

О применении отражателя с неоднородным полем в масс-рефлектроне

© В.П. Глащенко

Институт проблем управления сложными системами РАН,
443020 Самара, Россия
e-mail: vglaschenko@gmail.com

(Поступило в Редакцию 4 июня 2013 г. В окончательной редакции 10 октября 2013 г.)

Определены условия, при выполнении которых неоднородное компенсирующее поле отражателя масс-рефлектрона может быть реализовано с приемлемой точностью на оси симметрии отражателя и экстраполируется в радиальную окрестность осевой линии. Приведены графики, иллюстрирующие распределение расчетного неоднородного поля отражателя, возможности его реализации и погрешности фокусировки по времени пролета в радиальной окрестности. Получены аналитические выражения для расчета времени пролета ионов в отражателе, распределение поля в котором описывается степенным рядом, а также аналитические выражения для расчета распределения поля отражателя, время пролета в котором задается степенным рядом. Приведена методика аналитического расчета компенсирующего неоднородного поля отражателя по заданной зависимости времени пролета вне этого поля через решение интегрального уравнения Абеля. Решением этого уравнения получены аналитические выражения для расчета компенсирующего поля отражателя в масс-рефлектронах, содержащих бесполовое пространство дрейфа и различные участки ускорения (торможения) ионов с однородным полем.

Введение

Времяпролетный масс-спектрометр с пространственно-временной фокусировкой второго порядка по энергии ионов в двухсекционном отражателе с однородным электростатическим полем [1] наиболее широко применяется во времяпролетной масс-спектрометрии.

В работах [2,3] предложено использовать в таком масс-спектрометре („масс-рефлектроне“) отражатель с неоднородным полем для теоретически идеальной пространственно-временной фокусировки в произвольно широком диапазоне энергии ионов, предложен также алгоритм численного расчета электростатического поля отражателя. В работе [4] описан метод аналитического расчета неоднородного поля отражателя для масс-рефлектрона, содержащего бесполовый участок дрейфа и односекционные участки с однородным полем для ускорения ионов перед пространством дрейфа и для торможения в отражателе. Описанный в [4] метод расчета несколько доработан по сравнению с ранее опубликованным [5]. В упомянутых работах, как и в настоящей работе, расчет компенсирующего поля отражателя производится по заданной зависимости времени пролета от начальной энергии ионов за пределами участка с компенсирующим полем. В отличие от такого подхода, в работе [6] предложен метод расчета компенсирующего поля отражателя по заданному распределению электростатического поля вдоль траектории ионов.

Однако до настоящего времени не рассматривались условия, при выполнении которых расчетное распределение компенсирующего поля может быть реализовано с приемлемой точностью — причем не только на осевой линии электростатической системы, но и в радиальной окрестности, что сдерживает применение отражателей

с неоднородным полем в масс-рефлектронах. В настоящей статье рассматриваются требования к аналитической схеме масс-рефлектрона, при выполнении которых расчетная зависимость распределения компенсирующего поля представляет собой электрическое поле, допускает экстраполяцию в радиальную окрестность вблизи осевой линии масс-рефлектрона, согласовывается по форме эквипотенциали с полем прилегающего участка отражателя или с плоской сеткой.

1. Время пролета в области отражения

Для определенности далее будем называть областью торможения рефлектора участок с однородным полем от точки входа ионов в рефлектор до нулевой эквипотенциали, где происходит разворот ионов с нулевой начальной энергией. Соответственно под областью отражения рефлектора будем понимать участок, где разворачиваются ионы с отличной от нуля начальной энергией.

Время пролета в области отражения (суммарно в прямом и обратном направлениях) можно получить интегрированием уравнения движения

$$t_1(\Delta U) = 2\sqrt{\frac{m}{2q}} \int_0^{z^*} \frac{dz}{\sqrt{\Delta U - U}}, \quad (1)$$

где m , q — масса и заряд ионов, z — текущая продольная координата в области отражения, z^* — координата точки разворота ионов, $q^*\Delta U$ — начальная энергия ионов, U — потенциал поля в области отражения (нулевому потенциалу соответствует точка входа в эту область).

Заменим переменную интегрирования и запишем (1) в виде

$$t_1(\Delta U) = 2\sqrt{\frac{m}{2q}} \int_0^{\Delta U} \left(\frac{dz}{dU}\right) \frac{dU}{\sqrt{\Delta U - U}}. \quad (2)$$

Рассмотрим случай, когда распределение поля в области отражения описывается рядом Макларена

$$dz/dU = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \cdot U^n. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (2) и осуществляя замену переменной $x = U/\Delta U$, получим

$$t_1(\Delta U) = 2\sqrt{\frac{m}{2q}} \sum_{n=0}^{\infty} b_n \Delta U^{(n+0.5)} \int_0^1 \frac{x^n dx}{\sqrt{1-x}}. \quad (4)$$

В окончательном виде

$$t_1(\Delta U) = 2\sqrt{\frac{m}{2q}} \sum_{n=0}^{\infty} b_n \Delta U^{(n+0.5)} B(n+1; 0.5), \quad (5)$$

где B — бета-функция [7].

2. Расчет компенсирующего поля

Рассмотрим обратный случай, когда требуется рассчитать распределение поля, время пролета в котором соответствует заданной зависимости от энергии ионов.

Потребуем, чтобы зависимость времени пролета в области отражения соответствовала выражению

$$t_2(\Delta U) = \sqrt{\frac{m}{2q}} \left(a_{0.5} \sqrt{\Delta U} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Delta U^n \right). \quad (6)$$

Приравнявая (6) к правой части уравнения (2), получаем интегральное уравнение Абеля [8], решением которого относительно функции dz/dU будет интеграл

$$\frac{dz}{dU} = \frac{d}{dU} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^U \left(a_{0.5} \sqrt{\Delta U} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Delta U^n \right) \frac{d\Delta U}{\sqrt{\Delta U - U}} \right\}. \quad (7)$$

Заменив переменную $x = \Delta U/U$, запишем уравнение (7) относительно $z(U)$ в виде

$$z(U) = \frac{a_{0.5} U}{2\pi} \int_0^1 \frac{\sqrt{x} dx}{\sqrt{1-x}} + \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} a_n U^{n+0.5} \int_0^1 \frac{x^n dx}{\sqrt{1-x}}. \quad (8)$$

Принимая во внимание, что определенные интегралы в (8) есть бета-функция, запишем окончательно

$$z(U) = 0.25 a_{0.5} U + \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} a_n U^{n+0.5} B(n+1; 0.5). \quad (9)$$

3. Обсуждение

Выражения (6) и (9) связывают зависимость времени пролета за пределами области отражения рефлектора с распределением неоднородного поля. Это позволяет транспонировать условия реализуемости расчетного неоднородного поля в требования к зависимости времени пролета от энергии ионов за пределами области отражения. Через эту зависимость, в свою очередь, можно определять и оптимизировать параметры аналитической схемы прибора.

Сформулируем требования к аналитической схеме масс-рефлектрона исходя из соображений реализуемости расчетного неоднородного поля отражателя.

1. Вследствие линейности уравнения Абеля слагаемые в выражении для времени пролета (6) взаимно однозначно соответствуют слагаемым в выражении для компенсирующего поля (9). Слагаемому времени пролета, пропорциональному $\sqrt{\Delta U}$, соответствует однородная составляющая поля. Соответственно параметры аналитической схемы прибора и легко реализуемую однородную составляющую поля в области отражения следует выбирать из условия полной компенсации этой, наиболее существенно зависящей от начальной энергии ионов, компоненты времени пролета вне области отражения.

2. При полной компенсации первого слагаемого времени пролета в однородном поле, согласно п. 1 (когда $a_{0.5} = 0$), уравнение (6) фактически описывает зависимость отклонений времени пролета от начальной энергии ионов в масс-рефлектроне с однородным полем отражателя относительно масс-рефлектрона с идеальной пространственно-временной фокусировкой. А уравнение (9) — соответствующие этим отклонения изменения поля в области отражения по сравнению с однородным полем. Принимая во внимание, что для ряда Макларена в (6) $a_n = (d^n t / d\Delta U^n) / n!$, видим, что выполнение классических условий пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков $dt/d\Delta U = 0$ и $d^2 t / d\Delta U^2 = 0$ для масс-рефлектрона с однородным полем отражателя означает исключение соответствующих слагаемых неоднородного поля, представленного степенным рядом.

Чтобы расчетная функция $z(U)$ описывала электрическое поле, $U(z)$ должна существовать, а также иметь первую и вторую производные. Из уравнения (9) следует, что это автоматически выполняется при выборе параметров аналитической схемы масс-рефлектрона, удовлетворяющих условиям пространственно-временной фокусировки первого порядка при рекомендованном выборе однородной составляющей компенсирующего поля.

3. Неоднородное поле отражателя граничит с однородным полем участка торможения. Соответственно при необходимости исключить дополнительную сетку на границе однородного и неоднородного полей, параметры аналитической схемы прибора следует выбирать из условия непрерывности напряженности поля на этой границе (когда это возможно).

4. Независимо от наличия или отсутствия сетки на границе областей, поля с обеих сторон от границы должны быть согласованы по форме эквипотенциалей. Учитывая известное представление электростатического поля в окрестности осевой линии аксиально-симметричного поля, это означает, что, как минимум, вторая производная распределения поля на оси отражателя должна быть непрерывной. В частности, при однородном поле на граничащем участке торможения, необходимо выполнение условия $d^2U/dz^2 = 0$ в начале участка отражения (в той мере, насколько можно считать плоской вершину параболоида вращения в окрестности осевой линии). Это условие также автоматически выполняется при выборе параметров аналитической схемы масс-рефлектрона, удовлетворяющих условиям пространственно-временной фокусировки первого порядка $dt/d\Delta U = 0$.

5. Кривизна эквипотенциалей не должна существенно зависеть от продольной координаты в области отражения, чтобы расчетное поле можно было реализовать с приемлемой точностью при необходимом поперечном размере рефлектора. Кроме того, уменьшение кривизны эквипотенциалей в области отражения уменьшит оптическую силу рефлектора и связанные с этим погрешности пространственно-временной фокусировки. Из этого следует желательность равенства нулю или минимизации (в абсолютном значении) третьей и следующих производных распределения поля в отражателе — насколько это возможно. Для аналитической схемы это требование означает желательность выполнения условий пространственно-временной фокусировки второго порядка и далее, а также стремление к непрерывности и „гладкости“ соответствующих производных $d^n t/d\Delta U^n$ более высокого порядка.

4. Масс-рефлектрон с протяженной областью ионизации в источнике

Дальнейший анализ будем выполнять относительно схемы масс-рефлектрона с двухсекционным рефлектором, ионизацией исследуемого газа в протяженной области ионизации L_i с однородным полем и выталкиванием ионов электрическим полем в начале цикла измерений в область ускорения L_a аналитической схемы прибора, приведенной на рис. 1. Далее ионы движутся в первом участке бесполевого дрейфа L_{11} , тормозятся при движении в однородных полях участков L_2, L_3 отражателя, разворачиваются в области отражения Z . Затем, двигаясь в обратном направлении, проходят участки с однородным полем L_3, L_2 , второй участок бесполевого дрейфа L_{12} и регистрируются приемником Det.

В области ионизации напряженность выталкивающего поля выбирается максимально возможной для уменьшения влияния на разрешающую способность теплового разброса скоростей ионов. С другой стороны, для повышения чувствительности или для решения других задач приходится увеличивать ширину области ионизации, что приводит к увеличению разброса энергии ионов вследствие выталкивания их электрическим

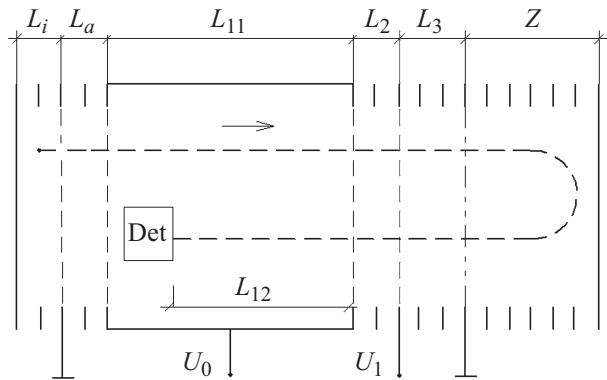


Рис. 1. Аналитическая схема масс-рефлектрона с протяженной областью ионизации в источнике.

полем из различных точек в источнике. Применение отражателя с неоднородным полем позволяет в таком масс-рефлектроне теоретически идеально компенсировать влияние на разрешающую способность разброса энергии, обусловленного различием координат ионов в области ионизации. Тем самым становится возможным уменьшить ускоряющий потенциал без снижения разрешающей способности и, благодаря этому, минимизировать размеры аналитической части масс-рефлектрона.

Время пролета за пределами области отражения Z в масс-рефлектроне, изображенном на рис. 1, можно представить выражением

$$t_3(\Delta U) = \sqrt{\frac{m}{2q}} \left\{ \frac{2}{E_i} \sqrt{\Delta U} + \frac{2}{E_a} \left(\sqrt{U_0 + \Delta U} - \sqrt{\Delta U} \right) + \frac{L_1}{\sqrt{U_0 + \Delta U}} + \frac{4L_2}{(1-\alpha)U_0} \left(\sqrt{U_0 + \Delta U} - \sqrt{\alpha U_0 + \Delta U} \right) + \frac{4L_3}{\alpha F_0} \left(\sqrt{\alpha U_0 + \Delta U} - \sqrt{\Delta U} \right) \right\}, \quad (10)$$

где m, q — масса и заряд ионов, L_1 — длина траектории ионов в бесполовом пространстве дрейфа, $L_1 = L_{11} + L_{12}$, L_2 — расстояние между сетками первого участка торможения, L_3 — расстояние от начала второго участка торможения до входа в область отражения, U_0 — ускоряющий потенциал (соответствует потенциалу в пространстве дрейфа), $U_1 = \alpha U_0$ — потенциал сетки на границе участков торможения ($\alpha = 0 - 1$), E_i, L_i — напряженность поля на участке ионизации и его ширина, E_a, L_a — напряженность поля на участке ускорения и ширина этого участка. Перегруппируем выражение (10) и представим зависимость отклонений времени пролета в виде

$$\Delta t_3(\Delta U) = \sqrt{\frac{m}{2q}} \left(C_0 - C_1 \sqrt{\Delta U} - C_2 \sqrt{U_0 + \Delta U} - \frac{C_3}{\sqrt{U_0 + \Delta U}} - C_4 \sqrt{\alpha U_0 + \Delta U} \right), \quad (11)$$

где $C_0 = t_3(0)/\sqrt{m/2q}$ (постоянная составляющая времени пролета),

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{2}{E_i} - \left(\frac{2}{E_a} + \frac{4L_3}{\alpha F_0} \right), \\ C_2 &= \frac{2}{E_a} + \frac{4L_2}{(1-\alpha)U_0}, \\ C_3 &= L_1, \\ C_4 &= \frac{4L_3}{\alpha U_0} - \frac{4L_2}{(1-\alpha)U_0}. \end{aligned}$$

С другой стороны, время пролета в области отражения можно представить выражением (2). Приравняв их, получим упоминавшееся уравнение Абеля, решением которого относительно $z(U)$ будет интеграл

$$z(U) = \frac{1}{2\pi} \int_0^U \frac{\Delta t_3(\Delta U)}{\sqrt{U - \Delta U}} d\Delta U. \quad (12)$$

Выполнив интегрирование в (12), получим искомое распределение компенсирующего поля отражателя в виде

$$\begin{aligned} z(u) &= \frac{1}{2\pi} \left\{ 2C_0 \sqrt{U_0} \sqrt{u} - \frac{\pi}{2} C_1 U_0 u \right. \\ &\quad - C_2 U_0 \left[\sqrt{u} + (1+u) \arcsin \sqrt{\frac{u}{1+u}} \right] \\ &\quad - 2C_3 \arcsin \sqrt{\frac{u}{1+u}} \\ &\quad \left. - C_4 U_0 \left[\sqrt{\alpha u} + (\alpha + u) \arcsin \sqrt{\frac{u}{\alpha + u}} \right] \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

где u — нормированный потенциал в отражателе, $u = \Delta U/U_0$.

При интегрировании использовалось описанное выше приведение интеграла к бета-функции и неопределенные табличные интегралы. Из (13) получим первую производную для $z(u)$

$$\begin{aligned} \frac{dz}{du} &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{C_3 \sqrt{u}}{(1+u)} \right. \\ &\quad - \frac{\pi}{2} C_1 U_0 - C_2 U_0 \arcsin \sqrt{\frac{u}{1+u}} \\ &\quad \left. - C_4 U_0 \arcsin \sqrt{\frac{u}{\alpha + u}} \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

Однородная составляющая поля в (14)

$$dz/du = -0.25C_1 U_0. \quad (15)$$

Подставив значение C_1 в (15), получим, что для равенства напряженности однородного поля на втором участке торможения и напряженности поля на входе

участка отражения в рассматриваемой аналитической схеме прибора достаточно, чтобы напряженность поля в области ионизации была равна напряженности поля на участке ускорения. Соответственно в этом случае можно избежать установки дополнительной сетки на входе в область отражения.

Отметим здесь, что в случае использования в качестве ионного источника плоской мишени (ионизируемой, например, импульсом лазерного излучения) в однородном ускоряющем поле источника установка дополнительной сетки на границе областей торможения и ускорения для выполнения условия (15) становится необходимой из-за ступенчатого изменения напряженности поля на этой границе.

Вторая производная

$$\begin{aligned} \frac{d^2 z}{du^2} &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{u}} \left(\frac{C_3}{1+u} - \frac{C_2 U_0}{1+u} - \frac{C_4 U_0}{(1+u)\sqrt{\alpha}} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{C_3 \sqrt{u}}{(1+u)^2} \right\}. \quad (16) \end{aligned}$$

Чтобы вторая производная (16) существовала и равнялась нулю при $u \rightarrow 0$, необходимо равенство нулю слагаемого при $1/\sqrt{u}$. Это выполняется при условии

$$C_3 - C_2 U_0 - C_4 U_0/\sqrt{\alpha} = 0. \quad (17)$$

При выполнении условий (15) и (17) расчетная функция $z(U)$ аналитическая и описывает электростатическое поле. Тем не менее при выполнении условия (17) вторая производная (16) в окрестности нулевого потенциала изменяется пропорционально \sqrt{u} , и поле существенно неоднородно. Для устранения данного препятствия потребуем существования и равенства нулю третьей производной $z(u)$ при $u \rightarrow 0$. Выполнив преобразования, получим еще одно условие для выбора параметров аналитической схемы прибора

$$3C_3 - C_2 U_0 - C_4 U_0/(\alpha\sqrt{\alpha}) = 0. \quad (18)$$

Не представляет труда убедиться, что уравнения (17) и (18), полученные выше исходя из условий реализуемости компенсирующего неоднородного поля отражателя, можно получить также из временных условий пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков соответственно для уравнения (11).

Решая совместно уравнения (17) и (18), получим соотношения для выбора параметров аналитической схемы, при которых расчетное неоднородное поле отражателя может быть реализовано с приемлемой точностью

$$L_2 = 0.25L_1(1-3\alpha) - 0.5L_\alpha(1-\alpha), \quad (19)$$

$$L_3 = (0.5L_1\alpha\sqrt{\alpha} + L_2)\alpha/(1-\alpha). \quad (20)$$

Для рассмотренной схемы масс-рефлектрона на рис. 2, 3 приведены графики зависимости напряженности компенсирующего поля $E(z) = dU/dz$ и вторая

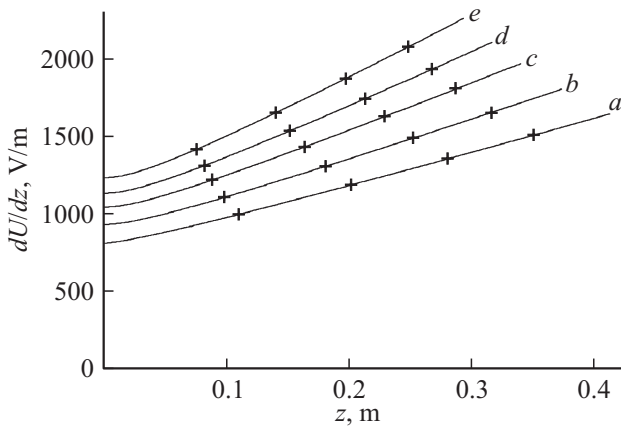


Рис. 2. Зависимость напряженности неоднородного поля dU/dz от продольной координаты в области отражения z .

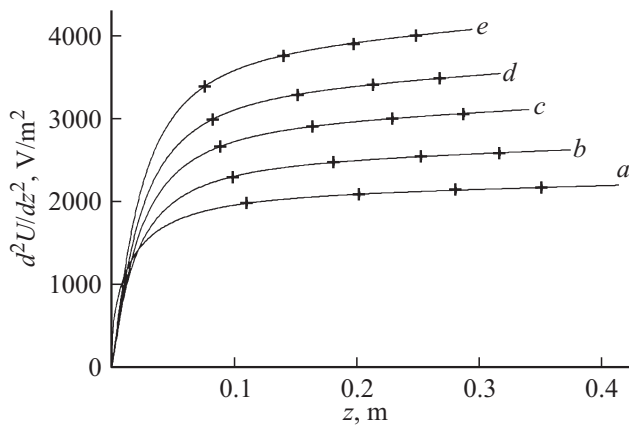


Рис. 3. Зависимость второй производной неоднородного поля d^2U/dz^2 от продольной координаты в области отражения z .

производная поля d^2U/dz^2 в области отражения Z от текущей продольной координаты z для различных значений коэффициентов α . На рис. 4 приведены графики кривизны эквипотенциалей ρ на оси симметрии аксиально-симметричного поля отражателя. Меткам кривых на рис. 2–4 соответствуют наборы параметров аналитической схемы прибора, приведенные в табл. 1. Значком „+“ на рис. 2–4 помечены точки на графиках, соответствующие потенциалу 100, 200, 300 и 400 В на оси отражателя, а окончание кривых соответствует потенциалу 500 В.

Длина траектории бесполевого дрейфа в приборе $L_1 = L_{11} + L_{12}$ суммарно равна 0.5 м, ускоряющий потенциал $V = 100$ В, длина участка ускорения $L_a = 5$ мм. Прочие параметры рассчитывались решением уравнений (15), (17), (18).

На рис. 5 приведены графики отклонений времени пролета параксиальных ионов по сравнению с их движением на оси вращения отражателя при $\alpha = 0.2$, отклонения нормированы на полное время пролета в приборе — поэтому значение коэффициента $m/2q$ не имеет значения в данном случае. Цифровые метки кри-

Таблица 1. Параметры аналитической схемы масс-рефлектрона с протяженной областью ионизации для графиков рис. 2–5

Метка	α	L_2, m	L_3, m
<i>a</i>	0.000001	0.122500	~ 0
<i>b</i>	0.08	0.092700	0.008553
<i>c</i>	0.15	0.066625	0.014320
<i>d</i>	0.20	0.048000	0.017590
<i>e</i>	0.25	0.029375	0.020208

вых соответствуют удалению параксиальной траектории ионов от оси отражателя в миллиметрах (радиальное смещение во время движения не учитывалось ввиду незначительности). При построении графиков на этом рисунке использовалось сглаженное до монотонности представление третьей производной распределения осевого потенциала d^3U/dz^3 , которое изначально по расчету существенно изменчиво вблизи точки входа в область отражения. Это обстоятельство требует отно-

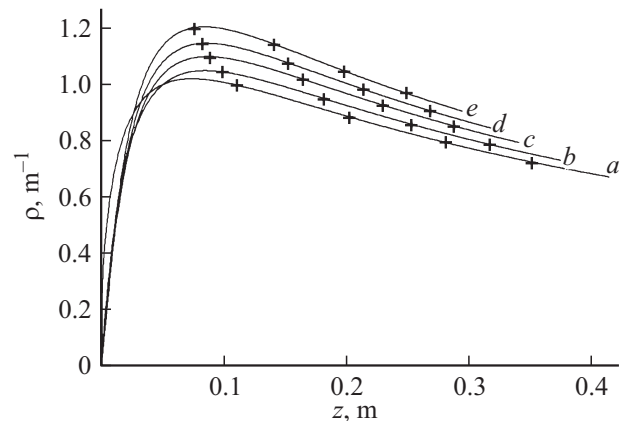


Рис. 4. Зависимость кривизны эквипотенциалей неоднородно поля ρ от продольной координаты в области отражения z .

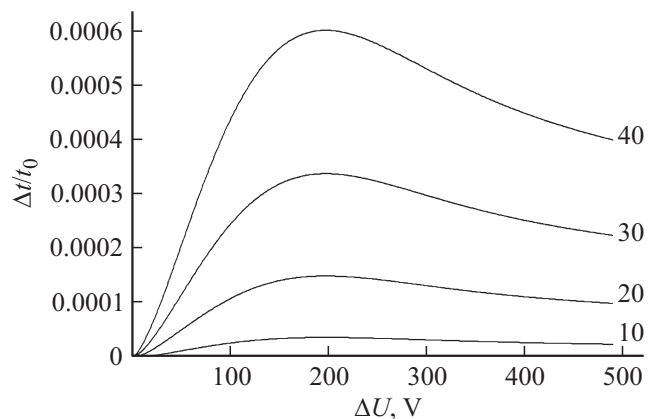


Рис. 5. Относительные отклонения времени пролета ионов в зависимости от начальной энергии ΔU . Метки кривых соответствуют удалению траектории ионов от оси симметрии отражателя в миллиметрах.

ситься к графикам на рис. 5 только как к качественной, иллюстративной оценке влияния радиального удаления траектории ионов на отклонения времени пролета.

Приведенные на рис. 2–5 большие значения относительного разброса энергии ионов на графиках — до 500% — обычно не являются необходимыми для масс-рефлектрона с рассматриваемым источником ионов. Они приведены, чтобы показать возможности компенсации в отражателе с неоднородным полем, а также проиллюстрировать различия зависимостей в „ближней“ области, когда собственная энергия ионов менее ускоряющего потенциала, и в „дальней“ области, когда она существенно превышает ускоряющий потенциал.

На рис. 2,3 видим, что напряженность и вторая производная компенсирующего поля — монотонные функции. Радиус кривизны эквипотенциалей $1/\rho$ даже в худшей точке превышает 80% от длины траектории дрейфа в бесполовом пространстве (рис. 4). Расчеты показывают, что преломление траектории в рефлекторе незначительно, поскольку фокусное расстояние рефлектора превышает длину бесполового дрейфа более чем вдвое (с учетом участков с однородным полем L_{11} , L_{12}). На рис. 5 видим, что отклонения времени пролета в зависимости от радиального удаления траектории ионов от оси системы незначительны для приосевых траекторий. Необходимо отметить, что влияние на разрешающую способность радиального отклонения траектории ионов для точечных источника и приемника компенсируется при настройке системы — не поддаются корректировке только отклонения параметров от расчетных в пределах трубки возможных траекторий. В итоге, можно сделать вывод о том, что при выборе параметров аналитической схемы прибора, соответствующих условиям (15), (17), (18), компенсирующее неоднородное поле отражателя может быть реализовано с точностью, достаточной для парирования деградации разрешающей способности масс-рефлектрона при расширении диапазона энергии ионов для различных задач.

5. Масс-рефлектрон с лазерной десорбцией

Для источника с лазерной десорбцией характерным является большой разброс энергии ионов, обусловленный процессами ионизации. Например, в работе [9] сообщалось, что в масс-рефлектроне LAZMA с таким источником основной рабочий диапазон по энергии ионов в „узком окне“ находится в пределах 10–40 eV, а верхняя граница может достигать 150 eV при желательности анализа массового состава во всем энергетическом спектре. Соответственно разброс энергии ионов от 4 до 15 раз превышает их минимальную энергию в пространстве дрейфа. В работе [6] также указывается, что в источнике с лазерной десорбцией начальная энергия ионов для больших масс может достигать 150 eV. Все это говорит о важности решения задачи пространственно-временной фокусировки в масс-рефлектронах с энергетическим

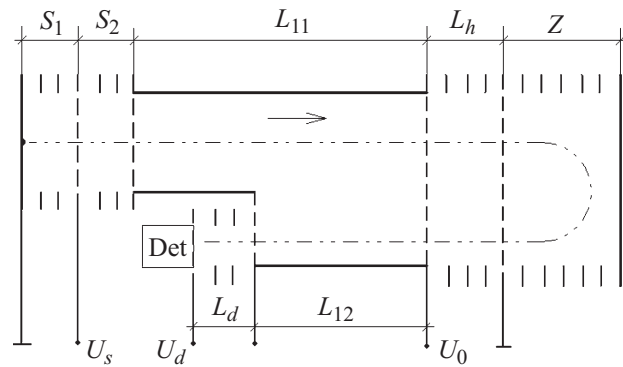


Рис. 6. Аналитическая схема масс-рефлектрона с лазерной десорбцией ионов в источнике.

разбросом ионов, кратно превышающем ускоряющий потенциал.

В [6] приведен пример расчета отражателя с неоднородным полем для теоретически идеальной компенсации зависимости времени пролета от энергии ионов в таком масс-рефлектроне с низким ускоряющим потенциалом и источником ионов MALDI. Представляет интерес сравнение результатов расчета компенсирующего поля отражателя для описанного авторами [6] масс-рефлектрона с результатами расчета для того же масс-рефлектрона, в котором значения параметров аналитической схемы прибора соответствуют рекомендованным условиям пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков.

Схема масс-рефлектрона приведена на рис. 6. Поверхность исследуемого образца ионизируется импульсом лазерного излучения. Ионы ускоряются в однородном поле первого участка ускорения S_1 , затем дополнительно ускоряются в поле второго участка ускорения S_2 . Далее они движутся в бесполовом пространстве дрейфа L_{11} , тормозятся до нулевого потенциала в отражателе на участке с однородным полем шириной L_h . При движении в неоднородном компенсирующем поле участка отражения Z ионы полностью теряют свою начальную энергию и разворачиваются. После разворота покидают область отражения Z , ускоряются на участке с однородным полем L_h , проходят второй бесполовый участок дрейфа L_{12} . Затем ионы ускоряются на участке с однородным полем шириной X_d до потенциала U_d и регистрируются приемником Det. В работе [6] отношение потенциалов $U_d/U_0 = 50$, расстояния $S_1 = 10$ mm, $S_2 = 10$ mm, $X_d = 10$ mm. Ширина участка отражателя с однородным полем $L_h = 25$ mm, суммарная длина участков дрейфа $L_1 = L_{11} + L_{12}$ равна 300 mm. Потенциал U_s сетки на границе участков S_1 и S_2 равен 0.195 от ускоряющего потенциала U_0 ($\alpha = 0.195$). Значение ускоряющего потенциала в работе не указано — для определенности примем его равным 40 V (исходя из предположения о том, что в приемник ионы попадают с потенциалом $U_d = 2000$ V при заданном отношении U_d/U_0). Для такой схемы масс-рефлектрона по аналогии с разд. 4 запишем зависимость отклонений времени

пролета ионов от энергии при движении вне области отражения Z в виде

$$\Delta t_4(U) = \sqrt{\frac{m}{2q}} \left(C_0 - C_1 \sqrt{\Delta U} - C_2 \sqrt{U_0 + \Delta U} - \frac{C_3}{\sqrt{U_0 + \Delta U}} - C_4 \sqrt{\alpha U_0 + \Delta U} - C_5 \sqrt{k U_0 + \Delta U} \right), \quad (21)$$

где $k = U_d/U_0$ — коэффициент ($k > 1$ и равен 50 в данном примере), $C_0 = t_4(0)/\sqrt{m/2q}$ (здесь $t_4(0)$ — постоянная составляющая времени пролета),

$$C_1 = - \left(\frac{2S_1}{\alpha U_0} + \frac{4L_h}{U_0} \right),$$

$$C_2 = \frac{2S_2}{(1-\alpha)U_0} + \frac{4L_h}{U_0} - \frac{2X_d}{(k-1)U_0},$$

$$C_3 = L_1,$$

$$C_4 = \frac{2S_1}{\alpha U_0} - \frac{2S_2}{(1-\alpha)U_0},$$

$$C_5 = \frac{2X_d}{(k-1)U_0}.$$

Соотношения размеров для выполнения условий пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков

$$L_h = 0.25L_1 - 0.5 \left(\frac{S_1}{\alpha\sqrt{\alpha}} - \frac{S_2}{(1+\sqrt{\alpha})\sqrt{\alpha}} - \frac{X_d}{(1+\sqrt{k})\sqrt{k}} \right), \quad (22)$$

$$S_2 = \frac{S_1(1-\alpha)}{\alpha} - \alpha\sqrt{\alpha} \left(L_1 + \frac{X_d}{k\sqrt{k}} \right). \quad (23)$$

Распределение компенсирующего поля отражателя

$$z(u) = \frac{1}{2\pi} \left\{ 2C_0\sqrt{U_0}\sqrt{u} - \frac{\pi}{2}C_1U_0u - C_2U_0 \left[\sqrt{u} + (1+u) \arcsin \sqrt{\frac{u}{1+u}} \right] - 2C_3 \arcsin \sqrt{\frac{u}{1+u}} - C_4U_0 \left[\sqrt{\alpha u} + (\alpha+u) \arcsin \sqrt{\frac{u}{\alpha+u}} \right] - C_5U_0 \left[\sqrt{ku} + (k+u) \arcsin \sqrt{\frac{u}{k+u}} \right] \right\}, \quad (24)$$

где $u = \Delta U/U_0$.

В табл. 2 приведены значения различающихся параметров аналитической схемы для вариантов:

а) исходные значения из работы [6],

Таблица 2. Параметры аналитической схемы масс-рефлектрона с лазерной десорбцией для графиков рис. 7, 8

Метка	L_h, mm	S_2, mm
<i>a</i>	25.0000	10.000
<i>b</i>	24.8765	10.000
<i>c</i>	29.1550	15.447

б) с выполнением условия пространственно-временной фокусировки первого порядка,

с) с выполнением условий пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков.

Напряженность компенсирующего поля $E(z) = -dU/dz$ в данном случае мало отличается по сути от приведенной на графиках рис. 2 и поэтому не приведена. Этого нельзя сказать о графиках второй производной поля d^2U/dz^2 , приведенных на рис. 7, и в более детальном представлении для малых ΔU на рис. 8. На рис. 7 помечены точки с потенциалом, кратным ускоряющему потенциалу U_0 , — слева направо 40, 80 и 120 V. На рис. 8 помечены точки, соответствующие потенциалам 1 и 2 V.

На графиках рис. 7, 8 видим, что для исходной комбинации параметров масс-рефлектрона (кривая *a*) вторая производная d^2U/dz^2 стремится к бесконечности вблизи нулевого потенциала. Соответствующая ей кривизна эквипотенциалей ρ , уменьшаясь от бесконечной величины в начале, дважды меняет знак на интервале от 0 до 3 V. Такая зависимость не удовлетворяет уравнению Лапласа, и, строго говоря, расчетное распределение поля не может быть реализовано вблизи точки входа в область отражения.

При изменении длины участка L_h с 25 до 24.8765 мм (кривая *b*), когда выполняется условие пространственно-временной фокусировки первого порядка, вторая производная поля равна нулю при $\Delta U = 0$. Соответственно кривизна эквипотенциалей на входе участка с неоднород-

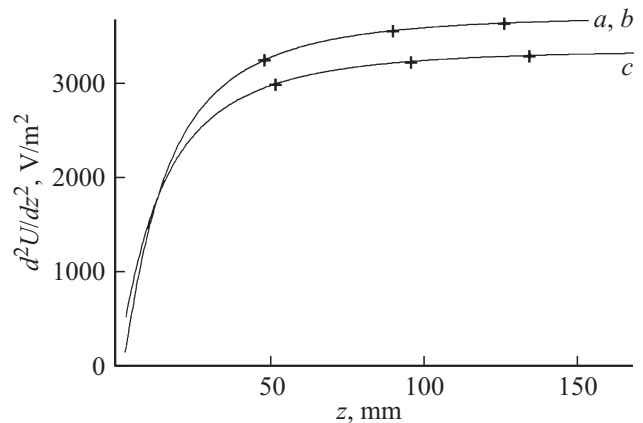


Рис. 7. Зависимость второй производной неоднородного поля d^2U/dz^2 от продольной координаты в области отражения z в широком диапазоне начальной энергии ионов для масс-рефлектрона с лазерной десорбцией.

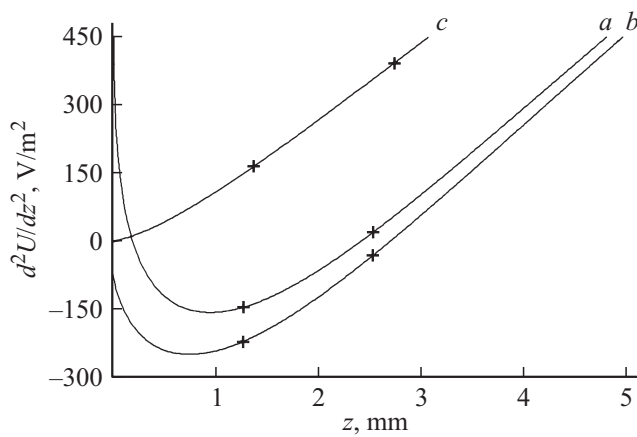


Рис. 8. Зависимость второй производной неоднородного поля d^2U/dz^2 от продольной координаты в области отражения z при малых значениях начальной энергии ионов для масс-рефлектрона с лазерной десорбцией.

ным полем согласуется по форме с примыкающей плоской сеткой. Однако кривизна эквипотенциала является быстроизменяющейся функцией вблизи точки входа в область отражения. Такое поле практически может быть реализовано только в малой радиальной окрестности от точки нулевого потенциала, поскольку плоская сетка на границе участков оказывает консервативное влияние на возможности изменения напряженности поля вблизи нее и будет препятствовать формированию расчетного распределения поля с быстро изменяющейся второй производной.

Наконец, при выборе параметров в соответствии с условиями пространственно-временной фокусировки второго порядка (кривая c) зависимость второй производной d^2U/dz^2 становится монотонной, условия для реализации такого расчетного распределения потенциала упрощаются и становится возможным экстраполировать распределение осевого потенциала в радиальную окрестность. Это позволит рассчитать конфигурацию и потенциалы электродов, формирующих расчетное распределение компенсирующего поля отражателя, и минимизировать влияние радиального смещения траектории ионов на разрешающую способность масс-рефлектрона.

Заключение

1. Наиболее важный вывод заключается в том, что выбор параметров аналитической схемы масс-рефлектрона с учетом условий пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков по энергии ионов при однородном компенсирующем поле отражателя, остается необходимым также и для масс-рефлектронов с фокусировкой в неоднородном поле.

Соответственно разработанные ранее методики расчета и масс-рефлектроны с фокусировкой в однородном поле отражателя могут быть доработаны при необходимости для расширения энергетического диапазона

анализируемых ионных пакетов с помощью фокусировки в неоднородном поле без существенных изменений их основы.

2. Для реализуемости расчетного неоднородного поля отражателя необходимо напряженность поля на входе в область отражения выбирать из условия полной компенсации пропорционального $\sqrt{\Delta U}$ слагаемого времени пролета за пределами области отражения. Кроме того, соотношения параметров аналитической схемы прибора должны соответствовать условиям пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков $dt/d\Delta U = 0$ и $d^2t/d\Delta U^2 = 0$ при выбранном значении однородной составляющей компенсирующего поля на входе в область отражения.

3. Применение отражателя с неоднородным полем приводит к дополнительным погрешностям пространственно-временной фокусировки в радиальной окрестности по сравнению с фокусировкой в однородном поле.

В то же время такие погрешности можно минимизировать при рекомендованном выборе параметров аналитической схемы масс-рефлектрона. Более того, корректная экстраполяция расчетной зависимости поля в радиальную окрестность в начале участка отражения (для расчета потенциалов и формы задающих неоднородное компенсирующее поле электродов, а также для анализа времяпролетных характеристик отражателя в радиальной окрестности) возможна только при выполнении предложенных условий пространственно-временной фокусировки первого и второго порядков.

4. Можно ожидать, что полученные соотношения для расчета времени пролета в поле отражателя, представленном степенным рядом, равно как и соотношения для расчета компенсирующего поля отражателя по степенному ряду, описывающему зависимость времени пролета вне области отражения, найдут применение для анализа и синтеза отражателей масс-рефлектронов.

Список литературы

- [1] Каратаев В.И., Мамырин Б.А., Шмигк Д.В. // ЖТФ. 1971. Т. 41. Вып. 7. С. 1498–1501.
- [2] Глаценко В.П., Сёмкин Н.Д., Сысоев А.А., Олейников В.А., Татур В.Ю. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 5. С. 904–907.
- [3] Глаценко В.П., Сёмкин Н.Д. // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 6. С. 1142–1145.
- [4] Сёмкин Н.Д., Пиляков И.В., Родин Д.В., Помельников Р.А. // ЖТФ. 2012. Т. 82. Вып. 10. С. 79–84.
- [5] Мясников С.В., Сёмкин Н.Д., Воронов К.Е. Аналитический расчет распределения электростатического поля нелинейного масс-рефлектрона. // Деп. ВИНТИ № 3225–В1997 от 31.10.1997 г. 14 с.
- [6] Doroshenko V.M., Cotter R.J. // J. Am. Soc. MassSpectrom. 1999. Vol. 10. P. 992–999.
- [7] Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
- [8] Бицадзе А.В. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1976. 296 с.
- [9] Манагадзе Г.Г., Манагадзе Н.Г. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 10. С. 138–142.