

00362



**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTONOMA DE MEXICO**

**FACULTAD DE CIENCIAS  
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO**

**COEFICIENTES DE ABERRACION EN  
UN ESPECTROMETRO DE MASAS  
130°, 56°, 17.5 cm**

**FALLA DE ORIGEN**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE:  
MAESTRIA EN CIENCIAS (FISICA)**

**P R E S E N T A:**

**MARIA ISABEL CASAR ALDRETE**

**DIRECTOR DE TESIS:**

**M. EN C. PEDRO MORALES PUENTE**

**MEXICO, D. F.**

**NOVIEMBRE DE 1996**



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A la memoria de mi padre

A mis hijos: Mónica, Jos, Pau, y Katy por cargar mi batería diariamente con su amor .

A mi esposo por su amor, apoyo , comprensión y por suplirme a cada rato.

A mi mamá por enseñarme la alegría de vivir, amarme y apoyarme siempre.

Quiero agradecer al M. en C. Pedro Morales Fuente la dirección de esta tesis y por ayudarme con sus conocimientos, su apoyo y su comprensión.

También agradezco a los sinodales: Dr. Eduardo Muñoz Picone, M. en C. Raúl Gómez González, Dr. L. Fernando Magaña Solís, Dr. Fernando Alba Andrade, Dr. Jorge Rickards Campbell, Dr. Gerardo Vázquez Fonseca, por revisar este trabajo, por el tiempo que me brindaron y por sus sugerencias con las cuales se mejoro esta tesis.

Agradezco de una manera especial a la M. en C. Edith Cienfuegos por su excelente colaboración, su enorme paciencia, su tenacidad y su gran afecto.

Agradezco también al Fis. Francisco Fernández y al Fis. Francisco Pena por la construcción de la parte electrónica y a todo el grupo de electrónica por su apoyo constante.

Al Ing. Marco Veytia y a todos los miembros del taller del IFUNAM agradezco su excelente labor en la construcción del equipo y de una manera especial al Sr. Rafael Puente por su inapreciable labor en el mantenimiento de los equipos de vacío.

**INDICE**  
**CAPITULO I**  
**Introducción.**

- CAPITULO II**  
**Optica de Iones**
- 2.1 Movimiento de partícula en campo magnético uniforme
    - 2.1.1 Aproximación matricial de primer orden
    - 2.1.2 Aproximación matricial de tercer orden
  - 2.2 Aberraciones
  - 2.3 Arreglos geométricos.
    - 2.3.1 Enfoque 1<sup>er</sup> orden
    - 2.3.2 Entrada normal.
    - 2.3.3 Entrada oblicua
  - 2.4 Campo magnético disperso.

- CAPITULO III**  
**Cálculos**
- 3.1 Cálculo de trayectorias.
    - 3.1.1 Ecuaciones de movimiento
    - 3.1.2 Sistema de coordenadas
  - 3.2 Cálculo de Campo magnético disperso.
  - 3.3 Programa de cómputo.
  - 3.4 Cálculo de Aberraciones.
    - 3.4.1 Correlación de aberraciones de Matsuda y de programa de cómputo desarrollado.
    - 3.4.2 Aberraciones de geometrías estudiadas.
    - 3.4.3 Reducción y significado de aberraciones.

- CAPITULO IV**  
**Espectrómetro de masas**
- 4.1 Optimización de características del Espectrómetro
  - 4.2 Características de construcción
  - 4.3 Operación
  - 4.4 Aberraciones experimentales.

- CAPITULO V**  
**Conclusiones.**

## I N T R O D U C C I O N

Por ser la masa una de las dos características básicas de la materia, la instrumentación que mide esta variable tiene características únicas como son:

- Su capacidad de detectar átomos aislados o moléculas en un intervalo de masas de 1 hasta 10000 daltons.
- Su capacidad de analizar todos los elementos de la tabla periódica, así como cuantificar los isótopos de cada elemento.
- Su respuesta lineal en concentraciones que pueden variar hasta doce órdenes de magnitud.
- Su relación directa entre la salida instrumental y la concentración del compuesto a analizar.

Los espectrómetros de masas son algunos de los instrumentos que separan y cuantifican los compuestos según su masa y por lo tanto representan una técnica analítica muy versátil y de gran aplicación.

Un caso particular de espectrómetros de masas son aquellos que realizan análisis isotópico, o sea, que separan y cuantifican los isótopos de los elementos.

El análisis de isótopos estables durante los últimos veinte años ha adquirido gran interés ya que permite reconstruir los procesos o eventos que han ocurrido en una matriz. Al participar los elementos en los ciclos de la naturaleza y estar sujetos a distintos procesos fisicoquímicos, las relaciones entre los isótopos de los elementos cambian de forma predecible, de tal manera que estas relaciones actúan como huellas o registros de estos procesos. Mas aún en algunos sistemas biológicos y geológicos se puede analizar la composición isotópica de dos o tres de los elementos que participan en el proceso, contando así con dos o tres registros independientes que permiten elaborar una síntesis informativa muy útil en la solución de problemas complejos.

Algunas disciplinas en las que se utiliza de manera exitosa el análisis isotópico son: la Bioquímica, la Química Analítica, la Físicoquímica, Medicina, Farmacología, Geoquímica, Mineralogía Geocronología, Cosmoquímica, Biología y actualmente en Ecología.

En general un espectrómetro de masa se puede dividir en cinco partes, dependiendo de su función: introducción de muestras, formación, separación según su masa y detección de iones, y control instrumental y manejo de datos.

Las características de estos constituyentes varían dependiendo tanto del tipo de muestras que se quieren analizar como de la información que de ellas se requiera.

- Por ejemplo, la introducción de muestras, puede ser directa mediante el depósito de una solución sobre un filamento, como es el caso de la termoionización, en fase gaseosa por medio de flujo molecular a través de un orificio por medio de un cromatógrafo de gases, de equipo de electrofóresis, etc.

- La producción de iones puede llevarse a cabo mediante termoionización o por bombardeo de la muestra con: electrones (LD), átomos (FBA), iones (SIMS), fragmentos de fusión (PD) etc.

- La separación de iones según su masa se puede realizar mediante: campos eléctricos, campos magnéticos, cuadrupolos eléctricos o magnéticos o la combinación de todos ellos.

- La detección de iones se realiza en multiplicadores de electrones, placas fotográficas, cajas de faraday sencillas o de multicolección simultánea.

En particular en este trabajo se discutirá los espectrómetros de masas para análisis de isótopos estables en un intervalo de masas de 1 a 300 daltons, con fuente de ionización térmica.

El objetivo del presente trabajo es mostrar un novedoso método de cálculo de trayectorias de haces de iones en presencia de campos magnéticos para el diseño de un espectrómetro de masas donde se optimizan características de operación como son: la transmisión, resolución, sensibilidad de abundancia y dispersión de masas.

Para optimizar estas características se analizó en detalle el comportamiento de los haces de iones en campos magnéticos a partir de las ecuaciones fundamentales de movimiento tanto para la región del campo magnético uniforme como para la región del campo magnético disperso. De los resultados de las diferentes geometrías estudiadas se escogió el arreglo geométrico que optimiza las características de operación; con este arreglo se diseñó y construyó un espectrómetro de masas. Finalmente se evaluaron experimentalmente las características del espectrómetro de masas construido en el IFUNAM y se comparan con las características de otros espectrómetros de masas comerciales.

## II OPTICA DE IONES

La deflexión de partículas cargadas por campos magnéticos es el principio en el cual se basan los espectrómetros de masas de sectores magnéticos. Este principio no solo ha encontrado muchas aplicaciones técnicas en este siglo, sino que ha jugado un papel muy importante en el universo durante millones de años. La deflexión del viento solar por el campo magnético terrestre es uno de los prerequisites de la evolución biológica.

Al estudio de las trayectorias de iones en campos magnéticos y eléctricos se le llama Óptica de Iones por su similitud con el estudio de haces de luz a través de prismas y lentes.

Los iones se dispersan de acuerdo a su momento y los rayos divergentes se enfocan mediante la acción de campos magnéticos de la misma manera que los rayos de luz se enfocan mediante prismas y lentes, y en ambos casos se tienen aberraciones y se manejan matrices para representar los medios a través de los que pasan los rayos.

Desde 1886 cuando E. Goldstein descubrió en un tubo de descarga la forma de producir un haz de partículas positivas, una gran cantidad de científicos realizaron experimentos relacionados con la interacción entre haces de partículas cargadas y campos magnéticos, desarrollándose los fundamentos de la espectrometría de masas moderna. Entre este grupo de científicos destacan 4 ganadores del premio Nobel: J.J. Thomson, K.F. Braun, W. Wien y F.W. Aston, quien construyó el primer espectrómetro de masas y con él demostró la existencia de los isótopos del Neón.

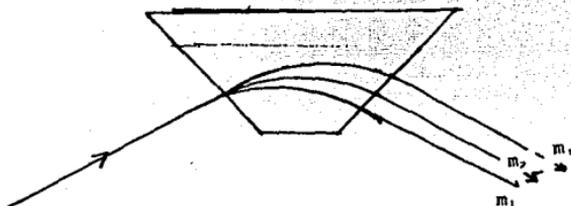
### 2.1 Movimiento de partículas en un Campo Magnético Uniforme.

El caso más simple es el del movimiento de una partícula en un campo magnético uniforme. Una partícula con masa " m ", carga " q ", energía cinética " qV " y velocidad " v " (  $v_x$ ,  $v_y$  ) que entra en un campo magnético uniforme de intensidad " B<sub>z</sub> " y componente solo en la dirección Z, se deflectará describiendo una trayectoria circular de radio " R " debido a la fuerza de Lorentz donde:

$$\frac{m}{q} = \frac{K R^2 B^2}{2V}$$

K es una constante dimensional  $4.83 \cdot 10^{-5}$  amu volts / cm<sup>2</sup> gauss<sup>2</sup>

Si en lugar de una partícula tenemos un haz de partículas monoenergéticas y monocargadas con diferentes masas entrando a un campo magnético uniforme, estas girarán con un radio distinto generando una separación espacial entre ellas de tal manera que se puede realizar una medición cuantitativa de cada una de las masas. Esta separación y cuantificación de masas es el principio básico de operación de los espectrómetros de masas.



**Fig.2.1 Separación de masas por un campo magnético**

Cuando se trata de haces de iones que salen de la fuente de iones divergiendo espacialmente, los sectores magnéticos deberán poseer ciertas características para enfocar estos haces.

El análisis del movimiento de un haz de iones en un campo magnético se ha realizado utilizando aproximaciones cada mas refinadas. Herzog<sup>(1934,1950,1953)</sup> fue el primero en estudiar analíticamente la óptica de iones con aproximaciones de primer orden y tanto Enge<sup>(1965,1970)</sup> como Penner<sup>(1964)</sup> lograron poner las bases para el cálculo matricial de las trayectorias de los iones en campos magnéticos y eléctricos hasta un segundo orden de aproximación.

Finalmente Matsuda y Wollnik<sup>(1965,1967,1971)</sup> durante la década de los 80<sup>(1981,1984,1985,1987,1989)</sup> desarrollaron integrales complicadas para simular el campo magnético disperso en forma matricial y llevaron los cálculos hasta un tercer orden de aproximación.

El éxito del método matricial es que debido a las propiedades de las matrices, el producto de ellas podía incluir siempre una mas que simulara un efecto adicional sobre el haz de iones.

El método de cálculo para la óptica de iones de un espectrómetro de masas propuesto en este trabajo, no es el método tradicional de cálculos matriciales. Sin embargo describiremos brevemente el método matricial con el propósito de compararlo con el nuestro y definir a los parámetros que utilizaremos.

### 2.1.1 Aproximación matricial de primer orden.

Para el análisis de las propiedades de un sector magnético "M" que enfoca, deflece y dispersa un haz de iones que pasa por él, Enge <sup>(1967)</sup> seleccionó dos rayos de partículas, uno central con parámetros ( $m_0$ ,  $v_0$ ,  $r_0$ ) y otro arbitrario que diverge del central tanto espacialmente como en cuanto a su momento. El momento "p" del rayo arbitrario es tal que:

$$p = p_0 (1 + \delta).$$

El rayo central sale, con una energía  $E = m_0 v_0^2 / 2$ , del punto  $S_0$  (rendija de definición que en realidad es tridimensional y se considera puntual por simplicidad) situado en un espacio (I) donde no hay fuerzas. Este punto se encuentra a una distancia  $L_1$  de la frontera del imán. El otro rayo diverge volumétricamente de las coordenadas ( $X_1, Y_1, Z_1$ ) del rayo central con una pendiente horizontal y vertical de  $Y_1'$  y  $Z_1'$  respectivamente. (Ver figura 2.2).

La dirección "X" coincide con la trayectoria del rayo central, "Y" es la dirección perpendicular a "X" y "Z" es la dirección perpendicular al plano XY que coincide con el plano medio del sector magnético. Después de recorrer la distancia  $L$ , el rayo entra a una región III donde actúa un campo magnético uniforme con simetría de espejo con respecto al plano XY y con componente solo en la dirección Z que hace que el rayo central se deflece girando con un radio "R". Después de la deflexión el rayo sale a otro espacio sin fuerzas (V) cuyo sistema de coordenadas ( $X_2, Y_2, Z_2$ ) es tal que nuevamente el eje "X" coincide con el rayo central y el rayo arbitrario nuevamente diverge espacialmente con pendientes  $Y_2'$  y  $Z_2'$ .

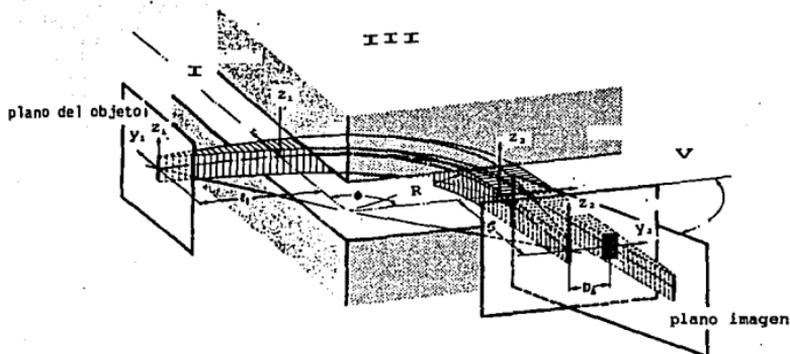


Fig.2.2 Sistema de coordenadas de trayectorias de haces de iones en espacios libres y en campo magnético uniforme.

La posición y dirección del rayo arbitrario al momento de salir del imán ( $X_2 = 0$ ) se puede expresar como una serie de funciones de las condiciones iniciales del rayo al entrar al campo magnético donde .

$$Y_2 = f_1 ( Y_1, Y_1', Z_1, Z_1', \delta )$$

$$Y_2' = f_2 ( Y_1, Y_1', Z_1, Z_1', \delta )$$

$$Z_2 = f_3 ( Y_1, Y_1', Z_1, Z_1', \delta )$$

$$Z_2' = f_4 ( Y_1, Y_1', Z_1, Z_1', \delta )$$

Las ecuaciones anteriores son lineales en tres parámetros (tamaño, ángulo y momento) ya que sus desviaciones con respecto al haz central son muy pequeñas ( $Y_1, Z_1, \delta \ll 1$  y  $Y_1', Z_1' < R$ ), y por lo tanto pueden expresarse en forma matricial. Los métodos matriciales para calcular trayectorias se conocen bien en óptica de fotones y se aplica la misma metodología tanto para electrones como para iones.

La expansión de las expresiones anteriores en series de Taylor a primer orden se encuentra en el apéndice I y aunque tiene una nomenclatura confusa se expresan para el movimiento en el plano horizontal como:

$$\begin{pmatrix} \frac{Y_2}{R} \\ \frac{Y_2'}{R} \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{Y}{Y} & \frac{Y}{Y'} & \frac{Y}{\delta} \\ \frac{Y'}{Y} & \frac{Y'}{Y'} & \frac{Y'}{\delta} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{Y_1}{R} \\ \frac{Y_1'}{R} \\ \delta \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 2.1}$$

donde  $Y/Y = \partial Y_2 / \partial Y_1$ ,  $Y/Y' = (1/R)\partial Y_2 / \partial Y_1'$ ,  $Y/\delta = (1/R)\partial Y_2 / \delta$  se divide entre el radio de giro del rayo central R para tener cantidades adimensionales que permiten comparaciones entre sistemas de distintos radios.

Para el sentido vertical la matriz es

$$\begin{pmatrix} \frac{Z_2}{R} \\ \frac{Z_2'}{R} \\ \frac{Z_2}{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{Z}{Z} & \frac{Z}{Z'} \\ \frac{Z'}{Z} & \frac{Z'}{Z'} \\ \frac{Z}{Z} & \frac{Z}{Z'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{Z_1}{R} \\ \frac{Z_1'}{R} \\ \frac{Z_1}{R} \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 2.2}$$

donde nuevamente  $Z/Z = \partial Z_2 / \partial Z_1$ ,  $Z/Z' = (1/R)\partial Z_2 / \partial Z_1'$

Además como la matriz de un sistema complejo se pueda expresar como el producto de las matrices individuales de cada componente del sistema, las trayectorias de los iones del sistema descrito anteriormente se pueden expresar como el producto de las matrices de transferencia del espacio libre I, del campo magnético III y del espacio libre V de tal manera que para el sentido horizontal

$$\begin{pmatrix} Y_2 \\ Y_2' \\ \delta \end{pmatrix} = |I_y| |III_y| |V_y| \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_1' \\ \delta \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 2.3}$$

y para el sentido vertical

$$\begin{vmatrix} z_2 \\ z_2' \end{vmatrix} = |I_z| |III_z| |V_z| \begin{vmatrix} z_1 \\ z_1' \\ \delta \end{vmatrix} \quad \text{Ec. 2.4}$$

Para los espacios libres de campos I y V las trayectorias de los haces son líneas rectas y por lo tanto la relación entre las coordenadas en la entrada y la salida del haz de iones del sector magnético se expresa mediante las siguientes matrices: (ver apéndice II para el desarrollo).

$$I_y = \begin{vmatrix} 1 & \frac{L_1}{R} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad V_z = \begin{vmatrix} 1 & \frac{L_1}{R} \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{Ec.2.5}$$

De la misma manera las matrices de transferencia del sector magnético expresado en coordenadas polares (  $r, \phi$  ) y para casos de entrada perpendicular a la frontera del imán en el plano XY son:

$$III_y = - \begin{vmatrix} \cos \phi & R \operatorname{sen} \phi \\ -\frac{\operatorname{sen} \phi}{R} & \cos \phi \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{Ec. 2.6}$$

$$III_x = \begin{vmatrix} 1 & R\phi \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Ec. 2.7

el desarrollo de estas ecuaciones se encuentra en el apéndice III

Cuando la entrada al sector magnético es oblicua, se incluyen dos matrices adicionales II y IV asociadas a los espacios comprendidos entre las fronteras del imán y los espacios libres. El efecto neto de una entrada oblicua de las partículas al campo magnético es cambiar la pendiente del haz en la posición  $Y_1$  a  $Y_1 \tan \epsilon$  donde  $\epsilon$  es el ángulo entre la perpendicular a la frontera del imán y el haz central en el espacio de entrada de tal manera que las matrices de transferencia horizontal y vertical se expresan como:

$$II_y = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \tan \frac{\epsilon_1}{R} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad II_x = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ -\tan \frac{\epsilon_1}{R} & 1 \end{vmatrix} \quad \text{Ec. 2.8}$$

Para los haces interiores al haz central, la trayectoria dentro del campo magnético aumenta produciendo un mayor ángulo de giro mientras que a los haces exteriores se les reduce la distancia que recorren en el campo magnético y su ángulo de giro disminuye. Esta característica de entrada oblicua puede utilizarse como propiedad enfocadora en el sentido vertical.

Tomando en cuenta la matriz de entrada oblicua el efecto total sobre un haz de iones en un campo magnético uniforme se describe mediante el producto de las matrices I, II, III, IV, V, de la misma manera que lo describe Taya <sup>(1978)</sup>. Fig 2.3

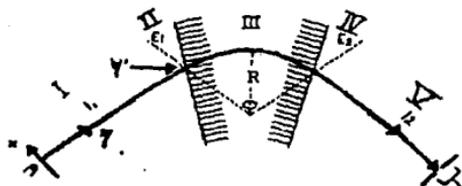


Fig 2.3 Trayectoria central de haz de iones en espectrómetro de masas

### 2.1.2 Aproximación matricial de tercer orden

Matsuda, Woolnik y Matsuo <sup>(1989)</sup> desarrollaron las matrices de transferencia con aproximaciones de tercer orden. Estas matrices tienen dimensiones de  $40 \times 40$  e incluyen además de efectos de tercer orden, entradas oblicuas, efectos de campo magnético disperso (extensión del campo magnético fuera de las fronteras del imán) etc.

El trabajo de Matsuda y Matsuo <sup>(1986)</sup> ha llegado hasta el desarrollo de un programa comercial de computadora llamado TRIO (third order ion optics) con el cual se pueden calcular las aberraciones de la imagen y la posición del foco para cualquier sistema óptico que tenga espacios libres, campos magnéticos homogéneos o inhomogéneos, campos eléctricos cilindricos o toroidales, lentes cuadrupolares magnéticas ó eléctricas y multipolos.

En el desarrollo del programa TRIO, Matsuda toma en cuenta las mismas consideraciones teóricas que Penner así como las mismas condiciones iniciales del haz de iones y estos difieren solo en nomenclatura.

Para Matsuda el tamaño del haz a la salida del sector magnético en la región de colección está dada por  $X_2$  en el plano horizontal y  $Y_2$  para el plano vertical.

$X_2$  se expresa como:

$$\begin{aligned}
 X_2 = & A_x X + A_\alpha \alpha + A_\delta \delta + A^\Gamma \Gamma + A_{xx} X^2 + A_{x\alpha} X\alpha + A_{x\delta} X\delta \\
 & + A_{\alpha\alpha} \alpha^2 + A_{\alpha\delta} \alpha\delta + A_{\delta\delta} \delta^2 + A_{yy} Y^2 + A_{y\beta} Y\beta + A_{\beta\beta} \beta^2 \\
 & + A_{\alpha\alpha\alpha} \alpha^3 + A_{\alpha\alpha\delta} \alpha^2\delta + A_{\alpha\delta\delta} \alpha\delta^2 + A_{\alpha yy} \alpha y^2 + A_{\alpha y\beta} \alpha y\beta \\
 & + A_{\alpha\beta\beta} \alpha\beta^2 + A_{\delta\delta\delta} \delta^3 + A_{\delta yy} \delta y^2 + A_{\delta y\beta} \delta y\beta + A_{\delta\beta\beta} \delta\beta^2
 \end{aligned}$$

Y

Ec. 2.9

$$Y_2 = A_y Y + A_\beta \beta + \dots$$

En las ecuaciones anteriores el ángulo de divergencia del haz al salir de la fuente de iones es  $(\alpha, \beta)$ , la dispersión del momento con respecto del haz central es  $\delta$  y el haz tiene una desviación adicional de energía  $\Gamma$ .

Las matrices de Matsuda tienen un gran campo de aplicación en aceleradores de partículas con haces muy energéticos y de anchos considerables, sin embargo el programa TRIO no tiene gran precisión en el cálculo de la posición del punto focal ni en el análisis del tamaño y forma de la imagen de haces de pequeñas dimensiones y poco energéticos como los que se usan en espectrómetros de masas para isótopos estables.

## 2.2 Aberraciones.

Una de las características más importantes de un sistema óptico que maneja partículas cargadas es el poseer una gran calidad de imagen. En óptica de fotones cuando la imagen producida no sufre ninguna distorsión respecto al objeto se dice que el sistema óptico no tiene aberraciones. Entendiendo por aberración la deformaciones que produce el sistema de transferencia al objeto.

En las matrices de transferencia desarrolladas por Enge (1970), Penner (1963), Matsuda y finalmente Sano (1969) es posible asociarle a cada término de las matrices una aberración y de esta manera se pueden analizar diferentes arreglos geométricos o sistemas ópticos de una manera muy simple.

Utilizando la nomenclatura de Matsuda, expresada en la ecuación 2.9, y la de Penner en la ecuación 2.1, a continuación se analizan las aberraciones o términos de las matrices:

$A_x$  o  $(Y/Y)$  es el primer término de la matriz, conocido como amplificación del sistema en la dirección XY y es la relación entre la dimensión lineal de la imagen y el objeto en el plano horizontal, determinada en la posición donde este término tiene un mínimo o sea en el punto de enfoque.

$A_y$  o  $(Y/Y')$  es la aberración de primer orden asociada a la dispersión angular del haz. El requisito mínimo que debe cumplir cualquier sistema óptico es que esta aberración tienda a cero, o sea que el haz divergente que sale de la fuente de iones sea un haz convergente hacia el punto de enfoque en la región del colector.

$A_z$  es la aberración asociada a la dispersión de la energía de los iones.

$A_r$  ó  $(Y/\delta)$  es la dispersión de la masa. Este término está asociado a partículas con distinto momento que parten de un mismo punto en la fuente de iones y se enfocan en el plano de la imagen en puntos distintos. Se llama dispersión "D" a la cantidad adimensional que cuantifica la capacidad de un sistema de separar los puntos focales de dos haces de diferente momento.

$$D = \frac{\Delta B}{B \Delta m} \quad \text{Ec. 2.10}$$

donde  $\Delta B$  es la diferencia entre las intensidades de los campos magnéticos necesarios para enfocar a la masa  $m$  y  $m+\Delta m$  en el mismo punto.

$A_{ij}$  o  $(Z/Z')$  es la amplificación de la imagen en la dirección  $Z$ , y  $A_{1j}$  y  $A_{2j}$  son los coeficientes de aberración de segundo y tercer orden.

El análisis de estos términos o aberraciones en las matrices de transferencia de los sistemas ópticos se utiliza para optimizar las características de operación de estos .

### 2.3 Arreglos geométricos.

Haciendo nuevamente referencia a la óptica de fotones, los campos magnéticos actúan como prismas enfocadores de los haces de iones que divergen de la fuente de iones. Las propiedades de los sistemas ópticos dependen tanto de las características de los campos magnéticos como de los arreglos geométricos en los que se utilizan.

Como se mencionó anteriormente una manera muy simple de estudiar las propiedades de los diferentes arreglos geométricos que se pueden construir con sectores magnéticos es analizando los coeficientes de enfoque o aberraciones de las matrices de transferencia de dichos sistemas.

A continuación analizaremos de una manera breve, las propiedades de las geometrías más utilizadas en la construcción de espectrómetros de masas como base de comparación a los cálculos desarrollados posteriormente en este trabajo.

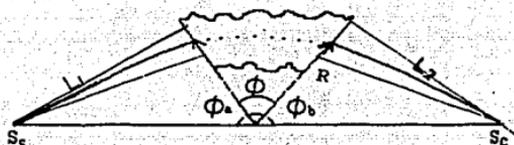
#### 2.3.1 Enfoque a primer orden.

El arreglo geométrico más sencillo, que se utilizó en la óptica de iones de las primeras décadas, fue el que utiliza la aproximación de Penner y que cumple con la Ley de Barber (1971):

$$\tan\phi + \tan\phi_a + \tan\phi_b = \Pi \quad \text{Ec. 2.11}$$

donde  $\phi$  es el ángulo del sector magnético,  $\phi_a$  es el ángulo entre la frontera del imán y la línea que va del vértice del imán a la fuente de iones y  $\phi_b$  el ángulo entre la frontera del imán y la línea que une al vértice del imán con el punto de enfoque. (ver figura 2.4)

Este arreglo geométrico tiene enfoque de primer orden, el coeficiente  $Y/Y'$  (Penner) o  $A_a$  (Matsuda) es cero, esto significa que la posición a la cual llega el haz al plano de la imagen es independiente de su divergencia a salir del objeto en  $X_o = 0$ . En apéndice IV se obtiene la ecuación 2.11 a partir de  $Y/Y' = 0$ .



**Fig. 2.4 Ley de Barber**

### 2.3.2 Entrada Normal.

Consideremos ahora el caso para el cual  $A = B = \cot \phi/2$  y donde la matriz de transferencia se convierte en:

$$H = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 2 \\ -\text{sen}\phi & -1 & \text{sen}\phi \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

al identificar en esta matriz las aberraciones podemos caracterizar a esta geometría como que tiene: una amplificación horizontal  $Y/Y'$  de 1, un enfoque de primer orden  $Y/Y'=0$  y una dispersión de masas de 2 independiente del ángulo de deflexión  $\phi$ .

### 2.3.3 Entrada oblicua.

Ahora consideramos un caso con entrada oblicua al sector magnético donde el sistema es simétrico y la distancia focal es  $L_1 = L_2 = 2R$ , el ángulo  $\phi$  del sector magnético es  $90^\circ$  y el ángulo de incidencia  $\epsilon_2 = \epsilon_1 = 26.5^\circ$ . En este caso las matrices de transferencia serán:

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 4 \\ \frac{3}{4} & 1 & \frac{3}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Se dice que esta geometría tiene doble enfoque o enfoque astigmático ya que tanto  $Y/Y'$  como  $Z/Z'$  son iguales a cero de tal manera que el sector magnético enfoca en ambas direcciones al haz divergente; además tiene doble dispersión de masa ya que la distancia entre los puntos focales de masas adyacentes es equivalente a la producida por un sector magnético del doble del radio del sector con entrada normal.

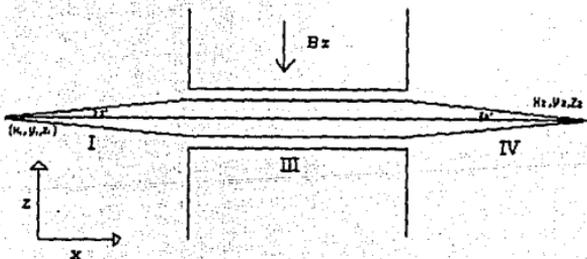


Fig. 2.5 Enfoque astigmático

Para que ocurra este doble enfoque la geometría deberá de cumplir simultáneamente la condición de enfoque horizontal que ocurre para una distancia  $L_{ty}$

$$L_{ty} = \frac{R}{1 - \tan \epsilon} \quad \text{Ec.2.12}$$

y la condición de enfoque vertical en  $L_{tz}$

$$L_{tz} = \frac{R \left( 1 + \frac{\pi}{2} - \pi \tan \epsilon \right)}{-\pi \tan^2 \epsilon + \left( 3 + \frac{\pi}{2} \right) \tan \epsilon - 1} \quad \text{Ec.2.13}$$

Por lo tanto todos los arreglos que cumplan las condiciones expresadas en las ecuaciones 2.12 y 2.13 simultáneamente tendrán enfoque astigmático.

$$\frac{1}{1 - \tan \epsilon} = \frac{\left( 1 + \frac{\pi}{2} - \pi \tan \epsilon \right)}{-\pi \tan^2 \epsilon + \left( 3 + \frac{\pi}{2} \right) \tan \epsilon - 1} \quad \text{Ec.2.14}$$

como en los casos de:  $\phi = 130^\circ$ ,  $\epsilon = 56^\circ$  y  $\phi = 90^\circ$ ,  $\epsilon = 26.5^\circ$

## 2.4 Campo magnético disperso.

En los primeros cálculos de sectores magnéticos, (Engel 1965, 1970) las propiedades de enfoque de los sectores se calculaban considerando que el campo magnético decrecía abruptamente en la frontera del imán, en forma de escalón de un valor de intensidad constante  $B_0$  a un valor cero. A esta consideración se le conoce como aproximación de campo no-campo.

En realidad la intensidad del campo, disminuye de manera gradual del 100% al 10% de la intensidad total en una distancia equivalente a la distancia del entrehierro del imán, para después disminuir del 10% a un valor cercano a cero en una distancia comparable al tamaño total del imán (figura 2.8). A la extensión del campo magnético fuera de las fronteras del imán se le llama campo magnético disperso.

El campo magnético disperso se debe principalmente a la distorsión de las líneas de campo por la saturación del hierro en los bordes de los polos debido a que aquí la permeabilidad no es infinita. El grado de esta saturación depende de varios factores, como son: la composición química del hierro de los polos, la posición y extensión de las bobinas, el tamaño del entrehierro así como del campo máximo de operación.

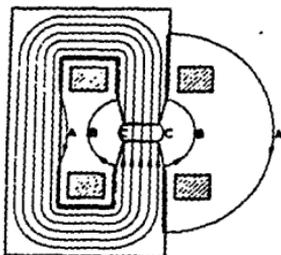
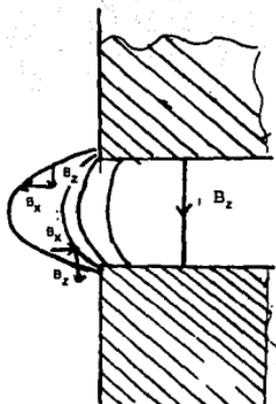


Fig 2.6 Zonas de saturación de un electroimán.

Los efectos del campo magnético disperso sobre el haz de partículas cargadas son variados e incluyen desde cambios en las propiedades de enfoque del sector magnético debido a la presencia de componentes no normales del campo magnético ( $B_x$  y  $B_y$ ), hasta el corrimiento de las distancias focales de los haces, ya que estos recorren una distancia adicional en un campo magnético no uniforme y por lo tanto tienen un mayor ángulo de giro.



**Fig. 2.7 Componentes del campo magnético disperso**

El cálculo y el efecto del campo efectivo sobre las propiedades enfocadoras de sectores magnéticos han sido estudiadas por varios autores. Desde 1933 Barber de una manera intuitiva recorrió las fronteras reales del imán una distancia de 0.6 unidades de entrehierro para corregir el efecto de campo disperso y así obtener el punto focal real.

Para hacer cálculos más precisos y aplicables a todo tipo de sectores magnéticos, H. Enge <sup>(1970)</sup>, desarrolló el concepto de fronteras de campo efectivo, donde estas son fronteras imaginarias que se desplazan con respecto de las fronteras reales. Este desplazamiento es el necesario para que la deflexión adicional del haz producida por el campo disperso sea la misma que la producida por un campo magnético constante en la misma distancia.

La posición de las fronteras de campo efectivo las calculó integrando una función que describía el campo magnético disperso con respecto a la distancia "Y". Gráficamente la posición de este punto es el lugar donde el área de la integral de la función de campo magnético disperso desde este punto hasta el infinito es igual al área de la integral de la misma función desde este mismo punto hasta el interior del imán donde la intensidad de campo es constante. A este punto se le conoce como frontera de campo efectivo. (fig 2.8)

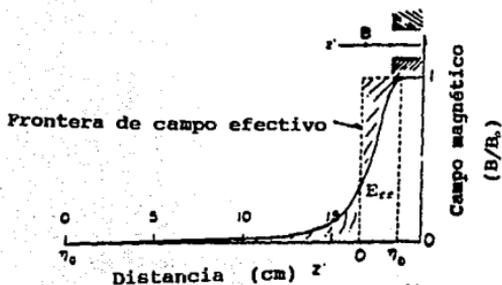


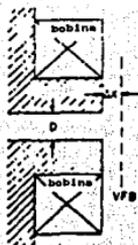
Fig. 2.8 Posición de la frontera de campo efectivo

Matsuda y Wollnik en sus matrices de tercer orden toman en cuenta el campo magnético disperso simulándolo mediante las funciones integrales de Enge.

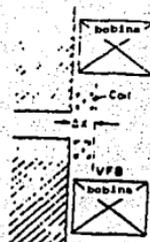
$$I_4 = B_0^2 - \int_{\mu_a}^{\mu_b} B^2 \mu d\mu - \mu_b \quad \text{Ec.2.15}$$

donde  $B_0$  es el campo magnético uniforme,  $B(\mu)$  es el campo disperso y  $(\mu_a, \mu_b)$  es la región sobre la cual se extiende el campo disperso normalizado por el radio de giro del haz central.

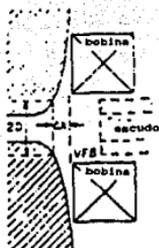
En el cálculo de algunas sistemas ópticos es deseable eliminar el campo magnético disperso para lo cual ciertos autores como Brown (1965) y Braams (1964) han desarrollado distintos tipos de blindajes. Aún otros como Rokowski (1970) desarrollaron distintos tipos de fronteras curvas en los polos magnéticos para evitar la saturación del hierro en las esquinas de los polos y así disminuir el campo magnético disperso.



a) para  $B < 2000$  gauss  
 $E_{rr} = .6$  a  $.8 D$



b) para  $B$  moderado  
 $E_{rr} = .5$  a  $.9 D$



c)  $B$  intenso y alta  
 precisión  
 $E_{rr} = .62 D$  sin escudo  
 $E_{rr} = .35 D$  con escudo



d)  $B$  intenso y alta  
 precisión  
 $E_{rr} = 1.1 D$

Fig. 2.9 Perfiles de configuraciones de polos magnéticos y su distancia.

### III. TRAYECTORIA

El objetivo del presente trabajo es mejorar el método matricial tradicional, con el que se obtienen las características ópticas de sistemas magnéticos, simulando el campo magnético disperso sólo con la integral de Enge.

El método propuesto consiste en obtener las soluciones analíticas a las ecuaciones de movimiento de los haces de iones en presencia de un campo magnético. Posteriormente, a partir de un mapeo espacial del campo magnético del espectrómetro, se realiza un ajuste utilizando una función exponencial cuadrática ( ec.3.38) y de este modo se describe el campo magnético en tres dimensiones. Con esta descripción y tomando regiones espaciales suficientemente pequeñas para poder considerar en ellas el campo magnético constante se aplican las soluciones de las ecuaciones de movimiento con las condiciones iniciales y de frontera adecuadas en cada región. Esto se hace mediante un programa de cálculo que utiliza un proceso iterativo para trazar las trayectorias de los haces punto a punto y obtener las imágenes de dichos haces en cualquier punto del espacio. De este modo se pueden optimizar las características ópticas de un espectrómetro de masas y diseñarlo.

#### 3.1 Ecuaciones de movimiento.

De forma general la ecuación de movimiento de una partícula con masa " m " y carga " q " que entra a un campo magnético constante  $B = ( B_x, B_y, B_z )$  con velocidad  $v = ( v_x, v_y, v_z )$

$$F = m\ddot{r} = q \begin{vmatrix} i & j & k \\ v_x & v_y & v_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} \quad 3.1$$

$$|B|^2 = (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2) \quad 3.2$$

$$A = \frac{q}{m} B_x \quad B = \frac{q}{m} B_y \quad \omega = A^2 + B^2 \quad 3.3$$

para los casos que trataremos  $B_y = 0$  y  $\omega$  es la frecuencia ciclotrónica con la que gira la partícula dentro del campo magnético.

Utilizando transformadas de Laplace para resolver las ecuaciones de movimiento tenemos:

$$SL(v_x) - AL(v_y) + 0L(v_x) = (v_x)_0 \quad 3.4$$

$$-A(v_x) - SL(v_y) - BL(v_x) = (v_y)_0 \quad 3.5$$

$$0L(v_x) + BL(v_y) + SL(v_x) = (v_x)_0 \quad 3.6$$

donde S y L son las transformadas.

Resolviendo para la primera componente tenemos que la transformada se puede escribir como:

$$L(V_x) = \frac{\begin{vmatrix} v_{x0} & -A & 0 \\ v_{y0} & +S & -B \\ v_{x0} & +B & S \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} S & -A & 0 \\ A & S & -B \\ 0 & B & S \end{vmatrix}} = \frac{S^2(V_x)_0 + AB(V_x)_0 + B^2(V_x)_0 + A(V_y)_0 S}{S(S^2 + B^2 + A^2)}$$

y su solución es:

3.7

$$v_x = (v_x)_0 \cos \omega t + \frac{A}{\omega} (v_y)_0 \sin \omega t + \frac{B}{\omega^2} [A(v_x)_0 + B(v_x)_0] [1 - \cos \omega t]$$

3.8

Para  $V_y$  la solución para las transformadas de Laplace es:

$$V_y = (V_y)_0 \cos \omega t + \frac{[B(V_x)_0 - A(V_x)_0] \operatorname{sen} \omega t}{\omega} \quad 3.9$$

y finalmente la solución para la componente  $v_x$  es:

$$V_x = (V_x)_0 \cos \omega t - \frac{B(V_y)_0 \operatorname{sen} \omega t}{\omega} + \frac{A}{\omega^2} [B(V_x)_0 + A(V_x)_0] [1 - \cos \omega t] \quad 3.10$$

Ahora para obtener las ecuaciones para las coordenadas de las partículas integramos las componentes de la velocidad obtenidas en las ecuaciones 3.8, 3.9 y 3.10

$$\int_{x_0}^{x_0} dx = (V_x)_0 \int \cos \omega t dt + \frac{A}{\omega} (V_y)_0 \int \operatorname{sen} \omega t dt + \frac{B}{\omega^2} [A(V_x)_0 + B(V_x)_0] \left[ \int (1 - \cos \omega t) dt \right] \quad 3.11$$

donde:

$$x = \frac{(V_x)_0}{\omega} \operatorname{sen} \omega t \Big|_0^t - \frac{A}{\omega^2} (V_y)_0 \cos \omega t \Big|_0^t - \frac{B}{\omega^2} [A(V_x)_0 + B(V_x)_0] \frac{\operatorname{sen} \omega t \Big|_0^t}{\omega} + \frac{B}{\omega^2} [A(V_x)_0 + B(V_x)_0] t \Big|_0^t + C_1$$

3.12

y la constante de integración es:

$$C_1 = \frac{A}{\omega^2} (V_y)_0$$

Resolviendo ahora para Y tenemos:

$$\int_0^y dY = (V_y)_0 \int_0^t \cos \omega t dt + \frac{B(V_x)_0 - A(V_x)_0}{\omega} \int_0^t \text{sen} \omega t dt$$

donde

3.13

$$Y = \frac{(V_y)_0}{\omega} \text{sen} \omega t \Big|_0^t - \frac{B(V_x)_0 - A(V_x)_0}{\omega^2} \cos \omega t \Big|_0^t + C_2$$

3.14

$$C_2 = \frac{B(V_x)_0 - A(V_x)_0}{\omega^2}$$

De igual manera si ahora integramos la componente Z de la velocidad tendremos:

$$\int_0^z dz = (V_z)_0 \int_0^t \cos \omega t dt - \frac{B}{\omega} (V_y)_0 \int_0^t \text{sen} \omega t dt + \frac{A}{\omega^2} [B(V_x)_0 + A(V_x)_0] \left[ \int_0^t dt - \int_0^t \cos \omega t \right]$$

3.15

de donde

$$Z = (V_z)_0 \text{sen} \omega t \Big|_0^t + \frac{B}{\omega^2} (V_y)_0 \cos \omega t \Big|_0^t + C + \frac{A}{\omega^2} [B(V_x)_0 + A(V_x)_0] \left[ t - \frac{\text{sen} \omega t}{\omega} \Big|_0^t \right]$$

siendo la constante de integración :

3.16

$$C_3 = - \frac{B(V_y)_0}{\omega^2}$$

Las expresiones que se obtuvieron para determinar la velocidad ( $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$ ) (ecuaciones 3.8, 3.9, 3.10), así como la posición ( $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ ) (ecuaciones 3.12, 3.14, 3.16) de una partícula en un campo magnético se simplificaron mediante cálculos numéricos de tal manera que se pueden reescribir como:

$$v_x = (v_x)_0 \left[ 1 - \frac{\omega^2 t^2}{2} \right] + A(v_y)_0 t + \frac{Bt^2}{2} (A(v_z)_0 + B(v_x)_0) \quad 3.17$$

$$v_y = (v_y)_0 \left[ 1 - \frac{\omega^2 t^2}{2} \right] + [B(v_x)_0 - A(v_x)_0] t \quad 3.18$$

$$v_z = (v_z)_0 \left[ 1 - \frac{\omega^2 t^2}{2} \right] - B(v_y)_0 t + A[B(v_x)_0 + A(v_x)_0] \frac{\omega^2 t^2}{2} \quad 3.19$$

$$x = (v_x)_0 t + (v_y)_0 \frac{At^2}{2} - (v_x)_0 \frac{AB}{\omega^2} \quad 3.20$$

$$y = (v_y)_0 t - \frac{[B(v_x)_0 - A(v_x)_0] t^2}{2} \quad 3.21$$

$$z = (v_z)_0 t - \frac{B(v_y)_0 t^2}{2} \quad 3.22$$

En las ecuaciones anteriores el tiempo es la variable independiente a partir de la cual se puede calcular la posición y velocidad de la partícula en movimiento. Sin embargo dado que nuestras necesidades de cálculo son hacer iteraciones de trayectorias utilizando incrementos constantes en la dirección  $X$ , vamos a substituir el tiempo "  $t$  " integrando la ecuación 3.20 en un intervalo que va de  $x$  a  $x + \Delta x$  ( $\Delta x$  es el tamaño del intervalo) y obtenemos:

$$x - x_0 = \Delta x = (V_y)_0 t + \frac{A(V_y)_0 t^2}{2}$$

3.23

Este intervalo  $\Delta x$  es una función de las condiciones iniciales y se resuelve numéricamente para cada  $t$ .

Con las ecuaciones de movimiento desarrolladas hasta el momento es posible obtener las trayectorias de los haces de iones haciendo una iteración numérica utilizando las condiciones finales de un intervalo anterior como condiciones iniciales del intervalo siguiente.

Ahora es necesario desarrollar un sistema de coordenadas adecuado para seguir las trayectorias de las partículas dentro y fuera del sector magnético y definir los espacios donde se hará la iteración numérica.

Debido principalmente a las características del campo magnético las iteraciones numéricas de las trayectorias de los haces de iones se realizaron en 5 regiones asignando en cada una valores distintos al intervalo de integración  $\Delta x$ .

La primera región comprende desde la rejilla de la fuente de iones  $S_1$  hasta 3 centímetros antes de la frontera de la imán, donde por ser la trayectoria una recta a primera aproximación las iteraciones se hacen cada milímetro.

La segunda región, caracterizada por el cambio de varios ordenes de magnitud en la intensidad del campo magnético, está comprendida entre 3 centímetros fuera de la frontera del imán y 3 centímetros dentro del imán. En esta región las iteraciones se hacen cada décima de milímetro.

La tercera región comprende de 3 centímetros dentro del imán en la entrada a 3 centímetros dentro de la imán a la salida, la trayectoria es circular y el radio de la trayectoria está dado por las ecuaciones de una partícula cargada moviéndose en un campo magnético homogéneo.

La cuarta región es semejante a la segunda y la quinta a la primera respectivamente.

### 3.2 SISTEMA DE COORDENADAS.

El sistema de coordenadas que utilizaremos es independiente de las trayectorias de las partículas, capaz de analizar diferentes geometrías y además de dar una continuidad en el trazo es congruente con el modelo teórico. Este sistema de coordenadas está definido por dos líneas perpendiculares a las fronteras del imán que se intersectan en un punto llamado "M" y que define al origen del sistema de coordenadas.

Llamamos "D" al ángulo del sector magnético donde entra la partícula, "Q" al punto de entrada de la partícula al imán, "R" al radio de giro de las partículas, "P" al ángulo total de giro de la partícula, "P" al punto de salida del imán y "alfa" y "beta" a los ángulos de entrada y salida de la partícula con respecto a los ejes del sistema de coordenadas. En la figura creada con los parámetros descritos anteriormente aparecen varios triángulos en los que podemos relacionar las características geométricas del sistema ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\phi$ , D) con las distancias sobre las cuales vamos a realizar las iteraciones numéricas de las trayectorias. (Fig.3.1)

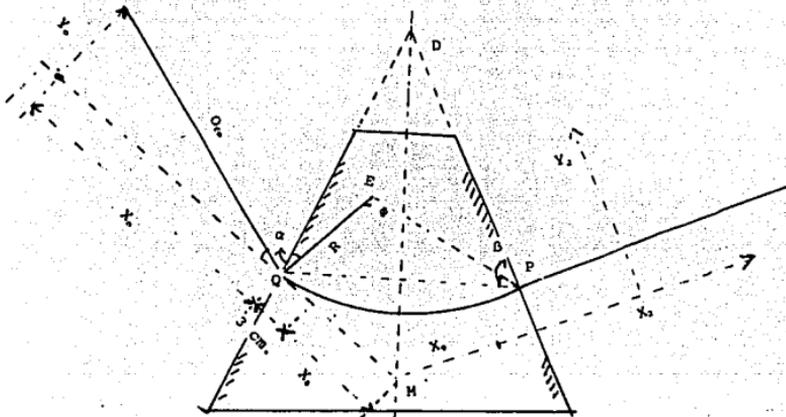


Fig.3.1 Sistema de coordenadas para el cálculo de las trayectorias de iones.

Si llamamos a las coordenadas de la fuente de iones en el plano XY ( $X_0, Y_0$ ),  $O_{1e}$  a la distancia de la fuente de iones a la frontera del imán y  $X_8 + 3$  a la distancia de la frontera del imán al origen del sistema de coordenadas, mediante relaciones geométricas calculamos los valores  $X_8, X_0, Y_0$  para cualquier arreglo geométrico:

$$X_8 = \frac{2R * \text{sen}(\frac{F}{2}) * \cos(\frac{F}{2} - \alpha) * \tan(\frac{D}{2})}{\text{sen}(D)} - 3 - E_{ff} \quad 3.26$$

$$\sigma = \phi + \alpha + \beta \quad 3.27$$

$$X_0 = O_{1e} \cos(\alpha) - 3 + X_8 \quad 3.28$$

$$Y_0 = O_{1e} \text{sen}(\alpha) \quad 3.29$$

para sistemas geométricos simétricos

$$X_8 = -X_9 \quad \text{y} \quad \alpha = \beta$$

Es necesario ajustar la distancia  $X_0$  a que sea un múltiplo entero de los intervalos sobre los cuales se va a realizar la iteración numérica de tal manera que la fuente de iones se recorre a una nueva distancia  $X_{14}$  donde:

$$X_{13} = (X_0 - X_8) - \text{PARTE ENTERA}(X_0 - X_8)$$

$$X_{14} = X_0 - X_{13}$$

Una vez que se han realizado las iteraciones desde la fuente de iones hasta 3 centímetros dentro del imán es necesario hacer un cambio de coordenadas del sistema de entrada ( $X_1, Y_1, Z_1$ ) al sistema de coordenadas de salida ( $X_2, Y_2, Z_2$ ) mediante las siguientes relaciones:

$$X_2 = X_1 \cos \sigma + Y_1 \text{sen} \sigma$$

$$Y_2 = Y_1 \cos \sigma - X_1 \text{sen} \sigma$$

$$T_2 = \tan(\text{atn}(T_1) - \sigma)$$

Considerando que dentro del imán actúa un campo magnético uniforme las trayectorias de las partículas serán círculos que, como ya mencionamos anteriormente, empezarán a trazarse 3 centímetros dentro del imán, o sea a partir de  $X_3$ .

La partícula que llega a  $X_3$  con una pendiente  $T_7$  y una ordenada al origen  $Y_7$ , se desplazará en un círculo con centro de giro  $(X_c, Y_c)$  y tendrá en el sistema de coordenadas de salida y en el punto simétrico  $X_3$ , una coordenada  $Y_3$  y  $Z_3$ , después del giro, una pendiente  $T_3$  y un ángulo "  $\tau$  " que es el ángulo en radianes que habrá girado la partícula al encontrarse en  $X_3$ . Se pueden escribir las siguientes relaciones.

$$X_c = R \cdot \cos(\text{atn}(T^{-1})) + X_0$$

$$Y_c = R \cdot \text{sen}(\text{atn}(T^{-1})) + Y_0$$

$$Y_3 = Y_c - R \cdot \cos(\text{asn}(\frac{X_3 - X_c}{R}))$$

$$T_3 = \frac{(X_3 - X_c)}{(Y_c - Y_3)}$$

Para obtener valores comparables directamente a los reportados en la literatura citada, en el capítulo 2 se decidió tomar de manera explícita la extensión del campo magnético disperso dentro del sistema de coordenadas, utilizando el concepto de campo efectivo introducido por Enge. Llamamos  $E_{ef}$  a la distancia del campo efectivo y ésta se calculo por aproximaciones sucesivas para cada arreglo geométrico, adicionando esta a las distancias  $X_3$  y a  $X_0$  y el efecto neto será aumentar o disminuir la distancia de la fuente de iones a la frontera del imán.

### 3.2 Cálculo de Campo Magnético Disperso.

Como se mencionó en el capítulo anterior, el campo magnético actúa como una lente óptica y los efectos del campo magnético disperso tiene propiedades enfocadoras muy interesantes, ya que la presencia de la componente  $B_x$  en la intensidad de campo magnético disperso implica la existencia de una fuerza en la dirección  $Z$  ( $F_z$ ) sobre las partículas con componentes de velocidad en la dirección  $Y$  ( $V_y$ ). Esta fuerza, que cambia de dirección dependiendo de su posición con respecto del plano medio, puede utilizarse como fuerza enfocadora, especialmente en arreglos geométricos donde los haces de iones tienen grandes ángulos de incidencia con respecto al sector magnético, ya que recorren una mayor distancia dentro del campo magnético disperso y es precisamente en esta región donde ocurre el enfoque o desenfoque de las partículas en el plano vertical.

Otro factor a considerar es que las aberraciones producidas por el campo magnético disperso son de la misma magnitud que los términos de segundo orden de las ecuaciones de movimiento utilizadas en los cálculos de las trayectorias de partículas cargadas en campos magnéticos. Por lo tanto la capacidad de poder modelar el campo magnético disperso con gran exactitud es un factor muy importante en el cálculo de las trayectorias mencionadas.

En este trabajo se determinó experimentalmente la distribución del campo magnético disperso en el espacio que recorren las partículas cargadas desde la fuente de iones hasta el colector. La determinación experimental de la distribución espacial del campo magnético se realizó con un medidor Varian modelo FR-40 con pastilla detectora tipo Hall con regulador de temperatura, el cual fue calibrado contra un medidor de resonancia nuclear absoluto.

Primero se determinó el centro del área sensible del generador Hall mediante un campo magnético muy definido generado con un imán permanente y una lámina muy delgada (Henni <sup>1966</sup>). Sobre la lámina se movió el generador Hall en dos direcciones perpendiculares hasta encontrar el centro del área sensible con una precisión de 0.1 mm. Con esta determinación es posible garantizar que los valores del campo magnético medido tienen una referencia de posición real con respecto al sistema de coordenadas que se establece.

Luego la punta Hall se montó en un banco óptico figura 3.3 con movimientos tridimensional colocado en el campo magnético disperso. El movimiento tridimensional en los ejes X, Y, Z se hizo manualmente controlando la posición de la punta Hall con una precisión de 0.1mm. Para cada valor de X, desde 3 cm. dentro del imán hasta 40 cm. fuera de él, se tomaron valores de campo magnético con incrementos de 1 mm. para las posiciones (Y=0 Z=0), (Y=0 Z=0.5 cm), (Y=0.5 Z=0.5) (Y=0.5 Z=0) y nuevamente se repitió la posición Y=0 Z=0 para asegurar que el movimiento de la punta Hall no tiene corrimientos.

Se mapearon los valores del campo magnético para intensidades de 6, 8 y 10 kilogauss en 2 imanes distintos de 60° y 90° grados tanto para el centro del entrehierro Z=0 como para 0.5 cm arriba. A cada juego de medidas se les asignaron las siguientes claves .

$$\begin{array}{ll} B_z(X_2, 0) = C_{f2} & B_z(X_2, .5) = D_{f2} \\ B_z(X_3, 0) = C_{f3} & B_z(X_3, .5) = D_{f3} \end{array}$$

Una vez obtenida la matriz de los valores se ajustaron los datos a una ecuación para utilizar esta para simular, en el cálculo de las trayectorias de partículas cargadas, la distribución del campo magnético en el espacio.

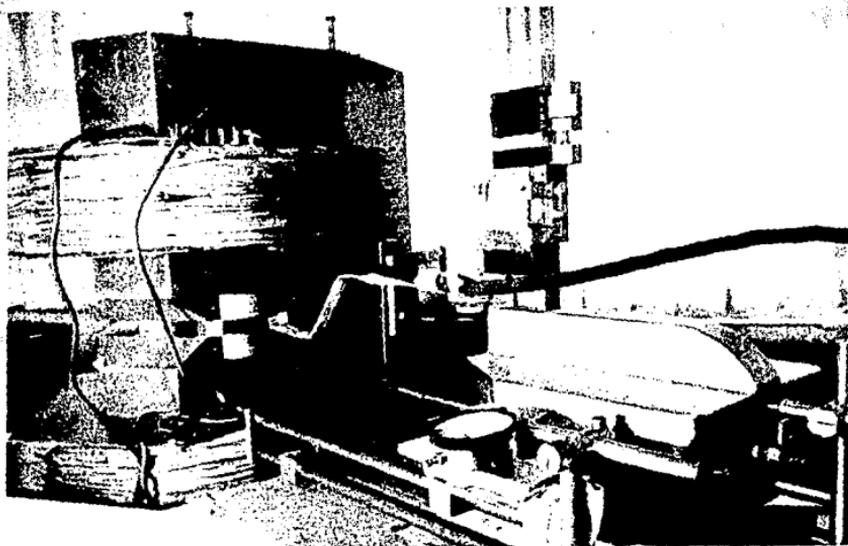


Fig. 3.2 Banco óptico para medir campos magnéticos

Mediante un ajuste por mínimos cuadrados no lineales a varios modelos se encontró que los datos mostraban un excelente ajuste a una ecuación exponencial cuadrática del tipo

$$B(x, z) = \frac{B_0}{1 + \exp(B \cdot X)^2 + \sqrt{(B \cdot X + E)^2 - 4C(A^2 + D + 1)}} \quad 3.38$$

donde

B(x, z) es la intensidad del campo magnético.

X es la distancia a la frontera del imán en cm.

B<sub>0</sub> es la intensidad máxima del campo dentro del entrehierro.

A, B, C, D y E son parámetros de ajuste.

Los valores de las parámetros A, B, C, D, E dependen de z, de la intensidad del campo magnético máximo, del hierro y de la construcción del imán y se encuentran en la tabla 3.1

E<sub>ff</sub> es la distancia al campo efectivo y / es la integral de Enge de la ecuación 2.15

	IMAN	IFUNAM R=25 Cm.	Entrehier= 2Cm.	60	
	10 Kilogauss		8 Kilogauss	6 Kilogauss	
	Central .5 arriba	Central .5 arriba	Central .5 arriba	Central .5 a	
A	-0.071	-0.28399	-0.06714	-0.26857	-0.06909
B	-0.49382	-0.96705	-0.47802	-0.95691	-0.49697
C	-0.07749	-0.0775	-0.07537	-0.07557	-0.0778
D	-0.93854	-1.87707	-0.94865	-1.8853	-0.94926
E	-0.41492	-0.41992	-0.41332	-0.41532	-0.4127
K	9987.3	9990.2	7865.23	7925.36	5985.63
f	4.686	2.332	4.179	2.349	4.707
E <sub>ff</sub>	2.15	1.1	2.25	1.1001	2.15

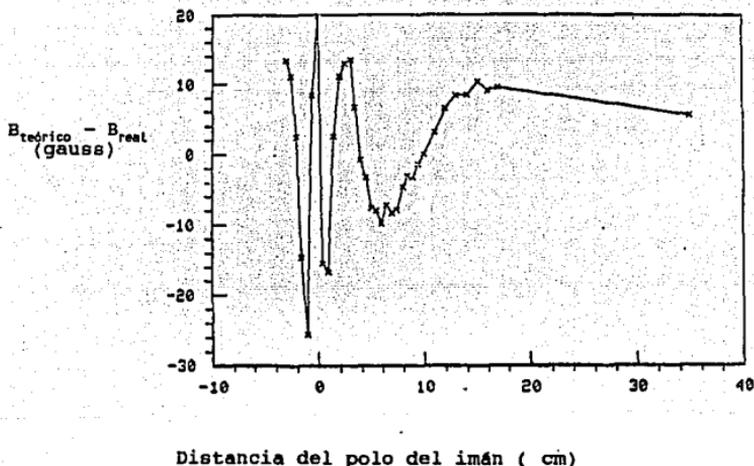
  

	IMAN	NBS	R = 30 Cm.	Entrehier=2.22 Cm.	90
	10 Kilogauss		8 Kilogauss	6 Kilogauss	
	Central .5 arriba	Central .5 arriba	Central .5 arriba	Central .5 a	
A	-0.07395	0.36446	-0.0684	-0.33712	-0.06999
B	-0.52024	-1.14452	-0.4984	-1.09647	-0.50255
C	-0.10385	-0.20395	-0.094	-0.0939	-0.09537
D	-1.07251	-2.35953	-1.06985	-2.3361	-1.05506
E	-0.25008	-0.65002	-0.64272	-0.64272	-0.63225
K	9998.6	9999.99	7985.63	8002.36	5988.63
f	4.546	2.045	4.562	2.074	4.5467
E <sub>ff</sub>	2.05	0.92	2.0501	0.92	2.0501

Tabla 3.1 Constantes de la ecuación cuadrática para Campo magnético.

La belleza de la ecuación obtenida es que además de que proporciona el valor del campo magnético en cada punto del espacio con gran precisión, al integrarse por métodos numéricos puede determinarse tanto el valor total del campo magnético disperso así como la distancia del campo efectivo y se puede utilizar en programas de cómputo donde se trazan punto a punto las trayectorias de las partículas cargadas por iteración numérica.

En la figura 3.2 se graficó la diferencia entre el campo magnético teórico calculado a partir de la ecuación 3.38 y el campo magnético real de un electroimán NBS a 8000 gauss. Como se puede observar la diferencia es mínima y el ajuste es bastante bueno.



**Fig. 3.2** Diferencia entre campo magnético teórico y el campo magnético real de un electroimán NBS a 8000 gauss

Las ecuaciones de campo magnético disperso propuestas por otros autores solo describen la intensidad de campo magnético en el plano central mientras que la ecuación propuesta en este trabajo describe tanto la intensidad de campo magnético para el plano central como para los planos superiores o inferiores mediante las diferentes constantes de la ecuación 3.38 mostradas en la tabla 3.1 donde para cada imán y cada campo magnético existen dos juegos de constantes para  $z=0$  y para  $z=0.5$

En la figura 3.3 se muestra la diferencia entre la intensidad del campo magnético medido en el plano superior  $Z = 0.5$  cm, con respecto a la intensidad de campo para ese mismo valor de  $X$  pero en el plano central  $Z=0$ . Esta diferencia obtenida de la ecuación 3.38 sigue la misma distribución que los valores experimentales y es importante porque ocurre en la región más crítica del enfoque fino de los haces de iones y no ha sido reportado en la literatura.

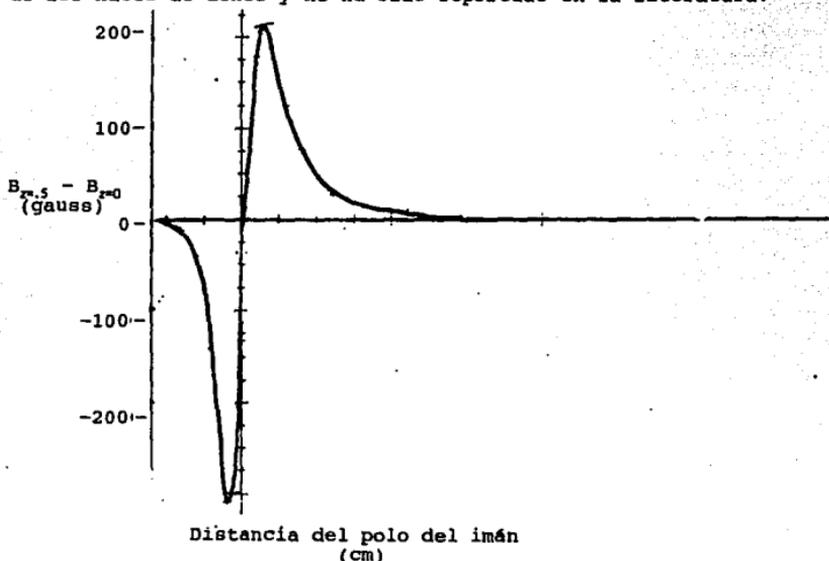


Fig. 3.3 Diferencia entre campo magnético en el centro del entrehierro  $z = 0$  y a 0.5 centímetros arriba  $z = 0.5$  para un electroimán IFUNAM a 8000 gauss.

La ecuación de campo magnético disperso calculada anteriormente se utilizará directamente en los cálculos de las ecuaciones de movimiento de las partículas cargadas haciendo las siguientes consideraciones:

El campo magnético tiene simetría de espejo con respecto a su plano medio.

El campo magnético se comporta como un campo magnético ideal uniforme con valor de  $B_0$  a partir de 3 cm. dentro de la frontera real del imán.

La intensidad del campo magnético en líneas paralelas a las caras del imán es idéntico, o sea no existen componentes  $B_y$  apreciables ya que los bordes del imán en la dirección XY están lejos de la región por donde pasan las partículas cargadas.

Primeramente para calcular el valor de  $B_z(x, z)$  desarrollamos la función en series de Taylor, donde por cuestión de simetría solo puede tener potencias pares de Z

$$B_z(x, z) = B_z(x, 0) + \frac{z^2}{2!} \frac{\partial^2 B_z(x, z)}{\partial z^2} \Big|_{z=0} \quad 3.39$$

ahora utilizando la ecuación 3.38 podemos calcular para cualquier valor de X el valor de  $B_z(x, 0)$  y  $B_z(x, .5)$  y substituyendo estos valores en el desarrollo de Taylor obtenemos la ecuación de una parábola con la cual se obtiene para esa X la  $B_z$  para cualquier z de tal manera que para  $X = X_2$

$$B_z(x_2, z) = B_z(x_2, 0) + 4z^2 [B_z(x_2, .5) - B_z(x_2, 0)] \quad 3.40$$

y para  $X = X_3$

$$B_z(x_3, z) = B_z(x_3, 0) + 4(z + \Delta z)^2 [B_z(x_3, .5) - B_z(x_3, 0)] \quad 3.41$$

en  $X_3$  el valor de z es  $z + P (X_3 - X_2)$  donde P es la pendiente vertical del rayo.

La componente  $z$  del campo magnético en el intervalo  $(X_3 - X_2)$  la definimos como el promedio de  $B_z(X_3, z)$  y  $B_z(X_2, z)$  donde substituyendo  $B_z(X, 0) = C_{fx}$  y  $B_z(X, .5) = D_{fx}$  tenemos

$$B_z(x, z) = \frac{B_z(X_2, z) + B_z(X_3, z)}{2} \quad 3.42$$

Con respecto a la componente  $B_x$  esta se puede expresar en serie de Taylor como:

$$B_x(x, z) = B_x(0, z) + z \frac{\partial B_x(x, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad 3.43$$

por ser el campo magnético un campo conservativo su rotacional es cero y

$$\frac{\partial B_x}{\partial z} = -\frac{\partial B_z}{\partial x}$$

por lo tanto  $B_x$  para el intervalo  $\Delta X = (X_3 - X_2)$  puede calcularse como una derivada numérica ya que el intervalo es suficientemente pequeño

$$\begin{aligned} B_x(X_2, z) &= B_x(0, z) - z \frac{\partial B_z(x, z)}{\partial x} \Big|_{z=0} = -z \frac{\partial B_z(x, z)}{\partial x} \Big|_{z=0} \\ &= -z \frac{(B_z(X_3, 0) - B_z(X_2, 0))}{(X_3 - X_2)} \end{aligned} \quad 3.44$$

Utilizando las ecuaciones 3.40 y 3.44 para determinar las componentes del campo magnético se puede generar en el espacio la distribución vectorial total de él.

### 3.3 PROGRAMA DE COMPUTO.

Con las ecuaciones de movimiento resueltas y los parámetros del sistema de coordenadas definidos y simulada la distribución espacial del campo magnético se desarrolló un programa de cómputo con el cual es posible calcular las trayectorias de partículas con distintos parámetros de movimiento.

Estos parámetros toman en cuenta las características de un haz de iones que sale de la rendija de la fuente de iones cuya altura es  $Z$ , con un ángulo de salida horizontal  $ATN(P_{hmin})$  y un ángulo de salida vertical  $ATN(P_{vmin})$ . Con estos tres parámetros podemos generar 27 combinaciones o haces distintos y analizar con ellos las aberraciones de distintos arreglos geométricos. Entre los parámetros estudiados no se toman en cuenta las dimensiones horizontales del haz de iones ya que los arreglos geométricos tienen enfoque direccional de primer orden.

El programa de cómputo comprende varias etapas:

a) Definición de las características del sistema a estudiar: campo magnético, campo eléctrico y características geométricas como son:  $\phi$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ , ángulo del imán,  $P_{hmin}$ ,  $P_{vmin}$  y  $Z$ .

b) Cálculo de los parámetros geométricos del sistemas de coordenadas o sea el cálculo de las distancias  $O_c$ ,  $D_{ef}$ ,  $X_8$ ,  $X_{10}$ ,  $Y_{10}$  descritas en la sección 3.2 y su ajuste mediante  $X_{14}$  a los intervalos que se utilizan en la iteración numérica de las trayectorias.

c) Generación de los 27 haces tomando en cuenta la altura, pendiente horizontal y pendiente vertical de la rejilla de definición de la fuente de iones mediante 3 contadores I, J, K que valen 0, 1, 2 como aparecen en la tabla 3.2

$$D_i = -\alpha - ATN(P_{hmin}) + I ATN(P_{hmin}).$$

$$P_i^e = P_{vmin} + K (P_{vmin})$$

$$Z = Z_{min} + J (Z_{min})$$

Tabla 3.2

1	-P <sub>h</sub>	-z	-P <sub>v</sub>	10	0	-z	-P <sub>v</sub>	19	P <sub>h</sub>	-z	-P <sub>v</sub>
2	-P <sub>h</sub>	-z	0	11	0	-z	0	20	P <sub>h</sub>	-z	0
3	-P <sub>h</sub>	-z	+P <sub>v</sub>	12	0	-z	+P <sub>v</sub>	21	P <sub>h</sub>	-z	+P <sub>v</sub>
4	-P <sub>h</sub>	0	-P <sub>v</sub>	13	0	0	-P <sub>v</sub>	22	P <sub>h</sub>	0	-P <sub>v</sub>
5	-P <sub>h</sub>	0	0	14	0	0	0	23	P <sub>h</sub>	0	0
6	-P <sub>h</sub>	0	+P <sub>v</sub>	15	0	0	+P <sub>v</sub>	24	P <sub>h</sub>	0	+P <sub>v</sub>
7	-P <sub>h</sub>	+z	-P <sub>v</sub>	16	0	+z	-P <sub>v</sub>	25	P <sub>h</sub>	+z	-P <sub>v</sub>
8	-P <sub>h</sub>	+z	0	17	0	+z	0	26	P <sub>h</sub>	+z	0
9	-P <sub>h</sub>	+z	+P <sub>v</sub>	18	0	+z	+P <sub>v</sub>	27	P <sub>h</sub>	+z	+P <sub>v</sub>

d) Para efectos de comparación con las aberraciones de Matsuda

$$P_{\text{min}} = \alpha \quad \text{y} \quad P_{\text{vmin}} = \beta$$

e) Cálculo de los valores iniciales de la parámetros de movimiento ( $V_x, V_y, V_z$ ) a partir de la posición, energía y masa de la partícula.

f) Iteración de trayectorias de los haces con mayor dispersión y cálculo en el punto focal de la imagen de ellos. Esta imagen se optimiza por aproximaciones sucesivas de las distancias  $E_{ff}$  de las fronteras del campo efectivo así como de  $D_{ef}$  simetrizan- do el sistema.

g) Iteración de trayectorias en las cinco regiones descritas en la sección 3.1 de cada uno de los 27 haces. Se calculan a partir de las condiciones iniciales los valores de las variables del movimiento ( $B_z, B_x, A, B, W, Y, Z, V_x, V_y, V_z, \alpha, \Gamma$ ) para cada punto y luego se transforman las condiciones finales del intervalo en las condiciones iniciales del siguiente.

h) Cálculo del punto focal: Clásicamente el punto focal es el lugar donde el tamaño de la imagen es mínima. En nuestro caso definimos el foco horizontal como el promedio de las distancias definidas por el punto de intersección entre el haz central y los dos haces que forman la envolvente horizontal central máxima ( $X_{hfo}, X_{hfi}, X_{hfi}$ ) de tal manera que el plano focal esta definido por las coordenadas:

$$X_{\text{foco h}} = ( X_{hfo} + X_{hfi} + X_{hfi} ) / 3$$

$$Y_{\text{foco h}} = ( Y_{hfo} + Y_{hfi} + Y_{hfi} ) / 3$$

de igual manera se calcula el foco de los haces que salen de la fuente de iones a una altura  $Z_{\text{min}}$  y el punto focal final es el promedio de los dos.

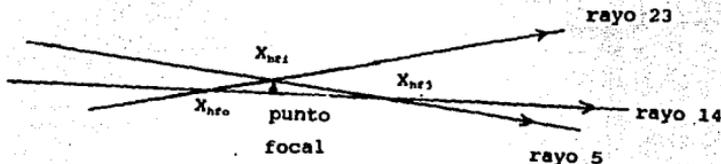


Fig.3.5 Definición del punto focal

i) Generación de la imagen en el punto focal de los 27 haces que salieron divergiendo de la fuente de iones.

j) Correspondencia entre la imagen de los haces y las aberraciones descritas por Matsuda.

Esta imagen proporciona los parámetros que definen a las aberraciones del sistema óptico estudiado.

A continuación se lista el programa desarrollado con los parámetros y consideraciones descritas anteriormente.

```

10 ' NAME OF THIS program is grafica 22-nov -1995 for IBM AT
20 'will generate the points for the trajectories in the central plane
30 OPTION BASE 1
60 DIM Y7(27), Z7(27), T7(27), P7(27), YZ(2, 27), Y70(27), X7(27), Z70(27), X(27)
65 CLS
70 INPUT "input angle, alfa in degrees ="; A1
71 'INPUT "input angle, alfa in degrees ="; A1$
80 INPUT "sector angle, fi in degrees ="; F1
81 'INPUT "sector angle, fi in degrees ="; F1$
90 INPUT "output angle, beta in degrees ="; B1
91 'INPUT "input angle, beta in degrees ="; B1$
92 INPUT "radius of central beam in centimeters "; RO
93 'INPUT "radius of central beam in centimeters "; RO$
94 INPUT "NAME OF OUTPUT FILE "; A$
95 A1$ = "c:\ionoptic\"
97 A2$ = A1$ + A$
98 PRINT A2$
99 OPEN A2$ FOR OUTPUT AS #1
100 D1 = F1 - A1 - B1
101 A = A1 * 3.141593 / 180
102 F = F1 * 3.141593 / 180
103 B = B1 * 3.141593 / 180
104 D = D1 * 3.141593 / 180
105 PRINT NBS; MAGNET
106 'ate$=TE$
108 WRITE #1, "NBS MAGNET 2.2 GAP", "date$=", DA$
110 INPUT "distance from source to effective magnetic field in centimeters="; DF
111 WRITE #1, "distance from source to effective magnetic field in centimeters="
120 INPUT "size of magnetic fringing field in centimeters="; EFF
121 WRITE #1, "size of magnetic fringing field in centimeters =", EFF
130 OPE = DPE + EFF / COS(A)
140 ' INPUT "energy dispersion of the ions in Ev="; EV
141 EV = .2
142 ZMIN = .6
150 ' INPUT "z minima="; ZMIN
161 WRITE #1, "radius of central beam in centimeters ", RO
170 ' INPUT " the mass of the main beam in atomic mass units"; M
172 M = 235
180 PRINT "sector angle, fi="; F1
181 WRITE #1, "sector angle, fi=", F1
190 PRINT "input angle, alfa="; A1
191 WRITE #1, "input angle, alfa=", A1
200 PRINT "output angle, beta="; B1
201 WRITE #1, "output angle, beta=", B1
210 PRINT "distance from source to effective magnetic field="; DFE
220 PRINT "size of magnetic fringing field="; EFF
230 PRINT "energy dispersion of the ions in Ev="; EV
240 PRINT "z minima="; ZMIN
250 PRINT "radius of central beam="; RO
260 PRINT "the mass of the main beam in atomic mass units"; M
270 PRINT "pole angle="; D1
280 PRINT "distance from source to the iron "; OPE
290 INPUT "6 Kgauss=6000, 8 Kgauss=8000, 10 Kgauss=10000"; BM
300 PRINT
310 IF BM = 6 THEN 340
320 IF BM = 8 THEN 520
330 IF BM = 10 THEN 700
335 PRINT "Please enter 6, 8 or 10 for the Kgauss setting"
336 GOTO 290
340 PRINT "WE ARE USING 6 Kgauss NBS 2.2 GAP DATA "

```

```

341 WRITE #1, "WE ARE USING 6 Kgauss NBS 2.2 GAP DATA "
350 va = (5991.7 * R0) ^ 2 / (143.975 ^ 2 * M)
360 VE = 1389133.2# * SQR(va / M)
370 PRINT "velocity of ion="; VE * .000001; "aceleration voltage="; INT(va)
380 g = 6000
381 WRITE #1, g, va
390 KC = 5991.7
400 BC = -.502553
410 EC = -.632346
420 CC = -.0953685
430 AC = -.0697966
440 DC = -1.05506
450 KU = 5991.78
460 BU = -.544453
470 EU = -.66645
480 CU = -.0260255
490 AU = -.0795943
500 DU = -1.16408
510 GOTO 850
520 PRINT "WE ARE USING 8 Kgauss NBS 2.2 GAP DATA"
521 WRITE #1, "WE ARE USING 8 Kgauss NBS 2.2 GAP DATA"
530 va = (7987.68 * R0) ^ 2 / (143.975 ^ 2 * M)
540 VE = 1389133.2# * SQR(va / M)
550 PRINT "VELOCITY OF THE ION="; VE * .000001; "ACCELERATION VOLTAGE="; INT(va)
560 g = 8000
561 WRITE #1, "intensity of the magnetic field =", g, "ACCELERATION VOLTAGE =", V
570 KC = 7987.68
580 BC = -.498397
590 EC = -.642715
600 CC = -.093898
610 AC = -.0684042
620 DC = -1.06185
630 KU = 7988.07
640 BU = -.544479
650 EU = -.684516
660 CU = -.024564
670 AU = -.0791192
680 DU = -1.17736
690 GOTO 850
700 PRINT "WE ARE USING 10 Kgauss NBS 2.2 GAP DATA"
701 va = (5991.7 * R0) ^ 2 / (143.975 ^ 2 * M)
702 VE = 1389133.2# * SQR(va / M)
703 WRITE #1, "WE ARE USING 10 Kgauss NBS 2.2 GAP DATA"
710 PRINT "VELOCITY OF THE ION="; VE * .000001; "ACCELERATION VOLTAGE="; INT(
720 g = 10000
721 WRITE #1, "intensity of the magnetic field =", g, "ACCELERATION VOLTAGE =", v
730 KC = 9981.03
740 BC = -.520235
750 EC = -.65008
760 CC = -.103846
770 AC = -.0739509
780 DC = -1.07251
790 KU = 9977.599
800 BU = -.578733
810 EU = -.694948
820 CU = -.0364021
830 AU = -.0870707
840 DU = -1.20225
841 ESC = 0
850 PU = COS(D)

```

```

860 E = SIN(D)
861 FU1 = COS(-D / 2)
862 E1 = SIN(-D / 2)
870 X9 = (2 * RO * SIN(F / 2) * COS(F / 2 - B) * TAN(D / 2)) / SIN(D) - 3! - EFF
880 X8 = -X9
890 X0 = -(DFE * COS(A)) + X8 - 3 - EFF
900 X10 = X0
910 Y9 = DFE * SIN(A)
920 Y10 = Y9
930 PRINT "the source coordinates are X="; X10; "y="; Y10
931 WRITE #1, "the source coordinates are x=", X10, "y=", Y10
940 PRINT "distance source to iron core OFE="; OFE; "X8="; X8
941 WRITE #1, "distance source to iron core OFE=", OFE, "X8=", X8
950 PHMIN = -.01
960 PVMIN = -.01
970 N = 1
980 DELPH = -PHMIN
990 DELPV = -PVMIN
1000 DELZ = -ZMIN
1010 PRINT
1020 FOR I = 0 TO 2
1040 K = 1
1050 PRINT "next beam"
1051 AA$ = "next beam"
1052 WRITE #1, AA$, N
1060 DI = -A - ATN(DELPH) + I * ATN(DELPH)
1070 Z = 0
1080 PE = PVMIN + K * DELPV
1090 P = 0
1101 DII = DI * 180 / 3.141593
1110 PRINT "ion beam output angle"; DII; "ion beam number"; N
1120 VXO = VE * COS(DI)
1130 VYO = VE * SIN(DI)
1140 VZO = VE * P
1150 K = (X10 - (X8 - 3))
1160 DM = (K * 10 - FIX(K * 10)) + 1
1161 K1 = (K * 10 - DM) / 10
1170 X0 = X10 + (K1 - K)
1180 Y0 = Y9 + TAN(DI) * (X0 - X10)
1190 Z0 = Z - P * (X0 - X10)
1191 v1 = X10 * FU1 - Y10 * E1
1192 w1 = Y10 * FU1 + X10 * E1
1200 PRINT "x0="; X0; "x10="; X10; "y0="; Y0; "y10="; Y10
1201 L = -K1
1202 X = X0
1203 PRINT " v1= "; v1; "w1="; w1; "source coordinates"
1210 PRINT #1, USING "+###.###"; v1; TAB(10); w1
1211 XI = X0
1212 XII = X8 - 6
1213 CF3 = KC / (1 + EXP((BC * L + EC + SQR((BC * L + EC) ^ 2 - 4 * CC * (AC * L
1215 CF2 = CF3
1216 DF3 = CF3
1217 ZC = 0
1220 FOR XII = XI TO XII STEP .1
1230 L = L - .1
1231 X = X + .1
1250 CF2 = CF3
1260 CF3 = KC / (1 + EXP((BC * L + EC + SQR((BC * L + EC) ^ 2 - 4 * CC * (AC * L
1280 DF2 = DF3
1290 DF3 = KU / (1 + KKP((BU * L + EU + SQR((BU * L + EU) ^ 2 - 4 * CU * (AU * L

```

```

1300 P = -(VZO / SQR(VXO ^ 2 + VYO ^ 2))
1310 B2 = CF2 + Z ^ 2 * 4 * (DF2 - CF2)
1320 B3 = CF3 + (Z + P * .1) ^ 2 * (DF3 - CF3) * 4
1330 BX = -(Z0 * (CF2 - CF3) * (1 / .1))
1340 BZ = .5 * (B2 + B3)
1350 AM = -9648.4553# * BZ / M
1360 BM = -9646.4553# * BX / M
1370 WM = SQR(AM ^ 2 + BM ^ 2)
1380 IF VY = 0 THEN 1412
1410 TM = 1 / (AM * VYO) * (-VXO + SQR(VXO ^ 2 + AM * VYO * 2 * .1))
1411 GOTO 1420
1412 TM = .1 / VXO
1420 VX = VXO - VXO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + AM * TM * VYO + .5 * BM * TM ^ 2 * (A
1430 VY = VYO - VYO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + BM * VZO * TM - AM * TM * VXO
1440 VZ = VZO - VZO * .5 * (WM * TM) ^ 2 - BM * VYO * TM + .5 * AM * TM ^ 2 * (B
1450 Y = YO + VYO * TM + .5 * TM ^ 2 * (BM * VZO - AM * VXO)
1460 Z = ZO + VZO * TM - .5 * TM ^ 2 * BM * VYO
1550 ALFA = ATN((Y - YO) / .1)
1560 GAMA = ATN((Z - ZO) / .1)
1570 X0 = X
1580 Y0 = Y
1590 Z0 = Z
1600 V = X
1610 W = Y
1611 V1 = V * FU1 - W * E1
1612 W1 = W * FU1 + V * E1
1620 VXO = VX
1630 VYO = VY
1640 VZO = VZ
1641 ZC = ZC + 1
1642 ZC1 = ABS(ZC / 10)
1644 IF ABS(ZC1) = CINT(ZC1) THEN PRINT #1, USING "###.###"; V1; TAB(10); W1
1650 NEXT X11
1651 PRINT "VI="; V1; "WI="; W1; "Z="; Z0; "I="; L
1660 XA1 = X8 - 6 + .01
1670 FOR XA = XA1 TO X8 STEP .01
1680 L = L - .01
1681 X = X + .01
1690 CP2 = CF3
1700 CF3 = KC / (1 + EXP((BC * L + EC + SQR((BC * L + EC) ^ 2 - 4 * CC * (AC * L
1710 DF2 = DF3
1720 DF3 = KU / (1 + EXP((BU * L + EU + SQR((BU * L + EU) ^ 2 - 4 * CU * (AU * L
1730 P = -(VZO / SQR(VXO ^ 2 + VYO ^ 2))
1740 B2 = CF2 + Z ^ 2 * 4 * (DF2 - CF2)
1750 B3 = CF3 + (Z + P * .01) ^ 2 * (DF3 - CF3) * 4
1760 BX = -(Z0 * (CF2 - CF3) * (1 / .01))
1770 BZ = .5 * (B2 + B3)
1780 AM = -9648.4553# * BZ / M
1790 BM = -9646.4553# * BX / M
1800 WM = SQR(AM ^ 2 + BM ^ 2)
1810 IF VY = 0 THEN 1842
1840 TM = 1 / (AM * VYO) * (-VXO + SQR(VXO ^ 2 + AM * VYO * 2 * .01))
1841 GOTO 1850
1842 TM = .01 / VXO
1850 VX = VXO - VXO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + AM * TM * VYO + .5 * BM * TM ^ 2 * (A
1860 VY = VYO - VYO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + BM * VZO * TM - AM * TM * VXO
1870 VZ = VZO - VZO * .5 * (WM * TM) ^ 2 - BM * VYO * TM + .5 * AM * TM ^ 2 * (B
1880 Y = YO + VYO * TM + .5 * TM ^ 2 * (BM * VZO - AM * VXO)
1890 Z = ZO + VZO * TM - .5 * TM ^ 2 * BM * VYO
1980 ALFA = ATN((Y - YO) / .01)

```

```

1990 GAMA = ATN((Z - ZO) / .01)
2000 XO = X
2010 YO = Y
2020 ZO = Z
2030 V = X
2040 W = Y
2041 v1 = V * FU1 - W * E1
2042 w1 = W * FU1 + V * E1
2050 VXO = VX
2060 VYO = VY
2070 VZO = VZ
2071 ZC = ZC + 1
2072 ZC1 = ABS(ZC / 10)
2073 IF ABS(ZC1) = CINT(ZC1) THEN PRINT #1, USING "###.###"; v1; TAB(10); w1
2080 NEXT XA
2081 PRINT
2082 PRINT "vII="; v1; "wII="; w1; "L="; L
2090 BE = B3
2100 AM = -9648.4553# * BZ / M
2110 X3 = FU * XO + E * YO
2120 Y3 = FU * YO - E * XO
2130 X4 = -X3
2140 VXO = FU * VX + E * VY
2150 VYO = FU * VY - E * VX
2160 XO = X3
2170 YO = Y3
2180 ZO = Z
2181 XB1 = X8 + .01
2182 XB2 = X9
2183 X = X3
2200 FOR X = (X3 + .01) TO X9 STEP .01
2205 IF VY = 0 THEN 2212
2210 TM = 1 / (AM * VYO) * (-VXO + SQR(VXO ^ 2 + AM * VYO * 2 * .01))
2211 GOTO 2220
2212 TM = .01 / VXO
2220 VX = VXO - VXO * .5 * (AM * TM) ^ 2 + AM * VYO * TM
2230 VY = VYO - VYO * .5 * (AM * TM) ^ 2 - AM * VXO * TM
2240 VZ = VZO
2250 y = YO + VYO * TM - .5 * AM * VXO * TM ^ 2
2260 z = ZO + VZO * TM
2270 ALFA = ATN((y - YO) / .01)
2280 T = (y - YO) / .01
2290 GAMMA = ATN((Z - ZO) / .01)
2300 XO = X
2310 YO = Y
2320 ZO = Z
2330 VXO = VX
2340 VYO = VY
2350 VZO = VZ
2360 V = X * FU - y * E
2370 W = y * FU + X * E
2371 v1 = V * FU1 - W * E1
2372 w1 = W * FU1 + V * E1
2500 ZC = ZC + 1
2501 ZC1 = ABS(ZC / 10)
2502 IF ABS(ZC1) = CINT(ZC1) THEN PRINT #1, USING "###.###"; v1; TAB(10); w1
2510 NEXT X
2520 PRINT
2521 PRINT "vIII="; v1; "wIII="; w1; "L="; L
2530 X5 = XO + .01

```

```

2540 L = -3
2560 FOR X = X5 TO X9 + 6 STEP .01
2570 L = L + .01
2580 CF3 = KC / (1 + EXP((BC * L + EC + SQR((BC * L + EC) ^ 2 - 4 * CC * (AC * L
2590 DF3 = KU / (1 + EXP((BU * L + EU + SQR((BU * L + EU) ^ 2 - 4 * CU * (AU * L
2600 P = -(VZO / SQR(VXO ^ 2 + VVO ^ 2))
2610 B2 = CF2 + Z ^ 2 * 4 * (DF2 - CF2)
2620 B3 = CF3 + (Z + P * .01) ^ 2 * (DF3 - CF3) * 4
2630 BX = -(Z0 * (CF2 - CF3) * (1 / .01))
2640 BZ = .5 * (B2 + B3)
2650 AM = -9648.4553# * BZ / M
2660 BM = -9646.4553# * BX / M
2670 WM = SQR(AM ^ 2 + BM ^ 2)
2680 CF2 = CF3
2681 DF2 = DF3
2683 IF VY = 0 THEN 2687
2685 TM = 1 / (AM * VYO) * (-VXO + SQR(VXO ^ 2 + AM * VYO * 2 * .01))
2686 GOTO 2700
2687 TM = .01 / VXO
2700 VX = VXO - VXO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + AM * TM * VYO + .5 * BM * TM ^ 2 * (A
2710 VY = VYO - VYO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + BM * VZO * TM - AM * TM * VXO
2720 VZ = VZO - VZO * .5 * (WM * TM) ^ 2 - BM * VYO * TM + .5 * AM * TM ^ 2 * (B
2730 Y = Y0 + VYO * TM + .5 * TM ^ 2 * (BM * VZO - AM * VXO)
2740 Z = Z0 + VZO * TM - .5 * TM ^ 2 * BM * VYO
2830 ALFA = ATN((Y - Y0) / .01)
2840 GAMA = ATN((Z - Z0) / .01)
2850 X0 = X
2860 Y0 = Y
2870 Z0 = Z
2880 V = X * FU - Y * E
2890 W = Y * FU + X * E
2891 v1 = V * FU1 - W * E1
2892 w1 = W * FU1 + V * E1
2900 VXO = VX
2910 VYO = VY
2920 VZO = VZ
2921 / PRINT "v1=";V1;"w1=";W1;"z=";Z0;"1=";L
2922 ZC = ZC + 1
2923 ZC1 = ABS(ZC / 10)
2924 IF ABS(ZC1) = CINT(ZC1) THEN PRINT #1, USING "###.###"; v1; TAB(10); w1
2930 NEXT X
2931 PRINT
2932 PRINT "v1v=";v1;"w1w=";w1;"1=";L
2940 X5 = X0 + .1
2950 FOR X = X5 TO -X10 + 2.5 STEP .1
2960 L = L + .1
2970 CF3 = KC / (1 + EXP((BC * L + EC + SQR((BC * L + EC) ^ 2 - 4 * CC * (AC * L
2980 DF3 = KU / (1 + EXP((BU * L + EU + SQR((BU * L + EU) ^ 2 - 4 * CU * (AU * L
2990 P = -(VZO / SQR(VXO ^ 2 + VVO ^ 2))
3000 B2 = CF2 + Z ^ 2 * 4 * (DF2 - CF2)
3010 B3 = CF3 + (Z + P * .1) ^ 2 * (DF3 - CF3) * 4
3020 BX = -(Z0 * (CF2 - CF3) * (1 / .1))
3030 BZ = .5 * (B2 + B3)
3040 AM = -9648.4553# * BZ / M
3050 BM = -9646.4553# * BX / M
3060 WM = SQR(AM ^ 2 + BM ^ 2)
3070 CF2 = CF3
3080 DF2 = DF3
3081 IF VY = 0 THEN 3084
3082 TM = 1 / (AM * VYO) * (-VXO + SQR(VXO ^ 2 + AM * VYO * 2 * .1))

```

```

1082 GOTO 3110
1084 TM = .01 / VXO
1100 TM = 1 / (AM * VYO) * (-VXO + SQR(VXO ^ 2 + AM * VYO * 2 * .1))
1110 VX = VXO - VXO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + AM * TM * VYO + .5 * BM * TM ^ 2 * (A
1120 VY = VYO - VYO * .5 * (WM * TM) ^ 2 + BM * VZO * TM - AM * TM * VXO
1130 VZ = VZO - VZO * .5 * (WM * TM) ^ 2 - BM * VYO * TM + .5 * AM * TM ^ 2 * (B
1140 Y = YO + VYO * TM + .5 * TM ^ 2 * BM * VZO - AM * VXO)
1150 Z = ZO + VZO * TM - .5 * TM ^ 2 * BM * VYO
1230 ALFA = ATN((Y - YO) / .1)
1240 GAMA = ATN((Z - ZO) / .1)
1241 T = (Y - YO) / .1
1260 XO = X
1270 YO = Y
1280 ZO = Z
1290 V = X * FU - Y * E
1300 W = Y * FU + X * E
1301 v1 = V * FU1 - W * E1
1302 w1 = W * FU1 + V * E1
1310 VKO = VX
1320 VYO = VY
1330 VZO = VZ
1331 * PRINT "v=";V;"w=";W;"z=";Z;"l=";L
1332 *PRINT "x=";X;"y=";Y;"z=";Z;"l=";L
1333 ZC = ZC + 1
1335 ZC1 = ABS(ZC / 10)
1336 IF ABS(ZC1) = CINT(ZC1) THEN PRINT #1, USING "+###.###": v1; TAB(10); w1
1340 NEXT X
1341 ALFA1 = ALFA * 180 / 3.141593
1342 PRINT "v="; v1; "w="; w1
1350 PRINT "x="; X; "y="; Y; "n="; N
1360 PRINT "alfa="; ALFA1; "gama="; GAMA
1380 X7(N) = X
1390 Y7(N) = Y
1400 Z7(N) = Z
1410 T7(N) = T
1430 P7(N) = P
1450 N = N + 1
1480 NEXT I
1490 XHFO = (X7(1) * (T7(2) - T7(1)) - Y7(2) + Y7(1)) / (T7(2) - T7(1))
1500 YHFO = T7(1) * (XHFO - X7(1)) + Y7(1)
1510 XHFI = (X7(1) * (T7(3) - T7(1)) - Y7(3) + Y7(1)) / (T7(3) - T7(1))
1520 YHFI = T7(1) * (XHFI - X7(1)) + Y7(1)
1530 XHFJ = (X7(2) * (T7(3) - T7(2)) - Y7(3) + Y7(2)) / (T7(3) - T7(2))
1540 YHFJ = T7(2) * (XHFJ - X7(2)) + Y7(2)
1560 XHFOI = (XHFO + XHFI + XHFJ) / 3
1570 YHFOI = (YHFO + YHFI + YHFJ) / 3
1571 VHFOI = XHFOI * FU - YHFOI * E
1572 WHFOI = YHFOI * FU + XHFOI * E
1573 VH1 = VHFOI * FU1 - WHFOI * E1
1574 WH1 = WHFOI * FU1 + VHFOI * E1
1580 PRINT "COORDINATES OF THE HORIZONTAL FOCAL PLANE FOR THE CENTRAL BEAMS"
1590 PRINT
1600 PRINT "XHFO="; XHFO; TAB(22); "YHFO="; YHFO
1610 PRINT "XHFI="; XHFI; TAB(22); "YHFI="; YHFI
1620 PRINT "XHFJ="; XHFJ; TAB(22); "YHFJ="; YHFJ
1630 PRINT "XHFOI="; XHFOI; TAB(22); "YHFOI="; YHFOI
1640 PRINT "FINAL FOCAL PLANE "
1620 PRINT "VHFOI="; VHFOI; TAB(22); "WHFOI="; WHFOI
1621 PRINT "VH1="; VH1; "WH1="; WH1
1630 PRINT

```

```
3940 PRINT "the source coordinates are X="; X10; "y="; Y10; "eff="; EFF
3950 PRINT "distance source to iron core"; "OFE="; OFE; "X8="; X8; "DFE="; DFE
3960 PRINT "FINAL FOCAL PLANE "
3970 PRINT "XhFOI="; XHFOI; "YhFOI="; YHFOI; "zc="; ZC
3971 CLOSE #1
3980 END
```

### 3.4 Cálculo de aberraciones

#### 3.4.1 Correlación entre aberraciones de Matsuda y aberraciones obtenidas por el programa 116-IFUNAM.

Es conveniente validar la metodología desarrollada comparando los valores obtenidos en este trabajo con los reportados en la literatura. En particular se analizaron tres de las geometrías cuyas características están ampliamente documentadas.

Las geometrías analizadas poseen las características necesarias para el funcionamiento óptimo de un espectrómetro de masas para análisis de isótopos estables. Estas características son un alto poder de resolución y una alta sensibilidad. El poder de resolución está asociado a la dispersión o al coeficiente de aberración  $A_v$ . Este poder de resolución se define como la capacidad de un sistema para resolver ó separar dos masas adyacentes y la definición teórica es:

$$P.R. = \frac{A_v}{S_x A_x + \Delta + S_c} \quad 3.45$$

donde  $S_x$  y  $S_c$  son las dimensiones de las rejillas de definición de la fuente de iones y del colector respectivamente y  $\Delta$  es la aberración total del sistema.

Para lograr un alto poder de resolución, de la ecuación 3.45 se ve que se requiere un numerador  $A_v$  grande y un denominador pequeño. De los parámetros del denominador solo se puede disminuir la aberración total  $\Delta$  ya que si se disminuye el tamaño de las rejillas del colector ó de la fuente de iones ( $S_c$ ,  $S_x$ ) se disminuye la sensibilidad del sistema.

En general los sistemas que tienen enfoque astigmático, o sea enfoque en las dos direcciones, tienen un ángulo de incidencia  $\epsilon > 0$  con las fronteras del imán, una dispersión  $A_v > 1$  y una aberración total  $\Delta$  mínima. A medida que  $\epsilon$  aumenta crece la interacción entre el haz de iones y el campo magnético disperso produciéndose un mayor enfoque angular y una mayor separación entre las masas. Por lo tanto se estudiaron tres sistemas con estas características:  $\epsilon > 0$ ,  $A_x = 0$ ,  $A_v = 1$ ,  $A_v > 2$ , y una dispersión energética (1 volt/20000 volts) y angular (4mm/1000mm) muy pequeña.

El tamaño total del haz tomando en cuenta solo coeficientes de segundo orden (ec. 2.9 y ec. 2.10) se puede reescribir como:

$$X_2 = S_2 + A_{\alpha\alpha}\alpha^2 + A_{zz}z^2 + A_{z\beta}z\beta + A_{\beta\beta}\beta^2 \quad 3.46$$

donde la aberración total  $\Delta$  es  $X_2 - S_2$ .

Como se puede observar de la ecuación 3.46 los coeficientes de aberración de Matsuda salieron de una aproximación matricial donde las aberraciones son variables linealmente independientes que se pueden sumar para dar el tamaño total del haz. Sin embargo en el caso de programa 116-IFUNAM lo que se obtiene es la distancia física entre dos haces, el central y el que produce la aberración de tal manera que cuando esta distancia es cero y los dos haces tienen la misma coordenada entonces suponemos que la aberración no existe. Otra diferencia que existe entre los dos métodos que el tamaño total del haz para nosotros no es una suma lineal sino la distancia entre los haces que tienen la máxima dispersión.

Aunque claramente estos dos conceptos no son comparables directamente suponemos que para algunos casos existe una constante de proporcionalidad entre ellos y trataremos de probar que existe esa constante K de tal manera que los coeficientes de aberración  $A_{ij}$  (TRIO) y las distancias  $D_{ij}$  (116-IFUNAM) se pueden escribir como  $D_{ij} = K A_{ij}$ , utilizando valores normalizados tanto para las distancias como para las aberraciones.

La aberración asociada al coeficiente  $A_{\alpha\alpha}$  del programa TRIO corresponde a la distancia en X foco entre el haz central (14) ( $z=0, \alpha=0, \beta=0$ ) y los haces que salieron de la fuente de iones con un ángulo de divergencia " $\alpha$ ", o sea el haz (5) ( $z=0, \alpha=-\alpha, \beta=0$ ) y el haz (23) ( $z=0, \alpha=\alpha, \beta=0$ )  $D_{(5-23)}$ . Teóricamente si en  $X_{foco}$   $Y_2$  del haz (14),  $Y_2$  del haz (5) y  $Y_2$  del haz (23) no son iguales entonces no hay enfoque direccional de segundo orden o sea  $A_{\alpha\alpha}$  es distinta de cero.

$D_{17}$  corresponde a la aberración generada por el parámetro Z y es la distancia  $Y_{70}$  entre el haz(11) ( $\alpha=0, z=z_0, \beta=0$ ) y el haz(17) ( $\alpha=0, z=-z_0, \beta=0$ ).

$D_{28}$  corresponde a la aberración generada por el parámetro Z y  $\beta$  y es la distancia  $Y_{70}$  entre el haz(10) ( $\alpha=0, z=z_0, \beta=\beta$ ) y el haz(18) ( $\alpha=0, z=z_0, \beta=-\beta$ ).

$D_{m1}$  corresponde a la aberración generada por el doble parámetro  $\beta$  y corresponde a la distancia  $Y_{70}$  entre el haz (13) ( $\alpha=0$   $z=0$   $\beta=\beta$ ) y el haz (15) ( $\alpha=0$   $z=0$   $\beta=-\beta$ ).

$D_{m2}$  corresponde a la aberración generada por los tres parámetros considerados y corresponde a la distancia  $Y_{70}$  de varias parejas de haces dependiendo de la combinación de ellas. Así puede asociarse esta aberración a las parejas de haces 1 y 9

3 y 7  
21 y 25  
19 y 27

$D_{m3}$  corresponde de la misma manera que en el caso anterior a la aberración producida por la combinación de los parámetros  $\beta$  y  $\alpha$  y es por lo tanto la distancia  $Y_{70}$  entre varias parejas de haces dependiendo de estas combinaciones: 4 y 6

o 22 y 24

$D_{m4}$  corresponde a la distancia  $Y_{70}$  entre las parejas de haces 2 y 8 o 20 y 26

De la misma manera que se les asocia la distancia  $Y_{70}$  a las aberraciones en el plano horizontal para el plano vertical a las distancias  $Z_{70}$  de los diferentes haces se les asociaran las mismas aberraciones con excepción de  $D_8$  que no tiene su correspondiente en el plano horizontal.

$D_9$  corresponde a la aberración producida por la pendiente vertical  $\beta$  y es la distancia  $Z_{70}$  del haz (13) con  $\alpha=0$   $z=0$   $\beta=+\beta$

### 3.4.2 Aberraciones de geometrías $90^\circ, 26.5^\circ$ y $130^\circ, 56^\circ$

Las dos geometrías con enfoque astigmático que se escogieron fueron de  $\phi = 90^\circ$  y  $\phi = 130^\circ$ . Para la geometría de  $\phi = 90^\circ$  y  $\epsilon = 26^\circ$  se variaron los valores de  $\epsilon$  entre  $24^\circ$  y  $31^\circ$  para analizar los efectos de enfoque horizontal y vertical con respecto a este parámetro.

Después de varias pruebas se encontró que uno de los parámetros que influye más sobre el tamaño de las aberraciones es  $A_x$  o sea la simetría del sistema. Este hecho ha sido reportado por Matsuda y la simetría de los sistemas se escogió como una condición indispensable ya que una asimetría de milímetro entre la fuente de iones ( $X_{10}$ ,  $Y_{10}$ ) y el colector ( $X_{70}$ ,  $Y_{70}$ ) duplica el tamaño de la aberración.

Se modificó el programa 116-IFUNAM para analizar primeramente solo los 6 haces de las máximas envolventes y con este programa se optimizaron los valores  $D_{\text{e}}$  y  $E_{\text{e}}$ , simetrizando cada uno de los casos. Una vez simetrizada la geometría se corrió con el programa 116 y se obtuvieron las coordenadas de los 27 haces que definen las aberraciones del sistema.

Para la geometría de  $90^\circ$  además de variar  $\epsilon$ , se variaron los parámetros de  $\alpha$ ,  $Z$  para analizar sus efectos sobre el enfoque del sistema. De la misma manera se analizó un juego completo de la misma geometría con un radio distinto.

La segunda geometría que se estudio fue la que tiene un ángulo de giro  $\phi$  de  $130^\circ$  y un ángulo de incidencia a los polos del imán  $\epsilon$  de  $55^\circ$ . Nuevamente se variaron los parámetros  $\alpha$ ,  $Z$  y  $\epsilon$  de  $54^\circ$  a  $58^\circ$  para buscar la óptima combinación de parámetros para esta geometría.

En las Tabla 3.3, 3.4 y 3.5 se encuentran las coordenadas  $(Y_{70}, Z_{70})$  de cada haz en el punto focal para los 15 casos estudiados.

TABLA 3.3. Distancia  $Y_{70}$  entre haces de iones en el punto focal

$\phi = 90^\circ$        $R=15.24$  cm       $\alpha = \beta = .008$        $z = .6$  cm.

$\theta$	$D_1$ 10,18	$D_2$ 19,27	$C_z$ 14	$D$ 5,23	$D_1$ 3,7	$D_2$ 21,25	$D$ 13,15	$D$ 11,17	$D_1$ 1,16	$\Delta x$	envolvente	$Z$
26	+0.0015	+0.0053	0.0065	0.0098	0.0000	-0.0160	0.0027	-0.0051	+0.0052	0.0297	16 y23	0.6
				0.0106					+0.0052			
28	-0.0240	-0.0205	0.0085	0.0123	0.0061	0.0062	0.0037	-0.0064	-0.0160	0.0371	18 y23	0.6
				0.0131					-0.0191			
29.4	-0.0290	-0.0251	0.0104	0.0155	0.0671	0.0072	0.0046	-0.0076	-0.0195	0.0445	10 y23	0.6
				0.0147					-0.0234			
30	-0.0212	-0.0195	0.0124	0.0143	0.0035	0.0035	0.0097	-0.0073	-0.0153	0.0361	10 y23	0.6
				0.0148					-0.0187			
30	-0.0224	-0.0180	0.0042	0.0090	0.0056	0.0057	-0.0021	-0.0046	-0.0144	0.0316	10 y23	0.4
				0.0092					-0.0169			
31	-0.0212	-0.0163	0.0020	0.0073	0.0045	0.0045	-0.0053	-0.0037	-0.0132	0.0286	10 y23	0.3
				0.0074					-0.0154			
31	-0.0369	-0.0323	0.0134	0.0184	0.0089	0.0090	+0.0061	-0.0094	-0.0255	0.0561	10 y23	0.6
				0.0191					-0.0307			
31.5	-0.0404	-0.0356	0.0147	0.0199	0.0097	0.0098	+0.0067	-0.0101	-0.0283	0.0611	10 y23	0.6
				0.0206					-0.0339			

Distancia  $Z_{70}$  entre haces de iones en el punto focal

$\phi = 90^\circ$        $R=15.24$  cm      = = .008       $z = .6$  cm.

$\theta$	$D_1$ 10,18	$D_2$ 19,27	$C_z$ 14	$D$ 5,23	$D_1$ 3,7	$D_2$ 21,25	$D$ 13,15	$D$ 11,17	$D_1$ 1,9	$\Delta x$	envolvente	$z$
26	0.04573	+4.474	2.0240	0	0.1581	-0.0974	-0.1718	0.2898	-0.5024	0.9703	1 y 9	0.6
	0.4579								+0.4679			
28	0.3399	+3.065	2.2140	0	0.5361	0.5169	0.1006	0.4297	+0.3892	1.0722	3 y 7	0.6
	0.3407								-0.3742			
29.4	0.5234	+4.867	2.3750	0	0.5868	0.5683	0.0354	0.5462	+0.5631	1.1736	3 y 7	0.6
	0.5234								-0.5609			
30	0.6048	+5.831	2.4521	0	0.6073	0.5889	0.0024	0.5995	+0.6238	1.2464	1 y 9	0.6
	0.6048								-0.6238			
30	0.4007	+3.703		0	0.4006	0.3984	0.0034	0.3971	+0.4291	0.8609	1 y 9	0.4
	0.4007								-0.4318			
31	0.4189	+3.899		0	0.2825	0.2906	0.0636	0.3500	+0.4367	0.8851	1 y 9	0.3
	0.4189								-0.4368			
31	0.7848	+7.432	2.5950	0	0.6458	0.6287	0.0639	0.7055	+0.8030	1.6300	1 y 9	0.6
	0.7845								-0.827			
31.5	0.8742	+8.309	2.6740	0	0.6610	0.6445	0.1003	0.7575	+0.8841	1.800	1 y 9	0.6

TABLA 3.4 Distancia  $Y_{70}$  de haces de iones en el punto focal

$\phi = 90^\circ$   $R=30.48\text{cm}$   $= = .004$   $z = .4 \text{ cm.}$

$\epsilon$	$D_{10,18}$	$D_{19,27}$	$C_{14}$	$D_{5,23}$	$D_{3,7}$	$D_{21,25}$	$D_{13,15}$	$D_{11,17}$	$D_{1,9}$	$\Delta K$ AK	envolvente	$x$
4	0.00005	0.0060	0.00067	0.00120	-0.00530	-0.00540	-0.00160	-0.0060	+0.00059	0.0239	18 y 23	0.2
26	-0.01580	-0.0151	.00750	0.00820	0.00320	0.00320	0.00510	-0.0042	-0.01280	0.0242	5 y 23	0.4
27	-0.01720	-0.0164	.00810	0.0084	0.00890	0.00360	0.00360	-0.0045	-0.01380	0.0262	10 y 23	0.4
28	-0.0189	-0.0180	.00870	0.00960	0.00420	0.00420	0.00570	-0.0049	-0.01520	0.0286	10 y 23	0.4
29	-0.0211	-0.0203	.00950	0.01030	0.00460	0.00960	0.00590	-0.0053	-0.01690	0.0315	10 y 23	0.4
30	-0.0238	-0.0227	.01050	0.01140	0.00540	0.00530	0.00640	-0.0056	-0.01860	0.0352	10 y 23	0.4
31	-0.0267	-0.0256	.01130	0.01240	0.00670	0.00630	0.00670	-0.0063	-0.02150	0.0394	10 y 23	0.4

Distancia  $Z_{70}$  de haces de iones en el punto focal

$\phi = 90^\circ$   $R=30.48\text{cm}$   $= = .004$   $z = .4 \text{ cm.}$

$\epsilon$	$D_{10,18}$	$D_{19,27}$	$C_{14}$	$D_{5,23}$	$D_{3,7}$	$D_{21,25}$	$D_{13,15}$	$D_{11,17}$	$D_{1,9}$	$\Delta K$	envolvente	$x$
4	-0.2649	-0.2748	0	0	0.6315	0.6432	0.4517	0.1862	-0.2748	1.28	21 y 25	0.2
26	+0.2634	+0.2652	0	0	+0.338	0.3332	-0.0645	0.2717	+0.2281	0.676	3 y 7	0.4
27	-0.2085	+0.2281	0	0	+0.3642	0.3594	+0.0408	0.3213	+0.2979	0.7284	3 y 7	0.4
28	+0.2086	+0.2017	0	0	+0.2821	+0.2979	0	0	-0.2154			
28	+0.2821	+0.2749	0	0	+0.2821	-0.2749			-0.2894			
28	+0.3676	-0.3399	0	0	+0.3676	-0.3398			+0.3774	0.7846	3 y 7	0.4
29	+0.3676	+0.3398	0	0	+0.4557	-0.4473	0	0	-0.3755			
29	+0.4557	-0.4473	0	0	+0.4173	0.4125	+0.0192	0.4347	+0.4579	0.922	1 y 9	0.4
30	-0.4557				-0.4641				-0.4641			
30	+0.3664	+0.5573	0	0	+0.3664	+0.5573	0	0	+0.557	1.1421	9 y 10	0.4
30	-0.3664				-0.3756				-0.3756			
31	+0.6903	+0.6803	0	0	+0.6903	+0.6803	0	0	+0.6653	103909	9 y 10	0.4
31	-0.6903				-0.6903				-0.7004			

TABLA 3.5 Distancia  $Y_{70}$  entre haces de iones en el punto focal

$$\phi = 130^\circ \quad R = 17.5\text{cm} \quad \alpha = \beta = .004 \quad z = .6 \text{ cm.}$$

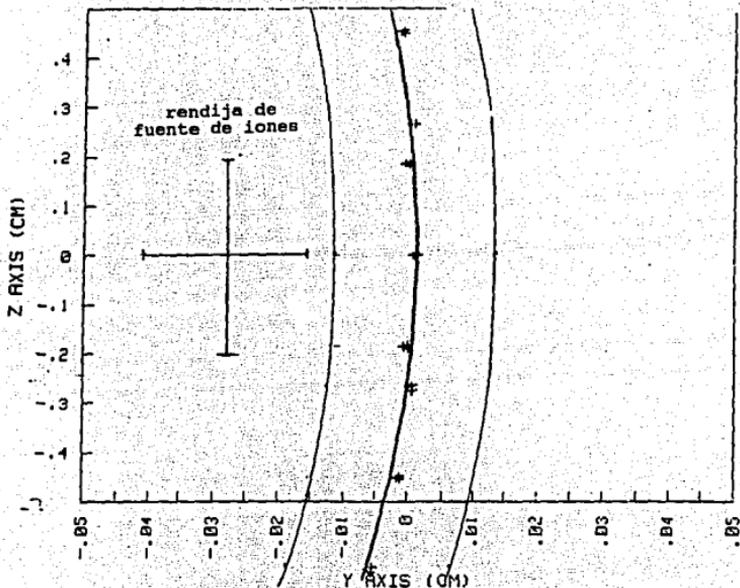
$\epsilon$	$D_z$ 10,18	$D_z$ 19,27	$C_0$ 14	$D$ 5,23	$D_z$ 3,7	$D_z$ 21,25	$D$ 13,15	$D$ 11,17	$D_z$ 1,9	$\Delta X$ AX	envolvente
54	+0.0014	0.0032	0.0014	0.0010	+0.0003	+0.0003	-0.0014	-0.0004	-0.0089	0.0121	1 y 27
	+0.0013	0.0032		0.0005					+0.0039		
55	+0.0015	0.0034	0.0000	0.0017	-0.0010	-0.0010	-0.0010	-0.0007	-0.0179	0.0219	1 y 9
	+0.0013	0.0033		0.0010					+0.0042		
56	+0.0005	0.0026	0.0002	0.0025	-0.0003	-0.0040	0.0003	-0.0014	-0.0242	0.0270	1 y 9
	+0.0003	0.0025		0.0032					+0.0035		
57	-0.0019	0.0005	0.0026	0.0051	-0.0004	-0.0050	0.0026	-0.0028	-0.0328	0.0387	1 y 9
	-0.0021	0.0003		0.0059					+0.0014		
58	-0.0070	-0.0041	0.0070	0.0100	-0.0001	-0.0003	0.0068	-0.0052	-0.0445	0.0551	1 y 23
	-0.0072	-0.0043		0.0106					+0.0035		

Distancia  $Z_{70}$  entre haces de iones en el punto focal

$$\phi = 130^\circ \quad R = 17.5\text{cm} \quad \alpha = \beta = .004 \quad z = .6 \text{ cm.}$$

$\epsilon$	$D_z$ 10,18	$D_z$ 19,27	$C_0$ 14	$D$ 5,23	$D_z$ 3,7	$D_z$ 21,25	$D$ 13,15	$D$ 11,17	$D_z$ 1,9	$\Delta Z$	envolventes
54	+0.8021	+0.7889	0.0000	0.0000	+0.6457	+0.6348	0.0786	0.7202	+0.6425	1.5221	19 y 27
	-0.8021	+0.79882								-0.8146	
55	+1.0799	+1.0635	0.0000	0.0000	+0.8629	0.8476	0.1085	0.9661	-0.7999	2.1751	9 y 10
	-1.0784	-1.0621								-1.0952	
56	+1.2367	+1.2187	0.0000	0.0000	+0.9339	0.9817	0.1507	1.0796	+0.8461	2.4801	9 y 10
	-1.2348	-1.2170								-1.2532	
57	+1.4698	+1.4493	0.0000	0.0000	+1.0231	1.0085	0.2214	1.2402	+0.9112	2.9581	9 y 10
	-1.4672	-1.4493								-1.4881	
58	+1.7252	+1.7021	0.0000	0.0000	+1.1190	1.1049	0.3003	1.4152	+0.9701	2.4602	9 y 10
	-1.7221	-1.6992								-1.7458	

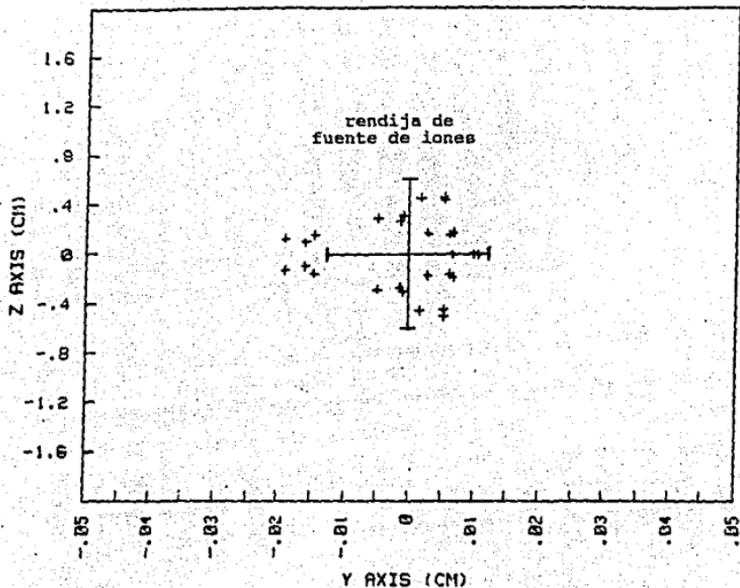
En las figuras 3.6 a 3.12 se muestra las imágenes de los haces para los diferentes parámetros de la geometría 90°, 26°, 15.24 cm.



NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7997.698  
 MASS DEL ION = 235.000 ACCELERATION VOLTAGE = 12169.280  
 VELOCITY OF THE ION = 9.995  
 FI = 90.000 ALFA = 4.000 BETA = 4.000 POLE ANGLE = 92.000  
 Ofc = 34.943 RADIUS = 30.480 Effective FIELD = 1.769  
 Phin = -.004 Pvmin = -.004 Zmin = .200  
 X10 = -61.627 Y10 = 2.312  
 X8 = -23.769 Def = 33.150 Xpfoi = 61.636 Ypfoi = 2.396

Fig.3.6 Imagen en del plano focal de geometría 90°, 4°, 30.48 cm

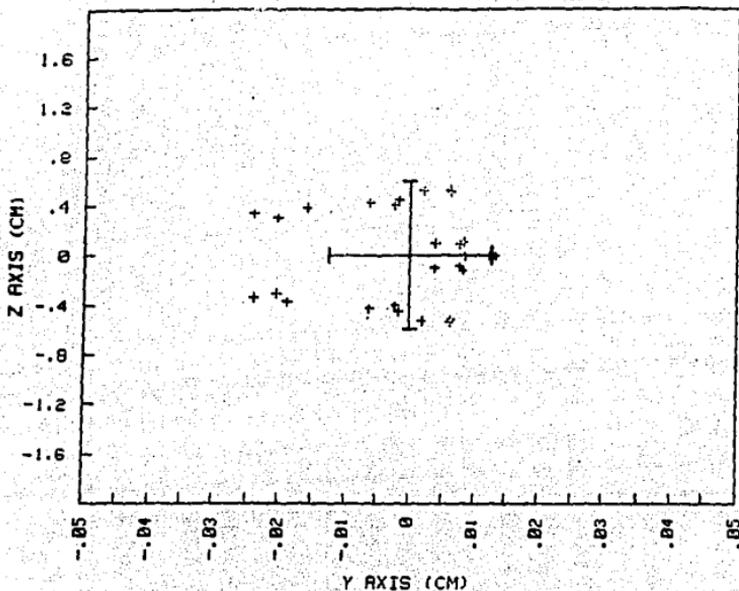


NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7987.620  
 MASA DEL ION = 235.000 ACCELERATION VOLTAGE = 3042.070  
 VELOCITY OF THE ION = 4.998  
 ENERGY DISPERSION OF THE IONS IN  $E_u$  = .200  
 FI= 90.000 ALFA= 26.000 BETA= 26.000 POLE ANGLE= 33.000  
 Ofc= 32.661/ RADIUS= 15.240 Effective FIELD = 1.600  
 Pmin=-.006 Pmin=-.008 Zmin=.600  
 X10=-39.132 Y10= 13.527  
 X0=-6.597 Def= 30.856

X10=-39.132 Y10= 13.527  
 Xprol= 39.103 Yprol= 13.429

Fig.3.7 Imagen en del plano focal de geometría 90°, 26°, 30.48 cm

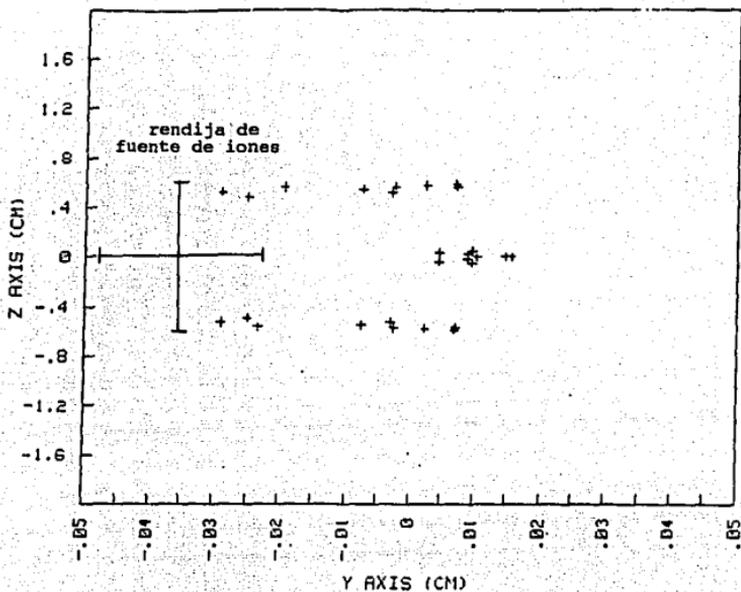


.NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7987.680  
 MASA DEL ION = 235.000 ACCELERATION VOLTAGE = 3042.070  
 VELOCITY OF THE ION = 4.998  
 ENERGY DISPERSION OF THE IONS IN  $E_u = .200$   
 FI = 90.000 ALFA = 28.000 BETA = 28.000 POLE ANGLE = 34.000  
 Ofc = 35.780 RADIUS = 15.240 Effective FIELD = 1.800  
 Phmin = -.008 Pumin = -.008 Zmin = -.600  
 X10 = -41.060 Y10 = 15.840  
 X0 = -6.469 Def = 33.741

X10 = -41.060 Y10 = 15.840  
 Xpfoi = 40.962 Ypfoi = 15.800

Fig.3.8 Imagen en del plano focal de geometría 90°, 28°, 30.48 cm

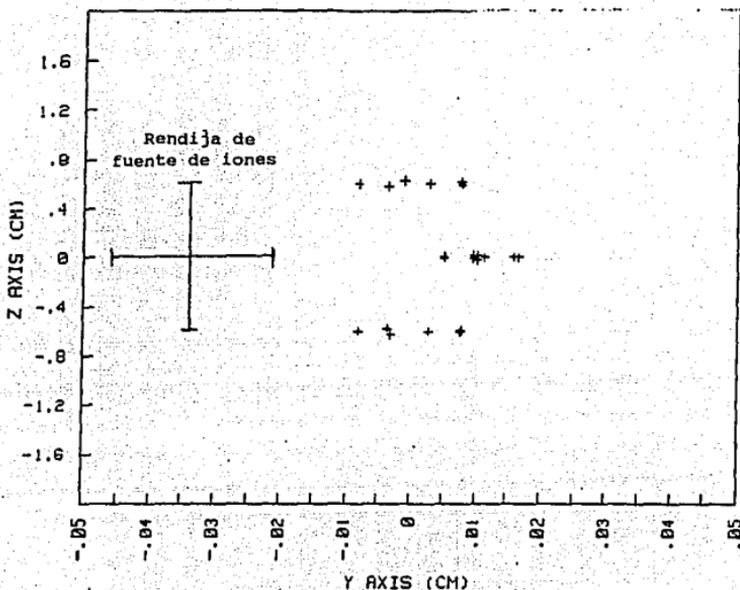


NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7997.680  
 MASA DEL ION = 235.000 ACELERATION VOLTAGE = 3042.070  
 VELOCITY OF THE ION = 4.998  
 ENERGY DISPERSION OF THE IONS IN Ev = .200  
 FI = 90.000 ALFA = 29.400 BETA = 29.400 POLE ANGLE = 31.200  
 Ofc = 38.288 RADIUS = 15.240 Effective FIELD = 1.920  
 Pmin = -.008 Pmin = -.008 Zmin = -.600  
 X10 = -42.726 Y10 = 17.770  
 X8 = -6.368 Def = 36.199

X10 = -42.726 Y10 = 17.770  
 Xpfoi = 42.613 Ypfoi = 17.692

Fig. 3.9 Imagen en del plano focal de geometría 90°, 29.5°, 30.48 cm

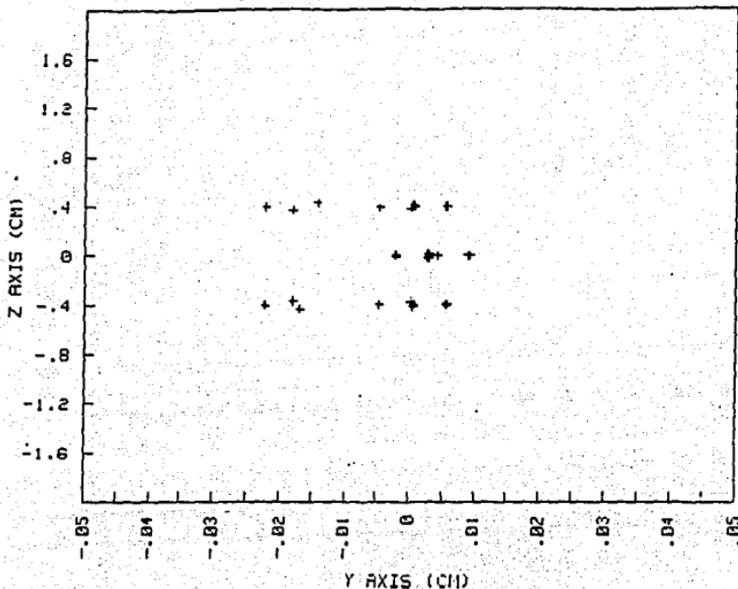


NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7997.680  
 MASA DEL ION = 235.000 ACELERATION VOLTAGE = 3042.070  
 VELOCITY OF THE ION = 4.998  
 ENERGY DISPERSION OF THE IONS IN EV = .200  
 FI = 90.000 ALFA = 30.000 BETA = 30.000 POLE ANGLE = 30.000  
 OFE = 39.499 RADIUS = 15.240 Effective FIELD = 1.840  
 PHAIN = -.008 PUMIN = -.008 ZMIN = -.600  
 X10 = -43.522 Y10 = 18.687  
 X8 = -6.316 Def = 37.373

X10 = -43.522 Y10 = 18.687  
 Xpfoi = 43.507 Ypfoi = 13.571

Fig. 3.10 Imagen en del plano focal de geometría 90°, 30°, 30.48 cm,  $\xi = .6$

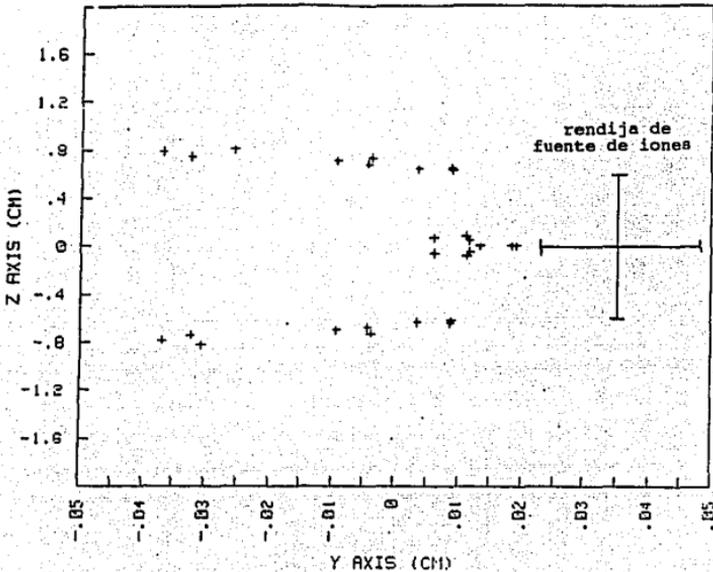


NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7997.680  
 MASA DEL ION = 235.000 ACCELERATION VOLTAGE = 3042.070  
 VELOCITY OF THE ION = 4.998  
 ENERGY DISPERSION OF THE IONS IN E<sup>+</sup> = .200  
 F1 = 90.000 ALFA = 30.000 BETA = 20.000 POLE ANGLE = 30.000  
 Ofc = 39.498 RADIUS = 15.240 Effective FIELD = 1.340  
 Phain = -.008 Pwmin = -.008 Zmin = -.400  
 X10 = -43.522 Y10 = 18.287  
 X8 = -6.316 Def = 37.373

X10 = -43.522 Y10 = 18.287  
 Xpfoi = 43.535 Ypfoi = 18.595

Fig. 3.11 Imagen en del plano focal de geometría 90°, 30°, 30.48 cm, z = 0.4



NBS MAGNET

INTENSITY OF THE MAGNETIC FIELD = 7987.680  
 MASA DEL ION = 235.000 ACCELERATION VOLTAGE = 3042.070  
 VELOCITY OF THE ION = 4.998  
 ENERGY DISPERSION OF THE IONS IN EV = .200  
 FI = 90.000 ALFA = 31.000 BETA = 31.000 POLE ANGLE = 28.000  
 Ofc = 41.892 RADIUS = 15.240 Effective FIELD = 1.830  
 Phmin = -.008 Pwmin = .008 Zmin = -.600  
 X10 = -45.013 Y10 = 20.373  
 X2 = -6.276 Def = 39.557

X10 = -45.013 Y10 = 20.373  
 Xpfo1 = 44.862 Ypfo1 = 20.311

Fig. 3.12 Imagen en el plano focal de geometría 90°, 31°, 30.48 cm

Las figuras 3.13 y 3.14 son una síntesis de 4 casos de las geometrías  $90^\circ, 26^\circ, 30 \text{ cm.}$  y  $130^\circ, 56^\circ, 17.5 \text{ cm.}$  En ambos casos se ve claramente el efecto del enfoque vertical a  $26^\circ$  y el desenfoco horizontal que ocurre a medida que se aumenta el ángulo  $\epsilon$ . Este efecto de cambio de forma del haz de iones al aumentar el ángulo esta reportado experimentalmente por Taya en 1988.

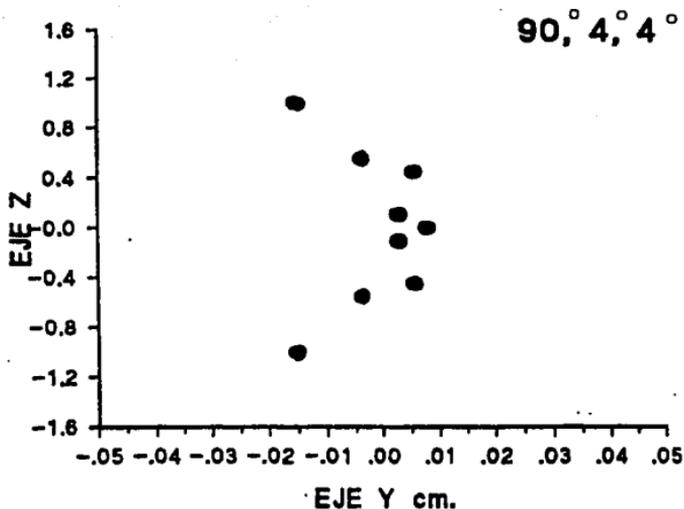


Fig.3.13 Síntesis de imágenes en punto focal de un espectrómetro de masas de  $90^\circ$  con distintos ángulos de entrada.

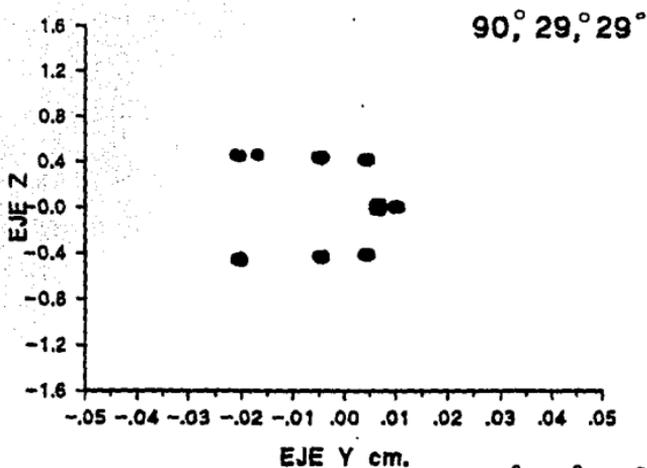
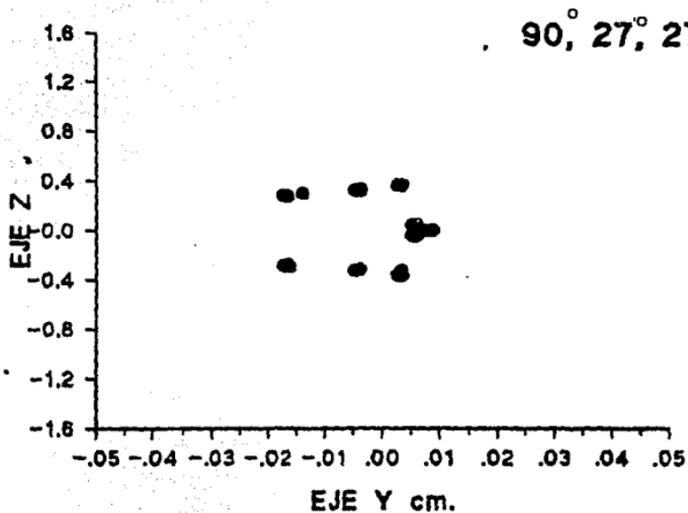


Fig.3.13 Síntesis de imágenes en punto focal de un espectrómetro de masas de  $90^\circ$  con distintos ángulos de entrada.

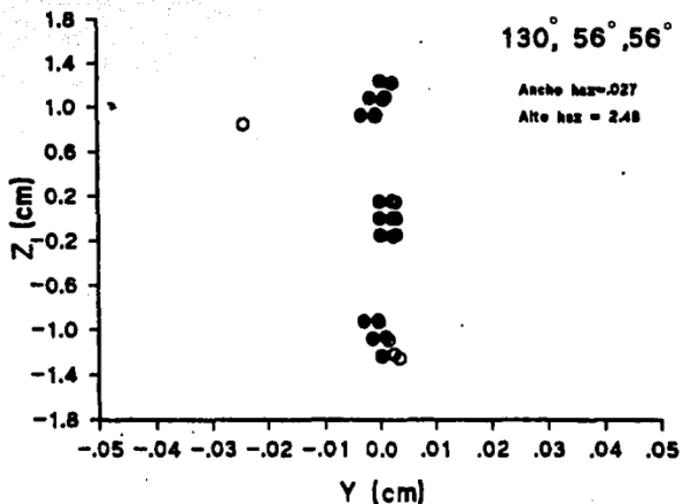
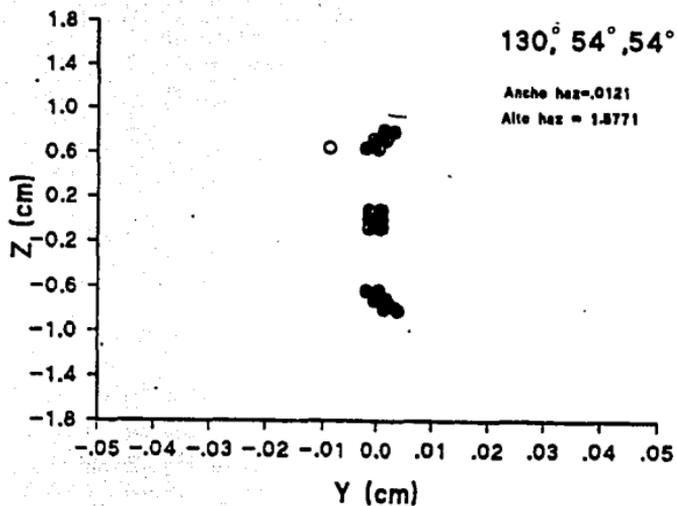


Fig. 3.14 Síntesis de imágenes en punto focal de un espectrómetro de masas de  $130^\circ$  con distintos ángulos de entrada.

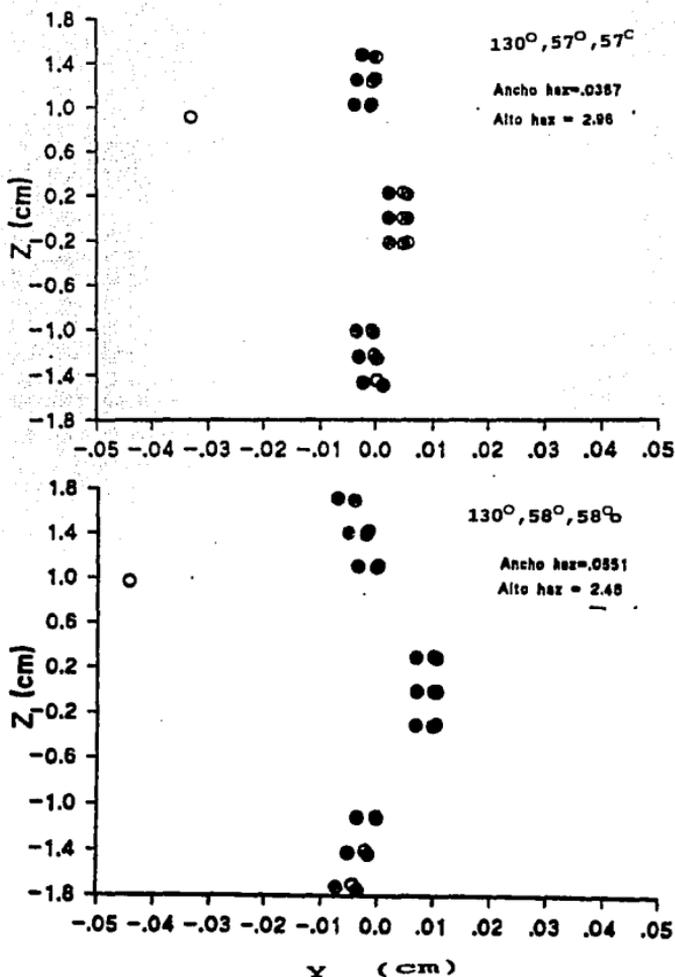


Fig. 3.14 Síntesis de imágenes en punto focal de un espectrómetro de masas de 130° con distintos ángulos de entrada.

Las aberraciones obtenidas para el caso  $130^\circ$ ,  $55^\circ$ ,  $17.5$  cm se graficaron en la figura 3.16 con el fin de entender el comportamiento de cada una de ellas y en esta región se comportan de la misma manera que las aberraciones reportadas por Matsuda (1986) figura 3.15.

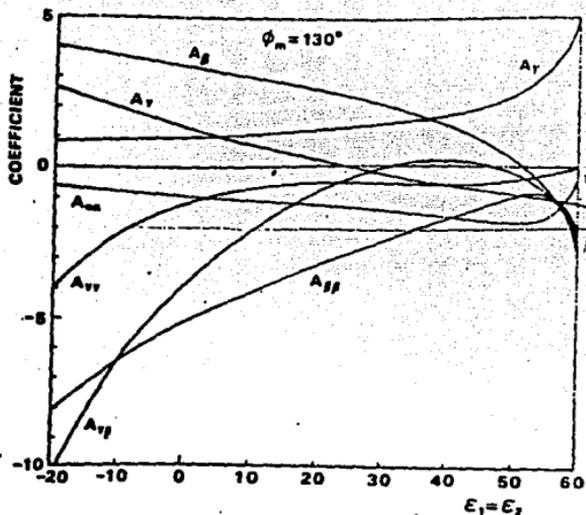


Fig 3.15 Coeficientes de aberración calculados por TRIO para distintos ángulos de incidencia al polo del imán  $\epsilon$

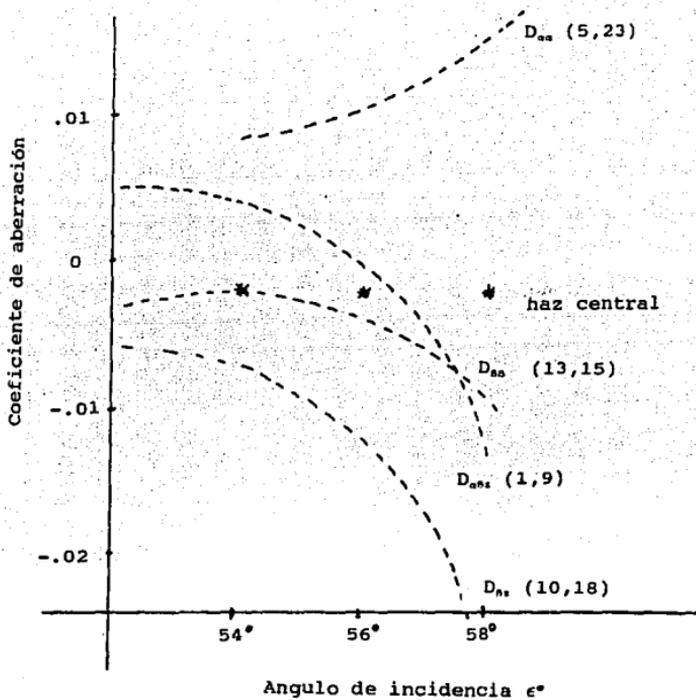


Fig 3.16 Coeficientes de aberración calculados con 116\_IFUNAM para distintos ángulos de incidencia al polo del imán  $\epsilon$

### 3.4.3 Reducción e interpretación de las aberraciones.

De las tablas y figuras del inciso anterior se pueden hacer varios comentarios.

#### Geometría 90°, 26°, 30 cm

- el enfoque astigmático que se ha reportado en la literatura con la geometría de  $\phi = 90^\circ$  y  $\epsilon = 26'$  se observa claramente en los resultados obtenidos en este trabajo para las dos geometrías con distintos radios que se analizaron en el inciso anterior.

El enfoque en la dirección z que se ve claramente para el ángulo  $\epsilon = 26'$  y el desenfoque que aparece a partir de  $26'$  tanto en z como en XY lo mostró experimentalmente tanto Taya como Matsuda.

- los coeficientes  $D_{\text{enfz}}$  son indicadores muy sensibles de la asimetría del sistema y los que definen una de las envolventes máximas del haz. De las tres parejas de  $D_{\text{enfz}}$  los más importantes por su tamaño son el 9 ( $\alpha, z, \beta$ ) y el 27 ( $-\alpha, -z, -\beta$ )

En las aproximaciones de Matsuda el considera este término como de tercer orden sin embargo para nosotros probablemente debido al tamaño considerable de  $z = 0.6$  (Matsuda  $z = 0.05$ ) el término no puede despreciarse.

- el coeficiente  $D_{\text{ov}}$  es el más pequeño o el más cercano al haz central

- el coeficiente  $D_{\text{ff}}$  también es considerablemente pequeño e insensible a cambios de simetría o altura del haz.

- con respecto a la dirección XY todos los coeficientes aumentan al aumentar  $\epsilon$  de  $26'$  a  $31'$  o sea aumenta el tamaño del haz, sin embargo con respecto a la dirección Z diferentes coeficientes tienen su mínimo a diferentes valores de  $\epsilon$ . Por ejemplo  $26'$  es un mínimo para  $D_{\text{ffz}}$  (10,18) y  $D_{\text{enfz}}$  (3,7 y 21,25).

$31'$  es un mínimo para  $D_{\text{ff}}$  (13,15)

$30'$  es un mínimo para  $D_{\text{enfz}}$  (1,9)

- la altura del objeto z es un factor determinante es el tamaño de las aberraciones.

Si comparamos los ángulos sólidos que se tiene saliendo de dos filamentos uno con altura  $z = 0.6$  y  $\alpha = \beta = 0.008$  y otro con altura  $z = 0.3$  y  $\alpha = \beta = 0.008$  tenemos que el primer ángulo sólido es 0.0048 y el segundo 0.0024. Los tamaños del haz, asociados a estos ángulos sólidos, tanto en la dirección XY como en la dirección Z se duplican. ( $\Delta Y$  va de 0.0282 a 0.056 y  $\Delta Z$  va de 0.8851 a 1.63). Sin embargo si aumentamos el ángulo sólido aumentando  $\alpha$  de 0.005 a 0.008 tenemos que el ángulo sólido aumenta de 0.0030 a 0.0048 un aumento de 60% sin embargo el tamaño del haz en la dirección XY va de 0.0316 a 0.0361 solo un aumento del 14% y para la dirección Z aumenta de 0.8609 a 1.2464 un aumento del 44%. Lo anterior nos muestra que es muy importante limitar el tamaño de  $z$  en el espectrómetro de masas poniendo baffles o placas limitadoras tanto a la entrada como a la salida del imán.

#### Geometría 130°, 56°, 17.5 cm.

- En esta geometría se observaron las mismas tendencias de  $D_{mz}$ ,  $D_{m0}$ ,  $D_{mz}$  que para el caso de 90°, 26°.

- las dimensiones de las aberraciones son menores que para el caso de 90°, demostrando el efecto enfocador del campo magnético disperso.

- las aberraciones  $D_{mz}$ ,  $D_{m0}$  y  $D_z$  obtenidas con el programa 116-IFUNAM son comparables (del mismo orden de magnitud) e inclusive iguales que los reportados en la literatura.

- para el enfoque en Z se observa una clara coincidencia entre que  $A_{m0}$  sea mínima y que el enfoque sea puntual.

-  $D_{mz}$  aumenta a medida que  $\epsilon$  va de 54° a 58°.

-  $D_{zz}$ ,  $D_{m0}$  y  $D_{mz}$  tienen un mínimo en 56° mostrando claramente que los parámetros con los que se optimiza esta geometría son los que corresponden a 56°. En la gráfica 3.14 se ve claramente el efecto enfocador que tiene el ángulo  $\epsilon$ . Para  $\epsilon = 54^\circ$  el haz tiene una curvatura hacia la derecha en  $\epsilon = 56^\circ$  y  $\epsilon = 57^\circ$  el haz aumenta de altura, se endereza y disminuye su anchura "Y" para  $\epsilon = 58^\circ$  disminuye su altura y vuelve a curvarse hacia la izquierda.

De los cinco casos estudiados para esta geometría tomando en cuenta el tamaño de la imagen del haz el óptimo se encuentra entre 56° y 57° pero si se toma en cuenta la dispersión entre masas adyacentes el caso de 56° tiene una dispersión mayor ( $A_v = 3.2$  y la aberración total de 0.0216).

Después del minucioso análisis de los resultados obtenidos y en especial del comportamiento de las aberraciones obtenidas por ambos métodos (figura 3.15 y 3.16) se puede concluir que los resultados obtenidos por el programa 116-IFUNAM resultaron ser muy satisfactorios y por lo tanto la metodología es suficientemente buena como para utilizarla en el diseño de un espectrómetro de masas de alta poder de resolución y alta sensibilidad.

## IV ESPECTRÓMETRO DE MASAS

### 4.1 Optimización de características del Espectrómetro de Masas.

La validez de los resultados obtenidos en la sección anterior se hizo evidente al poder diseñar y optimizar fácilmente una geometría deseada para construir un espectrómetro de masa para realizar investigación sobre isótopos estables de elementos pesados.

Las características del espectrómetro debían ser: un alto poder de resolución ( $PR > 500$ ), para lo cual como ya se discutió en el capítulo I se requiere de una dispersión grande  $\Delta y$  y una aberración total mínima  $\Delta A$ . Una alta sensibilidad que permita medir concentraciones de elementos en el intervalo de nanogramos/gramo, manejando corrientes de iones menores de  $10^{-12}$  ampers) para lo cual, la transmisión debe de ser máxima.

De entre las geometrías estudiadas, se escogió la de mayor dispersión entre masas adyacentes o sea aquella cuyo ángulo total de giro es de  $130^\circ$  y  $56^\circ$  de ángulo de incidencia. Sin embargo las características del espectrómetro estaban restringidos ya que debían ajustarse a un electroimán que ya se tenía y cuya distribución espacial de campo magnético se había determinado. El electroimán estaba construido con hierro de bajo carbón tipo ARMCO y tenía 25 centímetros de radio y  $60^\circ$  de sector. La geometría que se construyó a partir del electroimán existente tiene 17.5 centímetros de radio.

La geometría optimizada en el capítulo anterior de  $56^\circ$  de ángulo de entrada,  $130^\circ$  de giro total y 17.5 cm. mostró tener una dispersión de 3.2 y una aberración total de 0.0216. Las dimensiones de este arreglo son  $O_p = 33.65$  cm. (distancia entre la fuente de iones y la frontera del imán),  $E_{ff} = 1.648$  (extensión del campo disperso),  $X_{10} = -33.22$  cm.  $Y_{10} = 25.45$  cm.  $X_8 = -11.41$  cm.

### 4.2 Características de Construcción

La construcción de la envolvente mecánica del Espectrómetro se llevó a cabo en los talleres del IFUNAM utilizando acero inoxidable tipo 304.

Esta envolvente consiste principalmente de un tubo de vuelo de sección rectangular de 5 X 2 centímetros con  $130$  grados de giro y 17.5 centímetros de radio central que se acopla con precisión dentro del entrehierro del imán y que, como muestra la figura 4.1, se une a dos tubos de extensión y dos cámaras de acero inoxidable que albergan la fuente de iones y el colector.

Las dimensiones de los tubos de extensión, tubo de vuelo, cámaras de vacío y acoplamiento a las bombas de vacío se muestran en la figura 4.1, estas se obtuvieron directamente del sistema de coordenadas utilizado en el programa 116-IFUNAMN trasladando el origen del sistema de coordenadas de programa al punto de intersección entre la distancia fuente de iones y colector y la bisectriz del sector magnético con una precisión mejor de 0.001", y con el sistema de coordenadas se trazo el triángulo ABC de la figura 4.2 y calcularon las distancias de los tubos y cámaras.

Con estas medidas se construyeron los tubos de acero inoxidable y las bases de la fuente de iones y colector se ajustaron para que las rejillas de definición coincidieran con el diseño con una precisión de 0.1 mm.

Las principales especificaciones de diseño durante la construcción del espectrómetro fueron: mantener el centro horizontal de las piezas que forman la envolvente dentro de la cual viajan los iones, desde la fuente de iones hasta el colector con un desviación no mayor de 0.001", asegurar en el momento de armar el espectrómetro el paralelismo entre las bridas de los tubos rectos de extensión utilizando sellos tipo escalón con anillos de oro, así como pernos de alineamiento, usar como centro de alineamiento el tubo de vuelo, de tal manera que el ángulo entre sus bridas (130') se traslade paralelamente hacia las bridas de las cámaras donde se montan el colector y la fuente de iones sin ningún giro en el sentido vertical ni horizontal.

El tubo de vuelo de sección rectangular y con radio central de 17.5 centímetros se construyó a partir de una placa de acero inoxidable 304 de 0.5" de espesor maquinando una dona de 20 centímetros de diámetro externo y 15 cm. de diámetro interno con fondo plano de 0.8 cm y dejando una preparación para el ensamble y alineación. La dona se partió en 2 sectores de 130' cada uno y se soldaron uno arriba del otro con un alma de cobre para uniformizar la penetración de la soldadura.

El sistema de vacío del espectrómetro de masas opera con bombeo diferencial entre la cámara de ionización cuya presión es del orden de  $10^{-6}$  torrs, y el tubo de vuelo y la cámara del colector cuya presión es de  $10^{-8}$  torrs. Estas secciones se mantienen aisladas mediante una válvula neumática de 2" tipo Granville Phillips.

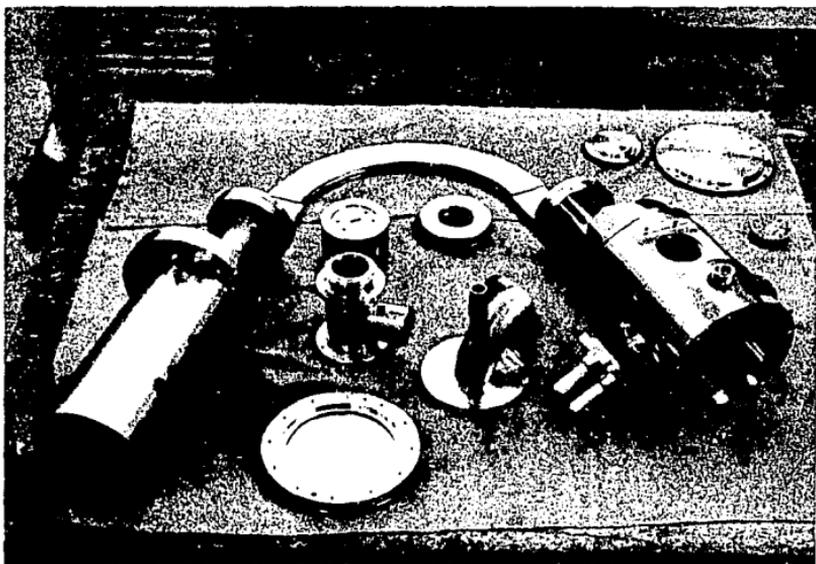


Fig. 4.1 Envolverte metálica del Espectrómetro de Masas 130-56<sup>o</sup>

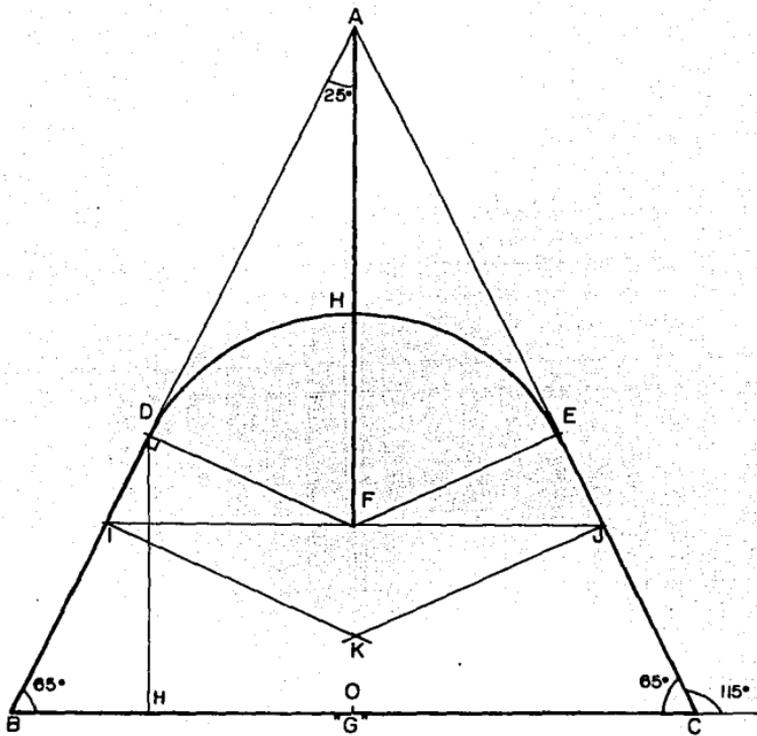


Fig. 4.2 Geometría de la envolvente del Espectrómetro de Masas 130°-56°

La cámara de ionización se evacua mediante una bomba mecánica Leybold D4A y una bomba turbomolecular Leybold de 150 l/s y el tubo de vuelo y la cámara de ionización mediante una bomba iónica marca Varian de 100 l/s.

La fuente de iones se muestra en la figura 4.3 y está formada de cinco placas que actúan como lentes electrostáticas extrayendo y definiendo el haz de iones eléctricamente y otras 3 placas de definición móviles, una limita al haz en la dirección Z y las otras dos lo definen en la dirección XY.

La fuente ioniza mediante termoionización y la probabilidad de que un átomo al evaporarse del filamento caliente se ionice es:

$$\frac{n}{n_0} = k e^{\frac{(\phi - I)}{T}}$$

donde  $k$  es la constante de Boltzman,  $\phi$  es la función de trabajo del filamento,  $I$  es el potencial de ionización del elemento que se evapora y  $T$  es la temperatura en grados Kelvin del filamento ionizante. Para esta fuente de ionización la probabilidad es de 10-5 iones/molécula.

La ionización es selectiva produciendo mínima ionización de fondo y un haz intenso de iones para elementos pesados como el plomo, uranio, rubidio, estroncio, tierras raras etc.

La probabilidad de producir iones doblemente cargados es mínima; los efectos de memoria no son apreciables y finalmente la dispersión en la energía de los iones formados ( $\Delta V/V$ ) es de 1volt/40 000 volts.

El diagrama del colector se muestra en la figura 4.4 y esta constituido por una caja de Faraday de 3 cm de profundidad con superficie reflectora para evitar la salida de los iones incidentes, 6 placas con potenciales negativos para suprimir volumétrica de los electrones secundarios que se generan al incidir el haz de iones con cualquier superficie metálica y finalmente una rejilla de definición ajustable.

Cuando los análisis isotópicos requieren una precisión externa de 1% un solo colector es suficiente y las diferentes masas se enfocan en él al variar el campo magnético. Sin embargo para realizar análisis isotópicos de mayor precisión se requiere de un colector múltiple para que puede realizarse una colección simultanea de masas.

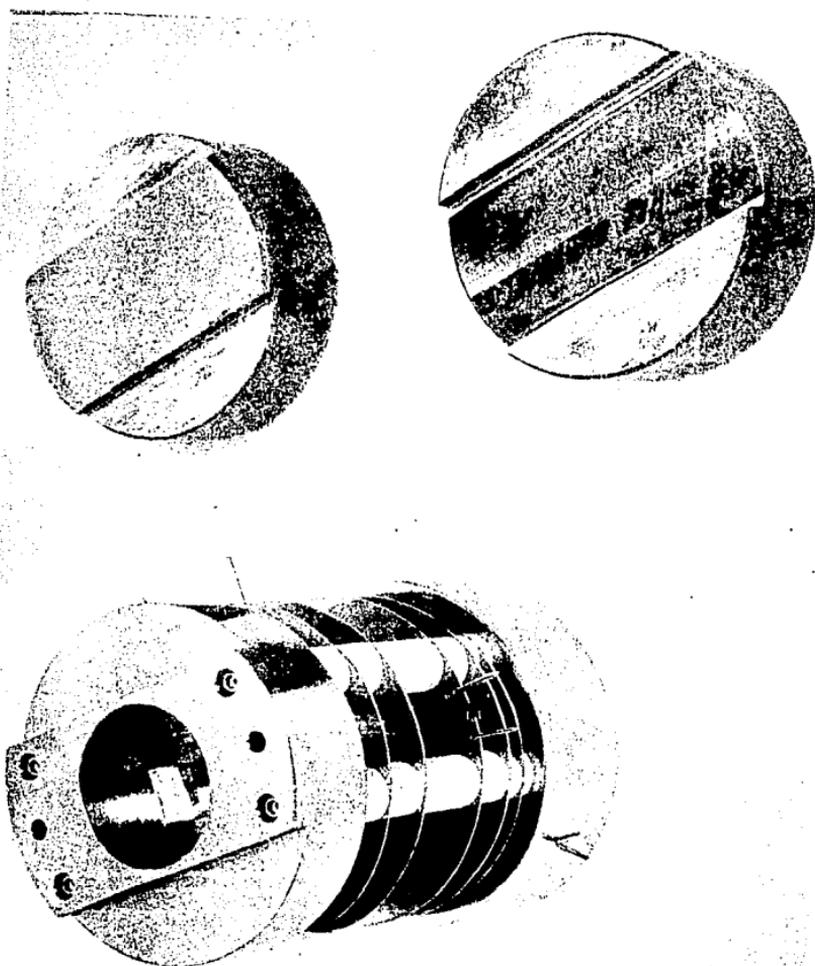


Fig. 4.3 Fuente de iones

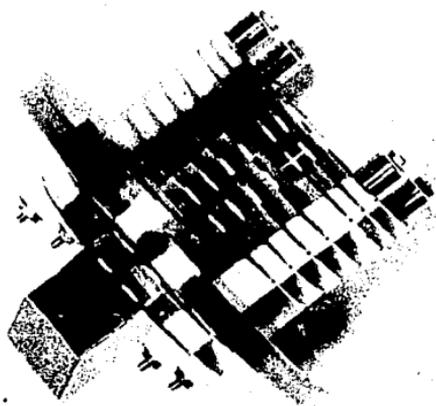
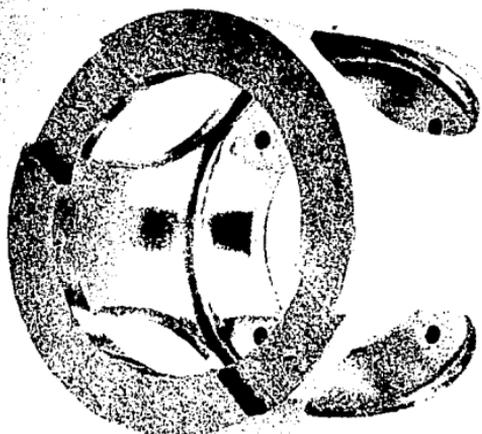


Fig. 4.4 Colector de una caja de Faraday

El diseño del colector múltiple se realizó como en el caso de la envolvente del espectrómetro a partir de los datos obtenidos con el programa 116-IFUNAM. Al programa se le hizo una pequeña modificación para poder variar la masa de los iones y de esta manera obtener las coordenadas de los puntos focales de distintas masas. En particular se analizó para el caso de  $\phi = 130^\circ$  y  $\epsilon = 56^\circ$  las coordenadas de los puntos focales de las masas 144, 145, 146.

Con las coordenadas de los puntos focales de las tres masas se definió el plano focal y en él se calculó la dispersión experimental del espectrómetro. La definición de la posición del plano focal y de los puntos de enfoque permite diseñar un colector múltiple con gran facilidad. (figura 4.5)

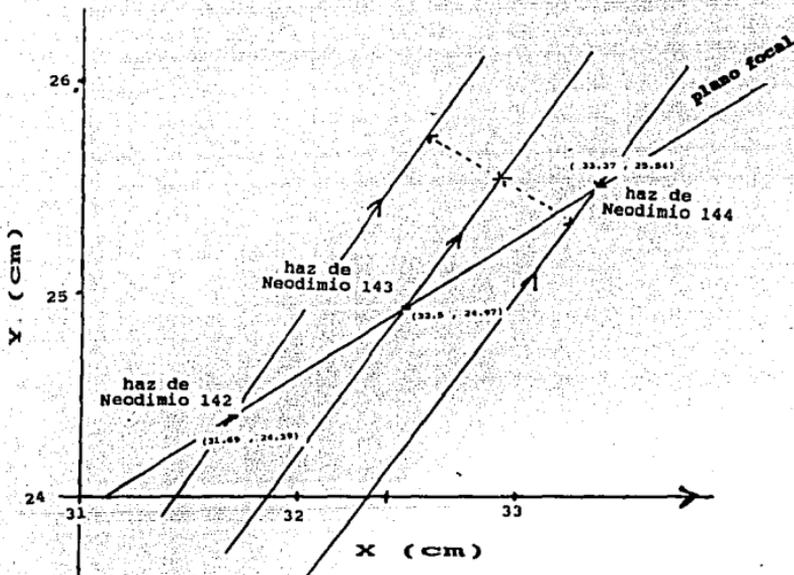


Fig 4.5 Posición de puntos de enfoque de isótopos del Neodimio

Las placas tanto de la fuente de iones como del colector están hechas de nicromel V ya que este material no es magnético, es de baja actividad catalítica, es resistente a la corrosión y de baja adsorción de gases. Los aisladores que están colocados entre las placas de la fuente de iones y el colector se maquinaron de Alúmina Coors AD-94 con una precisión de .001" para asegurar el paralelismo entre las placas. Esta alúmina tiene baja adsorción de gases y baja conductividad eléctrica.

La fuente de iones y el colector son abiertos para aumentar la velocidad de bombeo y están ensamblados de tal manera que se facilite la limpieza y autoalineación.

La rejilla de definición del colector así como la de la fuente de iones se ajustaron a  $S_a = 0.010"$  y a  $S_c = 0.020"$  para obtener un poder de resolución mayor de 500, que es suficiente para resolver las masas 235 y 236 del URANIO.

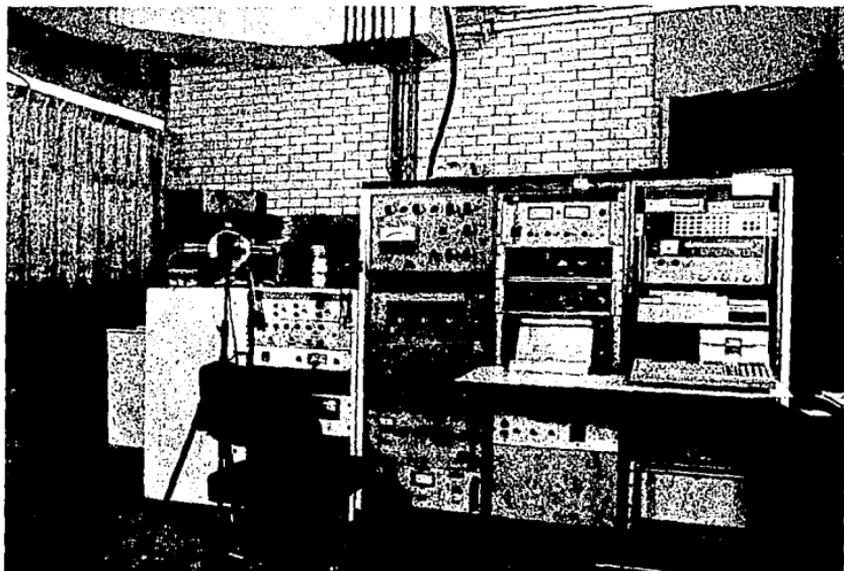
La electrónica utilizada para operar el espectrómetro de masas se describe brevemente haciendo hincapié solo en los aspectos de la regulación ó dispersión de energía asociada a cada componente.

Los filamentos de ionización de la fuente de iones están alimentados por tres fuente de corriente directa de 10 V, 10 A, aislados del potencial de tierra y con una estabilidad mayor de 1/30 000.

La fuente de alto voltaje (10 kV) marca Fluke y el divisor de voltaje para la alimentación de las lentes electrostáticas tienen una regulación mayor de 1/20 000 y la fuente de corriente del electroimán (0-40 amperes) HP-6268B tiene una regulación mayor de 1/40 000.

Hasta el momento el método de colección es en un solo colector en el cual se enfoca alternadamente los distintos isótopos variando el campo magnético. La señal generada por el impacto de los iones de una masa dada en la caja de faraday es amplificada mediante un electrómetro de condensador vibrante Cary 401, cuya sensibilidad en corriente es de  $10^{-12}$  A y nivel de ruido menor de  $10^{-15}$  A. Esta señal se manda a un voltmetro digital de 6.5 cifras HP3456A para que la digitalice, la envíe a la computadora para que la procese estadísticamente.

El control del espectrómetro así como el sistema de adquisición de datos es automático y se maneja con una computadora HP-9826.



**Espectrómetro de Masas 130°-56°-56° construido en el IFUNAM**

### 4.3 Aberraciones Experimentales.

Se calcularon teóricamente los parámetros de operación del espectrómetro de masas construido, los cuales en algunos casos se pueden asociar directamente a las aberraciones descritas en el capítulo anterior y comparar con los parámetros experimentales medidos.

#### LINEARIDAD

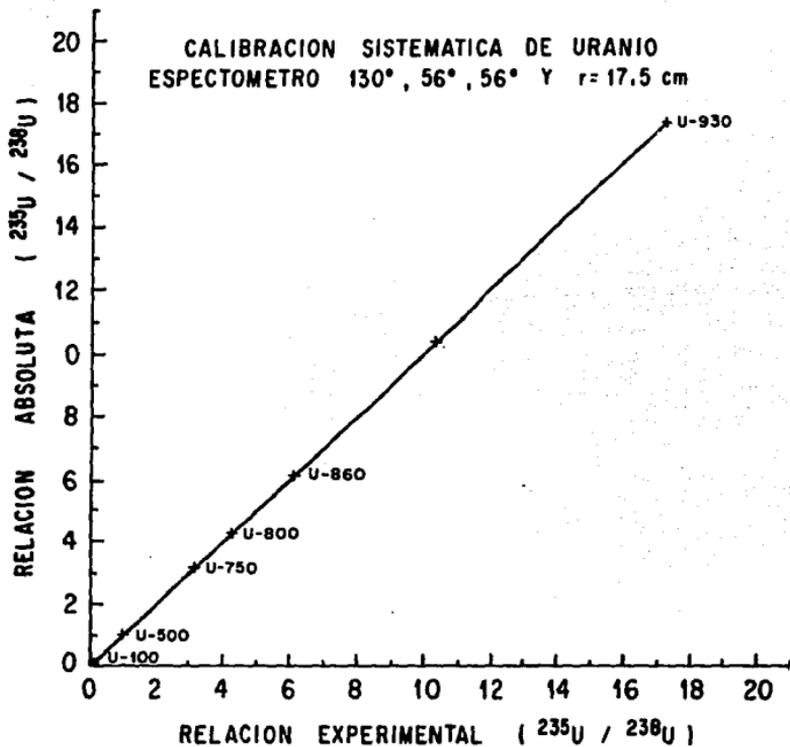
La linealidad es una característica de operación muy importante en un espectrómetro de masas y aunque no se asocia directamente al sistema de enfoque es una medida del funcionamiento general del equipo. En un espectrómetro bien enfocado la linealidad se debe principalmente a que en el sistema de medición aparece una respuesta RC al medir alternadamente corriente cuyas magnitudes varían en tres o más órdenes. ( $10^{-10}$  A para el haz de iones de uranio 238 y  $10^{-15}$  A para el haz de iones de uranio-234).

Para determinar experimentalmente este parámetro se analizaron una serie de patrones internacionales de referencia SRM (Standard Reference Material) de uranio cuyas relaciones  $U^{235}/U^{238}$  varían desde 0.05 hasta 20 (3 órdenes de magnitud).

Los resultados se muestran en la tabla 4.1 y figura 4.6 donde la linealidad para el sistema de medición del espectrómetro es de .996799

Patrón de Referencia	$(U_{235}/U_{238})_{teórico}$	$(U_{235}/U_{238})_{experimental}$	Linealidad
SRM U-930	17.34867	17.35461	.999658
SRM U-850	6.14796	6.15052	.999583
SRM U-800	4.2656	4.2797	.996688
SRM U-750	3.16612	3.17586	.996933
SRM U-500	.99969	1.00327	.996439
SRM U-100	.113595	.114102	.995550
SRM U- 50	.05278	.053097	.994017
		Promedio	.996799

Tabla 4.1 Valores experimentales y teóricos de patrones de referencia.



**Fig. 4.6** Linearidad del sistema de medición del Espectrómetro de Masas

### SENSIBILIDAD DE ABUNDANCIA.

Se define como sensibilidad de abundancia a la contribución de un haz de iones de masa "m" muy intenso, sobre la posición de otro haz de iones de masa  $m+\Delta m$  cuya intensidad es varios órdenes de magnitud menor. En nuestro caso determinamos la sensibilidad de abundancia con la contribución de la masa 235 en la posición de la masa 234, cuya intensidad es 4 órdenes de magnitud menor. Como se muestra en la figura 4.7 este parámetro es igual a 10 ppm.

Aunque este parámetro no es comparable directamente a ninguna de las aberraciones estudiadas, una aberración total pequeña y una dispersión máxima dará una sensibilidad de abundancia muy pequeña.

Para medir la sensibilidad de abundancia se analizó en el espectrómetro de masas, el patrón de referencia de Uranio SRM-U-900 con un voltaje de aceleración de 3480 volts. Se barrió el campo magnético aumentándolo linealmente para enfocar las masas, y se cambió la sensibilidad del sistema de medición según fueron apareciendo los haces de las diferentes masas.

Masa	Sensibilidad	Intensidad del haz
$^{234}\text{U}$	0.3 volts	4.4
$^{235}\text{U}$	10 volts	6.8

Se extrapoloó gráficamente y se cálculo la contribución del haz de  $^{235}\text{U}$  sobre el centro del haz de  $^{234}\text{U}$ .

$$\text{Sensibilidad abundancia} = \frac{U^{235} \text{ sobre } U^{234}}{U^{235}} = \frac{1}{68000} = 1\text{ppm}$$

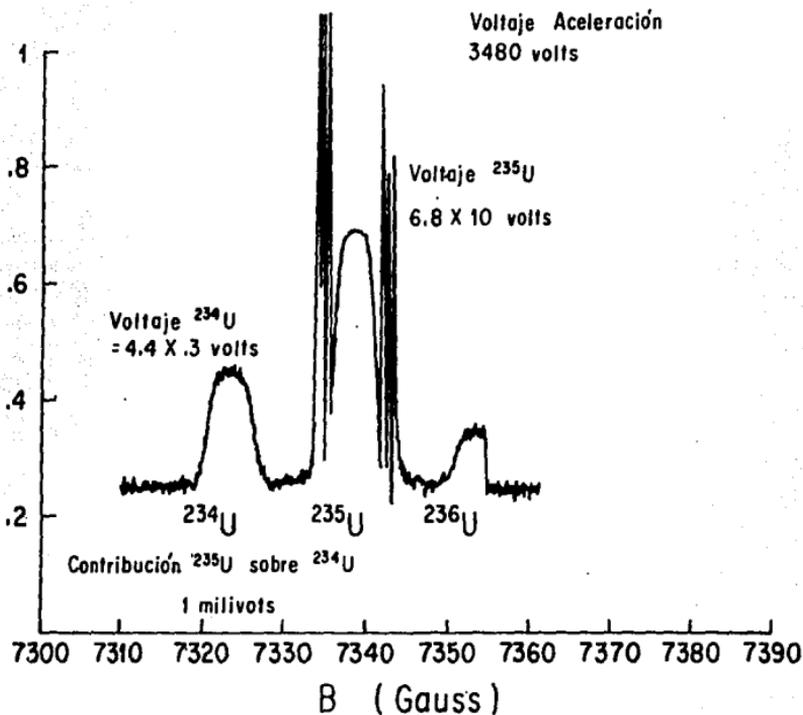


Fig 4.7 Sensibilidad de abundancia de Espectrómetro de Masas

## RESOLUCION.

Teóricamente asociado al término de dispersión de masas  $A_r$ , está el poder de la resolución del sistema. Este poder de resolución como se mencionó anteriormente se expresa como la capacidad del sistema para separar haces de diferente masa.

El poder de resolución de un espectrómetro de masas, que tiene una dispersión de 3.2, radio de 17.5 cm, rejilla de definición de  $0.01^\circ$  y  $0.02^\circ$  y aberración total de 0.021 cm se puede calcular como:

$$P.R. = \frac{A_r \cdot R}{(S_s + S_c + \Delta)} = \frac{3.2 \cdot 17.5}{.025 + .050 + .0216} = 580$$

Experimentalmente no es posible medir directamente ni la aberración total ni el coeficiente  $A_r$ , por lo tanto se mide la resolución a partir de la diferencia que hay entre el campo magnético necesario para enfocar dos haces cuya diferencia de masas es  $\Delta m$  (ec 2.10).

En la figura 4.8 se muestra el espectro del renio donde la diferencia entre el centro del pico de renio 185 y el de renio 187 es de 34 gauss (d) así mismo el ancho del pico del renio 187 a 10% de intensidad es de 6 gauss (b) de tal manera que la resolución experimental la podemos calcular con la fórmula.

$$P.R. = \frac{M \Delta B}{\Delta m B} = \frac{187 \cdot 34}{2 \cdot 6} = 523$$

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

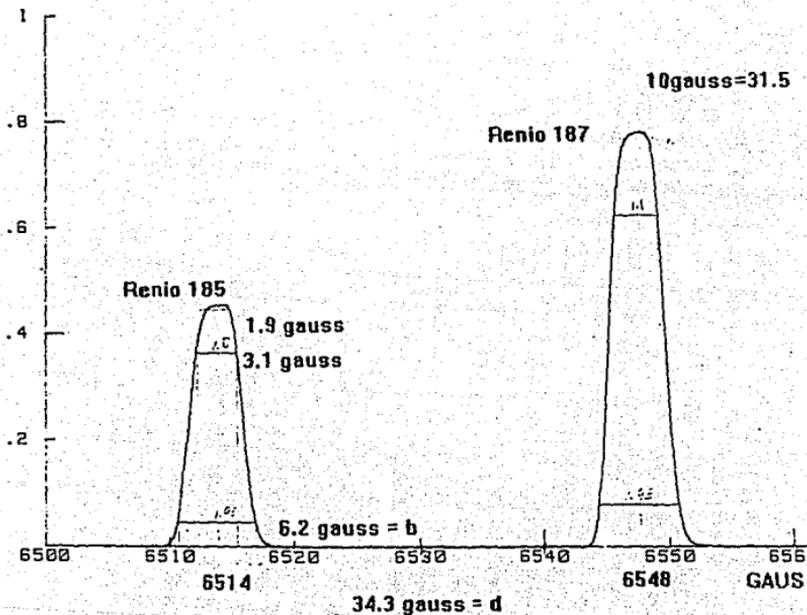


Fig. 4.8 Resolución entre haz de Re-185 y Re-187

## REPETIBILIDAD.

La repetibilidad interna del espectrómetro está dada por la desviación standard de una serie sucesiva de determinaciones de las relaciones isotópicas en una muestra dada. Mientras que la repetibilidad externa está dada por la desviación standard del promedio de las relaciones isotópicas de varias muestras preparadas y analizada varias veces.

La desviación standard de promedio de diez patrones de referencia de estroncio (SRM-987) y uranio (SRM U-500), analizadas cada una bajo las mismas condiciones experimentales así como la desviación standard de cada determinación se muestran en la tabla 4.2

TABLA 4.2

# análisis	SRM-U-500		Repetibilidad interna
	$^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$	n	
1038	0.99874	20	+0.0005
1039	0.99843	20	+0.0003
1040	0.99983	20	+0.0004
1041	0.99942	18	+0.0003
1042	0.99745	20	+0.0006
1043	0.99832	20	+0.0004
1044	0.99934	19	+0.0005
1045	0.99729	20	+0.0003
1046	0.99853	20	+0.0002
1047	0.99792	20	+0.0004

Promedio = 0.99890 n=10

$\sigma$  = 0.00052      Repetibilidad externa

El valor certificado de la relación del Uranio-235 al Uranio-238 del patrón de referencia SRM U-500 es 0.9996 por lo tanto la diferencia entre el valor experimental obtenido en nuestro laboratorio y el certificado es de:

$$^{235}\text{U}/^{238}\text{U} \text{ certificado} - ^{235}\text{U}/^{238}\text{U} \text{ experimental} = 0.9996 - 0.9989 \\ = 0.0007$$

Para el caso del patrón de referencia de estroncio SRM - 987 cuyo valor certificado es de 0.7104, el valor  $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$  promedio obtenido en el espectrómetro de masas es de 0.71022, siendo la diferencia de 0.0002 del mismo orden de la repetibilidad externa ( $\sigma = 0.00025$ ). Los valores de  $\text{Sr}^{87} / \text{Sr}^{86}$  están normalizados con los valores de  $\text{Sr}^{88}/\text{Sr}^{86}$  según el método descrito por Faure (1965).

FORMA DE PICO.

La representación gráfica de un haz de iones se conoce como pico y la forma del pico depende tanto de la relación entre el ancho del haz y la rejilla de definición como de la dispersión del sistema.

La relación entre la dimensión de la plataforma o área de intensidad constante (3.2 gauss) y la dimensión del ancho total del pico (6.2 gauss) se muestra en la figura 4.8, una relación de 52% es excelente.

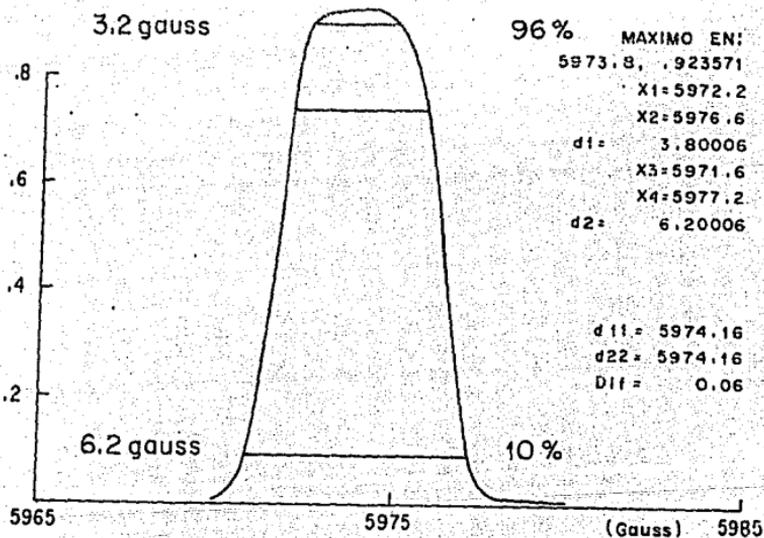


Fig.4.8 Mapeo de haz de iones de Sr88 a 6000 gauss

## TRANSMISION.

Aunque experimentalmente no se determinó esta característica debido al enfoque astigmático que este arreglo geométrico mostró al analizarlo con el programa 116-IFUNAM, se estima que la transmisión es mayor del 50%.

Un indicador indirecto de la transmisión es el obtener en algún punto del espectro una línea base negativa. La línea base negativa en general se asocia a la presencia de electrones secundarios producidos por el choque de los iones no transmitidos contra la envolvente mecánica. Estos electrones secundarios son más abundantes en la vecindad de haces más intensos y neutralizan a los iones haciendo la línea base negativa. En los análisis realizados nunca se observó una línea base negativa.

A continuación se comparan las características de operación de un espectrómetro comercial marca FINNIGAN-MAT 262 con valor de 600 000 dólares y las características de operación del espectrómetro construido en el IFUNAM.

	MAT 261	IFUNAM
Reproducibilidad Interna	< .01%	.0004
Resolución $M/\Delta m$ (valle al 10%)	500	523
Forma Pico	$2 * 10^{-4}$	
Sensibilidad de abundancia	< 2 ppm 238/237	1ppm 234/235
Transmisión	> 45 %	50%

### **Conclusiones:**

- Con la metodología desarrollada en este trabajo para el análisis de la óptica de iones en un espectrómetro de masas ha sido posible reproducir los resultados reportados en la literatura inclusive mejorarlos, ya que se obtuvo mayor precisión en el enfoque fino de los haces de iones de energías de 10 kilovots, que no son comunes comercialmente.

- El programa de computo desarrollado resultó ser muy sencillo para calcular los puntos focales de diferentes isótopos de un elemento, lo cual es de suma utilidad en el diseño de colectores múltiples para análisis isotópicos de gran precisión.

- El espectrómetro de masas construido cumplió con las expectativas de diseño y superó las características de los espectrómetros comerciales.

## APENDICE I

### MATRICES DE TRANSFERENCIA

La transformación de las coordenadas de un rayo arbitrario con partículas de momento "p" al pasar por una región donde actúa un campo magnético constante puede describirse mediante una serie de funciones de las condiciones iniciales del rayo antes de entrar a la región donde actúa el campo magnético de intensidad constante cuya componente actúa solo en la dirección Z.

Para calcular esta transformación consideramos dos rayos, uno central con momento  $p_0$  que gira en el campo magnético con un radio R y cuya trayectoria es tal que la dirección "X" coincide con ella. El otro rayo arbitrario de momento  $p = p_0 (1 + \delta)$  entra al espacio donde actúa el campo magnético con coordenadas de entrada  $(x_1, y_1, z_1)$  y pendientes  $y_1' = \delta y_1 / dx_1$ ,  $z_1' = dz_1 / dx_1$ . Para calcular las coordenadas en el espacio de salida de este rayo arbitrario debemos calcular en  $x_2 = 0$  las siguientes funciones:

$$y_2 = f_1(y_1, y_1', z_1, z_1', \delta)$$

$$y_2' = f_2(y_1, y_1', z_1, z_1', \delta)$$

$$z_2 = f_3(y_1, y_1', z_1, z_1', \delta)$$

$$z_2' = f_4(y_1, y_1', z_1, z_1', \delta)$$

Supongamos que los parámetros de entrada  $y_1, y_1', z_1, z_1'$  están definidos en un punto  $x_1 = 0$  por donde pasa el rayo y que el parámetro  $\delta = \Delta p / p$  es una constante de movimiento en el espacio donde actúa el campo magnético ya que  $v$  es perpendicular a  $B$ . Más aún las desviaciones del rayo arbitrario con respecto al rayo central son pequeñas ( $|y_1', z_1', \delta| \ll 1$ ) y que  $y_1$  y  $z_1$  son pequeñas con respecto al radio del rayo central "R". En este caso podemos expandir en series de Taylor las ecuaciones anteriores hasta un 2° orden y substituyendo

$$\frac{y}{y'} \frac{\partial y_2}{\partial y_1} \quad \frac{y}{y'} \frac{\partial y_2}{R \partial y_1'} \quad \frac{y'}{y^2} \frac{R^2 \partial^2 y_2}{2 \partial y_1'^2}$$

podemos escribir las ecuaciones como:

$$\begin{aligned} \frac{y_2}{R} &= \left(\frac{y}{y}\right) \frac{y_1}{R} + \left(\frac{y'}{y'}\right) y_1' + \left(\frac{y}{\delta}\right) \delta + \left(\frac{y}{y^2}\right) \left(\frac{y_1}{R}\right)^2 + \left(\frac{y'}{yy'}\right) \frac{y_1}{R} y_1' + \left(\frac{y}{y\delta}\right) \frac{y_1}{R} \delta \\ &\quad + \left(\frac{y}{y^2}\right) y_1'^2 + \left(\frac{y'}{y'\delta}\right) y_1' \delta + \left(\frac{y}{\delta^2}\right) \delta^2 + \left(\frac{y}{z^2}\right) \left(\frac{z_1}{R}\right)^2 + \left(\frac{y'}{zz'}\right) \frac{z_1}{R} z_1' + \left(\frac{y}{z^2}\right) z_1'^2 \\ y_2' &= \left(\frac{y'}{y}\right) \frac{y_1}{R} + \left(\frac{y'}{y'}\right) y_1' + \left(\frac{y'}{\delta}\right) \delta + \left(\frac{y'}{y^2}\right) \left(\frac{y_1}{R}\right)^2 + \left(\frac{y'}{yy'}\right) \frac{y_1}{R} y_1' + \left(\frac{y'}{y\delta}\right) \frac{y_1}{R} \delta \\ &\quad + \left(\frac{y'}{y^2}\right) y_1'^2 + \left(\frac{y'}{y'\delta}\right) y_1' \delta + \left(\frac{y'}{\delta^2}\right) \delta^2 + \left(\frac{y'}{z^2}\right) \left(\frac{z_1}{R}\right)^2 + \left(\frac{y'}{zz'}\right) \frac{z_1}{R} z_1' + \left(\frac{y'}{z^2}\right) z_1'^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{z_2}{R} &= \left(\frac{z}{z}\right) \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z}{z'}\right) z_1' + \left(\frac{z}{yz}\right) \frac{y_1}{R} \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z}{y'z'}\right) y_1' \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z}{\delta z}\right) \delta \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z}{yz'}\right) \frac{y_1}{R} z_1' \\ &\quad + \left(\frac{z}{y'z'}\right) y_1' z_1' + \left(\frac{z}{\delta z'}\right) \delta z_1' \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z_2' &= \left(\frac{z'}{z}\right) \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z'}{z'}\right) z_1' + \left(\frac{z'}{yz}\right) \frac{y_1}{R} \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z'}{y'z'}\right) y_1' \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z'}{\delta z}\right) \delta \frac{z_1}{R} + \left(\frac{z'}{yz'}\right) \frac{y_1}{R} z_1' \\ &\quad + \left(\frac{z'}{y'z'}\right) y_1' z_1' + \left(\frac{z'}{\delta z'}\right) \delta z_1' \end{aligned}$$

En las ecuaciones anteriores por cuestiones de simetría algunos de los coeficientes de enfoque son cero ( $y/yz = 0$ ).

En el caso más simple donde tomamos solo los coeficientes de primer orden, podemos reordenar las ecuaciones y escribirlas en forma de matriz. Para el plano XY las ecuaciones se simplifican de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \frac{y_2}{R} \\ y_2' \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{y}{y}\right) & \left(\frac{y'}{y'}\right) & \left(\frac{y}{\delta}\right) \\ \left(\frac{y'}{y}\right) & \left(\frac{y'}{y'}\right) & \left(\frac{y'}{\delta}\right) \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{y_1}{R} \\ y_1' \\ \delta \end{pmatrix}$$

y para el plano Z

$$\begin{pmatrix} z_2 \\ R \\ z_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (z' \\ z) & (z' \\ z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ R \\ z_1' \end{pmatrix}$$

Cabe hacer notar que a primer orden el movimiento en el plano horizontal y vertical son independientes uno de otro. Además de su simplicidad, la formulación matricial permite que las matrices de transferencia para un sistema magnético se puedan calcular como el producto de matrices individuales de cada componente incluyendo los espacios entre imanes.

## APENDICE II

### MATRICES DE TRANSFERENCIA PARA ESPACIO LIBRE DE CARGAS

En un espacio libre de fuerzas eléctricas y magnéticas, las trayectorias de las partículas cargadas son líneas rectas y la relación entre las coordenadas de la entrada y las de salida de este espacio libre cuya longitud es  $L$  se pueden escribir como:

$$\frac{Y_2}{R} = \frac{Y_1}{R} + \frac{L}{R} Y_1'$$

$$Y_2' = Y_1'$$

$$\frac{Z_2}{R} = \frac{Z_1}{R} + \frac{L}{R} Z_1'$$

$$Z_2' = Z_1'$$

de tal manera que las matrices de transferencia horizontal y vertical correspondientes serán:

$$H = \begin{vmatrix} 1 & \frac{L}{R} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$V = \begin{vmatrix} 1 & \frac{L}{R} \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$$

### APENDICE III

#### MATRICES DE TRANSFERENCIA DE UN SECTOR MAGNETICO CON CAMPO UNIFORME

Consideremos el movimiento de una partícula de masa "m" y carga "q" que pasa através de un campo magnético de intensidad constante  $B_0$  con componente solo en la dirección Z y cuyas fronteras de entrada y de salida son perpendiculares a la dirección de la trayectoria central de radio R del haz de partículas (ver fig).

Utilizando un sistema de coordenadas cilíndricas (r,  $\theta$ , z) el movimiento de esta partícula está gobernada por la componente  $B_z$  del campo y podemos escribir la segunda Ley de Newton.

$$m\vec{a} = q \vec{v} \times \vec{B} = q \vec{v} \times \hat{z} B_z$$

sea

$$\vec{a} = (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\hat{\lambda}_r + (2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta})\hat{\lambda}_\theta$$

substituyendo

$$m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\hat{\lambda}_r + m(2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta})\hat{\lambda}_\theta = q(\dot{r}\hat{\lambda}_\theta + r\dot{\theta}\hat{\lambda}_r) \times \hat{z} B_z$$

igualando los términos de los vectores unitarios

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = -qr\dot{r}B_z$$

$$\frac{d}{dt}(mr) = mr\dot{\theta}^2 + qr\dot{\theta}B_z$$

como la masa de la partícula no cambia al pasar por el campo magnético estacionario podemos reescribir las ecuaciones anteriores como:

$$\dot{r} = r\dot{\theta}^2 + \omega\dot{\theta}r$$

$$\frac{d}{dt}(r^2\dot{\theta}) = -\omega r^2$$

Donde  $\omega = q B_0 / m$  es la frecuencia de oscilación de la partícula de la órbita central. Para  $\dot{\theta} = -\omega$  y  $r = R$  podemos integrar directamente y obtener:

$$\theta = -\omega \left[ 1 - \left( \frac{Y}{R} \right) \right]$$

utilizando esta expresión y términos de primer orden, ya que las cantidades  $Y/R$  son pequeñas tenemos

$$y'' + \omega^2 y = 0$$

cuya solución nos describe el movimiento en el plano horizontal.

Por otro lado el movimiento vertical de las partículas está gobernado por la componente  $z$  del campo donde

$$B_{(z,0)} = B_0 \left( \frac{z}{R} \right)^n$$

pero en este caso el campo es homogéneo  $n=0$  y la ecuación que describe el movimiento vertical es:

$$\frac{d}{dt}(m\dot{z}) = -q r \dot{\theta} B_r$$

Podemos calcular  $B_r$  en función de  $B_z$  ya que el campo es conservativo y por lo tanto su rotacional es cero  $\nabla \times B = 0$

$$\frac{\delta B_r}{\delta z} = \frac{\delta B_z}{\delta r}$$

además por simetría con respecto al plano medio el campo radial  $B_r = 0$  para  $z=0$  y fuera del plano medio podemos obtener  $B_r$  integrando  $B_z$  sobre  $z$  de tal manera que

$$B_r = -\frac{B_0 z}{R}$$

Substituyendo el valor de  $B_r$  y  $r = R$ ,  $\dot{z} = \omega$  tenemos

$$z + \omega^2 n z = 0$$

que es la ecuación del movimiento vertical.

Introduciendo una nueva variable "X" o sea la distancia sobre el rayo central desde la frontera del imán podemos decir que  $X = R\omega t$  y substituyendo tenemos

$$\begin{aligned} y + k_H^2 y &= 0 \\ z + k_V^2 z &= 0 \end{aligned}$$

donde  $k_H^2 = (1-n)/R^2$  y  $k_V^2 = n/R^2$ .

Las solución de la primera de las ecuaciones anteriores es:

$$y = y_A \sin(k_H X + \gamma_H)$$

y su derivada, o sea la pendiente con respecto al rayo central será:

$$\dot{y} = y_A k_H \cos(k_H X + \gamma_H)$$

Para  $X=0$  o sea a la entrada del imán

$$y_1 = y(0) = y_A \sin y_H$$

$$y_1' = y'(0) = y_A k_H \cos y_H$$

Para  $X = \phi R$  o sea a la salida del imán

$$y_2 = y_A \sin y_H \cos k_H \phi R + y_A \cos y_H \sin k_H \phi R$$

$$y_2' = y_1' \cos k_H \phi R + \frac{y_1}{k_H} \sin k_H \phi R$$

$$y_2' = -y_1 k_H \sin k_H \phi R + y_1' \sin k_H \phi R$$

Estas dos ecuaciones dan las relaciones a primer orden de la posición y la pendiente del haz de partículas a la salida del imán de tal manera que podemos poner estas ecuaciones en forma matricial de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \frac{y_2}{R} \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \epsilon_H \phi & \epsilon_H^{-1} \sin \epsilon_H \phi \\ -\epsilon_H \sin \epsilon_H \phi & \cos \epsilon_H \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{y_1}{R} \\ y_1' \end{pmatrix}$$

Y para el movimiento vertical haciendo las mismas consideraciones tenemos

$$\begin{pmatrix} \frac{z_2}{R} \\ z_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \epsilon_v \phi & \epsilon_v^{-1} \sin \epsilon_v \phi \\ -\epsilon_v \sin \epsilon_v \phi & \cos \epsilon_v \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{z_1}{R} \\ z_1' \end{pmatrix}$$

donde  $\epsilon_v = n^{1/2}$  y  $\epsilon_H = (1-n)^{1/2}$

- R. Barber , R.l. Bishop, Rev. Sci. Instr. 42 (1971) 1.
- B. Berkes, Nucl. Instr. & Meth. 14 (1962) 321.
- C. Braams, Nucl. Instr. & Meth. 26 (1964) 83.
- K.L. Brown , Rev. Sci. Instr. 35,4 (1964) 481.
- K.L. Brown , Rev. Sci. Instr. 36,3 (1965) 271.
- H. Enge. Nucl. Instr. & Meth. 35 (1965) 278.
- H. Enge. Focusing of charged particles 2,ed., A. Septier (Academic Press, New York ,1967) p.203
- M. Henni, T. Karasawa, Nucl. Instr. & Meth. 6 (1966) 105.
- R. Herzog, Z. Phys. 89 (1934) 447.
- R. Herzog, Acta Phys Aust., 4 (1950) 431.
- R. Herzog, Z. Naturforschg. 8a(1953) 191.
- R. Herzog, Z. Naturforschg. 10a(1955) 887.
- H. Hintenberg , L.A. Koning, Z. Naturforschg. 12a (1957) 541
- S. Kowalski, H.A. Curge, Tesis doctoral MIT ,Julio 1987
- H. Matsuda, H. Woolnik, Nucl. Instr. & Meth. 77 (1970) 40 y 283.
- H. Matsuda, Nucl. Instr. & Meth. 91 (1971) 637.
- H. Matsuda, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 14 (1974) 219
- H. Matsuda, T. Matsuo, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 26 (1978) 77.
- H. Matsuda, Nucl. Instr. & Meth. 187 (1981) 127.
- H. Matsuda, Nucl. Instr. & Meth. 187 (1981) 127.
- H. Matsuda, Japan J. Appl. Phys., (1984) 854.
- H. Matsuda, Mass Spectroscopy (Japan), 29 (1985) 161.
- H. Matsuda, Nucl. Instr. & Meth. 258 (1987) 310.
- H. Matsuda, T. Matsuo, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 1.

- H. Matsuda, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 11.
- H. Matsuda, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 5111.
- H. Matsuda, H. Wollnik, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 19.
- T. Matsuo, H. Matsuda, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 27.
- T. Matsuo, H. Matsuda, Mass Spectros. 24 (1986) 19.
- T. Matsuo, Mass Spectros. 32 (1986) 319.
- R.S. Prahallada, J. Appl. Phys. (Brit), 2, (1968), 99 y 1801.
- S. Penner, Rev. Sci. Instr. 32 (1963) 150.
- Rokowski
- T. Sakuri, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 69.
- Y. Sano, H. Matsuda, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 91 (1989) 41.
- J. Stoffel, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 114 (1992) 41.
- S. Taya, I. Kanomata, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 26, (1978) 77.
- S. Taya, Nucl. Instr. & Meth. 152 (1978) 399.
- H. Wollnik, H. Ewald, Nucl. Instr. & Meth. 36 (1965) 93.
- H. Wollnik. Nucl. Instr. & Meth. 52 (1967) 250.
- H. Wollnik, T. Matsuo, H. Matsuda, Nucl. Instr. & Meth. 102 (1972) 13.
- H. Wollnik. Mass Spectrographs and Isotope separators. Applied charged particle optics, A. Septier. (Academic Press, New York, 1987) 133.
- Z. Wu, H. Matsuda, Mass Spectroscopy (Japan) 30, (1986) 129.
- H. Zhao, H. Matsuda, Mass Spectroscopy (Japan) 19, (1982) 31.