ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2012, том 76, № 5, с. 674–676

УДК 537.534.7+53.088

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЭНЕРГО- И МАСС-СПЕКТРОВ ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРОВ С ДВОЙНОЙ ФОКУСИРОВКОЙ

© 2012 г. В. А. Урусов

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва

E-mail: Vik@ plasma.mephi.ru

Для двухкаскадных спектрометров с двойной фокусировкой исследовалась связь сигнала на выходе спектрометра и распределения по энергии и массам потока заряженных частиц на входе в спектрометр. Предложено универсальное уравнение для произвольных методов сканирования. Получены формулы для восстановления истинных энергетических и масс-спектров.

ВВЕДЕНИЕ

Двухкаскадные спектрометры с двойной фокусировкой, состоящие из последовательно расположенных электростатического и магнитного секторного спектрометров (рисунок), широко применяются при исследовании параметров плазмы и взаимодействия плазмы с поверхностью. Развертка спектров осуществляется как изменением электрического или магнитного полей, так и их совместным изменением [1, 2] в зависимости от целей измерения (энергетические распределения или изотопный состав потока частиц).

В данной работе для различных режимов развертки спектров предложено универсальное уравнение, связывающее сигнал на выходе спектрометра и распределения по энергии и массам потока заряженных частиц на входе в спектрометр. На основе этого уравнения был проведен анализ различных алгоритмов восстановления энергетических и масс-спектров.

МОДЕЛЬ

Уравнение основано на полученных в [3, 4] уравнениях для электростатического и магнитного спектрометров:

$$I(U) = I_0 \int_0^\infty \delta(E) f(E) A_1\left(\frac{qU}{E}\right) dE,$$
$$I(H) = I_0 \int_0^\infty \delta(p) f(p) A_2\left(\frac{qH}{p}\right) dp, \quad (1)$$

где $f(E)$ и $f(p)$ – нормированные на единицу распределения частиц на входе в спектрометр по энергии и модулю импульса соответственно, $A_1\left(\frac{qU}{E}\right)$ и $A_2\left(\frac{qH}{p}\right)$ – аппаратные функции электростатического и магнитного спектрометров, $\delta(E)$ и $\delta(p)$ – эффективность регистрации частиц выходным детектором, $I(U)$ и $I(H)$ – сигналы на выходе спектрометров, I_0 – ток на входе в анализатор, q – заряд частицы, H – напряженность магнитного поля в магнитном спектрометре, U – потенциал на обкладках электростатического спектрометра. Энергия настройки и импульс связаны с напряжением развертки и напряженностью магнитного поля соотношениями

$$W = qk_1U, \quad p = qk_2H, \quad (2)$$

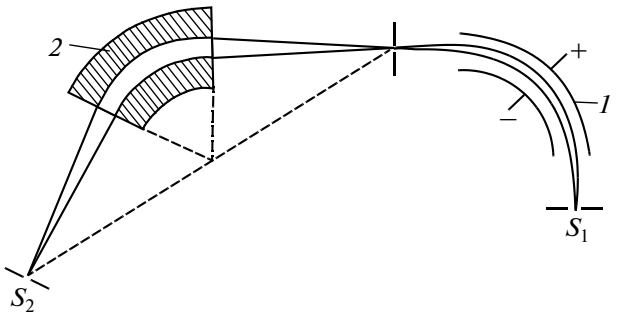
где k_1, k_2 – постоянные, зависящие от геометрии спектрометра.

Комбинируя эти уравнения, для двухкаскадного спектрометра получаем

$$I(U,H) = \sum_i I_{0i} \int_0^\infty \delta_i(E) f_i(E) A_1\left(\frac{q_iU}{E}\right) A_2\left(\frac{q_iH}{\sqrt{2m_iE}}\right) dE, \quad (3)$$

где суммирование ведется по всем различным массам частиц.

Для измерения энергетического спектра с фиксированным отношением массы частиц к заряду обычно меняют одну из величин, фиксиро-



Принципиальная схема двухкаскадного спектрометра (*1* – электростатический спектрометр, *2* – секторный магнитный спектрометр).

ПРОВЕРЕНО КОРРЕКТОРОМ.
Материал отправлен на согласование

вав вторую, настраиваются на максимум какого-либо пика и далее для снятия энергетического спектра используют режим развертки, в котором

$$\frac{m_i U}{q_i H^2} = \text{const}. \tag{4}$$

В итоге получаем уравнением

$$I(U) = I_{0i}\int_0^\infty \delta_i(E) f_i(E) A_1\left(\frac{q_i U}{E}\right) A_2\left(\sqrt{\frac{q_i U}{2E}}\right) dE = \\ = I_{0i}\int_0^\infty \delta_i(E) f_i(E) A\left(\frac{q_i U}{E}\right) dE. \tag{5}$$

Решение уравнения (5) в виде ряда было получено в [4]. В первом приближении решение сводится к делению выходного сигнала на напряжение развертки или, учитывая уравнение (2), на энергию настройки анализатора

$$f_i(q_i k_1 U) \approx \frac{B_0 I(U)}{q_i I_{0i} U \delta_i(q_i k_1 U)}, \tag{6}$$

где B_0 = const – постоянная, выражаемая через моменты аппаратной функции. Относительное энергетическое разрешение остается постоянным: $\Delta W/W$ = const.

Режимы развертки, в которых U = const или H = const, используются для снятия масс-спектров. При стандартной процедуре измерение интенсивности пиков проводится по плоской вершине, что накладывает дополнительные ограничения на разрешение спектрометра. В [5, 6] показано, что для измерения изотопных отношений эффективной оценкой может служить площадь пика. Однако в этих работах рассматривался спектр с постоянной шириной пика и использовалось уравнение свертки, что правомерно при экспоненциальной по времени развертке и фактически означает построение масс-спектра в логарифмическом масштабе по переменным U или H. В случае линейной развертки по напряжению или напряженности магнитного поля уравнение свертки неприменимо [4].

Уравнение (3) позволяет восстанавливать спектр для таких разверток. Если алгоритм обработки сигнала предусматривает простое вычисление площади пика, требуется дополнительная нормировка на отношение массы к заряду, что предполагает априорное знание значения этого отношения. Однако существует алгоритм восстановления, при котором дополнительная нормировка на массу не требуется.

При фиксированном значении напряжения на пластинах электростатического спектрометра развертка по магнитному полю представляет собой ряд пиков, каждый из которых соответствует какой-либо массе. Поделив уравнение (3) на H, интегрируя по магнитному полю и предполагая, что функция распределения слабо меняется на ширине аппаратной функции электростатического спектрометра, получаем приближенное уравнение

$$\int_0^\infty \left(\frac{I_i(U,H)}{H}\right) dH \approx I_{0i} f_i(W)\delta_i(W) C_2 \int_0^\infty A_1\left(\frac{q_i U}{E}\right) dE \approx \\ \approx I_{0i} f_i(W)\delta_i(W) C_2 C_1 q_i U, \tag{7}$$

где W – энергия настройки электростатического спектрометра $W = q_i k_1 U$, C_1 и C_2 – постоянные.

Используя уравнение (7) для пиков разной массы, несложно найти относительные доли (вес) этих пиков при заданной энергии. Для нахождения относительной доли пика в этом случае требуется априорное знание только величин зарядов соответствующих пиков при условии, что эффективность регистрации различных ионов одинакова:

$$\frac{I_{0n} f_n(W)}{I_{0i} f_i(W)} \approx \frac{q_i \delta_i(W) \int_0^\infty \left(\frac{I_n(U,H)}{H}\right) dH}{q_n \delta_n(W) \int_0^\infty \left(\frac{I_i(U,H)}{H}\right) dH}. \tag{8}$$

Рассмотрим альтернативный способ восстановления массового спектра для этого же случая развертки, основанный на простом вычислении площади. Проинтегрируем уравнение (3) по H:

$$\int_0^\infty I_i(U,H) dH \approx I_{0i}\sqrt{2 m_i q_i} f_i(W)\delta_i(W) C_3 C_4 U^{3/2} \tag{9}$$

или

$$\frac{I_{0n} f_n(W)}{I_{0i} f_i(W)} \approx \frac{\delta_i(W) \int_0^\infty (I_n(U,H)) dH}{\delta_n(W) \int_0^\infty (I_i(U,H)) dH} \sqrt{\frac{m_i q_i}{m_n q_n}}. \tag{10}$$

Заметим, что выражение (10) в отличие от уравнения (8) содержит помимо заряда еще и массу, и для восстановления спектра для каждого элемента надо предварительно идентифицировать каждый пик по заряду и массе.

Помимо рассмотренного выше способа развертки магнитным полем можно зафиксировать магнитное поле, а развертку осуществлять, меняя напряжение на электродах электростатического спектрометра. В этом случае удобно перейти от уравнения (3) с интегралом по энергии к уравнению с интегрированием по импульсу:

$$I(U,H) = \\ = \sum_i I_{0i}\int_0^\infty \delta_i(p) f_i(p) A_1\left(\frac{2 m_i q_i U}{p^2}\right) A_2\left(\frac{q_i H}{p}\right) dp. \tag{11}$$

Если функция распределения слабо меняется на ширине аппаратной функции магнитного

спектрометра, то получаем приближенное уравнение

$$\int_0^\infty \left(\frac{I_i(U,H)}{U}\right) dU \approx I_{0i} C_5 C_6 f_i(p)\,\delta_i(p) q_i H, \qquad (12)$$

или

$$\frac{I_{0n} f_n(p)}{I_{0i} f_i(p)} \approx \frac{q_i \delta_i(p) \int_0^\infty \left(\frac{I_n(U,H)}{U}\right) dU}{q_n \delta_n(p) \int_0^\infty \left(\frac{I_i(U,H)}{U}\right) dU}, \qquad (13)$$

из которого несложно найти относительные доли пиков при фиксированном значении импульса.

Если воспользоваться методом простого определения площади пиков, то получается следующее выражение:

$$\int_0^\infty I_i(U,H)\, dU \approx I_{0i} C_7 C_8 f_i(p)\,\delta_i(p) \frac{q_i^2 H^3}{m_i} \qquad (14)$$

или

$$\frac{I_{0n} f_n(p)}{I_{0i} f_i(p)} \approx \frac{q_i^2 m_n \delta_i(p) \int_0^\infty I_n(U,H) dU}{q_n^2 m_i \delta_n(p) \int_0^\infty I_i(U,H) dU}. \qquad (15)$$

Каждое из выражений (9), (11), (13) и (15) позволяет определить относительную долю элемента в потоке частиц, но только выражения (9) и (13) не требуют априорного знания массы элементов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты показывают, что существует простой метод восстановления энергетического спектра для каждой массы, который тем не менее требует априорного знания величины заряда этого элемента. При определении изотопного состава потока заряженных частиц существуют алгоритмы, при которых требуется априорное знание только величины зарядов каждого элемента, тогда как при простом вычислении площади пика требуется знание величин как зарядов, так и массы элементов.

В заключение отметим, что уравнения (3) и (11) сохраняют свой вид независимо от порядка расположения спектрометров, если используется электростатический спектрометр без предварительного торможения. Следовательно, алгоритмы восстановления спектров будут в обоих случаях эквивалентны. При использовании электростатического спектрометра с предварительным торможением уравнения (3) и (11) применимы, если он расположен после магнитного спектрометра и используется в режиме ПФТ (режим постоянного фактора торможения – режим, в котором тормозящий потенциал и потенциалы на отклоняющих пластинах линейно связаны) [3, 7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Сысоев А.А., Чупахин М.С.* Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977.
2. *de Hoffmann E., Stroobant V.* Mass spectrometry: principles and applications. (3rd ed.) The Atrium. Southern Gate. Chichester. England: John Wiley & Sons Ltd. 2007. P. 149
3. *Курнаев В.А., Урусов В.А.* Аппаратные функции электростатических и магнитных анализаторов и обработка экспериментальных результатов. Препринт № 018-95. М.: Изд-во МИФИ, 1995.
4. *Курнаев В.А., Урусов В.А.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 6. С. 86.
5. *Разников В.В., Пыхтелев А.Р., Разникова М.О.* // Масс-спектрометрия. 2006. Т. 3. № 2. С. 113.
6. *Перегудов О.Н., Бугай А.Н., Сидора О.А.* // ПТЭ. 2010. № 2. С. 97
7. *Курнаев В.А., Урусов В.А.* // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. Вып. 10. С. 24.