

*На правах рукописи*

АНТОНОВ Андрей Сергеевич

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ УВЕЛИЧЕНИЯ ПРОПУСКАНИЯ И  
РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МАЛОГАБАРИТНЫХ  
СТАТИЧЕСКИХ МАСС-АНАЛИЗАТОРОВ**

специальность

01.04.04 – физическая электроника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук и в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт аналитического приборостроения Российской академии наук.

Научный руководитель:

**Саченко Вячеслав Данилович**, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук

Научный консультант:

**Аруев Николай Николаевич** доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией масс-спектрометрии ФТИ им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук

Официальные оппоненты:

**Цыбин Олег Юрьевич**, доктор физико-математических наук, профессор ИФНиТ ФГАОУ ВО «СПбГПУ»

**Ганеев Александр Ахатович**, доктор физико-математических наук, заведующий химико-аналитическим отделом института токсикологии Федерального медико-биологического агентства России

Ведущая организация: ФГБУН Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН), 199034, Санкт-Петербург наб. Макарова, д. 2.

Защита состоится «15» апреля 2021г. В 14 часов

на заседании диссертационного совета ФТИ 34.01.03 при ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГБУН Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук: <http://www.ioffe.ru/>

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2021г.

Ученый секретарь

диссертационного совета ФТИ 34.01.03,  
кандидат физико-математических наук (PhD)

Н.В. Теплова

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы диссертации

Корпускулярная оптика статических электромагнитных полей, теоретическим вопросам которой посвящена настоящая диссертация, изучает фокусирующие и диспергирующие свойства движения заряженных частиц в электрических и магнитных полях, не изменяющихся во времени, и является особым разделом физической электроники. Ее важное прикладное значение определено тем, что ее результаты используются во многих областях науки и техники и определяют базовые принципы и характеристики большого количества различных корпускулярно-оптических приборов и инструментов – от электронных сканирующих и эмиссионных микроскопов до элементных, химических и изотопных масс-спектрометров, сфера применения которых чрезвычайно широка. Постоянное расширение областей применения современного научного приборостроения диктует возрастающие требования к приборам, что стимулирует развитие и поиск новых теоретических принципов и методов самой корпускулярной оптики.

Несмотря на впечатляющие успехи, достигнутые в последнее время в области разработок динамических типов масс-анализаторов, статические масс-анализаторы, имеющие более скромные показатели по разрешающей способности и значительно большие вес и габариты, остаются еще чрезвычайно востребованы и незаменимы в атомной промышленности, геологии, изотопном анализе газовых смесей, где важнейшим параметром является изотопическая чувствительность, элементном анализе и во многих других областях науки и техники. С другой стороны, значительные габариты и вес современных статических масс-спектрометров, а также сравнительно невысокая их абсолютная чувствительность, существенно ограничивают возможности расширения их применения. Поэтому совершенствование теории ионно-оптических систем (ИОС), предназначенных для создания на

их основе малогабаритных прецизионных статических масс-спектрометров с аналитическими характеристиками, не уступающими крупногабаритным аналогам, является актуальным направлением физической электроники.

Разработка мобильных приборов, дающая возможность работать в «полевых условиях» - современный тренд масс-спектрометрии, выдвигающий на первый план требование значительного снижения веса и размеров электромагнита, который является основным элементом статических масс-спектрометров. Однако снижение габаритов электромагнитов вызывает необходимость пересмотра общепринятой методики расчета аббераций ионно-оптической системы масс-анализатора, обусловленных прохождением ионов в краевых магнитных полях, поскольку в таких условиях нарушается правомерность применения приближений, основанных на малости величины отношения межполюсного зазора электромагнита к радиусу поворота ионов в однородной части поля.

Таким образом, совершенствование методики расчета ионно-оптических систем статических масс-анализаторов в направлении снижения их габаритов и улучшения основных аналитических характеристик – разрешения и чувствительности, является актуальной задачей физической электроники.

**Целью диссертационной работы** являлось совершенствование методов расчета и анализа ионно-оптических систем, и поиск новых решений в создании малогабаритных прецизионных статических масс-анализаторов с высоким пропусканием.

В соответствии с данной целью были сформулированы следующие **задачи** исследования:

1. Совершенствование методики расчета абберационных характеристик ИОС с большой величиной отношения межполюсного зазора магнита к радиусу отклонения оптической оси в магнитном поле.
2. Анализ возможности коррекции аббераций ИОС на основе двумерных

магнитных призм и секторных цилиндрических конденсаторов, обеспечивающих двойную фокусировку ионов по углу и энергии.

3. Разработка методик оптимизации пропускания ИОС при наличии у них нескорректированных аксиальных aberrаций.

### **Научная новизна полученных результатов**

1. Впервые найдены аналитические тождества, связывающие угловые и линейные компоненты aberrационных коэффициентов, служащие критериями точности расчета aberrационных элементов матриц переноса 2-го порядка в краевых полях магнитного элемента ИОС.

2. Обнаружено, что в ИОС с двойной фокусировкой, включающих двумерную магнитную призму и цилиндрический конденсатор, имеется возможность обеспечить полную коррекцию всех слагаемых аксиальной aberrации 2-го порядка.

3. Обнаружено, что в симметричной трехкаскадной двухканальной ИОС с двойной фокусировкой, содержащей магнитную призму и секторные цилиндрические конденсаторы, все компоненты аксиальной aberrации 2-го порядка тождественно равны нулю для двух ионно-оптических каналов.

4. Разработана оригинальная методика оптимизации вертикального аксептанса<sup>1</sup> статического масс-анализатора, имеющего ненулевую аксиальную aberrацию 2-го порядка, позволяющая значительно увеличить его пропускание без ухудшения разрешающей способности.

5. Для ИОС типа Маттауха-Герцога показано, что оптимизация вертикального аксептанса по разработанной методике позволяет максимизировать пропускание ионного пучка по всем его мономассовым компонентам в рабочем диапазоне регистрируемых массовых чисел.

---

<sup>1</sup> Аксептанс - область фазового пространства начальных параметров ионов, пропускаемых масс-анализатором

## **Практическая значимость результатов работы**

- 1.** Полученные аналитические тождества, связывающие угловые и линейные компоненты абберационных коэффициентов, позволяют оценить корректность и границы применимости существующих методов расчета абберационных составляющих траекторий ионов в краевых магнитных полях статических масс-анализаторов.
- 2.** Показанная возможность полной коррекции геометрических аббераций 2-го порядка в ИОС, включающих в себя двумерную магнитную призму и цилиндрические конденсаторы, позволяет разработать на базе таких ИОС малогабаритные статические масс-спектрометры с высоким разрешением. Численное моделирование одной из таких ИОС показало возможность достижения разрешающей способности порядка 100 000 на 0.1% уровне масс-спектрального пика, что достигалось до настоящего времени в крупногабаритных статических масс-анализаторах.
- 3.** Применение методики оптимизации вертикального аксептанса ИОС типа Маттауха-Герцога показало возможность увеличения пропускания ионов более чем на порядок по всему диапазону регистрируемых линий масс-спектра без ухудшения их разрешения.
- 4.** Результаты исследования симметричной 3-х каскадной ИОС с двумерной магнитной призмой и двумя цилиндрическими конденсаторами легли в основу разработки в ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН опытного образца компактного изотопного масс-спектрометра, предназначенного для анализа водородно-гелиевых смесей.
- 5.** Разработанные методики корректного расчета аббераций и оптимизации вертикального аксептанса ИОС могут быть применены для

модернизации медицинского масс-спектрометра, ранее разработанного в ФТИ им А. Ф. Иоффе РАН.

### **Положения диссертационной работы, выносимые на защиту**

- 1.** Получены аналитические тождества, связывающие угловые и линейные компоненты абберационных коэффициентов, являющиеся критерием корректности расчёта абберационных составляющих траекторий ионов в краевых областях магнитных элементов статических масс-анализаторов.
- 2.** Установлена некорректность применения линейного приближения метода полевых интегралов при расчете абберационных составляющих траекторий ионов в краевых полях магнитных элементов с характерной для малогабаритных статических масс-анализаторов величиной отношения межполюсного зазора к радиусу отклонения оптической оси в области однородного поля.
- 3.** Показана возможность устранения аксиальной абберации 2-го порядка в вариантах ИОС, включающих двумерную магнитную призму и секторные цилиндрические конденсаторы и обеспечивающих двойную фокусировку по углу и энергии.
- 4.** Разработана методика оптимизации вертикального аксептанса статических масс-анализаторов с ненулевой аксиальной абберацией 2-го порядка, позволяющая максимизировать пропускание данных масс-анализаторов без ухудшения их разрешающей способности.
- 5.** Предложены и рассчитаны ионно-оптические схемы, обеспечивающие спектрографическую фокусировку 2-го порядка по углу и 1-го порядка по энергии, с коллимирующей системой, формирующей максимальный вертикальный аксептанс при заданной величине разрешения по массам.

**Достоверность полученных результатов** обеспечена математической корректностью использованных методов и формул и подтверждена сравнением данных, полученных аналитическим путем, с результатами численного моделирования для нескольких тестовых примеров, а также согласием с результатами, опубликованными другими авторами.

### **Апробация работы**

Результаты исследований, полученные в рамках выполнения настоящей диссертационной работы, опубликованы в научных журналах, входящих в рекомендованный перечень ВАК и рецензируемых в РИНЦ (12 статей) и Web of Science (6 статей), и докладывались на научных конференциях: VIII Всероссийской конференции с международным участием «Масс-спектрометрия и её прикладные проблемы», Москва, 14-18 октября 2019 г (3 доклада) и VII Всероссийской конференции с международным участием «Масс-спектрометрия и её прикладные проблемы», Москва, 09-13 октября 2017 г., а также на научных семинарах ИАП РАН и лаборатории масс-спектрометрии ФТИ им. А. Ф. Иоффе. Материалы диссертация докладывались на семинарах ИАП РАН и ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН.

### **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 141 страницу текста, включая 1 таблицу, 34 рисунка. Библиография содержит 91 наименование.

### **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во Введении обосновывается актуальность и перспективность темы диссертации, сформулирована цель работы, перечислены ее основные результаты, обсуждается их новизна и практическая значимость.



В первой главе диссертации дан обзор и проведён анализ современного состояния ионно-оптической теории статических масс-анализаторов, сформулированы цель и задачи настоящей диссертации и обоснована ее актуальность. Показано, что, несмотря на успехи, достигнутые в последнее время в развитии динамических типов масс-анализаторов, потенциал развития статической масс-спектрометрии ещё далеко не исчерпан, и множество областей применения масс-спектрального анализа базируются на использовании статических приборов. Это и традиционные задачи изотопного анализа водородно-гелиевых смесей - важнейшее направление аналитической изотопной масс-спектрометрии, и широкий спектр современных методик диагностики в медицине, и многие другие области применения статических масс-спектрометрических приборов.

Отмечено, что главным недостатком статических масс-спектрометров являются их габариты, достигающие многих метров, требующие отдельных площадей, с тяжелым электромагнитом, а немногочисленные переносные приборы характеризуются скромными аналитическими характеристиками.

В обзоре указаны основные факторы, ограничивающие разрешающую способность и пропускание статических ИОС. В значительной степени, это различного рода геометрические и хроматические aberrации, среди которых наиболее значимыми являются аксиальные aberrации, обусловленные прохождением ионов в краевых магнитных полях вне медианной плоскости и вызывающие уширение и искривление формы ионного пучка.

В обзоре работ, посвященных вопросам устранения ионно-оптических aberrаций, отмечено, что способы их коррекции, отраженные в литературе, сопряжены с существенным усложнением конструкции масс-анализаторов. Это обуславливает неизбежные погрешности изготовления их элементов, порождая тем самым дополнительные aberrации, и затрудняет настройку масс-спектрометров.

В обзоре работ, посвящённых статическим масс-анализаторам с призмными элементами, отмечено их принципиальное преимущество, заключающееся в том, что их коэффициент дисперсии по массам и предельное разрешение не зависят от габаритов магнита. В то же время, ввиду значительной величины коэффициента хроматической аберрации фокусирующих линз и электростатических призм необходимо использовать большое ускоряющее напряжение, в связи с чем все разработанные к настоящему времени призмные масс-анализаторы имеют большие габариты и вес магнита.

В обзоре выделены работы, посвященные учёту аберраций, обусловленных прохождением ионов в краевых неоднородных полях ИОС. Отмечено особое значение вопроса корректности применения существующих методик учёта краевых магнитных полей при снижении габаритов магнита. Основным аналитическим методом расчета краевых эффектов традиционно является представление краевых полей и траекторий в виде асимптотических рядов, слагаемые которых ранжируются по порядкам малости относительно степеней координат и углов отклонения траектории от оптической оси. Элементы матрицы преобразования на эффективной границе вычисляются итерационно в соответствии с учитываемым приближением. Однако, ввиду значительной трудоемкости и объема вычислений операций в рамках указанного метода, названного *методом полевых интегралов*, при вычислении краевых поправок к аберрационным элементам матрицы переноса учитываются лишь слагаемые порядка величины отношения полузазора магнита к радиусу поворота оптической оси в однородной части магнита, что предполагает малость величины данного отношения. Последнее было оправдано громоздкими размерами магнита высокопрецизионных статических масс-спектрометров. Однако современные тенденции к снижению габаритов статических масс-спектрометров требуют разработки надежных, физически обоснованных критериев корректности расчета

аббераций в указанных условиях. Такие критерии, которые были бы удобны в практическом применении, по существу, отсутствуют.

В конце главы сформулированы следующие основные направления совершенствования ионно-оптической теории статических масс-анализаторов:

- кардинальное уменьшение размеров магнита,
- поиск новых принципов разработки малогабаритных систем,
- поиск эффективных способов коррекции аббераций 2-го порядка.

**Вторая глава** посвящена разработке физически обоснованного критерия оценки точности расчета абберационных искажений траекторий ионов в краевых магнитных полях статических масс-анализаторов; проведена оценка погрешности общепринятого линейного приближения метода полевых интегралов в зависимости от величины отношения  $d/r$ , где  $d$  – межполюсный полузазор магнита, а  $r$  – радиус поворота оптической оси в области однородного магнитного поля.

В условиях независимости магнитного поля от одной из координат ( $Z$ ), из закона сохранения проекции обобщенного импульса  $p_z(X)$

$$p_z(X) + \frac{e}{c} A[X, Y(X)] = const$$

в приближении второго порядка по начальным параметрам траекторий ионов ( $\alpha, \beta, \varepsilon$ ) следует:

$$\alpha_1 = \alpha_0 \frac{\cos(\theta_0)}{\cos(\theta_1)} + \frac{\sin(\theta_0)}{\cos(\theta_1)} \left( \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\beta_0^2}{2} \right) - \operatorname{tg}(\theta_1) \left( \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\beta_1^2}{2} \right) \quad (1)$$

где  $\alpha_0$  и  $\beta_0$  – горизонтальный и вертикальный угол наклона траектории перед входом в магнитное поле,  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  – после прохождения магнитного поля,  $\varepsilon$  – разброс по энергии (рис.1). В частности, если в качестве выходной границы 1 рассматривать плоскость  $X = X'$ , то из (1) следует равенство нулю в этой

плоскости угловых абберационных коэффициентов  $(\alpha, \gamma\gamma)$  и  $(\alpha, \gamma\beta)$  в разложении углового отклонения  $\alpha$  по начальным параметрам  $\gamma_0$  и  $\beta_0$ :

$$\alpha = (\alpha, \gamma\gamma) \gamma_0^2 + (\alpha, \gamma\beta) \gamma_0 \beta_0 + (\alpha, \beta\beta) \beta_0^2 + \dots$$

Поскольку равенство (1) не связано с разложением траектории иона в асимптотический ряд по величине отношения  $d/r$ , то оно не зависит от этой величины, и его можно рассматривать в качестве критерия точности расчета коэффициентов аксиальной абберации, рассчитанных методом полевых интегралов.

Эффективность применения такого критерия показана на примере двухканальной ИОС с компактной магнитной призмой (рис.2) [7]. Из равенства (1) следует, что в условиях фокусировки ионов по углу и энергии координатная аксиальная абберация в данной ИОС отсутствует для обоих ионно-оптических каналов.

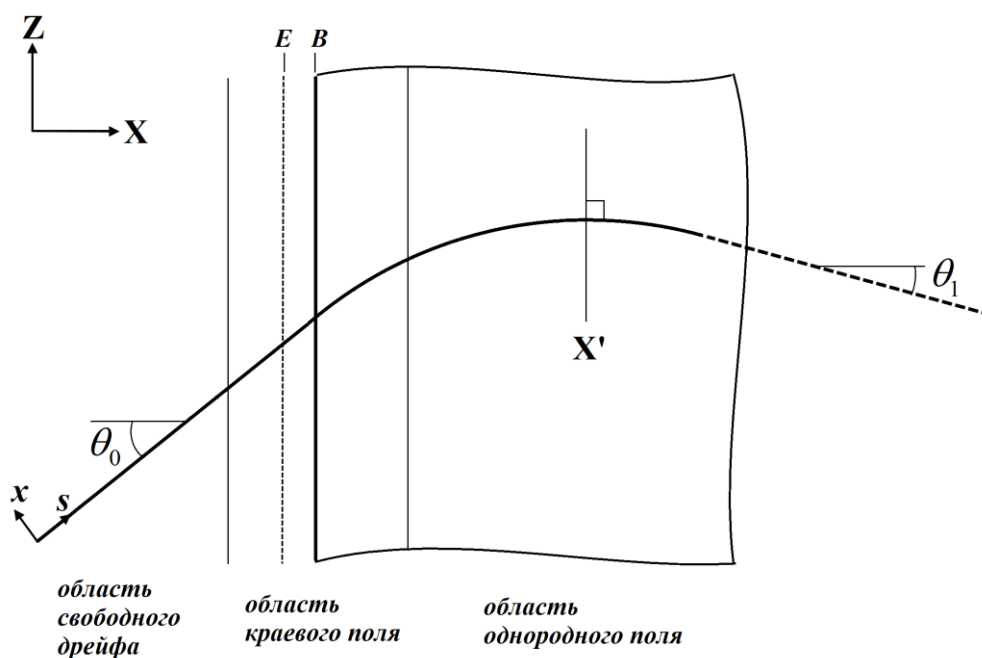


Рис.1 Двумерная область, охватывающая краевое магнитное поле со стороны входа ионов в поле магнитного сектора и часть неискаженного однородного поля, и направления прямоугольных осей  $X, Z$ . Оси  $Y$  и  $y$  перпендикулярны плоскости рисунка.  $B$  – входная граница магнитного сектора,  $E$  – эффективная граница магнитного поля.

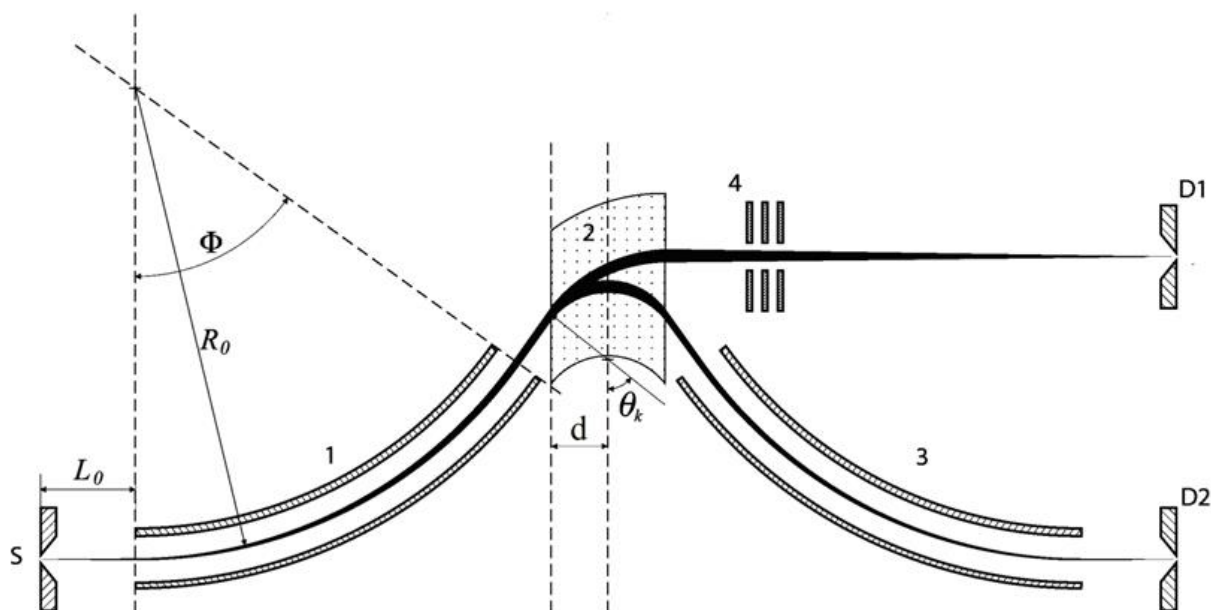


Рис.2. Симметричный двухканальный призмный масс-анализатор с компактной магнитной призмой и двумя цилиндрическими конденсаторами с расположением источника и детектора «в линию» [7].

Численный анализ аксиальных абберационных коэффициентов указанной ИОС в рамках линейного приближения метода полевых интегралов [A1] проведён программой ISIOS [A2]. На рис. 3 показаны результаты расчета указанных коэффициентов по первому каналу ИОС, представленные графиками зависимостей расчетных величин от ширины призмы  $S$ . Учитывая, что указанные коэффициенты должны быть равны нулю при любом значении  $S$ , приведенные на рис.3 графики показывают зависимости ошибок расчета от ширины магнитной призмы.

Из приведенных на рис. 3 графиков видно, что при ширине призмы менее 200 мм линейное приближение метода полевых интегралов дает ошибку в расчёте аксиальной абберации порядка десятков  $\mu\text{м}$ , что сравнимо с размером выходной щели источника ионов, которая определяет его разрешающую способность.

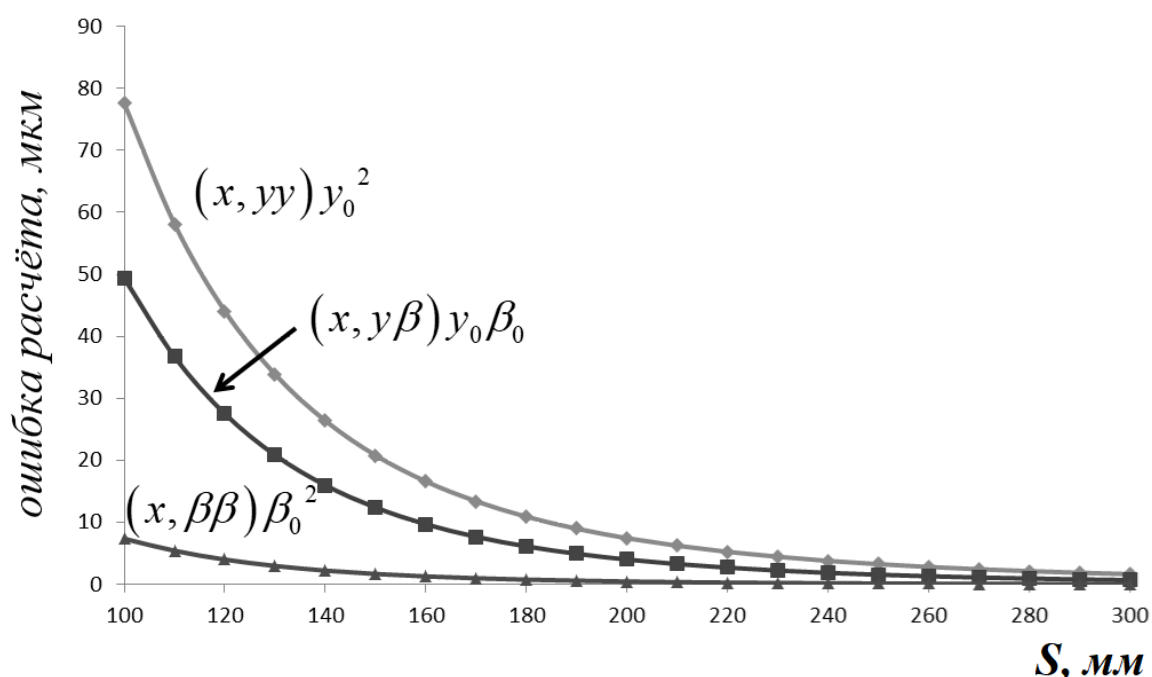


Рис 3. Оценка ошибки расчета программой ISIOS [A2], составляющих аксиальной aberrации по 1-му каналу призменного масс-анализатора [7].

Таким образом, традиционное линейное приближение метода полевых интегралов, удерживающее в асимптотическом ряде по степеням отношения  $d/r$  лишь линейные члены, в условиях малых габаритов магнита описывает аксиальные aberrации в краевых магнитных полях со значительными погрешностями и даёт недостоверную информацию об aberrационных характеристиках ИОС.

Приведенные на рис. 3 графики наглядно показывают, что при расчете аксиальных aberrаций ИОС, содержащих малогабаритные магнитные элементы с относительно большим межполюсным зазором, применение линейного приближения метода полевых интегралов может обесценить качество расчета aberrаций, если не контролировать величину погрешности расчета посредством объективного критерия.

Также отмечено, что расчет составляющих аксиальной aberrации, проведенный для 2-го канала при тех же значениях величины  $d/r$  показал на 1-2 порядка более удовлетворительные результаты по точности, что объясняется ортогональным выходом оси из магнитной призмы и,

соответственно, меньшим влиянием на величину аксиальной aberrации выходного краевого поля.

На основе тождества (1) и его следствий выведены следующие фундаментальные соотношения, связывающие координатные и угловые аксиальные aberrационные коэффициенты матрицы переноса на эффективной границе краевого поля:

$$\begin{aligned}(\alpha, y\alpha)^* \cdot ctg(\theta_0) - (x, y\alpha)^* / r &= [(\beta, y)^*]^2 / 2 \\(\alpha, y\beta)^* \cdot ctg(\theta_0) - (x, y\beta)^* / r &= (\beta, y)^* \cdot (\beta, \beta)^* \\(\alpha, \beta\beta)^* \cdot ctg(\theta_0) - (x, \beta\beta)^* / r &= [(\beta, \beta)^*]^2 - 1 / 2\end{aligned}$$

В третьей главе рассмотрен класс малогабаритных ионно-оптических систем на основе двумерных магнитных полей и цилиндрических конденсаторов в условиях угловой (рис. 4а) и координатной (рис. 4б) фокусировки ионов по энергетическому разбросу. В силу тождества (1), рассматриваемые системы характеризуются отсутствием аксиальных aberrаций 2-го порядка, что значительно облегчает решение задачи повышения пропускания данных ИОС при сохранении их разрешения.

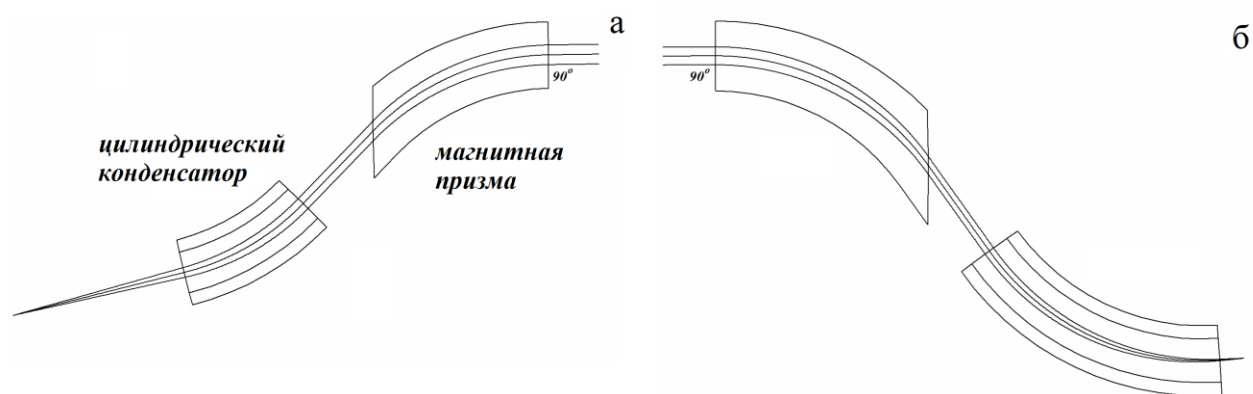


Рис. 4. Двухкаскадные варианты ионно-оптических систем с коррекцией аксиальной aberrации в ионно-оптических системах с двумерной призмой и цилиндрическим конденсатором, а) с угловой фокусировкой по энергии, б) с координатной фокусировкой по энергии.

Наряду с проблемой коррекции аксиальной aberrации, в данной главе рассмотрен вопрос коррекции сферической aberrации 2-го порядка в ионно-оптических системах с двойной фокусировкой по углу и энергии. Цилиндрические конденсаторы, применяемые в статических масс-анализаторах для компенсации в фокальной плоскости дисперсии ионов по энергетическому разбросу, являются источником значительной сферической aberrации второго порядка. Известен способ коррекции данной aberrации в секторных цилиндрических конденсаторах [А3], заключающийся в смещении нулевой эквипотенциали от оптической оси конденсатора. Однако прямая попытка применения данного метода к системам с двойной фокусировкой показала, что достигаемая этим коррекция сферической aberrации второго порядка вызывает нарушение фокусировки ионов по энергии. В связи с этим в диссертации предложена система электродов с управляющими потенциалами, которая позволила осуществить коррекцию сферической aberrации в более сложных условиях одновременной фокусировки ионов 1-го порядка по углу и энергии.

В качестве примера возможности практического применения найденных решений, в диссертации детально рассмотрена симметричная ионно-оптическая система, представляющая собой комбинацию компактной магнитной призмы и двух цилиндрических конденсаторов с расположением центров выходной щели источника ионов и приемной щели детектора на прямой линии (рис.2) [7]. Данная ионно-оптическая система включает два ионно-оптических канала, для каждого из которых выполняется условие фокусировки 1-го порядка по углу и энергии, что, согласно тождеству (1), обеспечивает отсутствие аксиальной aberrации в обоих каналах. Благодаря независимости важнейших аналитических характеристик указанных масс-анализаторов от габаритов магнитной призмы, достоинства традиционных статических секторным масс-анализаторов сохраняются при существенно меньших габарите и весе диспергирующего магнита.



Численное моделирование рассматриваемой ИОС проводилось в программе SIMION 8. Результаты расчёта показали, что при достижении коррекции сферической абберации 2-го порядка вклад сферической абберации 3-го порядка не превышал единиц *мкм* в широком диапазоне величин горизонтальных углов расходимости ионного пучка на выходе из источника ионов. Основной вклад в аксиальную абберацию вносили абберационные составляющие 4-го порядка, однако при этом величина этого вклада оказалась незначительной: при ширине магнитной призмы 100 мм их вклад не превысил 1 *мкм*. Результаты моделирования масс-спектрального пика показали, что предельная расчётная разрешающая способность данной ИОС, при ширине выходной щели источника 2 *мкм* и вертикальном аксептансе около 60 *мм·град* составляет порядка 150 000 на 10% уровне высоты пика, что не уступает соответствующим параметрам крупногабаритных масс-спектрометров.

В **четвёртой главе** описан эффективный способ снижения вклада аксиальной абберации в статических ИОС, в которых невозможно осуществить одновременную коррекцию всех трёх её коэффициентов 2-го порядка. Разработанная методика максимизации пропускания масс-анализатора основана на оптимальном согласовании вертикального аксептанса масс-анализатора с фазовым контуром, соответствующим заданному уровню аксиальной абберации. Несмотря на наглядность и физическую прозрачность самой идеи согласования эмиттансов<sup>2</sup> пучков заряженных частиц с аксептансами различных корпускулярно-оптических устройств, конструктивные и удобные в реализации алгоритмы расчёта и оптимизации систем транспортировки до настоящего фактически не отмечены в публикациях. Описанные в диссертации способ и алгоритм оптимального формирования вертикального аксептанса статического масс-

---

<sup>2</sup> Эммитанс - область фазового пространства начальных параметров ионов на выходе из источника

анализатора основаны на применении дополнительных, оптимально подобранных коллимирующих диафрагм, позволяющих увеличить вертикальную составляющую эмиттанса ионного тока исходного вещества и, благодаря этому, повысить интенсивность детектируемых линий масс-спектра без снижения разрешающей способности ИОС по массам.

В качестве практических примеров применения разработанной методики оптимизации аксептанса рассмотрены следующие ИОС:

- однокаскадный магнитный спектрограф [A4] на основе двумерного магнитного поля, с прямой линией фокусов и фокусировкой 2-го порядка по углу для всех регистрируемых мономассовых компонент ионного пучка.
- два варианта двухкаскадной ИОС типа Маттауха-Герцога с выведенной за пределы магнитного поля прямой линией фокусов, в которых цилиндрический или сферический конденсатор совместно с магнитным сектором обеспечивают фокусировку 1-го порядка по энергии и 2-го порядка по углу для всех регистрируемых линий масс-спектра.

Проведенное численное моделирование масс-спектральных пиков в программе COSY INFINITY [A5] показало, что оптимизация вертикального аксептанса рассмотренных вариантов ИОС позволила значительно увеличить их пропускание по сравнению с традиционным способом коллимации пучка ионов. Численное моделирование одиночных масс-спектральных пиков в широком диапазоне регистрируемых масс показало, что:

- Вариант ИОС типа Маттауха-Герцога с цилиндрическим конденсатором позволяет достичь величины вертикального аксептанса  $\sim 0.45 \cdot R_i \text{ мм} \cdot \text{мрад}$ , где  $R_i$  - радиус оптической оси в магнитном поле, выраженный в мм, при ширине выходной щели источника 80 мкм. В сравнении с традиционной коллимацией пучка ионов путем уменьшения вертикальной апертурной диафрагмы и вертикального размера выходной щели, полученный выигрыш по пропусканию масс-спектрографа при той же разрешающей способности составил 11.5 раз.

- Вариант ИОС типа Маттауха-Герцога со сферическим конденсатором (рис.5) позволяет достичь величины вертикального аксептанса  $\sim 0.61 \cdot R_i \text{ мм} \cdot \text{мрад}$  при ширине выходной щели источника 160 мкм. В сравнении с традиционной коллимацией пучка ионов, выигрыш по пропусканию масс-спектрографа при той же разрешающей способности составил более чем в 5 раз.

### **Основные результаты и выводы:**

В результате проведенных в рамках поставленных задач исследований найдены эффективные решения, позволяющие значительно улучшить основные параметры статических масс-анализаторов - их пропускание и разрешающую способность, при малых габаритах магнитного элемента.

1. Впервые найдены аналитические тождества, связывающие угловые и линейные компоненты абберационных коэффициентов, служащие физически обоснованными критериями точности расчета абберационных искажений траекторий ионов в краевых магнитных полях статических масс-анализаторов. Данные критерии показали некорректность применения традиционного линейного приближения метода полевых интегралов для расчёта абберационных искажений траекторий в условиях малых габаритов магнитного элемента. Показано, что погрешность данного приближения в указанных условиях может превышать ширину выходной щели источника ионов, соответствующую требуемой величине разрешающей способности масс-анализатора.

2. Исследования ионно-оптических систем с двойной фокусировкой, включающих в себя двумерную магнитную призму и секторные цилиндрические конденсаторы, показали, что в них возможна полная коррекция всех составляющих аксиальной абберации 2-го порядка и коррекция сферической абберации 2-го порядка.

3. Расчёт и численное моделирование малогабаритного трёхкаскадного масс-анализатора с коррекцией сферической абберации и всех компонент аксиальной абберации 2-го порядка показали возможность достижения его разрешающей способности порядка 150 000 при абсолютной чувствительности, не уступающей крупногабаритным аналогам.
4. Разработана оригинальная методика оптимизации вертикального аксептанса ионно-оптических систем СМА с неустранимой аксиальной абберацией 2-го порядка, позволяющая значительно повысить пропускание таких СМА без ухудшения их разрешающей способности.
5. Предложены оригинальные варианты ИОС типа Маттауха-Герцога с расположенным перед секторным магнитом цилиндрическим или сферическим конденсатором. Данные ИОС обеспечивают фокусировку ионов по углу 2-го порядка и по энергии 1-го порядка во всех точках рабочей области линии фокусов. Проведена оптимизация коллимирующей системы, формирующей вертикальный аксептанс данных ИОС, позволившая максимизировать пропускание ионов во всем рабочем диапазоне массовых чисел.

#### **Публикации соискателя по теме диссертации:**

1. Gall L. N., Antonov A. S., Gall N. R., Yakushev E. M., Nazarenko L. M., Semenov A. A. A prism mass-spectrometer for isotope analysis of hydrogen–helium mixtures // Technical physics letters. 2018. Vol. 44, no 7. P. 646-649.
2. Antonov A. S., Berdnikov A. S., Gall L. N., Sachenko V. D. Controlling the resolution of static mass spectrometers using intermediate slit diaphragms // Journal of Analytical Chemistry. 2019. Vol.74, no 14. P. 1405-1411.
3. Sachenko V. D., Antonov A. S., Gall L. N., Berdnikov A. S. Optimization of

vertical acceptance of the static mass analyzer // *Journal of Analytical Chemistry*. 2020. Vol. 75, no. 13. P. 1660–1664.

4. Sachenko V. D., Yakushev E. M., Nazarenko L. M., Antonov A. S., Gall L. N., Gall N. R., Berdnikov A. S. An ion-optical circuit of a small-sized mass-spectrometer for the isotope analysis of hydrogen–helium mixtures // *Journal of Analytical Chemistry*. 2020. Vol. 75, no. 13. P. 1693–1699.

5. Sachenko V. D., Antonov A. S., Gall L. N., Berdnikov A. S. Geometric aspects of optimizing the acceptance of a static mass analyzer // *Journal of Analytical Chemistry*. 2020. Vol. 75, no.14. P. 1781–1789.

6. Антонов А. С., Бердников А. С., Галль Л. Н., Саченко В. Д., Управление разрешением статических масс-спектрометров с помощью промежуточных щелевых диафрагм // *Масс-спектрометрия*. 2018., Vol. 15, no 4. P. 254-261.

7. Саченко В. Д., Якушев Е. М., Назаренко Л. М., Антонов А. С., Галль Л. Н., Галль Н. Р., Бердников А. С. Ионно-оптическая схема малогабаритного масс-спектрометра для изотопного анализа водородно-гелиевых смесей // *Масс-спектрометрия*. 2019. Vol. 16, no 2. P. 146-155.

8. Саченко В. Д., Антонов А. С., Галль Л. Н., Бердников А. С. Оптимизация вертикального аксептанса статического масс-анализатора // *Масс-спектрометрия*. 2019. Vol. 16, no 2. P. 110-115.

9. Саченко В. Д., Антонов А. С., Галль Л. Н., Бердников А. С. Геометрические аспекты оптимизации аксептанса статического масс-анализатора // *Масс-спектрометрия*. 2020. Vol. 17, no 1. P. 16-25.

10. Саченко В. Д., Антонов А. С., Критерий корректности определения траекторий ионов в краевых магнитных полях статических секторных масс-анализаторах // *Масс-спектрометрия*. 2020. Vol. 17, no 3. P. 197-201.

11. Галль Л. Н., Семенов А. А., Кудрявцев В. Н., Лизунов А. В., Лесина И. Г., Иванов Б. В., Букин А. Н., Штань А. С., Кирьянов Г. Е., Антонов А. С.,

Галль Н. Р. Новые решения в масс-спектрометрическом изотопном анализе водородно-гелиевых смесей. Условие получения достоверных данных // Научное приборостроение. 2016. Vol. 26, no 3. P. 24-34.

**12.** Kogan V. T., Chichagov Yu. V., Bogdanov A. A., Antonov A. S., Tubol'tsev Yu. V., Aruev N. N., Lebedev D. S. Interfacing of a Coordinate-Sensitive Detector Based on Charge-Coupled Devices for Recording Ions with a Portable Static Mass Spectrograph // Technical Physics Letters. 2018. Vol 44, no 7. P. 599–601.

### **Публикации в тезисах конференций:**

**13.** Якушев Е. М., Галль Л. Н., Антонов А. С., Назаренко Л. М., Семенов А. А., Галль Н. Р. Новая схема призменного масс-анализатора для изотопного анализа водородно-гелиевых смесей // Восьмой съезд ВМСО и VII Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и её прикладные проблемы», 09-13 октября 2017 г., С. 32.

**14.** Антонов А. С., Саченко В. Д., Галль Л. Н., Якушев Е. М. Малогабаритный трёхкаскадный призменный масс-спектрометр высокого разрешения // Девятый съезд ВМСО и VIII Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и её прикладные проблемы», 14-18 октября 2019 г., С. 109.

**15.** Саченко В. Д., Антонов А. С. Критерий оценки приближения асимптотического ряда по степеням отношения межполюсного зазора к радиусу оптической оси в краевом магнитном поле // Девятый съезд ВМСО и VIII Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и её прикладные проблемы», 14-18 октября 2019 г., С. 125.

**16.** Громов И. А., Галль Л. Н., Масюкевич С. В., Самсонова Н. С., Антонов А. С., Якушев Е. М., Семёнов А. А., Лизунов А. В., Беляева О. А., Галль Н. Р. Специализированный масс-спектрометр для определения изотопного состава водородно-гелиевых смесей на базе призменного масс-анализатора //

Девятый съезд ВМСО и VIII Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и её прикладные проблемы», 14-18 октября 2019 г., С. 41.

**Цитируемая литература:**

- A1.** Wollnik H. Optics of Charged Particles // Orlando: Elsevier, Academic Press. 1987. 293 P.
- A2.** Yavor M. I., Berdnikov A. S. ISIOS: a program to calculate imperfect static charged particle optical systems // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. 1995. Vol. 363, no 1-2. P. 416-422.
- A3.** Yavor M. I., Belov, V. D., and Pomozov, T. V. Fringing field correction of the second order angular aberration in sector field electron energy analyzers // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2008. Vol. 168, no 1–3. P. 29–33.
- A4.** Livingood J. J. The optics of dipole magnets // Academic Press, New York and London. 1969.
- A5.** Berz M. Computational aspects of optics design and simulation: COSY INFINITY // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. 1990. Vol. 298. P. 473-479.