

Моделирование пылеударного времяпролетного преобразователя пылевых частиц

И.В. Пияков¹, Д.В. Родин¹, М.А. Родина¹, А.М. Телегин¹

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Рассмотрены одномерная и двумерная осесимметричная модели пылеударного времяпролетного преобразователя для анализа химического состава микрометеороидов и частиц космического мусора. Приведены результаты расчета конструктивных параметров и функциональных характеристик преобразователя. Описан алгоритм программы моделирования массовых спектров. Представлены модельные массовые спектры, полученные для осевого случая в одномерном приближении, а также для двумерного случая и различных координат ударного взаимодействия. Приведено сравнение модельных спектров с экспериментальными данными, полученными на электродинамическом ускорителе пылевых частиц.

1. Введение

В настоящее время все большее внимание уделяется проблеме космического мусора, что связано как с увеличением сроков активного существования космических аппаратов, так и со все возрастающим количеством космического мусора техногенного происхождения. Микрометеороиды и техногенные пылевые частицы являются одним из основных факторов космического пространства, которые наряду с различными излучениями и потоками заряженных частиц, вызывают преждевременную деградацию конструктивных элементов космического аппарата [1], а значит, могут привести к ухудшению его функциональных характеристик, или выходу из строя. Для анализа свойств потоков пылевых частиц можно использовать различные методы, такие как ловушки на основе аэрогеля, бесконтактные оптические измерители, ионизационные датчики удара [2, 3]. Но наибольшее количество информации о физико-химических свойствах частицы-ударника можно получить только с использованием времяпролетного пылеударного преобразователя масс-спектрометрического типа. Такой анализатор позволяет исследовать однократные быстропротекающие события и оценивать не только химический состав частицы, но также ее заряд, вектор скорости и косвенным образом массу.

Принцип работы таких анализаторов [4 – 7] основан на ударной ионизации вещества частицы-ударника с последующим ускорением ионов электрическим полем и измерением их времени пролета. Высокая разрешающая способность может быть достигнута за счет обеспечения минимальной флуктуации времени пролета ионов одной массы внутри ионного пакета, что обеспечивается фокусировкой ионов во времени и пространстве. Разработка подобных приборов всегда сопряжена с большими трудностями, поскольку одновременно с высокой разрешающей способности на них накладываются внутренне противоречивые

требования увеличения активной площади мишени и повышения коэффициента сбора ионов. Решение этой задачи требует большого объема математического моделирования, так и экспериментальных исследований, подтверждающих правильность выбора конструктивных параметров, в связи с чем верификация результатов моделирования позволяет сократить объем требуемых экспериментальных исследований и ускорить процесс разработки новых приборов.

2. Постановка задачи

Принцип работы прибора представлен на оптической схеме (рисунок 1).

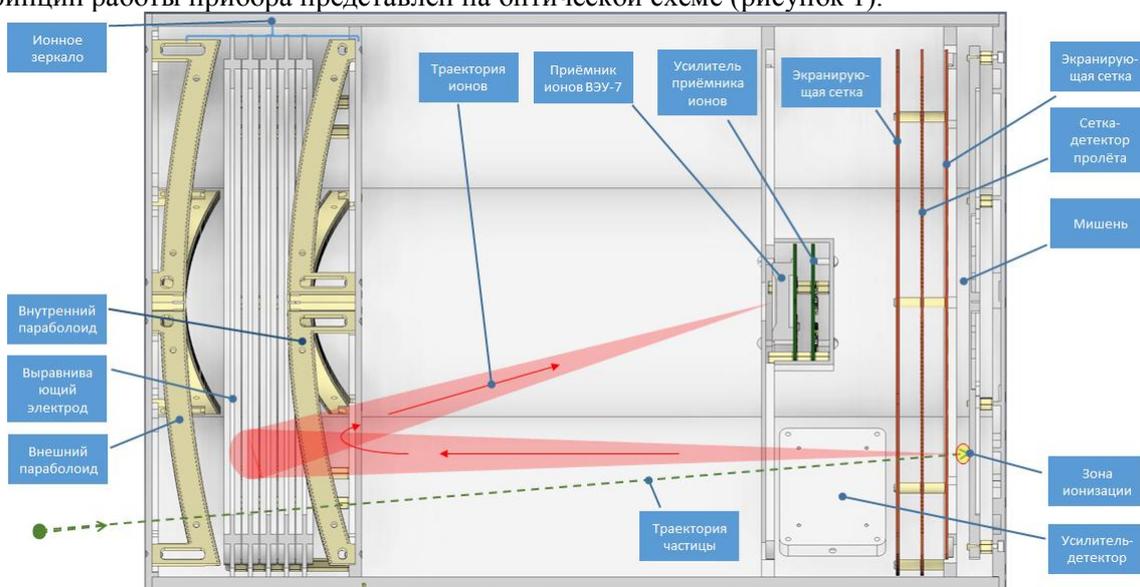


Рисунок 1. Оптическая схема НА СПЕКТР.

В начальный момент пылевая частица ударяется об мишень и преобразуется в облако слабо ионизированного газа, состоящее из ионов материалов частицы и мишени. Во время пролета через сетку-детектор формируется электрический сигнал, по которому начинается запись кадра данных, содержащих информацию с приемника ионов. Под действием электрического поля, образованного разностью потенциалов мишени и экранирующей сетки, ионное облако ускоряется в направлении ионного зеркала. Ионное зеркало выполнено в виде 4-х сеток в форме параболоидов, фокус которых совпадает с приёмником ионов и пяти выравнивающих электродов. После разворота ионы попадают в приёмник и сигнал с усилителя приёмника ионов поступает на микроконтроллерный модуль. Конструкция, описанная в [8], была изменена следующим образом: с целью повышения коэффициента сбора ионов устранено одно из ионных зеркал, с целью повышения разрешающей способности, ускоряющее напряжение повышено до 1125 В, дополнительная сетка после параболического отражателя служит для гарантированного отражения всех ионов в сторону приемника. Схематичное расположение мишени, электродов и приемника, а также распределение потенциалов, приведено на рисунке 2.

3. Расчет параметров преобразователя

3.1 Одномерная модель

Запишем выражение, определяющее время пролета частицы массой m и зарядом q с начальной энергией ΔU

$$T = \left(\frac{m}{2q}\right)^{1/2} \left\{ \frac{2L_1}{U_1} \left[\sqrt{\Delta U + U_1(1+n)} - \sqrt{\Delta U} \right] + \frac{4L_3}{k_1 U_1} \left[\sqrt{\Delta U + U_1} - \sqrt{\Delta U + U_1(1-k_1)} \right] + \frac{4L_4}{k_2 U_1} \sqrt{\Delta U + U_1(1-k_1)} + L_{\Pi} (\Delta U + U_1)^{-1/2} \right\}$$

Далее распишем через коэффициенты

$$T = \left(\frac{m}{2q}\right)^{1/2} \left[C_1 \sqrt{\Delta U} + C_2 \sqrt{\Delta U + U_1} + C_3 \sqrt{\Delta U + U_1(1 - k_1)} + C_4 (\Delta U + U_1)^{-1/2} \right];$$

$$C_1 = -\frac{2L_1}{U_1};$$

$$C_2 = \frac{2L_1}{U_1} + \frac{4L_3}{k_1 U_1};$$

$$C_3 = -\frac{4L_3}{k_1 U_1} + \frac{4L_4}{k_2 U_1};$$

$$C_4 = L_{fl}.$$

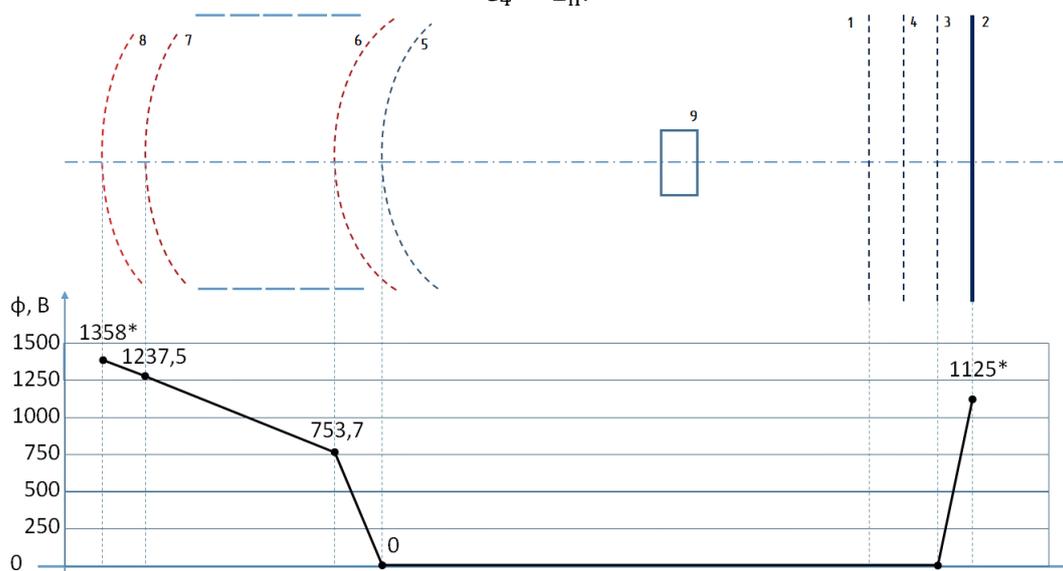


Рисунок 2. Пылеударный масс-спектрометр с параболическим отражателем (2 – мишень; 3 – ускоряющая сетка; 4 – тормозящая сетка, заземлена; 5, 6, 7, 8 – сетки параболического ионного зеркала; 9 – кожух приемника, заземлен).

Для того чтобы начальный энергетический разброс ионов не оказывал отрицательного действия на временную фокусировку ионов в масс-спектрометрическом тракте, необходимо потребовать равенство нулю первых двух производных выражения при энергетическом разбросе ионов, стремящимся к нулю

$$\begin{cases} \left(\frac{dT}{dU}\right)_{U=U_0} = 0; \\ \left(\frac{d^2T}{dU^2}\right)_{U=U_0} = 0. \end{cases}$$

Иногда требуют равенства нулю трех производных, в таком случае говорят о фокусировке третьего порядка.

На практике решение такой системы уравнений не всегда представляется возможным. Так, если посмотреть на первую производную выражения, то слагаемое $C_1 \sqrt{\Delta U}$ после подстановки и дифференцирования превращается в $L_1 (C_1 \sqrt{\Delta U})^{-1}$. Что при устремлении ΔU к нулю приводит к устремлению производной к бесконечности. Устремляя же ΔU к очень малым значениям, мы получим решение, которое не реализуемо конструктивно: размеры L_1 и L_2 будут очень малы (L_1 стремится к нулю, а величина L_2 составляет порядка мм).

Поэтому на практике можно использовать другой подход: приравнять нулю разницу времени пролета ионов с нулевой энергией и с граничной энергией находящейся в середине допустимого для нас интервала с зафиксированными минимальными конструктивно реализуемыми размерами

$$\Delta T = \left(\frac{m}{2q}\right)^{1/2} \left[C_0 - C_1 \sqrt{\Delta U} - C_2 \sqrt{\Delta U + U_1} - C_3 \sqrt{\Delta U + U_1(1 - k_1)} - C_4 (\Delta U + U_1)^{-1/2} \right],$$

где

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{U_1}} \left[2L_1 + L_{\text{п}} + \frac{4L_3(1-\sqrt{1-k_1})}{k_1} + \frac{4L_4\sqrt{1-k_1}}{k_2} \right];$$

$\Delta T = 0$ при $U = U_{\text{const}}$.

На рисунке 3 приведено сравнение зависимости разрешающей способности прибора от энергии, рассчитанной двумя способами. Слева изображены характеристики полученные для точных размеров, справа – для прибора с погрешностью изготовления линейных размеров в 5 %, что допустимо для электродов и сеток, изготавливаемых штучно. Пик на графике соответствует выбранной граничной энергии, при которой площадь под кривой разрешающей способности максимальна в интересующей нас области энергетического спектра.

Можно видеть, что хотя расчет через производные и позволяет получить очень высокие значения разрешающей способности, на практике даже при небольших отклонениях размеров от идеальных (не говоря о конструктивной нереализуемости), разрешающая способность такого прибора быстро падает.

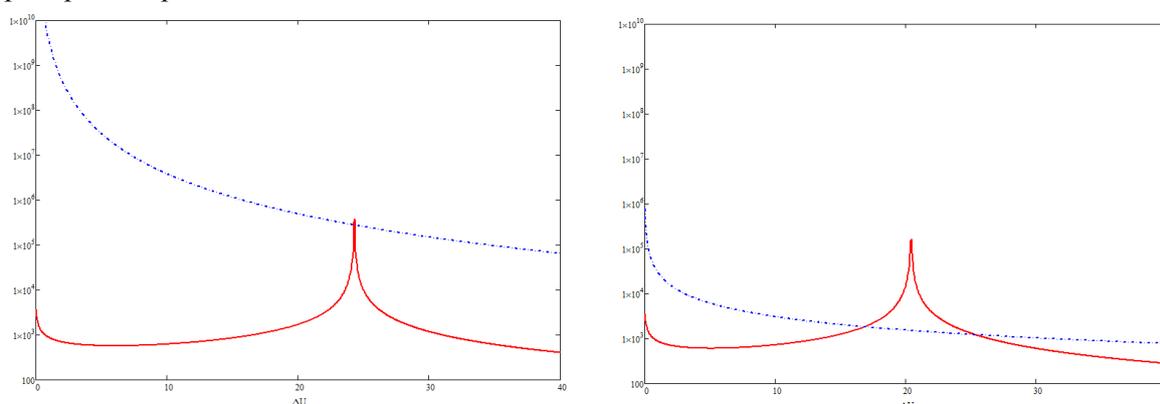


Рисунок 3. Сравнение зависимости разрешающей способности прибора от энергии, рассчитанной двумя способами.

Результатом расчета для осевого случая являются расстояния между сетками и напряжения на электродах, однако размеры по радиальной координате и подход к пространственной фокусировке требуют моделирования в объеме.

3.2 Двумерная осесимметричная модель

Полученные в результате одномерного расчета исходные данные недостаточны для полной проработки конструкции, также необходимыми являются два параметра – диаметр мишени и расстояние до приемника ионов. Исходя из предыдущего опыта макетирования, нами был выбран диаметр мишени, равный 24 см. Положение приемника ионов, как и фокусное расстояние параболического ионного зеркала, определялось конструктивной реализацией и удобством изготовления.

Верификация результатов расчета производилась в два этапа, сначала моделировались конструкции с отклонениями длины бесполевого пробега от номинального, результаты моделирования приведены в таблице 1.

Таблица 1. Разрешающая способность прибора в зависимости от температуры и длины бесполевого участка.

	$T = 1$ (эВ)	$T = 2$ (эВ)	$T = 4$ (эВ)
$L_2 = 511$ (мм)	382	382	164
$L_2 = 518$ (мм)	386	386	165
$L_2 = 525$ (мм)	333	259	163

Можно видеть, что длина бесполевого пробега, равная 518 мм, является оптимальной для заданной конструкции. Затем, после подтверждения правильности выбора для осевого расположения точки взаимодействия, проводилось моделирование спектров соударения для

различных радиальных координат, результаты расчета обобщенного коэффициента сбора и девиации времени пролета приведены в таблице 2.

Таблица 2. Коэффициенты сбора и девиации времени пролета ионов в зависимости от начальной энергии ионов для фокусного расстояния, равного 22 см.

	$\Delta U = 4$ (эВ)	$\Delta U = 2$ (эВ)	$\Delta U = 1$ (эВ)
$K_{сб}$	0.21	0.32	0.39
$\delta T_{пр}$ (с)	$1.48 \cdot 10^{-7}$	$1.50 \cdot 10^{-7}$	$1.49 \cdot 10^{-7}$

4. Алгоритм расчета

Для анализа двумерного случая использовалась CPU реализация алгоритма, подробно описанного в [8]. Для расчета траекторий ионов использовалась треугольная нерегулярная сетка значений поля, содержащая информацию об электродах и доменах области расчета. Итеративный расчет производился методом Рунге-Кутты 4-го порядка, особое внимание при реализации было уделено алгоритму поиска нового треугольника при выходе частицы за границы текущего.

Упрощенно начальная температура плазменного сгустка определялась согласно формуле:

$$T_0 = 0,1 \cdot \left(V_0 \left(1 + \sqrt{\frac{\rho_y}{\rho_m}} \right)^{-1} \right),$$

где V_0 – скорость микрочастицы, $\frac{\rho_y}{\rho_m}$ – отношение плотности микрочастицы к плотности мишени.

Распределение скоростей ионов в плазменном сгустке, представляющем собой многокомпонентную плазму, в зависимости от температуры подчиняется распределению Максвелла:

$$f_q(V) = \eta_j Q \sqrt{\frac{2m_j}{\pi k T_j}} \exp\left(-\frac{m_j V^2}{2k T_j}\right),$$

где Q – общий заряд плазмы, m_j – масса ионов, k – постоянная Больцмана, T_j – температура, η_j – доля ионов j -сорта в общей плазме.

Для генерации заданного распределения вероятности использовался алгоритм Бокса-Мюллера. Для расчета спектра был написан модуль, осуществляющий расчет количества ионов, попавших в приемник в единицу времени с заданной частотой опроса (либо ширины временного окна).

Пошагово алгоритм работы программы на треугольной сетке не слишком отличается от вышеприведенного, за исключением последнего пункта.

1. Загрузка данных о расчетной сетке с полем из файла.
2. Разбор файла: увязывание узлов, треугольников, областей и значений поля.
3. Создание объекта Mesh с описанием взаимосвязей узлов и треугольников.
4. Формирование модельного ионного пакета, исходя из заданных координат и скорости взаимодействия.
5. Нахождение текущего треугольника для каждого иона.
6. Интерполяция поля в точке нахождения каждого иона.
7. Расчет смещения каждого иона за время dt .
8. Проверка нахождения иона в текущем треугольнике.
9. Рекурсивный поиск нового треугольника.
10. Проверка на вылет/детектирование – возврат на пункт 6
11. По достижению максимального времени расчета – остановка и подсчет протектированных ионов в единицу времени.

5. Экспериментальная отработка

По результатам расчетов был изготовлен опытный образец прибора, фронтальный вид которого изображен на рисунке 4.

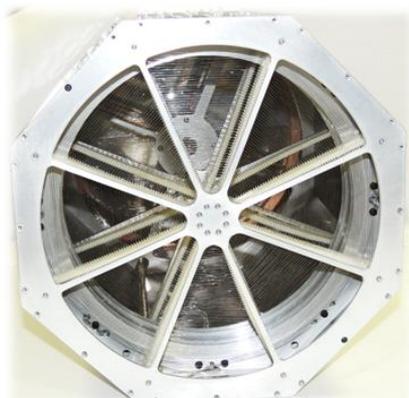


Рисунок 4. Фронтальный вид пылеударного преобразователя пылевых частиц, можно видеть сетки, мишень прибора и входное отверстие детектора частиц.

При экспериментальной обработке на ускорителе пылевых частиц [9, 10] проводилось экспонирование стальной мишени потоку высокоскоростных частиц алюминия со скоростями до 6 км/с. Результаты моделирования приведены на рисунке 5 с типичным спектром, содержащим массовые линии Li (4.7 мкс), N(6.7 мкс), Al (9.15 мкс), N₂ (9.5 мкс), K (11,2 мкс).

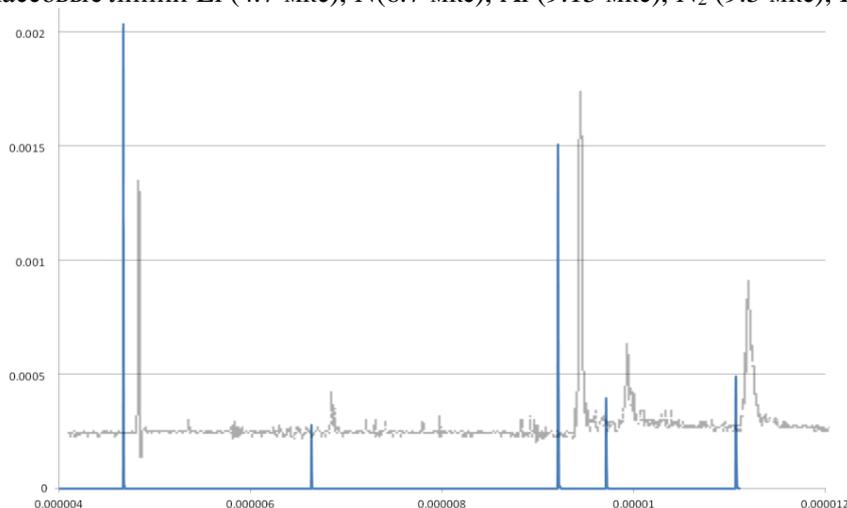


Рисунок 5. Сравнение модельного и экспериментального спектров. Экспериментальный спектр для удобства смещен на 2.5мкс вправо и вверх.

6. Заключение

Аналитический расчет, а также двумерное моделирование позволили получить значительное количество информации о работе прибора и выбрать оптимальные конструктивные параметры, которые позволяют обеспечить повышение коэффициента сбора и разрешающей способности при сохранении низких массогабаритных характеристик, что практически невозможно получить в результате натурной экспериментальной обработки.

Результаты моделирование показали хорошую сходимость с результатами эксперимента и подтвердили применимость данного подхода к моделированию и при решении задач конструирования более сложных времяпролетных преобразователей.

7. Литература

- [1] Semkin, N.D. Multilayer film structures under the influence of micrometeoroids and space debris / N.D. Semkin, M.P. Kalaev, A.M. Telegin // Applied Physics. – 2012. – Vol. 2. – P. 104-115.
- [2] Новиков, Л.С. Воздействие твердых частиц естественного и искусственного происхождения на космические аппараты: учебное пособие / Л.С. Новиков – М.: Университетская книга, 2009. – 104 с.

- [3] Bauera, W. Development of in-situ space debris detector / W. Bauera, O. Romberg, C. Wiedemann // *Advances in Space Research*. – 2014. – Vol. 54. – P. 1858-1869.
- [4] Inogamov, N.A. Collision of a micrometeoroid with an anode as an ion source for mass spectrometry / N.A. Inogamov // *Soviet Technical Physics Letters*. – 1984. – Vol. 10. – P. 323-324.
- [5] Zhitenev, S.V. Time-of-flight mass-spectrometer with dust-impact ion source / S.V. Zhitenev, N.A. Inogamov, A.B. Konstantinov // *Journal of engineering physics*. – 1986. – Vol. 50. – P. 518-526.
- [6] Ahrens, T.J. Mass spectrometer calibration of Cosmic Dust Analyzer // T.J. Ahrens, S.C. Gupta, G. Jyoti / *Journal of geophysical research*. – 2003. – Vol. 108. – P. 967-970.
- [7] Hillier, J.K. Impact ionization mass spectra of anorthite cosmic dust analogue particles / J.K. Hillier, F. Postberg, S. Sestak // *Journal of geophysical research*. – 2012. – Vol. 117. – P. 1-16.
- [8] Piyakov, I.V. Numerical simulation of the ion focusing process in a dust impact time of flight mass spectrometer / I.V. Piyakov, D.V. Rodin, M.A. Rodina // *CEUR Workshop Proceedings*. – 2018. – Vol. 2212. – P. 152-157.
- [9] Piyakov, A.V. Numerical simulation of motion of dust particles in an accelerator path / A.V. Piyakov, D.V. Rodin, M.A. Rodina, A.M. Telegin // *CEUR Workshop Proceedings*. – 2017. – Vol. 1902. – P. 55-61.

Simulation of a dust impact time-of-flight dust particle sensor

I.V. Piyakov¹, D.V. Rodin¹, M.A. Rodina¹, A.M. Telegin¹

¹Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. One-dimensional and two-dimensional axisymmetric models of a dust-shock time-of-flight sensor for analysis of the chemical composition of micrometeoroids and particles of space debris are considered. The results of calculating the design parameters and functional characteristics of the sensor are presented. The algorithm of the program for modeling mass spectra is described. Model mass spectra obtained for the axial case in the one-dimensional approximation, as well as for the two-dimensional case and various coordinates of the impact interaction, are presented. The comparison of model spectra with experimental data obtained at the electrodynamic accelerator of dust particles is given.