

Расчет порога изотопической чувствительности однокаскадного масс-спектрометра для изотопного анализа. Соколов Б. Н., Щербakov А. Н. — В кн.: Научное приборостроение. Л., «Наука», 1983, с. 36—45.

Описывается методика расчета фона рассеяния ионов на молекулах остаточного газа, стенках камеры анализатора и кромках коллимирующих диафрагм. Представлены результаты расчета порога изотопической чувствительности для масс-спектрометра МИ1320, показано их совпадение с экспериментальными данными. При давлении  $p > 1 \cdot 10^{-6}$  мм рт. ст. фон обусловлен рассеянием на остаточном газе, при  $p \leq (2-3) \cdot 10^{-6}$  мм рт. ст. — рассеянием на твердых поверхностях. Порог изотопической чувствительности зависит от шероховатости рассеивающей поверхности, причем характер зависимости определяется размером и местоположением коллимирующих диафрагм. Для геометрии, использованной в расчетах, с уменьшением шероховатости порог изотопической чувствительности уменьшается. Лит. — 15 назв., ил. — 10, табл. — 1.

## **РАСЧЕТ ПОРОГА ИЗОТОПИЧЕСКОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ОДНОКАСКАДНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА ДЛЯ ИЗОТОПНОГО АНАЛИЗА**

Рассеяние ионов при их транспортировании от источника до приемника ионов приводит к появлению фона вблизи измеряемых пиков масс-спектра и соответственно к снижению точности анализа. Влияние различных причин рассеяния — столкновения ионов с молекулами остаточного газа, стенками камеры анализатора и кромками коллимирующих диафрагм — исследовалось в отдельных работах [1—3] путем разработки алгоритмов и программ расчета методами статистического моделирования с последующим сравнением расчетных и экспериментальных результатов.

На основании выполненных исследований представляется возможным разработать методику расчета порога изотопической чувствительности для конкретной геометрии магнитного статического масс-спектрометра и конкретных условий прохождения ионного пучка через масс-анализатор. В настоящей работе представлены результаты расчетно-теоретических исследований порога изотопической чувствительности для масс-спектрометра с одинарной фокусировкой в зависимости от давления остаточных газов в масс-спектрометре, а также от обработки поверхности камеры анализатора и кромок коллимирующих диафрагм.

### **Постановка задачи и методика расчета**

Наиболее широко для целей изотопного анализа применяются статические масс-спектрометры с секторными магнитными полями [4—7], позволяющие получить высокую точность измерений изотопных отношений, в том числе и наиболее простые из них с одинарной фокусировкой [4—6]. В частности, эле-

Рис. 1. Эмиттансы ионного пучка и аксептансы масс-спектрометра (вертикальная плоскость).

Аксептансы:  $a$ — $a$  — входной диафрагмы камеры анализатора;  $b$ — $b$  — камеры анализатора;  $e$ — $e$  — выходной диафрагмы камеры анализатора;  $I, II, III$  — эмиттансы.

чественный масс-спектрометр МИ1320 наряду с высокими характеристиками по чувствительности, точности, производительности [4] имеет низкий порог изотопической чувствительности  $\delta = (2-3) \times 10^{-6}$  на соседних массах урана.

Целью настоящей работы являлась разработка методики расчета порога изотопической чувствительности секторных масс-спектрометров применительно к геометрии МИ1320, оценка величины порога для рабочих условий в масс-спектрометре и сравнение с экспериментально измеренной величиной для последующего распространения методики на вновь разрабатываемые приборы. Так же как и ранее, расчеты основывались на применении метода статистического моделирования.

Применительно к данной задаче этот метод заключается в многократной математической имитации основного элементарного процесса — «истории» иона, зависящего от ряда случайных параметров и включающего отдельные этапы от момента инжекции иона из источника ионов до момента пересечения им плоскости щели приемника ионов. Для движения иона в различных зонах прибора моделировались акты случайных столкновений с молекулами остаточного газа или, при соответствующем направлении вектора скорости иона, с поверхностью коллимирующих диафрагм и поверхностью вакуумной камеры масс-анализатора. При акте столкновения учитывалось изменение импульса и вычислялась траектория дальнейшего движения с учетом измененного импульса. Алгоритм расчета допускал повторные столкновения, если изменение направления вектора скорости после первого столкновения могло привести к новому попаданию иона на стенку камеры или кромку диафрагмы.

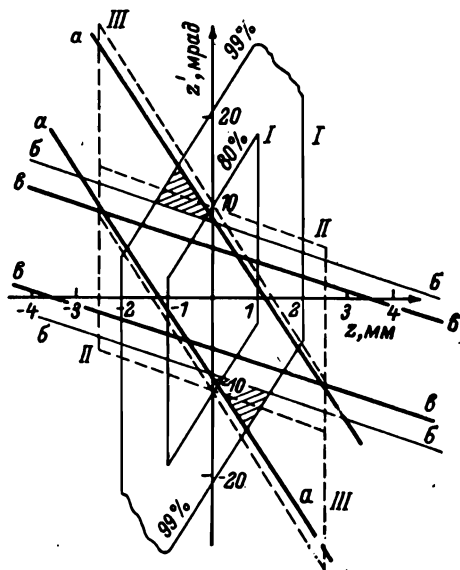
Координаты пересечения рассеянным ионом плоскости щели приемника ионов определяли его расстояние от центральной траектории в единицах относительной разности масс или в единицах массового числа, а количество ионов, попавших в элементарную ячейку с данными координатами, — интенсивность фона рассеяния. Относительная величина фона рассеяния вычислялась на один инжектированный ион с учетом коэффициента нейтрализации при попадании иона на металлические поверхности.

**Модель инжекции иона.** Начальные условия движения иона, прошедшего выходную щель источника ионов, моделировались как случайные величины в промежутках

$$|y| \leq d, \quad |\alpha| \leq \alpha_0, \quad |z| \leq h, \quad az - \beta_0 \leq \beta \leq az + \beta_0. \quad (1)$$

Величины  $y$  и  $\alpha$  разыгрывались равномерно на указанных промежутках,  $z$  и  $\beta$  — по нормальному закону с параметрами, заимствованными из экспериментально измеренных распределений плотности ионного пучка по сечению для трехленточного источника ионов.

На рис. 1 изображена аппроксимация реального эмиттанта ионного пучка, включающего 80 и 90% ионного тока, которая использовалась в настоящей работе (эмиттанс I). На том же рис. 1 представлены эмиттансы II и III, для которых проводился расчет с целью выяснения влияния начальных параметров ионного пучка на величину фоновоего тока. Линиями  $a$ — $a$ ,  $b$ — $b$ ,  $e$ — $e$  отмечены аксептансы входа в масс-анализатор, ограниченной диафрагмой 2; самой камерой масс-анализатора и выходной диафрагмой 4 (рис. 2). В щель приемника



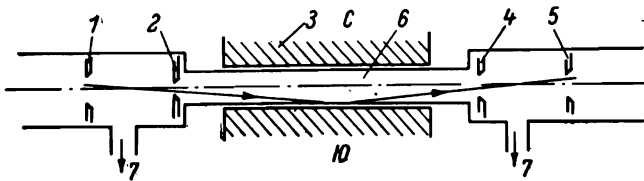


Рис. 2. Схема масс-спектрометра МИ1320 (вертикальная плоскость).

1 — выходная диафрагма источника ионов,  $h=5$  мм; 2 — входная диафрагма камеры анализатора,  $h=2.4$  мм; 3 — магнит анализатора; 4 — выходная диафрагма камеры анализатора,  $h=7$  мм; 5 — входная диафрагма приемника ионов,  $h=7$  м; 6 — камера анализатора,  $h=10$  мм; 7 — измерители давления.

ионов может попасть часть ионов, рассеянных на кромках диафрагм (по линиям  $a-a$  и  $b-b$ ), и часть ионов, рассеянных на стенках камеры анализатора (заштрихованная область эмиттанта I). Для эмиттансов II и III эта зона рассеяния не выделена. Ионы, рассеянные на молекулах остаточного газа, могут попасть в приемник ионов в пределах практически всей площади эмиттанта, ограниченной линиями  $a-a$  и  $b-b$ .

**Модель рассеяния на молекулах остаточного газа.** Столкновение иона с атомом или молекулой является основным процессом, приводящим к изменению импульса и как следствие — к уширению масс-спектрометрического пика. В области энергий, типичных для изотопной масс-спектрометрии (3—15 кэВ), с хорошей точностью можно использовать кинематику упругого рассеяния, происходящего практически во всем диапазоне углов по законам классической механики. Исключения составляют углы [8]

$$\theta \leq \theta_c = \frac{n\hbar}{Pr_{\min}}, \quad (2)$$

где  $P$  — относительный импульс;  $r_{\min}$  — расстояние наименьшего сближения. В лабораторной системе координат для пары  $U^+ - N_2$  при энергии ионов 10 кэВ  $\theta_c \approx 1.7 \cdot 10^{-4}$  рад. Рассеяние на столь малые углы вызывает незначительное изменение импульса, сравнимое (и меньше) с угловыми абберациями, что может привести лишь к изменению формы вблизи основного пика.

Зависимость угла рассеяния  $\theta$  от прицельного параметра  $b$  однозначно определяется потенциалом взаимодействия сталкивающихся частиц. В работах по рассеянию ионов [1—3] и в настоящем исследовании использовался модифицированный потенциал Фирсова [9, 10] — экранированный кулоновский потенциал с функцией экранирования

$$\chi(R) = \left[ a \exp\left(\frac{-\alpha}{A_\Phi} R\right) + b \exp\left(\frac{-\beta}{A_\Phi} R\right) \right]^2, \quad (3)$$

где  $a=0.7111$ ;  $b=0.2889$ ;  $\alpha=0.175$ ;  $\beta/\alpha=9.5$ ;  $A_\Phi$  — длина экранирования;

$$A_\Phi = 0.8853a_0(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^{-2/3}; \quad (4)$$

$a_0$  — боровский радиус;  $Z_1$  и  $Z_2$  — заряды ядер сталкивающихся атомов.

Особенности рассеяния на двухатомных молекулах (молекулы азота или кислорода в остаточном газе) описаны в [11], где для пары  $U^+ - N_2$  вычислена функция отклонения

$$\theta = \frac{1}{E_{\text{отн}}} e^{-4.3b} (102.2 - 38.7b + 11.7b^2). \quad (5)$$

Моделирование акта столкновения состоит из следующих операций:

— моделируется прицельный параметр в промежутке  $(b_1, b_2)$  как случайная величина с плотностью распределения  $P(b) = 2b/(b_2^2 - b_1^2)$ ;

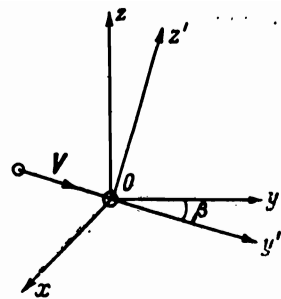
— по данному  $b$  вычисляется из (5) полярный угол рассеяния  $\theta$ ;

— азимутальный угол рассеяния моделируется как равномерно распределенная величина на промежутке  $[0, 2\pi]$ ;

— производится расчет импульса иона после столкновения.

Расчет углов, задающих в лабораторной системе координат направление движения иона после столкновения, производился следующим образом. Си-

Рис. 3. Преобразование координат при рассеянии иона на молекуле остаточного газа.



стема координат  $xuz$  выбиралась так, чтобы плоскость  $xu$  была параллельна горизонтальной плоскости масс-анализатора, а вектор скорости иона  $\mathbf{V}$  лежал в плоскости  $yz$ . Пусть наклон вектора  $\mathbf{V}$  к оси  $oy$  есть угол  $\beta$  (рис. 3). Выберем систему координат  $x'y'z'$  так, чтобы ось  $oy'$  совпала с вектором  $\mathbf{V}$ , а ось  $ox'$  — с осью  $ox$ . Пусть  $\mathbf{v}$  — единичный вектор рассеяния в системе центра масс. Считая, что до столкновения рассеивающая молекула покоится, получаем для вектора скорости иона после столкновения

$$\mathbf{V}' = \frac{m_0}{m_0 + M} \mathbf{V} + \frac{M}{m_0 + M} \mathbf{V} \mathbf{v}, \quad (6)$$

где  $m_0$  — масса иона;  $M$  — масса рассеивающей молекулы. В проекциях на оси  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$

$$\begin{aligned} V'_{x'} &= \frac{M}{m_0 + M} V \sin \theta \sin \varphi; \\ V'_{y'} &= \frac{m_0}{m_0 + M} V + \frac{M}{m_0 + M} V \cos \theta; \\ V'_{z'} &= \frac{M}{m_0 + M} V \sin \theta \cos \varphi. \end{aligned} \quad (7)$$

Производя поворот вокруг оси  $Ox'$  на угол  $-\beta$ , переходим в систему  $xuz$ , где новые значения компонент вектора скорости иона составляют

$$\begin{aligned} V'_x &= V'_{x'}; \\ V'_y &= V'_{y'} \cos \beta - V'_{z'} \sin \beta; \\ V'_z &= V'_{y'} \sin \beta + V'_{z'} \cos \beta. \end{aligned} \quad (8)$$

Тогда в лабораторной системе координат, считая углы вектора скорости иона до столкновения  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$ , а после столкновения  $\alpha$  и  $\beta$ , получаем

$$\beta = \arcsin \left( \frac{V'_z}{V'} \right) = \arcsin \frac{V'_{y'} \sin \beta_0 + V'_{z'} \cos \beta_0}{V'}; \quad (9)$$

$$\alpha = \alpha_0 + \arcsin \left( \frac{-V'_x}{V'_y} \right) = \alpha_0 + \arcsin \frac{V'_{x'}}{V'_{y'} \sin \beta - V'_{z'} \cos \beta};$$

энергия иона после рассеяния  $E = m_0 V'^2/2$ .

Вероятность перезарядки и «обдирки» иона при столкновениях оценивалась по сечениям соответствующих процессов [12—16], откуда следует, что для рассматриваемых областей энергий вероятностью обдирки можно пренебречь, а вероятность перезарядки имеет существенное значение для ионов благородных газов и должна учитываться, например путем нормирования гистограмм рассеяния.

**Модель рассеяния на поверхности твердых тел.** Модель подробно описана в [2], в данной работе учитывалась различная величина характеристик шероховатости поверхности при ее технологической обработке. «Технологическая» шероховатость моделировалась как стационарное нормальное изотропное случайное поле с корреляционной функцией вида [1]

$$K(r) = \sigma_z^2 \exp(-\alpha_z^2 r^2). \quad (10)$$

Тангенсы углов наклона нормали к элементарной площадке встречи в этом случае оказываются независимыми нормально распределенными случайными величинами с дисперсией  $2\alpha_z^2 \sigma_z^2$ . Таким образом, в нашей модели величина шероховатости характеризуется произведением частотного параметра  $\alpha_z$  (число

неровностей на единице длины) и параметра  $\sigma_z$ , характеризующего высоту неровностей. В дальнейшем эту меру шероховатости будем обозначать

$$x = \sqrt{2} \alpha_z \sigma_z. \quad (11)$$

Поликристаллическая структура поверхности не учитывалась: предполагалось, что из-за покрытия аморфными пленками поликристаллический рельеф сглажен. В качестве обоснования такого допущения послужило соответствие расчетных и экспериментальных результатов в [2]. Изменение импульса иона при движении в твердом теле рассчитывалось как результат последовательных парных упругих соударений иона с атомными остатками твердого тела. За потенциал взаимодействия при столкновениях был принят модифицированный потенциал Фирсова. Потери энергии на неупругое торможение рассчитывались по формуле Линдхарда [17]. Нейтрализация ионов учитывалась нормированием рассчитанных гистограмм рассеяния.

### Результаты расчетов

Расчеты проводились для геометрии масс-спектрометра МИ1320 (рис. 2), который в отличие от применяемого в [2] имел диафрагмы для уменьшения фона ионов, рассеянных на стенках камеры анализатора.

Для определенности исследовалось рассеяние ионов урана  $^{238}\text{U}^+$ , остаточным газом являлся молекулярный азот, а за меру порога изотопической чувствительности принималась относительная величина фона для  $m=237$  а. е. м. Алгоритм и программа расчета были составлены таким образом, что в качестве промежуточных результатов можно было выводить количество ионов, рассеявшихся в той или иной части анализатора масс-спектрометра.

Составляющая фонового тока, обусловленная рассеянием на молекулах остаточного газа, достигала величины  $8 \cdot 10^{-5}$  от основного пика при давлении газа  $p=1 \cdot 10^{-6}$  мм рт. ст. и изменялась пропорционально давлению. Как следует из рис. 2, относительное количество рассеянных на газе ионов не зависит от характеристик ионного пучка и геометрии масс-анализатора, однако это количество может незначительно изменяться при установке других коллимирующих диафрагм (см., например, рис. 2 в [2]).

Результаты расчета фона рассеянных ионов на шероховатых поверхностях твердых тел представлены на рис. 4—7 и в таблице. Общее число разыгранных историй для каждого эмиттанта было не менее 50 000. Для возможности сравнения все числа рассчитаны на 50 000 ионов. Отметим основные результаты расчетов.

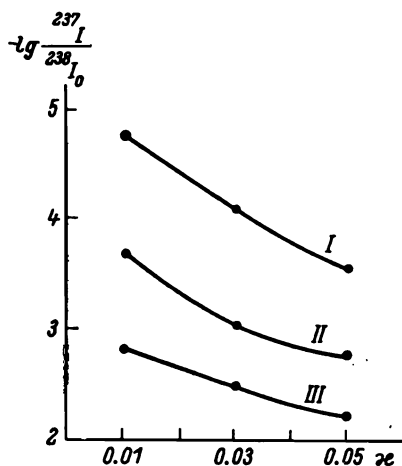


Рис. 4. Зависимость относительной величины фона рассеяния  $\lg^{237} I / \lg^{238} I_0$  на стенках камеры анализатора от параметра шероховатости.

I, II, III — эмиттансы.

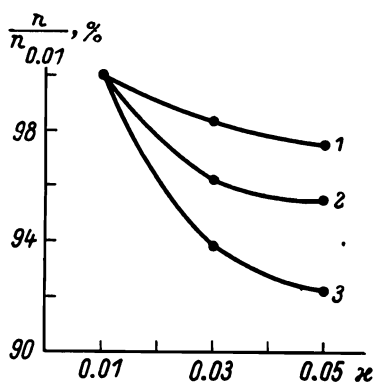


Рис. 5. Зависимость числа ионов, погибших на выходной диафрагме камеры анализатора, от параметра шероховатости.

1 — эмиттанс III,  $n_{0,01}=9040$ ; 2 — эмиттанс I,  $n_{0,01}=4720$ ; 3 — эмиттанс II,  $n_{0,01}=5990$ .

1. С увеличением шероховатости поверхности растет фоновый ток, обусловленный рассеянием ионов на стенках камеры (рис. 4). Это объясняется тем, что в случае малых  $\chi$  ионы в среднем отражаются под малыми углами и, поскольку столкновения происходят во второй половине камеры анализатора, большая часть рассеянных ионов погибает на выходной диафрагме. Это подтверждается рис. 5, из которого

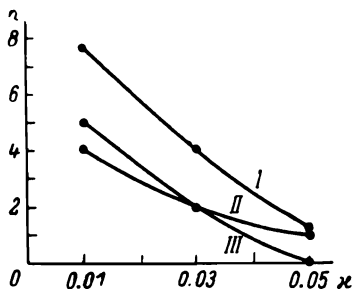


Рис. 6. Зависимость числа ионов, рассеянных на кромках входной диафрагмы камеры анализатора, от параметра шероховатости.

1, 2, 3 — эмиттансы I, II, III.

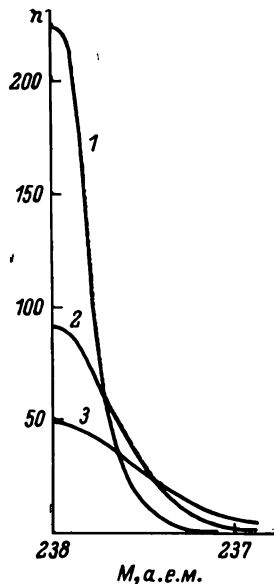


Рис. 7. Сглаженные гистограммы фона рассеянных ионов на стенках камеры анализатора.

Значения  $\chi$ : 1 — 0.01; 2 — 0.03; 3 — 0.05.

следует, что с уменьшением  $\chi$  увеличивается число частиц, отсекаемых выходной диафрагмой камеры анализатора.

Следует отметить, что в [2] наблюдалась обратная зависимость фона рассеяния на стенках камеры от параметра шероховатости: больший фоновый ток давала меньшая шероховатость. В [2] расчеты проводились для того же прибора, однако зазоры входной и выходной диафрагм камеры были значительно больше и составили 8 мм (в настоящей работе соответственно 2.4 и 7 мм при сохранившемся зазоре в камере анализатора 10 мм). Таким образом, для одной и той же ионно-оптической схемы характер зависимости величины фонового тока от величины шероховатости может быть различным для различной геометрии прибора и определяется соотношением размеров камеры анализатора и коллимирующих диафрагм и их взаимным расположением.

2. Величина фонового тока существенно зависит от эмиттанса пучка на выходе из источника ионов и акцептанса масс-спектрометра. С увеличением доли частиц, попадающих на стенки камеры анализатора, фоновый ток возрастает.

#### Число рассеянных ионов и происшедших столкновений

	Эмиттанс I			Эмиттанс II			Эмиттанс III		
	параметр шероховатости $\chi$								
	0.01	0.03	0.05	0.01	0.03	0.05	0.01	0.03	0.05
Частицы: не претерпевшие соударений погибшие на входной диафрагме	16600 27300			14160 27000			12400 22000		
Столкновения: со стенками входного плеча	0	0.7	0.7	0			0		
со стенками выходного плеча	104	100	80	214	221	141	418	421	280
с кромками выходной диафрагмы	1	0.7	1.3	4	2	0	2.5	3	2
со стенками камеры анализатора	222	130	93	1051	659	423	3011	1914	1295

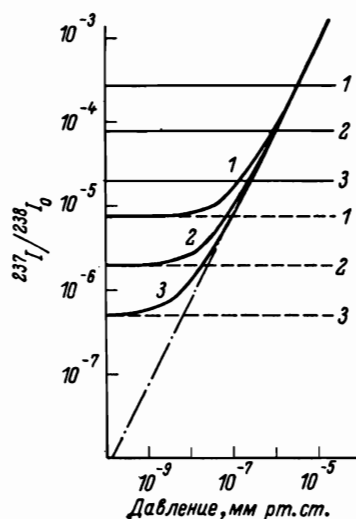


Рис. 8. Зависимость расчетной изотопической чувствительности  $^{237}\text{I}/^{238}\text{I}_0$  масс-спектрометра МИ1320 от давления.

Значения  $x$ : 1 — 0.05; 2 — 0.03; 3 — 0.01.

Эта доля определяется той частью эмиттанса на рис. 1, которая пропускается входной диафрагмой (между линиями  $a-a$ ), но не проходит через камеру анализатора (часть эмиттанса вне линий  $b-b$ ). Так, для эмиттанса III фонный ток на порядок больше по сравнению с фоновым током для эмиттанса I (см. рис. 4, таблицу). Естественно, число рассеянных ионов и соответственно уровень фона сильно зависит от распределения плотности ионов по эмиттансу, так как определяется интегралом по заштрихованной части эмиттанса на рис. 1.

3. Величина фонового тока, обусловленного рассеянием на стенках, сравнима с величиной фонового тока, обусловленного рассеянием на молекулах остаточного газа при  $p=1 \cdot 10^{-6}$  мм рт. ст., для шероховатости  $x=0.03$  (если не учитывать нейтрализацию ионов на стенках) и  $m=237$  а. е. м. составляет величину  $8 \cdot 10^{-5}$  от основного пика.

4. Рассеяние ионов на кромках выходной диафрагмы весьма незначительно (см. таблицу), и не наблюдалось заметного вклада этого рассеяния в фонный ток.

5. Рассеяние ионов на кромках входной диафрагмы также незначительно, однако с уменьшением шероховатости поверхности кромок увеличивается число частиц, достигших плоскости приемной щели после столкновения с кромками (рис. 6). Для шероховатости  $x=0.01$  вклад в общий фонный ток становится сравнимым с долей рассеяния на стенках камеры анализатора. Относительная доля столкнувшихся с кромками диафрагм ионов зависит от эмиттанса ионного пучка (рис. 6), распределения плотности ионов по эмиттансу и толщины диафрагмы. На рис. 1 толщина входной диафрагмы эквивалентна толщине линий  $a-a$  и число рассеянных ионов на кромках равно интегралу по площади соответствующего эмиттанса, занятой линией  $a-a$  (для выходной диафрагмы — соответственно линией  $b-b$ ).

На рис. 7 представлены сглаженные гистограммы распределения рассеянных на стенках камеры и кромках диафрагм ионов в окрестности основного пика ( $M=238$  а. е. м.) со стороны меньших масс. Данные гистограммы можно интерпретировать как фон рассеянных ионов  $^{238}\text{U}^+$  при развертке масс-спектра урана.

Отметим следующие особенности фона рассеянных ионов. Как и в [2], максимум распределения приходится на основную массу  $M=238$  а. е. м. и возрастает с уменьшением параметра шероховатости  $x$ . Общее число рассеянных и достигших плоскости приемной щели ионов, измеряемое площадью под соответствующими кривыми, уменьшается с ростом шероховатости. Однако в отличие от [2] существенно уменьшается область, в которой меньшая шероховатость приводит к большему фоновому току. Если в [2] это  $\Delta M \leq 5$  а. е. м., то в данном случае  $\Delta M \leq 0.3$  а. е. м. и на  $M=237$  а. е. м. больший фон рассеянных ионов образуется в случае более грубой шероховатости.

На рис. 8 приведены зависимости суммарного фонового тока на  $m=237$  а. е. м. от величины остаточного давления. Наклонная прямая — часть фонового тока, обусловленная рассеянием ионов  $^{238}\text{U}^+$  на молекулах остаточного газа. Горизонтальные сплошные прямые — часть фонового тока, обусловленная рассеянием на стенках камеры и кромках диафрагм, для трех различных величин шероховатости:  $x=0.01, 0.03$  и  $0.05$ . Расчеты проводились для эмиттанса I, аппроксимирующего реальный эмиттанс источника ионов масс-спектрометра МИ1320. На том же рис. 8 пунктирные прямые — фонный ток рассеяния на поверхностях, нормированный с учетом нейтрализации ионов при взаимодействии их со стенками по результатам работы [2]. В настоящей работе была



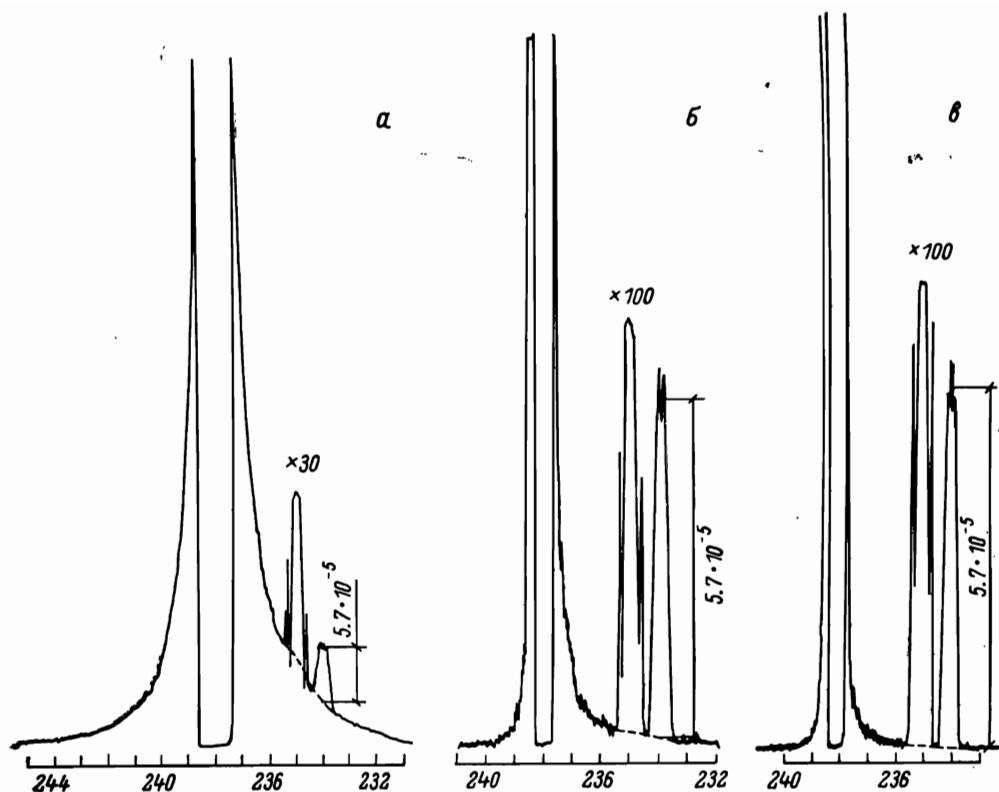


Рис. 9. Форма хвостов пиков  $^{238}\text{U}^+$  при различных давлениях.  
 Давление, мм рт. ст.: а —  $3 \cdot 10^{-8}$ ; б —  $3 \cdot 10^{-9}$ ; в —  $2 \cdot 10^{-9}$ .

проведена оценка среднего коэффициента нейтрализации при скользящих углах падения, которая для неоднократных столкновений дала величину  $\sim 97.5\%$ .

Таким образом, зависимость суммарного фонового тока от давления (кривые 1—3) будет различной для различных шероховатостей, причем при давлении  $p > 10^{-6}$  мм рт. ст. величина фона не зависит от  $\chi$ : основной вклад в него вносит рассеяние на молекулах остаточного газа. С уменьшением остаточного давления суммарный фоновый ток становится постоянной величиной. Начало этой области зависит от величины шероховатости. Для  $\chi = 0.05$  фоновый ток перестает зависеть от давления начиная с нескольких единиц  $10^{-7}$  мм рт. ст., для  $\chi = 0.01$  — начиная с давления порядка  $10^{-9}$  мм рт. ст.

### Экспериментальные результаты

Нелинейная зависимость порога изотопической чувствительности от давления была впервые описана в [18]. Авторы предполагали, что приближение изотопической чувствительности при понижении давления к постоянной величине обусловлено хроматическими aberrациями ионно-оптической системы при наличии начального разброса ионов по скоростям. Разброс по скоростям обусловлен двумя причинами — распределением падения напряжения вдоль ленты ионизатора при ее прямонакальном нагреве в источнике ионов и максвелловским разбросом по скоростям с температурой, равной температуре ионизатора ( $\sim 2000$  °С для урана). В области эффективной ионизации падение напряжения составляет менее 0.5 В, а при наличии фона на расстоянии  $\Delta m/m \approx 0.5\%$  и ускоряющем напряжении 10 кВ необходимо изменение энергии ионов  $\sim 50$  эВ. Количество ионов в максвелловском распределении с такими энергиями пренебрежимо мало. Таким образом, хроматические aberrации не могут быть

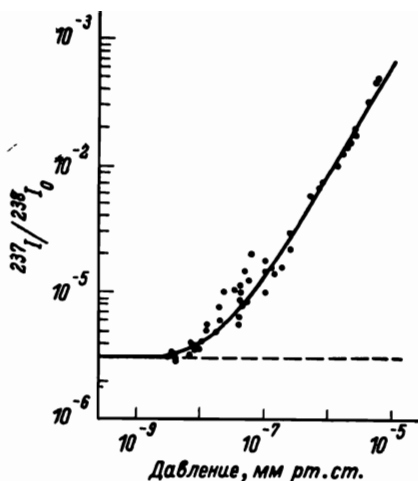


Рис. 10. Экспериментальная зависимость изотопической чувствительности  $^{237}\text{I}/^{238}\text{I}_0$  МИ1320 от давления.

Сплошная кривая — теоретическая; точки — экспериментальные значения; пунктир — предельное значение изотопической чувствительности при  $\alpha=0.033$ .

ответственными за наблюдаемую величину хвостов пиков.

Для сравнения результатов нашего расчета с экспериментальными данными нами проводилась серия измерений порога изотопической чувствительности  $\delta$  масс-спектрометра МИ1320 при различных давлениях остаточного газа (рис. 9, 10). Общий вид зависимости  $\delta(p)$  (рис. 10) аналогичен представленным на рис. 8 с шероховатостью  $\chi \approx 0.033$ .

Напомним типичные значения параметра шероховатости для различных способов обработки поверхности [19]. После шлифовки и электрополировки  $\sigma_z=0.15$  мкм,  $\alpha_z=0.07$  мкм $^{-1}$ ,  $\chi=0.015$ ; после шлифовки и механической полировки  $\sigma_z=0.015$  мкм,  $\alpha_z=0.3$  мкм $^{-1}$ ,  $\chi=0.064$ ; после шлифовки и доводки  $\sigma_z=0.1$  мкм,  $\alpha_z=0.7$  мкм $^{-1}$ ,  $\chi=0.1$ . В нашем случае стенки камеры обрабатывались методами шлифовки и механической полировки с последующей повторной полировкой в направлении движения ионов в камере анализатора при незначительном прижиге полирующего материала к поверхности камеры. Сравнение теоретических и экспериментальных данных на рис. 10 показывает их хорошее совпадение с точностью до разброса экспериментальных точек. В области фона, пропорциональной давлению, наблюдается полное соответствие с учетом поправки на измерение давления в начале и конце камеры анализатора.

Показанные на рис. 9 формы хвостов пиков  $^{238}\text{U}^+$  имеют такой же характер, что и в [18], что указывает на одинаковые причины их образования. Следует отметить большую асимметрию фона рассеяния при низких давлениях остаточного газа. Это может быть объяснено большими углами рассеяния при столкновении ионов со стенками камеры и соответственно большими потерями энергии ( $\Delta E \sim \theta^2$ ).

Таким образом, на основе разработанных алгоритмов и программ расчета рассеяния ионов в однокаскадном масс-спектрометре теоретически рассчитан порог изотопической чувствительности масс-спектрометра МИ1320. Расчет показал хорошее совпадение с экспериментально измеренной изотопической чувствительностью. Было установлено следующее.

1. При давлении в анализаторе  $p > 1 \cdot 10^{-7}$  мм рт. ст. порог изотопической чувствительности определяется рассеянием ионов на молекулах остаточного газа, при  $p \leq (2-3) \cdot 10^{-9}$  мм рт. ст. — рассеянием на твердых поверхностях.

2. Порог изотопической чувствительности зависит от степени шероховатости твердых поверхностей, на которых происходит рассеяние, и в данной геометрии прибора уменьшается с уменьшением шероховатости. Характер зависимости величины фона рассеянных ионов от шероховатости определяется размером и расположением коллимирующих диафрагм.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Александров М. Л., Плисс Н. С., Щербаков А. П. — ЖТФ, 1977, т. 47, № 1, с. 189.
2. Галль Р. Н., Плисс Н. С., Соколов Б. Н., Щербаков А. П. — Науч. приборы, 1979, № 21, с. 33.
3. Александров М. Л., Галль Л. Н., Плисс Н. С. — ЖТФ, 1974, т. 44, № 6, с. 1302.
4. Галль Р. Н., Ганзбург-Преснов В. С., Гольдин А. А. и др. — Изв. АН СССР. Сер. геол., 1979, № 10, с. 130.
5. Mass-spectrometer system MAT 260. Просп. фирмы «Varian—MAT», ФРГ, 1977.
6. Thermal ionization mass-spectrometer Isomass 54E. Просп. фирмы «Micromass», Великобритания, 1979.
7. Галль Р. Н., Леднев В. А., Соколов Б. Н., Холодов А. И. — Науч. приборы, 1978, № 17, с. 7.

8. *Massey H. S. W., Mohr C. B. O.* — Proc. Roy. Soc., 1933, v. A141, p. 434.
9. *Csavinsky P.* — Phys. Rev., 1968, v. 166, p. 53.
10. *Никудин В. К.* — ЖТФ, 1971, т. 41, с. 33.
11. *Александров М. Л., Плюсс Н. С., Щербатов А. П.* — ЖТФ, 1974, т. 44, № 3, с. 632.
12. *Федоренко Н. В.* — ЖТФ, 1954, т. 24, с. 769.
13. *Hedrick A. F., Moran F. F., McCann K. T., Flannery M. R.* — J. Chem. Phys., 1977, v. 66, p. 24.
14. *Stier P. M., Barnett C. F.* — Phys. Rev., 1956, v. 103, p. 896.
15. *Koorman D. W.* — Phys. Rev., 1968, v. 166, p. 57.
16. *Огурцов Г. Н., Кукучани Б. И., Флакс И. П.* — ЖТФ, 1966, т. 36, с. 491.
17. *Lindhard J., Scharff M., Shiott H. E.* — Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 1963, v. 33, p. 14.
18. *Maurer K. H., Kappus G.* — 2. Diskussionstagung der Sektion Massenspectrometrische Mess- und Experimentiertechnik der Arbeitsgemeinschaft Massenspectrometrie. Mainz, 1971.
19. *Витенберг Ю. Р., Плюсс Н. С.* — Тр. ВНИИАШ, 1968, № 8, с. 113.