

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای

پایان‌نامه کارشناسی ارشد فیزیک هسته‌ای

بررسی ترابرد یون و قدرت تفکیک در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

نگارنده:

مسعود معدنی پور

استاد راهنما

دکتر مسلم سوهانی

مهر ۱۳۹۹



فرم شماره ۷: صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم / آقای به شماره دانشجویی رشته گرایش تحت عنوان که در تاریخ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

قبول (با درجه: امتیاز:)	☐ دفعات مجدد	☐ مردود
نوع تحقیق: نظری ☐ عملی ☐		

۱- عالی (۲۰ - ۱۹)

۲- بسیار خوب (۱۸ - ۱۷)

۳- خوب (۱۶ - ۱۵)

۴- قابل قبول (۱۴ - ۱۳)

۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول			
۲- استاد راهنمای دوم			
۳- استاد مشاور			
۴- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی			
۵- استاد ممتحن اول			
۶- استاد ممتحن دوم			

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده:

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تقدیم اثر

خدای را بسی شاکرم که از روی کرم، پدر و مادری فداکار نصیبم ساخته تا در سایه درخت پر بار وجودشان بیاسایم و از ریشه آنها شاخ و برگ گیرم و از سایه وجودشان در راه کسب علم و دانش تلاش نمایم. والدینی که بودنشان تاج افتخاری است بر سرم و نامشان دلیلی است بر بودنم، چرا که این دو وجود پس از پروردگار مایه هستی‌ام بوده‌اند دستم را گرفتند و راه رفتن را در این وادی زندگی پر از فراز و نشیب آموختند. آموزگارانی که برایم زندگی؛ بودن و انسان بودن را معنا کردند. حال این برگ سبزی است تحفه درویش تقدیم آنان

شکر و قدردانی

از استاد راهنمای مهربان و دلسوزم؛ جناب آقای دکتر مسلم سوهانی برای تمام حمایت‌ها و زحمات بی‌دریغ‌شان سپاسگزاری می‌کنم چرا که بدون راهنمایی‌های بی‌چشمداشت ایشان، تألیف این پایان‌نامه بسیار مشکل می‌بود. همچنین از اساتید عزیزم آقایان دکتر حسن حسن آبادی، دکتر حسین توکلی عنبران و دکتر احسان ابراهیمی بسابی تشکر و قدردانی می‌کنم.

از دوستان و همکلاسی‌های گرامی که ایام خوشی را در کنار هم سپری کردیم و مطالب زیادی را به من آموختند تشکر کرده و برایشان آرزوی موفقیت و سربلندی می‌کنم.

تهیه نامه

اینجانب مسعود معدنی پوردانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی ترابرد یون و قدرت تفکیک در طیف سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی تحت راهنمایی دکتر مسلم سوهانی متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « *Shahrood University of Technology* » به چاپ خواهد رسید.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود. استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی *CST* شبیه‌سازی و مطالعه شده است. سپس کانون باریکه یونی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی بدست آمده است و در ادامه کانون بهینه باریکه یونی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی مشخص شده است. به کمک نرم‌افزار *CST* زمان پرواز یون‌ها در طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی ثبت شده است. سپس زمان پرواز دو یون مختلف که از چشمه یونی ساطع می‌شود در طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی بدست آمده و آنها با یکدیگر مقایسه شده‌اند، سپس نمودار هیستوگرام تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز برحسب زمان پرواز، که توزیع آن به صورت یک توزیع گوسی است رسم شده است و از روی نمودار، قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی بدست آمده و مقایسه شده‌اند.

کلمات کلیدی: طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی، نرم‌افزار شبیه‌سازی

CST، آینه یونی، قدرت تفکیک

فهرست مطالب

ک	فهرست جداول
ل	فهرست اشکال
۱	فصل ۱: مقدمه
۲	۱-۱ تاریخچه.....
۳	۲-۱ طیف‌سنج جرمی.....
۴	۳-۱ اجزای تشکیل‌دهنده طیف‌سنج جرمی.....
۵	۱-۳-۱ آماده‌سازی نمونه برای ورود به محفظه یونش.....
۵	۲-۳-۱ روش‌های مختلف یونش در چشمه‌های یونی.....
۶	۳-۳-۱ آنالیزور جرمی.....
۶	۴-۳-۱ انواع آنالیزور جرمی زمان پرواز (انواع طیف‌سنج جرمی زمان پرواز).....
۶	۱-۴-۳-۱ آنالیزور جرمی زمان پرواز خطی.....
۸	۱-۴-۳-۱-۱ زمان پرواز.....
۱۰	۲-۴-۳-۱ آنالیزور جرمی زمان پرواز بازتابی.....
۱۱	۳-۴-۳-۱ آنالیزور جرمی زمان پرواز چند بازتابی.....
۱۲	۵-۳-۱ آشکارسازهای یونی.....
۱۲	۱-۵-۳-۱ آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی.....
۱۳	۲-۵-۳-۱ آشکارساز یونی فنجان فارادی.....
۱۴	۳-۵-۳-۱ آشکارساز یونی صفحه چند کاناله.....

- ۱-۳-۶ سیستم خلاء ۱۵
- ۱-۴ آینه یونی ۱۶
- ۱-۵ کانون باریکه یونی ۱۷
- ۱-۶ اهداف پایان نامه ۱۸

فصل ۲: شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی با نرم افزار

شبیه سازی CST ۱۹

- ۲-۱ شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز خطی ۲۰
- ۲-۱-۱ طراحی چشمه یونی ۲۰
- ۲-۱-۲ طراحی آشکارساز ۲۱
- ۲-۱-۳ شبیه سازی و نتایج آن ۲۱
- ۲-۲ شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی ۲۲
- ۲-۲-۱ طراحی چشمه یونی ۲۲
- ۲-۲-۲ طراحی آینه یونی ۲۳
- ۲-۲-۳ شبیه سازی و نتایج آن ۲۷
- ۲-۳ شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی ۳۱
- ۲-۳-۱ طراحی چشمه یونی ۳۱
- ۲-۳-۲ طراحی آینه های یونی ۳۲
- ۲-۳-۳ طراحی آشکارساز ۳۳
- ۲-۳-۴ شبیه سازی و نتایج آن ۳۴

فصل ۳: پارامترهای مؤثر در کانون بهینه باریکه یونی ۳۵

- ۳-۱ انرژی چشمه یونی مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی ۳۶
- ۳-۲ فاصله الکتروود آینه یونی مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی ۳۸

۳-۳ اندازه الکتروود آینه یونی مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی ۴۱

فصل ۴: زمان پرواز و قدرت تفکیک زمانی و جرمی ۴۳

۱-۴ زمان پرواز در طیفسنج جرمی زمان پرواز خطی ۴۴

۲-۴ زمان پرواز در طیفسنج جرمی زمان پرواز بازتابی ۴۵

۳-۴ زمان پرواز در طیفسنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی ۴۶

۴-۴ قدرت تفکیک ۴۷

۱-۴-۴ بررسی قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیفسنج جرمی زمان پرواز خطی ۴۹

۲-۴-۴ بررسی قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیفسنج جرمی زمان پرواز بازتابی ۵۱

۳-۴-۴ بررسی قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیفسنج جرمی زمان پرواز چندبازتابی .. ۵۳

فصل ۵: نتیجه گیری و پیشنهادات ۵۷

۱-۵ نتیجه گیری ۵۸

۲-۵ پیشنهادات ۵۹

پیوست ۶۰

مراجع ۶۱

فهرست جداول

- جدول ۱-۲. فاصله‌های الکترودهای طراحی شده آینه‌ی یونی ۲۶
- جدول ۲-۲. پتانسیل الکتریکی اعمال‌شده به الکترودهای طراحی شده ۲۶
- جدول ۳-۲. فاصله‌های الکترودهای طراحی شده آینه‌های یونی ۳۰

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱. طیف جرمی به صورت شدت بر حسب m/q ۳
- شکل ۲-۱. طرح کلی اجزای تشکیل دهنده طیفسنج جرمی ۴
- شکل ۳-۱. طرحی ساده از طیفسنج جرمی زمان پرواز خطی ۷
- شکل ۴-۱. طرحی ساده از طیفسنج جرمی زمان پرواز بازتابی ۱۰
- شکل ۵-۱. نمای طرح وار از طیفسنج جرمی زمان پرواز بازتابی ۱۰
- شکل ۶-۱. نمای طرح وار از طیفسنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی ۱۱
- شکل ۷-۱. شکل بیرونی آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی ۱۳
- شکل ۸-۱. نمای طرح وار آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی ۱۳
- شکل ۹-۱. شکل بیرونی آشکارساز یونی فنجان فارادی ۱۴
- شکل ۱۰-۱. نمای طرح وار آشکارساز یونی فنجان فارادی ۱۴
- شکل ۱۱-۱. شکل بیرونی آشکارساز یونی صفحه چند کاناله ۱۵
- شکل ۱۲-۱. نمای طرح وار آشکارساز یونی صفحه چند کاناله ۱۵
- شکل ۱۳-۱. شکل بیرونی آینه یونی ۱۶
- شکل ۱۴-۱. نمای طرح وار از آینه یونی ۱۶
- شکل ۱۵-۱. کانون بهینه باریکه یون ها در جنب چشمه یونی ۱۷
- شکل ۱۶-۱. کانون بهینه باریکه یون ها در پشت چشمه یونی ۱۷
- شکل ۱-۲. طراحی چشمه یونی روی سطح دایروی ۲۰
- شکل ۲-۲. شبیه سازی طیفسنج جرمی زمان پرواز خطی ۲۱
- شکل ۳-۲. مسیر یون ها از شبیه سازی طیفسنج جرمی زمان پرواز خطی ۲۱
- شکل ۴-۲. طراحی چشمه یونی روی سطح دایروی ۲۲
- شکل ۵-۲. طراحی صفحه استوانه ای ۲۳
- شکل ۶-۲. طراحی میله استوانه ای متصل به صفحه استوانه ای ۲۳
- شکل ۷-۲. طراحی ۴ میله استوانه ای در راستای همدیگر ۲۴
- شکل ۸-۲. الکتروود طراحی شده ۲۴
- شکل ۹-۲. ۱۸ الکتروود طراحی شده سوار بر ۴ میله استوانه ای در راستای محور Z ۲۵
- شکل ۱۰-۲. شماره گذاری الکتروودهای طراحی شده ۲۵

- شکل ۲-۱۱. شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی..... ۲۷
- شکل ۲-۱۲. مسیر یون‌ها از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی..... ۲۷
- شکل ۲-۱۳. کانون باریکه یونی از جهت‌های مختلف ۲۸
- شکل ۲-۱۴. نمودارهای y برحسب x در پشت کانون، روی کانون و جلوی کانون ۲۹
- شکل ۲-۱۵. نمودارهای فراوانی برحسب x و y در محل کانون ۳۰
- شکل ۲-۱۶. طراحی چشمه یونی روی سطح دایروی ۳۱
- شکل ۲-۱۷. آینه یونی طراحی شده در جهت محور Z ها..... ۳۲
- شکل ۲-۱۸. شبیه‌سازی آینه‌های یونی در راستای همدیگر ۳۳
- شکل ۲-۱۹. شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی ۳۳
- شکل ۲-۲۰. مسیر یون‌ها از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی ۳۴
- شکل ۳-۱. نمودار فاصله کانون تا چشمه بر حسب انرژی چشمه یونی ۳۶
- شکل ۳-۲. مسیر یون‌ها و کانون باریکه یونی براساس انرژی مطلوب $235eV$ ۳۷
- شکل ۳-۳. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۱ و ۲ ۳۸
- شکل ۳-۴. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۲ و ۳ ۳۹
- شکل ۳-۵. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ ۴۰
- شکل ۳-۶. مسیر یون‌ها و کانون باریکه یونی براساس انرژی مطلوب $235eV$ ، فاصله الکترودهای ۱ و ۲ برابر با $70mm$ ، الکترودهای ۲ و ۳ برابر با $8mm$ و الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ برابر با $3mm$ ۴۰
- شکل ۳-۷. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب شعاع داخلی الکترودهای آینه یونی ۴۱
- شکل ۳-۸. مسیر یون‌ها و کانون باریکه یونی براساس انرژی مطلوب $235eV$ ، فاصله مطلوب الکترودهای ۱ و ۲ برابر با $70mm$ ، الکترودهای ۲ و ۳ برابر با $8mm$ و الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ برابر با $3mm$ و شعاع داخلی الکترودهای مطلوب برابر با $56mm$ ۴۲
- شکل ۳-۹. مسیر یون‌ها و کانون بهینه باریکه یونی براساس انرژی مطلوب $235eV$ ، فاصله مطلوب الکترودهای ۱ و ۲ برابر با $70mm$ ، الکترودهای ۲ و ۳ برابر با $8mm$ و الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ برابر با $3mm$ و شعاع داخلی الکترودهای مطلوب برابر با $56mm$ و شعاع خارجی چشمه یونی برابر با $2mm$ ۴۲
- شکل ۴-۱. نمایشگر ذره طراحی شده در جلوی آشکارساز ۴۴
- شکل ۴-۲. مسیر یون $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی..... ۴۶
- شکل ۴-۳. نمای ریاضی از یک توزیع جرمی ۴۷

- شکل ۴-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز
خطی ۴۹
- شکل ۵-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ و $^{208}\text{Pb}^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان
پرواز خطی ۵۱
- شکل ۶-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز
بازتابی ۵۲
- شکل ۷-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ و $^{208}\text{Pb}^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان
پرواز بازتابی ۵۳
- شکل ۸-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز
چند بازتابی ۵۴
- شکل ۹-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ و $^{208}\text{Pb}^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان
پرواز چند بازتابی ۵۵

فصل ۱: مقدمه

۱-۱ تاریخچه

پژوهش‌های دانشمندانی همچون تامسون^۱ و استون^۲ در آزمایشگاه دانشگاه کمبریج انگلستان منجر به طراحی و ساخت طیف‌سنج جرمی^۳ شد این کار با پژوهش در زمینه یون‌های مثبت به وسیله تامسون شروع شد و در ادامه استون توانست تعدادی از ایزوتوپ‌های غیررادیواکتیو عناصر را کشف کند. پژوهش‌های انجام شده از سال ۱۸۹۷ به وسیله تامسون و همکارانش، پایه و اساس دریافت هفت جایزه نوبل در رشته‌های فیزیک و شیمی را برای دانشمندان مختلفی فراهم آورد. دانشمندان دیگری همچون دمپ استر^۴، هرزوک^۵، نیر^۶ و بینبرج^۷، نیز نقش مهمی در توسعه طیف‌سنج جرمی داشته‌اند. مجموعه این فعالیت‌ها، به استانداردسازی تفکیک جرمی در سال ۱۹۳۰ انجامید. در سال ۱۹۴۹ طیف‌سنجی جرمی از قالب پژوهش‌های صرفاً آکادمیک به حوضه کاربردی راه یافت و در زمینه غنی‌سازی ایزوتوپ‌های هسته‌ای و تحلیل عناصر به کار گرفته شد. اولین نمونه طیف‌سنج جرمی تجاری به نام MS-2 در سال ۱۹۴۸ به وسیله ویکرز^۸ در شهر منچستر انگلستان با قدرت تفکیک جرمی محدود وارد بازار شد. برای اولین بار طیف‌سنج جرمی زمان پرواز^۹ در سال ۱۹۴۶ توسط استفان^{۱۰} پیشنهاد شد سپس در سال ۱۹۴۸ آزمایشاتی توسط کامرون و اگرس^{۱۱} گزارش، و در سال ۱۹۵۵ توسط ویلی و مک لارن^{۱۲} طراحی و ساخته شد.

۱- Thomson

۲- Aston

۳- Mass Spectrometry (MS)

۴- Dempster

۵- Herzog

۶- Nier

۷- Bainbridge

۸- Vickers

۹- Time Of Flight Mass Spectrometry (TOF-MS)

۱۰- Stephen

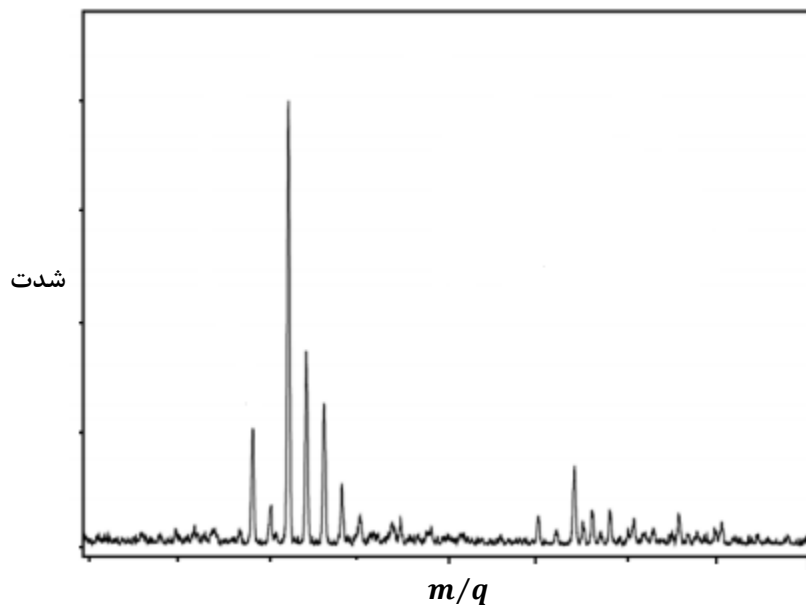
۱۱- Cameron and Eggers

۱۲- Wiley and McLaren

۲-۱ طیف‌سنج جرمی

اندازه‌گیری نسبت جرم به بارالکتریکی (m/q) و تشخیص فراوانی آنها با استفاده از روش جداسازی یونی در آنالیزورهای جرمی را طیف‌سنج جرمی می‌نامند که نوع آنالیزور جرمی، نوع طیف‌سنج جرمی را نیز مشخص می‌کند. اساس کار هر طیف‌سنج جرمی، بر متمرکز کردن و محصور نمودن ذرات باردار بنا شده است که تنها آشکارسازی ذرات باردار (یون‌های مثبت و منفی) را در بر می‌گیرد. [۲]

شکل ۱-۱ طیف جرمی بدست آمده، به صورت شدت^۱ (تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز) بر حسب m/q را نشان می‌دهد. m جرم یون آشکار شده بر حسب دالتون (Da) (معادل یک واحد جرم اتمی) و q بارالکتریکی یون بر حسب کولن (C) می‌باشد.



شکل ۱-۱. طیف جرمی به صورت شدت بر حسب m/q [۳]

^۱ - Intensity

۱-۳ اجزای تشکیل دهنده طیف‌سنج جرمی

اجزای هر طیف‌سنج جرمی را می‌توان به صورت زیر معرفی کرد:

ورودی نمونه^۱: آماده‌سازی و ورود نمونه‌های مختلف به محفظه یونش.

چشمه یونی^۲: تولید یون از مولکول‌های نمونه در فاز گازی.

آنالیزور جرمی^۳: تفکیک جرمی یون‌های حاصل از نمونه.

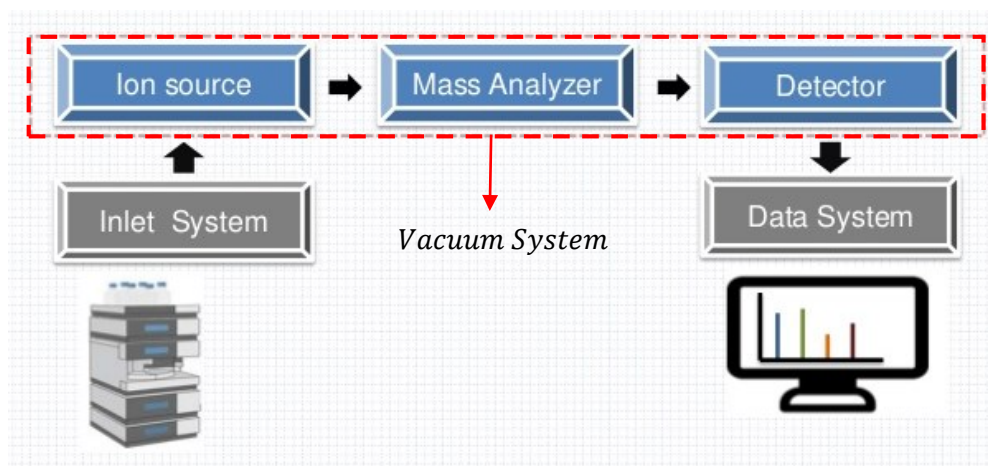
آشکارساز یونی^۴: آشکارسازی یون‌های جداسازی شده توسط آنالیزور جرمی.

پردازش سیگنال^۵: پردازش سیگنال الکتریکی حاصل از آشکارساز.

نمایشگر طیف جرمی^۶: نمایش طیف جرمی به صورت تعداد یون‌های آشکار شده بر حسب m/q .

سیستم خلاء^۷: جهت قراردادن چشمه یونی، آنالیزور جرمی و آشکارساز در محفظه خلاء.

شکل ۱-۲ طرح کلی اجزای تشکیل دهنده یک طیف‌سنج جرمی را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۲. طرح کلی اجزای تشکیل دهنده طیف‌سنج جرمی [۲]

در ادامه اجزای مهم طیف‌سنج جرمی را به طور دقیق‌تر بررسی می‌کنیم.

۱- Sample Inlet

۲- Ion Source

۳- Mass Analyzer

۴- Ion Detector

۵- Signal Processor

۶- signal Processing

۷- Vacuum System

۱-۳-۱ آماده‌سازی نمونه برای ورود به محفظه یونش

پیش از آن که نمونه برای یونش، وارد چشمه یونی شود، ابتدا باید به صورت گاز درآید این فرآیند را آماده‌سازی می‌نامند. آماده‌سازی صحیح نمونه به منظور تولید یک طیف جرمی در طیف‌سنج جرمی از اهمیت شایانی برخوردار است، زیرا بر روی قدرت تفکیک طیف‌سنج بسیار تأثیرگذار است. یکی از آسان‌ترین روش‌ها برای تحلیل نمونه‌ها استفاده از آنها به صورت گاز است. زیرا ورود نمونه به چشمه یونی را تسهیل می‌کند. این گاز به طور مستقیم پس از ایجاد خلاء در محفظه، وارد چشمه یونی می‌شود. نمونه‌های مایع و جامد را به منظور تحلیل، معمولاً با حرارت دادن به صورت گاز درمی‌آورند. اگر نمونه‌ای به مقدار کافی به صورت گاز درنیاید، باید به صورت مستقیم یونیزه شود که کار را قدری مشکل می‌کند، زیرا نیاز به ابزارهای خاصی دارد. اما طیف‌سنج‌های جرمی نسل جدید می‌توانند نمونه‌هایی مانند پروتئین‌ها و پلیمرها با جرم مولکولی $100000 Da$ را به طور مستقیم تحلیل کنند. البته برای نمونه‌هایی که به میزان کافی به حالت گازی تبدیل شده باشند، نیازی به روش یونش مستقیم نخواهد بود. [۲]

۱-۳-۲ روش‌های مختلف یونش در چشمه‌های یونی

برخی از پرکاربردترین روش‌های یونش در چشمه‌های یونی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

- ✓ برخورد الکترونی^۱ (EI): استفاده از الکترون‌های پر انرژی. [۲]
- ✓ یونش شیمیایی^۲ (CI): با استفاده از عناصر واسطه و یا محلول‌هایی که از روش‌های خاص، یون‌های گازی تولید می‌کنند. [۲]
- ✓ یونش الکترواسپری^۳ (ESI): با استفاده از میدان‌های الکتریکی قوی. [۲]
- ✓ بمباران اتمی سریع^۴ (FAB): با استفاده از باریکه اتمی با انرژی بالا. [۲]
- ✓ یونش تبخیری ماتریسی^۵ ($MALDI$): با استفاده از پرتوی لیزر. [۲]
- ✓ یونش پخش گرمایی^۶ (TSI): با استفاده از درجه حرارت بالا. [۲]

۱- Electron Impact

۲- Chemical Ionization

۳- Electro Spray Ionization

۴- Fast Atom Bombardment

۵- Matrix Assisted Laser Desorption Ionization

۶- Thermo Spray Ionization

۱-۳-۳ آنالیزور جرمی

آنالیزور جرمی از مهم‌ترین اجزای طیف‌سنج جرمی است زیرا از یک سوء تعیین‌کننده پارامترهای اصلی طیف‌سنج از قبیل حساسیت و قدرت تفکیک است و از سوی دیگر، نوع طیف‌سنج جرمی را نیز مشخص می‌کند.

انواع آنالیزورهای جرمی عبارت‌اند از:

- ✓ آنالیزور جرمی قطاع مغناطیسی^۱ [۳]
- ✓ آنالیزور جرمی چهار قطبی^۲ [۳]
- ✓ آنالیزور جرمی تله یونی^۳ [۳]
- ✓ آنالیزور جرمی زمان پرواز^۴

در ادامه به انواع آنالیزور جرمی زمان پرواز که موضوع اصلی پایان‌نامه می‌باشد، می‌پردازیم.

۱-۳-۴ انواع آنالیزور جرمی زمان پرواز (انواع طیف‌سنج جرمی زمان پرواز)

۱-۳-۴-۱ آنالیزور جرمی زمان پرواز خطی^۵ (طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی^۶)

این آنالیزور جرمی، یون‌هایی را که به طرف آشکارساز می‌روند، در واحد زمان جداسازی می‌کند. یون‌ها به وسیله چشمه به طور متناوب تولید می‌شوند. سپس این یون‌ها از طریق یک میدان الکتریکی شتاب می‌گیرند. یون‌های شتاب گرفته به داخل محفظه‌ای به طول ۰.۵ تا ۳ متر که فاقد میدان الکتریکی است رها می‌شوند. تمامی یون‌هایی که وارد محفظه می‌شوند، از انرژی جنبشی و بار الکتریکی یکسانی برخوردارند و رابطه معکوسی بین جرم و مجذور سرعتشان برقرار است. در واقع یون‌های با جرم متفاوت، مسافت یکسان را در زمان‌های متفاوت طی می‌کنند. بدین ترتیب، ذرات سبک‌تر که جرم کمتری دارند

۱- Magnetic Sector Mass Analyzer

۲- Quadrupole Mass Analyzer

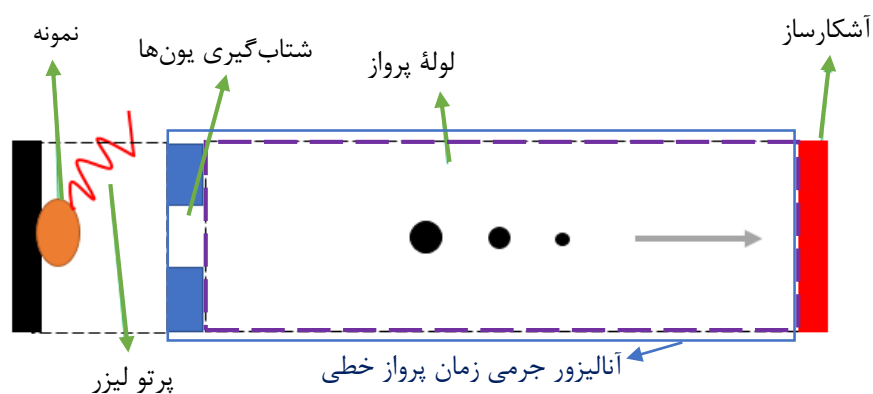
۳- Ion Trap Mass Analyzer

۴- Time Of Flight Mass Analyzer

۵- Liner Time Of Flight Mass Analyzer

۶- Liner Time Of Flight Mass Spectrometry (L-TOF-MS)

زودتر به آشکارساز می‌رسند و ذرات سنگین‌تر که جرم بیشتری دارند دیرتر به آشکارساز می‌رسند. هر چه مسیر پرواز طولانی‌تر باشد قدرت تفکیک و جداسازی یون‌ها بیشتر خواهد بود و به خاطر همین در بعضی موارد طول لوله پرواز^۱ را تا چندین متر در نظر می‌گیرند. از ویژگی‌های آنالیزور جرمی زمان پرواز می‌توان به سادگی کار یعنی عدم استفاده از میدان مغناطیسی، قدرت تفکیک تقریباً پایین و زمان پاسخ آهسته آشکارساز اشاره کرد. شکل ۱-۳ طرحی ساده از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی^۲ را نشان می‌دهد که آنالیزور جرمی در آن مشخص شده است.



شکل ۱-۳. طرحی ساده از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

از آنجایی که در این طیف‌سنج، تمام یون‌ها در یک فاصله و به وسیله یک میدان شتاب می‌گیرند، از انرژی جنبشی تقریباً یکسانی برخوردارند و داریم:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = qV \quad (1-1)$$

که در آن E_k انرژی جنبشی برحسب ژول (J)، m جرم برحسب (kg)، v سرعت برحسب متر بر ثانیه (m/s)، q بارالکتریکی برحسب کولن (C) و V ولتاژ شتاب‌دهنده یون‌ها برحسب ولت (V) می‌باشد.

^۱-Flight Tube

از رابطه ۱-۱ می‌توانیم سرعت یون‌ها را بدست بیاوریم:

$$v = \sqrt{\frac{2qV}{m}} \quad (2-1)$$

۱-۳-۴-۱ زمان پرواز^۱

مدت زمان رسیدن یون‌ها به آشکارساز را زمان پرواز (t) گویند. زمان پرواز یون‌ها بسیار کوتاه؛ در حدود ۱ تا ۳۰۰ میکروثانیه (μs) می‌باشد در نتیجه آشکارساز باید زمان پاسخ بسیار سریعی داشته باشد. یون‌ها پس از ورود به لوله پرواز (L)، طول آن را برای رسیدن به آشکارساز در زمان t طی می‌کنند در نتیجه از رابطه های ۲-۱ و ۳-۱ می‌توان رابطه ۴-۱ که زمان پرواز یون‌ها می‌باشد را بدست آورد:

$$L = vt \quad (3-1)$$

$$t = L \sqrt{\frac{m/q}{2V}} \quad (4-1)$$

از رابطه ۴-۱ متوجه می‌شویم که:

$$t \propto \sqrt{m/q} \quad (5-1)$$

یون‌هایی که m/q پایین‌تری دارند زمان پرواز کمتری دارند و زودتر به آشکارساز می‌رسند و یون‌هایی که m/q بالاتری دارند زمان پرواز بیشتری دارند و دیرتر به آشکارساز می‌رسند.

مثال ۱-۱.

می‌خواهیم زمان پرواز یون $^{207}Pb^+$ را با یون $^{208}Pb^+$ مقایسه کنیم، برای اینکه زمان پرواز را بدست بیاوریم نیاز به ولتاژ شتاب‌دهنده و طول لوله پرواز داریم در اینجا ولتاژ شتاب‌دهنده را ثابت و برابر با $235V$ و طول لوله پرواز را $335mm$ در نظر می‌گیریم.

زمان پرواز یون $^{207}Pb^+$:

$$q = 1.60217653 \times 10^{-19} C$$

$$m = 346.59 \times 10^{-27} kg$$

$$t = L \sqrt{\frac{m/q}{2V}} \rightarrow t = (335 \times 10^{-3} m) \times \sqrt{\frac{346.59 \times 10^{-27} kg}{\frac{1.60217653 \times 10^{-19} C}{2 \times 235 V}}}$$

$$\rightarrow t_{^{207}Pb^+} = 22.65 \mu s$$

زمان پرواز یون $^{208}Pb^+$:

$$q = 1.60217653 \times 10^{-19} C$$

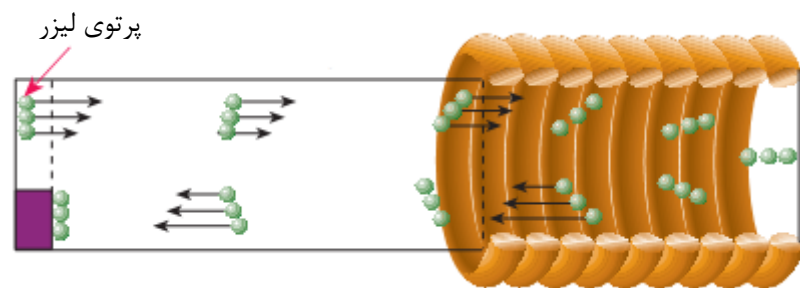
$$m = 348.27 \times 10^{-27} kg$$

$$t = L \sqrt{\frac{m/q}{2V}} \rightarrow t = (335 \times 10^{-3} m) \times \sqrt{\frac{348.27 \times 10^{-27} kg}{\frac{1.60217653 \times 10^{-19} C}{2 \times 235 V}}}$$

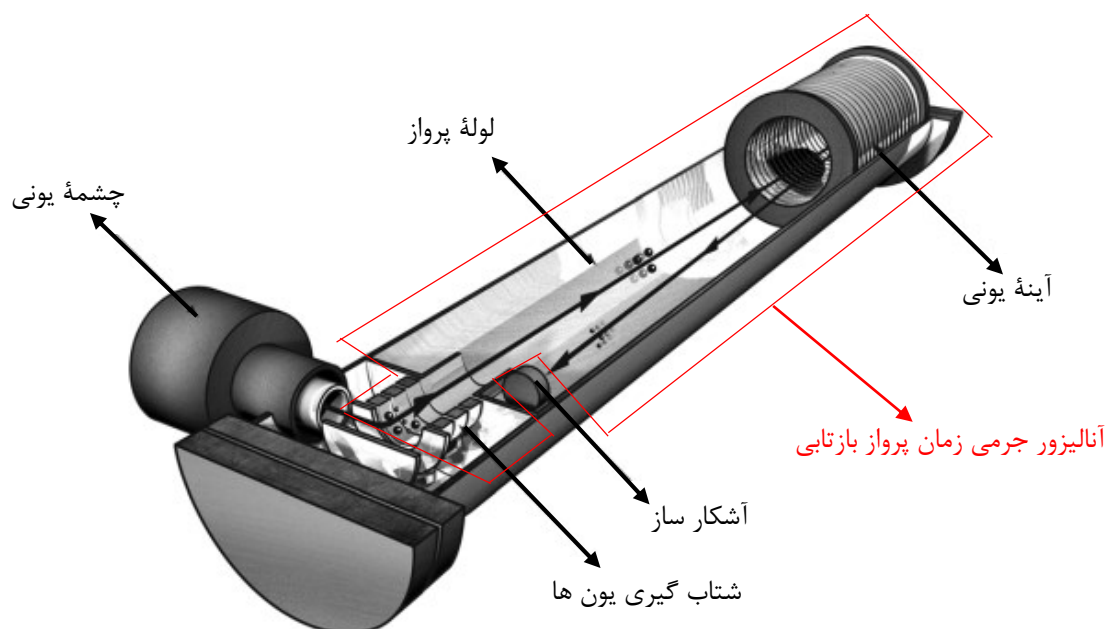
$$\rightarrow t_{^{208}Pb^+} = 22.71 \mu s$$

۱-۳-۴-۲ آنالیزور جرمی زمان پرواز بازتابی (طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی)^(۱)

این آنالیزور جرمی مشابه آنالیزور جرمی زمان پرواز خطی می‌باشد با این تفاوت که در انتهای لوله پرواز یک آینه یونی^۲ تعبیه شده است. یون‌ها توسط آینه یونی بازتاب می‌شوند و باعث می‌شود که طول مسیر پرواز یون‌ها بیشتر و در نتیجه قدرت تفکیک و جداسازی یون‌ها افزایش یابد. شکل ۴-۱ طرحی ساده و شکل ۵-۱ نمای طرح وار طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی را نشان می‌دهد که آنالیزور جرمی آن مشخص شده است.



شکل ۴-۱. طرحی ساده از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی [۵]



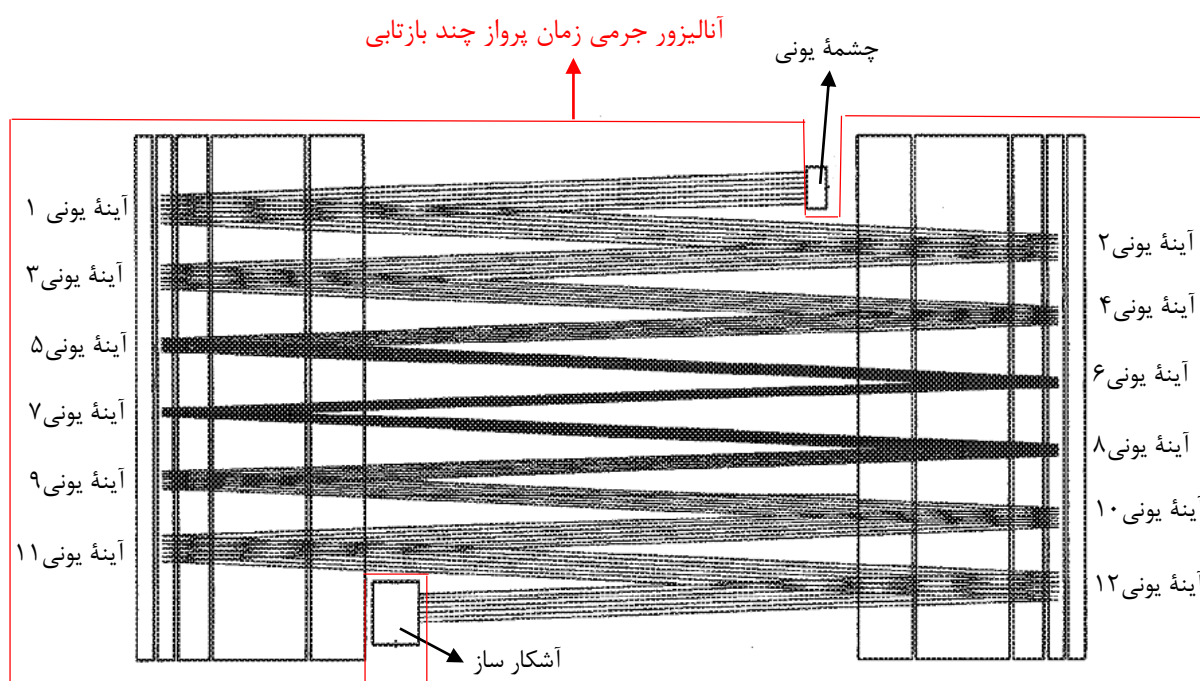
شکل ۵-۱. نمای طرح وار از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی [۳]

^۱-Reflection Time Of Flight Mass Spectrometry (R-TOF-MS)

^۲-Ion Reflector

۱-۳-۴ آنالیزور جرمی زمان پرواز چند بازتابی (طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی)^(۱)

این آنالیزور جرمی مشابه آنالیزور جرمی زمان پرواز بازتابی می‌باشد با این تفاوت که به جای یک آینه یونی، از چندین آینه یونی استفاده می‌شود. یون‌ها توسط چندین آینه یونی که وجود دارد بازتاب می‌شوند و باعث می‌شود که طول مسیر پرواز یون‌ها نسبت به آنالیزور جرمی زمان پرواز بازتابی، بیشتر و در نتیجه قدرت تفکیک و جداسازی یون‌ها نیز افزایش یابد. شکل ۱-۶ نمای طرح وار از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی را نشان می‌دهد که آنالیزور جرمی آن مشخص شده است.



شکل ۱-۶. نمای طرح وار از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی [۶]

۱-۳-۵ آشکارسازهای یونی

آشکارسازها یکی از قسمت های اصلی تمامی طیفسنج ها به شمار می روند. آشکارسازهای طیفسنج جرمی برای اندازه گیری و شناسایی یون های جداسازی شده به کار می روند. اساس آشکارسازهای یونی مورد استفاده در طیفسنجی جرمی، برخورد یون ها با آشکارساز و تولید سیگنال الکتریکی است. نوع آشکارساز یونی، به نوع طیفسنج جرمی در آزمایش مورد نظر بستگی دارد اما به طور کلی، آشکارسازهای مورد استفاده در طیفسنج های جرمی را می توان به دو دسته تقسیم کرد. در دسته اول، یون های رسیده به آشکارساز به طور مستقیم به سیگنال الکتریکی تبدیل می شوند مانند آشکارساز یونی فنجان فارادی^۱ و در دسته دوم وجود داینود^۲ موجب تقویت سیگنال می شود مانند آشکارسازهای یونی تکثیرکننده الکترونی^۳ و آشکارساز صفحه چند کاناله^۴.

انواع آشکارسازهای مورد استفاده در طیفسنج جرمی در ادامه به اختصار شرح داده می شوند.

۱-۳-۵-۱ آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی

آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی یکی از رایج ترین آشکارسازهای مورد استفاده در طیفسنج های جرمی است که توانایی آشکارسازی یون های مثبت و منفی در یک سیستم را دارد. در این آشکارساز، یون ها پس از رسیدن به یک داینود موجب تولید الکترون می شوند. تعداد این الکترون ها در برخورد با الکترودهای تکثیرکننده افزایش می یابد و جریانی قابل اندازه گیری ایجاد می کند. توان تقویت این آشکارساز تا 10^7 مرتبه می رسد. آشکارسازهای یونی تکثیرکننده، از توان پاسخگویی بسیار سریع و حساسیت بالایی برخوردارند اما طول عمر کوتاهی دارند. شکل ۱-۷ شکل بیرونی آشکارساز تکثیرکننده الکترونی و شکل ۱-۸ نمای طرح وار این آشکارساز را نشان می دهد.

۱- Farady Cup Ion Detector

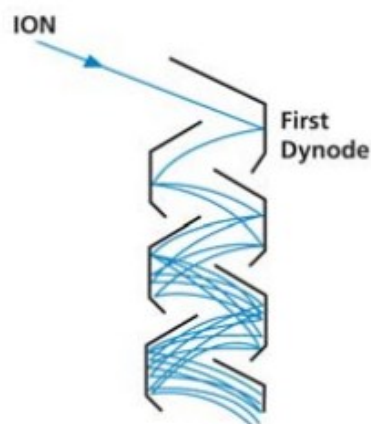
۲- Dynode

۳- Electron Multiplier Ion Detector

۴- Micro Channel Plate (MCP) Ion Detector



شکل ۷-۱. شکل بیرونی آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی

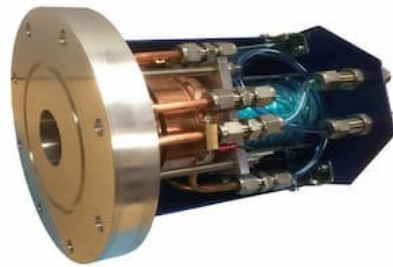


شکل ۸-۱. نمای طرح وار آشکارساز یونی تکثیرکننده الکترونی

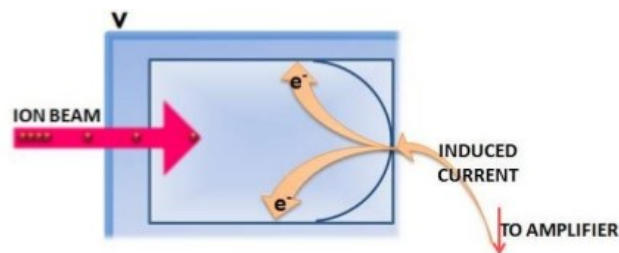
۱-۳-۵-۲ آشکارساز یونی فنجان فارادی

آشکارساز یونی فنجان فارادی یکی از آشکارسازهایی است که در طیف‌سنج جرمی مدرن مورد استفاده قرار می‌گیرد و ساختاری بسیار ساده دارد. این آشکارساز مشابه تکثیرکننده الکترونی است که از یک فلز منحنی شکل (داینود معمولاً استوانه‌ای شکل) از جنس اکسید برلیم (BeO) یا گالیم فسفید (GaP) تشکیل شده است که پس از برخورد یون به آن، موجب تولید الکترون و ایجاد جریان می‌گردد، این جریان ابتدا تقویت و سپس ثبت می‌شود. تفاوت این آشکارساز با آشکارساز تکثیرکننده الکترونی در این است که در آشکارساز فنجان فارادی تنها از یک داینود استفاده می‌شود، حال آن که در آشکارساز تکثیرکننده الکترونی، چندین داینود وجود دارد. آشکارساز یونی فنجان فارادی از حساسیت

محدودی برخوردار است با این وجود بسیار دقیق عمل می‌کند. سادگی، مقاومت و کارکردن در هر فشاری از مزیت‌های این آشکارساز است. شکل ۹-۱ شکل بیرونی آشکارساز فنجان فارادی و شکل ۱۰-۱ نمای طرح وار این آشکارساز را نشان می‌دهد.



شکل ۹-۱. شکل بیرونی آشکارساز یونی فنجان فارادی



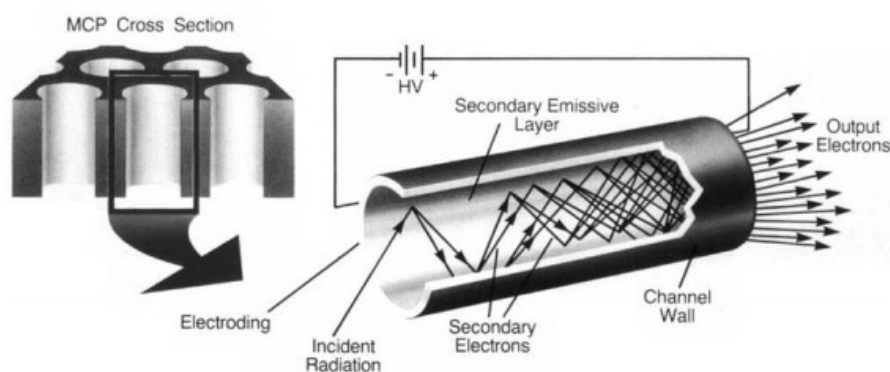
شکل ۱۰-۱. نمای طرح وار آشکارساز یونی فنجان فارادی [۲]

۱-۳-۵ آشکارساز یونی صفحه چند کاناله

عملکرد این آشکارساز مشابه آشکارساز تکثیرکننده الکترونی است با این تفاوت که به جای یک کانال تقویتی، کانال‌های متعدد موازی در سطح یک صفحه توزیع شده‌اند. هر کانال دارای قطر معمول ۱۰ میکرومتر و طول ۱ میلی‌متر است. نسبت طول به قطر (L/D) بین ۴۰ تا ۱۲۰ است. فاصله بین کانال‌ها فقط کمی از قطر کانال‌ها بزرگ‌تر است و کانال‌ها طوری طراحی شده‌اند که عمود بر سطح نیستند و زاویه ۱۱ درجه نسبت به عمود دارند. این آشکارساز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی کاربرد زیادی دارد. مزیت عمده این آشکارساز اندازه‌گیری همزمان یون‌هاست. شکل ۱۱-۱ شکل بیرونی آشکارساز صفحه چند کاناله و شکل ۱۲-۱ نمای طرح وار این آشکارساز را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۱۱. شکل بیرونی آشکارساز یونی صفحه چند کاناله



شکل ۱-۱۲. نمای طرح وار آشکارساز یونی صفحه چند کاناله [۴]

۱-۳-۶ سیستم خلاء

آنالیزور جرمی، آشکارساز و چشمه یونی در یک محفظه قرار دارند که براساس سیستم خلاء کار می‌کند. تمام طیف‌سنج‌های جرمی در محیط خلاء کار می‌کنند زیرا یون‌های به وجود آمده و تفکیک‌شده برحسب m/q ، باید بدون انحراف و آشفته‌گی ناشی از برخورد با دیگر اتم‌ها یا مولکول‌ها، در طی مسیر خود به آشکارساز برسند. در طیف‌سنج‌های جرمی برای ایجاد خلاء مناسب، غالباً پمپ‌های روتاری^۱، دیفیوژن^۲، توربو^۳ و گاهی پمپ‌های یونی^۴ مورد استفاده قرار می‌گیرند. [۲]

۱- Rotary Pump

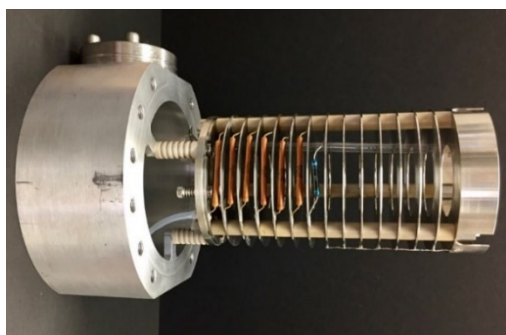
۲- Diffusion Pump

۳- Turbo Pump

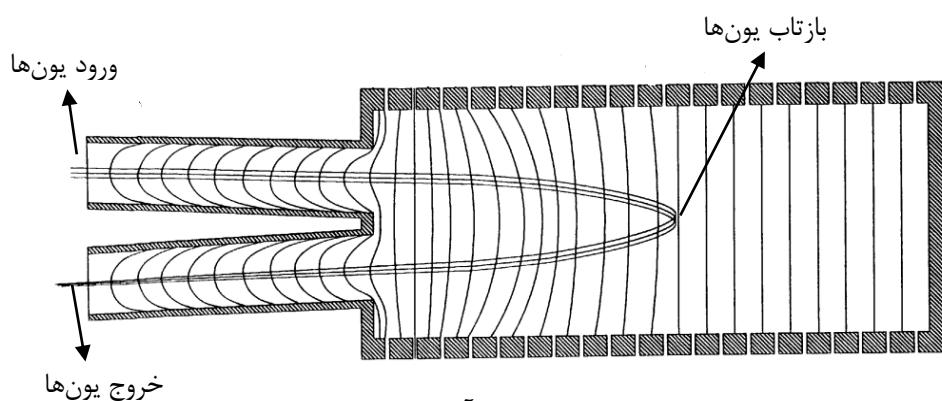
۴- Ion Pumps

۴-۱ آینه یونی

هدف از استفاده آینه یونی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی و چند بازتابی افزایش قدرت تفکیک و جداسازی یون‌ها می‌باشد. آینه یونی از چندین الکتروود مشابه تشکیل شده است که بر روی میله‌های حامل عایق الکتریکی به صورت شبکه‌ای نصب شده است و الکتروودهای متقارن روی آن سوار هستند. جنس الکتروودها از یک رسانای خوب (مس) می‌باشد. هر کدام از الکتروودها پتانسیل دارند و اختلاف پتانسیل بین الکتروودها باعث ایجاد میدان الکتریکی می‌شود و میدان الکتریکی باعث می‌شود به یون‌هایی که درون آینه یونی هستند نیرو وارد شود و در نتیجه یون‌ها بازتاب پیدا می‌کنند. شکل ۱-۱۳ که بیرونی آینه یونی و شکل ۱-۱۴ نمای طرح وار آینه یونی را نشان می‌دهد. [۷]



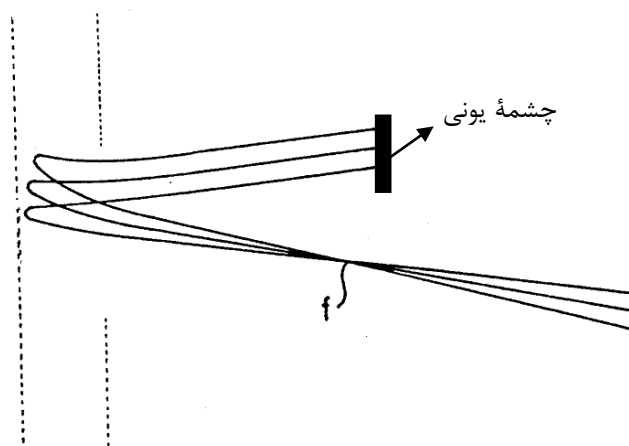
شکل ۱-۱۳. شکل بیرونی آینه یونی



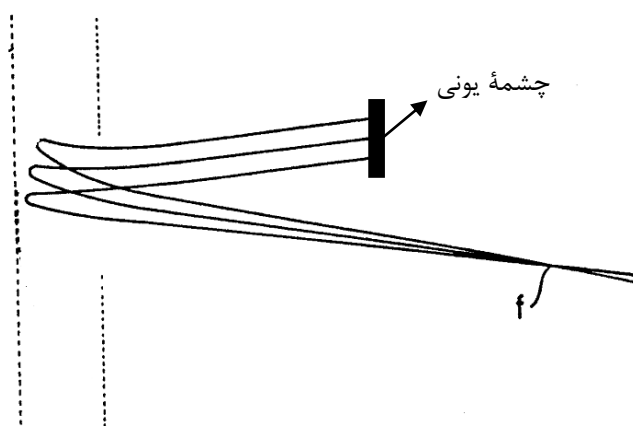
شکل ۱-۱۴. نمای طرح وار از آینه یونی [۷]

۵-۱-۵ کانون باریکه یونی

بعد از بازتاب یون ها به وسیله آینه یونی، مسیر یون ها در یک نقطه ای همدیگر را قطع می کنند که کانون باریکه یونی (f) نام دارد. هدف از کانونی کردن باریکه یونی آن است که باریکه یون ها روی آشکارساز کانونی شود. کانون باریکه یونی باید بهینه باشد و کانونی بهینه است که در جنب چشمه یونی یا پشت چشمه یونی قرار گیرد تا نوفه ناشی از چشمه یونی روی آشکارساز اثر نگذارد. در شکل ۱۵-۱ کانون بهینه باریکه یون ها در جنب چشمه یونی و در شکل ۱۶-۱ کانون بهینه باریکه یون ها در پشت چشمه یونی قرار دارد. [۸]



شکل ۱۵-۱. کانون بهینه باریکه یون ها در جنب چشمه یونی [۸]



شکل ۱۶-۱. کانون بهینه باریکه یون ها در پشت چشمه یونی [۸]

۱-۶ اهداف پایان نامه

پس از شبیه سازی طیف سنج های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی، کانون بهینه باریکه یونی در طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی را بدست می آوریم و آن را بهینه می کنیم سپس زمان پرواز یون ها را به کمک نرم افزار *CST* ثبت می کنیم. زمان پرواز دو یون مختلف که از چشمه یونی ساطع می شود را در طیف سنج های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی با استفاده از نرم افزار *CST* بدست آورده و آنها را با یکدیگر مقایسه می کنیم. در ادامه نمودار هیستوگرام تعداد یون های رسیده به آشکارساز را برحسب زمان پرواز، که توزیع آن به صورت یک توزیع گوسی است رسم کرده و از روی نمودار، قدرت تفکیک زمانی و جرمی را در طیف سنج های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی بدست می آوریم و آنها را با یکدیگر مقایسه می کنیم.

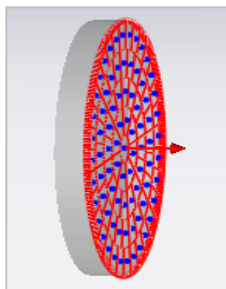
فصل ۲: شییه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چندبازتابی

بانرم افزار شییه سازی CST

۱-۲ شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

۱-۱-۲ طراحی چشمه یونی

ابتدا در نرم‌افزار شبیه‌سازی CST (پیوست) با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس خلاء) در راستای محور Z که شعاع خارجی آن ۱۰ میلی‌متر و ارتفاع (ضخامت) آن ۲ میلی‌متر است رسم می‌کنیم. سپس بر روی یک سطح مقطع استوانه با استفاده از ابزار *Particle Area Source* چشمه را روی سطح دایروی تعریف می‌کنیم (شکل ۱-۲). برای تعیین چشمه، لازم است تا نوع چشمه، نوع ذره، مدل انتشار، تعداد ذرات ساطع شده از چشمه، نوع توزیع، مقدار انرژی چشمه (مقدار انرژی اولیه ذرات ساطع شده)، مقدار پراکندگی انرژی (درصد) و زاویه پراکندگی ذرات (درجه) را مشخص کنیم. نوع چشمه را چشمه یونی و به عنوان مثال نوع ذره را یون سرب ($^{208}Pb^+$)، مدل انتشار را ثابت، تعداد یون‌هایی که از چشمه یونی ساطع می‌شود را ۸۰، توزیع به صورت یکنواخت، انرژی چشمه یونی را 250 eV ، مقدار پراکندگی انرژی ۱٪ و زاویه پراکندگی را 0.1° انتخاب می‌کنیم.

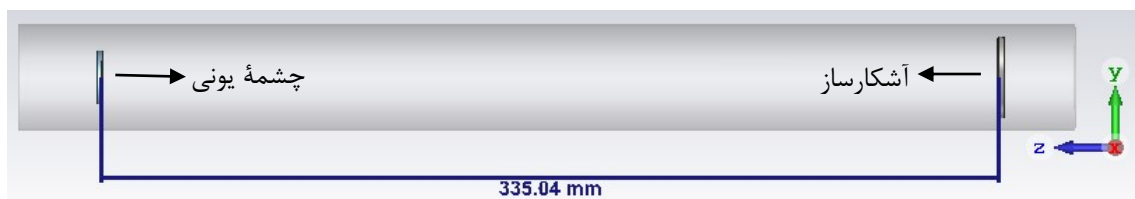


شکل ۱-۲. طراحی چشمه یونی روی سطح دایروی

۲-۱-۲ طراحی آشکارساز

برای طراحی آشکارساز، با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس فولاد) در راستای محور Z به شعاع خارجی ۱۵ میلی‌متر و ارتفاع (ضخامت) ۲ میلی‌متر رسم می‌کنیم و در جایی قرار می‌دهیم که یون‌هایی که از چشمه ساطع می‌شوند، به آشکارساز برسند.

در ادامه مجدداً با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس PEC^1) به شعاع خارجی ۲۰ میلی‌متر و ارتفاع ۳۹۵ میلی‌متر رسم کرده و طوری استوانه را تعبیه می‌کنیم که چشمه یونی و آشکارساز درون استوانه قرار گیرند (شکل ۲-۲).

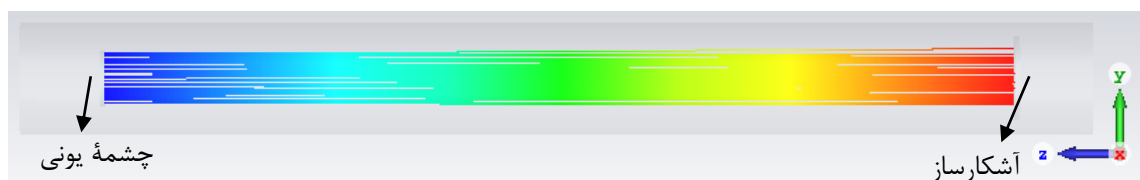


شکل ۲-۲. شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

سپس با استفاده از ابزار *Electric Potential* به سطوح استوانه طراحی‌شده، پتانسیل الکتریکی صفر اعمال می‌کنیم.

۲-۱-۳ شبیه‌سازی و نتایج آن

برای شبیه‌سازی ابتدا از ماژول *CST Particle Studio* که یکی از ماژول‌های نرم افزار *CST* می‌باشد استفاده می‌کنیم. با استفاده از این ماژول می‌توان تأثیرات میدان الکتریکی روی ذرات باردار را مشاهده و مسیر حرکت آن‌ها را ردیابی و ترابرد کرد. در ادامه با استفاده از ابزار *Setup Solver* به شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی می‌پردازیم که مسیر یون‌ها مطابق شکل ۳-۲ خواهد بود.



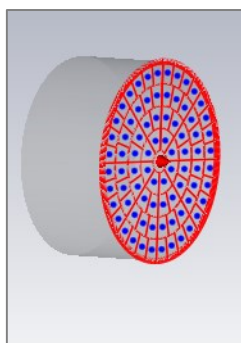
شکل ۳-۲. مسیر یون‌ها از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

^۱-Perfect Electrical Conductor

۲-۲ شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

۱-۲-۲ طراحی چشمه یونی

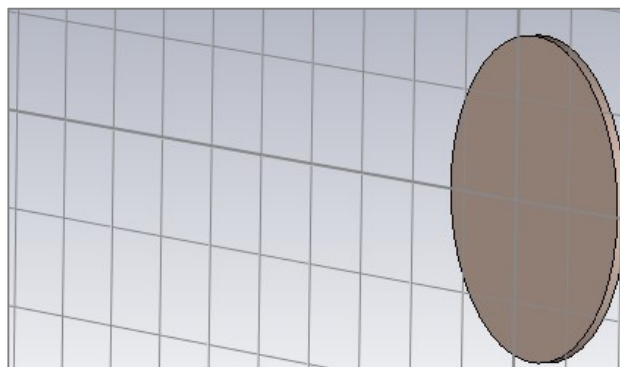
با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس خلاء) در راستای محور Z که شعاع خارجی آن ۷ میلی‌متر و ارتفاع آن نیز ۷ میلی‌متر است رسم می‌کنیم. سپس بر روی یک سطح مقطع استوانه با استفاده از ابزار *Particle Area Source* چشمه را روی سطح دایروی تعریف می‌کنیم (شکل ۲-۴). نوع چشمه را چشمه یونی و به عنوان مثال نوع ذره را یون سرب ($^{208}Pb^+$)، مدل انتشار را ثابت، تعداد یون‌هایی که از چشمه یونی ساطع می‌شود را ۱۲۰، توزیع به صورت یکنواخت، انرژی چشمه یونی را 250 eV ، مقدار پراکندگی انرژی ۱٪ و زاویه پراکندگی را 0.1° انتخاب می‌کنیم.



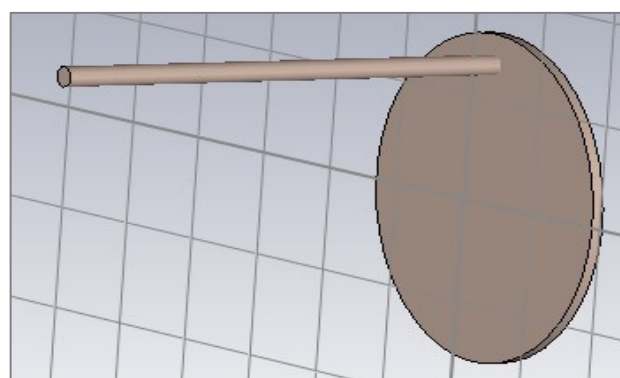
شکل ۲-۴. طراحی چشمه یونی روی سطح دایروی

۲-۲-۲ طراحی آینه یونی

آینه یونی را به کمک نرم افزار *CST* براساس مرجع شماره ۸ طراحی می کنیم. ابتدا با استفاده از ابزار *Cylinder* یک صفحه استوانه ای (از جنس پلی استایرن) در راستای محور *Z* به شعاع خارجی ۸۰ میلی متر و ارتفاع (ضخامت) ۵ میلی متر مطابق شکل ۲-۵ رسم می کنیم. مجدداً با استفاده از ابزار *Cylinder* یک میله استوانه ای (از جنس پلی استایرن) در راستای محور *Z* به شعاع خارجی ۵ میلی متر و ارتفاع ۲۳۰ میلی متر، طوری که میله استوانه ای به صفحه استوانه ای متصل شده باشد رسم می کنیم (شکل ۲-۶).

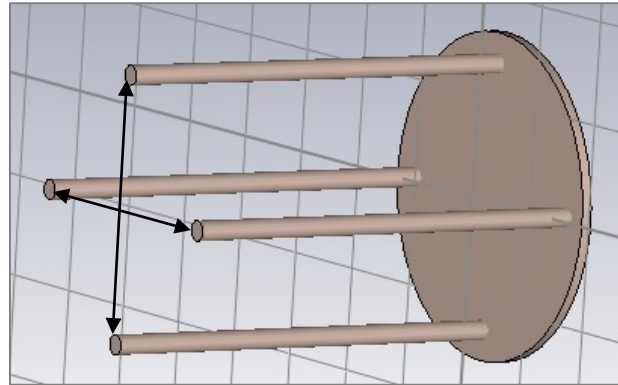


شکل ۲-۵. طراحی صفحه استوانه ای



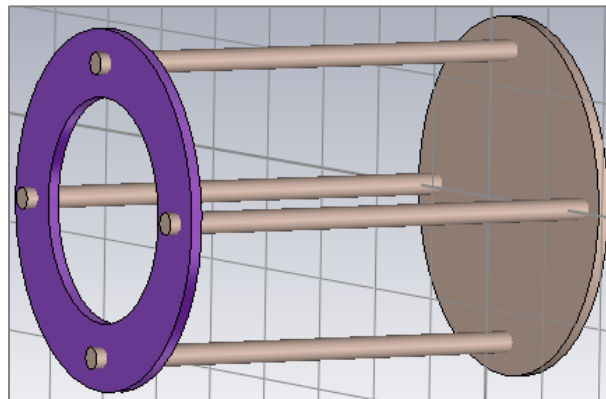
شکل ۲-۶. طراحی میله استوانه ای متصل به صفحه

در ادامه، ۳ میله استوانه‌ای از میله استوانه‌ای طراحی شده، کپی می‌کنیم و در راستای همدیگر قرار می‌دهیم (شکل ۷-۲).



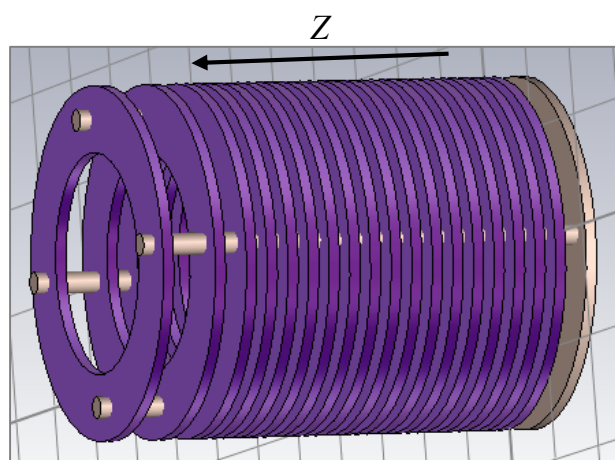
شکل ۷-۲. طراحی ۴ میله استوانه‌ای در راستای همدیگر

سپس الکترودهای آینه یونی را طراحی می‌کنیم. برای طراحی الکترودها با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس مس) در راستای محور Z به شعاع خارجی ۸۰ میلی‌متر، شعاع داخلی ۵۰ میلی‌متر، پهنای ۳۰ میلی‌متر و ارتفاع (ضخامت) ۵ میلی‌متر، طوری که الکتروده روی ۴ میله استوانه‌ای سوار شده باشد مطابق شکل ۸-۲ رسم می‌کنیم.



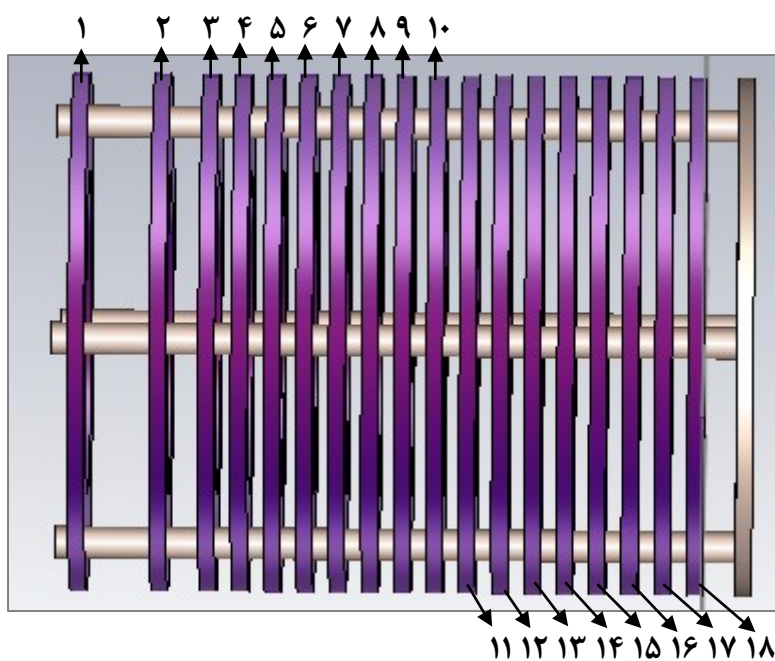
شکل ۸-۲. الکتروده طراحی شده

۱۷ الکتروود از الکتروود طراحی شده، کپی کرده و در فواصل معین و در راستای محور Z ها قرار می‌دهیم (شکل ۹-۲)



شکل ۹-۲. ۱۸ الکتروود طراحی شده سوار بر ۴ میله استوانه‌ای در راستای محور Z

شماره‌گذاری الکتروودها مطابق شکل ۱۰-۲ خواهد بود.



شکل ۱۰-۲. شماره‌گذاری الکتروودهای طراحی شده

فاصله بین الکترودهای طراحی شده مطابق جدول ۱-۲ می باشد.

جدول ۱-۲. فاصله الکترودهای طراحی شده آینه یونی

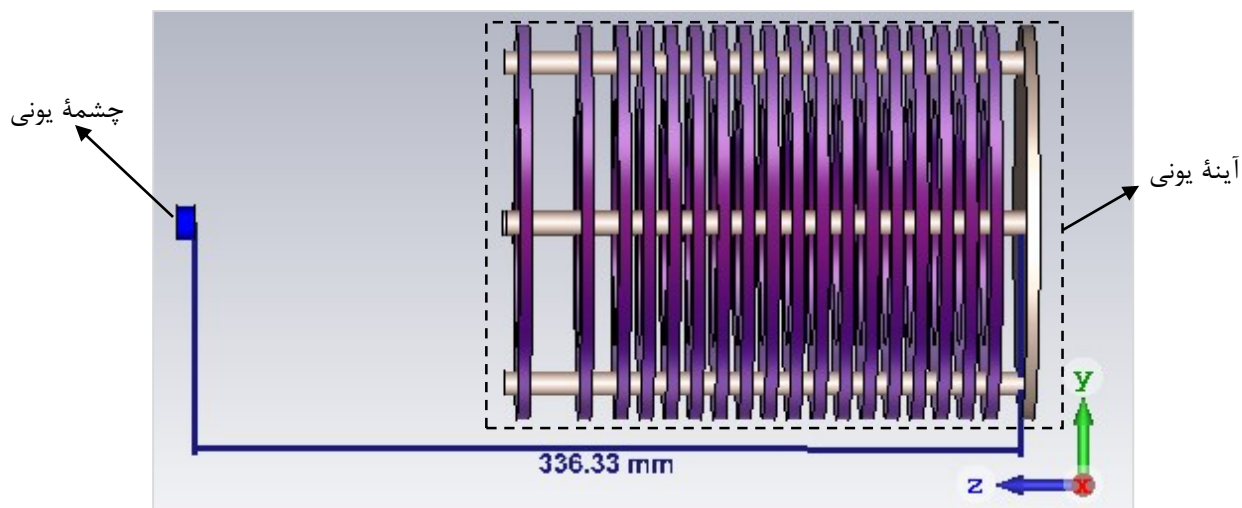
الکترودهای	فاصله (mm)
۱-۲	۲۰
۲-۳	۱۰
۳-۴ الی ۱۷-۱۸	۵

در نرم افزار CST با استفاده از ابزار *Electric Potential* به هر کدام از الکترودهای طراحی شده پتانسیل الکتریکی اعمال می کنیم (جدول ۲-۲)

جدول ۲-۲. پتانسیل الکتریکی اعمال شده به الکترودهای طراحی شده [۸]

الکترودهای	پتانسیل اعمال شده (V)
۱	۰
۲	۲۵۵
۳	۲۷۵
۴	۲۹۳
۵	۳۱۱
۶	۳۳۱
۷	۳۵۱
۸	۳۶۸
۹	۳۸۳
۱۰	۳۹۵
۱۱	۴۰۴
۱۲	۴۱۲
۱۳	۴۲۰
۱۴	۴۳۱
۱۵	۴۴۵
۱۶	۴۶۱
۱۷	۴۷۹
۱۸	۵۰۰

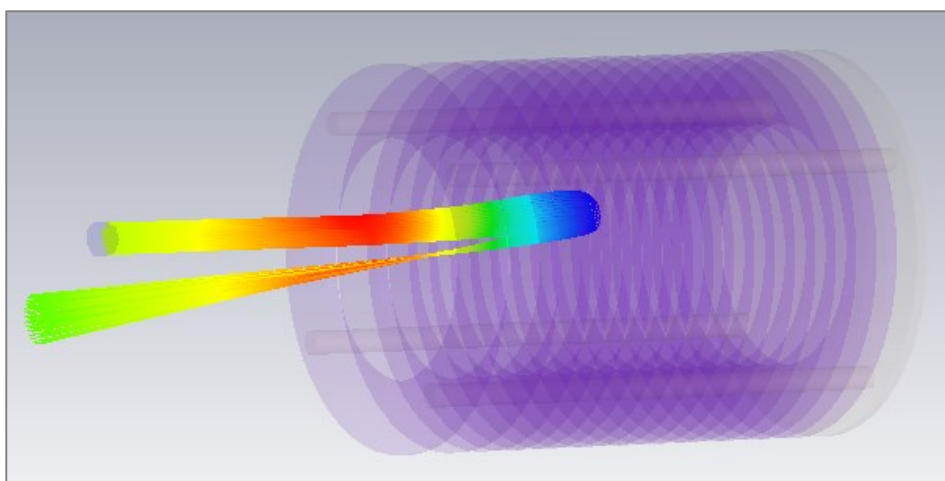
در نتیجه شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی مطابق شکل ۱۱-۲ خواهد بود.



شکل ۲-۱۱. شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

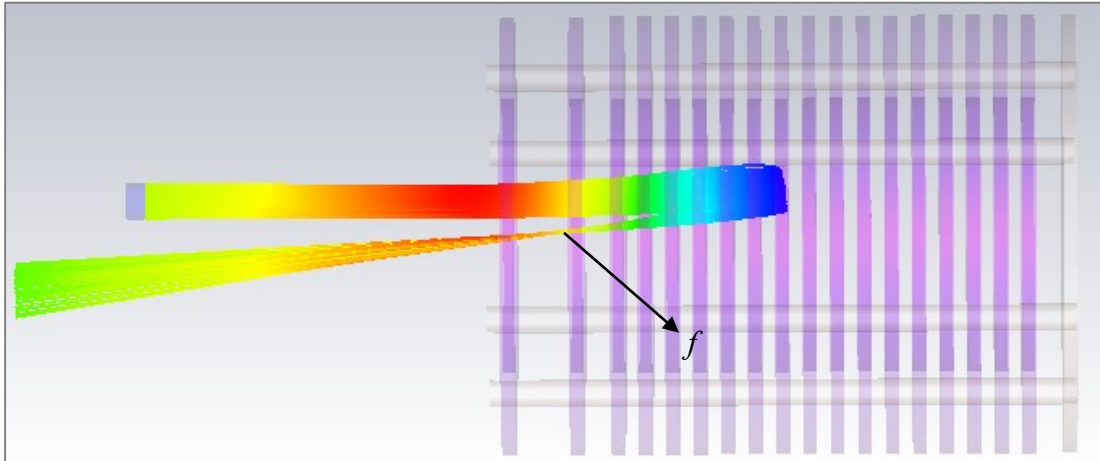
۳-۲-۲ شبیه سازی و نتایج آن

با استفاده از ابزار *Setup Solver* به شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی می پردازیم که مسیر یون ها مطابق شکل ۲-۱۲ خواهد بود. در این شبیه سازی مسیر یون های $^{208}\text{Pb}^+$ از چشمه یونی ساطع و سپس وارد آینه یونی می شود و با توجه به این که در آینه یونی میدان الکتریکی وجود دارد از طرف میدان الکتریکی به یون ها نیرویی وارد می شود که باعث بازتاب یون ها می شود.

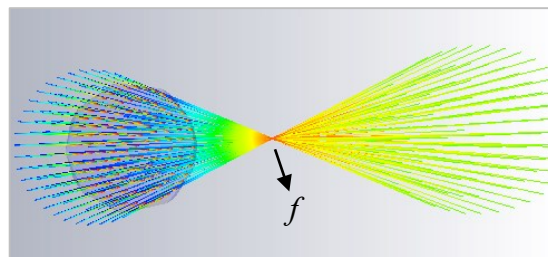


شکل ۲-۱۲. مسیر یون ها از شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

در ادامه مسیر یون‌های بازتاب شده در یک نقطه‌ای همدیگر را قطع می‌کنند که کانون باریکه یونی (f) نام دارد که در شکل‌های ۲-۱۳ از جهت‌های مشخص شده است.



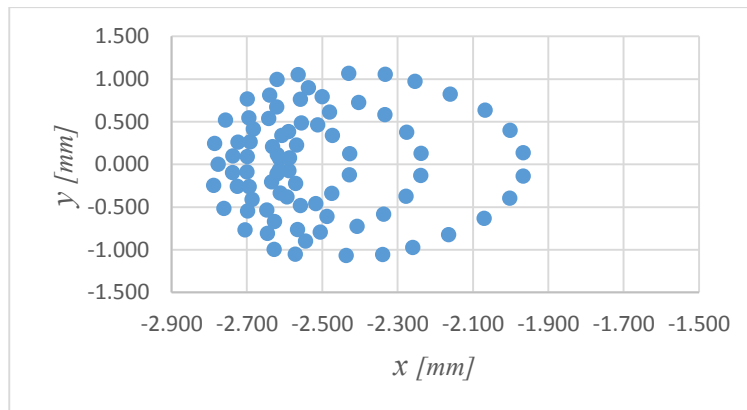
شکل ۲-۱۳-الف. کانون باریکه یونی از یک جهت



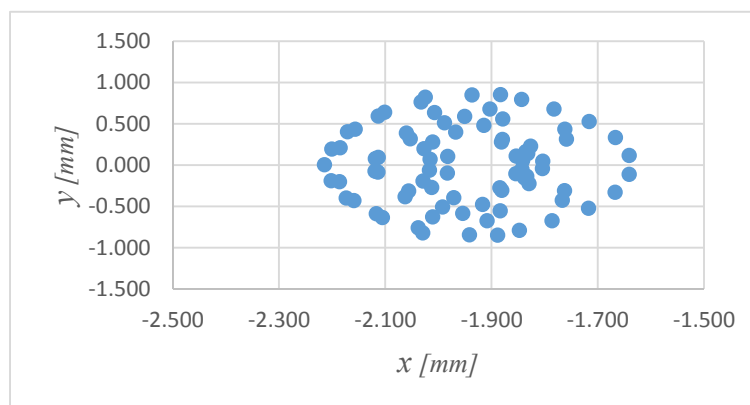
شکل ۲-۱۳-ب. کانون باریکه یونی از جهت چشمه یونی

مطابق مطالب فصل ۱، هدف از کانونی کردن باریکه یونی آن است که مسیر یون‌های بازتاب شده روی آشکارساز کانونی شود. کانون باریکه یونی باید بهینه باشد و کانونی بهینه است که جنب چشمه یونی یا پشت چشمه یونی قرار گیرد. در شکل ۲-۱۳ کانون باریکه یونی درون آینه یونی قرار دارد که باید جنب چشمه یونی یا پشت چشمه یونی قرار گیرد تا کانون بهینه شود که در فصل ۳ این کانون را بهینه خواهیم کرد.

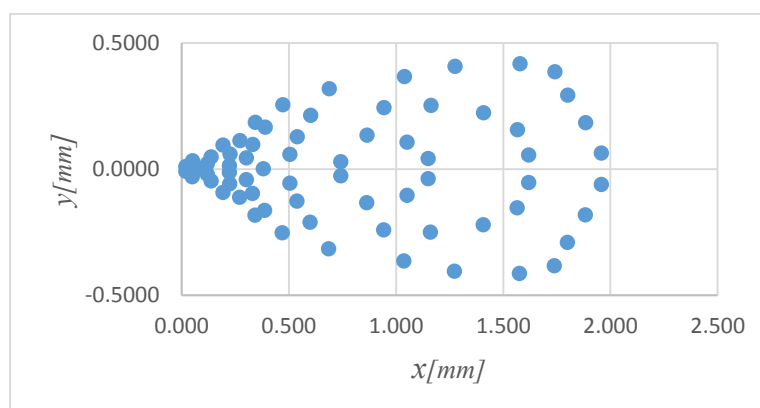
برای اینکه کانون باریکه یونی را بهتر مشاهده کنیم از نمایشگر ذره استفاده می کنیم. نمایشگرهای ذره را عمود بر امتداد بیم قرار می دهیم. نمودارهای y بر حسب x مطابق شکل های ۲-۱۴ خواهد بود. همچنین توزیع یون ها در جهت x و y در شکل ۲-۱۵ به شکل توزیع فراوانی نشان داده شده است. انتظار می رود با افزایش تعداد یون ها در شبیه سازی، این توزیع ها به توزیع لورنتسی نزدیک شوند.



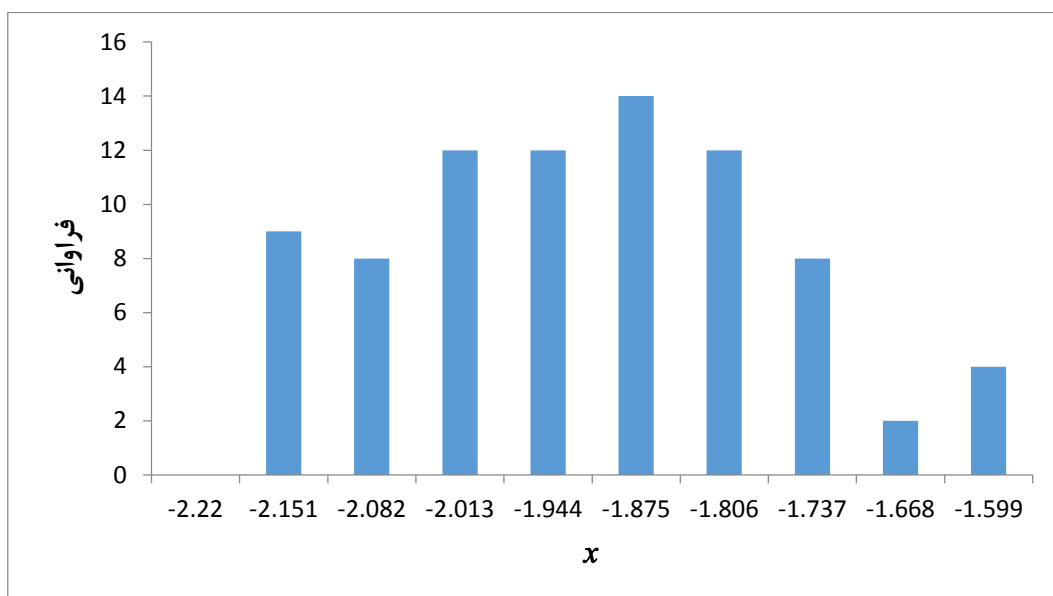
شکل ۲-۱۴-الف. نمودار y بر حسب x در فاصله 10 mm پشت کانون



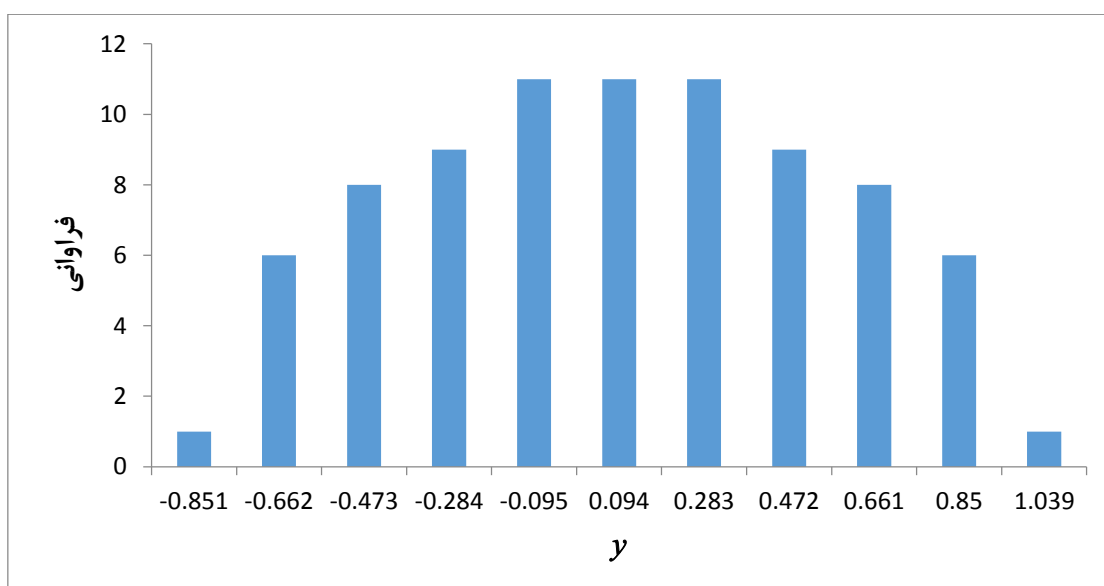
شکل ۲-۱۴-ب. نمودار y بر حسب x در روی کانون



شکل ۲-۱۴-ج. نمودار y بر حسب x در فاصله 10 mm جلوی کانون



شکل ۲-۱۵-الف. نمودار فراوانی بر حسب x در محل کانون

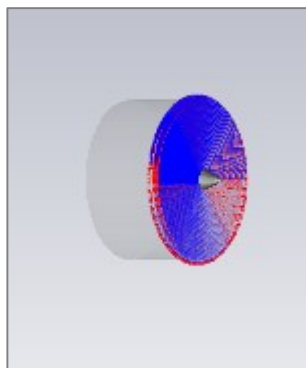


شکل ۲-۱۵-ب. نمودار فراوانی بر حسب y در محل کانون

۳-۲ شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

۱-۳-۲ طراحی چشمه یونی

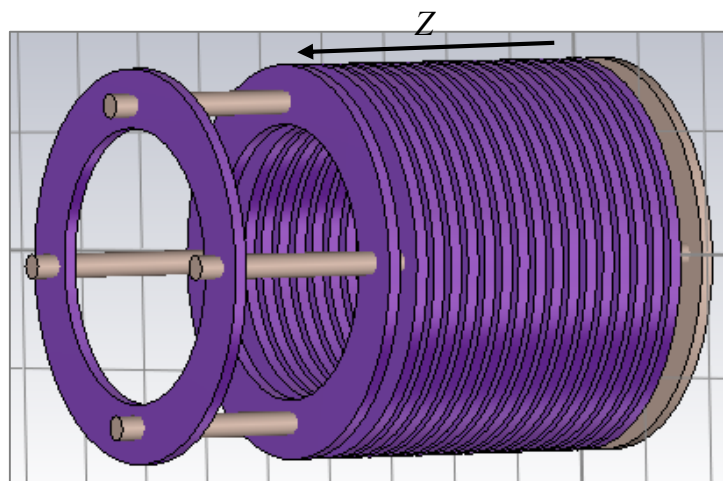
مشابه شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس خلاء) در راستای محور Z که شعاع خارجی آن ۲ میلی‌متر و ارتفاع آن (ضخامت) نیز ۲ میلی‌متر است رسم می‌کنیم سپس بر روی یک سطح مقطع استوانه، چشمه را روی سطح دایروی تعریف می‌کنیم (شکل ۲-۱۶). نوع چشمه را چشمه یونی و به عنوان مثال نوع ذره را یون سرب ($^{208}Pb^+$)، مدل انتشار را ثابت، تعداد یون‌هایی که از چشمه یونی ساطع می‌شود را ۲۰۰۰، توزیع به صورت یکنواخت، انرژی چشمه یونی را 250 eV ، پراکندگی انرژی ۱٪ و زاویه پراکندگی را 0.1° انتخاب می‌کنیم.



شکل ۲-۱۶. طراحی چشمه یونی روی سطح دایروی

۲-۳-۲ طراحی آینه‌های یونی

مشابه آینه یونی که در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی طراحی کردیم این بار هم مجدد همین کار را برای طراحی آینه‌های یونی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی مطابق شکل ۱۷-۲ انجام می‌دهیم.



شکل ۱۷-۲. آینه یونی طراحی شده در جهت محور Z ها

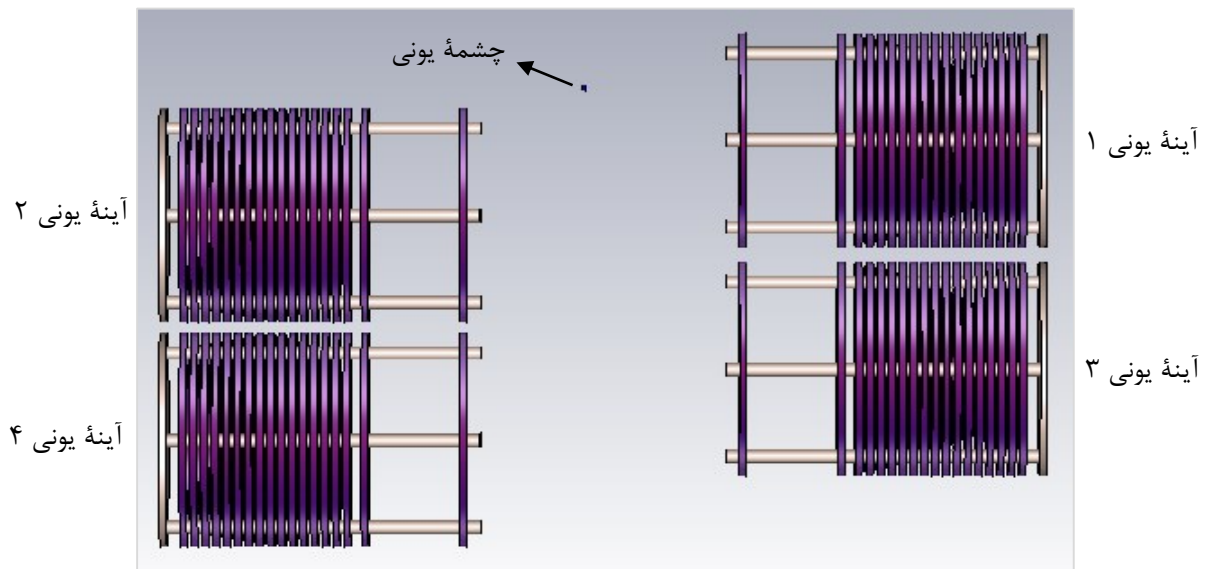
فاصله الکترودهای طراحی شده به صورت جدول ۳-۲ می‌باشد.

جدول ۳-۲. فاصله الکترودهای طراحی شده آینه‌های یونی

فاصله (mm)	الکترودهای
۶۵	۱-۲
۱۲	۲-۳
۴	۳-۴ الی ۱۷-۱۸

پتانسیل الکتریکی الکترودهای طراحی شده مطابق جدول ۲-۲ خواهد بود که در نرم‌افزار *CST* با استفاده از ابزار *Electric Potential* به هر کدام از الکترودها اعمال می‌کنیم.

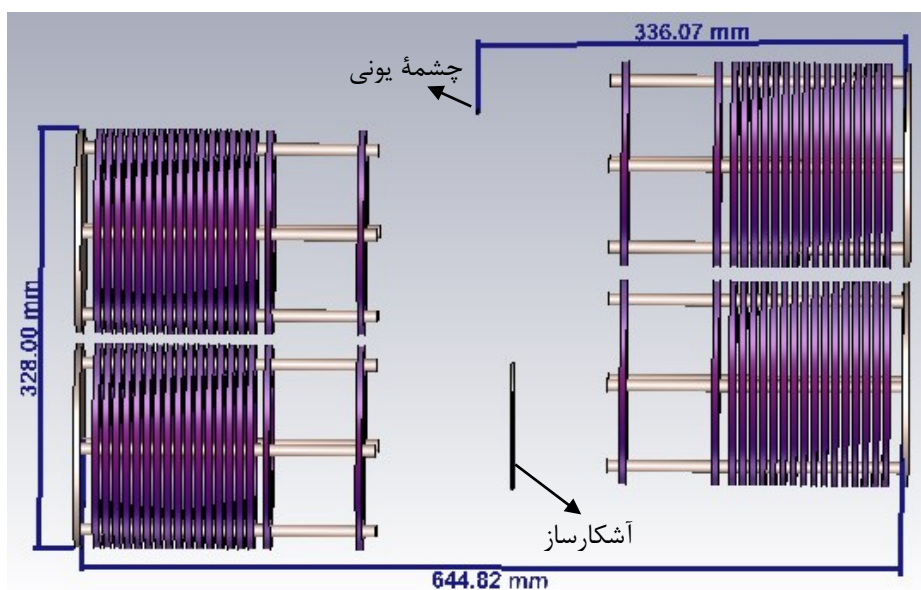
در ادامه از آینه یونی طراحی شده، ۳ آینه یونی کپی کرده و مطابق شکل ۲-۱۸ طوری روبروی یکدیگر قرار می‌دهیم که یون‌ها پس از چندین بار بازتاب، به آشکارساز برسند.



شکل ۲-۱۸. شبیه‌سازی آینه‌های یونی در راستای هم‌دیگر

۲-۳-۳ طراحی آشکارساز

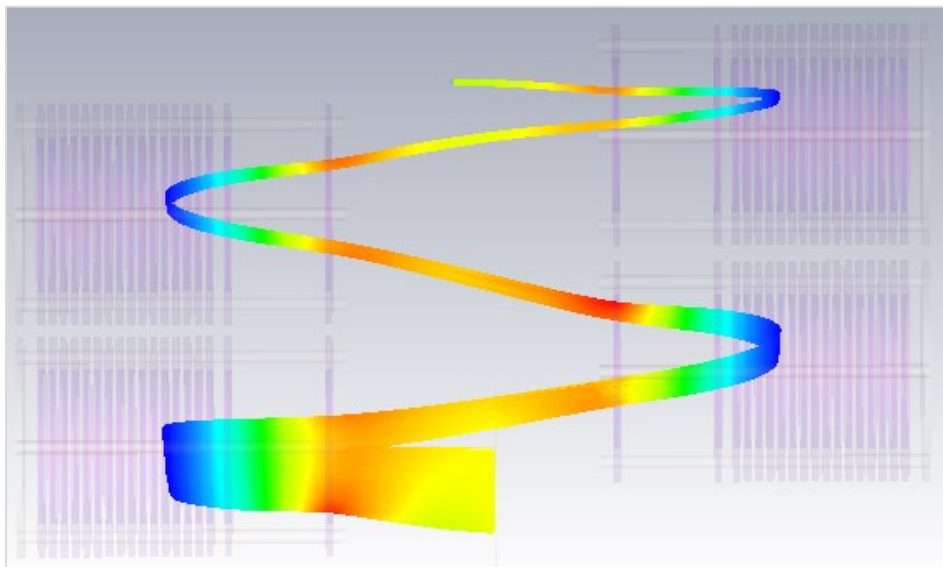
مجدداً با استفاده از ابزار *Cylinder* یک استوانه (از جنس فولاد) در راستای محور Z به شعاع خارجی ۵۰ میلی‌متر و ارتفاع (ضخامت) ۲ میلی‌متر مطابق شکل ۲-۱۹ رسم می‌کنیم و در جایی قرار می‌دهیم که یون‌ها پس از چندین بازتاب از آینه یونی به آشکارساز برسند.



شکل ۲-۱۹. شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

۲-۳-۴ شبیه‌سازی و نتایج آن

مطابق شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی از ماژول *CST Particle Studio* استفاده می‌کنیم. در ادامه به کمک ابزار *Setup Solver* به شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی می‌پردازیم که مسیر یون‌ها مطابق شکل ۲-۲۰ خواهد بود. در این شبیه‌سازی مسیر یون‌های $^{208}Pb^+$ از چشمه یونی ساطع و به ترتیب وارد آینه‌های یونی ۱ و ۲ و ۳ و ۴ می‌شوند و بازتاب پیدا کرده و در آخر به آشکارساز می‌رسند.



شکل ۲-۲۰. مسیر یون‌ها از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

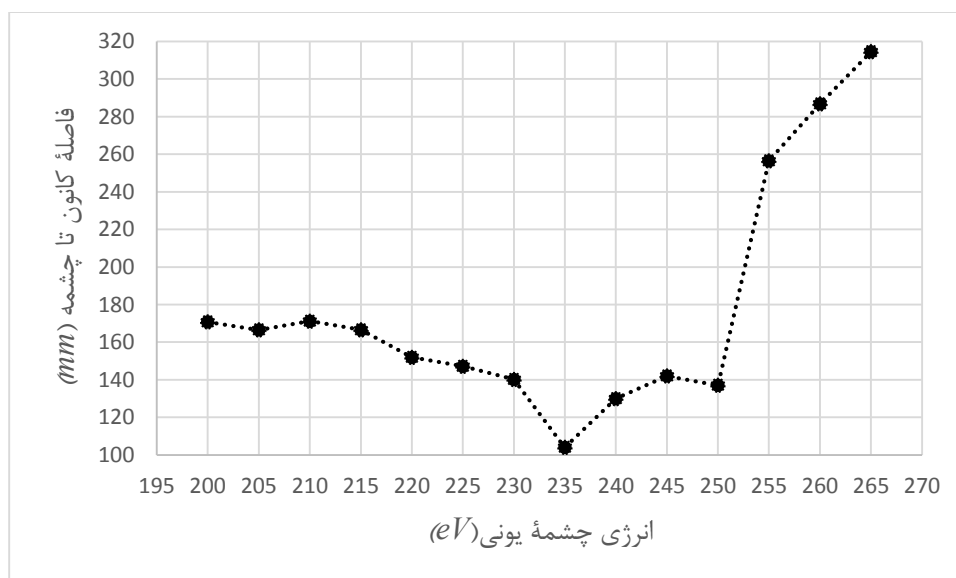
فصل ۳: پارامترهای مؤثر در قانون بهینه‌ی باریکه‌ی یونی

با استفاده از مطالب فصل ۲ توانستیم کانون باریکه یونی (f) که جلوتر از چشمه یونی قرار داشت را بدست بیاوریم. حال سراغ کانون بهینه باریکه یونی می‌رویم تا بتوانیم کانون باریکه یونی را جنب چشمه یونی یا پشت چشمه یونی منتقل کنیم. در ادامه به چندین پارامتر مؤثر برای کانون بهینه باریکه یونی می‌پردازیم.

۳-۱ انرژی چشمه مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی

انرژی چشمه یونی برای کانون بهینه باریکه یونی وقتی مطلوب است که کانون به چشمه یونی نزدیک شود. در نتیجه نمودار فاصله کانون تا چشمه را برحسب انرژی چشمه یونی رسم می‌کنیم و از روی نمودار، انرژی چشمه مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی را بدست می‌آوریم. به عنوان مثال انرژی چشمه یونی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی که در فصل ۲ برای یون $^{208}Pb^+$ برابر با 250 eV بود را به صورت کم‌کم تغییر می‌دهیم سپس فاصله کانون تا چشمه را ثبت می‌کنیم.

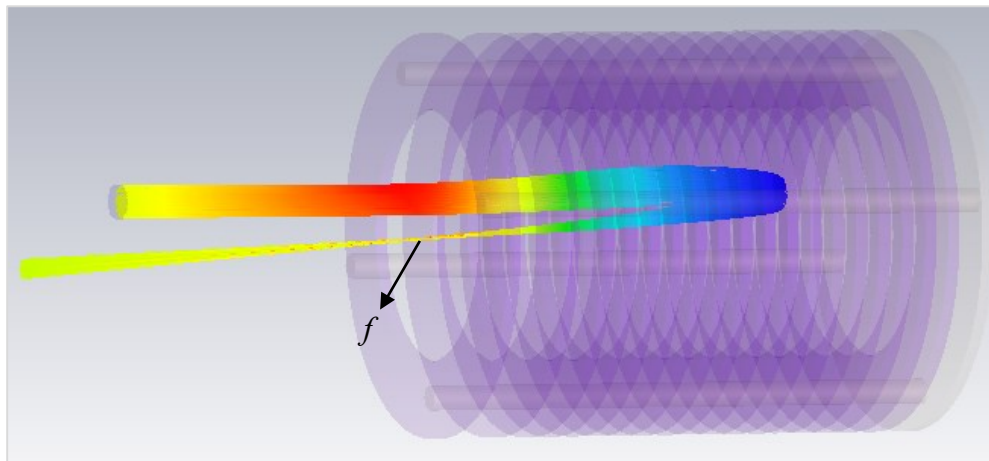
نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب انرژی چشمه یونی به صورت شکل ۳-۱ خواهد بود که برای هدایت چشم نقاط با خط راست نازک خط چین به هم وصل شده‌اند.



شکل ۳-۱. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب انرژی چشمه یونی

با توجه به شکل ۱-۳ انرژی چشمه مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی انرژی 235 eV می باشد که به ازای آن فاصله کانون تا چشمه 104 mm است.

شکل ۲-۳ شبیه سازی انرژی چشمه مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی می باشد که مسیر یون ها و کانون را نشان می دهد.



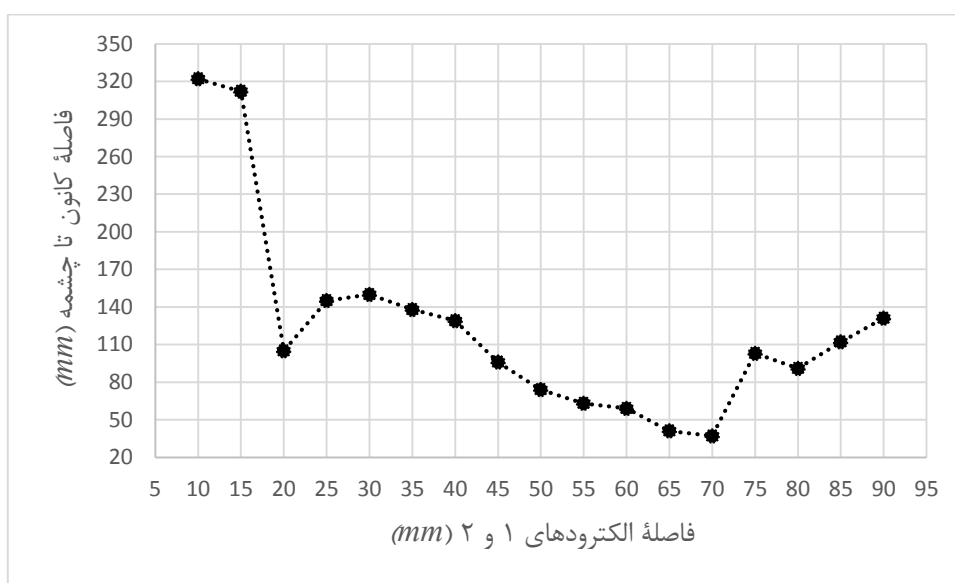
شکل ۲-۳. مسیر یون ها و کانون باریکه یونی براساس انرژی چشمه مطلوب 235 eV

پس از بدست آوردن انرژی چشمه مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی، آن را ثابت در نظر گرفته و سراغ فاصله الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی می رویم.

۳-۲ فاصله الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی

فاصله الکترودها برای کانون بهینه باریکه یونی وقتی مطلوب است که کانون به چشمه یونی نزدیک شود. در نتیجه نمودار فاصله کانون تا چشمه را برحسب فاصله الکترودهای آینه یونی رسم می‌کنیم و از روی نمودار فاصله الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی را بدست می‌آوریم. در شبیه‌سازی انرژی چشمه مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی، فاصله بین الکترودهای آینه یونی ۱ و ۲ که برابر با 20 mm می‌باشد به صورت کم‌کم تغییر داده و فاصله سایر الکترودها را ثابت در نظر می‌گیریم سپس فاصله کانون تا چشمه را ثبت می‌کنیم.

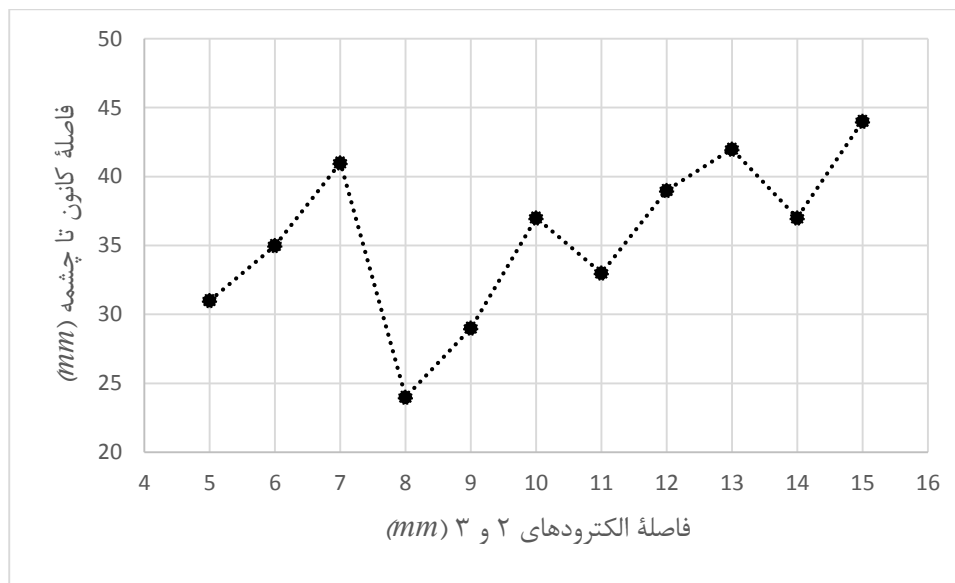
نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۱ و ۲ به صورت شکل ۳-۳ خواهد بود که برای هدایت چشم نقاط با خط راست نازک خط چین به هم وصل شده‌اند.



شکل ۳-۳. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۱ و ۲

با توجه به شکل ۳-۳ فاصله الکترودهای ۱ و ۲ مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی فاصله 70 mm می‌باشد که به ازای آن فاصله کانون تا چشمه 37 mm است.

فاصله بین الکترودهای ۲ و ۳ که برابر با 10 mm می باشد به صورت کم کم تغییر داده و فاصله الکترودهای ۱ و ۲ را 70 mm و سایر الکترودها را ثابت در نظر می گیریم سپس فاصله کانون تا چشمه را ثبت می کنیم. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۲ و ۳ به صورت شکل ۳-۴ خواهد بود. که برای هدایت چشم نقاط با خط راست نازک خط چین به هم وصل شده اند.

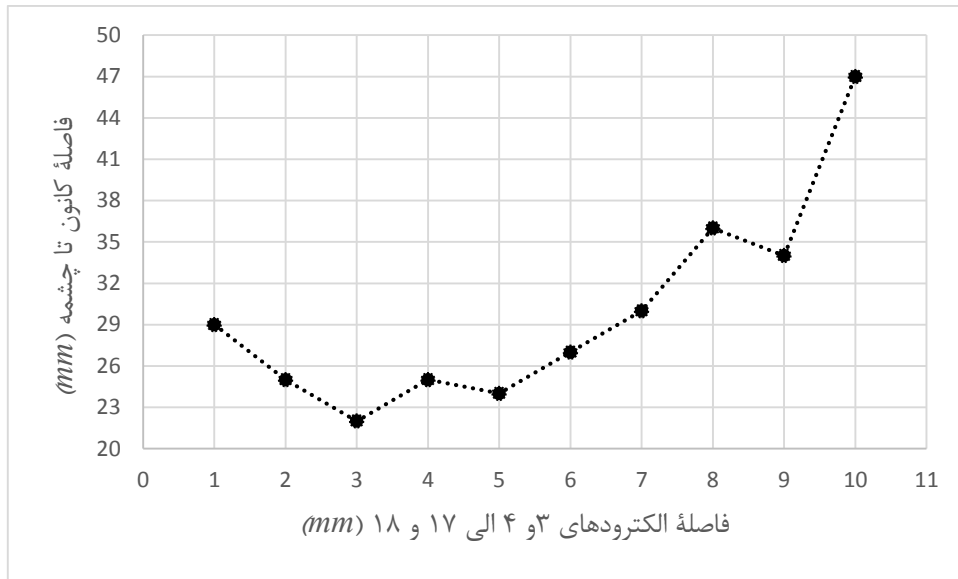


شکل ۳-۴. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۲ و ۳

با توجه به شکل ۳-۴ فاصله الکترودهای ۲ و ۳ مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی فاصله 8 mm می باشد که به ازای آن فاصله کانون تا چشمه 24 mm است.

فاصله بین الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ که برابر با 5 mm می باشد به صورت کم کم و همزمان تغییر داده و فاصله الکترودهای ۱ و ۲ را 70 mm و فاصله الکترودهای ۲ و ۳ را 8 mm در نظر می گیریم سپس فاصله کانون تا چشمه را ثبت می کنیم.

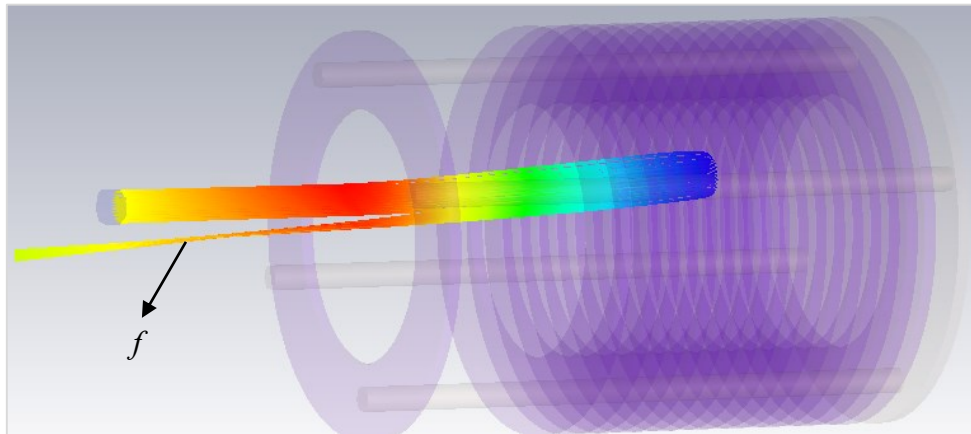
نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ به صورت شکل ۳-۵ خواهد بود.



شکل ۳-۵. نمودار فاصله کاتون تا چشمه برحسب فاصله الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸

با توجه به شکل ۳-۵ فاصله الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ مطلوب برای کاتون بهینه باریکه یونی فاصله ۳mm می باشد که به ازای آن فاصله کاتون تا چشمه ۲۲ mm است.

شکل ۳-۶ شبیه سازی فاصله الکترودهای مطلوب برای کاتون بهینه باریکه یونی می باشد که مسیر یون ها و کاتون باریکه یونی را نشان می دهد.



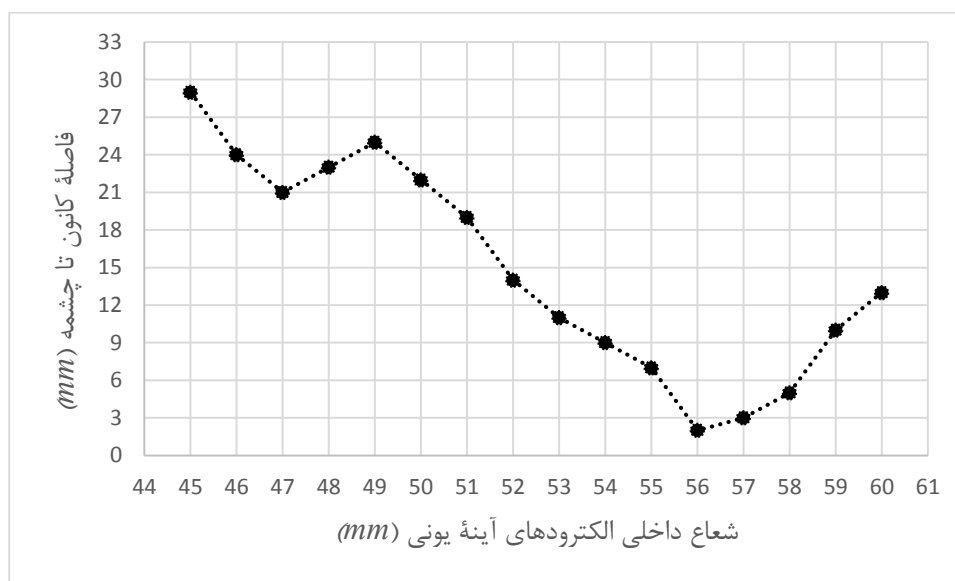
شکل ۳-۶. مسیر یون ها و کاتون باریکه یونی براساس انرژی مطلوب ۲۳۵eV، فاصله مطلوب الکترودهای ۱ و ۲ برابر با ۷۰mm، الکترودهای ۳ و ۴ برابر با ۸mm و الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ برابر با ۳mm

پس از بدست آوردن فاصله الکترودهای مطلوب برای کاتون بهینه باریکه یونی، آن را ثابت در نظر گرفته و سراغ اندازه الکترودهای آینه یونی برای کاتون بهینه باریکه یونی می رویم.

۳-۳ اندازه الکترودهای آینه‌یونی مطلوب برای کانون بهینه باریکه

یونی

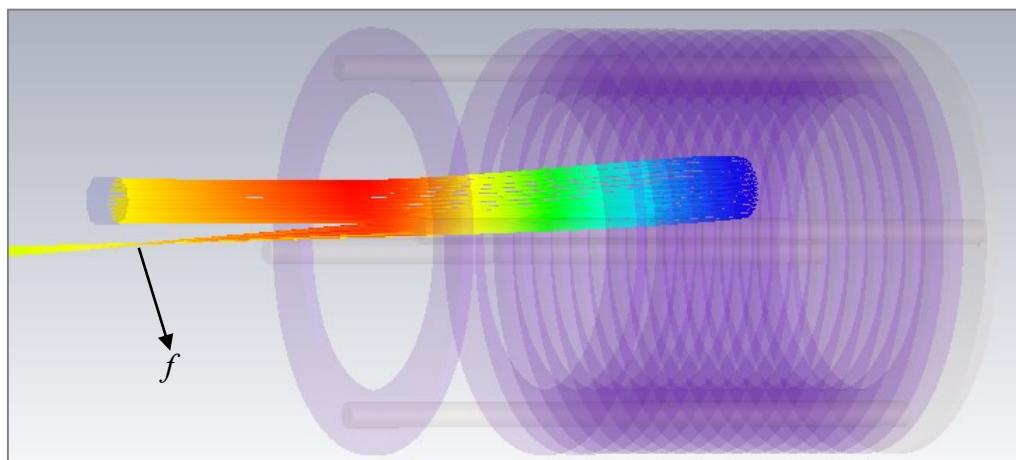
اندازه الکترودها برای کانون بهینه باریکه یونی وقتی مطلوب است که کانون به چشمه یونی نزدیک شود. در نتیجه نمودار فاصله کانون تا چشمه را برحسب اندازه الکترودهای آینه یونی رسم می‌کنیم و از روی نمودار اندازه الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی را بدست می‌آوریم. در شبیه‌سازی فاصله الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی، شعاع داخلی الکترودهای آینه یونی که برابر با 50 mm می‌باشد به صورت کم‌کم و همزمان تغییر داده و سپس فاصله کانون تا چشمه را ثبت می‌کنیم. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب شعاع داخلی الکترودهای آینه یونی به صورت شکل ۳-۷ خواهد بود.



شکل ۳-۷. نمودار فاصله کانون تا چشمه برحسب شعاع داخلی الکترودهای آینه یونی

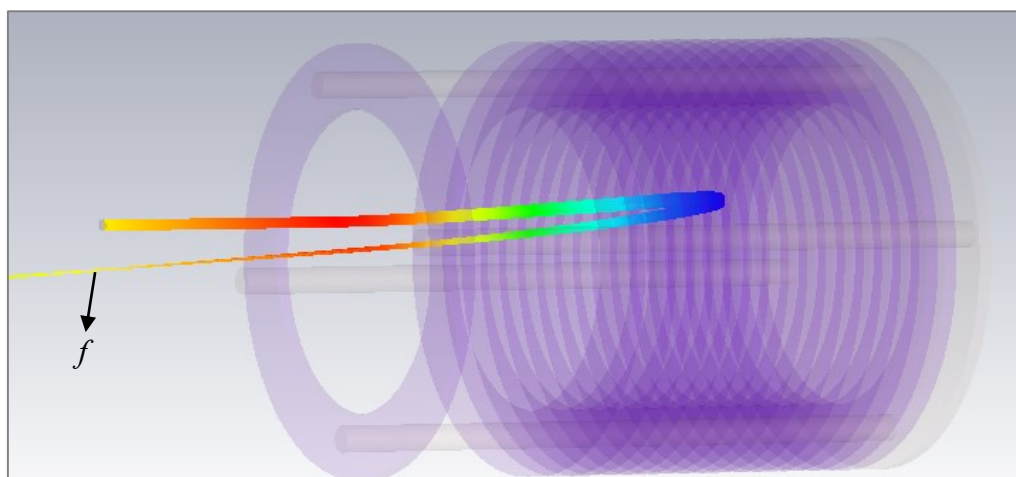
با توجه به شکل ۳-۷ اندازه الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی فاصله 56 mm می‌باشد که به ازای آن فاصله کانون تا چشمه 2 mm است.

شکل ۳-۸ شبیه‌سازی اندازه‌های الکترودهای مطلوب برای کانون بهینه باریکه یونی می‌باشد که مسیر یون‌ها و کانون باریکه یونی را نشان می‌دهد.



شکل ۳-۸. مسیر یون‌ها و کانون باریکه یونی براساس انرژی مطلوب $235eV$ ، فاصله مطلوب الکترودهای ۱ و ۲ برابر با $70mm$ ، الکترودهای ۳ و ۴ برابر با $8mm$ و الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ برابر با $3mm$ و شعاع داخلی الکترودهای مطلوب برابر با $56mm$

هر چقدر اندازه چشمه یونی کوچکتر باشد کانون بهینه‌تر می‌باشد. به عنوان مثال در شبیه‌سازی اندازه الکترودهای مطلوب برای کانونی بهینه باریکه یونی، شعاع خارجی چشمه یونی که برابر با $7mm$ است را به $2mm$ تغییر می‌دهیم در نتیجه شکل ۳-۹ شبیه‌سازی اندازه چشمه یونی برای کانون بهینه باریکه یونی می‌باشد که مسیر یون‌ها و کانون بهینه باریکه یونی را نشان می‌دهد.



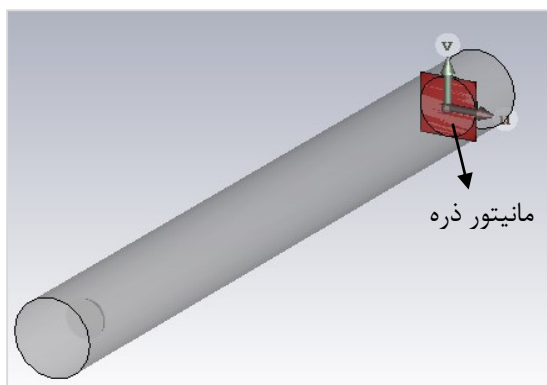
شکل ۳-۹. مسیر یون‌ها و کانون بهینه باریکه یونی براساس انرژی مطلوب $235eV$ ، فاصله مطلوب الکترودهای ۱ و ۲ برابر با $70mm$ ، الکترودهای ۳ و ۴ برابر با $8mm$ و الکترودهای ۳ و ۴ الی ۱۷ و ۱۸ برابر با $3mm$ ، شعاع داخلی الکترودهای مطلوب برابر با $56mm$ و شعاع خارجی چشمه یونی برابر با $2mm$

فصل ۴: زمان پرواز و قدرت تفکیک زمانی و جرمی

در ابتدای این فصل، زمان پرواز دو یون مختلف ($^{208}Pb^{+}$ و $^{207}Pb^{+}$) که از چشمه یونی ساطع می شود و انرژی چشمه یونی هر دو آن یکسان می باشد را در طیف سنج های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی با استفاده از نرم افزار *CST* بدست آورده و آنها را با یکدیگر مقایسه می کنیم. در ادامه فصل، نمودار هیستوگرام تعداد یون های رسیده به آشکارساز بر حسب زمان پرواز بدست آورده و از روی نمودار، قدرت تفکیک زمانی و جرمی را در طیف سنج های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی بدست می آوریم و آنها را با یکدیگر مقایسه می کنیم.

۴-۱ زمان پرواز در طیف سنج جرمی زمان پرواز خطی

با استفاده از شبیه سازی طیف سنج جرمی زمان پرواز خطی که در فصل ۲ انجام دادیم، زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^{+}$ و $^{207}Pb^{+}$ بدست آورده و با همدیگر مقایسه می کنیم. ابتدا با استفاده از نرم افزار *CST* دو چشمه یونی $^{208}Pb^{+}$ و $^{207}Pb^{+}$ که مکان آنها یکسان است طراحی می کنیم. فاصله چشمه تا آشکارساز 335 mm (شکل ۲-۲) و انرژی چشمه یونی برای هر دو یون مقدار یکسان و به عنوان مثال برابر با 235 eV ، توزیع انرژی به صورت یکنواخت، مقدار پراکندگی انرژی ۱٪ و زاویه پراکندگی را 0.1° قرار می دهیم. سپس با استفاده از ابزار *Particle Monitor*، یک مانیتور ذره در جلوی آشکارساز طراحی و تعبیه کرده (شکل ۴-۱) و زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^{+}$ و $^{207}Pb^{+}$ که به آشکارساز می رسند را ثبت می کنیم.



شکل ۴-۱. نمایشگر ذره طراحی شده در جلوی آشکارساز

به کمک نرم افزار *CST* زمان پرواز یون‌های $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ بدست آمد که برابر است با :

$$t_{^{207}Pb^+} = 22.74 \mu s$$

$$t_{^{208}Pb^+} = 22.82 \mu s$$

زمان پروازهای بدست آمده با مثال ۱.۱ که از راه تئوری زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ محاسبه شد تقریباً همخوانی دارد. به این ترتیب که زمان پرواز $^{207}Pb^+$ بدست آمده توسط نرم افزار *CST* با زمان پرواز $^{207}Pb^+$ بدست آمده توسط رابطه، $0.09 \mu s$ اختلاف دارد و زمان پرواز $^{208}Pb^+$ بدست آمده توسط نرم افزار *CST* با زمان پرواز $^{208}Pb^+$ بدست آمده توسط رابطه، $0.11 \mu s$ اختلاف دارد.

۴-۲ زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

با استفاده از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی که در فصل ۲ انجام دادیم و همچنین کانونی کردن باریکه یونی در فصل ۳، می‌خواهیم زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ بدست آورده و با یکدیگر مقایسه کنیم. ابتدا با استفاده از نرم‌افزار *CST* دو چشمه یونی $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ که مکان آنها یکسان است طراحی می‌کنیم. فاصله چشمه تا آینه یونی 336 mm (شکل ۲-۱۱) و انرژی چشمه یونی برای هر دو یون مقدار یکسان و برابر با 235 eV ، توزیع انرژی به صورت یکنواخت، مقدار پراکندگی انرژی ۱٪ و زاویه پراکندگی را 0.1° قرار می‌دهیم. مشابه بدست آوردن زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی، یک مانیتور ذره در جلوی آشکارساز طراحی و تعبیه کرده و زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ که به آشکارساز می‌رسند را ثبت می‌کنیم.

به کمک نرم افزار *CST* زمان پرواز یون $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ بدست آمد که برابر است با :

$$t_{^{207}Pb^+} = 51.48 \mu s$$

$$t_{^{208}Pb^+} = 51.53 \mu s$$

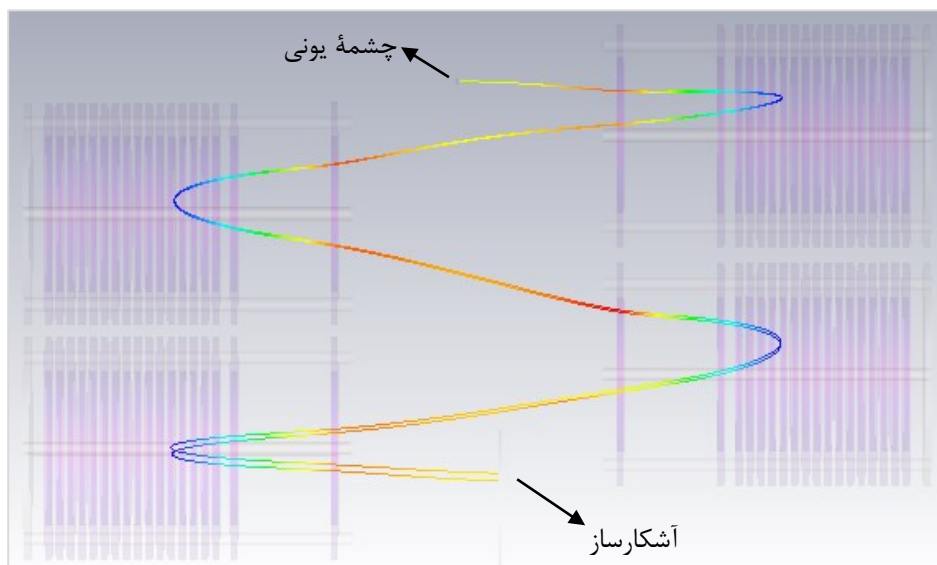
۳-۴ زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

با استفاده از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی که در فصل ۲ انجام دادیم، می‌خواهیم زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ بدست آورده و با همدیگر مقایسه کنیم. ابتدا با استفاده از نرم‌افزار CST دو چشمه یونی $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ که مکان آنها یکسان است طراحی می‌کنیم. انرژی چشمه یونی برای هر دو یون مقدار یکسان و برابر با $235eV$ قرار می‌دهیم، فاصله چشمه تا اولین آینه یونی 336 mm (شکل ۲-۱۹) و انرژی چشمه یونی برای هر دو یون مقدار یکسان و برابر با $235eV$ ، توزیع انرژی به صورت یکنواخت، مقدار پراکندگی انرژی ۱٪ و زاویه پراکندگی را 0.1° قرار می‌دهیم مشابه بدست آوردن زمان پرواز در طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی و بازتابی، یک مانیتور ذره در جلوی آشکارساز طراحی و تعبیه کرده و زمان پرواز دو یون $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ که به آشکارساز می‌رسند را ثبت می‌کنیم.

به کمک نرم افزار CST زمان پرواز یون‌های $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ بدست آمد (شکل ۴-۲) که برابر است با :

$$t_{^{207}Pb^+} = 177.98\mu s$$

$$t_{^{208}Pb^+} = 178.39\mu s$$



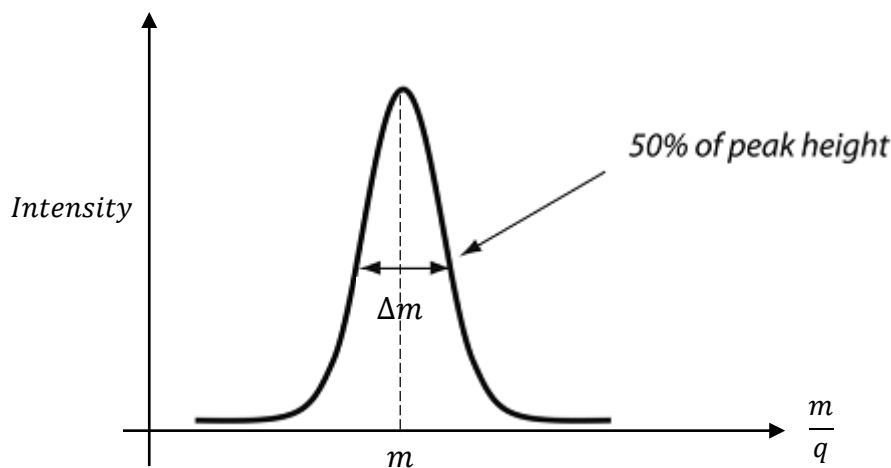
شکل ۴-۲. مسیر یون‌های $^{208}Pb^+$ و $^{207}Pb^+$ از شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

۴-۴ قدرت تفکیک

قدرت تفکیک بیانگر قدرت جداسازی طیف‌های جرمی نزدیک به هم است. آنالیزورهای جرمی، یون‌ها را بر اساس نسبت جرم به بار (m/q) جدا می‌کنند، اینکه چقدر می‌توان این جداسازی‌ها را انجام داد و اندازه‌گیری کرد، توسط قدرت تفکیک تعریف می‌شود.

قدرت تفکیک به صورت نسبت بالاترین دامنه (مکان قله) بر عرض منحنی در نیم ارتفاع طیف تعریف می‌شود. (شکل ۴-۱)

$$R = \frac{m}{\Delta m} \quad (۱-۴)$$



شکل ۴-۳. نمای ریاضی از یک توزیع جرمی [۳]

از رابطه (۴-۱) فصل ۱ داریم:

$$t \propto \sqrt{\frac{m}{q}}$$

در نتیجه :

$$t = c\sqrt{m} \quad (۲-۴)$$

که در آن c ضریب ثابت می‌باشد.

از طرفین رابطه (۳-۴)، Ln می‌گیریم:

$$Ln(t) = Lnc + \frac{1}{2}Ln(m) \quad (۳-۴)$$

سپس از طرفین رابطه (۳-۴)، دیفرانسیل‌گیری می‌کنیم.

$$\frac{dt}{t} = \frac{1}{2} \frac{dm}{m} \quad (۴-۴)$$

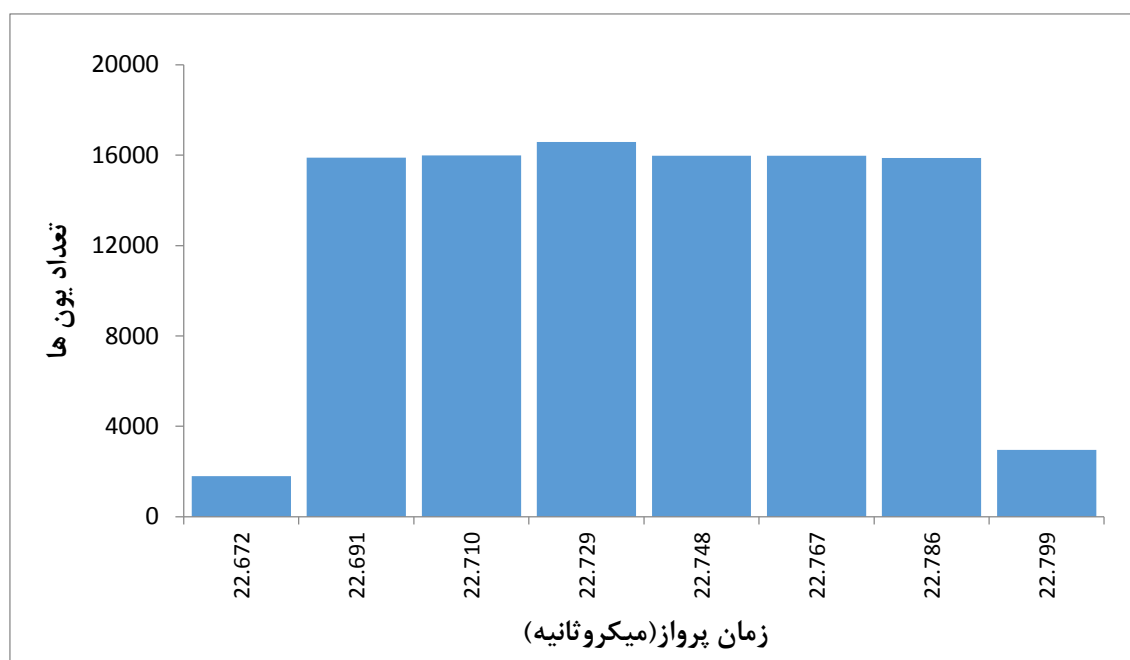
در ادامه به جای $dm = \Delta m$ و به جای $dt = \Delta t$ قرار می‌دهیم و داریم [۳]:

$$R = \frac{m}{\Delta m} = \frac{t}{2\Delta t} = \frac{T}{2} \quad (۵-۴)$$

از رابطه (۵-۴) نتیجه می‌گیریم که قدرت تفکیک زمانی، ۲ برابر قدرت تفکیک جرمی خواهد بود و باید قدرت تفکیک زمانی را داشته باشیم تا قدرت تفکیک جرمی را محاسبه کنیم. تفکیک زمانی وقتی بهتر خواهد بود که از چندین آینه یونی استفاده کنیم تا فاصله زمانی یونها از هم زیاد شود و یونها از همدیگر تفکیک شوند و باید آشکارسازی انتخاب کنیم که قدرت تفکیک زمانی آن بالا باشد در نتیجه الکترونیکی انتخاب می‌کنیم که پشت آشکارساز با قدرت تفکیک زمانی زیاد پالس‌های الکتریکی را آشکارسازی کند.

۱-۴-۴ بررسی قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

ابتدا در شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی، تعداد یون‌های ساطع شده از چشمه‌های یونی $^{208}\text{Pb}^+$ و $^{207}\text{Pb}^+$ به عنوان مثال برابر با ۱۰۰۰۰۰ تا، به صورت جداگانه قرار می‌دهیم. سپس نمودار هیستوگرام تعداد یون‌ها را بر حسب زمان پرواز به کمک نرم افزار *Excel* رسم می‌کنیم (شکل ۴-۴).



شکل ۴-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}\text{Pb}^+$ بر حسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

در شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی، توزیع انرژی چشمه یونی به صورت یکنواخت می‌باشد و یون‌ها مسیر خطی طی می‌کنند و افت و خیز آماری نداریم در نتیجه در تراپرد ذرات، توزیع زمانی یون‌های رسیده به آشکارساز به توزیع یکنواخت نزدیک می‌باشد.

برای بدست آوردن قدرت تفکیک زمانی و جرمی شکل (۴-۴)، ابتدا انحراف معیار (σ) را با استفاده از تابع *STDEV* که در نرم افزار *Excel* موجود است محاسبه می‌کنیم که برابر است با:

$$\sigma = 0.033$$

با توجه به رابطه (۴-۵) قدرت تفکیک زمانی برابر است با :

$$T = \frac{t}{\Delta t} = \frac{t}{\Gamma}$$

که در آن Γ پهنای نیم ارتفاع توزیع گوسی که تقریباً برابر با ۲.۳۵σ و t مقدار بیشینه توزیع می باشد. از آنجایی که در این شبیه سازی توزیع به توزیع یکنواخت نزدیک است (بخاطر محدودیت چشمه) به جای Γ از دو برابر انحراف معیار داده ها و به جای t از میانگین عددی داده ها استفاده می کنیم.

پهنای توزیع (Γ) و میانگین (t) به ترتیب برابر است با :

$$\Gamma = ۲\sigma \rightarrow \Gamma = ۲(۰.۰۳۳) = ۰.۰۶۶$$

$$t = ۲۲.۷۳۶$$

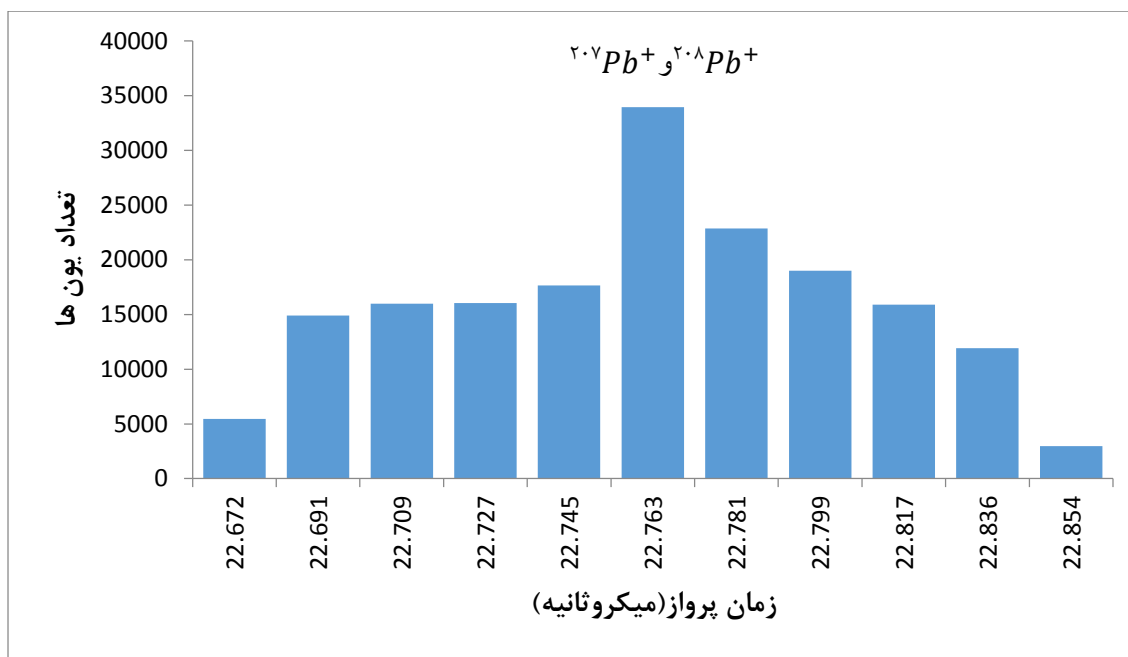
در نتیجه قدرت تفکیک زمانی برابر است با :

$$T = \frac{t}{\Gamma} = \frac{۲۲.۷۳}{۰.۰۶۶} = ۳۴۴.۴۸$$

و در نتیجه قدرت تفکیک جرمی برابر است با :

$$R = \frac{T}{۲} = \frac{۳۴۴.۴۸}{۲} = ۱۷۲.۲۴$$

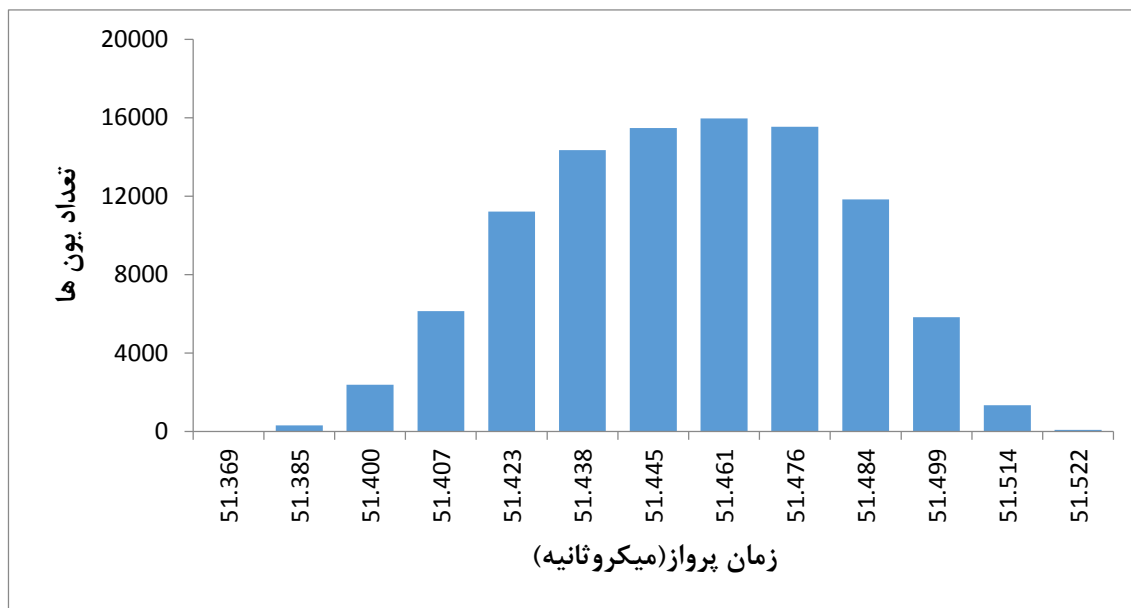
در شکل ۴-۵، نمودار تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز برحسب زمان پرواز برای دو یون $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ با هم ترکیب شده و در کنار هم دیده می‌شوند. با توجه به این که لبه سمت راست توزیع $^{207}Pb^+$ روی لبه سمت چپ توزیع $^{208}Pb^+$ افتاده است در مرکز یک تجمع موضعی دیده می‌شود. بنابراین در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی دو یون از یکدیگر تفکیک شده ولی خیلی به هم نزدیک هستند.



شکل ۴-۵. نمودار تعداد یون‌های $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی

۴-۴-۲ بررسی قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

ابتدا در شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی، تعداد یون‌های ساطع شده از چشمه‌های یونی $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ به عنوان مثال برابر با ۱۰۰۰۰۰ تا، به صورت جداگانه قرار می‌دهیم و سپس نمودار هیستوگرام تعداد یون‌ها را بر حسب زمان پرواز به کمک نرم افزار Excel رسم می‌کنیم (شکل ۴-۶)



شکل ۴-۶. نمودار تعداد یون های $^{207}Pb^+$ بر حسب زمان پرواز در طیف سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

با وجود این که چشمه همچنان با توزیع انرژی یکنواخت یون تولید می کند؛ به دلیل افت و خیز آماری در ترابرد ذرات، توزیع زمانی یون های رسیده به آشکارساز شبیه به یک توزیع گوسی شده است.

برای بدست آوردن قدرت تفکیک زمانی و جرمی شکل (۴-۶)، ابتدا انحراف معیار (σ) را با استفاده از تابع $STDEV$ که در نرم افزار *Excel* موجود است محاسبه می کنیم که برابر است با :

$$\sigma = 0.0269$$

پهنای نیم ارتفاع توزیع گوسی (Γ) برابر است با :

$$\Gamma = 2.35 \times (0.0269) = 0.06321$$

و بالاترین دامنه (قله) در نمودار هیستوگرام برابر با :

$$t = 51.461$$

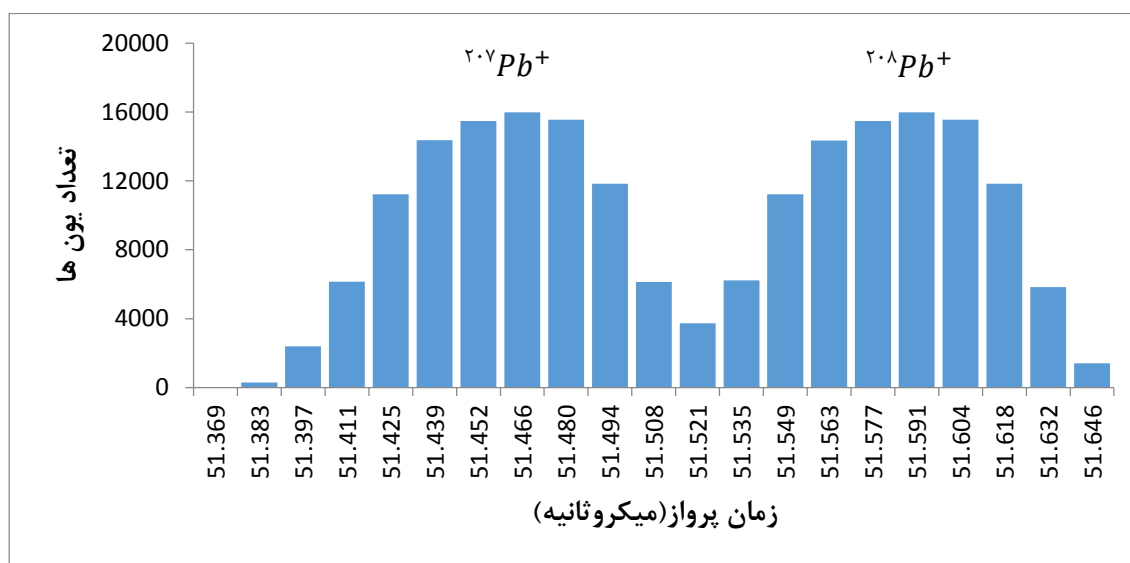
در نتیجه قدرت تفکیک زمانی برابر است با :

$$T = \frac{t}{\Gamma} = \frac{51.461}{0.06321} = 814.127$$

و در نتیجه قدرت تفکیک جرمی برابر است با :

$$R = \frac{T}{2} = \frac{814.127}{2} = 407.063$$

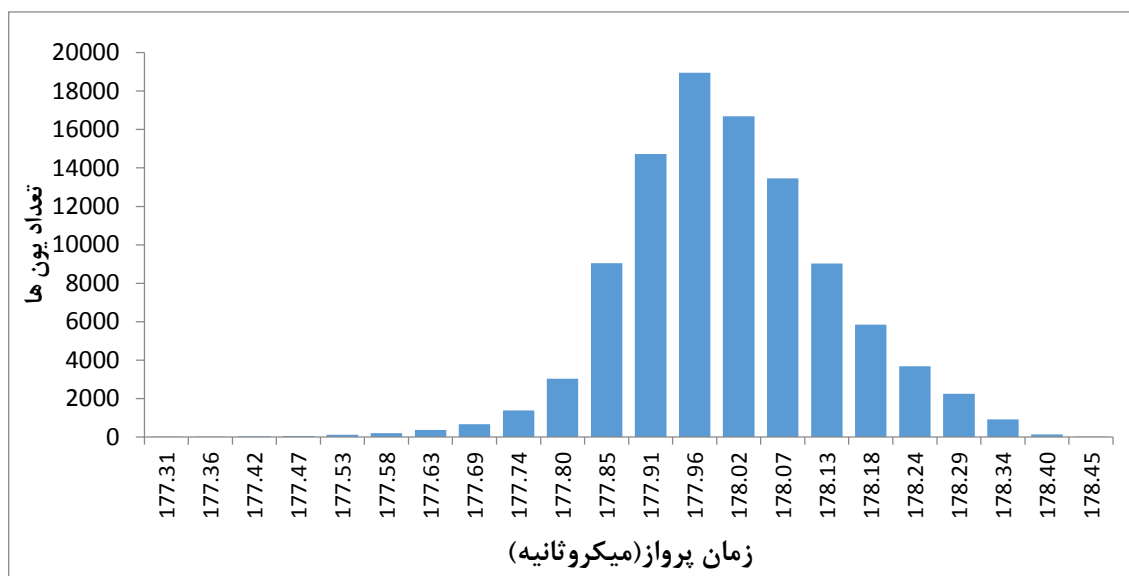
در شکل ۷-۴، نمودار تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز برحسب زمان پرواز برای دو یون $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ در کنار هم دیده می‌شوند که یون‌ها در مقایسه با شکل (۴-۵) بیشتر تفکیک شده‌اند.



شکل ۷-۴. نمودار تعداد یون‌های $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی

۳-۴-۴ بررسی قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی

ابتدا در شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی، تعداد یون‌های ساطع شده از چشمه‌های یونی $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ به عنوان مثال برابر با ۱۰۰۰۰۰ تا، به صورت جداگانه قرار می‌دهیم و سپس نمودار هیستوگرام تعداد یون‌ها را بر حسب زمان پرواز به کمک نرم افزار *Excel* رسم می‌کنیم (شکل ۴-۸).



شکل ۴-۸. نمودار تعداد یون های $^{209}Pb^+$ بر حسب زمان پرواز در طیف سنج جرمی
زمان پرواز چند بازتابی

با وجود این که چشمه همچنان با توزیع انرژی یکنواخت یون تولید می کند؛ به دلیل افت و خیز آماری در ترابرد ذرات، توزیع زمانی یون های رسیده به آشکارساز شبیه به یک توزیع گاوسی شده است.

برای بدست آوردن قدرت تفکیک زمانی و جرمی شکل (۴-۸)، ابتدا انحراف معیار (σ) را با استفاده از تابع $STDEV$ که در نرم افزار *Excel* موجود است محاسبه می کنیم :

$$\sigma = 0.0128$$

پهنای نیم ارتفاع توزیع گاوسی (Γ) برابر است با :

$$\Gamma = 2.35 \times (0.0128) = 0.03$$

و بالاترین دامنه (قله) در نمودار هیستوگرام برابر با :

$$t = 177.96$$

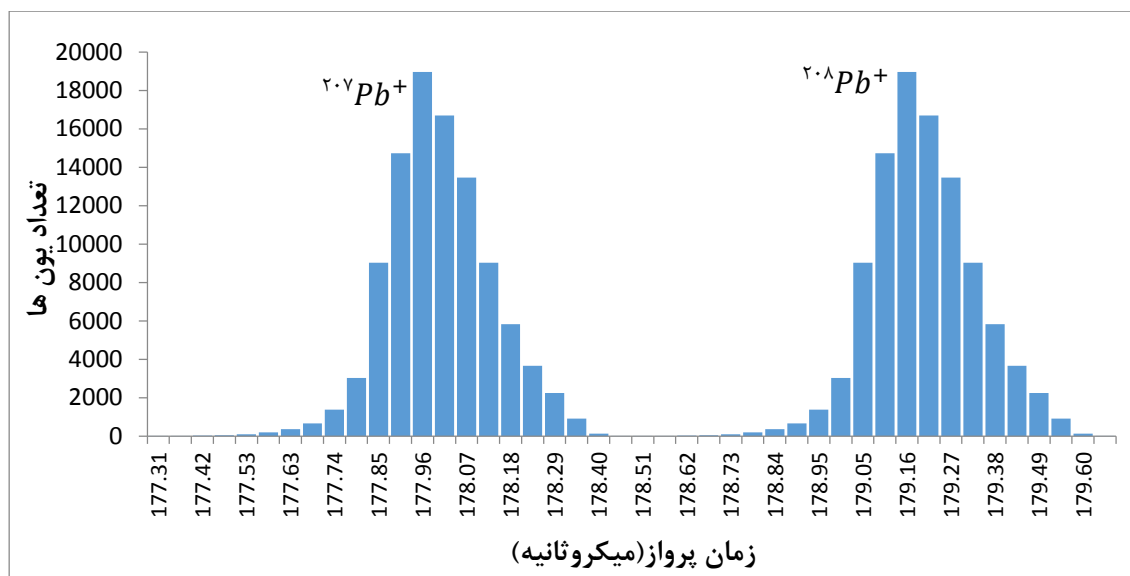
در نتیجه قدرت تفکیک زمانی برابر است با :

$$T = \frac{t}{\Gamma} = \frac{177.96}{0.03} = 5932$$

و در نتیجه قدرت تفکیک جرمی برابر است با :

$$R = \frac{T}{2} = \frac{5932}{2} = 2966$$

در شکل ۴-۹، نمودار تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز برحسب زمان پرواز برای دو یون $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ در کنار هم دیده می‌شوند که یون‌ها در مقایسه با شکل‌های (۴-۵) و (۴-۷) بیشتر و بهتر تفکیک شده‌اند.



شکل ۴-۹. نمودار تعداد یون‌های $^{207}Pb^+$ و $^{208}Pb^+$ برحسب زمان پرواز در طیف‌سنج جرمی
زمان پرواز چند بازتابی

فصل ۵: نتیجه گیری و پیشنهادات

۵-۱ نتیجه گیری

این پژوهش به منظور بررسی ترابرد یون و قدرت تفکیک جرمی و زمانی در طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی انجام شد.

در فصل ۲، شبیه‌سازی طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی به کمک نرم‌افزار شبیه‌سازی *CST* با اعمال میدان الکتریکی در آینه یونی پرداخته شد و مسیر حرکت یون‌ها بررسی شد. سپس قانون باریکه یونی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی بدست آمد. قانون باریکه یونی بدست آمده بهینه نبود چرا که در جلوی چشمه قرار داشت. در فصل ۳ قانون باریکه یونی بهینه شد. هدف از بدست آوردن قانون بهینه باریکه یونی آن بود که مسیر یون‌ها روی آشکارساز کانونی شود. در فصل ۴ به کمک شبیه‌سازی طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی، زمان پرواز دو یون مختلف ($^{208}Pb^+$ و $^{209}Pb^+$) ثبت شد. سپس نمودار هیستوگرام تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز برحسب زمان پرواز یون‌ها به کمک نرم‌افزار *Excel* برای طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی رسم شد. در ادامه از روی نمودارهای بدست آمده، قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج‌های جرمی زمان پرواز خطی، بازتابی و چند بازتابی محاسبه شد. قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی بیشتر از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی و قدرت تفکیک زمانی و جرمی در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی بیشتر از طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی بدست آمد و دلیل آن این بود که در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز خطی آینه یونی نداریم و فاصله زمانی یون‌ها از همدیگر زیاد نیست و در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی یک آینه یونی داریم و در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چند بازتابی ۴ آینه یونی داریم و فاصله زمانی یون‌ها از یکدیگر زیاد است. با استفاده از نمودارهای هیستوگرام تعداد یون‌های رسیده به آشکارساز برحسب زمان پرواز یون‌ها نیز می‌توانستیم این نتیجه و تحلیل انجام گیرد به این صورت که توزیع زمانی یون‌ها

در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز چندبازتابی باریک‌تر از توزیع زمانی یون‌ها در طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی شد و هر چه طیف باریک‌تر باشد قدرت تفکیک بیشتر می‌باشد.

۵-۲ پیشنهادات

شبیه‌سازی طیف‌سنج جرمی زمان پرواز بازتابی و چند بازتابی با اعمال میدان مغناطیسی در آینه یونی به کمک نرم‌افزار شبیه‌سازی *CST*. اضافه شدن میدان مغناطیسی می‌تواند باعث حذف یون‌ها با مرتبه بار بالاتر شده و سیگنال روی آشکارساز را بهتر کند.

پوست

آشنایی با نرم افزار شبیه سازی CST

نرم افزار CST یکی از پرکاربردترین نرم افزارهای شناخته شده است که نه تنها در علم شتاب دهنده ها بلکه در مهندسی برق نیز کاربرد دارد. نرم افزار CST برگرفته از *Computer Simulation Technology*، که در زمینه شبیه سازی میدان های الکترومغناطیسی در ساختارهای سه بُعدی است. اولین نسخه این برنامه در سال ۱۹۹۲ توسط آقای توماس ویلاند در کشور آلمان ساخته شد. این برنامه تلاش و تحقیق چندین ساله ۲۴۰ نفر از ۱۴ کشور، برای ساخت قدرتمندترین و کامل ترین نرم افزار در زمینه آنالیز و طراحی سازه های الکترومغناطیسی است. این شرکت در سال ۲۰۰۵ با اضافه کردن روش های دیگر شبیه سازی و قابلیت انتخاب این روش ها توسط کاربر، این نرم افزار را توسعه داد. در حال حاضر نرم افزار CST شامل ۷ ماژول است که توانایی شبیه سازی در حوزه های الکترواستاتیک، مگنواستاتیک، فرکانس بالا و پایین را دارد. یکی از ماژول های مورد استفاده برای دانشجویان فیزیک، ماژول *CST Particle Studio* است که می توان با استفاده از آن تأثیرات میدان الکتریکی روی ذرات باردار را مشاهده و مسیر حرکت آن ها را ردیابی و ترابرد کرد. [۱]

مراج

[۱] مستأجران، م.، کاظمی، ف. و حجازی، س. (۱۳۹۵) "آموزش شبیه‌سازی ساختارهای الکترومغناطیسی با استفاده از نرم افزار شبیه‌سازی CST" چاپ اول، انتشارات دانشگاه یزد، قم، صفحات ۳ تا ۳۷۵.

[۲] کیانی، م. (۱۳۹۰) "مبانی طیف‌سنج جرمی تله‌یونی چهارقطبی" چاپ اول، انتشارات پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، نقش و نگار ایرانیان، صفحات ۱ تا ۴۱.

[۳] Christopher Barner-Kowollik, Till Gruending, Jana Falkenhagen, and Steffen . (2012) "Mass Spectrometry in Polymer Chemistry", Vol. 1 , Wiley, pp 1-29.

[۴] Johannes Sebastian .(2016) "Development of a Mobile High-Resolution Multiple-Reflection Time-of-Flight Mass Spectrometer for In-situ Life Science Application", Vol. 1 , University Giessen, pp 3-37.

[۵] Timothy J.Cornish, Wayne Bryden.(1999) "Miniature Time-Of-Flight Mass Spectrometer for a Field-Portable Biodetection System" J.Hopkins APL Tech D., 20, 3, pp 37.

[۶] Anatoli N.Verentchikov, Mikhail I.Yavor. (2016) "Quasi-Planar Multi-Reflecting Time-Of-Flight Mass Spectrometer" J.U.S., 141, 4, pp 4-8.

[۷] I.Kerley, E.Haufler. (1999) "Reflection Time-Of-Flight Mass Spectrometer" J.U.S., 95, 3, pp2-5.

[۸] R.Kutscher,H.Wollnik, R.Grix. (1991) "Ion Reflector" J.U.S., 140, 6, pp3-6.

[٩] S.Knauer, P.Fischer, G.Marx, B.Schabinger, L.Schweikhard, R.N. Wolf. (2017)
“Multi-reflection time-of-flight mass spectrometry with combined in-trap lift capture
and mirror-switch ejection” *Int.J.Mass Spectrom.*, **423**, 3,pp 2-26.

[١٠] P. Schury, M. Wada, Y. Ito, F. Arai, S. Naimi, T. Sonoda, H. Wollnik, V.Shchepunov,
C. Smorra, C. Yuan. (2014) “A High-Resolution Multi-Reflection Time-Of-Flight Mass
Spectrograph for Precision Mass Measurements at Riken/Slowri” *Int. J. Mass Spectrom.*,
335, 4, pp 39-53.

Abstract

Liner, single-reflection and multi-reflection time-of-flight mass spectrometers have been simulated and studied using CST simulation software. Then, the ion-beam focal point of the reflection time-of-flight mass spectrometry are obtained, and then the optimal ion-beam focal point in the reflection time-of-flight mass spectrometry are determined. With the help of CST software, the time-of-flight of ions has been recorded in liner, single reflection and multi-reflection time-of-flight mass spectrometers. Then time-of-flight of two different ions emitted from the ion source are obtained in Liner, single-reflection and multi-reflection time-of-flight mass spectrometers and they are compared with each other. The histogram plots the number of ions reached by the detector in terms of time-of-flight, which is distributed as a Gaussian distribution, and from the graph, the temporal and mass resolving power of the liner, single-reflection and multi-reflection time-of-flight mass spectrometers are obtained and compared.

Keywords: *liner, single-reflection and multi-reflection time-of-flight mass spectrometers, CST simulation software, ion reflector, resolving power*



*Shahrood University of
Technology*

Faculty of Physics and Nuclear Engineering

M.Sc. Thesis in Nuclear Physics

Investigation of Ion Transmission and Resolving Power in a Multi-Reflection Time-Of-Flight Mass Spectrometer

By: Masoud Madanipour

Supervisor:

Dr. Moslem Sohani

October, 2020