# Краткие сообщения

### 01;10

# Масс-анализатор зеркального типа с цилиндрической формой полюсов

#### © Л.П. Овсянникова, Т.Я. Фишкова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия e-mail: L.Ovsyannikova@pop.ioffe.rssi.ru

#### (Поступило в Редакцию 28 января 2002 г.)

Предложен статический анализатор заряженных частиц по массе с неоднородным магнитным полем. В аналитическом виде получено выражение для распределения магнитного потенциала, на основании которого найдены формулы основных параметров в плоскости дисперсии при наличии фокусировки первого порядка по углу. Получены также условия пространственной фокусировки при расположении источника и приемника вне пределов магнитного поля. Найдены режимы работы, при которых траектория имеет три поворота, т.е. большую протяженность пути заряженных частиц в поле. Это приводит к существенному увеличению линейной дисперсии по массе.

Для анализа ионных пучков по массе наиболее часто используются статические однородные магнитные поля. При этом величина линейной дисперсии определяется радиусом кривизны траектории пучка, поэтому получение в них высокого разрешения приводит к увеличению габаритов прибора. Кроме того, в однородных полях отсутствует фокусировка по углу в направлении, перпендикулярном плоскости дисперсии. Указанные недостатки стимулировали развития работ, связанных с использованием неоднородных магнитных полей [1].

Нами предлагается в качестве масс-анализатора использовать конструкцию, которая представлена на рис. 1. Она представляет собой цилиндр из магнитного матери-



Рис. 1. Поперечное сечение масс-анализатора с цилиндрической формой полюсов, а также картина силовых линий магнитного поля. *I* — полюсные наконечники магнита, *2* экраны, *3* — катушки возбуждения, *4* — ярмо.

ала, разрезанный по образующим на четыре одинаковые части с малыми зазорами; при этом две из них являются полюсами магнита, между которыми располагаются экраны. Ввод и вывод пучка осуществляется по каналам, прорезанным в одном из экранов.

Распределение скалярного магнитного потенциала в двумерном приближении в направлении продольной оси системы *z* имеет вид

$$\omega(x, y) = W/\pi \left\{ \operatorname{arctg} \left[ \sqrt{2}(1 - x + y)/(2x - x^2 - y^2) \right] - \operatorname{arctg} \left[ \sqrt{2}(1 - x - y)/(2x - x^2 - y^2) \right] \right\}.$$
 (1)

Здесь и в дальнейшем координаты, а также все геометрические параметры выражены в единицах радиуса цилиндрических полюсов *r*. Силовые линии такого поля даны на рис. 1.

Рассмотрим движение пучка заряженных частиц в средней плоскости магнита xoz, которая является плоскостью дисперсии (рис. 2). Тогда, проинтегрировав один раз проекцию уравнения движения на эту плоскость и приравняв полученное таким образом изменение продольной скорости е его величине, найденной из закона сохранения энергии, получим выражение, определяющее угол наклона траектории пучка в поле,

где

$$(x')^2 = [1 - P^2(x)]/P^2(x),$$
 (2)

$$P(x) = \cos \vartheta + \sigma \ln \left\{ \left[ x^2(\sqrt{2} + 1) + \sqrt{2}(1 - x) \right] \right\} / \left[ x^2(\sqrt{2} - 1) + \sqrt{2}(1 - x) \right] \right\} / (2\sqrt{2}).$$

Здесь  $\vartheta$  — угол наклона траектории на входе в поле, через  $\sigma$  обозначена сила магнитного поля, равная

$$\sigma = (KW)/(rc)\sqrt{-e/2m\Phi},$$
(3)



**Рис. 2.** Ход центральных траекторий пучка в зеркальном режиме работы при углах впуска  $\Theta > 90$  (1), 90 (2),  $< 90^{\circ}$  (3).

в которой  $K = 2\sqrt{2}/\pi$  является коэффициентом при старшей гармонике, если магнитный скалярный потенциал (1) представить в виде ряда; *т* и *е* — масса и заряд частицы; *с* — скорость света;  $\Phi$  — ускоряющий потенциал.

Из формул (2) при x' = 0 можно определить максимальную координату, через которую проходит ось зеркальной симметрии траектории внутри поля, а при  $x' = \infty$  — координату точки поворота траектории для случая, когда начальный угол входа пучка  $\vartheta > 90^\circ$ . Эти координаты можно записать единым образом

$$x_{m,n} = \left(1 - \sqrt{2\sqrt{2}\operatorname{cth}\mu - 3}\right) / \left[\sqrt{2}(\sqrt{2} - \operatorname{cth}\mu)\right]. \quad (4)$$

Максимальной координате  $x_m$  соответствует  $\mu_m = \sqrt{2}(1 - \cos \vartheta)/\sigma$ , точке поворота —  $x_n - \mu_n = -\sqrt{2}\cos \vartheta/\sigma$ .

Определим базу масс-анализатора (расстояние между источником и приемником)  $L = l + \lambda \operatorname{ctg} \Theta$ , где  $\Theta$  — входной угол наклона центральной траектории пучка, l — расстояние между входом и выходом ее из поля,  $\lambda = h + g$  — суммарная величина выноса из поля источника и приемника соответственно. Для частиц, выходящих их точечного источника под углами  $\pm \alpha$  к центральной траектории, расстояние между входом и выходом и выходом из поля равно

$$Z = l(\alpha) + \lambda \operatorname{ctg}(\Theta \pm \alpha) = L + C_1 \alpha + C_2 \alpha^2 + \dots,$$

где коэффициенты аберраций первого и второго порядка в плоскости дисперсии соответственно равны  $C_1 = \partial Z / \partial \alpha \Big|_{\alpha=0}, C_2 = 1/2 \partial^2 Z / \partial \alpha^2 \Big|_{\alpha=0}.$ 

Величина  $l(\alpha)$  найдена путем интегрирования выражения (2) в пределах от входа в поле, где x = 0 до максимальной координаты  $x_m$  и последующего удвоения полученного результата ввиду зеркальной симметрии траектории

$$l(\alpha) = 2 \int_{0}^{x_{m}} P(x) / \left[1 - P^{2}(x)\right]^{1/2} dx.$$
 (5)

Из выражений (2), (4), (5) видно, что подынтегральная функция в верхнем пределе стремится к бесконечности, от которой можно избавиться интегрированием по частям. Однако при этом возникает бесконечность на нижнем пределе, поэтому интеграл (5) приходится разбивать на два. Для режимов с тремя поворотами, имеющими место при углах впуска > 90°, для которых характерна большая протяженность пути заряженных частиц в поле (траектория 1 на рис. 2) и, как следствие, большая дисперсия по массе, логично выбрать следующие два участка: 1) от входа в поле до первого поворота траектории, 2) от первого поворота до второго. Тогда расстояние между входом и выходом запишется в виде:  $l(\alpha) = 2[l_1(\alpha) + l_2(\alpha)]$ . При этом протяженность пути вдоль оси z на первом участке  $l_1(\alpha)$  выражается попрежнему через интеграл (5), но с верхним пределом интегрирования x<sub>n</sub>. Величина  $l_1(\alpha)$  всегда меньше нуля, поскольку частицы двигаются против положительного направления продольной оси.

Протяженность пути вдоль оси *z* на втором участке после интегрирования по частям запишется в виде

$$l_{2}(\alpha) = \left\{ u(x_{n}) + 2 \int_{x_{n}}^{x_{m}} (x-1) \left\{ 2/[x^{2}(2-x)^{2}] - 1 \right\} \times \left[ 1 - P^{2}(x) \right]^{1/2} dx \right\} / \sigma,$$
(6)

где  $u(x) = [x^4 + 2(1-x)(1-x+2x^2)]/[x(2-x)]$ , а  $u(x_n)$  — это величина данной функции в точке первого поворота.

Фокусировка первого порядка по углу раствора пучка имеет место, если для величины выноса источника и приемника выполняется условие  $\lambda = \sin^2 \Theta \partial l(\alpha) / \partial \alpha$ . Для режимов с тремя поворотами это означает

$$\lambda = 2\sin^{3}\Theta \left\{ -\int_{0}^{x_{n}} \left[1 - P^{2}(x)\right]^{-3/2} dx + 1/\sigma^{2} \left[u(x_{n})(du/dx)\right] x_{n} + \int_{x_{n}}^{x_{m}} \left[(du/dx)^{2} + u d^{2}u/dx^{2}\right] \left[1 - P^{2}(x)\right]^{1/2} dx \right\}.$$
 (7)

Здесь и в дальнейшем координаты  $x_n$  и  $x_m$  относятся к центральной тректории пучка. При выполнении условия (7) расширение изображения будет определяться

главным образом аберрациями второго порядка. Для режимов с тремя поворотами имеем

$$C_{2} = 3\lambda \cos \Theta / (2 \sin^{3} \Theta) + \sin^{2} \Theta \bigg\{ G/\sigma + 3 \int_{0}^{x_{n}} P(x) [1 - P^{2}(x)]^{-5/2} dx + \sigma^{-3} \bigg\{ u(x_{n}) [(du/dx)^{2} + u d^{2}u/dx^{2}](x_{n}) + \int_{x_{n}}^{x_{m}} [(du/dx)^{3} + 4u du/dx d^{2}u/dx^{2} + u^{2} d^{3}u/dx^{3}] [1 - P^{2}(x)]^{1/2} dx \bigg\} \bigg\},$$
(8)

где

$$G = \frac{1 - \sqrt{2} \operatorname{cth} \mu_n + \left(2\sqrt{2} \operatorname{cth} \mu_n - 3\right)^{1/2}}{\operatorname{sh}^2 \mu_n \left(\sqrt{2} - \operatorname{cth} \mu_n\right)^2 \left(2\sqrt{2} \operatorname{cth} \mu_n - 3\right)^{1/2}}.$$
 (9)

Коэффициент дисперсии по массе, определяемый ходом траекторий в поле для частиц разной массы и одинаковой энергии, на выходе из него равен

$$D_m = (dl/dm)m = -0.5\sigma(\partial l/\partial\sigma).$$
(10)

В исследуемом магнитном поле из (10), учитывая формулы (5)–(7), для режимов с тремя поворотами, обладающими фокусировкой первого порядка по углу, после ряда преобразований получим

$$D_{m} = 1 - \lambda \cos \Theta / (2 \sin^{3} \Theta) - u(x_{n}) / \sigma$$
  
-  $\int_{0}^{x_{n}} P(x) [3 - 2P^{2}(x)] [1 - P^{2}(x)]^{-3/2} dx$   
+  $\sigma^{-2} \int_{x_{n}}^{x_{m}} P(x) [1 - P^{2}(x)] [(du/dx)^{2} + u d^{2}u/dx^{2}] dx.$  (11)

Для режимов с одним поворотом, которые имеют место при малой силе магнитного поля  $\sigma \leq 1$  и углах входа  $\Theta \leq 90^{\circ}$ , интервал интегрирования при определении  $l, \lambda, C_2, D_m$  для избавления от бесконечности также разбивается на два, но произвольных участка. Таким путем нами найдены формулы для всех основных параметров в плоскости дисперсии масс-анализатора при небольших углах впуска пучка. Эти формулы из-за экономии места здесь не приводятся.

В качестве примера на рис. 2 показан ход центральной траектории пучка при ста восьмидесятиградусном отклонении ( $\Theta = 90^{\circ}$ ) и силе  $\sigma = 1$  (кривая 2), а также с углами входа и выхода  $\Theta = 60^{\circ}$  при силе поля  $\sigma = 0.6$  (кривая 3). Параметры целого ряда режимов работы



**Рис. 3.** Параметры масс-анализатора в плоскости дисперсии при ходе траекторий с одним поворотом. Сплошные кривые относятся к суммарной величине выноса из поля источника и приемника, штриховые с крестиками — к базе анализатора, пунктир — к его дисперсии по массе, штрихпунктир — к коэффициенту аберрации второго порядка. Сила поля  $\sigma = 0.6$  (*I*), 0.8 (*2*), 1.0 (*3*).

масс-анализатора при ходе траекторий с одним поворотом даны на рис. 3. Эти режимы выбраны таким образом, чтобы имела место фокусировка первого порядка, а источник и приемник располагались вне поля. Вообще говоря, фокусировка второго порядка также возможна, но она имеет место только внутри поля ( $\lambda < 0$ ), что неприемлемо для практического использования. Следует отметить, что в подходящих для работы режимах с одним поворотом тректории дисперсия по массе мала. Она возрастает (рис. 3) в области максимально возможных для каждой силы углах впуска. Однако при этом значительно возрастают аберрации.

Для достижения высокой дисперсии предпочтительнее использовать режимы с тремя поворотами. Параметры для таких режимов при наличии фокусировки первого порядка, вычисленные по формулам (5)-(11), представлены на рис. 4. Видно, что при постоянной силе поля диапазон углов впуска, при котором фокусировка осуществляется за пределами магнитного поля, не превышает 10°. С ростом силы поля величина угла впуска возрастает и при  $\sigma = 1.6$  достигает своего максимально приемлемого значения. При этом возрастает не только дисперсия по массе, но и коэффициент аберрации второго порядка. Величина последнего, как правило, превышает коэффициент дисперсии, и поэтому удельная дисперсия, ответственная за разрешающую способность, невелика. Однако существует достаточно узкий диапазон сил  $1.5 \le \sigma < 1.6$ , при котором эти величины примерно равны, а при  $\sigma = 1.6 - D_m > C_2$ . Такие режимы наиболее благоприятны для получения высокой разрешающей



**Рис. 4.** Параметры масс-анализатора в плоскости дисперсии при ходе траекторий с тремя поворотами. Обозначения те же, что на рис. 2. Сила поля  $\sigma = 1.2$  (1), 1.4 (2), 1.6 (3).

способности, поэтому основные параметры для них приведены в таблице, в которой все линейные размеры выражены в единицах радиуса апертуры магнита r. Следует отметить, что поскольку отсчет ведется от входа пучка в масс-анализатор, отрицательная величина базы анализатора L соответствует расположению детектора слева от источника (траектория I на рис. 2).

Ввиду того что рассматриваемое магнитное поле является неоднородным, на пучок заряженных частиц воздействуют силы во всех направлениях. С целью нахождения пространственной фокусировки будем решать векторное дифференциальное уравнение движения, спроектированное на оси декартовой системы координат. Поскольку в этом случае уравнения не интегрируются, будем решать их численно при следующих начальных условиях:

$$x_0 = 0, \quad y_0 = h \operatorname{tg} \gamma / \sin \Theta, \quad v_{x0} = v_0 \sin \Theta \cos \gamma,$$
$$v_{y0} = v_0 \sin \gamma, \quad v_{z0} = v_0 \cos \Theta \cos \gamma. \quad (12)$$

Здесь  $v_0 = \sqrt{-2e\Phi/m}$  — полная скорость частицы;  $\Theta$  угол между проекцией скорости частицы на плоскость дисперсии и вертакальной плоскостью, равный входному углу наклона центральной траектории пучка; *у* — угол между направлением полной скорость и плоскостью дисперсии. Отметим, что в режимах с  $\Theta \ge 90^\circ$  либо на входе и выходе, либо в точках первого и третьего поворотов  $x' \to \infty$ . Поэтому при расчете пространственной фокусировки следует решать уравнения движения, где дифференцирование ведется по времени. При этом в месте расположения приемника, положение которого определяется из условия фокусировки первого порядка в плоскости дисперсии (см. формулу (7)), расширение изображения в перпендикулярном направлении равно  $y_i = g \operatorname{tg} \gamma_i / \sin \Theta_i - y_l$ , где  $y_l, \gamma_i, \Theta_{i-}$  — координата и углы наклона на выходе из поля.

Режиму пространственной фокусировки первого порядка соответствует такой угол впуска центральной траектории  $\Theta_{xy}$ , при котором расширение изображения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях в первом приближении равно нулю. На рис. 5 приведены величины таких углов в зависимости от силы поля, а также другие параметры для этих режимов. Видно, что с ростом силы поля величина угла пространственной фокусировки возрастает по линейному закону, в то время как остальные параметры падают. Следует отметить, что отношение величины линейной дисперсии к коэффициенту аберрации второго порядка (кривая 5 на рис. 5), ответственное за разрешающую способность анализатора, при этом возрастает. При  $\sigma = 1.23$  пространственная фокусировка осуществляется на границе поля ( $\lambda = 0$ ), а при дальнейшем росте силы она происходит в поле, что неприемлемо с точки зрения расположения источника и приемника заряженных частиц. Наличие режимов с пространственной фокусировки за пределами поля является достоинством рассмотренного масс-анализатора.

Проиллюстрируем возможности предложенного массанализатора при решении одной из распространенных задач, связанной с разделением ионов СО (m = 27.995) и N<sub>2</sub> (m = 28.006). Для этого требуется разрешающая



**Рис. 5.** Параметры масс-анализатора в режиме с пространственной фокусировкой. *1* — угол впуска центральной траектории пучка, *2* — база анализатора, *3* — суммарное расстояние от источника и приемника до входа в поле, *4* — дисперсия по массе, *5* — отношение величины дисперсии к коэффициенту аберрации второго порядка.

		Первый поворот		Второй поворот						
$\sigma$	$\Theta^0$	$x_n$	$-z_n$	$x_m$	$z_m = l/2$	λ	L	$C_2$	$D_m$	$D_m/C_2$
1.50	138	0.871	0.555	1.640	0.411	0.244	0.551	6.166	4.227	0.685
	140	0.887	0.595	1.673	0.425	0.464	0.297	8.793	5.380	0.655
	145	0.923	0.706	1.765	0.535	1.569	-1.169	34.97	12.46	0.356
1.52	140	0.880	0.591	1.640	0.363	0.115	0.588	5.215	4.157	0.797
	145	0.915	0.701	1.719	0.405	0.639	-0.103	13.20	7.875	0.597
	147	0.928	0.749	1.755	0.451	1.020	-0.670	23.35	11.15	0.478
1.54	145	0.908	0.696	1.681	0.318	0.189	0.366	6.523	5.627	0.863
	150	0.939	0.821	1.762	0.385	0.742	-0.516	19.76	11.78	0.596
	152	0.950	0.876	1.800	0.456	1.209	-1.362	41.52	18.10	0.436
1.56	152	0.943	0.870	1.747	0.283	0.342	-0.076	11.11	10.07	0.906
	154	0.953	0.928	1.780	0.321	0.548	-0.454	18.89	14.18	0.751
	156	0.962	0.991	1.816	0.389	0.888	-1.216	40.01	21.93	0.548
1.58	157	0.959	1.017	1.774	0.201	0.203	-0.077	10.15	13.16	1.296
	160	0.972	1.125	1.821	0.260	0.417	-0.625	24.00	23.02	0.959
	162	0.979	1.205	1.857	0.351	0.698	-1.446	61.53	38.88	0.632
1.60	165	0.980	1.335	1.826	0.057	0.037	-0.023	7.115	24.25	3.408
	167	0.986	1.442	1.852	0.074	0.072	-0.165	10.91	35.63	3.266
	170	0.992	1.639	1.896	0.147	0.151	-0.563	38.09	78.18	2.053

способность на уровне 50% интенсивности линии массспектра, равная R = 5000.

Режимы с пространственной фокусировкой при вынесенных из поля источнике и приемнике, параметры которых даны на рис. 4, обеспечивают разрешающую способность по массе  $R \approx 10^2 - 10^3$  при светосиле (0.01 - 0.03)% от  $4\pi$ . Для получения более высокой разрешающей способности следует использовать режимы работы масс-анализатора с тремя поворотами траектории и большими углами впуска, приведенные в таблице. Как видно из этой таблицы, при каждой силе с ростом угла впуска дисперсия по массе растет. Однако при этом растут также аберрации. Оптимальными являются режимы, в которых  $D_m/C_2 > 1$ . Для них разрешающая способность составляет  $R \cong 10^4$ .

Таким образом, в нашем примере R = 5000 может быть обеспечена целым рядом режимов, выбор которых определяется конструктивными соображениями. Так, если радиус цилиндрических полюсов r = 25 mm и размер входной и выходной щелей  $s = 50 \,\mu$ m, то линейная дисперсия по массе должна равняться D = 20r = 500 mm. При этом траектория представляет собой петлю, продольный размер которой не превышает 3r = 75 mm. В то же время в 90°-ном секторном масс-спектрометре с однородным полем для получения разрешающей способности R = 5000 при тех же размерах щелей радиус кривизны траектории должен быть равен 500 mm, т.е. габариты магнита и прибора в целом существенно больше.

В заключение следует отметить, что при подаче на экранирующие элементы определенной разности потенциалов (фактически потенциал надо подавать только на одни экран, в то время как другой, через который производится впуск пучка, заземляется) образуются пространственно совмещенные взаимно перпендикулярные магнитное и электростатическое поля, в которых, как известно, существуют условия ахроматизма. Таким образом, не усложняя конструкции, можно рассчитывать на получение фокусировки по скорости.

## Список литературы

[1] Кельман В.М., Родникова И.В., Секунова Л.М. Статические масс-спектрометры. Алма-Ата: Наука, 1985. 260 с.