



Der Einfluß der Ionisator-Geometrie auf die Signalkalibrierung eines Massenspektrometers

Tobias Krähling

AG Reaktive Plasmen, Ruhr-Universität Bochum

Seminar »Angewandte Plasmaphysik«
11. Dezember 2008



Übersicht

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- 1 Motivation
- 2 Quantitative Messung mittels Massenspektrometrie
 - Massenspektrometrie
 - Kopplung Plasma-Massenspektrometer
 - Hintergrunddichte
- 3 Modell
- 4 Implementierung
- 5 Simulation
 - Aufbau
 - Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$
 - Variation des Exponenten der Kosinus-Verteilung
 - Variation der Plasma-Temperatur
 - Veränderung der Ionisator-Durchlässigkeit
- 6 Fazit



Motivation

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Quantitative Analytik der Bestandteile eines reaktiven Plasmas wichtig für das Verständnis der Reaktionskinetik
- Massenspektrometrie geeignete Diagnostik zur Teilchendichtebestimmung
- Kalibrierung des Detektorsignals notwendig
- Systematische Fehler bei der Kalibrierung beeinflussen Teilchendichtebestimmung



Motivation

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Quantitative Analytik der Bestandteile eines reaktiven Plasmas wichtig für das Verständnis der Reaktionskinetik
- Massenspektrometrie geeignete Diagnostik zur Teilchendichtebestimmung
- Kalibrierung des Detektorsignals notwendig
- Systematische Fehler bei der Kalibrierung beeinflussen Teilchendichtebestimmung



Motivation

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

Problem

Messungen von Benedikt et al. (2005) zeigten eine Diskrepanz zwischen gemessenen und erwarteten Teilchendichten von inreaktiven Acetylen um Faktor 2.

These

Reflexionen von C_2H_2 -Molekülen an den Ionisatorwänden führt zu höheren Teilchendichten im Ionisator.

- ⇒ Systematischer Fehler bei der Kalibrierung
- ⇒ Abhängig von der Ionisator-Geometrie

⇒ Verifizierung der These mittels Monte-Carlo-Simulation!



Motivation

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

Problem

Messungen von Benedikt et al. (2005) zeigten eine Diskrepanz zwischen gemessenen und erwarteten Teilchendichten von inreaktiven Acetylen um Faktor 2.

These

Reflexionen von C_2H_2 -Molekülen an den Ionisatorwänden führt zu höheren Teilchendichten im Ionisator.

- ⇒ Systematischer Fehler bei der Kalibrierung
- ⇒ Abhängig von der Ionisator-Geometrie

⇒ Verifizierung der These mittels Monte-Carlo-Simulation!



Allgemeines zur Massenspektrometrie (MS)

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer
Hintergrunddichte

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- **Analyt muß gasförmig sein**
- Ionisation des Analyts
 - EI, CI, Photoionisation...
- Trennung durch elektrische/magnetische Felder nach Masse-zu-Ladungsverhältnis
 - Sektorfeld-MS, QMS, Ion-Trap, ToF-MS...
- Detektion der Analyten
 - Channeltron, SEM, Faraday Cup...
- Massenspektrometer werden unter Vakuum betrieben
 - Mittlere freie Weglänge $\lambda >$ Analysatorabmessungen
 $\Rightarrow p < 1\text{mPa}$





Allgemeines zur Massenspektrometrie (MS)

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer
Hintergrunddichte

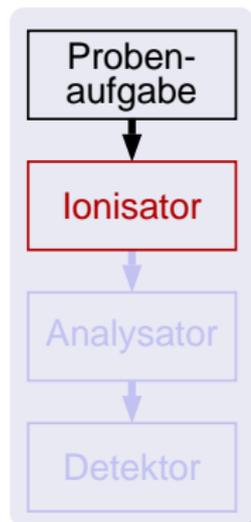
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Analyt muß gasförmig sein
- Ionisation des Analyts
 - EI, CI, Photoionisation...
- Trennung durch elektrische/magnetische Felder nach Masse-zu-Ladungsverhältnis
 - Sektorfeld-MS, QMS, Ion-Trap, ToF-MS...
- Detektion der Analyten
 - Channeltron, SEM, Faraday Cup...
- Massenspektrometer werden unter Vakuum betrieben
 - Mittlere freie Weglänge $\lambda >$ Analysatorabmessungen
 $\Rightarrow p < 1\text{mPa}$





Allgemeines zur Massenspektrometrie (MS)

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer
Hintergrunddichte

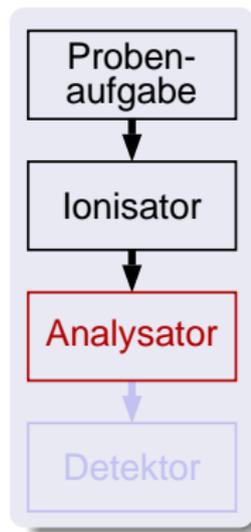
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Analyt muß gasförmig sein
- Ionisation des Analyts
 - EI, CI, Photoionisation...
- Trennung durch elektrische/magnetische Felder nach Masse-zu-Ladungsverhältnis
 - Sektorfeld-MS, QMS, Ion-Trap, ToF-MS...
- Detektion der Analyten
 - Channeltron, SEM, Faraday Cup...
- Massenspektrometer werden unter Vakuum betrieben
 - Mittlere freie Weglänge $\lambda >$ Analysatorabmessungen
 $\Rightarrow p < 1\text{mPa}$





Allgemeines zur Massenspektrometrie (MS)

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer
Hintergrunddichte

Modell

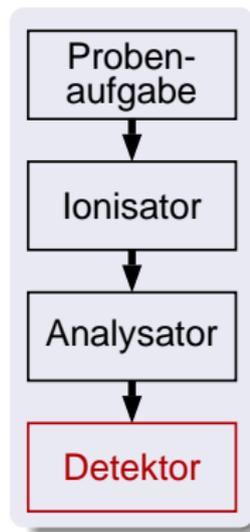
Implementierung

Simulation

Fazit

- Analyt muß gasförmig sein
- Ionisation des Analyts
 - EI, CI, Photoionisation...
- Trennung durch elektrische/magnetische Felder nach Masse-zu-Ladungsverhältnis
 - Sektorfeld-MS, QMS, Ion-Trap, ToF-MS...
- Detektion der Analyten
 - Channeltron, SEM, Faraday Cup...

- Massenspektrometer werden unter Vakuum betrieben
 - Mittlere freie Weglänge $\lambda >$ Analysatorabmessungen
 $\Rightarrow p < 1\text{mPa}$





Allgemeines zur Massenspektrometrie (MS)

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer
Hintergrunddichte

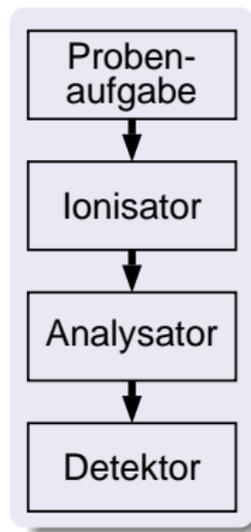
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Analyt muß gasförmig sein
- Ionisation des Analyts
 - EI, CI, Photoionisation...
- Trennung durch elektrische/magnetische Felder nach Masse-zu-Ladungsverhältnis
 - Sektorfeld-MS, QMS, Ion-Trap, ToF-MS...
- Detektion der Analyten
 - Channeltron, SEM, Faraday Cup...



- Massenspektrometer werden unter Vakuum betrieben
 - Mittlere freie Weglänge $\lambda >$ Analysatorabmessungen $\Rightarrow p < 1\text{mPa}$



Allgemeines zur Massenspektrometrie (MS)

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer
Hintergrunddichte

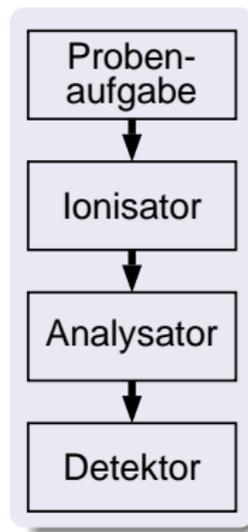
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Analyt muß gasförmig sein
- Ionisation des Analyts
 - EI, CI, Photoionisation...
- Trennung durch elektrische/magnetische Felder nach Masse-zu-Ladungsverhältnis
 - Sektorfeld-MS, QMS, Ion-Trap, ToF-MS...
- Detektion der Analyten
 - Channeltron, SEM, Faraday Cup...
- Massenspektrometer werden unter Vakuum betrieben
 - Mittlere freie Weglänge $\lambda >$ Analysatorabmessungen
⇒ $p < 1\text{mPa}$





Elektronenstoß-Ionisator

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer

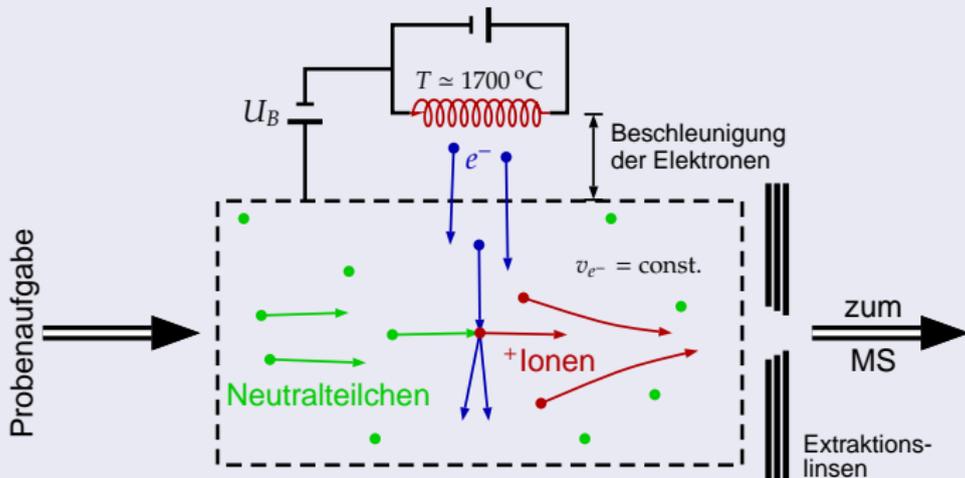
Hintergrundlichte

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit



Signalstärke am Detektor

$$S_i = n_i^{\text{Ionisator}} \cdot \sigma_i(E) \cdot I_{\text{Emission}} \cdot L_{\text{Ionisator}} \cdot \beta \cdot \mathcal{T}(M_i)$$



Quantitative Bestimmung der Teilchendichte

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer

Hintergrunddichte

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Signalkalibrierung mit einem Kalibriergas

$$S_{\text{Kal}} = n_{\text{Kal}}^{\text{lonisator}} \cdot \sigma_{\text{Kal}}(E) \cdot I_{\text{Emission}} \cdot L_{\text{lonisator}} \cdot \beta \cdot \mathcal{T}(M_{\text{Kal}})$$

- Detektorsignal einer Spezies i

$$S_i = n_i^{\text{lonisator}} \cdot \sigma_i(E) \cdot I_{\text{Emission}} \cdot L_{\text{lonisator}} \cdot \beta \cdot \mathcal{T}(M_i)$$

Gleichung für die Teilchendichte

$$n_i^{\text{lonisator}} = n_{\text{Kal}}^{\text{lonisator}} \frac{S_i}{S_{\text{Kal}}} \frac{\sigma_{\text{Kal}}(E)}{\sigma_i(E)}$$



Quantitative Bestimmung der Teilchendichte

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer

Hintergrunddichte

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Signalkalibrierung mit einem Kalibriergas

$$S_{\text{Kal}} = n_{\text{Kal}}^{\text{lonisator}} \cdot \sigma_{\text{Kal}}(E) \cdot I_{\text{Emission}} \cdot L_{\text{lonisator}} \cdot \beta \cdot \mathcal{T}(M_{\text{Kal}})$$

- Detektorsignal einer Spezies i

$$S_i = n_i^{\text{lonisator}} \cdot \sigma_i(E) \cdot I_{\text{Emission}} \cdot L_{\text{lonisator}} \cdot \beta \cdot \mathcal{T}(M_i)$$

Gleichung für die Teilchendichte

$$n_i^{\text{lonisator}} = n_{\text{Kal}}^{\text{lonisator}} \frac{S_i}{S_{\text{Kal}}} \frac{\sigma_{\text{Kal}}(E)}{\sigma_i(E)}$$



Kopplung Plasma-Massenspektrometer

Differentielle Pumpstufe

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-Massenspektrometer

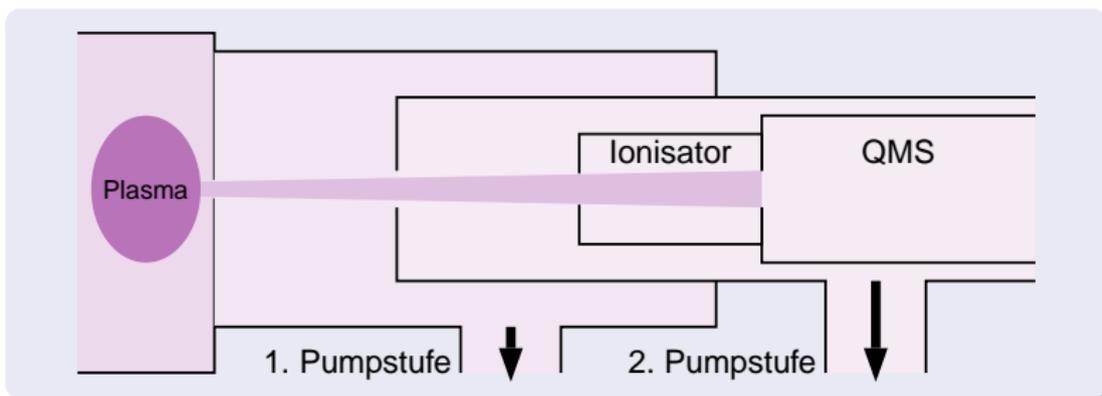
Hintergrunddicke

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit



Strahlteilchendichte

$$n_i^{\text{Strahl}} = \frac{1}{4} \left(\frac{r}{x} \right)^2 n_i^{\text{Plasma}} = K_{\text{Geometrie}}(x) \cdot n_i^{\text{Plasma}}$$

Teilchendichte im Ionisator

$$n_i^{\text{Ionisator}} = n_i^{\text{Strahl}} + n_i^{\text{BG}}$$



Bestimmung der Hintergrunddichte

Verwendung eines Choppers

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-Massenspektrometer

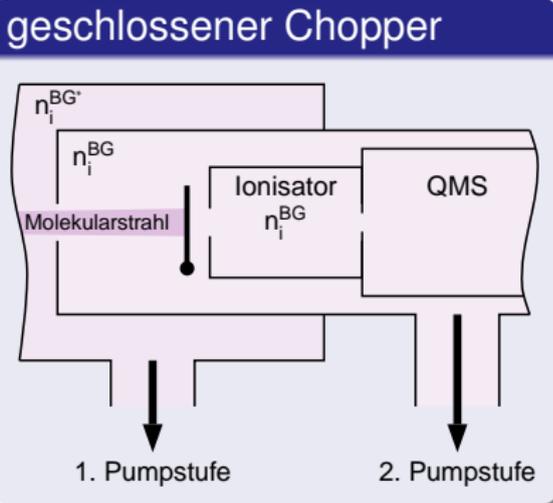
Hintergrunddichte

Modell

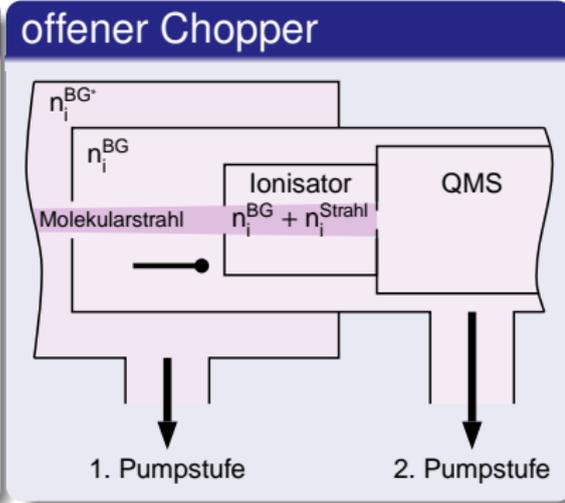
Implementierung

Simulation

Fazit



$$S_i \sim n_i^{BG}$$



$$S_i \sim n_i^{Strahl} + n_i^{BG}$$



Bestimmung der Hintergrunddichte

Problem bei inreaktiven Teilchen

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-

Massenspektrometer

Hintergrunddichte

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- (globale) Hintergrunddichte kann mit Chopper bestimmt werden
- **Aber:** Reflektion von inreaktiven Spezies im Ionisator führt zu zusätzlicher Hintergrunddichte

Dichte im Ionisator

$$n_i^{\text{Ionisator}} = n_i^{\text{Strahl}} + n_i^{\text{BG}}$$

⇒ $n_i^{\text{BG,Reflektion}}$ nicht durch Chopper bestimmbar!



Bestimmung der Hintergrunddichte

Problem bei inreaktiven Teilchen

Motivation

Quantitative MS

Massenspektrometrie

Kopplung Plasma-
Massenspektrometer

Hintergrunddichte

Modell

Implementierung

Simulation

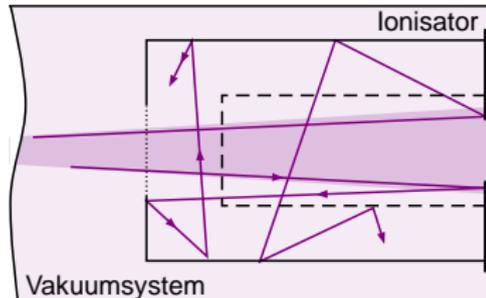
Fazit

- (globale) Hintergrunddichte kann mit Chopper bestimmt werden
- **Aber:** Reflektion von inreaktiven Spezies im Ionisator führt zu zusätzlicher Hintergrunddichte

Dichte im Ionisator

$$n_i^{\text{Ionisator}} = n_i^{\text{Strahl}} + n_i^{\text{BG,global}} + n_i^{\text{BG,Reflektion}}$$

⇒ $n_i^{\text{BG,Reflektion}}$ nicht durch Chopper bestimmbar!





Modell

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

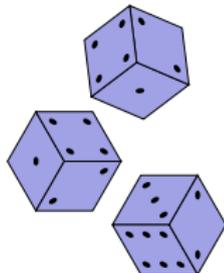
Um den Anteil der Teilchendichte durch Reflektionen zu bestimmen wurde eine Monte-Carlo-Simulation durchgeführt:

- Zufällige Generierung von Teilchen $P(\vec{r}, \vec{v})$
- Verfolgung der Teilcentrajektorien im Ionisator
- Statistik über viele Teilchen

$\Rightarrow n_i^{\text{Ionisator}}, n_i^{\text{Strahl}}, n_i^{\text{BG, reflektiert}}$

wobei

$$n_i^x |_{\Delta V} \sim \sum_P \tau_P |_{\Delta V}$$





Modell

Modellannahmen I

Motivation

Quantitative MS

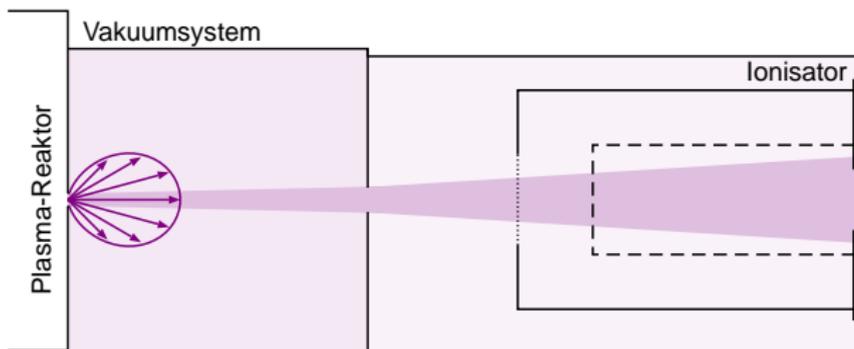
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Teilchenquelle ist nur der Plasma-Reaktor
- isotrope Teilchenverteilung im Molekularstrahl
- MB-Geschwindigkeitsverteilung mit $T_i^{\text{Strahl}} = T_i^{\text{Plasma}}$
- Simuliert werden nur inreaktive, neutrale Teilchen
- kräftefreie, gradlinige Bewegung
- keine Stöße und sonstige Wechselwirkungen zwischen den Teilchen





Modell

Modellannahmen I

Motivation

Quantitative MS

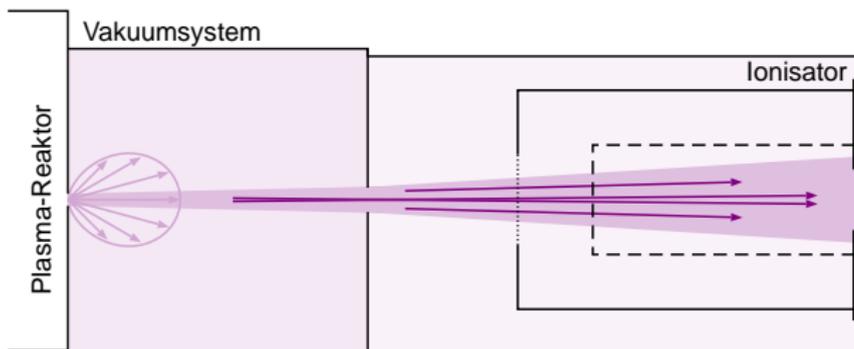
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Teilchenquelle ist nur der Plasma-Reaktor
- isotrope Teilchenverteilung im Molekularstrahl
- MB-Geschwindigkeitsverteilung mit $T_i^{\text{Strahl}} = T_i^{\text{Plasma}}$
- Simuliert werden nur inreaktive, neutrale Teilchen
- kräftefreie, gradlinige Bewegung
- keine Stöße und sonstige Wechselwirkungen zwischen den Teilchen



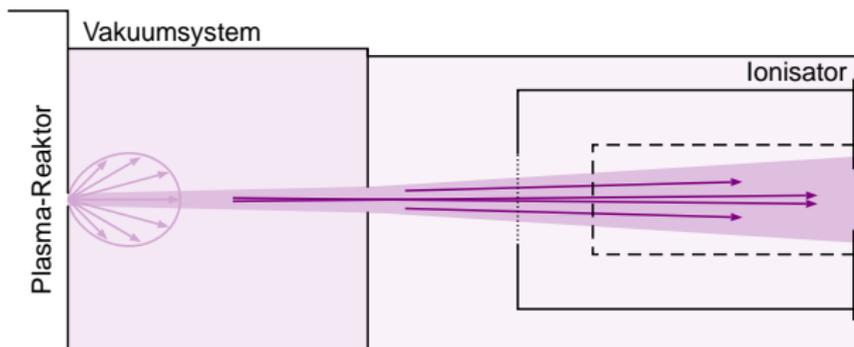


Modell

Modellannahmen II

Motivation
Quantitative MS
Modell
Implementierung
Simulation
Fazit

- $n_i^{BG, global}$ wird nicht berücksichtigt;
- inelastische Stöße mit Ionisatorwänden
 - $T_i^{nach\ Stoß} = T^{Ionisator}$, MB-verteilt
 - Reflektionsrichtung: \cos^n -verteilt
- typische Ionisationsrate $\sim 10^{-6}$
⇒ Ionisation wird vernachlässigt
- Teilchensenke sind die Öffnungen des Ionisators





Modell

Modellannahmen II

Motivation

Quantitative MS

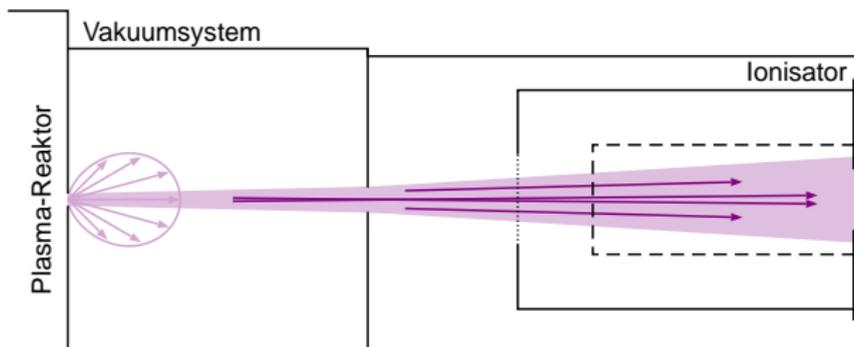
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- $n_i^{\text{BG,global}}$ wird nicht berücksichtigt;
- inelastische Stöße mit Ionisatorwänden
 - $T_i^{\text{nach Stoß}} = T^{\text{Ionisator}}$, MB-verteilt
 - Reflektionsrichtung: \cos^n -verteilt
- typische Ionisationsrate $\sim 10^{-6}$
⇒ Ionisation wird vernachlässigt
- Teilchensenke sind die Öffnungen des Ionisators





Modell

Modellannahmen II

Motivation

Quantitative MS

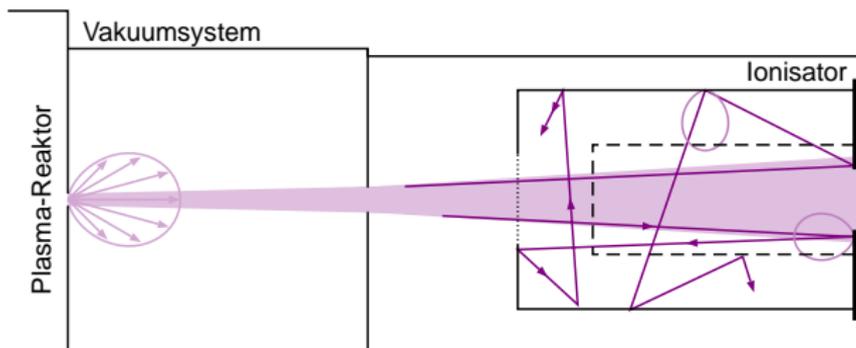
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- $n_i^{\text{BG,global}}$ wird nicht berücksichtigt;
- inelastische Stöße mit Ionisatorwänden
 - $T_i^{\text{nach Stoß}} = T^{\text{Ionisator}}$, MB-verteilt
 - Reflektionsrichtung: \cos^n -verteilt
- typische Ionisationsrate $\sim 10^{-6}$
⇒ Ionisation wird vernachlässigt
- Teilchensenke sind die Öffnungen des Ionisators





Modell

Modellannahmen II

Motivation

Quantitative MS

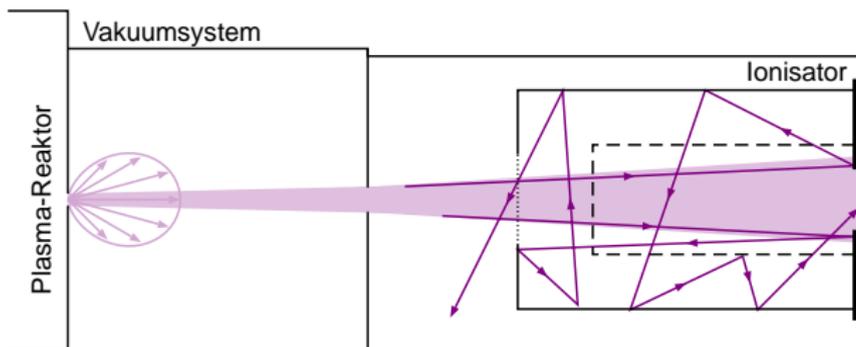
Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- $n_i^{\text{BG,global}}$ wird nicht berücksichtigt;
- inelastische Stöße mit Ionisatorwänden
 - $T_i^{\text{nach Stoß}} = T^{\text{Ionisator}}$, MB-verteilt
 - Reflektionsrichtung: \cos^n -verteilt
- typische Ionisationsrate $\sim 10^{-6}$
 \Rightarrow Ionisation wird vernachlässigt
- Teilchensenke sind die Öffnungen des Ionisators





Implementierung

Anforderungen und Realisierungstechnik

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

Anforderungen

- modularer Aufbau
- leichte Anpassung an andere Geometrien
- parametrisierbar

Realisierungstechnik

- objektorientierte Entwicklung in C++
- Trennung in allgemeinen und spezifischen Anteil
- kommandozeilenorientiert \Rightarrow einfache Automatisierung



Implementierung

Anforderungen und Realisierungstechnik

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

Anforderungen

- modularer Aufbau
- leichte Anpassung an andere Geometrien
- parametrisierbar

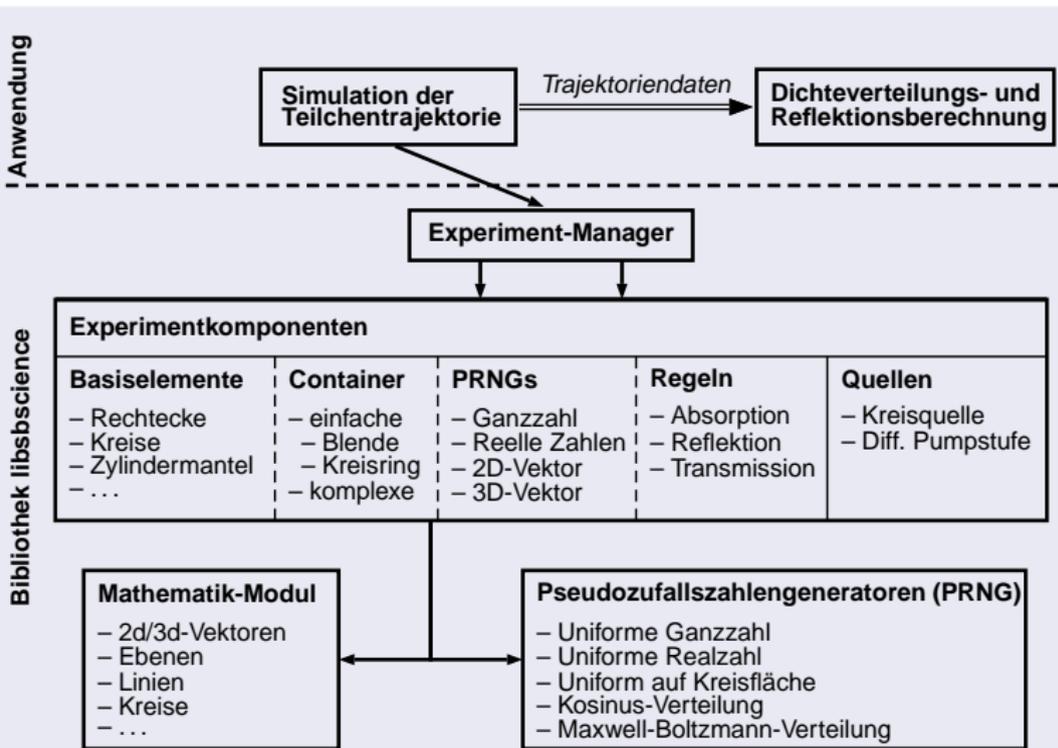
Realisierungstechnik

- objektorientierte Entwicklung in C++
- Trennung in allgemeinen und spezifischen Anteil
- kommandozeilenorientiert \Rightarrow einfache Automatisierung



Implementierung Architektur

- Motivation
- Quantitative MS
- Modell
- Implementierung
- Simulation
- Fazit





RNG mit beliebiger Verteilungsfunktion

Acceptance-Rejection Methode

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

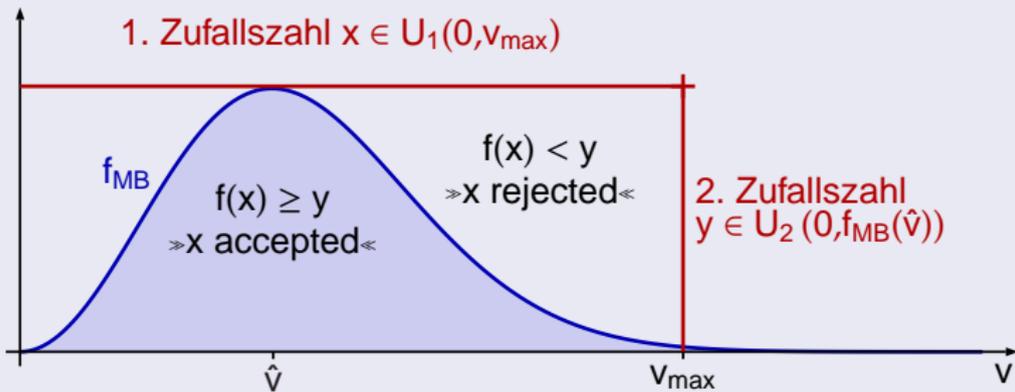
Simulation

Fazit

Wie können uniformen Zufallszahlen in beliebige Verteilungsfunktion transformiert werden?

Eine Möglichkeit: **Acceptance-Rejection Methode**

Beispiel: Maxwell-Boltzmann-Verteilung





Simulationsaufbau

Plasma-Ionisator-Kopplung

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

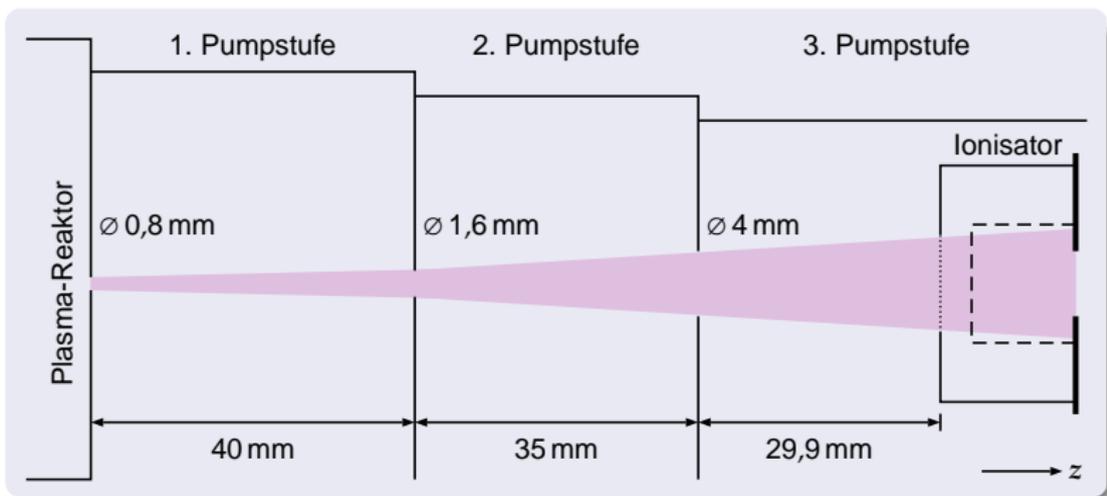
Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit



- max. Öffnungswinkel des Molekularstrahl: $\sim 0,3 \text{ rad}$
- komplette Plasma-Ionisator-Kopplung wurde als Teilchenquelle implementiert
- Durchmesser Molekularstrahl $>$ Austrittsloch Ionisator



Simulationsaufbau Ionisator

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

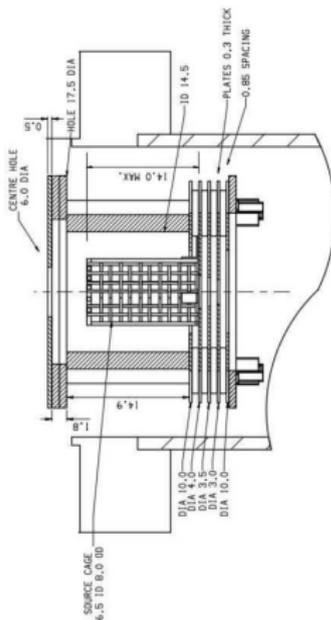
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

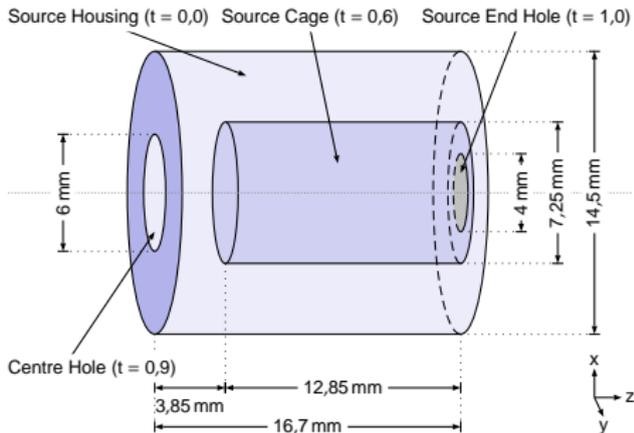
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

HIDEN Ionisator*



Vereinfachte Geometrie



- Vereinfachungen am *Centre Hole*
- Extraktionslinsen nicht berücksichtigt

*HIDEN Analytical Ltd.,
Persönliche Mitteilung 28.08.08



Simulationsaufbau

Parameter und Einstellungen

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

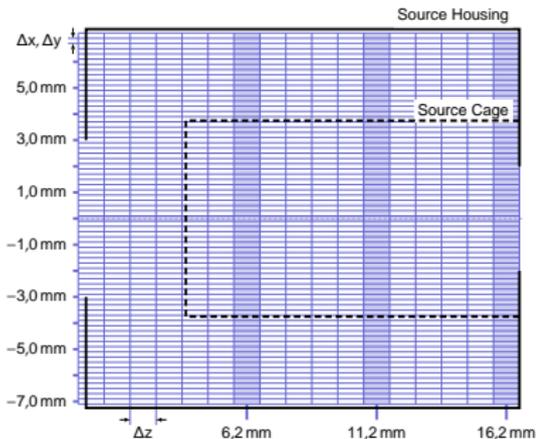
Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

- Ionisator Temperatur
 $T_{\text{Ionisator}} = 298\text{ K}$
- Teilchensorte: Acetylen
($m = 26\text{ u}$)
- 30.000 Teilchen pro Simulation
- Mittelung über 4 Simulationen
- variable Parameter:
 T_{Plasma} , n

Teilchendichtematrix



$$\Delta x = \Delta y = 0,2\text{ mm}$$

$$\Delta z = 1,0\text{ mm}$$



Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Dichteverteilung in y-z-Ebene bei $x = 0$ mm

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

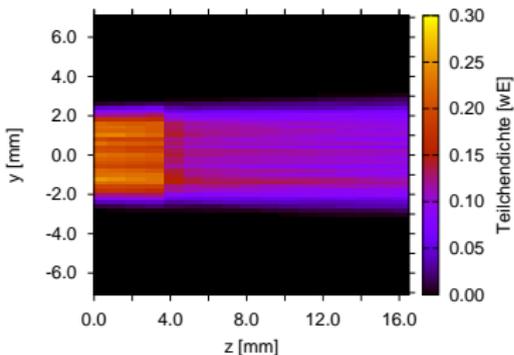
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

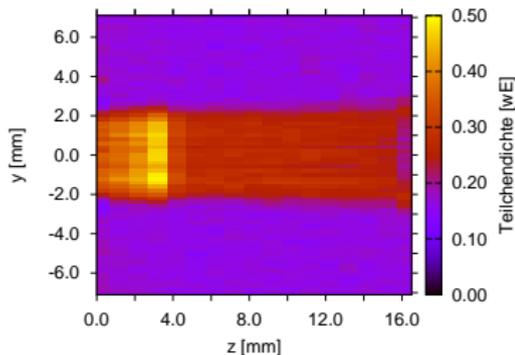
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

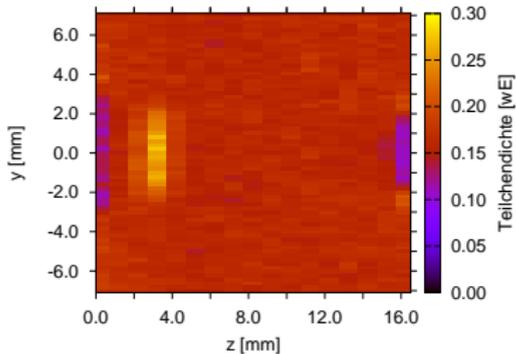
Eingangsstrahlteilchendichte



Gesamteilchendichte



Hintergrundteilchendichte





Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Querschnitt der Dichteverteilung in x-y-Ebene bei $z = 11,2$ mm

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

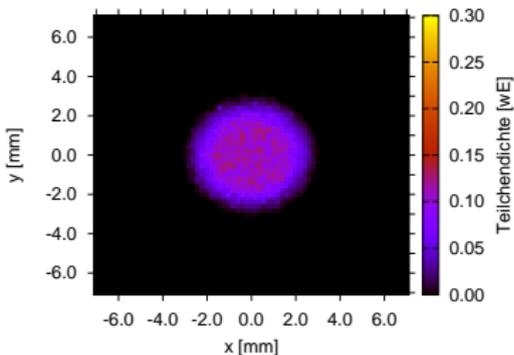
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

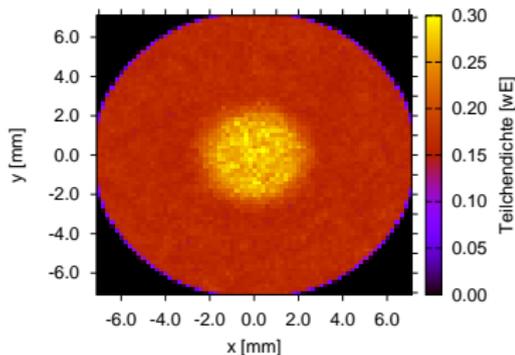
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

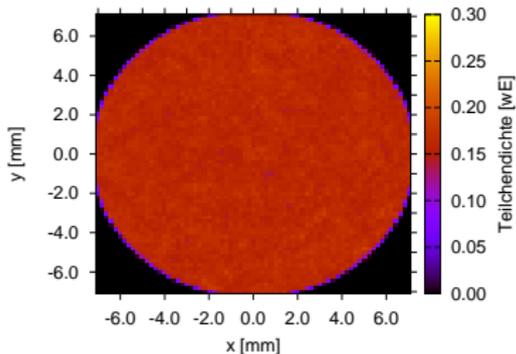
Eingangsstrahlteilchendichte



Gesamtteilchendichte



Hintergrundteilchendichte





Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Querschnitt der Dichteverteilung in x-y-Ebene bei $z = 16,2$ mm

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

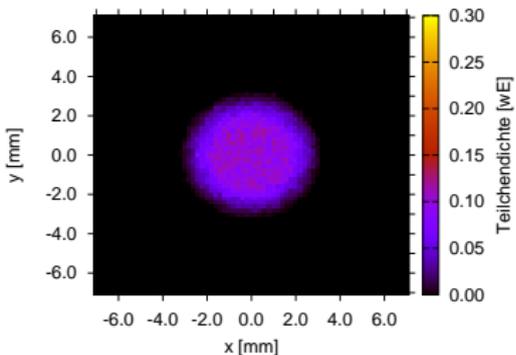
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

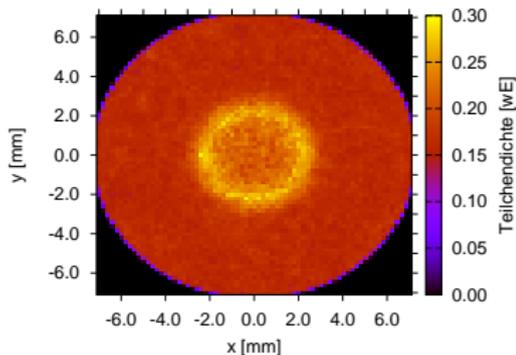
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

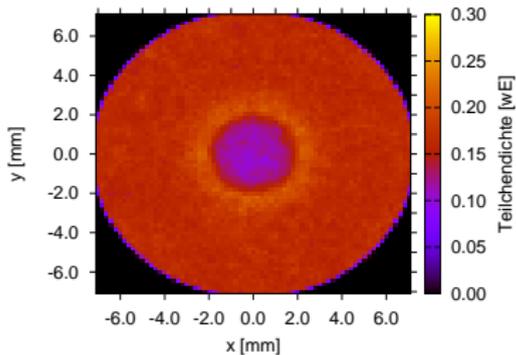
Eingangsstrahlteilchendichte



Gesamtteilchendichte



Hintergrundteilchendichte





Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Dichteprofile in der y -Ebene bei $x = 0$ mm

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

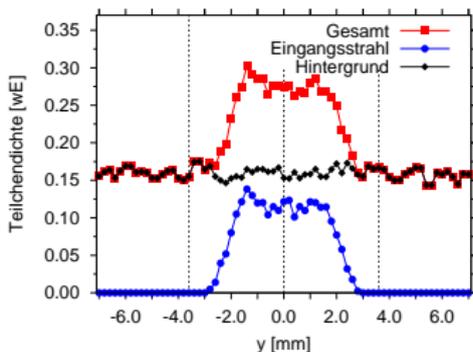
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

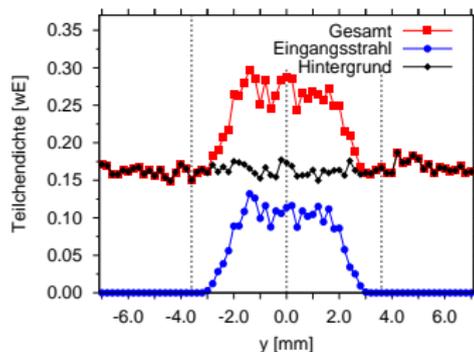
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

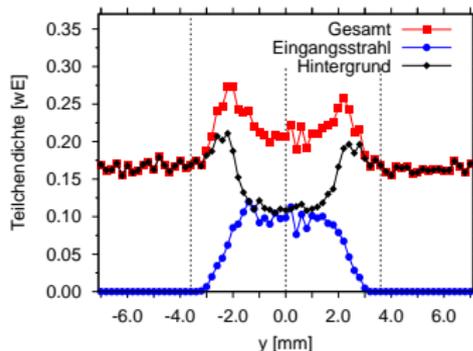
Dichteprofil bei $z=6.2$ mm



Dichteprofil bei $z=11.2$ mm



Dichteprofil bei $z=16.2$ mm





Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Zusammenfassung

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

- Reflektionen führen zu isotropen Hintergrunddichte
- *Source Cage* hat keinen Einfluß auf die Hintergrunddichte
- $S/BG = \frac{n_{\text{Eingangsstrahl}}}{n_{BG}}$
 - $S/BG \simeq 1,0$ am Ionisatorende
 - $S/BG \simeq 0,7$ im Ionisatorinnern

⇒ Teilchendichteerhöhung um min. Faktor 2!



Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Zusammenfassung

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

- Reflektionen führen zu isotropen Hintergrunddichte
- *Source Cage* hat keinen Einfluß auf die Hintergrunddichte
- $S/BG = \frac{n_{\text{Eingangsstrahl}}}{n_{BG}}$
 - $S/BG \simeq 1,0$ am Ionisatorende
 - $S/BG \simeq 0,7$ im Ionisatorinnern

⇒ Teilchendichteerhöhung um min. Faktor 2!



Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Reflektionshäufigkeit

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

Frage: Ist das Modell realistisch?

⇒ Betrachtung der Reflektionshäufigkeitsverteilung

$$\tau_{res} \sim \frac{V}{P}$$
$$P = \frac{1}{4} \bar{v}(T) \cdot A$$

$$p_R(N) \sim \exp\{-N/N_0\}$$

mit charakteristischer Länge

$$N_0 = \frac{\tau_{res} \bar{v}(T)}{2r_{Ionisator}} \simeq 20$$

Modell ist realistisch



Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Reflektionshäufigkeit

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

Frage: Ist das Modell realistisch?

⇒ Betrachtung der Reflektionshäufigkeitsverteilung

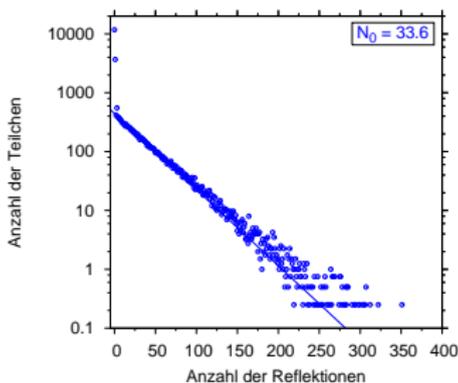
$$\tau_{res} \sim \frac{V}{P}$$

$$P = \frac{1}{4} \bar{v}(T) \cdot A$$

mit charakteristischer Länge

$$N_0 = \frac{\tau_{res} \bar{v}(T)}{2r_{ionisator}} \approx 20$$

$$p_R(N) \sim \exp\{-N/N_0\}$$



Modell ist realistisch



Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Reflektionshäufigkeit

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

Frage: Ist das Modell realistisch?

⇒ Betrachtung der Reflektionshäufigkeitsverteilung

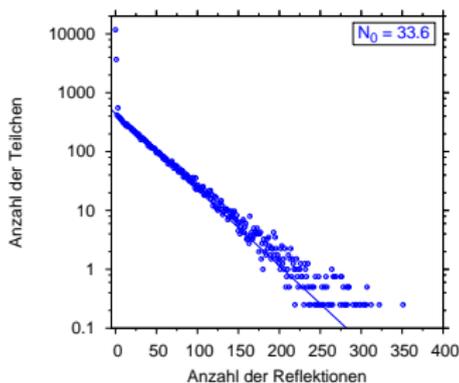
$$\tau_{res} \sim \frac{V}{P}$$

$$P = \frac{1}{4} \bar{v}(T) \cdot A$$

mit charakteristischer Länge

$$N_0 = \frac{\tau_{res} \bar{v}(T)}{2r_{Ionisator}} \simeq 20$$

$$p_R(N) \sim \exp\{-N/N_0\}$$



Modell ist realistisch



Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$

Reflektionshäufigkeit

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

Frage: Ist das Modell realistisch?

⇒ Betrachtung der Reflektionshäufigkeitsverteilung

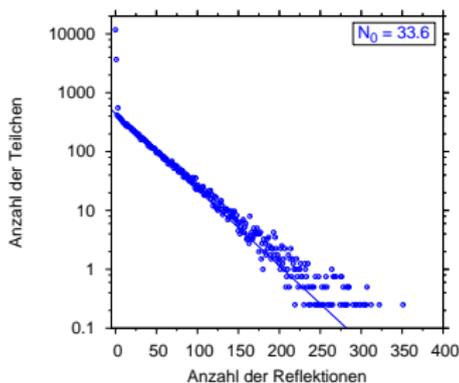
$$\tau_{res} \sim \frac{V}{P}$$

$$P = \frac{1}{4} \bar{v}(T) \cdot A$$

mit charakteristischer Länge

$$N_0 = \frac{\tau_{res} \bar{v}(T)}{2r_{Ionisator}} \simeq 20$$

$$p_R(N) \sim \exp\{-N/N_0\}$$



Modell ist realistisch



Simulation mit $T = 300K$, n variabel

Dichteprofile innerhalb des Ionisators ($z = 11,2\text{ mm}$)

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K$, $n = 1$

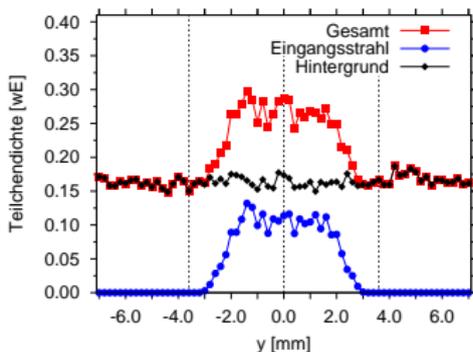
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

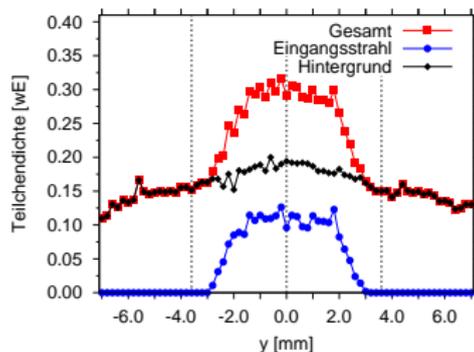
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

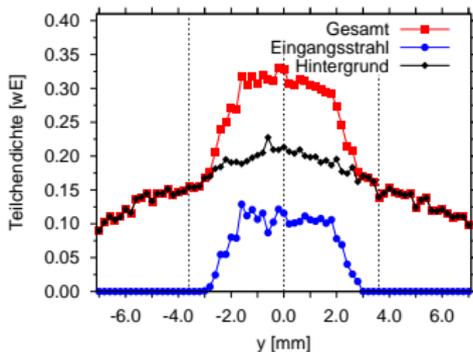
Dichteprofil bei $n=1$



Dichteprofil bei $n=2$



Dichteprofil bei $n=3$



bei höherem n

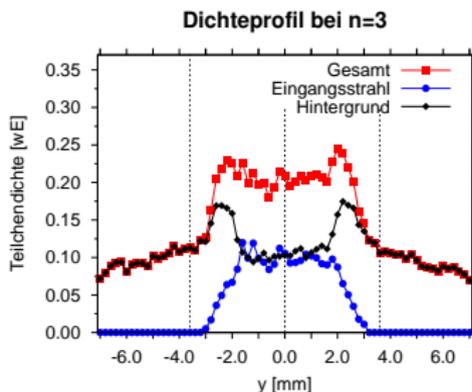
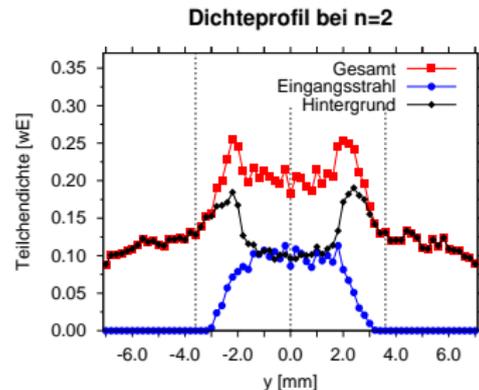
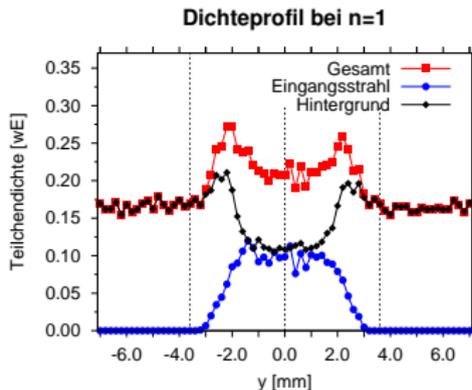
- Fokussierung zur Ionisatormitte
- leichte Verschlechterung von S/BG



Simulation mit $T = 300K$, n variabel

Dichteprojile am Ionisatorende ($z = 16,2$ mm)

- Motivation
- Quantitative MS
- Modell
- Implementierung
- Simulation
 - Aufbau
 - Simulation mit $T = 300K$, $n = 1$
 - Variation des Exponenten der Kosinus-Verteilung
 - Variation der Plasma-Temperatur
 - Veränderung der Ionisator-Durchlässigkeit
- Fazit



- keine Veränderung von S/BG
- n üblicherweise 1 – 2 (Scharfenort 2007)



Simulation mit $n = 1$, T variabel

Signal-zu-Hintergrundverhältnis

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

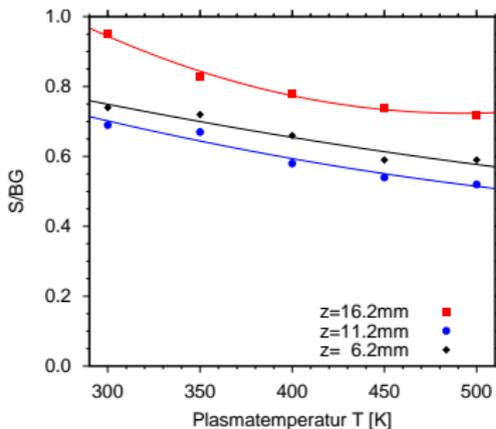
Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit



- S/BG sinkt nur leicht bei steigendem T_{Plasma}
- Erklärbar, da T_{Plasma} nur die Geschwindigkeit im Eingangsstrahl beeinflusst

⇒ Plasmatemperatur hat nur geringen Einfluß auf S/BG



Welche Möglichkeit zur Optimierung gibt es?

Veränderung der Ionisator-Durchlässigkeit

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

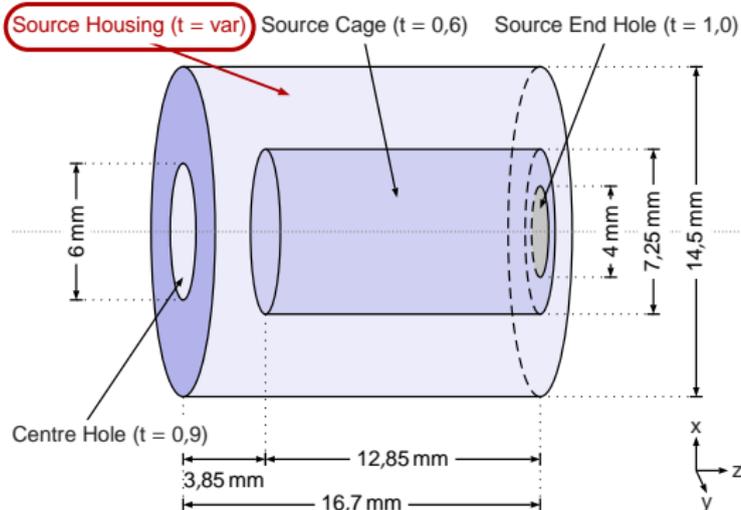
Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit



- Ersetzung des Source Housing Mantels durch Gitter
- ⇒ Variation der Gitterdurchlässigkeit t
- $n = 1$, $T = 300\text{K}$ konstant gehalten



Veränderung der Ionisator-Durchlässigkeit

Dichtepprofile in der y -Ebene bei $x = 0$ mm

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300K, n = 1$

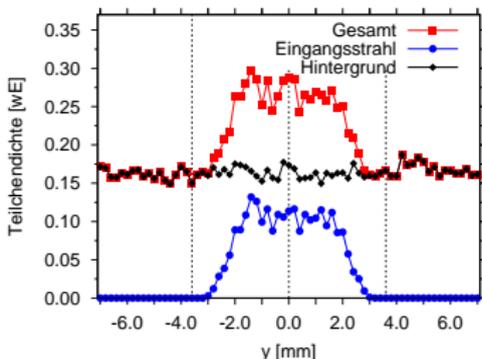
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

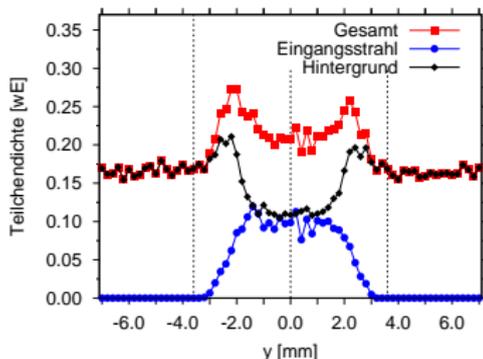
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

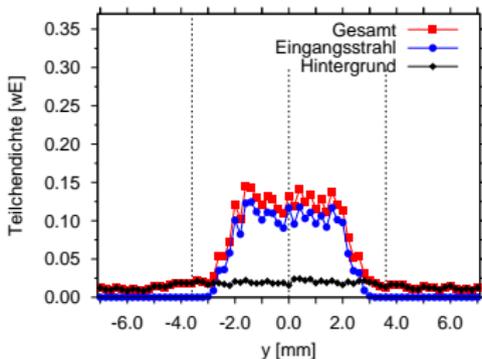
Dichteprofil bei $z=11.2$ mm und $t=0.0$



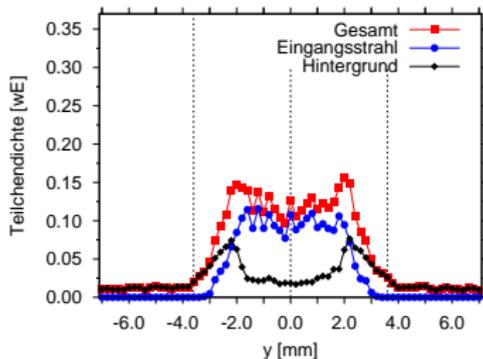
Dichteprofil bei $z=16.2$ mm und $t=0.0$



Dichteprofil bei $z=11.2$ mm und $t=0.4$



Dichteprofil bei $z=16.2$ mm und $t=0.4$





Veränderung der Ionisator-Durchlässigkeit S/BG in Abhängigkeit der Durchlässigkeit des *Source Housing*-Mantels

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

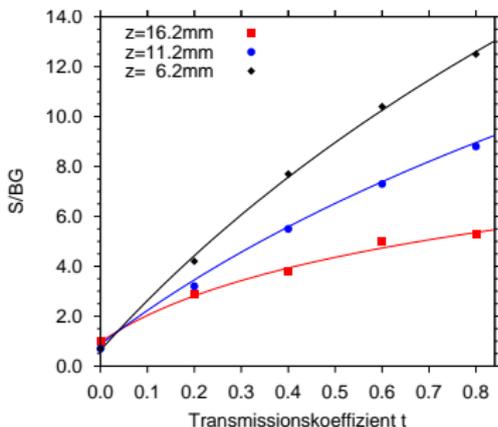
Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit



- $t(\nearrow) \Rightarrow S/BG(\nearrow)$
- bereits bei $t = 0,2$ Verbesserung von S/BG um Faktor 3

Durchlässigkeit des Ionisator-Mantels hat erheblichen
Einfluß auf das S/BG -Verhältnis!

\Rightarrow Durchlässigkeit bietet Optimierungspotenzial



Veränderung der Ionisator-Durchlässigkeit S/BG in Abhängigkeit der Durchlässigkeit des *Source Housing*-Mantels

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

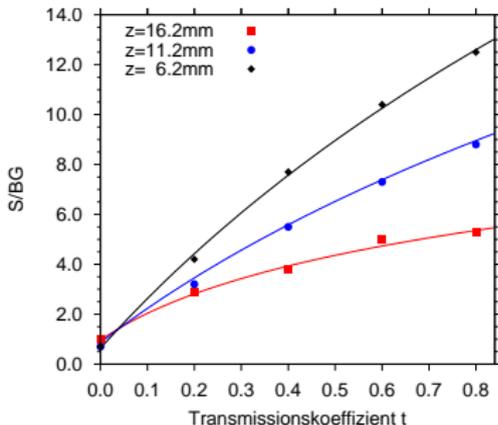
Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit



- $t(\nearrow) \Rightarrow S/BG(\nearrow)$
- bereits bei $t = 0,2$ Verbesserung von S/BG um Faktor 3

Durchlässigkeit des Ionisator-Mantels hat erheblichen Einfluß auf das S/BG -Verhältnis!

⇒ Durchlässigkeit bietet Optimierungspotenzial



Veränderung der Ionisator-Geometrie

Häufigkeitsverteilung der Reflektionsanzahl

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Aufbau

Simulation mit
 $T = 300\text{K}$, $n = 1$

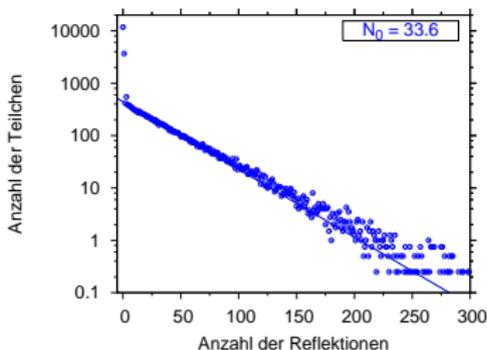
Variation des
Exponenten der
Kosinus-Verteilung

Variation der
Plasma-Temperatur

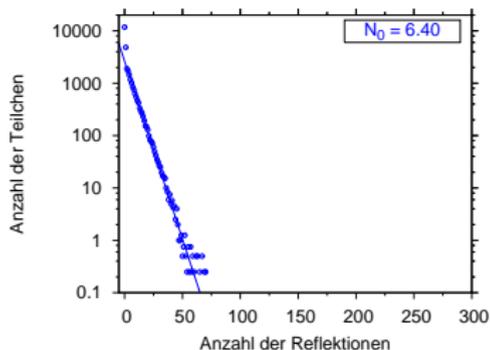
Veränderung der
Ionisator-Durchlässigkeit

Fazit

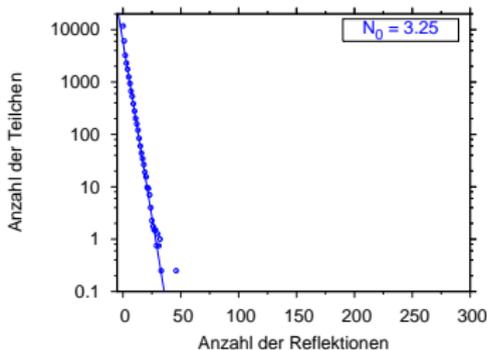
Reflektionsverteilung bei $t=0.0$



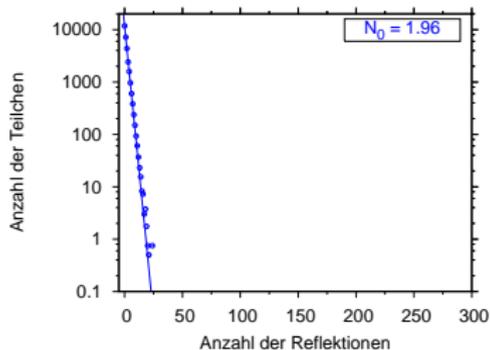
Reflektionsverteilung bei $t=0.2$



Reflektionsverteilung bei $t=0.4$



Reflektionsverteilung bei $t=0.6$





Fazit

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Reflektionen von inreaktiven Teilchen erhöhen signifikant die Teilchendichte im Ionisator
- Plasmatemperatur und Exponent der Kosinusverteilung haben nur geringen Einfluß auf die Teilchendichte
- Zusätzliche Hintergrunddichte \gtrsim Strahldichte
 - ⇒ Faktor 2 in Messungen von Benedikt et al. kann hierdurch erklärt werden
- Erhöhung der Durchlässigkeit des Ionisators verbessert S/BG wesentlich (> 3)



Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit



Literatur

Motivation

Quantitative MS

Modell

Implementierung

Simulation

Fazit

- Benedikt et al. Threshold ionization mass spectrometry of reactive species in remote Ar/C₂H₂ expanding thermal plasma. Journal of Vacuum Science & Technology A, 23(5):1400-1412, 2005
- Benedikt et al. Detailed TIMS Study of Ar/C₂H₂ Expanding thermal Plasma: Identification of a-C:H Film Growth Precursors. Journal of Physical Chemistry A, 109:10153-10167, 2005
- Feres und Yablonsky. Knudsen's cosine law and random billiards. Chemical Engineering Science, 59(7):1541-1556,2004
- Greenwood. The correct and incorrect generation of a cosine distribution of scattered particles for Monte-Carlo modelling of vacuum systems. Vacuum, 67(2):217-222, 2002.
- Press et al. Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, 1992
- Scharfenort. Schwefelsäure-Grenzflächen im Temperaturbereich von 210 bis 240 K. Experimentelle Entwicklung und Anwendung. Dissertation, Universität Duisburg-Essen, 2007.
- Singh et al. Mass spectrometric detection of reactive neutral species: Beam-to-background ratio. Journal of Vacuum Science & Technology A, 17:2447-2455, 1999