

03

Модель метода спектрометрии нелинейного дрейфа ионов для газоанализаторов с цилиндрической геометрией дрейф-камеры

© А.А. Елистратов, С.В. Шибков

Институт криптографии, связи и информатики, Москва
E-mail: elist@fssr.ru

Поступило в Редакцию 23 июля 2003 г.

Построена модель метода спектрометрии нелинейного дрейфа ионов, используемого в современных газоанализаторах. Установлено, что в случае цилиндрической геометрии дрейф-камеры газоанализатора появление пика на ионограмме соответствует возникновению предельного цикла в пространстве траекторий динамической системы. Теоретически рассчитан экспериментально наблюдаемый эффект фокусировки ионного пучка. Для кусочно-постоянного вида временной зависимости разделяющего напряжения и простейшей модели нелинейной подвижности приведен вид ионограммы, а также аналитическое выражение для компенсирующего напряжения как функции разделяющего.

Газоанализаторы, работающие по методу спектрометрии нелинейного дрейфа ионов (СНДИ), активно используются в настоящее время для поиска взрывчатых, наркотических и отравляющих веществ [1–7]. В данной работе, в рамках обоснованной в [8] модели, рассмотрен принцип разделения ионов для СНДИ-газоанализаторов с цилиндрической геометрией дрейф-камеры.

Схема СНДИ-газоанализатора приведена в работах [1–5]. Рассмотрим прибор, имеющий следующие параметры дрейф-камеры: цилиндрический конденсатор длиной l , с радиусом внутренней обкладки — r_1 , внешней — r_2 . К обкладкам приложено напряжение, которое является суммой высокого асимметричного разделяющего напряжения $U_S(t)$ с периодом T и малого компенсирующего напряжения U_C , обладающих следующими свойствами: $\int_0^T U_S(t) dt = 0$, $\int_0^T U_S^{2n+1}(t) dt \neq 0$, $n = 1, 2, 3, \dots$,

$U_C \ll U_0 = \max_{0 < t < T} U_S(t)$. Через зазор дрейф-камеры прокачивается проба воздуха, содержащая ионы детектируемого газа.

При параметрах движения ионов и нейтрального газа-носителя, реализующихся в большинстве современных СНДИ-газоанализаторов, поперечный дрейф ионов описывается уравнением:

$$\frac{dr}{dt} = k(E)E(r, t), \quad (1)$$

являющимся, по сути, уравнением движения отдельного иона в вязкой среде. Здесь r — расстояние иона от оси дрейф-камеры, $E(r, t)$ — напряженность электрического поля в зазоре, $k(E)$ — полевая зависимость подвижности иона в газе, которая может быть представлена в виде $k(E) = k(0)(1 + \alpha(E))$, где $k(0)$ — подвижность в пределе нулевого поля, $\alpha(E)$ — нелинейная часть подвижности. Последовательное теоретическое обоснование такого подхода в пренебрежении влиянием диффузии и объемного заряда ионов дано в работе [8]. В дальнейших рассуждениях удобно перейти от величины r к безразмерной координате $x = (r/r_2)^2$.

Уравнение (1) является примером неавтономной динамической системы, для анализ которой обычно используется цилиндрическое фазовое многообразие (рис. 1), возникающее при отождествлении точек координатного пространства, соответствующих началу и концу каждого периода [9]. Область поверхности цилиндра, двигаясь внутри которой ионы не касаются обкладок дрейф-камеры (т.е. их траектории $x(t)$ лежат в области, заключенной между $x_{1sw}(t)$ и $x_{2sw}(t)$ (см. рис. 1)), с нулевой точностью по $\alpha(E)$ представляет собой кольцо. Его точная форма определяется форм-фактором разделяющего напряжения $U_S(t)$. Сечение этого кольца, соответствующее некоторой фазе (для определенности возьмем $\varphi = 0$), назовем окном выживания. Траектория отдельной частицы на цилиндрическом многообразии представляет собой незамкнутую обмотку, причем величина смещения частицы за период $\Delta x_T(x_0, U_{C0}) = x_T(x_0, U_{C0}) - x_0$ зависит от положения частицы в начале периода x_0 (здесь введено безразмерное компенсирующее напряжение $U_{C0} = U_C/U_0$). Зависимость $\Delta x_T(x_0, U_{C0})$, являющуюся по существу разностью используемой в теории динамических систем [9] функции последования и начальной координаты, в дальнейшем для краткости будем называть функцией последования. Она может иметь корень x_0^* : $\Delta x_T(x_0^*, U_{C0}) = 0$, что соответствует выполнению условия

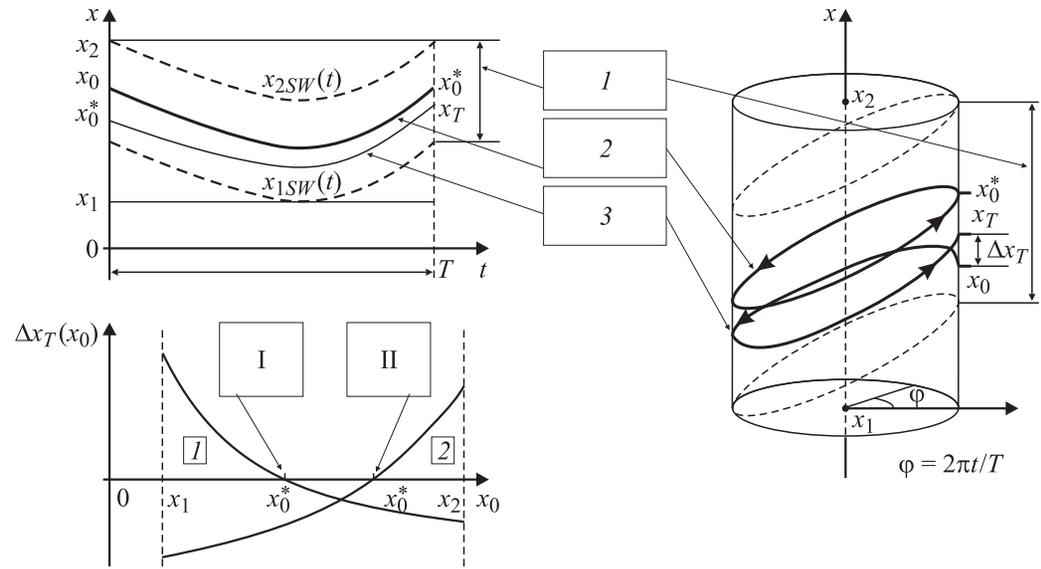


Рис. 1. Траектории ионов в зазоре дрейф-камеры. Цилиндрическое фазовое многообразие. Функции последования, соответствующие режиму фокусировки [1] и расфокусировки [2]. 1 — окно выживания; 2 — предельный цикл; 3 — траектория иона; I — предельный устойчивый цикл; II — предельный неустойчивый цикл.

отбора в случае плоской геометрии дрейф-камеры [8]. Введем параметр

$$\eta = \left. \frac{\partial(\Delta x_T(x_0, U_{C0}))}{\partial x_0} \right|_{x_0=x_0^*}, \quad (2)$$

который назовем интенсивностью фокусировки. Замкнутая траектория, проходящая через точку x_0^* , является предельным циклом динамической системы — устойчивым при $\eta < 0$ и неустойчивым при $\eta > 0$. Если осуществляется устойчивый предельный цикл, то траектории частиц, наматываясь на цилиндр, все сильнее прижимаются к предельному циклу, т.е. происходит фокусировка ионного шнура. В случае неустойчивого предельного цикла траектории, наоборот, разбегаются к обкладкам дрейф-камеры, что при возрастании числа периодов приводит к увеличению доли ионов, рекомбинирующих на стенках (и соответственно к убыванию пика на ионограмме).

Приведем в качестве примера аналитическое решение, полученное методом осреднения быстрых вращений, для случая полевой зависимости подвижности простейшего вида $k(E) = k(0) \times (1 + \beta(E/E_{\max})^2)$, где E_{\max} — масштаб напряженности поля, начиная с которого подвижность существенно нелинейна, и кусочно-постоянного напряжения $U(\tau) = U_0 g(\tau)$, где $g(\tau) = \{(1 + U_{C0}), 0 < \tau < \tau_1; (-\tau_1/(1 - \tau_1) + U_{C0}), \tau_1 < \tau < 1\}$, $\tau = t/T$ и τ_1 — безразмерное время и момент переключения полярности напряжения соответственно, $E_0 = U_0/(r_2 \ln(r_2/r_1))$ — характерная величина напряженности поля в зазоре. В результате интегрирования уравнения (1) с точностью до членов, линейных по β , получаем:

$$\Delta x_T(x_0, U_{C0}) = 2cU_{C0} + \beta_1 \theta \ln \left(1 + \frac{2c\tau_1}{x_0} \right), \quad (3)$$

где использованы следующие обозначения: $c = k(0)E_0T/r_2$, $\beta_1 = \beta(E_0/E_{\max})^2$, $\theta = (1/\tau_1) \int_0^1 (U_S(\tau)/U_0)^3 d\tau = (1 - 2\tau_1)/(1 - \tau_1)^2$.

Равенство $\Delta x_T(x_0^*, U_{C0}) = 0$ определяет неявно зависимость положения предельного цикла от величины компенсирующего напряжения. Решая уравнение, полученное из (3) с учетом последнего равенства, получим искомую зависимость

$$x_0^*(U_{C0}) = \frac{2c\tau_1}{\exp\left\{-\frac{2cU_{C0}}{\beta_1\theta}\right\} - 1}, \quad (4)$$

которую назовем траекторией предельного цикла в пространстве параметров динамической системы. Примеры траекторий предельных циклов для ионов различных знаков с сублинейным (при $\beta_1 < 0$) и суперлинейным (при $\beta_1 > 0$) характером подвижности изображены на рис. 2. Отметим, что, например, в случае $0 < \tau_1 < 0.5$ для отрицательных ионов ($c < 0$) явление фокусировки (устойчивый предельный цикл) наблюдается только при сублинейном ($\beta_1 < 0$) характере подвижности, пик на ионограмме при этом находится в области положительных компенсирующих напряжений ($U_{C0} > 0$).

Используя выражения (2), (3), (4), для интенсивности фокусировки, имеем:

$$\eta = -\frac{2\beta_1\theta}{c\tau_1}sh^2\left(\frac{cU_{C0}}{\beta_1\theta}\right). \quad (5)$$

При изменении U_{C0} предельный цикл „движется“ по траектории, пересекая окно выживания. При этом на ионограмме наблюдается пик (рис. 2). В случае устойчивого предельного цикла верхняя часть пика, соответствующая положению предельного цикла внутри окна выживания, представляет собой плато, так как все ионы, траектории которых проходят через окно выживания, в независимости от положения предельного цикла (а значит, и от величины U_{C0}) фокусируются в его окрестности.

Значения компенсирующего напряжения U_1 и U_2 , ограничивающие верхнюю часть пика, получаем с использованием выражения (4):

$$U_1 = -\frac{\beta_1\theta}{2c} \ln\left(1 + \frac{2c\tau_1}{x_1}\right),$$

$$U_2 = \frac{\beta_1\theta}{2c} \ln\left(1 - \frac{2c\tau_1}{x_2}\right), \quad (6)$$

где $x_1 = r_1^2/r_2^2$, $x_2 = 1$.

Мы не приводим здесь выражения, описывающие форму пика, по причине их громоздкости. Отметим только, что с уменьшением расхода воздуха (т.е. с увеличением времени нахождения ионов в дрейф-камере) у пика, соответствующего устойчивому предельному циклу, происходит укручение склонов при неизменной высоте плато, а пик, соответствующий неустойчивому предельному циклу, постепенно сходит на нет.

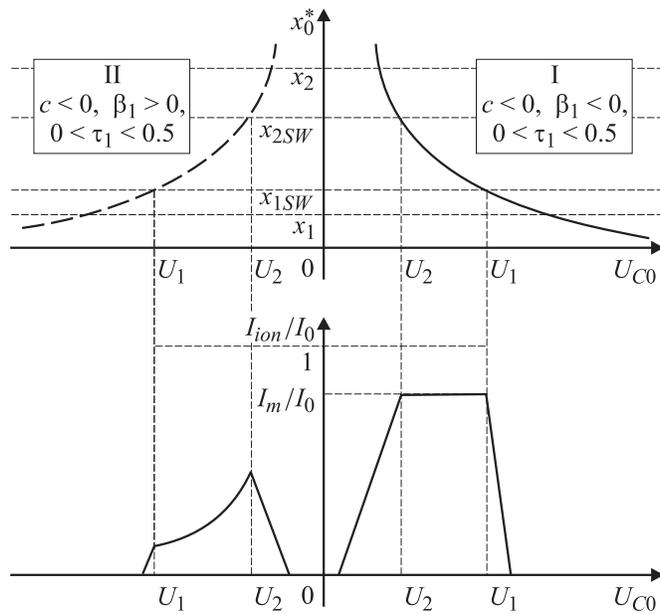


Рис. 2. Зависимость положения устойчивого I и неустойчивого II предельного цикла от величины компенсирующего напряжения. Вид соответствующих пиков на ионограмме.

Как видно из (4) и (5), в случае $c < 0, 0 < \tau_1 < 0.5, \beta_1 < 0$ при $U_{C0} \rightarrow \infty, x_0^* \rightarrow -2c\tau_1$ и $\eta < 0$, таким образом, при $-2c\tau_1 \in [x_1, x_2]$ будет происходить „зависание“ устойчивого предельного цикла в окне выживания. При этом на эксперименте должно наблюдаться практически равномерное засвечивание всего дрейф-спектра.

При $-2c\tau_1 > x_2$ траектория предельного цикла не попадает в окно выживания ни при каком значении U_{C0} , т.е. ионы данного типа не могут быть зарегистрированы дрейф-камерой с соответствующими параметрами.

Мы оставляем до подробной публикации обсуждение влияния немонотонности нелинейной подвижности на поведение предельного цикла.

Зависимость компенсирующего напряжения, которое соответствует местоположению пика данного вещества на ионограмме, от максималь-

ного значения приложенного к обкладкам дрейф-камеры разделяющего напряжения является наиболее часто измеряемой в эксперименте [2,3,6]. Определяя U_C/U_0 как $(U_1 + U_2)/2$ и воспользовавшись (6), получаем аналитическое выражение данной зависимости

$$U_C(U_0) = AU_0^2 \left\{ B + \ln \left(\frac{C + U_0}{D - U_0} \right) \right\}, \quad (7)$$

где $A = -\beta\theta/(2E_{\max}^2 k(0)TB)$, $B = 2 \ln(r_2/r_1)$, $C = r_1^2 B / (\tau_1 k(0)T)$, $D = C(r_2/r_1)^2$. В пределе $U_0 \rightarrow 0$ из (7) с логарифмической точностью имеем $U_C(U_0) \sim U_0^2$, что вполне согласуется с результатами экспериментов, приведенными в работах [2,3,6]. При $r_1, r_2 \rightarrow \infty$, так что $d = (r_2 - r_1)$ — конечная величина, выражение (7) дает $U_C(U_0) \sim U_0^3$, что совпадает с теоретическими расчетами для плоской геометрии дрейф-камеры [8].

В заключение отметим, что данная модель может использоваться в качестве методологической основы при анализе работы и проектировании СНДИ-газоанализаторов с цилиндрической геометрией дрейф-камеры.

Список литературы

- [1] Буряков И.А., Крылов Е.В., Макась А.Л. и др. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 12. С. 60–65.
- [2] Буряков И.А., Крылов Е.В., Макась А.Л. и др. // ЖАХ. 1993. Т. 48. В. 1. С. 156–165.
- [3] Буряков И.А., Коломиец Ю.Н., Луппу В.Б. // ЖАХ. 2001. Т. 56. В. 4. С. 381–385.
- [4] Kudryavtsev A.V., Makas A.L. // Proc. of 10th Int. Conf. on IMS. Germany. 2001. V. 4. N 2. P. 117–120.
- [5] Nasarov E.G., Miller R.A., Eiceman G.A. et al. // Proc. of 10th Int. Conf. on IMS. Germany. 2001. V. 4. N 2. P. 43–46.
- [6] Буряков И.А. // ЖТФ. 2002. Т. 72. В. 11. С. 109–113.
- [7] Банных О.А., Поварова К.Б., Капустин В.И. // ЖТФ. 2002. Т. 72. В. 12. С. 88–93.
- [8] Елистратов А.А., Шибков С.В. // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. В. 2. С. 88–94.
- [9] Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И. и др. / Теория бифуркаций динамических систем на плоскости. М.: Наука, 1967. 488 с