

ӘОЖ 537.533.34

**Кесіктік электродтарға ие болатын гексапольдік-цилиндірлік
анализатордың электронды-оптикалық сұлбасын модельдеу**

**Modeling of the electron-optical scheme
of hexapole-cylindrical analyzer with front electrodes**

Сәулебеков А.О.¹, Трубицын А.А.², Қамбарова Ж.Т.¹

¹Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті (E-mail: saulebekov@mail.ru, kambarova@bk.ru);

²Рязань мемлекеттік радиотехникалық университеті, Ресей (E-mail: assur@bk.ru)

Разработаны численная модель и конструкция электронно-оптической схемы гексапольно-цилиндрического энергоанализатора с торцевыми электродами в режиме фокусировки «ось-кольцо». Проведен расчет траекторий заряженных частиц в численном виде, определены фокусирующие свойства гексапольно-цилиндрического энергоанализатора в режиме фокусировки «ось-кольцо». Получена аппаратная функция гексапольно-цилиндрического энергоанализатора с диапазоном начальных углов $\alpha = 25^\circ - 35^\circ$. Относительное энергетическое разрешение на полувисоте инструментальной функции гексапольно-цилиндрического анализатора составляет 0,77 % при светосиле $\Omega/2\pi = 2,22$ %. Теоретически рассчитанные параметры анализатора оказываются несколько лучше аналогичных параметров классического цилиндрического зеркала.

A numerical model and design of electron-optical scheme of hexapole-cylindrical energy analyzer with front electrodes in the focus regime mode «axis-ring» has been constructed. The calculation of charged particles trajectories in the numerical form has been done, the focusing properties of hexapole-cylindrical energy analyzer at the regime of «axis-ring» focusing has been determined. The instrumental function of hexapole-cylindrical analyzer with the initial angles in the range $\alpha = 25^\circ - 35^\circ$ have been obtained. The relative energy resolution at half height of instrumental function of the hexapole-cylindrical analyzer is 0,77 % at luminosity $\Omega/2\pi = 2,22$ %. The theoretical calculated parameters of analyzer are in somewhat better than the similar parameters of the classical cylindrical mirror.

Зарядталған бөлшектер шоғының затпен әсерлесу процестерін зерттеу іргелі, сондай-ақ қолданбалы мағынаға ие болатын көптеген ақпараттар алуға мүмкіндік береді. Соңғы уақытта дене бетіндегі және қатты дене мен вакуум шекарасында болатын түрлі процестерді зерттеуге қызығушылық айтарлықтай өсті.

Қалыңдығы бірнеше атомдық қабатты беттен объективті ақпаратты алу электр техника бұйымдарының өндірудегі принципіалды жаңа технологиялық процесін ғылыми түрде шешуге мүмкіндік береді. Тәжірибе деңгейінің жоғарылауына байланысты аналитикалық аспап құрастырудың әрі қарай дамуына талап қойылды. Өйткені бұл әр түрлі пішінді электродтарды дайындаудың технологиялық мүмкіндіктерінің өсуімен байланысты.

Қатты дене беттерінің атомды-молекулалық деңгейде зерттеудегі және бақылаудағы күшті әдіс — бұл электронды спектроскопия әдісі. Электронды спектроскопия әдісінің негізі қандай да бір қоздыру көзімен әсер еткендегі объект бетіндегі атомдардан шығатын электрондардың спектрлерін алу және энергиялық талдау болып табылады. Бұл спектрлер атом бетінің электрондық құрылымы туралы мынандай ақпаратқа ие: оның химиялық (элементар) құрылысы, заряд тығыздығының таралуы және валентті электрондардың энергиялық спектрлерімен анықталатын атомдардың электрондық күйлері.

Электрондық спектроскопия әдістерінде қолданылатын аспаптардың талдауы (Оже-спектроскопия, фотоэлектрондық спектроскопия, энергиялардың сипаттамалық шығындалу спектроскопиясы, рентгенді-оптикалық спектроскопия, ультракүлгінді спектроскопия және т.б.) аналитикалық аспап құрастыруда айналық оське симметриялы оптикаға бағытталғанын көрсетеді, бұл екі негізгі себептермен шартталған: энергия мен сезгіштік бойынша жоғары ажырату көрсеткіші мен жоғары жарық күші.

Элементар функцияларда немесе квадратураларда қозғалыс траекторияларын анықтау және қозғалыс теңдеуіндегі айнымалыларды бөлуге мүмкіндік беретін осьтік симметриялы электростатикалық өрістер класы шамадан тыс тар және жеткілікті қарастырылған. Бұл келесі өрістер және олардың суперпозициялары: цилиндрлік өріс ($V \sim \ln r$), сфералық өріс ($V \sim 1/r$), гиперболалық өріс ($V \sim z^2 - 1/r^2$), осы өрістердің суперпозициясы, симметрия осін бойлай бағытталған біртекті өріс ($V \sim E_z$).

Жоғарыда айтылған классикалық өрістердің зарядталған бөлшектер шоқтарының энергиясы ретінде потенциалдық мүмкіндіктері таусылды. Кейбіреулері электрондық спектрометрде бұрыннан қолданылады.

Аналитикалық әдістердің негізгі артықшылығы жалпы физикалық заңдылықтарды анықтау тұрғысынан маңызды болатын модельдейтін процестің параметрлері арасындағы жеткілікті қарапайым қатынастарды алу мүмкіндігі болып табылады. Бұл әдістердің бір кемшілігі — модельдерді идеализациялаудың жоғары дәрежесі.

Қазіргі кездегі эксперимент практикасы ұсынылған құрылғылардың параметрлерін нақты бағалауын қажет ететіндіктен, онда берілген әдістер құрылғыларды өңдеудің бастапқы сатыларының бірі ретінде ғана қарастыруға болады. Қорытынды нәтижелер тек сандық әдістердің көмегімен жасалынуы мүмкін. Аналитикалық шешімдерге ие болатын жүйелер класымен салыстырғанда сандық зерттеуді рұқсат ететін жүйелер класы принципіалды түрде шектелмеген.

Есептеуіш техника құралдарының өндіруінің қарқынды өсуі болашақта эксперименттік құрылғыларды синтездеу есептерін, соның ішінде аналитикалық есептерді бірінші жоспарға жылжытады, ал мұнда әмбебаптық және бағалау дәлдігіне ие болатын сандық әдістер негізгі роль атқарады.

Ионды- және электронды-оптикалық жүйелерді сандық модельдеу үш өзіндік бөлімнен құрылады:

- жұмыс көлемінде электростатикалық өрісті есептеу;
- жүйе өрісінде зарядталған бөлшектер траекторияларын есептеу;
- электронды-оптикалық жүйенің интегралдық сипаттамаларын есептеу: анықталған реттілікке ие болатын бұрыштық тоғыстау, дисперсия, ажырату қабілеті, абберациялық көмескілер және т.б.

Шынайы цилиндрлік спектрометрді құрастырудағы мәселелердің бірі жұмыс көлемін шектік өрістердің әсерінен қорғауды ұйымдастыруы болып табылады. Шынайы спектрометрде симметрия осіндегі цилиндрлік электродтардың созылықлығы және кесіктердегі шарттар көп мөлшерде талданатын бөлшектердің өту облысындағы өрістің таралуына әсер етуі мүмкін. Цилиндрлік өріске жеткілікті жақындауды сақтау үшін анализатордың талданатын бөлігінде цилиндрлік электродтарды созу немесе электродтардың бойлық өлшемдерін арттырмай арнайы шаралар жүргізу қажет. Электростатикалық спектрометрлерді құрастырудың тәжірибелерінен анықталған заң бойынша таралатын және потенциалдарға ие болатын қосымша электродтардың көмегімен жұмыс көлемін қорғау тәсілі мәлім. Мысалы, К.Зигбанның және т.б. [1] кітабында сипатталған сфералық типті секторлық электростатикалық спектрометрінде шектік өрістер сфералық өріс үшін есептелген потенциалға ие болатын үш майысқан біліктердің көмегімен компенсацияланады. Мұндай қорғау тәсілі ең қарапайым және тиімді болып табылады.

Жұмыс көлемін қорғауды ұйымдастырудың мәселесін шешу үшін цилиндрлік және дөңгелектік гексапольдің электростатикалық өрістерінен құрылған, бойлық өлшемдері кесіктік электродтарымен шектелген гексапольдік-цилиндрлік өріс негізінде жаңа айналық энергоанализаторды өңдеу [2] жұмыста ұсынылған.

Айналық анализатор сұлбаларының электронды-оптикалық сипаттамаларын анықтауға мүмкіндік беретін осьсимметриялық электростатикалық өрістердегі траекторияларды есептеудің аналитикалық әдісі [3] жұмыста өңделген. Бұл әдіспен [3] жұмыста кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік айналық анализатордағы траекторияларының есептелуі жүргізіліп, тоғыстаушы қасиеттері алынған. Теориялық түрде есептелген бұл анализатордың параметрлері классикалық цилиндрлік айнаның аналогиялық параметрлерінен бірнеше есе жоғары болып табылады. Цилиндрлік

айнаның және дөңгелектік гексапольдің өрістерінің суперпозициясының жағдайы үшін аналитикалық түрдегі потенциал келесі түрге ие:

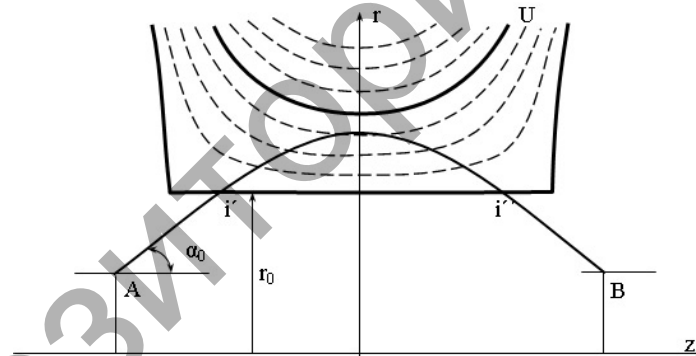
$$\varphi(r, z) = \mu \ln r + \gamma U_h(r, z),$$

мұндағы $U_h(r, z) = \frac{1}{2} \left[\ln r \left(z^2 - \frac{1}{2} r^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} r^2 - \frac{1}{2} \right]$ — дөңгелектік гексаполь; μ — цилиндрлік $\ln r$

өрістің салмақтық үлесін беретін коэффициент; γ — дөңгелектік гексапольдің салмақтық құраушысы.

$\mu = 1$ және $\gamma = -1$ үшін цилиндрлік өріс пен гексапольдің суперпозициясының сұлбасы 1-суретте көрсетілген осьсимметриялық электростатикалық айналық анализаторда жүзеге асырылады. Анализатор нольдік потенциалға ие болатын $r_0 = 1$ цилиндрлік электродтан және екі кесіктік электродтардан, құраушысы өрістің эквипотенциалымен сәйкес келетін U_0 потенциалды осьсимметриялық ауытқушы электродтан құрылады.

[3] жұмыста екінші ретті бұрыштық тоғыстаудың шарттарын қанағаттандыратын және шағылу параметрінен тәуелді есептелінген анализатордың негізгі электронды-оптикалық сипаттамалары келтірілген. Мұнда гексапольдік-цилиндрлік өрістің негізіндегі айналық энергоанализаторда бұрыштық тоғыстаудың бәріне мәлім сұлбалары іске асырылуы мүмкін: «сақина-ось», яғни сақиналық көз симметрия осінде нүктеге кескінделеді, және «ось-ось» сұлбасы, мұнда нүктелік көз нүктелік кескінді береді. Ең оңтайлы сұлба шағылу параметрі $P = 0,4892$ болатын «сақина-ось» тоғыстау сұлбасы таңдалған. Бұл сұлба талданатын бөлшектердің энергияларының өзгеруінен тәуелді көз кескінінің ығысу шамасын сипаттайтын энергия бойынша сызықтық дисперсиясының ең жоғарғы мәніне ие. Кесіктік электродтар анализатордың бойлық өлшемдерін шектеп, талданатын бөлшектер траекториясының өту облысындағы тежеуші өрісінің таралуына шектік өрістердің әсерлерін минимизациялауға мүмкіндік береді. Есептеулерден ішкі цилиндр бетінің бойымен кесіктік электродтар арасындағы қашықтық r_0 бірліктерімен $2\sqrt{2}$ құрайды. Кесіктік электродтардың беті радиал жазықтықтан үлкен емес ауытқуымен конустық бетімен аппроксимациялануы мүмкін.



1-сур. Кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік айналық анализатор: A — көз; i' — кіріс сақина көзі; i'' — шығыс сақина көзі; B — қабылдағыш

Жұмыста кесіктік электродтардан құрылған $\mu = 1$ және $\gamma = -1$ кезіндегі гексапольдік-цилиндрлік анализатордың электронды-оптикалық сұлбасының «ось-сақина» тоғыстау режимі үшін модельдеуі «Фокус» сандық бағдарламасы көмегімен жүргізілген.

«Фокус» бағдарламасы тұрақты және айнымалы электрлік өрістермен қоректену режиміндегі кез келген пішінді электродтардан құрылатын аксиалды-симметриялық электронды және ионды-оптикалық жүйелерді модельдеуге арналған. Бұл бағдарлама бірнеше модульдерден (графикалық редактор, электрлік өрістерді есептеу модулі, траекториялық талдау модулі) құрылады, олардың арасындағы ақпарат өзара тасымалдау мәліметтер файлдары көмегімен жүзеге асырылады.

Графикалық редактор модулі сәйкесті потенциал берілетін электродтар жүйесінің радиалды қимасын құрастыруға мүмкіндік береді. Әр электродтың қимасы оның ішкі кез келген нүктесіне қатысты сағат тіліне қарама-қарсы бағытталған тұйық контур түрінде кескінделеді.

Потенциалдың таралу функциясын есептеу модулінде сингулярлы және квази-сингулярлы интегралдарды есептеу әдістемесімен дамытылған шекаралық элементтер әдісі [4] іске асырылады. Бұл әдістің негізінде Дирихленің сыртқы есебі шешіледі, Дирихленің ішкі есепті шешумен салыстырған-

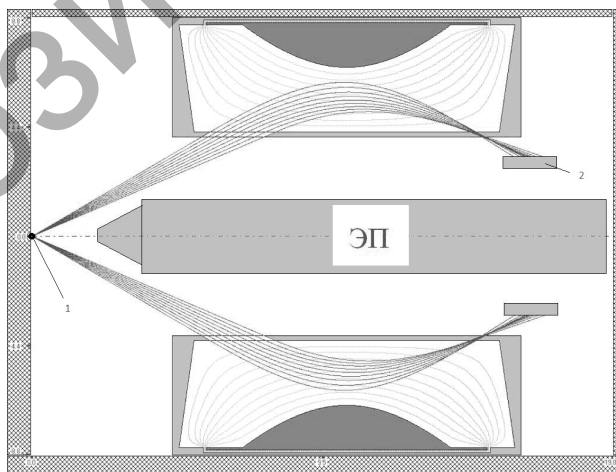
да бұл жағдайда конструкциялары нақты жағдайларға максималды жақын болатын электронды-оптикалық жүйелерді модельдеуге болады. Потенциалдың таралу функциясын есептеу модулі электродтардың модификациясын сандық түрде, өрістің есептелінетін облысын арттыру мақсатында конструкцияның қажетті масштабын, кейін таңдалған дәлдікпен электростатикалық өрістегі зарядталған бөлшектер траекторияларын есептеу үшін қолданылатын облыс шекарасында нормаль туынды потенциал мәндерінің массивін есептеуге мүмкіндік береді. Нормаль туындыларды есептеуден кейін, кеңістіктің кез келген нүктесіндегі потенциалды есептеу немесе таңдалған облыстағы потенциалдың таралуын есептеуге мүмкіндік туады. Ақырғы жағдайда потенциал массиві айнымалы электрлік өрістегі зарядталған бөлшектер траекторияларын модельдеу үшін қолданылады.

Электростатикалық өрістегі зарядталған бөлшектер траекторияларын модельдеу модулі бастапқы энергияға ие болатын және бастапқы бұрыштардың кейбір диапазоны үшін нүктелік немесе созылғынқы көзден ұшып шыққан зарядталған бөлшектердің траекториялар жиынын есептеуге мүмкіндік береді. Бұл модуль есептеу нәтижелерін графикалық және сандық түрде бере алады. Егер есептелген траекториялар саны 5-тен артық болса, онда жоғары ретті бұрыштық тоғыстау шартын анықтауы жүзеге асырылады. Анықтаудың нәтижелері тоғыстау реті, тоғыстаудың центрлік бұрышы және тоғыс нүктесінің координаталары болып табылады. Сонымен бірге бұл модульде зарядталған бөлшектердің бастапқы энергиялары бойынша электронды-оптикалық жүйенің өткізу функциясын (аппараттық функция) құру мүмкіндігі іске асырылады [5].

Сандық модельдеудің бірінші сатысында берілген анализатордың конструкциясы құрастырылды. Конструкциядағы электродтар зарядталған бөлшектердің қозғалысы үшін мөлдір деп таңдалған.

Электрондық оптикада зарядталған бөлшектің траекториясын E энергияның абсолютті мәні емес, ал $E/V = C$ қатынасы анықтайды. Мұндағы V — электронды-оптикалық сұлбасының ауытқушы немесе тоғыстаушы электродтың потенциалы. Бұл жағдайда V потенциалының әрбір мәні үшін коллектормен $R = \Delta E/E$ ажыратудың тұрақты мәнін қамтамасыз ететін $\Delta E = \Delta E(V)$ диапазонындағы бөлшектер тіркеледі. Сондықтан траекторияларды есептеу кезінде зарядталған бөлшектердің энергиясы E/V деп беріледі.

2-суретте $\mu = 1$ және $\gamma = -1$ кезіндегі кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік анализатордың электронды-оптикалық сұлбасындағы бастапқы бұрыштар 25° – 35° диапазоны үшін $X, Y (0,0)$ координаттағы нүктелік көзден ұшып шыққан анықталған $E/V = 1,3$ энергияларға ие болатын зарядталған бөлшектер траекторияларының жиыны келтірілген. Суреттен көрінетіндей, нүктелік көзден ұшып шыққан зарядталған бөлшектер шоғы айнаның өрісінен шағылып, цилиндрлік электродтың бетінде тоғысталады. Ал бұл «ось-сақина» тоғыстау режимінің орындалуын білдіреді. Есептеулерде бұрыштардың өзгеру қадамы 2° .



2-сур. Кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік анализатордың электронды-оптикалық сұлбасының физикалық түрде іске асыралатын аппроксимациясы: 1 — нүктелік көз; 2 — қабылдағыш; ЭП — электрондық пушка

Төменгі кестеде кесіктік электродтарға ие болатын $\mu = 1$ және $\gamma = -1$ кезіндегі гексапольдік-цилиндрлік анализатордың «ось-сақина» тоғыстау режимі үшін тоғыстаушы қасиеттерін есептеудің нәтижелері келтірілген.

Кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік анализатордың тоғыстаушы қасиеттері

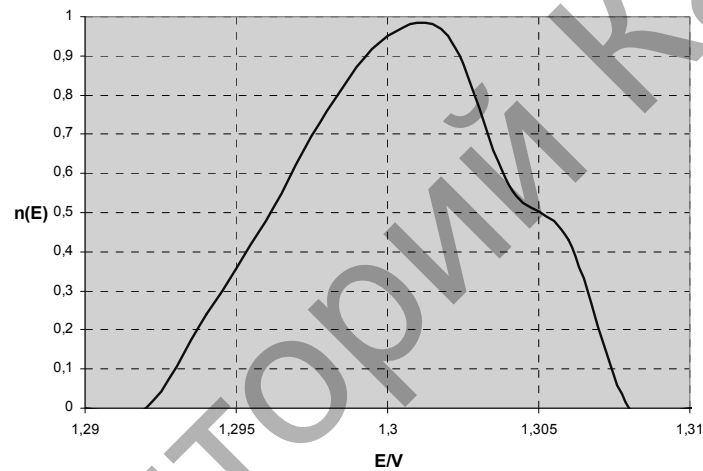
Тоғыстау реті	2
Тоғыстаудың центрлік бұрышы	32^0
Тоғыстаудың X координатасы	13,764
Тоғыстаудың Y координатасы	4,049
Шағылу параметрі	1

Энергия бойынша сызықтық энергиялық дисперсия келесі формуламен анықталған:

$$D = E_0(Rf_2 - Rf_1)/(E_2 - E_1).$$

Бұл үшін энергиялары $E_1 = 1,27E_0$ және $E_2 = 1,33E_0$ болатын екі траекториялардың тізбектік есептеуі жүргізілген. Сәйкесті энергияларға ие болатын траекториялардың соңғы нүктелерінің ордината мәндері келесідей: $Rf_1 = 4,545$; $Rf_2 = 4,733$. Берілген анализатордың сызықтық энергиялық дисперсиясы $D = 4$ -ке тең болды.

3-суретте кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік анализатордың электронды-оптикалық сұлбасының аппараттық функциясы көрсетілген.



3-сур. «Ось-сакина» тоғыстау режиміндегі кесіктік электродтардан құрылған гексапольдік-цилиндрлік анализатордың аппараттық функциясы

Қабылдағыш диафрагмасы радиусы ішкі цилиндрдің радиусынан өте кіші болатын $r \ll r_0$ дөңгелек саңылау болып табылды. Шығу диафрагмасының радиусы $r = 0,0143r_0$ болғандағы гексапольдік-цилиндрлік анализаторының $\Omega/2\pi = 2,22\%$ жарық күші кезіндегі аппараттық функциясының жартылай биіктігіндегі салыстырмалы энергиялық ажыратуы $0,77\%$ құрайды. Кесіктік электродтардан құрылған гексапольді-цилиндрлік энергоанализатордың теориялық түрде есептелген тоғыстаушы параметрлері классикалық цилиндрлік айналық энергоанализаторының аналогиялық параметрлерінен бірнеше есе жоғары болып табылады.

References

1. Zigban K., Nordling T., Falman A., Nordberg R. Electron spectroscopy. — М.: World, 1971. — P. 493.
2. Saulebekov A.O., Assylbekova S.N., Kambanova Zh.T. Calculation of the charged particles trajectories in the hexapole cylindrical field // Charged Particle Optics: 8th International conference handbook. — Singapore, 2010. — P. 77.
3. Ashimbaeva B.U., Chokin K.Sh. et al. Analyzers of the charged particles fluxes with the hexapole cylindrical field // Charged Particle Optics: 8th International conference handbook. — Singapore, 2010. — P. 179.
4. Trubitsyn A.A. Calculation of the singular integrals in the solution problem with method of Dirichle with boundary element method // Comput. Math. and Math. Physics Journal. — 1995. — Vol. 35. — № 4. — P. 124.
5. Trubitsyn A.A. The software «FOCUS» to simulate axi-symmetrical and planar electron (ion) optical systems // Charged Particle Optics: 8th International conference handbook. — Singapore, 2010. — P. 208.