

CH₄型质谱计离子光学系统的一个改进方案

刘纯亮 盛翰宇

(西安交通大学)

茅乃丰 刘炳襄

(中国原子能科学研究院)

〔摘要〕 本文利用传输矩阵方法和TRANSPORT程序计算了CH₄型质谱计的离子光学系统,并提出了一个改进该系统的方案。结果表明,只要在磁分析器的入口和出口处稍加改动(磁垫块)就可以实现离子束在水平方向的二级聚焦和在垂直方向的一级聚焦,从而使仪器的分辨本领和灵敏度都有较大的改善。

一、引言

CH₄型质谱计是十多年前西德MAT公司生产的产品。该仪器采用对称式离子光学系统,分析磁铁的偏转角为60°,偏转半径为22.4cm,离子束垂直于磁铁边界而入射和出射,系一级单向聚焦仪器。这种系统不仅在垂直方向没有聚焦作用,而且在水平方向也没有对象差进行修正,因而限制了仪器的灵敏度和分辨本领。

为了提高仪器水平,我们以成像光学理论为基础,利用传输矩阵方法和国际上通用的束流传输程序TRANSPORT^[1-4]分析研究了这台质谱计离子光学特性的改进问题。

二、离子光学特性的矩阵表述

利用矩阵方法描写带电粒子运动采用粒子相对于某一特定的参考轨迹的六个广义坐标 x, θ, y, φ, l 和 δ 。它们构成一个矢量(单列矩阵) X

$$X = \begin{pmatrix} x \\ \theta \\ y \\ \varphi \\ l \\ \delta \end{pmatrix} \quad (1)$$

1983年12月10日收

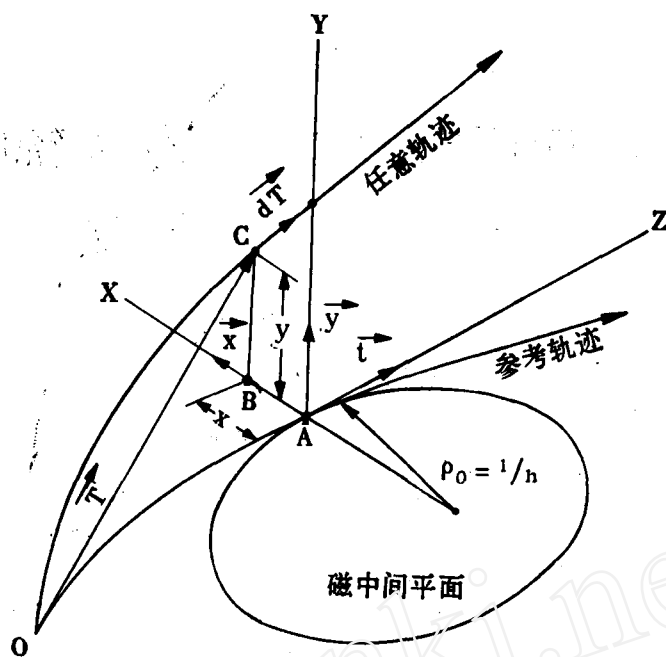


图1 曲线坐标系

其中 x 和 y 分别是该粒子相对于参考轨迹的水平和垂直位移,如图1所示; θ 和 φ 分别是该粒子轨迹在水平面和垂直面上的投影和参考轨迹之间的夹角; l 是该粒子轨迹和参考轨迹长度之差; $\delta = \Delta p/p$ 是该粒子与参考粒子的相对动量差。用 t 表示参考轨迹的长度,并设 $t=0$ 时任意粒子相对于参考轨迹的广义坐标为 $x(0)$, $\theta(0)$, $y(0)$, $\varphi(0)$, $l(0)$ 和 $\delta(0)$,则根据传输矩阵理论,粒子通过具有任意数目传输元件组成的系统后,在 $t=t$ 处相对于参考轨迹的广义坐标 $x(t)$, $\theta(t)$, $y(t)$, $\varphi(t)$, $l(t)$ 和 $\delta(t)$ 可表述为

$$x_i(t) = \sum_{j=1}^6 R_{ij}(t) x_j(0) + \sum_{j=1}^6 \sum_{k=2}^6 T_{ijk}(t) x_j(0) x_k(0) + \dots \quad (2)$$

式中 x_i 为矢量 X 的第 i 个分量,例如 $x_1 = x$, $x_2 = \theta$ 等; R_{ij} 和 T_{ijk} 分别为一阶和二阶传输矩阵 R 和 T 的矩阵元,它们由组成该系统的元件的几何参数和电磁参数所决定。

显而易见,矩阵元 R_{11} 和 R_{33} 分别是系统在水平方向和垂直方向的放大系数,有时它们也写成 (x/x) 和 (y/y) 的形式。 $R_{12} = (x/\theta) = 0$ 和 $R_{34} = (y/\varphi) = 0$ 分别是系统在水平方向和垂直方向的一级聚焦条件;如果两个条件同时满足,则系统具有双向一级聚焦的光学特性。而 $R_{16} = (x/\delta)$ 则是系统的动量色散系数,等等。

二阶传输矩阵元 $T_{111} = (x/x^2)$, $T_{112} = (x/x\theta)$, $T_{122} = (x/\theta^2)$ 等为二级象差系数。 $T_{122} = (x/\theta^2) = 0$ 和 $T_{133} = (x/y^2) = 0$ 分别是消除由于 $\theta(0)$ 和 $y(0)$ 引起的水平方向二级象差的条件,等等。

由此可见,传输矩阵把系统的组成及其参数与系统的光学特性联系起来了。在系统设计中,对系统光学特性的要求通过传输矩阵能简洁地用数学形式表示出来,以求解出所需要的元件参数。例如,令一阶矩阵元 $R_{12} = (x/\theta) = 0$ 和 $R_{34} = (y/\varphi) = 0$,即可求得粒子在均匀场分析磁场的入口和出口端面的人射和出射角 α 和 β ,实现双向聚焦;令二阶矩阵元 $T_{122} = (x/$

表1 原方案和改进方案的主要参数和一级光学特性

方 案	几 何 参 数 和 场 参 数					一 级 光 学 特 性				
	Φ_{m} ($^{\circ}$)	ρ_0 (cm)	$l_0 = l_t$ (cm)	$\alpha = \beta$ ($^{\circ}$)	ρ^{as} (G)	$R_{11} =$ (x/x)	$R_{33} =$ (y/y)	$R_{12} = (x/\theta)$ (cm/mrad)	$R_{34} = (y/\varphi)$ (cm/mrad)	$R_{16} = (x/\delta)$ (cm)
原方案	60	22.4	38.8	0	4996	-1.0000	1.1098	0.0000	0.1063	44.80
改进方案	83	18.0	42.86	24.93	6217	-1.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	75.84

* 设离子质量数为200, 能量为8 KeV
 ** 表中数据取自计算方案RUN CH402(1)和CH404(1)

表2 原方案和改进方案的二级参数和二级光学特性

方案	象 差 修正项	边界面曲率半径		二 级 象 差 系 数						象宽 w ₁ (cm)
		R ₁ (cm)	R ₂ (cm)	T ₁₁₁ =(x/x ²) (1/cm)	T ₁₁₂ =(x/xθ) (1/mrad)	T ₁₂₂ =(x/θ ²) (cm/mrad ²)	T ₁₃₃ =(x/y ²) (1/cm)	T ₁₃₄ =(x/yφ) (1/mrad)	T ₁₄₄ =(x/φ ²) (cm/mrad ²)	
原方案		∞	∞	-1.67×10 ⁻²	-8.66×10 ⁻⁴	-2.24×10 ⁻⁵	-4.58×10 ⁻²	-4.68×10 ⁻³	-1.47×10 ⁻⁴	0.056
改进方 案二级 参数和 特性比 较		∞	∞	-3.59×10 ⁻²	-2.87×10 ⁻³	-7.78×10 ⁻⁵	-5.87×10 ⁻²	-4.71×10 ⁻³	-1.46×10 ⁻⁴	0.156
	(x/θ ²)	∞	37.72	-2.15×10 ⁻²	-7.56×10 ⁻⁴	0.00×10 ⁻⁶	-6.52×10 ⁻²	-6.13×10 ⁻³	-2.24×10 ⁻⁴	0.044
	(x/θ ²)	75.43	75.43	-7.52×10 ⁻³	0.00×10 ⁻⁶	0.00×10 ⁻⁶	-8.31×10 ⁻²	-7.24×10 ⁻³	-2.24×10 ⁻⁴	0.050
	(x/θ ²) 和(x/y ²)	-20.74	13.38	-7.23×10 ⁻²	-3.51×10 ⁻³	0.00×10 ⁻⁶	6.01×10 ⁻⁶	-2.12×10 ⁻³	-2.24×10 ⁻⁴	0.034

* 表中数据取自计算方案RUN CH402(2), 404(2), 404(3)和404A(4B)

$\theta^2) = 0$, $T_{133} = (x/y^2) = 0$ 即可求得磁铁入口和出口边界面所需的曲率半径值, 以修正二级象差, 等等。

TRANSPORT 程序是以一、二阶传输矩阵理论为基础编写的计算带电粒子光学系统一、二级光学特性的程序。该程序具有较强的参数优化功能, 能自动搜索元件参数以满足对系统光学特性的要求。本文将以此一程序为工具来分析计算离子光学系统的特性。

三、原方案离子光学特性分析

图 2 是CH4型质谱计离子光学系统原方案示意图。利用TRANSPORT 程序计算了该系

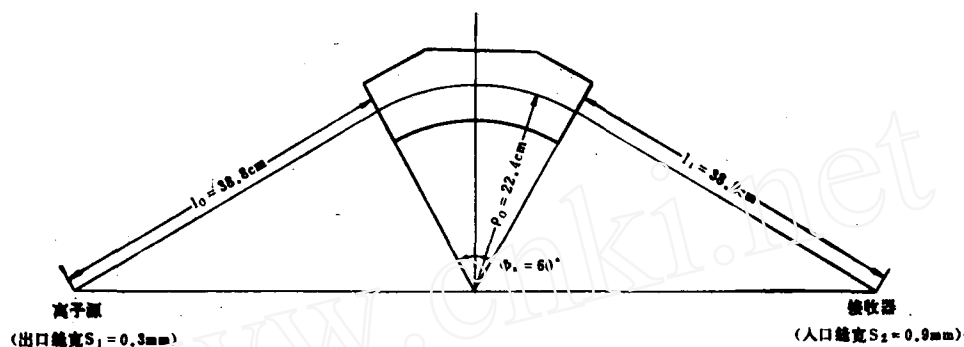


图 2 原方案离子光学系统示意图

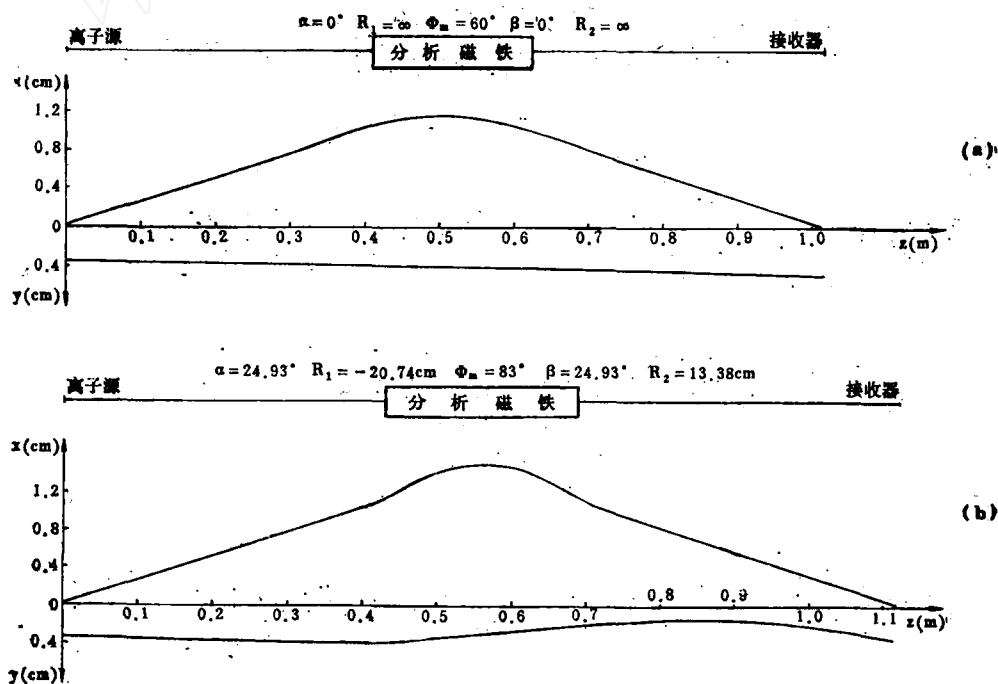


图 8 离子束包络图

- (a) 原方案束包络
RUN CH402(2)
- (b) 改进方案束包络
RUN CH404A(4B)

统的一、二阶传输矩阵,并分别列于表1和表2。计算中考虑了磁场的边缘效应(极间隙高1.2cm)。由表可见,系统的一阶传输矩阵元 $R_{12}=0$, $R_{34}=0$,因此仪器是单向聚焦的;而且系统没有对二级象差进行任何修正。

根据离子源的实际工作条件,设离子束在水平面的初始半宽度 $x_0=0.015\text{cm}$,半散角 $\theta_0=26.18\text{mrad}=1.5^\circ$;而在垂直面的初始半高度和半散角分别为 $y_0=0.35\text{cm}$ 和 $\varphi_0=2.8\text{mrad}=0.16^\circ$ 。在束的发射相图为正椭圆的假定下,离子束传输过程中在水平面(x)和垂直面(y)的束包络如图3所示。这时束在垂直面恰恰能通过处在磁极间隙中半高度为0.4cm的那一段分析管道。于是,通过系统的束的四维相体积 $V=\frac{\pi^2}{2}x_0\theta_0y_0\varphi_0=190\text{mm}^2\text{mrad}^2$ 。

如果系统具有垂直聚焦,能通过的相体积将明显增大。显然,仪器改进前后灵敏度的变化可以用能通过系统的束的相体积的变化来表征。

在上述初始条件和发射相图为正椭圆的假定下,离子束的象宽(包括二级象差在内) $w_i=0.056\text{cm}$ 。于是质量分辨本领为153。这一值是根据计算象宽,即谱线底宽求得的,因此要比仪器实测的出厂指标低。但可用于仪器改进前后分辨本领的相对比较。

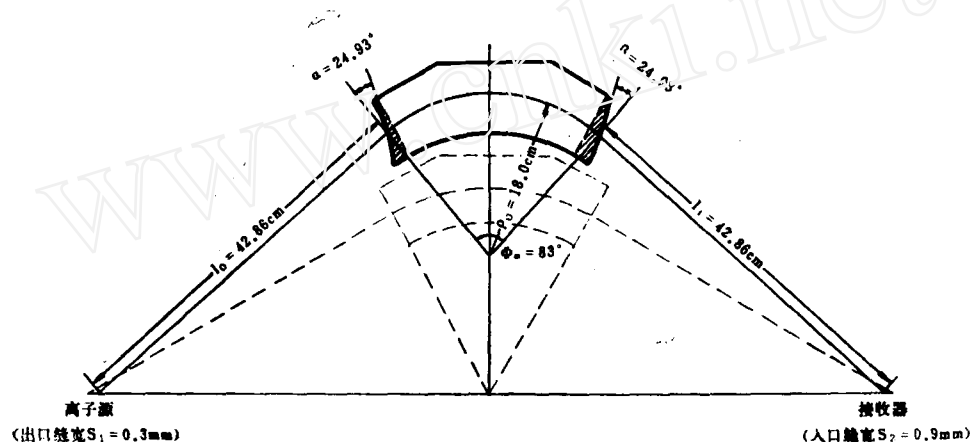


图4 改进方案离子光学系统示意图

四、改进方案的离子光学特性分析

为了提高仪器的灵敏度和分辨本领,现将其离子光学系统加以改进,使之具有双向聚焦和某些二级象差为零的特点。改进方案能保持离子源和接收器的相对位置基本不变以及使用原来的均匀场分析磁铁。

图4是系统改进方案的示意图。为便于比较,图中同时用虚线画出了原方案的布局。改进方案要求将分析磁铁沿系统的中线向上平移10.0厘米,在磁铁的离子入口和出口端面增加如图4中阴影部份所示的垫块,垫块的平均宽度为1.1厘米。分析磁铁的曲率半径分别为-20.74和13.38cm,将磁极面向两侧延伸使其偏转角 $\Phi_m=83^\circ$,偏转半径 $\rho_0=18.0\text{cm}$,入射角和出射角 $\alpha=\beta=24.93^\circ$ 。分析管道做相应的改动。

表1和表2列出了这一方案的有关参数和一、二阶传输矩阵元。由表1可见, $R_{12}=R_{34}=0$,即仪器实现了双向聚焦;色散系数 $R_{16}=75.84\text{cm}$ 增加到原设计的1.7倍。

和原设计一样,取离子束在水平面的初始半宽度和半散角 $x_0=0.015\text{厘米}$, $\theta_0=26.18$

$\text{mrad} = 1.5^\circ$, 在垂直面的初始半高度 $y_0 = 0.35$ 厘米, 但在垂直面的半散角取得大些, $\varphi_0 = 4.5 \text{ mrad} = 0.26^\circ$ 。图 3 给出了在这一初始条件下离子束通过系统时在水平面和垂直面的包络。由于系统有垂直聚焦作用, 因此尽管垂直半散角 φ_0 增大, 束在垂直面仍能通过分析管道。相体积 $V = \frac{\pi^2}{2} x_0 \theta_0 y_0 \varphi_0 = 305 \text{ mm}^2 \text{ mrad}^2$, 为原方案的 1.6 倍。

表 2 列出了 $\Phi_m = 83^\circ$ 改进方案在二级象差没有进行修正或进行不同修正情况下的二级象差系数。由于离子束初始水平半散角 θ_0 和垂直半高度 y_0 都比较大, 因此对象宽贡献比较大的二级象差项是 (x/θ^2) 和 (x/y^2) 。为了修正 (x/θ^2) 项, 或同时修正 (x/θ^2) 和 (x/y^2) 项的象差, 可将入口、出口边界面做成圆弧面。计算了修正不同象差项所需的圆弧面曲率半径, 并列入了表 2。其中, 曲率半径值大于零表示圆弧面向外凸, 反之向里凹。二级象差修正明显减小了象宽 w_i , 如表 2 所示。当入口面向里凹, 出口面向外凸, 同时修正 (x/θ^2) 和 (x/y^2) 项象差时, 获得最窄象宽 $w_i = 0.034 \text{ cm}$ 。因此, 改进方案中用于二级象差修正的边界面曲率半径取为 $R_1 = -20.74 \text{ cm}$, $R_2 = 13.38 \text{ cm}$ 。这时质量分辨本领 $\frac{m}{\Delta m} = 306$, 为原方案的二倍。

参 考 文 献

- [1] K. L. Brown, SLAC-75, Rev. 3 (1972)
- [2] K. L. Brown et al., SLAC-91, Rev. 2 (1977)
- [3] 茅乃丰, “静电粒子光学系统设计和计算机程序”, 北京电机学会加速器专业委员会专题讲座讲义, 1981年5月, 北京
- [4] 茅乃丰, 质谱学杂志, 4, №2, 27 (1983); 4, №3, 16 (1983)

A Proposal for Improving Ion Optics System of the Mass Spectrometer CH4

Liu Chunliang, Sheng Hanyu
(Xian Jiaotong University, Xian)

Mao Naifeng and Liu Binghuan
(Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275, Beijing)

Received 10, Dec. 1983

Abstract

The ion optics system of the CH4 type mass spectrometer is calculated by using of matrix method and program TRANSPORT in this paper. A proposal for improving the system is presented. It is shown that the ion beam can be focused with second order in horizontal direction and first order in vertical direction, if magnetic shimming is made both at the entrance and exit of the analyzer. In such a case the resolving power and the sensitivity of the spectrometer can be improved considerably.