

Analytische Bestimmung von Bildfehlern
im Streufeldbereich ionenoptischer
Elemente

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
der Justus-Liebig-Universität Gießen
(Fachbereich 13)

vorgelegt von
Bernd Hartmann
aus Simmershausen/Rhön

Gießen 1992

D 26

Dekan: Prof. Dr. Dr. h. c. mult. A. Scharmann

I. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Wollnik

II. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Löb

Tag der mündlichen Prüfung:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Die Transfermatrix zur Beschreibung von ionenoptischen Systemen	6
2.1	Die teilchenoptischen Koordinaten	6
2.2	Bewegungsgleichungen in teilchenoptischen Koordinaten	7
2.3	Bestimmung der elektrostatischen Felder und magnetischen Flußdichten	9
2.3.1	Potentialverteilung bei Ablenkelementen	10
2.3.2	Potentialverteilung bei Elementen mit gerader optischer Achse	11
2.4	Die Transfermatrix in der Ionenoptik	13
2.5	Bestimmung der inversen und reversen Transfermatrix	16
3	Streifeldmodell	18
3.1	Numerische Bestimmung der Transfermatrix	21
3.1.1	Numerische Bestimmung mit Standard "Ray Tracing" Verfahren	22
3.1.2	Numerische Bestimmung mit Hilfe der Differentialalgebra	22
3.2	Näherungsweise Bestimmung der Teilchenbahn durch sukzessive Ap- proximation	27
3.3	Analytische Näherungsformeln durch Integrale über die Feldverteilung	30
3.4	Anwendung und Vergleich der numerischen Verfahren mit dem Ver- fahren der sukzessiven Approximation	32
4	Streifeldmatrix des homogenen magnetischen Sektors	34
4.1	Bewegungsgleichung im Fall des magnetischen Sektors	34
4.2	Einfluß des Streufeldes auf die Referenzbahn	38
4.3	Bestimmung der Potentialkoeffizienten	43
4.4	Einfluß des Streufeldes auf die Bewegung eines beliebigen Teilchens	46
4.5	Bestimmung der chromatischen Elemente	49
4.6	Numerische Bestimmung der Streifeldtransfermatrix	51
4.7	Vergleich der analytischen Näherungsformeln mit den numerischen Er- gebnissen	53
5	Bestimmung der Streifeldtransfermatrix dritter Ordnung des toroi- dalen elektrostatischen Sektors	55
5.1	Bewegungsgleichungen im nichtrelativistischen Grenzfall	55
5.2	Das elektrostatische Potential im Streifeldbereich des toroidalen Kon- densators	57

5.3	Bestimmung der Endkoordinaten unter Annahme einer geraden Feldgrenze	59
5.4	Einfluß einer gekrümmten Feldgrenze auf die Streufeldmatrix	62
5.5	Bestimmung der Transfermatrix durch numerische Integration und Vergleich mit der Integralmethode	64
6	Streufeldmatrix fünfter Ordnung des magnetischen Quadrupols	67
6.1	Entwicklung der Bewegungsgleichungen im Streufeld des magnetischen Quadrupols	67
6.2	Näherungslösung der Bewegungsgleichungen für den magnetischen Quadrupol	68
6.3	Vergleich zwischen numerischer Integration und den Näherungsformeln	74
7	Streufeldmatrix für das Streufeld des elektrostatischen Quadrupols	77
7.1	Entwicklung der Bewegungsgleichungen im Streufeld des elektrostatischen Quadrupols	77
7.2	Näherungslösung der Bewegungsgleichungen für den elektrostatischen Quadrupol	78
7.3	Vergleich zwischen numerischer Integration und den Näherungsformeln	82
8	Der Einfluß des Streufeldefeffekts auf ein stigmatisch fokussierendes Strahlführungssystem	85
9	Massenbestimmung kurzlebiger Nuklide mit Hilfe des Experimentierspeicherrings ESR	89
10	Zusammenfassung und Ausblick	100
11	Anhang 1	102
11.1	Liste der Integrale, die bei der Berechnung der Matrix des homogenen magnetischen Sektors auftreten	103
11.2	Liste der Integrale, die bei der Berechnung der Matrix des toroidalen elektrostatischen Sektors auftreten	112
11.3	Liste der Integrale, die bei der Berechnung der Matrix des elektrostatischen und magnetischen Quadrupols auftreten	113
12	Anhang 2	117
12.1	Streufeldmatrix des homogenen magnetischen Sektors	117
12.2	Streufeldmatrix des toroidalen elektrostatischen Sektors	127

12.3	Streufeldmatrix des magnetischen Quadrupols	131
12.4	Streufeldmatrix des elektrostatischen Quadrupols	143

13	Danksagung	151
-----------	-------------------	------------

1 Einleitung

Teilchenoptische Systeme spielen in vielen Bereichen der modernen Physik eine wichtige Rolle. Sie haben große Bedeutung im Bereich der Teilchenbeschleuniger, der Strahlführungssysteme und der Elektronen- und Ionenmikroskopie. So finden diese Systeme Anwendung im Bereich von der hochpräzisen Massenbestimmung von Nukliden aller Art in der Kernphysik bis zur Untersuchung der Masse und damit Struktur von Makromolekülen in der Chemie und Pharmakologie.

Teilchenoptische Systeme setzen sich aus einzelnen Elementen mit einer jeweils charakteristischen Anordnung von elektromagnetischen Feldern zusammen. Die Eigenschaften dieser Elemente werden durch eine Transferfunktion vollständig beschrieben, die die Transformation aller Koordinaten, die ein geladenes Teilchen beschreiben, darstellt. Die Eigenschaften eines Gesamtsystems ergeben sich durch Bestimmen der Transferfunktion der einzelnen Elemente und anschließendem Verketteten aller Transferfunktionen.

Die Transferfunktionen werden durch Potenzreihen in den Koordinaten beschrieben, die das Verhalten eines Teilchens charakterisieren. Die Koeffizienten dieser Potenzreihen können zu einer Matrix, der Transfermatrix, zusammengefaßt werden. Der lineare Anteil dieser Matrix beschreibt die Abbildungseigenschaften eines Systems, die nichtlinearen Terme dieser Matrix dagegen beschreiben Verzerrungen, Kaustiken und andere meist unerwünschte Eigenschaften des Systems.

Die ionenoptischen Eigenschaften eines Systems werden umso genauer beschrieben, je höher man die Ordnung der Transferfunktion bestimmt und je genauer die einzelnen Terme der Transfermatrix berechnet werden. Die Kenntnis der Abhängigkeit der Bildfehler ist daher von großer Bedeutung für den Bau teilchenoptischer Systeme.

Die Abhängigkeiten der Bildfehler eines Elements setzen sich zusammen aus der Wirkung des Hauptfeldes innerhalb des Elements und der Wirkung der Streufelder an dessen Grenzen. Der Einfluß des Hauptfeldes läßt sich analytisch bestimmen [1,2] und in Formeln für die einzelnen Bildfehler darstellen. So existieren viele ionenoptische Programme, die diese Formeln bis zur dritten oder fünften Ordnung beinhalten [3,4,5,6].

Zur genauen Beschreibung eines ionenoptischen Systems ist die Kenntnis der Wirkung der Streufelder notwendig. Die Transfermatrix kann im Gegensatz zum Hauptfeld nicht analytisch bestimmt werden, sondern muß durch numerische Integration [7,8] oder durch analytische Näherungsformeln für die einzelnen Matrixelemente bestimmt werden [9,10,11,12,13,14,15,16,17].

Ein Vergleich der numerischen Ergebnisse mit den Näherungsformeln zeigt, daß

sie für den magnetischen und elektrostatischen Sektor in ihrer Approximationsordnung teilweise nicht mit den numerischen Ergebnissen übereinstimmen, wodurch eine erneute Berechnung notwendig wurde.

Im Rahmen dieser Dissertation ist ein Modell zur Bestimmung dieser Näherungsformeln entwickelt worden. Dadurch konnten analytische Ausdrücke zur Berechnung der Transfermatrix bis zur dritten Ordnung des magnetischen und elektrostatischen Dipols und der Transfermatrix bis zur fünften Ordnung des magnetischen und elektrostatischen Quadrupols hergeleitet werden. Bei den magnetischen Elementen wurden die Herleitungen so erweitert, daß im Gegensatz zu den Arbeiten [12,13,17] auch die Flugzeitkoordinate berücksichtigt worden sind. Dadurch können auf effektive Weise die ionenoptischen Eigenschaften isochroner Flugzeitmassenspektrometer beschrieben werden.

Im ersten Kapitel werden die für das Verständnis der Teilchenoptik notwendigen Grundlagen dargestellt. Im zweiten Kapitel wird das Streufeldmodell beschrieben und die Bestimmung der Transfermatrix durch numerische Rechenverfahren und durch analytische Näherungsformeln erläutert. In den nachfolgenden vier Kapiteln erfolgt eine detaillierte Beschreibung der Herleitung der Näherungsformeln für die Transfermatrix der einzelnen Elemente, sowie ihre Untersuchung auf Konsistenz beim Vergleich mit den numerischen Ergebnissen.

Im darauf folgenden Kapitel werden die Streufeldeffekte von Quadrupolen in einem stigmatisch fokussierenden Strahlführungssystem untersucht. Schließlich werden Simulationsrechnungen zum Einsatz des Experimentierspeicherringes (ESR)[18,19] bei der GSI als hochauflösendes Flugzeitspektrometer zur Massenbestimmung kurzlebiger Nuklide durchgeführt.

2 Die Transfermatrix zur Beschreibung von ionenoptischen Systemen

Bei der Simulation von teilchenoptischen Systemen sind oft nicht die Flugbahnen von einzelnen Ionen von Interesse, sondern die globalen Eigenschaften eines solchen optischen Systems. Solche Eigenschaften können durch eine nichtlineare mehrdimensionale Abbildungsfunktion \mathcal{M} beschrieben werden, die eine Beziehung zwischen den Endphasenraumkoordinaten \vec{r}_f und den Anfangsphasenraumkoordinaten \vec{r}_i von beliebigen geladenen Teilchen herstellt:

$$\vec{r}_f = \mathcal{M}(\vec{r}_i). \quad (1)$$

Diese Transferabbildung ist gewöhnlicherweise durch eine Taylorreihe bis zu einer bestimmten Ordnung n repräsentiert. Die Koeffizienten der Reihe werden in einer Matrix, der Transfermatrix zusammengefaßt [15,20]. Im allgemeinen gibt es keine analytische Formel für die Funktion \mathcal{M} , aber sie kann dennoch bestimmt werden, indem numerisch die Bewegungsgleichungen für die Teilchen gelöst werden:

$$\frac{d}{ds}\vec{r} = \vec{F}(\vec{r}, s), \quad (2)$$

wobei der Koordinatenvektor \vec{r} , die unabhängige Variable s und die Funktion $\vec{F}(\vec{r}, s)$, die von elektrostatischen Feldern und magnetischen Flußdichten abhängt, bestimmt werden müssen. In den folgenden Abschnitten wird daher näher auf diese Punkte eingegangen. Weiterhin wird der Begriff der Transfermatrix am Beispiel einer Driftstrecke und einer dünnen Linse anschaulich erläutert und die Eigenschaften dieser Matrizen diskutiert.

2.1 Die teilchenoptischen Koordinaten

In der Teilchenoptik ist es nicht üblich, die Dynamik eines Systems in kartesischen Orten und Impulsen zu beschreiben. Vorteilhafter wird die Bewegung in Relativkoordinaten zu der Bahn eines Referenzteilchens, der sogenannten optischen Achse, dargestellt. Als unabhängige Variable wird nicht die Zeit t , sondern die Bogenlänge s entlang der optischen Achse verwendet.

Bei allen normalerweise verwendeten teilchenoptischen Elementen verläuft die optische Achse geradeaus oder liegt in einer Symmetrieebene des teilchenoptischen Elements. Somit verläuft die optische Achse in einer Ebene, der sogenannten Referenz-

ebene. Unter diesen Umständen werden alle Eigenschaften durch die teilchenoptischen Koordinaten (siehe z. B. [1])

$$\begin{aligned} r_1 &= x, \\ r_2 &= a = \frac{p_x}{p_0}, \\ r_3 &= y, \\ r_4 &= b = \frac{p_y}{p_0}, \\ r_5 &= l = v_0(T - T_0), \\ r_6 &= d = \frac{K - K_0}{K_0}, \\ r_7 &= g = \frac{m - m_0}{m_0}, \end{aligned} \quad (3)$$

sowie der Bogenlänge s beschrieben. Die Koordinaten x, a, y und b werden als transversale geometrische Koordinaten bezeichnet, die Koordinate l als longitudinale geometrische Koordinate und die Koordinaten d und g als chromatische Koordinaten.

Hierbei ist x der Abstand zwischen optischer Achse und Projektion des Teilchenortes in die Referenzebene und y der Abstand des Teilchenortes zur Referenzebene. p_x ist die Impulskomponente senkrecht zur optischen Achse in der Referenzebene, p_y die Impulskomponente senkrecht zur Referenzebene (siehe Abbildung 1). K ist die kinetische Teilchenenergie, v die Teilchengeschwindigkeit, T seine Flugzeit bis zum momentanen Ort und m seine Masse. Die Ladung wird bei allen Teilchen als gleich angenommen. p_0, K_0, v_0, T_0 und m_0 sind Impuls, kinetische Energie, Geschwindigkeit, Flugzeit und Masse des Referenzteilchens.

Die hier gewählten teilchenoptischen Koordinaten stimmen mit denen von [1,21,22] überein und unterscheiden sich geringfügig von den bisher am meisten verwendeten Koordinaten [3,6,17,23,24,25]. Dort sind a und b als $a = p_x/p_z$ und $b = p_y/p_z$ definiert und entsprechen den Steigungen der Teilchenbahn. Die hier gewählten Koordinaten (siehe Gleichung (3)) gleichen bis auf den Faktor $1/p_0$ den kanonischen Koordinaten von [26]. Damit können die symplektischen Beziehungen [1,27] ausgenutzt werden.

2.2 Bewegungsgleichungen in teilchenoptischen Koordinaten

Im folgenden sind noch einmal die Bewegungsgleichungen aus [21] zusammengestellt, die für nicht beschleunigende ionenoptische Elemente geeignet sind. Die unabhängige

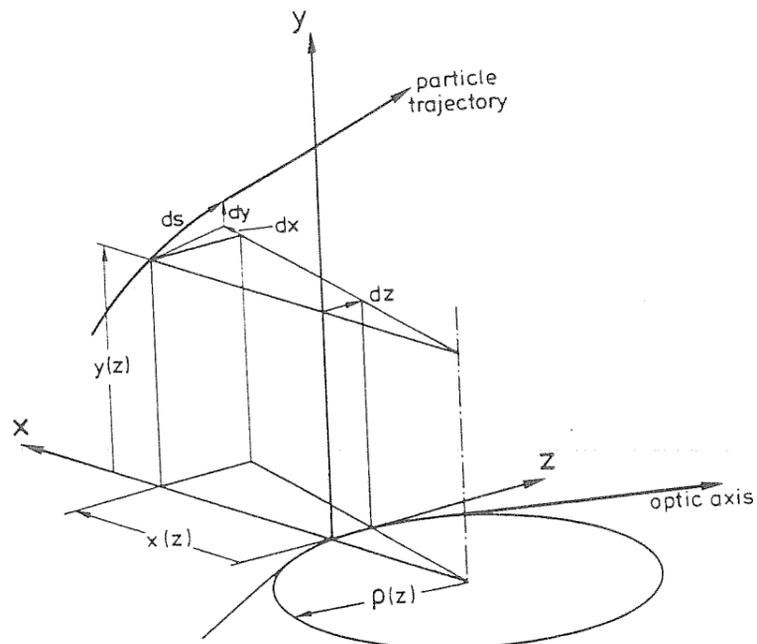


Abb. 1: Die teilchenoptischen Koordinaten [1].

Variable ist die Bogenlänge s . Der Strich bedeutet die Ableitung nach z , der Tangenten entlang der aktuellen Teilchenbahn des Referenzteilchens. Die Größe $h(s)$ ist die aktuelle Krümmung, also der reziproke Ablenkradius $1/R(s)$ der Referenzteilchenbahn.

$$\begin{aligned}
 F_1 = x' &= a(1+hx) \frac{p_0}{p} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 F_2 = y' &= b(1+hx) \frac{p_0}{p} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 F_3 = l' &= (1+hx) \frac{v_0}{v} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 F_4 = a' &= \left(\frac{1}{\chi_e} E_x + \frac{1}{\chi_m} b \frac{E_0}{E} B_z - \frac{1}{\chi_m} \frac{v}{v_0} \left(1 - \left(\frac{v_0}{v} \right)^2 \left(\frac{E_0}{E} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{\frac{1}{2}} B_y \right) l'
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+ h \frac{p}{p_0} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{\frac{1}{2}}, \\
 F_5 = b' &= \left(\frac{1}{\chi_e} E_y - \frac{1}{\chi_m} a \frac{E_0}{E} B_z + \frac{1}{\chi_m} \frac{v}{v_0} \left(1 - \left(\frac{v_0}{v} \right)^2 \left(\frac{E_0}{E} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{\frac{1}{2}} B_x \right) l', \\
 F_6 = d' &= 0, \\
 F_7 = g' &= 0.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Hierbei bedeutet ne die Ladung eines n -fach geladenen Teilchens und $\chi_e = p_0 v_0 / ne$, $\chi_m = p_0 / ne$ die elektrische bzw. magnetische Steifigkeit dieses Teilchens. Es treten nun noch die Terme p_0/p , v_0/v und E_0/E auf, die ebenfalls in teilchenoptischen Koordinaten ausgedrückt werden müssen. Mit der Größe $\phi = ze/K_0$ und der relativistischen Korrektur $\eta = K_0/m_0 c^2$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \frac{E_0}{E} &= \frac{m_0 c^2 + K_0}{m c^2 + K} = \left(1 + \frac{\eta}{1+\eta} (d - \phi V) + \frac{1}{1+\eta} g \right)^{-1}, \\
 \frac{p_0}{p} &= (1+g)^{-\frac{1}{2}} (1+d - \phi V)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\eta}{1+\frac{1}{2}\eta} \frac{d - \phi V - g}{1+g} \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 \frac{v_0}{v} &= (1+g)^{\frac{1}{2}} (1+d - \phi V)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\eta}{1+\frac{1}{2}\eta} \frac{d - \phi V - g}{1+g} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
 &\quad \left(1 + \frac{\eta}{1+\eta} \frac{d - \phi V - g}{1+g} \right).
 \end{aligned} \tag{5}$$

Zu beachten ist, daß hier die kinetische Energie K zusammengesetzt ist aus der Referenzenergie K_0 mal dem Faktor $1+d$, der die Startenergie eines beliebigen Teilchens angibt und der zusätzlichen Energie, die dieses Teilchen aufgrund eines elektrischen Potentials erfährt. Die Gleichungen (4) und (5) dienen als Grundlage für das Bestimmen des Streufeldinflusses auf die Transfermatrix.

2.3 Bestimmung der elektrostatischen Felder und magnetischen Flußdichten

Grundlage zur Beschreibung der elektrostatischen Felder und magnetischen Flußdichten bilden die Maxwell-Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div} \vec{B} &= 0, \\
 \operatorname{div} \vec{D} &= \vec{\rho},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\operatorname{rot} \vec{H} &= \vec{j} + \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}.\end{aligned}\quad (6)$$

Hierbei bedeuten $\bar{\rho}$ die Ladungsdichte und \vec{j} die Stromdichte. Da in den meisten teilchenoptischen Elementen nur statische Felder erzeugt werden, verschwinden in den Maxwell-Gleichungen die zeitabhängigen Terme. Dadurch gilt:

$$\operatorname{rot} \vec{E} = 0. \quad (7)$$

Im Inneren von teilchenoptischen Elementen sind keine elektrischen Ströme vorhanden. Daher ist die magnetische Flußdichte rotationsfrei:

$$\operatorname{rot} \vec{B} = 0, \quad (8)$$

Hier wurde die Stromdichte des Teilchenstrahls vernachlässigt. Somit existieren sowohl für das elektrostatische Feld als auch für die magnetische Flußdichte skalare Potentiale $V^{(e)}$ und $V^{(m)}$. Da im Inneren des teilchenoptischen Elements auch keine Ladungen auftreten, verschwindet die Divergenz von \vec{E} :

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0. \quad (9)$$

Folglich genügen sowohl das elektrische als auch das magnetische Skalarpotential der Laplace-Gleichung.

$$\bar{\nabla}^2 V = 0. \quad (10)$$

2.3.1 Potentialverteilung bei Ablenkelementen

Wie im vorherigen Kapitel gezeigt wurde, kann man im elektrostatischen, wie im magnetischen Fall ein skalares Potential konstruieren, welches die Laplace-Gleichung erfüllt und somit gewissen Einschränkungen unterliegt. Dieses Potential kann in den teilchenoptischen Koordinaten x und y entwickelt werden. Die Entwicklungskoeffizienten sind dann s -abhängig:

$$V(x, y, s) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} A_{i,j}(s) \frac{x^i y^j}{i! j!}. \quad (11)$$

Dieses Potential muß die Laplace-Gleichung erfüllen [6,28]:

$$\nabla^2 V = \frac{1}{1+hx} \frac{\partial}{\partial x} \left((1+hx) \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{1}{1+hx} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{1+hx} \frac{\partial V}{\partial z} \right) = 0. \quad (12)$$

Die Größe $h(s) = 1/R(s)$ bedeutet hier der momentane reziproke Krümmungsradius der optischen Achse. Durch Einsetzen von Gleichung (11) in Gleichung (12) erhält man weiterhin:

$$\begin{aligned}A_{i,j+2} &= -A''_{i,j} - ihA''_{i-1,j} + ih'A'_{i-1,j} - A_{i+2,j} - (3i+1)hA_{i+1,j} \\ &\quad - 3ihA_{i-1,j+2} - i(3i-1)h^2A_{i,j} - 3i(i-1)h^2A_{i-2,j+2} \\ &\quad - i(i-1)^2h^3A_{i-1,j} - i(i-1)(i-2)h^3A_{i-3,j+2}.\end{aligned}\quad (13)$$

Es wird angenommen, daß alle Koeffizienten mit negativem Index verschwinden. Im Hauptfeld der Elemente ist das Potential z -unabhängig. Dadurch vereinfacht sich Gleichung (13) zu:

$$A_{i,j+2} = -A_{i+2,j} - ihA_{i-1,j} - (i+1)hA_{i+1,j}. \quad (14)$$

Alle in der Teilchenoptik auftretenden Felder besitzen eine Symmetrieebene der Form, daß zu einer gegebenen Teilchenbahn auch die an der Symmetrieebene gespiegelte Bahn möglich ist. Dies bedeutet, daß das elektrische Potential stets eine gerade Funktion und das magnetische Potential eine ungerade Funktion der Koordinate y ist.

2.3.2 Potentialverteilung bei Elementen mit gerader optischer Achse

Multipolelemente [17,29,30] besitzen eine gerade optische Achse. Bei ihnen ist es vorteilhaft, die räumliche Verteilung des Potentials durch die Zylinderkoordinaten z , r und ϕ zu beschreiben. Das Potential $V(r, z, \phi)$ kann in eine Potenzreihe um $r = 0$ entwickelt werden:

$$V(r, \phi, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} M_{k,l}(z) \cos(l\phi + \theta_{k,l}) \cdot r^k. \quad (15)$$

Zu beachten ist, daß wiederum nicht um z entwickelt wird, sondern z -abhängige Koeffizienten $M_{k,l}$ eingeführt worden sind. In diesen zylindrischen Koordinaten lautet die Laplace-Gleichung:

$$\Delta V = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0. \quad (16)$$

Einsetzen von Gleichung (15) in Gleichung (16) liefert:

$$\Delta V = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} (M_{k,l}(k^2 - l^2) + M''_{k-2,l}) \cos(l\phi + \theta_{k,l}) \cdot r^{(k-2)} = 0. \quad (17)$$

Im Hauptfeld der Multipole ist das Potential V z -unabhängig. Dadurch verschwinden alle $M''_{k-2,l}$ und Gleichung (17) ist nur für $l = k$ erfüllt. In diesem Fall vereinfacht sich Gleichung (15) zu:

$$V(r, \phi) = \sum_{k=1}^{\infty} M_{k,k} \cos(k\phi + \theta_{k,k}) \cdot r^k.$$

Für einen Multipol mit $2k$ -facher Winkelsymmetrie wächst das Potential V mit r^k und die Konstante $M_{k,k}$ ist die sogenannte Multipolstärke. Im Streufeldbereich dagegen hängt V von z ab, so daß die Terme $M''_{k-2,l}$ nicht mehr verschwinden und mit Hilfe von Gleichung (17) bestimmt werden können:

$$M_{k,l} = M''_{k-2,l} / (l^2 - k^2). \quad (18)$$

Für eine allgemeine Überlagerung von Multipolen erhält man aus den Gleichungen (15,18) bis zur sechsten Ordnung:

$$\begin{aligned} V(r, \phi) &= \sum_{k=2}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} M_{k,k}^{(2i)}(z) \cdot r^{k+2i} \cdot \frac{k!}{i!(k+i)!(-4)^i} \cdot \cos(k\phi + \theta_{k,k}) \\ &= (M_{2,2}r^2 - M''_{2,2}\frac{r^4}{12} + M''''_{2,2}\frac{r^6}{384} + \dots) \cdot \cos(2\phi + \theta_{2,2}) \\ &\quad + (M_{3,3}r^3 - M''_{3,3}\frac{r^5}{16} + \dots) \cdot \cos(3\phi + \theta_{3,3}) \\ &\quad + (M_{4,4}r^4 - M''_{4,4}\frac{r^6}{20} + \dots) \cdot \cos(4\phi + \theta_{4,4}) \\ &\quad + (M_{5,5}r^5 + \dots) \cdot \cos(5\phi + \theta_{5,5}) \\ &\quad + (M_{6,6}r^6 + \dots) \cdot \cos(6\phi + \theta_{6,6}) + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

Offensichtlich erlauben die Gleichungen (18,19) im Streufeld höhere r -Abhängigkeiten des Potentials als die k te Ordnung der $2k$ -fach Symmetrie. So existieren im Falle des reinen Quadrupols nur die Koeffizienten $M_{2,2}$, $M''_{2,2}$, $M''''_{2,2}$, \dots . Dadurch bleibt die Vierfachsymmetrie in der ϕ Richtung des Quadrupols erhalten, aber das Potential hängt sowohl von r^2 als auch von r^4 , r^6 , \dots ab. Durch die Beziehungen $x = r \cos \phi$ und $y = r \sin \phi$ kann man das Potential in die ionenoptischen Koordinaten überführen.

2.4 Die Transfermatrix in der Ionenoptik

Die Matrixbeschreibung ist eine mathematische Methode zur Organisation der Information über die Bewegung von Teilchen um die optische Achse. Matrizen sind insbesondere vorteilhaft, falls es sich um die Behandlung von komplexen Systemen handelt, wie es von Cotte [31], Penner [32], Brown et. al. [20] und Wollnik [1,15] in der Teilchenoptik und von Herzberger [33], Halbach [34] und Wollnik [1] in der Lichoptik gezeigt wurde.

Am Beispiel von einfachen Systemen in der Lichoptik kann man sofort die Vorteile der Transfermatrixmethode erkennen [1]. Wird ein Strahlenbündel angenommen, daß sich in der Nähe der optischen Achse befindet, so ergeben sich für einen beliebigen Strahl mit dem Startort x_1 und dem Startwinkel α_1 beim Zurücklegen einer Strecke

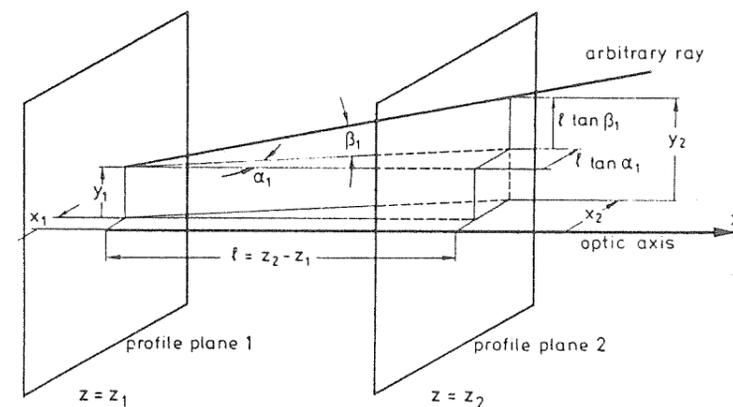


Abb. 2: Trajektorie eines Strahls beim Durchqueren einer Strecke der Länge l [1].

l folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 + l \tan \alpha_1 \approx x_1 + l\alpha_1 + \frac{1}{3}l\alpha_1^3, \\ \alpha_2 &= \alpha_1. \end{aligned} \quad (20)$$

In der Matrixschreibweise folgt in erster Ordnung:

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (X, X) & (X, A) \\ (A, X) & (A, A) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & l \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \alpha_1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Die Transfermatrix transformiert also die Position (x_1, α_1) eines Teilchenstrahls am Ort z_1 näherungsweise zur Position (x_2, α_2) am Ort z_2 . Ein in der Lichoptik häufig

benutztes Element ist die dünne Linse. Die dünne Linse wird eingesetzt, um parallele Strahlen in einem Punkt zu fokussieren. Dies geschieht dadurch, daß die Lichtstrahlen eine Richtungsänderung erfahren, die proportional zum Abstand zur optischen Achse ist. Aus Abbildung 3 ergeben sich für die Strahlkoordinaten:

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2, \\ \tan(\Delta\alpha) &= -x_2/f, \end{aligned} \quad (22)$$

wobei f die Brennweite der Linse ist. Diese Ergebnisse können wiederum in der

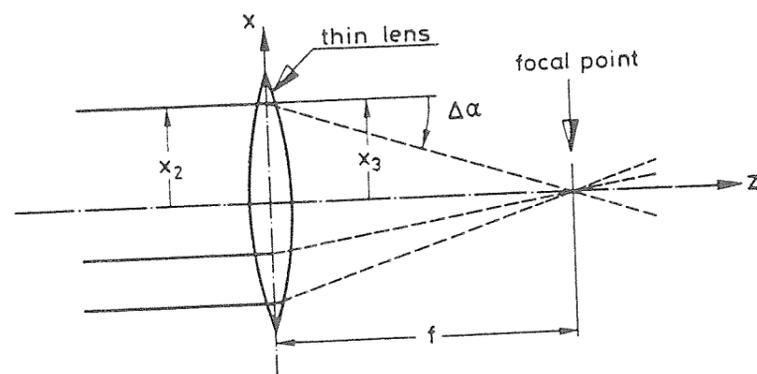


Abb. 3: Trajektorie eines Strahls beim Durchqueren einer dünnen Linse [1].

Matrixschreibweise dargestellt werden:

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1/f & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Betrachtet man nun ein abbildendes System, so wird hier gefordert, daß der Endort der Strahlen unabhängig vom Anfangswinkel sein soll. In der Matrixschreibweise muß also das Element (X, A) verschwinden. Sei nach Abbildung 4 l_1 der Abstand des Gegenstandes von der Linse, f die Brennweite der dünnen Linse und l_2 der Abstand des Bildes, so kann man die Gesamtwirkung des Systems in drei Einzelabschnitte unterteilen und sie miteinander verketten. Diese Abschnitte bestehen aus den Driftstrecken vor und nach der Linse und der Linse selbst. In der Matrixdarstellung

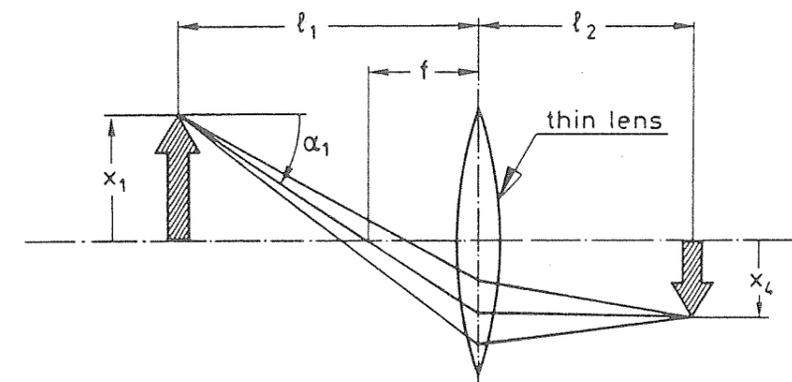


Abb. 4: Strahlengang eines abbildenden Systems [1].

bekommt man folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_4 \\ \alpha_4 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & l_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1/f & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ \alpha_0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - (l_2/f) & l_1 + l_2 - l_1 l_2 / f \\ -1/f & 1 - l_1 / f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ \alpha_0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24)$$

Um eine Abbildung zu erreichen, muß nach Gleichung (24) folgende Beziehung erfüllt sein:

$$l_1 + l_2 - l_1 l_2 / f = 0. \quad (25)$$

Durch Umformung dieser Gleichung ergibt sich die aus der Lichtoptik bekannte Linsengleichung:

$$1/l_1 + 1/l_2 = 1/f. \quad (26)$$

An diesem Beispiel wird ersichtlich, daß komplexe Systeme in Einzelabschnitte aufgeteilt werden können, wobei die Wirkung der einzelnen Abschnitte durch jeweils eine Matrix beschrieben wird. Die optischen Eigenschaften des Gesamtsystems bekommt man durch Hintereinanderschalten der einzelnen Abschnitte. Dieses wird in der Matrixschreibweise durch schrittweise Multiplikation der einzelnen Matrizen erreicht.

Die obige Darstellung ermöglicht eine Beschreibung von Strahlen, die sich in der Nähe der optischen Achse befinden und einen kleinen Neigungswinkel α_0 besitzen. Sollen auch Strahlen beschrieben werden, die eine größere Abweichung besitzen, so muß man noch die nichtlinearen Wirkungen berücksichtigen. Nach Gleichung (20) hängt der Endort nicht vom Winkel α_0 ab, sondern vom Tangens des Winkels. Dadurch wird der Endort auch von höheren Potenzen des Anfangswinkels beeinflusst.

Bis zur dritten Ordnung ergibt sich:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + l\alpha_0 + \frac{1}{3}l\alpha_0^3 \\ &= (X, X)x_0 + (X, A)\alpha_0 + (X, AAA)\alpha_0^3. \end{aligned} \quad (27)$$

An diesem Beispiel wird die natürliche Erweiterung der Matrix erster Ordnung zur Matrix höherer Ordnung erkennbar. Die Wirkung eines Systemabschnittes läßt sich durch eine im allgemeinen nichtlineare Funktion beschreiben. Diese Funktion wird in eine Taylorreihe in den Anfangskoordinaten entwickelt und die Koeffizienten dieser Reihe werden zu einer Matrix zusammengefaßt. Die Wirkung des Gesamtsystems wird durch sukzessive Multiplikation der Matrizen höherer Ordnung bestimmt. Alle diese Eigenschaften können auf die Ionenoptik übertragen werden, indem die Koordinaten x, α durch die entsprechenden teilchenoptischen Koordinaten ersetzt und die Koeffizienten der Matrix durch Lösung der Differentialgleichungen (4) bestimmt werden. Eine detaillierte Erläuterung wird bei der numerischen Bestimmung der Streufeldmatrix erfolgen.

2.5 Bestimmung der inversen und reversen Transfermatrix

Für viele Anwendungen ist es notwendig, die Inverse einer gegebenen Matrix zu bestimmen. Dies gilt zum Beispiel für die Berechnung der reversen Matrix, die bei der Streufeldberechnung von besonderem Interesse ist.

Um die Inverse zu bilden, teilt man die Matrix A in ihren linearen und nichtlinearen Teil auf [35]:

$$A = A_1 + A_{\geq 2}. \quad (28)$$

Weiterhin wird angenommen, daß sich die inverse Matrix aus einer Summe von Matrizen zusammensetzt, die nur Terme der Ordnung ν enthalten:

$$A^{-1} = \sum_{\nu=1}^{\infty} M_{\nu}. \quad (29)$$

Durch Verkettung der Matrix mit ihrer Inversen muß sich die Einheitsmatrix ergeben:

$$(A_1 + A_{\geq 2}) \circ \sum_{\nu=1}^{\infty} M_{\nu} = E. \quad (30)$$

Daraus folgt:

$$A_1 \circ \sum_{\nu=1}^{\infty} M_{\nu} = E - A_{\geq 2} \circ \sum_{\nu=1}^{\infty} M_{\nu}$$

$$\Rightarrow M_{\leq i} = A_1^{-1} \circ \left(E - A_{\geq 2} \circ \sum_{\nu=1}^{i-1} M_{\nu} \right). \quad (31)$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, daß für die i -te Ordnung der inversen Matrix gilt:

$$A_{\geq 2} \circ \sum_{\nu=1}^i M_{\nu} = A_{\geq 2} \circ \sum_{\nu=1}^{i-1} M_{\nu}. \quad (32)$$

Für die i -ten Ordnungsterme von M werden nur die Terme bis zur Ordnung $(i-1)$ benötigt. Daher kann man durch obige Vorschrift die inverse Matrix iterativ exakt bestimmen, sobald man den linearen Teil der inversen Matrix kennt. Die inverse Matrix erster Ordnung wird z. B. durch das Gauss'sche Eliminationsverfahren bestimmt. Sie existiert immer, da symplektische Koordinaten benutzt werden und daher die Determinante der Matrix eins ist. Unter Voraussetzung der Mittelebenensymmetrie und unter der Annahme, daß die Teilchen keine Beschleunigung entlang der optischen Achse erfahren, ergeben sich für die nichtverschwindenden Matrixelemente 1. Ordnung folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} (X, X)_i &= (A, A), \\ (X, A)_i &= -(X, A), \\ (X, G)_i &= -(A, A)(X, G) + (X, A)(A, G), \\ (X, D)_i &= -(A, A)(X, D) + (X, A)(A, D), \\ (A, X)_i &= -(A, X), \\ (A, A)_i &= (X, X), \\ (A, G)_i &= -(A, X)(X, G) + (X, X)(A, G), \\ (A, D)_i &= -(A, X)(X, D) + (X, X)(A, D), \\ (G, G)_i &= 1, \\ (D, D)_i &= 1, \\ (L, X)_i &= -(L, X)(A, A) + (L, A)(A, X), \\ (L, A)_i &= -(L, X)(X, A) + (L, A)(X, X), \\ (L, L)_i &= 1, \\ (L, G)_i &= -(L, G), \\ (L, D)_i &= -(L, D). \end{aligned} \quad (33)$$

Die reverse Matrix beschreibt den Einfluß eines Systems beim Durchgang in der umgekehrten Richtung. Man berechnet sie, indem die inverse Matrix bestimmt und dann eine Vorzeichenumkehr bei den Koordinaten a, b und l durchgeführt wird.

3 Streufeldmodell

Ionenoptische Systeme sind im allgemeinen aus mehreren Elementen (EL) zusammengesetzt, die durch feldfreie Räume, den Driftstrecken (DL), voneinander getrennt sind. Ein solches System kann man in einfache Zellen unterteilen, wobei diese Zellen aus einem ionenoptischen Element und jeweils einer davor- und dahintergeschalteten Driftstrecke bestehen (Abbildung 5). Im einfachsten Fall wird angenommen, daß das

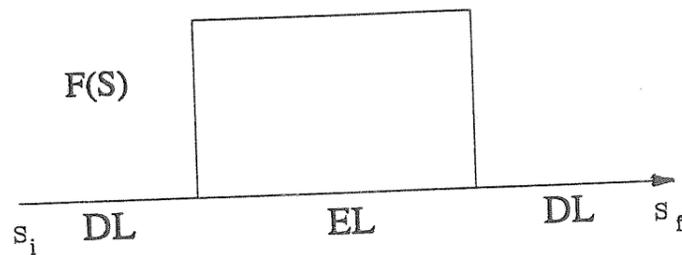


Abb. 5: Grundstruktur einer ionenoptischen Zelle.

Feld oder der Feldgradient des Elements entlang der optischen Achse innerhalb seiner geometrischen Ausdehnung einen konstanten Wert annimmt und an den Enden sprunghaft auf null abfällt. Die Zelle kann man durch drei Transfermatrizen beschreiben, nämlich zwei Matrizen, die jeweils den Einfluß der Driftstrecken repräsentieren und die Transfermatrix des ionenoptischen Elements. Da die Feldstärken dieses Elements keine s -Abhängigkeit besitzen, sind die Differentialgleichungen (4) analytisch lösbar und es können geschlossene Formeln für die einzelnen Matrixelemente angegeben werden. Es existieren spezielle Formelmanipulatoren [21], die so die Transfermatrix in hoher Ordnung bestimmen können. Dieser Ansatz spiegelt die Realität nur unzureichend wieder, da die Feldstärke schon an den geometrischen Grenzen geringer wird und auch noch aus dem Element herausragt.

In einem der Realität näherkommenden Ansatz wird die Wirkung der einzelnen Zelle durch ein einzelnes Element repräsentiert. Für dieses Element wird eine Feldverteilung angenommen, die kontinuierlich von null außerhalb der geometrischen Grenze auf einen konstanten Wert F_0 im Inneren ansteigt um schließlich wieder auf null abzufallen (Abbildung 6). Grundsätzlich kann man die optischen Eigenschaften dieses Systems durch ein "Ray Tracing" Verfahren [3,7,23,36] bestimmen, sobald

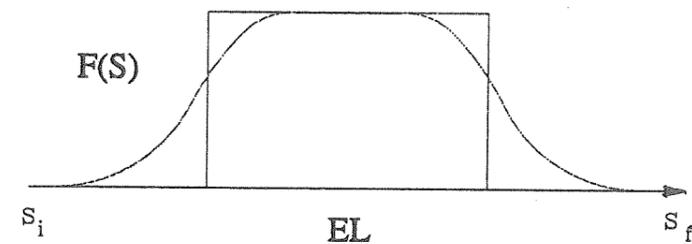


Abb. 6: Beschreibung der Zelle durch ein Element mit einer kontinuierlichen Feldverteilung.

die genaue Feldverteilung entlang der optischen Achse bekannt ist. Diese Verfahren können zwar die ionenoptischen Eigenschaften eines Elements unter Annahme einer realen Feldverteilung genau bestimmen. Sie sind aber sehr rechenintensiv und eignen sich nicht zum Design von Strahlführungssystemen, da hier aufgrund der Optimierung sehr viele Systemvarianten berechnet werden müssen. Ist eine Lösung gefunden, so können solche Verfahren sehr gut zum Überprüfen des Systems eingesetzt werden.

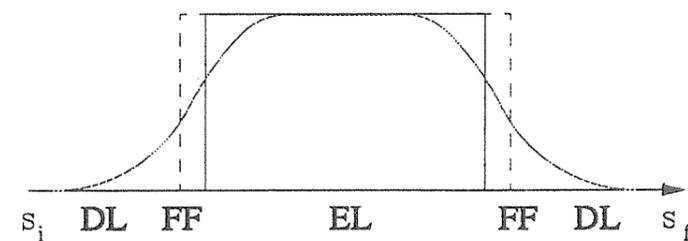


Abb. 7: Unterteilung der Zelle in fünf ionenoptische Elemente.

Um auf eine effektive Weise die Transferfunktion unter Berücksichtigung der realen Streufeldverteilung bestimmen zu können, wird die Zelle in fünf Abschnitte unterteilt, wobei zusätzlich zwei Streufeld (FF) [8,9,17,37,38] an den effektiven Feldgrenzen vor und hinter dem Element platziert werden (Abbildung 7). Für diese Streufeld (FF) existieren zwar keine analytischen Lösungen, doch es zeigt sich, daß man sehr gute analytische Näherungen finden kann und dadurch eine effektive Bestimmung der Transfermatrix ermöglicht wird. Die effektiven Feldgrenzen wer-

den so gewählt, daß das Integral über die reale Feldverteilung und das Produkt von Abstand zwischen Feldgrenzen und der idealen Feldverteilung übereinstimmen.

Die Streufeldmatrix haben nun die Wirkung einer dünnen Linse und die Transfermatrix dieses Elements kann durch ein Produkt aus drei Matrizen bestimmt werden (Abbildung 8) [8,9,17,37,38]. Somit besteht die Eintrittsstreufeldmatrix aus dem Produkt

1. einer reversen Matrix im feldfreien Bereich, verlaufend von s_* , der Position der effektiven Feldgrenze, bis an die Stelle s_a , die so gewählt ist, daß die Feldstärke und alle ihre Ableitungen nach s verschwinden,
2. einer vorwärts gerichteten Matrix von s_a nach s_b , der Position bei der die Feldstärke konstant ist und dadurch wiederum alle Ableitungen nach s verschwinden,
3. einer reversen Matrix, beinhaltend den Bereich von s_b nach s_* , wobei angenommen wird, daß die Feldstärke konstant ist.

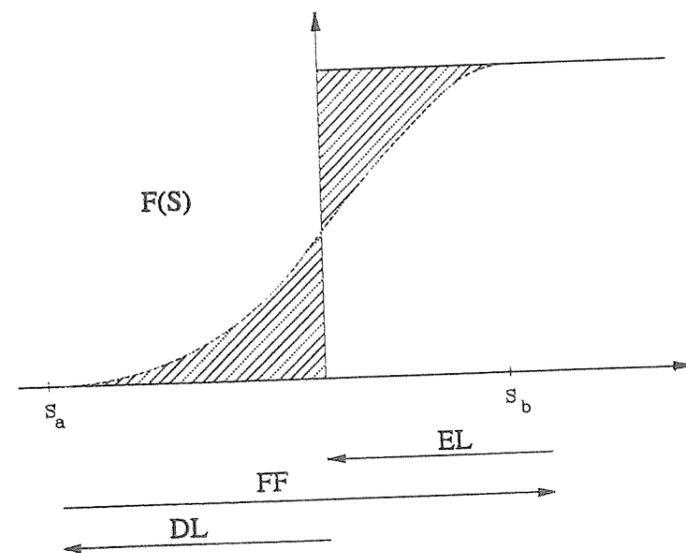


Abb. 8: Streufeldmatrix als Produkt von drei Matrizen.

Die Lage des Ortes s_* wird durch die Definition der effektiven Feldgrenze festgelegt:

$$s_* = \frac{1}{F_0} \int_{s_a}^{s_b} F(s) ds - s_b, \quad (34)$$

wobei die Funktion $F(s)$ den Feldverlauf beschreibt und F_0 die maximale Feldstärke ist. In den meisten Fällen liegt der Ort s_a außerhalb der geometrischen Grenze des Hauptelements, so daß die effektive Länge größer als die geometrische ist. Aus der Wahl dieses Punktes folgt, daß die beiden schraffierten Flächen in Abbildung 8 übereinstimmen. Deshalb besitzt die Produktmatrix folgende Eigenschaften:

1. Viele Elemente dieser Matrix verschwinden oder sind sehr klein.
2. Einige Elemente sind in guter Näherung unabhängig von der speziellen Feldverteilung und dem Polschuh- oder Elektrodenabstand.
3. Näherungsweise lassen sich alle Elemente als eine Funktion der Feldstärke und des Polschuh- oder Elektrodenabstandes darstellen.

Um die Austrittsstreufeldmatrix zu berechnen, ist die erste mit der dritten Matrix zu vertauschen. Andererseits kann sie auch nach Abschnitt 2.5 aus der Eintrittsstreufeldmatrix bestimmt werden. Bei der Herleitung der Streufeldmatrizen durch die sukzessive Approximation (Integralmethode) wird deshalb nur das Eintrittsstreufeld behandelt.

3.1 Numerische Bestimmung der Transfermatrix

Zur Bestimmung der Streufeldmatrix ist es notwendig, alle drei Matrizen zu berechnen und diese miteinander zu verketteten. Im Gegensatz zur ersten und dritten Matrix existiert für die zweite Matrix keine analytische Lösung, somit muß sie auf numerischem Weg bestimmt werden.

Die Bewegungsgleichungen für die Teilchenbahn lassen sich nach Gleichung (2) als ein System von gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung darstellen, wobei der Koordinatenvektor \vec{r} durch Gleichung (3) und die rechte Seite \vec{F} durch Gleichung (4) definiert ist.

Numerische Integratoren benutzen \vec{F} um eine Abschätzung für \vec{r} an der Stelle $s + \Delta s$ zu erhalten. So ergibt sich für den bekannten Runge-Kutta Integrator vierter Ordnung folgendes Schema: Nachdem die Größen $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4$ rekursiv als

$$\vec{k}_1 = \vec{F}(\vec{r}, s) \cdot \Delta s,$$

$$\begin{aligned}
\vec{k}_2 &= \vec{F}(\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{k}_1, s + \frac{1}{2}\Delta s) \cdot \Delta s, \\
\vec{k}_3 &= \vec{F}(\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{k}_2, s + \frac{1}{2}\Delta s) \cdot \Delta s, \\
\vec{k}_4 &= \vec{F}(\vec{r} + \vec{k}_3, s + \Delta s) \cdot \Delta s
\end{aligned} \tag{35}$$

bestimmt worden sind, ergibt sich aus diesen \vec{k}_i für \vec{r} an $s + \Delta s$ folgende Größe:

$$\vec{r}(s + \Delta s) = \vec{r}(s) + \frac{1}{6} \cdot (\vec{k}_1 + 2 \cdot \vec{k}_2 + 2 \cdot \vec{k}_3 + \vec{k}_4) + O(\Delta s^5). \tag{36}$$

Der lokale Fehler ist also proportional zur fünften Potenz der Schrittweite Δs . Somit konvergiert die numerische Lösung schnell bei kleiner werdender Schrittweite. Mit diesem Verfahren kann man also den Koordinatenvektor \vec{r} eines beliebigen Teilchens von der Stelle s_a zur Stelle s_b transformieren. Um die Transfermatrix zu erhalten, gibt es nun zwei Möglichkeiten:

1. Man transformiert eine bestimmte Anzahl von Teilchen mit jeweils verschiedenen Startbedingungen durch das Streufeld und berechnet die Transfermatrix durch numerische Differentiation.
2. Man erweitert den Koordinatenvektor \vec{r} so, daß in ihm nicht nur die aktuellen Koordinaten, sondern auch die partiellen Ableitungen der aktuellen Koordinaten nach den Startkoordinaten gespeichert sind, somit ergibt sich für $r_1 = X$ der Ausdruck $X = (x, \frac{\partial x}{\partial x_0}, \frac{\partial x}{\partial a_0}, \dots, \frac{1}{2} \frac{\partial^2 x}{\partial x_0^2}, \frac{\partial^2 x}{\partial x_0 \partial a_0}, \dots)$. Durch entsprechende Anpassung von \vec{F} ergibt sich dann ein Differentialgleichungssystem für die Matrixelemente.

3.1.1 Numerische Bestimmung mit Standard "Ray Tracing" Verfahren

Die numerische Lösung der Bewegungsgleichungen einzelner Teilchen wird häufig angewendet. So existieren verbreitete Simulationsprogramme wie RAYTRACE [7,36] oder BEAMTRACE [3,23]. Diese Programme liefern gute Ergebnisse bei der Bestimmung von Matrixelementen niedriger Ordnung, sind aber ungenau bei Elementen hoher Ordnung, da bei ihrer Berechnung mehrfache numerische Differentiation notwendig ist.

3.1.2 Numerische Bestimmung mit Hilfe der Differentialalgebra

Die Differentialalgebra (DA)[39,40,41,42] ist ein nützliches Instrument um auf direktem Weg ein Differentialgleichungssystem für die Transfermatrix aufzustellen. Ziel

der DA ist es, die Rechenarithmetik von reellen Funktionen $f(\vec{u})$ auf die Rechenarithmetik von Funktionen und deren Ableitungen nach den einzelnen Komponenten u_i zu erweitern.

Die formale Erweiterung soll am Beispiel einer eindimensionalen Variablen $\vec{u} = u$ demonstriert werden. Sind zwei beliebige reelle Funktionen $f(u)$ und $g(u)$ gegeben, die beliebig oft ableitbar sind, so kann man dazugehörige DA-Vektoren $\vec{D}^f(u)$ und $\vec{D}^g(u)$ einführen:

$$\begin{aligned}
\vec{D}^f(u) &= (D_0^f(u), D_1^f(u), D_2^f(u), \dots) \\
&= (\frac{1}{0!}f(u), \frac{1}{1!}f'(u), \frac{1}{2!}f''(u), \dots),
\end{aligned} \tag{37}$$

$$\vec{D}^g(u) = (D_0^g(u), D_1^g(u), D_2^g(u), \dots) \tag{38}$$

$$= (\frac{1}{0!}g(u), \frac{1}{1!}g'(u), \frac{1}{2!}g''(u), \dots). \tag{39}$$

Die DA-Vektoren enthalten die Koeffizienten der Taylorreihenentwicklung. Analog zu den reellen Operationen wie Addition, Multiplikation und Funktionenauswertung müssen diese auch für DA-Vektoren definiert werden:

- Addition zweier DA-Vektoren
- Multiplikation des DA-Vektors mit einer reellen Konstanten
- Multiplikation zweier DA-Vektoren
- Auswertung einer DA-Funktion

Die Addition zweier DA-Vektoren ergibt sich aus der Summenregel für die Differentiation:

$$\begin{aligned}
\vec{D}^{f+g} &= (\frac{1}{0!}(f(u) + g(u)), \frac{1}{1!}(f'(u) + g'(u)), \frac{1}{2!}(f''(u) + g''(u)), \dots) \\
&= (\frac{1}{0!}f(u), \frac{1}{1!}f'(u), \frac{1}{2!}f''(u), \dots) + (\frac{1}{0!}g(u), \frac{1}{1!}g'(u), \frac{1}{2!}g''(u), \dots) \\
&= \vec{D}^f + \vec{D}^g.
\end{aligned} \tag{40}$$

Die Summe zweier DA-Vektoren ergibt sich also durch komponentenweise Addition der einzelnen Terme. Auf ähnliche Weise wird ein DA-Vektor mit einer reellen Konstanten a multipliziert:

$$\begin{aligned}
\vec{D}^{a \cdot f} &= (\frac{1}{0!}a \cdot f(u), \frac{1}{1!}a \cdot f'(u), \frac{1}{2!}a \cdot f''(u), \dots) \\
&= a \cdot (\frac{1}{0!}f(u), \frac{1}{1!}f'(u), \frac{1}{2!}f''(u), \dots) \\
&= a \cdot \vec{D}^f,
\end{aligned} \tag{41}$$

jede Komponente des DA-Vektors muß mit der Größe a multipliziert werden. Zwei DA-Vektoren der Ordnung n werden nach der Leibnizregel miteinander multipliziert. Für die k -te Komponente von $\vec{D}^h = \vec{D}^{f \cdot g}$ gilt:

$$\begin{aligned} D_k^h = D_k^{f \cdot g} &= \frac{1}{k!} (f(u) \cdot g(u))^{(k)} \\ &= \frac{1}{k!} \sum_{i=0}^k \frac{k!}{i!(k-i)!} f(u)^{(i)} g(u)^{(k-i)} \\ &= \sum_{i=0}^k D_i^f D_{k-i}^g. \end{aligned} \quad (42)$$

Das Ausführen dieser Vorschrift für alle Komponenten liefert den vollständigen DA-Vektor. Bis zur zweiten Ordnung lautet er explizit:

$$\vec{D}^h = (D_0^f D_0^g, D_1^f D_0^g + D_0^f D_1^g, D_2^f D_0^g + D_1^f D_1^g + D_0^f D_2^g). \quad (43)$$

Mit den oben angegebenen Vorschriften ist man nun in der Lage einfache Polynome auszuwerten. So sei z. B. das Polynom $f(u) = 4 \cdot u^2 + 5 \cdot u + 2$ gegeben und gesucht wird die Taylorentwicklung an der Stelle $u = 2$. Um die Entwicklung durchführen zu können, werden noch die Ableitungen benötigt. Bis zur zweiten Ordnung gilt:

$$f'(u) = 8 \cdot u + 5 \quad \frac{1}{2} f''(u) = 4.$$

Durch Auswerten der Funktion und deren Ableitungen an der Stelle 2 ergibt sich für den dazugehörigen DA-Vektor:

$$\vec{D}^f(2) = (28, 21, 4).$$

Um die Entwicklung mit dem DA-Formalismus zu erhalten, ist vorher noch der Einheitsvektor \vec{D}^E und der Identitätsvektor \vec{D}^u zu u zu bilden. Die Multiplikation des Einheitsvektors mit einem beliebigen Vektor \vec{D}^f muß wieder \vec{D}^f ergeben. Somit lautet er:

$$\vec{D}^E = (1, 0, 0). \quad (44)$$

Der Identitätsvektor beinhaltet die Größe u und die Ableitungen von u nach sich selbst. Da alle Ableitungen bis auf die erste verschwinden, schreibt er sich:

$$\vec{D}^u = (u, 1, 0). \quad (45)$$

Wird die Variable u des Polynoms $f(u)$ durch \vec{D}^u ersetzt, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \vec{D}^f(2) &= 4 \cdot (2, 1, 0) \cdot (2, 1, 0) + 5 \cdot (2, 1, 0) + 2 \cdot (1, 0, 0) \\ &= 4 \cdot (4, 4, 1) + (10, 5, 0) + (2, 0, 0) \\ &= (16, 16, 4) + (12, 5, 0) \\ &= (28, 21, 4). \end{aligned}$$

Durch die Anwendung der DA-Operationen wie Multiplikation und Addition kann die Taylorentwicklung des Polynoms bestimmt werden, ohne die Ableitungen explizit zu kennen.

In vielen Fällen werden nicht nur die Entwicklungskoeffizienten von Polynomen benötigt, sondern man will auch Funktionen wie \sin, \exp, \dots auswerten. Um eine Rechenvorschrift im DA-Formalismus zu finden, seien die Funktionen $f(g)$ und $g(u)$ gegeben. Verkettet man die beiden Funktionen, so entsteht eine neue Funktion $h(u) = f(g(u))$. Der entsprechende DA-Vektor $\vec{D}^h(u)$ ergibt sich, indem die Funktion f an der Stelle $g_0 = g(u_0)$ und g an der Stelle u_0 entwickelt wird:

$$\begin{aligned} f(g) &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{\partial^i f}{\partial u^i} (g - g_0)^i = \sum_{i=0}^{\infty} D_i^f (g - g_0)^i, \\ g(u) &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{\partial^i g}{\partial u^i} (u - u_0)^i = \sum_{i=0}^{\infty} D_i^g (u - u_0)^i. \end{aligned} \quad (46)$$

Durch Einsetzen von g in f folgt für $h(u)$:

$$h(u) = \sum_{i=0}^{\infty} D_i^f \left(\sum_{j=0}^{\infty} D_j^g (u - u_0)^j - g_0 \right)^i = \sum_{i=0}^{\infty} D_i^f \left(\sum_{j=0}^{\infty} D_j^{g^*} (u - u_0)^j \right)^i, \quad (47)$$

mit

$$\vec{D}^{g^*} = (0, D_1^g, D_2^g, D_3^g, \dots).$$

Andererseits ist $h(u)$ formal als eine Potenzreihe in u um u_0 darstellbar:

$$h(u) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{\partial^i h}{\partial u^i} (u - u_0)^i = \sum_{i=0}^{\infty} D_i^h (u - u_0)^i. \quad (48)$$

Vergleicht man die Gleichungen (47) und (48), so ergibt sich für \vec{D}^h folgende Rechenvorschrift:

$$\vec{D}^h = \sum_{i=0}^{\infty} D_i^f (\vec{D}^{g^*})^i. \quad (49)$$

Für den DA-Vektor der Ordnung n bedeutet das:

$$\vec{D}_n^h = \sum_{i=0}^n D_i^f (\vec{D}_n^{g*})^i. \quad (50)$$

In der Summe müssen nur die ersten n Terme berücksichtigt werden, da \vec{D}_n^{g*} keinen reellen Anteil besitzt und somit folgende Beziehung gilt:

$$\begin{aligned} (\vec{D}_n^{g*})^i &= (0, D_1^g, D_2^g, D_3^g, \dots, D_n^g)^i \\ &= (0, 0, 0, 0, \dots, 0) \quad i > n. \end{aligned} \quad (51)$$

So wird z. B. zur Auswertung der Exponentialfunktion $f(g) = \exp(g)$ gesetzt. Der zu g gehörenden DA-Vektor spaltet sich in einen konstanten und einen nicht konstanten Teil auf:

$$\vec{D}^g = g_0 + \vec{D}^{g*} = g_0 + (0, D_1^g, D_2^g, \dots).$$

Für \vec{D}^f ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \vec{D}^f &= \exp(\vec{D}^g) = \exp(g_0 + \vec{D}^{g*}) \\ &= \exp(g_0) \exp(\vec{D}^{g*}) \\ &= \exp(g_0) \left(1 + \vec{D}^{g*} + \frac{(\vec{D}^{g*})^2}{2!} + \dots \right). \end{aligned}$$

Ist man an einer mehrdimensionalen Taylorentwicklung interessiert, muß die eindimensionale Variable u durch einen Variablenvektor \vec{u} ersetzt werden.

Bei der Anwendung des DA-Formalismus zur Bestimmung der Streufeldmatrix bestehen die Koordinaten, nach denen entwickelt werden soll, aus den Startkoordinaten:

$$\vec{u} = (x_0, a_0, y_0, b_0, l_0, d_0, g_0). \quad (52)$$

Die teilchenoptischen Koordinaten können nun durch DA-Vektoren ersetzt werden, da am Anfang der Integration diese Koordinaten mit den Startkoordinaten übereinstimmen. Weiterhin wird vorausgesetzt, daß das zu integrierende Teilchen mit dem Referenzteilchen übereinstimmt. Dadurch verschwinden die Koordinaten dieses Teilchens während der gesamten Integration. Die Ableitungen der aktuellen Koordinaten nach den Startkoordinaten hingegen verändern sich.

Mit dem in Gleichung (52) definierten \vec{u} hat in erster Ordnung ein zu einer beliebigen Funktion $f(\vec{u})$ gehöriger DA-Vektor folgende Form:

$$D^f(\vec{u}) = \left(f, \frac{\partial f}{\partial x_0}, \frac{\partial f}{\partial a_0}, \frac{\partial f}{\partial y_0}, \frac{\partial f}{\partial b_0}, \frac{\partial f}{\partial l_0}, \frac{\partial f}{\partial d_0}, \frac{\partial f}{\partial g_0} \right). \quad (53)$$

Da die teilchenoptischen Koordinaten zu Beginn der Integration mit den Startkoordinaten übereinstimmen, lauten die dazugehörigen DA-Vektoren:

$$\begin{aligned} D^x(\vec{u}) &= (0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0), \\ D^a(\vec{u}) &= (0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0), \\ D^y(\vec{u}) &= (0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0), \\ D^b(\vec{u}) &= (0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0), \\ D^l(\vec{u}) &= (0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0), \\ D^d(\vec{u}) &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0), \\ D^g(\vec{u}) &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1). \end{aligned} \quad (54)$$

Ausgehend von diesen Startbedingungen werden alle im Gleichungssystem (4) vorkommenden reellen Operationen durch DA-Operationen ersetzt. Dadurch wird erreicht, daß ein Differentialgleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten entstanden ist. Dieses Gleichungssystem kann mit dem oben beschriebenen Runge-Kutta Integrator gelöst werden, wodurch automatisch die Werte der Matrixelemente gegeben sind.

Ein wesentlicher Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, daß die partiellen Ableitungen auf Maschinengenauigkeit bestimmt werden können. Die Genauigkeit der berechneten Transfermatrix hängt somit nur von der Ordnung des Integrationsverfahrens und der Größe der gewählten Schrittweite ab.

3.2 Näherungsweise Bestimmung der Teilchenbahn durch sukzessive Approximation

Durch Untersuchung der Bewegungsgleichungen (4) kommt man zu dem Ergebnis, daß für die ionenoptischen Elemente mit Mittelebenensymmetrie diese Gleichungen in folgender Form dargestellt werden können [21]:

$$\begin{aligned} x'(s) &= a + f_x(x(s), a(s), y(s), b(s), g, d, s), \\ a'(s) &= k_x x + f_a(x(s), a(s), y(s), b(s), g, d, s), \\ y'(s) &= b + f_y(x(s), a(s), y(s), b(s), g, d, s), \\ b'(s) &= k_y y + f_b(x(s), a(s), y(s), b(s), g, d, s), \\ l'(s) &= f_l(x(s), a(s), y(s), b(s), g, d, s). \end{aligned} \quad (55)$$

Es liegt also ein gekoppeltes Gleichungssystem für die transversalen Koordinaten vor. Die normierte Flugzeit kann man durch einfache Integration bestimmen, während die

chromatischen Koordinaten g und d unverändert bleiben. Die Funktionen f_x, f_a, f_y und f_b enthalten keine linearen Terme in x, a, y und b , können aber lineare Terme in g und d enthalten. Die Funktionen f_{r_i} hängen auch explizit von s ab, da im Streufeldbereich die elektrostatischen oder magnetischen Felder eine s -Abhängigkeit besitzen. Entwickelt man die f_{r_i} nach den ionenoptischen Koordinaten und faßt alle Koeffizienten der jeweiligen Ordnung i zusammen, so ergibt sich für die transversalen Komponenten:

$$f_x = \sum_{i=1}^{\infty} f_x^{(i)}, \quad f_a = \sum_{i=1}^{\infty} f_a^{(i)}, \quad f_y = \sum_{i=1}^{\infty} f_y^{(i)}, \quad f_b = \sum_{i=1}^{\infty} f_b^{(i)}. \quad (56)$$

Die in den f_i auftretenden ionenoptischen Koordinaten sind wiederum als Polynome in den Anfangskoordinaten darstellbar:

$$\begin{aligned} x(s) &= P_x(x_0, a_0, y_0, b_0, g_0, d_0, s), \\ a(s) &= P_a(x_0, a_0, y_0, b_0, g_0, d_0, s), \\ y(s) &= P_y(x_0, a_0, y_0, b_0, g_0, d_0, s), \\ b(s) &= P_b(x_0, a_0, y_0, b_0, g_0, d_0, s). \end{aligned} \quad (57)$$

Ausgehend davon, daß die Transferfunktion \mathcal{M} an der Stelle s_a durch die Einheitsmatrix repräsentiert wird, folgt für die geometrischen Koordinaten an s_a :

$$\begin{aligned} x(s_a) &= P_{x_0} = x_0, \\ a(s_a) &= P_{a_0} = a_0, \\ y(s_a) &= P_{y_0} = y_0, \\ b(s_a) &= P_{b_0} = b_0. \end{aligned} \quad (58)$$

Die Differentialgleichungen (55) können unter Berücksichtigung der Gleichungen (57) und (56) und den oben angegebenen Startbedingungen in ein Integralgleichungssystem umgewandelt werden:

$$\begin{aligned} P_x(s) &= x_0 + \int_{s_a}^s P_a(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_x^{(i)}(P_x(s), P_a(s), P_y(s), P_b(s), g_0, d_0, s) ds, \\ P_a(s) &= a_0 + \int_{s_a}^s k_x(s) P_x(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_a^{(i)}(P_x(s), P_a(s), P_y(s), P_b(s), g_0, d_0, s) ds, \\ P_y(s) &= y_0 + \int_{s_a}^s P_b(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_y^{(i)}(P_x(s), P_a(s), P_y(s), P_b(s), g_0, d_0, s) ds, \\ P_b(s) &= b_0 + \int_{s_a}^s k_y(s) P_y(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_b^{(i)}(P_x(s), P_a(s), P_y(s), P_b(s), g_0, d_0, s) ds. \end{aligned} \quad (59)$$

Um die Transfermatrix der Ordnung i bestimmen zu können, werden nur die ersten i Terme der Summen benötigt, denn die Terme $f^{(j)}$ mit $j > i$ enthalten nur Monome der Ordnung $i+1$ und höher. Dadurch liefert die j -te Potenz eines solchen Polynoms nur Beiträge ab der Ordnung $i+1$.

In [22] wurde gezeigt, daß obige Integralgleichung einer Lipschitz-Bedingung genügt und somit nach dem Satz von Picard-Lindelöf auch eine eindeutige Lösung existiert. Dieser Satz liefert sogar eine Iterationsvorschrift:

$$\begin{aligned} P_{x_{\nu+1}}(s) &= x_0 + \int_{s_a}^s P_{a_{\nu}}(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_x^{(i)}(P_{x_{\nu}}(s), P_{a_{\nu}}(s), P_{y_{\nu}}(s), P_{b_{\nu}}(s), g_0, d_0, s) ds, \\ P_{a_{\nu+1}}(s) &= a_0 + \int_{s_a}^s k_x(s) P_{x_{\nu}}(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_a^{(i)}(P_{x_{\nu}}(s), P_{a_{\nu}}(s), P_{y_{\nu}}(s), P_{b_{\nu}}(s), g_0, d_0, s) ds, \\ P_{y_{\nu+1}}(s) &= y_0 + \int_{s_a}^s P_{b_{\nu}}(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_y^{(i)}(P_{x_{\nu}}(s), P_{a_{\nu}}(s), P_{y_{\nu}}(s), P_{b_{\nu}}(s), g_0, d_0, s) ds, \\ P_{b_{\nu+1}}(s) &= b_0 + \int_{s_a}^s k_y(s) P_{y_{\nu}}(s) ds + \sum_{i=1}^{\infty} \int_{s_a}^s f_b^{(i)}(P_{x_{\nu}}(s), P_{a_{\nu}}(s), P_{y_{\nu}}(s), P_{b_{\nu}}(s), g_0, d_0, s) ds. \end{aligned} \quad (60)$$

Ausgehend von den Startbedingungen (58) kann eine Näherungslösung für die Polynome konstruiert werden. Die Ausdehnung des Streufeldbereichs beträgt einige G_0 innerhalb und außerhalb eines Elements. Dies führt dazu, daß eine Einfachintegration proportional zu G_0 ist. Die beim Iterationsprozeß entstehenden Lösungen werden immer wieder in Gleichung (60) eingesetzt, wodurch Mehrfachintegrale entstehen. Die Werte dieser Integrale sind dementsprechend proportional zu einer bestimmten Potenz von G_0 . Es existieren daher Terme $T_1 \sim G_0$, $T_2 \sim G_0^2$, $T_3 \sim G_0^3$ usw.. Da G_0 aber als klein angenommen werden kann, dominieren die Terme niedriger Ordnung gegenüber den Termen hoher Ordnung. Soll das Endpolynom bis zur einer Ordnung n approximiert werden, muß man die Iteration so lange durchführen, bis keine zusätzlichen Terme T_n mehr auftreten. Der Fehler zur wahren Lösung beträgt dann:

$$\Delta \vec{P}(s) = \vec{P}_{iter}(s) - \vec{P}(s) = \vec{O}(G_0^{n+1}). \quad (61)$$

Da die Matrixelemente niedriger Ordnung von größerer Bedeutung sind, sollten sie auch genauer approximiert werden. Unter der Annahme, daß die geometrische Ausdehnung eines Teilchenstrahls im Streufeldbereich maximal die Größe G_0 erreichen kann, skalieren die Matrixelemente der Ordnung n mit G_0^n . Aus diesem Grund ist in der Literatur [17,38] eine effektive Approximationsordnung eingeführt worden, die sich aus der Summe der Matrixordnung und der Approximationsordnung der Iteration zusammensetzt.

Um eine Vereinfachung der Sprachweise zu ermöglichen, wird der Begriff Approximationsordnung ab jetzt im Sinne der effektiven Approximationsordnung verwendet. Die Iterationsordnung bezeichnet die Genauigkeit der Approximation der einzelnen Matrixelemente und die Matrixordnung die Ordnung der einzelnen Matrixelemente.

3.3 Analytische Näherungsformeln durch Integrale über die Feldverteilung

Das Gleichungssystem (60) liefert eine allgemeine Iterationsvorschrift zur Bestimmung der Transfermatrix, die einen Teilchenstrahl vom Ort s_a außerhalb bis zum Ort s_b weit innerhalb eines Elements transformiert. Die Endkoordinaten der Teilchenbahnen hängen nur von Integralen über die normierte Feldverteilung ab.

Zur Veranschaulichung betrachte man nun die horizontale Komponente der Matrix erster Ordnung. Hier vereinfachen sich die Integralgleichungen ohne Berücksichtigung der chromatischen Elemente zu:

$$\begin{aligned} P_{x_{\nu+1}}(s) &= x_0 + \int_{s_a}^s P_{a_{\nu}}(s) ds \\ P_{a_{\nu+1}}(s) &= a_0 + \int_{s_a}^s k_x(s) P_{x_{\nu}}(s) ds. \end{aligned} \quad (62)$$

Setzt man nun \vec{P}_{r_0} ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} P_{x_1}(s) &= x_0 + \int a_0 ds \\ P_{a_1}(s) &= a_0 + \int k_x x_0 ds. \end{aligned} \quad (63)$$

Durch weiteres Iterieren ergibt sich:

$$\begin{aligned} P_{x_2}(s) &= x_0 \left(1 + \int \int k_x d^2s \right) + a_0 s \\ P_{a_2}(s) &= a_0 \left(1 + \int k_x s ds \right) + x_0 \int k_x ds. \end{aligned} \quad (64)$$

Die Koordinaten am Ort s_b hängen nur von Integralen über die Feldverteilung entlang der optischen Achse ab. Bei Elementen mit gerader optischer Achse entsprechen diese Integrale den Integralen über entlang der geraden z -Achse gemessenen oder berechneten Feldverteilung. Liegen dagegen ionenoptische Elemente mit gekrümmter optischer Achse vor, so müssen die über z bestimmten Integrale auf Integrale entlang der unabhängigen Koordinate s transformiert werden.

Im Streufeldmodell ist man aber nicht explizit an den Endkoordinaten interessiert, sondern an dem Unterschied zwischen der Teilchenbahn unter Einfluß des realen, kontinuierlichen Feldanstieges und der Teilchenbahn unter Einfluß eines idealen Feldes. Dieses Feld steigt sprunghaft an der effektiven Feldgrenze von null auf einen konstanten Wert an. Die Integrale sind beim idealen Feld besonders leicht auszuwerten:

$$\begin{aligned} \int k_{ideal} ds &= k_0 s_b \\ \int \int k_{ideal} d^2s &= \frac{1}{2} k_0 s_b^2. \end{aligned} \quad (65)$$

Werden diese Integrale mit den Integralen über $k(s)$, welche den realen Feldanstieg charakterisieren, verglichen, so stimmen die ersten Integrale aufgrund der Definition der effektiven Feldgrenze überein. Das zweite Integral unterscheidet sich in beiden Fällen. Bildet man die Differenz und normiert auf k_0 , so ergibt sich ein Integral, das unabhängig von der Feldstärke ist:

$$I_{1a} = k_0^{-1} \int \int k d^2s - \frac{1}{2} s_b^2. \quad (66)$$

Das in Gleichung (64) verbleibende Integral kann durch partielle Integration umgeformt werden:

$$\int k s ds = s_b \int k ds - \int \int k d^2s. \quad (67)$$

Nutzt man diese Bedingung aus und bildet die Differenz zwischen Teilchenbahn unter dem Einfluß eines realen Feldverlaufs und eines idealen Feldverlaufs, so ergibt sich für die Streufeldmatrix:

$$\begin{aligned} (X, X) &= 1 + k_0 I_{1A} \\ (X, A) &= 0 \\ (A, X) &= 0 \\ (A, A) &= 1 - k_0 I_{1A}. \end{aligned} \quad (68)$$

Um die Matrix höherer Ordnung zu berechnen, müssen die Funktionen $f_{r_j}^i$, die explizit von der Feldverteilung abhängen, bestimmt werden. Diese Abhängigkeiten lassen sich durch die Rekursionsformeln (13,18) erhalten. Betrachtet man nun eine approximative Lösung der Matrix höherer Ordnung, so entstehen Ausdrücke wie:

$$(A, XX) = c_1 \int k'' ds \quad \text{und} \quad (X, XX) = c_2 \int \int k'' d^2s. \quad (69)$$

Diese Integrale liefern aufgrund der im Streufeldmodell angenommenen Form der Feldverteilung einfache Ausdrücke, da an den Stellen s_a und s_b alle Ableitungen von

k verschwinden und da k an den Stellen s_a und s_b jeweils den Wert null oder k_0 annimmt. Die Integrale vereinfachen sich daher zu:

$$(A, XX) = 0 \quad \text{und} \quad (X, XX) = c_2 k_0. \quad (70)$$

Der erste Ausdruck verschwindet und der Wert des zweiten Ausdrucks ist unabhängig von G_0 und der Form der Feldverteilung. Analog können alle Integrale ausgewertet werden. Werden die Ergebnisse zusammengefaßt, so ergibt sich folgende Lösungsstrategie:

1. Die allgemeinen Bewegungsgleichungen (4) werden in ein iterierfähiges Integralgleichungssystem (60) umgewandelt, wobei alle in den f_r^i vorkommenden Komponenten der Feldverteilung durch die Rekursionsformeln (13,18) bestimmt werden.
2. Alle vorkommenden Komponenten der Feldverteilung, die in Abhängigkeit einer Koordinate z gegeben sind, werden auf die unabhängige Variable s transformiert.
3. Die Integralgleichung wird sukzessive in der gewünschten effektiven Approximationsordnung gelöst.
4. Es werden alle auftretenden Integrale unter Ausnutzung der speziellen Form der im Streufeldmodell angenommenen Feldverteilung in voneinander unabhängige Grundintegrale umgeformt.
5. Zu bilden ist die Differenz zwischen der Teilchenbahn im realen Feld und der Teilchenbahn im idealen Feld.

Die jetzt auftretenden Integrale sind unabhängig von den Integralgrenzen und lassen sich auf G_0 skalieren, so daß sie nur die Form der Feldverteilung repräsentieren. Somit läßt sich die Streufeldmatrix durch eine Potenzreihe in k_0 und G_0 darstellen.

3.4 Anwendung und Vergleich der numerischen Verfahren mit dem Verfahren der sukzessiven Approximation

Um die beschriebenen Methoden anzuwenden und vergleichen zu können, muß man eine geeignete Funktion finden, die die Bedingungen für die Form der Feldstärke erfüllt. Ein geeigneter Ansatz zur Approximation des Feldverlaufs liefert die sogenannte Engfunktion [11]:

$$k(z) = \frac{k(z_b)}{1 + \exp[a_0 + a_1(z/G_0) + a_2(z/G_0)^2 + \dots]} \quad (71)$$

Die Koeffizienten a_i müssen so angepaßt werden, daß sie einem numerisch gegebenen Feldverlauf entsprechen. Hierbei ist die Koordinate z so gewählt, daß sie null an der effektiven Feldgrenze ist. Diese Funktion läßt sich beliebig oft differenzieren und besitzt verschwindende Ableitungen an den Integrationsgrenzen. In der DA-Arithmetik ergeben sich automatisch die Ableitungen, so daß sich auf einfachem Weg die elektrostatischen oder magnetischen Felder und ihre Entwicklungskoeffizienten bestimmen lassen. Durch Integrieren läßt sich die Transfermatrix genau bis auf Rundungsfehler des Computers berechnen.

Um die Integralmethode mit der numerischen Methode vergleichen zu können, werden ausgehend von der Engfunktion alle Grundintegrale bestimmt. Zur Überprüfung der Integralmethode kann Gleichung (61) verwendet werden. Es wird dazu die Differenz zwischen Matrixelementen, die aus der numerischen Integration erhalten werden, und den Werten aus der Integralmethode gegen G_0 aufgetragen. Sind die Matrixelemente bis zum Polynom des Grades n in G_0 approximiert worden, so muß der Fehler der einzelnen Matrixelemente gerade eine Funktion der Gestalt $O(G_0^{n+1})$ sein. Bei genügend kleinem G_0 hat diese Fehlerfunktion dann die Form $O(G_0^{n+1}) = c G_0^{n+1}$, so daß die Integralmethode leicht verifizierbar ist.

4 Streufeldmatrix des homogenen magnetischen Sektors

Im folgenden Kapitel wird die Einfluß des Streufeldes beim Eintritt und Austritt in den homogenen magnetischen Sektor unter Einbeziehung einer schrägen und gekrümmten Feldgrenze untersucht. Die Ergebnisse werden in Form einer Transfermatrix dargestellt.

Berechnungen bis zur zweiten Ordnung wurden von Wollnik [9,10] und unabhängig davon von Enge [11] durchgeführt. Die radialen Koeffizienten für einen homogenen Magneten wurden von Ludwig [43] bis in dritter Ordnung berechnet. Des weiteren bestimmten Matsuda und Wollnik [12,44] den Einfluß des Streufeldes bis zur dritten Ordnung auf die radiale Matrix eines inhomogenen Magneten. Der Einfluß auf die vertikale Matrix bis zur dritten Ordnung wurde von Sakurai, Matsuo und Matsuda untersucht [13]. Sagalovsky [14] wiederholte diese Rechnungen mit Unterstützung des Formelmanipulators MACSYMA, wobei er jedoch nur eine gerade Feldgrenze annahm.

Die Rechnungen stehen teilweise im Widerspruch zur numerischen Berechnung [8] der Streufeldmatrix. Ein Vergleich der numerischen Werte mit den Approximationsformeln aus [12] zeigt, daß der Knick der optischen Achse bedingt durch den kontinuierlichen Feldanstieg in der dort angegebenen Näherung falsch angegeben ist. In erster Ordnung zeigen sich unterschiedliche Ergebnisse bei den Elementen, die abhängig vom Einfluß der gekrümmten Feldgrenze sind. In den angegebenen Artikeln ist nur auf die lateralen Bildfehler eingegangen worden. Da das Auflösungsvermögen der Flugzeitmassenspektrometer von den longitudinalen Bildfehler abhängt, ist ihre Berechnung ebenso notwendig. Im folgenden Kapitel soll die Herleitung der Näherungsformeln unter Berücksichtigung der Krümmung der Referenzbahn durchgeführt werden, wobei die Matrixelemente in der dritten Approximationsordnung bestimmt werden. Durch Vergleich mit den numerisch berechneten Elementen wird die Konsistenz der Näherungsformeln mit den numerischen Ergebnissen nachgewiesen.

4.1 Bewegungsgleichung im Fall des magnetischen Sektors

Im Falle des magnetischen Sektors verschwinden in den Bewegungsgleichungen (4) alle Terme, die proportional zu den elektrischen Feldern oder dem elektrischen Potential sind. Dadurch vereinfachen sie sich zu:

$$\begin{aligned}
 x' &= a(1+hx) \frac{p_0}{p} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 y' &= b(1+hx) \frac{p_0}{p} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 l' &= (1+hx) \frac{v_0}{v} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 a' &= \frac{1}{\chi_m} \left(b \frac{p_0}{p} B_z - \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{\frac{1}{2}} B_y \right) (1+hx) \\
 &\quad \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}} + h \frac{p}{p_0} \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{\frac{1}{2}}, \\
 b' &= \frac{1}{\chi_m} \left(-a \frac{p_0}{p} B_z + \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{\frac{1}{2}} B_x \right) (1+hx) \\
 &\quad \left(1 - \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}.
 \end{aligned} \tag{72}$$

Bei der Berechnung der Transfermatrix sollen zunächst nur die geometrischen Elemente berücksichtigt werden. Entwickeln der Differentialgleichung bis dritter Ordnung ohne Berücksichtigung der chromatischen Elemente liefert:

$$\begin{aligned}
 x' &= a + hax + \frac{1}{2}a^3 + \frac{1}{2}ab^2, \\
 y' &= b + hbx + \frac{1}{2}a^2b + \frac{1}{2}b^3, \\
 l' &= 1 + hx + \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{2}b^2 + \frac{1}{2}hxa^2 + \frac{1}{2}hxb^2, \\
 a' &= \frac{1}{\chi_m} (B_z b + xbhB_z - B_y - hx B_y) + h \left(1 - \frac{1}{2}a^2 - \frac{1}{2}b^2 \right), \\
 b' &= \frac{1}{\chi_m} (-B_z a - ahxB_z + B_x + hx B_x).
 \end{aligned} \tag{73}$$

Um die Transfermatrix zu erhalten, ist eine detaillierte Beschreibung der räumlichen Verteilung des magnetischen Feldes \vec{B} notwendig. Für alle Sektormagneten

wird angenommen, daß die optische Achse einen Kreis vom Radius R_0 innerhalb des Hauptfeldes beschreibt. Die Koordinate entlang dieser Achse wird als z bezeichnet. Innerhalb der Region des Hauptfeldes bedeutet dies, daß die Flußdichte \vec{B} entlang dieses Kreises konstant $= B_0$, also unabhängig von s ist. Daraus folgt, daß die Polschuhe rotationssymmetrisch sein müssen. In der Ebene der optischen Achse, für $y = 0$, wird dann die y -Komponente der Feldverteilung durch eine Taylorreihe beschrieben:

$$\frac{B_y(x)}{B_0} = 1 - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{n_i x^i}{i!} = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{A_{i,1} x^i}{A_{0,1} i!}.$$

Die Koeffizienten für das Potential in der Ablenkebene können also durch die y -Komponente der magnetischen Flußdichte dargestellt werden. Die Variable x liefert die Abweichung der Trajektorie von der optischen Achse, während die Koeffizienten n_i die Inhomogenität der Feldverteilung definieren. Im Falle eines homogenen Magneten mit parallelen Polschuhen verschwinden alle Koeffizienten n_i . Dadurch ist B_y unabhängig von x und somit gilt $B_y(x) = B_0$.

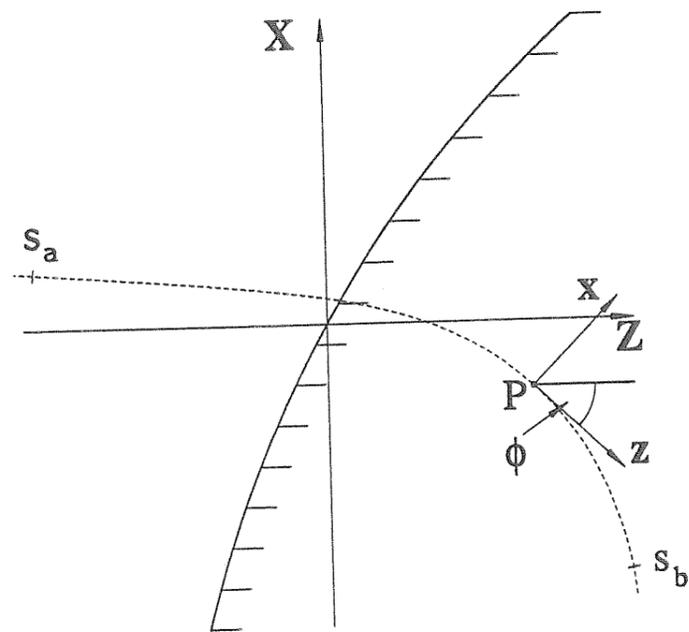


Abb. 9: Lage des mitgeführten teilchenoptischen Koordinatensystems.

Im Streufeldbereich fällt die Flußdichte entlang der optischen Achse ab und ist dadurch nicht mehr unabhängig von der Variable s . Im Koordinatensystem des

Magneten (siehe Abbildung 9) ergibt sich für die Taylorentwicklung der Flußdichten bis zur dritten Ordnung:

$$\begin{aligned} B_X(X, Y, Z) &= - \left(\frac{\partial V_B(Z)}{\partial X} \right) = -V_{1,1}Y - V_{2,1}XY - \frac{1}{2}V_{3,1}X^2Y - \frac{1}{6}V_{1,3}Y^3, \\ B_Y(X, Y, Z) &= - \left(\frac{\partial V_B(Z)}{\partial Y} \right) = -V_{0,1} - V_{1,1}X - \frac{1}{2}V_{2,1}X^2 - \frac{1}{2}V_{0,3}Y^2 \\ &\quad - \frac{1}{6}V_{3,1}X^3 - \frac{1}{2}V_{1,3}XY^2, \\ B_Z(X, Y, Z) &= - \left(\frac{\partial V_B(Z)}{\partial Z} \right) = -V'_{0,1}Y - V'_{1,1}XY - \frac{1}{2}V'_{2,1}X^2Y - \frac{1}{6}V'_{0,3}Y^3. \end{aligned} \quad (74)$$

Mit Hilfe der obigen Gleichungen werden alle vorkommenden Felder durch die Koeffizienten $V_{i,j}$ des skalaren magnetischen Potentials ausgedrückt.

Nicht alle in der Gleichung auftretenden Koeffizienten sind unabhängig voneinander, so lassen sich die Koeffizienten $V_{0,3}$ und $V_{1,3}$ durch die anderen Koeffizienten ausdrücken.

$$\begin{aligned} V_{0,3} &= -V''_{0,1} - V_{2,1} \\ V_{1,3} &= -V''_{1,1} - V_{3,1}. \end{aligned} \quad (75)$$

Um die Potentialkoeffizienten $A_{i,j}$ im mitgeführten System x, y, s zu erhalten, welches um den Winkel Φ gedreht ist, kann die Beziehung

$$\begin{aligned} Z &= z \cos(\Phi) + x \sin(\Phi) + X_p, \\ X &= -z \sin(\Phi) + x \cos(\Phi) + Z_p \end{aligned}$$

herangezogen werden. Dadurch ergeben sich für die Impulskoordinaten a und b mit $h = -\frac{A_{0,1}}{\chi_m}$ folgende Bedingungen:

$$\begin{aligned} a' &= \frac{1}{\chi_m} (B_z b + h B_z x b - B_y - h B_y x) + h \left(1 - \frac{1}{2} a^2 - \frac{1}{2} b^2 \right) \\ &= \frac{1}{\chi_m} \left(-A'_{0,1} y b - A'_{1,1} x y b - h A'_{0,1} x y b + A_{0,1} + A_{1,1} x + \frac{1}{2} A_{2,1} x^2 + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} A_{0,3} y^2 + \frac{1}{6} A_{3,1} x^3 + \frac{1}{2} A_{1,3} x y^2 + h A_{0,1} x + h A_{1,1} x^2 + \frac{1}{2} h A_{2,1} x^3 + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} h A_{0,3} x y^2 - A_{0,1} - \frac{1}{2} A_{0,1} a^2 - \frac{1}{2} A_{0,1} b^2 \right), \\ b' &= \frac{1}{\chi_m} (-B_z a - h B_z x a + B_x + h x B_x) \\ &= \frac{1}{\chi_m} \left(A'_{0,1} a y + A'_{1,1} - h A'_{0,1} x a y + h A'_{0,1} x a y - A_{1,1} y - A_{2,1} x y - \frac{1}{2} A_{3,1} x^2 y - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{6} A_{1,3} y^3 - h A_{1,1} x y - h A_{2,1} x^2 y \right). \end{aligned} \quad (76)$$

Sortiert man nun nach den teilchenoptischen Koordinaten x, a, y, b und nutzt Gleichung (75) aus, so ergibt sich für die Bewegungsgleichung bis in dritter Ordnung – ohne die chromatischen Terme und mit den normierten Potentialkoeffizienten $B_{i,j} = \frac{1}{\chi_m} A_{i,j}$ – folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned}
 x' &= a + hax + \frac{1}{2}a^3 + \frac{1}{2}ab^2, \\
 y' &= b + hbx + \frac{1}{2}a^2b + \frac{1}{2}b^3, \\
 l' &= 1 + hx + \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{2}b^2 + \frac{1}{2}hxa^2 + \frac{1}{2}hxb^2, \\
 a' &= (B_{1,1} - h^2)x + \left(\frac{1}{2}B_{2,1} + hB_{1,1}\right)x^2 - \frac{1}{2}ha^2 + \\
 &\quad \left(\frac{1}{2}h'' - \frac{1}{2}B_{2,1}\right)y^2 + h'yb - \frac{1}{2}hb^2 + \left(\frac{1}{6}B_{3,1} + \frac{1}{2}hB_{2,1}\right)x^3 + \\
 &\quad \left(-\frac{1}{2}B_{1,1}'' + \frac{1}{2}hh'' - \frac{1}{2}B_{3,1} - \frac{1}{2}hB_{2,1}\right)xy^2 - (B_{1,1}' - hB_{0,1}')xyb, \\
 b' &= -B_{1,1}y + (-B_{2,1} - hB_{1,1})xy - h'ay + \left(-\frac{1}{2}B_{3,1} - hB_{2,1}\right)x^2y + \\
 &\quad (B_{1,1}' + hB_{0,1}')xay + \left(\frac{1}{6}B_{1,1}'' + \frac{1}{6}B_{3,1}\right)y^3.
 \end{aligned} \tag{77}$$

4.2 Einfluß des Streufeldes auf die Referenzbahn

Im Gegensatz zu den Multipolelementen erfährt auch das Referenzteilchen eine Ablenkung im magnetischen Dipol. Eine vereinfachte Darstellung des Streufeldebeflusses liefert das SCOFF (sharp cut off) Modell [11]. In diesem Modell wird angenommen, daß G_0 unendlich klein ist. Dadurch steigt das Feld sprunghaft an der effektiven Feldgrenze von null auf einen konstanten Wert an. Unter dieser Annahme bewegt sich das Referenzteilchen außerhalb des Magneten geradeaus und beschreibt innerhalb des Magneten eine Kreisbahn mit der konstanten Krümmung $h_0 = 1/R_0$. Wird dagegen die reale Feldverteilung berücksichtigt, so wächst die Krümmung der Flugbahn dieses Teilchens kontinuierlich von null weit außerhalb zum Wert h_0 weit innerhalb des Magneten an. Unter der Annahme, daß die Flugbahnen im Hauptfeld des Magneten im SCOFF Modell und unter Einfluß einer realen Feldverteilung übereinstimmen sollen, muß diese Flugbahn beim Eintritt in den Magneten einen Versatz Δx und einen Knick $\Delta\Phi$ besitzen.

Da die Referenzbahn in der Ablenkebene ($y = 0$) liegt, wird die Ablenkung nur von der y -Komponente der magnetischen Flußdichte $B_y(s) = -A_{0,1}(s)$ bewirkt. Die Krümmung $h(s)$ der Teilchenbahn stimmt bis auf den Skalierungsfaktor $1/\chi_m$ mit $B_y(s)$ überein. Ab hier wird nur noch von der Krümmung h statt von der magnetischen Flußdichte ausgegangen.

Im allgemeinen tritt ein Teilchen nicht senkrecht zur effektiven Feldgrenze in den Magneten ein, sondern es besitzt eine um den Winkel ϵ geneigte Bahn (siehe Abbildung 10). Weiterhin kann die effektive Feldgrenze noch eine Krümmung mit dem Radius R_g besitzen.

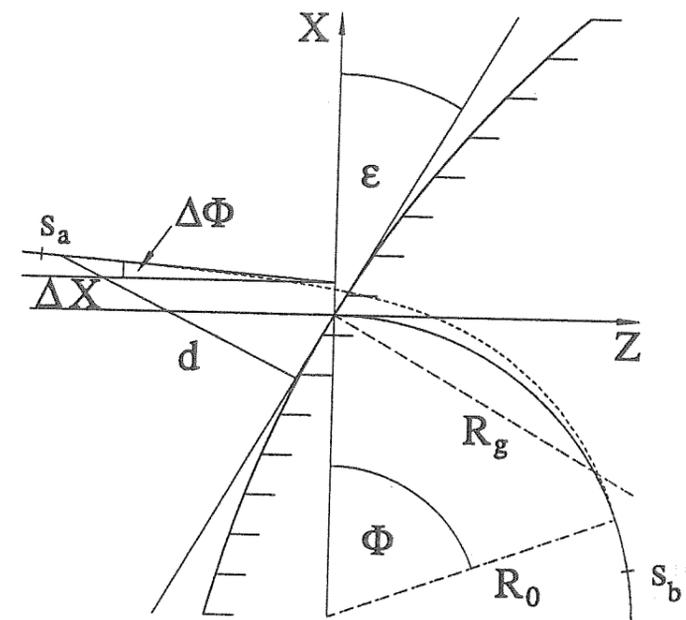


Abb. 10: Teilchenbahn im Streufeld eines Magneten

Die Flugbahn des Teilchens soll an der Stelle s_a weit außerhalb des Magneten starten und an der Stelle s_b im homogenen Bereich enden. Aus dem unterschiedlichen Flugwinkel und der Verschiebung in der x -Richtung relativ zur Flugbahn in einem idealen Feld kann anschließend der benötigte Versatz ΔX und Knick $\Delta\Phi$ bestimmt werden. Für die Flugbahn ergibt sich folgendes Differentialgleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 \Phi' &= h(s), \\
 X' &= -\sin(\Phi), \\
 Z' &= \cos(\Phi).
 \end{aligned} \tag{78}$$

Diese Bewegungsgleichungen sind lösbar, sobald die Größe $h(s)$ bekannt ist. Im allgemeinen bestimmt man die Flußdichte entweder durch numerische Rechenverfahren oder durch Messung entlang der Senkrechten zur effektiven Feldgrenze, (gestrichelte Linie in Abbildung 11). Da die Feldverteilung entlang der Flugbahn des Referenzteilchens von Interesse ist, muß eine Transformation dieser bekannten Feldverteilung auf die Flugbahn durchgeführt werden.

Ausgehend von einer geraden Feldgrenze und unter der Annahme, daß das Teilchen keine Ablenkung erfahren wird, verläuft die Flugbahn entlang der Z -Achse und der Abstand d des Teilchen ist durch die geometrische Beziehung $d = z \cos(\epsilon)$

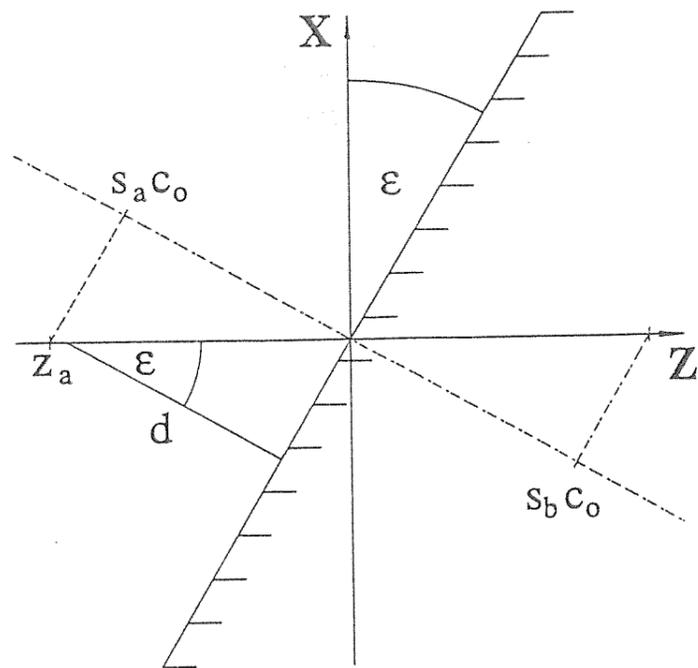


Abb. 11: Feldverlauf entlang der ungestörten Bahn.

gegeben. Für den Ablenkwinkel Φ ergibt sich mit $c_0 = \cos(\epsilon)$ und $u = c_0 z$ folgende Beziehung:

$$\Delta\Phi = \int_{z_a}^{z_b} h(c_0 z) dz = \frac{1}{c_0} \int_{z_a c_0}^{z_b c_0} h(u) du. \quad (79)$$

Da bei gerader Feldgrenze die Feldverteilung unabhängig von der X -Richtung ist, entspricht $\int_{z_a c_0}^{z_b c_0} h(u) du$ gerade dem Integral über die Feldverteilung entlang der gestrichelten Linie. Bei der weiteren Herleitung wird angenommen, daß immer in den Integrationsgrenzen $z_b c_0$ und $z_a c_0$ integriert wird, ab jetzt werden sie deshalb weggelassen. Weiterhin soll $h = h(u)$ gelten. Setzt man das Ergebnis in Gleichung (78) ein und entwickelt die trigonometrischen Funktionen $\sin(\Phi)$ und $\cos(\Phi)$, so folgt:

$$\begin{aligned} \Phi_b &= \frac{1}{c_0} \int h du, \\ X_b &= -\frac{1}{c_0^2} \iint h d^2 u, \\ Z_b &= \frac{1}{c_0} u - \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} \int \left(\int h du \right)^2 du, \end{aligned} \quad (80)$$

wobei folgende Startbedingungen vorausgesetzt wurden.

$$\begin{aligned} \Phi_a &= 0, \\ X_a &= 0, \end{aligned} \quad (81)$$

$$Z_a = s_a. \quad (82)$$

Gleichung (80) beschreibt in erster Näherung die Bewegung des Referenzteilchens bei gerader Feldgrenze. Berücksichtigt man zusätzlich die Krümmung der effektiven Feldgrenze, so wird der Abstand des Teilchens zur effektiven Feldgrenze durch folgenden Ausdruck beschrieben:

$$d(Z, X) = \sqrt{(X - X_0)^2 + (Z - Z_0)^2} - R_g. \quad (83)$$

Die Größen $Z_0 = R_g \cos(\epsilon)$ und $X_0 = -R_g \sin(\epsilon)$ bestimmen den Mittelpunkt des Kreises, der die gekrümmte Feldgrenze beschreibt. Der Abstand d hängt von der aktuellen Position Z, X des Referenzteilchens und somit indirekt von der aktuellen Krümmung h ab. Unter der Annahme, daß die Teilchenbahn im Streufeldbereich nur wenig von der Krümmung beeinflusst wird, ist der Verlauf dieser Bahn störungstheoretisch bestimmbar. Entwickelt man Gleichung (83) bis in dritter Ordnung, so ergibt sich mit $\rho = 1/R_g$ und $s_0 = \sin(\epsilon)$:

$$\begin{aligned} d(X, Z) &= c_0 Z - s_0 X - \frac{1}{2} \rho (c_0^2 X^2 + 2s_0 c_0 X Z + s_0^2 Z^2) + \frac{1}{2} \rho^2 (s_0 c_0^2 X^3 \\ &\quad + c_0 (3s_0^2 - 1) X^2 Z + s_0 (1 - 3c_0^2) X Z^2 - s_0^2 c_0 Z^3). \end{aligned} \quad (84)$$

Werden für Z und X die Lösungen aus Gleichung (80) eingesetzt und entwickelt man $h(s)$ um die Stelle u , so folgt mit $t_0 = \tan(\epsilon)$ und $\Delta d = d - u$:

$$\begin{aligned} h(s) &= h + h' \Delta d + \frac{1}{2} h'' (\Delta d)^2 \\ &= h + \\ &\quad h' \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{c_0^2} \int \left(\int h du \right)^2 du + \frac{t_0}{c_0} \iint h d^2 u \right. \\ &\quad \left. + \rho \frac{t_0}{c_0} u \iint h d^2 u - \frac{1}{2} \rho t_0^2 u^2 - \frac{1}{2} \rho^2 t_0^2 u^3 \right) + \\ &\quad \frac{1}{2} h'' \left(\frac{t_0^2}{c_0^2} \left(\int \int h d^2 u \right)^2 - \rho \frac{t_0^3}{c_0} u^2 \iint h d^2 u + \frac{1}{4} \rho^2 t_0^4 u^4 \right). \end{aligned} \quad (85)$$

Diese Gleichung enthält aber noch nicht alle Terme bis zur zweiten Ordnung, denn wird der Ausdruck in Gleichung (78) eingesetzt, ergeben sich für X und Z folgende erweiterte Lösungen:

$$\begin{aligned} X_b &= -\frac{1}{c_0^2} \iint h d^2 u - \frac{t_0}{c_0^3} \iint h' \iint h d^4 u + \frac{1}{2} \frac{t_0^2}{c_0^2} \rho \iint h' u^2 d^2 u, \\ Z_b &= \frac{1}{c_0} u - \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} \int \left(\int h du \right)^2 du. \end{aligned} \quad (86)$$

Den Unterschied des Endortes im Vergleich zur SCOFF Näherung kann man durch die Streufeldintegrale ausdrücken, die unabhängig von den Integrationsgrenzen sind. Werden alle auftretende Integrale (siehe Anhang 10) in Grundintegrale umgeformt, ergeben sich für den Versatz an der effektiven Feldgrenze folgende Größen:

$$\begin{aligned}\Delta X &= -\frac{1}{c_0^2} h_0 I_{1a} + \frac{3}{2} \frac{t_0}{c_0^3} h_0^2 I_{3a} - 3 \frac{t_0^2}{c_0^2} \rho h_0 I_{2a}, \\ \Delta Z &= -\frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} h_0^2 I_{3a}.\end{aligned}\quad (87)$$

Da angenommen wurde, daß der Endort in beiden Fällen übereinstimmen soll, muß das Teilchen außerhalb des Magneten entsprechend um diese Differenz verschoben werden. Dadurch modifiziert sich der Ausdruck für die Krümmung:

$$\begin{aligned}h(s) &= h + \\ h' &\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{c_0^2} \int (\int h du)^2 du + \frac{t}{c_0} \int \int h d^2 u + \frac{t^2}{c_0^2} \int \int h' \int \int h d^4 u \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \frac{t_0^3}{c_0^3} \rho \int \int h' u^2 d^2 u + \rho \frac{t_0}{c_0} u \int \int h d^2 u - \frac{1}{2} \rho t_0^2 u^2 - \frac{1}{2} \rho^2 t_0^2 u^3 \right. \\ &\quad \left. - \frac{t_0}{c_0} h_0 I_{1a} + \frac{3}{2} \frac{t_0^2}{c_0^3} h_0^2 I_{3a} - 3 \frac{t_0^3}{c_0^2} \rho h_0 I_{2a} + \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} h_0^2 I_{3a} \right) \\ \frac{1}{2} h'' &\left(\frac{t_0^2}{c_0^2} (\int \int h d^2 u)^2 - \rho \frac{t_0^3}{c_0} u^2 \int \int h d^2 u + \frac{1}{4} \rho^2 t_0^4 u^4 \right).\end{aligned}\quad (88)$$

Schließlich erhält man für den Winkel Φ am Integrationsende:

$$\begin{aligned}\Phi_b &= \frac{1}{c_0} \int h du - \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} \int h' \int (\int h du)^2 d^2 u + \frac{t}{c_0^2} \int h' \int \int h d^3 u + \\ &\quad \frac{t_0^2}{c_0^3} \int h' \int \int h' \int \int h d^5 u - \frac{1}{2} \frac{t_0^3}{c_0^3} \rho \int h' \int \int h' u^2 d^3 u + \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0^2} \rho \int h' u \int \int h d^3 u - \\ &\quad \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u^2 du - \frac{1}{2} \rho^2 \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u^3 du + \frac{1}{2} \frac{t_0^2}{c_0^3} \int h'' (\int \int h d^2 u)^2 du - \\ &\quad \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^3}{c_0^2} \int h'' u^2 \int \int h d^3 u + \frac{1}{8} \rho^2 \frac{t_0^4}{c_0} \int h'' u^4 du - \\ &\quad \frac{t_0}{c_0^2} h_0^2 I_{1a} + \frac{3}{2} \frac{t_0^2}{c_0^3} h_0^3 I_{3a} - 3 \frac{t_0^3}{c_0^2} \rho h_0^2 I_{2a} + \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} h_0^3 I_{3a}.\end{aligned}\quad (89)$$

Werden alle Integrale ausgewertet und zusammengefaßt, so ergibt sich der Knick $\Delta\Phi$ der Teilchenbahn. Durch Projektion aller Einflüsse auf die effektive Feldgrenze wird der Versatz und Knick der Teilchenbahn mit Hilfe folgender Größen beschrieben:

$$\Delta\Phi = \frac{t_0^2}{c_0} \rho h_0 I_{1A} - \rho h_0^2 \left(\frac{3}{4} \frac{t_0}{c_0^2} I_{3a} + \frac{t_0^3}{c_0^2} (2I_{3a} - I_{2b}) \right) + 3 \rho^2 h_0 \frac{t_0^2}{c_0^3} I_{2a},$$

$$\begin{aligned}\Delta X &= \frac{1}{c_0^2} h_0 I_{1a} - \frac{3}{2} \frac{t_0}{c_0^3} h_0^2 I_{3a} + 3 \rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0^2} I_{2a}, \\ \Delta Z &= \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} h_0^2 I_{3a}.\end{aligned}\quad (90)$$

Zu sehen ist, daß bei verschwindender Krümmung die Ablenkrichtung der Bahnen mit und ohne realen Streufeld einfluß sich nicht unterscheiden, so daß nur der Versatz ΔX und ΔZ zu berücksichtigen ist. Bei gekrümmten Feldgrenzen tritt zusätzlich noch ein Knick der Teilchenbahn auf, der bei der Justierung eines Ablenkmagneten von Bedeutung ist.

4.3 Bestimmung der Potentialkoeffizienten

Um die Transfermatrix des Streufeldes zu bestimmen, müssen die normierten Potentialkoeffizienten $B_{i,1}^{(k)}(s)$ berechnet werden. Die Indizes i und k geben jeweils die Ableitung in x -Richtung und entlang der Flugrichtung des Referenzteilchens an, wie in Abbildung 9 erkennbar ist. Alle Koeffizienten $B_{i,1}^{(k)}(s)$ lassen sich analog zu $A_{0,1}(s)$ durch die aktuelle Krümmung ausdrücken:

$$B_{i,1}^{(k)}(s) = -h_{x^i z^k}(s).\quad (91)$$

Die Ableitungen von $h(s)$ sind nicht explizit gegeben, sondern müssen über den Abstand $d(z, x)$ durch mehrfaches Anwenden der Kettenregel bestimmt werden. Für die in Gleichung (77) auftretenden Koeffizienten ergeben sich dann:

$$\begin{aligned}h_x &= h' d_x, \\ h_z &= h' d_z, \\ h_{xx} &= h' d_{xx} + h'' d_x^2, \\ h_{zz} &= h' d_{zz} + h'' d_z^2, \\ h_{xxx} &= h' d_{xxx} + 3h_{dd} d_{xx} d_x + h''' d_x^3, \\ h_{zzz} &= h' d_{zzz} + h'' (d_{zz} d_z + d_{zz} d_z) + 3h''' d_z d_z^2,\end{aligned}\quad (92)$$

wobei der Strich die Ableitung von h nach d kennzeichnet. Aus Abbildung 9 lassen sich die Laborkoordinaten Z, X durch das mitgeführte Koordinatensystem x, z ausdrücken:

$$\begin{aligned}Z &= z \cos(\Phi) + x \sin(\Phi) + Z_p, \\ X &= -z \sin(\Phi) + x \cos(\Phi) + X_p.\end{aligned}\quad (93)$$

Dadurch ergeben sich für die partiellen Ableitungen von Z, X nach den intrinsischen Koordinaten unter Ausnutzung von Gleichung (89) folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z}{\partial z} &= 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^2} \left(\int h du \right)^2, \\ \frac{\partial Z}{\partial x} &= \frac{1}{c_0} \int h du + \frac{t_0}{c_0^2} \int h' \int \int h d^3 u - \rho \frac{1}{2} \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u^2 du + \rho \frac{t_0^2}{c_0} h_0^2 I_{1a}, \\ \frac{\partial X}{\partial z} &= -\frac{1}{c_0} \int h du - \frac{t_0}{c_0^2} \int h' \int \int h d^3 u + \rho \frac{1}{2} \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u^2 du - \rho \frac{t_0^2}{c_0} h_0^2 I_{1a}, \\ \frac{\partial X}{\partial x} &= 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^2} \left(\int h du \right)^2.\end{aligned}\quad (94)$$

Somit können die partiellen Ableitungen des Abstandes d bestimmt werden, z. B. ergeben sich für die Ableitungen in x -Richtung in der jeweils benötigten Approximationsordnung:

$$\begin{aligned}d_x &= \int h du + \frac{t_0}{c_0} \int h' \int \int h d^3 u - \frac{1}{2} \rho t_0^2 \int h' u^2 du + \rho t_0^2 h_0^2 I_{1a} - t_0 c_0 + \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0} \left(\int h du \right)^2 + \\ &\quad \rho \int \int h d^2 u - \rho h I_{1a} - \rho t_0 c_0 u - \rho t_0^2 u \int h du + \frac{1}{2} \rho^2 \frac{t_0}{c_0} (1 - 3c_0^2) u^2, \\ d_{xx} &= -\rho c_0^2 - 2\rho t_0 c_0 \int h du + \rho^2 (3t_0^2 c_0^2 - 1) u, \\ d_{xxx} &= 3\rho^2 t_0 c_0^3.\end{aligned}\quad (95)$$

Aufgrund der nun bekannten Ableitungen von d nach den Koordinaten des mitgeführten Koordinatensystems können die Größen $B_{i,1}^{(k)}(s)$ näherungsweise bestimmt werden. Im folgenden ist jeweils ein für eine bestimmte Matrixordnung charakteristischer Koeffizient aufgelistet, so ergibt sich für $-B_{1,1}(s) = h_x(s)$:

$$\begin{aligned}h_x &= h' d_x + h'' d_x \Delta d + \frac{1}{2} h''' d_x (\Delta d)^2 \\ &= h' \int h du + \frac{t_0}{c_0} h' \int h' \int \int h d^3 u - \frac{1}{2} \rho t_0^2 h' \int h' u^2 du + \rho t_0^2 h' h_0 I_{1a} - h' t_0 c_0 + \\ &\quad \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0} h' \left(\int h du \right)^2 + \rho h' \int \int h d^2 u - \rho h' h I_{1a} - \rho t_0 c_0 h' u - \\ &\quad \rho t_0^2 h' u \int h du + \frac{1}{2} \rho^2 \frac{t_0}{c_0} (1 - 3c_0^2) h' u^2 + \\ &\quad \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0} h'' \int \left(\int h du \right)^2 du - t_0^2 h'' \int \int h d^2 u - \frac{t_0^3}{c_0} h'' \int \int h' \int \int h d^4 u + \\ &\quad \frac{1}{2} t_0^4 \rho h'' \int \int h' u^2 d^2 u - 2\rho t_0^2 h'' u \int \int h d^2 u + \frac{1}{2} \rho t_0^3 c_0 h'' u^2 + \rho^2 t_0^3 c_0 h'' u^3 +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\frac{t_0}{c_0} h'' \int h du \int \int h d^2 u - \frac{1}{2} \rho t_0^2 h'' u \int h du + t_0^2 h'' h_0 I_{1a} - \\ &\frac{1}{2} \frac{t_0^3}{c_0} h''' \left(\int \int h d^2 u \right)^2 + \frac{1}{2} \rho t_0^4 h''' u^2 \int \int h d^2 u - \frac{1}{8} \rho^2 t_0^5 c_0 h''' u^4,\end{aligned}\quad (96)$$

für $-B_{2,1}(s) = h_{xx}(s)$:

$$\begin{aligned}h_{xx} &= h' d_{xx} + h'' d_{xx} \Delta d + h''' (d_x)^2 + h'''' (d_x)^2 \Delta d + \frac{1}{2} h'''' (d_x)^2 (\Delta d)^2 \\ &= -h' \rho c_0^2 - 2\rho t_0 c_0 h' \int h du + \rho^2 (3t_0^2 c_0^2 - 1) h' u - \\ &\quad \rho t_0 c_0 h'' \int \int h d^2 u + \frac{1}{2} \rho t_0^2 c_0^2 h'' u^2 - \\ &\quad 2t_0 c_0 h'' \int h du - 2t_0^2 h'' \int h' \int \int h d^3 u + \rho t_0^3 c_0 h'' \int h' u^2 du + t_0^2 c_0^2 h'' - \\ &\quad t_0^2 h'' \left(\int h du \right)^2 - 2\rho t_0 c_0 \int \int h d^2 u + 2\rho t_0^2 c_0^2 h'' u + 2\rho t_0^3 c_0 h'' u \int h du - \\ &\quad \rho^2 t_0^2 (1 - 3c_0^2) h'' u^2 + \rho^2 t_0^2 c_0^2 h'' u^2 + h'' \left(\int h du \right)^2 - 2\rho t_0 c_0 h'' u \int h du - \\ &\quad \frac{1}{2} t_0^2 h''' \int \left(\int h du \right)^2 du + t_0^3 c_0 h''' \int \int h d^2 u + t_0^4 h''' \int \int h' \int \int h d^4 u - \\ &\quad \frac{1}{2} t_0^5 c_0 \rho h''' \int \int h' u^2 d^2 u + 3\rho t_0^3 c_0 h''' u \int \int h d^2 u - \frac{1}{2} \rho t_0^4 c_0^2 h''' u^2 - \\ &\quad \frac{3}{2} \rho^2 t_0^4 c_0^2 h''' u^3 - 2t_0^2 h''' \int h du \int \int h d^2 u + \rho t_0^3 c_0 h''' u \int h du + \\ &\quad \frac{1}{2} t_0^4 h'''' \left(\int \int h d^2 u \right)^2 - \frac{1}{2} \rho t_0^5 c_0 h'''' u^2 \int \int h d^2 u + \frac{1}{8} \rho^2 t_0^6 c_0^2 h'''' u^4\end{aligned}\quad (97)$$

und schließlich für $-B_{3,1}(s) = h_{xxx}(s)$:

$$\begin{aligned}h_{xxx} &= h' d_{xxx} + 3h'' d_x d_{xx} + 3h''' d_x d_{xx} \Delta d + \\ &\quad h'''' (d_x)^3 + h'''' (d_x)^3 \Delta d + \frac{1}{2} h'''' (d_x)^3 (\Delta d)^2 \\ &= 3\rho^2 t_0 c_0^3 h' + \\ &\quad 3\rho^2 t_0 c_0^3 h'' - 3\rho c_0^2 h'' \int h du + 3\rho^2 t_0 c_0^3 h'' u + \\ &\quad 6\rho t_0^2 c_0^2 h'' \int h du - 3\rho^2 t_0 c_0 (3t_0^2 c_0^2 - 1) h'' u + \\ &\quad 3\rho t_0^2 c_0^2 h''' \int \int h d^2 u - \frac{3}{2} \rho^2 t_0^3 c_0^3 h''' u^2 -\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& t_0^3 c_0^3 h''' + 3t_0^2 c_0^2 h''' \int h du + 3t_0 c_0 h''' \int h' \int \int h d^3 u - \frac{3}{2} \rho t_0^4 c_0^2 h''' \int h' u^2 du + \\
& \frac{3}{2} t_0^3 c_0 h''' \left(\int h du \right)^2 + 3\rho t_0^2 c_0^2 h''' \int \int h d^2 u - 3\rho t_0^3 c_0^3 h''' u - 3\rho t_0^4 c_0^2 h''' u \int h du + \\
& \frac{3}{2} \rho^2 t_0^3 c_0 (1 - 3c_0^2) h''' u^2 - 3t_0 c_0 h''' \left(\int h du \right)^2 - 3\rho^2 t_0^3 c_0^3 h''' u^2 + 6t_0^2 c_0^2 h''' u \int h du - \\
& t_0^4 c_0^2 h''' \int \int h d^2 u - t_0^5 c_0 h''' \int \int h' \int \int h d^4 u + \frac{1}{2} \rho t_0^6 c_0^2 h''' \int \int h' u^2 d^2 u + \\
& \frac{1}{2} t_0^3 c_0 h''' \int \left(\int h du \right)^2 du - \rho t_0^4 c_0^2 h''' u \int \int h d^2 u + \frac{1}{2} \rho t_0^5 c_0^3 h''' u^2 + \\
& \frac{1}{2} \rho^2 t_0^5 c_0^3 h''' u^3 + 3t_0^3 c_0 h''' \int h du \int \int h d^2 u - \frac{3}{2} \rho t_0^4 c_0^2 h''' u^2 \int h du - \\
& 3\rho t_0^4 c_0^2 h''' u \int \int h d^2 u + \frac{3}{2} \rho^2 t_0^5 c_0^3 h''' u^3 - \\
& \frac{1}{2} t_0^5 c_0 h''' \left(\int \int h d^2 u \right)^2 + \frac{1}{2} \rho t_0^6 c_0^2 h''' u^2 \int \int h d^2 u - \frac{1}{8} \rho^2 t_0^7 c_0^3 h''' u^4. \quad (98)
\end{aligned}$$

4.4 Einfluß des Streufeldes auf die Bewegung eines beliebigen Teilchens

In Kapitel 4.2 wurde gezeigt, wie der Verlauf der optischen Achse, die durch das Referenzteilchen definiert ist, beim Durchgang durch das Streufeld mit Hilfe von Integralen über den Feldverlauf entlang der Senkrechten zur effektiven Streufeldgrenze bestimmt werden kann. Das Verhalten eines beliebigen Teilchens, welches mit gewissen Anfangskordinaten $\vec{r}_i = (x_i, a_i, l_i, y_i, b_i)$ relativ zur optischen Achse startet, wird in der Matrixdarstellung durch ein Polynom in diesen Koordinaten angenähert. Ziel in diesem Abschnitt ist es, die Koeffizienten dieses Polynoms ebenso durch Integrale über die Feldverteilung zu approximieren.

Analog zu den Koordinaten der Referenzbahn können die Polynomkoeffizienten durch Lösung der Differentialgleichungen (77) bestimmt werden. Eine wichtige Eigenschaft dieser Gleichungen ist, daß sie bis auf die Gleichung für die Flugzeit, welche die anderen Koordinaten nicht beeinflußt, keine Terme nullter Ordnung enthält. D. h. ein Teilchen, das mit den Anfangsbedingungen $\vec{r}_i = 0$ startet, wird keine Änderung erfahren, so daß es am Ende wieder auf der optischen Achse liegt ($\vec{r}_f = 0$). Aufgrund dieser Eigenschaft lassen sich die Polynomkoeffizienten schrittweise bestimmen, da die Polynomkoeffizienten der Ordnung i durch die Terme bis zur Ordnung i der Gleichungen (77) vollständig beschrieben werden. So ergibt sich für die Polynomkoeffizienten erster Ordnung unter Ausnutzung von Gleichung (96) folgendes System

von Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned}
x' &= a, \\
y' &= b, \\
l' &= 1 + hx, \\
a' &= (-h_x - h^2) x, \\
b' &= h_x y. \quad (99)
\end{aligned}$$

Die oben stehenden Differentialgleichungen entkoppeln in vertikalen und horizontalen Komponenten, so daß zwei gekoppelte Differentialgleichungen mit jeweils zwei Komponenten zu lösen sind. Da die Flugzeit l nur von der Variablen x abhängt, berechnen sich deren Polynomkoeffizienten durch einfache Integration. Somit ergibt sich für die vertikalen Variablen folgendes gekoppeltes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
y' &= b, \\
b' &= h_x y. \quad (100)
\end{aligned}$$

Mit den Startbedingungen

$$\begin{aligned}
y &= y_0, \\
b &= b_0 \quad (101)
\end{aligned}$$

ergibt sich folgende Iterationsvorschrift:

$$\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_0 + \frac{1}{c_0} \int b_i du, \\
b_{i+1} &= b_0 + \frac{1}{c_0} \int h_x y_i du. \quad (102)
\end{aligned}$$

Wird h_x durch den Ausdruck aus Gleichung (96) ersetzt, lautet die Lösung für die erste Iteration:

$$\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + \frac{1}{c_0} u b_0, \\
b_1 &= b_0 + \left(\frac{1}{c_0} \int h' \int h d^2 u + \frac{t_0}{c_0^2} \int h' \int h' \int \int h d^4 u - \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h' \int h' u^2 d^2 u + \right. \\
& \left. \rho \frac{t_0^2}{c_0} h_0^2 I_{1a} - t_0 \int h' du + \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0^2} \int h' \left(\int h du \right)^2 du + \rho \frac{1}{c_0} \int h' \int \int h d^3 u + \right. \\
& \left. \rho \frac{1}{c_0} h_0^2 I_{1a} - \rho t_0 \int h' u du - \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u \int h d^2 u + \frac{1}{2} \rho^2 \frac{t_0}{c_0^2} (1 - 3c_0^2) \int h' u^2 du + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0^2} \int h'' \int \left(\int h du \right)^2 d^2 u - \frac{t_0^2}{c_0} \int h'' \int \int h d^3 u - \frac{t_0^3}{c_0^2} \int h'' \int \int h' \int \int h d^5 u + \\
& \frac{1}{2} \frac{t_0^4}{c_0} \rho \int h'' \int \int h' u^2 d^3 u - 2 \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h'' u \int \int h d^3 u + \frac{1}{2} \rho t_0^3 \int h'' u^2 du + \\
& \rho^2 t_0^3 \int h'' u^3 du + \frac{t_0}{c_0^2} \int h'' \int h du \int \int h d^3 u - \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h'' u \int h d^2 u + \frac{t_0^2}{c_0} \int h'' du h_0 I_{1a} - \\
& \frac{1}{2} \frac{t_0^3}{c_0^2} \int h''' \left(\int \int h d^2 u \right)^2 du + \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^4}{c_0} \int h''' u^2 \int \int h d^3 u - \frac{1}{8} \rho^2 t_0^5 \int h''' u^4 du \Big) y_0. \quad (103)
\end{aligned}$$

Die meisten Terme liefern Beiträge in zweiter Ordnung, die bei der zweiten Iteration nicht mehr berücksichtigt werden müssen. Die übrigen Terme erweitern y und b folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
y_2 &= \left(\frac{1}{c_0^2} \int \int h' \int h d^3 u - \frac{t_0}{c_0} \int h du - \rho \frac{t_0}{c_0} \int \int h' u d^2 u - \right. \\
& \quad \left. \frac{t_0^2}{c_0^2} \int \int h'' \int \int h d^4 u + \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^3}{c_0} \int \int h'' u^2 d^2 u + \frac{t_0^2}{c_0^2} \int \int h'' d^2 u h_0 I_{1a} \right) y_0, \\
b_2 &= \left(\frac{1}{c_0^2} \int h' u \int h d^2 u - \frac{t_0}{c_0} \int h' u du - \rho \frac{t_0}{c_0} \int h' u^2 du - \right. \\
& \quad \left. \frac{t_0^2}{c_0^2} \int h'' u \int \int h d^3 u + \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^3}{c_0} \int h'' u^3 du + \frac{t_0^2}{c_0^2} \int h'' u du h_0 I_{1a} \right) b_0. \quad (104)
\end{aligned}$$

Diese Erweiterungen bewirken im dritten Schritt folgende Ergänzungen:

$$\begin{aligned}
y_3 &= -\frac{t_0}{c_0^2} \int \int h' u d^2 u b_0, \\
b_3 &= \left(-\frac{t_0}{c_0^2} \int h' \int \int h' \int h d^4 u + \frac{t_0^2}{c_0} \int h' \int h d^2 u + \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h' \int \int h' u d^3 u + \right. \\
& \quad \left. \frac{t_0^3}{c_0^2} \int h' \int \int h'' \int \int h d^5 u - \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^4}{c_0} \int h' \int \int h'' u^2 d^3 u - \frac{t_0^3}{c_0^2} \int h' \int \int h'' d^3 u h_0 I_{1a} - \right. \\
& \quad \left. \frac{t_0}{c_0^2} \int h' \left(\int h du \right)^2 du + \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u \int h du du + \frac{t_0^3}{c_0^2} \int h'' \int h du \int \int h d^3 u - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^4}{c_0} \int h'' u^2 \int h d^3 u - \frac{t_0^3}{c_0} \int h'' \int h d^2 u h_0 I_{1a} \right) y_0. \quad (105)
\end{aligned}$$

Weitere Iteration ergibt:

$$y_4 = \frac{t_0^2}{c_0^2} \int \int h' \int h d^3 u y_0,$$

$$b_4 = \frac{t_0^2}{c_0^2} \int h' \int \int h' u d^3 u b_0. \quad (106)$$

Durch Einsetzen von y_4 bekommt man den letzten Term von b :

$$b_5 = -\frac{t_0^3}{c_0^2} \int h' \int \int h' \int h d^4 u y_0. \quad (107)$$

Durch Addieren aller Komponenten ist der Gesamteinfluß des Streufeldes bis in zweiter Näherung festgelegt. Alle Integrale kann man wiederum auf Grundintegrale zurückführen und sie dann zusammenfassen. Dadurch nimmt die vertikale Eintritts-streufeldmatrix folgende Form an:

$$\begin{aligned}
(Y, Y) &= 1 - h_0^2 I_{1b} \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) + \rho h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0} (2t_0 + 3t_0^3), \\
(Y, B) &= 2h \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a}, \\
(B, Y) &= -t_0 h_0 - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 I_{1b} \frac{t_0}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 I_9 \frac{t_0}{c_0^2} (7 + 10t_0^2) \\
& \quad - \rho h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0} (2 + 3t_0^2) + \rho h_0^2 I_{1b} \frac{t_0^2}{c_0} (5 + 6t_0^2) - \rho^2 h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0^2} (2 + 3t_0^2), \\
(B, B) &= 1 - 2h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0^2} + h_0^2 I_{1b} \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) - \rho h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0} (2t_0 + 3t_0^3). \quad (108)
\end{aligned}$$

Die horizontale Matrix wird auf ähnliche Weise bestimmt. Die Polynomkoeffizienten zweiter und dritter Ordnung können berechnet werden, indem die Iterationsvorschrift in den Gleichungen (102) so erweitert wird, daß alle Terme aus den Gleichungen (77) berücksichtigt sind. Die auftretenden Potentialkoeffizienten können nach dem im Abschnitt 4.3 erläuterten Verfahren gebildet werden. Die Iteration erfolgt analog zur Bestimmung der vertikalen Matrix erster Ordnung. Da die Durchführung sehr aufwendig ist, aber keine neuen Erkenntnisse liefert, soll hier auf die Darstellung verzichtet werden. Im Anhang 10.1 sind alle auftretenden Integrale und ihre Transformation in Grundintegrale aufgelistet.

4.5 Bestimmung der chromatischen Elemente

In den vorausgegangenen Abschnitten wurde ein Verfahren beschrieben, um die geometrischen Polynomkoeffizienten in Form von Integralen über die Feldverteilung anzunähern. Von entscheidender Bedeutung bei allen Massenseparatoren sind aber auch

die chromatischen Bildfehler, so will man z. B. bei doppelfokussierenden Systemen erreichen, daß der horizontale Endort unabhängig vom Startwinkel und der Startenergie der Teilchen ist $((X, A), (X, D) = 0)$, die Massendispersion (X, G) aber möglichst groß wird. Um die chromatischen Bildfehler zu bestimmen, wird von Impulskoordinaten an Stelle von Masse- und Energiekoordinaten ausgegangen, da sich dadurch die Differentialgleichungen vereinfachen und außerdem noch relativistisch invariant werden. Sind Lösungen für die Impulselemente gefunden worden, so können sie durch einfache Transformation in Energie- und Massenelemente umgewandelt werden. Wird die Impulskoordinate

$$\tau = \frac{p - p_0}{p_0} \quad (109)$$

eingeführt, das Gleichungssystem (72) entwickelt und werden nur die in der Approximationsordnung notwendigen Terme berücksichtigt, so ergibt sich für die Impulselemente folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} x'_\tau &= -a\tau, \\ y'_\tau &= -b\tau, \\ a'_\tau &= h\tau - h'by\tau, \\ b'_\tau &= h'ay\tau. \end{aligned} \quad (110)$$

Durch Einsetzen der Lösungen der geometrischen Koordinaten und anschließendem Integrieren ergeben sich für die Impulsterme der horizontalen Matrix erster Ordnung folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} x'_\tau &= \frac{1}{c_0^2} \int \int h d^2u = \frac{1}{c_0^2} h_0 I_{1a} \tau, \\ a'_\tau &= \frac{1}{c_0} \int h du + 2 \frac{t_0}{c_0^2} \int h' \int \int h d^3u - \frac{t_0}{c_0^2} \int h' du h_0 I_{1a} - \frac{1}{2} \rho \frac{t_0^2}{c_0} \int h' u^2 du \\ &= \left(\frac{t_0}{c_0^2} h_0^2 - \rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0} I_{1a} \right) \tau. \end{aligned} \quad (111)$$

Analog können alle anderen Elemente bestimmt werden. Zur Umwandlung in Masse und Energiekoordinaten entwickelt man τ mit Hilfe von Gleichung (5) nach g und d . Die Taylorkoeffizienten 1. Ordnung lauten:

$$\begin{aligned} \tau_g &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{2 + \eta} \right), \\ \tau_d &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\eta}{2 + \eta} \right). \end{aligned} \quad (112)$$

Durch Einsetzen dieser Umwandlungsfaktoren kann man schließlich den gesamten Streufeld einfluß voll relativistisch beschreiben.

4.6 Numerische Bestimmung der Streufeldtransfermatrix

Bei der numerischen Bestimmung wird im Streufeldmodell die Transfermatrix in drei Matrizen zerlegt, wobei nur die zweite Matrix den Streufeld einfluß charakterisiert und die beiden anderen Matrizen diesen Einfluß auf die effektive Feldgrenze projizieren.

Die Vorgehensweise ist weitgehend analog zur Integralmethode. Zuerst ist die Lage des teilchenoptischen Koordinatensystems zu bestimmen. Auch hier wird davon ausgegangen, daß die Flugbahn des Referenzteilchens weit innerhalb des Magneten unter realem Streufeld einfluß und im SCOFF Modell übereinstimmen soll. Hat im SCOFF Modell das Referenzteilchen die Wegstrecke s_b innerhalb des Magneten zurückgelegt, so ist die Lage des Koordinatensystems durch folgende Werte festgelegt:

$$\begin{aligned} \Phi_{s_b} &= h_0 s_b, \\ X_{s_b} &= -\frac{1}{h_0} (1 - \cos(h_0 s_b)), \\ Z_{s_b} &= \frac{1}{h_0} \sin(h_0 s_b). \end{aligned} \quad (113)$$

Die Lage des Koordinatensystems an der Stelle s_a berechnet sich durch numerische Integration des folgenden Gleichungssystems:

$$\begin{aligned} \Phi' &= -h(d), \\ X' &= \sin(\Phi), \\ Z' &= -\cos(\Phi). \end{aligned} \quad (114)$$

Die aktuelle Krümmung ist durch die Engfunktion gegeben:

$$h(d) = \frac{h_0}{1 + \exp[a_0 + a_1(d/G_0) + a_2(d/G_0)^2 + \dots]}, \quad (115)$$

wobei der Abstand d durch Gleichung (83) bestimmt ist. Um die Transfermatrix bestimmen zu können, benötigt man zusätzlich zu der aktuellen Krümmung h auch noch die Entwicklungskoeffizienten von h nach der ionenoptischen Koordinate x und entlang der Flugrichtung. Diese ergeben sich, indem die Koordinaten X, Z unter Ausnutzung von Gleichung (93) durch DA-Vektoren ersetzt werden. Diese DA-Vektoren beinhalten die Entwicklungskoeffizienten nach x und z . Berechnet man nun $h(d)$ in der DA-Arithmetik, so ergeben sich automatisch die Entwicklungskoeffizienten. Paralleles numerisches Integrieren des Gleichungssystems (72) in DA-Arithmetik und des Gleichungssystems (78) in reeller Arithmetik liefert somit die zweite Matrix. Durch Verkettung dieser Matrix mit den anderen Matrizen ergibt sich Streufeldmatrix.

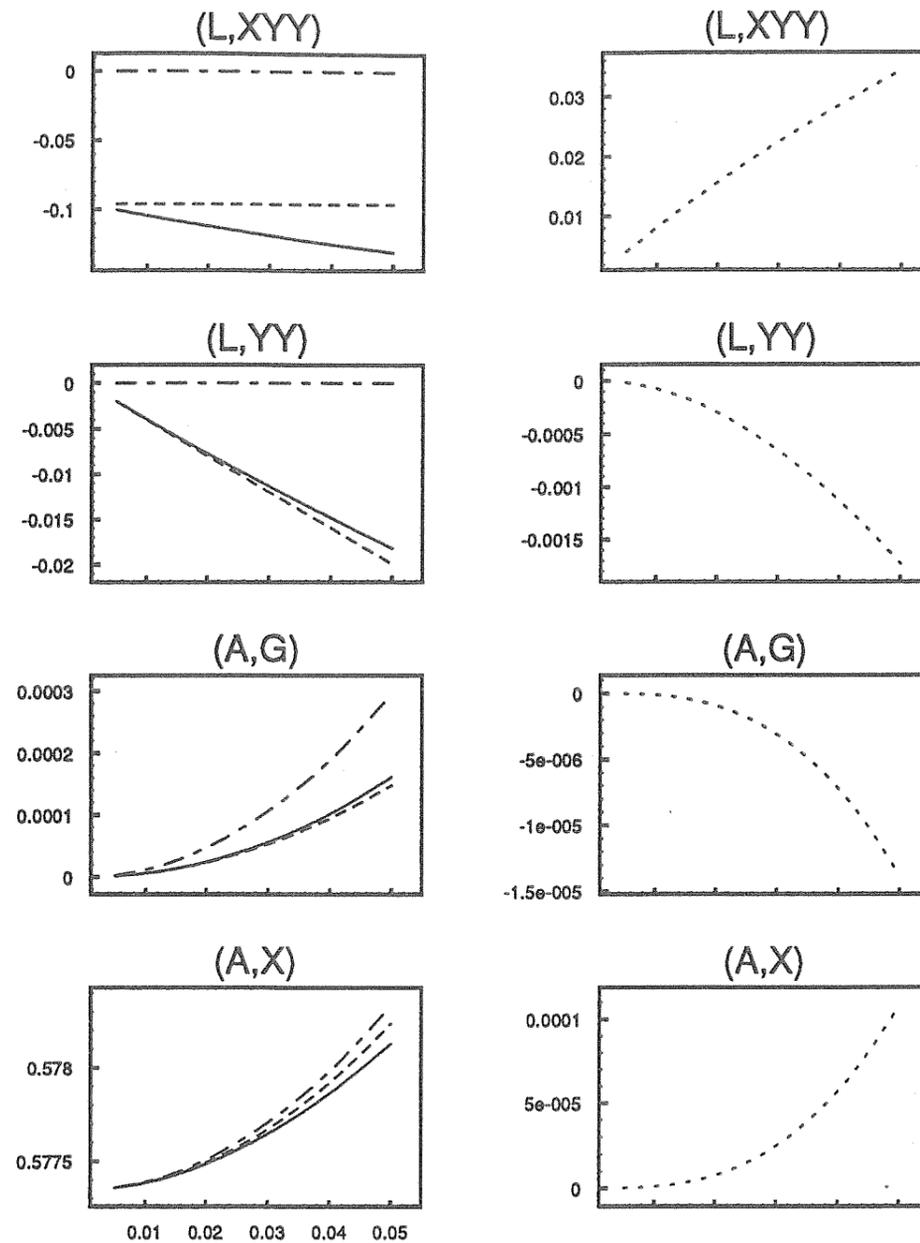


Abb. 12: Vergleich der Größe von repräsentativen Matrixelementen des magnetischen Sektors als Funktion des halben Polschuhabstandes G_0 , wobei alle Längen und die normierte Flugzeit in m und alle Winkel in rad angegeben sind. In der linken Spalte sind die Ergebnisse der DA-Integration (durchgezogen), der hier hergeleiteten Methode (gestrichelt) und der Methode (Strich-Punkt) von [12,13] aufgetragen. Die rechte Spalte zeigt die Differenz dieser Matrixelemente zwischen der hier hergeleiteten Methode und der DA-Integration. G_0 wird im Bereich von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ variiert.

4.7 Vergleich der analytischen Näherungsformeln mit den numerischen Ergebnissen

Beim Vergleich der hier hergeleiteten Formeln der Streufeldmatrix (siehe 11.1) mit den in [12,13] bestimmten Elementen zeigen sich Unterschiede bei bestimmten Matrixelementen. In erster Ordnung treten unterschiedliche Ergebnisse bei den krümmungsabhängigen Termen auf und in höherer Ordnung unterscheiden sich die Elemente, die von den vertikalen Koordinaten y_0 und b_0 abhängen. Um die Gültigkeit der hier hergeleiteten Ausdrücke überprüfen zu können, ist hier das numerische Verfahren mit Hilfe der Differentialalgebra herangezogen worden. Dazu wurden ein homogener magnetischer Sektor mit einem Ablenkradius von $1 m$ untersucht, dessen effektive Feldgrenze um 30° geneigt ist und einen Krümmungsradius von $1 m$ besitzt. Zur Beschreibung des Feldabfalls werden die in [45] für die magnetischen Dipole verwendeten Koeffizienten

$$a_0 = 0.3886, \quad a_1 = 2.4080, \quad a_2 = -0.8346, \\ a_3 = 0.1982, \quad a_4 = 0.0024, \quad a_5 = -0.0003$$

herangezogen. Aus dieser Feldverteilung ergeben sich folgende Größen für die benötigten Grundintegrale:

$$I_{1a} = 0.30712 G_0^2, \quad I_{1b} = 0.20134 G_0^2, \quad I_{2a} = -0.10143 G_0^3, \\ I_{2b} = -0.09189 G_0^3, \quad I_{3a} = 0.10690 G_0^3, \quad I_{4a} = -0.41484 G_0, \\ I_5 = 0.44840 G_0^{-1}, \quad I_6 = 0.09261, \quad I_9 = -0.13082 G_0^2, \\ I_{10} = 0.19669.$$

Die in 11.1 aufgelisteten Formeln für die Matrixelemente stellen eine Näherungslösung in Form eines endlichen Polynoms in G_0 dar. Um den Fehler dieser Näherung überprüfen zu können, sind in Abbildung 12 einige charakteristische Matrixelemente in Abhängigkeit vom halben Polschuhabstand G_0 im Bereich von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ dargestellt. In der ersten Spalte sind jeweils die absoluten Werte aufgetragen, wobei die durchgezogene Linie die numerischen Ergebnisse darstellt, die gestrichelte Linie die in dieser Arbeit bestimmten Näherungslösungen kennzeichnet und die durch Strich-Punkt gekennzeichnete Linie die in [12,13] hergeleiteten Formeln beschreibt.

Es wurden hier nur solche Elemente herangezogen, bei denen die älteren Arbeiten [12,13] unterschiedliche Ergebnisse liefern. Ein entscheidendes Kriterium für die Gültigkeit der in dieser Arbeit gelieferten Formeln ist die Bestimmung der Größe des Fehlerglieds, welches durch Bilden der Differenz zu den numerischen Werten berechnet wird. Für die Matrixelemente erster Ordnung muß sich dieses Fehlerglied wie ein Polynom dritten Grades in G_0 verhalten, das Fehlerglied für ein Matrixelement

ein Polynom dritten Grades in G_0 verhalten, das Fehlerglied für ein Matrixelement entsprechend wie ein Polynom zweiter Ordnung, und für die Matrixelemente dritter Ordnung muß es linear ansteigen. In der zweiten Spalte von Abbildung 12 sind jeweils die Differenzen zwischen den Werten der hier hergeleiteten Formeln und den numerischen Werten aufgetragen. Die Differenzen der Elemente (A, X) und (A, G) verhalten sich wie Polynome dritter Ordnung, die Werte der Flugzeitelemente (L, YY) und (L, XYY) weichen quadratisch, bzw. linear ab. Sie sind also in der jeweiligen Approximationsordnung richtig bestimmt. Die Genauigkeit der Näherungslösung verringert sich bei wachsender Ordnung der Matrixelemente jeweils um eine Größenordnung von G_0 , so daß dies als ein weiterer Beweis für die Richtigkeit der Lösung gedeutet werden kann. Analog sind alle vorkommenden Matrixelemente auf diese Kriterien untersucht worden, somit kann von einer Konsistenz der Integrale und der numerischen Integration gesprochen werden.

In den hier hergeleiteten Näherungslösungen sind alle Effekte eines homogenen magnetischen Sektors mit geneigter und gekrümmter Feldgrenze in der dritten Approximationsordnung berücksichtigt und mit Hilfe der numerischen Integration verifiziert worden. Sie stimmen bis auf einige Elemente erster Ordnung mit den in [12,13] überein. Die Unterschiede in den Elementen (X, X) , (A, X) , (A, A) , (A, G) , (A, G) , (Y, Y) , (B, Y) und (B, B) sind vermutlich auf eine fehlerhafte Potentialbeschreibung der Magnetflußdichte unter Einfluß der Krümmung der effektiven Feldgrenze zurückzuführen. Zusätzlich zu den Arbeiten [12,13] sind auch die für die Flugzeitmassenspektrometern wichtigen Flugzeitelemente bestimmt worden. Zu beachten ist, daß in dritter Ordnung das Element (B, YYY) proportional zu G_0^{-1} ist und somit bei verschwindendem Polschuhabstand divergiert.

5 Bestimmung der Streufeldtransfermatrix dritter Ordnung des toroidalen elektrostatischen Sektors

In diesem Kapitel werden die Streufeldeffekte in der radialen und axialen Richtung eines toroidalen elektrostatischen Kondensators unter Berücksichtigung von gekrümmten Feldgrenzen in der dritten Approximationsordnung berechnet und das Ergebnis in Form einer Transfermatrix dargestellt.

Der Einfluß des Streufeldes eines parallelen Kondensators wurde von Wollnik und Ewald [37] in der Approximation zweiter Ordnung bestimmt und aufbauend auf diesen Ergebnissen von Wollnik [15] in Form einer Transfermatrix beschrieben. Des weiteren untersuchte Matsuda [16] den Einfluß auf die radialen Matrixelemente in der dritten Approximationsordnung.

Analog zum homogenen magnetischen Sektor werden die hier erhaltenen Näherungslösungen mit den durch numerische Integration erhaltenen Werten verglichen.

5.1 Bewegungsgleichungen im nichtrelativistischen Grenzfall

Aufgrund der Komplexität der Differentialgleichungen (4) wird für die Bewegungsgleichungen im elektrostatischen Feld der nichtrelativistische Grenzfall angenommen. Diese Vereinfachung ist zulässig, da elektrostatische Elemente aufgrund von Überschlüssen bei zu hohen Spannungen nur bei nichtrelativistischen oder schwach relativistischen Ionenstrahlen eingesetzt werden können. Bei der hier durchgeführten Herleitung werden die Flugzeitelemente nicht berücksichtigt. Dadurch ergibt sich aus (4) folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 x' &= a(1+g)^{-\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 y' &= b(1+g)^{-\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 a' &= \frac{1}{\chi_e}E_x(1+g)^{\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}} + \\
 &\quad h(1+g)^{-\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{\frac{1}{2}}, \\
 b' &= \frac{1}{\chi_e}E_y(1+g)^{\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}.
 \end{aligned}
 \tag{116}$$

Die auftretenden elektrostatischen Felder E_x, E_y und das elektrostatische Skalarpotential V_e hängen durch die Beziehung

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V_e \quad (117)$$

miteinander zusammen. Das Potential läßt sich nach Gleichung (11) in eine Potenzreihe von x und y darstellen:

$$V_e = \sum \sum A_{i,j} \frac{x^i y^j}{i! j!}. \quad (118)$$

Zur Vereinfachung führt man ein normiertes Potential ein:

$$V_n = \frac{V_e}{\chi_e} = \sum \sum B_{i,j} \frac{x^i y^j}{i! j!}. \quad (119)$$

Da beim elektrostatischen Kondensator das Potential so eingestellt wird, daß die Beziehung $A_{1,0}/\chi_e = h$ erfüllt ist, entspricht der Koeffizient $B_{1,0}$ genau der aktuellen Krümmung h . Weiterhin gilt im nichtrelativistischen Grenzfall die Beziehung $\phi = 2/\chi_e$. Unter Ausnutzung dieser Beziehungen kann man das Gleichungssystem bis in dritter Ordnung entwickeln.

$$\begin{aligned} x' &= a + 2hxa + \left(\frac{5}{2}h^2 + \frac{1}{2}B_{2,0}\right)x^2a + \frac{1}{2}a^3 + \frac{1}{2}B_{0,2}ay^2 + \frac{1}{2}ab^2 - \frac{1}{2}ad - \frac{1}{2}ag, \\ y' &= b + 2hxb + \left(\frac{5}{2}h^2 + \frac{1}{2}B_{2,0}\right)x^2b + \frac{1}{2}a^2b + \frac{1}{2}B_{0,2}y^2b + \frac{1}{2}b^3 - \frac{1}{2}bd - \frac{1}{2}bg, \\ a' &= (-3h^2 - B_{2,0})x + \left(-3h^3 - 3hB_{2,0} - \frac{1}{2}B_{3,0}\right)x^2 - ha^2 + \\ &\quad \left(-hB_{0,2} - \frac{1}{2}B_{1,2}\right)y^2 - hb^2 + \left(-\frac{9}{2}h^4 - 5h^2B_{2,0} - \frac{4}{3}hB_{3,0} - \frac{1}{2}B_{2,0}^2 - \frac{1}{6}B_{4,0}\right)x^3 + \\ &\quad \left(-\frac{5}{2}h^2 - \frac{1}{2}hB_{2,0}\right)xa^2 + \left(-\frac{5}{2}h^2B_{0,2} - 2hB_{1,2} - \frac{1}{2}hB_{2,2} - \frac{1}{2}hB_{2,0}B_{0,2}\right)xy^2 + \\ &\quad \left(-\frac{5}{2}h^2 - \frac{1}{2}hB_{2,0}\right)xb^2 + hd + \left(-\frac{3}{2}h^2 - \frac{1}{2}B_{2,0}\right)gx + \left(\frac{5}{2}h^2 + \frac{1}{2}B_{2,0}\right)dx - \\ &\quad \frac{1}{4}B_{3,0}x^2g + \frac{1}{4}B_{3,0}x^2d - \frac{1}{4}B_{1,2}y^2g + \frac{1}{4}B_{1,2}y^2d, \\ b' &= -B_{0,2}y + (-2hB_{0,2} - B_{1,2})xy + \\ &\quad \left(-\frac{5}{2}h^2B_{0,2} - 2hB_{1,2} - \frac{1}{2}hB_{2,2} - \frac{1}{2}hB_{2,0}B_{0,2}\right)x^2y - \frac{1}{2}B_{0,2}a^2y + \\ &\quad \left(-\frac{1}{2}B_{0,2}^2 - \frac{1}{6}hB_{0,4}\right)y^2 - \frac{1}{2}B_{0,2}yb^2 - \frac{1}{2}B_{0,2}yg + \\ &\quad \frac{1}{2}B_{0,2}yd - \frac{1}{2}B_{1,2}xyg - \frac{1}{2}B_{1,2}xyd. \end{aligned} \quad (120)$$

In dieser Reihenentwicklung werden alle Terme, die nur geometrische Koordinaten enthalten, berücksichtigt. Dagegen sind bei den chromatischen Termen nur diejenigen aufgelistet, die in der dritten Approximationsordnung einen Beitrag liefern.

5.2 Das elektrostatische Potential im Streufeldbereich des toroidalen Kondensators

Toroidale Kondensatoren sind vorteilhafter als konventionelle Zylinderkondensatoren, da sie nicht nur Fokussiereigenschaften in der radialen sondern auch in der axialen Ebene besitzen. In Abbildung 13 ist der schematische Aufbau eines solchen Kondensators dargestellt. Die innere und äußere Elektrode sind durch (2) und (3) gekennzeichnet und mit dem Abstand $2G_0$ (1) voneinander entfernt. Sie besitzen gegensätzliches Potential und erzeugen somit eine Äquipotentialebene mit dem Potential 0, die durch die gestrichelten Linie angedeutet ist. Diese Äquipotentialebene besitzt in der y - z Ebene einen konstanten Krümmungsradius R_0 (4) und senkrecht dazu einen von der s -Koordinate unabhängigen Krümmungsradius R_v (5). Um Bildfehler zweiter Ordnung zu kompensieren, können die Elektroden an beiden Enden gekrümmt sein. Im Hauptfeld ergeben sich für die Koeffizienten $A_{i,0}$ in der Ablenkebene bis vierter

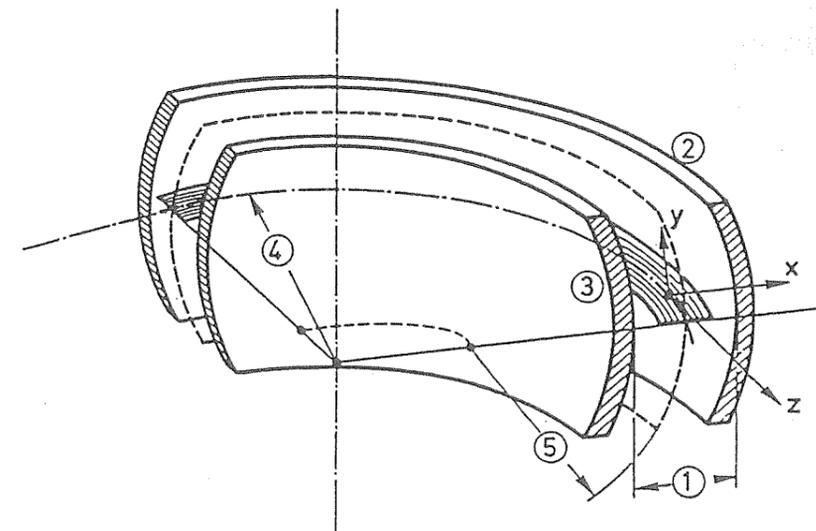


Abb. 13: Schematische Darstellung eines toroidalen Kondensators [1].

Ordnung nach Wollnik et al. [46] folgende Werte:

$$A_{1,0} = E_0,$$

$$\begin{aligned}
A_{2,0} &= E_0 h_0 (-1 - c), \\
A_{3,0} &= E_0 h_0^2 (2 + 2c + c^2 - c'), \\
A_{4,0} &= E_0 h_0^3 (-6 - 5c - 5c^2 + 2c' + 6cc').
\end{aligned} \tag{121}$$

Die Größe $h_0 = 1/R_0$ bedeutet hierbei die Krümmung der Äquipotentialebene in der Ablenkebene, die Größe $c = R_v/R_0$ das Verhältnis der vertikalen Krümmung zur horizontalen und schließlich $c' = d(R_v/R_0)/dy$ die Änderung der vertikalen Krümmung an der Stelle $y = 0$.

Durch diese Koeffizienten lassen sich nach Gleichung (14) alle übrigen Koeffizienten bis vierter Ordnung bestimmen.

$$\begin{aligned}
A_{0,2} &= E_0 h_0 c, \\
A_{1,2} &= E_0 h_0^2 (-c - c^2 + c'), \\
A_{2,2} &= E_0 h_0^3 (c + 4c^2 - c' - 6cc'), \\
A_{0,4} &= E_0 h_0^3 (-3c^2 + 6cc').
\end{aligned} \tag{122}$$

Im Streufeldbereich wird das Potential durch das abfallende Feld $E_x(0, 0, s)$ entlang der optischen Achse beschrieben. Im Gegensatz zum Hauptfeld verlaufen die Äquipotentialebenen im Streufeld nicht mehr parallel zu den Elektroden, so daß die Gleichungen für die Potentialkoeffizienten (121) nicht mehr erfüllt werden. Das Potential muß das Krümmungsverhalten der Elektroden in der y - z Ebene widerspiegeln und dadurch folgende Bedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned}
A_{1,0} &= E h_0, \\
A_{0,2} &= E h_0 c, \\
A_{1,2} &= E h_0^2 (-c - c^2 + c'), \\
A_{0,4} &= E h_0^3 (-3c^2 + 6cc').
\end{aligned} \tag{123}$$

Die restlichen Koeffizienten werden durch die Rekursionsformel nach Gleichung (13) bestimmt:

$$\begin{aligned}
A_{2,0} &= -A_{0,2} - h A_{1,0}, \\
A_{3,0} &= -A_{1,0}'' - A_{1,2} + h A_{0,2} + 2h^2 A_{1,0}, \\
A_{2,2} &= -A_{0,2}'' - A_{0,4} - h A_{1,2}, \\
A_{4,0} &= 2A_{0,2}'' + A_{0,4} + 2h A_{1,2} - 3h^2 A_{0,2} - 6h^3 A_{1,0} + 6h A_{1,0}'' + 4h' A_{1,0}' + 2h'' A_{1,0}.
\end{aligned} \tag{124}$$

In den entwickelten Bewegungsgleichungen (120) treten aber nicht die Koeffizienten des elektrostatischen Potentials auf, sondern die auf die elektrische Steifigkeit normierten Koeffizienten $B_{i,j}$. Für diese Koeffizienten ergibt sich aus den Gleichungen (123) und (124):

$$\begin{aligned}
B_{1,0} &= h, \\
B_{0,2} &= ch_0 h, \\
B_{2,0} &= -ch_0 h - h^2, \\
B_{1,2} &= (-c - c^2 + c') h_0^2 h, \\
B_{3,0} &= -h'' + (c + c^2 - c') h_0^2 h + ch_0 h^2 + 2h^3, \\
B_{0,4} &= (-3c^2 + 6cc') h_0^3 h, \\
B_{2,2} &= -ch_0 h'' + (3c^2 - 6cc') h_0^3 h + (c + c^2 - c') h_0^2 h^2, \\
B_{4,0} &= -2ch_0 h'' + 7hh'' + 4h'^2 + (-3c^2 + 6cc') h_0^3 h + \\
&\quad 2(-c - c^2 + c') h_0^2 h^2 - 3ch_0 h^3 - 6h^4.
\end{aligned} \tag{125}$$

5.3 Bestimmung der Endkoordinaten unter Annahme einer geraden Feldgrenze

In den vorherigen Abschnitten wurde die Taylorentwicklung der Bewegungsgleichungen (120) und die normierte Potentialverteilung im Streufeldbereich (125) hergeleitet. Ausgehend von diesen Gleichungen ergibt sich im Streufeldbereich folgendes bis in

dritter Ordnung entwickeltes Differentialgleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 x' &= a + 2hxa + \left(2h^2 - \frac{1}{2}ch_0h\right)x^2a + \frac{1}{2}a^3 + \frac{1}{2}ch_0hay^2 + \frac{1}{2}ab^2 - \frac{1}{2}ad - \frac{1}{2}ag, \\
 y' &= b + 2hxb + \left(2h^2 - \frac{1}{2}ch_0h\right)x^2b + \frac{1}{2}a^2b + \frac{1}{2}ch_0hy^2b + \frac{1}{2}b^3 - \frac{1}{2}bd - \frac{1}{2}bg, \\
 a' &= (-2h^2 + ch_0h)x + hd + \left(-h^3 + \frac{5}{2}ch_0h^2 - \frac{1}{2}(c+c^2-c')h_0^2h + \frac{1}{2}h''\right)x^2 + \\
 &\quad \left(-h^2 + \frac{1}{2}ch_0h\right)gx + \left(3h^2 - \frac{1}{2}ch_0h\right)dx - ha^2 + (-ch_0h^2 + (c+c^2-c')h_0^2h)y^2 - \\
 &\quad hb^2 + \left(-\frac{5}{3}h^4 + \frac{19}{6}ch_0h^3 + \left(-c - \frac{3}{2}c^2 + c'\right)h_0^2h^2 + \left(\frac{1}{2}c^2 - cc'\right)h_0^3h + \right. \\
 &\quad \left. \left(\frac{1}{6}h - \frac{1}{3}ch_0\right)h'' - \frac{2}{3}h'^2\right)x^3 + \left(-2h^2 + \frac{1}{2}ch_0h\right)xa^2 + \\
 &\quad \left(-2ch_0h^3 + \left(\frac{3}{2}c + 2c^2 - \frac{3}{2}c'\right)h_0^2h^2 + \left(-\frac{3}{2}c^2 + 3cc'\right)h_0^3h + \frac{1}{2}ch_0h''\right)xy^2 + \\
 &\quad \left(-2h^2 + \frac{1}{2}ch_0h\right)xb^2 + \frac{1}{4}h''x^2g - \frac{1}{4}h''x^2d, \\
 b' &= (-ch_0h)y + (-2ch_0h^2 + (c+c^2-c')h_0^2h)xy + \\
 &\quad \left(-2ch_0h^3 + \left(\frac{3}{2}c + 2c^2 - \frac{3}{2}c'\right)h_0^2h^2 + \left(-\frac{3}{2}c^2 + 3cc'\right)h_0^3h + \frac{1}{2}ch_0h''\right)x^2y + \\
 &\quad \left(-\frac{1}{2}ch_0h\right)a^2y + \left(-c^2h_0^2h^2 + \left(\frac{1}{2}c^2 - cc'\right)h_0^3h\right)y^3 + \left(-\frac{1}{2}ch_0h\right)yb^2.
 \end{aligned} \tag{126}$$

Aus den Gleichungen wird ersichtlich, daß sie nur noch von den vier Größen h, h_0, c und c' abhängen. Das Differentialgleichungssystem hat die in Gleichung (55) dargestellte Form und läßt sich daher nach dem in Abschnitt 3.2 angegebenen Iterationsvorschrift lösen. Dazu werden zuerst nur die geometrischen Terme bis zweiter Ordnung berücksichtigt und die Endkoordinaten als ein quadratisches Polynom in den geometrischen Anfangskoordinaten in der dritten Approximationsordnung dargestellt. Ausgehend von dieser Lösung wird dieses quadratische Polynom zu einem Polynom dritter Ordnung in den geometrischen Koordinaten erweitert. Die Abhängigkeiten von den chromatischen Koordinaten ergeben sich dann durch einfache Integration. Durch Iteration der geometrischen Terme zweiter Ordnung ergibt sich für x :

$$\begin{aligned}
 x_{2f} &= x_0 \left(1 + \iint (-2h^2 + ch_0h) d^2s \right) \\
 &\quad + a_0(s) + \\
 &\quad + x_0^2 \left(\iint \frac{1}{2} h'' d^2s \right) \\
 &\quad + x_0 a_0 \left(\iint h'' s d^2s + \iint 2h ds \right) \\
 &\quad + x_0^3 \left(\iint \frac{1}{2} h'' \iint h'' d^4s + \iint h \iint h'' d^2s \right).
 \end{aligned} \tag{127}$$

Für die horizontale Impulskomponente a folgt:

$$\begin{aligned}
 a_{2f} &= x_0 \left(\iint (-2h^2 + ch_0h) ds \right) \\
 &\quad + a_0 \left(1 + \iint (-2h^2 + ch_0h) s ds \right) \\
 &\quad + x_0^2 \left(\frac{1}{2} \iint h'' ds + \frac{1}{2} \iint (-2h^2 + ch_0h) \iint h'' d^3s + \right. \\
 &\quad \left. \iint h'' \iint (-2h^2 + ch_0h) d^3s + \frac{5}{2} ch_0 \iint h^2 ds - \frac{1}{2} (c+c^2-c') h_0^2 \iint h ds \right) \\
 &\quad + x_0 a_0 \left(\iint h'' s ds \right) \\
 &\quad + a_0^2 \left(-\frac{1}{2} \iint h'' s^2 ds - \iint h ds \right) \\
 &\quad + y_0^2 \left(-ch_0 \iint h^2 ds + (c+c^2-c') h_0^2 \iint h ds \right) \\
 &\quad + b_0^2 \left(-\iint h ds \right) \\
 &\quad + x_0^3 \left(\frac{1}{2} \iint h'' \iint h'' d^3s \right) \\
 &\quad + x_0^2 a_0 \left(\iint h'' \iint h'' s d^3s + 2 \iint h'' \iint h d^2s + \right. \\
 &\quad \left. \frac{1}{2} \iint h'' s \iint h'' d^3s - \iint h \iint h'' d^2s \right).
 \end{aligned} \tag{128}$$

Die Lösungen in der vertikalen Richtung sind wesentlich einfacher, so ergibt sich für y :

$$\begin{aligned}
 y_{2f} &= y_0 \left(1 - ch_0 \iint h d^2s \right) \\
 &\quad + b_0(s) \\
 &\quad + b_0^2 \left(-\iint h ds \right)
 \end{aligned} \tag{129}$$

und analog für die Koordinate b :

$$\begin{aligned}
 b_{2f} &= y_0 \left(-ch_0 \iint h ds \right) \\
 &\quad + b_0 \left(1 - ch_0 \iint h s ds \right) \\
 &\quad + x_0 y_0 \left(-2ch_0 \iint h^2 ds + (c+c^2-c') h_0^2 \iint h ds \right).
 \end{aligned} \tag{130}$$

Durch die quadratischen Terme in Gleichung (126) werden die Endkoordinaten zusätzlich von kubischen Ausdrücken in den Anfangskoordinaten beeinflusst. Somit werden Abhängigkeiten dritter Ordnung erzeugt:

$$\begin{aligned}
 x_{3f} &= x_0^3 \left(\frac{1}{2} \iint h'^2 d^2s + \iint h h' ds \right), \\
 a_{3f} &= x_0^3 \left(\frac{1}{2} \iint h'^2 ds \right) \\
 &\quad + x_0^2 a_0 \left(\iint h'' \iint h'' s d^3s + 2 \iint h'' \iint h d^2s + \frac{1}{2} \iint h'' s \iint h d^3s - \iint h h' ds \right).
 \end{aligned} \tag{131}$$

Berücksichtigt man die dritten Ordnungsterme in Gleichung (126), so müssen folgende Terme hinzugefügt werden:

$$\begin{aligned}
 x_{33f} &= x_0^3 \left(\frac{1}{6} \iint h h'' d^2 s - \frac{3}{2} \iint h'^2 d^2 s - \frac{1}{3} c h_0 \iint h'' d^2 s \right) \\
 &+ x_0 y_0^2 \left(\frac{1}{2} c h_0 \iint h'' d^2 s \right), \\
 a_{33f} &= x_0^3 \left(\frac{1}{6} \int h h'' ds - \frac{3}{2} \int h'^2 ds - \frac{1}{3} c h_0 \int h'' ds \right) \\
 &+ x_0^2 a_0 \left(\frac{1}{2} \int h'' h s ds - \int 2 h'^2 s ds - c h_0 \int h'' s ds \right) \\
 &+ x_0 y_0^2 \left(\frac{1}{2} c h_0 \int h'' ds \right) \\
 &+ x_0 y_0 b_0 \left(c h_0 \int h'' s ds \right) \\
 &+ a_0 y_0^2 \left(\frac{1}{2} c h_0 \int h'' s ds \right).
 \end{aligned} \tag{132}$$

Für die vertikalen Komponenten folgt:

$$\begin{aligned}
 y_{33f} &= x_0^2 y_0 \left(\frac{1}{2} c h_0 \iint h'' d^2 s \right), \\
 b_{33f} &= x_0^2 y_0 \left(\frac{1}{2} c h_0 \int h'' ds \right) \\
 &+ x_0^2 b_0 \left(\frac{1}{2} c h_0 \int h'' s ds \right) \\
 &+ x_0 a_0 y_0 \left(c h_0 \int h'' s ds \right).
 \end{aligned} \tag{133}$$

Zum Schluß müssen noch die chromatischen Terme berücksichtigt werden. In dieser Approximation ergeben sich nur Terme in der radialen Komponente, die aufbauend auf den obigen Ergebnissen bestimmt werden können:

$$\begin{aligned}
 x_{gd_f} &= d_0 \left(\iint h d^2 s \right) \\
 &+ x_0^2 d_0 \left(-\frac{1}{2} \iint h'' d^2 s \right), \\
 a_{gd_f} &= d_0 \left(\int h ds \right) \\
 &+ x_0 g_0 \left(-\int h^2 ds \right) \\
 &+ x_0 g_0 \left(3 \int h^2 ds \right) \\
 &+ x_0 a_0 d_0 \left(-\int h'' s ds \right).
 \end{aligned} \tag{134}$$

Durch Addition aller Integrale ergibt sich eine Näherung in der dritten Approximationsordnung unter Annahme einer geraden Feldgrenze.

5.4 Einfluß einer gekrümmten Feldgrenze auf die Streufeldmatrix

Im vorherigen Kapitel sind Effekte untersucht worden, die durch den kontinuierlichen Feldanstieg oder -abfall im Streufeldbereich hervorgerufen werden. Diese Effekte produzieren unerwünschte Bildfehler. Streufeldeffekte können gezielt eingesetzt werden, um diese Bildfehler zu korrigieren. Im Gegensatz zum magnetischen

Sektor, bei dem geneigte und gekrümmte Feldgrenzen eingesetzt werden, um Fokussiereigenschaften des Magneten zu verändern, wird beim elektrostatischen Kondensator nur die Krümmung der Feldgrenze variiert. Dadurch können Korrekturen von Bildfehlern zweiter Ordnung durchgeführt werden. Die Krümmung der Feldgrenze

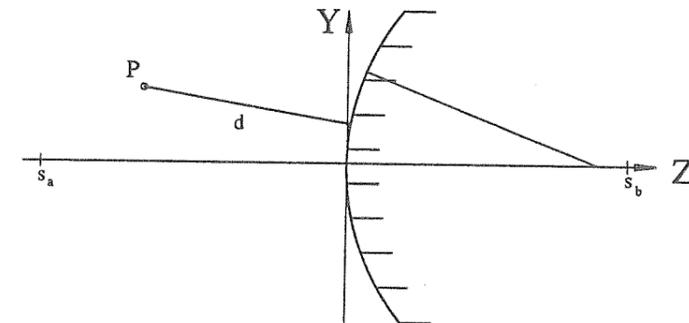


Abb. 14: Gekrümmte Feldgrenze des elektrostatischen Sektors.

(siehe Abb. 14) verursacht eine Änderung der Potentialverteilung im Streufeldbereich. Befindet sich ein Teilchen an der Stelle Z_P, Y_P , so ist der Abstand des Teilchens von der effektiven Feldgrenze gegeben durch:

$$d = \sqrt{Y_P^2 + (Z_P - R_g)^2} - R_g, \tag{135}$$

wobei R_g der Krümmungsradius der Feldgrenze ist. Wird die Krümmung $\rho = 1/R_g$ der effektiven Feldgrenze eingeführt und d bis zweiter Ordnung entwickelt, so ergibt sich:

$$d = Z_P - \frac{1}{2} \rho Y_P^2 + \dots \tag{136}$$

Die vertikalen Koeffizienten transformieren sich dann zu:

$$\begin{aligned}
 A_{1,2\rho} &= A_{1,2} - \rho A_{0,1} h', \\
 A_{0,4\rho} &= A_{0,4} - 3\rho c A_{0,1} h_0 h'.
 \end{aligned} \tag{137}$$

Der Index ρ steht für die Potentialverteilung bei gekrümmter Feldgrenze. Aus den Gleichungen (119) und (124) ergeben sich für die normierten Koeffizienten folgende Werte:

$$\begin{aligned}
 B_{1,2\rho} &= B_{1,2} - \rho h_0 h', \\
 B_{0,4\rho} &= B_{0,4} - 3\rho c h_0^2 h',
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{3,0\rho} &= B_{3,0} + \rho h_0 h', \\
B_{2,2\rho} &= B_{2,2} + \rho h_0 h h' + 3\rho c h_0^2 h', \\
B_{0,4\rho} &= B_{0,4} - 2\rho h_0 h h' - 3\rho c h_0^2 h'.
\end{aligned}
\tag{138}$$

Einsetzen dieser modifizierten Potentiale in Gleichung (120) und anschließende sukzessive Approximation führt zu folgenden Korrekturen:

$$\begin{aligned}
x_{\rho f} &= x_0^2 \left(-\frac{1}{2} \rho \int h ds \right), \\
a_{\rho f} &= x_0^2 \left(-\frac{1}{2} \rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + y_0^2 \left(\frac{1}{2} \rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0^3 \left(-\rho h_0 \int h h' ds + \frac{1}{2} \rho c h_0^2 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0 y_0^2 \left(\frac{3}{2} \rho h_0 \int h h' ds - \frac{3}{2} \rho c h_0^2 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0^2 g_0 \left(-\frac{1}{4} \rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0^2 d_0 \left(\frac{1}{4} \rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + y_0^2 g_0 \left(\frac{1}{4} \rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + y_0^2 d_0 \left(-\frac{1}{4} \rho h_0 \int h' ds \right), \\
b_{\rho f} &= x_0 y_0 \left(\rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0^2 y_0 \left(-\frac{3}{2} \rho h_0 \int h h' ds + \frac{3}{2} \rho c h_0^2 \int h' ds \right) \\
&\quad + y_0^3 \left(\frac{1}{2} \rho h_0^2 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0 y_0 g_0 \left(\frac{1}{2} \rho h_0 \int h' ds \right) \\
&\quad + x_0 y_0 d_0 \left(-\frac{1}{2} \rho h_0 \int h' ds \right).
\end{aligned}
\tag{139}$$

Addiert man diese Korrekturen zu den in Abschnitt 5.3 erhaltenen Lösungen, werden die Streufeldeffekte unter Einbeziehung der gekrümmten Feldgrenze in der dritten Approximationsordnung vollständig beschrieben. Um den Streufeld einfluß auf die effektive Feldgrenze zu transformieren, müssen analog zum magnetischen Sektor alle auftretenden Integrale in Grundintegrale umgewandelt (siehe Anhang 10.2) und alle Terme aufsummiert werden. Die Transfermatrizen für den Eintritt und Austritt sind in Anhang 11.2 aufgelistet.

5.5 Bestimmung der Transfermatrix durch numerische Integration und Vergleich mit der Integralmethode

Die Berechnung der Streufeldmatrix durch numerische Integration ist analog zum magnetischen Sektor durchzuführen. Hierbei ist der Abstand d durch Gleichung (135) und das Differentialgleichungssystem zur Bestimmung der Transfermatrix durch Gleichung (116) gegeben. Um einen Vergleich der beiden Methoden durchführen zu können, wurde ein toroidaler Kondensator mit $c = 0.5$ und einem Ablenkradius von

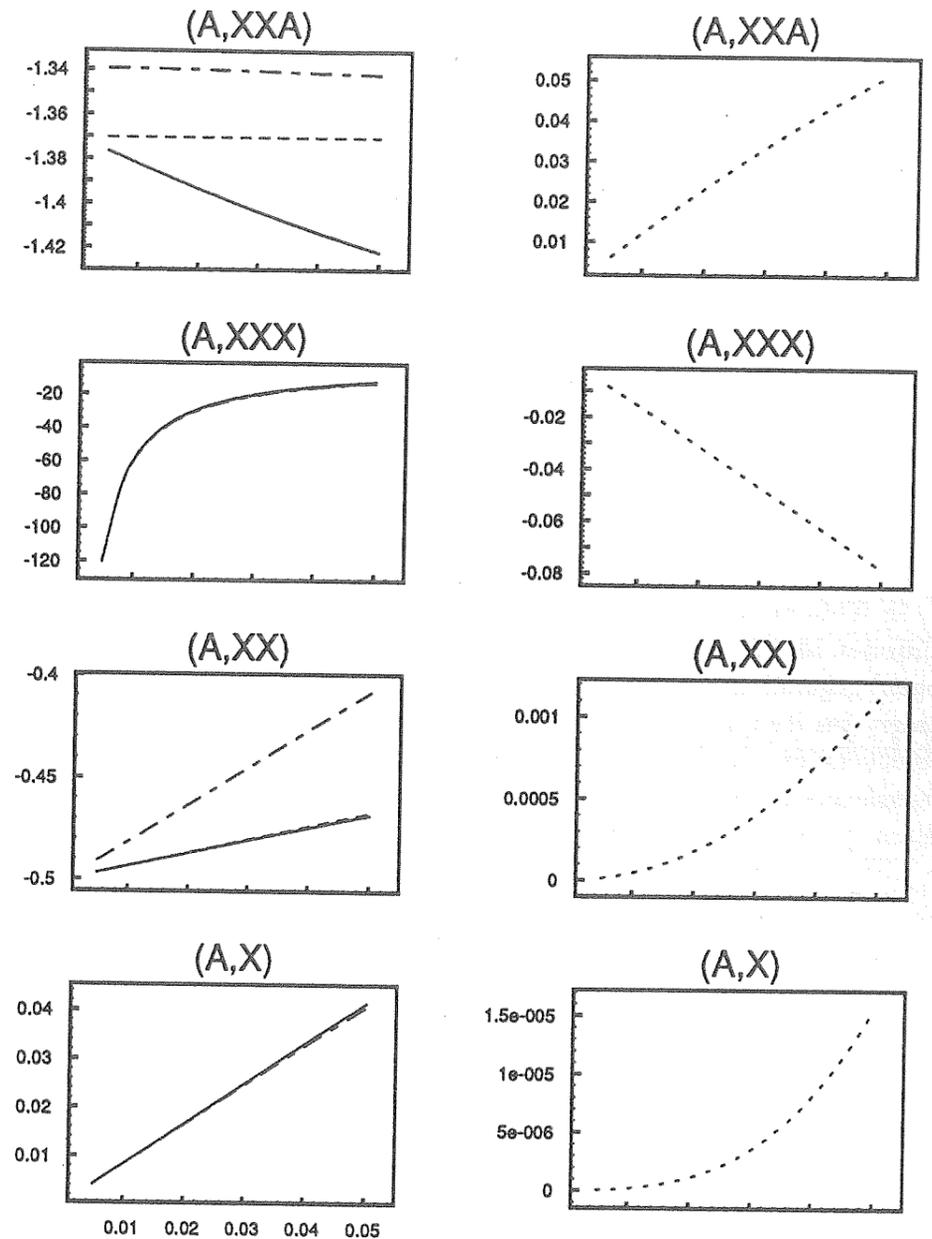


Abb. 15: Vergleich der Größe von repräsentativen Matrixelementen des elektrostatischen Sektors als Funktion des halben Elektrodenabstandes G_0 , wobei alle Längen in m und alle Winkel in rad angegeben sind. In der linken Spalte sind die Ergebnisse der DA-Integration (durchgezogen), der hier hergeleiteten Methode (gestrichelt) und der Methode (Strich-Punkt) von [16] aufgetragen. Die rechte Spalte zeigt die Differenz dieser Matrixelemente zwischen der hier hergeleiteten Methode und der DA-Integration. G_0 wird im Bereich von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ variiert.

1 m angenommen, wobei der Krümmungsradius der effektiven Feldgrenze 1 m ($\rho = 1$) betrug. Wie beim magnetischen Sektor ist der halbe Elektrodenabstand im Bereich von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ variiert worden. Zur Beschreibung des Potentialabfalls wurden ebenso die Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_0 &= 0.3886, & a_1 &= 2.4080, & a_2 &= -0.8346, \\ a_3 &= 0.1982, & a_4 &= 0.0024, & a_5 &= -0.0003 \end{aligned}$$

herangezogen. Aus diesen Koeffizienten errechnen sich folgende Werte für die zur Bestimmung der Transfermatrix benötigten Grundintegrale:

$$\begin{aligned} I_{1a} &= 0.30712 G_0^2, & I_{1b} &= 0.20134 G_0^2, & I_{4a} &= -0.41484 G_0, \\ I_{4b} &= -0.57909 G_0, & I_5 &= 0.44840 G_0^{-1}, & I_6 &= 0.09261. \end{aligned}$$

In Abbildung 15 sind die Ergebnisse von [16] (hell gestrichelt) und der hier bestimmten Matrix (dunkel gestrichelt) mit den numerischen Werten (schwarz durchgezogen) gegenübergestellt. In [16] wurden schon einige Streufeldeffekte in der Transfermatrix des Hauptfeldes berücksichtigt, so daß die Transfermatrix aus [16] modifiziert werden mußte, um einen Vergleich zu ermöglichen. Beim Vergleich der angepaßten Transfermatrix mit der hier bestimmten Matrix ergeben sich immer noch Unstimmigkeiten bei einigen Elementen, so z. B. (A, X) , (A, XX) , (A, XXX) und $(A, XXXA)$. In Abbildung 15 sind in der linken Spalte die Werte dieser Matrixelemente aufgetragen. Analog zum magnetischen Sektor beschreibt die durchgezogene Linie die Werte der numerischen Integration, die gestrichelte Linie die Werte der hier hergeleiteten Approximation und die durch Strich-Punkt gekennzeichnete Linie die Werte aus der in [16] bestimmten Matrix. Zur Überprüfung der in dieser Arbeit durchgeführten Näherung sind in der rechten Spalte wiederum die Differenzen dieser Matrixelemente zu den numerischen Werten aufgetragen worden. Ebenso wie beim magnetischen Sektor stimmen die Näherungslösungen in der geforderten Approximationsordnung mit den numerischen Ergebnissen überein. Zu beachten ist, daß das Element (A, XXX) divergiert, sobald der Elektrodenabstand gegen null geht.

6 Streufeldmatrix fünfter Ordnung des magnetischen Quadrupols

Quadrupollinsen sind wichtige ionenoptische Elemente zur Fokussierung geladener Teilchen. Die Transfermatrix des Hauptfeldes von Quadrupollinsen bis fünfter Ordnung ist durch Berz und Wollnik [5] beschrieben worden. Eine analytische Näherung für die Transfermatrix des Streufeldes in dritter Ordnung wurde von Matsuda und Wollnik [17] in der vierten Approximationsordnung durchgeführt. In diesem Kapitel wird der Einfluß des Streufeldes des magnetischen Quadrupols durch eine Transfermatrix fünfter Ordnung in der fünften Approximationsordnung dargestellt.

Wie sich in der Herleitung zeigen wird, liefern in dritter Ordnung solche Matrixelemente den größten Beitrag, die unabhängig von der Streufeldverteilung und vom Aperturradius sind. Dagegen treten in der fünften Ordnung Matrixelemente auf, die bei kleinem Aperturradius divergieren und explizit von der Streufeldverteilung abhängen.

6.1 Entwicklung der Bewegungsgleichungen im Streufeld des magnetischen Quadrupols

Im Falle des magnetischen Quadrupols liegt eine gerade optische Achse vor, so daß die Krümmung h verschwindet und sich Gleichung (72) unter Ausnutzung der Beziehung $\tau = (p - p_0)/p_0$ vereinfacht zu :

$$\begin{aligned} x' &= a(1 + \tau)^{-1} \left(1 - (1 + \tau)^{-2} (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\ y' &= b(1 + \tau)^{-1} \left(1 - (1 + \tau)^{-2} (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\ l' &= \frac{v_0}{v} \left(1 - (1 + \tau)^{-2} (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}}, \\ a' &= \frac{1}{\chi_m} \left(b(1 + \tau)^{-1} B_z \left(1 - (1 + \tau)^{-2} (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}} - B_y \right), \\ b' &= \frac{1}{\chi_m} \left(-a(1 + \tau)^{-1} B_z \left(1 - (1 + \tau)^{-2} (a^2 + b^2) \right)^{-\frac{1}{2}} + B_x \right). \end{aligned} \quad (140)$$

Um die Differentialgleichung weiter behandeln zu können, muß die magnetische Flußdichte bestimmt werden. Im Hauptfeld des Quadrupols existiert zu den Komponenten der Flußdichte ein skalares magnetisches Potential der Form:

$$V_{Q_m} = -gxy, \quad (141)$$

wobei g der Feldgradient in T/m ist. Im Streufeldbereich treten wegen der Laplace-Gleichung nach Gleichung (19) für das Potential zusätzliche Terme auf. Um die Differentialgleichung bis fünfter Ordnung entwickeln zu können, wird das Potential bis sechster Ordnung benötigt:

$$V_{Q_m} = -gxy + \frac{1}{12}g''(x^3y + xy^3) - \frac{1}{384}g''''(x^5y + 2x^3y^3 + xy^5), \quad (142)$$

wobei diese Potentialverteilung gute Übereinstimmung mit experimentell gemessenen Werten [47] zeigt. Somit lauten die Komponenten der magnetischen Flußdichte:

$$\begin{aligned} B_x &= gy - g''\left(\frac{x^2y}{4} + \frac{y^3}{12}\right) + g''''\left(\frac{5x^4y}{384} + \frac{x^2y^3}{64} + \frac{y^5}{384}\right), \\ B_y &= gx - g''\left(\frac{x^3}{12} + \frac{xy^2}{4}\right) + g''''\left(\frac{x^5}{384} + \frac{x^3y^2}{64} + \frac{5xy^4}{384}\right), \\ B_z &= g'xy - g'''\left(\frac{x^3y}{12} + \frac{xy^3}{12}\right). \end{aligned} \quad (143)$$

Werden die Komponenten der Flußdichten in die Gleichungen (140) eingesetzt und bis fünfter Ordnung entwickelt, so ergeben sich für die Koordinaten in der radialen Richtung mit $k = g/\chi_m$:

$$\begin{aligned} x' &= a - a\tau + \frac{1}{2}a^3 + \frac{1}{2}ab^2 + a\tau^2 - \frac{3}{2}a^3\tau - \frac{3}{2}ab^2\tau - a\tau^3 + a\tau^4 \\ &\quad + 3a^3\tau^2 + 3ab^2\tau^2 + \frac{3}{8}a^5 + \frac{3}{4}a^3b^2 + \frac{3}{8}ab^4, \\ a' &= -kx + \frac{1}{4}k''xy^2 + \frac{1}{12}k''x^3 + k'xyb - k'xyb\tau \\ &\quad - \frac{1}{12}k''''x^3yb - \frac{1}{12}k''''xy^3b - \frac{1}{384}k''''x^5 - \frac{1}{64}k''''x^3y^2 \\ &\quad - \frac{5}{384}k''''xy^4 + \frac{1}{2}k'xya^2b + \frac{1}{2}k'xyb^3 + k'xyb\tau^2. \end{aligned} \quad (144)$$

Analog kann man auch die Differentialgleichungen für die Koordinaten in der vertikalen Richtung entwickeln. Da sie aber mit den horizontalen Differentialgleichungen übereinstimmen, indem k durch $-k$ ersetzt wird, kann folgende Herleitung ohne Schwierigkeiten übertragen werden.

6.2 Näherungslösung der Bewegungsgleichungen für den magnetischen Quadrupol

Die Teilchenbahn kann durch sukzessive Approximation näherungsweise gelöst werden. Das Gleichungssystem (144) besitzt die Form des Gleichungssystems (55). Um

die Lösung in fünfter Ordnung zu erhalten, werden die Terme in den Gleichungen (144) nach ihren Ordnungen eingeteilt und die impulsabhängigen Terme gesondert behandelt. Somit entstehen vier Gleichungssysteme, die getrennt abgearbeitet werden können:

$$\begin{aligned} x'_1 &= a, \\ a'_1 &= -kx, \\ x'_3 &= \frac{1}{2}a^3 + \frac{1}{2}ab^2, \\ a'_3 &= \frac{1}{4}k''xy^2 + \frac{1}{12}k''x^3 + k'xyb, \\ x'_5 &= 0, \\ a'_5 &= -\frac{1}{12}k''''x^3yb - \frac{1}{12}k''''xy^3b - \frac{1}{384}k''''x^5 - \frac{1}{64}k''''x^3y^2 \\ &\quad - \frac{5}{384}k''''xy^4 + \frac{1}{2}k'xya^2b + \frac{1}{2}k'xyb^3, \\ x'_\tau &= -a\tau + a\tau^2, \\ a'_\tau &= -k'xyb\tau + k'xyb\tau^2. \end{aligned} \quad (145)$$

Es sind in den Gleichungen (144) nur die Terme berücksichtigt worden, die in der fünften Approximationsordnung einen Beitrag liefern. Werden die ersten beiden Gleichungen von (145) durch Iteration gelöst, so ergibt sich bis vierter Ordnung:

$$\begin{aligned} x_{1f} &= x_0 + a_0s - x_0 \int \int kd^2s - a_0 \int \int ksd^2s + x_0 \int \int \int k \int \int kd^4s, \\ a_{1f} &= a_0 - x_0 \int kds - a_0 \int ksd s + x_0 \int \int kd^3s + a_0 \int \int \int ksd^3s. \end{aligned} \quad (146)$$

Einsetzen dieser Lösung in die Gleichungen drei und vier von (145) und schrittweises Iterieren bis zweiter Ordnung liefert für die x -Koordinate folgendes Ergebnis:

$$\begin{aligned}
x_{3f} = & x_0^3 \left(\frac{1}{12} \iint k'' d^2 s - \frac{1}{4} \iint k'' \iint k d^4 s - \frac{1}{12} \iint k \iint k'' d^4 s \right) \\
& + x_0^2 a_0 \left(\frac{1}{4} \iint k'' s d^2 s \right) \\
& + x_0 a_0^2 \left(\frac{1}{4} \iint k'' s^2 d^2 s - \frac{3}{2} \iint k d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0^2 \left(\frac{1}{4} \iint k'' d^2 s - \frac{1}{4} \iint k'' \iint k d^4 s + \frac{1}{2} \iint k'' \iint k d^4 s - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{4} \iint k \iint k'' d^4 s + \iint k' \iint k d^3 s \right) \\
& + x_0 y_0 b_0 \left(\frac{1}{2} \iint k'' s d^2 s + \iint k' d^2 s \right) \\
& + x_0 b_0^2 \left(\frac{1}{4} \iint k'' s^2 d^2 s + \iint k' s d^2 s - \frac{1}{2} \iint k d^2 s \right) \\
& + a_0 y_0^2 \left(\frac{1}{4} \iint k'' s d^2 s \right) \\
& + a_0 y_0 b_0 \left(\frac{1}{2} \iint k'' s^2 d^2 s + \iint k' s d^2 s + \iint k d^2 s \right).
\end{aligned} \tag{147}$$

Analog folgt für die Impulskoordinate a :

$$\begin{aligned}
a_{3f} = & x_0^3 \left(\frac{1}{12} \int k'' ds - \frac{1}{4} \int k'' \iint k d^3 s - \frac{1}{12} \int k \iint k'' d^3 s \right) \\
& + x_0^2 a_0 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds - \frac{1}{4} \int k'' \iint k s d^3 s - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{4} \int k \iint k'' s d^3 s - \frac{1}{2} \int k'' s \iint k d^3 s \right) \\
& + x_0 y_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' ds - \frac{1}{4} \int k'' \iint k d^3 s + \frac{1}{2} \int k'' \iint k d^3 s - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{4} \int k \iint k'' d^3 s + \int k' \iint k d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0 b_0 \left(\frac{1}{2} \int k'' s ds + \frac{1}{2} \int k'' \iint k s d^3 s + \int k' ds - \int k' s \iint k d^2 s + \right. \\
& \quad \left. \int k' \iint k s d^2 s - \int k \iint k' d^3 s - \frac{1}{2} \int k \iint k'' d^3 s \right) \\
& + x_0 b_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s^2 ds + \int k' s ds \right) \\
& + a_0 y_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds - \frac{1}{4} \int k'' \iint k s d^3 s + \frac{1}{2} \int k'' s \iint k d^3 s + \right. \\
& \quad \left. \int k' s \iint k d^2 s - \frac{1}{4} \int k \iint k'' s d^3 s \right) \\
& + a_0 y_0 b_0 \left(\frac{1}{2} \int k'' s^2 ds + \int k' s ds \right) \\
& + a_0^3 \left(\frac{1}{12} \int k'' s^3 ds - \frac{1}{2} \int k s ds \right) \\
& + a_0 b_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s^3 ds + \int k' s^2 ds - \frac{1}{2} \int k s ds \right) \\
& + x_0 a_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s^2 ds \right).
\end{aligned} \tag{148}$$

Durch die Nichtlinearität der dritten Ordnung treten auch Terme in der fünften Ordnung auf. So ergeben sich folgende Näherungen in der x -Koordinate:

$$\begin{aligned}
x_{53f} = & x_0^5 \left(\frac{1}{48} \iint k'' k d^2 s \right) \\
& + x_0^3 a_0^2 \left(\frac{1}{8} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{24} \iint k'' k d^2 s - \frac{1}{4} \iint k'^2 d^2 s \right) \\
& + x_0^3 b_0^2 \left(\frac{1}{24} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{4} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + x_0 a_0^2 y_0^2 \left(\frac{3}{8} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0^4 \left(\frac{1}{48} \iint k'' k d^2 s - \frac{1}{12} \iint k'^2 d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0^2 b_0^2 \left(\frac{1}{8} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + a_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{1}{12} \iint k'' d^2 s \right).
\end{aligned} \tag{149}$$

Für a ergibt sich:

$$\begin{aligned}
a_{53f} = & x_0^5 \left(\frac{1}{48} \int k'' k ds \right) \\
& + x_0^4 a_0 \left(\frac{1}{24} \int k'' k s ds + \frac{1}{16} \int k'' \iint k'' s d^3 s \right) \\
& + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{24} \int k'' k ds - \frac{1}{4} \int k'^2 ds \right) \\
& + x_0^3 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{12} \int k'' k s ds + \frac{1}{4} \int k'' \iint k d^2 s - \frac{1}{6} \int k' k ds - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{4} \int k'^2 s ds - \frac{1}{4} \int k' \iint k'' s d^2 s \right) \\
& + x_0^2 a_0^3 \left(\frac{1}{8} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0^2 \left(-\frac{1}{8} \int k'' \iint k'' s d^3 s - \frac{1}{2} \int k'' \iint k d^2 s - \frac{1}{4} \int k'^2 s ds - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{2} \int k' \iint k'' s d^2 s - \int k' k ds \right) \\
& + x_0^2 a_0 b_0^2 \left(\frac{1}{8} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0 a_0^2 y_0 b_0 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0 y_0^4 \left(\frac{1}{48} \int k'' k ds - \frac{1}{12} \int k'^2 ds \right) \\
& + x_0 y_0^3 b_0 \left(\frac{1}{4} \int k'' \iint k d^2 s + \frac{1}{12} \int k'' k s ds + \frac{1}{6} \int k' k ds - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{12} \int k'^2 s ds - \frac{1}{4} \int k' \iint k'' s d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0 b_0^3 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
& + a_0^3 y_0^2 \left(\frac{1}{8} \int k'' s ds \right) \\
& + a_0 y_0^4 \left(\frac{1}{16} \int k'' \iint k'' s d^3 s - \frac{1}{24} \int k'' k s ds - \frac{1}{12} \int k'^2 s ds \right) \\
& + a_0 y_0 b_0^2 \left(\frac{1}{8} \int k'' s ds \right).
\end{aligned} \tag{150}$$

Iteration der Terme fünfter Ordnung liefert für x :

$$\begin{aligned}
 x_{5f} = & x_0^5 \left(-\frac{1}{384} \iint k'''' d^2s + \frac{5}{384} \iint k'''' \iint kd^4s + \right. \\
 & \left. \frac{1}{384} \iint k \iint k'''' d^4s \right) \\
 & + x_0^4 a_0 \left(-\frac{5}{384} \iint k'''' s d^2s \right) \\
 & + x_0^3 a_0^2 \left(-\frac{5}{192} \iint k'''' s^2 d^2s \right) \\
 & + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{12} \iint k'''' \iint kd^3s - \frac{1}{64} \iint k'''' d^2s + \frac{1}{64} \iint k'''' \iint kd^4s + \right. \\
 & \left. \frac{1}{64} \iint k \iint k'''' d^4s \right) \\
 & + x_0^3 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{32} \iint k'''' s d^2s - \frac{1}{12} \iint k'''' d^2s \right) \\
 & + x_0^3 b_0^2 \left(-\frac{1}{12} \iint k'''' s d^2s - \frac{1}{64} \iint k'''' s^2 d^2s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 y_0^2 \left(-\frac{3}{64} \iint k'''' s d^2s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{4} \iint k'''' s d^2s - \frac{3}{32} \iint k'''' s^2 d^2s \right) \\
 & + x_0^2 a_0^2 y_0^2 \left(-\frac{3}{64} \iint k'''' s^2 d^2s \right) \\
 & + x_0 y_0^4 \left(-\frac{5}{384} \iint k'''' d^2s - \frac{5}{128} \iint k'''' \iint kd^4s + \right. \\
 & \left. \frac{5}{384} \iint k \iint k'''' d^4s - \frac{1}{12} \iint k'''' \iint kd^3s \right) \\
 & + x_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{5}{96} \iint k'''' s d^2s - \frac{1}{12} \iint k'''' d^2s \right) \\
 & + x_0 y_0^2 b_0^2 \left(-\frac{5}{64} \iint k'''' s^2 d^2s - \frac{1}{4} \iint k'''' s d^2s \right) \\
 & + a_0 y_0^4 \left(-\frac{5}{384} \iint k'''' s d^2s \right) \\
 & + a_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{5}{96} \iint k'''' s^2 d^2s - \frac{1}{12} \iint k'''' s d^2s \right).
 \end{aligned} \tag{151}$$

Analog folgt für a :

$$\begin{aligned}
 a_{5f} = & x_0^5 \left(-\frac{1}{384} \iint k'''' ds + \frac{5}{384} \iint k'''' \iint kd^3s + \frac{1}{384} \iint k \iint k'''' d^3s \right) \\
 & + x_0^4 a_0 \left(-\frac{5}{384} \iint k'''' s ds + \frac{5}{96} \iint k'''' s \iint kd^3s + \frac{5}{384} \iint k'''' \iint ksd^3s + \right. \\
 & \left. \frac{5}{384} \iint k \iint k'''' s d^3s \right) \\
 & + x_0^3 a_0^2 \left(-\frac{5}{192} \iint k'''' s^2 ds \right) \\
 & + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{12} \iint k'''' \iint kd^2s - \frac{1}{64} \iint k'''' ds + \frac{1}{64} \iint k'''' \iint kd^3s + \right. \\
 & \left. \frac{1}{64} \iint k \iint k'''' d^3s \right) \\
 & + x_0^3 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{12} \iint k'''' ds + \frac{1}{6} \iint k'''' \iint kd^3s - \frac{1}{12} \iint k'''' s \iint kd^2s - \right. \\
 & \left. \frac{1}{12} \iint k'''' \iint ksd^2s + \frac{1}{12} \iint k \iint k'''' d^3s - \frac{1}{32} \iint k'''' s ds + \right. \\
 & \left. \frac{1}{16} \iint k'''' s \iint kd^3s - \frac{1}{32} \iint k'''' \iint ksd^3s + \frac{1}{32} \iint k \iint k'''' s d^3s \right) \\
 & + x_0^3 b_0^2 \left(-\frac{1}{12} \iint k'''' s ds - \frac{1}{64} \iint k'''' s^2 ds \right) \\
 & + x_0^2 a_0^3 \left(-\frac{5}{192} \iint k'''' s^3 ds \right) \\
 & + x_0^2 a_0 y_0^2 \left(-\frac{1}{4} \iint k'''' s \iint kd^2s - \frac{3}{64} \iint k'''' s ds + \frac{3}{64} \iint k'''' \iint ksd^3s + \right. \\
 & \left. \frac{3}{64} \iint k \iint k'''' s d^3s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{4} \iint k'''' s ds - \frac{3}{32} \iint k'''' s^2 ds \right) \\
 & + x_0^2 a_0 b_0^2 \left(-\frac{1}{4} \iint k'''' s^2 ds - \frac{3}{64} \iint k'''' s^3 ds \right) \\
 & + x_0 a_0^2 y_0^2 \left(-\frac{3}{64} \iint k'''' s^2 ds \right) \\
 & + x_0 a_0^2 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{4} \iint k'''' s^2 ds - \frac{3}{32} \iint k'''' s^3 ds + \frac{1}{2} \iint k' ds \right) \\
 & + x_0 y_0^4 \left(-\frac{5}{384} \iint k'''' ds - \frac{5}{128} \iint k'''' \iint kd^3s + \frac{5}{384} \iint k \iint k'''' d^3s - \right. \\
 & \left. \frac{1}{12} \iint k'''' \iint kd^2s \right) \\
 & + x_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{5}{96} \iint k'''' s ds - \frac{5}{48} \iint k'''' s \iint kd^3s - \frac{5}{96} \iint k'''' \iint ksd^3s + \right. \\
 & \left. \frac{5}{96} \iint k \iint k'''' s d^3s - \frac{1}{12} \iint k'''' ds - \frac{1}{6} \iint k'''' \iint kd^3s - \right. \\
 & \left. \frac{1}{12} \iint k'''' \iint ksd^2s - \frac{1}{4} \iint k'''' s \iint kd^2s + \frac{1}{12} \iint k \iint k'''' d^3s \right) \\
 & + x_0 y_0^2 b_0^2 \left(-\frac{5}{64} \iint k'''' s^2 ds - \frac{1}{4} \iint k'''' s ds \right) \\
 & + x_0 y_0 b_0^3 \left(-\frac{5}{96} \iint k'''' s^3 ds - \frac{1}{4} \iint k'''' s^2 ds + \frac{1}{2} \iint k' ds \right) \\
 & + a_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{64} \iint k'''' s^3 ds \right) \\
 & + a_0 y_0^4 \left(-\frac{5}{384} \iint k'''' s ds - \frac{5}{96} \iint k'''' s \iint kd^3s + \frac{5}{384} \iint k'''' \iint ksd^3s + \right. \\
 & \left. \frac{5}{384} \iint k \iint k'''' s d^3s - \frac{1}{12} \iint k'''' s \iint kd^2s \right) \\
 & + a_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{5}{96} \iint k'''' s^2 ds - \frac{1}{12} \iint k'''' s ds \right) \\
 & + a_0 y_0^2 b_0^2 \left(-\frac{5}{64} \iint k'''' s^3 ds - \frac{1}{4} \iint k'''' s^2 ds \right).
 \end{aligned} \tag{152}$$

Für die Lösung in Impulskordinaten ergibt sich für x :

$$\begin{aligned}
 x_{rf} = & x_0 \tau_0 \left(\iint k d^2 s \right) \\
 & + a_0 \tau_0 \left(2 \iint k s d^2 s \right) \\
 & + a_0 \tau_0^2 \left(s \right) \\
 & + x_0^2 \tau_0^2 \left(- \iint k d^2 s \right) \\
 & + x_0^3 \tau_0 \left(- \frac{1}{12} \iint k'' d^2 s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 \tau_0 \left(- \frac{1}{2} \iint k'' s d^2 s \right) \\
 & + x_0 y_0^2 \tau_0 \left(- \frac{1}{4} \iint k'' d^2 s \right) \\
 & + x_0 y_0 b_0 \tau_0 \left(- \iint k'' s d^2 s - \int k ds \right) \\
 & + a_0 y_0^2 \tau_0 \left(- \frac{1}{4} \iint k'' s d^2 s \right) \\
 & + x_0^3 \tau_0^2 \left(\frac{1}{12} \iint k'' d^2 s \right) \\
 & + x_0 y_0^2 \tau_0 \left(\frac{1}{4} \iint k'' d^2 s \right).
 \end{aligned} \tag{153}$$

Ebenso folgt für a :

$$\begin{aligned}
 a_{rf} = & x_0 \tau_0 \left(- \int k \int k s d^2 s \right) \\
 & + a_0 \tau_0 \left(\int k s ds \right) \\
 & + a_0 \tau_0^2 \left(- \int k s ds \right) \\
 & + x_0^3 \tau_0 \left(\frac{1}{12} \int k \iint k'' d^3 s + \frac{1}{4} \int k'' \iint k d^3 s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 \tau_0 \left(- \frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
 & + x_0 y_0^2 \tau_0 \left(\frac{1}{4} \int k \iint k'' d^3 s - \frac{1}{4} \int k'' \iint k d^3 s - \int k' \int k d^3 s \right) \\
 & + x_0 y_0 b_0 \tau_0 \left(- \int k' ds - \frac{1}{2} \int k'' s ds \right) \\
 & + a_0 y_0^2 \tau_0 \left(- \frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
 & + x_0 b_0^2 \tau_0 \left(- \int k' s ds \right) \\
 & + a_0 y_0 b_0 \tau_0 \left(- \int k' s ds \right) \\
 & + x_0^2 a_0 \tau_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
 & + x_0 y_0 b_0 \tau_0^2 \left(\frac{1}{2} \int k'' s ds \right) \\
 & + a_0 y_0^2 \tau_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds \right).
 \end{aligned} \tag{154}$$

Die vollständige Lösung ergibt sich durch Addition der einzelnen Terme. Mit Hilfe der in Anhang 10.3 aufgelisteten Integrale lassen sich Streufeldefekte auf die effektive Feldgrenze transformieren. Die Eintritts- und Austrittsstreufeldmatrizen sind jeweils in Anhang 11.3 dargestellt.

6.3 Vergleich zwischen numerischer Integration und den Näherungsformeln

Um einen Vergleich zwischen den Ergebnissen der numerischen Integration und Integralmethode durchführen zu können, ist ein stigmatisch fokussierendes Quadrupolquadruplett, das in Ref. [48] als Demonstrationsbeispiel benutzt wurde, herangezogen

worden. Für die Feldverteilung des Gradienten im Streufeldbereich des Quadrupolmagneten wurden die in Ref. [45] verwendeten Koeffizienten benutzt:

$$\begin{aligned}
 a_0 = 0.296471, \quad a_1 = 2.266609, \quad a_2 = -0.567746, \\
 a_3 = 0.133578, \quad a_4 = -0.002274, \quad a_5 = 0.000696.
 \end{aligned} \tag{155}$$

Aus dieser Feldverteilung ergeben sich folgende Größen für die Integrale:

$$\begin{aligned}
 I_{1a} = 0.32168 G_0^2, \quad I_{1b} = 0.23267 G_0^2, \quad I_2 = -0.08797 G_0^3, \\
 I_3 = 0.12818 G_0^3, \quad I_{4a} = -0.43282 G_0, \quad I_5 = 0.40798 G_0^{-1}, \\
 I_6 = 0.07112, \quad I_8 = -0.07112, \quad I_{11a} = 0.05174 G_0^4, \\
 I_{11b} = 0.03565 G_0^4.
 \end{aligned} \tag{156}$$

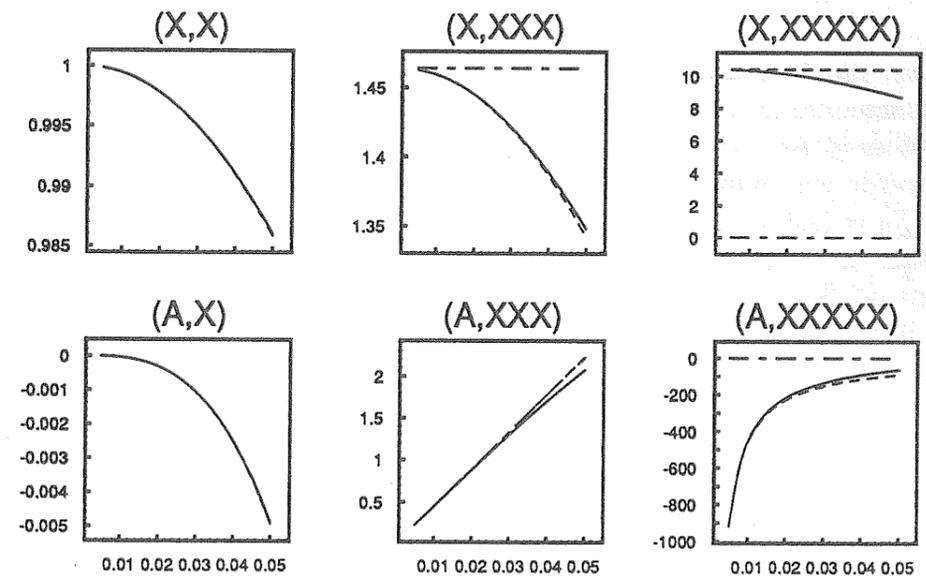


Abb. 16: Vergleich der Größe von repräsentativen Matrixelementen des magnetischen Quadrupols als Funktion des Aperturradiuses G_0 , wobei alle Längen in m und alle Winkel in rad angegeben sind. Es sind die Ergebnisse der DA-Integration (durchgezogen), der hier berechneten Matrix (gestrichelt) und der Matrix aus Ref. [17] (Strich-Punkt) aufgetragen. G_0 wird im Bereich von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ variiert.

Um den Einfluß der Streufeldverteilung zu analysieren, wurde die Transfermatrix des Eintrittsstreufeldes vom magnetischen Quadrupol berechnet. In Abbildung

Matrixelemente			
	DA-Integration	Ergebnisse dieser Arbeit	Ergebnisse aus [17]
(X,X)	9.860360E-01	9.860379E-01	9.858693E-01
(A,X)	-4.872697E-03	-4.946890E-03	-4.946890E-03
(X,XXX)	1.348298E+00	1.342328E+00	1.464265E+00
(A,XXX)	2.073417E+00	2.227194E+00	2.227194E+00
(X,XXXXX)	8.701065E+00	1.044888E+01	0.000000E+00
(A,XXXXX)	-6.403380E+01	-9.184756E+01	0.000000E+00

Tabelle 1: Werte einiger repräsentativer Matrixelemente des magnetischen Quadrupols an der Stelle $G_0 = 0.05 m$. Alle Längen sind in m und alle Winkel in rad angegeben.

6.3 ist die Variation einiger repräsentativer erster, dritter und fünfter Ordnungselemente der Streufeldtransfermatrix dargestellt. Der Aperturradius wurde von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ bei einer konstanten Feldstärke von $1.6 T/m$ variiert und es wurde ein einfach geladenes Teilchen mit der Masse $m_0 = 4 m_p$ und der Energie $K_0 = 100 keV$ benutzt. Die ersten Ordnungselemente in Abbildung 6.3 zeigen keinen signifikanten Unterschied. Aus Tabelle 1 ist jedoch ersichtlich, daß das Element (X,X) aufgrund der höheren effektiven Approximationsordnung im Vergleich zu Ref. [17] genauer approximiert wird. In der hier berechneten Näherung zeigt das Element (X,XXX) ebenso eine bessere Übereinstimmung. Die Elemente (A,X) und (A,XXX) besitzen in beiden Näherungsverfahren die gleichen Werte, da keine zusätzlichen Integrale auftreten. Bei der Berechnung der Matrixelemente fünfter Ordnung sind nur Terme bis nullter Ordnung in G_0 berücksichtigt worden, so daß größere Differenzen zwischen der analytischen Näherung und den korrekt berechneten Ergebnissen auftreten. Verkleinert man aber G_0 , so verringern sich die Unterschiede deutlich. Im Gegensatz zu den Matrixelementen der Dipole treten erst in fünfter Ordnung divergierende Elemente bei verschwindendem G_0 auf. Beim Element (A,XXXXX) erkennt man die übereinstimmende Beschreibung dieser Eigenschaft durch die Integralmethode. Die Differenz zwischen den Werten aus der numerischen Integration und der approximativen Näherung für $G_0 = 0.05 m$ ist durch einen großen Term von erster Ordnung in G_0 bedingt. In dieser approximativen Näherung ist das Element (X,XXXXX) zwar unabhängig von dem Aperturradius, hängt aber von der detaillierten Form der Feldverteilung ab. In Abbildung 6.3 ist ersichtlich, daß dies bei kleinem G_0 gut erfüllt ist.

7 Streufeldmatrix für das Streufeld des elektrostatischen Quadrupols

Die Berechnung der Streufeldmatrix des elektrostatischen Quadrupols vollzieht sich ähnlich zu der des magnetischen. Im Gegensatz zum magnetischen Fall ist die Herleitung der Näherungsformeln nur für den nichtrelativistischen Grenzfall durchgeführt worden.

Analog zum magnetischen Quadrupol sind die dominierenden Matrixelemente dritter Ordnung unabhängig vom Streufeldverlauf [17], zeigen aber divergierenden Charakter in der fünften Ordnung.

7.1 Entwicklung der Bewegungsgleichungen im Streufeld des elektrostatischen Quadrupols

Im Falle des elektrostatischen Quadrupols liegt eine gerade optische Achse vor, wodurch die Krümmung h verschwindet. Im nichtrelativistischen Grenzfall vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen (4) ohne Berücksichtigung der Flugzeitkoordinate l zu:

$$\begin{aligned}
 x' &= a(1+g)^{-\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 y' &= a(1+g)^{-\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 a' &= \frac{1}{\chi_e}E_x(1+g)^{\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}, \\
 b' &= \frac{1}{\chi_e}E_y(1+g)^{\frac{1}{2}}(1+d-\phi V)^{-\frac{1}{2}}\left(1-(1+g)^{-1}(1+d-\phi V)^{-1}(a^2+b^2)\right)^{-\frac{1}{2}}.
 \end{aligned}
 \tag{157}$$

Um die Differentialgleichung weiter behandeln zu können, müssen ähnlich wie beim magnetischen Quadrupol das elektrische Potential und die elektrischen Felder bestimmt werden. Im Hauptfeld des elektrischen Quadrupols lautet das Potential:

$$V_{Q_e} = \frac{1}{2}g(x^2 - y^2),
 \tag{158}$$

wobei $-g$ der Feldgradient in V/m^2 ist. Im Streufeldbereich treten wegen der Laplace-Gleichung nach Gleichung (19) für das Potential zusätzliche Terme auf. Dadurch ergibt sich für das Potential bis sechster Ordnung:

$$V_{Q_e} = \frac{1}{2}g(x^2 - y^2) - \frac{1}{24}g''(x^4 - y^4) + \frac{1}{768}g''''(x^6 + x^4y^2 - x^2y^4 - y^6). \quad (159)$$

Durch Bilden der Ableitungen folgt für die elektrischen Felder in x - und y -Richtung:

$$\begin{aligned} E_x &= -gx + \frac{1}{6}g''x^3 - g''''\left(\frac{x^5}{128} + \frac{x^3y^2}{192} - \frac{xy^4}{384}\right), \\ E_y &= gy - \frac{1}{6}g''y^3 - g''''\left(\frac{x^4y}{384} - \frac{x^2y^3}{192} - \frac{y^5}{128}\right). \end{aligned} \quad (160)$$

Setzt man nun die Felder und das Potential in die Gleichungen (157) und entwickelt bis fünfter Ordnung, so ergeben sich für die Koordinaten in der radialen Richtung mit $k = g/\chi_e$ und $\phi = 2/\chi_e$.

$$\begin{aligned} x' &= a + \frac{1}{2}x^2ak + \frac{1}{2}a^3 - \frac{1}{2}ay^2k + \frac{1}{2}ab^2 - \frac{1}{24}x^4ak'' + \frac{1}{24}ay^4k'' - \\ &\quad \frac{1}{2}ag - \frac{1}{2}ad + \frac{3}{8}ag^2 + \frac{1}{4}agd + \frac{3}{8}ad^2, \\ a' &= -xk + x^3\left(\frac{1}{6}k'' - \frac{1}{2}k^2\right) - \frac{1}{2}xa^2k + \frac{1}{2}xy^2k^2 - \frac{1}{2}xb^2k + \\ &\quad x^5\left(-\frac{1}{128}k'''' + \frac{1}{8}k''k\right) + \frac{1}{12}x^3a^2k'' + x^3y^2\left(-\frac{1}{192}k'''' - \frac{1}{12}k''k\right) + \\ &\quad \frac{1}{12}x^3b^2k'' + xy^4\left(\frac{1}{384}k'''' - \frac{1}{24}k''k\right) - \\ &\quad \frac{1}{2}xgk + \frac{1}{2}xdk + \frac{1}{8}xg^2k + \frac{1}{4}xgdk - \frac{3}{8}xd^2k + x^3g\left(\frac{1}{12}k'' - \frac{1}{4}k^2\right) + \frac{1}{4}xy^2gk^2 + \\ &\quad x^3d\left(-\frac{1}{12}k'' + \frac{3}{4}k^2\right) - \frac{3}{4}xy^2dk^2 - \frac{1}{48}x^3g^2k'' - \frac{1}{24}x^3gdk'' - \frac{1}{16}x^3d^2k''. \end{aligned} \quad (161)$$

Es wurden hier nur die Terme berücksichtigt, die in der fünften Approximationsordnung einen Beitrag für die Streufeldmatrix liefern. Analog kann man auch die Differentialgleichungen für die Koordinaten in der vertikalen Richtung entwickeln. Da sie aber mit den horizontalen Differentialgleichungen übereinstimmen, indem k durch $-k$ ersetzt wird, kann folgende Herleitung ohne Schwierigkeiten übertragen werden.

7.2 Näherungslösung der Bewegungsgleichungen für den elektrostatischen Quadrupol

Zur Bestimmung der Teilchenbahn beim Durchgang durch das Streufeld wird wie im Falle des magnetischen Quadrupols vorgegangen. Zuerst werden nur die geometrischen Terme behandelt, wobei zunächst nur die linearen Terme berücksichtigt werden

und eine Lösung der Differentialgleichung in der vierten Iterationsordnung berechnet wird. Diese Lösung wird dann dazu benutzt, um die Terme dritter Ordnung in der zweiten Iterationsordnung zu bestimmen. Schließlich werden mit Hilfe der Lösung erster Ordnung die Terme fünfter Ordnung berechnet. Aufbauend auf den erhaltenen Ergebnissen werden noch die Lösungen für die chromatischen Terme ermittelt.

Die linearen Abhängigkeiten der Endkoordinaten entsprechen denen des magnetischen Quadrupols:

$$\begin{aligned} x_{1f} &= x_0 + a_0s - x_0 \iint kd^2s - a_0 \iint ksd^2s + x_0 \iint k \iint kd^4s, \\ a_{1f} &= a_0 - x_0 \int kds - a_0 \int ksd^2s + x_0 \int k \iint kd^3s + a_0 \int k \iint ksd^3s. \end{aligned} \quad (162)$$

Durch Einsetzen der obigen Lösung und anschließendem Iterieren ergibt sich für x in dritter Ordnung:

$$\begin{aligned} x_{3f} &= x_0^3 \left(\frac{1}{6} \iint k''d^2s - \frac{1}{2} \iint k'' \iint kd^4s - \frac{1}{2} \iint k^2d^2s - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{6} \iint k \iint k''d^4s - \frac{1}{2} \int k \int kd^2s \right) \\ &\quad + x_0^2 a_0 \left(\frac{1}{2} \iint k''sd^2s + \frac{1}{2} \int kds \right) \\ &\quad + x_0 a_0^2 \left(\frac{1}{2} \iint k''s^2d^2s - \frac{1}{2} \iint ksd^2s + \int ksd^2s - \frac{3}{2} \iint kd^2s \right) \\ &\quad + x_0 y_0^2 \left(\frac{1}{2} \iint kd^2s + \frac{1}{2} \int k \int kd^2s \right) \\ &\quad + x_0 b_0^2 \left(-\frac{1}{2} \iint kd^2s - \frac{1}{2} \iint kd^2s \right) \\ &\quad + a_0 y_0^2 \left(-\frac{1}{2} \int kds \right) \\ &\quad + a_0 y_0 b_0 \left(-\int ksd^2s + \iint kd^2s \right). \end{aligned} \quad (163)$$

Analog folgt für die Impulsordinate a :

$$\begin{aligned} a_{3f} &= x_0^3 \left(\frac{1}{6} \int k''ds - \frac{1}{2} \int k'' \iint kd^3s - \frac{1}{2} \int k^2ds - \frac{1}{6} \int k \iint k''d^3s \right) \\ &\quad + x_0^2 a_0 \left(\frac{1}{2} \int k''sds - \frac{3}{2} \int k^2sds + \int k \int kd^2s - \frac{1}{2} \int k'' \iint ksd^3s - \right. \\ &\quad \left. \int k''s \iint kd^3s - \frac{1}{2} \int k \iint k''sd^3s - \frac{1}{2} \int k \int kd^2s \right) \\ &\quad + x_0 a_0^2 \left(\frac{1}{2} \int k''s^2ds - \frac{1}{2} \int kds \right) \\ &\quad + x_0 y_0^2 \left(\frac{1}{2} \int k^2ds \right) \\ &\quad + x_0 y_0 b_0 \left(\int k^2sds - \int k \int kd^2s \right) \\ &\quad + x_0 b_0^2 \left(-\frac{1}{2} \int kds \right) \\ &\quad + a_0^3 \left(\frac{1}{6} \int k''s^3ds - \int ksd^2s \right) \\ &\quad + a_0 y_0^2 \left(\frac{1}{2} \int k^2sd^2s + \frac{1}{2} \int k \int kd^2s \right) \\ &\quad + a_0 b_0^2 \left(-\int ksd^2s \right). \end{aligned} \quad (164)$$

Durch die Nichtlinearität der dritten Ordnung treten auch Terme in der fünften Ordnung auf, die sogar zu divergenten Ausdrücken bei verschwindendem Aperturradius führen. So ergeben sich folgende Näherungen für die x -Koordinate:

$$\begin{aligned}
x_{53f} = & x_0^5 \left(\frac{1}{12} \iint k'' k d^2 s + \frac{1}{12} \int k' k ds \right) \\
& + x_0^3 a_0^2 \left(\frac{1}{4} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{12} \int k' k ds \right) \\
& + x_0^3 b_0^2 \left(\frac{1}{12} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + a_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{1}{6} \iint k'' d^2 s \right).
\end{aligned} \tag{165}$$

Für a ergibt sich:

$$\begin{aligned}
a_{53f} = & x_0^5 \left(\frac{1}{12} \int k'' k ds \right) \\
& + x_0^4 a_0 \left(\frac{1}{4} \int k'' \iint k'' s d^3 s + \frac{1}{4} \int k'' \int k ds + \frac{1}{6} \int k'' k s ds - \frac{1}{6} \int k k' ds \right) \\
& + x_0^2 a_0^3 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0^2 \left(-\frac{1}{4} \int k'' \int k d^2 s \right) \\
& + x_0^2 a_0 b_0^2 \left(\frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0 y_0^3 b_0 \left(\frac{1}{6} \int k k' ds \right).
\end{aligned} \tag{166}$$

Iteration der Terme fünfter Ordnung liefert für x :

$$\begin{aligned}
x_{55f} = & x_0^5 \left(-\frac{1}{128} \iint k'''' d^2 s + \frac{5}{128} \iint k'''' \iint k d^4 s + \right. \\
& \left. \frac{1}{128} \iint k \iint k'''' d^4 s + \frac{1}{8} \iint k'' k d^2 s + \frac{1}{24} \int k'' \int k d^2 s \right) \\
& + x_0^4 a_0 \left(-\frac{5}{128} \iint k'''' s d^2 s - \frac{1}{24} \int k'' ds \right) \\
& + x_0^3 a_0^2 \left(-\frac{10}{128} \iint k'''' s^2 d^2 s + \frac{1}{12} \iint k'' d^2 s - \frac{1}{6} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{192} \iint k'''' d^2 s + \frac{1}{192} \iint k'''' \iint k d^4 s + \right. \\
& \left. \frac{1}{192} \iint k \iint k'''' d^4 s - \frac{1}{12} \iint k'' k d^2 s \right) \\
& + x_0^3 y_0 b_0 \left(-\frac{2}{192} \iint k'''' s d^2 s \right) \\
& + x_0^3 b_0^2 \left(-\frac{1}{192} \iint k'''' s^2 d^2 s + \frac{1}{12} \iint k'' d^2 s \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0^2 \left(-\frac{3}{192} \iint k'''' s d^2 s \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0 b_0 \left(-\frac{6}{192} \iint k'''' s^2 d^2 s \right) \\
& + x_0 a_0^2 y_0^2 \left(-\frac{3}{192} \iint k'''' s^2 d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0^4 \left(-\frac{1}{24} \int k'' k d^2 s + \frac{1}{384} \iint k'''' d^2 s + \frac{3}{384} \iint k'''' \iint k d^4 s - \right. \\
& \left. \frac{1}{384} \iint k \iint k'''' d^4 s - \frac{1}{24} \int k'' \int k d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0^3 b_0 \left(\frac{4}{384} \iint k'''' s d^2 s \right) \\
& + x_0 y_0^2 b_0^2 \left(\frac{6}{384} \iint k'''' s^2 d^2 s \right) \\
& + a_0 y_0^4 \left(\frac{1}{384} \iint k'''' s d^2 s + \frac{1}{24} \iint k'' ds \right) \\
& + a_0 y_0^3 b_0 \left(\frac{4}{384} \iint k'''' s^2 d^2 s + \frac{1}{6} \iint k'' s d^2 s \right).
\end{aligned} \tag{167}$$

Die Lösung für a lautet:

$$\begin{aligned}
a_{55f} = & x_0^5 \left(-\frac{1}{128} \int k'''' ds + \frac{5}{128} \int k'''' \iint k d^3 s + \right. \\
& \left. \frac{1}{128} \int k \iint k'''' d^3 s + \frac{1}{8} \int k'' k ds \right) \\
& + x_0^4 a_0 \left(-\frac{5}{128} \int k'''' s ds + \frac{5}{128} \int k'''' \iint k s d^3 s + \frac{20}{128} \int k'''' s \iint k d^3 s + \right. \\
& \left. \frac{5}{128} \int k \iint k'''' s d^3 s + \frac{5}{8} \int k'' k s ds - \right. \\
& \left. \frac{1}{6} \int k'' \int k d^2 s + \frac{1}{24} \int k \int k'' d^2 s \right) \\
& + x_0^3 a_0^2 \left(-\frac{10}{128} \int k'''' s^2 ds + \frac{1}{12} \int k'' ds \right) \\
& + x_0^3 y_0^2 \left(-\frac{1}{192} \int k'''' ds + \frac{1}{192} \int k'''' \iint k d^3 s + \right. \\
& \left. \frac{1}{192} \int k \iint k'''' d^3 s - \frac{1}{12} \int k'' k d^2 s \right) \\
& + x_0^3 y_0 b_0 \left(-\frac{1}{96} \int k'''' s ds - \frac{1}{96} \int k'''' \iint k s d^3 s + \frac{1}{48} \int k'''' s \iint k d^3 s + \right. \\
& \left. \frac{1}{96} \int k \iint k'''' s d^3 s - \frac{1}{6} \int k'' k s ds + \frac{1}{6} \int k'' \int k d^2 s \right) \\
& + x_0^3 b_0^2 \left(-\frac{1}{192} \int k'''' s^2 ds + \frac{1}{12} \int k'' ds \right) \\
& + x_0^2 a_0^3 \left(-\frac{10}{128} \int k'''' s^3 ds + \frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0^2 \left(-\frac{3}{192} \int k'''' s ds + \frac{3}{192} \int k'''' \iint k s d^3 s + \right. \\
& \left. \frac{3}{192} \int k \iint k'''' s d^3 s - \frac{1}{4} \int k'' k s ds \right) \\
& + x_0^2 a_0 y_0 b_0 \left(-\frac{6}{192} \int k'''' s^2 ds \right) \\
& + x_0^2 a_0 b_0^2 \left(-\frac{3}{192} \int k'''' s^3 ds + \frac{1}{4} \int k'' s ds \right) \\
& + x_0 a_0^2 y_0^2 \left(-\frac{3}{192} \int k'''' s^2 ds \right) \\
& + x_0 a_0^2 y_0 b_0 \left(-\frac{3}{96} \int k'''' s^3 ds \right) \\
& + x_0 y_0^4 \left(-\frac{1}{24} \int k'' k ds + \frac{1}{384} \int k'''' ds + \right. \\
& \left. \frac{3}{384} \int k'''' \iint k d^3 s - \frac{1}{384} \int k \iint k'''' d^3 s \right) \\
& + x_0 y_0^3 b_0 \left(-\frac{1}{6} \int k'' k s ds + \frac{4}{384} \int k'''' s ds + \frac{4}{384} \int k'''' \iint k s d^3 s + \right. \\
& \left. \frac{8}{384} \int k'''' s \iint k d^3 s - \frac{4}{384} \int k \iint k'''' s d^3 s \right) \\
& + x_0 y_0^2 b_0^2 \left(\frac{6}{384} \int k'''' s^2 ds \right) \\
& + x_0 y_0 b_0^3 \left(\frac{4}{384} \int k'''' s^3 ds \right) \\
& + a_0 y_0^2 \left(-\frac{1}{192} \int k'''' s^3 ds \right) \\
& + a_0 y_0^4 \left(-\frac{1}{24} \int k'' k s ds + \frac{1}{384} \int k'''' s ds + \frac{4}{384} \int k'''' s \iint k d^3 s - \right. \\
& \left. \frac{1}{384} \int k'''' \iint k s d^3 s - \frac{1}{384} \int k \iint k'''' s d^3 s - \frac{1}{24} \int k \int k'' d^2 s \right) \\
& + a_0 y_0^3 b_0 \left(\frac{4}{384} \int k'''' s^2 ds \right) \\
& + a_0 y_0^2 b_0^2 \left(\frac{6}{384} \int k'''' s^3 ds \right).
\end{aligned} \tag{168}$$

Schließlich müssen noch die Abhängigkeiten der Endkoordinaten von den chromati-

schen Koordinaten bestimmt werden. Die Lösung für x lautet:

$$\begin{aligned}
 x_{dgf} = & x_0 d_0 \left(\int \int k d^2 s \right) \\
 & + a_0 g_0 \left(\frac{1}{2} \int \int k s d^2 s \right) \\
 & + a_0 d_0 \left(\frac{3}{2} \int \int k s d^2 s \right) \\
 & + x_0 d_0^2 \left(-\frac{3}{4} \int \int k d^2 s \right) \\
 & + x_0^3 d_0 \left(-\frac{1}{6} \int \int k'' d^2 s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 g_0 \left(-\frac{1}{4} \int \int k'' s d^2 s \right) \\
 & + x_0^2 a_0 d_0 \left(-\frac{1}{4} \int \int k'' s d^2 s \right) \\
 & + x_0^3 d_0^2 \left(\frac{1}{6} \int \int k'' d^2 s \right).
 \end{aligned} \tag{169}$$

Ebenso folgt für a :

$$\begin{aligned}
 a_{dgf} = & x_0 g_0 \left(\frac{1}{2} \int k \int \int k d^3 s \right) \\
 & + x_0 d_0 \left(-\frac{3}{2} \int k \int \int k d^3 s \right) \\
 & + a_0 d_0 \left(\int k s ds \right) \\
 & + a_0 d_0^2 \left(-\int k s ds \right) \\
 & + x_0^3 g_0 \left(-\frac{1}{12} \int k \int \int k'' d^3 s - \frac{1}{4} \int k'' \int \int k d^3 s - \frac{1}{4} \int k^2 ds \right) \\
 & + x_0^3 d_0 \left(\frac{1}{4} \int k \int \int k'' d^3 s + \frac{3}{4} \int k'' \int \int k d^3 s + \frac{3}{4} \int k^2 ds \right) \\
 & + x_0^2 a_0 d_0 \left(-\frac{1}{2} \int k'' s ds \right) \\
 & + x_0 y_0^2 g_0 \left(+\frac{1}{4} \int k^2 ds \right) \\
 & + x_0 y_0^2 d_0 \left(-\frac{3}{4} \int k^2 ds \right) \\
 & + x_0^2 a_0 d_0^2 \left(\frac{1}{2} \int k'' s ds \right).
 \end{aligned} \tag{170}$$

Die vollständige Lösung der Endkoordinaten ergibt sich durch Addition der einzelnen Gleichungen. Durch Transformation aller vorkommenden Integrale in die entsprechenden Grundintegrale nach Anhang 10.3 und Zusammenfassung aller Terme wird die Eintrittstransfermatrix berechnet. Die Transfermatrix am Austritt erhält man durch Berechnen der reversen Matrix. Die entgültigen Eintritts- und Austrittsmatrizen sind in 11.4 aufgelistet.

7.3 Vergleich zwischen numerischer Integration und den Näherungsformeln

Um einen Vergleich zwischen den Ergebnissen der numerischen Integration und der Integralmethode durchführen zu können, ist das Quadrupolquadruplett aus [48] herangezogen worden. Die magnetischen Quadrupole sind durch elektrostatische Quadrupole ersetzt worden. Zur Beschreibung des Potentialabfalls wurden die gleichen Koeffizienten und Integrale wie im magnetischen Fall benutzt. Zur Bestimmung des

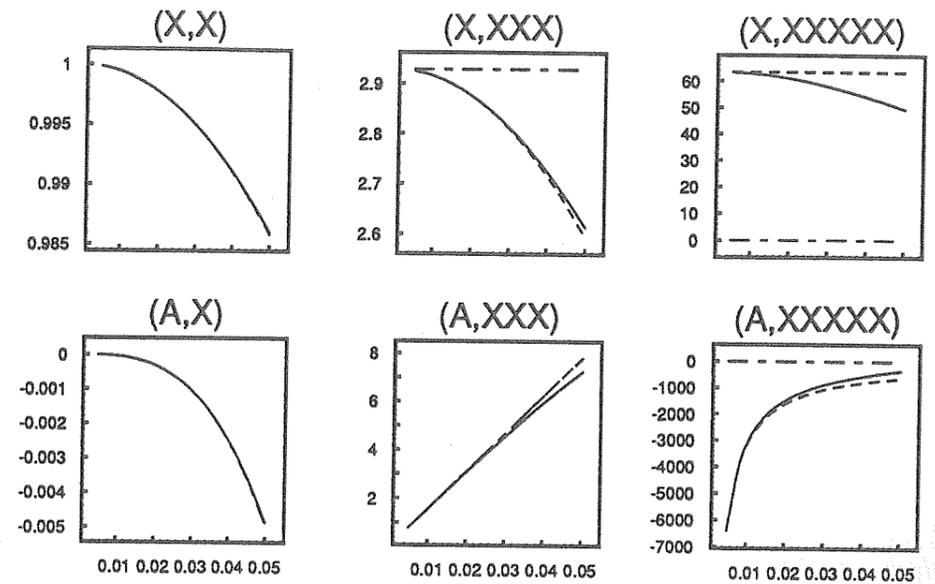


Abb. 17: Vergleich der Größe von repräsentativen Matrixelementen des elektrostatischen Quadrupols als Funktion des Aperturradiuses G_0 , wobei alle Längen in m und alle Winkel in rad angegeben sind. Es sind die Ergebnisse der DA-Integration (durchgezogen), der hier berechneten Matrix (gestrichelt) und der Matrix aus Ref. [17] (Strich-Punkt) aufgetragen. G_0 wird im Bereich von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ variiert.

Einflusses der Streufeldverteilung auf die Transfermatrix wurde das Eintrittsstreufeld des elektrostatischen Quadrupols untersucht. In Abbildung 6.3 ist die Variation der gleichen Matrixelemente wie beim magnetischen Quadrupol dargestellt. Ebenso wurde der Aperturradius von $0.005 m \leq G_0 \leq 0.05 m$ bei einer konstanten Feldstärke von $3514 V/m^2$ variiert und ein einfach geladenes Teilchen der Masse $m_0 = 4 m_p$ und der Energie $K_0 = 100 keV$ benutzt. Dadurch besitzen die elektrostatischen Quadrupole die gleiche Brechkraft wie die magnetischen Quadrupole aus Kapitel 6.3. Die Elemente (X, X) und (A, X) zeigen das gleiche Verhalten wie im magnetischen Fall, da die linearen Terme der Differentialgleichung für den magnetischen und elektrostatischen Quadrupol die gleiche Form besitzen. Die Elemente (X, XXX) und (A, XXX) zeigen qualitativ das gleiche Verhalten, so ist (X, XXX) in dem hier hergeleiteten Verfahren ebenso besser bestimmt als in [17]. Sie besitzen aber um den Faktor 2 bzw. 4 größere Werte als im magnetischen Fall. Auch die Elemente fünfter Ordnung verhalten sich ähnlich, ihre Werte steigen jedoch um das 6-fache. Das Ele-

	Matrixelemente		
	DA-Integration	Ergebnisse dieser Arbeit	Ergebnisse aus [17]
(X,X)	9.860360E-01	9.860379E-01	9.858693E-01
(A,X)	-4.872697E-03	-4.946890E-03	-4.946890E-03
(X,XXX)	2.614495E+00	2.594862E+00	2.928530E+00
(A,XXX)	7.226465E+00	7.795178E+00	7.795178E+00
(X,XXXXX)	4.942444E+01	6.349383E+01	0.000000E+00
(A,XXXXX)	-3.585412E+02	-6.429329E+02	0.000000E+00

Tabelle 2: Werte einiger repräsentativer Matrixelemente des elektrostatischen Quadrupols an der Stelle $G_0 = 0.05 m$. Alle Längen sind in m und alle Winkel in rad angegeben.

ment $(A, XXXXX)$ wird von einem noch stärker abhängigen linearen Term in G_0 beeinflusst, so daß er für $G_0 = 0.05 m$ in dieser Approximationsordnung nur qualitativ beschrieben werden kann. Der divergierende Charakter für kleines G_0 wird korrekt wiedergegeben. Aus diesen Ergebnissen zeigt sich, daß die Bildfehler des elektrostatischen Quadrupols bei gleicher Brechkraft ein ungünstigeres Verhalten zeigen als im magnetischen Fall.

8 Der Einfluß des Streufeldefekts auf ein stigmatisch fokussierendes Strahlführungssystem

Zur Illustrierung des Streufeldeflusses bei Quadrupolen ist ein in [48] verwendetes Demonstrationsbeispiel herangezogen worden. Dieses System besteht aus vier gleichen magnetischen Quadrupolen der Länge L und einem Feldgradienten von $1.6 T/m$. Die Quadrupole sind jeweils paarweise angeordnet, wobei deren Feldgradienten entgegengesetztes Vorzeichen besitzen. Die Länge der Driftstrecke zwischen den Quadrupoldupletts beträgt $0.3 m$ und der Abstand zwischen den Quadrupolen des Dupletts jeweils $0.05 m$. Vor und hinter den Quadrupolsystem existieren Driftstrecken der Länge $0.15 m$.

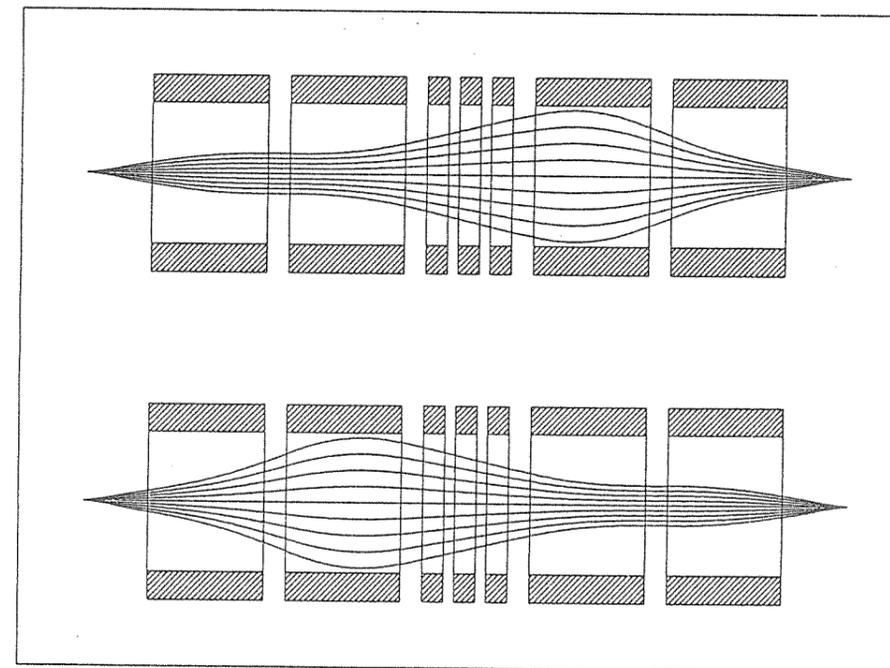


Abb. 18: Strahlengang des stigmatisch fokussierenden Quadrupolsystems, oben ist der Strahlengang in der $x-z$ Ebene, unten der Strahlengang in der $y-z$ Ebene dargestellt.

Durch Anpassen der Quadrupollänge L kann erreicht werden, daß diese eine stigmatische Fokussierung bewirken. Betrachtet wird ein einfach geladenes Teilchen der Masse $m_0 = 4 amu$ und der Energie $K_0 = 100 keV$. Zur Beschreibung des Feldabfalls werden die in Abschnitt 6.3 angegebenen Koeffizienten benutzt. Weiterhin ist ein Aperturradius von $G_0 = 0.05 m$ gewählt worden, wodurch sich für L unter

	numerisch	Integrale dieser Arbeit	Integrale aus [17]	ohne Integrale
(A,X)	-3.4917E-08	-8.3574E-06	-3.8258E-04	1.055095

Tabelle 3: Erfüllung der Fokussierbedingung beim Einsatz verschiedener Berechnungsmethoden

Anwendung des in Abschnitt 3.1.2 beschriebenen numerischen Verfahrens eine Länge von 0.2672 m ergibt. Aufgrund der alternierenden Vorzeichen der Quadrupole bei gleichbleibender Feldstärke wird erreicht, daß die ionenoptische Wirkung des Systems in der y - z Ebene der Wirkung des reversen Systems in der x - z Ebene entspricht. Dadurch ist automatisch eine Fokussierung mit der Vergrößerung -1 in beiden Ebenen gegeben.

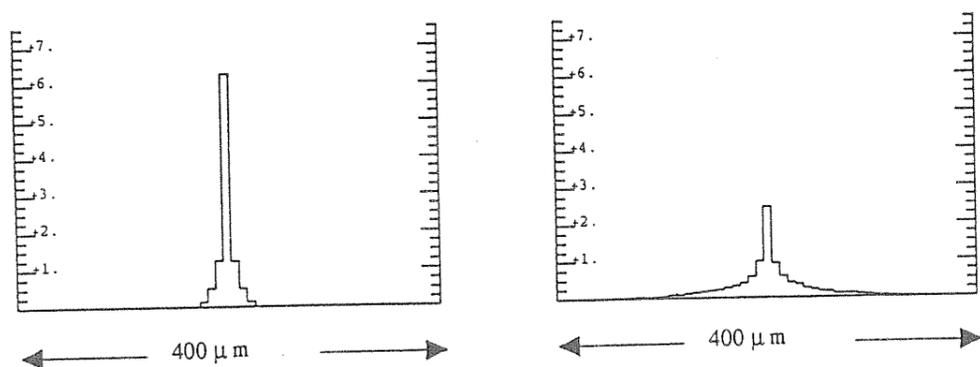


Abb. 19: Einfluß des Streufeldes auf die Bildfehler am Fokus. Die linke Graphik zeigt die Intensitätsverteilung in der horizontalen Ebene ohne Streufeldeinfluß, die rechte Graphik mit Streufeldeinfluß.

Zur Überprüfung der Näherungsformeln aus Abschnitt 6 und aus Ref. [17] kann die Gültigkeit der Fokussierbedingung herangezogen werden, die durch die Beziehungen $(A, X) = 0$ und $(B, Y) = 0$ gegeben ist. In Tabelle 3 sind die Werte von (A, X) unter Anwendung der verschiedenen Berechnungsverfahren aufgelistet. Der numerische Wert gibt nur die Genauigkeit der Optimierung an, so daß dieser noch weiter verkleinert werden kann. Man erkennt, daß beide Approximationsmethoden in der Nähe der Fokussierbedingung liegen, wobei die Methode dieser Arbeit diese Bedingung um zwei Stellen besser erfüllt. Unter der Vernachlässigung der Streufeldefekte

verschiebt sich die Fokalebene erheblich. Dadurch wird die Größe des letzten Wertes, der ja ohne die den Streufeldeinfluß beschreibenden Integrale berechnet wurde, verständlich.

Eine noch größere Bedeutung der Streufelder bezüglich ihrer Wirkung ist bei den Bildfehlern zu erkennen [49]. In Abbildung 8 sind jeweils die Intensitätsverteilungen in der horizontalen Ebene ohne und mit Berücksichtigung des Streufeldes aufgetragen, wobei ein Startphasenraum von $x_0 = \pm 1\ \mu\text{m}$ und $a_0 = \pm 20\ \text{mrad}$ angenommen wurde. Aus Abbildung 8 wird ersichtlich, daß die Intensitätsverteilung ohne Streufeldeinfluß wesentlich schmaler und höher ist im Vergleich zur Verteilung mit Berücksichtigung des Streufeldeinflusses. Die maximale Intensität verringert sich um das 2.5-fache und der Strahl verbreitert sich auf $\pm 160\ \mu\text{m}$.

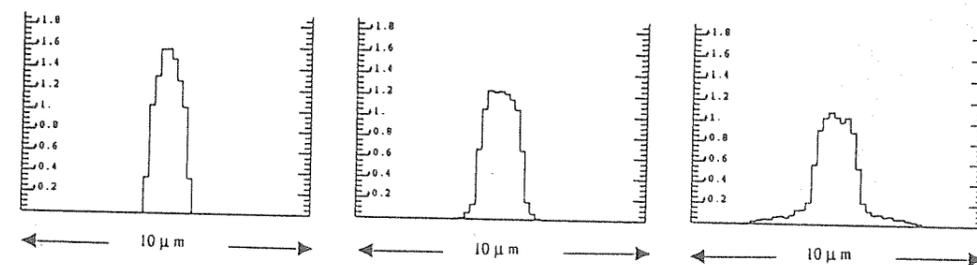


Abb. 20: Intensitätsverteilung in der x - z Ebene am Fokus des korrigierten Systems unter Anwendung der DA-Integration (links), der hier hergeleiteten Methode (Mitte) und der Methode aus [17] (rechts) in einer Rechnung bis in dritter Ordnung.

Durch den Einsatz eines Oktupoltripletts zwischen den zwei Quadrupoldupletts ist es möglich, die für die Verbreiterung verantwortlichen Bildfehler zu beseitigen. Die Oktupole besitzen jeweils eine Länge von 0.05 m und einen Aperturradius von 0.05 m und sind im Abstand von 0.025 m voneinander entfernt. Durch Optimierung ergeben sich für die äußeren Oktupole eine Polschuhfeldstärke von -0.060 T und für den inneren von 0.120 T . Diese Feldstärken sind ungefähr um den Faktor 5 größer im Vergleich zur Korrektur ohne Berücksichtigung der Streufeldefekte.

In Abbildung 20 sind jeweils die Intensitätsverteilungen am Fokus unter Benutzung von drei verschiedenen Berechnungsmethoden dargestellt. Im Gegensatz zur Abbildung 8 beträgt die maximale x -Ausdehnung nur $\pm 5\ \mu\text{m}$, so daß die Darstellung eine vierzigfache Vergrößerung aufweist. Die linke Verteilung wurde durch An-

wendung der DA-Integration bestimmt. In diesem Fall verschwinden die Bildfehler vollständig, wodurch der Strahl seine ursprüngliche Breite von $\pm 1 \mu m$ beibehält. Die Verwendung der hier hergeleiteten Methode liefert eine ähnliche Verteilungskurve. Sie ist aber etwas flacher und breiter. Die Verteilungskurve aus [17] weist charakteristische Verbreiterungen am Fuß auf, was auf nicht vollständig korrigierte Bildfehler zurückzuführen ist. Insgesamt liefern alle drei Verfahren relativ übereinstimmende Ergebnisse, wobei die hier hergeleitete Methode eine bessere Näherung darstellt.

In Abbildung 21 ist noch einmal die Strahlverteilung unter der Berücksichtigung der Bildfehler bis in fünfter Ordnung aufgetragen. In diesen Graphen beträgt die maximale x -Ausdehnung $\pm 20 \mu m$, so daß eine vierfach geringere Auflösung der Intensitätsverteilung dargestellt ist als in Abbildung 20. In dieser Auflösung liefern die DA-Integration und die in dieser Arbeit bestimmten Näherungsformeln nahezu übereinstimmende Formen für die Strahlverteilung.

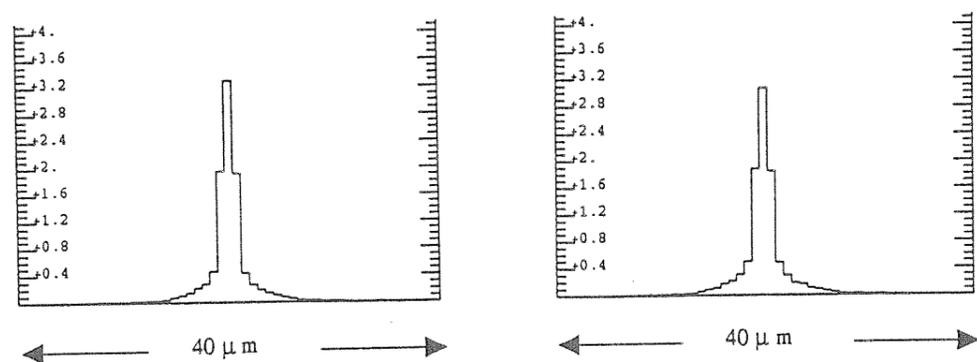


Abb. 21: Intensitätsverteilung in der x - z Ebene am Fokus des korrigierten Systems unter Anwendung der DA-Integration (links) und der hier hergeleiteten Methode (rechts) in einer Rechnung bis in fünfter Ordnung.

9 Massenbestimmung kurzlebiger Nuklide mit Hilfe des Experimentierspeicherrings ESR

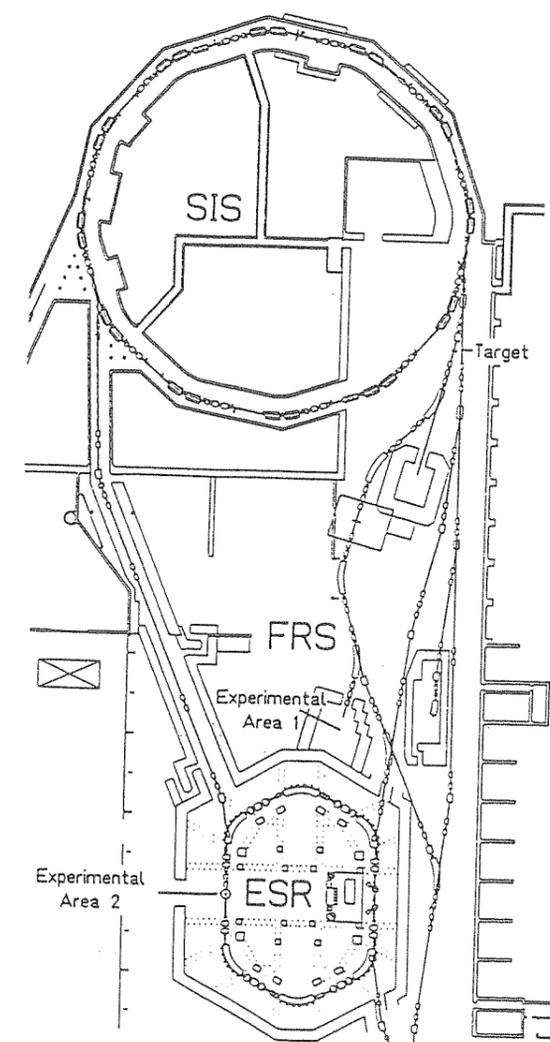


Abb. 22: Experimentiereinrichtungen der GSI zur Erzeugung und Untersuchung exotischer Nuklide. Im Bild sind das Schwerionensynchrotron (SIS), der Fragmentseparator (FRS) und der Experimentierspeicherring (ESR) dargestellt.

Der an der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt fertiggestellte Experimentierspeicherring (ESR) [19,50] ermöglicht die Untersuchung exotischer Nuklide mit extremen N/Z Verhältnissen. Die Erzeugung dieser Nuklide erfolgt dabei durch Fragmentation des im Schwerionensynchrotron (SIS) auf einige 100 MeV pro Nukleon beschleunigten Projekttilstrahls. Anschließend werden die Fragmentprodukte durch den Fragmentseparator (FRS) selektiert und in den ESR injiziert (siehe Abbildung 22).

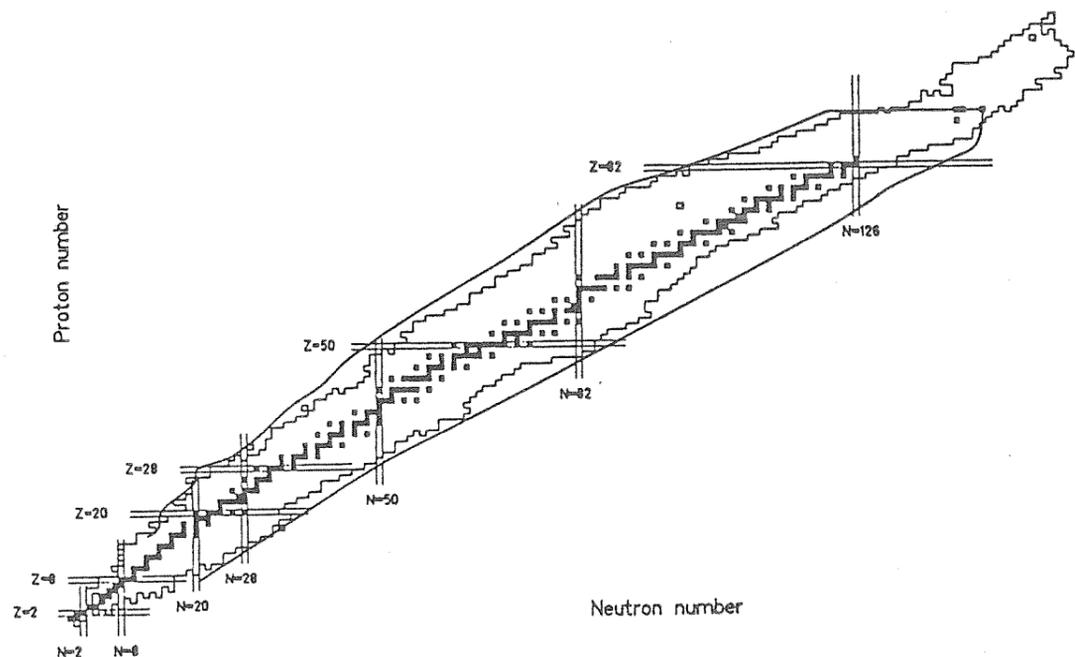


Abb. 23: Isotope, die mit Hilfe des FRS mit einer Produktionsrate von größer als ein Teilchen pro Sekunde separiert werden können.

Abbildung 9 zeigt die Kerne auf der Nuklidkarte, die mit Hilfe des SIS-FRS System erzeugt und separiert werden können. Dieses System kann ein sehr breites Spektrum von exotischen Nukliden mit hoher Intensität produzieren und eröffnet eine große Vielfalt von Möglichkeiten zur Untersuchung von Eigenschaften dieser Kerne. Eine der fundamentalsten Größen von Nukliden ist ihre Masse. Da sich unterschiedliche Bindungsenergien von Neutronen und Protonen sich direkt in den Massen von Nukliden niederschlagen, dienen Massenbestimmungen als hilfreiches Mittel z. B. zur:

- Bestimmung des Gültigkeitsbereich der Kernmodelle.

- Vorhersagen von Lebensdauern und Zerfallsarten exotischer Nukliden.
- Lieferung von Eingabeparametern für verschiedene theoretische Berechnungen in Kern und astrophysikalischen Modellen.

Zur Messung der Massen wird der ESR analog zu dem in der Mesonenfabrik LAMPF in Los Alamos eingesetzten Spektrometer TOFI [51,52] als isochrones Flugzeitmassenspektrometer eingesetzt.

Da magnetische Felder Ionen nach Impulsen separieren und elektrische Felder nach Energien, ist es prinzipiell möglich durch geeignete Kombination der beiden Felder nach Massen zu separieren und dabei die Energiedispersion zu kompensieren. Dieses Prinzip ist bei sehr vielen Massenspektrometern angewendet worden [53].

Aufgrund der begrenzten elektrischen Feldstärken, die in Ablenkkondensatoren erreicht werden können, ist ihre Einsetzbarkeit nur bei geringen Ionenenergien gewährleistet. Eine Alternative zu diesem System stellen die Flugzeitmassenspektrometer dar [1,50]. Bei Teilchenstrahlen hoher Energie bestehen sie aus einer Kombination von magnetischen Elementen, die so angeordnet sind, daß die Gesamtflugzeit der Teilchen in erster Ordnung nur von ihren Massen abhängt. Da magnetische Felder die kinetische Energie von Teilchen nicht verändern, müssen Ionen unterschiedlichen Startortes und Startwinkels die gleiche Wegstrecke zurücklegen. Die Bahnen von Ionen verschiedener Energien müssen dagegen unterschiedliche Längen besitzen, so daß die unterschiedliche Flugzeit aufgrund der Geschwindigkeitsdifferenz gerade kompensiert wird. Für die Transfermatrix ergeben sich daraus folgende Bedingungen:

$$(T, X) = 0, \quad (T, A) = 0, \quad (T, D) = 0, \quad (T, G) \neq 0, \quad (171)$$

wobei das Matrixelement (T, G) möglichst groß werden sollte. Weiterhin sollten die Flugzeitbildfehler zweiter und höherer Ordnung klein sein oder verschwinden. In Abbildung 24 ist am Beispiel des TOFI ist die Funktionsweise eines isochronen Flugzeitmassenspektrometers verdeutlicht.

Für die Einstellung des ESR als Flugzeitmassenspektrometer wurden schon einige Rechnungen durchgeführt [54,55,56], wobei hier diese Bedingungen schon nach einem Umlauf erfüllt wurden. Diese Einstellungen sind aber nicht unbedingt wünschenswert, da z. B. nach der in [55] gefundenen Einstellung eine Massenabweichung von 0.01% zu einem Flugzeitunterschied von 22 ps nach einem Umlauf führt. Dieser liegt deutlich unter der realisierbaren Meßgenauigkeit des Detektors von ≈ 100 ps [57].

In Abbildung 25 ist der schematische Aufbau des ESR dargestellt. Als Hauptelemente zur Strahlsteuerung dienen 6 baugleiche Sektorfelder und 20 Quadrupole, von denen jeweils die Quadrupole $Q_1 - Q_1'$, $Q_2 - Q_2'$ usw. in Reihe geschaltet sind. Dadurch weist der ESR vom Layout her eine Zweifachsymmetrie auf [18]. Mit Hilfe des

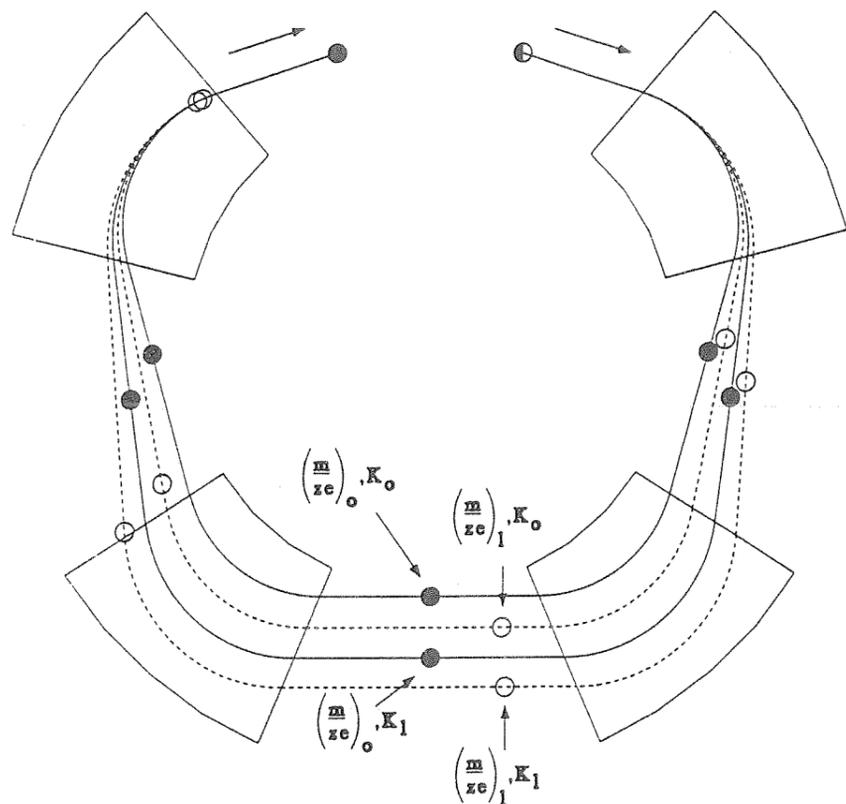


Abb. 24: Funktionsweise des Flugzeitmassenspektrometers TOFI. Es sind die Flugbahnen verschiedener Teilchen zu fünf verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Die ausgefüllten Kreise charakterisieren Teilchen mit dem Masse-zu-Ladung Verhältnis $(m/ze)_0$ und den Energien K_0 und K_1 , wobei $K_1 > K_0$ ist. Die Teilchen größerer Energie bewegen sich schneller, da sie aber weiter außen verlaufen kommen sie zur selben Zeit am Detektor an. Die nichtausgefüllten Kreise charakterisieren analog Teilchen mit dem Masse-zu-Ladung Verhältnis $(m/ze)_1$, wobei $(m/ze)_1 > (m/ze)_0$ ist und diese wiederum die Energien K_0 und K_1 besitzen. Sie bewegen sich insgesamt weiter außen und kommen daher zu einem späteren Zeitpunkt am Detektor an. Bei gleicher Ladung hängt demnach die Flugzeit nur von der Masse ab [51].

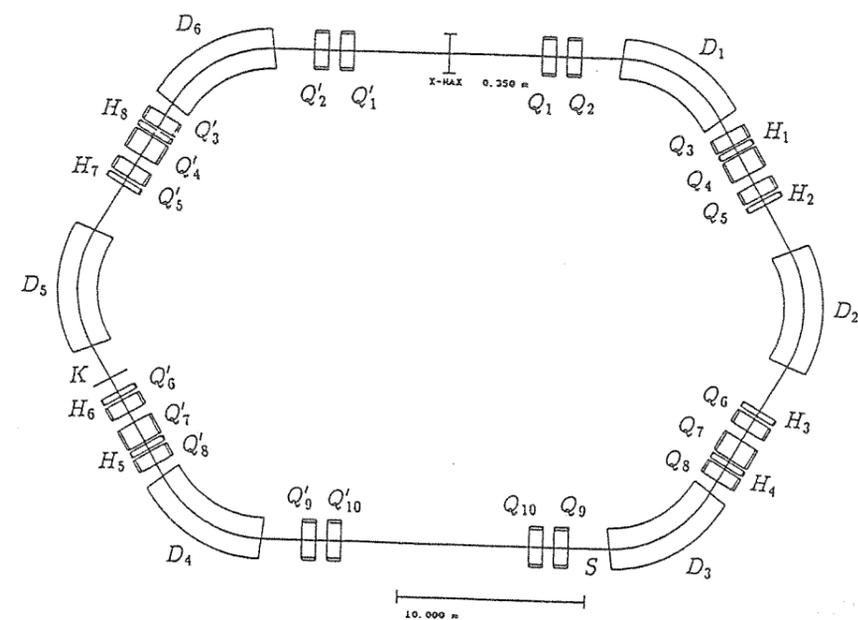


Abb. 25: Schematischer Aufbau des Experimentierspeicherrings (ESR). Der ESR besteht aus 6 Dipolen (D), die eine 360° Ablenkung ermöglichen, 20 Quadrupolen (Q) und 8 Hexapolen (H). An der Stelle S befindet sich das Septum (S), an der der vom FRS kommende Strahl in den ESR eintritt. Durch den Kicker (K) wird der Strahl auf eine auf der optischen Achse verlaufende Bahn gebracht [56].

Septums wird der vom FRS kommende Strahl in den ESR eingefädelt und durch den Kicker auf eine auf der optischen Achse verlaufende Bahn gebracht. Zur Korrektur von Bildfehlern existieren 8 Hexapole.

Um eine möglichst bildfehlerarme Einstellung zu ermöglichen, ist eine zum Flugzeitmassenspektrometer TOFI analoge Struktur gewählt worden. Es besteht aus vier gleichen Zellen, wobei diese Zellen spiegelsymmetrisch aufgebaut sind. Es können die Quadrupole $Q_1 - Q_{10}$, $Q_2 - Q_9$ usw. ebenso in Reihe geschaltet werden. Dadurch ist der ESR aus zwei identischen spiegelsymmetrischen Zellen aufgebaut und somit kann eine Zeitfokussierung nach zwei Umläufen erreicht werden. Es besteht die Möglichkeit, den gesamten Ring als eine Zelle zu definieren und somit eine Zeitfokussierung nach vier Umläufen zu erzielen. In diesem Fall können die Feldstärken der Quadrupole Q_1 bis Q_{10} beliebig gewählt werden.

Eine Fokussierung schon nach zwei Umläufen ist nicht realisierbar, da die Quadrupole bezüglich ihrer Fokussierungsrichtung Einschränkungen unterliegen. Es ist

hier eine Lösung gefunden worden, in der die Gleichungen (171) nach vier Umläufen erfüllt sind und der ESR aus zwei spiegelsymmetrischen Zellen besteht. Es handelt sich hierbei um eine idealisierte Einstellung, da z. B. nicht berücksichtigt wird, daß der Strahl anfangs nicht auf der optischen Achse verläuft. Die Quadrupolfeldstärken sind durch nichtlineares Optimieren so eingestellt worden, daß nach einem Umlauf die Bedingung

$$(A, A) = (B, B) = 0 \quad (172)$$

und nach zwei Umläufen

$$(T, D) = 0 \quad (173)$$

erfüllt ist. Weiterhin ergibt sich, daß durch Hintereinanderschalten der vier identi-

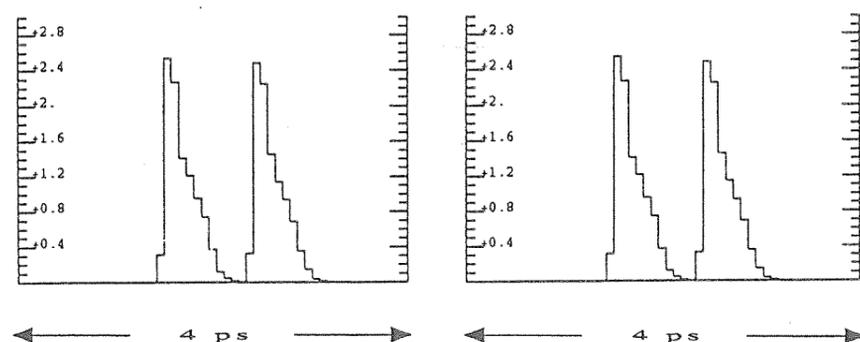


Abb. 26: Massenauflösung von 2 Massen, deren Werte sich um $5 \cdot 10^{-7}$ unterscheiden. Es sind die Intensitätsverteilungen unter Anwendung der DA-Integration (links) und Verwendung der Streufeldintegrale (rechts) dargestellt.

schen Zellen in beiden Ebenen ein achromatisches Bild der Vergrößerung 1 erzeugt wird. Als Folge davon verschwinden die Flugzeitelemente (T, X) und (T, A) . In zweiter Ordnung verschwinden aufgrund der Symmetrie ebenso die Flugzeitbildfehler (T, XA) , (T, AD) und (T, YB) [51]. Durch geeignete Wahl der Hexapolfeldstärken ist es möglich, in zweiter Ordnung alle transversalen Bildfehler bis auf die rein chromatischen zu eliminieren [58]. Der ESR kann somit als Achromat zweiter Ordnung angesehen werden. Aufgrund der symplektischen Beziehungen [27] verschwinden dann ebenso alle Laufzeitbildfehler bis auf die rein chromatischen und somit liefert nur der Bildfehlerkoeffizient (T, DD) einen Beitrag in zweiter Ordnung.

In der Simulation wurde ein zweifach geladenes neutronenreiches ${}^6_2\text{He}$ Isotop der

Element	Polschuhfeldstärke [T]
Q1	-2.241596162E-01
Q2	6.406153850E-02
Q3	2.352395358E-01
Q3	2.353283499E-01
Q4	-2.757063538E-01
Q5	1.478902023E-01
H1	8.884102857E-03
H2	-1.124896149E-02

Tabelle 4: Feldstärken der einzelnen Quadrupole und Hexapole.

Energie 250 Mev/u verwendet. Die sich daraus ergebenden Feldstärken der Quadrupole und Hexapole sind in Tabelle 4 aufgelistet.

Abbildung 26 zeigt die Massenauflösung zweier Massen nach vier Umläufen, deren Ruhemassen sich um $5 \cdot 10^{-7}$ unterscheiden. Bei der Bestimmung der Intensitätsverteilung wurde jeweils ein Phasenraumvolumen von 20 mm mrad in der horizontalen und vertikalen Ebene und eine Energieunschärfe von 0.1% angenommen. Diese Abbildung zeigt verschiedene Intensitätsverteilungen in einer Rechnung bis in dritter Ordnung. Rechts ist der Streufeld einfluß durch DA-Integration und links unter Benutzung der Streufeldintegrale berücksichtigt worden. Es ist gut die Übereinstimmung der beiden Intensitätsverteilungen zu erkennen. Es wurden auch noch Berechnungen unter Einbeziehung der Bildfehler vierter und fünfter Ordnung durchgeführt. Es zeigte sich, daß diese nur unwesentlich zur Verbreiterung der Intensitätsverteilung beitragen, so daß die Berechnungen bis in dritter Ordnung eine genügend genaue Beschreibung der ionenoptischen Eigenschaften des Systems liefern.

Die hier angenommene Energiebreite liegt unter der in [55,56] gewählten Energieverteilung. Vergrößert man den Wert auf 0.3%, so verringert sich die Auflösung von $\approx 2 \cdot 10^6$ auf $\approx 2 \cdot 10^5$. Es zeigt sich, daß unter Ausnutzung der Symmetriebedingungen ein vierfach größeres Auflösungsvermögen im Vergleich zu den in [55,56] angegebenen Systemen erreicht wird.

Zur Untersuchung des Langzeitverhaltens des Ionenstrahls sind in Abbildung 27 die Intensitätsverteilungen zweier Massen mit einer relativen Massenabweichung von $5 \cdot 10^{-6}$ dargestellt, wobei wie in [55,56] eine Energieverteilung von 0.3% angenommen worden ist. Die Gesamtbreite der Intensitätsverteilungen beträgt jeweils 700 ps.

Spaltenweise sind jeweils fünf aufeinanderfolgende Intensitätsverteilungen darge-

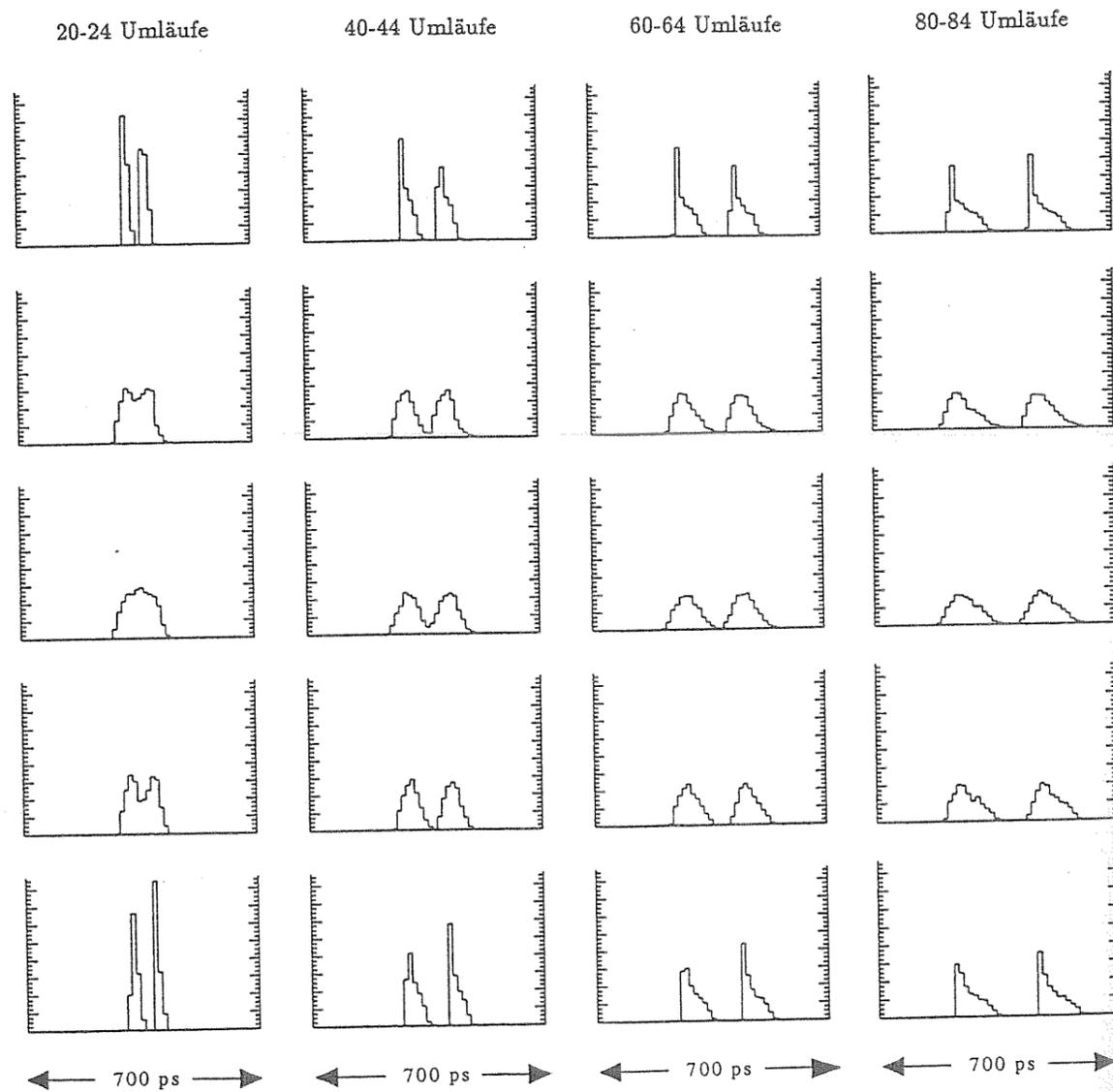


Abb. 27: In dieser Abbildung sind jeweils spaltenweise vier nacheinander folgende Intensitätsverteilungen nach 20,40,60 und 80 Umläufen aufgetragen.

stellt. Sie zeigen ein periodisches Verhalten, wobei nach $4n$ Umläufen ein besonders gutes Auflösungsvermögen erreicht wird. In der ersten Spalte sind jeweils die Verteilungen nach 20 bis 24 Umläufen aufgetragen. Bei diesen Verteilungen überwiegen die Bildfehler 1. Ordnung, sodaß in diesen Fällen keine Massentrennung möglich ist. Betrachtet man dagegen die Intensitätsverteilungen nach 60 oder 80 Umläufen (Spalte 3 und 4), so können in allen Fällen die Massen getrennt werden. Dies läßt sich dadurch erklären, daß die Werte der Bildfehler bis zweiter Ordnung mit Ausnahme von (T, DD) aufgrund der Vierfachsymmetrie immer in der gleichen Größenordnung bleiben und der Flugzeitunterschied bedingt durch die verschiedenen Massen linear ansteigt. Das Element (T, DD) dagegen wächst ebenso linear und wird dadurch zum dominierenden Bildfehler auch bei den Durchgängen, bei denen die übrigen Bildfehler bis zweiter Ordnung nicht verschwinden.

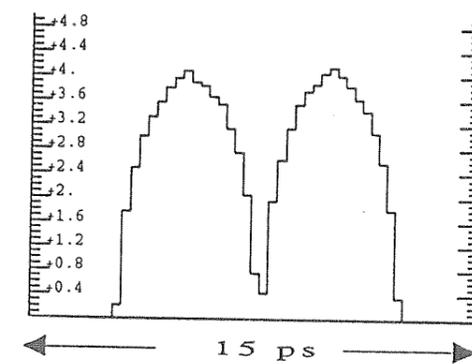


Abb. 28: Intensitätsverteilung zweier Teilchen gleicher Masse und einer unterschiedlichen Energie von 0.15%. Die Peaks haben einen Abstand von $6ps$. Es wird angenommen, daß der Ort auf 0.5 mm und der Winkel auf 0.1 mrad bestimmt werden kann.

Um das ionenoptische Auflösungsvermögen weiter zu verbessern, müssen Aussagen über die Energie eines einzelnen Teilchens gewonnen werden. Eine Möglichkeit besteht darin, aus der Flugzeitmessung bei jedem ungeraden Umlauf die Energie des Teilchens zu bestimmen. Beträgt die Umlauffrequenz eines Teilchens nach vier Umläufen $4 t_0$, so tritt bei ungeraden Durchgängen eine Verschiebung

$$\Delta t = (T, X)x + (T, A)a + (T, D)\delta_K \quad (174)$$

der Umlaufzeit auf. Bestimmt man zusätzlich zur Umlauffrequenz auch noch den

Ort und den Winkel mit Hilfe eines Detektors, so kann man daraus die Energie eines Teilchens berechnen.

In Abbildung 28 ist die unterschiedliche Flugzeit zweier Teilchen mit einer Energiedifferenz von 0.15% dargestellt. Es wird hierbei angenommen, daß der Ort und Winkel eines Teilchens auf 0.5 mm bzw. auf 0.1 mrad bestimmt werden kann. Dies kann dadurch erreicht werden, indem zwei ortsempfindliche Detektoren mit einem Auflösungsvermögen von 0.5 mm im Abstand von 5 m positioniert werden. Diese Meßgenauigkeit ermöglicht eine Bestimmung dieser Energiedifferenz. Der Flugzeitunterschied dieser Teilchen beträgt 6 ps, liegt also weit unterhalb des Auflösungsvermögens des Zeitdetektors.

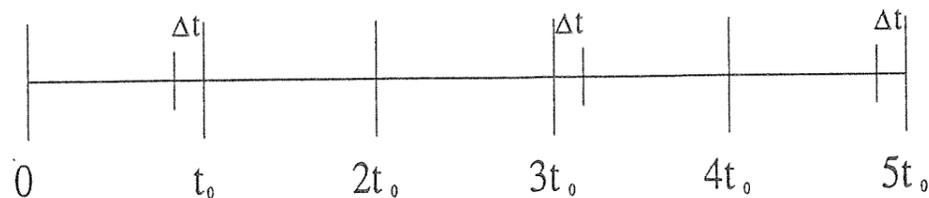


Abb. 29: Periodisches Verhalten der Flugzeitdifferenz eines Teilchens aufgrund seiner Energieabweichung.

Betrachtet man aber das Verhalten der Flugzeitdifferenz über eine Periode von vier Umläufen, so erkennt man aus Abbildung 29, daß sich die Flugzeitdifferenz eines Teilchens mit Energieabweichung einmal negativ und einmal positiv auswirkt. Die Flugzeit zwischen den ersten und dritten Durchgang beträgt $2t_0 + 2\Delta t$ und zwischen dem dritten und fünften Durchgang $2t_0 - 2\Delta t$. Werden diese beiden Zeiten verglichen, so ergibt sich ein Zeitunterschied von $4\Delta t$, also 24 ps bei einer angenommenen Energieabweichung von 0.15%. Es sollte durch Mittelung möglich sein, diese Differenz zu registrieren, wenn diese Zeiten über einen längeren Zeitraum gemessen werden. So reduziert sich die Bestimmbarkeit der Flugzeiten aufgrund der Ungenauigkeit des Zeitdetektors bei 100 Umläufen auf ca. 20 ps, da die Messungen 25 mal durchgeführt werden können.

Durch zusätzlichen Einbau von Ortsdetektoren wäre man in der Lage die Energiedifferenz auf 0.15% zu bestimmen und dadurch die Wirkung des Bildfehlers (T, DD) auf die Flugzeiteigenschaften genauer vorherzusagen. Bei einer angenommenen Ener-

gieunschärfe des Strahls von 0.3% kann das Auflösungsvermögen um den Faktor vier auf $8 \cdot 10^5$ verbessert werden.

Im Gegensatz zu den Einstellungen von [55,56] beträgt der Phasenraumvorschub nach vier Umläufen ein Vielfaches von 2π . Dies kann zu Resonanzeffekten bei fehlerhafter Justierung der Elemente und einer damit verbundenen Verschlechterung der Strahlqualität führen. Die hier erreichte ionenoptische Auflösungsvermögen von Ionen gleicher Masse liegt im ps Bereich bei einer angenommenen Energieunschärfe von 0.1% oder um ≈ 10 ps für $\Delta E = 0.3\%$. Diese Zeiten können demnach erst nach 400 bzw. 40 Umläufen mit einem Detektor gemessen werden. Zumindest nach 40 Umläufen dürften sich die Resonanzeffekte noch nicht bemerkbar machen. Es sollte daher möglich sein, Massen mit einer Ungenauigkeit von $\Delta m/m \approx 10^{-6}$ zu bestimmen.

10 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Verfahren entwickelt, um die Streufeldefekte ionenoptischer Elemente auf effektive Weise zu bestimmen. Dazu wurden die in [12,17,44] dargestellten Methoden so modifiziert, daß die Berechnung der Streufeldefekte in den dem Problem angepaßten Koordinaten [2] durchgeführt und somit eine konsistente Darstellung zu den durch numerische Integration unter Ausnutzung der DA-Methode [8] erhaltenen Werten gefunden wurde.

Es gelang hier, erstmals analytische Näherungsformeln bis in fünfter Ordnung für den elektrostatischen und magnetischen Quadrupol zu entwickeln. Die Unstimmigkeiten in den Näherungsformeln bis dritter Ordnung bei den elektrostatischen und magnetischen Sektoren konnten behoben werden. Weiterhin zeigte sich, daß die in [16,17] dargestellte Annahme, bei elektrostatischen Elementen gewisse Streufeldefekte in der Matrix des Hauptfeldes zu berücksichtigen, zur Reduzierung der Approximationsordnung führt, da in diesem Fall die unterschiedliche Lage des Eintritts- und Austrittsstreufeldes vernachlässigt wird. Im Falle des magnetischen Sektors und Quadrupols wurden zusätzlich die Flugzeitelemente mit einbezogen, da sie zur genauen Beschreibung der ionenoptischen Eigenschaften von Flugzeitmassenspektrometern notwendig sind.

Die hier bestimmten Näherungsformeln wurden in das Simulationsprogramm GICO implementiert, womit ein effektives Programm zur präzisen Berechnung komplexer ionenoptischer Systeme zur Verfügung steht. Anhand von zwei Beispielen wurde durch Vergleich mit der numerischen Integration gezeigt, daß auch detaillierte Formen der Intensitätsverteilungen wiedergegeben werden können. Die Berechnungszeiten reduzieren sich dadurch erheblich, sodaß eine Optimierung von Systemen bei vertretbarem Zeitaufwand möglich wird.

Die hier gewonnene analytische Bestimmung des Streufeldeinflusses erlaubte eine genaue Beschreibung der ionenoptischen Eigenschaften des ESR Speichers als isochrones Flugzeitmassenspektrometer. Diese Beschreibung hätte auch alternativ durch numerische Einzelbahnverfolgungen gewonnen werden können. Diese sind aber außerordentlich rechenintensiv, insbesondere über viele Umläufe, wodurch eine praktikable Durchführung einer Optimierung nicht durchführbar ist. Es konnte eine idealisierte Einstellung gefunden werden, die die Bedingung eines Achromaten zweiter Ordnung nach Brown [58] nach jedem vierten Umlauf erfüllt, wodurch eine präzise Massenbestimmung möglich ist.

Die numerischen Rechnungen zeigten, daß unter gleichzeitiger Verwendung von Ort- und Zeitdetektoren die Energieabweichung einzelner Teilchen bestimmt werden kann. Dadurch ist möglich, den in zweiter Ordnung verbleibenden Bildfehler (L, DD)

einzuschränken und dadurch das Auflösungsvermögen zu vergrößern.

Die in dieser Arbeit erhaltene Lösung stellt eine Vereinfachung des realen Systems dar. Sie müßte dahingehend modifiziert werden, daß auch die Einschubbedingungen ESR hinreichend genau beschrieben werden. Ein Einsatz des ESR als Flugzeitmassenspektrometer ist im nächsten Jahr geplant. Es sollte möglich sein, Ionenbahnen über einige 10, vielleicht einige 100 Umläufe zu verfolgen, also über eine Zeitdauer bis zu 10^{-3} s. Dadurch wäre man in der Lage Massenmessungen neu erzeugter kurzlebiger Nuklide durchzuführen.

11 Anhang 1

Alle in den Näherungsformeln auftretenden Integrale lassen sich durch partielle Integration auf eine bestimmte Anzahl von Grundintegralen zurückführen. Diese Integrale sind bei den Sektoren auf den reziproken Ablenkradius und bei den Quadrupolen auf das Verhältnis vom Feldgradienten zu der jeweiligen elektrischen oder magnetischen Steifigkeit des Referenzteilchens skaliert. Bei den Sektoren bedeutet $h_0 = 1/R_0$, beim elektrostatischen Quadrupol $h_0 = g/\chi_e$ und beim magnetischen Quadrupol $h_0 = g/\chi_m$, wobei g der jeweilige Feldgradient ist. Die Form der Integrale ist so gewählt, daß sie unabhängig von den Integrationsgrenzen sind. Dies führt dazu, daß sie den Streufeldeinfluß auf die effektive Feldgrenze transformieren. Im folgenden sind alle vorkommenden Grundintegrale aufgelistet:

$$I_{1a} = h_0^{-1} \left(\iint h d^2s - \frac{s_b^2}{2} \right)$$

$$I_{1b} = h_0^{-2} \left(\iint h^2 d^2s - I_{4a} s_b - \frac{s_b^2}{2} \right)$$

$$I_{2a} = h_0^{-1} \left(\int [s \int h ds] ds - \frac{s_b^3}{3} \right)$$

$$I_{2b} = h_0^{-2} \left(\int h^2 s^2 ds - \frac{s_b^3}{3} \right)$$

$$I_{3a} = h_0^{-2} \left(\int \left(\int h ds \right)^2 ds - \frac{s_b^3}{3} \right)$$

$$I_{3b} = h_0^{-3} \left(\int \left(\int h^2 ds \right) \left(\int h ds \right) ds - \frac{1}{2} I_{4a} s^2 - \frac{s_b^3}{3} \right)$$

$$I_{4a} = h_0^{-2} \left(\int h^2 ds - s_b \right)$$

$$I_{4b} = h_0^{-3} \left(\int h^3 ds - s_b \right)$$

$$I_5 = h_0^{-2} \int \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 ds$$

$$I_6 = h_0^{-2} \int s \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 ds$$

$$I_{7a} = h_0^{-3} \int \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 \left[\iint h d^2s \right] ds$$

$$I_{7b} = h_0^{-2} \int s^2 \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 ds$$

$$I_8 = h_0^{-2} \left(\iint \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 d^2s - I_5 s_b \right)$$

$$I_9 = h_0^{-3} \left(\int \left[h^2 \int h ds \right] ds - \frac{s_b^2}{2} \right)$$

$$I_{10} = h_0^{-3} \int \left[\left(\frac{dh}{ds} \right)^2 \int h ds \right] ds$$

$$I_{11a} = h_0^{-2} \left(\int \left(\int h ds \right) \left(\iint h d^2s \right) ds - \frac{1}{2} I_{1a} s_b^2 - \frac{s_b^4}{8} \right)$$

$$I_{11b} = h_0^{-2} \left(\int s \left(\int h ds \right)^2 ds - \frac{s_b^4}{4} \right)$$

Bei allen Grundintegralen wird angenommen, daß der Aperturradius oder halbe Polschuh- oder Elektrodenabstand G_0 auf 1 normiert wird. Nimmt man $G_0 \neq 1$ an, so muß s durch s/G_0 ersetzt werden. Somit müssen schließlich bei der Bestimmung der Streufeldeffekte die Grundintegrale mit den in Tabelle 5 angegebenen Faktoren multipliziert werden.

11.1 Liste der Integrale, die bei der Berechnung der Matrix des homogenen magnetischen Sektors auftreten

Im folgenden sind alle Integrale aufgelistet, die bei der sukzessiven Approximation in der dritten Approximationsordnung für die Transfermatrix des magnetischen Sektors unter Berücksichtigung einer schrägen und gekrümmten Feldgrenze auftreten:

$$\begin{aligned} \int h' \iint h d^3s &= h_0^2 I_{1a} \\ \int h h' \iint h d^3s &= \frac{1}{2} h_0^3 (I_{1a} - I_9) \\ \int h'' \int \left(\int h ds \right)^2 d^2s &= 2h^3 I_9 \\ \int h'' \iint h d^3s &= h_0^2 I_{4a} \\ \int h h' \int h d^2s &= -\frac{1}{2} h_0^3 I_{4b} \\ \int h''' \int \left(\int h ds \right)^2 d^2s &= -h_0^3 I_{4b} \end{aligned}$$

Integral	Multiplikationsfaktor
I_{1a}	G_0^2
I_{1b}	G_0^2
I_{2a}	G_0^3
I_{2b}	G_0^3
I_{3a}	G_0^3
I_{3b}	G_0^3
I_{4a}	G_0
I_{4b}	G_0
I_5	G_0^{-1}
I_6	1
I_{7a}	G_0
I_{7b}	G_0
I_8	1
I_9	G_0^2
I_{10}	1
I_{11a}	G_0^4
I_{11b}	G_0^4

Tabelle 5: Multiplikationsfaktoren für die einzelnen Grundintegrale

$$\begin{aligned} \int h''' \int \int h d^3 s &= \frac{1}{2} h_0^2 \\ \int h'' \left(\int h ds \right)^2 ds &= h_0^3 I_{4b} \\ \int h'' h \int \int h d^3 s &= h_0^3 \left(\frac{1}{2} I_{4b} - I_{7a} \right) \\ \int h'''' \left(\int \int h d^2 s \right)^2 ds &= h_0^3 (3I_{4b} - 2I_{7a}) \\ \int h'^2 \int h d^2 s &= h_0^3 I_{10} \\ \int h' h^2 ds &= \frac{1}{3} h_0^3 \\ \int h'''' \int \left(\int h ds \right)^2 d^2 s &= -2h_0^3 \left(I_{10} + \frac{1}{3} \right) \\ \int h'''' \int \int h d^3 s &= -h_0^2 I_5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int h'' h' \int \int h d^3 s &= -\frac{1}{2} h_0^3 I_{10} \\ \int h'''' h \int \int h d^3 s &= h_0^3 \left(\frac{3}{2} I_{10} + \frac{1}{3} \right) \\ \int h'' h \int h d^2 s &= -h_0^3 \left(I_{10} + \frac{1}{3} \right) \\ \int h'''' \left(\int h ds \right)^2 ds &= h_0^3 \left(2I_{10} + \frac{2}{3} \right) \\ \int h'''' \left(\int \int h d^2 s \right)^2 ds &= h_0^3 (7I_{10} + 2) \\ \int h' \left(\int h ds \right)^2 ds &= -2h_0^3 I_9 \\ \int h'''' \left(\int \int h d^2 s \right)^2 ds &= h_0^3 (I_{1a} - 5I_9) \\ \int h' s^2 ds &= 2h_0 I_{1a} \\ \int h'' s \int \int h d^3 s &= -h_0^2 (I_{1a} + I_{1b}) \\ \int h'' s^2 ds &= 0 \\ \int h'' s^3 ds &= -6h_0 I_{1a} \\ \int h' s \int h d^2 s &= h_0^2 I_{1b} \\ \int h' h s^2 ds &= h_0^2 I_{1b} \\ \int h'' s^2 \int h d^2 s &= -3h_0^2 I_{1b} \\ \int h'''' s^2 \int \int h d^3 s &= h_0^2 (2I_{1a} + 5I_{1b}) \\ \int h'''' s^4 ds &= 24h_0 I_{1a} \\ \int h' \int \int h' \int \int h d^5 s &= h_0^3 \left(-I_{1a} I_{4a} - \frac{5}{2} I_{3a} + I_{3b} \right) \\ \int h \int h' \int \int h d^4 s &= h_0^3 (I_{1a} I_{4a} + I_{3a} - I_{3b}) \\ \int h^2 \int \int h d^3 s &= h_0^3 (I_{1a} I_{4a} - I_{3b}) \\ \int h'' \left(\int \int h d^2 s \right)^2 ds &= h_0^3 (2I_{1a} I_{4a} - 2I_{3b} + 2I_{3a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int \int h' \int \int h d^4 s &= -\frac{3}{2} h_0^2 I_{3a} \\
\int \int h \int h d^3 s &= \frac{1}{2} h_0^2 I_{3a} \\
\int h' \int \left(\int h ds \right)^2 d^2 s &= h_0^3 I_{3a} \\
\int \left(\int h ds \right)^2 ds &= h_0^3 I_{3a} \\
\int h h' \int \int h d^3 s &= \frac{1}{2} h_0^3 (I_{1a} - I_9) \\
\int h'' \int \int h' \int \int h d^5 s &= -\frac{1}{2} h_0^3 (I_{1a} + I_9) \\
\int h''' \int \int h' \int \int h d^5 s &= h_0^3 I_{7a} \\
\int h'''' \int \int h' \int \int h d^5 s &= -\frac{1}{2} h_0^3 I_{10} \\
\int \int h' s^2 d^2 s &= -6h^2 I_2 \\
\int h'' \int \int h' s^2 d^3 s &= h_0^2 (-2I_{1a} + I_{1b}) \\
\int h'' s ds &= -h_0 \\
\int h''' s^2 ds &= 2h_0 \\
\int h h' ds &= \frac{1}{2} h_0^2 \\
\int h' s ds &= 0 \\
\int h'' ds &= 0 \\
\int h''' s ds &= 0 \\
\int h h' s ds &= -\frac{1}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int h' h' s^2 ds &= h_0^2 I_{7b} \\
\int h'' h s^2 ds &= h_0^2 (-I_{7b} + I_{4a}) \\
\int h'' s \int h d^2 s &= \frac{3}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int h'''' \int \int h d^2 s s^2 ds &= h_0^2 (-I_{7b} + 9I_{4a})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int h'''' s^4 ds &= 0 \\
\int h''' \int \int h' s^2 d^3 s &= h_0^2 I_{7b} \\
\int h' \int h d^2 s &= -h_0^2 I_{4a} \\
\int h''' s \int \int h d^3 s &= -\frac{5}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int h''' s^3 ds &= 0 \\
\int h'' \int h ds \int \int h d^3 s &= h_0^3 \left(-\frac{1}{2} I_{1a} + \frac{5}{2} I_9 \right) \\
\int h' \int h' \int \int h d^4 s &= \frac{1}{2} h_0^3 (I_{1a} + I_9) \\
\int h' \int h' s^2 d^2 s &= h_0^2 (2I_{1a} - I_{1b}) \\
\int \int h' s d^2 s &= -2h_0 I_{1a} \\
\int \int h'' \int \int h d^4 s &= h_0^2 (I_{1a} + I_{1b}) \\
\int \int h'' d^2 s &= h_0 \\
\int \int h'' s^2 d^2 s &= 6h_0 I_{1a} \\
\int \int h' \int h d^3 s &= -h_0^2 I_{1b} \\
\int \int h' d^2 s &= 0 \\
\int h'' \int \int h s d^3 s &= h_0^2 (I_{1a} - I_{1b}) \\
\int h' \int h s d^2 s &= h_0^2 (-I_{1a} + I_{1b}) \\
\int h' \int \int h' s d^3 s &= h_0^2 (-2I_{1a} + I_{1b}) \\
\int h'' s \int \int h d^3 s &= h_0^2 (-I_{1a} - I_{1b}) \\
\int h \int h'' \int \int h d^4 s &= \frac{1}{2} h_0^3 (I_{1a} - 5I_9) \\
\int h' \int \int h'' \int \int h d^5 s &= \frac{1}{2} h_0^3 (I_{1a} + 2I_{1b} + 5I_9) \\
\int h' \int \int h'' s^2 d^3 s &= h_0^2 (6I_{1a} - 3I_{1b})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int h \int h' \int h d^3 s &= -h_0^3 I_9 \\
\int h' \int \int h' \int h d^4 s &= -h_0^3 (I_{1b} + 2I_9) \\
\int h'' \int h d^2 s &= -\frac{1}{2} h_0^2 \\
\int h'' s^2 \int h d^2 s &= -3h_0^2 I_{1b} \\
\int h' h s^2 ds &= h_0^2 I_{1b} \\
\int h' \int \int h^2 d^3 s &= h_0^3 (I_{1b} + I_9) \\
\int h'' \int h' \int \int h d^4 s &= -h_0^3 I_{7a} \\
\int h'' \int h' s^2 d^2 s &= -h_0^2 I_{7b} \\
\int h''' \int h ds \int \int h d^4 s &= h_0^3 \left(-\frac{3}{2} I_{4b} + I_{7a} \right) \\
\int h''' s^2 \int h d^2 s &= h_0^2 (-4I_{4a} + I_{7b}) \\
\int h''' \int h d^2 s &= h_0^2 I_5 \\
\int h''' \int h' \int \int h d^4 s &= \frac{1}{2} h_0^3 I_{10} \\
\int h''' s ds &= 0 \\
\int h''' s \int h d^2 s &= h_0^2 (1 + I_6) \\
\int h'''' s \int \int h d^3 s &= -h_0^2 \left(\frac{3}{2} + I_6 \right) \\
\int h'''' \int h ds \int \int h d^4 s &= -h_0^3 \left(1 + \frac{7}{2} I_{10} \right) \\
\int h'' h' s^2 ds &= -h_0^2 I_6 \\
\int h'''' h s^2 ds &= h_0^2 (1 + 3I_6) \\
\int h'''' s^2 \int h d^2 s &= -h_0^2 (3 + 5I_6) \\
\int h'''' s^2 \int \int h d^3 s &= h_0^2 (6 + 7I_6) \\
\int h'''' s^4 ds &= 24h_0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int h'''' s^3 ds &= -6h_0 \\
\int h'''' s^2 ds &= 0 \\
\int h'''' \int \int h' s^2 d^3 s &= -h_0^2 I_6 \\
\int h'''' \int \int h d^3 s &= -h_0^2 I_5 \\
\int h''' \int h' s^2 d^2 s &= h_0^2 I_6 \\
\int h'' \int \int h' s d^3 s &= -\frac{1}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int h'' \int \int h'' \int \int h d^5 s &= h_0^3 \left(-I_{4a} + \frac{1}{2} I_{4b} - I_{7a} \right) \\
\int h'' h ds &= -h_0^2 I_5 \\
\int h'' \int \int h'' s^2 d^3 s &= h_0^2 (I_{4a} - I_{7b}) \\
\int h'' \int \int h' \int h d^4 s &= h_0^3 \left(I_{4a} - \frac{1}{2} I_{4b} \right) \\
\int \int h' h d^2 s &= \frac{1}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int h' \int \int h'' \int h d^4 s &= h_0^3 \left(-\frac{3}{2} I_{4a} + I_{4b} \right) \\
\int h' \int \int h'' s d^3 s &= \frac{3}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int \int h'' \int h d^3 s &= -\frac{3}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int \int h'' s d^2 s &= 0 \\
\int h' \int \int h''' \int \int h d^5 s &= h_0^3 \left(\frac{5}{2} I_{4a} - \frac{3}{2} I_{4b} + I_{7a} \right) \\
\int h''' s \int \int h d^3 s &= -\frac{5}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int \int h''' \int \int h d^4 s &= \frac{5}{2} h_0^2 I_{4a} \\
\int \int h''' s^2 d^2 s &= 0 \\
\int h' \int \int h''' s^2 d^3 s &= h_0^2 (-4I_{4a} + I_{7b}) \\
\int h'' \int \int h^2 d^3 s &= h_0^3 (-I_{4a} + I_{4b})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\iint hh'd^2s &= \frac{1}{2}h_0^2I_{4a} \\
\int h' \iint hh'd^3s &= \frac{1}{2}h_0^2(I_{4a} - I_{4b}) \\
\int h' \int h^2d^2s &= h_0^3(I_{4a} - I_{4b}) \\
\int h' \int hsd^2s &= \frac{1}{2}h_0^2I_{4a} \\
\int h' \int h' \int hd^3s &= h_0^3\left(-I_{4a} + \frac{1}{2}I_{4b}\right) \\
\int h' \int h'' \iint hd^4s &= h_0^3\left(I_{4a} + I_{7a} - \frac{1}{2}I_{4b}\right) \\
\int h' \int h''s^2d^2s &= h_0^2(-I_{4a} + I_{7b}) \\
\int h'' \int h^2d^2s &= -\frac{1}{3}h_0^3 \\
\int h'' \iint h''sd^3s &= h_0^2\left(\frac{1}{2} - I_6\right) \\
\int h' \iint h''hd^3s &= h_0^3\left(\frac{1}{6} + I_6 - I_{10}\right) \\
\iint h''hd^2s &= h_0^2\left(\frac{1}{2} + I_6\right) \\
\int h''hsds &= -h_0^2\left(\frac{1}{2} + I_6\right) \\
\int h'' \iint h''' \iint hd^5s &= h_0^3\left(-\frac{1}{6} + \frac{3}{2}I_{10}\right) \\
\int h'' \iint h'hd^3s &= -\frac{1}{6}h_0^3 \\
\int h'' \iint h'''s^2d^3s &= h_0^2(-1 + 3I_6) \\
\int h'' \iint h'' \int hd^4s &= h_0^3\left(\frac{1}{6} - I_{10}\right) \\
\int h''h's^2ds &= -h_0^2I_6 \\
\int h'''hs^2ds &= h_0^2(1 + 3I_6) \\
\int h' \int hh'd^2s &= \frac{1}{6}h_0^3 \\
\int h' \int h''' \iint hd^4s &= h_0^3\left(\frac{1}{6} - \frac{3}{2}I_{10}\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int h' \int h'' \int hd^3s &= h_0^3\left(-\frac{1}{6} + I_{10}\right) \\
\int h' \int h''sd^2s &= h_0^2\left(-\frac{1}{2} + I_6\right) \\
\int h' \int h'''s^2d^2s &= h_0^2(1 - 3I_6) \\
\int h' \iint h'^2d^3s &= h_0^3(-I_6 + I_{10}) \\
\int h''' \iint h'sd^3s &= h_0^2I_6 \\
\int h''' \iint h'' \int hd^5s &= -\frac{1}{2}h_0^3I_{10} \\
\int h''' \iint h''s^2d^3s &= -h_0^2I_6 \\
\int h''' \iint h' \int hd^4s &= h_0^3I_{10} \\
\int h''' \iint h^2d^3s &= \frac{1}{3}h_0^3 \\
\int h'h^2ds &= \frac{1}{3}h_0^3 \\
\iint h''' \int hd^3s &= -h_0^2(1 + I_6) \\
\iint h'''sd^2s &= -2h_0 \\
\int h' \iint h''' \int hd^4s &= h_0^3\left(-\frac{1}{3} - I_6 + 2I_{10}\right) \\
\int h' \iint h'''sd^3s &= h_0^2(-1 + I_6) \\
\iint h'''' \iint hd^4s &= h_0^2\left(\frac{3}{2} + I_6\right) \\
\int h' \iint h'''' \iint hd^5s &= h_0^3\left(\frac{1}{2} + I_6 - \frac{7}{2}I_{10}\right) \\
\iint h''''s^2d^2s &= 6h_0 \\
\int h' \iint h''''s^2d^3s &= h_0^2(3 - 5I_6) \\
\int h'' \int h'sd^2s &= -h_0^2I_6 \\
\int h'' \int h'' \iint hd^4s &= \frac{1}{2}h_0^3I_{10}
\end{aligned}$$

$$\int h'' \int h'' s^2 d^2 s = h_0^2 I_6$$

$$\int h'' \int h' \int h d^3 s = -h_0^3 I_{10}$$

11.2 Liste der Integrale, die bei der Berechnung der Matrix des toroidalen elektrostatischen Sektors auftreten

Im folgenden sind alle Integrale aufgelistet, die bei der sukzessiven Approximation in der dritten Approximationsordnung für die Transfermatrix des toroidalen elektrostatischen Sektors unter Berücksichtigung einer gekrümmten Feldgrenze auftreten:

$$\iint h^2 d^2 s = h_0^2 I_{1b}$$

$$\iint h'' d^2 s = h_0$$

$$\iint h'' s d^2 s = 0$$

$$\iiint h'' \iint h'' d^4 s = -h_0^2 I_5$$

$$\int h \int h'' d^2 s = \frac{1}{2} h_0^2$$

$$\int h^2 ds = h_0^2 I_{4a}$$

$$\int h^2 s ds = -h_0^2 I_{1b}$$

$$\int h s ds = -h_0 I_{1a}$$

$$\int h'' ds = 0$$

$$\int h^2 \iint h'' d^3 s = h_0^3 I_{4b}$$

$$\int h \iint h'' d^3 s = h_0^2 I_{4a}$$

$$\int h'' \iint h^2 d^3 s = h_0^3 (I_{4b} - I_{4a})$$

$$\int h'' \iint h d^3 s = h_0^2 I_{4a}$$

$$\int h'' s ds = -h_0$$

$$\int h'' s^2 ds = 0$$

$$\int h'' \iint h'' d^3 s = -h_0^2 I_5$$

$$\int h'' \iint h'' s d^3 s = h_0^2 \left(\frac{1}{2} - I_6 \right)$$

$$\int h'' \int h d^2 s = -\frac{1}{2} h_0^2$$

$$\iint h'' h d^2 s = -h_0^2 I_8$$

$$\iint h'^2 d^2 s = h_0^2 I_8$$

$$\int h h'' ds = -h_0^2 I_5$$

$$\int h'^2 ds = h_0^2 I_5$$

$$\int h'' h s ds = -h_0^2 \left(\frac{1}{2} + I_6 \right)$$

$$\int h'^2 s ds = h_0^2 I_6$$

$$\int h' ds = h_0$$

$$\int h h' ds = \frac{1}{2} h_0^2$$

11.3 Liste der Integrale, die bei der Berechnung der Matrix des elektrostatischen und magnetischen Quadrupols auftreten

Im folgenden sind alle Integrale aufgelistet, die bei der sukzessiven Approximation in der fünften Approximationsordnung für die Transfermatrix des elektrostatischen und magnetischen Quadrupols auftreten.

$$\iiint k \iint k d^4 s = k_0^2 (I_{11a} + I_{11b})$$

$$\int k \iint k s d^3 s = k_0^2 (I_{11a} - I_{11b})$$

$$\int k \iint k d^3 s = -k_0^2 I_{3a}$$

$$\iint k s d^2 s = 2k_0 I_{2a}$$

$$\int k s^2 ds = -2k_0 I_{2a}$$

$$\begin{aligned}
\int k'' ds &= 0 \\
\int k'' \int \int k d^3 s &= k_0^2 I_{4a} \\
\int k'' s ds &= -k_0 \\
\int k'' \int \int k s d^3 s &= k_0^2 (I_{1a} - I_{1b}) \\
\int k \int \int k'' d^3 s &= k_0^2 I_{4a} \\
\int k' \int k d^2 s &= -k_0^2 I_{4a} \\
\int k' ds &= k_0 \\
\int k'' s \int \int k d^3 s &= -k_0^2 (I_{1a} + I_{1b}) \\
\int k' s \int k d^2 s &= k_0^2 I_{1b} \\
\int k'' s^2 ds &= 0 \\
\int k' s ds &= 0 \\
\int k'' s^3 ds &= -6k_0 I_{1a} \\
\int k' s^2 ds &= 2k_0 I_{1a} \\
\int k \int \int k' d^3 s &= 0 \\
\int k \int \int k'' s d^3 s &= -k_0^2 I_{1b} \\
\int k' \int k s d^2 s &= k_0^2 (-I_{1a} + I_{1b}) \\
\int k' k s ds &= -\frac{1}{2} k_0^2 I_{4a} \\
\int \int k d^2 s &= k_0 I_{1a} \\
\int \int k'' d^2 s &= k_0 \\
\int \int k'' \int \int k d^4 s &= k_0^2 (I_{1a} + I_{1b}) \\
\int \int k'' s d^2 s &= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int \int k' \int k d^3 s &= -k_0^2 I_{1b} \\
\int \int k \int \int k'' d^4 s &= k_0^2 I_{1b} \\
\int \int k' s d^2 s &= -2k_0 I_{1a} \\
\int \int k'' s^2 d^2 s &= 6k_0 I_{1a} \\
\int k \int k d^2 s &= 0 \\
\int k'' k ds &= -k_0^2 I_5 \\
\int k'' k s ds &= -k_0^2 \left(\frac{1}{2} + I_6 \right) \\
\int k'' \int \int k'' s d^3 s &= k_0^2 \left(\frac{1}{2} - I_6 \right) \\
\int k'^2 ds &= k_0^2 I_5 \\
\int k'' \int k d^2 s &= -\frac{1}{2} k_0^2 \\
\int k' k ds &= \frac{1}{2} k_0^2 \\
\int k'^2 s ds &= k_0^2 I_6 \\
\int k' \int k'' s d^2 s &= k_0^2 \left(-\frac{1}{2} + I_6 \right) \\
\int \int k'' k d^2 s &= k_0^2 \left(\frac{1}{2} - I_8 \right) \\
\int \int k'^2 d^2 s &= k_0^2 I_8 \\
\int k'''' ds &= 0 \\
\int k'''' \int \int k d^3 s &= -k_0^2 I_5 \\
\int k'''' s ds &= 0 \\
\int k'''' s \int \int k d^3 s &= -k_0^2 \left(\frac{3}{2} + I_6 \right) \\
\int k'''' \int \int k s d^3 s &= -k_0^2 \left(\frac{1}{2} + I_6 \right) \\
\int k \int \int k'''' s d^3 s &= -k_0^2 \left(\frac{3}{2} + I_6 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int k'''' s^2 ds &= 0 \\
\int k''' ds &= 0 \\
\int k''' \int k d^3 s &= \frac{1}{2} k_0^2 \\
\int k''' s \int k d^2 s &= k_0^2 (1 + I_6) \\
\int k''' \int k s d^2 s &= k_0^2 \left(\frac{1}{2} + I_6 \right) \\
\int k''' s ds &= 0 \\
\int k'''' s^3 ds &= -6k_0 \\
\int k''' s^2 ds &= 2k_0 \\
\int k''' \int k d^2 s &= k_0^2 I_5 \\
\int \int k'''' d^2 s &= 0 \\
\int \int k'''' \int k d^4 s &= k_0^2 \left(\frac{3}{2} - I_8 \right) \\
\int \int k \int \int k'''' d^4 s &= k_0^2 \left(\frac{1}{2} - I_8 \right) \\
\int \int k'''' s d^2 s &= 0 \\
\int \int k''' \int k d^3 s &= k_0^2 (-1 + I_8) \\
\int \int k''' d^2 s &= 0 \\
\int \int k'''' s^2 d^2 s &= 6k_0 \\
\int \int k''' s d^2 s &= -2k_0
\end{aligned}$$

12 Anhang 2

Liste der Streufeldmatrizen des homogenen magnetischen Sektors, des toroidalen elektrostatischen Sektors, des magnetischen und des elektrostatischen Quadrupols.

12.1 Streufeldmatrix des homogenen magnetischen Sektors

Im folgenden sind die nichtverschwindenden Matrixelemente des Eintritts- und Austrittsstreufeldes bis in dritter Ordnung des homogenen magnetischen Sektors in der dritten Approximationsordnung aufgelistet. Die Größe $h_0 = 1/R_0$ bedeutet reziproker Ablenkradius des Magneten. Ist die effektive Feldgrenze um den Winkel ϵ geneigt und besitzt einen Krümmungsradius R_G , so kennzeichnen $\rho = 1/R_G$ die Krümmung der effektiven Feldgrenze. Die Größen $t_0 = \tan \epsilon$ und $c_0 = \cos \epsilon$ geben jeweils den Tangens und Cosinus des Neigungswinkels an. Zur Bestimmung der Transfermatrix werden folgende Grundintegrale benötigt:

$$\begin{aligned}
I_{1a} &= h_0^{-1} \left(\int \int h d^2 s - \frac{s_b^2}{2} \right) \\
I_{1b} &= h_0^{-2} \left(\int \int h^2 d^2 s - I_{4a} s_b - \frac{s_b^2}{2} \right) \\
I_{2a} &= h_0^{-1} \left(\int \left[s \int h ds \right] ds - \frac{s_b^3}{3} \right) \\
I_{2b} &= h_0^{-2} \left(\int h^2 s^2 ds - \frac{s_b^3}{3} \right) \\
I_{3a} &= h_0^{-2} \left(\int \left(\int h ds \right)^2 ds - \frac{s_b^3}{3} \right) \\
I_{3b} &= h_0^{-3} \left(\int \left(\int h^2 ds \right) \left(\int h ds \right) ds - \frac{1}{2} I_{4a} s^2 - \frac{s_b^3}{3} \right) \\
I_{4a} &= h_0^{-2} \left(\int h^2 ds - s_b \right) \\
I_5 &= h_0^{-2} \int \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 ds \\
I_6 &= h_0^{-2} \int s \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 ds \\
I_{7a} &= h_0^{-3} \int \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 \left[\int \int h d^2 s \right] ds
\end{aligned}$$

$$I_{7b} = h_0^{-2} \int s^2 \left(\frac{dh}{ds} \right)^2 ds$$

$$I_9 = h_0^{-3} \left(\int \left[h^2 \int h ds \right] ds - \frac{z_b^2}{2} \right)$$

$$I_{10} = h_0^{-3} \int \left[\left(\frac{dh}{ds} \right)^2 \int h ds \right] ds,$$

Da die chromatischen Elemente einen relativistischen Einfluß erfahren, ergibt sich für sie folgende Korrektur:

$$\tau_d = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\eta}{2 + \eta} \right)$$

$$\tau_g = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{2 + \eta} \right)$$

(175)

Versatz und Knick der Referenzbahn im Eintritts- und Austrittsstreufeld:

$$\Delta X = \frac{1}{c_0^2} h_0 I_{1a} - \frac{3}{2} \frac{t_0}{c_0^3} h_0^2 I_{3a} + 3 \rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0^2} I_{2a}$$

$$\Delta Z = \frac{1}{2} \frac{1}{c_0^3} h_0^2 I_{3a}$$

$$\Delta \Phi = \frac{t_0^2}{c_0} \rho h_0 I_{1a} - \rho h_0^2 \left(\frac{3}{4} \frac{t_0}{c_0^2} I_{3a} + \frac{t_0^3}{c_0^2} (2I_{3a} - I_{2b}) \right) + 3 \rho^2 h_0 \frac{t_0^2}{c_0^3} I_{2a}$$

Eintrittsstreufeldmatrix:

1. Ordnung:

$$(X, X) = 1 - \rho h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0} (2 + 3t_0^2)$$

$$(X, A) = -2h_0 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a}$$

$$(X, G) = \frac{1}{c_0^2} h_0 \tau_g I_{1a}$$

$$(X, D) = \frac{1}{c_0^2} h_0 \tau_d I_{1a}$$

$$(A, X) = t_0 h_0 + \rho^2 h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0^2} (2 + 3t_0^2) - \rho h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0} (2 + 3t_0^2)$$

$$(A, A) = 1 - 2h_0^2 \frac{t_0^2}{c_0^2} I_{1a} + \rho h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0} (2 + 3t_0^2)$$

$$(A, G) = \left(h_0^2 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a} - \rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0} I_{1a} \right) \tau_g$$

$$(A, D) = \left(h_0^2 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a} - \rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0} I_{1a} \right) \tau_d$$

$$(Y, Y) = 1 - h_0^2 I_{1b} \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) + \rho h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0} (2t_0 + 3t_0^3)$$

$$(Y, B) = 2h_0 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a}$$

$$(B, Y) = -t_0 h_0 - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 I_{1b} \frac{t_0}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 I_9 \frac{t_0}{c_0^2} (7 + 10t_0^2)$$

$$- \rho h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0} (2 + 3t_0^2) + \rho h_0^2 I_{1b} \frac{t_0^2}{c_0} (5 + 6t_0^2) - \rho^2 h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0^2} (2 + 3t_0^2)$$

$$(B, B) = 1 - 2h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0^2} + h_0^2 I_{1b} \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) - \rho h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0} (2t_0 + 3t_0^3)$$

$$(L, X) = -\rho h_0 \frac{t_0}{c_0} I_{1a}$$

$$(L, A) = -h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0^2}$$

2. Ordnung:

$$(X, XX) = -\frac{1}{2} h_0 t_0^2$$

$$(X, YY) = \frac{1}{2} h_0 \frac{1}{c_0^2} + \frac{1}{2} h_0^2 \frac{t_0}{c_0} I_{4a} (5 + 6t_0^2)$$

$$(A, XX) = \frac{1}{2} \rho h_0 \frac{1}{c_0^3}$$

$$(A, XA) = h_0 t_0^2$$

$$(A, YY) = \frac{1}{2} h_0^2 t_0 (1 + 2t_0^2) - \frac{1}{2} \rho h_0 \frac{1}{c_0^3} + \frac{1}{2} h_0^3 I_{4a} \frac{t_0^2}{c_0} (7 + 10t_0^2) - \frac{1}{2} h_0^2 \rho I_{4a} \frac{t_0}{c_0^2} (5 + 6t_0^2)$$

$$(A, YB) = -h_0 t_0^2 - h_0^2 I_{4a} \frac{t_0}{c_0} (1 + 2t_0^2)$$

$$(Y, XY) = t_0^2 h_0 + h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (t_0 + 2t_0^3)$$

$$(B, XY) = -\rho h_0 \frac{1}{c_0^3} - \rho h_0^2 I_{4a} (5t_0 + 11t_0^3 + 6t_0^5)$$

$$\begin{aligned}
(B, XB) &= -t_0^2 h_0 - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (t_0 + 2t_0^3) \\
(B, AY) &= -h_0 \frac{1}{c_0^2} - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (5t_0 + 6t_0^3) \\
(B, YG) &= h_0^2 I_{4a} (1 + 2t_0^2) \frac{1}{c_0} \tau_g \\
(B, YD) &= h_0^2 I_{4a} (1 + 2t_0^2) \frac{1}{c_0} \tau_d \\
(L, YY) &= h_0^2 I_{4a} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{c_0} + \frac{t_0^2}{c_0} \right)
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= -\frac{1}{2} \rho h_0 \frac{t_0}{c_0^3} \\
(X, XXA) &= -h_0 t_0^3 \\
(X, XYY) &= -\frac{1}{2} h_0^2 (t_0^2 + 2t_0^4) + \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(X, XYB) &= h_0 (t_0 + 2t_0^3) \\
(X, XXG) &= \frac{1}{2} h_0 t_0^2 \tau_g \\
(X, XXD) &= \frac{1}{2} h_0 t_0^2 \tau_d \\
(X, AYY) &= h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \\
(X, YYG) &= -\frac{1}{2} h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_g \\
(X, YYD) &= -\frac{1}{2} h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_d \\
(A, XXX) &= \frac{1}{2} \rho^2 h_0 \frac{t_0}{c_0^4} \\
(A, XXA) &= \frac{3}{2} \rho h_0 \frac{t_0}{c_0^3} \\
(A, XAA) &= h_0 t_0^3 \\
(A, XAG) &= -h_0 t_0^2 \tau_g \\
(A, XAD) &= -h_0 t_0^2 \tau_d \\
(A, XYY) &= +\frac{1}{2} h_0^2 \rho \frac{1}{c_0^3} (1 + 6t_0^2) - \frac{3}{2} h_0 \rho^2 \frac{t_0}{c_0^4}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XYB) &= h_0^2 t_0^2 (1 + 2t_0^2) - 3h_0 \rho \left(\frac{t_0}{c_0^3} \right) \\
(A, XBB) &= -t_0^3 h_0 \\
(A, AYY) &= \frac{1}{2} h_0^2 t_0^2 (5 + 6t_0^2) - \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(A, AYB) &= h_0 (-t_0 - 2t_0^3) \\
(A, YYG) &= h_0^2 \left(-\frac{1}{2} t_0 - t_0^3 \right) \tau_g \\
(A, YYD) &= h_0^2 \left(-\frac{1}{2} t_0 - t_0^3 \right) \tau_d \\
(A, YBG) &= h_0 t_0^2 \tau_g \\
(A, YBD) &= h_0 t_0^2 \tau_d \\
(Y, XXY) &= \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(Y, XXB) &= h_0 t_0^3 \\
(Y, XAY) &= h_0 (t_0 + 2t_0^3) \\
(Y, XYG) &= -t_0^2 h_0 \tau_g \\
(Y, XYD) &= -t_0^2 h_0 \tau_d \\
(Y, YYY) &= +\frac{1}{6} h_0^2 \frac{1}{c_0^2} (1 + 6t_0^2) + \frac{2}{3} h_0^2 I_6 \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) - \frac{1}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(Y, YYB) &= -\frac{t_0}{c_0^2} h_0 \quad (?) \\
(B, XXY) &= -\frac{3}{2} h_0 \rho^2 \frac{t_0}{c_0^4} \\
(B, XXB) &= -\frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(B, XAY) &= -3h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(B, XAB) &= h_0 (-t_0 - 2t_0^3) \\
(B, AAY) &= -h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \\
(B, XBG) &= t_0^2 h_0 \tau_g \\
(B, XBD) &= t_0^2 h_0 \tau_d \\
(B, AYG) &= h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_g
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, AYD) &= h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_d \\
(B, YYY) &= -\frac{2}{3} h_0^2 I_5 \frac{1}{c_0} (1 + 2t_0^2) + \frac{1}{9} h_0^3 t_0 (4 + 10t_0^2 + 6t_0^4) \\
&\quad + \frac{1}{3} h_0^3 I_{10} \frac{t_0}{c_0^2} (18 + 28t_0^2) - \frac{2}{3} h_0^3 I_6 \frac{t_0}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) \\
&\quad - \frac{1}{6} h_0^2 \rho \frac{1}{c_0^3} (1 + 6t_0^2) - \frac{2}{3} h_0^2 \rho I_6 \frac{t_0}{c_0} (5 + 6t_0^2) + \frac{1}{2} h_0 \rho^2 \frac{t_0}{c_0^4} \\
(B, YYB) &= +\frac{2}{3} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} - \frac{1}{2} h_0^2 \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) - 2h_0^2 I_6 \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) \\
(B, YBB) &= h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \\
(L, XXX) &= -\frac{1}{6} h_0^2 t_0^3 \\
(L, XXA) &= -\frac{1}{2} h_0 t_0^2 \\
(L, XYY) &= -\frac{1}{2} h_0^2 t_0^3 \\
(L, XYB) &= h_0 t_0^2 \\
(L, AYY) &= \frac{1}{2} h \frac{1}{c_0^2}
\end{aligned}$$

Austrittsstreufeldmatrix:

1. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, X) &= 1 - 2h_0^2 \frac{t_0^2}{c_0^2} I_{1a} + \rho h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0} (2 + 3t_0^2) \\
(X, A) &= -2h_0 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a} \\
(X, G) &= -h_0 \frac{1}{c_0^2} I_{1a} \tau_g \\
(X, D) &= -h_0 \frac{1}{c_0^2} I_{1a} \tau_d \\
(A, X) &= t_0 h_0 + \rho^2 h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0^2} (2 + 3t_0^2) - \rho h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0} (2 + 3t_0^2) \\
(A, A) &= 1 - \rho h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0} (2 + 3t_0^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, G) &= -\rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0} I_{1a} \tau_g \\
(A, D) &= -\rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0} I_{1a} \tau_d \\
(Y, Y) &= 1 - 2h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0^2} + h_0^2 I_{1b} \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) - \rho h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0} (2t_0 + 3t_0^3) \\
(Y, B) &= 2h_0 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a} \\
(B, Y) &= -t_0 h_0 - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 I_{1b} \frac{t_0}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 I_9 \frac{t_0}{c_0^2} (7 + 10t_0^2) \\
&\quad - \rho h_0^2 I_{1a} \frac{t_0^2}{c_0} (2 + 3t_0^2) + \rho h_0^2 I_{1b} \frac{t_0^2}{c_0} (5 + 6t_0^2) - \rho^2 h_0 I_{1a} \frac{t_0}{c_0^2} (2 + 3t_0^2) \\
(B, B) &= 1 - h_0^2 I_{1b} \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) + \rho h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0} (2t_0 + 3t_0^3) \\
(L, X) &= -\rho h_0 \frac{t_0^2}{c_0} I_{1a} + h_0^2 \frac{t_0}{c_0^2} I_{1a} \\
(L, A) &= h_0 I_{1a} \frac{1}{c_0^2}
\end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XX) &= \frac{1}{2} h_0 t_0^2 \\
(X, YY) &= -\frac{1}{2} \frac{1}{c_0^2} h_0 - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{2} \frac{t_0}{c_0} (5 + 6t_0^2) \\
(A, XX) &= -\frac{1}{2} h_0^2 t_0^3 + \frac{1}{2} \rho h_0 \frac{1}{c_0^3} \\
(A, XA) &= -h_0 t_0^2 \\
(A, YY) &= -\frac{1}{2} h_0^2 t_0^3 - \frac{1}{2} \rho h_0 \frac{1}{c_0^3} - h_0^3 t_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (1 + 2t_0^2) \\
&\quad - \frac{1}{2} h_0^2 I_{4a} \frac{t_0}{c_0^2} \rho (5 + 6t_0^2) \\
(A, YB) &= t_0^2 h_0 + h_0^2 I_{4a} \frac{t_0}{c_0} (1 + 2t_0^2) \\
(Y, XY) &= -t_0^2 h_0 - h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (t_0 + 2t_0^3) \\
(B, XY) &= h_0^2 \frac{t_0}{c_0^2} + h_0^3 I_{4a} \frac{t_0^2}{c_0} (5 + 6t_0^2) - \rho h_0 \frac{1}{c_0^3} - \rho h_0^2 I_{4a} (5t_0 + 11t_0^3 + 6t_0^5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XB) &= t_0^2 h_0 + h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (t_0 + 2t_0^3) \\
(B, AY) &= h_0 \frac{1}{c_0^2} + h_0^2 I_{4a} \frac{1}{c_0} (5t_0 + 6t_0^3) \\
(B, YG) &= h_0^2 I_{4a} (1 + 2t_0^2) \frac{1}{c_0} \tau_g \\
(B, YD) &= h_0^2 I_{4a} (1 + 2t_0^2) \frac{1}{c_0} \tau_d \\
(L, YY) &= h_0^2 I_{4a} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{c_0} + \frac{t_0^2}{c_0} \right)
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= -\frac{1}{2} h_0^2 t_0^4 + \frac{1}{2} \rho h_0 \frac{t_0}{c_0^3} \\
(X, XXA) &= -h_0 t_0^3 \\
(X, XYY) &= h_0^2 (t_0^2 + \frac{1}{2} t_0^4) - \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(X, XYB) &= h_0 (t_0 + 2t_0^3) \\
(X, XXG) &= -\frac{1}{2} h_0 t_0^2 \tau_g \\
(X, XXD) &= -\frac{1}{2} h_0 t_0^2 \tau_d \\
(X, AYY) &= h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \\
(X, YYG) &= \frac{1}{2} h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_g \\
(X, YYD) &= \frac{1}{2} h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_d \\
(A, XXX) &= \frac{1}{2} h_0^3 t_0^5 - h_0^2 \rho \frac{t_0^2}{c_0^3} + \frac{1}{2} \rho^2 h_0 \frac{t_0}{c_0^4} \\
(A, XXA) &= \frac{3}{2} h_0^2 t_0^4 - \frac{3}{2} \rho h_0 \frac{t_0}{c_0^3} \\
(A, XXG) &= \frac{1}{2} h_0^2 t_0^3 \tau_g \\
(A, XXD) &= \frac{1}{2} h_0^2 t_0^3 \tau_d \\
(A, XAA) &= h_0 t_0^3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XAG) &= h_0 t_0^2 \tau_g \\
(A, XAD) &= h_0 t_0^2 \tau_d \\
(A, XYY) &= \frac{1}{2} h_0^3 t_0^3 (2 + 3t_0^2) - \frac{3}{2} h_0 \rho^2 \frac{t_0}{c_0^4} \\
(A, XYB) &= -h_0^2 \frac{t_0^2}{c_0^2} + 3h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(A, XBB) &= -h_0 t_0^3 \\
(A, AYY) &= h_0^2 (t_0^2 + \frac{3}{2} t_0^4) + \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(A, AYB) &= -h_0 (t_0 + 2t_0^3) \\
(A, YYG) &= \frac{1}{2} h_0^2 t_0^3 \tau_g \\
(A, YYD) &= \frac{1}{2} t_0^3 h_0^2 \tau_d \\
(A, YBG) &= -h_0 t_0^2 \tau_g \\
(A, YBD) &= -h_0 t_0^2 \tau_d \\
(Y, XXY) &= h_0^2 (t_0^2 + \frac{3}{2} t_0^4) - \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(Y, XXB) &= h_0 t_0^3 \\
(Y, XAY) &= h_0 (t_0 + 2t_0^3) \\
(Y, XYG) &= t_0^2 h_0 \tau_g \\
(Y, XYD) &= t_0^2 h_0 \tau_d \\
(Y, YYY) &= \frac{1}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} - \frac{1}{6} h_0^2 \frac{1}{c_0^2} (1 - 3t_0^2) - \frac{2}{3} h_0^2 I_6 \frac{1}{c_0^2} (1 + 2t_0^2) \\
(Y, YYB) &= -\frac{t_0}{c_0^2} h_0 \\
(B, XXY) &= -\frac{3}{2} h_0 \rho^2 \frac{t_0}{c_0^4} - \frac{3}{2} h_0^3 \frac{t_0^3}{c_0^2} + \frac{1}{2} h_0^2 \rho \frac{1}{c_0^3} (1 + 6t_0^2) \\
(B, XXB) &= -h_0^2 (t_0^2 + \frac{3}{2} t_0^4) + \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(B, XAY) &= +3h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} - 3h_0^2 \frac{t_0^2}{c_0^2} \\
(B, XAB) &= -h_0 (t_0 + 2t_0^3) \\
(B, AAY) &= -h_0 \frac{t_0}{c_0^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XBG) &= -h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \tau_g \\
(B, XBD) &= -h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \tau_d \\
(B, AYG) &= -h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_g \\
(B, AYD) &= -h_0 \frac{1}{c_0^2} \tau_d \\
(B, YYY) &= -\frac{2}{3} h_0^2 I_5 \frac{1}{c_0} (1 + 2t_0^2) + h_0^3 \frac{1}{18} t_0 (2 + 5t_0^2 + 3t_0^4) + \frac{2}{3} h_0^3 I_{10} \frac{t_0}{c_0^2} (9 + 14t_0^2) \\
&\quad - 2h_0^3 I_6 \frac{t_0}{c_0^2} (1 - 2t_0^2) - \frac{1}{6} h_0^2 \rho \frac{1}{c_0^3} \\
&\quad - \frac{2}{3} h_0^2 \rho I_6 \frac{t_0^2}{c_0} (5 + 6t_0^2) + \frac{1}{2} h_0 \rho^2 \frac{t_0}{c_0^4} \\
(B, YYB) &= h_0^2 \left(1 + \frac{3}{4} t_0^2 + \frac{1}{2} t_0^4 \right) + h_0^2 I_6 \left(\frac{5}{2} + \frac{11}{2} t_0^2 + 4t_0^4 \right) - \frac{3}{2} h_0 \rho \frac{t_0}{c_0^3} \\
(B, YBB) &= h_0 \frac{t_0}{c_0^2} \\
(L, XXX) &= \frac{1}{3} h_0^2 t_0^3 \\
(L, XXA) &= \frac{1}{2} h_0 t_0^2 \\
(L, XYY) &= -\frac{1}{2} h_0^2 t_0 \\
(L, XYB) &= -h_0 t_0^2 \\
(L, AYY) &= -\frac{1}{2} h \frac{1}{c_0^2}
\end{aligned}$$

12.2 Streufeldmatrix des toroidalen elektrostatischen Sektors

Im folgenden sind die nichtverschwindenden Matrixelemente des Eintritts- und Austrittsstreufeldes bis in dritter Ordnung des toroidalen elektrostatischen Sektors in der dritten Approximationsordnung aufgelistet. Die Größe $h_0 = 1/R_0$ bedeutet reziproker Ablenksradius des Sektors, $\rho = 1/R_G$ die Krümmung der effektiven Feldgrenze und $c = R_0/R_v$ die auf h_0 normierte Krümmung der Kondensatorplatten in der z - y Ebene. Die Transfermatrix hängt von folgenden Grundintegralen ab:

$$\begin{aligned}
I_{1a} &= h_0^{-1} \int \int h d^2 s - \frac{1}{2} s_b^2 \\
I_{1b} &= h_0^{-2} \int \int h^2 d^2 s - \frac{1}{2} s_b^2 \\
I_{4a} &= h_0^{-2} \int h^2 ds - s_b \\
I_{4b} &= h_0^{-3} \int h^3 ds - s_b \\
I_5 &= h_0^{-2} \int h'^2 ds \\
I_6 &= h_0^{-2} \int h'^2 s ds \\
I_8 &= h_0^{-2} \int \int h'^2 d^2 s - I_5 s_b
\end{aligned}$$

Die Transfermatrix für das Eintrittsstreufeld lautet:

1. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, X) &= 1 + h_0^2 (c I_{1a} - 2 I_{1b}) \\
(X, D) &= h_0 I_{1a} \\
(A, X) &= -2 h_0^2 I_{4a} \\
(A, A) &= 1 + h_0^2 (2 I_{1b} - c I_{1a}) \\
(Y, Y) &= 1 - c h_0^2 I_{1a} \\
(B, B) &= 1 + c h_0^2 I_{1a}
\end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XX) &= \frac{1}{2} h_0 \\
(A, XX) &= h_0^3 (-4 I_{4b} + I_{4a} (2 + 4c)) - \frac{1}{2} \rho h_0^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XA) &= -h_0 \\
(A, XG) &= -h_0^2 I_{4a} \\
(A, XD) &= 3h_0^2 I_{4a} \\
(A, YY) &= h_0^2 \left(\frac{1}{2} \rho - c I_{4a} h_0 \right) \\
(B, XY) &= \rho h_0^2 - 2ch_0^3 I_{4a}
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= h_0^2 \left(\frac{5}{6} - \frac{4}{3} I_8 - \frac{1}{3} c \right) \\
(X, XXD) &= -\frac{1}{2} h_0 \\
(X, XYY) &= \frac{1}{2} ch_0^2 \\
(A, XXX) &= -h_0^2 \left(\frac{4}{3} I_5 + \frac{1}{2} \rho (1 - c) \right) \\
(A, XXA) &= h_0^2 \left(-\frac{3}{2} - 4I_6 + c \right) \\
(A, XXG) &= -\frac{1}{4} \rho h_0^2 \\
(A, XXD) &= \frac{1}{4} \rho h_0^2 \\
(A, XAD) &= h_0 \\
(A, XYY) &= \frac{1}{2} \rho (1 - 3c) h_0^3 \\
(A, XYB) &= -ch_0^2 \\
(A, AYY) &= -\frac{1}{2} ch_0^2 \\
(A, YYG) &= \frac{1}{4} \rho h_0^2 \\
(A, YYD) &= -\frac{1}{4} \rho h_0^2 \\
(Y, XXY) &= \frac{1}{2} ch_0^2 \\
(B, XXY) &= -\frac{1}{2} \rho h_0^3 (1 - 3c) \\
(B, XXB) &= -\frac{1}{2} ch_0^2 \\
(B, XAY) &= -ch_0^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XYG) &= \frac{1}{2} \rho h_0^2 \\
(B, XYD) &= -\frac{1}{2} \rho h_0^2 \\
(B, YYY) &= \frac{1}{2} \rho ch_0^3
\end{aligned}$$

Die Matrixelemente für das Austrittsstreufeld lauten:

1. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, X) &= 1 - h_0^2 (c I_{1a} - 2I_{1b}) \\
(X, D) &= -h_0 I_{1a} \\
(A, X) &= -2h_0^2 I_{4a} \\
(A, A) &= 1 - h_0^2 (2I_{1b} - c I_{1a}) \\
(Y, Y) &= 1 + ch_0^2 I_{1a} \\
(B, B) &= 1 - ch_0^2 I_{1a}
\end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XX) &= -\frac{1}{2} h_0 \\
(A, XX) &= h_0^3 (-4I_{4b} + I_{4a} (1 + 4c)) - \frac{1}{2} \rho h_0^2 \\
(A, XA) &= h_0 \\
(A, XG) &= -h_0^2 I_{4a} \\
(A, XD) &= 3h_0^2 I_{4a} \\
(A, YY) &= h_0^2 \left(\frac{1}{2} \rho - c I_{4a} h_0 \right) \\
(B, XY) &= \rho h_0^2 - 2ch_0^3 I_{4a}
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= h_0^2 \left(-\frac{1}{3} + \frac{4}{3} I_8 + \frac{1}{3} c \right) \\
(X, XXD) &= \frac{1}{2} h_0 \\
(X, XYY) &= -\frac{1}{2} ch_0^2 \\
(A, XXX) &= h_0^2 \left(-\frac{4}{3} I_5 + \frac{1}{2} \rho (c - 1) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XXA) &= h_0^2(2 + 4I_6 - c) \\
(A, XXG) &= -\frac{1}{4}\rho h_0^2 \\
(A, XXD) &= \frac{1}{4}\rho h_0^2 \\
(A, XAD) &= -h_0 \\
(A, XYY) &= \frac{1}{2}\rho h_0^3(1 - 3c) \\
(A, XYB) &= ch_0^2 \\
(A, AYY) &= \frac{1}{2}ch_0^2 \\
(A, YYG) &= \frac{1}{4}\rho h_0^2 \\
(A, YYD) &= -\frac{1}{4}\rho h_0^2 \\
(Y, XXY) &= -\frac{1}{2}ch_0^2 \\
(B, XXY) &= -\frac{1}{2}\rho h_0^3(1 - 3c) \\
(B, XXB) &= \frac{1}{2}ch_0^2 \\
(B, XAY) &= ch_0^2 \\
(B, XYG) &= \frac{1}{2}\rho h_0^2 \\
(B, XYD) &= -\frac{1}{2}\rho h_0^2 \\
(B, YYY) &= \frac{1}{2}\rho ch_0^3
\end{aligned}$$

12.3 Streufeldmatrix des magnetischen Quadrupols

Im folgenden sind die nichtverschwindenden Matrixelemente der Eintritts- und Austrittstransfermatrix bis in fünfter Ordnung des magnetischen Quadrupols in der effektiven fünften Approximationsordnung aufgelistet. Die Größe $k_0 = q_0/\chi_m$ kennzeichnet die auf die magnetische Steifigkeit normierte Quadrupolfeldstärke im Hauptfeld des Quadrupols. Die Transfermatrix hängt von folgenden Grundintegralen ab:

$$\begin{aligned}
I_{1a} &= k_0^{-1} \iint kd^2s - \frac{1}{2}s_b^2 \\
I_{1b} &= k_0^{-2} \iint k^2 d^2s - \frac{1}{2}s_b^2 \\
I_{2a} &= k_0^{-1} \int s \int kd^2s - \frac{1}{6}s_b^3 \\
I_{3a} &= k_0^{-2} \int \left(\int kds \right)^2 ds - \frac{1}{6}s_b^3 \\
I_{4a} &= k_0^{-2} \int k^2 ds - s_b \\
I_5 &= k_0^{-2} \int k'^2 ds \\
I_6 &= k_0^{-2} \int k'^2 s ds \\
I_8 &= k_0^{-2} \iint k'^2 d^2s - I_5 s_b \\
I_{11a} &= k_0^{-2} \left(\int \left(\int kds \right) \left(\iint kd^2s \right) ds - \frac{1}{2}I_{1a}s_b^2 - \frac{s_b^4}{8} \right) \\
I_{11b} &= k_0^{-2} \left(\int s \left(\int kds \right)^2 ds - \frac{s_b^4}{4} \right)
\end{aligned}$$

Da die chromatischen Elemente einen relativistischen Einfluß erfahren, ergibt sich für sie folgende Korrektur:

$$\begin{aligned}
\tau_d &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\eta}{2 + \eta} \right) \\
\tau_g &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{2 + \eta} \right) \\
\tau_{gg} &= -\frac{1}{8} \left(1 - \frac{\eta}{2 + \eta} \right)^2 \\
\tau_{gd} &= \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\eta}{2 + \eta} \right)^2
\end{aligned}$$

$$\tau_{dd} = -\frac{1}{8} \left(1 - \frac{\eta}{2 + \eta} \right)^2$$

$$v_g = \tau_g - \frac{1}{1 + \eta}$$

$$v_d = \tau_d - \frac{\eta}{1 + \eta}$$

Für die Eintrittstransfermatrix ergeben sich folgende Ausdrücke:

1. Ordnung

$$\begin{aligned} (X, X) &= 1 - k_0 I_{1a} + k_0^2 (I_{11a} + I_{11b}) \\ (X, A) &= -2k_0 I_{2a} \\ (A, X) &= -k_0^2 I_{3a} \\ (A, A) &= 1 + k_0 I_{1a} + k_0^2 (I_{11a} - I_{11b}) \\ (Y, Y) &= 1 + k_0 I_{1a} + k_0^2 (I_{11a} + I_{11b}) \\ (Y, B) &= 2k_0 I_{2a} \\ (B, Y) &= -k_0^2 I_{3a} \\ (B, B) &= 1 - k_0 I_{1a} + k_0^2 (I_{11a} - I_{11b}) \end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$\begin{aligned} (X, XG) &= k_0 I_{1a} \tau_g \\ (X, XD) &= k_0 I_{1a} \tau_d \\ (X, AG) &= 4k_0 I_{2a} \tau_g \\ (X, AD) &= 4k_0 I_{2a} \tau_d \\ (A, XG) &= k_0^2 I_{3a} \tau_g \\ (A, XD) &= k_0^2 I_{3a} \tau_d \\ (A, AG) &= -k_0 I_{1a} \tau_g \\ (A, AD) &= -k_0 I_{1a} \tau_d \\ (Y, YG) &= -k_0 I_{1a} \tau_g \\ (Y, YD) &= -k_0 I_{1a} \tau_d \\ (Y, BG) &= -4k_0 I_{2a} \tau_g \\ (Y, BD) &= -4k_0 I_{2a} \tau_d \\ (B, YG) &= k_0^2 I_{3a} \tau_g \\ (B, YD) &= k_0^2 I_{3a} \tau_d \\ (B, BG) &= k_0 I_{1a} \tau_g \\ (B, BD) &= k_0 I_{1a} \tau_d \\ (L, XX) &= \frac{1}{2} k_0^2 I_{3a} \\ (L, XA) &= -k_0 I_{1a} \\ (L, AA) &= -2k_0 I_{2a} \\ (L, YY) &= \frac{1}{2} k_0^2 I_{3a} \\ (L, YB) &= k_0 I_{1a} \\ (L, BB) &= 2k_0 I_{2a} \end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned} (X, XXX) &= \frac{1}{12} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} + \frac{1}{3} I_{1b} \right) \\ (X, XYY) &= \frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} - I_{1b} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (X, XBB) &= -k_0 I_{1a} \\ (X, XGG) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\ (X, XDG) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\ (X, XDD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\ (X, AYB) &= 2k_0 I_{1a} \\ (A, XXX) &= -\frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \\ (A, XXA) &= -\frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\ (A, XYY) &= -k_0^2 I_{4a} \\ (A, XYB) &= \frac{1}{2} k_0 + k_0^2 \left(-\frac{1}{2} I_{1a} + 2I_{1b} \right) \\ (A, AYY) &= -\frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(-\frac{3}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\ (A, ABB) &= k_0 I_{1a} \\ (A, AGG) &= k_0 I_{1a} (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\ (A, AGD) &= k_0 I_{1a} (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\ (A, ADD) &= k_0 I_{1a} (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\ (Y, XXY) &= -\frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} - I_{1b} \right) \\ (Y, XAB) &= -2k_0 I_{1a} \\ (Y, AAY) &= k_0 I_{1a} \\ (Y, YYY) &= -\frac{1}{12} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} + \frac{1}{3} I_{1b} \right) \\ (Y, YGG) &= -k_0 I_{1a} (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\ (Y, YGD) &= -k_0 I_{1a} (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\ (Y, YDD) &= -k_0 I_{1a} (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\ (B, XXY) &= -k_0^2 I_{4a} \\ (B, XXB) &= \frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(-\frac{3}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\ (B, XAY) &= -\frac{1}{2} k_0 + k_0^2 \left(-\frac{1}{2} I_{1a} + 2I_{1b} \right) \\ (B, AAB) &= -k_0 I_{1a} \\ (B, YYY) &= -k_0^2 \left(\frac{1}{3} I_{4a} \right) \\ (B, YYB) &= \frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\ (B, BGG) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\ (B, BGD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\ (B, BDD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\ (L, XAG) &= k_0 I_{1a} (2\tau_g + v_g) \\ (L, XAD) &= k_0 I_{1a} (2\tau_d + v_d) \\ (L, YBG) &= -k_0 I_{1a} (2\tau_g + v_g) \\ (L, YBD) &= -k_0 I_{1a} (2\tau_d + v_d) \end{aligned}$$

4. Ordnung:

$$\begin{aligned} (X, XXXG) &= -\frac{1}{12} k_0 \tau_g \\ (X, XXXD) &= -\frac{1}{12} k_0 \tau_d \\ (X, XYYG) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_g \\ (X, XYYD) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_d \\ (A, XXXG) &= \frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \tau_g \\ (A, XXXD) &= \frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \tau_d \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XXAG) &= \frac{1}{4} k_o \tau_g \\
(A, XXAD) &= \frac{1}{4} k_o \tau_d \\
(A, XYYG) &= k_o^2 I_{4a} \tau_g \\
(A, XYYD) &= k_o^2 I_{4a} \tau_d \\
(A, XYBG) &= -\frac{1}{2} k_o \tau_g \\
(A, XYBD) &= -\frac{1}{2} k_o \tau_d \\
(A, AYYG) &= \frac{1}{4} k_o \tau_g \\
(A, AYYD) &= \frac{1}{4} k_o \tau_d \\
(Y, XXYG) &= \frac{1}{4} k_o \tau_g \\
(Y, XXYD) &= \frac{1}{4} k_o \tau_d \\
(Y, YYYG) &= \frac{1}{12} k_o \tau_g \\
(Y, YYYD) &= \frac{1}{12} k_o \tau_d \\
(B, XXYG) &= k_o^2 I_{4a} \tau_g \\
(B, XXYD) &= k_o^2 I_{4a} \tau_d \\
(B, XXBG) &= -\frac{1}{4} k_o \tau_g \\
(B, XXBD) &= -\frac{1}{4} k_o \tau_d \\
(B, XAYG) &= \frac{1}{2} k_o \tau_g \\
(B, XAYD) &= \frac{1}{2} k_o \tau_d \\
(B, YYYG) &= \frac{1}{3} k_o^2 I_{4a} \tau_g \\
(B, YYYD) &= \frac{1}{3} k_o^2 I_{4a} \tau_d \\
(B, YYBG) &= -\frac{1}{4} k_o \tau_g \\
(B, YYBD) &= -\frac{1}{4} k_o \tau_d \\
(L, XXXX) &= \frac{1}{12} k_o^2 I_{4a} \\
(L, XXXA) &= \frac{1}{12} k_o \\
(L, XXYG) &= \frac{1}{2} k_o^2 I_{4a} \\
(L, XXYB) &= -\frac{1}{4} k_o \\
(L, XAYG) &= \frac{1}{4} k_o \\
(L, YYYG) &= \frac{1}{12} k_o^2 I_{4a} \\
(L, YYYB) &= -\frac{1}{12} k_o
\end{aligned}$$

5. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXXXX) &= k_o^2 \left(\frac{1}{32} - \frac{7}{192} I_6 \right) \\
(X, XXXAA) &= -\frac{1}{32} k_o \\
(X, XXXYY) &= k_o^2 \left(\frac{3}{32} - \frac{31}{96} I_6 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(X, XXXBB) &= \frac{11}{96} k_o \\
(X, XXXGG) &= \frac{1}{12} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(X, XXXGD) &= \frac{1}{12} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
(X, XXXDD) &= \frac{1}{12} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(X, XXAYB) &= -\frac{5}{16} k_o \\
(X, XAAYY) &= \frac{3}{32} k_o \\
(X, XYYYY) &= k_o^2 \left(\frac{1}{24} - \frac{31}{192} I_6 \right) \\
(X, XYYBB) &= \frac{5}{32} k_o \\
(X, XYYGG) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(X, XYYGD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
(X, XYYDD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(X, AYYBY) &= -\frac{11}{48} k_o \\
(A, XXXXX) &= -\frac{7}{192} k_o^2 I_6 \\
(A, XXXXA) &= k_o^2 \left(-\frac{3}{32} - \frac{35}{192} I_6 \right) \\
(A, XXXYY) &= -\frac{31}{96} k_o^2 I_6 \\
(A, XXXYB) &= k_o^2 \left(-\frac{1}{6} - \frac{31}{48} I_6 \right) \\
(A, XXAAA) &= \frac{1}{32} k_o \\
(A, XXAYY) &= -k_o^2 \left(\frac{13}{32} + \frac{31}{32} I_6 \right) \\
(A, XXABB) &= -\frac{11}{32} k_o \\
(A, XXAGG) &= \frac{1}{4} k_o (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(A, XXAGD) &= \frac{1}{4} k_o (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(A, XXADD) &= \frac{1}{4} k_o (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(A, XAAYB) &= \frac{5}{16} k_o \\
(A, XYYYY) &= -\frac{31}{192} k_o^2 I_6 \\
(A, XYYBY) &= -k_o^2 \left(\frac{3}{16} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
(A, XYBBB) &= \frac{1}{16} k_o \\
(A, XYBGG) &= \frac{1}{2} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(A, XYBGD) &= \frac{1}{2} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
(A, XYBDD) &= \frac{1}{2} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(A, AAAYY) &= -\frac{1}{32} k_o \\
(A, AYYYY) &= k_o^2 \left(\frac{1}{48} - \frac{31}{192} I_6 \right) \\
(A, AYYBY) &= -\frac{5}{32} k_o
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, AYYGG) &= \frac{1}{4} k_o(\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(A, AYYGD) &= \frac{1}{4} k_o(\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(A, AYYDD) &= \frac{1}{4} k_o(\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(Y, XXXXY) &= k_o^2 \left(\frac{1}{24} - \frac{31}{192} I_8 \right) \\
(Y, XXXAB) &= \frac{11}{48} k_o \\
(Y, XXAAY) &= -\frac{5}{32} k_o \\
(Y, XXYYY) &= k_o^2 \left(\frac{3}{32} - \frac{31}{96} I_8 \right) \\
(Y, XXYBB) &= -\frac{3}{32} k_o \\
(Y, XXYGG) &= \frac{1}{4} k_o(\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(Y, XXYGD) &= \frac{1}{4} k_o(\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(Y, XXYDD) &= \frac{1}{4} k_o(\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(Y, XAYYB) &= \frac{5}{16} k_o \\
(Y, AAYYY) &= -\frac{11}{96} k_o \\
(Y, YYYYY) &= k_o^2 \left(\frac{1}{32} - \frac{7}{192} I_8 \right) \\
(Y, YYYBB) &= \frac{1}{32} k_o \\
(Y, YYYGG) &= \frac{1}{12} k_o(\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(Y, YYYGD) &= \frac{1}{12} k_o(\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(Y, YYYDD) &= \frac{1}{12} k_o(\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(B, XXXXY) &= -\frac{31}{192} k_o^2 I_5 \\
(B, XXXXB) &= k_o^2 \left(\frac{1}{48} - \frac{31}{192} I_6 \right) \\
(B, XXXAY) &= -k_o^2 \left(\frac{3}{16} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
(B, XXAAB) &= \frac{5}{32} k_o \\
(B, XXYYY) &= -\frac{31}{96} k_o^2 I_5 \\
(B, XXYBB) &= -k_o^2 \left(\frac{13}{32} + \frac{31}{32} I_6 \right) \\
(B, XXBBB) &= \frac{1}{32} k_o \\
(B, XXBGG) &= \frac{1}{4} k_o(-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(B, XXBGD) &= \frac{1}{4} k_o(-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
(B, XXBDD) &= \frac{1}{4} k_o(-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(B, XAAAY) &= -\frac{1}{16} k_o \\
(B, XAYYY) &= -k_o^2 \left(\frac{1}{6} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
(B, XAYBB) &= -\frac{5}{16} k_o \\
(B, XAYGG) &= \frac{1}{2} k_o(\tau_{gg} - \tau_g \tau_g)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XAYGD) &= \frac{1}{2} k_o(\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(B, XAYDD) &= \frac{1}{2} k_o(\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(B, AAYYB) &= \frac{11}{32} k_o \\
(B, YYYYY) &= -\frac{7}{192} k_o^2 I_5 \\
(B, YYYBB) &= -k_o^2 \left(\frac{3}{32} + \frac{35}{192} I_6 \right) \\
(B, YYYGG) &= -\frac{1}{32} k_o \\
(B, YYYGD) &= \frac{1}{4} k_o(-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(B, YYYDD) &= \frac{1}{4} k_o(-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(L, XXXAG) &= -\frac{1/12}{k_o} (2\tau_g + v_g) \\
(L, XXXAD) &= -\frac{1/12}{k_o} (2\tau_d + v_d) \\
(L, XXYBG) &= \frac{1}{4} k_o(2\tau_g + v_g) \\
(L, XXYBD) &= \frac{1}{4} k_o(2\tau_d + v_d) \\
(L, XAYYG) &= -\frac{1}{4} k_o(2\tau_g + v_g) \\
(L, XAYYD) &= -\frac{1}{4} k_o(2\tau_d + v_d) \\
(L, YYYBG) &= \frac{1}{12} k_o(2\tau_g + v_g) \\
(L, YYYBD) &= \frac{1}{12} k_o(2\tau_d + v_d)
\end{aligned}$$

Die Austrittstrefelfeldmatrix lautet:
1. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, X) &= 1 + k_o I_{1a} + k_o^2 (I_{11a} - I_{11b}) \\
(X, A) &= -2k_o I_{2a} \\
(A, X) &= -k_o^2 I_{3a} \\
(A, A) &= 1 - k_o I_{1a} + k_o^2 (I_{11a} + I_{11b}) \\
(Y, Y) &= 1 - k_o I_{1a} + k_o^2 (I_{11a} - I_{11b}) \\
(Y, B) &= +2k_o I_{2a} \\
(B, Y) &= -k_o^2 I_{3a} \\
(B, B) &= 1 + k_o I_{1a} + k_o^2 (I_{11a} + I_{11b})
\end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XG) &= -k_o I_{1a} \tau_g \\
(X, XD) &= -k_o I_{1a} \tau_d \\
(X, AG) &= 4k_o I_{2a} \tau_g \\
(X, AD) &= 4k_o I_{2a} \tau_d \\
(A, XG) &= +k_o^2 I_{3a} \tau_g \\
(A, XD) &= +k_o^2 I_{3a} \tau_d \\
(A, AG) &= +k_o I_{1a} \tau_g \\
(A, AD) &= +k_o I_{1a} \tau_d
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(Y, YG) &= +k_0 I_{1a} \tau_g \\
(Y, YD) &= +k_0 I_{1a} \tau_d \\
(Y, BG) &= -4k_0 I_{2a} \tau_g \\
(Y, BD) &= -4k_0 I_{2a} \tau_d \\
(B, YG) &= +k_0^2 I_{3a} \tau_g \\
(B, YD) &= +k_0^2 I_{3a} \tau_d \\
(B, BG) &= -k_0 I_{1a} \tau_g \\
(B, BD) &= -k_0 I_{1a} \tau_d \\
(L, XX) &= \frac{1}{2} k_0^2 I_{3a} \\
(L, XA) &= k_0 I_{1a} \\
(L, AA) &= -2k_0 I_{2a} \\
(L, YY) &= \frac{1}{2} k_0^2 I_{3a} \\
(L, YB) &= -k_0 I_{1a} \\
(L, BB) &= 2k_0 I_{2a}
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= -\frac{1}{12} k_0 + k_0^2 \left(-\frac{1}{12} I_{1a} + \frac{1}{3} I_{1b} \right) \\
(X, XYY) &= -\frac{1}{4} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} - I_{1b} \right) \\
(X, XBB) &= k_0 I_{1a} \\
(X, XGG) &= -k_0 I_{1a} (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(X, XGD) &= -k_0 I_{1a} (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(X, XDD) &= -k_0 I_{1a} (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(X, AYB) &= -2k_0 I_{1a} \\
(A, XXX) &= -\frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \\
(A, XXA) &= \frac{1}{4} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\
(A, XYY) &= -k_0^2 I_{4a} \\
(A, XYB) &= -\frac{1}{2} k_0 + k_0^2 \left(\frac{1}{2} I_{1a} - 2I_{1b} \right) \\
(A, AYY) &= \frac{1}{4} k_0 - k_0^2 \left(-\frac{3}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\
(A, ABB) &= -k_0 I_{1a} \\
(A, AGG) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(A, AGD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(A, ADD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(Y, XXY) &= \frac{1}{4} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} - I_{1b} \right) \\
(Y, XAY) &= 2k_0 I_{1a} \\
(Y, AAY) &= -k_0 I_{1a} \\
(Y, YYY) &= \frac{1}{12} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{12} I_{1a} - \frac{1}{3} I_{1b} \right) \\
(Y, YGG) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(Y, YGD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(Y, YDD) &= k_0 I_{1a} (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(B, XXY) &= -k_0^2 I_{4a} \\
(B, XXB) &= -\frac{1}{4} k_0 + k_0^2 \left(\frac{3}{4} I_{1a} - I_{1b} \right) \\
(B, XAY) &= \frac{1}{2} k_0 + k_0^2 \left(\frac{1}{2} I_{1a} - 2I_{1b} \right) \\
(B, AAB) &= k_0 I_{1a} \\
(B, YYY) &= -\frac{1}{3} k_0^2 I_{4a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, YYB) &= -\frac{1}{4} k_0 - k_0^2 \left(\frac{1}{4} I_{1a} + I_{1b} \right) \\
(B, BGG) &= k_0 I_{1a} (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(B, BGD) &= k_0 I_{1a} (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
(B, BDD) &= k_0 I_{1a} (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(L, XAG) &= -k_0 I_{1a} (2\tau_g + v_g) \\
(L, XAD) &= -k_0 I_{1a} (2\tau_d + v_d) \\
(L, YBG) &= k_0 I_{1a} (2\tau_g + v_g) \\
(L, YBD) &= k_0 I_{1a} (2\tau_d + v_d)
\end{aligned}$$

4. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXXG) &= \frac{1}{12} k_0 \tau_g \\
(X, XXXD) &= \frac{1}{12} k_0 \tau_d \\
(X, XYYG) &= \frac{1}{4} k_0 \tau_g \\
(X, XYYD) &= \frac{1}{4} k_0 \tau_d \\
(A, XXXG) &= \frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \tau_g \\
(A, XXXD) &= \frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \tau_d \\
(A, XXAG) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_g \\
(A, XXAD) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_d \\
(A, XYYG) &= k_0^2 I_{4a} \tau_g \\
(A, XYYD) &= k_0^2 I_{4a} \tau_d \\
(A, XYBG) &= \frac{1}{2} k_0 \tau_g \\
(A, XYBD) &= \frac{1}{2} k_0 \tau_d \\
(A, AYYG) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_g \\
(A, AYYD) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_d \\
(Y, XXYG) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_g \\
(Y, XXYD) &= -\frac{1}{4} k_0 \tau_d \\
(Y, YYYG) &= -\frac{1}{12} k_0 \tau_g \\
(Y, YYYD) &= -\frac{1}{12} k_0 \tau_d \\
(B, XXYG) &= k_0^2 I_{4a} \tau_g \\
(B, XXYD) &= k_0^2 I_{4a} \tau_d \\
(B, XXBG) &= \frac{1}{4} k_0 \tau_g \\
(B, XXBD) &= \frac{1}{4} k_0 \tau_d \\
(B, XAYG) &= -\frac{1}{2} k_0 \tau_g \\
(B, XAYD) &= -\frac{1}{2} k_0 \tau_d \\
(B, YYYG) &= \frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \tau_g \\
(B, YYYD) &= \frac{1}{3} k_0^2 I_{4a} \tau_d \\
(B, YYBG) &= \frac{1}{4} k_0 \tau_g
\end{aligned}$$

5. Ordnung:

$$\begin{aligned}
 (B, YYBD) &= \frac{1}{4} k_o \tau_d \\
 (L, XXXX) &= \frac{1}{12} k_o^2 I_{4a} \\
 (L, XXXA) &= -\frac{1}{12} k_o \\
 (L, XXY) &= \frac{1}{2} k_o^2 I_{4a} \\
 (L, XXYB) &= \frac{1}{4} k_o \\
 (L, XAYY) &= -\frac{1}{4} k_o \\
 (L, YYYY) &= \frac{1}{12} k_o^2 I_{4a} \\
 (L, YYB) &= \frac{1}{12} k_o \\
 (X, XXXXX) &= k_o^2 \left(-\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_8 \right) \\
 (X, XXXAA) &= \frac{1}{32} k_o \\
 (X, XXXYY) &= k_o^2 \left(-\frac{13}{96} + \frac{31}{96} I_8 \right) \\
 (X, XXXBB) &= -\frac{11}{96} k_o \\
 (X, XXXGG) &= \frac{1}{12} k_o (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
 (X, XXXGD) &= \frac{1}{12} k_o (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
 (X, XXXDD) &= \frac{1}{12} k_o (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
 (X, XXAYB) &= \frac{5}{16} k_o \\
 (X, XAAYY) &= -\frac{3}{32} k_o \\
 (X, XYYYY) &= k_o^2 \left(-\frac{1}{48} + \frac{31}{192} I_8 \right) \\
 (X, XYYBB) &= -\frac{5}{32} k_o \\
 (X, XYYGG) &= \frac{1}{4} k_o (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
 (X, XYYGD) &= \frac{1}{4} k_o (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
 (X, XYYDD) &= \frac{1}{4} k_o (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
 (X, AYYYYB) &= \frac{11}{48} k_o \\
 (A, XXXXX) &= -\frac{7}{192} k_o^2 I_5 \\
 (A, XXXXA) &= k_o^2 \left(\frac{11}{96} + \frac{35}{192} I_8 \right) \\
 (A, XXXYY) &= -\frac{31}{96} k_o^2 I_5 \\
 (A, XXXYB) &= k_o^2 \left(\frac{1}{12} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
 (A, XXXAA) &= -\frac{1}{32} k_o \\
 (A, XXAYY) &= k_o^2 \left(\frac{9}{32} + \frac{31}{32} I_6 \right) \\
 (A, XXABB) &= \frac{11}{32} k_o \\
 (A, XXAGG) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (A, XXAGD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
 (A, XXADD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
 (A, XAAYB) &= -\frac{5}{16} k_o \\
 (A, XYYYY) &= -\frac{31}{192} k_o^2 I_5 \\
 (A, XYYYB) &= k_o^2 \left(\frac{13}{48} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
 (A, XYBBB) &= -\frac{1}{16} k_o \\
 (A, XYBGG) &= \frac{1}{2} k_o (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
 (A, XYBGD) &= \frac{1}{2} k_o (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
 (A, XYBDD) &= \frac{1}{2} k_o (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
 (A, AAAYY) &= \frac{1}{32} k_o \\
 (A, AYYYY) &= k_o^2 \left(\frac{1}{12} + \frac{31}{192} I_6 \right) \\
 (A, AYYBB) &= \frac{5}{32} k_o \\
 (A, AYYGG) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
 (A, AYYGD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
 (A, AYYDD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
 (Y, XXXXY) &= k_o^2 \left(-\frac{1}{48} + \frac{31}{192} I_8 \right) \\
 (Y, XXXAB) &= -\frac{11}{48} k_o \\
 (Y, XXAAY) &= \frac{5}{32} k_o \\
 (Y, XYYYY) &= k_o^2 \left(-\frac{13}{96} + \frac{31}{96} I_8 \right) \\
 (Y, XXYBB) &= \frac{3}{32} k_o \\
 (Y, XXYGG) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
 (Y, XXYGD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
 (Y, XXYDD) &= \frac{1}{4} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
 (Y, XAYYB) &= -\frac{5}{16} k_o \\
 (Y, AAYY) &= \frac{11}{96} k_o \\
 (Y, YYYYY) &= k_o^2 \left(-\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_8 \right) \\
 (Y, YYYBB) &= -\frac{1}{32} k_o \\
 (Y, YYYGG) &= \frac{1}{12} k_o (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
 (Y, YYYGD) &= \frac{1}{12} k_o (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
 (Y, YYYDD) &= \frac{1}{12} k_o (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
 (B, XXXXY) &= -\frac{31}{192} k_o^2 I_5 \\
 (B, XXXXB) &= k_o^2 \left(\frac{1}{12} + \frac{31}{192} I_6 \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XXXAY) &= k_0^2 \left(\frac{13}{48} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
(B, X X A A B) &= -\frac{5}{32} k_0 \\
(B, X X Y Y Y) &= -\frac{31}{96} k_0^2 I_5 \\
(B, X X Y Y B) &= k_0^2 \left(\frac{9}{32} + \frac{31}{32} I_6 \right) \\
(B, X X B B B) &= -\frac{1}{32} k_0 \\
(B, X X B G G) &= \frac{1}{4} k_0 (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(B, X X B G D) &= \frac{1}{4} k_0 (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(B, X X B D D) &= \frac{1}{4} k_0 (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(B, X A A A Y) &= \frac{1}{16} k_0 \\
(B, X A Y Y Y) &= k_0^2 \left(\frac{1}{12} + \frac{31}{48} I_6 \right) \\
(B, X A Y B B) &= \frac{5}{16} k_0 \\
(B, X A Y G G) &= \frac{1}{2} k_0 (-\tau_{gg} + \tau_g \tau_g) \\
(B, X A Y G D) &= \frac{1}{2} k_0 (-\tau_{gd} + 2\tau_g \tau_d) \\
(B, X A Y D D) &= \frac{1}{2} k_0 (-\tau_{dd} + \tau_d \tau_d) \\
(B, A A Y Y B) &= -\frac{11}{32} k_0 \\
(B, Y Y Y Y Y) &= -\frac{7}{192} k_0^2 I_5 \\
(B, Y Y Y Y B) &= k_0^2 \left(\frac{11}{96} + \frac{35}{192} I_6 \right) \\
(B, Y Y B B B) &= \frac{1}{32} k_0 \\
(B, Y Y B G G) &= \frac{1}{4} k_0 (\tau_{gg} - \tau_g \tau_g) \\
(B, Y Y B G D) &= \frac{1}{4} k_0 (\tau_{gd} - 2\tau_g \tau_d) \\
(B, Y Y B D D) &= \frac{1}{4} k_0 (\tau_{dd} - \tau_d \tau_d) \\
(L, X X X A G) &= \frac{1/12}{k_0} (2\tau_g + v_g) \\
(L, X X X A D) &= \frac{1/12}{k_0} (2\tau_d + v_d) \\
(L, X X Y B G) &= -\frac{1}{4} k_0 (2\tau_g + v_g) \\
(L, X X Y B D) &= -\frac{1}{4} k_0 (2\tau_d + v_d) \\
(L, X A Y Y G) &= \frac{1}{4} k_0 (2\tau_g + v_g) \\
(L, X A Y Y D) &= \frac{1}{4} k_0 (2\tau_d + v_d) \\
(L, Y Y Y B G) &= -\frac{1}{12} k_0 (2\tau_g + v_g) \\
(L, Y Y Y B D) &= -\frac{1}{12} k_0 (2\tau_d + v_d)
\end{aligned}$$

12.4 Streufeldmatrix des elektrostatischen Quadrupols

Im folgenden sind die nichtverschwindenden Matrixelemente der Eintritts- und Austrittstransfermatrix bis in fünfter Ordnung des elektrostatischen Quadrupols in der effektiven fünften Approximationsordnung aufgelistet. Die Größe $k_0 = q_0/\chi_e$ kennzeichnet die auf die elektrische Steifigkeit normierte Quadrupolfeldstärke im Hauptfeld des Quadrupols. Die Transfermatrix hängt von folgenden Grundintegralen ab:

$$\begin{aligned}
I_{1a} &= k_0^{-1} \iint k d^2 s - \frac{1}{2} s_b^2 \\
I_{1b} &= k_0^{-2} \iint k^2 d^2 s - \frac{1}{2} s_b^2 \\
I_{2a} &= k_0^{-1} \int s \int k d^2 s - \frac{1}{6} s_b^3 \\
I_{3a} &= k_0^{-2} \int \left(\int k ds \right)^2 ds - \frac{1}{6} s_b^3 \\
I_{4a} &= k_0^{-2} \int k^2 ds - s_b \\
I_5 &= k_0^{-2} \int k'^2 ds \\
I_6 &= k_0^{-2} \int k'^2 s ds \\
I_8 &= k_0^{-2} \iint k'^2 d^2 s - I_5 s_b \\
I_{11a} &= k_0^{-2} \left(\int \left(\int k ds \right) \left(\iint k d^2 s \right) ds - \frac{1}{2} I_{1a} s_b^2 - \frac{s_b^4}{8} \right) \\
I_{11b} &= k_0^{-2} \left(\int s \left(\int k ds \right)^2 ds - \frac{s_b^4}{4} \right)
\end{aligned}$$

Für die Eintrittstransfermatrix ergeben sich folgende Ausdrücke:
1. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, X) &= 1 - k I_{1a} + k^2 (I_{11a} + I_{11b}) \\
(X, A) &= -2k I_{2a} \\
(A, X) &= -k^2 I_{3a} \\
(A, A) &= 1 + k I_{1a} + k^2 (I_{11a} - I_{11b}) \\
(Y, Y) &= 1 + k I_{1a} + k^2 (I_{11a} + I_{11b}) \\
(Y, B) &= 2k I_{2a} \\
(B, Y) &= -k^2 I_{3a} \\
(B, B) &= 1 - k I_{1a} + k^2 (I_{11a} - I_{11b})
\end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$(X, XD) = +k I_{1a}$$

$$\begin{aligned}
(X, AG) &= hJ_{2a} \\
(X, AD) &= 3hI_{2a} \\
(A, XG) &= -\frac{1}{2}k^2 I_{3a} \\
(A, XD) &= \frac{3}{2}k^2 I_{3a} \\
(A, AD) &= -hI_{1a} \\
(Y, YD) &= -hI_{1a} \\
(Y, BG) &= -hJ_{2a} \\
(Y, BD) &= -3hI_{2a} \\
(B, YG) &= -\frac{1}{2}k^2 I_{3a} \\
(B, YD) &= \frac{3}{2}k^2 I_{3a} \\
(B, BD) &= hI_{1a}
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= \frac{1}{6}k - k^2\left(\frac{1}{2}I_{1a} + \frac{7}{6}I_{1b}\right) \\
(X, XYY) &= \frac{1}{2}k^2 I_{1b} \\
(X, XBB) &= -hI_{1a} \\
(X, XDD) &= -hI_{1a} \\
(X, AYB) &= 2hI_{1a} \\
(A, XXX) &= -\frac{7}{6}k^2 I_{4a} \\
(A, XXA) &= -\frac{1}{2}k + k^2\left(\frac{1}{2}I_{1a} + \frac{7}{2}I_{1b}\right) \\
(A, XYY) &= \frac{1}{2}k^2 I_{4a} \\
(A, XYB) &= -h^2 I_{1b} \\
(A, AYY) &= -\frac{1}{2}k^2 I_{1b} \\
(A, ABB) &= hI_{1a} \\
(A, ADD) &= hI_{1a} \\
(Y, XXY) &= \frac{1}{2}k^2 I_{1b} \\
(Y, XAB) &= -2hI_{1a} \\
(Y, AAY) &= hI_{1a} \\
(Y, YYY) &= -\frac{1}{6}k - k^2\left(\frac{1}{2}I_{1a} + \frac{7}{6}I_{1b}\right) \\
(Y, YDD) &= hI_{1a} \\
(B, XXY) &= \frac{1}{2}k^2 I_{4a} \\
(B, XXB) &= -\frac{1}{2}k^2 I_{1b} \\
(B, XAY) &= -h^2 I_{1b} \\
(B, AAB) &= -hI_{1a} \\
(B, YYY) &= -\frac{7}{6}k^2 I_{4a} \\
(B, YYB) &= \frac{1}{2}k + k^2\left(\frac{1}{2}I_{1a} + \frac{7}{2}I_{1b}\right) \\
(B, BDD) &= -hI_{1a}
\end{aligned}$$

4. Ordnung:

$$(X, XXXD) = -\frac{1}{6}k$$

$$\begin{aligned}
(A, XXXG) &= -\frac{7}{12}k^2 I_{4a} \\
(A, XXXD) &= \frac{7}{4}k^2 I_{4a} \\
(A, XYYG) &= \frac{1}{4}k^2 I_{4a} \\
(A, XYYD) &= -\frac{3}{4}k^2 I_{4a} \\
(A, XXAD) &= \frac{1}{2}k \\
(Y, YYYD) &= \frac{1}{6}k \\
(B, XXYG) &= \frac{1}{4}k^2 I_{4a} \\
(B, XXYD) &= -\frac{3}{4}k^2 I_{4a} \\
(B, YYYG) &= -\frac{7}{12}k^2 I_{4a} \\
(B, YYYD) &= \frac{7}{4}k^2 I_{4a} \\
(B, YYBD) &= -\frac{1}{2}k
\end{aligned}$$

5. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXXXX) &= k^2\left(\frac{3}{16} - \frac{49}{192}I_8\right) \\
(X, XXXAA) &= \frac{1}{32}k \\
(X, XXXYY) &= k^2\left(-\frac{7}{96} + \frac{7}{96}I_8\right) \\
(X, XXXBB) &= \frac{13}{96}k \\
(X, XXXDD) &= \frac{1}{6}k \\
(X, XXAYB) &= -\frac{3}{16}k \\
(X, XAAYY) &= -\frac{3}{32}k \\
(X, XYYYY) &= k^2\left(\frac{1}{96} + \frac{7}{192}I_8\right) \\
(X, XYYBB) &= \frac{3}{32}k \\
(X, AYYYY) &= -\frac{13}{48}k \\
(A, XXXXX) &= -\frac{49}{192}k^2 I_5 \\
(A, XXXXA) &= k^2\left(-\frac{33}{48} - \frac{245}{192}I_6\right) \\
(A, XXXYY) &= \frac{7}{96}k^2 I_5 \\
(A, XXXYB) &= k^2\left(-\frac{1}{24} + \frac{7}{48}I_6\right) \\
(A, XXAAA) &= -\frac{1}{32}k \\
(A, XXAAY) &= k^2\left(\frac{7}{32} + \frac{7}{32}I_6\right) \\
(A, XXABB) &= -\frac{13}{32}k \\
(A, XXADD) &= -\frac{1}{2}k \\
(A, XAAYB) &= \frac{3}{16}k \\
(X, XYYYY) &= \frac{7}{192}k^2 I_5
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XYYYY) &= k^2 \left(\frac{7}{48} + \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(A, XYBBB) &= -\frac{1}{16} k \\
(A, AAAAY) &= \frac{1}{32} k \\
(A, AYYYY) &= k^2 \left(-\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_6 \right) \\
(A, AYYBB) &= -\frac{3}{32} k \\
(Y, XXXXY) &= k^2 \left(\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_6 \right) \\
(Y, XXXAB) &= \frac{13}{48} k \\
(Y, XXAAY) &= -\frac{3}{32} k \\
(Y, XXYYY) &= k^2 \left(-\frac{7}{96} + \frac{7}{96} I_6 \right) \\
(Y, XXYBB) &= \frac{3}{32} k \\
(Y, XAYYB) &= \frac{3}{16} k \\
(Y, AAYYY) &= -\frac{13}{96} k \\
(Y, YYYYY) &= k^2 \left(\frac{3}{16} - \frac{49}{192} I_6 \right) \\
(Y, YYYBB) &= -\frac{1}{32} k \\
(Y, YYYDD) &= -\frac{1}{6} k \\
(B, XXXXY) &= \frac{7}{192} k^2 I_5 \\
(B, XXXXB) &= k^2 \left(-\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_6 \right) \\
(B, XXXAY) &= k^2 \left(\frac{7}{48} + \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(B, XXAAB) &= \frac{3}{32} k \\
(B, XXYYY) &= \frac{7}{96} k^2 I_5 \\
(B, XXYBB) &= k^2 \left(\frac{7}{32} + \frac{7}{32} I_6 \right) \\
(B, XXBBB) &= -\frac{1}{32} k \\
(B, XAAAY) &= \frac{1}{16} k \\
(B, XAYYY) &= k^2 \left(-\frac{1}{24} + \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(B, XAYBB) &= -\frac{3}{16} k \\
(B, AAYYB) &= \frac{13}{32} k \\
(B, YYYYY) &= -\frac{49}{192} k^2 I_5 \\
(B, YYYBB) &= k^2 \left(-\frac{33}{48} - \frac{245}{192} I_6 \right) \\
(B, YYBBB) &= \frac{1}{32} k \\
(B, YYBDD) &= \frac{1}{2} k
\end{aligned}$$

Die Austrittstrefeldmatrix lautet:

1. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, X) &= 1 + kI_{1a} + k^2(I_{11a} - I_{11b}) \\
(X, A) &= -2kI_{2a} \\
(A, X) &= -k^2I_{3a} \\
(A, A) &= 1 - kI_{1a} + k^2(I_{11a} + I_{11b}) \\
(Y, Y) &= 1 - kI_{1a} + k^2(I_{11a} - I_{11b}) \\
(Y, B) &= +2kI_{2a} \\
(B, Y) &= -k^2I_{3a} \\
(B, B) &= 1 + kI_{1a} + k^2(I_{11a} + I_{11b})
\end{aligned}$$

2. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XD) &= -kI_{1a} \\
(X, AG) &= kI_{2a} \\
(X, AD) &= 3kI_{2a} \\
(A, XG) &= -\frac{1}{2}k^2I_{3a} \\
(A, XD) &= \frac{3}{2}k^2I_{3a} \\
(A, AD) &= kI_{1a} \\
(Y, YD) &= kI_{1a} \\
(Y, BG) &= -kI_{2a} \\
(B, BD) &= -3kI_{2a} \\
(B, YG) &= -\frac{1}{2}k^2I_{3a} \\
(B, YD) &= \frac{3}{2}k^2I_{3a} \\
(B, BD) &= -kI_{1a}
\end{aligned}$$

3. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXX) &= -\frac{1}{6}k + k^2 \left(-\frac{1}{6}I_{1a} + \frac{7}{6}I_{1b} \right) \\
(X, XYY) &= -\frac{1}{2}k^2(I_{1b}) \\
(X, XBB) &= kI_{1a} \\
(X, XDD) &= kI_{1a} \\
(X, AYB) &= -2kI_{1a} \\
(A, XXX) &= -\frac{7}{6}k^2I_{4a} \\
(A, XXA) &= +\frac{1}{2}k - k^2 \left(\frac{1}{2}I_{1a} + \frac{7}{2}I_{1b} \right) \\
(A, XYY) &= \frac{1}{2}k^2I_{4a} \\
(A, XYB) &= k^2I_{1b} \\
(A, AYY) &= \frac{1}{2}k^2I_{1b} \\
(A, ABB) &= -kI_{1a} \\
(A, ADD) &= -kI_{1a} \\
(Y, XYY) &= -\frac{1}{2}k^2I_{1b} \\
(Y, XAB) &= 2kI_{1a} \\
(Y, AAY) &= -kI_{1a} \\
(Y, YYY) &= \frac{1}{6}k + k^2 \left(\frac{1}{2}I_{1a} + \frac{7}{6}I_{1b} \right) \\
(Y, YDD) &= -kI_{1a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XXY) &= \frac{1}{2} k^2 I_{4a} \\
(B, XXB) &= \frac{1}{2} k^2 I_{1b} \\
(B, XAY) &= k^2 I_{1b} \\
(B, AAB) &= k I_{1a} \\
(B, YYY) &= -\frac{7}{6} k^2 I_{4a} \\
(B, YYB) &= -\frac{1}{2} k - k^2 \left(\frac{1}{2} I_{1a} + \frac{7}{2} I_{1b} \right) \\
(B, BDD) &= k I_{1a}
\end{aligned}$$

4. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXXD) &= \frac{1}{6} k \\
(A, XXXG) &= -\frac{7}{12} k^2 I_{4a} \\
(A, XXXD) &= \frac{7}{4} k^2 I_{4a} \\
(A, XYYG) &= \frac{1}{4} k^2 I_{4a} \\
(A, XYYD) &= -\frac{3}{4} k^2 I_{4a} \\
(A, XXAD) &= -\frac{1}{2} k \\
(Y, YYYD) &= -\frac{1}{6} k \\
(B, XXYG) &= \frac{1}{4} k^2 I_{4a} \\
(B, XXYD) &= -\frac{3}{4} k^2 I_{4a} \\
(B, YYYG) &= -\frac{7}{12} k^2 I_{4a} \\
(B, YYYD) &= \frac{7}{4} k^2 I_{4a} \\
(B, YYBD) &= \frac{1}{2} k
\end{aligned}$$

5. Ordnung:

$$\begin{aligned}
(X, XXXXX) &= -k^2 \left(\frac{5}{48} - \frac{49}{192} I_8 \right) \\
(X, XXXAA) &= -\frac{1}{32} k \\
(X, XXXYY) &= k^2 \left(\frac{7}{96} - \frac{7}{96} I_8 \right) \\
(X, XXXBB) &= -\frac{13}{96} k \\
(X, XXXDD) &= -\frac{1}{6} k \\
(X, XXAYB) &= \frac{3}{16} k \\
(X, XAAYY) &= \frac{3}{32} k \\
(X, XYYYY) &= -k^2 \left(\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_8 \right) \\
(X, XYYBB) &= -\frac{3}{32} k \\
(X, AYYYB) &= \frac{13}{48} k \\
(A, XXXXX) &= -\frac{49}{192} k^2 I_5
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(A, XXXXA) &= k^2 \left(\frac{37}{48} + \frac{245}{192} I_6 \right) \\
(A, XXXYY) &= \frac{7}{96} k^2 I_5 \\
(A, XXXYB) &= k^2 \left(\frac{1}{24} - \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(A, XXAAA) &= \frac{1}{32} k \\
(A, XXAYY) &= -k^2 \left(\frac{7}{32} + \frac{7}{32} I_6 \right) \\
(A, XXABB) &= \frac{13}{32} k \\
(A, XXADD) &= \frac{1}{2} k \\
(A, XAAYB) &= -\frac{3}{16} k \\
(A, XYYYY) &= \frac{7}{192} k^2 I_5 \\
(A, XYYYB) &= -k^2 \left(\frac{7}{48} + \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(A, XYBBB) &= \frac{1}{16} k \\
(A, AAAAY) &= -\frac{1}{32} k \\
(A, AYYYY) &= k^2 \left(\frac{1}{96} - \frac{7}{192} I_6 \right) \\
(A, AYYBB) &= \frac{3}{32} k \\
(Y, XXXXY) &= -k^2 \left(\frac{1}{96} + \frac{7}{192} I_8 \right) \\
(Y, XXXAB) &= -\frac{13}{48} k \\
(Y, XxAAY) &= \frac{3}{32} k \\
(Y, XXYYY) &= k^2 \left(\frac{7}{96} - \frac{7}{96} I_8 \right) \\
(Y, XXYBB) &= -\frac{3}{32} k \\
(Y, XAYYB) &= -\frac{3}{16} k \\
(Y, AAYYY) &= \frac{13}{96} k \\
(Y, YYYYY) &= k^2 \left(-\frac{5}{48} + \frac{49}{192} I_8 \right) \\
(Y, YYYBB) &= \frac{1}{32} k \\
(Y, YYYDD) &= \frac{1}{6} k \\
(B, XXXXY) &= \frac{7}{192} k^2 I_5 \\
(B, XXXXB) &= k^2 \left(\frac{1}{96} - \frac{7}{192} I_6 \right) \\
(B, XXXAY) &= -k^2 \left(\frac{7}{48} + \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(B, XxAAB) &= -\frac{3}{32} k \\
(B, XXYYY) &= \frac{7}{96} k^2 I_5 \\
(B, XYYYB) &= -k^2 \left(\frac{7}{32} + \frac{7}{32} I_6 \right) \\
(B, XXBBB) &= \frac{1}{32} k \\
(B, XAAAA) &= -\frac{1}{16} k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(B, XAYYY) &= k^2 \left(\frac{1}{24} - \frac{7}{48} I_6 \right) \\
(B, XAYBB) &= \frac{3}{16} k \\
(B, AAYYB) &= -\frac{13}{32} k \\
(B, YYYYY) &= -\frac{49}{192} k^2 I_5 \\
(B, YYYYY) &= k^2 \left(\frac{37}{48} + \frac{245}{192} I_6 \right) \\
(B, YYBBB) &= -\frac{1}{32} k \\
(B, YYBDD) &= -\frac{1}{2} k
\end{aligned}$$

13 Danksagung

Mein Dank gilt allen, die mir bei der Durchführung dieser Arbeit geholfen haben. Insbesondere möchte ich danken:

- Herrn Prof. Dr. Hermann Wollnik für die Übertragung dieser Arbeit und die zahlreichen Anregungen, die zu ihrem Gelingen beitrugen.
- Herrn Prof. Dr. Martin Berz, der durch die vielen Gespräche und Diskussionen bei der Anwendung der DA-Methode eine große Unterstützung war.
- Den Herren Mario Nappi und Dipl. Phys. Hartmut Irnich für die zahlreichen Kontrollrechnungen während der Durchführung dieser Arbeit.
- Den Herren Dipl. Phys. Jens Trötscher und Dipl. Phys. Carsten Weil für die Unterstützung beim Erstellen der Zeichnungen und Grafiken.
- Den Betreuern der Fachbereichsrechner der physikalischen Institute für die sehr großzügige Gewährung von Rechenzeit und Speicherkontingenten.
- Frau Iris Schleicher und Herrn Bernhard Pfreundtner für das kritische Durchlesen dieser Arbeit.

Literaturverzeichnis

- [1] H. Wollnik. *Charged Particle Optics*. Academic Press, Orlando, Florida, 1987.
- [2] M. Berz and H. Wollnik. Analytical solution of the equations of motion to high orders: the formula manipulator HAMILTON and the fifth order code COSY. *AIP Conference Proceedings*, 177:301, 1988.
- [3] H. Wollnik, J. Brezina, M. Berz, and W. Wendel. GIOS-BEAMTRACE, a program for the design of high resolution mass spectrometers. In *GSI-Rep. THD-26*, page 679, 1984.
- [4] H. Wollnik, B. Hartmann, and M. Berz. Principles of GIOS and COSY. *AIP Conference Proceedings*, 177:74, 1988.
- [5] M. Berz, H. C. Hofmann, and H. Wollnik. COSY 5.0, the fifth order code for corpuscular optical systems. *Nuclear Instruments and Methods*, A258:402, 1987.
- [6] K. L. Brown. *The Ion Optical Program TRANSPORT*. Technical Report 91, SLAC, 1979.
- [7] S. Kowalski and H. Enge. *RAYTRACE*. Technical Report, MIT, Cambridge, Massachusetts, 1985.
- [8] B. Hartmann, M. Berz, and H. Wollnik. The computation of aberrations of fringing fields of magnetic multipoles and sector fields using Differential Algebra. *Nuclear Instruments and Methods*, 297:343, 1990.
- [9] H. Wollnik. Image aberrations of second order for magnetic and electrostatic sector fields including all fringing field effects. *Nuclear Instruments and Methods*, 38:56, 1965.
- [10] H. Wollnik. The correction of image aberrations of second order for mass or energy separators consisting of one single magnetic sector field. *Nuclear Instruments and Methods*, 53:197, 1967.
- [11] H. Enge. Effect of extended fringing fields on ion-focusing properties of deflecting magnets. *The Review of Scientific Instruments*, 35:278, 1964.
- [12] H. Matsuda and H. Wollnik. Third order transfer matrices of the fringing field of an inhomogeneous magnet. *Nuclear Instruments and Methods*, 77:283, 1970.
- [13] T. Sakurai, T. Matsuo, and H. Matsuda. The vertical component of an ion trajectory in a homogeneous magnet to a third-order approximation. *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Physics*, 91:51, 1989.
- [14] L. Sagalovsky. Beam transport optics of dipole fringe field in the framework of third-order matrix theory. *Nuclear Instruments and Methods*, 298:205, 1990.
- [15] H. Wollnik. Second order transfer matrices of real magnetic and electrostatic sector fields. *Nuclear Instruments and Methods*, 52:250, 1967.
- [16] H. Matsuda. The influence of a toroidal electric fringing field on the trajectories of charged particles in a third order approximation. *Nuclear Instruments and Methods*, 91:637, 1971.
- [17] H. Matsuda and H. Wollnik. Third order transfer matrices for the fringing field of magnetic and electrostatic quadrupole lenses. *Nuclear Instruments and Methods*, 103:117, 1972.
- [18] B. Franzke. The heavy ion storage and cooler ring project ESR at GSI. *Nuclear Instruments and Methods*, B24/25:18, 1987.
- [19] J. Trötscher et al. Isochronous, multi-turn mass measurement of exotic nuclei using the ESR. *Proc. 2nd Int. Conf. on Radioactive Nuclear Beams, 1991*, ed. Th. Delbar (IOP Publ., Bristol), 401, 1992.
- [20] K. L. Brown, R. Belbeoch, and P. Bounin. First- and second- order magnetic optics matrix equations for the midplane of uniform- field wedge magnets. *Reviews of Scientific Instruments*, 35:481, 1964.
- [21] M. Berz and H. Wollnik. The program HAMILTON for the analytic solution of the equations of motion in particle optical systems through fifth order. *Nuclear Instruments and Methods*, A258:364, 1987.
- [22] M. Berz. *Verallgemeinerung der nichtlinearen Teilchenoptik auf Bildfehler bis fünfter Ordnung*. PhD thesis, Justus Liebig Universität Gießen, W-6300 Gießen, Germany, 1986.
- [23] H. Wollnik, J. Brezina, and M. Berz. GIOS-BEAMTRACE, a computer code for the design of ion optical systems including linear or nonlinear space charge. *Nuclear Instruments and Methods*, A258:408, 1987.

- [24] T. Matsuo, H. Matsuda, Y. Fujita, and H. Wollnik. Computer program TRIO for third order calculations of ion trajectories. *International Journal of Mass Spectrometry*, 24, 1976.
- [25] M. Berz. *Numerische Behandlung von allgemeinen teilchenoptischen Systemen mit nichtlinearer Raumladung*. Master's thesis, Justus Liebig Universität Gießen, W-6300 Gießen, Germany, 1983.
- [26] A. J. Dragt. Lectures on nonlinear orbit dynamics. In *1981 Fermilab Summer School*, AIP Conference Proceedings Vol. 87, 1982.
- [27] H. Wollnik and M. Berz. Relations between the elements of transfer matrices due to the condition of symplecticity. *Nuclear Instruments and Methods*, 238:127, 1985.
- [28] L. C. Teng. *Expanded form of magnetic field with midplane symmetry*. Technical Report ANL-LCT-28, ANL, 1962.
- [29] D. Smith. Fokussing properties of electric and magnetic quadrupole lenses. *Nuclear Instruments and Methods*, 79:144, 1970.
- [30] E. Lee Whiting. Third-order aberrations of a magnetic quadrupole lens. *Nuclear Instruments and Methods*, 83:232, 1970.
- [31] M. Cotte. Recherches sur l'optique électronique. *Ann. Phys. (Paris)*, 10:333, 1938.
- [32] S. Penner. Calculations of properties of magnetic deflection systems. *The review of scientific instruments*, 32:150, 1961.
- [33] M. Herzberger. *Modern Geometrical Optics*. Wiley (Interscience), New York, 1958.
- [34] K. Halbach. Matrix representation of gaussian optics. *Am. J. Physics*, 32:90, 1964.
- [35] M. Berz. The description of particle accelerators using high order perturbation theory on maps. In *1987 Physics of Particle Accelerators*, page 961, AIP Conference Proceedings, 1989.
- [36] S. Kowalski and H. Enge. The ionoptical program RAYTRACE. *Nuclear Instruments and Methods*, A258:407, 1987.

- [37] H. Wollnik and H. Ewald. The influence of magnetic and electric fringing fields on the trajectories of charged particles. *Nuclear Instruments and Methods*, 36:93, 1965.
- [38] B. Hartmann, H. Irnich, and H. Wollnik. Analytical determination of 5th-order transfer matrices of magnetic quadrupole fringing fields. In *1992 Nonlinear Problems in Accelerator Physics, in print*, AIP Conference Proceedings, 1992.
- [39] I. Niven. Formal power series. *American Mathematical Monthly*, 76-8:871, 1969.
- [40] M. Berz. The method of power series tracking for the mathematical description of beam dynamics. *Nuclear Instruments and Methods*, A258:431, 1987.
- [41] M. Berz. Differential Algebraic treatment of beam dynamics to very high orders including applications to spacecharge. *AIP Conference Proceedings*, 177:275, 1988.
- [42] M. Berz. Differential Algebraic description of beam dynamics to very high orders. *Particle Accelerators*, 24:109, 1989.
- [43] R. Ludwig. Die Ionenbahnen dritter Näherung in magnetischen Sektorfeldern einschließlich ihrer Streufelder. *Zeitschrift für Naturforschung*, 22a:553, 1967.
- [44] H. Matsuda and H. Wollnik. The influence of an inhomogeneous magnetic fringing field on the trajectories of charged particles in a third order approximation. *Nuclear Instruments and Methods*, 77:40, 1970.
- [45] K.L. Brown and J. E. Spencer. Non-linear optics for the final focus of the single-pass-collider. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, NS-28,3:2568, 1981.
- [46] H. Wollnik, T. Matsuo, and H. Matsuda. The electric potential in a toroidal condenser. *Nuclear Instruments and Methods*, 102:13, 1972.
- [47] G. R. Moloney, D. N. Jamieson, and G. J. F. Legge. Measurement, analysis and modification of the fifth-order fringe field components of magnetic quadrupole lenses. *Nuclear Instruments and Methods*, B54:24, 1991.
- [48] M. Berz. Computational aspects of design and simulation: COSY INFINITY. *Nuclear Instruments and Methods*, A298:426, 1990.
- [49] H. Wollnik. Nonlinear optical effects induced in ion beams during transport. *Nuclear Instruments and Methods*, B56/57:1096, 1991.

- [50] H. Wollnik. Laterally and longitudinally dispersive recoil mass separators. *Nuclear Instruments and Methods*, B26:267, 1987.
- [51] J. M. Wouters et al. Optical design of the TOFI(time-of-flight isochronous) spectrometer for mass measurements of exotic nuclei. *Nuclear Instruments and Methods*, A240:77, 1985.
- [52] H. Wollnik, J. M. Wouters, and D. J. Viera. TOFI: an isochronous Time-of-Flight mass spectrometer. *Nuclear Instruments and Methods*, A258:331, 1987.
- [53] H. Ewald and H. Hintenberger. *Methoden und Anwendungen der Massenspektroskopie*. Verlag Chemie, Weinheim, 1953.
- [54] H. Wollnik, T. Schwab, and M. Berz. *First ion optic calculations to operate the planned ESR as a time of flight mass spectrometer*. Scientific Report 1985, GSI 86-1, GSI Darmstadt, 1986.
- [55] K. Lindemann. *Der ESR als Flugzeitmassenspektrometer*. Master's thesis, Justus Liebig Universität Gießen, W-6300 Gießen, Germany, 1990.
- [56] H.C. Hofmann. *Design komplexer ionenoptischer Systeme mit Hilfe eines modellunabhängigen Optimierungsverfahrens*. Master's thesis, Justus Liebig Universität Gießen, W-6300 Gießen, Germany, 1988.
- [57] J. Trötscher et al. Mass measurements of exotic nuclei at the ESR. *Nuclear Instruments and Methods*, B70:455, 1992.
- [58] K.L. Brown. A second-order magnetic optical achromat. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, NS-26:3490, 1979.