

微尺度质谱仪离子源结构设计及 离子光学系统仿真

张浩¹, 窦仁超², 刘坤^{1*}, 孟冬辉^{2*}, 巴德纯¹, 杜广煜¹, 巴要帅¹, 孙立臣², 闫荣鑫²

(1. 东北大学 机械工程与自动化学院, 沈阳 110819; 2. 北京卫星环境工程研究所, 北京 100094)

摘要: 文章针对多领域对便携式质谱仪的需求, 对微尺度质谱仪的核心部件离子源进行结构设计, 并利用离子光学模拟软件 SIMION 进行仿真, 探究电极电压、透镜结构、电极结构等对离子传输的影响并进行优化, 获取相关参数研究规律, 为微尺度质谱仪的研制提供设计依据。

关键词: 微尺度质谱仪; 离子源; 离子光学系统; SIMION 软件; 仿真分析

中图分类号: V447⁺.1

文献标志码: A

文章编号: 1673-1379(2019)01-0083-06

DOI: [10.12126/see.2019.01.013](https://doi.org/10.12126/see.2019.01.013)

Structural design and optical system simulation of ion source for microscale mass spectrometer

ZHANG Hao¹, DOU Renchao², LIU Kun^{1*}, MENG Donghui^{2*}, BA Dechun¹, DU Guangyu¹, BA Yaoshuai¹,
SUN Lichen², YAN Rongxin²

(1. School of Mechanical Engineer and Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China;

2. Beijing Institute of Spacecraft Environment Engineering, Beijing 100094, China)

Abstract: In view of the demand of the portable mass spectrometer in many fields, the structure of the ion source, as the core functional component of the microscale mass spectrometers, is designed, and its ion optical system is simulated by the software SIMION. The effect of the electrode voltage, the lens structure, and the electrode structure on the ion width and the divergence angle are investigated and optimized. The related parameters obtained may provide a basis for the development of microscale mass spectrometers.

Keywords: microscale mass spectrometer; ion source; ion optical system; SIMION software; simulation analysis

收稿日期: 2018-11-08; 修回日期: 2019-01-27

基金项目: 教育部中央高校基本科研业务费项目(编号: N160302001, N170308028); 北京卫星环境工程研究所创新基金项目(编号: CAST-BISEE 2017-011)

引用格式: 张浩, 窦仁超, 刘坤, 等. 微尺度质谱仪离子源结构设计及离子光学系统仿真[J]. 航天器环境工程, 2019, 36(1): 83-88
ZHANG H, DOU R C, LIU K, et al. Structural design and optical system simulation of ion source for microscale mass spectrometer[J]. Spacecraft Environment Engineering, 2019, 36(1): 83-88

0 引言

质谱仪是通过样品离子质荷比的分析实现对样品定性和定量分析的仪器。大型质谱仪目前已经广泛应用于生命科学、药物、化工、军事和国防等各种微量或痕量物质检测领域。近年来,在空间环境探测、突发事件应急和食品安全检测等领域的迫切需求要求分析仪器具有体积小、功耗低、价格低廉、使用方便等特点,因此微尺度质谱仪成为当前质谱仪研究领域的重点和热点^[1-2]。开发并设计新型微尺度质谱仪将促进其在航空航天、军事探索和军民融合领域的进一步应用,对于现有质谱技术的革新具有重要的理论意义和应用价值。

在过去 10 年中,分析系统小型化发展较为迅速,突破了传统的庞杂结构,能够应用新设备和新技术在现场进行环境勘探^[3]、深空探索^[4]或国土安全应用^[5]。而且随着微电子机械系统(MEMS)制造方法的不断发展完善,质谱仪的尺寸正向着更小的量级发展。国外研究团队在相关研究中已发展出离子阱^[6-7]、四极杆^[8]、飞行时间(TOF)^[9-11]、维恩滤波器^[12]等质谱仪整机或核心部件。国内在小型质谱仪方面的研究虽起步较晚,然也有小型磁偏转^[13]、四级杆^[14]、离子阱质谱仪^[15]的相关研究报道,但是在 MEMS 尺度下的质谱仪技术较为薄弱,亟待实现突破。

本文基于 MEMS 工艺特点,结合微型质谱仪的发展现状,对微尺度质谱仪的核心部件——离子源进行结构设计,并运用离子光学模拟软件 SIMION^[16]进行了仿真模拟,考察电极电压、透镜结构、电极结构等参数和结构对离子传输效果的影响规律,通过优化获取最佳的设计方案,为质谱仪核心部件的结构设计和机理研究提供参考。

1 微尺度质谱仪离子源芯片结构方案

本文设计的微尺度质谱仪离子源芯片主要包括进样系统和离子源,芯片结构主要包含底层硅、中间层玻璃、顶层玻璃及位于两层玻璃之间的导电硅。其功能实现过程为:待测样品经过进样系统传输,由离子源进行离化,并通过离子源中离子光学系统的提取、聚焦和加速后,方可进入后续的质量选择器进行选择区分。

1.1 进样系统

国外学者报道的微尺度质谱仪^[9-12]采用泵送输送样品的方式,其进样系统较为烦琐。本次设计采用直接进样方式,可大大简化进样系统的构成,如图 1 所示,主要包括进样毛细管、流量计、微阀等部件:通过芯片所处真空系统造成质谱仪内外压差,利用微阀调解、流量计控制气体流量,将待测样品送入电离室中。

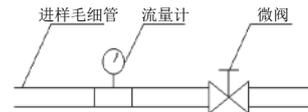
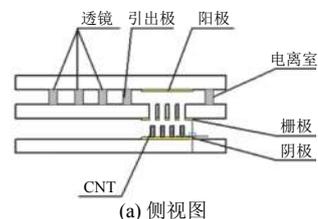


图 1 质谱仪进样系统示意

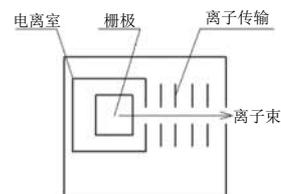
Fig. 1 Injection system of the mass spectrometer

1.2 离子源

有相关文献报道过微尺度质谱仪的离子源^[9-10],但将电子源与离子传输系统进行集成的方法未见报道。本次离子源设计采用碳纳米管(CNT)作为电子源材料,将电子源与离子传输系统集成于一体。CNT 具有优异的电学、力学等性能,在高真空环境下具有优良的场致发射特性,是理想的电子源材料。图 2 为本次设计所用三级场致发射碳纳米管离子源的结构示意:在阴阳极之间引入栅极,对栅极施加合适的电压产生高场强,使得电子逸出;电子通过栅网后,利用阳极和栅极间的低电场对电子进行汇聚和二次加速,电子束能量可由栅极、阳极电压进行控制;离子源中的离子传输系统由引出极和透镜电极组组成,利用引出电极和电离室所形成的电场把离子由电离室内引出,引出的离子通过透镜电极组进行聚焦、加速后,进入质量分析区中进行选择区分。



(a) 侧视图



(b) 俯视图

图 2 离子源结构

Fig. 2 Structure of the ion source

2 离子光学系统计算与模拟优化

质谱仪中的离子光学系统能够将离子引出电离区, 并进一步加速、聚焦成离子束。良好的离子光学系统能将大部分离子以较小的束宽和散角送入质量分析器中, 这在很大程度上决定了质谱仪的灵敏度和分辨率。因此, 离子光学系统的计算与模拟是质谱仪设计的关键环节。

2.1 离子光学系统计算

图 3 为常见的双透镜离子源设计方案: 由电离室 A 和引出极 B 组成, 设电离室电压为 V_1 , 引出电极电压为 V_2 , 电离室与引出电极间距为 L_1 , 引出电极与加速电极间距为 L_2 。

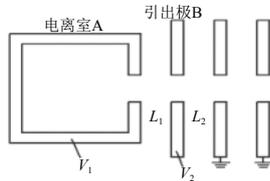


图 3 双透镜离子源结构

Fig. 3 Schematic diagram of double lens ion source

对于电离室出口处产生的聚焦效果, 其焦距^[17]为

$$f_1 = \frac{2V_1}{(V_1 - V_2)/L_1}; \quad (1)$$

对于引出极产生的聚焦效果, 其焦距^[17]为

$$f_2 = \frac{2V_2}{V_2/L_2 - (V_1 - V_2)/L_1}; \quad (2)$$

总焦距 F 的计算公式^[17]为

$$\frac{1}{F} = \frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2} - \frac{L_1}{f_1 \times f_2}. \quad (3)$$

为了更好地提高聚焦性能, 得到更小的离子束宽, 我们采用多组电极组成的离子光学系统, 但利用上述经典公式无法计算实际焦距, 而施加在电极上的电压、电极间距离、开口宽度均会影响末端电极处的离子束宽, 因此拟采用 SIMION 软件模拟离子传输情况, 分析其相互影响规律并进行方案优选。

2.2 离子光学系统模拟

2.2.1 引出极与聚焦极电压对离子束宽的影响

如图 4 所示, 传统离子源包含电离室、引出极、聚焦极、加速极和出口狭缝。利用 SIMION 模拟软件进行模型建立 (参图 5) 及参数设置, 具体设置包括: 离子源出口宽度为 $500 \mu\text{m}$, 电极间距离为 $600 \mu\text{m}$, 电离室与电极宽度均为 $400 \mu\text{m}$, 电极高度

均为 $500 \mu\text{m}$ 。设置离子初始状态, 以 50 amu 带正电离子为例, 数量为 200, 在电离室内沿直线分布, 起始坐标为 $(15, 2.5, 16)$ 、终止坐标为 $(15, 2.5, 25)$, 初始离子动能为 0.1 eV 。电离室电压设为 100 V , 一般情况下, 加速极、出口狭缝接地为 0 V 。

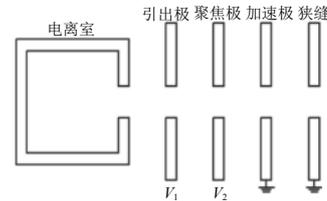


图 4 传统离子源结构

Fig. 4 Traditional ion source structure

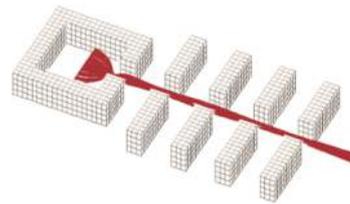


图 5 离子源 SIMION 模型

Fig. 5 SIMION model of the ion source

在传统离子源中, 引出极、聚焦极对离子束宽的影响较大。在本文研究中, 设定引出极电压 V_1 的范围为 $-50 \sim 50 \text{ V}$, 聚焦极电压 V_2 的范围为 $20 \sim 70 \text{ V}$ 。在此范围内, 对离子在末端电极处的离子束宽及散角进行对比, 将引出极、聚焦极电压对离子传输的影响进行数据统计和处理, 结果如图 6、图 7 所示。

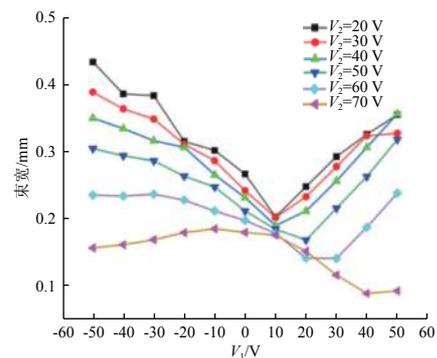


图 6 引出极、聚焦极电压对离子束宽影响

Fig. 6 Effect of voltage of extraction electrode and focusing electrode on ion beam width

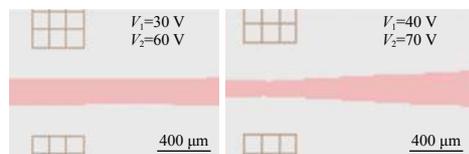


图 7 不同引出极、聚焦极电压下末端电极处离子束散角情况

Fig. 7 Ion beam divergence angle at the end electrode

由图 6 可以看出,引出极、聚焦极电压变化均会影响离子束宽:当固定聚焦极电压 V_2 , 改变引出极电压 V_1 时,离子束宽随 V_1 的升高先增大后减小;当固定引出极电压 V_1 , 改变聚焦极电压 V_2 时,离子束宽随 V_2 的升高逐渐减小。由 2.1 节的离子光学系统计算可知,当改变引出极、聚焦极电压时,会改变相邻电极压差,进而影响焦距,适当地调整电压可使离子在末端电极处产生较好的聚焦效果,离子束散角较小。

由图 7 可看出当 $V_1=40\text{ V}$ 、 $V_2=70\text{ V}$ 时,离子束宽最小,但此时模拟结果显示离子束散角较大,会影响质谱仪的分辨率。经综合考量,在 $V_1=30\text{ V}$ 、 $V_2=60\text{ V}$ 时,离子束宽为 $0.141\ 2\text{ mm}$,且散角较小,离子传输效果最佳。

2.2.2 聚焦透镜类型对离子束宽的影响

聚焦透镜由多个带不同电压的电极组成,其目的是将离子束进行汇聚、加速。对于聚焦透镜而言,结构不同会影响离子聚焦效果。除了在 2.1 节中介绍的聚焦极、加速极结构组成外,聚焦透镜的常用类型还包括单透镜、五级单透镜等结构,如图 8 所示。

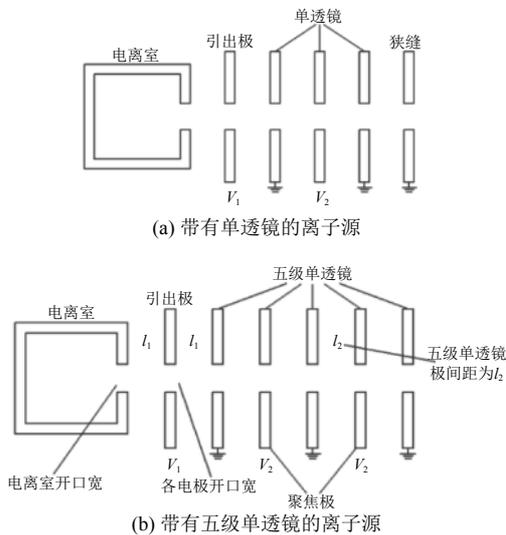


图 8 带有聚焦透镜的离子源
Fig. 8 Ion source with different focusing lens

我们基于 2.2.1 节的电压设置(电离室电压 100 V 、引出极电压 30 V 、聚焦极电压 60 V),讨论不同聚焦透镜对离子束宽的影响,相应的模拟结果见图 9 及表 1。可以看出,在相同电压下,采用五级单透镜较单透镜、传统透镜传输具有更小的离子束宽且散角较小,这之前相关文献报道的结果吻合^[11,18]。

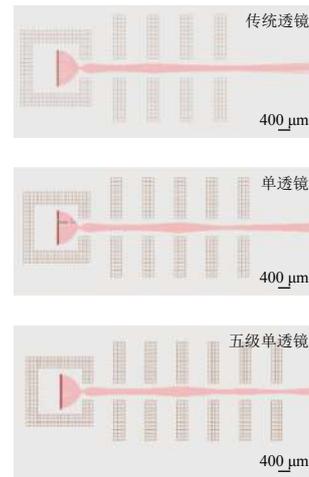


图 9 不同聚焦透镜下末端电极处离子束散角情况
Fig. 9 Ion beam divergence angle at the end electrode for different focusing lens

表 1 不同聚焦电极对离子束宽的影响

Table 1 Effect of different focusing electrodes on ion beam width

离子源类型	离子束宽/mm
传统离子源	0.141 2
单透镜离子源	0.118 2
五级单透镜离子源	0.096 9

2.2.3 电极间距对离子束宽的影响

由 2.2.2 节的模拟结果统计可以看出,当聚焦透镜类型为五级单透镜时,其聚焦效果较其他 2 种类型的离子源表现更佳。在本部分研究中,我们基于五级单透镜模型,利用 SIMION 模拟软件对 2 种电极间距进行模拟讨论,设定引出极与电离室间距及透镜间距为 l_1 ,五级单透镜电极间距为 l_2 ,设置 l_1 、 l_2 变化范围为 $0.3\sim 0.7\text{ mm}$,将其对离子束宽的影响结果进行统计分析,如图 10、图 11 所示。

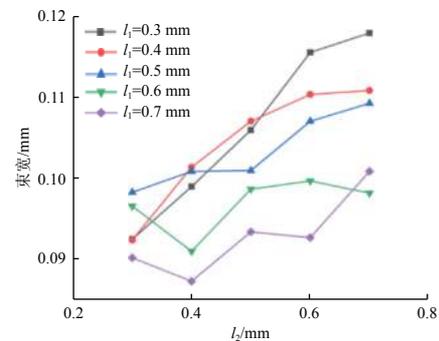


图 10 电极间距对离子束宽的影响
Fig. 10 Effect of electrode distance on ion beam width

由图 10 可以看出,电极间距的变化会影响离子束宽,当 l_1 一定时,随着 l_2 增大,离子束宽逐渐增大;当 l_2 一定时,整体来看离子束宽随 l_1 增大而减小。这是由于 l_1 、 l_2 分别影响着引出极、聚焦透镜

的聚焦效果, 当电压确定时, 总焦距是关于 l_1 、 l_2 的等式, 适当调整 l_1 、 l_2 会使得离子束恰好聚焦于末端电极处, 且有良好的散角。

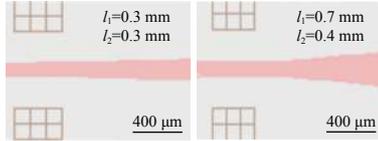


图 11 不同电极间距下末端电极处离子束散角情况

Fig. 11 Ion beam divergence angle at the end electrode for different electrode distances

由图 11 可知, 虽然在 $l_1=0.7$ mm、 $l_2=0.4$ mm 时有最小离子束宽, 但是离子束散角较大, 会影响质谱仪的分辨率。考虑到产品尺寸越小越好, 我们最终取引出极与电离室间距及透镜间距 $l_1=0.3$ mm、五级单透镜电极间距 $l_2=0.3$ mm, 此时离子束宽为 0.092 4 mm, 且散角小。

2.2.4 电离室出口宽度与电极开口宽度对离子束宽的影响

基于上述离子传输模型讨论电离室出口宽度与电极开口宽度对离子束宽的影响, 电极电压及间距设定为上述最优结果。取电离室出口宽 d_1 在 0.3~0.7 mm 范围变化, 电极开口宽 d_2 在 0.3~1.1 mm 范围变化, 通过 SIMION 软件模拟不同 d_1 、 d_2 对离子束宽的影响结果, 统计数据整理如图 12、图 13 所示。

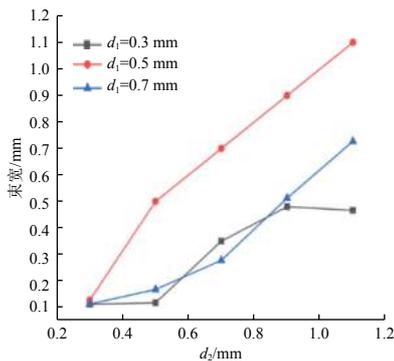


图 12 电离室出口宽度及电极开口宽度对离子束宽影响

Fig. 12 Effect of ionization chamber and electrode opening width on ion beam width

从图 12 可知: $d_1=0.5$ mm 情况下, $d_2 < d_1$ 时, 离子束宽随电极开口宽度 d_2 的增加逐渐减小; $d_2 > d_1$ 时, 离子束宽随电极开口宽度 d_2 的增加迅速增大; 当 $d_1=d_2=0.5$ mm 时有最小离子束宽 0.090 8 mm, 且散角较小。综合对比, 当 $d_1=d_2=0.5$ mm 时离子传输效果最佳。

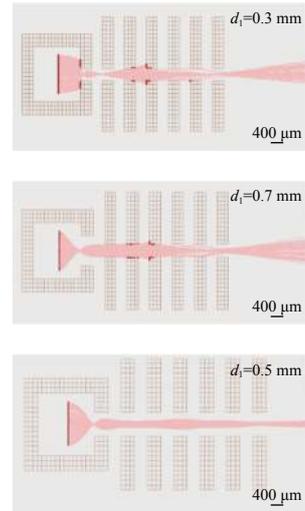


图 13 不同电离室出口宽度下的离子束散角情况

Fig. 13 Ion beam divergence angle at the end electrode for ionization chamber opening width

由图 13 模拟结果来看: 在电离室出口宽度 $d_1=0.3$ mm 和 0.7 mm 时, 无论电极开口宽度 d_2 在 0.3~1.1 mm 之间取何值, 都会有离子与电离室、电极相碰撞的情况; 而在 $d_1=0.5$ mm 时, 离子都可以顺利通过, 只是存在聚焦效果优良之分。这表明电离室开口不能过大或过小。

3 结束语

本文对于微尺度质谱仪核心部件——离子源进行了原理介绍和结构设计, 利用离子光学模拟软件 SIMION 进行仿真, 探究电极电压、透镜结构、电极结构对离子传输的影响并进行优化取值:

1) 研究不同引出极、聚焦极电压对离子束宽和散角的影响, 结合散角综合考量认为, 当引出极电压 $V_1=30$ V、聚焦极电压 $V_2=60$ V 时离子束宽和散角均较小;

2) 对比不同聚焦透镜类型对离子束宽和散角的影响, 得出采用五级单透镜较单透镜、传统透镜传输具有更小的离子束宽且散角较小;

3) 分析不同电极间距对离子束宽和散角的影响, 表明当引出极与电离室间距及透镜间距 $l_1=0.3$ mm、五级单透镜电极间距 $l_2=0.3$ mm 时, 离子束宽和散角均较小;

4) 改变电离室出口宽度 d_1 、电极开口宽度 d_2 , 得到当 $d_1=d_2=0.5$ mm 时有最小离子束宽 0.090 8 mm, 且散角较小。

本文的研究内容对质谱仪微型化的结构设计

有一定指导意义:通过模拟结果探究电极电压、透镜结构、电极结构对微尺度离子源中离子传输性能的影响规律,优化相关参数取值,可为后续微尺度质谱仪研制提供参考。

参考文献 (References)

- [1] SNYDER D T, PULLIAM C J, OUYANG Z, et al. Miniature and fieldable mass spectrometers: recent advances[J]. *Analytical Chemistry*, 2016, 88(1): 2
- [2] SYMS R R A, WRIGHT S. MEMS mass spectrometers: the next wave of miniaturization[J]. *Journal of Micromechanics & Microengineering*, 2015, 26(2): 023001
- [3] LEBEDEV A T. Environmental mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 2013, 6(18): 163-189
- [4] PALMER P T, LIMERO T F. Mass spectrometry in the US space program: past, present, and future[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2001, 12(6): 656-675
- [5] GIANNOUKOS S, BRKIĆ B, TAYLOR S, et al. Membrane inlet mass spectrometry for homeland security and forensic applications[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2015, 26(2): 231-239
- [6] BLAIN M G, RITER L S, CRUZ D, et al. Towards the hand-held mass spectrometer: design considerations, simulation, and fabrication of micrometer-scaled cylindrical ion traps[J]. *Int J Mass Spectrum*, 2004, 236: 91-104
- [7] CHAUDHARY A, AMEROM F H W V, SHORT R T. Development of microfabricated cylindrical ion trap mass spectrometer arrays[J]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2009, 18(2): 442-448
- [8] CHEUNG K, VELASQUEZ-GARCIA L F, AKINWANDE A I. High-performance MEMS square electrode quadrupole mass filters for chip-scale mass spectrometry[C]//IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, 2010: 867-870
- [9] HAN K, LEE Y, JUN D, et al. Field emission ion source using a carbon nanotube array for micro time-of-flight mass spectrometer[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2013, 50(6): 345-359
- [10] TASSETTI C M, DURAFFOURG L, DANIEL J S, et al. A MEMS electron impact ion source integrated in a micro-time-of-flight mass spectrometer[J]. *Procedia Engineering*, 2012, 47: 538-541
- [11] VIGNE S, ALAVA T, TASSETTI C M, et al. Optimization of an electron impact ion source on a MEMS time-of-flight mass spectrometer[J]. *Sensors & Actuators (B): Chemical*, 2017, 243: 690-695
- [12] SILLON N, BAPTIST R. Micromachined mass spectrometer[J]. *Sensors & Actuators (B): Chemical*, 2002, 83(1/2/3): 129-137
- [13] 郭美如, 张伟文, 李得天, 等. 空间小型磁偏转质谱计的研制[J]. *真空科学与技术学报*, 2015, 35(4): 381-385
- [14] GUO M R, ZHANG W W, LI D T, et al. Development of miniaturized magnetic sector mass spectrometer for space exploration[J]. *Chinese Journal of Vacuum Science and Technology*, 2015, 35(4): 381-385
- [15] WANG J, ZHANG X, MAO F, et al. Study of a micro chamber quadrupole mass spectrometer[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology (A): Vacuum Surfaces & Films*, 2008, 26(2): 239-243
- [16] HE M, XUE Z, ZHANG Y, et al. Development and characterizations of a miniature capillary electrophoresis mass spectrometry system[J]. *Analytical Chemistry*, 2015, 87(4): 2236-2241
- [17] GAHL D A. SIMION 3D[G]. Version 6.0, 1995
- [18] 季欧. 质谱分析法[M]. 北京: 原子能出版社, 1978
- [19] 朱一心, 曹麟刚. 用于聚焦微离子束装置的静电透镜系统的设计分析[J]. *微细加工技术*, 1986(3): 35-39
- [20] ZHU Y X, CAO L G. Design analysis of electrostatic lens system for focusing micro ion beam devices[J]. *Microfabrication Technology*, 1986(3): 35-39

(编辑:张艳艳)

作者简介:张浩(1995—),男,硕士研究生,主要从事微纳质谱方面研究。E-mail: 15998257665@163.com。

*通信作者:刘坤(1979—),男,教授,博士生导师,主要研究方向为微纳流动与微纳芯片应用,真空干泵与制造测试工艺;E-mail: kliu@mail.neu.edu.cn。孟冬辉(1978—),男,硕士学位,研究员,从事航天器相关真空与检漏技术研究工作;E-mail: mengdonghui@126.com。