

Расчет динамики ионного пучка в тандемном лазерном масс-рефлектроне с помощью численного моделирования

П.О. Медакин, Р.Н. Никулин, О.А. Авдеюк, И.В. Поляков, Н.В. Грецова

Волгоградский государственный технический университет

Аннотация: В статье рассмотрена динамика ионного пучка в тандемном лазерном масс-рефлектроне. Программный комплекс, реализующий математическую модель движения ионного пучка, построен на методе «крупных частиц», учитывает влияние поля пространственного заряда и взаимодействие ионов с полем электродинамической системы. Получено распределение потенциала в узлах прибора путем численного решения уравнения Лапласа с помощью математического пакета *Freefem++*, в котором реализовано решение дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных элементов. Показано отсутствие неоднородности электрического поля внутри рефлекторов. Проведена серия численных экспериментов, которая показала удобство применения метода конечных элементов для численного решения задач электростатики и ионной оптики, а также эффективность использования численного моделирования для разработки и оптимизации параметров масс-спектрометров.

Ключевые слова: метод «крупных частиц», лазерный масс-спектрометр, метод «частица-частица», электродинамическая система, метод Рунге-Кутты, лазерная плазма, ионный пучок, фокусирующая система, триангуляция, газообразующие примеси, времяпролетный масс-спектрометр.

В различных областях, как рядовых, так и передовых научных исследований, и производства необходим контроль концентрации и состава примесей, так как их наличие вносит существенные изменения в свойства металлов, композитных материалов, а также приводит к кристаллографическим дефектам полупроводниковой продукции [1,2].

Согласно работе [3], зачастую значительную часть примесей составляют газообразующие примеси – примеси водорода, углерода, азота и кислорода. Это обусловлено, главным образом, высокой химической активностью данных веществ, а также широкой распространенностью, вследствие которой, из-за газовой адсорбции, поверхности большинства материалов покрыты оксидным слоем. В связи с этим, несколько десятков лет исследователи работают над разработкой приборов и методов аналитического контроля данных примесей с различной степенью точности.

Одним из высокотехнологичных и высокоточных методов определения газообразующих примесей является масс-спектрометрия, которая насчитывает большое количество различных подходов к решению данному вопросу. К наиболее универсальным методам относится времяпролетная лазерная масс-спектрометрия, причем перспективными времяпролетными масс-анализаторами в настоящее время являются многоотражательные анализаторы, составленные из нескольких ступеней ионных зеркал (рефлекторов) [4-6]. Прибором данного типа, созданного именно для определения газообразующих примесей, является тандемный лазерный масс-рефлектрон (ТЛМР) (рис. 1) [7].

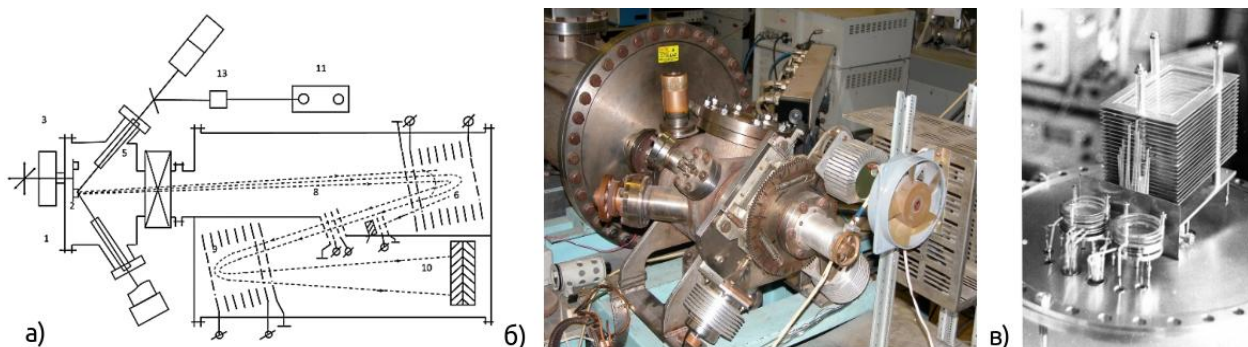


Рис. 1 - Тандемный лазерный масс-рефлектрон; а) схема, б) внешний вид, в) ионное зеркало

Принцип функционирования прибора заключается в следующем: камера, содержащая исследуемый образец, оснащена системой видеонаблюдения и фокусировки лазерного излучения. Излучение сдвоенного Nd:YAG-лазера фокусируется на исследуемый образец, первый импульс производит очистку объекта от поверхностных – газообразующих примесей, а затем, пока не произошла адсорбция вещества, испаренного первым лазерным импульсом, второй импульс лазерного излучения попадает на образец, что приводит к испарению и ионизации атомов вещества. Далее образованная лазерная плазма свободно разлетается, достигает сетки под

потенциалом 90 В, задерживающей частицы с низкой энергией, и попадает в пространство дрейфа масс-анализатора. Времяпролетный масс-анализатор состоит из двух ступеней ионных зеркал (рефлекторов), разделенных электродинамическим клапаном и детектором ионов основы. Таким образом, полученные ионы основы после отражения в первом рефлекторе попадают на соответствующий детектор, а ионы газообразующих примесей проходят через электродинамический клапан, который открывается только на время пролета газообразующих примесей. Это позволяет снизить фон во второй камере прибора, что приводит к увеличению точности и чувствительности измерения. После прохождения электродинамического клапана ионы примеси отражаются во втором рефлекторе и попадают на детектор, где происходит их регистрация.

Для разработки и оптимизации параметров, оказывающих влияние на работу данных приборов, активно используется численное моделирование [8-10].

Численная реализация и результаты моделирования

В статье исследуется движение ионного пучка в тандемном лазерном масс-рефлектроне. Расчет распределения потенциала в узлах прибора производится путем численного решения уравнения Лапласа с помощью математического пакета *Freefem++*, в котором реализовано решение дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных элементов.

Рассмотрим результаты расчета распределения потенциала в тандемном лазерном масс-рефлектроне. Уравнение Лапласа в слабой форме для прямоугольной системы координат имеет вид:

$$\int_{\Omega} \nabla \varphi \nabla v dx dy = 0$$

где Ω – область интегрирования, φ – потенциал, v – тестовая функция.

На рис. 2 представлено распределение потенциала в приборе: а) без дополнительных рамок в ионных зеркалах и б) при их наличии. В первом

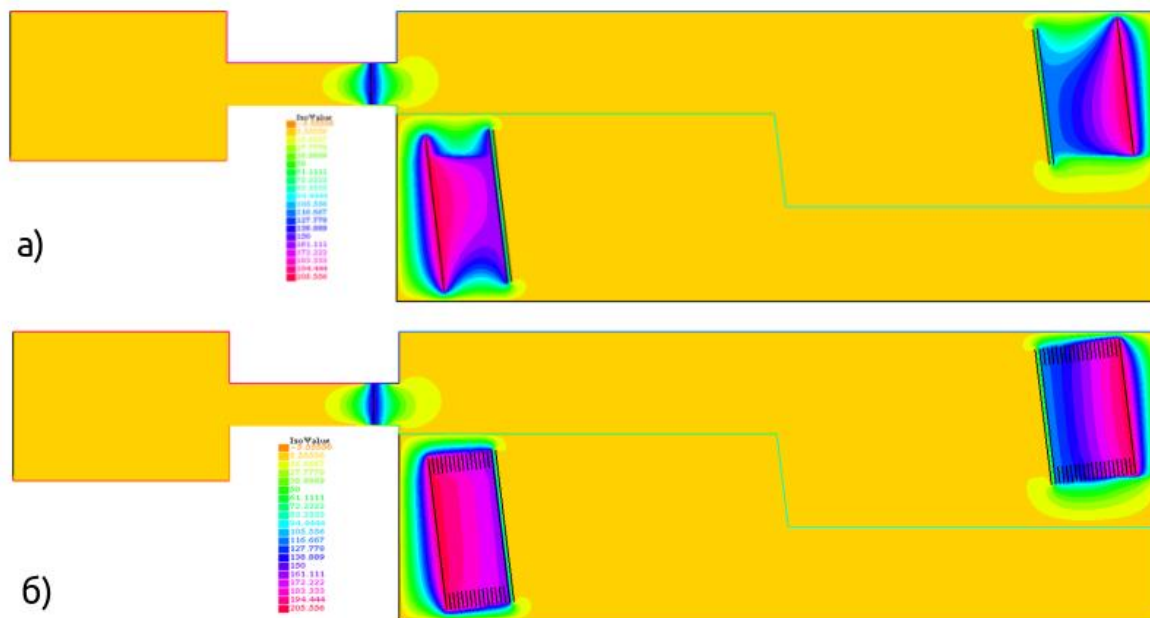


Рис. 2 - Распределение электрического поля в тандемные лазерные масс-рефлектроне; а) трехсеточные рефлекторы, б) рефлекторы с дополнительными рамками

случае, в рефлекторах, состоящих из трех сеток, наблюдается наличие неоднородности распределения электрического поля, что приводит к неправильной работе прибора. Во втором случае, при наличии дополнительных рамок с линейно меняющимся потенциалом, показано отсутствие неоднородности электрического поля.

Программный комплекс [11], реализующий математическую модель движения ионного пучка и построенный на методах «крупных частиц» и «частица-частица», учитывает влияние поля пространственного заряда и взаимодействие ионов с полем электродинамической системы. Для организации многопоточности вычислений используется технология *OpenMP*. Интегрирование уравнений движения выполняется с помощью классического для данного рода задач, метода Рунге-Кутты 4 порядка.

На рис. 3 показаны траектории движения ионов газообразующих примесей в тандемном лазерном масс-рефлектроне: а) моноэнергетический пучок,

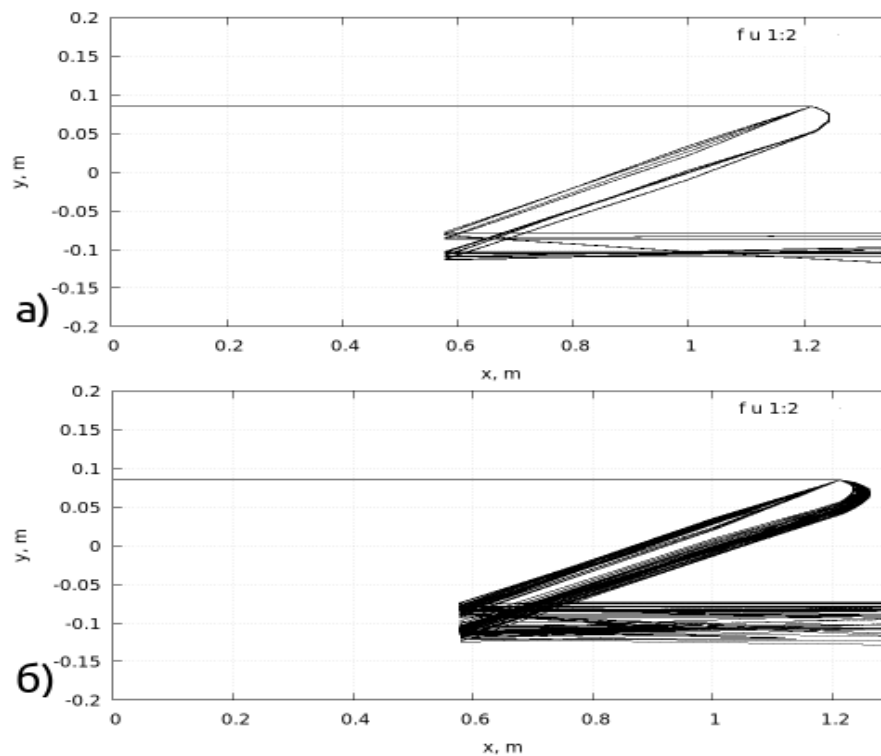


Рис. 3 - Траектории движения ионов газообразующих примесей в тандемном лазерном масс рефлектроне: а) моноэнергетический пучок, б) с первоначальным разбросом по энергии 10%.

б) с первоначальным разбросом по энергии 10%. Видно, что наличие первоначального разброса по энергии не только ухудшает разрешение прибора, но и, главным образом, определяет характер отражения частиц в зеркале.

Заключение

Таким образом, проведенная серия численных экспериментов демонстрирует удобство применения метода конечных элементов для численного решения задач электростатики и ионной оптики, а также

показывает эффективность применения численного моделирования для разработки и оптимизации параметров масс-спектрометров.

Литература

1. Богданов С.А., Захаров А.Г., Писаренко И.В. Влияние многозарядных примесных центров на распределение потенциала в приповерхностной области полупроводника // Инженерный вестник Дона, 2013, № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2013/1530.

2. Богданов С.А., Захаров А.Г., Писаренко И.В. Модификация поверхности чувствительного слоя сенсора газа электроискровой обработкой // Инженерный вестник Дона, 2013, № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2013/1528.

3. Девярых Г. Г. Анализ данных по примесному составу образцов простых твердых веществ Выставки-коллекции веществ особой чистоты // Высокочистые вещества. 1992. № 5-6. С.71-80.

4. Веренчиков А. Н., Краснов Н. В., Мурадымов М. З., Хасин Ю. И. Современное состояние приборов времяпролетной масс-спектрометрии // Научное приборостроение. 2001. №4. С. 3-15.

5. Sysoeva E.A., Sysoev A.A. A method of chromatic aberration correction for a laser time of-flight mass analyzer // European Journal of Mass Spectrometry. 2016. №3. pp. 141-144.

6. Хасин Ю. И., Веренчиков А. Н., Гаврик М. А., Явор М. И. Первые экспериментальные исследования планарного многоотражательного ВПМС // Научное приборостроение. 2004. №2. С. 59-71.

7. Безруков В.В. Определение водорода и кислорода в халькогенидных стеклах на тандемном лазерном масс-рефлектроне // Журнал аналитической химии. 2002. №57. С.378 – 382.

8. Hockney R., Eastwood J. Numerical modeling by the particle method. Computer simulation using particles. McGraw Hill, 1981. 640 p.

9. Позднеев А.В. Система моделирования масс-спектрометра на основе параллельного кода частиц в ячейке // Программные продукты и системы. 2009. №2. С. 173-175.

10. Позднеев А.В. Численное моделирование эволюции ионных облаков в масс-спектрометре методом частиц в ячейке // Вестник Московского университета. 2008. №3. С. 11-19.

11. Медакин В.Л. Абдрахманов А.Г. Шеин А.Г. Свид. о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2019617995 от 25 июня 2019 г. Российская Федерация. Программа для моделирования движения многокомпонентного ионного пучка в статических масс-спектрометрах с неоднородными электрическими полями методом крупных частиц. ВолгГТУ.2019.

References

1. Bogdanov S. A., Zakharov A. G., Pisarenko I. V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2013, № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2013/1530.

2. Bogdanov S. A., Zakharov A. G., Pisarenko I. V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2013, № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2013/1528.

3. Devyatyh G. G. Vysokochistye veshchestva.1992. № 5-6. pp.71-80.

4. Verenchikov A. N., Krasnov N. V., Muradymov M. Z., Khasin Yu. I. Nauchnoe priborostroenie. 2001. №4. pp. 3-15.

5. Sysoeva E.A., Sysoev A.A. European Journal of Mass Spectrometry. 2016. №3. pp. 141-144.

6. Hasin Yu. I., Verenchikov A. N., Gavrik M. A., Yavor M. I. Nauchnoe priborostroenie. 2004.№2. pp. 59-71.

7. Bezrukov V.V. Zhurnal analiticheskoy himii.2002. №57. pp.378 – 382.

8. Hockney R., Eastwood J. Numerical modeling by the particle method. Computer simulation using particles. McGraw Hill,1981. 640 p.

9. Pozdneeв A.V. Programmnye produkty i sistemy. 2009. №2. pp. 173-175.



10. Pozdneev A.V. Vestnik Moskovskogo universiteta. 2008. №3. pp. 11-19.
11. Medakin V.L. Abdrahmanov A.G. Shein A.G. Svid. o gos. registracii programmy dlya EVM № 2019617995 ot 25 iyunya 2019 g. Rossijskaya Federaciya. VolgGTU.2019.