

## Monte Carlo-Simulation eines thermischen Atomstrahls

D. Bender<sup>1</sup>, C. Grüning<sup>1</sup>, G. Huber<sup>2</sup>, J.V. Kratz<sup>1</sup>, P. Kunz<sup>2</sup>, J. Lassen<sup>2</sup>, G. Passler<sup>2</sup>, N. Trautmann<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Institut für Kernchemie, <sup>2</sup>Institut für Physik, Universität Mainz

Der apparative Aufbau zur Ultrapurenanalyse von Plutonium mittels Resonanzionisations-Massenspektroskopie (RIMS) befindet sich in der dritten Generation. Dieser kompakte Aufbau von drei Diodenlasern besteht aus einem Atomstrahlrofen, Laserionisationskammer mit Ionenoptik, einem Quadrupol-Massenspektrometer (QMS) und einem Channeltrondetektor. Dabei ist die Verbesserung der Nachweiseffizienz ein wichtiges Ziel. Um die Effizienz zu verbessern, ist es von besonderem Interesse, den Atomstrahl kollimiert zum spektralen Überlapp mit dem Laserlicht zu bringen, damit ein Maximum an ionisierten Atomen durch das QMS nachgewiesen wird.

Die zu untersuchenden Proben werden in ein elektrothermisch geheiztes, zylinderförmiges Graphitröhrchen eingebracht und nach ihrer Reduktion atomar aus dem Röhrchen verdampft.

Abdampfprozesse und räumliches Abstrahlverhalten von Teilchen sind zufällige und mit einer Wahrscheinlichkeit behaftete Prozesse. Genau nach diesem Zufallsprinzip arbeitet die Monte Carlo-Methode (MC) und ist als Simulationsverfahren für diese Betrachtungen sehr gut geeignet.

Die MC-Simulation gibt Aufschluss darüber, unter welchem Winkel und mit welcher Geschwindigkeit, abhängig von der Heiztemperatur und Geometrie des Röhrchens, die Atome aus dem Ofen austreten. Damit ist es möglich, durch Variation verschiedener Parameter, wie z.B. der Ofengeometrie oder des ortsabhängigen Temperaturgradienten, herauszufinden, ob der vorhandene Atomstrahlrofen jetzt schon optimal eingesetzt wird, ob er noch zu optimieren ist, oder ob er gar gegen einen durch Simulation ermittelten besser dimensionierten Ofen ausgewechselt werden soll.

Angelehnt an eine bereits existierende MC-Computersimulation [1] wurde eine neue MC-Simulation in C++ programmiert und getestet. Sie berücksichtigt das thermodynamische Abdampfverhalten der Atome aus der Probe und deren Desorption von der Ofenwand durch Maxwell-Verteilungen, sowie Adsorption und Wandhaftungszeiten der Atome in Abhängigkeit von der Ofentemperatur und vom Ofenmaterial. In Abbildung 1 ist ein erster Vergleich zwischen Messung [2] und Simulation zu sehen, wobei eine gute Übereinstimmung festzustellen ist.

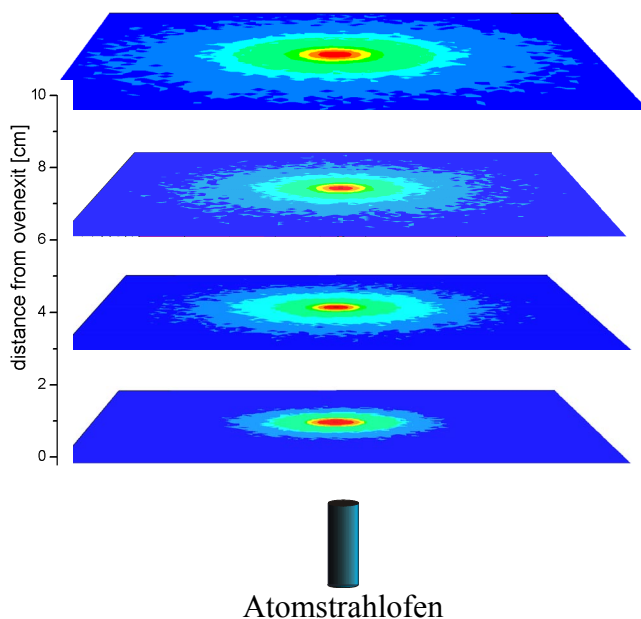


Abb.2: Häufigkeitsverteilung der abgedampften Atome für vier verschiedene Entfernungen zur Ofenaustrittsöffnung. Häufigkeit – blau, grün, rot (steigend).

Mit der Simulation kann man sowohl einzelne Atome verfolgen, als auch die Orts-, Winkel-, und Geschwindigkeitsverteilung einer Schar von  $10^7$  Teilchen oder mehr bestimmen (Abb. 2).

Wie gut die Simulation das Abdampfverhalten einer Probe letztendlich beschreibt, muss experimentell ermittelt werden. Solche Messungen sind für Anfang 2002 geplant.

Literatur:

[1] T. Histen et al., Spectrochimica Acta **B 51** 1279-1289 (1996)

[2] B. Bushaw. Private communication

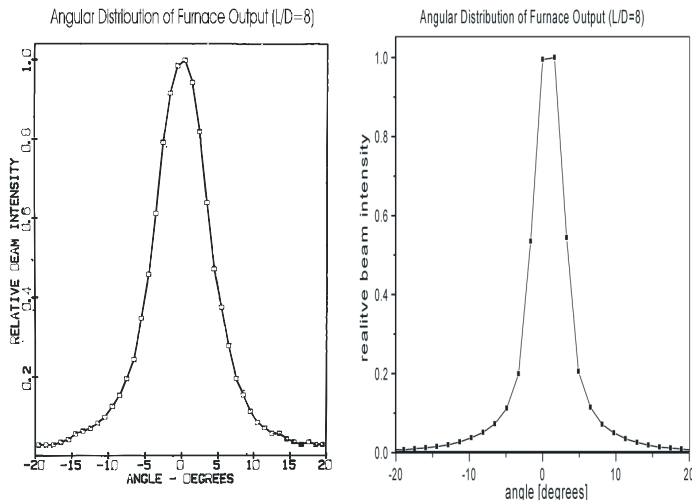


Abb.1: Winkelverteilung der Atome nach Austritt aus dem Ofen. (links: Messung; rechts: Simulation)