01;10;12 Обратные задачи магнитостатики и проблема расчета электронных магнитных спектрометров с двойной фокусировкой

© Л.С. Васильев, С.Ф. Ломаева

Удмуртский государственный университет, 426034 Ижевск, Россия

(Поступило в Редакцию 6 июня 1996 г.)

Предложен метод расчета электронных магнитных спектрометров с двойной фокусировкой с использованием прямых методов решения обратных задач магнитостатики. Впервые в схеме с двумя парами электромагнитных катушек найдены электронные магнитные спектрометры с двойной фокусировкой в модели третьего порядка, что значительно улучшает основные оптические характеристики прибора: разрешающую способность и светосилу. В указанной схеме найдена реальная конструкция энергоанализатора со свободной торовой камерой в модели третьего порядка.

Введение

В рентгеноэлектронной спектроскопии [1-3] применяют два типа анализаторов для фокусировки электронов: магнитные и электростатические. Двойная фокусировка электронов магнитным полем, предложенная в [1], позволяет достичь лучшего разрешения по сравнению с электростатической фокусировкой при прочих равных условиях. В приборах с магнитной фокусировкой удается наиболее точным образом сфокусировать электронный пучок за счет прецизионного изготовления фокусирующих катушек и выбора диафрагм по сравнению с электростатической фокусировкой, где разрешение лимитируется точностью изготовления сложных поверхностей электродов. Помимо этого, преимущество энергоанализатора магнитного типа заключается в том, что он конструктивно отделен от вакуумной камеры спектрометра, что принципиально позволяет использовать в эксперименте практически любые технологические приставки для дополнительного физико-химического или механического воздействия на исследуемый образец. Это позволяет расширить экспериментальные возможности исследователя: становятся возможными нагрев, расплав, распыление, химическая обработка и т.п. процессы, сопровождающиеся выделением агрессивных газов. В электростатических анализаторах газовыделение может привести к загрязнению поверхности электродов, что отразится на фокусировке электронов. Подобные возможности ставят электронные магнитные спектрометры с двойной фокусировкой в ряд совершенно уникальных приборов. Однако практическая реализация этих возможностей сегодня во многом наталкивается на трудности, связанные с некоторыми конструктивными особенностями этих приборов. Наиболее существенные из них связаны с отсутствием свободного доступа к вакуумной камере, что снижает возможности применения различных технологических приставок.

Рассмотрим наиболее простую модель электронного магнитного спектрометра с двойной фокусировкой, принципиальная схема энергоанализатора которого приведена на рис. 1 [3]. Энергоанализатор является главной системой любого спектрометра. Все остальные системы играют ту или иную вспомогательную роль. Рассматриваемый энергоанализатор состоит из двух пар электромагнитных осесимметричных катушек, создающих неоднородное статическое магнитное поле. Это поле позволяет сортировать испускаемые образцом фотоэлектроны по энергиям в вакуумной торовой камере. С этой целью магнитное поле подбирается так, чтобы фотоэлектроны в одной энергией фокусировались в выходной щели энергоанализатора. Фокусировка осуществляется в двух направлениях: в оптической плоскости (z = 0) энергоанализатора (рис. 2) и в вертикальном направлении [2,3]. Магнитное поле, обладающее этим свойством, ниже



Рис. 1. Принципиальная схема энергоанализатора электронного магнитного спектрометра с двумя парами электромагнитных катушек. Сечение в плоскости аксиальной симметрии. *I*, 2 — две пары осесимметричных катушек; 3 — вакуумная торовая камера энергоанализатора; N_i , R_i и H_i (i = 1, 2) — число витков, радиус намотки и высота над плоскостью z = 0 для катушки из *i*-й пары.



Рис. 2. Принципиальная схема фокусировки пучка электронов в плоскости оптической оси неоднородным магнитным полем энергоанализатора. 1 — образец, 2 — входная щель, 3 — выходная щель, 4 — счетчик электронов, 5 — рентгеновский источник, 6 — траектории исследуемых электронов; R_0 — радиус оптической оси.

будем называть оптимальным магнитным полем энергоанализатора.

Чтобы обеспечить свободный доступ к торовой камере, необходимо достаточно далеко развести от нее обе пары электромагнитных катушек. До сих пор не было создано ни одного спектрометра со свободной торовой камерой в наиболее простой схеме, приведенной на рис. 1. Существующие спектрометры [4,5] имеют более сложную конструкцию. В данной работе предложен метод расчета всех параметров энергоанализатора, свободного от указанных недостатков.

Методика расчета

Оптимальное магнитное поле энергоанализатора в объеме торовой камеры должно обладать весьма сложной структурой. В [6] доказано, что эта структура легко может быть восстановлена по граничному значению поля на оптической плоскости. Показано также, что индукция оптимального магнитного поля в этой области может быть представлена в виде [6]

$$B_{z}(z=0,\rho) = B_{0} \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_{i} x^{i}, \quad B_{\rho}(z=0,\rho) = 0, \qquad (1)$$

$$x = (\rho - R_0)/R_0.$$
 (2)

Здесь ρ и *z* — цилиндрические координаты; R_0 — радиус оптической орбиты, лежащей на оптической плоскости; $z = 0, B_0$ и α_i (i = 0, 1, 2...) — известные постоянные, причем $\alpha_0 = 1$. В конкретных приложениях сумму ряда (1) обрывают на некотором слагаемом с номером *n*. В этом случае мы будем говорить, что рассматривается модель энергоанализатора *n*-го порядка по точности аппроксимации истинного магнитного поля или просто модель *n*-го порядка.

Таким образом, наиболее важная задача, которую необходимо решить с целью проектирования и создания реальной конструкции электронного магнитного спектрометра, является одной из обратных задач магнитостатики, т. е. задачей восстановления геометрии источника поля по заранее известному полю или его граничному значению на плоскости. Последние же, как известно, не всегда могут быть корректно поставлены, в частности, могут не иметь решения совсем или иметь их бесконечное множество [7].

Существует несколько подходов к решению обратных задач [7]. В применении к электронным магнитным спектрометрам наиболее распространенный из них описан в [1,3,6]. Суть его в следующем. Выбирается некоторая конструкция энергоанализатора, укладывающаяся в схему рис. 1, и рассчитывается соответствующее ей магнитное поле, электронные траектории, число электронов с выбранной энергией Е, которые попадают в выходную щель энергоанализатора n_E, и число электронов с другими энергиями $n_{E'}$, которые также могут попасть в выходную щель. Если $n_{E'} \sim n_E$ или n_E слишком мало́ по сравнению с количеством электронов N_E с энергией Е, испускаемых образцом, то геометрические параметры исследуемой конструкции немного изменяют и весь расчет повторяют снова, пока не удовлетворяют условиям

$$n_{E'}/n_E \ll 1,\tag{3}$$

$$n_E/N_E \sim 1. \tag{4}$$

В результате такого расчета можно получить необходимое оптимальное магнитное поле энергоанализатора. Заметим, что заранее неизвестно, есть ли решение у этой задачи и какие параметры энергоанализатора нужно варьировать, чтобы это решение получить.

Очевидно, что описанный метод слишком громоздок, требует много машинного времени и не слишком точен из-за большого объема вычислений, накапливающих ошибки округления. В связи с этим не вызывает удивления и то, что, используя этот метод, до сих пор не удалось решить проблему создания спектрометра со свободной торовой камерой.

Мы предлагаем прямой метод расчета всех параметров энергоанализатора. Суть метода в следующем. Построим формулу для определения магнитного поля, создаваемого произвольной *i*-й (i = 1, 2) парой осесимметричных катушек, в каждой из которых число витков N_i , радиус намотки R_i и радиус провода r_i . В цилиндрических координатах (z, ρ, φ) в плоскости z = 0 имеем [8]

$$B_{Z_i} = (4I_i/c) \sum_{n=1}^{N_i} ((R_i + \rho)^2 + z_{in})^{-1/2} \Big\{ K(\alpha_{in}) + E(\alpha)(R_i^2 - \rho^2 - z_{in}^2) / ((R_i - \rho)^2 + z_{in}^2) \Big\}.$$
 (5)

Здесь

$$z_{in} = H_i + 2r_i(n-1);$$
 (6)

$$\alpha_{in} = 4R_i\rho/\left((R_i+\rho)^2 + z_{in}^2\right); \tag{7}$$

 $K(\alpha)$ и $E(\alpha)$ — эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно; I_i — ток, текущий в *i*-й паре катушек при их последовательном соединении.

Выражению (5) можно придать форму, соответствующую формуле (1),

$$B_{Z_i} = (4I_i/c) \sum_{j=0}^{\infty} \beta_{ji} x^j, \qquad (8)$$

где

$$\beta_{ji} = \sum_{q=0}^{j} \sum_{n=1}^{N_j} R_{qin} A_{j-qin},$$
(9)

$$A_{jim} = K_{jim} + \sum_{p=0}^{j} \sum_{q=0}^{j-p} P_{pim} R K_{qim} E_{j-p-qim}, \qquad (10)$$

$$R_{nim} = \frac{1}{ni} \left[\frac{d^n}{d\rho^n} (R_{im})^{-1} \right]_{\rho = R_0},$$
 (11)

$$RK_{nim} = \frac{1}{ni} \left[\frac{d^n}{d\rho^n} (RK_{im})^{-1} \right]_{\rho = R_0},$$
 (12)

$$K_{nim} = \frac{1}{ni} \left[\frac{d^n}{d\rho^n} K(\alpha_{im}) \right]_{\rho=R_0},$$
 (13)

$$E_{nim} = \frac{1}{ni} \left[\frac{d^n}{d\rho^n} E(\alpha_{im}) \right]_{\rho=R_0},$$
 (14)

$$R_{in} = \left((R_i + \rho)^2 + z_{in}^2 \right)^{1/2}, \tag{15}$$

$$RK_{in} = (R_i - \rho)^2 + z_{in}^2,$$
(16)

$$P_{oin} = R_i^2 - R_0^2 - z_{in}^2, \tag{17}$$

$$P_{1in} = -2R_0, (18)$$

$$P_{2in} = -1.$$
 (19)

Полное поле энергоанализатора создается обеими парами катушек, поэтому имеем

$$B_z(z=0,\rho) = B_0 \sum_{i=n}^{\infty} \zeta_i x^i,$$
 (20)

где

$$\zeta_0 = 1, \quad \zeta_i = (\beta_{j1}c + \beta_{j2})/(\beta_{01}c + \beta_{02}), \tag{21}$$

$$B_0 = 4I_2(\beta_{01}c + \beta_{02})/c, \quad c = I_1/I_2. \tag{22,23}$$

При этом еще необходимо требование

$$c = \text{const.}$$
 (24)

Сравнивая (20) с (1), находим, что должны быть выполнены равенства

$$\zeta_i = \alpha_i \ (i = 1, 2, 3, \dots, n),$$
 (25)

которые представляют собой бесконечную систему трансцендентных уравнений, которой должны удовлетворять все параметры энергоанализатора для того, чтобы создаваемое им магнитное поле совпадало с оптимальным магнитным полем. Очевидно, что в полной мере удовлетворить всем уравнениям (25) невозможно, так как любой энергоанализатор характеризуется конечным числом параметров. Для выбранной нами схемы их всего десять: $R_1, R_2, r_1, r_2, H_1, H_2, N_1, N_2, c, R_0$. Поэтому в лучшем случае можно попытаться удовлетворить только первым десяти уравнениям (25). Здесь и ниже предполагается, что катушки имеют однослойную намотку. В противном случае добавляется еще два параметра, определяющих количество слоев намотки в обеих парах. Таким образом, в выбранной нами схеме в принципе нельзя построить энергоанализатор в модели выше десятого порядка. Однако и для модели *n*-го порядка с n > 4, по-видимому, получить какое-либо решение будет весьма сложно. Во всяком случае не существует в настоящее время достаточной уведенности, что система (25) для I < i < n, 4 < n < 10 может иметь хотя бы одно решение для некоторого набора из *n* параметров, определяющих конструкцию энергоанализатора. В случае 1 < i < 3 известно, что система (25) допускает определенные решения [1-4]. Для этого необходимо фиксировать некоторые семь из имеющихся параметров, а остальные три вычислить из первых трех уравнений (25). В нашем случае множество фиксированных параметров выбирались в виде

$$\{r_1, r_2, H_1, N_1, N_2, c, R_0\}.$$
 (26)

Величины R_1, R_2, H_2 рассчитывались с помощью вычислительной машины. При расчетах полагалось $\alpha_1 = -0.5000, \alpha_2 = 0.3750, \alpha_3 = -0.2986,$ $\alpha_4 = 0.2400$ [1,3,6].

Результаты вычислений приведены в таблице. В первой колонке приведены данные, полученные в [3]. Этот спектрометр условно обозначен S_1 . Анализ последних четырех данных для S_1 показывает, что по существу он соответствует модели второго порядка, так как не является высокоточным прибором. Вместе с тем значения величин H_1 и H_2 показывают, что катушки энергоанализатора находятся достаточно близко друг от друга и доступ к торовой камере затруднен.

Во второй колонке (S'_1) приведены геометрические параметры прибора S_1 , но значения величин ζ_i (i = 1, 2, 3, 4) вычислены по предложенной выше методике. Очевидно, что имеется неплохое совпадение результатов.

В колонке S_2 приведены наши данные для спектрометра, который точно соответствует модели третьего порядка. Этот спектрометр получен путем коррекции соответствующих данных для спектрометра S_1 с помощью предложенной нами методики. Очевидно, что по своим характеристикам S_2 значительно превосходит S_1 . Здесь же приведены дополнительные данные по S_2 . Так, в

	~ ~					~				
	In	0071110	0000000		14 000	6 6 6 4 6	nnaiiata	0 00//7	001000	
	,, ,	141660	2411441/	MAIBININIIAINKIN	1/1 11111				<i>, ,, ,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,</i>	N/A/ H// H6/ Y
~	<i>'</i>	Danibic	Sagann	wai nen oo anene		Uncivia	Daurora	JUCKI		
_	_									

Парамотри	Спектрометры						
Параметры	S_1	S'_1	<i>S</i> ₂	<i>S</i> ₃			
N_1	30	30	30	30			
N_2	46	46	46	60			
$r_1 \cdot 10^2(m)$	0.132	0.132	0.132	0.100			
$r_2 \cdot 10^2(m)$	0.132	0.132	0.132	0.050			
$R_1 \cdot 10^2(m)$	26.676	26.676	26.933	21.931			
$R_2 \cdot 10^2 (m)$	45.344	45.344	45.444	62.550			
$H_1 \cdot 10^2 (m)$	14.027	14.027	14.027	18.000			
$H_2 \cdot 10^2 (m)$	5.977	5.977	5.9015	29.865			
$R_0 \cdot 10^2 (m)$	30.0	30.0	30.0	30.0			
с	1.0	1.0	1.0	0.60			
$E_{ m max} \cdot 1.6022 \cdot 10^{19} ({ m J})$			1500	1500			
$K_{\rm opt} \cdot 1.6022 \cdot 10^{19} ({\rm J/A^2})$			192.75	56.901			
$I_{2 \max}$			2.7896	5.1344			
ζ_1	-0.5001	-0.50055	-0.50000	-0.49999			
ζ_2	0.3828	0.38145	0.37498	0.37502			
ζ_3	-0.4629	-0.46347	-0.29873	-0.29864			
ζ_4	-6.2715	-6.2641	-6.1147	-3.8536			

строке E_{max} показано максимальное значение энергии электронов в измеряемом интервале. Этому значению соответствует максимальный ток $I_{2 \text{ max}}$ во второй паре катушек. Величину K_{opt} назовем оптической постоянной спектрометра. Знание этой постоянной необходимо для интерпретации получаемых спектров в соответствии с формулой

$$E = K_{\text{opt}} I_2^2. \tag{27}$$

Меняя ток в катушках, мы можем исследовать различные точки спектра фотоэлектронов. К сожалению, эти данные в работе [3] не указаны, поэтому полное сравнение характеристик S_1 и S_2 оказываются невозможными. В дополнение заметим, что и в S_2 доступ к торовой камере ограничен, так как за основу S_2 принимались параметры, взятые с S_1 .

С целью разработки реальной конструкции электронного магнитного спектрометра со свободной торовой камерой был предпринят соответствующий расчет, результаты которого даны в последней колонке таблицы (S_3). Этот прибор по своим характеристикам значительно превосходит имеющиеся к настоящему времени аналоги. Для свободного доступа к торовой камере радиусы внутренних и внешних катушек соответственно уменьшены или увеличены, при этом все катушки значительно разведены друг от друга и от торовой камеры. Наряду с S_2 этот прибор в рамках рассмотренной принципиальной схемы точно соответствует модели третьего порядка. До настоящего времени этого сделано не было.

Выводы

1. В работе впервые предложена методика расчета электронных магнитных спектрометров с двойной фокусировкой с использованием прямых методов решения обратных задач магнитостатики. 2. В схеме с двумя парами электромагнитных катушек найдены электронные магнитные спектрометры с двойной фокусировкой в модели третьего порядка, что значительно улучшает основные оптические характеристики прибора: разрешающую способность и светосилу.

3. В указанной схеме найдены реальные конструкции энергоанализаторов со свободной торовой камерой в модели третьего порядка.

4. Предложенная методика расчета может служить реальной основой для практического создания высокоточных приборов электронной спектроскопии.

Список литературы

- [1] Зигбан К., Нордлинг К., Фальман А. и др. Электронная спектроскопия. М.: Мир, 1971. 492 с.
- [2] Анализ поверхности методами оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии / Под ред. Д. Бригтоа, М.П. Сиха. М.: Мир, 1987. 598 с.
- [3] Besev C., Castman B., Nordberg R. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1968. N 62. P. 125–146.
- [4] Fadley C.S., Healey R.N., Hollander I.M. et al. // J. Appl. Phys. 1972. Vol. 43. N 3. P. 1085–1102.
- [5] Craham R.L., Ewan G.T., Geiger I.S. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1960. N 9. P. 275–279.
- [6] Lee-Whiting G.E., Taylor E.A. // Canadian J. Phys. 1957. Vol. 35. N 1. P. 1–15.
- [7] Тихонов А.Н., Ароенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Мир, 1986. 286 с.
- [8] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: ГИТТЛ, 1957. 532 с.