

УДК 537.534.3

Моделирование движения пучка ионов в потоке газа под действием электрического поля и исследование его фокусировки. Елисеенко Л.В., Ермаков М.С., Щербаков А.П. // Научное приборостроение. Приборы и средства автоматизации для научных исследований. Л.: Наука, 1987, с. 16-21.

Движение ионов представляется как процесс диффузии и дрейфа ионов под действием электрического поля, наложенного на движение потока газа, что является естественным предположением при не слишком больших градиентах параметров потока. Коэффициенты диффузии и дрейфовая скорость, задаются на основе моделей диффузии ионов в потоке газа под действием постоянного электрического поля. Диффузионный процесс моделируется методом Монте-Карло. Лит. - 6 назв., ил. - 2.

Л.В.Елисеенко, М.С.Ермаков, А.П.Щербаков (НТО АН СССР)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ПУЧКА ИОНОВ В ПОТОКЕ ГАЗА ПОД ДЕЙСТВИЕМ
ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ФОКУСИРОВКИ

Отличительной особенностью источников ионов, работающих при повышенном давлении вплоть до атмосферного, например, источника ЭРИАД [1], является то, что в них на ионный пучок наряду с электрическим полем воздействуют газодинамические поля потоков спутного газа. Разработка и оптимизация таких источников ставит задачу создания эффективных методов расчета движения ионов в заданных электрогазодинамических полях.

Задача состоит из расчета электрического поля, моделирования потока газа и движения ионов в газе под действием электрического поля. Первые два аспекта задачи достаточно подробно исследовались, и мы будем рассматривать третий.

Для него наиболее естественным представляется прямое статическое моделирование движения отдельных ионов в заданном электрическом поле, прерываемом столкновениями с молекулами спутного газа. Однако большие затраты машинного времени и необходимость расчета большого числа вариантов для целей оптимизации ограничивают область применимости метода невысокими давлениями спутного газа, когда ион на пути своего движения претерпевает не слишком много столкновений. При больших давлениях, когда число Кнудсена $Kn \gg 1$, необходимо использовать другие подходы к решению задачи.

В настоящей работе предлагается приближенная модель, позволяющая обойти указанные трудности. Она состоит в следующем. Рассчитывается электрическое поле. Поток спутного газа описывается с помощью одного из известных теоретических приближений [2], например, как свободно расширяющаяся сверхзвуковая изоэнтропическая струя или как одномерное расчетное изоэнтропическое течение в сопле заданной конфигурации.

Описание движения ионов основывается на модели, базирующейся на следующих предположениях.

1. Движение ионов есть сумма двух движений – движения потока газа и движения ионов относительно потока. Предполагается, что последнее можно описать как диффузия и дрейф ионов в покоящемся газе под действием электрического поля.

2. Движение ионов не влияет на течение спутного газа.

3. Полем объемного заряда пучка ионов можно пренебречь по сравнению с внешним электрическим полем.

Первое предположение естественно для потоков газа с небольшими градиентами скорости, температуры и плотности и основано на том, что этими градиентами можно пренебречь. Обозначая через U скорость потока и полагая, что характерное расстояние изменения параметров потока $L \sim U/|\nabla U|$ много больше расстояния, на которое ион сместится за время прохождения пути L , получаем

$$\frac{UL}{D} \gg 1, \quad U \gg V_d, \quad (1)$$

где D – наибольший из коэффициентов диффузии; V_d – дрейфовая скорость иона в покоящемся газе.

Второе предположение выполняется, если мало значение параметра электрогазодинамического взаимодействия [3].

$$S = \frac{en_i E L}{Mn U^2} \ll 1, \quad (2)$$

где n_i – концентрация ионов с зарядом e ; E – напряженность электрического поля; M – масса молекул спутного газа; n – их концентрация.

Третье предположение накладывает ограничение на концентрацию ионов

$$n_i \ll E/(4\pi e \ell), \quad (3)$$

где ℓ – характерная длина изменения внешнего электрического поля.

Перейдем к подробному описанию модели. В качестве локального задания движения иона относительно потока газа берется задание диффузии и дрейфа ионов в покоящемся газе под действием постоянного электрического поля с напряженностью, равной напряженности поля в данной точке. Скорость ионов получается как сумма скоростей потока спутного газа и скорости движения ионов в газе, вызванной электрическим полем

$$\vec{V} dt = \vec{U} dt + \vec{V}_d dt + (D(E))^{1/2} d\vec{W}(t), \quad (4)$$

где \vec{U} – вектор скорости движения газа в точке; $\vec{V}_d(E)$ – скорость движения ионов в газе, вызванного электрическим полем; $D(E)$ – диффузионная матрица; $d\vec{W}(t)$ – вектор гауссовского белого шума.

Другим описанием движения пучка ионов является задание уравнения стационарной диффузии.

Для определения коэффициентов диффузии и скорости дрейфа ионов использовались выражения для модели Максвелла и приближения длины свободного пробега, развитыми Ванье [4].

В рамках первой модели постоянна частота столкновений ν иона с молекулами газа и $V_d = eE/(\mu\nu)$, где μ – приведенная масса иона и молекулы.

Эта модель включает в себя такой важный случай взаимодействия иона с молекулой, как поляризационное, которое определяет его рассеяние при небольших энергиях (до нескольких эВ), когда $\nu = 2\pi e \sqrt{\alpha/\mu}$, где α – поляризуемость молекулы.

В рамках второй модели практически постоянно сечение рассеяния σ , что имеет место при достаточно больших энергиях иона, когда рассеяние его определяется отталкивательными короткодействующими силами. В этом случае [4]

$$V_d = \left(\frac{3kT}{2M} \right)^{1/2} \left\{ \left[1 + \frac{4}{9} \xi^2 \frac{M}{\mu} \left(\frac{eB}{\pi\sigma kT} \right)^2 \right]^{1/2} - 1 \right\}^{1/2},$$

где T - температура потока; ξ - параметр, порядка единицы.

Коэффициенты поперечной D_T и продольной D_L диффузии ионов массы m в рамках той и другой модели даются выражениями [4]

$$D_T = kT \frac{V_d}{eE} + \frac{1}{3} \cdot \frac{M(m+M)}{2m+M} \cdot \frac{V_d^3}{E},$$

$$D_L = kT \frac{V_d}{eE} + \frac{1}{3} \cdot \frac{M(4m+M)}{2m+M} \cdot \frac{V_d^3}{E}.$$

Дадим описание моделей движения потока спутного газа. В них поток газа характеризуется следующими параметрами: поле концентрации молекул газа $n(\vec{r})$, поле температуры потока $T(\vec{r})$, поле скоростей потока $\vec{U}(\vec{r})$. Газ считается идеальным. Для модели изоэнтروпического течения газа с показателем адиабаты γ имеют место следующие соотношения подобия [2]

$$\frac{n}{n_0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1/(\gamma-1)}, \quad a/a_0 = (T/T_0)^{1/2}, \quad (5)$$

где $a(\vec{r})$ - локальная скорость звука; a_0, n_0, T_0 - параметры торможения.

Зависимость скорости потока от температуры определяется с помощью связи локального числа Маха $M = U/a$ с температурой

$$T/T_0 = \left\{ \frac{2}{\gamma-1} \left(1 + (\gamma-1)M^2/2 \right) \right\}^{-1}. \quad (6)$$

Зависимость параметров потока для модели свободно расширяющейся изоэнтропической струи от продольной координаты X устанавливается соотношениями (5) и (6) вместе с соотношением [5]

$$n/n_0 = A (d_*/X)^2, \quad (7)$$

где A - коэффициент, зависящий от γ (для $\gamma = 1,4$ $A = 0,1$); d_* - диаметр критического сечения сопла, расположенного в точке $X = 0$.

Соотношение (7) справедливо при $X/d_* \gg 3$ и означает, что выполняется приближение точечного источника.

Останемся на алгоритме расчета. Сначала вычислялось электрическое поле по стандартной программе. Затем согласно определенному вероятностному распределению находилось положение частицы и начиналось моделирование ее движения, как диффузионного процесса [6]. На каждом шаге моделирования находились величины \vec{U} , $\vec{V}_d(E)$, $D(E)$ в данной точке \vec{X} , после чего вычислялась длина вектора $|\vec{U} + \vec{V}_d(E)| = W$ и среднее время $t = h/W$, за которое частица пройдет расстояние h , равное шагу моделирования. Положение следующей точки \vec{Y} находилось по формуле, являющейся дискретным аналогом формулы (4),

$$\vec{Y} = \vec{X} + (\vec{U} + \vec{V}_d(E))t + (D(E)t)^{1/2} \vec{\xi},$$

где $\vec{\eta}_t$ - вектор независимых гауссовских случайных величин с единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием.

Выбор шага моделирования h однозначно определяет погрешность, связанную с непостоянством параметров $U, V(E), D(E)$. Она пропорциональна относительной погрешности изменения $U, V_d(E), D^{1/2}(E)$ на расстояние h , если $D(E) \ll \ll h W$. Возможностью простой оценки погрешности и обусловлено преимущество данного метода моделирования диффузии с переменными коэффициентами. Отметим, что алгоритм моделирования существенно упростился за счет того, что собственные вектора $D(E)$ лежат в направлениях продольной и поперечной диффузии.

Результаты моделирования фиксировались в вертикальной плоскости, проходящей через точку входа в скиммер (плоскости анализа фокусировки).

В качестве примера были проведены расчеты движения пучка ионов для двух конфигураций системы сопло-скиммер источника ЭРИАД (рис.1). Первая состоит из кони-

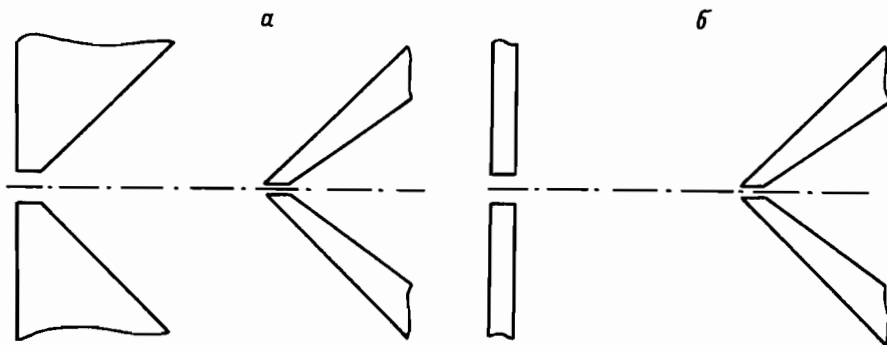


Рис.1. Конфигурация системы сопло-скиммер с коническим соплом (а) и с соплом в виде отверстия в пластине (б).

ческого сопла с диаметром отверстия $d_* = 0,6$ мм и конического скиммера с диаметром отверстия 0,1 мм. Углы раствора обоих конусов 90° . Во второй системе сопло выполнено в виде круглого отверстия $d_* = 0,6$ мм в плоской пластине. Спутным газом является атмосферный воздух, т.е. показатель адиабаты $\gamma = 1,4$. Значения параметров торможения $T_0 = 300$ К, $n_0 = 2,45 \times 10^{19}$ см $^{-3}$, $P_0 = 100$ кПа. В области между соплом и скиммером поддерживается фоновое давление $P_\infty = 1-4$ кПа. При таком большом перепаде давлений течение газа из сопла представляет собой сверхзвуковую свободно расширяющуюся изоэнтропическую струю, удовлетворительно описываемую формулами (5)-(7). Свободное истечение происходит до диска Маха, находящегося на расстоянии $L_M \approx 0,7 d_* \sqrt{P_0/P_\infty}$ от отверстия сопла. При $P_\infty = 2$ кПа, $L_M = 3$ мм.

За диском Маха вплоть до скиммера струя имеет приблизительно постоянные параметры. При малых значениях фонового давления свободно расширяющаяся струя простирается вплоть до скиммера. Поток газа моделировался в виде сверхзвуковой свободно расширяющейся изоэнтропической струи, или в виде течения с постоянной плотностью и температурой, а также в виде комбинации этих моделей: свободно расширяющаяся сверхзвуковая струя за диском Маха переходит в течение постоянной плотности.

Условие (1) даже вблизи отверстия сопла, где характерное расстояние ускорения струи L минимально ($L \sim d_* \sim 10^{-2}$ см) выполняется, поскольку $D \sim 0,1$ см 2 /с, $U \sim 5 \cdot 10^4$ см/с.

Оценим теперь влияние объемного заряда. Обозначим $n_0 = E/(4\pi e\ell)$. Возьмем для оценки $E = 100$ В/см, $\ell = 1$ см. Тогда $n_0 \approx 6 \cdot 10^{-7}$ см⁻³, что для скорости ионов 10^5 см/с и для сечения пучка 10^{-2} см² соответствует току 10^{-8} А.

Таким образом, согласно формуле (3) для токов, меньших 10^{-8} А, можно пренебречь полем объемного заряда пучка по сравнению с внешним электрическим полем всюду, за исключением небольшой области вблизи отверстия сопла, куда электрическое поле проникает слабо. Отметим, что типичные значения тока между соплом и скиммером источника ЗРИАД составляют 10^{-9} А.

Наконец, параметр электрогазодинамического взаимодействия (2) мал для всех областей рассматриваемой системы. Так в окрестности входа в скиммер, где он максимален, при $E \sim 10^4$ в/см, $n_i \sim 10^{10}$ см⁻³, $n \sim 10^{18}$ см⁻³, $L \sim 1$ см, $U \sim 10^4$ см/с получаем $S \sim 10^{-2}$.

Результаты анализа фокусирующих характеристик рассматриваемых систем показали, что для сверхзвуковых потоков газа наблюдается собирание пучка в кольцо радиуса 1–2 мм в окрестности скиммера. При этом в зависимости от моделируемых режимов потока газа и движения ионов радиус кольца не изменялся, а существенно менялось количество ионов в кольце, что и являлось критерием качества фокусировки.

На рис.2 представлены гистограммы распределения числа ионов в плоскости входа

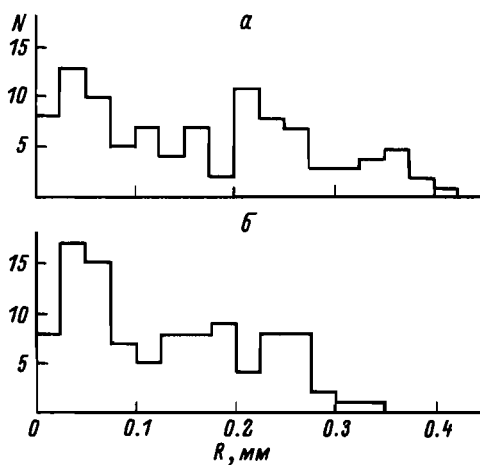


Рис.2. Гистограммы Распределения числа ионов в плоскости входа в скиммер при разности потенциалов между соплом и скиммером 10 В (а) и 100 В (б).

да в скиммер для геометрии системы, изображенной на рис.1б, при расстоянии между соплом и скиммером 8 мм для дозвукового потока газа с постоянными параметрами $T = 273$ К, $P = 2$ кПа, $U = 150$ м/с. Движение ионов моделировалось для двух значений ускоряющего напряжения между соплом и скиммером. Видно, что с увеличением ускоряющего напряжения увеличивается доля ионов, проходящих в отверстие скиммера. Эта доля, как показали расчеты, примерно линейно растет с увеличением ускоряющего напряжения для всех рассмотренных систем и для различных моделей газового потока.

При равных параметрах потока и одинаковом напряжении схема рис.1а обладает лучшими фокусирующими свойствами по сравнению со схемой рис.1б. Причем фокуси-

ровка улучшается с уменьшением угла раствора конуса сопла до значений порядка 60° . При дальнейшем уменьшении угла фокусировка практически не менялась.

Расчеты показали слабую зависимость фокусировки от массы ионов, поскольку в модели не учитывались инерционные эффекты. От массы зависят только коэффициенты диффузии, роль которой в рассматриваемой нами области изменения значений параметров потока и электрического поля оказалась незначительной.

Варьирование расстояния между соплом и скиммером (брались расстояния 3, 5 и 8 мм) показало несколько лучшую фокусировку при расстоянии 5 мм.

Из сравнения результатов расчета движения ионов для различных моделей газового потока следует, что лучшие фокусирующие свойства реализуются для модели дозвукового течения с постоянными параметрами, причем фокусировка лучше для потока с меньшей скоростью.

Приведенные примеры показывают, что разработанная методика может быть использована в расчетах транспортирующих систем источников ионов, работающих в условиях повышенных давлений остаточных газов. При этом она легко допускает варьирование большого числа параметров: параметров геометрии, поля, потока газа и пучка ионов. Тем самым она может быть положена в основу методик оптимизации таких систем по широкому классу параметров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров М.Л., Галль Л.Н., Краснов Н.В., Николаев В.И., Павленко В.А., Шкурнов В.А. // ДАН СССР, 1984, Т.274, № 6, с.1416.
2. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1973.-736 с.
3. Ватажин А.Б., Грабовский В.И., Дихтер В.А., Шульгин В.И. Электрогазодинамические течения. М.: Наука, 1983. - 344 с.
4. Мак-Даниель И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газе. М.: Мир, 1976. - 422 с.
5. Ashkenas H.A., Sherman F.S. / *Rarefied Gas Dynamics, IX Int. Symp., Acad. Press, N.-Y. 1966, V.2, p. 84.*
6. Гихман И.И., Скороход А.В. Теория случайных процессов. Т.3. М.: Наука, 1975. - 496 с.

Е.Э.Печалина, Г.В.Фридлянский (НТО АН СССР)

ВЛИЯНИЕ ВЕЛИЧИНЫ МЕЖЭЛЕКТРОДНЫХ ЗАЗОРОВ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ЛИНЗАХ И НА ИОННО-ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИММЕТРИЧНОГО ПРИЗМЕННОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

Расчет характеристик призматических электростатических систем, применяемых для создания электронных и масс-спектрометров, проводился до сих пор в предположении бесконечно узкого зазора между электродами [1, 2]. Между тем, наличие зазора конечной величины является необходимым условием реализации таких систем, поэтому представляется весьма важным исследование влияния величины зазора на их ионно-оптические характеристики. Ценность такого исследования возрастает при построении крупных приборов с высокими или сверхвысокими параметрами.

Исключение составляет работа [3], где проведено исследование влияния ве-