

МРНТИ 29.01.05; 29.01.45

РАСЧЕТ ВРЕМЯПРОЛЕТНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА НА ОСНОВЕ ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ЗЕРКАЛ

И.Ф. СПИВАК-ЛАВРОВ^{[0000-0002-2683-2425].*}, **Т.Ж. ШУГАЕВА**^[0000-0002-4797-4529],

С.У. ШАРИПОВ^[0000-0003-4350-2361]

Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, г. Актөбе, Казахстан

*e-mail: spivakif@rambler.ru

Аннотация. В данной статье рассмотрены свойства времяпролетного масс-спектрометра, ионно-оптический тракт которого содержит импульсный кольцевой источник ионов и электростатический дефлектор с электродами в виде цилиндров равного диаметра с общей осью. Высокая эффективность клиновидных зеркал с двумерным полем обусловлена тем, что задний электрод зеркала выполнен в виде вогнутого цилиндра и фокусирующие свойства зеркала могут быть изменены изменением кривизны электрода. Возможны два режима пространственно-времяпролетной фокусировки: «кольцо-ось» и «ось-кольцо». Распределение потенциала в такой системе представлено в достаточно простом аналитическом виде. Для нахождения траекторий и времени пролета заряженных частиц в электростатическом поле дефлектора используются безразмерные уравнения Ньютона, которые интегрируются методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Разгонные точки находились методом последовательных сближений Крылова. Относительная точность интегрирования выбиралась равной 10^{-9} . Расчет пространственной фокусировки и времени прилета частиц к плоскости детектора выполнен методом Монте-Карло с нормальным распределением событий в заданном интервале начальных параметров. Расчеты показали, что разрешение времяпролетного масс-спектрометра может быть доведено до 5000 (на уровне 50% от высоты пиков).

Ключевые слова: времяпролетный масс-спектрометр, зеркала и линзы с аксиальной симметрией, фокусировка, потенциал, траектория заряженных частиц, безразмерные уравнения Ньютона.

Идея времяпролетной фокусировки по энергии и схема безмагнитного масс-спектрометра (масс-рефлектрона), реализующая такую фокусировку, впервые опубликована в 60-х годах (Мамырин и др. [1]). Принцип времяпролетной фокусировки получил дальнейшее развитие в целом ряде работ [2-5]. Достоинства времяпролетного масс-рефлектрона – практически неограниченный диапазон анализируемых масс, достаточно высокая чувствительность из-за возможности использования источников ионов со значительной площадью поверхности ионизации, малогабаритность и легкость конструкций, а также высокая разрешающая способность, достигаемая путем времяпролетной фокусировки ионных пакетов по энергии. Наряду с достоинствами масс-рефлектронов, довольно быстро выяснился и ряд очевидных недостатков, связанных с использованием в качестве электродов плоских мелкоячеистых сеток, установленных на пути движения заряженных частиц для создания участков тормозящего однородного электростатического

поля. Существенным недостатком является также и то, что однородные поля и не обеспечивают пространственную фокусировку ионных пакетов в поперечном направлении, что ограничивает чувствительность масс-рефлектрона. Предложение использовать во времяпролетных масс-спектрометрах бессеточные электростатические ионные зеркала для обеспечения пространственной и времяпролетной фокусировки ионных пакетов впервые высказано независимо и практически одновременно в ряде работ [6-11]. В настоящей работе рассчитывается времяпролетный масс-спектрометр на основе зеркал с аксиальной симметрией.

Цилиндрическая осесимметричная линза или зеркало представляет собой круговой цилиндр, разрезанный плоскостями, перпендикулярными оси цилиндра (ось z) в точках z_k . Эти плоскости делят цилиндр на электроды с потенциалами V_k . Такая электростатическая система схематически изображена на рисунке 1. Здесь V_{k-1} , V_k и V_{k+1} – потенциалы электродов, $k=1,2,3, \dots, N$, R – внутренний радиус цилиндрических поверхностей. Зазоры между электродами считаются бесконечно узкими [12].

В приближении, когда зазоры между электродами считаются бесконечно узкими, потенциал такой $(N + 1)$ – электродной системы с хорошей степенью точности можно представить в виде [голиков]:

$$\varphi(\rho, z) = \frac{1}{2}(V_N + V_0) + \sum_{k=1}^N \varphi_k(\rho, z) \quad (1)$$

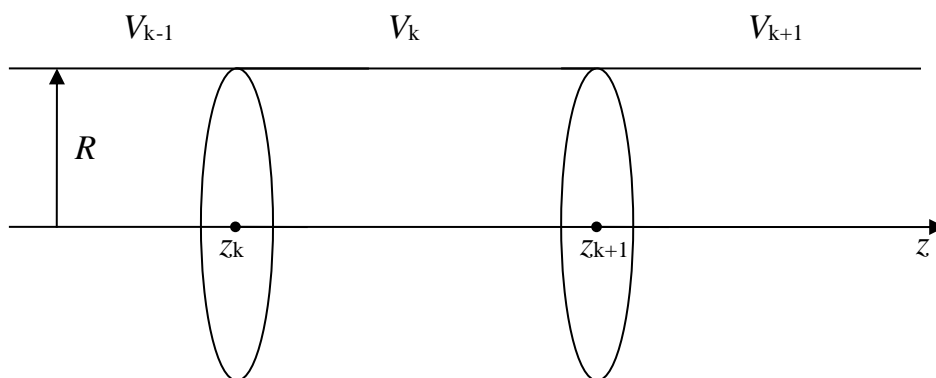


Рисунок 1. Схематическое изображение цилиндрической осесимметричной линзы

Здесь $\varphi_k(\rho, z)$ определяются следующими выражениями:

$$\varphi_k(\rho, z) = \frac{1}{\pi}(V_k - V_{k-1}) \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{sh} \frac{2\pi}{3R}(z - z_k)}{\cos \frac{\pi\rho}{2R}}. \quad (2)$$

В реальной системе последний замыкающий электрод может быть выполнен в форме эквипотенциальной поверхности системы с бесконечно протяженным последним электродом. При этом поле системы в области движения пучка останется прежним.

Найдем аналитические выражения для частных производные от φ_k , используя формулу (2), получим:

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_k}{\partial \rho} = \frac{1}{2R}(V_k - V_{k-1}) \frac{\sin\left(\frac{\pi\rho}{2R}\right) \operatorname{sh}\left[\frac{2\pi}{3R}(z - z_k)\right]}{\cos^2\left(\frac{\pi\rho}{2R}\right) + \operatorname{sh}^2\left[\frac{2\pi}{3R}(z - z_k)\right]}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \frac{2}{3R}(V_k - V_{k-1}) \frac{\cos\left(\frac{\pi\rho}{2R}\right) \operatorname{ch}\left[\frac{2\pi}{3R}(z - z_k)\right]}{\cos^2\left(\frac{\pi\rho}{2R}\right) + \operatorname{sh}^2\left[\frac{2\pi}{3R}(z - z_k)\right]}. \quad (4)$$

Для построения эквипотенциалей в плоскости $y = 0$, где $\rho = x$, используем следующее уравнение:

$$\frac{dz}{dx} = -\frac{\frac{\partial \varphi}{\partial x}}{\frac{\partial \varphi}{\partial z}}. \quad (5)$$

Для нахождения траекторий ионов и времени пролета частиц используются безразмерные уравнения Ньютона [13]. Для заряженной частицы с зарядом q и массой m в электростатическом поле в безразмерных декартовых координатах x, y, z их можно записать в следующем виде:

$$\ddot{x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \ddot{y} = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad \ddot{z} = \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (6)$$

Здесь потенциал φ измеряется в единицах V_0 , за единицу длины берется величина R – внутренний радиус цилиндра, точки обозначают производные по безразмерному времени $\tau = t/\tau_0$, где

$$\tau_0 = R \sqrt{\frac{m}{qV_0}}. \quad (7)$$

Будем считать, что движение происходит в плоскости xz , тогда $x = \rho$, а $y = 0$. Начальные условия для расчета траекторий при интегрировании уравнений (6) можно задать следующим образом:

$$x_0 = \rho_0 \pm \Delta\rho, y_0 = 0, z_0 = 0; \dot{z}_0 = \sqrt{2(1+\varepsilon) - \dot{y}_0^2 - \dot{z}_0^2}, \dot{x}_0 = \alpha, \dot{y}_0 = \beta. \quad (9)$$

Здесь ε – относительный разброс по энергии на входе в систему. Первоначально будем полагать $\alpha = \beta = 0$.

Рассчитывались траектории заряженных частиц в четырехэлектродном зеркале. Дифференциальные уравнения (5) и (6) интегрировались методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Разгонные точки находились методом последовательных сближений Крылова. Относительная точность интегрирования выбиралась равной 10^{-9} .

Рассчитанные траектории ионов представлены на рисунке 2. Здесь $V_0 = 1, V_1 = 0.33, V_2 = 0.071, V_3 = -0.092$; $z_1 = 7.6R, z_2 = 9.6R, z_3 = 11.2R$. На рисунке 1 показаны осевая и крайние траектории пучка с одинаковой энергией ($\varepsilon = 0$), а также две траектории, стартующие по осевой траектории с энергией $\varepsilon = +0.01$ (нижняя траектория, входящая в детектор D) и с энергией $\varepsilon = -0.01$ (верхняя траектория, входящая в детектор D).

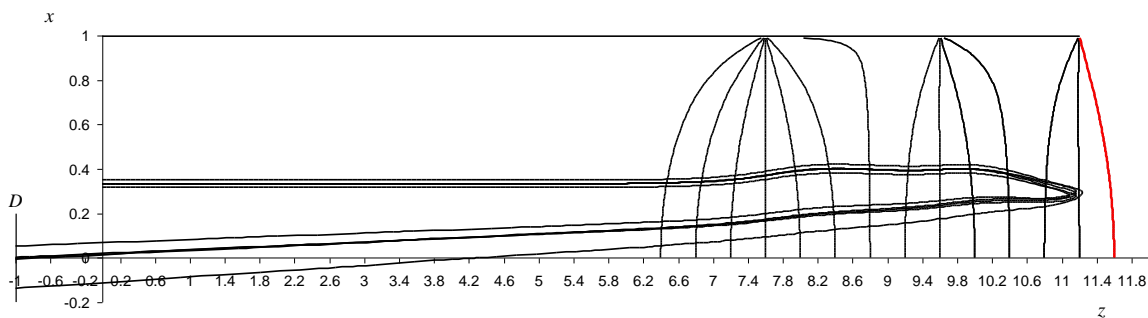


Рисунок 2. Картина эквипотенциалей поля и траектории ионов в четырехэлектродном зеркале ($V_0 = 1, V_1 = 0.33, V_2 = 0.071, V_3 = -0.092$; $z_1 = 7.6R, z_2 = 9.6R, z_3 = 11.2R$).

Время прилета в детектор осевой траектории пучка в единицах τ_0 равно 26.517, крайних траекторий 26.508 и 26.526; время прилета частицы с $\varepsilon = +0.01$ – 26.546, а с $\varepsilon = -0.01$ – 26.545. Здесь мы видим, что время пролета частиц практически не зависит от знака ε , т.е. времяпролетная дисперсия по энергии равняется нулю, а различие во времени пролета относительно осевой траектории видимо связано с абберациями пропорциональными ε^2 .

На рисунке 2 замыкающий электрод красного цвета, он пересекает ось z в точке $z = z_n = 11.6R$ и имеет потенциал $V_{n3} = -0.0470$. Форма этого электрода задается функцией $\rho(z)$, которая определяется следующей таблицей 1:

Таблица 1. Конфигурация замыкающего электрода.

ρ/R	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95
z/R	11.6	11.596	11.583	11.562	11.533	11.495	11.447	11.392	11.330	11.261	11.294

При нахождении траекторий полагалось, что радиус ионного кольца $\rho_0 = \frac{R}{3}$, а толщина $\Delta\rho = \pm \frac{R}{60}$. Предполагалось также, что детектор расположен в бесполовой области, причем плоскость детектора перпендикулярна оси цилиндра и совпадает с плоскостью $z = z_d = -1$.

Для пучка с указанными параметрами был проведен расчет времени прилета частиц в детектор методом Монте-Карло для $N = 1000$ частиц. Результаты расчета представлены на рисунке 3 и 4. На рисунке 3 показано распределение частиц в плоскости детектора D .

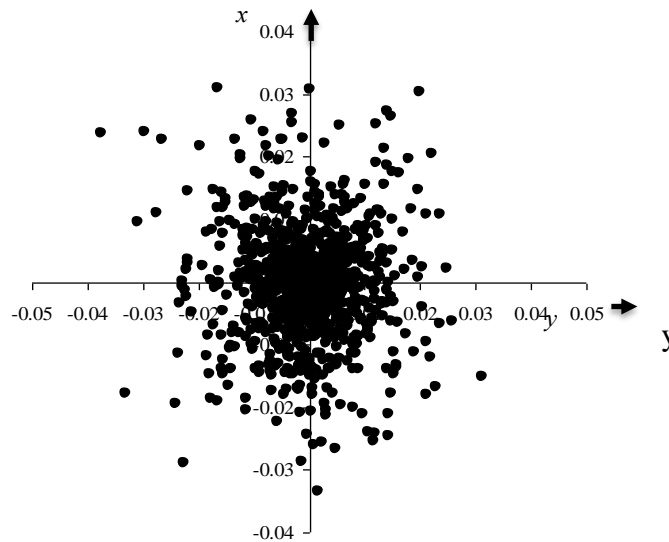


Рисунок 3. Распределение частиц в плоскости детектора.

На рисунке 4 представлен массовый дуплет для двух масс с относительной разницей в массах $\gamma = 1/4000$ при расчетах предполагалось нормальное распределение частиц по энергетическому разбросу с $\varepsilon = \pm 0.005$ и по координате влета с $\Delta\rho = \pm \frac{R}{60}$ в пределах

интервала «три сигма». При расчете времени пролета частиц учитывалось, что время пролета частиц с большей массой увеличивается в $(1 + \gamma/2)$ раз.

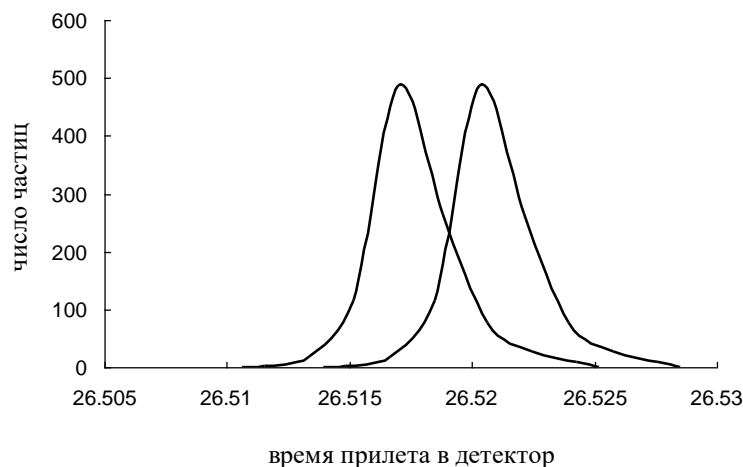


Рисунок 4. **Времяпролетный масс-спектр для массового дуплета с $\gamma = 1/4000$.**

Как видно из рисунка 4, ожидаемое разрешение TOF MS составляет примерно 4000 на уровне 50% от высоты пиков.

Разрешение можно также увеличить за счет использования диафрагмы, обрезающей пучок ионов перед входом в детектор. Если установить круглую диафрагму с радиусом r_0 и центром на оси системы в плоскости $z=0$, то получим следующие результаты, представленные на рисунке 5, 6 для диафрагмы с $r_0=0.015R$. Эта диафрагма из 1000 частиц пропускает более 800, распределение которых в плоскости детектора показано на рисунке 5. На рисунке 6 представлен массовый дуплет для двух масс с относительной разницей в массах $\gamma=1/5000$. Как видно из рисунка 6, ожидаемое разрешение TOF MS составляет примерно 5000 на уровне 50% от высоты пиков.

Высокая чувствительность TOF MS обеспечивается тем, что большое количество выходящих из импульсного источника ионов в виде кольца сравнительно большой площади, вследствие наличия пространственно-времяпролетной фокусировки «кольцо-ось», концентрируется на входную плоскость импульсного ионного детектора D в виде пятна малого диаметра. При этом достигается предельно высокое отношение сигнал/шум ионных токов.

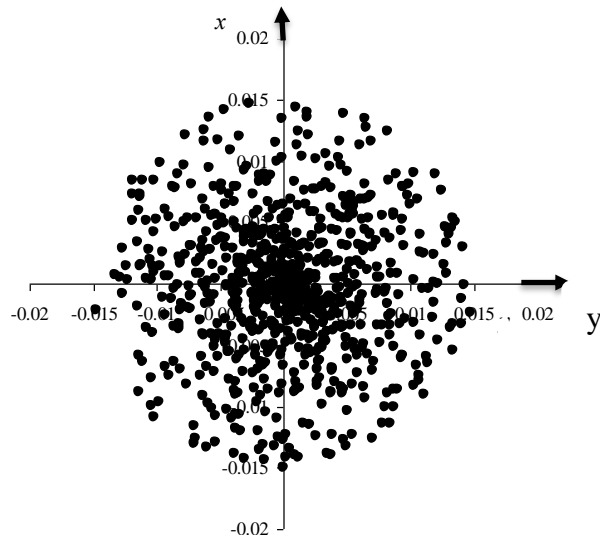


Рисунок 5. Распределение частиц в плоскости детектора при наличии диафрагмы

$$r_0 = 0.015 R.$$

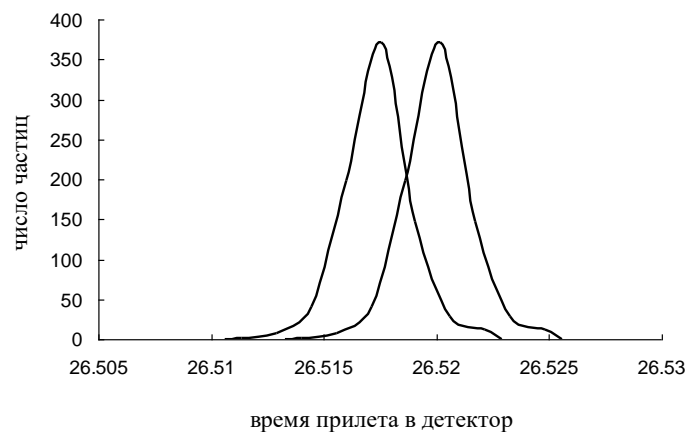


Рисунок 6. Времяпролетный масс-спектр для массового дуплета с $\gamma = 1/5000$.

Вследствие обратимости ионных траекторий рассчитанная система электродов электростатического дефлектора может быть использована как для фокусировки типа «кольцо-ось», так и для обратной фокусировки – «ось-кольцо».

Разработаны теория и алгоритмы численных расчетов пространственно-времяпролетной фокусировки в осесимметричных зеркалах конкретных конструкций (трех- и четырехэлектродных зеркалах) с целью поиска ионно-оптических систем с высоким разрешением и уменьшенными aberrациями.

Исследованы зеркально-линзовые системы с учетом свойств пространственно-времяпролетной фокусировки и aberrаций – сферической и хроматической – до третьего

порядка малости. Проведены теоретические расчеты и разработана электронно-оптическая схема, реализующая режим наложенных изображений.

Возможны два режима пространственно-времяпролетной фокусировки: «кольцо-ось» и «ось-кольцо». Распределение потенциала в зеркалах представлено в достаточно простом аналитическом виде. Для нахождения траекторий и времени пролета заряженных частиц в электростатическом поле дефлектора используются безразмерные уравнения Ньютона, которые интегрируются методом Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования.

Проведены расчеты осесимметричных систем с криволинейной осевой траекторией, предназначенной для разведения падающего потока заряженных частиц от источника до детектора с целью транспортировки с минимальными абберационными потерями. Разработана и подтверждена экспериментами теория импульсного ионного источника с фокусировкой ионных пакетов неоднородным электростатическим полем.

Высокая чувствительность TOF MS обеспечивается тем, что большое количество выходящих из импульсного источника ионов в виде кольца сравнительно большой площади, вследствие наличия пространственно-времяпролетной фокусировки «кольцо-ось», концентрируется на входную плоскость импульсного ионного детектора D в виде пятна малого диаметра. При этом достигается предельно высокое отношение сигнал/шум ионных токов.

Работа выполнена в рамках проекта с грантовым финансированием Комитета науки МОН РК (ИРН AP09258546).

Список литературы

1. Mamyrin V.A. Time-of-flight mass spectrometry (concepts, achievements, and prospects). / V.A. Mamyrin // *International Journal of Mass Spectrometry*. — 2001. — Vol. 206, Iss. 3. — P. 251-266. DOI:[https://doi.org/10.1016/S1387-3806\(00\)00392-4](https://doi.org/10.1016/S1387-3806(00)00392-4)
2. Mirgorodskaya O.A. Electrospray-ionization time-of-flight mass spectrometry in protein chemistry / O.A. Mirgorodskaya, A.A. Shevchenko, I.V. Chernushevich, A.F. Dodonov, A.I. Miroshnikov // *Analytical Chemistry*. — 1994. — Vol. 66, №1. — P. 99-107. DOI:<https://doi.org/10.1021/ac00073a018>
3. Dodonov A.F. Electrospray Ionization on a Reflecting Time-of-Flight Mass Spectrometer / A.F. Dodonov, I.V. Chernushevich, V.V. Laiko // *ACS Symposium Series*. — 1993. — №549. — P. 108-123.
4. Patent 2080021 UK. Time-of-flight mass spectrometer. / H.A. Wollnik — January 1982.
5. Price D. The renaissance of time-of-flight mass spectrometry / Price D., Milnes G.J. // *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*. — 1990. — № 99. — P.1-39.

DOI:[https://doi.org/10.1016/0168-1176\(90\)85019-X](https://doi.org/10.1016/0168-1176(90)85019-X)

6. Patent SU 1725289 A1. Time-of-flight mass spectrometer with multiple reflection. / L.M. Nazarenko, L.M. Sekunova, E.M. Yakushev— 1989.

7. Явор М.И. Планарный многоотражательный времяпролетный масс-анализатор, работающий без ограничения диапазона масс / М.И. Явор, А.Н. Веренчиков // Научное приборостроение. — 2004. — Т. 14, №2. — С. 38–45.

8. Голиков Ю.К. Теория синтеза электростатических энергоанализаторов. / Ю.К. Голиков, Н.К. Краснова // — Изд-во Политехнического университета, Санкт-Петербург, 2010. — 409 с.

9. Yavor M. Planar multi-reflecting time-of-flight mass analyzer with a jig-saw ion path / M. Yavor, A. Verentchikov, Ju. Hasin, B. Kozlov, M. Gavrik, A. Trufanov, // Physics Procedia. — 2011.—Vol. 1. — P. 391–400. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.phpro.2008.07.120>

10. Bimurzaev S. B. Time-of-flight mass-spectrometer with high resolution and sensitivity via elimination of chromatic TOF aberrations of higher orders / S.B. Bimurzaev // International Journal of Mass Spectrometry. — 2015. — Vol. 376. — P. 23–26.

DOI:<https://doi.org/10.1016/j.ijms.2014.11.007>

11. Bimurzaev S.B. Planar multi-reflecting time-of-flight mass-spectrometer of a simple design / S.B. Bimurzaev // Advances in Imaging and Electron Physics. — Academic Press, Burlington, 2019. — P. 3-13. DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2019.08.001>

12. Spivak-Lavrov I.F. Analytical Methods for The Calculation and Simulation of New Schemes of Static and Time-of-Flight Mass Spectrometers / I.F. Spivak-Lavrov // Advances in Imaging and Electron Physics. — Academic Press, Burlington, 2016.— P. 45-128.

DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2015.10.001>

13. Spivak-Lavrov I.F. Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to 2D harmonic potentials / I.F. Spivak-Lavrov, T.Zh. Shugaev, S.U. Sharipov // Advances in Imaging and Electron Physics. — Academic Press, Burlington, 2020. — P. 181-193.

DOI:<https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2020.06.006>

References

1. Mamyrin B.A. (2001). Time-of-flight mass spectrometry (concepts, achievements, and prospects). International Journal of Mass Spectrometry, Vol. 206, Iss.3, 251-266. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1387-3806\(00\)00392-4](https://doi.org/10.1016/S1387-3806(00)00392-4)

2. Mirgorodskaya O.A., Shevchenko A.A., Chernushevich I.V., Dodonov A.F., Miroshnikov A.I. (1994). Electrospray-ionization time-of-flight mass spectrometry in protein chemistry. Analytical Chemistry, Vol. 66, Iss. 1, 99-107. DOI: <https://doi.org/10.1021/ac00073a018>

3. Dodonov A.F., Chernushevich I.V., Laiko V.V. (1993). Electrospray Ionization on a Reflecting Time-of-Flight Mass Spectrometer. ACS Symposium Series, Vol. 549, 108-123.
4. Wollnik H.A. (1982). Patent 2080021 UK. Time-of-flight mass spectrometer.
5. Price D., Milnes G.J. (1990). The renaissance of time-of-flight mass spectrometry. International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes, Vol. 99, 1-39.
doi: [https://doi.org/10.1016/0168-1176\(90\)85019-X](https://doi.org/10.1016/0168-1176(90)85019-X)
6. Nazarenko L.M., Sekunova L.M, Yakushev E.M. (1989). Patent SU 1725289 A1. Time-of-flight mass spectrometer with multiple reflection.
7. Yavor M.I., Verentchikov A.N. (2004). Planarnyi mnogootrazhatel'nyi vremyapraletnyi mass-analizator, rabotaiyshii bez ogranikheniya diapozona mass [Planar multi-reflector TOF mass analyzer operating without mass range limitation]. Nauchnoe priborostroenie [in Russian].
8. Golikov Yu.K., Krasnova N.K. (2010). Teoriya sinteza jelektrostaticheskih jenergoanalizatorov [Synthesis theory of electrostatic energy analyzers]. Izdatel'stvo politehnicheskogo universiteta, Sankt-Peterburg [in Russian].
9. Yavor M., Verentchikov A., Hasin Ju., Kozlov B., Gavrik M., Trufanov A. (2011). Planar multi-reflecting time-of-flight mass analyzer with a jig-saw ion path. Physics Procedia, Vol. 1, 391–400. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2008.07.120>
10. Bimurzaev, S.B. (2015). Time-of-flight mass-spectrometer with high resolution and sensitivity via elimination of chromatic TOF aberrations of higher orders. International Journal of Mass Spectrometry, Vol. 376, 23–26. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.ijms.2014.11.007>
11. Bimurzaev, S.B. (2019). Planar multi-reflecting time-of-flight mass-spectrometer of a simple design. Advances in Imaging and Electron Physics, Burlington: Academic Press, Vol. 212, 3-13. DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2019.08.001>
12. Spivak-Lavrov I.F. (2016). Analytical Methods for The Calculation and Simulation of New Schemes of Static and Time-of-Flight Mass Spectrometers. Advances in Imaging and Electron Physics, Burlington: Academic Press, Vol.193, 45-128.
DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2015.10.001>
13. Spivak-Lavrov I.F., Shugaeda T.Zh., Sharipov S.U. (2020). Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to 2D harmonic potentials. Advances in Imaging and Electron Physics, Burlington: Academic Press, Vol. 215, 181-193.
DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2020.06.006>

ОСЬТИ-СИММЕТРИЯЛЫҚ ЦИЛИНДРЛІК АЙНАЛАР НЕГІЗІНДЕ УАҚЫТАРАЛЫҚ МАСС-СПЕКТРОМЕТРДІ ЕСЕПТЕУ

И.Ф. СПИВАК-ЛАВРОВ*, Т.Ж. ШУГАЕВА, С.У. ШАРИПОВ

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан

*e-mail: spivakif@rambler.ru

Аңдатпа. Бұл мақалада ионды-оптикалық трактіде иондардың импульсті сақиналы көзі және жалпы осі бар бірдей диаметрлі цилиндрлер түріндегі электродтары бар электростатикалық дефлекторы бар уақыт аралығының масс-спектрометрінің қасиеттері қарастырылады. Екі өлшемді өрісі бар сына тәрізді айналардың жоғары тиімділігі айнаның артқы электродының ойыс цилиндр түрінде жасалғанына және де айнаның фокустық қасиеттерін электрод қисықтығының өзгеруімен өзгертуге болатындығына байланысты. Кеңістік - уақытаралық фокустеудің екі режимі мүмкін болады: "сақина-ось" және "ось-сақина". Мұндай берілген жүйеде потенциалды бөлу өте қарапайым аналитикалық түрде ұсынылған. Дефлектордың электростатикалық өрісіндегі зарядталған бөлшектердің траекториялары мен ұшу уақыттарын табылуы мүмкін болуы үшін Адамс әдісімен интегралдау қадамын автоматты түрде таңдаумен біріктірілген өлшемсіз Ньютон теңдеулері қолданылады және де үдеткіш нүктелер Крыловтың тізбекті жақындасу әдісімен болды. Бұл жерде интеграцияның салыстырмалы дәлдігі 10^{-9} тең таңдалды. Бөлшектердің детектор жазықтығына кеңістіктік фокусталуы мен келу уақытын есептеу бастапқы параметрлердің берілген интервалында жағдайлардың қалыпты бөлінуімен Монте-Карло әдісімен жасалады. Осы мақаладағы есептеулер көрсеткендей, уақытаралық масс-спектрометрдің рұқсаты 5000-ға дейін арттыруға болатынын көрсетті (шындардың биіктігінен 50% деңгейінде).

Түйін сөздер: уақытаралық масс-спектрометр, аксиалды симметриясы бар айналар мен линзалар, фокустеу, потенциал, зарядталған бөлшектердің траекториясы, өлшемсіз Ньютон теңдеулері.

CALCULATION OF A TIME OF FLIGHT MASS SPECTROMETER BASED ON AXISYMMETRIC CYLINDRICAL MIRRORS

I.F. SPIVAK-LAVROV*, T.ZH. SHUGAYEVA, S.U. SHARIPOV

K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

*e-mail: spivakif@rambler.ru

Abstract. This article discusses the properties of a time-of-flight mass spectrometer, the ion-optical path of which contains a pulsed annular ion source and an electrostatic deflector with electrodes in the form of cylinders of equal diameter with a common axis. The high efficiency of wedge-shaped mirrors with a two-dimensional field is due to the fact that the rear electrode of the mirror is made in the form of a concave cylinder and the focusing properties of the mirror can be changed by changing the curvature of the electrode. There are two modes of space-time-of-flight focusing: "ring-axis" and "axis-ring". The potential distribution in such a system is presented in a simple analytical form. To find the trajectories and time of flight of charged particles in the electrostatic field of the deflector, the dimensionless Newton equations are used, which are integrated by the Adams method with an automatic choice of the

integration step. The accelerating points were found by the method of successive approaches of Krylov. The relative accuracy of integration was chosen equal to 10^{-9} . The spatial focusing and the time of arrival of particles to the detector plane were calculated by the Monte Carlo method with a normal distribution of events in a given interval of initial parameters. Calculations have shown that the resolution of a TOF mass spectrometer can be increased to 5000 (at the level of 50% of the peak heights).

Key words: time-of-flight mass spectrometer, mirrors and lenses with axial symmetry, focusing, potential, trajectory of charged particles, dimensionless Newton equations.