

УДК 537.534.2

Расчет вертикального эмиттанса пучка в источнике ионов с электронным ударом с учетом объемного заряда. Галль Л. Н., Мальков А. С., Огородников А. К., Тимченко Н. А. — В кн.: Научное приборостроение. Теоретические и экспериментальные исследования. Л.: Наука, 1984, с. 17—22.

Разработана и реализована на языке ФОРТРАН-4 для ЭВМ ЕС-1022 и М-4030 программа, позволяющая на основе метода «больших частиц» проводить расчет эмиттанса пучка ионов на выходе из ионизационной камеры с учетом объемного заряда ионизирующих электронов и образующихся ионов. Приведены результаты расчетного исследования, демонстрирующие существенное влияние объемного заряда в типичных для работы источника условиях. Ил. — 7.

РАСЧЕТ ВЕРТИКАЛЬНОГО ЭМИТТАНСА ПУЧКА В ИСТОЧНИКЕ ИОНОВ С ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ С УЧЕТОМ ОБЪЕМНОГО ЗАРЯДА

Как известно, для источников ионов статических масс-спектрометров с ионизацией электронным ударом специфическими являются две особенности: необходимость формирования ленточных пучков ионов с отношением ширины к высоте $10^{-2} \div 10^{-3}$ и использование сравнительно малой, порядка 10^{-2} А/см², плотности тока ионизирующих электронов с энергиями 70 ÷ 100 эВ. Как правило, в таких источниках пучок ионизирующих электронов направляют вдоль высоты формируемого ионного пучка, так что именно в этом направлении следует ожидать наибольшего влияния пространственного заряда.

Задача расчета условий формирования эмиттansa пучка ионов у вытягивающего электрода ионизационной камеры источника ионов в плоскости движения электронного пучка представляет собой самосогласованную задачу с пространственным зарядом электронов и ионов. Для ее решения используется метод «больших частиц», позволяющий представить множество всех электронов и ионов, присутствующих в источнике, в виде совокупности небольшого числа заряженных частиц, называемых «большими частицами». Расчет источника по этому методу включает в себя следующие основные этапы: моделирование образования электронов и ионов, моделирование совместного движения электронов и ионов, расчет плотности пространственного заряда и соответствующего электростатического поля в источнике ионов. Метод реализован в программе, написанной на языке ФОРТРАН-4 применительно к ЭВМ ЕС-1022 и М-4030.

Особенности работы программы следующие. Перед началом счета в ЭВМ вводятся основные параметры рассчитываемой модели источника: размеры и расположение электродов, значения потенциалов на электродах, давление газообразной пробы и кривая вероятности ионизации анализируемого газа, плотность тока эмиссии с катода. Кроме того, в ЭВМ вводятся несколько служебных параметров, определяющих порядок печати выходной информации и точность расчета. Далее, с помощью специальной вызывающей программы основная программа извлекается из библиотеки абсолютных модулей и начинается счет варианта. Во время работы программы большая часть текущей информации хранится на диске и считывается с него в некоторые моменты времени в оперативную память машины.

Контроль над работой программы осуществляется по выводимой на печать текущей информации о полях в источнике, траекториях «больших частиц» и выходном ионном токе на щели ионизационной камеры. По этой информации можно также установить близость рассчитываемого процесса к стационарному режиму работы источника ионов. После того как стационарный режим достигнут, на печать выводятся двумерные гистограммы интенсивности выходного ионного тока и числа ионных «больших частиц» для любых сечений эмиттansa, а также частные распределения ионов, выходящих из щели ионизационной камеры, по углу φ , координате y и энергии W , величина полного ионного тока I^+ , время выхода ионов из области ионизации. Рассчитанные эмиттansa могут служить исходными данными для построения целевой функции оптимизации источника ионов.

Программа была применена для исследования электронно-оптических условий формирования пучка ионов в ионизационной камере источника в зависи-

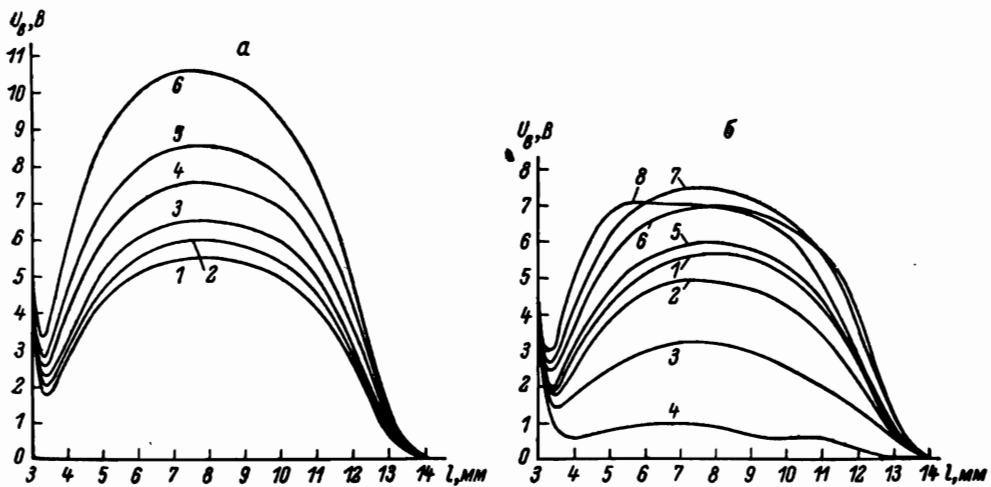


Рис. 1. Распределение потенциала в ионизационной камере по линии $z=3$ мм в стационарном случае при различных значениях плотности тока эмиссии ионизирующих электронов j^- (мА/см²) и давления анализируемой пробы p (мм рт. ст.).

a — отрицательный объемный заряд; $p=0$; j^- : 1 — 0, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 20, 5 — 30, 6 — 50; *b* — объемный заряд электронов и ионов; j^- : 1 — 0, 2 — 10, 3, 7 — 30, 4, 8 — 50, 5 — 5, 6 — 20; p : 1 — 0, 2 — 4 — $5 \cdot 10^{-4}$, 5 — 8 — 10^{-4} .

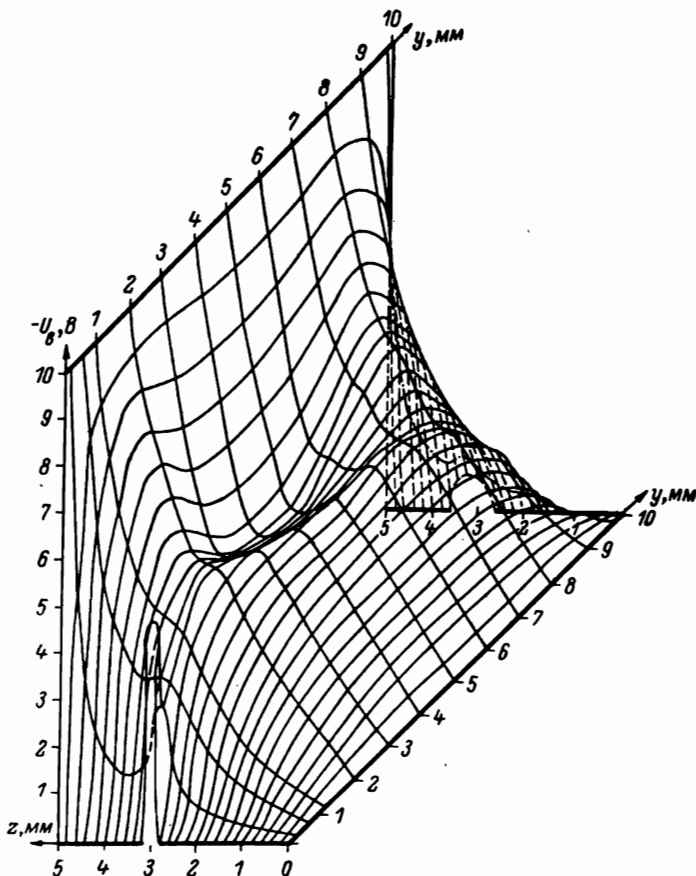


Рис. 2. Распределение потенциала в ионизационной камере источника ионов в плоскости zy для случая потенциалов на электродах $U_x=-70$, $U_s=0$, $U_a=-10$ В; плотность тока эмиссии электронов с катода $j^- = 50$ мА/см², давление анализируемой пробы $p=10^{-4}$ мм рт. ст.

мости от величин объемных зарядов электронов и ионов. Плотность тока эмиссии электронов с катода изменялась в пределах от $5 \cdot 10^{-3}$ до $5 \cdot 10^{-2}$ А/см², что в исследуемой геометрии ионизационной камеры соответствовало изменению величины полного электронного тока в ней от 80 до 800 мкА. Давление анализируемого газа (азота) p в ионизационной камере варьировалось от 10^{-4} до $5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст. Для уменьшения числа внешних, не определяющих собственно эффекты объемного заряда, факторов все расчеты проводились для постоянной геометрии ионизационной камеры при постоянном потенциале катода $U_k = -70$ В и постоянном вытягивающем напряжении $U_g = -10$ В, приложенном между верхней крышкой и корпусом ионизационной камеры:

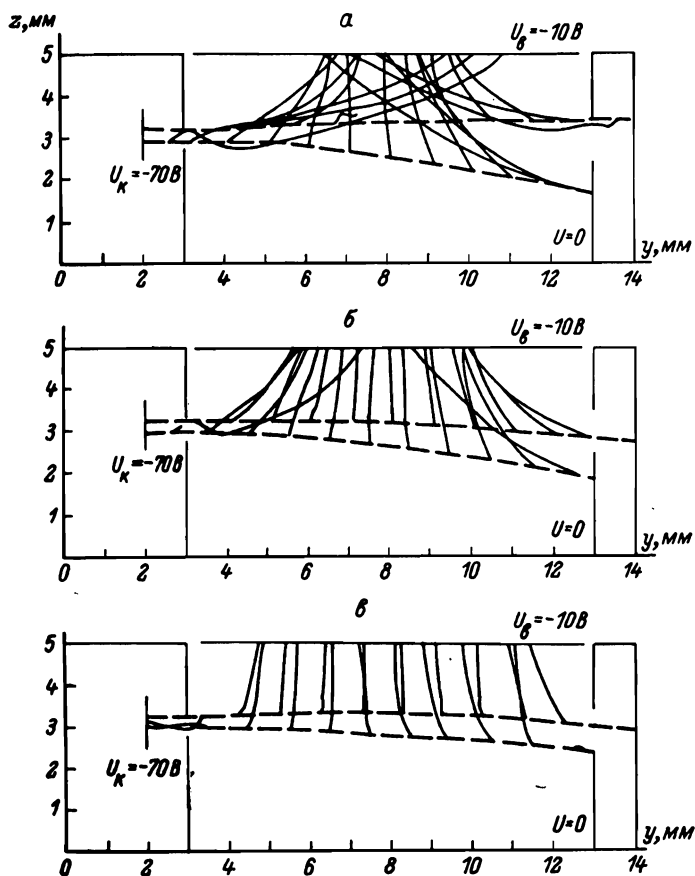
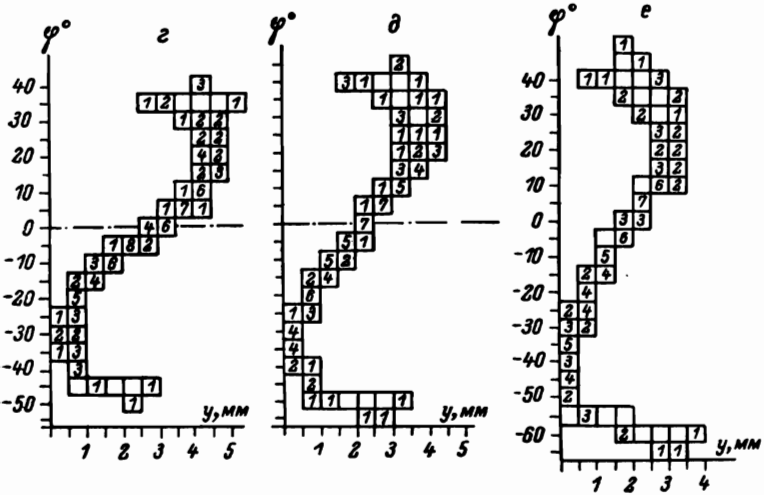
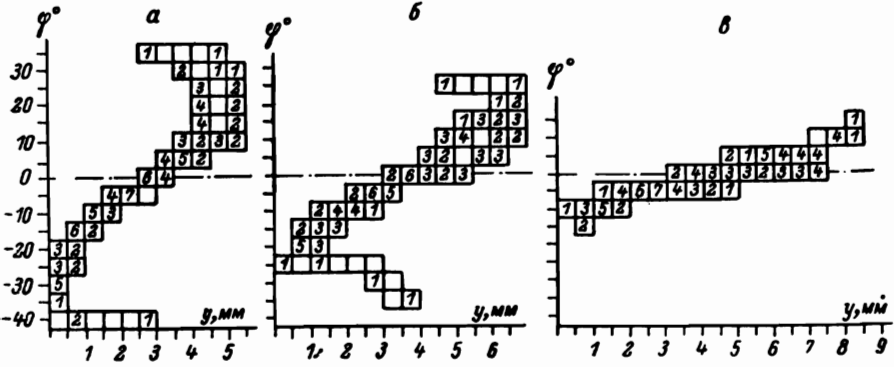


Рис. 3. Траектории электронов и ионов в ионизационной камере источника ионов (плоскость zy).

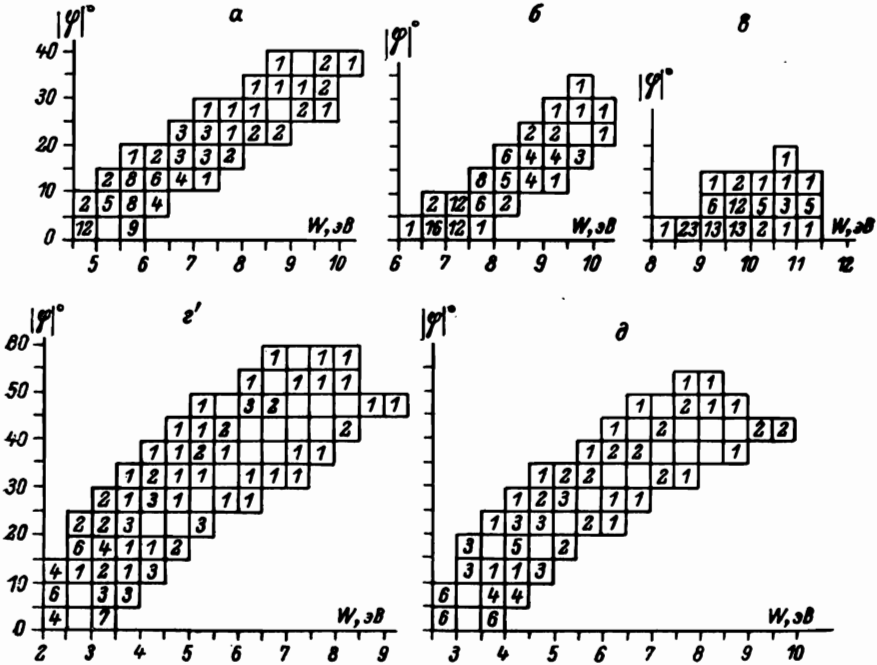
a — $j^- = 50$ мА/см², $p = 10^{-4}$ мм рт. ст.; $б$ — $j^- = 10$ мА/см², $p = 5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст.; $в$ — $j^- = 50$ мА/см², $p = 5 \times 10^{-4}$ мм рт. ст.

На рис. 1 приведены кривые осевого распределения потенциала по линии $z = z_0$ (z_0 — координата центра входной электронной щели) для случая только отрицательного объемного заряда в установившемся режиме и для различных давлений анализируемого газа в стационарном режиме. Рассматривая указанные кривые, легко заметить следующую особенность: при $p = 5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст. с ростом объемного заряда j^- глубина потенциальной ямы уменьшается, а при $p = 10^{-4}$ мм рт. ст. — возрастает. Это обстоятельство позволяет сделать вывод о существовании некоторого граничного давления p_0 ($10^{-4} < p_0 < 5 \times 10^{-4}$ мм рт. ст.), которое разделяет области преимущественного влияния отрицательного и положительного объемных зарядов. На рис. 2 для одного из рассчитанных случаев приведена полная картина электрического поля в области ионизации в стационарном режиме. В этом случае ($j^- = 5 \cdot 10^{-2}$ А/см²)

A



B



преобладающий отрицательный объемный заряд создает потенциальную яму, в которой образующиеся ионы удерживаются продолжительное (10^{-6} с) время.

Форма электронного пучка и траектории ионов в вертикальной плоскости представлены на рис. 3 для трех наиболее характерных случаев из рассмотренных при исследовании: для большого отрицательного объемного заряда (рис. 3, а), вызывающего удержание ионов в пучке, для малого объемного заряда (рис. 3, б), при котором формирование пучка определяется в основном внешними электростатическими полями, и для большого положительного объемного заряда (рис. 3, в), наиболее ярко проявляющегося в варианте $j^- = 50$ мА/см², $p = 5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст.

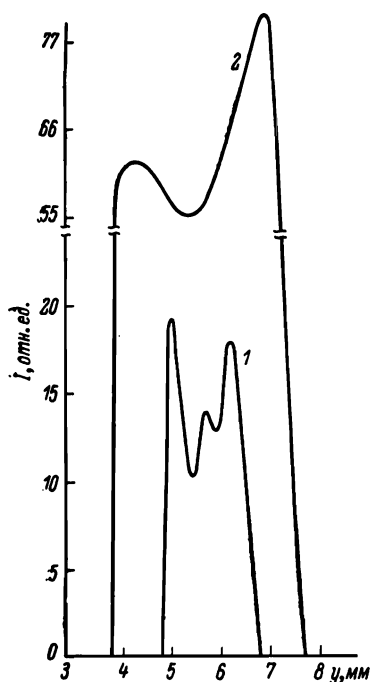


Рис. 5. Распределение интенсивности ионов I по длине y на выходе из ионизационной камеры для различных значений j^- (мА/м²) и p (мм рт. ст.).

1 — $j^- = 30$, $p = 10^{-4}$; 2 — $j^- = 50$, $p = 5 \cdot 10^{-4}$.

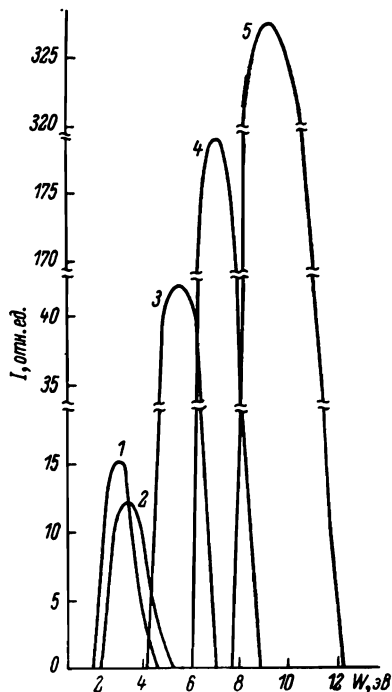


Рис. 6. Распределение интенсивности ионов I по энергии W на выходе из ионизационной камеры для различных значений j^- (мА/см²) и p (мм рт. ст.).

j^- : 1 — 30; 2 — 20; 3 — 10; 4 — 30; 5 — 50; p : 1, 2 — 10^{-4} ; 3—5 — $5 \cdot 10^{-4}$.

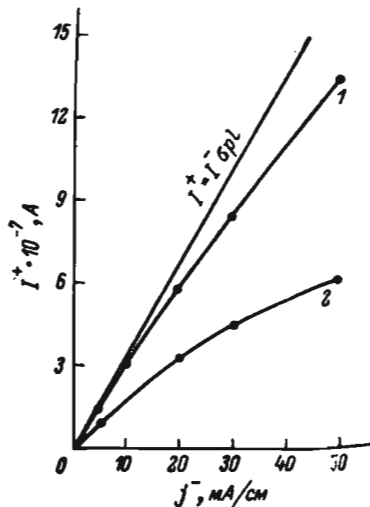
На рис. 3 хорошо прослеживается изменение характера электронного пучка в ионизационной камере, где влияние положительного объемного заряда приводит к уменьшению отклонения пучка во внешнем электрическом поле и, кроме того, уменьшает его рассеяние. В результате весьма существенно изменяется форма и размер области начального эмиттанса образовавшихся ионов. Это обстоятельство совместно с изменением внешнего вытягивающего поля оказывает определяющее влияние на параметры эмиттанса пучка на выходе из ионизационной камеры.

На рис. 4 приведены сечения ($y\varphi$) и (φW) фазового объема ионного пучка в плоскости крышки ионизационной камеры $z = z_b$, а на рис. 5 и 6 — частные распределения интенсивности ионов по длине ионизационной камеры и по энергии. Как видно из рис. 4—6, параметры выходного пучка существенно

Рис. 4. Эмиттанс пучка ионов в плоскостях $y\varphi$ (А) и φW (Б) для различных значений плотности тока эмиссии ионизирующих электронов j^- (мА/см²) и давления анализируемой пробы p (мм рт. ст.).

j^- : а — 10; б — 30; в — 50; г — 5; г' — 30; д — 20; е — 50; p : а—в — $5 \cdot 10^{-4}$; г—е — 10^{-4} .

зависят от величины тока ионизирующих электронов I^- и от давления p в области ионизации. Удержание ионов в пучке отрицательным объемным зарядом во всех исследованных случаях приводит к отклонению зависимости $I^+ = f(I^-)$ от линейной, ожидаемой из соотношения $I^+ = I^- \cdot \sigma p l$ для общего ионного тока



на выходе из ионизационной камеры (рис. 7, кривая 1). Однако это отклонение оказывается еще более значительным для ионного тока на выходе из источника (рис. 7, кривая 2) из-за уменьшения транспортируемой части эмиттанса для ионного пучка, формируемого в присутствии большого отрицательного объемного заряда.

Таким образом, проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы.

Рис. 7. Зависимость ионного тока на выходе из ионизационной камеры от тока ионизирующих электронов при $p = 10^{-4}$ мм рт. ст.

1 — полный выходной ток, 2 — ток ионов, выходящих в диапазоне углов $|\Delta\phi| < 20^\circ$.

1. Увеличение отрицательного объемного заряда приводит к увеличению фазовой площади, занимаемой ионным пучком и соответствующему уширению частных распределений ионного тока по углу и энергии, что должно приводить к уменьшению разрешающей способности и пропускания масс-спектрометра.

2. Увеличение положительного объемного заряда приводит к сужению частных распределений по углу и энергии, т. е. к увеличению пропускания и чувствительности масс-спектрометра. Предел увеличения положительного объемного заряда определяется предельными давлениями в области ионизации, при которых становится заметным вклад в масс-спектр ионно-молекулярных реакций.