

УДК 537.534.3

Численное моделирование транспортировки ионных пучков в электрогазодинамических полях. Щербаков А.П. // Научное приборостроение. Автоматизация научных исследований. Л.: Наука, 1988, с.46

Разработана методика расчета движения ионов в реальных электрогазодинамических полях, основанная на методе статистического моделирования. Методика предназначена для расчета транспортировки пучков ионов небольшой интенсивности в системах дифференциальной откачки источников ионов, в которых на ионы помимо электростатического поля системы электродов воздействуют газовые потоки различного вида. Лит. - 11 назв., ил. - 5, табл. - 1.

## П. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ АНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

А.П.Шербаков (НТО АН СССР)

### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТИРОВКИ ИОННЫХ ПУЧКОВ В ЭЛЕКТРОГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

В последнее время для анализа нелетучих, термически нестабильных органических и биоорганических соединений широко применяются масс-спектрометрические установки, в которых образование ионов происходит в области высокого давления, а транспортировка ионов в высоковакуумную область осуществляется с помощью систем дифференцированной откачки с ионно-оптическими элементами, формирующими пучок [1-3]. Отличительной особенностью таких систем является то, что в них на ионный пучок воздействуют наряду с электростатическим полем газодинамические поля потоков спутного газа. Причем воздействие этих потоков на ионный пучок может быть не только сравнимым, но даже превышать действие электрического поля.

Проблема расчета и оптимизации масс-спектрометрических источников ионов, работающих при высоких давлениях, ставит задачу построения адекватных моделей движения ионов в электрогазодинамических полях и разработки эффективных методов расчета транспортирующих свойств таких систем. Возникающая задача отличается от классических задач расчета коэффициентов подвижности и диффузии ионов в покоящемся газе дрейфовых труб [4], во-первых, наличием больших градиентов электрического поля и, во-вторых, наличием потоков газа с большими градиентами давления, температуры и скорости. Транспортировка ионов осуществляется в существенно различных областях течения газа: из области высокого давления, где течение газа является сплошным и малы эффекты диффузионного расплывания пучка (число Пекле для ионов  $Pe \gg 1$ ), через промежуточную область, где  $Pe \sim 1$ , в область разреженного течения, где  $Pe \ll 1$ , и далее, в высоковакуумную область, где столкновения ионов с молекулами остаточного газа крайне редки.

В данной работе в основу расчетной методики положен метод статистического моделирования - метод Монте-Карло [5], в наибольшей мере, по нашему мнению, отвечающий специфике задачи и позволяющий единым образом описать движение ионов в различных областях течения газа и при различных соотношениях между величинами электрического и газодинамического полей. Метод заключается в сведении исходного вероятностного процесса к модели, допускающей практическую реализацию на ЭВМ. В качестве такой модели мы приняли имитацию движения ионов в заданном электрическом поле, прерываемого столкновениями с молекулами спутного газа. Эта модель хорошо зарекомендовала себя в задачах расчета коэффициентов диффузии и подвижности [6, 7]. По сравнению с работами [6, 7] новыми моментами в нашей методике является то, что процесс движения и столкновений ионов разыгрывается в неоднородном электрическом поле заданной системы электродов и в заданном неоднородном газодинамическом поле концентраций и скоростей молекул газа. Тем самым разработанная методика может быть использована для численного моделирования транспортировки ионов в реальных электрогазодинамических полях конкретных систем дифференциальной откачки источников ионов.

Модель движения ионов в электрическом поле и в потоке  
спутного газа

В качестве модели исходного вероятностного физического процесса была использована схема, часто применяемая в задачах о прохождении частиц через вещество [5]. А именно, система разбивалась на "среду" – поток спутного газа и электрическое поле электродов, и на ансамбль "пробных частиц" – ионов. Среда (электрогазодинамическое поле) описывалась с помощью четырех параметров: поля концентрации молекул спутного газа  $n(r)$ , поля температуры газа  $T(r)$ , поля скорости потока газа  $u(r)$ , электрического поля  $E(r)$ .

Учитывалось только взаимодействие пробных частиц со средой. Пренебрегалось воздействием пробных частиц на среду и их взаимодействием между собой. Первое предположение означает, что мал параметр электрогазодинамического взаимодействия

$$S = en_i E l / \rho U^2 \ll 1, \quad (1)$$

где  $e$  – элементарный заряд,  $n_i$  – концентрация ионов,  $l$  – характерная длина изменения газодинамических параметров,  $\rho$  – плотность потока спутного газа.

Критерием справедливости второго предположения является малость электрического поля объемного заряда пучка ионов по сравнению с внешним электрическим полем, что также накладывает ограничения на величину концентрации ионов

$$n_i \ll E / 4\pi e L, \quad (2)$$

где  $L$  – характерная длина изменения внешнего электрического поля.

Взаимодействие пробных частиц (ионов) со средой моделировалось как последовательность парных упругих соударений их с молекулами спутного газа, между которыми в течение времени свободного пролета моделировалось их движение в заданном электрическом поле. Остановимся на основных этапах этого вероятностного процесса.

Столкновение с молекулой спутного газа. Пусть  $V_1$  – скорость иона массы  $m$  до столкновения, масса молекулы  $M$ , ее скорость до столкновения  $V_2$ . Тогда скорость иона после столкновения есть

$$V_1' = \frac{M}{m+M} V \chi + \frac{m}{m+M} V_1 + \frac{M}{m+M} V_2, \quad (3)$$

где  $V$  – величина скорости относительного движения,  $\chi$  – единичный вектор рассеяния, определяемый полярным  $\chi$  и азимутальным  $\varphi$  углами рассеяния.

Палагая процесс рассеяния вероятностным, углы  $\chi$  и  $\varphi$  считаем реализациями случайных величин с плотностями распределения, определяемыми потенциалом взаимодействия между частицами. Для изотропного рассеяния азимутальный угол распределен равномерно на промежутке  $(0, 2\pi)$ , полярный угол распределен на  $(0, \pi)$  с плотностью  $f(\chi) = (1/2) \sin \chi$ .

Обозначим через  $R_1$  и  $R_2$  реализации двух независимых равномерно распределенных на  $(0, 1)$  случайных величин. Тогда углы  $\chi$  и  $\varphi$  находятся из соотношений

$$\cos \chi = 1 - 2R_1, \quad \varphi = 2\pi R_2. \quad (4)$$

Розыгрыш вектора скорости молекулы спутного газа. Скорость молекулы спутного газа  $V_2$  представлялась в виде суммы скорости потока спутного газа  $u$  и скорости теплового движения  $W$ . Первое слагаемое определялось значением поля скорости потока, второе – значением поля температуры газа в точке столкновения и моделировалось как случайная величина согласно распределению Максвелла с плотностью вероятности для компонент

$$f(W_i) = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{MW_i^2}{2kT}\right), \quad i = x, y, z.$$

Пусть  $R N_i$  – реализации трех ( $i = x, y, z$ ) независимых нормально распределенных случайных величин с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией. Тогда

$$W_i = \sqrt{kT/M} R N_i. \quad (5)$$

Моделирование времени свободного пробега. В качестве функции распределения случайной величины  $\tau$  – времени свободного пробега иона между столкновениями, было принято следующее выражение

$$F(\tau) = 1 - \exp\left\{-\int_0^\tau v(t) dt\right\}. \quad (6)$$

Это есть вероятность того, что время между столкновениями лежит в интервале  $(0, \tau)$ . Частота столкновений

$$v(t) = V(t) n \sigma(V),$$

где  $V(t)$  – скорость относительного движения,  $\sigma$  – сечение столкновения зависит от времени. Поэтому в общем случае для вычисления реализации случайной величины  $\tau$  по известной реализации  $R$ , равномерно распределенной на  $(0, 1)$  случайной величины, необходимо решать уравнение

$$R = \exp\left\{-\int_0^\tau v(t) dt\right\}, \quad (7)$$

что приводит к большим затратам машинного времени. Приемы моделирования  $\tau$ , предложенные в работе [7], не снижают значительно эти затраты. Поэтому в данной работе были приняты модели, для которых уравнение (7) может быть разрешено в явном виде относительно  $\tau$ .

Это, во-первых, модель Максвелла [4], когда  $v = \text{const}$  и

$$\tau = -\frac{1}{v} \ln R. \quad (8)$$

Модель Максвелла включает в себя такой важный случай взаимодействия, как поляризованное, которым определяется рассеяние иона на нейтральной молекуле в области энергий от тепловых до нескольких электрон-вольт.

Второй случай, упрощающий уравнение (7), это  $V = \text{const}$ , когда также приходим к соотношению (8). Этот случай реализуется, если приращение скорости иона за время между столкновениями мало по сравнению с дрейфовой скоростью, что выполняется для тяжелых ионов:  $m \gg M$ .

Наконец, в случае  $\sigma = \text{const}$  из уравнения (7) получаем

$$\lambda = -\bar{\lambda} \ln R, \quad (9)$$

где  $\lambda$  - реализация случайной величины - длины свободного пробега,  $\bar{\lambda} = 1/n\sigma$  - средняя длина свободного пробега.

Практически сечение столкновения можно считать независимым от скорости, когда сечение поляризационного захвата меньше поперечного сечения иона  $\sigma_k$

$$\frac{2\pi e}{V} \sqrt{\frac{\alpha}{\mu}} < \sigma_k, \quad (10)$$

где  $\alpha$  - поляризуемость молекулы,  $\mu$  - приведенная масса сталкивающихся частиц. В этом случае  $\sigma = \sigma_k$ . Условие (10) выполняется при достаточно большой скорости относительного движения, тем меньшей, чем больше масса иона. Например, для пары  $N_2^+ - N_2$  и  $\sigma_k = 10^{-15}$  см<sup>2</sup> условие (10) выполняется для  $V > 10^6$  см/с, что соответствует энергии выше 10 эВ.

Расчет траектории движения иона в электрическом поле. Траектория иона в электрическом поле определяется уравнениями движения и начальными условиями в момент времени  $t_0$  последнего соударения

$$\ddot{r} = \frac{e}{m} E(r), \quad r|_{t_0} = r_0, \quad \dot{r}|_{t_0} = V_0.$$

Пусть  $\tau$  - время движения иона до следующего соударения. Введем  $\Delta r = |V_0\tau + \omega\tau^2/2|$ , где  $\omega = (e/m) E(r_0)$  - ускорение иона в точке последнего соударения. И пусть  $\delta$  - пространственный шаг интегрирования уравнений движения. Тогда, если  $\Delta r \leq \delta$ , координата  $r_1$  и скорость иона  $V_1$  к моменту следующего столкновения определялись по формулам равноускоренного движения за время  $\tau$  с ускорением  $\omega$ . В противном случае уравнения движения решались методом Рунге-Кутты второго порядка с шагом по времени  $\Delta t = 2\delta/(V_0 + \sqrt{V_0^2 + 2\omega\delta^2})$ .

Моделирование потока спутного газа. В данной работе не ставилась задача детального расчета параметров течения газа. Вместо этого были приняты две модели потока спутного газа, удовлетворительно описывающие, как показали эксперименты [8], поток спутного газа в приосевой области. Это, во-первых, свободно расширяющаяся, изэнтропическая струя, и во-вторых, течение постоянной скорости и плотности.

Для изэнтропического течения идеального газа имеют место соотношения подобия [10]

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}, \quad \frac{n}{n_0} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}, \quad \frac{a}{a_0} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (11)$$

где  $\rho_0$ ,  $T_0$ ,  $n_0$ ,  $a_0$  - значения давления, температуры, концентрации молекул и скорости звука в покоящемся газе (параметры торможения),  $a$  - локальная скорость звука,  $\gamma = C_p/C_v$  - показатель адиабаты. Зависимость скорости потока газа от температуры определяется выражением [9]

$$u = \sqrt{\frac{2}{\gamma-1} \left(1 - T/T_0\right)} a_0. \quad (12)$$

В случае свободно расширяющейся изэнтропической струи при  $X > 3d_*$ , где  $X$  - координата вдоль оси потока, отсчитываемая от отверстия, диаметром  $d_*$ , имеет место следующая аппроксимация [10]

$$\frac{n}{n_0} = A \left(\frac{d_*}{x}\right)^2, \quad (13)$$

где  $A$  - коэффициент, зависящий от  $\gamma$  (для  $\gamma = 1,4$   $A = 0,1$ ), т.е. справедливо приближение точечного источника. Направление скорости потока соответствует направлению от отверстия, которое рассматривается как точечный источник, в данную точку.

Соотношение (13) определяет зависимость  $n = n(x)$ , с помощью которой из формул (11) и (12) могут быть найдены поле температуры  $T = T(x)$  и поле скорости потока  $u = u(x)$ .

#### Алгоритм и программа вычислений

Алгоритм моделирования процесса движения иона в заданном электрическом поле и в потоке спутного газа должен включать в себя следующие этапы:

розыгрыш времени или длины свободного пробега;

расчет траектории движения иона с заданными начальными условиями в электрическом поле за время свободного пробега и определение координат точки столкновения с молекулой спутного газа;

расчет параметров потока в точке столкновения и розыгрыш вектора скорости молекулы спутного газа;

моделирование столкновения иона с молекулой спутного газа и определение вектора скорости иона после соударения.

Программы, осуществляющие эти этапы моделирования, были включены в пакет прикладных программ по расчету ионно-оптических систем [11], позволяющий рассчитывать плоские двумерные и осесимметричные электростатические поля заданной системы электродов, проверять условия пересечения траекторий с границами области, рассчитывать двумерные гистограммы координатно-угловых, энерго-координатных и энерго-угловых распределений ионов в пучке.

Практическая реализация метода на ЭВМ состояла в расчете электрического поля, далее, в многократной имитации основного вероятностного процесса - "истории" иона, заключающейся в моделировании движения иона в рассчитанном электрическом поле, прерываемом столкновениями с молекулами газа согласно описанным выше этапам и, наконец, в построении гистограмм распределений ионов в пучке.

Быстродействие разработанной программы в случае, когда средняя длина свободного пробега  $\bar{\lambda}$  больше размера ячейки сетки значений потенциала  $\delta$ , определяется числом ячеек сетки вдоль траектории иона.

В случае  $\bar{\lambda} < \delta$  время счета определяется числом столкновений иона на рассматриваемом участке его траектории длины  $s$ . В модели Максвелла ( $v = \text{const}$ ,  $V_d = eE/\mu v$ ) число столкновений за время дрейфа  $\tau_d$

$$N = v\tau_d = vs/V_d \sim v^2 s/E \sim n^2 s/E.$$

В модели постоянного сечения столкновения

$$N = \nu \tau_d \sim s n \sigma.$$

Таким образом, в случае  $\bar{\lambda} < \delta$  время счета существенно зависит от концентрации молекул газа, особенно в модели Максвелла.

Время расчета одной траектории на промежутке  $s = 2$  мм при  $n = 10^{18}$  см<sup>-3</sup>, когда  $\bar{\lambda} < \delta$ , и  $E = 100$  В/см составило 1 мин на ЭВМ М4030.

С целью проверки построенного алгоритма рассматривалась задача о дрейфе ионов в однородном электрическом поле и в газе постоянной плотности. Для не слишком сильных электрических полей, когда рассеяние ионов на молекулах определяется поляризационным взаимодействием, этот дрейф хорошо описывается моделью Максвелла, в рамках которой имеют место следующие соотношения для дрейфовой скорости и средней кинетической энергии ионов [4]

$$V_d = eE/\mu \nu, \quad (14)$$

$$\frac{m}{2} \langle V^2 \rangle = \frac{3}{2} kT + \frac{1}{2} (m+M) V_d^2. \quad (15)$$

В данной работе в рамках модели Максвелла и изотропного рассеяния проверялось выполнение соотношений (14) и (15) в случае дрейфа ионов с массами  $m = 1; 28; 280$  а.е.м. в газе молекул  $N_2$  ( $M = 28$  а.е.м.) с концентрацией  $n = 1,4 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> в диапазоне напряженности электрического поля 200–2000 В/см.

Теоретические значения подвижности ионов, рассчитанные по формуле (14), следующие:  $k = 208$  см<sup>2</sup>/В·с для  $m = 1$ ,  $k = 53,7$  см<sup>2</sup>/В·с для  $m = 28$  и  $k = 39,8$  см<sup>2</sup>/В·с для  $m = 280$ . Результаты численного моделирования представлены в таблице. Видно,

Таблица

| $m$ ,<br>а.е.м. | $E$ ,<br>В/см | $T$ ,<br>К | $\frac{\nu}{c^{-1}}$ | $V_d$ ,<br>см/с    | $k$ ,<br>см <sup>2</sup> /В·с | $\frac{1}{2} m \langle V^2 \rangle$ ,<br>эВ | $\frac{3}{2} kT + \frac{m+M}{2} V_d^2$ ,<br>эВ |
|-----------------|---------------|------------|----------------------|--------------------|-------------------------------|---|--|
| 28              | 200           | 0          | $1,17 \times 10^9$   | $1,16 \times 10^4$ | 58,0                          | 0,0044                                      | 0,0039   |
|                 |               | 0          | $1,18 \times 10^9$   | $5,73 \times 10^4$ | 57,3                          | 0,102                                       | 0,096  |
|                 | 1000          | 100        | $1,17 \times 10^9$   | $5,72 \times 10^4$ | 57,2                          | 0,115                                       | 0,109  |
|                 |               | 1000       | $1,17 \times 10^9$   | $5,82 \times 10^4$ | 58,2                          | 0,238                                       | 0,228  |
|                 | 2000          | 1000       | $1,17 \times 10^9$   | $1,14 \times 10^5$ | 57,0                          | 0,515                                       | 0,509  |
| 1               | 200           | 0          | $4,42 \times 10^9$   | $4,66 \times 10^4$ | 233                           | 0,0361                                      | 0,0329   |
|                 | 2000          | 0          | $4,32 \times 10^9$   | $4,66 \times 10^5$ | 233                           | 3,65  | 3,29   |
| 280             | 200           | 0          | $8,62 \times 10^8$   | $8,77 \times 10^3$ | 43,9                          | 0,0137                                      | 0,0124   |
|                 | 2000          | 0          | $8,70 \times 10^8$   | $8,64 \times 10^4$ | 43,2                          | 1,35  | 1,20   |

что рассчитанные значения подвижности совпадают с теоретическими с точностью, не хуже 10%. С такой же точностью выполняется соотношение (15).

В качестве примера были рассчитаны транспортирующие свойства системы дифференциальной откачки источника ионов метода ЭРИАД [1], изображенной на рис.1. Она состоит из сопла 1 в виде конического отверстия с наименьшим диаметром  $d_* = 0,6$  мм и конического скиммера 2 с отверстием диаметром 0,1 мм и углом раствора 90°. Между соплом и скиммером приложено ускоряющее напряжение  $U_{c-cx}$ . Поток спутного газа моделировался в виде свободно расширяющейся сверхзвуковой изэнтропической струи, вытекающей из точечного источника в точке  $x = 0$ , переходящей за диском Маха в поток постоянной плотности. Расстояние до диска Маха при фоновом

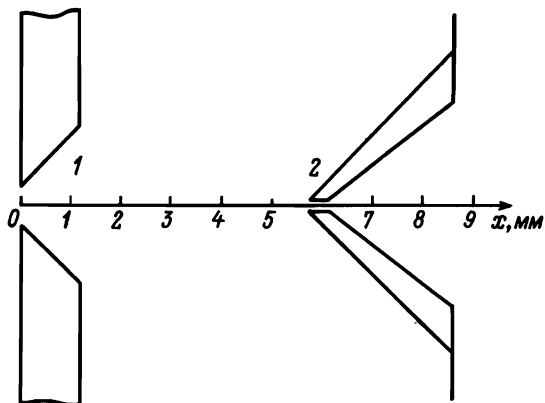


Рис.1. Система дифференциальной откачки источника ЭРИАД

вблизи отверстия сопла, где велика концентрация ионов и мало внешнее поле. Однако при  $E=10^2$  В/см,  $L=10^{-1}$  см из (2) получаем  $n_i \ll 10^9$  см $^{-3}$ , что выполняется уже на расстоянии  $3d_*$  от отверстия сопла при полном токе через сопло  $10^{-8}$  А.

Отметим, что на всем протяжении от сопла до скиммера велико значение числа Пекле  $Pe = u\ell/D$ , где  $D$  - коэффициент диффузии ионов.

На рис.2 представлены результаты расчета тока ионов с массой  $m=28$  а.е.м.,

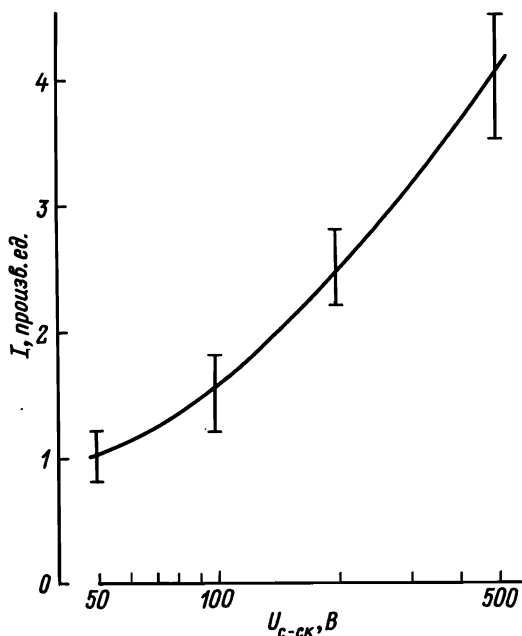


Рис.2. Ток ионов через скиммер

давлении  $p_{\infty} = 7$  торр и давлении торможения  $p_0 = 760$  торр,  $L_M \approx 0,7\sqrt{p_0/p_{\infty}} d_* = 4,4$  мм. Параметры потока постоянной плотности  $n = 1,6 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ ,  $T = 300$  К,  $u = 1,5 \cdot 10^4$  см/с.

Условие малого влияния тока ионов на поток (1) выполняется всюду в области между соплом и скиммером. Наибольшее значение параметра  $S$  достигается вблизи скиммера. Взяв для оценки  $n_i = 10^8$  см $^{-3}$ ,  $E = 10^4$  В/см,  $\ell = 1$  см,  $\rho = 10^{-4}$  г/см $^3$ , получаем  $S \approx 10^{-4}$ .

Условие (2) малого влияния объемного заряда не выполняется только

вблизи отверстия сопла, где велика концентрация ионов и мало внешнее поле. Однако при  $E=10^2$  В/см,  $L=10^{-1}$  см из (2) получаем  $n_i \ll 10^9$  см $^{-3}$ , что выполняется уже на расстоянии  $3d_*$  от отверстия сопла при полном токе через сопло  $10^{-8}$  А.

Отметим, что на всем протяжении от сопла до скиммера велико значение числа Пекле  $Pe = u\ell/D$ , где  $D$  - коэффициент диффузии ионов. На рис.2 представлены результаты расчета тока ионов с массой  $m=28$  а.е.м., попадающих в отверстие скиммера в зависимости от величины ускоряющего напряжения  $U_{c-ск}$ . Все результаты нормированы на одинаковую плотность тока ионов в сечении  $\chi = 3d_*$ . Для всего рассматриваемого интервала разности потенциалов  $U_{c-ск} = 10-500$  В имеет место приблизительная линейная зависимость тока от величины  $U_{c-ск}$ .

Гистограммы энергетических распределений ионов, попадающих в отверстие скиммера, для различных значений  $U_{c-ск}$  и различных масс ионов представлены на рис.3. Видно, что ширина энергетического распределения растет с ростом разности потенциалов. Отметим также различный характер энергетических распределений в случае  $m = M$ , когда максимальны потери энергии при столкновениях, и в случае  $m \gg M$  или  $m \ll M$ , когда потери энергии малы.

Следующая серия расчетов была выполнена для второй ступени системы дифференциальной откачки источника ЭРИАД - для области за скиммером (рис.1). Электрическое поле определяется разностью потенциа-



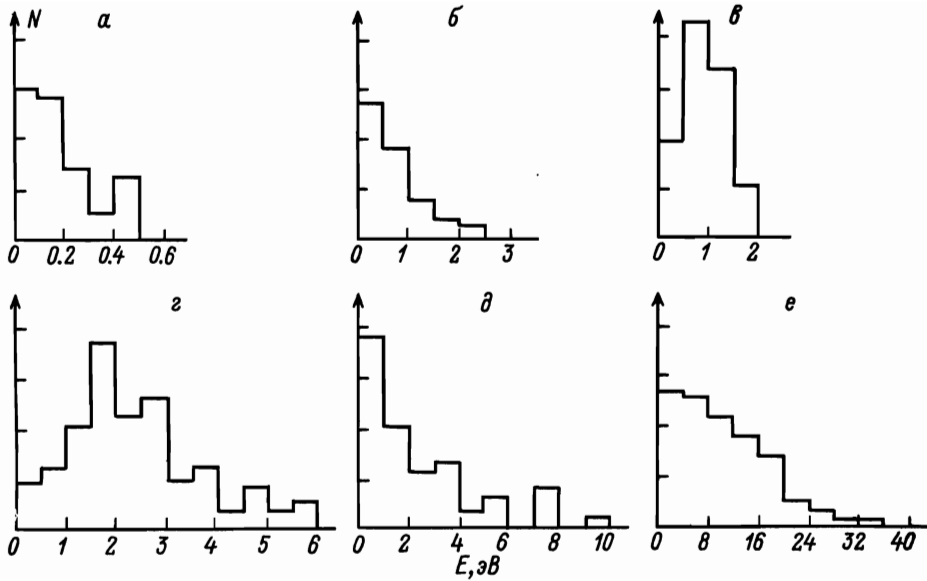


Рис.3. Гистограммы энергетических распределений ионов, прошедших в отверстие скиммера:

| $U_{с-ск}, В$       | а  | б   | в   | г   | д   | е   |
|---------------------|----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $m, \text{ а.е.м.}$ | 50 | 100 | 100 | 100 | 200 | 500 |
|                     | 28 | 28  | 280 | 1   | 28  | 28  |

лов  $U_{с-ск}$  между скиммером и ускоряющим плоским электродом, расположенным на расстоянии 8 мм от отверстия скиммера. Давление спутного газа в этой области меняется от 20–30 до  $10^{-4}$  –  $10^{-5}$  торр. В этой области происходит переход к бесстолкновительному движению ионов, т.е. отрыв пучка ионов от потока газа. Именно здесь формируются значения параметров пучка, знание которых необходимо для расчета ионно-оптических систем, оптимально согласующих характеристики пучка с характеристиками масс-спектрометра.

Скиммер работает в режиме второго сопла. Поток газа за скиммером моделировался в виде свободно расширяющейся изэнтропической струи, концентрация молекул в которой меняется по закону (13), где  $x$  – координата вдоль оси, отсчитываемая от координаты отверстия скиммера. В расчетах бралось  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $d_x = 10^{-2} \text{ см}$ ,  $A = 0,2$ ,  $T_0 = 300 \text{ К}$ . Моделировалось движение ионов  $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_2$  ( $m = 37 \text{ а.е.м.}$ ) на промежутке  $x$  от 0,1 до 3 мм. В этой области по-прежнему выполняется условие (1). Число Пекле меняется от значений  $Pe \sim 10^1$  до  $Pe \ll 1$ . Влиянием объемного заряда пучка пренебрегалось. Варьировалась разность потенциалов  $U_{с-ск}$  и рассчитывались характеристики пучка в различных его сечениях на указанном промежутке.

На рис.4 представлены фазовые контуры и гистограммы координатно-угловых распределений ионов пучка. В силу аксиальной симметрии пучка фазовые контуры симметричны относительно начала координат, поэтому на рисунке приведены только половины этих контуров. При малых  $x$  фазовый контур расположен в I-й четверти пространства  $R-\theta$  (радиус-угол) и сильно вытянут. Это означает, что ионный пучок вморожен в газовую струю и расширяется вместе с ней. Начиная с некоторого  $x$ , тем меньшего, чем больше  $U_{с-ск}$ , фазовый контур начинает разворачиваться, приближаясь к оси  $R$ . Это означает, что действие электрического поля на пучок

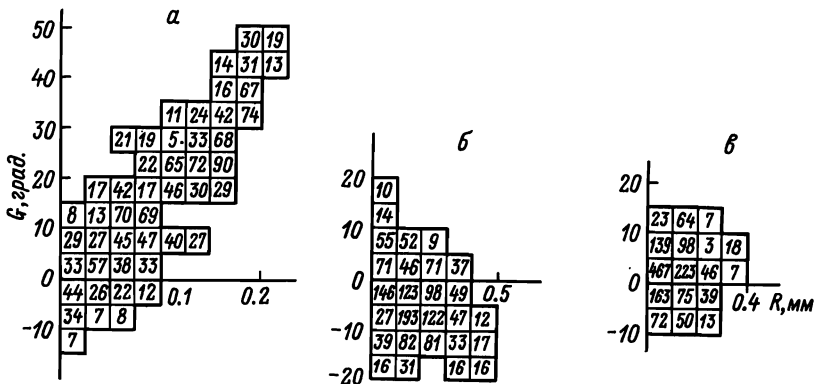


Рис.4. Гистограммы координатно-угловых распределений и фазовые контуры пучка ионов  $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_2$  ( $m=37$  а.е.м.) за скиммером при  $U_{\text{иск}}=1000$  В в различных сечениях пучка:  $x=0,3$  мм (а),  $x=1$  мм (б),  $x=3$  мм (в)

становится сравнимым с действием газового потока. При  $x=3$  мм ионы пучка уже практически не испытывают столкновений с молекулами газа, и форма фазового контура и распределения на нем могут быть использованы в качестве начальных данных для расчета ионно-оптических систем.

На рис.5 приведены гистограммы энергетических распределений ионов пучка в

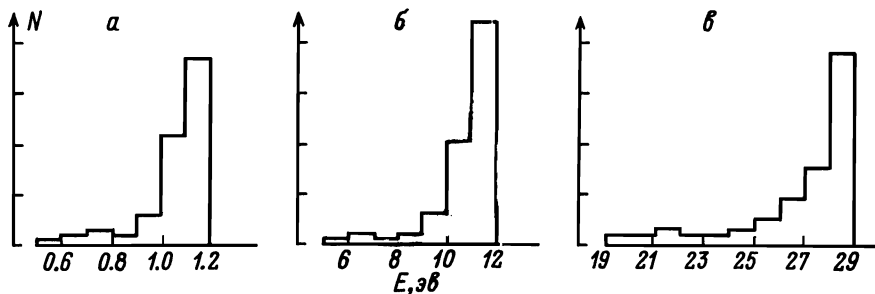


Рис.5. Гистограммы энергетических распределений ионов  $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_2$  ( $m=37$  а.е.м.) в сечении  $x=3$  мм за скиммером при  $U_{\text{иск}}=100$  В (а),  $U_{\text{иск}}=1000$  В (б),  $U_{\text{иск}}=2500$  В (в)

сечении  $x=3$  мм. Отметим, что максимум распределения приблизительно соответствует энергии, приобретаемой ионом в электрическом поле на пути от отверстия скиммера до сечения  $x=3$  мм без столкновения с газом. Это означает, что большая часть столкновений происходит в ближайшей окрестности отверстия скиммера, куда внешнее электрическое поле проникает слабо. Разброс по энергиям, как видно из рис.5, пропорционален величине  $U_{\text{иск}}$ . Фрагментация ионов в процессе их транспортировки в электрическом поле, которая здесь не учитывалась, должна влиять на энергетическое распределение. Поэтому степень отклонения экспериментально измеренных энергетических распределений от рассчитанных характеризует интенсивность фрагментации. Заметим, что процессы фрагментации могут быть без труда включены в разработанную схему численного моделирования.

Полученные фазовые контуры позволяют рассчитывать нормализованный эмиттанс

пучка в разных его сечениях. Он является инвариантом для пучка без диссипации. Степень отклонения нормализованного эмиттенса от постоянного значения характеризует меру воздействия на пучок потока газа. Выход этой величины в зависимости от  $x$  на постоянное значение позволяет определить координату зоны отрыва пучка ионов от потока газа.

Разработанная расчетная методика позволяет контролировать число частиц в пучке, долетевших до заданного сечения, и тем самым учитывать потери ионного тока за счет диффузии и осаждения на стенках. Расчеты показали, что эти потери зависят от массы ионов, поэтому они являются одной из причин дискриминаций по массе.

Приведенные примеры численного моделирования транспортировки ионов в реальном электрогазодинамическом поле системы дифференциальной откачки источника ЭРИАД показывают эффективность разработанной расчетной методики. С ее помощью могут быть получены детальные характеристики пучка в различных его сечениях в зависимости от конфигурации электродов, величины электрического поля и параметров газового потока. Тем самым она может быть использована для оптимизации конструкции и параметров источников ионов, а также для выяснения механизмов физических процессов, протекающих в источниках ионов, работающих при высоких давлениях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Александров М.Л., Галль Л.Н., Краснов Н.В., Николаев В.И., Павленко В.А., Шкуров В.А.//ДАН СССР, 1984. Т.277. № 2. С.379-383.
2. Kambara H.//Anal.Chem. 1982.V. 54. N 1. P.143-146.
3. Yamashita M., Fenn J.B.//J.Phys.Chem.1984. V.88. N 20. P.4451-4459.
4. Мак-Даниель И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир, 1976.
5. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1971.
6. Skullerud H.R.//J.Phys.B. 1973. V.6. N 4. P. 728-742.
7. Lin S.L., Bardsley J.N.//J.Chem.Phys. 1977. V.66. N 2. P.435-445.
8. Веренчиков А.Н., Долгов К.А., Николаев В.И., Краснов Н.В., Куснер Ю.С., Шербаков А.П.//Тез.докл.IV Всес.конф.по масс-спектрометрии. Сумы, 1986. Ч.VI. С.20.
9. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. М.: Наука, 1969.
10. Ashkenas H.A., Sherman F.S.//Proceedings of the IV Inter.Symposium on Rarefied Gas Dynamics.New York, Academic Press.1966.V.2. P.84.
11. Огородников А.К.//Тез.докл.IV Всес.конф.по масс-спектрометрии. Сумы, 1986. Ч.1. С.54.