

PACS numbers: 07.05.Kf, 07.05.Tr, 07.75. + h, 82.80.Ms

ОЦЕНКА ШИРИНЫ ПУЧКА В МАГНИТНОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРЕ

О.Н. Перегудов, Е.А. Миронец

Институт прикладной физики НАН Украины,
ул. Петропавловская, 58, 40000, Сумы, Украина
E-mail: o.peregudov@gmail.com

Предложен метод оценки ширины пучка для секторных магнитных масс-спектрометров. Метод заключается в восстановлении исходной функции распределения плотности ионов в поперечном сечении пучка перед приёмной щелью коллектора и может быть использован для оценки качества фокусировки ионно-оптической схемы масс-спектрометра.

Ключевые слова: МАГНИТНЫЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТР, МОДЕЛЬ ФОРМЫ ПИКА, ШИРИНА ПРОФИЛЯ ПУЧКА, КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ, ОПИСАНИЕ ПИКОВ.

(Получено 10.11.2010, в отредактированной форме 12.01.2011)

1. ВВЕДЕНИЕ

Прецизионные измерения отношения массы иона к его заряду, а также отношения распространённостей ионов требуют тщательной юстировки масс-спектрометра, целью которой является получение наилучшей фокусировки ионно-оптической системы масс-спектрометра. Известно [1], что одним из основных параметров, по которому оценивают качество фокусировки, является форма и размеры изображения выходной апертуры источника ионов на детекторе. На этапе проектирования ионно-оптических систем параметры этого изображения определяют методами численного моделирования [2-5]. В случае работающего прибора для определения формы и размеров изображения используются специальные устройства и приспособления [6, 7].

В отличие от микрозондовой техники, где форма изображения определяется двумерным распределением плотности ионов в поперечном сечении пучка, в секторных магнитных масс-спектрометрах в процессе юстировки необходимо оптимизировать форму пика, которая является одномерным распределением плотности ионов в поперечном сечении пучка [2-4]. Идеальную форму пика можно представить в виде прямоугольника, что соответствует прохождению бесконечно узкого пучка ионов через щель приёмного коллектора. В реальных масс-спектрометрах идеальная форма пика недостижима, так как распределение плотности ионов в пучке, приходящем на коллектор, неравномерно и не имеет чётких границ [1].

В большинстве серийно выпускаемых масс-спектрометров определить форму пика методами численного моделирования не представляется возможным, так же как невозможно использовать специальное оборудование для определения формы пика в процессе юстировки масс-спектрометра. Поэтому для оценки ширины и неоднородности функции

распределения плотности ионов в поперечном сечении пучка оператору приходится вычислять разрешающую способность на различной высоте пика, оценивать плоскостность вершины пика, а также использовать другие критерии. Конечное решение о приемлемости формы пика принимает непосредственно оператор.

В работе [8] описана обобщённая модель формы пика для секторных магнитных и времяпролётных масс-спектрометров, которая позволяет восстановить распределение плотности ионов в поперечном сечении пучка перед щелью приёмного коллектора. Это позволяет непосредственно оценить ширину и асимметрию функции распределения плотности ионов в пучке.

Настоящая работа посвящена применению обобщённой модели формы пика для оценки ширины пучка в поперечном сечении. В работе показано, что посредством простой калибровочной процедуры ширину пучка можно оценить в линейных единицах.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

2.1 Масс-спектрометр

Эксперименты выполнялись на масс-спектрометре МИ1201СГ производства “Selmi” (Сумы, Украина). Прибор предназначен для анализа стабильных изотопов в газовой фазе с ионизацией пробы электронным ударом и оснащён приёмником ионов с двумя коллекторами (цилиндры Фарадея) – основным и дополнительным. Дополнительный коллектор соответствует ионам с большим отношением m/z . В масс-спектрометре имеется возможность регулировки ширины выходной щели источника ионов и входных щелей обоих коллекторов (или вторично-электронного умножителя). Регулировка выполняется посредством микрометрических перемещателей, шкала которых не калибруется производителем масс-спектрометра. Один оборот ручки имеет 50 делений. Диапазон регулировки ширины выходной щели источника ионов – от 0.05 мм до 0.5 мм, а ширины щелей коллектора – от 0 до 1.2 мм.

В качестве образца использовался стандартный криптон производства ГП “Ингаз” (Мариуполь, Украина). Чистота образца 99.999 %.

2.2 Определение параметров формы пика

С математической точки зрения форму пика секторного магнитного масс-спектрометра можно представить в виде [8]:

$$I(\tilde{m}) = \int_{\tilde{m}(1-\rho^2-2\rho)}^{\tilde{m}(1+\rho^2+2\rho)} f(x-\mu) dx, \quad (1)$$

где $\tilde{m} = m/z$ – отношение массы иона к его заряду, $I(\tilde{m})$ – зарегистрированный сигнал масс-спектрометра, ρ – безразмерный параметр, характеризующий относительное приращение радиуса поворота ионов, которое соответствует половине ширины щели коллектора, μ – положение пика на шкале масс, $f(x)$ – функция распределения плотности ионов в поперечном сечении пучка перед щелью коллектора. В качестве функции распределения плотности ионов удобно использовать модифицированную функцию Гаусса [9]:

$$f(x) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{k^2}{4} - \frac{\ln^2\left(1 + k \frac{x}{\sqrt{2\sigma}}\right)}{k^2}\right), \quad (2)$$

где A – площадь пика, k – безразмерный параметр, характеризующий степень асимметрии пика.

Параметр σ в выражении (2) можно использовать для оценивания ширины пика на заданной высоте $h \in (0; 1)$:

$$\Delta\tilde{w}_h = \begin{cases} \left| \frac{\sqrt{2\sigma}}{k} \left(\exp(k\sqrt{-\ln h}) - \exp(-k\sqrt{-\ln h}) \right) \right|, & k \neq 0 \\ 2\sqrt{2\sigma\sqrt{-\ln h}}, & k = 0 \end{cases}, \quad (3)$$

где $\Delta\tilde{w}_h$ – ширина пучка (функции распределения плотности ионов), выраженная в единицах m/z .

Из формулы (1) следует, что в точке $\tilde{m} = \mu$ ширина приёмной щели коллектора в единицах m/z будет равна:

$$\Delta\tilde{w}_{sl} = 2\mu\rho(\rho + 2). \quad (4)$$

Используя величины $\Delta\tilde{w}_h$ и $\Delta\tilde{w}_{sl}$ можно определить коэффициент пропорциональности между шириной щели приёмника и шириной функции распределения плотности ионов в пучке на заданной высоте:

$$\alpha = \frac{\Delta\tilde{w}_h}{\Delta\tilde{w}_{sl}} = \frac{\Delta w_h}{\Delta w_{sl}}, \quad (5)$$

где величины Δw_h и Δw_{sl} выражены в линейных единицах.

2.3 Оценка ширины пучка методом моделирования формы пика

Процедура оценки ширины пучка в поперечном сечении была следующей. Регистрировался пик ^{84}Kr при разном положении ручки изменения ширины щели коллектора. Вначале ширина щели коллектора увеличивалась на один полный оборот ручки до полного раскрытия щели. После этого устанавливалась исходная ширина щели. Затем ширина щели последовательно уменьшалась на 10 делений, что соответствует 1/5 оборота. В конце эксперимента восстанавливалась исходная ширина щели. Выбранный пик сканировался слева направо при каждом значении ширины щели с минимальным шагом сканирования. Время интегрирования составляло 0.1 с.

Для каждого из зарегистрированных пиков определялись параметры модели (1). Процедура выполняется стандартным методом Левенберга-Марквардта, алгоритм которого реализован в библиотеке GSL [10]. Стоит отметить, что для обеспечения высокой эффективности вычислений средства библиотеки требуют задания аналитических выражений для частных производных модели.

Используя полученные параметры, для каждого пика рассчитывались величины полной ширины профиля пучка на полувысоте (FWHM) по формуле (3) и полной ширины щели коллектора по формуле (4), после чего определялся коэффициент пропорциональности по формуле (5).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

На рис. 1 показано изменение в ходе эксперимента значения параметра относительного приращения радиуса поворота ионов ρ .

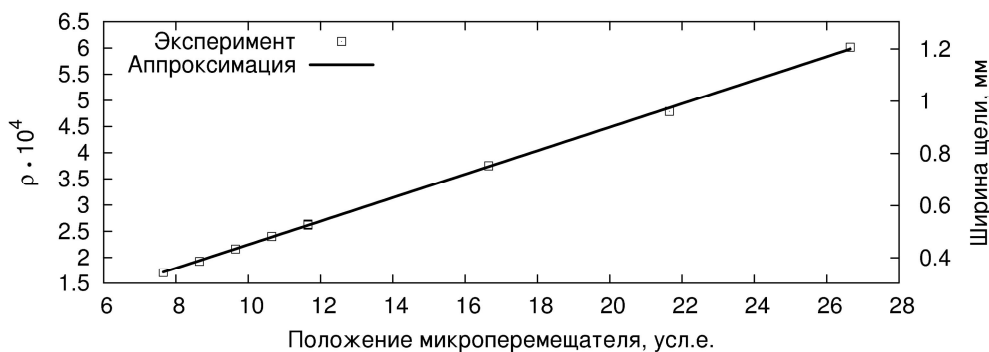


Рис. 1 – Зависимость параметра ρ от положения ручки микроперемещателя ширины щели коллектора

Из рис. 1 видно, что значение параметра линейно зависит от положения ручки микроперемещателя ширины щели коллектора. Учитывая этот факт, а также диапазон изменения линейных размеров щели, указанный в паспорте прибора, нетрудно выполнить калибровку для оценки ширины щели коллектора в линейных величинах по зарегистрированному спектру. Результат такой калибровки также представлен на рис. 1 (шкала справа).

Используя полученную зависимость и коэффициент пропорциональности для каждого пика можно оценить полную ширину профиля пучка на полувысоте в линейных величинах. Результаты оценки представлены на рис. 2.

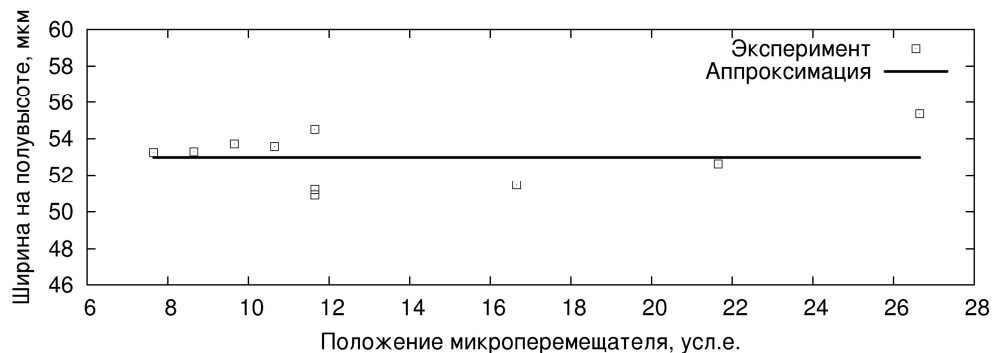


Рис. 2 – Зависимость полной ширины профиля пучка на полувысоте от положения ручки микроперемещателя ширины щели коллектора

Из рис. 2 видно, что величина полной ширины профиля пучка на полувывсоте не зависит от положения ручки микроперемещателя и составляет примерно 53 мкм. Действительно, условия формирования пучка ионов в процессе эксперимента не изменялись, следовательно, ширина пучка должна быть примерно постоянной вне зависимости от ширины щели коллектора. Из рис. 2 также видно, что разброс оценок составляет несколько (порядка 5) микрометров, что можно объяснить люфтом микроперемещателя.

Определение ширины пучка позволяет правильно выбрать размеры щели детектора, что необходимо для обеспечения максимального пропускания ионного тока от источника ионов к приёмнику [1]. Очевидно, что ширина щели детектора должна быть больше или равной ширине пучка. Однако при оценке ширины пучка необходимо учитывать тот факт, что производитель прибора не калибрует микроперемещатели щелей коллекторов. Это будет вносить соответствующую погрешность в полученные оценки, так как в реальном приборе возможны отклонения от указанного в паспорте диапазона регулировки щелей.

4. ВЫВОДЫ

Использование обобщённой модели формы пика позволяет достаточно просто оценить ширину пучка на заданном уровне интенсивности. При этом нет необходимости в использовании дополнительного оборудования. Кроме того, предложенная методика значительно упрощает процесс юстировки масс-спектрометра, так как даёт возможность выполнять оценку качества фокусировки по двум критериям: минимальной ширине и асимметрии функции распределения плотности ионов в пучке. Такие простые критерии могут быть использованы при разработке автоматизированных компьютерных систем юстировки масс-спектрометров.

Предложенный метод может быть с успехом использован при разработке и совершенствовании ионно-оптических схем магнитных масс-спектрометров.

Авторы выражают благодарность О.А. Сидоре за помощь в проведении экспериментов, К.В. Федько за многочисленные полезные дискуссии, а также А.Н. Бугаю за участие в обсуждении работы.

ESTIMATION OF THE BEAM WIDTH IN MAGNETIC MASS SPECTROMETER

O.N. Peregudov, E.A. Mironetz

Institute of Applied Physics NAS of Ukraine,
58, Petropavlivska Str., 40000, Sumy, Ukraine
E-mail: o.peregudov@gmail.com

A method for estimation of the beam width in magnetic sector mass spectrometers is proposed. This method consists in the restoration of the initial ion density distribution function in a beam cross-section before the receiving collector slit and can be used for the qualitative estimation of the mass spectrometer ion-optical scheme.

Keywords: MAGNETIC MASS SPECTROMETER, PEAK SHAPE MODEL, BEAM PROFILE WIDTH, QUANTITATIVE ANALYSIS, PEAK DESCRIPTION.

ОЦІНКА ШИРИНИ ПУЧКА У МАГНІТНОМУ МАС-СПЕКТРОМЕТРІ

О.М. Перегудов, Є.А. Міронець

Інститут прикладної фізики НАН України,
вул. Петропавлівська, 58, 40000, Суми, Україна
E-mail: o.peregudov@gmail.com

Запропоновано метод оцінки ширини пучка для секторних магнітних мас-спектрометрів. Метод полягає у відновленні вихідної функції розподілення густини іонів у поперечному розрізі пучка перед приймаючою щільною колектором, і може бути застосований для оцінки якості фокусування іонно-оптичної схеми мас-спектрометра.

Ключові слова: МАГНІТНИЙ МАС-СПЕКТРОМЕТР, МОДЕЛЬ ФОРМИ ПІКА, ШИРИНА ПРОФІЛЯ ПУЧКА, КІЛЬКІСНИЙ АНАЛІЗ, ОПИС ПІКІВ.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. А.А. Сысоев, М.С. Чупахин, *Введение в масс-спектрометрию* (М.: Атомиздат: 1977).
2. L.N. Gall, V.D. Sachenko, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **46**, 43 (1983).
3. V.V. Laiko, A.F. Dodonov, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **8**, 720 (1994).
4. А.И. Борискин, В.М. Ерёмченко, С.Н. Мордик, О.Р. Савин, А.Н. Скрипченко, В.Е. Сторижко, С.Н. Хоменко, *ЖТФ* **78**, 111 (2008) (A.I. Boriskin, V.M. Eremenko, S.N. Mordyk, O.R. Savin, A.N. Skripchenko, V.E. Storizhko, S.N. Khomenko, *Tech. Phys.* **53**, 927 (2008)).
5. H. Wollnik, *J. Mass Spectrom.* **34**, 991 (1999).
6. А.А. Ponomarev, V.I. Miroshnichenko, A.G. Ponomarev, *Nucl. Instrum. Meth. B* **267**, 2041 (2009).
7. S.E. Bragin, I.A. Vasilyev, O.M. Volodkevich, O.V. Grekhov, Yu.V. Kiselev, A.N. Mirzojan, V.A. Moiseev, A.V. Feschenko, *Problems of Atomic Science And Technology. Series: Nuclear Physics Investigations* No2(53), 96 (2010).
8. O.N. Peregudov, O.M. Buhay, *Int. J. Mass Spectrom.* **295**, 1 (2010).
9. R.D.B. Fraser, E. Suzuki, *Anal. Chem.* **41**, 37 (1969).
10. GSL - GNU Scientific Library, <http://www.gnu.org/software/gsl/>.