

А. Г. Бородинов, А. К. Огородников, А. П. Щербаков
(Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург)

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТИРОВКИ ИОНОВ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКАХ И ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ФОРМИРОВАНИЯ И ФОКУСИРОВКИ ПУЧКА

The processes of ion beam transportation are numerically analyzed from high pressure ion source to a mass spectrometer vacuum chamber. The main factors which define an ion beam formation in such systems are an electrical potential distribution and a flow structure of a carrier gas.

Theoretical models and algorithms are proposed for ion transport in different stages of systems. Typical examples are given which illustrate the application of the technique to calculate optimized mass-spectrometric gas dynamic ion source.

Введение

Широкое применение газодинамических источников ионов (ГИИ) в аналитической практике [1—3] делает весьма актуальной задачу оптимального выбора схемы такого источника с целью снижения потерь ионов на всех стадиях формирования и транспортировки пучка ионов, сведения к минимуму искажений ионного состава пучка и наилучшего согласования пучка, формируемого в ГИИ, с масс-анализатором. Схемы ГИИ отличаются большим разнообразием [1, 4, 5], однако выбор той или иной схемы часто носит случайный характер, а иногда прямо продиктован соображениями патентной чистоты [3].

Настоящая работа является продолжением серии работ, посвященных целенаправленному поиску оптимальных схем ГИИ [6—8]. Этот поиск ведется в рамках общего подхода к проблемам оптимизации источников ионов, основанного на анализе движения ионов в фазовом пространстве координат и импульсов [9]. На первом этапе проводится минимизация фазового объема, занимаемого пучком. Именно этот критерий лежал в основе проведенных ранее исследований [6—8], потребовавших изучения влияния на параметры пучка ряда физических факторов: характера и структуры газодинамического течения, распределения электрического поля в области этого течения, взаимодействия ионного пучка с электрогазодинамическим полем.

Проведенный анализ показал немонотонную зависимость величины фазового объема пучка от давления газа в промежуточной ступени системы дифференциальной откачки (СДО), сложный характер зависимостей фазового объема от ряда электростатических параметров (разности потенциалов между соплом и скиммером, вытягивающего напряжения за скиммером), причем характер этой зависимости определяется газодинамическим фактором. Было показано, что в зависимости от величины давления газа в промежуточной ступени СДО реализуются два предельных режима формирования пучка: при малом давлении фазовые характеристики пучка определяются неполной термализацией пучка, ускоренного перед скиммером, при высоком — процессами последних столкновений в области отрыва ионного пучка от газовой струи за скиммером. Эти результаты позволили указать диапазон основных физических

параметров ГИИ, обеспечивающих минимальные значения фазового объема ионного пучка.

На втором этапе оптимизации осуществляется целенаправленная трансформация фазовой области, занимаемой пучком, с целью оптимального ее согласования с масс-анализатором. Это осуществляется с помощью варьирования параметров ионно-оптической системы (ИОС), расположенной в области практически полного отсутствия рассеяния ионного пучка на газе, где его фазовый объем сохраняется. Именно этой задаче посвящена настоящая работа.

Постановка задачи

В качестве критерия оптимальности ионно-оптической системы транспортировки в данной работе выбиралось условие максимума тока пучка в фазовой области заданного объема, форма которой соответствует форме области начальных фазовых координат ионов пучка, пропускаемых масс-спектрометром, т.е. его акцептансу. При этом идеальный исход и согласование двух этапов оптимизации достигается в случае, когда режим минимального фазового объема при выходе из зоны столкновений приводит к максимуму пропускания.

Исследования проводились среди систем как имеющих аксиальную симметрию, так и не обладающих ею (рис.1). В основу исследований была положена расчетная методика, базирующаяся на методе статистического моделирования и позволяющая рассчитывать интегральные фазовые характеристики пучка (фазовый объем, эмиттанс, полный ток) и всевозможные его распределения (координатно-угловые, энергетические), а также некоторые дифференциальные характеристики (например, яркость) с учетом реальных электрогазодинамических полей [6, 8]. В качестве критерия отбора ионно-оптических систем было выбрано пропускание через прямоугольную выходную щель с ограничениями по углам в вертикальной и горизонтальной плоскостях, что является простейшей аппроксимацией акцептанса масс-анализатора.

Исследовалась зависимость пропускания от величины вытягивающего напряжения $U = U_s - U_1$ (U_s —

потенциал скиммера, U_1 — потенциал вытягивающего электрода), от разности потенциалов между вытягивающими и формирующими электродами $dU = U_{II} - U_I$, где U_{II} — потенциал формирующего электрода, для различных значений фонового давления p_∞ в области между соплом и скиммером и разности потенциалов $\Delta U = U_N - U_s$ (U_N — потенциал сопла) между ними. Исследовались эффекты, связанные с прохождением пучка через канал скиммера, и, наконец, были проведены сравнения двух систем транспортировки (рис. 2, а, б).

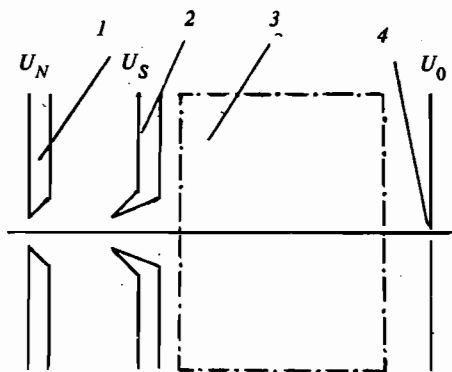


Рис. 1. Схема системы транспортировки газодинамического источника ионов для статического масс-спектрометра.

1 — сопло, 2 — скиммер, 3 — ионно-оптическая система, 4 — входная щель масс-анализатора.

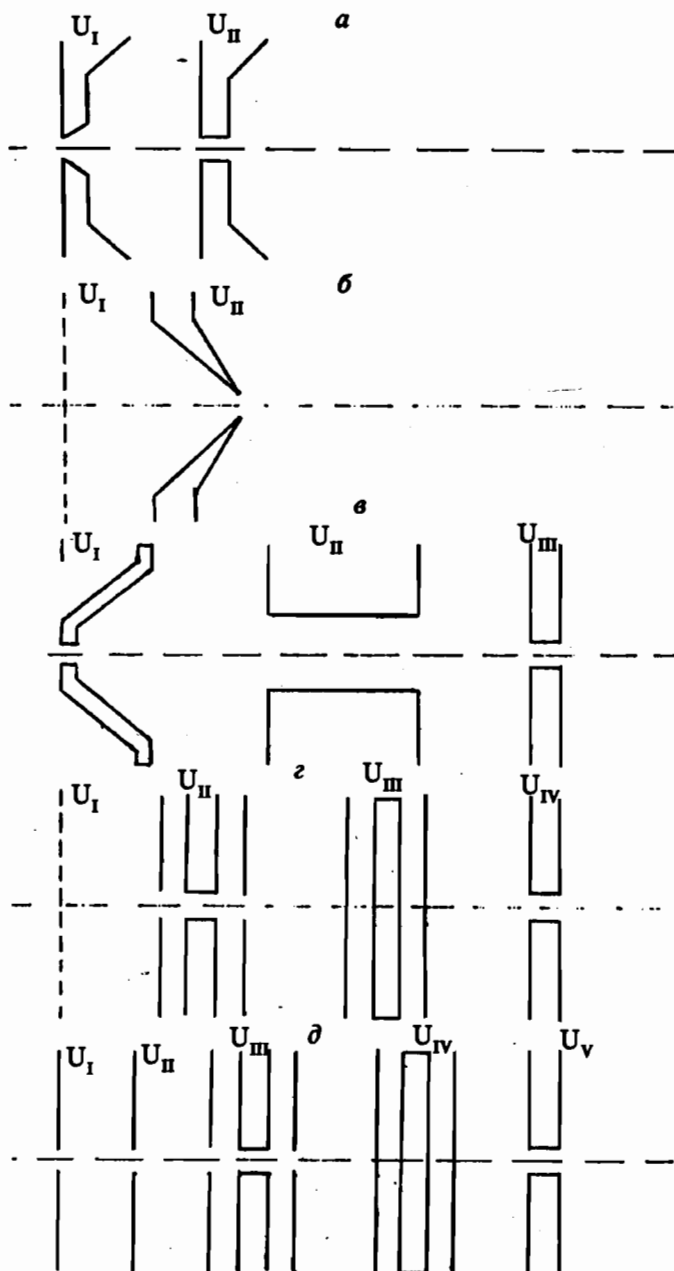


Рис. 2. Ионно-оптические схемы газодинамических интерфейсов сопел.
Объяснение в тексте.

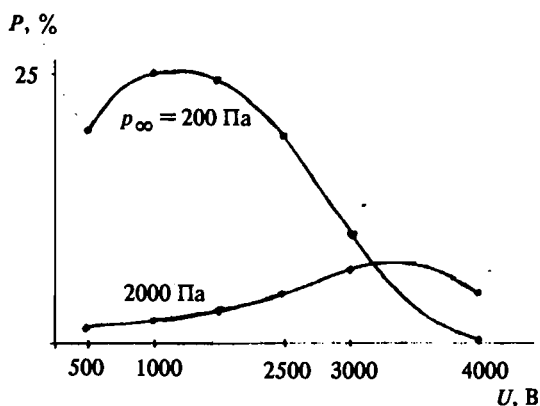


Рис. 3. Зависимость пропускания ИОС от вытягивающего напряжения. Под пропусканием понимается отношение тока ионов, прошедших входную щель масс-анализатора, к току ионов, прошедших через канал скиммера. Расчет проведен при $\Delta U = 125$ В, $U_c = 4$ кВ.

напряжения по мере роста давления смещается в сторону больших U .

2. В качестве дополнительной оптимизации при оптимальных значениях вытягивающего напряжения проведено варьирование разности потенциалов между вытягивающим и формирующим электродами dU с целью достижения максимального пропускания (рис. 4). Получен предварительный оптимум $dU/U \approx 0,5$. При этом поле для ионов в данной области является тормозящим и формирует промежуточный кроссовер, облегчающий дальнейшую транспортировку ионов, рассеянных на остаточном газе.

Приступим к обзору результатов проведенного сравнения систем рис. 2, а и

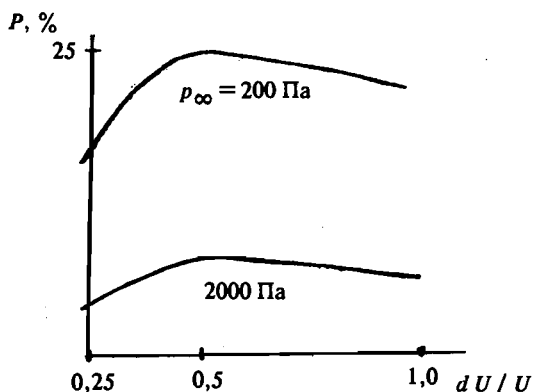


Рис. 4. Зависимость пропускания ИОС от отношения разности потенциалов между формирующим и вытягивающим электродами к вытягивающему напряжению. Расчет проведен при $\Delta U = 125$ В, $U = 1500$ В для $p_{\infty} = 200$ Па и $U = 3000$ В для $p_{\infty} = 2000$ Па.

При этом система первого типа аналогична транспортирующей системе химического масс-спектрометра МХ 3305, а вторая предложена на основе результатов, изложенных в работе [10].

Результаты расчетных исследований

Основные результаты оптимизации ИОС (см. рис. 2, а) заключаются в следующем:

1. Исследование зависимости пропускания от вытягивающего напряжения U (рис. 3) позволило указать область оптимальных его значений. Оптимум вытягивающего

вытягивающего

напряжения

2, б. Получены зависимости таких характеристик ионного пучка, как пропускание (P), нормализованный эмиттанс (ϵ_n), по целому ряду параметров. Данные численных расчетов (рис. 5, б) выявили принципиальное подобие для обеих исследованных систем. Вместе с тем, система рис. 2, б характеризуется меньшим пропусканием в сравнении с пропусканием системы рис. 2, а. Лимитирующим фактором для нее служит более значительный угловой разброс пучка ионов в плоскости выходной щели интерфейса. Однако такая система является вполне приемле-

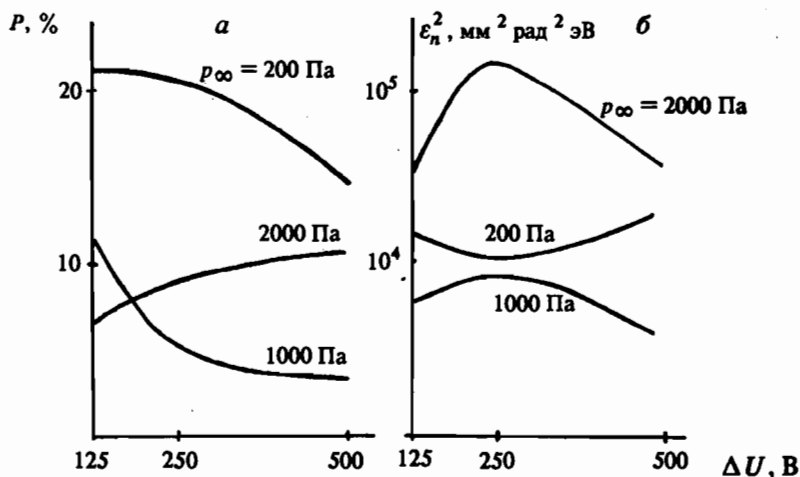


Рис. 5. Зависимость пропускания транспортирующей системы (а) и нормализованного эмиттанса пучка (б) от разности потенциалов между соплом и скиммером для системы рис. 2, а при $U_S = 4$ кВ, $U_I = 2,5$ кВ, $U_{II} = 3,25$ кВ.

мой для квадрупольного масс-спектрометра с жесткими ограничениями на ширину энергораспределения, но с относительно большим нормализованным акцептансом, в отличие от статического масс-спектрометра.

На основе проведенного анализа характеристик транспортируемого пучка предпринята попытка проектирования оптимальной ИОС для согласования пучка с заданным акцептансом масс-анализатора. В работе [10] с этой целью предложена простейшая ИОС, содержащая лишь сетку вблизи скиммера для вытягивания ионов. Несмотря на простоту, такая схема хорошо себя зарекомендовала экспериментально. Результаты, полученные методом статистического моделирования для такой системы с учетом разброса по энергии и

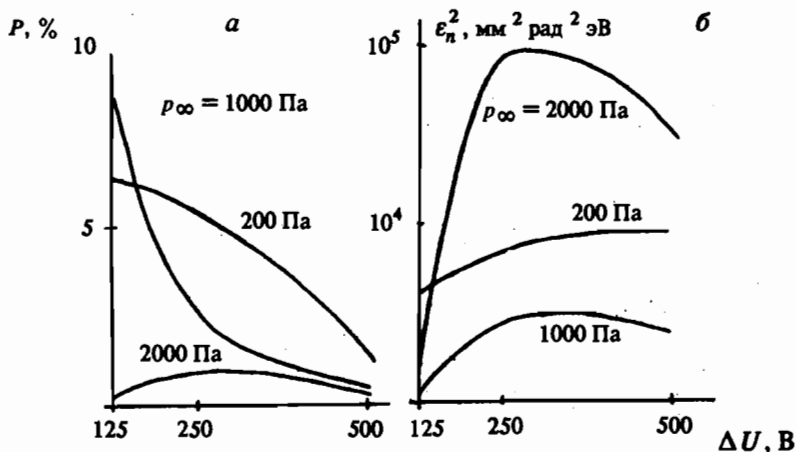


Рис. 6. Зависимость пропускания транспортирующей системы (а) и нормализованного эмиттанса пучка (б) от разности потенциалов между соплом и скиммером для системы рис. 2, б при $U_S = 4$ кВ, $U_I = 3$ кВ, $U_{II} = 3,8$ кВ.

столкновений ионов с молекулами газа, показывают хорошее совпадение как с экспериментом, так и с аналитической моделью зависимостей пропускания от напряжения на сетке.

Однако варьированием лишь одного потенциала сетки сложно осуществить адаптацию пучка к аксептансу масс-анализатора. Система с коническим вытягивающим электродом и дополнительным формирующим электродом (рис. 2, в) позволяет в 5—6 раз повысить пропускание системы. Более чем в два раза пропускание увеличивается при введении еще одного электрода, позволяющего сформировать оптику, эквивалентную одиночной линзе с коническим экстрактором.

Эффективным шагом является использование транспортирующей системы, не обладающей аксиальной симметрией. Трудоемкость расчетных исследований при этом резко увеличивается, но появляется возможность значительно повысить пропускание системы ввиду того, что аксептанс статического масс-анализатора сильно вытянут вдоль одной из осей и заметно аксиально несимметричен. Приемлемой ИОС интерфейса для таких целей может служить система с двумя одиночными линзами в разных плоскостях и иммерсионной линзой в виде сетки, формирующей объект изображения (рис. 2, з). Подбором напряжения на сетке U_1 можно получить мнимое изображение в приближении точечного источника $D \approx 0,1$ мм (незначительное рассеяние ионов на газовой компоненте) с энергиями $E \approx 10$ эВ и угловым разбросом $\pm 20^\circ$. Подбором U_{II} на вертикальной линзе и U_{III} на горизонтальной возможно получить стигматическое изображение в плоскости входной щели масс-анализатора. Использование иммерсионной линзы позволяет существенно уменьшить абберрационные "хвосты" изображения. А выбор расстояний между электродами позволяет получить нужный наклон эмиттанса пучка на выходе с целью оптимального согласования с аксептансом.

Для функционирования газодинамических интерфейсов с достаточно большими газовыми потоками и влиянием объемного заряда пучка, когда фазовый объем, трансформируемый одиночными линзами, все более отклоняется от приближения точечного источника, более оптимальной является иммерсионная линза, сформированная двумя диафрагмами, а не сеткой (рис. 2, д). Такая конструкция позволяет с помощью напряжения U_1 изменять положение промежуточного кроссовера в широком диапазоне вдоль оси, что дает возможность получить на выходе стигматическое изображение как в вертикальной, так и в горизонтальной плоскости, а также уменьшить абберрационные искажения. Как показывают численные расчеты, применение оптики, не обладающей аксиальной симметрией, позволяет увеличить пропускание системы на порядок вследствие неаксиальности аксептанса.

Выводы

На основе проведенного анализа определен класс систем, наилучшим образом осуществляющих формирование и транспортировку пучка в ГИИ с учетом типа масс-анализатора. Показано, что принципиально пригодным является достаточно широкий класс систем в виде простой схемы из 2-3 электродов (экстрактор, формирующий и фокусирующий электроды), если учесть различные требования квадрупольного и статического масс-анализатора к транспортируемому пучку. Большие преимущества для оптимизации интер-

фейса для статического масс-спектрометра дает использование оптики, не обладающей аксиальной симметрией, существенно повышающей пропускание системы.

Полученные результаты и их интерпретация ставят задачи дальнейшего исследования электростатических полей в зоне повышенного давления, учета эффектов объемного заряда, совершенствования методики моделирования газодинамического поля в околоскиммерной зоне и повышенного интереса к использованию аксиально несимметричных ИОС для формирования пучка.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fenn J. B., Mann M., Meng C. K., Wong S. F. // *Mass Spectrometry Rev.* 1990. Vol. 9. P. 37—70.
2. Smith R. D., Loo J. A., Edmonds C. G. e. a. // *Anal. Chem.* 1990. Vol. 62. P. 882—899.
3. Bruins A. P. // *Mass Spectrometry Rev.* 1991. Vol. 10. P. 53—77.
4. Smith R. D., Loo J. A., Edmonds C. G. e. a. // *J. Amer. Soc. Mass. Spectrom.* 1990. Vol. 1. P. 53—65.
5. McLuckey S. A., Van Berkel G. J., Glish G. L. e. a. // *Anal. Chem.* 1991. Vol. 63. P. 375—383.
6. Бородинов А. Г., Вереников А. Н., Чуприков А. В., Щербаков А. П. Транспортировка ионных пучков в газодинамических источниках ионов: Препринт ИАП НТО АН СССР. Л., 1989. 36 с.
7. Щербаков А. П. // *Научное приборостроение: Автоматизация научных исследований.* Л., 1988. С. 46—55.
8. Бородинов А. Г., Вереников А. Н., Щербаков А. П. // *Журн. техн. физики.* 1991. Т. 60, N 6. С. 1—7.
9. Галль Л. Н. *Научное приборостроение: Теоретические и экспериментальные исследования.* Л., 1984. С. 22—27.
10. Галль Л. Н., Чуприков А. В. // *Научное приборостроение.* 1991. Т. 1, N 3. С. 44—52.

Рукопись поступила 13.05.93