

УДК 537.534.3

О моделировании процесса формирования ионного пучка в газодинамических источниках ионов. Бородин А.Г., Щербаков А.П. // Научное приборостроение. Формирование пучков заряженных частиц. Л.: Наука, 1990. - С. 10-14.

Разработана методика "постоянного сечения" при розыгрыше времени свободного пробега, позволяющая усовершенствовать метод статистического моделирования транспортировки ионных пучков в газодинамических источниках ионов. Предложенная модель фрагментации позволяет учесть влияние физико-химических процессов при транспортировке на формирование фазовых характеристик пучка. Лит. - 13 назв., ил. - 2.

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ИОННОГО ПУЧКА
В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКАХ ИОНОВ

В связи с широким применением в масс-спектрометрии газодинамических источников - источников с ионизацией при высоком давлении [1-3], актуальной становится задача построения адекватных моделей движения и превращения ионов в электрогазодинамических (ЭГД) полях и разработка эффективных методов расчета транспортирующих систем этих источников.

Предложенный в работе [4] алгоритм моделирования процесса движения иона в ЭГД-поле основан на методе статистического моделирования и включает в себя следующие этапы: розыгрыш времени или длины свободного пробега; расчет траектории движения иона в электрическом поле за время свободного пробега; расчет параметров потока в точке столкновения и розыгрыш вектора скорости молекулы спутного газа; моделирование столкновения иона с молекулой спутного газа.

Таким образом, взаимодействие ионов со средой моделировалось как чередование парных упругих столкновений с молекулами спутного газа и движения во внешнем электрическом поле в течение времени τ - времени свободного пробега. В качестве функции распределения случайной величины τ принято следующее выражение:

$$F(\tau) = 1 - \exp \left\{ - \int_0^{\tau} \nu(t) dt \right\},$$

где $\nu = \nu n \sigma$ - частота столкновений; $\nu(t)$ - скорость относительного движения; σ - сечение столкновения, n - число молекул спутного газа в единице объема.

В общем случае для вычисления реализации случайной величины τ по известной реализации R , равномерно распределенной на промежутке $(0,1)$ случайной величины, необходимо решать уравнение

$$R = \exp \left\{ - \int_0^{\tau} \nu(t) dt \right\}, \quad (1)$$

что приводит к большим затратам машинного времени.

В работе [4] рассмотрены физически важные модели, для которых уравнение (1) может быть разрешено в явном виде относительно τ . При этом модель Максвелла (поляризационное взаимодействие), где $\nu = \text{const}$, и, модель для ионов с массой, существенно большей массы молекулы спутного газа, где $\nu = \text{const}$, приводят к следующему выражению для времени свободного пробега:

$$\tau = - \frac{1}{\nu} \ln R. \quad (2)$$

Наконец, в случае $\sigma = \text{const}$ получаем

$$\lambda = - \bar{\lambda} \ln R, \quad (3)$$

где λ - реализация случайной величины - длины свободного пробега; $\bar{\lambda} = 1/\nu$ - средняя длина свободного пробега.

Очевидно, что эти допущения не исчерпывают всей совокупности физических моделей для ион-молекулярного взаимодействия. Кроме того, подобная методика моделирования времени свободного пробега применима лишь в случае, когда средняя длина пробега $\bar{\lambda}$ меньше характерной длины ℓ_r изменения газодинамических параметров. В области отрыва ионного пучка от газа, когда $\bar{\lambda} > \ell_r$ и концентрация молекул газа быстро уменьшается, она дает заниженные оценки среднего времени свободного пробега.

Важная роль области последних столкновений в формировании ионного пучка продемонстрирована расчетными исследованиями системы ЭРИАД в работе [5]. В зависимости от величины потока газа через скиммер реализуются два режима формирования ионного пучка (далее p_{∞} – фоновое давление в промежуточной области дифференциальной откачки). При малом потоке газа ($p_{\infty} \leq 0,7$ кПа) характеристики пучка в фазовом пространстве определяются в основном термализацией в области отрыва пучка, ускоренного перед скиммером. При высоком потоке газа ($p_{\infty} \geq 2$ кПа) фазовые характеристики пучка определяются процессами последних столкновений в области отрыва ионного пучка от газовой струи.

В настоящей статье для более полного и адекватного моделирования процессов движения ионов в области последних столкновений использован метод, сочетающий в себе метод "постоянного сечения", "максимального сечения" и "null-collision technique" [6–8]. Этот метод основан на существовании значения ν_{max} максимально возможной частоты столкновения при каждом розыгрыше времени свободного пробега на моделируемом отрезке траектории. Здесь под актом "столкновения" подразумевается любой акт, прерывающий свободное движение иона в электрическом поле. В частности, в случае изэнтропически расширяющейся струи ν является монотонно убывающей функцией расстояния от входа в скиммер, поэтому за ν_{max} принимается значение частоты столкновений в начальной точке траектории.

Используя значение $\nu = \nu_{max}$ в функции распределения, генерируем время свободного пробега τ по формуле (3) и вычисляем значение $\nu = \nu(\tau)$ в конце траектории. Введем понятие фиктивного столкновения, при котором ни величина, ни направление скорости иона не меняются. Его частота $\nu_f = \nu_{max} - \nu(\tau)$, а вероятность равна ν_f / ν_{max} . С учетом этой вероятности в конце рассматриваемого отрезка траектории определяется, является ли столкновение истинным или фиктивным. В такую схему легко вписывается задача вычисления свободных пробегов с несколькими типами реакций ($\nu = \sum_i \nu_i$), при этом вероятности соответствующих реакций равны ν_i / ν_{max} , а тип столкновения разыгрывается с учетом всех возможностей. В работе [6] показано, что сумма таких пробегов до первого нефиктивного столкновения подчиняется тому же закону распределения, что и истинный случайный пробег.

Для оценки эффективности предлагаемой методики обратимся к анализу фазовых характеристик пучка на выходе системы транспортировки источника ЭРИАД. На рис.1 представлены зависимости квадрата нормализованного эмиттанта ε_n^2 пучка от расстояния от отверстия скиммера при высоком фоновом давлении $p_{\infty} = 2$ кПа (I – расчет времени свободного пробега по формуле (2), II – расчет по методу "максимального сечения"). Выход на постоянное значение в соответствии с теоремой Лиувилля означает практически полное отсутствие рассеяния ионов в газовом потоке. Очевиден эффект приближения зоны "последнего столкновения" ко входу в скиммер и уменьшение фазового объема пучка ионов.

На рис.2 представлены фазовые контуры и гистограммы координатно-угловых распределений ионов пучка на расстоянии 5 мм от отверстия скиммера также для двух соответствующих методик расчета времени свободного пробега. Очевидно, что на рис.2,б фазовый контур разворачивается, приближаясь к оси R , что показывает отсутствие столкновений с молекулами газа и преобладающим действием электрического поля на пучок ионов. На рис.2,а ионный пучок вмерзает в газовую струю и расширяется вместе с ней.

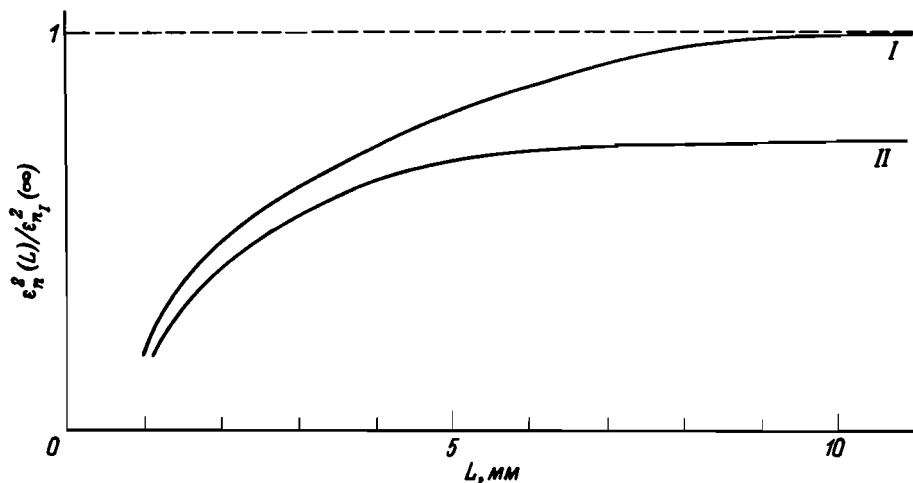


Рис.1. Зависимости квадрата нормализованного эмиттansa пучка от расстояния

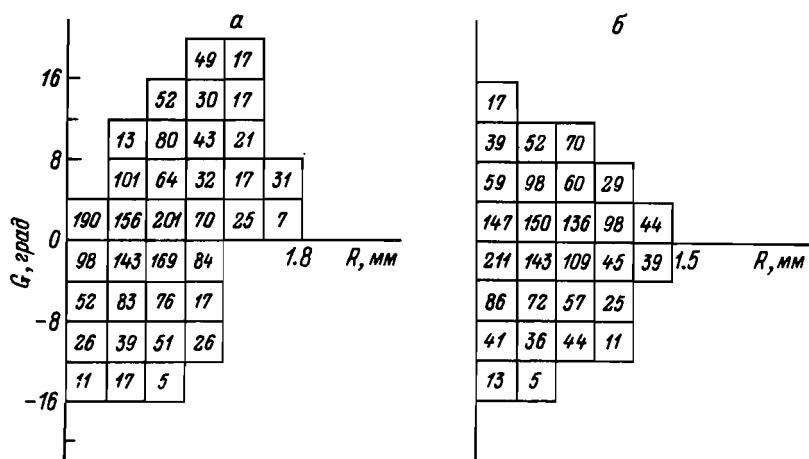


Рис.2. Фазовые контуры и гистограммы координатно-угловых распределений ионов пучка на расстоянии 5 мм от скиммера:
а - расчет времени свободного пробега по формуле (2);
б - расчет по методу "максимального сечения"

Учитывая возможность различных актов эволюции ионов в ЭГД-полях в такой постановке введено рассмотрение процесса фрагментации ионов. При этом ион массы M распадается на ион с массой m и нейтральную частицу с массой Δm . В системе центра масс (где покоится ион с массой M) из законов сохранения импульса и энергии для энергии дочернего иона E_d получаем выражение

$$E_d = E \frac{M-m}{M},$$

где E - высвобождающаяся при фрагментации энергия. Для вектора скорости дочернего иона в системе центра масс $\vec{w}$ получаем

$$|\vec{w}| = \sqrt{2E \frac{M-m}{mM}}.$$

При этом розыгрыше направление вектора $\vec{w}$ соответствует изотропному распределению.

Скорость дочернего иона в лабораторной системе координат

$$\vec{v}_d = \vec{v}_p + \vec{w},$$

где $\vec{v}_p$ - скорость материнского иона.

Время жизни материнского иона до момента распада t рассчитывается по случайной реализации R , равномерно распределенной на $(0,1)$ случайной величины:

$$t = -\tau_0 \ln R = -\frac{1}{\nu_0} \ln R,$$

где τ_0 - среднее время жизни материнского иона; ν_0 - средняя частота актов распада.

Включение учета процессов фрагментации в схему расчета транспортировки ионного пучка с рассеянием на молекулах спутного газа очевидно. В этом случае

$\nu_{\max} = \nu_c + \nu_{sc} + \nu_f$, где в качестве максимально возможной частоты акта прерывания свободного движения ионов в электрическом поле берется сумма соответствующих частот для распада, упругого столкновения и фиктивного столкновения.

Высокая эффективность аналогичного метода при розыгрыше времени свободного пробега, "*null-collision technique*", для моделирования неизотропного рассеяния и более сложных законов ион-молекулярного взаимодействия подтверждается в работе [9]. Возможность учета нескольких типов взаимодействия при транспортировке заряженных пучков в дрейфовых трубах содержит работа [10]. Методика введения фиктивных актов столкновения в применении к радиально расходящимся пучкам была усовершенствована авторами работы [11]. Наконец, в работе [8] содержится корректный анализ преимущества рассматриваемого метода при прямом моделировании методом Монте-Карло задач динамики разреженного газа по сравнению с процедурой счетчика времени - "*time-counter technique*" и с методом расчета частоты столкновений согласно "*collision-frequency*" [12, 13].

Проведенный анализ показывает, что методика "постоянного сечения" при розыгрыше времени свободного пробега позволяет более адекватно моделировать транспортировку ионных пучков в газодинамических источниках ионов. Сюда относится корректная процедура учета последних столкновений в области разреженного потока спутного газа, моделирование более сложных видов взаимодействия с молекулами спутного газа, учет одновременно нескольких типов взаимодействия с процессами распада. Предложенная модель фрагментации позволяет учесть влияние физико-химических процессов в транспортировке ионных пучков на формирование их фазовых характеристик на выходе из источника.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров М.Л. и др.//ДАН СССР, 1984. - Т.277, № 2. - С. 379-383.
2. Kambara H.//Anal.Chem. - 1982. - V.54, N 1. - P. 143-146.
3. Date A.R., Gray A.L.//Spectrochimica Acta. - 1983. - V.38 B, N 1/2. - P. 29-37.
4. Щербаков А.П./Численное моделирование транспортировки ионных пучков в электрогазодинамических полях//Научное приборостроение: Сб.научн.тр. - Л.: Наука, 1988. - С. 46-55.
5. Бородинов А.Г. и др. Транспортировка ионных пучков в газодинамических источниках ионов/Препринт ИАП НТО АН СССР, Ленинград. - 1989. - 36 с.
6. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. - М.: Наука, 1973.
7. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. - М.: Наука, 1982.
8. Koura K.//Phys. Fluids. - 1986. - V.29, N 11. - P. 3509 - 3511.
9. Lin S.L., Bardsley T.N.//T.Chem.Phys. - 1977. - V.66, N 2. - P. 435-445.
10. Koura K.//T.Chem.Phys. - 1987. - V.87, N 11. - P. 6481.
11. Nanbu K.et.al//Phys.Fluids. - 1988. - V.31, N 7. - P. 2047-2048.
12. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. - М.: Мир, 1981.
13. Koura K.//Phys.Fluids. - 1970. - V.13. - P. 1457.