

УДК 519.248.621.384.8

Многокритериальная оптимизация магнитных масс-анализаторов с однородным полем. Абакумова Е.В., Саченко В.Д., Туртия С.Б. // Научное приборостроение. Электронно-ионная оптика. Л.: Наука, 1989, с. 45-54.

Исследуется вопрос оптимизации статических магнитных масс-анализаторов с однородным полем по нескольким критериям одновременно. В качестве критериев выбраны разрешающая способность, угол наклона, кривизна линии фокусов и коэффициент дисперсии по массе, представлены варианты ионно-оптических систем магнитных секторных масс-анализаторов, которые могут быть применены при разработке статических масс-спектрометров. Лит. - 7 назв., ил. - 1.

Е.В.Абакумова, В.Д.Саченко, С.Б.Туртия (НТО АН СССР)

## МНОГОКРИТЕРИАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ МАСС-АНАЛИЗАТОРОВ С ОДНОРОДНЫМ ПОЛЕМ

Магнитные масс-анализаторы с однородным полем нашли широкое применение в масс-спектрометрии и в различных вариантах используются в качестве основного диспергирующего элемента масс-спектрометра, определяя все важнейшие его характеристики — разрешающую способность, пропускание, диапазон масс и ряд других параметров. Теоретическое изучение фокусирующих и диспергирующих свойств таких анализаторов началось давно и к настоящему времени известно большое разнообразие вариантов их построения [1-3]. Однако на практике используются (включая и современные магнитные масс-спектрометры) лишь отдельные решения, предложенные много лет назад.

Объясняется это, по-видимому, известным разрывом между теоретическими работами, посвященными, в большинстве своем, изучению тех или иных аналитических свойств магнитных анализаторов, и реальными проблемами, стоящими перед разработчиками-конструкторами при выборе наиболее подходящего технического решения, удовлетворяющего совокупности альтернативных требований. В отсутствии возможности оптимального выбора решающими аргументами в пользу выбираемого решения выступают отдельные общепринятые факторы, что и предопределяет ограниченное число используемых на практике ионно-оптических систем. Так, например, широкое использование ионно-оптической системы Кросса (Cross W.S., RSI 4931, 22, № 10, p. 717-722) обусловлено сравнительно большой величиной коэффициента дисперсии и наличием стигматической фокусировки, хотя упомянутые достоинства сочетаются с невысоким качеством фокусировки (следствие больших величин аберрационных коэффициентов, присущих указанной системе), малым углом наклона линии фокусов к оптическому лучу и большой искривленностью последней (что является особенно большим недостатком в многоколлекторном варианте анализатора). Справедливости ради отметим, что указанная ионно-оптическая система (ИОС) была впервые предложена в то время, когда теория магнитных анализаторов еще была недостаточно развита, чтобы можно было учесть и скорректировать перечисленные недостатки. Однако современный уровень требований к магнитным масс-спектрометрам с одновременной регистрацией нескольких линий масс-спектра анализируемого вещества, в особенности требований по точности измерения массовых чисел и увеличения их диапазона вызывает необходимость совершенствовать качество фокусировки ионных пучков на линии фокусов и улучшать форму последней. Решению этих задач и посвящена эта статья.

Для решения поставленной задачи можно использовать, в принципе, методы однокритериальной оптимизации [4], однако они обладают весьма существенным недостатком: результат оптимизации полностью определяется субъективно устанавливаемыми значениями весовых коэффициентов критериев, входящих в состав целевой функции, и, как правило, отражает уровень желаемого компромисса между величинами критериев в случае, когда они альтернативны; получаемое множество компромиссных решений не позволяет оценить реальную "стоимость" устанавливаемых критериев и их взаимное влияние. В связи с отмеченным для решения поставленной задачи наиболее приемлемой представляется непосредственно многокритериальная постановка, позволяющая в качестве решения получить множество всех возможных компромиссных вариантов и выяснить значимость учитываемых в процессе оптимизации критериев.

Выберем в качестве критериев оптимизации ИОС следующие величины: разрешающую способность  $R$ , коэффициент дисперсии по массе  $D$ , угол наклона линии фокусов  $\varphi$ , среднеквадратичное отклонение линии фокусов от прямой в заданном диапазоне одновременно регистрируемых масс  $\sigma$  и сформулируем основные положения теории многокритериальной оптимизации применительно к рассматриваемому случаю. Пусть  $X \subset R^n$  множество варьируемых переменных (рисунок): входное ( $\varepsilon'$ ) и выходное ( $\varepsilon''$ ) плечи анализатора, угол отклонения оптической оси в магнитном поле  $\varphi$ , углы наклона входной и выходной границ поля  $\varepsilon'$  и  $\varepsilon''$  и радиусы их кривизн  $r'$ ,  $r''$ . Обозначим  $Y \subset R^m$  — множество значений критериев оптимизации:  $Y = Y_1, \dots, Y_m$ ;  $Y_i = f_i(x)$ ,  $x \in X$ ,  $i = 1, m$ . Для удобства сформируем все критерии таким образом, чтобы целью многокритериальной оптимизации являлась минимизация компонент целевой вектор-функции:

$$F(x) = \langle f_1(x), \dots, f_m(x) \rangle \rightarrow \min, x \in X. \quad (1)$$

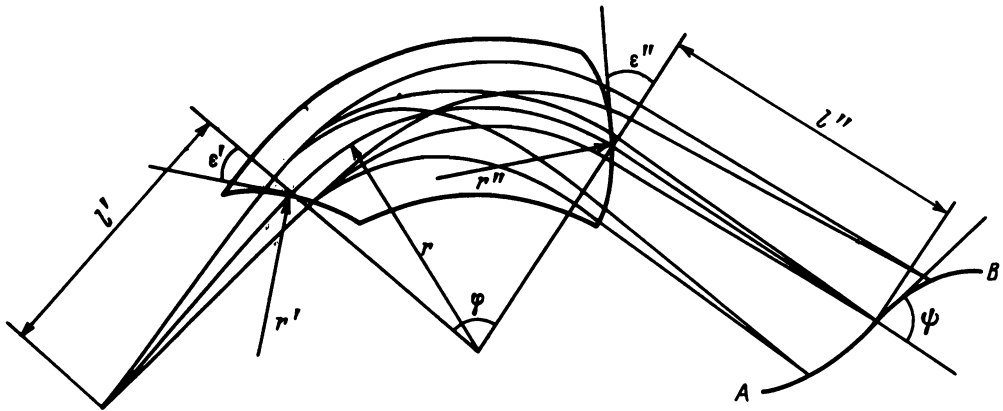


Схема магнитного анализатора

В соответствии со сказанным выберем  $f_1 = -R$ ,  $f_2 = -\psi$ ,  $f_3 = -D$ ,  $f_4 = \delta$ . Множество решений этой задачи принято называть множеством эффективных решений  $E$ , а множество  $\mathcal{P} = F(E)$  — множеством Парето [5]. Следует отметить, что в отличие от случая однокритериальной оптимизации, где минимум целевой функции на заданном множестве понимается как наименьшее значение этой функции в рассматриваемой области, в случае векторной оптимизации множество решений задачи (1) понимается как множество значений  $x^* \in E$ , соответствующих значениям вектор-функции  $F(x)$ , которые нельзя уменьшить на множестве  $X$  одновременно по всем компонентам. То есть не существует  $x' \in X$ :  $x' \neq x^*$ ,  $f_i(x') \leq f_i(x^*)$  для всех  $i = \overline{1, m}$  одновременно, причем по одному из критериев имеет место строгое неравенство. Второй этап оптимизации состоит в выборе из полученного множества Парето тех компромиссных решений, которые субъективно в наибольшей степени отвечают решению конкретной практической задачи. На этом этапе, в котором непосредственно участвует конструктор-разработчик, учитываются либо дополнительные условия, не входящие в критерий оптимизации, либо уровень допустимых вариаций критериев существенно ограничивается; в последнем случае возможна автоматизация выбора приемлемых решений путем сравнительного анализа с помощью ЭВМ полученных на первом этапе оптимальных в указанном выше смысле решений и их машинной отбраковки.

М а т е м а т и ч е с к а я   ф о р м у л и р о в к а   к р и т е р и е в

Разрешающая способность масс-анализатора определяется формулой [6]:

$$R = \frac{D \cdot r}{M S_u + S_{np} + S_{ad}},$$

где  $S_u$  — ширина выходной щели источника,  $S_{np}$  — ширина щели приемника,  $M$  — коэффициент оптического увеличения,  $D$  — коэффициент дисперсии по массе,  $r$  — радиус осевой орбиты масс-анализатора,  $S_{ad}$  — абберационная ширина:

$$S_{\alpha\delta} = \max_{\alpha} y(\alpha) - \min_{\alpha} y(\alpha), \quad \alpha = \{\alpha_i, i = \overline{1,6}\},$$

где  $y(\alpha)$  – ордината следа траекторий в плоскости приемника,  $\alpha_i$  – начальные данные, характеризующие эмиттанс пучка на выходе из источника:  $\alpha_1, \alpha_2$  – тангенсы углов вылета, соответственно, в горизонтальном и вертикальном направлениях,  $\alpha_3, \alpha_4$  – относительные значения горизонтальной и вертикальной координат (в единицах радиуса  $r$ ),  $\alpha_5$  и  $\alpha_6$  – относительные энергия и масса. Величина  $y(\alpha)$  представляется в виде полипараметрического степенного ряда:

$$y(\alpha) = \sum_{i=2,4} \Delta_i \alpha_i + \sum_{i,j=2,4} \Delta_{ij} \alpha_i \alpha_j + \sum_{i,j=2,4} \Delta_{ij} \alpha_i \alpha_j^2 + \dots,$$

в котором коэффициенты  $\Delta_i, \Delta_{ij}$  вычисляются стандартным путем [6]. Для случая магнитного анализатора с наклонными и криволинейными границами они выражаются следующими формулами:

$$\Delta_{i,lj} = \mu_{i,lj} + \lambda'' \nu_{i,lj}$$

$$\mu_1 = \mu_{1a} + \lambda' \mu_{1b}$$

$$\nu_1 = \nu_{1a} + \lambda' \nu_{1b}$$

$$\mu_{1a} = \sin \varphi$$

$$\nu_{1a} = \frac{\cos(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''}$$

$$\mu_{1b} = \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos \varepsilon'}$$

$$\nu_{1b} = -\frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon' \cos \varepsilon''}$$

$$\mu_3 = \mu_{1b}$$

$$\nu_3 = \nu_{1b}$$

$$\mu_5 = \frac{1}{2}(1 - \cos \varphi)$$

$$\nu_5 = \frac{1}{2} \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \operatorname{tg} \varepsilon'' \right)$$

$$\mu_6 = \mu_5$$

$$\nu_6 = \nu_5$$

$$\mu_{11} = \mu_{11a} + \lambda' \mu_{11b} + \lambda'^2 \mu_{11c}$$

$$\mu_{11a} = \left( \frac{\sin^2 \varphi}{\cos^2 \varepsilon''} - 1 + \cos \varphi \right) / 2$$

$$\mu_{11b} = \frac{\sin \varphi \cdot \cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos \varepsilon' \cos^2 \varepsilon''} - \operatorname{tg} \varepsilon' \left( 1 - \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos \varepsilon'} \right)$$

$$\mu_{11c} = -\frac{1}{2} \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon' \cos \varepsilon''} \cdot \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' + \varepsilon'')}{\cos \varepsilon' \cos \varepsilon''} - \frac{\sin \varphi}{2 \cos^3 \varepsilon'} \cdot \delta'$$

$$\nu_{11} = \nu_{11a} + \lambda' \nu_{11b} + \lambda'^2 \nu_{11c}$$

$$\nu_{11a} = -\frac{1}{2} \left( \operatorname{tg} \varepsilon'' \frac{\cos^2(\varphi - \varepsilon'')}{\cos^2 \varepsilon''} + \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} \right) - \frac{\sin^2 \varphi}{2 \cos^3 \varepsilon''} \cdot \delta''$$

$$\nu_{11b} = -\left( \operatorname{tg} \varepsilon' - \operatorname{tg} \varepsilon'' \frac{\cos(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} \right) \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon' \cos \varepsilon''} - \frac{\sin \varphi \cdot \cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos \varepsilon' \cos^3 \varepsilon''} \cdot \delta''$$

$$\nu_{11c} = -\frac{1}{2} \left( \operatorname{tg} \varepsilon'' \cdot \frac{\sin^2(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos^2 \varepsilon' \cos^2 \varepsilon''} + \frac{\cos(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} \cdot \frac{\delta'}{\cos^3 \varepsilon'} + \frac{\cos^2(\varphi - \varepsilon')}{\cos^2 \varepsilon'} \cdot \frac{\delta''}{\cos^2 \varepsilon''} \right)$$

$$\mu_{13} = \mu_{11b} + 2\lambda' \mu_{11c}$$

$$\nu_{13} = \nu_{11b} + 2\lambda' \nu_{11c}$$

$$\mu_{33} = \mu_{11c}$$

$$\nu_{33} = \nu_{11c}$$

$$\mu_{15} = \mu_{15a} + \lambda' \cdot \mu_{15b}$$

$$\mu_{15a} = \frac{\sin \varphi (1 - \cos \varphi)}{2 \cos^2 \varepsilon''}$$

$$\mu_{15b} = \frac{1}{2} + \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')}{2 \cos \varepsilon'} \left( \tan^2 \varepsilon'' - \frac{\cos \varphi}{\cos^2 \varepsilon''} \right)$$

$$\nu_{15} = \nu_{15a} + \lambda' \cdot \nu_{15b}$$

$$\nu_{15a} = -\frac{1}{2} \left[ \tan \varepsilon'' \frac{\cos(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} \cdot \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \tan \varepsilon'' \right) + (1 - \cos \varphi) \frac{\sin \varphi}{\cos^3 \varepsilon''} \cdot \delta'' \right]$$

$$\nu_{15b} = \frac{1}{2} \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon' \cos \varepsilon''} \left[ 1 + \tan \varepsilon'' \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \tan \varepsilon'' \right) \right] - \frac{1}{2} \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')(1 - \cos \varphi)}{\cos \varepsilon' \cos^3 \varepsilon''} \delta''$$

$$\mu_{16} = \mu_{15}$$

$$\nu_{16} = \nu_{15}$$

$$\mu_{35} = \mu_{15b}$$

$$\nu_{35} = \nu_{15b}$$

$$\mu_{36} = \mu_{35}$$

$$\nu_{36} = \nu_{35}$$

$$\mu_{55} = \frac{1}{8} (1 - \cos \varphi) \left( \frac{1 - \cos \varphi}{\cos^2 \varepsilon''} - 3 \right)$$

$$\nu_{55} = -\frac{1}{8} \left\{ \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \tan \varepsilon'' \right) \left[ \tan \varepsilon'' \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \tan \varepsilon'' \right) + 3 \right] + \frac{(1 - \cos \varphi)^2}{\cos^3 \varepsilon''} \delta'' \right\}$$

$$\mu_{56} = \frac{1}{8} (1 - \cos \varphi) \left( \frac{1 - \cos \varphi}{\cos^2 \varepsilon''} - 1 \right)$$

$$\nu_{56} = -\frac{1}{4} \left( \tan \varepsilon'' + \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} \right) \left[ \tan \varepsilon'' \left( \tan \varepsilon'' + \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} \right) + 1 \right]$$

$$\mu_{66} = \mu_{55}$$

$$\nu_{66} = \nu_{55}$$

$$\mu_{22} = \mu_{22a} + \lambda' \cdot \mu_{22b} + \lambda'^2 \cdot \mu_{22c}$$

$$\mu_{22a} = -\frac{1}{2} \varphi^2 \sec^2 \varepsilon'' - \frac{1}{2} (1 - \cos \varphi)$$

$$\mu_{22b} = \tan \varepsilon' \left( 1 - \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos \varepsilon'} \right) - \sec^2 \varepsilon'' \cdot \varphi (1 - \varphi \tan \varepsilon')$$

$$\mu_{22c} = -\frac{1}{2} \tan^2 \varepsilon' \left( 1 - \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos \varepsilon'} \right) + \frac{1}{2} \frac{\cos(\varphi - \varepsilon')}{\cos^3 \varepsilon'} - \frac{1}{2} \frac{(1 - \varphi \tan \varepsilon')^2}{\cos^2 \varepsilon''} + \frac{\sin \varphi}{2 \cos^3 \varepsilon'} \delta'$$

$$\nu_{22} = \nu_{22a} + \lambda' \nu_{22b} + \lambda'^2 \nu_{22c}$$

$$\nu_{22a} = -\frac{1}{2} \left[ \frac{\sin(\varphi - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \tan \varepsilon'' - \tan^2 \varepsilon'' \varphi (2 - \varphi \tan \varepsilon'') - \frac{\varphi^2}{\cos^3 \varepsilon''} \delta'' \right]$$

$$\nu_{22b} = \tan \varepsilon' \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon' \cos \varepsilon''} + \tan \varepsilon'' \right) + \tan^2 \varepsilon'' \left[ 1 - 2 \tan \varepsilon' \cdot \varphi \tan \varepsilon'' (1 - \varphi \tan \varepsilon') \right] + \frac{\varphi (1 - \varphi \tan \varepsilon')}{\cos^3 \varepsilon''} \delta''$$

$$\nu_{22c} = -\frac{1}{2} \left[ \operatorname{tg}^2 \varepsilon' \left( \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''} + \operatorname{tg} \varepsilon'' \right) + \operatorname{tg}^2 \varepsilon'' (1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon') (2 \operatorname{tg} \varepsilon' + \right. \\ \left. + \operatorname{tg} \varepsilon'' (1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon')) + \frac{\sin(\varphi - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\cos^3 \varepsilon' \cdot \cos \varepsilon''} - \frac{\cos(\varphi - \varepsilon'')}{\cos^3 \varepsilon' \cos \varepsilon''} \cdot \beta' - \frac{(1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon')^2}{\cos^3 \varepsilon''} \beta'' \right]$$

$$\mu_{24} = \mu_{22} \beta' + 2 \lambda' \mu_{22c}$$

$$\nu_{24} = \nu_{22} \beta + 2 \lambda' \nu_{22c}$$

$$\mu_{44} = \mu_{22c}$$

$$\nu_{44} = \nu_{22c}$$

$$\mu_2 = \varphi + \lambda' (1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon')$$

$$\nu_2 = 1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon'' - \lambda' [\operatorname{tg} \varepsilon' (1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon'') + \operatorname{tg} \varepsilon'']$$

$$\mu_4 = 1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon'$$

$$\nu_4 = -\operatorname{tg} \varepsilon' (1 - \varphi \operatorname{tg} \varepsilon'') - \operatorname{tg} \varepsilon''$$

$$\lambda' = \frac{\ell'}{\tau}, \quad \lambda'' = \frac{\ell''}{\tau}, \quad \beta' = \frac{\tau'}{\tau}, \quad \beta'' = \frac{\tau''}{\tau}.$$

Отметим, что коэффициенты  $\Delta_2$  и  $\Delta_4$  определяют высоту пучка ионов в плоскости щели приемника:

$$z = \Delta_2 \alpha_2 + \Delta_4 \alpha_4.$$

Коэффициенты дисперсии  $D$  и оптического увеличения  $M$  определяются, соответственно, формулами для  $|\Delta_6|$  и  $|\Delta_3|$ . Выражение для тангенса угла наклона линии фокусов хорошо известно [6]:

$$\operatorname{tg} \psi = \frac{\Delta_6}{\Delta_3 \Delta_{16}}. \quad (2)$$

Уравнение линии фокусов (на рисунке — кривая АВ) в общем случае, когда границы магнитного поля искривлены и неортогональны к оптической оси анализатора, можно записать в следующем параметрическом виде (вывод приведенных ниже формул опущен ввиду громоздкости выкладок):

$$\begin{cases} x(\rho) = -a \sin\left(\varepsilon'' - \frac{\Theta}{2}\right) + \lambda'' \cdot \cos(\varphi_\rho - \varphi) \\ y(\rho) = a \cos\left(\varepsilon'' + \frac{\Theta}{2}\right) - \lambda'' \cdot \sin(\varphi_\rho - \varphi), \end{cases} \quad (3)$$

где

$$a = -2 \left( \tau'' / \tau \right) \cdot \sin(\Theta/2),$$

$$\lambda'' = \frac{\lambda' \frac{\cos(\varphi_\rho - \varepsilon')}{\cos \varepsilon'} + \rho \sin \varphi_\rho}{\frac{\lambda' \cdot \sin(\varphi_\rho - \varepsilon' - \varepsilon'')}{\rho \cos \varepsilon' \cdot \cos \varepsilon''} - \frac{\cos(\varphi_\rho - \varepsilon'')}{\cos \varepsilon''}},$$

$$\varphi_\rho = \arccos \left[ \frac{1}{\rho} \left( \rho - 1 + \cos \varphi - 2 \left( \tau'' / \tau \right) \sin \frac{\Theta}{2} \cos \left( \varphi - \frac{\Theta}{2} \right) \right) \right],$$

$$\begin{aligned}\varepsilon'' &= \varphi_p - \varphi + \varepsilon'' + \Theta, & \Phi &= \varphi - \varepsilon'', & \Theta &= 2 \arctg \left\{ \frac{A - \sqrt{B}}{C} \right\}, \\ A &= (\tau''/\tau) (\cos \varepsilon'' + (\rho - 1) \cos \Phi), \\ B &= (\tau''/\tau)^2 (\cos \varepsilon'' + (\rho - 1) \cos \Phi)^2 + (\rho - 1)(1 - \cos \varphi) \cdot c, \\ C &= 2 (\tau''/\tau) (\tau''/\tau + \sin \varepsilon'' - (\rho - 1) \sin \Phi) - (\rho - 1)(1 - \cos \varphi).\end{aligned}$$

В уравнении (3) координата  $x$  отсчитывается вдоль оптической оси,  $y$  — в поперечном к оптической оси направлении, начало координат выбрано в гауссовой плоскости, соответствующей главной оптической оси ( $\rho = 1$ ). Параметр  $\rho$  есть относительное значение радиуса кривизны траектории (в единицах радиуса кривизны главной оптической оси), соответствующей массе иона, отличной от массы иона, движущегося по главной оптической оси, так что интервал значений  $[\rho_1, \rho_2]$  характеризует ширину диапазона анализируемых масс.

Степень искривленности линии фокусов в заданном диапазоне  $[\rho_1, \rho_2]$  определим величиной  $\delta$ :

$$\delta = \left( \int_{\rho_1}^{\rho_2} |y(\rho) - x(\rho) \operatorname{tg} \psi| x'(\rho) d\rho \right) \tau.$$

Таким образом, задача многокритериальной оптимизации

$$R, \psi, D \rightarrow \max, \quad \delta \rightarrow \min$$

математически сформулирована.

Поиск множества Парето осуществлялся с использованием метода ветвящегося адаптивного случайного поиска ВАСП [7] (см. также статью С.Б. Туртия "Оптимизация нескольких критериев с помощью случайного поиска" в настоящем сборнике), сочетающего преимущества метода наилучшей пробы, адаптацию функции плотности поиска с выделением перспективных областей и более интенсивного поиска в них, а также ветвление процесса поиска. Последнее позволяет увеличить представительность выборки из множества Парето, особенно при решении задач оптимизации обратных и сильно осциллирующих функций, к которым принадлежат наши критерии, в особенности величина  $R$ . В качестве датчиков случайных чисел использовалась ЛПЧ-последовательность. Применение ее для генерации случайных чисел существенно улучшает равномерность поиска по всему множеству  $X$ , не приводя к заметному замедлению скорости поиска методом ВАСП.

## Результаты оптимизации

Результаты оптимизации сведены в таблицу. В первой ее строке представлены параметры ионно-оптической системы магнитного анализатора, применявшейся в настоящее время во многих современных приборах (МАТ 261 и его последующие модификации, МИ 1201 и его модификации, МИ 1320 и др.). Этот анализатор, как уже указывалось, обладает стигматичной фокусировкой ( $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ ). Из таблицы видно, что коэффициенты его аберраций весьма значительны и, как следствие, его разрешающая способность невысока. Обращает на себя внимание малый угол наклона и значительная кривизна линии фокусов, что является большим недостатком, если учесть, что указанный масс-анализатор используется в многоколлекторном режиме. Представленные в таблице варианты показывают, что эти величины можно значительно улучшить. При решении был выбран диапазон значения для  $\rho$ , равный  $(0.96 \pm 1.04)$ , что соответствует диапазону масс  $M = M_0(1 \pm 8 \%)$ .

Таблица

Варианты ИОС магнитного анализатора

| N<br>п.п. | R     | $\psi$ | $\delta$ | $\Delta$ | D    | M    | $\frac{D}{M}$ | $\varphi$ | $\epsilon'$ | $\epsilon''$ | $\epsilon'$ | $\epsilon''$ | $\delta'$ | $\delta''$ | $\Delta_{11}$ | $\Delta_{22}$ | $\Delta_{24}$ | $\Delta_{44}$ | $\Delta_2$ | $\Delta_4$ |
|-----------|-------|--------|----------|----------|------|------|---------------|-----------|-------------|--------------|-------------|--------------|-----------|------------|---------------|---------------|---------------|---------------|------------|------------|
| 1         | 666.  | 26.5   | .88      | 3.2      | 2.0  | 1.0  | 2.0           | 90.       | 400.        | 400.         | 26.5        | 26.5         | 0.0       | 0.0        | -4.0          | -6.0          | -3.6          | -1.1          | 0.0        | -1.0       |
| 2         | 400.  | 81.8   | .57      | 2.1      | 2.4  | 1.4  | 1.74          | 99.       | 238.        | 480.         | 38.         | 24.          | .92       | .92        | -10.5         | 1.3           | .00           | -.4           | 0.0        | -1.9       |
| 3         | 538.  | 65.8   | .50      | 1.7      | 1.37 | .64  | 2.14          | 88.       | 370.        | 331.         | 40.         | 4.2          | -.57      | -.91       | -6.1          | -4.9          | -5.7          | -1.9          | 0.0        | -1.6       |
| 4         | 816.  | 63.    | .71      | 2.6      | 2.5  | 1.6  | 1.56          | 97.       | 273.        | 450.         | 23.         | 33.          | -.58      | -.96       | -5.4          | .16           | -3.9          | -2.2          | 0.0        | -1.1       |
| 5         | 875.  | 52.9   | 1.14     | 3.9      | 2.7  | 1.9  | 1.42          | 97.       | 244.        | 498.         | 21.4        | 33.          | -.48      | -.79       | -5.0          | .15           | -3.2          | -2.2          | 0.0        | -1.2       |
| 6         | 943   | 46.4   | .41      | 1.4      | 1.35 | .61  | 2.2           | 91.       | 368.        | 309.         | 40.         | 5.5          | -.91      | -.40       | -1.8          | -6.5          | -6.8          | -2.3          | 0.0        | -1.6       |
| 7         | 995.  | 49.4   | .86      | 3.2      | 2.5  | 1.7  | 1.47          | 97.       | 260.        | 445.         | 19.2        | 35.          | -.56      | -.82       | -4.4          | .05           | -3.3          | -2.0          | 0.0        | -1.0       |
| 8         | 1040. | 14.1   | .50      | 2.2      | 2.5  | 1.5  | 1.67          | 96.       | 271.        | 491.         | 30.         | 28.          | .23       | .95        | .20           | -9.2          | -2.3          | -1.3          | 0.0        | -1.4       |
| 9         | 1430. | 36.0   | .22      | .80      | 1.23 | .50  | 2.46          | 98.       | 392.        | 238.         | 40.         | 7.0          | -.74      | -.26       | -.44          | -6.0          | -5.2          | -1.9          | 0.0        | -1.3       |
| 10        | 1600. | 37.4   | 1.6      | 5.2      | 2.6  | 2.0  | 1.3           | 95.6      | 241.        | 441.         | 9.4         | 37.5         | -.81      | .72        | -2.7          | -.14          | -3.1          | -2.2          | 0.0        | -.87       |
| 11        | 1700. | 35.5   | 1.15     | 3.8      | 2.0  | 1.34 | 1.5           | 86.2      | 382.        | 351.         | 5.4         | 40.          | -.62      | .90        | -2.5          | .17           | -2.8          | -1.3          | 0.0        | -.56       |
| 12        | 2168. | 28.0   | .10      | .40      | 1.23 | .53  | 2.3           | 91.3      | 395.        | 274.         | 40.         | 3.0          | .23       | -.82       | -.96          | -2.4          | -.93          | -.85          | 0.0        | -1.4       |
| 13        | 2880. | 24.6   | .18      | .71      | 1.44 | .66  | 2.2           | 86.0      | 395.        | 355.         | 38.         | 6.0          | .24       | -.74       | -1.3          | -10.4         | -3.6          | -1.3          | 0.0        | -1.2       |
| 14        | 1567. | 26.0   | .02      | .08      | 1.15 | 1.2  | .94           | 98.4      | 112.        | 260.         | 15.5        | -5.1         | -.86      | -.92       | -.33          | -5.6          | -3.0          | -1.4          | 3.3        | .22        |
| 15        | 3086. | 76.    | .20      | .77      | .74  | .87  | .85           | 88.       | 103.        | 216.         | 23.         | -28.         | -.69      | .93        | -1.3          | .28           | -23           | -.85          | 3.6        | .10        |
| 16        | 3980  | 68.    | .25      | .85      | .81  | 1.03 | .79           | 89.       | 104.        | 219.         | 5.9         | -23.         | -.45      | .95        | -1.12         | -.007         | .02           | -.58          | 4.0        | 1.1        |
| 17        | 4102. | 43.4   | .42      | 1.5      | .66  | .31  | 2.13          | 88.       | 370.        | 158.         | 39.         | -29.         | 0.0       | .18        | .22           | -1.9          | -1.2          | -.5           | 1.2        | -.98       |
| 18        | 4519. | 38.    | .03      | .12      | .70  | .70  | 1.0           | 94.       | 124.        | 177.         | 27.         | -30.         | -.36      | .005       | -.09          | -2.0          | -.82          | -.74          | 3.2        | -.2        |
| 19        | 4564. | 44.    | .46      | 1.7      | .65  | .33  | 2.0           | 87.       | 353.        | 155.         | 35.         | -30.         | 0.0       | .26        | -.10          | -2.0          | -1.4          | -.5           | 1.9        | -.54       |
| 20        | 4963. | 63.    | .14      | .50      | .72  | .87  | .83           | 95.5      | 102.        | 174.         | 5.7         | -28.         | -.76      | .93        | -.78          | -.96          | -.30          | -.60          | 3.9        | 1.1        |
| 21        | 5016. | 35.    | .06      | .27      | .69  | .68  | 1.0           | 76.       | 192.        | 222.         | 24.7        | -28.         | .56       | -.08       | .006          | -2.0          | -1.0          | -.43          | 3.3        | .11        |
| 22        | 5190. | 61.    | .95      | 3.5      | 2.0  | 2.2  | .91           | 83.       | 222.        | 428.         | -9.2        | 30.0         | -.98      | -.75       | -.84          | -.69          | -2.4          | -1.8          | 1.9        | .05        |
| 23        | 5387. | 43.    | .50      | 2.4      | .65  | .38  | 1.71          | 86.       | 309.        | 162.         | 34.3        | -30.         | 0.0       | .22        | 0.0           | -1.8          | -1.2          | -.5           | 2.1        | -.56       |
| 24        | 6500  | 28.6   | 1.1      | 4.0      | 1.94 | 2.2  | .88           | 84.       | 212.        | 395.         | -11.        | 30.          | -.91      | .82        | -.62          | -.11          | -1.6          | -1.5          | 2.0        | .21        |
| 25        | 7923  | 27.4   | 1.06     | 3.8      | 1.94 | 2.2  | .88           | 82.       | 222.        | 409.         | -11.3       | 30.          | -.97      | .80        | -.34          | -.45          | -2.1          | -1.7          | 2.0        | .19        |
| 26        | 9450  | 49.    | .18      | .70      | .61  | .89  | .68           | 74.       | 160.        | 182.         | -11.6       | -30.         | -.47      | .94        | .44           | -.06          | -.32          | -.46          | 4.6        | 12.11      |

В четвертом столбце таблицы приведены значения величины максимального отклонения линии фокусов в указанном диапазоне от прямой (касательной в точке  $\rho = 1$ ):

$$\Delta = \max_{i=1,9} |y(\rho_i) - x(\rho_i) \operatorname{tg} \psi| \cdot r,$$

$$\rho_i = \rho_1 + (i-1) \cdot 0.01.$$

Линейные величины  $\delta$ ,  $\Delta$ ,  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  даны в таблице в миллиметрах, угловые величины  $\psi$ ,  $\varphi$ ,  $\epsilon'$ ,  $\epsilon''$  — в градусах. Первые тринадцать вариантов ИОС рассчитаны в условиях стигматической фокусировки. В таблице они представлены, начиная со второго, в порядке возрастания величины разрешающей способности  $R$ . Последняя рассчитывалась в соответствии с приведенной выше формулой при  $\alpha_1 = 0.015$ ,  $\alpha_2 = \alpha_4 = 0.01$ ,  $\alpha_3 = 0.0001$ . В вариантах 2 и 3 величина  $R$  несколько меньше, чем в варианте 1, однако значительно увеличен угол наклона линии фокусов, что создает конструктивные удобства размещения коллекторов, и уменьшена кривизна линии фокусов. Во всех последующих вариантах величина  $R$  значительно больше, чем в первом случае, что является следствием проведенной коррекции аберраций. Кроме того, значительно предпочтительнее выглядят и величины  $\psi$ ,  $\delta$  и  $\Delta$ . Анализ величин  $D$  и  $D/M$  показывает, что эти параметры в значительной мере альтернативны, как остальным критериальным величинам ( $R$ ,  $\psi$ ,  $\delta$ ), так и между собой. Поэтому выбор того или иного варианта зависит от конкретного назначения разрабатываемого прибора.

При расчете вариантов 14–26 условие стигматической фокусировки было опущено. Это существенно расширило возможности многокритериальной оптимизации, о чем свидетельствуют полученные характеристики. Однако и здесь отчетливо прослеживается альтернативность достижения наилучших результатов по каждому из критериев выбора. Так, например, видна необходимость компромисса между величинами  $D$ ,  $D/M$ ,  $R$ . В частности, не удалось найти варианта со значением  $D = 2$  и  $D/M = 2$  (или близкого к нему), у которого разрешающая способность при указанных значениях параметров пучка превысила бы  $R = 666$ , (первая строка таблицы). Однако можно значительно увеличить и величину  $D$  и величину  $R$ , если принять возможным снижение величины  $D/M$ . Если же сохранить величину  $D/M$  (варианты 17, 19 и др.) и допустить снижение величины коэффициента дисперсии, то можно существенно увеличить разрешающую способность и угол наклона линии фокусов к оптической оси, уменьшив при этом кривизну линии фокусов.

В целом же можно отметить, что многокритериальная оптимизация дала возможность получить широкий спектр компромиссных вариантов ионно-оптических систем, оптимальных по совокупности критериев.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Кельман В.М., Родникова И.В. Статические масс-спектрометры. Алма-Ата, 1985.
2. Лепорский Б.Б., Залецкий Э.И., Ерохин В.Н.//ЖТФ. 1973, 43, № 4. С.871–873.
3. Галль Р.Н., Саченко В.Д.//ЖТФ. 1980, 50, № 4. С.824–830.
4. Александров М.Л., Галль Л.Н., Саченко В.Д.//Научные приборы. 1976, № 12: С.23–25.

5. Соболев И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. М.: Наука, 1981.

6. Сысоев А.А., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977.

7. Туртия С.Б. // АСУ и приборы автоматики. Харьков, 1986, № 77.- С.16-21.