

求解离子光学系统高阶轨迹方程的新方法

陈仁木

西门纪业

(中山大学物理学系)

(北京大学无线电系)

摘要 本文讨论求解离子光学系统高阶轨迹方程的逐次积分方法。计算轨迹方程齐次解的积分,可以直接建立轨迹方程非齐次项的 G 矩阵与该非齐次方程的特解轨迹 S 矩阵的转换关系。把这个关系归结为特解生成矩阵。按照这种改进的理论方法,高阶轨迹的求解简化成为 G 矩阵与 L 矩阵的相乘, S 矩阵各元素间的某些相互关系亦同时被清晰显示。

关键词 特解生成矩阵, S 矩阵, 离子光学系统, 轨迹方程, 高阶轨迹

许多离子光学系统的欧拉方程,都可以归结为下列的形式

$$\begin{aligned}x'' + K_x^2 x &= F^x(x, x', x'', y, y', y'', \gamma, \delta) \\y'' + K_y^2 y &= F^y(x, x', x'', y, y', y'', \gamma, \delta)\end{aligned}\quad (1)$$

式中的微分是对独立变量(弧长或方位角)的导数, x 和 y 是任意粒子在该方向上相对于参考粒子的位置偏移, γ 和 δ 是相应的质量分散及能量分散, K_x 和 K_y 是反映组成系统的电场与磁场特性的参数。这是带电粒子轨迹方程的普遍形式。

轨迹方程的高阶轨迹通常采用逐步近似的方法求出,已有很多具体结果发表^[1~4]。本文讨论采用齐次解积分的方法来简化求解高阶轨迹的计算。

根据微分方程的理论,形式为 $Y'' + K^2 Y = f(X)$ 的线性微分方程的非齐次特解 \tilde{Y} ,可以由下列的积分求得

$$\tilde{Y} = \frac{1}{K} \left[\sin KX \int_{x_0}^x f(X) \cos KX dX - \cos KX \int_{x_0}^x f(X) \sin KX dX \right] \quad (2)$$

若方程的非齐次项 $f(X)$ 能够记为便于积分的形式,则可由(2)式直接获得 \tilde{Y} 而避开运算繁复的待定系数的计算,从而求出微分方程的解。

结合扇形重迭场中带电粒子二、三级轨迹的计算来叙述逐次积分方法。由(2)式引出一个称之为特解生成矩阵的 L 矩阵,把方程(1)的非齐次项以 G 矩阵的形式给出,轨迹的求解过程可以简化为 G 矩阵与 L 矩阵的相乘。显示了非齐次轨迹方程特解轨迹的 S 矩阵各元素间的相互关系。它适用于广泛的离子光学系统,丰富了象差理论的研究方法。

本文1991年9月14日收到

1 轨迹方程的G矩阵与S矩阵

在量子光学理论的计算中, 轨迹方程(1)的右端可以展成幂级数的形式, 即

$$\begin{aligned} x'' + K_x^2 x &= \sum_{i=1}^8 r_i \left[(r_i, 1)^x + \sum_{j=1}^8 r_j \left[(r_i, r_j)^x + \sum_{k=j}^8 r_k \left[(r_i, r_j r_k)^x + \dots \right] \right] \right] \\ y'' + K_y^2 y &= \sum_{i=1}^8 r_i \left[(r_i, 1)^y + \sum_{j=1}^8 r_j \left[(r_i, r_j)^y + \sum_{k=j}^8 r_k \left[(r_i, r_j r_k)^y + \dots \right] \right] \right] \end{aligned} \quad (3)$$

式中的 $(I, J)^x$ 和 $(I, J)^y$ 是相应各项的数字系数, 并且 $I, J \in \{1, r_i\}$. $\{r_i\} = (r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6, r_7, r_8) = (x, x', x'', y, y', y'', \gamma, \delta)$. $i, j, k, \dots \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$.

略去(3)式右边高于一级各项, 便是粒子的高斯轨迹方程. 由于微分方程本身的特性, 高斯轨迹由二种因子与数字系数的积所组成. 第一种因子是由粒子在入射面上的位置、斜率 x_0, y_0, x'_0, y'_0 和质量、能量分散 γ, δ 等决定的初条件因子, 称为 n 因子. 第二种因子是由弧长或方位角 ω 决定的路径因子, 称为 m 因子. 在逐步近似的过程中, $(i-1)$ 级轨迹代入(3)式右边相应的各个 r 中便得到 i 级近似的轨迹方程. 由于高斯轨迹的上述特点, 高阶的轨迹方程应具有以下的形式

$$\begin{aligned} x_i'' + K_x^2 x_i &= \sum_m \sum_n G_i^x(n|m) n_i^x m^x \\ y_i'' + K_y^2 y_i &= \sum_m \sum_n G_i^y(n|m) n_i^y m^y \end{aligned} \quad (4)$$

即轨迹方程的非齐次项必然是由数字系数 $G(n|m)$ 与上述的 n, m 两种因子所组成. 作为(4)式的解, 粒子的 i 级轨迹也必然是由数字系数 $S(n|m)$ 及 n, m 两种因子所组成, 即

$$x_i = \sum_m \sum_n S_i^x(n|m) n_i^x m^x, \quad y_i = \sum_m \sum_n S_i^y(n|m) n_i^y m^y \quad (5)$$

在(4)、(5)两式中, n 因子可以视为由 $x_0, y_0, x'_0, y'_0, \gamma, \delta$ 等的乘积或乘幂作为元素的矢量 \vec{n} , m 因子则是由 $1, \omega, \sin K_x \omega, \cos K_x \omega, \sin K_y \omega, \cos K_y \omega$ 等的乘积或乘幂作为元素的矢量 \vec{m} . 这样, 数字系数 $G(n|m)$ 和 $S(n|m)$ 便各自形成具有 n 行 m 列的两个矩阵, 记为 G 矩阵和 S 矩阵^[1,2,4]. 轨迹方程的求解过程实质上便是由 G 矩阵求出 S 矩阵的过程.

2 L矩阵与齐次解积分法

目前, S 矩阵的推导通常采用待定系数法^[1~3], 这种计算是颇为麻烦的. 其实, 把(2)式中的 $f(X)$ 用(4)式的非齐次项代入便可得到

$$\begin{aligned}\tilde{x}_i &= \sum_n G_i^x(n|m)n_i^x \cdot \left\{ \sum_m \frac{1}{K_x} [\sin K_x \omega \int_0^\omega m^x \cos K_x \varphi d\varphi \right. \\ &\quad \left. - \cos K_x \omega \int_0^\omega m^x \sin K_x \varphi d\varphi] \right\} \\ \tilde{y}_i &= \sum_n G_i^y(n|m)n_i^y \cdot \left\{ \sum_m \frac{1}{K_y} [\sin K_y \omega \int_0^\omega m^y \cos K_y \varphi d\varphi \right. \\ &\quad \left. - \cos K_y \omega \int_0^\omega m^y \sin K_y \varphi d\varphi] \right\}\end{aligned}\quad (6)$$

式中的 \tilde{x}_i 和 \tilde{y}_i 是轨迹方程的非齐次特解。由于 \vec{m} 矢量各元素的性质, (6)式大括号中的积分就是把原先相应于 \vec{m} 的多项式重新组合成一个稍为扩展了的 \vec{m}_e 的多项式。将其列出可得

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{m}_e} L_i^x(m|m_e)m_e^x &= \sum_m \frac{1}{K_x} \left[\sin K_x \omega \int_0^\omega m^x \cos K_x \varphi d\varphi - \cos K_x \omega \int_0^\omega m^x \sin K_x \varphi d\varphi \right] \\ \sum_{\vec{m}_e} L_i^y(m|m_e)m_e^y &= \sum_m \frac{1}{K_y} \left[\sin K_y \omega \int_0^\omega m^y \cos K_y \varphi d\varphi - \cos K_y \omega \int_0^\omega m^y \sin K_y \varphi d\varphi \right]\end{aligned}\quad (7)$$

上式中的各个 $L(m|m_e)$ 系数, 分别形成径向和轴向、各具有 m 行 m_e 列的两个 L 矩阵。由于它们的引入, (6)式可以改写为

$$\begin{aligned}\left[\tilde{S}_i^x \right] &= \left[\vec{G}_i^x \right] \cdot \left[\vec{L}_i^x \right] \\ \left[\tilde{S}_i^y \right] &= \left[\vec{G}_i^y \right] \cdot \left[\vec{L}_i^y \right]\end{aligned}\quad (8)$$

$[\tilde{S}_i]$ 代表 i 级轨迹方程的非齐次特解, $[\vec{G}_i]$ 代表轨迹方程的非齐次项, 因而 $[\vec{L}_i]$ 矩阵称为特解生成矩阵。

应当注意, 在某些条件下, 方程(4)的齐次通解中包含有高阶项, 把这些高阶项与 $[\tilde{S}_i]$ 矩阵的相应元素合并, 才得到完整的第 i 级轨迹, 即

$$\begin{aligned}S_i^x(n|m) &= \tilde{S}_i^x(n|m) + b^x(n|m) \cdot \Delta_{n,k} \\ S_i^y(n|m) &= \tilde{S}_i^y(n|m) + b^y(n|m) \cdot \Delta_{n,k}\end{aligned}\quad (9)$$

等号右边的第二项即是齐次解的高阶项, k 代表 \vec{n} 矢量中的某些特定因子, $b(n|m)$ 则是相应的数字系数。 $\Delta_{n,k}$ 是常用的狄拉克函数, 当 $n=k$ 时, $\Delta_{n,k}=1$; 当 $n \neq k$ 时, $\Delta_{n,k}=0$ 。

以上的讨论, 显示了求解轨迹方程的一种改进的方法, 称为逐次积分方法。其基本步骤是: 首先求得形式如同(4)式的轨迹方程, 导出方程的 G 矩阵; 把 G 矩阵对应的 \vec{m} 代入(7)式求得扩展了的 \vec{m}_e 及相应的 L 矩阵; 由(8)式与(9)式算出 $[\tilde{S}_i]$, 完成轨迹方程的求解。

在本文的符号体系中, 右下方的下标 i 表示近似计算的级数, 右上角的上标 x 、 y 表

示该量属径向或轴向。在泛指或不会引起混淆的场合,它们常被略去。

3 扇形重迭场粒子轨迹的求解

扇形重迭场是曲线光轴离子光学系统的典型形式。将环形电场与非均匀磁场正交配置,使它们具有共同的旋转对称轴(z 轴)和镜象对称平面($z=0$),并具有同一扇形角 ω ,便形成了扇形重迭场。在这样的场中,离子运动的主轨迹是曲率半径为 r_0 的圆弧,傍轴轨迹采用无量纲局部坐标 (x, y, ω) 表示,它们与圆柱坐标 (r, z, φ) 的关系如下:

$$x = (r - r_0)/r_0, \quad y = z/r_0, \quad \omega = \varphi \quad (10)$$

式中 x 是径向坐标, y 是轴向坐标, ω 是方位角坐标。其中,只有方位角坐标 ω 才是真正的独立变量。

3.1 L矩阵的推导

在扇形重迭场中,带电粒子的高斯迹轨为^[1]:

$$x_1 = C_x x_0 + (S_x/k_x) \alpha_0 + [(1 - C_x)/k_x^2] \left(\frac{p}{2} \gamma + \frac{1+q}{2} \delta \right)$$

$$y_1 = C_y y_0 + (S_y/k_y) \beta_0 \quad (11)$$

式中的 γ 、 δ 是质量分散与能量分散。因沿用文献[1]的记号,初始条件用粒子在入射面上的位置及倾角 x_0 、 α_0 、 y_0 、 β_0 来表示。 C_x 、 S_x 、 C_y 、 S_y 分别代表 $\cosh k_x \omega$ 、 $\sinh k_x \omega$ 、 $\cosh k_y \omega$ 、 $\sinh k_y \omega$ 。 p 和 q 代表 r_0/r_e 与 r_0/r_m , r_e 和 r_m 各表示仅有电场及仅有磁场存在时镜象平面粒子在入射面处的轨迹的曲率半径。 Q 和 Q_1 是 $(k_x^2 - 4k_y^2)$ 与 $(k_x^2 - k_y^2)$ 的缩写。

略去高于二级的各项,径向二级轨迹方程的非齐次项包含有 $(\gamma + \delta)x$ 、 x^2 、 y^2 、 xx'' 、 x'^2 、 y'^2 等项^[1],把(11)式代入可知,此时的 \bar{m}^x 为

$$\bar{m}^x: 1, S_x, C_x, \omega S_x, \omega C_x, S_x^2, S_x C_x, S_y^2, S_y C_y \quad (12)$$

同理,对于轴向二级轨迹方程可以求得

$$\bar{m}^y: S_y, C_y, \omega S_y, \omega C_y, S_x S_y, S_x C_y, C_x S_y, C_x C_y \quad (13)$$

而对于径向三级轨迹方程则有

$$\begin{aligned} \bar{m}^x: & 1, \omega, S_x, C_x, \omega S_x, \omega C_x, S_x^2, S_x C_x, S_y^2, S_y C_y, \omega^2 S_x, \omega^2 C_x, \omega S_x^2, \omega S_x C_x, \\ & \omega S_y^2, \omega S_y C_y, S_x^3, S_x^2 C_x, S_x S_y^2, S_x S_y C_y, C_x S_y^2, C_x S_y C_y \end{aligned} \quad (14)$$

不难看出,(14)式把(12)式包括在其中。

把(14)式代入(7)式,便得到径向的三级特解生成矩阵 $[\bar{L}_{III}^x]$,如图1所示。这个矩阵有62个非零元素,详列于下:

$$\begin{aligned} L(1|1) &= 1/K_x^2, & L(1|C_x) &= -1/K_x^2, & L(\omega|\omega) &= 1/K_x^2 \\ L(\omega|S_x) &= -1/K_x^3, & L(S_x|S_x) &= 1/2K_x^2, & L(S_x|\omega C_x) &= -1/2K_x \end{aligned}$$

	1	ω	S_x	C_x	ωS_x	ωC_x	S_x^2	$S_x C_x$	S_y^2	$S_y C_y$	$\omega^2 S_x$	$\omega^2 C_x$	$\omega^2 S_x^2$	$\omega^2 S_x C_x$	$\omega^2 S_y^2$	$\omega^2 S_y C_y$	S_x^3	$S_x^2 C_x$	$S_x C_y^2$	$S_x S_y C_y$	$C_x S_y^2$	$C_x S_y C_y$	$\omega^3 S_x$	$\omega^3 C_x$	
1	L																								
ω		L	L																						
S_x			L			L																			
C_x						L																			
ωS_x						L						L													
ωC_x						L					L														
S_x^2	L					L																			
$S_x C_x$						L								L											
S_y^2	L					L				L															
$S_y C_y$						L				L															
$\omega^2 S_x$						L						L												L	
$\omega^2 C_x$						L						L												L	
ωS_x^2			L	L									L												
$\omega S_x C_x$	L					L									L										
ωS_y^2			L	L						L						L									
$\omega S_y C_y$	L					L				L						L									
S_x^3						L																			
$S_x^2 C_x$						L																			
$S_x C_y^2$						L																			
$S_x S_y C_y$						L																			
$C_x S_y^2$						L																			
$C_x S_y C_y$						L																			

图1 $[\bar{L}_{III}^x]$ 的非零元素

Fig.1 Nonzero elements of $[\bar{L}_{III}^x]$

$$\begin{aligned}
 L(C_x|\omega S_x) &= 1/2K_x & L(\omega S_x|\omega S_x) &= 1/4K_x^2, & L(\omega S_x|\omega^2 C_x) &= -1/4K_x \\
 L(\omega C_x|S_x) &= -1/4K_x^3, & L(\omega C_x|\omega C_x) &= 1/4K_x^2, & L(\omega C_x|\omega^2 S_x) &= 1/4K_x \\
 L(S_x^2|1) &= 2/3K_x^2, & L(S_x^2|C_x) &= -2/3K_x^2, & L(S_x^2|S_x^2) &= -1/3K_x^2 \\
 L(S_x C_x|S_x) &= 1/3K_x^2, & L(S_x C_x|S_x C_x) &= -1/3K_x^2, & L(S_y^2|1) &= -2K_y^2/K_x^2 Q \\
 L(S_y^2|C_x) &= 2K_y^2/K_x^2 Q, & L(S_y^2|S_y^2) &= 1/Q, & L(S_y C_y|S_x) &= -K_y/K_x Q \\
 L(S_y C_y|S_y C_y) &= 1/Q, & L(\omega^2 S_x|S_x) &= -1/4K_x^4, & L(\omega^2 S_x|\omega C_x) &= 1/4K_x^3 \\
 L(\omega^2 S_x|\omega^2 S_x) &= 1/4K_x^2, & L(\omega^2 S_x|\omega^3 C_x) &= -1/6K_x, & L(\omega^2 C_x|\omega S_x) &= -1/4K_x^3 \\
 L(\omega^2 C_x|\omega^2 C_x) &= 1/4K_x^2, & L(\omega^2 C_x|\omega^3 S_x) &= 1/6K_x, & L(\omega S_x^2|\omega) &= 2/3K_x^2 \\
 L(\omega S_x^2|S_x) &= -2/9K_x^3, & L(\omega S_x^2|S_x C_x) &= -4/9K_x^3, & L(\omega S_x^2|\omega S_x^2) &= -1/3K_x^2 \\
 L(\omega S_x C_x|1) &= -2/9K_x^3, & L(\omega S_x C_x|C_x) &= 2/9K_x^3, & L(\omega S_x C_x|S_x^2) &= 4/9K_x^3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 L(\omega S_x C_x | \omega S_x C_x) &= \frac{-1}{3K_x^2}, & L(\omega S_y^2 | \omega) &= \frac{-2K_y^2}{K_x^2 Q}, & L(\omega S_y^2 | S_x) &= \frac{2K_y^2}{K_x Q} \left[\frac{2}{Q} + \frac{1}{K_x^2} \right] \\
 L(\omega S_y^2 | S_y C_y) &= -4K_y/Q^2, & L(\omega S_y^2 | \omega S_y^2) &= 1/Q, & L(\omega S_y C_y | 1) &= -2K_y/Q^2 \\
 L(\omega S_y C_y | C_x) &= 2K_y/Q^2, & L(\omega S_y C_y | S_y^2) &= 4K_y/Q^2, & L(\omega S_y C_y | \omega S_y C_y) &= 1/Q \\
 L(S_x^3 | S_x) &= 3/8K_x^2, & L(S_x^3 | \omega C_x) &= -3/8K_x, & L(S_x^3 | S_x^3) &= -1/8K_x^2 \\
 L(S_x^2 C_x | \omega S_x) &= 1/8K_x, & L(S_x^2 C_x | S_x^2 C_x) &= -1/8K_x^2, & L(S_x S_y^2 | S_x) &= -K_y^2 / 4K_x^2 Q_1 \\
 L(S_x S_y^2 | \omega C_x) &= -1/4K_x, & L(S_x S_y^2 | S_x S_y^2) &= 1/4Q_1, & L(S_x S_y^2 | C_x S_y C_y) &= -K_x / 4K_y Q_1 \\
 L(S_x S_y C_y | S_x S_y C_y) &= 1/4Q_1, & L(S_x S_y C_y | C_x S_y^2) &= -K_x / 4K_y Q_1, & L(C_x S_y^2 | \omega S_x) &= -1/4K_x \\
 L(C_x S_y^2 | S_x S_y C_y) &= -K_x / 4K_y Q_1, & L(C_x S_y^2 | C_x S_y^2) &= -1/4Q_1, & L(C_x S_y C_y | S_x) &= -K_y / 4K_x Q_1 \\
 L(C_x S_y C_y | S_x S_y^2) &= -K_x / 4K_y Q_1, & L(C_x S_y C_y | C_x S_y C_y) &= 1/4Q_1
 \end{aligned} \tag{15}$$

根据(12)式,可从上面的结果中抽取出径向的二级矩阵 $[\vec{L}_{11}^x]$,如图2(a)所示。其非零元素是(15)式中前半部的20个元素。

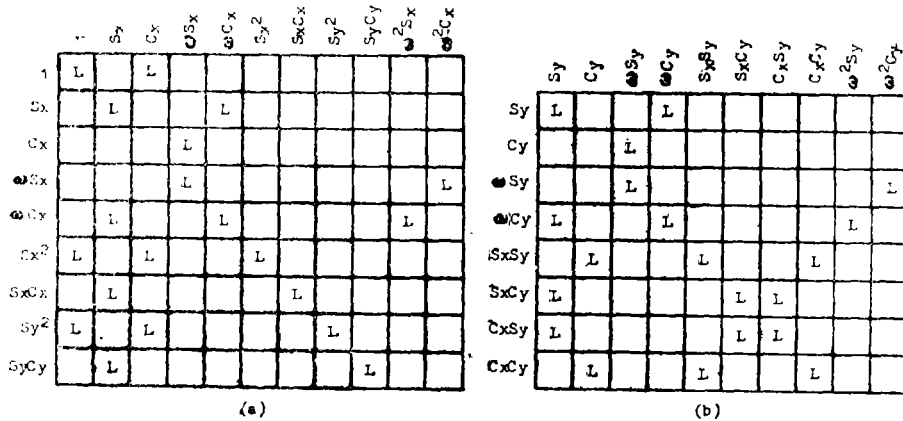


图2 $[\vec{L}_{11}^x]$ 和 $[\vec{L}_{11}^y]$ 的非零元素。(a) $[\vec{L}_{11}^x]$, (b) $[\vec{L}_{11}^y]$

Fig.2 Nonzero elements of $[\vec{L}_{11}^x]$ and $[\vec{L}_{11}^y]$

把(13)式代入(7)式,便得到轴向的二级矩阵 $[\vec{L}_{11}^y]$,如图2(b)所示。这个矩阵的20个非零元素如下:

$$\begin{aligned}
 L(S_y | S_y) &= 1/2K_y^2, & L(S_y | \omega C_y) &= -1/2K_y, & L(C_y | \omega S_y) &= 1/2K_y \\
 L(\omega S_y | \omega S_y) &= 1/4K_y^2, & L(\omega S_y | \omega^2 C_y) &= -1/4K_y, & L(\omega C_y | S_y) &= -1/4K_y^3 \\
 L(\omega C_y | \omega C_y) &= 1/4K_y^2, & L(\omega C_y | \omega^2 S_y) &= 1/4K_y, & L(S_x S_y | C_y) &= 2K_y / K_x Q \\
 L(S_x S_y | S_x S_y) &= -1/Q, & L(S_x S_y | C_x C_y) &= -2K_y / K_x Q, & L(S_x C_y | S_y) &= (K_x^2 - 2K_y^2) / K_x K_y Q
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 L(S_x C_y | S_x C_y) &= -1/Q, & L(S_x C_y | C_x S_y) &= 2K_y/K_x Q, & L(C_x S_y | S_y) &= -1/Q \\
 L(C_x S_y | S_x C_y) &= 2K_y/K_x Q, & L(C_x S_y | C_x S_y) &= -1/Q, & L(C_x C_y | C_y) &= 1/Q \\
 L(C_x C_y | S_x S_y) &= -2K_y/K_x Q, & L(C_x C_y | C_x C_y) &= -1/Q
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

3.2 高阶轨迹的求解

在轨迹方程求解中要特别注意方程齐次通解的高阶项问题。扇形重迭场的计算采用了无量纲的局部坐标，用来确定齐次通解中积分常数的初始条件为⁽¹⁾

$$\begin{aligned}
 x|_0 &= x_0, & y|_0 &= y_0 \\
 x'|_0 &= (1+x_0)\alpha_0, & y'|_0 &= (1+x_0)\beta_0
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

因此，轨迹方程齐次解的完整形式是

$$\begin{aligned}
 x^* &= x_0 C_x + (\alpha_0 + x_0 \alpha_0) S_x / K_x \\
 y^* &= y_0 C_y + (\beta_0 + x_0 \beta_0) S_y / K_y
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

可见符合初条件的齐次通解中包含有二级项。只有把 $x_0 \alpha_0 S_x / K_x$ 和 $x_0 \beta_0 S_y / K_y$ 这些项按照(9)式与由(8)式求得的 $[\bar{S}]$ 矩阵的相应元素合并，才能得到轨迹方程的正确解。

搞清齐次解高阶项以后，可由上节求得的L矩阵与轨迹方程相应的G矩阵求解粒子的高阶轨迹。对于径向的二级轨迹方程，其非齐次项 $[\bar{G}_{II}^x]$ 矩阵如图3(a)所示，二级轨迹 $[\bar{S}_{II}^x]$ 如图3(b)所示。S矩阵最右两列零元素是特意添加的，它们并不带来任何数值上的改变。检验 $[\bar{G}_{II}^x]$ 、 $[\bar{L}_{II}^x]$ 和 $[\bar{S}_{II}^x]$ ，即对照检查图3(a)、图2(a)和图3(b)，从非零元素的分布不难看出，它们完全符合(8)式。

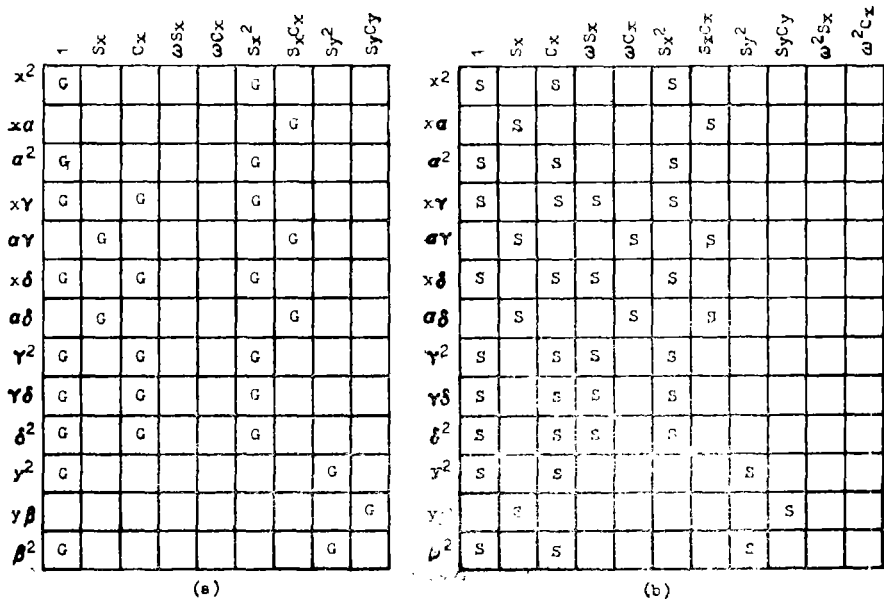


图3 $[\bar{G}_{II}^x]$ 和 $[\bar{S}_{II}^x]$ 非零元素。(a) $[\bar{G}_{II}^x]$, (b) $[\bar{S}_{II}^x]$

Fig.3 Nonzero elements of $[\bar{G}_{II}^x]$ and $[\bar{S}_{II}^x]$

对于轴向的二级轨迹方程, 其非齐次项 $[\bar{G}_{II}^y]$ 矩阵及解 $[\bar{S}_{II}^y]$ 矩阵如图4所示, 对照图2(b)的 $[\bar{L}_{II}^y]$ 矩阵, 它们亦完全符合(8)式.

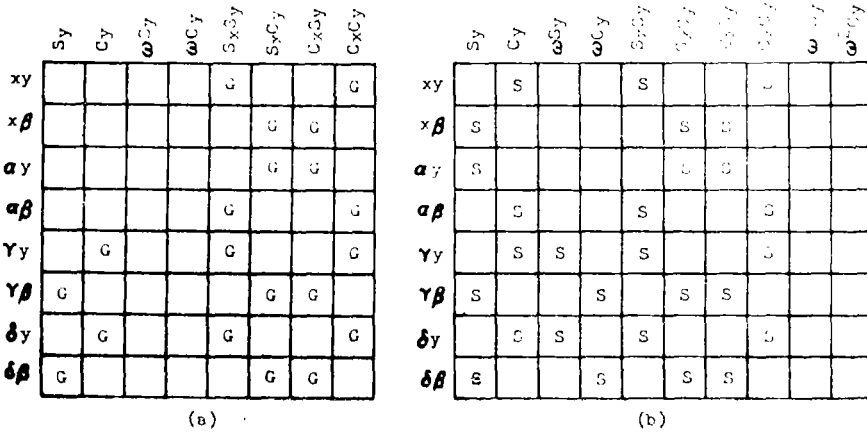


图4 $[\bar{G}_{II}^y]$ 和 $[\bar{S}_{II}^y]$ 的非零元素. (a) $[\bar{G}_{II}^y]$, (b) $[\bar{S}_{II}^y]$

Fig.4 Nonzero elements of $[\bar{G}_{II}^y]$ and $[\bar{S}_{II}^y]$

径向三级轨迹方程的非齐次项是一个 32×22 的G矩阵, 其解是一个 32×24 的S矩阵^[1], 它们同样适从(8)式. 因篇幅所限, 将它们省略.

这些事实表明, 计及齐次解高阶项的因素, 可以用L矩阵来求解轨迹方程.

3.3 S矩阵元素的计算公式

根据(8)式, L矩阵的每一个纵列, 就是S矩阵与G矩阵元素间的一组关系式. 例如, $[\bar{L}_{III}^x]$ 矩阵最左边的四列, 可以写成以下的关系式:

$$\begin{aligned}
 S(n|1) &= (1/K_x^2)G(n|1) + (2/3K_x^2)G(n|S_x^2) - (2K_y^2 / K_x^2 Q)G(n|S_y^2) \\
 &\quad - (2/9K_x^3)G(n|\omega S_x C_x) - (2K_y/Q^2)G(n|\omega S_y C_y) \\
 S(n|\omega) &= (1/K_x^2)G(n|\omega) + (2/3K_x^2)G(n|\omega S_x^2) - (2K_y^2 / K_x^2 Q)G(n|\omega S_y^2) \\
 S(n|S_x) &= -(1/K_x^3)G(n|\omega) + (1/2K_x^2)G(n|S_x) - (1/4K_x^3)G(n|\omega C_x) \\
 &\quad + (1/3K_x^2)G(n|S_x C_x) - (K_y/K_x Q)G(n|S_y C_y) \\
 &\quad - (1/4K_x^4)G(n|\omega^2 S_x) - (2/9K_x^3)G(n|\omega S_x^2) \\
 &\quad + (2K_y^2/K_x Q)[2/Q + 1/K_x^2]G(n|\omega S_y^2) + (3/8K_x^2)G(n|S_x^3) \\
 &\quad - (K_y^2/4K_x^2 Q_1)G(n|S_x S_y^2) - (K_y/4K_x Q_1)G(n|C_x S_y C_y)
 \end{aligned}$$

$$S(n|C_x) = -(1/K_x^2)G(n|1) - (2/3K_x^2)G(n|S_x^2) + (2K_y^2/K_x^2Q)G(n|S_y^2) \\ + (2/9K_x^3)G(n|\omega S_x C_x) + (2K_y/Q^2)G(n|\omega S_y C_y) \quad (19)$$

而 $[L_{ii}^y]$ 矩阵的最左两列可以写成以下的关系式:

$$S(n|S_y) = (1/2K_y^2)G(n|S_y) - (1/4K_y^3)G(n|\omega C_y) \\ + [(K_x^2 - 2K_y^2)/K_x K_y Q]G(n|S_x S_y) - G(n|C_x S_y)/Q \\ S(n|C_y) = (2K_y/K_x Q)G(n|S_x S_y) + G(n|C_x C_y)/Q \quad (20)$$

象这样的关系式, 由 $[L_{iii}^x]$ 可列出11个, 由 $[L_{ii}^y]$ 可列出10个, 由 $[L_{iii}^x]$ 可以列出24个。

Fujita等在文献[2]中对应于径向与轴向的二级轨迹, 以及径向的三级轨迹分别列出9个、8个及22个这种类型的关系式。与我们的结果相比, 下列6个关系式他们并未列入

$$S(n|\omega^2 S_x) = (1/4K_x)G(n|\omega C_x), \quad S(n|\omega^2 C_x) = (-1/4K_x)G(n|\omega S_x) \\ S(n|\omega^2 S_y) = (1/4K_y)G(n|\omega C_y), \quad S(n|\omega^2 C_y) = (-1/4K_y)G(n|\omega S_y) \\ S(n|\omega^3 S_x) = (1/6K_x)G(n|\omega^2 C_x), \quad S(n|\omega^3 C_x) = (-1/6K_x)G(n|\omega^2 S_x) \quad (21)$$

检查方程的非齐次项, $G(n|\omega C_x)$, $G(n|\omega S_x)$, $G(n|\omega S_y)$, $G(n|\omega C_y)$, $G(n|\omega^2 C_x)$, $G(n|\omega^2 S_x)$ 等项均为零, 因而用待定系数法当然无法得到这6个关系式。在考虑了齐次解高阶项及 G 矩阵零元素等因素后, 由 L 矩阵列出的关系式与文献[2]列出的公式完全相符, 与文献[1, 4]的结果也完全相符。这证明了本文讨论的求解轨迹的新方法的正确性。这些从前需从繁复的计算中经细心归纳才能得到的关系式现在可以简便地、更加完整地由 L 矩阵及(8)、(9)式导出, 显示了逐次积分方法的优点。

3.4 S矩阵各元素间的关系

逐次积分方法的应用不仅可以简化高阶轨迹的计算, 而且能帮助找出 S 矩阵各元素间的相互关系。在再次算出扇形重迭场的二级轨迹以后发现: 二级径向 S 矩阵的42个非零元素中, $S(x^2|1)$ 、 $S(x\gamma|\omega S_x)$ 、 $S(x\delta|\omega S_x)$ 和 $S(y^2|1)$ 等4个元素是最基本的元素; 另外有10个元素可由下列的线性关系式导出; 其余的28个元素均是前述14个元素中某个元素的简单倍数。

$$S(x^2|1) - S(x^2|S_x^2) = (1+q)/2, \quad 2S(y^2/S_y^2) - K_x^2 S(\beta^2|1) = (1+q)/2 \\ S(y^2|1) + S(y^2|S_y^2) = K_y^2 S(\beta^2|1), \quad S(\alpha^2|1) = (1/K_x^2)[S(x^2|1) + S(x^2|S_x^2)] \\ S(\alpha\gamma|S_x) = (1/K_x^2)S(x\gamma|\omega S_x) - (p/K_x^3)S(x^2|S_x^2) \\ S(\alpha\delta|S_x) = (1/K_x^2)S(x\delta|\omega S_x) - [(1+q)/K_x^3]S(x^2|S_x^2)$$

$$\begin{aligned}
S(\gamma\delta|\omega S_x) &= -(p/2K_x^2)S(x\delta|\omega S_x) - [(1+q)/2K_x^2]S(x\gamma|\omega S_x) \\
S(\gamma^2|1) &= (-3p/8K_x^2) + (p/K_x^3)S(x\gamma|\omega S_x) - (p^2/2K_x^4)S(x^2|S_x^2) \\
S(\delta^2|1) &= -(q+3p/8)/K_x^2 + [(1+q)/K_x^3]S(x\delta|\omega S_x) \\
&\quad - [(1+q)^2/2K_x^4]S(x^2|S_x^2) \\
S(\gamma\delta|1) &= -(p/4K_x^2) + [(1+q)/K_x^3]S(x\gamma|\omega S_x) + (p/K_x^3)S(x\delta|\omega S_x) \\
&\quad - [p(1+q)/K_x^4]S(x^2|S_x^2) \tag{22}
\end{aligned}$$

在二级轴向 S 矩阵的28个非零元素中, $S(xy|C_y)$ 、 $S(\gamma y|\omega S_y)$ 、 $S(\delta y|\omega S_y)$ 等3个元素是最基本的元素; 另外有5个元素可由下列的线性关系式导出; 其余的20个元素均是前8个元素中某个元素的简单倍数。

$$\begin{aligned}
2S(xy|C_y) + (K_x/K_y)S(xy|S_x S_y) &= -(1+q) \\
S(xy|C_y) + K_y S(x\beta|S_y) &= -(1+q) \\
S(\alpha y|S_y) &= (1/K_y)S(xy|C_y) + (1/K_x)S(xy|S_x S_y) \\
S(\delta\beta|S_y) &= (1/K_y^2)S(\delta y|\omega S_y) - [(1+q)/2K_x^2]S(x\beta|S_y) \\
S(\gamma\beta|S_y) &= (1/K_y^2)S(\gamma y|\omega S_y) - [p/2K_x^2]S(x\beta|S_y) \tag{23}
\end{aligned}$$

此外, 还存在着下列普遍的关系

$$\begin{aligned}
S^x(n|1) + S^x(n|C_x) &= 0 \\
S^x(n|S_x) + (1/K_x)S^x(n|\omega C_x) + S^x(n|S_x C_x) + (K_y/K_x)S^x(n|S_y C_y) &= 0 \\
S^y(n|C_y) + S^y(n|C_x C_y) &= 0 \tag{24}
\end{aligned}$$

在径向与轴向 S 矩阵之间还存在有

$$S^y(xy|C_y) = -2S^x(y^2|S_y^2) \tag{25}$$

三级径向 S 矩阵各元素间也存在着众多的这类关系式。上述关于 S 矩阵一系列关系式的意义及应用, 是值得进一步深入研究的。

4 结 语

(1)在以逐步近似法计算带电粒子高阶轨迹的过程中, 可以采用逐次积分方法代替运算较为冗繁的待定系数法。处理方法的简便可以减少出错、使计算快捷、也有利于使用计算机进行计算。

(2)研究与分析象差系数间的相互关系, 历来都是颇受重视的课题^[5,6]。采用逐次积分方法求解方程, 有助于认识轨迹 S 矩阵的结构。这对于离子光学的理论研究及实际仪器的优化设计具有一定的意义。

(3)由于(14)、(13)式的 m^x 、 m^y 的概括性, (15)、(16)式给出的 L 矩阵可以适用于

广泛的情况。也就是说, 在计算某个离子光学系统的轨迹时, 若推导 G 矩阵时得到的 m^x 或 m^y 与(14)、(13)式相同。可直接引用图1或图2(b)所示的 L 矩阵。如果 m^x 或 m^y 中出现了新的因子, 则应把新因子代入(7)式中计算积分, 再用积分的结果扩展或修改相应的 L 矩阵。对于新的系统, 要特别注意轨迹方程齐次通解是否具有高阶项。只有仔细分析高阶项的具体形式, 才能正确求得带电粒子的高阶轨迹。

(4)逐次积分方法不仅适用于具有曲线光轴的扇形场, 它是一种普遍的方法。例如对于直线光轴的离子光学系统, 若采用文献[3]的符号并且把正、余弦函数扩展为双曲正、余弦函数, 本文第3节的讨论都能成立。

参 考 文 献

- 1 陈仁术, 西门纪业. 物理学报, 1982, 31: 722, 738
- 2 Fujita Y, Matsuda H, Matsuo T. Nucl Instr Meth, 1977, 144: 279
- 3 Fujita Y. Nucl Instr Meth, 1978, 155: 39
- 4 Ximen Jiye, Chen Renshu. Int J Mass Spectr Ion Phys, 1982, 44: 129, 153
- 5 Wollnik H, Berz M. Nucl Instr Meth, 1985, a238: 127
- 6 Wollnik H. Optics of Charged Particles, 1987

A Successive Integration Method for Solving Higher Order Trajectory Equations in Ion Optical Systems

Chen Renshu* Ximen Jiye

Abstract In this paper, an improved theoretical method for solving higher order trajectory equations in ion optical systems has been proposed and investigated. By integrating the homogeneous solution of trajectory equations successively, the relationships between the $[G]$ -matrix (which characterizes inhomogeneous terms in trajectory equations) and $[S]$ -matrix (which characterizes the particular solution of the corresponding inhomogeneous trajectory equations) is established. Moreover, by defining a transfer matrix $[L]$, higher order trajectories solution is reduced to the multiplication of $[G]$ -matrix and $[L]$ -matrix, i. e. $[S]=[G][L]$. Meanwhile, some equalities between different elements in the $[S]$ -matrix is deduced.

Keywords generating matrix for the inhomogeneous solutions, equalities in $[S]$ -matrix, ion optical system, trajectory equation, higher order trajectory

* Department of Physics