

存在初级象差下电子和离子光学系统 中刘维定理的应用

西门纪业

(北京大学无线电电子学系)

1981年2月26日收到

提 要

在电子和离子光学理论(特别是象差理论)中,广泛地应用了矩阵的运算方法.本文讨论了旋转对称电子光学系统与重叠场(环形电场与非均匀磁场的叠加)离子光学系统中存在初级象差下的变换矩阵,证明了这些变换矩阵的行列式数值恒为1.这个普遍结论是刘维定理的具体应用.这对于电子和离子光学象差理论及计算机辅助设计具有一定意义.

引 言

在电子和离子光学理论^[1-8](特别是象差理论)中,广泛地采用了矩阵的运算方法.对于一个电子或离子光学系统,可以引入变换矩阵来全面描述其高斯光学和象差性质.对于多透镜的电子或离子光学系统,将各部分透镜的变换矩阵顺序进行乘法运算,就可以确定整个系统的高斯光学性质及其象差的传递效应.

上述矩阵运算方法成功地应用于电子和离子光学仪器的设计上.例如:透射电子显微镜三、四个透镜组成的成像系统^[5,6],扫描电子显微镜两、三个透镜组成的探针系统^[5,6],质谱仪器中几个扇形离子透镜组成的分析系统^[7,8].与此相应,粒子加速器和传输系统的束流光学理论中,矩阵的表示方法也得到了应用^[9,10].

应该指出,矩阵的运算方法具有深刻的物理本质.在电磁场中带电粒子的运动满足一定的变分原理,亦即正则运动方程能够成立.因此,根据统计物理的刘维(Liouville)定理^[11],在粒子运动过程(即粒子束传播过程)中,相空间中代表点所占体积元保持常数.根据这个定理,电子和离子光学系统的变换矩阵的作用实质上是把物方相空间中的体积元变换为象方相空间中的体积元.由于相体积不变性,可以得出结论:对于一个电子或离子光学系统,其变换矩阵行列式数值等于1;对于相继的一系列电子和离子光学系统,其变换矩阵服从乘法运算,因而总的变换矩阵行列式数值亦恒等于1.

刘维定理所导出的上述结论是对于电子和离子运动的精确轨迹确立的.然而精确轨迹一般是不易求解的.这样就需要在各级近似下(特别是存在初级象差下)论证上述结论的正确性.可是,迄今为止文献上仅对于一级近似(不考虑象差下)下的高斯轨迹变换矩阵论证了上述结论^[12].本文将讨论存在初级象差下普遍的电子和离子光学系统的变换矩

阵, 从而论证上述结论能够成立. 这些普遍结论正是刘维定理的具体应用. 它们对于进一步发展电子和离子光学的矩阵代数和束流光学具有一定的理论与实际意义.

一、存在三级象差下电子光学系统的变换矩阵及刘维定理的表述

我们讨论旋转对称电子光学系统时, 采用矢量形式描写轨迹, 运用矩阵形式表示三级象差^[1,2]. 这样高斯轨迹及其斜率表示如下:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}'_a r_a(z) + \mathbf{u}_a r_\beta(z), \quad \mathbf{u}' = \mathbf{u}'_a r'_a(z) + \mathbf{u}_a r'_\beta(z), \quad (1.1)$$

式中 $\mathbf{u}'_a, \mathbf{u}_a$ 是物平面 z_a 处的初始斜率和位置, r_a, r_β 是高斯轨迹方程一对线性无关特解. 于是象平面 z_b 处的三级象差为

$$\Delta \mathbf{u}_3(z_b) = M \begin{bmatrix} \mathbf{u}'_a \cdot \mathbf{u}'_a \\ \mathbf{u}_a \cdot \mathbf{u}'_a \\ \mathbf{u}_a \times \mathbf{u}'_a \\ \mathbf{u}_a \cdot \mathbf{u}_a \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} B & F & f \\ 2F & 2C & c \\ 2f & c & 0 \\ D & E & e \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{u}'_a \\ \mathbf{u}_a \\ \mathbf{u}_a \end{bmatrix}. \quad (1.2)$$

B, F, C, D, E, f, c, e 是三级象差系数, M 是放大率. 式中 $*$ 表示转置矩阵, $\mathbf{u}_a$ 是 $\mathbf{u}_a$ 的正交矢量, 即

$$\mathbf{u}_a = i \mathbf{u}_a \quad (i = \sqrt{-1}). \quad (1.3)$$

为了符合刘维定理, 我们选取粒子的速度矢量 $\mathbf{v}_a$ (或 $\mathbf{v}$) 代替斜率矢量 $\mathbf{u}'_a$ (或 $\mathbf{u}'$) 作为描写轨迹的参量之一, 即

$$\mathbf{v}_a = \sqrt{V_a} \mathbf{u}'_a, \quad \mathbf{v}_b = \sqrt{V_b} \mathbf{u}'_b, \quad \mathbf{v} = \sqrt{V} \mathbf{u}', \quad (1.4)$$

式中 V_a, V_b 是物平面 z_a 、象平面 z_b 处的电位 (能量常数). 可见 $\mathbf{v}_a$ (或 $\mathbf{v}$) 较之速度相差一常数因子 $\sqrt{2e/m}$, e/m 是粒子荷质比. 利用上式, 则 (1.3) 式变为

$$\Delta \mathbf{u}_3(z_b) = M \begin{bmatrix} \mathbf{v}_a \cdot \mathbf{v}_a \\ \mathbf{u}_a \cdot \mathbf{v}_a \\ \mathbf{u}_a \times \mathbf{v}_a \\ \mathbf{u}_a \cdot \mathbf{u}_a \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} B/V_a^{3/2} & (F + if)/V_a \\ 2F/V_a & (2C + ic)/V_a^{1/2} \\ 2f/V_a & c/V_a^{1/2} \\ D/V_a^{1/2} & (E + ie) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_a \\ \mathbf{u}_a \end{bmatrix}. \quad (1.5)$$

将上式展开得到象平面 z_b 处直到三级的轨迹

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(z_b) &= M \mathbf{u}_a + \Delta \mathbf{u}_3(z_b) \\ &= M \{ \mathbf{u}_a + m_{11} \mathbf{v}_a (\mathbf{v}_a \cdot \mathbf{v}_a) + m_{12} \mathbf{u}_a (\mathbf{v}_a \cdot \mathbf{v}_a) + m_{13} \mathbf{v}_a (\mathbf{u}_a \times \mathbf{v}_a) \\ &\quad + m_{14} \mathbf{v}_a (\mathbf{u}_a \cdot \mathbf{v}_a) + m_{15} \mathbf{u}_a (\mathbf{u}_a \times \mathbf{v}_a) + m_{16} \mathbf{u}_a (\mathbf{u}_a \cdot \mathbf{v}_a) \\ &\quad + m_{17} \mathbf{v}_a (\mathbf{u}_a \cdot \mathbf{u}_a) + m_{18} \mathbf{u}_a (\mathbf{u}_a \cdot \mathbf{u}_a) \}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

式中

$$\begin{aligned} m_{11} &= B/V_a^{3/2}, \quad m_{12} = (F + if)/V_a, \quad m_{13} = 2f/V_a, \quad m_{14} = 2F/V_a, \\ m_{15} &= c/V_a^{1/2}, \quad m_{16} = (2C + ic)/V_a^{1/2}, \quad m_{17} = D/V_a^{1/2}, \quad m_{18} = E + ie. \end{aligned} \quad (1.7)$$

同理可以得到象平面处直到三级的轨迹斜率:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(z_b) &= c_0 \mathbf{u}_a + m \mathbf{v}_a + \Delta \mathbf{v}_3(z_b) \\ &= \{ c_0 \mathbf{u}_a + m \mathbf{v}_a \} + \{ m_{21} \mathbf{v}_a (\mathbf{v}_a \cdot \mathbf{v}_a) + m_{22} \mathbf{u}_a (\mathbf{v}_a \cdot \mathbf{v}_a) + m_{23} \mathbf{v}_a (\mathbf{u}_a \times \mathbf{v}_a) \} \end{aligned}$$

$$+ m_{24}v_a(u_a \cdot v_a) + m_{25}u_a(u_a \times v_a) + m_{26}u_a(u_a \cdot v_a) + m_{27}v_a(u_a \cdot u_a) + m_{28}u_a(u_a \cdot u_a)\}, \quad (1.8)$$

式中 $m_{21}, m_{22}, \dots, m_{28}$ 是三级速度象差系数, 这里不讨论其具体公式, 可参考文献 [5]. 上式中 c_0, m 由下式给出:

$$c_0 = -\sqrt{V_a/f_a}, \quad m = 1/M, \quad (1.9)$$

式中 f_a 是物方焦距 (绝对值), $1/f_a$ 是物方光学本领, m 是缩小率, 即等于放大率 M 的倒数.

现将 (1.6), (1.8) 式合并写成以下矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ v(v \cdot v) \\ u(u \cdot v) \\ v(u \times v) \\ v(u \cdot v) \\ u(u \times v) \\ u(u \cdot v) \\ v(u \cdot u) \\ u(u \cdot u) \end{bmatrix} z_b = \begin{bmatrix} M & 0 & M m_{11} & M m_{12} & M m_{13} & M m_{14} & M m_{15} & M m_{16} & M m_{17} & M m_{18} \\ c_0 & m & m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} & m_{25} & m_{26} & m_{27} & m_{28} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ v(v \cdot v) \\ u(v \cdot v) \\ v(u \times v) \\ v(u \cdot v) \\ u(u \times v) \\ u(u \cdot v) \\ v(u \cdot u) \\ u(u \cdot u) \end{bmatrix} z_a. \quad (1.10)$$

矩阵中空白处全是零元素.

上述 10×10 的矩阵定义为变换矩阵 $[M]$. 它将物空间 z_a 的一级、三级轨迹和速度参量变换为象空间 z_b 的一级、三级轨迹和速度参量. 因此 $[M]$ 全面地描述了该系统的高斯光学和三级象差性质.

由 (1.10) 式可见, M 可以用虚线分成四个子矩阵, 即

$$[M] = \begin{bmatrix} \text{I} & \text{II} \\ \text{III} & \text{IV} \end{bmatrix}. \quad (1.11)$$

2×2 的子矩阵 $[\text{I}]$ 是物、象平面之间的高斯光学变换矩阵:

$$[\mathbf{I}] = \begin{bmatrix} M & 0 \\ c_0 & m \end{bmatrix}. \quad (1.12)$$

2×8 的子矩阵 $[\mathbf{II}]$ 是三级象差变换矩阵:

$$[\mathbf{II}] = \begin{bmatrix} M m_{11} & M m_{12} & M m_{13} & M m_{14} & M m_{15} & M m_{16} & M m_{17} & M m_{18} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} & m_{25} & m_{26} & m_{27} & m_{28} \end{bmatrix}. \quad (1.13)$$

8×2 子矩阵 $[\mathbf{III}]$ 则恒为零, 即

$$[\mathbf{III}] \equiv 0. \quad (1.14)$$

8×8 的子矩阵 $[\mathbf{IV}]$ 是三级轨迹和速度参量的变换矩阵, 其元素即 (1.10) 式 $[\mathbf{M}]$ 矩阵右下方的 8×8 个元素. 它们可以由上述高斯光学变换矩阵 $[\mathbf{I}]$ 导出.

由 (1.9) 式易证下述两个子矩阵的行列式数值为 1, 即

$$|[\mathbf{I}]| = 1, \quad |[\mathbf{IV}]| = 1. \quad (1.15)$$

而且 $[\mathbf{III}] \equiv 0$, 因此有行列式

$$|[\mathbf{M}]| = |[\mathbf{I}]| \cdot |[\mathbf{IV}]| = 1. \quad (1.16)$$

由此证明了旋转对称电子光学中考虑三级象差的变换矩阵行列式数值为 1, 从而电子在相空间中的运动满足刘维定理. 这个结论可以推广到多透镜系统, 从而可以讨论象差的传递效应.

二、存在二级象差下离子光学系统的变换矩阵及刘维定理的表述

我们在文献 [3,4] 中建立了环形电场和非均匀磁场构成的重叠场离子光学系统二级象差的普遍理论, 设 u, v, α, β 是无量纲径向、轴向轨迹位移及其倾角. 它们在初始状态平面(下标 2)和终了状态平面(下标 3)处分别取值为 $u_2, v_2, \alpha_2, \beta_2$ 及 $u_3, v_3, \alpha_3, \beta_3$. 于是文献 [3,4] 给出以下关系式:

$$\begin{aligned} \text{径向位移 } u_3 = & u_2 D_u + \alpha_2 D_\alpha + \gamma D_\gamma + \delta D_\delta + u_2^2 D_{uu} + u_2 \alpha_2 D_{u\alpha} + \alpha_2^2 D_{\alpha\alpha} \\ & + v_2^2 D_{vv} + v_2 \beta_2 D_{v\beta} + \beta_2^2 D_{\beta\beta} + u_2 \gamma D_{u\gamma} + u_2 \delta D_{u\delta} + \alpha_2 \gamma D_{\alpha\gamma} \\ & + \alpha_2 \delta D_{\alpha\delta} + \gamma^2 D_{\gamma\gamma} + \gamma \delta D_{\gamma\delta} + \delta^2 D_{\delta\delta}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \text{径向倾角 } \alpha_3 = & u_2 E_u + \alpha_2 E_\alpha + \gamma E_\gamma + \delta E_\delta + u_2^2 E_{uu} + u_2 \alpha_2 E_{u\alpha} + \alpha_2^2 E_{\alpha\alpha} \\ & + v_2^2 E_{vv} + v_2 \beta_2 E_{v\beta} + \beta_2^2 E_{\beta\beta} + u_2 \gamma E_{u\gamma} + u_2 \delta E_{u\delta} + \alpha_2 \gamma E_{\alpha\gamma} \\ & + \alpha_2 \delta E_{\alpha\delta} + \gamma^2 E_{\gamma\gamma} + \gamma \delta E_{\gamma\delta} + \delta^2 E_{\delta\delta}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \text{轴向位移 } v_3 = & v_2 D_v + \beta_2 D_\beta + v_2 u_2 D_{vu} + v_2 \alpha_2 D_{v\alpha} + \beta_2 u_2 D_{\beta u} + \beta_2 \alpha_2 D_{\beta\alpha} \\ & + v_2 \gamma D_{v\gamma} + v_2 \delta D_{v\delta} + \beta_2 \gamma D_{\beta\gamma} + \beta_2 \delta D_{\beta\delta}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \text{轴向倾角 } \beta_3 = & v_2 E_v + \beta_2 E_\beta + v_2 u_2 E_{vu} + v_2 \alpha_2 E_{v\alpha} + \beta_2 u_2 E_{\beta u} + \beta_2 \alpha_2 E_{\beta\alpha} \\ & + v_2 \gamma E_{v\gamma} + v_2 \delta E_{v\delta} + \beta_2 \gamma E_{\beta\gamma} + \beta_2 \delta E_{\beta\delta}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

这里 γ, δ 是质量相对分散和速度相对分散, 都是一级小量. E_i, D_i 是高斯光学参量, 其公式如下^[3,4]:

$$\begin{aligned} D_u &= C_r, \quad D_\alpha = S_r/\mathcal{R}_r, \quad D_\gamma = (1 - C_r)/\mathcal{R}_r^2, \quad D_\delta = (1 + q)(1 - C_r)/\mathcal{R}_r^2, \\ E_u &= -\mathcal{R}_r S_r, \quad E_\alpha = C_r, \quad E_\gamma = S_r/\mathcal{R}_r, \quad E_\delta = (1 + q)S_r/\mathcal{R}_r, \\ D_v &= C_z, \quad D_\beta = S_z/\mathcal{R}_z, \quad E_v = -\mathcal{R}_z S_z, \quad E_\beta = C_z. \end{aligned} \quad (2.5)$$

13×13 的 $[\mathbf{IV}_r]$ 是二级轨迹和斜率参量的变换矩阵, 其元素即(2.7)式 $[\mathbf{M}_r]$ 矩阵右下方的 13×13 个元素. 它们可以由一级变换矩阵 $[\mathbf{I}_r]$, $[\mathbf{I}_s]$ 导出.

将(2.5)式代入 $[\mathbf{M}_r]$ 的子矩阵中, 不难验证行列式

$$|[\mathbf{I}_r]| = 1; \quad (2.12)$$

而子矩阵 $[\mathbf{IV}_r]$ 在对角线上顺序有 3×3, 3×3, 4×4, 3×3 等四个矩阵, 每个矩阵的行列式数值均为 1, 于是行列式

$$|[\mathbf{IV}_r]| = 1. \quad (2.13)$$

因此, 由(2.11)–(2.13)式, 即有行列式

$$|[\mathbf{M}_r]| = |[\mathbf{I}_r]| \cdot |[\mathbf{IV}_r]| = 1. \quad (2.14)$$

同理可以将轴向位移及其倾角(2.3), (2.4)式写成矩阵形式, 并定义 10×10 的轴向变换矩阵 $[\mathbf{M}_z]$ 如下:

$$\begin{bmatrix} v \\ \beta \\ uv \\ v\alpha \\ \beta u \\ \beta\alpha \\ v\gamma \\ v\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_v & D_\beta & D_{vu} & D_{v\alpha} & D_{\beta u} & D_{\beta\alpha} & D_{v\gamma} & D_{v\delta} & D_{\beta\gamma} & D_{\beta\delta} \\ E_v & E_\beta & E_{vu} & E_{v\alpha} & E_{\beta u} & E_{\beta\alpha} & E_{v\gamma} & E_{v\delta} & E_{\beta\gamma} & E_{\beta\delta} \\ \hline D_v D_u & D_v D_\alpha & D_\beta D_u & D_\beta D_\alpha & D_v D_\gamma & D_v D_\delta & D_\beta D_\gamma & D_\beta D_\delta & & \\ D_v E_u & D_v E_\alpha & D_\beta E_u & D_\beta E_\alpha & D_v E_\gamma & D_v E_\delta & D_\beta E_\gamma & D_\beta E_\delta & & \\ E_v D_u & E_v D_\alpha & E_\beta D_u & E_\beta D_\alpha & E_v D_\gamma & E_v D_\delta & E_\beta D_\gamma & E_\beta D_\delta & & \\ E_v E_u & E_v E_\alpha & E_\beta E_u & E_\beta E_\alpha & E_v E_\gamma & E_v E_\delta & E_\beta E_\gamma & E_\beta E_\delta & & \\ & & & & D_v & 0 & D_\beta & 0 & & \\ & & & & 0 & D_v & 0 & D_\beta & & \\ & & & & E_v & 0 & E_\beta & 0 & & \\ & & & & 0 & E_v & 0 & E_\beta & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v \\ \beta \\ uv \\ v\alpha \\ \beta u \\ \beta\alpha \\ v\gamma \\ v\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

矩阵中空白处全是零元素.

由此可以证明行列式

$$|[\mathbf{M}_z]| = |[\mathbf{I}_z]| \cdot |[\mathbf{IV}_z]| = 1. \quad (2.16)$$

至此, 证明了重叠场离子光学系统中考虑二级象差的变换矩阵行列式数值等于 1, 从而离子在相空间中的运动满足刘维定理. 这个结论可以推广到倾斜出入射、曲线边界和考虑边缘场的情况.

三、结 语

我们对于两种普遍的系统, 即旋转对称电子光学系统与重叠场离子光学系统, 证明了存在初级象差下, 变换矩阵的行列式数值等于 1. 而且在通过相继的电子和离子光学系统时, 变换矩阵服从乘法运算, 因而总的变换矩阵行列式数值恒等于 1. 这是刘维定理的具体应用. 这个普遍结论具有一定的理论与实际意义. (1) 它有助于发展存在初级象差下电子和离子光学系统的矩阵代数和束流光学; (2) 根据刘维定理相体积不变性要求, 可以正确选择物理上合理的方式来描述高斯轨迹和象差; (3) 变换矩阵行列式数值恒等于 1 的性质, 在数值计算和计算机辅助设计中可以作为检验计算正确与否的判据. (4) 上述普

遍结论实质上证明了在电子和离子光学系统中包括初级象差的近似处理是收敛的。

参 考 文 献

- [1] 西门纪业, 电子和离子光学原理及象差导论, 科学出版社, 即将出版.
- [2] 西门纪业, 物理学报, **30**(1981), 472.
- [3] 西门纪业, 物理学报, **29**(1980), 330.
- [4] Ximen Ji-ye (西门纪业), *Adv. in Mass Spectrom.*, **8**(1980), 1778.
- [5] P. W. Hawkes, *Optik*, **27**(1968), 287; **31**(1970), 213; 592.
- [6] P. W. Hawkes in "Image Processing and C. A. D. in Electron Optics", (1973), 230.
- [7] H. Wollnik, *Nucl. Instr. Meth.*, **52**(1967), 250.
- [8] T. Matsuo, H. Matsuda, Y. Fujita, H. Wollnik, 质量分析 (日文), **24**(1976), 19; Y. Fujita, H. Matsuda, T. Matsuo, *Nucl. Instr. Meth.*, **144**(1977), 279.
- [9] K. L. Brown, SLAC-75, SLAC-91; K. L. Brown, In "Adv. in particles Phys.", **1**(1968), 71.
- [10] A. P. Banford, "The Transport of Charged Particles Beams", (1966).
- [11] 王竹溪, 统计物理学导论 高等教育出版社, (1956).
- [12] A. J. H. Boerboom, *Adv. in Mass Spectrom.*, **5**(1971), 269.

APPLICATION OF LIOUVILLE'S THEOREM TO ELECTRON AND ION OPTICAL SYSTEMS POSSESSING THE PRIMARY ABERRATIONS

XIMEN JI-YE

(Department of Radio-electronics, Peking University, Beijing, China)

ABSTRACT

The method of matrix calculations is widely applied in the theory of electron- and ion-optics, especially in the aberration theory. In the present paper, a rotationally symmetrical electron-optical system and an ion-optical system with crossed toroidal electric and inhomogeneous magnetic fields are treated respectively. The general transfer matrices for the above mentioned electron- and ion-optical systems possessing the primary aberrations are derived. As a direct consequence of Liouville's theorem, we prove that the determinant of the transfer matrix has the value 1 in the approximation up to the primary aberrations. This general conclusion is useful for the electron- and ion-optical aberration theory and the computer-aided design.