

УДК 621.384.4

РАЗРАБОТКА ИОННО-ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ИСТОЧНИКА ИОНОВ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА МТИ-350Г

А.Б.Малеев, А.В.Сапрыгин, В.А.Калашников, Ю.Н.Залесов, Л.Н.Галль*, В.Д.Саченко*, А.С.Бердников*, Ю.И.Хасин*, В.А.Леднев**

Уральский электрохимический комбинат
624130, Новоуральск Свердловской обл., Дзержинского, 2
czi@ueir.ru

*Институт аналитического приборостроения Российской академии наук
198103, Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

**ЗАО "СКБ "Спектрон-Аналит"
198103, Санкт-Петербург, Рижский пр., 26

Описаны основные этапы и вопросы проектирования ионно-оптической системы масс-спектрометра МТИ-350Г, расчета ионно-оптических систем источника ионов и анализатора, вопросы их согласования. Рассмотрен алгоритм применения современного программного обеспечения при проектировании ионно-оптических систем масс-спектрометров.

Масс-спектрометр для анализа изотопного состава урана МТИ-350Г стал первым из намеченного к разработке комплекса специализированных приборов различного назначения, объединенных едиными конструктивными решениями на основе проблемно-ориентированной модульной компоновки [1]. Единой частью для всего ряда приборов стала базовая аналитическая часть, а различные исполнения приборов отличаются специализированными источниками ионов, приемниками ионов и системами, обеспечивающими их питание и функциональность.

Разработка ионно-оптической схемы (далее – ИОС) масс-спектрометра МТИ-350Г состояла из двух задач: создания ИОС масс-анализатора и ИОС источника ионов, причем согласование этих двух ИОС происходит на основе концепции фазового пространства [2, 3, 4]. Вследствие моноэнергетичности и анизотропности ионного пучка, используемого в масс-спектрометрах с магнитным секторным анализатором, рассмотрение общего случая движения ионов в шестимерном фазовом пространстве координат и импульсов может быть преобразовано в рассмотрение движения в двумерных проекциях координата-угол (двумерных

эмиттансах в горизонтальной и вертикальной плоскости). Эмиттанс источника ионов, представленный линейным размером Z и углом расходимости A в горизонтальной плоскости и линейным размером Y и углом расходимости B в вертикальной плоскости, должен быть согласован с соответствующими параметрами аксептанса анализатора, что обеспечивает прохождение пучка ионов из источника через анализатор на приемник ионов с минимальными потерями.

Тогда как ионно-оптическая схема масс-анализатора разрабатывалась как общая часть всей серии статических масс-спектрометров, ионно-оптическая схема источника ионов для МТИ-350Г учитывала особенности получения, формирования и ускорения пучка именно для задач анализа изотопного анализа в газовой фазе гексафторида урана (далее – ГФУ). В соответствии с техническим заданием был разработан однокаскадный секторный магнитный анализатор с углом отклонения 90 градусов и радиусом центральной траектории 250 мм, обеспечивающий следующие показатели масс-спектрометра: разрешающая способность – не менее 750, дисперсия – не менее 7 мм/1%. Пропускание масс-анализатора близко к 100 %, форма входной и выходной гра-

ниц магнита – криволинейная, наклон линии фокусов 45° по отношению к оптической оси. Расчет ИОС анализатора проводился методом математического моделирования при помощи разработанного в ИАНП программного обеспечения на базе программы ISIOS при моделировании прохождения траекторий ионов внутри системы на

основе абберационной модели с учетом абберационных коэффициентов вплоть до третьего порядка. По результатам расчетов был изготовлен макет анализатора, на котором были окончательно проверены и оптимизированы параметры, а также проведен учет влияния краевых полей магнита. Схема ИОС анализатора приведена на рис. 1.

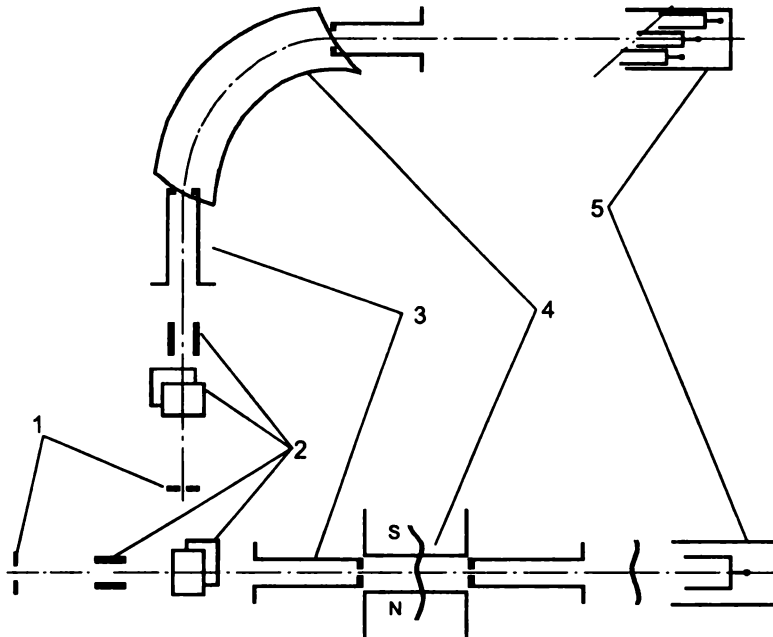


Рис.1. Ионно-оптическая схема анализатора:

1 – выходная щель источника ионов, 2 – блок корректирующих линз,
3 – апертурная диафрагма, 4 – электромагнит анализатора, 5 – приемник ионов

Полученный в ходе расчетов, моделирования и оптимизации аксептанс анализатора задал границы, в пределах которых должен был уместиться эмиттанс разрабатываемого источника ионов. Эти границы описываются следующими выражениями:

- в горизонтальной плоскости:

$$- 10 < A < 10; \quad (1)$$

$$- 1 < (z/Z+a/A) < 1 \quad (2)$$

где $Z = -0,1$ мм; $A = 0,011460^\circ$;

- в вертикальной плоскости:

$$- 2,9 \text{ мм} < y < 2,9 \text{ мм}; \quad (3)$$

$$- 0,3440^\circ < b < 0,344^\circ. \quad (4)$$

Ионизация ГФУ происходит при помощи электронного удара в области, образуемой пересечением пучка электронов и молекулярного пучка ГФУ. Далее из полученных ионов при помощи ИОС источника ионов формируется пучок, направляемый в анализатор. Формирование пучка осуществляется при помощи системы электронных линз, обладающих фокусирующим действием отдельно в вертикальном и горизонтальном направлении. В состав ИОС источника ионов вош-

ли следующие узлы:

- ионизационная камера с вытягивающим и выталкивающим электродами;
- линза горизонтальной фокусировки, формирующая эмиттанс ионного пучка в горизонтальной плоскости и фокусирующая ионы в плоскость выходной щели источника;
- первая и вторая линзы вертикальной фокусировки.

Схема источника ИОС источника ионов приведена на рис. 2.

Разработка ИОС источника ионов велась при помощи специализированного программного обеспечения SIMION 3D версии 7.0, обладающего широкими возможностями расчетов ионно-оптических систем. Программа позволяет задавать сложную конфигурацию электродов, рассчитывать распределение потенциала электростатического поля на основе метода конечных разностей, а затем определять траектории заряженных частиц, попадающих в моделируемую ИОС. Но, несмотря на широкие возможности, программа обладает рядом недостатков, осложняющих ее использование. Первым из недостатков является сложность и утомительность задания большого

числа начальных условий (координат, энергий, углов и др.) для заряженных частиц, вводимых в модель. Дело в том, что для качественного моделирования источника необходимо формировать массив начальных условий для достаточно большого числа частиц, измеряющегося десятками тысяч. Трудно, почти нереально задать такое количество данных вручную, как это предусмотрено разработчиками программы. Однако открытый формат данных, используемой программой SIMION, позволил решить эту проблему путем создания специализированного модуля, задающего параметры необходимого количества заряженных частиц, исходя из

заданных диапазонов значений. Программный модуль GENIO, разработанный в ИАНП, позволяет создавать ансамбль начальных координат, скоростей, масс и энергий частиц, выбираемых либо случайным образом, либо с фиксированным шагом в заданном диапазоне. Кроме того, задаваемые ограничения по каким-либо параметрам позволяют достаточно точно моделировать специфические распределения, свойственные определенным моделируемым распределениям ионов. Получаемый в результате работы программы файл служит исходным файлом начальных данных, используемым в дальнейшем программой SIMION.

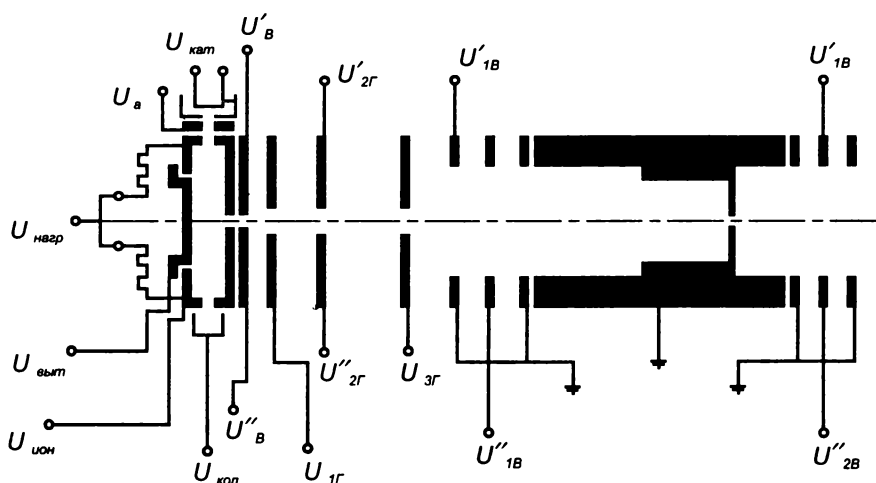


Рис.2. Схема ИОС источника ионов масс-спектрометра МТИ-350Г

Другим недостатком программы SIMION является отсутствие возможности представления данных в явном виде в координатах фазового пространства. Пользовательский интерфейс, созданный разработчиками, позволяет лишь обозначить геометрически траектории частиц в проекциях трехмерной модели, не давая возможности представления выходных параметров в виде двумерных эмиттансов. Для решения этой проблемы в ИАНП был разработан модуль SIMDRAW, определяющий координаты, углы и скорости частиц в любой заданной плоскости, пересекающей оптическую ось модели. На основе данных, рассчитанных SIMION, программа SIMDRAW позволяет строить сечения эмиттанса пучка, накладывая ограничения по аксептансу, полученные из расчета анализатора, и рассчитывать долю частиц, попадающих в заданный диапазон углов и координат. Указанные представления результатов расчета значительно облегчают и ускоряют поиск и количественную оценку оптимальности разрабатываемой системы.

Таким образом, становится возможным полное моделирование ионно-оптических систем масс-спектрометра при использовании следующей связки программ. Исходя из показателей, определенных техническим заданием на масс-спектрометр, задаются параметры, производится расчет и оптимизация ИОС анализатора при помощи программного обеспечения на основе ISIOS. Полученные в результате расчетов двумерные аксептансы анализатора определяют границы двумерных эмиттансов ИОС источника ионов. При использовании программы GENIO создается массив данных, описывающих большое число заряженных частиц, характеристики которых соответствуют ионам, получаемым в ионизационной камере. Затем указанный массив передается в программу SIMION для расчета прохождения ионов через моделируемую ИОС источника ионов. Полученные результаты расчета передаются в SIMDRAW для анализа эмиттанса моделируемой ИОС источника ионов и проверки на соответствие аксептансу анализатора. Далее

производится оптимизация ИОС источника по критерию наименьших потерь ионов внутри ИОС источника ионов и максимального совпадения эмиттанса с аксептансом.

Используя указанную комбинацию программных средств, была разработана ионно-оптическая схема источника ионов, наилучшим образом согласованная с ИОС анализатора, что позволило в короткий срок создать масс-спектрометр с отличными характеристиками, исключая трудоемкие и продолжительные операции моделиро-

вания и оптимизации конструкции ИОС. Испытания опытного образца масс-спектрометра продемонстрировали высокую степень совпадения расчетов с экспериментальными данными и показали высокую достоверность использованных алгоритмов и методов моделирования.

Двумерные эмиттансы разработанного источника ионов представлены на рис.3 и рис.4. Более подробно методика и программное обеспечение, использованное при разработке источника ионов, описаны в [5].

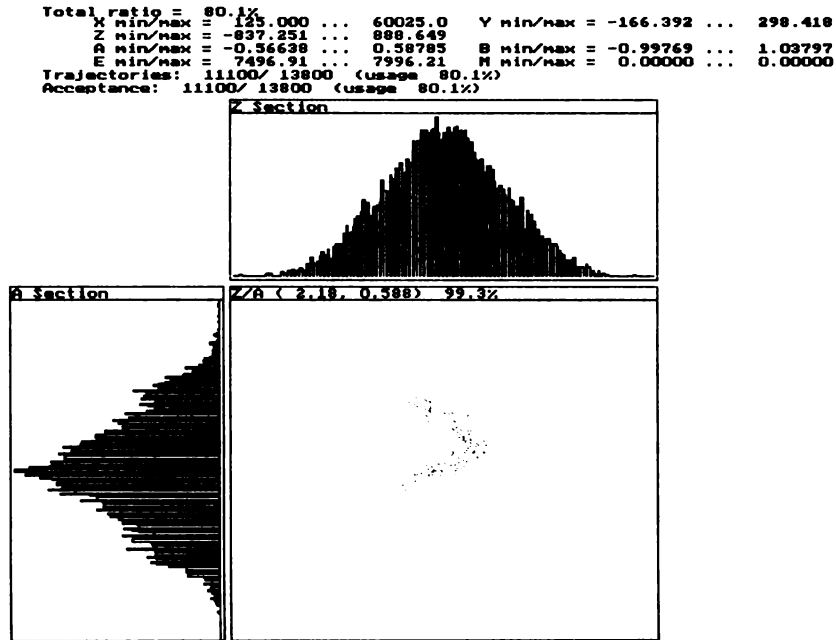


Рис.3. Распределение траекторий и сечение эмиттанса пучка ионов в вертикальной плоскости

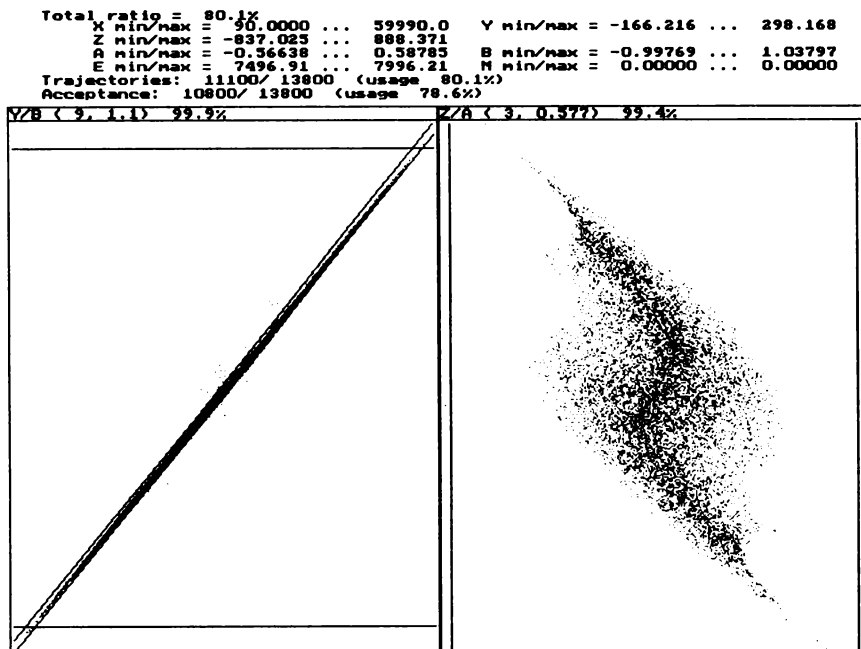


Рис.4. Эмиттансы пучка ионов в горизонтальной и вертикальной плоскости и их согласование с аксептансом анализатора

После разработки источника ионов были приняты дополнительные меры, направленные на уменьшение влияния мешающих и дестабилизирующих факторов. На входе анализатора была размещена апертурная диафрагма, назначение которой – исключить попадание в анализатор ионов, возникших вне области распространения молекулярного пучка, и способных ухудшить характеристики масс-спектрометра (поз. 3 на рис. 1). Между выходной щелью источника ионов и входной диафрагмой анализатора были установлены корректирующие линзы, служащие для компенсации отклонения от оптической оси пучка ионов, исходящего из источника (поз. 2 на рис. 1).

Эффективность разработанной ионно-оптической

системы была подтверждена высокими характеристиками масс-спектрометра МТИ-350Г, по ряду параметров (дисперсия, разрешающая способность, изотопическая и абсолютная чувствительность) превышающими соответствующие показатели аналогов: МАТ-281 производства Finnigan МАТ (Германия) и МИ-1201АГМ-01 производства ОАО "Selmi" (Украина). Высокие характеристики масс-спектрометра МТИ-350Г и их соответствие техническому заданию были подтверждены в ходе Государственных приемочных испытаний. Успешно проведены испытания для целей утверждения типа средства измерения, получен сертификат. В настоящее время на УЭЖК готовится выпуск первой партии масс-спектрометров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Техническое задание на ОКР "Разработка масс-спектрометрического оборудования и организация его выпуска для оснащения предприятий отрасли. Разработка масс-спектрометра для изотопного анализа урана в газовой фазе" / Разраб. ВНИИТФА. Утв. Иванов В. Б. 08.09.99. М., 1999. 12 с.
2. Бенфорд А. Транспортировка пучков заряженных частиц / Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1969. 148 с.
3. Галль Л.Н. Об отборе ионов из источника ионов масс-спектрометра // ЖТФ. 1977. Т.47, №10. С.2198- 2203.
4. Галль Л.Н.. О критерии оптимизации источников ионов с ионизацией электронным ударом // ЖТФ. 1982. Т.52, №10. С.2086-2092.
5. Хасин Ю.И., Бердников А.С., Галль Л.Н. Источник ионов для масс-спектрометрического изотопного анализа газов. II Теоретическое сравнение источника ионов для изотопного анализа методом математического моделирования // Научное приборостроение. 2002. Т.12, №1. С.30-34

* * * * *

ION OPTIC SISTEM DEVELOPMENT FOR ION SOURCE OF MTI-350G MASS SPEKTROMETER
 A.B.Maleev, A.V.Saprygin, V.A.Kalashnikov, Yu.N.Zalesov, L.N.Gall, V.D.Sachenko, A.S.Berdnikov,
 Yu.I.Khasin, V.A.Lednyov

The basic stages and principles of ion optic system development, ion source and mass analyzer ion optic's calculations for the mass spectrometer MTI-350G are described. The algorithm of modern software application for mass spectrometers ion optic systems development is considered.