

НАО Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова

УДК 537.534:535.31

На правах рукописи

ШУГАЕВА ТИЛЕКТЕС ЖАЛГАСОВНА

**Моделирование динамики пучков заряженных частиц в статических и
времяпролетных масс-спектрометрах**

6D060400 – Физика

Диссертация на соискание степени
Доктора философии (PhD), доктора по профилю

Научный консультант:
доктор физико-математических наук,
профессор
И.Ф. Спивак-Лавров

Зарубежный научный консультант
доктор физико-математических наук,
профессор
А.А. Трубицын

Республика Казахстан
Актобе, 2023

СОДЕРЖАНИЕ

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ.....	4
ВВЕДЕНИЕ.....	5
1 ИСТОРИЧЕСКИЙ ОБЗОР (ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ДИССЕРТАЦИИ)	11
1.1 Статические секторные масс-спектрометры.....	11
1.2 Призмённые статические масс-анализаторы.....	15
1.3 Статический масс-анализатор с секторным однородным магнитным полем и электростатической призмённой системой.....	17
1.4 Призмённый масс-анализатор с КАП и трансаксиальными линзами.....	19
1.5 Расчет времяпролетных масс-анализаторов.....	22
Выводы по первому разделу.....	23
2 ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ДИНАМИКИ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ.....	24
2.1 Дифференциальные уравнения, описывающие отклонение заряженных частиц от осевой траектории в криволинейных координатах.....	24
2.2 Уравнения, описывающие свойства КОС со средней плоскостью...	28
2.3 Уравнения Ньютона в безразмерных переменных.....	37
Выводы по второму разделу.....	39
3 АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ДВУМЕРНЫХ ПОЛЕЙ И ПОЛЕЙ, СВОДИМЫХ К ДВУМЕРНЫМ.....	40
3.1 Расчет конических электрических и магнитных полей.....	41
3.2 Расчет электростатических полей с осевой и трансаксиальной симметрией.....	47
Выводы по третьему разделу.....	56
4 ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ И ПРИБОРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СТАТИЧЕСКИХ МАСССПЕКТРОМЕТРОВ.....	57
4.1 Расчет характеристик масс-спектрометра с секторным магнитом, электростатической призмой и трансаксиальной линзой.....	57
4.2 Масс-анализаторы на основе конусовидной ахроматической призмы.....	64
4.3 Призмённый масс-анализатор с конусовидной ахроматической призмой и трансаксиальными линзами.....	71
4.4 Программные средства моделирования ЭОС.....	83
Выводы по четвертому разделу.....	87
5 ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ И ПРИБОРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ.....	88
5.1 Расчет времяпролетного масс-спектрометра на основе осесимметричного цилиндрического зеркала.....	88
5.2 Расчет времяпролетного масс-анализатора на основе	94

трансаксиальных зеркал.....	101
Выводы по пятому разделу.....	101
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	102
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	104

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

КО	– корпускулярная оптика
ИО	– ионная оптика
ЭО	– электронная оптика
КОС	– корпускулярно-оптические системы
ИОС	– ионно-оптические системы
ЭОС	– электронно-оптические системы
СМС	– статический масс-спектрометр
СМА	– статический масс-анализатор
ВПМС	– времяпролетный масс-спектрометр
ВПМА	– времяпролетный масс-анализатор
КЛ	– квадрупольная ловушка
КМС	– квадрупольный масс-спектрометр
ТФКП	– теория функций комплексной переменной
ДЭП	– двумерное электростатическое поле
КАП	– конусовидная ахроматичная призма
ЦЗА	– цилиндрический зеркальный анализатор
ЗСДП	– закрытая система с двумерным полем

ВВЕДЕНИЕ

Общая характеристика работы. Диссертационная работа посвящена совершенствованию методов расчета ионно-оптических схем статических и времяпролетных масс-спектрометров и разработке методов моделирования динамики пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах, что является актуальной задачей физической электроники.

Актуальность исследования.

Масс-спектрометрия является универсальным и наиболее точным методом определения элементного, химического и изотопного состава вещества в произвольном агрегатном состоянии. Благодаря своим широким возможностям она нашла применение в самых различных областях науки, техники и производства. В настоящее время развились также новые методы исследования такие как хромато-масс-спектрометрия, тандемная масс-спектрометрия и др., значительно расширившие возможности масс-спектрометрического анализа. Так, с помощью хромато-масс-спектрометров была решена проблема очистки Великих канадских озер от диоксина, токсичного загрязнителя целлюлозного производства. В последнее время в связи с разработкой мягких методов ионизации образцов масс-спектрометрия стала также незаменимым методом исследования в области, так называемых, «наук о жизни» (life sciences): протеомика, геномика, биохимия, фармацевтика и медицина. Здесь особенно успешно используются времяпролетные масс-спектрометры.

Таким образом разработка новых методов расчета и моделирования физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-спектрометров, основанных на корректных физических и математических теориях и использующих возросшие возможности вычислительных технологий, которые позволяют проектировать и рассчитывать приборы с улучшенными аналитическими возможностями, является актуальной задачей корпускулярной оптики и научного приборостроения.

Методы, которые использовались при расчете физических и приборных характеристик статических масс-спектрометров: разрешающей способности, чувствительности и аберраций – это традиционные методы корпускулярной оптики. Корпускулярная оптика (КО), или, как ее еще называют – электронная или ионная оптика, возникла из аналогии между распространением света в прозрачных средах и движением заряженных частиц в электрических и магнитных полях. КО лежит в основе научного приборостроения, определяя уровень научно-технического развития многих экспериментальных методов исследования и базовые принципы, лежащие в основе создания большого числа всевозможных корпускулярно-оптических приборов и инструментов. Это такие приборы как: электронно-лучевые трубки, растровые и эмиссионные электронные и ионные микроскопы, энерго- и масс-спектрометры, различные электронно-оптические преобразователи, ускорители и системы транспортировки заряженных частиц, ионно-оптические каналы транспортирующих комплексов для молекулярно-пучковой эпитакии и т.д. [1].

Теоретической основой КО является классическая электродинамика. В

электродинамике движение заряженных частиц в электрическом и магнитном полях определяется действием силы Лоренца. Однако КО рассматривает не только движение отдельных заряженных частиц, а проблемы, связанные с формированием пучков заряженных частиц и управлением этими потоками [2 - 6]. В первую очередь, здесь стоит отметить задачи разделения пучков заряженных частиц по массе и энергии, которые решаются в масс- и энергоспектроскопии, а также проблемы формирования и фокусировки пучков, возникающие в электронной и ионной микроскопии. Для решения этих задач в КО используются теоретические методы, заимствованные из световой оптики; а именно, сначала, находится решение линейной задачи или параксиальное приближение, а затем развивается теория аббераций. Причем абберационная теория традиционно строится с помощью асимптотических рядов по малым параметрам, характеризующим ионный пучок. Метод последовательных приближений, применяемый для нахождения абберационных коэффициентов приводит к очень громоздким выражениям особенно для абберационных коэффициентов высокого порядка. При этом невозможно определить в рамках самой абберационной теории, при каких значениях малых параметров, характеризующих пучок, выбранное приближение достаточно хорошо работает [4, стр. 247-332; 5 стр. 221-260; 7-10].

Другим методом, который используется в КО для расчета физических свойств корпускулярно-оптических систем (КОС), является «метод центральной частицы» или иначе «метод осевой траектории». Здесь сначала рассчитывается осевая траектория, по которой движется «центральная частица», а траектории остальных частиц ионного пучка характеризуются их отклонением от осевой траектории. Этот метод подробно описан во второй главе диссертации. Во второй главе изложен также и новый метод расчета КОС, предложенный в диссертации, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений для потенциалов, описывающих электрическое и магнитное поля КОС.

Опыт показывает, что обычно самые плодотворные идеи в КО начинались с оригинальных теоретических работ. Здесь, например, следует отметить призмное направление в масс- и энерго-анализе, приведшее к созданию масс-анализаторов и энерго-анализаторов, аналогичных по своей схеме призмным светооптическим приборам [11-13]. Кроме того, отметим другие исследования [14-16], связанные с созданием систем с идеальной фокусировкой для разделения пучков заряженных частиц по энергии, а также аналитические работы, которые легли в основу масс-анализатора Orbitrap [17-20].

Целью диссертационной работы является разработка методов моделирования динамики пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах и оптимизация их физических и приборных характеристик.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие **основные задачи**:

1. Разработать метод расчета динамики пучков заряженных частиц, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и

аналитических выражений для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля КОС.

2. Получить аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля конических призматических систем, а также потенциалов трансаксиальных и осесимметричных КОС с использованием методов ТФКП.

3. Моделирование динамики пучков заряженных частиц, формируемых ионным источником с применением метода Монте-Карло.

4. Выполнить расчет и оптимизацию физических и приборных характеристик статического призматического масс-анализатора с КАП и трансаксиальными коллиматорной и фокусирующей линзами.

5. Выполнить расчет физических и приборных характеристик времяпролетных масс-анализаторов, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений для потенциалов трансаксиальных и электростатических полей и провести оптимизацию их характеристик.

6. Провести расчет электронно-оптической схемы микрофокусной трубки с использованием компьютерного приложения «FOCUS».

Объектом исследования является динамика пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах.

Предметом исследования являются физические и приборные характеристики статических и времяпролетных масс-спектрометров.

Методы исследования.

Для моделирования динамики пучков заряженных частиц использовались безразмерные уравнения Ньютона и аналитические выражения для потенциалов описывающих электрические и магнитные поля статических и времяпролетных масс-спектрометров, полученные с помощью методов ТФКП. При моделировании динамики пучков заряженных частиц проводилось численное интегрирование системы дифференциальных уравнений с помощью компьютерной программы на языке VBA, реализующей четырехточечный метод Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Разгонные точки для метода Адамса находились с использованием метода последовательных сближений Крылова. Начальные условия для заряженных частиц, вылетающих из источника ионов, находились с использованием метода Монте-Карло. Численный расчет ЭОС микрофокусной трубки проводился с помощью компьютерного приложения «FOCUS».

Научная новизна заключается в том, что в работе впервые:

1. Создана математическая и компьютерная модель динамики пучков заряженных частиц, основанная на численном интегрировании безразмерных уравнений Ньютона для заряженной частицы в электрических и магнитных полях, описываемых безразмерными скалярными потенциалами.

2. Получены аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля конических призматических систем, а также аналитические выражения для потенциалов трансаксиальных и осесимметричных КОС с использованием методов ТФКП.

3. Апробированы методы решения граничных задач электростатики для уравнения Лапласа с использованием методов теории функций комплексной переменной (ТФКП). Адекватность полученных аналитических выражений для потенциала обеспечивается корректностью используемых математических методов.

4. Рассчитана трехэлектродная трансаксиальная линза в режиме анаморфота, уменьшающая энергию пучка ионов, которая используется в качестве коллиматорной линзы перед входом в КАП.

5. Исследованы хроматические aberrации КАП, а также осесимметричных и трансаксиальных электростатических зеркал и определены пути оптимизации приборных характеристик времяпролетных масс-анализаторов.

6. Разработана и численно исследована электронно-оптическая схема микрофокусной трубки, обеспечивающей ускорение электронного потока и его транспортировку из области эмиссии в точку фокуса с 10-кратным сжатием радиуса сечения.

Теоретическая и практическая значимость результатов. Результаты диссертации носят, в основном, теоретический характер. Научная значимость работы заключается в разработке аналитических и компьютерных методов расчета и оптимизации физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-анализаторов на основе двумерных, конических, а также осесимметричных и трансаксиальных электростатических систем путем моделирования динамики пучков заряженных частиц.

Положения, выносимые на защиту:

1 Численные решения точных безразмерных дифференциальных уравнений движения заряженных частиц в электрических и магнитных полях, исследуемых КОС, аналитические выражения для потенциалов которых были найдены в работе, позволяют учитывать распределение ионов в источнике по координатам и углам вылета, а также по энергиям и массам и содержат в себе поправки на aberrации.

2. В статическом призмном масс-спектрометре с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами моделирование массового дуплета с $\gamma=0$ и $\gamma=1/20000$ показало, что достигается разрешение по массе 20000, а на полувысоте пиков 40000, что больше в 8 раз в сравнении с разрешением масс-спектрометра Матсуда при почти одинаковых размерах прибора и параметрах ионного источника.

3. В результате отражения заряженных частиц, вылетающих из точечного источника, расположенного в средней плоскости трехэлектродного трансаксиального зеркала, достигается энергетическая и пространственная времяпролетная фокусировка ионного пучка, а в времяпролетном масс-спектрометре на основе осесимметричного цилиндрического зеркала для массового дуплета с относительной разницей в массах $\gamma=1/4000$ достигается разрешение 4000 на уровне 50% от высоты пиков.

Достоверность и обоснованность научных положений, результатов и выводов, сформулированных в диссертационной работе, подтверждается использованием апробированных физических теорий и методов и абсолютной

согласованностью полученных результатов с фундаментальными положениями корпускулярной оптики, а также обеспечивается корректностью использованных аналитических и численных математических методов, сравнением с результатами численного моделирования для некоторых тестовых примеров и согласием с результатами, полученными другими авторами.

Связь темы с планами научных работ. Результаты диссертационной работы были использованы при подготовке документов проекта с грантовым финансированием МНВО РК фундаментальных исследований в области естественных наук «Моделирование влияния краевых полей при проектировании и расчете бессеточных энерго- и масс-анализаторов заряженных частиц» (№АР09258546, 2021-2023 гг.).

Личный вклад автора заключается в том, что автор участвовал в разработке программ и проведении численных расчетов физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-анализаторов на основе двумерных, конических, трансаксиальных и осесимметричных электростатических систем с использованием алгоритмов и пакета прикладных программ, созданных с применением метода Монте-Карло. Участие научных консультантов заключается в постановке задач и обсуждении полученных результатов.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

–Международная научно-практическая конференция "Актуальные проблемы анализа, дифференциальных уравнений и алгебры" (Нур-Султан, 16-19 октября 2019 г.);

–Девятый съезд ВМСО, 8-ая Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы» (Москва, 14-18 октября 2019 г.);

–XV Международная научно-практическая конференция «Молодежь, наука и инновации» (Актобе, 12 апрель 2019 г.);

–III Международный научный форум «Ядерная наука и технологии», (Алматы, 20-24 сентября 2021 г.).

Публикации. По результатам исследований, изложенных в диссертационной работе, опубликовано 12 научных работ, в том числе 4 статьи в рейтинговых научных журналах, индексируемых в базе данных Web of Science и Scopus; 1 статья в журнале, рекомендованном Комитетом по обеспечению качества в сфере образования и науки МНВО РК; 7 публикаций в других научных журналах и материалах международных конференций.

1. Prismatic mass analyzer with the conical achromatic prism and transaxial lenses //International Journal of Mass Spectrometry. –2019.–Vol. 444, 116180 (Scopus – процентиль 68);

2. Development of High-Power Microfocus X-ray Tube //Eurasian Physical Technical Journal. 2021. Vol. 18, №1(35). – p.41-50;

3. Time-of-flight mass analyzer based on transaxial mirrors// Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement. –2021- Vol. 14 – p. 853-864 (Scopus – процентиль 15);

4. Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to 2D harmonic potentials // *Advances in Imaging and Electron Physics*. Burlington: Academic Press – 2020. – Vol. 215. – P. 181-193;

5. Решения уравнения Лапласа в цилиндрических координатах, приводимые к двумерным гармоническим потенциалам // *Научное приборостроение*. г. Санкт-Петербург. –2020 г. – Том 30, № 2– С. 51–60;

6. Динамика пучка заряженных частиц в трансаксиальном зеркале // *Научное приборостроение*. г. Санкт-Петербург. – 2022. – Т. 32. № 1– С. 68—76;

7. Расчет времяпролетного масс-спектрометра на основе осесимметричных цилиндрических зеркал// *Вестник АРГУ им. К. Жубанова*. г. Актобе. – 2021. – №3(53) – С.15-27.

8. Решение задачи Дирихле для уравнения Лапласа для трансаксиальных и осесимметричных систем // *Сборник тезисов Международной конференции «Актуальные проблемы анализа, дифференциальных уравнений и алгебры»*. Г. Астана. – 2019 г. – С.166;

9. Призмный масс-анализатор с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами // *Тезисы докладов Девятого съезда ВМСО, 8 Всероссийской конференции с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы»*. г. Москва. – 2019 г. – С.116;

10. Аналитические выражения для трансаксиальных и осесимметричных потенциалов корпускулярно-оптических систем // *Материалы XV Международной научно-практической конференции «Молодежь, наука и инновация»*. – 2019. – С. 254-256;

11. Аналитические выражения для трансаксиальных и осесимметричных потенциалов корпускулярно-оптических систем // *Труды научного семинара «Прикладная математика и информатика»*. – 2019. – С. 110-115;

12. Призмный масс-анализатор с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами // *Тезисы III Международного научного форума «Ядерная наука и технологии»*. –2021. – С. 221;

Структура и объем диссертации. В соответствии с определенной целью и поставленными задачами исследования диссертационная работа состоит из введения, пяти разделов, заключения, списка использованных источников. Нумерация формул двухзначная: первое число означает номер раздела, второе – собственный номер формулы, графики, рисунки, таблицы, формулы внутри подраздела. Общий объем диссертации - 111 страниц, 5 таблиц, 46 рисунка и библиография, содержащая 115 наименований.

1 ИСТОРИЧЕСКИЙ ОБЗОР (ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ДИССЕРТАЦИИ)

Современный масс-спектрометр представляет собой сложный прибор, при создании которого приходится пользоваться новейшими достижениями ионной оптики, техники высокого вакуума, радиотехники, методами получения и регистрации ионов, обработки информации и т.п. [21,22]. Однако основой каждого масс-спектрометра является его ионнооптическая часть, осуществляющая разделение ионов по массам. Эта главная функция масс-спектрометра в статических приборах выполняется постоянными электрическими и магнитными полями, изменяющимися лишь при перестройке прибора от одной массы к другой [5 стр. 3-5].

Масс-спектрометрия ранее использовалась в основном в ядерной физике для прецессионных измерений масс ядер. Однако в настоящее время, в результате разработки различных способов ионизации вещества в приготовленных для анализа образцах, а также развитию тандемных методов анализа, область применения масс-спектрометрии значительно расширилась [23,24]. Можно отметить работы по расшифровке генома человека, выполненные с помощью времяпролетной масс-спектрометрии, и удостоенные нобелевской премией. Из других уникальных проблем, решение которых стало возможно благодаря достижениям в масс-спектрометрии и хромато-масс-спектрометрии, отметим работы по очистке Великих Канадских озер от диоксина (продукт, возникающий при производстве целлюлозы). Здесь приходилось проводить анализы воды на содержание диоксина с относительной точностью до 10^{-10} и выше.

Масс-спектрометрия постоянно развивается, завоевывая для себя новые области применения [25-30]. В связи с использованием масс-спектрометрии в различных областях науки, техники и производства разработка новых высокоэффективных схем статических и времяпролетных масс-анализаторов и методов расчета их приборных характеристик является актуальной задачей научного приборостроения.

1.1 Статические секторные масс-спектрометры

Недавно масс-спектрометрия отметила свой столетний юбилей. Начало восходит к первым работам, выполненным Дж.Дж. Томсоном в 1912 году, который, отклоняя катодные лучи в электрическом и магнитном полях, обнаружил наличие двух изотопов неона [31, 32]. Позже, этот метод Томсона стали называть методом парабол, и он вошел во все учебники по атомной физике. Заметим, что к тому моменту Дж. Дж. Томсон уже был нобелевским лауреатом. Нобелевская премия была вручена ему еще в 1906 году за цикл работ по исследованию природы катодных лучей и открытие электрона. В дальнейшем была открыта глубокая аналогия между распространением света в прозрачных средах и движением заряженных частиц в электрических и магнитных полях, которая легла в основу электронной и ионной оптики.

Одной из самых плодотворных идей в масс-спектрометрии является идея осуществления фокусировки по энергии, принадлежащая Астону [33-35]. Магнитное поле обладает дисперсией по энергии и массе, а электрическое только по энергии. Фокусировка по энергии осуществляется за счет последовательного отклонения пучка в магнитном и в электрическом поле, которое происходит таким образом, что совместное действие этих полей приводит к равенству нулю дисперсии прибора по энергии. Осуществив на своем масс-спектрографе фокусировку по энергии, Астон построил прибор с достаточно высоким разрешением, что позволило ему открыть большое количество стабильных изотопов у многих элементов. За это открытие в 1922 году он был награжден нобелевской премией по химии.

Дальнейшее развитие масс-спектрометрии связано с работами Демстера, Матауха-Герцога, Матсуда и других исследователей, которое привело к созданию серийных секторных приборов. Так, Демстер, изучая на своем приборе изотопы тяжелых элементов, обнаружил изотоп урана U^{235} , что открыло путь к ядерной энергетике [36-38].

Современный секторный статический масс-спектрометр это – прибор с тройной фокусировкой ионного пучка по двум направлениям и энергии. Иногда говорят о двойной фокусировке пучка, имея в виду пространственную фокусировку (по двум направлениям) и фокусировку по энергии. Пространственная фокусировка пучка осуществляется в секторных статических масс-спектрометрах с помощью секторного магнита и секторного поля цилиндрического, сферического или тороидального конденсатора. Чтобы устранить искривление линий изображения, граница секторного магнита незначительно искривляется и магнит снабжается магнитными экранами.

Еще одной плодотворной идеей в масс-спектрометрии является, принадлежащая Герману Вольнику [39], идея расширения ионного пучка перед входом в магнитное поле. Им была впервые доказана «теорема о потоке» для случая круговой траектории ионов в магнитном поле. Он доказал, что параметр «качество» или Q -величина статического масс-спектрометра, пропорциональна потоку магнитного поля, пронизывающему расходящийся ионный пучок в масс-спектрометре.

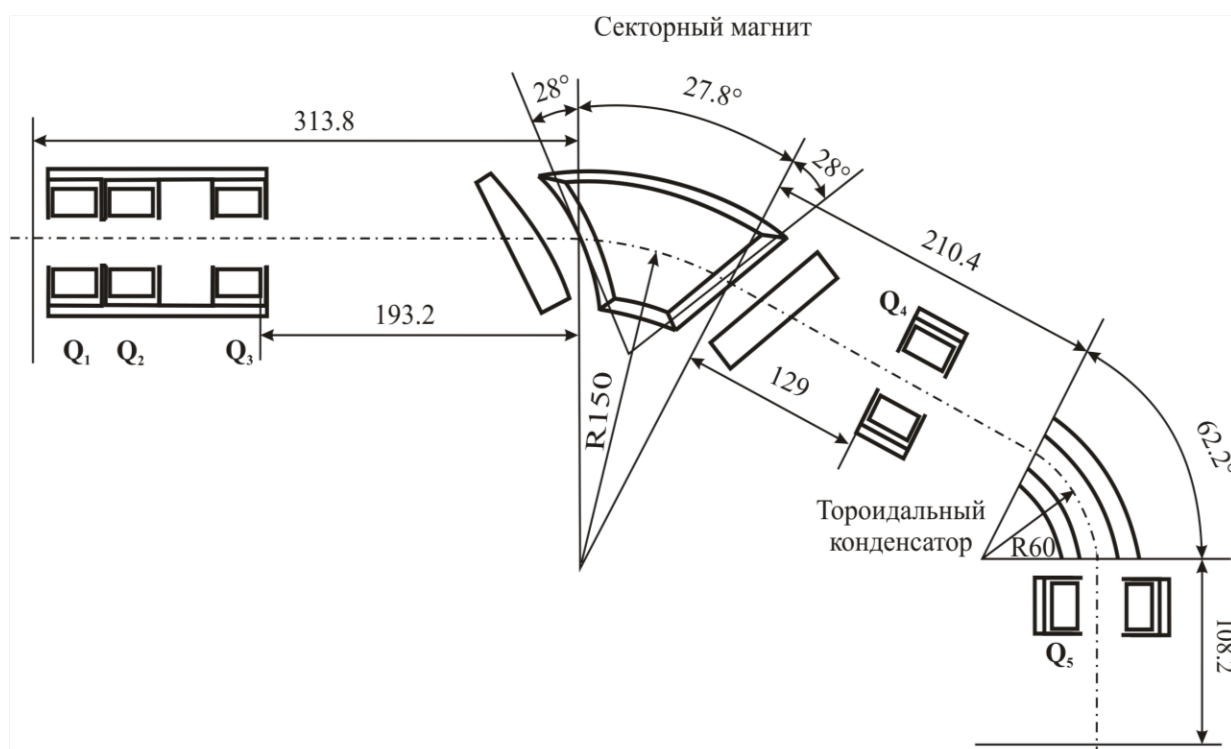
Основными приборными характеристиками масс-спектрометра с тройной фокусировкой являются: разрешение по массе R , линейная дисперсия прибора по массе D_m и горизонтальная светимость прибора, равная произведению ширины источника S ионов на его угловую расходимость 2α в горизонтальном направлении. Светимость определяет чувствительность масс-спектрометра в том случае, если все ионы одинаковой массы достигают детектора. Параметр «качество» (по Вольнику) определяется как произведение максимального разрешения на горизонтальную светимость прибора:

$$Q = R_{max} S 2\alpha = \frac{D_m}{S} S 2\alpha = D_m 2\alpha \approx N_2. \quad (1.1)$$

Здесь N_2 – поток магнитного поля, пронизывающий расходящийся пучок ионов, выходящий из точечного источника.

В работе [40] теорема о потоке была доказана для случая совмещенных электрического и магнитного полей и для любой формы осевой траектории пучка. Это доказательство приведено во второй главе диссертации. Теорема о потоке дает мощный эвристический принцип увеличения качества статических масс-спектрометров – необходимо, как можно сильнее расширять ионный пучок перед ходом в магнитное поле.

Впервые идея расширения пучка с помощью квадрупольных линз перед входом магнитное поле была реализована в настольном масс-спектрометре Матсуда [41]. Схема этого масс-спектрометра изображена на рисунке 1.1.



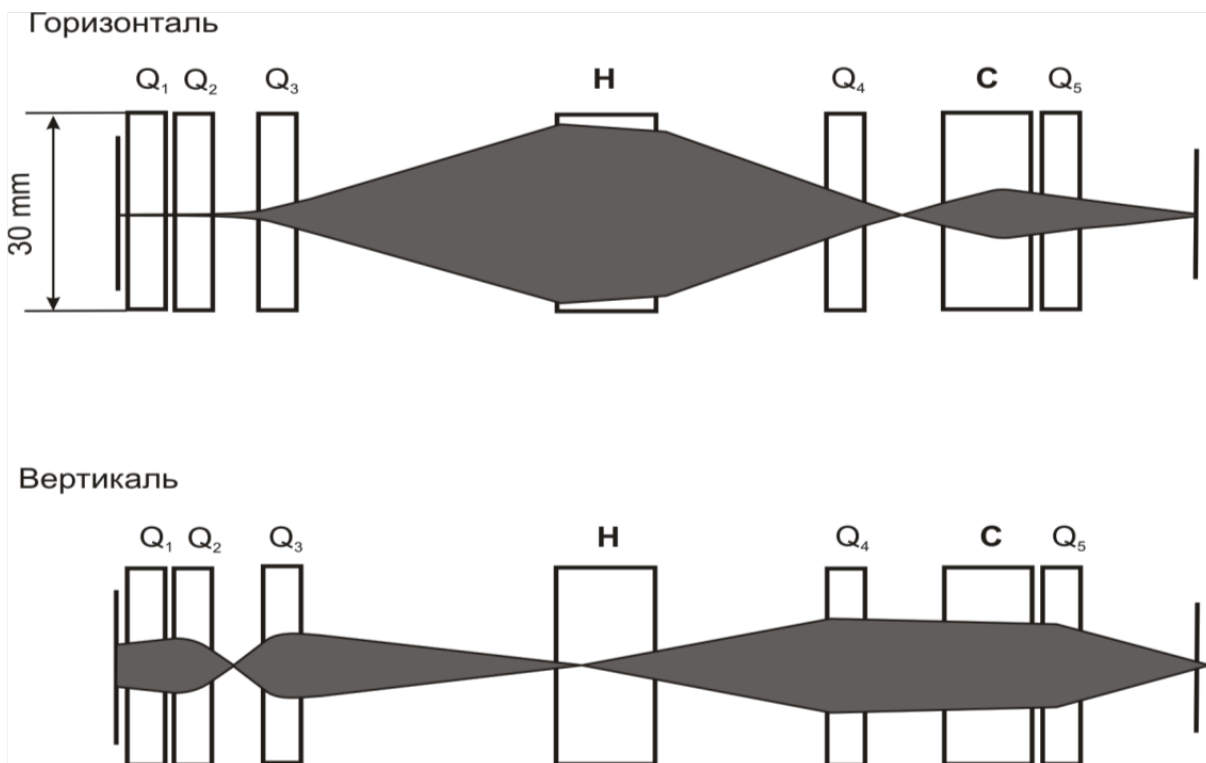
Q1, Q2, Q3, Q4, Q5 – квадрупольные линзы

Рисунок 1.1 – Схематическое изображение масс-спектрометра Матсуда

Примечание – Составлено по источнику [41, р. 441]

На рисунке 1.2 представлены проекции пучка ионов на горизонтальное и вертикальное направления. Этот небольшой прибор с длиной ионной траектории около одного метра использовался для химического анализа нефтепродуктов и на нем было получено разрешение 5000 при ширине источника ионов $S = 84$ мкм.

По своей эффективности масс-спектрометр Матсуда является лучшим секторным статическим масс-спектрометром, поэтому в дальнейшем мы будем использовать этот масс-спектрометр, как эталон для сравнения.



Н – магнитный сектор, С – электрический сектор

Рисунок 1.2 – Проекция пучка на горизонтальное и вертикальное направления

Примечание – Составлено по источнику [41, р. 442]

Основной недостаток секторных масс-спектрометров связан с тем, что в них функции дисперсии и фокусировки выполняют одни и те же секторные поля. Поэтому увеличить линейную дисперсию по массе, а следовательно, и разрешение, можно только за счет увеличения линейных размеров секторного прибора. В настоящее время во всем мире имеется только несколько секторных статических масс-спектрометров с линейными размерами порядка 10 м и с многотонным магнитом, которые при микронных размерах щелей источника и детектора имеют разрешение от сотен тысяч до миллиона.

При расчете секторных статических масс-спектрометров, в том числе, и масс-спектрометра Матсуда использовались традиционные методы расчета, заимствованные из световой оптики. Сначала ионно-оптическая схема рассчитывалась в параксиальном приближении путем решения линейаризованных приближенных уравнений, а затем находились aberrации второго и третьего порядка. Для улучшения характеристик масс-спектрометров при расчетах были учтены: влияние квадрупольных линз, искривление границы магнитного сектора, тороидальность конденсатора. Все это позволило в реальном приборе получить идеальные линии масс-спектра.

1.2 Призменные статические масс-анализаторы

В 50-х годах прошлого века в масс-спектрометрии появилось новое направление, связанное с именем академика АН Казахской ССР Кельмана В.М., основанное на создании электростатических и магнитных призм [42, 43]. Первоначально в качестве призмных полей использовались двумерные электрические и магнитные поля. Потенциалы, описывающие такие поля, в декартовой системе координат зависят от двух декартовых переменных. На рисунке 1.3 схематически показана магнитная призма, магнитные полюса которой значительно вытянуты вдоль оси z . Поэтому в области движения частиц магнитный скалярный потенциал ω , описывающий поле призмы, зависит только от двух других декартовых координат $\omega = \omega(x, y)$.

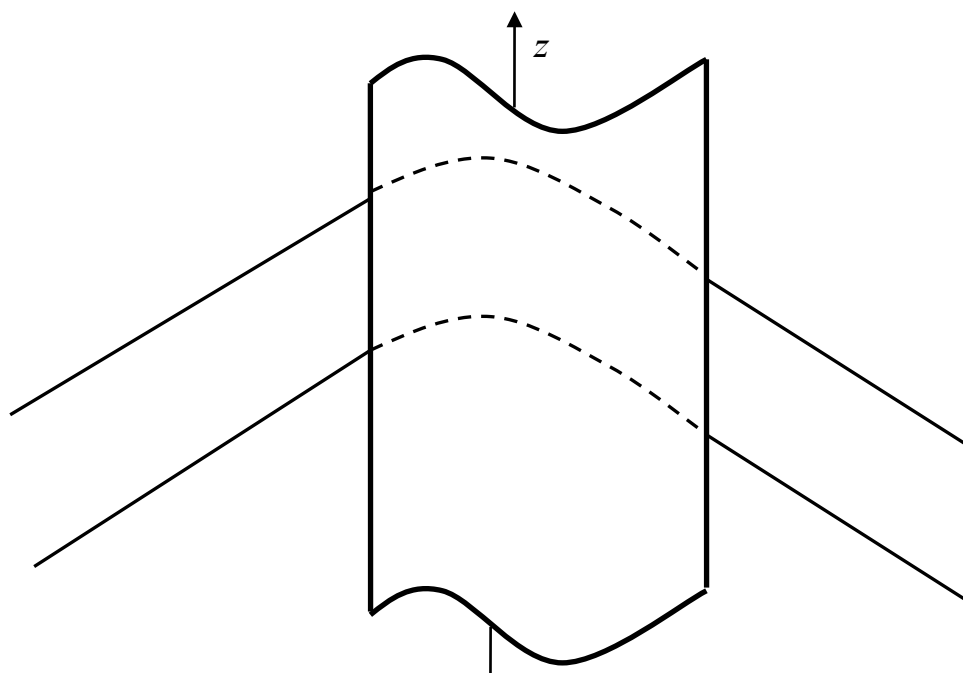


Рисунок 1.3 – Двумерная магнитная призма

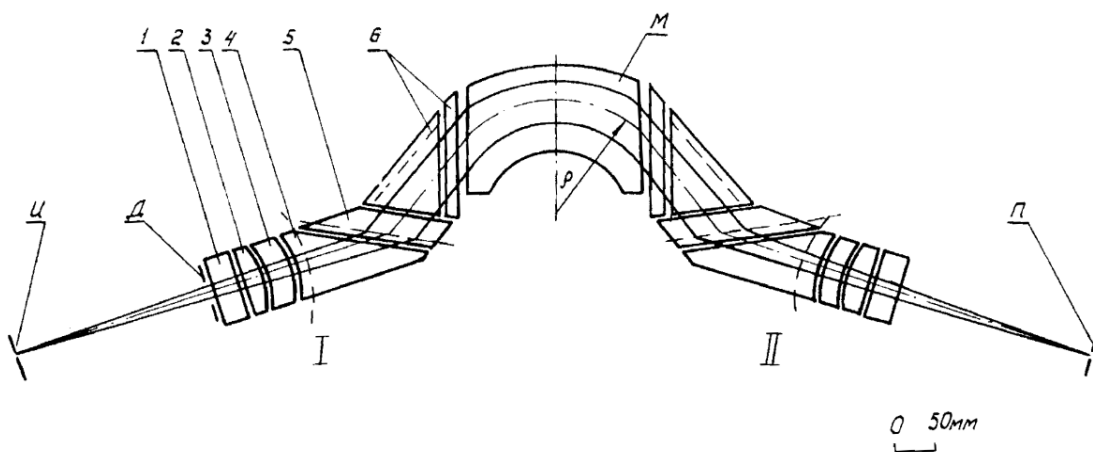
Параллельный пучок заряженных частиц с одинаковым отношением заряда к массе, движущийся в средней плоскости призмы с одинаковой энергией, отклоняется призмой и выходит из нее также параллельно вследствие идентичности траекторий частиц. Сохранение параллельности объемного пучка можно обеспечить за счет выполнения условия телескопичности [5, стр. 158]. Снабдив такую призму коллиматорной и фокусирующей линзами, можно создать призмный магнитный бета-спектрометр [44]. Линейная дисперсия такого прибора по энергии и массе D будет равна произведению угловой дисперсии призмы D' на фокусное расстояние фокусирующей линзы f_2 :

$$D = D' f_2. \quad (1.2)$$

Таким образом, линейная дисперсия призмного прибора, может быть, увеличена без увеличения линейных размеров магнита за счет увеличения фокусного расстояния фокусирующей линзы [45].

Двумерная электростатическая призма осуществляется с помощью двумерных щелевых электростатических полей, преломляющие грани которых располагаются под углом к друг другу, рисунок 1.4. При этом поле призмы в целом не является двумерным, что приводит к определенным трудностям при расчете электростатических призмных полей.

В Институте ядерной физики РК в отделе ядерной спектроскопии под руководством академика Кельмана был создан симметричный призмный масс-спектрометр с трансаксиальными линзами [46].



1–4 – электроды трансаксиальной линзы; 4–6 – электроды телескопической системы; М – магнитная призма; И – выходная щель источника ионов; П – входная щель приемника; Д – апертурная диафрагма

Рисунок 1.4 – Ионно-оптическая схема симметричного призмного масс-спектрометра

Примечание – Составлено по источнику [46, с. 94]

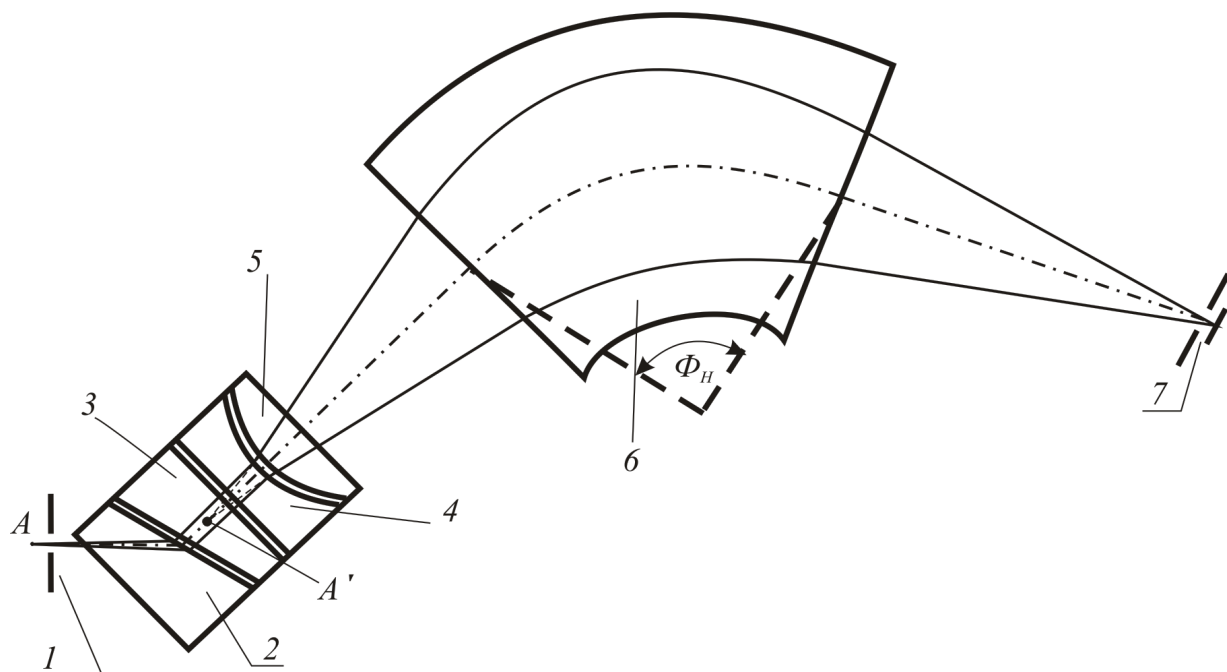
Основными элементами этого прибора являются двумерная магнитная призма и симметрично примыкающие с двух сторон к призме два идентичных электростатических блока. Электростатические блоки включали в себя призмную телескопическую систему и трансаксиальную линзу. Был осуществлен прибор с тройной фокусировкой пучка и с устраненным искривлением изображения источника, его линейная дисперсия по массе равнялась 1140 мм на 100% изменения массы в сравнительно небольшом приборе с длиной ионной траектории 1.6 м. На аналогичном приборе, построенном по той же схеме с длиной ионной траектории 2.5 м, при ширине

щелей источника и приёмника 3 мкм и 5 мкм соответственно было получено разрешение 150 000 на уровне 10% от высоты пика.

При расчете призмных масс-анализаторов также использовались традиционные методы корпускулярной оптики, основанные на рассмотрении паракиального приближения и расчете геометрических, хроматических и смешанных aberrаций.

1.3 Статический масс-анализатор с секторным однородным магнитным полем и электростатической призмной системой

Интересная ионно-оптическая схема статического масс-анализатора с тройной фокусировкой пучка предложена в работах Байсанова [47-49]. В этих работах рассмотрено необычное сочетание электростатической призмной системы и секторного однородного магнитного поля. Схематическое изображение этого масс-анализатора представлено на рисунке 1.5, где также показана проекция монохроматического пучка ионов с одинаковым отношением заряда к массе.



1 – щель источника ионов; 2-4 – электроды электростатической трехэлектродной призмы с потенциалами; V_0 , V_1 , V_2 – потенциалы призмы; 4-5 – электроды трансаксиальной линзы с потенциалами V_2 и V_0 ; 6 – полюса секторного магнита с углом отклонения равным Φ_H ; 7 – щель приемника ионов.

Рисунок 1.5 – Схематическое изображение масс-анализатора с электростатической призмой, трансаксиальной линзой и секторным однородным магнитным полем

Примечание – Составлено по источнику [47, р. 426]

Выходя из точки A источника, расходящийся пучок ионов сначала ускоряется, преломляясь на границе электродов 2, 3, затем замедляется на границе электродов 3, 4 и выходит перпендикулярно этой границе, затем пучок расширяется трансаксиальной линзой, которая работает как рассеивающая линза, увеличивая угловую расходимость пучка. Здесь расходящийся пучок создает мнимое изображение источника в точке A' . Расширенный пучок ионов отклоняется секторным магнитом 6 и фокусируется в щель 7 приемника ионов.

Был рассчитан масс-анализатор с тройной фокусировкой ионного пучка. При расчете этой схемы использовались криволинейные координаты q , z , s и нелинейные дифференциальные уравнения, описывающие отклонение частиц пучка от осевой траектории. Криволинейная ось s лежит в средней плоскости и совпадает с осевой траекторией пучка; криволинейная ось z имеет постоянное направление, перпендикулярное к средней плоскости $z=0$; ось q лежит в средней плоскости и направлена нормально к осевой траектории. Результаты расчета приборных характеристик этого масс-анализатора приведены в четвертой главе. На рисунках 1.6 и 1.7 показан ход пучка заряженных частиц в анализаторе.

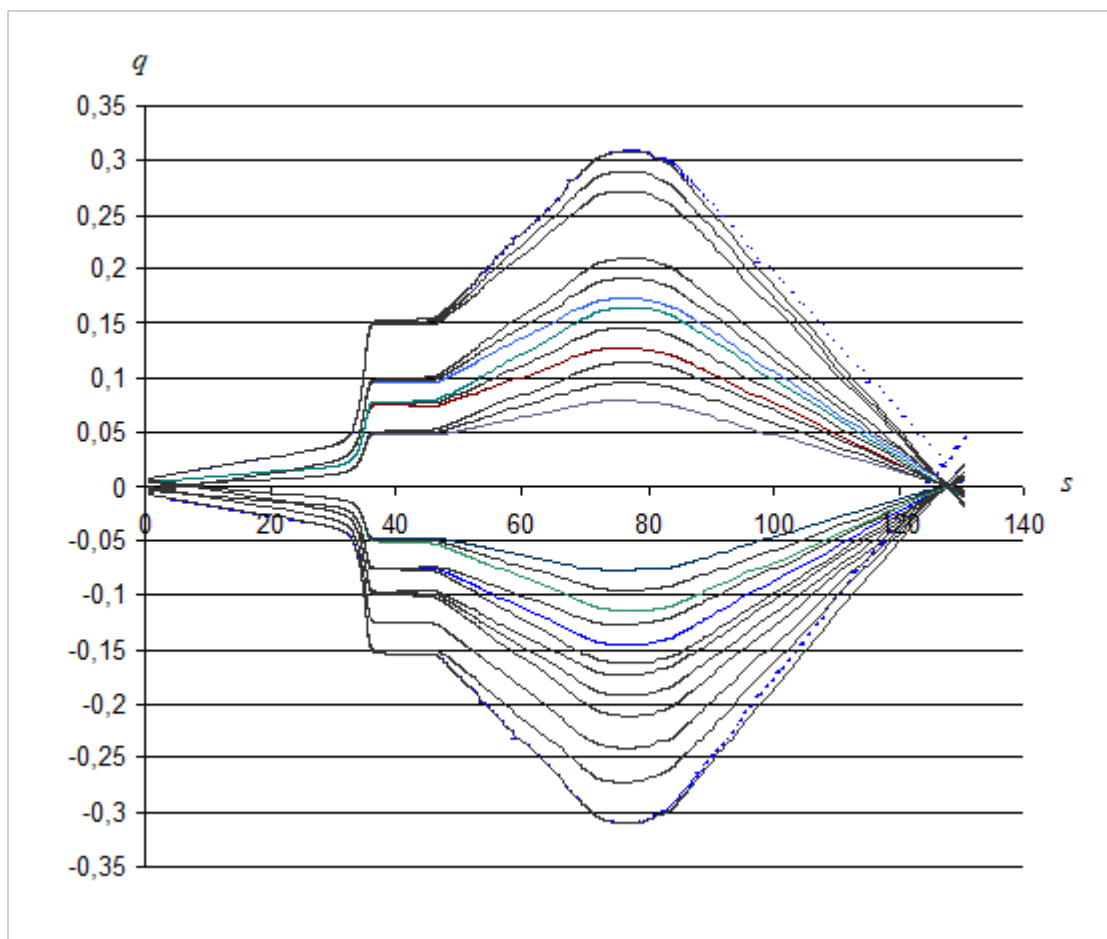


Рисунок 1.6 – Проекция траекторий частиц пучка на среднюю плоскость

Примечание – Составлено по источнику [47, р. 431]

Из рисунка 1.6 видно, что электростатическая призма не только обеспечивает фокусировку по энергии, но и значительно расширяет пучок перед входом в магнитное поле. Это в соответствии с теоремой о потоке увеличивает

параметр «качество» данного анализатора. По своим приборным характеристикам при одинаковых размерах он имеет примерно такие же показатели, что и масс-спектрометр Матсуда, но гораздо более простую конструкцию.

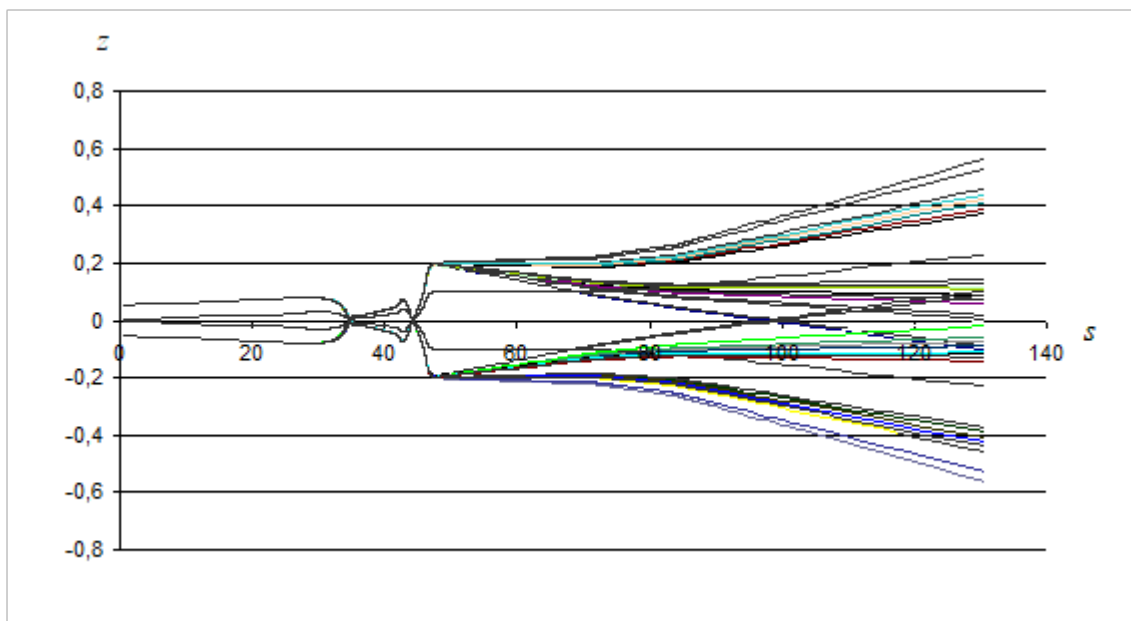
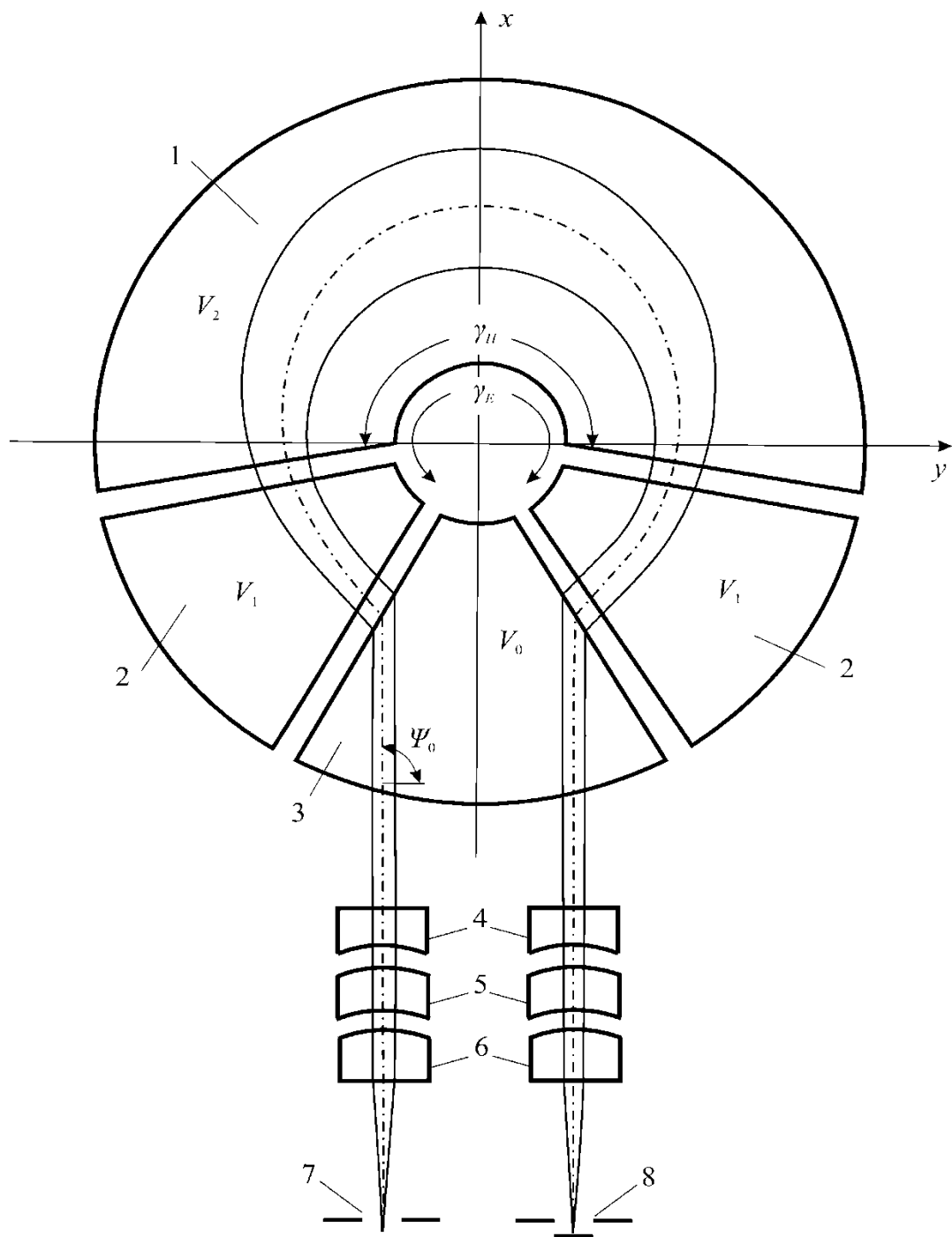


Рисунок 1.7 – Проекция траектория пучка на вертикальное направление

Примечание – Составлено по источнику [47, p. 432]

1.4 Призмный масс-анализатор с КАП и трансаксиальными линзами

В качестве электрических и магнитных полей призмных элементов могут использоваться не только двумерные поля, но также, так называемые, конические отклоняющие поля. Это поля типа $1/r$, потенциалы которых в сферической системе координат r, ϑ, ψ зависят только от угловых переменных ϑ, ψ . В частности, такие поля реализуются в конусовидной ахроматичной призме (КАП) [50-52]. Все траектории заряженных частиц однородного плоского параллельного пучка, входящего в КАП, движутся в средней плоскости по подобным траекториям, в результате сохраняется их параллельность на выходе из КАП, как показано на рисунке 1.8, где представлена схема призмного масс-спектрометра с КАП и трансаксиальными линзами. Причем это свойство не зависит от ширины пучка в средней плоскости, поэтому увеличение ширины пучка в КАП не приводит к возникновению дополнительных aberrаций. Последнее свойство особенно важно при использовании КАП в призмных приборах, снабженных коллиматорной и фокусирующей линзами. Таким образом, свойство идентичности траекторий в двумерных полях в конических полях заменяется их подобием.



1 – полюсные наконечники; 2, 3 – магнитные экраны-электроды призмы; 4, 5, 6 – электроды коллиматорной и фокусирующей трансаксиальных линз; 7, 8 – щели источника и приемника ионов.

Рисунок 1.8 – Схема призматического масс-анализатора с КАП

Примечание – Составлено по источнику [50, с. 2]

Параллельный однородный пучок ионов, поступающий в КАП, сначала ускоряется на границе электродов 3 и 2, преломляясь и расширяясь перед входом в магнитное поле. В магнитном поле ионы движутся по подобным траекториям, отличным от круговых, что приводит к еще большему расширению пучка. Так как угол магнитного сектора в КАП $\gamma_H \equiv 208^\circ$, то магнитный поток,

пронизывающий пучок здесь очень большой. Это приводит к тому, что угловая дисперсия по массе КАП более 51 рад на 100% изменения массы. Дисперсия КАП по энергии равна нулю, то есть в КАП осуществляется фокусировка по энергии, а сохранение параллельности объемного пучка обеспечивается телескопичностью КАП. На рисунках 1.9 и 1.10 показаны проекции пучка заряженных частиц в КАП на горизонтальное и вертикальное направления.

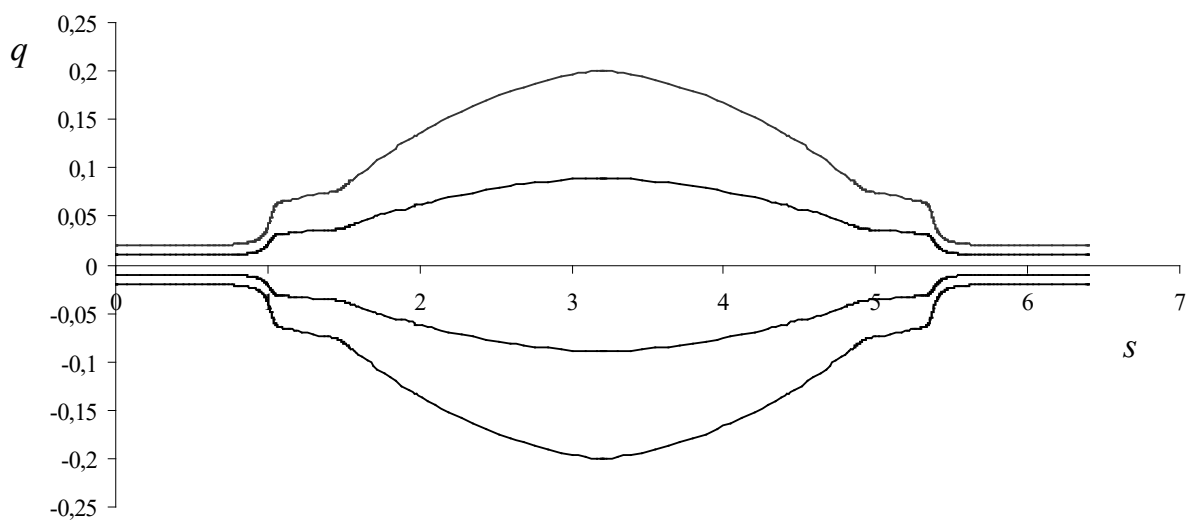


Рисунок 1.9 – Поведение пучка в КАП в проекции на горизонтальное направление

Примечание – Составлено по источнику [52, р. 111]

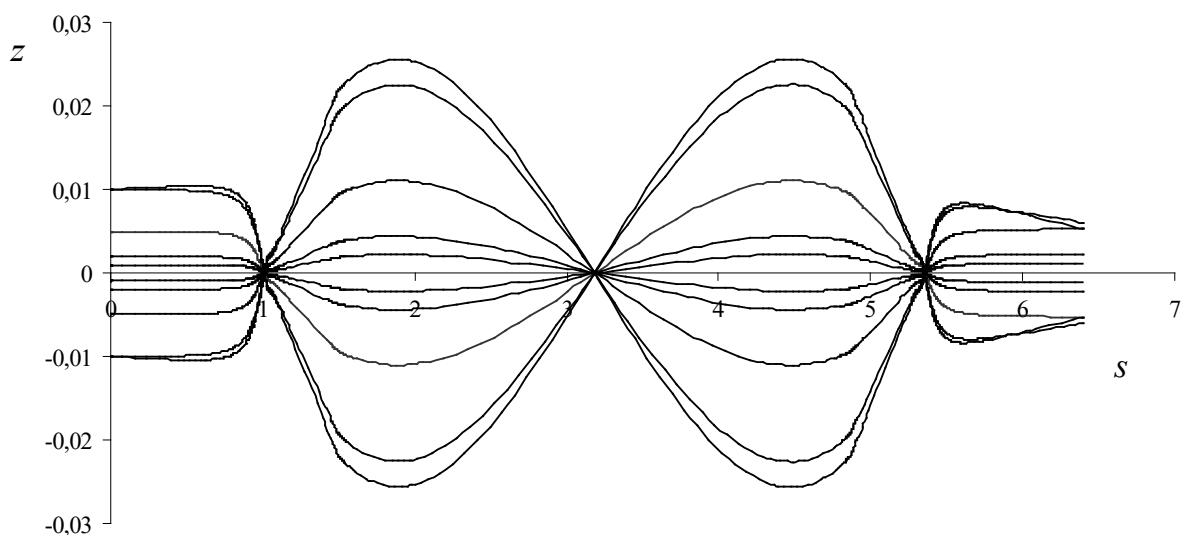


Рисунок 1.10 – Поведение пучка в КАП в проекции на вертикальное направление

Примечание – Составлено по источнику [52, р. 111]

Вследствие очень большой угловой дисперсии КАП призмный масс-анализатор с КАП является уникальным прибором. Линейная дисперсия такого прибора равна произведению угловой дисперсии призмы D'_m на фокусное расстояние f_2 фокусирующей линзы. Так, при $f_2 \cong 1\text{ м}$ линейная дисперсия прибора по массе будет равна:

$$D_m = D'_m f_2 \cong 50 \text{ м}. \quad (1.3)$$

Такая линейная дисперсия при микронных ширинах щелей источника и приемника ионов позволяет получить разрешение порядка 10^7 на сравнительно небольшом приборе.

Заметим, что параметры КАП были рассчитаны с использованием уравнений, описывающих отклонение частиц пучка от осевой траектории в криволинейных координатах q, z, s . Однако призмный масс-анализатор с КАП и с трансверсальными коллиматорной и фокусирующей линзами ранее не рассчитывался. Необходимо просчитать параметры КАП еще одним независимым методом, чтобы получить дополнительное подтверждение правильности полученных ранее результатов.

1.5 Расчет времяпролетных масс-анализаторов

В последнее время в научном приборостроении активно развивается направление, связанное с созданием времяпролетных масс-анализаторов. Здесь внимание сосредоточено в основном на разработке масс-рефлектронов, в которых используются электростатические зеркала [53-56]. В таких зеркалах пучок заряженных частиц тормозится и отражается от областей с отрицательным потенциалом. При этом можно обеспечить времяпролетную фокусировку пучка ионов по энергии. Это связано с тем, что более энергичные частицы проходят дальше в область отражения и их путь удлиняется. В результате можно добиться того, чтобы частицы с разными энергиями приходили в детектор одновременно. Осуществив достаточно хорошую пространственно-энергетическую времяпролетную фокусировку ионного пучка, можно создать времяпролетный масс-спектрометр с высоким разрешением.

Известно, что при расчете электронных зеркал возникают математические трудности, связанные с тем, что в окрестности точек поворота радиусы кривизны траекторий частиц стремятся к нулю, а наклоны траекторий к оптической оси и относительный разброс энергий частиц неограниченно возрастают. Все эти трудности остаются в стороне, если интегрировать не уравнения траектории, а уравнения Ньютона по времени движения частиц.

Таким образом, в масс-спектроскопии, где энергии ионов нерелятивистские, порядка тысячи электронвольт, напрашивается использование уравнений Ньютона с силой Лоренца в правой части этих уравнений. Такие уравнения особенно эффективно использовать в тех случаях, если известны аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрическое и магнитное поля КОС.

Для анализа поведения пучков заряженных частиц в КОС, при численном интегрировании уравнений Ньютона можно использовать методы имитационного программирования и метод Монте-Карло. Используя генератор случайных чисел, моделируются начальные условия для большого числа частиц, вылетающих из ионного источника. При этом может быть учтено распределение ионов в источнике по координатам и углам вылета, а также по энергиям и массам. Для всех этих частиц численно интегрируются уравнения движения Ньютона и находится распределение частиц на выходе из КОС в плоскости детектора. Таким образом, получается компьютерная модель реального прибора. Изменяя геометрические и электрические параметры модели, можно добиться оптимизации приборных характеристик КОС.

В данной работе используются безразмерные переменные, в частности, безразмерные уравнения Ньютона. Это облегчает проведение численных расчетов и делает результаты расчетов более универсальными.

Выводы по первому разделу

Итак, исходя из вышеизложенного, были сформулированы основные задачи, которые необходимо решить в диссертации:

1. Построить математическую модель для расчета динамики пучков заряженных частиц в КОС, основанную на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений, описывающих электрические и магнитные поля КОС.

2. Создать компьютерную модель для численного расчета призменного масс-анализатора с КАП и трансаксиальными линзами, позволяющую с использованием метода Монте-Карло моделировать ионный источник по координатам и углам вылета, а также энергиям и массам вылетающих частиц и следить за динамикой пучка заряженных частиц в анализаторе.

3. Разработать метод расчета аббераций КОС, основанный на решении системы линейных алгебраических уравнений, полученных путем численного решения безразмерных уравнений Ньютона при различных начальных условиях.

4. Реализовать метод расчета времени пролета заряженных частиц в электростатических зеркалах от источника до детектора, основанный на численном интегрировании безразмерных уравнений Ньютона и линейной интерполяции решений в области детектора.

2 ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

2.1 Дифференциальные уравнения, описывающие отклонение заряженных частиц от осевой траектории в криволинейных координатах

Множество уравнений траекторий для отслеживания пучков заряженных частиц, выраженных в криволинейных координатах относительно осевой траектории, было использовано в работах [57-59]. Точные уравнения не были непосредственно интегрированы, на практике использовались только параксиальные уравнения и теория аббераций. Свойства фокуса для ортогональных систем исследовались с помощью параксиальных уравнений [60]. Линейный аппроксимальный подход был использован для нахождения общих фокусирующих и дисперсионных свойств систем со средней плоской симметрией [61].

В работах [62, 63] были получены точные уравнения движения и численно интегрированы в криволинейных координатах для полей, усредненных вдоль плоскости. В этой главе показано, что, соединяя координатные точки в декартовых координатах с криволинейными координатами, потенциальные градиенты могут быть вычислены в декартовых координатах таким образом, что проектирование может осуществляться с использованием ортогональных базисных векторов, которые привязаны к осевой траектории. Это помогает решить задачу расчета потенциальных градиентов.

Электрическое и магнитное поля произвольной корпускулярно-оптической системы (КОС) описываются электростатическим потенциалом $\varphi \equiv \varphi(x, y, z)$ и скалярным магнитостатическим потенциалом $\omega \equiv \omega(x, y, z)$, с заданными в некоторой декартовой системе координат x, y, z . В области пространства свободной от зарядов и токов напряженность электрического поля \vec{E} и индукция магнитного поля \vec{B} выражаются через градиенты скалярных потенциалов φ и ω :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi, \quad \vec{B} = -\vec{\nabla}\omega. \quad (2.1)$$

Рассмотрим пучки заряженных частиц с различными массами и энергиями, представив массу частиц в виде:

$$m = m_c(1 + \gamma), \quad (2.2)$$

а энергию частиц на входе в систему как:

$$W_0 = -(1 + \varepsilon)e\varphi_0. \quad (2.3)$$

где m_c и e – масса и заряд «центральной» частицы, движущейся по осевой траектории;

γ – безразмерный параметр, определяющий разброс частиц по массе;

ε – безразмерный параметр, определяющий разброс частиц по энергии на входе в систему, где электростатический потенциал постоянен и равен φ_0 . Для осевой траектории $\gamma = \varepsilon = 0$. Электростатический потенциал φ нормирован таким образом, что он равен нулю там, где равна нулю скорость частиц. Здесь и в дальнейшем индекс «0» обозначает значения переменных в предметной области на входе в корпускулярно-оптическую систему, а индекс «с» – значения величин, относящихся к осевой траектории.

Вводятся безразмерные скалярные потенциалы Φ и Ω , которые связаны с электростатическим потенциалом φ и магнитостатическим потенциалом ω соотношениями:

$$\Phi = -\frac{e\varphi}{m_c c^2}, \quad \Omega = -\frac{e\omega}{m_c c}, \quad (2.4)$$

где c – скорость света в вакууме. Вводится также ортогональная правая система криволинейных координат с ортами $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_s$, при этом вектор \vec{e}_s направлен по касательной к осевой траектории, вектор \vec{e}_1 – по нормали, а вектор \vec{e}_2 – по бинормали, как показано на рисунке 2.1.

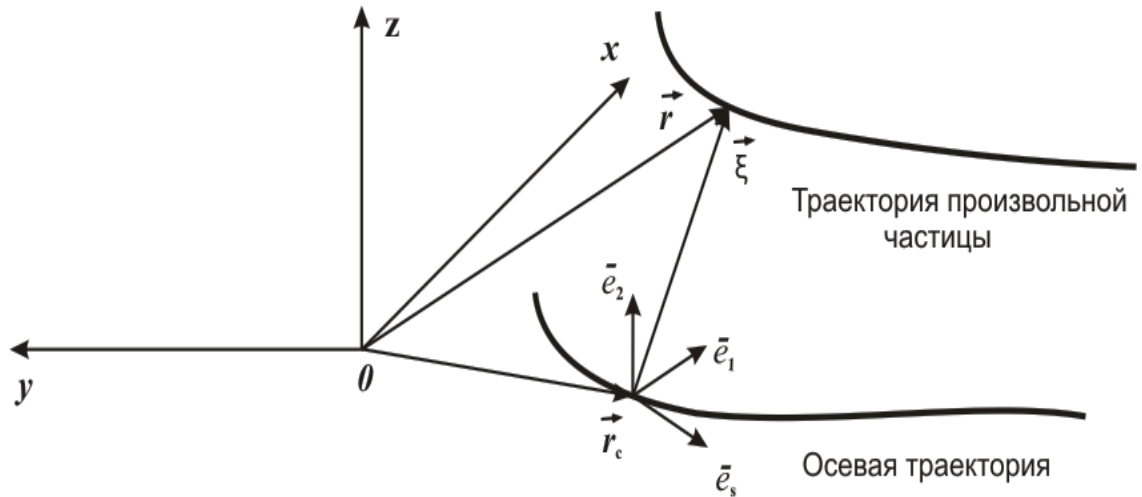


Рисунок 2.1 – Выбор криволинейных координат

Примечание – Составлено по источнику [63, р. 436]

Радиус-вектор $\vec{r} = \vec{r}(s)$ произвольной траектории пучка можно представить в виде:

$$\vec{r}(s) = \vec{r}_c(s) + \vec{\xi}(s), \quad (2.5)$$

где $\vec{r}_c(s)$ – радиус-вектор, описывающий осевую траекторию пучка, а

$$\vec{\xi}(s) = q_1(s)\vec{e}_1 + q_2(s)\vec{e}_2. \quad (2.6)$$

В качестве независимой переменной криволинейной системы координат используется длина дуги осевой траектории пучка s . В дальнейшем будем считать, что осевая траектория пучка $r_c(s)$ вычисленная при определенных начальных условиях известна:

$$\vec{r}_c(s) = \vec{i}x_c(s) + \vec{j}y_c(s) + \vec{k}z_c(s). \quad (2.7)$$

Единичные векторы криволинейной системы координат $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_s$ связаны с радиус-вектором осевой траектории $\vec{r}_c(s)$ следующими соотношениями [64]:

$$\vec{e}_s = \frac{d\vec{r}_c}{ds} \equiv \vec{r}_c', \quad \vec{e}_1 = \frac{1}{k_1} \frac{d^2\vec{r}_c}{ds^2} \equiv \frac{1}{k_1} \vec{r}_c'', \quad \vec{e}_2 = \vec{e}_s \times \vec{e}_1. \quad (2.8)$$

Здесь $k_1 \equiv k_1(s)$ кривизна осевой траектории, которая определяется выражением:

$$k_1 = \left| \frac{d^2\vec{r}_c}{ds^2} \right| = \sqrt{x_c''^2 + y_c''^2 + z_c''^2}. \quad (2.9)$$

Уравнения для функций $q_1(s)$ и $q_2(s)$, разрешенные относительно старших производных, могут быть записаны в следующем виде [56, p.160-162]:

$$\begin{aligned} q_1'' &= -k_1 + (k_1^2 + k_2^2)q_1 - k_2'q_2 - 2k_2q_2' \\ &\quad - \frac{q_1' + k_2q_2}{1 - k_1q_1} (2k_1q_1' + k_1'q_1 + k_1k_2q_2) \\ &\quad + \frac{r'^2}{2(\Phi + \varepsilon\Phi_0)} \left[(\vec{\nabla}\Phi)_{q_1} - \frac{q_1' + k_2q_2}{1 - k_1q_1} (\vec{\nabla}\Phi)_s \right] \\ &\quad + \frac{r'}{\sqrt{2(\Phi + \varepsilon\Phi_0)(1 + \gamma)}} \left[(q_2' - k_2q_1)(\vec{\nabla}\Omega)_s \right. \\ &\quad \left. + \frac{(q_1' + k_2q_2)(q_2' - k_2q_1)}{1 - k_1q_1} (\vec{\nabla}\Omega)_{q_1} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(1 - k_1q_1)^2 + (q_1' + k_2q_2)^2}{1 - k_1q_1} (\vec{\nabla}\Omega)_{q_2} \right] + \frac{(q_1' + k_2q_2)(q_2' - k_2q_1)}{1 - k_1q_1} \\ &\quad \left. (\vec{\nabla}\Omega)_{q_1} - \frac{(1 - k_1q_1)^2 + (q_1' + k_2q_2)^2}{1 - k_1q_1} (\vec{\nabla}\Omega)_{q_2} \right], \quad (2.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
q_2'' = & k_2' q_1 + 2k_2 q_1' + k_2^2 q_2 - \frac{q_1' + k_2 q_2}{1 - k_1 q_1} (2k_1 q_1' + k_1' q_1 + k_1 k_2 q_2) \\
& + \frac{r'^2}{2(\Phi + \varepsilon \Phi_0)} \left[(\vec{\nabla} \Phi)_{q_2} - \frac{q_2' + k_2 q_1}{1 - k_1 q_1} (\vec{\nabla} \Phi)_s \right] \\
& + \frac{r'}{\sqrt{2(\Phi + \varepsilon \Phi_0)(1 + \gamma)}} \left[-(q_1' + k_2 q_2) \right. \\
& \times (\vec{\nabla} \Omega)_s + \frac{(1 - k_1 q_1)^2 + (q_2' - k_2 q_1)^2}{1 - k_1 q_1} (\vec{\nabla} \Omega)_{q_1} \\
& \left. - \frac{(q_1' + k_2 q_2)(q_2' - k_2 q_1)}{1 - k_1 q_1} (\vec{\nabla} \Omega)_{q_2} \right]. \tag{2.11}
\end{aligned}$$

Главной особенностью приведенных точных уравнений траекторий (2.10) и (2.11) является то, что при их интегрировании можно сразу получить отклонения $q_1(s)$ и $q_2(s)$ произвольной частицы пучка от осевой траектории. Это значительно повышает точность расчетов по сравнению с обычным подходом, где отклонение вычисляется как малая разность между двумя большими числами, которыми являются обычные координаты частиц. Эти уравнения позволяют с высокой точностью описывать поведение практически любых пучков в корпускулярно-оптических системах, рассматривая их сечения плоскостями $s = const$, перпендикулярными осевой траектории, и не ограничиваясь при этом требованием малости $q_1, q_1', q_2, q_2', \varepsilon, \gamma$, как это обычно предполагается в корпускулярной оптике. Условием, которое делает невозможным применение этих уравнений, является требование однозначности определения координат, которое выполняется в том случае, если значения координат q_1 и q_2 не превышают радиусов кривизны и кручения осевой траектории. Полученные уравнения являются удобной математической базой для исследования поведения пучков заряженных частиц в электромагнитных полях методом Монте Карло.

Используя уравнения траекторий (2.10) и (2.11), можно найти значения начальных параметров $q_{10}, q_{10}', q_{20}, q_{20}', \varepsilon, \gamma$ при которых можно использовать линейную аппроксимацию этих уравнений. Линейная аппроксимация уравнений траекторий (2.10) и (2.11) имеет вид:

$$\begin{aligned}
q_1'' + q_1' \frac{f'}{2f} + q_2' \left(2k_2 - \frac{h'}{\sqrt{2f}} \right) + q_1 \left[-(k_1^2 + k_2^2) + \frac{f_{q_1}^2}{2f^2} - \frac{f_{q_1 q_1}}{2f} + \right. \\
\left. 2k_1 \frac{f_{q_1}}{2f} + \frac{1}{\sqrt{2f}} \left(k_2 n' - 2k_1 n_{q_2} - \frac{f_{q_1} n_{q_2}}{2f} + h_{q_1 q_2} \right) \right] + q_2 \left[k_2' + \frac{f_{q_1 q_2}}{2f^2} - \right. \\
\left. \frac{f_{q_1 q_2}}{2f} + k_2 \frac{f'}{2f} + \frac{1}{\sqrt{2f}} \left(-\frac{f_{q_2} n_{q_2}}{2f} + n_{q_2 q_2} \right) \right] = \frac{f_0}{2f} \left(\frac{n_{q_2}}{\sqrt{2f}} - \frac{f_{q_1}}{f} \right) \varepsilon + \frac{n_{q_2}}{2\sqrt{2f}} \gamma, \tag{2.12}
\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
& q_2'' + q_1' \left(\frac{n'}{\sqrt{2f}} - 2k_2 \right) + q_2' \frac{f'}{2f} \\
& + q_1 \left[-k_2' + \frac{f_{q_1} f_{q_2}}{2f^2} - \frac{f_{q_1} f_{q_2}}{2f} - k_2 \frac{f'}{2f} \right. \\
& \left. + \frac{1}{\sqrt{2f}} \left(-\frac{f_{q_1} n_{q_1}}{2f} + 2k_1 n_{q_1} - n_{q_1 q_1} \right) \right] \\
& + q_2 \left[-k_2^2 + \frac{f_{q_1}^2}{2f} - \frac{f_{q_2} f_{q_2}}{2f} \right. \\
& \left. + \frac{1}{\sqrt{2f}} \left(k_2 n' - \frac{f_{q_2} n_{q_1}}{2f \sqrt{2f}} + n_{q_1 q_2} \right) \right] \\
& = \frac{f_0}{2f} \left(-\frac{n_{q_1}}{\sqrt{2f}} - \frac{f_{q_2}}{f} \right) \varepsilon - \frac{n_{q_1}}{2\sqrt{2f}} \gamma.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

При этом выполняются следующие соотношения:

$$k_1 = \frac{f_{q_1}}{2f} - \frac{h_{q_2}}{\sqrt{2f}}, \quad \frac{f_{q_2}}{2f} - \frac{h_{q_1}}{\sqrt{2f}} = 0. \tag{2.14}$$

здесь $f \equiv f(s)$ and $h \equiv h(s)$ – распределения электрического Φ и магнитного Ω потенциалов на осевой траектории, штрихи обозначают дифференцирование по координате s , индексы при f and n обозначают производные по соответствующим координатам.

2.2 Некоторые общие свойства КОС со средней плоскостью

Далее рассматриваются фокусирующие и диспергирующие характеристики КОС со средней плоскостью, представляющей собой плоскость симметрии электрического поля и антисимметрию магнитного поля. Дифференциальные уравнения траектории заряженных частиц в таких полях рассматриваются в линейном приближении. В этом случае криволинейная ось координат совпадает с осевой траекторией пучка, лежащей в средней плоскости. Это позволяет найти некоторые общие фокусирующие и диспергирующие свойства рассматриваемых полей.

В криволинейной системе координат q, z и s [65, 66] выбираем в качестве криволинейной оси осевую траекторию пучка заряженных частиц, лежащую в средней плоскости $x, y, q \equiv q_1$ (как показано на рисунке 2.1). Криволинейная ось q лежит в средней плоскости и направлена нормалью к осевой траектории; ось z имеет постоянное направление, перпендикулярное средней плоскости $z = 0$; а ось s совпадает с осевой траекторией пучка. В каждом перпендикулярном сечении пучка, определяемом координатой s , отклонение частицы от осевой траектории определяется координатами q и z .

Принимая во внимание, что

$$dl = \sqrt{q'^2 + z'^2 + (1 - kq)^2} ds = r' ds \quad (2.15)$$

и

$$\frac{d\vec{r}}{dl} = \frac{q'\vec{e}_q + z'\vec{e}_z + (1 - kq)\vec{e}_s}{r'}, \quad (2.16)$$

из точных уравнений траектории заряженной частицы в криволинейной системе координат (2.10) и (2.11) получим следующие уравнения для систем со средней плоскостью:

$$\begin{aligned} q'' + (1 - kq)k + q' \left(\ln \frac{\sqrt{\Phi}}{r'} \right)' \\ = \frac{r'^2 \Phi_q}{2\Phi} + \frac{r'}{\sqrt{2\Phi(1 + \gamma)}} \left[\frac{z'\Omega_s}{1 - kq} - (1 - kq)\Omega_z \right], \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$z'' + z' \left(\ln \frac{\sqrt{\Phi}}{r'} \right)' = \frac{r'^2 \Phi_z}{2\Phi} + \frac{r'}{\sqrt{2\Phi(1 + \gamma)}} \left[(1 - kq)\Omega_q - \frac{q'\Omega_s}{1 - kq} \right]. \quad (2.18)$$

В этих двух уравнениях штрихи обозначают дифференцирование по криволинейной координате s ; $k \equiv k(s)$ – кривизна осевой траектории, а индексы при Φ и Ω обозначают частную производную по соответствующим координатам, в них также используется выражение:

$$\begin{aligned} \left(\ln \frac{\sqrt{\Phi}}{r'} \right)' = \frac{1}{1 - kq} \left[\frac{r'^2 \Phi_s}{2\Phi(1 - kq)} + \frac{r'}{\sqrt{2\Phi(1 + \gamma)}} (q'\Omega_z - z'\Omega_q) \right. \\ \left. + qk' + 2q'k \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Уравнения (2.17) и (2.18) являются точными. Они позволяют непосредственно вычислять функции $q(s)$ и $z(s)$, определяющие отклонение частицы от осевой траектории. Единственным условием, ограничивающим их применение, является требование $|q| < k^{-1}$.

Уравнения (2.17) и (2.18) в линейном приближении могут быть представлены в следующем виде, с точностью до членов первого порядка относительно q , q' , z , z' , которые считаются малыми величинами первого порядка:

$$q'' + \frac{f'}{2f} q' + \left(k^2 + \frac{f_q^2}{4f^2} + \frac{kf_q}{2f} - \frac{f_{qq}}{2f} + \frac{h_q}{\sqrt{2f}} \right) q =$$

$$= \frac{f_0}{2f} \left(-\frac{f_q}{f} + \frac{h}{\sqrt{2f}} \right) \varepsilon + \frac{h}{2\sqrt{2f}} \gamma, \quad (2.20)$$

$$z'' + \frac{f'}{2f} z' + \left(-\frac{kf_q}{2f} + \frac{f_{qq}}{2f} + \frac{f''}{2f} - \frac{h_q}{\sqrt{2f}} \right) z = 0. \quad (2.21)$$

Здесь функции $f \equiv f(s) = \Phi_c(0,0,s)$, $f_q \equiv f_q(s) = \Phi_{cq}(0,0,s)$ и $f_{qq} \equiv f_{qq}(s) = \Phi_{cqq}(0,0,s)$ являются безразмерным потенциалом $\Phi_c(q,z,s)$ и его частными производными первого и второго порядка по q , рассчитанными на осевой траектории (т.е. при $q=z=0$); $h \equiv h(s) = \Omega_z(0,0,s)$, $h_q \equiv h_q(s) = \Omega_{zq}(0,0,s)$ и определяют соответственно распределение напряженности магнитного поля и его частной производной по q на осевой траектории. Кривизна осевой траектории вычисляется по формуле:

$$k = \frac{f_q}{2f} - \frac{h}{\sqrt{2f}}, \quad (2.22)$$

При выводе уравнений (2.20) и (2.21) учитывалось, что потенциалы удовлетворяют уравнению Лапласа. В частности, выполняется соотношение:

$$f_{zz} = kf_q - f_{qq} - f''.$$

Дифференциальные уравнения (2.20) и (2.21) позволяют получить некоторые общие соотношения, характеризующие фокусирующие и диспергирующие свойства полей со средней плоскостью.

Исследуем фокусирующие свойства, поставив в уравнение (2.20) и $\varepsilon = \gamma = 0$. Таким образом, получим линейное однородное уравнение. Линейно независимые решения однородного уравнения, соответствующие уравнению (2.20), обозначим через p_1 и p_2 , а уравнению (2.21), через z_1 и z_2 . Эти решения определяются в области вне поля в предметной области при $s = s_0$ следующими начальными условиями:

$$p_{10} = 1, \quad p'_{10} = 0; \quad p_{20} = 0, \quad p'_{20} = 1; \quad (2.23)$$

$$z_{10} = 1, \quad z'_{10} = 0; \quad z_{20} = 0, \quad z'_{20} = 1. \quad (2.24)$$

Принимая во внимание соотношения (2.23) и (2.24), найдем детерминанты Вронского линейно независимых решений этих уравнений:

$$p_1(s)p'_2(s) - p'_1(s)p_2(s) = \sqrt{\frac{f_0}{f(s)}}, \quad (2.25)$$

$$z_1(s)z_2'(s) - z_1'(s)z_2(s) = \sqrt{\frac{f_0}{f(s)}}. \quad (2.26)$$

Пусть в пространстве изображений, где поле отсутствует, плоскость $s = s_g$ является гауссовой. Если система стигматическая, то в этой плоскости $p_{2g} = z_{2g} = 0$, и из выражений (2.25), (2.26) следуют соотношения Лагранжа-Гельмгольца, связывающие угловое Γ и линейное M увеличения в гауссовой плоскости:

$$M\Gamma = \sqrt{\frac{f_0}{f_g}}, \quad M_z\Gamma_z = \sqrt{\frac{f_0}{f_g}}. \quad (2.27)$$

где $M = p_{1g}$ и $\Gamma = p'_{2g}$ – являются линейным и угловым увеличениями в направлении оси q в средней плоскости (горизонтальное направление);

$M_z = z_{1g}$ и $\Gamma = z'_{2g}$ – линейное и угловое увеличения в направлении оси z (вертикальное направление), индексом "g" здесь и в дальнейшем отмечены значения переменных при $s = s_g$.

Однородное уравнение, соответствующее уравнению (2.20), умножаем на z , а уравнение (2.21) умножаем на q и складываем их почленно. После простых преобразований получим выражение:

$$q''z + qz'' + \left(\frac{f'}{2f}qz\right)' = -qz\left(k^2 + \frac{f_q^2}{4f^2} + \frac{f'^2}{2f^2}\right). \quad (2.28)$$

Отсюда можно получить следующее выражение:

$$\left[\frac{(\sqrt{f}qz)'}{qz}\right]' = -\sqrt{f}\left(k^2 + \frac{f_q^2}{4f^2} + \frac{f'^2}{4f^2} + \frac{q'^2}{q^2} + \frac{z'^2}{z^2}\right). \quad (2.29)$$

Правая часть этого уравнения меньше нуля, поэтому

$$\left[\frac{(\sqrt{f}qz)'}{qz}\right]' < 0. \quad (2.30)$$

Это условие сильнее, чем то, которое получили в [1, стр. 198]:

$$\frac{q''}{q} + \frac{z''}{z} < 0.$$

Из уравнения (2.30) после интегрирования получим следующее неравенство, описывающее фокусирующие свойства любых полей со средней плоскостью:

$$\frac{(\sqrt{f}qz)'}{qz} - \frac{\sqrt{f_0}(qz)_0'}{q_0z_0} < 0. \quad (2.31)$$

Итак, если в поле входит объемный параллельный пучок, для которого $q'_0 = z'_0 = 0$, тогда в плоскости $s = s_a$ в области изображения, где поле отсутствует, уравнение (2.31) приводит к следующему неравенству:

$$\frac{(qz)_a'}{q_a z_a} < 0. \quad (2.32)$$

Из этого неравенства следует, что либо пучок, после прохождения поля один или несколько раз пересекает среднюю плоскость, образуя линейные фокусы, либо площадь его сечения уменьшается на выходе из поля. Следовательно, либо фокусировка пучка происходит в обоих направлениях q и z , либо, если в одном из направлений поле имеется эффект дефокусировки, то в другом направлении обязательно появится эффект еще более сильной фокусировки. В частности, из этого следует, что для двумерных и конических полей, не фокусирующих пучки в средней плоскости, обязательно проявляется фокусировка в вертикальном направлении.

Для призмных систем с двумерными полями, а также для систем со средней плоскостью порядок уравнения (2.20) может быть понижен. Действительно для конических призмных полей имеют место следующие соотношения, связывающие производные потенциалов на осевой траектории:

$$f' = f_q \operatorname{ctg} \sigma, \quad (2.33)$$

$$f'_q = f_{qq} \operatorname{ctg} \sigma - \frac{f_q}{\operatorname{ctg} \sigma} \left(\frac{1}{\rho_c} + k \cos \sigma \right), \quad (2.34)$$

$$h'_q = h_q \operatorname{ctg} \sigma - \frac{h}{\rho_c \sin \sigma}. \quad (2.35)$$

Здесь функция $\rho_c(s)$ описывает осевую траекторию в цилиндрических координатах ρ, ψ, z ($z = 0$ – средняя плоскость); $\sigma(s)$ – угол между касательной к осевой траектории и перпендикуляром к лучу $\psi = \psi_c(s)$, в точке их контакта. В этом случае осевая траектория описывается уравнениями

(2.36)

$$\rho'_c = \sin \sigma, \quad \psi'_c = \frac{\cos \sigma}{\rho}, \quad \sigma' = \psi'_c - k.$$

Используя уравнения (2.33)–(2.36), можно показать, что функция

$$u_1 = \rho_c(s) \cos \sigma(s), \quad (2.37)$$

является частным решением однородного уравнения, соответствующего уравнению (2.20). Это решение задает траекторию подобную осевой траектории. Используя уравнение (2.37), для функции

$$u(s) = \left(\frac{q(s)}{u_1(s)} \right)', \quad (2.38)$$

мы получим следующее уравнение первого порядка:

$$u' + \left(\frac{f'}{2f} + \frac{2u'_1}{u_1} \right) u = 0. \quad (2.39)$$

Второе частное решение этого уравнения можно записать в виде:

$$u_2(s) = \frac{\sqrt{f_0}}{u_1^2(s) \sqrt{f(s)}}. \quad (2.40)$$

Найденные функции $u_1(s)$ и $u_2(s)$ позволяют записать линейно независимые решения однородного уравнения, соответствующего уравнению (2.20), удовлетворяющие начальным условиям (2.23):

$$p_1(s) = \frac{u_1(s)}{u_{10}} = \frac{\rho_c(s) \cos \sigma(s)}{\rho_{c0} \cos \sigma_0}, \quad (2.41)$$

$$p_2(s) = \sqrt{f_0} p_1(s) \int_{s_0}^s \frac{ds}{q_1^2(s) \sqrt{f(s)}}, \quad (2.42)$$

причем

$$p'_1(s) = \frac{u'_1(s)}{u_{10}} = \frac{k(s) \rho_c(s) \sin \sigma(s)}{\rho_{c0} \cos \sigma(s)}, \quad (2.43)$$

$$p'_2 = \frac{\sqrt{f_0}}{p_1(s) \sqrt{f(s)}} + p'_1(s) \int_{s_0}^s \frac{ds}{p_1^2(s) \sqrt{f(s)}}. \quad (2.44)$$

Если однородный объемный параллельный пучок входит в призмную систему, то траектории частиц в пучке описываются функциями:

$$q(s) = q_0 p_1(s), \quad z(s) = z_0 z_1(s) \quad (2.45)$$

Таким образом, в области вне поля, где $k = 0$, этот результат согласуется с уравнением (2.43), так как для всех траекторий пучка сохраняется параллельность траекторий в горизонтальном направлении, при этом уравнение (2.32) приводит к следующему неравенству:

$$\frac{z'_a}{z_a} < 0. \quad (2.46)$$

в плоскости $s = s_a$ в области изображения, где поле отсутствует. Отсюда следует, что частицы в конических призмных полях всегда фокусируются к средней плоскости, образуя линейные фокусы [67].

Пусть в предметном пространстве точечный источник, создает пучок заряженных частиц с одинаковым отношением заряда к массе, энергией и углом расходимости в средней плоскости, равен α_s . Если функция $z_2(s)$ обращается в нуль при $s = s_f$, то в этом месте формируется линейное изображение точечного источника. Это изображение представляет собой отрезок прямой, расположенный в средней плоскости перпендикулярно осевой траектории. Длина этого линейного отрезка равна:

$$l = \alpha_s p_2(s_f). \quad (2.47)$$

Общее решение линейного уравнения (2.20) может быть записано в следующем виде:

$$q = q_0 p_1(s) + q'_0 p_2(s) + A(s)\varepsilon + B(s)\gamma, \quad (2.48)$$

где

$$A(s) = \frac{\sqrt{f_0}}{2} \left[p_2 \int_{s_0}^s \frac{p_1}{\sqrt{f}} \left(-\frac{f_q}{f} + \frac{h}{\sqrt{2f}} \right) ds - p_1 \int_{s_0}^s \frac{p_2}{\sqrt{f}} \left(-\frac{f_q}{f} + \frac{h}{\sqrt{2f}} \right) ds \right], \quad (2.49)$$

$$B(s) = \frac{1}{2\sqrt{2f_0}} \left[p_2 \int_{s_0}^s p_1 h ds - p_1 \int_{s_0}^s p_2 h ds \right]. \quad (2.50)$$

В плоскости $s = s_a$ в области изображения, где поле отсутствует, дисперсии по энергии и массе могут быть определены соответственно следующими выражениями: $D_w = A(s_a)$, и $D_m = B(s_a)$. При этом угловые дисперсии равны соответственно $D'_w = A'(s_a)$ и $D'_m = B'(s_a)$. Если плоскость $s = s_a$ совпадает с гауссовой плоскостью, то при $s = s_a = s_g$ выполняются

равенства: $p_{2g} = 0$, $p_{1g} = M$, а для дисперсии по массе D_m можно записать следующее выражение:

$$D_m = B(s_g) = -\frac{M}{2\sqrt{2f_0}} \int_{s_0}^{s_a} p_2 h ds. \quad (2.51)$$

Интеграл, входящий в уравнение (2.51), определяет магнитный поток N_2 , пронизывающий горизонтальное сечение однородного плоского пучка, выходящего из точечного источника ионов с угловой расходимостью $2\alpha_s$. Для всех траекторий такого пучка: $q_0 = 0$, $z_0 = z'_0 = 0$, $\varepsilon = \gamma = 0$, а $-\alpha_s \leq q'_0 \leq \alpha_s$. Таким образом, уравнение (2.51) можно записать в виде:

$$D_m = -\frac{M}{2\sqrt{2f_0}} \frac{N_2}{2\alpha_s}. \quad (2.52)$$

Вводя параметр «качество» или Q – величину статических масс-спектрометров [62, с.27-28]:

$$Q = R_m 2d_s 2\alpha_s, \quad (2.53)$$

где $2d_s$ и $2\alpha_s$ – ширина входной щели источника ионов и радиальный угол расходимости пучка соответственно, а

$$R_m = \frac{D_m}{2d_s M_{max}}, \quad (2.54)$$

это максимальное разрешение масс-анализатора. Подставляя уравнение (2.54) в выражение (2.53) и используя выражение (2.52), получим:

$$Q = -\frac{eN_2}{2cp_0} \quad (2.55)$$

где p_0 – начальный импульс частиц, движущихся по осевой траектории. Таким образом, доказано, что при любой форме осевой траектории пучка и для любого масс-анализатора со средней плоскостью;

Q – величина в линейном приближении определяется потоком магнитного поля N_2 , пронизывающим пучок ионов, выходящий из точечного источника. Этот результат и называют – теоремой о магнитном потоке. Выражение (2.55) дает простой общий критерий повышения качества статического масс-спектрометра. При одинаковом значении Q разрешающая способность и чувствительность масс-спектрометра в основном будут определяться абберациями анализатора.

В ряде случаев наряду с линейной дисперсией массы D_m важно знать угловую дисперсию по массе D'_m . Используя выражение (2.50), для угловой дисперсии по массе можно записать следующее выражение в гауссовой плоскости при $s = s_g$:

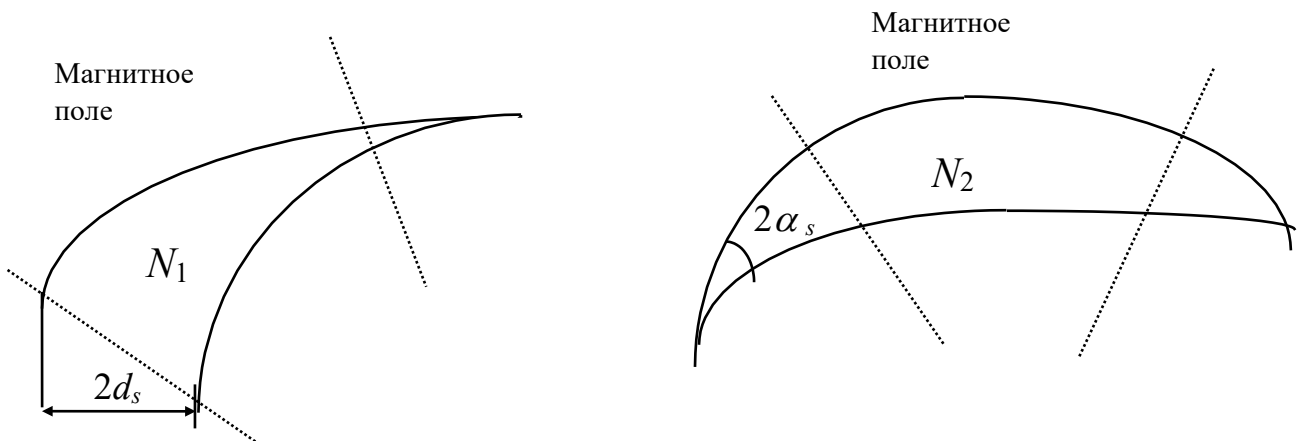
$$D'_m = B'(s_g) = \frac{e}{2cp_0} \left(\Gamma \frac{N_1}{2d_s} + \frac{N_2}{2\alpha_s F_1} \right). \quad (2.56)$$

Здесь $F_1 = -1/p'_{1g}$ – заднее фокусное расстояние в горизонтальном направлении; N_1 – поток напряженности магнитного поля через горизонтальное сечение однородного плоского параллельного пучка в предметной области, где его ширина равна $2d_s$. Для всех траекторий такого пучка; $q'_0 = 0$, $z_0 = z'_0 = 0$, $\varepsilon = \gamma = 0$, а $-d_s \leq q_0 \leq d_s$.

Если ионно-оптическая система является телескопической в горизонтальном направлении ($F_1 = \infty$), то угловая дисперсия определяется только слагаемым, содержащим поток N_1 . Заметим, что для призматических систем с двумерными или коническими полями из уравнения (2.56) получаем:

$$D'_m = \frac{e}{2c p_0} \Gamma \frac{N_1}{2d_s}, \quad (2.57)$$

уравнение (2.57) справедливо при любой ширине $2d_s$ параллельного пучка, выходящего из источника. На рисунке 2.2 показано различие в определении магнитных потоков N_1 и N_2 .



N_1 – пучок на входе, N_2 – расходящийся пучок

Рисунок 2.2– Магнитные потоки, пронизывающие параллельный

Примечание – Составлено по источнику [49, р. 436]

Общие соотношения, полученные в этом разделе и характеризующие фокусирующие и диспергирующие свойства КОС со средней плоскостью, существенно облегчают поиск эффективных схем энергетических и масс-анализаторов. Так, теорема о потоке дает простой эвристический принцип увеличения параметра «качество» статических масс-анализаторов – необходимо как можно сильнее расширять ионный пучок перед входом в магнитное поле.

2.3 Уравнения Ньютона в безразмерных переменных

Приведенные выше уравнения, определяющие отклонение траекторий частиц ионного пучка в криволинейной системе координат, связанной с выбранной осевой траекторией – уравнения (2.10) и (2.11), а для систем со средней плоскостью – уравнения (2.17) и (2.18) дают возможность с высокой точностью рассчитывать динамику широких пучков в корпускулярно-оптических системах. Эти уравнения позволяют описывать пучки, рассматривая их сечения плоскостями $s = const$, перпендикулярными осевой траектории, и не ограничиваясь при этом требованием малости отклонений частиц пучка от осевой траектории, как это обычно предполагается в корпускулярной оптике.

Условием, ограничивающим применение этих уравнений, является требование однозначности определения координат частиц, которое не выполняется в том случае, когда значения криволинейных координат превосходят радиусы кривизны и кручения осевой траектории. Часто такая ситуация возникает при рассмотрении зеркальных систем в точках поворота траекторий. Особые неприятности возникают в случае систем с прямолинейной осью, т.к. для них точки поворота являются точками останова. Скорость частиц в этих точках обращается в нуль и при выбранной нормировке потенциала он также обращается в нуль, что приводит к возникновению особенностей в уравнениях траектории.

Поэтому для нахождения траекторий частиц в зеркальных системах удобнее интегрировать непосредственно уравнения Ньютона по времени, так как при этом никаких особенностей не возникает. Применять уравнения Ньютона особенно целесообразно при расчете систем рефлекторного типа, которые последнее время используются при создании времяпролетных масс-спектрометров. Кроме того, при интегрировании уравнений Ньютона по времени проще определять времяпролетные характеристики рефлекторов, а также моделировать поведение пучков методом Монте-Карло.

С помощью выражений (2.1)-(2.4) описанных в параграфе 2.1, уравнения Ньютона в безразмерных переменных для чисто электростатических можно записать в виде:

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= \Phi_x + \dot{y}\Omega_z - \dot{z}\Omega_y, \\ \ddot{y} &= \Phi_y + \dot{z}\Omega_x - \dot{x}\Omega_z, \\ \ddot{z} &= \Phi_z + \dot{x}\Omega_y - \dot{y}\Omega_x.\end{aligned}\tag{2.58}$$

Здесь $\Phi = \Phi(x, y, z)$ – безразмерный потенциал, измеряемый в единицах $V_0 = |\varphi_0|$, индексы x и y означают частные производные безразмерного потенциала Φ по соответствующим координатам, а точки – производные по безразмерному времени $\tau = t/\tau_0$, где t – обычное время, а

$$\tau_0 = l_0 \sqrt{\frac{m_c(1 + \gamma)}{|e|V_0(1 + \varepsilon)}}, \quad (2.59)$$

В последней формуле l_0 – выбранная единица длины. Начальные условия для уравнений (2.58) задаются на входе в систему, где потенциал постоянный и по модулю равен $V_0 = |\varphi_0|$, причем безразмерная начальная скорость частиц пучка определяется выражением:

$$v_0 = \sqrt{2 \frac{1 + \varepsilon}{1 + \gamma}}. \quad (2.60)$$

Из выражения (2.59) следует, что при одинаковых начальных условиях частицы, отличающиеся только по массе, движутся по одинаковым траекториям, и отличаются только временем движения, которое для более тяжелых частиц увеличивается в $\sqrt{1 + \gamma}$ раз. Для частиц с одинаковой массой разницу во времени пролета, обусловленную разбросом по энергии ε , можно скомпенсировать только в системах рефлекторного типа. В таких системах частицы с большей энергией проходят дальше в тормозящее поле, чем частицы с меньшей энергией, за счет чего можно осуществить времяпролетную фокусировку.

Выводы по второму разделу

1. Исследование параксиальных уравнений, описывающих траектории заряженных частиц в линейном приближении и разработка абберационной теории второго порядка и более высоких порядков является основным методом анализа поведения пучков заряженных частиц в КОС. Этот способ является достаточно трудоемким и требует выполнения огромного объема теоретических вычислений. Данный метод не позволяет исследовать широкие пучки заряженных частиц, так как при этом асимптотические ряды абберационной теории могут расходиться даже при учете аббераций высокого порядка.

2. Если поведение пучков исследовать, анализируя траектории частиц, полученные путем решения точных дифференциальных уравнений траектории для заряженных частиц в электрических и магнитных полях исследуемых КОС, то трудностей, возникающих при расчете с помощью традиционного метода, не возникает.

2. Если криволинейная система координат не является ортогональной и связанное с ней кручение осевой траектории отличается от нуля, то это приводит к трудностям при вычислении градиентов потенциалов в точках, удаленных от

осевой траектории. Ортогональной является лишь тройка орт на самой осевой траектории. В данном разделе показано, что с помощью соотношений, связывающих координаты точек в базовой декартовой системе с их координатами в криволинейной системе, градиенты потенциалов могут быть вычислены в нужных точках в декартовых координатах, а затем спроектированы на ортогональные орты, связанные с осевой траекторией. Таким образом, трудности, возникающие при вычислении градиентов потенциалов, легко разрешаются.

3 АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ДВУМЕРНЫХ ПОЛЕЙ И ПОЛЕЙ, СВОДИМЫХ К ДВУМЕРНЫМ

Для расчета потенциалов поля обычно целесообразно использовать системы координат, соответствующие симметрии поля: декартовы координаты в случае двумерных полей, цилиндрические координаты – в случае трансаксиальных и осесимметричных полей, сферические – в случае, так называемых, конических полей и др.

В случае двумерных полей скалярные потенциалы φ и ω не изменяются вдоль некоторого направления. Если одну из осей декартовой системы координат направить в этом направлении, то потенциалы будут зависеть только от двух других координат. Эквипотенциальные поверхности двумерных полей являются цилиндрическими поверхностями, поэтому такие поля часто называют цилиндрическими [1 с. 233-254]. Потенциалы, описывающие такие поля, подчиняются двумерному уравнению Лапласа и являются гармоничными функциями декартовых координат.

В пространстве, свободном от зарядов и токов, скалярные потенциалы φ и ω удовлетворяют уравнению Лапласа, и для их расчета можно использовать практически идентичные методы. Поэтому, чтобы избежать повторений, мы будем здесь говорить в основном о скалярном электростатическом потенциале φ , имея в виду также магнитный скалярный потенциал ω , если это не указано особо.

В корпускулярной оптике также рассматриваются поля, потенциалы которых в цилиндрических координатах ρ , ψ , z зависят только от двух переменных ρ , ψ . Потенциалы таких полей путем замены:

$$\eta = \ln \rho \quad (3.1)$$

превращаются в гармонические функции переменных ψ , η , удовлетворяющие двумерному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \psi^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} = 0 \quad (3.2)$$

Поля, эквипотенциальные поверхности которых представляют собой конические поверхности с общей вершиной, расположенной в средней плоскости, называются коническими [67, стр.1987]. Они превращаются в двумерные поля в предельном случае, когда конические поверхности вырождаются в цилиндрические. В сферической системе координат r, ϑ, ψ с полюсом θ в вершине конических поверхностей, определяющих поле, скалярные потенциалы φ и ω являются функциями только угловых переменных ϑ и ψ . Корпускулярно-оптические системы, в которых реализованы такие поля, называются коническими отклоняющими системами. Потенциал $\varphi(\vartheta, \psi)$ в сферических координатах является решением уравнения Лапласа:

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \varphi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \psi^2} = 0 \quad (3.3)$$

С помощью замены переменной:

$$\xi = \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} \quad (3.4)$$

это уравнение сводится к двумерному уравнения Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \psi^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} = 0 \quad (3.5)$$

Таким образом, функция $\varphi(\psi, \xi)$ является гармонической функцией переменных ψ и ξ .

3.1 Расчет конических электрических и магнитных полей

Рассмотрим расчет потенциалов поля конических отклоняющих систем в приближении, когда зазоры между их электродами и магнитными элементами считаются бесконечно узкими. В работе [68] получены простые выражения, описывающие поля клиновидных и конусовидных призматических систем с пренебрежимо малыми зазорами между электродами. Отмечая координаты клиновидных систем индексом «Λ», найдем, что связь между сферическими координатами «клина» ϑ_Λ , ψ_Λ и переменными «конуса» ψ , ξ задается преобразованием поворота:

$$\tau_\Lambda = i \ln \operatorname{tg} \frac{\tau}{2}. \quad (3.6)$$

Здесь $\tau_{\Lambda 1} = \psi_\Lambda + i\xi_\Lambda$, $\tau = \psi + i\xi$, а ξ_Λ связано с ϑ_Λ тем же соотношением (3.4)

$$\xi_\Lambda = \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta_\Lambda}{2}. \quad (3.7)$$

Граничные условия Дирихле для поля конусовидных призм задаются на поверхностях двух прямых круговых конусов, которые расположены симметрично относительно средней плоскости $\vartheta = \pi/2$, и имеют общую вершину и ось вращения. Область, заключенная между этими коническими поверхностями, при переходе в комплексную $\tau = \psi + i\xi$ плоскость отображается на симметричную относительно оси ψ полосу, для которой $-\xi_k \leq \xi \leq \xi_k$. Здесь, согласно (3.4), ξ_k связано с углом χ между обращенными к средней плоскости образующими конусов соотношением

$$\xi_k = \ln \operatorname{tg} \frac{\pi + \chi}{4} \quad (3.8)$$

На рисунке 3.1 показаны простейшие двухэлектродные электростатические конусовидная и клиновидная отклоняющие системы. Границы электродов в случае конусовидной призмы (рисунок 3.1а) задаются поверхностями прямых круговых конусов $\vartheta = \pi/2 \pm \chi/2$, разделенных плоскостью $\psi = 0, \pi$. На рисунке 3.1в приведена соответствующая граничная задача, возникающая при переходе к переменным ψ, ξ . В случае двухэлектродной клиновидной призмы (рисунок 3.1б) границы электродов совпадают с полуплоскостями $\psi_{\Delta} = \pm \chi_{\Delta}$, разделенными плоскостью $\vartheta_{\Delta} = \pi/2$. На рисунке 3.1г приведена соответствующая граничная задача в переменных $\psi_{\Delta}, \xi_{\Delta}$. На рисунке 3.1 обозначены также безразмерные потенциалы электродов V_1, V_2 и параметр ξ_k .

Найдем распределение потенциала $F_1(\psi, \xi | V_1, V_2)$, удовлетворяющего следующим граничным условиям:

$$F_1(\psi, \xi_k | V_1, V_2) = \begin{cases} V_1 & \text{при } \psi < 0 \\ V_2 & \text{при } \psi > 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

Здесь для удобства дальнейших записей потенциалы электродов V_1 и V_2 введены под знак аргумента.

Воспользовавшись конформным преобразованием

$$\omega = i \exp\left(\frac{\pi}{2\xi_k} \tau\right), \quad (3.10)$$

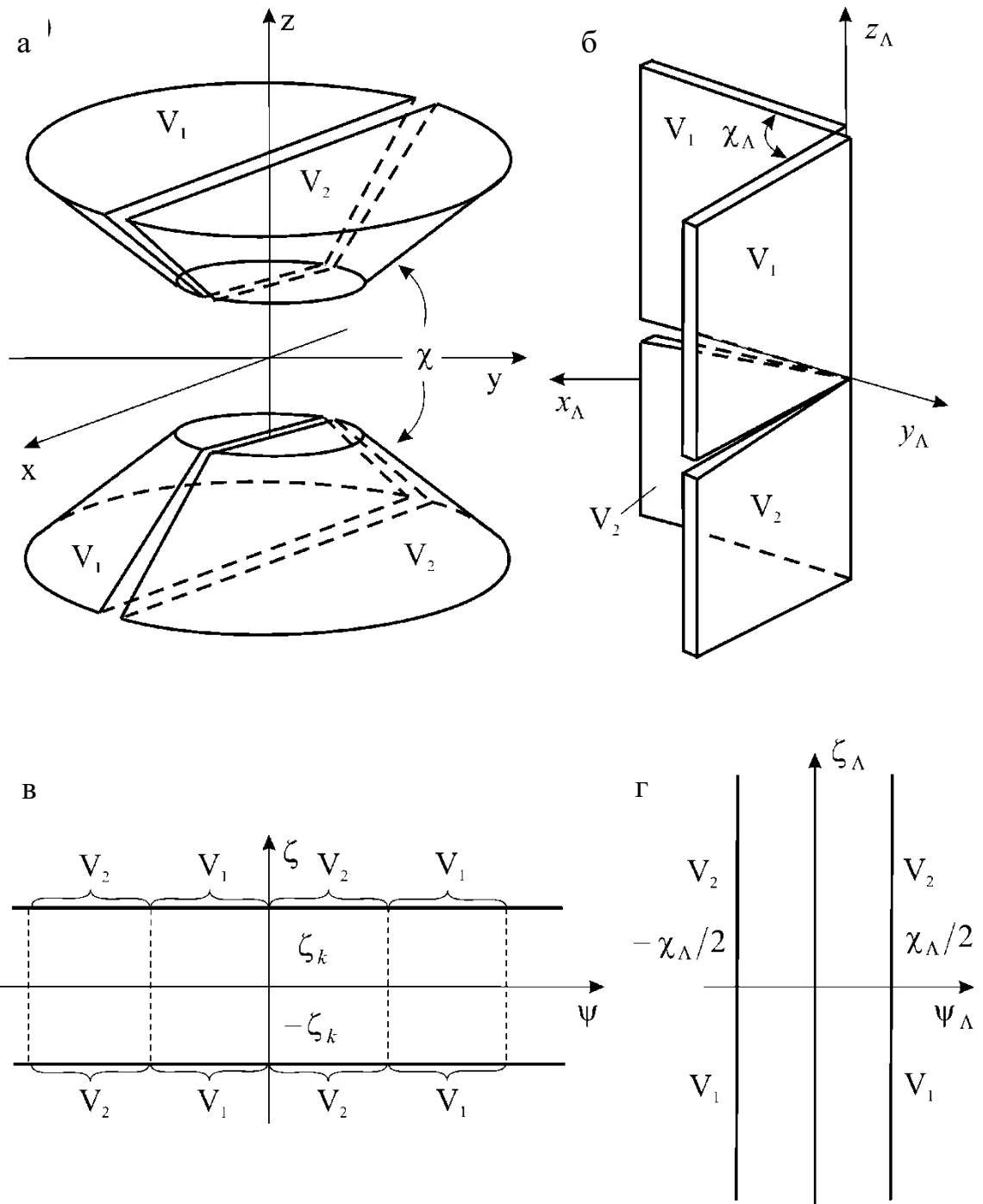
отобразим полосу $-\xi_k \leq \xi \leq \xi_k$ на верхнюю полуплоскость плоскости w , для которой, используя интеграл Пуассона, получим следующее распределение потенциала:

$$F_1(\psi, \xi | V_1, V_2) = V_2 + \frac{V_1 - V_2}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{1+u}{v} + \operatorname{arctg} \frac{1-u}{v} \right), \quad (3.11)$$

где, согласно (3.10),

$$\begin{aligned} u &\equiv u(\psi, \xi) = - \exp\left(\frac{\pi}{2\xi_k} \psi\right) \sin\left(\frac{\pi}{2\xi_k} \xi\right), \\ v &\equiv v(\psi, \xi) = \exp\left(\frac{\pi}{2\xi_k} \psi\right) \cos\left(\frac{\pi}{2\xi_k} \xi\right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Воспользовавшись принципом суперпозиции, с помощью выражения (3.11) легко записать точное решение двухэлектродной задачи с учетом периодичности граничных условий (см. рисунок 3.1в):



а – двухэлектродная конусовидная призма; б – соответствующая граничная задача в $\tau = \psi + i\xi$ плоскости; в – двухэлектродная клиновидная призма; г – соответствующая граничная задача в $\tau_{\Lambda 1} = \psi_{\Lambda} + i\xi_{\Lambda}$ плоскости

Рисунок 3.1 – Схематический рисунок двухэлектродных конусовидной и клиновидной призм

Примечание – Составлено по источнику [68, с. 148]

$$\begin{aligned}
\Phi(\psi, \xi) = & -V_1 - V_2 + F_1(\psi, \xi|V_1, V_2) + F_1(\psi - \pi, \xi|V_2, V_1) \\
& + F_1(\psi + \pi, \xi|V_1, V_2) + \sum_{n=0} \{F_1(\psi + (2n + 3)\pi, \xi|V_2, V_1) \\
& + F_1(\psi - (2n + 3)\pi, \xi|V_2, V_1) \\
& + F_1(\psi + 2(n + 1)\pi, \xi|V_1, V_2) \\
& + F_1(\psi - 2(n + 1)\pi, \xi|V_1, V_2) - 2(V_1 + V_2)\}.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Однако при малых χ , когда $\xi_k \approx \chi/2$ согласно (3.8), ряд в (3.13) приводит лишь к малым поправкам к основным членам в области $-\pi < \psi < \pi$. Действительно, в средней плоскости ($\xi = 0$) члены ряда дают слагаемые, не превосходящие величины

$$2 \frac{|V_1 - V_2|}{\pi} \exp\left(-\frac{\chi^2}{\pi}\right). \tag{3.14}$$

Даже при $\chi = 20^\circ$ экспонента в (3.14) меньше 10^{-12} , а при значениях $\chi = 5^\circ$ практически точно можно считать, что потенциал двухэлектродной конусовидной призмы определяется лишь первыми пятью слагаемыми в выражении (3.13). Отметим, что в области $-\pi/2 \leq \psi \leq \pi/2$ с очень хорошей точностью можно положить:

$$\Phi(\psi, \xi) = F_1(\psi, \xi|V_1, V_2). \tag{3.15}$$

Используя принцип суперпозиции, в том же приближении легко определить и потенциал поля более сложных конусовидных призмных систем. Так, для четырехэлектродной призмы (рисунок 3.2) с симметричным относительно плоскости xz расположением электродов 1, 2, 3 с потенциалами V_1, V_2, V_0 соответственно получим следующее распределение потенциала:

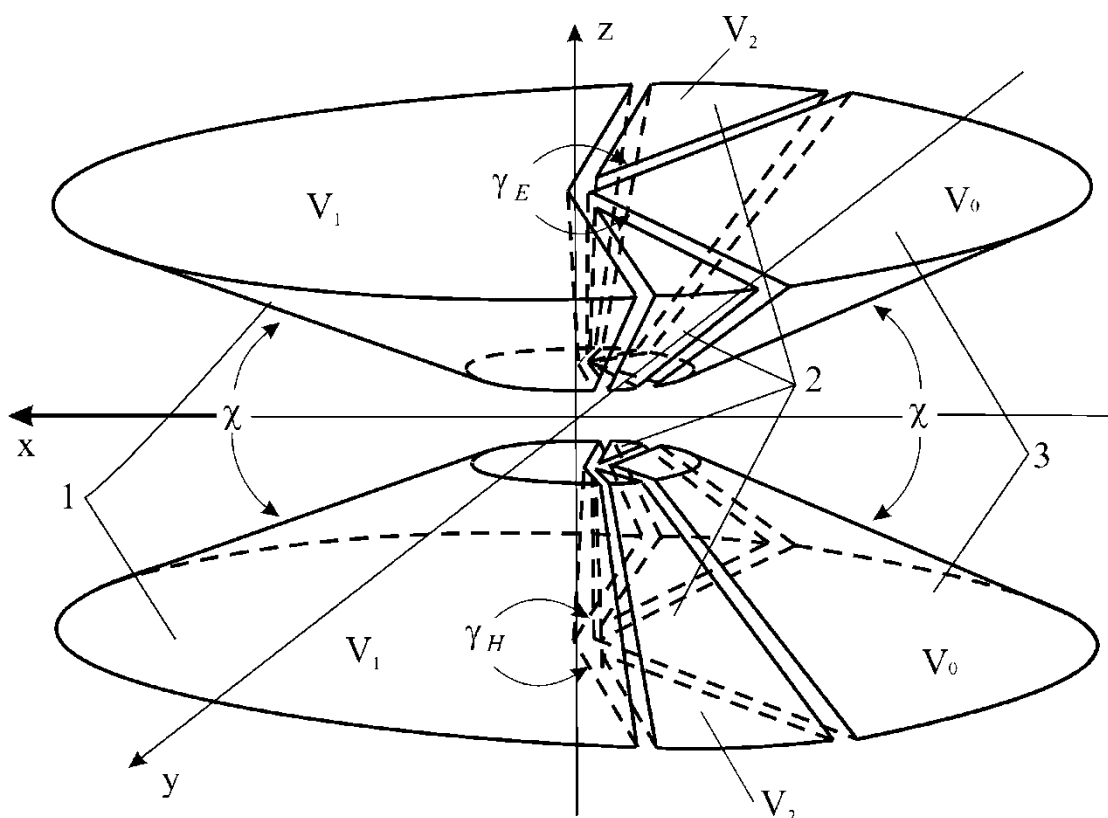
$$\begin{aligned}
\Phi(\psi, \xi) = & -2V_2 - V_1 + F_1\left(\psi + \frac{\gamma_E}{2}, \xi|V_0, V_2\right) + F_1\left(\psi + \frac{\gamma_H}{2}, \xi|V_2, V_1\right) + \\
& + F_1\left(\psi - \frac{\gamma_H}{2}, \xi|V_1, V_2\right) + F_1\left(\psi - \frac{\gamma_E}{2}, \xi|V_2, V_0\right).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Здесь γ_E, γ_H – геометрические параметры, задающие положение границ электродов, определяемых полуплоскостями $\psi = \pm \gamma_E/2, \psi = \pm \gamma_H/2$.

По существу, полученные выражения для потенциалов поля конусовидных электростатических призм описывают и поля некоторых соответствующих им клиновидных аналогов, причем в этом случае формулы справедливы при любых значениях двугранного угла χ_Δ . Так, формула (3.11) дает точный потенциал двухэлектродной клиновидной призмы (рисунок 3.1б, 3.1г):

$$\Phi_\Delta(\psi_\Delta, \xi_\Delta) = F_1(-\xi_\Delta, \psi_\Delta|V_2, V_1), \tag{3.17}$$

Однако при этом в (3.12) нужно положить $\xi_k = \chi_\Lambda/2$ и учесть изменение порядка следования аргументов в (3.17).



1 – полюсные наконечники; 2, 3 – магнитные экраны-электроды призмы; V_1, V_2, V_0 – потенциалы; γ_E, γ_H – геометрические параметры, задающие положение границ электродов; χ – угол между обращенными к средней плоскости образующими конусов

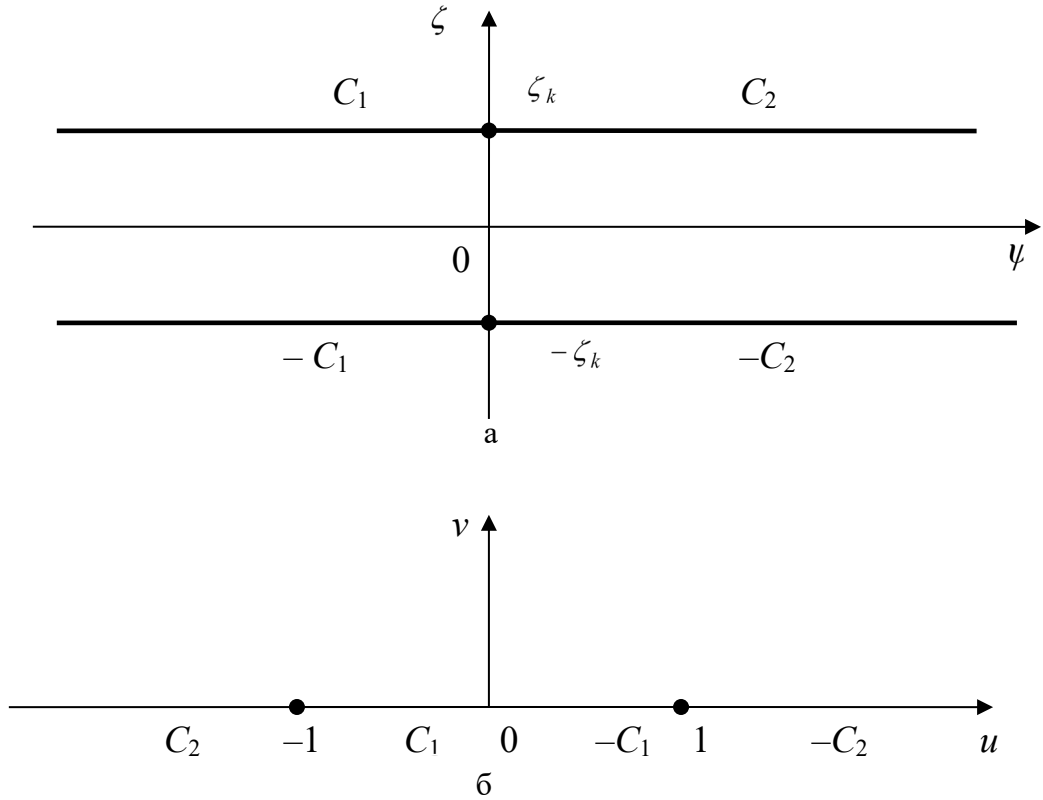
Рисунок 3.2 – Четырехэлектродная конусовидная призма

Примечание – Составлено по источнику [68, с. 150]

Используя соотношения (3.6), можно перейти в выражениях для потенциалов к переменным «конуса» ψ, ξ :

$$\psi_\Lambda = -\operatorname{arctg} \frac{\sin h \xi}{\cos \psi}, \quad \xi_\Lambda = \frac{1}{2} \ln \frac{\cos h \xi + \sin \psi}{\cos h \xi - \sin \psi}. \quad (3.18)$$

Развитый подход можно использовать и для нахождения магнитоэстатического потенциала конусовидных призм. В этом случае роль базовой функции $F_1(\psi, \xi|V_1, V_2)$ будет выполнять распределение $\Omega_1(\psi, \xi|C_1, C_2)$, удовлетворяющее в τ -плоскости граничным условиям, представленным на рис. 3.3а. Конформное преобразование (3.10) позволяет свести эту граничную задачу к известной граничной задаче для верхней полуплоскости w -плоскости (рисунок 3.3б).



а – в τ – плоскости; б – в w -плоскости

Рисунок 3.3 – Граничная задача для магнитного потенциала

Примечание – Составлено по источнику [68, с. 151]

Применяя интеграл Пуассона для верхней полуплоскости, получим:

$$\Omega_1(\psi, \xi | C_1, C_2) = \frac{C_1 - C_2}{\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{1 + u(\psi, \xi)}{v(\psi, \xi)} - \operatorname{arctg} \frac{1 - u(\psi, \xi)}{v(\psi, \xi)} \right] - \frac{2C_1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{u(\psi, \xi)}{v(\psi, \xi)}. \quad (3.19)$$

Здесь $u(\psi, \xi)$ и $v(\psi, \xi)$ определяются формулами (3.12).

Используя выражение (3.19), запишем распределение магнитостатического потенциала $\Omega(\psi, \xi)$ в конусовидной призме (рисунок 3.3), у которой электроды 1 одновременно являются и полюсами магнита с магнитостатическим потенциалом $\pm C_2$ на поверхностях $\vartheta = \pi/2 \pm \chi/2$ соответственно, а электроды 2, 3 – магнитными экранами с бесконечно большой магнитной проницаемостью и потенциалом $C_1 = 0$:

$$\Omega(\psi, \zeta) = \Omega_1 \left(\psi + \frac{\gamma_H}{2}, \xi \left| -\frac{C_2}{2}, \frac{C_2}{2} \right. \right) + \Omega_1 \left(\psi - \frac{\gamma_H}{2}, \xi \left| \frac{C_2}{2}, -\frac{C_2}{2} \right. \right). \quad (3.20)$$

Изложенный в работе метод расчета потенциалов электрических и магнитных полей конических отклоняющих систем отличается универсальностью и простотой. Получаемые с его помощью выражения для потенциалов не содержат громоздких сумм и рядов, что особенно существенно при проведении численных расчетов. Записав выражения для потенциалов в переменных ψ, ξ , можно найти величины:

$$f(\psi) = \Phi(\psi, 0), \quad h(\psi) = \left. \frac{\partial \Omega}{\partial \xi} \right|_{\xi=0}, \quad (3.21)$$

определяющие распределение электрического и магнитного полей в средней плоскости призмы. Полученные в этом разделе аналитические выражения для потенциалов можно использовать для расчета диспергирующих, фокусирующих и аберационных свойств произвольных конических отклоняющих систем, в частности, для описания конусовидной призмы. На рисунке 3.4 дано рассчитанное распределение по тенциала и магнитного поля в конусовидной призме при следующих значениях потенциалов на электродах $V_0 = 1, V_1 = 2, V_2 = 3, C_1 = 0, C_2 = 0.1, \chi = 5^\circ, \gamma_H = 208^\circ, \gamma_E = 295^\circ$.

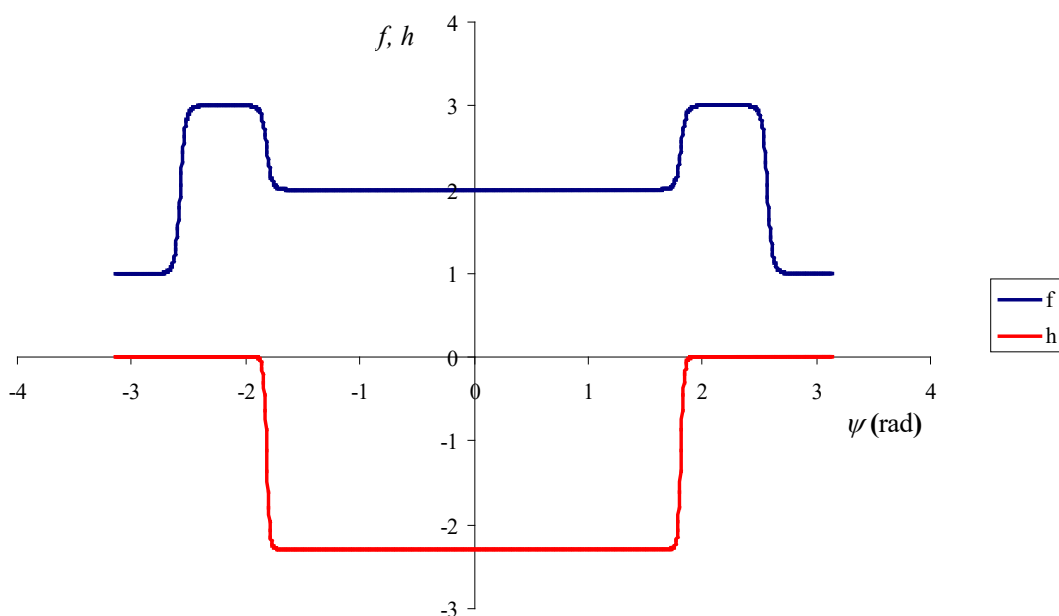


Рисунок 3.4 – Распределение электрического потенциала $f(\psi)$ и магнитного поля $h(\psi)$ в средней плоскости конусовидной призмы

Примечание – Составлено по источнику [68, p. 149]

3.2 Расчет электростатических полей с осевой и трансаксиальной симметрией

Одна из основных задач, решаемых при расчете корпускулярно-оптических систем (КОС), связана с вычислением реализуемых в них

электрических и магнитных полей. При этом, как правило, приходится решать задачу Дирихле для скалярного потенциала, удовлетворяющего уравнению Лапласа. Расчет КОС значительно упрощается, если поле удастся описать с помощью замкнутых аналитических выражений для потенциала. В случае двумерных полей декартову систему координат (x, y, z) можно выбрать таким образом, чтобы скалярный потенциал φ зависел только от двух координат, например x и y . Потенциал, описывающий такие поля, удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0. \quad (3.22)$$

Решениями уравнения (3.22) являются гармонические функции декартовых координат x и y , поэтому в этом случае для расчета потенциала можно использовать мощный аппарат теории функций комплексной переменной (ТФКП).

Обычно электростатические поля трансаксиальных и осесимметричных корпускулярно-оптических систем описываются в цилиндрической системе координат ρ, ψ, z . Уравнение Лапласа для потенциала φ в цилиндрических координатах имеет вид:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \psi^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0. \quad (3.23)$$

В частном случае, когда потенциал φ зависит только от переменных ρ, ψ , можно ввести безразмерную переменную

$$\eta = \ln \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (3.24)$$

где ρ_0 – некоторая характерная длина (обычно радиус цилиндрической поверхности). В переменных η, ψ потенциал $\varphi(\eta, \psi)$ удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \psi^2} = 0. \quad (3.25)$$

Потенциал $\varphi(\eta, \psi)$ является гармонической функцией переменных η, ψ и для его нахождения может быть использован весь арсенал теории функций комплексной переменной (ТФКП).

В случае трансаксиальных и осесимметричных систем потенциал электростатического поля φ зависит только от переменных ρ, z и удовлетворяет уравнению:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0. \quad (3.26)$$

Наиболее общим методом решения граничной задачи Дирихле для уравнения (3.26) является метод разделения переменных [69, 70]. При этом потенциалы представляются в виде рядов функций Бесселя [71]. Однако эти решения из-за плохой сходимости рядов неудобно использовать для численных расчетов. В данной работе найдены простые приближенные выражения для потенциалов цилиндрической осесимметричной линзы и трехэлектродной трансаксиальной линзы, которые с хорошей точностью описывают поля этих систем.

Общее решение уравнения (3.26) может быть записано в виде следующего интегрального выражения:

$$\varphi(\rho, z) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\lambda) e^{i\lambda z} I_0(\lambda \rho) d\lambda + const. \quad (3.27)$$

Вид функции $B(\lambda)$ определяется граничными условиями, которым должен удовлетворять потенциал $\varphi(\rho, z)$. Модифицированная функция Бесселя нулевого порядка, входящая в (3.27) может быть также представлена интегралом:

$$I_0(\lambda \rho) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{-\lambda \rho \cos \beta} d\beta. \quad (3.28)$$

В результате пространственное распределение потенциала произвольной осесимметричной системы однозначно определяется распределением потенциала на аксиальной оси $U(z) = \varphi(0, z)$ с помощью общей формулы Уиттекера [72]:

$$\varphi(\rho, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} U(z + i\rho \cos \beta) d\beta. \quad (3.29)$$

Эту формулу (3.29), а также приведенную ниже формулу (3.30), можно найти в работах [69 стр.215-225, 73, 74] где обсуждаются различные аналитические методы нахождения потенциала осесимметричных систем. Если известно распределение потенциала на оси $U(z)$, то можно также использовать следующее разложение потенциала, удовлетворяющее уравнению (3.26):

$$\varphi(\rho, z) = U(z) - U'' \frac{\rho^2}{4} + U^{(IV)} \frac{\rho^4}{64} - U^{(VI)} \frac{\rho^6}{2304} + \dots \quad (3.30)$$

Если в уравнении (3.26) перейти к безразмерным переменным $\eta, \zeta = z/\rho_0$ используя замену (3.24), то получим следующее уравнение для потенциала $\phi(\eta, \zeta)$:

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \zeta^2} = 0. \quad (3.31)$$

Отметим, что в области $\rho \cong \rho_0$ переменная $\eta \cong 0$ и потенциал $\varphi(\eta, \zeta)$ удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа. Будем искать потенциал $\varphi(\eta, \zeta)$ в виде суммы двух слагаемых

$$\varphi(\eta, \zeta) = \varphi^{(0)}(\eta, \zeta) + \varphi^{(1)}(\eta, \zeta). \quad (3.32)$$

Здесь $\varphi^{(0)}(\eta, \zeta)$ – гармонический потенциал, удовлетворяющий двумерному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \varphi^{(0)}}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi^{(0)}}{\partial \zeta^2} = 0 \quad (3.33)$$

и заданным граничным условиям Дирихле. С помощью методов ТФКП слагаемое $\varphi^{(0)}(\eta, \zeta)$ может быть найдено в замкнутом виде. Тогда второе слагаемое $\varphi^{(1)}(\eta, \zeta)$ удовлетворяет нулевым граничным условиям Дирихле и является решением следующего неоднородного уравнения:

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 \varphi^{(1)}}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi^{(1)}}{\partial \zeta^2} = (1 - e^{-2\eta}) \frac{\partial^2 \varphi^{(0)}}{\partial \eta^2}. \quad (3.34)$$

В большинстве случаев слагаемое $\varphi^{(0)}(\eta, \zeta)$ уже является достаточно хорошим приближением для расчета потенциала. Это связано с тем фактом, что производная

$$\frac{\partial^2 \varphi^{(0)}}{\partial \eta^2} = - \frac{\partial^2 \varphi^{(0)}}{\partial \zeta^2}$$

в правой части (3.29) принимает большие значения в области, где $\eta \cong 0$. В этой области $\varphi^{(1)}(\eta, \zeta)$ приближенно удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \varphi^{(1)}}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi^{(1)}}{\partial \zeta^2} = 0, \quad (3.35)$$

которое при нулевых граничных условиях Дирихле на замкнутой границе имеет тождественно нулевое решение.

Применим описанный метод к расчету поля конкретных систем: иммерсионной трансаксиальной линзы и многоэлектродной осесимметричной линзы.

Простейшая иммерсионная трансаксиальная линза схематически изображена на рисунке 3.5, где показана также декартова система координат x, y, z . Трансаксиальная линза представляет собой две параллельные пластины, разрезанные прямым круговым цилиндром радиуса R , ось которого совпадает с осью z [75,76].

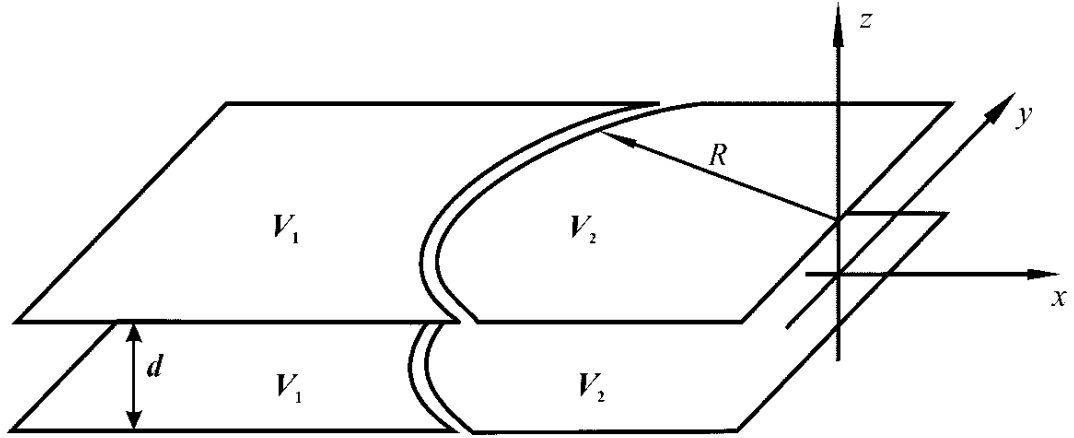


Рисунок 3.5 – Схематическое изображение трансаксиальной линзы

Примечание – Составлено по источнику [52, с. 78]

Начало декартовой системы координат находится в средней плоскости линзы $z = 0$, V_1 и V_2 – потенциалы электродов, d – расстояние между пластинами. Зазор между электродами считается бесконечно узким. Вдали от краев пластин электростатический потенциал φ зависит только от переменных $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ и z . Вводя безразмерные переменные η и ζ :

$$\eta = \ln \frac{\rho}{R}, \quad \zeta = \frac{z}{R}, \quad (3.36)$$

получим уравнение для потенциала (3.27). Решение этого уравнения, удовлетворяющее граничным условиям для трансаксиальной линзы, представим в виде:

$$\varphi(\eta, \zeta) = \frac{V_1 + V_2}{2} + F(\eta, \zeta), \quad (3.33)$$

где функция $F(\eta, \zeta)$ удовлетворяет следующим граничным условиям в полосе $\zeta = \pm \zeta_k = \pm \frac{d}{2R}$:

$$F(\eta, \pm \zeta_k) = \begin{cases} V & \text{для } \eta > 0, \\ -V & \text{для } \eta < 0. \end{cases} \quad (3.34)$$

В последней формуле (3.34), $V = \frac{V_1 - V_2}{2}$.

Решение уравнения (3.27) для функции $F(\eta, \zeta)$ представим в виде:

$$F(\eta, \zeta) = F^{(0)}(\eta, \zeta) + F^{(1)}(\eta, \zeta). \quad (3.35)$$

Здесь $F^{(0)}(\eta, \zeta)$ гармоническая функция, удовлетворяющая граничным условиям (3.34):

$$F^{(0)}(\eta, \zeta) = -V + \frac{2V}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{1-u}{v} + \operatorname{arctg} \frac{1+u}{v} \right), \quad (3.36)$$

где

$$\begin{cases} u = \exp\left(-\frac{\pi\eta}{2\zeta_0}\right) \sin \frac{\pi\zeta}{2\zeta_k} \\ v = \exp\left(-\frac{\pi\eta}{2\zeta_0}\right) \cos \frac{\pi\zeta}{2\zeta_k} \end{cases} \quad (3.37)$$

а слагаемое $F^{(1)}(\eta, \zeta)$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 F^{(1)}}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 F^{(1)}}{\partial \zeta^2} = (1 - e^{-2\eta}) \frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial \eta^2} \quad (3.38)$$

и нулевым граничным условиям в полосе $\xi = \pm \zeta_k$.

Уравнение (3.38) будем решать численно, перейдя от уравнения в частных производных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $F_j^{(1)}(\zeta) \equiv F^{(1)}(\eta_j, \zeta)$:

$$\frac{d^2 F_j^{(1)}}{d\zeta^2} = (1 - e^{-2\eta_j}) \left(\frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial \eta^2} \right)_j - e^{-2\eta_j} \left(\frac{\partial^2 F^{(1)}}{\partial \eta^2} \right)_j. \quad (3.39)$$

Здесь $j = -n, -n+1, \dots, n-1, n$, переменная η принимает дискретные значения $\eta_j = jh$ индекс "j" у частных производных означает, что эти производные берутся при значении $\eta = \eta_j$, причем

$$\left(\frac{\partial^2 F^{(1)}}{\partial \eta^2} \right)_j = \frac{F_{j+2}^{(1)} - 2F_j^{(1)} + F_{j-2}^{(1)}}{4h^2}, \quad (3.40)$$

где h – шаг дискретизации по η . Приведем также выражение для частной производной:

$$\frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial \eta^2} = \frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial u^2} \left(\frac{\partial u}{\partial \eta} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial u \partial v} \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial v^2} \left(\frac{\partial v}{\partial \eta} \right)^2. \quad (3.41)$$

Используя формулы (3.36), (3.37), найдем производные, входящие в (3.41):

$$\frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial u^2} = -\frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial v^2} = -\frac{4V}{\pi} v \left\{ \frac{1-u}{[v^2 + (1-u)^2]^2} + \frac{1+u}{[v^2 + (1+u)^2]^2} \right\}, \quad (3.42)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \eta} = -\frac{\pi}{2\zeta_k} \exp\left(-\frac{\pi\eta}{2\zeta_k}\right) \sin \frac{\pi\zeta}{2\zeta_k} \\ \frac{\partial v}{\partial \eta} = -\frac{\pi}{2\zeta_k} \exp\left(-\frac{\pi\eta}{2\zeta_k}\right) \cos \frac{\pi\zeta}{2\zeta_k} \end{cases} \quad (3.43)$$

Систему уравнения (3.39) можно проинтегрировать численно, задавая нулевые начальные условия на прямой $\zeta = -\zeta_k$:

$$F_j^{(1)}(-\zeta_k) = 0, \quad \left(\frac{dF_j^{(1)}}{d\zeta}\right)_{\zeta=-\zeta_k} = 0. \quad (3.44)$$

Отметим, что $F_0^{(1)}(\zeta) \equiv 0$.

Цилиндрическая осесимметричная линза или зеркало представляет собой круговой проводящий цилиндр, разрезанный плоскостями, перпендикулярными оси цилиндра (ось z) в точках z_k [77,78]. Эти плоскости делят цилиндр на электроды с потенциалами V_k . Здесь $k = 1, 2, 3, \dots, N-1$. Такая линза схематически изображена на рис. 3.6 Здесь V_{k-1} , V_k и V_{k+1} – потенциалы электродов, R – внутренний радиус цилиндрических поверхностей

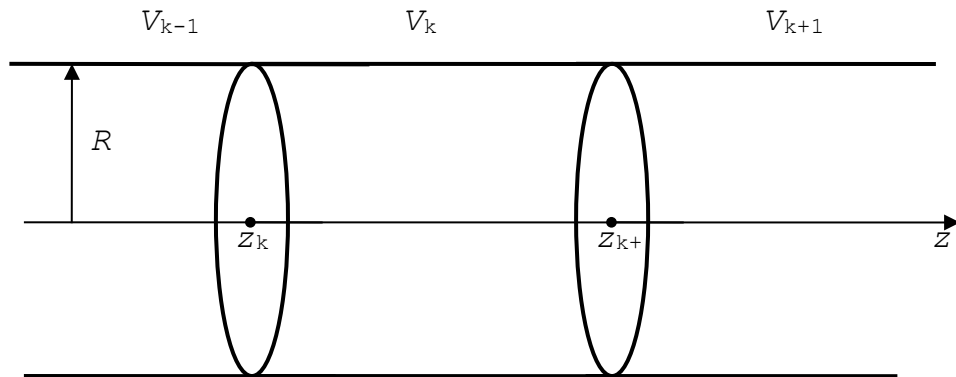


Рисунок 3.6 – Схематическое изображение цилиндрической осесимметричной линзы

Примечание – Составлено по источнику [52, с. 86]

В приближении, когда зазоры между электродами считаются бесконечно узкими, потенциал такой $(N+1)$ -электродной системы с хорошей степенью точности можно представить в виде [69 стр. 219]:

$$\varphi(\rho, z) = \frac{1}{2}(V_N + V_0) + \sum_{k=1}^N \phi_k(\rho, z). \quad (3.45)$$

Здесь $\varphi_k(\rho, z)$ определяется выражением:

$$\varphi_k(\rho, z) = \frac{1}{\pi} (V_k - V_{k-1}) \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{sh} \left[\frac{\pi}{\sqrt{2}R} (z - z_k) \right]}{\cos \frac{\pi\rho}{2R}}. \quad (3.46)$$

Здесь предполагается бесконечная протяженность первого электрода $-\infty < z \leq z_1$ с потенциалом V_0 и последнего электрода $z_{N-1} \leq z < \infty$ с потенциалом V_N . Выражение (3.46) является точным решением двухэлектродной граничной задачи для уравнения

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial (\sqrt{2}z)^2} = 0. \quad (3.47)$$

и находится с помощью методов ТФКП [79]. Нетрудно убедиться прямой подстановкой, что выражение (3.46) для $\varphi_k(\rho, z)$ удовлетворяет уравнению (3.47).

Отметим, что уравнение (3.26) сводится к уравнению (3.47) в приосевой области малых ρ , так как в этой области согласно (3.44) приближенно выполняется равенство $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho^2} \cong \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} \cong -\frac{U''(z)}{2}$. Однако дополнительный анализ показал, что более адекватной аналитической формулой для функций $\varphi_k(\rho, z)$ является следующее выражение, которое лишь незначительно отличается от (3.46) следующей заменой: $(\sqrt{2}z \rightarrow 3z/2)$. В результате

$$\varphi_k(\rho, z) = \frac{1}{\pi} (V_k - V_{k-1}) \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{sh} \left[\frac{2\pi}{3R} (z - z_k) \right]}{\cos \frac{\pi\rho}{2R}}. \quad (3.48)$$

Найдем аналитические выражения для частных производных, используя формулу (3.48), получим:

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_k}{\partial \rho} = \frac{1}{2R} (V_k - V_{k-1}) \frac{\sin \left(\frac{2\pi}{2R} \right) \operatorname{sh} \left[\frac{2\pi}{3R} (z - z_k) \right]}{\cos^2 \left(\frac{2\pi}{2R} \right) + \operatorname{sh}^2 \left[\frac{2\pi}{3R} (z - z_k) \right]}, \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \frac{2}{3R} (V_k - V_{k-1}) \frac{\cos \left(\frac{\pi\rho}{2R} \right) \operatorname{ch} \left[\frac{2\pi}{3R} (z - z_k) \right]}{\cos^2 \left(\frac{\pi\rho}{2R} \right) + \operatorname{sh}^2 \left[\frac{2\pi}{3R} (z - z_k) \right]}. \quad (3.50)$$

Для построения эквипотенциалей в плоскости xz , где $y = 0$, $\rho = x$, используем следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{dz}{dx} = -\frac{\partial\varphi}{\partial x} / \frac{\partial\varphi}{\partial z}. \quad (3.51)$$

Это уравнение интегрировалось численно по x от 0 до R . На рисунке 3.7 приведена картина поля четырехэлектродной осесимметричной системы, у которой $R = 1$, $z_1 = 7.6R$, $z_2 = 9.6R$, $z_3 = 11.2R$; $V_0 = 1$, $V_1 = 0.3789$, $V_2 = 0.0710$, $V_3 = -0.0863$ [80].

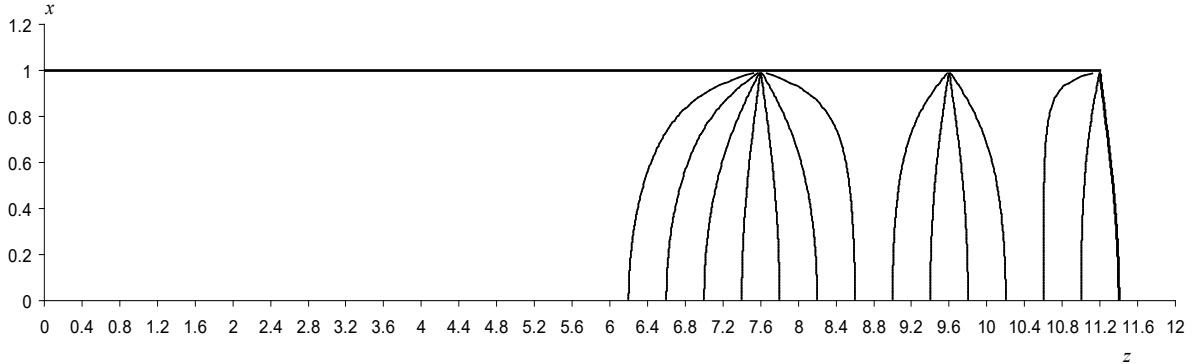


Рисунок 3.7 – Эквипотенциальный портрет поля четырехэлектродной КОС

Расчет проводился для системы, с бесконечно протяженными первым и последним электродами. Здесь первый электрод имеет достаточную протяженность, а последний электрод выполнен в форме замыкающей эквипотенциальной поверхности и имеет потенциал $V_3' = -0.0234$.

В таблице 3.1 приведены данные, определяющие форму замыкающего электрода. На рисунке 3.8 приведен также график распределения потенциала, рассчитанного по формулам (3.45) и (3.48), на оси z при $\rho = 0$ для той же электростатической КОС [80 стр. 55].

Таблица 3.1 – Координаты поверхности замыкающего электрода

x/R	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95
z/R	11.4	11.397	11.390	11.377	11.360	11.336	11.311	11.286	11.255	11.227	11.213

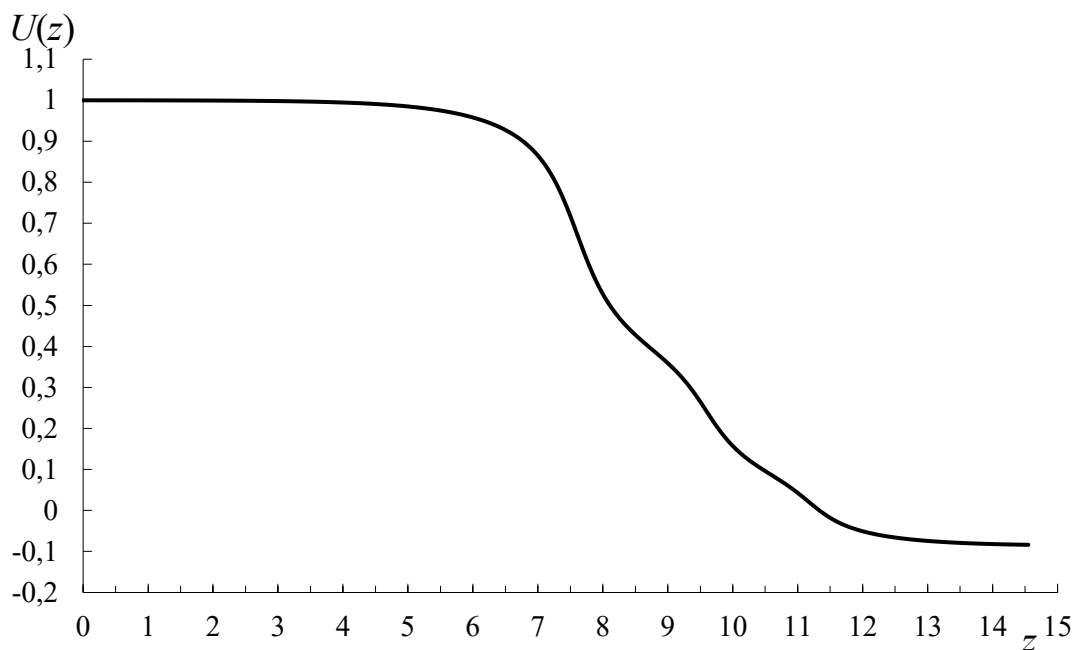


Рисунок 3.8 – Распределение потенциала на оси осесимметричной четырехэлектродной КОС

Выводы по третьему разделу

1. Изучены подходы, позволяющие свести решение уравнения Лапласа для осесимметричных и трансаксиальных корпускулярно оптических систем к расчету двумерных гармонических потенциалов, для нахождения которых используются методы ТФКП.

2. Найдены простые аналитические формулы, которые с достаточно высокой точностью описывают электростатический потенциал поля многоэлектродной осесимметричной цилиндрической линзы или зеркала. Эффективность полученных формул обусловлена тем, что распределение потенциала вдоль оси симметрии достаточно гладкое и поэтому старшие производные малы. Вследствие этого электростатический потенциал с хорошей точностью удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа.

3. Получены аналитические выражения для электростатического потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы также с хорошей точностью описывают поле линзы. Это связано с тем, что в области щелей, где происходит максимальный перепад потенциалов, с хорошей точностью выполняется двумерное уравнение Лапласа для потенциала.

Полученные в этом разделе выражения для потенциалов используются в следующей главе при интегрировании безразмерных уравнений Ньютона, описывающих движение заряженных частиц.

4 ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ И ПРИБОРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СТАТИЧЕСКИХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ

4.1 Расчет масс-спектрометра с секторным магнитом, электростатической призмой и трансаксиальной линзой

Здесь рассматривается статический масс-спектрометр с тройной фокусировкой пучка (по энергии и двум направлениям), в котором используется секторное однородное магнитное поле в сочетании с трехэлектродной электростатической призмой и рассеивающей трансаксиальной линзой [47, с. 41-43]. Такой масс-спектрометр схематически изображен в главе 1 на рисунке 1.5, где также показан ход однородного ионного пучка в средней плоскости масс-спектрометра. Здесь выбранная электростатическая система не только обеспечивает фокусировку по энергии, но и значительно расширяет ионный пучок перед входом в магнитное поле. Что в согласии с теоремой о магнитном потоке позволяет увеличить разрешающую способность масс-спектрометра.

Приведены аналитические выражения для потенциалов электрического и магнитного полей масс-спектрометра. Путем численного интегрирования дифференциальных уравнений (2.17) и (2.18) вычисляются траектории заряженных частиц ионного пучка в криволинейных координатах с осевой траекторией пучка в качестве криволинейной оси. Найдены параметры масс-анализатора, обеспечивающего тройную фокусировку пучка.

Расчетная схема предлагаемого масс-спектрометра представлена на рисунке 4.1 вместе с сопутствующими декартовыми координатами.

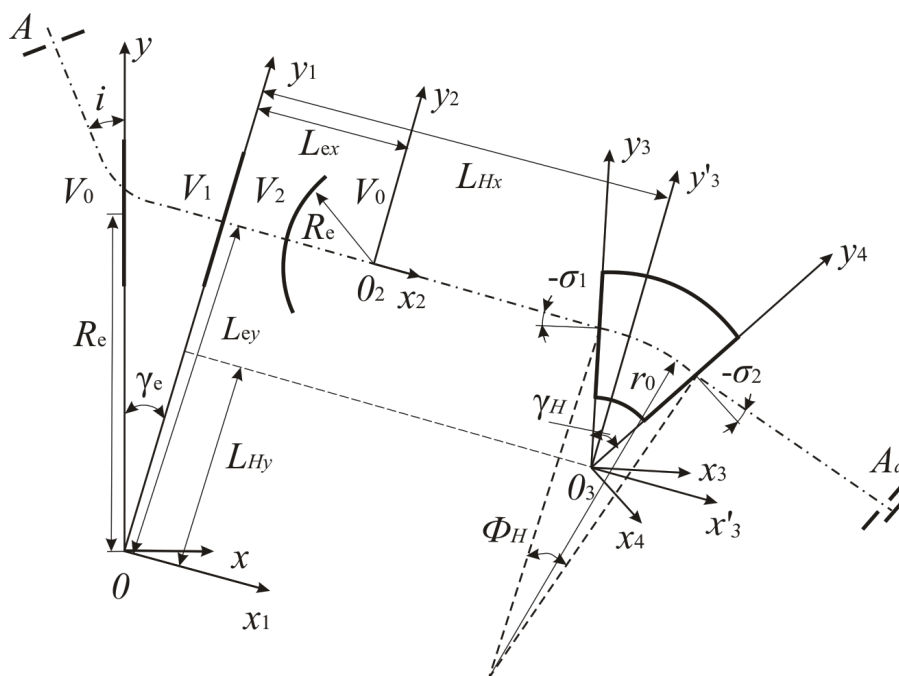


Рисунок 4.1 – Расчетная схема масс-спектрометра с электростатической призмой, трансаксиальной линзой и секторным однородным магнитным полем

Примечание – Составлено по источнику [49, р. 426]

Пунктирной линией показана осевая траектория пучка ионов. Оси O_y и O_{y1} совпадают с границами электродов призмы, потенциалы которых V_0, V_1, V_2 , указаны на рисунке 4.1. Угол между границами электродов призмы равен γ_e . Электроды трансаксиальной линзы с радиусом, равным R_e , имеют потенциалы V_2 и V_0 , а ее центр совпадает с началом декартовой системы координат $x_2 O_2 y_2$.

Положение начала координат O_2 задается расстояниями L_{ex} и L_{ey} . Границы магнитных полюсов секторного магнита совпадают с осями O_{3y3} и O_{3y4} . Угол между границами магнитных полюсов равно γ_H . Положение начала координат O_3 задается расстояниями L_{Hx} и L_{Hy} . На рис. 4.1 показаны также углы σ_1 и σ_2 , образованные осевой траекторией с границами магнитных полюсов. Буквы A и A_d обозначают щели источника и приемника ионов соответственно.

При расчетах используются криволинейные координаты q, z и s , определенные в разделе 2.2. Криволинейная ось s лежит в средней плоскости и совпадает с осевой траекторией пучка; криволинейная ось z имеет постоянное направление, перпендикулярное средней плоскости $z = 0$; ось q лежит в средней плоскости и направлена нормально к осевой траектории.

Электрическое и магнитное поля описываются безразмерными потенциалами Φ и Ω , которые связаны с электростатическим φ и магнитным ω потенциалами соотношениями (2.4). Потенциал $\Phi(q, z, s) = F(q, z, s) + \varepsilon f_0$, нормирован таким образом, что он равен нулю там, где равна нулю скорость частиц с массой m_c и энергией $m_c c^2 f(s)$, которые движутся по осевой траектории. Здесь $f(s) = F(0, 0, s)$ – распределение электростатического потенциала на осевой траектории, а $h \equiv h(s) = \Phi_z(0, 0, s)$ – распределение напряженности магнитного поля на осевой траектории, лежащей в средней плоскости $z = 0$. Индексом «0» отмечены величины в области вне поля в плоскости $s = 0$, где расположена щель источника ионов, а индексы при Φ и Ω обозначают частные производные по соответствующим координатам. Величины γ и ε характеризуют относительный разброс по массе и энергии в пучке.

Используя закон преломления на границах электростатической призмы и линзы, а также аппроксимацию резкой границы для магнитного поля, можно получить приближенные формулы для характеристик предлагаемого масс-спектрометра в горизонтальном направлении. Однако это не позволяет рассчитать фокусирующие свойства в вертикальном направлении и абберации системы.

Для осуществления детального расчета масс-спектрометра использовались аналитические выражения для электрических и магнитных полей, полученные ранее с помощью методов теории функций комплексного переменного (см. выражение (3.16)). Электрическое поле масс-спектрометра может быть описано потенциальной функцией:

$$F(x, y, z) = F_1(u, v|V_0, V_1) + F_1(u, v_1|V_1, V_2) + F_1(u_2, v_2|V_2, V_0) - V_1 - V_2. \quad (4.1)$$

Здесь,

$$F_1(u, v | V_1, V_2) = V_2 + \frac{V_1 - V_2}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{1-u}{v} + \operatorname{arctg} \frac{1+u}{v} \right), \quad (4.2)$$

$$\begin{cases} u_1 \equiv u_1(x, z) = -\exp\left(\frac{\pi}{d}x\right) \sin \frac{\pi}{d}z \\ v_1 \equiv v_1(x, z) = -\exp\left(\frac{\pi}{d}x\right) \cos \frac{\pi}{d}z \end{cases}, \quad (4.3)$$

$$\begin{cases} u_1 \equiv u_1(x, y, z) = -\exp\left(\frac{\pi}{d}x_1\right) \sin \frac{\pi}{d}z \\ v_1 \equiv v_1(x, y, z) = -\exp\left(\frac{\pi}{d}x_1\right) \cos \frac{\pi}{d}z \end{cases}, \quad (4.4)$$

$$\begin{cases} u_2 = \left(\frac{\rho}{R_e}x\right)^{-\frac{\pi R}{d}} \sin \frac{\pi}{d}z \\ v_2 = \left(\frac{\rho}{R_e}x\right)^{-\frac{\pi R}{d}} \cos \frac{\pi}{d}z \end{cases}, \quad (4.5)$$

В последних формулах d – расстояние между плоскими электродами,

$$\begin{cases} x_1 = x \cos \gamma_e - y \sin \gamma_e \\ y_1 = x \sin \gamma_e - y \cos \gamma_e \end{cases}, \quad (4.6)$$

$$\rho = \sqrt{x_2^2 + y_2^2}, \quad (4.7)$$

$$\begin{cases} x_2 = x \cos \gamma_e - y \sin \gamma_e - L_{ex} \\ y_2 = x \sin \gamma_e - y \cos \gamma_e - L_{ey} \end{cases}. \quad (4.8)$$

Выражение (4.1) и (4.2) хорошо описывают поле электростатической системы масс-спектрометра с бесконечно узкими зазорами между электродами, когда области отдельных щелей, где происходит перепад потенциалов, достаточно далеко удалены друг от друга.

В том же приближении находилось магнитное поле масс-спектрометра. При этом считалось, что вплотную к магнитным полюсам примыкают магнитные экраны с равным нулю магнитным потенциалом. Магнитное поле секторного магнита можно описать следующей формулой (4.9):

$$\Omega(x, y, z) = \begin{cases} W_1(u_3, v_3 | -C), & x_3 \cos \frac{\gamma_H}{2} - y_3 \sin \frac{\gamma_H}{2} \leq 0; \\ W_1(u_4, v_4 | C), & x_3 \cos \frac{\gamma_H}{2} - y_3 \sin \frac{\gamma_H}{2} \geq 0. \end{cases}. \quad (4.9)$$

Здесь,

$$W_1(u, v | C) = \frac{C}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{1+u}{v} - \operatorname{arctg} \frac{1-u}{v} \right), \quad (4.10)$$

$$\begin{cases} u_3 = -\exp\left(\frac{\pi}{a}x_3\right) \sin \frac{\pi}{a}z \\ v_3 = \exp\left(\frac{\pi}{a}x_3\right) \cos \frac{\pi}{a}z \end{cases}, \quad (4.11)$$

и

$$\begin{cases} u_4 = -\exp\left(\frac{\pi}{a}x_4\right) \sin \frac{\pi}{a}z \\ v_4 = \exp\left(\frac{\pi}{a}x_4\right) \cos \frac{\pi}{a}z \end{cases}. \quad (4.12)$$

В этих последних формулах (4.11) и (4.12) a – расстояние между полюсами магнита в вертикальном направлении:

$$\begin{cases} x_3 = (x_1 - L_{Hx}) \cos \sigma_1 - (y_1 - L_{Hy}) \sin \sigma_1 \\ y_3 = (x_1 - L_{Hx}) \sin \sigma_1 + (y_1 - L_{Hy}) \cos \sigma_1 \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\begin{cases} x_4 = x_3 \cos \gamma_H - y_3 \sin \gamma_H \\ y_4 = x_3 \sin \gamma_H + y_3 \cos \gamma_H \end{cases} \quad (4.14)$$

а $C = -\frac{a}{\sqrt{2}r_0}$, где r_0 – радиус осевой траектории в центре магнита, где магнитное поле однородно.

Осевая траектория определялась численным интегрированием системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} x'' = y'^2 \frac{F_x}{2F} - x'y' \frac{F_y}{2F} + y' \frac{h}{\sqrt{2F}} \\ y'' = x'^2 \frac{F_y}{2F} - x'y' \frac{F_x}{2F} + x' \frac{h}{\sqrt{2F}} \end{cases} \quad (4.15)$$

где штрихи обозначают дифференцирование по s – длине осевой траектории. Начальные условия для этих уравнений задавались следующими соотношениями:

$$x_0 = -l_s \cos i, \quad x'_0 = \cos i, \quad y_0 = l_s \sin i + r_e, \quad y'_0 = -\sin i,$$

где l_s – расстояние от щели источника ионов до призмы, r_e – задает размеры призмы, а i – асимптотический угол падения осевой траектории на первую грань призмы (см. рисунок 4.1).

Связь между декартовыми координатами x, y и z и криволинейными

координатами q, z и s задается следующими соотношениями:

$$x = x_c(s) - qy'_c(s), \quad y = y_c(s) - qx'_c(s), \quad z = z. \quad (4.16)$$

Здесь функции $x_c(s), y_c(s)$ определяют осевую траекторию в средней плоскости $z = 0$.

Расчет траекторий заряженных частиц проводился путем численного интегрирования дифференциальных уравнений траектории в криволинейных координатах q, z и s (2.17) и (2.18), где k – кривизна осевой траектории, определяемая формулой:

$$k = \frac{f_q}{2f} - \frac{h}{\sqrt{2f}}. \quad (4.17)$$

Каждая частица пучка описывается двумя криволинейными координатами q и z , характеризующими отклонение частицы от осевой траектории.

Таким образом, рассматривалось шести параметрическое семейство траекторий, выходящих из источника ионов и отличающихся двумя начальными координатами q_0 и z_0 и производными q'_0 и z'_0 , а также относительным отклонением по массе γ и энергии ε . Такой подход позволяет описать поведение пучка в целом, одновременно определяя множество траекторий с различными значениями начальных условий и различной величиной параметров γ и ε .

Проведено численное интегрирование уравнений (4.15), (1.17) и (1.18) методом Адамса с автоматическим выбором шага, а начальные точки находились методом последовательных сближений Крылова. В качестве единицы измерения длины было выбрано $d = a$, то есть расстояние между электродами и магнитными полюсами. Относительная точность при расчете осевой траектории варьировалась и достигалась 10^{-9} .

Было выбрано отношение потенциалов V_1/V_0 и значение угла γ_e , при которых осевая траектория перпендикулярна второй преломляющей стороне призмы. Полученные результаты хорошо согласовались с приближенными оценками, которые были приведены более ранних работах [45 с. 44-45, 52 р.102].

Был проведен расчет масс-спектрометра со следующими параметрами, которые представлены в таблице 4.1.

На рисунке 4.2 представлена расчетная осевая траектория пучка в декартовой системе координат x и y . Толстые линии на рисунке 4.2 обозначают проекции границ электродов и магнитных полюсов на среднюю плоскость.

Проекция траекторий частиц ионного пучка в ахроматическом масс-спектрометре на горизонтальное направление при небольших значениях z_0 и z'_0 представлены на рисунке 1.6.

Таблица 4.1 – Параметры масс-спектрометра и ионного пучка

Компонент	i	75°
Призма	l_s	40
	γ_e	$12,4732^\circ$
	r_e	25
	V_1/V_0	20
	V_2/V_0	3,27665
Линзы	L_{ex}	28,9
	L_{ey}	28,96731
	R_e	25
Магнит	$L_{hx} - L_{ex}$	3,9
	L_{hy}	12,05002
	r_0	25
	γ_H	58°
	$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$	-15°
	Φ_H	28°
Ионный пучок	ε	0,001
	q_s	0,007
	q'_s	0,001
	z_s	0,05
	z'_s	0,001
Примечание – Составлено по источнику [52, p. 103]		

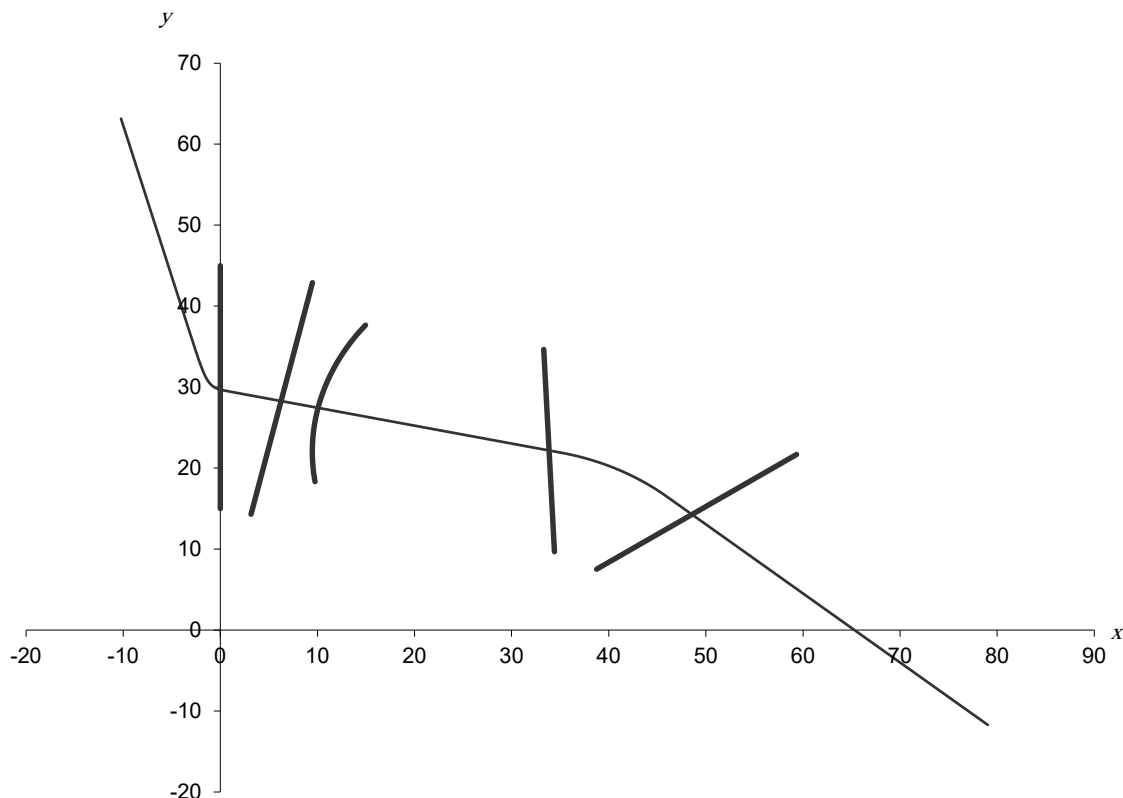


Рисунок 4.2 – Рассчитанная осевая траектория пучка в масс- спектрометре

Примечание – Составлено по источнику [52, р. 104]

Профиль пучка в вертикальном направлении, полученный при максимально возможных значениях z_s и z'_s , при которых частицы еще не касаются ползадающих поверхностей представлен на рисунке 1.7. Пунктирными линиями показаны крайние траектории частиц пучка с относительным отклонением по массе $\gamma = 0,001$.

Угловое увеличение масс-спектрометра составляет $\Gamma = 5,2911$ Самое высокое разрешение достигается при $s = s_{cr} = 127.5$. Плоскость Гаусса соответствует значению $s = s_g = 127.58$. В средней плоскости при $s = s_{cr} = 127.5$ можно записать следующее приближенное выражение с точностью до членов второго порядка малости:

$$\begin{aligned}
 q_{cr} &= q(s_{cr}) \\
 &= Mq_0 + D_m\gamma + A_2q'_0 + A_5\varepsilon + A_{11}q_0^2 + A_{12}q_0q'_0 \\
 &+ A_{22}q_0'^2 + A_{15}q_0\varepsilon + A_{25}q'_0\varepsilon + A_{55}\varepsilon^2.
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Здесь увеличение изображения $M = 1/\Gamma = 0.18899$, дисперсия по массе $D_m = 10.981 = 0.43924r_0$, отношение $D_m/M = 2.3241$, коэффициенты $A_2 = 0.15774$ и $A_5 = -0.014625$. Значения остальных абберационных коэффициентов второго порядка приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Коэффициенты aberrации второго порядка масс-спектрометра

A_{11}	A_{12}	A_{22}	A_{15}	A_{25}	A_{55}
0.632155	38.355	582.54	10.994	374.64	-18.126
Примечание – Составлено по источнику [52, p. 105]					

По своим возможностям рассчитанный масс-спектрометр сравним с масс-спектрометром Матсуда, но имеет более простую конструкцию [49, p. 426]. Если мы подставим значения параметров такие, как в $d = a = 6$ мм, то значение $q_s = 0.007$ соответствует ширине щели источника ионов, равной 84 мкм. Таким образом, в зависимости от значений z_s и z'_s можно рассчитать разрешение R_m и aberrации масс-спектрометра Δ_{cr} . Данные для $q_s = 0.007$, $q'_s = 0.001$, $\varepsilon = 0.001$ при $s = s_{cr}$ представлены в таблице 4.3. Предполагалось, что в пучке $-z_s \leq z_0 \leq z_s$ и $-z'_s \leq z'_0 \leq z'_s$, $q_{min} \leq q_{cr} \leq q_{max}$, h_{cr} – высота пучка в плоскости детектора.

Отметим, что метод расчета, используемый в данной работе, позволяет анализировать прохождение широких пучков заряженных частиц, когда применение теории aberrаций не дает нужной точности.

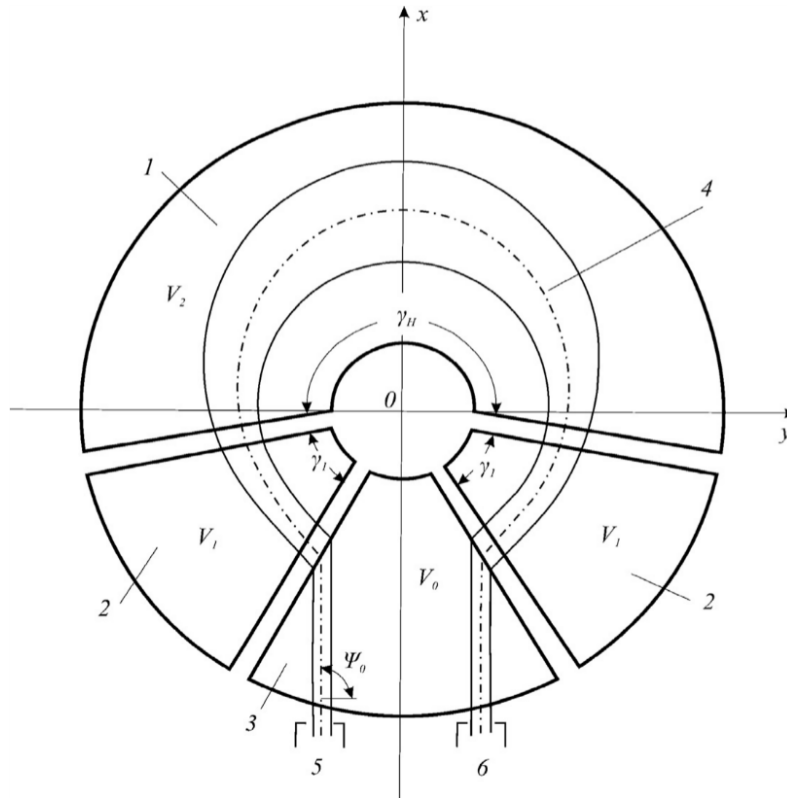
Таблица 4.3 – Зависимость разрешения по массе от вертикальных размеров пучка

Вход		Пересечение				Аберрации и разрешение	
z_s	z'_s	q_1	q_2	Δq_{max}	h_{cr}	Δ_{cr}	R
0	0	-0,001618	0,002221	0,003839	0	0,001193	2866
0,0125	0,00025	-0,002589	0,002157	0,004810	0,23	0,002164	2287
0,025	0,0005	-0,005354	0,002025	0,007575	0,43	0,004929	1452
0,05	0,001	-0,009434	0,001148	0,01166	0,60	0,009010	944
Примечание – Составлено по источнику [52, p. 106]							

4.2 Масс-анализаторы на основе конусовидной ахроматичной призмы

В данном разделе рассматриваются КО свойства конусовидной ахроматичной призмы (КАП), представленной на рисунке 4.3, где изображена также осевая траектория и проекция однородного параллельного плоского пучка ионов на среднюю плоскость призмы [81-83].

Электрическое поле призмы $\Phi(\xi, \psi)$ в переменных ξ и ψ описывается уравнением (3.38), и магнитное поле рассчитывается с помощью выражения (3.40), где потенциал магнитных экранов $C_1 = 0$, а $C_2 = h(0)\xi_k$. Здесь распределение $h(\psi)$ магнитного поля в средней плоскости призмы определяется выражением (3.21).



1 - магнитные полюса призмы; 2, 3 - электроды и магнитные экраны; 4 - осевая траектория ионного пучка; 5 - источник ионов; 6 - детектор; V_0, V_1, V_2 - потенциалы электродов; ψ_0 - угол входа пучка в призму

Рисунок 4.3 – Схематическое изображение КАП

Примечание – Составлено по источнику [52 p. 48]

Для интегрирования уравнений (4.15) для осевой траектории и уравнений (2.17) и (2.18) необходимо осуществить переход от переменных ξ, ψ к соответствующим переменным в декартовых координатах:

$$x = r \sin \vartheta \cos \psi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \psi, \quad z = r \cos \vartheta,$$

а также нужно осуществлять обратные переходы, описываемые следующими соотношениями:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \cos \vartheta = \frac{z}{r}, \quad \operatorname{tg} \psi = \frac{y}{x};$$

$$\xi = \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} = \ln \sqrt{\frac{r-z}{r+z}}, \quad \psi = \operatorname{arctg} \frac{y}{x}. \quad (4.19)$$

Также находятся производные потенциала, входящие в уравнения для осевой траектории (4.15) и в уравнения для произвольной траектории пучка (2.17) и (2.18):

$$\Phi_x = \Phi_\psi \frac{\partial \psi}{\partial x} + \Phi_\xi \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad \Phi_y = \Phi_\psi \frac{\partial \psi}{\partial y} + \Phi_\xi \frac{\partial \xi}{\partial y}, \quad \Phi_z = \Phi_\xi \frac{\partial \xi}{\partial z}. \quad (4.20)$$

Используя соотношения (4.19), определим производные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial x} &= \frac{\partial \xi \partial \vartheta}{\partial \vartheta \partial x} = \frac{zx}{r(x^2 + y^2)}, & \frac{\partial \xi}{\partial y} &= \frac{\partial \xi \partial \vartheta}{\partial \vartheta \partial y} = \frac{zy}{r(x^2 + y^2)}, \\ \frac{\partial \xi}{\partial z} &= \frac{\partial \xi \partial \vartheta}{\partial \vartheta \partial z} = -\frac{1}{r}, \\ \frac{\partial \psi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2 + y^2}, & \frac{\partial \psi}{\partial y} &= \frac{y}{x^2 + y^2}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Из уравнений (3.11) и (3.12) найдем:

$$F_{1\psi} = F_{1u} \frac{\partial u}{\partial \psi} + F_{1v} \frac{\partial v}{\partial \psi}, \quad F_{1\xi} = F_{1u} \frac{\partial u}{\partial \xi} + F_{1v} \frac{\partial v}{\partial \xi}, \quad (4.22)$$

где

$$F_{1u} = \frac{V_1 - V_2}{\pi} \left[\frac{v}{v^2 + (1+u)^2} - \frac{v}{v^2 + (1-u)^2} \right], \quad (4.23)$$

$$F_{1v} = \frac{V_1 - V_2}{\pi} \left[\frac{1+u}{v^2 + (1+u)^2} + \frac{1-u}{v^2 + (1-u)^2} \right], \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \psi} = \frac{\partial v}{\partial \xi} = \frac{\pi}{2\xi_k} u, \quad \frac{\partial u}{\partial \xi} = \frac{\partial v}{\partial \psi} = \frac{\pi}{2\xi_k} v. \quad (4.25)$$

Производные Φ_ψ и Φ_ξ теперь легко находятся. Если воспользоваться соотношением (3.16) для $\Phi(\xi, \psi)$ и учесть относительный разброс по энергии ε в исходном пучке, получим выражение:

$$\begin{aligned} \Phi(\psi, \xi) &= -2V_2 - V_1 + F_1 \left(\psi + \frac{\gamma_E}{2}, \xi | V_0, V_2 \right) + F_1 \left(\psi + \frac{\gamma_H}{2}, \xi | V_2, V_1 \right) \\ &+ F_1 \left(\psi - \frac{\gamma_H}{2}, \xi | V_1, V_2 \right) + F_1 \left(\psi - \frac{\gamma_E}{2}, \xi | V_2, V_0 \right) + \varepsilon V_0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Выражения, подобные соотношениям (4.20), могут быть записаны и для производных магнитного потенциала. Используя уравнение (3.19), найдем;

$$\Omega_{1u} = -\frac{2C_1}{\pi} \frac{v}{v^2 + u^2} + \frac{C_1 - C_2}{\pi} \left[\frac{v}{v^2 + (1+u)^2} + \frac{v}{v^2 + (1-u)^2} \right], \quad (4.27)$$

$$\Omega_{1v} = -\frac{2C_1}{\pi} \frac{u}{v^2 + u^2} - \frac{C_1 - C_2}{\pi} \left[\frac{1+u}{v^2 + (1+u)^2} - \frac{1-u}{v^2 + (1-u)^2} \right], \quad (4.28)$$

и с помощью уравнений (3.20) и (4.25) можно найти Ω_ψ и Ω_z . Далее, используя выражения, аналогичные соотношению (4.20), рассчитаем Ω_x, Ω_y и Ω_z .

Вычислительная схема осуществляется следующим образом. Задавая начальные условия для осевой траектории, численно интегрируем уравнения (4.15) и находим осевую траекторию $x_c(s), y_c(s)$, лежащую в средней плоскости $z = 0$ (для нее $\xi = 0$ и $u = 0$). В то же время также интегрируются уравнения (2.17) и (2.18), для которых начальными условиями для произвольной траектории пучка задаются значениями: q_0, q'_0, z_0, z'_0 и ε, γ . В каждой точке интегрирования для этих траекторий находятся x, y и z по формулам (4.16), а ξ, ψ и $\Phi(\xi, \psi)$ – по формулам (4.19) и (4.26), вычисляются также производные Φ_ψ, Φ_ξ и Ω_ψ, Ω_ξ . С помощью формул (4.20) в этой точке находятся Φ_x, Φ_y, Φ_z и $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$. Затем вычисляются производные потенциалов, входящих в уравнения (2.17) и (2.18):

$$\Phi_q = (\vec{\nabla}\Phi)_q = \Phi_x y'_c - \Phi_y x'_c, \quad \Phi_s = (\vec{\nabla}\Phi)_s = \Phi_x x'_c + \Phi_y y'_c; \quad (4.29)$$

$$\Omega_q = (\vec{\nabla}\Omega)_q = \Omega_x y'_c - \Omega_y x'_c, \quad \Omega_s = (\vec{\nabla}\Omega)_s = \Omega_x x'_c + \Omega_y y'_c. \quad (4.30)$$

Кривизна осевой траектории k и ее производная k' находятся по следующим формулам (4.31, 4.32):

$$k \equiv k_c = \frac{\Phi_{qc}}{2\Phi_c} - \frac{\Omega_{zc}}{\sqrt{2\Phi_c}}, \quad (4.31)$$

$$k' \equiv k'_c = \frac{\Phi'_{qc}}{2\Phi_c} - \frac{\Phi'_c \Phi_{qc}}{2\Phi_c^2} - \frac{\Omega'_{zc}}{\sqrt{2\Phi_c}} + \frac{\Omega_{zc} \Phi'_c}{2\Phi_c \sqrt{2\Phi_c}}.$$

Здесь

$$\Phi'_{qc} = \Phi'_{xc} y'_c + \Phi_{xc} y''_c - \Phi'_{yc} x'_c - \Phi_{yc} x''_c. \quad (4.32)$$

В этих формулах (4.31) и (4.32) индексы q, c, x и y обозначают частные производные по соответствующим координатам, штрихи обозначают производные по координате s . Более того,

$$\Phi'_{xc} = \Phi_{xhc} x'_c + \Phi_{xyc} y'_c, \quad \Phi'_{yc} = \Phi_{xyc} x'_c + \Phi_{yuc} y'_c.$$

В последних формулах (4.33), (4.34):

$$\Phi_{xhc} = \Phi_{\psi c} \frac{2x_c y_c}{(x_c^2 + y_c^2)^2} + \Phi_{\psi\psi} \frac{y_c^2}{(x_c^2 + y_c^2)^2}, \quad (4.33)$$

$$\Phi_{yuc} = \Phi_{\psi c} \frac{2x_c y_c}{(x_c^2 + y_c^2)^2} + \Phi_{\psi\psi c} \frac{x_c^2}{(x_c^2 + y_c^2)^2}, \quad (4.34)$$

$$\Phi_{xyc} = \Phi_{\psi c} \frac{y_c^2 - x_c^2}{(x_c^2 + y_c^2)^2} + \Phi_{\psi\psi c} \frac{(-x_c y_c)}{(x_c^2 + y_c^2)^2}, \quad (4.35)$$

$$\Omega'_{zc} = \Omega_{\xi c} \frac{x_c x'_c}{r_c^3} + \Omega_{\xi c} \frac{y_c y'_c}{r_c^3}.$$

Рассматривались пучки с осевой траекторией, симметричной относительно плоскости xz . Параметры конусовидной призмы подбирались таким образом, чтобы удовлетворялись условия ахроматичности и телескопичности. КАП задается следующими параметрами:

$$h(0) = 7.200939, \quad \xi_k = \ln \operatorname{tg}((\pi + \chi)/4) = 0.04364708,$$

кривизна осевой траектории в центре магнита равна $k_m = 1.248013$. При входе в призму угол наклона осевой траектории к оси y равен $\Psi_{c0} = 81.911^\circ$, были использованы следующие начальные условия для осевой траектории:

$$x_0 = -1.50, \quad y_0 = -0.39, \quad x'_0 = \frac{\operatorname{tg} \Psi_{c0}}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \Psi_{c0}}}, \quad y'_0 = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \Psi_{c0}}}.$$

На рисунке 4.4 показана осевая траектория параллельного ионного пучка в КАП и показано разделение пучка по массе. Смоделирована ситуация, когда в КАП входит параллельный плоский пучок, состоящий из ионов двух масс с относительной разностью масс $\gamma = 0,002$. Относительный разброс энергии ε в пучке составлял $\pm 1\%$. Ширина пучка на входе в призму равна $2d_s = 0.04$, выраженная в относительных единицах, используемых на рисунке 4.4.

Здесь угловая дисперсия по массе равна $D'_m \cong 50$ рад. на 100% изменения массы. При выбранных параметрах КАП выполняются условия ахроматичности и телескопичности. Уровень ахроматизации считался удовлетворительным, когда угловая дисперсия призмы по энергии удовлетворяет неравенству: $D'_{chr} < 10^{-2}$. [52 p. 112, 84 p. 146]

Хроматические aberrации КАП исследовались численным интегрированием точных уравнений траектории (4.15). Относительная погрешность расчета координат не превышали 10^{-9} .

Полученные результаты показали, что угловые хроматические aberrации КАП могут быть описаны следующей формулой (4.36), определяющей изменение угла выхода частицы из призмы:

$$\Delta\Psi_e = \Psi_e - \Psi_{ce} = D'_{chr} \varepsilon + A_2 \varepsilon^2 + A_3 \varepsilon^3, \quad (4.36)$$

до значений $\varepsilon = \pm 0.1$. Для данной КАП $D'_{ch} = 0.0075$, а коэффициенты хроматической абберации: $A_2 = 0,47$, $A_3 = -0.56$. Эти значения находятся путем решения системы линейных алгебраических уравнений, вытекающих из выражения (4.36) для различных значений ε .

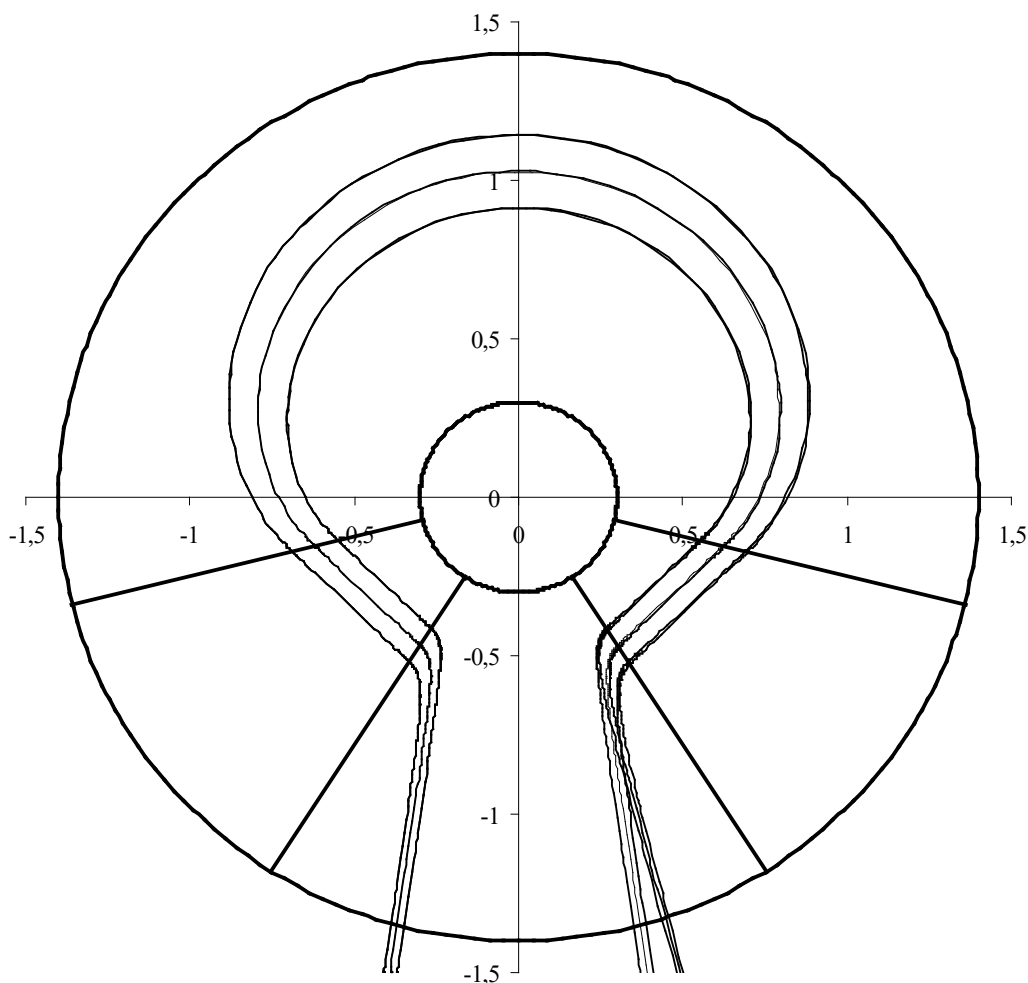


Рисунок 4.4 –Разделение параллельного пучка ионов по массам в КАП для двух масс с относительной разницей в массах $\gamma = 0,002$

Примечание – Составлено по источнику [50 p. 110]

Поведение широких пучков в КАП исследовалось путем численного интегрирования уравнений траектории (2.17) и (2.18) при различных начальных условиях, задаваемых значениями q_0, q'_0, z_0, z'_0 , определяющих отклонение от осевой траектории в криволинейных координатах, а также параметрами ε и γ , определяющими отклонение по энергии и массе. На рисунках 1.9 и 1.10 представлены проекции ионного пучка на горизонтальное и вертикальное направления соответственно.

По оси абсцисс откладывается длина s траектории, измеренная вдоль осевой траектории пучка, значения q'_0 и z'_0 варьировались в пределах $\pm 10^{-3}$. На рис. 1.9 видно, что в магнитном поле пучок расширяется примерно в шесть раз,

что обеспечивает большую угловую дисперсию по массе. В вертикальном направлении, как видно на рисунке 1.10, телескопичность обеспечивается при трех промежуточных линейных фокусах.

Высокий ахроматизм, большое значение угловой дисперсии по массе D'_m , симметрия осевой траектории $\Psi_{c0} = -\Psi_{ce}$, а также свойство конического поля сохранять параллельность широкого пучка, лежащего в средней плоскости, позволяют создавать масс-спектрометры с высоким разрешением и чувствительностью [84 p. 140-143].

Тем не менее, больший эффект может быть достигнут, если использовать конусовидную призму в призмном масс-спектрометре, содержащем коллиматор и фокусирующие линзы, как показано на рисунке 1.8.

Линза коллиматора преобразует угловую расходимость пучка в его ширину, что не приводит к дополнительным aberrациям КАП, а ширина источника преобразуется в угловую расходимость пучка [85, 86].

Рассчитаем параметры малогабаритного призмного масс-спектрометра, схематически представленного на рисунке 1.8. Пусть фокусное расстояние одиночной коллиматорной и фокусирующей линз равно $f_1 = f_2 = 0,2\text{м}$, а ширина щели источника ионов $S = 100\text{ мкм}$. Тогда угловая расходимость пучка ионов, поступающего в призму равна:

$$2\alpha_1 = \frac{S}{f_1} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ рад} \quad (4.37)$$

Так как в призме сохраняется параллельность однородных пучков ионов любой ширины, то в призму можно вводить достаточно широкий пучок, сформированный коллиматорной линзой. Полагая угловую расходимость пучка, выходящего из источника, равной

$$2\alpha_s = 0,02 \text{ рад},$$

получим для ширины пучка, входящего в призму, значение

$$2d_s = 2\alpha_s f_1 = 4 \cdot 10^{-3} \text{ м} = 4 \text{ мм}. \quad (4.38)$$

Угловая расходимость луча, равная $2\alpha_s = 0,02 \text{ рад}$, может быть полученный в источнике с ускоряющим потенциалом $\cong 100 \text{ В}$. В этот момент относительный энергетический разброс будет удовлетворять выражению $-0.02 < \varepsilon < 0.02$, что не приведет к дополнительным aberrациям из-за высокой ахроматичности.

Линейная дисперсия такого призматического масс-спектрометра на 100% изменение массы равна:

$$D_m = D'_m f_2 \cong 50 \cdot 0,2 \text{ м} = 10 \text{ м}. \quad (4.39)$$

Для симметричной схемы линейное и угловое увеличение равно единице $M =$

$\Gamma = 1$, поэтому предельное разрешение масс-спектрометра без учета aberrаций равно:

$$R_m = \frac{D_m}{2S} = \frac{10}{2 \cdot 10^{-4}} = 50000, \quad (4.40)$$

что на порядок выше, чем в масс-спектрометре Матсуда. То же относится и к Q-параметру, который для рассматриваемого призмного масс-спектрометра с КАП равен:

$$Q = R_m 2\alpha_s S = R_m 2\alpha_1 S_1 = 150 \cdot 10^{-3} \text{ м}. \quad (4.41)$$

а для масс-спектрометра Матсуда $Q = 5000 \cdot 0,0025 \cdot 10^{-4} \text{ м} = 125 \cdot 10^{-5} \text{ м}$, т.е. на 2 порядка меньше.

4.3 Призмный масс-анализатор с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами

Призмный масс-анализатор с конусовидной ахроматичной призмой (КАП), является уникальной конструкцией так как обладает рекордной угловой дисперсией по массе, равной примерно 50 рад. на 100 % изменения массы [51 р. 486-490; 52 р. 110-113, 84 р.142-144]. Линейная дисперсия такого прибора равна произведению угловой дисперсии призмы D'_m на фокусное расстояние f_2 фокусирующей линзы. Так, при $f_2 \approx 1 \text{ м}$ линейная дисперсия прибора будет больше 50 м. Такая линейная дисперсия при микронных ширинах щелей источника и приемника ионов позволяет получить разрешение порядка десяти миллионов на сравнительно небольшом приборе.

При расчете траекторий заряженных частиц с зарядом e и массой m в призмном масс-анализаторе используются безразмерные уравнения Ньютона, которые в декартовых координатах x, y, z можно записать в следующем виде [87]:

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \Phi_x + \dot{y}\Omega_z - \dot{z}\Omega_y, \\ \ddot{y} &= \Phi_y + \dot{z}\Omega_x - \dot{x}\Omega_z, \\ \ddot{z} &= \Phi_z + \dot{x}\Omega_y - \dot{y}\Omega_x. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Здесь $\Phi = -\Phi/V_0$ – безразмерный электростатический потенциал, а Ω – безразмерный магнитный потенциал; индексы при Φ и Ω обозначают частные производные по соответствующим безразмерным декартовым координатам; за единицу длины берется величина d – расстояние между параллельными плоскостями трансаксиальных линз (см. рисунок 4.4); точки обозначают производные по безразмерному времени $\tau = t/\tau_0$, где

$$\tau_0 = d \sqrt{\frac{m}{eV_0}}.$$

(4.43)

Трехэлектродная трансаксиальная линза или зеркало представляет собой две параллельные пластины, разрезанные прямыми круговыми цилиндрами радиуса R_1 и R_2 , ось которых совпадает с осью Z . Такое линза схематически изображена на рисунке 4.5, где показана также сопутствующая декартова система координат x, y, z с началом в средней плоскости линзы xu . Здесь V_{l0} , V_{l1} и V_{l2} – потенциалы электродов линзы, d – расстояние между пластинами.

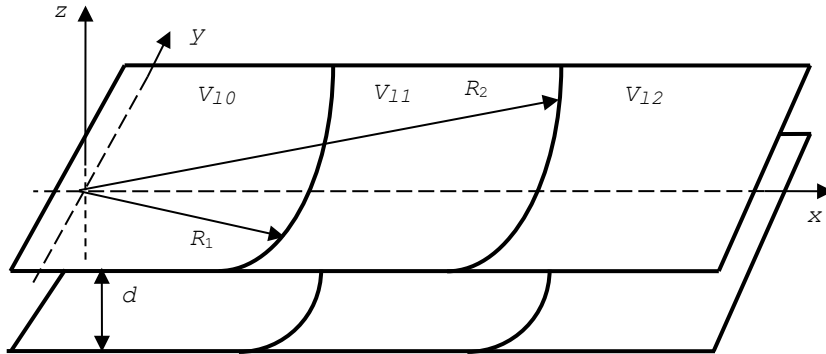


Рисунок 4.5 – Схематическое изображение трансаксиальной линзы

Зазоры между электродами считаются бесконечно узкими. Вдали от краев пластин в цилиндрических координатах потенциал поля линзы зависит от переменных $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, z .

Вводя безразмерные переменные (3.36)

где $R = \sqrt{R_1 R_2}$, получим следующее уравнение для потенциала

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} = 0 \quad (4.44)$$

Гармоническая составляющая $F(\eta, \zeta)$ электростатического потенциала $\varphi(\eta, \zeta)$ удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа и является гармонической функцией безразмерных переменных η и ζ . Поэтому для расчета $F(\eta, \zeta)$ можно использовать аппарат теории функций комплексной переменной (ТФКП). Полученные таким образом аналитические выражения для потенциала дают хорошее приближение для потенциала $\varphi(\eta, \zeta$, т.к. точно удовлетворяют заданным граничным условиям Дирихле и при $\rho \cong R$ ($\eta = 0$) удовлетворяют двумерному уравнению Лапласа [88]. В плоскости $\eta\zeta$ имеем электростатическую систему с двумерным полем, изображенную на рис. 4.6 В плоскости $\eta\zeta$ потенциал $\varphi(\eta, \zeta$ удовлетворяет следующим граничным условиям

$$\text{При } \zeta = \pm \zeta_0 = \pm \frac{d}{2R}:$$

$$\varphi(\eta \pm \zeta) = \begin{cases} V_0, & \text{для } \eta < -\eta_0, \\ V_1 & \text{для } -\eta_0 < \eta < \eta_0, \\ V_2 & \text{для } \eta > \eta_0. \end{cases} \quad (4.45)$$

В последней формуле $\eta_0 = \ln \sqrt{\frac{R_2}{R_1}}$.

Уравнение (4.44) для потенциала можно решать методом последовательных приближений, взяв за нулевое приближение гармоническую функцию $F(\eta, \zeta)$, удовлетворяющую граничным условиям (4.45). Чтобы найти потенциал $F(\eta, \zeta)$ этой системы, отобразим полосу $-\zeta_0 \leq \zeta \leq \zeta_0$ комплексной плоскости $\omega = \eta + i\zeta$ на верхнюю полу плоскость плоскости $w = u + iv$ с помощью следующего конформного преобразования:

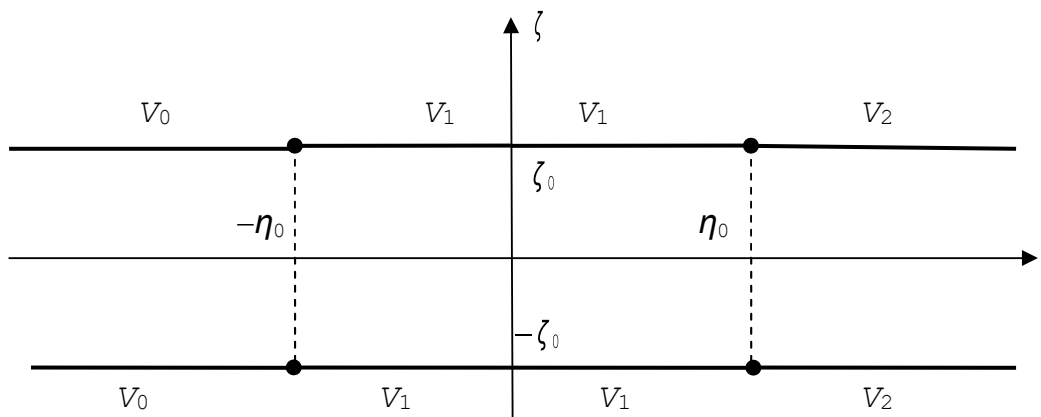


Рисунок 4.6 –Трехэлектродная электростатическая система с двумерным полем

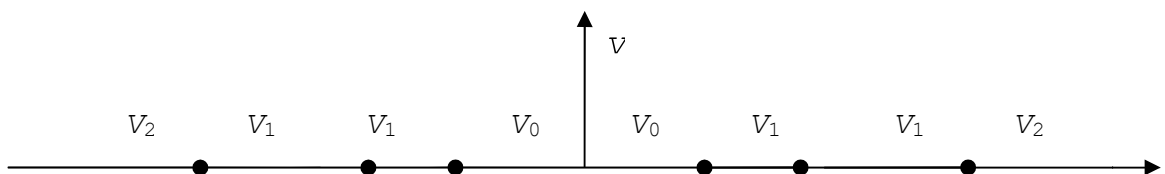


Рисунок 4.7 – Граничная задача в w-плоскости

$$w = i \exp\left(\frac{\pi R \omega}{d}\right) \quad (4.46)$$

Откуда

$$u = -\exp\left(\frac{\pi R \eta}{d}\right) \sin\left(\frac{\pi R \zeta}{d}\right), \quad (4.47)$$

$$v = -\exp\left(\frac{\pi R \eta}{d}\right) \cos\frac{\pi R \zeta}{d}.$$

В w -плоскости получаем граничную задачу, представленную на рис. 4.7 где верхним электродам соответствует область $u < 0$, а нижним — $u > 0$. Распределение потенциала в w -плоскости определяется следующим выражением:

$$F(u, v) = V_2 + \frac{V_0 - V_1}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{u + a_1}{v} - \operatorname{arctg} \frac{u - a_1}{v} \right) + \frac{V_1 - V_2}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{u + a_2}{v} - \operatorname{arctg} \frac{u - a_2}{v} \right). \quad (4.48)$$

здесь

$$a_1 = \exp\left(-\frac{\pi R \eta_0}{d}\right), \quad a_2 = \frac{1}{a_1} = \exp\left(-\frac{\pi R \eta_0}{d}\right) \quad (4.49)$$

Возвращаясь к цилиндрическим координатам ρ и z , запишем также следующее выражение для потенциала [88, p. 191, 89]:

$$\phi(\rho, z) = V_2 + (V_0 - V_1)P_1\left(\frac{\rho}{R_1}, z, R\right) + (V_1 - V_2)P_2\left(\frac{\rho}{R_2}, z, R\right), \quad (4.50)$$

где

$$P_k\left(\frac{\rho}{R_k}, z, R\right) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{2 \cos \frac{\pi}{d} z}{\left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{-\frac{\pi R}{d}}}. \quad (4.51)$$

Функции $P_k\left(\frac{\rho}{R_k}, z, R\right)$ ($k = 1, 2$) зависят также от параметра $R = \sqrt{R_1 R_2}$. Формулы (4.44), (4.45) дают простое аналитическое выражение для электростатического потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы, удобное для проведения численных расчетов.

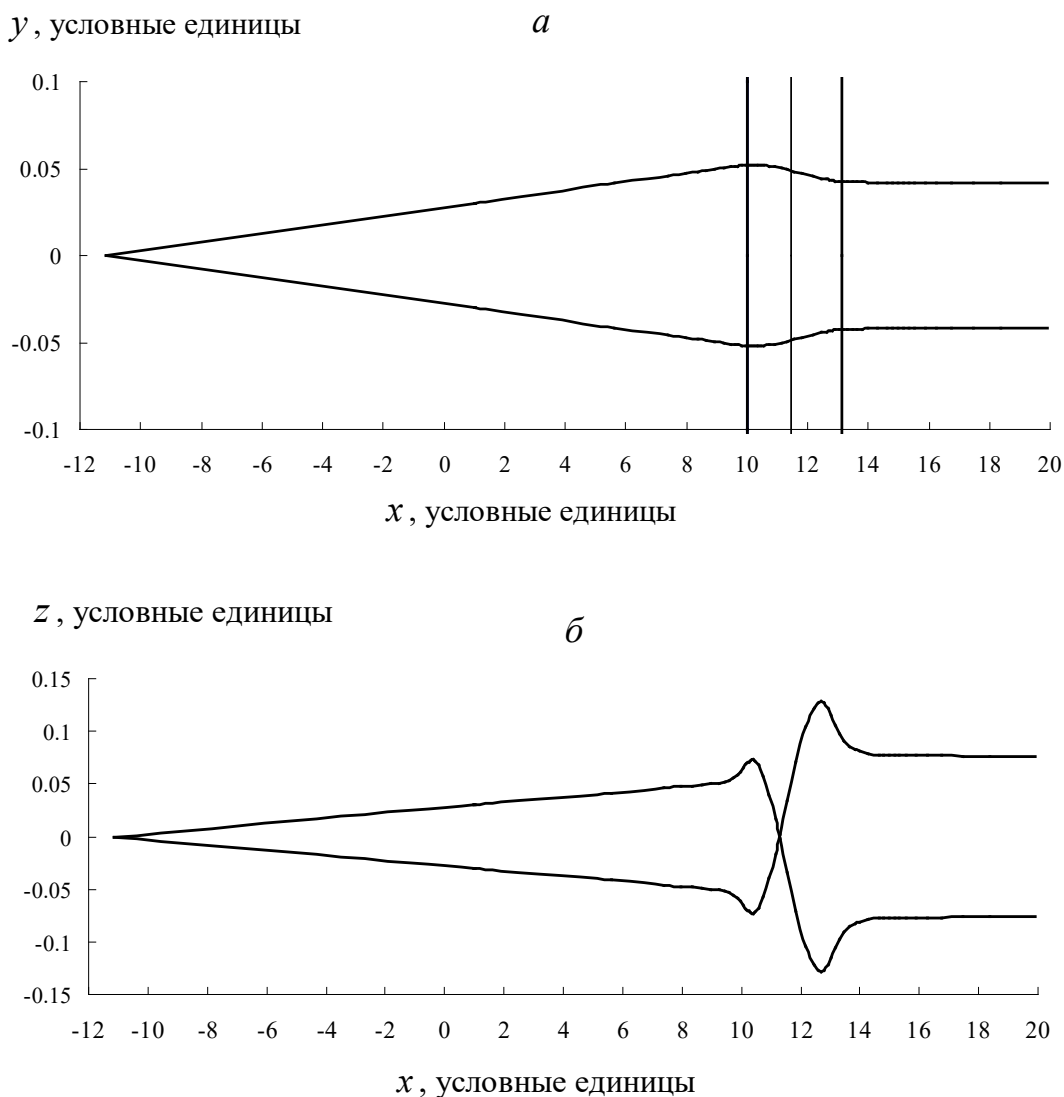
Таким образом, получено простое аналитическое выражение для электростатического потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы [90].

Расчет траекторий частиц в трансаксиальной коллиматорной линзе также проводился путем численного интегрирования уравнений (4.42). Начальные условия для частиц задавались следующим образом:

$$\begin{aligned} x_0 = l, |y_0| \leq a, |z_0| \leq b; |\dot{y}_0| \leq \sqrt{2(1 + \varepsilon)} \sin \alpha, \\ |\dot{z}_0| \leq \sqrt{2(1 + \varepsilon)} \sin \beta, \\ \dot{x}_0 = \sqrt{2(1 + \varepsilon) - \dot{y}_0^2 - \dot{z}_0^2}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Здесь ε – относительный разброс по энергии на входе в коллиматорную линзу; постоянные a и b определяют ширину и высоту источника ионов; углы α и β определяют разброс частиц по направлению вылета из источника в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно.

Была рассчитана эмиссионная трехэлектродная трансаксиальная линза в режиме анаморфота, которая имеет следующие параметры: $R_1 = 10d$ и $R_2 = 13.2d$; $V_{l0} = 1$, $V_{l1} = 0.068$ и $V_{l2} = 0.4$ с фокусным расстоянием примерно равным $f_1 \cong 20d$. Ход траекторий ионов в линзе в двух проекциях в параксиальном приближении показан на рисунке 4.8, где все размеры даны в единицах d [87 р. 3, 91]



а – горизонтальное направление; б – вертикальное направление

Рисунок 4.8– Ход ионных траекторий в коллиматорной линзе в проекциях на горизонтальное a и вертикальное b направления

Рассматривались пучки в анализаторе с осевой траекторией симметричной относительно плоскости xz . Геометрические и полевые параметры

конусовидной призмы подбирались так, чтобы выполнялись условия ахроматичности и телескопичности. КАП задается следующими параметрами: $\chi = 5^\circ$, $\gamma_H = 208^\circ$, $\gamma_E = 294.77^\circ$, $V_2/V_0 = 16.6482$, $V_1 = V_2$, $C_2 = 0.3143$, радиус кривизны осевой траектории в центре магнита $r_m = 12.3964$. На входе в призму угол наклона осевой траектории к оси y равен $\Psi_{c0} = 81,69781^\circ$. Относительный энергетический разброс в источнике изменялся в интервале $\varepsilon = \pm 0.01$, угловая дисперсия по энергии $D'_\varepsilon \leq 0.002$. Координаты частиц на входе в призму преобразовывались в декартовы координаты, связанные с КАП. Точка входа осевой траектории в КАП в этих координатах: $x_0 = -15.0$, $y_0 = -3.90061$.

Отметим также, что при расчетах потенциалы электродов призмы умножаются на $k = V_0/V_{l0} = 0.4$, так как потенциалы на выходе из коллиматорной линзы V_{l2} и на входе в КАП V_0 одинаковы $V_0 = V_{l2}$. Разница в массах частиц задавалась путем изменения потенциала магнитного поля:

$$C_2 \rightarrow C_2 \sqrt{(1 + \gamma)k}.$$

Угловые хроматические aberrации КАП можно описать следующей формулой, определяющей изменение угла выхода частицы из КАП:

$$\Delta\Psi = D'_{xp}\varepsilon + A_2\varepsilon^2 + A_3\varepsilon^3. \quad (4.47)$$

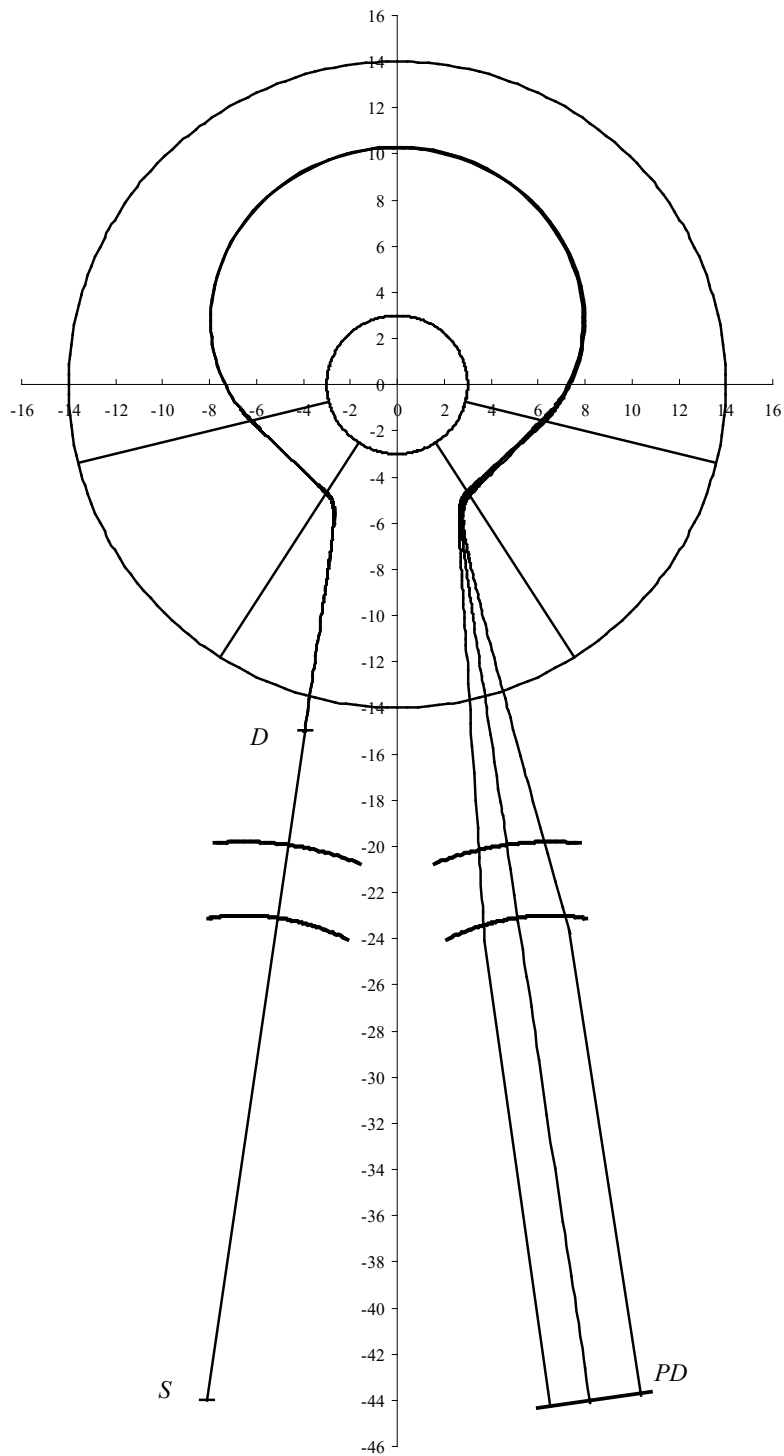
Формула (4.47) справедлива вплоть до значений $\varepsilon = \pm 0.1$. Здесь коэффициенты хроматической aberrации: $A_2 = 0.47$, $A_3 = -0.56$.

На рисунке 4.9 показано поведение узкого пучка ионов в призмном анализаторе с КАП и его разделение по массам. На рисунке 4.7 схематически изображена КАП и показаны границы электродов коллиматорной и фокусирующей трансаксиальных линз. Численные значения на координатных осях приведены в единицах d .

На рисунке 4.9 изображены осевая траектория ($\gamma = 0$) и две крайние траектории, по которым движутся ионы с относительной разницей в массах $\gamma = \pm 0,002$. Визуально видно, что угловое разделение по массам нелинейно. Угловое отклонение траекторий $\Delta\Psi$ от осевой траектории в зависимости от γ хорошо описывается следующей формулой (4.48):

$$\Delta\Psi = D'_m\gamma + A_{2m}\gamma^2. \quad (4.48)$$

Здесь угловая дисперсия по массе $D'_m = 51.275$, а коэффициент второго порядка $A_{2m} = 4995.9$.



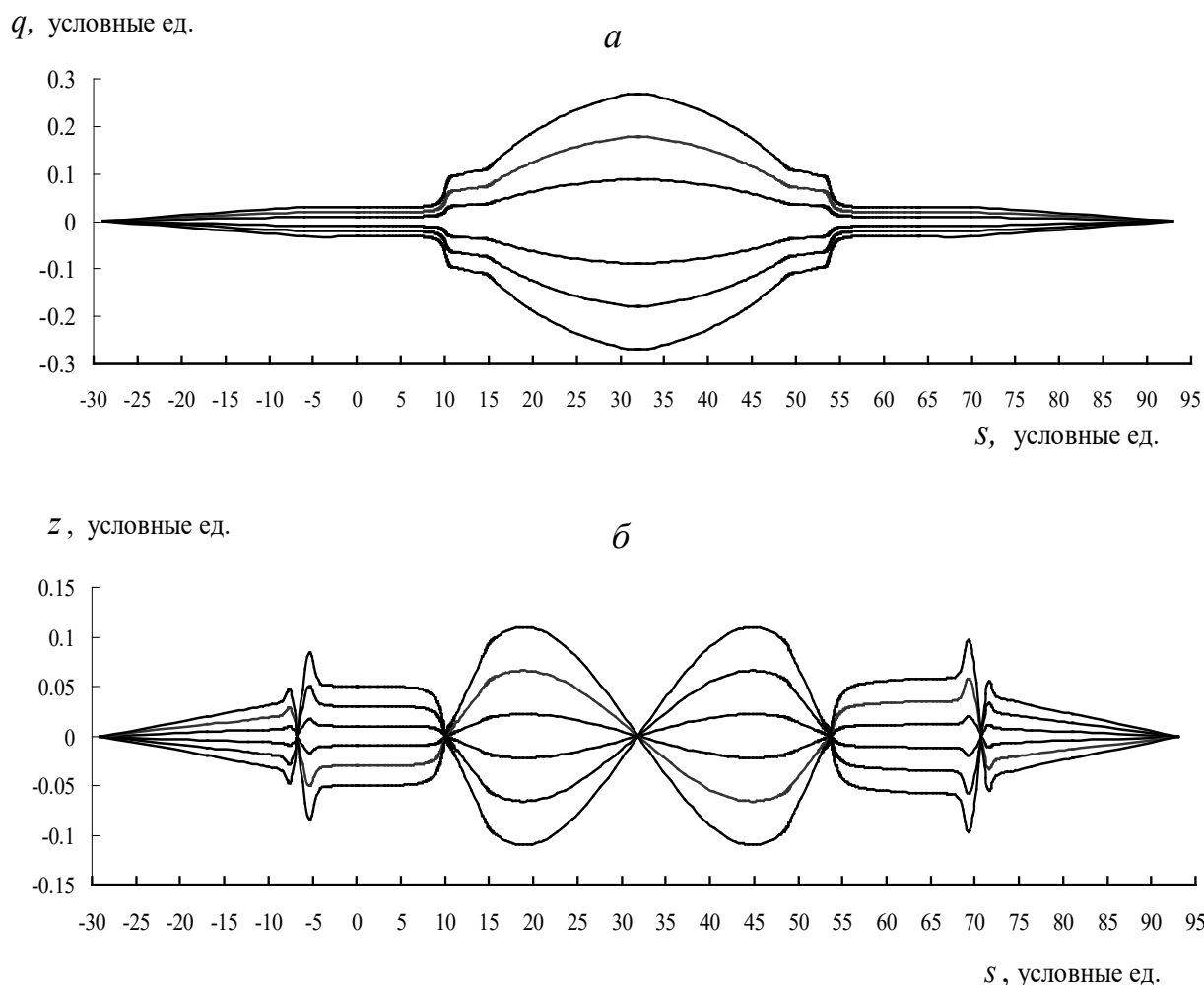
S – источник ионов, D – диафрагма, PD – позиционный детектор

Рисунок 4.9 – Разделение параллельного узкого пучка ионов по массам в КАП для двух масс с относительной разницей в массах $\gamma = \pm 0,002$

На рисунке 4.10 показаны проекции узкого пучка ионов на горизонтальное и вертикальное направления в параксиальном приближении.

Здесь s – длина пути вдоль осевой траектории, q – отклонение частиц от

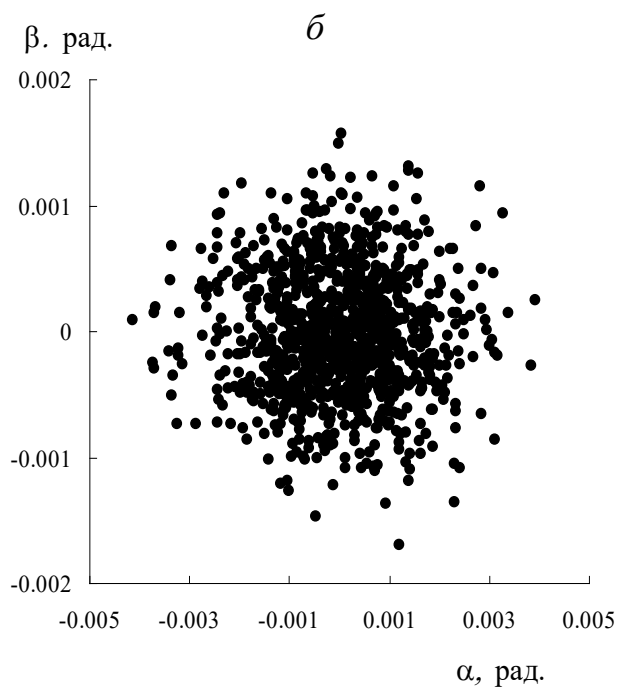
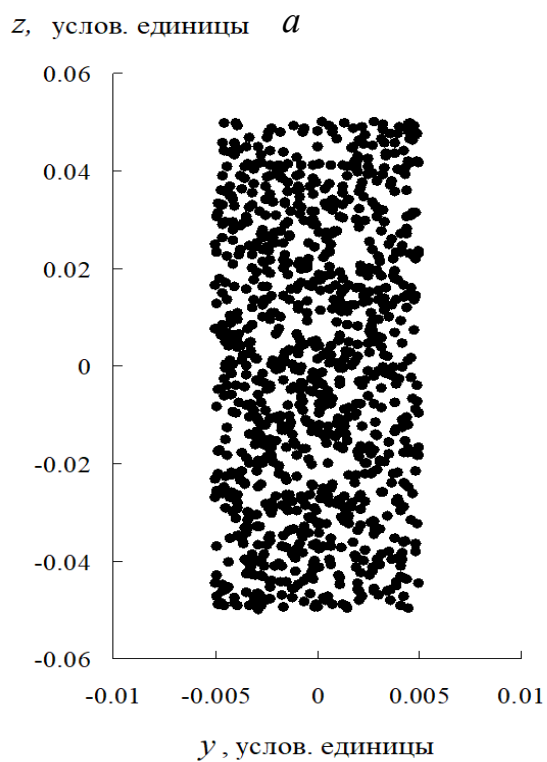
осевой траектории в горизонтальном направлении. Видно, что в вертикальном направлении пучок образует пять промежуточных линейных фокусов.



а – горизонтальное направление; б – вертикальное направление

Рисунок 4.10 – Проекция ионного пучка на горизонтальное a и вертикальное b направления

Проводилось интегрирование $N = 1000$ траекторий, для которых начальные условия определялись в заданных интервалах методом Монте-Карло. Параметры пучка задавались примерно, как в масс-спектрометре Матсуда. Результаты расчета приведены на рисунках 4.11, 4.12 и 4.13. Распределение частиц в ионном источнике показано на рисунке 4.11. Если считать $d = 1$ см, то ширина источника $S \cong 100$ мкм, ($|y_0| \leq 0.005$). По углам α и β предполагалось нормальное распределение в интервале «трех сигма». Нормальное распределение моделировалось с помощью алгоритма Метрополиса. Бралось следующие значения интервалов: $|z_0| \leq 0.05$, $|\alpha| \leq 0.005$ (в 2 раза больше, чем у Матсуда), $|\beta| \leq 0.002$. Для сравнения у Матсуда $S \cong 84$ мкм, $|\alpha| \cong |\beta| \leq 0.0025$. [87 p. 4]



а – горизонтальное направление; *б* –вертикальное направление

Рисунок 4.11 – Распределение частиц в ионном источнике по координатам *а* и углам вылета *б*

На рисунке 4.12 показано распределение частиц в плоскости детектора, куда из 1000 частиц долетели лишь примерно 630. Остальные частицы были задержаны диафрагмами или попали на электроды КАП.

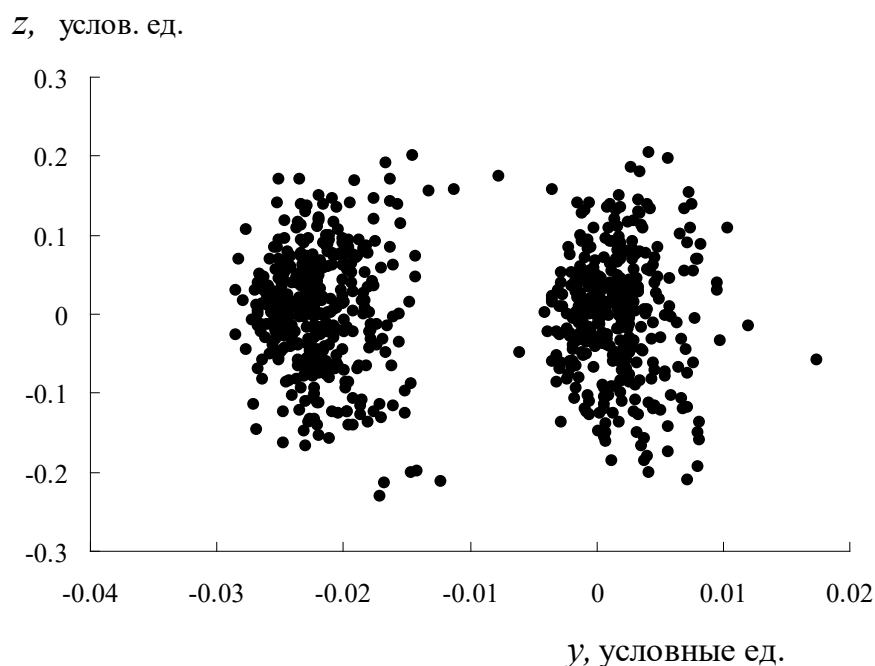


Рисунок 4.12 – Распределение частиц в плоскости детектора для двух масс с $\gamma = 0$ и $\gamma = 1/20000$

На рисунке 4.13 показан масс-спектр для массового дуплета, половина частиц которого имела $\gamma = 0$, а половина – $\gamma = 1/20000$, т.е. разрешение здесь более 20000, а на полувысоте пиков разрешение около 40000 [92].

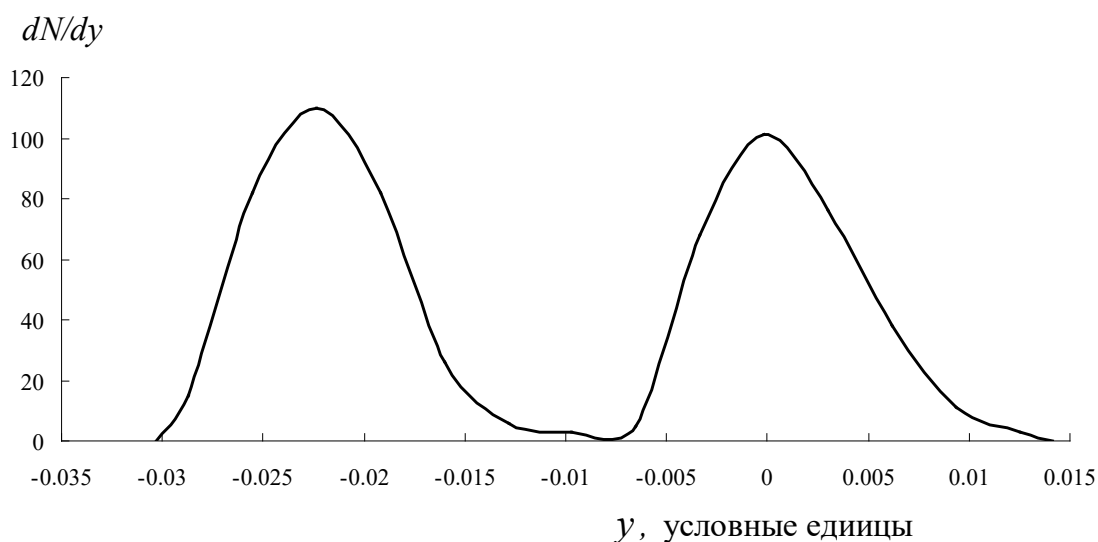


Рисунок 4.13 – Масс-спектр дуплета масс, левый пик соответствует $\gamma = 1/20000$, а правый – $\gamma = 0$

Таким образом, по сравнению с масс-спектрометром Матсуда при почти одинаковых размерах прибора и параметрах ионного источника мы получаем в 8 раз большее разрешение. В масс-спектрометре Матсуда было получено разрешение 5000 при $S \cong 84$ мкм, а у нас 40000 при $S \cong 100$ мкм.

Наибольшие aberrации в призмённом масс-анализаторе обусловлены отклонением частиц от средней плоскости. Дело в том, что идеальная вертикальная фокусировка пучка, как показано на рисунке 4.10, осуществляется только в параксиальном приближении, которое справедливо лишь в том случае, когда отклонение пучка от средней плоскости не превосходит $0.05d$. Даже обрезая пучок двумя диафрагмами, которые расположены на входе и на выходе из КАП, мы получаем aberrации, сравнимые по величине с шириной источника.

Если использовать более узкие пучки, то можно добиться 100% прохождения пучка через анализатор и при этом получить более высокое разрешение. Если взять следующие значения интервалов: $|y_0| \leq 0.0025, |z_0| \leq 0.01, |\alpha| \leq 0.005, |\beta| \leq 0.0005$, то получим практически 100% прохождение частиц и масс-спектр для массового дуплета, половина частиц которого имела $\gamma = 0$, а половина – $\gamma = 1/20000$, представленный на рисунке 4.14. Видно, что разрешение здесь более 50000 на полувысоте пиков [87 р. 4].

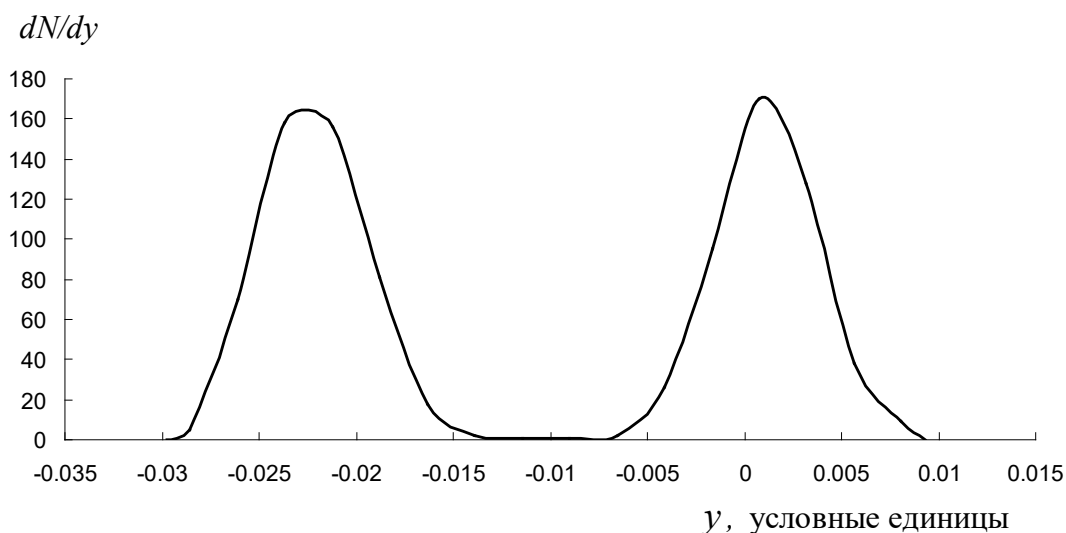


Рисунок 4.14 – Масс-спектр дуплета масс, левый пик соответствует $\gamma = 1/20000$, а правый – $\gamma = 0$

В настоящее время широко используются времяпролетные масс-спектрометры, а также Orbitrap, у которых имеется целый ряд позитивных качеств, но все они эксплуатируются в импульсном режиме. Статические масс-спектрометры могут работать в стационарном режиме, накапливая сигнал или отслеживая динамику изучаемых процессов, поэтому у них всегда остаются свои области практического применения.

Как известно, линейная дисперсия D_m секторных масс-спектрометров пропорциональна их линейным размерам. Если дисперсия D_m прибора равна нескольким метрам, то он имеет длину ионной траектории примерно 10 м. Это уникальные приборы, которые в основном используются для прецизионных измерений в ядерной физике. Их удельная дисперсия (линейная дисперсия D_m отнесенная к длине ионной траектории), как правило, не превосходит 0.5. Настольный масс-спектрометр Матсуда является лучшим статическим масс-

спектрометром по этому показателю. Его линейная дисперсия $D_m \cong 1$ м при длине ионной траектории, также примерно равной 1 м, то есть удельная дисперсия этого прибора примерно равна единице.

В нашей работе все расчеты выполнены в безразмерных единицах. Размеры реального прибора можно определить, выбрав величину d (расстояния между параллельными электродами трансаксиальной линзы). Если взять $d = 1$ см, то длина ионной траектории будет равна примерно 1 м, как в приборе Матсуда. При этом линейная дисперсия нашего анализатора $D_m \cong 10$ м. Таким образом, в рассчитанном нами приборе удельная дисперсия равна примерно 10, что на порядок выше, чем в приборе Матсуда.

За большую удельную дисперсию мы платим уменьшением максимальной анализируемой массы M , которая определяется по формуле (4.49):

$$M = \frac{er_m^2 B^2}{2V_m} \quad (4.49)$$

где e – элементарный заряд;

r_m – радиус кривизны траектории в центре магнита;

B – индукция магнитного поля;

V_m – потенциал, определяющий энергию ионов в магнитном поле. Для определения потенциала V_m необходимо учитывать уменьшение энергии ионов после прохождения поля коллиматорной линзы и их ускорение в электрическом поле КАП.

Ускоряющий потенциал на входе в анализатор совпадает с потенциалом V_{l0} на входном электроде коллиматорной линзы. Выразим потенциал V_m через потенциал V_{l0} . Для этого необходимо учесть, что потенциал V_{l2} на выходе из коллиматорной линзы равен потенциалу V_0 на входе в КАП, то есть $V_0 = V_{l2}$. Учитывая, что $\frac{V_{l2}}{V_{l0}} = k = 0.4$, а $\frac{V_1}{V_0} = \frac{V_1}{V_{l2}} \cong 16.65$, получим $V_m = V_1 \cong 6,67V_{l0}$.

В приборе Матсуда ускоряющее напряжение $V_m = 2.5$ кВ, $B = 1.52$ Т, $r_m = 0.15$ м, подставляя эти значения в формулу (4.50), получим $M = 1000$ а. е. м. Таким образом, при одинаковых размерах и одинаковом ускоряющем потенциале в нашем анализаторе M в 10 раз меньше чем в приборе Матсуда, хотя удельная дисперсия в 10 раз больше.

Мы провели расчеты, предполагая, что начальный относительный разброс энергий ионов $\varepsilon = \pm 0.01$. Однако большая дисперсия по массе и высокая ахроматичность рассчитанного масс-анализатора позволяют получить разрешение 20000 даже при $\varepsilon = \pm 0.04$, поэтому в нашем анализаторе можно использовать пучки с меньшей начальной энергией. При $V_{l0} = 1.0$ кВ энергия ионов в области магнита будет определяться потенциалом $V_m \cong 6,67V_{l0} = 6.67$ кэВ, при этом $M \cong 250$ а. е. м. Согласно формуле (4.50) всегда существует возможность существенного увеличения M , путем увеличения линейных размеров прибора, приводящих к увеличению r_m , или индукции магнитного поля B . [87 р. 6].

Имеется практический опыт создания статического конусовидного магнитного поля в масс-спектрометре Осака-2 [94], на котором получено разрешение один миллион. Модернизация этого прибора в наш анализатор с КАП позволила бы увеличить его разрешение более чем в 20 раз при тех же линейных размерах. При таком разрешении можно было бы сепарировать атомные ядра в метастабильном состоянии или попытаться решить задачу определения массы нейтрино.

Отметим также, что рассчитанный масс-анализатор с КАП может быть использован и как масс-спектрограф. Действительно, компактный масс-спектрограф с высоким разрешением и чувствительностью можно осуществить, установив позиционный детектор в фокальной плоскости фокусирующей линзы. При этом можно наблюдать довольно широкий фрагмент массового спектра с высоким разрешением. Таким образом, можно создать небольшой прибор для изотопного и химического анализа с рекордными характеристиками, что позволит получать новые интересные экспериментальные результаты.

4.4 Программные средства моделирования ЭОС

В настоящее время наблюдается отклонение от классической традиции при решении проблем оптики, заряженных частиц. Эти задачи пытаются решать прямым способом за счет вычислительной мощности современных компьютеров (то есть непосредственно численно интегрируют известные уравнения электродинамики и механики). Сейчас создано много прикладных программ, позволяющих моделировать поведения заряженных частиц в различных довольно сложных корпускулярных оптических системах (КОС). Одной из самых известных программ является программа SIMION (Scientific Instrument Services, Ringoes, NJ), которая используется многими исследователями [95, 96]. Однако полный отказ от аналитических методов не привел к значительному прогрессу в создании новых высокоэффективных КОС.

Наиболее точными оценками относительно прогнозируемых параметров устройств электронной оптики со сложной электродной конфигурацией обладают численные методы.

Численное моделирование электронно-оптических систем (ЭОС) традиционно включает в себя три самостоятельных раздела:

- расчет электростатического и магнитного поля в рабочем объеме;
- расчет траекторий заряженных частиц в электромагнитном поле системы;
- вычисление интегральных характеристик ЭОС, таких как угловая фокусировка определенного порядка, дисперсия, разрешающая способность, абберационные искажения и т.д.

Для эффективного решения задач численного моделирования электронно-оптических систем можно использовать компьютерное приложение «FOCUS» [97], представляющее собой совокупность нескольких программных модулей - Design, Field_E, Field_M, Path_S, Path_D, каждый из которых решает самостоятельную задачу:

- модуль Design предназначен для формирования и модификации конструкции ЭОС;

- модуль Field_E реализует метод граничных элементов расчета функции распределения потенциала в ЭОС;
- модуль Field_M обеспечивает вычисление функции распределения индукции магнитного поля множества соленоидов;
- модуль Path_S предназначен для траекторного экспресс-анализа статических ЭОС;
- модуль Path_D предлагает более мощный набор пользовательских функций и аналитических возможностей при проведении трехмерного траекторного анализа систем с переменным электрическим и постоянным магнитным полями.

Программа позволяет рассчитывать траектории частиц в случае сложной формы питающего напряжения, с учетом поперечных скоростей по отношению к меридиональной плоскости и в условиях столкновений ионов с молекулами остаточного (буферного) газа. В программе реализована возможность оценки функций пропускания (инструментальных функций) ЭОС по энергиям и массам. [98].

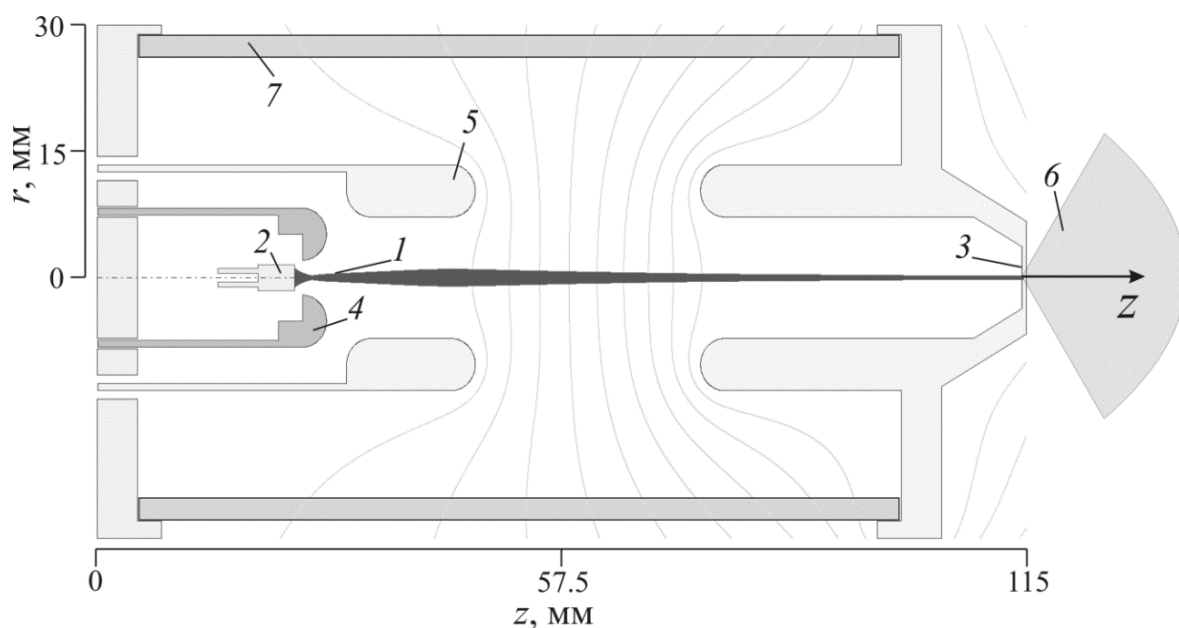
На основе численных исследований сделан вывод о том, что цилиндрический зеркальный анализатор (ЦЗА) с тремя, четырьмя и пятью парами корректирующих колец обеспечивает режим угловой фокусировки второго порядка, соответствующий идеальному цилиндрическому зеркалу. Формирование неоднородных полей вдоль оси симметрии ЦЗА с помощью двух пар корректирующих колец обеспечивает режим трехкратной фокусировки второго порядка, что приводит к увеличению остроты фокуса на порядок по сравнению с идеальным зеркалом, и в конечном счете, к увеличению на порядок разрешающей способности по энергиям.

В качестве примера Приложение “FOCUS” позволило в условиях высокой надежности результатов разработать электронно-оптическую схему рентгеновской трубки.

Результаты траекторного анализа микрофокусной трубки представлены на рисунке 5.10 Траекторный анализ проводился без учета влияния пространственного заряда, поскольку уровень тока в трубке не превышает нескольких мА. [99].

Трубка работает следующим образом.

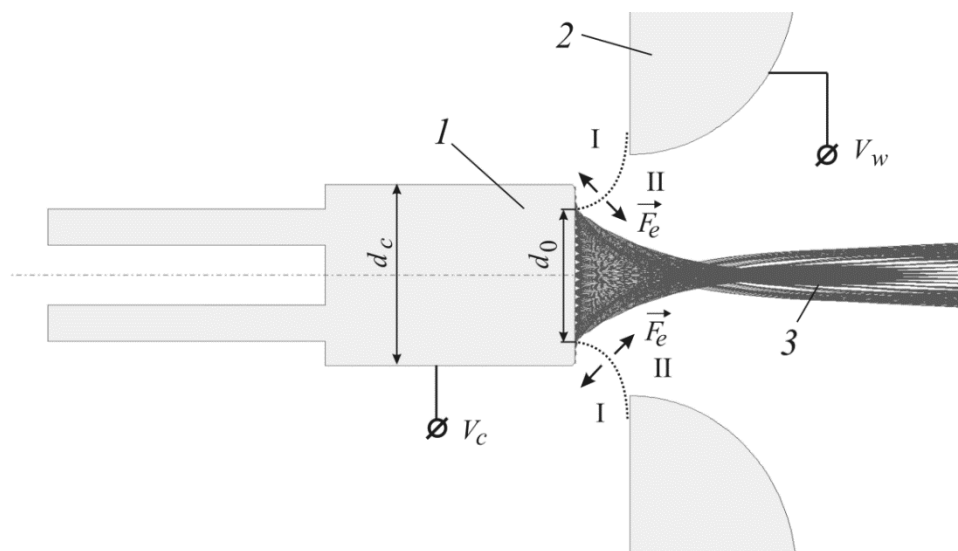
Электроны 1, эмиттируемые с основания цилиндрического термоэмиссионного катода 2, попадают в ускоряющее электрическое поле между катодом 2 с потенциалом V_c и анодом 3, имеющим положительный потенциал V_a . Здесь и далее все потенциалы рассматриваются относительно потенциала катода V_c . Электронный поток 1 образует изображение диаметром 2δ на мишени анода 3. Формирование изображения осуществляется электрическим полем, созданным небольшим отрицательным потенциалом V_w на электроде Венельта 4, а также положительным потенциалом V_f на фокусирующем электроде 5 и ускоряющим потенциалом V_a на аноде 3. Область взаимодействия ускоренных электронов 1 с материалом мишени анода 3 становится источником эмиссии рентгеновских лучей 6. Электроды трубки размещены в керамическом корпусе 7.



1 – электронный луч, 2 – термоэмиссионный катод, 3 – анод, 4 – электрод Венельта, 5 – фокусирующий электрод, 6 – рентгеновское излучение, 7 – керамический корпус трубки

Рисунок 4.15 – Результаты траекторного анализа аксиально-симметричной микрофокусной трубки

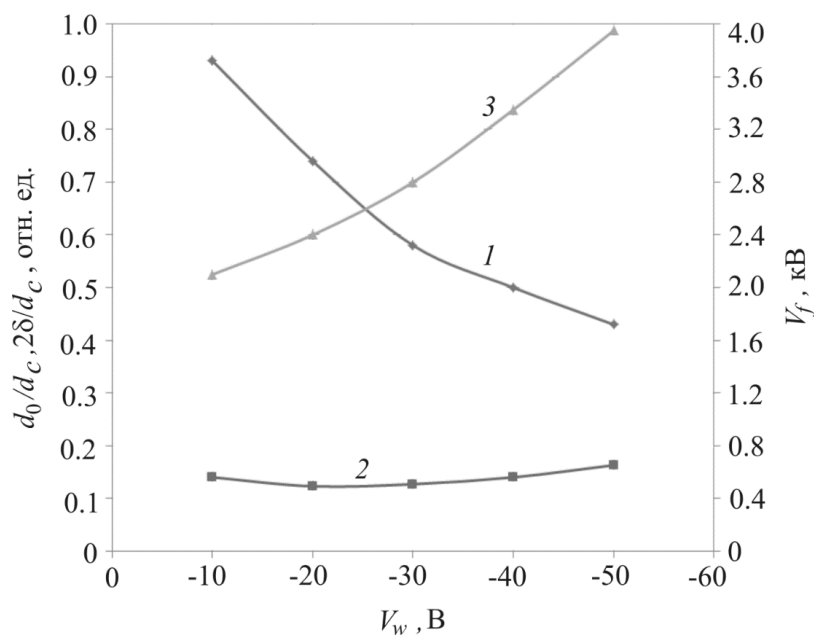
Электрод Венельта служит для первичного формирования электронного потока и регулировки размеров эффективной области эмиссии электронов с катода за счет изменения величины потенциала V_w , т.к. от величины данного потенциала зависит диаметр d_0 нулевой эквипотенциали вблизи поверхности катода (рисунок 4.15). Нулевая эквипотенциаль делит прикатодную область на две подобласти - I и II. Электроны, испущенные катодом (в том числе, его боковой поверхностью) выше нулевой эквипотенциали (подобласть I), возвращаются на катод; испущенные ниже ее (область II), становятся частью потока, движущегося к аноду. Этот эффект является результатом действия электростатической силы \vec{F}_e , направления которой в соответствующих подобластях схематично показаны на рисунке 4.15.



1 – катод, 2 – электрод Венельта, 3 – электронный луч. Прерывистая линия, разделяющая области I и II, является нулевой эквипотенциалью.

Рисунок 4.16 – Формирование электронного луча в прикатодной области

На рисунке 4.17 (кривая 1) показана зависимость относительного диаметра d_0/d_c нулевой эквипотенциали вблизи поверхности катода от величины потенциала V_w электрода Венельта, где d_c – диаметр катода.



1 - относительный диаметр d_0/d_c нулевой эквипотенциали вблизи поверхности катода, 2 – относительный диаметр $2\delta/d_c$ фокального пятна, 3 - потенциал V_f фокусирующего электрода. Потенциал анода $V_a=80$ кВ.

Рисунок 4.17 – Зависимости геометрических и электрических параметров микрофокусной трубки от потенциала электрода Венельта

Из зависимости следует вывод о возможности значительного уменьшения диаметра области эмиссии увеличением абсолютной величины отрицательного потенциала V_w . Заметим, что для позиционирования наименьшего сечения (фокуса) электронного потока на поверхность мишени анода требуется соответствующая регулировка потенциала V_f фокусирующего электрода (рисунок 5.12, кривая 3). К сожалению, уменьшение области эмиссии не приводит к уменьшению диаметра 2δ фокального пятна (рисунок 4.17, кривая 2). Это связано с наличием больших угловых aberrаций исследуемой ЭОС.

Выводы по четвертому разделу

1. Разработаны и апробированы алгоритмы и программы, с использованием которых выполнен расчет физических и приборных характеристик призменного масс-спектрометра с КАП и трансаксиальными линзами с использованием метода Монте-Карло. При этом начальные условия для заряженных частиц, вылетающих из ионного источника, моделировались в предположении нормального распределения частиц по энергии и углам вылета частиц из источника и равновероятного распределения по координатам.

2. Получены аналитические выражения для потенциала, описывающего поле трансаксиальной линзы.

3. Написана и отлажена компьютерная программа, позволившая анализировать динамику пучка заряженных частиц в трансаксиальной линзе путем численного интегрирования безразмерных уравнений Ньютона.

4. Рассчитаны параметры тормозящей трансаксиальной линзы, работающей в режиме анаморфота.

5. Проведен расчет параметров масс-спектрометров, при которых обеспечивается пространственная фокусировка пучка, а также фокусировка по энергии при высоком значении параметра «качество».

6. Рассчитана схема призменного масс-спектрометра с конусовидной ахроматичной призмой (КАП) и трансаксиальными линзами. Показано, что такой масс-спектрометр при небольших размерах обладает рекордным разрешением и параметром «качество».

7. При увеличении линейных размеров призмы и трансаксиальных линз может быть создан масс-спектрометр с уникально большим разрешением для масс-спектрометрического разделения ядер в возбужденном состоянии.

8. Рассчитанный масс-анализатор с КАП может быть использован и как масс-спектрограф.

9. Разработана и численно исследована электронно-оптическая схема микрофокусной трубки, обеспечивающей ускорение электронного потока и его транспортировку из области эмиссии в точку фокуса с 10-кратным сжатием радиуса сечения.

5 ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ

5.1 Расчет времяпролетного масс-спектрометра на основе осесимметричного цилиндрического зеркала

В настоящее время времяпролетные масс-спектрометры (ВПМС) стали бесценным инструментом исследований в области естественных наук, таких как молекулярная биология, протеомика, геомика и медицина. Благодаря высокой эффективности ВПМС были решены некоторые важные задачи в биологии и медицине, в частности, расшифрованы геномы человека и других организмов.

Этот успех стал возможен благодаря применению новых методов ионизации больших молекул ESI и MALDI, а также совершенствованию ВПМС. Высокие значения разрешающей способности и чувствительности достигаются в ВПМС рефлекторного типа [100, 101], в которых осуществляется времяпролетная фокусировка ионного пучка по энергии. Основным недостатком использования ВПМС отражательного типа обусловлен использованием мелкозернистых сеток для создания ускоряющего электростатического поля. Наличие сеток приводит к ряду негативных эффектов, основным из которых является дисперсия заряженных частиц на неоднородностях поля вблизи ячеек сетки [102].

В настоящее время разрабатываются ионно-оптические элементы, а именно ионные зеркала, в которых ускоряющие поля создаются без применения сеток. Неоднородное ускоряющее поле создается системой электродов, которая является внешней по отношению к пучку ионов. Наряду с ускорением такие поля осуществляют качественную ВП и пространственную фокусировку ионных пучков на входной плоскости детектора ионов. Так, в некоторых исследованиях [103, 104] рассматривался простой времяпролетный масс-анализатор (ВПМА) на основе неоднородного ускоряющего поля с осевой симметрией. Ионы извлекаются из источника импульсным пуском электрического поля ускорителя. Образуется ионный пучок малой длительности, который выталкивается в дрейфовое пространство для дальнейшего времяпролетного анализа ионов по массам.

Идея времяпролетной фокусировки по энергии и схема безмагнитного масс-спектрометра (масс-рефлектрона), реализующая такую фокусировку, впервые опубликована в 60-х годах [105]. Принцип времяпролетной фокусировки получил дальнейшее развитие в целом ряде работ [106-108]. Предложение использовать во времяпролетных масс-спектрометрах бессеточные электростатические ионные зеркала для обеспечения пространственной и времяпролетной фокусировки ионных пакетов впервые высказано независимо и практически одновременно в ряде работ [109-112]. В настоящей работе рассчитывается времяпролетный масс-спектрометр на основе зеркал с аксиальной симметрией.

В разделе 3.2 были получены аналитические выражения для поля осесимметричного цилиндрического зеркала. В данном разделе рассчитывается

времяпролетный масс-спектрометр на основе зеркал с аксиальной симметрией с использованием полученных в разделе 3.2 аналитических выражений.

В реальной системе последний замыкающий электрод может быть выполнен в форме эвипотенциальной поверхности системы с бесконечно протяженным последним электродом. При этом поле системы в области движения пучка останется прежним.

Для нахождения траекторий ионов и времени пролета частиц используются безразмерные уравнения Ньютона. Для заряженной частицы с зарядом q и массой m в электростатическом поле в безразмерных декартовых координатах x, y, z их можно записать в следующем виде [113]:

$$\ddot{x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \ddot{y} = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad \ddot{z} = \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (5.1)$$

Здесь потенциал φ измеряется в единицах V_0 , за единицу длины берется величина R – внутренний радиус цилиндра, точки обозначают производные по безразмерному времени $\tau = t/\tau_0$, где

$$\tau_0 = R \sqrt{\frac{m}{qV_0}}. \quad (5.2)$$

Будем считать, что движение происходит в плоскости xz , тогда $x = \rho$, а $y = 0$. Начальные условия для расчета траекторий при интегрировании уравнений (4.50) можно задать следующим образом:

$$x_0 = \rho_0 \pm \Delta\rho, \quad y_0 = 0, \quad z_0 = 0, \\ \dot{z} = \sqrt{2(1 + \varepsilon) - y_0^2 - z_0^2}, \quad \dot{x}_0 = \alpha, \quad \dot{y}_0 = \beta \quad (5.3)$$

Здесь ε – относительный разброс по энергии на входе в систему. Первоначально будем полагать $\alpha = \beta = 0$.

Рассчитывались траектории заряженных частиц в четырехэлектродных зеркалах. Дифференциальные уравнения (5.1) интегрировались методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Разгонные точки находились методом последовательных сближений Крылова. Относительная точность интегрирования выбиралась равной 10^{-9} .

Рассчитанные траектории ионов представлены на рисунке 5.1. Здесь $V_0 = 1, V_1 = 0.33, V_2 = 0.071, V_3 = -0.092; z_1 = 7.6R, z_2 = 9.6R, z_3 = 11.2R$. На рисунке показаны осевая и крайние траектории пучка с одинаковой энергией ($\varepsilon = 0$), а также две траектории, стартующие по осевой траектории с энергией $\varepsilon = +0.01$ (нижняя траектория, входящая в детектор D) и с энергией $\varepsilon = -0.01$ (верхняя траектория, входящая в детектор D).

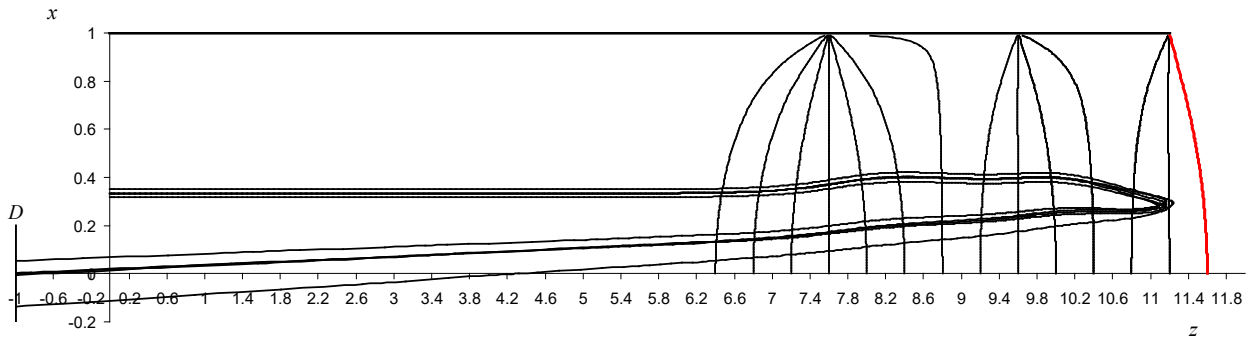


Рисунок 5.1 – Картина эквипотенциалей поля и траектории ионов в четырехэлектродном зеркале $V_0 = 1, V_1 = 0.33, V_2 = 0.071, V_3 = -0.092$; $z_1 = 7.6R, z_2 = 9.6R, z_3 = 11.2R$

Время прилета в детектор осевой траектории пучка в единицах τ_0 равно 26.517, крайних траекторий 26.508 и 26.526; время прилета частицы с $\varepsilon = +0.01$ равно 26.546, а с $\varepsilon = -0.01$ равно 26.545. Здесь мы видим, что время прилета частиц практически не зависит от знака ε , т.е. времяпролетная дисперсия по энергии равняется нулю, а различие во времени пролета относительно осевой траектории видимо связано с абберациями пропорциональными ε^2 .

На рисунке 5.1 замыкающий электрод красного цвета, он пересекает ось z в точке $z = z_n = 11.6R$ и имеет потенциал $V_{n3} = -0.0470$. Форма этого электрода задается функцией $\rho(z)$, которая определяется следующей таблицей 5.1. [113 стр. 18].

Таблица 5.1 – Конфигурация замыкающего электрода

ρ/R	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95
z/R	11.6	11.596	11.583	11.562	11.533	11.495	11.447	11.392	11.330	11.261	11.294

При нахождении траекторий полагалось, что радиус ионного кольца $\rho_0 = R/3$, а толщина $\Delta\rho = \pm \frac{R}{60}$. Предполагалось также, что детектор расположен в бесполовой области, причем плоскость детектора перпендикулярна оси цилиндра и совпадает с плоскостью $z = z_d = -1$.

Для пучка с указанными параметрами был проведен расчет времени прилета частиц в детектор методом Монте-Карло для $N = 1000$ частиц. Результаты расчета представлены на рисунках 5.2 и 5.3. На рисунке 5.2 показано распределение частиц в плоскости детектора D . [113 стр.19].

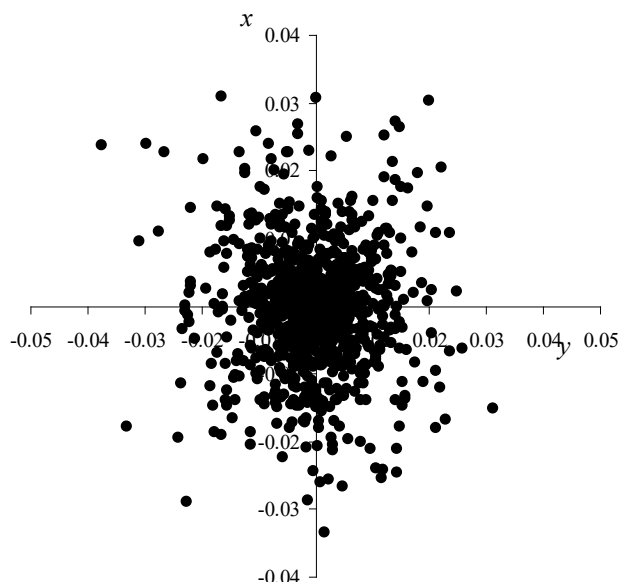


Рисунок 5.2 – Распределение частиц в плоскости детектора

На рисунке 5.3 представлен массовый дуплет для двух масс с относительной разницей в массах $\gamma = 1/4000$ при расчетах предполагалось нормальное распределение частиц по энергетическому разбросу с $\varepsilon = \pm 0.005$ и по координате влета с $\Delta\rho = \pm \frac{R}{60}$ в пределах интервала «три сигма».

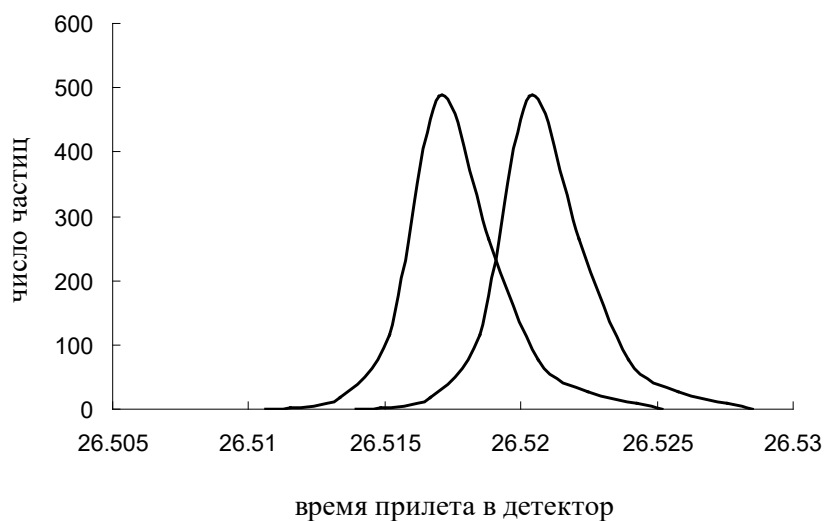


Рисунок 5.3 – Времяпролетный масс-спектр для массового дуплета $\gamma = 1/4000$

При расчете времени пролета частиц учитывалось, что время пролета частиц с большей массой увеличивается в $(1 + \gamma/2)$ раз. Как видно из рисунка 5.3, ожидаемое разрешение ВПМС составляет примерно 4000 на уровне 50% от высоты пиков.

Разрешение можно также увеличить за счет использования диафрагмы, обрезающей пучок ионов перед входом в детектор. Если установить круглую

диафрагму с радиусом r_0 и центром на оси системы в плоскости $z = 0$, то получим следующие результаты, представленные на рисунках 5.4, 5.5 для диафрагмы с $r_0 = 0.015R$. Эта диафрагма из 1000 частиц пропускает более 800, распределение которых в плоскости детектора показано на рисунке 5.4. На рисунке 5.5 представлен массовый дуплет для двух масс с относительной разницей в массах $\gamma = 1/5000$. Как видно из рисунка 5.5, ожидаемое разрешение ВПМС составляет примерно 5000 на уровне 50% от высоты пиков.

Высокая чувствительность ВПМС обеспечивается тем, что большое количество выходящих из импульсного источника ионов в виде кольца сравнительно большой площади, вследствие наличия пространственно-временяпролетной фокусировки «кольцо-ось», концентрируется на входную плоскость импульсного ионного детектора D в виде пятна малого диаметра. При этом достигается предельно высокое отношение сигнал/шум ионных токов.

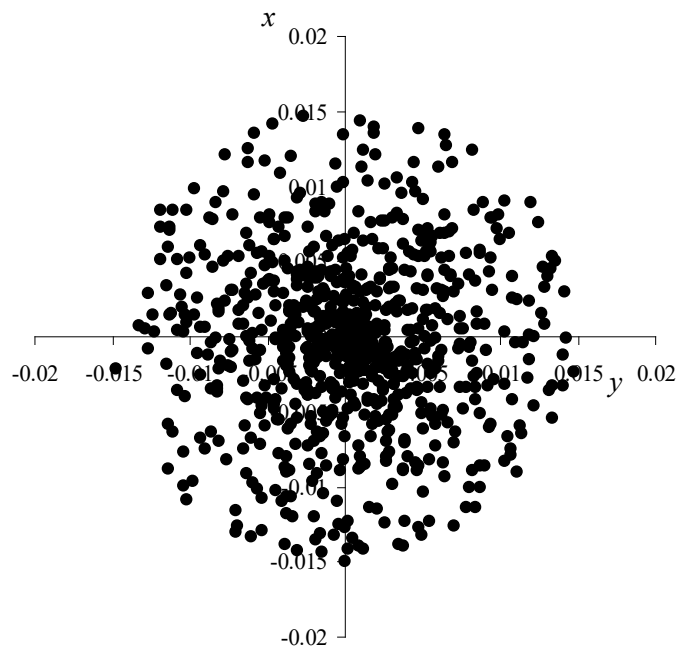


Рисунок 5.4 – Распределение частиц в плоскости детектора при наличии диафрагмы $r_0 = 0.015R$

Вследствие обратимости ионных траекторий рассчитанная система электродов электростатического дефлектора может быть использована как для фокусировки типа «кольцо-ось», так и для обратной фокусировки – «ось-кольцо». Результаты расчета системы «ось-кольцо» представлены на рисунке 4.18.



Рисунок 5.5 – Времяпролетный масс-спектр для массового дуплета с $\gamma = 1/5000$

При расчете траекторий полагалось, что ионы стартуют с оси из окружности радиуса $\Delta\rho = \frac{R}{100}$ под углом $\dot{x} = \alpha = 0.035$. Угловой разброс считался равным $\Delta\alpha = \pm 0.001$. Предполагалось также, что детектор расположен в бесполовой области, причем плоскость детектора перпендикулярна оси цилиндра и совпадает с плоскостью $z = z_d = 2$. Здесь $V_0 = 1, V_1 = 0.35, V_2 = 0.071, V_3 = -0.0863; z_1 = 7.6R, z_2 = 9.6R, z_3 = 11.2R$. На рисунке 5.6 показаны осевая и крайние траектории пучка с одинаковой энергией ($\varepsilon = 0$), а также две траектории стартующие по осевой траектории с энергией $\varepsilon = +0.01$ (нижняя траектория, входящая в детектор D) и с энергией $\varepsilon = -0.01$ (верхняя траектория, входящая в детектор D).

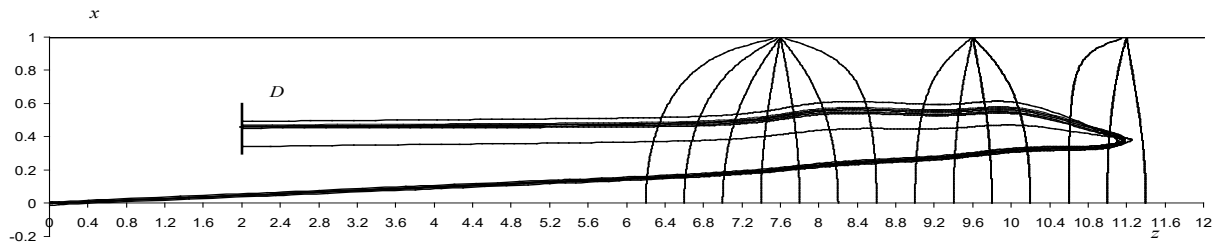


Рисунок 5.6 – Картина эквипотенциалов поля и траектории ионов в четырехэлектродном зеркале ($V_0 = 1, V_1 = 0.35, V_2 = 0.071, V_3 = -0.0863; z_1 = 7.6R, z_2 = 9.6R, z_3 = 11.2R$)

Время прилета в детектор осевой траектории пучка в единицах $\tau_0(7)$ равно 24.212, крайних траекторий 24.202 и 24.222; время прилета частицы с $\varepsilon = +0.01$ равно 24.178, а с $\varepsilon = -0.01$ равно 24.337. [113 стр.19].

Возможны два режима пространственно-времяпролетной фокусировки: «кольцо-ось» и «ось-кольцо». Распределение потенциала в зеркалах представлено в достаточно простом аналитическом виде. Для нахождения траекторий и времени пролета заряженных частиц в электростатическом поле дефлектора используются безразмерные уравнения Ньютона, которые

интегрируются методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования.

Высокая чувствительность ВП МС обеспечивается тем, что большое количество выходящих из импульсного источника ионов в виде кольца сравнительно большой площади, вследствие наличия пространственно-времяпролетной фокусировки «кольцо-ось», концентрируется на входную плоскость импульсного ионного детектора D в виде пятна малого диаметра. При этом достигается предельно высокое отношение сигнал/шум ионных токов.

5.2 Расчет времяпролетного масс-анализатора на основе трансаксиальных зеркал

Здесь рассмотрено движение заряженных частиц, вылетающих из точечного источника, расположенного в средней плоскости трансаксиального зеркала. Показано, что в результате отражения в трехэлектродном трансаксиальном зеркале может формироваться параллельный объемный пучок. Для расчета траекторий частиц используются безразмерные уравнения Ньютона и аналитические выражения для потенциала, с хорошей точностью описывающие поле трехэлектродного трансаксиального зеркала. Рассчитаны два режима вертикальной фокусировки пучка. Трансаксиальные зеркала могут быть использованы для создания высокоэффективных времяпролетных масс-спектрометров.

Известно, что при расчете траекторий заряженных частиц в электростатических зеркалах возникают математические трудности, связанные с тем, что в окрестности точек поворота радиусы кривизны траекторий стремятся к нулю. При этом наклон траекторий к оптической оси и относительный разброс энергий частиц неограниченно увеличиваются. Все эти трудности останутся в стороне, если интегрировать не уравнения траекторий, а уравнения Ньютона относительно времени движения частиц. Численное интегрирование уравнений Ньютона значительно упрощается, если известны аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические поля зеркал. Для нахождения потенциалов, описывающих электростатические поля корпускулярно-оптических систем (КОС), как правило, необходимо решить задачу Дирихле для скалярного потенциала, удовлетворяющего уравнению Лапласа. Потенциалы трансаксиальной КОС в цилиндрической системе координат, зависят только от переменных ρ и z и удовлетворяют уравнению Лапласа [114].

Наиболее общим методом решения краевой задачи Дирихле для уравнения

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0$$

является метод разделения переменных. В этом случае потенциалы представляются в виде рядов функций Бесселя. Однако эти решения трудно использовать для численных расчетов из-за плохой сходимости ряда. В работах [78, р. 1354-1355; 79 р. 2-6, 85, р. 8-13] найдены простые приближенные

аналитические выражения для потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы, которые также с хорошей точностью описывают поле трансаксиального зеркала. Такие зеркала могут быть использованы, в частности, для создания времяпролетных масс-спектрометров.

Трехэлектродная трансаксиальная линза хорошо описана в разделе 4. Такое зеркало схематично показано на рисунке 4.5. На рисунке также показана соответствующая декартова система координат x, y, z . Начало декартовой системы координат находится в средней плоскости зеркала, которая совпадает с плоскостью $xу$; V_{10} , V_{11} и V_{12} - потенциалы электродов, d - расстояние между пластинами. Промежутки между электродами считаются бесконечно малыми. Вдали от краев пластин потенциал φ зависит только от переменных $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ и z .

Вводя безразмерные переменные (3.36):

$$\eta = \ln \frac{\rho}{R}, \quad \zeta = \frac{z}{R}.$$

где $R = \sqrt{R_1 R_2}$ получаем следующее уравнение для потенциала:

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} = 0. \quad (5.4)$$

Гармоническая составляющая $F(\eta, \zeta)$ электростатического потенциала $\varphi(\eta, \zeta)$ удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа и является гармонической функцией безразмерных переменных η и ζ . Поэтому для расчета можно использовать аппарат теории функций комплексного переменного (ТФКП). Полученные таким образом аналитические выражения для потенциала $\varphi(\eta, \zeta)$ дают хорошее приближение для потенциала, поскольку он точно удовлетворяет заданным граничным условиям Дирихле, $\rho \cong R$ при ($\eta = 0$) они удовлетворяют двумерному уравнению Лапласа.

В цилиндрических координатах аналитические выражения для электростатического потенциала трехэлектродных трансаксиальных линз можно записать в виде (4.44) и (4.45) [101, с. 16-19]:

$$\varphi(\rho, z) = V_2 + (V_0 - V_1)P_1\left(\frac{\rho}{R_1}, z, R\right) + (V_1 - V_2)P_2\left(\frac{\rho}{R_2}, z, R\right),$$

где

$$P_k\left(\frac{\rho}{R_k}, z, R\right) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{2 \cos \frac{\pi}{d} z}{\left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{-\frac{\pi R}{d}}} \quad (k=1, 2).$$

Это довольно простое аналитическое выражение, полученное для

электростатического потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы, также может быть использовано для расчета трансаксиальных зеркал.

При исследовании динамики пучка заряженных частиц в трансаксиальных зеркалах воспользуемся безразмерными уравнениями Ньютона. Уравнения движения заряженной частицы с зарядом и массой в электростатическом поле в безразмерных декартовых координатах x, y, z можно записать в следующем виде:

$$\ddot{x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \ddot{y} = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad \ddot{z} = \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (5.5)$$

Здесь потенциал φ измеряется в единицах V_0 ; индексы при Φ обозначают частные производные по соответствующим координатам; за единицу длины принимается расстояние d между параллельными плоскостями трансаксиального зеркала; точками обозначены производные по безразмерному времени $\tau = t/\tau_0$, где

$$\tau_0 = d \sqrt{\frac{m}{qV_0}}. \quad (5.6)$$

Начальные условия для расчета траекторий при интегрировании уравнений (5.2) можно задать следующим образом:

$$x_0 = a, \quad y_0 = b, \quad z_0 = c, \quad \dot{x}_0 = \sqrt{2(1 + \varepsilon) - \dot{y}_0^2 - \dot{z}_0^2}, \quad \dot{y}_0 = \sqrt{2(1 + \varepsilon) \sin \alpha}, \\ \dot{z}_0 = \sqrt{2(1 + \varepsilon) \sin \beta}.$$

Здесь ε - относительный разброс энергии на входе в систему; углы α и β определяют угловой разброс пучка в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно. При движении в средней плоскости зеркала, где $z_0 = \dot{z}_0 = 0$ угол α , образованный лучом с осью x , которая является главной оптической осью зеркала, определяется выражением:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\dot{y}_0}{\dot{x}_0}. \quad (5.7)$$

Для вычисления производных потенциала, входящего в уравнения (5.6), используются следующие формулы для производных потенциала, определяемых выражениями (4.44) и (4.45):

$$\frac{\partial P_k}{\partial \rho} = - \frac{\frac{2R}{R_k d} \cos \frac{\pi}{d} z \left[\left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{\frac{\pi R}{d}-1} + \left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{-\frac{\pi R}{d}-1} \right]}{\left[\left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{-\frac{\pi R}{d}} \right] + 4 \cos^2 \frac{\pi}{d} z}. \quad (5.8)$$

$$\frac{\partial P_k}{\partial x} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{x}{\rho}, \quad \frac{\partial P_k}{\partial y} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{y}{\rho}. \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial P_k}{\partial z} = - \frac{\frac{2R}{R_k d} \sin \frac{\pi}{d} z \left[\left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{-\frac{\pi R}{d}} \right]}{\left[\left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{-\frac{\pi R}{d}} \right]^2 + 4 \cos^2 \frac{\pi}{d} z}. \quad (5.10)$$

Приведенные значения производных подставлены в дифференцированное выражение (4.44) и тем самым определены правые части уравнений (5.5).

Безразмерные уравнения Ньютона (5.5) интегрировались численно четырехточечным методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Точки разгона были найдены методом последовательных подходов Крылова. Относительная точность интегрирования выбрана равной $10^{-8} \div 10^{-9}$.

Численные расчеты проводились для трансаксиального зеркала, для которого $R_1 = 23d$, $R_2 = 25d$; $V_0 = 1$, $V_1 > 0$, $V_2 < 0$. Была выбрана единица длины $d = 1$ – расстояние между параллельными плоскостями трансаксиального зеркала. В начальных условиях моделировался точечный источник, расположенный вне поля в средней плоскости зеркала в точке: $x_0 = -10$, $y_0 = 1.4$, $z_0 = 0$. Осевая траектория была направлена под углом $\alpha \cong 2^\circ$ к оси x при задании следующих начальных условий: $\dot{x}_0 = \sqrt{2(1 + \varepsilon) - \dot{y}_0^2 - \dot{z}_0^2}$, где $\dot{y}_0 = -0.0528$, $|\dot{z}_0| \leq 0.001$, ε – относительный энергетический разброс в пучке. Объемный пучок моделировался следующими изменениями начальных условий: $|\Delta\alpha| \leq 0.001$ рад., $|\varepsilon| \leq 0.01$. При указанных изменениях начальных условий парааксиальное приближение по-прежнему выполняется достаточно хорошо.

Результаты расчета представлены на рисунках 5.7 и 5.8. На рисунке 5.7 показано поведение луча в проекции на среднюю плоскость зеркала, а на рисунке 5.8 – поведение крайних траекторий луча в вертикальном направлении. Потенциалы электродов подбирались так, чтобы линейный фокус в вертикальном направлении располагался симметрично положению источника относительно оси x . Такая ситуация реализовывалась при следующих потенциалах электродов: $V_0 = 1$, $V_1 = 0.969$, $V_2 = -0.093$. Также определялось время пролета частиц до плоскости детектора, проходящей через точку $x_k = x_0 = -10$ перпендикулярную осевой траектории луча. Для осевой траектории ($\varepsilon = 0$) время прихода к детектору равно $\tau_{d0} = 53.541$, а для частиц, движущихся по осевой траектории с разной энергией: при $\varepsilon = 0.01$ получаем $\tau_{d1} = 53.576$, а при $\varepsilon = -0.01$ получаем $\tau_{d2} = 53.556$. Из этих данных видно, что должна существовать плоскость, в которой осуществляется времяпролетная фокусировка по энергии и одновременно пространственная фокусировка пучка.

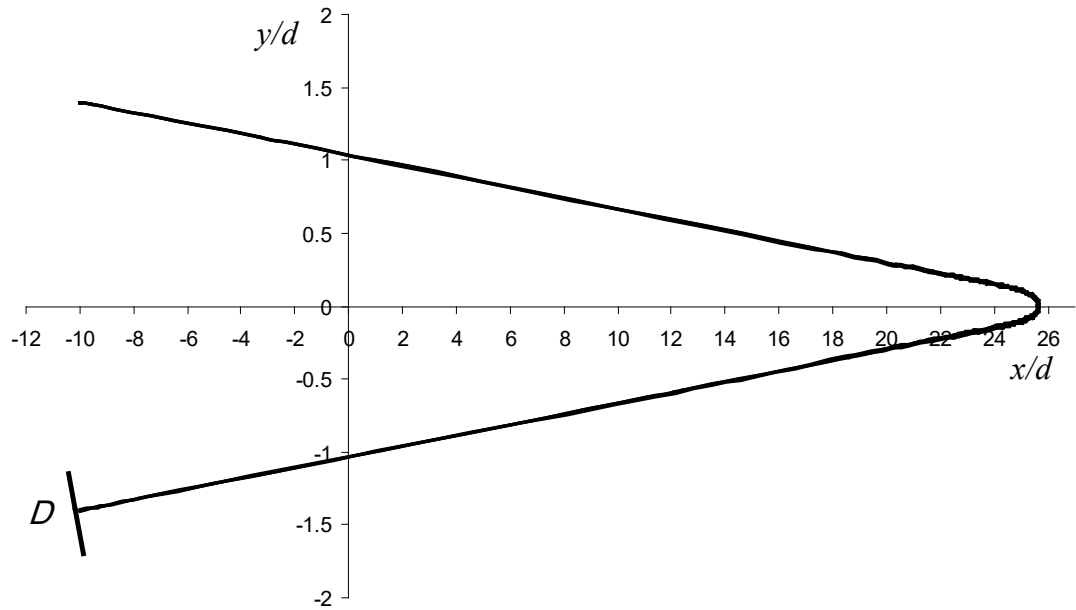


Рисунок 5.7 – Поведение пучка в проекции на среднюю плоскость зеркала

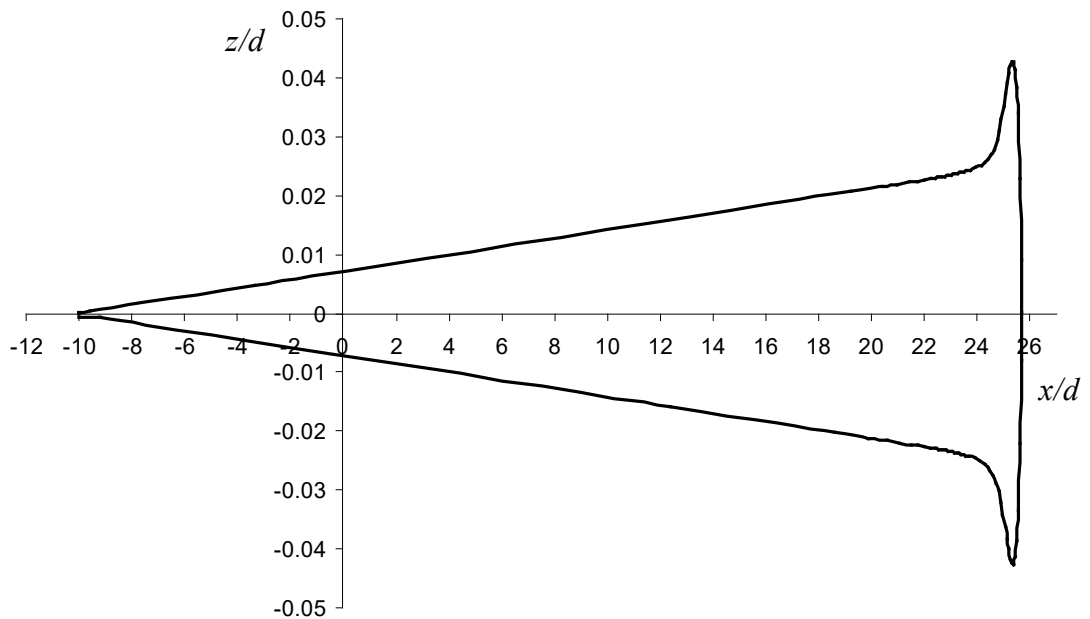


Рисунок 5.8 – Проекция крайних траекторий пучка на вертикальное направление

Безразмерные уравнения Ньютона для разных начальных условий интегрировались за безразмерное время τ до одного и того же конечного значения $\tau_{k0} = \tau_{d0}$. При этом из-за разных начальных условий часть частиц не достигла плоскости детектора, а часть пролетала над плоскостью детектора. При этом время прихода заряженных частиц к детектору определялось с учетом того, что вблизи плоскости детектора, где поле отсутствует, частицы движутся по прямолинейным траекториям с постоянной скоростью. Если к моменту времени

$\tau = \tau_{k0}$ частица находилась в точке (x_k, y_k, z_k) и двигалась со скоростью $(\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k)$, затем было найдено расстояние до плоскости детектора.

Уравнение плоскости детектора, проходящей через точку (x_d, y_d) , параллельную оси z :

$$y - y_d = k_d(x - x_d), \quad (5.11)$$

где $k_d = -1/\text{tg}\alpha$. Уравнение проекции траектории на плоскость xy :

$$y - y_k = k_k(x - x_k), \quad (5.12)$$

где $k_k = \dot{y}_k/\dot{x}_k$. Координаты точки пересечения этой проекции с плоскостью детектора:

$$x_1 = \frac{k_k x_k - k_d x_d + y_d - y_k}{k_k - k_d}, \quad y_1 = k_k(x_1 - x_k) + y_k. \quad (5.13)$$

Теперь время прихода к детектору определяется по формуле (5.14):

$$\tau_d = \tau_{d0} \pm \frac{\sqrt{(x_1 - x_k)^2 + (y_1 - y_k)^2}}{v_{xy}}. \quad (5.14)$$

Здесь знак «+» принимается, если частица не достигает плоскости детектора, и знак «-», если она пролетает над плоскостью детектора; v_{xy} – проекция скорости на плоскость xy :

$$v_{xy} = \sqrt{\dot{x}_k^2 + \dot{y}_k^2}. \quad (5.15)$$

Также можно осуществлять телескопическое поведение луча в вертикальном направлении, немного изменяя потенциал на отражающем электроде. Если приложить к нему потенциал $V_2 = 0.957$, то на выходе из зеркала мы получим почти параллельный пучок частиц [115]. На рисунке 5.9 показан ход крайних траекторий луча для этого случая.

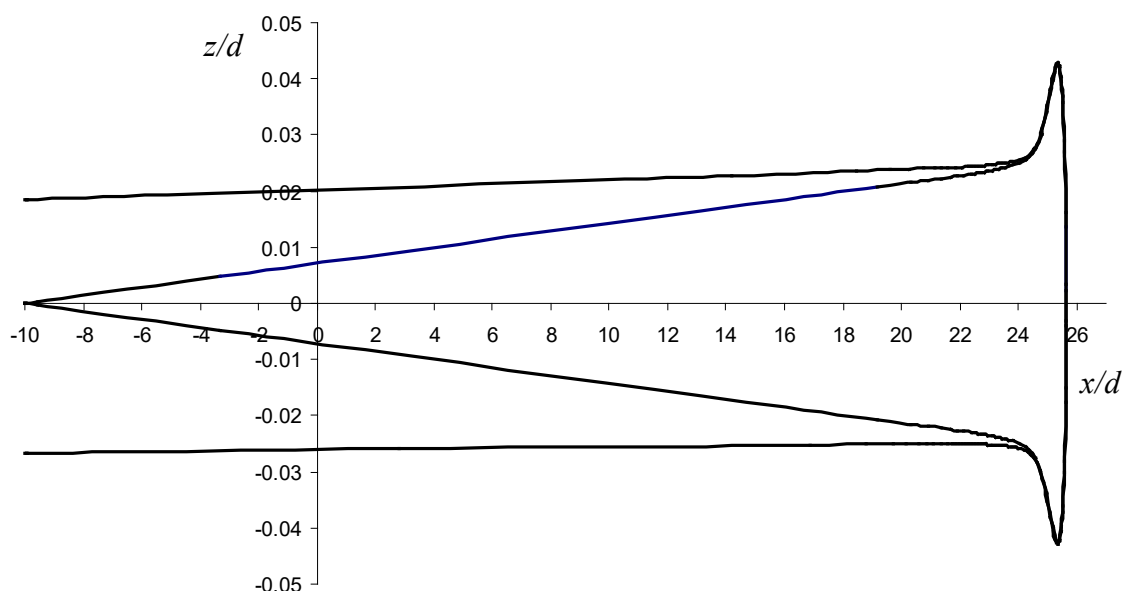


Рисунок 5.9 – Проекция крайних путей пучка на вертикальное направление (телескопический режим)

Выводы по пятому разделу

1. Распределение потенциала в зеркалах представлено в достаточно простом аналитическом виде. Для нахождения траекторий и времени пролета заряженных частиц в электростатическом поле дефлектора безразмерные уравнения Ньютона интегрируются методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования.

2. В реальной системе ВПМС с цилиндрическим зеркалом последний замыкающий электрод может быть выполнен в форме эквипотенциальной поверхности КОС, рассчитанной для зеркала с бесконечно протяженным последним электродом. При этом поле зеркала в области движения пучка останется прежним.

3. Реализован метод расчета времени пролета заряженных частиц в электростатических зеркалах от источника до детектора, основанный на численном интегрировании безразмерных уравнений Ньютона и линейной интерполяции решений в области детектора, где поле отсутствует.

4. Разработаны теория и алгоритмы численного расчета энергетической и пространственной времяпролетной фокусировки в осесимметричных зеркалах конкретных конструкций (трех- и четырехэлектродных зеркалах) с целью поиска ионно-оптических систем с высоким разрешением и уменьшенными aberrациями. Рассмотрены два режима пространственно-времяпролетной фокусировки: «кольцо-ось» и «ось-кольцо».

5. Использование аналитических выражений, описывающих поле трансаксиальных трехэлектродных зеркал, позволило численно интегрировать

безразмерные уравнения Ньютона для заряженной частицы в поле трансаксиального зеркала и таким образом изучить поведение пучка заряженных частиц в трансаксиальном зеркале.

6. Показано, что в результате отражения в трансаксиальном зеркале расходящийся пучок может быть преобразован в почти параллельный и может быть достигнута качественная пространственно-временная фокусировка.

7. Рассмотрены две возможности вертикальной пространственной фокусировки пучка. Корпускулярно-оптические свойства трансаксиальных зеркал могут быть использованы для создания высокоэффективных времяпролетных масс-спектрометров, состоящих из различных комбинаций трансаксиальных зеркал.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной диссертационной работе разработан метод расчета КОС, основанный на использовании дифференциальных уравнений, определяющих отклонение частиц пучка от осевой траектории, а также безразмерных уравнений Ньютона. Показано, что использование этих уравнений и метода Монте-Карло позволяет моделировать поведение пучков заряженных частиц в КОС. Необходимо также отметить, что разработанный метод решает задачу расчета поведения широких пучков в КОС без использования традиционной теории абберации. Эффективность предложенного метода возрастает, если известны аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля КОС.

Основные результаты:

1. Разработан метод моделирования динамики пучков заряженных частиц, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона для заряженной частицы в электрических и магнитных полях, описываемых скалярными потенциалами;

2. Разработаны методы расчета двумерных, осесимметричных, трансаксиальных и конических полей, основанные на использовании методов теории функций комплексной переменной;

3. Получены аналитические выражения для потенциалов, описывающих поля конкретных осесимметричных и трансаксиальных КОС;

4. Рассчитаны трехэлектродные трансаксиальные линзы для призменного масс-анализатора с КАП;

5. Разработанные математические методы используются для расчета новых схем статических и времяпролетных МС. В случае статических масс-спектрометров особенно перспективна схема призменного масс-спектрометра на основе КАП;

6. Предложены и рассчитаны оригинальные схемы ВПМА на основе цилиндрических зеркал с осесимметричным полем без использования мелкоструктурных сеток.

7. Разработаны теория и алгоритмы численных расчетов пространственно-времяпролетной фокусировки в трансаксиальных зеркалах и проведен расчет приборных характеристик конкретных конструкций на основе трех- и четырехэлектродных зеркал.

8. Освоена работа с компьютерным приложением «FOCUS» и проведен численный расчет электронно-оптической схемы микрофокусной трубки.

Оценка полноты решения поставленных задач. В результате проведенных в рамках поставленных задач исследований найдены эффективные решения, позволяющие значительно улучшить основные параметры статических и времяпролетных масс-анализаторов - их пропускание и разрешающую способность, при малых габаритах магнитного элемента.

Рекомендации по конкретному использованию результатов исследований. Имеется практический опыт создания статического конусовидного магнитного поля в масс-спектрометре Осака-2, на котором получено разрешение один

миллион. Модернизация этого прибора в наш анализатор с КАП позволила бы увеличить его разрешение более чем в 20 раз при тех же линейных размерах. При таком разрешении можно было бы сепарировать атомные ядра в метастабильном состоянии или попытаться решить задачу определения массы нейтрино.

Отметим также, что рассчитанный масс-анализатор с КАП может быть использован и как масс-спектрограф. Действительно, компактный масс-спектрограф с высоким разрешением и чувствительностью можно осуществить, установив позиционный детектор в фокальной плоскости фокусирующей линзы. При этом можно наблюдать довольно широкий фрагмент массового спектра с высоким разрешением. Таким образом, можно создать небольшой прибор для изотопного и химического анализа с рекордными характеристиками, что позволит получать новые интересные экспериментальные результаты.

Оценка научного уровня выполненной работы в сравнении с лучшими достижениями в данной области. Высокий научный уровень диссертации обеспечен 12 опубликованными работами в научных журналах, входящих в базу данных Scopus и WOS, Комитета по обеспечению качества в сфере образования и науки МНВО РК и в других журналах. Результаты диссертационного исследования широко обсуждены на различных научных конференциях республиканского и международного уровня.

В заключение выражаю искреннюю благодарность и признательность своим научным консультантам докторам физико-математических наук, профессорам Спивак-Лаврову Игорю Феликсовичу и Трубицыну Андрею Афанасьевичу за постановку задач, полезные замечания, советы при обсуждении полученных результатов и всестороннюю поддержку.

Благодарю Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова за поддержку и за возможность работать с зарубежным научным консультантом.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Кельман В.М., Явор С.Ю. Электронная оптика. – М.; Л.: Изд. АН СССР, 1963. – 364 с.
- 2 Глейзер В. Основы электронной оптики. – М., 1958. – 287 с.
- 3 Стеррок П.А. Статическая и динамическая электронная оптика. – М.: ИЛ, 1958. – 286 с.
- 4 Силадьи М. Электронная и ионная оптика. – М.: Наука, 1990. – 639 с.
- 5 Хокс П. Электронная оптика и электронная микроскопия. – М., 1974. – 320 с.
- 6 Кельман В.М., Родникова И.В., Секунова Л.М. Статические масс-спектрометры. – Алма-Ата: Наука, 1985. – 264 с.
- 7 Тасман Н.А. Коррекция aberrаций второго порядка в масс-спектрометрах с неоднородными магнитными секторными полями // В кн.: Успехи масс-спектрометрии. – М.: Изд-во Иностранная литература, 1963. – С. 47-54.
- 8 Монастырский М. А., Куликов Ю.В. Теория aberrаций катодных линз. Хроматические aberrации // РЭ. – 1978. – Т. 23, №3. – С.644-647.
- 9 Карецкая С.П., Кельман В.М., Якушев Е.М. Aberrации трансаксиальных электростатических линз // ЖТФ. – 1971 – Т.41, №2 – С.325-329.
- 10 Монастырский М.А. Об асимптотике решений параксиальных уравнений электронной оптики // ЖТФ. – 1978, Т. 48, №6. – С. 1117-1122.
- 11 Кельман В.М., Карецкая С.П., Федулина Л.В. и др. Электрооптические элементы призмных спектрометров заряженных частиц. – Алма-Ата: Наука КазССР, 1979. – 232 с.
- 12 Галль Р.Н., Галль Л.Н. Развитие масс-спектрометрического приборостроения: от СКБ АП АН СССР до ИАНП РАН // Научное приборостроение. – 2002. – Т.12, № 3 – С. 3-9.
- 13 Заикин В.Г., Третьяков К.В. История масс-спектрометрии в датах. – М.: ВМСО, 2018. – 194 с.
- 14 Кельман В.М., Галль Л.Н. Масс-спектрометры с двумерной магнитной призмой // Журнал технической физики. – 1961. – Т. 31, №9. – С. 1083-1091.
- 15 Кельман В.М., Назаренко Л.М., Якушев Е.М. Теория симметричного призмного масс-спектрометра // Журнал технической физики. – 1972. – Т. 42, №5. – С. 963-968.
- 16 Карецкая С.П., Кельман В.М., Мить А.Г. и др. Призмный масс-спектрометр с многократным прохождением ионами магнитного поля // Письма в журнал технической физики. – 1990. – Т. 16, №8. – С. 69-73.
- 17 Gal L.N., Golikov Y.K., Aleksandrov M.L. et al. USSR Inventors Certificate 1247973, 1986.
- 18 Макаров А.А., Гринфельд Д.Е., Монастырский М.А. Расчет статических возмущений масс-анализатора ORBITRAP на основе квадрологарифмического поля с идеальной времяпролетной фокусировкой. – 2014. – Т. 24, №1. – С.68-75.

- 19 Makarov A.A. Electrostatic axially harmonic orbital trapping: a high-performance technique of mass-analysis // *Anal. Chem.* – 2000. – Vol. 72. – P. 1156-1162.
- 20 Makarov A.A., Denisov E. Dynamics of Ions of Intact Proteins in the Orbitrap Mass Analyzer // *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* – 2009. – Vol. 20. – P. 1486-1495.
- 21 Wolfgang R. Pläß, Timo Dickel, Christoph Scheidenberger. Multiple-reflection time-of-flight mass spectrometry // *International Journal of Mass Spectrometry.* – 2013. – Volumes 349–350– P. 134-144.
- 22 Satoh T., Sato T., Tamura J. Development of a high-performance MALDI-TOF mass spectrometer utilizing a spiral ion trajectory // *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* – 2007. – Vol. 18. – P. 1318-1323.
- 23 Веренчиков А.Н., Краснова Н.В., Галль Л.Н. Тандемные масс-спектрометры в биохимии // *Масс-спектрометрия для биотехнологии, Научное приборостроение.* – 2004. – Т. 14, №2. – С. 4-23.
- 24 Краснов Н.В., Лютвинский Я.И., Подольская Е.П. Масс-спектрометрия с мягкими методами ионизации в протеомном анализе (обзор) // *Масс-спектрометрия для биотехнологии, Научное приборостроение.* – 2010. – Т. 20, №4. – С. 5-20.
- 25 Marzano V., Tilocca B., Fiocchi A.G. et al. Perusal of food allergens analysis by mass spectrometry-based proteomics // *Journal of Proteomics.* – 2020. – Vol. 215, 103636.
- 26 Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. – М.: Бинوم, 2003. – 493 с.
- 27 Галль Л.Н. Физические основы масс-спектрометрии и ее применение в аналитике и биофизике. – СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 163 с.
- 28 Тахистов В.В., Пономарёв Д.А. Органическая масс-спектрометрия. – СПб.: ВВМ, 2005. – 346 с.
- 29 Терентьев П.Б. Масс-спектрометрия в органической химии. – М.: Высш. шк., 1979. – 224 с.
- 30 Ямашкин С.А., Терентьев П.Б., Юровская М.А. Особенности масс-спектров замещенных пирролохинолинов // *Вестник Московского университета.* – 2019. – Т. 60, №1. – С. 34-40.
- 31 Thomson J.J. Rays of positive electricity // *Philosophical Magazine.* – 1912. – Vol. 21. – P. 225-249.
- 32 Thomson J.J. Rays of positive electricity and their application to chemical analyses. – London, 1921. – 237 p.
- 33 Астон Ф.В. Масс-спектры и изотопы. – М., 1948. – 198 с.
- 34 Aston F.W. A positive ray spectrograph // *Philosophical Magazine.* – 1919. – Vol. 38. – P. 707-714.
- 35 Aston F.W. A second-order focusing mass-spectrograph and isotopic weights by the doublet method // *Proceedings of the Royal Society.* – 1937. – Vol. 163A. – P. 391-404.

- 36 Dempster A.J. A new method of positive ray analysis // *Physical Review*. – 1918. – Vol. 11. – P. 316-325.
- 37 Dempster A.J. New methods in mass spectroscopy // *Proceedings of the American Philosophical Society*. – 1935. – Vol. 75. – P. 755-767.
- 38 Dempster A. J. Electric and magnetic focusing in mass spectroscopy // *Physical Review*. – 1937. – Vol. 51. – P. 67-69.
- 39 Вольник Г. Оптика заряженных частиц. – СПб.: Энергоатомиздат, 1992. – 280 с.
- 40 Гликман Л.Г., Спивак-Лавров И.Ф. Общий критерий качества статических масс-анализаторов с совмещенными электрическим и магнитным полями // *Письма в ЖТФ*. – 1990. – Т. 16, №13. – С. 26-29.
- 41 Ishihara M., Kammei Y., Matsuda H. A High-Performance Mass Spectrometer for Very Small Size // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A*. – 1995. – Vol. 363. – P. 440-444.
- 42 Кельман В.М., Каминский Д.Л. К вопросу о построении бета-спектрографа по аналогии с оптическим спектрографом // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 1951. – Т. 21, №4. – С. 555-561.
- 43 Кельман В.М., Родникова И.В. Новые схемы масс-спектрометров. // *ЖТФ*. – 1962. – Т. 32, №3. – С. 269-278.
- 44 Кельман В. М., Галь Л.Н. Новый магнитный бета-спектрометр. – 1958. – №7. – С. 75-78.
- 45 Кельман В.М., Назаренко Л.М., Якушев Е. М. Теория симметричного призмного масс-спектрометра. - *ЖТФ*, 1972, т. 42, вып. 5, с. 963-968.
- 46 Кельман В.М., Карецкая С.П., Федупина Л.В., Якушев Е.М. Электронно-оптические элементы призмных спектрометров заряженных частиц. – Алма-Ата, ЦА: Наука КазССР, 1979. – 232 с.
- 47 Байсанов О.А., Доскеев Г.А., Спивак-Лавров И.Ф. Масс-спектрометр с однородным магнитным сектором и электростатической призмой // *Известия НАН РК*. – 2006. – Т. 2. – С. 41-45.
- 48 Baisanov O.A., Doskeev G.A., Doskeev T. G., Spivak-Lavrov I.F. The Differential Equations Defining Deflection of Particles of Ion Beam from Axial Trajectory in Electric and Magnetic Fields. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. – 2011. – Vol. 645. – P. 159-162.
- 49 Baisanov O.A., Doskeev G.A., Spivak-Lavrov I.F. Calculation of a Mass Spectrometer with a Sector Magnet, An Electrostatic Prism and a Transaxial Lens // *Phys. Procedia*. – 2008. – Vol. 1. – P. 425-433.
- 50 А.С. 671582 СССР. Призмные масс-спектрометры / И.Ф. Спивак-Лавров; опубл. 7.03.1979 – 10 с.
- 51 Spivak-Lavrov I.F. Mass Spectrometer Based on Cone-Shaped Achromatic Prism. // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A*. – 1995. – Vol. 636. – P. 485-490.
- 52 Spivak-Lavrov I.F. Analytical Methods for Calculation of New Schemes of static and Time-of-flight mass spectrometers // *Advances in imaging and Electron physics*. – 2016. – Vol. 193. – P. 45-128.

53 Wollnik H., Casares A. An energy-isochronous multi-pass time-of-flight mass spectrometer consisting of two coaxial electrostatic mirrors // *International Journal of Mass Spectrometry*. – 2003. – Vol. 227, №2. – P. 217-222.

54 Веренчиков А.Н., Явор М.И., Хасин Ю.И. и др. Многоотражательный планарный времяпролётный масс-анализатор. Режим высокого разрешения // *Журнал технической физики*. – 2005. – Vol. 75, №1. – P. 84-88.

55 Явор М.И., Веренчиков А.Н. Сравнительный анализ многопроходных ТОФ масс-анализаторов на основе Зеркал и Секторных полей // *Научное приборостроение*. – 2006. – Т. 16, №3. – С. 21-29.

56 Явор М.И., Веренчиков А.Н., Хасин И.Ю. и др. Многоотражательный планарный времяпролётный масс-анализатор I. Анализатор для параллельного танденмоного спектрометра // *Журнал технической физики*. – 2005. – Т. 75, №1. – С. 75-83.

57 Grinberg G.A. Selected Questions of Mathematical Theory of Electric and Magnetic Phenomena's. – M.; L.: Izd. AN SSSR, 1948. – 48 p.

58 Вандакуров Ю.В. Исследование аксиально-симметричных магнитных полей, осуществляющих фокусировку пространственного пучка, осевая траектория которого имеет вид спирали с медленно меняющимся радиусом // *Журнал технической физики*. – 1957. – Т. 27, №6. – С. 1319-1329.

59 Spivak-Lavrov I.F., Baisanov O.A., Doskeev G.A. Differential equations, defining deflection of the particles of the ion beam from main path in electric and magnetic fields // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. – 2011. – Vol. 645. – P. 159-162.

60 Адилова З.Т., Якушев Э.М. Фокусирующее действие ортогональных электронно-оптических систем // *Известия Академии Наук Каз. ССР*. – 1987. – Т. 2. – С. 69-74.

61 Гликман Л.Г., Спивак-Лавров И.Ф. О невозможности создания Расходящейся линзы с коническими электрическими и магнитными полями // *Журнал технической физики*. – 1983. – Т. 53. – С. 1372-1379.

62 Гликман Л. Г., Спивак-Лавров И. Ф. Общий критерий качества статических масс - анализаторов с комбинированным электрическим и магнитным полем // *Письма в ЖТФ. Тех. Физ.* – 1990. – Т. 16 – С.26-29.

63 Baisanov O.A., Glikman L.G., Doskeev G.A. Spivak-Lavrov I.F. Some general properties of corpuscular-optical systems with a median plane // *Proceed. of the 7th internat. conf. on the Optics of Charged Particles, Phys. Procedia*. – Cambridge, UK – 2008. – P. 435-442.

64 Смирнов В. И. Курс высшей математики. – Москва: Наука, 1974. 3(2). – 672 с.

65 Байсанов О.А., Доскеев Г.А., Зарипова З.Г., Спивак-Лавров И.Ф. Дифференциальные уравнения, определяющие отклонение частиц ионного пучка от осевой траектории в электрическом и магнитном полях // *Прикладная физика*. – 2010. – №3. – С. 109-115.

66 Байсанов О.А., Доскеев Г.А., Спивак-Лавров И.Ф. Математическое моделирование траекторий заряженных частиц в электрических и магнитных полях со средней плоскостью // *Матер. 3-й междунар. науч.-метод. конф.*

- «Математическое моделирование и информационные технологии в образовании и науке». – Алматы: КазНПУ, 2005. – С. 39-42
- 67 Гликман Л.Г. Конические отклоняющие системы с совмещенными электрическим и магнитным полями // Журнал технической физики. – 1984. – Т. 54, №10. – С. 1986-1991.
- 68 Доскеев Г.А., Спивак-Лавров И. Ф. О возможности единого описания корпускулярно-оптических свойств конических призматических систем. // Журнал технической физики. – 1989. – Т. 59. – С. 144-153.
- 69 Голиков Ю.К., Краснова Н.К. Теория синтеза электростатических энергоанализаторов. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 409 с.
- 70 Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1977. – 736 с.
- 71 Русак В.Н. Математическая физика. – М.: Ком. книга, 2006. – 245 с.
- 72 Whittaker E.T., Watson J.N. A course of modern analysis. 4th edition – Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 608 p.
- 73 Бердников А.С., Краснова Н.К., Соловьев К.В. Интегральная формула Уиттекера для электрических и магнитных потенциалов с нулевым порядком однородности и ее следствия // Научное приборостроение. –2017. –Т. 27(4). –С. 72-89.
- 74 Hawkes P.W., Spence J.C.H. Springer handbook of microscopy. – Switzerland: Springer handbooks, 2019. – 1543 p.
- 75 Гликман Л.Г. и др. Электронно-оптические параметры трехэлектродных трансаксиальных цилиндрических линз // Журнал технической физики. –1971. – Т. 41, №2. – С. 330-335.
- 76 Doskeev G.A. Spivak-Lavrov I.F. Method of the calculation of transaxial lens' field // Eurasian Physical Technical Journal. - 2008. - Vol. 5, №1 (9). - P. 50-53.
- 77 Harting E., Read F. H. Electrostatic Lenses. Amsterdam: Elsevier, 1976. – 324 p.
- 78 Bimurzaev S. B., Serikbaeva G. S., Yakushev E. M. Calculation of focusing quality of the electrostatic mirror objective free of third-order spherical aberration // Nucl.Instr. Meth. Research. A. – 2004. – Vol. 519, №1-2. – P. 70-75.
DOI 10.1016/j.nima.2003.11.122.
- 79 Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. М. Наука, 1976 – 716 с.
- 80 Спивак-Лавров И. Ф., Шарипов С.У., Шугаева Т.Ж. Решения уравнения Лапласа в цилиндрических координатах, приводимые к двумерным гармоническим потенциалам // Научное приборостроение. – 2020 г. – Т. 30, № 2. – С. 51-60.
- 81 Гликман Л.Г., Спивак-Лавров И.Ф. Ахроматичная конусовидная призма с большой угловой дисперсией по массе // Известия Академии наук Казахской ССР. – 1985. – Т. 2. – С. 75-83.
- 82 Гликман Л.Г., Спивак-Лавров И.Ф. Корпускулярно-оптические свойства конусовидных ахроматических призм с двумя дополнительными электродами // ЖТФ. – 1994. – Т. 64, №11. – С. 149-159.

83 Baisanov O.A., Doskeev G.A., Spivak-Lavrov I.F. New Schemes of Static Mass Spectrometers // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. – 2011. – Vol. 645. – P. 216-218.

84 Spivak-Lavrov I.F. Without Lenses Mass Spectrometer on Base Cone-Shaped Achromatic Prism. // Zh. Tekh. Fiz. – 1994. – Vol. 64. – P. 140-148.

85 Spivak-Lavrov I.F., Baisanov O.A., Nurmuhanova A.A. Ways of Developing Analyzers for static Mass Spectrometers // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics. – 2018. – Vol.82, №10. – P. 1353-1358.

86 Байсанов О.А., Доскеев Г.А., Спивак-Лавров И.Ф. Абберации масс-спектрометрии как секторным магнитом и электростатической призмной системой. // Прикладная физика. – 2008. – Т.4. – С. 100-104.

87 Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Kalimatov T.S. Prismatic mass analyzer with the conical achromatic prism and transaxial lenses // International Journal of Mass Spectrometry. – 2019. – Vol. 444. – P. 116180.

88 Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Sharipov S.U. Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to 2D harmonic potentials // Advances in Imaging and Electron Physics. Burlington: Academic Press – 2020. – Vol. 215. – P. 181-193.

89 Спивак-Лавров И.Ф., Шугаева Т.Ж., Калиматов М.С. Решение задачи Дирихле для уравнения Лапласа для трансаксиальных и осесимметричных систем // Актуальные проблемы анализа, дифференциальных уравнений и алгебры (ЕМЖ-2019): сб. тез. междунар. конф – Нур-Султан, 2019. – С. 166.

90 Спивак-Лавров И. Ф., Калиматов Т.С., Доскеев Г.А. Решение задачи Дирихле для уравнения Лапласа для трансаксиальных систем // Труды научного семинара конференции «Проблемы прикладной математики и информатики». – Актобе, 5 мая 2019. – С. 110-115.

91 Шугаева Т.Ж., Калиматов М.С. Аналитические выражения для трансаксиальных и осесимметричных потенциалов корпускулярно-оптических систем // Молодежь, наука и инновация: материалы 15-й междунар. науч.-практ. конф. – Актобе, 2019. – С. 254-256.

92 Спивак-Лавров И.Ф., Байсанов О.С., Шугаева Т.Ж. Призмный масс-анализатор с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами // Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы: тез. докл. 9-го съезда ВМСО, 8-й всеросс. конф. с междунар. уч. – М., 2019. – С. 116.

93 Спивак-Лавров И.Ф., Байсанов О.А., Шугаева Т.Ж. Призмный масс-анализатор с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами // Ядерная наука и технологии: тез. 3-го междунар. науч. форума. – Алматы, 2021. – С. 221.

94 Matsuda H., Fukumoto S., Kuroda Y., Nojiri M.Z. A new spectrograph with very large dispersion // Naturforsher. – 1966. – Bd. 21a. – P. 25-33.

95 Yu Q., Li M., Lu X., Wang X. Geometric optimization of toroidal ion trap based on electric field analysis and SIMION simulation // International Journal of Mass Spectrometry. – 2018. – Vol. 434. – P. 60-64.

- 96 Gurov V., Saulebekov A., Trubitsyn A. Analytical, Approximate-Analytical and Numerical Methods in the Design of Energy Analyzers // In book: Advances in Imaging and Electron Physics. – London: Academic Press – 2015. – Vol. 192. – 209 p.
- 97 Трубицын А.А., Трубицын И.А. Программа «ФОКУС» моделирования статических и динамических систем корпускулярной оптики с аксиальной симметрией // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. – Рязань: РИЦРГРТА, 2002. – С. 77-81.
- 98 Трубицын А.А. Моделирование ионно-оптических систем для масс-спектрометров с квадрупольным фильтром масс // Журнал технической физики. – 2003. – Т. 73, №6. – С. 136-137.
- 99 Trubitsyn A.A., Grachev E.Yu., Kozlov E.A., Shugayeva T.Zh. Development of High Power Microfocus X-ray Tube // Eurasian Physical Technical Journal. – 2021. – Vol. 18, №1(35). – P. 41-50.
- 100 Каратаев В.И., Мамырин Б.А., Шмикк Д.В. и др. Масс-Рефлектрон. Новый Немагнитный времяпролетный масс-спектрометр с высоким разрешением // Журнал технической физики. – 1973. – Т. 64. – С. 82-89.
- 101 Каратаев В. И., Мамырин Б. А., Шмикк Д. В. Новый принцип фокусировки ионных пучков в времяпролетном масс-спектрометре. // Журнал технической физики. – 1971. – Т. 41. – С. 1498-1501.
- 102 Помозов Т.В., Явор М.И. Бессеточный ортогональный ускоритель для многоотражательных времяпролетных масс-анализаторов Научное приборостроение. – 2012. – Вып. 22, №1. – P. 113-120.
- 103 Якушев Е.М., Назаренко Л.М., Бимурзаев С.Б. и др. Анализирующие свойства электростатического ускорителя ионов // Научное приборостроение. – 2014. – Т. 24, №1. – С. 76-81.
- 104 Mamyrin B.A. Time-of-flight mass spectrometry (concepts, achievements, and prospects) // International Journal of Mass Spectrometry. – 2001. – Vol. 206, Issue 3. – P. 251-266.
- 105 Ионов Н.И., Мамырин Б.А. Масс-спектрометр с импульсным источником ионов // Журнал технической физики. – 1953. – Vol. 23, №11. – P. 2101-2103.
- 106 Mirgorodskaya O.A., Shevchenko A.A., Chernushevich I.V. et al. Electrospray-ionization time-of-flight mass spectrometry in protein chemistry // Analytical Chemistry. – 1994. – Vol. 66, №1. – P. 99-107.
- 107 Dodonov A.F. Electrospray Ionization on a Reflecting Time-of-Flight Mass Spectrometer // ACS Symposium Series. – 1993. – №549. – P. 108-123.
- 108 Bimurzaev S.B. Time-of-flight mass-spectrometer with high resolution and sensitivity via elimination of chromatic TOF aberrations of higher orders // International Journal of Mass Spectrometry. – 2015. – Vol. 376. – P. 23-26.
- 109 Явор М.И., Веренчиков А.Н. Планарный многоотражательный времяпролетный масс-анализатор, работающий без ограничения диапазона масс // Научное приборостроение. – 2004. – Т. 14, №2. – С. 38-45.
- 110 SU Pat. 1725289 A1 Time-of-flight mass spectrometer with multiple reflection / L.M. Nazarenko, L.M. Sekunova, E.M. Yakushev; 1989.

111 Yavor M., Verentchikov A., Hasin Ju. et al. Planar multi-reflecting time-of-flight mass analyzer with a jig-saw ion path // *Physics Procedia*. – 2011. – Vol. 1. – P. 391-400.

112 Bimurzaev S.B. Planar multi-reflecting time-of-flight mass-spectrometer of a simple design // In book: *Advances in Imaging and Electron Physics*. – Burlington Academic Press. – 2019. – P. 3-13.

113 Спивак-Лавров И.Ф., Шугаева Т.Ж., Шарипов С.У. Расчет времяпролетного масс-спектрометра на основе осесимметричных цилиндрических зеркал // *Вестник АРГУ им. К. Жубанова*. – 2021. – №3(53). – С. 15-27.

114 I.F. Spivak-Lavrova, O.A. Baisanov, T. Zh. Shugaeva, G.T. Urinbaeva Time-of-flight mass analyzer based on transaxial mirrors // *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement*. – 2021 – Vol. 14 – p. 853– 864.

115 Спивак-Лавров И. Ф., Байсанов О.А., Шарипов С.У., Шугаева Т.Ж. Динамика пучка заряженных частиц в трансаксиальном зеркале // *Научное приборостроение*. – 2022 г. – Т. 32, № 1. – с. 68-76.