



Országos Szilárd Leó Fizikaverseny Döntő 2022.

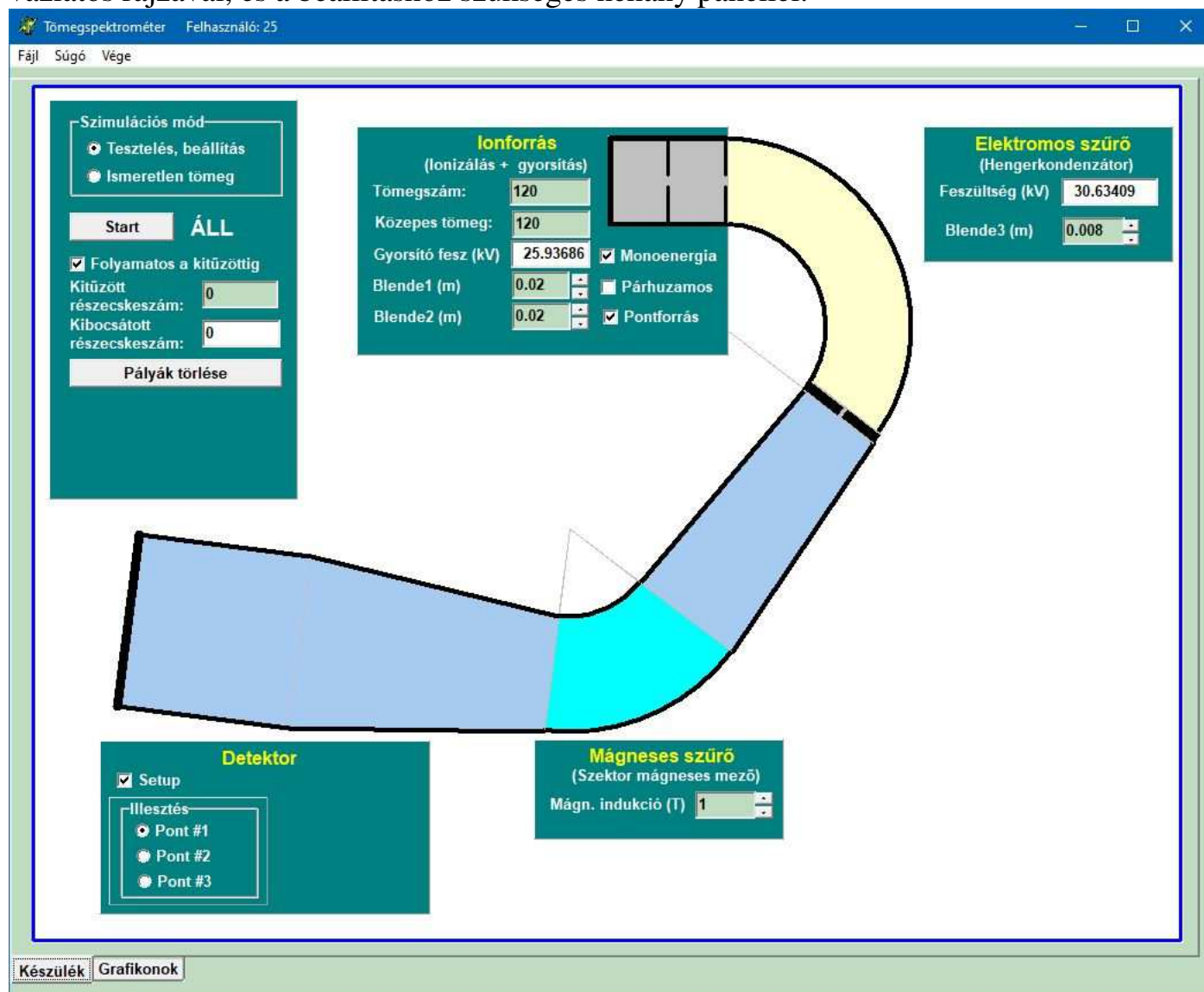
Számítógépes szimulációs feladat

Program kezelési útmutató



Tömegspektrométer modellezése

A program indítása (és bejelentkezés) után a **Készülék** képét látjuk, rajta a tömegspektrométer vázlatos rajzával, és a beállításhoz szükséges néhány panellel.



A tömegspektrométer a képernyőn lévő, furcsa alakú eszköz, amely arra szolgál, hogy egy részecskenyalában lévő különböző tömegű részecskéket szétválassza, és lehetővé tegye nemcsak a tömegek meghatározását, hanem azt is, hogy az egyes komponensek milyen arányban (hány százalékban) vannak jelen a nyalábban. J. J. Thomson óta tudjuk, hogy ionok töltés/tömeg (q/m) hányadosát kombinált elektromos és mágneses mezőben való eltérítéssel lehet meghatározni. Az elv roppant egyszerű, ám a gyakorlati megvalósítás során több nehézséggel is meg kell küzdeni. A konkrét megvalósításra vonatkozólag nagyon sokféle megoldás született.

Az eszköz egyes elemeit különböző színekkel jelöltük a jobb felismerhetőség érdekében. Az ablak tetején lévő, szürkére festett téglalap alakú rész az **ionforrás**, a halványsárga körcikk alakú rész egy elektrosztatikus **hengerkondenzátor**. A két világoskék rész neve: **driftcső**, a türkiz színű, szektor alakú rész pedig az **eltérítő mágnes**. Ezeknek a funkcióit az alábbiakban vázlatosan ismertetjük.

Ionforrás

Ahhoz, hogy a vizsgálandó részecskenyalábban lévő részecskéket tömeg szerint szétválaszthassuk, először ionizálni kell, és valamekkora sebességre fel kell gyorsítani őket, hogy aztán elektromos és mágneses mezőkkel manipulálhassuk őket. Az ionforrás egyszeres pozitív töltésű ionokat állít elő, amelyeket egy, a **Gyorsító feszültségre** kapcsolt elektróda felgyorsít. Az ionforrás mellett lévő mezőben látjuk a gyorsító feszültség értékét. Ennek beállítása automatikusan történik (ld. később), ezen kézzel nem változtathatunk.

Gyakorlati nehézségek:

- Az ionforrásból kilépő nyaláb részecskéinek az energiáját egyéb hatások is befolyásolják (pl. hőmozgás, feszültség-stabilitás stb.), ezért a nyaláb energiájának mindenképpen van egy szórása. Ez azért probléma, mert a különböző energiájú részecskék különböző pályákat futnak be. Az energiaszórás hatásának vizsgálata érdekében a szimuláció lehetővé teszi, hogy ezt az energiaszórást kikapcsoljuk. Erre szolgál a **Monoenergia** nevű jelölő.
- A második nehézség az, hogy az ionforrás nem pontszerű, azaz az ionforrás kilépő ablakának különböző helyeiről kilépő részecskék is különböző pályát futnak be. A **Pontforrás** nevű jelölővel ez a zavaró hatás a szimulációban kikapcsolható.
- Harmadsorban, a kilépő részecskék iránya sem mind azonos, a nyalábnak van bizonyos széttartása (mint a zuhanyból kijövő víz sugárnak), és a széttartó részecskék is más és más pályán haladnak. A **Párhuzamos** nevű jelölővel ez a zavaró hatás is kikapcsolható.

Ezek a kikapcsolási lehetőségek csak a tömegspektrométer működésének a jobb megértése érdekében vannak a szimulációban. Egy valóságos készülékben ezeket természetesen nem lehet kikapcsolni. Amikor az ismeretlen összetételű mintát kell majd mérni, ezek a kikapcsolási lehetőségek nem működnek – azaz az eszköz egy valóságos tömegspektrométert szimulál.

Akkor tudnánk tömegek szerint jól válogatni, ha mindezek a hatások nem befolyásolnák azt, hogy a részecskék hova csapódnak be. Ennek a megvalósítására (vagy legalábbis megközelítésére) tesznek kísérletet a különböző típusú tömegspektrométerek. A szimulált eszköz egy úgynevezett Bainbridge-Jordan típusú tömegspektrométer.

Blendék

Az ionforrásból a felgyorsított nyaláb egy két **blendéből** álló rendszeren tud kilépni. Ezzel tudjuk valamennyire befolyásolni (megszüntetni nem) a fent felsorolt második és harmadik problémát. A blendéket kézzel állíthatjuk 5 mm és 100 mm között. A blendék szerepe kettős: egyrészt a kilépő blende szabja meg a kilépő nyaláb „vastagságát” (minél nagyobb a blende, annál vastagabb nyaláb lép ki), másrészt a két blende együttesen szabja meg a kilépő nyaláb „széttartását”. Ha mindkét blende nagyon szűk, akkor a nyaláb csak kicsit széttartó, ha mindkét blende tág, akkor pedig a nyaláb a leginkább széttartó.

Még az ionforrásnál adhatjuk meg a teszt-nyaláb tömegét is (atomi tömegegységben). Itt nem egész számokat is megadhatunk! A **Közepes tömeghez** állítja be a spektrométer a paramétereket (automatikusan) úgy, hogy ezek a részecskék a spektrométer középvonala mentén haladjanak (ha nincs sem energiaszórás, sem nyalábvastagság, sem nyaláb-széttartás). A **Tömegszám** mutatja azt a tömeget, ami az ionforrásból éppen kijön. A spektrométer detektorát (ld. lentebb) kalibrálni kell, azaz meg kell majd határozni, hogy egy adott beállításnál a különböző tömegű részek hova érkeznek. A közepes tömeggel tudjuk a beállítást létrehozni, és a tömegszámmal tudjuk megnézni, hogy az adott beállítás mellett a különböző tömegszámú részecskék hova érkeznek a céltárgyra.

Hengerkondenzátor

A hengerkondenzátorban elektromos erőter görbíti be a részecskék pályáját. A hengerkondenzátor elektromos erőterét a rákapcsolt feszültséggel lehet befolyásolni. Ezt a feszültséget mutatja a **Feszültség (kV)** kijelző. Az ionforrás gyorsító-feszültségéhez hasonlóan, ezt a feszültséget sem állíthatjuk közvetlenül; ezt is a tömegspektrométer automatikája határozza meg. A hengerkondenzátor kilépő pontján is van egy blende (**Blende3**), amelynek a szélességét, valamint a **Helyzetét** is változtathatjuk.

Driftcső

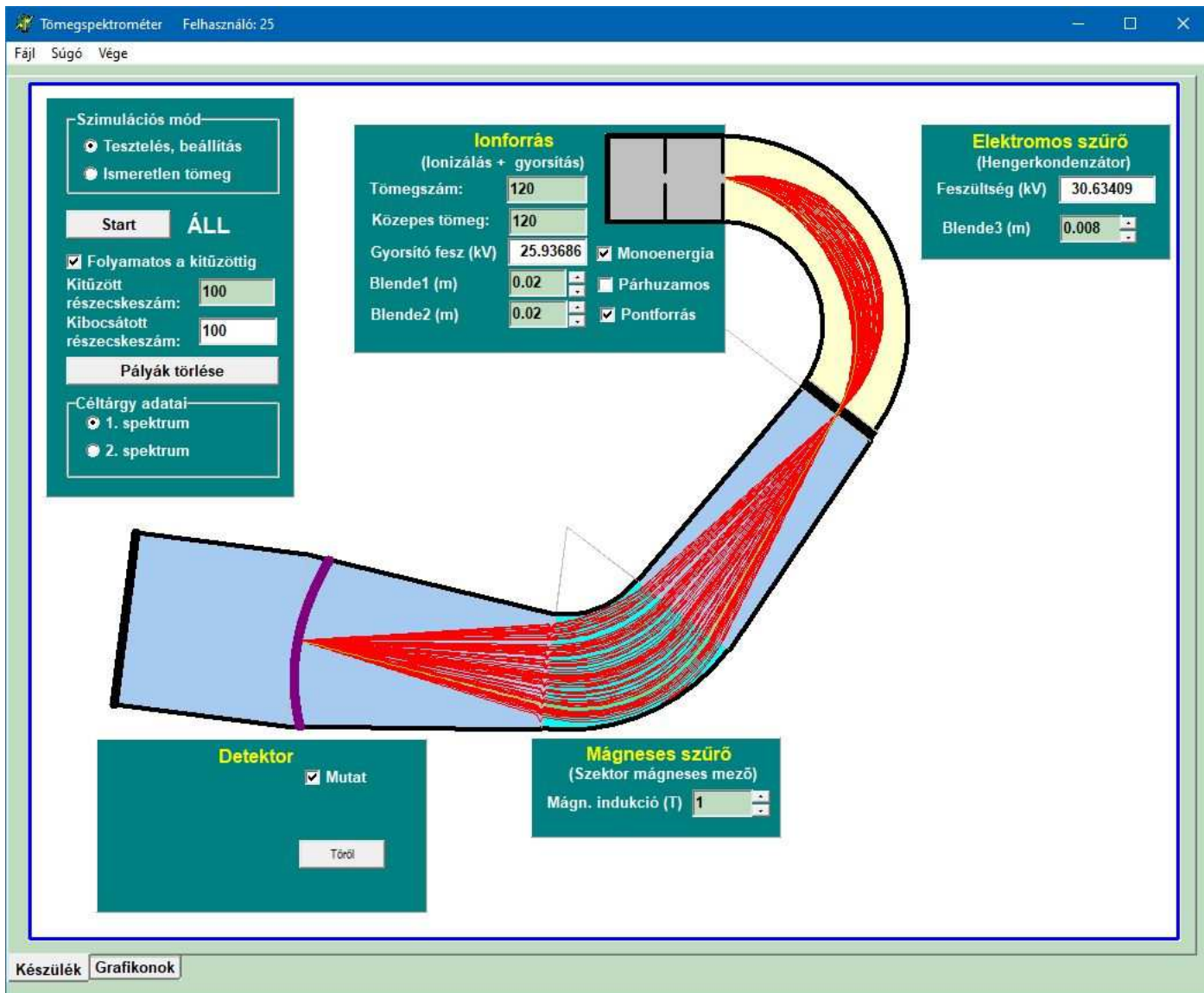
Tulajdonképpen egy üres cső, amelyben haladó nyalábra semmilyen erőter nem hat. A részecskék egyenes vonalú egyenletes mozgást végeznek benne.

Mágneses szűrő (eltérítő mágnes)

Az eltérítő mágnes homogén mágneses mezejében haladó részecskékre a mágneses Lorentz-erő hat, aminek hatására körpályán kezdenek mozogni. Itt egyetlen dolgot állíthatunk: a mágneses térerősséget. Ezt viszont időnként állítanunk kell, mivel a közepes tömeg és a mágneses térerősség alapján „állítja be” az eszköz az ionforrásban lévő gyorsító feszültséget, valamint a hengerkondenzátor feszültségét. Minthogy azonban ezek – műszaki okoknál fogva – csak bizonyos határok között (min: 1 kV, max: 120 kV) változtathatók, ezért előfordulhat olyan tömeg-mágneses tér kombináció, ahol a beállításához szükséges feszültség kívül esne ezen a határon. Ilyenkor a hibás mezők színe pirosra vált. A mágneses tér változtatásával kell a megfelelő beállítási határon belül tartani az értékeket.

Detektor

A detektor tulajdonképpen egy olyan eszköz (régebben fényképező lemez, újabban elektronikus érzékelő), amely érzékeli a rá becsapódó nyalábrészecskéket. A bekapcsolás után még *nincs* detektor a készülékben, hiszen nem tudjuk, hogy pontosan hova kellene tenni. Tehát ha elindítjuk a szimulációt, a nyaláb végigmegy az egész készüléken. Az egyik feladatunk a detektor optimális helyzetének (és alakjának) a meghatározása lesz. Erre szolgál a **Detektor** nevű beállító panel. A **Setup** három pontja segítségével három pontot tudunk majd elhelyezni az utolsó driftcsőben. Ha a **Setup** be van kapcsolva, akkor az egér kurzora alakot vált, amikor az utolsó driftcsőre visszük, és így pontokat tudunk kijelölni. A harmadik pont kijelölése után a program másodfokú görbét illeszt erre a három pontra, és kirajzolja. Ha **Elfogadjuk** a kirajzolt görbét, akkor a kijelzett detektort el is helyezi a készülékben. Ha nem vagyunk vele megelégedve, lehetőség van az elhelyezett detektor törlésére is. A következő kép mutatja az eszközt, amikor egy nyaláb felütközött egy detektorba.



A „Szimulációs mód” panel kezelőszervei

A panel felső részén lévő választás egyértelmű: amíg a **Tesztelés, beállítás** van kiválasztva, addig mi állítjuk a nyalábban lévő részecskék tömegét. Az **Ismeretlen tömeg** kiválasztásával a mérendő nyaláb kerül be az ionforrásba. Ekkor a tömegén nyilvánvalóan nem változtathatunk, ám minden egyéb beállításon igen (kivéve a fentebb említett energiaszórás, nyalábvastagság és nyalábszéttartás). Mivel nem tudjuk előre, hogy a vizsgálandó nyaláb tömege kb. mekkora, szükséges lehet a **Közepes tömeg** és a **Mágneses szűrő** beállításán is változtatni. Ha nagyon eltér a közepes tömeg a vizsgálni kívánt tömegtől, azt a program a megfelelő mezők piros jelzésével mutatja.

A **Start/Stop** gomb jelentése egyértelmű. Fontos megjegyezni, hogy a Stop gomb megnyomása után még nem áll le azonnal a szimuláció, hanem megvárja, amíg az összes nyalábrészecske eltűnik a készülékből.

A **Kitűzőt részecskeszám** mezőben adhatjuk meg, hogy hány részecskét indítson a program. A szimuláció egyszerre maximum 100 részecske mozgását követi. Ezért ha 100-nál több részecskét akarunk, akkor új részecskéket akkor indít csak, amikor egy részecske eltűnik a nyalábból (pl. felütkezik valahova, vagy eljut a detektorba). Ezért a kibocsátott részecskeszám „adagokban” történik.

A **Kibocsátott részecskeszám** mutatja az addigra éppen kibocsátott részecskeszámot. Fontos megjegyezni, hogy a Start gomb minden megnyomása újraindítja ezt a számlálót!

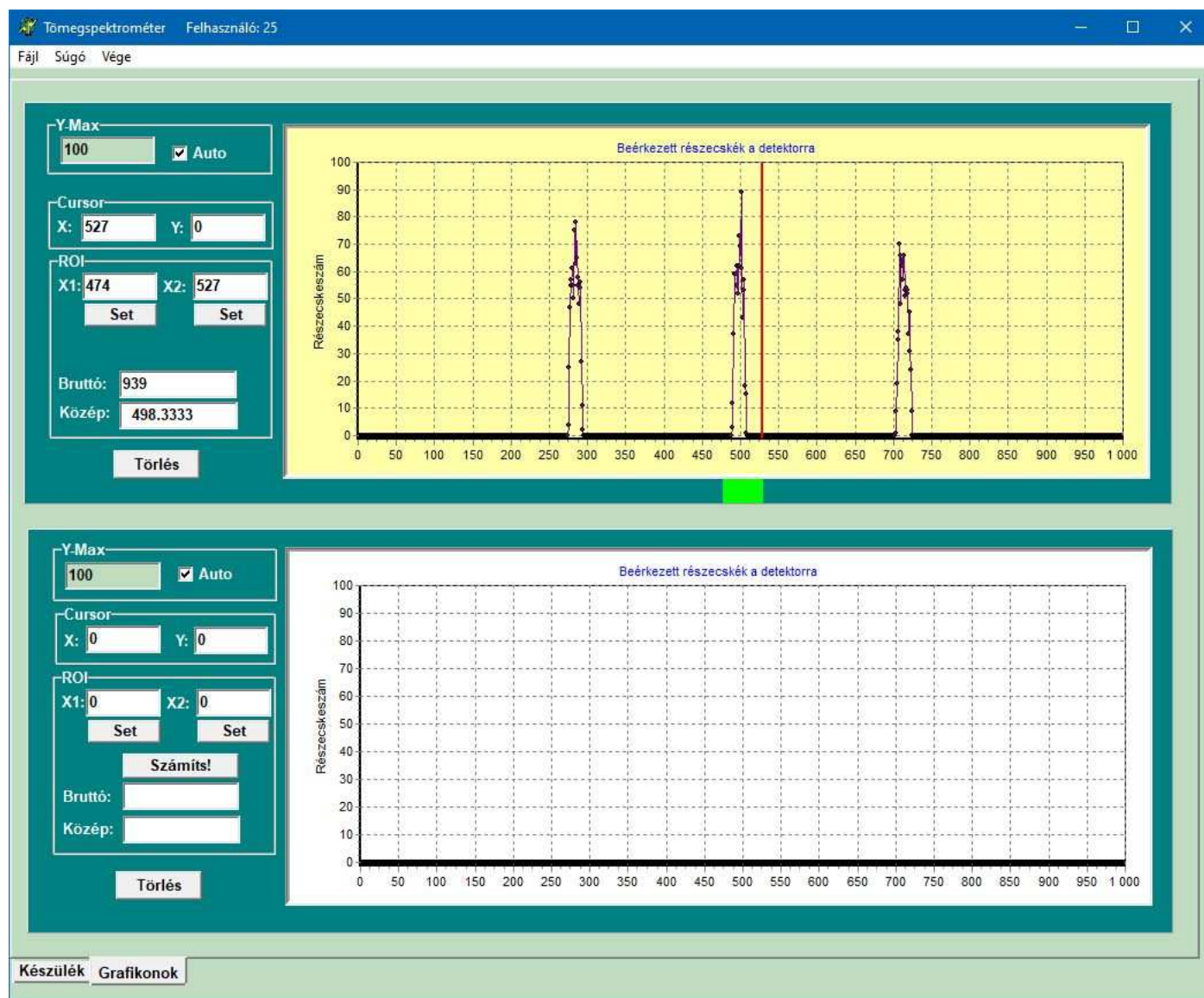
A **Folyamatos a kitűzőtíg** bejelölt állapotánál indítja újra a részecskéket a program. Ha ez nincs bejelölve, akkor egyetlen részecske kibocsátása (és eltűnése) után megáll.

A **Pályák törlése** gomb funkciója egyértelmű. Törli a képen lévő részecskepályákat.

Ha van egy detektorunk, akkor megjelenik a **Céltárgy adatai** nevű mező is. A program két „spektrumba” gyűjti a céltárgyba becsapódó részecskék számát. Itt választhatjuk ki, hogy a két spektrum közül melyikbe akarjuk gyűjteni.

GRAFIKONOK

A „**Készülék**” fül mellett található a „**Grafikonok**” fül. Ezt kiválasztva látjuk a két spektrumot (ld. ábra)



Spektrum: A fentebb említett **Detektor** teljes hossza 1000 azonos méretű érzékelő egységből áll. A spektrum vízszintes tengelye ezeknek az érzékelő egységeknek („csatornáknak”) felel meg, a függőleges tengelyre pedig azon részecskék száma kerül, amelyek az adott csatornába estek. A fenti kép felső spektrumában látjuk, hogy a detektor három különböző kis területére érkeztek részecskék (három „csúcs”).

Y Max: A spektrum Y-tengelyének maximumát az **Y max** mezőbe beírt számmal lehet meghatározni. Ha az **Auto** jelölőt kiválasztjuk, akkor az Y-tengely automatikusan a legnagyobb y-értékre normál. (Az y-max legkisebb értéke 100.)

Kurzor: Az egér bal gombjával a spektrumra kattintva kurzort helyezhetünk el a spektrumon. A kurzor vízszintes koordinátáját a spektrum mellett bal oldalon lévő **Cursor** nevű mező **X:** kijelzőjében, az adott csatornába esett részecskeszámot pedig az **Y:** kijelzőben lehet leolvasni. A kurzort egyenként is léptethetjük a billentyűzet jobb-bal nyiláival az **Alt** gomb egyidejű nyomva tartása mellett.

ROI (Region Of Interest):

A kurzorral egy tartományt (ROI) is kijelölhetünk a spektrumon. A tartománynak a két határát a két **Set** gomb megnyomásával jelölhetjük ki. A program az x-tengely alatt kijelzi, hogy mely tartomány van kijelölve.

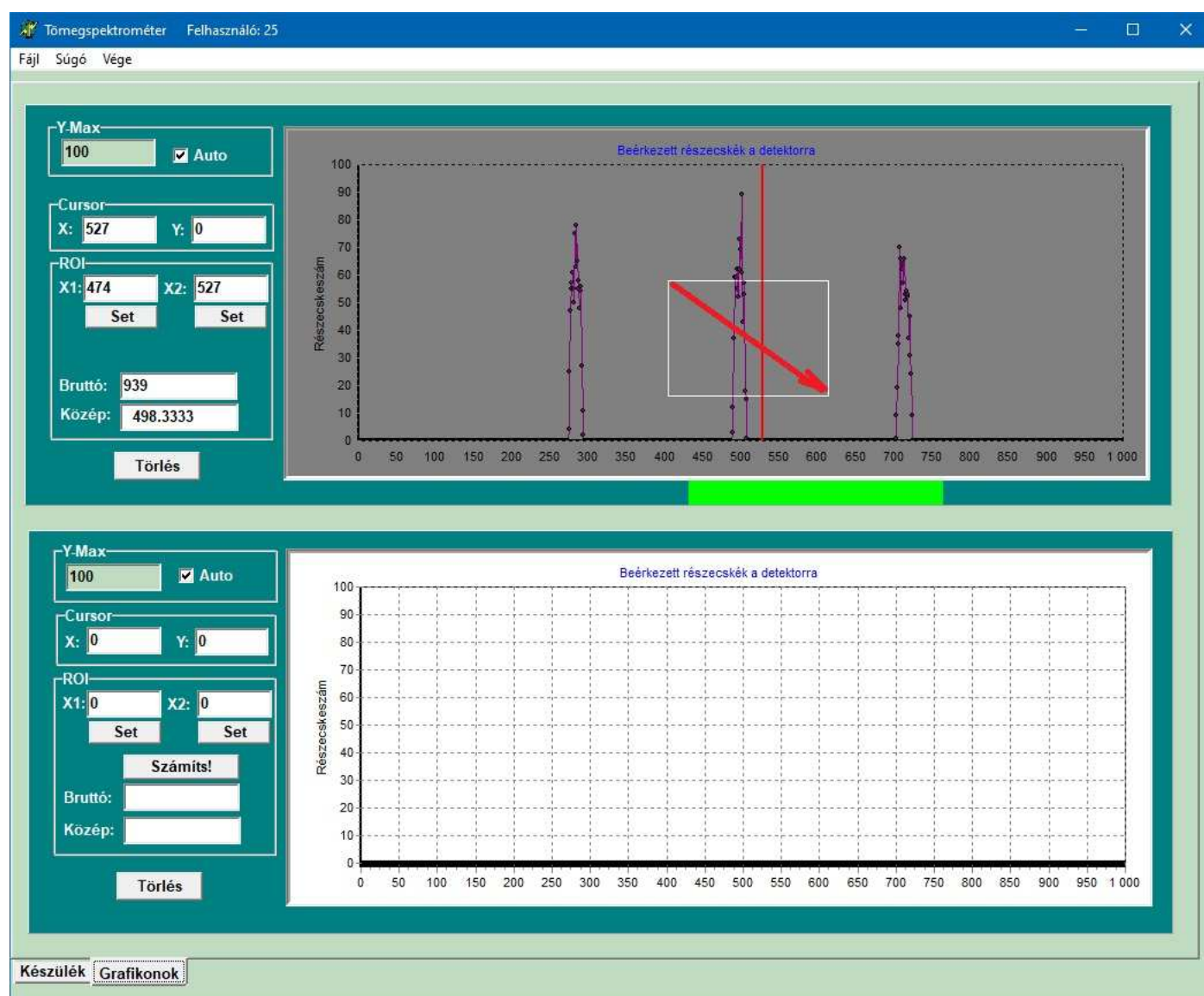
Számíts!

A **Számíts!** gomb megnyomására a program két dolgot számít ki: egyrészt összeadja a kijelölt tartományban lévő összes részecskeszámot (**Bruttó**), másrészt pedig kiszámítja a tartományban lévő „csúcs” súlypontjának X-koordinátáját (**Közép**). Figyeljünk arra, hogy ha egy újabb ROI-t definiálunk, az előző értékek elvesznek (ha szükségünk lesz rá később, érdemes külön lejegyezni).

A **Törlés** gomb jelentése eléggé egyértelmű: törli a spektrum tartalmát.

Zoom Be

Ha az **Alt** gomb lenyomása mellett a spektrumon az egérrel egy „húzd és vidd” mozdulatot végzünk (bal gomb lenyomásával mozgatjuk) átlós irányban (lásd ábrán a nyilat), akkor a program a spektrumnak a kijelölés vízszintes tartományába eső részét jeleníti csak meg (a függőleges nagyítás változatlan marad).



Zoom Ki

A *Zoom be* művelethez hasonló, csak a nyíllal ellentétes irányú (jobb letről balra föl) „húzd” mozgást kell végezni az Alt gomb lenyomása mellett.

Adatlista

A grafikonpanelekre kattintva az **egér jobb gombjával**, egy menü ugrik fel, amely lehetővé teszi az adott grafikon adatainak listázását, illetve fájlba mentését.

A FŐMENÜ pontjai

A **Fájl** menüpont alatt háromféle mentési lehetőség van.

- Az elsőnél a **mérési elrendezést és a mérési adatokat** is elmenti a program egy fájlba (a zsűri ezt majd **betöltheti**).
- A **Mentés képként** a „Készülék” és a „Grafikonok” panelt is elmenti egyetlen képfájlba. (Így lehet például a részecske pályák képét elmenteni.)
- A harmadik mentési lehetőségnél **csak a mérési adatokat** menti el a program.

A **Súgó** lehetőséget ad a mérési feladatok valamint a programleírás megtekintésére, továbbá a program névjegyét is megjeleníti.

A **Vége** gombbal ki lehet lépni a programból.