01;10

Расчет матрицанта третьего порядка для секторного электростатического поля

© С.Н. Мордик, А.Г. Пономарев

Институт прикладной физики НАН Украины,
244030 Сумы, Украина

(Поступило в Редакцию 12 мая 2000 г.)

Предложен метод исследования ионно-оптических свойств электростатических секторных анализаторов заряженных частиц на основе метода матрицантов. Полученные матриканты можно эффективно применять для решения задачи динамики пучка в электростатических секторных полях с учетом краевых эффектов как в рамках прямоугольной, так и гладкой моделях поля.

Многие современные методики исследования твердого тела и плазмы основаны на анализе масс- и энергетических спектров заряженных частиц. В этих исследованиях применяются электростатические и магнитные анализаторы. При исследовании ионно-оптических свойств анализаторов заряженных частиц наиболее широкое распространение нашли матричные методы решения уравнений движения пучка в электрических и магнитных полях различной структуры. Матричный метод реализован в наиболее известном численном коде TRANSPORT [1]. Усовершенствованный вариант этой программы позволяет производить расчет транспортировки пучка в статических ускорительных и магнитных структурах с третьим порядком аппроксимации исходных уравнений движения. Из-за отсутствия элемента типа электростатического тороидального секторного конденсатора данный код не может быть применен при расчетах масс-анализаторов с двойной фокусировкой, содержащих этот элемент.

В данной статье, в рамках прямоугольной модели поля, получено аналитическое выражение для матрицанта 3-го порядка (частным случаем которого является матрица переноса в лучевой оптике) секторного электростатического поля тороидального конденсатора с учетом краевых эффектов с помощью метода матрициантов [2,3]. Полученная матрица $P^{(3)}$ может быть использована как для численного (с помощью метода челнок-сумм [4]), так и аналитического (в рамках прямоугольной модели поля методом матрициантов [2,3]) для определения аберрационных коэффициентов 3-го порядка по фазовым переменным. Верхние четыре строки матрицанта, полученного в результате аналитического либо численного решения системы дифференциальных уравнений движения заряженных частиц, содержат информацию об аберрационных коэффициентах исследуемой ионно-оптической системы. Использование консервативных методов расчета матрицантов (обеспечивается полное сохранение фазового объема на каждом шаге вычислений) при исследованиях конкретных ионно-оптических систем масс-анализаторов позволит уточнить условия транспортировки пучков заряженных частиц через эти системы.

Введем натуральную систему координат x, y, s, связанную с произвольной плоской кривой, однозначно определяемой радиусом кривизны ρ. Данная система координат полностью совпадает с системой, применяемой Брауном [5]. Связь между декартовой системой координат $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ с началом координат в точке начала движения осевой частицы и выбранной системы координат с началом координат, размещенным в центре радиуса кривизны реперной частицы, записывается в виде

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

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 [6]

$$x'' + \frac{GT'}{\vartheta}x' - \frac{h_3}{\rho} = \frac{q(T')^2}{m\vartheta^2}E_x,$$

$$y'' + \frac{GT'}{\vartheta}y' = \frac{q(T')^2}{m\vartheta^2}E_y, \tag{1}$$

где

$$G = \frac{d}{ds}\left(\frac{\vartheta}{T'}\right) = \frac{q}{mh_3}\frac{T'E_s}{\vartheta} - \frac{2\vartheta x'}{T'h_3\rho};$$

$$T' = \sqrt{h_3^2 + x'^2 + y'^2};$$

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

Определим ϑ^2 как функцию приращения потенциала поля в каждой точке относительно потенциала точек центральной траектории

$$\vartheta^2 = \frac{p_0^2}{m_0^2}\left((1+\mu^2) - \frac{\Delta U_x}{U_0}\right), \tag{2}$$

где ϑ — скорость частицы массы $m = m_0$ с разбросом по импульсу $\mu = \Delta p/p_0$; ΔU_x — разность потенциала между точкой $M(x, y, s)$ траектории иона и точками на оси $x = 0$, $y = 0$; U_0 — ускоряющее напряжение источника ионов.

Учитывая условие симметрии, выражения для потенциала $V(x,y,s)$ и напряженности электрического поля $\mathbf{E}(x,y,s)$ с точностью до третьего порядка разложения в ряд вблизи осевой траектории имеют вид:

$$V(x,y,s)=V_{10}(s)x+\frac{1}{2}V_{20}(s)x^2+\frac{1}{6}V_{30}(s)x^3+\frac{1}{24}V_{40}(s)x^4$$
$$+\frac{1}{2}V_{02}(s)y^2+\frac{1}{2}V_{12}(s)xy^2+\frac{1}{4}V_{22}(s)x^2y^2,$$
$$E_x(s)=V_{10}(s)+V_{20}(s)x+\frac{1}{2}V_{30}(s)x^2+\frac{1}{6}V_{40}(s)x^3$$
$$+\frac{1}{2}V_{12}(s)y^2+\frac{1}{2}V_{22}(s)xy^2,$$
$$E_y(s)=V_{02}(s)y+V_{12}(s)xy+\frac{1}{2}V_{22}(s)x^2y,$$
$$E_s(s)=\frac{1}{h_3}\left(V'_{10}(s)x+\frac{1}{2}V'_{20}(s)x^2+\frac{1}{3!}V'_{30}(s)x^3\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}V'_{02}(s)y^2+\frac{1}{2}V'_{12}(s)xy^2\right). \qquad (3)$$

С учетом того, что электрический потенциал V должен удовлетворять уравнению Лапласа $\Delta V = 0$, и для тороидального конденсатора

$$E_x(x,0,s)=E_0(s)\,\frac{\rho}{\rho+x}\,\frac{a_e}{a_e+x} \qquad [7]$$

получим выражения для компонент потенциала с точностью до 3-го порядка разложения в ряд вблизи осевой траектории

$$V_{10}(s)=E_0(s), \quad V_{20}(s)=E_0(s)(-g-h),$$
$$V_{30}(s)=E_0(s)(g^2+hg+h^2),$$
$$V_{40}(s)=6E_0(s)(-g^3-hg^2-h^2g-h^3),$$
$$V_{02}(s)=E_0(s)g, \quad V_{12}(s)=E_0(s)(-2g^2-hg)-E'_0(s),$$
$$V_{22}(s)=E_0(s)(6g^3+4hg^2+2h^2g)+E'_0(s)(g+5h), \quad (4)$$

где $h=1/\rho$, $g=1/a_e$, a_e — радиус кривизны электродов тороидального конденсатора.

Потенциал для топоидального конденсатора с учетом малых деформаций электродов [8] в данной работе не рассматривался. Выражение для напряженности электростатического поля может быть представлено в виде

$$E_0(\tau)=\breve{E}_0\,\Theta(\tau). \qquad (5)$$

Для прямоугольной модели поля

$$\Theta(\tau)=u_+(\tau-s_0)-u_+(s-\tau), \qquad (6)$$

где $u_+(t)$ — ступенчатая функция [9], удовлетворяющая условиям

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

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

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

Для гладкой модели поля

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

Точки s_1 и s_2 определяют границы рассеянных полей. Гладкая модель применяется с целью аппроксимации реального продольного распределения поля с достаточной степенью точности, чтобы учесть влияние рассеянных полей на динамику пучка в конкретной ионно-оптической системе.

Приеним метод погружения в пространство фазовых моментов [2] для решения траекторных уравнений. Определим фазовые моменты третьего порядка $\hat{Q}^{(3)}=\{x,x',y,y',x^2,x{\cdot}x',x'^2,y^2,y{\cdot}y',y'^2,x{\cdot}y,x'{\cdot}y,x{\cdot}y',x'{\cdot}y',x^3,x^2\cdot x',x\cdot x'^2,x'^3,x\cdot y^2,x\cdot y\cdot y',x\cdot y'^2,x'\cdot y^2,x'\cdot y\cdot y',x{\cdot}y'^2,y^3,y^2{\cdot}y',y{\cdot}y'^2,y'^3,y{\cdot}x^2,y{\cdot}x{\cdot}x',y{\cdot}x'^2,y'{\cdot}x^2,y'{\cdot}x{\cdot}x',y'{\cdot}x'^2\}$.

Систему траекторных уравнений (1) запишем в матричном виде

$$\frac{d}{ds}\left(\tilde{\hat{Q}}^{(3)}\right)=P^{(3)}(s)\tilde{\hat{Q}}^{(3)}. \qquad (8)$$

После преобразований получим матрицу $P^{(3)}$ в виде

$$P^{(3)}=$$
$$\left\{\begin{matrix} P^{1.1} & 0 & P^{1.3} & P^{1.4} & 0 & P^{1.6} & P^{1.7} & 0 & 0\\ 0 & P^{2.2} & 0 & 0 & P^{2.5} & 0 & 0 & P^{2.8} & P^{2.9}\\ 0 & 0 & P^{3.3} & 0 & 0 & P^{3.6} & P^{3.7} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & P^{4.4} & 0 & 0 & P^{4.7} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & P^{5.5} & 0 & 0 & P^{5.8} & P^{5.9}\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P^{6.6} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P^{7.7} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P^{8.8} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P^{9.9}\end{matrix}\right\},$$

$$P^{1.1}=\left\{\begin{matrix}0 & 1\\ -k & 0\end{matrix}\right\}, \quad P^{1.3}=\left\{\begin{matrix}0 & 0 & 0\\ -h^3n^2-h^3 & he_1 & h\end{matrix}\right\},$$

$$P^{1.4}=\left\{\begin{matrix}0 & 0 & 0\\ \dfrac{h}{2}e_2+h^3\left(n^2-\dfrac{7}{2}n+3\right) & 0 & -h\end{matrix}\right\},$$

$$P^{1,6} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ h^4\left(-n^3 + \frac{4}{3}n^2 - \frac{8}{3}n + \frac{1}{3}\right) & \frac{1}{2}e_2h^2(n-3) & -h^2(n+1) & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{1.7} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h^2}{2}e_2(n-1) + h^4(3n^3 - 13n^2 + 19n + 3) & 0 & h^2(1-n) & e_2h^2\left(1 - \frac{1}{2}n\right) & 0 & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{2.2} = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ -f & 0 \end{Bmatrix}, \qquad P^{2.5} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ e_2h + h^3(2n^2 - 5n + 2) & e_1h & 0 & 2h \end{Bmatrix},$$

$$P^{2.8} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ h^4(-n^2 + 4n - 4) & \frac{1}{2}e_2h^2(2-n) & h^2(n-2) & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{2.9} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h^2}{2}e_2(n+1) + h^4(3n^3 - 11n^2 + 13n - 6) & 0 & h^2(n-2) & \frac{h^2}{2}e_2(n-3) & -2h^2 & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{3.3} = \begin{Bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ -k & 0 & 1 \\ 0 & -2k & 0 \end{Bmatrix}, \qquad P^{3.6} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -h^3(n^2+1) + 1 & e_1h & h & 0 \\ 0 & -2h^3(n^2+1) & 2e_1h & 2h \end{Bmatrix},$$

$$P^{3.7} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h}{2}e_2 + h^3(n^2 - \frac{7}{2}n + 3) & 0 & -h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & he_2 + h^3(2n^2 - 7n + 6) & 0 & -2h \end{Bmatrix},$$

$$P^{4.4} = \begin{Bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ -f & 0 & 1 \\ 0 & -2f & 0 \end{Bmatrix}, \qquad P^{5.5} = \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ -f & 0 & 0 & 1 \\ -k & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -k & -f & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{4.7} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ he_2 + h^3(2n^2 - 5n + 2) & 0 & 0 & 0 & 2h & 0 \\ 0 & 2he_2 + h^3(4n^2 - 10n + 4) & 2he_1 & 0 & 0 & 4h \end{Bmatrix},$$

$$P^{5.8} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h}{2}e_2 + h^3(n^2 - \frac{7}{2}n + 3) & 0 & -h & 0 \\ 0 & \frac{h}{2}e_2 + h^3\left(n^2 - \frac{7}{2}n + 3\right) & 0 & -h \end{Bmatrix},$$

$$P^{5.9} = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ he_2 + h^3(2n^2 - 5n + 2) & 0 & 0 & he_1 & 2h & 0 \\ -h^3(n^2+1) & he_1 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & he_2 + h^3(2n^2 - 5n + 2) & 0 & -h^3(n^2+1) & 2he_1 & 3h \end{Bmatrix},$$

$$P^{6.6} = \begin{Bmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ -k & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2k & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -3k & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{7.7} = \begin{Bmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -f & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2f & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -k & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -k & 0 & -f & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -k & 0 & -2f & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{8.8} = \begin{Bmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ -f & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2f & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -3f & 0 \end{Bmatrix},$$

$$P^{9.9} = \begin{Bmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -k & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2k & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -f & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -f & 0 & -k & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -f & 0 & -2k & 0 \end{Bmatrix}, \quad (9)$$

где $k = nh^2$, $n = 2 - \dfrac{g}{h}$, $f = \dfrac{g}{h}$, $e_1 = \dfrac{E_0'(s)}{\breve{E}_0}$, $e_2 = \dfrac{E_2''(s)}{\breve{E}_0}$.

Решение уравнения (8) записывается через матрицант в виде

$$\tilde{\tilde{Q}} = X\big(P^{(3)}, s/s_0\big)\tilde{\tilde{Q}}_0, \quad (10)$$

где матрицант $X(P^{(3)}, s/s_0)$ имеет, как и матрица коэффициентов $P^{(3)}$, верхнюю треугольную блочную структуру

$$X\big(P^{(3)}, s/s_0\big) =$$

$$\begin{Bmatrix} X^{1.1} & 0 & X^{1.3} & X^{1.4} & 0 & X^{1.6} & X^{1.7} & 0 & 0 \\ 0 & X^{2.2} & 0 & 0 & X^{2.5} & 0 & 0 & X^{2.8} & X^{2.9} \\ 0 & 0 & X^{3.3} & 0 & 0 & X^{3.6} & X^{3.7} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X^{4.4} & 0 & 0 & X^{4.7} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X^{5.5} & 0 & 0 & X^{5.8} & X^{5.9} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X^{6.6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X^{7.7} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X^{8.8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X^{9.9} \end{Bmatrix},$$

и удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$X'\big(P^{(3)}, s/s_0\big) = P^{(3)}X\big(P^{(3)}, s/s_0\big),$$

$$X\big(P^{(3)}, s_0/s_0\big) = I, \quad (11)$$

где I — единичная матрица.

Пусть $r_{i,j}$ — элементы блочной матрицы $X^{1.1}$; $q_{i,j}$ — элементы блочной матрицы $X^{2.2}$; $i, j = 1.2$. Тогда аналитические решения для уравнения (11) в рамках прямоугольной модели поля для диагональных матричных блоков $X^{k,k}$, где $k = 2, 4, 5, \dots, 9$ несложно получить при помощи простых алгебраических вычислений. Например, для x^2 строки матричного блока $X^{3.3}$ из

$$x^2 = \big(r_{11}x_0 + r_{12}x_0'\big)^2 = r_{11}^2x_0^2 + 2r_{11}r_{12}x_0x_0' + r_{12}^2x_0'^2 \quad (12)$$

получаем $X_{1.1}^{3.3} = r_{11}^2$, $X_{1.2}^{3.3} = 2r_{11}r_{12}$, $X_{1.3}^{3.3} = r_{12}^2$. Для недиагональных блоков $X^{i,k}$, $k > i$ имеет место общая формула [7]

$$X^{i,k}(s/s_0) = \sum_{j=1+i}^{k} \int_{s_0}^{s} X^{i,j}(s/\tau)P^{i,j}(\tau)X^{j,k}(\tau/s_0)d\tau. \quad (13)$$

Для прямоугольной модели поля интегралы в (13) могут быть взяты в квадратурах, а следовательно, элементы матрицанта $X(P^{(3)}, s/s_0)$ будут иметь аналитический вид. Так как рашения уравнений

$$\frac{dX^{1.1}(s/s_0)}{ds} = P^{1.1}(s)X^{1.1}(s/s_0), \quad X^{1.1}(s_0/s_0) = I, \quad (14)$$

$$\frac{dX^{2.2}(s/s_0)}{ds} = P^{2.2}(s)X^{2.2}(s/s_0), \quad X^{2.2}(s_0/s_0) = I, \quad (15)$$

для матрицы (6) можно записать в виде

$$X^{1.1} = \begin{Bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} \cos\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big) & \frac{1}{\sqrt{k}}\sin\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big) \\ -\sqrt{k}\sin\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big) & \cos\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big) \end{Bmatrix}, \quad (16)$$

$$X^{2.2} = \begin{Bmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} \cos\big(\sqrt{f}(s-s_0)\big) & \frac{1}{\sqrt{f}}\sin\big(\sqrt{f}(s-s_0)\big) \\ -\sqrt{f}\sin\big(\sqrt{f}(s-s_0)\big) & \cos\big(\sqrt{f}(s-s_0)\big) \end{Bmatrix}, \quad (17)$$

в случае цилиндрического конденсатора

$$X^{2.2} = \begin{Bmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 & (s-s_0) \\ 0 & 1 \end{Bmatrix}. \quad (18)$$

Получим аберрационные коэффициенты второго порядка по фазовым переменным $\hat{Q}_{x,x'}^{(2)} = \{x, x', x^2, x{\cdot}x', x'^2\}$. Для этого необходимо вначале найти элементы матричного блока $X^{1.3}(s/s_0) = \int_{s_0}^{s} X^{1.1}(s/\tau)P^{1.3}(\tau)X^{3.3}(\tau/s_0)d\tau$, где $X^{1.1}(s/\tau)$ определяется из (16), $P^{1.3}(\tau)$ из (9), $X^{3.3}(\tau/s_0)$ из (12).

Матрицу переноса 2-го порядка по фазовым переменным $\hat{Q}_{x,x'}^{(2)}$ можно записать следующим образом:

$$M_{\hat{Q}_{x,x'}^{(2)}}(s/s_0) = \begin{Bmatrix} X^{1.1}(s/s_0) & X^{1.3}(s/s_0) \\ 0 & X^{3.3}(s/s_0) \end{Bmatrix}.$$

Матрица переноса 2-го порядка по фазовым переменным $\hat{Q}^{(2)}_{x,a}$ в декартовой системе координат будет иметь вид

$$R^{(2)}(s/s_0) = M_{\hat{Q}^{(2)}_{x,a}}(s/s_0) = A^{(2)}_{(x,y,s)\to(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})}$$
$$\times M_{\hat{Q}^{(2)}_{x,x'}}(s/s_0) A^{(2)}_{(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})\to(x,y,s)}, \qquad (19)$$

где

$$A^{(2)}_{(x,y,s)\to(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})} = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -h & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix},$$

$$A^{(2)}_{(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})\to(x,y,s)} = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix}$$

— матрицы преобразования координат, которые несложно получить из граничных условий

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

Таким образом, аберрационные коэффициенты 2-го порядка для прямоугольной модели поля записываются в виде

$$\langle \tilde{x}|\tilde{x}^2\rangle = R^{(2)}_{1.5} = \frac{h}{3n}\Big((-2+n-2n^2)$$
$$+ (1-2n+n^2)C + (1+n+n^2)C^2\Big),$$

$$\langle \tilde{x}|\tilde{x}a\rangle = R^{(2)}_{1.6} = \frac{1}{3n^{3/2}}\Big(2(1+n+n^2)SC$$
$$+ (-2+n-2n^2)S\Big) + \zeta\left(\frac{1}{\sqrt{n}}S\right),$$

$$\langle \tilde{x}|a^2\rangle = R^{(2)}_{1.7} = -\frac{1}{3hn^2}\Big((1-2n+n^2)$$
$$+ (-2+n-2n^2)C + (1+n+n^2)C^2\Big),$$

$$\langle a|\tilde{x}^2\rangle = R^{(2)}_{2.5} = \frac{h^2}{3-\sqrt{n}}\Big((-2+n-2n^2)SC$$
$$+ (-1+2n-n^2)S\Big) + \zeta\left(h^2\cdot\sqrt{n}\,SC\right),$$

$$\langle a|\tilde{x}a\rangle = R^{(2)}_{2.6} = \frac{h}{3n}\Big((-2+n-2n^2) + (-2+n-2n^2)C$$
$$+ (-2+4n+4n^2)C^2\Big) + \zeta\big(h(C+S^2-C^2)\big),$$

$$\langle a|a^2\rangle = R^{(2)}_{2.7} = \frac{1}{3n^{3/2}}\Big((2-n+2n^2)SC$$
$$+ (-2+n-2n^2)S\Big) + \zeta\left(-\frac{h}{\sqrt{n}}SC\right),$$

где $S = \sin\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big)$, $C = \cos\big(\sqrt{k}(s-s_0)\big)$, параметр $\zeta = 1$, если функция описывается уравнением (6), если положить параметр $\zeta = 0$ $(E'(s) = 0,\ E''(s) = 0)$, мы получаем уравнения [7,9], широко используемые при расчетах ионно-оптических систем для случая, когда учет полей рассеивания производится путем замены реального поля идеальным полем, эквивалентным по углу поворота.

Для получения матрицы переноса 3-го порядка по фазовым переменным $\hat{Q}^{(3)}_{x,x',y,y',\delta}$ используем формулу Коши

$$\hat{Q} = X(P, s/s_0)\hat{Q}_0 + \int\limits_{s_0}^{s} X(P, s/\tau)\Psi(\tau)d\tau. \qquad (20)$$

Матрица переноса 3-го порядка по фазовым переменным $\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\delta}$ в декартовой системе координат будет иметь вид

$$R^{(3)}(s/s_0) = A^{(3)}_{(x,y,s)\to(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})}$$
$$\times M_{\hat{Q}^{(3)}_{x,x',y,y',\delta}}(s/s_0)\, A^{(3)}_{(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})\to(x,y,s)}, \qquad (21)$$

где

$$M_{\hat{Q}^{(3)}_{x,x',y,y',\delta}}(s/s_0) = \left\{X(P^{(3)}, s/s_0), \int\limits_{s_0}^{s} X(P^{(3)}, s/\tau)\Psi^{(3)}(\tau)d\tau\right\}$$

— расширенная матрица переноса в пространстве $\hat{Q}^{(3)}_{x,x',y,y',\delta}$.

Матричный блок Ψ определяется при помощи метода погружения в пространство фазовых моментов $\hat{Q}^{(3)} = \{\delta, x\delta, x'\delta, \delta^2, \ldots, \delta^3\}$.

Аберрационные коэффициенты 3-го порядка для прямоугольной модели поля записываются в виде

$$\left\langle \tilde{x}\,|\,\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\delta}\right\rangle = R^{(3)}_{1,i}, \quad \left\langle a\,|\,\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\delta}\right\rangle = R^{(3)}_{2,i},$$
$$\left\langle \tilde{y}\,|\,\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\delta}\right\rangle = R^{(3)}_{3,i}, \quad \left\langle b\,|\,\hat{Q}^{(3)}_{\tilde{x},a,\tilde{y},b,\delta}\right\rangle = R^{(3)}_{4,i}, \qquad (22)$$

где i — порядковый номер фазовой переменной.

Для прямоугольного продольного распределения поля электростатического тороидального секторного конденсатора с учетом краевых эффектов получены аналитические выражения для всех элементов матриканта, а следовательно и для всех коэффициентов аберраций 3-го порядка. Получена матрица коэффициентов $P^{(3)}$ с учетом краевых эффектов для вычисления матриканта в случае гладкой модели продольного распределения численным методом челнок-сумм.

Список литературы

[1] *Carey D.C., Brown K.L., Rothacher F.* Third-Order TRANSPORT with MAD Input. A. Computer Program for Designing Charged Particle Beam Transport Systems. SLAC-R-530. Fermilab-Pub-98-310. 1998.
[2] *Dymnikov A.D., Hellbord R.* // Nucl. Instr. and Meth. 1993. Vol. A330. P. 323–362.
[3] *Dymnikov A.D.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1998. Vol. A403. P. 195–204.
[4] *Dymnikov A.D.* // Nucl. Instr. and Meth. A. 1995. Vol. 363. P. 435–439.
[5] *Brown K.L.* et al. // Rev. Sci. Instrum. 1964. Vol. 35. P. 481.
[6] *Силадьи М.* Электронная и ионная оптика. М.: Мир, 1990. 639 с.
[7] *Сысоев А.А., Самсонов Г.А.* Теория и расчет статических масс-анализаторов. Препринт МИФИ. М., 1972. Т. 1.2. 211 с.
[8] *Yavor M.I.* // Nucl. Instr. and Meth. 1998. Vol. A298. N 1–3. P. 223–226.
[9] *Хинтербергер Г., Кениг Л.А.* // Успехи масс-спектроскопии / Под ред. Дж. Уордорна. М.: ИЛ, 1963. С. 26–38.