

01;10;12

Влияние аппаратных функций электростатических и магнитных анализаторов на обработку экспериментальных результатов

© В.А. Курнаев, В.А. Урусов

Московский государственный инженерно-физический институт,
115409 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 29 января 1996 г.)

На основе анализа движения заряженных частиц в дисперсионных анализаторах получены и решены уравнения, связывающие сигнал на выходе анализатора и функцию распределения по энергии, попадающих в него заряженных частиц. Рассмотрено влияние поправок на восстановление энергетического распределения по сравнению со стандартной процедурой.

Введение

Многие современные методики исследования твердого тела и плазмы основаны на анализе энергетических спектров заряженных частиц. В этих исследованиях применяются электростатические и магнитные анализаторы. Поскольку сигнал на выходе анализатора передает форму энергетического спектра частиц с искажениями, то возникает задача о восстановлении истинного спектра частиц по сигналу на выходе анализатора.

Для электростатических анализаторов в ряде работ (см., например, [1]) задача по восстановлению истинного распределения сводилась к решению интегрального уравнения свертки

$$I(W) = C \int_0^{+\infty} A(W - E)f(E)dE, \quad (1)$$

где $I(W)$ — сигнал на выходе анализатора, $f(E)$ — функция распределения частиц по энергии, $A(W - E)$ — аппаратная функция анализатора, W — энергия настройки анализатора, C — постоянная.

Известно [2], что при восстановлении распределения по энергии (по импульсу для магнитного анализатора) сигнал на выходе анализатора $I(W)$ (или $I(p)$) делится на W (или p соответственно). В работе [3] на основе аппроксимации экспериментальных данных для конкретного анализатора задача о восстановлении истинного энергетического распределения сводилась к решению интегрального уравнения вида

$$I(W) = C \int_0^{+\infty} A(W/E)f(E)dE. \quad (2)$$

Было получено решение этого уравнения в общем виде в интегральной форме, а также показано, что приближенное решение уравнения (2) для широкого спектра получается делением сигнала на выходе анализатора $I(W)$ на W . В работе [4] также на основании аппроксимации экспериментальных данных использовалось уравнение, аналогичное уравнению (2), и было получено решение

в виде ряда. Однако вопрос о том, в каких случаях для обработки экспериментальных данных следует пользоваться уравнениями первого или второго типа, в общем случае остался открытым. Целью данной работы является попытка восстановления истинного распределения по сигналу на выходе анализатора в общем случае.

Уравнения траекторий

Для получения уравнений траектории частиц в анализаторе воспользуемся изложенным в [5] подходом, выразив скорость частиц через ν через \mathbf{R} — радиус-вектор частицы и S — координату, совпадающую с его траекторией

$$\nu = \frac{d\mathbf{R}}{dt} = \frac{d\mathbf{R}}{dS} \frac{dS}{dt} = \frac{d\mathbf{R}}{dS} \nu, \quad (3)$$

где ν — абсолютная скорость частицы.

Тогда, учитывая уравнения движения нерелятивистской заряженной частицы в электростатическом поле

$$m \frac{d\nu}{dt} = -qe\nabla U, \quad (4)$$

где U — потенциал электрического поля, и выражая кинетическую энергию через полную E_0 , после несложных преобразований получаем

$$2 \frac{d^2\mathbf{R}}{dS^2} \left(1 - \frac{qeU}{E_0}\right) - \frac{d\mathbf{R}}{dS} \frac{d(qeU/E_0)}{dS} = -\nabla \left(\frac{qeU}{E_0}\right). \quad (5)$$

Аналогично для релятивистской заряженной частицы в постоянном магнитном поле, подставляя (3) в уравнение движения

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m\nu}{\sqrt{1 - \nu^2/c^2}} \right) = \frac{qe}{c} [\nu, \mathbf{H}]. \quad (6)$$

и учитывая, что в магнитном поле кинетическая энергия частиц не меняется ($d\nu/dS = 0$), а также вводя вектор $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H$, для уравнения траектории получаем

$$\frac{d^2\mathbf{R}}{dS^2} = \frac{qeH}{pc} \left[\frac{d\mathbf{R}}{dS}, \mathbf{h} \right], \quad (7)$$

где $p = \frac{m\nu}{\sqrt{1 - \nu^2/c^2}}$ — величина импульса.

Аппаратная функция анализатора и обработка результатов измерений

Рассмотрим движение заряженных частиц в электростатическом анализаторе. Пусть частица влетает в анализатор в точке с координатами (η, ξ) (система координат совпадает с плоскостью входного электрода) в направлении, задаваемом углами (α, β) с энергией $E = E_0/e$, где e — элементарный заряд. Распределение поля в анализаторе задается потенциалами U_i , где $i = 1, \dots, n$, на электродах относительно входного электрода, который находится под нулевым потенциалом. На выходном n -м электроде анализатора частица окажется в точке с координатами (η_1, ξ_1) (система координат лежит в плоскости выходного электрода).

Координаты (η_1, ξ_1) находятся из решения уравнения движения (3). Поскольку траектория частицы (уравнение (5)) остается неизменной при изменении ее энергии и потенциала во всем пространстве в L раз, то и значения (η_1, ξ_1) останутся неизменными при одновременном изменении в L раз E и U_i , где $i = 1, \dots, n$. Это условие выполняется только в случае, когда энергия и потенциалы входят в функции координат (η_1, ξ_1) в виде отношения. Аналогично можно показать, что величина заряда и энергия также входят в виде отношения.

Для того чтобы найти связь между сигналом на выходе анализатора и функцией распределения частиц по энергии, воспользуемся методом, изложенным в работе [6]. Если частицы на входе в анализатор имеют функцию распределения по координатам сечения пучка поверхностью входной диафрагмы, углам и энергии $f(\eta, \xi, \alpha, \beta, E)$, то количество частиц, имеющих энергию в интервале от E до $E + dE$ и вылетевших в направлении, заданном углами α, β в элемент телесного угла $d\Omega$ с элемента площади входной диафрагмы dS_0 в единицу времени, равно

$$d^3I = I_0 f(\eta, \xi, \alpha, \beta, E) d\Omega dS_0 dE, \tag{8}$$

где

$$I_0 = \int \int \int \frac{d^3I}{dE dS_0 d\Omega} d\Omega dS_0 dE$$

— количество частиц, прошедших через отверстие во входной диафрагме в единицу времени.

Для того чтобы найти количество частиц I , прошедших через отверстие в выходной диафрагме в единицу времени, необходимо выражение (8) проинтегрировать по всем траекториям, проходящим через отверстие в выходном электроде. Для этого выразим углы α, β через координаты η_1, ξ_1 системы координат выходной диафрагмы

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha \left(\eta, \xi, \eta_1, \xi_1, \frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E} \right), \\ \beta &= \beta \left(\eta, \xi, \eta_1, \xi_1, \frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E} \right) \end{aligned} \tag{9}$$

и, подставив в (8), проинтегрируем по энергии и площадям входного и выходного отверстий

$$\begin{aligned} I &= I_0 \int_0^{+\infty} \int_{S_0} \int_{S_1} f \left(\eta, \xi, \eta_1, \xi_1, \frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E}, E \right) \\ &\quad \times J(\alpha, \beta, \eta_1, \xi_1) \sin \alpha dS_1 dS_0 dE, \end{aligned} \tag{10}$$

где

$$J \left(\alpha, \beta, \eta_1, \xi_1, \eta, \xi, \frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E} \right) = \frac{\partial(\alpha, \beta)}{\partial(\eta_1, \xi_1)}$$

— якобиан преобразования.

Предположим, что распределение по энергии в анализируемом пучке не зависит от распределения по сечению и углам

$$f(\eta, \xi, \alpha, \beta, E) = f_1(\eta, \xi, \alpha, \beta) f_2(E). \tag{11}$$

С такой функцией выражение (10) можно представить в виде

$$I = I_0 \int_0^{+\infty} A \left(\frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E} \right) f_2(E) dE, \tag{12}$$

где

$$\begin{aligned} A \left(\frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E} \right) &= \int \int_{S_0 S_1} f_1 \left(\eta, \xi, \eta_1, \xi_1, \frac{qU_1}{E}, \dots, \frac{qU_n}{E} \right) \\ &\quad \times J(\alpha, \beta, \eta_1, \xi_1) \sin \alpha dS_1 dS_0. \end{aligned}$$

Функция $A(qU_1/E_0, \dots, qU_n/E_0)$ является аппаратной функцией анализатора, так как она выражает зависимость сигнала на выходе анализатора от потенциалов на электродах для моноэнергетического пучка частиц. Необходимо отметить, что аппаратная функция анализатора будет функцией отношений потенциалов к энергии частиц даже в том случае, если не будет выполняться условие взаимно однозначного соответствия между углами α, β на входе анализатора и координатами η_1, ξ_1 на выходе, так как аппаратная функция является интегралом по всем траекториям, проходящим через отверстие в выходной диафрагме, а каждая траектория в анализаторе является функцией отношений потенциалов на электродах к энергии частиц, например, при фокусировке пучка в точку.

Несложно показать, что уравнение свертки (1) несовместимо с уравнением (12) и, таким образом, неприменимо к анализаторам, работающим в режиме спектрометра. Действительно, если предположить, что аппаратная функция удовлетворяет одновременно уравнениям (1) и (12), то должно выполняться условие

$$W - E = F(qU_1/E, \dots, qU_n/E), \tag{13}$$

т.е. разность энергии настройки анализатора и энергии частиц должна быть функцией от отношений потенциалов к энергии. С другой стороны, энергия настройки электростатического анализатора W не должна зависеть от того, с какой энергией E частица влетает в анализатор, что несовместимо с условием (13).

Для того чтобы аппаратная функция анализатора имела вид $A(W/E)$, необходимо, чтобы при изменении энергии частиц в L раз во столько же раз изменились электрические поля на всей траектории движения частиц. Это условие строго выполняется только в случае, если выполнено условие подобия электрического поля во всем пространстве анализатора. Следовательно, в этом случае потенциалы на электродах должны быть линейно связаны

$$\frac{U_2}{U_1} = \lambda_2; \dots; \frac{U_n}{U_1} = \lambda_n, \quad (14)$$

где $\lambda_2, \dots, \lambda_n$ — постоянные.

Тогда энергия настройки и потенциал на одном из электродов, в зависимости от которого измеряется ток частиц на входе анализатора, будут связаны соотношением

$$W = kU_1, \quad (15)$$

где $k = \text{const}$ — коэффициент анализатора.

В этом случае связь тока на выходе анализатора и функции распределения частиц по энергии описывается уравнением

$$I(U_1) = I_0 \int_0^{+\infty} A\left(\frac{qU_1}{E}, \lambda_2, \dots, \lambda_n\right) f(E) dE. \quad (16)$$

Для функции распределения частиц по энергии решенные уравнения (16) может быть найдено в интегральной форме с помощью преобразования Меллина [3]

$$f(k\check{U}) = \frac{1}{I_0} \frac{1}{2\pi i} \int_{x_0-i\cdot\infty}^{x_0+i\cdot\infty} \frac{I_{x-1}}{A_{x-1}} (k\check{U})^{-x} dx, \quad (17)$$

где

$$I_{x-1} = \int_0^{+\infty} I(U_1) U_1^{x-2} dU_1,$$

$$A_{x-1} = \int_0^{+\infty} A\left(\frac{qU_1}{E}\right) \left(\frac{U_1}{E}\right)^{x-2} d(U_1/E). \quad (18)$$

Полученное выражение неудобно для практического использования, поэтому найдем решение уравнения в виде ряда. Для этого предположим, что функция $I(U_1)$ бесконечно дифференцируема и может быть разложена в ряд Тейлора в окрестности точки \check{U} .

$$I(U_1) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{I^{(n)}(\check{U})(U_1 - \check{U})^n}{n!}. \quad (19)$$

Подставляя выражение (19) в интеграл (18) и предполагая для простоты изложения, что $\check{U} > 0$, $U_1 > 0$, получаем для (17)

$$f(k\check{U}) = \frac{1}{I_0} \sum_{n=0}^{+\infty} I^{(n)}(\check{U}) \check{U}^{n-1} \frac{1}{2\pi i n!} \times \int_0^{+\infty} \int_{x_0-i\cdot\infty}^{x_0+i\cdot\infty} \frac{(U_1/\check{U} - 1)^n}{A_{x-1} k^2} \left(\frac{U_1}{kU}\right)^{x-2} dx d(U_1/\check{U})$$

или

$$f(k\check{U}) = \frac{1}{I_0} \sum_{n=0}^{+\infty} B_n I^{(n)}(\check{U}) \check{U}^{n-1}, \quad (20)$$

где $I^{(n)}(\check{U})$ — n -я производная от тока на выходе анализатора по \check{U} , B_n — постоянные.

Выразим коэффициенты B_n через моменты аппаратной функции. Для этого, разложив $I^{(n)}(\check{U})$ в ряд Тейлора и подставив выражение (20) в уравнение (16), получаем уравнение

$$I(U_1) = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{B_n C_{nm}}{m! k^{n+m-1}} I^{(n+m)}(U_1) U_1^{n+m}, \quad (21)$$

где

$$C_{nm} = \int_0^{+\infty} z^{n-1} (z-k)^m A(q/z) dz. \quad (22)$$

Поскольку уравнение (21) выполняется для любой функции $I(U_1)$, то для $n=0$, $m=0$ коэффициент при $I^{(n+m)}(U_1)$ равен единице, а сумма коэффициентов при остальных производных равна нулю. Тогда

$$B_0 = \frac{1}{kC_{00}}, \quad B_n = -\frac{1}{C_{n0}} \sum_{i=0}^{n-1} B_i \frac{C_{i(n-i)}}{(n-i)!}. \quad (23)$$

Коэффициент анализатора можно выбрать таким образом, чтобы он удовлетворял условию $B_1 = 0$, в этом случае он равен

$$k = \frac{C_{10}}{C_{00}}. \quad (24)$$

Следовательно, выбором коэффициента анализатора можно устранить поправку, связанную с первой производной $I'(U_1)$, что позволяет предположить в отличие от результатов, полученных в работе [3], что влияние первой производной от тока на форму энергетического распределения малó. На рис. 1 показаны примеры обработки спектра в первом приближении и с учетом поправки, связанной со второй производной от тока. В качестве пробной истинной функции распределения использовалось нормальное гауссовское распределение. На основании полученных результатов (рис. 2) можно сделать вывод, что поправка, связанная со второй производной, дает существенный вклад в функцию распределения для случая, когда истинная функция распределения

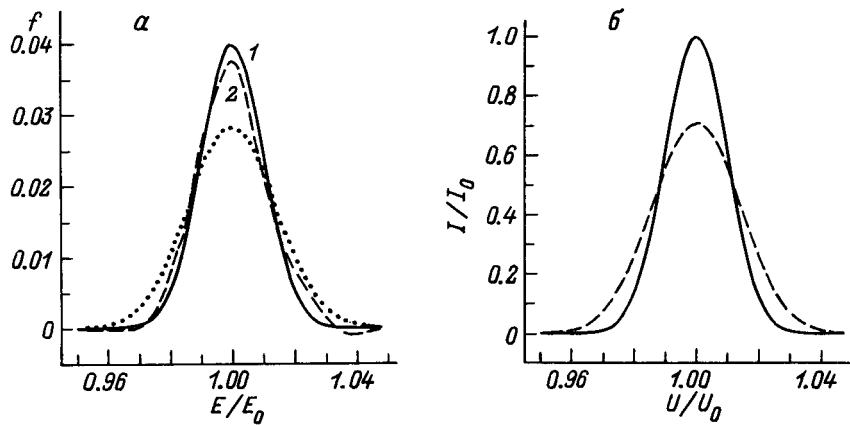


Рис. 1. Результаты восстановления энергетического распределения. *а*: сплошная кривая — истинное распределение; пунктир — распределение, полученное делением выходного сигнала на энергию; штриховая кривая — распределение (по (20) с точностью до поправки, связанной со второй производной) по известному выходному сигналу (штриховая на рис. 1, *б*) и аппаратной функции (сплошная кривая на рис. 1, *б*) (ширина истинного энергетического распределения на половине высоты равна ширине аппаратной функции на половине высоты).

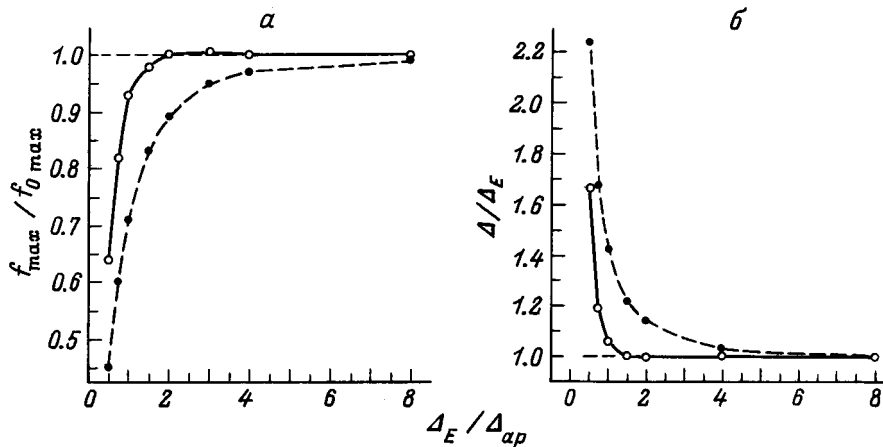


Рис. 2. f_{\max} — высота восстановленного спектра, $f_{0\max}$ — высота истинного распределения; ширина по половинной высоте: Δ — восстановленного спектра, Δ_E — истинного распределения, Δ_{ap} — аппаратной функции; сплошная кривая — с учетом поправки, связанной со второй производной; штриховая — для спектров, полученных простым делением на энергию.

по ширине порядка ширины аппаратной функции. В этом случае полученное с учетом поправки энергетическое распределение значительно ближе к истинному распределению по сравнению с распределениями, полученными без учета поправок. Кроме того, несложно показать, что полученная таким образом функция распределения удовлетворяет условию нормировки.

Используя условие нормировки функции $f(E)$, несложно показать, что $I(U_1)$ будет стремиться к нулю при $U_1 \rightarrow 0$ и $U_1 \rightarrow \infty$. Учитывая это, получаем, что

$$\int_0^{+\infty} I^{(n)}(U_1)U_1^{n-1}dU_1 = 0, \quad (25)$$

где $n \geq 1$.

Выражение (25) дает возможность сравнить по интенсивности два тока с квазиодноэнергетическими функ-

циями распределения частиц по энергии с шириной порядка ширины аппаратной функции, не уточняя при этом форму функции распределения. Следует отметить, что простое сравнение по максимумам токов на выходе анализатора дает неверный результат:

$$\frac{I_{10}}{I_{20}} = \frac{\int_0^{+\infty} I_1(U)/U dU}{\int_0^{+\infty} I_2(U)/U dU} \neq \frac{I_{1\max}}{I_{2\max}}, \quad (26)$$

где I_{10} и I_{20} — токи частиц на входе в анализатор, $I_{1\max}$ и $I_{2\max}$ — максимальные значения токов частиц $I_1(U)$ и $I_2(U)$ на выходе анализатора.

Рассмотрим теперь магнитный анализатор заряженных частиц, работающий в режиме спектрометра. Считаю, что магнитное поле в анализаторе создается элементами магнитной оптики, причем поля, создаваемые этими

элементами, линейно связаны по величине, для частицы с координатами η, ξ на входной диафрагме анализатора, вылетающей в направлении, задаваемом углами α, β , с импульсом p , из уравнений движения получим координаты частицы на выходной диафрагме анализатора

$$\eta_1 = \eta_1(\eta, \xi, \alpha, \beta, qH/p), \quad \xi_1 = \xi_1(\eta, \xi, \alpha, \beta, qH/p), \quad (27)$$

где H — величина напряженности магнитного поля в произвольно выбранной фиксированной точке.

Для функции распределения частиц по величине импульса, не зависящей от распределения по углам и сечению, количество частиц, проходящих через отверстие во входной диафрагме в единицу времени, связаны соотношением, аналогичным соотношению для электростатических анализаторов,

$$I(H) = I_0 \int_0^{+\infty} A(qH/p) f_2(p) dp. \quad (28)$$

Значение импульса, соответствующего настройке анализатора, и величина магнитного поля H связаны соотношением

$$p_1 = kH. \quad (29)$$

Для функции распределения, значение которой слабо меняется на ширине аппаратной функции, приближенное решение уравнения (28) будет иметь вид

$$f_2(kH) \approx \frac{I(H)}{CI_0H}, \quad (30)$$

где $C = \int_0^{+\infty} A(q/z) dz$ — постоянная, $z = p/H$.

Заключение

Кратко резюмируем основные результаты работы.

1. В работе показано, что для всех электростатических анализаторов, работающих в режиме спектрометра, функция распределения заряженных частиц по энергии на входе в анализатор и количество частиц, прошедших через отверстие в выходном электроде в единицу времени, зависит от отношения значений потенциалов и энергии частиц связаны соотношением (12). Следует отметить, что полученные выше выражения (12), (16) для описания связи между током на выходе анализатора и функцией распределения частиц по энергии остаются справедливыми и при учете электростатических полей рассеяния, обусловленных реальной геометрией электродов.

2. Подробный анализ показывает, что ранее предложенное [1] уравнение свертки (1) для описания связи между током частиц на выходе анализатора и функцией распределения частиц по энергии неприменимо для анализатора, работающего в режиме спектрометра.

3. При условии линейной связи потенциалов на электродах анализатора ток частиц на выходе анализатора

и функция распределения частиц по энергии связаны уравнением (2), в котором аппаратная функция является функцией отношения энергии настройки W к энергии частиц E . Для магнитного анализатора, работающего в режиме спектрометра, функция распределения частиц по величине импульса и ток частиц на выходе анализатора связаны аналогичным уравнением (28) при условии, что поля, создаваемые элементами магнитной оптики, линейно связаны.

4. Полученное для произвольной непрерывной функции распределения частиц по энергии решение (20) в виде ряда по производным от тока на выходе анализатора и рекуррентные соотношения (23) для коэффициентов ряда позволяют восстанавливать энергетические спектры с шириной порядка ширины аппаратной функции.

5. Так как функция распределения пучка по координатам сечения пучка входной диафрагмой и углам входит в выражение для аппаратной функции (12), то при калибровке анализаторов необходимо, чтобы используемый моноэнергетический пучок частиц имел функцию распределения по сечению и углам, близкую к тем спектрам, для измерения которых анализатор предназначен. Например, если анализатор предназначен для исследования отраженных от поверхности или эмиттированных частиц и при этом "видимая" анализатором площадь поверхности меньше, чем площадь эмиссии, а функция распределения частиц по углам в пределах угловой апертуры анализатора меняется слабо, то для калибровки анализатора лучше всего применять широкий моноэнергетический пучок частиц с квазиизотропным в пределах угловой апертуры анализатора распределением по углам.

6. Для улучшения разрешающей способности дисперсионного анализатора часто используется предварительное торможение частиц. Как правило, анализаторы с предварительным торможением работают в двух режимах [1]: в первом режиме постоянным остается тормозящий потенциал, а развертка спектра осуществляется изменением потенциала на отклоняющих электродах. Недостатком этого режима является то, что он неудобен при обработке результатов измерений широких спектров; во втором режиме постоянной остается разность потенциалов на отклоняющих электродах, а развертка осуществляется изменением тормозящего потенциала. Недостаток этого режима в том, что после системы торможения меняется функция распределения частиц по углам, что затрудняет последующую обработку спектров. Перечисленных выше недостатков можно избежать, если использовать анализатор в режиме, когда тормозящий потенциал и потенциалы на отклоняющих электродах линейно связаны (14). Использование тормозящего потенциала позволяет улучшить разрешающую способность анализатора, с другой стороны, ток частиц на выходе анализатора и функция распределения по энергии связаны уравнением (16) и, таким образом, в первом приближении обработка спектра сводится к делению сигнала на энергию.

Список литературы

- [1] *Афанасьев В.П., Явор С.Я.* Электростатические анализаторы для пучков заряженных частиц. М.: Наука, 1978.
- [2] *Зигбан К.* Бета- и гамма-спектрометрия. Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1959. С. 63–106.
- [3] *Жабров Г.И., Жданов С.К.* // Письма в ЖТФ. 1979. Т. 49. С. 2450–2454.
- [4] *Коборов Н.Н., Курнаев В.А., Урусов В.А.* Взаимодействие ионов и плазмы с поверхностью твердого тела. 1986. С. 22–31.
- [5] *Сысоев А.А., Чупахин М.С.* Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977.
- [6] *Афанасьев В.П., Явор С.Я.* // Письма в ЖТФ. 1975. Вып. 1. С. 227.