SIMULATIONSPROGRAMM FÜR TIME-OF-FLIGHT-MASSENSPEKTROMETER

MASTERARBEIT

Autor: Oliver Lietz
Oliver.lietz@stud.hawk.de
Oliver.lietz@dlr.de
Referent: Prof. Dr. Christoph Gerhard
christoph.gerhard@hawk.de
Koreferent: Dr. Martin Grabe
Martin.grabe@dlr.de

Durchführungszeitraum: 09.02.2022 – 09.06.2022
Abgabedatum: 09.06.2022

HAWK Fakultät Ingenieurwissenschaften und Gesundheit Göttingen

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis 3
Tabellenverzeichnis 3
1. Einleitung und Aufgabenstellung 4
2. Funktion des Time-of-flight-Massenspektrometers 5
Ionenquelle (Source) 5
Ionenbeschleuniger (Accelerator) 5
Reflektor (Reflector) 5
Detektor (Detector) 6
Berechnung des Masse-Ladungs-Verhältnisses 6
3. Aufbau Time-of-flight-Massenspektrometer 3D-Modell 7
Ionenbeschleuniger (Accelerator) 8
Reflektor (Reflector) 9
4. C++ Bibliothek - IBSimu 11
5. Aufbau des Simulationsprogramms tof-ibsimu 2.0 12
Das Hauptprogramm 12
Dateneinlesefunktion 13
Simulationsausführung 15
6. Überprüfung der Arbeitsweise 17
Simulation eines Plattenkondensators 17
Anfangsbedingungen – FEMM vergleich 17
Ergebnis – FEMM vergleich 17
Anfangsbedingungen – Ablenkung im Plattenkondensator 18
Ergebnis – Ablenkung im Plattenkondensator 19
7. Simulation des Spezialfalls Time-of-flight-Massenspektrometer 20
Anfangsbedingungen 20
Ergebnis 22
8. Ausblick 24
Die Analysefunktion 24
Literaturverzeichnis 25
Anhang: 26
Poisson-Herleitung 26
Technische Zeichnung Time-of-Flight-Massenspektrometer 0

Abbildungsverzeichnis

ABBILDUNG 1 7
ABBILDUNG 2 8
ABBILDUNG 3 9
ABBILDUNG 4 11
ABBILDUNG 5 12
ABBILDUNG 6 14
ABBILDUNG 7 16
ABBILDUNG 8 17
ABBILDUNG 9 18
ABBILDUNG 10 20
ABBILDUNG 11 23

Tabellenverzeichnis

TABELLE 1: PARAMETER DER DREI SIMULATIONEN DES TIME-OF-FLIGHT-MASSENSPEKTROMETER. 21

1. Einleitung und Aufgabenstellung

Das Ergebnis dieser Masterarbeit soll ein Programm sein, dass der Entwicklung von Time-of-Flight-Massenspektrometern dient und dazu allgemein die Flugbahnen von geladenen Teilchen in statischen elektromagnetischen Feldern berechnen kann.

Das Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik (AS) forscht führend auf den Gebieten der Flugzeug-Aerodynamik, Flugzeug-Aerostatik und Raumfahrt-Aerothermodynamik. Die Abteilung Raumfahrzeuge untersucht in der Simulationsanlage für Treibstrahlen chemischer Kleintriebwerke (STG-CT) experimentell wie sich Kleintriebwerke von Raumfahrzeugen verhalten. Die Ausbreitung von Triebstrahlen und deren Wechselwirkung mit Raumfahrzeugkomponenten zu charakterisieren, bietet wertvolle Einblicke bei der Entwicklung von Raumfahrzeugen.

In diesem Kontext ist die Untersuchung der chemischen Zusammensetzung eines Treibstrahls wichtig. Allerdings ändert sich diese Zusammensetzung über die Dauer eines typischen Triebwerkpulses in der Versuchsanlage STG-CT (einige hundert Millisekunden). Um zeitaufgelöst zu erkennen, welche Spezies ausgestoßen werden, soll ein Time-of-flight-Massenspektrometer zum Einsatz kommen. Allerdings gibt es keine kommerziell erhältlichen Time-of-flight-Massenspektrometer, die für den Einsatz in der Hochvakuum-niedertemperatur -Umgebung der STG-CT geeignet sind. Eine Eigenentwicklung wird daher in Betracht gezogen. Essenziell für eine gute Massentrennung ist die korrekte mechanische und elektrische Dimensionierung der ionenoptischen Komponenten. Für den Entwurf ist es daher wichtig, ein Softwarewerkzeug zu haben, das die Bewegung des Ionenstrahls unter Einfluss elektrischer Felder berechnen und darstellen kann. Die OpenSource-Bibliothek IBSimu („Ion Beam Simulator“) bietet Funktionen, mit denen eine solche Simulation implementiert werden kann. Dieser Arbeit vorangegangen wurde die C++ Bibliothek „Ion Beam Simulator“ (IBSimu) im Masterprojekt[1] arbeitsfähig gemacht. Das unter Nutzung der Bibliothek geschriebene Programm, dass die Simulation eines Time-of-flight-Massenspektrometer ermöglicht, soll erweitert werden, sodass es für die kommende Entwicklung flexibel und einfach zu bedienen ist. Die Anforderungen an das Programm sind:

- Die Inputwerte sollen aus einem Textfile gelesen werden,
  Inputwerte sind: Diverse Potentiale, STL-Files, Partikeleigenschaften, Geometriewerte.
- Die Simulation aus dem Masterprojekt soll die Inputwerte verarbeiten,
- die berechneten Werte darstellen
- und zur Weiterverarbeitung abspeichern.

[1] (Lietz, 2022)

2. Funktion des Time-of-flight-Massenspektrometers

Ionenquelle (Source)

Die Ionenquelle speist das Time-of-flight-Massenspektrometer mit Teilchen, die es zu bestimmen gilt. Verschiedene Methoden führen zur Ionisierung. Die Wahl der Methode hängt hauptsächlich von der Art der zu analysierenden Substanz ab. Ein elektrisches Feld leitet die geladenen Teilchen aus der Ionenquelle in den Analysator. Neben der Chemischen Ionisation (CI), der Matrix-unterstützten Laser-Desorption/Ionisation (MALDI) und weiteren, gehört vor allem die Elektronenstoßionisation (EI) zu den am meisten genutzte Ionisationsmethode.

In der EI werden Elektronen, mittels eines elektrischen Feldes beschleunigt. Beim Zusammentreffen zwischen Elektron und neutralem Teilchen wird meist ein Elektron herausgeschlagen, wenn die kinetische Energie groß genug ist. So werden aus neutralen Teilchen, geladene Teilchen.

Ionenbeschleuniger (Accelerator)

Die ionisierten Teilchen müssen auf eine konstante Geschwindigkeit beschleunigt werden, um das Masse-Ladungs-Verhältnisses zu messen. Zur Beschleunigung der Ionen baut ein Potentialgefälle ein elektrisches Feld auf. Die Beschleunigungsspannung U_B setzt sich aus der Summe der Spannungen der Beschleunigungsplatten zusammen. Bei diesem Aufbau wird sich am Radiofrequenz-Ionentriebwerk orientiert.[2] Die Spannungssumme setzt sich aus den Teilspannungen U_{ABP}[3] und U_{AG1}[4] zusammen. U_{ABP} entspricht der Spannung an der Rückwand des Beschleunigers. U_{AG1} entspricht der Spannung am Beschleunigungsgitter.

$$\boldsymbol{U_B = U_{ABP} + U_{AG1}} \tag{1}$$

Es wird vorausgesetzt, dass $U_{AG1} \leq 0$ ist.

Reflektor (Reflector)

Um untersuchte Teilchen voneinander unterscheiden zu können muss die Zeit zwischen dem Eintreffen verschiedener Teilchen, die gleichzeitig starten, maximal sein. Dies kann durch eine Verlängerung des Flugweges erreicht werden. Um die Dimensionierung des Time-of-flight-Massenspektrometer trotzdem gering zu halten, wird Reflektor verwendet. Um ein Teilchen zu reflektieren, wird ein elektrisches Potential benötigt, dass die Teilchen verlangsamt und anschließend rückwärts beschleunigt. Der Eintrittswinkel entspricht dabei dem Austrittswinkel. In diesem Modell haben die Platte und Gitter im Beschleuniger ein Winkel. Dieser Entspricht dem Eintrittswinkel. Es kann aber auch der Reflektor einen Winkel erhalten.

Das elektrische Feld zwischen der ersten und der letzten Platte verlangsamt das Teilchen beim Hineinfliegen und beschleunigt es beim Herausfliegen gleichermaßen. In der Beschleunigungseinheit kann es passieren, dass Teilchen gleicher Masse mit unterschiedlicher Geschwindigkeit losfliegen. Der Reflektor hat den Nebeneffekt, dass die Geschwindigkeitsdifferenz verringert wird. Ein Teilchen, dass schneller fliegt, tritt zuerst in den Reflektor ein. Durch seine höhere kinetische Energie dringt es auch tiefer in den Reflektor vor als ein Teilchen mit gleicher Masse, dass langsamer fliegt. Durch die größere Weglänge verlässt das schnellere Teilchen den Reflektor später und holt das langsamere ein. Dies kann einen Energieunterscheid von bis zu 20 eV kompensieren.[5]

---

[2] Seite 44 ff (Volkmar, 2015; Volkmar, 2015)
[3] ABP – Accelerator Backplate
[4] AG1 – Accelerator Grid 1
[5] Seite 18 (Jordan TOF Products, INC., 2021)

Detektor (Detector)

Der Detektor ist in diesem Modell ein Quader, der auf Distanz $(250\ \mathrm{mm})$ vom Reflektor gesetzt wird. Somit sitz er unterhalb des Beschleunigers. Ziel ist es in der Simulation eine Kollision der Ionen mit der Oberfläche zu erwirken und zu registrieren. Im praktischen Aufbau besteht der Detektor aus einem Gitter, das zwei Funktionen erfüllt. Zum einen ist es die Ziellinie für die Ionen und zum anderen schützt das Gitter die Flugröhre vor dem elektrischen Feld, das im Detektor herrscht. Das Innere des Detektors ist auf eine negative Spannung von $2{,}2\ \mathrm{kV}$ geladen. Dadurch schlagen die Ionen auf der Oberfläche ein und lösen Elektronen dem Material. Diese Elektronen lösen weitere Elektronen aus der Oberfläche und es entsteht eine Kaskade aus mehreren Millionen Elektronen pro Ion, das in den Detektor stürzt. Die Anode des Signalkabels sammelt diese Elektronen und es entsteht ein Strom. Es ist zu beachten, dass die Anode eine Kegelform hat, die ein Schwingen des Signals verhindert. Die Schirmung des Kabels muss in exakten Winkeln an die Impedanz der Anode angepasst werden. Koaxiale Signalleitungen haben das Minimum der Dämpfung bei $77\ \Omega$ und das Maximum der Übertragungsleistung bei $30\ \Omega$. Der hieraus entstehende Kompromiss führte zur Standardisierung der Koaxialkabel auf 50Ω.[6]

Berechnung des Masse-Ladungs-Verhältnisses

Das Time-of-flight-Massenspektrometer besteht aus einer Flugröhre in dem kein EM-Feld wirkt. Über die Flugzeit t eines Ions und die bekannte Länge l, der Flugröhre (Flight Tube), kann dann die Geschwindigkeit v berechnet werden.

$$\boldsymbol{v = \frac{l}{t}} \tag{2}$$

Die Formel der klassischen Kinetische Energie wird gleichgesetzt mit ihrem Äquivalent im elektrischen Feld.

$$\boldsymbol{E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 = z \cdot e \cdot U} \tag{3}$$

Diese setzt sich zusammen aus der Beschleunigungsspannung U, der Ladungszahl z und der Elementarladung e. Umgestellt ergibt sich somit das Verhältnis Masse zu Ladungszahl:

$$\boldsymbol{\frac{m}{z} = \frac{2 \cdot e \cdot U}{v^2}} \tag{4}$$

[6] Seite 12 (Jordan TOF Products, INC., 2021)

3. Aufbau Time-of-flight-Massenspektrometer 3D-Modell

Für das Simulationsprogramm wurde ein 3D-Modell eines Time-of-flight-Massenspektrometer erstellt. Im Folgenden werden die Geometrischen Gegebenheiten beschrieben. Das beispielhaft konstruierte Time-of-flight-Massenspektrometer besteht aus zwei Hauptkomponenten, die aus Einzelkomponenten zusammengesetzt sind. Bei den Hauptkomponenten handelt es sich um den Beschleuniger und den Reflektor. Die gesamte Konstruktion hat die Maße: $(50{,}00 \times 347{,}75 \times 104{,}00)\ \mathrm{mm}^3$ in den $(\mathrm{X} \times \mathrm{Y} \times \mathrm{Z})$-Achsen. Alle Maßangaben in diesem Kapitel werden sich an dieser Achsenausrichtung orientieren. Die Y-Achse ist die Hauptflugrichtung des Teilchens. Die X-Achse beschreibt die horizontale und die Z-Achse die vertikale Ausrichtung des Modells. Die Zeichnung ist im Anhang „Technische Zeichnung Time-of-Flight-Massenspektrometer“ zu finden. Ausschnitte der technischen Zeichnung sind im Folgenden zu sehen. Abbildung 1 zeigt den Schnitt A-A mit den Bezeichnungen der Einzelkomponenten und ihren Maßen zueinander. Aus Platzgründen wurde die $250\ \mathrm{mm}$ lange feldfreie Flugröhre verkürzt dargestellt. Der angegebene Maßstab gilt nicht in den Abbildungen, dieses Kapitels. Alle Maße sind in Millimeter oder Grad, wenn nicht anders beschriftet.

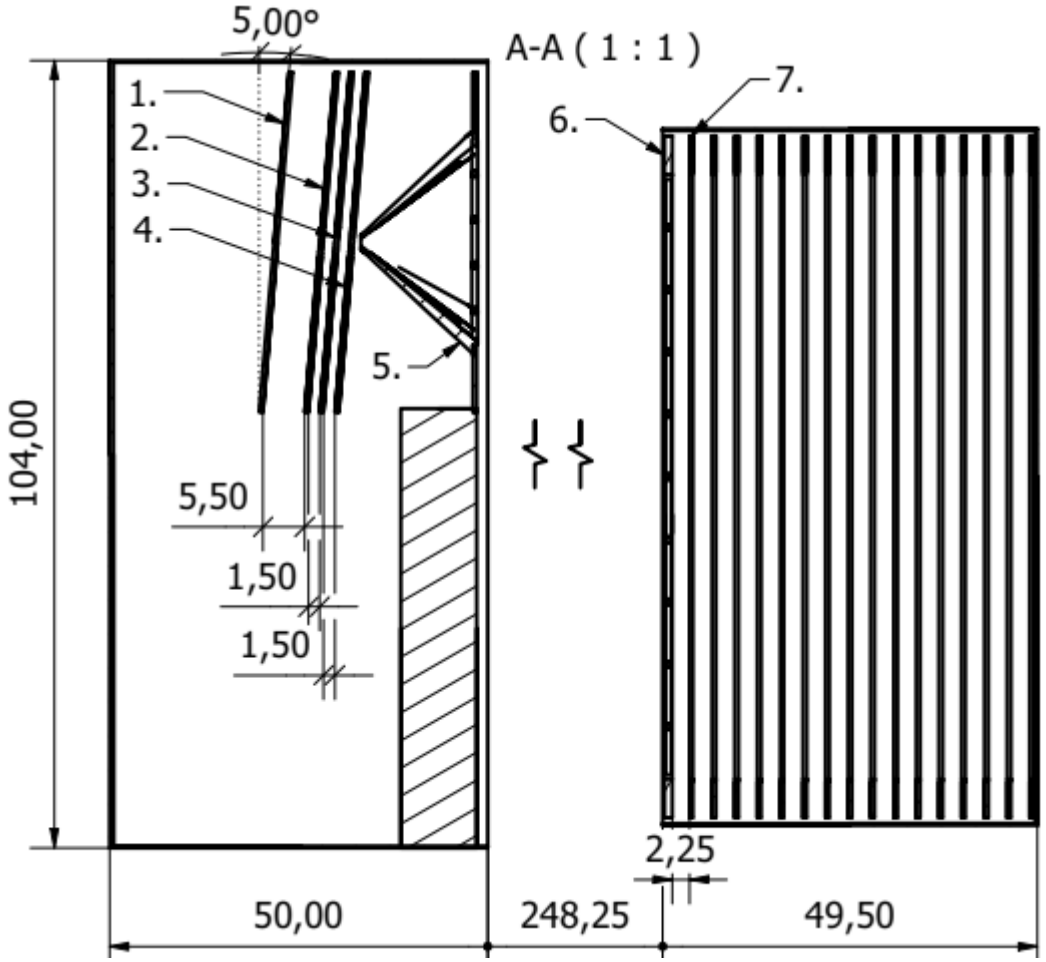


Abbildung 1 Schnitt A-A der Frontansicht mit den Einzelkomponenten. 1. Beschleunigerplatte, 2. Extraktionsgitter, 3. Beschleunigergitter, 4. Erdungsgitter, 5. Skimmer, 6. Reflektorgitter, 7. Reflektorplatte.

Ionenbeschleuniger (Accelerator)

Der Beschleuniger besteht aus sieben Einzelkomponenten. Als erstes sind die Beschleunigerplatte (Abbildung 2) und die drei Beschleunigergitter zu nennen. In Abbildung 1 sind die Komponenten abgebildet mit Abständen zwischen den Oberflächen. Die Platten haben die Maße: $(45 \times 1 \times 45)\ \mathrm{mm}^3$. Die Gitter haben eine zentrierte Bohrung mit $4{,}0\ \mathrm{mm}$ Durchmesser. Die Platte und Gitter haben in der Anordnung (Abbildung 1) einen $5°$-Winkel im Uhrzeigersinn um die X-Achse. Dieser Winkel gibt den Teilchen bei der Beschleunigung einen Einfallswinkel in den Reflektor. Die Beschleunigerplatte wird mit einer positiven Spannung geladen. Die verwendeten Werte sind in Tabelle 1 aufgeführt. Das erste Gitter (Abbildung 2-2.) ist das Extraktionsgitter. An dieses Gitter wird ein Spannungswert angelegt, dessen Wert $90\ \%$ der Spannung beträgt[7], die an der Beschleunigerplatte angelegt wird. Dies führt zu einem Potenzialgefälle, dass die Teilchen in Richtung der Öffnung saugt. Das zweite Gitter (Abbildung 2-3.) ist das Beschleunigergitter. Dessen Spannung ist gegenpolig zur Beschleunigerplatte und bringt die Teilchen auf die Geschwindigkeit, die zum Durchfliegen des Time-of-flight-Massenspektrometers notwendig ist. Das dritte Gitter (Abbildung 2-4.) ist das Erdungsgitter. Es hat eine Neutrale Ladung. Wenn ein Teilchen nicht auf geradem Weg durch die Öffnung fliegt, prallt es am Skimmer (Abbildung 3) ab.

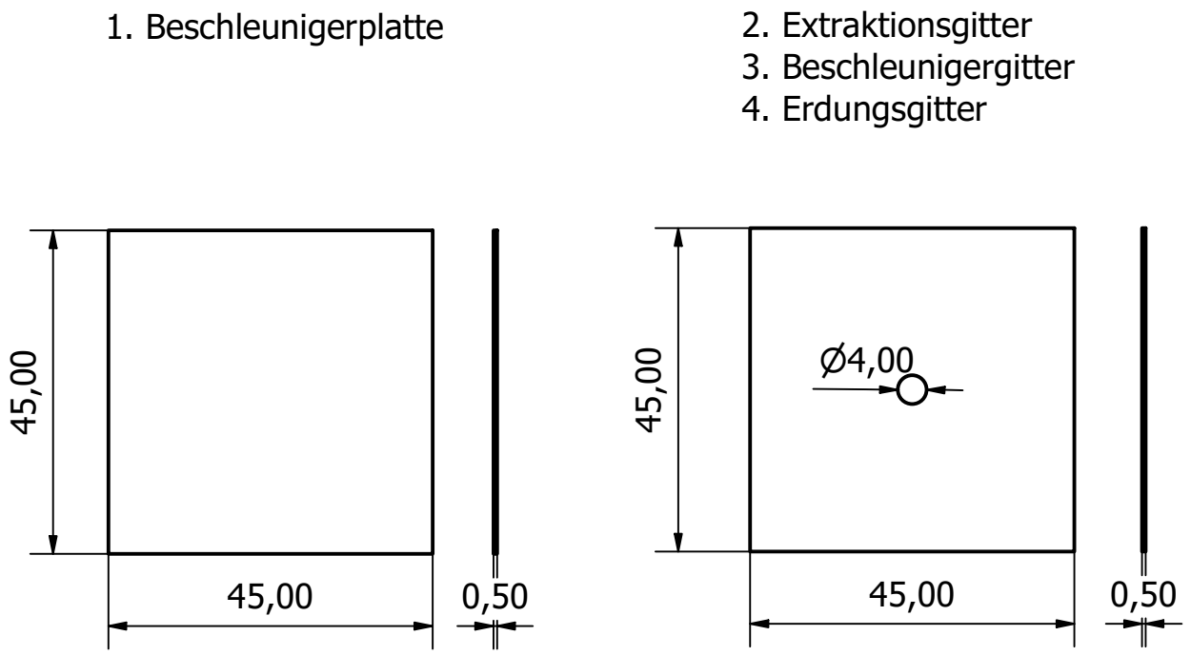


Abbildung 2 Ansicht der Einzelkomponenten 1. Beschleunigerplatte und 2. Extraktionsgitter. Das Beschleunigergitter und Erdungsgitter haben die gleichen Maße wie das Extraktionsgitter.

Es würde dann auf die negativ geladene Beschleunigergitter zurückgezogen werden und dort für Sputter-Effekte sorgen. Das Erdungsgitter verhindert diesen Effekt.

Bauteil 5. ist eine Platte mit den Maßen: $(1 \times 45 \times 45)\ \mathrm{mm}^3$. Auf dieser Platte befindet sich der Skimmer, oder auch Kollimator. Ein hohler Kegel in Richtung der Y-Achse. Der Kegel hat eine kreisrunde Grundfläche mit einem Außendurchmesser von $29{,}49\ \mathrm{mm}$. Der Kegelstumpf ist

[7] Seite 4 (Jordan TOF Products, INC., 2021)

$15{,}25\ \mathrm{mm}$ hoch. Die Kegelspitze hat ein Loch mit $1\ \mathrm{mm}$ Durchmesser. Der Skimmer wirkt wie ein umgedrehter Trichter.

Der Detektor, ist als Quader vereinfacht angedeutet. Die Maße sind nicht entscheidend, daher werden die Details vernachlässigt. Für die Simulation musste eine Oberfläche implementiert werden, die bei Kollision mit dem Teilchen eindeutig erkannt wird. Umschlossen werden die bisher beschrieben Komponenten von einem Käfig, der aus fünf Platten besteht, die einen Behälter bilden. Der Behälter bildet mit Detektor und Skimmer eine geschlossene Einheit, so dass der Feldfreie Raum zwischen Beschleuniger und Reflektor vom elektrostatischen Feld im Beschleuniger abgeschirmt ist.

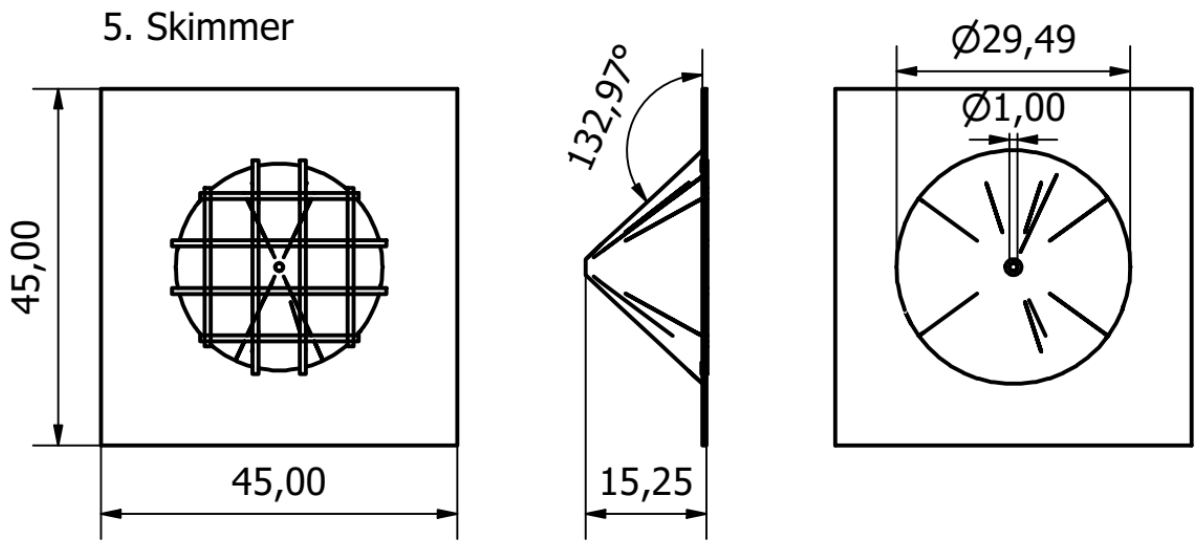


Abbildung 3 Ansicht der Einzelkomponenten 5. Skimmer.

Reflektor (Reflector)

Der Reflektor sorgt für eine Verlängerung der Flugbahn des Teilchens, ohne die Längenausdehung zu vergrößern. Das wiederum führt zu einer Steigerung der Genauigkeit des Messsystems (Siehe: Kapitel 2 Berechnung des Masse-Ladungs-Verhältnisses). Der Reflektor (Abbildung 1 und Abbildung 4) besteht aus einem Gitter (6.), das zusammen mit einem Käfig den feldfreien Raum zwischen Beschleuniger und Reflektor abschirmt. Das Gitter hat die Maße: $(45 \times 1 \times 90)\ \mathrm{mm}^3$. In der Mitte ist eine Ellipse. Die Länge der Hauptachse beträgt $80{,}6\ \mathrm{mm}$ und die Länge der Nebenachse beträgt $39{,}98\ \mathrm{mm}$. In der Ellipse befindet sich das Gitter mit einer quadratischen Maschenbreite von $7{,}5\ \mathrm{mm}$. Die Gitterstäbe haben eine Breite von $0{,}75\ \mathrm{mm}$. Das Gitter hat eine größere Maschenbreite, als es zum Abschirmen notwendig wäre. Der Grund ist, dass die Simulationszeit so geringgehalten werden kann.

Im Time-of-flight-Massenspektrometer entsteht zwischen den angelegten Potentialen ein elektrostatisches Feld. Die Elektrostatik ist ein Spezialfall der Elektrodynamik und basiert auf den Wechselwirkungen unbewegter elektrischer Ladungen und stationären, d.h. zeitlich gleichbleibenden elektrischen Feldern.[8] Es ist wichtig das diese Felder die Teilchen nicht beeinflussen. Die Flugröhre muss also von den elektrischen Feldern abgeschirmt sein, die im Reflektor und dem Beschleuniger entsteht. In der Elektrostatik beruht die Abschirmung auf der

[8] Seite 150 ff. (Weißgerber, 2015)

Influenz.[9] bewegt sich ein geladenes Teilchen durch ein elektrisches Feld, wie es im Time-of-flight-Massenspektrometer der Fall ist, wird aus dem stationären Feld ein dynamisches Feld. Um die Abschirmwirkung des Gitters zu maximieren, muss die Maschen kleiner sein als die Wellenlänge des elektrischen Feldes, wenn es in den dynamischen zustand übergeht. Im statischen Feld würde die Frequenz $f = 0\,\mathrm{Hz}$ betragen. Umso mehr Ladungen durch das Time-of-flight-Massenspektrometer bewegt werden umso größer wird die Frequenz ansteigen. In dem Fall wird mit der Lichtgeschwindigkeit c die Wellenlänge über die Gleichung

$$\lambda = \frac{c}{f} \tag{5}$$

berechnet. Ist die Frequenz $f > 0$ folgt, dass die Wellenlänge $\lambda < 3 \cdot 10^8\,\mathrm{m}$ sein muss. Viele bewegte Teilchen bilden einen Strom. Ein Strom induziert ein Magnetfeld. Das Magnetfeld wechselwirkt mit dem elektrostatischen Feld und regt es zu schwingen an. Die Frequenz nimmt zu und bestimmt die Wellenlänge und somit die Maschengröße des Gitters. Die Aufnahmefrequenz eines Messzyklus soll einen Takt von $1\,\mathrm{kHz}$ haben. Das bedeutet eine Messung pro Millisekunde. In diesem Fall nimmt die Wellenlänge einen Wert von $\lambda = 3 \cdot 10^5\,\mathrm{m}$ an. Ab einer Frequenz von $\lambda = 3{,}75\,\mathrm{GHz}$ unterschreitet die Wellenlänge die Größe der Elliptischen Öffnung des Reflektorgitters. Es kann vereinfacht angenommen werden, dass ein Time-of-flight-Massenspektrometer im normalen Betriebszustand im Elektrostatischen Bereich arbeitet.

Abschirmgitter müssen auf zwei Zielgrößen hin optimiert werden. Neben der oben beschriebenen Abschirmwirkung ist die Durchlässigkeit von Bedeutung. Es sollen möglichst viele Teilchen durch das Gitter kommen, ohne am Gitter abzuprallen oder aus der Bahn gelenkt zu werden. Bei den gegebenen Maßen hat das Gitter eine Fläche von $A_{Gitter} = 499{,}0\,\mathrm{mm}^2$. Die Fläche der Ellipse beträgt $A_{Ellipse} = 2513{,}3\,\mathrm{mm}^2$. Die Durchlässigkeit des Gitters beträgt demnach $80{,}1\,\%$.

In dem Käfig befinden sich weiterhin 16 Reflektorplatten die jeweils die Maße: $(45{,}0 \times 0{,}5 \times 90{,}0)\,\mathrm{mm}^3$. Die Platten haben eine Öffnung, die zusammengesetzt ist aus einem Quadrat mit der Kantenlänge $40\,\mathrm{mm}$ und zwei Halbkreisen, ober- und unterhalb, mit dem Radius $20\,\mathrm{mm}$. Der Abstand zwischen den Oberflächen der Platten beträgt $2{,}25\,\mathrm{mm}$.

[9] Seite 170 ff. (Weißgerber, 2015)

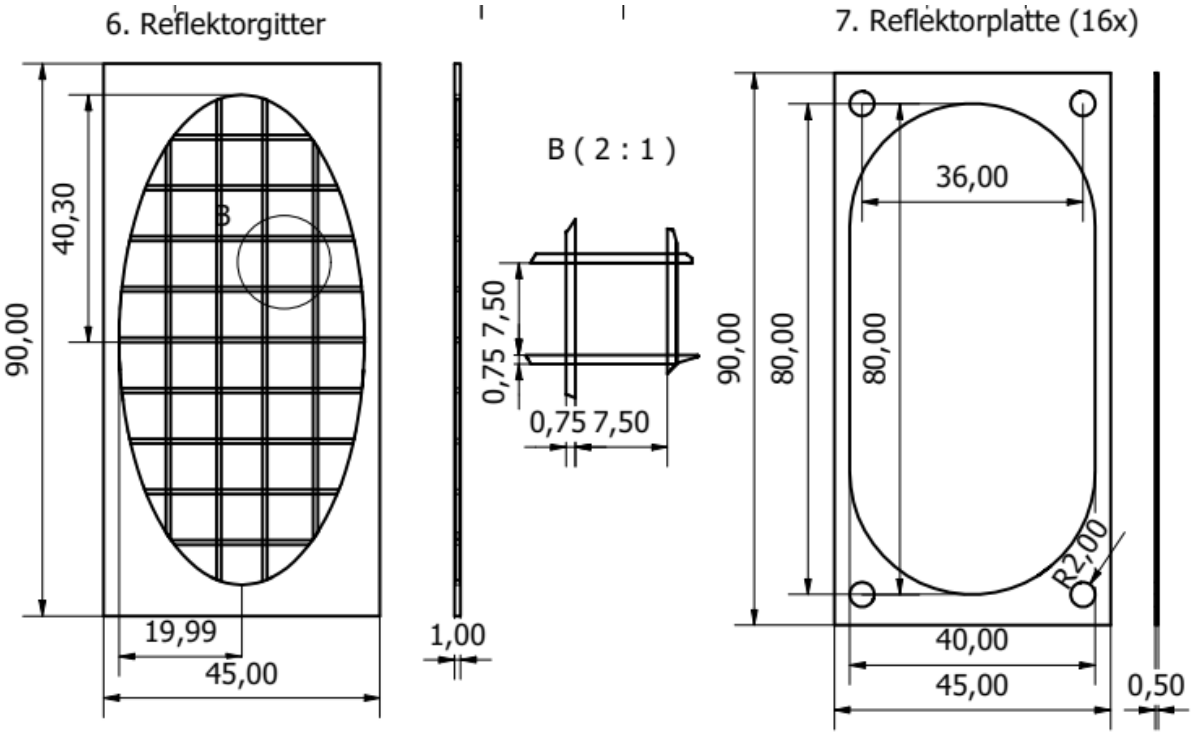


Abbildung 4 Ansicht der Einzelkomponenten 6. Reflektorgitter und 7. Reflektorplatte.

4. C++ Bibliothek - IBSimu

IBSimu wurde erstmals 2009, in einem Paper für die „International Conference on Ion Sources“ (T. Kalvas, 2010), veröffentlicht. Es handelt sich beim „Ion Beam Simulator“ um ein Softwarepaket zur Simulation von Ionen Optik, Plasma Extraktion und Ionenstrahlausbreitung durch Raumladungsverteilung mit der Vlasov-Iteration[10]. Die Bibliothek bietet die Möglichkeiten:

- der Berechnung elektrischer Felder in selbst definierten Geometrien,
- die Berechnung von Flugbahnen geladener Teilchen in elektrischen und magnetischen Feldern,
- Geometrie Definition über 2D DXF Dateien oder 3D STL Dateien,
- Finite Differenz Methode für 1D, 2D und 3D Poisson Gleichungen mit Kantenglättung,[11]
- Importieren von magnetischen Feldern,
- Die Berechnung Raumladungsdichte für Flugbahnen,
- Nichtlineare Plasma Modelle für positive und negative Ionen Extraktion,
- Interaktive Diagnose Werkzeuge,
- Objektorientierte Programmierung und leicht anpassbar.

Für das Simulationsprogramm sind alle Punkte bis auf die Import-Funktion magnetischer Felder wichtig, um die Flugbahn der Teilchen im Time-of-flight-Massenspektrometer zu berechnen.

[10] Vlasov Gleichung ist eine Differential Gleichung zur Beschreibung des zeitlichen Verlaufs geladener Teilchen und Plasma Interaktion bei großer Reichweite. (Vlasov, 1938)
[11] Anhang: Poisson-Herleitung

IBSimu ist kein selbständiges Programm. Der Ausdruck Bibliothek impliziert, dass es einzelne Funktionen zur Verfügung stellt, die zur Lösung individuelle Probleme zusammengestellt werden können. Wie es in dieser Masterarbeit passiert ist.

5. Aufbau des Simulationsprogramms tof-ibsimu 2.0

In den folgenden Abschnitten werden die Struktur und die Aufgaben der einzelnen Funktionen des Simulationsprogramms tof-ibsimu 2.0 erläutert. Diese wurden über den Zeitraum der Masterarbeit ausgearbeitet und auf den hier Präsentierten Status entwickelt.

Das Hauptprogramm

Das Hauptprogramm verbindet, die im Folgenden erklärten, Unterfunktionen: reader und simulation. Es dient als Manager um eine zirkulare Abhängigkeit der Funktionen untereinander zu vermeiden. In der Folge können die Unterfunktionen im Einzelnen weiterentwickelt und geändert werden, ohne eine Anpassung einer anderen Unterfunktion notwendig zu machen. Eine Änderung der Hauptprogramm wird, indess immer eine Änderung in den Unterfunktionen zur Folge haben. Daher ist es wichtig diese so wartungsfrei wie möglich zu programmieren. Über eine if-else-Abfrage wird sichergestellt, dass beim Start des Programms ein Dateiname mitgegeben wurde. Die Datei sollte im besten Fall im selben Ordner wie die Ausführungsdatei liegen. Liegt diese in einem anderen Verzeichnis muss der Dateiname den Pfad relativ zu der Ausführungsdatei mit angeben, damit das Programm die Datei findet.

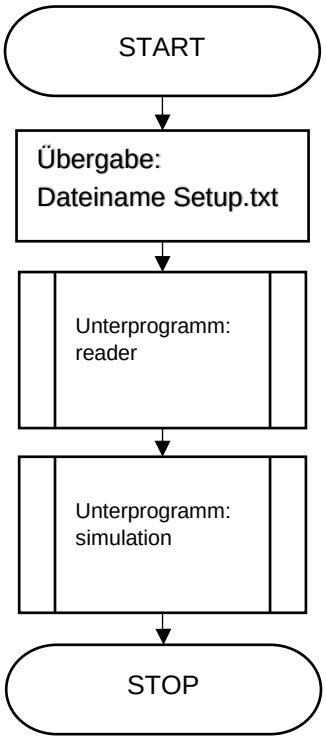


Abbildung 5 Flussdiagramm der Main-Funktion.

Dateneinlesefunktion

Die reader-Funktion ist eine Klasse in der vier Funktionen definiert werden. Zusätzlich beinhaltet sie die Struktur data_tof deren Mitglieder die Anfangs- und Rahmenbedingungen für die Simulation sind. Die Anfangswerte für die Simulation sind auf diese Weise flexibel anpassbar und automatisierbar für weitere Einbindung des Programms in z.B. Python-Skripte.

Die Input-Datei ist in vier Abschnitte aufgeteilt. Der erste Abschnitt beinhaltet die Spannungswerte (**vgnd**, **vaccplate**, **vexgr**, **vaccgr1**, **vaccski**, **vrefgr**, **vrefstart**, **vrefend**, **vdec**) die entscheidend für die Funktion des Time-of-flight-Massenspektrometer sind. Der zweite Abschnitt beinhaltet die Namen der STL-Files, die vom Simulationsprogramm eingelesen werden. Der Bereich ist durch die Signalworte „**BEGIN_STL**“ und „**END_STL**“ gekennzeichnet. Die Namen müssen als Prefix vor dem Dateinamen den Pfad beinhalten in dem sie relativ zur main.cpp Datei haben. Am einfachsten ist es, wenn im Hauptverzeichnis des Programms ein Ordner „stl“ angelegt ist. In dem Fall sieht der Prefix wie folgt aus: „./stl/“.

Der dritte Abschnitt beinhaltet die geometrischen Gegebenheiten und kann in zwei Unterkategorien unterteilt werden. Die erste Unterkategorie legt die Größen des dreidimensionalen Simulationsraums fest. Die dreidimensionale Kantenlängen (**sizex**, **sizey**, **sizez**), die Verschiebung des Ursprungs (**deltax**, **deltay**, **deltaz**), sowie die Größe einer Simulationszelle (**meshsize_h**) werden definiert. Die zweite Unterkategorie beinhaltet die geometrischen Ursprungswerte des zu simulierenden Teilchens (**particlestartx, particlestarty, particlestartz**). Der vierte Abschnitt beinhaltet die Eigenschaften des Teilchens. Zu diesen Eigenschaften gehören: die Anzahl der simulierten Teilchen identischer Art (**particlenumber**), die Ladungszahl (**atomicnumber**), die Masse (**mass**), die Anfangsgeschwindigkeit (**velocity**) und die Ionenstromdichte (**density**).

Die Lesefunktion öffnet die Datei. Ist sie nicht vorhanden wird eine Fehlermeldung angezeigt. Die Textdatei wird zeilenweise eingelesen. Über die Funktion find wird in der Zeile nach Schlagwörtern gesucht. Beginnt die Zeile z.B. mit einem **‚#‘** dann wird die Zeile übersprungen. Wird der Name eines Spannungswertes z.B. ‚**vgnd**‘ gefunden, wird die Unterfunktion read_volt_data aufgerufen. Diese Unterfunktion spaltet den String hinter dem **‚=‘** Zeichen.

So wird der Zahlenwert in den Doubletyp umgewandelt und in das entsprechende Mitglied von data_tof gespeichert. Auf dieselbe Weise funktionieren die Unterfunktionen read_geom_data und read_particle_data.

Der Ausdruck ‚**BEGIN_STL**‘ markiert den Übergang in die read_stl Unterfunktion. Diese Unterfunktion zählt, wie viele STL-Dateien eingelesen werden sollen und wie viele davon Reflektorplatten sind. Diese Informationen werden in der Simulationsdatei benötigt. Die Namen der STL-Dateien werden in einen Vector vom Typ String geschrieben. Der Vorteil eines Vectors ist, dass die Größe variabel ist und nicht wie bei einem Array bei der Initialisierung festgelegt werden muss. Das erlaubt dem Programm z.B. mehr oder weniger Platten im Reflektor zu verwenden. Die Zeile ‚**END_STL**‘ markiert, dass die Unterfunktion read_stl verlassen werden kann.

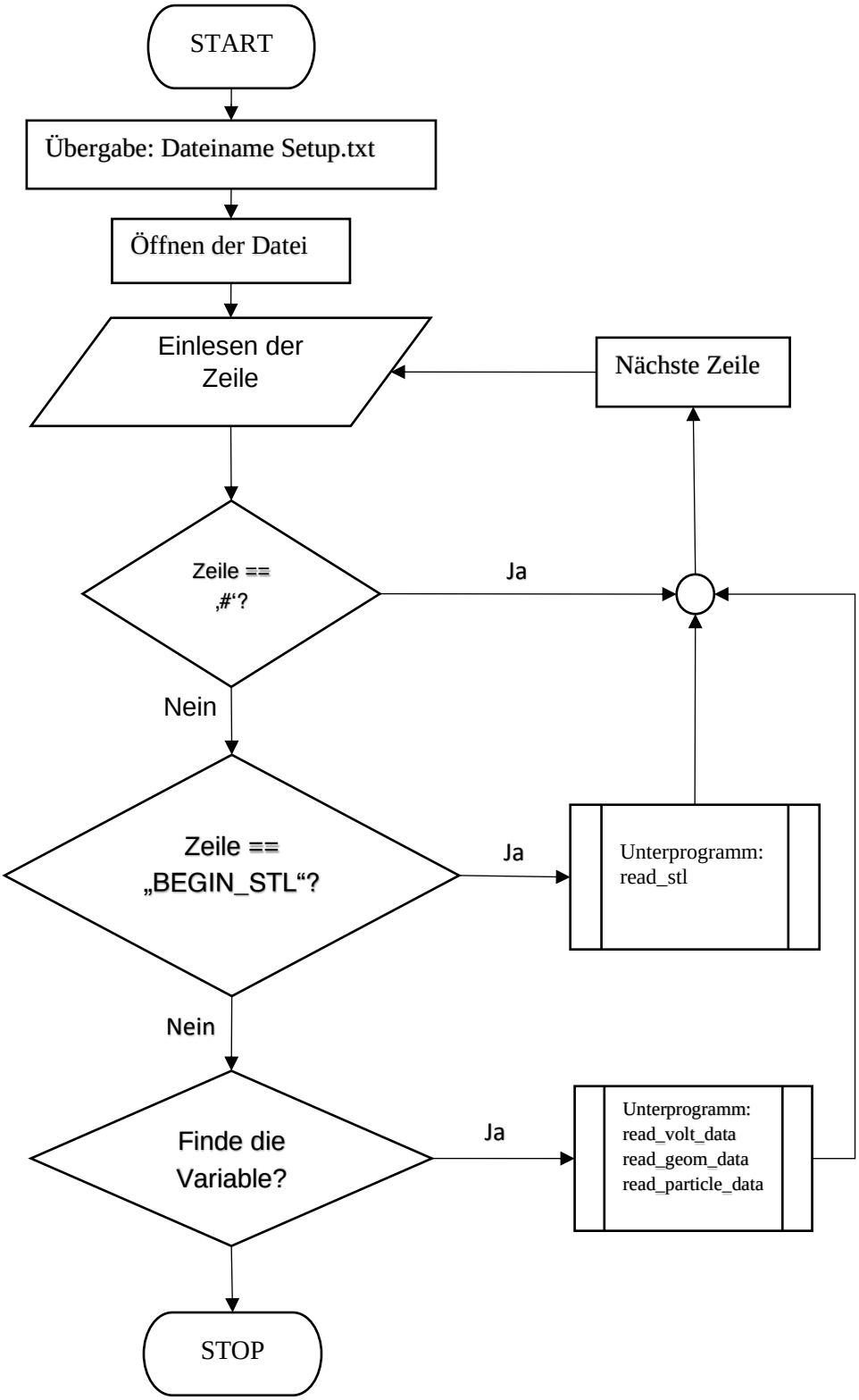


Abbildung 6 Flussdiagramm der reader-Funktion.

Simulationsausführung

Die Funktion simulation bekommt das vorher in der Lesefunktion erzeugte Objekt übergeben. In dem Objekt sind alle Werte abgespeichert. Zu Beginn der Simulation werden geometrische Größen genutzt, um den Simulationsraum festzulegen. Anschließend werden die Spannungen berechnet, die an den Reflektorplatten angelegt werden sollen. Aus der Textdatei werden der Anfangswert und Endwert entnommen. Mit der Anzahl der Platten wird eine Schrittweite bestimmt und anschließend jeder Wert in ein Array geschrieben.

Als nächstes werden die STL-Files eingelesen und in die IBSimu eigenen Geometry Klasse umgewandelt. Jedem Teil wird eine Randbedingung zugeordnet und der Spannungswert gesetzt. Es wird unterschieden zwischen Neumann-Randbedingung[12] und Dirichlet-Randbedingung[13]. Jede Geometrie erhält eine Nummer. Die ersten Sechs Körper sind die Außenwände des Simulationsraums. Die erste STL-Geometrie des Time-of-flight-Massenspektrometers startet mit der Nummer Sieben. In diesem Schritt wird auch der Spannungswert der entsprechenden Geometrie zugeordnet.

Alle Flächen werden dann von der IBSimu Bibliothek als Oberfläche gebaut. Die fertige Geometrie wird als DAT-Datei mit Zeitstempel im Dateinamen abgespeichert. Die Dateien können zur Weiterverarbeitung genutzt werden. Daher ist ein Ordner ‚**results**' im Programmverzeichnis angelegt.

Im Anschluss werden das elektrische Feld und das Magnetfeld in der Geometrie berechnet. Für das elektrische Feld kommt hier der EpotBICGSTABSolver zum Einsatz. Dabei handelt es sich um eine Klasse, die von der EpotMatrixSolver Klasse erbt. IBSimu kann keine Magnetfelder erzeugen, dafür importieren und berechnen. Daher ist eine DAT-Datei notwendig. Da im Time-of-flight-Massenspektrometer keine elektrischen Wechselfelder entstehen, sondern ausschließlich statische Felder durch das Potentialgefälle entsteht, ist das Magnetfeld gleich Null. IBSimu verlangt dennoch nach einer Datei, in der die Werte übergeben werden. Mit den Feldern wird die Raumladung des Simulationsmodells berechnet. Im Anschluss wird über die solve-Funktion die Raumladungsdichte für das berechnete Potentialfeld gesetzt. Anschließend wird ein zylindrischer Plasmastrahl mit den Startwerten des Partikels aus der Input-Datei erzeugt. Der Funktion iterate trajectories werden die Raumladungsdichte, das E-Feld und B-Feld (wenn vorhanden) übergeben. Diese berechnet die Flugbahn des Teilchens durch das Simulationsmodell. Dieser Vorgang wiederholt sich bis maximal 100 Wiederholungen des Teilchens berechnet wurden oder der Wert eine Genauigkeit (**eps**[14]) von $0{,}1$ erreicht hat. Diese Grenzen können für beliebige Wiederholungen und Genauigkeit angepasst werden. Für schnelle Simulationszeiten sind diese Werte aber ausreichend.

12 Neumann- *Randbedingung: "All boundaries of the simulation box* $(\mathrm{n} \leq 6)$ default to Neumann *boundary condition with derivative value zero."* (Kalvas T. , IBSimu Geom, 2022)
13 Dirichlet- *Randbedingung: "All defined solids* $(\mathrm{n} \geq 7)$ default to Dirichlet boundary with potential *zero."* (Kalvas T. , IBSimu Geom, 2022)
14 "Accuracy requirement for Poisson solver $\varepsilon_{Poisson}$…." Seite 95 ff (Kalvas T. , 2013)

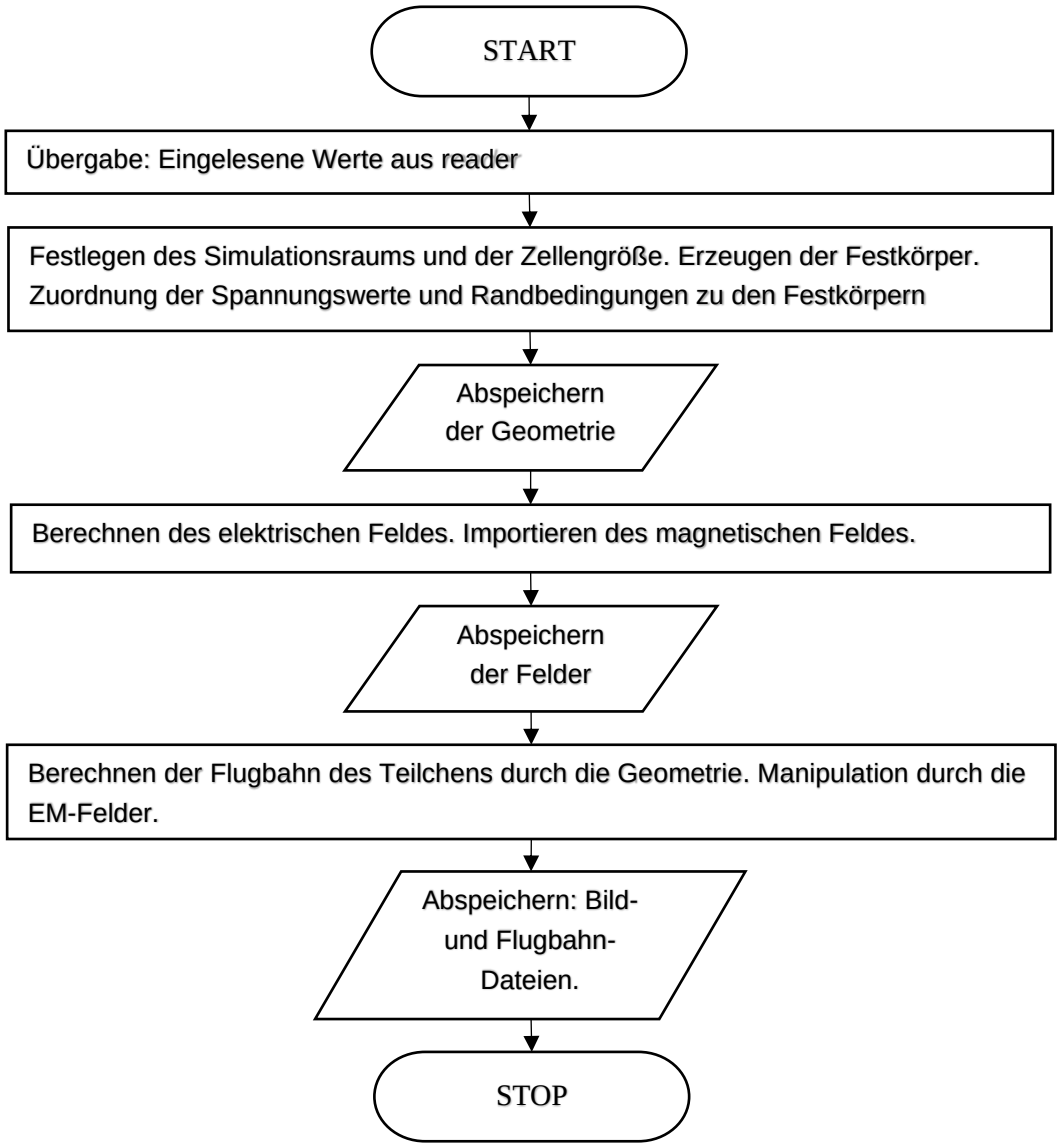


Abbildung 7 Flussdiagramm der simulation-Funktion.

Die so generierte Flugbahnbeschreibung wird als DAT-Datei im binären Format abgespeichert. Aus der Geometrie DAT-Datei, der Potentialfeld DAT-Datei und der Partikelflugbahn DAT-Datei werden Bilder in XY-, YZ-Ausrichtung erzeugt und gespeichert. Von der XY-Ausrichtung werden zwei Bilder erzeugt, da zwei Schnittebenen in der Z-Ebene von Interesse sind. Zum einen die Schnittebene durch den Beschleuniger, der ca. bei 75% der Gesamthöhe von Z liegt. Um die Homogenität der Äquipotentiallinien beurteilen zu können, befindet sich die zweite Schnittebene auf halber Höhe der Z-Achse.

6. Überprüfung der Arbeitsweise

Simulation eines Plattenkondensators

Auf zwei Arten wurde die Arbeitsweise der Bibliothek IBSimu überprüft. Als erstes wurde das erzeugte elektrische Feld durch Äquipotentiallinien dargestellt und mit dem Simulationsergebnis der Software FEMM[15] verglichen. Anschließend wurde die Ablenkung eines Ions, das durch den Plattenkondensator bewegt, mit den berechneten Werten der Bewegungsgleichung verglichen.

Anfangsbedingungen – FEMM vergleich

Für diese Simulation wurden drei Platten erstellt. In Simulation-1 stehen sich zwei Platten mit den Maßen: $(1 \times 0{,}1 \times 2)\,\mathrm{mm}^3$ in den $(\mathrm{X} \times \mathrm{Y} \times \mathrm{Z})$-Achsen planparallel gegenüber. Der Abstand zwischen den Platten beträgt $1{,}9\,\mathrm{mm}$ (Oberfläche zu Oberfläche). In Abbildung 8 ist die linke Platte mit $+1\,\mathrm{V}$ geladen und die rechte Platte mit $-1\,\mathrm{V}$.

In Simulation-2 wurde der Aufbau von Simulation-1 erweitert um eine weitere Platte mit denselben Maßen. Sie wurde im Abstand von $0{,}6\,\mathrm{mm}$, ebenfalls planparallel zur positiv geladenen Platte positioniert. Die dritte Platte ist neutrale geladen.

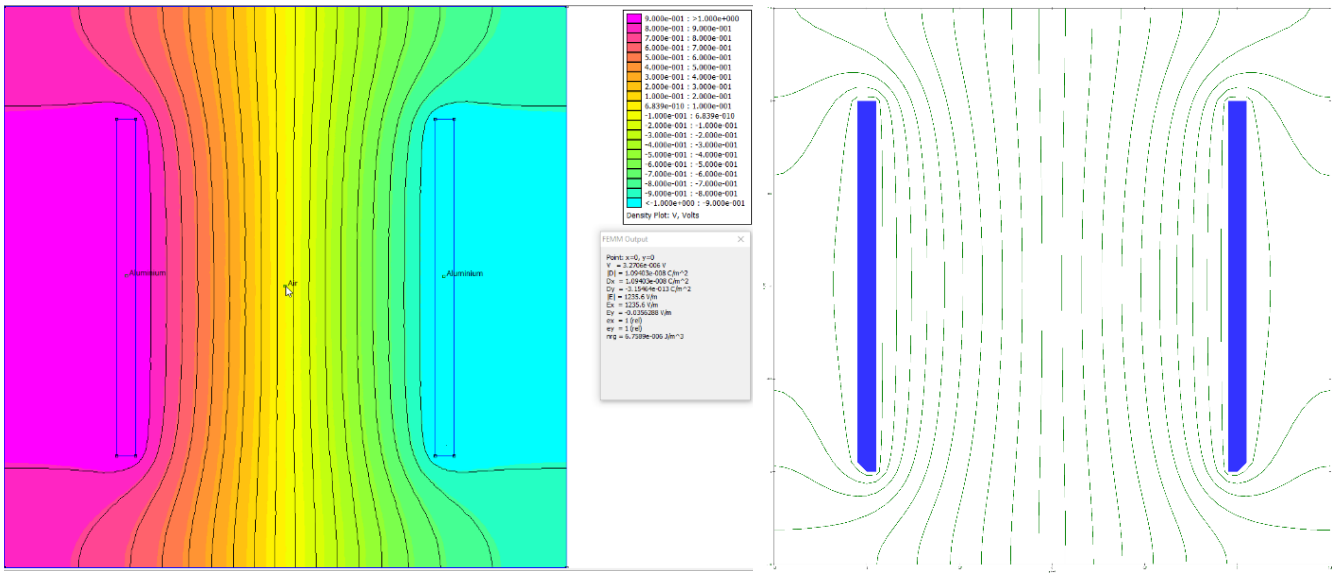


Abbildung 8 Links: Simulation mit FEMM. Rechts Simulation mit IBSimu.

Ergebnis – FEMM vergleich

Für Simulation-1 stellt Abbildung 8 das Ergebnis dar. Im linken Bild ist das Ergebnis der 2D Simulation mit dem Programm FEMM zu sehen, während rechts das Ergebnis mit IBSimu erzeugt wurde. Die Übereinstimmung des Verlaufes der Äquipotentiallinien zeigt, dass beide Simulationsprogramme mit demselben Anfangsbedingungen dieselben Ergebnisse erzeugen. Um den Einfluss einer neutral geladenen Oberfläche auf ein elektrostatisches Feld zu zeigen, wurde in der Simulation-2 die dritte Platte zwischen die geladenen Platten positioniert. Abbildung 9 zeigt links das Ergebnis erzeugt mit FEMM und rechts mit IBSimu. Beide Programme erzeugen, wie in Simulation-1 identische Verläufe der Äquipotentiallinien. Durch die neutrale Platte, die etwas näher an der positiv geladenen Platte platziert wurde, verschiebt

[15] (Meeker, 2022)

sich der neutrale Bereich. An der oberen und unteren Kante der neutralen Platte knicken die Linien auf dieselbe Weise ab. Für Simulation-1 und Simulation-2 gilt, dass IBSimu die Kanten der Platten nicht korrekt darstellt. Durch das Importieren von STL-Dateien und die Wahl der Dimensionsgröße einer Simulationszelle können solche Fehler entstehen. Um dies künftig zu vermeiden, könnte IBSimu die kleinste geometrische Größe ermitteln und die Simulationszelle auf einen Wert setzen der kleiner ist als diese. An dieser Stelle macht sich ein Nachteil der Bibliothek IBSimu bemerkbar. Die Zellgröße lässt sich leider nicht dynamisch im Simulationsraum vergrößern oder verkleinern, sondern ist statisch im gesamten Raum. Demzufolge verursacht eine Verkleinerung der Simulationszelle eine Verlängerung der Simulationszeit.

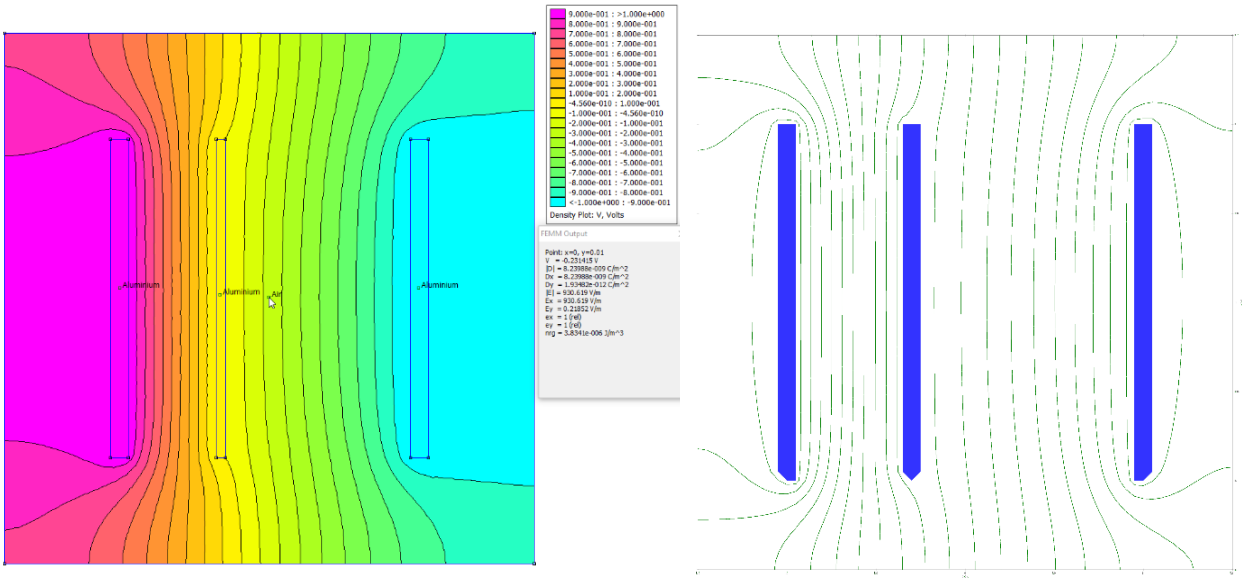


Abbildung 9 Links: Simulation mit FEMM. Rechts Simulation mit IBSimu.

Anfangsbedingungen – Ablenkung im Plattenkondensator

Der Plattenkondensator aus Simulation-1 wird um eine Beschleunigereinheit erweitert. Diese besteht aus einer positiv geladenen Platte und einer neutral geladenen Platte. Die neutral geladene Platte besitzt eine zentrierte Durchgangsbohrung. In Richtung der Z-Achse wird ein Teilchen im Zwischenraum der Kondensatorplatten beschleunigt.

Die Gleichung der kinetischen Energie gleichgesetzt mit der Kinetischen Energie im elektrischen Feld

$$\boldsymbol{E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 = z \cdot e \cdot U} \tag{6}$$

ist Ausgangspunkt für die Herleitung der Ablenkungsgleichung. Diese wird umgestellt nach der Geschwindigkeit v.

$$\boldsymbol{v = \sqrt{\frac{2 \cdot z \cdot e \cdot U}{m}}} \tag{7}$$

Die Ablenkung im Plattenkondensator benötigt eine Bewegungsgleichung für die Richtung auf den Z- und Y-Achsen. Die Ablenkung in Richtung der X-Achse wird vernachlässigt. Für die Z-Achse gilt folgende Bewegungsgleichung.

$$\boldsymbol{z = v_z \cdot t} \tag{8}$$

Für die Bewegung auf der Y-Achse gilt

$$\boldsymbol{y = \frac{1}{2} \cdot a \cdot t^2} \tag{9}$$

Es wird (8) nach t umgestellt und in (9) eingesetzt:

$$\boldsymbol{y = \frac{1}{2} \cdot \frac{a}{v_z^2} \cdot z^2} \tag{10}$$

Die Newtonsche Bewegungsgleichung $F = m \cdot a$ kann nach der Beschleunigung a umgestellt werden. Für die Kraft F im elektrischen Feld wird $F = Q \cdot E$ eingesetzt. Das homogene elektrische Feld E_c im Plattenkondensator wird definiert mit $E_c = \frac{U_c}{d}$. Es ergibt sich:

$$\boldsymbol{a = \frac{z \cdot e \cdot U_c}{m \cdot d}} \tag{11}$$

Wobei d der Abstand zwischen den Platten ist und U_c die Spannung zwischen den Kondensatorplatten. Üblich ist es, diese Gleichung für Elektronen zu nutzen. In diesem Fall wäre $z = 1$. Da aber mit Ionen gerechnet wird, kann mit z die Ladung verschiedener Ionen angegeben werden. (11) und (7), als Geschwindigkeit in Y-Richtung kann nun in (10) eingesetzt werden. U_B ist die Spannung, mit der das Ion in Z-Richtung beschleunigt wird.

$$\boldsymbol{y = \frac{1}{4} \cdot \frac{U_c}{d \cdot U_B} \cdot z^2} \tag{12}$$

Die Gleichung (12) ist die Funktion einer Parabel. Das Ion wird mittig durch den Kondensator geschossen. Daher muss zu (12) noch $\frac{d}{2}$ addiert werden, um die Parabel in die Mitte zwischen die Kondensatorplatten zu verschieben.

$$\boldsymbol{y = \frac{1}{4} \cdot \frac{U_c}{d \cdot U_B} \cdot x^2 + \frac{d}{2}} \tag{13}$$

Als Beschleunigungsspannung wird in Simulation-3 $U_{B1} = 1\,\mathrm{V}$ und in Simulation-4 $U_{B2} = 2\,\mathrm{V}$ angenommen.

Ergebnis – Ablenkung im Plattenkondensator

Das Ergebnis der Simulation wird in Abbildung 10 links gezeigt. Die Simulation wurde für die drei Teilchen: Wasserstoff, Stickstoff und ein Teilchen dessen Masse den Maximalen Wert hat, auf den das Time-of-flight-Massenspektrometer ausgelegt ($600\ \mathrm{amu}$[16]) sein soll, durchgeführt. Im weiteren Verlauf wird dieses theoretische Teilchen mit MaxM bezeichnet. Alle Teilchen hatten denselben Verlauf, da **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** u nabhängig von Masse und Ladung gilt. Das Ergebnis der Berechnung mit **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** ist in Abbildung 10 rechts zu sehen. Die Flugbahnen für Simulation-3 und Simulation-4 sind identisch zur Simulation mit IBSimu.

[16] amu = Atomic Mass Unit

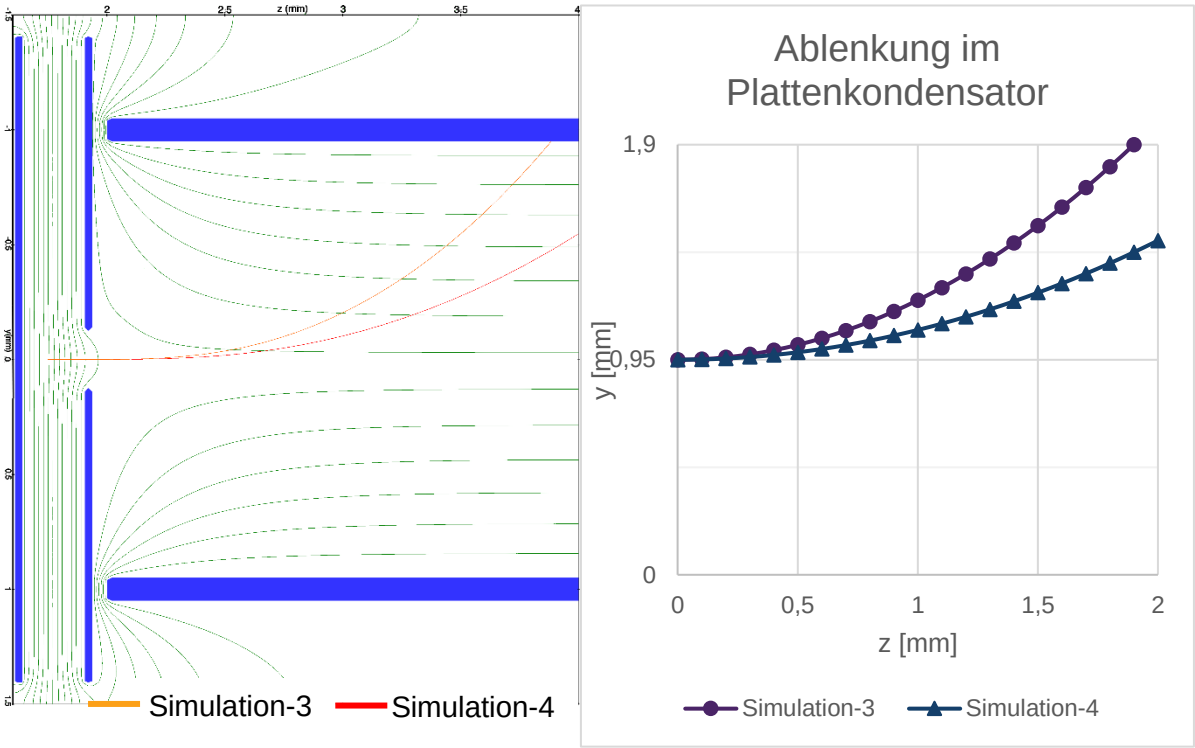


Abbildung 10 Links: Simulation mit IBSimu. Rechts Berechnung der Ablenkung von Teilchen mit den Bewegungsgleichungen.

7. Simulation des Spezialfalls Time-of-flight-Massenspektrometer

In diesem Abschnitt werden die Anfangsbindungen erläutert, die zur Erfolgreichen Simulation des Time-of-flight-Massenspektrometer geführt haben.

Anfangsbedingungen

Im Folgenden werden die Anfangsbedingungen für die Simulation des Time-of-flight-Massenspektrometer-Modells tabellarisch (Tabelle 1) aufgeführt. Diese Werte sind den Text-Dateien entnommen, die vom Simulationsprogramm eingelesen werden. Drei Dateien wurden erzeugt in denen die Spannungs- und Geometrie-Werte, sowie die STL-Dateinamen gleich sind. Jede Datei simuliert eines von drei verschiedenen Teilchen: Wasserstoff, Stickstoff und ein Teilchen dessen Masse den Maximalen Wert hat, auf den das Time-of-flight-Massenspektrometer ausgelegt sein soll $(600\,\mathrm{amu})$. Im weiteren Verlauf wird dieses theoretische Teilchen mit MaxM bezeichnet.

Die Spannungswerte **vaccplate** wurden über viele Simulationen verändert, bis das Ergebnis (Abbildung 11) erzeugt wurde. Die Spannung **vexgr** ist der Wert am Extraktionsgitters und beträgt immer 90% des Wertes **vaccplate** an der Beschleunigerplatte. Die Spannung vaccgr1 ist gegenpolig zum Wert **vaccplate** und liegt am Beschleunigergitter an. Aus der Potentialdifferenz zwischen Beschleunigerplatte und Beschleunigergitter setzt sich die Beschleunigungsspannung U_B zusammen. Die Werte **vaccski** (Abbildung 1-5.), **vrefgr** (Abbildung 1-6.) und **vdec** (am Detektor) haben ein neutrales Potential. Der Wert **vrefstart**

legt das Potential fest, dass die erste Reflektorplatte (Abbildung 1-7.) bekommt. Es sind 16 Reflektorplatten in dieser Simulation eingesetzt worden.

Daher wird mit **vrefend** der Wert der letzten Reflektorplatte festgelegt. Laut (Jordan TOF Products, INC., 2021) soll dieser Wert etwas höher sein als U_B. Die Spannungswerte der Reflektorplatten dazwischen errechnen sich über die Schrittweite. Diese wird mit

$$\boldsymbol{U_{step} = \frac{U_{end} - U_{start}}{n_{platten}}} \tag{14}$$

berechnet. Wobei $n_{platten}$ die Anzahl der Platten ist.

Tabelle 1: Parameter der drei Simulationen des Time-of-flight-Massenspektrometer.

Bezeichnung | Einheit:		**Wert:**	
Spannungen			
vgnd | V		0,0	
vaccplate | V		15,0	
vexgr | V		13,5	
vaccgr1 | V		−15,0	
vaccski | V		0,0	
vrefgr | V		0,0	
vrefstart | V		15,0	
vrefend | V		32,0	
vdec | V		0,0	
Geometrie			
deltax | mm		−25.0	
deltay | mm		−49.0	
deltaz | mm		0.0	
meshsize_h		0.4	
sizex | mm		50.0	
sizey | mm		348.0	
sizez | mm		105.0	
particlestartx | mm		0.0	
particlestarty | mm		−25.0	
particlestartz | mm		81.0	
Partikel Eigenschaften	Wasserstoff	Stickstoff	MaxM
particlenumber	1	1	1
density | A/m²	$1{,}2142945292 \cdot e^{-14}$	$1{,}2142945292 \cdot e^{-14}$	$1{,}4384734192 \cdot e^{-12}$
atomicnumber	1	7	600
mass | u	1,008	14,0067	604,8
velocity | m/s	1000,0	1000,0	1000,0
plasmabeamradius | mm	$100 \cdot e^{-9}$	$100 \cdot e^{-9}$	$100 \cdot e^{-9}$

Die Eigenschaften der Partikel sind die Grundlage für die Berechnung der Flugbahn des Partikels in der Simulation. Aktuell wird immer ein Partikel einzeln simuliert. Die **density** ist die Ionenstromdichte J des Partikels. Diese wird über den Zusammenhang

$$\boldsymbol{J = n \cdot q \cdot v_B} \tag{15}$$

berechnet. n entspricht der Anzahl der Teilchen im Strahl. q ist die Ladung des Teilchens. Die Ladung setzt sich zusammen aus der Elementarladung e multipliziert mit der Anzahl an Protonen im Atomkern. Die Simulation geht von positiv geladenen Ionen aus, daher muss auch die Ladung positiv angenommen werden. v_B ist die Geschwindigkeit des Teilchens die über die Beschleunigungsspannung U_B wie Folgt berechnet wird.

$$v_B = \sqrt{\frac{2 \cdot q \cdot U_B}{m}} \tag{16}$$

m ist in dieser Gleichung die Masse des Teilchens in kg. Beim Ermitteln des Wertes für **vaccplate** wurde darauf geachtet, dass der Wert für die Ionenstromdichte jedes Mal angepasst werden muss.

Die **atomicnumber** in Tabelle 1 entspricht der Ordnungszahl des Elements im Periodensystem. Die Simulation braucht die Masse des Teilchens in Atommasseneinheiten u. In der Tabelle ist das der Wert **mass**. **velocity** ist nicht zu verwechseln mit der oben berechneten Geschwindigkeit. Die gemeinte Geschwindigkeit ist die, mit der die Teilchen aus der Ionisationskammer im Raum, zwischen Beschleunigerplatte und Extraktionsgitter, ankommen. In der Simulation wird mit einem Zylindrischen Strahl gerechnet. Daher wird das Plasma als zylindrische Scheibe am Startpunkt erzeugt. Zur Definition benötigt es einen Radius. Da hier nur ein Teilchen pro Simulation gerechnet wird reicht ein Atomradius von 1 Ångström $(= 100\ \mathrm{pm})$ aus.

Ergebnis

Über den gesamten Entwicklungsprozess der Masterarbeit wurden 165 Simulationen gemacht. Die Parameter, die im „Kapitel 6 - Anfangsbedingungen“ beschrieben wurden, haben diese Ergebnisse erzeugt. Neben der Beschleunigungsspannung war die Spannung im Reflektor die wichtigste Stellschraube. Allerdings und vor allem zu Beginn wurde auch die Anordnung der Geometrien verändert, um die Auswirkungen zu untersuchen. Es zeigte sich, dass die geometrische Anordnung zueinander genauso entscheidend für die Flugbahn ist, wie die angelegten Potentialwerte. Für die Flugbahn von Ionen können vereinfacht die Gesetze der Optik angewendet werden. Vor allem für den Reflektor des Time-of-flight-Massenspektrometer bedeutet, dass die Mitte des Reflektors als optische Achse zu verstehen ist und der Einfallswinkel der Flugbahn des Teilchens gleich dem Ausfallswinkel sein muss. Für die Berechnung des Einfallswinkels, in der beschriebenen Geometrie, muss die Frage gestellt werden: Wohin zielt die Beschleunigereinheit?

Die Beschleunigereinheit kann auf drei verschiedene Ziele ausgerichtet sein. Das erste Ziel wäre der Punkt am Anfang des Reflektors auf der optischen Achse. Bei einer Entfernung von $250\ \mathrm{mm}$ zwischen Beschleuniger und Reflektor und dem Abstand von $30\ \mathrm{mm}$ von der optischen Achse zum Austrittspunkt des Teilchens aus dem Beschleuniger ergibt sich ein Winkel von $6{,}8°$. Das zweite Ziel wäre das Ende des Reflektors auf der optischen Achse. Bei einem Abstand von $2{,}5\ \mathrm{mm}$ zwischen den Platten des Reflektors ergibt sich eine Länge von $49{,}0\ \mathrm{mm}$. Diese Länge wird auf den Abstand zwischen Beschleuniger und Reflektor addiert. Es ergibt sich ein Winkel von $5{,}7°$. Das dritte Ziel ist die Mitte des Reflektors auf der optischen Achse. Hier ergibt sich ein Winkel von $6{,}2°$. Der Einfallswinkel der Flugbahn entspricht dem Winkel, um den die Platte und Gitter im Beschleuniger um die X-Achse im Uhrzeigersinn geneigt werden. Die Ergebnisse wurden mit einem Winkel von $5{,}0°$ erziehlt.

Die Simulationen haben gezeigt, dass der Winkel eine Rolle spielt, aber vor allem der Verlauf der Äquipotentiallinien im Reflektor entscheidend ist in welche Richtung die Teilchen abgelenkt werden. Abbildung 11 zeigt drei Simulationen mit verschiedenen Teilchen. Die Äquipotentiallinien im Reflektor sind identisch, da immer die gleichen Spannungen angelegt wurden. Die Platten wirken wie Kondensatoren. Das elektrische Feld ist nur zwischen den Platten homogen. Das bedeutet die Feldlinien verlaufen ohne Divergenz von Oberfläche zu Oberfläche. Die Äquipotentiallinien verlaufen senkrecht zu den Feldlinien. Im Innenraum wird

das Feld inhomogen. Die Feldlinien verlaufen nicht mehr gerade, sondern beschreiben einen Bogen. Die Äquipotentiallinien bleiben weiterhin senkrecht zu den Feldlinien. Die Überlagerung mit den Feldern der Nachbarplatten erzeugen das dargestellte Muster (Abbildung 11). Zusätzlich tritt an der ersten Äquipotentiallinie direkt hinter dem Gitter des Reflektors der Effekt auf, dass die Linie gewellt ist. Die abschirmende Wirkung der Gitterstäbe verursacht diesen Effekt. Eine Krümmung dieser Art in einer Masche sorgt wie eine Linse für einen Ablenkungseffekt des Teilchens. Diese Ablenkung ist verantwortlich dafür, dass der Austrittswinkel nicht wie erwartet ausfällt. Dies kann vermieden werden in dem die Verteilung der Spannungen auf den Reflektorplatten nicht linear ansteigt, sondern mit verschiedenen Schrittgrößen. An das Gitter ist das Erdpotential von $0\,\mathrm{V}$ angelegt. Daher sollte der Potentialunterschied zur ersten Platte nicht mehr als $1\,\mathrm{V}$ betragen. Auch die Potentialschritte zur zweiten und dritten Platte sollten in der Größenordnung sein. Alternativ kann der Abstand zwischen dem Gitter und der ersten Platte vergrößert werden. Ab der vierten Platte sollte das Potential steiler ansteigen. Die letzten sechs Platten sollten einen steileren Potentialanstieg aufweisen als die Platten zuvor. Wie in Abbildung 11 zu sehen ist, entsteht an der Rückwand eine Wölbung der Äquipotentiallinien. Diese Wölbung kann vermieden werden in dem der Abstand zwischen der letzten Platte des Reflektors und der Käfigwand vergrößert wird.

Der Reflektor soll Teilchen mit unterschiedlichen Massen unterschiedlich tief eindringen lassen. So entsteht bei gleicher Energie, bzw. Geschwindigkeit, ein Flugzeitunterschied. Daraus resultiert die Möglichkeit zwischen Teilchen unterscheiden zu können. Die Flugbahnen der Teilchen, Wasserstoff (Blau), Stickstoff (Rot) und MaxM (Orange), weisen jedoch einen Unterschied im Ausgangswinkel auf. Dies hat ebenso eine Änderung der Flugzeit zur Folge, weil sich durch die Winkeländerung die Flugstrecke verändert. Auch auf diese Weise kann zwischen den Teilchen unterschieden werden. Dies setzt aber voraus, dass der Detektor so ausgelegt ist, dass die Teilchen den Detektionsbereich treffen. Es sollte möglich sein, dass Time-of-flight-Massenspektrometer so zu bauen, dass Start und Endpunkt der Flugbahn feste Punkte sind. Der Zeitunterschied in der Flugbahn muss durch die Eindringtiefe im Reflektor erzeugt werden. Das würde auch der Theoretischen Optik entsprechen, dass Einfalls- und Ausfallswinkel am Reflektor gleich sind.

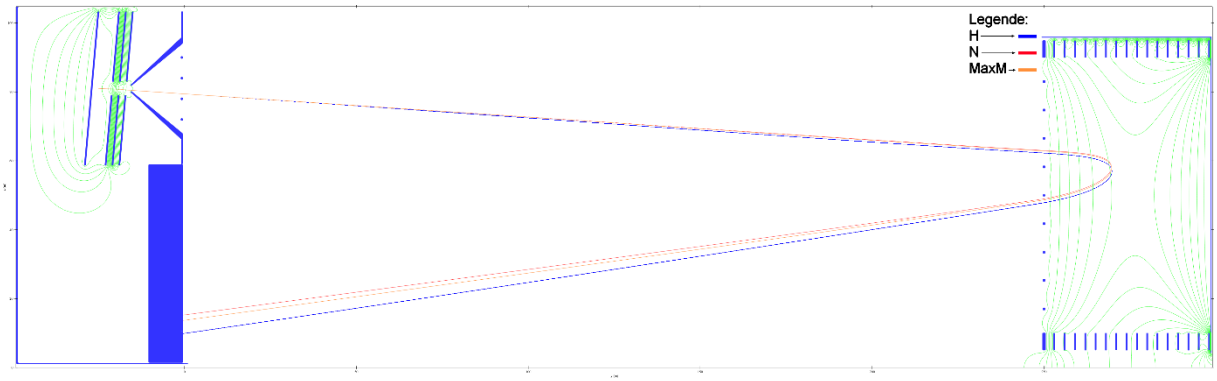


Abbildung 11 Simulation tof-ibsimu 2.0 mit Parametern aus Tabelle 1 mit Stickstoff (Rot), Wasserstoff (Blau), MaxM (Orange).

8. Ausblick

Diese Software wurde geschrieben, um die Entwicklung eines Time-of-flight-Massenspektrometers zu ermöglichen und den in Kapitel 3 gezeigten Aufbau zu optimieren. Um die Forderungen, die in „Kapitel 7 - Ergebnis“ beschrieben wurden, zu erfüllen, müssen die Äquipotentiallinien homogener verlaufen. Mit dem Programm können flexibel und schnell verschiedene Reflektor-Anordnungen simuliert werden, die Spannungsverteilung angepasst werden und die Auswirkung auf die Flugbahn verschiedener Teilchen untersucht werden.

Das Potential der IBSimu Bibliothek wurde noch nicht vollständig ausgeschöpft. Das Simulationsprogramm kann an vielen Stellen noch erweitert und optimiert werden. Für die Automatisierung der Simulation und einer Entwicklung eines Optimierungsalgorithmus wäre es notwendig, dass die Simulationsfunktion am Ende ausgibt, ob das Simulierte Teilchen den Detektor trifft oder nicht. Dies kann über die Rückgabe der Kollisionskoordinate realisiert werden. Weitere Optimierungsmöglichkeiten bestehen bei Werten wie die Ionenstromdichte. Da dieser Wert sich mit der Beschleunigerspannung ändert und diese Spannung eine wichtige Stellschraube bei der Entwicklung ist, sollte die Ionenstromdichte in der Simulation berechnet werden.

Die Analysefunktion

Während der Entwicklung des Simulationsprogrammes wurden die Grundlagen für einen zweiten Programmteil gelegt. Der Analyse-Teil nutz die 3D und 2D Plotter-Funktionen von IBSimu. Hierfür werden die DAT-Dateien, die in der Simulation erzeugt werden, eingelesen. IBSimu gibt dann die Möglichkeit 2D-Plotts der Potentialverteilung, der Feldstärke und der Teilchenenergie an selbst gewählten Punkten zu erstellen. Dieser Teil implementiert eine wissenschaftliche Analyse des Time-of-flight-Massenspektrometers.

Literaturverzeichnis

Jordan TOF Products, INC. (2021, 10 27). TOF Fundamentals Tutorial. 999 Golden Gate Terrace, Grass Valley, CA 95945, CA, USA.

Kalvas, T. (2013). Development and use of Computational Tools for Modelling Negativ Hydrogen Ion Source Extraction Systems. Jyväskylä: Department of Physics Universität of Jyväskylä.

Kalvas, T. (2022, 05 24). IBSimu Epot. Retrieved from EpotSolver Class Referenceabstract: http://ibsimu.sourceforge.net/manual_1_0_6/classEpotSolver.html

Kalvas, T. (2022, 05 24). IBSimu Geom. Retrieved from Geometry Class Reference - set_boundary: http://ibsimu.sourceforge.net/manual_1_0_6/classGeometry.html

Lietz, O. (2022). Masterprojekt - Time of Flight Massenspektrometer Simulation mit C++ Library IBSimu. Göttingen.

Meeker, D. (2022, 05 26). Finite Element Method Magnetics. Retrieved from FEMM 4.2 Electrostatics Tutorial: https://www.femm.info/wiki/ElectrostaticsTutorial

T. Kalvas, O. T. (2010). IBSIMU: A three-dimensional simulation software for charged particle optics. Finnland/USA: REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS.

Vlasov, A. A. (1938). On Vibration Properties of Electron Gas. J. Exp. Theor. Phys.

Volkmar, C. (2015). Selbstkonsistente numerische 1D/3D Hybridmodellierung von Radiofrequenz-Ionentriebwerken. Dissertation, Justus-Liebig-Universität Gießen, I. Physikalisches Institut, Braunfels. Retrieved November 01, 2019, from http://geb.uni-giessen.de/geb/volltexte/2015/11611/

Weißgerber, W. (2015). Elektrotechnik für Ingenieure 1. Wiesbaden: Springer Vieweg.

Anhang:

Poisson-Herleitung[17]

In case of linear problem (no plasma model), the Poisson equation

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{17}$$

is

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{18}$$

in 1D, which is discretized into

$$\phi_{i-1} + \phi_{i+1} - 2\phi_i = -h^2 \frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{19}$$

using finite differences. In 2D coordinates the discretized form is

$$\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1} - 4\phi_{i,j} = -h^2 \frac{\rho_{i,j}}{\varepsilon_0} \tag{20}$$

and in 3D it is

$$\phi_{i-1,j,k} + \phi_{i+1,j,k} + \phi_{i,j-1,k} + \phi_{i,j+1,k} + \phi_{i,j,k-1} + \phi_{i,j,k+1} - 6\phi_{i,j,k} = -h^2 \frac{\rho_{i,j,k}}{\varepsilon_0} \tag{21}$$

In cylindrical coordinates the Poisson equation is

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{22}$$

where $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} = 0$ because of cylindrical symmetry of the simulations. Therefore, the discretized form becomes

$$\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + \left(1 - \frac{h}{2r_j}\right)\phi_{i,j-1} + \left(1 + \frac{h}{2r_j}\right)\phi_{i,j+1} - 4\phi_{i,j} = -h^2 \frac{\rho_{i,j}}{\varepsilon_0} \tag{23}$$

where $\frac{h}{2r_j} = \frac{h}{2jh} = \frac{1}{2j}$ because the radius $r_j = hj$. At the symmetry axis there is an exception because both r and $\frac{\partial \phi}{\partial r}$ approach zero. By using Bernoulli-L'Hospital rule we can evaluate

$$\lim_{r \to 0} \frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r} = \lim_{r \to 0} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \tag{24}$$

which turns the Poisson equation to

$$2\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{25}$$

on axis. Discretion of the equation gives us

$$\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + 2\phi_{i,j+1} + 2\phi_{i,j-1} - 6\phi_{i,j} = -h^2 \frac{\rho_{i,j}}{\varepsilon_0} \tag{26}$$

Here $\phi_{i,j+1} = \phi_{i,j-1}$ so that the final form is

$$\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + 4\phi_{i,j+1} - 6\phi_{i,j} = -h^2 \frac{\rho_{i,j}}{\varepsilon_0} \tag{27}$$

[17] (Kalvas T. , IBSimu Epot, 2022)

In addition to the Poisson equation the problem matrix and vector also contain finite difference representations of the boundary conditions. The Dirichlet boundary condition is defined by constant potential at boundary, i.e., $\phi_{i,j} = \phi_{const}$. The Neumann boundary condition can be defined as first order discretation

$$\frac{\boldsymbol{\phi_{i+1} - \phi_i}}{\boldsymbol{h}} = \boldsymbol{N_{const}} \tag{28}$$

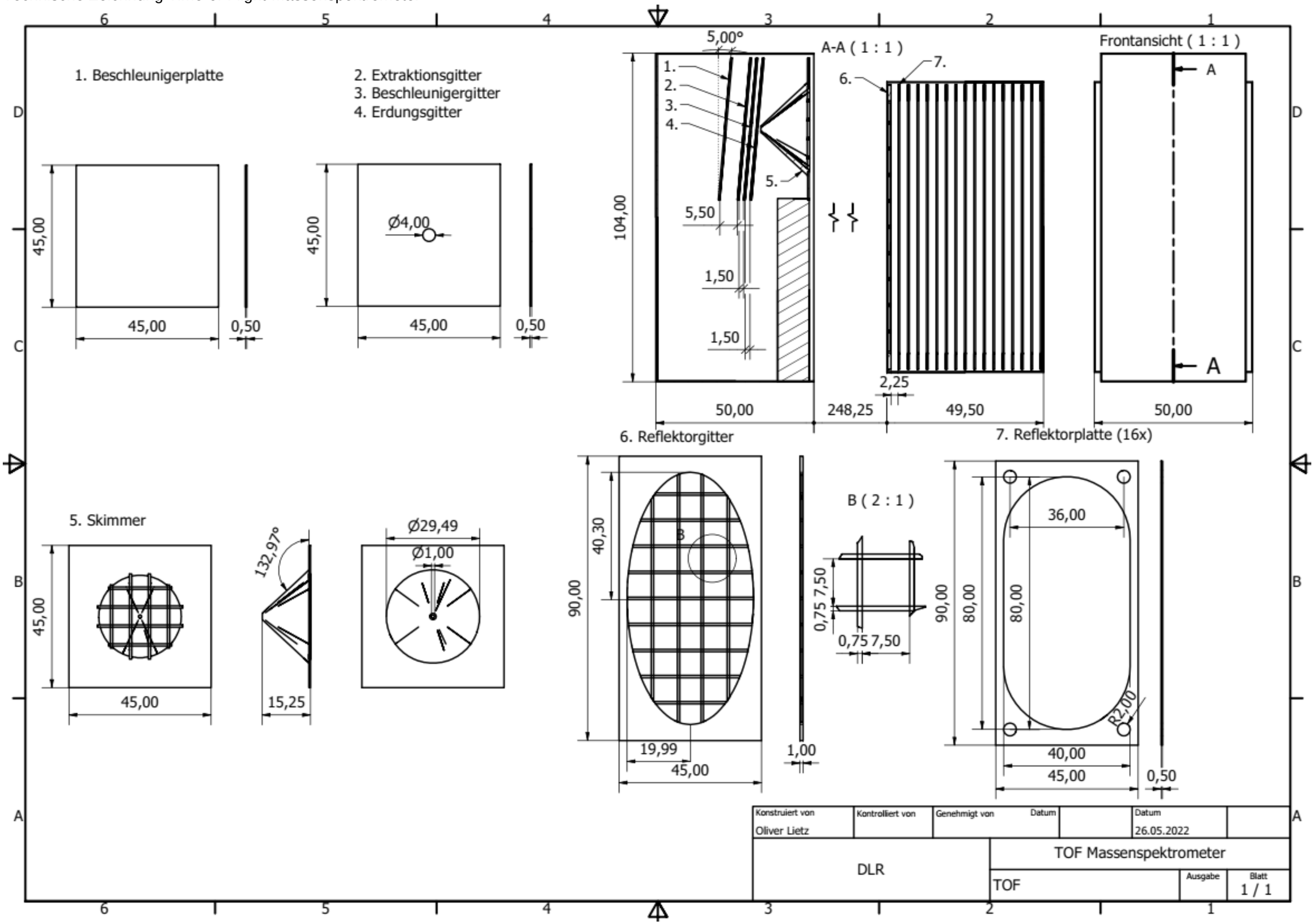
or second order discretation

$$\frac{\boldsymbol{-\phi_{i+2} + 4\phi_{i+1} - \phi_i}}{\boldsymbol{2h}} = \boldsymbol{N_{const}} \tag{29}$$

selected by the user.

The plasma problems are described by using nonlinear models for screening charges in the plasma. For positive ion extraction for example, the screening charge is an electron population at the plasma potential ϕ_p with a thermal energy distribution with temperature T_e. The screening charge is therefore

$$\boldsymbol{\rho_e = \rho_{e0}\, e^{\frac{\phi - \phi_p}{\frac{kT_e}{e}}}} \tag{30}$$

where electron charge density at plasma potential (ρ_{e0}) is the same as the total positive beam space charge density for enabling plasma neutrality.

Technische Zeichnung Time-of-Flight-Massenspektrometer