

Расчет и оптимизация транспортирующих линзовых систем масс-спектрометров. Г а л л ь Л. Н., Лебедев Г. В. — В кн.: Приборы для научных исследований и автоматизации эксперимента. Л., «Наука», 1982, с. 64—70.

Функциональным назначением систем транспортировки является согласование эмиттанса пучка с аксептансом прибора с целью увеличения пропускания заряженных частиц. Оптимизация системы транспортировки в данной работе сводится к минимизации целевой функции при ограничениях на изменения параметров минимизации, которыми являются потенциалы электродов и их геометрия. Преобразование пучка в медианной плоскости приводит к смещению изображения источника вдоль от пучка, которое может быть скомпенсировано одним из приведенных в работе способов. В работе приведены алгоритм и результаты оптимизации электростатической системы транспортировки прибора МХ1320. На каждом шаге минимизации целевой функции проводится расчет кардинальных элементов системы и коэффициентов сферической аберрации, величина которых учитывается при юстировке прибора. Расчет проводился на ЭВМ ЕС-1022. Программа оптимизации написана на языке ФОРТРАН. Лит. — 2 назв., вл. — 4.

## **РАСЧЕТ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТРАНСПОРТИРУЮЩИХ ЛИНЗОВЫХ СИСТЕМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ**

Системы транспортировки заряженных частиц широко используются с целью увеличения пропускания в ускорителях, ионных и электронных пушках, системах инъекции [1] и обычно включают в себя элементы электрических и магнитных линз. Одним из критериев оптимизации транспортирующих систем является максимальное согласование эмиттанса пучка с аксептансом прибора, т. е. увеличение площади эмиттанса, принадлежащей контуру аксептанса прибора.

В масс-спектрометрах транспортирующие системы наиболее удобно устанавливать между источником ионов и масс-анализатором с целью их наилучшего согласования. Так как эти системы не должны вносить каких-либо дискриминаций в транспортируемый пучок ионов, они могут включать в себя только электростатические элементы.

В настоящей работе приведены описания алгоритмов, а также пример расчета двумерной электростатической транспортирующей системы (ЭТС) для масс-спектрометра МХ1320, использование которой позволяет повысить пропускание масс-анализатора без нарушения качества фокусиров-

ки пучка ионов, т. е. повысить чувствительность масс-спектрометра при сохранении его разрешающей способности.

Оптимизация ЭТС с целью увеличения пропускания масс-анализатора равнозначна минимизации целевой функции

$$S = \|S_{эм} \setminus (S_{ак} \cap S_{эм})\|, \quad (1)$$

где в качестве целевой функции берется число частиц, не прошедших через анализатор. В качестве параметров, по которым ведется оптимизация, возможно использование как потенциалов на электродах, так и геометрических параметров ЭТС.

Поскольку из источника ионов выходит пучок частиц с малым угловым и координатным разбросом, то расчет системы транспортировки может быть проведен в параксиальном приближении.

Параксиальное уравнение траекторий для двумерных систем имеет вид

$$2\Phi(z)y'' + \Phi(z)y' + \Phi''(z)y = 0, \quad (2)$$

где  $\Phi(z)$  — осевое распределение потенциала. Тогда преобразование фазовых координат  $Y = AY_0$  определяется матрицей  $A$ :

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_1(z) & \varphi_2(z) \\ \varphi_1'(z) & \varphi_2'(z) \end{pmatrix}, \quad Y_0 = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_0' \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где  $\varphi_1(z)$  и  $\varphi_2(z)$  — решения уравнения (2), а  $\varphi_1'$ ,  $\varphi_2'$  — их производные, и контур эмиттанса посредством этого преобразования отображается на плоскость акцептанса.

Часто контуры эмиттанса и акцептанса задаются выпуклым многоугольником, а для анализа систем удобнее, когда контуры представляют собой эллипсы. Проведем аппроксимацию многоугольника эллипсом из условия, что площадь эллипса и площадь многоугольника равны, а площадь части эллипса, выступающей за контур многоугольника, минимальна. В случае параллелограмма проведением преобразования фазовых координат  $(y, y')$

$$Y = CY_0,$$

где

$$C = D_{ак}AD_{эм}^{-1} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

контур акцептанса переводится в окружность единичного радиуса, а контур эмиттанса в плоскости акцептанса — в эллипс. При этом

$$D = \begin{pmatrix} -\frac{y_1' + y_2'}{S} & \frac{y_2 + y_1}{S} \\ \frac{y_1' - y_2'}{S} & \frac{y_2 - y_1}{S} \end{pmatrix}, \\ S = y_2y_1' - y_1y_2',$$

где  $y_1, y_1', y_2, y_2'$  — координаты двух произвольных вершин параллелограмма на фазовой плоскости.

Уравнение контура эмиттанса при этом представляется как

$$r_1x^2 + 2r_2xy + r_3y^2 = 1,$$

где

$$r_1 = \frac{c_{12}^2 + c_{11}^2}{\Delta_c^2}, \quad r_2 = \frac{-c_{22}c_{12} - c_{21}c_{11}}{\Delta_c^2}, \quad r_3 = \frac{c_{22}^2 + c_{21}^2}{\Delta_c^2},$$

$\Delta_c$  — определитель матрицы  $C$ .

Проведем поворот системы координат на угол

$$\frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2r_2}{r_3 - r_1}.$$

При этом уравнение эллипса примет вид

$$d_1 x^2 + d_2 y^2 = 1, \quad (5)$$

причем  $d_1 + d_2 = r_1 + r_3$ ,  $d_1 d_2 = 1/\Delta_c^2$ .

Следует отметить, что площадь эллипса, описываемого уравнением (5), не зависит от  $A$  в случае, если потенциалы в плоскости эмиттанса и аксептанса постоянны, т. е. не являются параметрами оптимизации. Поскольку

$$d_1 + d_2 = \frac{c_{11}^2 + c_{12}^2 + c_{21}^2 + c_{22}^2}{\Delta_c^2} = \frac{1 + d_1 \Delta_c^2}{d_1} = P, \quad (6)$$

то параметр  $P$  является критерием пропускания системы.

Если  $\Delta_c > 1$ , т. е. эмиттанс пучка больше аксептанса прибора, то, предполагая, что максимум интенсивности пучка сосредоточен в центре эмиттанса, следует ожидать, что наибольшее пропускание осуществляется при  $d_1 = d_2 = 1/\Delta_c$ , т. е. когда эллипс (5) преобразуется в окружность. Так же полное заполнение эмиттанса аксептансом осуществляется в случае  $d_1 < 1$  или  $d_2 < 1$ . Если  $\Delta_c < 1$ , то эмиттанс пучка полностью входит в контур аксептанса при

$$\frac{1}{\Delta_c} \leq d_1, \quad d_2 \leq \frac{1}{\Delta_c}.$$

Таким образом, решение задачи оптимизации состоит в нахождении такой связи между параметрами транспортирующей системы и контуром эмиттанса, которая позволит наилучшим образом вписать друг в друга эмиттанс пучка и аксептанс масс-анализатора.

Наиболее общий метод решения задачи оптимизации заключается в поиске минимума целевой функции  $S$  из условия (1). Параметрами минимизации являются потенциалы на электродах системы и расстояния между ее электродами. Поиск минимума целевой функции велся методом направленных градиентов с использованием программ из математического обеспечения ЭВМ ЕС-1022. Контур аксептанса и эмиттанса задавались многоугольниками. Варьирование параметров проводилось при ограничениях типа неравенств методом штрафных функций.

При решении конкретной задачи оптимизации ЭТС рассматривались два случая задания осевого распределения потенциала  $\Phi(z)$ . В первом случае в качестве  $\Phi(z)$  бралась аналитическая функция, являющаяся осевым потенциалом одной из систем плоских электродов (рис. 1,  $a-e$ ). Ограничения на параметры оптимизации в таких системах имели вид

$$0 \leq v_i \leq 1, \quad l_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^N l_i \leq L,$$

где  $L$  — общая длина транспортирующей системы;  $v_i$  — потенциалы электродов;  $l_i$  — длина электродов.

Во втором случае в качестве  $\Phi(z)$  бралась произвольная аналитическая функция, включающая параметры оптимизации и удовлетворяющая граничным условиям

$$\Phi(z_{эм}) = \Phi(z_{ак}) = 1, \quad \Phi'(z_{эм}) = \Phi'(z_{ак}) = 0.$$

Это распределение потенциала могло быть получено с помощью системы диафрагм (рис. 2), на которые распределение потенциалов задается по закону  $U(z, d) = \operatorname{Re} [\Phi(z + id)]$ .

Для сохранения величины входного плеча анализатора необходимо включить в целевую функцию оптимизации ограничение на смещение изображения щели источника в направлении оси  $z$  в плоскости дисперсии анализатора, которое может достигать значительных величин. Поэтому

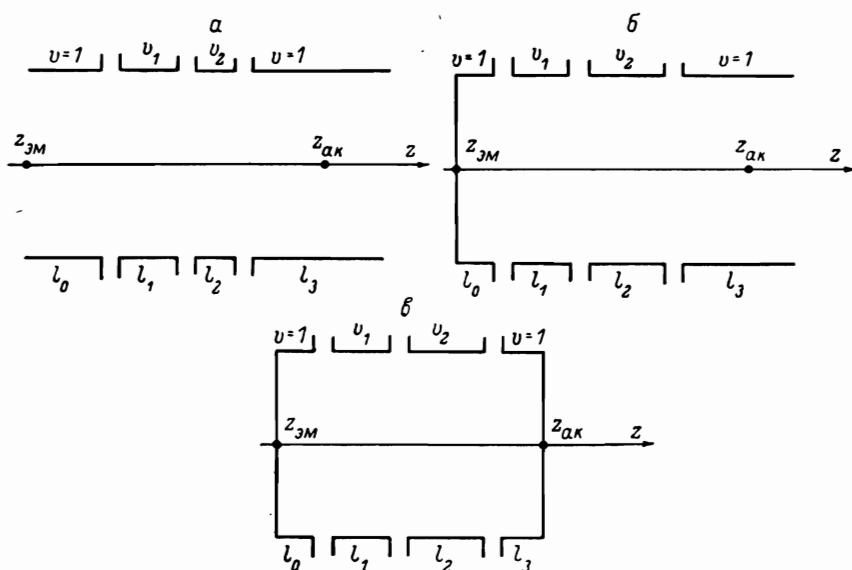


Рис. 1. Транспортирующие системы, состоящие из наборов плоских электродов. а — с открытым входом и выходом; б — с закрытым входом; в — с закрытым входом и выходом.

при оптимизации ЭТС следует включить в ограничения на изменение варьируемых параметров условие  $|\Delta z| < \epsilon_0$ , где

$$\Delta z = \int_{z_{жм}}^{z_{ак}} \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{\Phi(z)}} \right] dz \quad (7)$$

— смещение изображения щели источника;  $\epsilon_0$  определяется из конструктивных возможностей юстировки прибора по положению выходной щели источника ионов.

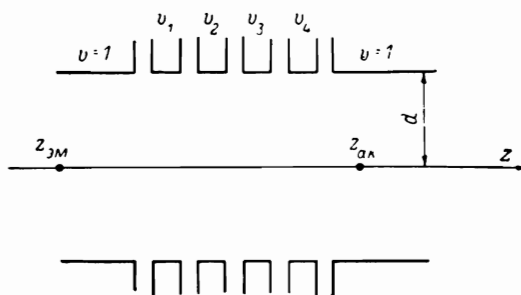


Рис. 2. Транспортирующая система, состоящая из набора плоских диафрагм.

Оптимизация систем, приведенных на рис. 1 и 2, показала, что ЭТС такого типа позволяют практически полностью заполнить аксептанс масс-анализатора МХ1320 пучками стандартных источников ионов.

Можно выделить и отдельно рассмотреть два крайних случая в реализации систем транспортировки: случай слабо изменяющегося протяженного по  $z$  осевого распределения потенциала и случай короткодействующего по  $z$ , заметного по величине  $\Phi(z)$ . Оба эти случая имеют аналитические решения и могут быть рассмотрены отдельно.

Если принять потенциал первого и последнего электродов за единицу и если отклонение величин потенциалов на электродах от единицы достаточно мало, то осевое распределение потенциала можно представить в виде

$$\Phi(z) = 1 + \varepsilon(z). \tag{8}$$

Считаем, что

$$\max_{z \in [0, L]} \{ |\varepsilon'(z)|, |\varepsilon''(z)| \} \ll 1.$$

Приведем уравнение (2) к виду

$$\xi'' + \sigma(z)\xi = 0, \tag{9}$$

где

$$\xi(z) = y(z) \sqrt[4]{\Phi(z)}, \quad \sigma(z) = \frac{3}{16} \left( \frac{\Phi'(z)}{\Phi(z)} \right)^2 + \frac{1}{4} \frac{\Phi''(z)}{\Phi(z)}. \tag{10}$$

Решая уравнение (9) методом вариации произвольных постоянных, получим

$$\left. \begin{aligned} \xi_1 &= \int_0^z z^2 \sigma(z) dz + z \left[ 1 - \int_0^z z \sigma(z) dz \right], \\ \xi_2 &= \int_0^z z \sigma(z) dz + 1 - z \int_0^z \sigma(z) dz, \\ \xi_1' &= 1 - \int_0^z z \sigma(z) dz, \\ \xi_2' &= - \int_0^z \sigma(z) dz. \end{aligned} \right\} \tag{11}$$

Оптические характеристики такой системы определяются как

$$z_p = \frac{\int_0^\infty z^2 \sigma(z) dz}{\int_0^\infty z \sigma(z) dz - 1}, \quad H = \frac{\int_0^\infty z \sigma}{\int_0^\infty \sigma}, \quad \frac{1}{f} = \int_0^\infty \sigma(z) dz,$$

$$z_H = \frac{\int_0^\infty z^2 \sigma(z)}{\int_0^\infty z \sigma(z) dz}, \quad z_f = \frac{1 + \int_0^\infty z \sigma}{\int_0^\infty \sigma(z) dz}, \quad f = \frac{1}{\int_0^\infty \sigma(z)}$$

где  $z_p$  — координата гауссовой плоскости изображения;  $z_H$  — положение гауссовой плоскости преломления;  $H$  — положение главной плоскости;  $z_f$  — положение фокуса;  $f$  — фокусное расстояние;  $1/f$  — оптическая сила.

При этом требуется сходимость интегралов типа  $\int_0^\infty z^n \varepsilon^{(k)} dz$ ,  $n = 0, 1, 2$ ,  $k = 0, 1, 2$ , где  $k$  — номер производной.

В случае, если  $\varepsilon(z) = \sum_{i=1}^N \delta_i f_i$  ( $\delta_i$  — возбуждения на электродах), где  $\delta_i \ll 1$ , то, учитывая (11), получаем

$$\left. \begin{aligned} \xi_1 &= \sum_{i=1}^N \delta_i c_i, \\ \xi_2 &= \sum_{i=1}^N \delta_i d_i, \\ \xi'_1 &= \sum \delta_i r_i, \\ \xi'_2 &= \sum \delta_i l_i, \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

где  $c_i, d_i, r_i, l_i$  — константы, определяемые из (11).

Оптимизация такой системы сводится к поиску минимума параметра  $P$  из (6), который определяется квадратичной формой относительно  $\delta_i$ . Правомерность отбрасывания величин при  $\delta_i^2$  в (12) требуется оценивать из условия (10) для каждой системы отдельно, вычисляя интегралы в (11). В результате для данной геометрии получаем значения потенциалов на электродах, при которых осуществляется оптимальная транспортировка пучка.

В случае, когда  $\Phi(z)$  имеет вид дельта-функций, который реализуется в системе одиночных тонких линз, матрица  $A$  имеет следующий вид:

$$A = D_n L_n D_{n-1} \dots D_2 L_1 D_1,$$

$$D_i = \begin{pmatrix} 1 & R_i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f_i} & 1 \end{pmatrix},$$

где  $R_i$  — расстояние между  $(i-1)$ -й и  $i$ -й линзами;  $f_i$  — их фокусные расстояния.

В этом случае параметрами оптимизации являются  $f_i$  и  $R_i$ . Для одной тонкой линзы

$$A = \begin{pmatrix} 1 - \frac{L-R}{f} & L - \frac{R(L-R)}{f} \\ -\frac{1}{f} & 1 - \frac{R}{f} \end{pmatrix}.$$

В качестве примера приведем расчет ЭТС для МХ1230. Акцептанс масс-анализатора для этого масс-спектрометра и экспериментально измеренный эмиттанс пучка ионов, формируемого источником, представлены на рис. 3. Проведя аппроксимацию эмиттанса и акцептанса эллипсами и определяя преобразование (4) из уравнения (6) и условия (5), проделав алгебраические преобразования, получаем уравнение относительно  $P$ ,  $R$  и  $f$ . Это уравнение имеет вид

$$f^2 [4.286 - P] + f [5.5015 \cdot 10^{-3} R^2 - 6.966R + 128.36] + \dots + 0.2725 \times \\ \times 10^{-4} R^4 - 5.5 \cdot 10^{-3} R^3 + 5.2463 R^2 - 493.89R + 83471 = 0. \quad (13)$$

Для  $2\Delta c < P < 1 + \Delta c^2$  уравнение (13) не имеет действительных корней при  $0 \leq R \leq L$ , т. е. полное заполнение эмиттанса невозможно. Коэффициент при  $f$  и свободный член уравнения (13) монотонны на промежутке  $0 < R < L$  ( $L=142.23$ ). Минимум  $P$  достигается при условии, что дискриминант уравнения (13) равен нулю и  $R$  максимально. При  $R=140$   $P=3.056$ .

Из уравнения (6) находим  $r$ :  $r_1=1.25$ ,  $r_2=0.44$  — и полуоси эллипса:  $a=0.8944$ ,  $b=1.5058$ .

Для вычисления пропускания необходимо вычислить площадь, образуемую пересечением окружности и эллипса.

Заполнение площади акцептанса составляет 92%. Фокусное расстояние линзы, осуществляющей такую транспортировку,  $f=302$  мм.

Таким образом, из ранее сказанного видно, что оптимальным для данного прибора является расположение линзы у входа в магнит. Линза должна удовлетворять следующим требованиям:

- 1) иметь фокусное расстояние  $f=300$ ;
- 2) иметь входную апертуру не меньше 1.5 линейных размеров пучка, т. е. порядка 11 мм;

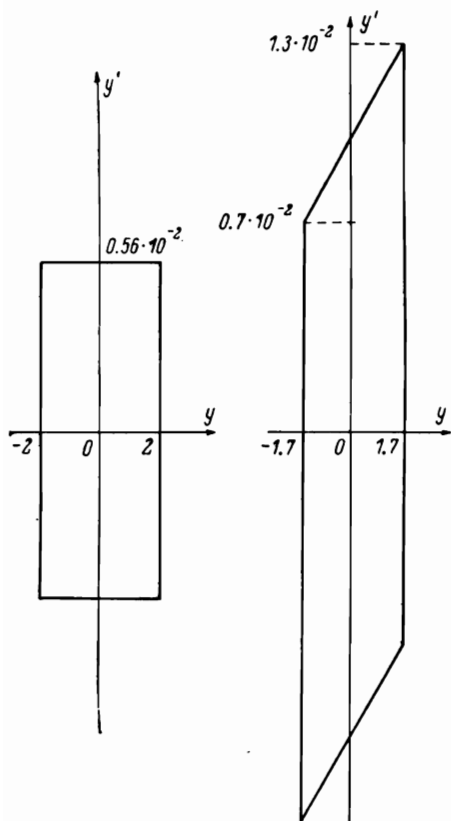


Рис. 3. Акцептанс анализатора и эмиттанс пучка в масс-спектрометре МХ1320.

- 3) иметь малую протяженность вдоль оси пучка;
- 4) давать смещения изображения в горизонтальной плоскости в пределах возможности юстировки;
- 5) осуществлять фокусировку торможением.

Одна из возможных реализаций такой линзы изображена на рис. 4. При  $V_0=0.7$  линза имеет фокусное расстояние  $f \approx 300$  мм [2]. Смещение в горизонтальной плоскости оценивается как  $\Delta z = \frac{l}{2} \left( \frac{2}{1 + \sqrt{V_0}} - 1 \right)$  и не

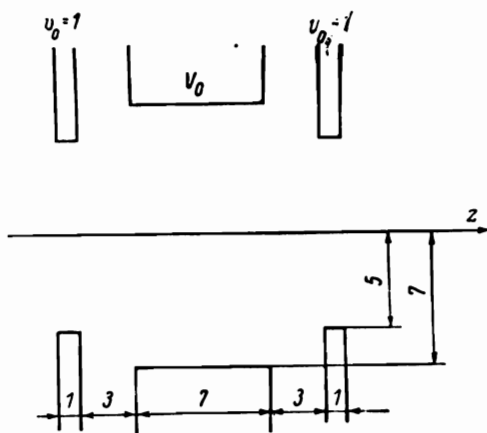


Рис. 4. Линзовая транспортирующая система масс-спектрометра МХ1320.

зависит от параметров пучка ( $l$  — протяженность поля линзы). При  $V_0=0.7$   $\Delta z=1$  мм.

Для выполнения условия двумерности поля в горизонтальной плоскости линза должна иметь трехкратный размер наибольшей апертуры в обе стороны от области заполнения пучка, т. е. длина электродов в горизонтальной плоскости должна быть не менее 45 мм.

Сферическая aberrация оценивается как

$$\Delta z^3 \approx \frac{l}{\sqrt{V_0}(1 + \sqrt{V_0})}$$

и для  $V_0=0.7$ ,  $l=10$  равна  $\sim 6.5$ .

Линза такого типа проста в изготовлении, занимает мало места и достаточно легко может быть установлена в камере входного плеча масс-спектрометра МХ1320.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бенфорд А. Транспортировка заряженных частиц. М., 1969.
2. Александров М. Л., Галль Л. Н., Лебедев Г. В., Павленко В. А., ЖТФ, 1975, т. 47, с. 241.