

РАСЧЕТ НЕЛИНЕЙНОГО РЕЖИМА РАБОТЫ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА
РЕДХЕДА

С.И. Фадеев, К.В. Шведова

Рассматривается нелинейный режим работы радиочастотного масс-спектрометра типа Редхеда с целью выбора оптимальной конструкции прибора.

В ряде случаев требуется, чтобы прибор для масс-спектрометрического исследования вещества сочетал хорошую разрешающую способность с портативностью. Этим качеством обладает радиочастотный масс-спектрометр (РМС) типа Редхеда [1]. Имеются работы экспериментального и теоретического характера, посвященные выяснению предельных значений разрешающей способности и коэффициента полезного действия РМС. В настоящее время хорошо изучен линейный режим работы РМС (теория "малых сигналов"), когда решение задачи можно представить в аналитическом виде. Однако, как это следует из [2], наиболее выгодна конструкция прибора, работающего в нелинейном режиме (теория "больших сигналов").

Исследование нелинейного режима связано с некоторыми вычислительными трудностями, в том числе с большими затратами машинного времени. По-видимому, последним объясняется отсутствие достаточно полных сведений по теории "больших сигналов". Известны лишь результаты численного расчета РМС, анализатор которого состоит из пяти секций (см. [2]). Ниже будет показана-

но, что выбор такого числа секций оправдан только при близких к единице значениях параметра \mathcal{K} , характеризующего степень нелинейности и равного отношению максимальной энергии электростатического поля между сетками анализатора к кинетической энергии заряженной частицы, влетающей в анализатор.

В связи с математической постановкой задачи заметим, что теоретически предсказанные величины разрешающей способности и коэффициента полезного действия никак не связаны с такими важными характеристиками прибора, как его вес, габариты и т.д. В данном случае на основании только расчета математической модели РМС нельзя выбрать оптимальный для практики вариант. Если параметры, определяемые энергетическими характеристиками прибора (в том числе и параметр \mathcal{K}), заданы, то можно получить более высокую разрешающую способность, увеличив число секций \mathcal{N} . Но увеличение числа секций влечет уменьшение коэффициента полезного действия, а прибор становится более громоздким. В свою очередь выбор \mathcal{K} накладывает ограничение снизу на расстояние между сетками анализатора и т.д. Основным результатом теории "больших сигналов" состоит в том, что для каждого выбранного режима работы РМС существует практически оптимальное число секций анализатора, начиная с которого разрешающая способность прибора возрастает незначительно, то есть дальнейшее увеличение числа секций становится невыгодным.

В предлагаемой работе приводятся результаты расчетов нескольких режимов: $\mathcal{K} = 0,3; 0,5; 0,7; 1$; число секций изменялось в пределах: $\mathcal{N} = 1 + 10$. Пользуясь этим набором решений, нетрудно предвидеть результаты и при других значениях $\mathcal{K} < 1$.

В отличие от [2], мы ограничились вычислением разрешающей способности при "нулевом фоне", то есть величина потенциального барьера выбиралась так, что на приемное устройство могли попасть частицы только одного сорта. Таким образом, мы получили теоретическую оценку снизу для разрешающей способности РМС, а также оценку снизу для коэффициента полезного действия. При этом объем вычислений одного варианта существенно меньше, чем в [2], и в то же время оценки позволяют достаточно хорошо судить о возможностях РМС.

Для удобства и более полного изложения результатов по расчету РМС приведем краткое описание принципа действия при-

бора, математическую постановку задачи и основные уравнения теории "больших сигналов".

1. РМС - прибор, который различает по массам одинаково заряженные частицы, воздействуя на них электростатическим полем, квазистационарно зависящим от времени. При этом решаются две основные проблемы:

1. Пусть имеется смесь одинаково заряженных частиц. Требуется определить, из частиц каких масс состоит эта смесь.

2. Из смеси одинаково заряженных частиц выделить частицы определенной массы.

В первом случае основное внимание уделяется разрешающей способности РМС, в то время как коэффициент полезного действия только должен удовлетворять ограничению, порождаемому чувствительностью прибора, то есть быть не слишком низким. Во втором случае исследователь заинтересован в выборе такого варианта, при котором, помимо разделения частиц по массам, был бы как можно выше коэффициент полезного действия.

Основные элементы конструкции РМС - источник ионов, анализатор и приемное устройство - схематически изображены на рис. 1. x)

Анализатор состоит из n сеток, параллельных друг другу. Расстояния между сетками одинаковы и равны ℓ . На сетках с четными номерами, начиная от 0 (на схеме эти сетки изображены сплошными линиями), поддерживается постоянный потенциал V_0 , а на сетках с нечетными номерами (пунктирные линии) - переменный потенциал $V(t)$, где t - время. В дальнейшем ограничимся рассмотрением только такой зависимости V от времени:

$$V = V_0 [1 - k \sin(\omega t + \varphi_0)], \quad (1)$$

где ω - частота, φ_0 - фазовый угол влета иона в анализатор, k - некоторая постоянная, которая характеризует максимальную величину модуля разности потенциалов $|V - V_0|$, равную kV_0 . Сетки с номерами $2i, 2i+1, 2i+2, i=0,1,2,\dots$, образуют секцию с номером $\mathcal{N} = i+1$. Так, на рис. 1 изображен анализатор из 3 секций. Источник ионов и приемное устройство имеют соответственно постоянные потенциалы \bar{V} и \bar{V}' , причем $\bar{V} > V_0$ и $\bar{V}' > V_0$.

Расчет РМС наиболее прост, если его конструкция позволя-

x) Все рисунки даны в приложении.

ет описывать процесс по одномерной, квазистационарной теории. Будем предполагать, что а) расстояние между сетками, а также расстояния между источником ионов и анализатором (ab), анализатором и приемным устройством (cd) много меньше поперечного размера сетки - радиуса круга ρ (например, $\frac{e^2}{\rho^2} \ll 1$); в) толщина сеток много меньше ℓ , а ячеистая структура сеток такова, что её влияние на движение иона пренебрежимо мало, если кинетическая энергия иона больше некоторой величины; с) ионы имеют прямолинейную траекторию, перпендикулярную к плоскости сеток; d) частота ω такова, что $\omega^2 \ell^2 / c^2 \ll 1$, где c - скорость света, ℓ - характерная протяженность прибора.

Если перечисленные условия выполнены, то распределение потенциала между сетками и на участках ab и cd пропорционально линейной координате x и, кроме того, в анализаторе параметрически зависит от времени. На рис. I (в нижней половине) изображено распределение потенциала в два характерных момента времени.

При этом закон движения заряженных частиц описывается элементарно, так как сила, действующая на ион, либо постоянна (на ab и cd), либо просто пропорциональна $\sin(\omega t + \varphi_i)$, где φ_i - фазовый угол, при котором ион вылетает из i -ой сетки (плотность потока заряженных частиц такова, что взаимодействием частиц можно пренебречь). Решения соответствующих дифференциальных уравнений второго порядка относительно x легко записываются в конечном виде.

Заряженные частицы, образующиеся в ионном источнике, благодаря разности потенциалов $\bar{V} - V_0$, разгоняются на ab от состояния покоя (по предположению) до скорости

$$u_0 = \sqrt{2 \frac{q}{m} (\bar{V} - V_0)}, \quad (2)$$

где q - заряд, m - масса иона.

Отсюда следует, что приобретаемая ими кинетическая энергия будет

$$W_0 = q(\bar{V} - V_0), \quad (3)$$

то есть все частицы, независимо от массы обладают при влете в анализатор одной и той же кинетической энергией, если их заряды равны.

В анализаторе на заряженную частицу действует меняющаяся со временем сила, которая ускоряет или замедляет движение иона. При пролете иона через сетку направление действия силы меняется на противоположное, так как производная потенциала по x , абсолютная величина которой в фиксированный момент времени в анализаторе одинакова, на сетке меняет знак. Изменение кинетической энергии частицы, пролетевшей анализатор, при прочих равных условиях зависит от массы частицы и фазового угла влета в анализатор. Оказывается, что при фиксированных значениях ℓ , u_0 , W_0 , kV_0 и числе секций N , входящих в условие задачи, для частицы данной массы m_* можно указать такую частоту ω_* и фазовый угол влета в анализатор $(\varphi_0)_*$, что по сравнению с кинетической энергией других частиц, пролетевших анализатор, кинетическая энергия частицы данной массы окажется наибольшей. Поскольку распределение масс дискретно, то существуют некоторые окрестности ω_* и $(\varphi_0)_*$, для которых вышесказанное остается справедливым.

Пусть разность потенциалов $\bar{V} - V_0$ выбрана так, что энергия "потенциального барьера" $q(\bar{V} - V_0)$ меньше максимальной кинетической энергии частицы данной массы, вылетающей из анализатора, но больше кинетической энергии частицы, масса которой наиболее близка к m_* , причем частота равна ω_* . Тогда на приемное устройство будут попадать только частицы данной массы. Все же остальные частицы, в том числе и частицы данной массы, которые влетели в анализатор при значениях φ_0 , не принадлежащих к окрестности $(\varphi_0)_*$, не смогут преодолеть потенциального барьера. Упомянутые окрестности ω_* и $(\varphi_0)_*$ определяют соответственно разрешающую способность и коэффициент полезного действия прибора.

2. Закон движения частицы массы m между двумя сетками с номерами i и $i+1$ описывается уравнением

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = k \frac{qV_0}{\ell} \sin(\omega t + \varphi_i) \quad (4)$$

с начальными условиями:

$$x=0, \quad \frac{dx}{dt} = u_i \quad \text{при } t=0, \quad (i=0, 1, \dots, 2N-1), \quad (5)$$

где u_i - скорость, при которой частица пролетает i -ю сетку.

Выберем в качестве масштаба длины и времени соответственно l и $l^{-1}u_0$. В безразмерных переменных ξ и τ

$$x = l\xi, \quad t = \frac{l}{u_0}\tau, \quad (6)$$

уравнение (4) и начальные условия (5) примут вид:

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2} = \frac{1}{2} \mathcal{K} \sin(\varphi_i + \alpha\tau), \quad (7)$$

$$\xi = 0, \quad u = \frac{d\xi}{d\tau} = u_i \text{ при } \tau = 0, \quad (8)$$

где

$$\mathcal{K} = \frac{k\varphi W_0}{W_0} = \frac{kV}{V - V_0}, \quad \alpha = \frac{\omega l}{u_0} \quad (9)$$

Проинтегрировав (7) с учетом (8), получим:

$$\left. \begin{aligned} u(\tau) &= \frac{d\xi}{d\tau} = u_i + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} [\cos\varphi_i - \cos(\varphi_i + \alpha\tau)], \\ \xi(\tau) &= (u_i + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} \cos\varphi_i)\tau + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha^2} [\sin\varphi_i - \sin(\varphi_i + \alpha\tau)]. \end{aligned} \right\} (10)$$

Безразмерная скорость частицы на $(i+1)$ -ой сетке, то есть при $\xi = 1$ ($x = l$), будет

$$u_{i+1} = u_i + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} [\cos\varphi_i - \cos(\varphi_i + \alpha\tau_{i+1})], \quad (11)$$

где τ_{i+1} - корень трансцендентного уравнения

$$1 = (u_i + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} \cos\varphi_i)\tau_{i+1} + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha^2} [\sin\varphi_i - \sin(\varphi_i + \alpha\tau_{i+1})]. \quad (12)$$

Зная τ_{i+1} и u_{i+1} , можем найти u_{i+2} из системы равенств, аналогичной (11), (12). Так как при переходе через сетку правая часть (7) меняет знак, то начальная фаза φ_{i+1} частицы, вылетающей из $(i+1)$ -ой сетки, связана с φ_i соотношением:

$$\varphi_{i+1} = \varphi_i + \alpha\tau_{i+1} + \pi. \quad (13)$$

и т.д.

Из выбора масштабов следует, что $u_0 = 1$, а

$$W_i = \frac{W_i}{W_0} = \frac{m\mathcal{U}_i^2}{2} / \frac{m\mathcal{U}_0^2}{2} = u_i^2 \quad (14)$$

- кинетическая энергия частицы в момент прилета i -ой сетки, относенная к энергии разгоняющего электромагнитического поля.

Таким образом, система равенств (11)-(13) в конечном счете определяет u_{2N} на выходе из анализатора и, следовательно, $W_{2N} = u_{2N}^2$ как функции четырех параметров: φ_0 , α , N и \mathcal{K} .

Как уже упоминалось, мы можем вычислить на каждом i -ом шаге значение u_{i+1} , предварительно решив трансцендентное относительно τ_{i+1} уравнение (12). Выясним, при каких значениях \mathcal{K} , α , u_i и φ существует решение этого уравнения.

По физическому смыслу задачи интерес представляют только те решения (12), которые соответствуют условию:

$$u(\tau) \geq 0 \quad \text{при} \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad (15)$$

причем знак равенства возможен только при $\xi = 0$ и $\xi = 1$. Условие (15) означает, что увеличение функции $\xi(\tau)$, определенной в (10), от 0 до 1 должно происходить монотонно. Следовательно, среди всех корней трансцендентного уравнения (12) мы должны выбрать наименьший положительный корень τ_{i+1} , так что $\xi(\tau_{i+1}) = 1$.

Введем в рассмотрение функцию:

$$\mathcal{F}(\tau) = \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} [\alpha\varphi_i\tau + \sin\varphi_i - \sin(\varphi_i + \alpha\tau)] - 1 = \xi(\tau) - 1, \quad (16)$$

$$\mathcal{F}(0) = -1, \quad \mathcal{F}(\tau_{i+1}) = 0,$$

$$\frac{d\mathcal{F}}{d\tau} = u(\tau) = \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} [\varphi_i - \cos(\varphi_i + \alpha\tau)], \quad (17)$$

где

$$\varphi_i = \frac{2\alpha u_i}{\mathcal{K}} + \cos\varphi_i. \quad (18)$$

Рассмотрим возможные случаи.

а) Параметры \mathcal{K} , α , u_i и φ_i таковы, что $\varphi_i > 1$. Тогда из (17) следует, что при всех значениях $\tau > 0$ и $u(\tau) > 0$ функция $\mathcal{F}(\tau)$ с увеличением τ монотонно возрастает от значения $\mathcal{F}(0) = -1$, и, таким образом, существует единственное значение $\tau = \tau_{i+1}$, при котором $\mathcal{F}(\tau_{i+1}) = 0$. За левую и правую границы корня можно взять значения:

$$\tau_{i+1}' = \frac{1 - \frac{\mathcal{K}}{2\alpha^2}(1 + \sin\varphi_i)}{u_i + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} \cos\varphi_i} \quad \text{и} \quad \tau_{i+1}'' = \frac{1 + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha^2}(1 - \sin\varphi_i)}{u_i + \frac{\mathcal{K}}{2\alpha} \cos\varphi_i}. \quad (19)$$

Действительно,

$$F(\tau'_{i+1}) = -\frac{\chi}{2\alpha^2} [1 + \sin(\varphi_i + \alpha\tau'_{i+1})] \leq 0,$$

$$F(\tau''_{i+1}) = \frac{\chi}{2\alpha^2} [1 - \sin(\varphi_i + \alpha\tau''_{i+1})] \geq 0,$$

то есть $\tau'_{i+1} \leq \tau_{i+1} \leq \tau''_{i+1}$ при $\tau'_{i+1} > 0$.

Если $\tau'_{i+1} < 0$, то интервал, содержащий корень, можно сузить до

$$0 < \tau_{i+1} < \tau''_{i+1}.$$

б) $\varphi_i = 1$. В этом случае обязательно найдется такое значение $\tau = \tau_{i+1}^*$, что $u(\tau_{i+1}^*) = 0$, причем среди τ_{i+1}^* , определяемых равенством

$$\cos(\varphi_i + \alpha\tau_{i+1}^*) = \varphi_i, \quad 0 \leq \varphi_i \leq 2\pi, \quad (20)$$

выбирается наименьший положительный корень. При изменении τ от 0 до τ_{i+1}^* функция $F(\tau)$ монотонно возрастает от -1 до $F(\tau_{i+1}^*)$. Если $F(\tau_{i+1}^*) \geq 0$, то решение трансцендентного уравнения (12), удовлетворяющее условию (15), существует. Если $F(\tau_{i+1}^*) < 0$, то это означает, что функция $u(\tau)$ обращается в 0 при значении $\tau = \tau_{i+1}^*$, которому соответствует значение $\xi < 1$, то есть искомого корня нет. При $F(\tau_{i+1}^*) \geq 0$ за правую границу корня можно взять τ_{i+1}^* , так что

$$0 < \tau_{i+1} \leq \tau_{i+1}^*.$$

Установив границы, заключающие единственный корень, можем найти его численно, например, методом последовательного деления отрезка пополам.

3. Рассмотрим произвольный, определяемый величиной параметра χ , режим работы РМС, анализатор которого состоит из N секций, то есть в системе равенств (II) - (I3) зафиксируем параметры χ и N . При этом система (II)-(I3) определит на выходе из анализатора $W_{\text{РН}}$ как функцию φ_0 и α :

$$W_{\text{РН}} = f(\varphi_0, \alpha), \quad 0 \leq \varphi_0 \leq 2\pi, \quad \alpha > 0. \quad (21)$$

Очевидно, для каждого $\alpha > 0$ существует φ_0^* , при котором $W_{\text{РН}}$ принимает максимальное значение:

$$\max_{\varphi_0} f(\varphi_0, \alpha) = g(\alpha). \quad (22)$$

В дальнейшем функция $g(\alpha)$ используется для вычисления разрешающей способности РМС. В связи с этим требуется найти: 1) величину абсолютного максимума w_* :

$$w_* = \max_{\alpha} \{ \max_{\varphi_0} f(\varphi_0, \alpha) \} \quad (23)$$

и значение α_* , при котором он достигается; 2) величину наибольшего после w_* локального максимума. Поэтому функцию $g(\alpha)$ достаточно построить на интервале, на котором указанные максимальные значения достигаются.

Пусть функция $g(\alpha)$ построена на $(0, \alpha_*)$. На этом интервале обозначим через w_* наибольший локальный максимум, а через \hat{w}_* - следующий по величине локальный максимум. Поскольку в каждой из секций приращение u_i всегда не более $2\chi/\alpha$ (см. (II)), то справедлива оценка:

$$g(\alpha) < (1 + \frac{2N\chi}{\alpha})^2.$$

Отсюда следует, что если $g(\alpha) < \hat{w}_*$, при $\alpha_0 \leq \alpha \leq \hat{\alpha}$, где

$$\hat{\alpha} = \frac{2N\chi}{\sqrt{\hat{w}_*} - 1},$$

то и при $\alpha > \hat{\alpha}$ заведомо $g(\alpha) < \hat{w}_*$ и, таким образом, $w_*' = w_*$. Практика вычислений показала, что оба интересующих нас максимума принадлежат $(0, 2\pi)$ ($0 < \chi \leq 1, N \leq 10$).

Рассмотрим следующую задачу. Пусть смесь в ионном источнике состоит из одинаково заряженных частиц масс m_1 и m_2 , $m_2 > m_1$. Обозначим через \bar{W} отношение энергии потенциального барьера к энергии разгоняющего электростатического поля:

$$\bar{W} = \frac{q(\bar{V} - V_0)}{W} = \frac{\bar{V} - V_0}{\bar{V} - V_0}. \quad (24)$$

Считая, что функция $g(\alpha)$ построена, найдем величину \bar{W} , при которой с изменением частоты ω на приемное устройство попадали бы сначала частицы одной массы, а затем - другой.

Пусть прибор работает с частотой ω . Составим безраз-

мерные комбинации:

$$\alpha' = \frac{\omega l}{\sqrt{\frac{g}{m_1}(\tilde{V}-V_0)}} \quad \text{и} \quad \alpha'' = \frac{\omega l}{\sqrt{\frac{g}{m_2}(\tilde{V}-V_0)}}, \quad \alpha' < \alpha''$$

Для определенности предположим, что частота ω со временем непрерывно возрастает. Тогда точка $(\alpha'', g(\alpha''))$ всегда будет двигаться перед точкой $(\alpha', g(\alpha'))$ по кривой $g(\alpha)$. Если $\bar{W} > g(\alpha')$ и $\bar{W} > g(\alpha'')$, то при данной частоте ω ни одна из частиц не будет долетать до приемного устройства, и, наоборот, при $\bar{W} < g(\alpha')$ и $\bar{W} < g(\alpha'')$ на приемное устройство попадет смесь частиц.

Пусть прямая $g = \bar{W}$ пересекает кривую $g(\alpha)$ в окрестности W_* в точках с координатами $(\bar{\alpha}_1, \alpha_1)$ и $(\bar{\alpha}_2, \alpha_2)$, $\alpha_1 < \alpha_2$; при $\alpha_1 < \alpha < \alpha_2$, $g(\alpha) > \bar{W}$ (рис. 2). Значение α_1 достигается сначала при частоте ω_1'' , а затем при частоте ω_1' , где

$$\omega_1' = \frac{\alpha_1}{l} \sqrt{\frac{g}{m_1}(\tilde{V}-V_0)}, \quad \omega_1'' = \frac{\alpha_1}{l} \sqrt{\frac{g}{m_2}(\tilde{V}-V_0)}, \quad \omega_1' > \omega_1''$$

Аналогично значение α_2 достигается при

$$\omega_2' = \frac{\alpha_2}{l} \sqrt{\frac{g}{m_1}(\tilde{V}-V_0)}, \quad \omega_2'' = \frac{\alpha_2}{l} \sqrt{\frac{g}{m_2}(\tilde{V}-V_0)}, \quad \omega_2' > \omega_2''$$

Выберем \bar{W} так, чтобы

$$\omega_1' = \omega_2'' \quad (25)$$

Тогда при частотах

$$\omega_1'' < \omega < \omega_1', \quad \alpha' < \alpha_1, \quad \alpha_1 < \alpha'' < \alpha_2, \\ g(\alpha') < \bar{W}, \quad g(\alpha'') > \bar{W},$$

и на приемное устройство будут попадать частицы только с массой m_2 ; при частотах

$$\omega_2'' < \omega < \omega_2', \quad \alpha_2 < \alpha' < \alpha_2, \quad \alpha_2 < \alpha'', \\ g(\alpha') > \bar{W}, \quad g(\alpha'') < \bar{W}$$

- на приемное устройство попадут частицы только с массой m_1 . Если $\omega < \omega_1''$ или $\omega > \omega_2'$, то соответственно

$$\alpha' < \alpha'' < \alpha_1, \quad \text{или} \quad \alpha_2 < \alpha' < \alpha'' \\ g(\alpha') < \bar{W}, \quad g(\alpha'') < \bar{W},$$

то есть частицы не будут долетать до приемного устройства.

На рис. 2 изображен момент, когда

$$\alpha' = \alpha_1, \quad \alpha'' = \alpha_2, \quad g(\alpha') = g(\alpha'') = \bar{W}.$$

Таким образом, при указанном выборе \bar{W} массе m_2 ставится в соответствие интервал частот (ω_1'', ω_2') , а массе $m_1 - (\omega_1', \omega_2'')$. Очевидно, соответствие будет однозначным только в том случае, если прямая $g = \bar{W}$ пересекает лишь один наибольший "горб" кривой $g(\alpha)$, то есть при $\bar{W} > \hat{W}_*$.

Из равенства (25) следует, что

$$\frac{\alpha_2}{\alpha_1} = \sqrt{1 - \frac{\Delta m}{m_1}} \approx 1 + \frac{\Delta m}{2m_1}, \quad \Delta m = m_2 - m_1, \quad (26)$$

так как обычно $\frac{\Delta m}{m} \ll 1$. Тем самым величина \bar{W} , необходимая для разделения масс m_1 и m_2 , определена. Опустив в (26) индексы у m , получим для разрешающей способности следующее выражение:

$$R = \frac{m}{\Delta m} \approx \frac{\alpha_1}{2(\alpha_2 - \alpha_1)} \quad (27)$$

Пусть при фиксированном значении α ($\alpha_1 < \alpha < \alpha_2$) построена численно функция W_{EN} . Её наибольший максимум по φ_0 на $[0, 2\pi]$ мы обозначили ранее через $g(\alpha)$. И пусть, далее, прямая $W_{EN} = \bar{W}$ ($W < g$) пересекает кривую $W_{EN} = f(\varphi_0, \alpha)$ (α фиксировано) в окрестности g в двух точках, абсциссы которых φ_0' и φ_0'' , $\varphi_0' < \varphi_0''$. Отношение

$$\eta = \frac{\Delta \varphi_0}{2\pi}, \quad \Delta \varphi_0 = \varphi_0'' - \varphi_0', \quad (28)$$

определяет долю частиц данной массы, которые долетели до приемного устройства, и называется коэффициентом полезного действия прибора. Если прямая $W_{EN} = \bar{W}$ пересекает несколько "горбов" кривой, то величина коэффициента полезного действия складывается из нескольких слагаемых вида (28).

При некотором α_{max} из интервала (α_1, α_2) коэффициент полезного действия принимает наибольшее значение η_{max} , причем α_{max} не совпадает с α_* : $\alpha_1 < \alpha_{max} < \alpha_2$ (см. [2]). В данной работе η_{max} не вычислялось. Достаточно хорошую оценку снизу для η_{max} при больших R дает коэффициент полезного действия η_* , вычисленный при $\alpha = \alpha_*$.

Заметим, что в [2] разрешающая способность определяется

как

$$\bar{R} = \frac{\alpha_{max}}{2(\alpha_2 - \alpha_1)},$$

где $\bar{\alpha}_1$ и $\bar{\alpha}_2$ находятся из условия:

$$\eta(\bar{\alpha}_1) = \eta(\bar{\alpha}_2) = 0,5\eta_{\max} \text{ ("фон 0,5")}. \quad (12)$$

Поскольку $\alpha_1 < \bar{\alpha}_1 < \alpha_2$, а $\alpha_{\max} \approx \alpha_1$, то разрешающая способность в [2] с "фоном 0,5" оказывается более высокой, чем вычисленная по формуле (27), где

$$\eta(\alpha_1) = \eta(\alpha_2) = 0 \text{ ("нулевой фон")}. \quad (13)$$

Заметим также, что определение разрешающей способности по "нулевому фону" необходимо, если РМС работает как масс-фильтр, то есть в случае, когда требуется выделить из смеси частицы определенной массы.

4. Прежде чем перейти к изложению результатов вычислений, остановимся на некоторых особенностях построения функции $g(\alpha)$. При этом основной задачей является отыскание w_* и \hat{w}_* .

Используя систему (II)-(I3), определяющую $w_{\text{ев}} = f(\varphi_0, \alpha)$, можно составить выражение $\frac{\partial f}{\partial \varphi_0}$ и $\frac{\partial f}{\partial \alpha}$, приравнять их нулю и из полученной таким образом системы искать экстремальные точки. Однако решение этой системы весьма затруднительно, и, кроме того, нас интересует не все множество экстремальных значений $w_{\text{ев}}$, а только два наибольших максимума. Поэтому для вычисления w_* и \hat{w}_* целесообразно применить один из методов нелокального поиска.

В ходе численного эксперимента оказалось, что в некоторых областях, принадлежащих $0 \leq \varphi_0 \leq 2\pi$, $\pi < \alpha < 2\pi$, структура функции $w_{\text{ев}}$ становится чрезвычайно сложной, особенно при больших значениях N и K ($0 < K \leq 1$, $N \leq 10$). Образно говоря, эти области характеризуются частым чередованием крутых высоких "хребтов" и узких "ущелий". В этих условиях применение метода оврагов [3], по-видимому, не дает выигрыша машинного времени по сравнению с обычным слепым поиском, так как организация счета, включающая выбор овражного шага и градиентной пробы, становится затруднительной.

Слепой поиск осуществлялся в следующем порядке. Сначала для отыскания $\max f(\varphi_0, \alpha)$ (K и N заданы) значения φ_0 из $[0, 2\pi]$ перебирались с некоторым экспериментально определяемым шагом h_{φ} . Среди вычисленных $w_{\text{ев}}$ фиксировалось максимальное, величина которого затем уточнялась в соответствии с заданной точностью вычислений. После этого в системе (II)-

(I3) фиксировалось значение $\alpha + h_{\alpha}$ и отыскивался $\max f(\varphi_0, \alpha + h_{\alpha})$ и т.д.

Выбор шагов h_{φ} и h_{α} облегчается тем, что кривые $g(\alpha)$ однотипны при фиксированном N . Однотипность $g(\alpha)$ при $N = 5$ иллюстрируется рис. 3. Построив, например, $g(\alpha)$ при $K = 0,3$ и $K = 1$, легко представить качественное поведение кривых при промежуточных значениях K . Если при расчете форма кривой $g(\alpha)$ отклонялась от типичной (появлялись дополнительные локальные максимумы и минимумы), то это означало, что шаг h_{φ} необходимо уменьшить. Интересно, что количество локальных максимумов $g(\alpha)$, расположенных левее α_* , всегда равнялось $N-1$.

Отметим, что при расчете вариантов $N = 10$, $K = 0,3$; $0,5$; $0,7$; 1 по мере увеличения α до α_* шаг h_{φ} приходилось уменьшать на 2-3 порядка (от 10^{-1} до 10^{-4}). Также сильно менялась и необходимая точность вычисления корня трансцендентного уравнения (I2): от 10^{-2} до 10^{-5} (если задаться вычислением $w_{\text{ев}}$ с тремя верными знаками после запятой). Поэтому применение универсального для всех значений φ_0 метода последовательного деления отрезка пополам с учетом найденных выше границ корня связано в ряде случаев с большим числом итераций. В ходе вычисления $g(\alpha)$ было замечено, что при $\alpha > 1$ получаются практически тождественные результаты, если для нахождения τ_{i+1} вместо метода последовательного деления отрезка пополам использовать итеративный метод Вегстейна [4]. При этом время, затрачиваемое на вычисление $g(\alpha)$, сокращалось в 3-4 раза.

Окрестность абсолютного максимума характеризуется тем, что при $N > 5$ ($0,3 \leq K \leq 1$) значения функции $g(\alpha)$, достигнув w_* , затем резко падают до значений порядка τ . В этом случае для построения $g(\alpha)$ в окрестности α_* шаг по α должен быть менее 10^{-3} .

В качестве примера на рис. 4 приведено типичное для всех вариантов поведение кривых $g(\alpha)$ при $K = 0,7$, $N = 1 + 10$. Пунктирными линиями выделена область колебаний $g(\alpha)$ при $\alpha < 3$ и $\alpha > 4,6$; $N = 5 + 10$.

С ростом N и K увеличивается w_* , а положение абсолютного максимума смещается в сторону больших значений α (рис. 5 и 6). Однако для каждого K , начиная с некоторого номера секции N_0 , возрастание w_* и α_* становится мало

заметным, а функции $g(\alpha)$ в окрестности абсолютного максимума практически совпадают. Так, при $\kappa = 0,7$ (рис. 4) в окрестности α_* сливаются в одну линию графики функций $g(\alpha)$ при $N = 7-10$. Если теперь по графикам $g(\alpha)$ вычислить R в зависимости от \bar{w} , то окажется, что для $N > N_0$ разрешающая способность мало зависит от номера секции, что и определяет выбор N_0 .

На рис. 7-14 приведены зависимости R и η_* от σ при $\kappa = 0,3; 0,5; 0,7; I$, $N = 5 + 10$, где

$$\sigma = \frac{w_* - \bar{w}}{w_*}, \quad 0 < \sigma \leq 0,01. \quad (29)$$

По графикам $R(\sigma)$ легко определить оптимальные числа секций в зависимости от величины κ , а именно:

Т а б л и ц а I

| κ | 0,3 | 0,5 | 0,7 | I |
|----------|------|------|-----|---|
| N_0 | 9-10 | 9-10 | 8-9 | 6 |

Отсюда следует, что с ростом κ N_0 уменьшается. Заметим, что сам параметр κ выбирается из соображений физического характера, которые не учитываются математической постановкой задачи.

На рис. 15-22 приведены результаты по расчету $g(\alpha)$, а также w_{2N} как функции φ_0 при $\alpha = \alpha_*$ в окрестности абсолютного максимума при $\kappa = 0,3; 0,5; 0,7; I$ и $N = N_0$. (на рисунках индекс у w_{2N} опущен). Эти и аналогичные им графики для других N использовались для построения зависимостей $R(\sigma)$ и $\eta_*(\sigma)$.

В табл. 2 делаются некоторые сопоставления разрешающей способности при $N = N_0$ (берется меньшее из двух значений) и $\sigma = 0,003; 0,005; 0,010$, а также соответствующих коэффициентов полезного действия при $\alpha = \alpha_*$. В скобках для сравнения указаны результаты для анализатора, состоящего из 5 секций (результаты для R определены до десятка, а для η_* - до $5 \cdot 10^{-3}$).

Из табл. 2 видно, что разрешающая способность для меньшего числа секций не убывает, если при этом увеличить параметр κ .

Т а б л и ц а 2

| κ | R | | | η_* | | |
|----------|-----------|-------------------|-------------------|---------------|-------------------|-------------------|
| | 10^{-2} | $5 \cdot 10^{-3}$ | $3 \cdot 10^{-3}$ | 10^{-2} | $5 \cdot 10^{-3}$ | $3 \cdot 10^{-3}$ |
| 0,3 | 70 (20) | 130 (30) | 210 (50) | 0,030 (0,105) | 0,025 (0,035) | 0,020 (0,070) |
| 0,5 | 70 (40) | 130 (60) | 220 (30) | 0,030 (0,110) | 0,025 (0,090) | 0,020 (0,170) |
| 0,7 | 70 (40) | 130 (80) | 230 (110) | 0,040 (0,095) | 0,040 (0,080) | 0,035 (0,070) |
| I | 70 (50) | 130 (100) | 230 (160) | 0,030 (0,060) | 0,025 (0,050) | 0,025 (0,045) |

Среди выводов, которые можно сделать на основании полученных результатов, наиболее важны следующие: 1) существует абсолютный максимум функции $g(\alpha)$, и тем самым в принципе возможна работа РМС в нелинейном режиме; 2) величина \bar{w}_* значительно превосходит \hat{w}_* , что указывает на возможность использования РМС в качестве масс-фильтра; 3) при нелинейном режиме работы РМС можно достичь разрешающей способности порядка 200 по "нулевому фону", причем коэффициент полезного действия не будет слишком мал; 4) для каждого выбранного режима существует оптимальное число секций.

Проведенные исследования влияния малых возмущений W_0 и ϵ на разрешающую способность R порядка 100-200 при $N = N_0$ показали, что допустимые отклонения должны быть меньше соответственно сотых долей процента и одного процента.

Нами рассмотрены режимы работы РМС при $\kappa \leq 1$. Большие значения κ , по-видимому, рассматривать нецелесообразно. Увеличение параметра κ можно осуществить либо за счет уменьшения разгоняющей разности потенциалов, либо за счет увеличения максимальной разности потенциалов между сетками. В первом случае возрастает влияние разброса частиц по энергиям W_0 , а во втором - из-за угрозы пробоя - необходимо увеличивать расстояние ϵ между сетками, что по целому ряду причин нежелательно.

Все вычисления проводились на ЭВМ "М-20".

Авторы выражают искреннюю благодарность А.И. Трубецкому, по предложению которого решалась данная задача, за обсуждение результатов.

Л и т е р а т у р а

1. P.A.Redhead. Analysis of the linear RF mass-spectrometer. Journal of applied physics, 1953, 24, 331.
2. К.Н.Löcherer. Nichtlineare theorie für das noch Frequenz - massenspectrometer nach Redhead, Vakuum Technik, 1961, 6, 163-175.
3. И.М. Гельфанд, М.Л. Цейтлин. О некоторых способах управления сложными системами. - УМН, 1962, 17, 1(103).

4. Дж. Н. Ланс. Численные методы для быстродействующих вычислительных машин. ИЛ, 1962, стр. 171-175.

Поступила в редакцию
20/IV-1966 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ

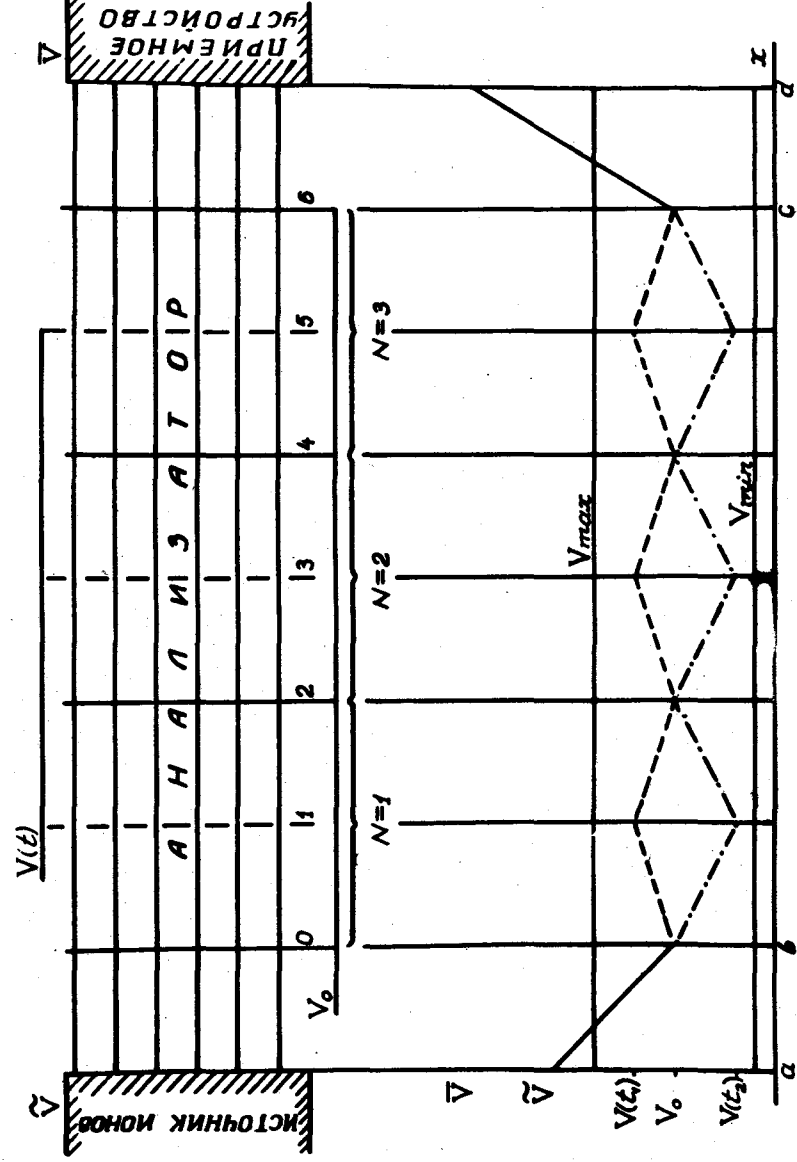


Рис. I

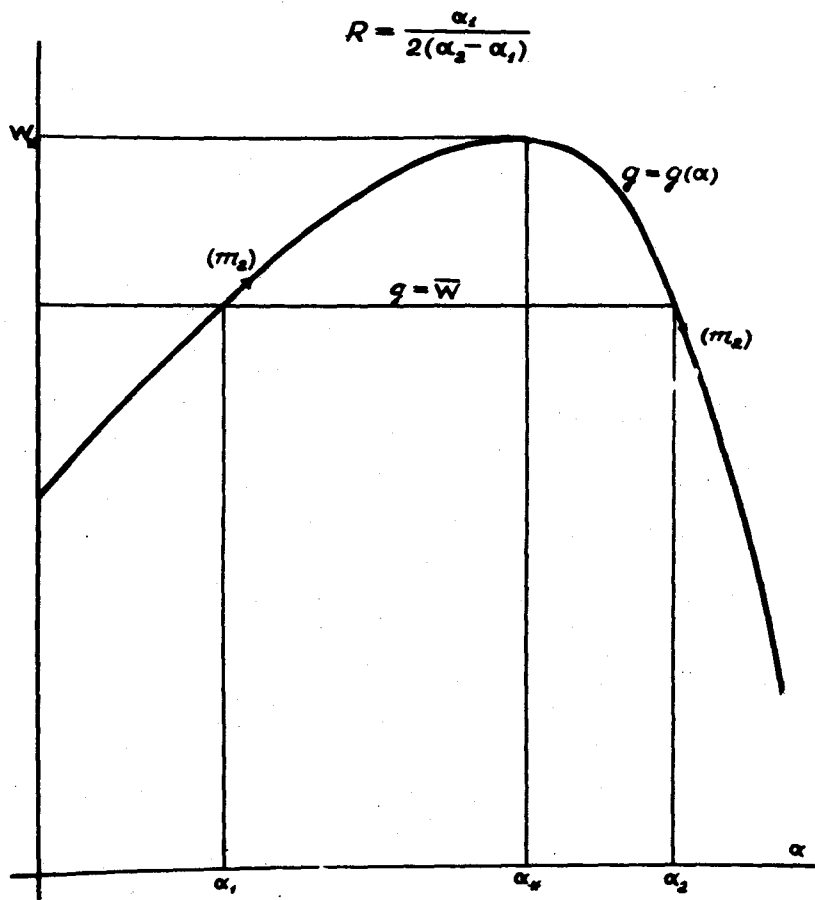


Рис. 2

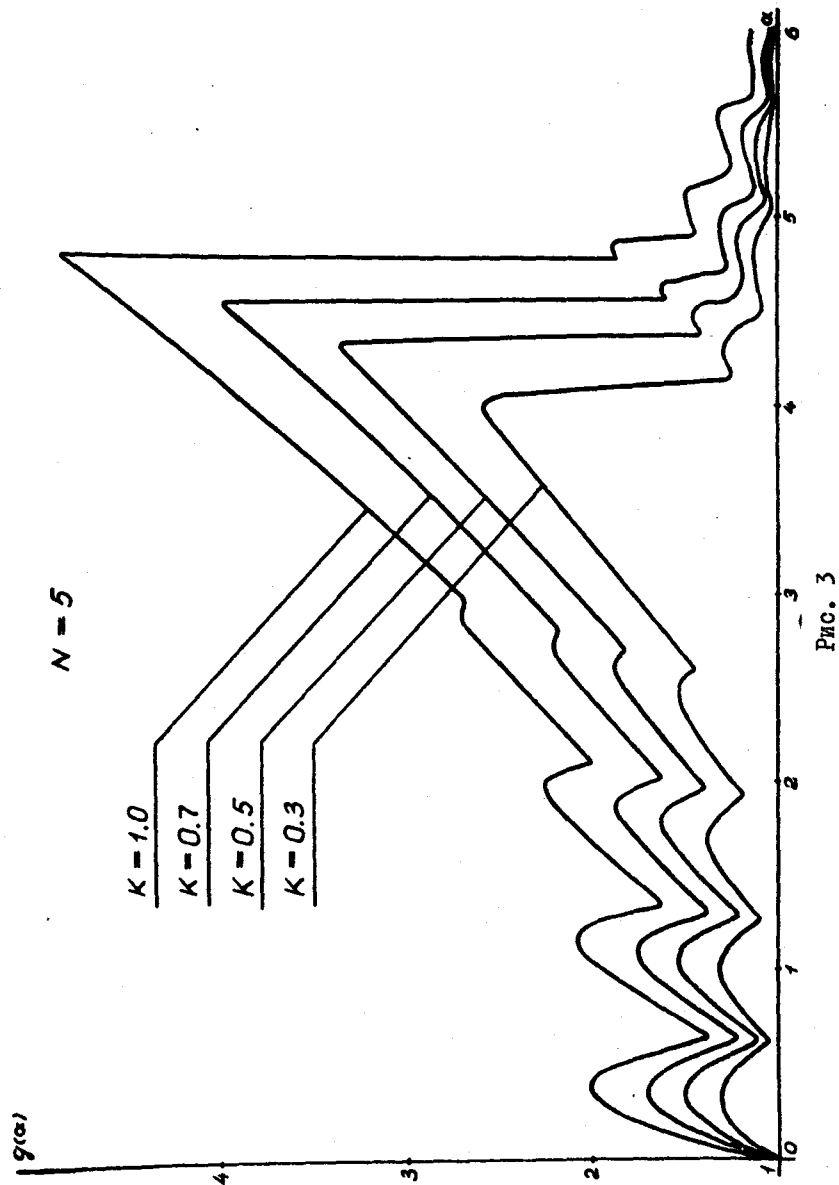


Рис. 3

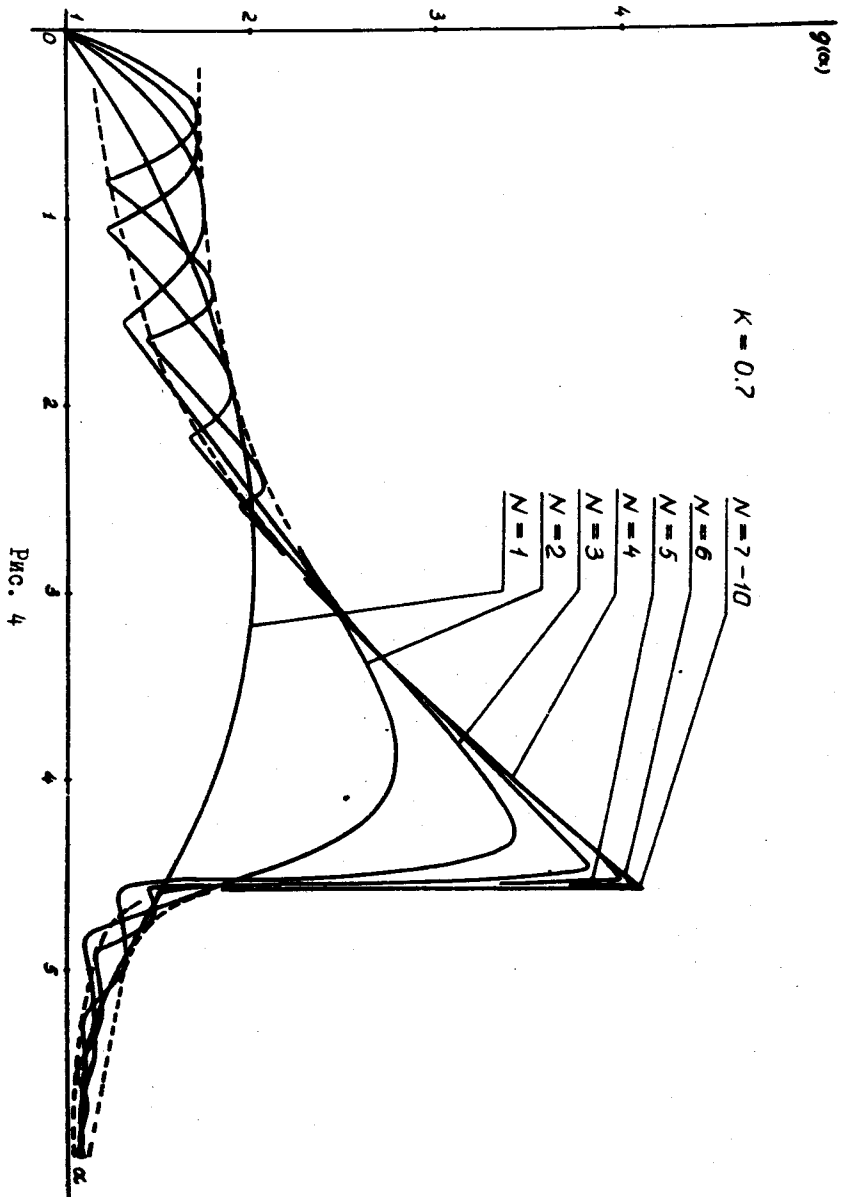


Рис. 4

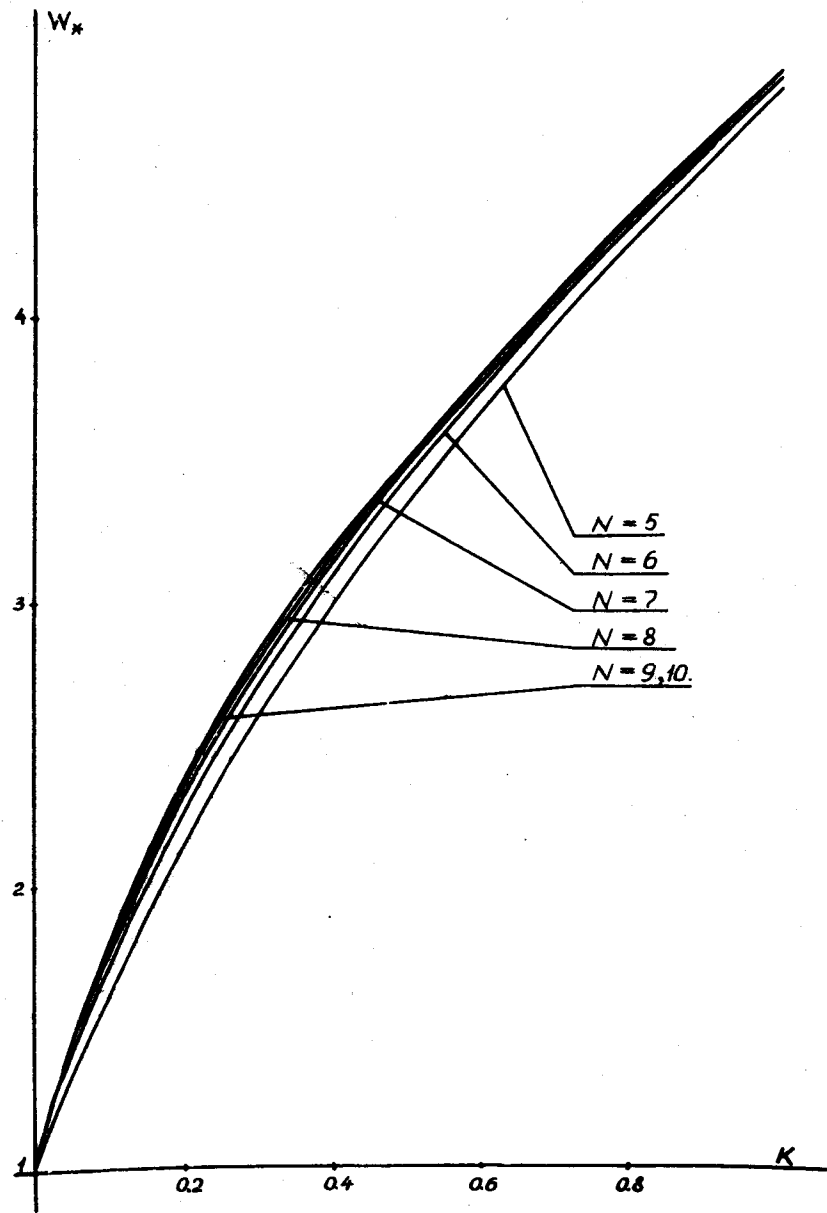


Рис. 5

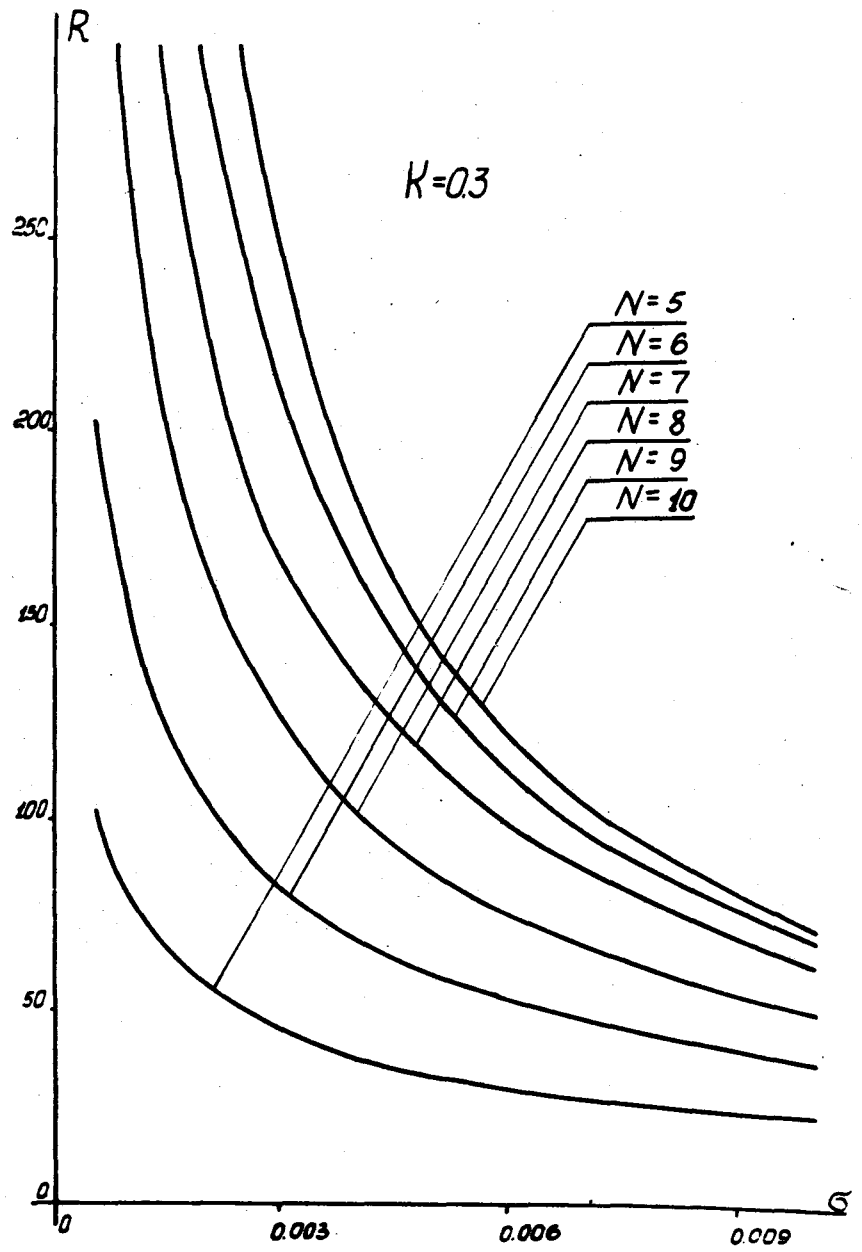
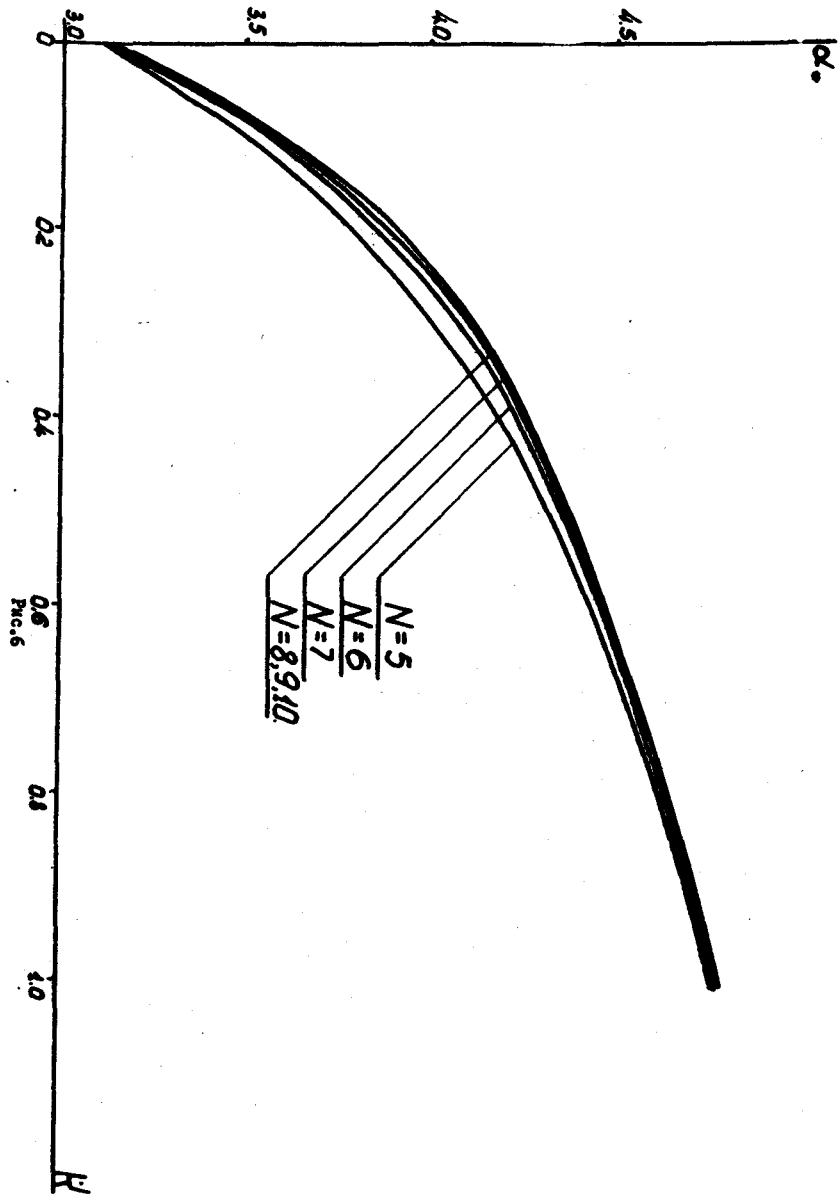


Рис. 7

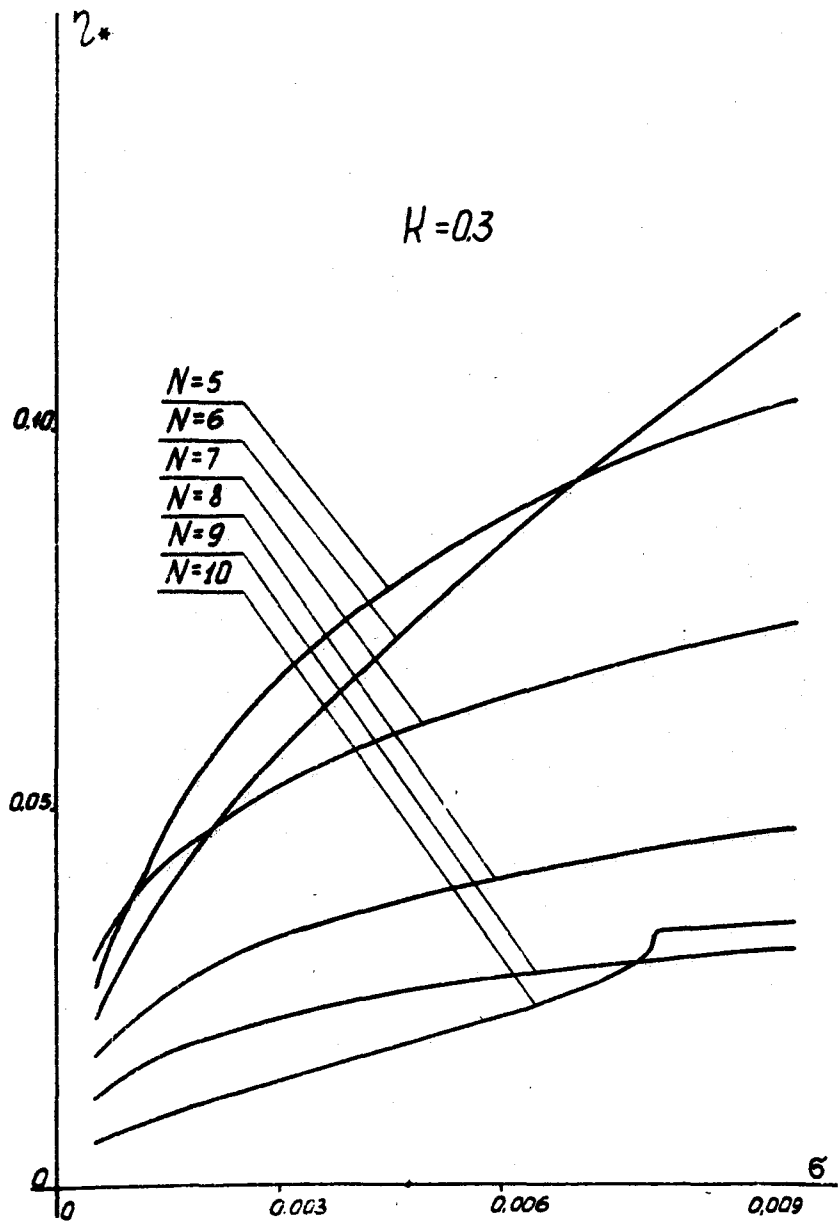


FIG. 8

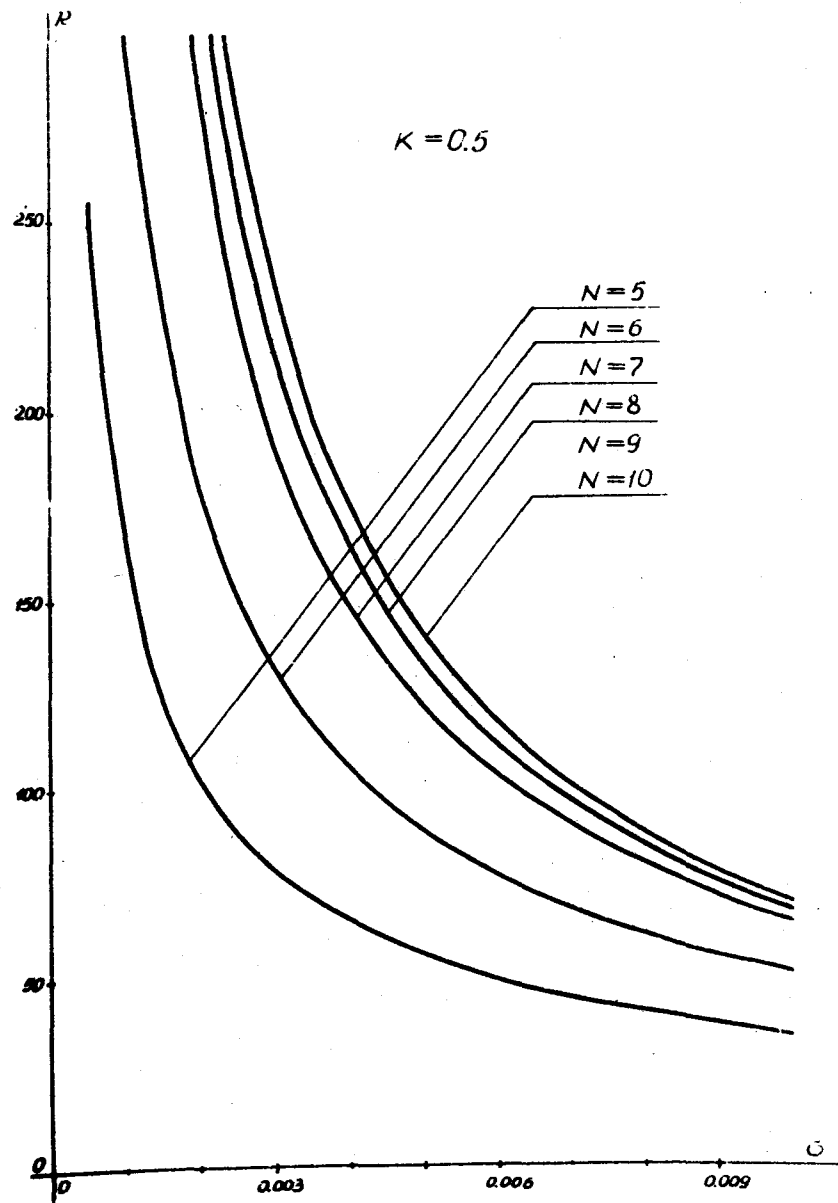


FIG. 9

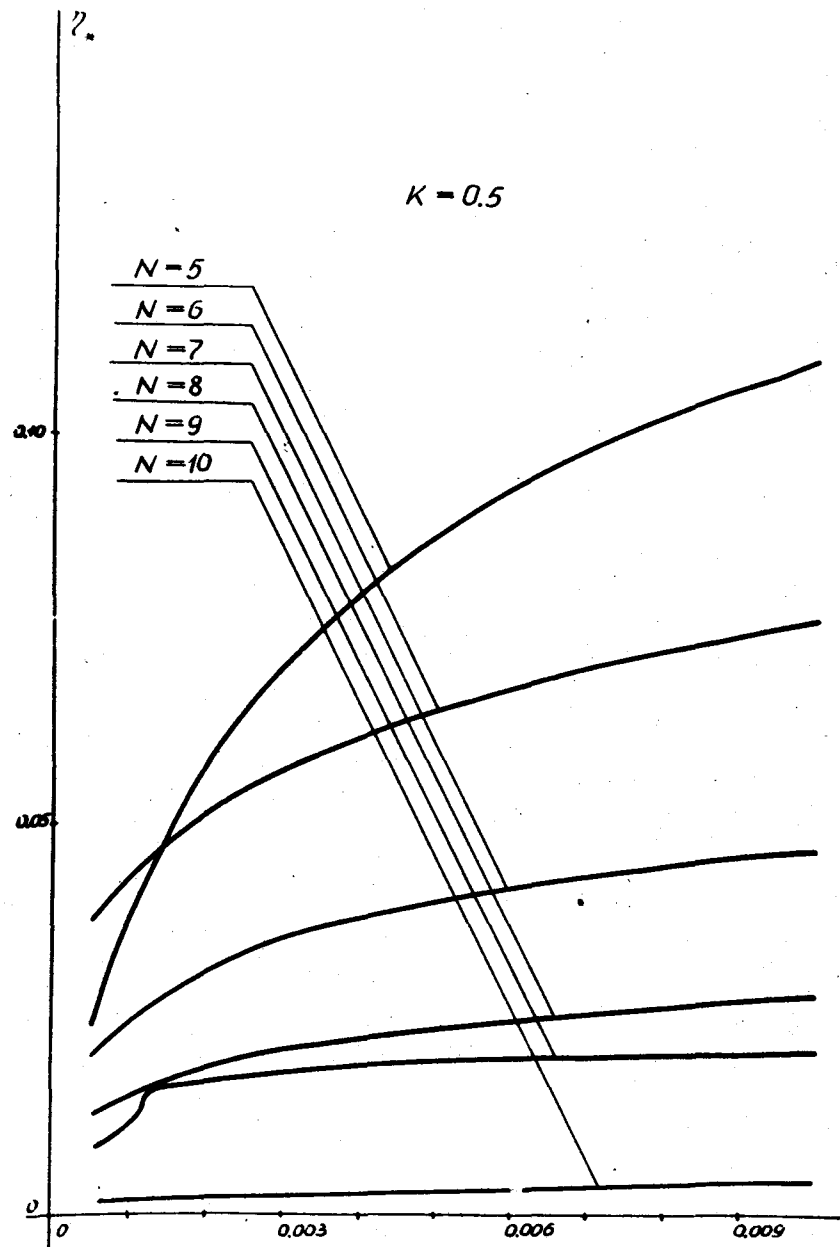


Рис. IО

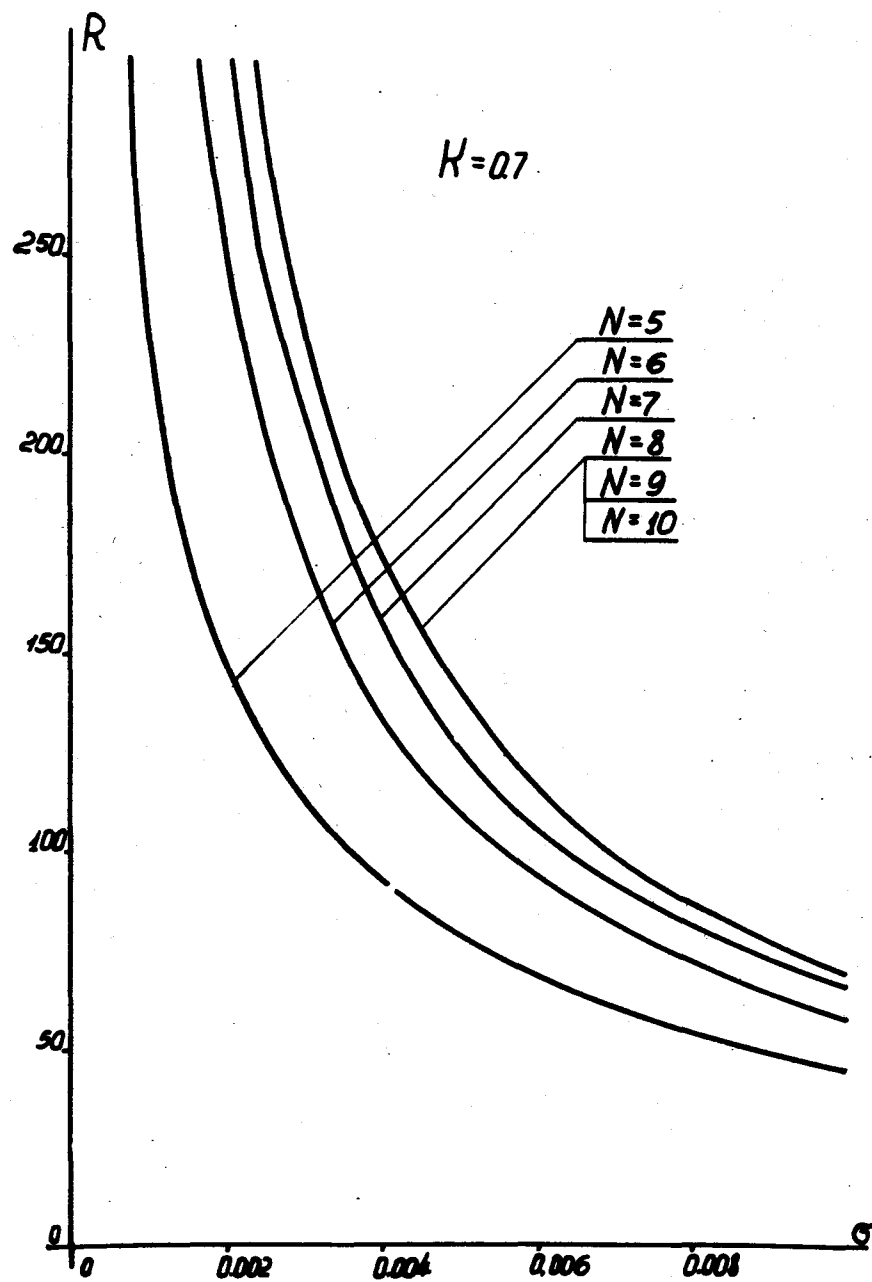


Рис. II

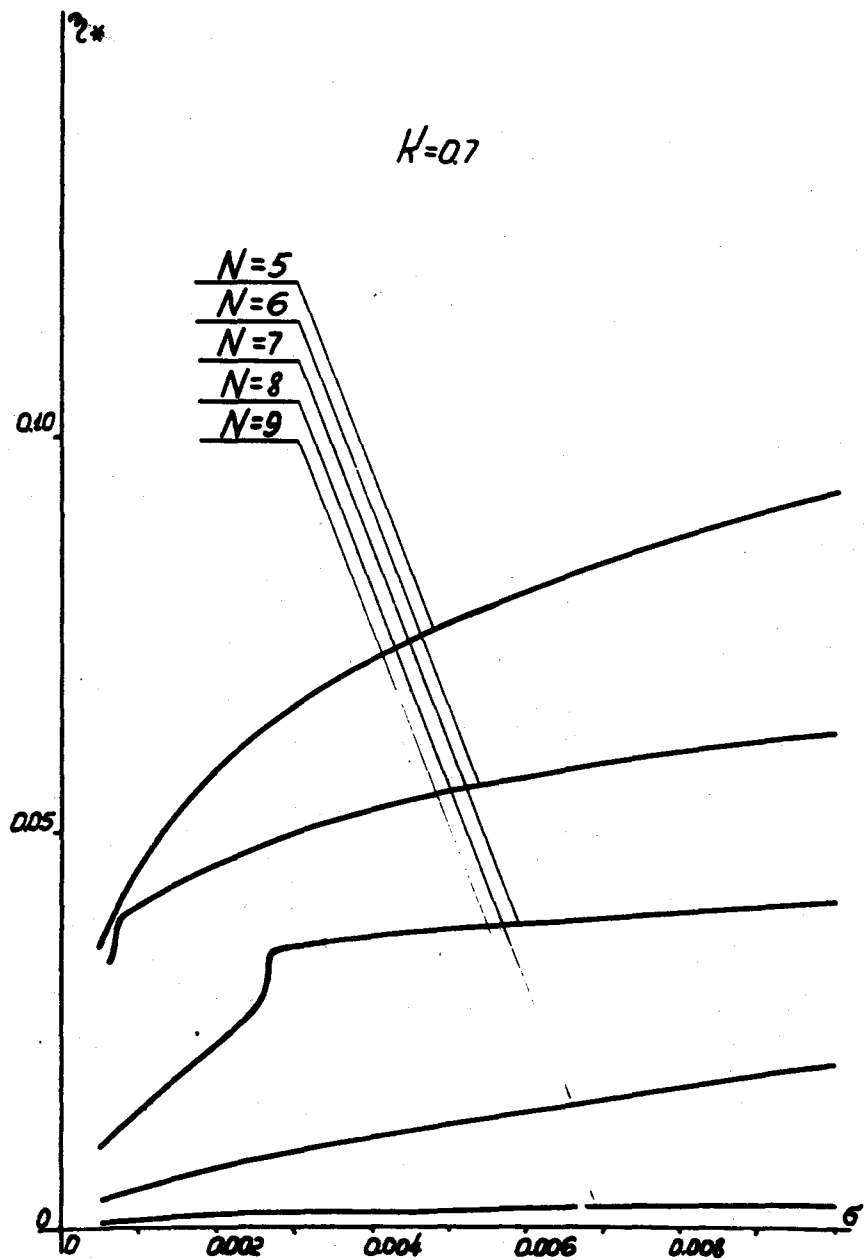


Рис. 12

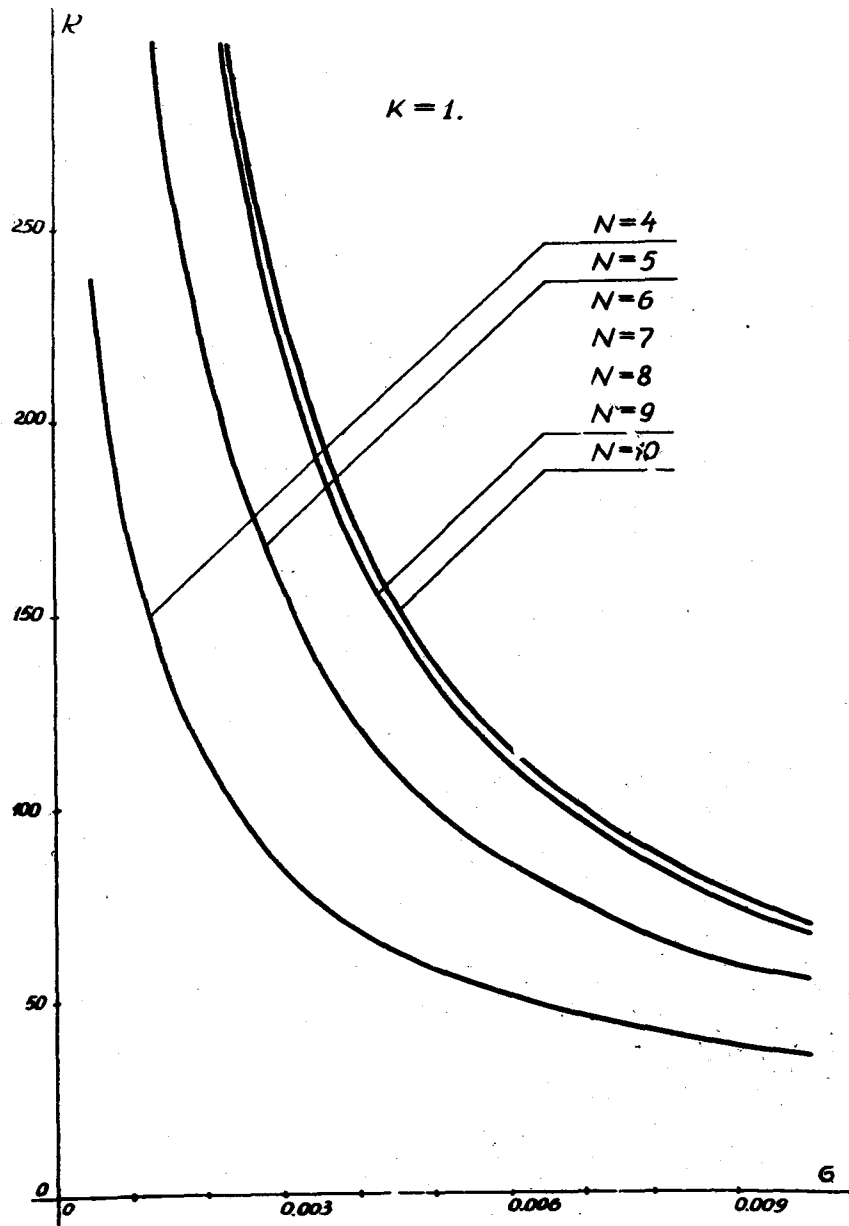


Рис. 13

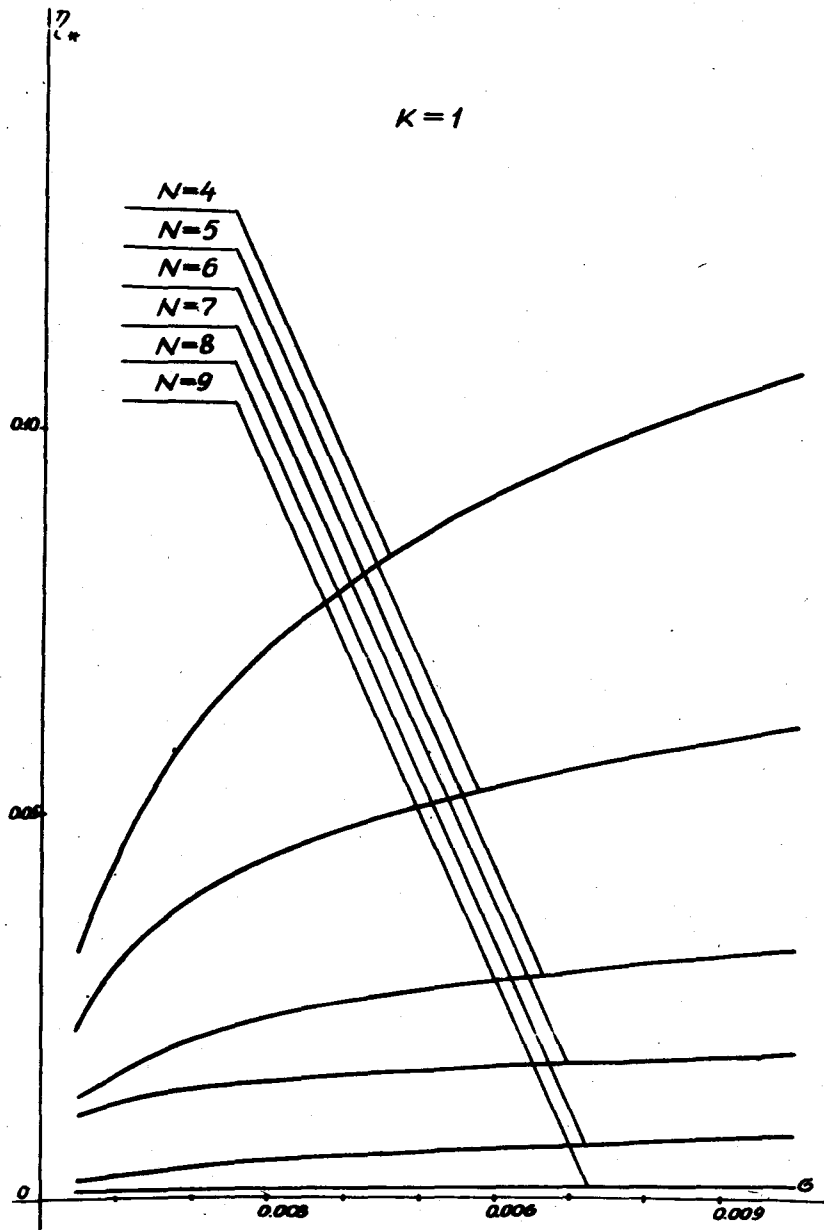


Рис. 14

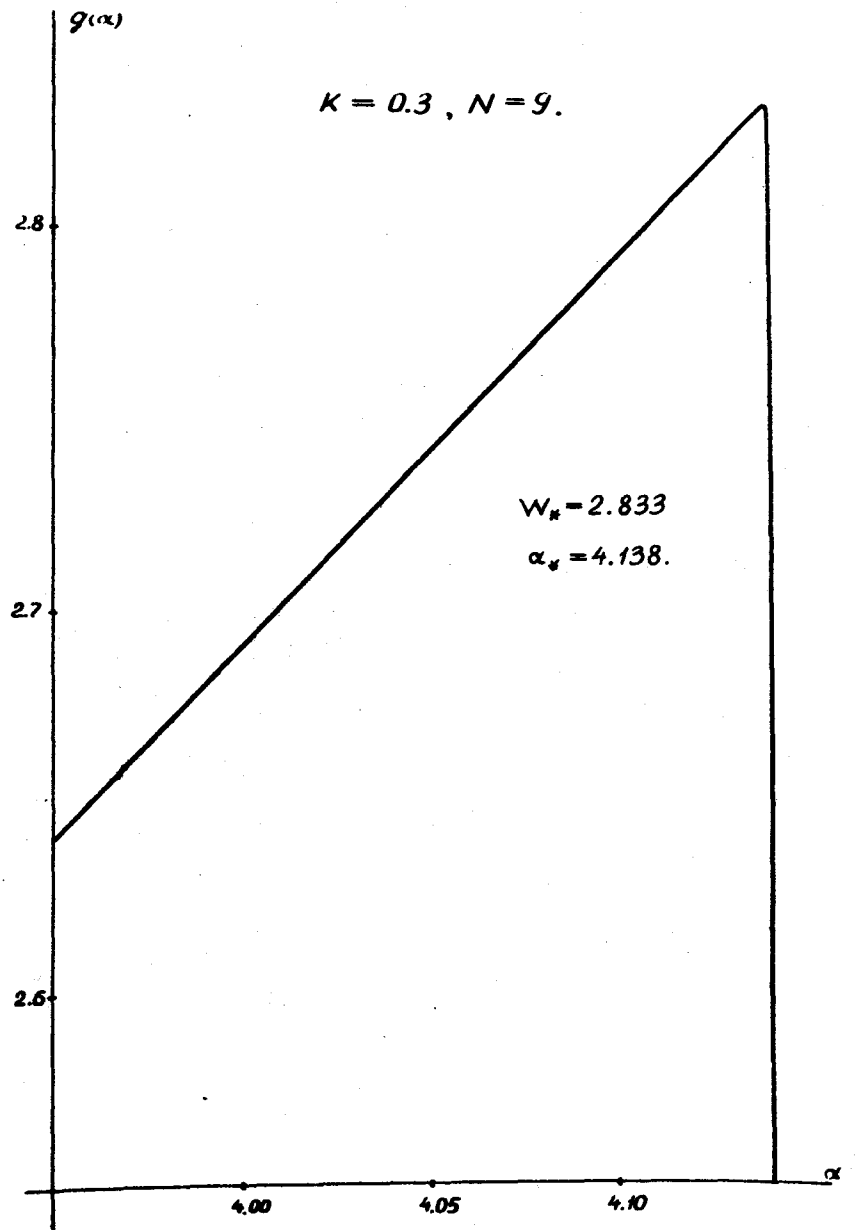


Рис. 15

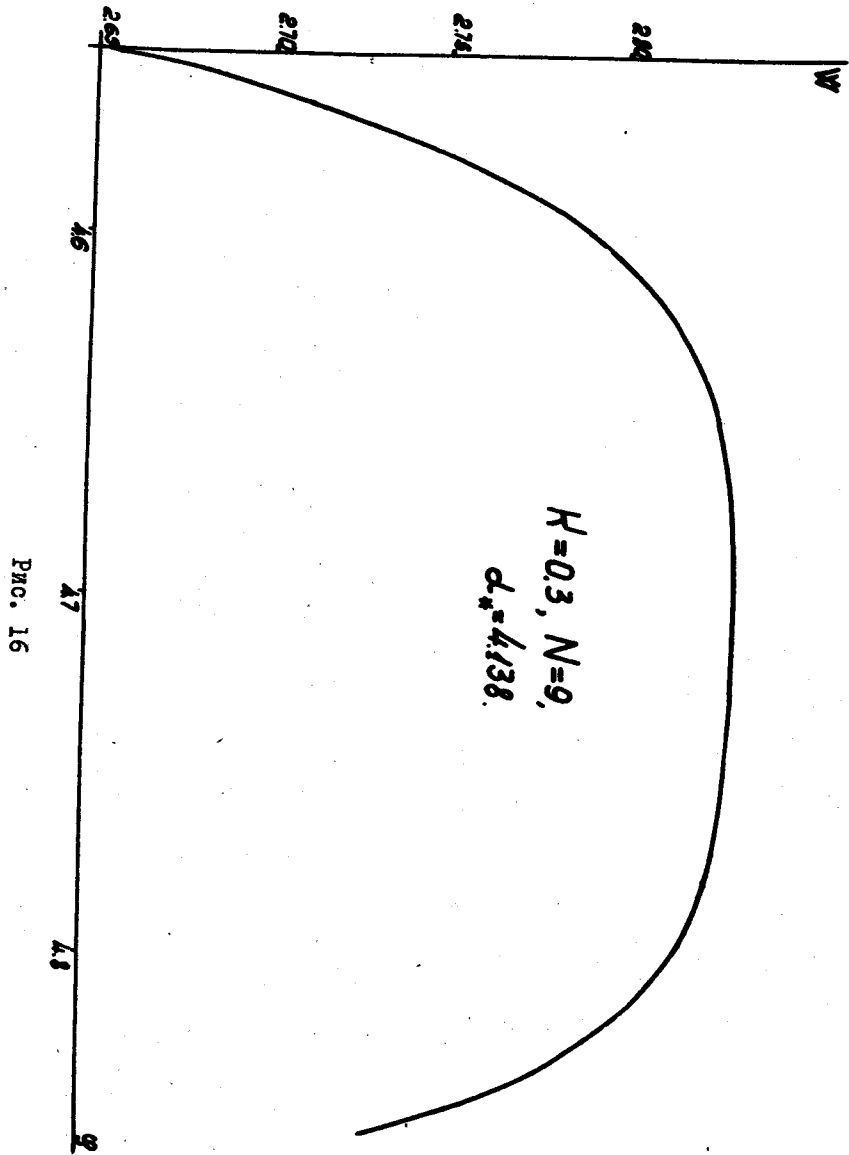


Рис. 16

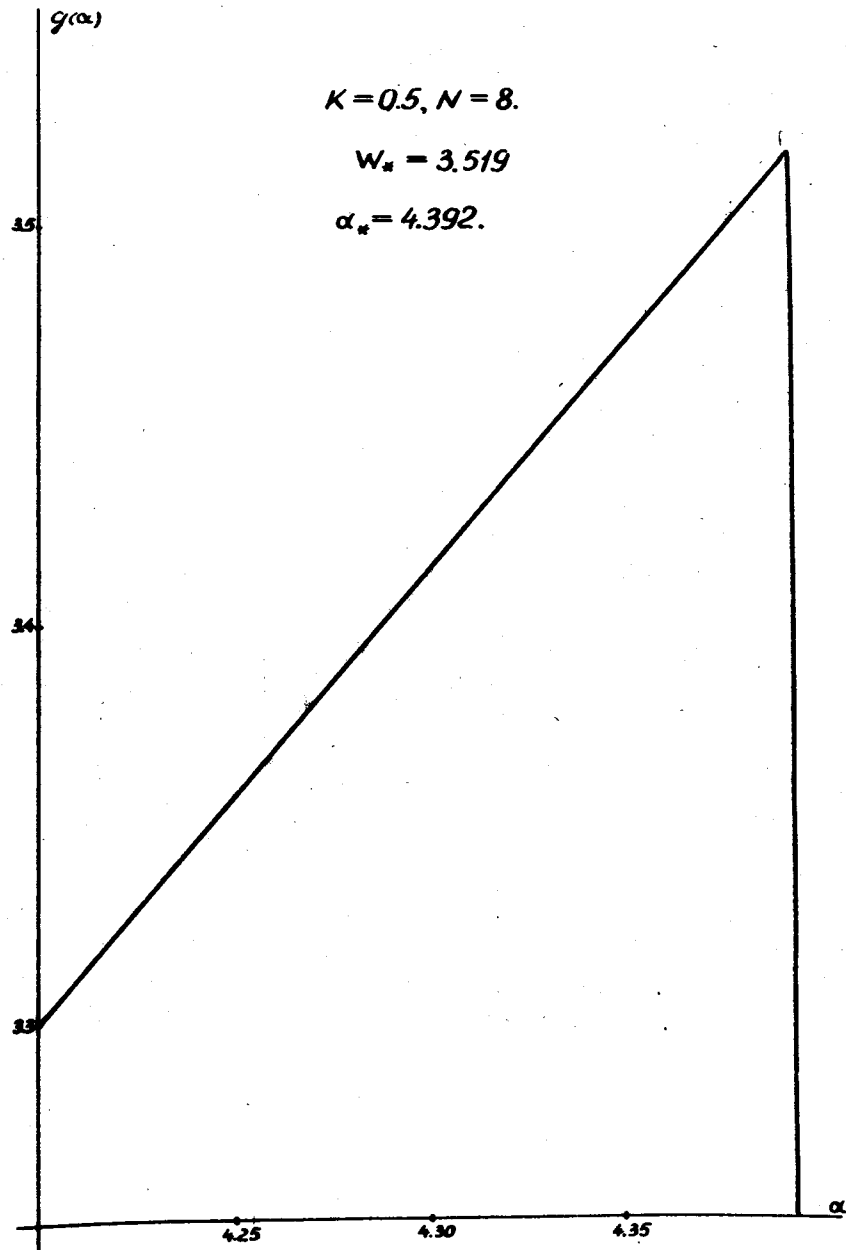


Рис. 17

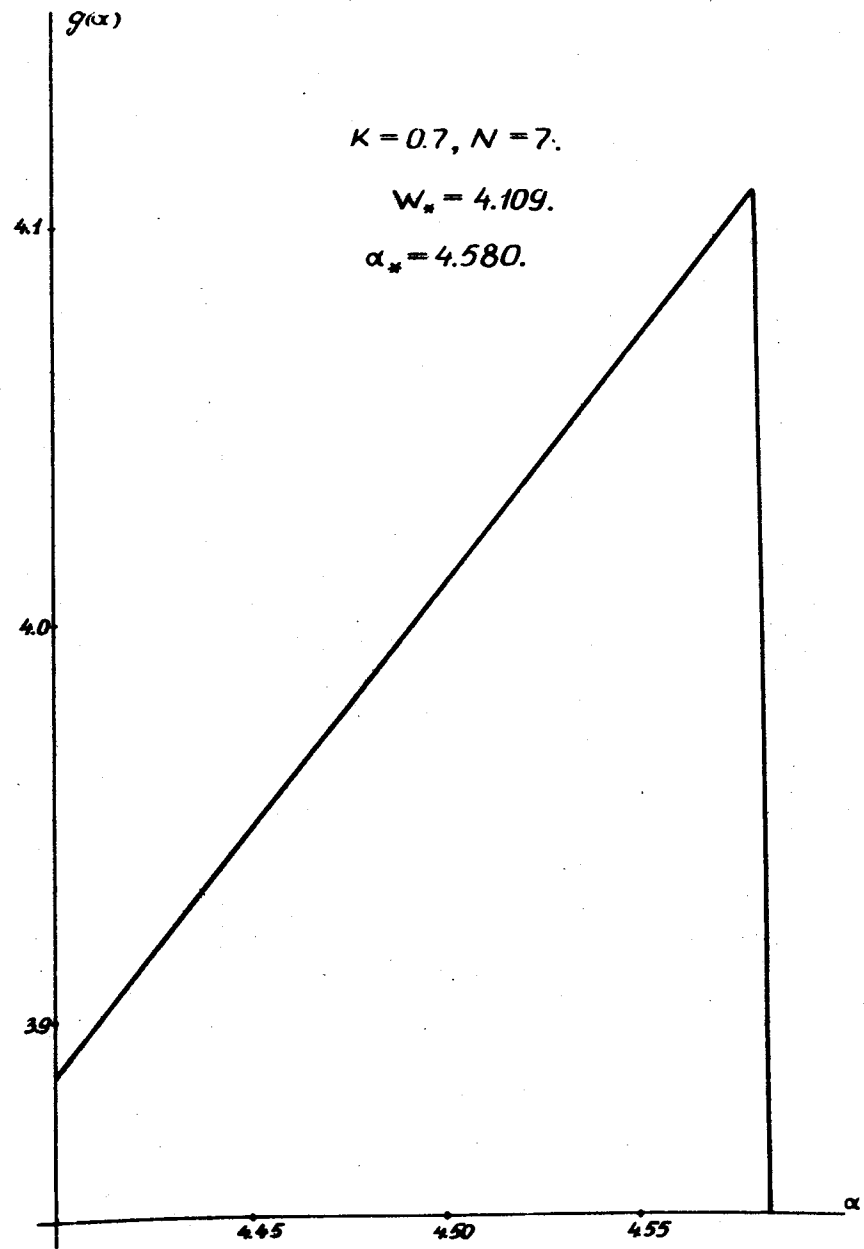
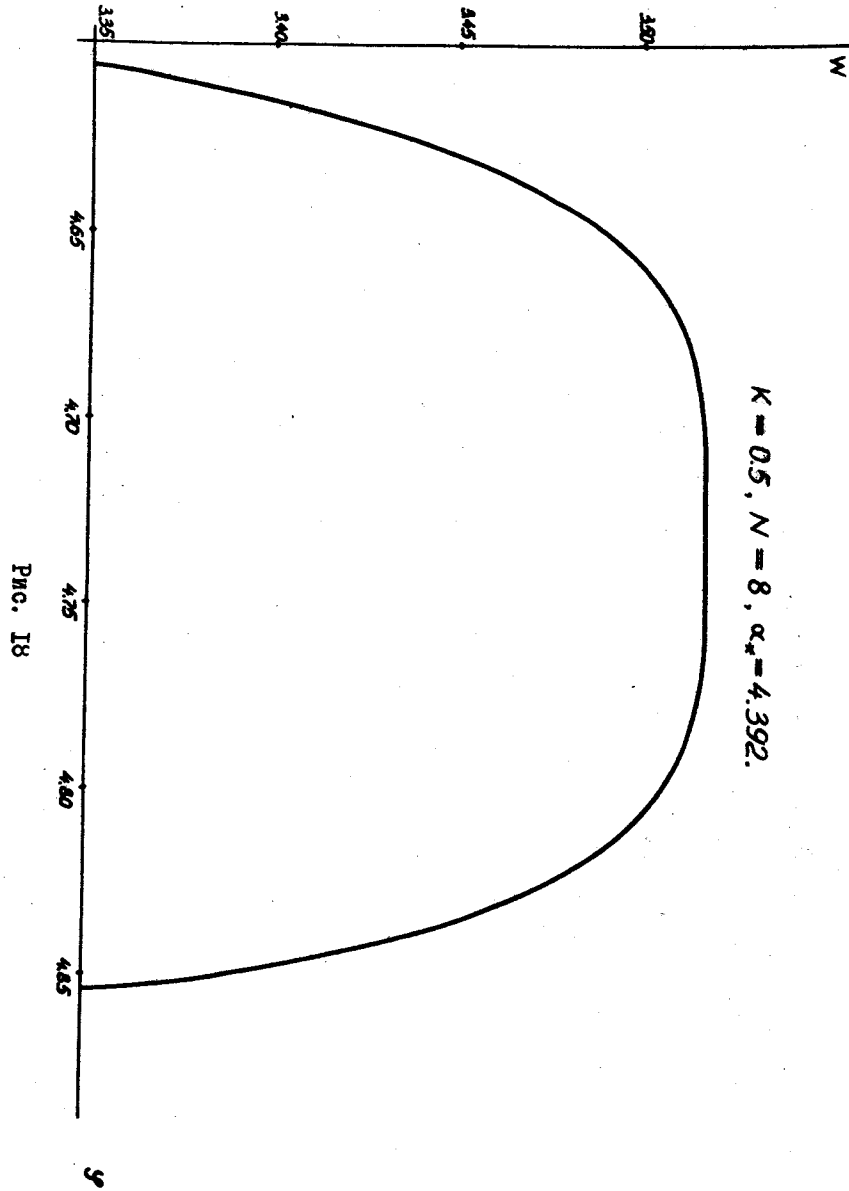


Рис. 19

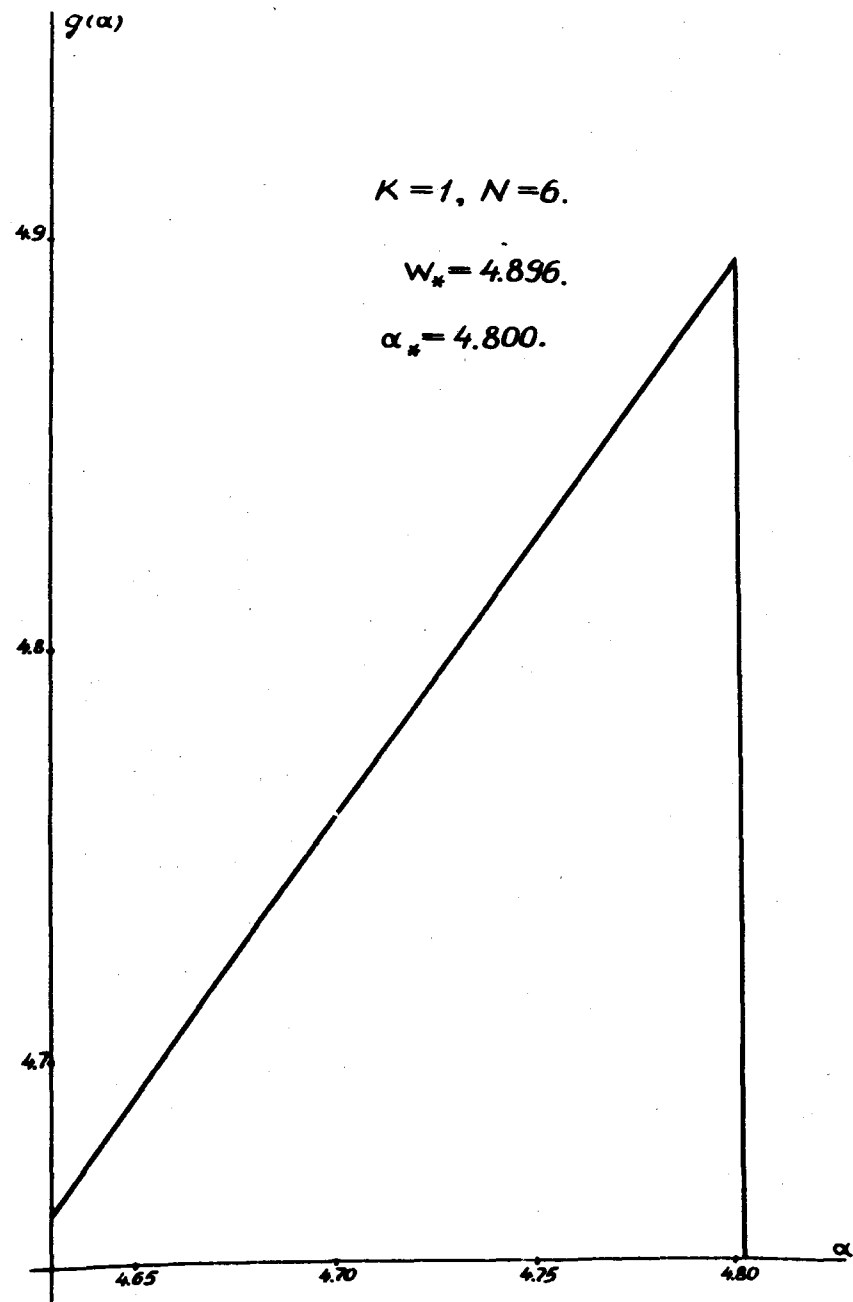
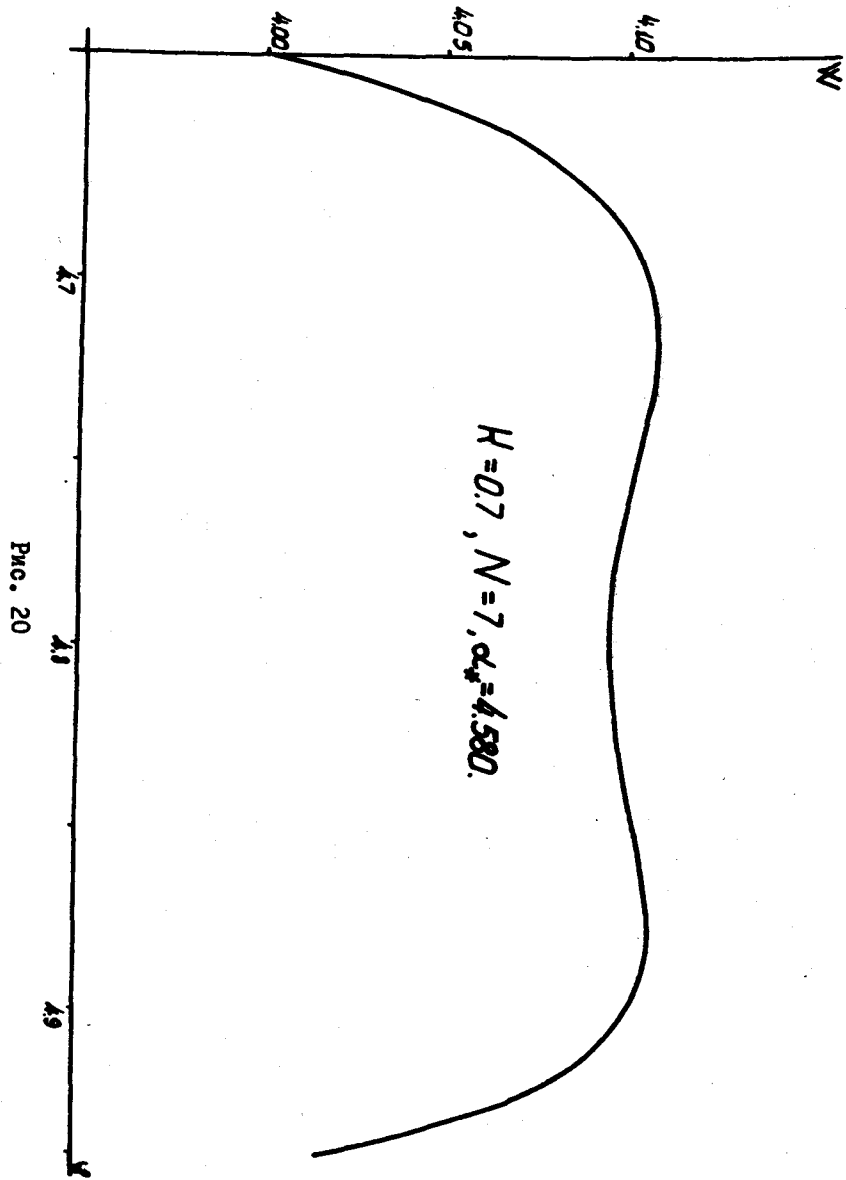


Рис. 2I

$K=1, N=6, \alpha_n=4,800.$

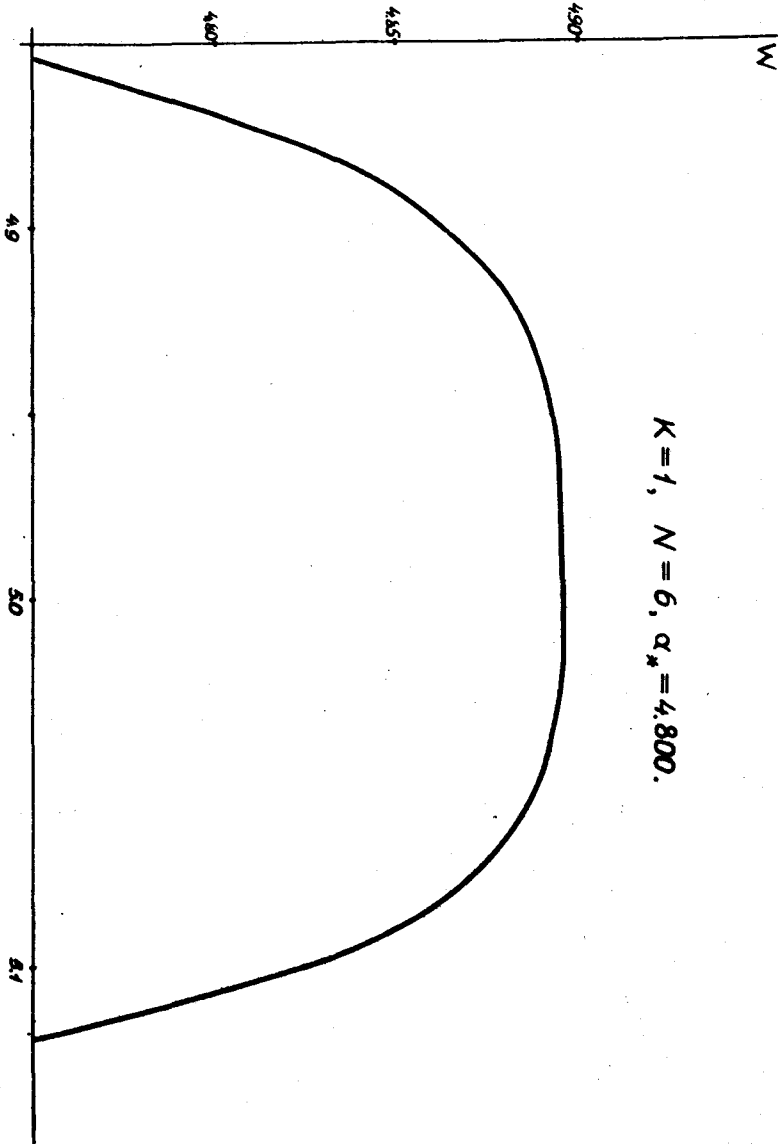


FIG. 22