

Компенсация большого энергетического разброса ионов многозачорными сеточными отражателями времяпролетных масс-спектрометров: случаи катастроф A_4, A_5, A_6, A_7

© И.И. Пилюгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: i.pilyugin@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 27 ноября 2020 г.
В окончательной редакции 27 ноября 2020 г.
Принято к публикации 3 декабря 2020 г.

Рассмотрена задача компенсации начального энергетического разброса ионов многозачорными отражателями времяпролетных масс-спектрометров с сетками. Рассмотрены случаи катастроф A_4, A_5, A_6, A_7 для простейшего варианта распределения потенциалов. Показано, что многозачорные отражатели, функция времени пролета которых описывается катастрофами A_4, A_5, A_6, A_7 , компенсируют гораздо большие энергетические разбросы ионов в сравнении с катастрофами A_2 и A_3 . Полученные результаты можно использовать при конструировании бессеточных масс-спектрометров, компенсирующих большие начальные энергоразбросы ионов.

Ключевые слова: времяпролетный масс-спектрометр, энергоразброс ионов.

DOI: 10.21883/JTF.2021.05.50703.328-20

Введение

В предыдущей работе [1] показано, что большие начальные разбросы ионов по энергиям во времяпролетном масс-спектрометре (ВПМС) с сетками могут быть скомпенсированы конструированием многозачорных отражателей. Там же [1] было показано, что функция времени пролета ионов может быть математически описана катастрофами A_n [2,3] и рассмотрены случаи простейших катастроф A_2 и A_3 .

В настоящей работе анализ будет продолжен для катастроф A_4, A_5, A_6, A_7 . Достижимый диапазон компенсации энергий ионов —

$$k = U_{\max}/U_{\min}, \quad (1)$$

где qU_{\max} и qU_{\min} — максимальная и минимальная энергия ионов в зоне ионизации источника соответственно. Теоремы теории катастроф [2,3], утверждают, что при одном и том же диапазоне компенсации энергий ионов разрешающая способность ВПМС по фактору компенсации разброса ионов по энергиям R_{ref} должна резко увеличиваться с ростом номера катастрофы n , где $R_{\text{ref}} = T_{\text{ref}}/2\Delta T_{\text{ref}}$, где T_{ref} — среднее время пролета иона в приборе, а ΔT_{ref} — разброс времени пролета ионов в приборе по фактору компенсации энергоразброса.

Целью настоящей работы является рассчитать зависимость $R_{\text{ref}} = R_{\text{ref}}(n, k)$ для простейших конструктивных реализаций исследованных катастроф ($n = 2-7$) и простейшего пространственного распределения потенциалов для катастроф A_4, A_5, A_6, A_7 .

Функция времени пролета, в дальнейшем (ФВП), многозачорного отражателя (рис. 1), согласно [1], равна

$$T = \sqrt{\frac{m}{2q}} \left(\frac{L}{\sqrt{U}} + \frac{4d_1}{U_1} (\sqrt{U} - \sqrt{U-U_1}) + \frac{4d_2}{U_2 - U_1} \times (\sqrt{U-U_1} - \sqrt{U-U_2}) + \dots + \frac{4d_{n-1}}{U_{n-1} - U_{n-2}} \times (\sqrt{U-U_{n-2}} - \sqrt{U-U_{n-1}}) + \frac{4d_n}{U_n - U_{n-1}} \sqrt{U-U_{n-1}} \right), \quad (2)$$

где m — масса иона, L — суммарный дрейф ионов, d_n — промежуток между n и $n+1$ сетками, U_n — потенциал $n+1$ сетки отражателя. Сетка 1 отражателя имеет

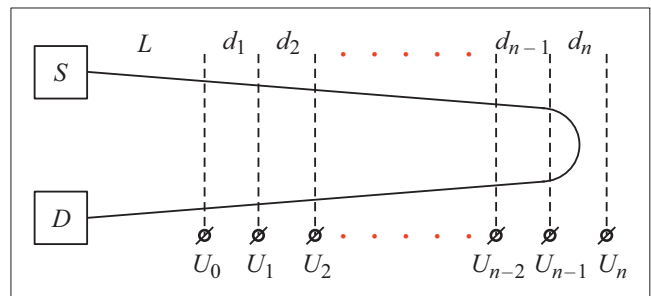


Рис. 1. Схема конструкции многозачорного сеточного отражателя ВПМС. S — источник ионов, D — детектор ионов, L — дрейфовый промежуток движения ионов, $d_1, d_2, \dots, d_{n-1}, d_n$ — зазоры между сетками, $U_0, U_1, U_2, \dots, U_{n-2}, U_{n-1}, U_n$ — потенциалы на соответствующих сетках.

потенциал Земли $U_0 = 0$. Для дрейфового промежутка в случае, когда $U_{n-m-1} = U_{n-m}$, член в уравнении (2)

$$\frac{4d_{n-m}}{U_{n-m} - U_{n-m-1}} \left(\sqrt{U - U_{n-m-1}} - \sqrt{U - U_{n-m}} \right) \quad (3)$$

заменяем на

$$\frac{2d_{n-m}}{\sqrt{U - U_{n-m}}}. \quad (4)$$

ФВП (2) может быть приведена к нормализованному виду, в котором безразмерная часть отделена от размерной:

$$\begin{aligned} T &= \sqrt{\frac{m}{2q}} \frac{L}{\sqrt{U_{n-1}}} \left[\frac{1}{\sqrt{y}} + \frac{4z_1}{v_n} (\sqrt{y} - \sqrt{y - v_n}) + \dots \right. \\ &\quad \dots + \frac{4z_2}{v_{n-1} - v_n} (\sqrt{y - v_{n-1}} - \sqrt{y - v_{n-2}}) \\ &\quad \left. + \frac{4z_{n-1}}{1 - v_3} (\sqrt{y - v_3} - \sqrt{y - 1}) + \frac{4z_n}{v_1 - 1} \sqrt{y - 1} \right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2q}} \frac{L}{\sqrt{U_{n-1}}} \quad t(y; z_1 \dots z_n, v_1 \dots v_n), \quad (5) \end{aligned}$$

где $y = U/U_{n-1}$, $z_n = d_n/L$, а $v_{m+1} = U_{n-m}/U_{n-1}$ при этом $v_2 \equiv 1$.

1. Конструктивные особенности исследуемых отражателей и алгоритм расчета разрешающей способности

Опишем распределения потенциалов исследуемых отражателей. Распределение потенциала в многоззорном отражателе является непрерывной функцией. Из работы [4] известно, что для получения фокусировки по энергии высокого порядка необходимо применить в отражателе ускоряющее поле. Поэтому рассмотрим следующую схему распределения потенциала (рис. 2, цифрами обозначены зазоры отражателя).

Из (2) и (5) легко получается ФВП для каждого случая рассматриваемых катастроф. Из условия фокусировки n уравнений

$$t'_{y_{cp}} = 0, \quad t''_{y_{cp}} = 0, \quad \dots, \quad t^{(n)}_{y_{cp}} = 0, \quad (6)$$

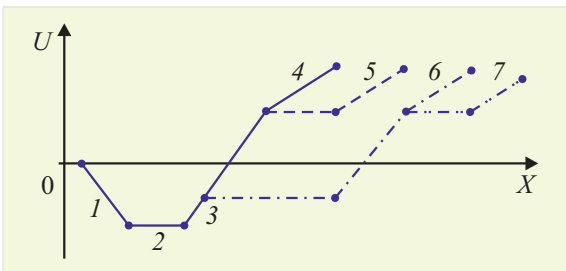


Рис. 2. Пространственное распределение потенциала отражателей.

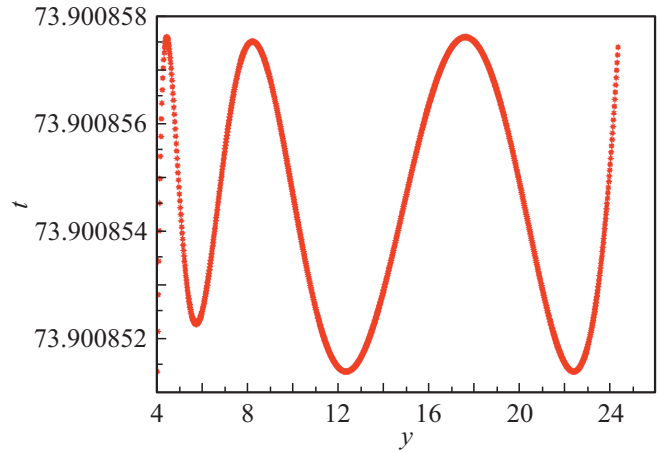


Рис. 3. Вид безразмерной функции времени пролета t для максимума разрешающей способности многоззорного отражателя катастрофы A_6 .

обращающихся одновременно в ноль в критической точке

$$y_{cp} = \frac{U_{max} + U_{min}}{2U_{n-1}} = \frac{v_1}{2} \left(1 + \frac{1}{k} \right).$$

получается система n линейных уравнений (6) относительно z_i при случайным образом выбранных v_k . Система уравнений должна удовлетворять условию $z_i > 0 \forall i$. Полученные z_i вместе с v_k являются первым приближением для многопараметрической оптимизации [5] разрешающей способности по v . В результате этой оптимизации получается набор чисел v_{k_1} , являющийся вместе с z_i первым приближением многопараметрической оптимизации по z .

В результате проведения этой процедуры N раз ($N > 100$) выбираем максимальное значение разрешающей способности R_{ref} для заданного энергетического разброса k (по формуле (1)) при определенных значениях параметров z_i и v_k . Функция времени пролета для случая максимума разрешающей способности катастрофы A_6 изображена на рис. 3.

Результаты расчетов для всех исследуемых катастроф A_n представлены на рис. 4. Дополнительно на рисунке приведены точки для катастроф A_2 и A_3 из работы [1].

Отметим, что для катастрофы A_7 данный алгоритм не срабатывает, и фокусировки седьмого порядка получить не удастся. Данный алгоритм позволяет получить параметры отражателей с фокусировкой не более, чем шестого порядка по энергии.

2. Обсуждение результатов и выводы

Анализ рис. 4 показывает, что многоззорные точные отражатели ВПМС с числом зазоров 4–7 могут компенсировать начальные энергоразбросы ионов, редко встречающиеся на практике ($k > 10$). При этом достигаемая разрешающая способность $R_{ref} > 10^6$, что

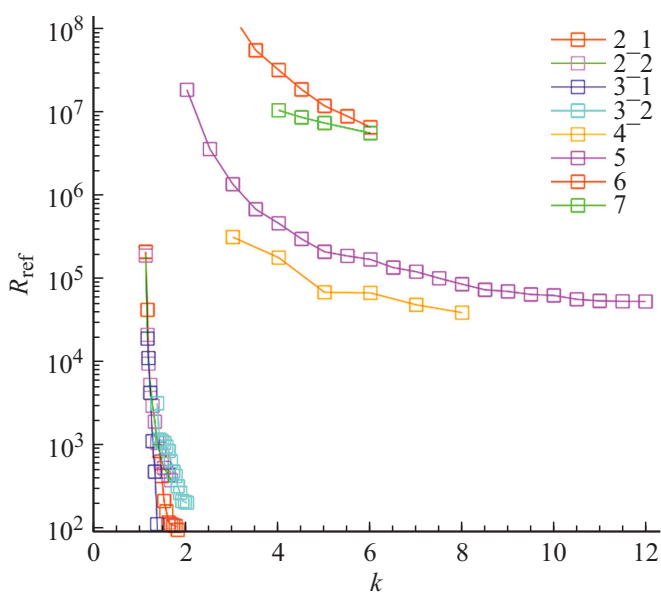


Рис. 4. Значения максимума разрешающей способности R_{ref} многозакорного отражателя в зависимости от величины энергоразброса k . Номером у символа обозначена катастрофа A_n : 2_1 — A_2 , 2_2 — A_2 , 3_1 — A_3 , 3_2 — A_3 , 4 — A_4 , 5 — A_5 , 6 — A_6 , 7 — A_7 .

практически позволяет полностью исключить фактор компенсации энергоразброса из aberrаций, ограничивающих суммарную разрешающую способность ВПМС с сетками. Однако практически построить такой прибор невозможно, так как отношение $L/d_2 \gg 50$ для всех исследованных в настоящей работе случаев, что не позволяет построить прибор разумных габаритов с большим значением отношения L/d_0 , где d_0 — ширина пакета ионов в источнике. Чтобы построить такой прибор, необходимо сделать масс-спектрометр с большой величиной дрейфа L , т.е. сделать его многопроходным (два одинаковых отражателя расположены симметрично друг напротив друга и ионы входят в отражатели под небольшим углом), что технически невозможно с многозакорным отражателем, так как прозрачность сеток такого прибора делает его непригодным для использования на практике.

Единственной альтернативой представляется конструирование бессеточного отражателя, подобного рассмотренному в [4], с распределением потенциалов на „оси“ прибора, напоминающим рис. 2 для катастроф A_5 или A_6 . (Катастрофа A_7 уже не дает выигрыша в разрешающей способности, что видно из рисунка.) Расчет такого прибора выходит за рамки данного исследования.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] И.И. Пилюгин. ЖТФ, **86** (3), 128 (2016).
- [2] В.И. Арнольд, А.Н. Варченко, С.М. Гусейн-Заде. *Особенности дифференцируемых отображений*. Издание второе, испр. (МЦ-НМО, М., 2004), 672 с.
- [3] Р. Гилмор. *Прикладная теория катастроф* (Наука, М., 1981), т. 1, 2.
- [4] А.Н. Веренчиков, М.И. Явор. Научное приборостроение. **14** (2), 38 (2004).
- [5] Электронный ресурс. режим доступа: <http://www.scilab.org>.