

Использование численного моделирования для расчета динамики ионного пучка в лазерном масс - спектрометре ЭМАЛ – 2

П.О. Медакин, Р.Н. Никулин, О.А. Авдеюк, И.В. Поляков, Н.В. Грецова

Волгоградский государственный технический университет

Аннотация: В статье исследуется динамика ионного пучка в лазерные массы - спектрометре ЭМАЛ – 2. Реализована численная модель, которая построена на основе методе «крупных - частиц», учитывающая влияние поля пространственного заряда и взаимодействие ионов с полем электродинамической системы. Программный комплекс, который реализует математическую модель движения ионного пучка, состоит из двух частей. Первая часть - программа, написанная на языке C++, в которой задаются начальные условия, рассчитываются кулоновские взаимодействия между «крупными частицами» с помощью метода «частица-частица», интегрируется система дифференциальных уравнений с помощью метода Рунге-Кутты четвертого порядка, а также запись и обработка результатов. Вторая часть — скрипт для пакета FreeFem++, в котором реализовано решение дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных элементов. Проведена серия численных экспериментов.

Ключевые слова: метод «крупных частиц», лазерный масс – спектрометр, метод «частица – частица», электродинамическая система, метод Рунге-Кутты, лазерная плазма, магнитный анализатор, ионный пучок, фокусирующая система, триангуляция.

Введение

Несмотря на успехи в разработке современных масс-спектрометров проектирование и модернизация статических масс-спектрометров является актуальной задачей. Для разработки и оптимизации параметров, оказывающих влияние на работу данных приборов, активно используется численное моделирование [1-3]. Его использование позволило рассмотреть проявления кулоновского взаимодействия в пакетах ионов, движущихся в изохронных электростатических системах [4], описать физику разлета многокомпонентной лазерной плазмы [5] и другое.

В статье изучается движение ионного пучка в статическом масс-спектрометре ЭМАЛ – 2, в основе работы которого заложена классическая схема Маттауха – Герцога (рис. 1).

Принцип функционирования прибора заключается в следующем: излучение YAG - лазера 1 фокусируется на объект 2, что создает образование лазерной

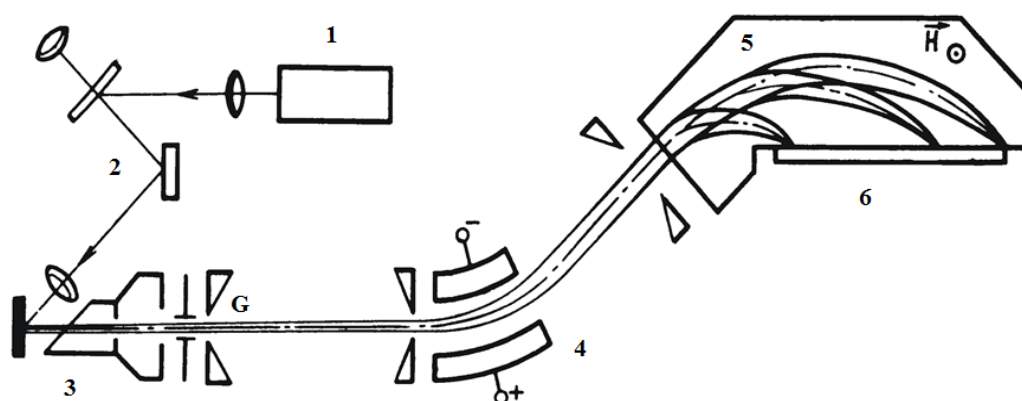


Рис. 1. – Схема лазерного масс - спектрометра с двойной фокусировкой ЭМАЛ – 2

плазмы, которая в дальнейшем поступает в фокусирующую систему 3, затем происходит фокусировка и ускорение ионов до энергии 18,5 эВ. Далее ионный пучок попадает в электростатический анализатор 4, затем - в магнитный анализатор 5, фокусируясь на фотопластинке 6. В целях снижения краевых эффектов, на торцах электростатического анализатора предусмотрены заземленные экраны [6,7].

Большая часть ионов, образующихся при разлете лазерной плазмы в формирующей системе, оседает на стенках и диафрагмах, и лишь небольшая часть, вылетающая под углом менее 1° , попадает в пушку Пирса, которая фокусирует пучок. Так как система обладает симметрией, для уменьшения вычислительной сложности, воспользуемся методом трубок тока, в соответствии с которым можно рассчитывать движение только тех частиц, которые пройдут через все диафрагмы. А также сделаем допущение, что в образовавшейся лазерной плазме не присутствуют электроны.

Математическая модель

Уравнение движения имеет следующий вид:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2 ,$$

где F_1 - силы взаимодействия между ионами, F_2 - силы взаимодействия заряженных частиц с внешними электрическим и магнитным полем.

Известно, что определение динамики ионного пучка, образовавшегося в результате разлета лазерной плазмы, и состоящего из большого количества взаимодействующих друг с другом частиц, относится к сложным вычислительным задачам. Поэтому для экономии ресурсов ЭВМ реальную систему заменяют моделью с меньшим количеством частиц, но обладающей подобными свойствами. Для решения этой задачи можно применить метод «крупных частиц», а для определения распределения потенциала в электростатическом анализаторе и фокусирующей системе - уравнение Лапласа:

$$\Delta\varphi = 0$$

Численная реализация и результаты моделирования

Программный комплекс, который реализует математическую модель движения ионного пучка (рис. 2), состоит из двух частей. Первая часть - программа, написанная на языке C++. В ней задаются начальные условия, рассчитывается кулоновское взаимодействие между крупными частицами с помощью метода «частица-частица» [8], интегрируется система дифференциальных уравнений с помощью метода Рунге-Кутты [9] четвертого порядка с шагом по времени $1 \cdot 10^{-12}$ с, а также запись и обработка результатов [10]. Этот метод имеет хорошую сходимость, сравнительно невысокую вычислительную сложность и приемлемую точность. Для организации многопоточности вычислений используется технология *OpenMP*. Генерация псевдослучайных чисел осуществляется с помощью алгоритма *MT19937*.

Вторая часть — скрипт для пакета *FreeFem++*, в котором реализовано решение дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных элементов. Удобный интерфейс позволяет формировать границы и триангуляцию двух- и трехмерных моделей, а также сохранять и выводить полученные данные для дальнейшего использования.

Рассмотрим результаты расчета распределения потенциала в фокусирующей системе, которая состоит из эквипотенциального экспандера и пушки Пирса. С учетом цилиндрической симметрии, уравнение Лапласа в слабой форме имеет вид: $\int_{\Omega} y \cdot (\nabla \phi \nabla v) dx dy = 0$, где Ω — область интегрирования, ϕ — потенциал, v — тестовая функция.

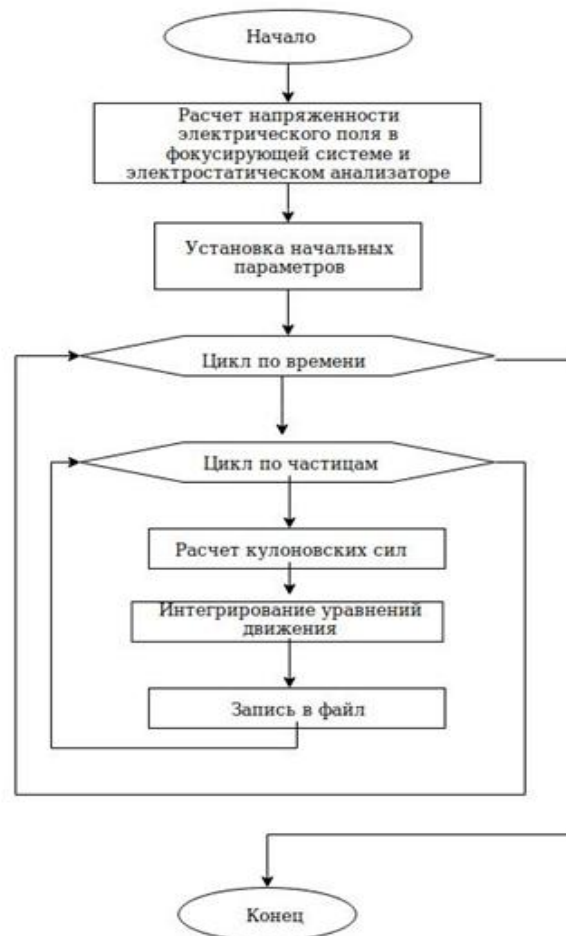


Рис. 2 – Блок схема численной реализации математической модели движения ионного пучка

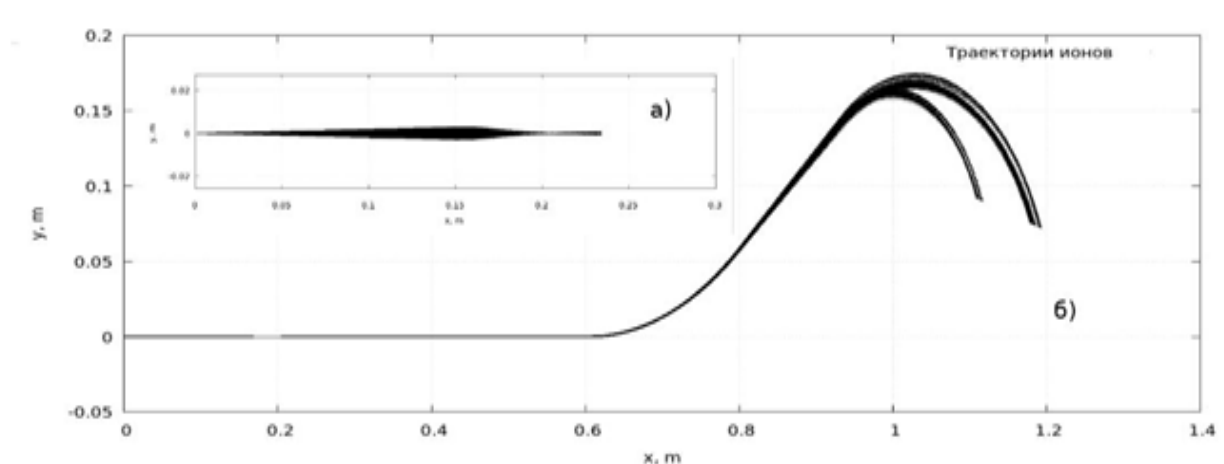


Рис. 6. – Траектории движения одно- и двухзарядных изотопов меди и цинка а) в фокусирующей системе б) от источника ионов до фотопластины

На рис. 6 представлены траектории движения изотопов цинка и меди в лазерном масс-спектрометре ЭМАЛ — 2, а также возникающие aberrации и фокусировка ионного потока.

Заключение

Таким образом, проведенная серия численных экспериментов показывает, что описанный программный комплекс позволяет численно рассчитывать распределение электрического поля в узлах масс-спектрометра и динамику ионного пучка в нем.

Полученные результаты могут быть использованы в дальнейших исследованиях по модернизации масс-спектрометров, разработке ионной оптики и новых типов масс-анализаторов, а также могут быть полезны исследователям, которые при изучении поведения пучков заряженных частиц применяют численные методы, использованные в данной работе.

Развитие модели, путем учета временной развертки, позволит проводить более детальные исследования наиболее перспективного в

настоящее время типа масс - анализаторов — многоотражательных анализаторов, составленных из ионных зеркал (рефлекторов).

Литература

1. Позднеев А.В. Численное моделирование эволюции ионных облаков в масс-спектрометре методом частиц в ячейке // Вестник Московского университета.2008. №3.С. 11-19.
2. Юдин И.П., Перепелкин Е. Е. Использование параллельных вычислений на графических процессорах при исследовании пропускной способности канала транспортировки пучка ионов с учетом пространственного заряда // Вестник Санкт-Петербургского университета. 2012. Сер.10, вып. 3. С.103-112.
3. Позднеев А.В. Система моделирования масс-спектрометра на основе параллельного кода частиц в ячейке // Программные продукты и системы.2009. №2.С. 173-175.
4. Козлов Б.Н., Кириллов С.Н., Монахов А.М. Простая модель кулоновского взаимодействия во времяпролетные массы – спектрометрах и электростатических ловушках. Эффекты второго порядка. Автофокусировка и слияние пиков // Масс-Спектрометрия.2012. №4.С. 234-244.
5. Сысоев А.А. Разлет многокомпонентного лазерного плазменного сгустка // Масс-Спектрометрия.2010. №4. С. 291-298.
6. Ahearn A. J. Trace analysis by mass spectrometry. New York and London: Academic press, 1972. 453p.
7. Быковский Ю.А., Неволин В.Н. Лазерная масс – спектрометрия. Москва: Энергоатомиздат, 1985. 128с.
8. Hockney R., Eastwood J. Numerical modeling by the particle method. Computer simulation using particles. McGraw Hill,1981. 640 p.



9. Иващенко С.Н. Моделирование энергетического спектра в полупроводниковых наноструктурах // Инженерный вестник Дона, 2008, №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2008/66.

10. Грецов М.В., Грецова Н.В., Попов П.Р., Соловьева О.Ю., Асанова Н.В., Кожанова Т.Е. Численное моделирование влияния переменного электрического поля на транспорт ионов через мембрану нейрона // Инженерный вестник Дона, 2017, №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2017/4203.

References

1. Pozdneev A.V. Bulletin of the Moscow University. 2008. № 3. pp. 11-19.
2. Yudin I. P., Perepelkin E. E. Bulletin of Saint Petersburg University. 2012. Ser. 10. № 3. pp. 103-112.
3. Pozdneev A.V. Software products and systems. 2009. № 2. pp. 173-175.
4. Kozlov B.N., Kirillov S.N., Monahov A.M. Mass-Spektrometriya. 2012. №4. pp. 234-244.
5. Sysoev A.A. Mass-Spektrometriya. 2010. №4. pp. 291-298.
6. Ahearn A. J. Trace analysis by mass spectrometry. New York and London: Academic press, 1972. 453p.
7. Bykovskij Yu.A., Nevolin V.N. Lazernaya mass – spektrometriya [Laser mass spectrometry]. Moskva: Energoatooizdat, 1985. 128p.
8. Hockney R., Eastwood J. Numerical modeling by the particle method. Computer simulation using particles. McGraw Hill, 1981. 640 p.
9. Ivashchenko S.N. Inzhenernyj vestnik Dona, 2008, №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2008/66.
10. Grecov M.V., Grecova N.V., Popov P.R., Solov'eva O.YU., Asanova N.V., Kozhanova T.E. Inzhenernyj vestnik Dona, 2017, №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2017/4203.