

УДК 53.072; 53:681.3

© А. П. Щербаков

МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ АТОМНОГО РАССЕЯНИЯ В ЗАДАЧАХ НАУЧНОГО ПРИБОРОСТРОЕНИЯ

Дан обзор методов компьютерного моделирования процессов атомного рассеяния, развиваемых в Институте аналитического приборостроения РАН, применительно к задачам изотопной масс-спектрометрии, физики газодинамических источников ионов, газонаполненных сепараторов продуктов ядерных реакций.

ВВЕДЕНИЕ

Современное научное приборостроение — чрезвычайно наукоемкая область, в которой широко используются новейшие компьютерные и информационные технологии. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент стали необходимыми этапами разработки, оптимизации, методического обеспечения прибора и интерпретации результатов.

Одно из направлений в области математического моделирования, которое развивается в Институте уже в течение тридцати лет, — разработка методов компьютерного моделирования процессов рассеяния атомных частиц применительно к задачам аналитического приборостроения.

Изначально это направление возникло из задач разработки масс-спектрометров для изотопного анализа [1, 2] при исследовании факторов, определяющих изотопическую чувствительность. Как известно, предел чувствительности определения содержания малораспространенных изотопов зависит от фона рассеянных ионов, основными причинами образования которого является рассеяние ионов на молекулах остаточного газа и их отражение от стенок вакуумной камеры масс-анализатора.

Дальнейшим стимулом к развитию этого направления стала разработка и оптимизация газодинамических источников ионов. К ним относятся источники с электрораспылением при атмосферном давлении. Этот метод ионизации, впервые предложенный в нашем институте [3], получил у нас в стране название ЭРИАД (в англоязычной литературе — Electrospray [4]). К разряду газодинамических источников относятся также источники с ионизацией микропримесей в плазме коронного разряда при атмосферном давлении (API) [5], источники с ионизацией в индуктивно связанной плазме (ICP MS) [6], источники с ионизацией

в плазме тлеющего разряда и некоторые другие. В этих источниках образование ионов происходит в области, где давление газа или слабоионизованной плазмы составляет величину от долей Торр до атмосферного давления, и процесс формирования ионного пучка сопровождается многочисленными столкновениями ионов с атомными частицами (молекулами газа, атомами, ионами).

Процессы взаимодействия ионов с атомами или молекулами газа играют ключевую роль в методе столкновительной диссоциации, широко используемой в настоящее время в масс-спектрометрии для исследования структуры сложных высокомолекулярных соединений [7, 8].

Взаимодействие быстрых заряженных частиц с газом лежит в основе работы газонаполненных сепараторов продуктов ядерных реакций [9, 10]. Разработка и оптимизация такого рода установок невозможна без адекватного описания и компьютерного моделирования процессов захвата и потери электронов, углового рассеяния и торможения быстрых заряженных частиц при их прохождении через газовую среду.

В настоящей статье дается обзор основных методов компьютерного моделирования рассеяния атомных частиц, развиваемых в нашем институте. Большая их часть основана на методе статистического моделирования — методе Монте-Карло, что делает их более приспособленными к практическим задачам научного приборостроения, когда при моделировании и оптимизации необходимо учитывать много разнохарактерных факторов: физических, конструктивных и технологических. Суть метода заключается в многократной компьютерной имитации основного физического процесса — "истории" иона от момента его зарождения до прихода на регистрирующее устройство, и включает в себя моделирование свободного пробега между столкновениями (с соответствующими длиной и временем), движения иона в электриче-

ских, магнитных полях и в бесполовом пространстве, моделирование самого акта столкновения, в результате которого происходит изменение величины и направления скорости движения атомной частицы и ее зарядового состояния. Ниже мы последовательно рассмотрим основные этапы моделирования рассеяния.

ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ ЧАСТИЦ

Столкновение атомных частиц — сложное явление, включающее в себя множество различных процессов, и для своего описания оно требует, строго говоря, квантовомеханического подхода. Однако в зависимости от того, при каких условиях происходит столкновение, какими характеристиками столкновения мы интересуемся и с какой точностью нам нужно их знать, описание процесса столкновения может быть существенно упрощено.

Энергия столкновения атомных частиц определяет область расстояний их сближения, наиболее существенную для процесса рассеяния. Значения энергий заряженных частиц при их столкновениях с атомами или молекулами среды в случае газодинамических источников ионов простираются от тепловых (сотых долей эВ) в области ионообразования до десятков эВ в электрогазодинамических трактах их систем транспортировки. В задачах изотопной масс-спектрометрии энергии частиц лежат в кэВ-диапазоне, а в случае газонаполненных сепараторов — в области десятков МэВ.

Типичный потенциал взаимодействия между атомными частицами (ион—атом, ион—молекула) отвечает притяжению на больших расстояниях ($r > r_m$) и отталкиванию на малых ($r < r_m$), где r_m — равновесное расстояние между частицами. На различных участках изменения расстояния r между частицами возможны различные приближенные представления потенциала $V(r)$.

В области малых r , определяющих рассеяние высокоэнергетических частиц ($r \ll a_0$, где $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ см}$ — боровский радиус), ядра становятся ближайшей парой заряженных частиц в системе, их кулоновский потенциал взаимодействия преобладает над всеми другими членами в $V(r)$. Тогда

$$V(r) = z_1 z_2 e^2 / r. \quad (1)$$

Здесь и далее по тексту: $z_1 e, z_2 e$ — заряды ядер сталкивающихся частиц, e — элементарный заряд.

В области значений $r \sim a_0$, определяющих рассеяние частиц средних энергий (в кэВ-диапазоне), возможно проникновение электронов

в пространство между ядрами, что приводит к экранированию кулоновского взаимодействия ядер. Получаем экранированный кулоновский потенциал

$$V(r) = (z_1 z_2 e^2 / r) \chi(r), \quad (2)$$

где $\chi(r)$ — функция экранирования.

Для функции экранирования различные авторы использовали различные представления. Наиболее простой вид функции был предложен Бором:

$$\chi(r) = \exp(-r / A_B), \quad (3)$$

A_B — характеристическая длина экранирования

$$A_B = a_0 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{-1/2}. \quad (4)$$

Более точным является потенциал, в котором в качестве функции экранирования используется функция Томаса—Ферми φ , вычисленная на основе статистической теории атома

$$\chi(r) = \varphi(r / A_\varphi). \quad (5)$$

Потенциал в таком виде был предложен Фирсовым [11]. Длина экранирования в формуле (5) берется в виде

$$A_\varphi = 0.8853 a_0 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{-2/3}. \quad (6)$$

Потенциал Фирсова на больших расстояниях спадает медленнее, чем истинный атомный потенциал. Правильный асимптотический спад электронной плотности на больших расстояниях дает вариационное решение уравнения Томаса—Ферми с пробной функцией в виде суммы нескольких экспонент. Функция экранирования, полученная таким образом, определяет модифицированный потенциал Фирсова [12] и имеет следующий вид

$$\chi(r) = [a \exp(-\frac{\alpha}{A_\varphi} r) + b \exp(-\frac{\beta}{A_\varphi} r)]^2, \quad (7)$$

где $a = 0.7111$, $b = 0.2889$, $\alpha = 0.175$, $\alpha / \beta = 9.5$. Отличие модифицированного потенциала Фирсова с функцией экранирования (7) от потенциала Фирсова с функцией экранирования (5) наиболее значительно для пар тяжелых атомов на средних расстояниях, сближение на которые, судя по результатам расчетов [13], определяет рассеяние на малые углы (1–20 град. в системе центра масс) в диапазоне энергий 3–15 кэВ.

Хорошим приближением к потенциалу Фирсова в области расстояний 0.16–1.6 единиц боровского радиуса является следующее выражение, записанное в атомной системе единиц ($\hbar = m_e = e = 1$):

$$V(r) = \frac{0.4 z_1 z_2}{(\sqrt{z_1} + \sqrt{z_2})^{2/3}} \frac{1}{r^2}. \quad (8)$$

Отличительной особенностью этого выражения является простота, что в ряде задач является крайне важным, например при моделировании отражения ионов от поверхности твердого тела, когда рассеиваемый ион претерпевает большое число столкновений, прежде чем он отразится от поверхности, и необходимо многократно моделировать рассеяние иона на атомах среды [14].

В области $a_0 < r < r_m$ потенциал взаимодействия зависит от состояния внешних электронных оболочек сталкивающихся частиц и не описывается универсальной формулой. В этом случае потенциал взаимодействия необходимо вычислять отдельно для каждой пары сталкивающихся атомных частиц.

На больших расстояниях ($r > r_m$) взаимодействие атомных частиц, как правило, отвечает притяжению (если, конечно, исключить из рассмотрения одноименно заряженные частицы). Для нейтральных частиц потенциал взаимодействия при больших r убывает как r^{-6} (ван-дер-ваальсовы силы). В случае пары частиц "заряженная—нейтральная" основной составляющей потенциала при больших r является поляризационное взаимодействие — взаимодействие заряда с наведенным дипольным моментом:

$$V(r) = -\frac{\alpha e^2}{2r^4}, \quad (9)$$

где α — поляризуемость нейтрального атома или молекулы.

Область больших расстояний определяет рассеяние в диапазоне малых энергий. Например, в работе [15] была определена граница поляризационной области для пары $K^+—Ag$ $E\theta \leq 4 \text{ эВ} \cdot \text{рад}$. Отсюда следует, что, например, для $\theta \sim 10$ град (≈ 0.2 рад) поляризационный потенциал является определяющим для ионов калия с энергией не выше 20 эВ.

Одной из особенностей рассеяния ионов на молекулах является анизотропия взаимодействия сталкивающихся частиц, т. е. зависимость сил их взаимодействия от взаимной ориентации. Для описания такого взаимодействия используют либо разложение потенциала в ряд по полиномам Лежандра от угла, задающего ориентацию молекулы относительно направления падающего пучка, либо используют многоцентровое представление [16], т. е. потенциал взаимодействия $V(r, \Omega)$ иона А с молекулой ВС записывают следующим образом

$$V(r, \Omega) = V_1(r_{AB}) + V_2(r_{AC}), \quad (10)$$

где r — расстояние между ионом А и центром масс молекулы ВС; V_i ($i = 1, 2$) — потенциал меж-

атомного взаимодействия; r_{AB}, r_{AC} — межатомные расстояния; Ω — совокупность углов, задающих ориентацию молекулы. Представление анизотропного потенциала в виде ряда по полиномам Лежандра предпочтительнее на больших расстояниях ($r \gg a_0$), многоцентровое представление лучше работает в области расстояний $r \sim a_0$.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛИНЫ И ВРЕМЕНИ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА

Вероятность того, что время t между столкновениями лежит в интервале $(0, \tau)$, определяет функцию распределения случайной величины τ — времени свободного пробега между столкновениями

$$P(0 < t < \tau) = F(\tau) = 1 - \exp\left\{-\int_0^\tau v(t) dt\right\}. \quad (11)$$

Частота столкновений

$$v(t) = v(t)n \sigma(v), \quad (12)$$

где $v(t)$ — скорость относительного движения сталкивающихся частиц, n — концентрация молекул или атомов среды, $\sigma(v)$ — сечение столкновения, зависящее от относительной скорости. Для определения τ в общем случае необходимо решать уравнение

$$R = \exp\left\{-\int_0^\tau v(t) dt\right\}, \quad (13)$$

где R — равномерно распределенная на промежутке $(0, 1)$ случайная величина. Прямое решение уравнения (13) приводит к большим затратам машинного времени. Однако в случае, когда $\dot{v} = \text{const}$ (модель Максвелла [17]), уравнение (13) может быть разрешено в явном виде относительно τ , и

$$\tau = -\bar{\tau} \ln R, \quad (14)$$

где $\bar{\tau} = 1/\dot{v}$ — среднее время между столкновениями.

Модель Максвелла при $n = \text{const}$ включает в себя такой важный случай взаимодействия между сталкивающимся ионом и нейтральной атомной частицей, как поляризационное с потенциалом взаимодействия (9). Именно этим взаимодействием, как отмечалось выше, определяется рассеяние иона на нейтральной частице в области энергий от тепловых до нескольких эВ.

В ряде задач удобнее моделировать не время, а длину свободного пробега $\bar{\lambda}$, функция распределения которой определяется выражением, аналогичным выражению (11):

$$P(0 < s < \lambda) = F(\lambda) = 1 - \exp\left\{-\int_0^{\lambda} \frac{ds}{\bar{\lambda}(s)}\right\}, \quad (15)$$

где $\bar{\lambda}(s) = 1/n(s)\sigma$ — средняя длина свободного пробега. При $\bar{\lambda}(s) = \text{const}$ получаем простое и эффективное соотношение для генерирования случайной величины λ , аналогичное соотношению (14):

$$\lambda = -\bar{\lambda} \ln R. \quad (16)$$

При $n = \text{const}$ условие $\bar{\lambda}(s) = \text{const}$ выполняется при постоянном, не зависящем от скорости сечения столкновения. Практически это условие выполняется при достаточно больших энергиях сталкивающихся частиц. Если, например, речь идет о столкновении иона с нейтральной атомной частицей (атомом или молекулой), то в качестве оценки можно принять условие того, чтобы сечение поляризационного захвата σ_p , убывающее обратно пропорционально скорости, стало меньше эффективного газокинетического сечения столкновения σ_g , которое слабо зависит от скорости (энергии) сталкивающихся частиц

$$\sigma_p = \frac{2\pi e}{v} \sqrt{\frac{\alpha}{\mu}} < \sigma_g, \quad (17)$$

где α — поляризуемость атомной частицы-мишени, μ — приведенная масса сталкивающихся частиц. Условие (17) выполняется при достаточно большой скорости относительного движения. Например, для пары $N_2^+ - N_2$ и $\sigma_g = 10^{-15} \text{ см}^2$ условие (17) выполняется при $v > 10^6 \text{ см/с}$, что соответствует энергии свыше 10 эВ.

Очевидно, что приведенные выше модели не исчерпывают всего спектра физических ситуаций. В ряде задач, например в задачах моделирования формирования ионных пучков в газодинамических системах, принципиально важно учитывать неоднородность концентрации газовой компоненты. Для этих целей может быть использована методика, предложенная в работе [18]. Методика основана на существовании значения v_{max} максимально возможной частоты столкновения при каждом разыгрыше времени свободного пробега на моделируемом отрезке траектории. Здесь под актом "столкновения" подразумевается любой процесс, возмущающий движение иона во внешнем поле,

при условии, что длительность этого процесса во времени мала по сравнению с характерным временем движения во внешнем поле. Используя значение $v = v_{\text{max}}$ в функции распределения (11), генерируем время свободного пробега τ по формуле (14) и вычисляем значение $v(t)$ в конце отрезка траектории. Введем понятие фиктивного столкновения, при котором ни величина, ни направление скорости иона не меняются. Его частота $v_f = v_{\text{max}} - v(t)$, а вероятность равна v_f/v_{max} . С учетом этой вероятности в конце рассматриваемого отрезка траектории определяется, является ли столкновение истинным или фиктивным. В такую схему легко вписывается методика вычисления свободных пробегов с несколькими типами реакций ($v = \sum_i v_i$), при этом вероятности соответствующих реакций равны v_i/v_{max} , а тип столкновения разыгрывается с учетом всех возможностей.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Угловое распределение рассеянных атомных частиц практически во всей области углов описывается классической механикой даже при тепловых энергиях столкновения. Исключение составляет лишь область малых углов, где реализуется так называемое дифракционное рассеяние, и окрестности радужных углов [19]. Область малых углов определяется соотношением $\theta \leq \theta_c$, $\theta_c \sim 1/kR$, где $k = p/(2\pi\hbar)$ — волновой вектор, p — импульс налетающей частицы, R — характерные размеры рассеивателя, для оценки которого может быть принято расстояние наибольшего сближения r_{min} . Величина θ_c мала даже для не очень высоких энергий и убывает с ростом энергии рассеиваемой частицы. Так, для пары $Ag^+ - N_2$ при энергии ионов 1 эВ $\theta_c \approx 10^{-1}$ рад, а при энергии ионов 10 кэВ $\theta_c \approx 10^{-3}$ рад. Радужные особенности рассеяния приводят к очень тонким эффектам в угловом распределении рассеянных частиц [20, 21], которыми можно пренебречь в большинстве практических задач научного приборостроения.

Столкновения при высоких энергиях (1 кэВ и выше), типичных для задач изотопной масс-спектрометрии и физики газонаполненных сепараторов, существенно неупругие. Однако потери энергии на неупругие удары малы по сравнению с энергией налетающей частицы. Поэтому для описания неупругого рассеяния с достаточно вы-

сокой точностью можно использовать кинематику упругого рассеяния [2]. Кроме того, в этих задачах часто не нужно знать, что происходит с электронными оболочками рассеиваемой и рассеивающей частиц. Исключение составляют те процессы в электронных оболочках, которые приводят к изменению заряда рассеиваемого иона (перезарядка и обдирка, об этом речь пойдет ниже). Важно лишь знать изменение скорости рассеиваемой частицы как по величине, так и по направлению. При этом часть изменения скорости по величине, обусловленная потерями энергии на неупругие процессы, может быть приближенно оценена с помощью известных формул Бете—Блоха, Фирсова или Кишиневского [22].

При меньших энергиях, в эВ-диапазоне, возможность тех или иных неупругих процессов с передачей энергии ΔE при скорости относительного движения v определяется известным параметром Мессии $\Delta E \cdot r_{\min} / \hbar v$.

Если известно дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$, зависящее в случае сферически симметричного рассеивателя только от полярного угла рассеяния θ , то значение этого угла при моделировании вычисляется как реализация случайной величины с плотностью распределения, пропорциональной дифференциальному сечению. Однако более технологичным является моделирование прицельного параметра b в некотором промежутке (b_1, b_2) с плотностью распределения, пропорциональной прицельному параметру b :

$$p(b) = 2b/(b_2^2 - b_1^2). \quad (18)$$

Затем вычисляется угол рассеяния θ с помощью классической функции отклонения $\theta = \theta(b)$.

Классическая функция отклонения — зависимость угла рассеяния θ от прицельного параметра, однозначно определяется потенциалом взаимодействия сталкивающихся частиц. Если этот потенциал является сферически симметричным, т. е. зависит только от расстояния между частицами (такая ситуация имеет место при рассеянии атомов или атомарных ионов на атомах), то угол рассеяния θ в системе центра масс может быть вычислен по следующей формуле [23]:

$$\theta = |\pi - 2\chi_0|, \\ \chi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} br^{-2} [1 - b^2/r^2 - V(r)/E_{\text{отн}}]^{-1/2} dr. \quad (19)$$

Здесь r_{\min} — наибольший корень выражения, стоящего под знаком радикала (расстояние наи-

большого сближения сталкивающихся частиц), $E_{\text{отн}}$ — энергия относительного движения.

Если нас интересует рассеяние на малые углы, которое определяется такими расстояниями сближения, где $V(r)/E_{\text{отн}} \ll 1$, то выражение (19) может быть упрощено. Раскладывая (19) в ряд по степеням малого параметра $V(r)/E_{\text{отн}} \ll 1$ и отбрасывая квадратичные по этому параметру члены, получаем

$$\theta = -\frac{b}{E_{\text{отн}}} \int_b^{\infty} \frac{dV}{dr} \frac{dr}{\sqrt{r^2 - b^2}} \equiv -\frac{b}{E_{\text{отн}}} P(b). \quad (20)$$

Эта формула может быть также получена [23] из соотношения $\theta \approx \Delta p_{\perp} / p$, где Δp_{\perp} — приращение поперечной компоненты импульса, вычисленное вдоль прямолинейной траектории частицы, p — начальный импульс частицы. Заметим, что если в формуле (20) вместо энергии относительного движения $E_{\text{отн}}$ взять кинетическую энергию налетающей частицы E , то мы получим угол рассеяния в лабораторной системе координат, поскольку связь между углами $\theta_{\text{лаб}}$ и $\theta_{\text{ц.м.}}$

$$\theta_{\text{лаб}} = \frac{M \sin \theta_{\text{ц.м.}}}{m_0 + M \cos \theta_{\text{ц.м.}}}, \quad (21)$$

где m_0 и M — массы налетающей частицы и частицы-мишени соответственно. В случае малых углов рассеяния формула переходит в

$$\theta_{\text{лаб}} \approx \frac{M}{m_0 + M} \theta_{\text{ц.м.}}, \quad (22)$$

а соотношение между $E_{\text{отн}}$ и E в случае покоящейся частицы-мишени следующее

$$E_{\text{отн}} = \frac{M}{m_0 + M} E. \quad (23)$$

По формуле (19) без труда вычисляется классическая функция отклонения в области малых углов рассеяния потенциалом

$$V(r) = c/r^n, \quad (24)$$

частным случаем которого является поляризационный потенциал (9). Получаем

$$\theta(b) = \frac{c\sqrt{\pi}}{Eb^n} \frac{\Gamma((n+1)/2)}{\Gamma(n/2)}. \quad (25)$$

По сравнению с задачей рассеяния полем сферически симметричного потенциала задача вычис-

ления углов рассеяния частицы полем анизотропного потенциала значительно сложнее, поскольку уравнения движения в этом случае, вообще говоря, не разделяются. Однако если ограничиться случаем малых углов рассеяния, можно вычислить приращение поперечной компоненты импульса, определяющей угол рассеяния θ , в виде векторной суммы приращений, полученных при взаимодействии иона с каждым из атомов молекулы на прямолинейной траектории. При этом, поскольку относительная скорость сталкивающихся частиц велика, можно считать, что ориентация молекулы не меняется за все время столкновения. Ориентацию можно задать с помощью полярного угла ψ (в качестве полярной оси выбирается направление вектора относительной скорости) и азимутального угла φ . При фиксированной ориентации молекулы в случае двухцентрового потенциала (10) получаем следующее выражение для θ [16]

$$\theta(b, \psi, \varphi) = \frac{1}{E_{\text{отн}}} \left[b_1^2 P^2(b_1) + b_2^2 P^2(b_2) + 2(b^2 - r_0^2 \sin^2 \psi) P(b_1) P(b_2) \right]^{1/2}, \quad (26)$$

где $b_i^2 = b^2 + 2(-1)^i b r_0 \sin \psi \sin \varphi + r_0^2 \sin^2 \psi$, ($i = 1, 2$); $2r_0$ — межъядерное расстояние в молекуле; b — прицельный параметр, отсчитываемый от центра тяжести молекулы; $P(b_i)$ определяется интегралом (20), где вместо V подставляется потенциал взаимодействия рассеиваемого иона с соответствующим атомом молекулы V_i .

В работе [2] таким способом были вычислены классические функции отклонения, усредненные по всевозможным ориентациям молекулы, для пар $\text{Ag}^+ - \text{N}_2$ и $\text{U}^+ - \text{N}_2$. При этом в качестве межатомных потенциалов был использован модифицированный потенциал Фирсова (7). Результаты расчетов были аппроксимированы следующими выражениями:

$$\theta = (102.2 - 38.7b + 11.7b^2) \exp(-4.3b) / E_{\text{отн}} \quad (27)$$

для пары $\text{U}^+ - \text{N}_2$,

$$\theta = (20.1 - 15.1b + 5.3b^2) \exp(-3.2) / E_{\text{отн}} \quad (28)$$

для пары $\text{Ag}^+ - \text{N}_2$.

В этих формулах прицельный параметр задается в ангстремах, энергия относительного движения — в кэВ, угол рассеяния в системе центра масс получается в радианах.

Приведенные выражения позволяют эффективно и с малыми затратами компьютерных ресурсов проводить моделирование акта столкновения иона

с двухатомной молекулой. Сначала моделируется прицельный параметр в промежутке (b_1, b_2) как случайная величина с плотностью распределения (18), затем по полученному значению b вычисляется полярный угол рассеяния согласно определенной выше классической функции отклонения. Азимутальный угол рассеяния моделируется как равномерно распределенная на промежутке $(0, 2\pi)$ случайная величина.

В случае моделирования прохождения заряженных частиц через вещество (как газообразное, так и твердое) в МэВ-диапазоне энергий целесообразно моделировать не отдельные столкновения с частицами среды, приводящие к отклонению на очень малый угол, а совокупное действие многократных столкновений при прохождении частицей слоя вещества некоторой толщины d . В этом случае наиболее эффективным является моделирование угла рассеяния согласно гауссову распределению

$$p(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\theta} \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma_\theta^2}\right). \quad (29)$$

Дисперсия угла рассеяния σ_θ^2 пропорциональна концентрации частиц среды и длине пробега, а ее конкретный вид определяется видом потенциала взаимодействия заряженной частицы с частицами среды. В случае обратно степенной зависимости потенциала (24) могут быть получены замкнутые аналитические выражения [22]. Для потенциала Томас—Ферми—Фирсова угловое распределение может быть найдено только численным методом [24].

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

При малых энергиях налетающих частиц (для протонов эта энергия не превышает нескольких десятков эВ) потери энергии в основном определяются упругими столкновениями с атомами мишени. Эти потери с ростом скорости достигают максимума при $v \sim \sqrt{z_1 z_2 e^2 (m_0 + M) / (A_\phi m_0 M)}$ и затем уменьшаются.

Если скорость налетающей частицы сравнима со скоростями атомных электронов, но не очень велика ($v < z_1^{2/3} v_0$, где $v_0 = e^2 / \hbar \approx 2.2 \times 10^8$ см/с — атомная единица скорости), потери энергии, обусловленные неупругими потерями (возбуждением электронов сталкивающихся частиц) в каждом отдельном акте столкновения, могут быть оценены с помощью формулы Фирсова [25]

$$\Delta E = \frac{4.3 \times 10^{-8} (z_1 + z_2)^{5/3} v}{[1 + 3.1(z_1 + z_2)^{1/3} \times 10^7 r_{\min}(b)]^5}, \quad (30)$$

$$z_1 \approx z_2 > 10$$

$$\Delta E = \frac{0.3 \times 10^{-7} z_{\max} (\sqrt{z_{\max}} + \sqrt{z_{\min}}) (z_{\max}^{1/6} + z_{\min}^{1/6})}{[1 + 0.67 \sqrt{z_{\max}} r_{\min}(b) / (A_\phi (z_{\max}^{1/6} + z_{\min}^{1/6}))]^3} \cdot \left[1 - 0.68 \frac{V(r_{\min})}{E} \right] v. \quad (31)$$

В формулах (30) и (31) v — относительная скорость сталкивающихся частиц в см/с; r_{\min} — расстояние наибольшего сближения в см; A_ϕ — длина экранирования, определенная формулой (6); средняя неупругая потеря энергии ΔE получается в эВ.

В случае большой скорости налетающей частицы, когда ее значения превосходят значения скоростей любого электрона атома мишени, потери энергии частицы на единице длины пути могут быть оценены с помощью формулы Бете—Блоха

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{m_e v^2} z_2 N \ln(2mv^2 / I), \quad (32)$$

где I — средний потенциал возбуждения атомов среды, вычисление которого на основе статистической модели атома Томаса—Ферми дает $I = 13.5z_2$ эВ; N — концентрация атомов среды.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАРЯДОВОГО СОСТАВА

Как уже отмечалось выше, из множества процессов, происходящих при столкновении заряженной частицы с атомами или молекулами среды, необходимо прежде всего учитывать те, которые приводят к изменению заряда иона: перезарядку (или захват электрона положительно заряженной частицей) и обдирку (потерю электрона положительно заряженной частицей). При движении в электрическом или магнитном поле такие процессы имеют следствием заметное возмущение траектории частицы.

В задачах изотопной масс-спектрометрии в диапазоне энергий 1–10 кэВ сечения обдирки настолько малы, что ее можно не учитывать. Например, при энергии ионов N^+ , K^+ , Ag^+ 10 кэВ сечения обдирки в N_2 имеют величину порядка 10^{-18} см² [27]. С ростом энергии сечение обдирки возрастает.

Сечения перезарядки в кэВ-диапазоне энергий имеют существенно большую величину. Например, сечение перезарядки ионов Ag^+ в N_2 при энергии 3 кэВ имеет порядок 10^{-16} см² [28]. В условиях

или формулы Кишиневского [26], которая является обобщением формулы Фирсова на случай разных зарядов ядер сталкивающихся атомов ($z_1 \neq z_2$):

глубокого вакуума, характерного для задач изотопной масс-спектрометрии, можно пренебречь многократными столкновениями. Вероятность даже однократного столкновения иона с молекулой остаточного газа мала: при давлении 10^{-6} Торр и длине центральной траектории 10^2 см она составляет величину порядка 10^{-2} . В таком приближении учет перезарядки сводится просто к перенормировке рассчитанных гистограмм распределений рассеянных ионов. Поскольку ионы, потерявшие заряд, не вносят вклад в фоновый ток, гистограмму следует домножить на величину

$$(\sigma_{tot} - \sigma_{exch}) / \sigma_{tot}, \quad (33)$$

где σ_{tot} — полное сечение рассеяния иона на молекуле, σ_{exch} — сечение перезарядки.

Процессы с изменением зарядового состояния быстрых многозарядных ионов являются ключевыми в задачах по моделированию газонаполненных магнитных сепараторов продуктов ядерных реакций [29]. Здесь давление в газовой среде составляет величину порядка 1 Торр, и средняя длина свободного пробега иона между двумя столкновениями с изменением заряда много меньше длины всей траектории. Из-за большого числа столкновений устанавливается равновесное распределение частиц по зарядовым состояниям с хорошо определенным средним зарядом \bar{q} . Последний определяет радиус центральной траектории в магнитном поле, а дисперсия распределения — уширение пучка в фокальной плоскости.

Изменение зарядового состояния и установление равновесного распределения по зарядам адекватно описываются следующей моделью [30, 31]. Сечения захвата σ_c и потери σ_l электрона представляются в виде

$$\begin{aligned} \sigma_c(q) &= \sigma_0 \exp\{a_c(q - \bar{q})\}, \\ \sigma_l(q) &= \sigma_0 \exp\{-a_l(q - \bar{q})\}. \end{aligned} \quad (34)$$

Учитываются только одноэлектронные переходы ($q \rightarrow q \pm 1$), поскольку при скорости ионов,

сравнимой с атомной единицей скорости $v_0 = e^2/\hbar \approx 2.2 \times 10^8$ см/с, сечения многоэлектронных переходов, как показывают эксперименты, малы. В этом случае быстро устанавливается равновесное гауссово распределение частиц по зарядам

$$p(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_q} \exp\left(-\frac{(q-\bar{q})^2}{2\sigma_q^2}\right), \quad (35)$$

дисперсия которого связана с параметрами a_c и a_l :

$$\sigma_q^2 = 1/(a_c + a_l). \quad (36)$$

Значения полуэмпирических параметров \bar{q} , a_c и a_l берутся из аппроксимации экспериментальных данных [32, 33].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описанные выше модели были с успехом использованы при исследовании факторов, определяющих изотопическую чувствительность статических масс-спектрометров различного типа:

1) однокаскадных секторных магнитных масс-спектрометров [34, 35, 36];

2) двухкаскадных с двойной фокусировкой, построенных по схеме "электростатик—магнит", и с обращенной геометрией "магнит—электростатик" [34, 35];

3) тандемных масс-спектрометров, состоящих из двух секторных магнитов, отклоняющих ионный пучок в одинаковом направлении (схема "С") и в противоположных направлениях (схема "S") [37].

Результаты этих исследований были внедрены при разработке изотопных масс-спектрометров с высокими параметрами по изотопической чувствительности МИ320, МИ3303, МИ3304, МИ3305. В самое последнее время они были использованы при создании специализированного масс-спектрометра для измерения изотопных отношений гексафторида урана в газовой фазе МТИ350Г.

На базе приведенных выше моделей был проведен широкий круг исследований газодинамических источников ионов с целью оптимизации конфигурации полезного элемента и структуры газодинамического поля [38, 39].

В настоящее время в Институте развернуты работы по моделированию газонаполненных сепараторов продуктов ядерных реакций и процессов формирования ионных пучков в динамических по-

лях квадрупольных масс-фильтров, работающих при повышенных давлениях остаточного газа, также основанные на описанных выше методах моделирования процессов рассеяния атомных частиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александров М.Л., Галль Л.Н., Плисс Н.С. Исследование рассеяния ионов в масс-спектрометрах методом статистического моделирования // ЖТФ. 1974. Т. 44, вып. 6. С. 1302–1305.
2. Александров М.Л., Плисс Н.С., Щербаков А.П. Моделирование рассеяния ионов на двухатомных молекулах // ЖТФ. 1974. Т. 44, вып. 3. С. 632–634.
3. Александров М.Л., Галль Л.Н., Краснов Н.В., Николаев В.И., Павленко В.А., Шкуров В.А. Экстракция ионов из растворов при атмосферном давлении — новый способ масс-спектрометрического анализа биоорганических веществ // ДАН СССР. 1984. Т. 277, № 2. С. 379–383.
4. Jamashita M., Fenn J.B. Electrospray ion source. Another variation on the free-jet theme // J. Chem. Phys. 1984. V. 88, N 20. P. 4451–4459.
5. Kambara H. // Mass Spectrometry (Jap). 1979. V. 12. P. 848–857.
6. Date A.R., Gray A.L. Progress in plasma source mass spectrometry // Spectrochimica Acta. 1983. V. 38B, N 1/2. P. 29–37.
7. Cooks R.G., Beynon J.H., Caprioli R.M. and Lester G.R. Metastable Ions. Amsterdam: Elsevier, 1973. 296 p.
8. Brunnee C. Instrumental developments in MS/MS // Pittsburg Conference and Expo in Anal. Chem. and Appl. Spectrosc.: Abstracts. 1988. P. 491.
9. Oganessian Yu.Ts. et al. // Proceedings of Fourth International Conference on Dynamical Aspects of Nuclear Fission, 19-23 October 1998, Easta-Papiernieka, Slovak Republic. Singapore: World Scientific, 2000. P. 334.
10. Lazarev Yu.A. et al. // Proceedings of International School-Seminar on Heavy Ion Physics, 10–15 May 1993, Dubna, Russia. Dubna, 1993, P. 497.
11. Фирсов О.Б. Рассеяние ионов на атомах // ЖЭТФ. 1958. Т. 34, № 2. С. 447–452.
12. Никулин В.К. Вычисление отталкивательных межатомных потенциалов взаимодействия на основании статистической теории // ЖТФ. 1971. Т. 41, вып. 1. С. 41–47.
13. Никулин В.К. Дифференциальные сечения и параметры кинетического рассеивания атомов на атомах в кэВ-диапазоне энергий // ЖТФ. 1971. Т. 41, вып. 1. С. 33–40.

14. Александров М.Л., Плисс Н.С., Щербаков А.П. Исследование влияния отражения ионов от шероховатых поверхностей на образование "хвостов" пиков масс-спектрометров // ЖТФ. 1977. Т. 47, вып. 1. С. 189–194.
15. Чигинь В.И., Палюх Б.М., Савчин Л.С. Упругое рассеяние ионов калия на атомах аргона // ЖТФ. 1972. Т. 42, вып. 10. С. 2164–2169.
16. Леонас В.Б. Исследование короткодействующих межмолекулярных сил // УФН. 1972. Т. 107, № 1. С. 29–56.
17. Мак-Даниель И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир, 1976. 422 с.
18. Бородинов А.Г., Щербаков А.П. О моделировании процесса формирования ионного пучка в газодинамических источниках ионов // Сб. "Научное приборостроение". Л.: Наука, 1990. С. 10–14.
19. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 352 с.
20. Комаров И.В., Щербаков А.П. Классическое рассеяние на анизотропном потенциале // Вестник ЛГУ. 1979. № 16. С. 24–31.
21. Комаров И.В., Щербаков А.П. Упругое рассеяние атомных частиц на двухатомных молекулах // Сб. "Вопросы теории атомных столкновений", вып. 2. Л.: ЛГУ, 1981. С. 86–100.
22. Готт Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
23. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1973. 208 с.
24. Meyer L. Plural and Multiple Scattering of Low-Energy Heavy Particles in Solids // Phys. Stat. Sol. (b). 1971. V. 44. P. 253–268.
25. Фирсов О.Б. Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях // ЖЭТФ. 1959. Т. 36, № 5. С. 1517–1523.
26. Кишиневский Л.М. Неупругие потери и сечение ионизации // Известия АН СССР, Серия физич. 1962. Т. 26. С. 1410–1414.
27. Федоренко Н.В. Магнитный анализ пучка положительных ионов, ускоренных напряжением 5–30 кВ, после прохождения через разреженный газ // ЖТФ. 1954. Т. 24, вып. 5. С. 769–783.
28. Hedrick A.F., Moran F.F., McCann K.J., Flannery M.R. Charge transfer cross sections in argon ion-diatom molecule collisions // J. Chem. Phys. 1977. V. 66, N 1. P. 24–31.
29. Oganessian Ju.Ts. et al. Average charge states of heavy atoms in dilute hydrogen // Phys. Rev. C. 2001. V. 64, N 6. (064309).
30. Paul M et al. Heavy ion separation with a gas-filled magnetic spectrograph // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1989. V. A277. P. 418–430.
31. Ninov V. et al. Separation of actinide-made transurania by a gas-filled magnetic separator // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1995. V. A357. P. 486–494.
32. Wittkower A.B., Betz H.D. Equilibrium charge-state distributions of 2–15 MeV tantalum and uranium ions stripped in gases and solids // Phys. Rev. A. 1973. V. 7, N 1. P. 159–167.
33. Betz H.D. Heavy ion charge states // Applied Atomic Collision Physics. 1983. V. 4. P. 1–42.
34. Павленко В.А., Плисс Н.С., Соколов Б.Н., Щербаков А.П. Изотопическая чувствительность статических масс-спектрометров с одинарной и двойной фокусировкой // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Радиационная техника. 1986. Вып. 1 (32). С. 20–25.
35. Pavlenko V.A., Pliss N.S., Sokolov B.N., Shcherbakov A.P. Ion Scattering in Mass Spectrometers. Theory and Its Application for Abundance Sensitivity Estimation // Int. J. Mass Spectrom, Ion Physics. 1983. V. 46, N 1. P. 55–58.
36. Соколов Б.Н., Щербаков А.П. Расчет порога изотопической чувствительности однокаскадного масс-спектрометра для изотопного анализа // Сб. "Научное приборостроение". Л.: Наука, 1983. С. 36–45.
37. Gall R.N., Pliss N.S., and Shcherbakov A.P. Comparative Performance of Tandem and Double-Focusing Mass Spectrometers // Advanc. Mass Spectrometry. 1980. V. 8B. P. 1893–1902.
38. Бородинов А.Г., Веренчиков А.Н., Чуприков А.В., Щербаков А.П. Транспортировка ионных пучков в газодинамических источниках ионов. Л.: Препринт НТО АН СССР № 28, 1989. 34 с.
39. Бородинов А.Г., Веренчиков А.Н., Щербаков А.П. Исследование транспортировки ионов в газодинамических системах // ЖТФ. 1991. Т. 61, вып. 6. С. 1–7.

**Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург**

Материал поступил в редакцию 10.10.2002.

COMPUTER SIMULATION OF ATOM SCATTERING AS APPLIED TO PROBLEMS OF SCIENTIFIC INSTRUMENTATION

A. P. Shcherbakov

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

A review of computer simulation methods for atom scattering studies developed at the Institute for Analytical Instrumentation of RAS is given as applied to problems of abundance sensitivity of mass spectrometers, the physics of gas dynamic ion sources and gas-filled recoil separators.