

计算机在带电粒子谱仪设计中的应用(一)*

茅乃丰

(中国科学院原子能研究所)

〔摘要〕 本文综述了计算机在带电粒子谱仪设计中的应用, 内容包括: (1) 带电粒子在电磁场中运动轨迹、粒子束包络以及聚焦特性的计算方法和相应的计算机程序(如TRANSPORT、RAYTRACE); (2) 电磁场的计算方法和相应的计算机程序(如TRIM)。文中列举了计算机程序的一些应用实例。

一、引言

近一、二十年来, 带电粒子谱仪, 包括质谱计、离子注入机、电磁同位素分离器都有很大的发展。例如日本大阪大学的大型质谱计是由两个双聚焦质量分析器串联而成(图1)^[1-2],

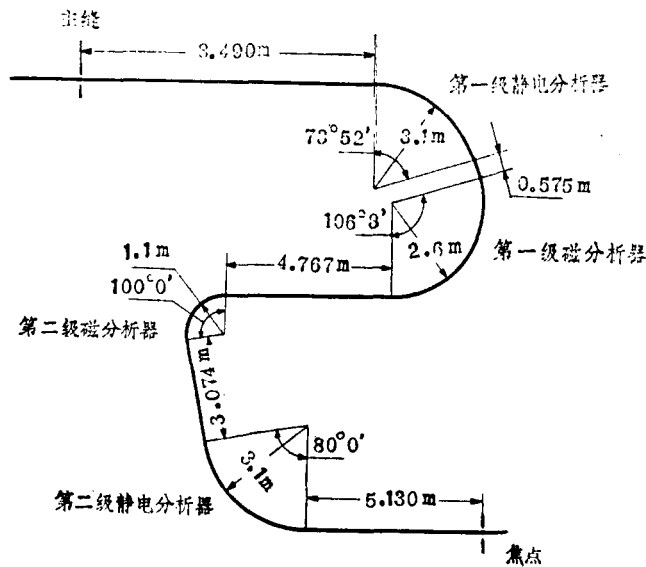


图1 日本大阪大学两级双聚焦质谱计

用于带电粒子能量分析的Q3D谱仪是由一四极透镜(Q)、三个磁分析器(D1、D2和D3)以及两个多极透镜(M1和M2)组成(图2)^[3-4]的等等。显然, 对于这样庞大和复杂

1982年12月15日收

* 本文分二期刊登

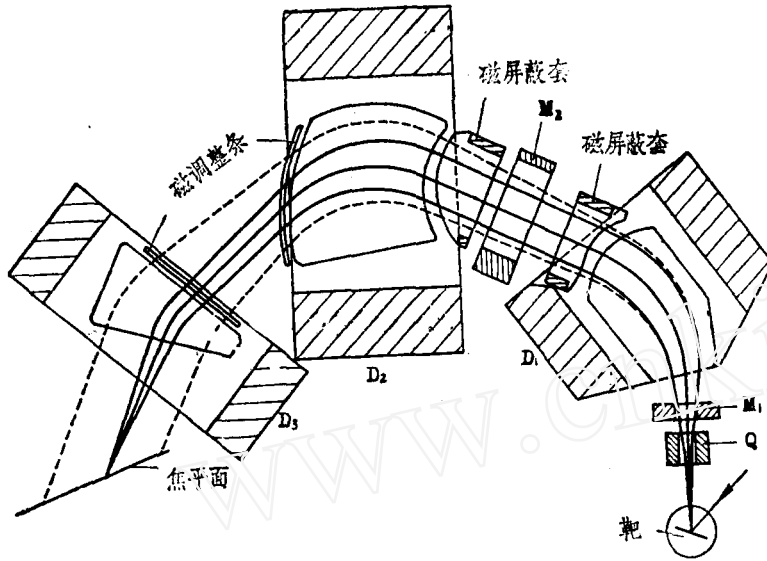


图2 Q3D谱仪(QMG/2型)

的设备，经验法则和粗略计算已经不能适应设计的要求。数值计算方法和高速、大存储计算机的快速发展，为上述设计计算提供了一个有力的手段，在六十年代初就开始了利用计算机进行谱仪设计。二十多年来，特别是近十几年来，用于谱仪设计的计算机程序大量出现。这些计算机程序按所解决的问题，大体上可分成两类。一类是轨迹计算程序，用于解决粒子动力学

设计问题；另一类是电场和磁场计算，用于解决电、磁场设计问题。下面就对这两类计算机程序扼要地做一介绍^[5]。

二、轨迹计算程序

轨迹计算所涉及的是带电粒子在电磁场中的运动，即运动方程

$$d\vec{p}/dt = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (1)$$

的求解问题，方程中 \vec{p} 和 q 分别是粒子的动量和电荷，而 \vec{E} 和 \vec{B} 分别是电场强度和磁感应强度。由于轨迹计算把空间电磁场分布和粒子运动轨迹联系起来，因此利用轨迹计算既可以分析空间场分布确定设备的性能（如质谱仪的聚焦性能），也可以根据对粒子运动规律的要求设计出所需要的电磁场分布。轨迹计算是谱仪中离子光学系统或电子光学系统设计的一个中心环节。

轨迹计算程序，就解运动方程的方法而言，可以归纳为矩阵方法和数值积分方法两种。

1. 采用矩阵方法的程序

利用矩阵方法求解运动方程，对带电粒子运动的描写采用该粒子相对于某一特定的参考轨迹的六个广义坐标^[6]

$$X = \begin{pmatrix} x \\ \theta \\ y \\ \varphi \\ l \\ \delta \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中 x 和 y 分别是粒子相对于参考轨迹的水平和垂直位移，如图3所示； θ 和 φ 分别是该粒子轨迹在水平面和垂直平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粒子轨迹长度之差； $\delta = \Delta P/P$ 是该粒子与参考粒子的相对动量差。

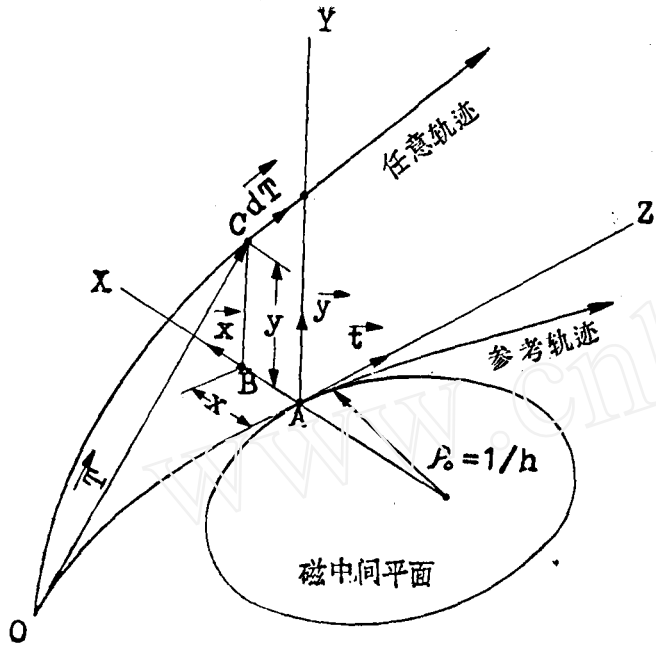


图3 曲线坐标系

根据一级传输矩阵理论, 带电粒子在漂移空间、磁分析器、各种单透镜、四极透镜等一级电磁元件的入口和出口处的坐标矢量 $X(0)$ 和 $X(L)$ 服从线性变换

$$X(L) = R X(0) \quad (3)$$

其中 R 即通常所说的传输矩阵, 它是一个 6×6 方形矩阵。在一级近似下求解运动方程(1), 就可以得到各种一级元件的传输矩阵。

例如漂移空间的一阶传输矩阵

$$R = \begin{pmatrix} 1 & L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中 L 是漂移空间的长度。

理想磁分析器 (不包括边缘场效应和入口、出口边界面旋转效应) 的一阶传输矩阵为:

$$R = \begin{pmatrix} \cos K_x L & \frac{1}{K_x} \sin K_x L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -K_x \sin K_x L & \cos K_x L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos K_y L & \frac{1}{K_y} \sin K_y L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -K_y \sin K_y L & \cos K_y L & 0 & 0 \\ -\frac{h}{K_x} \sin K_x L & -\frac{h}{K_x} (1 - \cos K_x L) & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h}{K_x} (1 - \cos K_x L) & \frac{h}{K_x} \sin K_x L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{h^2}{K_x^3} (K_x L - \sin K_x L) & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

其中, L 是参考轨迹在磁场内的路径长度, 即磁场的有效长度, $h = 1/\rho_0$, ρ_0 是参考轨迹偏转半径, $K_x = (1-n)h^2$, $K_y = nh^2$, n 是场梯度。

如果整个谱仪系统由 n 个元件组成, 则在第一个元件的入口和第 n 个元件的出口, 坐标矢量 $X(0)$ 和 $X(l)$ 同样服从 (3) 式, 只是这时 R 是这 n 个元件的总传输矩阵。

$$R = R(n) \cdot R(n-1) \cdots R(2) \cdot R(1) \quad (6)$$

借助于传输矩阵, 人们把轨迹追踪化为矩阵运算。事实上传输矩阵不仅可以用于讨论单个粒子的运动轨迹, 在引进相椭圆概念的基础上还可以用于讨论束的整体行为。

设粒子束在六维相空间 $(x, \theta, y, \varphi, l, \delta)$ 中所占据的空间是一个六维椭球, 椭球方程可以写成矩阵形式

$$X^T \sigma^{-1} X = 1 \quad (7)$$

其中 X^T 是坐标矢量 X 的转置矢量, σ 是 6×6 正定对称矩阵。易于证明, σ 矩阵对角线上各矩阵元的平方根 $\sqrt{\sigma_{ii}}$ 是束在该矩阵元所对应的坐标上的“半宽度”。例如, $\sqrt{\sigma_{11}}$ 和 $\sqrt{\sigma_{22}}$ 分别是束包络在 x 平面上的半宽度和半散角, 如图 4 所示。由于 σ 矩阵反映了束的整体行为, 因此通称为束矩阵。

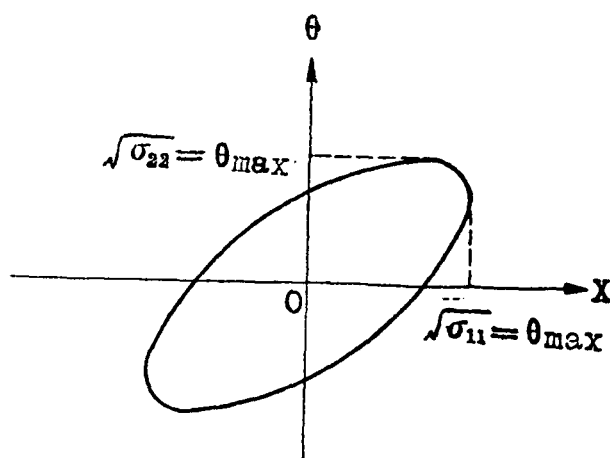


图 4 束在 (x, θ) 平面上的相椭圆

如果束的初始束矩阵是 $\sigma(0)$, 则经过传输矩阵为 R 的系统后, 束矩阵 $\sigma(l)$ 满足

$$\sigma(l) = R\sigma(0)R^T \quad (8)$$

这就是束在相空间的椭球变换公式, 由方程 (3) 和 (7) 不难导出。

利用传输矩阵 R 和束矩阵 σ 可以分别在成像光学和束流光学意义上讨论带电粒子束在系统中的特性。例如: 系统的传输矩阵元 $R_{12} = 0$ 表示粒子通过系统后的 x 坐标与初始 θ 角无关, 因此 $R_{12} = 0$ 是水平成像条件。而束矩阵元 $\sigma_{21} = 0$, 则是水平成腰条件。

矩阵方法同样用于二级近似^[6]和三级近似^[7], 限于篇幅, 这里就不再一一介绍。

采用矩阵方法的计算机程序很多, 如 TRANSPORT^{[8], [9]}, OPTIC^[10], 4P^[11], SYTRAN^[12] 等。其中 TRANSPORT 是比较灵活和通用的一种。这个程序广泛用于束流传输系统、能谱仪、质谱仪、离子注入机等设计。所设计的系统可以包括漂移空间、磁分析器、四极透镜、六极透镜、螺线管、行波加速段等一级和二级元件。其中, 磁分析器的磁场可以是径向非均匀场, 入口和出口面不仅可以倾斜, 也可以是圆弧, 并且考虑了边缘场效应。此外, 该程序还可以做系统公差计算。

TRANSPORT 程序可以计算系统的一级和二级传输矩阵和束矩阵, 因此计算准确度比较高。另外, 它还能利用非线性最小二乘和耦合系数方法自动进行系统的最优化设计, 即自动调整元件参数, 以满足对系统在聚焦、传输等方面的设计要求。例如自动调整漂移空间长度、磁分析器入口和出口边界的倾斜角、场梯度、四极透镜的长度和场强等参数实现成像、成腰等。又如自动调整磁分析器边界曲率或六极透镜场强消除二级几何象差等。

该程序用 FORTRAN 语言编写, 全长 6 千多行, 要求计算机存储容量为 20 多万字节, 能够计算的元件数目 500 个左右。对于一个由 5、6 个元件组成的系统, 每秒几十万次的计算机所要花费的计算时间约一、二十秒。

矩阵方法已广泛用于带电粒子谱仪设计。如质谱仪器方面^{〔13〕、〔14〕、〔15〕}。图 5 是利用 TRANSPORT 程序得到的一台离子束实验装置^{〔16〕}的束包络图。该装置由磁分析器 (D1)、四极透镜对 (Q1 和 Q2) 和静电分析器 (D2) 等组成。另外, 利用 TRANSPORT 程序正在进行一台质谱计离子光学系统改进的计算工作。预期改进方案将具有双向聚焦的特点, 从而更提高仪器的灵敏度和分辨本领都有所提高。

2. 采用数值积分方法的程序

计算粒子轨迹的另一种方法是直接对运动方程 (1) 进行数值积分。积分中, 积分变量是时间, 但也可以变换成弧长或其它量, 这时描写运动的方程和坐标系要做相应的改变。出现在运动方程中的磁场和电场可以直接由实验测定, 也可以由近似公式、数值计算或解析式给出。比较常用的数值积分方法是四阶龙格-库塔方法, 因为这种方法易于处理不同场形

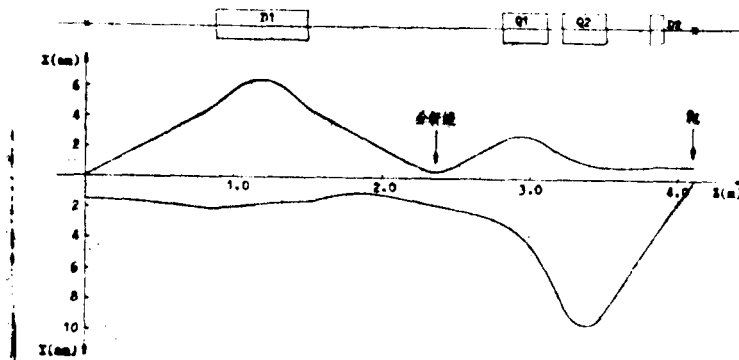


图 5 离子束实验装置束包络图 (TRANSPORT 程序计算结果)

和各种几何区域 (数值积分就在这些区域内进行), 并能灵活选择积分步长。当然也有用其它方法的, 如预报校正法。

以粒子在磁元件系统中运动方程的数值积分为例。由于磁场只改变粒子运动方向, 不改变粒子的能量, 因此荷质比 $k = q/m$ 是一个运动常数。于是, 若把 (1) 改为分量的形式, 就可以得到下述三个联立的二阶常微分方程

$$\begin{cases} \ddot{x} = k(B_z \dot{y} - B_y \dot{z}) \\ \ddot{y} = k(B_x \dot{z} - B_z \dot{x}) \\ \ddot{z} = k(B_y \dot{x} - B_x \dot{y}) \end{cases} \quad (9)$$

式中的点“·”表示对时间求导。令 $u = \dot{x}$, $v = \dot{y}$ 和 $w = \dot{z}$, 则 (9) 式可化为六个联立的二阶常微分方程

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &= u = f_x(t, x, y, z, u, v, w) \\
 \dot{y} &= v = f_y(t, x, y, z, u, v, w) \\
 \dot{z} &= w = f_z(t, x, y, z, u, v, w) \\
 \dot{u} &= k(B_z v - B_y w) = f_u(t, x, y, z, u, v, w) \\
 \dot{v} &= k(B_x w - B_z u) = f_v(t, x, y, z, u, v, w) \\
 \dot{w} &= k(B_y u - B_x v) = f_w(t, x, y, z, u, v, w)
 \end{aligned} \tag{10}$$

如果给定初始条件 $x(0) = x_0, y(0) = y_0, \dots, w(0) = w_0$ 以及出现在 (10) 式右端项的 B_x, B_y 和 B_z 的空间分布, 就可以对 (10) 进行积分。四阶龙格—库塔数值积分公式是

$$\begin{cases}
 x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6}(k_{x1} + 2k_{x2} + 2k_{x3} + k_{x4}) \\
 y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_{y1} + 2k_{y2} + 2k_{y3} + k_{y4}) \\
 \dots\dots
 \end{cases} \tag{11}$$

其中

$$\begin{cases}
 k_{x1} = hf_x(t_n, x_n, y_n, z_n, u_n, v_n, w_n) \\
 k_{x2} = hf_x(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{1}{2}k_{x1}, y_n + \frac{1}{2}k_{y1}, z_n + \frac{1}{2}k_{z1}, \\
 \quad u_n + \frac{1}{2}k_{u1}, v_n + \frac{1}{2}k_{v1}, w_n + \frac{1}{2}k_{w1}) \\
 \dots\dots
 \end{cases} \tag{12}$$

而 h 在这里是时间积分步长。

利用数值积分方法不仅可以得到具有不同初始条件的粒子运动轨迹, 还可以利用这些轨迹计算系统的各级传输矩阵元, 进一步分析系统的动力学特性。

采用数值积分方法求解运动微分方程的计算机程序为数不少。如 RAYTRACE^{[3], [9]}, CYDE^[17], MAGOP^[18], SOTRM^{[19], [20]}, TRAJECTORY^[21] 等。其中 RAYTRACE 是由美国 MIT 的 H. A. Enge 和 S. B. Kowalski 等人从 1964 年开始逐渐发展起来的。这个程序广泛用于带电粒子磁谱仪设计。所计算的系统可以包括磁分析器、各种多极磁透镜(四极、六极、八极、十极等)、螺线管以及速度选择器等。其中磁分析器的入口和出口边界面可以是五次曲线。传输矩阵元的计算到五级。

现在, 这个程序尚在不断改进之中, 而且还出现了一些以 RAYTRACE 为基础的新程序, 如 MOTER^[22], RAY-FIT^[23], 它们增加了轨迹初始条件随机发生、系统参数最优化等功能。

RAYTRACE 程序用 FORTRAN 语言编写, 全长近四千行。计算由五、六个元件组成的一台磁质谱仪的离子光学问题, 每秒百万次机器约需几分钟。

图 6 是利用 RAYTRACE 程序得到的 Q3D 谱仪焦平面附近粒子的运动轨迹。谱仪结构如图 2 所示。

矩阵方法和数值积分方法是解粒子运动方程的两种不同方法, 它们在使用上也具有不同的特点。

首先, 矩阵法适用于可理想化的电磁场元件, 如理想化的磁分析器(场均匀或具有径向梯度和二次不均匀性)、理想的四极和六极透镜等。积分法则不受此限制, 它适用于任意

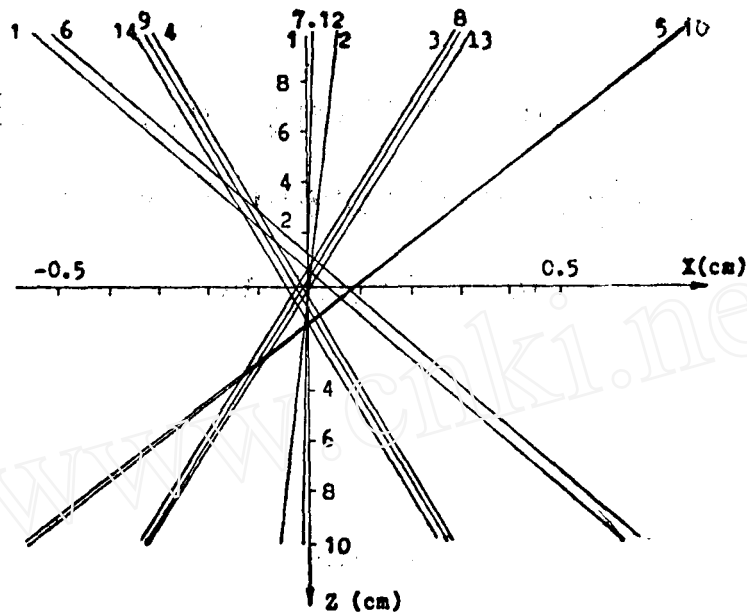


图6 Q3D谱仪焦平面附近粒子运动轨迹在中间平面上的投影
(RAYTRACE 程序计算结果)

元件,如具有特殊边缘场分布的磁分析器、各种形状电极的系统等。

第二,矩阵法多在一级、二级近似下解运动方程,只考虑场对粒子运动的低级效应,因此适用于粒子在参数轨迹附近运动的旁轴问题。积分法在求解运动方程时则不对方程做任何简化,轨迹积分包括了场对粒子运动的高级效应,结果更为准确。

第三,矩阵法,由于元件理想化,描写元件所需要的参数比较少。如四级,只是四极长度和场梯度。积分法,场参数可以根据需要和可能以多种形式提供,如实测数据、数值计算结果,近似公式或解析表示式等。当然相应数据量就比较大。

第四,矩阵法解题时间短,为秒量级;积分法则长,为分量级。

利用计算机计算轨迹,解决粒子动力学问题虽然已经有二十年的历史,但轨迹计算程序仍处于发展之中。

例如,随着对强束流,特别是低能强束流的需要日益增长,而强束流问题需要考虑束的空间电荷以及自身磁场对粒子运动的影响。对于低能强束流,虽然自身磁场的作用可以忽略,但空间电荷效应却更加突出。可是,至今多数轨迹程序,如TRANSPORT, RAYTRACE都是为弱束流编写的,没有考虑束空间电荷和自身磁场效应。近年来这方面工作国内外均有开展。如空间电荷力的计算、用外电磁场补偿空间电荷效应等,相应的计算机程序也陆续出现〔24〕,〔25〕,〔26〕。

轨迹程序发展的另一个动向是设计最优化问题。前面提到过的某些程序,如TRANSPORT能够自动调整系统中某些元件的参数,使束具有最佳动力学性能。但参数的搜索范围有限。而另一些程序,如RAYTRACE则并不具有最优化功能。因此,在轨迹程序,特别是采用数值积分方法的轨迹程序的最优化功能方面,有不少工作要做。如扩大程序的参数搜索范围,并进而使程序具有自动搜索元件的功能。(待续)

Applications of Computers to the Design of Charged Particle Spectrographs*

Mao Naifeng

(Institute of Atomic Energy, Academia Sinica)

Abstract

The computer programs are described for the design of charged particle spectrographs. The present paper includes two parts: (1) The calculating methods and computer programs of the trajectory, the envelope enclosing beam and the focusing properties for the charged particle in the electric-magnetic field (such as TRANSPORT, RAYTRACE); (2) The calculating methods and programs of the distribution of the electric-magnetic field (such as TRIM). Here some examples for application are mentioned.

* The present paper will be published in two instalments in the Journal of Chinese Mass Spectrometry Society.

简讯

美国B. Munson教授来我国讲学

根据中国质谱学会1983年活动计划,由学会在京举办一次有机质谱讲座,已邀请美国前质谱学会主席,美国DELAWARE大学教授B. Munson于今年6月下旬来我国讲学,内容如下:

化学电离质谱技术(CIMS)一般介绍;

化学电离的最新进展;

解吸化学电离质谱技术;

GC/CI质谱新技术——反应离子监测;

高压碰撞活化MS;

高温裂解碰撞活化MS;

负离子CIMS。

全国各地一百多名质谱工作者参加了此次讲座。

(山 佳)