

справлено в оптических системах, имеющих различные конструкции. Важно отметить, что для оптимизации конструкции ионного источника необходимо учитывать не только его физическую сущность, но и то, как он будет использоваться в различных приложениях. Для этого требуется тщательное изучение специфики каждого конкретного приложения.

УДК 543.08:621.384.8

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ИОННО-ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ИСТОЧНИКОВ ИОНОВ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ

А.В.Сапрыгин, В.А.Калашников, Ю.Н.Залесов, А.Б.Малеев, Л.Н.Галь*, В.Д.Саченко*, А.С.Бердников*,
Ю.И.Хасин*

Уральский электрохимический комбинат

624130, Новоуральск Свердловской обл., Дзержинского, 2

czi@ueip.ru

*Институт аналитического приборостроения (ИАНП) РАН

Санкт-Петербург

Описаны методы моделирования, используемые для проектирования и расчета ионно-оптических систем, а также специализированное программное обеспечение, применяемое для этих целей. Особое внимание удалено использованию связки программ на основе SIMION 3D для сквозного проектирования ионно-оптических систем источников ионов.

Введение

Электронная оптика, как дисциплина, изучающая и описывающая генерацию, формирование и трансформирование пучков заряженных частиц в электростатических и магнитных полях, возникла в двадцатых годах XX века в результате работ по конструированию электронно-лучевых трубок и других электровакуумных приборов. Начиная с шестидесятых годов, электронная оптика испытала период бурного развития, обусловленный с одной стороны потребностью в создании различных ускорителей, а с другой – в появлении аналоговых и цифровых вычислительных машин, позволивших использовать новые методы расчета. Современное состояние этой дисциплины, превратившейся в отдельную самостоятельную отрасль физики, характеризуется с одной стороны наличием развитых аналитических методов, задающих базу для синтеза электронно-оптических систем, а с другой – широким использованием специализированных программ, позволяющих с большой точностью рассчитывать сложные системы без необходимости проведения трудоемких

этапов моделирования и оптимизации.

Задачи электронной оптики, такие как описание движения заряженных частиц в электростатических полях, определение характеристик генерируемых пучков, нахождение оптимальной конфигурации элементов электронно-оптических систем, применительно к задачам конструирования источников ионов для масс-спектрометров решаются следующим образом. На первом этапе выбирается количество, тип, размеры, взаимное расположение и потенциалы электронных линз. На втором этапе определяется потенциальное поле полученной системы линз. На третьем этапе на основе полученного распределения потенциалов ионно-оптической системы вычисляются траектории движения ионов и пространственные характеристики получаемого пучка. По результатам расчетов ионно-оптическая схема корректируется, и вычисления повторяются до достижения необходимых характеристик ионного пучка, формируемого источником ионов.

При разработке источников ионов для масс-спектрометров должны учитываться некоторые специфические требования. Во-первых: при вытягивании, формировании и фокусировке пучка

ионов на пути от ионизационной камеры до выходной щели источника ионов получаемый пучок не должен подвергаться дискриминации по массовому числу, поэтому в источниках ионов нельзя использовать магнитные линзы. Во-вторых: источник ионов должен быть компактным, что накладывает ограничения на использование линз, имеющих большую протяженность вдоль оси движения пучка ионов (цилиндрических и квадрупольных). В-третьих: ввиду невысокой интенсивности ионного пучка можно пренебречь эффектами влияния пространственного заряда и столкновениями частиц в пучке. Кроме того, ввиду невысоких скоростей ионов не учитывается релятивистский эффект.

Хотя свойства простых электронно-оптических систем давно изучены и описаны, достаточно сложно определить распределение потенциалов сложных систем аналитическим путем, поэтому для нахождения распределения потенциалов электростатических полей использовались различные методы моделирования. Эти методы можно разделить на две группы: методы моделирования и методы расчета.

Методы моделирования

Методы моделирования были широко распространены в период с сороковых до семидесятых годов. В основе этих методов лежит аналогия между законами распределения потенциала электростатических полей в вакууме и законами, определяющими иные физические процессы. Такими аналогиями являются: распределение потенциала в электролите, напряжение резиновой мембранны и другие.

Одним из первых методов, позволивших оперативно определять траектории и скорости движения заряженных частиц, явился метод, основанный на свойствах равномерно натянутой резиновой мембранны. В этом методе высота отдельных участков мембранны моделирует потенциал электростатического поля. Для задания распределения потенциалов создается модель ионно-оптической системы таким образом, чтобы отдельные элементы системы представлялись их сечениями в центральной плоскости, а высота этих элементов была пропорциональна напряжениям на соответствующих элементах. Для определения движения положительно заряженных частиц положительные электроды должны прикладываться снизу, увеличивая высоту мембранны, а отрицательные – сверху, уменьшая высоту. Тогда высота участков мембранны, опирающихся на площа-

ди, изображающие электроды, будет равна высоте, пропорциональной напряжению электродов, а высота участков между электродами будет определяться в соответствии с уравнением Лапласа, как и напряженность поля моделируемой системы. Доказательства соответствия закона распределения потенциала электростатической системы и функции, описывающей рельеф мембранны приведены в [1, 2].

Измеряя высоту участков резиновой мембранны, можно построить распределение напряженности электростатического поля исследуемой системы, но этим применение метода резиновой мембранны не ограничивается. Возможно определить траектории движения заряженных частиц, используя свободное качение по натянутой мембрани маленьких металлических шариков. Действительно, потенциальная энергия шарика пропорциональна высоте участка мембранны, на котором находится шарик, а кинетическая энергия пропорциональна квадрату его скорости. Следовательно, шарик может моделировать движение заряженной частицы, потенциальная энергия которой пропорциональна напряженности электростатического поля, а кинетическая – квадрату скорости. Доказательства этого утверждения и уравнения движения шариков также приведены в [1, 2]. Таким образом, выпуская шарики на участках, соответствующих вводу заряженных частиц в исследуемую ионно-оптическую систему, и выполняя условия соответствия начальных направлений и скоростей движения шариков, аналогичным начальным условиям моделируемых заряженных частиц, становится возможным определять траектории и скорости заряженных частиц в ионно-оптических системах. При использовании стrobоскопического фотографирования скорости движения шариков на отдельных участках траекторий определяются по расстояниям между последовательно зафиксированными изображениями.

На рис. 1 схематично изображено применение метода резиновой мембранны для определения потенциалов и траекторий движения ионов системы, состоящей из катода 1, находящегося под положительным потенциалом, диафрагмы с отверстием 2, находящейся под нулевым потенциалом относительно дрейфового промежутка 3. Линиями 4 условно показаны участки одинаковой высоты мембранны, соответствующие эквипотенциальнym линиям моделируемой системы. Линиями 5 изображены траектории движения шариков, моделирующих заряженные частицы в исследуемой системе.

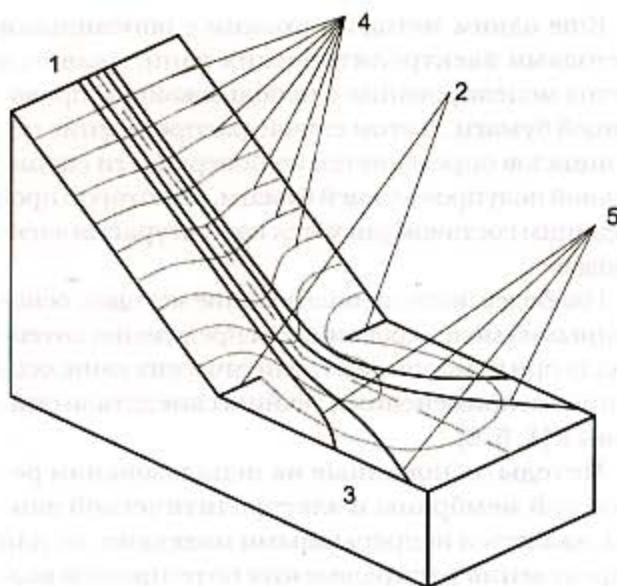


Рис.1. Метод резиновой мембранны

Тем не менее, несмотря на доступность и наглядность метода, получаемые траектории движения не отличаются высокой точностью, и наибольшее распространение этот метод резиновой мембранны получил для анализа распределения потенциалов, причем известны даже автоматизированные установки, использующие этот метод [3].

Одним из наиболее распространенных методов моделирования электростатических полей является метод, основанный на измерении распределения потенциалов в электролитической ванне. В ванну, стенки и дно которой выполнены из непроводящего материала, помещают увеличенную модель исследуемой ионно-оптической системы. Электроды модели изготавливают из металла и запитывают напряжениями, пропорциональными напряжениям электродов моделируемой системы. При заливке электролитом модели до плоскости симметрии распределение потенциалов в приповерхностном слое повторяет распределение напряженности исходной системы в вакууме. Такое соответствие обусловлено тем, что оба распределения подчиняются уравнениям Лапласа, а при подобии граничных условиях, задаваемых напряжениями на электродах, распределения потенциалов также совпадают.

Распределение потенциалов в методе электролитической ванны измеряется при помощи зонда с тонким острием, касающегося поверхности жидкости. Картина распределения потенциала определяется при помощи пантографа, отслеживающего перемещение зонда, и измерительного устройства, контролирующего потенциал, измеряемый зондом в точке контакта. Для выяснения характера распределения потенциалы фиксиру-

ются последовательно при сканировании модели, но более информативным является способ построения эквиденциальных линий. При этом способе измерительное устройство настраивается на определенный уровень сигнала, при достижении которого пантограф ставит точку на листе бумаги. Последовательно перемещая зонд по поверхности, получают серию точек, соответствующих линии одинакового потенциала. Затем контрольный уровень меняется, процесс построения эквиденциальной линии повторяется для нового уровня. В шестидесятых годах были разработаны и использовались приборы, автоматически производящие расчет и построение траекторий заряженных частиц — траектографы, использующие метод электролитической ванны [4]. При использовании метода электролитической ванны и соблюдении определенных условий, направленных на уменьшение влияния различных мешающих факторов, возможно довести погрешность измерения в электролитический ванне до показателя менее 0,1%.

На рис.2 схематично изображена установка для определения потенциалов методом электролитической ванны. При помощи зонда 1 измеряется потенциал $U_{\text{зам}}$, образующийся в электролите при подаче потенциалов U_1 , U_2 , U_3 , на модели электродов 2. Эквиденциальные линии отмечаются на листе 5 карандашом 3, связанным с зондом при помощи пантографа. Также на листе отмечены контуры 4 сечений электродов.

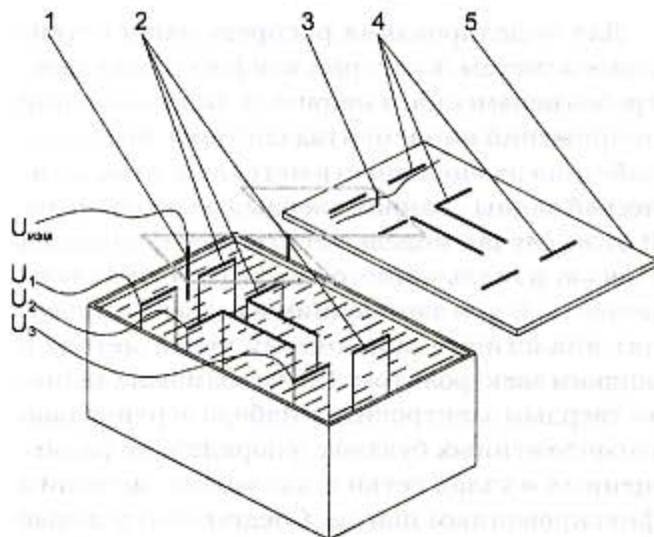


Рис.2. Метод электролитической ванны

Изготовление моделей электродов для электролитической ванны является достаточно трудоемкой операцией, особенно при подборе оптимальных форм электродов. Для облегчения процесса быстрого задания нестандартных и слож-

ных форм электродов для метода электролитической ванны использовались металлические сетки с булавками. При этом металлическая сетка с мелкими ячейками являлась основой, на которой закреплялись металлические булавки, погруженные в электролит. Своим расположением булавки имитировали сечение электрода, позволяя строить достаточно точные и сложные конфигурации.

На рис. 3 схематично изображено использование булавок для быстрого моделирования сложных форм электродов. Сетка, в ячейки которой вставлены булавки, условно не показана.

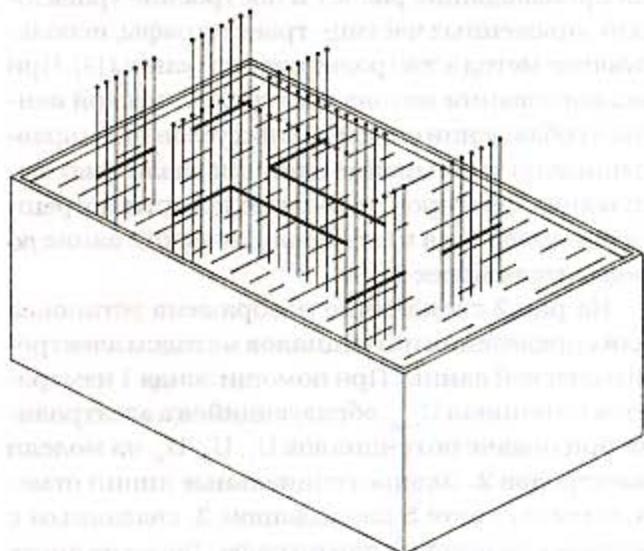


Рис.3. Использование сетки с булавками в методе электролитической ванны

Для моделирования распределения потенциалов систем, в которых конфигурация электродов неизменна, а меняются лишь значения напряжений на элементах системы, была разработана разновидность метода электролитической ванны – ванна с твердым электролитом. В этом случае модель электродов заливается смесью измельченного графита и гипсового цемента, и при застывании измерения проводят аналогично описанному выше методу с жидким электролитом. Также возможна заливка твердым электролитом набора вертикально расположенных булавок, упорядочено размещенных в узлах сетки с как можно меньшим фиксированным шагом. Соединяя отдельные булавки, и подавая на них напряжение, получают модели электродов сложной формы аналогично использованию булавок и металлической сетки в ванне с жидким электролитом. Булавки, оставшиеся вне сечений электродов, оставляют не подключенными к источникам и не влияют на распределение потенциала.

Еще одним методом, схожим с описанными методами электролитических ванн, является метод моделирования с использованием проводящей бумаги. В этом случае распределение потенциалов определяется на поверхности специальной полупроводящей бумаги, на которой проводящим составом рисуется конфигурация электродов.

Наиболее полно использование методов, основанных на моделировании распределения потенциала при помощи электролитических ванн, особенности применения и технические детали описаны в [1, 5, 6].

Методы, основанные на использовании резиновой мембранны и электролитической ванны, являются непрерывными моделями, но для определения распределения потенциалов возможно использование также дискретных моделей. Дискретная модель использует то допущение, что дифференциальное уравнение Лапласа, описывающее распределение потенциалов, может быть преобразовано в уравнение конечных разностей. При этом исследуемая система может быть задана в виде конечного числа точек, потенциалы которых связаны между собой системой линейных уравнений. Потенциал каждой точки находится как среднее арифметическое соседних равноудаленных точек, а граничными условиями являются заданные потенциалы точек, изображающих электроды моделируемой ионно-оптической системы. Физической реализацией такого подхода к определению распределения потенциалов служит сетка сопротивлений, причем для моделирования систем с полоской или осевой симметрией используется двумерная сетка, легко реализуемая на практике. Уравнения, подтверждающие правомочность использования сетки, и соотношения значений сопротивлений, необходимые для моделирования различных систем и граничных условий, приведены в [1, 5, 6].

Измерение распределения потенциала производится следующим образом: все точки, относящиеся к отдельным электродам, соединяют между собой и подают потенциалы, пропорциональные потенциалам соответствующих электродов исследуемой системы. Потенциалы свободных точек измеряются, и на основе этих измерений строится картина распределения потенциала. Чем больше количество точек, тем соответственно точнее получается результат; при тщательном моделировании и правильном подборе сопротивлений удается достичь погрешности менее 0,01%.

Расчетные методы и специализированное программное обеспечение

В настоящее время использование описанных выше методов уступило место моделированию на ЭВМ с применением специализированного программного обеспечения. Причинами, вызвавшими такой переход, явились с одной стороны громоздкость и трудоемкость методов моделирования, а с другой – развитие вычислительных методов, появление специализированного программного обеспечения для расчета ионно-оптических систем, а также – широкое распространение, доступность персональных ЭВМ и возросшая производительность современных компьютеров.

Программы, моделирующие движение пучков заряженных частиц, разделяются на три класса: программы, основанные на построении огибающей пучка, программы, последовательно рассчитывающие траектории отдельных частиц и представляющие пучок как сумму не взаимодействующих между собой частиц, и программы трассировки пучка, определяющие движение частиц с учетом взаимодействия частиц между собой [7]. Для целей проектирования ионно-оптических систем источников ионов для масс-спектрометров наиболее приемлемыми являются программы расчета траекторий частиц, описываемые ниже.

В основе большинства специализированных программ расчета траекторий частиц лежит аппроксимация непрерывного распределения, определяемого уравнением Лапласа, дискретными уравнениями конечных разностей. Распределение потенциалов чаще всего находится либо при помощи метода конечных разностей, либо при помощи метода конечных элементов.

В основе метода конечных разностей лежит замена системой линейных уравнений дифференциального уравнения, описывающего распределение потенциала. При этом потенциал каждой точки принимается равным среднему арифметическому потенциалов, определенных в ближайших равноудаленных точках. В общем случае строится трехмерная сетка равноудаленных точек, затем задаются известные потенциалы точек, относящихся к электродам, а потенциалы остальных точек определяются различными итерационными методами. Для расчета симметричных систем используется двумерная сетка, что позволяет значительно упростить задание граничных условий и ускорить процесс расчета.

Метод конечных элементов основан на решении дифференциального уравнения на основе вариационного подхода. Исследуемая область

разбивается на множество треугольных элементов, внутри каждого из которых изменение потенциала считается линейным. Значения потенциалов на границах соседних элементов принимаются равными для обеспечения непрерывности функции распределения. Затем определяется функционал, минимизация которого даст решения исходного уравнения в точках, соответствующих узлам треугольников. Так как изменение потенциала внутри треугольников принимается линейным, то значения потенциала в каждой точке находится из системы линейных уравнений, число которых соответствует числу этих точек.

Подробно математический аппарат и численные методы расчета, используемые при расчете ионно-оптических систем, а также достоинства и недостатки методов освещены в [6].

В настоящее время существует множество программ, реализующих численные методы расчета, часть из этих программ – коммерческие, выполненные и поддерживаемые фирмами, специализирующимися на разработке программного обеспечения, а часть – программы, разработанные различными исследовательскими организациями и используемые в этих организациях для своих нужд. В первом случае программы отличает дружественный интерфейс и развитая система помощи и поддержки, а во втором – более аскетичный интерфейс, отсутствие или ограниченность справочного материала, более узкая специализация решаемой задачи. Далее приведены сведения о наиболее популярных "профессиональных" коммерческих программах, а данные о "любительском" программном обеспечении не приводятся из-за недостатка подробной информации. Большой перечень подобных программ с краткими описаниями можно найти на сайте общества Charged Particle Optics Software Internet Services, расположенным по адресу wwwdo.tn.tudelft.nl/bbs/cposis.htm. Следует отметить, что достаточно большая часть упомянутых на сайте программ создана российскими учеными: Я.Гурьева, В.Ильин, Е.Ицкович, В.Свешников, В.Синях (компьютерный центр Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск), В.Иванов (Институт математики, г. Новосибирск), А.Толмачев (Институт физики, г. Черноголовка Московской обл.), М.Явор, А.Бердников, М.Сведенцов, А.Калимов (Институт аналитического приборостроения РАН, г. С.-Петербург), А.Титов, С.Сабчевский, И.Барбари (Санкт-Петербургский университет электротехники, г. С.-Петербург).

Английская компания Vector Fields Ltd пред-

лагает три программных продукта: OPERA-2D; OPERA-3D и CONCERTO. Программа OPERA-2D предназначена для анализа полей планарной и аксиальной симметрии, где можно обойтись без третьего измерения. Включает модули для расчета статических и динамических полей, вихревых токов, тепловых процессов, механических нагрузок. Учитывает свойства нелинейных и анизотропных материалов, влияние объемного заряда. Может использоваться для расчета траекторий заряженных частиц. OPERA-3D в отличие от OPERA-2D позволяет производить расчеты полностью трехмерных конструкций сложной конфигурации. Дополнительно к OPERA-3D могут подключаться следующие специализированные модули: TOSCA – модуль, предназначенный для расчетов статических электрического и магнитного полей, ELECTRA – модуль для трехмерного динамического анализа электромагнитных полей, SCALA – для анализа движения частиц с учетом влияния объемного заряда, CARMEN – для расчетов электродвигателей и других вращающихся машин. Программа CONCERTO предназначена для расчета высокочастотных устройств, включая элементы волноводов, различные типы антенн, полосковые линии, микроволновые нагреватели. Математический аппарат программ семейства OPERA основан на применении метода конечных элементов, программы CONCERTO – на применении метода конечных разностей в сочетании с методом конформного отображения.

Для расчетов ионно-оптических систем источников ионов производитель рекомендует следующую конфигурацию – программу OPERA-3D с дополнительным модулем SCALA. Стоимость такого пакета составляет 12000 £ за OPERA-3D и 5400 £ за SCALA. При отправке запроса фирма может бесплатно выслать демо-версию продукта, функциональность которой в части создания и расчета моделей соответствует полной версии, но с отсутствием возможностей записи и последующего воспроизведения созданных моделей и результатов.

По сведениям, полученным от менеджера компании, описанное выше программное обеспечение используется рядом исследовательских и производственных компаний, в том числе такими известными, как Thomson, Siemens, Philips, General Electric, Panasonic, Sony, Samsung. В России программы производства Vector Fields Ltd используются в Институте теоретической и экспериментальной физики (ИТЭФ, г. Москва). На рис.4 представлены примеры изображений различных расчетов, проведенных при помощи описанных программ.

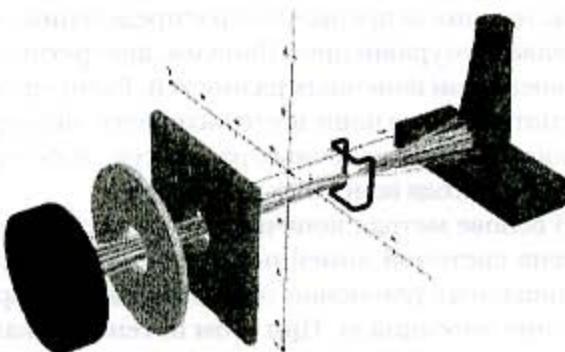
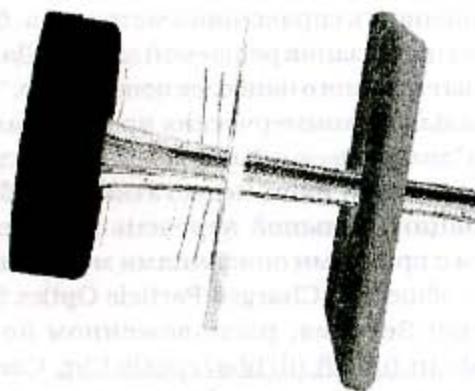


Рис.4. Примеры моделирования траекторий заряженных частиц, выполненного при помощи программы OPERA-3D

Узнать о последних версиях программ и получить дополнительную информацию можно на сайте компании www.vectorfields.com.

В течение продолжительного времени немецкая компания Ingenieurbüro für Naturwissenschaft und Programmentwicklung выпускала специализированные программы для расчета траекторий пучков заряженных частиц в электрических полях в двумерном пространстве AXCEL-INP и в трехмерном – KOBRAZ-INP, а также для расчета

магнитных полей – MAGNET-INP. Отличительной чертой указанных программ является специализация на разработке разнообразных источников ионов, что проявляется в учете различных тонкостей моделирования, а именно – процессов экстракции и транспортирования, образования вторичных электронов и ионов, эффектов объемного заряда и его компенсации, тепловых эффектов (см.рис.5).

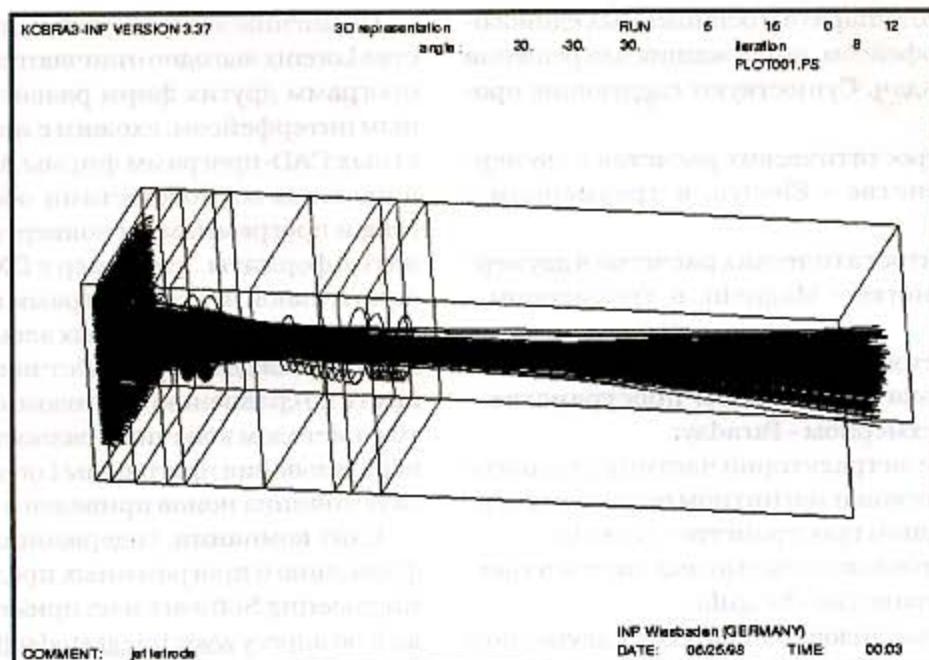


Рис.5. Расчет траекторий заряженных частиц, выполненный при помощи программы KOBRA3-INO

К положительным качествам программы также следует отнести возможность вывода результатов не только в виде трехмерного графического представления траекторий на фоне ионно-оптической системы, как в остальных

программах, но и возможность отображения в проекциях фазового пространства (эмиттанс в пространственно-угловых координатах, рассчитанный при помощи программы AXCEL-INO, представлен на рис.6).

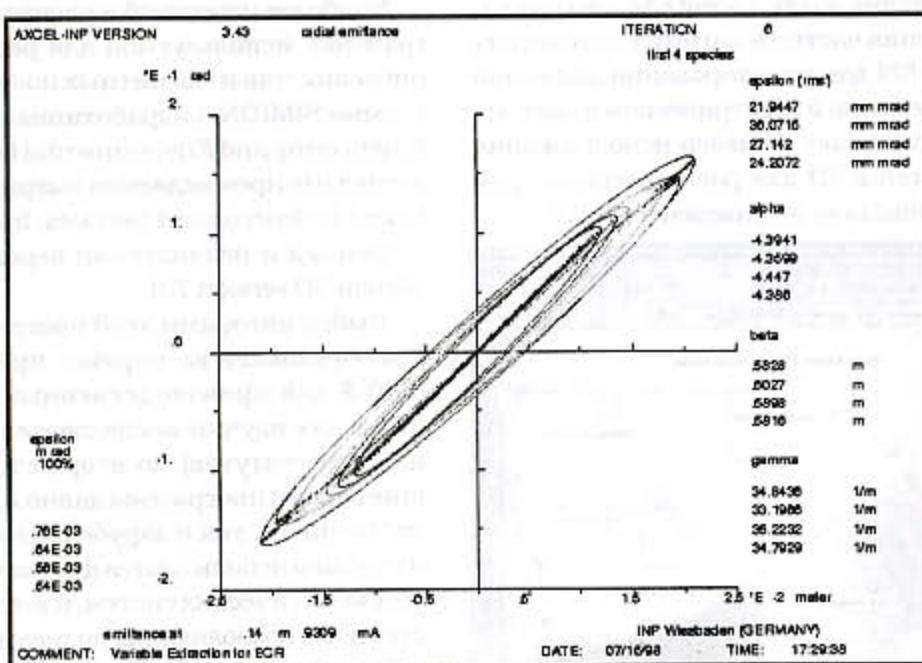


Рис.6. Расчет эмиттанса, выполненный при помощи программы AXCEL-INO

Узнать подробнее о программах и областях их применения, а также посмотреть примеры расчетов можно по адресу www.inp-dme.com. Однако следует заметить, что последние версии указанных программ датированы 1998 годом, а письма, отосленные авторам программ,

остались без ответа, в связи с чем можно сделать вывод о прекращении работ над описанными выше программами.

Канадская Фирма Integrated Engineering Software предлагает разработчикам целую серию программ, выполненных на основе единого ма-

тематического аппарата и оснащенных единообразным интерфейсом, но служащих для решения различных задач. Существуют следующие программы:

- для электростатических расчетов в двумерном пространстве – **Electro**, в трехмерном – **Coulomb**;
- для магнитостатических расчетов в двумерном пространстве – **Magneto**, в трехмерном – **Amperes**;
- для расчетов электромагнитных систем переменного тока в двумерном пространстве – **Oersted**, в трехмерном – **Faraday**;
- для расчетов траекторий частиц в статических электрическом и магнитном полях в двумерном и трехмерном пространстве – **Lorentz**;
- для расчетов высокочастотных систем в трехмерном пространстве – **Singula**;
- для расчета тепловых процессов в двумерном пространстве – **Kelvin**, в трехмерном – **Celsius**;
- для расчета механических нагрузок в двумерном пространстве – **Elasto**;
- для расчетов силовой электроники – **Caspoc**.

Для разработки ионно-оптических систем используются различные версии программы **Lorentz**: **Lorentz-2D** для двухмерного моделирования, **Lorentz-E** для моделирования движения частиц в электростатических полях, **Lorentz-M** для моделирования движения частиц в магнитостатических полях, **Lorentz-EM** для моделирования движения частиц одновременно в электрическом и магнитном статических полях. Пример использования программы **Lorentz-2D** для расчета траекторий ионов в источнике ионов приведен на рис. 7.

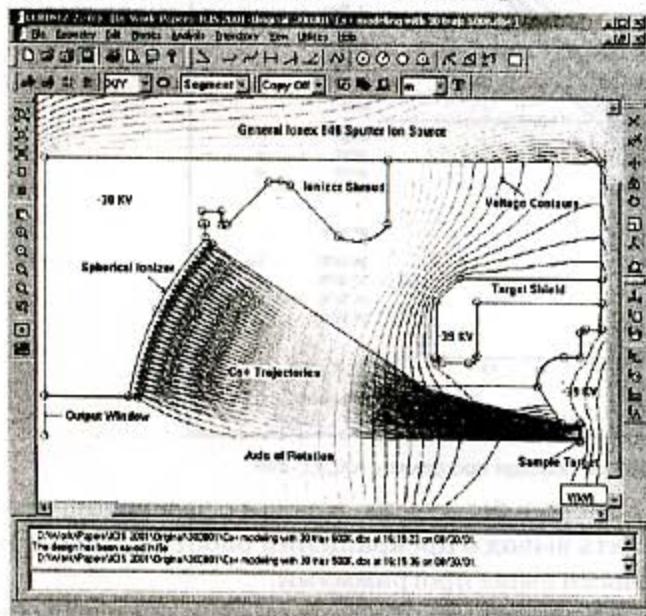


Рис.7. Расчет траекторий заряженных частиц, выполненный при помощи программы **Lorentz-2D**

По мнению авторов статьи, программы семейства **Lorentz** выгодно отличаются от аналогичных программ других фирм развитым и дружелюбным интерфейсом, схожим с интерфейсом известных CAD-программ фирмы Autodesk, а также широкими возможностями обмена данными с этими программами и конвертации в общепринятые форматы, например в DXF. Еще одной отличительной чертой программ является использование метода граничных элементов, обладающего по убеждению разработчиков рядом преимуществ по сравнению с методом конечных элементов и методом конечных разностей [8, 9]. Пример использования программы **Lorentz-2D** для расчета источника ионов приведен в [10].

Сайт компании, содержащий подробную информацию о программных продуктах Integrated Engineering Software и их применении, расположен по адресу www.integratedsoft.com. В качестве демо-версии программы компания предоставляет полнофункциональную версию программы после оплаты транспортных расходов (75 \$ за программу), но с условием или обязательного возврата программы, или оплаты полной версии по истечении оговоренного срока. Стоимость программ составляет от 4900 \$ до 50000 \$ в зависимости от запрашиваемого комплекта.

Наиболее известной и распространенной программой, используемой для расчета как электрических, так и магнитных полей, является программа **SIMION**, разработанная в Idaho National Engineering and Environmental Laboratory, реализуемая и сопровождаемая американской фирмой Scientific Instrument Services, Inc. Последняя выпущенная и реализуемая версия программы – **Simion 3D version 7.0**.

Выбор авторами этой программы для расчетов обусловлен во-первых, приемлемой ценой (600 \$ для производственных организаций и 300 \$ для научно-исследовательских организаций и институтов), во-вторых тем, что предыдущие версии программы давно известны как отечественным, так и зарубежным разработчикам и успешно используются для расчетов различных ионно-оптических систем, и в-третьих, рядом достоинств, позволяющих полнее использовать возможности, предоставляемые программой для моделирования и расчетов источников ионов. В частности, программа сопровождается подробнейшим описанием форматов файлов входных и выходных значений, что позволяет использовать данные, полученные в ходе расчетов вне интерфейса программы, дает возможность создавать собственные программы, облегчающие задание

начальных условий и отображение результатов. Кроме того, встроенный в программу Simion компилятор пользовательских программ позволяет создавать внутри программы собственные программные модули, предназначенные для моделирования специфических условий задачи. Еще одно достоинство программы – возможность задания геометрии моделируемой системы не только рисованием электродов при помощи клавиатуры и мыши, но и путем аналитического описания моделируемой системы.

Программа Simion написана на языке С, работает в среде Windows. Минимальные требования к ЭВМ: процессор Intel-486, ОЗУ – 16 Мбайт, 200 Мбайт свободного места на жестком диске.

Программа позволяет рассчитывать электрические и магнитные поля и определять траектории движения заряженных частиц без учета влияния объемного заряда. Для расчета распределения потенциалов используется метод конечных разностей, при этом пространство моделируемой системы разбивается на множество равноудаленных точек, потенциал каждой точки связан с потенциалом соседних системой линейных уравнений. При расчетах на каждую точку отводится 10 байт оперативной памяти, а максимальное

количество точек, которое может быть задано в программе, составляет 50 000 000. В качестве граничных условий, исходя из которых производится решение системы линейных уравнений, выступают задаваемые при моделировании потенциалы точек, соответствующих электродам моделируемой системы. При моделировании сложных трехмерных систем используется трехмерный массив точек, при моделировании более простых систем, обладающих цилиндрической или пла-парной симметрией – используется двумерный массив. Максимальное число задаваемых потенциальных массивов, описывающих электроды, составляет 200, что более чем достаточно для описания реальных ионно-оптических систем.

Задание конфигурации и потенциалов электродов исследуемой системы производится при помощи специального редактора, определяющего количество моделируемых точек, тип симметрии и размеры системы. Затем при помощи команд рисования прямоугольников, окружностей, полилиний, парабол и гипербол создаются необходимые конфигурации электродов. На рис.8 приведен пример построения электростатической линзы с осевой симметрией.

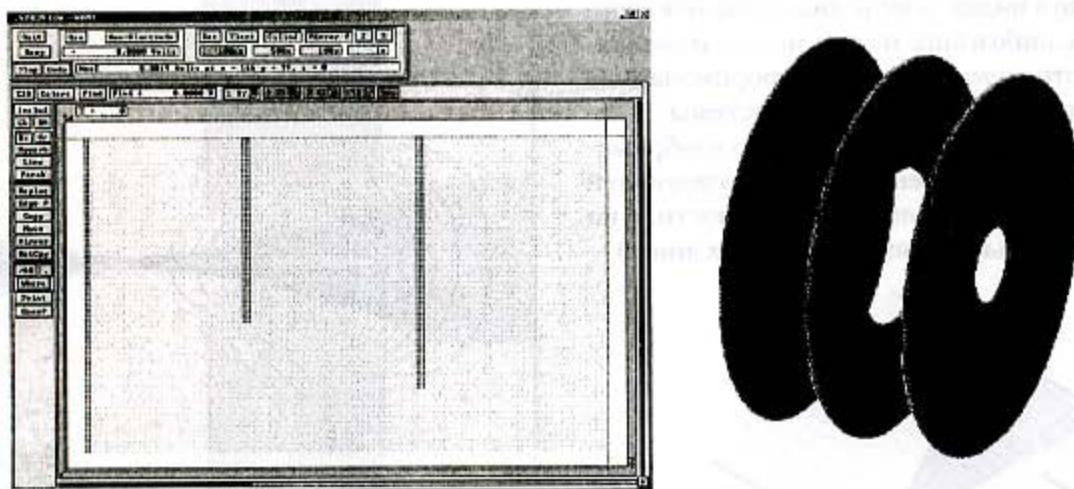


Рис.8. Создание модели электростатической линзы с осевой симметрией. Слева – прорисовка сечения линзы, справа – полученная трехмерная модель

Кроме режима "ручного" построения конфигурации электродов, SIMION предусматривает возможность построения при помощи так называемого "геометрического компилятора". Этот компилятор позволяет задавать достаточно сложные формы при использовании аналитических функций, операторов логического сложения, вычитания и умножения и трансформации в трехмерном пространстве модели.

На рис.9 приведены примеры систем, построенных при помощи геометрического компилятора. Модели, созданные как в "ручном" режиме, так и построенные при помощи компилятора, можно рассматривать в виде двумерных и трехмерных проекций, для наглядности возможно выполнение сечений в различных плоскостях, вращение, приближение и удаление изображений.

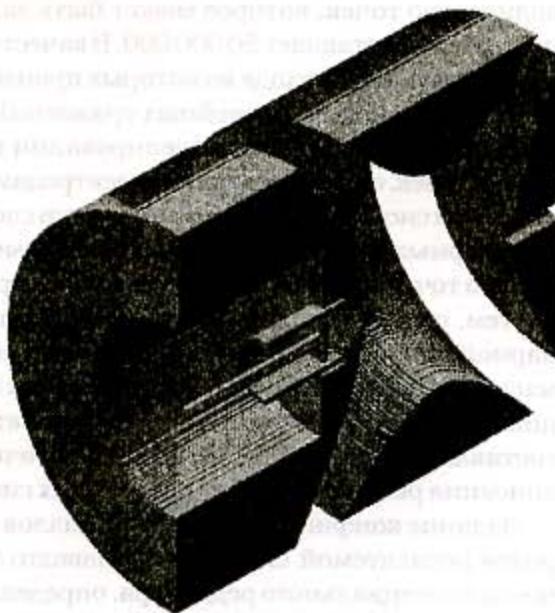


Рис.9. Модели, созданные при помощи геометрического компилятора

После создания модели ионно-оптической системы и задания потенциалов ее элементов SIMION позволяет произвести расчет распределения потенциалов. По результатам расчета определяется потенциал каждой точки массива, представляющего моделируемую систему. SIMION позволяет графически представлять результаты расчета в двух видах: в виде линий одинакового потенциала, либо в виде потенциальной поверхности, высота точек которой пропорциональна величине потенциала в сечении системы. В качестве примера на рис. 10 приведено изображение распределения потенциалов фокусирующей линзы в виде потенциальной поверхности, а на рис. 11 – с помощью изопотенциальных линий.

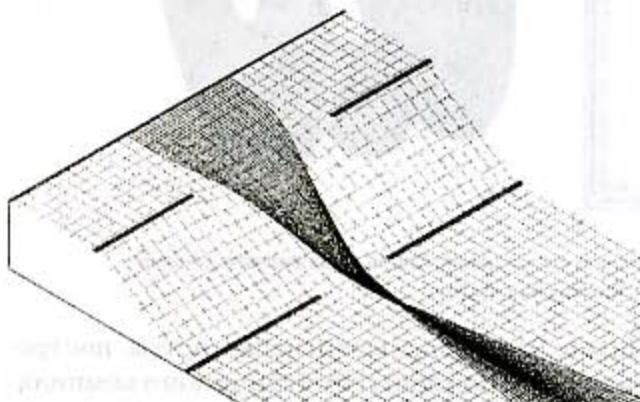
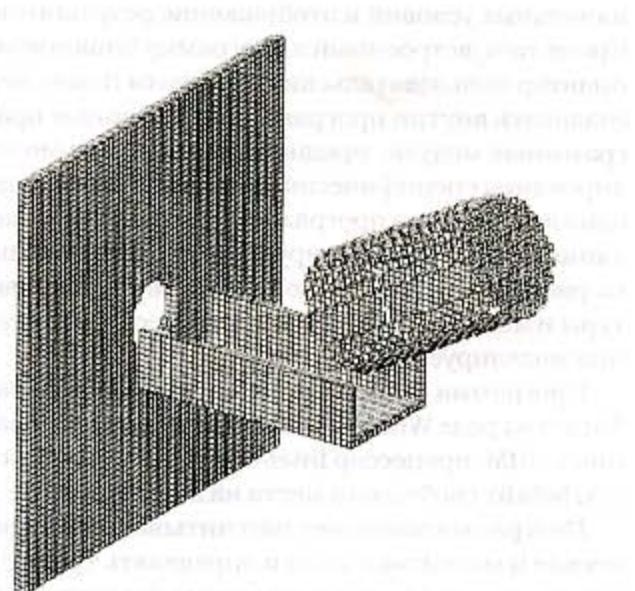


Рис.10. Изображение распределения потенциалов в виде потенциальной поверхности в осевом сечении линзы

После расчета распределения потенциалов становится возможным определить траектории заряженных частиц, вводимых в систему. SIMION позволяет задавать различные характеристики



ионов (начальные координаты, углы, энергии и прочее) вручном режиме. Однако, что для качественного моделирования источника необходимо формировать массив начальных условий для достаточно большого числа частиц, измеряющееся десятками тысяч.

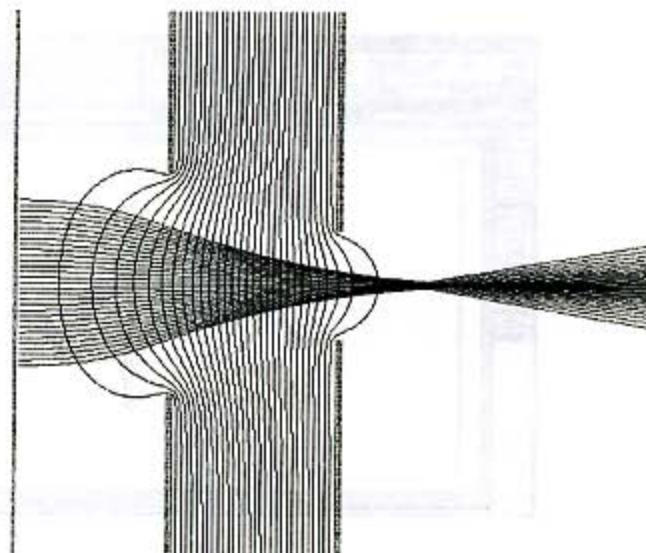


Рис.11. Изображение распределения потенциалов в виде изопотенциальных линий в осевом сечении линзы

Трудно, почти нереально задать такое количество данных вручную, как это предусмотрено разработчиками программы. Однако открытый формат данных, используемой программой SIMION, позволил решить эту проблему путем создания специализированного модуля, задающего параметры необходимого количества заряженных частиц, исходя из заданных диапазонов значений. Программный модуль GENIO, разработан-

ный в ИАНП, позволяет создавать ансамбль начальных координат: скоростей, масс и энергий частиц, выбираемых либо случайным образом, либо с фиксированным шагом в заданном диапазоне. Кроме того, задаваемые ограничения по каким-либо параметрам позволяют достаточно точно моделировать специфические распределения, свойственные определенным моделируемым распределениям ионов. Получаемый в результате работы программы файл служит исходным файлом начальных данных, используемым в дальнейшем программой SIMION.

Расчет траекторий движения производится на основе информации о текущем положении и скорости иона в соответствии со значением потен-

циала электростатического поля в этой точке. После определения изменения вектора скорости вычисляется положение иона через заданный временной интервал. Таким образом вычисления повторяются до тех пор, пока ион не выйдет за границы области моделируемой системы, либо не столкнется с электродом. SIMION предусматривает возможность варьирования величины временного интервала, что позволяет выбирать компромисс между точностью расчета траектории и длительностью процесса расчета. Результат расчета траектории в графическом виде отображается на экране совместно с выбранными проекциями моделируемой системы (пример представлен на рис. 12).

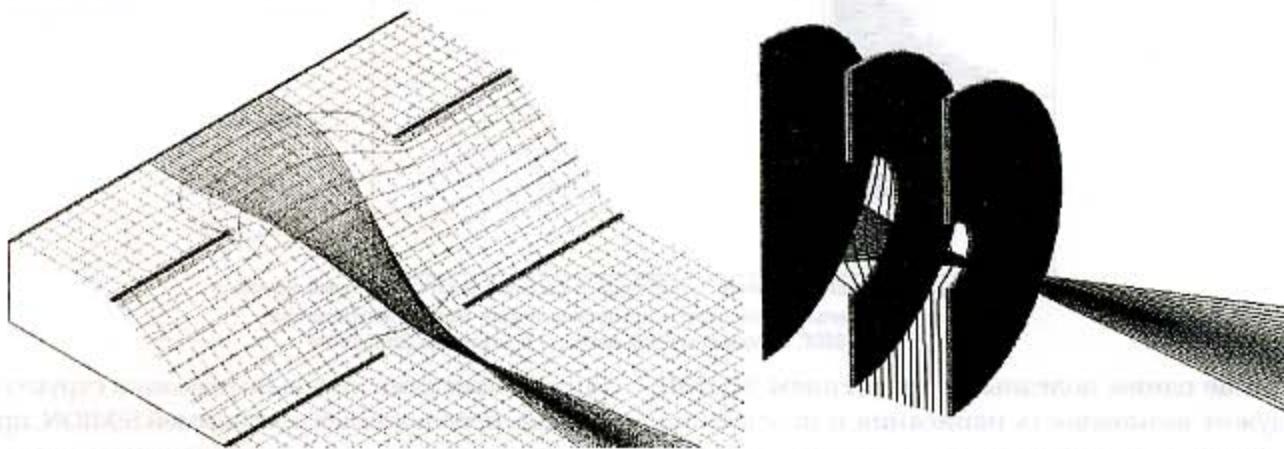


Рис.12. Изображение траекторий ионов в электростатической линзе

Однако такое представление не дает возможности объективно оценить характеристики получаемого ионного пучка в координатах фазового пространства. Пользовательский интерфейс, созданный разработчиками, позволяет лишь обозначить геометрические траектории частиц в проекциях трехмерной модели, не давая возможности представления выходных параметров в виде двумерных эмиттансов. Для решения этой проблемы в ИАНП был разработан модуль SIMDRAW, определяющий координаты, углы и скорости частиц в любой заданной плоскости, пересекающей оптическую ось модели. На основе данных, рассчитанных SIMION, программа SIMDRAW позволяет строить сечения эмиттанса пучка, накладывать ограничения и рассчитывать долю частиц, попадающих в заданный диапазон углов и координат (рис. 13). Указанные представления результатов расчета значительно облегчают и ускоряют поиск и количественную оценку оптимальности разрабатываемой системы.

Таким образом, становится возможным моделирование ионно-оптической системы источника ионов масс-спектрометра при использовании

следующей связки программ. Полученные в результате расчетов масс-анализатора двумерные акцептансы анализатора определяют границы двумерных эмиттансов ИОС источника ионов. При использовании программы GENIO создается массив данных, описывающих большое число заряженных частиц, характеристики которых соответствуют ионам, получаемым в ионизационной камере. Затем указанный массив передается в программу SIMION для расчета прохождения ионов через моделируемую ИОС источника ионов. Полученные результаты расчета передаются в SIMDRAW для анализа эмиттанса моделируемой ИОС источника ионов и проверки на соответствие акцептансу анализатора. Далее производится оптимизация ИОС источника по критерию наименьших потерь ионов внутри ИОС источника ионов и максимального совпадения эмиттанса с акцептантом. Именно такая связка программ использовалась при разработке масс-спектрометра МТИ-350Г, что позволило в короткий срок создать масс-спектрометр с отличными характеристиками, исключая трудоемкие и продолжительные этапы моделирования и опти-

мизации конструкции ИОС. Испытания опытного образца масс-спектрометра продемонстрировали высокую степень совпадения расчетов с экспериментальными данными и показали высокую достоверность использованных алгоритмов и методов моделирования.

```
Total ratio = 80.1%
X min/max = -125.000 ... 60025.0   Y min/max = -166.392 ... 298.418
Z min/max = -837.251 ... 888.649
A min/max = -0.56638 ... 0.58783   B min/max = -0.99769 ... 1.03797
E min/max = 7496.91 ... 7996.21   M min/max = 0.00000 ... 0.00000
Trajectories: 11100 / 13800 (usage 80.1%)
Acceptance: 11100 / 13800 (usage 80.1%)
```

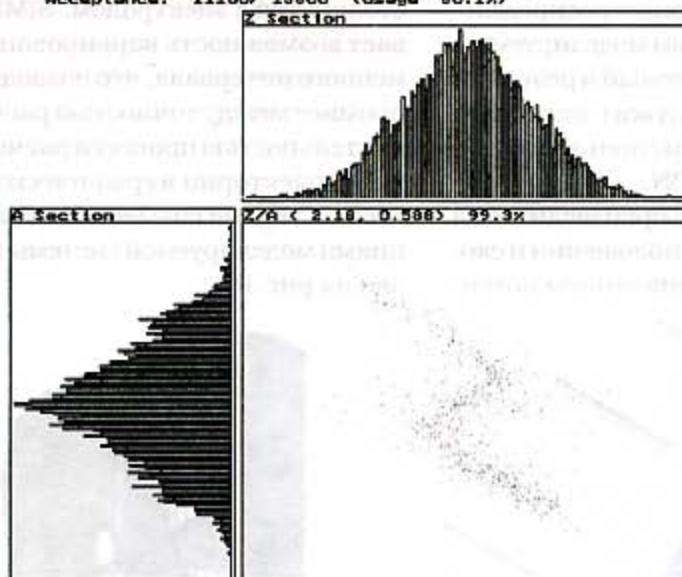


Рис.13. Распределение траекторий и сечение эмиттанса пучка ионов в вертикальной плоскости источника ионов масс-спектрометра МТИ-350Г, полученные при помощи программы SIMDRAW

Еще одним полезным дополнением SIMION служит возможность написания и исполнения пользовательских программ, запускаемых при выполнении процедуры расчета траекторий заряженных частиц. В этих программах пользователь может определить любые функции, зависящие от характеристик частиц, параметров их движения, потенциалов полей, и задать влияние этих функций на заряженные частицы и потенциалы электродов. В частности, при помощи пользовательских программ очень легко могут быть, процессы рассеяния заряженных частиц на молекулах остаточного газа в объеме моделируемой системы и прочие процессы, оказывающие влияние на характеристики реальных ионно-оптических систем. В качестве примера в приложении к описанию приведена программа, моделирующая движение ионов в квадрупольном масс-спектрометре.

Кроме перечисленных выше достоинств программы хотелось бы упомянуть об отличном описании, поставляемом с программой. В нем не только подробно указаны основные приемы работы с программой, но также описаны тонкости настройки множества параметров, влияющих на точность и скорость работы, приведены примеры расчетов, примеры файлов для геометрического компилятора и пользовательских программ.

Также в описании детально показана структура файлов, используемых программой SIMION, приведены алгоритмы и формулы используемого математического аппарата программы. Отдельно приведены тесты, при помощи которых пользователь сам может оценить качество расчетов, выполняемых SIMION в сравнении с результатами, полученными аналитическим путем (так называемые *performance tests*).

Узнать подробнее о применении программы Simion, скачать демонстрационную версию программы и посмотреть примеры использования программы можно на официальном сайте компании Scientific Instrument Services, расположенному по адресу www.sisweb.com. Примеры использования SIMION при анализе работы и конструировании источников ионов масс-спектрометров можно найти в серии работ [11-13].

Заключение

В настоящее время разработчикам ионно-оптических систем нет необходимости использовать громоздкие и трудоемкие методы "натуриного" моделирования с использованием электролитической ванны или резиновой мембранны для разработки приборов, исследования их свойств и определения характеристик. Бурное развитие и широкое использование средств вычислитель-

ной техники позволили разрабатывать и оптимизировать источники ионов методами математического моделирования, воплощенными в виде специализированного программного обеспечения. Наличие такого развитого и точного инструмента позволило значительно облегчить и ускорить работы по разработке ионно-оптических систем, повысить точность расчетов и достоверность моделей. Однако программное обеспечение – это только инструмент, один лишь факт его использования не гарантирует успешность разработки. Главным условием успешной работы является знание физических процессов, используемых в конструируемых приборах, понимание особенностей реализации математических методов, заложенных в программном обеспечении, умение

правильно воспользоваться этим программным обеспечением. Авторы надеются, что материалы статьи станут основой для выбора разработчиками ионно-оптических систем наиболее подходящих инструментов.

Авторы выражают благодарность всем разработчикам специализированного программного обеспечения, за возможность использования этих высокопроизводительных и наглядных средств в процессах разработки и исследования ионно-оптических систем. Авторы надеются получить отзывы на статью, а также информацию о различном программном обеспечении и опыту его использования при разработке ионно-оптических систем по адресу malab@aiib.ru.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кельман В.М. Электронная оптика / В.М.Кельман, С.Я.Явор Л.: Наука, 1968. С. 488.
2. W. Glaser. Grundlagen der Elektronenoptik. Wien, Springer-Verlag, 1952. С.700.
3. Уткин К.Г.. Установка с резиновой мембраной для автоматического определения эквипотенциалей с учетом пространственного заряда // ПТЭ № 5, 1959.
4. Левин Г.Э. Траекторографы – автоматы, производящие расчет и построение траекторий заряженных частиц / Г.Э.Левин, Г.П.Прудковский (Обзор) //ПТЭ №1, 1962
5. Кирштейн П.Т. Формирование электронных пучков / П.Т.Кирштейн, Г.С.Карно, У.Е.Уотерс.Пер с англ. М.: Мир, 1970, С.506.
6. Сидади М. Электронная и ионная оптика. Пер с англ. М.: Мир, 1990, С.639.
7. Физика и технология источников ионов. Под ред. Я. Брауна: Пер с англ. М.: Мир. 1998. С.496.
8. A.Asi. Boundary Element Method (BEM) for Charged Particle Optics. Proceedings of 46th SPIE Annual Meeting, San Diego, California, 2001
9. A.Asi. Superior Solutions for Electromagnetic Field Designs: The Boundary Element Method. Integrated Engineering Software, Winnipeg, MB, Canada, September 1995
10. A.Asi. Ion source modeling with LORENTZ-2D. Review of Scientific Instruments, Volume 73, number 2, February 2002
11. Галль Л.Н. Источник ионов для масс-спектрометрического изотопного анализа газов. I. Сравнительный анализ экспериментальных характеристик источников ионов масс-спектрометров для изотопного анализа газов / Л.Н.Галль, К.И.Лохов, Ю.И.Хасин // Научное приборостроение, 2001. Т. 11, №4. С.16-20.
12. Хасин Ю.И. Источник ионов для масс-спектрометрического изотопного анализа газов. II. Теоретическое сравнение источников ионов для изотопного анализа методом математического моделирования /Ю.И.Хасин, А.С.Бердников, Л.Н.Галль// Научное приборостроение, 2002. Т. 12, №1. С.30-34.
13. Бердников А.С. Источник ионов для масс-спектрометрического изотопного анализа газов. III Разработка источника ионов специализированного масс-спектрометра МТИ350Г для изотопного анализа гексафторида урана / А.С.Бердников, Л.Н.Галль, Ю.Н.Залесов, В.А.Калашников, В.А.Леднев, А.Б.Малеев, Ю.И.Хасин// Научное приборостроение, 2002. т. 12, №1. С.35-38.

* * * *

MODELING METHODS AND SOFTWARE TO DEVELOP ION OPTICAL SYSTEMS OF MS ION SOURCES
A.V.Saprygin, V.A.Kalashnikov, Yu.N.Zalesov, A.B.Maleev, L.N.Gal', V.D.Sachenko, A.S.Berdnikov,
Yu.I.Khasin

The article describes both modeling and special software used to design and calculate ion optical systems. Special emphasis is placed on program links based on SIMON 3D for through-designing of ion sources optical systems.