

УДК 535.31: 621.384.8

© Т. В. Помозов, М. И. Явор

## БЕССЕТОЧНЫЙ ОРТОГОНАЛЬНЫЙ УСКОРИТЕЛЬ ДЛЯ МНОГООТРАЖАТЕЛЬНЫХ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ МАСС-АНАЛИЗАТОРОВ

На основе численного моделирования предложена конструкция полностью бессеточного ортогонального ускорителя для многоотражательных времяпролетных масс-анализаторов, характеризующаяся малыми абберациями времени пролета пакетов ионов.

*Кл. сл.:* времяпролетный масс-анализатор, ортогональный ускоритель, абберации времени пролета

### ВВЕДЕНИЕ

В современной масс-спектрометрии большинство используемых ионных источников являются непрерывными. Согласование времяпролетных масс-анализаторов с такими источниками осуществляется посредством применения импульсных конвертеров, преобразующих стационарный поток ионов в импульсные пакеты. Наиболее широко используемым импульсным конвертером в настоящее время является ортогональный ускоритель, в котором узкий непрерывный ионный пучок пропускается в пространстве между двумя электродами и периодически ускоряется однородным электрическим полем в перпендикулярном направлении [1].

Традиционная конструкция ортогонального ускорителя предусматривает наличие трех сеточных электродов, два из которых предназначены для экранирования области движения непрерывного пучка заряженных частиц от постоянного ускоряющего поля в промежутки времени между выталкивающими импульсами, а третий (обычно выполняемый в виде двойной сетки) отделяет однородное поле ускорителя от пространства дрейфа (рис. 1). Использование сеток неизбежно сопровождается целым рядом негативных эффектов: малоугловым рассеянием ионных пакетов на неоднородностях поля вблизи сеток, вызывающим уширение временной длительности сигнала в плоскости детектора ("хвосты" пиков спектра), уменьшением трансмиссии ионов, обусловленным конечной прозрачностью сеточных электродов и рассеянием на большие углы, эффектами зарядки, нагревом и фрагментацией заряженных частиц.

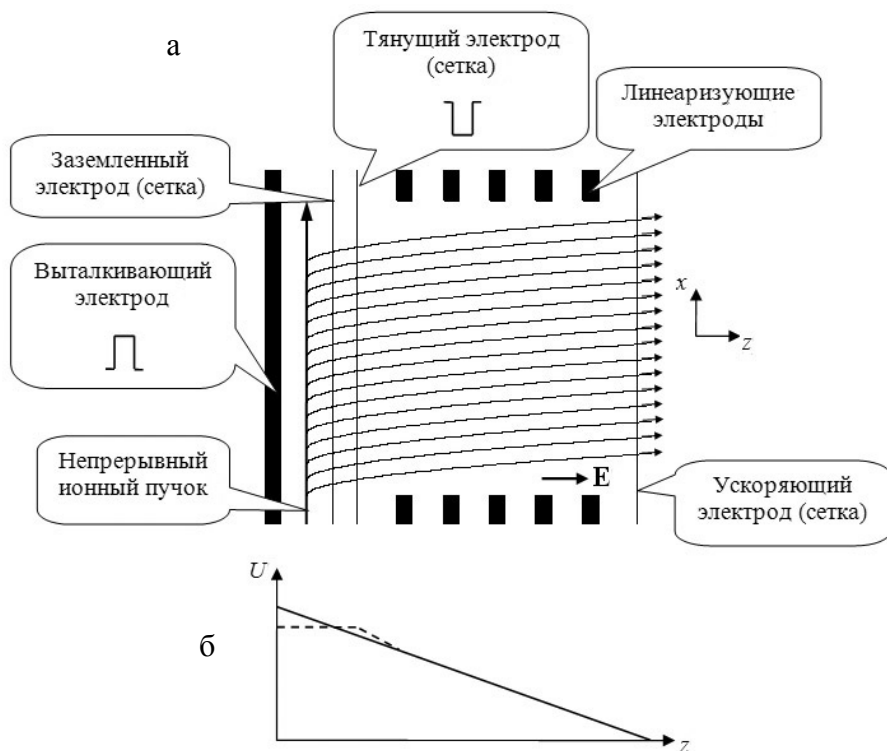
Малоугловое рассеяние ионных пакетов имеет место на всех сеточных электродах ортогонального ускорителя. Рассеяние заряженных частиц на ускоряющем электроде, отделяющем однородное

поле на выходе из ортогонального ускорителя от дрейфового пространства, обусловлено скачком напряженности электростатического поля вблизи сеточного электрода. В этом случае каждая ячейка сетки действует как слабая нелинейная дефокусирующая ионная линза. Степень рассеяния ионов может быть уменьшена только путем использования более мелкоструктурных сеток, однако при этом уменьшается их прозрачность.

Эффекты рассеяния на сеточных электродах входной (импульсной) части ускорителя могут возникать вследствие осаждения на них заряженных частиц. Поскольку кинетическая энергия ионов в области их начального ускорения относительно невелика, зарядка сеток может вносить существенный вклад в угловое расхождение ионных пакетов. При этом наибольшее воздействие на ионные пакеты должно оказывать загрязнение заземленного сеточного электрода, где кинетическая энергия ионов минимальна. Влияние зарядки последующих сеток ускорителя является существенно меньшим.

Для многоотражательных времяпролетных масс-анализаторов с бессеточными ионными зеркалами, обладающими небольшим угловым акцептансом [2], наиболее существенным из перечисленных недостатков является рассеяние пучка ионов на сетках ускорителя, приводящее к потере чувствительности прибора. Таким образом, эффективное использование подобных ионных зеркал требует отсутствия сеточных электродов в конструкции импульсного конвертера.

Принципиальные схемы бессеточных ортогональных ускорителей предлагались в работах [3, 4], однако в этих работах не рассматривались эффекты уширения временной длительности ионных пакетов в неоднородных полях таких систем и вариаций потенциала в области движения непрерывного пучка в моменты времени между экстрагирующими импульсами. В настоящей работе



**Рис. 1.** Схема ортогонального ускорителя с сеточными электродами (а) и распределения потенциала (б) вдоль направления выталкивания в режиме экстракции (сплошная линия) и в промежутках времени между экстрагирующими импульсами (пунктирная линия)

предложена новая конструкция бессеточного ортогонального ускорителя, полученная на основе тщательной оптимизации электродных конфигураций его входного и выходного каскадов. Численное моделирование электростатического поля и траекторий заряженных частиц проводилось с помощью программы SIMION 8.0 [3].

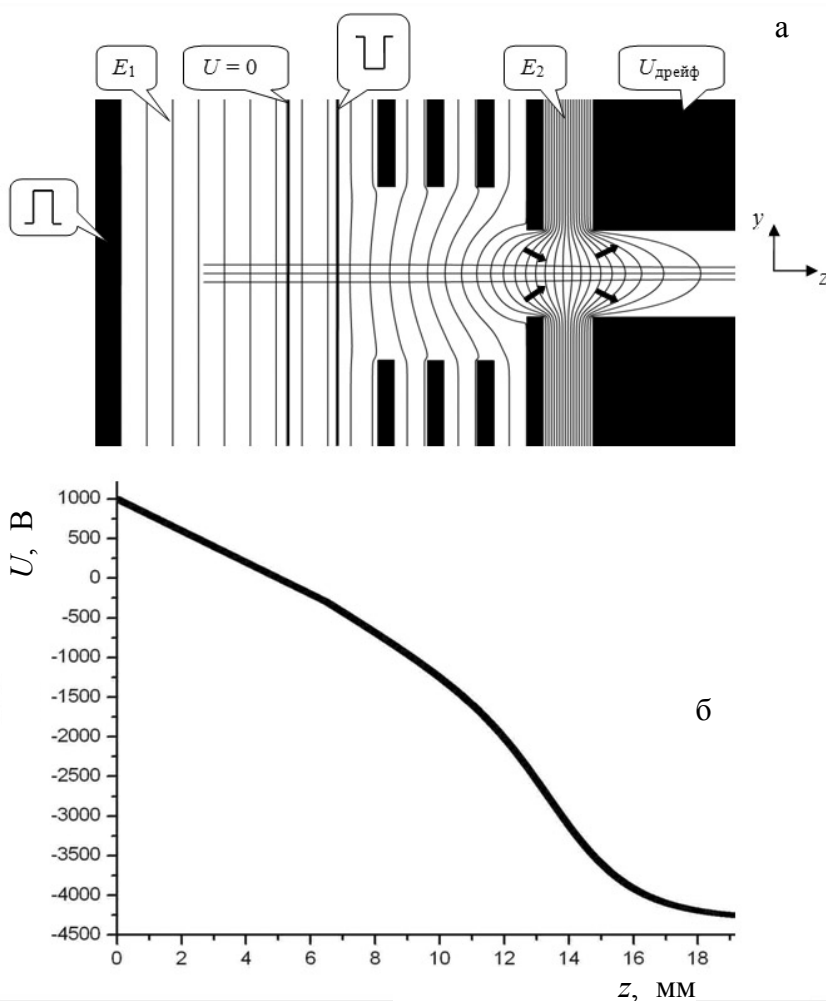
### ОПТИМИЗАЦИЯ ВЫХОДНОЙ ЧАСТИ ОРТОГОНАЛЬНОГО УСКОРИТЕЛЯ

Оптимизацию электродной конфигурации бессеточного ортогонального ускорителя удобно осуществить путем отдельной оптимизации геометрий его входной (импульсной) и выходной частей. Поскольку все электроды конвертера, за исключением выталкивающего, представляют собой щелевые диафрагмы, вытянутые в направлении движения стационарного пучка заряженных частиц, то отказ от использования сетки, отделяющей однородное поле от дрейфа, приводит к образованию в плоскости  $yz$ , перпендикулярной к направлению движения непрерывного пучка ионов, дефокусирующей линзы. Устранение возникающего расхождения ионного пучка возможно при создании на выходе ускорителя фокусирующей линзы, которая может быть реализована либо

при формировании областей с различной напряженностью поля, либо при помощи использования дополнительного фокусирующего электрода.

Первый вариант, показанный на рис. 2, при фиксированном потенциале дрейфа эквивалентен укорачиванию ортогонального ускорителя, при котором образуются смежные области с различной напряженностью электростатического поля, причем напряженность поля в выходной части конвертера ( $E_2$ ) превышает таковую в его основной части ( $E_1$ ). Таким образом, в выходной части конвертера формируется ускоряющая линза, входная часть которой фокусирует ионный пучок, а выходная дефокусирует. Кривизна эквипотенциалей линзы в дефокусирующей области больше, чем в области фокусировки, однако в последней заряженные частицы движутся с меньшими кинетическими энергиями и при больших радиальных координатах, так что при некотором соотношении напряженностей полей  $E_2 / E_1$  возможно осуществление сохранения параллельности выходящего из ускорителя пучка заряженных частиц.

Неоднородное поле ускоряющей линзы создает времяпролетные геометрические аберрации по пространственной координате  $y$ , уширяющие длительность временного сигнала ионных пакетов в плоскости первичного временного фокуса, создаваемого ускорителем. Если представить

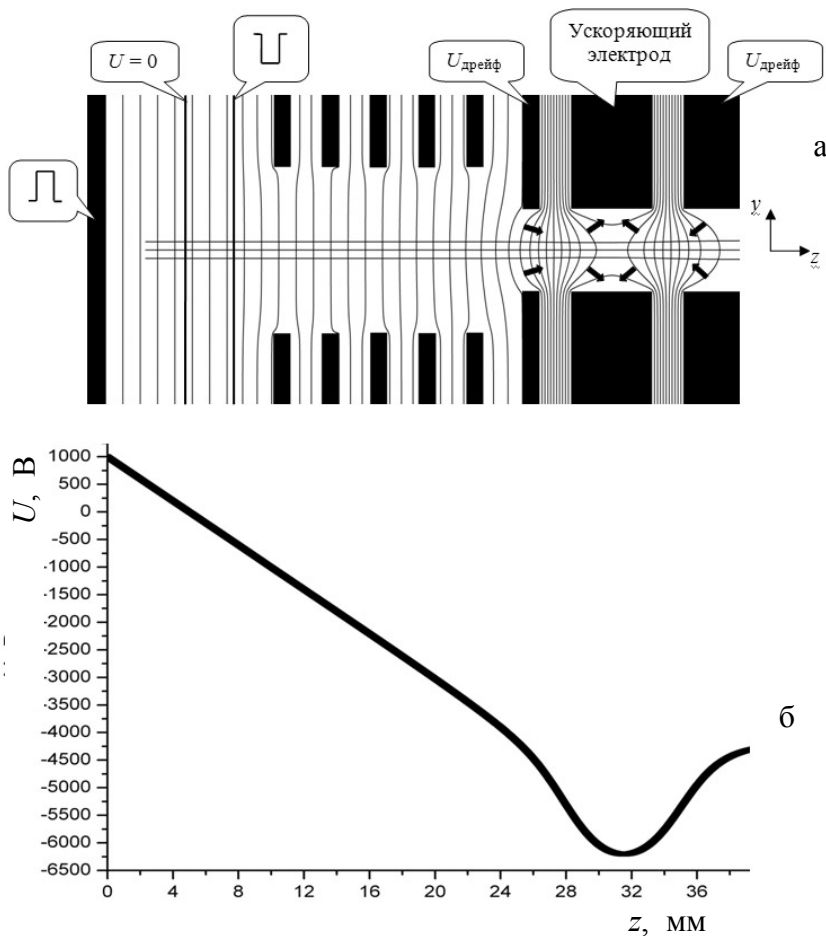


**Рис. 2.** Ортогональный ускоритель (а) с линзой, создаваемой на границе двух промежутков с различной напряженностью поля, и распределение потенциала (б) вдоль направления выталкивания в режиме экстракции. Стрелками обозначены направления сил, действующих на положительные ионы на различных участках линзы. Направление оси  $y$  здесь и на следующих рисунках соответствует направлению, перпендикулярному движению непрерывного ионного пучка (оси  $x$ )

зависимость времени пролета  $T$  через линзу от координаты  $y$  в виде абберационного разложения  $T = T_0 + (T|_{yy})y^2 + (T|_{yyy})y^4 + \dots$ , то доминирующий вклад в уширение временного сигнала вносит абберация второго порядка  $(T|_{yy})y^2$ . Например, в приведенной на рис. 2 схеме ортогонального ускорителя с напряженностью поля  $E_1 = 200$  В / мм и кинетической энергией заряженных частиц в дрейфе  $K_{дрейф} = 4800$  эВ абберационный коэффициент  $(T|_{yy})$  положителен и равен  $(T|_{yy}) \approx 1.36$  нс/мм<sup>2</sup> (здесь и далее приводятся значения абберации для заряженных частиц, стартующих из плоскости, проходящей через середину зазора (выталкивающий электрод—заземленная сетка)). Абберационный коэффициент  $(T|_{yy})$  уменьшается при увеличении кинетической энергии ионов и растет при повышении напряженности поля  $E_1$  в ускорителе. Так, при значениях энергии  $K_{дрейф} \approx 8200$  эВ и напряженности  $E_1 = 200$  В/мм его величина уменьшается до  $(T|_{yy}) \approx 0.36$  нс/мм<sup>2</sup>, а при

$K_{дрейф} \approx 8200$  эВ и  $E_1 = 300$  В/мм возрастает до  $(T|_{yy}) \approx 0.68$  нс/мм<sup>2</sup>.

Рассмотренный выше способ устранения пространственной дефокусировки ионных пакетов в ортогональном ускорителе с бессеточным выходом имеет существенные недостатки. Во-первых, для компенсации дефокусирующего действия линзы необходимо, чтобы отношение напряженности полей  $E_2 / E_1$  было достаточно велико (около 10). Данное условие означает сильное укорачивание ускорителя и, следовательно, близость сильного поля формируемой линзы к области движения непрерывного пучка. Во-вторых, подстройка линзы может быть осуществлена изменением либо кинетической энергии заряженных частиц в дрейфе, либо напряженности поля ускорителя, т. е. она невозможна без изменения параметров ионных пакетов на выходе конвертера. Наконец, величины времяпролетной абберации второго порядка по пространственной координате  $(T|_{yy})y^2$ , создаваемые полем такой линзы, достаточно велики



**Рис. 3.** Ортогональный ускоритель (а) с линзой, создаваемой дополнительным ускоряющим электродом, и распределение потенциала (б) вдоль направления выталкивания в режиме экстракции. Стрелками обозначены направления сил, действующих на положительные ионы на различных участках линзы

по сравнению с типичными значениями длительности временного сигнала ионных пакетов в плоскости первичного временного фокуса ортогонального ускорителя.

Альтернативный вариант устранения пространственной дефокусировки ионного пучка заключается в размещении дополнительного фокусирующего ускоряющего электрода в выходном каскаде импульсного конвертера между апертурами, находящимися под потенциалом дрейфа, как показано на рис. 3. Образующаяся при этом линза фокусирует заряженные частицы во входном и выходном участках поля и дефокусирует его в центральной части, так что при некоторой величине ускоряющего потенциала ионный пучок на выходе ускорителя остается параллельным.

Времяпролетная aberrация второго порядка по пространственной координате  $(T|yy)y^2$ , создаваемая в рассматриваемой схеме, положительная, однако она существенно меньше по сравнению с таковой в конвертере, где линза формируется внутри ускорителя на границе промежутков с различной

напряженностью поля. Так, при напряженности поля в ускорителе  $E = 200$  В/мм и энергии частиц в дрейфе  $K_{дрейф} \approx 4800$  эВ (рис. 3) величина aberrационного коэффициента составляет  $(T|yy) \approx 0.52$  нс/мм<sup>2</sup>. При увеличении кинетической энергии ионов до  $K_{дрейф} \approx 8200$  эВ этот коэффициент уменьшается до  $(T|yy) \approx 0.2$  нс/мм<sup>2</sup> и при напряженности поля в  $E = 300$  В/мм возрастает до  $(T|yy) \approx 0.32$  нс/мм<sup>2</sup>.

Вообще говоря, параллельный пучок заряженных частиц может быть получен и при подаче на фокусирующий электрод замедляющего потенциала, т. е. при создании замедляющей линзы, однако это приводит к резкому росту времяпролетной aberrации: например, при  $E = 200$  В/мм и  $K_{дрейф} \approx 4800$  эВ коэффициент aberrации составляет  $(T|yy) \approx 1.44$  нс/мм<sup>2</sup>. Поскольку геометрия выходной части ускорителя практически не оказывает влияния на величину aberrационного коэффициента  $(T|yy)$ , то наиболее целесообразным с точки зрения значения ускоряющего потенциала представляется использование симметричного ди-

зайна линзы, при котором протяженность линзового электрода совпадает с шириной межэлектродного зазора.

### ОПТИМИЗАЦИЯ ИМПУЛЬСНОЙ ЧАСТИ ОРТОГОНАЛЬНОГО УСКОРИТЕЛЯ

Замена сеточных земляного и тянущего электродов во входной (импульсной) части ортогонального ускорителя на бессеточные апертуры в традиционной схеме неизбежно приводит к проникновению постоянного ускоряющего поля в область локализации непрерывного ионного пучка в моменты времени между экстрагирующими импульсами, что нарушает прямолинейность его движения. Для предотвращения этого эффекта к импульсному тянущему электроду в указанные промежутки времени должен прикладываться некоторый достаточно значительный положительный потенциал, компенсирующий отрицательный потенциал ускоряющего поля конвертера. На рис. 4 показан возможный вариант схемы ортогонального ускорителя с бессеточной входной частью. Вариации потенциала на границе параллельного непрерывного ионного пучка диаметром  $d = 1$  мм, проходящего в середине зазора между выталкивающим и заземленным электродами, для напряженности поля в предложенной геометрии конвертера  $E = 300$  В/мм при различных значениях

потенциала на тянущем электроде приведены на рис. 5. Из графика рис. 5 видно, что оптимальное значение компенсирующего потенциала в рассматриваемом случае составляет около  $U \approx 135$  В.

Другим существенным эффектом, возникающим при отказе от использования сеток во входной части ортогонального ускорителя, является формирование линз в окрестностях заземленного и тянущего апертурных электродов, каждая из которых состоит из входного дефокусирующего и выходного фокусирующего полей (см. рис. 4). Линза тянущего электрода оказывает очень слабое влияние на ионный пучок ввиду его высокой энергии на соответствующем участке пути. В области линзы, создаваемой заземленной апертурой, кинетическая энергия ионов мала, и ее результирующее действие является дефокусирующим. Неоднородное поле в окрестности заземленного электрода создает отрицательную времяпролетную aberrацию второго порядка по пространственной координате  $(T|yy)y^2 < 0$ . В схеме ускорителя, показанной на рис. 4, при напряженности выталкивающего поля  $E = 200$  В/мм соответствующий aberrационный коэффициент равен  $(T|yy) \approx -0.6$  нс/мм<sup>2</sup>, причем величина aberrационного коэффициента  $(T|yy)$  не зависит от кинетической энергии заряженных частиц в дрейфе и несущественно уменьшается с ростом напряженности электростатического поля.

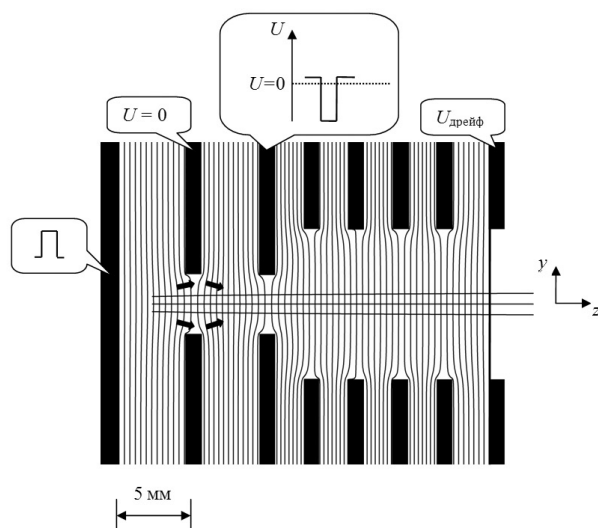


Рис. 4. Схема ортогонального ускорителя с бессеточной входной частью

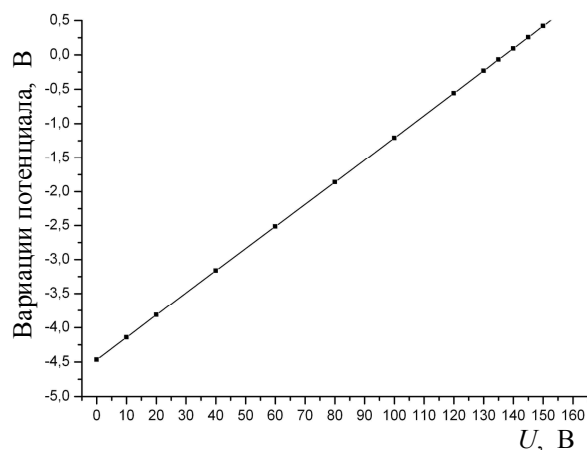
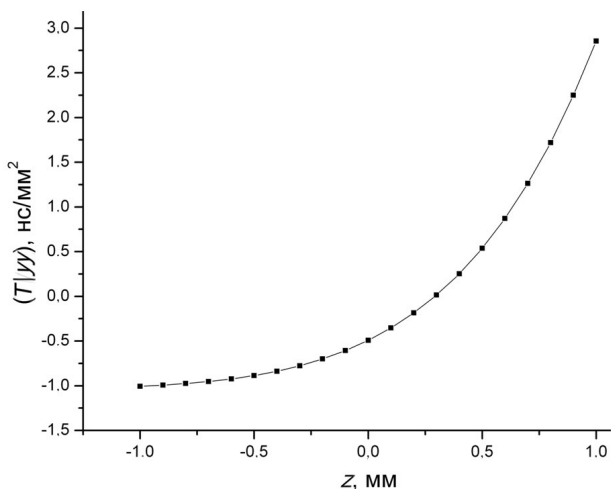


Рис. 5. Зависимость вариации потенциала на границе ионного пучка диаметра  $d = 1$  мм, проходящего в середине зазора между выталкивающим и заземленным электродами, от потенциала тянущего электрода в промежутки времени между экстрагирующими импульсами для ортогонального ускорителя, показанного на рис. 4, при напряженности выталкивающего поля  $E = 300$  В/мм



**Рис. 6.** Зависимость абберационного коэффициента  $(T|yy)$  от координаты  $z$  для ускорителя, изображенного на рис. 4, при напряженности выталкивающего поля  $E = 300$  В/мм. Координата  $z = 0$  соответствует середине зазора между выталкивающим и земляным электродами

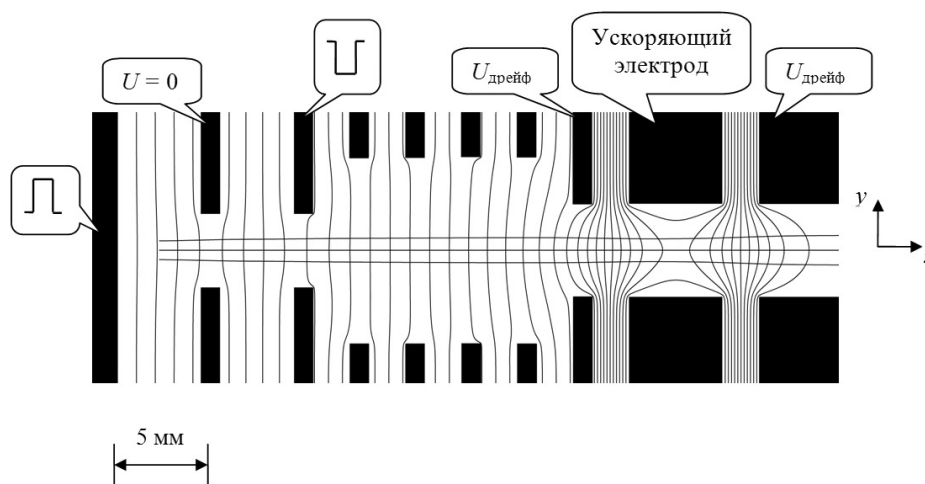
Отметим, что величина абберации  $(T|yy)u^2$ , формируемой бессеточной входной частью ортогонального ускорителя, достаточно сильно зависит от координаты старта ионов в направлении их выталкивания  $z$  ввиду маленькой энергии этих ионов в области линзы в окрестности заземленной апертуры. На рис. 6 приведена кривая зависимости

абберационного коэффициента  $(T|yy)$  от координаты  $z$  для конвертера, изображенного на рис. 4, при напряженности выталкивающего поля  $E = 300$  В/мм. Из рис. 6 видно, что при приближении к выталкивающему электроду величина абберации сохраняет свой знак и умеренно увеличивается по абсолютной величине. Однако при удалении от этого электрода абберационный коэффициент  $(T|yy)$  меняет свой знак (становится положительным) и начинает резко возрастать. Поэтому оптимальное положение непрерывного ионного пучка в зазоре между выталкивающим и заземленным электродами может не совпадать с серединой этого зазора. В реальности это положение определяется взаимной компенсацией рассматриваемой абберации второго порядка во входной и выходной частях ортогонального ускорителя.

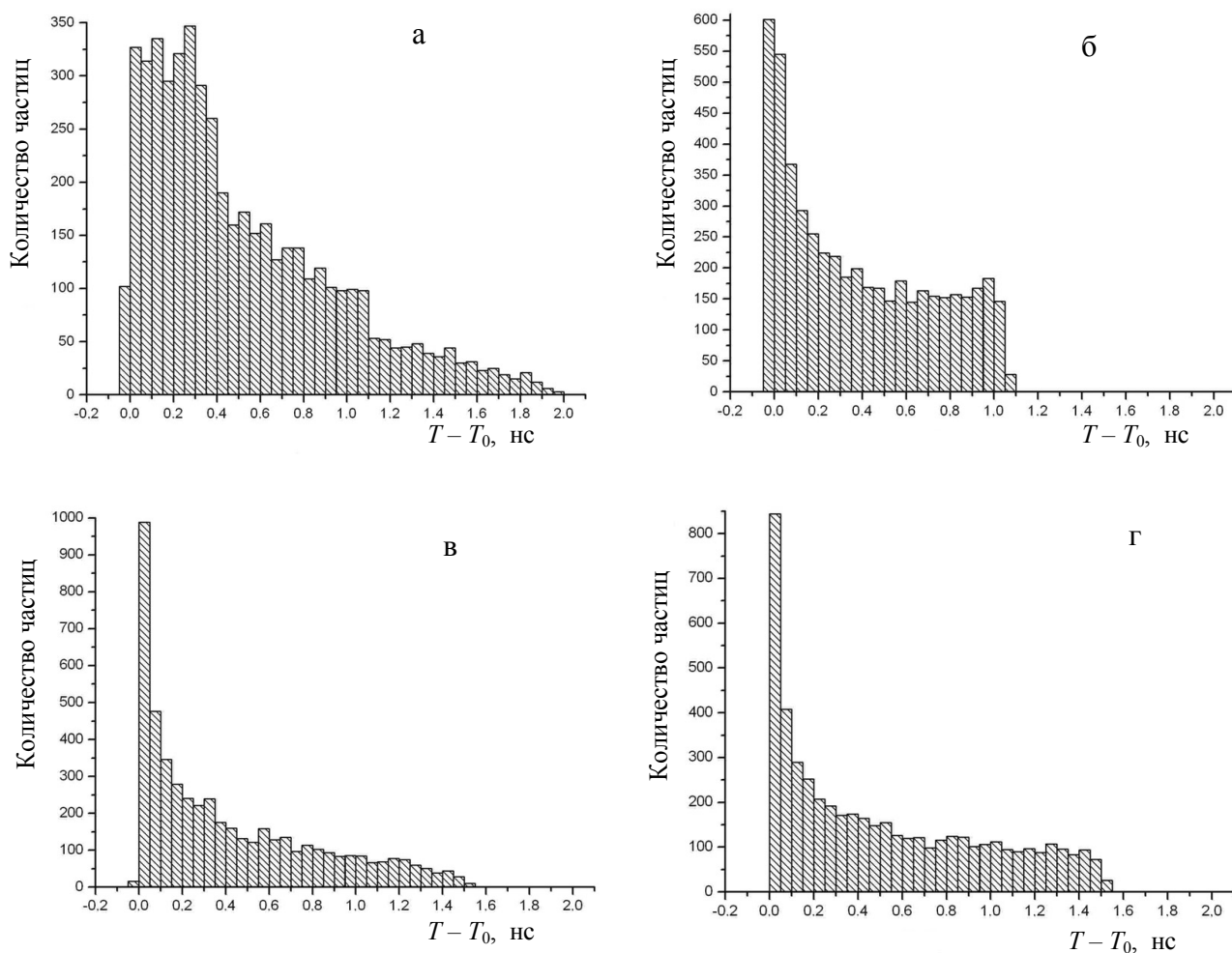
### ОРТОГОНАЛЬНЫЙ УСКОРИТЕЛЬ С БЕССЕТОЧНЫМИ ВХОДНОЙ И ВЫХОДНОЙ ЧАСТЯМИ

Объединение бессеточных входной и выходной частей приводит к схеме бессеточного ортогонального ускорителя, показанной на рис. 7.

При величине напряженности поля  $E = 300$  В/мм, которая соответствует кинетической энергии ионов в дрейфе  $K_{дрейф} = 6750$  эВ, времяпролетная абберация второго порядка по пространственной координате в плоскости первичного временного фокуса  $(T|\delta) = 0$ , формируемого ускорителем,



**Рис. 7.** Схема бессеточного ортогонального ускорителя



**Рис. 8.** Форма пика в плоскости первичного временного фокуса для бессеточного ускорителя рис. 7 при  $E = 300$  В/мм для ионного пучка диаметра  $d = 2$  мм без начального углового разброса и временное уширение сигнала, обусловленное энергоразбросом, при центральной инжекции (а, б) и при смещении координаты инжекции на 0.8 мм в направлении выталкивающего электрода (в, г)

положительна и ее коэффициент составляет  $(T|y|y) \approx 0.68$  нс/мм<sup>2</sup> для ионов, стартующих из центра зазора между выталкивающим и заземленным электродами. Форма пика в плоскости первичного временного фокуса для ионного пучка диаметром  $d = 2$  мм без начального разброса ионов по скоростям (т. е. без учета времени разворота) при такой "центральной" инжекции непрерывного пучка в ускоритель представлена на рис. 8, а. Вклад в этот пик временного уширения, обусловленного непосредственно энергетическим разбросом (без учета эффекта протяженности непрерывного пучка в направлении  $y$ ), показан на рис. 8, б. Из приведенных результатов видно, что времяпролетная aberrация второго порядка  $(T|y|y)^2$ , формируемая в выходной части ускорителя, существенно увеличивает временную длительность сигнала в первичном фо-

кусе как на полувысоте, так и по основанию.

Как было отмечено выше, эта aberrация может быть скомпенсирована за счет оптимизации положения непрерывного пучка ионов в зазоре между выталкивающим и земляным электродами. Для рассматриваемого конвертера такая компенсация осуществляется при сдвиге координаты инжекции приблизительно на 0.8 мм к выталкивающему электроду. На рис. 8, в, г, для ортогонального ускорителя со смещенной инжекцией показаны форма временного пика (без учета времени разворота ионов) в плоскости первичного фокуса и уширение временного сигнала вследствие энергетического разброса ионов соответственно, демонстрирующие пренебрежимо малый вклад времяпролетной aberrации по высоте непрерывного пучка. Остающийся вклад aberrации второго по-

рядка времени пролета по энергии может быть скомпенсирован ионным зеркалом времяпролетного анализатора.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные в работе расчеты показывают, что возможно формирование полностью бессеточных ортогональных ускорителей с малыми искажениями формируемого временного сигнала. При этом сравнение двух способов устранения пространственной дефокусировки ионов в выходной части ускорителя показывает, что оптимальным вариантом, обеспечивающим независимую настройку линзы и наименьшие величины времяпролетной aberrации второго порядка по пространственной координате, является размещение в выходном каскаде конвертера фокусирующего ускоряющего электрода. Дальнейшее уменьшение вклада указанной aberrации возможно за счет компенсации этой aberrации во входной и выходной частях ускорителя.

*Авторы выражают благодарность А.Н. Веренчикову и С.Н. Кириллову за полезные обсуждения.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Додонов А.Ф., Чернушевич И.В., Додонова Т.Ф. и др. Метод времяпролетного масс-спектрометрического анализа из непрерывных ионных пучков. А.с. 1681340А1, 1987.
2. Помозов Т.В., Явор М.И. О возможности улучшения характеристик планарных бессеточных ионных зеркал // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 2. С. 90–97.
3. Makarov A. A time of flight mass spectrometer including an orthogonal accelerator. Patent WO 01/11660 A1, filed Aug. 4, 2000.
4. Franzen J. Gridless time-of-flight mass spectrometer for orthogonal ion injection. Patent US 2001/0011703 A1, filed Feb. 7, 2001.
5. Manura D.J., Dahl D.A. SIMION™ 8.0 User Manual. Sci. Instrument Services, Inc., Idaho Nat. Lab., 2006.

*Институт аналитического приборостроения РАН,  
г. Санкт-Петербург*

Контакты: Явор Михаил Игоревич,  
mikhail.yavor@gmail.com

Материал поступил в редакцию 24.10.2011.

## GRIDLESS ORTHOGONAL ACCELERATOR FOR MULTI-REFLECTING TIME-OF-FLIGHT MASS ANALYZERS

**T. V. Pomozov, M. I. Yavor**

*Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg*

Based on numerical simulation a design of fully gridless orthogonal accelerator is proposed for multi-reflecting time-of-flight mass analyzers characterized by small flight time aberrations of ion packets.

*Keywords:* time-of-flight mass analyzer, orthogonal accelerator, flight time aberrations