

Экспресс-метод поиска конструкций магнитных масс-анализаторов

© О.Н. Перегудов, В.Ф. Шкурдода, Л.Ф. Суходуб

Институт прикладной физики НАН Украины,
40030 Сумы, Украина
e-mail: iaruas@gluk.apc.org

(Поступило в Редакцию 20 ноября 2001 г.)

Предложена оригинальная методика расчета конструкций магнитных масс-анализаторов, формализованная в виде компьютерной программы. Тщательная оптимизация методики расчета позволила выполнить моделирование фокусирующих свойств масс-анализатора вдоль фокальной линии с большой скоростью и точностью, а также производить отбор подходящих для данной задачи конструкций.

Введение

Разработка магнитного масс-анализатора всегда была сложной и трудоемкой задачей для конструкторов, требующей значительного объема вычислений и богатого опыта предыдущих разработок. Для ускорения процесса разработки новых конструкций масс-анализаторов, а также для выполнения различного рода сравнений и оптимизационных задач нами была разработана новая экспресс-методика расчета.

Метод экспресс-поиска

Подход базируется на общеизвестных формулах, приведенных в [1], с некоторыми расширениями, которые сводятся к тому, что в классическое дисперсионное соотношение добавлены абберрационные коэффициенты высших порядков. Кроме того, были учтены результаты компьютерной симуляции и выполнена оптимизация полученной математической модели. Все это позволило моделировать фокусирующие свойства масс-анализатора вдоль фокальной линии в достаточно широком диапазоне масс при значительно сокращенном объеме вычислений.

В силу того что методика базируется на классических общепризнанных формулах, рекомендуется применять ее в качестве основной для расчета магнитных масс-анализаторов. Дальнейшего повышения точности результатов можно достичь только за счет учета эффектов влияния краевого поля рассеяния высших порядков, что сделано в более громоздких моделях, как, например, в методе матрицантов для магнитных масс-анализаторов [2]. Отметим, что сравнение результатов расчетов данного метода и метода матрицантов [2] показывает различие порядка 2.5%. Вследствие предельной простоты и, следовательно, высокой скорости вычислений применение настоящего метода для экспресс-анализа вполне оправдано.

На основе предложенной методики была разработана программа (доступна в сети Internet на сайте <http://or.pochtamt.ru/>), которая позволяет оценить практически все основные свойства магнитного масс-анализатора вдоль фокальной линии (разрешение, положение

точек фокусировки, параметры фокусировки в вертикальной и горизонтальной плоскостях и т.д.). Кроме того, программа позволяет выполнять экспресс-поиск конструкций по заданным критериям. Оптимизация параметров не выполняется. Обусловлено это тем, что критериев оптимизации несколько и они не образуют непрерывного множества. Зачастую улучшение одного из критериев приводит к значительному ухудшению других. Подобная проблема была подробно рассмотрена в работе [3]. В той же работе отмечается, что результатом любой компьютерной оптимизации не может быть единая точка в пространстве исходных параметров. Вместо этого можно лишь ограничить область приемлемых решений, а выбор конкретной конструкции должен быть выполнен конструктором по некоторым неформальным критериям. Подобно тому, как это сделано в работе [3], разработанная нами программа отделяет область подходящих решений по формальным, достаточно гибко заданным критериям. Результаты этого отделения помещаются в некоторую базу данных, которая затем без особых сложностей может быть импортирована в более „наглядные“ программные средства (например, в Microsoft Excel) для последующей обработки.

Как уже отмечалось, основным отличием разработанной методики является ее не экстенсивность — минимум затрат ресурсов при достаточно высокой точности. Алгоритм поиска подходящих конструкций базируется на методе исчерпывающего поиска (вместо метода статистических испытаний [3]). Как результат, программа не требует значительного объема памяти, а процесс поиска и формирования базы данных (подробное моделирование фокусирующих свойств масс-анализатора вдоль фокальной линии) занимает несколько минут в зависимости от требуемой дискретности поиска. Кроме того, имеется возможность моделирования процесса электростатической развертки по фиксированным коллекторам в случае применения постоянного магнита [4] для углов поворота отличных от 180°.

Результаты и обсуждения

Настоящий метод был успешно опробован в задаче экспресс-поиска конструкций магнитных масс-анализаторов для анализа изотопов аргона. Объектом модели-

$\varepsilon' = \varepsilon''$	R_S	l'	D	Ψ	δ
31	1014	0.8840	3.0608	28.7	$1.243 \cdot 10^{-4}$
32	1016	0.9032	3.1772	28.2	$1.415 \cdot 10^{-4}$
33	1017	0.9327	3.3024	27.7	$1.640 \cdot 10^{-4}$
34	1019	0.9456	3.4376	27.1	$1.860 \cdot 10^{-4}$
35	1021	0.9691	3.5840	26.6	$2.137 \cdot 10^{-4}$
36	1023	0.9945	3.7428	26.1	$2.464 \cdot 10^{-3}$
37	1025	1.0220	3.9160	25.6	$2.864 \cdot 10^{-3}$
38	1028	1.0520	4.1040	25.1	$3.362 \cdot 10^{-4}$
47	1063	1.5160	7.1720	20.3	$1.867 \cdot 10^{-3}$
48	1069	1.6090	7.8040	19.7	$2.401 \cdot 10^{-3}$

рования были следующие критерии: R_S — разрешающая способность, D — коэффициент дисперсии по массам, Ψ — угол наклона фокальной линии, δ — сумма квадратов отклонений точек фокусировки от прямой линии. Отметим, что указанные параметры, кроме последнего, в общем случае являются локальными, т.е. они актуальны только для конкретной массы (или пары масс, например, в случае угла наклона) из диапазона. В качестве исходных параметров задавались: φ — угол поворота в магнитном поле, r — радиус поворота в магнитном поле, M — оптическое увеличение; параметры ионного источника. Входное плечо (l') является опциональным параметром (рассчитывается, если не задано). Выходное плечо (l'') во всех случаях определяется из условия фокусировки по направлению. Входная и выходная границы магнита прямолинейные. Интересовали конструкции с оптическим увеличением (M) в диапазоне $[0, 5, 1]$ и разрешением (R_S) не менее 600 (ширина щели источника $S_1 = 0.1$ mm, угол расхождения пучка $2\alpha = 4 \cdot 10^{-2}$ rad).

В таблице приведены сравнительные результаты для симметричных конструкций масс-анализаторов с радиусом и углом поворота 50 mm и 120° соответственно с целыми значениями углов входа/выхода.

Воспользовавшись данными таблицы нетрудно заметить, что можно построить достаточно компактный анализатор с хорошими аналитическими характеристиками. Кроме того, имея область допустимых конструкций можно выбрать более технологичную с точки зрения изготовления и/или удобную с точки зрения юстировки. В данном случае, выполнив простую интерполяцию, корректность которой подтверждают дополнительные расчеты, можно остановиться на варианте с углами входа/выхода ($\varepsilon' = \varepsilon''$) $37^\circ 30'$: $R_S = 1026$, $l' = 1.0370$, $D = 4.0080$, $\Psi = 25.2$, $\delta = 3.088 \cdot 10^{-4}$.

Выводы

Сравнение результатов показывает адекватность предложенной методики экспресс-поиска уже существующим аналогам. Кроме того, высокая скорость и эффективность расчетов открывает широкий спектр приложений, одно из которых представлено здесь. Это достаточно

актуальный на сегодняшний день аспект, так как магнитным масс-анализаторам до сих пор уделяется внимание, но теперь в рамках миниатюризации.

Первый автор выражает благодарность С.Н. Мордику, О.Р. Савину, О.А. Сидоре, А.Г. Рябышеву за многочисленные очень полезные дискуссии.

Список литературы

- [1] Кузема А.С., Савин О.Р., Чертков И.Я. Анализирующие системы магнитных масс-спектрометров. Киев: Наукова думка, 1987.
- [2] Мордик С.Н., Пономарев А.Г. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 7. С. 98–105.
- [3] Turtia S.B., Satchenko V.D., Berdnikov A.S. et al. // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Research. 1999. Vol. A427. P. 382–386.
- [4] Бражник Ю.В., Шкурдода В.Ф. // Укр. физ. журнал, 2000. Т. 45. № 8. С. 1015–1017.