

Использование численных методов для исследования источников ионов с поверхностной ионизацией.
Галль Л. Н., Огородников А. К., Пятакин А. Н., Соколов Б. Н., Тихонов В. М. —
В кн.: Научное приборостроение. Л., «Наука», 1983, с. 31—36.

В статье изложены результаты исследования источника ионов с поверхностной ионизацией с использованием разработанного пакета прикладных программ. Описан разработанный метод расчета эффективности источников ионов с поверхностной ионизацией с применением концепции фазового пространства и теории транспортировки пучков. Разработана методика определения численного критерия, позволяющая сравнить между собой источники ионов для различной конфигурации электродов в области ионизации. Построены двумерные гистограммы интенсивности и проведено сравнение двух- и трехленточных блоков ионизации источника. Приведены примеры графической иллюстрации основных возможностей пакета прикладных программ. Лит. — 4 назв., ил. — 4.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ИСТОЧНИКОВ ИОНОВ С ПОВЕРХНОСТНОЙ ИОНИЗАЦИЕЙ

При изотопном анализе микропримесей, например в ядерной физике, геологии или космохимии, особые требования среди всех параметров предъявляются к чувствительности масс-спектрометра: она должна быть максимальной. Чувствительность масс-спектрометра для изотопного анализа твердых веществ характеризуется коэффициентом использования пробы (КИП), определяемым как произведение частных коэффициентов использования пробы на различных операциях по ее вводу и ионизации, отбору, фокусировке и транспортировке через анализатор образовавшихся ионов. Каждый из частных коэффициентов представляет собой положительный вклад соответствующего процесса преобразования пробы, нормированный на первоначальное для данного процесса количество атомов (ионов). В соответствии с этим определением каждый из частных коэффициентов есть безразмерное число $k_i \leq 1$.

Физические процессы преобразования пробы от ее ввода в источник ионов в виде нейтральных молекул химических соединений, содержащих исследуемый элемент, до регистрации ионного тока измеряемого изотопа на коллекторе масс-спектрометра в значительной степени взаимосвязаны, в связи с чем частные коэффициенты k_i можно рассматривать как независимые только в первом приближении. Для проведения расчетов источников ионов с достаточной точностью необходимо учитывать взаимосвязь частных коэффициентов исследования пробы.

Настоящая работа посвящена разработке метода расчета эффективности источников ионов с поверхностной ионизацией, предназначенных для изотопного анализа труднолетучих твердых веществ. Метод основан на концепции фазового пространства и теории транспортировки пучков и позволяет учитывать во взаимосвязи три частных коэффициента использования пробы k_i : коэффициент напыления пробы с ионизатора на испаритель k_1 , коэффициент сбора образовавшихся ионов k_2 и коэффициент пропускания ионно-оптической системы источника ионов k_3 . Разработан также метод расчета численного критерия, позволяющего сравнивать между собой источники ионов с поверхностной ионизацией с различной конфигурацией электродов в области ионизации и учитывающего коэффициент пропускания (транспортировки) ионно-оптической системы масс-анализатора при использовании источника в масс-спектрометре.

Метод расчета. Расчет характеристик ионно-оптической системы источника ионов с поверхностной ионизацией проводился с использованием гибридной вычислительной системы (ГВС), включающей электроинтегратор ЭС-1, ЭВМ ЕС1022 и графопостроитель ЕС7054 [1, 2]. ГВС снабжена пакетом прикладных программ, позволяющим определять распределение потенциала в исследуемой ионно-оптической системе источника ионов путем ее моделирования на сетке сопротивлений электроинтегратора ЭС-1, рассчитывать на ЭВМ ЕС1022 и строить на графопостроителе ЕС7054 эквипотенциальные линии электростатического поля и траектории ионов с любыми начальными условиями, определять кроссовер пучка ионов, рассчитывать и выводить на АЦПУ аксептанс источника и эмиттанс формируемого пучка для любых плоскостей $x = \text{const}$, а также рассчитывать двумерные гистограммы интенсивности в этих эмиттансах.

Для проведения количественного сравнения ионно-оптических систем источников ионов с учетом их согласования с масс-спектрометром была разработана методика построения объективного числового критерия интенсивности, учитывающего специфические особенности многоленточных источников ионов с поверхностной ионизацией. Критерий представляет собой число, равное максимально возможной суммарной интенсивности внутри контура на эмиттансе, ограничивающего его транспортируемую через масс-анализатор часть. При этом ожидаемое качество источника определяется просто величиной полученного числа [3].

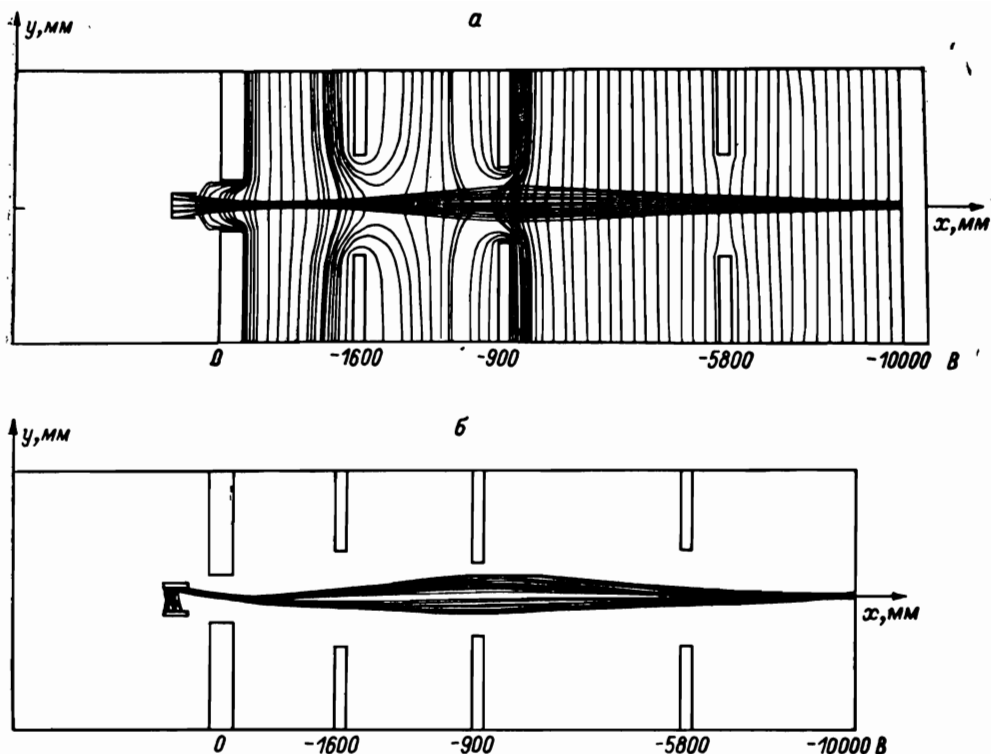


Рис. 1. Топография электрического поля и траектория ионов в источнике ионов.

a — трехленточный вариант; *b* — двухленточный вариант. Цифры — значения потенциала на электродах, в вольтах.

Методика определения критерия для источников ионов с поверхностной ионизацией. Для заданной геометрии области ионизации (рис. 1) указанным выше способом определяется топография электрического поля, формируемого ионно-оптической системой источника ионов. В фазовой плоскости $(y_0\varphi_0)$, проходящей через ионизатор, строится двумерная сетка с равномерным шагом по длине ионизатора Δy_0 и по углу вылета ионов $\Delta\varphi_0$. Каждая клетка этой сетки в дальнейшем будет называться «фазовой частицей». На ЭВМ рассчитываются траектории фазовых частиц, вылетающих из центров соответствующих клеток с начальной энергией $\epsilon_0 = \text{const}$, соответствующей, например, максимуму распределения Максвелла для заданной температуры ионизатора, и определяется положение кроссовера пучка ионов. Изменением потенциалов на электродах ионно-оптической системы добиваются совмещения плоскости кроссовера с плоскостью выходной щели источника ионов, т. е. фокусировки пучка на выходную щель источника. Площадь внутри контура, очерчивающего на сетке $y_0\varphi_0$ область, отвечающую фазовым частицам, вошедшим в кроссовер пучка, представляет собой аксептанс источника ионов.

Для той же двумерной сетки $y_0\varphi_0$ в плоскости ионизатора рассчитывается двумерная таблица коэффициентов, определяющих «вес» рассчитываемых фазовых частиц. Весовые коэффициенты рассчитываются с учетом условий напыления анализируемой пробы с испарителя на ионизатор и угловых распределений образовавшихся ионов, характерных для поверхностной ионизации.

Для плоскости выходной щели $x=x_n$, являющейся одновременно и плоскостью кроссовера в фазовом пространстве $y_n\varphi_n$, строится двумерная сетка с размерностью ячейки $\Delta y_n \Delta\varphi_n$ и производится подсчет числа фазовых частиц, пришедших в каждую ячейку сетки. Область таблицы, занятая фазовыми частицами, представляет собой эмиттанс сформированного источником пучка ионов; очевидно, что площадь эмиттанса определяется числом занятых ячеек: $S_n = n \Delta y_n \Delta\varphi_n$. Полученная двумерная гистограмма характеризует качество фоку-

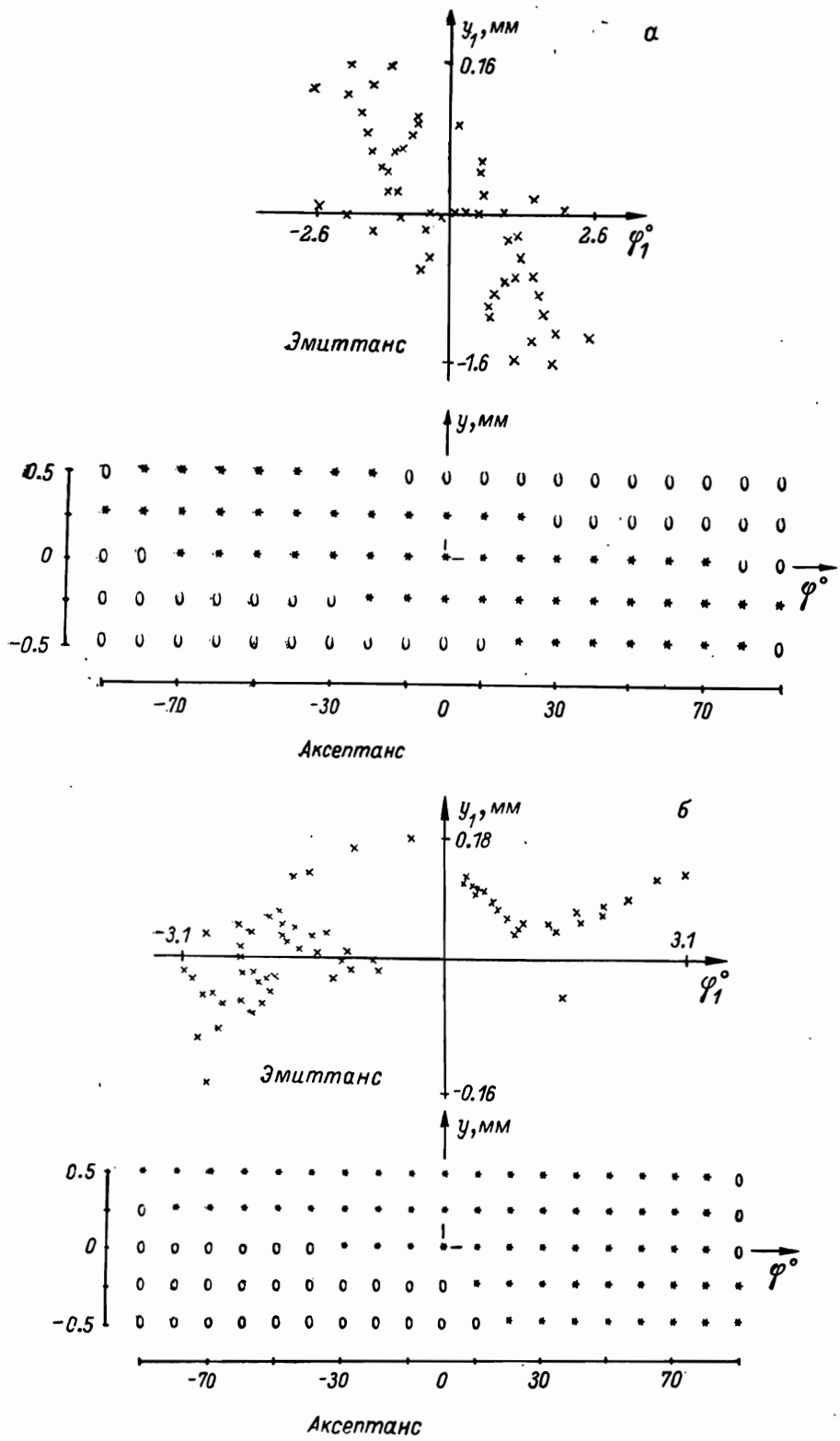


Рис. 2. Эмиттансы и акцептансы на выходе источника ионов.

а — трехленточный вариант; б — двухленточный вариант; звездочки и нули — частицы, прошедшие и не прошедшие в выходную щель соответственно; y — координаты точек вылета ионов с ионизатора; φ — их углы вылета; y_1 — координаты иона в плоскости выходной щели; φ_1 — угол наклона вектора скорости иона к оси источника.

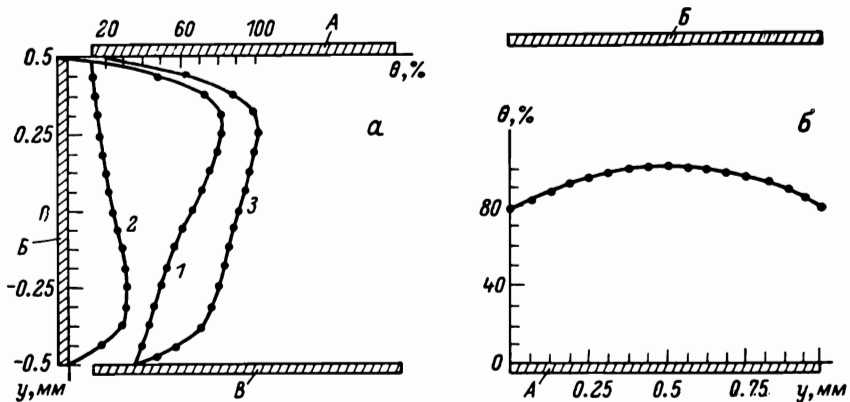


Рис. 3. Распределение плотности напыления нейтралей на ионизатор.

α — трехленточный вариант; β — двухленточный вариант; θ — относительное количество напыленных нейтралей; y — координаты точек вылета ионов; А — испаритель с нанесенной пробой; В — ионизатор; В — испаритель без пробы; 1 — прямое напыление с испарителя А; 2 — напыление с испарителя В; 3 — суммарное напыление с обоих испарителей.

сировки пучка с заданной начальной энергией ϵ_0 ионно-оптической системы источника ионов.

В соответствии с таблицей весовых коэффициентов каждой фазовой частице, вошедшей в эмиттанс сформированного пучка, приписывается определенный «вес» и строится двумерная фазовая гистограмма интенсивности пучка. По площади эта гистограмма равна рассмотренной выше гистограмме, однако распределение интенсивности в ней характеризует не только качество фокусировки пучка, но и особенности напыления и ионизации пробы в системе испаритель — ионизатор.

Анализируется ионно-оптическая схема и конструкция масс-анализатора, для работы с которым предназначается источник ионов, и для выходной плоскости источника ионов определяется площадь акцептанса A_R масс-анализатора в режиме низкой, средней и высокой разрешающей способности. Таким образом, выходная плоскость источника ионов является плоскостью сшивки. Область, вырезаемая акцептансом A_R на эмиттансе S_s , определяет его транспортируемую часть.

Перебором на гистограмме интенсивности с фазовой площадью S_s всех возможных вариантов с суммированием интенсивности в пределах площади A_R , ограниченной контуром в виде параллелограмма либо другой простой фигуры, определяется максимальная величина интенсивности, которая может быть транспортирована через масс-анализатор. Эта величина и является критерием оптимальности, учитывающим взаимосвязь трех частных коэффициентов использования пробы и условия совмещения источника с масс-анализатором.

Сравнительный расчет источников ионов с поверхностной ионизацией. По предложенному методу рассчитывались и сравнивались между собой источники ионов с поверхностной ионизацией, имеющие одинаковую ионно-оптическую систему и отличающиеся числом и расположением лент в блоке испаритель — ионизатор. Один вариант соответствовал трехленточной схеме, в которой центральный ионизатор окружен двумя испарителями, расположенными симметрично и перпендикулярно плоскости ионизатора. В другом варианте одна из двух параллельных лент служила испарителем, вторая — ионизатором.

Для источников снималась также топография электрического поля вдоль всей траектории ионного пучка от области ионообразования до выходной щели (рис. 1, а). Для обоих вариантов строились траектории ионов (двухленточный режим представлен на рис. 1, б, трехленточный — на рис. 1, а).

На рис. 2 для обоих источников представлены акцептансы и эмиттансы сформированных пучков в плоскости выходной щели. Величина фазовой частицы в обоих случаях $\Delta y_0 \Delta \varphi_0 = 0.1 \cdot 5 \text{ мм} \cdot \text{град}$, начальная энергия ионов $\epsilon_0 = 0.2 \text{ эВ}$ ($t_{\text{ион}} = 1900 \text{ }^\circ\text{C}$). В обоих случаях для образовавшихся на ионизаторе ионов принималось косинусное распределение по углу вылета [4].

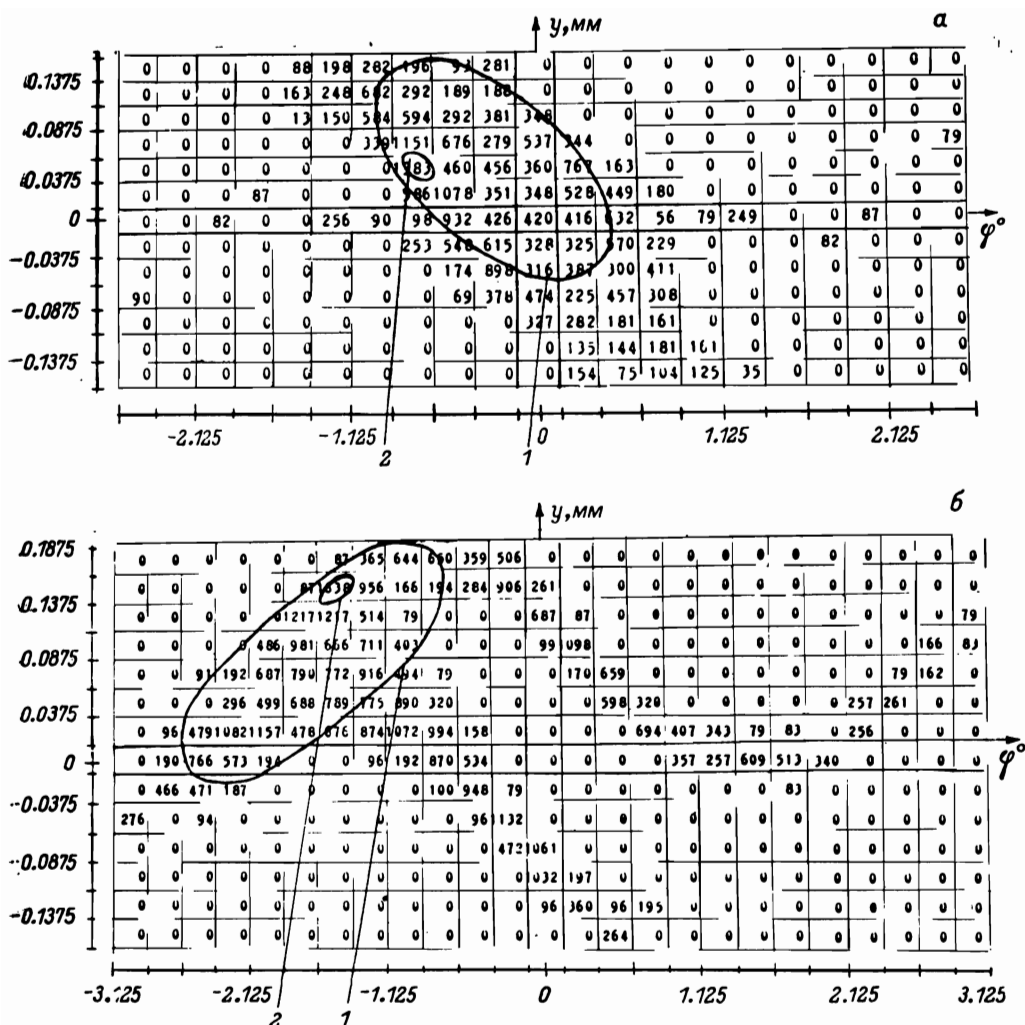


Рис. 4. Двумерные фазовые гистограммы интенсивности ионного тока на выходе источника ионов.

a — трехленточный вариант; *b* — двухленточный вариант; *y* — координата иона в плоскости выходной щели; φ — угол наклона вектора скорости иона к оси источника; амплитанс, мм·град; 1 — 0.2 (низкая разрешающая способность); 2 — 0.004 (высокая разрешающая способность).

При расчете напыления пробы на ионизатор предполагалось, что испарение из каждой точки также имеет косинусное угловое распределение. На рис. 3 представлены рассчитанные для обоих случаев зависимости коэффициентов напыления от координаты по ширине ионизатора для указанных двух случаев расположения лент. При расчете принималось равномерное распределение пробы на испарителе. Для трехленточного режима учитывалась возможность напыления пробы на второй испаритель с последующим ее испарением (кривая 2 на рис. 3, *a*). Двумерные фазовые гистограммы интенсивности (рис. 4) были рассчитаны в соответствии с «весами», в которых, кроме коэффициента напыления, учитываются угловые распределения образующихся на ионизаторе ионов.

Для тандемного масс-анализатора с двойной фокусировкой, совместно с которым предполагается использование рассматриваемого источника ионов, акцептанс в плоскости выходной щели источника в режиме низкой разрешающей способности был определен как $A_R=0.2$ мм·град. Критерий оптимальности, определенный как наибольшая интенсивность в пределах контура площадью 0.2 мм·град (на рис. 4 указанные контуры показаны жирной сплошной линией), равен соответственно для обоих источников 158500 и 214300, т. е. двухленточ-

ный блок оказывается предпочтительным. Аналогичный результат имеет место и для режима высокой разрешающей способности ($A_R=0.0125$ мм-град). Для этого режима критерий составил 885 и 1048 соответственно.

Полученный результат позволяет рекомендовать использование в масс-спектрометре источника ионов с двухленточным блоком вместо традиционного, как обладающего более высоким коэффициентом использования пробы.

Итоги проделанной работы следующие.

1. Разработан метод расчета эмиттансов источников ионов с поверхностной ионизацией с учетом коэффициента напыления нейтралей на ионизатор, углового распределения эмиттируемых ионов и конкретной геометрии электродов-ионно-оптической системы.

2. Разработана методика определения критериев оценки источников ионов.

3. Для конкретной ионно-оптической системы и двух вариантов системы испаритель—ионизатор выполнены численные расчеты распределения электрического поля, траекторий ионов, эмиттансов в плоскости выходной щели и распределение интенсивности ионного пучка в фазовой плоскости.

4. По результатам расчетов для конкретного аксептанса масс-спектрометра проведено сравнение двух источников ионов и определен вариант, обладающий большим коэффициентом использования пробы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров М. Л., Галль Л. Н., Крупнов В. С. и др. — ПТЭ, 1974, № 2, с. 273.
2. Александров М. Л., Пятакин А. Н., Тихонов В. М. — Автометрия, 1980, № 5, с. 33.
3. Исследование путей повышения аналитических и метрологических параметров масс-спектрометров для изотопного анализа. Отчет по научно-исследовательской работе. НТО АН СССР. Номер гос. регистрации 80027601. Л., 1980.
4. Добрецов Л. Н., Гомоюнова М. В. Эмиссионная электроника. М., 1966.