

01;10;12

Влияние флуктуаций потенциалов на аппаратные функции электростатических анализаторов

© В.А. Курнаев, В.А. Урусов

Московский государственный инженерно-физический институт,
115409 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 29 января 1996 г.)

Получено уравнение, связывающее сигнал на выходе электростатического дисперсионного анализатора и функцию распределения по энергии попадающих в него заряженных частиц при учете флуктуаций потенциалов на отклоняющих электродах. Получены решения этого уравнения. Рассмотрено влияние шума на аппаратные функции анализаторов.

Введение

В предыдущей работе [1] было показано, что функция распределения заряженных частиц по энергии на входе в электростатический анализатор и сигнал на выходе анализатора связаны соотношением

$$I(U_1, \dots, U_n) = \int_0^{+\infty} f(E) A(U_1/E, \dots, U_n/E) dE, \quad (1)$$

где $A(U_1/E, \dots, U_n/E)$ — аппаратная функция анализатора; U_1, \dots, U_n — потенциалы на электродах анализатора; $f(E)$ — функция распределения заряженных частиц по энергии.

Соотношение (1) выполняется и при учете полей рассеяния, обусловленных реальной геометрией анализатора. Однако вид аппаратной функции анализатора заряженных частиц определяется не только его геометрией, но и флуктуациями полей внутри анализатора, т. е. шумами. Если рассматривать флуктуации, характерный период которых много больше времени пролета частицы в анализаторе, то в этом случае можно считать, что флуктуирует энергия настройки анализатора.

В данной работе на примере дисперсионного электростатического анализатора рассмотрим влияние шума на его аппаратную функцию.

Влияние флуктуаций на аппаратную функцию анализатора с одним отклоняющим электродом

Предположим, что для электростатического анализатора, у которого под потенциалом находится только один электрод, напряжение \check{U} на электроде анализатора флуктуирует около среднего значения потенциала U с функцией распределения $\varphi(\check{U}, U)$, удовлетворяющей следующим условиям

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}, U) d\check{U} = 1,$$

$$U = \langle \check{U} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \check{U} \cdot \varphi(\check{U}, U) d\check{U},$$

$$\sigma^2(\check{U}) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\check{U} - U)^2 \varphi(\check{U}, U) d\check{U}. \quad (2)$$

Если время измерения тока частиц на выходе анализатора много больше характерного периода флуктуаций, то, используя (1), среднее значение тока на выходе анализатора можно представить в виде

$$I(U) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}, U) \tilde{I}(\check{U}) d\check{U} = I_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}, U) \int_0^{+\infty} f(E) A\left(\frac{q\check{U}}{E}\right) dE d\check{U} \quad (3)$$

или

$$I(U) = I_0 \int_0^{+\infty} f(E) B(U, E) dE, \quad (4)$$

где

$$B(U, E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}, U) A(q\check{U}/E) d\check{U} \quad (5)$$

— аппаратная функция анализатора с учетом шума.

Найдем приближенное решение этого уравнения. Разложив в ряд Тейлора функцию $\tilde{I}(\check{U})$ в окрестности точки U , полагая, что в первом приближении $\tilde{I}(U) \approx I(U)$, и учитывая члены ряда, содержащие производные не выше второй, получаем из (3) выражение

$$\tilde{I}(U) \approx I(U) - \frac{\sigma^2}{2} \frac{d^2 I}{dU^2}. \quad (6)$$

Решение уравнения

$$\tilde{I}(U) = I_0 \int_0^{+\infty} f(E) A\left(\frac{qU}{E}\right) dE \quad (7)$$

может быть получено в виде ряда [1]

$$f(kU) = \sum_{n=0}^{+\infty} B_n U^{n-1} \frac{d\tilde{I}^n(U)}{dU^n}, \quad (8)$$

где

$$B_0 = \frac{1}{kC_{00}}, \quad B_n = -\frac{1}{C_{n0}} \sum_{i=0}^n B_i \frac{C_{i(n-i)}}{(n-i)!}.$$

Окончательно с точностью до членов со второй производной для "истинного распределения" как функции выходного сигнала $I(U)$ получаем

$$f(kU) \approx \frac{i(U)}{C_{10}I_0U} - \frac{Ud^2I/dU^2}{2C_{10}I_0} \left(1 - \frac{C_{10}^2}{C_{00}C_{20}} + \frac{\sigma^2}{U^2} \right), \quad (9)$$

где $C_{nm} = \int_0^{+\infty} z^{n-1}(z-k)^m A(q/z) dz$ — постоянные.

Коэффициент анализатора целесообразно выбрать таким образом, чтобы в области энергий, где влияние шума пренебрежимо мало, коэффициент анализатора определялся из выражения [1]

$$k = C_{10}/C_{00}. \quad (10)$$

Рассмотрим теперь влияние шума на вид аппаратной функции анализатора. При произвольной функции распределения шума $\varphi(\check{U}, U)$ приближенное аналитическое выражение для аппаратной функции анализатора $B(U, E)$ можно получить в двух предельных случаях: в области энергий, где ширина аппаратной функции определяется в основном шумами, и в области энергий, где влияние шума на аппаратную функцию мало.

В первом случае, применяя к интегралу в выражении (5) теорему о среднем значении [2] и предполагая, что для $z \leq 0$ $A(q/z) \equiv 0$, получаем

$$B(U, E) = C_{00}\hat{U}\varphi(\hat{U}, U). \quad (11)$$

Предполагая, что $\check{U}\varphi(\check{U}, U)$ слабо меняется на ширине аппаратной функции $A(q\check{U}/E)$, имеем

$$\hat{U}\varphi(\hat{U}, U) \approx \frac{E}{k}\varphi\left(\frac{E}{k}, U\right). \quad (12)$$

Подставляя это выражение в (11), окончательно получаем

$$B(U, E) \approx (C_{00}/k)E\varphi\left(\frac{E}{k}, U\right), \quad (13)$$

т.е. вид аппаратной функции определяется в основном функцией распределения по шумам, а значение аппаратной функции в максимуме зависит от энергии частиц.

Например, для функции распределения шума вида $\varphi(\check{U} - U)$ из выражения (13) следует, что пропускание анализатора с уменьшением энергии частиц будет падать. Пропусканием анализатора мы называем коэффициент, равный отношению максимального тока на выходе

анализатора к току моноэнергетического пучка на входе анализатора.

Во втором случае, поскольку распределение шума $\varphi(\check{U}, U)$ значительно уже аппаратной функции $A(q\check{U}/E)$, применяя теорему о среднем и предполагая, что $A(q\check{U}/E) \approx A(qU/E)$, получаем

$$B(U, E) \approx A\left(\frac{qU}{E}\right), \quad (14)$$

т.е. ширина аппаратной функции будет линейно возрастать с ростом энергии, а пропускание анализатора останется неизменным.

Проследим, как меняется вид аппаратной функции анализатора при наличии шума в зависимости от энергии на примере функции распределения по шумам вида $\varphi(\check{U}, U) = \varphi(\check{U} - U)$. Для этого рассмотрим аппаратную функцию $B(U, E)$ как функцию распределения по U , которую можно охарактеризовать средним значением $\langle U \rangle$ и дисперсией $\langle \Delta U^2 \rangle$,

$$\langle U \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} U B(U, E) dU}{\int_{-\infty}^{+\infty} B(U, E) dU}, \quad (15)$$

$$\langle \Delta U^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (U - \langle U \rangle)^2 B(U, E) dU}{\int_{-\infty}^{+\infty} B(U, E) dU}. \quad (16)$$

После несложных математических преобразований получим, что среднее значение потенциала пропорционально энергии

$$\langle U \rangle = \frac{C_1}{C} E, \quad (17)$$

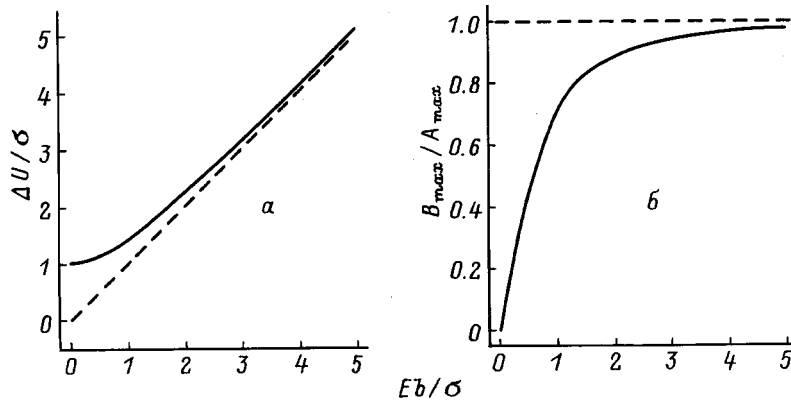
где $C = \int_{-\infty}^{+\infty} A(qx) dx$, $C_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} xA(qx) dx$ — постоянные; $x = \check{U}/E$.

Дисперсию аппаратной функции вычислим, подставив (17) в выражение (16) и проинтегрировав,

$$\langle \Delta U^2 \rangle = \sigma^2 + b^2 E^2, \quad (18)$$

где $b^2 = (C_2C - C_1^2)/C^2$, $C_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 A(qx) dx$.

На рисунке качественно показано поведение ширины аппаратной функции и ее значения в максимуме в зависимости от энергии E . Полученные выражения (13), (14), (18) позволяют сделать вывод, что в области энергий, когда $E \ll \sigma/b$, ширина аппаратной функции почти не зависит от энергии, а ее значение в максимуме с энергией линейно растет. В области энергий, где $E \gg \sigma/b$, наоборот, линейно растет с увеличением энергии ширина аппаратной функции, а значение в максимуме остается постоянным. Величина $E^2 b^2$ соответствует дисперсии



Зависимости для дисперсионного электростатического анализатора: *a* — отношения дисперсии аппаратной функции ΔU (с учетом влияния флуктуаций потенциала) и дисперсии шума σ , *b* — отношения высоты аппаратной функции B_{\max} (с учетом влияния флуктуаций потенциалов) к высоте аппаратной функции A_{\max} (без учета шума) от отношения дисперсии аппаратной функции (без учета шума) bE к величине дисперсии флуктуаций потенциалов на электродах анализатора σ .

аппаратной функции по U в отсутствие флуктуаций потенциала и может быть определена экспериментально.

Следует отметить, для рассмотренной функции распределения по шумам вида $\varphi(\check{U} - U)$ решение уравнения (3) может быть найдено в общем виде. Применяя преобразования Фурье к уравнению (3), получим решение в виде ряда [3]

$$\int_0^{+\infty} f(E) A\left(\frac{qU}{E}\right) dE = \sum_{s=0}^{+\infty} D_s \frac{d^s I(U)}{dU^s} = \check{I}(U), \quad (19)$$

где

$$D_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(z) dz = 1, \quad \sum_{s=0}^m D_s \int_{-\infty}^{+\infty} z^{m-s} \varphi(z) dz \frac{1}{(m-s)!} = 0. \quad (20)$$

Решение уравнения (19) в виде ряда найдено в работе [1]. Для данного случая оно имеет вид

$$f(kU) = \sum_{n=0}^{+\infty} B_n U^{n-1} \frac{d\check{I}^n(U)}{dU^n}, \quad (21)$$

где

$$B_0 = \frac{1}{kC_{00}}, \quad B_n = -\frac{1}{C_{n0}} \sum_{i=0}^n B_i \frac{C_{i(n-i)}}{(n-i)!}. \quad (22)$$

Окончательно для общего решения получаем

$$f(kU) = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} D_m B_n U^{n-1} \frac{d^{m+n} I(U)}{dU^{m+n}}, \quad (23)$$

где коэффициент анализатора k определяется выражением (7).

Влияние шума на аппаратную функцию анализатора с двумя отклоняющими электродами

Все рассуждения, сделанные выше, относились к случаю, когда потенциал подавался на один электрод. Рассмотрим теперь случай, когда потенциалы подаются на два электрода. Выражение для среднего значения тока на выходе анализатора при условии, что время измерения много больше характерного периода флуктуаций, имеет вид

$$\begin{aligned} I(U_1, U_2) &= I_0 \iint_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) \int_0^{+\infty} A\left(\frac{\check{U}_1}{E}, \frac{\check{U}_2}{E}\right) f(E) \\ &\times dE d\check{U}_1 d\check{U}_2 = \iint_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) \\ &\times \check{I}(\check{U}_1, \check{U}_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2, \end{aligned} \quad (24)$$

где $\varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2)$ — нормированная функция распределения по шумам потенциалов, удовлетворяющая условиям

$$\begin{aligned} \iint_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2 &= 1, \\ \iint_{-\infty}^{+\infty} \check{U}_1 \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2 &= U_1, \\ \iint_{-\infty}^{+\infty} \check{U}_2 \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2 &= U_2, \\ \iint_{-\infty}^{+\infty} (\check{U}_1 - U_1)^2 \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2 &= \sigma_1^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\check{U}_2 - U_2)^2 \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2 = \sigma_2^2, \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\check{U}_1 - U_1)(\check{U}_2 - U_2) \varphi(\check{U}_1, \check{U}_2, U_1, U_2) d\check{U}_1 d\check{U}_2 \\ & = \text{cov}(\check{U}_1, \check{U}_2). \end{aligned} \quad (25)$$

Предполагая, что функция $\check{I}(\check{U}_1, \check{U}_2)$ слабо меняется на ширине функции распределения по шумам, разлагая функцию $\check{I}(\check{U}_1, \check{U}_2)$ в ряд Тейлора в окрестности точки (U_1, U_2) , предполагая, что в первом приближении $\check{I}(U_1, U_2) = I(U_1, U_2)$, и оставляя члены с производными не более чем второго порядка, из уравнения (24) получаем

$$\begin{aligned} \check{I}(U_1, U_2) \approx I(U_1, U_2) - \frac{1}{2} \left(\sigma_1^2 \frac{\partial^2 I}{\partial U_1^2} + 2\text{cov}(\check{U}_1, \check{U}_2) \right. \\ \left. \times \frac{\partial^2 I}{\partial U_1 \partial U_2} + \sigma_2^2 \frac{\partial^2 I}{\partial U_2^2} \right). \end{aligned} \quad (26)$$

Если средние значения потенциалов линейно связаны $U_2 = \lambda U_1$, то с учетом того что выражение для функции распределения по энергии через функцию $\check{I}(U_1, U_2)$ имеет вид [1]

$$f(kU_1) = \frac{1}{I_0} \sum_{n=0}^{\infty} B_n U_1^{n-1} \frac{d\check{I}^n(U_1, \lambda U_1)}{dU_1^n}, \quad (27)$$

решение уравнения (24) с точностью до членов со второй производной будет следующим:

$$\begin{aligned} f(kU_1) \approx \frac{1}{I_0} \left(\frac{I(U_1, \lambda U_1)}{C_{10} U_1} - \frac{U_1}{2} \frac{C_{20} C_{00} - C_{10}^2}{C_{00} C_{10} C_{20}} \frac{d^2 I(U_1, \lambda U_1)}{dU_1^2} \right) \\ - \frac{U_1}{2I_0} \left(\sigma_1^2 \frac{\partial^2 I(U_1, U_2)}{\partial U_1^2} + 2\text{cov}(\check{U}_1, \check{U}_2) \right. \\ \left. \times \frac{\partial^2 I(U_1, U_2)}{\partial U_1 \partial U_2} + \sigma_2^2 \frac{\partial^2 I(U_1, U_2)}{\partial U_2^2} \right) \Bigg|_{U_2 = \lambda U_1}. \end{aligned} \quad (28)$$

Из выражения (28) следует, что для более точного восстановления энергетического спектра с учетом поправок, связанных с шумами, при условии, что средние значения потенциалов линейно связаны, необходимо в общем случае знать значения выходного сигнала не только в точках, где потенциалы линейно связаны, но и в некоторой их окрестности. В случае, если выполняются дополнительные условия на шумы потенциалов

$$\sigma_2^2 = \lambda^2 \sigma_1^2, \quad \text{cov}(\check{U}_1, \check{U}_2) = \lambda \sigma_1^2, \quad (29)$$

выражение (28) преобразуется в выражение в полных производных и для восстановления такого спектра с точностью до поправок, связанных со второй производной,

достаточно знать сигнал в точках, где средние значения потенциалов линейно связаны.

Отметим, что результаты, полученные для спектрометров с двумя электродами, могут быть легко обобщены на случай анализатора с n -электродами.

Заключение

В заключение кратко изложим полученные результаты.

1. Уравнения (3), (24) позволяют описать связь между функцией распределения заряженных частиц по энергии и выходным сигналом электростатического анализатора, работающего в режиме спектрометра, с учетом влияния флуктуаций потенциалов на его электродах.

2. Приближенные решения этих уравнений (9), (28) для произвольной функции распределения по шумам потенциалов позволяют учитывать поправки, связанные с шумами, на восстановленное энергетическое распределение.

3. Для анализаторов с несколькими электродами, находящимися под разными потенциалами, недостаточно знать значения выходного сигнала в точках, где средние значения потенциалов линейно связаны. Для более точного восстановления истинного энергетического распределения необходимо знать значения выходного сигнала в окрестности этих точек и дисперсии шумов.

4. Рассмотрение поведения аппаратной функции в зависимости от различных параметров на примере анализатора с одним отклоняющим электродом показывает, что в области энергий, где ширина аппаратной функции анализатора определяется в основном шумами потенциалов, пропускание анализатора будет падать с уменьшением энергии.

Список литературы

- [1] Курнаев В.А., Урусов В.А. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 6. С. 86–91.
- [2] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1977.
- [3] Разников В.В., Разникова М.О. Информационно-аналитическая масс-спектрометрия. М.: Наука, 1992.