01;10;12

Восстановление распределения заряженных частиц по массам в периодическом электрическом поле

© *Ю.К. Голиков, Е.Ю. Флегонтова*

С.-Петербургский государственный технический университет

Поступило в Редакцию 1 октября 1996 г.

Предлагается метод определения спектра масс монохроматического точечного направленного источика при помощи плоского конденсатора с синусоидально меняющимся со временем напряжением на обкладках. Спектр масс восстанавливается из интегрального уравнения, связываающего ток на коллекторе с амплитудой переменной части напряжения.

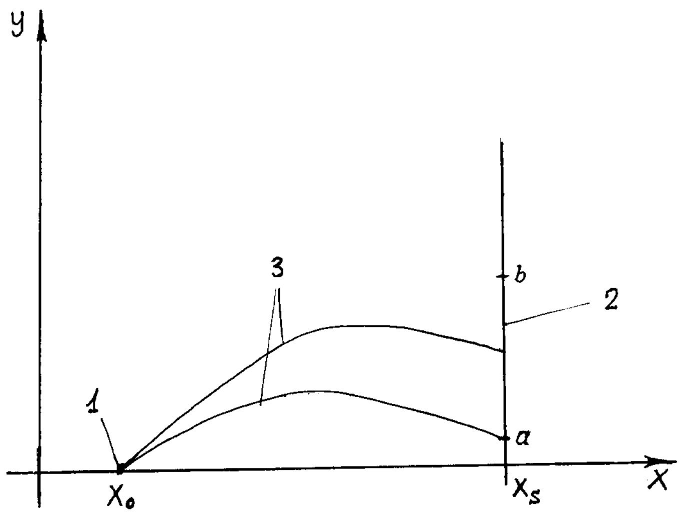
Как известно, в электростатических полях траектория заряженной частицы не зависит от массы, поэтому такие поля используются для масс-анализа только во времяпролетных приборах (см., например, [1]). Сделав поле меняющимся во времени (достаточно медленно, чтобы пренебречь электромагнитными эффектами), можно получить разделение потока по массам в пространстве (как это сделано, например, в [2] для импульсных источников, синхронизованных с полем). Интегральный характер предложенного ниже метода масс-анализа позволяет рассматривать источник, не синхронизованный с изменяющимся во времени полем (в данном частном случае стационарный), так как при анализе учитываются все траектории частиц, покинувших источник в различные моменты времени. При этом используется самая простая и легко реализуемая из возможных полевых структур (поле плоского конденсатора) и временны́х зависимостей (синусоидальное напряжение на обкладках). Заявленная выше "интегральность" метода с математической точки зрения означает решение интегрального уравнения, связывающего спектр масс с зависимостью тока на коллекторе от отношения переменной и постоянной составляющих напряжения на обкладках. Благодаря простоте описываемой системы удалось получить решение этого интегрального уравнения в квадратурах и предложить алгоритм восстановления функции распределения по массам в источнике.

Рассмотрим электрическое поле плоского конденсатора, синусоидально меняющееся со временем:

$$\Phi = \Phi_0(1 + \alpha \sin 2\pi\nu t), \tag{1}$$

где ν — частота, t — время. Пусть в плоскости нижнего электрода находится стационарный точечный источник заряженных частиц, вылетающих при заданных начальных значениях энергии и направления скорости. Выберем систему координат так, чтобы ось OX совпадала с нижним электродом, а ось OY была антипараллельна силовым линиям поля. В точке X_s по оси OX поместим коллектор конечной ширины по оси OY. Описанная система может быть двумерной или аксиально-симметричной (см. рисунок).

Функция распределения при вылете из источника не зависит от момента вылета t_0. Но траектории частиц колеблются в зависимости от t_0 в пределах, определяемых амплитудой колебаний напряжения и массой частицы. Частицы с массой, большей некоторой пороговой, попадают на коллектор независимо от фазы вылета, а из более легких частиц на коллектор приходит только часть, вылетевшая в определенном интервале времен, зависящем от массы m и отношения амплитуд переменной и постоянной составляющих поля — α. Усредненный по периоду ток через коллектор зависит от α и выражается интегралом по коллектору от мгновенного значения тока в каждой точке. Эта зависимость и служит интегральным уравнением для неизвестного спектра масс.



Система координат и сечение электродов: *1* — источник, *2* — коллектор, *3* — траектории частиц.

Запишем уравнение для величины потока заряженных частиц через плоскость, перпендикулярную оси OX:

$$j(X,Y,t)=\int\limits_0^{\infty}dm\int\limits_{-\infty}^{t}dt_0\int\limits_0^{\infty}dX\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\dot{Y}\dot{X}f(m,X,Y,\dot{X},\dot{Y},t,t_0), \qquad (2)$$

где $f(m,X,Y,\dot{X},\dot{Y},t,t_0)$ — полная функция распределения частиц — подчиняется уравнению неразрывности (см. [3]) с начальным условием

$$f(m,X,Y,\dot{X},\dot{Y},t)\big|_{t=t_0}=f_0(X,Y,\dot{X},\dot{Y})$$

$$=g(m)\delta(X-X_0)\delta(Y-Y_0)\delta\left(m\frac{\dot{X}^2+\dot{Y}^2}{2}-\varepsilon_0\right)\delta\left(\operatorname{arctg}\frac{\dot{Y}}{\dot{X}}-\vartheta_0\right), \qquad (3)$$

где $g(m)$ — искомое распределение по массам, ϑ_0 — угол вылета, ε_0 — начальная энергия, $\delta(\cdot)$ — дельта-функция Дирака.

Предположим, что характеристики уравнения неразрывности ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 известны как функции от $m, X, Y, \dot{X}, \dot{Y}, t, t_0$. Функция распределения выражается через характеристики и начальное условие следующим образом [3]:

$$f(m, X, Y, \dot{X}, \dot{Y}, t, t_0) = f_0(m, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4). \tag{4}$$

Подставив (4) в уравнение (3), проинтегрировав плотность тока по коллектору, усреднив ток через коллектор по периоду и изменив порядок интегрирования (все интегралы равномерно-непрерывно зависят от параметров), получаем:

$$I(X_s, \alpha) = \nu \int\limits_0^\infty dm \int\limits_0^{1/\nu} dt \int\limits_a^h dY \int\limits_{-\infty}^t dt_0 \int\limits_0^\infty d\dot{X} \int\limits_{-\infty}^\infty d\dot{Y} \dot{X}$$

$$\times f_0(m, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4). \tag{5}$$

Уравнение (5) является исходным для восстановления спектра масс. Чтобы найти его конкретный вид, проинтегрирум уравнения движения.

Прежде чем интегрировать уравнения движения, целесообразно перейти к безразмерной физической модели по схеме, указанной в [4]. В безразмерных координатах уравнения упрощаются и взаимосвязь различных параметров становится более явной. Выберем за единицу длины расстояние между обкладками L и перейдем к безразмерным координатам x, y и времени τ:

$$x = X/L, \quad y = Y/L, \quad \tau = t/T, \tag{6}$$

где T — масштабный множитель, определяемый условием

$$mL^2/T^2 = q\Phi_0, \tag{7}$$

где q — заряд частицы (равенство множителей при "кинетическом" и "потенциальном" слагаемых в функции Лагранжа). Безразмерные и реальные скорости иэнергии связаны так:

$$\dot{x} = \frac{dx}{d\tau} = \sqrt{\frac{m}{q\Phi_0}} \frac{dX}{dt}, \quad \dot{y} = \frac{dy}{d\tau} = \sqrt{\frac{m}{q\Phi_0}} \frac{dY}{dt}, \tag{8}$$

$$\varepsilon = m\frac{\dot{X}^2+\dot{Y}^2}{2} = \frac{mL^2}{T^2}\frac{\dot{x}^2+\dot{y}^2}{2} = \frac{mL^2}{T^2}W = q\Phi_0 W. \tag{9}$$

Здесь E и W — соответственно реальная и безразмерная энергии. Видно, что единицей энергии в этой модели служит энергия частицы, пролетевшей характерный потенциал Φ_0.

Введем безразмерный параметр, определяющий реальную массу m в долях некоторой характерной массы m_0:

$$\mu = m/m_0, \quad m_0 = q\Phi_0/4\pi^2\nu^2L^2. \tag{10}$$

Найдя в безразмерных координатах характеристики φ_1, φ_2, φ_3, φ_4, получим новый вид уравнений (5).

$$N(x) = \frac{1}{4\pi^2\nu I}\int\limits_0^\infty G\mu\,d\mu \int\limits_0^{2\pi\sqrt{\mu}} d\tau \int\limits_{a/L}^{b/L} dy \int\limits_{-\infty}^{\tau} d\tau_0 \int\limits_0^\infty \frac{2\pi\nu}{\sqrt{\mu}}\,\dot{x}\,d\dot{x} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\dot{y}$$

$$\times\,\delta(\varphi_1 - x_0)\delta(\varphi_2 - y_0)\delta\left(\frac{\varphi_3^2+\varphi_4^2}{2} - W_0\right)\delta\left(\operatorname{arctg}\frac{\varphi_4}{\varphi_3} - \vartheta_0\right). \tag{11}$$

Здесь

$$G(\mu) = g(m(\mu)), \quad N(x) = I(X(x)), \tag{12}$$

x_s — параметр — безразмерная координата коллектора, который в дальнейшем опускается для краткости записи.

Взяв внутренние интегралы, можно привести уравнение (11) к виду

$$N(\alpha) = \frac{\dot{x}_0}{2\pi}\int\limits_0^\alpha v(s)4\arcsin\frac{s}{\alpha}ds + \dot{x}_0\int\limits_\alpha^\infty v(s)ds, \tag{13}$$

где

$$s = h\mu \Bigg/ \sqrt{\left(1-\cos\sqrt{\mu\frac{x_s-x_0}{\dot{x}}}\right)^2 + \left(\sqrt{\mu}\,\frac{x_s-x_0}{\dot{x}} - \sin\sqrt{\mu}\,\frac{x_s-x_0}{\dot{x}}\right)^2},$$

$$v(s)ds = \frac{G(\mu)}{\mu}d\mu. \tag{14}$$

Дифференцируя уравнение (13) по переменному пределу и проделав элементарные преобразования, получаем уравнение Шлемильха:

$$P(\alpha) = \int_0^\alpha w(s) \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 - s^2}}\, ds, \tag{15}$$

где

$$sv(s) = w(s), \qquad \frac{\pi\alpha}{2x_0} \frac{dN(\alpha)}{d\alpha} = P(\alpha), \tag{16}$$

формула обращения для которого известна [5]. Обратив его, находим функцию $v(s)$:

$$v(s) = \frac{2}{\pi} \int_0^s \frac{P'(\xi)}{\sqrt{s^2 - \xi^2}}\, d\xi. \tag{17}$$

Подставив ее в (14), находим $G(\mu)$. После этого можно вновь перейти к размерной массе и определить $g(m)$ по формуле (12).

Компьютерная реализация расчета реального спектра масс по интегральному току на коллектор при помощи формулы (17) может быть осуществлена несколькими способами. Например:

а) Непосредственное вычисление $v(s)$ по интегральной формуле (17) ввиду несобственного характера интеграла становится доступным для численного моделирования, если избавиться от особенности при помощи очевидного преобразования

$$\int_0^s \frac{P'(\xi)}{\sqrt{s^2 - \xi^2}}\, d\xi = \int_0^s \frac{P'(\xi) - P'(s)}{\sqrt{s^2 - \xi^2}}\, d\xi + \frac{\pi}{2} P'(s). \tag{18}$$

б) Можно использовать какую-либо удобную аппроксимацию экспериментально измеренной зависимости $P'(\xi)$ в (17), гарантирующую вычисление $v(s)$ в классе известных функций. Так, при тригонометрической аппроксимации $P'(\xi)$ отрезком ряда Фурье получается следующее представление для искомой функции $v(s)$:

$$v(s) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{N} C_n \int_0^s \frac{\cos n\pi\xi}{\sqrt{s^2 - \xi^2}}\, d\xi = \sum_{n=0}^{N} C_n J_0(n\pi s). \tag{19}$$

где C_n — коэффициенты Фурье, $J_0(x)$ — функция Бесселя нулевого порядка.

в) Иногда может оказаться полезной полиномиальная аппроксимация $P'(\xi)$, при которой алгоритм вычисления выглядит следующим образом:

$$v(s) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{N} d_n \int\limits_0^s \frac{\xi^n}{\sqrt{s^2 - \xi^2}} \, d\xi = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{N} d_n B\left(\frac{n+1}{2}, \frac{1}{2}\right) s^n, \qquad (20)$$

здесь d_n — коэффициенты полиномиального представления, $B\left(\frac{n+1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ — бета-функция (см. [6]).

Список литературы

[1] *Сысоев А.А., Чупахин М.С.* Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977. 302 с.

[2] *Матышев А.А.* // Тез. докл. Российской науч.-техн. конф. "Инновационные наукоемкие технологии для России". 25–27 апреля 1995 г. Ч. 9. СПб., 1995.

[3] *Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д.* Элементы математической физики. М.: Наука, 1973. 351 с.

[4] *Голиков Ю.К.* и др. Расчет элементов электростатических электронно-оптических систем. Л.: изд. ЛПИ, 1984. 80 с.

[5] *Ватсон Г.Н.* Теория бесселевых функций. М.: Изд-во иностр. лит. 1949. Т. 1. 798 с.

[6] *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962. 1100 с.