales de la trayectoria. Particularizando para las trayectorias correspondientes se pueden calcular los puntos cardinales y los coeficientes de aberración. Como ejemplo damos las siguientes aproximaciones, que son aplicables con un margen de error que puede llegar a superar en algunos casos el 10%.

$0 < k^2 < 1$	$-1 < k^2 \leq 0$
$\frac{f}{d} = \frac{64}{3\pi} \left(\frac{1-k^2}{k^4} \right)$	$\frac{f}{d} = \frac{64}{3\pi} \frac{(1+k^2)^{3/2}}{k^4}$
$\frac{C_s}{d} = \frac{1}{2k^2} \left(\frac{f}{d} \right)^3$	$\frac{C_s}{d} = \frac{1}{2} \left(\frac{f}{d} \right)^3 \left(\frac{1-k^2}{k^2} \right) + 3 \left(\frac{f}{d} \right)^3 \left(\frac{1-k^2/4}{1+3k^2/4} \right)$ (III.10)
$\frac{C_c}{d} = 2 \left(\frac{f}{d} \right) \left(\frac{1+k^2/4}{1-3k^2/4} \right)$	$\frac{C_c}{d} = 2 \left(\frac{f}{d} \right) \left(\frac{1}{1+3k^2/4} \right)$

En los valores de III.10, f representa la distancia focal - objetiva. Como puede verse, las propiedades de la lente quedan expresadas en función de los parámetros d y k exclusivamente. Estos resultados, si bien en su día constituyeron un avance importante, al mismo tiempo que una elegante resolución del problema, tienen el inconveniente

niente de ser aplicables sólo a lentes débiles, siendo incluso una aproximación más inexacta que la de Regenstreif.

Un nuevo avance en esta línea lo representa el trabajo realizado por Kanaya et al. (1966), que combinando los dos métodos anteriores con resultados experimentales e introduciendo algunas modificaciones constituye el primer estudio que realmente se puede aplicar a diseños dentro de un margen de error aceptable. Podríamos resumir los aspectos más destacados en los siguientes puntos:

- a) Calculan el valor de k^2 a partir del potencial de Regenstreif modificándolo para tener en cuenta con mayor aproximación el espesor del electrodo intermedio; para ello superponen tres, cuatro o cinco funciones del tipo (III.1). También modifican algunas condiciones de contorno quedando en definitiva las siguientes aproximaciones: 1) Aproximación de tres electrodos ($0 < z_1/R_1 \leq 0.5$), $V_1 = V(z_1)$; 2) Aproximación de cuatro electrodos ($0.5 < z_1/R_1 < 1.5$), $V_1 = V(\pm z_1)$; 3) Aproximación de cinco electrodos, ($1.5 < z_1/R_1$), $V_1 = V(0)$, $V_1 = V(\pm z_1)$.

Añadiendo en todos los casos la condición $V_2 = V(\pm z_2)$ se tiene el número de ecuaciones necesario para poder hallar todos los coeficientes de la combinación lineal.

- b) El parámetro d representa la distancia respecto del origen a la que la distribución en forma de campana se reduce a la mitad de su va-

lor máximo. Para su cálculo utilizan la siguiente expresión, obtenida empleando una aproximación lineal de $V(z)$ entre $z=0$ y $z=z_2$

$$d = \frac{\eta z_2 k^2 / 2}{k^2 - (1 - V(z_2)/V_0)} \quad (\text{III.11})$$

siendo η un factor de corrección que se ajusta de acuerdo con resultados experimentales. Por ejemplo, obtienen $\eta = 8 \times 10^{-2} (z_1/R_1) + 1.06$ para el caso $R_1 = R_2$.

- c) Cuando el espesor del electrodo central es grande, $z_1/R_1 > 1.5$, los resultados difieren notablemente de los obtenidos por computación numérica de las trayectorias. Para tales casos proponen una distribución en forma de doble campana que parece asemejarse más a la verdadera. No obstante los errores en los resultados son bastante grandes y hemos dejado a un lado el entrar en detalles acerca de esta nueva aproximación.

En un trabajo posterior Yamazaki (1973) estudia las propiedades de la lente empleando una distribución gaussiana de forma que el potencial en el eje se aproxima por la función

$$V(z) = V_0 \left\{ 1 - k^2 \exp \left(- \frac{z}{a_g} \right)^2 \right\} \quad (\text{III.12})$$

siendo k^2 el valor definido en (III.7) y a_g la distancia respecto del origen a la que la distribución se reduce a $1/e$ en su valor máximo.

La ecuación (III.12) se ajusta mejor a los valores reales -

del potencial en la lente einzel que la distribución de Glaser, pero tiene el inconveniente de que no pueden integrarse analíticamente las ecuaciones de las trayectorias.

En la misma publicación y como alternativa mejor Yamazaki - propone modificar la aproximación de cinco electrodos para el potencial de Regenstreif, obteniéndola mediante la combinación

$$V_5(z) = C_1 V_3(z) + C_2 V_4(z) \quad (\text{III.13})$$

en donde V_3 y V_4 son la aproximación de tres y cuatro electrodos respectivamente. El potencial en un punto fuera del eje, $\phi(\rho, z)$, lo calcula mediante el desarrollo (II.2) e impone las condiciones $\phi(r_1, 0) = V_1$, $\phi(R_1, \pm z_1) = V_1$ y $\phi(R_2, \pm z_2) = V_2$; para estas condiciones resulta $C_1 = C_2 = 0.5$ y el potencial queda en la forma

$$\begin{aligned} V_5(z) = & \frac{1}{\pi S} \left\{ -z \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z}{R_1} \right) - \frac{1}{2} \left((z-z_1) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z-z_1}{R_1} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (z+z_1) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z+z_1}{R_1} \right) \right\} - 2(R_1-R_2) + (z-z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z-z_2}{R_2} \right) + \\ & \left. + (z+z_2) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{z+z_2}{R_2} \right) \right\} \quad (\text{III.14}) \end{aligned}$$

En el caso especial $0 < z_1/R_1 < 0.5$; la ecuación III.14 representa con muy buena aproximación el potencial de la lente.

En la misma línea de los anteriores se encuentra un amplio estudio realizado por Kanaya y Baba (1978); el fundamento del mismo se encuentra en el tratamiento analítico sugerido por Lenz (1956) para

lentes einzel con enfoque magnetostático. Así, la distribución

$$\psi(z/a) = \psi(0) \exp \left\{ \frac{8}{\sqrt{3}} k \operatorname{tg}^{-1} (z/a)^m \right\} \quad (\text{III.15})$$

puede ser utilizada para el cálculo del potencial $V(z)$ en forma similar a la de Glaser y Gauss. Los puntos cardinales y las aberraciones esférica y cromática quedan expresadas analíticamente en función de tres parámetros: el cociente $\psi(0)/V_0$, la semianchura de la distribución d , que según (III.15) está dada por

$$d = a \left\{ \operatorname{tg} \left(\frac{\pi \ln(1+V_0/2 \psi(0))}{2 \ln(V_0/\psi(0))} \right) \right\}^{m-1} \quad (\text{III.16})$$

y el valor de m que viene impuesto por las características de la geometría de la lente, en especial por el espesor del electrodo central. Así, $m = 1.7$ representa una lente delgada, $m = 2.45$ representa una lente gruesa y el rango $m = 1.8 - 2.0$ comprende las geometrías más usuales. Los parámetros m , d y $\psi(0)$ son calculados aproximadamente comparando con el potencial de Regenstreif los valores de la función complementaria de (III.16) y con la ayuda de medidas experimentales.

En una línea diferente de la anterior se sitúa el trabajo de Read (1969), aunque también parte de una solución analítica de la ecuación de Laplace. Esta ecuación es resuelta para una geometría que representa con bastante aproximación una lente einzel cuyos electrodos tienen un espesor despreciable frente al diámetro de las aberturas o la separación interelectródica, Figura III.2.

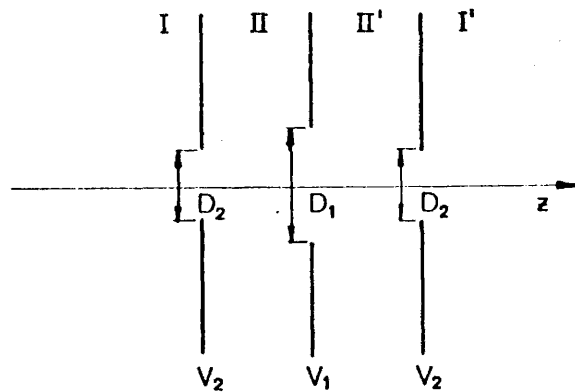


Figura II.2.- Geometría para el estudio de una lente einzel por el método de colocación propuesto por Read (1969).

El problema se cierra introduciendo un conjunto de cilindros de diámetro D' , los cilindros en la región I y I' se encuentran a potencial V_2 y los potenciales de los cilindros II y II' varían linealmente desde V_1 en $z = 0$ hasta V_2 en $z = A$.

Los cilindros se introducen con el objeto de facilitar la resolución de la ecuación de Laplace y apenas afectan al valor de $V(z)$ con tal que $D' \geq 2A$, $2D_1$ y $2D_2$. Los desarrollos que supone para el potencial en las regiones I y II son respectivamente

$$\begin{aligned}
 V_I(\rho, z) &= V_2 + \sum_{n=1}^N A_n \exp(p_n z) J_0(p_n \rho) \\
 V_{II}(\rho, z) &= V_1 + \left(\frac{V_1 - V_2}{A} \right) z \\
 &+ \sum_{n=1}^N \{ B_n \exp(-p_n z) + C_n \exp(p_n z) \} J_0(p_n \rho)
 \end{aligned}
 \tag{III.17}$$

donde los números p_n son los ceros sucesivos de la función $J_0(p_n D'/2)$. Los potenciales I' y II' son simétricos de I y II; por otra parte la condición $V_I(\rho, A) = V_{II}(\rho, A)$ para todo ρ comprendido entre cero y $0.5 D'$ reduce el número de parámetros independientes A_n , B_n y C_n a $2N$.

La forma de las ecuaciones (III.17) asegura automáticamente que las condiciones de contorno para el potencial se satisfacen en $z = \pm \infty$ y en $\rho = 0.5 D'$. Se debe cumplir también que el potencial en los electrodos sea V_1 o V_2 respectivamente y el campo eléctrico contínuo al pasar de una región a otra. El método empleado por Read, denominado de "colocación", consiste en obligar a que se cumplan dichas condiciones en M puntos discretos siendo $M \geq 2N$. Con $M = 800$ y $N = 90$ obtiene un sistema de ecuaciones sobredeterminado, que resuelve por el método de mínimos cuadrados con un error máximo del 5% en los bordes de los electrodos.

Nosotros hemos preparado unos cálculos utilizando el método de densidades de carga a fin de comparar los resultados que Read obtiene para la distribución de potencial en el eje con los nuestros. La geometría que hemos generado consta de tres discos con una abertu-

ra circular en el centro. En la Tabla III.1 se comparan algunos de estos valores:

D_2/D_1 Z/A	0.25	0.50	1.0
0.0	0.681	0.682	0.693
	0.685	0.686	0.697
1.0	0.034	0.073	0.149
	0.037	0.075	0.149

Tabla III.1.- *Potential en el eje de una lente einzel, con electrodos de espesor despreciable. Los valores superiores corresponden a los obtenidos por Read (1969), los inferiores a los calculados por el Método de Densidades de Carga con 60 subelectrodos. $A/D_1 = 1.0$; $V_1/V_2 = 0$.*

Tanto en los casos que se presentan como en los restantes propuestos por Read las diferencias que resultan están en el orden de milésimas de voltio. Puesto que nosotros hemos empleado un número elevado de subelectrodos y los cálculos se realizan con doble precisión pensamos que estos resultados son bastante próximos a los valores exactos.

tos. El mayor inconveniente de la aproximación de Read es que su aplicación se limita a valores de z_1 despreciables frente a otras dimensiones.

III.1.2.- Métodos numéricos para la obtención del potencial en el eje.

Como hemos visto en el apartado anterior, una formulación analítica para el potencial en el eje de la lente puede llevar a resultados correctos pero en general, con serias restricciones tanto en la geometría de la lente como en el rango de operación. Como alternativa se recurre a las técnicas numéricas; aunque en principio la resolución del problema suponga mayores necesidades de tiempo de computación y de memoria, como contrapartida son mucho más versátiles y el error en los cálculos puede supeditarse a las exigencias del diseño. Dos son las técnicas que con mayor frecuencia se han aplicado al estudio de la lente einzel: el método de relajación y el de densidades de carga. Ya hemos comentado algunas de las ventajas que, a nuestro parecer, tiene el segundo de ellos frente al primero y más adelante tendremos ocasión de compararlos detalladamente; ahora bien, el método de relajación resulta muy simple en cuanto a su puesta a punto, ya que sólo requiere efectuar un mallado correcto de la región en estudio y por ello se utiliza con frecuencia en todo tipo de problemas electrostáticos.

El primer estudio importante que aplica el método de relajación es el realizado por El-Kareh y Sturans (1972), que caracterizan

diversas geometrías dando una serie de tablas para las distancias focal y focal-media objetivas, y las aberraciones esférica y cromática. La forma de la lente es similar a la representada en la Figura III.1, con $H = 2R_2$, $T_2 = R_1/4$ y $R_e \geq 2R_1, 2R_2$ y $2A$.

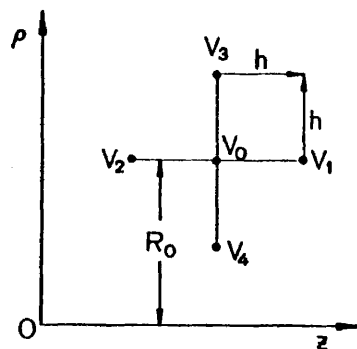


Figura III.3.- Representación de un punto del malla V_0 , y los cuatro puntos más próximos utilizados en la resolución de la ecuación de Laplace por el método de relajación.

El-Kareh y Sturans emplean el método de Liebman extrapolado, que a veces se denomina "sobre-relajación sucesiva". Refiriéndonos a la Figura III.3, el potencial V_0 en la iteración $n+1$ viene dado por

$$V_0^{n+1} = V_0^n + \omega \left\{ \frac{1}{4} (V_1^n + V_2^{n+1} + AV_3^n + BV_4^{n+1} - V_0^n) \right\} \quad (\text{III.18})$$

siendo

$$A = 1 + \frac{h}{2R_0} \quad , \quad B = 1 - \frac{h}{2R_0} \quad (\text{III.19})$$

El factor de convergencia ω , debe encontrarse entre los valores 1 y 2, cuando $\omega = 1$ la ecuación (III.18) se reduce al método de Liebman ordinario, si $\omega \geq 2$ el método se hace inestable. Para valores intermedios la rapidez de convergencia puede optimizarse eligiendo adecuadamente ω ; se demuestra que para el problema de Dirichlet este valor óptimo es (e.g. Durand, T.III-1966),

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \lambda}} \quad (\text{III.20})$$

para una región de contorno rectangular con un mallado de $(p+1) \times (q+1)$ puntos, λ viene dada por

$$\lambda = \frac{1}{4} \left(\cos \frac{\pi}{p} + \cos \frac{\pi}{q} \right)^2 \quad (\text{III.21})$$

Los resultados de este trabajo parecen estar en buen acuerdo con los obtenidos por Vine (1960) que hace una simulación con malla resistiva, y difieren algo más (del orden del 10%) con los de Read (1969) para el caso particular $T_1 = 0$.

En un trabajo posterior Shimizu y Kawakatsu (1974), aplican el mismo método de sobre-relajación sucesiva a una lente einzel para obtener los valores del potencial en el eje; los resultados los expresan en función de los parámetros k^2 y d en una forma similar a la uti

lizada por Kanaya et al. (1966), según estiman ellos mismos el error en las gráficas supera el 10%, sobre todo en la región $k^2 = 1$, relativo a cálculos más precisos obtenidos por integración numérica de las trayectorias.

Señalemos también en esta línea, el trabajo de Riddle (1978); las lentes que analiza difieren de las que nosotros estudiamos ya que son todas asimétricas con el primer electrodo de espesor despreciable y los dos restantes con diversos espesores y formas de los bordes. Este trabajo tiene para nosotros mucho interés como posible objeto de estudio en un futuro, ya que muestra que las configuraciones asimétricas suelen tener menos aberración esférica, pudiendo llegar a diseñarse lentes con un valor mínimo para esta constante.

En cuanto al método de densidades de carga, aunque ya fue sugerida su posible utilidad en el estudio de lentes por Higgins et al. (1951), ha sido aplicado solo recientemente por Read et al. (1972) al estudio de lentes cilíndricas de dos y tres electrodos y más tarde por Harting y Read (1976) a las de dos y tres electrodos planos. En ambos casos para la obtención de los coeficientes de potencial emplean la aproximación de carga lineal que hemos descrito en el apartado I.3. En la segunda parte del capítulo tendremos ocasión de analizar con detalle las características de esta aproximación y los resultados que con ella se obtienen.

III.2.- APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA AL ESTUDIO DE LA LENTE EINZEL.

En este apartado presentamos los resultados obtenidos mediante la aplicación del método que hemos puesto a punto, al estudio de la lente einzel. Hemos seleccionado para ello unas geometrías standard, quedando siempre abierta la posibilidad de abordar cualquier diseño específico. También se comparan nuestros resultados con los de otros autores concluyendo con una discusión de los mismos y de las posibles ventajas de nuestro método respecto de los empleados hasta ahora.

La geometría que hemos generado para simular esta lente se encuentra representada en la Figura III.1; se ha dividido la misma en un total de 112 subelectrodos aunque debido a la simetría del problema el número de ecuaciones del sistema a resolver se divide por dos. Con el fin de reducir a un mínimo el tiempo de cálculo, conservando un margen de error aceptable, hemos utilizado los siguientes criterios al efectuar la división: a) División no uniforme, de manera que los subelectrodos se estrechan a medida que se acercan a los bordes; ya hemos visto en el primer capítulo las ventajas de este tipo de división. b) El número de subelectrodos es comparativamente mayor en las regiones del contorno que están próximas al eje que en las más alejadas; este criterio es de aplicación lógica teniendo en cuenta la naturaleza del problema y los términos en los que se plantea su solución.

Algunos de los parámetros representados en la Figura III.1 van a permanecer fijos en todos los casos ya que no influyen en el comportamiento de la lente y tan solo sirven para delimitar el contorno; estos parámetros son: el radio exterior de las placas, $R_e = 2.5D$; la altura del cierre igual a 8.2 veces el mayor de entre los valores de A y D, y la separación entre la línea a potencial V_2 y la placa intermedia, $L = 0.1 R_1$. Por otra parte siempre consideraremos los radio interior y exterior de las aberturas iguales, $D_1 = D_2 = D$, así como los espesores de las placas $T_1 = T_2 = T$. Los electrodos exteriores se mantienen a potencial unidad, $V_2 = 1$ V, y el central V_1 es variable siendo el que determina la potencia de la lente; tanto V_1 como V_2 se miden con respecto al potencial para el que los electrones tienen una energía cinética nula (generalmente el cátodo emisor). Una forma muy frecuente de trabajo es conectar a dicho potencial el electrodo intermedio, $V_1 = 0$; en este modo de operación se le denomina lente einzel "unipotencial".

III.2.1.- Precisión del cálculo de potenciales.

El primer paso antes de seguir el estudio es comprobar la exactitud con que se ha resuelto el cálculo del potencial creado por la distribución. Dada la complejidad del problema por la gran cantidad de variables que intervienen en él y las aproximaciones que se han hecho, no parece posible un tratamiento matemático riguroso para analizar el error; en la bibliografía consultada no es tratado este aspecto. Sin embargo teniendo en cuenta como se realizan dichas apro-

ximaciones cabe formular algunas hipótesis acerca de las regiones en las que este error puede ser más grande. Estas hipótesis quedaron plenamente confirmadas en el caso del disco a potencial unidad que se estudió en el apartado I.2 y suponemos que son igualmente aplicables a otros problemas electrostáticos. Así, el error debe ser mayor en los puntos situados sobre los conductores ya que necesariamente se encuentran próximos o pertenecen a algunos de los subelectrodos (véase la discusión que hicimos en el estudio del disco); además este error aumenta al acercarse a los bordes ya que la distribución de carga varía muy rápidamente y nosotros la hemos discretizado suponiéndola constante en cada subelectrodo. En puntos fuera de los conductores y alejados de los bordes el error debe disminuir considerablemente. Como posible comprobación se ha calculado el potencial en una serie de puntos que se presentan en la Tabla III.2; se han incluido puntos sobre los electrodos donde el potencial es conocido y además otros que nos interesarán posteriormente. El comportamiento es por lo general el esperado, aumentando el error en las proximidades de los bordes. Notemos que éste es mayor en puntos del contorno distantes del eje ($\rho/D = 2.5$) mientras que en los más próximos ($\rho/D = 0.5$) no llega a las ocho milésimas de voltio. Para otros valores de V_1 se obtienen resultados similares aumentando algo los errores en la región en la que la polarización es alta, por ejemplo $V_1/V_2 = 40.$, sin llegar a superar el 2 ó 3% en los puntos más críticos.

$z/D \backslash \rho/D$	0.5	1.0	1.5	2.5
0.	-1.5×10^{-3} (0.0)	-2.2×10^{-3}	2.8×10^{-3}	0.17
0.05	7.1×10^{-3} (0.0)	-2.4×10^{-3} (0.0)	2.9×10^{-3} (0.0)	6.4×10^{-2} (0.0)
0.45	0.9946 (1.0)	1.0001 (1.0)	1.0013 (1.0)	0.9965 (1.0)
8.0	1.0000	1.0000	1.0002	1.0026 (1.0)
8.2	1.0001 (1.0)	1.0001 (1.0)	1.0009 (1.0)	0.9823 (1.0)

Tabla III.2.- Valores obtenidos numéricamente para el potencial en puntos sobre los electrodos de la lente o muy próximos a ellos. El número inferior que se pone en algunos de los cuadros (puntos sobre electrodos) corresponde al valor exacto del potencial.

$$A/D = 0.5, T/D = 0.01, V_1/V_2 = 0.$$

Según hemos visto en el Capítulo II, tanto en el cálculo de distancias focales como en el de las aberraciones, solo es preciso hallar el potencial y sus derivadas en el eje lo cual nos hace suponer que el error con que vamos a trabajar es mínimo, primero porque estos

puntos del eje siempre están alejados de los bordes de la geometría y segundo porque las expresiones que se utilizan según vimos, son mucho más simples que las generales empleadas al obtener la Tabla III.2, con lo cual el error por redondeo siempre es menor. Así pues y considerando los errores en dicha tabla, se pueden dar como error un valor inferior en general al 0.5% para el potencial en el eje de la lente. Es posible disminuirlo dividiendo la geometría en un número mayor de subelectrodos, pero ello no interesa pues ha de ser a costa de aumentar considerablemente el tiempo de cálculo y creemos que, a nivel de diseño, este error es bastante aceptable.

En la Figura III.4 se han dibujado el potencial y las cuatro primeras derivadas en el eje de una lente einzel típica. Los valores del potencial se obtienen a partir de las ecuaciones (I.33) y (I.36) y los restantes por derivaciones sucesivas.

III.2.2.- Distancias focales.

Estos parámetros, distancia focal y focal-media, son los más importantes para la caracterización de la lente en la zona paraxial, pues una vez conocidos se resuelve fácilmente el problema de la formación de imágenes. Como ya vimos, la manera de obtenerlos es a partir de un rayo que entra en la lente desde el infinito (región de campo nulo) paralelo al eje; una vez que éste atraviesa la lente, el corte de la asíntota con el eje determina la posición del foco imagen. Para el cálculo de esta trayectoria se ha empleado el método de Runge-

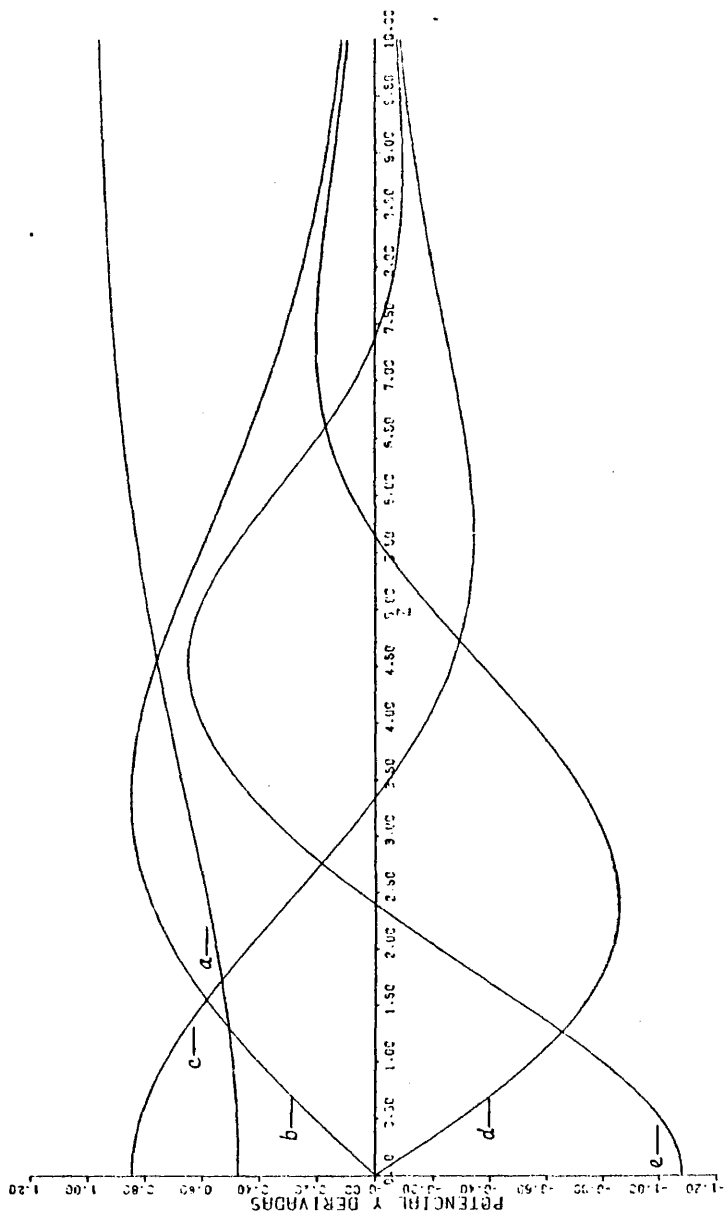


Figura III.4.- Potencial y cuatro primeras derivadas en el eje de una lente zínzel.

a: $V(V)$; b: $V'(10^{-2}V m^{-1})$; c: $V''(2 \times 10^{-5}V m^{-2})$; d: $V'''(5 \times 10^{-8}V m^{-3})$;

e: $V^{IV}(9 \times 10^{-11}V m^{-4})$. Datos de la lente: $D = 1 \text{ cm}$, $A/D = 1.0$, $T/D = 0.1$,

Kutta resumido en las ecuaciones (II.45) y (II.46). Con el fin de asegurar que el error del método de integración de la trayectoria sea siempre inferior al introducido por el del cálculo de potencial se ha puesto un paso de integración relativamente pequeño; con respecto a las ecuaciones (II.51) el valor de m es siempre mayor o igual a 150. Este criterio se adoptó variando m hasta que los resultados no se modificaban apreciablemente al reducir la longitud del paso.

Una buena comprobación de que la distancia focal obtenida es correcta, dado que el error es acumulativo a lo largo de la trayectoria, consiste en invertir el recorrido del rayo. En una lente simétrica respecto a la geometría y a la polarización de los electrodos, las distancias focales objeto e imagen coinciden; si se toman como condiciones iniciales de una segunda trayectoria los valores ρ , $-z$ y $-\text{tg}\alpha$, siendo ρ la posición radial, z la axial y α el ángulo que forma con el eje en su punto final, el rayo invertido debe salir paralelo a dicho eje y a la misma distancia radial a la que entró el primero. En la Tabla III.3 se presentan algunas de las pruebas que hemos realizado para distintas polarizaciones del electrodo intermedio.

Hay algunas consideraciones a tener en cuenta. En general el error en el cálculo de la distancia focal aumenta en las regiones en que la lente es muy fuerte o muy débil. Cuando $V_1 \gg V_2$, una de las principales causas de error es que el electrón no esté lo suficientemente alejado de las placas exteriores como para poder asegurar que la trayectoria comienza y acaba en regiones de campo nulo; nosotros -

V_1/V_2	-0.8	0.	2.0	10.	40.
$\rho(10^{-6}m)$	0.9997	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
$tg\alpha(10^{-10})$	36.66	0.1811	0.4468	-0.2983	-0.5777

Tabla III.3.- Posición final y ángulo con el eje de la trayectoria invertida en función de la polarización de la lente. Las condiciones iniciales del rayo directo son

$$\rho = 1.0 \times 10^{-6} \text{ m}, \quad tg\alpha = 0.; \quad A/D = 0.5; \quad T/D = 0.05;$$

$$m = 200.$$

hemos comprobado que situando el punto inicial a una distancia de ocho veces el diámetro de la abertura o la separación interelectródica, el potencial en este punto difiere de V_2 en un 0.01% como máximo. Para lentes más débiles la diferencia es menor como puede comprobarse en la Tabla III.2. Cuando el electrón se mueve en la zona de campo nulo los errores que predominan en el cálculo de las derivadas de $V(z)$ son los de redondeo, pudiendo resultar longitudes del paso de integración arbitrariamente grandes, por ello se limita la longitud máxima del paso a un valor de 0.01 D.

Cuando $V_1 < V_2$, la partícula es retardada a medida que se acerca al centro de la lente y puede ocurrir que la velocidad axial llegue a hacerse comparable con la radial y la aproximación de despre-

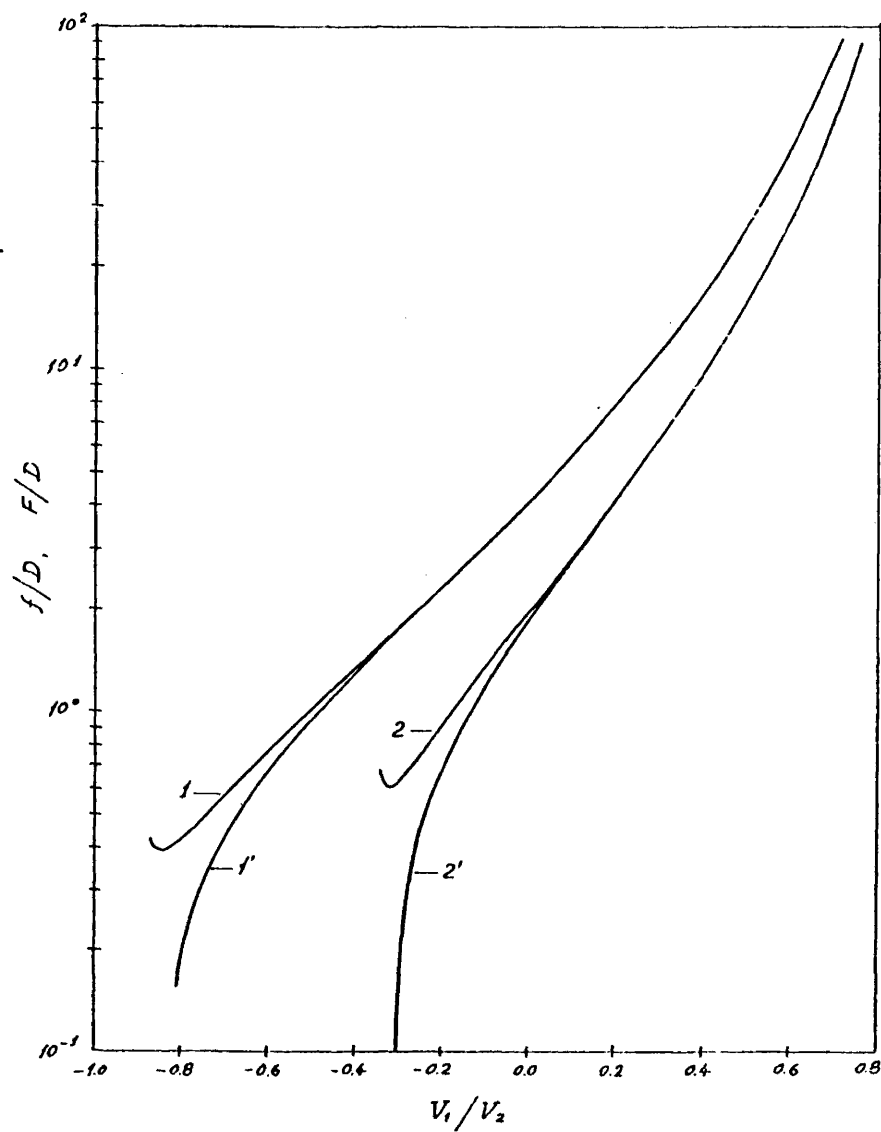


Figura III.5.- Distancia focal (1,2) y focal-media (1',2') para dos lentes einzel en la región $V_1 < V_2$. $T/D=0.1$.
 Lente 1: $\lambda/D=0.5$. Lente 2: $\lambda/D=1.0$; $m = 150$.

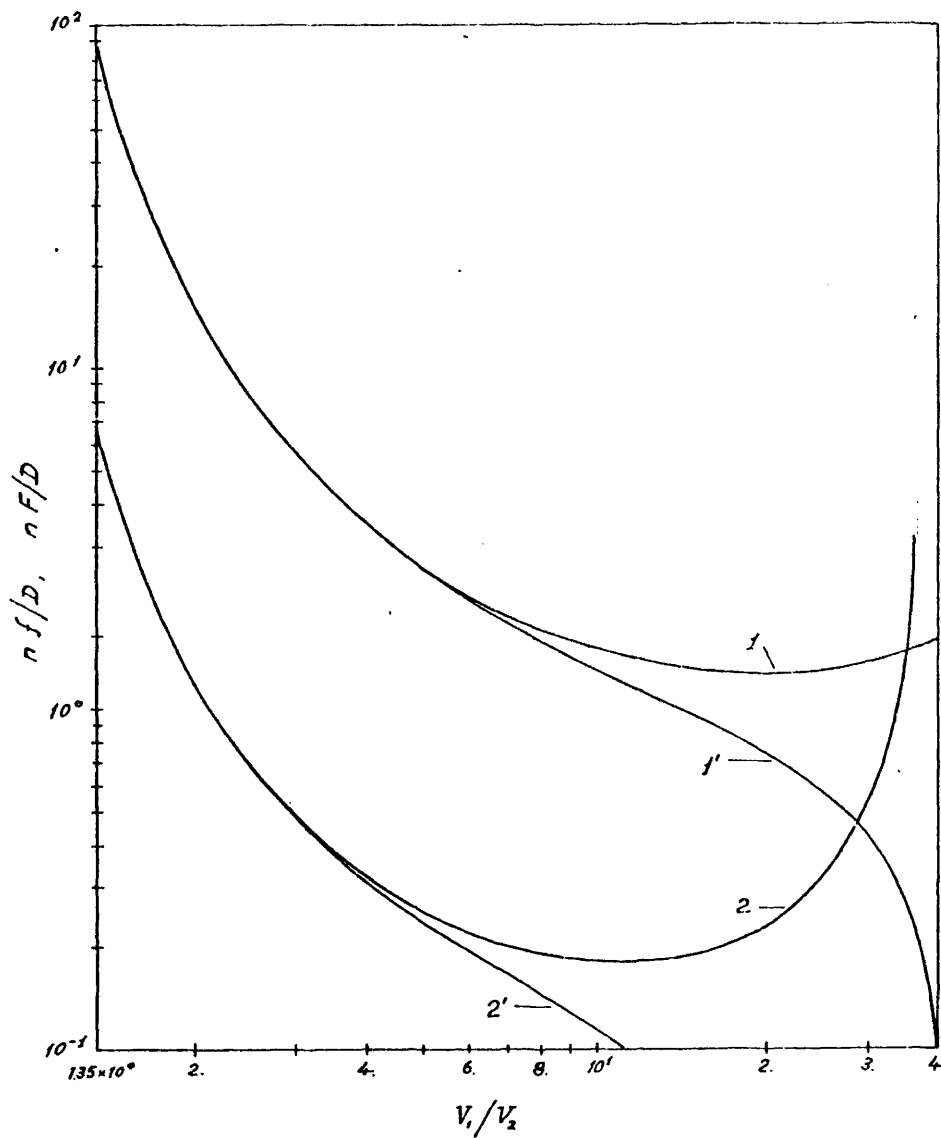


Figura III.6.- Distancias focal (1,2) y focal-media (1',2') para las dos lentes einzel de la Figura III.5, en la región $V_1 > V_2$. Lente 1: $n=1$. Lente 2: $n=0.1$; $m = 150$.

ciarla, que hicimos al plantear la ecuación de la trayectoria gaussiana, deja de ser válida; para admitir como correctos los resultados, hemos impuesto que el cociente entre ambas componentes sea menor o igual que 10^{-3} , lo que implica despreciar términos del orden de 10^{-6} en la ecuación de conservación de la energía.

En el rango $V_1 - V_2$ el error más significativo es el que introduce el método de integración de la trayectoria, siendo conveniente utilizar una longitud de intervalo pequeña; de todas formas se trata de una región de poco interés práctico ya que en ella el enfoque es muy débil.

En las Figuras III.5 y III.6 se han representado la distancia focal f , y la focal-media F , para dos geometrías corrientemente utilizadas. Los números con prima denotan los valores de F y los números sin prima los de f . Se suele trabajar en el rango $V_1/V_2 < 1$ porque en éste los valores de la distancia focal son más pequeños; a medida que V_1 se va haciendo más negativo la potencia de la lente crece pasando por un máximo; a partir de un determinado valor de V_1 se verifica $V(z=0) \leq 0$ y el electrón no puede atravesar la lente siendo reflejado, el sistema se comporta entonces como un espejo. En la región $V_1/V_2 > 1$ las distancias focales son mayores, salvo que se trabaje con polarizaciones altas ya dentro del segundo o tercer rango de operación. La Tabla III.4 muestra algunos datos de interés para las dos lentes en estudio.

Cuando $V_1 - V_2$ los resultados son muy sensibles a la longitud del paso de integración siendo en este rango la principal fuente de error.

	V_1/V_2	F/D	f/D	P_e
Lente 1	19.0	0.77	1.27	-0.9
	-0.85	0.02	0.39	
Lente 2	11.0	1.00	1.77	-0.36
	-0.315	0.07	0.60	

Tabla III.4.- Detalle de los valores de las Figuras III.5 y III.6 para los que f es mínimo. P_e es el potencial por debajo del cual la lente se comporta como un espejo.

Hemos realizado diversos estudios comparativos de los valores de f y F calculados con nuestro método y los obtenidos por algunos de los autores citados anteriormente.

En la Tabla III.5 se comparan dichos valores con los calculados por El-Kareh y Sturans (1972) utilizando el método de relajación, para distancias focales objetivas. Cuando la lente es débil los valores concuerdan bastante bien, sin embargo se observa un incremento de las diferencias al hacerse la lente más potente llegando a ser del

4.7% para f y del 5.2% para F en el caso $S/R = 3$. Aparte de las posibles discrepancias en el cálculo del potencial, nos parece que un factor importante es la diferencia en la altura del cierre ya que El-Kareh y Sturans lo situán a una distancia igual a $2R$ por encima del electrodo exterior y nosotros hemos comprobado que ello puede afectar los valores obtenidos sobre todo cuando la lente es fuerte y la penetración de las líneas de campo a través de la abertura exterior hace que no podamos asegurar que a esa distancia el campo es nulo.

S/R	f/R		F/R	
	El-Kareh y Sturans	Método propuesto	El-Kareh y Sturans	Método propuesto
1.0	5.62	5.70	5.55	5.64
1.5	4.00	4.05	3.86	3.91
2.0	3.45	3.50	3.23	3.29
2.5	3.22	3.30	2.93	3.02
3.0	3.06	3.21	2.75	2.90

Tabla III.5.- Comparación de las distancias focales y focales-medias objetivas, con los resultados de El-Kareh y Sturans.

$$T/R = 0.25; V_1/V_2 = 0.; m = 200.$$

En la Tabla III.6 se comparan los valores dados por Harting y Read (1976) con los nuestros para una misma geometría y diferentes valores de la polarización.

V_1/V_2	f/D		F/D	
	Harting y Read	Método propuesto	Harting y Read	Método propuesto
40.	1.59	1.583	0.16	0.170
20.	1.32	1.321	0.78	0.786
10.	1.57	1.581	1.37	1.377
0.	4.65	4.669	4.63	4.652
-0.4	1.54	1.551	1.50	1.503
-0.8	0.50	0.503	0.32	0.327

Tabla III.6.- Comparación de la distancia focal y focal-media con los resultados de Harting y Read.

$$T/D = 0.05; A/D = 0.5; m = 200.$$

Las diferencias no sobrepasan nunca el 1% salvo en el primer y último valor de la tabla de F en donde son del 4.1% y 2.1% respectivamente. En estos extremos el valor de F es pequeño y por las pruebas realizadas sabemos que es bastante sensible a la longitud del paso empleado en la integración de la trayectoria.

Por último, en la Tabla III.7 se comparan nuestros resultados con los obtenidos experimentalmente por Lippert y Pohlit (1952); para diversas geometrías. En general los resultados concuerdan bastante bien y, aparte de los errores propios de la medida experimental y del cálculo teórico, las diferencias pueden ser atribuidas a varias causas. Entre ellas cabe destacar por un lado el error en la lectura de los resultados experimentales que son representados por los autores en unas gráficas, estimamos la cota de este error en 5% aproximadamente; por otro las diferencias pueden ser debidas en parte a que la geometría simulada en nuestro caso no se corresponde exactamente con la utilizada en el experimento siendo quizá el factor más influyente la curvatura del borde del diafragma central -véase el estudio hecho al respecto por Shinuzu et al. (1974)-.

S/R	T/R	f_e/R experimental	f_c/R Método propuesto
0.52	1.98	1.7	1.71
1.0	1.50	1.8	1.82
0.97	1.98	1.95	1.94
1.0	1.10	2.0	2.09
2.89	1.77	2.85	3.0
5.0	1.43	3.45	3.10
8.09	1.22	3.9	3.52

Tabla III.7.- Comparación de la distancia focal de diversas lentes con los resultados experimentales de Lippert y Pohlit.

$$V_1/V_2 = 0.; m = 200.$$

Hemos de señalar con relación a los valores dados en la Tabla III.7 que se repitieron los cálculos aumentando el número de subelectrodos hasta 136 para comprobar la influencia de una posible mejora en el cálculo de la distribución de campos; sin embargo los resultados para la distancia focal solo se modificaron a partir de la cuarta cifra significativa.

III.2.3.- Aberración Esférica y Cromática.

De todos los coeficientes de aberraciones geométricas de tercer orden, el más importante en el diseño de sistemas de enfoque es el de aberración esférica; en los trabajos consultados este coeficiente es el que se tabula con más frecuencia si bien los otros pueden obtenerse indirectamente a través de él -ver por ejemplo Harting y Read (1976), pág. 15 y siguientes-. Por otra parte el coeficiente de aberración cromática, también puede resultar un dato de utilidad en el diseño de sistemas especialmente en aquellos que trabajan con haces de diámetro pequeño, en los que otros tipos de aberración van a ser menos significativos. Nosotros hemos puesto a punto el cálculo de estos dos coeficientes basándonos en las ecuaciones (II.75) y (II.85) respectivamente. Tanto C_s como C_c son función de la posición de los puntos objeto e imagen; en los cálculos se han impuesto, salvo que se indique lo contrario, que los objetos e imágenes reales queden en la región de campo nulo por lo cual las curvas que se dan a continuación se pueden obtener al mismo tiempo que las de la distancia focal ya que los límites de las integrales pasan a ser $\pm \infty$. Para efectuar la integración he

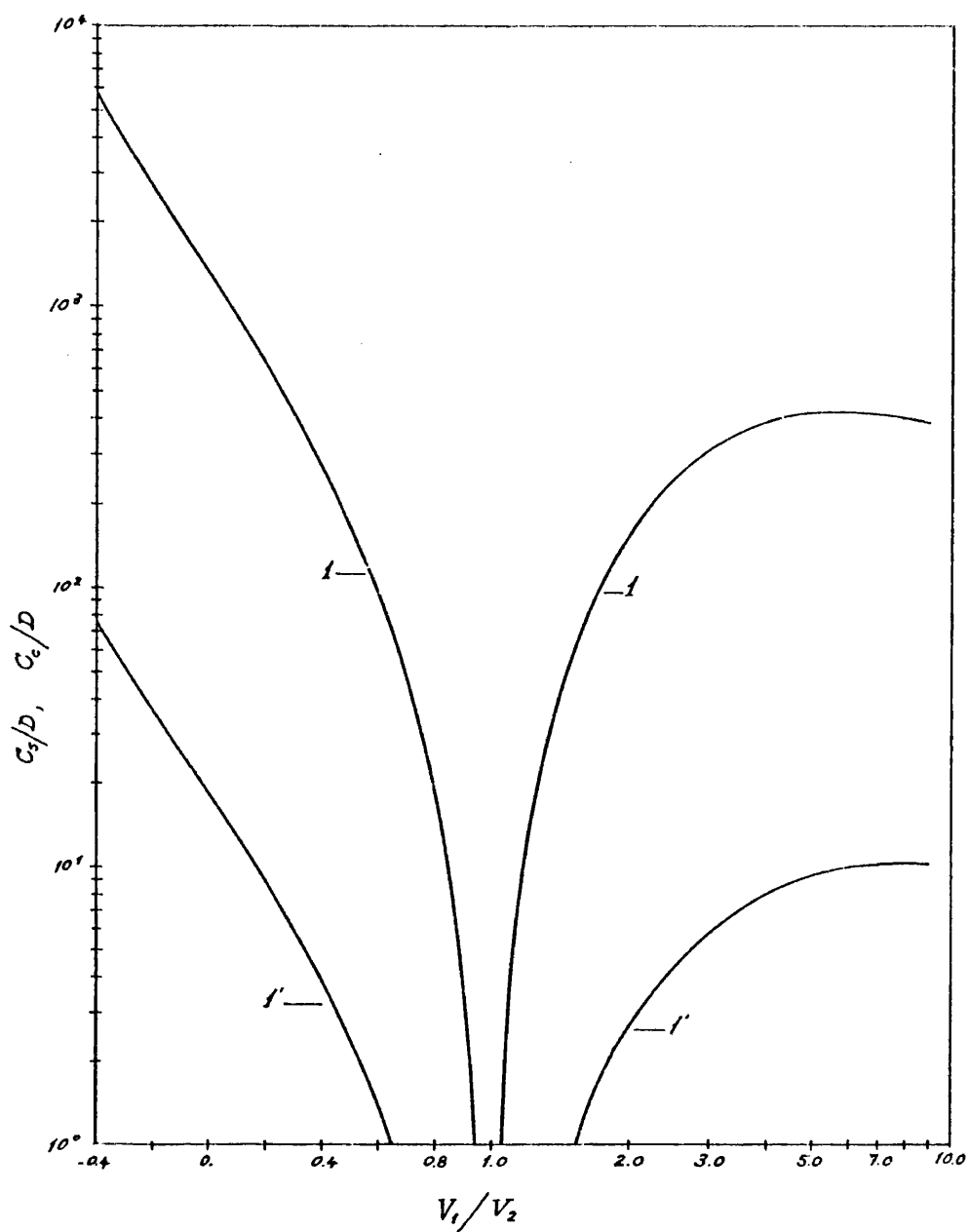


Figura III.7.- Coeficientes de aberración esférica (I) y de aberración cromática (I') en función de la polarización de los electrodos. Lente 1. $P = 50$; $m = 150$.

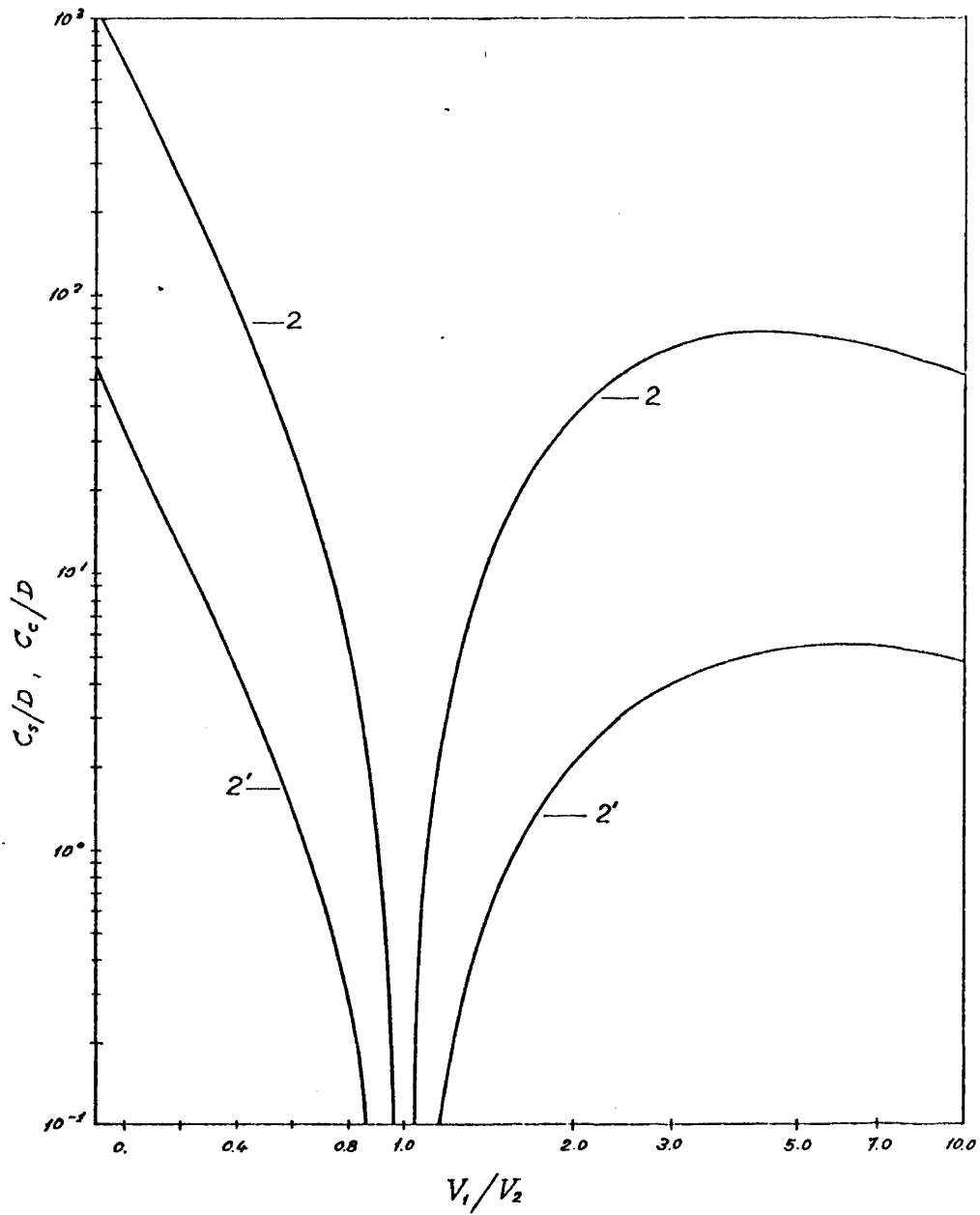


Figura III.8.- Coeficientes de aberración esférica (2) y de aberración cromática (2') en función de la polarización de los electrodos. Lente 2. $P = 50$; $m = 150$.

mos aplicado la regla trapecial, Gérald (1972), estimándose que el error por truncamiento no afecta apreciablemente a los resultados debido a que se utiliza un paso relativamente pequeño.

Las Figuras III.7 y III.8 muestran la variación de $C_s(P)$ y $C_c(P)$ con la polarización de las lentes einzel ya mencionadas. El punto objeto está situado en $P = 5$ D y el punto imagen, que se puede hallar a partir de la ecuación (II.15), se encuentra como mínimo a una distancia $Q = 2$ D del centro de la lente. En la Tabla III.8 se presentan los resultados de la aberración esférica de una lente comparados con los de Harting y Read (1976), para diversas polarizaciones.

V_1/V_2	C_s/D	C_{sH}/D	$\frac{C_s - C_{sH}}{C_s} \times 100$
-0.4	29,863	29,566	0.99
-0.2	14,384	14,233	1.05
0.	7,077	6,988	1.16
3.0	1,764	1,748	1.26
5.0	2,453	2,475	-0.90
8.0	2,436	2,476	-1.64

Tabla III.8.- Comparación del coeficiente de aberración esférica con los resultados de Harting y Read (C_{sH}) para la misma lente de la Tabla III.6.



Al igual que en las distancias focales se tienen unas diferencias pequeñas manteniéndose por debajo del 1.7%. Estos mismos autores no realizan ningún estudio sobre la aberración cromática, por ello hemos tomado como referencia los datos de El-Kareh y Sturans (1972), que obtienen los valores de dicha aberración para el caso de magnificación infinita, esto es, el punto objeto -o el imagen- se encuentran situados en el foco. Hemos de advertir que los autores emplean una definición ligeramente distinta de la aberración cromática; con respecto a la ecuación (II.83) el potencial en el punto objeto V_0 que aparece en el denominador, lo engloban en dicha constante de forma que la relación entre la que ellos definen, C_{cE} , y la que nosotros damos en (II.84) es $C_{cE} = C_c/V_0$. La Tabla III.9 muestra los resultados obtenidos para las mismas lentes de la Tabla III.5.

S/R	$C_c V_0^{-1}/D$	C_{cE}/D El-Kareh y Sturans	$\frac{C_c - C_{cE}}{C_c} \times 100$
1.0	18.92	18.45	2.47
1.5	16.08	15.20	4.50
2.0	16.62	14.72	11.45
2.5	17.73	15.66	14.55
3.	20.10	17.14	14.72

Tabla III.9.- Comparación del coeficiente de aberración cromática con los resultados de El-Kareh y Sturans - para las mismas lentes de la Tabla III.5.

Estas dos tablas se pueden calcular simultáneamente; en primer lugar se determinan los valores de la distancia focal y la focal-media objetivas a partir del corte del rayo con el eje. El valor de f se toma como posición del punto objeto y se procede a calcular $C_c(f)$. Las diferencias son mayores para separaciones interelectródicas grandes, si bien pueden explicarse por el hecho de que es justamente en estos casos donde nuestros valores de f discrepan más de los de El-Kareh y Sturans; puesto que siempre esta diferencia es por exceso ello supone que nuestra integral tiene su límite inferior en un punto objeto más alejado del centro de la lente y contiene un mayor número de aportaciones que siempre son nulas o positivas. Cuando el punto objeto está en la región de campo nulo esta diferencia no debe influir en los resultados pero sí se hace importante cuando f sea del orden de 1.50 ó inferior. Así pues, para las lentes más fuertes además del efecto de la altura del cierre hay que considerar éste otro que pensamos es más influyente a la hora de explicar las diferencias en los resultados de C_c .

III.2.4.- Diseño de una lente con aberración cromática mínima.

Hasta ahora hemos estudiado fundamentalmente el comportamiento de la lente einzel en función de la polarización del electrodo intermedio; hay otros parámetros en la lente respecto de los cuales puede ser interesante el analizar las variaciones. Uno de los factores geométricos más característico es la separación interelectródica; en la región $V_1/V_2 < 1$ el aumento de dicha separación va acompañado de una

disminución de la distancia focal. En la Figura III.9 se ha representado dicha variación junto con la de $C_s(5D)$ y $C_c(5D)$ para dos lentes con distinto grosor del electrodo central. Quizá el aspecto más interesante de este tipo de curvas es que la aberración cromática calculada para $P = f$, pasa por un mínimo, y puesto que en muchas lentes dobles el punto objeto de la segunda coincide con su foco ello puede ser un dato de interés.

En la Tabla III.10 se dan algunos de los valores de $C_c(f)$ en función de la separación entre electrodos. A la vista de dichos resultados podemos seleccionar para cada valor de T una lente con mínima aberración. Suponiendo $D = 1$ cm las especificaciones para dichas lentes son:

<u>T = 0.10 cm</u>	<u>T = 0.15 cm</u>
A = 0.95 cm	A = 0.90 cm
$R_1 = R_2 = 0.5$ cm	$R_1 = R_2 = 0.5$ cm
f = 2.01 cm	f = 1.89 cm
F = 1.93 cm	F = 1.82 cm
$C_s(f) = 51.34$ cm	$C_s(f) = 47.05$ cm
$C_c(f) = 8.24$ cm	$C_c(f) = 7.74$ cm

Los datos corresponden al caso $V_1/V_2 = 0$.

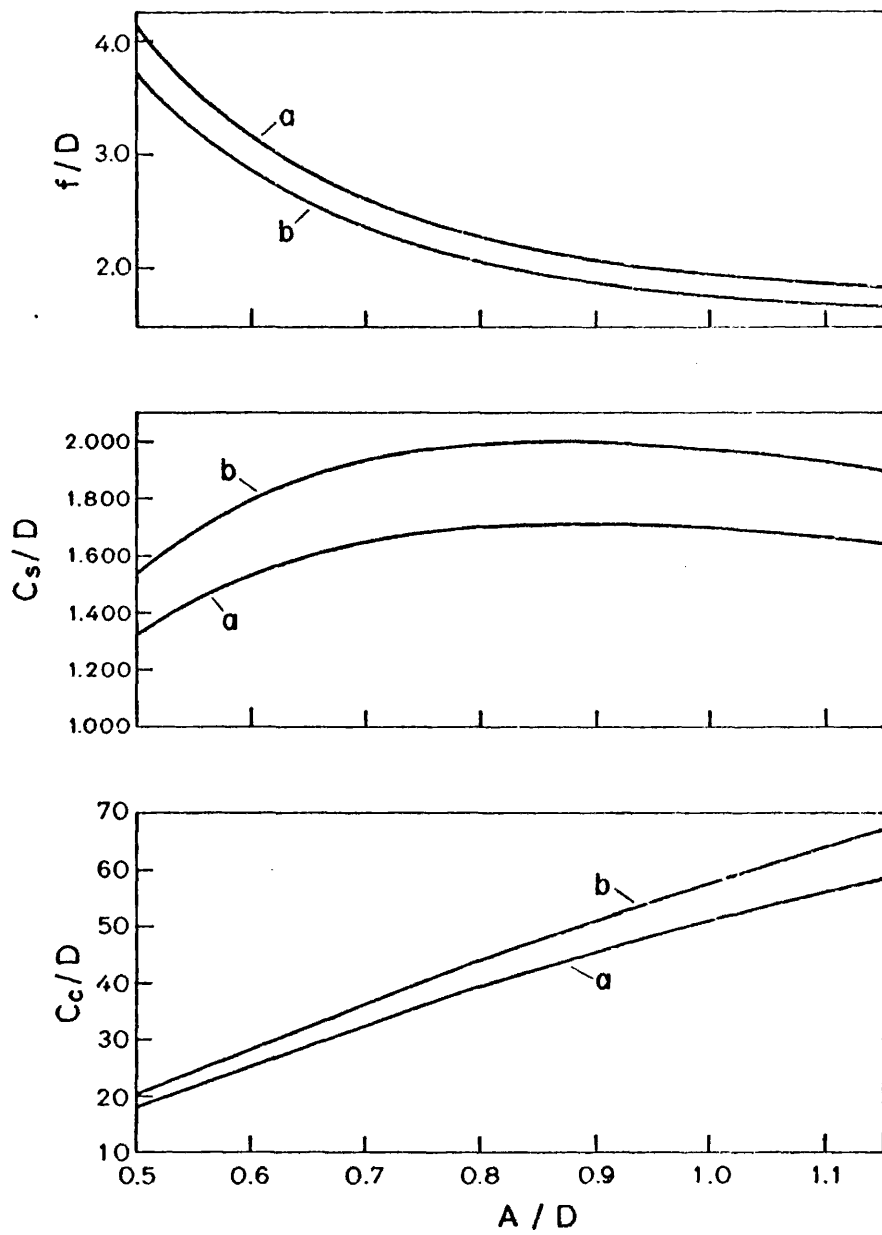


Figura III.9.- Variación de f , C_s y C_c en función de la separación entre electrodos. $V_1/V_2 = 0.$, $P = 5D$. a: $T/D = 0.10$; b: $T/D = 0.15$; $m = 150$.

$$z_1/D = 0.050$$

A/D	0.50	0.70	0.80	0.90	0.95	1.00	1.10	1.20
$C_c(f)/D$	12.42	9.07	8.49	8.26	8.24	8.26	8.41	8.67

$$z_1/D = 0.075$$

A/D	0.40	0.65	0.85	0.90	0.95	1.00	1.05	1.10
$C_c(f)/D$	15.51	8.77	7.76	7.74	7.76	7.81	7.90	8.01

Tabla III.10.- Variación de $C_c(\delta)$ en función de la separación entre electrodos

$$V_1/V_2 = 0.; m = 200.$$

III.2.5.- Discusión de los resultados y conclusiones.

Como resumen de lo expuesto en el presente capítulo podemos considerar que existen dos posibles líneas para abordar el estudio de la lente eínzel. Por un lado hay una serie de tratamientos analíticos que intentan representar en forma aproximada el potencial en la región de interés; de otra parte se puede intentar resolver el problema mediante métodos numéricos siendo los más usuales el de relajación y el de densidades de carga.

Los tratamientos analíticos consideramos que presentan bastantes inconvenientes sobre todo en lo que se refiere a limitaciones en la geometría y en el rango de polarizaciones aplicables, además los resultados suelen ir afectados de un error apreciable que en muchos casos supera el 10%. Sin embargo, a nivel de diseño pueden resultar útiles ya que la imprecisión del método experimental en ocasiones supera ese margen.

Los métodos numéricos son en principio una forma de tratar el problema bastante más elaborada que la anterior y que va a requerir generalmente mayor tiempo de cálculo, pero como contrapartida ofrecen una mayor flexibilidad en cuanto a la simulación de la geometría y, lo que es también importante, un error en los resultados que se puede ajustar a las condiciones de cada problema concreto y solo va a estar limitado por exigencias de tiempo de cálculo o memoria del computador.

En el presente estudio nos hemos limitado a comparar nuestros resultados con los obtenidos por tratamientos numéricos; podemos concluir que en general concuerdan bastante bien siendo mayores las discrepancias en las zonas donde la lente es más fuerte pero sin llegar a superar el 5 ó 6% en la mayoría de los casos propuestos; lógicamente las diferencias son menores cuando el método empleado es del mismo tipo, como sucede con los resultados de Harting y Read.

Nos gustaría hacer algunas consideraciones sobre las ventajas e inconvenientes del método de relajación comparado con el que nosotros proponemos, ya que ha sido ampliamente utilizado. Pensamos que la principal ventaja es la facilidad, en lo referente a cálculos requeridos, con que se aplica a la solución de problemas electrostáticos e incluso para algunos de ellos puede ser el más indicado. Sin embargo, y como ya señalamos en el primer capítulo, para este tipo de problemas nos parece que está en desventaja con respecto al de densidades de carga. En primer lugar requiere la obtención del potencial en todo un mallado que no se va a utilizar en absoluto posteriormente; en segundo no da el valor del potencial en los puntos por los que va transcurriendo la trayectoria sino que hay que interpolar entre los dos más próximos lo que obliga a efectuar un mallado relativamente pequeño si se quieren tener unos resultados precisos. Como ejemplo citaremos los datos dados por El-Kareh y Sturans (1972), que en una geometría similar a la de la Figura III.1 realizan un mallado de 39345 puntos y el programa tarda 20 minutos en obtener una convergencia de 10^{-8} -procesador GE 635-. A título de comparación diremos que uno de nues-

tros programas en el que se calculan la distribución de densidades de carga, los valores de f , F , C_s y C_c para una lente, emplea un tiempo inferior a 1.5 minutos para una trayectoria de aproximadamente 1600 pasos (procesador Univac 1110). La ventaja del método que utilizamos frente al de relajación todavía se hace más patente si se tiene en cuenta que en las gráficas en las que la variable independiente es la polarización del electrodo medio solo es preciso calcular una vez los coeficientes de potencial ya que éstos dependen exclusivamente de la geometría. Por otro lado señalemos que la memoria utilizada para almacenar una matriz de 56×56 representa menos de la décima parte de la requerida por el mallado que utilizan en la referencia citada.

Con respecto a la forma de resolver el problema electrostático por el método de Harting y Read (1976) proponen, creemos que la nuestra presenta ventajas evidentes. En primer lugar, el hecho de utilizar la aproximación de carga lineal les obliga a dividir la geometría en un elevado número de subelectrodos a fin de no introducir en los resultados un error apreciable, como se desprende de los cálculos que efectuamos en el apartado I.3. Así, en esta lente emplean 280 subelectrodos (trabajan a tope de memoria), para generar la mitad de la geometría; ello representa unas necesidades de memoria veinticinco veces superior a la precisada para almacenar nuestra matriz de coeficientes. Aunque no hacen comentarios acerca del tiempo de computación podemos pensar que la ventaja de utilizar expresiones más simples para los coeficientes de potencial queda anulada, al pasar a multiplicarse por veinticinco el número de éstos. Por otro lado en los puntos por -

los que transcurre la trayectoria hay que sumar las aportaciones de cada subelectrodo al potencial, las expresiones son sencillas de calcular por ambos métodos pero en su caso queda multiplicado por cinco el número de aportaciones; puesto que una trayectoria consta de 1500 a 2000 pasos el tiempo de computación debe ser bastante inferior para nuestro programa.

Concluimos pues, que el método puesto a punto si bien requiere en un principio la preparación de una serie de cálculos relativamente más costosos, presenta bastantes ventajas frente a otras técnicas numéricas, ya que se trata de un método preciso en tanto en cuanto que permite la resolución del problema electrostático con un error que estimamos entre el 0.1 y el 0.3% y a la vez de un método competitivo en lo que a las exigencias de tiempo de computación y de memoria se refiere.

CAPITULO IV

IV.1.- FUENTES DE IONES

Los sistemas productores de haces de iones constituyen una herramienta básica en la investigación aplicada. Su utilización se extiende a campos muy diversos tales como espectrometría de masas, física nuclear, dopado de cristales semiconductores mediante implantación iónica, etc. Desde la primera fuente construida por Goldstein en la que el haz de iones era extraído de la descarga de un gas a baja presión, las técnicas han ido perfeccionándose constantemente y hoy día contamos con una gran variedad de fuentes. El tema es ampliamente tratado en la bibliografía, Wilson y Brewer (1973), Valyi (1976), y no abordaremos aquí el estudio de los diversos tipos de fuentes aunque los métodos que desarrollamos aquí serían análogamente aplicables a muchas de ellas. Nuestro propósito es centrarnos en el análisis de una fuente de iones por impacto electrónico de tipo Nier, caracterizada por una baja densidad de corriente (10^{-7} A cm^{-2}) y pequeña dispersión en energía (1-5 eV). Una fuente de estas características es especialmente adecuada para análisis químicos, espectrometría de masas, estudio de partículas retrodispersadas en el bombardeo de blancos. El diseño de nuestra fuente se hizo en concreto orientado a esta última aplicación.

A pesar de que este tipo de configuraciones se utiliza con -

frecuencia, no existe por lo que conocemos, un estudio completo y riguroso de sus propiedades ópticas. Un modelo que intente incluir todos los fenómenos que intervienen en la generación y enfoque de los iones tiene que ser necesariamente complejo; sin embargo como una primera aproximación se puede comenzar con una serie de hipótesis simplificadoras -por ejemplo despreciar el efecto de la carga espacial- que permitan abordar su estudio y tratar después de mejorarlo incluyendo algunos de los efectos no considerados. El estudio quizá más completo que se ha realizado hasta hoy es el de Wallington (1970, 1971), que analiza las propiedades paraxiales y no paraxiales de una fuente Nier con simetría planar. Uno de los aspectos fundamentales es la resolución del problema electrostático, para lo cual el autor aplica el método de transformación conforme. Los cálculos preparados en el presente trabajo permiten un estudio similar para una fuente con simetría rotacional, éste será uno de los objetivos principales del capítulo.

IV.1.1.- Parámetros Característicos de una Fuente de Iones.

En general toda aplicación en un sistema productor de iones requiere unas características específicas. Vamos a señalar los parámetros que consideramos más importantes y que deberán ser analizados al abordar un diseño.

Especies iónicas.- La primera característica a tener en cuenta en el tipo de iones que el sistema debe ser capaz de generar. Así mientras que en el caso de implantación iónica la fuente debe presen-

tar una gran flexibilidad en este aspecto y ser capaz de producir cualquier tipo de dopante que se desee implantar, para el estudio de los fenómenos de sputtering conviene utilizar gases nobles de peso atómico intermedio o grande (A, Kr).

Corriente iónica.- La densidad de corriente de iones es uno de los parámetros que más va a variar con el tipo de aplicación. En retrodispersión se puede trabajar con corrientes del orden de microamperios, sin embargo la fabricación de dispositivos de microelectrónica requiere intensidades de microamperios para que el proceso sea rentable.

Emitancia y Aceptancia.- En toda fuente real el haz de iones no lleva un flujo laminar sino que las trayectorias se cruzan continuamente; ello se debe principalmente a la dispersión en las componentes de la velocidad que es introducida por la energía térmica de los iones en el punto en el que se generan y por las aberraciones inherentes al sistema óptico. Se suele caracterizar este comportamiento -para cualquier posición axial- representando en un diagrama la pendiente de la trayectoria $d\psi/dz = \rho'$, frente a la distancia al eje ρ ; en este diagrama se incluye un incremento $\delta\rho'$ igual a la dispersión asociada a ρ' en cada punto. Uniendo todos los puntos del contorno se obtiene un área finita que es proporcional a la emitancia del sistema. Lógicamente el área debe hacerse tan pequeña como sea posible.

Se tiene por consiguiente que el estado de una partícula en

un haz de iones puede representarse por un punto en el espacio fásico (ρ', ρ) y todas las trayectorias dentro del haz para una determinada posición z , estarán contenidas en un volumen cerrado en dicho espacio; de acuerdo con el teorema de Liouville, Steffen (1965), este volumen permanece constante a lo largo de la trayectoria siempre que se desprecien las interacciones entre partículas y cualquier otro tipo de efectos no conservativos. Una formulación matemática para la emitancia en sistemas con simetría rotacional es discutida ampliamente por Rose y Galejs (1967).

En una segunda representación, también para las coordenadas (ρ', ρ) los límites físicos del sistema de transporte (aberturas limitadoras, etc) pueden trasladarse a lo largo del haz, resultando un volumen en el espacio de las fases que representa aquellos valores de la posición radial y de su pendiente que serían transmitidos a otras zonas del sistema. Esta representación se conoce como diagrama de aceptancia. En un diseño óptimo el diagrama de emitancia debe estar incluido o por lo menos coincidir con el diagrama de aceptación para toda posición radial.

De hecho este proceso de adaptación constituye una de las tareas más importantes de diseño.

Brillo.- Por analogía con los sistemas ópticos de luz se define como la densidad de corriente emitida por unidad de ángulo sólido, es decir $B = I/\pi r_c^2 \alpha^2$, donde r_c es el radio de la envolvente del

haz y α la semiapertura angular del mismo cuando emerge de la fuente.

En general se requiere un valor grande para B lo cual es razonable si se tiene en cuenta que el brillo está relacionado inversamente con la emitancia, van Steenbergem (1965).

Distribución de energía. - Es uno de los parámetros más significativos; cuando se precise un haz de iones con poca dispersión en energía, como es el caso que nos ocupa, debe influir muy directamente en la elección del sistema. Hay varias causas que pueden contribuir a esta dispersión, siendo para nosotros las más importantes la variación espacial del potencial en la región de ionización y la energía térmica de los iones. Mediante un filtrado en energía puede seleccionarse la distribución adecuada, aunque es preferible diseñar un punto de trabajo que a priori minimice la dispersión.

IV.1.2.- Ionización por Impacto Electrónico.

En una fuente Nier, los iones se generan por colisión de un haz de electrones con átomos o moléculas gaseosas; conviene pues realizar algunas consideraciones acerca del fenómeno de la ionización con objeto de hacer comprensible el fundamento de la operación del sistema. Una revisión más completa puede verse en Field y Franklin (1957).

Cuando comunicamos energía a un átomo sus electrones pasan a ocupar órbitas más alejadas del núcleo que la del estado fundamental,

quedando el átomo excitado. A medida que se incrementa la energía comunicada, la interacción electrón-núcleo va disminuyendo y en el límite el electrón escapa del campo de acción del átomo al que pertenecía, su energía potencial es ahora nula y decimos que el átomo ha sido ionizado.

El proceso de ionización requiere por tanto suministrar al átomo una energía mínima que permita al electrón pasar del estado fundamental al estado de energía cero. Se denomina primer potencial ionización a esta energía. El potencial de ionización depende de la configuración electrónica, siendo menor para los metales alcalinos que tienen un electrón poco ligado al núcleo, y tomando los valores más elevados para los gases nobles.

Es posible obtener átomos doblemente ionizados si comunicamos la energía necesaria para liberar un nuevo electrón y lo mismo puede decirse para ionizaciones sucesivas. La energía que se requiere es cada vez mayor pues los electrones son atraídos más fuertemente por el núcleo al existir un exceso de carga positiva; por ejemplo el potencial de ionización del Hg es 10.4 eV mientras que para obtener Hg^{5+} se requieren 230 eV.

También es posible la formación de iones negativos. Hay gases tales como el oxígeno, halógenos, etc., que por su configuración pueden capturar fácilmente un electrón y pasar a iones negativos más o menos estables; un factor que interviene en la estabilidad del ión

es la probabilidad que tenga de chocar con otras partículas por lo que a presiones o temperaturas bajas el tiempo de vida medio será mayor.

Existen diversas formas de comunicar la energía de ionización a los átomos: colisión con partículas ligeras (electrones) o pesadas (iones), incidencia de radiaciones de alta frecuencia, contacto con superficies de elevada temperatura, etc. Es justamente el proceso de ionización el que determina en gran medida las características de la fuente (véase por ejemplo Wilson y Brever (1973), págs. 100 y 101). Nosotros nos limitaremos al análisis de los fenómenos de colisión en una atmósfera gaseosa que son los que intervienen en la formación de iones en nuestra fuente.

Vamos a introducir en primer lugar algunos parámetros. Consideremos un conjunto de partículas caracterizado por una densidad n_b ; hagamos incidir sobre este blanco un haz de partículas proyectiles cuya densidad es n_p . La situación se representa en la Figura IV.1.

Tratemos de hallar la densidad de partículas dn_p que han colisionado en el intervalo dx ; este número será proporcional a la densidad del haz y a τ_a del blanco. Podemos escribir pues

$$dn_p = - \sigma n_p n_b dx \quad (IV.1)$$

el signo menos indica una disminución de partículas en el haz. La sección eficaz de choque σ , es función de diversas magnitudes especialmen

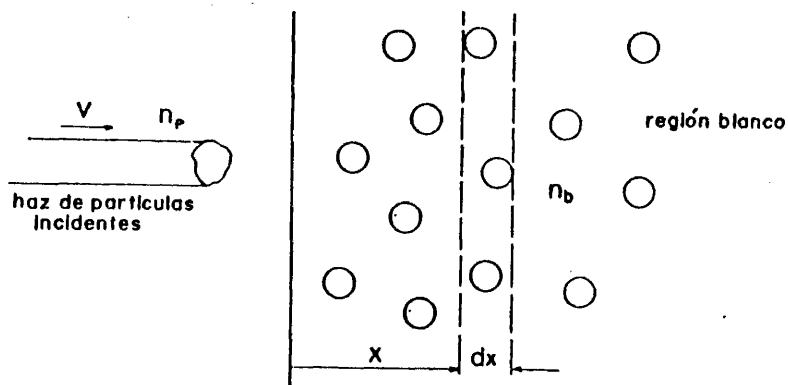


Figura IV.1.- Colisión entre un haz de partículas y un blanco.

te de la energía de las partículas que interactúan. Integrando (IV.1) se tiene

$$n_p = n_{p0} \exp \{ - n_b \sigma x \} \quad (\text{IV.2})$$

siendo n_{p0} la densidad inicial del haz.

Otra cantidad importante es el recorrido libre medio, o distancia que recorre una partícula por término medio entre dos colisiones. Este valor viene dado por

$$\lambda = \frac{\int_0^{\infty} x \exp\{-n_b \sigma x\} dx}{\int_0^{\infty} \exp\{-n_b \sigma x\} dx} = \frac{1}{n_b \sigma} \quad (\text{IV.3})$$

La sección eficaz de choque en general no puede expresarse como función analítica de sus variables paramétricas. Se suele representar en gráficas como funciones de la energía de las partículas incidentes; en la mayor parte de los procesos de colisión σ es baja para pequeñas energías, alcanza un máximo y disminuye en la región de altas energías. De la ecuación (IV.3) deducimos que la partícula sufre n_b colisiones por unidad de longitud recorrida; algunas de ellas serán elásticas otras provocarán la excitación de los átomos blanco o su ionización. Podemos descomponer el número total de colisiones en la suma

$$\sigma n_b = (\sigma_{el} + \sigma_{ex} + \sigma_{ion}) n_b \quad (IV.4)$$

Por último, una cantidad que se emplea con frecuencia en los trabajos experimentales es el número de colisiones ionizantes por unidad de longitud η_{ion} denominada eficiencia de ionización

$$\eta_{ion} = \sigma_{ion} n_b \quad (IV.5)$$

esta variable dependerá de la presión y temperatura del gas a través de n_b .

Para el cálculo de σ_{ion} como función de la energía incidente se han elaborado diversas aproximaciones clásicas y cuánticas. En la teoría clásica, la colisión inelástica ionizante puede ser tratada como un choque entre dos partículas si se considera únicamente la interacción entre el proyectil y los electrones arbitrarios. Entre los modelos clásicos señalaremos el de Thomson (1912), que da un resultado

cuantitativo correcto en la transición $H \rightarrow H^+$, sin embargo la posición y el valor del máximo no concuerdan bien con los resultados experimentales; el modelo propuesto por Gryzinski (1959), constituye la mejor aproximación clásica a los resultados experimentales, estando las mayores diferencias en la región de altas energías.

Parece que un modelo cuántico es más apropiado para la obtención de σ_{ion} , sin embargo debido a la complejidad del problema no existe un tratamiento cuyos resultados concuerden bien con los experimentales. Así, la aproximación de Born es utilizada por Bethe (1930), obteniendo buenos resultados en el rango de energías grandes, sin embargo el modelo falla para energías pequeñas y especialmente en la región donde σ_{ion} es máxima. El modelo de Otskur (1964) es el que obtiene funciones más próximas a las curvas experimentales.

Se han hecho algunos intentos de formulación semiempírica que pretenden extender el rango de validez de los modelos clásicos y cuánticos. Señalaremos la formulación semiempírica de Gryzinski y la de Drawin -véase Vályi (1976), pág. 30 y siguientes- que se ajustan bastante bien para el proceso $H \rightarrow H^+$ como para $He \rightarrow He^+$ y $H_2 \rightarrow H_2^+$.

En cualquier caso disponemos de una gran cantidad de datos experimentales que nos pueden ser útiles para propósitos de diseño. En la Figura IV.2 se representa la sección eficaz de ionización en unidades de πa_0^2 (siendo a_0 el radio de Bohr), frente a la energía de los electrones incidentes para los gases nobles; estas curvas han sido ob

tenidas por Rapp et al. (1965) experimentalmente. Los máximos se presentan entre 80 y 200 eV aumentando la probabilidad de ionización con el tamaño de los átomos:

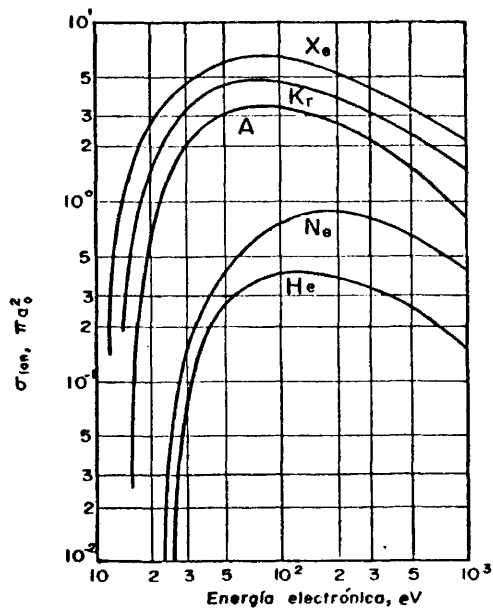


Figura IV.2.- Sección eficaz de ionización por impacto electrónico para los gases nobles.

La sección eficaz de ionización de un átomo excitado es bastante mayor que la del estado fundamental ya que la energía requerida es en este caso menor que el potencial de ionización. Este valor puede obtenerse de las curvas clásicas, cuánticas o semiempíricas ante-

riormente vistas; ello es fácil de justificar en términos del modelo atómico de Bohr. Si la sección eficaz se considera delimitada por la órbita del electrón cuyo número cuántico es n , la sección eficaz del átomo excitado debe ser n^4/Z^2 veces la del estado fundamental ya que el radio de Bohr varía como n^2/Z .

Para la ionización múltiple el umbral de energía se desplaza hacia valores crecientes a medida que el índice de ionización aumenta; por otra parte se observa que las secciones eficaces disminuyen con respecto a la de ionización simple, siendo ello particularmente notable en los átomos alcalinos que al perder un electrón reducen mucho su tamaño con lo que la probabilidad de nuevas colisiones ionizantes es menor.

IV.1.3.- Estudio de una Fuente Nier.

Dempster (1916), fue el primero en utilizar una fuente en la que los iones eran generados por bombardeo de un gas con un haz de electrones previamente acelerado; este prototipo fue mejorado más tarde por Bleakney (1932) y sobre todo por Nier (1940, 1947), constituyendo una de las principales innovaciones el confinamiento del gas en una cámara de ionización lo que permite que el resto de la cámara se encuentre a una presión más baja, con ello se mejora notablemente la eficiencia del sistema. En la Figura IV.3 se ha representado un esquema básico de la fuente. El gas entra en la cámara de ionización a una presión del orden de 10^{-4} Torr, donde es ionizado por los electrones

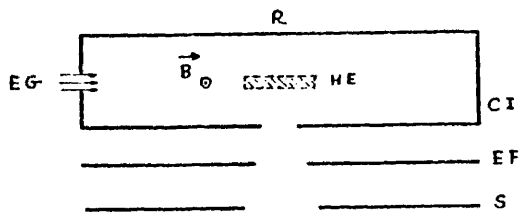


Figura IV.3.- Esquema de una fuente de iones Nier. CI cámara de ionización; R repelidor de iones; EF rendija de extracción y focalización; S rendija de salida; HE haz de electrones; EG entrada del gas.

emitidos por un filamento; estos electrones son acelerados con anterioridad de manera que penetran en la cámara con una energía que normalmente está entre 50-100 eV. A veces se aplica un campo magnético paralelo a la dirección del haz con el fin de aumentar el recorrido de los electrones y en consecuencia la probabilidad de colisión ionizantes. Una fracción de los iones generados es extraída de la cámara a través de la abertura de la base inferior. La intensidad puede optimizarse con la ayuda de un campo electrostático creado por el electrodo repelidor que se encuentra a un potencial algo más positivo que el resto de la cámara. Los iones son enfocados y acelerados hacia la abertura de salida. El haz formado puede someterse a un análisis en energía o en masa, tratarse por un sistema corrector de aberraciones mecá

nicas, ser nuevamente enfocado y acelerado etc., antes de incidir en el blanco. Un diagrama de estas posibles opciones puede verse en Wilson y Brewer (1973), pág. 130.

En el cálculo de las propiedades focales del sistema el primer paso es la determinación de la distribución de potencial en la región de interés. Para sistemas con aberturas rectangulares (simetría planar) un método alternativo al de relajación es el de transformación conforme. El modelo matemático que resulta más adecuado para simular la geometría es el de una disposición de electrodos paralelos de espesor infinitesimal; cada electrodo se supone de extensión infinita al igual que la longitud de las aberturas.

La obtención del potencial para un solo electrodo es bastante simple de calcular por este método, Glaser y Henneberg (1935). La extensión a una lente de tres electrodos fue realizada por Landet (1953) y Archard (1954), pero con ciertas limitaciones, incluyendo la simetría respecto del electrodo central. Boerboom (1959, 1960) desarrolló una serie de métodos iterativos que permiten resolver las ecuaciones planteadas para un sistema que contenga un número cualquiera de subelectrodos; sin embargo en todos los casos se supone que la configuración tiene una simetría determinada o que la separación entre electrodos adyacentes es mayor que la anchura de las rendijas; estas restricciones suponen una limitación grande en la aplicación del método a sistemas prácticos. Wallington (1970), mejora uno de los métodos de Boerboom con el fin de que resulte aplicable a sistemas en los que

no se requiera ninguna condición especial. En la Figura IV.4 se ha representado un corte en el plano xy de una distribución en la que se incluyen n electrodos con aberturas rectangulares y un electrodo sin abertura que puede simular el repelidor de iones; cada abertura está colocada simétricamente alrededor del eje y , siendo infinitamente larga en la dirección Z perpendicular al plano xy . El origen de coordenadas se toma en el centro de la abertura más próxima al electrodo repelidor. Con relación a la Figura IV.4 el potencial $V(y)$ en un punto del eje viene dado por el siguiente par de ecuaciones paramétricas

$$V(y) = V_{n+1} + \frac{2}{\pi} \sum_{i=1}^n (V_i - V_{i+1}) \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{v}{a_{2i}} \right) \quad (\text{IV.6})$$

$$y = v - d_n - \frac{2}{\pi} \sum_{i=1}^n d_i \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{v}{a_{2i}} \right) \quad (\text{IV.7})$$

Las constantes $V_1, V_2, \dots, V_{n+1}, d_1, d_2, \dots, d_n$ son conocidas para un sistema dado. La variable v es un parámetro auxiliar que relaciona la ecuación de voltaje con la ecuación de la distancia. Los parámetros a_1, a_2, \dots, a_{2n} son las denominadas constantes de transformación del sistema, su significado geométrico es el siguiente: a_1 es la coordenada u del borde superior del electrodo 1 cuando el sistema se transforma al plano complejo uv , el borde inferior tiene la coordenada $u = -a_1$; de forma análoga los parámetros a_2, \dots, a_{2n} a los bordes de la parte exterior de los electrodos (infinitamente alejados en el plano xy). Las constantes de transformación se determinan a partir de un conjunto de ecuaciones simultáneas derivadas de la ecuación de transformación y supuestas conocidas las condiciones de contorno. Para el siste

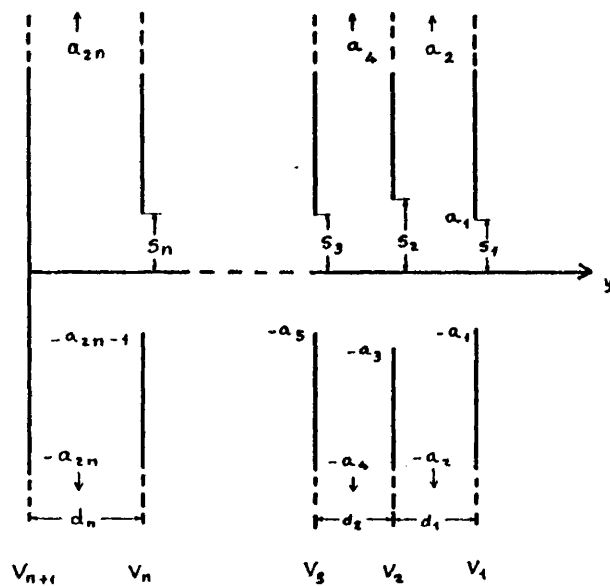


Figura IV.4.- Geometría para la resolución del problema electrostático de un sistema de electrodos con simetría planar, por el método de transformación conforme propuesto por Wallington (1970).

ma en estudio las ecuaciones son

$$S_j = a_{2j-1} + \frac{1}{\pi} \sum_{i=1}^n d_i \ln \left\{ \frac{a_{2j-1} + a_{2i}}{a_{2j-1} - a_{2i}} (-1)^p \right\} \quad (IV.8)$$

$$p = 1, 2j - 1 > 2i$$

$$p = 2, 2j - 1 < 2i$$

$$\frac{d_j}{n} = \frac{\prod_{i=1}^n \{ (a_{2j}^2 - a_{2i-1}^2)(-1)^t \}}{2a_{2j} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \{ (a_{2j}^2 - a_{2i}^2)(-1)^t \}} = r_j \quad (\text{IV.9})$$

$$t = 1, 2j > 2i-1$$

$$t = 2, 2j < 2i-1$$

en donde j varía entre 1 y n . Queda pues planteado un sistema de $2n$ ecuaciones no lineales. El método iterativo desarrollado por Wallington para su resolución, es descrito con todo detalle en el trabajo anteriormente citado y no entraremos aquí en su análisis. Una vez puesta a punto la técnica se aplica en concreto a la obtención del potencial en el eje de una fuente Nier simulada mediante cinco electrodos con aberturas rectangulares y un electrodo repeledor sin abertura; también pueden obtenerse las derivadas sucesivas de $V(y)$ a partir de (IV.6). En un trabajo posterior, Wallington (1971), utiliza estos resultados para abordar el estudio de una fuente Nier que forma parte de un espectrómetro de masas; la fuente es analizada en la región paraxial viendo la formación de imágenes tanto reales como virtuales en función del voltaje del repeledor que es uno de los parámetros más característicos de la fuente de iones. También se realiza un estudio aproximado de la variación de la corriente de iones recogida en el espectrómetro en función de la tensión del repeledor; esta curva es de

gran interés ya que presenta unos máximos que pueden ser útiles con vistas a mejorar la sensibilidad del sistema, en esta curva se incluyen también las trayectorias que transcurren en la zona de tercer orden.

En el apartado siguiente presentamos un estudio llevado a cabo para una fuente con simetría rotacional que en muchos aspectos será similar al realizado por Wallington.

IV.2.- APLICACION DEL METODO DE DENSIDADES DE CARGA AL ESTUDIO DE UNA FUENTE NIER CON ABERTURAS CIRCULARES.

Hemos visto en capítulos anteriores que el método desarrollado es de una gran generalidad y puede aplicarse a cualquier sistema electrostático que tenga simetría rotacional, la única tarea a realizar en cada caso es generar la configuración correspondiente. Ayudándonos de estos cálculos construiremos un modelo que simula el comportamiento de la fuente con vistas a comprobar que la geometría escogida es adecuada para la extracción y enfoque y a optimizar las condiciones de operación del sistema, teniendo en cuenta que este tipo de fuente nos interesa un compromiso entre la máxima intensidad de corriente iónica y la mínima dispersión en energía. Para una fuente de iones Nier el esquema es similar al de la Figura IV.3 incluyéndose algunos electrodos adicionales que permiten cerrar el contorno. En la Figura IV.5 se representa la geometría que se ha empleado para la simulación de la misma.

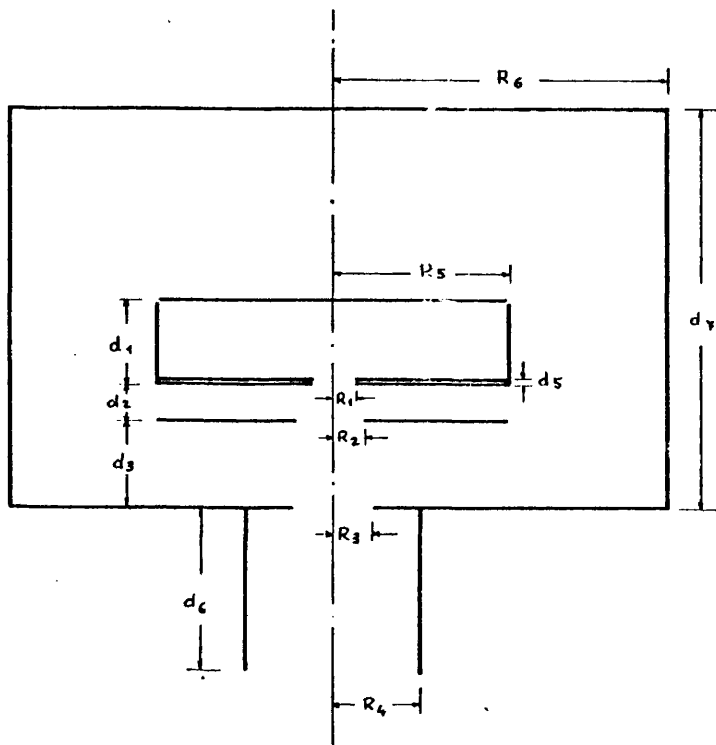


Figura IV.5.- Esquema de una fuente Nier de simetría rotacional. Geometría generada para la simulación de una fuente real.

Datos del sistema: $R_1 = 1.25$, $R_2 = 2.0$, $R_3 = 2.5$,
 $R_4 = 5.0$, $R_5 = 20.$, $R_6 = 50.$, $d_1 = 5.0$, $d_2 = 2.0$,
 $d_3 = 4.0$, $d_5 = 0.5$, $d_6 = 25.$, $d_7 = 90$. Todas las dimensiones se expresan en mm.

En esta representación se han hecho algunas simplificaciones con respecto al verdadero diseño. Así, se ignoran los agujeros de entrada del haz de electrones y del gas; sin embargo al estar en las paredes laterales de la cámara de ionización la perturbación que producen en la región de interés puede despreciarse; incluso el mismo efecto de las paredes laterales tampoco es significativo en dicha región, para justificar esto haremos referencia al problema de la caja cilíndrica resuelto en el apartado I.3; según se ve en la Tabla I.5 - el efecto de la pared lateral es apreciable en sus proximidades, sin embargo en la parte central la distribución es prácticamente la que corresponde a dos discos paralelos de 2.0 cm de radio y 0.5 cm de separación. No obstante la pared lateral se ha incluido para tener en cuenta su efecto de apantallamiento sobre la región de ionización ya que evita la penetración de las líneas de campo de la zona exterior; señalemos que esta situación no se da en la simulación de Wallington ya que supone los electrodos indefinidos. Por las razones ya expuestas no se tiene en cuenta la perturbación creada por el filamento a un potencial entre 50 y 100 V por debajo del de aquella.

Una nueva simplificación consiste en despreciar el espesor de la placa extractora y la de salida; sin embargo se ha tenido en cuenta el espesor de la base de la cámara de ionización (simulada mediante dos discos con una abertura de 1.25 mm de radio separados 0.5 mm). Esto se ha hecho por razones de diseño práctico; dado que se trata de una fuente cuya característica primordial es la de producir haces con poca dispersión en energía, conviene evitar la penetración del

campo de la región de aceleración ya que en la misma puede alcanzar valores grandes (hasta unos 3.000 Vm^{-1}); la forma de lograrlo es hacer la base relativamente gruesa y el no considerar esta característica en la simulación numérica puede llevar a resultados que no corresponden a los verdaderos.

En la generación de la geometría de la Figura IV.5 se han empleado 78 subelectrodos; el criterio seguido para su distribución es el mismo que utilizamos en la lente einzel. En el estudio que presentamos a continuación se ha supuesto fija la polarización de la mayor parte de los electrodos; así, la cámara de ionización se polariza a 200. V, el electrodo acelerador a 130. V y el de salida junto con todos los que configuran el cierre se encuentran conectados a tierra. El potencial del repeedor será por lo general variable y siempre que no se especifique se supondrá igual a 205. V.

IV.2.1.- Precisión del Cálculo de Potenciales.

Una vez que se ha generado el sistema conviene efectuar un análisis de la precisión con que es obtenida la distribución de potencial. Ya hemos discutido ampliamente este aspecto en el capítulo anterior y por tanto nos limitaremos a presentar los resultados para la fuente. En la Tabla IV.1 se muestran los potenciales calculados por aplicación de las ecuaciones (I.26 - I.43) en diversos puntos situados sobre los electrodos o próximos a ellos. Los resultados concuerdan bien con los valores exactos de contorno especialmente en la región -

ρ (mm) \ z (mm)	1.25	6.25	11.25	16.25
-81.5	0.0041 (0.0)	0.0002 (0.0)	-0.0002 (0.0)	0.004 (0.0)
-2.5	205.00 (205.0)	204.99 (205.0)	205.13 (205.0)	204.92 (205.0)
2.0	199.56 (200.0)	199.98 (200.0)	199.97 (200.0)	199.89 (200.0)
2.5	198.44 (200.0)	200.00 (200.0)	199.95 (200.0)	199.88 (200.0)
4.5	131.59	130.28 (130.0)	129.89 (130.0)	129.79 (130.0)
8.5	22.45	-0.008 (0.0)	-0.005 (0.0)	-0.038 (0.0)

Tabla IV.1.- Valores obtenidos numéricamente para el potencial en puntos sobre los electrodos de la fuente o próximos a ellos. El origen se toma en el centro de la cámara de ionización, las z positivas se miden hacia la abertura de salida. El número inferior que se pone en algunos de los cuadros (puntos sobre electrodos) corresponde al valor exacto del potencial.

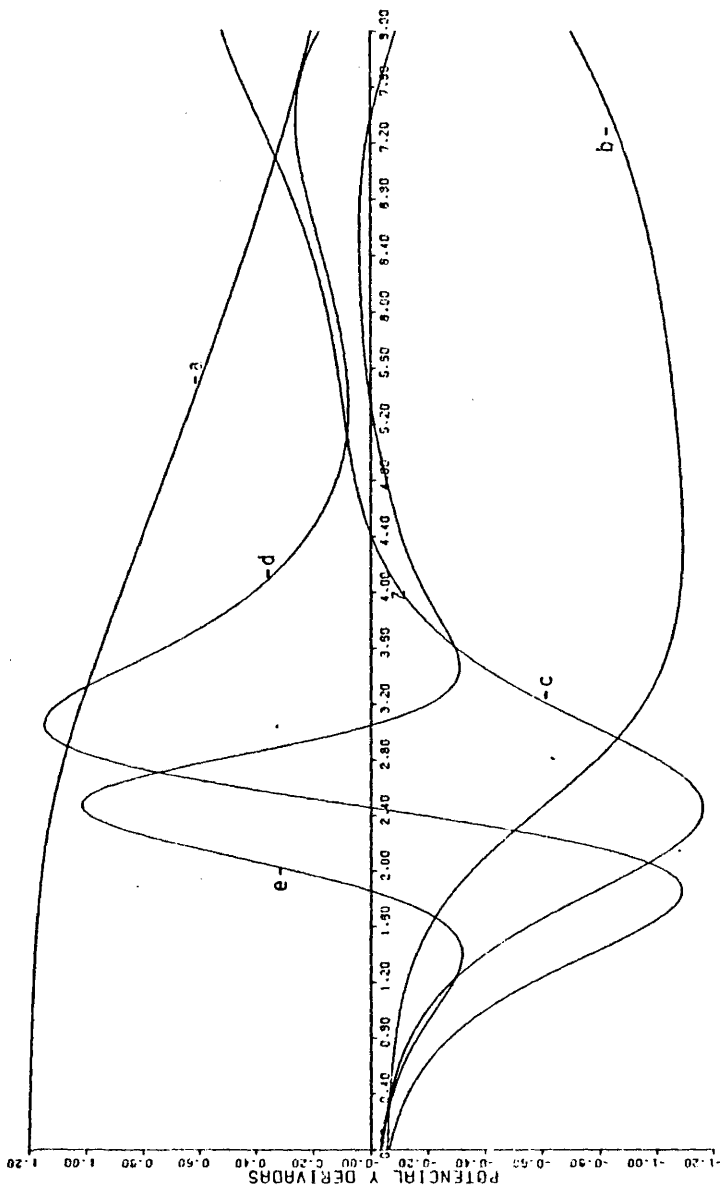


Figura IV.6.- Potencial y cuatro primeras derivadas en el eje de la fuente de iones.

- a: $V(6 \times 10^{-3} V)$; b: $V'(3.5 \times 10^{-5} Vm^{-1})$; c: $V''(7 \times 10^{-8} Vm^{-2})$; d: $V'''(8 \times 10^{-11} Vm^{-3})$;
- e: $V^{IV}(2.5 \times 10^{-14} Vm^{-4})$. Trazador CALCOMP.

cercana al eje ($\rho = 1.25$ mm), ya que aún para puntos que se encuentran en el borde ($z = 2.0$ mm, $z = 2.5$ mm) el error no llega a superar el 0.8%; ello nos permite suponer que en puntos fuera de los conductores, y particularmente en el eje donde el cálculo es mucho más simple, este error es bastante menor estimándolo inferior en cualquier caso - al 0.5%.

Para determinar las trayectorias de los iones en la zona pa raxial y en la de tercer orden necesitamos conocer el potencial en el eje y sus cuatro primeras derivadas. En la Figura IV.6 se han representado estas funciones; se observa un buen comportamiento de las derivadas en los puntos notables -inflexión, máximos y mínimos- si bien es cierto que el error debe aumentar al ir calculando las sucesivas - derivadas.

IV.2.2.- Trayectorias Electrónicas en la Cámara de Ionización.

Ya hemos visto que la formación de iones en una fuente Nier tiene lugar por choque de electrones con las moléculas de gas en la cámara de ionización. De los iones generados sólo una parte se encuentra en la región en la que pueden ser extraídos, los restantes se pierden al colisionar con los electrodos. Para poder estimar la posición de esta zona necesitamos conocer previamente la trayectoria de los electrones en la cámara. Este problema es abordable si se hacen una serie de hipótesis que lo simplifiquen.

Así, la primera de ellas consiste en despreciar el efecto - de las componentes térmicas de la velocidad de los electrones que, como se sabe, son emitidos por el filamento con una distribución en energía de tipo maxwelliano (modificada debido al filtrado de los electrones más lentos al atravesar la barrera de potencial). Por otra parte no tendremos en cuenta la repulsión mutua de las cargas que tiende a provocar la apertura del haz en direcciones normales al eje del mismo. Finalmente ignoraremos el efecto de la abertura de entrada a la cámara.

Todas estas simplificaciones nos permiten plantear el problema en términos del cálculo de trayectorias cuyas condiciones iniciales serán, en cuanto a posición la de encontrarse aproximadamente en la parte central de la abertura de entrada a la cámara y en cuanto a velocidad la impuesta por la ddp entre el filamento y la cámara de ionización. De esta manera es posible obtener una información que, si bien no es exacta, al menos dará idea del comportamiento de buena parte de los electrones. Esta información la utilizaremos posteriormente en el cálculo de la sensibilidad de la fuente.

Para el cálculo de las trayectorias se ha aplicado el método de la fuerza promediada en la primera etapa y el de diferencias - centrales en las restantes. Las componentes del campo se obtienen por cálculo directo mediante las ecuaciones generales (I.45 - I.49) ya que las trayectorias transcurren en su mayor parte por zonas en las que - no son aplicables las aproximaciones de primer o tercer orden.

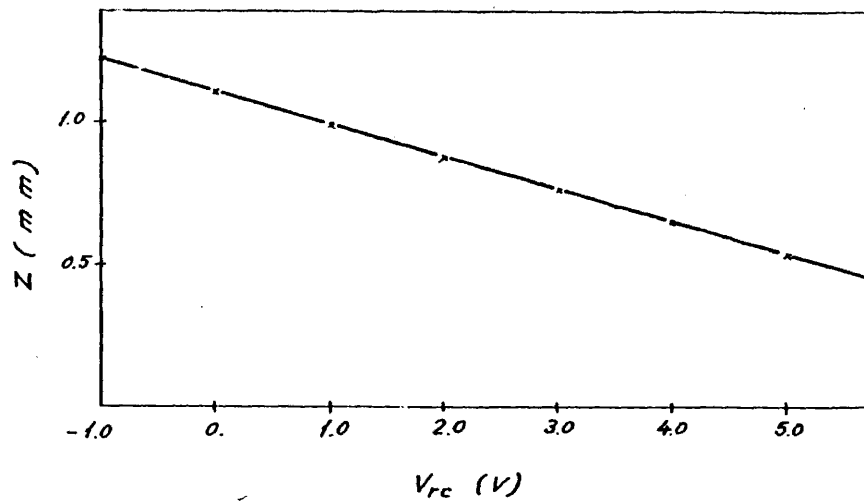


Figura IV.7.- Posición axial para $\rho = 0$, de las trayectorias del haz de electrones en función de la ddp entre el repeledor y la cámara de ionización. Condiciones iniciales:
 $\rho = -1.95$ cm, $z = 1.1$ mm, $v_{\rho} = 7.5 \times 10^6$ m/s, $v_z = 0$.

En la Figura IV.7 se ha representado la posición axial del electrón en el eje de la fuente ($\rho = 0$) en función de la ddp entre el repeledor y el resto de la cámara. Observamos un comportamiento lineal en la variación de la posición; hemos hecho otras pruebas variando las condiciones iniciales obteniendo resultados similares. En cualquier caso es evidente que la región de ionización va desplazándose hacia el repeledor a medida que éste se hace más positivo.

La simplificación que más puede restringir la validez del estudio es quizá la de haber ignorado el efecto de la carga espacial. Con frecuencia la intensidad de corriente de electrones es lo suficientemente grande como para que sea preciso tenerla en cuenta; por ello hemos intentado analizar bajo qué condiciones sería razonable aplicarla. En concreto se ha hecho el estudio para un haz de sección rectangular que puede representar bien un posible caso práctico en el que tanto la abertura de entrada a la cámara como el filamento tengan esta simetría.

Nuevamente la complejidad del problema real exige la utilización de unas aproximaciones que permitan su estudio, al menos dentro de la cámara. Podemos resumir las aproximaciones realizadas en la siguiente forma: a) El único campo eléctrico que actúa es el debido a las propias cargas; b) La sección del haz tiene una anchura mucho mayor que la altura; c) El ensanchamiento que sufre es pequeño manteniéndose la forma de cilindro rectangular; d) Se supone una situación de flujo laminar, sin cruce de trayectorias.

Estas aproximaciones son análogas a las que Wilson y Brewer (1973), aplican a un haz de sección circular. Obtienen el campo transversal que actúa en el haz por resolución de la ecuación de Poisson y estudian la evolución de la envolvente bajo la acción de este campo. El resultado se puede obtener a partir de unas curvas universales que dan el radio del haz, relativo al inicial, en función de la distancia longitudinal recorrida y de una constante en la que intervienen los -

parámetros característicos del haz como su intensidad, energía, etc. Así, para un haz de 100 μ A acelerado previamente con 160 V (condiciones aproximadas a las de nuestra fuente) y con un radio inicial de 1 mm, se incrementa el mismo en una décima parte aproximadamente al cabo de recorrer 2 cm; para radios iniciales mayores el aumento relativo disminuye en forma apreciable. Puede parecer que las aproximaciones efectuadas no se aplican correctamente ya que por ejemplo en la práctica un haz de electrones nunca es laminar, sin embargo Wilson y Brewer señalan que los resultados concuerdan bien con las características de primer orden observadas para este caso.

Siguiendo el mismo modelo, obtenemos para el cilindro rectangular un ensanchamiento que es proporcional al cuadrado de la distancia longitudinal e independiente de la altura inicial. En concreto suponiendo un haz de la misma intensidad y energía que en el caso anterior y de las dimensiones que debemos tener aproximadamente en nuestra geometría (5 mm x 1 mm) resulta un ensanchamiento de 0.08 mm al recorrer una distancia de 2 cm.

A partir de este dato podemos concluir que si bien el efecto de la carga espacial no es del todo despreciable en un haz de las características dadas, su influencia no es muy significativa aunque no se deben olvidar las limitaciones del modelo que hemos aplicado.

IV.2.3.- Caracterización de la Fuente en la Zona Paraxial.

Vamos a presentar en este apartado las propiedades focales del sistema en la zona paraxial. El primer análisis ha consistido en delimitar la extensión de dicha zona en relación con las componentes del campo eléctrico que son las que intervienen en el cálculo de las trayectorias; comparando los resultados para esta aproximación de primer orden con los obtenidos directamente a partir de las ecuaciones (I.45 - I.49), concluimos que es aplicable con un error inferior al 1% en los puntos que disten menos de 0.1 mm del eje. Las mayores limitaciones están en la región de extracción y enfoque donde los campos son más intensos; en otras posiciones axiales la zona se extiende a 0.4 mm o más. Este resultado no se modifica sustancialmente al variar el potencial del repeledor que será un parámetro en muchas de las curvas que se han representado para caracterizar la fuente.

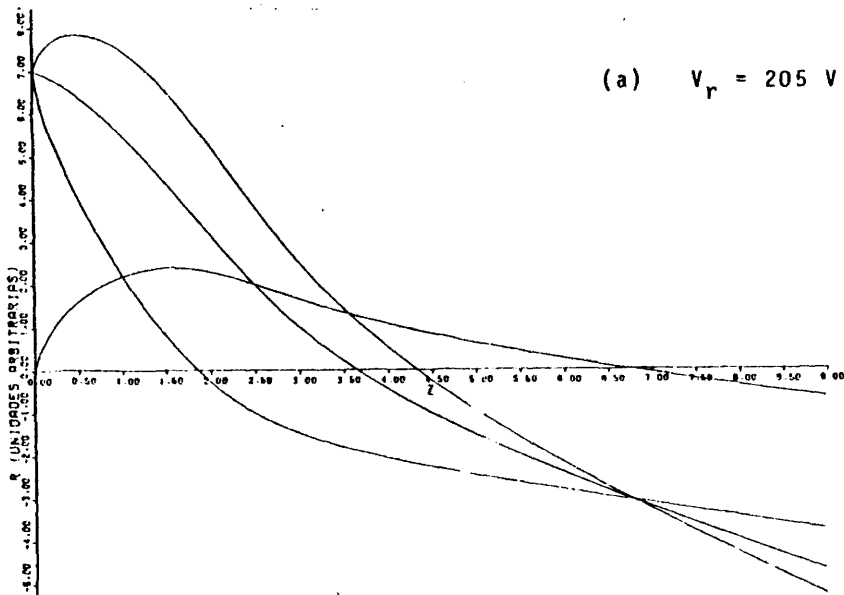
Otra cuestión previa a considerar es la asignación de las condiciones iniciales para las trayectorias. Es evidente que en la colisión la transferencia de momento del electrón al átomo es despreciable debido a la gran diferencia de masas y la energía inicial asociada al ión es prácticamente la del átomo antes de colisionar. Suponiendo en el gas una distribución de energía que obedece la estadística de Maxwell-Boltzmann podemos estimar que la energía más probable es kT siendo T la temperatura absoluta del gas. Los primeros estudios sobre las propiedades de enfoque de la fuente Nier, Naidu et al. (1966), desprecian este efecto sin embargo ello supone una limitación impor-

tante ya que en una fuente real las trayectorias pueden comenzar en cualquier dirección. Fock (1969) y otros trabajos posteriores incluyen esta componente térmica inicial para construir un modelo más aproximado. Nosotros hemos supuesto a lo largo de este estudio que la temperatura del gas es 300 K, ello implica que el módulo de la velocidad inicial de un ión argon representativo (masa atómica 39.948 uma) es 353.5 m s^{-1} para todas las trayectorias. Más adelante comentaremos el efecto de considerar posibles variaciones de esta velocidad inicial.

Con el fin de ilustrar la formación de imágenes reales se han dibujado en la Figura IV.8(a) y (b) diversas trayectorias. El plano objeto está situado en el centro de la cámara de ionización ($z=0$). Hemos de señalar la nitidez de las imágenes, su extremo está perfectamente definido por el corte de tres de las trayectorias. A medida que disminuye V_p la imagen se acerca al objeto; para valores de V_p negativos respecto del potencial de la cámara de ionización el campo del repelidor es desfavorable para la extracción de iones pero este efecto es compensado por la penetración del campo acelerador, en esta región aparece una segunda imagen como se muestra en la Figura IV.9.

No obstante por tratarse de una zona en la que el campo de extracción es débil los cálculos son muy críticos, y una pequeña variación en la longitud del intervalo entre dos puntos de la trayectoria modifica sensiblemente la posición de las imágenes; así pues, y sobre todo en las etapas iniciales, se ha impuesto un paso relativamente pequeño. En cualquier caso se trata de una región que para nosotros tie

(a) $V_r = 205 \text{ V}$



(b) $V_r = 202 \text{ V}$

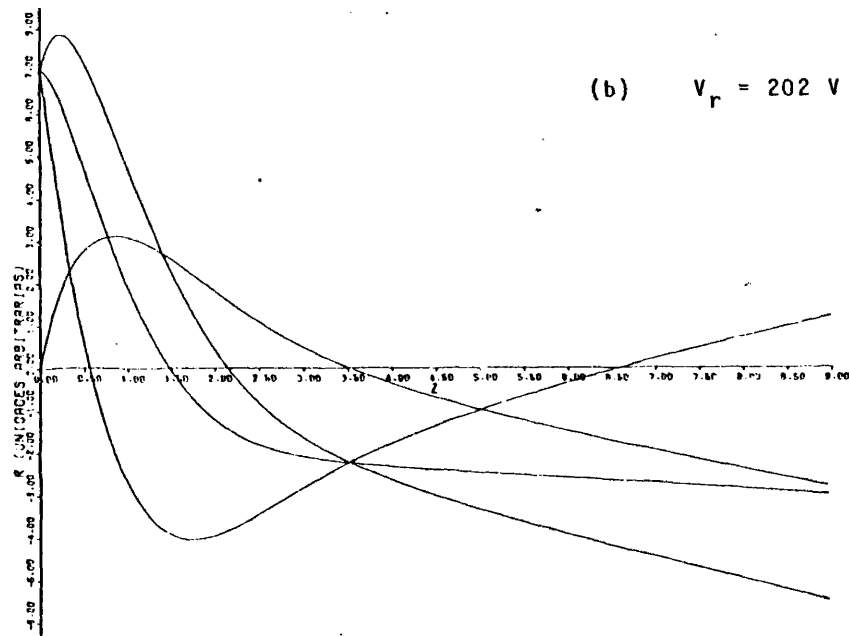


Figura IV.8.- Formación de imágenes reales en la fuente. Trazador CALCOMP.

ne poco interés práctico. Para $V_r = 196.6$ V el ión no es capaz de remontar el campo y es desviado hacia el repelidor.

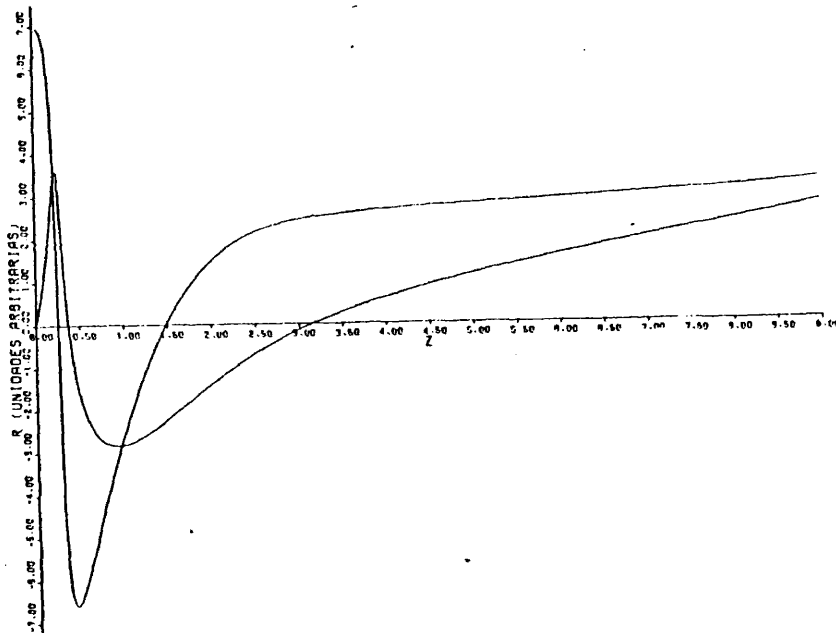


Figura IV.9.- Formación de la segunda imagen real, $v_h = 196.7$ V. Trazador CALCOMP.

La Figura IV.10 muestra la posición de la primera imagen real en función de V_r para un objeto situado en $z=0$. Puede verse que la variación es relativamente suave excepto en la zona próxima al valor de corte.

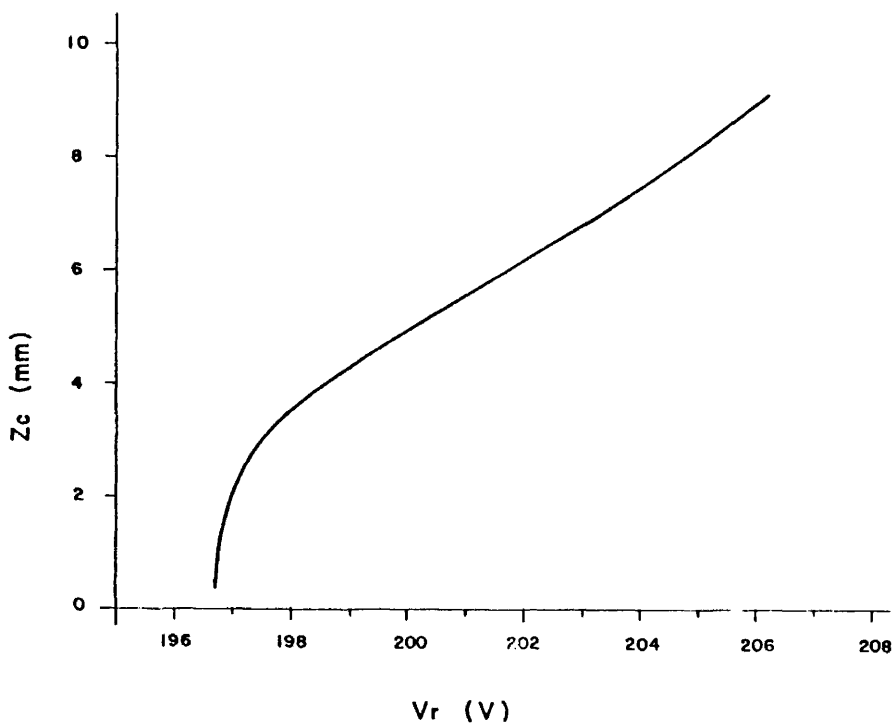


Figura IV.10.- Posición de la primera imagen real en función del voltaje repelidor.

Para propósitos prácticos interesa también el estudio de la formación de la imagen virtual, Figura IV.11, que es la que ve el sistema situado detrás de la fuente (espectrómetro, analizador de energía, etc.) por ello hemos realizado un estudio de la variación del aumento lateral de esta imagen en función de V_r , los resultados se muestran en la Figura IV.12.-

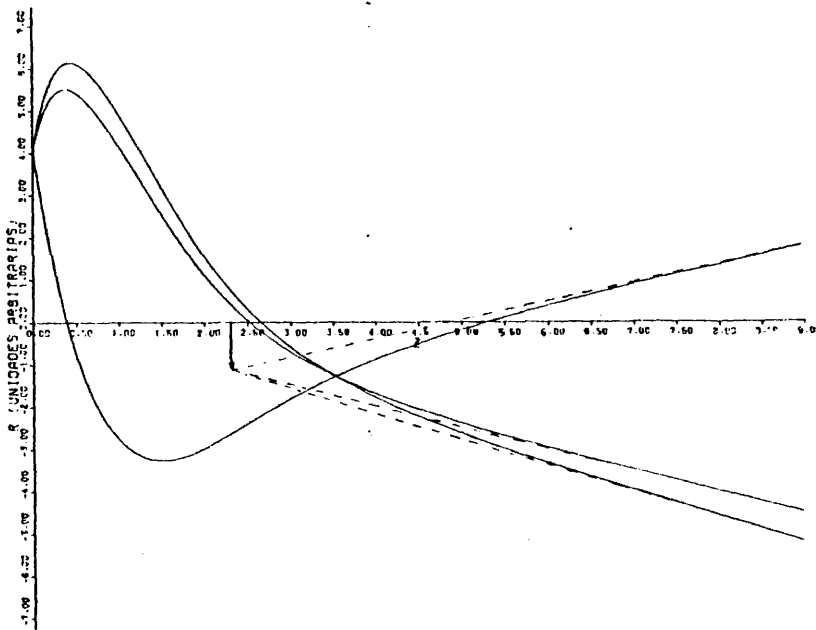


Figura IV.11.- Formación de la imagen virtual en la fuente de iones;
 $V_h = 198$. V, $M = -0.28$. Trazador CALCOMP.

En el análisis paraxial que hemos presentado se suponen los iones monoenergéticos y generados en una región de espesor infinitesimal. En una fuente real los iones pueden generarse con energías comprendidas entre cero y varios eV, ello se traduce en una pérdida de nitidez en la imagen; el mismo efecto produce el hecho de que los iones pueden estar situados inicialmente dentro de una zona de algunas décimas de milímetro de altura, ya que por lo general el haz de electrones

va a tener un grosor apreciable. Este segundo efecto es probablemente el más significativo influyendo también en la dispersión de energía del haz final, sobre todo para voltajes de repelidor grandes.

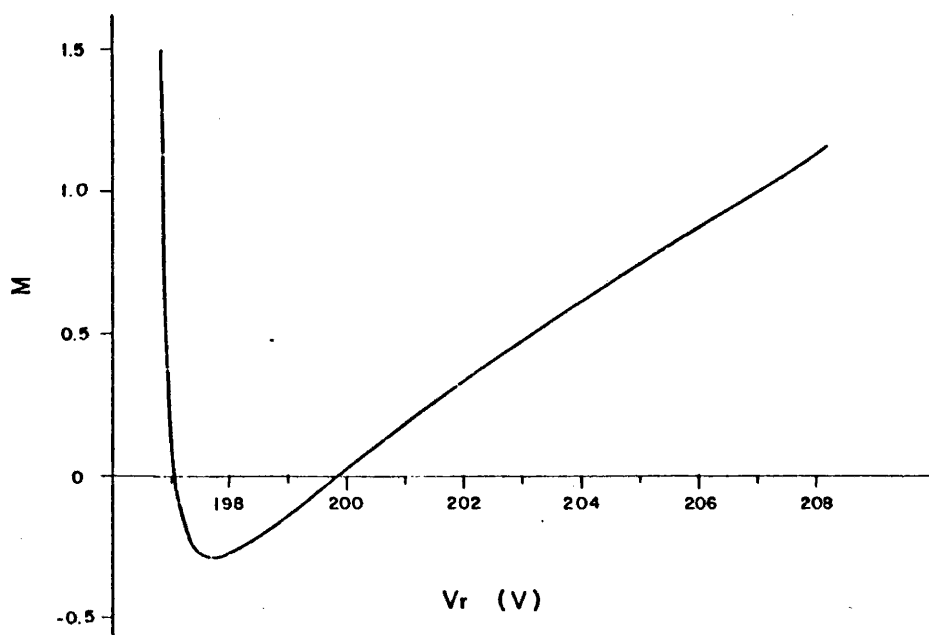


Figura IV.12.- Aumento lateral de la imagen virtual producida por la fuente de iones en función del voltaje repelidor.

IV.2.4.- Zona no Paraxial: Estudio de la Aberración Esférica.

En muchas aplicaciones prácticas el haz de iones está compuesto por partículas cuyas trayectorias discurren en puntos no situados en la zona paraxial. Es interesante analizar el comportamiento del sistema en otras regiones. Una forma usual de hacerlo -véase por ejemplo Wilson y Brever (1973), pág. 185 y siguientes- es representar la variación de la pendiente ρ' a la salida del sistema frente a la posición inicial ρ para diversas trayectorias cuya pendiente inicial es nula. Si la fuente estuviera libre de aberraciones la gráfica sería una línea recta; la desviación de la curva resultante con respecto a ella es una medida de la magnitud de la aberración esférica. Realmente, en este efecto se incluye también una contribución de tipo cromático debido a que las posiciones radiales no son equipotenciales, contribución que en nuestro caso a diferencia de lo que ocurre en una lente simple, es imposible separar. Hemos comprobado sin embargo, estudiando trayectorias que comienzan en una equipotencial, que este efecto es poco significativo.

En la Figura IV.13 se han representado los valores obtenidos.

En función de los resultados de esta gráfica puede estimarse el valor del coeficiente de aberración esférica para puntos no axiales. Puesto que los rayos marginales cortan al eje en una posición anterior a la de un rayo paraxial (Figura IV.14), podemos expresar esta diferencia Δf en la forma $\Delta f = C_s \rho'^2 = C_s \theta^2$ para valores de θ peque

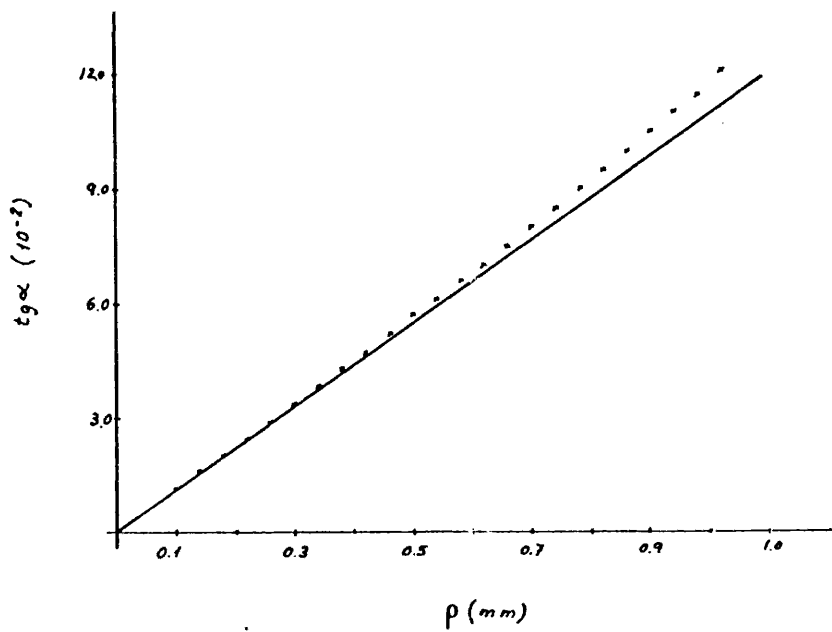


Figura IV.13.- Variación de la pendiente del haz de salida en función de la distancia inicial al eje; $z_{in} = 0$, $\rho'_{in} = 0$.

ños. Por otro lado para el rayo marginal se tiene $\rho = (f_p - \Delta f)\rho'$ mientras que para el rayo gaussiano correspondiente $\rho_0 = f_p \rho'$, de forma que el coeficiente de aberración esférica es

$$C_s = \frac{\rho_0 - \rho}{\rho^3}$$

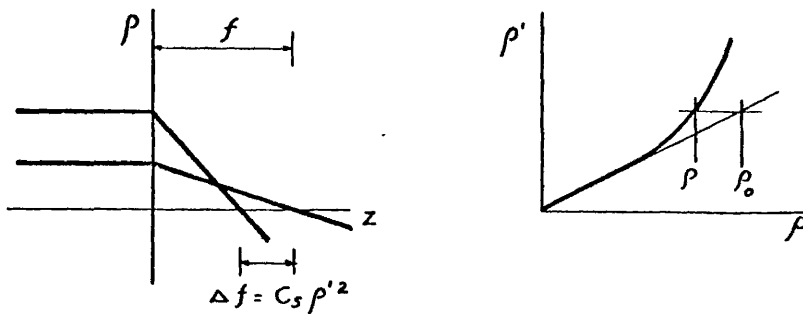


Figura IV.14.- Determinación del coeficiente de aberración esférica.

Así, tomando en la Figura IV.13 $\rho = 0.9$ mm resulta ser $\rho_0 = 0.927$ mm, $\rho' = 0.105$ y para el coeficiente de aberración esférica se obtiene el valor $C_s = 2.4$ cm; en otros puntos de la gráfica se obtienen valores similares.

IV.2.5.- Corriente Iónica. Curva $I_{ci} - V_r$

Es conocida la influencia que el campo creado por el repelidor tiene sobre la corriente iónica producida por la fuente. Experimentalmente se obtiene que para un determinado valor de V_r la corriente de iones es máxima; resulta pues de interés poner a punto un estudio que permita, mediante simulación numérica, predecir con cierta aproximación donde se encuentra este máximo. El proceso de cálculo está di-

rectamente relacionado con los conceptos de emitancia y aceptancia que hemos mencionado anteriormente. Nosotros en concreto hemos supuesto - la existencia de un límite físico fuera del sistema (una abertura por ejemplo) que solo permite el paso de los iones que a la salida de la fuente tengan unos valores de ρ y ρ' tales que al prolongar las trayectorias en la zona exterior de campo nulo, queden dentro de la abertura; ello se traduce para cada punto inicial de las mismas, en que - sólo habrá ciertas direcciones de salida que contribuyan a la corriente recogida. Esta situación puede representarse por una variable angular β , de tal manera que en una posición inicial dada ρ_{in} las trayectorias campo ángulo de salida esté incluido en β pasan a través de la abertura; la variable complementaria $\alpha = 2\pi - \beta$ incluye las direcciones de salida de los iones que no son recogidos, Figura IV.15.

Vamos a describir el esquema seguido en la elaboración del programa para el cálculo de la corriente. Básicamente hemos partido - de una serie de supuestos para los que se obtienen unos resultados y posteriormente se estudia la influencia que sobre ellos tiene variar algunos de los parámetros. Así, el punto de partida es definir con - precisión la zona en que se pueden generar los iones por colisión con el haz electrónico; para ello hemos utilizado los cálculos del apartado IV.2.2, lo que implica un desplazamiento aproximadamente lineal con V_p de esta región hacia el repeledor. Puesto que la zona tiene una - cierta anchura en la dirección del eje de la fuente se han tomado cuatro líneas radiales representativas, simétricas respecto a la línea - media del haz de electrones; las dos líneas interiores están separadas

por un intervalo $\Delta z = 0,15$ mm y las dos exteriores por un $\Delta z = 0,85$ mm. En cada una de estas líneas y a intervalos $\Delta \rho = 0.07$ mm se sitúa la posición inicial de los iones. Para incluir el efecto de la agitación térmica hay que hacer un barrido angular en la dirección de la velocidad para cada una de estas posiciones.

Una vez fijadas las condiciones iniciales procedemos al cálculo de trayectorias. Para ello hemos utilizado el método de la fuerza promediada en la primera etapa y el de diferencia centrales en las restantes. Se ha hecho un estudio para determinar la extensión de la zona de tercer orden (ya vimos que la de primer orden llega hasta 0.1 mm) concluyendo que es aplicable con un error inferior al 1% para puntos situados como máximo a 0.7 mm del eje; en las posiciones más alejadas se usa el cálculo directo.

Para estimar la corriente total que llega al colector hay que sumar todas las contribuciones teniendo en cuenta la simetría de revolución; así, al calcular el volumen engendrado por los contornos de la Figura IV.15 al girar alrededor del eje de la fuente se obtienen aportaciones proporcionales al factor $\beta \rho_{in}$. Sin embargo hay que notar que con este proceso únicamente se cuentan los iones cuyas trayectorias transcurren en planos de simetría. Una forma aproximada de incluir otras aportaciones, que nosotros hemos utilizado, es suponer que no entran aquellas trayectorias comprendidas en el ángulo sólido definido por una superficie esférica centrada en cada posición radial y por el ángulo plano α . En este caso la contribución de cada punto -

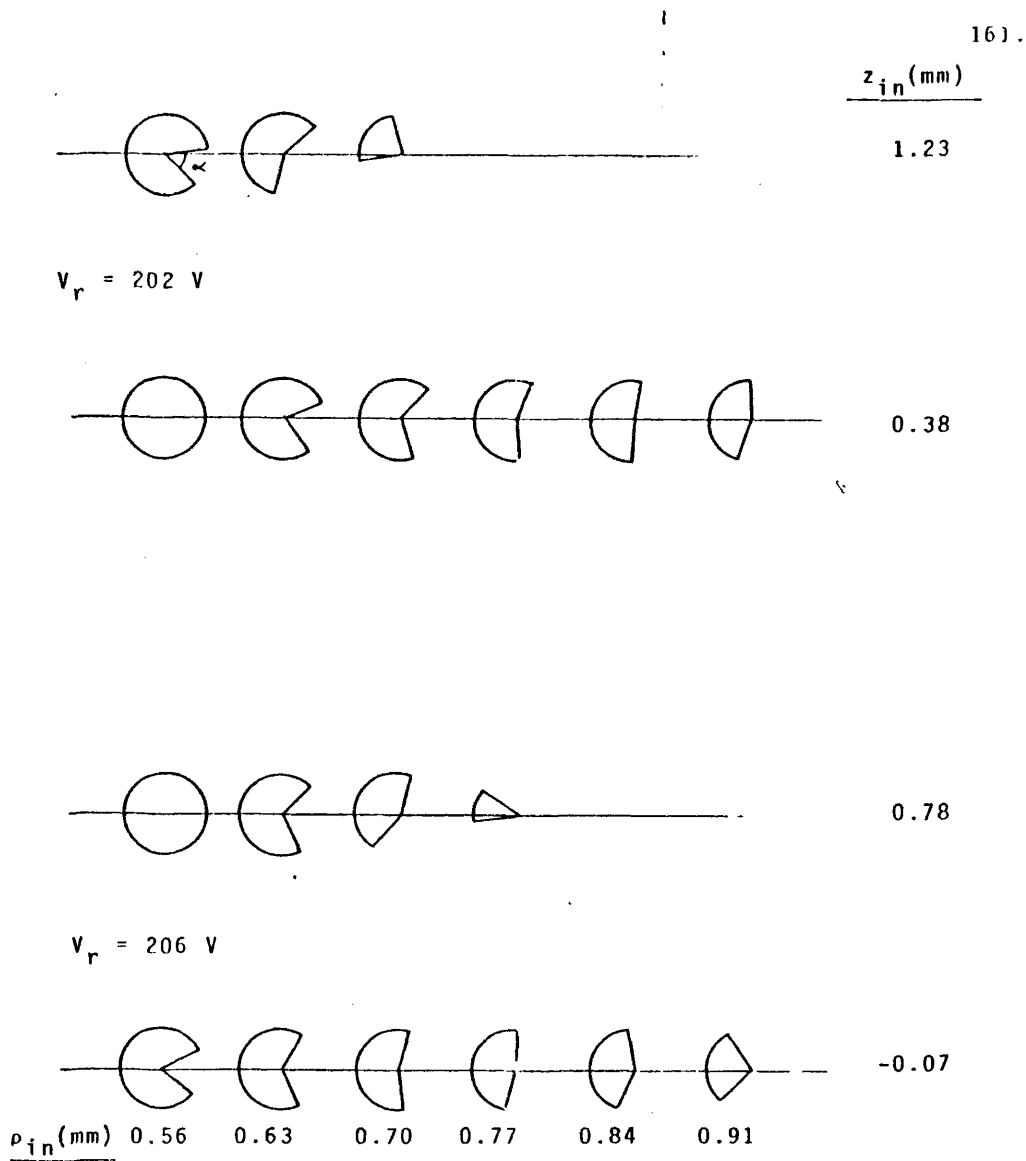


Figura IV.15.- Diagrama para el cálculo de la corriente iónica. Las trayectorias cuyo ángulo de salida queda fuera de α son recogidas por el colector de iones situado inmediatamente debajo de un diafragma de 5.5 mm de radio. El conjunto se encuentra a 6 cm de la salida de la fuente.

del diagrama es proporcional al factor $(1 - \cos(\alpha/2))\rho_{in}$.

Aunque hay muchos parámetros que pueden modificar los resultados particulares de la fuente presenta un comportamiento general - que podemos resumir en la forma siguiente:

a) Los iones generados en la zona paraxial y en la de tercer orden más próxima al eje son todos recogidos. A partir de cierta distancia algunos de los iones cuyo ángulo de salida es más desfavorable no entran. El valor de α aumenta con ρ_{in} , ésto permite minimizar el tiempo de computación.

b) De las cuatro líneas representativas de la región de ionización, la más próxima a la abertura de salida es la que da una contribución menor; en general aumenta el número de iones recogidos en las siguientes líneas, si bien para algunos valores de V_p la contribución de las dos líneas intermedias es prácticamente la misma.

En la Figura IV.15 se muestran los diagramas que ilustran este comportamiento para dos valores del potencial repeledor; es de notar la diferencia, para un mismo valor de V_p , entre las dos líneas representativas.

La Figura IV.16 muestra como varía la corriente recogida en función del potencial repeledor. Se ha supuesto que la temperatura del gas es de 300°K y la región de ionización se extiende hasta 0.91 mm

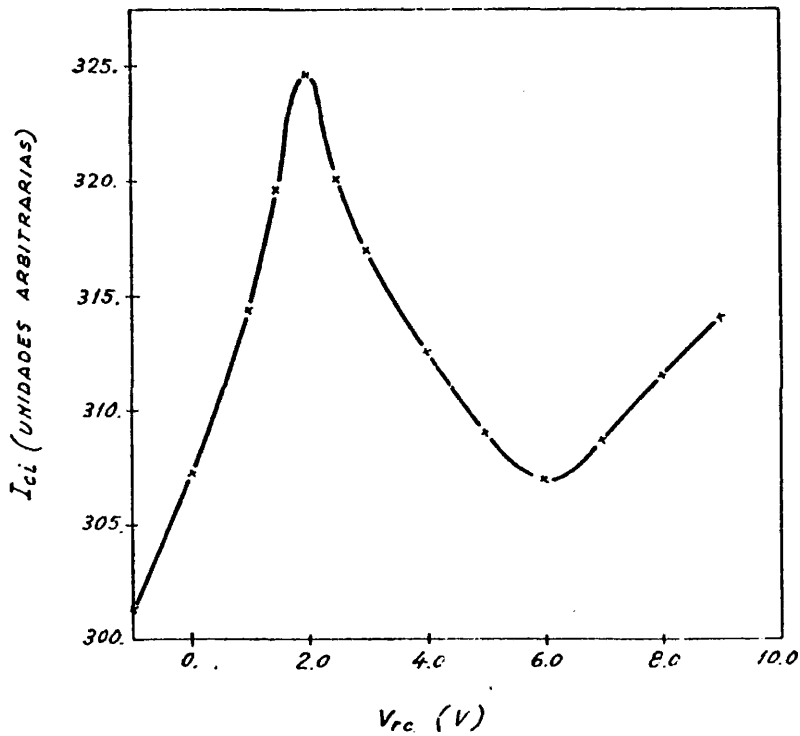


Figura IV.16.- Corriente de iones recogida en función de la ddp entre la cámara y el repelidor. Módulo de la velocidad inicial 353.5 m s^{-1} .

de distancia al eje. La corriente alcanza un valor máximo en $V_r = 202 \text{ V}$ y un mínimo de $V_r = 206 \text{ V}$ siendo el cociente de ambos igual a 1.06.

Hemos hecho un estudio modificando diversos parámetros de -

la simulación que pueden influir en esta curva, presentaremos una discusión de aquellos que nos parecen más significativos.

Velocidad térmica inicial.- Es probable que en una situación tan dinámica como es el proceso de formación y extracción de iones no exista un equilibrio térmico y los iones pueden tener una distribución de velocidades arbitraria. Para estudiar este efecto se han repetido los cálculos anteriores suponiendo una velocidad inicial de 408 m s^{-1} lo que equivale a una temperatura de 400 K; hemos analizado una temperatura mayor para tratar de tener en cuenta el hecho de que el filamento emisor de electrones se encuentra próximo a la cámara de ionización y elevará apreciablemente la temperatura de las paredes. En la Figura IV.17 se representan los valores obtenidos. Puede verse que la corriente total es menor que en el caso anterior pero la forma de la curva y el cociente entre máximo y mínimo se modifican relativamente poco. El valor de α para ρ_{jn} intermedias es bastante mayor que para $T = 300 \text{ K}$ pero esta disminución de la corriente recogida es parcialmente compensada por un valor más pequeño de α en las posiciones radiales externas.

Puntos representativos de la región de ionización.- El programa de simulación desarrollado puede representar solo en forma aproximada el comportamiento real de la fuente ya que se hace precisa una discretización de la región en estudio a fin de que el tiempo de computación no resulte excesivo. Hemos realizado pues algunas modificaciones en este sentido. Cabe destacar la influencia de una elección -

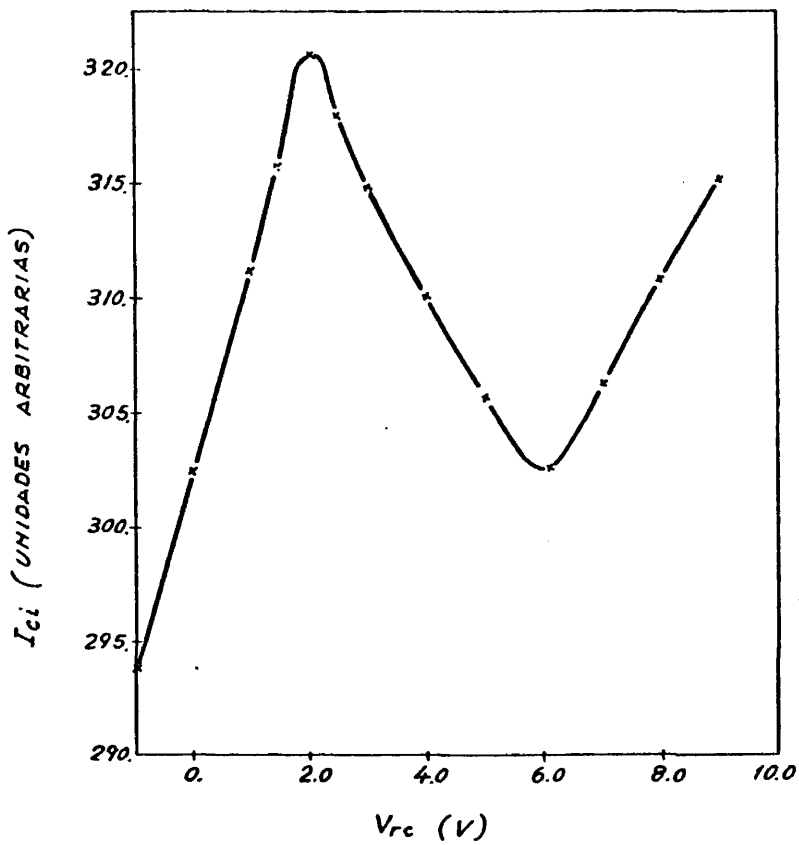


Figura IV.17.- Corriente de iones recogida en función de la ddp entre la cámara y el repelidor. Módulo de la velocidad inicial 408.0 m s^{-1} .

adecuada de la región de ionización, si la anchura se supone menor que la utilizada en la Figura IV.16 al máximo tiende a desplazarse hacia valores de V_p crecientes; en la práctica la anchura de esta zona depen

derá de la forma del haz de electrones, el valor que hemos tomado de 1.82 mm incluye todas las aportaciones apreciables como puede verse en los diagramas y será aplicable a regiones de esta anchura o mayores.

Para analizar si la discretización es correcta hemos visto la variación de los resultados al considerar más o menos líneas representativas y mayor o menor densidad de puntos sobre cada línea. Si se consideran dos líneas solamente -las internas- la forma de la curva no varía y el cociente I_{\max} / I_{\min} aumenta ligeramente. En cambio si tomamos doble número de puntos por línea, ésto es a intervalos de 0.035 mm, el cociente aumenta a 1.1. Concluimos pues que el intervalo $\Delta\rho$ no es suficientemente pequeño y nos lleva a resultados por defecto en el valor I_{\max} / I_{\min} . El utilizar un mayor número de puntos sin embargo, supondría un tiempo de computación excesivamente largo para producir toda la curva.

IV.3.- ESTUDIO EXPERIMENTAL DE UNA FUENTE DE IONES NIER

El estudio teórico que hemos realizado es en principio aplicable a una fuente que, dentro de ciertas limitaciones, nosotros estamos en condiciones de caracterizar en el laboratorio. El sistema diseñado es básicamente el que se representa en la Figura IV.5 si bien todo ello va incorporado a una configuración más compleja en la que se incluye el colector de iones y todo el equipo necesario para el funcionamiento. En los apartados siguientes presentaremos el diseño y montaje llevado a cabo así como las medidas efectuadas para analizar los aspectos más interesantes del sistema. Concluiremos con una discusión de los resultados y su comparación con los obtenidos mediante la simulación numérica.

IV.3.1.- Diseño y Montaje Experimental

En la Figura IV.18 se muestran los componentes básicos del sistema diseñado; la fuente se sujeta mediante dos vástagos a la parte superior de una cámara de vacío (contorno en forma de capa de la Figura IV.5), la parte inferior de esta cámara está conectada mediante un tubo de 1 cm de diámetro y 2.5 cm de altura al sistema de vacío de forma que la fuente está aislada del resto de los posibles componentes de la experiencia (blanco a bombardear, analizador energético, etc.), ello se hace porque en general la presión en la región de la fuente va a ser bastante más alta que la que se precisa en la región de bombardeo. La placa de salida se apoya sobre la base de la cámara

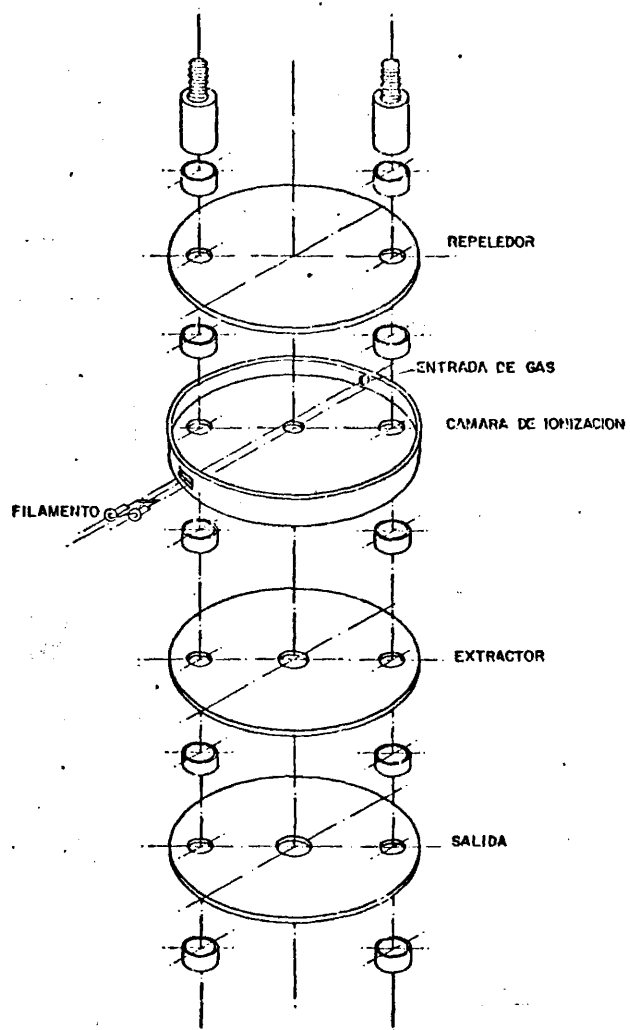


Figura IV.18.- Fuente de Iones Nier.

de vacío, por ello en el esquema no se representan como elementos diferenciados.

Todos los electrodos se han construido en acero inoxidable de 0,5 mm de espesor, para aislarlos se emplean pasadores y arandelas de esteatita. Las dimensiones de las aberturas y la separación entre placas son las dadas en la Figura IV.5. El filamento emisor de electrones es una cinta de renio de 0.8 mm de ancho, 10 mm de largo y 0.03 mm de espesor, se prefiere este metal al tungsteno por ser de vida más larga. Los electrones entran en la cámara de ionización a través de una abertura de $5 \times 1.5 \text{ mm}^2$ situada en la pared lateral a 1 mm de la base.

En las medidas se ha utilizado gas argon que se lleva directamente a la cámara de ionización por medio de un tubo con dos ramas, una de ellas comunicada con la válvula de entrada de gas y la otra con un manómetro.

A la salida de la fuente se encuentra el sistema de análisis en energía y detección de los iones, formado por una placa retardadora con una rejilla circular de 1.1 cm de diámetro y una placa colectora conectada a un electrómetro; esta última se encuentra aislada de forma que solo llegan a ella los iones que pasan a través de la rejilla, para ello se ha apantallado con una tela metálica dispuesta como se muestra en la Figura IV.19. En esta figura se incluye también el montaje eléctrico utilizado en las medidas.

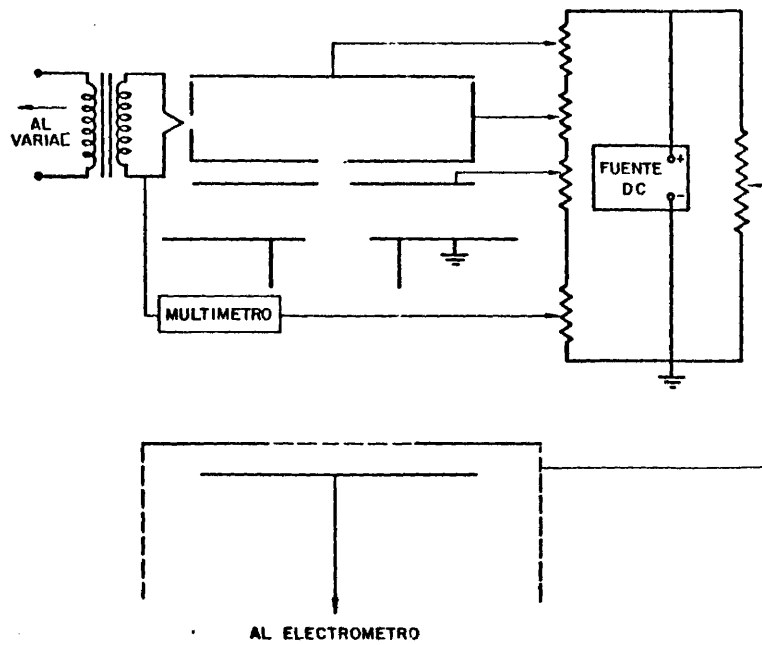


Figura IV.19.- Montaje experimental de la fuente de iones.

Mediante una red de polarización se conectan las placas a los potenciales adecuados; la nomenclatura y los valores que se han dado a los mismos es la siguiente:

Potencial repeledor	V_r -----	variable
Potencial cámara ionización	V_c -----	200. V
Potencial acelerador	V_a -----	130. V
Potencial filamento	V_f -----	40. V
Potencial retardador	V_{rt} -----	variable

El resto de los electrodos del sistema se encuentran conectados a tierra. Señalaremos finalmente que la calefacción del filamento se realiza mediante un autotransformador cuya salida varía entre -cero y 220. V y está conectado a un segundo transformador que suministra la intensidad necesaria para alimentarlo.

IV.3.2.- Medida Experimental de la Curva $I_{ci} - V_r$

El montaje efectuado para medir la variación de la corriente de iones con V_r es el que se da en la Figura IV.19; la rejilla se encuentra conectada a tierra de forma que en este caso actúa como una abertura limitadora de la corriente que llega al colector. Partiendo de una presión inicial de 0.5 micrones de Hg se introduce argon en la cámara hasta un valor de 3 μ . El trabajar con este orden de valores de la presión es una de las limitaciones de nuestro sistema ya que usualmente estos equipos trabajan con una presión diez veces por debajo como máximo, con el fin de evitar posibles descargas si se trabaja a altas energías y de asegurar que el recorrido libre medio es lo suficientemente grande como para que los iones no colisionen con el gas, lo cual provocaría su desenfoque.

Una vez polarizados los electrodos de la fuente, se calienta el filamento hasta tener una corriente de emisión de $100 \mu\text{A}$. Cabe optimizar el valor de la corriente de iones variando la ddp entre el filamento y la cámara; nosotros hemos obtenido un valor máximo para una ddp $V_{cf} = 160 \text{ V}$. Examinando la curva de la sección eficaz de ionización para el argon en la Figura IV.2 vemos que el valor óptimo correspondería a $V_{cf} = 82 \text{ V}$, creemos que influye también el hecho de que la región de ionización se desplaza con el valor de V_{cf} y el máximo experimental resulta del compromiso entre los dos factores.

En la Figura IV.20 se representan los valores de la corriente recogida en el colector de iones en función del potencial repelidor. Señalaremos algunas dificultades encontradas al efectuar esta experiencia. Dos de los parámetros que influyen mucho en el valor de I_{ci} son la corriente de electrones y la presión del gas, por ello deben permanecer constantes para no falsear las medidas; al no disponer de ningún mecanismo de control resulta difícil lograrlo y ello se traduce en una mayor dificultad y lentitud en las medidas. Otro problema importante es la alineación de la rejilla retardadora y el colector con el resto del sistema, esta parte se puede mover desde fuera y ello nos permitió idear una forma de conseguir la mejor alineación posible; experimentalmente se comprueba que el valor de I_{ci} es muy sensible a las variaciones de posición sobre todo cuando V_p es grande; de hecho la corriente recogida es máxima para la posición más correcta y esta ha sido siempre la optimización que hemos realizado antes de comenzar las medidas.

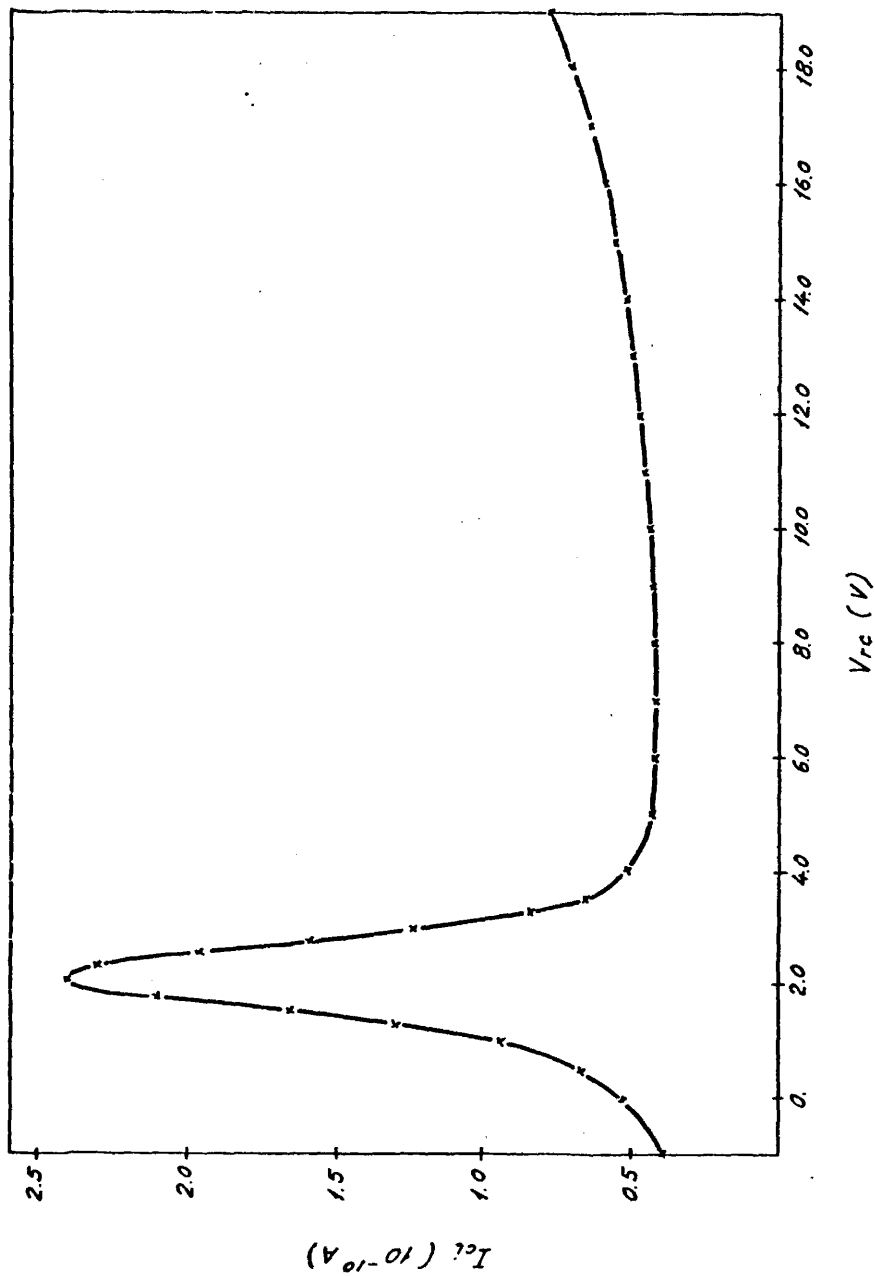


Figura IV.20.- Variación de la corriente de iones con el potencial repelidor. Corriente de emisión de filamento $100 \mu\text{A}$; presión 3μ de Hg.

Un factor que en el montaje utilizado puede introducir error en la lectura de I_{ci} es el de la emisión secundaria de electrones provocada por la incidencia del haz en el colector; generalmente se evita este problema con el uso de cajas de Faraday; sin embargo en el rango de energías empleado, el efecto es poco importante -véase por ejemplo Carter y Colligon (1968), pág. 38 y siguientes-.

Se han hecho diversas medidas modificando la corriente de emisión del filamento I_f , y la presión de argón; la forma de las curvas no difiere mucho de la presentada en la Figura IV.20, aumentando la corriente recogida para un mayor valor de I_f o de la presión.

IV.3.3.- Distribución en Energía. Analizador de Campo Retardador.

Una solución frecuentemente adoptada para resolver el problema de medir la distribución en energías de un haz de iones, consiste en el uso de un campo electrostático retardador, en el cual la energía de las partículas se infiere de la altura de la barrera de potencial que son capaces de superar.

Existen diversos tipos de analizadores basados en este principio; Simpson (1961) realiza un estudio crítico de los mismos. El más simple es el basado en una geometría de placas paralelas, Figura IV.19: las partículas de carga q entran en el sistema con una energía cinética $E_c = qV$, sufren el efecto retardador del campo electrostático axial y alcanzan la placa colectora si la energía cinética inicial es suficiente. Así, para un haz monoenergético, la curva $I_{ci} - V_{rt}$ será

un escalón con el corte en $V_{rt} = V$.

Hay que hacer notar sin embargo que la altura de la barrera de potencial no es una medida de la energía total, sino de la cantidad de movimiento en la dirección normal a las curvas equipotenciales. La diferencia entre "energía total" y "energía normal" marca el límite de resolución alcanzable -entendiendo aquí como falta de resolución del analizador el hecho de que no mida realmente la energía total-.

Suponiendo que el haz de partículas tiene un radio finito r_h , y una apertura angular finita α , Simpson (1961) obtiene la resolución límite, para α pequeño,

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{r_h^2}{16d^2} \quad (\text{IV.10})$$

siendo d la distancia entre placas y ΔE la diferencia entre la energía total y la energía "paralela" al movimiento de los iones.

Si tenemos una fuente puntual de partículas situada a una distancia p del orificio de entrada de radio r_h , se obtiene para la resolución el valor

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{r_h^2}{16d^2} \frac{(p+4d)^2}{p^2} \quad (\text{IV.11})$$

El uso de una malla o rejilla en lugar de un simple orificio, permite analizar haces cuyos diámetros son grandes frente al radio efectivo r_h (semiespaciado de la rejilla), sin pérdida de resolución. Este es el dispositivo que hemos diseñado para nuestra experien

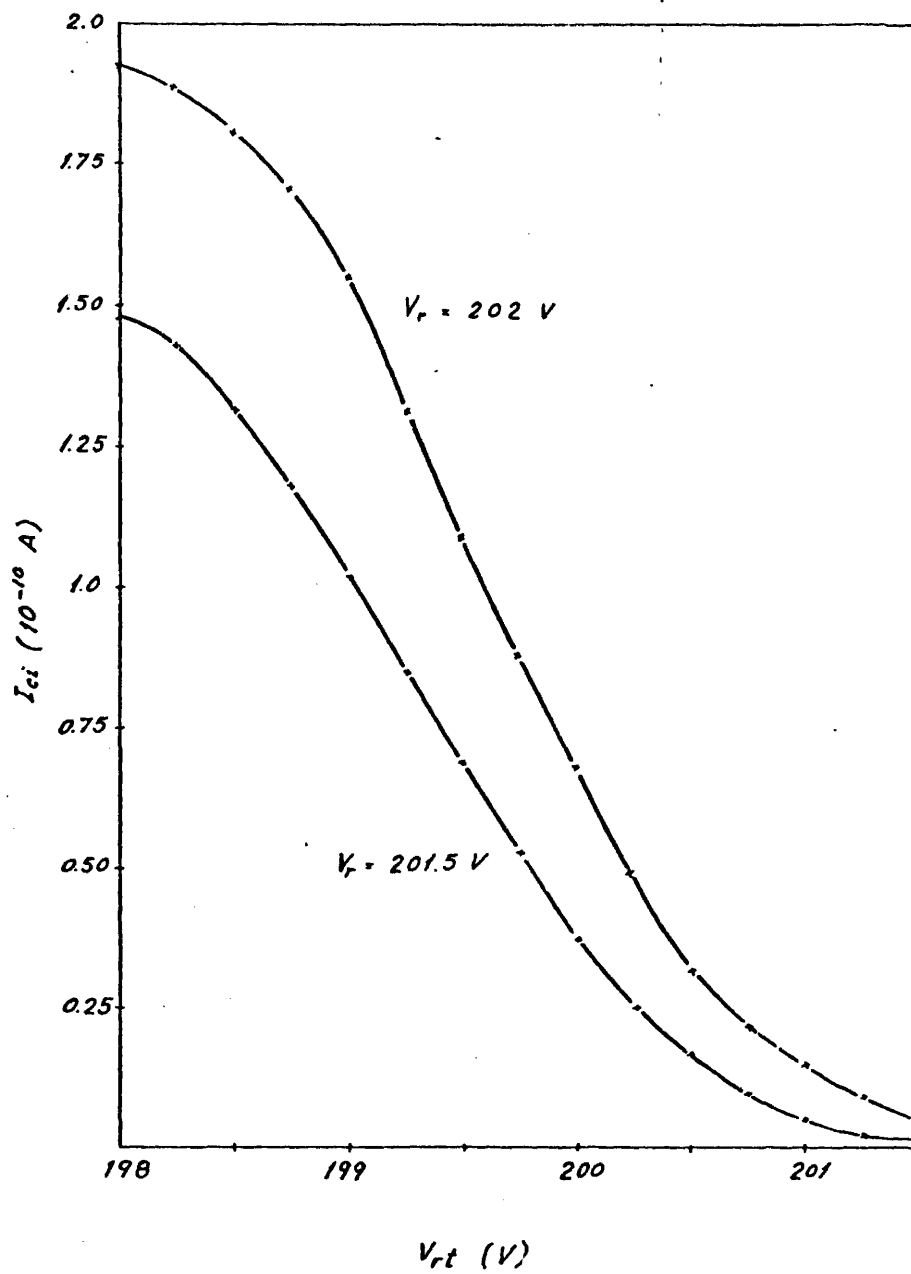


Figura IV.21.- Analisis en energia.

cia. Así, para los valores $r_h = 0.2$ mm, $p = 60$ mm, $d = 3$ mm se obtiene de (IV.11) una resolución $\Delta E/E \approx 4 \times 10^{-4}$.

En la Figura IV.21 se representan dos curvas de la variación de la corriente de iones en función del potencial retardador siendo el parámetro V_r . Del análisis de las mismas podemos concluir que la dispersión total en energía es del orden de 3 eV; sin embargo y teniendo en cuenta la resolución obtenida, estimamos que un gran porcentaje de la corriente del haz se encuentra en un intervalo de energía de unos 2 eV.

El hecho de disminuir V_r no modifica favorablemente la dispersión, se puede justificar esto teniendo en cuenta que al desplazarse la región de ionización hacia la base es la penetración del potencial extractor la que impone la distribución en esa zona, más que la ddp entre cámara y repeledor. Para potenciales V_r más altos sin embargo, éste será el factor predominante:

IV.3.4.- Discusión de los Resultados. Comparación con la Simulación Numérica.

Centraremos la discusión en las dos curvas experimentales que hemos presentado en los apartados anteriores.

Con respecto a las gráficas $I_{ci} - V_r$ cabe señalar que cualitativamente que las curvas teóricas, Figuras IV.16 y IV.17, y la expe

rimental, Figura IV.20, presentan un comportamiento muy semejante $I_{\text{cim}\acute{\text{a}}\text{x}}/I_{\text{cim}\acute{\text{i}}\text{n}}$ y en la parte correspondiente a valores de V_r grandes.

En lo que se refiere al análisis en energía del haz, hemos hecho un estudio para el punto $V_r = 202$ V. Se puede estimar la distribución en energía del haz ya que tenemos fijada la región de ionización y es inmediato calcular el potencial en la misma. Suponiendo que las líneas que limitan la zona se encuentran en $z_1 = 0.38$ mm y $z_2 = 1.23$ mm, la dispersión viene dada por $\Delta V = (200.4 - 198.2)$ V = 2.2V; a este valor hay que añadir la provocada por la energía térmica inicial de los iones. La curva experimental de la Figura IV.21 está en buen acuerdo con las predicciones teóricas tanto en el rango de energía del haz como en su dispersión, si bien para ésta se tiene un valor más alto.

En ambos tipos de experiencias se encuentran presentes diversos factores que pueden justificar las discrepancias encontradas al compararlas con los resultados numéricos. A nuestro juicio cabe destacar las siguientes:

Inestabilidad de los parámetros. - Ya hemos indicado anteriormente que una de las principales dificultades al realizar las medidas es la fluctuación de dos de los parámetros, esto es, de la presión del gas y de la corriente de emisión electrónica. Para subsanar en parte esta deficiencia se han repetido varias veces las medidas.

Las fluctuaciones de otros parámetros, tales como la tensión de polarización de los electrodos, deben ser poco importantes ya que se ha utilizado una fuente de tensión altamente estabilizada.

Presión del gas.- Por limitaciones del sistema nos hemos visto obligados a trabajar en un rango de presiones que es quizá demasiado elevado para este tipo de fuente. Hemos hecho un cálculo aproximado del recorrido libre medio de electrones y de las moléculas de argón con el fin de comprobar si el enfoque va a estar afectado o no por las colisiones. Así, en la ecuación (IV.3) hemos aplicado un modelo de esferas duras para determinar c : tomando el radio del argón igual a 1.91\AA y suponiendo $T = 300\text{ K}$ resulta $\lambda_e = 9\text{ cm}$ y $\lambda_{\text{gas}} = \lambda_e/4\sqrt{2} \approx 1.6\text{ cm}$. Puesto que los iones en esta región recorren una distancia inferior a 3 mm y el resto transcurre en una zona de presiones progresivamente más bajas, cabe esperar que el efecto de desenfoque debido a las colisiones no sea muy importante.

Aberraciones mecánicas.- Según hemos visto en el capítulo II para evitar este tipo de defectos se requiere en primer lugar una perfecta mecanización de los electrodos, y por otra un montaje cuidadoso de los mismos de forma que se tenga una reproducción correcta del diseño. Por falta de material que todo ello requiere, no nos ha sido posible minimizar el efecto de estas aberraciones y consideramos que son el factor más influyente en las diferencias con los resultados que se obtuvieran para una fuente ideal. Todo ello debe afectar principalmente a las trayectorias no paraxiales ya que por transcurrir más próximas a los bor

des de los electrodos son más sensibles a la falta de simetría de los campos y al subsiguiente desenfoque.

Así pues, refiriéndonos a la curva de la Figura IV.20 ($I_{ci} - V_p$), el efecto de aberración mecánica debe hacerse particularmente notable en la región de V_p grandes ya que los campos son más intensos. Nosotros hemos hecho una comprobación desplazando la rejilla y el colector respecto del eje del sistema; la curva que resulta en este caso es en el primer tramo similar a la citada -si bien la corriente de colector es más pequeña- alcanzando un máximo en $V_p = 202$ V, después la corriente baja hasta un valor mínimo en $V_p = 205.5$ V, si seguimos aumentando V_p la corriente no aumenta ya su valor lo que viene a corroborar nuestra afirmación de la importancia de un correcto montaje y -alineamiento del sistema. Concluimos pues que las diferencias entre I_{cimax} e I_{cimin} deben ser menores que las obtenidas en nuestra fuente. Esto nos lleva por otra parte a una mejor concordancia con el comportamiento previsto mediante simulación numérica.

La Figura IV.21 de análisis retardador también está afectada por la aberración mecánica; a ello hay que añadir el que probablemente se generan iones fuera de los límites previstos en la simulación ya que la región externa del haz de electrones es más influenciada por la abertura de entrada a la cámara de ionización, efecto que nosotros no hemos considerado.

C O N C L U S I O N E S

La investigación reflejada en esta memoria se ha referido a métodos de análisis y diseño de sistemas en óptica de partículas cargadas; en concreto se ha centrado en:

- a) Estudio de lentes electrostáticas.
- b) Estudio y diseño de una fuente de iones.

Aportaciones originales en este trabajo han sido: i) el desarrollo de expresiones analíticas para los coeficientes de potencial en el método de Densidades de Carga, basándonos en su significado físico. Esta aportación aumenta notablemente la potencia del método como se muestra por el estudio de varias lentes. ii) La consideración de las trayectorias electrónicas en la definición de la región de ionización como base para la descripción de un modelo de fuente por impacto electrónica. iii) La fuente diseñada concuerda en su comportamiento cualitativamente con la simulación numérica: el máximo de corriente iónica se obtiene muy exactamente para el valor del potencial repelidor previsto y la forma de la curva es semejante, si bien la separación entre máximo y mínimo es bastante mayor. Atribuimos esta discrepancia básicamente a las aberraciones mecánicas del sistema. El estudio experimental de la distribución y dispersión en energía del haz de iones, concuerda también con la previsión teórica.

A continuación resumimos las conclusiones fundamentales del trabajo, expuestas por capítulos de esta memoria:

I.

Planteamos la necesidad de elegir un método adecuado para la resolución del problema electrostático en configuraciones con simetría rotacional, con el fin de abordar posteriormente su caracterización óptica. Proponemos la utilización del Método de Densidades de Carga ya que se trata de una técnica muy potente y con una gran flexibilidad en lo que se refiere a la simulación de cualquier geometría. El mayor inconveniente del mismo está en que por lo general la obtención de los coeficientes de potencial requiere el uso de integración numérica. Para evitarlo proponemos la generación de nuestros sistemas por combinación de dos tipos de subelectrodos: coronas circulares y superficies laterales cilíndricas. Para ambos tipos hemos puesto a punto los cálculos necesarios en la obtención de los coeficientes de potencial por expresiones analíticas.

Como comprobación estudiamos dos problemas de solución conocida comparando los resultados analíticos y numéricos. Mostramos las ventajas de efectuar una división no uniforme de la geometría y concluimos que la aproximación obtenida es muy buena, especialmente en puntos no situados sobre los electrodos y cerca de los bordes; notemos que éste será el caso en la mayoría de los cálculos posteriores.

Analizamos la posible sustitución de la distribución de car

ga superficial sobre los conductores por una distribución lineal equivalente. Se hace un estudio de la validez de la misma en función del tamaño relativo de las coronas o las cintas cilíndricas. Para no perder precisión parece necesario un número comparativamente mayor de subelectrodos, si bien para los coeficientes de potencial se tienen expresiones más simples.

II.

Después de presentar los parámetros característicos de la óptica paraxial, estudiamos los métodos puestos a punto para la integración de trayectorias, tanto en esta zona como en la de tercer orden. Obtenemos las fórmulas para el cálculo de las aberraciones esférica y cromática que, usualmente, son las que más van a limitar el buen comportamiento óptico de los sistemas. Finalmente examinamos las aberraciones mecánicas producidas por un montaje defectuoso de los mismos.

III.

El capítulo se dedica al estudio de la lente einzel de electrodos planos. En la primera parte realizamos una revisión crítica de las aproximaciones, tanto analíticas como numéricas, llevadas a cabo hasta hoy para la resolución del problema electrostático e integración de trayectorias en esta lente. En la segunda parte presentamos la forma en que se ha calculado el potencial por el método de Densidades de Carga propuesto. A la vista de los errores obtenidos en los puntos más críticos, cabe esperar una aproximación muy buena para el potencial en el eje de la lente, sobre todo teniendo en cuenta que las expresio

nes que intervienen en su cálculo son mucho más simples que las generales.

Utilizando las técnicas puestas a punto en el capítulo anterior obtenemos, para dos geometrías típicas, las curvas de variación de las distancias focal y focal media así como las de aberración esférica y cromática, en función del potencial del electrodo intermedio.

Al comparar nuestros resultados con los obtenidos por otros procedimientos numéricos se tiene una buena concordancia en la mayoría de los casos; las diferencias son justificables por el valor dado a la altura del cierre de la lente, que ha de ser lo suficientemente grande como para asegurar que las trayectorias comienzan y terminan siempre en regiones de campo nulo. En la comparación con datos experimentales también resultan diferencias pequeñas; para lentes cuyo electrodo central es relativamente grande resultan mayores discrepancias debido a que en estos casos influye bastante la curvatura del borde del diafragma central, que en la simulación se supone en forma de ángulo recto.

El capítulo concluye con el diseño de una lente einzel unipotencial con aberración cromática mínima y el análisis de las ventajas que tanto en ahorro de memoria como de tiempo de computación presenta el método propuesto en comparación con los otros estudiados.

IV.

El contenido del capítulo se centra fundamentalmente en el

estudio de una fuente de iones Nier. Tras revisar los aspectos básicos de diseño y funcionamiento de la misma y el estudio realizado para el caso de simetría planar, abordamos su análisis mediante un modelo de simulación numérica, basado en las mismas técnicas que empleamos en la lente.

En la zona paraxial vemos la formación de imágenes reales y virtuales, siendo el parámetro el potencial del repeledor. El comportamiento en la región no paraxial queda caracterizado por el coeficiente de aberración esférica definido para puntos objetos no axiales.

La curva que más interesa a nivel práctico es la de variación de la corriente de iones recogida en función del potencial repeledor V_r . Para simularla hemos elaborado un programa que calcula la corriente de iones que atraviesa un diafragma situado a la salida de la fuente, suponiendo unas condiciones iniciales de posición y velocidad para la partícula. Un estudio previo muestra que la región de ionización se desplaza hacia el electrodo repeledor a medida que el potencial del mismo se hace más positivo; la velocidad inicial puede suponerse igual a la de la molécula gaseosa antes de ser ionizada. La curva obtenida pasa por un máximo para una ddp de 2 V entre repeledor y cámara y por un mínimo para 6 V. Al asignar una velocidad térmica inicial mayor no se tienen variaciones significativas en la curva.

En un segundo apartado se muestra el diseño y montaje experimental realizados para la caracterización de la fuente de iones estudiada. La curva que resulta para la variación de la corriente iónica

en función de V_r es semejante a la obtenida por el modelo numérico. Coinciden, dentro de un margen de error fijado por la separación entre los puntos de la curva, las posiciones del máximo y mínimo si bien el cociente $I_{cim\acute{a}x}/I_{cim\acute{i}n}$ es bastante mayor en la curva experimental y, por otra parte, la corriente para valores de V_r más positivos es menor en ésta. Las aberraciones mecánicas producidas por una inevitable mecanización defectuosa de los electrodos y una imperfecta alineación de los mismos son probablemente las principales causas de r_0 y aparte las diferencias entre unos y otros resultados.

Se ha efectuado también un análisis de la distribución en energía del haz, utilizando un campo electrostático retardador; de las curvas puede concluirse que para $V_r = 202$ V, la energía de los iones se sitúa entre 198 y 201 V aproximadamente si bien la mayor parte de la corriente se encuentra en la región central de esta distribución. La concordancia con las previsiones teóricas es buena aunque hemos de considerar siempre las limitaciones de uno y otro estudio.

En resumen concluimos que para la fuente diseñada el punto de funcionamiento óptimo se encuentra en el entorno $V_r = 202$ V, obteniéndose un haz con una distribución en energía en el intervalo 198-201 V.

Consideramos que el estudio realizado puede constituir la base de nuevas investigaciones; en concreto las líneas que quedan abiertas y en las cuales pensamos proseguir nuestro trabajo son:

- Aplicación del Método de Densidades de Carga al estudio de diversos tipos de lentes. El mayor interés se centra en el diseño de lentes con aberraciones mínimas, lo que implicará el análisis de configuraciones asimétricas.

- En el aspecto teórico del estudio de fuentes de iones cabe analizar la influencia de algunos parámetros (grosor de la base de la cámara de ionización, etc.) en las características del haz de iones. Puesta a punto de los cálculos que permitan incluir el efecto de carga espacial, lo que permitirá ampliar el rango de aplicación del modelo a fuentes con mayor intensidad iónica. Estudio teórico y realización experimental de una fuente de más alta energía para su aplicación en procesos de decapado.

APENDICE

CALCULO NUMERICO DE LAS INTEGRALES ELIPTICAS

En nuestro estudio han aparecido con frecuencia expresiones en las que intervienen este tipo de integrales; vamos a estudiarlas brevemente y a indicar el procedimiento por el que se han evaluado. La expresión más general, en la forma trigonométrica, de estas integrales es

$$E11(\phi, k) = \int_0^{\phi} \frac{1}{(1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{1/2}} d\theta \quad (A.1)$$

$$E12(\phi, k, c, d) = \int_0^{\phi} \frac{c+(d-c)\operatorname{sen}^2 \theta}{(1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{1/2}} d\theta \quad (A.2)$$

$$E13(\phi, k, m) = \int_0^{\phi} \frac{1}{(1+m^2 \operatorname{sen}^2 \theta)(1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{1/2}} d\theta \quad (A.3)$$

(A.1), (A.2) y (A.3) se denominan integrales elípticas de 1ª, 2ª y 3ª especie respectivamente; k es el módulo y ϕ el argumento, la integral E13 dependen además del parámetro m que deberá ser no nulo. Una variable muy utilizada es el módulo complementario k' definido por

$$k'^2 = 1 - k^2 \quad (A.4)$$

Con vistas a la computación numérica y por razones de estabilidad, resulta más adecuado usar como parámetros el módulo complementario y la tangente del argumento; efectuando estos cambios de varia-

ble resultan las siguientes expresiones, en forma algebraica, para las integrales

$$E11(x, k') = \int_0^x \frac{1}{\{(1+t^2)(1+k'^2 t^2)\}^{1/2}} dt \quad (A.5)$$

$$E12(x, k', c, d) = \int_0^x \frac{c + dt^2}{\{(1+t^2)(1+k'^2 t^2)\}^{1/2}} dt \quad (A.6)$$

$$E13(x, k', m) = \int_0^x \frac{1 + t^2}{\{1+(1+m^2)t^2\}\{(1+t^2)(1+k'^2 t^2)\}^{1/2}} dt \quad (A.7)$$

en donde $t = \operatorname{tg}\theta$ y $x = \operatorname{tg}\phi$. Hemos de notar que E12 incluye el E11 como caso particular y que para determinados valores de c y d se obtienen las integrales elípticas que más frecuentemente aparecen en la práctica; así

$$F(\phi, k) = \int_0^\phi (1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{-1/2} d\theta = E12(x, k', 1, 1) = E11(x, k') \quad (A.8)$$

$$E(\phi, k) = \int_0^\phi (1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{1/2} d\theta = E12(x, k', 1, k'^2) \quad (A.9)$$

$$B(\phi, k) = \int_0^\phi \frac{\cos^2 \theta}{(1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{1/2}} d\theta = E12(x, k', 1, 0) \quad (A.10)$$

$$D(\phi, k) = \int_0^\phi \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{(1-k^2 \operatorname{sen}^2 \theta)^{1/2}} d\theta = E12(x, k', 0, 1) \quad (A.11)$$

Nosotros concretamente hemos utilizado las expresiones (A.9) y (A.10) a las que denominamos integrales elípticas normales de 1ª y 2ª especie respectivamente. Cuando $x = \infty$ o bien $\phi = \pi/2$ se dice que las integrales son completas, éste es

$$\begin{aligned}
 K(k) &= F(\pi/2, k) \\
 E(k) &= E(\pi/2, k) \\
 \pi(k, m) &= E13(\pi/2, k, m)
 \end{aligned}
 \tag{A.12}$$

Existen numerosas tablas que dan con buena aproximación el valor de las integrales, también pueden obtenerse por desarrollo en serie -ver por ejemplo Byrd y Friedman (1971)-.

En el cálculo de las integrales elípticas de 1ª y 2ª especie nosotros hemos utilizado los algoritmos desarrollados por R. Bulirsch (1965), para argumento real. Vamos a dar el esquema de estos algoritmos comenzando por el correspondiente a E12, los restantes pueden obtenerse como casos particulares de aquél:

a) Integral elíptica incompleta de 2ª especie.-

Su cálculo está basado en la aplicación de la transformación de Landen definida por:

$$E12(x, k', c, d) = \frac{1}{1+k'} (E12(x_1, k'_1, c_1, d_1) + \frac{1}{2}(c-d) \frac{x_1}{(1+x_1^2)^{1/2}}) \tag{A.13}$$

en donde

$$\begin{aligned}
 c_1 &= \frac{1}{2} (c+d) \quad ; \quad d_1 = \frac{1}{1+k'} (d+c.k') \\
 k'_1 &= \frac{2(k')^{1/2}}{1+k'} \quad ; \quad x_1 = \frac{(1+k')x}{1-k'x^2} \\
 \phi_1 &= \text{tg}^{-1} (x_1)
 \end{aligned}
 \tag{A.14}$$

Mediante sucesivas transformaciones se puede obtener $E11(x, k', c_2, d_2)$, etc. Junto con cada transformación se efectúa un pro

ceso de media aritmética-geométrica; se comienza con el par de números

$$\begin{aligned} a_0 &= 1 \\ g_0 &= |k'| \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

y los siguientes pares se obtienen mediante las expresiones

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_n + g_n \\ g_{n+1} &= 2(a_n \cdot g_n)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

También es preciso generar las secuencias de números C_i , D_i mediante el siguiente esquema de iteración

$$\begin{aligned} C_0 &= c \quad ; \quad D_0 = d \\ C_{n+1} &= \frac{1}{2} \left(C_n + \frac{D_n}{a_n} \right) \\ D_{n+1} &= D_n + g_n \cdot C_n \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Por último, se realiza en cada paso una transformación del argumento dada por

$$\begin{aligned} \text{ang}_0 &= \frac{1}{|X|} \\ \text{ang}_{n+1} &= \text{ang}_n - \frac{a_n \cdot g_n}{\text{ang}_n} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

La iteración acaba, teóricamente, en el N -ésimo paso cuando $a_N = g_N$. En la práctica el proceso se detiene cuando se cumple que $|1 - a_N/g_N| \leq 10^{-D}$, siendo D el número de dígitos en la mantisa de los números de punto flotante. De esta forma se tiene un error relativo de truncamiento del orden de 10^{-D} , R. Bulirsch (1965).

En el N-ésimo paso la integral se expresará, de acuerdo con (A.13), en la siguiente manera

$$E12(x, k', c, d) = \frac{a_0}{a_N} E12(x_N, k'_N, c_N, d_N) + S \quad (A.19)$$

siendo

$$S = \frac{c-d}{2} \left(\frac{1}{a_1} \operatorname{sen} \phi_1 + \frac{1}{a_2} \frac{a_0 - g_0}{a_1} \frac{\operatorname{sen} \phi_2}{2} + \dots + \frac{1}{a_N} \frac{a_0 - g_0}{a_1} \dots \right. \\ \left. \dots \frac{a_{N-2} - g_{N-2}}{a_{N-1}} \frac{\operatorname{sen} \phi_N}{2^{N-1}} \right) \quad (A.20)$$

con

$$\operatorname{sen} \phi_n = \frac{a_n}{\pm \sqrt{\operatorname{ang}_n^2 + a_n^2}} \quad (A.21)$$

la elección del signo de la raíz debe hacerse de forma que $\phi_i = \operatorname{tg}^{-1}(x_i)$ crezca continuamente con el índice i . Para $a_N = g_N$ se verifica

$$k'_N = 1, \quad k_N = 0, \quad \text{por tanto}$$

$$E12(x_N, k'_N, c_N, d_N) = \int_0^{\phi_N} \{c_N + (d_N - c_N) \operatorname{sen}^2 t\} dt = \frac{c_N + d_N}{2} \phi_N - \\ - \frac{1}{2} (d_N - c_N) \operatorname{sen} \phi_N \cos \phi_N \quad (A.22)$$

y la integral buscada puede obtenerse finalmente en la forma

$$E12(x, k', c, d) = \frac{c_{N+1}}{a_N} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{a_N}{\operatorname{ang}_N} \right) + S + \frac{1}{a_N} \left(\frac{c_N - d_N}{2} \right) \operatorname{sen} \phi_N \cos \phi_N \quad (A.23)$$

b) Integral elíptica completa de 1ª especie.-

Es la integral más fácil de calcular y en este caso el algoritmo se simplifica notablemente, siendo tan solo necesario un proce-

so de media aritmética-geométrica que comienza con el par de números $a_0 = 2$, $g_0 = 2k'$ y los siguientes pares se obtienen mediante las ecuaciones (A.16). El proceso termina en la N-ésima iteración cuando $a_N = g_N$ y el valor de la integral viene dado por, R. Bulirsch (1965),

$$K(k) = \frac{2^N \pi}{a_N} \quad (\text{A.24})$$

c) Integral elíptica completa de 2ª especie.-

Para su obtención se realiza una media aritmética-geométrica, definida en los mismos términos que en el caso anterior, y simultáneamente se generan las secuencias

$$\begin{aligned} C_0 &= 1 \quad ; \quad D_0 = k'^2 \\ C_{n+1} &= \frac{D_n}{a_n} + C_n \quad ; \quad C_{n+1} = 2(D_n + g_n \cdot C_n) \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

La iteración termina cuando $a_N = g_N$ y la integral se calcula mediante la expresión, R. Bulirsch (1965),

$$E(k) = \frac{\pi}{4} \frac{C_{N+1}}{a_N} \quad (\text{A.26})$$

d) Integral elíptica incompleta de 1ª especie.-

Este algoritmo es muy similar al desarrollado en el primer caso si bien resulta algo más simple; así, no se precisan las secuencias definidas en (A.17) y la transformación de Landen en cada paso - se aplica ahora en la forma

$$E11(x, k') = \frac{1}{1+k'} E11(x_1, k'_1) \quad (\text{A.27})$$

Cuando $a_N = g_N$ se tiene $k'_N = 1, -k_N = 0$ y la integral transformada se reduce a la expresión

$$E11(x_N, k'_N) = \int_0^{\phi_N} dt = \phi_N \quad (\text{A.28})$$

con lo que E11 viene finalmente dada por

$$E11(x, k') = \frac{\phi_N}{a_N} \quad (\text{A.29})$$

De acuerdo con el criterio impuesto para finalizar los procesos de iteración, todas las integrales se obtienen con un error relativo de truncamiento del orden de 10^{-D} . Nosotros concretamente hemos utilizado doble precisión en los cálculos lo que implica operar con $D = 16$ cifras significativas.

La obtención de la integral elíptica completa de 3ª especie no es inmediata. En primer lugar hay que distinguir varios casos según el valor del parámetro m :

caso I	$0 < -m^2 < \infty$	}	circulares
caso II	$k^2 < m^2 < 1$		
caso III	$0 < m^2 < k^2$	}	hiperbólicas
caso IV	$1 < m^2 < \infty$		
caso V	parámetro complejo		

Nosotros, de acuerdo con (I.28) y (I.29), estamos siempre en el caso II, y la integral puede expresarse entonces como (e.g. Byrd y Friedman, 1971)

$$\pi(k, m) = K(k) + \frac{\pi m (1 - \Lambda_0(\psi, k))}{2 \{(m^2 - k^2)(1 - m^2)\}^{1/2}} \quad (\text{A.30})$$

$$\psi = \text{sen}^{-1} \{(1 - m^2) / k^2\}^{1/2} \quad (\text{A.31})$$

o también en la forma

$$\psi(k, m) = \frac{\pi m \Lambda_0(\xi, k)}{2 \{(m^2 - k^2)(1 - m^2)\}^{1/2}} \quad (\text{A.32})$$

$$\xi = \text{sen}^{-1} \{(m^2 - k^2) / (m^2 k^2)\}^{1/2} \quad (\text{A.33})$$

en donde $\Lambda_0(\alpha, k)$ es la función Lambda de Heuman definida por

$$\Lambda_0(\alpha, k) = \frac{2}{\pi} \{E(k) F(\alpha, k') + K(k) E(\alpha, k') - K(k) F(\alpha, k')\} \quad (\text{A.34})$$

Vemos pues, que la integral elíptica completa de 3ª especie puede obtenerse en función las de 1ª y 2ª especie; en nuestros cálculos hemos empleado concretamente la ecuación (A.32) que es algo más simple.

BIBLIOGRAFIA

- Adams A, Read F H 1972 J. Phys. E: Sci. Instrum. 5 150.
- Archard G D 1954 Brit. J. Appl. Phys. 5 179.
- Ayres F 1969 Ecuaciones Diferenciales (México: McGraw-Hill, Schaum).
- Bertram S 1940 Proc. IRE 28 418.
- Bethe H A 1930 Ann. der Phys. 5 325.
- Birtles A B 1972 Int. J. Electron. 33 649.
- Birtles A B et al. 1973 Proc. IEE 120 213.
- Bleakncy W 1932 Phys. Rev. 40 496.
- Boerboom A J 1959 Z. Naturf. 14a 809.
- Boerboom A J 1960 Z. Naturf. 15a 244.
- Bulirsch R 1965 Handbook Series of Special Functions, Num. Math. 7 78.
- Byrd P F, Friedman M D 1971 Handbook of Elliptical Integrals for Engineers and Scientists (berlin: Springer).
- Carter G, Colligon J S 1968 Ion Bombardment of Solids (New York: Elsevier).
- Coslett V E 1946 Introduction to Electron Optics (Oxford: Un. Press).
- Dempster A J 1916 Phil. Mag. 31 438.
- Durand E 1966 Electrostatique I, II y III (Paris: Masson et Cie).

- El-Kareh A B, Sturans M A 1972 IEE Trans. Elect. Dev. 19 1075.
- Field F H, Franklin J L 1957 Electron Impact Phenomena (London: Academic Press).
- Gélard J 1962 C.R. Acad. Sciences Paris 254 3822.
- Gerald C F 1973 Applied Numerical Analysis (Massachusetts: Addison-Wesley).
- Glaser A, Henneberg W 1935 Z. Techn. Phys. 16 222.
- Glaser W 1956 Handbuch der Physik 33 123.
- Glaser W, Schiske P 1954 Optik 11 422.
- Glaser W, Schiske P 1955 Optik 12 233.
- Grizinski M 1959 Phys. Rev. 115 374.
- Grivet P 1972 Electron Optics (Oxford: Pergamon Press).
- Harrington R 1968 Field Computation by Moment Method (New York: Mac Millan).
- Harrion D E et al. 1969 J. Math. Phys. 10 1179.
- Harting E, Read F H 1976 Electrostatic Lenses (Amsterdam: Elsevier).
- Hawkes P W 1967 Focusing of Charged Particles (New York: Septier, Academic Press).
- Higgins T J, Reitan D K 1951 A IEE Trans. 70 926.
- Jeans J H 1927 Electrocitv and Magnetism (Cambridge: Un. Press).
- Kanaya K et al. 1966 J. Sci. Instrum. 43 416.
- Kanaya K, Baba N 1978 J. Phys. E: Sci. Instrum. 11 265.

- Lapeyre R, Laudet M 1960 C.R. Acad. Sci., Paris 251 679.
- Laudet M 1953 Cah. Phys. 41 72.
- Lenz F 1956 Z. Angew. Phys. 8 492.
- Liebmann G 1949 Proc. Phys. Soc. B 62 753.
- Loveless A J, Russell R D 1969 Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 3 257.
- Magnus W et al. 1966 Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics (Berlin: Springer-Verlag).
- Malavard L 1956 Onde Elec. 36 762.
- Mautz J R, Harrington R F 1970 Proc. IEE 117 850.
- Mineur H 1966 Techniques de Calcul Numérique (Paris: Dunod).
- Munro E 1970 Proc. 7th Int. Cong. Electron. Microscopy, Grenoble p. 55.
- Naidu P S, Westphal K O 1966 Brit. J. Appl. Phys. 17 645.
- Natali S et al. 1972 Rev. Sci. Instrum 43 80.
- Nier A O 1940 Rev. Sci. Instrum. 11 212.
- Nier A O 1947 Rev. Sci. Instrum. 18 191.
- Olsen B et al. 1966 Nucl. Instr. and Methods 41 325.
- Ramberg E G 1942 J. Appl. Phys. 13 58.
- Rapp D et al. 1965 J. Chem. Phys. 43 1464.
- Read F H 1969 J. Phys. E: Sci. Instrum. 2 679.
- Read F H et al. 1971 J. Phys. E: Sci. Instrum. 4 625.

- Reitan D K 1959 J. Appl. Phys. 30 172.
- Reitan D K, Higgins T J 1951 J. Appl. Phys. 22 926.
- Riddle G H 1978 J. Vac. Sci. Technol. 15 857.
- Rose P H, Galejs A 1967 Prog. Nucl. Tech. Instrum. 2 1.
- Simpson J A 1961 Rev. Sci. Instrum. 35 1698.
- Shimizu K, Kawakatsu H 1974 J. Phys. E: Sci. Instrum. 7 472.
- Skolleremo A 1976 Nucl. Instr. and Methods 137 339.
- van Steenbergen A 1965 IEE Trans. Nucl. Sci. 12 746.
- Steffen K G 1965 High Energy Beam Optics (London: Wiley Intersc.).
- Sturrok P A 1951 C.R. Acad. Sci., Paris 233 146 y 243.
- Sturrok P A 1952 Phil. Trans. Roy. Soc. A243 387.
- Sturrok P A 1955 Static and Dynamic Electron Optics (Cambridge: Un. Press).
- Thomson J J 1912 Phil. Mag. 23 419.
- Vályi L 1976 Atom and Ion Surces (London: Wiley-Intersc.).
- Van Bladel J 1964 Electromagnetic Fields (New York: McGraw-Hill).
- Wallington M J 1970 J. Phys. E: Sci. Instrum. 3 599.
- Wallington M J 1971 J. Phys. E: Sci. Instrum. 4 1.
- Wilson R G, Brewer G R 1973 Ion Beams (New York: Wiley-Intersc.)
- Yamazaki H 1973 Optik 38 9.

Giovanna Marini

