

10;12

Улучшение параметров энергофильтра типа „двугранный угол“ с торцевыми диафрагмами

© А.С. Агафонова,¹ В.А. Сурков,² Т.Я. Фишкова³¹ Институт электронной физики НАН Украины² ОАО „SELMI“, Украина³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: fishkova@mail.ru

(Поступило в Редакцию 27 марта 2008 г.)

Численно решена трехмерная задача определения параметров фильтра по энергии заряженных частиц для монополярного масс-спектрометра. Найдены оптимальные геометрия и режим работы, позволяющие на порядок увеличить трансмиссию устройства. Такой энергофильтр будет использован в установках вторично-ионной (либо атомной) масс-спектроскопии, выполненных на базе монополярного масс-анализатора.

PACS: 07.75.+h

Повышение изотопической чувствительности малогабаритного монополярного масс-спектрометра необходимо в связи с его использованием для измерения изотопного отношения, в частности, в системах диагностики *Helicobacter pylori* по уреазному дыхательному тесту. Одним из решений может быть уменьшение разброса ионов по энергии [1].

В монополярных масс-спектрометрах MX7304A был использован компактный энергофильтр (ЭФ) типа „двугранный угол с торцевыми диафрагмами“ [2], разработанный на основе статей [3,4]. Он предназначен для уменьшения разброса ионов по энергии, а также для смещения входного отверстия монополярного блока электродов относительно стороннего источника ионов и сопутствующих нейтральных частиц. В последнее время этот энергофильтр был применен и для работы с вторичными ионами и нейтральными пучками [5]. Хотя реальная конструкция энергофильтра (исходный ЭФ) отличалась от рассчитанной аналитически, ее параметры не были оптимизированы.

Целью настоящей работы является оптимизация параметров ЭФ и его согласование с монополярным масс-анализатором. Прежде всего необходимо добиться, чтобы параллельный пучок ионов, вводимый в блок электродов монополя (рис. 1), не расходился в плоскости YOZ , что важно для обеспечения высокого разрешения по массам. В плоскости XOZ монополярный анализатор для ионов, на пропускание которых он настроен, является системой фокусирующей, поэтому некоторая непараллельность пучка ионов в этой плоскости допустима. Кроме того, для предотвращения загрязнения веществом пробы блока электродов масс-анализатора следует сместить отверстие во входной диафрагме ЭФ относительно входного отверстия блока электродов за его границы. При этом необходимо обеспечить в ЭФ достаточно большое расстояние между входящим и выходящим пучками ионов.

Предварительные расчеты ЭФ типа „двугранный угол“ проводились по аналитическим формулам рабо-

ты [4] для двумерного поля. Был найден оптимальный режим работы с пространственной фокусировкой первого порядка на плоский электрод при фокусировке второго порядка в плоскости дисперсии энергофильтра YOZ . При этом его сила $U/\Phi_0 = 0.92$, где U — разность потенциалов между уголковым и плоским электродами, Φ_0 — ускоряющий однозарядные ионы потенциал. Длина ЭФ и коэффициент дисперсии по энергии равны соответственно $L = 0.78P$ и $D = 0.91P$, а расстояние от продольной оси системы до осей входного и выходного отверстий для ионного пучка — $Y_0 = Y_i = 0.32P$. Следует отметить, что все линейные параметры выражены в единицах P — поперечного размера ЭФ (рис. 1), поэтому их пропорциональное изменение не меняет ионно-оптических свойств системы.

Поскольку аналитические формулы не учитывают краевых эффектов, возникающих из-за наличия торцевых диафрагм, конечной толщины плоского электрода, а также зазоров между электродами, задачу решали численно с помощью трехмерной программы SIMION. Для ускорения поиска вариантов решения круглые отверстия во входной и выходной диафрагмах энергофильтра были заменены щелевыми, расположенными перпендикулярно плоскому электроду. В тех случаях, когда необходимо добиться предельных характеристик ЭФ, следует иметь в виду возможную некорректность такого подхода.

Ионы с кинетической энергией E_0 вводились в энергофильтр через входную диафрагму параллельно оси Z в виде ряда, расположенного в плоскости YOZ . Определив те из ионов, которые выходят из энергофильтра с расходимостью, не превышающей заданной, можно определить допустимые границы входного и выходного отверстий. В качестве критерия параллельности было установлено значение допустимого наклона траекторий ионов к продольной оси на выходе из энергофильтра $dY/dZ = \pm 0.01$ (при этом обеспечивается прохождение ионного пучка через блок электродов монополярного масс-анализатора длиной 150 mm, использующегося в масс-спектрометрах MX7304A (AM)).

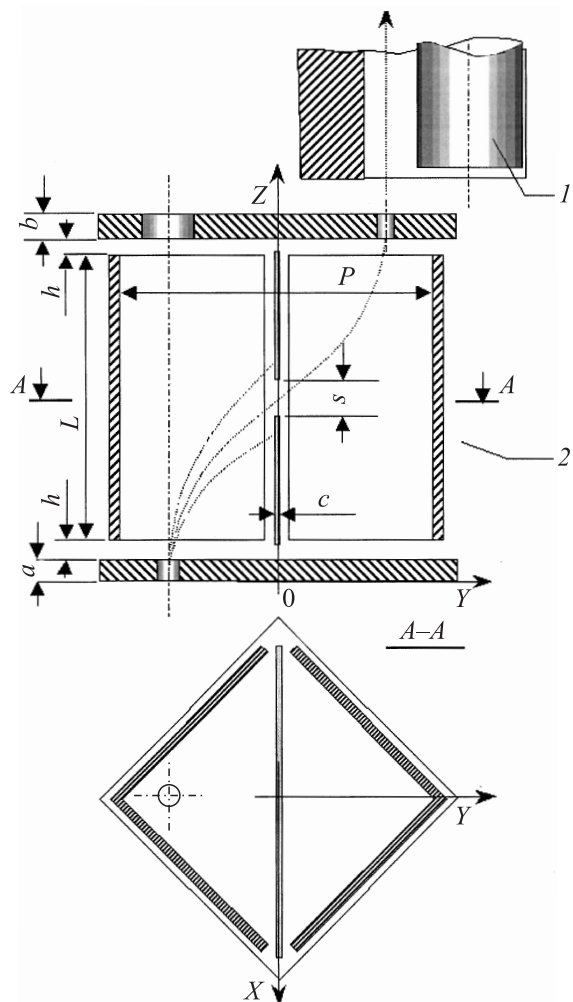


Рис. 1. Схема энергофильтра и траектории ионов с различной кинетической энергией: 1 — блок электродов монополярного масс-спектрометра; 2 — энергофильтр (вверху расположена выходная диафрагма, внизу — входная). В нижней части рисунка показано сечение устройства по А–А.

Геометрические размеры рассчитываемого ЭФ взяты теми же, что были у энергофильтра, используемого в масс-спектрометрах МХ7304А2 и МХ7304А3 (исходный ЭФ), лишь увеличена толщина выходной диафрагмы с 2 до 4 мм, для того чтобы исключить попадание в блок электродов монополя ионов с большими углами расходимости. Апертура ЭФ (расстояние между ребрами двугранных углов) $P = 19.6$ мм, общая длина уголкового электрода $L = 16.1$ мм, расстояние между уголками и торцевыми диафрагмами $h = 1$ мм, толщина входной диафрагмы $a = 2$ мм, выходной $b = 4$ мм, ширина щелей во входной и выходной диафрагмах $d = 1.8$ мм, толщина плоского электрода (перегородки) $c = 0.4$ мм, ширина щели в перегородке s изменялась. На уголкового электроды подаются отклоняющие напряжения. Плоский электрод, а также входная и выходная диафрагма заземлены.

Аналитические расчеты были выполнены в предположении наличия бесконечно тонкого плоского электрода,

поэтому предполагалось использовать один уголкового электрод. Однако оказалось, что при конечной толщине плоского электрода предпочтительней разрезать уголкового электрод на две равные части с близкими, но различными по толщине потенциалами. В результате численных расчетов найдены значения потенциалов U_1 (на первый по ходу пучка) и U_2 (на второй), обеспечивающих малую расходимость ионов ($dY/dZ \leq 0.01$) на выходе ЭФ для максимально возможного интервала (ΔY_0) входных координат, а также соответствующий интервал (ΔY_i) на выходе из ЭФ. Оптимизированные значения потенциалов на уголкового электродах составили $U_1 = 0.99\Phi_0$, $U_2 = 1.02\Phi_0$, где Φ_0 — потенциал, ускоряющий однозарядные ионы до кинетической энергии E_0 , на которую настроен ЭФ. Следует отметить, что величина силы ЭФ, найденной в приближении двумерной модели, отличается на (7–10)%.

На рис. 2, а представлены рассчитанные интервалы оптимального ввода и вывода пучка ионов (прямоугольники) и положение входного и выходного отверстий в исходном ЭФ с $L = 16.1$ мм (окружности). Положения осей входного и выходного отверстий оказались равны $Y_0 = -3.9$, $Y_i = 3.75$ мм, а длина соответствующих зон нахождения пучка ионов — $\Delta Y_0 = 1$ и $\Delta Y_i = 0.9$ мм. Ионы, удовлетворяющие требованиям заданной малой угловой расходимости, заключены в интервале $\Delta Y_0 = 1$ мм, для чего входное и выходное отверстия следует сблизить с $R = 12$ мм (как в исходном ЭФ, для которого расчет по двумерной модели дает 12.5 мм) до $R = 7.65$ мм. Следует отметить, что в исходном ЭФ заряженные частицы лишь в интервале $\Delta Y_0 = 0.05$ мм удовлетворяют заданному критерию параллельности пучка на выходе ЭФ, что на порядок меньше.

Для того чтобы раздвинуть входное и выходное отверстия без ухудшения трансмиссии ЭФ, следует либо пропорционально увеличить все его геометрические параметры, либо длину. В первом случае необходимо увеличивать область вакуумированного пространства, в котором размещен монополярный масс-анализатор, что приводит к удорожанию оборудования и не всегда возможно выполнить.

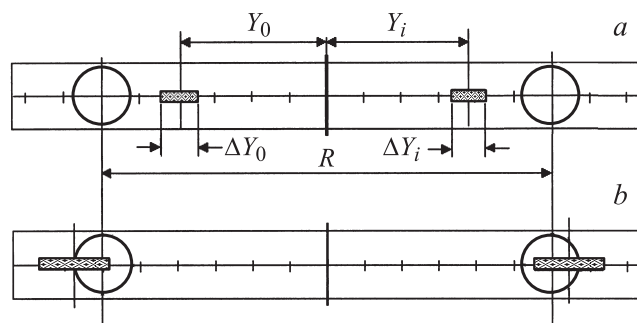


Рис. 2. Интервалы оптимального ввода и вывода пучка ионов, а также положение входного и выходного отверстий в ЭФ при различной длине уголкового электрода: а — $L = 16.1$, б — 24.5 мм.

Аналитические расчеты, выполненные при увеличенной в 1.5 раза длине уголкового электрода с учетом требования фокусировки пучка на плоский электрод, дали следующие результаты: сила ЭФ равна $U/\Phi_0 = 0.6$, коэффициент дисперсии по энергии $D = 0.73P$, а расстояние от продольной оси системы до осей входного и выходного отверстий для ионного пучка $Y_0 = Y_i = 0.4P$. В результате численного расчета варианта ЭФ с длиной $L = 24.5$ mm найдены значения потенциалов $U1$ и $U2$, обеспечивающих малую расходимость ионов ($dY/dZ \leq \pm 0.01$) на выходе из ЭФ, $U1 = 0.62\Phi_0$, $U2 = 0.63\Phi_0$. При этом интервал оптимального ввода и вывода пучка ионов расширился, а расстояние между входным и выходным отверстиями увеличилось: $Y_0 = -6.75$, $Y_i = 6.5$, а $\Delta Y_0 = 1.9$ и $\Delta Y_i = 1.8$ mm (рис. 2, б). В этом варианте отличие от аналитических расчетов оказалось меньшим: сила отличается на 3–5%, а суммарное расстояние между входным и выходным отверстиями — на 15%.

Для определения разрешения ЭФ по энергии были рассчитаны две его геометрии с двумя размерами вырезающей щели в плоском электроде каждый: при $H = 16.1$ mm — $s = 0.5$ и 1 mm, а при $H = 24.5$ mm — $s = 0.6$ и 1 mm. Во всех случаях ЭФ были настроены на пропускание ионов с энергией $E_0 = 35$ eV. Ионы вводили в ЭФ рядами в плоскости YOZ в пределах рассчитанного ранее интервала ΔY_0 . Результаты расчета сведены в таблицу, а на рис. 3 показана форма пиков при сканировании по энергии.

Кроме того, выполнен численный расчет размещения ЭФ по основанию в приближении двумерного поля по известной аналитической формуле первого порядка $\rho_b = \Delta E_b/E_0 = s/D$. Для ЭФ с $L = 16.1$ и $s = 0.5$ mm $\rho_b = 0.028$, а для ЭФ с $L = 24.5$ и $s = 0.6$ mm $\rho_b = 0.042$. Отличие от разрешения по основанию пиков, приведенных на рис. 3, составляет 20–25%.

По полученным результатам в линейном приближении выведены эмпирические формулы для ширины пика на полувысоте.

$$\text{— для случая } L = 16.1 \text{ mm: } \Delta E = 6s - 2.2; \quad (1)$$

$$\text{— для случая } L = 24.5 \text{ mm: } \Delta E = 3.3s - 1.3. \quad (2)$$

Из-за того, что плоский электрод имеет конечную толщину, а пучок заряженных частиц наклонен к нему, эффективная ширина щели оказывается меньше указанной в таблице. Из условия $\Delta E = 0$ можно получить минимально возможное значение ширины щели (s_{\min}). Так, для ЭФ длиной $L = 16.1$ mm $s_{\min} = 0.37$ mm, а для $L = 24.5$ mm — $s_{\min} = 0.39$ mm. Дальнейшее сужение щели приводит к тому, что ионы не смогут пройти через плоский электрод толщиной 0.4 mm.

Из кривых на рис. 3 видно, что в обоих случаях имеется относительно широкий интервал энергий, для которых трансмиссия составляет 100%, поэтому, сужая щель, можно уменьшить разброс в пучке по энергии приблизительно до 0.3 eV, т. е. повысить разрешение без снижения трансмиссии до $\rho = \Delta E/E = 0.009$. Для этого

L , mm	ΔE , eV		
	$s = 0.5$ mm	$s = 0.6$ mm	$s = 1$ mm
16.1	0.8		3.8
24.5		0.68	2

Примечание. Здесь ΔE — полная ширина на полувысоте.

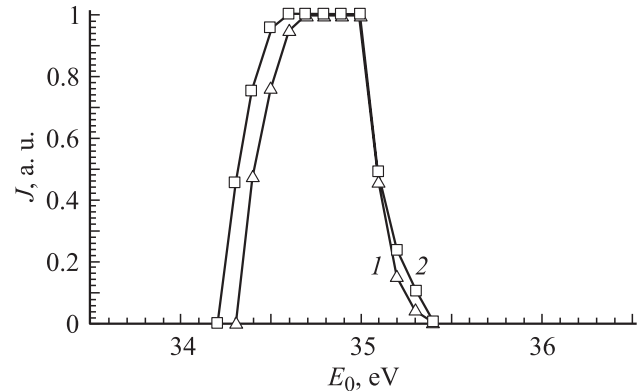


Рис. 3. Форма пиков при сканировании по энергии. Кривая 1 относится к ЭФ с $L = 24.5$, $s = 0.6$ mm; 2 — $L = 16.1$, $s = 0.5$ mm.

в соответствии с соотношениями (1) и (2) достаточно уменьшить отверстие в перегородке до $s = 0.48$ mm (для случая $L = 24.5$ mm) и до $s = 0.42$ mm (для случая $L = 16.1$ mm).

При переходе к пучкам заряженных частиц конечной протяженности по координате X происходит некоторое ухудшение разрешения. Это хорошо видно на картинке, отображающей в плоскости вырезающей щели координаты заряженных частиц, вводимых в ЭФ длиной $L = 24.5$ mm в виде пучка квадратного сечения 1.6×1.6 mm с шагом 0.025 mm (рис. 4). Размер такого пучка оказывается шире (в направлении Z), чем у тонкого, что ограничивает возможность улучшения разрешения за счет сужения вырезающей щели. Кроме того,

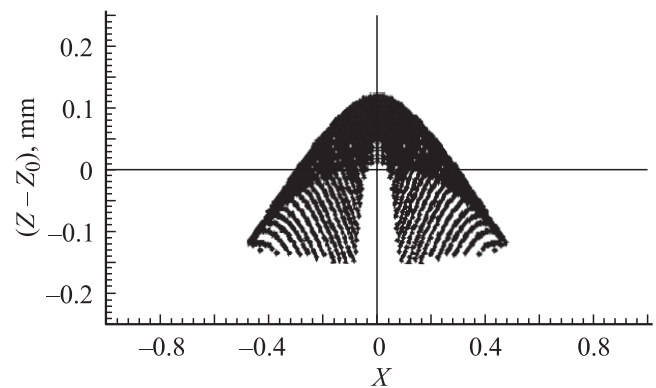


Рис. 4. Координаты ионов в области щели плоского электрода при длине уголкового электрода $L = 24.5$ mm. Координата середины щели $Z_0 = 15.25$ mm, а сама щель располагается в интервале $Z = Z_0 \pm 0.25$ mm.

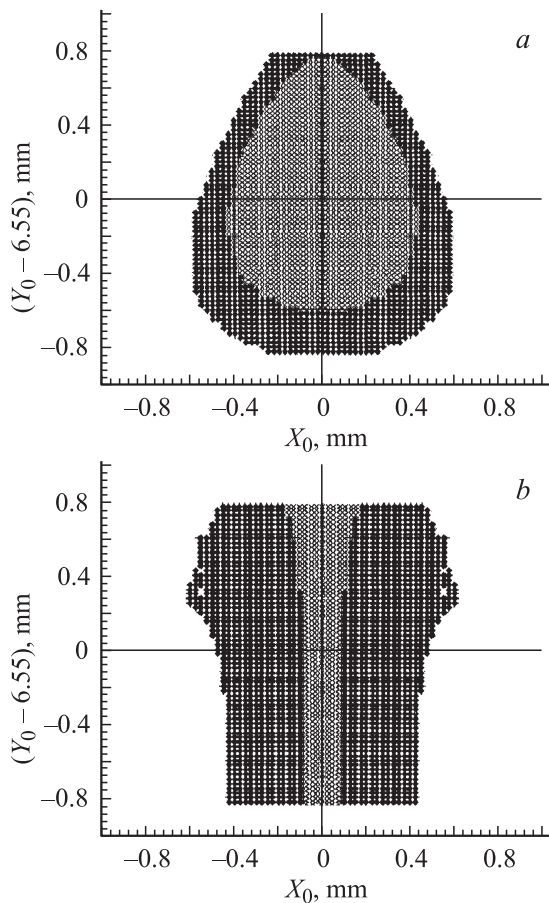


Рис. 5. Координаты X_0 и Y_0 в плоскости входной диафрагмы заряженных частиц, у которых на выходе из ЭФ длиной 24.5 мм: *a* — наклон к продольной оси $dY/dZ \leq 0.01$ (светлая часть относится к координатам частиц, для которых $dY/dZ \leq 0.005$); *b* — $dX/dZ \leq 0.05$ (светлая часть относится к $dX/dZ \leq 0.01$). (Частицы вводились параллельно оси Z в виде матрицы 1.6×1.6^2 мм с кинетической энергией $E_0 = 35$ эВ.)

частицы, удаленные от плоскости YOZ , не сохраняют заданной параллельности в этой плоскости, даже если их координаты Y соответствуют рассчитанному ранее для тонких пучков оптимальному интервалу.

На рис. 5 даны в плоскости входной диафрагмы начальные координаты заряженных частиц пучка, у которых на выходе из ЭФ наклон к продольной оси dY/dZ не превышает 0.01 (рис. 5, *a*), а наклон к продольной оси в перпендикулярной плоскости dX/dZ не превышает 0.05 (рис. 5, *b*). Как видно, отверстие круглого сечения во входной диафрагме ЭФ диаметром около 1.2 мм хорошо очерчивает границы области введения пучка по критерию $dY/dZ < 0.01$. Большой наклон траекторий в плоскости XOZ будет компенсироваться динамической фокусировкой монополярного масс-анализатора в этой плоскости.

Таким образом, с учетом краевых полей рассчитан энергофильтр типа „двугранный угол“ для монополярных масс-спектрометров серии MX7304A (AM). Ранее в таких приборах использовался режим работы ЭФ,

близкий к рассчитанному в приближении двумерной модели распределения электростатического поля. Использование уточненных режимов работы с фильтрацией ионов по энергии позволяет повысить чувствительность монополярных масс-спектрометров.

Заключение

Дополнительный расчет ЭФ, использованного ранее в монополярных масс-спектрометрах типа MX7304A, выявил следующие пути улучшения его параметров.

1. Плоскость дисперсии ЭФ следует располагать в плоскости YOZ монополярного анализатора.

2. Использование плоского электрода конечной толщины приводит к необходимости разрезания электрода типа „двугранный угол“ на две равные части и приложения к ним напряжений, близких по величине, что позволяет улучшить трансмиссию ЭФ.

3. При условии обеспечения параллельного переноса пучка и высокой трансмиссии входное и выходное отверстия ЭФ следует располагать ближе друг к другу (на расстоянии 7.7 мм), чем это было сделано в исходном ЭФ (12 мм). При этом параллельность пучка в плоскости YOZ и 100%-ная трансмиссия сохраняются для участка входного отверстия величиной $\Delta Y_0 = 1$ мм, т.е. на порядок больше по сравнению с исходным ЭФ, используемым в монополярных масс-спектрометрах MX7304A, у которого $\Delta Y_0 = 0.05$ мм.

4. Увеличив в 1.5 раза длину угольковых электродов, можно увеличить расстояние между входным и выходным отверстиями до 13.3 мм. При этом размер входного отверстия, для которого обеспечивается высокая параллельность пучка ионов на выходе из ЭФ и 100%-ная трансмиссия увеличиваются почти в 2 раза — до 1.8 мм (в направлении Y).

5. Увеличив толщину плоского электрода, можно повысить разрешающую способность ЭФ без сужения щели в нем. Однако ширина щели при этом должна превышать некоторое минимально допустимое значение.

6. Использование широких пучков ограничивает возможность улучшения разрешения ЭФ путем сужения щели в плоском электроде, а также приводит к нарушению параллельности пучка на выходе ЭФ, поэтому следует ограничивать диаметр вводимого пучка. Так, для ЭФ с $L = 24.5$ мм необходимо, чтобы диаметр входного отверстия не превышал 1.2 мм.

Список литературы

- [1] Агафонова А.С., Сурков В.А. // Мат. VI конф. молодых ученых I PE НАНУ „Радиофизика и электроника“. Харьков, 2006. С. 33.
- [2] Масс-спектрометры типа MX7304A. Техническое описание и инструкция по эксплуатации 1.560.024.
- [3] Фишкова Т.Я. А.С. № 1275587. Б.И. 1986. № 45. С. 212.
- [4] Фишкова Т.Я. // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 5. С. 925–929.
- [5] Батулин В.А., Еремин С.А., Пустовойтов С.А. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 6. С. 93–98.