

10;12

Моделирование и расчет магнитного резонансного масс-спектрометра с разрешающей способностью $\sim 10^6$

© Н.Н. Аруев, Е.Л. Байдаков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 5 сентября 1997 г.)

На основе уравнений движения заряженной частицы в скрещенных магнитном и электрическом полях проведено численное моделирование работы магнитного резонансного масс-спектрометра, для чего траектория движения ионов в анализаторе была разбита на отдельные участки. В расчетах учитывались реальные конструктивные размеры и параметры основных узлов и систем строящегося прибора, а также особенности его работы в различных режимах, полученные при исследованиях макета. В результате расчетов найдены оптимальные геометрические, электрические, частотные, фазовые и магнитные параметры прибора, которые позволяют одновременно получить разрешающую способность $R_{50\%} \approx 1.35 \cdot 10^6$ и коэффициент использования тока $K_I \approx 0.006$.

1. Магнитные резонансные масс-спектрометры (МРМС), предложенные [1] и разрабатываемые [2–4] в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, обладают высокими аналитическими характеристиками, что позволяет использовать эти приборы для решения различных физических задач. Одно из направлений развития этих приборов связано с достижением максимальной чувствительности за счет некоторой потери в разрешающей способности. Так, с помощью МРМС, обладающих рекордно высокими абсолютной и изотопической чувствительностями, были выполнены исследования, связанные с изотопией гелия и других благородных газов: открыты первичные гелий, неон и аргон в мантии Земли [5]; развиты представления о дегазации Земли [6]; определены скорость осадконакопления и возраст осадочных пород, в частности скорость роста железо-марганцевых конкреций [7]; измерен период полураспада трития новым изотопно-гелиевым способом [8] и т.д.

Другое направление развития МРМС имеет целью получение высокой разрешающей способности при соответственно более низкой чувствительности. Такие приборы необходимы для прецизионных измерений, например, масс атомов или фундаментальных физических констант. С помощью МРМС было выполнено самое точное прямое измерение величины магнитного момента протона в ядерных магнетонах μ_p'/μ_N [9,10], а также впервые зарегистрирован дублет ${}^3\text{H}^+ - {}^3\text{He}^+$, разность масс ионов в котором составляет $\Delta M \approx 2 \cdot 10^{-5}$ у [11]. Разрешающая способность прибора [11] на полувысоте массовой линии составила $R_{50\%} \approx 3.5 \cdot 10^5$. Так как этот МРМС был построен на базе постоянного магнита с индукцией магнитного поля $B \approx 0.12$ Т, то он работал в узком диапазоне масс (3–4 у) и не мог использоваться для решения широкого круга задач. Тем не менее этот прибор позволил экспериментально проверить и подтвердить справедливость разработанной теории МРМС, исследовать различные режимы работы, изучить влияние изменения электрических, частотных и

магнитных параметров на аналитические характеристики прибора [12,13].

Основываясь на результатах проведенных исследований, мы начали проектирование и строительство МРМС с расчетной разрешающей способностью на полувысоте массовой линии более 10^6 на базе специально созданного прецизионного электромагнита, обеспечивающего изменение индукции магнитного поля в пределах 0.05–0.5 Т и диапазон измеряемых масс 3–200 у. Одновременно с высокой разрешающей способностью прибор должен обладать максимально возможной чувствительностью и стабильно работать в различных режимах. Целью создания такого прибора являются прецизионные измерения масс атомов стабильных и нестабильных изотопов в широком массовом диапазоне, измерение разности масс дублета ${}^3\text{H}^+ - {}^3\text{He}^+$ для определения массы покоя электронного антинейтрино, определение энергий химических связей в молекулах, измерения фундаментальных физических констант, в частности μ_p'/μ_N , и т.д.

2. Принцип действия МРМС, различные режимы его работы, предложенные ранее методы расчета аналитических характеристик подробно описаны в [10,12,13]. Поэтому здесь приведем схему анализатора МРМС (рис. 1) с принятыми в более ранних публикациях обозначениями. Как и в предыдущих работах, основной программы моделирования анализатора МРМС является расчет параметров траектории отдельного иона в центральной плоскости прибора. Если в работе [11] для описания движения иона в анализаторе использовалось 9 трансцендентных уравнений, а в работе [12] — порядка 50 уравнений, то в данной работе применяется более логичный, на наш взгляд, путь моделирования и расчета параметров при численном решении уравнений движения иона в приборе. Для этого траектория движения иона в анализаторе разбивается на отдельные участки, где ионы подвергаются действию или только постоянного магнитного поля, или суперпозиции постоянного магнитного и переменного электрических полей. Число таких участков

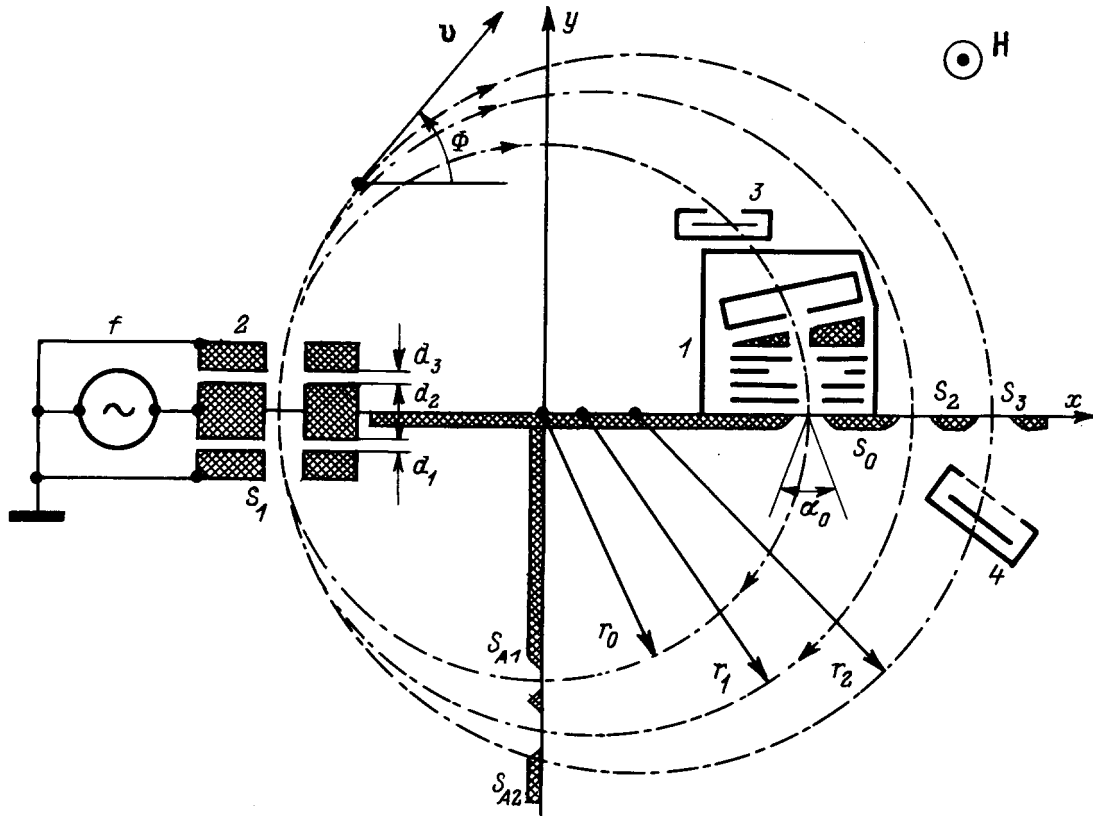


Рис. 1. Схема анализатора МРМС: 1 — ионный источник, 2 — модулятор, 3 — коллектор ионов, 4 — отражающий зазор; f — генератор высокочастотного модулирующего напряжения; S_0 — выходная щель источника; S_1 — щели в электродах модулятора; S_2 — щель дрейфа; S_3 — выходная щель анализатора; S_{A1} , S_{A2} — апертурные щели; d_1 и d_3 — ширины зазоров между центральным и боковыми электродами модулятора; d_2 — ширина центрального электрода модулятора.

в анализаторе с трехкамерным модулятором равно 10: от источника до модулятора — $S_0S_{A1}S_1$; в первом зазоре модулятора — d_1 ; в центральном электроде модулятора (условно бесполовом пространстве) — d_2 ; во втором зазоре модулятора — d_3 ; от модулятора до щели дрейфа — S_1S_2 ; от щели дрейфа до модулятора — $S_2S_{A2}S_1$; второй пролет модулятора — d_1, d_2, d_3 ; от модулятора до выходной щели анализатора — S_1S_3 . Результаты численных расчетов на каждом участке траектории являются начальными условиями для последующего участка.

Расположим оси x и y системы координат в центральной плоскости прибора, тогда вектор напряженности магнитного поля будет направлен по оси z (рис. 1). Пусть зазор модулятора представляет собой идеальный плоский конденсатор, перпендикулярный центральной плоскости прибора. Тогда система уравнений, описывающая движение иона в скрещенных однородном магнитном и переменном электрическом полях в плоском зазоре модулятора, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= \omega_0 \frac{dy}{dt} + D(\omega_0^2 - \omega^2) \sin \Theta \sin \omega t, \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= -\omega_0 \frac{dx}{dt} - D(\omega_0^2 - \omega^2) \cos \Theta \sin \omega t \end{aligned} \quad (1)$$

с начальными условиями в момент времени t_n

$$x(t_n) = x_n, \quad y(t_n) = y_n, \quad \dot{x}(t_n) = \dot{x}_n, \quad \dot{y}(t_n) = \dot{y}_n.$$

Здесь $(x(t), y(t))$ — координаты иона с зарядом q и массой m в момент времени t ; $\omega_0 = qH_0/mc$ — циклотронная частота ионов в однородном магнитном поле H_0 ; $|E| = (U/d) \sin \omega t$ — напряженность поля в зазоре модулятора; U — амплитуда и ω — круговая частота модулирующего напряжения;

$$D = \frac{qU}{md(\omega_0^2 - \omega^2)},$$

d — ширина зазора модулятора; Θ — угол, который составляет плоскость зазора модулятора с осью x .

Решение имеет вид

$$\begin{aligned} x(t) &= x_c + r \sin[\omega_0(t - t_n) - \phi] \\ &+ D \left\{ \frac{\omega}{\omega_0} \cos \omega t_n (\cos \Theta - \cos[\omega_0(t - t_n) - \Theta]) \right. \\ &+ \frac{\omega_0}{\omega} \cos \Theta (\cos \omega t - \cos \omega t_n) \\ &\left. + \sin[\omega_0(t - t_n) - \Theta] \sin \omega t_n + \sin \Theta \sin \omega t \right\}, \end{aligned}$$

$$y(t) = y_C + r \cos[\omega_0(t - t_n) - \phi] + D \left\{ \frac{\omega}{\omega_0} \cos \omega t_n (\sin \Theta + \sin[\omega_0(t - t_n) - \Theta] + \frac{\omega_0}{\omega} \sin \Theta (\cos \omega t - \cos \omega t_n) + \cos[\omega_0(t - t_n) - \Theta] \sin \omega t_n + \cos \Theta \sin \omega t) \right\}, \quad (3)$$

где (x_C, y_C) — координаты центра окружности радиусом r , по которой двигался бы ион в однородном магнитном поле в отсутствие электрического поля

$$x_C = x_n + \dot{y}_n / \omega_0, \quad y_C = y_n - \dot{x}_n / \omega_0, \quad (4)$$

$|v_n| = \sqrt{\dot{x}_n^2 + \dot{y}_n^2}$ — скорость при влете в зазор, $r = v_n / \omega_0$, ϕ — угол между вектором скорости v_n и осью x при влете в зазор.

Добавим к системе уравнений (3) уравнение точки встречи иона с противоположной границей зазора модулятора

$$[x(t) - x_1] \sin \Theta - [y(t) - y_1] \cos \Theta = 0, \quad (5)$$

где (x_1, y_1) — координаты произвольной точки на противоположной границе зазора модулятора.

Исключая из уравнений (3), (5) $x(t)$ и $y(t)$, получим уравнение относительно t — времени достижения ионом противоположной границы зазора модулятора

$$r \cos[\omega_0(t - t_n) - \phi + \Theta] = h_{C1} + D \left\{ \sin \omega t - \frac{\omega}{\omega_0} \times \cos \omega t_n \sin[\omega_0(t - t_n)] - \sin \omega t_n \cos[\omega_0(t - t_n)] \right\}, \quad (6)$$

где $h_{C1} = (x_C - x_1) \sin \Theta - (y_C - y_1) \cos \Theta$ — расстояние от центра окружности, по которой двигался бы ион в однородном магнитном поле, до границы зазора модулятора.

Трансцендентное уравнение (6) может быть решено численным методом, причем член в фигурных скобках играет роль поправки ко времени t_0 , которое вычисляется из уравнения, соответствующего случаю отсутствия электрического поля при $D = 0$,

$$\omega_0(t_0 - t_n) = \phi - \Theta + \arccos(h_{C1}/r). \quad (7)$$

Заметим, что уравнение (7) дает точное решение для задачи определения точки пересечения траектории иона в однородном магнитном поле с заданной плоской границей, например с плоскостями щелей масс-анализатора. Тогда для зазора модулятора способ решения заключается в естественной итерационной процедуре

$$\omega_0(t_{i+1} - t_n) = \phi - \Theta + \arccos(h_{C1}/r) + \frac{D}{r} \left\{ \sin \omega t_i - \frac{\omega}{\omega_0} \times \cos \omega t_n \sin[\omega_0(t_i - t_n)] - \sin \omega t_n \cos[\omega_0(t_i - t_n)] \right\}, \quad (8)$$

которая очень быстро сходится и дает относительную точность вычислений на уровне 10^{-5} за 3–4 итерации.

Подставляя найденное значение времени t в уравнения (3), мы получаем координаты иона на выходной границе зазора модулятора. Соответственно компоненты скорости иона находятся из уравнений, полученных из (3) однократным дифференцированием по времени,

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= v_n \cos[\omega_0(t - t_n) - \phi] \\ &+ D \{ \omega \cos \omega t_n \sin[\omega_0(t - t_n) - \Theta] - \omega_0 \cos \Theta \sin \omega t \\ &+ \omega_0 \cos[\omega_0(t - t_n) - \Theta] \sin \omega t_n + \omega \sin \Theta \cos \omega t \}, \\ \dot{y}(t) &= -v_n \sin[\omega_0(t - t_n) - \phi] \\ &+ D \{ \omega \cos \omega t_n \cos[\omega_0(t - t_n) - \Theta] - \omega_0 \sin \Theta \sin \omega t \\ &- \omega_0 \sin[\omega_0(t - t_n) - \Theta] \sin \omega t_n - \omega \cos \Theta \cos \omega t \}. \quad (9) \end{aligned}$$

В качестве начальных параметров задаются: $(x_{n0}, y_{n0} \equiv 0)$ — координаты иона на выходной щели источника ионов, $(qU_0, \alpha = \arctg(\dot{x}_{n0}/\dot{y}_{n0}))$ — энергия иона и угол вылета из источника, ωt_{n0} — фаза высокочастотного напряжения модулятора. Кроме того, при моделировании масс-анализатора задаются величина магнитного поля H_0 , амплитуда высокочастотного модулирующего напряжения U , заряд и масса исследуемых ионов m/q , геометрические параметры анализатора — диаметры рабочих орбит D_0, D_1, D_2 , которые определяют координаты центров щелей анализатора, ширины щелей источника ионов S_0 , модулятора S_1 , дрейфа S_2 , выходной щели анализатора S_3 и апертурной щели S_{A0} , расположенной на орбите в 90° от щели источника, и геометрические параметры модулятора d_1, d_2, d_3 .

Программа для персонального компьютера IBM PC написана на языках FoxPro и C. Расчетная часть программы представляет результаты в численной и графической формах. Другая часть программы предоставляет удобный интерфейс для ввода параметров анализатора, полуавтоматической настройки параметров моделируемого прибора к рабочим режимам и средства для сбора результатов расчетов в базу данных для последующей дополнительной обработки.

Как было указано в [2,10,12,13], рабочий режим анализатора МРМС достигается при определенных дополнительных связях между задаваемыми параметрами масс-анализатора. Нахождение набора параметров, при котором наблюдается масс-пик, соответствует настройке реального прибора. Программный режим настройки основан на расчете центральной траектории ионов и оценке aberrаций первого порядка, что позволяет получить напряжение прямого заброса, оценить точность настройки, например, на компенсационный режим работы, разрешающую способность и эффективность использования тока из источника ионов.

Во время проверки программы и на первых стадиях расчетов проводились исследования влияния на конечные результаты расчетов числа шагов по выходной щели источника, по углам вылета ионов из выходной щели

источника, по энергии ионов и частоте модулирующего напряжения. Увеличение числа шагов параметров от 2 до 10 раз приводило к значительному увеличению времени счета, однако разрешающая способность и другие характеристики изменялись пренебрежимо мало.

3. При расчетах, результаты которых будут представлены ниже, мы учитывали следующие обстоятельства, связанные с конструктивными особенностями и работой прибора. Прецизионный электромагнит, созданный специально для разрабатываемого МРМС, имеет диаметр полюсных наконечников 600 мм и ширину межполюсного зазора 53 мм. При проектировании магнита мы полагали, что рабочая орбита МРМС будет располагаться на расстоянии примерно двух ширин межполюсного зазора от краев полюсных наконечников, чтобы влияние краевых эффектов на однородность магнитного поля на рабочей орбите с диаметром D_1 было минимальным. Поэтому в расчетах рассматривались только те варианты, в которых величина D_1 составляла 400 ± 10 мм. Предварительные исследования показали, что неоднородность поля на рабочей орбите $\Delta H/H_0$ (H_0 — напряженность поля на оси симметрии полюсных наконечников в центре зазора) не превышает $\pm 7 \cdot 10^{-6}$ без какого-либо дополнительного шиммирования. Конструкция и характеристики электромагнита будут подробно описаны после его окончательной установки и юстировки.

В силу того что ионный источник МРМС располагается внутри камеры анализатора, он должен обладать малыми геометрическими размерами. Для строящегося прибора был разработан малогабаритный источник ионов, в ионно-оптическую систему которого введена трехэлектродная щелевая скрещенная линза, что позволило фокусировать пучок ионов как в горизонтальной, так и вертикальной плоскостях [14]. Величина ускоряющей разности потенциалов U_0 в источнике была выбрана ~ 2000 В для того, чтобы влияние нестабильностей ускоряющего напряжения, рассеянных электрических полей, контактных разностей потенциалов и объемных зарядов на движение пучка по начальной орбите с диаметром D_0 было незначительным и не уменьшало разрешающую способность прибора. С этой точки зрения было бы выгодно существенно (в несколько и даже в десятки раз) увеличивать значение U_0 . Однако такое увеличение повлекло бы за собой практически пропорциональный рост геометрических размеров изолирующих элементов и всего ионного источника, а также амплитуды модулирующего высокочастотного синусоидального напряжения U_{HF} , достижение стабильности которой является чрезвычайно трудной задачей. Поэтому в расчетах рассматривался диапазон $U_{HF} = (300-600)$ В, в котором реально достигается необходимая стабильность амплитуды U_{HF} .

Так как изменения параметров орбит анализатора ведут к изменениям амплитуды прямого заброса U_{13} , то для однозначной трактовки получаемых в расчетах результатов использовалось условие $U_{HF} \leq 0.9U_{13}$, где U_{HF} — амплитуда модулирующего напряжения, необходимая для достижения компенсационного режима рабо-

ты МРМС. Еще одно ограничение, которое учитывалось при расчетах, было связано с электрической прочностью ускоряющих зазоров в модуляторе. В связи с этим ширины зазоров d_1 и d_3 задавались более 0.5 мм.

4. Одним из наиболее важных с точки зрения конструирования прибора являлся вопрос, как влияют на разрешающую способность R и коэффициент использования тока K_I диаметры D_2 и D_0 , а также их разность $D_2 - D_0$.

Разность диаметров ($D_2 - D_0$) определяет величину амплитуды высокочастотного модулирующего напряжения, необходимую для того, чтобы ионы с определенными массой и зарядом M/q , вышедшие из источника, попали в выходную щель анализатора S_3 после первого прохождения модулятора, т. е. в режиме прямого заброса. Вершина прямого заброса соответствует наименьшей амплитуде ВЧ напряжения U_{13} , при которой ионы попадают в S_3 . Таким образом, величина U_{13} однозначно связывает геометрические D_0 , D_2 и электрические U_0 , ω параметры движения ионов с определенным M/q в магнитном поле H , и поэтому ее можно использовать в качестве относительной меры модулирующего напряжения U_{HF} . В большинстве расчетов мы придерживались соотношения $U_{HF} = 0.9U_{13}$, так как, во-первых, по абсолютной величине разница в $0.1U_{13}$ составляет 30–50 В, что исключает попадание нерезонансных ионов в выходную щель, а во-вторых, с ростом U_{HF} растет разрешающая способность МРМС, т. е. выгодно работать при больших модулирующих напряжениях.

В таблице приведены результаты расчетов $R_{50\%}$ и K_I в зависимости от D_0 и D_2 для двух значений разности ($D_2 - D_0$). При этом диаметр рабочей орбиты D_1 получается в расчетах исходя из условия достижения компенсационного режима работы МРМС [12,13]. Для указанных разностей диаметров ($D_2 - D_0$), равных 6.2 и 7.2 см, необходимые значения $U_{HF} = 0.9U_{13}$ составляют 352 ± 1 и 410 ± 1 В соответственно. Расчеты показывают, что с увеличением разности диаметров ($D_2 - D_0$) возрастают U_{HF} и разрешающая способность прибора. При этом значения самих диаметров D_0 и D_2 не влияют на $R_{50\%}$. В свою очередь коэффициент использования тока K_I , определяющий его чувствительность, падает с ростом ($D_2 - D_0$) так, что произведение $R_{50\%}K_I$ остается практически неизменным.

На рис. 2 представлены зависимости $R_{50\%}$ и K_I от величины модулирующего напряжения U_{HF} для двух значений диаметров D_0 и D_2 , а также их разностей ($D_2 - D_0$). Расчеты показывают, что для каждого набора геометрических параметров D_0 , D_2 , ($D_2 - D_1$) разрешающая способность $R_{50\%}$ увеличивается, а коэффициент использования тока K_I падает с ростом U_{HF} . Рост разрешающей способности с увеличением U_{HF} объясняется тем, что, во-первых, при этом увеличивается дисперсия прибора и, во-вторых, уменьшается стрела прогиба пакетов, вырезаемых щелью дрейфа S_2 , на что указывает падение величины модуляционных aberrаций. Эти два фактора объясняют и то, что при увеличении

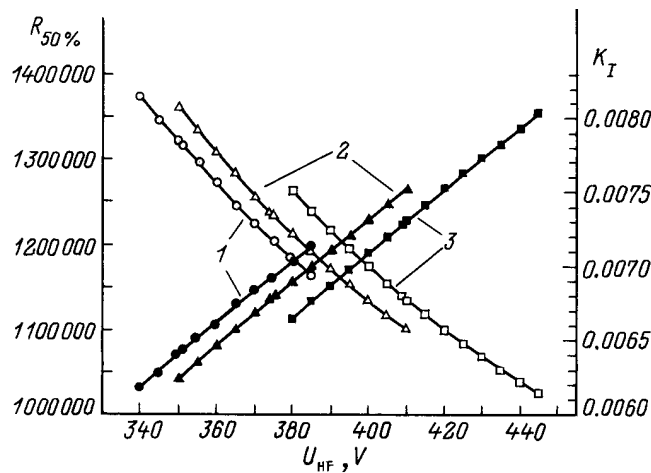


Рис. 2. Зависимости разрешающей способности $R_{50\%}$ и коэффициента использования тока от амплитуды модулирующего напряжения: $(D_2 - D_0)1 = 6.2$ (1), 6.6 (2), 7.2 см (3); $\circ, \triangle, \square - K_I, \bullet, \blacktriangle, \blacksquare - R_{50\%}$.

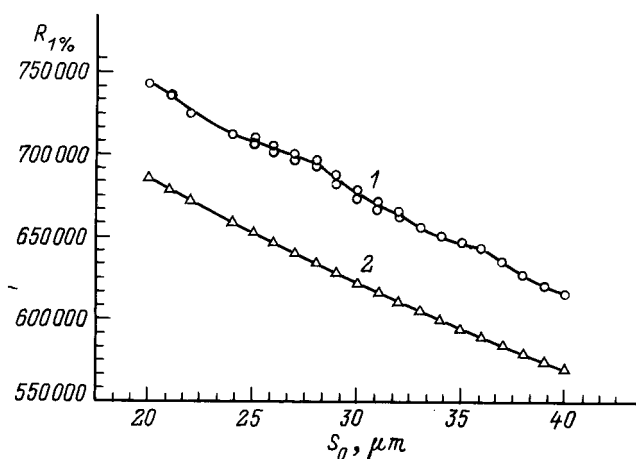


Рис. 3. Зависимость разрешающей способности $R_{1\%}$, рассчитанной двумя способами, от ширины выходной щели источника.

$(D_2 - D_0)$ наблюдается рост $R_{50\%}$ для относительных величин $U_{HF} = 0.9U_{13}$.

Падение K_I связано с увеличением амплитуды модуляции ионного пучка и уменьшением числа ионов в пакетах, вырезаемых щелью дрейфа S_2 . Эти расчетные зависимости $R_{50\%} = f(U_{HF})$ и $K_I = f(U_{HF})$ хорошо согласуются с экспериментальными данными, которые были получены на макете МРМС [13].

Расчетные данные, приведенные в таблице и на рис. 2, показывают, что для получения высокой разрешающей способности более выгодно работать при больших разностях $(D_2 - D_0)$ и высоких значениях U_{HF} .

Из теории известно, что в любых типах масс-спектрометров разрешающая способность прямо пропорциональна дисперсии и обратно пропорциональна ширине изображения ионного пучка на плоскости, где расположена выходная щель анализатора. Ширина изображения

включает ширину щели ионного источника (в нашем случае S_0), выходной щели (S_3) и всех aberrаций, которые вносят вклад в уширение ионного пучка. В расчетах мы учитывали aberrации, связанные с разбросом ионов по углам вылета из источника и энергиям, а также aberrации пучка, обусловленные процессом модуляции.

Для расчета магнитных aberrаций надо знать реальное распределение неоднородностей магнитного поля на орбите дрейфа диаметром D_1 , которое в настоящее время точно неизвестно. Поэтому, основываясь на исследованиях, проведенных на макете МРМС, мы оценили, что aberrации, вызываемые этими неоднородностями, могут составлять от 5 до 15 μm . Если принять во внимание тот факт, что в предварительных исследованиях величина неоднородностей магнитного поля ΔH на орбите дрейфа не превышала $\pm 7 \cdot 10^{-6}$ от H_0 , то такие оценки магнитных aberrаций представляются реальными. Соответственно вклад этих aberrаций в снижение разрешающей способности прибора не превысит $\sim 10\%$.

Рассмотрим, как влияют ширины всех щелей, определяющих траекторию движения ионов от ионного источника до детектора, на разрешающую способность и коэффициент использования тока МРМС.

В силу того что ширина выходной щели ионного источника S_0 (при вариации ее в небольших пределах, близких к реальным) слабо влияет на разрешающую способность на полувысоте линии $R_{50\%}$, программой был предусмотрен расчет разрешающей способности на 1% высоты линии двумя способами: аналитически по дисперсии и ширине изображения ионного пучка, а также по форме пика. На рис. 3 приведены графики $R_{1\%} \sim f(S_0)$, полученные двумя способами. Существенная разница в значениях $R_{1\%}$, по-видимому, объясняется тем, что при аналитическом методе расчета увеличивается влияние "хвостов" у основания линии.

Что касается чувствительности МРМС, то она определяется не только шириной выходной щели ионного источника S_0 , но также фокусирующими свойствами специально разработанных ионных источников [14,15] и коэффициентом использования тока прибора K_I , который равен отношению тока, прошедшего в выходную щель анализатора S_3 , к току, вышедшему из S_0 . Если принять,

D_0, cm	D_2, cm	$D_2 - D_0, \text{cm}$	$U_{HF} \approx 0.9U_{13}$	$R_{50\%}/10^6$	K_I
36.0	42.2	6.2	351	1.076	0.0078
36.2	42.2	6.2	351	1.075	0.0078
36.4	42.6	6.2	352	1.076	0.0078
36.6	42.8	6.2	353	1.078	0.0077
36.8	43.0	6.2	353	1.077	0.0077
37.0	43.2	6.2	353	1.074	0.0077
36.0	43.2	7.2	409	1.224	0.0068
36.2	43.4	7.2	410	1.225	0.0068
36.4	43.6	7.2	411	1.228	0.0067
36.6	43.8	7.2	411	1.225	0.0067
36.8	44.0	7.2	411	1.223	0.0067
37.0	44.2	7.2	411	1.220	0.0067

что заполнение щели S_0 ионами является равномерным, то уменьшение ширины S_0 будет приводить к пропорциональному уменьшению выходного тока источника. В то же время улучшение фокусирующих свойств ионно-оптической системы источника, в том числе осуществление вертикальной фокусировки ионного пучка [15], позволило практически на порядок повысить выходной ток источника и чувствительность макета МРМС в целом при сохранении разрешающей способности. Хотя в большинстве проведенных расчетов ширина щели S_0 принималась равной $28 \mu\text{m}$, мы считали вполне допустимым уменьшение S_0 до $20\text{--}25 \mu\text{m}$.

Ширина апертурной щели S_{A1} , расположенной на 90° от источника, определяет величину угловых aberrаций ионного пучка и, таким образом, может влиять на разрешающую способность и чувствительность МРМС. Но так как угловые aberrации дают малый вклад в изображение пучка ($\leq 1 \mu\text{m}$) при полной ширине изображения $\sim 50 \mu\text{m}$, то вариация S_{A1} в пределах от 0.2 до 2.0 mm приводит к изменениям $R_{50\%}$ на уровне $1\text{--}2\%$. Окончательная ширина щели S_{A1} будет выбрана экспериментально при настройке ионного источника.

Три щели в электродах модулятора, имеющие одинаковую ширину и обозначенные как S_1 , непосредственно не определяют разрешающую способность и чувствительность МРМС, так как их ширина в десятки раз превышает ширину выходной щели источника S_0 . В то же время очевидно, что при любых ширинах щелей S_1 в модуляторе существует провисание в них электрического поля, которое косвенным образом влияет на эффективность модулятора и разрешающую способность прибора. Как показали исследования на макете МРМС [13], наличие провисающих электрических полей аналогично увеличению ширины ускоряющих зазоров модулятора d_1 и d_3 , что влечет за собой уменьшение разрешающей способности прибора. Компенсировать этот эффект можно путем увеличения амплитуды U_{HF} . С другой стороны, при выбранной ширине ускоряющих (d_1, d_3) и бесполевого (d_2) зазоров модулятора провисание полей в щелях электродов определяет требования к разбросу ионов по энергии, и чем выше U_{HF} , тем выше эти требования [13]. Учитывая, что в макете МРМС амплитуда U_{HF} составляла $\sim 570 \text{ V}$, а в разрабатываемом приборе составляет $\sim 400 \text{ V}$, влияние провисающих электрических полей должно быть меньше. Поэтому в расчетах ширины щелей S_1 принимались такими же, как и в макете, т.е. $S_1 \approx 1 \text{ mm}$.

Щель дрейфа S_2 задает диаметр рабочей орбиты D_1 и вырезает пакеты ионов из промодулированного ионного пучка. Изменение ширины S_2 влечет за собой пропорциональное изменение коэффициента использования тока прибора K_I и обратно пропорциональное изменение разрешающей способности $R_{1\%}$. Последнее связано с тем, что при уменьшении S_2 уменьшается величина aberrации, обусловленной модуляцией пучка. Расчеты показывают, что при изменении S_2 в пределах $1.0\text{--}2.4 \text{ mm}$ модуляционные aberrации изменяются от 4.5 до $26 \mu\text{m}$.

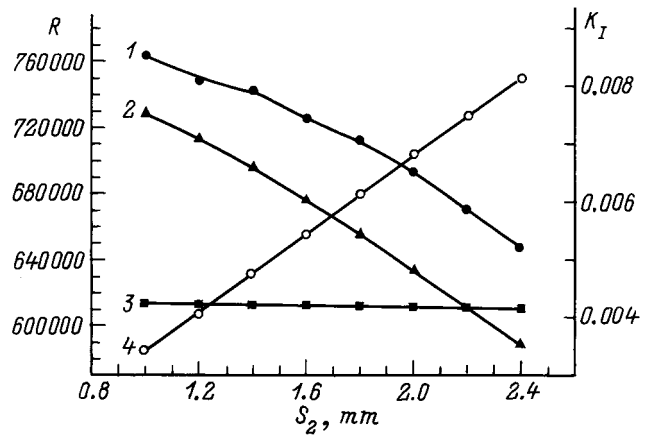


Рис. 4. Зависимости разрешающей способности $R_{1\%}$ и коэффициента использования тока от ширины щели дрейфа: 1 — $R_{1\%}$, 2 — R_{gen} , 3 — $R_{50\%}$, 4 — K_I .

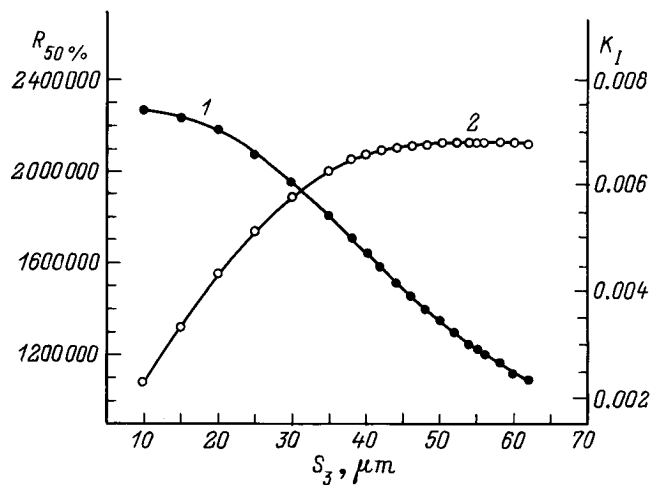


Рис. 5. Зависимости $R_{50\%}$ (1) и K_I (2) от ширины выходной щели анализатора.

На рис. 4 представлены зависимости $R_{1\%} \cong \approx f(S_2)$ и $K_I = f(S_2)$. Оптимальная ширина щели дрейфа S_2 лежит в пределах $1.7\text{--}2.0 \text{ mm}$, при этом модуляционные aberrации составляют $11\text{--}18 \mu\text{m}$.

На рис. 5 приведены графики зависимости разрешающей способности $R_{50\%}$ и коэффициента использования тока K_I от ширины выходной щели анализатора S_3 при $S_0 = 28 \mu\text{m}$, $S_2 = 2.0 \text{ mm}$ и $U_{\text{HF}} = 0.9U_{13}$.

Для получения максимального K_I оптимальной является ширина щели S_3 , равная ширине изображения ионного пучка с учетом всех aberrаций. Как видно из графика, оптимальная ширина щели S_3 равна $\sim 50 \mu\text{m}$ и в диапазоне $40\text{--}50 \mu\text{m}$ относительное падение K_I значительно меньше относительного роста $R_{50\%}$. Для компенсации неучитываемых в расчетах магнитных aberrаций величина S_3 должна быть увеличена в сторону верхнего предела. Поэтому в окончательных расчетах ширина выходной щели анализатора S_3 варьировалась в пределах $45\text{--}50 \mu\text{m}$.

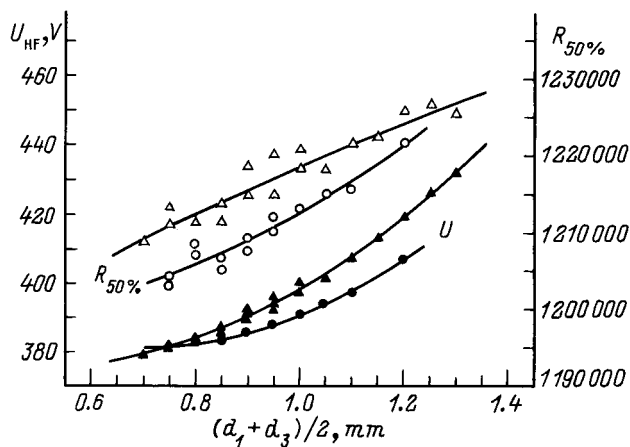


Рис. 6. Зависимость $R_{50\%}$ от ширины ускоряющих зазоров d_1 и d_3 как для симметричного ($d_1 = d_3$), так и для несимметричного ($d_1 \neq d_3$): модулятора $d_2 = 2.0$ (кружки), 2.2 mm (треугольники).

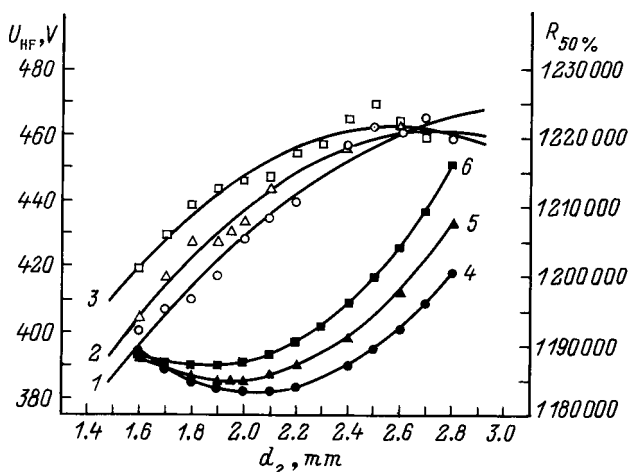


Рис. 7. Зависимость $R_{50\%}$ и U_{HF} от ширины бесполевого пространства модулятора d_2 ; $d_1 \neq d_3$ mm: 1, 4 — 0.8, 2, 5 — 0.9; 3, 6 — 1.0; 1-3 — $R_{50\%}$, 4, 6 — U_{HF} .

Наибольшую сложность для интерпретации представляют результаты расчетов, касающиеся влияния ширин ускоряющих промежутков модулятора d_1 и d_3 , а также ширины бесполевого пространства в среднем электроде d_2 на разрешающую способность МРМС. С одной стороны, если диаметры D_0 и D_2 поддерживаются постоянными, то изменение ширин d_1 , d_2 и d_3 приводит к изменению диаметра рабочей орбиты D_1 . В связи с этим изменяются величины и фаза модулирующего напряжения U_{HF} , обеспечивающие работу МРМС в компенсационном режиме. С другой стороны, при изменении ширин ускоряющих зазоров d_1 и d_3 в них изменяется напряженность электрического поля и, следовательно, траектории движения ионов (трохоиды). Результатом влияния этих двух факторов является то, что расчетная разрешающая способность МРМС остается практически

постоянной при значительных изменениях d_1 , d_2 , d_3 , если поддерживается соотношение $U_{HF} = 0.9U_{13}$ (рис. 6 и 7). При этом U_{HF} имеет минимум в области изменения $d_2 \approx 1.9-2.1$ mm.

Если условие $U_{HF} = 0.9U_{13}$ не выполняется и U_{HF} , например, остается постоянным, а параметры d_1 , d_2 , d_3 варьируются, то семейство кривых $R_{50\%} = f(d_1, d_2, d_3)$ имеет максимум в области $d_2 \approx 1.82-2.2$ mm (рис. 8) и $(d_1/2 + d_2 + d_1/2) \approx 2.7-2.9$ mm (рис. 9) как для симметричных ускоряющих зазоров $d_1 = d_3$, так и для несимметричных зазоров $d_1 \neq d_3$. Отсюда следует, что ширина ускоряющих зазоров лежит в пределах $0.7-0.9$ mm. Минимальные значения U_{HF} соответствуют именно таким величинам d_1 и d_3 (рис. 7).

Окончательные расчеты аналитических характеристик ($R_{50\%}$, $R_{1\%}$, K_I) анализатора МРМС производились при одновременной вариации параметров в узких пределах, определенных на предварительных стадиях вычислений.

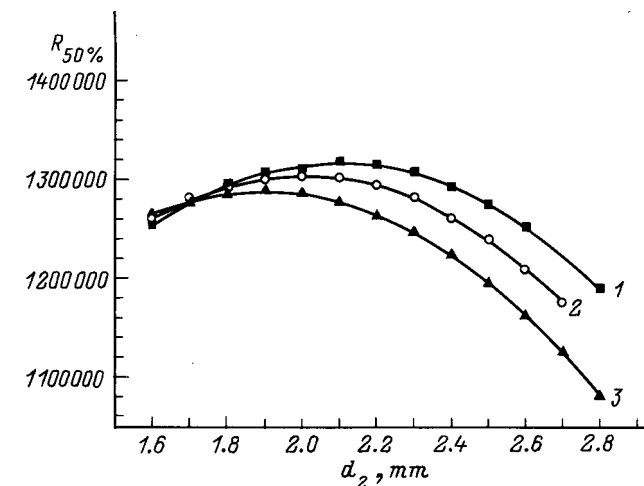


Рис. 8. Зависимость $R_{50\%}$ от ширины бесполевого пространства d_1, d_2, d_3 при $U_{HF} \neq 0.9U_{13}$; $d_1 = d_3$, mm: 1 — 0.8, 2 — 0.9, 3 — 1.0.

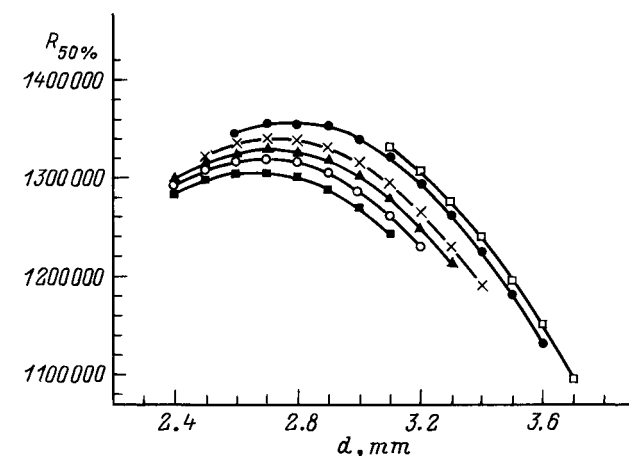


Рис. 9. Зависимость $R_{50\%}$ от ширины зазоров модулятора d_1, d_2, d_3 при $U_{HF} \neq 0.9U_{13}$; $d = (d_1/2) + d_2(d_3/2)$; d_2 , mm: ■ — 1.9, ◇ — 2.0, ▲ — 2.1, × — 2.2, ● — 2.4, ○ — 2.5.

В результате расчетов были найдены оптимальные параметры анализатора, при которых расчетная разрешающая способность достигает $R_{50\%} \approx 1.35 \cdot 10^6$ при коэффициенте использования тока $K_I \approx 0.006$.

В процессе расчетов найдены взаимосвязи, позволяющие путем изменения одного параметра компенсировать влияния, например, на $R_{50\%}$ других параметров, что необходимо при настройке и исследованиях строящегося МРМС.

Расчеты также показали, что схема МРМС устойчива к изменению в широких пределах геометрических, электрических, частотных параметров. Сравнивая результаты расчетов, на основе которых был построен МРМС с $R_{50\%} \approx 350$ тыс [11,12], с результатами, полученными в этой работе, можно отметить несколько существенных преимуществ (например, увеличение разрешающей способности статической ступени прибора за счет увеличения радиуса орбиты, значительное понижение амплитуды высокочастотного модулирующего напряжения U_{HF} , увеличение разности диаметров $D_1 - D_0$ и $D_2 - D_1$), которые, на наш взгляд, позволяют надеяться на достижение на практике расчетных аналитических характеристик.

Работа поддерживается грантом и выполняется в рамках государственной научно-технической программы "Фундаментальная метрология".

Список литературы

- [1] *Ионов Н.И., Мамырин Б.А., Фикс В.Б.* // ЖТФ. 1953. Т. 23. Вып. 11. С. 2101–2104.
- [2] *Шустров Б.Н.* // ЖТФ. 1960. Т. 30. Вып. 7. С. 860–864.
- [3] *Мамырин Б.А., Французов А.А.* // ПТЭ. 1961. № 3. С. 114–119.
- [4] *Алексейчук, Ануфриев Г.С., Афонина Г.И.* и др. // ПТЭ. 1979. № 4. С. 206–209.
- [5] *Ануфриев Г.С., Арбузова Л.А., Болтенков Б.С.* и др. // Журнал аналитической химии. 1983. Т. 38. № 3. С. 472–478.
- [6] *Толстихин И.Н., Азбель И.Я., Хабарин Л.В.* // Геохимия. 1975. № 5. С. 653–666.
- [7] *Ануфриев Г.С., Болтенков Б.С., Капитонов И.Н.* // ДАН СССР. 1989. Т. 304. № 3. С. 702–705.
- [8] *Акулов Ю.А., Мамырин Б.А., Хабарин Л.В.* и др. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. Вып. 10. С. 940–942.
- [9] *Мамырин Б.А., Французов А.А.* // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. Вып. 2. С. 416–428.
- [10] *Мамырин Б.А., Аруев Н.Н., Алексеенко С.А.* // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. Вып. 7. С. 3–20.
- [11] *Мамырин Б.А., Аруев Н.Н., Алексеенко С.А.* // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. Вып. 6. С. 2125–2131.
- [12] *Аруев Н.Н., Байдаков Е.Л., Мамырин Б.А., Яковлев А.В.* // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 3. С. 502–510.
- [13] *Аруев Н.Н., Байдаков Е.Л., Мамырин Б.А., Яковлев А.В.* // ЖТФ. 1990. Т. 60. Вып. 8. С. 181–187.
- [14] *Аруев Н.Н., Байдаков Е.Л.* // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 4. С. 175–179.
- [15] *Аруев Н.Н., Байдаков Е.Л., Мамырин Б.А., Яковлев А.В.* // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 3. С. 536–541.