Оптимизация вертикального аксептанса магнитного зеркала

© В.Д. Саченко¹, А.С. Антонов²

12.1

¹ Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия ² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия E-mail: v.sachenko@mail.ru

Поступило в Редакцию 14 марта 2023 г. В окончательной редакции 7 апреля 2023 г. Принято к публикации 16 мая 2023 г.

> Дана оценка аксиальной аберрации масс-анализатора типа магнитного зеркала, обусловленной прохождением ионов вне средней плоскости. Показана методика и получен результат оптимизации аксептанса масс-анализатора при заданной разрешающей способности.

Ключевые слова: масс-спектрометр, масс-спектрограф, магнитное зеркало, аксептанс.

DOI: 10.21883/PJTF.2023.14.55818.19552

Магнитное зеркало (МЗ) используется во многих аналитических приборах и устройствах. Впервые примененное в масс-спектрометрии Демпстером [1] МЗ позволило сделать значительные открытия в изотопии химических элементов. В масс-спектрометрах Демпстера ввод ионного пучка в M3 осуществлялся ортогонально. Впоследствии было показано, что ввод ионного пучка под углом к МЗ позволяет повысить степень фокусировки пучка, уменьшить коэффициент сферической аберрации третьего порядка и вывести линию фокусов (ЛФ) за пределы магнитного поля [2,3]. При этом без внимания оставался вклад в ширину пучка ионов, проходящих вне средней плоскости МЗ. В то же время анализ указанного вклада в секторных магнитных масс-анализаторах [4] (назовем его "аксиальной аберрацией") показал, что данная аберрация может быть заметной. Для ее подавления на практике с целью обеспечения требуемой разрешающей способности ионный пучок коллимируют выходной щелью источника ионов и приемной щелью детектора, значительно снижая тем самым чувствительность масс-спектрометра.

В настоящей работе проведен анализ аксиальной аберрации магнитного зеркала с однородным полем в условиях фокусировки второго порядка и показана возможность оптимизации коллимирующей системы МЗ с целью минимизации потерь ионного тока при коллимировании, обеспечивающем требуемую величину разрешающей способности.

Довольно подробно различные аспекты фокусировки ионов в средней плоскости M3 с однородным полем рассмотрены в работе [3]. Углы поворота φ разделившихся в поле M3 осевых орбит мономассовых ионных компонент вводимого в магнитное поле ионного пучка однозначно связаны с углом ε его ввода в M3:

$$\varphi + 2\varepsilon \equiv \pi. \tag{1}$$

Поэтому фокусировка первого порядка мономассовых компонент, осевые орбиты которых в поле МЗ представ-

ляют собой дуги окружности радиуса r, при расположении выходной щели источника ионов на расстоянии l_1 от M3, отсчитываемом вдоль оптической оси, осуществится после их выхода из M3 на расстоянии $l_2(r)$ (формула (6) в [5]):

$$l_2(r) = r \sin(\varphi) - l_1.$$
 (2)

При этом расстояние $l_2(r)$ отсчитывается вдоль соответствующего продолжения осевой орбиты (рис. 1) — выходного плеча оптической оси мономассовой компоненты. Расчет уширения $\delta(\alpha)$ поперечного сечения мономассовых компонент на ЛФ, обусловленного угловым разбросом α направлений вылета ионов относительно оптической оси в средней плоскости МЗ, в приближении третьего порядка по величине α приводит к следующему результату [3]:

$$\delta(\alpha) = \delta_{\alpha\alpha} + \delta_{\alpha\alpha\alpha},$$
 (3)

$$\delta_{\alpha\alpha} = \left[\left(2\tan^2 \varepsilon - 1 \right) r \right] \alpha^2, \tag{4}$$

$$\delta_{\alpha\alpha\alpha}(r) = 2 \Big[\sin(2\varepsilon) \big(\tan^2 \varepsilon + 1/2 \big) r \Big] \alpha^3.$$
 (5)

При угле ввода пучка в МЗ

$$\varepsilon = \arctan\left(1/\sqrt{2}\right)$$
 (6)

первое слагаемое в (3) — аберрационный вклад второго порядка — исчезнет (фокусировка второго порядка), и в итоге размер поперечного сечения мономассовых компонент на ЛФ в условиях (6) будет кубично зависеть от α :

$$\delta_{\alpha\alpha\alpha}(r) = 2(l_1 + l_2(r))\alpha^3 = \frac{4\sqrt{2}}{3}r\alpha^3.$$
(7)

При этом коэффициент дисперсии по массовому числу (X_m) и разрешающая способность масс-анализатора (Rs) при учете аберрации (5) составят

$$X_m = \frac{2}{3}r, \qquad Rs = 1 / \left(\frac{3}{2}\frac{S_0}{r} + \sqrt{8}\alpha^3\right),$$
 (8)



Рис. 1. Геометрия магнитного масс-анализатора типа "магнитное зеркало". *1* — осевые орбиты мономассовых компонент ионного пучка, ψ — угол наклона линии фокусов.

где S_0 — ширина выходной щели ионного источника. Отметим, что в условиях (6) угол поворота мономассовых компонент и выходное плечо их фокусировки составят

$$\varphi = 2 \arctan\left(\sqrt{2}\right). \tag{9}$$

$$l_2(r) = \left(\sqrt{8}/3\right)r - l_1.$$
 (10)

Учет вклада ионов, проходящих масс-анализатор вне средней плоскости, в приближении второго порядка описывается квадратным трехчленом [4]:

$$X(b, y) = (X, bb)b^{2} + (X, by)by + (X, yy)y^{2},$$
(11)

где (X, bb), (X, by) и (X, yy) — матричные аберрационные коэффициенты, размерность которых соответствует тому, что функция X(b, y) измеряется в μ m, b — углы вылета ионов в mrad, y — координаты их вылета в mm в направлении, перпендикулярном средней плоскости M3 (вертикальное направление). В случае M3 с однородным полем расчет матричных коэффициентов в (11) показывает, что все они одного знака и дискриминант D положителен. Это означает, что уровни X(b, y) = Sпредставляют собой эллипсы

$$(X, bb)b^{2} + (X, by)by + (X, yy)y^{2} = S.$$
 (12)

Из теории транспортировки [6] известно, что любая щелевая диафрагма, установленная на пути следования ионов, на плоскости координат (b, y) отображается в виде наклонной полосы, угол наклона которой определяется местоположением диафрагмы, а ширина размером щели диафрагмы. В соответствии с этим совокупность N щелевых диафрагм, коллимирующих ионный пучок, отображает на плоскости (b, y) вертикальный аксептанс масс-анализатора в виде 2N-угольника (рис. 2). Таким образом, задача максимизации пропускания масс-анализатора при фиксированной величине аксиальной аберрации *S* геометрически сводится к нахождению указанного 2*N*-угольника максимальной площади при условии

$$(X, bb)b^{2} + (X, by)by + (X, yy)y^{2} \leq S.$$
 (13)

Подробно данная задача сформулирована и рассмотрена в [7]. Для примера ограничимся коллимирующей системой из четырех щелевых диафрагм, расположив их на выходе из источника ионов, у входной и выходной границ МЗ и на ЛФ. Прохождение ионами *k*-й диафрагмы с высотой щелевого отверстия $2h_k$ (k = 1, 2, 3, 4) соответствует неравенству

$$\left|e_{k}b+f_{k}y\right|\leqslant h_{k},\tag{14}$$

где коэффициенты e_k (в mm) и f_k (безразмерная величина) определяются местоположением k-й диафрагмы, а их отношение определяет на плоскости (b, y) наклон соответствующей полосы к оси b. При этом вершины восьмиугольника, соответствующего выбранной коллимирующей системе, определяются совокупностью значений $h_k(k = 1-4)$.

Для конкретных вычислений примем, что ввод ионного пучка в M3 осуществляется под углом $\varepsilon = \arctan(1/\sqrt{2}) = 35.26^{\circ}$ к нормали, $l_1 = 20$ mm и r = 120 mm. При этих значениях расчет коэффициентов аксиальной аберрации (11) дает следующий результат:

 $(X, bb) = 0.374 \,\mu$ m/mrad², $(X, by) = 6.38 \,\mu$ m/mm · mrad,

$$(X, yy) = 32.1 \,\mu \text{m/mm}^2.$$
 (15)



Рис. 2. Аберрационный эллипс и вписанный в него фазовый восьмиугольник (затененная область).

Оценим параметры эмиттанса пучка, которые соответствовали бы максимальному аксептансу массанализатора при разрешающей способности Rs = 1000. С учетом того, что при r = 120 mm дисперсионный коэффициент $X_m = 80$ mm, т.е. $X_m/Rs = 80 \,\mu$ m, ширина ионного пучка в фокусе для принятой величины Rs не должна превышать значения

$$S_0 + \delta_{\alpha\alpha\alpha} + S = 80\,\mu\text{m.} \tag{16}$$

В силу кубической зависимости величины $\delta_{\alpha\alpha\alpha}$ от начального углового разброса α ионов в горизонтальном направлении и линейной зависимости вертикального аксептанса масс-анализатора от величины *S* [7] максимальное значение произведения [$\alpha \cdot S_0 \cdot S$] в условиях (14), как нетрудно показать, используя вариационный метод Лагранжа, достигается при

$$2\alpha = 0.074 (\approx 4^{\circ}), \qquad S_0 = S = 35\,\mu\text{m}.$$
 (17)

Максимизируя теперь площадь восьмиугольника (14) при условии (13) с коэффициентами (15) и величиной $S = 35 \,\mu$ m, в итоге найдем следующие значения $\{h_k\}$ (k = 1-4):

$$h_1 = 1.80 \text{ mm}, h_2 = 1.64 \text{ mm}, h_3 = 2.00 \text{ mm}, h_4 = 3.85 \text{ mm},$$
(18)

при которых вертикальный аксептанс при найденных значениях $\{h_k\}$ равен 58.1 mm · mrad, что составляет 70% от площади эллипса (12) при $S = 35 \, \mu$ m.

Сравним полученную величину аксептанса с аксептансом двухщелевой системы, традиционно используемой на практике для снижения аксиальной аберрации, включающей выходную щель источника с полувысотой h_1 и приемную щель детектора с полувысотой h_4 . Расчет указанных параметров h_1 и h_4 осуществим по той же методике. В условиях максимально допустимой

Письма в ЖТФ, 2023, том 49, вып. 14

аксиальной аберрации *S* = 35 µm вычисления приводят к следующим значениям:

$$h_1 = 1.67 \,\mathrm{mm}, \qquad h_4 = 3.43 \,\mathrm{mm}, \qquad (19)$$

что соответствует вертикальному аксептансу 43.1 mm · mrad и составляет 52% от площади аберрационного эллипса при $S = 35 \, \mu$ m.

Таким образом, оптимальная четырехщелевая коллимирующая система M3 по сравнению с оптимально подобранной двухщелевой системой коллимации в условиях разрешающей способности Rs = 1000 позволяет на 35% увеличить светосилу рассмотренного масс-анализатора. Важно отметить, что описанный метод оптимизации коллимирующей системы применим для оценки максимальной светосилы масс-анализатора, которая может служить объективным критерием эффективности коллимирующей системы при любой заданной величине разрешения по массам.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- F.W. Aston, J. Phys. Chem., 47 (6), 465 (1943). DOI: 10.1021/j150429a011
- [2] D.R. Inglis, Phys. Rev., 78 (2), 104 (1950).DOI: 10.1103/PhysRev.78.104
- [3] Л.П. Овсянникова, Т.Я. Фишкова, Письма в ЖТФ, 28 (4), 65 (2002).
 [L.P. Ovsyannikova, T.Ya. Fishkova, Tech. Phys. Lett., 28 (2), 157 (2002). DOI: 10.1134/1.1458521].
- [4] H. Wollnik, Optics of charged particles (Academic Press, 1987). DOI: 10.1016/B978-0-12-762130-2.X5001-8
- [5] Л.Н. Галль, Физические основы масс-спектрометрии и ее применение в аналитике и биофизике (Изд-во Политехн. ун-та, СПб., 2010), с. 68.
- [6] A.P. Banford, D. Keefe, Am. J. Phys., 35 (9), 896 (1967).
 DOI: 10.1119/1.1974286
- [7] В.Д. Саченко, А.С. Антонов, Л.Н. Галль, А.С. Бердников, Macc-спектрометрия, 17 (1), 16 (2020).
 DOI: 10.25703/MS.2020.17.12 [V.D. Sachenko, A.S. Antonov, L.N. Gall, A.S. Berdnikov, J. Anal. Chem., 75 (14), 1781 (2020). DOI: 10.1134/S1061934820140129].