



Országos Szilárd Leó Fizikaverseny Döntő 2022.

Számítógépes szimulációs feladat

Elméleti bevezető és feladatok



Tömegspektrométer modellezése

Elméleti bevezető

J. J. Thomson 1895-ben fedezte fel, hogy minden atomban vannak elektronok. Katódsugárcsőben különböző atomokat ionizált, és meghatározta a keletkezett töltött részecskék töltés/tömeg (q/m) arányát. Rájött arra, hogy sem külön elektromos, sem külön mágneses eltérítéssel nem lehet ezt az arányt meghatározni, de ha elektromos és mágneses eltérítést együttesen alkalmazunk, akkor ez az arány megmérhető. Mivel a részecskék töltése (q) az ismert elemi töltés egész számú többszöröse lehet csak (egyszeresen ionizált részecskénél ez éppen az elemi töltés), így a q/m arány mérésével a tömeg is meghatározható. Ezt a módszert – a kombinált elektromos és mágneses eltérítést – használják ki a tömegspektrométerek, ill. tömegspektroszkópok.

Ez a módszer lehetővé tette, hogy valamivel később felfedezzék az azonos kémiai tulajdonságú, de tömegükben mégis különböző izotópokat, valamint nagy segítséget adott az atommagok „tömeghiányának” – és ezáltal a kötési energiájuknak – a meghatározásában is. De a módszernek fontos alkalmazása van manapság is a tudományos és a gyakorlati élet sok területén. Nemcsak a fizikában, hanem például a kémiai és biológiai kutatásokban is, mert lehetővé teszi molekulatömegek meghatározását, illetve tömeg szerinti szétválasztását.

A tömegspektrométerek alapelve az, hogy *adott pontból, adott irányba, adott energiával* induló, különböző q/m arányú részecskék különböző pályát futnak be elektromos és mágneses erőterekben, és így a detektorlemez más helyére érkeznek.

Sajnos az elméletileg egyszerűnek tűnő módszer gyakorlati megvalósítása felvet problémákat. Az, hogy minden részecske egyetlen pontból induljon, gyakorlatilag megvalósíthatatlan. De gyakorlatilag megvalósíthatatlan az is, hogy minden induló részecskének pontosan azonos legyen az iránya, és az energiája! Ezek miatt még az azonos q/m értékű részecskék is különböző pályákat futnak be, és így a különböző q/m értékű részecskék pályái át is fedhetik egymást. Ez pedig lehetetlenné teheti a tömeg szerint szétválasztást.

A szétválasztás csak akkor jöhet létre, ha sikerül a különböző energiájú, különböző helyről, különböző irányba induló, de azonos q/m arányú részecskéket a pályájuk során valahol megint összegyűjteni. Olyan ez, mint az optikában, amikor egy lencse a képpontba gyűjti össze egy tárgypontból különböző irányba induló fénysugarakat. A részecskenyalábot **fókuszálni** kell. Külön fókusz jöhet létre a különböző helyről induló részecskéknek, külön fókusz a különböző irányba indulóknak és ismét külön fókusz a különböző energiával induló részecskéknek. Az lenne a legjobb, ha mindhárom fókuszpont egybe esne!

Nagyon sokféle spektrométer létezik, ezek mind más és más elrendezéssel próbálják megvalósítani ezt a célt. Az általunk vizsgált spektrométer egy Bainbridge-Jordan típusú, ahol az elektromos eltérítést egy hengerkondenzátor, a mágneses eltérítést pedig egy homogén, szektor mágneses tér végzi. A spektrométer kezelésével kapcsolatban lásd a **Súgó/Program használata** menüpontot.

A feladat: egy ismeretlen tömeg-összetételű nyaláb vizsgálata. Ez magában foglalja nemcsak a benne szereplő tömegértékek meghatározását, hanem az egyes tömegek százalékos részarányának, valamint az értékek becsült hibájának a megadását is.

A feladat konkrét végrehajtása előtt azonban néhány bevezető feladat során ismerkedjünk meg a berendezéssel! Az alábbi feladatok során – ha a jegyzőkönyvhöz vagy a zsűri tájékoztatásához szükségesnek érezzük – készíthetünk mentéseket akár kép, akár szövegfájl formájában a program által adott lehetőségek használatával.

- 1. feladat** Olvassuk el a **Súgó/Program használata** menüpontban található anyagot! Célszerű az abban található leírások kipróbálása is. **(0 pont)**
- 2. feladat** Állítsunk be 3-4 különböző **közepes tömeg** értéket (nemcsak egész számokat lehet választani!), és figyeljük azt, hogy milyen mágneses tér tartományban tudja a készülék automatikusan beállítani a szükséges paramétereket! Jegyezzük le a tapasztalatokat! **(3 pont)**
- 3. feladat** Vizsgáljuk a készülék fókuszálási tulajdonságait! **(3 pont)**
 - Mindig csak egyet kapcsoljunk ki az ionforrásnál található jelölők közül (**Monoenergia, Párhuzamos, Pontforrás**)
 - Indítsunk 100-200 részecskét, és figyeljük a pályájukat. Jegyezzük fel, hogy hol találunk fókuszpontokat!
 - Ismételjük meg a b) pontot még két más közepes tömeg mellett is. Változik-e a fókuszpontok helyzete a közepes tömeg állításakor?
 - Vonjunk le következtetést arra, hogy mi várható abban az esetben, ha a „valódi” mérésnél mindhárom jelölő ki lesz kapcsolva. Mit lehetne tenni a probléma csökkentésére? Próbáljuk is ki!
- 4. feladat** **(2 pont)**
 - Próbáljuk megkeresni, hogy milyen tömeg-tartományba eshet az ismeretlen nyaláb!
 - Ha megtaláltuk, akkor kapcsoljunk vissza **Tesztelés, beállítás** üzemmódba, és (az adott közepes tömeg megtartása mellett) három különböző tömeg mérésével határozzuk meg azt a három pontot, amelyen a detektor-lemeznek át kellene menni ahhoz, hogy a legjobb felbontást kapjuk (a nyaláb fókuszpontjai a detektorra essenek).
 - Ha sikerült jól definiálni a detektort, akkor ne felejtjük el **elfogadni!**
- 5. feladat** Gyűjtsük a detektorra érkező részecskéket az 1. spektrumban, és vegyünk fel legalább 3 különböző tömeg mellett adatokat (csúcsokat) elegendő beütésszámmal ahhoz, hogy azokból meg tudjuk határozni a detektor „csatornáinak” a tömegekhez való hozzárendelését (**kalibráció**). A kalibráció során ne felejtjük el használni a **Region Of Interest-et (ROI)**, mert ez a csúcs helyzetét (C) pontosabban meg tudja adni! **(3 pont)**
- 6. feladat** Határozzuk meg a detektor kalibrációs függvényét! $M = a \cdot C + b$, ahol C a spektrum „csatorna” száma (vízszintes tengely koordináta), M az annak megfelelő tömeg, és a és b konstansok. Ehhez használhatjuk a számítógépen lévő EXCEL programot, vagy bármilyen egyéb módszert (kézi számolás, milliméterpapír stb.). (EXCEL használata esetén esetleg ellenőrizhetjük azt is, hogy vajon a fenti lineáris közelítés elegendő-e, vagy másodfokú polinom használata szükséges?) **(3 pont)**
- 7. feladat** Miután az eddigi tapasztalatok alapján elvégeztük a spektrométer optimális beállítását, kapcsoljunk át az **Ismeretlen tömeg** meghatározására. Gyűjtsük a detektorra jutó részecskéket a 2. spektrumba (hogy ne írjuk felül az 1. spektrumban lévő kalibrációs spektrumot sem)! Állítsunk be egy megfelelően nagy **Kitűzött részecskeszámot**, és indítsuk el a szimulációt! **(1 pont)**

8. **feladat** A kitűzött részecskeszám lejárta után a 2. spektrum és a fenti kalibráció alapján határozzuk meg az ismeretlen nyalábban található részecskék tömegét, és az egyes komponensek százalékos arányát! Ne feledkezzünk el a kapott eredmények hibáinak becsléséről sem! **(8 pont)**
9. **feladat** Ne felejtsük el a spektrométer beállításainak és az ismeretlen minta mérése (valamint a kalibráció) során kapott adatoknak az elmentését a **Fájl/Mentés másként (elrendezés és mérési adatok)** menüpont választásával, hogy a zsűri visszaolvashassa az adatainkat. **(0 pont)**
10. **feladat** Készítsünk jegyzőkönyvet a mérésről! **(2 pont** a rendezettségre, olvashatóságra stb.) A jegyzőkönyv készülhet papíron, vagy elektronikusan a számítógépen lévő valamelyik program (pl. Word, Excel, Notepad stb.) segítségével. A jegyzőkönyvben mindenképpen utaljunk arra, hogy a mérés során melyik feladat végrehajtása során milyen fájlt (kép, adat) mentettünk el, és annak mi a neve. **(2 pont)**

Sok sikert kívánunk!

