

УДК 519.688 : 537.534.7

© А. П. Щербаков

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ ПУЧКА ИОНОВ В ИСТОЧНИКАХ С ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ДАВЛЕНИЯХ С УЧЕТОМ БИПОЛЯРНОГО ОБЪЕМНОГО ЗАРЯДА

Разработана методика моделирования ионно-электронных процессов формирования ионных пучков с учетом биполярного объемного заряда ионов и электронов и процессов взаимодействия с нейтральной газовой компонентой. Методика реализована в виде компьютерных алгоритмов и программ.

ВВЕДЕНИЕ

Имеется сравнительно немного работ по компьютерному моделированию процессов формирования ионных пучков в источниках ионов с электронным ударом. Это обусловлено не столько отсутствием потребностей и интереса со стороны разработчиков источников ионов, сколько крайней сложностью процессов и описывающих их моделей и алгоритмов и трудоемкостью вычислений.

В серии работ [1–3] разрабатывался метод больших частиц с целью исследования влияния биполярного объемного заряда на электронно-ионные процессы в системах с ионизацией электронным ударом. Применение метода больших частиц позволило исследовать не только некоторые статические характеристики формируемого пучка ионов, но и промоделировать динамику процесса во времени. Однако сложность алгоритма, его привязанность к конкретной геометрии системы и большие затраты машинного времени позволили получить лишь качественные результаты, т.к. имевшиеся в то время машинные ресурсы ограничивали моделирование системы лишь несколькими модельными частицами. При этом не учитывались процессы взаимодействия ионов с молекулами нейтральной газовой компоненты и рассмотрение ограничивалось системами, где давление газа не превышало 10^{-3} – 10^{-4} мм рт. ст.

Напротив, в работах [4–6], где методами компьютерного моделирования исследовалось формирование ионного пучка в газодинамических источниках ионов, акцент был сделан на рассмотрении процессов взаимодействия ионов с газовой компонентой. Разработанная методика и компьютерные алгоритмы были включены в пакет прикладных программ «Дельта» моделирования транспортировки пучков заряженных частиц в электростатических полях [7], и поэтому с их помощью стал доступен для исследования широкий

класс систем с осесимметричной и плоской двумерной геометрией. Однако эти алгоритмы и программы, предназначенные для исследования формирования и транспортировки униполярных ионных пучков, не могли быть использованы для компьютерного моделирования источников ионов с электронным ударом, где важную роль помимо положительного ионного играет отрицательный электронный объемный заряд.

Целью настоящей работы была разработка методов, компьютерных алгоритмов и программ моделирования ионно-электронных процессов формирования ионных пучков с учетом биполярного объемного заряда и процессов взаимодействия с нейтральной газовой компонентой. Последнее обстоятельство крайне важно для источников ионов в системе газовой хроматограф — масс-спектрометр, где используются интенсивные газовые потоки и давление газа в источнике достигает до 1 мм рт. ст. Кроме того, методика должна быть применима к системам с варьруемой геометрией подлежащих элементов с целью исследования влияния конфигурации и величины внешнего поля на те или иные параметры формируемого пучка и выбора оптимальных вариантов при проектировании источников ионов.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исследование процесса формирования ионных пучков в источниках ионов с электронным ударом равнозначно исследованию параметров ионной компоненты слабоионизованной плазмы во внешних полях. Как известно [8], эта задача сводится к решению набора кинетических уравнений по числу компонент системы и уравнений поля. Рассматриваемая система состоит из электронов, ионов и молекул или атомов нейтрального газа. Искомой функцией является одночастичная функция распределения ионов.

Широко распространенным приемом при моделировании плазмы является приближение заданного фона [8], когда частицы одной из компонент образуют фон с заданной плотностью. Если следить за динамикой лишь массивных модельных ионов, то полагают, что распределение электронов является известной функцией потенциала. В настоящей работе полагается, что электроны находятся в тепловом равновесии в потенциальном поле и подчиняются распределению Больцмана

$$n_e = n_{0e} \exp(e(\varphi - \varphi_0)/kT_e), \quad (1)$$

где φ — потенциал электрического поля, φ_0 и n_{0e} — соответственно среднее значение потенциала и средняя концентрация электронов в области ионообразования, T_e — электронная температура. Это приближение означает, что электроны как бы безынерционно следуют за изменениями распределения потенциала («бесконечно легкие» электроны).

Распределение нейтральной компоненты (неионизованный газ) предполагается известным. Это, как правило, равномерное распределение в ионизационной камере, монотонно спадающее за ее пределами.

В такой постановке задачи система описывается двумя дифференциальными уравнениями в частных производных: кинетическим уравнением для одночастичной функции распределения ионов $f(r, p, t)$ и уравнением Пуассона для электростатического потенциала. Полагая, что по ионной компоненте система является бесстолкновительной (пренебрегаем парными кулоновскими взаимодействиями ионов друг с другом), в качестве кинетического уравнения берем уравнение Власова с диссипативным членом, описывающим рассеяние ионов на молекулах нейтрального газа,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} + F \frac{\partial f}{\partial p} = I_{\text{ст}}, \quad (2)$$

где $F = eE$, а напряженность электрического поля $E = -\nabla\varphi$.

Потенциал электростатического поля определяется уравнением Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi e(n_i - n_e). \quad (3)$$

Правую часть уравнения Пуассона составляет сумма плотностей объемного заряда ионной и электронной составляющих с концентрациями соответственно

$$n_i = n_{0i} \int f d^3 p \quad \text{и} \quad n_e = n_{0e} \exp\left(\frac{e(\varphi - \varphi_0)}{kT_e}\right).$$

Уравнение Власова решается методом моделирования ионных траекторий в поле, полученном

на предыдущем шаге итераций, с учетом рассеяния на молекулах остаточного газа. Полученный на этом этапе ансамбль траекторий служит для процедуры раздачи заряда ионной компоненты и формирования правой части уравнения Пуассона. Далее проводится процедура решения уравнения Пуассона, которое в данной постановке из-за наличия в правой части члена, описывающего электронную плотность и зависящего от потенциала, является нелинейным и может быть решено только на основе той или иной итерационной процедуры, построение которой является самостоятельной задачей [9].

Таким образом, в данной постановке с математической точки зрения задача включает в себя две взаимосвязанные и взаимозависимые итерационные процедуры решения кинетического уравнения и уравнения поля.

2. ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ И ХАРАКТЕРНЫЕ ВЕЛИЧИНЫ СИСТЕМЫ

Обозначим через $f_i(r, p, t)$ и $f_e(r, p, t)$ одночастичные функции распределения ионов и электронов, n и n_s — концентрацию нейтральных молекул газа-носителя и молекул пробы соответственно, T_i и T_e — ионную и электронную температуры.

Дебаевский радиус экранирования для электронно-ионной системы определяется формулой

$$\lambda_D = (\lambda_{Di}^{-2} + \lambda_{De}^{-2})^{-1/2},$$

где $\lambda_{Di} = (kT_i/4\pi e^2 n_i)^{1/2}$ — ионный дебаевский радиус, $\lambda_{De} = (kT_e/4\pi e^2 n_e)^{1/2}$ — электронный дебаевский радиус, k — постоянная Больцмана.

Ионная температура соответствует температуре нейтральных частиц в области ионизации и составляет сотые доли эВ. Электронная температура определяется средней энергией вторичных электронов и составляет несколько эВ. Поскольку $T_i \ll T_e$ и $n_e \approx n_i$, то $\lambda_{Di} \ll \lambda_{De}$ и $\lambda_D \approx \lambda_{Di}$.

Полагая $n_i = 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_i = 300 \text{ К}$, получаем $\lambda_D \approx 4 \times 10^{-3} \text{ см}$. Число Дебая (число ионов в дебаевской сфере) $n_D = n_i \lambda_D^3 \sim 10^2$. Таким образом, $n_D \gg 1$ и систему ионов можно считать бесстолкновительной, т.е. можно пренебречь парными кулоновскими взаимодействиями — столкновениями ионов друг с другом, и в качестве кинетического уравнения для ионной функции распределения взять уравнение Власова [8].

Суммарный заряд ионов пробы, образующихся в единицу времени под действием электронного удара в области пучка первичных электронов на единицу его длины, определяется следующей формулой:

$$J_+ = I_{0e} n_s \sigma_i, \quad (4)$$

где I_{0e} — ток первичных электронов, σ_i — сечение ионизации нейтральной молекулы электронным ударом. Величину J_+ можно назвать начальной линейной плотностью ионного тока. «Коэффициент ионизации» $\kappa = n_s \sigma_i \approx 1$ при $\sigma_i = 3 \times 10^{-17} \text{ см}^2$ и $n_s = 3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (соответствует давлению 1 мм рт. ст. при $T=300 \text{ К}$).

Сечение рассеяния ионов на молекулах остаточного газа, определяемое дальнедействующими поляризационными силами:

$$\sigma = 2\pi \frac{e}{v} \sqrt{\frac{\alpha}{\mu}},$$

где α — поляризуемость молекулы, μ — приведенная масса, v — скорость относительного движения сталкивающихся частиц. Это сечение значительно больше сечения ионизации электронным ударом и в зависимости от энергии относительного движения лежит в диапазоне $10^{-14} - 10^{-16} \text{ см}^2$. В частности, для пары $\text{N}_2^+ - \text{N}_2$ при $E = 1 \text{ эВ}$ $\sigma = 3 \times 10^{-15} \text{ см}^2$. Частота столкновений иона с молекулами газа $\nu = 2\pi n \sqrt{a/\mu}$ определяет среднее время пролета иона между последовательными соударениями. Процедура моделирования стохастических ионных траекторий в электрическом поле с учетом столкновений с молекулами неоднородного газового потока описана в работах [10, 11].

Перечислим в заключение этого раздела основные свободные параметры развиваемой модели, определяющие физические характеристики системы. Их значения могут варьироваться в зависимости от условий задачи. Это:

m — масса иона;

M — масса молекулы газа;

$\kappa = n_s \sigma_i$ — коэффициент ионизации электронным ударом молекул пробы;

n — концентрация молекул газа;

I_{0e} — ток первичных электронов;

α — поляризуемость молекул газа;

T_e — электронная температура;

n_{0e} — концентрация электронов в области ионообразования с потенциалом $\varphi = \varphi_0$, нормированный коэффициент в формуле (1) распределения Больцмана. Отметим, что в нашей модели значение параметра n_{0e} задается, а не является результатом моделирования.

Кроме того, варьированной, как уже говорилось выше, является геометрия системы электродов, определяющая внешнее поле — плоское или осесимметричное, а также потенциалы на них.

3. ИТЕРАЦИОННАЯ СХЕМА

Перейдем к безразмерным переменным в уравнении (3), вводя новые переменные

$$u = e(\varphi_0 - \varphi)/kT_e, \quad x = r/\lambda_{De}, \quad q = n/n_{0e}.$$

Тогда уравнение Пуассона (3) запишется в виде

$$\Delta_x u = q - \exp(-u). \quad (5)$$

Для решения этого нелинейного уравнения в работе используется итерационная схема Ньютона [8]. А именно, если решается нелинейное уравнение $F(u) = 0$, где F — дифференцируемая необходимая число раз функция и u^k — результат k -й итерации, то $(k+1)$ приближение находится из уравнения

$$(\partial F/\partial u)^k u^{k+1} = -F(u^k) + (\partial F/\partial u)^k u^k.$$

Применительно к уравнению (5) мы приходим к итерационной схеме

$$(\Delta - \exp(-u^k)) u^{k+1} = q - \exp(-u^k)(1+u^k). \quad (6)$$

При переходе к конечноразностному уравнению на двумерной сетке получаем в левой части пятиточечный разностный оператор, коэффициенты которого зависят от u^k -решения, полученного на предыдущей итерации. Следовательно, матричный оператор данной итерационной схемы имеет переменные коэффициенты, зависящие от координат и изменяющиеся на каждой итерации.

Переписывая уравнение (6) в виде

$$\Delta u^{k+1} = q - \exp(-u^k) + \exp(-u^k)(u^{k+1} - u^k)$$

и пренебрегая в правой части последним слагаемым, приходим к итерационной схеме

$$\Delta u^{k+1} = q - \exp(-u^k). \quad (7)$$

Рассмотрим эти схемы более подробно. Система конечноразностных уравнений на двумерной сетке, построенных по пятиточечному шаблону, соответствующих уравнению Пуассона (5), имеет вид

$$u_0 = c_1 u_1 + c_2 u_2 + c_3 u_3 + c_4 u_4 + c_5, \quad (8)$$

где u_0 — значение потенциала в рассматриваемом узле, u_1, \dots, u_4 — значения потенциала в соседних узлах, c_1, \dots, c_4 — коэффициенты, зависящие от геометрии, c_5 — коэффициент, определяемый правой частью уравнения (5). Для схемы (7) этот коэффициент зависит только от значений потенциала, полученных на предыдущем шаге итераций. В этом случае система уравнений является линейной и для ее решения могут быть использованы стандартные методы, в частности реализованный в комплексе программ «Дельта» [7] метод последовательной верхней релаксации (SOR). Однако, как показали численные эксперименты, такая итерационная схема оказалась неустойчивой применительно к нелинейному уравнению (5).

В случае итерационной схемы (6) коэффициент c_5 зависит от искомого значения u_0 потенциала на

данном шаге итераций. Уравнение (8) становится нелинейным, и его решение ищется на основе ньютоновских итераций, которые производятся на каждом шаге итераций метода SOR. Такая схема оказалась устойчивой.

Итерационная схема решения всей задачи, т.е. совместного решения двух уравнений (2) и (3), представлена на рис. 1 и содержит два цикла итераций. Каждый шаг внешних итераций включает в себя решение кинетического уравнения (2) для определенного на предыдущем шаге распределения поля и определение распределения положительно-го объемного заряда ионной компоненты. Для полученного распределения $n_i(r)$ проводится цикл внутренних итераций решения нелинейного уравнения Пуассона (3) методом последовательной верхней релаксации в комбинации с ньютоновскими итерациями в соответствии с вышеизложенным.

На первом шаге внешних итераций решается уравнение Лапласа ($n_i = n_e = 0$) в заданной области с граничными условиями, определяемыми потенциалами на полежадающих элементах. В рассчитанном поле проводится моделирование ионных траекторий с учетом столкновений с молекулами

нейтральной газовой компоненты и определяется распределение $n_i(r)$ — метод «стохастических трубок тока» [4]. Полученное распределение используется для формирования правой части уравнения Пуассона (3), после чего проводится цикл внутренних итераций.

По завершении цикла внутренних итераций определяется среднее значение потенциала φ_0 в области ионообразования. Для источников ионов с ионизацией электронным ударом это будет область пучка первичных электронов. Рассчитанное распределение потенциала и значение φ_0 используются для определения распределения отрицательного объемного заряда электронной компоненты n_e .

При формировании правой части уравнения Пуассона при переходе к следующему шагу итераций используется метод нижней релаксации по ионной составляющей плотности объемного заряда:

$$n_i^{\text{new}} = \omega_i n_i + (1 - \omega_i) n_i^{\text{old}}.$$

Распределение $n_i^{\text{new}}(r)$ остается неизменным в продолжение всего цикла внутренних итераций. Выбор релаксационных параметров осуществлялся из соображений максимальной скорости сходимости при сохранении устойчивости процесса.

Критерием сходимости цикла внутренних итераций была установлена заданная точность вычисления потенциала в узлах сетки. В качестве критерия сходимости цикла внешних итераций выбиралось условие постоянства в пределах заданной точности некоторых параметров системы: суммарных ионного и электронного зарядов системы, значения среднего потенциала в области ионообразования. Именно эти параметры наиболее заметно менялись от одной итерации к другой. Использование в качестве критерия сходимости распределения ионной плотности $n_i(r)$ неприемлемо из-за стохастичности ионных траекторий. Электронная плотность $n_e(r)$ в нашей модели однозначно определяется распределением потенциала в соответствии с уравнением (1).

Дискретизация уравнений осуществляется на прямоугольной сетке с переменным шагом. При решении уравнения Пуассона используется метод конечных разностей. Объемный заряд трактуется в терминах частица–сетка [12]: распределение заряда по узлам сетки определяется временем, проведенным частицей в данной ячейке. Сила рассматривается как полевая величина и аппроксимируется на той же сетке. При этом учитываются как ионная, так и электронная составляющие поля сил.

4. ПРИМЕР РАСЧЕТА

В качестве примера была рассмотрена система, представленная на рис. 2. Это трехэлектродная



Рис. 1. Итерационная схема решения задачи — внешние итерации

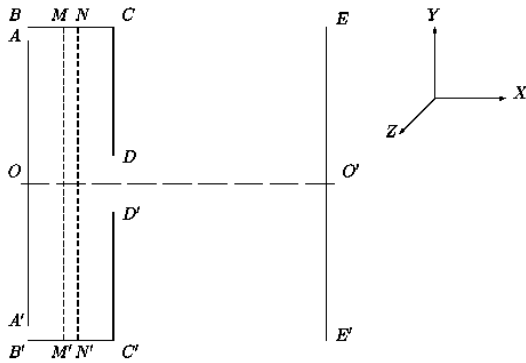


Рис. 2. Трехэлектродная система, создающая плоское поле. Плоскость $Y = 0$ (ось OO' на рисунке) — плоскость симметрии. Ось X направлена вдоль OO' . Отрезок AA' лежит на оси Y . Координаты точек (мм): $A(0, 10)$, $B(0, 11)$, $C(6, 11)$, $D(6, 2)$, $E(21, 11)$, $M(2,5, 11)$, $N(3,5, 11)$

система с плоскостью симметрии $Y=0$ (ось OO' на рисунке), создающая плоское (двумерное) поле. Обозначим значения потенциалов на электродах AA' , $BCDD'C'B'$ и EE' соответственно V_1 , V_0 , и V_2 , причем $V_1 \geq V_0 \geq V_2$. Для положительно заряженных ионов электрод AA' играет роль выталкивающего, а электрод EE' — вытягивающего. Полоса $MNN'M'$ — область пучка первичных электронов. В этой области происходит образование ионов. В рассматриваемой модели предполагается, что линейная плотность заряда ионов, образующихся в единицу времени (4), однородна.

Обсудим, в какой мере рассматриваемая двумерная модель описывает реальную трехмерную систему, когда электроды AA' , $BCDD'C'B'$ и диафрагма DD' имеют конечные размеры в поперечном направлении (вдоль оси Z). Для этого рассмотрим трехмерную область, ограниченную двумя параллельными плоскостями $z = \pm h/2$, т.е. слой толщины h . Величиной, характеризующей неоднородность поля электродов в поперечном направлении, будет ширина вдоль оси Z диафрагмы DD' . Обозначим ее H_d . Величиной, характеризующей неоднородность поля объемного заряда в поперечном направлении, будет ширина пучка первичных электронов H по оси Z . Поле и плотность объемного заряда в слое толщины h не будут зависеть от координаты z , если h мало по сравнению с поперечными размерами системы и пучка первичных электронов:

$$h \ll \min(H, H_d). \quad (9)$$

С другой стороны, толщина слоя должна быть достаточно большой, не меньше средней длины свободного пробега ионов в нейтральном газе.

Таким образом, рассматриваемая двумерная модель электронно-ионных процессов формирования ионного пучка описывает процессы в узком слое толщины h , удовлетворяющей условию (9).

Модель позволяет учитывать также постоянную электронную плотность пучка первичных электронов, сосредоточенных в полосе $MNN'M'$. Пусть V_{0e} — скорость первичных электронов. Полагая, что ток I_{0e} и сечение $S = aH$ (здесь a — ширина полосы MN) пучка первичных электронов остаются постоянными вдоль оси Y , получаем для концентрации N_{0e} первичных электронов

$$N_{0e} = I_{0e} / (eaH V_{0e}) = 1,27 \times 10^6 (I_{0e} / aH) \text{ мм}^{-3}.$$

Численный коэффициент в последнем равенстве получен для энергии электронов 70 эВ ($V_{0e} = 4,96 \times 10^8$ см/с), I_{0e} берется в мА, a и H — в мм. Плотность заряда первичных электронов, отнесенная к единице площади поверхности рассматриваемого слоя,

$$\begin{aligned} q_{0e} &= eN_{0e}h = 2,02 \times 10^{-7} (I_{0e}h/aH) \text{ мкК/мм}^2 = \\ &= 2,02 \times 10^{-7} (i_{0e}/a) \text{ мкК/мм}^2, \end{aligned}$$

где $i_{0e} = I_{0e}h/H$ — ток первичных электронов в рассматриваемом слое.

Величина заряда ионов, образующихся в единицу времени в рассматриваемом слое, отнесенная к единице длины пучка,

$$i_+ = i_{0e} n_s \sigma_i = \kappa i_{0e},$$

где κ — коэффициент ионизации.

Результаты счета представлены на рисунках 3–5.

Были выбраны следующие значения параметров: толщина рассматриваемого слоя $h=0,01$ мм, «толщина» первичного электронного пучка $H=4$ мм, ток первичных электронов $i_{0e}=0,0025$ мА (соответствует полному току $I_{0e}=1$ мА).

На рис. 3 представлены эквипотенциали поля рассматриваемой системы электродов с потенциалами $V_1=50$ В, $V_0=0$ и $V_2=-200$ В без учета объемного заряда (рис. 3, а) — лапласово поле, и с учетом объемного заряда (рис. 3, б). Рисунок демонстрирует кардинальную перестройку поля под действием объемного заряда ионов и электронов.

Типичная картина ионных траекторий представлена на рис. 4.

Рис. 5 показывает распределение потенциала системы на оси $Y=0$ для различных значений концентрации вторичных электронов n_{0e} при давлении газа 0,5 мм рт. ст., когда коэффициент ионизации $\kappa = 0,5$.

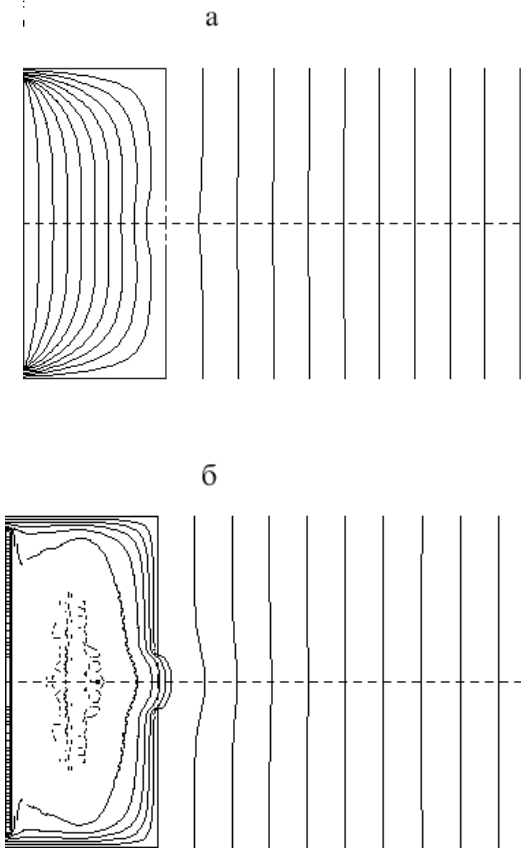


Рис. 3. Экипотенциали лапласова поля (без учета объемного заряда) (а) и поля с учетом объемного заряда (б) системы электродов рис. 2 с потенциалами $V_1=50$ В, $V_0=0$ и $V_2=200$ В

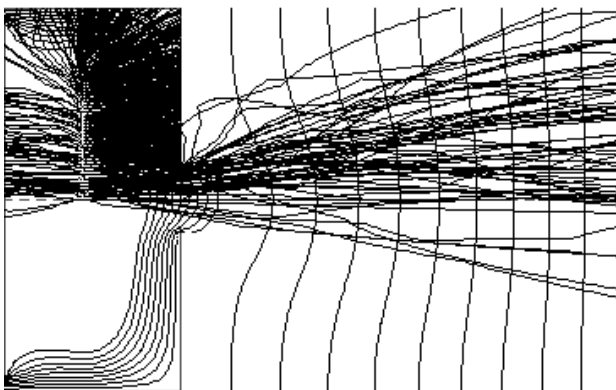


Рис. 4. Ионные траектории в системе. Система симметрична относительно оси $Y=0$, поэтому показаны только траектории с начальными координатами

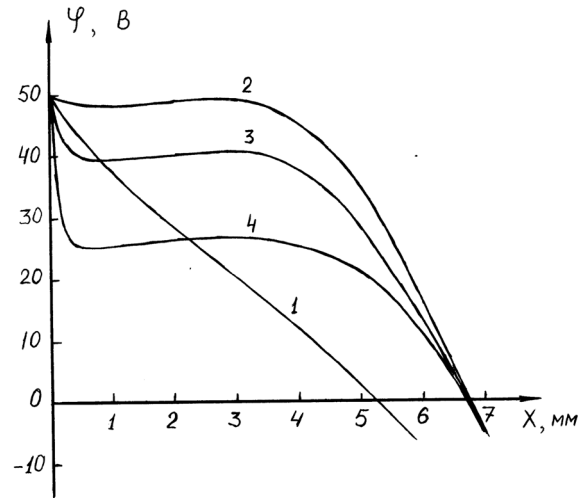


Рис. 5. Распределение потенциала системы в камере ионизации на оси $Y=0$: 1 — лапласово поле; 2 — $p = 0,5$ мм рт. ст., $n_{0e} = 4,4 \times 10^{11}$ см $^{-3}$; 3 — $p = 0,5$ мм рт. ст., $n_{0e} = 5,0 \times 10^{11}$ см $^{-3}$; 4 — $p = 1$ мм рт. ст., $n_{0e} = 1,9 \times 10^{12}$ см $^{-3}$

Напомним, что параметр n_{0e} в модели является свободным и его значение должно задаваться исходя из некоторых дополнительных условий. Кривая 1 — распределение поля в отсутствии объемного заряда (лапласово поле). Рисунок демонстрирует кардинальное влияние электронного объемного заряда на распределение поля в камере ионизации (область $BCDD'C'B'$ на рис. 2). Из-за низкой подвижности ионов в области ионизации при наличии газовой среды образуется повышенная концентрация положительного объемного заряда, не полностью скомпенсированного отрицательным объемным зарядом электронов при низких значениях n_{0e} , благодаря чему формируется максимум в распределении потенциала. Значение этого нескомпенсированного максимума растет с ростом давления газа в камере ионизации. С увеличением значения n_{0e} происходит компенсация положительного объемного заряда и распределение поля принимает вид кривой 2 на рис. 5. Модель позволяет контролировать величины суммарных электронного и ионного объемных зарядов, что позволяет ввести критерий выбора величины n_{0e} — равенство этих суммарных зарядов. Этому критерию квазинейтральности плазмы удовлетворяет кривая 2 рис. 5. В этом случае в большей части камеры ионизации устанавливается примерно постоянный потенциал: плазма экранирует поле как выталкивающего электрода, так и вытягивающего. Значение этого потенциала

зависит от параметров плазмы, давления газовой компоненты, конфигурации полезадающих элементов и потенциалов на них. Кривая 4 на этом рисунке — распределение потенциала квазинейтральной плазмы при давлении газа в камере ионообразования 1 мм рт. ст., когда $k = 1$. Кривая 3 соответствует перекомпенсации — преобладает отрицательный электронный заряд.

Распределение потенциала в камере ионообразования определяет параметры ионного пучка, генерируемого источником ионов, которые должны учитываться при выборе ионно-оптической системы анализатора, в котором используется рассматриваемый источник ионов. Модель позволяет вычислять эти параметры. Эти результаты будут рассмотрены в следующей работе.

ВЫВОДЫ

Разработана методика моделирования ионно-электронных процессов формирования ионных пучков с учетом биполярного объемного заряда ионов и электронов и процессов взаимодействия с нейтральной газовой компонентой. Методика реализована в виде компьютерных алгоритмов и программ.

Разработанная методика позволяет получать широкий спектр характеристик ионного пучка в зависимости от геометрии источника и формы полезадающих элементов, потенциалов на них, параметров плазмы (электронной температуры, давления, степени ионизации), давления газа, эффективности ионизации молекул пробы, массы ионов и молекул газа.

Показаны важность учета как ионной, так и электронной составляющих объемного заряда при моделировании ионно-электронных процессов в источниках ионов с электронным ударом и их критическое влияние на распределение поля в камере ионообразования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мальков А.С. О применении метода «больших частиц» для расчета ионных источников с ионизацией электронным ударом // ЖТФ. 1983. Т. 53, № 2. С. 562–566.
2. Лазарев С.В., Мальков А.С., Хасин Ю.И. Исследование энергетического распределения ионов в источнике с ионизацией электронным ударом // Научные приборы. 1984. № 33. С. 17–23.
3. Галль Л.Н., Мальков А.С., Огородников А.К., Тимченко Н.А. Расчет вертикального эмиттанта пучка в источнике ионов с электронным ударом с учетом объемного заряда // Научное приборостроение. Теоретические и экспериментальные исследования. Л.: Наука, 1984. С. 17–22.
4. Бородинов А.Г., Ретивых С.Н., Щербаков А.П. Метод стохастических траекторий для анализа транспортирующих систем с учетом газодинамического фактора // Методы расчета электронно-оптических систем. Алма-Ата, 1992. С. 15.
5. Borodinov A.G., Retivych S.N., Shcherbakov A.P. Algorithms and computational technique on the ion beam transport in electrogasdynamic flow // Abstracts of International Congress on Computer Systems and Applied Mathematics (CSAM'93). St. Petersburg, 1993. P. 133.
6. Бородинов А.Г., Огородников А.К., Щербаков А.П. Исследование транспортировки ионов в газодинамических источниках и оптимизация системы формирования и фокусировки пучка // Научное приборостроение. 1993. Т. 3, № 2. С. 79–85.
7. Огородников А.К. Комплекс программ «Дельта» для расчета транспортирующих систем заряженных частиц // Научное приборостроение. Электронно-ионная оптика. Л.: Наука, 1989. С. 107–111.
8. Рошаль А.С. Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979. 224 с.
9. Ортега Дж., Рейнболт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975. 560 с.
10. Щербаков А.П. Численное моделирование транспортировки ионных пучков в электрогазодинамических полях // Научное приборостроение. Автоматизация научных исследований. Л.: Наука, 1988. С. 46–55.
11. Бородинов А.Г., Щербаков А.П. О моделировании процесса формирования ионного пучка в газодинамических источниках ионов // Научное приборостроение. Формирование пучков заряженных частиц. Л.: Наука, 1990. С. 10–14.
12. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Материал поступил в редакцию 05.04.2000.

**COMPUTATIONAL MODEL FOR ION BEAM FORMATION
IN A HIGH PRESSURE ELECTRON IMPACT ION SOURCE
INCLUDING EFFECTS OF BIPOLAR SPACE CHARGE**

A. P. Shcherbakov

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The computational model for ion beam formation in an electron impact ion source operated at enhanced pressure is developed. The model includes the effects of space charge of the ions and the electron equilibrium distribution and takes into account the processes of ion interactions with neutral gas. The model is implemented in a set of algorithms and computer programs.