

УДК 537.533.31

Оптимизация электростатических транспортирующих систем с двумя плоскостями симметрии. Лебедев Г. В. — В кн.: Научное приборостроение. Л., «Наука», 1983, с. 13—20.

В работе рассмотрен алгоритм расчета электростатических транспортирующих систем, основанный на решении обратной задачи электронной оптики, что позволяет существенно сократить объем вычислений. Решение задачи о восстановлении потенциала представлено в интегральной форме. Определена норма аппроксимации восстановленного потенциала на заданной границе кусочно-постоянными функциями. В качестве примера приведен расчет системы транспортировки для масс-спектрометра МХ1320. Лит. — 5 назв., ил. — 3.

ОПТИМИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ТРАНСПОРТИРУЮЩИХ СИСТЕМ С ДВУМЯ ПЛОСКОСТЯМИ СИММЕТРИИ

Включение в схему приборов анализа заряженных частиц электростатических транспортирующих систем (ЭТС) в большом числе случаев позволяет существенно увеличить пропускание прибора [1] (отношение числа частиц, прошедших через прибор, к числу частиц в пучке), а следовательно, повысить чувствительность прибора и его разрешающую способность. Для некоторых классов приборов, например масс-анализаторов, в одной из плоскостей транспортировки требуется наиболее точное выполнение заданных критериев транспортировки пучка. Приведенный в данной работе алгоритм позволяет существенно сократить объем вычислений по сравнению с традиционными методами [2], так как оптимизация проводится только для одной плоскости транспортировки при обусловленном выполнении заданного преобразования пучка в другой плоскости.

Как известно, уравнения параксиальных траекторий в плоскостях симметрии XOZ и YOZ имеют вид

$$L_x[x, f, \psi] \equiv 2f(z)x''(z) + f'(z)x'(z) + \psi(z)x(z) = 0; \quad (1a)$$

$$L_y[y, f, \psi] \equiv 2f(z)y''(z) + f'(z)y'(z) + [f''(z) - \psi(z)]y(z) = 0, \quad (1b)$$

а пространственное распределение потенциала вблизи оптической оси Oz , соответствующее системе (1a), (1b) определяется равенством

$$U(x, y, z) = f(z) - \frac{1}{2}\psi(z)x^2 - \frac{1}{2}[f''(z) - \psi(z)]y^2 + O(x^2, y^2). \quad (2)$$

При этом (1a) удовлетворяется тождественно для линейно независимых функций $\xi_1(z)$ и $\xi_2(z)$, определяющих произвольную траекторию в плоскости XOZ , если $f(z)$ и $\psi(z)$ из (1) представить как

$$f = \frac{1}{(\xi_1'\xi_2 - \xi_1\xi_2')^2}, \quad \psi = 2 \frac{\xi_1''\xi_2 - \xi_1'\xi_2''}{(\xi_1'\xi_2 - \xi_1\xi_2')^3}. \quad (3)$$

Таким образом, уравнение (1b) при f и ψ , определенных выражением (3), является уравнением траекторий в плоскости YOZ на множестве заданных траекторий в ортогональной плоскости. Так как оптические характеристики ЭТС определяются граничными значениями траекторий и их производных, то, варьируя ξ_1 и ξ_2 в области преобразования пучка при сохранении их граничных значений, определяем η_1, η_2 из решения уравнения (1b), при которых осуществляется оптимальная транспортировка пучка в плоскости YOZ . Следовательно, задачу оптимизации можно свести к поиску экстремума целевой функции на множестве параметров, определяющих траектории в одной из плоскостей. Вторым этапом полного решения задачи является нахождение системы электродов с заданным распределением приосевого потенциала, определенного равенством (2).

Целевая функция оптимизации ЭТС. ЭТС осуществляет линейное преобразование фазовых координат y'_0 и y_0 приосевых монохроматических пучков и поэтому влияет не только на величину пропускания прибора, но и на другие параметры прибора, зависящие от формы фазового объема пучка, а именно на форму пика масс-анализатора, на величину абберрационных искажений и т. д., многие из которых, однако, могут быть существенно уменьшены выбором соответствующей геометрии анализатора. Поэтому увеличение пропускания является наиболее важным критерием оптимизации ЭТС.

Для реальных пучков занимаемый ими фазовый объем в координатно-угловом представлении достаточно хорошо аппроксимируется эллипсом. Считаем, что плотность частиц внутри контура имеет равномерное распределение. Кон-

тур эмиттанса (рассмотрение относится к плоскости YOZ , в плоскости XOZ построения аналогичны) при $z=0$ опишем матричным выражением

$${}^t Y_0 \mathcal{E} Y_0 = 1, \quad (4)$$

где

$$Y_0 = \begin{pmatrix} y'_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} \end{pmatrix},$$

ε_{11} , ε_{12} , ε_{22} — тройка чисел, однозначно задающая форму эллипса. При этом y_0 — расстояние от оси; y'_0 — тангенс угла наклона траектории частицы к оси; t означает транспонирование.

После прохождения ЭТС (4) преобразуется к виду

$${}^t Y_0 G Y_0 = 1, \quad (5)$$

где

$$G = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{12} & g_{22} \end{pmatrix} = {}^t T \mathcal{E} T, \quad T = w_a \begin{pmatrix} \eta_{2a} - \eta'_{1a} \\ -\eta_{1a} & \eta'_{2a} \end{pmatrix},$$

η_{1a} , η_{2a} , η'_{1a} , η'_{2a} — значения линейно независимых решений уравнения (16) и их производных при $z=z_a$, а $w_a = [\xi'_1(z_a) \xi_2(z_a) - \xi_1(z_a) \xi'_2(z_a)]$.

Контур аксептанса в плоскости $z=z_a$ представим уравнением эллипса

$${}^t Y A Y = 1, \quad (6)$$

где

$$Y = \begin{pmatrix} y' \\ y \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}.$$

Проведем дополнительные преобразования матрицы G из (5):

$${}^t P' R G R P = B = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & b_{22} \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы R определяются из условия

$${}^t R A R = E;$$

P — унитарное преобразование, приводящее B к диагональному виду; E — единичная матрица.

После указанных операций контур аксептанса преобразуется в окружность с единичным радиусом, а контур эмиттанса — в эллипс с полуосями $b_{11}^{-1/2}$, $b_{22}^{-1/2}$. В предположении равномерного распределения плотности частиц по фазовому контуру критерием величины пропускания является площадь фигуры, образованной пересечением эллипса с определяющей матрицей B и единичной окружностью. Так как площадь приведенного эмиттанса $S = \Delta_e / \Delta_A$ (Δ_e и Δ_A — определители матриц \mathcal{E} и A соответственно) остается постоянной при варьировании потенциала внутри области транспортировки и определяется только отношением энергий пучка на входе и выходе из ЭТС, то при $S > \pi$ выполнение $b_{11}, b_{22} < 1$ является достаточным условием полного заполнения аксептанса. В случае когда $S \leq \pi$, условие $b_{11}, b_{22} \geq 1$ является достаточным для полного пропускания пучка. С другой стороны, величина пропускания необходимо достигает максимума при минимуме функции $\gamma = b_{11} + b_{22}$. Выбор в дальнейших рассмотрениях γ в качестве целевой функции оптимизации обусловлен отсутствием необходимости сравнительного анализа величин b_{11} и b_{22} , т. е. возможностью сведения задачи оптимизации к поиску безусловного экстремума целевой функции.

В частном случае, когда аксептанс прибора определяется одной диафрагмой с полушириной d , полное пропускание пучка осуществляется при выполнении условия

$$g_{11} \leq w_a d^2 \Delta_e,$$

где g_{11} — элемент матрицы G .

Вариация целевой функции. Вариация целевой функции γ выражается через вариацию решений уравнения (16) на границе $z=z_a$ соотношением

$$\delta\gamma = Sp\delta B = \delta b_{11} + \delta b_{22},$$

где δb_{11} и δb_{22} — элементы матрицы δB , которая, вообще говоря, не является диагональной:

$$\delta B = {}^t P {}^t R [{}^t T E \delta T + ({}^t T E \delta T)] R P, \quad (7)$$

где

$$\delta T = w_a \begin{pmatrix} \delta\eta_{2a} & -\delta\eta_{1a} \\ -\delta\eta'_{2a} & \delta\eta'_{1a} \end{pmatrix}.$$

В свою очередь, варьируя f и ψ , из (16) получаем уравнения для вариаций $\delta\eta_1$ и $\delta\eta_2$ в зависимости от вариации f и ψ

$$\begin{aligned} L_y[\delta\eta_1, f, \psi] &= -L_y[\eta_1, \delta f, \delta\psi]; \\ L_y[\delta\eta_2, f, \psi] &= -L_y[\eta_2, \delta f, \delta\psi], \end{aligned}$$

решениями которых являются

$$\begin{aligned} \delta\eta_1 &= \frac{1}{2} \eta_1 \int_0^x \left[\eta_1 \eta_2 \frac{\psi}{f} - (\eta_1 \eta_2)'' \right] \frac{\delta f}{\sqrt{f}} dz + \frac{1}{2} \eta_2 \int_0^x \left[(\eta_1^2)'' - \eta_1^2 \frac{\psi}{f} \right] \frac{\delta f}{\sqrt{f}} dz + \\ &+ \frac{1}{2} \eta_2 \int_0^x \eta_1^2 \frac{\delta\psi}{\sqrt{f}} dz - \frac{1}{2} \eta_1 \int_0^x \eta_1 \eta_2 \frac{\delta\psi}{\sqrt{f}} dz; \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \delta\eta_2 &= \frac{1}{2} \eta_1 \int_0^x \left[(\eta_2^2)'' - \eta_2^2 \frac{\psi}{f} \right] \frac{\delta f}{\sqrt{f}} dz + \frac{1}{2} \eta_2 \int_0^x \left[\eta_1 \eta_2 \frac{\psi}{f} - (\eta_1 \eta_2)'' \right] \frac{\delta f}{\sqrt{f}} dz + \\ &+ \frac{1}{2} \eta_2 \int_0^x \eta_1 \eta_2 \frac{\delta\psi}{\sqrt{f}} dz - \frac{1}{2} \eta_1 \int_0^x \eta_2^2 \frac{\delta\psi}{\sqrt{f}} dz. \end{aligned}$$

Определяя вариацию f и ψ через вариацию ξ_1 и ξ_2 , совместно с (8) получаем при $z = z_a$

$$\delta\eta_1 = \frac{1}{2} \eta_{1a} \int_0^{z_a} (L_{x2} \alpha_{121} - L_{x1} \alpha_{122}) dz - \frac{1}{2} \eta_{2a} \int_0^{z_a} (L_{x2} \alpha_{111} - L_{x1} \alpha_{112}) dz; \quad (9)$$

$$\delta\eta_2 = \frac{1}{2} \eta_{1a} \int_0^{z_a} (L_{x2} \alpha_{221} - L_{x1} \alpha_{222}) dz - \frac{1}{2} \eta_{2a} \int_0^{z_a} (L_{x2} \alpha_{211} - L_{x1} \alpha_{212}) dz.$$

Здесь

$$\begin{aligned} L_{xi} &= L_x[\delta\xi_i, f, \psi], \quad i = 1, 2; \\ \alpha_{ijk} &= \frac{d}{dz} (\eta_i \eta_j \xi_k), \quad i, j, k = 1, 2. \end{aligned}$$

При этом считаем, что

$$\delta\xi_i^{(k)}(0) = \delta\xi_i^{(k)}(z_a) = 0,$$

где $k = 0, 1, 2, \dots$ — порядок производной.

Вариация производных η'_1 и η'_2 получается из (9) заменой η_{1a} , η_{2a} значениями η'_{1a} и η'_{2a} .

Построение итерационного алгоритма. Траектории $\xi_1(z)$ и $\xi_2(z)$ в плоскости XOZ могут быть описаны многими способами: сплайнами, рядами и т. д. Мы рассмотрим случай, когда траектории представлены в виде суммы базовых траекторий $\xi_{10}(z)$ и $\xi_{20}(z)$, удовлетворяющих заданным граничным условиям

и линейной суперпозиции функций возмущения с нулевыми граничными значениями:

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \xi_{10} + \sum_i a_i \xi_{1i}; \\ \xi_2 &= \xi_{20} + \sum_j b_j \xi_{2j}.\end{aligned}\quad (10)$$

Варьируемыми параметрами считаем весовые множители a_i и b_j ; тогда для ξ_1 и ξ_2 в форме (10) вариация матрицы B будет определяться из (7) как

$$\delta B = \sum_i a_i Q_{1i} + \sum_j b_j Q_{2j}, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned}Q_{ki} &= {}^t P^t R [{}^t T E T_{ki} + {}^t ({}^t T E T_{ki})] R P; \\ k &= 1, 2; T_{1i} = \begin{pmatrix} -\eta_{1i} \\ \eta'_{1i} \end{pmatrix}; T_{2j} = \begin{pmatrix} \eta_{2j} \\ -\eta'_{2j} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Компоненты векторов T_{1i} и T_{2j} на основании (9) имеют вид

$$\begin{aligned}\eta_{1i} &= \frac{1}{2} \eta_{1a} \int_0^{z_a} (L_{x2i} \alpha_{121} - L_{x1i} \alpha_{122}) dz - \frac{1}{2} \eta_{2a} \int_0^{z_a} (L_{x2i} \alpha_{111} - L_{x1i} \alpha_{112}) dz; \\ \eta_{2j} &= \frac{1}{2} \eta_{1a} \int_0^{z_a} (L_{x2j} \alpha_{221} - L_{x1j} \alpha_{222}) dz - \frac{1}{2} \eta_{2a} \int_0^{z_a} (L_{x2j} \alpha_{121} - L_{x1j} \alpha_{122}) dz,\end{aligned}$$

где $L_{xkm} = L_x[\xi_{km}, f, \phi]$; $m = i, j, k = 1, 2$.

Из (11) сразу получаем компоненты градиента целевой функции на множестве параметров траекторий ξ_1 и ξ_2 :

$$\frac{\partial \gamma}{\partial a_i} = S P Q_{1i}, \quad \frac{\partial \gamma}{\partial b_j} = S P Q_{2j}. \quad (12)$$

Вычисление градиента целевой функции вышеописанным способом является более устойчивым к погрешности вычислений по сравнению с разностными методами, так как использует только квадратурные выражения, в которых, как правило, происходит сглаживание малых возмущений численно заданных функций, а также требует существенно меньшего объема вычислений.

Восстановление потенциала. Траектории $\xi_1(z)$ и $\xi_2(z)$ со значениями параметров, при которых достигается экстремум целевой функции, на основании (2) и (3) однозначно определяют распределение потенциала в приосевой области. Так как распределение потенциала в одной плоскости симметрии однозначно определяет распределение потенциала в другой, то, следовательно, задача о восстановлении потенциала сводится к задаче Коши для уравнения Лапласа, которая может быть решена несколькими способами. Мы рассмотрим метод интегрального представления, который более удобен для получения требуемых оценок, т. е. найдем гармоническую функцию $W(x, y, z)$, удовлетворяющую следующим условиям:

$$W(x, 0, z) = V(x, z), \quad W_y|_{y=0} = W_x|_{x=0} = 0. \quad (13)$$

Решение может быть представлено в виде

$$W(x, y, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A(\alpha, \beta) \operatorname{ch} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} y \cos \alpha x e^{i\beta z} d\alpha d\beta, \quad (14)$$

где

$$A(\alpha, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, z) \cos \alpha x e^{-i\beta z} dx dz. \quad (15)$$

Сходимость интегралов (14), (15) требует, чтобы

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |A(\alpha, \beta)| \operatorname{ch} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} y d\alpha d\beta < \infty \text{ для } y \in [-y_0, y_0];$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |V(x, z)| dx dz < \infty \text{ для } x, z \in (-\infty, \infty).$$

В рассматриваемом нами случае, когда распределение потенциала вблизи оптической оси представляется выражением (2), для обеспечения сходимости интегралов (14) и (15) распределение потенциалов в плоскости представим как

$$V(x, z) = f(z) - \frac{1}{2} \psi(z) x^2 e^{-x^2};$$

тогда пространственное распределение потенциала определяется выражением

$$W(x, y, z) = \operatorname{Re} [f(z + iy)] + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(\alpha, \beta) \operatorname{ch} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} y \cos \alpha x e^{i\beta z} d\alpha d\beta, \quad (16)$$

где

$$A(\alpha, \beta) = -\frac{1}{16\sqrt{\pi}} \frac{2 - \alpha^2}{e^{\frac{\alpha^2}{4}}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(z) e^{-i\beta z} dz, \quad (17)$$

причем сходимость (17) обеспечивается соответствующим выбором $\xi_1(z)$ и $\xi_2(z)$. Положив в (16) $y = y_0$, получаем граничные условия, реализация которых определит ЭТС с заданными оптическими характеристиками, пространственно ограниченную по координате y .

В случае, когда ЭТС должна быть ограниченной по двум пространственным координатам, решение задачи Коши (13) представим в виде

$$W(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_n a_n(\alpha) \operatorname{ch} \sqrt{\alpha^2 + b_n^2} y \cos c_n x \right] e^{i\alpha z} d\alpha,$$

где

$$a_n(\alpha) = \frac{1}{x_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-x_0}^{x_0} V(x, z) \cos c_n x e^{-i\alpha z} dx dz;$$

$$c_n = \frac{\pi(2n+1)}{2x_0},$$

и, заменив выражение приосевого потенциала (2) выражением

$$U(x, y, z) = f(z) - \frac{1}{2} \psi(z) x^2 P_n, \quad (18)$$

где

$$P_n = 1 + \sum_{i=2}^n q_i(y) x^{2i};$$

$$q_i(y) = \sum_{j=2}^n c_{ij} y^{2j},$$

которое имеет асимптотическое представление вида (2) вблизи оси OZ , получаем

$$W(x, y, z) = \operatorname{Re}[f(z + iy)] + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_n a_n(\alpha) \operatorname{ch} \sqrt{\alpha^2 + b_n^2} y \cos c_n x \right] e^{i\alpha z} d\alpha;$$

$$a_n(\alpha) = \frac{1}{x_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(z) e^{-i\alpha z} dz x \sum_i q_i \int_{-x_0}^{x_0} x^{2i} \cos \frac{\pi(2n+1)}{2x_0} dx. \quad (19)$$

Вторые множители в выражении для a_n вычисляются элементарно, сходимость первых интегралов зависит от вида функций $\xi_1(z)$ и $\xi_2(z)$.

Построение ЭТС с заданными оптическими характеристиками. Нахождение системы электродов, дающей требуемое распределение потенциала в приосевой области, может быть сведено к поиску мини-макса разности аппроксимируемой функции и приосевого потенциала некоторой заданной системы электродов на множестве параметров, определяющих геометрию и потенциалы электродов [3].

В данном разделе рассмотрим алгоритм, основанный на аппроксимации аналитически продолженного потенциала кусочно-постоянными функциями на заданной границе. Норма аппроксимации определяется выполнением условий транспортровки с заданной погрешностью.

Оценим вариацию целевой функции γ в зависимости от вариации граничных условий. Из (7) получаем

$$|\delta\gamma| \leq C_1 |\delta\eta_1| + C_2 |\delta\eta_2| + C_3 |\delta\eta'_1| + C_4 |\delta\eta'_2|, \quad (20)$$

где C_1, C_2, C_3, C_4 — константы, определяющиеся в результате приведения матриц P, R, T и \mathcal{E} .

В свою очередь, из (8) имеем следующие оценки:

$$\begin{aligned} |\delta\eta_1| &\leq C_{11} \max_{s \in [0, s_a]} |\delta f| + D_{11} \max_{s \in [0, s_a]} |\delta\psi| = C_{11}\Delta_f + D_{11}\Delta_\psi; \\ |\delta\eta_2| &\leq C_{21}\Delta_f + D_{21}\Delta_\psi; \\ |\delta\eta'_1| &\leq C_{12}\Delta_f + D_{12}\Delta_\psi; \\ |\delta\eta'_2| &\leq C_{22}\Delta_f + D_{22}\Delta_\psi. \end{aligned} \quad (21)$$

Выражая f и ψ через W из (16), при $y = \pm y_0$ имеем

$$|\delta f| \leq \frac{B_1}{y_0} |\delta W(x, \pm y_0, z)|, \quad |\delta\psi| \leq \frac{B_2}{y_0^2} |\delta W(x, \pm y_0, z)|, \quad (22)$$

и, следовательно, неравенства (20), (21), (22) определяют норму аппроксимации. Для аналитического продолжения в форме (19) приведенные неравенства остаются справедливыми.

Распределение пространственного потенциала с кусочно-постоянными граничными значениями на плоскостях $y = \pm y_0$ описано в [4]. Для системы, пространственно ограниченной по координатам x и y , распределение потенциала при условиях на границах

$$\begin{aligned} U(\pm x_0, y, z) &= V_{x_i}, \quad z \in [z_i, z_{i+1}]; \\ U(x, \pm y_0, z) &= V_{y_j}, \quad z \in [z_j, z_{j+1}] \end{aligned}$$

может быть выражено как линейная суперпозиция функций вида

$$\begin{aligned} V_{x_i}(x, y, z) &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\sin \mu l_{xi}}{\mu} \cos \mu (z - z_i^*) \sum_n c_n \frac{\operatorname{ch} \beta_n x}{\operatorname{ch} \beta_n x_0} \cos b_n y d\mu; \\ V_{y_j}(x, y, z) &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\sin \mu l_{yj}}{\mu} \cos \mu (z - z_j^*) \sum_n c_n \frac{\operatorname{ch} \alpha_n y}{\operatorname{ch} \alpha_n y_0} \cos a_n x d\mu, \end{aligned} \quad (23)$$

где $z_i^* = \frac{z_{i+1} + z_i}{2}$; $\alpha_n = \sqrt{\mu^2 + a_n^2}$, $\beta_n = \sqrt{\mu^2 + b_n^2}$;

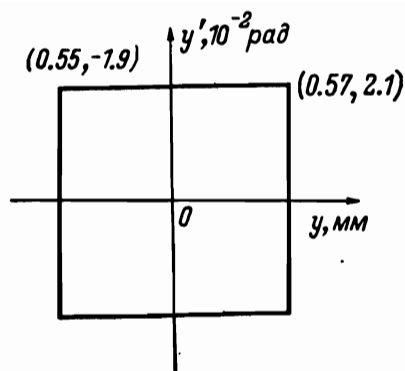


Рис. 1. Эмиттанс пучка ионов в плоскости выходной щели источника ионов.

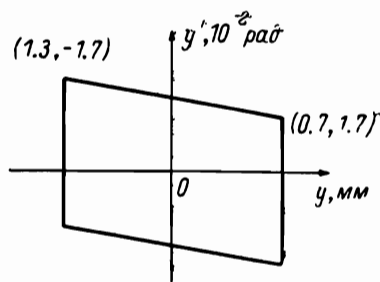


Рис. 2. Аксептанс прибора в плоскости входа в камеру анализатора МХ1320.

$a_n = \frac{\pi(2n+1)}{2x_0}$, $b_n = \frac{\pi(2n+1)}{2y_0}$, $c_n = (-1)^n \frac{1}{2n+1}$; V_{xi} и V_{yj} — потенциалы прямоугольных электродов, параллельных плоскостям YOZ и XOZ , l_{xi} и l_{yj} — длины электродов в направлении оси OZ .

При аппроксимации граничных значений потенциала вида (19) кусочно-постоянными функциями коэффициенты полиномов P и Q определяются из минимума функционалов:

$$\int_{-y_0}^{y_0} |W(\pm x_0, 0, z) - W(\pm x_0, y, z)| dy \text{ для } z \in [0, z_a];$$

$$\int_{-x_0}^{x_0} |W(0, \pm y_0, z) - W(x, \pm y_0, z)| dx \text{ для } z \in [0, z_a],$$

нахождение которых сводится к решению систем линейных уравнений относительно неизвестных c_{ij} из (18). Такой выбор коэффициентов полиномов P_n обуславливает малую вариацию граничных значений $W(x, y, z)$ из (19) в зависимости от изменения координат x и y , что позволяет сократить число электродов реальной системы.

Расчет ЭТС масс-спектрометра МХ1320. На основании вышеприведенного алгоритма был проведен расчет ЭТС для масс-спектрометра МХ1320 с целью увеличения пропускания прибора. Форма эмиттанса пучка ионов в плоскости выходной щели источника, полученная на основании экспериментальных данных, показана на рис. 1. Коллимация пучка в анализаторе происходит из-за наличия входной и выходной диафрагм магнитного анализатора, поэтому аксептанс прибора имеет форму параллелограмма, симметричного относительно начала координат (рис. 2).

Используя линейное преобразование фазовых координат y' и y

$$D = \begin{pmatrix} -\frac{y'_1 + y'_2}{S} & \frac{y_2 + y_1}{S} \\ \frac{y'_1 - y'_2}{S} & \frac{y_2 - y_1}{S} \end{pmatrix}, \text{ где } S = y'_1 y_2 - y_1 y'_2;$$

(y'_1, y_1) , (y'_2, y_2) — координаты двух вершин параллелограмма, проводим аппроксимацию параллелограммов эллипсами, площадь которых равна площади параллелограммов. Тогда определяющие матрицы контуров эмиттанса и аксептансов из (4) и (6) представляются как

$$\mathcal{E} = \frac{\pi}{4} {}^t D_\varepsilon D_\varepsilon, \quad A = \frac{\pi}{4} D_A D_A.$$

В плоскости дисперсии прибора должно выполняться условие совпадения изображения с объектом, которое следует из требования сохранения величины

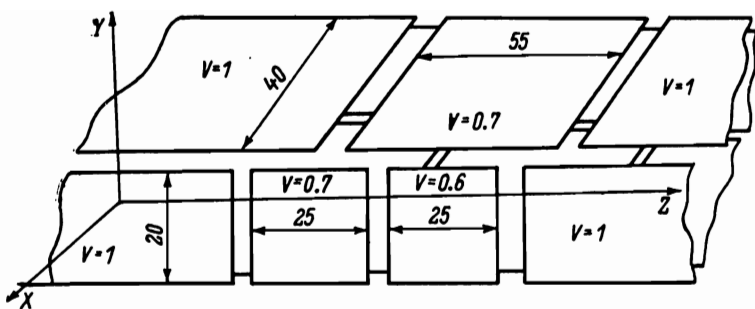


Рис. 3. Геометрия коробчатой транспортирующей линзовой системы.

входного плеча магнитного анализатора. Это условие будет выполнено, если траектории в плоскости дисперсии представить в виде

$$\xi_1(z) = z + \sum_i a_i \exp[-c_i(z - z_i)^2];$$

$$\xi_2(z) = 1 + \sum_j b_j \exp[-d_j(z - z_j)^2].$$

Параметры c_i , z_i , d_j , z_j определялись выполнением условия

$$\xi_1' \xi_2 - \xi_1 \xi_2' > 0$$

во всей области транспортировки.

Оптимизация проводилась на множестве параметров a_i и b_j для ряда значений c_i , z_i , d_j и z_j . Поиск экстремума целевой функции осуществлялся градиентными методами при использовании выражений (12) с использованием стандартных программ ЭВМ ЕС-1022. Итерационный процесс заканчивался при достижении относительной погрешности менее 2% за время порядка 15 мин. Геометрические параметры ЭТС, обеспечивающей оптимальную транспортировку пучка и потенциалы электродов, приведены на рис. 3. Расчетное увеличение пропускания составило более 300%.

Для контроля точности приведенного алгоритма решалась прямая траекторная задача для электростатической системы, параметры которой были найдены в результате кусочно-постоянной аппроксимации граничных значений аналитического продолжения потенциала вида (23). Расчеты показали, что отклонение расчетных траекторий от заданных аналитически не превышало общей погрешности вычислений.

В заключение следует добавить, что приведенная электростатическая система, кроме того, позволяет осуществлять юстировку источника ионов по углам и координатам в обеих плоскостях за счет смещения потенциала на противоположных электродах. Зависимость юстировочных параметров от геометрии системы и потенциалов электродов приведена в [5].

ЛИТЕРАТУРА

1. Clement S., Comston W. — Int. J. Mass-Spectrom. and Ion Phys., 1973, v. 10, N 3, p. 323.
2. Бенфорд А. Транспортировка пучков заряженных частиц. М., 1969.
3. Расчетные и экспериментальные исследования новых ионных и электронных оптических систем. Отчет по научно-исследовательской работе НИР 101 НТО АН СССР. Номер гос. регистрации 79060710. Л., 1981.
4. Де-Вольф Д. А. — ТИИЭР, 1978, т. 66, № 1, с. 73.
5. Лебедев Г. В. — Науч. приборы, 1980, № 23, с. 42.