01;10

Применение метода матрицантов для расчета аберрационных коэффициентов третьего порядка секторного магнитного поля с учетом краевых эффектов

© С.Н. Мордик, А.Г. Пономарев

Институт прикладной физики НАН Украины,
244030 Сумы, Украина
e-mail: iapuas@gluk.apc.org.

(Поступило в Редакцию 11 октября 2000 г.)

Для исследования нелинейной динамики заряженных частиц в магнитных секторных анализаторах применен метод матрицантов. При расчете матрицантов (матриц переноса) учтены краевые эффекты, связанные с влиянием рассеянного поля, а также высшие гармоники секторного магнитного поля до третьего порядка включительно. В случае прямоугольного распределения компонент поля вдоль оптической оси получены аналитические выражения для всех аберрационных коэффициентов, в том числе и дисперсионных, до третьего порядка включительно. Для моделирования реальных полей с шириной рассеянного поля, отличной от нуля, применено гладкое распределение компонент, для которого вычисление аналогичных аберрационных коэффициентов выполнено численно с применением консервативного численного метода.

Из всего многообразия подходов к решению задач нелинейной динамики пучка особо следует отметить консервативные (с обеспечением сохранения фазового объема пучка на каждом шаге вычислений) матричные методы расчета ионно-оптических систем, к которым относится метод матрицантов [1–6]. Свойство консервативности особенно важно для исследования нелинейной динамики фазового множества в протяженных системах, где используются несколько ионно-оптических элементов. Математическая строгость формализма метода матрицантов позволяет избегать порой спорных допущений при расчетах ионно-оптических систем. К достоинствам метода стоит также отнести простоту алгоритмизации, что позволяет использовать современные программные средства аналитических вычислений для нахождения решений. В настоящее время на основе метода матрицантов разработаны и успешно используются численные коды для оптимизации зондоформирующих систем, позволяющие решать задачу нелинейной динамики пучков для бездисперсионных систем с прямоугольной осью в декартовой системе координат для случая верхнетреугольной матрицы коэффициентов $P^{(3)}$ [2,3]. В данной работе для исследования дисперсионных свойств секторных магнитных систем вводится вектор дисперсионных фазовых моментов. Для случая реального секторного магнитного поля матрица коэффициентов $P^{(3)}$, получаемая при помощи метода погружения в пространство фазовых моментов, имеет верхнетреугольный вид в общепринятой криволинейной ортогональной системе координат [7] как для фазовых моментов координат, так и дисперсионных фазовых моментов. Для учета влияния краевых эффектов на динамику пучков заряженных частиц рассмотрены две модели продольного распределения магнитного поля: прямоугольная и гладкая. Прямоугольная модель предполагает отсутствие области рассеянного поля. В отличие от модели краевого поля с резкой осечкой (КПРО) [8] в прямоугольной модели напряженность магнитного поля описывается ступенчатой функцией, первая производная от которой равна дельта-функции. Данная модель позволяет учитывать влияние краевых эффектов на динамику пучка (в частности, при применении магнитных экранов в масс-анализаторах), а также исследовать сходимость решений для гладкой модели поля к прямоугольной в случае, когда ширина рассеянного поля стремится к нулю. Гладкая модель поля вводится с целью аппроксимации распределения поля с достаточной степенью точности, чтобы учесть влияние краевых рассеянных полей на динамику пучка в ионно-оптической системе. В отличие от широкоизвестных матриц переноса третьего порядка магнитных секторных анализаторов [9,10] матрицанты, полученные в данной работе, позволяют учитывать краевые эффекты как для прямоугольной, так и гладкой модели поля, при этом консервативность расчетов обеспечивается на каждом шаге вычислений.

Введем натуральную систему координат x, y, s, связанную с плоской кривой, однозначно определяемой постоянным радиусом кривизны ρ. Данная система координат полностью совпадает с системой, применяемой Брауном [7]. Связь между декартовой системой координат $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ с началом координат в точке начала движения осевой частицы и выбранной системой координат с началом координат, размещенным в центре радиуса кривизны реперной частицы, записывается в виде

$$\tilde{x} = (x + \rho)\cos(s/\rho) - \rho,$$

$$\tilde{y} = y, \quad \tilde{z} = (x + \rho)\sin(s/\rho).$$

Рассмотрим нерелятивистский случай движения частиц в выбранной системе координат. С учетом того, что коэффициенты Ламэ для данной системы координат

$h_1 = 1$, $h_2 = 1$, $h_3 = 1 + x/\rho$, траекторные уравнения можно записать в виде [11]

$$x'' + \frac{JT'}{\vartheta}x' - \frac{h_3}{\rho} = \frac{qT'}{m\vartheta}(y'B_s - h_3B_y),$$

$$y'' + \frac{JT'}{\vartheta}y' = \frac{qT'}{m\vartheta}(h_3B_x - x'B_s),$$

$$J = \frac{d}{ds}\left(\frac{\vartheta}{T'}\right) = \frac{q}{mh_3}(x'B_y - y'B_x) - \frac{2\vartheta x'}{T'h_3\rho},$$

$$T' = \sqrt{h_3^2 + x'^2 + y'^2}, \tag{1}$$

штрих означает дифференцирование по s; T — абсолютная величина элемента длины траектории при одновременном приращении всех трех координат; ϑ, m, q — постоянная скорость, масса и заряд частицы.

Учитывая условие симметрии $V(x, y, s) = -V(x, -y, s)$, выражения для скалярного магнитного потенциала $V(x, y, s)$ и индукции магнитного поля $\mathbf{B}(x, y, s)$ с точностью до третьего порядка разложения в ряд вблизи осевой траектории имеют вид

$$-V(x, y, s) = V_{01}(s)y + V_{11}(s)xy + \frac{1}{2}V_{21}(s)x^2y + \frac{1}{6}V_{03}(s)y^3 + \frac{1}{6}V_{31}(s)x^3y + \frac{1}{6}V_{13}(s)xy^3,$$

$$B_x(s) = V_{11}(s)y + V_{21}(s)xy + \frac{1}{2}V_{31}(s)x^2y + \frac{1}{6}V_{13}(s)y^3,$$

$$B_y(s) = V_{01}(s) + V_{11}(s)x + \frac{1}{2}V_{21}(s)x^2 + \frac{1}{2}V_{03}(s)y^2 + \frac{1}{6}V_{31}(s)x^3 + \frac{1}{2}V_{13}(s)xy^2,$$

$$B_s(s) = \frac{1}{h_3}\left(V'_{01}(s)y + V'_{11}xy + \frac{1}{2}V'_{21}(s)x^2y + \frac{1}{6}V'_{03}(s)y^3\right). \tag{2}$$

Очевидно, что коэффициенты

$$V_{j1}(s) = \left(\frac{\partial^j B_y(s)}{\partial x^j}\right)\bigg|_{\substack{x=0\\y=0}}$$

Введем обозначение

$$V_{01}(s) = \left(B_y(s)\right)\big|_{\substack{x=0\\y=0}} = B_0(s),$$

$$V_{11}(s) = \left(\frac{\partial B_y(s)}{\partial x}\right)\bigg|_{\substack{x=0\\y=0}} = G(s),$$

$$V_{21}(s) = \left(\frac{\partial^2 B_y(s)}{\partial x^2}\right)\bigg|_{\substack{x=0\\y=0}} = W(s),$$

$$V_{31}(s) = \left(\frac{\partial^3 B_y(s)}{\partial x^3}\right)\bigg|_{\substack{x=0\\y=0}} = O(s).$$

Для практических расчетов часто вместо $G(s)$ используют показатель спада поля

$$n = \rho\left(\frac{1}{B_y}\frac{\partial B_y}{\partial x}\right)\bigg|_{\substack{x=0\\y=0}}.$$

С учетом того, что скалярный магнитный потенциал V должен удовлетворять уравнению Лапласа $\Delta V = 0$, получим выражения для компонент потенциала с точностью до третьего порядка разложения в ряд вблизи осевой траектории

$$V_{03}(s) = -\left(B''_0(s) + W(s) + hG(s)\right),$$

$$V_{13}(s) = 2hB''_0(s) + h^2G(s) - G''(s) - O(s) - hW(s), \tag{3}$$

где $h = 1/\rho$.

Выражение для индукции магнитного поля, а также коэффициентов $G(s)$, $W(s)$ и $O(s)$ может быть представлено в виде

$$B_0(\tau) = \check{B}_0\Theta(\tau), \quad G(\tau) = \check{G}\Theta(\tau),$$

$$W(\tau) = \check{W}\Theta(\tau), \quad O(\tau) = \check{O}\Theta(\tau). \tag{4}$$

Для прямоугольной модели поля

$$\Theta(\tau) = u_+(\tau - s_0) - u_+(s - \tau), \tag{5}$$

где $u_+(t)$ — ступенчатая функция [12], удовлетворяющая условиям

$$\frac{d}{dt}u_+(t) = \delta_+(t),$$

$$\int\limits_{a+0}^{b}\varphi(\varepsilon)\delta_+(\varepsilon - t)d\varepsilon = \begin{cases} 0 & t < a,\ t \geqslant b, \\ \varphi(t+0) & a \leqslant t < b, \end{cases}$$

$$\int\limits_{a+0}^{b}\varphi(\varepsilon)\delta_+^{(r)}(\varepsilon - t)d\varepsilon = \begin{cases} 0 & t < a,\ t \geqslant b, \\ (-1)^r\varphi^{(r)}(t+0), & a \leqslant t < b. \end{cases} \tag{6}$$

Для гладкой модели поля

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 1 & s_1 \leqslant \tau \leqslant s_2, \\ 0 & \tau < s_0,\ \tau > s \\ \frac{1}{1+eC_0+C_1\eta(\tau)+C_2\eta^2(\tau)+C_3\eta^3(\tau)} & s_0 \leqslant \tau \leqslant s_1, \\ \frac{1}{1+eC_4+C_5\nu(\tau)+C_6\nu^2(\tau)+C_7\nu^3(\tau)} & s_2 < \tau \leqslant s, \end{cases} \tag{7}$$

где s_0 и s — точки входа и выхода заряженных частиц в секторном магнитном поле, s_1 и s_2 определяют границы рассеянных полей.

Для исследования дисперсионных свойств секторных магнитных систем введем вектор дисперсионных фазовых моментов $\{\mu, \mu'\}^T$, где $\nu = (\Delta p)/p$ — разброс заряженных частиц по импульсу. В связи с тем, что в секторных магнитных анализаторах $\mu' = 0$, для описания нелинейной динамики заряженных частиц в секторных магнитных полях будем использовать вектор $\bar{\hat{Q}}^{(3)}_{x,x',y,y',\mu} = \{x, x', y, y', \mu, x^2, x \cdot x', x'^2, y^2, y \cdot y', y'^2, x \cdot y, x' \cdot y, x \cdot y', x' \cdot y', x \cdot \mu, x' \cdot \mu, y \cdot \mu, y' \cdot \mu, \mu^2, x^3, x^2 \cdot x', x \cdot x'^2, x'^3, x \cdot y^2, x \cdot y \cdot y', x \cdot y'^2, x' \cdot y^2, x' \cdot y \cdot y', x' \cdot y'^2, y^3, y^2 \cdot y', y \cdot y'^2, y'^3, y \cdot x^2, y \cdot x \cdot x', y \cdot x'^2, y' \cdot x^2, y' \cdot x \cdot x', y' \cdot x'^2, x^2 \cdot \mu, x \cdot x' \cdot \mu, x'^2 \cdot \mu, y^2 \cdot \mu, y \cdot y' \cdot \mu, y'^2 \cdot \mu, x \cdot y \cdot \mu, x' \cdot y \cdot \mu, x \cdot y' \cdot \mu, x' \cdot y' \cdot \mu, x \cdot \mu^2, x' \cdot \mu^2, y \cdot \mu^2, y' \cdot \mu^2, \mu^3\}^T$, содержащий пятьдесят пять фазовых моментов первого, второго и третьего порядков.

Нелинейные уравнения движения пучка заряженных частиц в секторном магнитном поле (1) посредством погружения в пространство фазовых моментов $\hat{Q}^{(3)}_{x,x',y,y',\mu}$ заменяются расширенной системой линейных дифференциальных уравнений, которая в матричном виде записывается следующим образом:

$$\frac{d}{ds}\left(\bar{\hat{Q}}^{(3)}_{x,x',y,y',\mu}\right) = P^{(3)}\bar{\hat{Q}}^{(3)}_{x,x',y,y',\mu}, \tag{8}$$

где

$$P^{(3)}(s) = \begin{Bmatrix} P^{1,1} & P^{1,2} & P^{1,3} \\ 0 & P^{2,2} & P^{2,3} \\ 0 & 0 & P^{3,3} \end{Bmatrix}$$

— матрица коэффициентов, имеющая верхнетреугольную структуру.

Решение таким образом полученной линейной системы уравнений является приближением к решению исходной нелинейной системы с заданным порядком аппроксимации по фазовым переменным.

Для определения блочных элементов матрицы коэффициентов $P^{(3)}$ применим метод погружения в пространство фазовых моментов [1]. После преобразований получим

$$P^{1,1} = \begin{Bmatrix} H^{1,1} & 0 & H^{1,3} \\ 0 & H^{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & H^{3,3} \end{Bmatrix}, \qquad P^{1,2} = \begin{Bmatrix} H^{1,4} & H^{1,5} & 0 & H^{1,7} & 0 & H^{1,9} \\ 0 & 0 & H^{2,6} & 0 & H^{2,8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{1,3} = \begin{Bmatrix} H^{1,10} & H^{1,11} & 0 & H^{1,13} & 0 & H^{1,15} & H^{1,16} & H^{1,17} & 0 & H^{1,19} \\ 0 & 0 & H^{2,12} & 0 & H^{2,14} & 0 & 0 & 0 & H^{2,18} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{2,2} = \begin{Bmatrix} H^{4,4} & 0 & 0 & H^{1,7} & 0 & 0 \\ 0 & H^{5,5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H^{6,6} & 0 & H^{6,8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H^{7,7} & 0 & H^{7,9} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & H^{8,8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{9,9} \end{Bmatrix},$$

$$P^{1,3} = \begin{Bmatrix} H^{4,10} & H^{4,11} & 0 & 0 & H^{4,14} & 0 & 0 & H^{4,16} & 0 & 0 \\ 0 & H^{5,11} & 0 & 0 & 0 & H^{5,15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H^{6,12} & H^{6,13} & 0 & 0 & H^{6,16} & 0 & H^{6,18} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & H^{7,14} & H^{7,15} & 0 & H^{7,17} & 0 & H^{7,19} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{8,16} & 0 & H^{8,18} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{3,3} = \begin{Bmatrix} H^{10,10} & 0 & 0 & 0 & H^{10,14} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H^{11,11} & 0 & 0 & 0 & H^{11,15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H^{12,12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H^{13,13} & 0 & 0 & H^{13,16} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & H^{14,14} & 0 & 0 & H^{14,17} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{15,15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{16,16} & 0 & H^{16,18} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{17,17} & 0 & H^{17,19} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{18,18} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H^{19,19} \end{Bmatrix},$$

$$H^{1,1}=H^{7,7}=H^{17,17}=\begin{Bmatrix}0 & 1\\ -k & 0\end{Bmatrix},\qquad H^{1,3}=H^{7,9}=H^{17,19}=\begin{Bmatrix}0\\ h\end{Bmatrix},$$

$$H^{1,4}=H^{7,14}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ -h^3+2hg-\frac{1}{2}w & 0 & \frac{1}{2}h\end{Bmatrix},\qquad H^{1,5}=H^{7,15}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ \frac{1}{2}b_2-\frac{1}{2}hg+\frac{1}{2}w & b_1 & -\frac{1}{2}h\end{Bmatrix},$$

$$H^{1,7}=H^{7,17}=\begin{Bmatrix}0 & 0\\ 2h^2-g & 0\end{Bmatrix},\qquad H^{1,10}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ \frac{1}{2}h^4+h^2g-hw+\frac{1}{6}o & 0 & -2h^2+\frac{3}{2}g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{1,9}=H^{7,19}=\begin{Bmatrix}0\\ -h\end{Bmatrix},\qquad H^{1,11}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ -\frac{1}{2}h^2g-\frac{1}{2}g_2+\frac{3}{2}hw-\frac{1}{2}o & -g_1 & \frac{1}{2}g & 0 & -g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{1,17}=\begin{Bmatrix}0 & 0\\ -2h^2+g & 0\end{Bmatrix},\qquad H^{1,14}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ h^3-2hg+\frac{1}{2}w & 0 & \frac{3}{2}h\end{Bmatrix},\qquad H^{3,3}=H^{9,9}=H^{19,19}=\begin{Bmatrix}0\\ 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{1,15}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ -\frac{1}{2}b_2+\frac{1}{2}hg-\frac{1}{2}w & b_1 & \frac{1}{2}h\end{Bmatrix},\qquad H^{1,19}=\begin{Bmatrix}0\\ h\end{Bmatrix},\qquad H^{2,2}=H^{8,8}=H^{18,18}=\begin{Bmatrix}0 & 1\\ -g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{2,6}=H^{8,16}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ -2hg & 0 & -b_1 & h\end{Bmatrix},\qquad H^{2,8}=H^{8,18}=\begin{Bmatrix}0 & 0\\ g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{2,12}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{3}{2}g & -\frac{1}{2}h\end{Bmatrix},\qquad H^{2,13}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ -h^2g & g_1 & -\frac{1}{2}g & 0 & -2h^2+g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{2,16}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 2hg-w & 0 & b_1 & h\end{Bmatrix},\qquad H^{2,18}=\begin{Bmatrix}0 & 0\\ -g & 0\end{Bmatrix},\qquad H^{4,4}=H^{14,14}=\begin{Bmatrix}0 & 2 & 0\\ -k & 0 & 1\\ 0 & -2k & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{4,7}=H^{17,15}=\begin{Bmatrix}0 & 0\\ h & 0\\ 0 & 2h\end{Bmatrix},\qquad H^{4,11}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ \frac{1}{2}b_2-\frac{1}{2}hg+\frac{1}{2}w & b_1 & -\frac{1}{2}h & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & b_2-hg+w & 2b_1 & -h\end{Bmatrix},$$

$$H^{4,10}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ -h^3+2hg-\frac{1}{2}w & 0 & \frac{1}{2}h & 0\\ 0 & -2h^3+4hg-w & 0 & h\end{Bmatrix},\qquad H^{4,14}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ 2h^2-g & 0 & 0\\ 0 & 4h^2-2g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{4,17}=\begin{Bmatrix}0 & 0\\ -h & 0\\ 0 & -2h\end{Bmatrix},\qquad H^{5,5}=H^{15,15}=\begin{Bmatrix}0 & 2 & 0\\ -g & 0 & 1\\ 0 & -2g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{5,11}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ -2hg & 0 & 0 & -b_1 & h & 0\\ 0 & -4hg & 0 & 0 & -2b_1 & 2h\end{Bmatrix},\qquad H^{5,15}=\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ g & 0 & 0\\ 0 & 2g & 0\end{Bmatrix},$$

$$H^{6,6} = H^{16,16} = \left\{\begin{matrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ -g & 0 & 0 & 1 \\ -k & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -k & -g & 0 \end{matrix}\right\}, \quad H^{6,8} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ h & 0 \\ 0 & h \end{matrix}\right\}, \quad H^{6,16} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ g & 0 & 0 & 0 \\ 2h^2 - g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2h^2 - g & g & 0 \end{matrix}\right\},$$

$$H^{6,12} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}b_2 - \frac{1}{2}hg + \frac{1}{2}w & b_1 & -\frac{1}{2}h & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}b_2 - \frac{1}{2}hg + \frac{1}{2}w & b_1 & -\frac{1}{2}h \end{matrix}\right\},$$

$$H^{6,13} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2hg + w & -b_1 & 0 & 0 & h & 0 \\ -h^3 + 2hg - \frac{1}{2}w & 0 & \frac{1}{2}h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2hg + w & -b_1 & -h^3 + 2hg - \frac{1}{2}w & 0 & \frac{3}{2}h \end{matrix}\right\}, \quad H^{6,18} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ -h & 0 \\ 0 & -h \end{matrix}\right\},$$

$$H^{10,10} = \left\{\begin{matrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ -k & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2k & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -3k & 0 \end{matrix}\right\}, \quad H^{10,14} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & 0 \\ 0 & 2h & 0 \\ 0 & 0 & 3h \end{matrix}\right\}, \quad H^{12,12} = \left\{\begin{matrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ -g & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2g & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -3g & 0 \end{matrix}\right\},$$

$$H^{11,11} = \left\{\begin{matrix} 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -g & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2g & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -k & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -k & 0 & -g & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -k & 0 & -2g & 0 \end{matrix}\right\}, \quad H^{11,15} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & h \end{matrix}\right\},$$

$$H^{13,13} = \left\{\begin{matrix} 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -k & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2k & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -g & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -g & 0 & -k & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -g & 0 & -2k & 0 \end{matrix}\right\}, \quad H^{13,16} = \left\{\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2h \end{matrix}\right\}, \qquad (9)$$

где

$$\chi_B = \frac{m\vartheta}{q}, \quad h = \frac{1}{\rho} = \frac{\check{B}_0}{\chi_B}, \quad b_1 = \frac{B_0'(s)}{\chi_B}, \quad b_2 = \frac{B_0''(s)}{\chi_B}, \quad k = h^2 - g, \quad g = -\frac{G(s)}{\chi_B},$$

$$g_1 = -\frac{G'(s)}{\chi_B}, \quad w = \frac{W(s)}{\chi_B}, \quad o = -\frac{O(s)}{\chi_B}.$$

Связь между коэффициентом g и показателем спада n можно записать в виде

$$g = nh^2. \tag{10}$$

Решение уравнения (8) записывается через матрицант в виде

$$\bar{\hat{Q}}^{(3)}_{x,x',y,y',\mu} = X(P^{(3)}, s/s_0)\bar{\hat{Q}}^{(3)}_{x_0,x_0',y_0,y_0',\mu}, \tag{11}$$

где $\bar{\hat{Q}}^{(3)}_{x_0,x_0',y_0,y_0',\mu}$ — начальные координаты частиц; $X(P^{(3)}, s/s_0)$ — матрицант (матрица переноса) третьего порядка по фазовым переменным $\hat{Q}^{(3)}_{x,x',y,y',\mu}$.

Матрицант $X(P^{(3)}, s/s_0)$ имеет такую же, как и матрица коэффициентов $P^{(3)}$, верхнетреугольную блочную структуру

$$X(P^{(3)}, s/s_0) = \begin{Bmatrix} X^{1,1} & X^{1,2} & X^{1,3} \\ 0 & X^{2,2} & X^{2,3} \\ 0 & 0 & X^{3,3} \end{Bmatrix}$$

и удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$X'(P^{(3)}, s/s_0) = P^{(3)} X(P^{(3)}, s/s_0), \quad X(P^{(3)}, s/s_0) = I, \tag{12}$$

где I — единичная матрица.

Для прямоугольной модели поля интегралы в (12) могут быть взяты в квадратурах, а следовательно, элементы матрицанта $X(P^{(3)}, s/s_0)$ будут иметь аналитический вид. Решения линеаризованных уравнений

$$\frac{dX^{1,1}(s/s_0)}{ds} = P^{1,1}(s)X^{1,1}(s/s_0), \quad X^{1,1}(s/s_0) = I$$

можно записать в виде

$$X^{1,1} = \begin{Bmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 & d_{11} \\ r_{21} & r_{22} & 0 & 0 & d_{21} \\ 0 & 0 & q_{11} & q_{12} & 0 \\ 0 & 0 & q_{21} & q_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix}, \tag{13}$$

где

$$r_{11} = \cos\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big), \quad r_{12} = \frac{1}{\sqrt{k}}\sin\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big),$$

$$r_{21} = -\sqrt{k}\sin\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big), \quad r_{22} = \cos\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big),$$

$$q_{11} = \cos\big(\sqrt{g}(s-s_0)\big), \quad q_{12} = \frac{1}{\sqrt{g}}\sin\big(\sqrt{g}(s-s_0)\big),$$

$$q_{21} = -\sqrt{g}\sin\big(\sqrt{g}(s-s_0)\big), \quad q_{22} = \cos\big(\sqrt{g}(s-s_0)\big),$$

$$d_{11} = \frac{h}{k}\Big(1-\cos\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big)\Big), \quad d_{21} = \frac{h}{\sqrt{k}}\sin\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big).$$

Для однородного поля $(n = 0)$

$$r_{11} = \cos\big(h(s-s_0)\big), \quad r_{12} = \frac{1}{h}\sin\big(h(s-s_0)\big),$$

$$r_{21} = -h\sin\big(h(s-s_0)\big), \quad r_{22} = \cos\big(h(s-s_0)\big),$$

$$q_{11} = 1, \quad q_{12} = s-s_0, \quad q_{21} = 0, \quad q_{22} = 1,$$

$$d_{11} = \frac{1}{h}\Big(1-\cos\big(h(s-s_0)\big)\Big), \quad d_{21} = \sin\big(h(s-s_0)\big).$$

Пусть b_{ij} — элементы блочной матрицы $X^{1,1}$, $i = 1,\dots,5$, $j = 1,\dots,5$. Тогда аналитические решения для уравнения (15) в рамках прямоугольной модели поля для диагональных матричных блоков $X^{k,k}$, где $k = 2, 3$, несложно получить при помощи простых алгебраических вычислений. Например, для $y' \cdot x \cdot x'$ строки матричного блока $X^{3,3}$ из $y'xx' = (b_{41}x_0 + b_{42}x_0' + b_{43}y_0 + b_{44}y_0' + b_{45}\mu)(b_{11}x_0 + b_{12}x_0' + b_{13}y_0 + b_{14}y_0' + b_{15}\mu)(b_{21}x_0 + b_{22}x_0' + b_{23}y_0 + b_{24}y_0' + b_{25}\mu)$, учитывая, что $b_{11} = r_{11}$, $b_{12} = r_{12}$, $b_{21} = r_{21}$, $b_{22} = r_{22}$, $b_{15} = d_1$, $b_{25} = d_{21}$, $b_{43} = q_{21}$, $b_{44} = q_{22}$, $b_{13} = b_{14} = b_{23} = b_{24} = b_{41} = b_{42} = b_{45} = 0$, получаем

$$X^{3,3}_{16,15} = r_{11}r_{12}q_{21}, \quad X^{3,3}_{16,16} = (r_{11}r_{22} + r_{21}r_{12})q_{21},$$

$$X^{3,3}_{16,17} = r_{12}r_{22}q_2, \quad X^{3,3}_{16,18} = r_{11}r_{21}q_{22},$$

$$X^{3,3}_{16,19} = (r_{11}r_{22} + r_{21}r_{12})q_{22}, \quad X^{3,3}_{16,20} = r_{12}r_{22}q_{22},$$

$$X^{3,3}_{16,27} = (r_{11}d_{21} + r_{21}d_{11})q_{21},$$

$$X^{3,3}_{16,28} = (r_{12}d_{21} + r_{22}d_{11})q_2, \quad X^{3,3}_{16,29} = (r_{11}d_{21} + r_{21}d_{11})q_{22},$$

$$X^{3,3}_{16,30} = (r_{12}d_{21} + r_{22}d_{11})q_{22},$$

$$X^{3,3}_{16,33} = d_{11}d_{21}q_2, \quad X^{3,3}_{16,34} = d_{11}d_{21}q_{22},$$

остальные матричные элементы этой строки равны нулю.

Применяя аналогичную процедуру для всех компонент фазовых моментов второго и третьего порядка, получаем аналитические выражения для всех элементов диагональных блоков $X^{2,2}$ и $X^{3,3}$. Для недиагональных блоков $X^{i,k}$, $k > i$ имеет место общая формула [1]

$$X^{i,k}(s/s_0) = \sum_{j=1+i}^{k} \int_{s_0}^{s} X^{i,i}(s/\tau)P^{i,j}(\tau)X^{i,k}(\tau/s_0)d\tau. \tag{14}$$

Таким образом, аберрационные коэффициенты второго порядка в выбранной криволинейной системе координат мы можем определить при помощи формулы

$$X^{1,2}(s/s_0) = \int_{s_0}^{s} X^{1,1}(s/\tau)P^{1,2}(\tau)X^{2,2}(\tau/s_0)d\tau. \tag{15}$$

Так, дисперсионный аберрационный коэффициент $\langle x|\mu^2\rangle$ определяется по формуле

$$X^{1,2}_{1,15}(s/s_0) = \langle x|\mu^2\rangle = \int\limits_{s_0}^{s} X^{1,1}_{1,2}(s/\tau)\Big[H^{1,4}_{2,1}(\tau)\big(X^{1,1}_{1,5}(\tau/s_0)\big)^2$$

$$+ H^{1,4}_{2,3}(\tau)\big(X^{1,1}_{2,5}(\tau/s_0)\big)^2 + H^{1,7}_{2,1}(\tau)X^{1,1}_{1,5}(\tau/s_0) + H^{1,9}_{2,1}(\tau)\Big]d\tau$$

$$= \frac{1}{k^3}\Bigg((C_x-1)\left(\frac{4}{3}h^5 - \frac{7}{3}h^3k + hk^2 + khg - \frac{8}{3}h^3g + \frac{2}{3}h^2w\right)$$

$$- S_x^2\left(\frac{1}{3}h^5 + \frac{1}{6}h^3k - \frac{2}{3}h^3g + \frac{1}{6}h^2w\right)$$

$$+ S_x\sqrt{k}(s-s_0)\Big(h^5 - h^3k - 2h^3g + \frac{1}{2}hkg + \frac{1}{2}h^2w\Big)\Bigg),$$

где

$$H^{1,4}_{2,1}(\tau) = -h^3 + 2hg - \frac{1}{2}w, \quad H^{1,4}_{2,3}(\tau) = \frac{1}{2}h,$$

$$H^{1,7}_{2,1}(\tau) = 2h^2 - g, \quad H^{1,9}_{2,1}(\tau) = -h,$$

$$X^{1,1}_{1,2}(s/\tau) = \frac{1}{\sqrt{k}}\sin\Big(\sqrt{k}(s-\tau)\Big),$$

$$X^{1,1}_{1,5}(\tau/s_0) = \frac{h}{k}\Big(1 - \cos\big(\sqrt{k}(\tau - s_0)\big)\Big),$$

$$X^{1,1}_{2,5}(\tau/s_0) = \frac{h}{\sqrt{k}}\sin\Big(\sqrt{k}(\tau - s_0)\Big),$$

$$C_x = \cos\Big(\sqrt{k}(s-s_0)\Big), \quad S_x = \sin\Big(\sqrt{k}(s-s_0)\Big). \qquad (16)$$

Для случая однородного поля ($g = 0$, $w = 0$, $k = h^2$) мы получаем известное [7] выражение для данного коэффициента аберрации

$$\langle x|\mu^2\rangle = -\frac{1}{2h}\sin^2\big(h(s-s_0)\big).$$

Аберрационные коэффициенты третьего порядка в выбранной криволинейной системе координат вычисляются по формуле

$$X^{1,3}(s/s_0) = \int\limits_{s_0}^{s}\Big(X^{1,1}(s/\tau)P^{1,2}(\tau)X^{2,3}(\tau/s_0)$$

$$+ X^{1,1}(s/\tau)P^{1,3}(\tau)X^{3,3}(\tau/s_0)\Big)d\tau, \qquad (17)$$

при этом элементы недиагонального блока $X^{2,3}$ определяем по формуле

$$X^{2,3}(s/s_0) = \int\limits_{s_0}^{s} X^{2,2}(s/\tau)P^{2,3}(\tau)X^{3,3}(\tau/s_0)d\tau.$$

Матрица переноса третьего порядка фазовых моментов $\hat{Q}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\mu}$ в декартовой системе координат будет иметь вид

$$R^{(3)}(s/s_0) = A^{(3)}_{(x,y,s)\to(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})}X(P^{(3)}, s/s_0)A^{(3)}_{(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})\to(x,y,s_0)}, \qquad (18)$$

где $A^{(3)}_{(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})\to(x,y,s_0)}$, $A^{(3)}_{(x,y,s)\to(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})}$ — матрицы преобразования фазовых моментов из декартовой в натуральную на входе и из натуральной в декартовую систему координат на выходе секторного магнитного анализатора соответственно, которые несложно получить, учитывая, что при переходе от криволинейной к декартовой системе координаты не изменяются, а углы преобразуются по формулам

$$a = \frac{d\tilde{x}}{d\tilde{z}} = \frac{x'}{1+hx}, \qquad b = \frac{d\tilde{y}}{d\tilde{z}} = \frac{y'}{1+hx}. \qquad (19)$$

Аберрационные коэффициенты третьего порядка записываются в виде

$$\langle\tilde{x}|\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\mu}\rangle = R^{(3)}_{1,k}, \quad \langle a|\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\mu}\rangle = R^{(3)}_{2,k},$$

$$\langle\tilde{y}|\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\mu}\rangle = R^{(3)}_{3,k}, \quad \langle b|\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\mu}\rangle = R^{(3)}_{4,k}. \qquad (20)$$

где k — порядковый номер фазовой переменной.

Общее количество аберрационных коэффициентов третьего порядка равно $4 \times 55 = 220$. Ввиду ограниченности объема работы приведем выражения только для некоторых из аберрационных коэффициентов, в которых вклад краевых эффектов с нулевой протяженностью рассеянного поля наиболее существен.

В отличие от секторного электростатического поля, где вклад краевых эффектов с нулевой протяженностью рассеянного поля проявляется наличием добавок в аберрационных коэффициентах второго порядка по x и a $\langle\tilde{x}|\tilde{x}a\rangle$, $\langle a|\tilde{x}^2\rangle$, $\langle a|\tilde{x}a\rangle$, $\langle a|a^2\rangle$, $\langle\tilde{x}|y^2\rangle$, $\langle\tilde{x}|yb\rangle$, $\langle\tilde{x}|b^2\rangle$, $\langle a|y^2\rangle$, $\langle a|yb\rangle$, $\langle a|b^2\rangle$ [13], для секторного магнитного поля вклад проявляется в аберрационных коэффициентах $\langle\tilde{x}|y^2\rangle$, $\langle\tilde{x}|yb\rangle$, $\langle a|y^2\rangle$, $\langle a|yb\rangle$, $\langle a|b^2\rangle$

$$\langle\tilde{x}|y^2\rangle = R^{(3)}_{1,9} = \frac{1}{4k(k-4g)}\Big((1-C_x)(8g^2h - 2kgh - 4gw)$$

$$- kw(C_y^2 - S_y^2 - 2C_c)\Big) + \zeta\left(-\frac{h^2}{2\sqrt{k}}S_x\right),$$

$$\langle\tilde{x}|yb\rangle = R^{(3)}_{1,10} = \frac{1}{\sqrt{k}\sqrt{g}(k-4g)}(\sqrt{k}wC_y - \sqrt{g}wS_x) + \zeta\left(\frac{h}{\sqrt{k}}S_x\right),$$

$$\langle\tilde{x}|b^2\rangle = R^{(3)}_{1,11} = \frac{1}{2kg(k-4g)}$$

$$\times\Big((1-C_x)(4g^2h - kgh - 2gw) - kwS_y^2\Big),$$

$$\langle a|y^2\rangle = R^{(3)}_{2,9} = \frac{1}{2\sqrt{k}(k-4g)}\Big(S_x(4g^2h - kgh + kw - 2gw)$$

$$- 2\sqrt{k}\sqrt{g}wC_yS_y\Big) + \zeta\left(-h^2C_x + \frac{h^2}{2}C_y^2 + h\sqrt{g}S_y\right),$$

$$\langle a|yb\rangle = R^{(3)}_{2,10} = \frac{w}{(k-4g)}(-S_x - S_y^2 + C_y^2)$$

$$+ \zeta\left(hC_x - \frac{h^2}{\sqrt{g}}S_yC_y - h(C_y^2 - S_y^2)\right),$$

$$\langle a|b^2\rangle = R^{(3)}_{2,11} = \frac{1}{2\sqrt{k}\sqrt{g}(k-4g)}$$

$$\times\left(S_x(4hg\sqrt{g} - hk\sqrt{g} - 2\sqrt{g}w) + \sqrt{k}wS_yC_y\right)$$

$$+ \zeta\left(\frac{h^2}{2g}S_y^2 - \frac{h}{\sqrt{g}}S_yC_y\right),$$

где $C_x = \cos(\sqrt{k}(s - s_0))$, $S_x = \sin(\sqrt{k}(s - s_0))$, $C_y = \cos(\sqrt{g}(s - s_0))$, $S_y = \sin(\sqrt{g}(s - s_0))$, параметр $\zeta = 1$, если функция описывается уравнением (6), если положить параметр $\zeta = 0$ ($B'(s) = 0$, $B''(s) = 0$), мы получаем уравнения [7], широко используемые при расчетах ионно-оптических систем в случае, когда учет полей рассеивания производится путем замены реального поля идеальным полем, эквивалентным по углу поворота.

Для прямоугольного продольного распределения секторного магнитного поля получены аналитические выражения для всех элементов матрицанта, а следовательно, и для всех коэффициентов аберраций. Для вычисления матрицанта в случае гладкой модели продольного распределения поля использован консервативный численный метод челнок-сумм [6]. Проведено исследование сходимости решения задачи динамики пучка для гладкой модели с решением для прямоугольной модели при помощи разработанного пакета программ. Установлено, что для гладкой модели при стремлении ширины рассеянного поля к нулю величины коэффициентов аберраций стремятся к соответствующим величинам аберраций в прямоугольной модели. Исходя из этого можно сделать вывод о достоверности численного и аналитического решений.

Список литературы

[1] *Dymnikov A.D., Hellborg R.* // Nucl. Instr. and Meth. 1993. Vol. A330. P. 323–362.
[2] *Brazhnik V., Khomenko V., Lebed S., Ponomarev A.* // Nucl. Instr. and Meth. 1995. Vol. B104. P. 69.
[3] *Brazhnik V., Lebed S., Kwiatek W.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1997. Vol. B130. P. 104.
[4] *Dymnikov A.D.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1998. Vol. A403. P. 195–204.
[5] *Azbaid A.H., Dymnikov A.D., Martinez G.* // Nucl. Instr. and Meth. 1999. Vol. B158. P. 61–65.
[6] *Dymnikov A.D.* // Nucl. Instr. and Meth. 1995. Vol. A363. P. 435–439.
[7] *Brown K.L.* et al. // Rev. Sci. Instr. 1964. Vol. 35. P. 481.
[8] *Кузема А.С., Савин О.Р., Чертков И.Я.* Анализирующие системы магнитных масс-спектрометров. Киев: Наукова думка, 1987.
[9] *Matsuda H., Wollnik H.* // Nucl. Instr. and Meth. 1970. Vol. 77. P. 283–292.
[10] *Fujita Y., Matsuda H., Matsuo T.* // Nucl. Instr. and Meth. 1977. Vol. 144. P. 279–291.
[11] *Силадьи М.* Электронная и ионная оптика. М.: Мир, 1990. 639 с.
[12] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1968.
[13] *Мордик С.Н., Пономарев А.Г.* // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 4. С. 105–110.