

高性能质谱计的设计方法

松田 久*

对双聚焦质谱计的离子光学进行了研究。对 QOHOQ (Q 透镜、Q 透镜、均匀扇形磁场、Q 透镜、圆柱扇形电场) 所组成的场配置的高性能仪器设计技巧也进行了描述。用计算机计算程序如何减小 2 级和 3 级像差, 本文也作了详细的说明。给出了具有优异离子光学参数的质谱计的一些例子, 并给出了计算机程序的全部清单。

1 前言

为了得到高性能质谱计, 首先必需寻找高性能的离子光学系统, 笔者以前曾提出了各种双聚焦质谱计^[1-4], 在那些报告中, 仅给出了最终结果, 在此之前各种试探进行的过程则省略了记述。然而由于在实际考虑过程中既然是试探, 也就不会全能得到良好的结果, 在多数情况下是根据某种经验进行有规则性地试探以求得最终结果。所以详细记述其过程也许对同一目的的研究者是一个很好的参考。基于这样的考虑这次与以前不同, 是将质谱计的中间过程作为重点一并报告。而且本论文还给出了在改变离子光学系统各参数时聚焦性能的变化。作为设计的例子, 我选择了用尽量小的磁铁而又能够得到高性能的质谱计。如果能够给大家一个借鉴的话, 我将感到非常高兴。

2 轨道计算法和目的

使用电场和磁场的小型高性能质谱计的研究已在文献中进行了记述, 请参看文献。这里就用个人电脑作轨道计算时的步骤和目的作些说明。所用的程序是将文献 5 中叙述的 2 级近似轨道计算程序扩展到 3 级近似的程序, 其全部的程序在附录中给出。

首先把该程序所使用的文字符号的离子光学意义作如下说明:

- X 与轨道平面平行的位置座标(x)
- A 轨道与光轴在 x 方向上的倾角(α)
- C 任意离子的相对质量偏差(γ)
- D 任意离子的相对能量偏差(δ)
- Y 垂直于轨道平面的位置座标(y)
- B 轨道与光轴 y 方向上的倾角(β)

这些文字符号同时也表示轨道最终位置的展开系数。例如 D 为 A_x , AD 为 $A_{x\alpha}$, AYY 为 $A_{y\gamma\gamma}$ 。因此双聚焦的条件是 $A=0, D=0$ 。2 级像差系数是 AA、AD、DD、YY、YB、BB 共

1994 年 3 月 1 日收

* 関西医科大学医化学(守口市文園町 1)

6 个。3 级像差系数是 AAA、AAD、ADD、DDD、Ayy、AyB、ABB、Dyy、DyB、DBB 共 10 个。

其次,取配置如图 1 所示的 QQHQC(四极透镜、四极透镜、均匀扇形磁场、四极透镜、圆柱形扇形电场)装置的质谱计。这个装置由于有如下特点,所以可视为高性能质谱计。

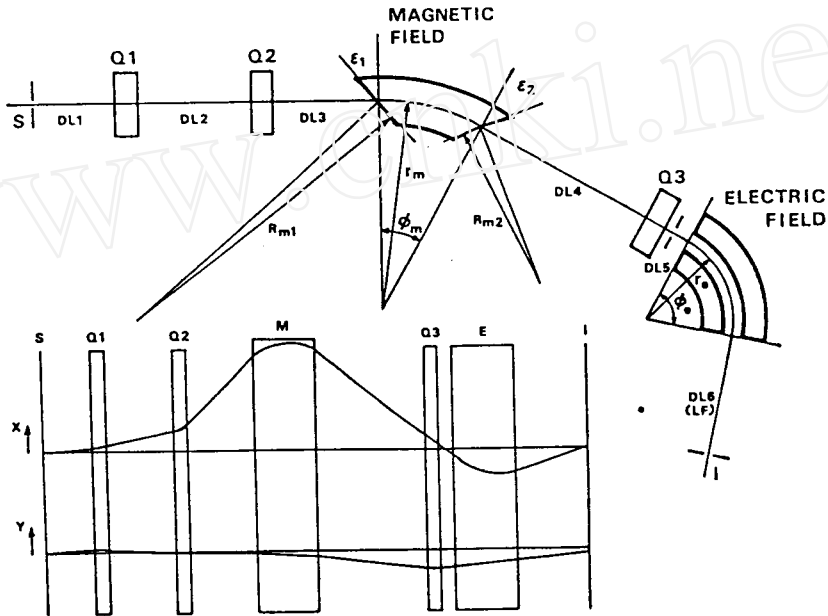


图 1 Fig.1 Schematic drawing of double-focusing mass spectrometer QQHQC. Horizontal and vertical ion trajectories are shown in the lower part.

1. 由于在离子源和磁场之间放置 2 个四极透镜,对离子束起聚焦作用,因而在垂直轨道平面的 y 方向上离子束变得很细,即使通过极狭的磁极间隙,也能得到很高的离子透过率。

2. 四极透镜在离子轨道面 x 方向上有光学凹透镜作用,因而产生了小的虚像,因为像放大系数 $X(A_x)$ 变小,所以即使用宽的狭缝也能得到高分辨本领。

本程序使用 BASIC 语言,表 I 给出计算结果的格式。在开始的 20—50 程序中给出磁场、电场、四极透镜的离子光学参数数值和自由空间的距离,下面则为打印出的计算后的各展开系数数值。以下所列举的是表示离子光学参数的文字符号的意义:

- WM 扇形磁场偏转角(ϕ_m)
- AM 磁场轨道半径(r_m)
- WE 扇形电场偏转角(ϕ_e)
- AE 电场轨道半径(r_e)
- GM (磁极间隙)/($2r_m$)
- GE (电极间隙)/($2r_e$)
- E1 磁场入射角(ϵ_1)
- E2 磁场出射角(ϵ_2)
- R1 r_m/R_{m1} ; R_{m1} 是磁场入口边界的曲率半径

表 I Table I Results of computer calculation for different parameters of QQHQC type mass spectrometer. Values of parameters, second and third order aberration coefficients and important characteristics are given.

20 AM=1! :GM=.008 :GE=.02 :C1=0! :QL=.11 :QR=.035

30 WM=30! :WE=80! :AE=.5 :E1=-35! :E2=-35! :QK1=-5.7 :QK3=-3.27

40 Q1=0! :Q2=0! :R1=0! :R2=0!

50 DL1=.3 :DL2=.7 :DL3=.7 :DL4=.9359 :DL5=.1

X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF
0.3183	0.0000	-0.9204	0.0000	1.2262	-0.4642	10.5886	0.0288	-0.4528	0.8586
6.0151	3.1409	-1.1183	-0.4518	-1.8335	1.5093	11.0024	1.2250	-1.0826	
AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT
-515.231	-12.439	0.225	-0.440	0.400	0.386	0.824	-0.005	2.892	5.146
AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB
20783.00	21.08	146.68	-6.72	355.80	-597.62	186.28	-6.72	23.85	-4.38

30 WM=30! :WE=80! :AE=.5 :E1=-35! :E2=-35! :QK1=-5.7 :QK3=-3.27

40 Q1=0! :Q2=0! :R1=-.7056 :R2=-.7056

50 DL1=.3 :DL2=.7 :DL3=.7 :DL4=.9367 :DL5=.1

X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF
0.3182	0.0000	-0.9199	0.0001	1.2251	-0.4638	10.5886	0.0288	-0.4528	0.8578
6.0174	3.1420	-1.1186	-0.4521	-1.8364	1.5111	11.0043	1.2250	-1.0826	
AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT
-0.009	-9.111	0.234	-3.956	6.666	-2.816	0.823	-0.006	2.891	5.146
AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB
215.01	-546.59	145.61	-6.71	94.18	-332.75	145.44	58.60	-34.47	-13.18

30 WM=30! :WE=80! :AE=.361 :E1=-35! :E2=-35! :QK1=-5.7 :QK3=-3.27

40 Q1=0! :Q2=0! :R1=-.7638 :R2=-.7638

50 DL1=.3 :DL2=.7 :DL3=.7 :DL4=1.0108 :DL5=.1

X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF
0.1517	0.0000	-0.4385	-0.0001	2.6284	-1.6220	10.5886	0.0288	-0.4528	0.2782
12.3450	6.5903	-1.5472	-0.8749	-2.1051	1.6794	11.0043	1.2250	-1.0826	
AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT
-0.039	-0.008	-0.180	-2.489	4.092	-1.704	0.047	-0.869	2.891	4.447
AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB
-2271.32	332.47	5.34	-2.11	106.15	-250.82	104.21	37.91	-22.40	-7.75

30 WM=30! :WE=80! :AE=.366 :E1=-35! :E2=-35! :QK1=-5.7 :QK3=-3.27

40 Q1=0! :Q2=.3 :R1=-.7635 :R2=-.7635

50 DL1=.3 :DL2=.7 :DL3=.7 :DL4=1.008 :DL5=.1

X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF
0.1557	0.0000	-0.4502	0.0001	2.5879	-1.5895	10.5886	0.0288	-0.4528	0.2909
12.0312	6.4193	-1.5261	-0.8541	-2.0950	1.6730	11.0043	1.2250	-1.0826	
AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT
0.011	-0.000	-0.186	0.793	-0.151	-0.336	0.077	-0.837	2.891	4.464
AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB
-2277.35	328.07	5.66	-2.07	108.73	-264.54	111.57	-7.64	1.70	-4.34

30 WM=30! :WE=74! :AE=.488 :E1=-35! :E2=-35! :QK1=-5.7 :QK3=-3.27

40 Q1=0! :Q2=.7 :R1=-.6738 :R2=-.6738

50 DL1=.3 :DL2=.7 :DL3=.563 :DL4=1.2302 :DL5=.1

X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF
0.2935	0.0000	-0.7581	-0.0000	1.0908	-0.4919	9.0703	-0.2813	-0.3326	0.6474
6.6200	3.4061	-1.3271	-0.6282	-2.1605	1.8909	10.2220	0.7979	-0.9172	
AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT
0.001	0.061	-0.330	1.874	-0.583	-0.591	0.086	-0.618	2.583	5.024
AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB
-0.60	-23.79	80.80	-7.29	26.43	-217.95	109.92	-6.15	-11.29	-3.04

- R2 电场常数(C);在园柱电场时 C 为零
 Q1 r_e/R_{e1} ; R_{e1} 是电场入口边界的曲率半径
 Q2 r_e/R_{e2} ; R_{e2} 是电场出口边界的曲率半径
 QK1 Q1 透镜与 Q2 透镜的强度(相等)
 QK3 Q3 透镜的强度

DL1—DL6 是如图 1 所示的自由空间长度,但是 DL6 由于为使方向聚焦条件 $A=0$ 成立而自动地进行调节,所以在表 I 计算结果的第 1 行右端 LF 列出。

把这些参数值进行各种变化并计算,以探求其结果满足高性能的数值。这时表 I 第 20 行的常数 AM、GM、GE、CI、QL、QR 保持在表中给出的数值固定不变。

作为计算结果,除 1 级、2 级、3 级的展开系数外,作为质谱计性能判断所必需的诸量也被打印给出。作为 1 级系数,在第 2 行中给出了角度 α 的系数,从而可知离子束的聚焦角。另外 GA、GY、GB 分别为在磁场边界的 A_x 、 A_y 、 A_z 值。第 1 行为入口,第 2 行为出口处之值。这些数值是磁极内的离子束尺寸。现在如果取从离子源出射的出射角为 α 、 β , x 及 y 方向上的离子位置座标分别由 $\alpha \times GA \times AM$ 、 $\beta \times GB \times AM$ 给出,那么当 $-0.005 < \alpha, \beta < +0.005$, $AM=1m$, $GA=10$, $GB=1$ 时,在 x 及 y 方向上的离子束尺寸则分别有 10cm 及 1cm 的扩展。其次 IMA 与 IMB 分别是第 3Q 透镜出口和在电场入口处的 A_z 值,从而可以知道中间像的位置。也就是说,假如 IMA 为正值,IMB 值为负值,因为可以在第 3Q 透镜与电场之间形成中间像,所以可以在此之间插入能量狭缝及放置碰撞室(collision chamber)。而且, C/X 是质量色散 A_z 和像放大倍数 A_x 的比,这个值越大则在高灵敏度下越可得到高分辨本领。最后,DLT 是质谱计的离子轨道全长,这个路程短的可使仪器变得小型化。总之,使 2 级、3 级像差变小是非常必要的。除此之外使 GY、GB、DL 值小,使 C/X 值变大也是我们所希求的。

3 试行过程

如图 1 配置的质谱计,我们根据下面的思考方法,适当地对离子光学参数试探。也就是说用小的磁铁,为了使轨道半径尽可能大,选取小的磁场偏转角 30° 。另外为了缩短轨道长度,取大入出射角 -35° 。磁场轨道半径固定为 1,紧接其后因为电场要选最佳值,假定选取 $\varphi_e=80^\circ$, $r_e=0.5$,自由空间长度也作任意选取 $DL1=0.3$, $DL2=DL3=0.7$, $DL5=0.1$,则 DL4 和 DL6 值根据双聚焦条件 $A=0$ 、 $D=0$ 成立来决定。Q 透镜的强度 QK1 是选取可使磁场内的 GB 绝对值与 1 接近或比 1 还小的数值。OK3 取能获得立体聚焦使 B 的绝对值在 1 以下的数值。场的边界取直线,并使 $R1=R2=Q1=Q2=0$ 。

表 I(a)是根据上述决定的参数值计算的结果。前面 4 行是参数值,下面的则是打印出的计算结果。从结果可以看出 AA 和 AAA 值都非常大。但是如果磁场边界具有曲率,由于 AA 值在不改变 1 级聚焦条件的情况下也可以使其改变,所以在表 I(b)中我们列出当给与 R1 和 R2 负值时(为了简单起见令 $R1=R2$)AA 值变小的结果。值得高兴的是当 AA 值变小时 AAA 值也明显地变小。但其它的 2 级像差系数值却还相当大。

2 级像差系数 AD 随着电场半径 AE 的改变而改变,在这种情况下,由于 1 级聚焦条件随着 AE 的改变而改变,所以必须同时调节 DL4 和 DL6 使 $A=D=0$ 成立。另外也要同

时变化 $R_1=R_2$ 使 $AA \approx 0$ 。这样反复计算,直到 AA 和 AD 同时变到 0.1 以下为止。 AE 变化的结果在表 I(c)中给出。

在这个离子光学系统中,由于 DD 已经非常小,剩下的 2 级像差则只有 YY 、 YB 、 BB 。这可以由改变电场边界的曲率(Q_1 或 Q_2)得到改善。这样一来,2 级像差都能减小到几乎满意的程度,其结果在表 I(d)中给出。通过对该结果的观察,其 3 级像差仍很大,如果到此为止就很难得到下节所述的那样良好的聚焦性能。若要忽视 3 级像差对聚焦的影响,就必须如文献 4 所指出的那样,把全部的 3 级像差系数都降至 100 以下。

在该离子光学系统中,3 级像差系数 AAA 受 DL_3 的影响很大,另外 AAD 与 WE 也有很大关系,因此 AAA 可以通过改变 DL_3 , AAD 可以通过改变 WE 的值使其变小。但是如果改变 DL_3 和 WE ,1 级、2 级的聚焦条件也会产生改变,所以再次重复(a)-(d)的操作使 2 级像差变小后再比较 AAA 、 AAD 值,使二者都向小的方向重复进行计算,这样所得到的结果即是表 I(e)所示的结果。从结果可以看出 YY 、 YB 、 BB 值稍大了些,要想使这些值变得更小,则必须如文献 2 加大 WM 。这里能得到这样的结果也可满意了。

4 性能的改善

表 I(e)的结果已是相当接近预期的数值。但若能再使 C/X 稍大,使轨道全长 DLT 缩短的话,则会变得更好。为了达到这个目的取 $E_1=E_2=-37^\circ$,并把 DL_1 和 QK_1 的值也加大探试。在这种条件下 2 级和 3 级像差变小的结果在表 I(a)中给出。该结果 C/X 有了某种程度的增大,而 DLT 几乎没有改变。

不仅仅限于把入出射角加大这一种情况, DLT 没有变短的主要原因是由于为了使 3 级系数 AAA 变小, DL_3 变短到了 0.51,为了探求即使取更长的 DL_3 值也可使 AAA 变为零的条件,把 R_1 和 R_2 给予非等值观测,这样一来在表 I(b)所示的条件下,显然得到了很大的改善。而且如改变 DL_2 、 DL_5 、 QK_1 就可得到(c)的结果。在这种情况下,全部的 3 级像差系数都比 1 小, DLT 也变得很短。表 I(d)是再增加入出射角使 DLT 变短的例子,(e)是取偏向角 32° 而使 DD 小到 0.036 的例子。

从以上结果可以看出,从轨道平面离散的离子群的像差 YY 、 YB 、 BB 还稍微大些,在要求极高的分辨本领时则成了问题。在这种场合下,必须在 y 方向放入光阑限制 Y 和 B 。这些像差避开了 WM 和 DLT 的限制,假如满足文献 2 所述的那些条件,就可以将其减小。

5 质谱的图形

为了研究 2 级和 3 级像差对质谱图形的影响,我们通过计算机模拟来描绘在表 I(a)、(b)、(c)及(d)中所表示的离子光学系统所得到的质谱图形。

计算机所用的程序是个人电脑“BEIS”^[6]程序。作为初始条件,假定:

$$|\alpha| \leq 0.005$$

$$|\delta| \leq 0.005$$

$$|y/r_m| \leq 0.0015$$

$$|\beta| \leq 0.002$$

表 I Table II Results of computer calculation for high performance examples of QHQ type mass spectrometer.

	20	AM=1!	:GM=.008	:GE=.02	:C1=0!	:Q1=.1!	:QR=.035														
	30	WM=30!	:WE=72!	:AE=.458	:E1=-37!	:E2=-37!	:QK1=-5.8	:QK3=-3.1													
	40	Q1=0!	:Q2=.29	:R1=-.7389	:R2=-.7389																
	50	DL1=.4	:DL2=.7	:DL3=.51	:DL4=1.2019	:DL5=.1															
a		X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF										
		0.2353	0.0000	-0.7062	0.0001	2.3570	-0.9112	10.4373	-0.2777	-0.3195	0.6086										
		6.9620	4.2477	-1.3205	-0.6133	-1.9712	1.1862	11.9761	0.9893	-0.7465											
		AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT										
		-0.048	-0.066	-0.186	0.835	0.679	-0.570	-0.000	-0.866	3.001	4.950										
		AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB										
		37.67	-45.37	94.82	-6.78	14.67	-207.02	66.92	-0.92	-4.78	-5.66										
	30	WM=30!	:WE=73!	:AE=.408	:E1=-37!	:E2=-37!	:QK1=-5.8	:QK3=-3.2													
	40	Q1=0!	:Q2=.37	:R1=-.3872	:R2=-1.2																
	50	DL1=.4	:DL2=.7	:DL3=.635	:DL4=.9665	:DL5=.1															
b		X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF										
		0.1903	0.0000	-0.6363	0.0001	2.8205	-1.0428	12.1542	0.0517	-0.3905	0.5467										
		8.4491	5.2525	-1.2937	-0.5883	-2.0611	1.1165	12.8195	1.4526	-0.8463											
		AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT										
		0.003	-0.027	-0.094	2.344	-0.214	-0.365	0.208	-0.878	3.343	4.722										
		AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB										
		21.86	33.74	86.06	-4.72	9.66	-144.15	45.58	-24.25	5.61	-5.90										
	30	WM=30!	:WE=71.5	:AE=.417	:E1=-37!	:E2=-37!	:QK1=-5.9	:QK3=-3.2													
	40	Q1=0!	:Q2=.38	:R1=-.3722	:R2=-1.2																
	50	DL1=.4	:DL2=.6	:DL3=.641	:DL4=.9521	:DL5=.14															
c		X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF										
		0.1995	0.0000	-0.6406	-0.0001	1.5651	-1.1966	11.6561	-0.2543	-0.4581	0.5518										
		8.2228	5.0107	-1.3132	-0.6031	-0.8618	1.2977	12.3269	0.5849	-1.0046											
		AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT										
		0.032	0.075	-0.114	1.232	-0.643	-0.633	0.443	-0.974	3.211	4.659										
		AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB										
		14.25	54.15	89.07	-5.39	-57.99	-43.25	53.68	-12.36	-4.79	-9.01										
	30	WM=30!	:WE=72!	:AE=.411	:E1=-41!	:E2=-40!	:QK1=-6.25	:QK3=-3.3													
	40	Q1=0!	:Q2=.51	:R1=-.5875	:R2=-1.215																
	50	DL1=.4	:DL2=.55	:DL3=.54	:DL4=.9228	:DL5=.12															
d		X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF										
		0.2107	0.0000	-0.6691	0.0001	1.8852	-0.8548	11.3460	-0.2036	-0.3829	0.5949										
		8.0481	4.7437	-1.2612	-0.5525	-1.4881	1.2049	12.3772	0.9204	-0.8400											
		AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT										
		-0.025	0.070	-0.093	1.988	-0.549	-0.595	0.423	-0.830	3.175	4.498										
		AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB										
		-9.13	56.68	98.15	-5.24	-73.72	-77.29	47.98	-22.03	-3.20	-8.29										
	30	WM=32!	:WE=79!	:AE=.432	:E1=-39!	:E2=-39!	:QK1=-6.2	:QK3=-3.3													
	40	Q1=0!	:Q2=.62	:R1=-.4882	:R2=-1.25																
	50	DL1=.4	:DL2=.55	:DL3=.592	:DL4=.8751	:DL5=.1															
e		X	A	C	D	Y	B	GA	GY	GB	LF										
		0.1916	0.0000	-0.6750	-0.0000	1.7986	-0.9015	11.8733	-0.1609	-0.4218	0.5615										
		8.7339	5.2167	-1.2530	-0.5779	-1.3665	1.2407	12.7169	0.9653	-0.9390											
		AA	AD	DD	YY	YB	BB	IMA	IMB	C/X	DLT										
		0.021	-0.017	-0.036	2.044	-0.617	-0.602	0.635	-0.452	3.523	4.563										
		AAA	AAD	ADD	DDD	AYY	AYB	ABB	DYY	DYB	DBB										
		8.71	37.19	78.18	-3.58	-56.58	-78.54	50.23	-20.56	-4.02	-8.09										

并取轨道半径 1m , 主狭缝宽度 $S=100\mu\text{m}$, 接收器狭缝 $d=30\mu\text{m}$ 进行计算。

图 2 是作质量扫描时所得到的一个谱线的峰形, (A)、(B)、(C)、(D) 分别对应表 I 的 (a)、(b)、(c)、(e)。横轴是由于扫描离子束移动的距离, 纵轴表示入射离子通过接收器狭缝的百分比。由 (A) 开始随着像差变小谱线变细。在 (D) 中几乎变成了没有像差影响的规整的三角形峰形。另外在峰的尖端接近 100% 的离子都通过了狭缝。

这里出现一个很有意思的现象就是 (A) 和 (C) 的谱, 由于像差不仅使峰形变宽, 而且类似光干涉那样的强弱图形也显示出来。这是 3 级像差系数大时的特征。特别在 (A) 里 3 级系数 AAA 因为在 20000 以上, 本来仅是一条宽度为 9mm 的谱线(注意横轴的刻度与其它的不同), 在这里变成了几条分布谱线(仅在中心的左侧分布是由于 2 级系数 AA 有 -515 之大的原因)。这一事实表明质谱计的调整很坏, 3 级像差一旦变得很大, 就造成了出现假像峰(ghost peak)。另外 (C) 的谱表明当 2 级像差非常小而 3 级像差非常大时(参看表 I(d)) 3 级像差的巨大影响。

图 3 是把主狭缝变细的高分辨本领谱的例子。(A) 是表 I(e), (B) 是表 I(e) 的离子光学峰形。初始条件与图 2 完全相同, 而以主狭缝宽 $S=25\mu\text{m}$, 收集器狭缝 $d=5\mu\text{m}$ 进行计算, 在 90% 峰谷处计算的分辨本领 (A) 为 1000, (B) 则变为 58000, DD 和 3 级像差都小的 (B) 得到了相当大的改善。

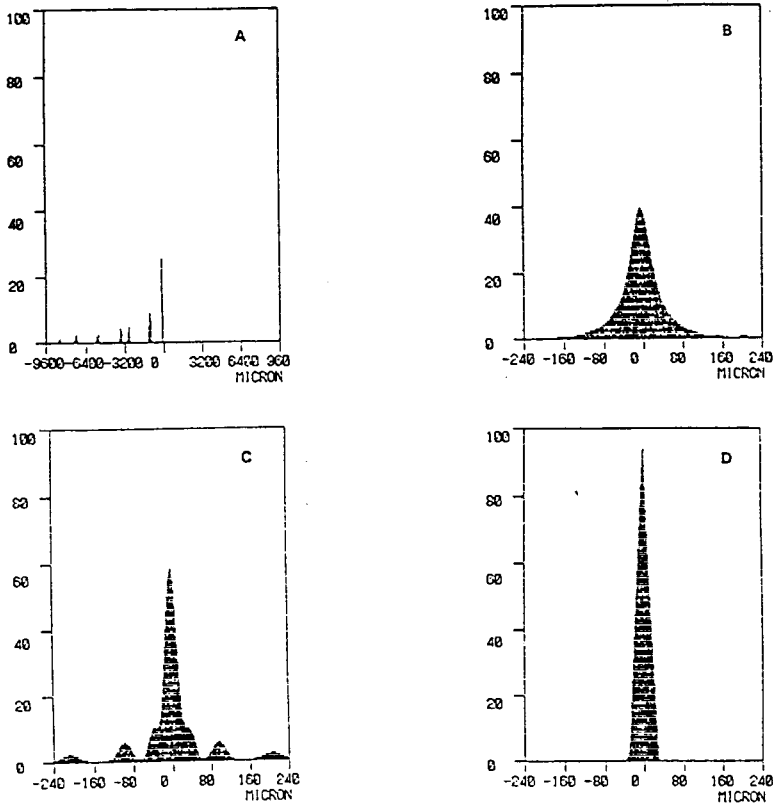


图 2 Fig. 2 Intensity distribution of the simulated mass spectrum peak. A, B, C, D correspond to the cases a, b, c, e of Table 1 respectively. The slit conditions are $s=100\mu\text{m}$ and $d=30\mu\text{m}$.

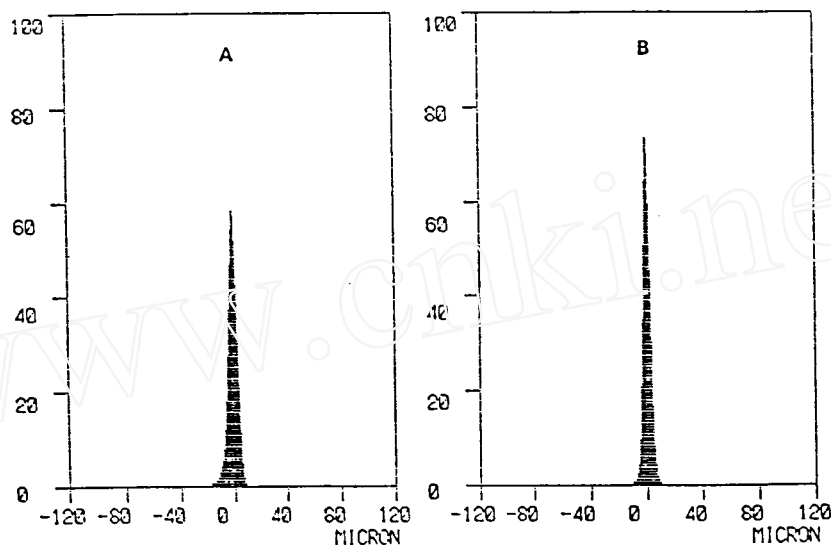


图 3 Fig. 3 Intensity distribution of the simulated mass spectrum peak. A and B correspond to the cases Table 1(e) and Table 2(e) respectively. The slit conditions are $s = 25\mu\text{m}$ and $d = 5\mu\text{m}$.

6 结束语

这里我们给出的 QQHQC 配置的离子光学系统,很庆幸地得到了与开始目标具有相近性能的质谱计。一般来说,这样幸运的事很少,即使是 1 级近似具有优越性能的离子光学系统,不论如何下功夫使 2 级和 3 级像差系数都能同时变小的情况是不多的。但是只要千方百计地努力实践,也不是不能获得意想不到的好结果。好的结果能否得到,必须依赖于开始选择的离子光学系统,然后进行各种各样可能成功的试探。

这里叙述的离子光学系统中,用偏转角 30° 的磁铁完成了离子轨道全长 $4.5r_m$ 的高性能装置的设计。这与最近在日本大阪大学安装的质谱计⁽⁷⁾(偏转角 40° , 离子轨道全长 $6.1r_m$)相比已变得相当小了,但还不是十分完美。我想若能在偏转角 20° 左右,轨道全长 $4r_m$ 以下得到高性能的质谱计将会更好。

参 考 文 献

- 1 H. Matsuda, Mass Spectrom, Rev. 2, 299(1983).
- 2 H. Matsuda, Int. J. Mass Spectrom, Ion Processes, 66, 209(1985).
- 3 松田 久, 质量分析, 33, 115(1995).
- 4 H. Matsuda, Nucl. Instr. and Meth, A258, 310(1987).
- 5 松田 久, 质量分析, 31, 231(1983).
- 6 T. Matsuo, T. Sakurai, H. Matsuda and H. Nakabushi, Mass Spectrosc. Jpn. 33, 261(1985).
- 7 H. Matsuda, T. Matsuo, Y. Fujita, T. Sakurai and I. Katakuse, Proc. 2nd Japan-China Joint Symp. on Mass Spectrom, H. Matsuda and Liang Xiao-tian ed. Bando Press, Osaka 1987, P. 49

附 录

3 级近似轨道计算程序

该程序是在文献 5 的 2 级近似程序基础上扩展为 3 级近似,用 BASIC 语言,使用存储信息组为 36K,用 NEC-9801VX 个人用计算机计算时间约需 12 秒。装置结构及子程序的代号因几乎与文献 5 相同,请参照文献 5。A、B 矩阵图是 3 级近似所以由 2×59 个要素构成。要素的号码与展开系数的对应关系如下:

1—X	2—A	3—C	4—D
5—XX	6—XA	7—XC	8—XD
9—AA	10—AC	11—AD	12—CC
13—CD	14—DD	15—YY	16—YB
17—BB	18—XXX	19—XXA	20—XXC
21—XXD	22—XAA	23—XAC	24—XAD
25—XCC	26—XCD	27—XDD	28—XYY
29—XYB	30—XBB	31—AAA	32—AAC
33—AAD	34—ACC	35—ACD	36—ADD
37—AYY	38—AYB	39—ABB	40—CCC
41—CCD	42—CDD	43—CYY	44—CYB
45—CBB	46—DDD	47—DYY	48—DYB
49—DBB	50—Y	51—B	52—YX
53—YA	54—YC	55—YD	56—BX
57—BA	58—BC	59—BD	

子程序的功能和程序号如下:

- 400 取 B 矩阵的全要素为 0
- 405 取 A 矩阵的全要素为 0
- 410 反转离子轨道偏转方向
- 420 长度 DL 的自由空间 B 矩阵
- 430 输出显示最终结果
- 440 打印出最终结果
- 450 把长度 DL 自由空间矩阵作乘法运算
- 460 输出显示 B 矩阵要素
- 470 打印出 B 矩阵要素
- 480 输出显示 A 矩阵要素
- 490 打印出 A 矩阵要素
- 500 把 $A \times B$ 的结果再放入 A 中(MANU)
- 600 电场入口边缘场的 B 矩阵

- 650 电场出口边缘场的 B 矩阵
- 700 磁场入口边缘场的 B 矩阵
- 750 磁场出口边缘场的 B 矩阵
- 800 理想圆柱电场的 B 矩阵
- 900 理想均匀磁场的 B 矩阵
- 1000 只适用 Q 透镜的 MANU
- 1100 Q 透镜的 B 矩阵(含有边缘场)
- 1200 8 极透镜 B 矩阵(含有边缘场)

主程序是从表示最初的自由空间的 A 矩阵开始,依次和离子进行顺序相对应的 B 矩阵相乘,直到得到最终结果。最后的自由空间长度可自动使方向聚焦(A=0)成立。以下为该程序的全部明细表。

(程序明细表)

```

10 CLEAR :DIM A(2,59), B(2,59) :DEFINT L, J
20 AM=1! :GM=.008 :GE=.02 :C1=0! :QL=.11 :QR=.035
30 WM=32! :WE=79! :AE=.432 :E1=-39! :E2=-39! :QK1=-6.2 :QK3=-3.3
40 Q1=0! :Q2=.62 :R1=-.4882 :R2=-1.25
50 DL1=.4 :DL2=.55 :DL3=.592 :DL4=.8751 :DL5=.1
100 G=GE/AE :H=GM/AM :M=QR :AE2=AE*AE :AE3=AE2*AE :AM2=AM*AM :AM3=AM2*AM
110 IE1A=.1549*G*G :IE1B=.152*G*G :IE4A=-.3027*G :IE4B=-.4535*G
120 IE5=.5657/G :IE6=-.002 :IE7=.05958*G :IE8=.002
130 IM1=2.8 *H*H :IM4=-1.04 *H
140 IQ1=.209 *M*M :IQ2=-.07678*M*M*M*M :IQ3=.05518*M*M*M*M :IQ4=-.3306*M
200 GOSUB 405 :A(1,1)=1! :A(1,2)=DL1 :A(2,2)=1! :A(1,50)=1! :A(1,51)=DL1 :A(2,51)
)=1!
210 QK=QK1 :GOSUB 1100 :GOSUB 1000
230 DL=DL2 :GOSUB 450 :GOSUB 1000
255 DL=DL3 :GOSUB 450
260 Z1=A(1,50) :Z2=A(1,51) :Z6=A(1,2) :PRINT Z1,Z2,Z6
265 GOSUB 700 :GOSUB 500
270 GOSUB 900 :GOSUB 500
280 GOSUB 750 :GOSUB 500
285 Z3=A(1,50) :Z4=A(1,51) :Z7=A(1,2) :PRINT Z3,Z4,Z7
295 DL=DL4 :GOSUB 450
315 QK=QK3 :GOSUB 1100 :GOSUB 500 :Z8=A(1,2)
320 DL=DL5 :GOSUB 450 :Z9=A(1,2) :PRINT Z8,Z9
330 GOSUB 600 :GOSUB 500
335 GOSUB 800 :GOSUB 500
340 GOSUB 650 :GOSUB 500
350 DL=-A(1,2)/A(2,2) :GOSUB 450
360 DLT=(WE*AE+WM)/180!*3.1416+3!*QL+DL1+DL2+DL3+DL4+DL5+DL
370 CX=-A(1,3)/A(1,1) :PRINT DLT,CX
380 GOSUB 430 :END
390 GOSUB 440 :END
400 FOR L=1 TO 2 :FOR J=1 TO 59 :B(L,J)=0! :NEXT J :NEXT L :RETURN
405 FOR L=1 TO 2 :FOR J=1 TO 59 :A(L,J)=0! :NEXT J :NEXT L :RETURN
410 GOSUB 400 :B(1,1)=-1! :B(2,2)=-1! :B(1,50)=1! :B(2,51)=1! :RETURN
420 GOSUB 400 :B(1,1)=1! :B(1,2)=DL :B(1,50)=1! :B(1,51)=DL :B(2,2)=1! :B(2,51)
)=1! :RETURN
430 'PRINT FINAL RESULT'
431 PRINT USING "&
&";" X A C D Y B GA GY
GB LF "
432 PRINT USING "###.####";A(1,1),A(1,2),A(1,3),A(1,4),A(1,50),A(1,51),Z6,Z1,Z2,
DL
433 PRINT USING "###.####";A(2,1),A(2,2),A(2,3),A(2,4),A(2,50),A(2,51),Z7,Z3,Z4
434 PRINT USING "&
&";" AA AD DD YY YB BB IMA IMB
C/X DLT "

```

```

435 PRINT USING "####.###";A(1,9),A(1,11),A(1,14),A(1,15),A(1,16),A(1,17),Z8,Z9,
CX,DLT
437 PRINT USING "&
&";" AAA AAD ADD DDD AYY AYB ABB DYY
DYB DBB "
438 PRINT USING "#####.##";A(1,31),A(1,33),A(1,36),A(1,46),A(1,37),A(1,38),A(1,39),
A(1,47),A(1,48),A(1,49) :RETURN
440 'LPRINT FINAL RESULT'
441 LPRINT USING "&
&";" X A C D Y B GA GY
GB LF "
442 LPRINT USING "#####.###";A(1,1),A(1,2),A(1,3),A(1,4),A(1,50),A(1,51),Z6,Z1,Z2,
DL
443 LPRINT USING "#####.###";A(2,1),A(2,2),A(2,3),A(2,4),A(2,50),A(2,51),Z7,Z3,Z4
444 LPRINT USING "&
&";" AA AD DD YY YB BB IMA IM
B C/X DLT "
445 LPRINT USING "#####.###";A(1,9),A(1,11),A(1,14),A(1,15),A(1,16),A(1,17),Z8,Z9,
CX,DLT
447 LPRINT USING "&
&";" AAA AAD ADD DDD AYY AYB ABB DY
Y DYB DBB "
448 LPRINT USING "#####.##";A(1,31),A(1,33),A(1,36),A(1,46),A(1,37),A(1,38),A(1,39),
A(1,47),A(1,48),A(1,49) :RETURN
450 'DRIFT SPACE DL ; MATRIX MULTIPLICATION'
451 FOR J=1 TO 59 :A(1,J)=A(1,J)+DL*A(2,J) :NEXT J :RETURN
460 'PRINT B-MATRIX'
461 PRINT USING "&
&";" X A C D XX XA XC XD
AA AC "
462 PRINT USING "###.####";B(1,1),B(1,2),B(1,3),B(1,4),B(1,5),B(1,6),B(1,7),B(1,8),
B(1,9),B(1,10)
463 PRINT USING "###.####";B(2,1),B(2,2),B(2,3),B(2,4),B(2,5),B(2,6),B(2,7),B(2,8),
B(2,9),B(2,10)
464 PRINT USING "&
&";" AD CC CD DD YY YB BB XXX
Y B "
465 PRINT USING "#####.###";B(1,11),B(1,12),B(1,13),B(1,14),B(1,15),B(1,16),B(1,17),
B(1,18),B(1,50),B(1,51)
466 PRINT USING "#####.###";B(2,11),B(2,12),B(2,13),B(2,14),B(2,15),B(2,16),B(2,17),
B(2,18),B(2,50),B(2,51)
467 PRINT USING "&
&";" AAA AAD ADD DDD AYY AYB ABB DYY
DYB DBB "
468 PRINT USING "#####.##";B(1,31),B(1,33),B(1,36),B(1,46),B(1,37),B(1,38),B(1,39),
B(1,47),B(1,48),B(1,49)
469 PRINT USING "#####.##";B(2,31),B(2,33),B(2,36),B(2,46),B(2,37),B(2,38),B(2,39),
B(2,47),B(2,48),B(2,49) :RETURN
470 'LPRINT B-MATRIX'
471 LPRINT USING "&
&";" X A C D XX XA XC XD
AA AC "
472 LPRINT USING "###.####";B(1,1),B(1,2),B(1,3),B(1,4),B(1,5),B(1,6),B(1,7),B(1,8),
B(1,9),B(1,10)
473 LPRINT USING "###.####";B(2,1),B(2,2),B(2,3),B(2,4),B(2,5),B(2,6),B(2,7),B(2,8),
B(2,9),B(2,10)
474 LPRINT USING "&
&";" AD CC CD DD YY YB BB XX
X Y B "
475 LPRINT USING "###.####";B(1,11),B(1,12),B(1,13),B(1,14),B(1,15),B(1,16),B(1,17),
B(1,18),B(1,50),B(1,51)
476 LPRINT USING "#####.###";B(2,11),B(2,12),B(2,13),B(2,14),B(2,15),B(2,16),B(2,17),
B(2,18),B(2,50),B(2,51)
477 LPRINT USING "&
&";" AAA AAD ADD DDD AYY AYB ABB DY
Y DYB DBB "
478 LPRINT USING "#####.##";B(1,31),B(1,33),B(1,36),B(1,46),B(1,37),B(1,38),B(1,39),
B(1,47),B(1,48),B(1,49)
479 LPRINT USING "#####.###";B(2,31),B(2,33),B(2,36),B(2,46),B(2,37),B(2,38),B(2,

```

```

39) ,B(2,47),B(2,48),B(2,49) :RETURN
480 'PRINT A-MATRIX'
481 PRINT USING "&
      &";" X      A      C      D      XX      XA      XC      XD
      AA      AC      "
482 PRINT USING "###.###";A(1,1),A(1,2),A(1,3),A(1,4),A(1,5),A(1,6),A(1,7),A(1,
8) ,A(1,9),A(1,10)
483 PRINT USING "###.###";A(2,1),A(2,2),A(2,3),A(2,4),A(2,5),A(2,6),A(2,7),A(2,
8) ,A(2,9),A(2,10)
484 PRINT USING "&
      &";" AD      CC      CD      DD      YY      YB      BB      XXX
      Y      B      "
485 PRINT USING "###.###";A(1,11),A(1,12),A(1,13),A(1,14),A(1,15),A(1,16),A(1,1
7) ,A(1,18),A(1,50),A(1,51)
486 PRINT USING "###.###";A(2,11),A(2,12),A(2,13),A(2,14),A(2,15),A(2,16),A(2,1
7) ,A(2,18),A(2,50),A(2,51)
487 PRINT USING "&
      &";" AAA      AAD      ADD      DDD      AYY      AYB      ABB      DYY
      DYB      DBB      "
488 PRINT USING "#####.##";A(1,31),A(1,33),A(1,36),A(1,46),A(1,37),A(1,38),A(1,3
9) ,A(1,47),A(1,48),A(1,49)
489 PRINT USING "#####.##";A(2,31),A(2,33),A(2,36),A(2,46),A(2,37),A(2,38),A(2,3
9) ,A(2,47),A(2,48),A(2,49) :RETURN
490 'LPRINT A-MATRIX'
491 LPRINT USING "&
      &";" X      A      C      D      XX      XA      XC      XD
      AA      AC      "
492 LPRINT USING "###.###";A(1,1),A(1,2),A(1,3),A(1,4),A(1,5),A(1,6),A(1,7),A(1
,8) ,A(1,9),A(1,10)
493 LPRINT USING "###.###";A(2,1),A(2,2),A(2,3),A(2,4),A(2,5),A(2,6),A(2,7),A(2
,8) ,A(2,9),A(2,10)
494 LPRINT USING "&
      &";" AA      AD      DD      YY      YB      BB      GY1      GB
      1      GY2      GB2      "
495 LPRINT USING "#####.##";A(1,11),A(1,12),A(1,13),A(1,14),A(1,15),A(1,16),A(1,
17) ,A(1,18),A(1,50),A(1,51)
496 LPRINT USING "#####.##";A(2,11),A(2,12),A(2,13),A(2,14),A(2,15),A(2,16),A(2,
17) ,A(2,18),A(2,50),A(2,51)
497 LPRINT USING "&
      &";" AAA      AAD      ADD      DDD      AYY      AYB      ABB      DY
      Y      DYB      DBB      "
498 LPRINT USING "#####.##";A(1,31),A(1,33),A(1,36),A(1,46),A(1,37),A(1,38),A(1,
39) ,A(1,47),A(1,48),A(1,49)
499 LPRINT USING "#####.##";A(2,31),A(2,33),A(2,36),A(2,46),A(2,37),A(2,38),A(2,
39) ,A(2,47),A(2,48),A(2,49) :RETURN
500 'MATRIX MULTIPLICATION'
501 X=A(1,1) :A=A(1,2) :C=A(1,3) :D=A(1,4) :Z=A(2,1) :G=A(2,2) :H=A(2,3) :I=A(2,
4) :Y=A(1,50) :B=A(1,51) :U=A(2,50) :V=A(2,51)
502 X5=A(1,5) :X6=A(1,6) :X7=A(1,7) :X8=A(1,8) :X9=A(1,9) :X10=A(1,10)
503 X11=A(1,11) :X12=A(1,12) :X13=A(1,13) :X14=A(1,14) :X15=A(1,15) :X16=A(1,16)
504 X17=A(1,17) :A5=A(2,5) :A6=A(2,6) :A7=A(2,7) :A8=A(2,8) :A9=A(2,9)
505 A10=A(2,10) :A11=A(2,11) :A12=A(2,12) :A13=A(2,13) :A14=A(2,14) :A15=A(2,15)
506 A16=A(2,16) :A17=A(2,17) :E3=A(1,52) :E4=A(1,53) :E5=A(1,54) :E6=A(1,55)
507 E7=A(1,56) :E8=A(1,57) :E9=A(1,58) :E10=A(1,59) :U3=A(2,52) :U4=A(2,53)
508 U5=A(2,54) :U6=A(2,55) :U7=A(2,56) :U8=A(2,57) :U9=A(2,58) :U10=A(2,59)
510 XX=X*X :XA=X*A :XZ=X*Z :XG=X*G :AA=A*A :AZ=A*Z :AG=A*G :ZZ=Z*Z :ZG=Z*G :GG=G*G
511 YY=Y*Y :YB=Y*B :YU=Y*U :YV=Y*V :BB=B*B :BU=B*U :BV=B*V :UU=U*U :UV=U*V :VV=V*V
512 X18=A(1,18) :X19=A(1,19) :X20=A(1,20) :X21=A(1,21) :X22=A(1,22) :X23=A(1,23)
: X24=A(1,24) :X25=A(1,25) :X26=A(1,26) :X27=A(1,27) :X28=A(1,28) :X29=A(1,29)
513 X30=A(1,30) :X31=A(1,31) :X32=A(1,32) :X33=A(1,33) :X34=A(1,34) :X35=A(1,35)
: X36=A(1,36) :X37=A(1,37) :X38=A(1,38) :X39=A(1,39) :X40=A(1,40) :X41=A(1,41)
514 X42=A(1,42) :X43=A(1,43) :X44=A(1,44) :X45=A(1,45) :X46=A(1,46) :X47=A(1,47)
: X48=A(1,48) :X49=A(1,49) :A18=A(2,18) :A19=A(2,19) :A20=A(2,20) :A21=A(2,21) :
A22=A(2,22) :A23=A(2,23) :A24=A(2,24) :A25=A(2,25) :A26=A(2,26) :A27=A(2,27)
515 A28=A(2,28) :A29=A(2,29) :A30=A(2,30) :A31=A(2,31) :A32=A(2,32) :A33=A(2,33)
: A34=A(2,34) :A35=A(2,35) :A36=A(2,36) :A37=A(2,37) :A38=A(2,38) :A39=A(2,39)
517 A40=A(2,40) :A41=A(2,41) :A42=A(2,42) :A43=A(2,43) :A44=A(2,44) :A45=A(2,45)
: A46=A(2,46) :A47=A(2,47) :A48=A(2,48) :A49=A(2,49)
518 HH=H*H :HI=H*I :II=I*I :CC=C*C :DD=D*D :CD=C*D

```

```

519 FOR L=1 TO 2
520 B1=B(L, 1) : B2=B(L, 2) : B3=B(L, 3) : B4=B(L, 4) : F1=B(L, 50) : F2=B(L, 51)
521 A(L, 1)=B1*X+B2*Z : A(L, 2)=B1*A+B2*G : A(L, 3)=B1*C+B2*H+B3
522 A(L, 4)=B1*D+B2*I+B4 : A(L, 50)=F1*Y+F2*U : A(L, 51)=F1*B+F2*V
523 B5=B(L, 5) : B6=B(L, 6) : B7=B(L, 7) : B8=B(L, 8) : B9=B(L, 9) : B10=B(L, 10) : B11=B(L,
11) : B12=B(L, 12) : B13=B(L, 13) : B14=B(L, 14) : B15=B(L, 15) : B16=B(L, 16) : B17=B(L, 17)
: B51=2!*B5*X+B6*Z : B52=2!*B5*A+B6*G : B53=2!*B5*C+B6*H : B54=2!*B5*D+B6*I
524 F3=B(L, 52) : F4=B(L, 53) : F5=B(L, 54) : F6=B(L, 55) : F7=B(L, 56) : F8=B(L, 57) : F9=B(L,
58) : F10=B(L, 59) : B91=2!*B9*Z+B6*X : B92=2!*B9*G+B6*A : B57=B53+B7 : B58=B54+B3
525 B93=2!*B9*H+B6*C : B94=2!*B9*I+B6*D : B75=2!*B15*Y+B16*U : B76=2!*B15*B+B16*V :
B71=2!*B17*U+B16*Y : B72=2!*B17*V+B16*Z : B95=B93+B16 : B96=B94+B11
526 A(L, 5)=B1*X5+B2*A5+B5*YX+B6*XZ+B3*ZZ : A(L, 6)=B1*X6+B2*A6+B5*I*A+B91*G
528 A(L, 7)=B1*X7+B2*A7+B5*I*C+B7*X*H+B91*H+E10*Z
529 A(L, 8)=B1*X8+B2*A8+B5*I*D+B8*X*H+B91*I+B11*Z
529 A(L, 9)=B1*X9+B2*A9+B5*AA+B6*AG+B9*GG
531 A(L, 10)=B1*X10+B2*A10+B52*C+B7*A+B92*H+B10*G
532 A(L, 11)=B1*X11+B2*A11+B52*D+B8*A+B92*I+B11*G
533 A(L, 12)=B1*X12+B2*A12+B5*CC+(B6*H+B7)*C+B9*HH+B10*H+B12
534 A(L, 13)=B1*X13+B2*A13+B57*D+B8*C+B95*I+B11*H+B13
535 A(L, 14)=B1*X14+B2*A14+B5*DD+(B6*D+B11)*I+B8*D+B9*I+B14
536 A(L, 15)=B1*X15+B2*A15+B15*YY+B16*YU+B17*UU
537 A(L, 16)=B1*X16+B2*A16+B75*B+B71*V
538 A(L, 17)=B1*X17+B2*A17+B15*BB+B16*BV+B17*VV
539 A(L, 52)=F1*E3+F2*U3+(F3*X+F4*Z)*Y+(F7*X+F8*Z)*U
540 A(L, 53)=F1*E4+F2*U4+(F3*A+F4*G)*Y+(F7*A+F8*G)*U
541 A(L, 54)=F1*E5+F2*U5+(F3*C+F4*H+F5)*Y+(F7*C+F8*H+F9)*U
542 A(L, 55)=F1*E6+F2*U6+(F3*D+F4*I+F6)*Y+(F7*D+F8*I+F10)*U
543 A(L, 56)=F1*E7+F2*U7+(F3*X+F4*Z)*B+(F7*X+F8*Z)*V
544 A(L, 57)=F1*E8+F2*U8+(F3*A+F4*G)*B+(F7*A+F8*G)*V
545 A(L, 58)=F1*E9+F2*U9+(F3*C+F4*H+F5)*B+(F7*C+F8*H+F9)*V
546 A(L, 59)=F1*E10+F2*U10+(F3*D+F4*I+F6)*B+(F7*D+F8*I+F10)*V
547 B18=B(L, 18) : B19=B(L, 19) : B20=B(L, 20) : B21=B(L, 21) : B22=B(L, 22) : B23=B(L, 23)
: B24=B(L, 24) : B25=B(L, 25) : B26=B(L, 26) : B27=B(L, 27) : B28=B(L, 28) : B29=B(L, 29)
548 B30=B(L, 30) : B31=B(L, 31) : B32=B(L, 32) : B33=B(L, 33) : B34=B(L, 34) : B35=B(L, 35)
: B36=B(L, 36) : B37=B(L, 37) : B38=B(L, 38) : B39=B(L, 39) : B40=B(L, 40) : B41=B(L, 41)
549 B42=B(L, 42) : B43=B(L, 43) : B44=B(L, 44) : B45=B(L, 45) : B46=B(L, 46) : B47=B(L, 47)
: B48=B(L, 48) : B49=B(L, 49) : B85=B31*3!*H+B32 : B86=B31*3!*I+B33 : B81=B18*3!*X : B8
3=B18*3!*C+B20 : B84=B18*3!*D+B21 : X1=2!*X*D : X2=2!*C*H
550 A(L, 18)=B1*X18+B2*A18+B51*X5+B91*A5+XX*(B18*X+B19*Z)+ZZ*(B22*X+B31*Z)
551 A(L, 19)=B1*X19+B2*A19+B51*X6+B52*X5+B91*A6+B92*A5+B81*XA+B19*(2!*XA*Z+XX*G)+
B22*(2!*ZG*X+ZZ*A)+B31*3!*ZZ*G
552 A(L, 20)=B1*X20+B2*A20+B51*X7+B57*X5+B91*A7+B95*A5+B83*XX+B19*(2!*XZ*C+XX*H)+
+B22*(2!*XZ*H+ZZ*C)+B23*XZ+B85*ZZ
553 A(L, 21)=B1*X21+B2*A21+B51*X8+B58*X5+B91*A8+B96*A5+B84*XX+B19*(X1*Z+XX*I)+B22
*(2!*XZ*I+ZZ*D)+B24*XZ+B86*ZZ
554 A(L, 22)=B1*X22+B2*A22+B51*X9+B52*X6+B91*A9+B92*A6+B81*AA+B19*(AA*Z+2!*XA*G)+
B22*(GG*X+2!*ZG*A)+B31*3!*ZG*G
555 A(L, 23)=B1*X23+B2*A23+B51*X10+B52*X7+B57*X6+B91*A10+B92*A7+B95*A6+B83*2!*XA+
B19*2!*AZ*C+XG*C+XA*H)+(B22*2!*H+B23)*(XG+AZ)+(B22*C+B85)*2!*ZG
557 A(L, 24)=B1*X24+B2*A24+B51*X11+B52*X8+B58*X6+B91*A11+B92*A8+B96*A6+B19*2!*AZ
*Y+XG*D+XA*I)+B84*2!*XA+(B22*2!*I+B24)*(XG+AZ)+(B22*D+B86)*2!*ZG
559 A(L, 25)=B1*X25+B2*A25+B51*X12+B57*X7+B91*A12+B95*A7+B81*CC+B19*(CC*Z+X2*X)+B
20*2!*X*C+B22*(HH*X+X2*Z)+B23*(X*H+C*Z)+B25*X+(B85+B32)*H+B34)*Z
561 A(L, 26)=B1*X26+B2*A26+B51*X13+B57*X8+B58*X7+B91*A13+B95*A8+B96*A7+2!*B81*CD+
B19*2!*CD*Z+X*D*H+X*C*I)+B20*X1+B21*2!*X*C+B22*2!*HI*X+Z*I*C+Z*H*D)+B23*(X*I+D
*Z)+B24*(X*H+C*Z)+B26*X+(B85*2!*I+B33*2!*H+B35)*Z
563 A(L, 27)=B1*X27+B2*A27+B51*X14+B58*X8+B91*A14+B96*A8+B81*DD+B19*(DD*Z+X1*I)+B
21*X1+B22*(I1*X+2!*Z*1*D)+B24*(X*I+D*Z)+B27*X+(B86+B33)*I+B36)*Z
565 P1=B28*X+B37*Z : P2=B29*X+B38*Z : P3=B30*X+B39*Z
566 A(L, 28)=B1*X28+B2*A28+B51*X15+B91*A15+B75*E3+B71*U3+YY*P1+YU*P2+UU*P3
567 A(L, 29)=B1*X29+B2*A29+B51*X16+B91*A16+B75*E7+B76*E3+B71*U7+B72*U3+2!*YB*P1+(
YV+BU)*P2+2!*UV*P3
568 A(L, 30)=B1*X30+B2*A30+B51*X17+B91*A17+B76*E7+B72*U7+BB*P1+BV*P2+VV*P3
569 A(L, 31)=B1*X31+B2*A31+B52*X9+B92*A9+B18*AA*A+B19*AA*G+GG*(B22*A+B31*G)
570 A(L, 32)=B1*X32+B2*A32+B52*X10+B57*X9+B92*A10+B95*A9+B83*AA+B19*(2!*AG*C+AA*H
)+B22*(2!*AG*H+GG*C)+B23*AG+GG*B85
571 A(L, 33)=B1*X33+B2*A33+B52*X11+B58*X9+B92*A11+B96*A9+B84*AA+B19*(2!*AG*D+AA*I
)+B22*(2!*AG*I+GG*D)+B24*AG+GG*B86
572 A(L, 34)=B1*X34+B2*A34+B52*X12+B57*X10+B92*A12+B95*A10+(B83+B20)*A*C+B19*(CC*

```

```

G+X2*A)+B22*(HH*A+X2*G)+B25*A+B23*(A*H+C*G)+G*((B85+B32)*H+B34)
574 A(L,35)=B1*X35+B2*A35+B52*X13+B57*X11+B58*X10+B92*A13+B95*A11+B96*A10+B84*A*
C*21+B19*2!*(CD*G+A*D*H+A*C*I)+(B20*2!*D+B26)*A+B22*2!*(HI*A+G*I*C+G*H*D)+B23*(A
*I+D*G)+B24*(A*H+C*G)+G*((B85*I+B33*H)*2!+B35)
576 A(L,36)=B1*X36+B2*A36+B52*X14+B58*X11+B92*A14+B96*A11+B19*(DD*G+2!*A*D*I)+((
B84+B21)*D+B27)*A+B22*(II*A+2!*G*I*D)+B24*(A*I+D*G)+G*((B86+B33)*I+B36)
578 P4=B28*A+B37*G :P5=B29*A+B38*G :P6=B30*A+B39*G
579 A(L,37)=B1*X37+B2*A37+B52*X15+B92*A15+B15*2!*Y*E4+B16*(Y*U4+E*U) :B17*2!*U*U
4+Y*P4+Y*U*P5+U*U*P6
580 A(L,38)=B1*X38+B2*A38+B52*X16+B92*A16+B15*2!*Y*E8+B*E4)+B16*(Y*U8+B*U4+E*U
+E4*V)+B17*2!*U*U8+V*U4)+2!*Y*P4+(Y*V+U)*P5+2!*U*U*P6
581 A(L,39)=B1*X39+B2*A39+E52*X17+B92*A17+B15*2!*E*E8+B16*(B*U8+E8*V)+B17*2!*V*U
8+BB*P4+BV*P5+VV*P6
582 A(L,40)=B1*X40+B2*A40+B57*X12+B95*A12+(B18*C+B19*H+B20)*CC+(B23*H+B25)*C+(B2
2*C+B31*H+B32)*H/H+B34*H+B40
583 A(L,41)=B1*X41+B2*A41+B57*X13+B58*X12+B95*A13+B96*A12+B19*(2!*CD*H+CC*I)+B84
*CC+B20*2!*CD+B22*(2!*HI*C+HH*D)+B23*(C*I+D*H)+B24*C*H+B25*D+B26*C+(B85+B32)*HI+
B33*H+H+B34*I+B35*H+B41
585 A(L,42)=B1*X42+B2*A42+B57*X14+B58*X13+B95*A14+B96*A13+B83*DD+B19*(DD*H+2!*CD
*I)+B21*2!*CD+B22*(II*C+2!*HI*D)+(B23*D+B35)*I+B24*(C*I+D*H)+B26*D+B27*C+B85*II+
B33*2!*HI+B36*H+B42
587 P7=B28*C+B37*H+B43 :P8=B29*C+B38*H+B44 :P9=B30*C+B39*H+B45
588 A(L,43)=B1*X43+B2*A43+B57*X15+B95*A15+B75*E5+B16*(Y*U5+E5*U)+B71*U5+Y*P7+YU
*P8+U*U*P9
589 A(L,44)=B1*X44+B2*A44+B57*X16+B95*A16+B75*E9+B76*E5+B71*U9+B72*U5+2!*Y*P7+(
Y*V+U)*P8+2!*U*U*P9
590 A(L,45)=B1*X45+B2*A45+B57*X17+B95*A17+B76*E9+B72*U9+BB*P7+BV*P8+VV*P9
591 A(L,46)=B1*X46+B2*A46+B58*X14+B96*A14+DD*(B18*D+B19*I+B21)+D*(B22*II+B24*I+B
27)+(B31*I+B33)*II+B36*I+B46
592 K1=B28*D+B37*I+B47 :K2=B29*D+B38*I+B48 :K3=B30*D+B39*I+B49
593 A(L,47)=B1*X47+B2*A47+B58*X15+B96*A15+B75*E6+B71*U6+Y*Y*K1+Y*U*K2+U*U*K3
594 A(L,48)=B1*X48+B2*A48+B58*X16+B96*A16+B75*E10+B76*E6+B71*U10+B72*U6+2!*Y*Y*K1
+(Y*V+U)*K2+2!*U*U*K3
595 A(L,49)=B1*X49+B2*A49+B58*X17+B96*A17+B76*E10+B72*U10+BB*K1+BV*K2+VV*K3
596 NEXT L :RETURN
600 *ELECTRIC FRINGING FIELD ENTRANCE*
601 GOSUB 400 :IA=C1*IE1A-2!*IE1B
602 B(1,1)=1!+IA :B(1,4)=IE1A*AE :B(2,1)=- (2!*IE4A+IE1A*Q1)/AE :B(2,2)=1!-IA
606 B(1,5)=-.5/AE :B(2,5)=(4!*(C1+.5)*IE4A-1.5*IE4B-IE1A*IE5+IE7)-Q1*.5)/AE2
608 B(2,8)=4!*IE4A/AE :B(2,15)=(.5*Q1-C1*IE4A)/AE2
610 B(1,50)=1! :B(2,51)=1! :B(2,52)=Q1/AE2 :B(2,56)=1!/AE
612 B(1,18)=(.5!-2!*C1)/6!-4!/3!*IE8)/AE2 :B(1,21)=-.5/AE :B(1,28)=-.5*C1
620 B(2,18)=(.5*(C1-2!)*Q1-4!/3!*IE5)/AE3
622 B(2,19)=(.5*(C1-1!)-1!)/3!*IE6)/AE2 :B(2,21)=-.5*Q1/AE2
624 B(2,28)=(1!-1.5*C1)*Q1/AE3 :B(2,29)=-C1/AE2
626 B(2,47)=-B(2,21) :RETURN
650 *ELECTRIC FRINGING FIELD EXIT*
651 GOSUB 400
652 B(1,1)=1!-IA :B(1,4)=-IE1A*AE :B(2,1)=- (2!*IE4A+IE1A*Q2)/AE :B(2,2)=1+IA
656 B(1,5)=-.5/AE :B(2,5)=(4!*(C1+3!)*IE4A-6!*IE4B-4!*(IE1A*IE5-IE7)-Q2*.5)/AE2
658 B(2,8)=4!*IE4A/AE :B(2,15)=(.5*Q2-C1*IE4A)/AE2
660 B(1,50)=1! :B(2,51)=1! :B(2,52)=Q2/AE2 :B(2,56)=-1!/AE
662 B(1,18)=(C1-1!)/3!+4!/3!*IE8)/AE2 :B(1,21)=-.5/AE :B(1,28)=-.5*C1
670 B(2,18)=(.5*(C1-1!)*Q2-4!/3!*IE5)/AE3
672 B(2,19)=(1!)/3!*IE6-.5*(C1-1!))/AE2 :B(2,21)=-.5*Q2/AE2
674 B(2,28)=(1!-1.5*C1)*Q2/AE3 :B(2,29)=-C1/AE2
676 B(2,47)=-B(2,21) :RETURN

800 *ELECTRIC FIELD MAIN*
801 GOSUB 400 :U=SQR(2!) :RU=1!/U :W=WE*3.14159/180! :S=SIN(U*W) :C=COS(U*W)
802 CC=C*C-S*S :S2=S*S :SC=S*C*U :S3=S2*S*U :SW=U*S*W/12! :CW=C*W/12!
803 CA=1!-C :US=U*S :S2C=S2*C :CX=CA+7!*S2
804 B(1,1)=C :B(1,2)=S*RU*AE :B(1,4)=CA*AE*.5 :B(1,50)=1! :B(1,51)=W*AE
808 B(2,1)=-US/AE :B(2,2)=C :B(2,4)=US*.5 :B(2,51)=1!
810 B(1,5)=(C/6!+7!/12!*CC-.75)/AE :B(1,6)=(7!*S*C-4!*S)/3!*RU
812 B(1,8)=-AE*B(1,5) :B(1,9)=(2!/3!*C-7!/24!*CC-.375)*AE
814 B(1,11)=7!/6!*RU*S*CA*AE :B(1,14)=(CA-3.5*S2)/12!*AE :B(1,17)=-B(1,4)
818 B(2,5)=- (US+8!*SC)/6!/AE2 :B(2,6)=-4!/3!*C*(C-CC)/AE
320 B(2,8)=2!/3!*U*(S+2!*S*C)/AE :B(2,9)=-2!/3!*US*CA

```

```

822 B(2,11)=2!/3!*C-CC) :B(2,14)=-B(2,8)*.25*AE :B(2,17)=-B(2,4)
826 B(1,56)=US-W :B(1,57)=CA*AE :B(1,59)=(W-.5*US)*AE
828 B(2,56)=-CA/AE :B(2,57)=.5*US :B(2,59)=.5*CA
830 B(1,18)=-CX/18!+SW+17!/12!*S2C)/AE2
832 B(1,19)=(95!*US/72!+CW-49*SC/36-2.125*S3)/AE
834 B(1,21)=(CX/6!+1.5*SW+2.125*S2C)/AE
836 B(1,22)=14/9!*CA-.5*SW-28!/9!*S2+2.125*S2C
838 B(1,24)=-95!*US/72!-CW+49!*SC/36!+2.125*S3
840 B(1,27)=-CX/12!-.75*SW-1.0625*S2C :B(1,30)=(5!*CA-7!*S2)/6!
844 B(1,31)=(-115*US/144!+CW*.5+7!*SC/9!+17!*S3/48)*AE
846 B(1,33)=(-10!/9!*CA+.25*SW+133!/72!*S2-1.0625*S2C)*AE
848 B(1,36)=(137!*US/288!+CW*.25-35!*SC/72!-.53125*S3)*AE
850 B(1,39)=-7!*1!/12!*S*CA*AE
852 B(1,46)=(CA/36!+.125*SW+7!/144!*S2+17!/36!*S2C)*AE
854 B(1,49)=(-2!/3!*CA+7!/12!*S2)*AE
856 B(2,18)=(-65!/36!*US-CW*2!-4!/9!*SC+1.75*S3)/AE3
858 B(2,19)=(-14!/9!*CA-SW+28!/9!*S2-5.25*S2C)/AE2
860 B(2,21)=(2.875*US+3!*CW+2!*SC-2.625*S3)/AE2
862 B(2,22)=(187!/72!*US-CW-32!/9!*SC-2.625*S3)/AE
864 B(2,24)=(8!/9!*CA+SW-16!/9!*S2+5.25*S2C)/AE
866 B(2,27)=(-77!/48!*US-1.5*CW-4!/3!*SC+1.3125*S3)/AE
870 B(2,30)=(US-4!*SC)/3!/AE :B(2,31)=8!/9!*CA-.5*SW-16!/9!*S2+.875*S2C
872 B(2,33)=-187!/144!*US+CW*.5+16!/9!*SC+1.3125*S3
874 B(2,36)=-2!/9!*CA-.25*SW+4!/9!*S2-1.3125*S2C
876 B(2,39)=2!/3!*CA-2!*S2) :B(2,46)=77!/288!*US+CW*.25+2!/9!*SC-.21875*S3
880 B(2,49)=2!/3!*SC-.25*US)
882 RETURN
700 'MAGNETIC FRINGING FIELD ENTRANCE'
701 GOSUB 400 :E1=E1*3.1416 /180! :C=COS(E1) :TF=SIN(E1)/C :T2=TF*TF :T3=T2*TF
702 C2=C*C :C3=C2*C :TAM=TF/AM :T2M=T2/AM :RC=R1/C3 :TR=TF*RC :B3=.5*IM1*AM/C2
704 B(1,1)=1!-2!*TR*IM1 :B(1,3)=B3 :B(1,2)=-4!*TF*B3 :B(1,4)=B3
706 B(2,1)=(TF+R1*IM1*(TF*R1*(2!+3!*T2)-2!*T2/C)/C2)/AM :B4=.5*TF*IM1/C2
708 B(2,2)=1!+2!*IM1*(TR-T2/C2) :B(2,3)=B4 :B(2,4)=B4 :B(1,50)=1! :B(2,51)=1!
710 B(2,50)=-TF+(1!+2!*T2)/C*IM4)/AM :B(1,5)=-.5*T2M :B(1,12)=-.25*B3
712 B(1,13)=.5*B3 :B(1,14)=-.25*B3 :B(1,15)=(.5/C2+TF*(2.5+3!*T2)/C*IM4)/AM
714 B(2,5)=.5*RC/AM2 :B(2,6)=T2M :B(2,7)=-.5*TAM :B(2,8)=-.5*TAM
715 B(2,12)=-.25*B4 :B(2,13)=.5*B4 :B(2,14)=-.25*B4
716 B(2,15)=(TF*(.5+T2)+IM4/C*(T2*(3.5+5!*T2)-R1*TF*(2.5+3!*T2)/C)-.5*RC)/AM2
718 B(2,16)=-T2+TF/C*(1!+2!*T2)*IM4)/AM :B(1,52)=T2M :B(2,52)=-RC/AM2
720 B(2,53)=-1!/C2/AM :B(2,54)=.5*TAM :B(2,55)=B(2,54) :B(2,56)=-T2M
722 B(1,18)=-.5*TR/AM2 :B(1,19)=-T3/AM :B(1,20)=.25*T2M :B(1,21)=.25*T2M
724 B(1,28)=(-T2*(.5+T2)+1.5*TR)/AM2 :B(1,29)=TAM*(1!+2!*T2)
726 B(1,37)=TAM/C2 :B(1,40)=B3*.125 :B(1,41)=-B(1,40) :B(1,42)=B(1,41)
727 B(1,43)=-.25/C2/AM :B(1,46)=B(1,40) :B(1,47)=B(1,43)
728 B(2,18)=.5*(T3+TR*R1/C)/AM3 :B(2,19)=1.5*(T2+TR)/AM2 :B(2,20)=-.25*RC/AM2
730 B(2,21)=B(2,20) :B(2,22)=TAM*(1.5+T2) :B(2,23)=-.5*T2M :B(2,24)=-.5*T2M
732 B(2,25)=.375*TAM :B(2,26)=.25*TAM :B(2,27)=.375*TAM
736 B(2,28)=(.5*T3+RC*(.5+3!*T2-1.5*TF*R1/C))/AM3
738 B(2,29)=(2!*T2*T2-3!*TR)/AM2 :B(2,30)=TAM*(.5-T2)
740 B(2,37)=(3!*T2/C2-1.5*TR)/AM2 :B(2,38)=-2!*TAM/C2
742 B(2,40)=B4*.125 :B(2,41)=-B4*.125 :B(2,42)=-B4*.125
744 B(2,43)=(.25*RC-TF*(.5+T2))/AM2 :B(2,44)=.5*T2M :B(2,46)=B(2,40)
746 B(2,47)=B(2,43) :B(2,48)=.5*T2M :RETURN
750 'MAGNETIC FRINGING FIELD EXIT'
751 GOSUB 400 :E2=E2*3.1416 /180! :C=COS(E2) :TF=SIN(E2)/C :T2=TF*TF :T3=T2*TF
752 C2=C*C :C3=C2*C :TAM=TF/AM :T2M=T2/AM :RC=R2/C3 :TR=TF*RC :B3=-.5*IM1*AM/C2
754 B(1,1)=1!+2!*TR-T2/C2)*IM1 :B(1,3)=B3 :B(1,2)=4!*TF*B3 :B(1,4)=B3
756 B(2,1)=(TF+R2*IM1*(TF*R2*(2!+3!*T2)-2!*T2/C)/C2)/AM :B(2,2)=1!-2!*IM1*TR
760 B(1,50)=1! :B(2,51)=1! :B(2,50)=-TF+(1!+2!*T2)/C*IM4)/AM
762 B(1,5)=.5*T2M :B(1,15)=-(.5/C2+TF*(2.5+3!*T2)/C*IM4)/AM
763 B(1,12)=-.25*B3 :B(1,13)=.5*B3 :B(1,14)=-.25*B3
764 B(2,5)=.5*(RC-T3)/AM2 :B(2,6)=-T2M :B(2,7)=-.5*TAM :B(2,8)=-.5*TAM
766 B(2,15)=-.5*(RC+T3+4!*T2*IM4*(.5+T2)/C+TF*R2/C2*(5!+6!*T2)*IM4)/AM2
768 B(2,16)=(T2+TF/C*(1!+2!*T2)*IM4)/AM :B(1,52)=-T2M :B(2,52)=(TF/C2-RC)/AM2
770 B(2,53)=1!/C2/AM :B(2,54)=.5*TAM :B(2,55)=B(2,54) :B(2,56)=T2M
772 B(1,18)=.5*(TR-T2*T2)/AM2 :B(1,19)=-T3/AM :B(1,20)=-.25*T2M :B(1,21)=-.25*T2M
774 B(1,28)=(.5*T2*(2!+T2)-1.5*TR)/AM2 :B(1,29)=TAM*(1!+2!*T2)
776 B(1,37)=TAM/C2 :B(1,40)=B3*.125 :B(1,41)=-B3*.125 :B(1,42)=-B3*.125
777 B(1,43)=.25/C2/AM :B(1,46)=B(1,40) :B(1,47)=B(1,43)

```



```

778 B(2,18)=.5*(T3/C2+RC*(TF*R2/C-2!*T2))/AM3 : B(2,19)=1.5*(T2/C2-TR)/AM2
780 B(2,20)=.5*(T3-.5*RC)/AM2 : B(2,21)=B(2,20) : B(2,22)=TAM*(1.5+T2)
782 B(2,23)=.5*T2M : B(2,24)=.5*T2M : B(2,25)=.375*TAM : B(2,26)=.25*TAM
784 B(2,27)=.375*TAM : B(2,28)=1.5*(T3-TF*R2*R2/C2)/C2/AM3 : B(2,30)=TAM*(.5-T2)
786 B(2,28)=1.5*(T3-TF*R2*R2/C2)/C2/AM3
788 B(2,29)=(3!*TR-T2*(2!*T2))/AM2 : B(2,37)=1.5*(T2/C2+TR)/AM2
790 B(2,38)=-2!*TAM/C2 : B(2,43)=(.5*T3+.25*RC)/AM2 : B(2,44)=-.5*T2M
796 B(2,47)=B(2,43) : B(2,48)=-.5*T2M : RETURN
900 'MAGNETIC FIELD MAIN'
901 W=WM*3.1416 /180! : S=SIN(W) : C=COS(W) : S2=S*S : C2=C*C : SC=S*C : S3=S2*S
902 B3=(1!-C)*.5*AM : B4=S*.5 : B5=B4/AM : B5=S*.25
904 GOSUB 400 : B(1,1)=C : B(1,2)=S*AM : B(1,3)=B3 : B(1,4)=B3
906 B(2,1)=-S/AM : B(2,2)=C : B(2,3)=B4 : B(2,4)=B4
910 B(1,50)=1! : B(1,51)=W*AM : B(2,51)=1! : B(1,5)=B5*S
912 B(1,6)=SC : B(1,7)=S2*.5 : B(1,8)=S2*.5 : B(1,9)=B3*C
914 B(1,10)=B3*S : B(1,11)=B3*S : B(1,12)=.125*(C+C2-2!)*AM
918 B(1,13)=.25*(C2-C)*AM : B(1,14)=B(1,12) : B(1,17)=-B3
920 B(1,56)=S : B(1,57)=B3*2! : B(1,58)=(W-S)*AM*.5 : B(1,59)=B(1,58)
924 B(2,7)=B5 : B(2,8)=B5 : B(2,9)=-B4 : B(2,12)=-S*.375
926 B(2,13)=-B6 : B(2,14)=-S*.375 : B(2,17)=-B4 : B(1,20)=.25*S2/AM
930 B(1,21)=B(1,20) : B(1,22)=-.5*S2 : B(1,25)=-S2*.375 : B(1,26)=-S2*.25
932 B(1,27)=-S2*.375 : B(1,30)=-.5*S2 : B(1,31)=-B3*S
936 B(1,32)=.25*(C-C2+S2)*AM : B(1,33)=B(1,32)
938 B(1,34)=(SC-S)*AM*.125 : B(1,35)=B3*S*.5 : B(1,36)=B(1,34)
940 B(1,39)=-B3*S : B(1,40)=.125*S2*AM+(1!-C)*AM/16!
942 B(1,41)=.125*S2*AM-(1!-C)*AM/16! : B(1,42)=B(1,41)
944 B(1,45)=B3*C*.5 : B(1,46)=B(1,40) : B(1,49)=B(1,45)
950 B(2,18)=-.5*S3/AM3 : B(2,19)=1.5*S2*C/AM2 : B(2,20)=.75*S3/AM2
952 B(2,21)=B(2,20) : B(2,22)=-1.5*S*C2/AM : B(2,23)=-1.5*S2*C/AM
954 B(2,24)=B(2,23) : B(2,25)=-.375*(S3+S)/AM : B(2,26)=-(.75*S3+.25*S)/AM
956 B(2,27)=B(2,25) : B(2,30)=-B5 : B(2,31)=-B4*SC : B(2,32)=.75*S*C2
960 B(2,33)=B(2,32) : B(2,34)=.375*S2*C : B(2,35)=.75*S2*C
962 B(2,36)=B(2,34) : B(2,40)=.0625*(S3+5!*S) : B(2,41)=.1875*(S+S3)
966 B(2,42)=B(2,41) : B(2,45)=B6 : B(2,46)=B(2,40) : B(2,49)=B6
968 RETURN

1000 'MATRIX MULTIPLICATION FOR QUADREUPOLE ONLY'
1001 X=A(1,1) : A=A(1,2) : Z=A(2,1) : G=A(2,2) : Y=A(1,50) : B=A(1,51) : U=A(2,50) : V=A(2,51)
1002 X8=A(1,8) : X11=A(1,11) : A8=A(2,8) : A11=A(2,11)
1007 E6=A(1,55) : E10=A(1,59) : U6=A(2,55) : U10=A(2,59)
1010 XX=X*X : XA=X*A : XZ=X*Z : XG=X*G : AA=A*A : AZ=A*Z : AG=A*G : ZZ=Z*Z : ZG=Z*G : GG=G*G
1011 YY=Y*Y : YB=Y*B : YU=Y*U : YV=Y*V : BB=B*B : BU=B*U : BV=B*V : UU=U*U : UV=U*V : VV=V*V
1012 X18=A(1,18) : X19=A(1,19) : X22=A(1,22) : X27=A(1,27) : X28=A(1,28) : X29=A(1,29)
1013 X30=A(1,30) : X31=A(1,31) : X36=A(1,36) : X37=A(1,37) : X38=A(1,38) : X39=A(1,39)
1015 A18=A(2,18) : A19=A(2,19) : A22=A(2,22) : A27=A(2,27) : A28=A(2,28) : A29=A(2,29)
1016 A30=A(2,30) : A31=A(2,31) : A36=A(2,36) : A37=A(2,37) : A38=A(2,38) : A39=A(2,39)
1019 FOR L=1 TO 2
1020 B1=B(L,1) : B2=B(L,2) : F1=B(L,50) : F2=B(L,51)
1021 A(L,1)=B1*X+B2*Z : A(L,2)=B1*A+B2*G : A(L,50)=F1*Y+F2*U : A(L,51)=F1*B+F2*V
1023 B8=B(L,8) : B11=B(L,11) : F6=B(L,55) : F10=B(L,59)
1025 A(L,8)=B1*X8+B2*A8+B8*X+B11*Z : A(L,11)=B1*X11+B2*A11+B8*A+B11*G
1027 A(L,55)=F1*E6+F2*U6+F6*Y+F10*U : A(L,59)=F1*E10+F2*U10+F6*B+F10*V
1030 B18=B(L,18) : B19=B(L,19) : B22=B(L,22) : B27=B(L,27) : B28=B(L,28) : B29=B(L,29)
1032 B30=B(L,30) : B31=B(L,31) : B36=B(L,36) : B37=B(L,37) : B38=B(L,38) : B39=B(L,39)
1034 A(L,18)=B1*X18+B2*A18+XX*(B18*X+B19*Z)+ZZ*(B22*X+B31*Z)
1036 A(L,19)=B1*X19+B2*A19+B18*3!*XX*A+B19*(2!*XA*Z+XX*G)+B22*(2!*ZG*X+ZZ*A)+B31*3!*ZZ*G
1038 A(L,22)=B1*X22+B2*A22+B18*3!*XA*A+B19*(AA*Z+2!*XA*G)+B22*(GG*X+2!*ZG*A)+B31*3!*ZG*G
1040 A(L,27)=B1*X27+B2*A27+B8*X8+B11*A8+B27*X+B36*Z
1041 P1=B28*X+B37*Z : P2=B29*X+B38*Z : P3=B30*X+B39*Z
1042 A(L,28)=B1*X28+B2*A28+YY*P1+YU*P2+UU*P3
1044 A(L,29)=B1*X29+B2*A29+2!*YB*P1+(YV+BU)*P2+2!*UV*P3
1046 A(L,30)=B1*X30+B2*A30+BB*P1+BV*P2+VV*P3
1048 A(L,31)=B1*X31+B2*A31+B18*AA*A+B19*AA*G+GG*(B22*A+B31*G)
1050 A(L,36)=B1*X36+B2*A36+B8*X11+B11*A11+B27*A+G*B36
1051 P4=B28*A+B37*G : P5=B29*A+B38*G : P6=B30*A+B39*G
1052 A(L,37)=B1*X37+B2*A37+YY*P4+YU*P5+UU*P6
1054 A(L,38)=B1*X38+B2*A38+2!*YB*P4+(YV+BU)*P5+2!*UV*P6

```



```

1056 A(L,39)=B1*X39+B2*A39+BB*P4+BV*P5+VV*P6
1058 NEXT L :RETURN
1100 'ELECTRIC QUADRUPOLE '
1101 GOSUB 400 :PN=ABS(QK)/QK :K=QK :KK=K*K :KKI1=KK*IQ1 :U3=KKI1*PN
1102 A=1!-U3 :B=-2!*KK*IQ2*PN :U=-KK*KK*IQ3 :V=1!+U3
1106 U4=1!/6!*KK*PN :U5=-7!/6!*KK*KK*IQ4 :U6=.5*KK*KK*IQ4 :U7=-.5*KK*PN
1108 F=QK*QL :EQ=EXP(F)
1110 IF PN=1! THEN 1115
1112 S=(EQ-1!/EQ)*.5 :C=(EQ+1!/EQ)*.5 :SH=SIN(F) :CH=COS(F) :GOTO 1120
1115 S=SIN(F) :C=COS(F) :SH=(EQ-1!/EQ)*.5 :CH=(EQ+1!/EQ)*.5
1120 D=QL :H=QK :HH=H*H :HHH=HH*H :SD=S*D :CD=C*D :SDD=SDD*D :CDD=C*D
1122 HCD=H*CD :HS=H*S :V2=S/H :W1=-HS*PN :V51=SH/H :W50=H*SH*PN
1125 V8=-.5*H*SD*PN :V11=-.5*(S/H-CD) :W6=-.5*H*(HCD+S)*PN
1127 V55=-.5*H*SH*D*PN :V59=-.5*(SH/H-CH*D) :W55=-.5*H*(H*CH*D+SH)*PN
1129 V18=-.5*HHH*SD :V19=-.5*(HH*CD-HS)*PN
1130 V27=-.125*(3!*H*SD+HH*CD)*PN :V36=-.125*(S/H-CD+H*SDD)*PN
1134 W18=-.5*HHH*(HCD+S) :W27=-(.625*H*HCD+.375*HS)*PN+.125*HHH*SDD
1140 X1=C*A+V2*U :X2=C*B+V2*V :Y1=W1*A+C*U :Y2=W1*B+C*V
1143 X50=CH*V+V51*U :X51=-CH*B+V51*A :Y50=W50*V+CH*U :Y51=-W50*B+CH*A
1145 X8=C*U3+V8*A+V11*U :X11=-V2*U3+V8*B+V11*V
1146 X55=-CH*U3+V55*V+V59*U :X59=V51*U3-V55*B+V59*A
1147 Y8=W1*U3+W8*A+V8*U :Y11=-C*U3+W8*B+V8*V
1148 Y55=-W50*U3+W55*V+V55*U :Y59=CH*U3-W55*B+V55*A
1150 AA=A*A :VV=V*V
1151 X18=C*U4+V2*U5+AA*V18*A+V19*U :Y18=W1*U4+C*U5+AA*W18*A+V18*U
1152 X19=V18*3!*B+V19*A-V8*2!*U :Y19=W18*3!*B+V18*A-W8*2!*U
1153 X22=V19*2!*B-V8*V-V11*3!*U :Y22=V18*2!*B-W8*V-V8*3!*U
1155 X27=V8*U3+V27*A+V36*U :Y27=W8*U3+W27*A+V27*U
1157 X28=V2*U6-V18*V-V19*U :Y28=C*U6-W18*V-V18*U
1158 X29=2!* (V18*B-V8*U) :Y29=2!* (W18*B-W8*U)
1159 X30=-V8*AA*A-V11*U :Y30=-W8*AA*A-V8*U
1160 X31=-V8*B-V11*V*VV :Y31=-W8*B-V8*V*VV
1162 X36=V11*U3+V27*B+V36*V :Y36=V8*U3+W27*B+V27*V
1164 X37=V2*U7-V18*B-V19*VV*V :Y37=C*U7-W18*B-V18*VV*V
1165 X38=2!* (V19*B-V11*U) :Y38=2!* (V18*B-V8*U)
1166 X39=-V8*B-V11*A :Y39=-W8*B-V8*A
1170 B(1,1)=V*X1+B*Y1 :B(1,2)=V*X2+B*Y2
1171 B(2,1)=U*X1+A*Y1 :B(2,2)=U*X2+A*Y2
1172 B(1,50)=A*X50-B*Y50 :B(1,51)=A*X51-B*Y51
1173 B(2,50)=U*X50+V*Y50 :B(2,51)=U*X51+V*Y51
1174 B(1,8)=V*X8+B*Y8-U3*X1 :B(1,11)=V*X11+B*Y11-U3*X2
1175 B(1,55)=A*X55-B*Y55+U3*X50 :B(1,59)=A*X59-B*Y59+U3*X51
1176 B(2,8)=U*X8+A*Y8+U3*Y1 :B(2,11)=U*X11+A*Y11+U3*Y2
1177 B(2,55)=U*X55+V*Y55-U3*Y50 :B(2,59)=U*X59+V*Y59-U3*Y51
1179 XS1=X1*X1 :YS2=Y2*Y2 :XS2=X2*X2 :YS1=Y1*Y1
1180 B(1,18)=V*X18+B*Y18-U4*XS1*X1 :B(2,18)=U*X18+A*Y18+U5*XS1*X1
1181 B(1,19)=V*X19+B*Y19-U4*3!*XS1*X2 :B(2,19)=U*X19+A*Y19+U5*3!*XS1*X2
1182 B(1,22)=V*X22+B*Y22-U4*3!*X1*XS2 :B(2,22)=U*X22+A*Y22+U5*3!*X1*XS2
1183 B(1,27)=V*X27+B*Y27-U3*X8 :B(2,27)=U*X27+A*Y27+U3*Y8
1184 P1=U6*X1-U7*Y1 :P2=U6*X2-U7*Y2
1185 B(1,28)=V*X28+B*Y28 :B(2,28)=U*X28+A*Y28+P1*X50*X50
1186 B(1,29)=V*X29+B*Y29 :B(2,29)=U*X29+A*Y29+P1*2!*X50*X51
1187 B(1,30)=V*X30+B*Y30 :B(2,30)=U*X30+A*Y30+P1*X51*X51
1188 B(1,31)=V*X31+B*Y31-U4*XS2*X2 :B(2,31)=U*X31+A*Y31+U5*XS2*X2
1189 B(1,36)=V*X36+B*Y36-U3*X11 :B(2,36)=U*X36+A*Y36+U3*Y11
1191 B(1,37)=V*X37+B*Y37 :B(2,37)=U*X37+A*Y37+P2*X50*X50
1192 B(1,38)=V*X38+B*Y38 :B(2,38)=U*X38+A*Y38+P2*2!*X50*X51
1193 B(1,39)=V*X39+B*Y39 :B(2,39)=U*X39+A*Y39+P2*X51*X51 :RETURN
1200 'ELECTRIC OCTAPOLE '
1202 Z=OLE :F=OKE :FZ=F*Z :FZ2=FZ*Z :FZ3=FZ2*Z :FZ4=FZ3*Z :FZ5=FZ4*Z
1204 GOSUB 400 :B(1,1)=1! :B(1,2)=Z :B(2,2)=1! :B(1,50)=1! :B(1,51)=Z :B(2,51)=1!
1206 B(1,18)=FZ2*.5 :B(1,19)=FZ3*.5 :B(1,22)=FZ4*.25 :B(1,28)=-FZ2*1.5
1208 B(1,29)=-FZ3 :B(1,30)=-FZ4*.25 :B(1,31)=FZ5*.05
1210 B(1,37)=-FZ3*.5 :B(1,38)=-FZ4*.5 :B(1,39)=-FZ5*.15
1212 B(2,18)=F*Z :B(2,19)=FZ2*1.5 :B(2,22)=FZ3 :B(2,28)=-FZ*3!
1214 B(2,29)=-FZ2*3! :B(2,30)=-FZ3 :B(2,31)=FZ4*.25
1216 B(2,37)=-FZ2*1.5 :B(2,38)=-FZ3*2! :B(2,39)=-FZ4*.75 :RETURN

```

(北京医科大学 吴志儒译,经作者同意全译,原文见松田 久.〔日〕質量分析,1989;37(3):149-165.
中国质谱学会 王梦瑞,三环相 模吴曼校)

