

小型高分辨率 $^3\text{He}/^4\text{He}$ 质谱计的离子光学

韩守真 茅乃丰 李公攀

(中国原子能科学研究院, 北京)

邱 纯 一

(国家地震局地质研究所, 北京)

关键词 质谱计, 氦同位素地球化学, 离子光学, 象差修正, 计算机辅助设计(CAD)。

一、前 言

地球上氦同位素组成有三个层次: 地幔氦、地壳氦和大气氦。地幔氦是地球生成时保留下来的原生氦, ^3He 含量高, $^3\text{He}/^4\text{He}$ 比值约 10^{-5} ; 地壳氦是地壳中铀、钍等放射性元素蜕变过程中生成的, $^3\text{He}/^4\text{He}$ 比值约 $10^{-7}\sim 10^{-8}$; 大气氦是在地幔氦与地壳氦不断地向大气喷射和扩散, 而大气中氦又不断地向宇宙逃逸这样一个动态平衡中形成的, 低层大气中 $^3\text{He}/^4\text{He}$ 的比值稳定在 1.36×10^{-6} 。由于氦同位素地球化学对研究地球的形成历史、地壳运动情况、地震预报、矿产资源普查等都有重要意义, 现已成为最热门的同位素地球化学课题。但是, 进行这项很有价值的研究工作的国家在世界上只有少数几个, 而我国尚未开展, 主要原因是现有的氦同位素质谱计结构复杂、价格极贵。因此, 设计制造一种简易、小型、轻便、价廉的 $^3\text{He}/^4\text{He}$ 质谱计是一项很有意义的工作。为此, 本文对小型高分辨率 $^3\text{He}/^4\text{He}$ 质谱计的离子光学进行了探讨。

氦同位素质谱计要求具有高灵敏度与高分辨率。地壳样品中 ^3He 与 ^4He 的丰度相差 7~8 个数量级, 而且在荷质比等于 3 的峰位上除了 ^3He 之外还有 HD 与 H_3 , 它们的强度远高于 ^3He 。其中 H_3 是在质谱计离子源中形成的, 很不稳定, 对 ^3He 的干扰非常大。为了准确测定 ^3He , 必须将 ^3He 与 HD, H_3 分开。三者间最小质量差不到 $6 \times 10^{-3}\text{u}$, 因而要求质谱计质量分辨率大于 512。为了仪器的小型与高分辨, 本文提出了由两级组成的串列式 $^3\text{He}/^4\text{He}$ 质谱计, 前级用于 ^3He (包括 HD 与 H_3) 与 ^4He 的分析, 后级用于 ^3He 与 HD, H_3 的分析。

二、质谱计一级光学设计

一级光学设计是整个设计中很重要的一个环节, 因为除了象差之外, 系统的光学特性主要是由一级参数决定的。

1. 总体结构

设计要求仪器对于 ^3He , ^4He 以及 ^3He , HD, H_3 都能进行分析。其中 ^3He 与 H_3 的相对质量差为 0.002468, ^3He 与 HD 间为 0.001955。从 ^3He , HD, H_3 分析要求出发, 仪器质量分辨率应大于 512。但是这个要求对于相对质量差很大, 因而色散值很大的 ^3He 和 ^4He 的分析不适合。因此质谱计的离子光学系统分为前后两级, 分别用于 ^3He (包括 HD 与 H_3), ^4He 以及 ^3He , HD, H_3 的分析。考虑到加工的方便, 这两级都采用对称式结构。结果表明, 上述的总体方案对于减小仪器体积, 消除二级象差都是行之有效的。

2. 离子源参数

增大离子源出口缝宽度可以提高仪器的灵敏度, 但引起分辨率的下降; 而减小缝宽可以提高分辨率, 却降低了灵敏度。综合考虑分辨率与灵敏度的要求, 选定了如下的离子源参数:

缝宽 0.01cm, 缝高 0.40cm, x 平面上半散角 9.0 mrad,
 y 平面上半散角 4.5mrad, 加速电压 3.0 kV。

3. 前级一级离子光学参数

该级用于 ^3He (包括 HD 与 H_3) 与 ^4He 的分析。要求束流在接收器处水平方向 (x 平面) 成象, 同时对成象处束的高度也有一定的限制。

样品中 ^3He 和 ^4He 的丰度相差悬殊, 为了尽量减少强度大的 ^4He 质谱峰拖尾对 ^3He 质谱峰的影响, 选取前级质量色散为 $D=6.0\text{cm}$ 。由于色散不大, 采用均匀场分析磁铁, 相应的偏转半径 $R_{m1}=6.0\text{cm}$, 所需的磁感强度 $B_1=2285\text{G}$ 。

由 x 平面上对称成象条件, 可以得到物距 l'_{m1} 、象距 l''_{m1} 与分析磁铁偏转半径 R_{m1} 、偏转角 ϕ_{m1} 之间关系为:

$$l'_{m1}=l''_{m1}=l_{m1}=R_{m1}\text{ctg}(\phi_{m1}/2) \quad (1)$$

ϕ_{m1} 的选取, 一般根据仪器的整体布局来确定。当 $\phi_{m1}=90^\circ$ 时, 出、入射束相互垂直, 对于系统前、后级间连接比较方便, 故选取 $\phi_{m1}=90^\circ$, 则 $l_{m1}=6.0\text{cm}$ 。

利用束流 CAD 软件包 TRANSPORT-EM/PC^[1] 完成了前级的束流传输计算, 并从束包络和有效均匀场区要求出发, 确定磁铁的工作气隙高度 $G_1=0.8\text{cm}$, 极面宽度 $W_1=2.2\text{cm}$ 。

4. 后级一级离子光学参数

该级与前级串联用于 ^3He 与 HD, H_3 的分析。要求束在接收器处水平方向成象, 垂直方向束高度较小, 整个系统有足够的分辨率 ($\frac{M}{\Delta M} > 512$) 与灵敏度。为了使计算更有一般性, 在描述系统的质量分辨率时, 可以先不考虑接收器缝宽的影响, 这时质量分辨率 P = 质量色散/象宽。本文在下面的讨论中, 系统的质量分辨率皆采用如上定义的 P 值。

(1) 分析磁铁场梯度 n 由于后级系统对分辨率要求较高, 为了仪器的小型与轻便, 宜采用径向非均匀场磁铁, 其在中间平面上的场分布可以表示为:

$$B(R) = B_0 \left[1 - n \left(\frac{R - R_0}{R_0} \right) + \beta \left(\frac{R - R_0}{R_0} \right)^2 + \dots \right] \quad (2)$$

式中 B_0 是中心轨道 R_0 处的磁感强度, n 为场梯度, β 为二次项系数。对称安排下, 偏转半径为 R_m 的这种非均匀场磁铁的分辨率为:

$$P = \frac{1}{1-n} \cdot \frac{R_m}{s_1 + \psi} \quad (3)$$

式中 s_1 为物宽, ψ 表示象差。可见, 当 $n > 0.5$ 时, P 值可显著提高。但 n 的取值也不可太大, 因为由一级成像条件出发, 求得磁铁边界与物点、象点的距离均为:

$$l_m = R_m \frac{\text{ctg}(\sqrt{1-n} \phi_m / 2)}{\sqrt{1-n}} \quad (4)$$

从 (4) 式可见, l_m 随着 n 的增大而增大, 另外接收器处束的高度也随 l_m 的增大而增高。当 $n > 0.8$ 时, P 值虽有很大提高, 但系统总长与接收器处束高也急剧增大。综合考虑这些因素, 选取 $n = 0.75$, 这时系统总长度较小, 且分辨能力已是同尺寸均匀场磁铁的 4 倍。

(2) 分析磁铁偏转半径 R_{m2} 后级分辨率与 R_{m2} 成正比。由于高分辨率的要求, R_{m2} 的取值不可太小。但是 R_{m2} 的增大不但使得系统总长度增长还将大大影响仪器的体积与重量。经综合考虑, 选取 $R_{m2} = 15.0\text{cm}$ 。由于采用径向非均匀场, 磁铁的质量色散值与 R_m 等于 60.0cm 的均匀场磁铁相当。

表 1 系统参数表
Table 1 The parameters of system

元件及光学参数		前 级	后 级	整个系统
分 析 磁 铁	偏转半径 R_m	6.0cm	15.0cm	
	偏 转 角 ϕ_m	90°	180°	
	极面宽度 W	2.2cm	5.0cm	
	气隙高度 G	0.8cm	2.0cm	
	场 梯 度 n	0	0.75	
	中心轨道磁感强度 B	2285 G	914 G	
物点与分析磁铁边界距离 l_m'		6.0cm	30.0cm	1.28m
象点与分析磁铁边界距离 l_m''		6.0cm	30.0cm	
系统总长度				
磁极间束包络最大全宽度		0.16cm	0.76cm	
磁极间束包络最大全高度		0.48cm	0.96cm	
接收器处束全高度		0.53cm	1.92cm	
质量分辨率 P	一级近似	600	5400	
	二级修正后	250	3800	

(3) 分析磁铁偏转角 ϕ_{m2} 一级近似下对称结构系统的分辨率与 ϕ_m 无关。但 (4) 式表明系统总长度将随 ϕ_m 的减少而增大。因此选择较小的 ϕ_{m2} 虽可使磁铁重量有所减少, 却由于系统总长度的增加使仪器整体尺寸加大, 同时出、入射束之间夹角较小也不利于仪器的整体安排。故选取 $\phi_{m2} = 180^\circ$, 这时 $l_{m2} = 30.0\text{cm}$, 出、入射束相互平行, 有利于减小整体尺寸。

(4) 极面宽度 W_2 与工作气隙高度 G_2 从减少仪器的体积与重量出发, W_2 与 G_2 应选得小一些。但 W_2 值一定要保证束流在极间运动时处于要求的场区中, G_2 值应保证传输管道内壁高度大于极间束包络高度的最大值, 以减少束流损失。根据束流 CAD 软件包计算结果, 确定极面宽度 $W_2=5.0\text{cm}$, 工作气隙高度 $G_2=2.0\text{cm}$ 。至此, 系统的一级光学设计已经完成。

5. 系统的参数与光学性能

系统的整体结构示于图 1。表 1 中列出了系统的前、后级及整体的各种参数。图 2 为利用束流 CAD 软件包得到的束包络图。由光学参数可知, 系统的一级光学设计完全满足仪器性能指标的要求。

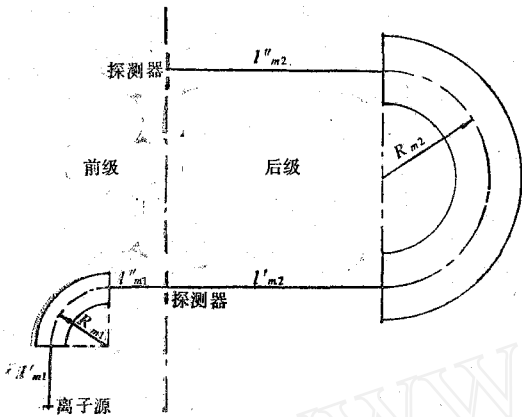


图 1 系统的总体结构

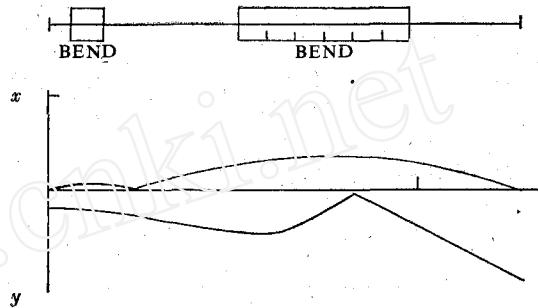


图 2 束包络图

Fig.1 The general sketch of the ion optical system

Fig.2 Beam envelopes

三、质谱计二级光学设计

二级与高级光学设计的主要内容是修正各级象差。二级计算中, 象的全宽度除了一级象宽外, 还要加上二级象差。这时系统的光学性能明显下降, 分辨率 P 低至 300 左右, 不满足设计指标的要求。因此二级象差的修正对于高分辨率带电粒子光学系统的设计是十分重要的。

引进磁多极分量可以修正高级象差。利用纯多极元件、非均匀场或磁铁入口、出口边界的旋转与弯曲都可以引进多极分量。若用 A_0 表示 n 级象差系数 $A(x_i/x^i \theta^m y^j \phi^v \delta^x)$ 的初始值, 由讨论可知^[1], 修正这一象差所需的单位长度上 n 级多极强度 K_n 应满足: $A_0 + \frac{\partial A}{\partial K_n} K_n = 0$ 。当引起二级象差的主要系数项不止一个时, 仅引入一个多极进行修正, 效果是有限的。为了达到较好的修正效果, 这时应引入多个多极分量 (它们可以是几种不同类型的多极) 对几个主要的象差系数项都进行修正, 得:

$$\begin{cases} A_{10} + \frac{\partial A_1}{\partial K_{n1}} K_{n1} + \frac{\partial A_1}{\partial K_{n2}} K_{n2} + \dots = 0 \\ A_{20} + \frac{\partial A_2}{\partial K_{n1}} K_{n1} + \frac{\partial A_2}{\partial K_{n2}} K_{n2} + \dots = 0 \\ \dots \dots \dots \\ A_{m0} + \frac{\partial A_m}{\partial K_{n1}} K_{n1} + \frac{\partial A_m}{\partial K_{n2}} K_{n2} + \dots = 0 \end{cases}$$

求解上述方程或方程组，即可求得修正象差所需的 K_n 值。本文提出的串列式质谱计中引入了两种类型的六极分量对两个主要的二级象差系数项进行修正。这两种六极分量分别由后级分析磁铁非均匀磁场中非零二次项系数 β 与弧形入射面产生。

众所周知，分析磁铁的非均匀磁场可以在锥形极面基础上通过垫补实现。由 (2) 式表示的非均匀磁场，其二次项系数 β 产生的六极分量，强度为 $K_2 = \frac{\beta}{R^3}$ 。若单独引入 β 修正二级象差系数项 (x/θ^2)，当 $\beta = 0.86$ 时，修正效果最好， P 值上升到 1500 左右。由于上述结果尚未满足设计要求，故用弯曲磁铁入口界面的方法引入另一个六极分量，其强度 $S_2 = -\frac{1}{2RR_0}$ ，与二次项系数 β 一起，同时对象差系数项 (x/θ^2) 及 (x/y^2) 进行修正。上式中 R_0 表示分析磁铁中心轨道半径， R 是界面弯曲的曲率半径，负号表示弧面是凹状的。

束流 CAD 软件包计算结果表明，引入两种类型六极分量时，在 $\beta = 0.60$ ， $R = -12.4\text{cm}$ 情况下，二级象差修正效果最好，系统质量分辨率 P 达到 3800，满足仪器指标的要求，且有相当的裕量。对于前级部分，考虑二级象差后，质量分辨率 P 为 250 左右，已满足要求，无须进行修正。二级修正后，整个传输线上束包络参数与一级计算结果非常接近。

上面对高级象差的讨论，只精确到二级。这是因为束流各参数的初始值都很小，三级以上高级象差的影响可以忽略。

四、机械公差

由于条件限制，加工误差是难以避免的。这里讨论锥形极面锥形角 α (图 3) 的变化对束流光学特性的影响。

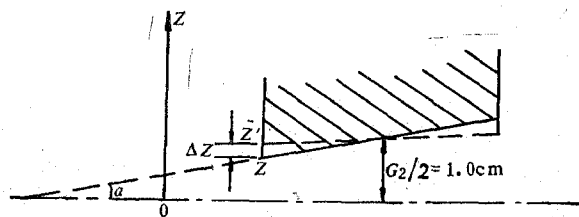


图 3 锥形角误差示意图
Fig.3 The sketch of the conical angle error

$\Delta z = z' - z$
 z 与 z' 分别表示极面外沿的设计值与加工实际值。

由于实际锥形角的偏差，引起了场梯度 n 的改变，破坏了原来 $\partial x/\partial \theta = 0$ 的一级成像条件，使系统性能下降。调整后级分析磁铁出口界面与接收器间距离 l''_{m2} ，可以对象差进行修正。结果表明，只要适当改变 l''_{m2} 的长度，即可取得很好的修正效果，在误差值 $\Delta z = \pm$

0.05mm 情况下,都可使系统的质量分辨能力 P 恢复到 3800 左右。由于 α 的加工偏差引起的 l''_{m2} 的调整量相当大,例如当 $\Delta z = \pm 0.05\text{mm}$ 时,对应的 $\Delta l''_{m2} \approx \mp 10\text{cm}$,这对仪器的安装,调试都是不利的。因此除了加工中应尽量提高精度外, Δz 的公差确定在 $-0.01 \sim +0.03\text{mm}$ 比较适合,这时对应的 $\Delta l''_{m2}$ 为 $+2 \sim -6\text{cm}$,这样既留出了一定的伸缩余地,又不致因 $\Delta l''_{m2}$ 太大而影响整体结构。在输运管道中装入一定数量可调节长度的特殊管段,即可实现对 l''_{m2} 长度的调整。

五、结 束 语

本文对 $^3\text{He}/^4\text{He}$ 质谱计离子光学进行了比较全面的讨论,特别在采用径向非均匀场分析磁铁与二级象差修正方面做了详尽的分析。根据设计参数值,仪器体积小于 $0.5 \times 0.7 \times 0.2\text{m}^3$,重量小于 50kg,功耗小于 1.2 kW,质量分辨率 P 理论值达到 3800,满足小型、轻便、低功耗的要求。文中所述的方法,对于类似的离子光学系统设计具有普遍意义。

设计中有关束流输运的计算,由束流 CAD 软件包 TRANSPORT-EM/PC 完成,有关磁场的计算由 CERN-POISCR 程序包^[2]在 CYBER-170/825 计算机上完成。

设计中与刘炳寰同志进行了有益的讨论,谨表谢意。

参 考 文 献

- [1] 茅乃丰等,束流 CAD 软件包 TRANSPORT-EM/PC,中国原子能科学研究院资料,北京,1986 年 10 月。
- [2] Holsinger, R. et al., The Cern-Poisson Package (POISCR) User Guide, Cern Computer Centre Program Library, 1984.

(编辑部收到日期:1987 年 8 月 4 日)

THE ION OPTICS OF A MINIATURE $^3\text{He}/^4\text{He}$ MASS SPECTROMETER OF HIGH RESOLUTION

HAN SHOUZHEN MAO NAIFENG LI GONGPAN

(China Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275, Beijing)

QIU CHUNYI

(Institute of Geology, State Seismology Bureau, Beijing)

ABSTRACT

To measure the isotopic abundance ratio of ^3He and ^4He in samples by mass spectrometers is an important detection mean for helium isotope geochemistry research. A symmetrically arranged tandem $^3\text{He}/^4\text{He}$ mass spectrometer is described in the paper. The front stage, used to analyse ^3He (including HD and H_3) and ^4He , is a homogeneous analysing magnet with a bending angle of 90° and a bending radius of 6 cm. The end stage, used to analyse ^3He , HD and H_3 , is a non-homogeneous analysing magnet with a bending angle of 180° , a bending radius of 15 cm and a magnetic field gradient of 0.75. Because of the use of the non-zero second order coefficient β and curved entrance face of the later magnet for eliminating second order aberrations, the resolving power of the system is notably improved, and theoretically reaches about 3800.

Key words Mass spectrometer, Helium isotope geochemistry, Ion optics, Correction of aberrations, Computer-aided design (CAD).