

Электронные и ионные пучки

УДК 537.533

Времяпролетный масс-спектрометр на основе электростатических полей двумерных зеркал и цилиндрического конденсатора

О.А. Байсанов, И.Ф. Спивак-Лавров

В настоящей работе предложен и рассчитан времяпролетный масс-спектрометр, в котором многократные отражения осуществляются двумерными электростатическими зеркалами. Между зеркалами расположен цилиндрический конденсатор, поворачивающий ионный пучок на 180°. Получены аналитические выражения для поля зеркала и конденсатора. Траектории ионов рассчитывались численно путем интегрирования дифференциальных уравнений движения. Найдены системы с высоким качеством пространственно-временной фокусировки пучка.

PACS: 41.85.—i

Ключевые слова: времяпролетный масс-спектрометр, цилиндрический конденсатор, электронное зеркало, изохронность траекторий.

Введение

В последнее время в аналитическом приборостроении активно развивается направление, связанное с созданием многокаскадных времяпролетных масс-спектрометров (ВПМС) на основе бессеточных планарных зеркал [1], а также многокаскадных ВПМС на основе секторных отклоняющих полей [2]. Применение зеркал позволяет устранить временные aberrации, обусловленные энергетическим разбросом в ионном пучке, вплоть до третьего порядка, тогда как в секторных полях устраняются лишь aberrации первого порядка.

Если времяпролетный масс-спектрометр содержит N идентичных времяпролетных каскадов с временем пролета одного каскада T_0 , то разрешение масс-спектрометра по массе определяется выражением [3]:

$$R_m = \frac{NT_0}{2(\Delta t_i + N\Delta t_0)} = \frac{T_0}{2\left(\frac{\Delta t_i}{N} + \Delta t_0\right)}. \quad (1)$$

Здесь Δt_i — начальная временная ширина ионного импульса, Δt_0 — времяпролетные aberrации одного каскада. При увеличении числа каскадов N

разрешение времяпролетного масс-спектрометра стремится к предельному значению:

$$R_{m0} = \frac{T_0}{2\Delta t_0}. \quad (2)$$

Таким образом, в зависимости от соотношения между Δt_i и Δt_0 существует оптимальное значение $N = N_0$, при котором $\Delta t_0 \gg \Delta t_i$, и дальнейшее увеличение N практически бессмысленно. В этом случае для увеличения разрешения необходимо увеличивать отношение $\frac{T_0}{\Delta t_0}$.

В настоящей работе предлагается ВПМС, в котором используются два электростатических зеркала с двумерным полем в сочетании с цилиндрическим конденсатором, поворачивающим пучок на 180°. Аналитические выражения для потенциалов полей зеркала и цилиндрического конденсатора находятся с помощью методов теории функций комплексных переменных (ТФКП). Траектории заряженных частиц рассчитываются путем численного интегрирования уравнений Ньютона. Высокую точность расчетов обеспечивает использование адекватных аналитических выражений, описывающих поля исследуемых систем.

Схема ВПМС

Предлагаемый ВПМС схематически изображен на рис. 1 в проекции на горизонтальную плоскость. Он состоит из цилиндрического конденсатора 2 с экранами 3, к которым с торцов примыкают пятиэлектродные зеркала с замыкающим электродом в форме вогнутого цилиндрического зеркала 7. Планарные электроды зеркал обозначены цифрами 4, 5, 6. Пучок ионов 1 вводится под

Байсанов Орда Абдуалиевич, ст. преподаватель.

Спивак-Лавров Игорь Феликсович, профессор.

Актюбинский государственный университет
им. К. Жубанова.

Казахстан, 030000, г. Актюбе, ул. Братьев Жубановых, 263.

Тел./факс: (7132) 543756. E-mail: spivakif@rambler.ru

Статья поступила в редакцию 20 октября 2013 г.

© Байсанов О.А., Спивак-Лавров И.Ф., 2014

углом $2^\circ \div 3^\circ$ к горизонтальной плоскости в центре сечения А-А. Затем пучок поворачивается в цилиндрическом конденсаторе на 180° и, отражаясь в зеркале, снова попадает в конденсатор и т.д., пока не достигает детектора.

Расчет поля зеркала

На рис. 2 схематически изображено пяти-электродное зеркало с плоским замыкающим электродом. Точками А, В, С отмечены границы электродов. Рассматриваемая область в плоскости $z_n = x_n + iy_n$ отображается на верхнюю полуплоскость плоскости $w = u + iv$ с помощью конформного преобразования [3]:

$$z_n = \frac{2}{\pi} \arcsin w. \tag{3}$$

Откуда

$$\begin{aligned} u &= \sin \frac{\pi x_n}{2} \operatorname{ch} \frac{\pi y_n}{2}, \\ v &= \cos \frac{\pi x_n}{2} \operatorname{sh} \frac{\pi y_n}{2}. \end{aligned} \tag{4}$$

Решая соответствующую граничную задачу, найдем распределение потенциала в верхней полуплоскости w -плоскости:

$$\begin{aligned} F(u, v) &= V_0 - F_1(u, v | a_3, V_0 - V_1) - \\ &- F_1(u, v | a_2, V_1 - V_2) - F_1(u, v | a_1, V_2 - V_3) - \\ &- F_1(u, v | 1, V_3 - V_4) \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь

$$F_1(u, v | a, V) = \frac{V}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{u+a}{v} - \operatorname{arctg} \frac{u-a}{v} \right). \tag{6}$$

Конформное преобразование, переводящее границы зеркала с параллельными электродами

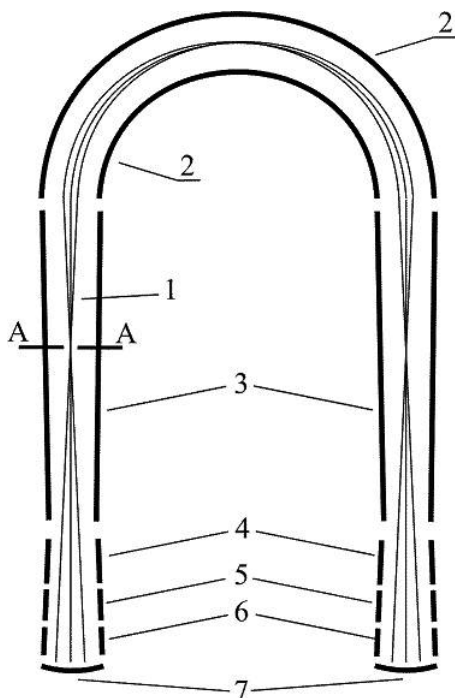


Рис. 1. Схема ВПМС.

в границы зеркала с клиновидными электродами и цилиндрическим замыкающим электродом имеет вид:

$$\begin{aligned} Z &= X + iY = \\ &= i \exp(-i\alpha(z_n + i\beta)) - i \operatorname{ctg} \alpha. \end{aligned} \tag{7}$$

Откуда

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{\sin \alpha} e^{\alpha y_n} \sin \alpha x_n, \\ Y &= \frac{1}{\sin \alpha} e^{\alpha y_n} \cos \alpha x_n - \operatorname{ctg} \alpha. \end{aligned} \tag{8}$$

Найдем также обратное преобразование. Используя (7), получим

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{1}{\alpha} \operatorname{arctg} \frac{X}{Y + \operatorname{ctg} \alpha}, \\ y_i &= \frac{1}{2\alpha} \ln \left\{ \left[X^2 + (Y + \operatorname{ctg} \alpha)^2 \right] \sin^2 \alpha \right\} \end{aligned} \tag{9}$$

В формулах (7), (8) и (9) учтено, что постоянная

$$\beta = \frac{1}{2\alpha} \ln \frac{1}{\sin^2 \alpha}. \tag{10}$$

В полученном решении нижний электрод с потенциалом V_4 представляет собой выпуклое цилиндрическое зеркало при $\alpha > 0$ и вогнутое — при $\alpha < 0$, причем его радиус кривизны определяется выражением:

$$R = \frac{1}{\sin \alpha}. \tag{11}$$

Постоянные a_1, a_2, a_3 выражаются через длины электродов l_1, l_2 и l_3 зеркала с параллельными электродами ($\alpha = 0$) с помощью следующих формул:

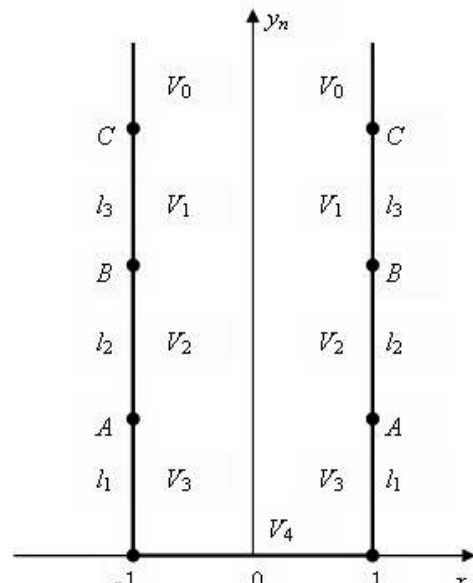


Рис. 2. Схематическое изображение зеркала с параллельными электродами, l_1, l_2, l_3 — длины электродов, V_0, V_1, V_2, V_3, V_4 — потенциалы электродов.

$$a_1 = u(1, l_1) = \sin \frac{\pi}{2} \operatorname{ch} \frac{\pi l_1}{2} = \operatorname{ch} \frac{\pi l_1}{2}, \quad (12)$$

$$a_2 = u(1, l_1 + l_2) = \sin \frac{\pi}{2} \operatorname{ch} \frac{\pi(l_1 + l_2)}{2} = \operatorname{ch} \frac{\pi(l_1 + l_2)}{2}, \quad (13)$$

$$a_3 = u(1, l_1 + l_2 + l_3) = \sin \frac{\pi}{2} \operatorname{ch} \frac{\pi(l_1 + l_2 + l_3)}{2} = \operatorname{ch} \frac{\pi(l_1 + l_2 + l_3)}{2} \quad (14)$$

С помощью формул (8) найдем координаты точек A, B, C

$$X_A = e^{\alpha l_1}, \quad Y_A = (e^{\alpha l_1} - 1) \operatorname{ctg} \alpha;$$

$$X_{\hat{A}} = e^{\alpha(l_1 + l_2)}, \quad Y_B = (e^{\alpha(l_1 + l_2)} - 1) \operatorname{ctg} \alpha; \quad (15)$$

$$X_C = e^{\alpha(l_1 + l_2 + l_3)}, \quad Y_{\hat{N}} = (e^{\alpha(l_1 + l_2 + l_3)} - 1) \operatorname{ctg} \alpha.$$

На рис. 3 представлена картина эквипотенциальных линий поля для зеркала со следующими параметрами: $\alpha = -1^\circ$; $L_1 = 1,1386$, $L_2 = 1,5466$, $L_3 = 1,5966$; $V_0 = 1$, $V_1 = 1,04$, $V_2 = 0,65$, $V_3 = -0,01$, $V_4 = -0,1$. Здесь длины электродов L_1, L_2, L_3 зеркала определяются формулами:

$$L_1 = \sqrt{(X_A - 1)^2 + Y_A^2},$$

$$L_2 = \sqrt{(X_B - X_A)^2 + (Y_B - Y_A)^2},$$

$$L_3 = \sqrt{(X_C - X_B)^2 + (Y_C - Y_B)^2}. \quad (16)$$

На рис. 3 самая нижняя кривая соответствует потенциалу $\varphi = 0$, а самая верхняя — $\varphi = 0,95$, шаг по потенциалу равен 0,05.

Расчет поля цилиндрического конденсатора

Рассмотрим трехэлектродную (по количеству потенциалов на электродах) электростатическую систему с двумерным полем, изображенную на рис. 4. На этом рисунке система электродов расположена симметрично относительно осей декартовой системы координат x_1, y_1, z_1 . Чтобы найти потенциал поля $\varphi(x_1, y_1)$ этой системы, отображим полосу $-d/2 \leq y_1 \leq d/2$ комплексной плоскости $\zeta = x_1 + iy_1$ на верхнюю полуплоскость плоскости $w = u + iv$ [3]:

$$w = -i \exp\left(\frac{\pi \zeta}{d}\right). \quad (17)$$

Откуда

$$u = -\exp\left(\frac{\pi x_1}{d}\right) \sin\left(\frac{\pi y_1}{d}\right),$$

$$v = \exp\left(\frac{\pi x_1}{d}\right) \cos\left(\frac{\pi y_1}{d}\right). \quad (18)$$

В w -плоскости получаем граничную задачу, где верхним электродам соответствует область $u < 0$, а нижним — $u > 0$. Распределение потенциала в w -плоскости определяется следующим выражением:

$$F(u, v) = V_0 - \frac{V_1 - V_0}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{v}{u + a_{11}} - \operatorname{arctg} \frac{a_{11} v}{a_{11} u + 1} \right) - \frac{V_2 - V_0}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{a_{21} v}{a_{21} u - 1} - \operatorname{arctg} \frac{v}{u - a_{21}} \right). \quad (19)$$

Здесь

$$a_{11} = \exp\left(\frac{\pi l_1}{2d}\right), \quad (20)$$

$$a_{12} = \exp\left(-\frac{\pi l_1}{2d}\right) = \frac{1}{a_{11}}$$

$$a_{21} = \exp\left(\frac{\pi l_2}{2d}\right), \quad (21)$$

$$a_{22} = \exp\left(-\frac{\pi l_2}{2d}\right) = \frac{1}{a_{21}}$$

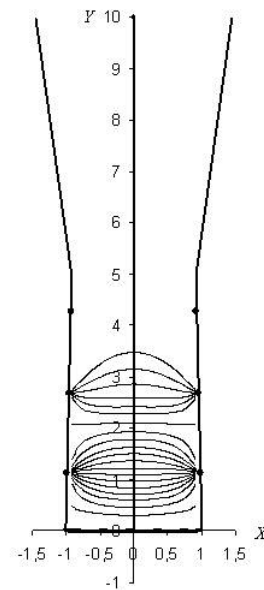


Рис. 3. Картина эквипотенциальных линий поля зеркала

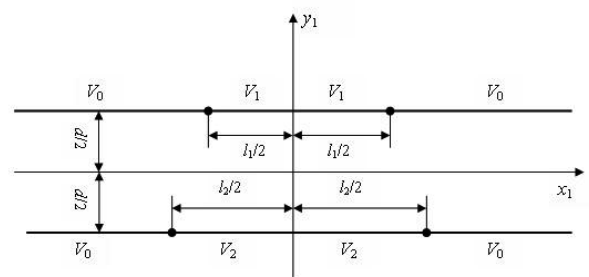


Рис. 4. Трехэлектродная электростатическая система с двумерным полем

Полагая $V_1 = V_0 + C_1$, а $V_2 = V_0 - C_2$, получим поле плоского конденсатора с экранами, имеющими потенциал V_0 .

Приведенные выражения можно использовать также и для расчета поля цилиндрического конденсатора с экранами. Соответствие между параметрами плоского и цилиндрического конденсаторов устанавливается следующим образом. Большой цилиндр с радиусом R_2 имеет потенциал $V_1 = V_0 + C_1$, а меньший цилиндр с радиусом R_1 имеет потенциал $V_2 = V_0 - C_2$, $d = \ln R_2 / R_1$, а угловые границы электродов определяются выражением

$$\Psi_0 = \pm \frac{l_1}{2d} \ln \frac{R_2}{R_1} = \pm \frac{l_2}{2d} \ln \frac{R_2}{R_1}. \quad (22)$$

Для того, чтобы получить поле соответствующего цилиндрического конденсатора, необходимо перейти от переменных x_1, y_1 к цилиндрическим координатам ρ, ψ , используя соотношения [4]:

$$x_1 \equiv \psi, \quad y_1 = \ln \frac{\rho}{\sqrt{R_1 R_2}}. \quad (23)$$

Декартовы координаты x, y , соответствующие введенным цилиндрическим координатам, связаны с координатами (23) соотношениями:

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{R_1 R_2} \exp(y_1) \sin(x_1), \\ y &= \sqrt{R_1 R_2} \exp(y_1) \cos(x_1). \end{aligned} \quad (24)$$

Обратные преобразования имеют вид:

$$\operatorname{tg} x_1 = \frac{x}{y}, \quad y_1 = \frac{1}{2} \ln \frac{x^2 + y^2}{R_1 R_2}. \quad (25)$$

Расчет траекторий заряженных частиц

Для нахождения траекторий интегрировались уравнения движения Ньютона. Эти уравнения в безразмерных переменных имеют простой вид:

$$\ddot{x} = \Phi_x, \quad (26)$$

$$\ddot{y} = \Phi_y. \quad (27)$$

Здесь точки обозначают производные по безразмерному времени $\tau = t / \tau_0$, где

$$\tau_0 = l_0 \sqrt{\frac{A m_0}{V_0 Z q_e}}. \quad (28)$$

В последней формуле A — массовое число, m_0 — атомная единица массы, Z — зарядовое число, q_e — элементарный заряд.

Высокая точность расчетов до 10^{-9} и выше достигается за счет использования аналитически выражений для производных потенциала. Дифференциальные уравнения (26), (27) интегрировались численно четырехточечным методом Адамса с автоматическим выбором шага. Разгонные точки находились методом последовательных сбли-

жений Крылова. Начальные условия для траекторий при численном интегрировании уравнений (26), (27) задавались на входе в цилиндрический конденсатор: $x_0, y_0, \dot{x}_0, \dot{y}_0$. Если γ_m — относительный разброс по массе, то зависимость времени пролета от массы частиц определяется множителем $\sqrt{1 + \gamma_m}$, поэтому достаточно найти время пролета для случая $\gamma_m = 0$.

Расчет каскада ВПМС

На рис. 5 приведена конфигурация электродов рассчитанного ВПМС, изображен пучок заряженных частиц, горизонтальными черточками показано положение источника и детектора. На рисунке показаны также оси координат со шкалой в относительных единицах длины. Пучок, выйдя из детектора, поворачивается в конденсаторе на 180° , затем поступает в зеркало и, отразившись в зеркале, попадает в детектор. Во всех случаях определялось время прилета частиц в детектор. Плоскость источника и детектора расположена при $y = y_0 = y_k = -17,35$. Время пролета одного каскада $T_0 = 150,95$. Все геометрические размеры зеркал, используемых в ВПМС, ровно в 3 раза больше, чем у зеркала, представленного на рис. 3, а потенциалы имеют те же значения. Радиусы цилиндрического конденсатора $R_1 = 12, R_2 = 20$, размеры сектора поля конденсатора $\Psi_0 = \pm 0,50809\pi$, а $C_1 = C_2 = 0,5$.

При моделировании поведения пучка задавались следующие начальные условия для частиц пучка. Для осевой траектории: $x_{c0} = -16,00, y_{c0} = -17,35; \dot{x}_{c0} = 0, \dot{y}_{c0} = \sqrt{2 - \dot{z}_{c0}^2}$, где $\dot{z}_{c0} = 0,058$. Для остальных траекторий пучка: $x_{c0} - \Delta x \leq x_0 \leq x_{c0} + \Delta x, y_0 = y_{c0}, z_0 = z_{c0}; \dot{x}_{c0} - \Delta \dot{x} \leq \dot{x}_0 \leq \dot{x}_{c0} + \Delta \dot{x}, \dot{y}_0 = \sqrt{(2 + \epsilon)(1 - x_0^2 - \dot{z}_{c0}^2)}, \dot{z}_0 = \dot{z}_{c0}$. Здесь Δx — разброс по координатам ча-

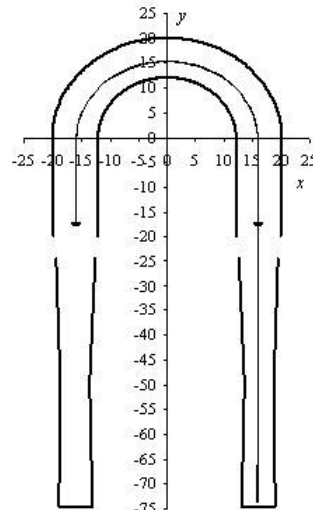


Рис. 5. Рассчитанный вариант ВПМС.

стиц, $\Delta\dot{x}$ — характеризует разброс по углам вылета, ε — разброс по энергии.

Полагая $\Delta x = 0,003$, $\Delta\dot{x} = 0,002$, $\varepsilon = \pm 0,0025$, получим для максимальных aberrаций одного каскада $\Delta t_0 \approx 0,0025$ и предельное разрешение по массе $R_{m0} = \frac{T_0}{2\Delta t_0} \approx 30000$.

Заключение

Предложена новая ионно-оптическая схема ВПМС на основе цилиндрического конденсатора и двумерных конических зеркал. Получены аналитические выражения для распределения потенциала и производных потенциала в двумерных пятиэлектродных конических зеркалах и разработаны программы моделирующие электростатические поля этих зеркал. Получены также аналитические выражения для распределения потенциала в цилиндрическом конденсаторе с экранами. Разработан численный метод расчета траекторий заряженных частиц в ВПМС, основанный на ис-

пользовании безразмерных уравнений Ньютона. Найдены параметры ВПМС с достаточно высоким качеством пространственно-временной фокусировки с изохронностью траекторий по энергии. Дальнейшая оптимизация выбранной схемы позволит создавать ВПМС с высоким разрешением по массе.

Отметим также, что развитый в работе метод расчета решает проблему динамики широких пучков без использования традиционной абберационной теории.

Литература

1. Явор М.И., Веренчиков А.Н. // Научное приборостроение. 2006. Т. 16. № 3. С. 21.
2. Satoh T., Tsuno H., Iwanaga M., and Kammei Y. // Amer. Soc. for Mass Spectrom. 2005, V. 16. P. 1969.
3. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Теория функций комплексной переменной. — М.: Наука, 1972.
4. Doskeev G.A., Edenova O.A., Spivak-Lavrov I.F. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 2011. V. 645. P. 163.

Time-of-flight mass spectrometer on the basis of electrostatic fields of bi-dimensional mirrors and cylindrical capacitor

O.A. Baisanov and I.F. Spivak-Lavrov

Zhubanov Aktobe State University
263 Br. Zhubanov str., Aktobe, 030000, Kazakhstan
E-mail: spivakif@rambler.ru
Received October 20, 2013

In this paper we propose and calculated time of flight mass spectrometer (TOFMS), in which multiple reflections are carried out by two-dimensional electrostatic mirrors. Between the mirrors of a cylindrical capacitor, turning the ion beam on 180°. The analytical expressions for the field mirror and condenser are obtained. Ion trajectories are calculated by numerically integrating the differential equations of motion. Results of high quality space- time focusing of the beam.

PACS: 41.85.— i

Keywords: TOF time of flight mass spectrometer (TOFMS), cylindrical capacitor, electric mirrors, isochronous trajectories.

References

1. M. I. Yavor and A. N. Verenchikov, Nauchn. Priborostr. **16** (3), 21 (2006).
2. T. Satoh, H. Tsuno, M. Iwanaga, and Y. Kammei, Amer. Soc. for Mass Spectrom. **16**, 1969 (2005).
3. M. A. Lavrent'ev and E. V. Shabat, *Theory of Functions of Complex Variable* (Nauka, Moscow, 1972) [in Russian].
4. G. A. Doskeev, O. A. Edenova, and I. F. Spivak-Lavrov, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. **645**, 163 (2011).