高等学校工科电子类规划教材

高等电子光学

唐天同 编著

北京理工大学出版社

高等电子光学

唐天同 编著

北京理工大学出版社

内 容 简 介

本书从统一的角度论述了应用于电子束器件、电子显微学、质谱学、微分析与表面分析、微电子工艺技术，加速器与核科学技术及电子束工艺技术等方面的现代电子光学(带电粒子光学)的共有的理论基础、分析方法与主要的最新进展。本书包括电子运动的质点动力学基础，电场与磁场研究，旋转对称系统，直轴多极场系统，电子束流的传输，束电流密度分布的演化，波动电子光学基础，扫描偏转系统，曲光轴系统与偏转分析器，自旋极化电子光学初步，飞行时间分析器与运动稳定性分析器等内容。

本书适用于物理电子学与光电子学、电子物理与离子束物理、真空物理、加速器与实验核物理技术、光电成象技术等专业的硕士与博士生使用，也可供上述领域与专业的科研人员、工程师、教师与高年级本科生参考。

图书在版编目(CIP)数据

高等电子光学/唐天同编著. —北京:北京理工大学出版社,1996
ISBN 7-81045-091-3

Ⅰ. 高… Ⅱ. 唐… Ⅲ. 电子光学—高等学校—教材 Ⅳ. 0463

中国版本图书馆 CIP 数据核字(95)第 22899 号

北京理工大学出版社出版发行
(北京市海淀区白石桥路 7 号)
(邮政编码 100081)
各地新华书店经售
北京地质印刷厂印刷
*
787×1092 毫米 16 开本 18.5 印张 446 千字
1996 年 3 月第一版 1996 年 3 月第一次印刷
印数:1—3000 册 定价:21.00 元

前　言

电子光学，或称带电粒子光学，是研究自由电子及其它带电粒子的运动，特别是电子和离子束的聚焦、成象、偏转与色散的学科。电子光学在电子显微学、电子束器件、质谱学与能谱学、加速器与实验粒子物理、微电子工艺技术与电子束工艺学等技术领域具有广泛的应用。因此，上述各领域各有侧重地研究了电子离子运动及电子离子束的性质。本书的目的在于对上述不同领域的电子光学做统一的描述，以适应各领域电子光学研究互相渗透、互相促进的现状，并尽可能反映近20年来电子光学发展的新内容和研究动向。

按照主要的物理特征，本书首先论述了质点动力学原理以及用于研究与计算电子光学中的场的电磁学基础；其次，介绍了几何电子光学的基本理论，即关于聚焦成象与偏转及其象差的理论。作为从单粒子电子光学向系综处理的发展，本书接着介绍了相空间动力学、束流传输与电流密度分布演化的理论与方法。本书的第三部分处理了波动电子光学这一发展很快而一般著作很少涉及的领域。第四部分系统介绍了曲光轴系统及有关的束传输与分析器的电子光学，其中包括了交叉场分析器、自旋极化电子光学与飞行时间分析器等新内容。全书统一地用多极场分析方法处理。因此，本书已包括了电子光学大多数重要领域里现阶段已成熟的基本原理，希望能有助于读者建立有关电子光学理论的较完整的概念，尤其有助于有关专业研究生掌握电子光学的基础理论知识与发展动向。

清华大学应根裕教授在百忙中审阅了本书的全稿，并提出了许多宝贵的意见和建议。作者谨向应教授及对本书支持与指导的机电部《物理电子学与光电子学》教材编审委员会表示衷心谢意。作者还对北京理工大学出版社有关同志对本书出版的热情帮助致谢。

由于作者水平有限，书中论述不妥之处在所难免，欢迎专家和读者们批评指正。

作　者

一九九四年六月于西安交通大学

目　录

附录

绪　论

电子光学(带电粒子光学)是电子物理学的一个重要组成部分。电子光学的研究对象包括自由电子和其它带电粒子的运动,电子束与其它带电粒子束的形成、传输与其它有关的现象,束的性质,以及应用电子束与其它带电粒子束的各种器件、仪器装置与技术的原理。

由于电子与离子束的优越的可控制性能,也由于电子和离子等带电粒子的产生,这些粒子与固体(表面)及与电磁场相互作用的大量的物理—化学过程的极其多样与丰富的特点,电子光学在多种现代技术中得到了广泛的应用,是对现代科学技术发展起着重大作用的技术物理学科之一。

电子光学的一个重要的应用领域是电子显微镜家族。象光线等电磁辐射一样,电子束也能聚焦与成象。由于受电子的波动性质限制的衍射爱里斑比光线的斑直径小得多,因此电子显微镜比光学显微镜分辨本领高得多,是现代科学技术微观研究的主要手段之一。用透射电子显微镜(TEM)、扫描透射电子显微镜(STEM)与场离子显微镜(FIM)已可观察到单个原子。除此之外,扫描电子显微镜(SEM)与发射电子显微镜(EEM)是表面研究的重要工具。扫描离子显微镜(SIM)、扫描电子声学显微镜等新型研究手段也正在大力研究和开发中。

与电子显微学密切联系的是各种微分析技术。利用各种电子、离子与核粒子的能量与质量分析器构成的质谱仪、能谱仪与核谱仪是对化学元素进行微量分析、痕量分析与微区分析的强有力的手段。将电子显微镜与微分析技术结合形成的分析电子显微分析技术,为现代科学技术提供了微观观测的同时进行电子衍射结构分析、电子激发特征 X 射线分析(即电子探针微分析)及电子能量损失谱分析技术,用以微区微量地提供化学元素与其它物理化学信息。近 20 年来,现代科学技术对表面与界面研究的要求,推动了大量的用电子光学原理研制的表面分析仪器及技术的出现。这些仪器大多是利用电子、离子与光子束与固体表面的作用,来分析相互作用后产生的次级带电粒子的能量、质量与空间分布。其中,已取得广泛应用并为人们熟知的有二次离子谱仪(SIMS)、低能电子衍射仪(LEED)、俄歇电子谱仪(AES)与光电子谱仪(XPS—X 射线光电子谱仪,UPS—紫外线光电子谱仪)等。这些仪器与技术大大推动了表面科学与其它现代技术的发展,同时也丰富与发展了电子光学,特别是关于曲轴电子光学与分析器的研究。

电子光学的发展一直与电子束器件的发展密切联系相关。电子束管中的显象管、计算机与雷达的显示管、研究快速电信号的示波管以及用于夜视与微光技术的象管,都是与现代技术密切联系的电子光学器件。电子束摄象管推动了整个电视技术发展,在现代仍有相当重要的地位。彩色显象管与高分辨电视(HDTV)显象管更是应用非常广泛,产值很大的高技术电子器件。这些电子束器件的进一步发展也相当程度地对电子光学提出了新的要求,促进了后者的研究。除用作信息转换的电子束器件外,以能量转换为主的电子器件,如行波管、速调管等也有大量的电子光学问题。强流电子光学的发展便是在这些微波管发展的推动下建立的。真空电子器件的最新与最有前途的研究方向之一——真空微电子器件,其研究与发展也与电子光学密切相关。

电子光学的另一重要应用方面是微电子工艺技术。离子注入可大大地提高半导体集成电路的质量，与此有关的离子束的形成、离子的纯化，离子束的聚焦和传输等新问题，也推动了带电粒子光学的有关研究。当集成电路线度缩小到微米与亚微米级时，用电子束曝光制造掩膜以至直接制造电路的技术，以及利用电子束检查芯片与掩膜板的几何尺寸、利用电子束动态地监视电路工作，诊断其故障，都是超大规模与超高频集成电路进一步发展的关键技术。对半导体材料与器件的电子显微与微分析技术，也都与电子光学原理进一步的研究密切相关。

带电粒子光学的发展长期与核科学与高能物理实验研究相联系。各种带电粒子的加速器、储存环、同位素电磁分离技术，以及各种核谱仪都是带电粒子光学的典型应用。近来特别引人注目的自由电子激光、同步辐射 X 光源与电子束引爆可控核聚变等重要新兴高技术都对电子光学发展起了新的推进作用。

利用电子束能量工作的电子束工艺学是一个十分广泛的技术领域，包括电子束焊接、金属熔炼，利用电子束与离子束进行铣削与打孔等微细加工、利用电子束产生 X 射线，利用离子束与电子束辐照使材料改性、电子束除尘等处理以及离子束流喷射推进技术等等。作为新兴技术的一大支，其应用潜力将不断地得到发展。

以上关于电子光学应用领域的简述，说明了电子光学理论与技术应用的互相推动与密切联系，也说明了电子与其它带电粒子束作用的多样性。作为研究自由电子的学科，电子光学要面对与处理以下自由电子的问题：

(1)电子作为经典粒子的运动规律；

(2)电子间经典的，长程(宏观)的统计相互作用；

(3)带电粒子间，以及带电粒子与固体间的短程(微观的)相互作用，即散射与碰撞；

(4)自由电子的波动性质；

(5)自由电子与辐射场的相互作用。

第一个问题，即电子作为经典的带电粒子，在(外)电磁场中，受到电场力与磁场力(洛仑兹力)作用而运动。由于没有考虑电子间的相互作用，这一运动遵从质点动力学原理。对于绝大多数电子光学器件与仪器装置的大多数问题，这种处理已可解决主要问题。这就是几何电子光学的研究范围。当然，在加速电位很高时，要考虑相对论。几何电子光学是本书的主体。在第一章介绍了质点动力学的理论基础，包括了相对论力学，便于处理曲线坐标系问题的拉格朗日力学与便于处理粒子系踪的哈密顿力学的简要介绍，并经由变分原理介绍了力学问题的光学方法。电子光学问题都离不开电场与磁场的分析计算。第二章结合电子光学研究的要求，介绍了场的微分方程、积分方程、变分原理与场的展开——延拓，介绍时围绕最常用的旋转对称场与直轴多极场进行。

大多数电子光学应用是基于电子束的聚焦成象，偏转(偏转可形成扫描象)与色散(用做分析器)，故本书在第三章与第四章介绍旋转对称系统与直轴多极场的成象光学；在第八章介绍扫描偏转系统，而在第九章介绍曲轴的色散成象光学系统。每一种系统都包括主要聚焦、成象、偏转、色散性质与上述性质的误差(象差)两大部分。在最后一章中简要介绍关于有磁矩的(自旋或极化)带电粒子的光学问题，飞行时间电子光学问题与运动稳定性问题。这些问题都是近年来备受理论研究者重视，并有待进一步研究的较新的课题。

第二个问题包含两个方面。第一是大量电子的随机热运动导致的电子束的宏观性质。第二是电子之间的相互作用；在加速电压较低时主要是库仑相互作用，即空间电荷问题。本书第

五章与第六章里，将电子束视为大量电子的统计系综。这样，电子束的性状便与单个粒子轨迹所描述的不同，其差异用位形空间的发射度表示。由于同时处理发射度不为零与空间电荷这两大因素比较困难，故这两章以处理发射度不为零，统计热运动导致的电子束宏观性质为主，只在少数节里考虑了空间电荷。第五章主要研究束的几何性质(即所谓束流传输理论)，第六章则研究亮度与电流密度分布，并从中导出基于几何电子光学的图象传递函数理论。

第三个问题，包括电子束中电子相互之间，电子束与剩余气体原子与离子间，以及电子与固体样品(或靶面)内的原子、离子与电子间的随机近程相互作用，是范围很大的一大类电子物理问题。其中电子间随机相互作用，造成了 Boersch 效应(电子能量分布展宽)、电子束横向尺寸扩展与电子束在束腰的随机偏转，是近年来电子光学研究前沿课题之一。电子间随机相互作用的各种效应，对一些电子光学仪器设备的性能造成了一些理论极限。电子与剩余气体原子与离子的作用，属于电子束等离子体问题，与等离子体及气体导电物理有密切联系。这一问题有重大理论意义，并已在空间电荷透镜、强流束中和聚焦、中性束技术等方面取得实际应用。电子与固体内粒子的散射，实际上已不能视为经典电子行为，要用量子理论处理。这种相互作用实际上是许多电子光学与电子束技术应用的物理基础。例如电子显微镜样品中电子的弹性与非弹性散射及其次级过程的研究，以及电子波在固体晶格点阵里的传播、干涉与衍射，是电子显微成象与微分析技术的基本物理基础；电子束曝光技术有赖于电子抗蚀剂中电子散射的研究；电子束显示与记录器件的实现，取决于电子激发发光及感光等过程，等等。由于第三大类问题涉及面很广，限于篇幅本书不作论述。

第四个问题，自由电子的波动性质。在无场空间，电子运动与光线类似，即带有波动特征并已从实验中观察到干涉与衍射现象。在电磁场中，电子运动遵从薛定谔方程。自由电子的波动性研究是全面理解电子显微镜的成象理论和分辨率的基石。这一研究导致了波动电子光学。本书第七章简要地介绍波动电子光学基础，包括电子波的概念，自由电子的衍射理论，旁轴电子运动波函数，波动光学成象理论与图象衬度传递函数。限于篇幅，本书没有介绍电子干涉，电子全息与电子自旋(极化)的量子理论等问题。

第五个问题，电子与电磁辐射相互作用问题。虽然与这一问题有关的自由电子激光、同步辐射、切仑可夫辐射、离子的集团加速器等有关问题有重大科学意义，但这些现象一般只发生在非常高加速电压的相对论电子束情形，在一般电子光学器件与设备中可不考虑。这些问题也不在本书范围内论述。

一般电子光学著作中通常还包含电磁场及电子轨迹的数值计算问题，电子枪问题，以及某些特殊成象系统，如阴极透镜与电子反射镜问题，限于篇幅本书也没有介绍。有兴趣读者可参阅有关专著。

为了使读者便于深入阅读学习，本书在各章末都列出了参考文献，并尽可能选用专著及较权威的综述文章，以便于查阅；在必要时也列入原著文献。在所有问题的论述上，都着重介绍有关的概念、原理与处理方法，而略去了一些繁冗的数学推演。在问题有多种处理方法时，本书不拘泥于某些历史惯例，而选择易于理解问题实质的方法。

限于作者的经验，书中定有不少缺点甚或错误，衷心欢迎读者批评指正。

第一章 电子运动的分析动力学基础

电子光学问题的实质是研究电子(以及其他带电粒子)在电磁场中的运动规律。在研究大多数电子光学系统时，我们将直接利用力学中的质点动力学原理，分析计算电子在电、磁场中的运动规律与运动轨迹。

在大多数电子光学系统里，电子束电流密度较小因而可以忽略电子之间的电与磁相互作用。这样，问题便简化为单个电子运动的质点动力学问题。这便是本章的主要研究对象。在第五章与第六章里，将涉及电子的相互作用及电子束中粒子的统计分布问题，而在第七章里将考虑电子运动的波动性。

在单粒子质点动力学研究中，除了熟知的牛顿方程外，本章还将简要讨论相对论力学问题。在大量的高加速电位的电子与离子光学问题里必须考虑相对论效应。由于现代电子光学里，处理曲线坐标系的拉格朗日力学与变分原理起了重大作用，本章将简要介绍分析质点动力学中的拉格朗日力学与哈密顿力学方法，并着重将它们与光线光学的概念相联系，引出电子光学折射率与特征函数概念，揭示几何电子光学与光线光学的类似性，为电子光学问题的光线光学处理方法打下基础。

§1.1 动力学方程与电子运动速度

脱离原子力场束缚的自由电子可视为经典的粒子，其特征为电荷 e 与质量 m(电子电荷为负值)。在电场强度为 $\boldsymbol{E}$，磁感强度为 $\boldsymbol{B}$ 的电磁场中，它将受到一个洛伦兹力 $\boldsymbol{F}$ 的作用

$$\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{E} + e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{1.1.1}$$

式中 $\boldsymbol{v}$ 为电子运动速度。显然洛伦兹力 $\boldsymbol{F}$ 可看为电力 $e\boldsymbol{E}$ 与磁力 $e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$ 两部分。在洛伦兹力作用下，粒子动量 $\boldsymbol{p}$ 将发生变化[1,2]

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\boldsymbol{v}) = e\boldsymbol{E} + e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{1.1.2}$$

这就是质点动力学基本方程或牛顿型方程。当电子运动速度比光速 c 小得多时，其质量可认为是恒定的，即静止质量 m_0，而动量 $\boldsymbol{p}=m_0\boldsymbol{v}$。这时，牛顿方程可写为

$$m_0\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = e\boldsymbol{E} + e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{1.1.3}$$

若粒子运动速度高得与光速 c 可比拟，则必须考虑质量随速度而变化的相对论效应

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}, \qquad \beta = \frac{v}{c} \tag{1.1.4}$$

将(1.1.4)式代入(1.1.2)式，便可得相对论质点动力学方程

$$m_0\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}\right) = e\boldsymbol{E} + e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{1.1.5}$$

根据(1.1.2)，(1.1.3)及(1.1.5)式，磁力均垂于 $\boldsymbol{v}$，即垂于电子运动的方向，故不作功。电

子能量(动能)的变化全来自电场。用速度 $\boldsymbol{v}$ 对(1.1.5)式两端做数量积

$$m_0\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)=e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}$$

而

$$m_0\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)=\frac{m_0}{(1-\beta^2)^{3/2}}v\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)$$

$$e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}=e\boldsymbol{E}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$$

对于静电场,上式可进一步变换为:

$$e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}=-e\left(\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial u}{\partial z}\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}\right)=-e\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}$$

式中 u 为电场的电位。故

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}+eu\right)=0,\quad \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}+eu=\text{常数} \tag{1.1.6}$$

设电子处于静止处($\beta=0$)电位为零,这样选定零位的电位叫加速电位,以 u_* 表示。(1.1.6)式可写为

$$\begin{cases}\dfrac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}-m_0c^2=-eu_*\\[2ex] mc^2+eu_*=\dfrac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}+eu_*=\text{常数}=m_0c^2\end{cases} \tag{1.1.7}$$

式中 m_0c^2 代表与粒子的静止质量 m_0 相联系的固有能量(对于电子,$m_0c^2=0.511\ 003\ 4\mathrm{MeV}$)。(1.1.6)与(1.1.7)式说明,静场中带电粒子的速度完全取决于所在位置的加速电位;粒子的固有能量、动能与电场中的位能之和守恒。由(1.1.7)式还可解出粒子运动速度

$$\begin{cases}v=c\left[1-\dfrac{1}{(1+2\varepsilon u_*)^2}\right]^{1/2}=\dfrac{\sqrt{-2\dfrac{e}{m_0}u_*(1+\varepsilon u_*)}}{1+2\varepsilon u_*}\\[2ex] \varepsilon=\dfrac{-e}{2m_0c^2}\end{cases} \tag{1.1.8}$$

对于电子,取四位有效数位,速度可按下式计算

$$v_e=2.998\times10^8\left[1-\frac{1}{(1+1.957\times10^{-6}u_*)^2}\right]^{1/2}(\mathrm{m/s}) \tag{1.1.9}$$

在电子以低速运动即不考虑相对论的情况,(1.1.7)—(1.1.9)式转变为

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}m_0v^2+eu_*=\text{常数}=0\\[2ex] v=\sqrt{-2\dfrac{e}{m_0}u_*}\\[2ex] v_e\doteq5.932\times10^5\sqrt{u_*}\quad(\mathrm{m/s})\end{cases} \tag{1.1.10}$$

比较(1.1.8)与(1.1.10)式可看出,当加速电位 u_* 与运动速度 v 较低时,两式的值大体符合一致;而加速电位高到一定程度后,非相对论式(1.1.10)的速度值比按(1.1.8)式计算值大得多;而且按(1.1.8)式计算 v 永远小于光速。例如,加速电位为 35kV 时,(1.1.10)式的计算

误差对电子约为 5.1%。但对离子来说，这一加速电位时(1.1.8)式计算速度的误差小到一般可略去不计。即使是最轻的离子 H^+ 或质子，加速电位也要高到 6.427×10^7V 或 64.27MV 时不考虑相对论的(1.1.10)式才有 5%左右的误差。这是因为同一加速电位下，离子的运动速度比电子低得多的缘故。

矢量形式的方程((1.1.2)、(1.1.3)与(1.1.5)式)，一般来说，相当于三个标量方程。在对运动方程积分时常要用到这样的标量形式的方程组。在最简单的直角坐标系里，非相对论动力学方程(1.1.3)式可写为

$$\begin{cases} m_0\ddot{x} = eE_x + e(\dot{y}B_z - \dot{z}B_y) \\ m_0\ddot{y} = eE_y + e(\dot{z}B_x - \dot{x}B_z) \\ m_0\ddot{z} = eE_z + e(\dot{x}B_y - \dot{y}B_x) \end{cases} \tag{1.1.11}$$

式中圆点代表对时间的导函数。在电子光学里还常常使用其它坐标系。例如对于圆柱坐标系(r、ψ、z)，利用圆柱坐标与直角坐标间的坐标关系式，或利用圆柱坐标系单位坐标轴向量($\boldsymbol{r}^\circ$、$\boldsymbol{\psi}^\circ$、$\boldsymbol{z}^\circ$)的微分关系，可以导出以下的(非相对论)动力学方程组

$$\begin{cases} m_0(\ddot{r} - r\dot{\psi}^2) = eEr + e(r\dot{\psi}B_z - \dot{z}B_\psi) \\ \dfrac{m_0}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r^2\dot{\psi}) = eE_\psi + e(\dot{z}B_r - \dot{r}B_z) \\ m_0\ddot{z} = eE_z + e(\dot{r}B_\psi - r\dot{\psi}B_r) \end{cases} \tag{1.1.12}$$

在考虑相对论的情况，动力学方程[(1.1.5)式]的左端不是以加速度的形式出现，求解比较不方便。为此，将此式左端加以变换

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = m_0\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\boldsymbol{v}\right)$$

$$= m_0\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} + m_0\boldsymbol{v}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} - \frac{m_0}{c^2}\frac{v\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}}{(1-\dfrac{v^2}{c^2})^{3/2}}\boldsymbol{v} \tag{1.1.13}$$

再利用电子能量(mc^2)的全微分式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mc^2) = eE\cdot\boldsymbol{v} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right) = -m_0\frac{v\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}}{(1-\dfrac{v^2}{c^2})^{3/2}} \tag{1.1.14}$$

将(1.1.13)式与(1.1.14)式联用，可得到加速度的显式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{m_0}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} + \frac{e}{c^2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v})\boldsymbol{v} = e\boldsymbol{E} + e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$$

$$\boldsymbol{a} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \sqrt{1-\beta^2}\,\frac{e}{m_0}\left[\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} - \frac{1}{c^2}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{v}\right] \tag{1.1.15}$$

而 $\boldsymbol{a}$ 的诸分量的标量方程组为

$$\begin{cases}\ddot{x} = \sqrt{1-\beta^2}\,\dfrac{e}{m_0}\left[E_x + \dot{y}B_z - \dot{z}B_y - \dfrac{\dot{x}}{c^2}(\dot{x}E_x + \dot{y}E_y + \dot{z}E_z)\right] \\ \ddot{y} = \sqrt{1-\beta^2}\,\dfrac{e}{m_0}\left[E_y + \dot{z}B_x - \dot{x}B_z - \dfrac{\dot{y}}{c^2}(\dot{x}E_x + \dot{y}E_y + \dot{z}E_z)\right] \\ \ddot{z} = \sqrt{1-\beta^2}\,\dfrac{e}{m_0}\left[E_z + \dot{x}B_y - \dot{y}B_x - \dfrac{\dot{z}}{c^2}(\dot{x}E_x + \dot{y}E_y + \dot{z}E_z)\right]\end{cases} \tag{1.1.16}$$

(1.1.16)式为已解出加速度分量的相对论动力学标量方程，很便于数值计算。

在圆柱坐标系里，(1.1.15)式可变换为下式

$$\begin{cases}\ddot{z} = \sqrt{1-\beta^2}\,\dfrac{e}{m_0}\left[E_z + \dot{r}B_\psi - r\dot{\psi}B_r - \dfrac{\dot{z}}{c^2}W\right] \\ \ddot{r} = \sqrt{1-\beta^2}\,\dfrac{e}{m_0}\left[E_r + r\dot{\psi}B_z - \dot{z}B_\psi - \dfrac{\dot{r}}{c^2}W\right] + r\dot{\psi}^2 \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r\dot{\psi}) = \sqrt{1-\beta^2}\,\dfrac{e}{m_0}\left[E_\psi + \dot{z}B_r - \dot{r}B_z - \dfrac{r\dot{\psi}}{c^2}W\right] - \dot{r}\dot{\psi}\end{cases} \tag{1.1.17}$$

式中

$$W = \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{E} = \dot{z}E_z + \dot{r}E_r + r\dot{\psi}E_\psi \tag{1.1.18}$$

(1.1.17)与(1.1.18)式也很方便用于考虑相对论效应时的电子运动和电子轨迹的数值计算。

采用某正交曲线坐标系(q_1,q_2,q_3)描述电子的运动的情况下，若坐标系的兰米(Lame)系数为(h_1,h_2,h_3)；则动力学方程(1.1.2)可化为三个动量分量的变化率的标量方程

$$\boldsymbol{p} = p_1\boldsymbol{q}^\circ_1 + p_2\boldsymbol{q}^\circ_2 + p_3\boldsymbol{q}^\circ_3 \tag{1.1.19}$$

式中 q°_1,q°_2 和 q°_3 为电子所在位置各曲线坐标轴方向的单位向量。[5]

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}p_1}{\mathrm{d}t} + p_2\left(\dfrac{\dot{q}_1}{h_2}\dfrac{\partial h_1}{\partial q_2} - \dfrac{\dot{q}_2}{h_1}\dfrac{\partial h_2}{\partial q_1}\right) + p_3\left(\dfrac{\dot{q}_1}{h_3}\dfrac{\partial h_1}{\partial q_3} - \dfrac{\dot{q}_3}{h_1}\dfrac{\partial h_3}{\partial q_1}\right) \\ \quad = e[E_1 + h_2\dot{q}_2B_3 - h_3\dot{q}_3B_2] \\ \dfrac{\mathrm{d}p_2}{\mathrm{d}t} + p_1\left(\dfrac{\dot{q}_2}{h_1}\dfrac{\partial h_2}{\partial q_1} - \dfrac{\dot{q}_1}{h_2}\dfrac{\partial h_1}{\partial q_2}\right) + p_3\left(\dfrac{\dot{q}_2}{h_3}\dfrac{\partial h_2}{\partial q_3} - \dfrac{\dot{q}_3}{h_2}\dfrac{\partial h_3}{\partial q_2}\right) \\ \quad = eE_2 + e(h_3\dot{q}_3B_1 - h_1\dot{q}_1B_3) \\ \dfrac{\mathrm{d}p_3}{\mathrm{d}t} + p_1\left(\dfrac{\dot{q}_3}{h_1}\dfrac{\partial h_3}{\partial q_1} - \dfrac{\dot{q}_1}{h_3}\dfrac{\partial h_1}{\partial q_3}\right) + p_2\left(\dfrac{\dot{q}_3}{h_2}\dfrac{\partial h_3}{\partial q_2} - \dfrac{\dot{q}_2}{h_3}\dfrac{\partial h_2}{\partial q_3}\right) \\ \quad = eE_3 + e(h_1\dot{q}_1B_2 - h_2\dot{q}_2B_1)\end{cases} \tag{1.1.20}$$

§1.2 拉格朗日方程

研究不同类型的电子光学，要选用不同的参考坐标系。例如 Cartesian 坐标(直角坐标)系，圆柱坐标系和球坐标系等。除 Cartesian 坐标系外，其它坐标系大都是曲线坐标系。一般来说，确定一个电子(或其它带电粒子)的位置要用三个标量；而为了确定电子的运动状态，则同时还要确定三个速度分量。在直角坐标系(x_1,x_2,x_3)，即要确定 x_1,x_2,x_3；$\dot{x}_1,\dot{x}_2$ 与 $\dot{x}_3$。

设有另一个坐标系，其三个坐标(q_1,q_2,q_3)用来确定电子的位置。在分析动力学中，(q_1,q_2,q_3)便组成了一个广义坐标。广义坐标与直角坐标间存在着变换

$$
\begin{cases}
x_1 = F_1(q_1, q_2, q_3) \\
x_2 = F_2(q_1, q_2, q_3) \\
x_3 = F_3(q_1, q_2, q_3)
\end{cases}
\tag{1.2.1}
$$

若(1.2.1)式中的函数均为连续和单值的，而且其雅可比行列式不为零，则由(1.2.1)式可解出反变换

$$
\begin{cases}
q_1 = f_1(x_1, x_2, x_3) \\
q_2 = f_2(x_1, x_2, x_3) \\
q_3 = f_3(x_1, x_2, x_3)
\end{cases}
\tag{1.2.2}
$$

(1.2.1)式实则定义了三组曲面，因而定义了一组曲线坐标系。若三组曲面互相互交，则广义坐标就是正交曲线坐标系。三个标量 q_1, q_2, q_3 即广义坐标决定了电子的位置。q_1, q_2 和 q_3 对时间的导函数 $\dot{q}_1, \dot{q}_2$ 和 $\dot{q}_3$ 叫广义速度。广义速度虽不一定是物理意义上的速度，但 $q_1, q_2, q_3; \dot{q}_1, \dot{q}_2$ 与 $\dot{q}_3$ 一起决定了电子的运动状态。

为讨论简单起见，设电子在静电场中运动，且忽略相对论效应。静电场是位场，电子受的电场力可以表为位函数的梯度

$$
\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{E} = -e\nabla u = -\nabla W \tag{1.2.3}
$$

式中 u 为电位，$W=eu$ 为位能。动力学方程(1.1.3)可写为

$$
m_0\ddot{x}_i = m_0\frac{\mathrm{d}^2x_i}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial W}{\partial x_i}, \quad (i = 1,2,3) \tag{1.2.4}
$$

利用(1.2.1)式

$$
\dot{x}_i = \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = \sum_{j=1}^{3}\frac{\partial F_i}{\partial q_j}\dot{q}_j, \quad (i = 1,2,3) \tag{1.2.5}
$$

将(1.2.5)式求平方相加，利用正交曲面系的正交条件

$$
\frac{\partial F_1}{\partial q_k}\frac{\partial F_1}{\partial q_l} + \frac{\partial F_2}{\partial q_k}\frac{\partial F_2}{\partial q_l} + \frac{\partial F_3}{\partial q_k}\frac{\partial F_3}{\partial q_l} = 0 \tag{1.2.6}
$$

和兰米系数 $h_i(i=1,2,3)$ 的定义

$$
h_i = \left[\left(\frac{\partial F_1}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial F_2}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial F_3}{\partial q_i}\right)^2\right]^{1/2} \tag{1.2.7}
$$

可得

$$
\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{2}m_0h_i^2\dot{q}_i^2 + W = \text{常数} \tag{1.2.8}
$$

(1.2.8)式的含义仍是能量守恒。如果取 $\boldsymbol{q}_1^0, \boldsymbol{q}_2^0$ 和 $\boldsymbol{q}_3^0$ 为电子所在位置的正交曲线坐标系单位向量，则电子速度可表为

$$
\boldsymbol{v} = h_1\dot{q}_1\boldsymbol{q}_1^0 + h_2\dot{q}_2\boldsymbol{q}_2^0 + h_3\dot{q}_3\boldsymbol{q}_3^0 \tag{1.2.9}
$$

而(1.2.8)式第一项代表了动能 T

$$
T = \frac{m_0}{2}\sum_{i=1}^{3}h_i^2\dot{q}_i^2 \tag{1.2.10}
$$

当 (q_1, q_2, q_3) 为一般的广义坐标系，而非正交曲线坐标系时，能量守恒关系(1.2.8)式应表为以下形式

$$
\sum_{i,j=1}^{3}\frac{m_0}{2}g_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j + W = \text{常数}, \quad (i,j = 1,2,3) \tag{1.2.11}
$$

其中第一个取和项仍为动能 T,g_{ij}为坐标系的度规张量。度规张量只取决于坐标系的性质。(1.2.11)式的第一项仍为动能

$$T=\sum_{i,j=1}^{3}\frac{m_0}{2}g_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j \tag{1.2.12}$$

(1.2.10)及(1.2.12)式表达的电子动能 T 都是广义速度 $\dot{q}_i$ 的二次积的和。定义拉格朗日函数为电子的动能与位能之差

$$L=T-W \tag{1.2.13}$$

以下我们可以看到,用这一拉格朗日函数可以归纳出动力学方程的另一种形式——拉格朗日方程。在曲线坐标系里,拉格朗日方程应用起来常比§1.1的牛顿型方程便利,而且这一方程与力学的变分原理有深刻的联系。

在一般的广义坐标系里推演拉格朗日方程比较繁琐,而且要用到张量分析①。为简单起见,以下只在直角坐标系推演这一方程。

在一个位能函数为 W 的位场中,作用力可写为

$$F_x=-\frac{\partial W}{\partial x},\quad F_y=-\frac{\partial W}{\partial y},\quad F_z=-\frac{\partial W}{\partial z} \tag{1.2.14}$$

牛顿方程的加速度项,可以与动能 T 相联系

$$\begin{aligned}m_0\ddot{x}&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m_0\dot{x})=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\frac{\partial}{\partial \dot{x}}\left[\frac{m}{2}(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)\right]\right\}\\&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\end{aligned} \tag{1.2.15}$$

故由牛顿方程可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}+\frac{\partial W}{\partial x}=0 \tag{1.2.16}$$

由于动能 T 中不显含坐标 x,y,z;位能 W 只与坐标有关,所以如令函数

$$L=T-W$$

则显然(1.2.16)式可改写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}-\frac{\partial L}{\partial x}=0$$

对 y,z 二坐标分量可推出类似的方程。使用广义坐标(q_1,q_2,q_3)时,相应的推演可得出三个方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0,\quad (i=1,2,3) \tag{1.2.17}$$

(1.2.17)式叫作拉格朗日方程,是动力学基本方程之一。对于电子或其它带电粒子,静电场是位场。单个带电粒子的位能函数为 eu(e 为粒子电荷量,u 为电位)。故不考虑相对论效应时,电场中带电粒子的拉格朗日函数为[9,10]

$$L=\frac{m_0}{2}v^2-eu \tag{1.2.18}$$

---

① 例如见参考文献[9],陆传务与林化夷,矢量和张量及其应用,华中工学院出版社,§2.1,§2.2,§2.3,§2.8诸节。

$$L=\frac{m_0}{2}\sum_{i=1}^{3}h_i^2\dot{q}_i^2-eu \qquad \text{（正交曲线坐标系）} \tag{1.2.19}$$

$$L=\frac{m_0}{2}\sum_{i,j=1}^{3}g_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j-eu \qquad \text{（一般广义坐标系）} \tag{1.2.20}$$

(1.2.17)式中，$\frac{\partial L}{\partial q_i}$称为广义力。这是由直角坐标系里位场力[(1.2.14)式]引伸来的。磁场不是位场。磁场对带电粒子的作用力与速度有关。可以证明，利用一种与速度有关系的广义位能函数同样可构成拉格朗日函数，并可应用拉格朗日方程。

由(1.2.18)式，$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}$（因$W$是位能函数，与坐标无关）称为广义动量，$\frac{\partial L}{\partial q_i}=-\frac{\partial W}{\partial q_i}$为位场决定的力。磁场不是位场，因而磁场作用力不能用上述位能函数对广义坐标的偏导数的形式表述。但是，以下将证明，磁场对应的广义力可以表为[1]

$$Q_i=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial M}{\partial \dot{q}_i}\right)-\frac{\partial M}{\partial q_i} \tag{1.2.21}$$

的形式。这样，对拉格朗日函数(1.2.18)作一定的修正，便可把拉格朗日方程推广到有磁场的情形。

用场向量$\boldsymbol{E}$及$\boldsymbol{B}$定义的电磁场，可用电位u及向量磁位$\boldsymbol{A}$表示

$$\boldsymbol{E}=-\nabla u-\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t},\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A} \tag{1.2.22}$$

§1.1的牛顿方程因而化为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=e\boldsymbol{E}+e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}=e\left[-\nabla u-\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}+\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A})\right]$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}p_x}{\mathrm{d}t}&=-e\frac{\partial u}{\partial x}-e\frac{\partial A_x}{\partial t}+e\dot{y}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)-e\dot{z}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\\&=-e\frac{\partial u}{\partial x}+e\left(\frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x}+\frac{\partial A_y}{\partial x}\dot{y}+\frac{\partial A_z}{\partial x}\dot{z}\right)\\&\quad-e\left(\frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x}+\frac{\partial A_x}{\partial y}\dot{y}+\frac{\partial A_x}{\partial z}\dot{z}+\frac{\partial A_x}{\partial t}\right)\end{aligned}$$

$$\frac{\mathrm{d}p_x}{\mathrm{d}t}=-e\frac{\partial u}{\partial x}-e\frac{\mathrm{d}A_x}{\mathrm{d}t}+e\left(\frac{\partial A_x}{\partial x}\dot{x}+\frac{\partial A_y}{\partial x}\dot{y}+\frac{\partial A_z}{\partial x}\dot{z}\right) \tag{1.2.23}$$

$\frac{\mathrm{d}p_y}{\mathrm{d}t}$，$\frac{\mathrm{d}p_z}{\mathrm{d}t}$也可按同样方式写出，合起来看，可写为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=-e\left(\nabla u+\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}\right)+e\nabla(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v}) \tag{1.2.24}$$

若令

$$M=-e\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v} \tag{1.2.25}$$

则(1.2.24)式有关$\boldsymbol{A}$的部分正可看为(1.2.21)式，令修正拉格朗日函数

$$L=T-W-M$$

则拉格朗日方程正好与(1.2.17)式相同，即与牛顿型方程完全一致。

对于非相对论速度运动的粒子，其拉格朗日函数因而为

$$L=\frac{mv^2}{2}-eu+e\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v} \tag{1.2.26}$$

自然(1.2.26)式不适用于以接近光速运动的高速粒子。为了使形如(1.2.17)的拉格朗日方程仍然适用，仍然要修正拉格朗日函数[(1.2.18)～(1.2.20)式]，使方程(1.2.17)仍与牛顿