

УДК 537.534.7, 537.291

© И. В. Курнин, 2020

**ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМА РАБОТЫ ТРЕХСЕТОЧНОГО
ЗАТВОРА ИОН-ДРЕЙФОВОГО СПЕКТРОМЕТРА**

Влияние характеристик трехсеточного затвора и режимов его работы было рассмотрено с целью получить на выходе короткий ионный импульс с максимально возможной амплитудой для повышения разрешающей способности ион-дрейфового спектрометра. В результате проведенного моделирования было показано, что существует оптимальная для рассматриваемых условий длительность открытия затвора, которой отвечает узкий выходной ионный пик максимальной амплитуды. Показано, что существует оптимальное для рассматриваемых условий значение величины выталкивающего потенциала. Ширина ионного импульса уменьшается с уменьшением разности потенциалов между второй и третьей сетками, при этом высота узкого пика будет максимальной, если время дрейфа иона между сетками 2–3 будет примерно равно длительности открытия затвора.

Кл. сл.: ионный затвор, разрешающая способность, ион-дрейфовый спектрометр

ВВЕДЕНИЕ

Одним из важных элементов ион-дрейфового спектрометра, определяющим разрешающую способность прибора, является ионный затвор, поскольку именно затвор формирует общий ионный импульс для последующей сепарации ионов по подвижности. В настоящее время для формирования ионного импульса широко применяются такие типы затворов, как Бредбери—Нильсена, Тиндалла—Пауэлла, применяется метод импульсного выталкивания ионов от источника [1].

Трехсеточный ионный затвор ион-дрейфового спектрометра был предложен в работе [2]. В этой работе экспериментально показано, что данный тип затвора имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционно используемыми в ион-дрейфовой спектрометрии затворами, такими как, например, Бредбери—Нильсена. В частности было показано, что использование такого типа затвора по сравнению с затвором Бредбери—Нильсена дает возможность повысить разрешение ион-дрейфового спектрометра.

Затвор представляет собой последовательность из трех параллельных сеток (рис. 1). В режиме накопления ионов потенциал средней сетки ниже остальных, и поэтому ионы дальше не проходят. При экстракции ионов потенциалы первой (входной) и второй сеток импульсно увеличивают, при этом потенциал первой сетки обеспечивает выталкивание ионов из области накопления, а превышение потенциала второй сетки относительно третьей непосредственно открывает затвор. В результате формируется выходной ионный импульс. Значения

потенциалов на сетках, расстояние между нитями ионных сеток, их взаимное расположение, длительность открывающего импульса, значения коэффициентов подвижности исследуемых ионов определяют параметры выходного ионного импульса.

Поскольку преимущество было экспериментально продемонстрировано для конкретных условий, то в связи с этим представляет интерес рассмотреть влияние характеристик затвора и режимов его работы на получение на выходе короткого ионного импульса максимально возможной амплитуды, что обеспечивало бы повышение разрешающей способности ион-дрейфового спектрометра. Этому вопросу и посвящена данная работа.

РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ

Моделирование режимов работы затвора проводилось в пакете SIMION 7 [3]. Для расчета динамики ионов в газе при атмосферном давлении и сильных электрических полях использовалась разработанная ранее модель [4], реализованная в prg-программе [5]. В программе учитывается диффузия иона в плотном газе и посредством коэффициента подвижности — его движение в электрическом поле. Особенность этой программы состоит в том, что в ней коэффициент подвижности иона берется согласно модели [4] и характеризуется временем между столкновениями иона с частицами газа, точно соответствующим поляризованному механизму взаимодействия в слабых полях, и при этом в модели определена зависимость коэффициента подвижности от скорости иона в сильных электрических полях, что позволяет корректно

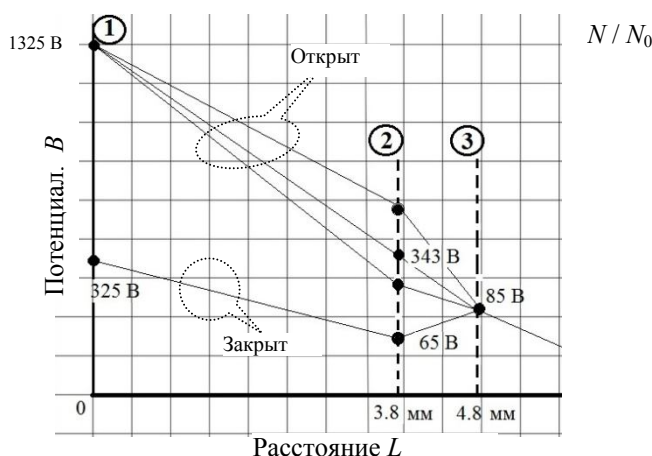


Рис. 1. Трехсеточный ионный затвор: геометрия и распределение потенциалов на сетках затвора в закрытом и открытом режимах. 1, 2, 3 — сетки затвора

описывать движение иона в плотном газе при наличии таких полей. Однако для того, чтобы исследовать непосредственно свойства затвора, поляризационные коэффициенты подвижности ионов K_0 в данном случае были фиксированы.

УСЛОВИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Влияние характеристик трехсеточного затвора и режимов его работы было рассмотрено с целью получить на выходе короткий ионный импульс с максимально возможной амплитудой для повышения разрешающей способности ион-дрейфового спектрометра. Моделирование проводилось для нормальных условий.

Расстояние между первой (выталкивающей) и второй (запирающей) сетками бралось равным 3.8 мм, третья сетка отстояла от второй на расстоянии 1 мм. В закрытом состоянии затвора потенциал первой сетки затвора равнялся 325 В, второй — 65 В, третьей — 85 В (рис. 1). Поскольку потенциал второй сетки ниже потенциала третьей, то ионы дальше не проходят. При открытии затвора потенциалы на первой и второй сетках "подкидываются", на третьей потенциал не меняется и оказывается ниже потенциала на второй (рис. 1). В результате ионы, находящиеся на момент открытия затвора между первой и второй сетками, выталкиваются за плоскость сначала второй, а затем и третьей сетки. В зависимости от времени (длительности) открытия затвора и динамики ионов формируются ионные импульсы с различными характеристиками. Напряженность тянущего поля

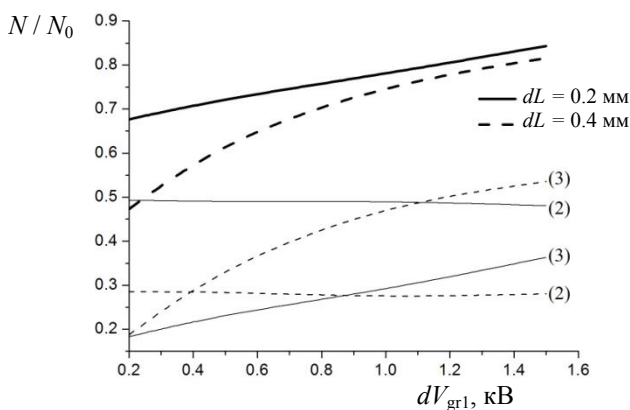


Рис. 2. Зависимость полных потерь ионов (немаркированные линии) и отдельно на второй (2) и третьей (3) сетках от величины выталкивающего потенциала (импульсной добавки на первой сетке) $dV_{gr1} + 200, 500, 1000$ и 1500 В для затворов с расстояниями dL между нитями сеток 0.2 и 0.4 мм

дрейфа за третьей сеткой составляла 51 В/мм. Диаметр нитей сеток принимался равным 0.05 мм. Рассматривались сетки с разными расстояниями между нитями, а именно 0.2 мм и 0.4 мм. Регистрация выходящего ионного импульса производилась на расстоянии 1.2 мм от третьей сетки.

ПРОПУСКНАЯ СПОСОБНОСТЬ ЗАТВОРА

Для того чтобы оценить эффективность экстракции ионов из затвора и пропускную способность сеток в зависимости от их "плотности", а также для оценки характерных времен экстракции рассматривался режим полного выталкивания ионов из области затвора, при котором мгновенно увеличивался потенциал первой сетки, а открывающий потенциал на второй сетке определялся линейной зависимостью между выталкивающим потенциалом на первой сетке и фиксированным потенциалом в 85 В на третьей сетке. На рис. 2 представлена зависимость полных потерь ионов и отдельно на второй и третьей сетках от величины выталкивающего потенциала для затворов с расстояниями между нитями сеток $dL = 0.2$ и 0.4 мм. Видно, что по мере увеличения выталкивающего потенциала общие уровни потерь растут и сближаются для сеток с расстояниями между нитями 0.2 и 0.4 мм. При этом потери на второй сетке оказываются пропорциональными ее "плотности". Потери на третьей сетке с повышением выталкивающего потенциала больше в случае расстояния 0.4 мм. При поперечном смещении третьей сетки на половину расстояния между нитями ионные

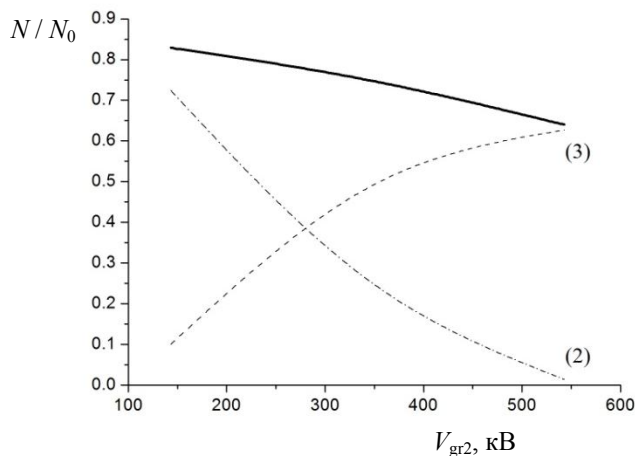


Рис. 3. Зависимость ионных потерь для $dL = 0.4$ мм от величины потенциала на второй сетке при неограниченном по времени открытии затвора (потенциал на первой 1325 В). Немаркированная кривая — общие потери; (2), (3) — потери на сетках 2 и 3

потери в обоих случаях возрастают в 1.5 раза, что говорит о важности взаимного расположения сеток, обеспечивающего максимальную "прозрачность".

Для открытия затвора важно, чтобы потенциал на второй сетке был выше потенциала третьей. При этом необязательно, чтобы значение его потенциала соответствовало линейной зависимости (согласно расстояниям между сетками) между выталкивающим потенциалом на первой сетке и фиксированным потенциалом на третьей сетке. При повышении потенциала на первой сетке на 1000 В (до 1325 В) и постоянном потенциале на третьей (85 В) линейной зависимости отвечает потенциал на второй сетке 343 В, который возрастает с величины 65 В. На рис. 3 представлена зависимость ионных потерь для $dL = 0.4$ мм от величины потенциала на второй сетке при неограниченном по времени открытии затвора (потенциал на первой 1325 В). Видно, что общие потери на затворе с увеличением потенциала на второй сетке немного падают. Соответственно на второй сетке они уменьшаются, а на третьей — увеличиваются согласно изменению разности потенциалов между сетками 1—2 и 2—3.

ОПТИМАЛЬНАЯ ШИРИНА ФОРМИРУЕМОГО ЗАТВОРОМ ИОННОГО ИМПУЛЬСА

С целью определения оптимальной ширины выходного ионного импульса при моделировании варьировалась длительность открытия затвора

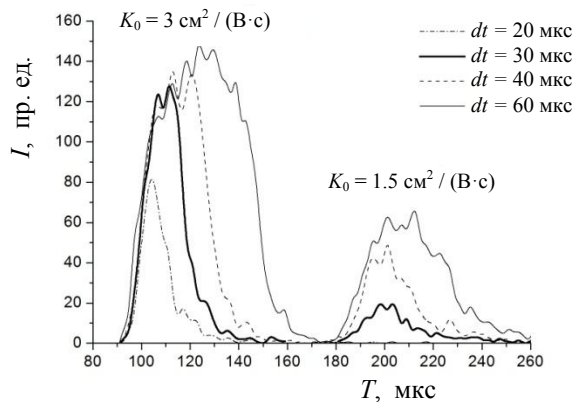


Рис. 4. Временные профили ионных импульсов, регистрируемые за плоскостью третьей сетки в зависимости от длительности открытия затвора

$dt = 20$ – 60 мкс при фиксированном потенциале экстракции на первой сетке $V_{gr1} = 1325$ В (+1000 В в импульсе) и открывающем потенциале на второй сетке, соответствующем линейной зависимости. Шаг нитей сетки $dL = 0.2$ мм. Рассматривались ионы с фиксированными коэффициентами подвижности $K_0 = 1.5$ и 3 $\text{cm}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$. На рис. 4 приведены временные профили ионных импульсов, регистрируемые на расстоянии 1.2 мм за плоскостью третьей сетки, в зависимости от длительности открытия затвора. Видно, что существует оптимальная длительность открытия затвора, которой отвечает узкий выходной ионный пик максимальной амплитуды. Для моделируемых условий величина оптимальной длительности открытия затвора составляет 30 мкс. При этом ионный пик, формируемый ионами с меньшим коэффициентом подвижности, оказывается значительно меньшим по высоте, а соответствующее значение оптимальной длительности открытия затвора — больше.

ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ФОРМИРУЕМОГО ИОННОГО ИМПУЛЬСА ОТ ПЛОТНОСТИ СЕТОК

Приведенные на рис. 5 временные профили ионных импульсов, полученные с сетками разной плотности ($dL = 0.2$ и 0.4 мм), показывают, что чем меньше расстояние между нитями затвора, тем более узкий пик получается на выходе, поскольку меньшее провисание полей между нитями определяет более крутые фронты ионных

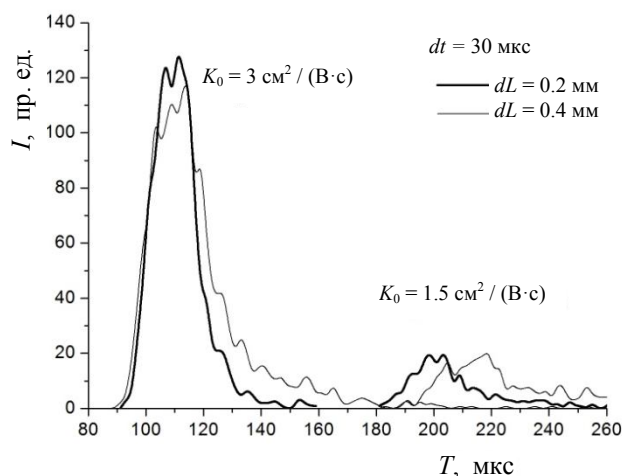


Рис. 5. Временные профили ионных импульсов, регистрируемые за плоскостью третьей сетки для затворов с расстоянием между нитями сеток 0.2 и 0.4 мм при длительности открытия затвора 30 мкс. Приведены импульсы ионов с коэффициентами подвижности 1.5 и $3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$

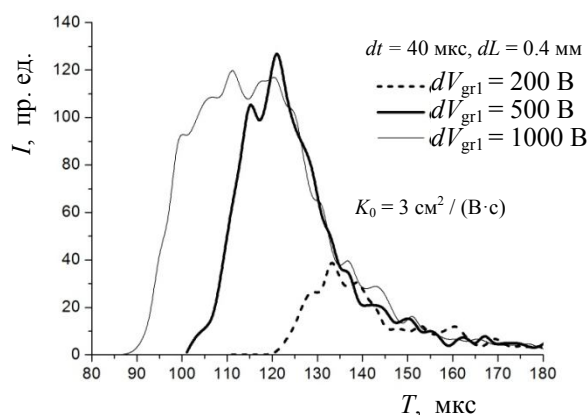


Рис. 6. Временные профили ионных импульсов на выходе затвора для разных значений потенциала выталкивания

импульсов. Приведены импульсы ионов с коэффициентами подвижности 1.5 и $3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ИОННОГО ИМПУЛЬСА ОТ ВЫТАЛКИВАЮЩЕГО ПОТЕНЦИАЛА

С увеличением напряженности выталкивающего электрического поля за время открытия затвора будет проходить большее число ионов. Однако, начиная с какого-то значения потенциала выталкивания, ширина ионного импульса на выходе затвора будет соответствовать длительности его открытия за счет большей стартовой скорости ионов. Поэтому существует оптимальное при данных условиях значение выталкивающего потенциала, при котором выходной ионный импульс будет еще коротким, но уже достаточно высоким. На рис. 6 представлены временные профили ионных импульсов на выходе затвора для разных значений потенциала выталкивания (потенциал на второй сетке линейен). Видно, что для условий моделирования оптимальным значением потенциала выталкивания является $V_{gr1} = 825 \text{ В} (+500 \text{ В})$.

ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ИОННОГО ИМПУЛЬСА ОТ РАЗНОСТИ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖДУ ВТОРОЙ И ТРЕТЬЕЙ СЕТКАМИ

Для определения влияния разности потенциалов между второй и третьей сетками на характери-

стики выходного ионного импульса величина напряжения на второй сетке варьировалась относительно линейного значения 343 В (при потенциале экстракции на первой сетке $V_{gr1} = 1325 \text{ В}$, $dt = 40 \text{ мкс}$, $dL = 0.4 \text{ мм}$, $K_0 = 3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$). На рис. 7 представлены временные профили ионных импульсов на выходе затвора для разных значений потенциала второй сетки. Видно, что ширина ионного импульса уменьшается с уменьшением разности потенциалов между второй и третьей сетками. Однако с уменьшением ширины высота ионного импульса начинает спадать не сразу, а лишь после того, как время дрейфа иона между сетками 2—3, обратно пропорционально зависящее от разности потенциалом между ними, не сравняется с длительностью открытия затвора. В результате определяется оптимальное значение потенциала на второй сетке, которому при заданных условиях отвечает короткий выходной ионный импульс с максимально возможной высотой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведено моделирование режимов работы трехсеточного ионного затвора ион-дрейфового спектрометра. Показано влияние характеристик затвора и режимов его работы на получение на выходе короткого ионного импульса максимально возможной амплитуды. А именно:

- показан уровень ионных потерь в зависимости от расстояния между нитями сеток затвора

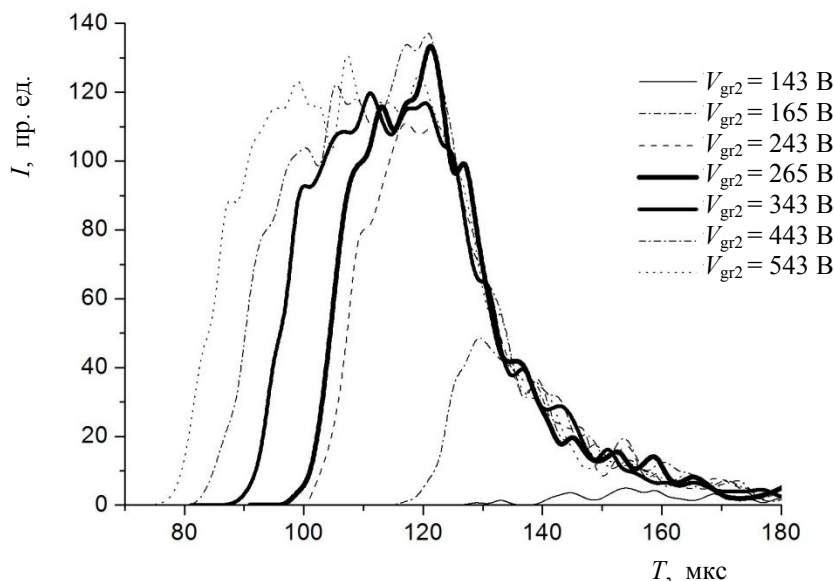


Рис. 7. Временные профили ионных импульсов на выходе затвора для разных значений потенциала второй сетки. $V_{gr1} = 1325$ В, $dt = 40$ мкс, $dL = 0.4$ мм, $K_0 = 3$ см² / (В·с)

и поперечного смещения одной из сеток (второй или третьей) от величины выталкивающего потенциала;

- существует оптимальная для рассматриваемых условий длительность открытия затвора, которой отвечает узкий выходной ионный пик максимальной амплитуды;

- меньшее расстояние между нитями сеток обуславливает более узкий ионный пик на выходе затвора;

- существует оптимальное для рассматриваемых условий значение величины выталкивающего потенциала, которому соответствует узкий выходной ионный пик максимальной амплитуды;

- ширина ионного импульса уменьшается с уменьшением разности потенциалов между второй и третьей сетками, при этом высота узкого пика будет максимальной, если время дрейфа иона между сетками 2–3 будет примерно равно длительности открытия затвора.

Работа частично выполнена в рамках НИР 0074-2019-0009 (номер гос. регистрации АААА-А19-119053190069-2), входящей в состав гос. задания № 075-00780-19-02 ИАП РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Eiceman G.A., Karpas Z., Hill H.H.Jr. Ion mobility spectrometry. Boca Raton: CRC Press, 2013. 428 p.
2. Zühlke M., Zenichowski K., Riebe D., Beitz T., Löhmannsröben H.-G. An alternative field switching ion gate for ESI-ion mobility spectrometry // International journal for ion mobility spectrometry. 2017. Vol. 20, no. 3-4, P. 67–73. DOI: 10.1007/s12127-017-0222-y
3. Dahl D.A. SIMION 3D V. 7.0 User's manual. Idaho National Eng. Envir. Lab, 2000. 480 p.
4. Курнин И.В., Явор М.И. Модель движения в вязкой среде со статистической диффузией для расчета динамики ионов в плотном газе и сильных электрических полях // Научное приборостроение. 2015. Т. 25, № 3. С. 29–34. URL: <http://iairas.ru/mag/2015/abst3.php#abst4>
5. Курнин И.В. Универсальная модель для расчета динамики ионов в плотном газе и сильных электрических полях // Научное приборостроение. 2018. Т. 28, № 3. С. 118–123. URL: <http://iairas.ru/mag/2018/abst3.php#abst15>

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург*

Контакты: Курнин Игорь Васильевич,
igor.kurnin@gmail.com

Материал поступил в редакцию 21.01.2020

OPTIMIZATION OF THE OPERATION MODE OF THE THREE-GRID ION GATE OF THE ION-MOBILITY SPECTROMETER

I. V. Kurnin

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia

The performance of the three-grid gate and its operating modes was being considered in terms of obtaining a short ion pulse with the maximum possible amplitude to increase the resolution of the ion-mobility spectrometer. As a result of the simulation, it was shown that there is an optimal shutter opening duration for the conditions under consideration, which corresponds to a narrow output ion peak of maximum amplitude. A smaller distance between the wires of the grids causes a narrower ion peak at the gate exit. It is shown that there exists an optimal value of the pushing out potential for the conditions under consideration. The width of the ion pulse decreases with a decrease in the potential difference between the second and third grids, while the height of the narrow peak will be maximum if the ion drift time between the grids 2–3 is approximately equal to the duration of the shutter opening.

Keywords: ion gate, resolving power, ion-mobility spectrometer

REFERENCES

1. Eiceman G.A., Karpas Z., Hill H.H.Jr. *Ion mobility spectrometry*. Boca Raton, CRC Press, 2013. 428 p.
2. Zühlke M., Zenichowski K., Riebe D., Beitz T., Löhmansröben H.-G. An alternative field switching ion gate for ESI-ion mobility spectrometry. *International journal for ion mobility spectrometry*, 2017, vol. 20, no. 3-4, pp. 67–73. DOI: 10.1007/s12127-017-0222-y
3. Dahl D.A. *SIMION 3D V. 7.0 User's manual*. Idaho National Eng. Envir. Lab., 2000. 480 p.
4. Kurnin I.V., Yavor M.I. [Model of motion in a viscous media with a statistic diffusion for calculation of ion dynamics in a dense gas and strong electric fields]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2015, vol. 25, no. 3, pp. 29–34. DOI: 10.18358/np-25-3-i2934 (In Russ.).
5. Kurnin I.V. [Model for simulation of ion dynamics in a dense gas and strong electric fields]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2018, vol. 28, no. 3, pp. 118–123. DOI: 10.18358/np-28-3-i118123 (In Russ.).

Contacts: *Kurnin Igor' Vasil'evich*,
igor.kurnin@gmail.com

Article received by the editorial office on 21.01.2020