

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДЕСОРБЦИИ И ИОНИЗАЦИИ

Компьютерное моделирование процессов поверхностной десорбции и ионизации сложных молекул с последующим получением их масс-спектров в совокупности с экспериментальным масс-спектром, полученном в реальном масс-спектрометре, может дать информацию не только о качественном и количественном составе исследуемой молекулы, но и о ее структуре.

В данной работе была поставлена задача смоделировать процесс ионизации и десорбции сложной молекулы методом молекулярной динамики.

Построение полной модели, состоящей из электронной и ионной подсистем, нецелесообразно, так как при большом количестве атомов в моделируемой молекуле расчеты потребуют слишком больших компьютерных ресурсов. Отказ от рассмотрения электронной подсистемы снизит число частиц, а следовательно и объем требуемых ресурсов, в несколько раз.

Взаимодействия ионов рассчитывались с помощью Кулоновского потенциала:

$$U = -\frac{K}{r},$$

и потенциала Морзе:

$$U = \varphi_0 \left(e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right)$$

Перемещения ионов описывались с помощью уравнения движения Ньютона. Взаимодействие с поверхностью учитывается введением зеркально отраженных от плоскости поверхности атомов.

Предложенная модель реализована в виде программного продукта, написанного на языке программирования Borland Delphi 5. Дальнейшее развитие программы исследований состоит из следующих этапов:

- создание модельного масс-спектра ионизированной молекулы-модели;
- получение масс-спектра от экспериментальной установки;
- сравнение масс-спектров модели и эксперимента.

Анализируя экспериментальный и смоделированный масс-спектр можно получить информацию не только о количественных параметрах молекулы, но и о ее структуре.