——МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ——— В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

УДК 537. 534, 535. 31

© И. Ф. Спивак-Лавров, О. А. Байсанов, С. У. Шарипов, Т. Ж. Шугаева, 2022

ДИНАМИКА ПУЧКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ТРАНСАКСИАЛЬНОМ ЗЕРКАЛЕ

Рассмотрено поведение пучка заряженных частиц, сформированного точечным источником, расположенным в средней плоскости зеркала. Расчет траекторий частиц в зеркале проводился путем численного интегрирования безразмерных уравнений Ньютона. Электростатическое поле трехэлектродного зеркала с хорошей точностью описывалось аналитическим выражением для потенциала. Показано, что в результате отражения в трехэлектродном трансаксиальном зеркале можно добиться одновременно пространственной и энергетической времяпролетной фокусировки. Рассмотрены два режима вертикальной фокусировки пучка.

Кл. сл.: заряженная частица, трансаксиальное электростатическое зеркало, безразмерные уравнения Ньютона, телескопическая система, скалярный потенциал, траектория частиц

введение

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 наклоны траекторий к оптической оси и относительный разброс энергий частиц неограниченно возрастают [1, 2]. Все эти трудности остаются в стороне, если интегрировать не уравнения траектории, а уравнения Ньютона по времени движения частиц. Численное интегрирование уравнений Ньютона значительно упрощается, если известны аналитические выражения для потенциалов, описывающие электрические поля зеркал. Для нахождения потенциалов, описывающих электростатические поля корпускулярно оптических систем (КОС), как правило, приходится решать задачу Дирихле для скалярного потенциала, удовлетворяющего уравнениям Лапласа. Потенциалы трансаксиальных КОС в цилиндрической системе координат ρ , ψ , z зависят только от переменных ρ и z и удовлетворяют уравнению Лапласа [3]:

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

Это уравнение обычно решают методом Фурье, записывая потенциал в виде рядов функций Бесселя [3]. Однако из-за плохой сходимости рядов полученные таким образом аналитические выражения сложно использовать при численных расчетах потенциала. В работах [4–9] найдены простые приближенные аналитические выражения для потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы, которые с хорошей точностью описывают и поле трансаксиального зеркала. Такие зеркала можно использовать, в частности, при создании времяпролетных масс-спектрометров. Расчету свойств таких зеркал и посвящена настоящая работа.

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ПОЛЯ ТРАНСАКСИАЛЬНОГО ЗЕРКАЛА

Трехэлектродная трансаксиальная линза или зеркало представляют собой две параллельные пластины, разрезанные прямыми круговыми цилиндрами радиусов R_1 и R_2 , ось которых совпадает с осью z [7, 9]. Такое зеркало схематически изображено на рис. 1. Показана также сопутствующая декартова система координат (x, y, z). Начало декартовой системы координат находится в средней плоскости зеркала, совпадающей с плоскостью (x, y); V_0 , V_1 и V_2 — потенциалы электродов; d — расстояние между пластинами. Зазоры между электродами считаются бесконечно узкими. Вдали от краев пластин потенциал φ за-

висит только от переменных $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ и *z*. Вводя безразмерные переменные [4–9]:

$$\eta = \ln \frac{\rho}{R}, \qquad \zeta = \frac{z}{R},$$
 (2)

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



Рис. 1. Схематическое изображение трансаксиального зеркала

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} = 0.$$
 (3)

Для расчета гармонической составляющей $F(\eta, \zeta)$ электростатического потенциала $\varphi(\eta, \zeta)$ можно использовать аппарат теории функций комплексной переменной (ТФКП) [10]. При этом получается аналитическое выражение, которое дает хорошее приближение для вычисления потенциала $\varphi(\eta, \zeta)$, т.к. оно точно удовлетворяет заданным граничным условиям Дирихле, а при $\rho \cong R$ ($\eta = 0$) удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа.

В цилиндрических координатах аналитические выражения для электростатического потенциала трехэлектродных трансаксиальных линз могут быть записаны в следующем виде [7, 9]:

$$\varphi(\rho, z) =$$

$$= V_2 + (V_0 - V_1) P_1 \left(\frac{\rho}{R_1}, z, R\right) + (V_1 - V_2) P_2 \left(\frac{\rho}{R_2}, z, R\right), \quad (4)$$

где

$$P_{k}\left(\frac{\rho}{R_{k}}, z, R\right) = \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{2\cos\frac{\pi}{d}z}{\left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{\frac{\pi}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{-\frac{\pi}{d}}}\right), \quad (5)$$

$$(k = 1, 2).$$

Это достаточно простое аналитическое выражение для электростатического потенциала трехэлектродной трансаксиальной линзы можно использовать и для расчета трансаксиальных зеркал.

БЕЗРАЗМЕРНЫЕ УРАВНЕНИЯ НЬЮТОНА

При исследовании динамики пучка заряженных частиц в трансаксиальных зеркалах будем использовать безразмерные уравнения Ньютона [4]. Уравнения движения заряженной частицы с зарядом q и массой m в электростатическом поле в безразмерных декартовых координатах x, y, zможно записать в следующем виде:

$$\ddot{x} = \Phi_x, \qquad \ddot{y} = \Phi_y \qquad \ddot{z} = \Phi_z.$$
 (6)

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

$$\tau_0 = d\sqrt{\frac{m}{qV_0}} \,. \tag{7}$$

Начальные условия для расчета траекторий при интегрировании уравнений (6) можно задать следующим образом:

$$x_{0} = a, y_{0} = b, z_{0} = 0; \quad \dot{x}_{0} = \sqrt{2(1+\varepsilon)} - \dot{y}_{0}^{2} - \dot{z}_{0}^{2}, \\ \dot{y}_{0} = \sqrt{2(1+\varepsilon)} \sin \alpha, \quad \dot{z}_{0} = \sqrt{2(1+\varepsilon)} \sin \beta.$$
(8)

Здесь ε — относительный разброс по энергии на входе в систему, углы α и β определяют проекции скорости на горизонтальное и вертикальное направления. При движении в средней плоскости зеркала, где $z_0 = \dot{z}_0 = 0$, угол α определяет наклон траектории к оси x, которая является главной оптической осью зеркала, и определяется выражением:

$$tg \alpha = \frac{\dot{y}_0}{\dot{x}_0}.$$
 (9)

Для вычисления производных потенциала, входящих в уравнения (6), используются следующие формулы для производных потенциала, определяемого выражениями (4) и (5):

$$\frac{\partial P_{k}}{\partial \rho} = -\frac{\frac{2R}{R_{k}d}\cos\frac{\pi}{d}z\left[\left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{\frac{\pi}{d}-1} + \left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{-\frac{\pi}{d}-1}\right]}{\left[\left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{\frac{\pi}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{-\frac{\pi}{d}}\right]^{2} + 4\cos^{2}\frac{\pi}{d}z}; \quad (10)$$
$$\frac{\partial P_{k}}{\partial x} = \frac{\partial P_{k}}{\partial \rho}\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial P_{k}}{\partial \rho}\frac{x}{\rho},$$
$$\frac{\partial P_{k}}{\partial R} = \frac{\partial P_{k}}{\partial \rho}\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial P_{k}}{\partial \rho}\frac{x}{\rho}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial P_k}{\partial y} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{y}{\rho};$$

$$\frac{\partial P_k}{\partial z} = -\frac{\frac{2}{d}\sin\frac{\pi}{d}z\left[\left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{-\frac{\pi R}{d}}\right]^2}{\left[\left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{-\frac{\pi R}{d}}\right]^2 + 4\cos^2\frac{\pi}{d}z}.$$
 (12)

Приведенные значения производных подставлялись в продифференцированное выражение (4), и таким образом определялись правые части уравнений (6).

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА

Безразмерные уравнения Ньютона (6) интегрировались численно четырехточечным методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Разгонные точки находились методом последовательных сближений Крылова. Относительная точность интегрирования выбиралась равной 10⁻⁸ ÷10⁻⁹.

Были проведены численные расчеты для трансаксиального зеркала, у которого $R_1 = 23d$, $R_2 = 25d$, $V_0 = 1$, $0 < V_1 < 1$, $V_2 < 0$. За единицу длины выбиралось d = 1 — расстояние между параллельными плоскостями трансаксиального зеркала. Начальные условия моделировали точечный источник, расположенный в области вне поля в средней плоскости зеркала в точке: x₀ = -10, $y_0 = 1.4$, $z_0 = 0$. Осевая траектория направлялась под углом $\alpha \cong 2^{\circ}$ к оси *x* путем задания следующих начальных условий: $\dot{x}_0 = \sqrt{2(1+\varepsilon) - \dot{y}_0^2 - \dot{z}_0^2}$, где $\dot{y}_0 = -0.0528$, $|\dot{z}_0| \le 0.001$, ε — относительный энергетический разброс в пучке. Объемный пучок моделировался путем следующих изменений начальных условий: $|\Delta \alpha| \le 0.001$ рад, $|\varepsilon| \le 0.01$. При указанных изменениях начальных условий еще достаточно хорошо выполняется параксиальное приближение.

Результаты расчетов представлены на рис. 2 и 3.



Рис. 2. Поведение пучка в проекции на среднюю плоскость зеркала



Рис. 3. Проекции крайних траекторий пучка на вертикальное направление

На рис. 2 показано поведение пучка в проекции на среднюю плоскость зеркала, а на рис. 3 — поведение крайних траекторий пучка в вертикальном направлении. Потенциалы электродов подбирались таким образом, чтобы осуществлялись пространственная и энергетическая времяпролетные фокусировки, а линейный фокус в вертикальном направлении был расположен симметрично положению источника относительно оси x. Эта ситуация осуществлялась при следующих потенциалах электродов: $V_0 = 1$, $V_1 = 0.969$, $V_2 = -0.093$. Определялось также время пролета частиц до плоскости детектора, которая проходит через точку $x_k = x_0 = -10$ перпендикулярно осевой траектории пучка. Для осевой траектории ($\varepsilon = 0$) время прилета в детектор D равно $\tau_{d0} = 53.541$, а для частиц, движущихся по осевой траектории с $\varepsilon = 0.01$, получим $\tau_{d1} = 53.576$, а при $\varepsilon = -0.01$ получим время прилета в детектор τ_{d2} =53.556. Из этих данных видно, что с достаточно хорошей точностью осуществляется времяпролетная фокусировка по энергии и одновременно пространственная фокусировка пучка.

Безразмерные уравнения Ньютона при различных начальных условиях интегрировались по безразмерному времени τ до одного и того же конечного значения $\tau_{k0} = \tau_{d0}$. При этом некоторые частицы не доходили до плоскости детектора, а некоторые перелетали плоскость детектора. В этом случае время прилета заряженных частиц в детектор 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 $(\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k)$, то находилось расстояние до плоскости детектора. Уравнение плоскости детектора, проходящей через точку (x_d, y_d) параллельно оси z:

$$y - y_d = k_d (x - x_d),$$
 (13)

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

$$y - y_k = k_k (x - x_k),$$
 (14)

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

$$x_{1} = \frac{k_{k} x_{k} - k_{d} x_{d} + y_{d} - y_{k}}{k_{k} - k_{d}}, \quad y_{1} = k_{k} (x_{1} - x_{k}) + y_{k}.$$
(15)

Теперь время прилета в детектор определяется по формуле:

$$\tau_{d} = \tau_{d\,0} \pm \frac{\sqrt{\left(x_{1} - x_{k}\right)^{2} + \left(y_{1} - y_{k}\right)^{2}}}{\upsilon_{xv}}.$$
 (16)

Здесь знак "+" берется, если частица не долетает до плоскости детектора, а знак "-", если она перелетает плоскость детектора; υ_{xy} — проекция скорости на плоскость xy:

$$v_{xy} = \sqrt{\dot{x}_k^2 + \dot{y}_k^2}$$
 (17)

Возможно также осуществить другое поведение пучка в вертикальном направлении, незначительно изменив потенциал на отражающем электроде. Если подать на него потенциал $V_1 = 0.957$, то на выходе из зеркала получим параллельный пучок частиц. На рис. 4 показан ход крайних траекторий пучка для этого случая.



Рис. 4. Проекции крайних траекторий пучка на вертикальное направление

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование аналитических выражений, описывающих поле трансаксиальных трехэлектродных зеркал, позволило провести численное интегрирование безразмерных уравнений Ньютона для заряженной частицы в поле зеркала и таким образом изучить поведение пучка заряженных частиц в трансаксиальном зеркале. Показано, что в результате отражения в трансаксиальном зеркале можно расходящийся пучок превратить в почти параллельный и осуществить при этом высококачественную пространственно-временную фокусировку. Это свойство трансаксиальных зеркал можно использовать для создания высокоэффективных времяпролетных масс-спектрометров, состоящих из различных комбинаций трансаксиальных зеркал.

Работа выполнена в рамках проектов с грантовым финансированием Комитета науки МОН РК (ИРН AP09258546, ИРН AP09562705).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Гликман Л.Г., Карецкая С.П., Кельман В.М., Якушев Е.М. Электронно-оптические параметры трехэлектродных трансаксиальных цилиндрических линз // ЖТФ. 1971. Т. 41, № 2. С. 330–335.
- Кельман В.М., Карецкая С.П., Федулина Л.В., Якушев Е.М. Электронно-оптические элементы призменных спектрометров заряженных частиц. Алма-Ата: "Наука", КазССР, 1979. 232 с.
- 3. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736 с.
- Spivak-Lavrov I.F. Analytical methods for the calculation and simulation of new schemes of static and time-of-flight mass spectrometers // Advances in Imaging and Electron Physics. Burlington, Academic Press, 2016. Vol. 193. P. 45–128. DOI: 10.1016/bs.aiep.2015.10.001.
- 5. Spivak-Lavrov I.F., Baisanov O.A., Nurmukhanova A.A. Ways of developing analyzers for static mass spectrome-

ters // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2018. Vol. 82, no. 10. P. 1353–1358. DOI: 10.3103/S1062873818100210

- 6. Спивак-Лавров И.Ф., Нурмуханова А.А., Шугаева Т.Ж. Призменный масс-спектрограф с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами // Научное приборостроение. 2019. Т. 29, № 1. С. 116– 125. URL: http://iairas.ru/mag/2019/abst1.php#abst18
- Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Kalimatov T.S. Mass analyzer with conic achromatic prism and transaxial lenses // International Journal of Mass Spectrometry. 2019. Vol. 444, id. 116180. DOI: 10.1016/j.ijms.2019.116180
- 8. Спивак-Лавров И.Ф., Шарипов С.У., Шугаева Т.Ж.
- Решения уравнения Лапласа в цилиндрических координатах, приводимые к двумерным гармоническим потенциалам // Научное приборостроение. 2020. Т. 30, № 2. С. 51–60.

URL: http://iairas.ru/mag/2020/abst2.php#abst7

- 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, 2021. Vol. 215. P. 181–193. DOI: 10.1016/bs.aiep.2020.06.006.
- Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1976. 716 с.

Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова, г. Актобе, Республика Казахстан (Спивак-Лавров И.Ф., Шарипов С.У., Уринбаева Г.Т.)

Военный институт противовоздушной обороны, г. Актобе, Республика Казахстан (Байсанов О.А.)

Контакты: Спивак-Лавров Игорь Феликсович, spivakif@rambler.ru

Материал поступил в редакцию 16.11.2021

DYNAMICS OF CHARGED PARTICLES BEAM IN A TRANSAXIAL MIRROR

I. F. Spivak-Lavrov¹, O. A. Baisanov², S. U. Sharipov¹, T. Zh. Shugaeva¹

¹K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Republic of Kazakhstan ²T. Begeldinov Military Institute of the Air Defence Forces, Aktobe, Republic of Kazakhstan

The behavior of a beam of charged particles formed by a point source located in the middle plane of the mirror is considered. The calculation of the trajectories of particles was carried out by numerical integration of dimensionless Newton equations. The electrostatic field of the three-electrode mirror was described by an analytical expression for the potential with good accuracy. It is shown that as a result of reflection in a three-electrode transaxial mirror, it is possible to achieve both spatial and energy time-of-flight focusing. Two modes of vertical beam focusing are considered.

Keywords: charged particle, transaxial electrostatic mirror, dimensionless Newton equations, telescopic system, scalar potential, trajectory of particles

INTRODUCTION

It is known that calculating the trajectories of charged particles in electrostatic mirrors can cause mathematical difficulties due to the fact that in the vicinity of the turning points, the radii of curvature of the trajectories tend to zero. In this case, the inclinations of the trajectories to the optical axis and the relative spread of the particle energies increase indefinitely [1, 2]. All these difficulties disappear, if we integrate not the trajectory equations, but Newton's equations with respect to the time of motion of the particles. The numerical integration of Newton's equations is greatly simplified if the analytical expressions for the potentials describing the electric fields of the mirrors are known. As a rule, solving the Dirichlet problem for a scalar potential that satisfies the Laplace equations is required to find the potentials describing the electrostatic fields of corpuscular-optical systems (COS). The potentials of transaxial COS in a cylindrical coordinate system ρ , ψ , z depend only on the variables ρ and z and satisfy the Laplace equation [3]:

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

The most general method for solving the Dirichlet boundary value problem for equation (1) is the method of separation of variables. In this case, the potentials are represented in the form of series of Bessel functions [3]. However, because of the poor convergence of the series, these solutions are difficult to use for numerical calculations. In [4–9], simple approximate analytical expressions were found for the potential of a three-electrode transaxial lens, which describe the field of the transaxial mirror with good accuracy too. Such mirrors can be used, in particular, for creating time-of-flight mass spectrometers. This work is devoted to the calculation of the properties of such mirrors.

ANALYTICAL EXPRESSIONS FOR THE POTENTIAL OF THE TRANSAXIAL MIRROR FIELD

A three-electrode transaxial lens or mirror are two parallel plates cut by straight circular cylinders of radii R_1 and R_2 , their axis coincides with the axis z [7, 8]. Such a mirror is shown schematically in Fig. 1. The corresponding Cartesian coordinate system (x, y, z) is also shown. The origin of the Cartesian coordinate system is in the middle plane of the mirror, which coincides with the plane (x, y); V_0 , V_1 and V_2 are the potentials of the electrodes; d is the distance between the plates. The gaps between the electrodes are considered infinitely narrow. Far from the edges of the plates, the potential φ depends only on the variables $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ and z.

Fig. 1. Schematic representation of a transaxial mirror

Introducing dimensionless variables [4–9]:

$$\eta = \ln \frac{\rho}{R}, \qquad \zeta = \frac{z}{R}, \tag{2}$$

where $R = \sqrt{R_1 R_2}$, we obtain the following equation for the potential:

$$e^{-2\eta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} = 0.$$
 (3)

The harmonic component $F(\eta, \zeta)$ of the electrostatic potential $\phi(\eta, \zeta)$ satisfies the two-dimensional Laplace equation and is a harmonic function of the dimensionless variables η and ζ . Therefore, for the calculation of $F(\eta, \zeta)$, one can use the apparatus of the theory of functions of a complex variable (TFCV) [9]. The analytical expression for the potential obtained in this way gives a good approximation for the potential $\phi(\eta, \zeta)$, since it exactly satisfies the specified Dirichlet boundary conditions, and for $\rho \cong R$ ($\eta = 0$) satisfies the two-dimensional Laplace equation.

In cylindrical coordinates, analytical expressions for the electrostatic potential of three-electrode transaxial lenses can be written in the following form [7, 9]:

$$\varphi(\rho, z) = = V_2 + (V_0 - V_1) P_1 \left(\frac{\rho}{R_1}, z, R\right) + (V_1 - V_2) P_2 \left(\frac{\rho}{R_2}, z, R\right), \quad (4)$$

where

$$P_{k}\left(\frac{\rho}{R_{k}}, z, R\right) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{2\cos\frac{\pi}{d}z}{\left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{\frac{\pi}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_{k}}\right)^{-\frac{\pi}{d}}}\right), \quad (5)$$

$$(k = 1, 2).$$

This rather simple analytical expression for the electrostatic potential of a three-electrode transaxial lens can also be used to calculate transaxial mirrors.

DIMENSIONLESS NEWTON EQUATIONS

When studying the dynamics of a beam of charged particles in transaxial mirrors, we use the dimensionless Newton equations [4]. The equations of motion of a charged particle with charge q and mass m in an electrostatic field in dimensionless Cartesian coordinates x, y, z can be written in this form:

$$\ddot{x} = \Phi_x, \qquad \ddot{y} = \Phi_y \qquad \ddot{z} = \Phi_z.$$
 (6)

Here the dimensionless potential Φ is measured in V_0 units; subscripts of Φ denote partial derivatives

with respect to the corresponding coordinates; d which is the value of the distance between the parallel planes of the transaxial mirror is taken as the length unit; dots denote derivatives with respect to dimensionless time $\tau = t/\tau_0$, where

$$\tau_0 = d \sqrt{\frac{m}{q V_0}} \,. \tag{7}$$

When integrating equations (6), the initial conditions for calculating trajectories can be set as follows:

$$x_{0} = a , y_{0} = b , z_{0} = 0 ; \dot{x}_{0} = \sqrt{2(1+\varepsilon) - \dot{y}_{0}^{2} - \dot{z}_{0}^{2}} ,$$

$$\dot{y}_{0} = \sqrt{2(1+\varepsilon)} \sin \alpha , \dot{z}_{0} = \sqrt{2(1+\varepsilon)} \sin \beta .$$
 (8)

Here ε is the relative spread in energy at the entrance to the system, the angles α and β determine the projection of the velocity on the horizontal and vertical directions. When moving in the middle plane of the mirror, where $z_0 = \dot{z}_0 = 0$, the angle α determines the inclination of the trajectory to the axis x, which is the main optical axis of the mirror, and is defined by the expression:

$$tg \alpha = \frac{\dot{y}_0}{\dot{x}_0}.$$
 (9)

To calculate the derivatives (from (6)) of the potential (determined by (4) and (5)), the following formulas are used

$$\frac{\partial P_k}{\partial \rho} = -\frac{\frac{2R}{R_k d} \cos \frac{\pi}{d} z \left[\left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{\frac{\pi R}{d} - 1} + \left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{-\frac{\pi R}{d} - 1} \right]}{\left[\left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k} \right)^{-\frac{\pi R}{d}} \right]^2 + 4\cos^2 \frac{\pi}{d} z}; \quad (10)$$

$$\frac{\partial P_k}{\partial x} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{x}{\rho},$$

$$\frac{\partial P_k}{\partial y} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} = \frac{\partial P_k}{\partial \rho} \frac{y}{\rho};$$
(11)

$$\frac{\partial P_k}{\partial z} = -\frac{\frac{2}{d}\sin\frac{\pi}{d}z\left[\left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{-\frac{\pi R}{d}}\right]^2}{\left[\left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{\frac{\pi R}{d}} - \left(\frac{\rho}{R_k}\right)^{-\frac{\pi R}{d}}\right]^2 + 4\cos^2\frac{\pi}{d}z}.$$
 (12)

НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2022, том 32, № 1

The given values of the derivatives were substituted into the differentiated expression (4) and thus the right-hand sides of equations (6) were obtained.

RESULTS OF NUMERICAL CALCULATIONS

Dimensionless Newton equations (6) were integrated numerically by the four-step Adams method with an automatic choice of the integration step. The accelerating points were found using the method of successive approaches of Krylov. The relative accuracy of integration was chosen equal to $10^{-8} \div 10^{-9}$.

Numerical calculations were carried out for a transaxial mirror with $R_1 = 23d$, $R_2 = 25d$, $V_0 = 1$, $0 < V_1 < 1$, $V_2 < 0$. The distance between the parallel planes of the transaxial mirror d=1 was chosen as a unit of length. The initial conditions simulated a point source located in the area outside the field in the middle plane of the mirror at the point: $x_0 = -10$, $y_0 = 1.4$, $z_0 = 0$. The axial trajectory was plotted at an angle $\alpha \cong 2^{\circ}$ to the axis x by setting the following initial $\dot{x}_0 = \sqrt{2(1+\varepsilon) - \dot{y}_0^2 - \dot{z}_0^2}$, conditions: where $\dot{y}_0 = -0.0528$, $|\dot{z}_0| \le 0.001$, ε is the relative energy spread in the beam. The volumetric beam was modeled by means of the following changes in the initial conditions: $|\Delta \alpha| \le 0.001$ rad, $|\varepsilon| \le 0.01$. Given these changes, the paraxial approximation is still quite well satisfied.

The calculation results are shown in Fig. 2 and 3.

Fig. 2. Behavior of the beam in the projection onto the middle plane of the mirror

Fig. 3. Projections of the extreme trajectories of the beam to the vertical direction

Fig. 2 shows the behavior of the beam projected onto the middle plane of the mirror, and Fig. 3 shows the behavior of the extreme trajectories of the beam in the vertical direction. The potentials of the electrodes were selected in such a way that allows for the spatial and energy time-of-flight focusing, and the linear focus in the vertical direction was located symmetrically to the position of the source relative to the axis x. This case was realized for the following electrode potentials: $V_0 = 1$, $V_1 = 0.969$, $V_2 = -0.093$. The time of flight of particles to the detector plane, which passes through a point $x_k = x_0 = -10$ perpendicular to the axial trajectory of the beam, was also determined. For the axial trajectory ($\varepsilon = 0$), the arrival time at the detector *D* is $\tau_{d0} = 53.541$, and for particles moving along the axial trajectory with $\varepsilon = 0.01$ we obtain the arrival time at the detector $\tau_{d1} = 53.576$ and with $\varepsilon = -0.01$ the arrival time is $\tau_{d2} = 53.556$. It can be seen that time-of-flight energy focusing and, at the same time, spatial focusing of the beam are carried out with a sufficiently good accuracy.

Dimensionless Newton equations with different initial conditions were integrated over dimensionless time τ to the same final value $\tau_{k0} = \tau_{d0}$. Some particles did not reach the detector plane, and some flew over the detector plane. In this case, the time of arrival of charged particles into the detector was determined taking into account the fact that near the detector plane, where there is no field, the particles moved along rectilinear trajectories with a constant velocity. If by the time instant $\tau = \tau_{k0}$ the particle was at the point (x_k, y_k, z_k) and moved with the velocity $(\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k)$, then the distance to the detector plane got determined. The equation of the detector plane passing through the point (x_d, y_d) parallel to the axis z is:

$$y - y_d = k_d (x - x_d)$$
, (13)

where $k_d = -1/\text{tg}\alpha$. The equation of the projection of the trajectory onto the plane xy:

$$y - y_k = k_k (x - x_k),$$
 (14)

where $k_k = \dot{y}_k / \dot{x}_k$. Coordinates of the point of intersection of this projection with the detector plane:

$$x_{1} = \frac{k_{k} x_{k} - k_{d} x_{d} + y_{d} - y_{k}}{k_{k} - k_{d}}, \quad y_{1} = k_{k} (x_{1} - x_{k}) + y_{k}.$$
(15)

Now the time of arrival at the detector is determined by the formula:

$$\tau_{d} = \tau_{d0} \pm \frac{\sqrt{(x_{1} - x_{k})^{2} + (y_{1} - y_{k})^{2}}}{\upsilon_{xy}}.$$
 (16)

Here, the "+" sign is taken if the particle does not reach the detector plane, and the "-" sign is taken if it flies over the detector plane; and v_{xy} is the velocity projection onto the plane xy:

$$v_{xy} = \sqrt{\dot{x}_k^2 + \dot{y}_k^2}.$$
 (17)

It is also possible to differ a behavior of the beam in the vertical direction, slightly changing the potential at the reflecting electrode. If we apply a potential $V_1 = 0.957$ to it, then at the outlet from the mirror we get a parallel beam of particles. Fig. 4 shows the course of the extreme trajectories of the beam for this case.

Fig. 4. Projections of the extreme trajectories of the beam to the vertical direction

CONCLUSION

The use of analytical expressions describing the field of transaxial three-electrode mirrors made it possible to numerically integrate Newton's dimensionless equations for a charged particle in the field of a mirror, and thus to study the behavior of a beam of charged particles in a transaxial mirror. It is shown that, as a result of reflection in a transaxial mirror, a diverging beam can be converted into an almost parallel one and high-quality spatio-temporal focusing can be achieved. This property of transaxial mirrors can be used to create highly efficient time-of-flight mass spectrometers consisting of various combinations of transaxial mirrors.

REFERENCES

- Glikman L.G., Karezkaya S.P., Kel'man V.M., Yakushev E.M. [Electron-optical parameters of threeelectrode transaxial cylindrical lenses]. *Zhurnal tekhnicheskoj fiziki* [Journal of Applied Physics], 1971, vol. 41, no. 2, pp. 330–335. (In Russ.).
- 2. Kel'man V.M., Karetskaya S.P., Fedulina L.V., Yakushev E.M. *Ehlektronno-opticheskie ehlementy prizmen*-

Contacts: Spivak-Lavrov Igor' Feliksovich, spivakif@rambler.ru

nykh spektrometrov zaryazhennykh chastits [Electronoptical elements of prism spectrometers of charged particles]. Alma-Ata, Nauka publ., KazSSR, 1979. 232 p. (In Russ.).

- Tikhonov A.N., Samarskiy A.A. Uravneniya matematicheskoi fiziki [Equations of mathematical physics]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 736 p. (In Russ.).
- Spivak-Lavrov I.F. Analytical methods for the calculation and simulation of new schemes of static and time-of-flight mass spectrometers. *Advances in Imaging and Electron Physics*, 2016, vol. 193, pp. 45–128. DOI: 10.1016/bs.aiep.2015.10.001
- Spivak-Lavrov I.F., Baisanov O.A., Nurmukhanova A.A. Ways of developing analyzers for static mass spectrometers. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2018, vol. 82, no. 10, pp. 1353–1358. DOI: 10.3103/S1062873818100210
- Spivak-Lavrov I.F., Nurmukhanov A.A., Shukaev T.Zh. [Prismatic mass spectrograph with a conical achromatic prism and transaxial lenses]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2019, vol. 29, no. 1, pp. 116– 125. DOI: 10.18358/np-29-1-i116125 (In Russ.).
- Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Kalimatov T.S. Mass analyzer with conic achromatic prism and transaxial lenses. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2019, vol. 444, id. 116180. DOI: 10.1016/j.ijms.2019.116180
- Spivak-Lavrov I.F., Sharipov S.U., Shugaeva T.Zh. [Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to two-dimensional harmonic potentials]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2020, vol. 30, no. 2, pp. 51–60. (In Russ.). DOI: 10.18358/np-30-2-i5160
- 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*, 2021, vol. 215, pp. 181–193. DOI: 10.1016/bs.aiep.2020.06.006
- Lavrent'ev M.A., Shabat B.V. *Metody teorii funktsii kompleksnogo peremennogo* [Methods of complex variable function theory]. Moscow: Nauka Publ., 1976. 716 p. (In Russ.).

Article received by the editorial office on 16.11.2021