

ПРИЛОЖЕНИЕ 6.

МОДЕЛЬ ТВЕРДЫХ СФЕР ДЛЯ ОПИСАНИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ ИОНОВ С ЧАСТИЦАМИ БУФЕРНОГО ГАЗА

Пб.1. Введение. Описание процедуры моделирования.

Для адекватного моделирования газонаполненных ионопроводов и ловушек, работающих в присутствии буферного газа необходимо иметь надежную и адекватную модель столкновений ионов с нейтральными частицами. Разработка сколь либо точной модели столкновений молекулярных (часто многозарядных) ионов со сравнительно малыми частицами буферного газа (см. рис. 6.1) вряд ли возможна и, даже если будет создана, вряд ли будет иметь практическую ценность для моделирования ввиду сложности и большого количества расчетов.

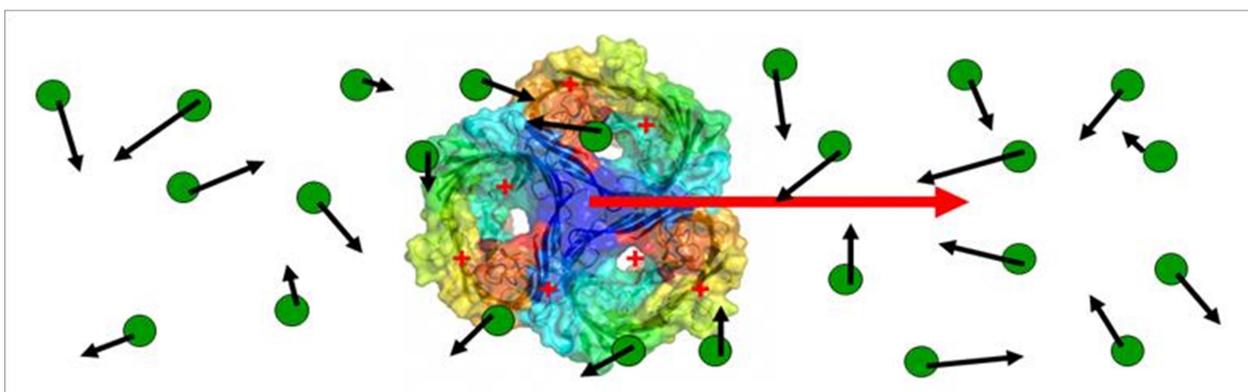


Рис.Пб.1. Движение тяжелого многозарядного иона в буферном газе.

Требования, предъявляемые к модели столкновений в моделированиях ловушек и газонаполненных ионопроводах можно сформулировать следующим образом:

- Адекватность описания релаксации кинетической энергии ионов (в системе центра масс) от десятков электрон-вольт до тепловых
- Давать разумные результаты не только для малых атомных ионов, но и для поли-атомных ионов с массой в несколько сотен и тысяч Дальтон.
- Обеспечивать сходимость к распределению Максвелла-Больцмана в состоянии теплового равновесия

- Быть эффективной с точки зрения вычислений.

В целом процедура моделирования столкновений ионов с нейтральными частицами принятая многими исследователями состоит из следующих основных шагов

1. **Шаг 1.***Оценка вероятности столкновения.*

Трассировка частиц производится путем численного интегрирования уравнений движения частиц в присутствии (переменных во времени) электрических полей. При этом, очевидно, предполагается, что движение происходит в вакууме. По окончании очередного шага известна конечная скорость иона и можно вычислить пройденную им дистанцию. Этих данных, как мы увидим далее, достаточно для оценки вероятности столкновений иона с частицами газа на этом конкретном шаге P_c . Исходя из этого, после каждого шага интегрирования делается случайное решение о том произошло ли столкновение данного иона или нет. Для этого генерируется случайное число ξ с равномерным распределением на отрезке $[0...1]$ и сравнивается с вероятностью столкновения. В случае если оказывается $P_c > \xi$, то принимается решение, что ион испытал столкновение и процедура продолжается к Шагу 2, в противном случае считается, что столкновения не было и расчет траектории иона продолжается без изменения начальной скорости иона. Заметим, что при использовании данного метода моделирования столкновений шаг интегрирования Δt должен быть достаточно маленьким, чтобы на каждом шаге вероятность была значительно меньше единицы. Адекватные результаты получаются если вероятность на каждом шаге не более 0.1.

2. **Шаг 2.***Моделирование случайных параметров столкновения*

На этом этапе случайные параметры и углы столкновения рассчитываются исходя из конкретной модели столкновений. Для модели твердых сфер этот этап описан подробно ниже в этом разделе.

3. Шаг 3. Расчет скорости иона после столкновения.

При известных параметрах столкновения, полученных на предыдущем шаге, данный этап достаточно элементарен, так как предполагает чисто упругое столкновение. Результирующая скорость иона после столкновения рассчитывается из законов сохранения. После изменения скорости иона на новую расчет траектории иона продолжается далее.

Многие исследователи проводили моделирования движения ионов в ВЧ полях при наличии столкновений с газом(143), (144). При этом делаются допущения, которые зачастую настолько упрощают моделирования столкновений, что результаты сомнительны. Для того, чтобы избежать подобных ситуаций автором было принято решение использовать для моделирования столкновений пусть упрощенную, однако математически точную модель, в которой не делалось бы каких либо допущений.

Такой моделью была выбрана модель парных столкновений твердых сфер, в которой ион и частица буферного газа рассматриваются как абсолютно упругие шарики и результат столкновения можно рассчитать исходя из законов сохранения импульса и энергии, если известны начальные скорости частиц и другие параметры конкретного столкновения. Как следует из вышесказанного, результат столкновения твердых сфер вполне предсказуем, однако выбор параметров столкновения является случайным из-за теплового распределения скоростей частиц буферного газа и случайных углов столкновения частиц. Задачей данного раздела является разработка статистически точных методов расчета данных случайных параметров. Итак для модели твердых сфер шаги 1,2,3 описаны ниже.

П6.2. Оценка вероятности столкновений для модели твердых сфер

Для частицы с сечением σ летящей со скоростью \vec{V} в «газе» неподвижных частиц, которые не имеют размера и представимы неподвижными материальными точками, вероятность столкновения за время Δt вычисляется как

$$\Delta P = n \cdot \sigma |\vec{v}| \Delta t, \quad (\text{П6.1})$$

где n - концентрация частиц. Уравнение П6.1 вполне очевидно, так как выражает просто количество частиц попадающих в объем цилиндра покрываемого сечением иона σ за время Δt . В рамках модели твердых сфер величину σ можно вычислить как $\sigma = \pi \cdot (r_i + r_b)^2$, где r_i и r_b - радиусы «сфер» которыми описываются ион и частицы буфера, соответственно. В случае, когда частицы буферного газа имеют случайное тепловое распределение скоростей, разобьем весь ансамбль нейтральных частиц на отдельные подгруппы с близкими скоростями в диапазоне $[\vec{v}_b, \vec{v}_b + d\vec{v}_b]$ и для каждой такой подгруппы воспользуемся уравнением П1.1 в котором под \vec{V} будем подразумевать относительную скорость иона к частицам подгруппы. Тогда результирующая вероятность вычисляется как

$$\Delta P = n \Delta t \cdot \int_{\vec{v}_b} \sigma |\vec{v}_i - \vec{v}_b| \cdot f(\vec{v}_b) d^3 \vec{v}_b. \quad (\text{П6.2})$$

Здесь $f(\vec{v}_b)$ - распределение вероятностей скоростей частиц буферного газа.

Будем предполагать далее, что это распределение является распределением Максвелла:

$$f_M(\vec{v}_b) = f_1(v_{b,x}) \cdot f_1(v_{b,y}) \cdot f_1(v_{b,z}),$$

где

$$f_1(v) = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \cdot \exp\left(\frac{-Mv^2}{2kT}\right). \quad (\text{П6.3})$$

Здесь M - масса частиц буферного газа, T - абсолютная температура, k - постоянная Больцмана. Для вычисления вероятности (Пб.2) удобно представить функцию распределения Пб.3 в полярной системе координат в которой ось z направлена вдоль вектора скорости иона \vec{v}_i . Тогда

$$\Delta P = n \sigma \Delta t \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \sqrt{v_i^2 + v^2 - 2vv_i \cdot \cos(\theta)} \cdot \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{Mv^2}{2kT} \right) \cdot v^2 dv \sin(\theta) \cdot d\theta \cdot d\varphi. \quad (\text{Пб.4})$$

Здесь v и v_i - абсолютные величины скорости буферной частицы и иона, соответственно, а θ и φ азимутальный и полярный угол, который образует вектор скорости буферной частицы со скоростью иона. Сечение σ вынесено за знак интеграла, так как для модели твердых сфер оно не зависит от скорости.

Оказывается, что интеграл в (Пб.4) удастся выразить через специальные функции. Интеграл по полярному углу φ берется элементарно.

Вычисления интегралов по углам при замене переменной $\cos \theta \rightarrow x$ дает:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sqrt{v_i^2 + v^2 - 2vv_i \cdot \cos(\theta)} \cdot \sin(\theta) \cdot d\theta \cdot d\varphi &= -2\pi \int_1^{-1} \sqrt{v_i^2 + v^2 - 2vv_i \cdot x} \cdot dx \\ &= \frac{2\pi}{3vv_i} \left[\left(v_i^2 + v^2 + 2vv_i^2 \right)^{3/2} - \left(v_i^2 + v^2 - 2vv_i \right)^{3/2} \right] = \\ &= \frac{2\pi}{3vv_i} \left[\left| v_i + v \right|^3 - \left| v_i - v \right|^3 \right] = \begin{cases} \frac{4\pi}{3v_i} \left(3v_i^2 + v^2 \right), & \text{if } v < v_i \\ \frac{4\pi}{3v} \left(v_i^2 + 3v^2 \right), & \text{if } v > v_i \end{cases}. \quad (\text{Пб.5}) \end{aligned}$$

Интегрирование по скорости буферных частиц окончательно дает

$$V_{rel}(s) = V_T \left[\left(s + \frac{1}{s} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{s}{\sqrt{2}} \right) + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp \left(-\frac{s^2}{2} \right) \right], \quad (\text{П6.6})$$

Где весь интеграл обозначен как $V_{rel}(s)$, так как он фактически имеет смысл некоторой усредненной относительной скорости иона, а величины

$$s = \frac{v_i}{V_T} \quad \text{и} \quad V_T = \sqrt{\frac{kT}{m}}. \quad (\text{П6.7})$$

Таким образом, интегральная вероятность столкновения частиц в модели твердых сфер вычисляется из абсолютной величины скорости иона v_i как

$$\Delta P = n \sigma \Delta t \cdot V_{rel}(v_i/V_T). \quad (\text{П6.8})$$

Выражение (П6.8) используется на шаге 1 для вычисления вероятности столкновения иона. Зависимость функции (П6.6) от параметра s показана на рисунке П6.2

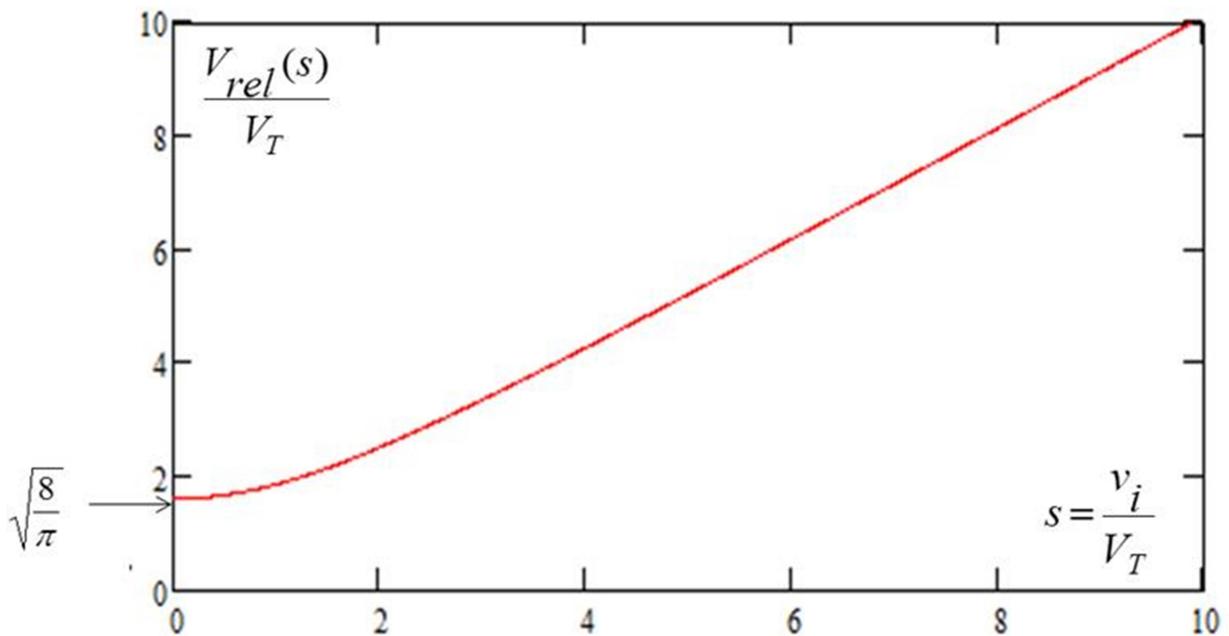


Рис.П6.2. Зависимость средней относительной скорости иона от величины абсолютной скорости иона v_i в безразмерных единицах.

Для эффективного вычисления функции (П6.6) без использования специальных функций, она была аппроксимирована полиномами на трех участках:

$$V_{rel}(s) = V_T \cdot \begin{cases} 1.595677 - 0.006229 \cdot S + 0.293231 \cdot S^2 - 0.032801 \cdot S^3, & \text{for } 0 \leq S \leq 3.0 \\ 0.815972 + 0.759081 \cdot S + 0.030555 \cdot S^2 - 0.001408 \cdot S^3, & \text{for } 3.0 \leq S \leq 8.0 \\ S + \frac{1}{S}, & \text{for } S > 8.0 \end{cases}$$

(П6.9)

Разница между точным вычислением и вычислением по формулам (П6.9) менее ширины линии на рис П6.2.

П6.3. Моделирование случайных параметров столкновения для модели твердых сфер

Многие исследователи при выборе скоростей буферных частиц, просто генерируют случайный вектор скорости буферной частицы из распределения Максвелла, тем самым предполагая, что независимо от скорости иона статистика скоростей буферных частиц, испытывающих столкновение с ионом, подчиняется распределению Максвелла. Тем не менее, очевидно, что статистика скоростей буферных частиц, испытывающих столкновение с ионом, не является Максвелловской. Действительно, полная вероятность столкновения вычисляется по формуле (П6.2) в которой под интегралом стоит функция

$$|\vec{v}_i - \vec{v}_b| \cdot f_M(\vec{v}_b), \quad (\text{П6.10})$$

являющаяся фактически плотностью вероятностей скоростей буферных частиц испытывающих столкновение с ионом при скорости последнего \vec{v}_i .

Поэтому величина скорости и углов буферных частиц при моделировании столкновений должна выбираться в соответствии с распределением (П6.10) а не распределением Максвелла $f_M(\vec{v}_b)$.

Это различие, часто не учитываемое в упрощенных моделях столкновений, вполне очевидно. Если ион покоится в лабораторной системе координат, то буферные частицы при любой скорости налетают на него с одинаковой вероятностью со всех сторон. Однако, если ион движется с некоторой скоростью v_i , например вдоль оси Z , то частицы буферного газа должны иметь скорость вдоль Z как минимум больше чем v_i для того чтобы догнать ион и испытать столкновение. Таким образом, вычисление статистики скоростей нейтральных частиц не столь тривиально. Ниже описано, как это реализовано для модели твердых сфер в программе AXSIM.

Во-первых, перейдем в систему координат, в которой удобно будет вычислить скорость иона после столкновения. Для этого определим углы φ_0 и θ_0 , которые образует исходный вектор скорости иона с осями лабораторной системы координат и с помощью двух поворотов, один вокруг оси Z на угол $-\varphi_0$, второй – вокруг оси Y на угол $-\theta_0$, перейдем в систему координат (x_1, y_1, z_1) , в которой вектор скорости иона направлен вдоль оси Z (см. рис. Пб.3).

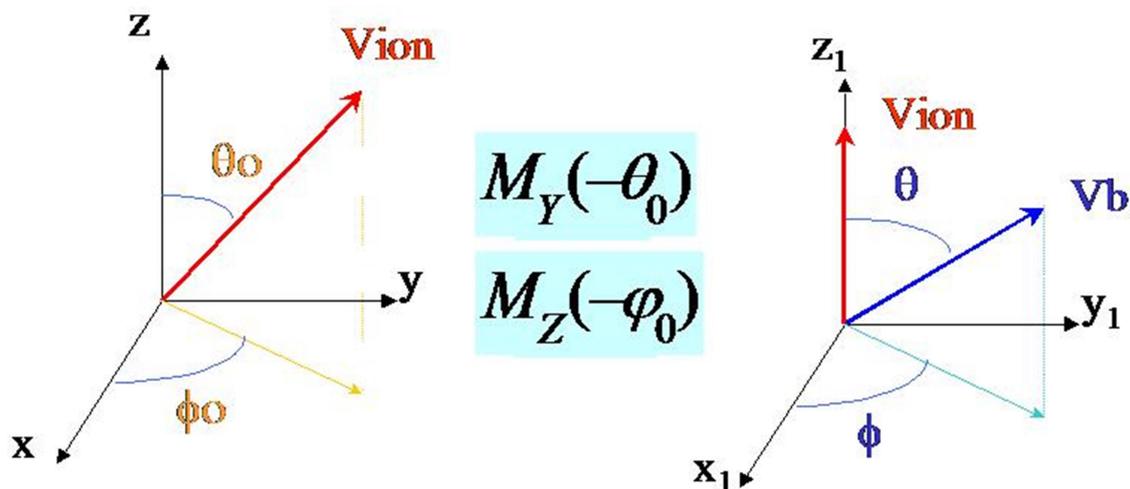


Рис.Пб.3. Лабораторная система координат (слева) и система 1 (справа)
 В системе (x_1, y_1, z_1) вектор скорости буферной частицы образует углы φ и θ с осями координат. Сделаем поворот вокруг оси Z_1 на угол $-\varphi$, чтобы

перейти в систему (x_2, y_2, z_2) в которой вектор скорости буфера лежит в плоскости XZ (см.рис. Пб.4)

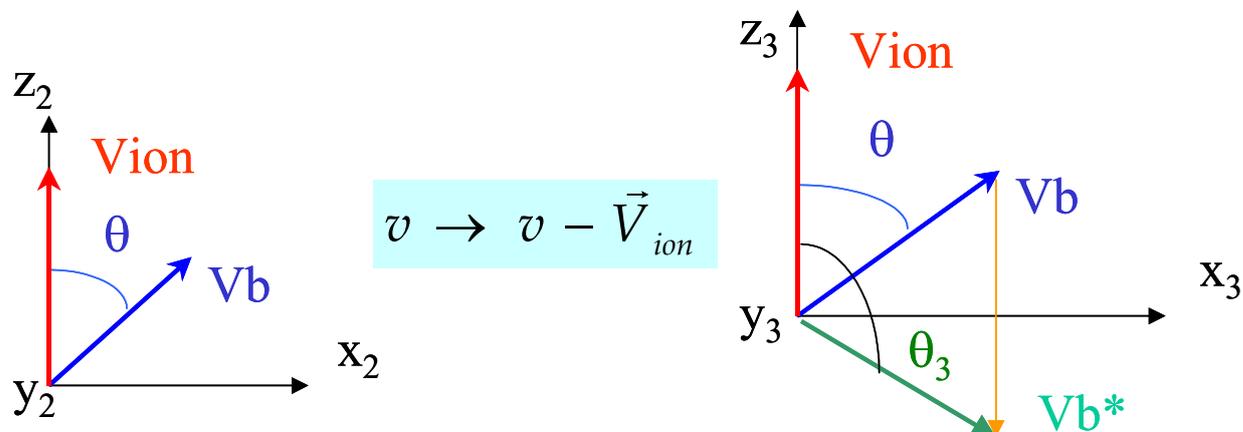


Рис.Пб.4. Система координат 3 (справа) и 2 (слева).

Теперь вычтем из скоростей всех частиц вектор скорости иона \vec{v}_i . Получим систему (x_3, y_3, z_3) , которая движется со скоростью \vec{v}_i вдоль оси Z_2 относительно (x_2, y_2, z_2) . В этой системе координат буферная частица имеет скорость $\vec{v}_b^* = \vec{v}_b - \vec{v}_i$ и образует угол θ_3 с осью Z_3 , однако продолжает лежать в плоскости XZ (см.рис. Пб.4).

Теперь совершим поворот вокруг оси Y_3 на угол $-\theta_3$, чтобы перейти в систему (x_4, y_4, z_4) в которой ион покоится в начале координат, а буферная частица налетает на него снизу вдоль оси Z_4 (см. рис. Пб.5 слева). Совершим еще один поворот на угол Φ вокруг оси Z_4 так чтобы буферная частица ион двигались бы до и после столкновения в плоскости XZ . Получим систему (x_5, y_5, z_5) в которой вычисление скорости иона после столкновения тривиально (см. рис. Пб.5 справа)

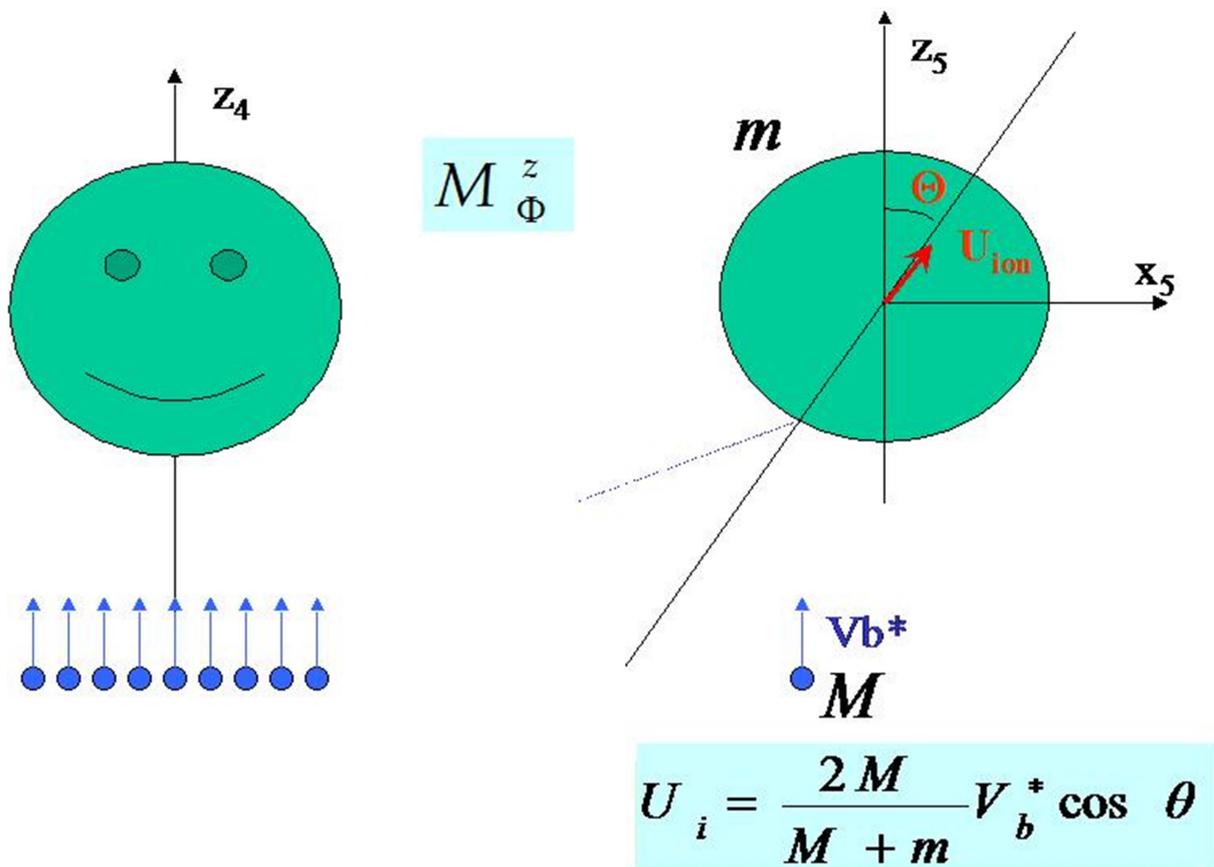


Рис.П6.5. Поток частиц налетающих на покоящийся ион снизу вдоль оси z (слева) и вычисление скорости иона после столкновения в зависимости от угла Θ (справа).

При вычислении случайных параметров столкновения необходимо вычислить случайный вектор скорости буферной частицы. Плотность вероятности задается формулой (П6.4) в которой необходимо произвести интегрирование по углам. Для правильной нормировки данного распределения вероятности его надо разделить на полный интеграл по всем скоростям буфера, который можно вычислить по (П6.8). Получим

$$dP(v_i, v_b) \cdot dv_b = dv_b \cdot \frac{1}{V_{rel}(s)} \cdot s_b^2 \exp(-0.5s_b^2) \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \begin{cases} \frac{1}{s} (3s^2 + s_b^2), & \text{if } v_b \leq v_i \\ \frac{1}{s_b} (s^2 + 3s_b^2), & \text{if } v_b > v_i \end{cases} \cdot \quad (П6.10)$$

Здесь обозначено $s = v_i / V_T$ и $s_b = v_b / V_T$. Распределение плотности вероятности в зависимости от скорости буфера и скорости иона показано на рис.П6.6. Из него можно видеть, что основное изменение плотности вероятности происходит в пределах $0 \leq v_b \leq 5V_T$ и $0 \leq v_i \leq 10V_T$.

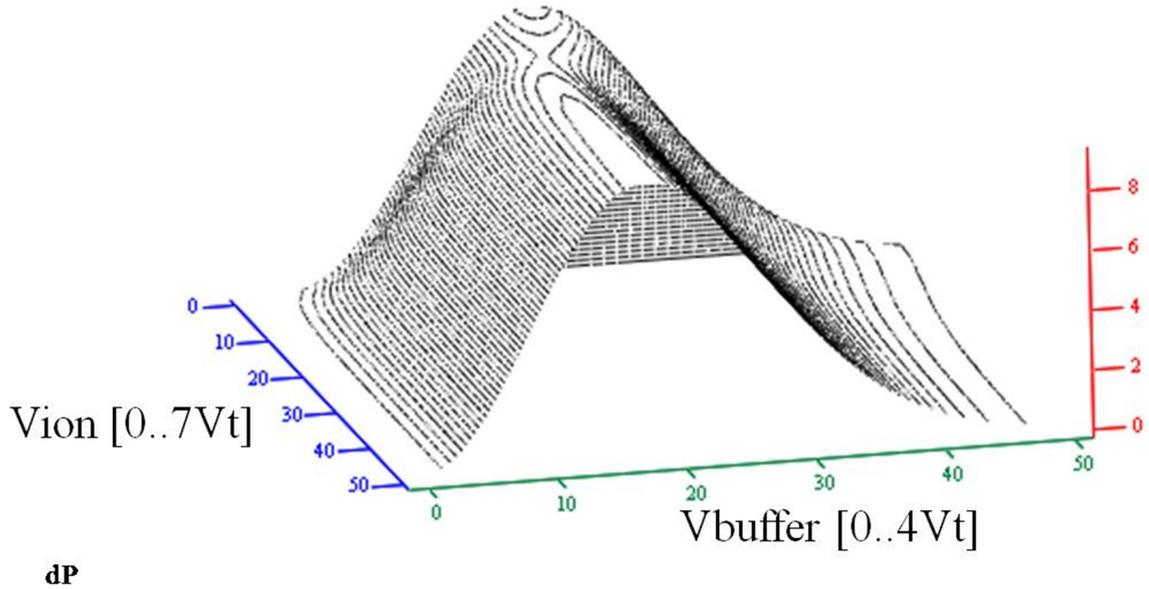


Рис.П6.6. Плотность вероятности различных значений скоростей буферных частиц в зависимости от скорости иона.

Для использования плотности вероятности (П6.10) в конкретных моделированиях необходимо получить из (П6.10) кумулятивную вероятность путем интегрирования по скоростям буфера в пределах от 0 до v_b . Получим

$$P(v_i, v_b) = \frac{V_T}{V_{rel}(v_i / V_T)} \begin{cases} \left(s + \frac{1}{s} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{s_b}{\sqrt{2}} \right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(s + \frac{1}{s} + \frac{s_b^2}{3s} \right) \cdot s_b \cdot \exp \left(-\frac{s_b^2}{2} \right), & \text{if } v_b \leq v_i \\ \left(s + \frac{1}{s} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{s}{\sqrt{2}} \right) + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp \left(-\frac{s_b^2}{2} \right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(2 + s_b^2 + \frac{s^2}{3} \right) \cdot \exp \left(-\frac{s_b^2}{2} \right), & \text{if } v_b > v_i \end{cases} \quad (\text{П6.11})$$

Уравнением (П6.11) было табулировано для различных значений скоростей ионов v_i в пределах от 0 до $10V_T$ с шагом в 500 точек и для различных значений скорости буферной частицы v_b в пределах от 0 до $5V_T$ с шагом в 500 точек. Массив значений кумулятивной вероятности сохранен в

оперативной памяти. Программа AXSIM выполняет эту работу всякий раз перед открытием программы и результаты можно видеть в меню Modules/AXCollisions.

При моделировании столкновений исходя из скорости иона v_i выбирается соответствующая строка в массиве $P(v_i, v_b)$ и генерируется случайное число ξ_1 с равномерным распределением от 0 до 1.0. Конкретное случайное значение скорости буферной частицы выбирается как решение уравнения

$$P(v_i, v_b) = \xi_1 \quad . \quad (\text{П6.12})$$

Заметим, что данная процедура дает математически точное случайное распределение абсолютных значений скоростей буферных частиц сталкивающихся с ионом, имеющим скорость v_i в газе частиц с Максвелловским распределением скоростей.

Следующий шаг в расчете параметров столкновения – определение углов θ и φ (см. рис. П6.4), которые образует вектор скорости буфера с вектором скорости иона. Из (П6.4) очевидно, что полярный угол имеет равномерное распределение в пределах от 0 до 2π . Случайный угол φ получаем с помощью еще одного случайного числа: $\varphi = 2\pi\xi_2$.

Для выбора угла θ вновь воспользуемся формулой (П6.4). Получим из нее плотность вероятности $p(v_i, v_b, \theta)$ различных углов θ . Фактически она дается выражением, стоящим под интегралом в уравнении (П6.4):

$$p(v_i, v_b, \theta) \cdot d\theta = \text{const} \cdot \sqrt{v_i^2 + v_b^2 - 2v_i v_b \cos \theta} \cdot \sin \theta \cdot d\theta \quad . \quad (\text{П6.13})$$

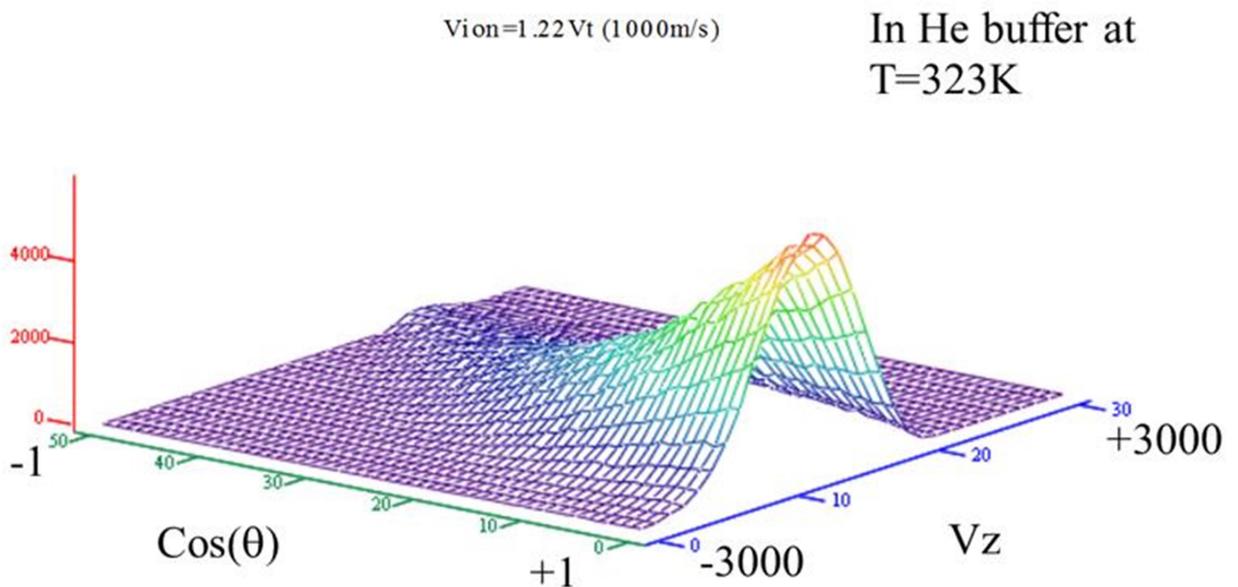
Для получения кумулятивной вероятности проинтегрируем (П6.13) в пределах от 0 до некоторого угла Θ и для правильной нормировки разделим выражение на тот же интеграл в пределах от 0 до π . Получим

$$P(v_i, v_b, \theta < \Theta) = \frac{(s^2 + s_b^2 - 2s \cdot s_b \cdot \cos \Theta)^{3/2} - (s^2 + s_b^2 - 2s \cdot s_b)^{3/2}}{(s^2 + s_b^2 + 2s \cdot s_b)^{3/2} - (s^2 + s_b^2 - 2s \cdot s_b)^{3/2}}. \quad (\text{П6.14})$$

Случайный угол $\theta = \Theta$ выбирается как решение уравнения

$$P(v_i, v_b, \theta < \Theta) = \xi_3, \quad (\text{П6.15})$$

где ξ_3 - случайное число с равномерным распределением от 0 до 1. При этом не приходится численно решать уравнение (П6.15) так как значение угла находится из него явным образом.



T

Рис.П6.7. Распределение кумулятивной вероятности углов θ в зависимости от компоненты V_z скорости буферных частиц (вдоль направления скорости ионов) и косинуса угла, который вектор скорости буфера образует с вектором скорости иона. Распределение рассчитано для иона движущегося со скоростью $v_i = 1.22V_T = 1000 \text{ m/s}$ в гелии находящемся при температуре $T = 323 \text{ K}$. Величина стандартного теплового отклонения скорости буферных частиц равна $V_T = 819.396 \text{ m/s}$.

На рисунке П6.7 показан пример расчета распределение вероятности углов θ в зависимости от компоненты V_z скорости буферных частиц и

косинуса угла, который вектор скорости буфера образует с вектором скорости иона при фиксированной скорости иона $v_i = 1.22V_T = 1000 \text{ m/s}$.

Заметим, что правильный выбор скоростей буферных частиц и углов φ и θ в соответствии с основным уравнением (П6.4) весьма важен для корректного моделирования столкновений в модели твердых сфер. При тестировании данной модели было замечено, что без правильного алгоритма выбора скоростей и углов не удастся получить для ионов распределение Максвелла в тепловом равновесии.

П6.4. Расчет скорости иона после столкновения.

Для расчета скорости иона после столкновения необходимо еще получить случайный «прицельный» параметр (см. рис. П6.8). Очевидно, что расстояние от центра сферы взаимодействия до точки на сфере где фактически происходит столкновение распределено равномерно.

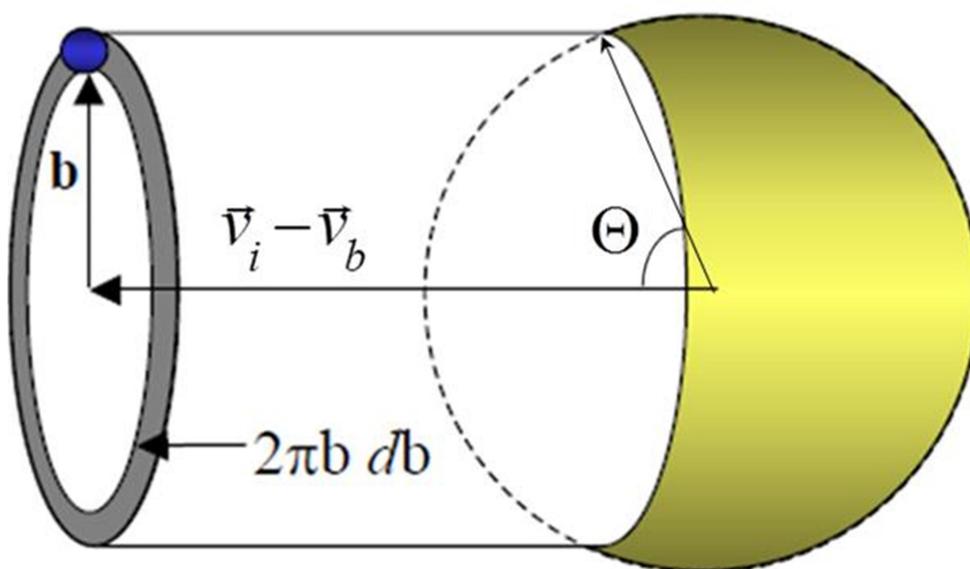


Рис.П6.8. Распределение «прицельного» параметра на сфере взаимодействия.

Следовательно, прицельный параметр может быть получен с помощью еще одного случайного числа ξ_4 как

$$b = (r_i + r_b) \cdot \xi_4 \quad . \quad (\text{П6.16})$$

Это позволяет определить угол Θ , под которым находится точка столкновения по отношению к оси столкновения. Очевидно, что полярный угол Φ под которым находится та же точка к оси столкновения распределен равномерно:

$$\Phi = 2\pi \cdot \xi_5 \quad . \quad (\text{П6.17})$$

Скорость иона после столкновения удобнее всего найти в системе координат, в которой ион покоится, а буферная частица налетает на него снизу вдоль оси z (см. рис. П6.8). Из законов сохранения энергии и импульса скорость иона после столкновения в зависимости от угла Θ находится элементарно.

Вектор скорости иона в системе координат (x_5, y_5, z_5) имеет следующие координаты:

$$U_{x,5} = U_{ion} \cdot \sin\Theta, \quad U_{y,5} = 0, \quad U_{z,5} = U_{ion} \cdot \cos\Theta. \quad (\text{П6.18})$$

Совершим теперь все обратные преобразования координат чтобы получить новую скорость иона в лабораторной системе.

Система (x_4, y_4, z_4) отличается от системы 5 поворотом на произвольный угол Φ относительно оси столкновений z_5 . Поэтому

$$U_{x,4} = -U_{x,5} \cdot \cos\Phi, \quad U_{y,4} = U_{x,5} \cdot \sin\Phi, \quad U_{z,4} = U_{z,5}. \quad (\text{П6.19})$$

Система (x_3, y_3, z_3) - это система координат, в которой вектор скорости буфера находится под углом θ к оси z , которая в свою очередь направлена вдоль вектора скорости иона. Система 3 получается из системы 4 путем поворота вокруг оси y_4 на угол θ . Следовательно

$$\begin{aligned} U_{x,3} &= \cos\theta \cdot U_{x,4} + \sin\theta \cdot U_{z,4}, & U_{y,3} &= U_{y,4}, \\ U_{z,3} &= -\sin\theta \cdot U_{x,4} + \cos\theta \cdot U_{z,4} \quad . \end{aligned} \quad (\text{П6.20})$$

Система (x_2, y_2, z_2) движется относительно системы (x_3, y_3, z_3) со скоростью $-v_i$ вдоль оси z_3 . Следовательно

$$U_{x,2} = U_{x,3}, \quad U_{y,2} = U_{y,3}, \quad U_{z,2} = U_{z,3} + v_i. \quad (\text{П6.21})$$

Система (x_1, y_1, z_1) повернута относительно системы (x_2, y_2, z_2) на угол $-\varphi$ вокруг оси z_2 . Поэтому

$$\begin{aligned} U_{x,1} &= \cos\varphi \cdot U_{x,2} - \sin\varphi \cdot U_{y,2}, \\ U_{y,1} &= \sin\varphi \cdot U_{x,2} + \cos\varphi \cdot U_{y,2}, \quad U_{z,1} = U_{z,2}. \end{aligned} \quad (\text{П6.22})$$

Лабораторная система координат отличается от системы (x_1, y_1, z_1) поворотом вокруг оси z_1 на угол $-\varphi_0$ и поворотом вокруг оси y_1 на угол θ_0 . Окончательно получим.

Поворот на θ_0 :

$$\begin{aligned} U_{x,0} &= \cos\theta_0 \cdot U_{x,1} + \sin\theta_0 \cdot U_{z,1}, \quad U_{y,0} = U_{y,1}, \\ U_{z,0} &= -\sin\theta_0 \cdot U_{x,1} + \cos\theta_0 \cdot U_{z,1}. \end{aligned} \quad (\text{П6.23.a})$$

Поворот на φ_0 :

$$\begin{aligned} U_{x,0} &= \cos\varphi_0 \cdot U_{x,0} - \sin\varphi_0 \cdot U_{y,0}, \\ U_{y,0} &= \sin\varphi_0 \cdot U_{x,0} + \cos\varphi_0 \cdot U_{y,0}. \end{aligned} \quad (\text{П6.23.б})$$

Можно собрать все данные преобразования в одно матричное уравнение, однако для простоты вычислений мы здесь этого не делаем.

Формулы (П6.18-П6.23) решают задачу вычисления скорости иона после столкновения при вычисленных углах столкновения и скорости буферной частицы. Заметим, что модель разработанная в этом разделе является математически точной моделью столкновений твердых сфер при максвелловском распределении буферных частиц.

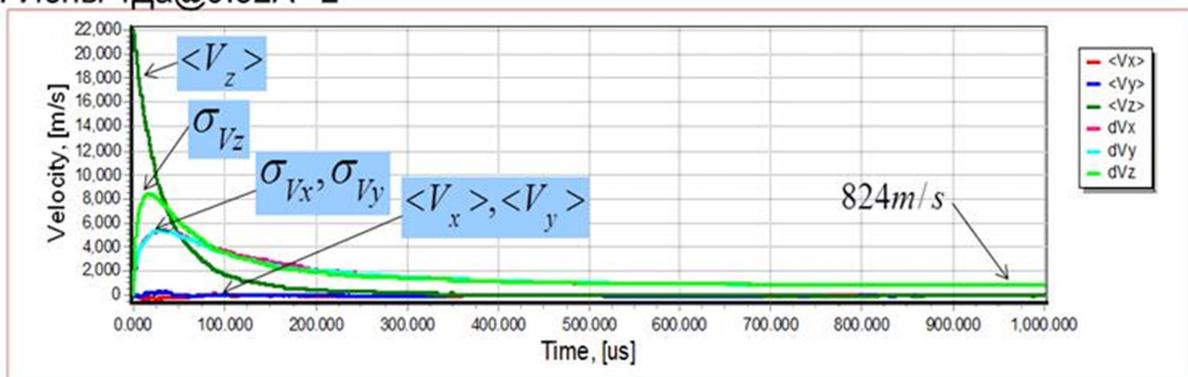
П6.5. Тестирование модели.

Тестирование каждого из элементов процедуры моделирования столкновений затруднительно, так как нет теоретических расчетов, с которыми можно было бы сравнивать результат моделирования. Поэтому для тестирования модели был выбран путь сравнения окончательных результатов моделирования с ожидаемыми из общих физических соображений результатами. Этими результатами очевидно являются требования предъявляемым к столкновительному коду (см. начало данного раздела). Ниже приведены результаты для каждого из аспектов перечисленных в указанных требованиях.

П6.5.1. Адекватность описания релаксации кинетической энергии ионов от десятков электрон-вольт до тепловых

Для проверки данного аспекта было подготовлено моделирование в котором 1000 частиц одинаковой массы стартуют из одной точки с нулевыми скоростями вдоль X и Y с начальной энергией 10эВ вдоль оси Z . Частицы распространяются в буферном газе гелий ($M = 4Da$) при давлении $P=1\text{мТорр}$ и температуре $T=323\text{К}$.

А. Ионы 4Да@9.82A**2



Б. Ионы 1000Да@390A**2

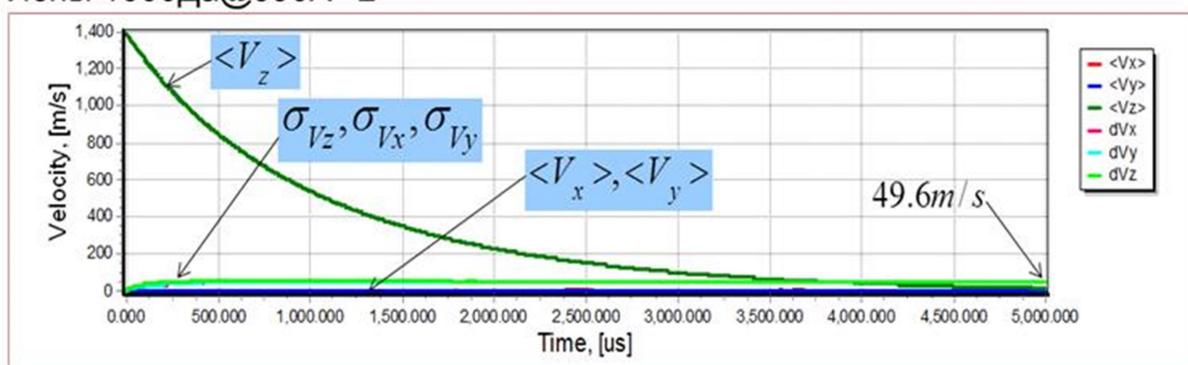


Рис.П6.9. Релаксация начальной кинетической энергии 10эВ к тепловому равновесию.

Рисунок П6.9 показывает результаты измерения средних скоростей и стандартных отклонений скорости по всем трем координатам для частиц двух типов: А. частицы гелия массой $m = 4Da$ и сечением столкновения $\sigma = 9.82A^2$ и Б. частицы массой $m = 1000Da$ и сечением столкновения $\sigma = 390A^2$. В первом случае полное затухание начальной энергии занимает примерно 100мкс, хотя требуется примерно 1мс чтобы среднеквадратичные отклонения скоростей по всем координатам достигли равновесного значения предсказываемого теорией ($\sqrt{kT/m} = 819m/s$). За все время моделирования каждая из частиц испытывает в среднем 10.1столкновений. Следовательно, за 100мкс, когда затухает начальная энергия частицы испытывают в среднем 1 столкновение. Это согласуется с теорией, согласно которой частицы одинаковой массы при упругом столкновении просто обмениваются скоростями, поэтому потеря начальной энергии частиц и термализация должна происходить за одно столкновение.

В случае тяжелых ионов (рис. П6.9Б) начальная энергия убывает более чем вдвое за первые 1мс, хотя полная термализация требует около 5мс. За это время стандартное отклонение скоростей частиц достигает равновесного значения $\sqrt{kT/m} = 51.8m/s$. За все время моделирования (5мс) частицы испытывают в среднем 832.2 столкновений. Таким образом, для тяжелых ионов для термализации требуется намного больше столкновений с частицами легкого буферного газа. Данное моделирование хорошо согласуется с эмпирическим правилом, гласящим, что термализация ионов массой 1кДа при давлении 1мТорр Гелия требует 5мс (145).

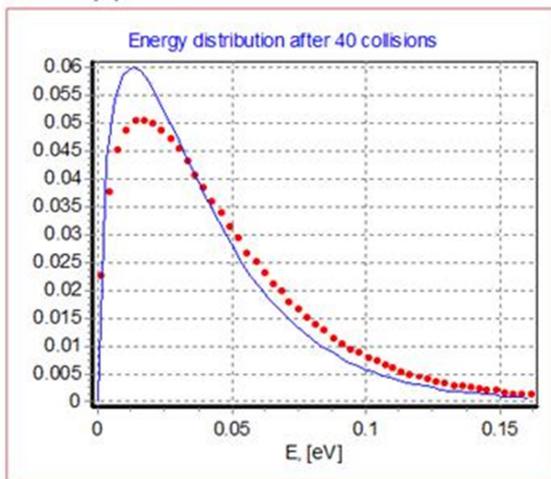
Результаты данного теста говорят о том, что предлагаемая модель адекватно описывает релаксацию кинетической энергии как малых так и тяжелых ионов, то есть удовлетворяет двум первым требованиям к модели, сформулированным в начале раздела.

П6.5.2. Сходимость к распределению Максвелла-Больцмана в состоянии теплового равновесия

Этот аспект моделирования особенно важен для адекватного описания столкновений. Для проверки его 1 миллион частиц одинаковой массы трассируются в буферном газе Гелий при температуре 300К и совершают столкновения с частицами газа обмениваясь энергией. Начальная энергия всех частиц нулевая. На рисунке П6.10 показаны результаты моделирования частиц массой 4Да для двух случаев. В первом случае (рис. П6.10.А) в коде намеренно была допущена неточность в результате которой вероятность столкновения иона на данном шаге не оценивалась в соответствии со скоростью частицы, а считалось, что столкновение происходит на каждом шаге. В результате даже после 40 столкновений равновесное распределение Максвелла-Больцмана не было получено. Во втором случае изображенном на рисунке П6.10.Б на каждом шаге моделирования вероятность столкновения частицы рассчитывается исходя из ее скорости, так как описано ранее в этом разделе. В результате равновесное

распределение Максвелла-Больцмана устанавливается примерно после 10 столкновений (в расчете на одну трассируемую частицу).

А. 4Да, столкновение каждый шаг



Б. 4Да, столкновение по вычислению вероятности

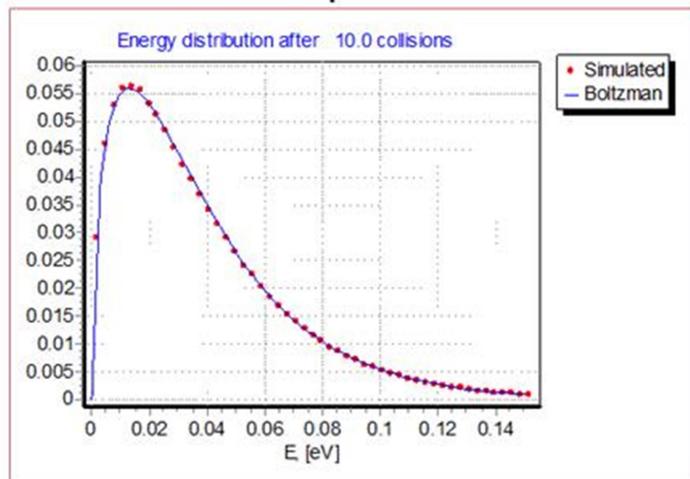
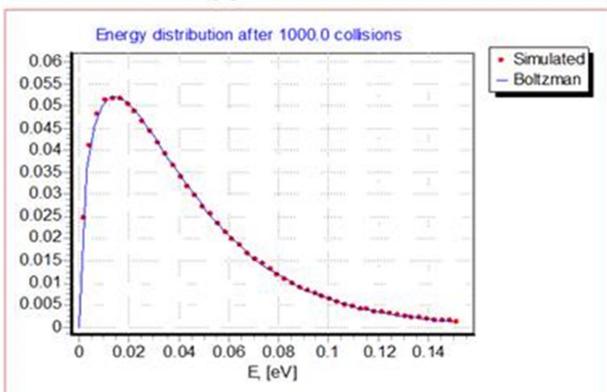


Рис.П6.10. Равновесные распределения по энергии частиц массой 4Да в буферном газе Гелий при температуре 300К. Теоретическое распределение Максвелла-Больцмана показано сплошной синей линией. Гистограмма распределения энергий частиц – красными точками.

Данный пример иллюстрирует необходимость соблюдения всех деталей моделирования описанных выше. В противном случае результаты моделирования могут быть физически неадекватными, хотя это будет весьма трудно отследить.

А. ионы 1000Да



Б. электроны, 5.376E-4Да

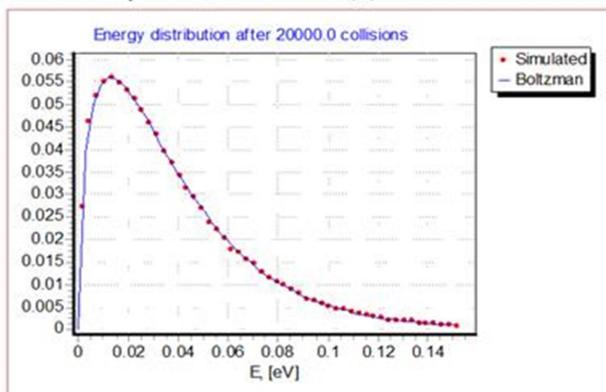


Рис.П6.11. Равновесные распределения для А. ионов 1000Да и Б. электронов

Второй пример установления равновесных распределений относится к тяжелым ионам массой 1000Да и к электронам (масса 5.376×10^{-4} Да). Результаты показаны на рисунке П1.11. В обоих случаях достигнуто равновесное распределение Максвелла-Больцмана, хотя количество столкновений, необходимых для этого намного больше, чем в предыдущем случае. Для тяжелых ионов 1000Да при каждом столкновении с легкой частицей буферного газа скорость иона почти не меняется по направлению, и немного меняется по абсолютной величине. Поэтому термализация тяжелых ионов занимает много столкновений. В случае электронов, их скорость практически хаотически изменяется после каждого столкновения с частицами буферного газа, но также мало меняется по абсолютной величине. В данном моделировании масса частиц буферного газа почти в 8000 раз больше массы электронов, поэтому равновесное распределение Максвелла-Больцмана почти достигается примерно после 20,000 столкновений на каждый исследуемый электрон.

В целом результаты этого раздела свидетельствуют о вполне адекватном описании столкновений с точки зрения установления равновесных распределений.

П6.5.3. Измерение мобильности ионов

Все предыдущие тесты не использовали факта, что частицы являются заряженными, так как движение частиц происходило в отсутствии каких либо электрических полей. Измерение мобильности ионов позволяет провести тестирование кода моделирования столкновений для ситуаций, в которых он реально используется в программе AXSIM.

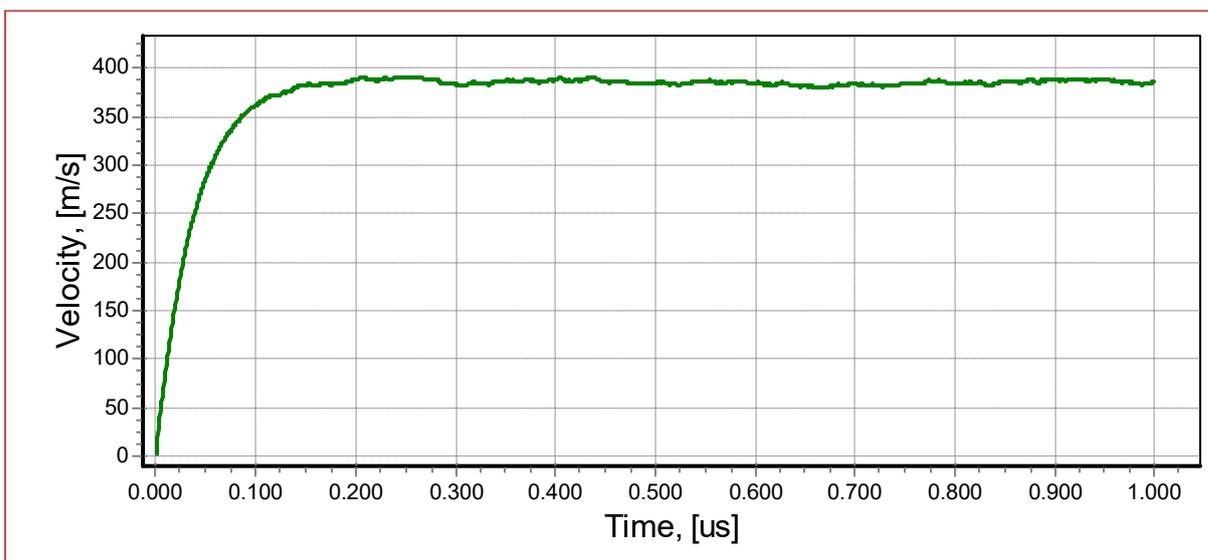


Рис.П6.12. Установление равновесной скорости вдоль направления поля для случая ионов массой 1000Да и сечением 400Å^2 , движущихся в Азоте при давлении 10Торр и температуре 323К в присутствии однородного электрического поля 100В/мм.

В этом моделировании 10,000 ионов массой 1000Да и сечением 400Å^2 стартуют с нулевой начальной скоростью в однородном электрическом поле и совершают движение в присутствии частиц буферного газа. В качестве последнего в данном моделировании использовался Азот (N_2 , $M = 28Da$) при давлении 10Торр и температуре $T=323K$. Спустя некоторое время после начала моделирования устанавливается равновесное значение скорости направленного дрейфа ионов вдоль поля (см. рис.П6.12). Заметим, что при указанных параметрах модели шаг интегрирования траекторий выбирался равным 0.1нс для того чтобы обеспечить достаточно малое значение вероятности столкновения на каждом шаге.

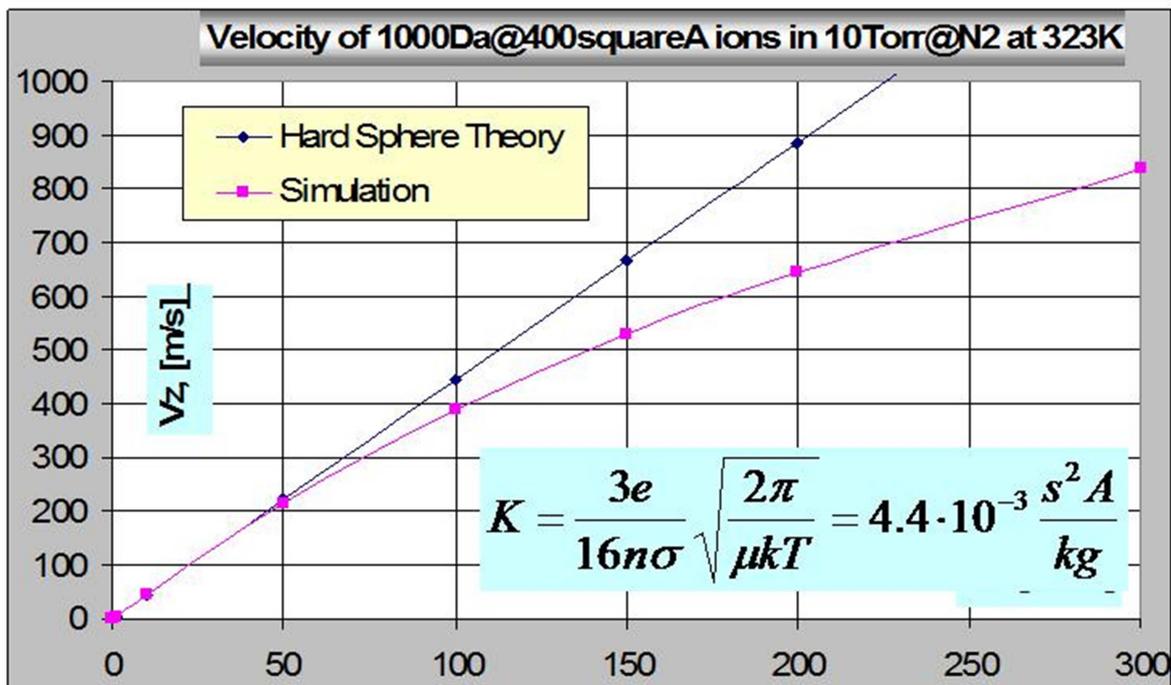


Рис.П6.13. Измерение мобильности ионов в однородном поле. Теоретическое значение скорости в линейном приближении показано синей линией.

Измерения равновесной скорости ионов при различной величине электрического поля представлены на рис. П6.13. На том же рисунке показана линейная зависимость скорости дрейфа ионов, рассчитанная исходя из формулы для мобильности, которая фактически является линейным приближением для модели твердых сфер (146). Видно, что при полях более 50В/мм скорость дрейфа частиц заметно меньше рассчитанной из линейного приближения. Заметим также, что отклонения измеренной мобильности от предсказаний линейной теории происходят когда скорость дрейфа становится более среднеквадратичной скорости частиц буферного газа, которая в данных условиях равна $\sqrt{kT/M} = 309.7 m/s$. Данные результаты полностью совпадают с предсказаниями теории мобильности в модели твердых сфер [**].

П6.5.4. Исследование равновесных распределений ионов в высокочастотном квадрупольном поле в равновесии с буферным газом.

Разработка надежного кода для моделирования столкновений ионов с буферным газом позволило исследовать такой важный аспект работы ВЧ ловушек, как установившееся распределение ионов совершающих движение в ВЧ квадрупольном поле в присутствии буферного газа. В качестве примера исследовалось движение популяции 10,000 ионов массой 1000Да и сечением 400Å^2 совершающих движение в ловушке в присутствии буферного газа Гелий при давлении 1мТорр и температуре 323К. Ловушка имеет идеальную теоретическую геометрию с внутренним радиусом кольцевого электрода $r_0 = 10\text{mm}$. Гармоническое питание (без постоянной составляющей) имеет частоту 1МГц и приложено к кольцевому электроду. При амплитуде ВЧ в 1000В исследуемые ионы имеют значение параметра стабильности $q \approx 0.1$. Процедура моделирования состоит в трассировке популяции ионов до наступления равновесия (как известно из предыдущих моделирований на это требуется около 5мс), затем моделирование продолжается еще на один период колебаний ВЧ (1мкс) с измерением параметров облака.

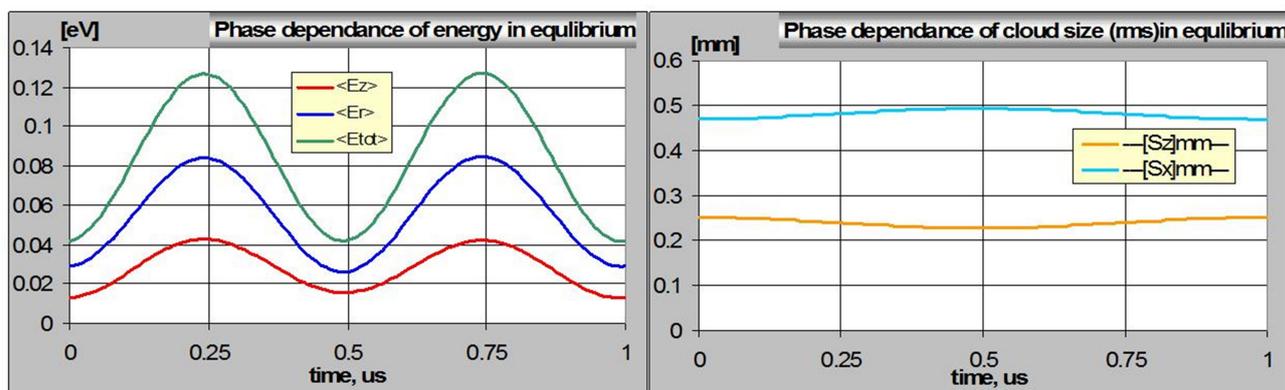


Рис.П6.14. Зависимость средней кинетической энергии ионов (слева) и среднеквадратичного отклонения ионов от центра ловушки (справа) в зависимости от фазы ВЧ. Параметр стабильности $q \approx 0.1$.

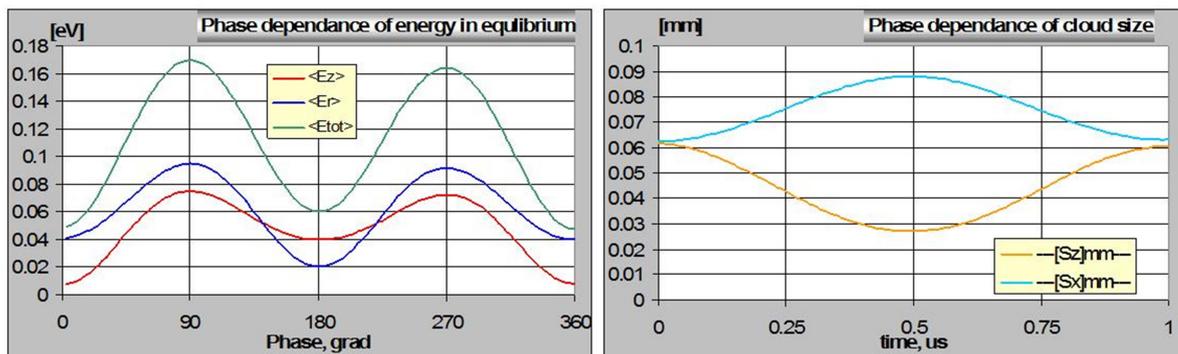
Результаты представлены на рисунке П6.14. Можно видеть, что зависимость средней энергии частиц претерпевает значительное изменение в течении каждого цикла ВЧ. В фазах 0 и 0.5 от полного периода энергия минимальна и близка к величине предсказываемой классической теорией (

$0.5kT = 0.014eV$ на одну степень свободы). В фазах 0.25 и 0.75 энергия достигает максимального значения примерно в 3 раза превышающее минимальное. Это объясняется влиянием ВЧ поля, которое создает микро осцилляции ионов. Очевидно, что пульсации кинетической энергии являются результатом этих микро осцилляций. Можно сделать вывод, что в каждой из степеней свободы содержится примерно $kT/2$ постоянной тепловой энергии и осциллирующая часть с амплитудой kT совершающая колебания два раза за один период ВЧ.

Правая часть рисунка П6.14 показывает измерение среднеквадратичного отклонения ионов от центра ловушки. Можно заметить, что эти величины тоже непостоянны в течении периода, хотя амплитуда изменения гораздо меньше. Измерение показывает, что размер облака вдоль оси Z примерно вдвое меньше радиального размера облака.

Заметим, что данные результаты моделирования находятся в полном соответствии с теорией равновесных распределений ионов в ВЧ поле, разработанной автором на базе теории эффективного потенциала (см. раздел 2.3.3).

А. RF=3272V ($q=0.64$)



Б. RF=4602V ($q=0.90$)

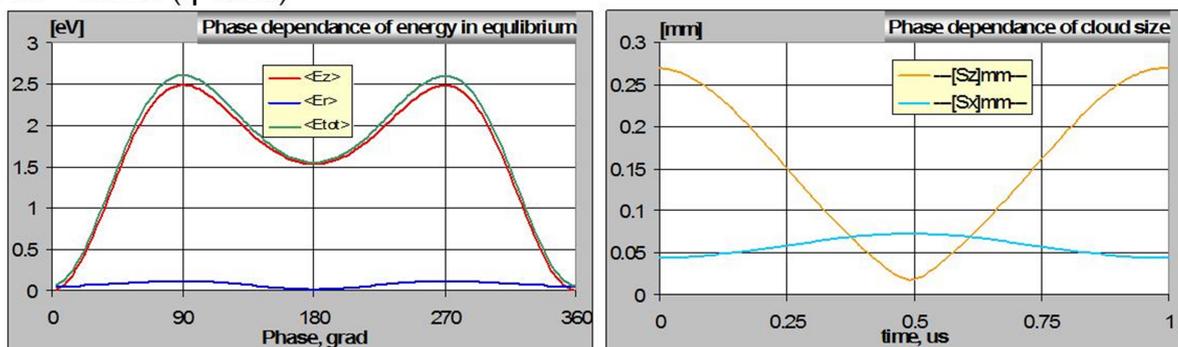


Рис.П6.15. Зависимость средней кинетической энергии ионов (слева) и среднеквадратичного отклонения ионов от центра ловушки (справа) в зависимости от фазы ВЧ для движения ионов в ВЧ поле при значениях параметра стабильности А. $q = 0.64$ и Б. $q = 0.90$.

В случае когда теория эффективного потенциала неприменима (для значений $q > 0.4$) аналогичные моделирования дают результаты, показанные на рисунках П6.15. Можно заметить следующие особенности

- Значения равновесной энергии в минимумах (0 и 0.5) различны и в одном из минимумов (0) несколько менее величины $kT/2$.
- Колебания энергии в течении периода за счет микро осцилляций являются несинусоидальными
- Размах микро осцилляций энергии (на одну степень свободы) намного больше величины kT
- Минимальный размер облака по оси Z достигается в середине периода (0.5), тогда как радиальный размер в этот момент максимален.
- Максимальный и минимальный размер облака вдоль оси ловушки может различаться более чем вдвое, тогда как радиальный размер в максимуме и в минимуме отличается не более чем вдвое.

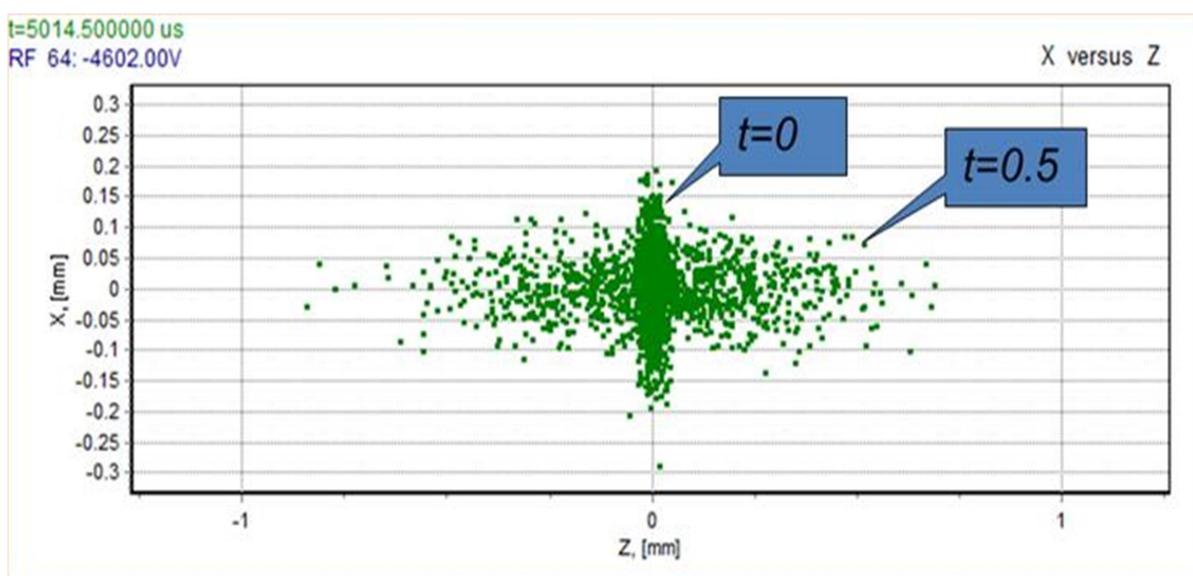


Рис.Пб.16. Форма равновесного облака ионов 1000Да в сечении $X-Z$ для двух фаз ВЧ. Ионы совершают движение в ловушке при параметре стабильности $q = 0.9$.

В заключение этого раздела приведем результат моделирования формы облака для случая показанного на рисунке Пб.15. На рисунке Пб.16 показано распределение частиц в плоскости $X-Z$ для двух значений фазы. В фазе $t = 0$ (начало ВЧ периода) облако максимально сжато по оси Z и расширено вдоль радиального направления. В фазе $t = 0.5$ (середина периода) облако расширяется вдоль оси Z почти в 10 раз имея размер более 1мм. Такие осцилляции формы облака характерны для движения ионов со значениями q близкими к единице, но даже и при малых значениях параметра стабильности осцилляции формы облака заметны.

This page is intentionally left blank

«Пятый Прокуратор Иудеи всадник понтийский Пилат.»