

УДК 621.384.668.8: 537.534.3

© И. В. Курнин, В. А. Самокиш, Н. В. Краснов

ОПТИМАЛЬНЫЙ РЕЖИМ РАБОТЫ ЗАТВОРА БРЕДБЕРИ—НИЛЬСЕНА В ИОН-ДРЕЙФОВОМ СПЕКТРОМЕТРЕ

С целью оптимизации параметров и повышения разрешающей способности ион-дрейфового спектрометра с затвором Бредбери—Нильсена рассмотрена работа затвора в режиме, при котором потенциалы соседних нитей закрытого затвора мгновенно переключаются. Хотя в этом случае затвор формально считается закрытым, имеет место пропускание импульса ионного тока. С помощью моделирования показано, что при определенном расстоянии между нитями затвора ионный импульс имеет минимальную ширину, а его амплитуда составляет 0.3–0.5 от уровня ионного тока, проходящего через открытый затвор. Рассмотрено влияние неидеальности, т. е. временной задержки режима "мгновенного" переключения.

Кл. сл.: ион-дрейфовый спектрометр, затвор Бредбери—Нильсена, разрешающая способность

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время ион-дрейфовая спектроскопия находит широкое применение в приборах различного назначения [1]. Главными отличительными факторами приборов, основанных на принципах ион-дрейфовой спектроскопии, являются высокая чувствительность, быстродействие, относительная простота самого устройства и его эксплуатации. Однако относительно невысокая разрешающая способность ограничивает возможности анализа. Поэтому поиск решений, которые дали бы возможность существенно повысить разрешающую способность ион-дрейфового спектрометра, представляет собой актуальную задачу. Одним из важных элементов ион-дрейфового спектрометра является затвор Бредбери—Нильсена [2]. Затвор представляет собой последовательность параллельных электропроводящих нитей, расположенных в одной плоскости, причем разность потенциалов между соседними нитями может меняться во времени. Затвор заперт, т. е. не пропускает ионный ток, при определенной разности потенциалов между соседними нитями. Когда потенциалы нитей на некоторое время (на длительность управляющего импульса) выравниваются, затвор открывается. Минимизация длительности прошедшего ионного импульса обуславливает повышение разрешающей способности ион-дрейфового спектрометра. В [3] с помощью численного моделирования показано, что в зависимости от параметров затвора существует оптимальная длительность его открытия, которая обеспечивает минимальную длительность ионного импульса при сохранении максимальной амплитуды.

В настоящей работе с целью оптимизации параметров и повышения разрешающей способности

ион-дрейфового спектрометра с затвором Бредбери—Нильсена рассмотрен не изученный ранее теоретически и экспериментально режим работы затвора, в котором управление работой производится не временным импульсным выравниванием потенциалов нитей затвора, а мгновенным переключением потенциалов соседних нитей запертого затвора. Для моделирования работы ион-дрейфового спектрометра с затвором Бредбери—Нильсена использовалась программа ионно-оптических расчетов SIMION 7.0 [4] с пользовательской программой [3], которая позволяет моделировать динамику ионов в газе при атмосферном давлении. Все расчеты проведены применительно к характеристикам спектрометра, описанного ранее в [5].

РЕЖИМ МГНОВЕННОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ ЗАТВОРА

Затвор располагается в дрейфовой трубке спектрометра между источником ионов и коллектором. Потенциал одной последовательности нитей (через одну) равен потенциалу поля дрейфа в плоскости расположения затвора, а потенциал другой последовательности нитей ниже, что соответствует закрытому состоянию затвора, поскольку ионы теряются именно на этих нитях. При выравнивании потенциалов нитей затвор открывается, и ионы проходят дальше по ион-дрейфовой трубке в сторону коллектора. Рассмотрим режим работы затвора, когда переключение потенциалов между соседними нитями происходит мгновенно и формально он остается закрытым. Тем не менее, исходя из результатов работы [3], мы можем предположить, что некоторая часть ионов пройдет дальше и в этом случае длительность ионного импуль-

са будет минимальна. Определяющую роль на характеристики прошедшего ионного импульса играет особенность динамики ионов вблизи соседних нитей затвора. В свою очередь динамика ионов зависит как от параметров системы — расстояние между нитями, напряженность поля дрейфа, разность потенциалов между соседними нитями, — так и от свойств ионов (коэффициентов подвижности и диффузии). На рис. 1 показаны характерные расчетные траектории временной последовательности ионов, соответствующие режиму мгновенного переключения потенциалов нитей. Нити с низким начальным потенциалом обозначены, как 1, 3, 5, а нити с начальным потенциалом, равным дрейфовому, — 2, 4, 6. Видно, что

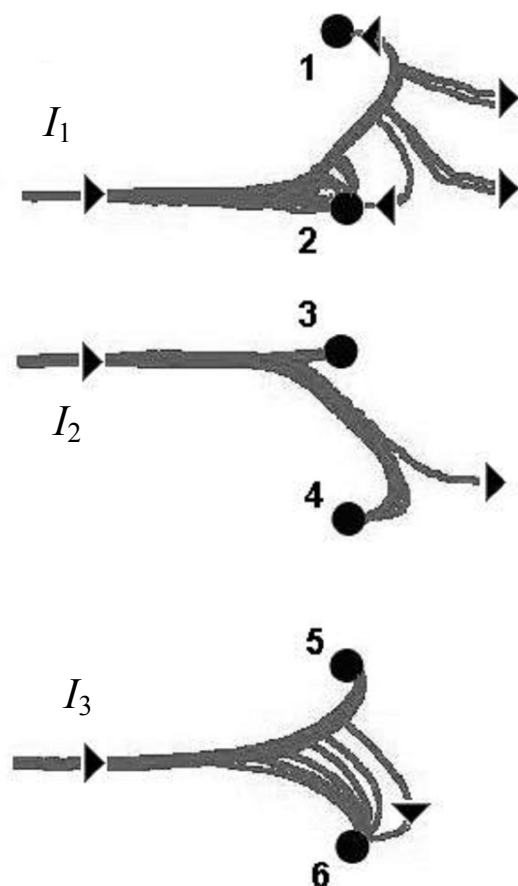


Рис. 1. Траектории последовательностей ионов при их проходе через затвор, работающий в режиме мгновенного переключения потенциалов соседних нитей. Нити с низким начальным потенциалом обозначены, как 1, 3, 5; нити с начальным потенциалом, равным дрейфовому, — 2, 4, 6. Стрелками показаны направления движения ионов

положительные ионы, приближающиеся к нити с низким потенциалом, с момента переключения потенциалов начинают смещаться в сторону соседней нити (теперь уже имеющей более низкий потенциал). При этом продольный дрейф ионов продолжается. В результате те ионы, которые на момент переключения уже находились в окрестности притягивающей нити, имеют наибольшее время при переключении потенциалов оказываются на почти максимально возможном расстоянии от новой притягивающей нити. Такие ионы проходят через затвор. Ионы, идущие следом, не успевают значительно продвинуться в продольном направлении и выйти из зоны притяжения. В результате они падают на нить с низким потенциалом. Кроме того, на рис. 1 видна зависимость эффективности прохождения ионами затвора от начальной поперечной координаты дрейфа. Условно мы можем разбить ионы на три группы (рис. 1): I_1 — ионы, дрейфующие на нить с потенциалом, равным дрейфовому; I_2 — ионы, дрейфующие прямо на притягивающую нить затвора; I_3 — ионы, чья начальная поперечная координата соответствует срединному пространству между нитями. Наибольшая доля ионов, проходящих сквозь затвор, относится к группе I_1 и небольшая часть соответствует I_2 . Ионы, которые при приближении к затвору имеют поперечные координаты, соответствующие срединной области между нитями, не проходят через затвор.

Таким образом, в режиме мгновенного переключения потенциалов часть ионов проходит через затвор, и полученный ионный импульс, по видимому, будет иметь наименьшую длительность по сравнению с обычными вариантами управления затвором.

Исследуем далее влияние параметров затвора и ион-дрейфовой области на временной профиль ионного импульса и его амплитуду. В качестве параметров выступают расстояние между нитями затвора, напряженность продольного электрического поля в дрейфовой области и временная неидеальность переключения потенциалов. В случае различных значений напряженности поля дрейфа соответственно менялись потенциалы на нитях затвора находящегося в закрытом состоянии. При этом во всех случаях потенциал одной из последовательностей нитей равен потенциалу поля дрейфа в месте расположения затвора. Минимальная разность потенциалов между нитями, необходимая для запираения затвора, линейно увеличивается с ростом напряженности электрического поля дрейфа. Очевидно, что при увеличении расстояния между нитями для запираения затвора разность потенциалов между нитями также увеличивается. Например, согласно проведенным расчетам, при

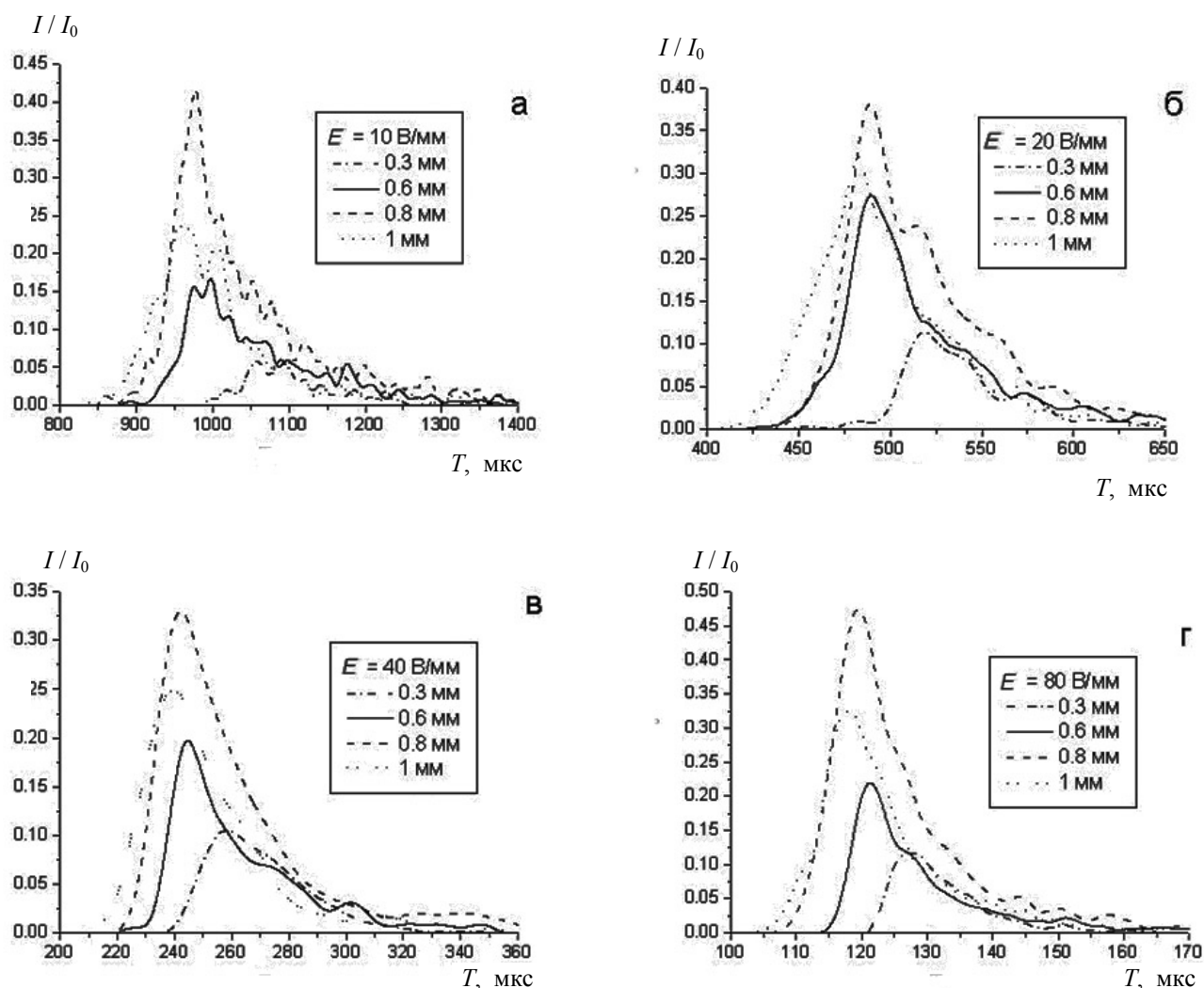


Рис. 2. Временные профили прошедших через затвор ионных импульсов для расстояний между нитями 0.3, 0.6, 0.8, 1 мм при напряженностях поля E дрейфа 10 (а), 20 (б), 40 (в), 80 В/мм (г). Профили нормированы на величину ионного тока, соответствующую открытому затвору при данной напряженности поля дрейфа

расстоянии между нитями 0.3 мм, напряженности поля дрейфа 80 В/мм соответствует минимальная запирающая затвор разность потенциалов 48 В, напряженности 20 В/мм — 12 В. При расстоянии между нитями 0.8 мм, напряженности поля дрейфа 80 В/мм соответствует минимальная запирающая затвор разность потенциалов 128 В, а напряженности 20 В/мм — 30 В. Диаметр нитей во всех случаях, как и в экспериментах [5], брался равным 0.05 мм.

ОПТИМАЛЬНОЕ РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ НИТЯМИ ЗАТВОРА

Поскольку в режиме мгновенного переключения потенциалов динамика ионов между соседни-

ми нитями затвора является определяющим фактором, влияющим на пропускание затвора, рассмотрим зависимость длительности и максимума ионного импульса от расстояния между нитями. Моделировалось прохождение ионов, имеющих коэффициент подвижности $k_0 = 2 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, через затворы с расстоянием между нитями 0.3, 0.6, 0.8 и 1 мм. Напряженность дрейфового электрического поля варьировалась от 10 до 80 В/мм. На рис. 2 представлены временные профили ионных импульсов, фиксируемые в плоскости, располагаемой сразу за затвором. Профили нормированы на соответствующую величину ионного тока, проходящего через открытый затвор при данной напряженности поля дрейфа. Видно, что по мере увели-

чения расстояния между нитями значение максимума импульса растет. Наибольшее его значение при минимальной ширине на полувысоте достигается при 0.8 мм (рис. 2). Дальнейшее увеличение расстояния между нитями приводит к проседанию и уширению проходящего ионного импульса. С увеличением напряженности поля дрейфа растет отношение максимума к ширине импульса на полувысоте. При этом значение оптимального расстояния, примерно 0.8 мм, не изменяется.

Таким образом, результаты моделирования показывают, что при определенном расстоянии между нитями затвора ионный импульс имеет минимальную ширину, а его амплитуда составляет 0.3–0.5 от уровня ионного тока проходящего через открытый затвор.

ВРЕМЕННАЯ НЕИДЕАЛЬНОСТЬ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ

Реальный процесс переключения потенциалов на соседних нитях затвора не происходит мгновенно. Чтобы определить степень влияния данного фактора на параметры проходящего через затвор ионного импульса, было проведено моделирование с симметричными временными нарастанием и убыванием потенциалов на нитях. Моделирование проводилось для условий, обеспечивающих максимальный сигнал: расстояние между нитями 0.8 мм, напряженность дрейфового электрического

поля 80 В/мм. Для определенности предполагается линейное увеличение/уменьшение потенциалов на нитях. На рис. 3 представлены временные профили прошедших ионных импульсов при разных темпах увеличения/уменьшения потенциалов на нитях в режиме "мгновенного" переключения потенциалов. Скорости линейного увеличения/уменьшения потенциалов характеризуются временем, за которое происходит процесс переключения — 20, 40, 60 мкс на рис. 3. Импульсы нормированы на величину ионного тока, проходящего через открытый затвор. Видно, что с увеличением времени переключения амплитуда ионного импульса растет, стремясь к величине, соответствующей открытому затвору. Однако ширина импульса при этом также увеличивается. Тем не менее отношение величины максимума к ширине импульса на его полувысоте для небольших времен (20 мкс) еще мало отличается от отношения для режима мгновенного переключения. Поэтому требование идеальности режима "мгновенного" переключения оказывается избыточным, что облегчает реализацию переключения.

ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ВЕЛИЧИНЫ КОЭФФИЦИЕНТА ПОДВИЖНОСТИ

Поскольку разные ионы отличаются по значению коэффициента подвижности, то и динамика их дрейфа вблизи нитей затвора, работающего в режиме мгновенного переключения, будет отличаться. Следовательно, прошедшие через затвор ионные импульсы будут отличаться по своим характеристикам. Моделирование прохождения через затвор ионов, имеющих разные коэффициенты подвижности k_0 , было проведено для следующих условий: напряженность дрейфового электрического поля 40 В/мм, расстояние между нитями 0.6, 0.8 и 1 мм. Рассматривались ионы с коэффициентами подвижности 1.33, 2 и 3 см²/(В·с). Временные профили импульсов ионного тока представлены на рис. 4. Видно, что во всех случаях расстоянию между нитями 0.8 мм соответствует максимальное значение ионного импульса. С увеличением коэффициента подвижности наблюдается рост сигнала. При этом значения ширины импульсов на полувысоте примерно равны.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С целью оптимизации параметров и повышения разрешающей способности ион-дрейфового спектрометра с затвором Бредбери—Нильсена рассмотрен режим работы затвора, который заключается в том, что потенциалы между соседними нитями закрытого затвора мгновенно переключаются (меняются). С помощью моделирования

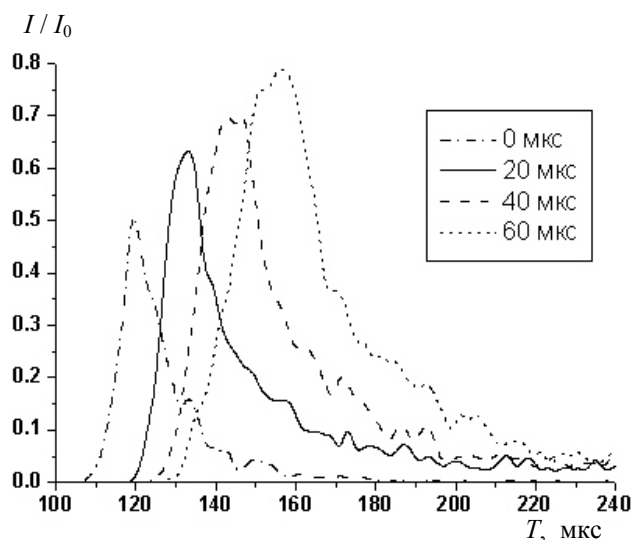


Рис. 3. Временные профили прошедших через затвор ионных импульсов при различных временах линейного переключения потенциалов нитей. Расстояние между нитями 0.8 мм, напряженность поля дрейфа 80 В/мм. Профили нормированы на величину ионного тока, соответствующую открытому затвору

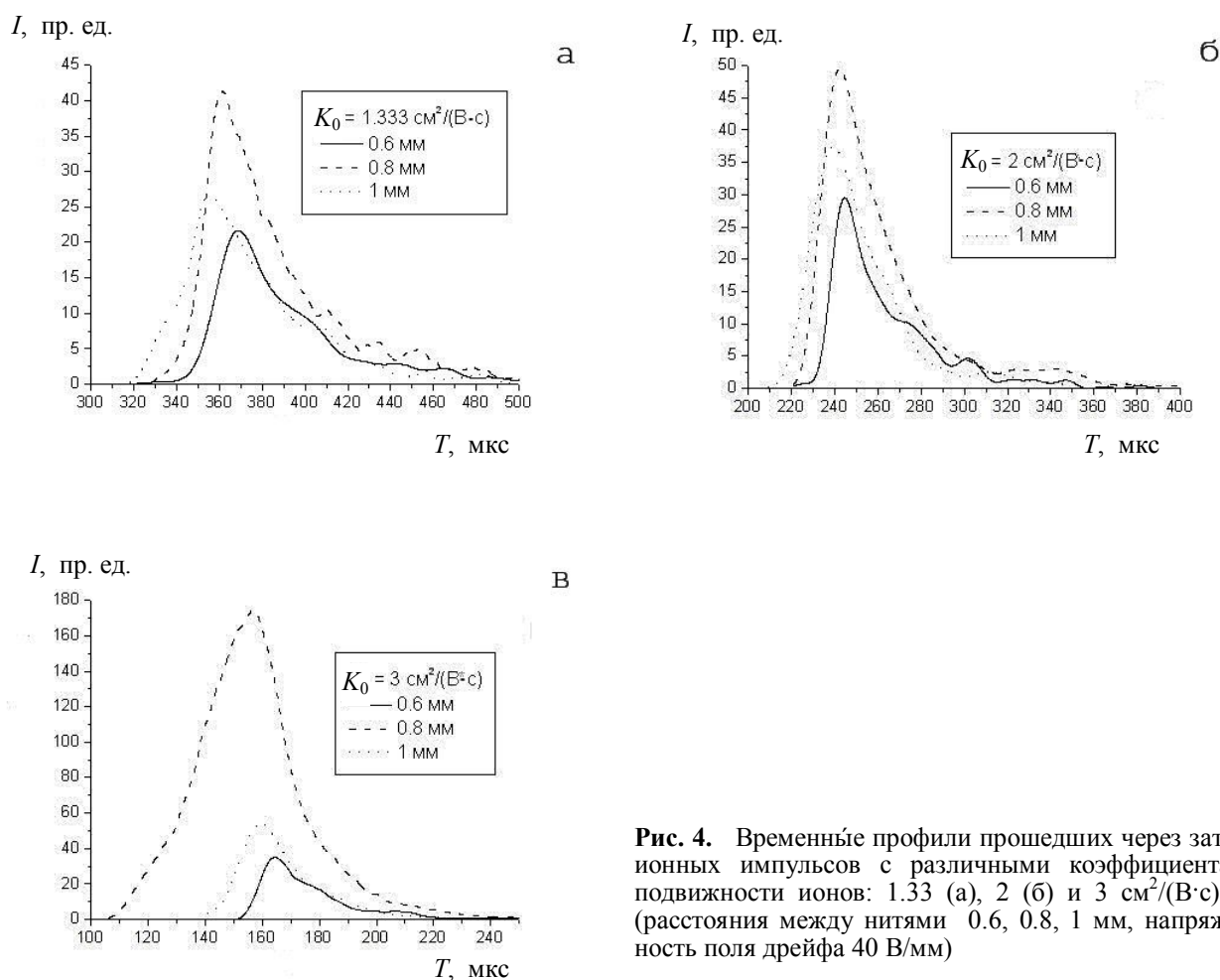


Рис. 4. Временные профили прошедших через затвор ионных импульсов с различными коэффициентами подвижности ионов: 1.33 (а), 2 (б) и 3 $\text{cm}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ (в) (расстояния между нитями 0.6, 0.8, 1 мм, напряженность поля дрейфа 40 В/мм)

определены особенности динамики ионов в этом режиме. Расчеты показали зависимость эффективности прохождения ионами затвора от начальной поперечной координаты дрейфа. Наибольшая доля ионов, проходящих сквозь затвор, изначально дрейфует на притягивающую нить затвора. Также результаты моделирования показывают, что при определенном расстоянии между нитями затвора ионный импульс имеет минимальную ширину, а его амплитуда составляет 0.3–0.5 от уровня ионного тока, проходящего через открытый затвор. При этом не требуется абсолютной идеальности режима "мгновенного" переключения, что облегчает его реализацию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Eiceman G.A., Karpas Z. Ion Mobility Spectrometry. CRC Press, Taylor & Francis Ltd., Boca Raton, 2005, 350 p.

2. Zuleta I.A., Barbula G.K., Robbins M.D., Yoon O.K., Zare R.N. Micromachined bradbury-nielsen gates // Anal. Chem. 2007. V. 79, N 23. P. 9160–9165.
3. Курнин И.В., Самокиш В.А., Краснов Н.В. Моделирование работы ион-дрейфового спектрометра с затвором Бредбери—Нильсена // Научное приборостроение. 2010. Т. 20, № 3. С. 14–21.
4. Dahl D.A. SIMION 7 User's Manual. Idaho National Engineering Lab., 2000. 657 p.
5. Краснов Н.В., Паульс Я.И., Самокиш А.В., Самокиш В.А., Хасин Ю.И. Разрешающая способность ион-дрейфового спектрометра двойного последовательного разделения ионов с ионизацией коронным разрядом // Научное приборостроение. 2007. Т. 17, № 1. С. 97–105.

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

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

Материал поступил в редакцию 20.12.2010.

OPTIMAL OPERATIONAL MODE OF BRADBURY—NIELSEN ION GATE IN AN ION MOBILITY SPECTROMETER

I. V. Kurnin, V. A. Samokish, N. V. Krasnov

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg

To increase the resolving power of ion mobility spectrometer the operational mode of Bradbury—Nielsen gate when potentials of the neighbor wires are exchanged instantly was considered. Though in that case the gate is considered formally closed, the transmission of ion current impulse takes place. By means of the simulation it is shown that with a fixed span between wires the ion pulse has a minimal duration, and its altitude is 0.3–0.5 of the level of ion current passing through the open gate. It is not necessary to have strictly cute in time potential exchange that makes it easier to realize. The influence of imperfectness, i.e. the temporary delay of the operation mode of the “instantaneous” switching is considered.

Keywords: ion mobility spectrometry, Bradbury—Nielsen gate, resolving power