

# FORMA DEL ESPECTRO DE MASA EN UN ESPECTRÓMETRO TIPO TOF

Lautaro R. Varas<sup>1</sup>, F. C. Pontes<sup>2</sup>, G. G. B. de Souza<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Universidad de Costa Rica, Escuela de Ingeniería Química  
lautaro.ramirezaras@ucr.ac.cr. (+506 89907746)

<sup>2</sup>Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Cidade Universitária, Ilha do Fundão, 21949-900 Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

**Resumen:** Este trabajo tiene como objetivo mostrar las variables que afectan la señal de masa de un espectrómetro de masas por tiempo de vuelo, conocer sus limitaciones y, posteriormente, poder predecir el funcionamiento de la espectroscopia de coincidencia ion-ion. El trabajo busca prever numéricamente las variables de trabajo que afectan mayoritariamente su funcionamiento.

## 1. INTRODUCCIÓN

*Principio de funcionamiento del espectrómetro TOF.*

Una población de iones moviéndose en una dada dirección, acelerada por campos eléctricos constantes, tiene distribuciones de masa, las cuales tendrán una distribución de velocidad inversamente proporcional a raíz de la relación masa-carga ( $m/z$ ) [1].

Los iones analizados en este trabajo fueron producidos o con un cañón de electrones o con luz sincrotrón. Una vez producido el ion, la molécula o átomo libera un electrón. El par electrón-ion es acelerado en direcciones opuestas con potenciales positivos para los electrones y negativos para los iones, respectivamente. El electrón, siendo más leve, llega primero al detector de electrones, iniciando la medida de tiempo. Cuando el ion alcanza el detector, la medida de tiempo es finalizada y el tiempo que el ion llevó para recorrer el tubo de vuelo es computado y la información almacenada en una placa de datos.

Wiley e McLaren desarrollaron [2] un espectrómetro con dos regiones de aceleración. El desarrollo propuesto consigue focalizar, en tiempo, iones que fueron formados en puntos diferentes de la región de ionización. Esto fue conseguido por medio de maximización de la resolución, obteniendo una relación de campos óptima en las condiciones de diseño.

A continuación, serán presentadas algunas ecuaciones desarrolladas por Maciel [3] con la finalidad didáctica, ya que, posteriormente, será realizado un análisis de incertidumbre en ellas.

## 2. ECUACIONES DE TIEMPO DE VUELO EN EL ESPECTRÓMETRO

*Tiempo de vuelo en la primera región de aceleración ( $d_s$ ):*

$$t_1 = \frac{-v_{0x} + \sqrt{(v_{0x}^2 + \frac{2qV_s}{mS}d_s)}}{\frac{qV_s}{mS}}$$

Con  $v_{0x} = v_0 \cos \theta$  la velocidad en la dirección del eje del espectrómetro (m/s).

Donde  $q$  es la carga en (C);

$V_s$  el potencial eléctrico en la primera región  $s$  (V);

$m$  la masa en (kg);

$d_s$  la distancia de la primera región de aceleración al punto de ionización en (m). Esta distancia, aunque es fija depende del ángulo con que el ión es expulsado en la explosión Coulombiana. Finalmente  $S=2d_s$ .

*Tiempo de vuelo en la segunda región de aceleración ( $d_s$ ):*

$$t_d = \frac{-\sqrt{(v_{0x}^2 + \frac{2qV_s}{mS}d_s)} + \sqrt{v_{0x}^2 + \frac{2qV_s}{mS}d_s + \frac{2q}{m}V_d}}{\frac{qV_d}{m d}}$$

Donde

$V_d$  el potencial eléctrico en la segunda región  $s$  (V);

$d$  es la longitud de la segunda región de aceleración (m)

*Tiempo en tubo de Drift (D):*

$$t_D = \frac{D}{v_D} \text{ con}$$

$$v_D = \sqrt{v_{0x}^2 + \frac{2qV_s}{mS}d_s + \frac{2q}{m}V_d}$$

Siendo  $V_d$  y  $D$  el potencial y la distancia del tubo de Drift respectivamente.

*Estimación del tiempo de vuelo (TOF) en un sistema tipo Wiley & McLaren*

En el sistema de estudio, el espectrómetro está dividido en 3 secciones de extracción. El tiempo total será la suma de los tiempos de las tres regiones:

$$TOF = t_1 + t_2 + t_3$$

**3. RESULTADOS**

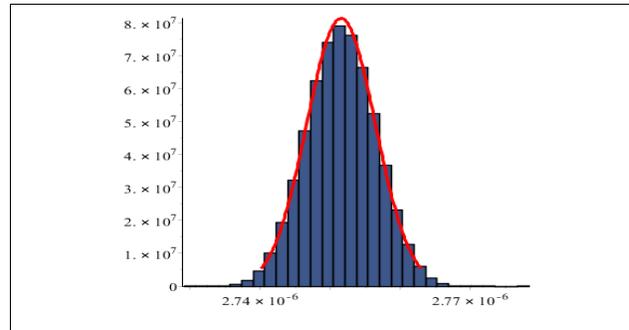
Para analizar el comportamiento de la largura de pico teórico del espectrómetro se realizó un análisis por Monte Carlo para cada una de las variables que conforman el modelo. La tabla 1.1 expone los valores utilizados para el cálculo.

**Tabla 1.1.** Distribuciones asumidas para cada uno de los parámetros para la ecuación de tiempo de vuelo.

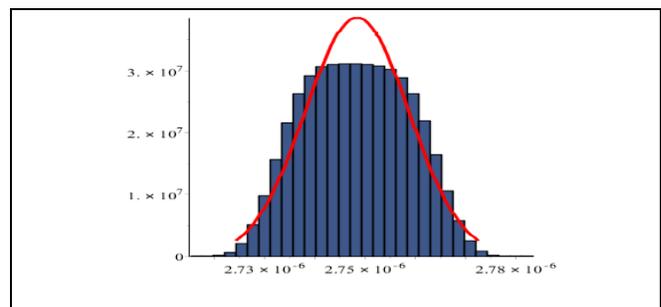
Variable	Distribución	Variación
$v_{0x}$ (m/s)	Normal	(0, 200)
$V_s$ (V)	Uniforme	[199, 201]
$d_s$ (m)	Uniforme	[0,00715, 00735]
$S$ (m)	Uniforme	[0.01449, 0.01451]
$V_d$ (V)	Uniforme	[189,187]
$d$ (m)	Uniforme	[0.0152, 0.0148]
$D$ (m)	Uniforme	[0,1239, 0.1241]
$q$ (C)		$1.6021 \times 10^{-19}$
$m$ (kg)		$2,24 \times 10^{-26}$

A partir del cálculo de Monte Carlo se obtuvo un ancho de pico de  $4.89 \cdot 10^{-9}$  segundos (4.9 ns). A seguir, en la Figura 1.1, se observa el comportamiento del pico teórico para las condiciones dadas. Se puede observar la Gaussiana en rojo ajustada con los parámetros calculados.

Como ejemplo, con el objetivo obtener funciones diferentes de salida. Variando el potencial en la región de extracción  $V_s \pm 4$  V durante la adquisición del espectro es posible observar la mudanza de forma del pico (ídem ángulos de explosión).



**Fig. 1.1.** Ancho del pico de masa, calculado por medio de Monte Carlo.



**Fig. 1.2.** Ancho del pico de masa, calculado por Monte Carlo, variando el potencial  $V_s \pm 4$  V con relación al cálculo inicial.

**4. CONCLUSIONES**

Este resultado tiene la relevancia que permite una primera aproximación a las explosiones Coulombianas. Este resultado permite indagar la relación entre la largura del pico de masa con los mecanismos de fragmentación.

**REFERENCIAS**

[1] GUILHAUS, M. Principles and instrumentation in time-of-flight mass spectrometry. J. Mass Spectrom, v. 30, p. 1519-1532, 1995.  
 [2] WILEY, W. C.; MCLAREN, I. H. Time of flight Mass Spectrometer with Improved Resolution. The Review of Scientific Instruments, p. 1150-1157, 1955.  
 [3] MACIEL, J. B. Fragmentação iónica de algumas moléculas poliatómicas utilizando luz síncrotron e a técnica de tempo-de-vôo. Rio de Janeiro. 2000.