



NOVA

NOVA SCHOOL OF
SCIENCE & TECHNOLOGY

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CATARINA MEALHA GUERREIRO

Licenciada em Engenharia Física

Desenvolvimento de uma fonte de ionização química

MESTRADO INTEGRADO EM ENGENHARIA FÍSICA

Universidade NOVA de Lisboa

30, setembro, 2023



DESENVOLVIMENTO DE UMA FONTE DE IONIZAÇÃO QUÍMICA

CATARINA MEALHA GUERREIRO

Licenciada em Engenharia Física

Orientador: Filipe Ribeiro Ferreira da Silva,
Professor Auxiliar com Agregação da Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade NOVA de Lisboa

Coorientadores: Orlando Manuel Neves Duarte Teodoro,
Professor Catedrático da Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade NOVA de Lisboa

Júri:

Presidente: Doutor Paulo António Martins Ribeiro,
Professor Associado da Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade NOVA de Lisboa

Arguentes: Doutora Ana Cristina Gomes Silva,
Professora Associada da Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade NOVA de Lisboa

Orientador: Doutor Filipe Ribeiro Ferreira da Silva,
Professor Auxiliar com Agregação da Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade NOVA de Lisboa

Desenvolvimento de uma fonte de ionização química

Copyright © Catarina Mealha Guerreiro, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade NOVA de Lisboa.

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade NOVA de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Este documento foi criado com o processador de texto Microsoft Word e o template NOVA-thesis Word [20]

AGRADECIMENTOS

Gostaria de deixar o meu agradecimento ao meu orientador, Professor Doutor Filipe Ferreira da Silva por todo o seu apoio, orientação e disponibilidade ao longo destes meses.

Ao Professor Doutor Orlando Teodoro pela transmissão de conhecimento prático e auxílio na resolução dos mais diversos problemas. O seu conhecimento foi indispensável para realização deste projeto.

Ao Doutor Nenad Bundaleski por toda a ajuda na validação do modelo de esferas rígidas e por toda a transmissão de conhecimento na área da simulação de modelos físicos.

Aos meus colegas, Rodrigo Rodrigues e Ricardo Silva por me terem acompanhado ao longo destes meses, por toda a transmissão de conhecimento nas diversas áreas da física e pela amizade e companheirismo.

Aos meus restantes colegas de laboratório, Carolina Adame, Orlando Ferreira, Susana Fidalgo e Susana Monteiro que proporcionaram um meio agradável de trabalho, partilha e interajuda.

Aos meus colegas de curso, Henrique, Nuno, Filipe e Mónica que partilharam parte desta jornada comigo e que nos momentos de dúvida e dificuldade me apoiaram.

Por fim, quero agradecer à minha família, em especial à minha mãe Carmo, irmã Camila, tio Zé e tia Toia, que estiveram sempre incondicionalmente presentes e me incentivaram ao longo destes 5 anos.

"Não deixes de viver o presente para viveres o futuro"
(Autor Desconhecido).

RESUMO

A espectrometria de massa utilizando reações de transferência de prótons é uma técnica analítica, que se baseia na ionização química e é usada para detectar compostos orgânicos voláteis (VOCs) na fase gasosa. Esta técnica baseia-se na transferência de um próton de um íon reagente para as moléculas do analito, formando um íon produto que posteriormente é analisado por um espectrômetro de massa .

Nesta dissertação procedeu-se ao design de um protótipo de uma fonte de ionização, utilizando a técnica PTR-MS. Recorreu-se a um programa de CAD (SolidWorks) para desenhar três configurações distintas da fonte de ionização, com e sem funil de íons. A simulação das trajetórias das partículas carregadas, nas três configurações, foi realizada através do software SIMION, permitindo a comparação das mesmas. Observou-se que as configurações com funil de íons, otimizadas em frequência e amplitude RF, apresentam uma transmissão superior no orifício de saída, quando comparadas com aquelas sem funil de íons, para a razão massa/carga de interesse, pelo que pretende-se acoplar a fonte de ionização projetada a um espectrômetro de massa de forma a detectar a compostos orgânicos voláteis nomeadamente a presença de TCA (tricloroanisol) em rolhas de cortiça.

Palavras chave: Espectrometria de Massa, reações de transferência de próton, TCA, SIMION, SolidWorks

ABSTRACT

Mass spectrometry utilizing proton transfer reactions is an analytical technique based on chemical ionization, employed for detecting volatile organic compounds (VOCs) in the gas phase. This technique relies on the transfer of a proton from a reactant ion to the analyte molecules, forming a product ion subsequently analyzed by a mass spectrometer.

In this dissertation, a prototype of an ionization source was designed using PTR-MS technique. A CAD program (SolidWorks) was employed to create three distinct configurations of the ionization source, with and without an ion funnel. Simulation of the trajectories of charged particles in these three configurations was conducted using SIMION software, facilitating their comparison. It was observed that configurations with ion funnel, optimized in terms of frequency and RF amplitude, exhibit higher transmission at the exit aperture compared to those without an ion funnel, for the desired mass-to-charge ratio. The intention is to integrate the designed ionization source with a mass spectrometer for the detection of volatile organic compounds, specifically targeting the presence of TCA (trichloroanisole) in cork stoppers.

Keywords: Mass spectrometry, Proton Transfer Reaction Mass-Spectrometry, TCA, SIMION, SolidWorks

ÍNDICE

CAPÍTULO 1	ESTADO DA ARTE	1
1.1	EI-MS.....	1
1.2	Ionização química	3
1.2.1	PTR-MS	4
CAPÍTULO 2	FONTE IONIZAÇÃO	7
2.1	Configuração sem funil de iões	8
2.1.1	Zona de Descarga	9
2.1.2	Zona intermédia	11
2.1.3	Drift Tube	12
2.2	Configuração com funil de iões.....	13
2.2.1	Funil de iões	13
CAPÍTULO 3	SIMULAÇÃO	17
3.1	Modelo de Esferas Rígidas	17
3.1.1	Validação do modelo de Esferas Rígidas.....	18
3.2	Funil de iões	21
CAPÍTULO 4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	23
4.1	Configuração sem funil de iões	24
4.1.1	Verificação do funcionamento.....	25
4.2	Configuração com funil de iões.....	27
4.2.1	Configuração com funil de iões 1	27

4.2.2	Configuração com funil de iões 2.....	33
CAPÍTULO 5	CONCLUSÃO.....	37
CAPÍTULO 6	TRABALHO FUTURO	39
CAPÍTULO 7	BIBLIOGRAFIA	41
CAPÍTULO 8	APÊNDICE 1	1

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema ilustrativo de ionização por impacto eletrônico, adaptado [2].....	2
Figura 2 - Secção eficaz de ionização em função da energia dos elétrons para gases nobres, adaptado[3]	3
Figura 3 - Peças de teflon desenhadas em SolidWorks 2023, de modo garantir o espaçamento e a vedação adequada entre elétrodos.....	7
Figura 4 - Eléctrodo ED1	8
Figura 5 – Esquema simplificado em corte longitudinal, do protótipo da fonte de ionização realizado em SolidWorks 2023 adaptado [8]. Dimensionamento presente no apêndice 1.....	9
Figura 6 - Curva experimental da ocorrência de descarga da água entre dois pratos de cobre afastados com uma distância d e com uma diferença de potencial V_b , a uma pressão p , adaptado de[9].....	10
Figura 7 - Esquema da configuração com funil de iões	15
Figura 8 - Representação do referencial de Laboratório e de Centro de Massa da colisão entre dois átomos (Z_1 e Z_2), adaptado de [16].....	18
Figura 9 - Erro relativo do ângulo de dispersão calculado através da aproximação ao potencial ZBL e com Modelo de Esferas Rígidas em função do ângulo de dispersão para energias de 0,1 eV, 1 eV e 3 eV.....	21
Figura 10 - Simulação realizada em SIMION para a configuração da fonte de ionização sem funil de iões.	25
Figura 11 - Transmissão em função da massa/carga dos iões para condições ideais da configuração sem funil de iões para verificação do funcionamento da fonte de ionização	26
Figura 12 - Transmissão em função da massa/carga em função para verificação de funcionamento da fonte de ionização, foram efetuadas 5 simulações.	27

Figura 13 – Simulação realizada no SIMION para a configuração com funil de íões 1, os elétrodos têm a espessura e espaçamento de 0,5 mm porém devido à baixa resolução do SIMION aparentam ter dimensões diferentes.....	28
Figura 14 - Estudo da variação da frequência RF para uma amplitude de 150 V.....	29
Figura 15 - Estudo da variação da amplitude para uma frequência de 8 MHz	30
Figura 16 - Estudo da variação da pressão.....	31
Figura 17 - Otimização da frequência e da amplitude para medição da molécula de TCA	32
Figura 18 - Teste de repetibilidade de resultados para a configuração com funil de íões a uma amplitude de 160V e frequência de 8MHz.....	33
Figura 19 Simulação realizada no SIMION para configuração com funil de íões 2.....	33
Figura 20 Estudo da frequência RF para uma amplitude de 90 V	34
Figura 21 Estudo da variação da amplitude com uma frequência de 3 MHz.....	35

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Processos de ionização química, onde X representa uma espécie reagente, M uma amostra a analisar, H hidrogénio e e – eletrão.	4
Tabela 2 - Protoafinidades de alguns constituintes do ar e compostos orgânicos, adaptado de [7].....	6
Tabela 3 - Coeficiente de velocidade das reações químicas k , a uma temperatura de 300 K, que ocorrem na zona de descarga[10].	11

SÍMBOLOS

π	Razão entre o perímetro de uma circunferência e o seu diâmetro, equivalente aproximadamente a 3,1416 (símbolo: π).
e	Carga elementar de um elétron $1.60217663 \times 10^{-19}$ C
a_0	Raio de Bohr aproximadamente $0.529177210903 \times 10^{-10}$ m

Capítulo 1

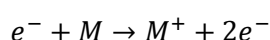
ESTADO DA ARTE

A ionização é um processo físico-químico pelo qual átomos, moléculas ou substâncias neutras perdem ou ganham eletrões, transformando-se em iões. Os iões são partículas com carga elétrica positiva (catiões) ou partículas com carga elétrica negativa (aniões).

Desde o século XX, a análise, identificação e caracterização de compostos químicos, sejam eles conhecidos ou desconhecidos, tem sido amplamente explorada. Para estudar essas amostras de forma eficaz, elas são submetidas à ionização, tornando possível a sua posterior análise por um espectrómetro de massa. A escolha da técnica de ionização adequada é essencial, devido à influência no resultado da análise. A ionização por impacto de eletrões e a ionização química são empregues devido à sua versatilidade e eficácia na produção de iões para análise. Neste capítulo será fornecida uma análise detalhada destas duas técnicas de ionização, destacando as suas características, vantagens e limitações.

1.1 EI-MS

A ionização eletrónica (EI-MS)[1] é uma técnica analítica que recorre ao impacto de eletrões para ionizar o analito (uma molécula, ião ou átomo que se encontra a ser medido ou estudado num determinado teste, ensaio ou experiência). Através do impacto eletrónico ocorre a reação descrita abaixo, onde M representa o analito e e^- , o eletrão.



Tal como se encontra ilustrado na Figura 1, os eletrões são produzidos através de um filamento, geralmente de tungsténio, que ao ser aplicado uma corrente emite eletrões. Estes eletrões são acelerados através da aplicação de campo elétrico, onde é formado uma diferença de potencial elétrico entre o cátodo (filamento de tungsténio) e o ânodo (elétrodo

positivamente carregado). Os elétrons são repelidos pelo cátodo e acelerados em direção ao ânodo. Após a aceleração, os elétrons atravessam lentes eletromagnéticas que os focam e colimam, concentrando o feixe de elétrons num ponto garantindo que permaneçam numa trajetória pretendida. Após serem acelerados e colimados, os elétrons colidem com a amostra que se pretende analisar provocando a sua ionização. O produto desta colisão, que geralmente são fragmentos do analito ionizados devido ao impacto dos elétrons, é posteriormente analisado por um espectrómetro de massa.

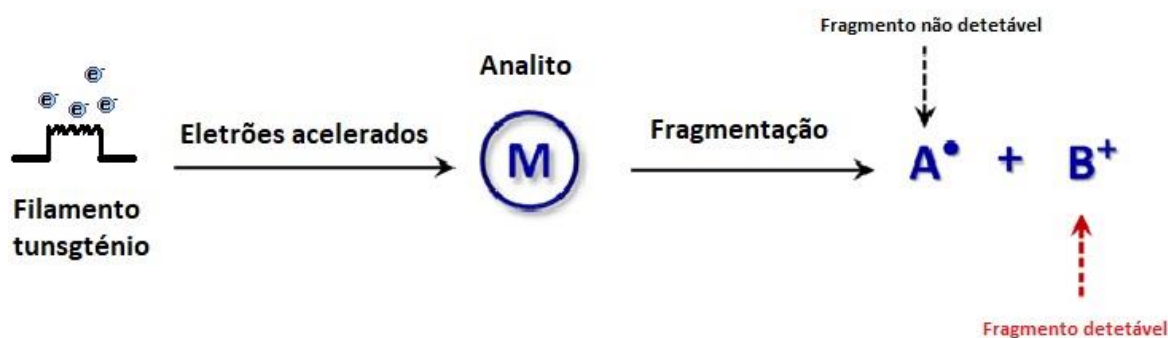


Figura 1 - Esquema ilustrativo de ionização por impacto eletrônico, adaptado [2]

De uma forma geral, durante a colisão dos elétrons com o analito ocorre a formação de cátions. Isto acontece devido à alta energia dos elétrons, habitualmente acelerados com uma energia próxima de 70 eV. Na Figura 2 é possível verificar que neste intervalo de energia, a secção eficaz de ionização atinge um máximo, ou seja, a probabilidade de haver ionização é bastante elevada. Quando estes elétrons colidem com a amostra, as partículas neutras tendem a fragmentar-se e a perder elétrons, resultando na formação de cátions.

A energia elevada dos elétrons é suficiente para expelir elétrons de uma molécula, levando à sua ionização. Porém a maioria das moléculas apenas necessita de 20 eV para ionizar, sendo que as moléculas orgânicas apenas 10 eV pelo que o excesso de energia leva à fragmentação. A consequência não é apenas a ionização do analito, mas sim uma fragmentação excessiva das moléculas pelo que a principal desvantagem desta técnica está na fragmentação excessiva do analito.

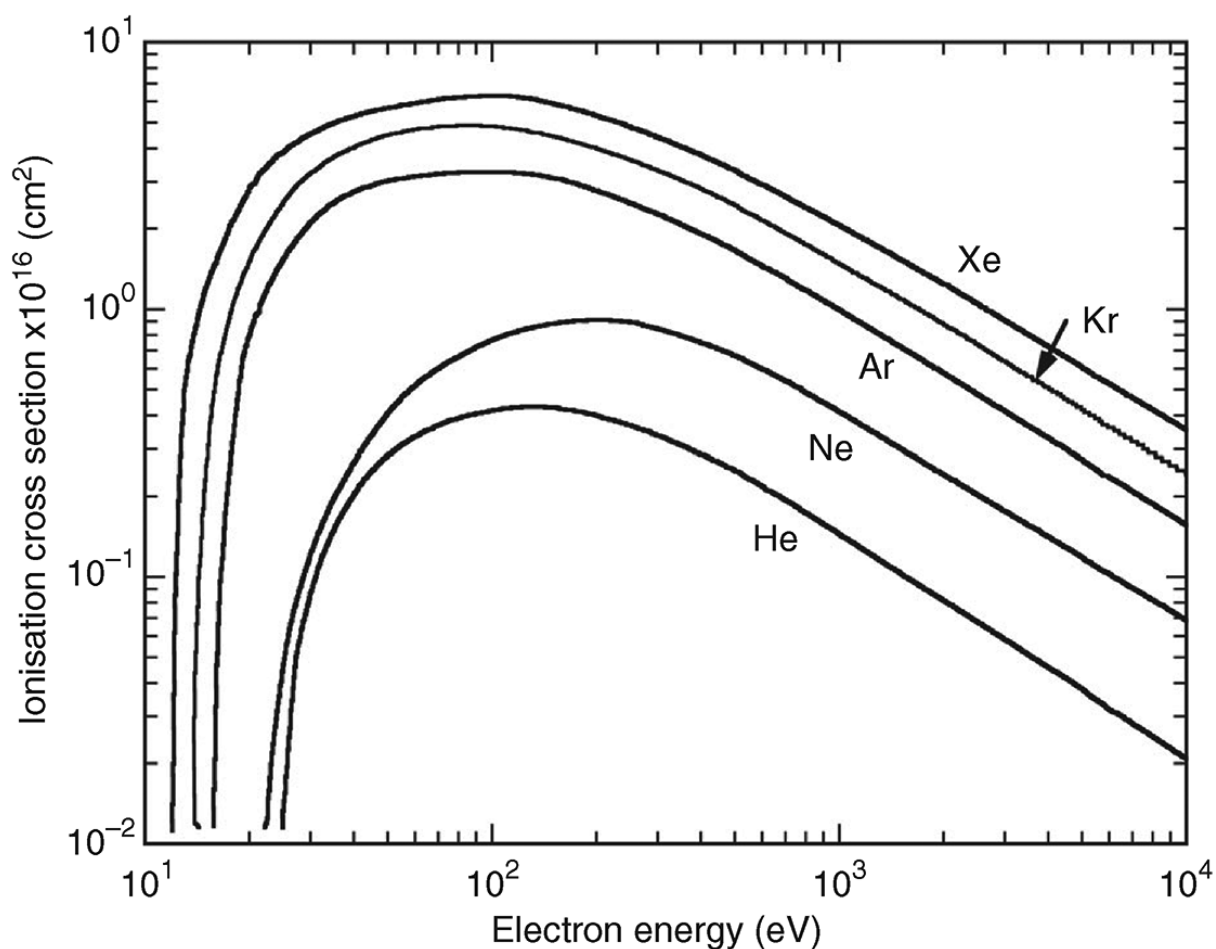


Figura 2 - Seção eficaz de ionização em função da energia dos elétrons para gases nobres, adaptado[3]

Os compostos orgânicos voláteis (COVs) têm tendência a fragmentar significativamente, o que torna a análise do espectro de massa insustentável para o estudo e detecção destas moléculas, devido à presença de bastantes fragmentos diferentes que pode tornar o espectro de massa impercetível.

A ionização por impacto de elétrons é uma técnica que se destaca pela sua sensibilidade, capacidade de identificação de compostos desconhecidos, informações estruturais detalhadas e versatilidade, o que a torna uma ferramenta bastante útil para a análise e caracterização de amostras em diversos contextos científicos e industriais.

1.2 Ionização química

A ionização química (IQ) [3] é uma técnica de espectrometria de massa que recorre a vários processos, como os descritos na Tabela 1 para ionizar amostras, pode ser usada em modo negativo ou positivo, produzindo aniões ou catiões respetivamente. Os iões resultantes

são subsequentemente analisados por um espectrômetro de massa [4]. Será descrito com mais detalhe o processo de ionização química através da transferência de próton na próxima subsecção.

Tabela 1 - Processos de ionização química, onde X representa uma espécie reagente, M uma amostra a analisar, H hidrogénio e e^- eletrão.

$X^+ + M \rightarrow M^+ + X$	Transferência de carga
$XH^+ + M \rightarrow MH^+ + X$	Transferência de próton
$e^- + M \rightarrow M^-$	Captura de eletrão

Na ionização química, a ionização ocorre através de reações controladas entre o analito e os reagentes. Estas reações são seletivas e direcionadas, resultando frequentemente na formação de iões moleculares intactos ou numa fragmentação controlada que produz iões de fragmentos específicos. Como resultado, a estrutura molecular das amostras analisadas é preservada de forma mais eficaz, e a fragmentação é reduzida comparativamente com a ionização por impacto de eletrões. Devido a este motivo, a ionização química é uma escolha apropriada quando se pretende manter a integridade das moléculas durante a análise, tornando mais fácil a identificação de substâncias com base nas suas massas moleculares, em oposição a uma análise rica em fragmentos, como por vezes acontece na EI.

A ionização química apresenta algumas limitações comparativamente a técnicas como a ionização por impacto de eletrões. Pode ser menos sensível, tornando necessário a aplicação de concentrações mais elevadas de analitos para deteção adequada. Adicionalmente, implica a introdução de reagentes químicos específicos, podendo aumentar a complexidade da análise. A presença de outros compostos na amostra que reagem com os reagentes pode originar interferências, afetando a seletividade. A resposta da ionização química pode variar consoante as condições e a composição da amostra, afetando a precisão das medições.

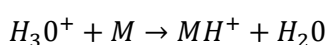
1.2.1 PTR-MS

A espetrometria de massa recorrendo a reações de transferência de próton (PTR-MS) [4] é uma técnica analítica, que tem como base a IQ e é utilizada maioritariamente para detetar compostos orgânicos voláteis (COV) em fase gasosa. Tal como se encontra representado na Tabela 1 esta técnica baseia-se na transferência de um próton de um ião reagente para as

moléculas que compõem a amostra a analisar, formando um ião produto que posteriormente é analisado por um espectrômetro de massa.

Existem estudos que utilizam determinados iões como o NH_4^+ [5], como iões reagentes dadores de próton, porém normalmente o ião mais utilizado é o H_3O^+ , visto que é facilmente produzido e apresenta uma protoafinidade menor que os COV tal como é possível verificar na Tabela 2 e maior que a maioria dos constituintes do ar, permitindo que a transferência de próton se dê quase exclusivamente entre os compostos orgânicos.

Esta reação de interesse para esta técnica de espectrometria encontra-se ilustrada na equação abaixo, onde M corresponde ao composto orgânico que é analisado.



Uma das principais características da PTR-MS é a sua elevada sensibilidade, sendo capaz de detetar concentrações extremamente baixas de COV's, até mesmo na ordem das partes por trilião (ppt) [6]. Além disso, proporciona resultados em tempo real, comparativamente a outras técnicas utilizadas como por exemplo a cromatografia gasosa, tornando-se valiosa para o controle instantâneo em áreas como a qualidade do ar e processos industriais. A PTR-MS permite a análise de uma variedade de compostos orgânicos, desde os de baixa massa até moléculas mais pesadas. Além disso, é uma técnica não destrutiva, preservando a integridade das amostras, o que a torna adequada para análises de amostras sensíveis, como amostras biológicas. As vantagens incluem a alta sensibilidade, rapidez na obtenção de resultados, eliminação da necessidade de preparação de amostras complexas e a sua aplicabilidade em diversas áreas, desde estudos ambientais até análise de aromas e controlo de processos industriais.

Além disso, esta técnica é adequada para a análise de compostos voláteis e semivoláteis, sendo menos apropriada para substâncias não voláteis. A interpretação dos dados da PTR-MS pode ser complexa devido à sobreposição de picos.

Tabela 2 - Protoafinidades de alguns constituintes do ar e compostos orgânicos, adaptado de [7]

Component	Proton affinities	
	(kcal mol ⁻¹)	(eV)
He	42.5	1.8
Ne	48.1	2.1
Ar	88.6	3.8
O ₂	100.9	4.4
N ₂	118.2	5.1
CO ₂	130.9	5.7
CH ₄	132	5.7
N ₂ O	136.5	5.9
CO	141.9	6.2
H ₂ O	166.5	7.2
C ₄ H ₁₀	163.3	7.1
H ₂ S	170.2	7.4
HCN	171.4	7.4
C ₆ H ₆	181.9	7.8
C ₃ H ₆	179.8	7.8
HCOOH	178.8	7.8
CH ₃ OH	181.9	7.9
CH ₃ CN	188.0	8.1
CH ₃ COH	186.6	8.1
C ₂ H ₅ OH	188.3	8.2
CH ₃ COCH ₃	196.7	8.5
NH ₃	204.0	8.8

Capítulo 2

FONTE IONIZAÇÃO

Neste capítulo, serão descritos pormenorizadamente três protótipos da fonte de ionização, estes utilizam a técnica de espectrometria PTR-MS descrita na subsecção 1.2.1. Para efeitos de clareza e compreensão, dividiram-se as configurações em zonas distintas, nomeadamente a zona de descarga, a zona intermédia, a do drift tube (tubo de deriva) e a do funil de iões. A primeira configuração ao contrário das outras não tem funil de iões pelo que apresenta apenas três zonas distintas enquanto que a segunda e a terceira configuração apresentam quatro zonas.

Serão abordadas as considerações que se tiveram no dimensionamento dos eléctrodos do protótipo da fonte de ionização, com base no projeto de PTR-MS [8].

Os eléctrodos foram projetados para fabricação em aço inoxidável 316L, um material eletricamente condutor, resistente à corrosão, com durabilidade e comumente utilizado em vácuo. Cada eléctrodo é isolado eletricamente do eléctrodo adjacente através peças de teflon.

As peças de teflon foram dimensionadas de forma a garantir o espaçamento entre eléctrodos desejado. Tal como é possível observar na Figura 3, as peças de teflon, contêm um sulco de 2 mm por 3 mm que permite que os O-rings de viton, com uma espessura de 3 mm, sejam comprimidos em 1 mm, garantindo uma vedação eficaz para manter a pressão no interior de 6-7 mbar necessária para o funcionamento da fonte de ionização.

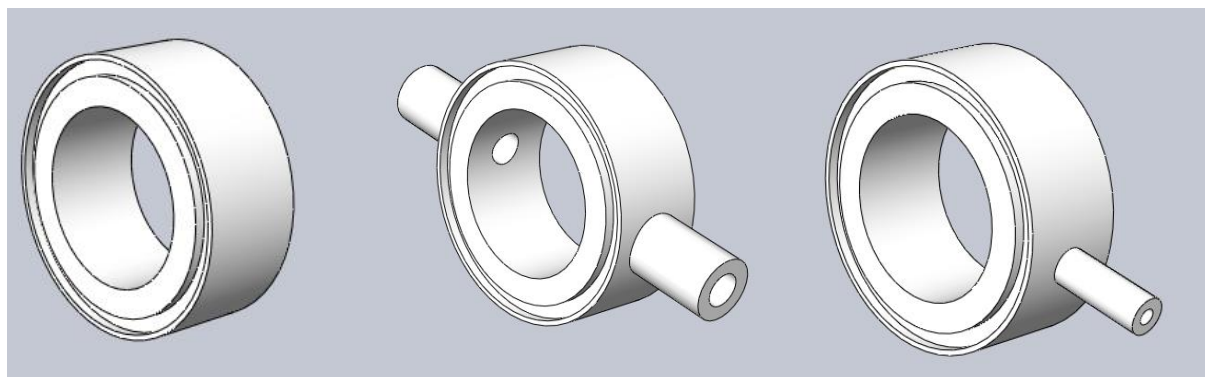


Figura 3 - Peças de teflon desenhadas em SolidWorks 2023, de modo garantir o espaçamento e a vedação adequada entre eléctrodos

Para além de garantirem o espaçamento e vedação adequados, há uma peça de teflon que tem um orifício destinado à entrada de analito, e outra com um orifício para a saída de gás onde estará ligada uma bomba de vácuo e um orifício destinado à inserção de um manómetro de pressão, possibilitando o acompanhamento preciso das condições de pressão durante a operação do sistema. O primeiro eléctrodo comum a todas as configurações, tal como é possível observar na Figura 4, tem um furo para a entrada de vapor de água. No total foram criados 4 orifícios de entrada/saída de gás, no primeiro eléctrodo e nas peças de teflon, tal como é possível verificar nas Figuras 3 e 4.

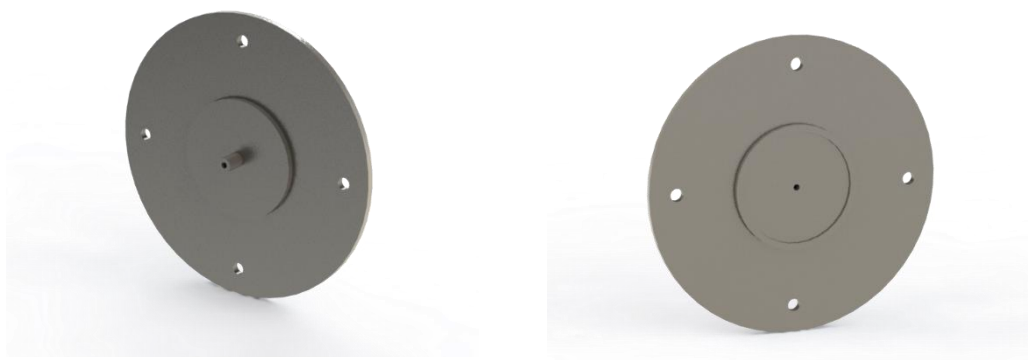


Figura 4 - Eléctrodo ED1

Para garantir a estrutura adequada dos eléctrodos, foram criados quatro furos em cada eléctrodo com o objetivo de inserir hastes de nylon, fornecendo a fixação necessária para manter os eléctrodos na posição correta.

O desenho técnico de todos os eléctrodos e peças de teflon para todas as configurações estão no apêndice 1, onde se encontram detalhadas todas as dimensões que foram projetadas para a construção da fonte de ionização.

2.1 Configuração sem funil de iões

Com base na fonte de ionização projetada por *S. Inomata et Al.* dimensionou-se a configuração que será descrita nesta secção. A Figura 5 ilustra de forma genérica o esquema completo do protótipo da fonte de ionização projetada sem funil de iões. Os eléctrodos que compõem esta fonte de ionização são submetidos a tensões elétricas específicas, conforme indicado na figura, e estão devidamente isolados eletricamente através da utilização de teflon.

O desenho técnico desta configuração encontra-se no apêndice 1.

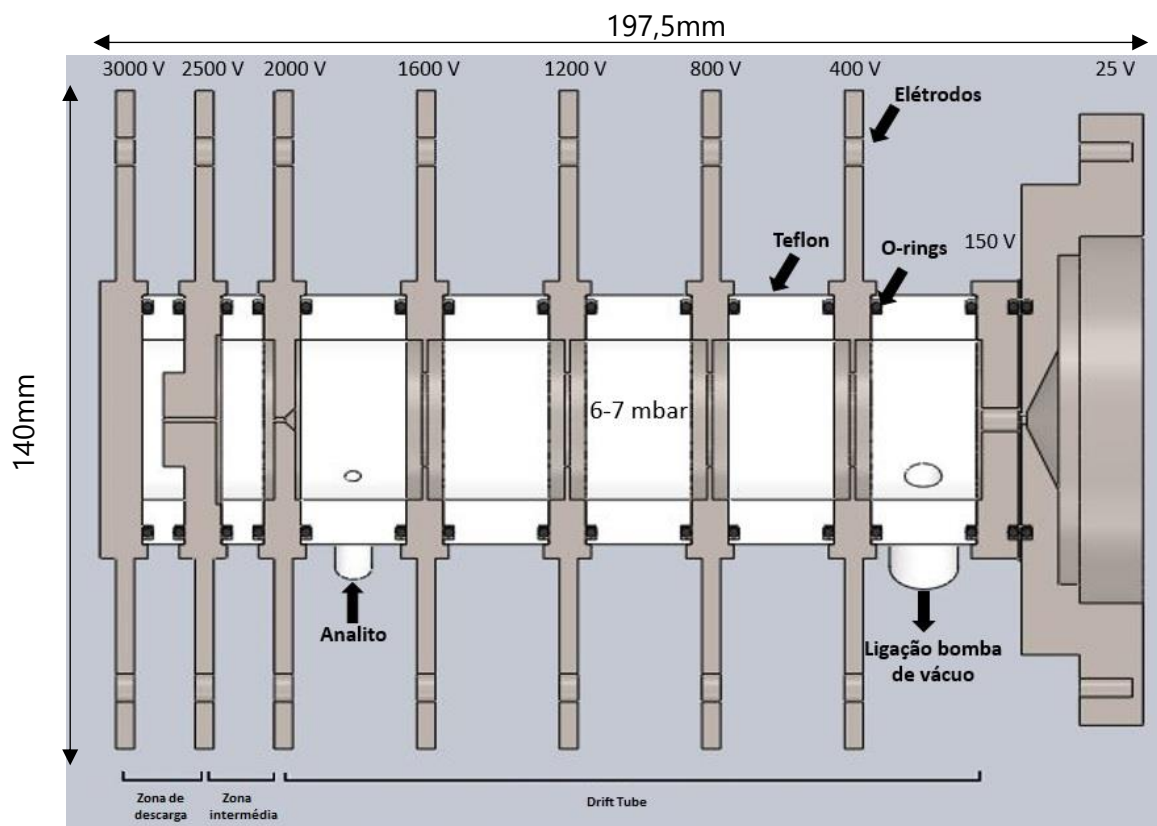


Figura 5 – Esquema simplificado em corte longitudinal, do protótipo da fonte de ionização realizado em SolidWorks 2023 adaptado [8]. Dimensionamento presente no apêndice 1.

2.1.1 Zona de Descarga

A zona de descarga, que constitui a primeira zona da fonte de ionização, tem como principal função a da transformação de moléculas neutras em iões, para que estas posteriormente reajam com o analito.

Neste contexto, a utilização de descargas de corrente contínua (CC) entre duas lentes eletrostáticas representa uma abordagem que permite que haja ionização da água para produzir iões H_3O^+ . Existem diferentes tipos de descargas, que são classificadas segundo as características de diferença de potencial/corrente elétrica em que ocorrem. A descarga de interesse para PTR-MS é designada de *glow discharge*, devido ao brilho que emite quando esta ocorre. Esta metodologia baseia-se na aplicação de uma diferença de potencial elétrico entre dois eléctrodos na ordem das centenas de volts, que resulta na formação de uma descarga. Os gases são excelentes isoladores elétricos pelo que as condições em que se efetua a descarga,

nomeadamente a pressão do gás e a tensão aplicada nos elétrodos têm de ser ideais para que ocorra a descarga.

Na Figura 6 é possível verificar as condições de descarga da água entre dois elétrodos de cobre que se encontram separados a uma distância d , com uma diferença de potencial V_b . As curvas mostram em que condições é possível ocorrer a descarga. A partir destes resultados é possível verificar que aplicando uma diferença de potencial de 500 V entre dois elétrodos que se encontram a uma distância de 4-8 mm e onde a pressão se encontra entre 6-7 mbar a descarga pretendida ocorrerá, pelo que a zona de descarga foi projetada com estas dimensões.

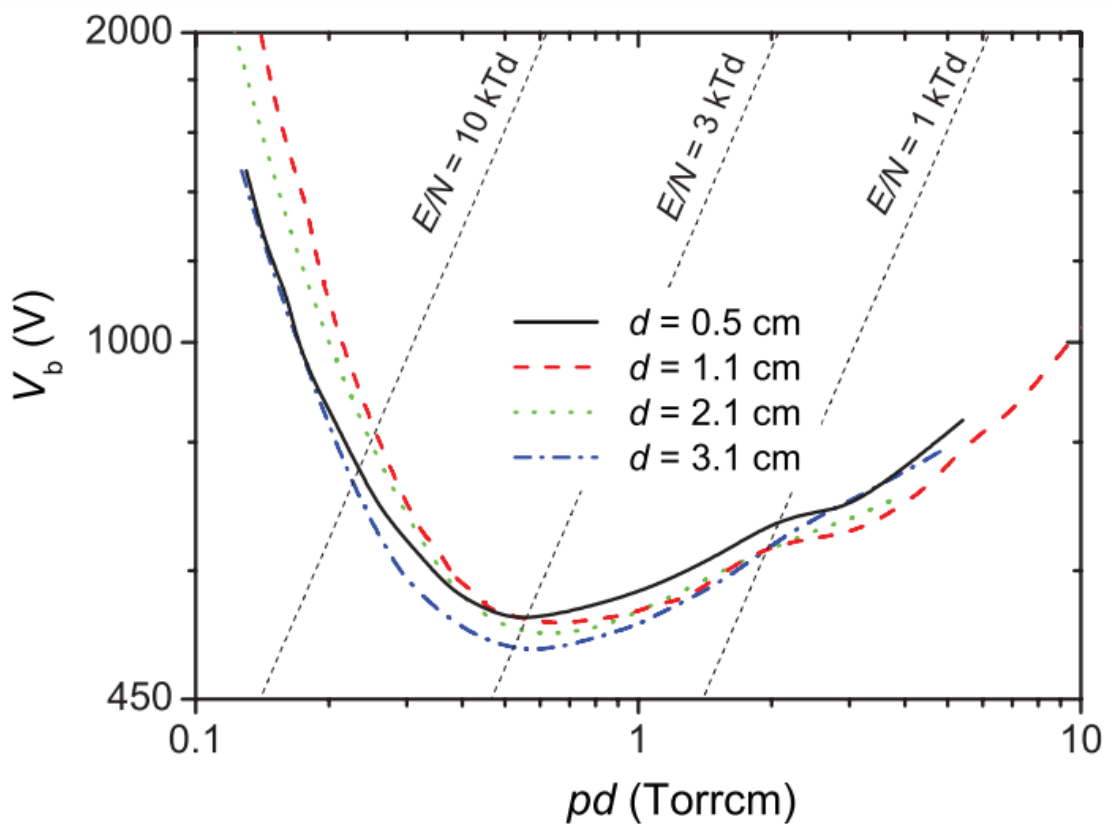


Figura 6 - Curva experimental da ocorrência de descarga da água entre dois pratos de cobre afastados com uma distância d e com uma diferença de potencial V_b , a uma Pressão p , adaptado de[9].

A descarga nesta zona ocorre num meio rico em vapor de água, sendo produzido assim iões de H_3O^+ . Durante a descarga, as moléculas de água ionizam, resultando na formação de iões H_2O^+ , ou fragmentam resultando em iões como H^+ , H_2^+ , OH^+ , e O^+ . Na Tabela 1 Tabela 3 é possível observar o coeficiente de velocidade da reação k , para as reações que ocorrem após a descarga. Verifica-se que após a formação dos iões anteriormente mencionados há a formação rápida do ião de interesse para esta técnica, H_3O^+ .

Tabela 3 - Coeficiente de velocidade das reações químicas k , a uma temperatura de 300 K, que ocorrem na zona de descarga[10].

$H_2O^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + OH$	$k = 1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$OH^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + O$	$k = 1,3 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$OH^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + OH$	$k = 2,6 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$O^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + O$	$k = 1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H_2^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + H$	$k = 1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H_2^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + H_2$	$k = 1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + H$	$k = 1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$N_2^+, +H_2O \rightarrow H_2O^+ + N_2$	$k = 1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$

Foi projetada a utilização de azoto, como gás precursor. Este foi escolhido deliberadamente, uma vez que possui uma protoafinidade inferior à do ião H_3O^+ , tal como mencionado anteriormente na Tabela 2. Isso implica que o azoto não interfere posteriormente de forma substancial nas reações de transferência de protão entre o analito e o ião reagente, garantindo a integridade e a confiabilidade das análises efetuadas. O azoto aquando ionizado transfere a sua carga facilmente, na Tabela 3 é possível observar a reação bem como o coeficiente de velocidade da reação. Através do coeficiente de reação, $1,8 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, é possível verificar que esta reação ocorre rapidamente.

Durante a descarga formam-se adicionalmente outros iões para além do H_3O^+ , como por exemplo, N_2^+ e N^+ provenientes do ar e do gás precursor que transferem a sua carga a moléculas de água neutra formando H_2O^+ , que por sua vez reagem com outras moléculas de água neutras formando H_3O^+ . Contudo existem moléculas como o oxigénio que se encontra na atmosfera que possuem uma energia de ionização mais baixa que a água e que por esse motivo não ionizam moléculas de água neutras, contaminando o fluxo de iões de H_3O^+ .

2.1.2 Zona intermédia

Durante a descarga, como foi mencionado na subsecção 2.1.1 há a formação de iões para além do H_3O^+ . A zona intermédia da fonte de ionização, é onde estes iões que foram formados e que ainda não efetuaram reações de transferência de carga, efetuam reações descritas na Tabela 3 cedendo a sua carga à molécula de água e resultando na formação de iões H_2O^+ . Os iões H_2O^+ subseqüentemente transferem um protão para uma molécula neutra de água, dando origem à formação de iões H_3O^+ . Porém existem iões como o O_2^+ e o NO^+ que

têm uma energia de ionização inferior à da água que não efetuam a cedência de carga. Estes iões, existem em concentração reduzida, porém são contaminantes visto posteriormente reagem com o analito e formam produtos de reação diferentes daqueles que são esperados que ocorram.

2.1.3 Drift Tube

O drift tube na espectrometria de massa, representa uma etapa bastante importante, na qual se processa a reação de transferência de protão entre os iões de H_3O^+ e a amostra a ser analisada. Nesta fase, os iões provenientes da zona intermédia, através uma série de elétrodos, são submetidos a um campo elétrico que acelera os iões, levando a colisões com as partículas neutras presentes no analito. É nessa altura que ocorre a transferência do protão da molécula H_3O^+ para a amostra, possibilitando, assim, a sua análise detalhada posteriormente através do espectrómetro de massa.

Para garantir um fluxo de gás contínuo no drift tube, o gás a ser analisado é introduzido através de uma válvula agulha tipicamente com um fluxo de $20\text{-}30 \text{ STP cm}^3 \text{ min}^{-1}$. A saída do drift tube, que será explicada na subsubsecção seguinte, é projetada com consideração especial para o diferencial de pressão existente entre a fonte de ionização e o próprio espectrómetro de massa. Isso é crucial, uma vez que o espectrómetro de massa opera em condições de alto vácuo, enquanto a pressão no drift tube se situa na faixa de 6 a 7 mbar.

O drift tube é constituído por um conjunto de seis elétrodos, sendo que os quatro primeiros apresentam geometria idêntica possuindo um orifício de passagem dos iões de 10 mm e uma diferença de potencial de 400 volts. No entanto, o quinto elétrodo possui um orifício com um diâmetro de 5 mm e encontra-se a uma tensão de 125 volts, enquanto o sexto e último elétrodo apresenta um orifício de 2 mm e está a uma tensão de 25 volts. No drift tube existe uma entrada de gás após o primeiro elétrodo e duas saídas para uma bomba de vácuo e um manómetro para a medição da pressão entre o quarto e quinto elétrodo.

2.1.3.1 Saída do Drift-Tube

A saída do Drift-Tube é constituída por um orifício onde os iões saem para serem analisados pelo espectrómetro de massa. Tendo em consideração que o espectrómetro de massa opera a uma pressão de 10^{-5} mbar e que na fonte de ionização a pressão encontra-se entre os 6-7 mbar, foi necessário avaliar o diâmetro do orifício final para garantir o bom funcionamento do sistema.

A condutância C , num pequeno orifício circular de raio r , em regime molecular e para uma temperatura do ar de 20 °C, é dada por [11]

$$C = 11,6 \pi r^2$$

A pressão P_a na fonte de ionização e a pressão P_b à entrada do espectrómetro relacionam-se pelo caudal Q que é dado pela seguinte equação:

$$Q = C(P_a - P_b)$$

A velocidade de bombeamento S de uma bomba é dada por:

$$S = \frac{Q}{P_b}$$

Substituindo os valores nas equações chegou-se à conclusão que não é possível ligar diretamente a fonte de ionização ao espectrómetro de massa, sendo necessária uma zona de pressão intermédia entre a saída da fonte de ionização e a entrada do espectrómetro de massa.

2.2 Configuração com funil de iões

Nesta secção será descrito o princípio de funcionamento de um funil de iões e duas configurações da fonte de ionização com funil de iões. Para efeitos de clareza e distinção das configurações com funil de iões, numeraram-se as configurações, com respetivamente configuração com funil de iões 1 e 2. Foram realizadas duas configurações com funil de iões tendo por base na configuração sem funil de iões descrita na secção 2.1. A configuração com funil de iões 1 teve por base o funil de iões projetado e simulado em SIMION de H. ZHU *et al.* [12]. A configuração com funil de iões 2 foi construída devido à dificuldade de produção da configuração 1 (elétrodos com espessura de 0.5mm) e devido a algumas problemáticas que serão descritas nesta secção.

2.2.1 Funil de iões

Um das soluções para a diminuição da dispersão espacial dos iões para pressões elevadas (na ordem dos milibares), é tipicamente a utilização de um funil de iões [13]. O funil de iões consiste numa série de elétrodos em forma de anel cilíndrico cujo diâmetro interno altera-se progressivamente (conforme ilustrado na Figura 7).

Nestes elétrodos, são aplicados potenciais de radiofrequência (RF) com polaridades opostas. Sendo que um "potencial de radiofrequência com polaridade oposta" refere-se a um arranjo de elétrodos ou uma configuração em que tensões de radiofrequência (varia entre os 3 kilohertz e os 300 gigahertz) são aplicadas em dois elétrodos adjacentes com polaridades

opostas. Quando se aplicam potenciais de RF com polaridades opostas, cria-se um campo elétrico oscilante entre os elétrodos. Este campo oscilante afeta os iões carregados que estão a mover-se através do sistema. Os iões são submetidos a forças alternadas de atração e repulsão, o que pode resultar em trajetórias controladas e focalizando os iões, tornando-se bastante útil para direcionar os iões para o caminho desejado e aumentar a eficiência da captura dos iões pelo espectrómetro de massa.

Esta configuração cria um potencial eficaz que confina os iões de forma radial dentro do funil de iões. O valor do potencial eficaz é diretamente proporcional ao quadrado da amplitude do campo elétrico de radiofrequência local, ou seja, o funil de iões acoplado o poder de aceleração dos iões com o poder de confinamento radial da radiofrequência melhora a corrente de iões que alcança o espectrómetro de massa, sendo assim uma ferramenta bastante útil para otimizar a corrente iónica.

2.2.1.1 Configuração com funil de iões 1

Nesta configuração optou-se por substituir os três últimos elétrodos descritos na subsecção 2.1.3 por um funil de iões mantendo a distância de deriva dos iões, 135 mm, idêntica à configuração anterior. Tentou-se minimizar a dispersão espacial dos iões, diminuindo o orifício de saída, que na configuração sem funil de iões era de 2 mm e nesta configuração é de 0,5 mm.

As saídas que se conectam à bomba de vácuo e ao manómetro de pressão foram colocadas entre o segundo e terceiro eléctrodo do drift-tube. De forma a manter a pressão interna dentro dos parâmetros ideais, mantendo-a entre 6 e 7 mbar, assegurando o funcionamento adequado de todo o sistema. Os potenciais aplicados aos elétrodos mantiveram-se idênticos à da configuração anterior.

No funil de iões, com base na melhor configuração do funil de iões simulada, introduziu-se um total de 55 elétrodos com espessura de 0,5 mm e espaçados 0,5 mm entre eles. O diâmetro interno de cada eléctrodo é variável, começando o primeiro eléctrodo com 27,5 mm e diminuindo 0,5 mm até chegar ao último (0,5 mm nesta configuração). O último eléctrodo tem dimensões menores que o orifício de saída da configuração sem funil de iões o que permite uma dispersão espacial menor, ou seja, os iões à saída da configuração com funil de iões estão menos dispersos.

A configuração que se encontra na Figura 7 é semelhante à que foi descrita anteriormente, porém esta contém adicionalmente um funil de iões que a distingue da configuração que se encontra esquematizada na Figura 5 sem funil de iões, pelo que apenas serão descritas

as alterações no drift-tube e o funil de iões. Esta configuração foi construída de forma a aumentar a corrente iónica à saída da fonte de ionização projetada inicialmente.

Foi usado um funil de iões que permite otimizar a corrente iónica à saída da fonte de ionização. Optou-se pelo estudo, simulação e aplicação do funil de iões acoplado ao drift tube para maximizar a extração de iões à saída da fonte de ionização.

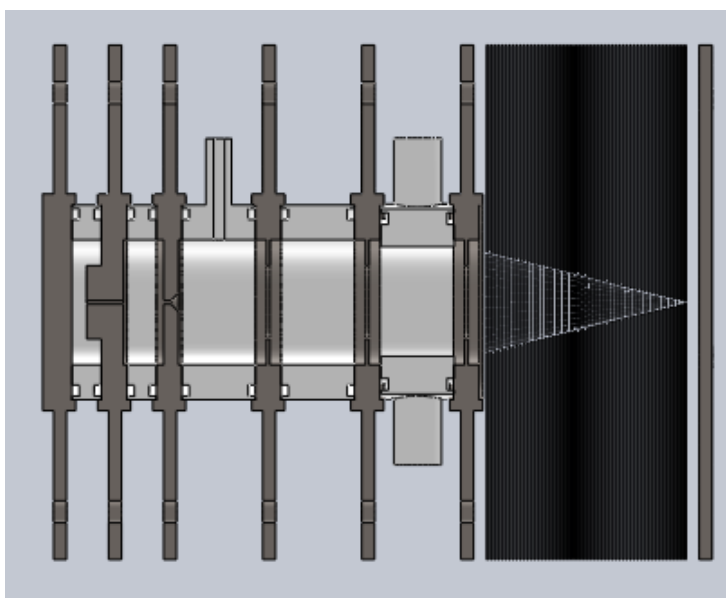


Figura 7 - Esquema da configuração com funil de iões

2.2.1.2 Configuração com funil de iões 2

De forma a elaborar uma configuração mais realista em termos de produção final do protótipo, realizou-se a configuração com funil de iões 2.

Com os resultados das simulações foi possível observar que o funil de iões seleciona os iões em massa/carga pelo que seria desejável que esta configuração fosse um acréscimo à configuração sem funil de iões para que quando for necessário analisar um analito com uma razão massa/carga mais leve, a configuração sem funil de iões possa ser utilizada. Dimensionou-se então o orifício de saída para 2 mm, como na configuração sem funil de iões e acrescentaram-se 33 eletrodos de 1 mm (espessura mais razoável para produção comparativamente à configuração com funil de iões 1) cujo diâmetro interno do furo começa a 28 mm e diminui até aos 2 mm.

Na configuração com funil de iões 1, os eletrodos encontram-se espaçados com 0,5 mm e pressão de 6-7 mbar, existindo por este motivo a possibilidade de ocorrerem descargas indesejadas nesta zona pelo que se aumentou o espaçamento entre eletrodos para 1 mm.

O primeiro elétrodo do funil de iões encontra-se com uma tensão estática a 300 V, tendo os restantes um potencial variável ao longo do tempo.

Capítulo 3

SIMULAÇÃO

De forma a simular a trajetória das partículas no Drift Tube e no Drift Tube + Funil de iões, recorreu-se ao software SIMION que permite definir campos elétricos e magnéticos no espaço e a geometria dos eletrodos possibilitando simular a trajetória de partículas carregadas. O SIMION resolvendo a equação de Laplace, calcula o potencial do meio dividindo o volume do espaço em partes e considerando o potencial a que os eletrodos estão sujeitos.

O SIMION permite que a geometria dos eletrodos seja importada a partir de ficheiros CAD, em que posteriormente são definidos os potenciais em cada eletrodo. Simula a trajetória das partículas, cujas condições iniciais foram definidas, e consegue exportar num ficheiro de texto informações da trajetória, como a velocidade das partículas num dado período de tempo. Permite ainda estabelecer algumas condições de colisão, através da programação das mesmas em LUA.

De forma a simular a trajetória das partículas recorreu-se ao código LUA disponibilizado pelo SIMION do modelo de colisão de esferas rígidas e do funil de iões.

3.1 Modelo de Esferas Rígidas

Quando uma esfera de massa m_1 colide elasticamente com outra esfera de massa m_2 com uma energia E , em que a soma dos seus raios é representada por d , o parâmetro de impacto b e a secção eficaz diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ são dados pelas equações 3.1 e 3.2 [14]:

$$b = d \cos \frac{\theta}{2} \quad \text{Equação 3.1}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{1}{4} d^2 \quad \text{Equação 3.2}$$

Aproximando as moléculas em estudo a esferas rígidas, é possível utilizar este modelo de colisão para estimar as colisões existentes no drift tube.

É de notar que o código do modelo de colisão de esferas rígidas tem algumas premissas:

- As colisões entre íões seguem o modelo de esferas rígidas.
 - A energia é transferida apenas durante as colisões.
 - As colisões são elásticas
 - O gás background não tem carga (é neutro).
 - A velocidade do gás background segue a distribuição de Maxwell-Boltzmann.
- O gás background não é afetado pelas colisões

3.1.1 Validação do modelo de Esferas Rígidas

Quando se consideram colisões atômicas na aproximação binária elástica, a sua interação pode ser nuclear (do tipo puramente Coulombiano) ou eletrônicas. [15]. Na Figura 8 encontra-se representada uma colisão entre dois átomos, onde um átomo 1 com um número atômico Z_1 , massa atômica m_1 e com uma energia cinética inicial E (E_c se for considerado o referencial de centro de massa) colide com um átomo 2 com um número atômico Z_2 e massa atômica m_2 .

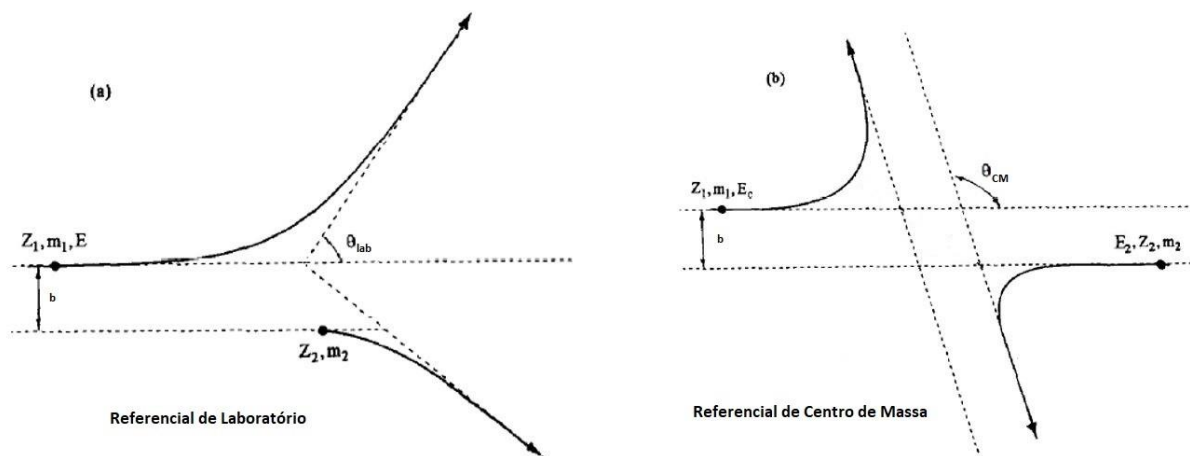


Figura 8 - Representação do referencial de Laboratório e de Centro de Massa da colisão entre dois átomos (Z_1 e Z_2), adaptado de [16]

No tratamento experimental e analítico destas colisões é possível considerar o referencial de laboratório onde o ponto de relação de movimento é a posição inicial de uma das partículas, ou o referencial de centro de massa que tem como ponto de relação de movimento o centro de massa do sistema das duas partículas. Tendo em consideração a conservação do momento pode-se demonstrar que a relação entre o ângulo de dispersão do sistema de laboratório (θ_{lab}) e o de centro de massa (θ_{CM}) é dada pela equação 3.3 [16]:

$$\tan \theta_{lab} = \frac{\sin \theta_{CM}}{\frac{m_1}{m_2} + \cos \theta_{CM}} \quad \text{Equação 3.3}$$

Considerando o potencial interatômico $V(R)$, dependente da soma dos raios dos átomos R , que provoca as colisões elásticas, o ângulo de dispersão do referencial de laboratório da colisão é dado pela equação 3.4, onde b é o parâmetro de impacto.

$$\theta_{CM} = \pi - 2b \int_0^{R_{min}^{-1}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V(R)}{E_c} - \frac{b^2}{R^2}}} d\left(\frac{1}{R}\right) \quad \text{Equação 3.4}$$

A integral mencionada acima possui uma solução analítica somente em determinados casos, como na interação pura de Coulomb. Contudo, essa solução é aplicável apenas em energias muito elevadas, na ordem de MeV, o que corresponde ao cenário característico da dispersão de Rutherford. Porém quando tratamos de baixas energias, o potencial de interação assume uma forma distinta. Nesses casos, o potencial de interação pode ser descrito como o produto do potencial de Coulomb e de uma função representada por $\phi(x)$ [17], tal como se encontra na equação 3.5.

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \phi\left(\frac{R}{a}\right) \quad \text{Equação 3.5}$$

$$a = \frac{0,8853a_0}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}}, \text{ onde } a_0 \text{ representa o raio de Bohr.} \quad \text{Equação 3.6}$$

Para calcular o potencial interatômico $V(R)$ existem várias aproximações de $\phi(x)$. Recorreu-se à aproximação de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) [18] presente na equação 3.7.

$$\phi(x) = 0,18175e^{-3,1998x} + 0,50986e^{-0,94229x} + 0,28022e^{-0,40290x} + 0,028171e^{-0,20162x}$$

Equação 3.7

É possível simplificar a equação 3.4 para o cálculo de θ_{CM} através de uma aproximação numérica, neste caso através da quadratura de Mehler que se encontra na equação 3.8.

$$\theta_{CM} = \pi - \frac{2\pi b}{aNx_0} \sum_{j=1}^{N/2} H\left(\cos \frac{2j-1}{2N} \pi\right),$$

$$H(u) = \sqrt{\frac{1 - u^2}{1 - \frac{\phi(x_0/u)}{(x_0/u)\epsilon} - \left(\frac{b/a}{x_0/u}\right)^2}}$$

$$\epsilon = \frac{am_2E}{(m_1+m_2)Z_1Z_2e^2} \quad \text{Equação 3.8}$$

De forma a validar e comparar o modelo de colisão de esferas rígidas, equiparou-se este modelo com outro modelo mais realista, nomeadamente o de colisões binárias. Este só funciona para átomos, pelo que se testou com átomos que correspondessem em massa às moléculas em estudo de forma a que pudéssemos validar o uso do modelo de esferas rígidas para moléculas. Considerou-se uma colisão binária clássica entre N₂ e o TCA, visto que a colisão entre estas duas moléculas será simulada no SIMION. Como este modelo assume que a colisão é entre átomos, considerou-se o átomo de silício e o átomo de ástato que têm massas similares às moléculas de N₂ e de TCA respetivamente. Fez-se um estudo para averiguar a que energia as moléculas colidem na simulação quando iniciam a trajetória a 0,1 eV verificou-se que alcançam no máximo 3 eV durante a trajetória. Calculou-se o ângulo de dispersão e o parâmetro de impacto para ambos os modelos com a energia cinética a que a simulação iniciará, com o máximo de energia que chegou numa das simulações e com um valor de energia cinética intermédio.

Na Figura 9, é possível observar o erro relativo entre o ângulo de dispersão calculado através do modelo de esferas rígidas e através do modelo de colisões binárias. Verifica-se que para ângulos de dispersão pequenos o erro relativo é bastante considerável pelo que se conclui que o modelo de esferas rígidas não se ajusta ao modelo de colisões binárias para ângulos de dispersão pequenos, enquanto que para ângulos de dispersão altos há um bom ajuste.

É de notar que ambos os modelos têm em consideração esferas/átomos, porém o que é pretendido simular são moléculas, pelo que na realidade esta comparação pode não traduzir resultados verdadeiros.

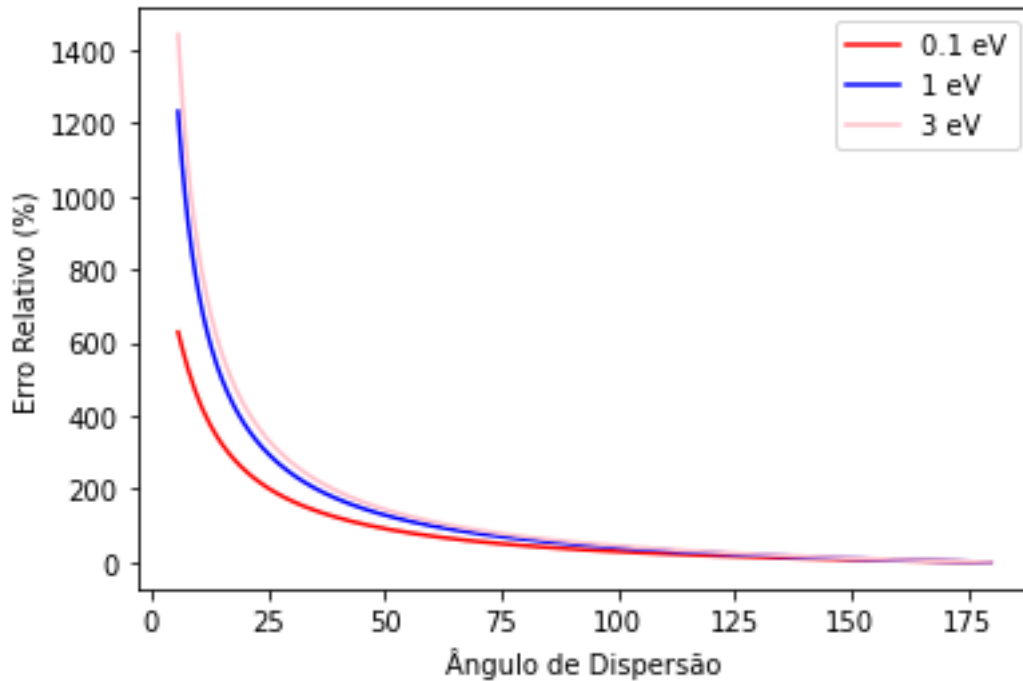


Figura 9 - Erro relativo do ângulo de dispersão calculado através da aproximação ao potencial ZBL e com Modelo de Esferas Rígidas em função do ângulo de dispersão para energias de 0,1 eV, 1 eV e 3 eV

3.2 Funil de iões

O funil de iões trata-se de um aparelho composto por uma série de eléctrodos dispostos em forma de anéis empilhados numa configuração em forma de funil. Através do código disponibilizado pelo SIMION, foram aplicadas tensões RF nos eléctrodos que compõem o funil de iões e as colisões entre as partículas seguiram o modelo de esferas rígidas também descrito na secção anterior.

A diferença de potencial $V(k)$ aplicada nos eléctrodos do funil num determinado momento "t" obedece à seguinte fórmula:

$$V(k) = (_DC_offset_1 + dcgradient * (k-1)) + _RF_amplitude * (-1)^{k-1} \sin(t * \omega + \theta)$$

Equação 3.9

Nesta fórmula, "k" varia de consoante o número do eléctrodo. A diferença de potencial aplicada a cada eléctrodo depende de determinadas constantes, nomeadamente $_DC_offset_1$ (tensão do primeiro eléctrodo), $dcgradient$ (amplitude DC a que cada eléctrodo se encontra), ω (frequência em radianos por microssegundos), θ (fase do eléctrodo em radianos) e $_RF_amplitude$ (amplitude RF definida pelo utilizador).

Capítulo 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão descritos os resultados da simulação em SIMION. Para isso realizaram-se várias simulações de forma a comparar e a melhorar a corrente iónica à saída das três configurações projetadas, uma configuração sem funil de iões e duas configurações com funil de iões descritas no capítulo Capítulo 2. Para esse efeito fez-se variar vários parâmetros que serão descritos nos próximos subcapítulos.

De forma a realizar a simulação foi criado um eléctrodo após o orifício final que simula a zona de extração, é neste eléctrodo que os iões colidem após a passagem pelo orifício final. As peças de teflon, que isolam eletricamente os eléctrodos não foram incluídas na simulação visto que o SIMION considera que todas as peças importadas são eléctrodos condutores.

Em todas as simulações realizadas as partículas saíram após o último eléctrodo da zona intermédia descrita na subsecção 2.1.2, ou seja, no primeiro eléctrodo do drift-tube. O objetivo foi simular a trajetória das partículas após a ionização. Não foi simulada a descarga descrita na secção 2.1.1 nem a passagem de iões da zona de descarga, para a zona intermédia e posteriormente para o drift-tube. Considerou-se que o gás presente no drift-tube era azoto (massa 28 g/mol), visto que a fonte de ionização foi projetada para utilizar azoto como gás percursor. Foi considerada a secção eficaz de colisão de hélio-hélio ($2,27 \times 10^{-18} \text{ m}^2$) predefinida pelo código do SIMION utilizado e a pressão de 1 torr (1,3328 mbar) também predefinida pelo código.

Foi calculada a transmissão em várias simulações, sendo que a transmissão é a razão dos iões criados no SIMION pelos iões que passam no orifício final. Esta varia entre 0, quando nenhum ião passa o orifício final, e 1, quando todos os iões criados na simulação passam o orifício final.

Durante as simulações considerou-se que o eixo de simetria da fonte de ionização correspondia ao eixo x. Neste contexto, abordaremos a configuração de um referencial com eixos

em que as partículas são direcionadas ao longo do eixo x, com a fonte de ionização centrada em $y=0$ e $z=0$.

A molécula de 2,4,6-Tricloroanisol (TCA)[19] é um composto com a fórmula química $C_7H_5Cl_3O$, cuja massa exata (média da massa do composto medida) é de 209,940598 g/mol. O CEFITEC tem ao longo dos anos realizados vários trabalhos na deteção desta molécula pelo que seria interessante que este equipamento também a conseguisse detetar, pelo que serão realizados testes que permitam verificar se as fontes de ionização são capazes de detetar iões deste composto, pelo que se realizaram estudos para verificação de funcionamento do equipamento para uma massa de 210 amu.

Não foi possível determinar a dispersão em energia à saída do orifício final, porque no caso das configurações com funil de iões o último eléctrodo do funil de iões tem uma tensão variável ao longo do tempo, pelo que as partículas ao passarem o orifício final são atraídas e repelidas por este, afetando a sua energia e ângulo de saída. Tentou realizar-se este estudo para a configuração sem funil de iões e para a configuração com funil de iões 2 colocando o eléctrodo com um potencial estático e diâmetro maior que o orifício final, porém por falta de tempo não foi possível configurar o código para desligar após a passagem das partículas.

4.1 Configuração sem funil de iões

Na Figura 10 é possível observar uma das simulações utilizando a configuração descrita e dimensionada na subsecção 2.1. Realizaram-se várias simulações no SIMION com esta configuração que serão descritas nas próximas subsecções.

Não foi possível realizar o estudo da dispersão angular e em energia visto que, por falta de tempo não foi possível configurar o código que modela as colisões entre partículas para desligar após a passagem das partículas no orifício final.

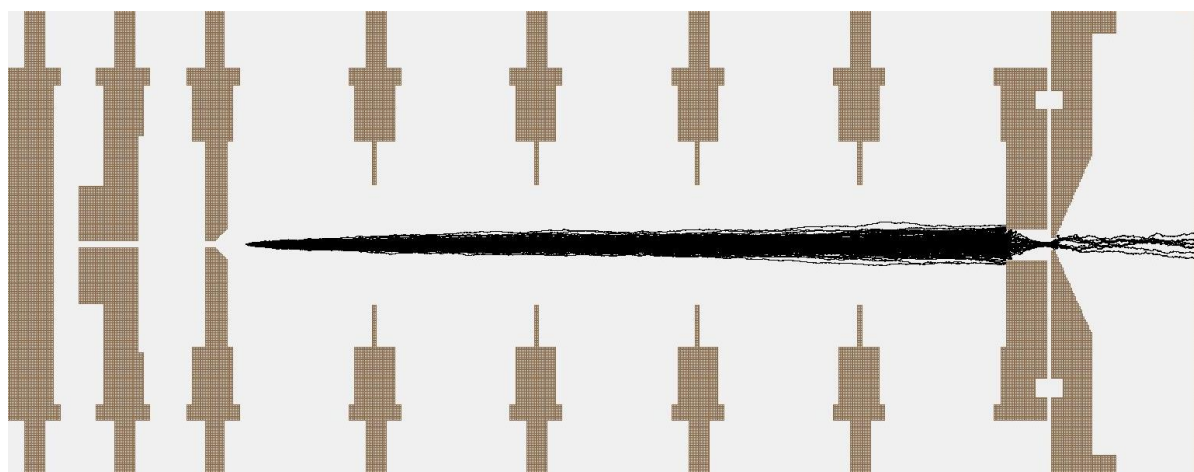


Figura 10 - Simulação realizada em SIMION para a configuração da fonte de ionização sem funil de iões.

4.1.1 Verificação do funcionamento

De forma a verificar o funcionamento da configuração sem funil de iões, criaram-se 10000 iões. A massa das partículas seguiu uma progressão aritmética de razão 30, pelo que, a massa dos iões variou de 30 a 300 amu. Tentaram recriar-se as condições ideais de funcionamento da fonte de ionização, ou seja, as partículas partiram 3 mm após o primeiro eléctrodo do drift-tube, de um ponto localizado no centro da fonte, tal como se encontra ilustrado na Figura 10, com uma energia no eixo x correspondente a 0,1 eV. Registou-se a transmissão de iões em função da massa. Os resultados obtidos encontram-se na Figura 11.

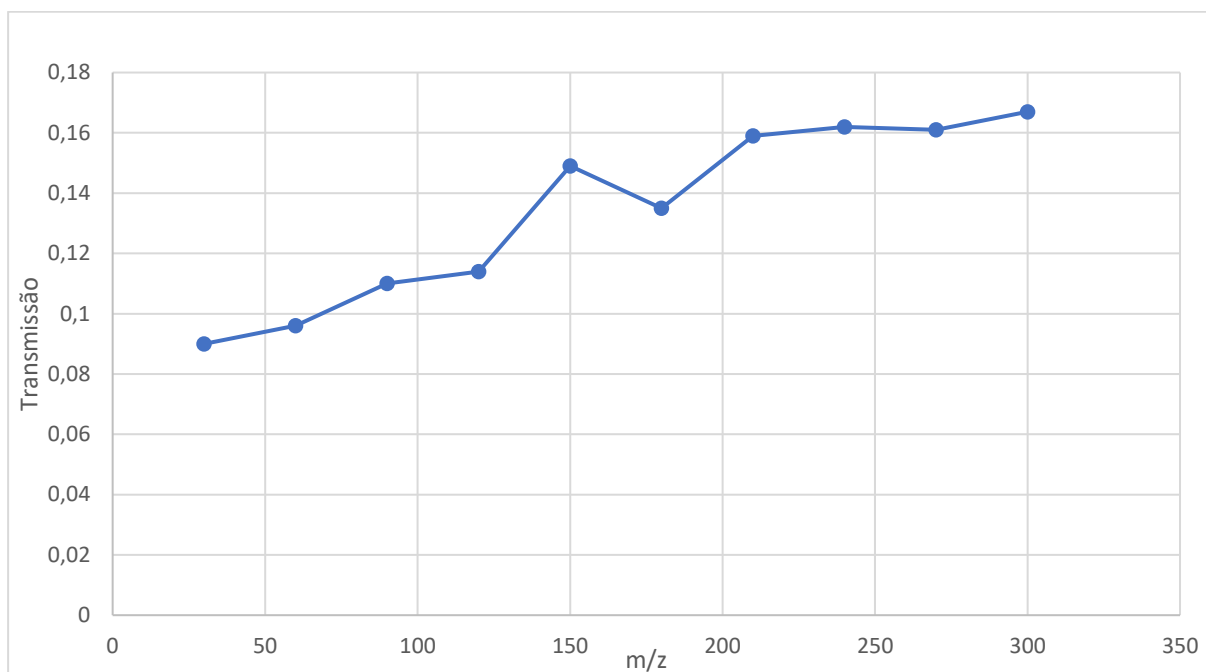


Figura 11 - Transmissão em função da massa/carga dos íões para condições ideais da configuração sem funil de íões para verificação do funcionamento da fonte de ionização

Após a verificação de funcionamento do equipamento em condições ideais, criou-se uma região de ionização com o objetivo de reproduzir resultados mais próximos da realidade onde as partículas saíam aleatoriamente de um volume de ionização cilíndrico com 5 mm de raio e de altura, que distou 3 mm do início do drift-tube e encontrava-se centrado. Realizaram-se 5 simulações com estas condições onde se registou a transmissão em função da massa, a média dos dados registados encontram-se na Figura 12. Tal como esperado registou-se um decréscimo na transmissão. É possível concluir que o funcionamento da fonte de ionização não depende substancialmente da massa do analito e que existe uma transmissão à volta de 10%. As barras de erro, são o desvio máximo dos valores de transmissão registados à média das 5 simulações. É de notar que para a molécula de estudo que tem uma relação massa/carga de 210 amu, a transmissão foi de 11%.

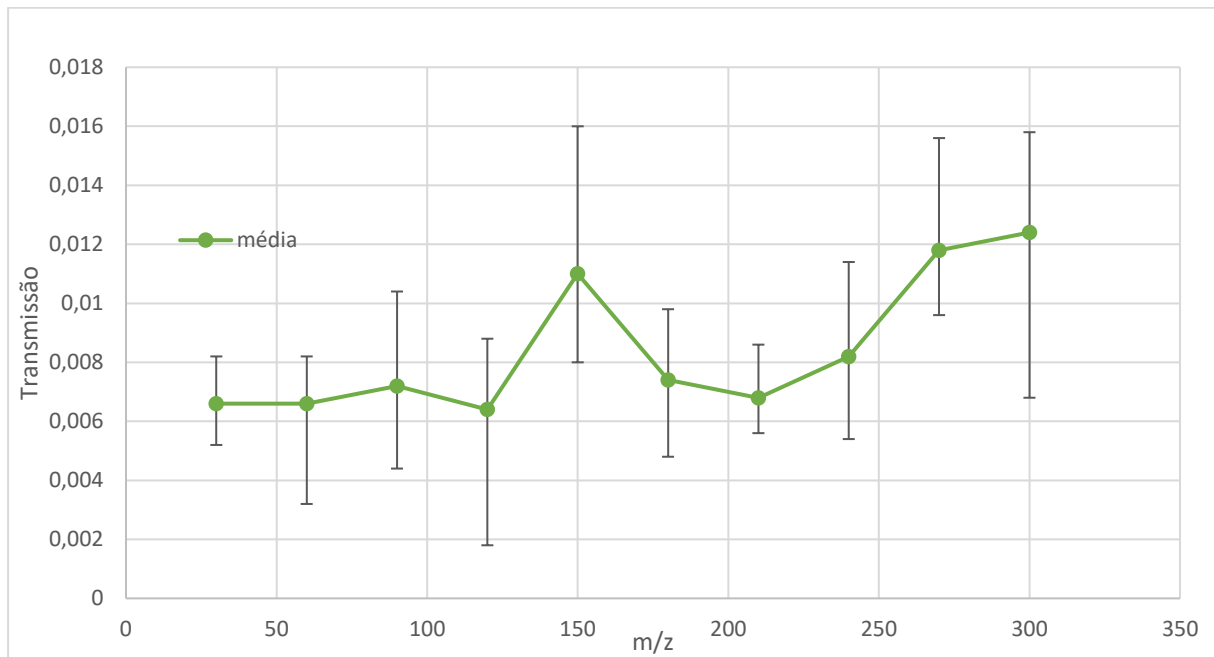


Figura 12 - Transmissão em função da massa/carga em função para verificação de funcionamento da fonte de ionização, foram efetuadas 5 simulações.

4.2 Configuração com funil de iões

Devido à baixa transmissão na corrente de iões da configuração sem funil de iões (cerca de 10%) no orifício de saída, realizaram-se duas configurações que se encontram descritas na subsecção 2.2 da fonte de ionização com o objetivo de otimizar a corrente iónica à saída do orifício final.

4.2.1 Configuração com funil de iões 1

Com a configuração projetada e dimensionada na subsubsecção 2.2.1.1, foram realizadas várias simulações, na Figura 13 encontra-se um exemplo de uma simulação efetuada com esta configuração. Nas próximas subsubsecções serão descritos os estudos que se efetuaram.

Primeiramente foi realizado um estudo com 150 partículas, porém os resultados obtidos tinham uma incerteza associada elevada pelo que de forma a aumentar a estatística foram geradas 1500 partículas com uma energia inicial de 0,1 eV segundo o eixo em que as partículas se movem. A massa destas partículas seguiu uma sequência aritmética de razão 30, sendo que o primeiro termo é de 30 e o último é 300, ou seja, a massa das partículas variou entre os 30 e 300 amu. As partículas foram geradas a partir de um volume de ionização cilíndrico com 5 mm

de raio e de altura, que distou 3 mm do início do drift-tube à semelhança das simulações anteriores.

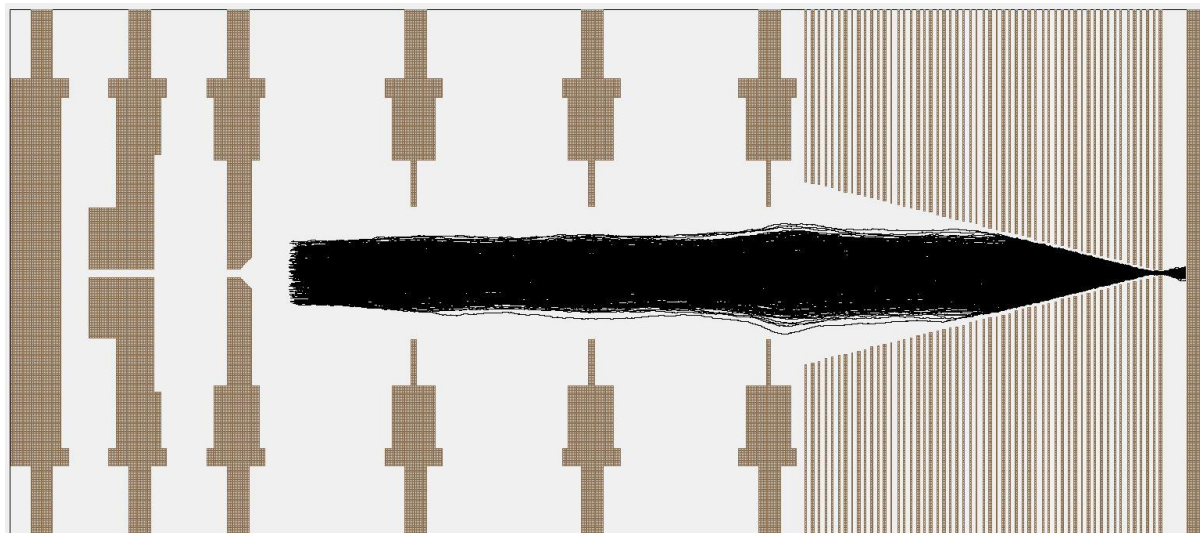


Figura 13 – Simulação realizada no SIMION para a configuração com funil de íons 1, os eletrodos têm a espessura e espaçamento de 0,5 mm porém devido à baixa resolução do SIMION aparentam ter dimensões diferentes.

4.2.1.1 Variação da frequência RF

Foi realizado um estudo da frequência e da amplitude da onda RF, de forma a avaliar a influência destes dois parâmetros na transmissibilidade dos íons em função da razão massa/carga. Começou-se por fixar a amplitude e variar a frequência RF, na Figura 14 é possível observar os resultados experimentais. Verifica-se que para estas condições a deteção de amostras com massas pequenas é mais difícil que para massas superiores. Existem condições de otimização da frequência e de amplitude, ou seja, consoante a razão massa/carga, a amplitude e frequência existe uma transmissão maior. Este estudo foi realizado para a amplitude de 140, 150 e 160 V. Na Figura 14 estão representados os resultados para amplitude de 150 V. Concluiu-se que a frequência ótima para esta gama de amplitudes é de 8-10 MHz.

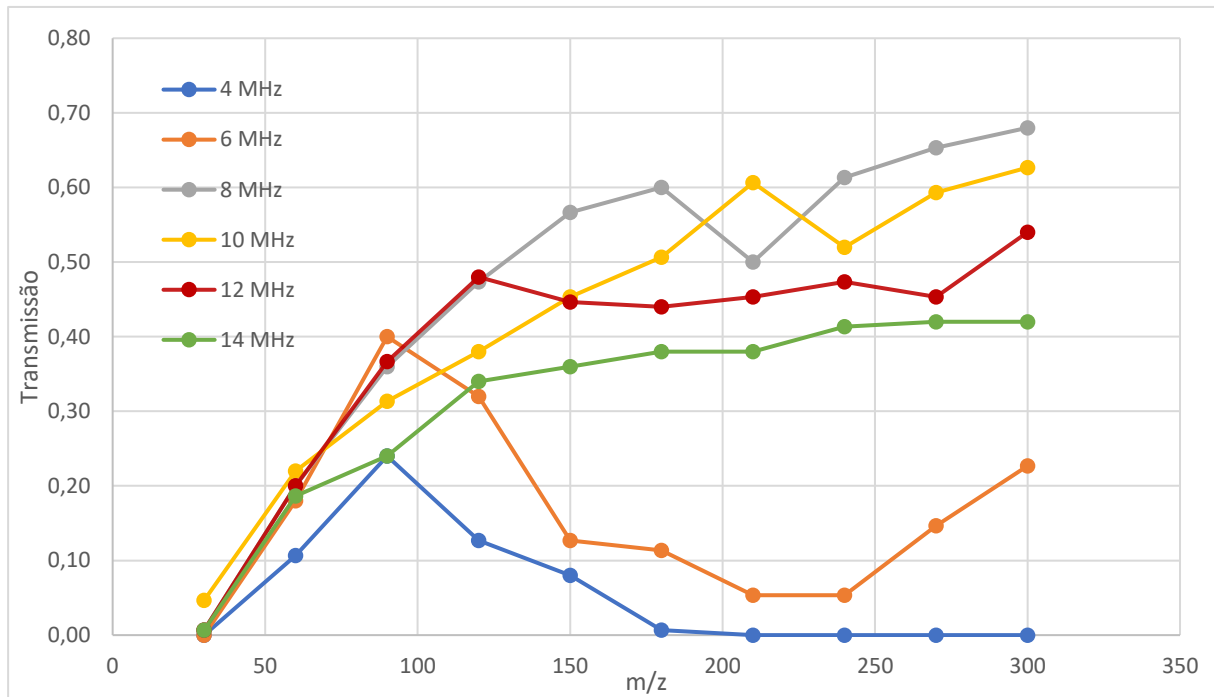


Figura 14 - Estudo da variação da frequência RF para uma amplitude de 150 V

4.2.1.2 Variação da amplitude RF

Como nos resultados anteriores a frequência com maior transmissão é de 8 MHz, fez-se um estudo da variação das amplitudes para esta frequência. Na Figura 15 é possível observar estes resultados. Dependendo da razão massa/carga que é pretendida detetar é possível escolher uma das amplitudes.

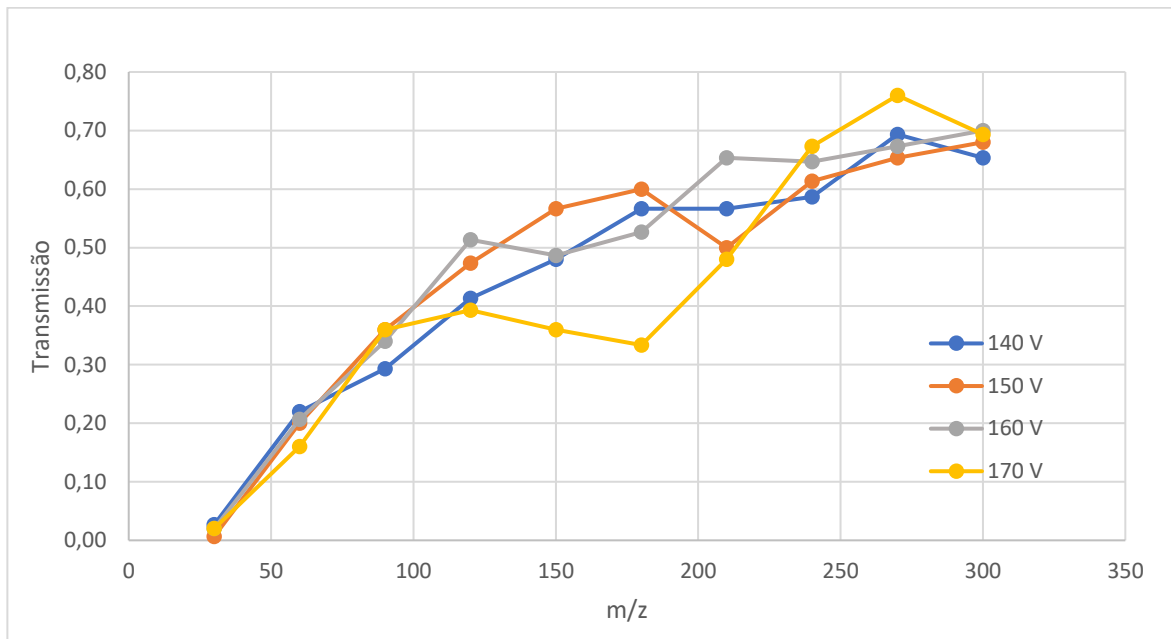


Figura 15 - Estudo da variação da amplitude para uma frequência de 8 MHz

4.2.1.3 Variação da pressão

Foi utilizado 1 torr (1,3328 mbar) para as simulações anteriores, visto que este valor estava predefinido no código, porém a fonte de ionização tem um regime de operação de vácuo na ordem dos 5-6 mbar pelo que se decidiu efetuar um estudo do efeito da variação da pressão na transmissão dos iões.

Na Figura 16, é possível verificar que para a pressão de 1,33 mbar, 3 mbar e 5 mbar o perfil da curva é idêntico, porém para 0,5 mbar há uma seleção em massa/carga maior comparativamente às pressões supramencionadas. É possível verificar que a transmissão é superior para analitos com uma razão massa/carga superior a 200 amu do que para massa inferior. É de notar que esta pode ser também uma estratégia de otimização do equipamento visto que a transmissão depende da pressão.

Verificou-se que para 6 mbar, a transmissão é nula, o teste experimental neste caso seria bastante útil para perceber se se observam resultados diferentes daqueles que se encontram a ser simulados.

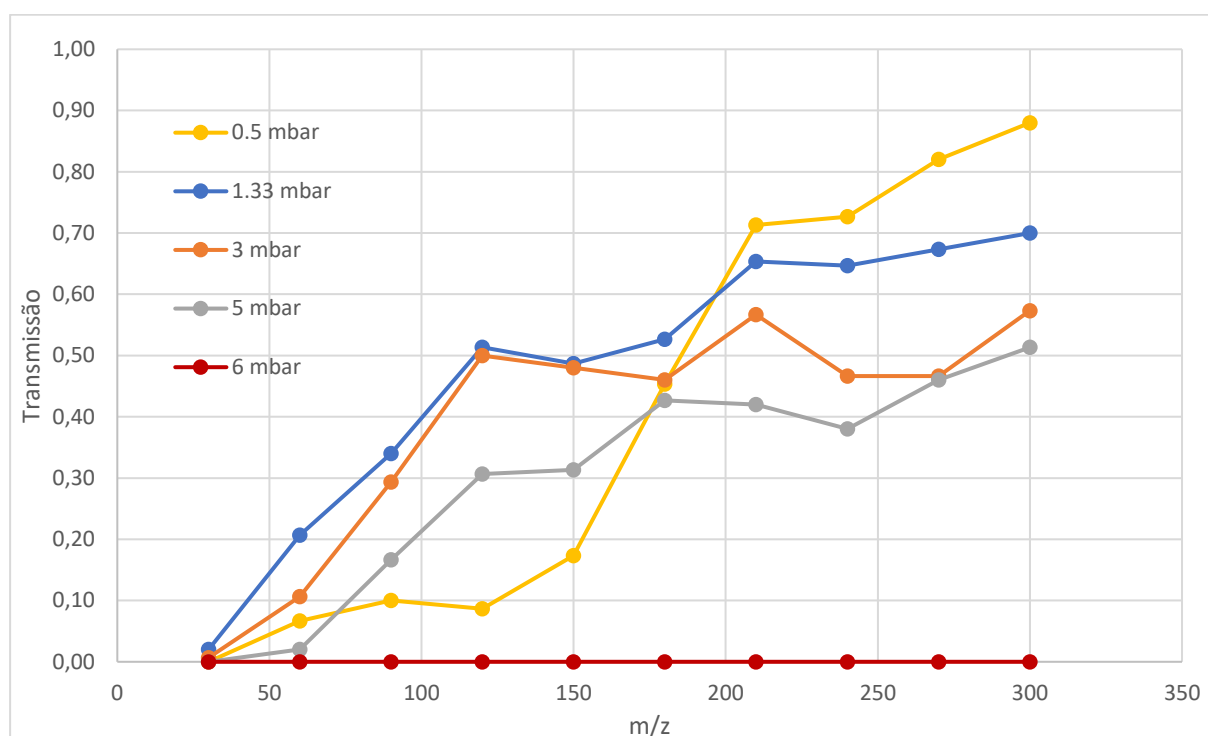


Figura 16 - Estudo da variação da pressão

4.2.1.4 Otimização molécula TCA

Como existe variação, dos parâmetros ótimos segundo a massa, decidiu-se otimizar os parâmetros para um composto em específico, o TCA.

Realizou-se este estudo para uma massa/carga de 210 amu, os resultados obtidos encontram-se na Figura 17, pode-se observar que para uma frequência RF de 8 MHz e uma amplitude de 160 V existe um máximo na transmissão. É possível verificar que para frequências mais baixas a transmissão reduz drasticamente.

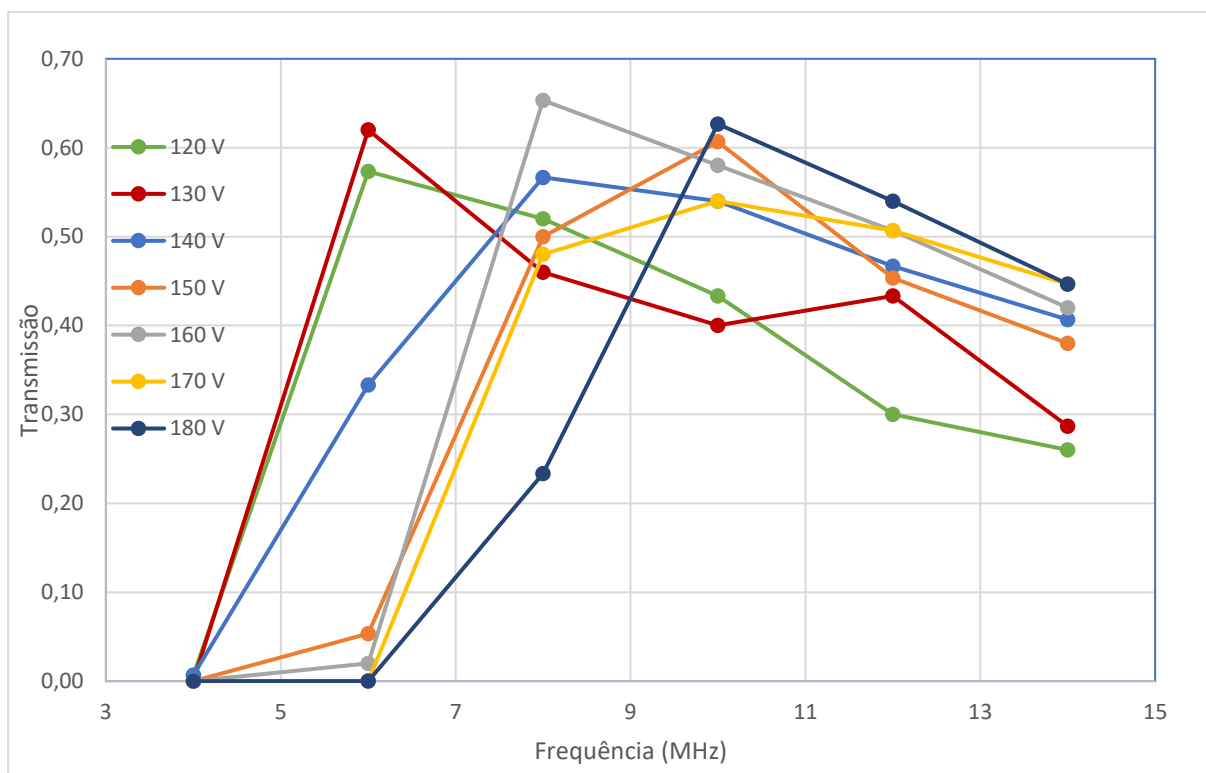


Figura 17 - Otimização da frequência e da amplitude para medição da molécula de TCA

4.2.1.5 Precisão da simulação

Na subsecção 4.2.1.4, foi observado que para a molécula de TCA a transmissão máxima seria obtida com uma frequência de 8 MHz e uma amplitude 160V. De forma a estimar a incerteza da simulação repetiu-se a simulação 5 vezes. Na Figura 18 é possível observar a média das cinco medições efetuadas para cada razão massa carga, bem como as barras de incerteza que indicam o desvio máximo das medidas efetuadas com a média das mesmas.

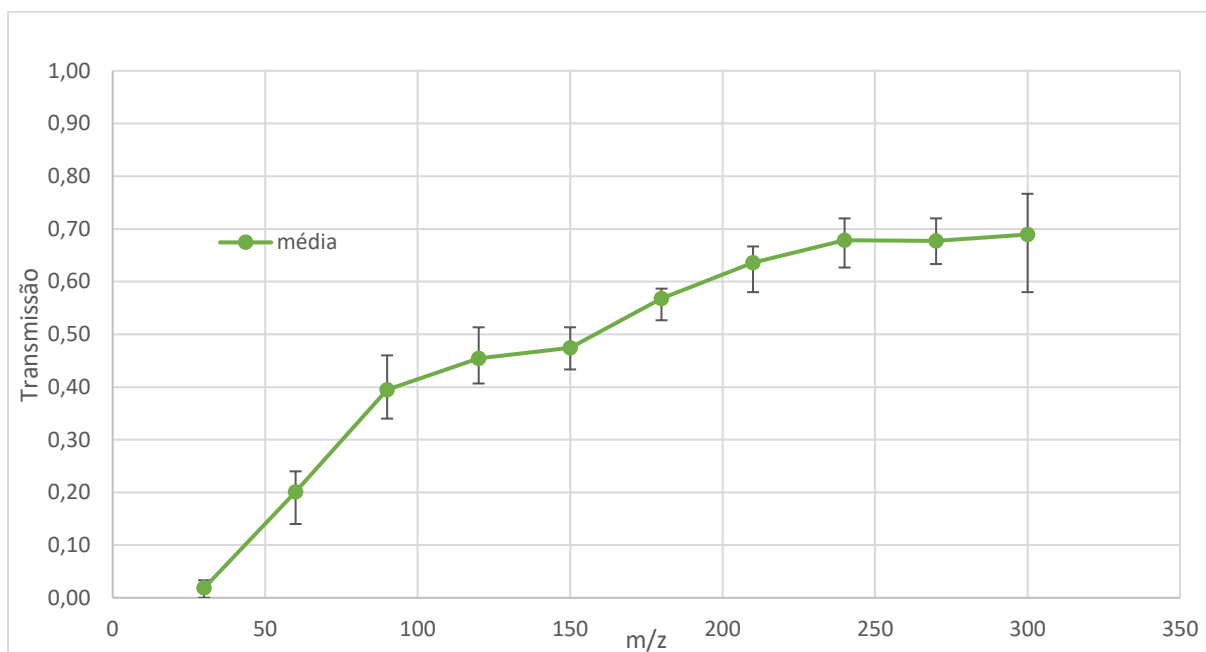


Figura 18 - Teste de repetibilidade de resultados para a configuração com funil de íons a uma amplitude de 160V e frequência de 8MHz

4.2.2 Configuração com funil de íons 2

Recorrendo à configuração descrita e dimensionada na subsubsecção 2.2.1.2, realizou-se o estudo da trajetória das partículas carregadas. Por falta de tempo não foi possível efetuar um estudo tão detalhado como na configuração com funil de íons 1.

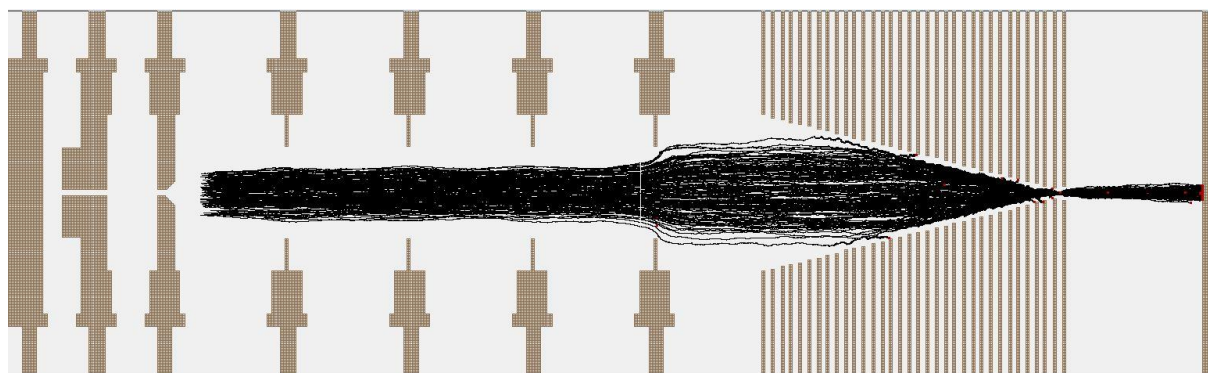


Figura 19 Simulação realizada no SIMION para configuração com funil de íons 2

À semelhança das simulações efetuadas anteriormente criou-se um volume de ionização cilíndrico com 5 mm de raio e de altura, que distou 3 mm do início do drift-tube e foram geradas 1500 partículas com uma energia inicial de 0,1 eV segundo o eixo em que as partículas se movem. A massa destas partículas seguiu uma sequência aritmética de razão 30, sendo que

o primeiro termo é de 30 e o último é 300, ou seja, a massa das partículas variou entre os 30 e 300 amu.

Como a transmissão ronda os 98% para massas pesadas, isto inclui a massa 210, a massa da molécula de TCA. Optou-se por não realizar um estudo extensivo da otimização da frequência e amplitude para esta massa visto que para os parâmetros estudados a transmissão é bastante boa.

4.2.2.1 Variação da frequência RF

Variou-se a frequência entre 0,5 MHz e 3 MHz, para amplitudes entre os 30 e 90 V. A amplitude de 90 V obteve uma transmissão mais elevada pelo que os resultados encontram-se na Figura 20. É possível verificar um aumento da transmissão face à configuração 1. Nesta configuração é possível denotar uma seletividade de massas mais vincada, onde a partir da massa/carga 50 a transmissão cresce abruptamente estabilizando para massas mais maiores.

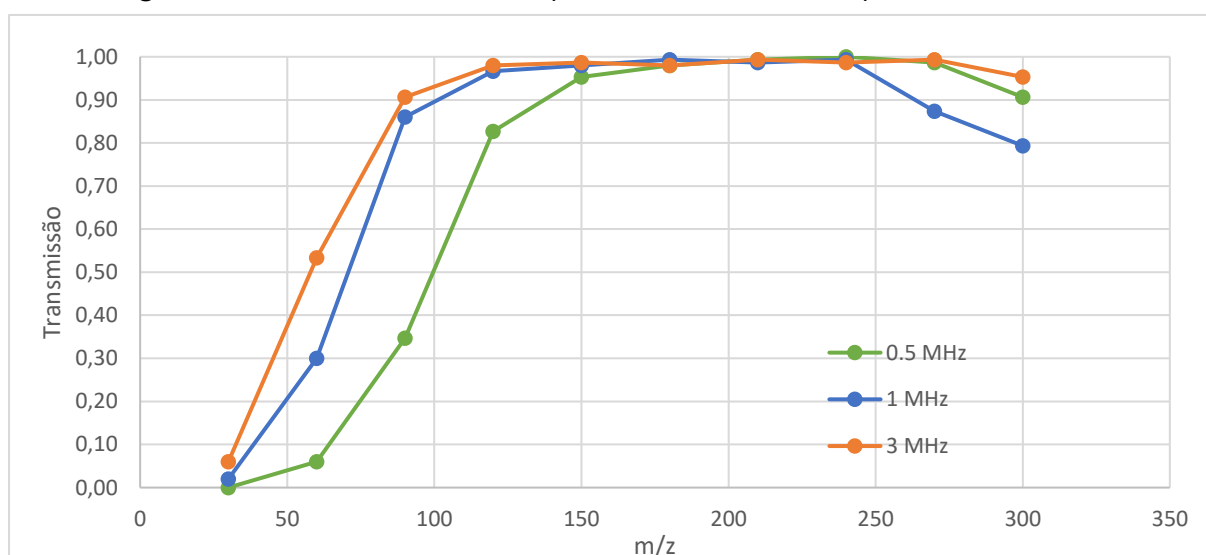


Figura 20 Estudo da frequência RF para uma amplitude de 90 V

4.2.2.2 Variação da amplitude RF

Como nos resultados anteriores a frequência com maior transmissão é de 3 MHz, fez-se um estudo da variação das amplitudes para esta frequência. Na Figura 21 é possível observar estes resultados. Conclui-se que a amplitude e frequência que maximizam a transmissão nesta

configuração é 90 V e 3 MHz respectivamente. Comparando com a configuração anterior, a amplitude e frequência necessárias para otimizar a configuração são mais baixas.

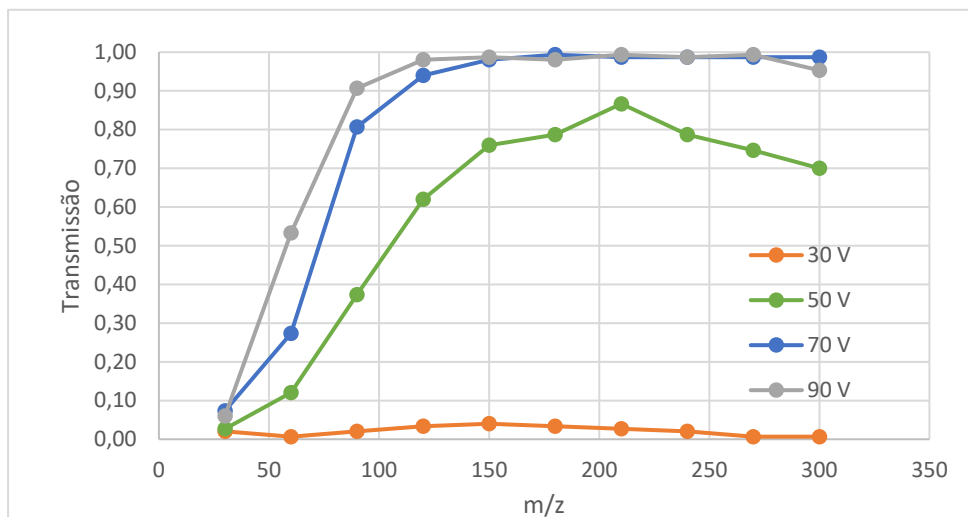


Figura 21 Estudo da variação da amplitude com uma frequência de 3 MHz

Capítulo 5

CONCLUSÃO

Com este trabalho, foi feito o design de um protótipo de uma fonte de ionização. Através de um programa de CAD foi possível desenhar três configurações para a fonte de ionização com e sem funil de iões. Através do software SIMION, foi possível simular a trajetória das partículas carregadas, nas três configurações e compará-las. Foi possível observar que as configurações com funil de iões, com a frequência e amplitude RF otimizadas, apresenta uma transmissão no orifício de saída superior à sem funil de iões para razões de massa/carga superiores a 60 amu.

Foi também possível registrar a transmissão da configuração com funil de iões para diferentes razões massa/carga, amplitudes e frequências RF e no caso da configuração 1 otimizar para uma molécula em específico, nomeadamente o TCA. Com este estudo, é possível verificar que na otimização do funil de iões a alteração da frequência implica um ajuste na amplitude, para obtermos uma maior transmissão. Para a configuração com funil de iões 1, a frequência deve rondar os 8-10 MHz e a amplitude 140-160 V, enquanto que para a configuração com funil de iões 2 a frequência deve rondar os 3 MHz e a amplitude 90 V.

Conclui-se que a configuração com funil de iões é melhor que a configuração sem iões na medição de compostos com razão massa carga superior a 60 amu. Comparando as duas configurações com funil de iões conclui-se que a configuração 2 apresenta uma transmissão maior que poderá resultar da abertura do orifício de saída visto que o seu orifício tem 2 mm de diâmetro enquanto que o da configuração 1 apenas 0,5 mm de diâmetro, o que facilitará a maquinação de um funil de iões.

Capítulo 6

TRABALHO FUTURO

Existem várias direções futuras que podem ser exploradas para aprimorar ainda mais a eficiência e a capacidade analítica do nosso sistema, tais como:

- **Aperfeiçoamento da Fonte de Ionização:** Continuar a pesquisa e desenvolvimento para aperfeiçoar ainda mais a fonte de ionização. Isso inclui a exploração de materiais e geometrias alternativas para otimizar o desempenho, bem como a consideração de novas abordagens para alcançar uma ionização mais eficiente.
- **Design e implementação da parte elétrica do sistema:** Desenhar e implementar um circuito elétrico que permita ligações elétricas entre componentes eletrônicos de forma a promover estabilidade e precisão nas tensões aplicadas aos eletrodos.
- **Aperfeiçoamento do sistema de entrada do reagente e do analito:** Continuar a aprimorar o sistema de entrada de gás e de vapor de água para garantir um fornecimento estável e preciso do analito e do reagente respectivamente.
- **Avaliação do Sistema de Vácuo:** Ter em consideração as necessidades de vácuo que o sistema necessita e consoante as necessidades escolher bombas de vácuo que as satisfaçam. Sugere-se também que se acrescentem manômetros de pressão na fonte de ionização de forma a que se possa caracterizar o sistema durante o funcionamento da mesma.
- **Simulação:** Sugere-se que se varie na simulação os potenciais aplicados aos eletrodos para perceber se existe alguma combinação que otimize a transmissão do sistema.
- **Desenvolvimento de Algoritmos de Simulação:** Desenvolver um algoritmo de simulação que modele as colisões de partículas na fonte de ionização. Isso

ajudará a compreender melhor os processos fundamentais envolvidos e a refinar as condições de ionização.

- Determinação da secção eficaz de colisão de forma a tornar a simulação mais aproximada da realidade.
- Validação Experimental: Após a construção da fonte de ionização, realizar testes em ambiente experimental, para verificar o funcionamento da fonte de ionização. Após os resultados experimentais, pode validar-se ou não as simulações e ajustar o código de acordo com os resultados experimentais. Isso contribuirá para a confiabilidade das simulações e para a melhoria contínua do sistema.
- Determinar a dispersão angular e em energia: Sugere-se que nas configurações com funil de iões se coloque um elétrodo com potencial estático que tenha um diâmetro superior ao do orifício final de forma a não afetar a transmissão dos iões e que quando a partícula atravesse o orifício de saída o código que modela as colisões seja desligado para que se estude a dispersão angular e em energia após a passagem dos iões no orifício final na zona intermédia, quando a pressão é baixa. Sugere-se que a partir do estudo da dispersão angular e em energia se determine a localização do orifício de entrada do espectrómetro de massa.

Em suma, para trabalho futuro, é sugerido essencialmente a construção de todo o equipamento, efetuar ensaios de funcionamento e posteriormente a otimização do mesmo. Para realizar a otimização, o uso dos programas informáticos aplicados na elaboração deste trabalho terão um papel essencial, pelo que o trabalho experimental e o trabalho de simulação deverão complementar-se.

Capítulo 7

BIBLIOGRAFIA

- [1] E. de Hoffmann and V. Stroobant, "Mass Spectrometry Principles and Applications."
- [2] P. Domingues, A. Garcia, E. Skrzydlewska, and W. Łuczaj, "AACLifeSci Course Companion Manual Advanced Analytical Chemistry for Life Sciences Open for Submission-Frontiers in Molecular Biosciences Research Topic: Metabolomics Perspectives for Clinical Medicine View project L-arginine metabolism in Leishmania amazonensis View project." [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/329040300>
- [3] F. Sauli, "Collisional excitations and charge multiplication in uniform fields," in *Gaseous Radiation Detectors*, Cambridge University Press, 2014, pp. 129–159. doi: 10.1017/CBO9781107337701.007.
- [4] W. Lindinger, A. Hansel, and A. Jordan, "Mass Spectrometry and Ion Processes On-line monitoring of volatile organic compounds at pptv levels by means of Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry (PTR-MS) Medical applications, food control and environmental research," 1998.
- [5] M. Müller, F. Piel, R. Gutmann, P. Sulzer, E. Hartungen, and A. Wisthaler, "A novel method for producing NH₄⁺ reagent ions in the hollow cathode glow discharge ion source of PTR-MS instruments," *Int J Mass Spectrom*, vol. 447, Jan. 2020, doi: 10.1016/j.ijms.2019.116254.
- [6] W. Lindinger, A. Hansel, and A. Jordan, "Mass Spectrometry and Ion Processes On-line monitoring of volatile organic compounds at pptv levels by means of Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry (PTR-MS) Medical applications, food control and environmental research," 1998.
- [7] A. Hansela, A. Jordana, R. Holzinger, P. Prazellera, W. Vogelb, and W. Lindingera, "Proton transfer reaction mass spectrometry: on-line trace gas analysis at the ppb level*," 1995.

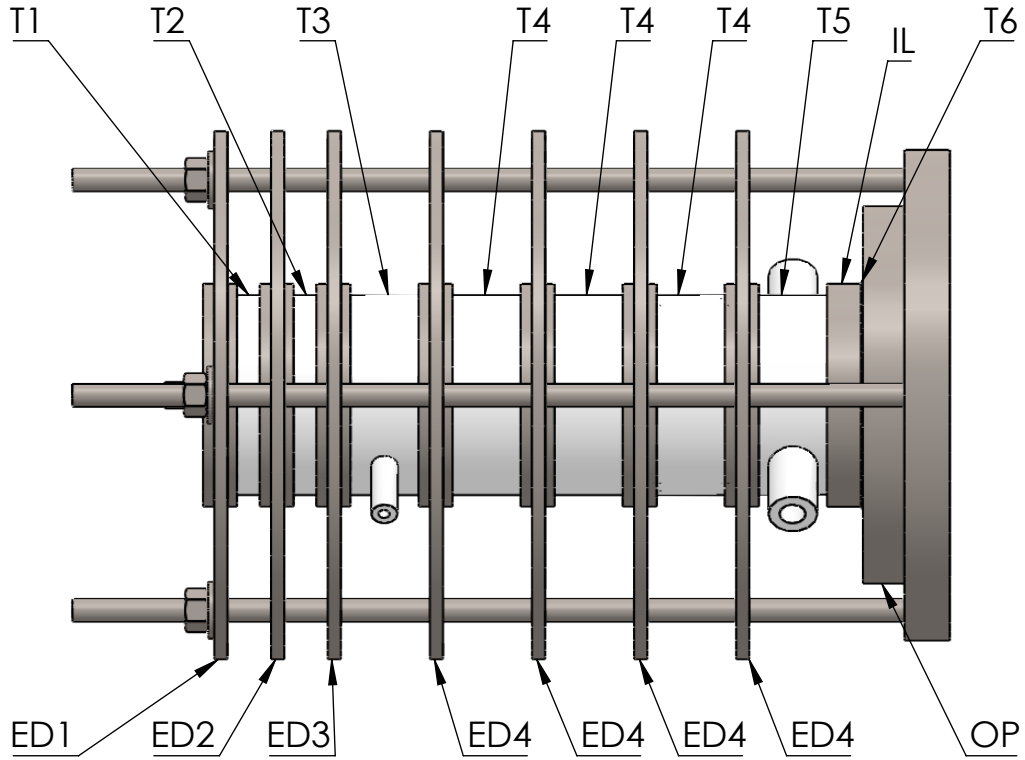
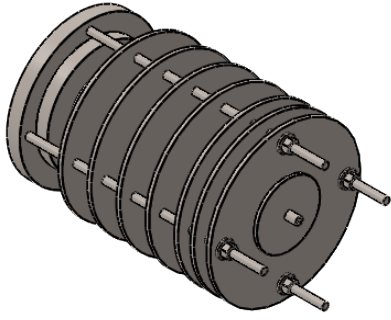
- [8] S. Inomata, H. Tanimoto, N. Aoki, J. Hirokawa, and Y. Sadanaga, "A novel discharge source of hydronium ions for proton transfer reaction ionization: Design, characterization, and performance," *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, vol. 20, no. 6, pp. 1025–1029, 2006, doi: 10.1002/rcm.2405.
- [9] N. Škoro, D. Marić, G. Malović, W. G. Graham, and Z. L. Petrović, "Electrical breakdown in water vapor," *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, vol. 84, no. 5, Nov. 2011, doi: 10.1103/PhysRevE.84.055401.
- [10] M. Hamden, "Gas Phase Ion-Molecule Reaction Rate Constants Through 1986. Yasumasa Ikezoe, Shingo Matsuoka, Masahiro Takebe and Albert Viggiano (eds). Maruzen Company Ltd, Tokyo. 1987. (viii) + 244 pp. US\$ 150.00," *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, vol. 3, no. 3, pp. iii–iii, Mar. 1989, doi: 10.1002/rcm.1290030312.
- [11] A. Moutinho, M. Silva, and M. Cunha, *Tecnologia de Vácuo*. 1980.
- [12] H. ZHU *et al.*, "Development of a SIMION-Simulated Ion Funnel Tube for Proton Transfer Reaction Mass Spectrometry," *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, vol. 46, no. 8, pp. e1868–e1873, Aug. 2018, doi: 10.1016/S1872-2040(18)61101-6.
- [13] R. T. Kelly, A. V. Tolmachev, J. S. Page, K. Tang, and R. D. Smith, "The ion funnel: Theory, implementations, and applications," *Mass Spectrom Rev*, vol. 29, no. 2, pp. 294–312, Mar. 2010, doi: 10.1002/mas.20232.
- [14] M. F. F. da Silva, "Secções eficazes numa colisão inelástica entre duas esferas," *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 30, no. 1, pp. 1301.1-1301.12, 2008, doi: 10.1590/S1806-11172008000100002.
- [15] W. Möller, "FUNDAMENTALS OF ION-SOLID INTERACTION - A Compact Introduction".
- [16] B. Yuan, F. C. Yu, and S. M. Tang, "A database method for binary atomic scattering angle calculation," 1993.
- [17] J. P. Biersack and J. F. Ziegler, "The Stopping and Range of Ions in Solids," in *Ion Implantation Techniques*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1982, pp. 122–156. doi: 10.1007/978-3-642-68779-2_5.
- [18] W. Eckstein', S. Hackel', D. Heinemann ', and B. Fricke, "Atoms, Molecules and Clusters Influence of the interaction potential on simulated sputtering and reflection data," 1992.
- [19] "National Center for Biotechnology Information. PubChem Compound Summary for CID 6884, 2,4,6-Trichloroanisole." Accessed: Sep. 12, 2023. [Online]. Available: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6884>

- [20] J. M. Lourenço, "The NOVAtesis LATEX Template User's Manual. NOVA University Lisbon. 2021." [Online]. Available: https://github.com/joaomlourenco/novathesis_word/raw/master/novathesis_word-FINAL-EN.pdf.

Capítulo 8

APÊNDICE 1

Desenhos Técnicos



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

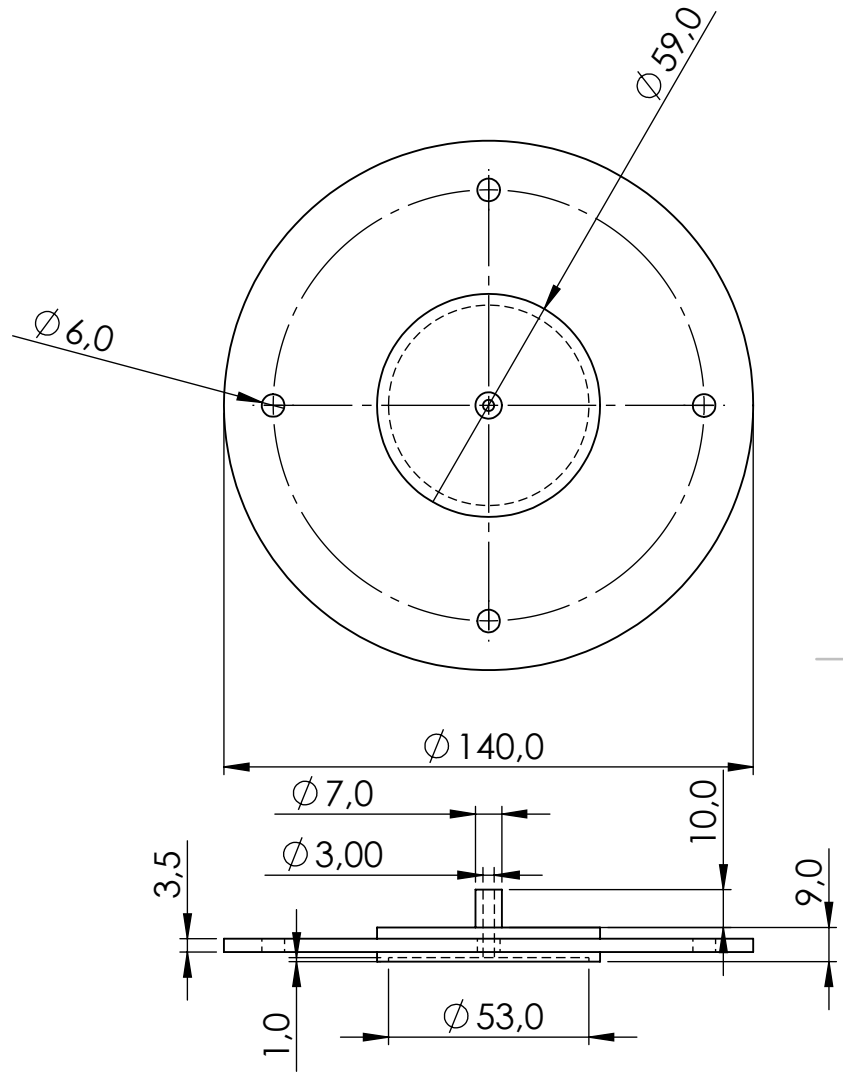
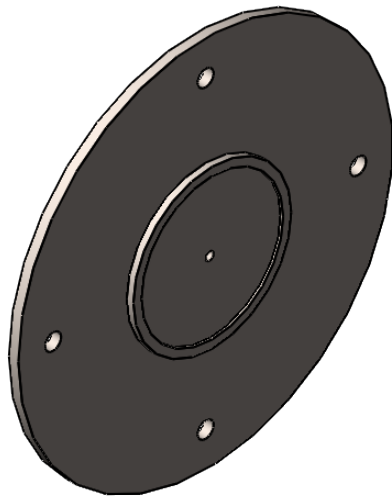
DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION **1.0**

NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN Catarina Guerreiro		30 Sept. 2023
CHK'D		
APPV'D		
MFG		
Q.A		
MATERIAL:		
316L Stainless steel		
WEIGHT:		
1360g		

TITLE:	<h1>Assembly</h1>
DWG NO.	
ED_TFL	A4
SCALE:1:2	SHEET 1 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			
MATERIAL:		316L Stainless steel	
WEIGHT:		532g	

TITLE:

ED 1

DWG NO.

ED_TFL

A4

SCALE:1:2

SHEET 2 OF 17

4 3 2 1

F

F

E

E

D

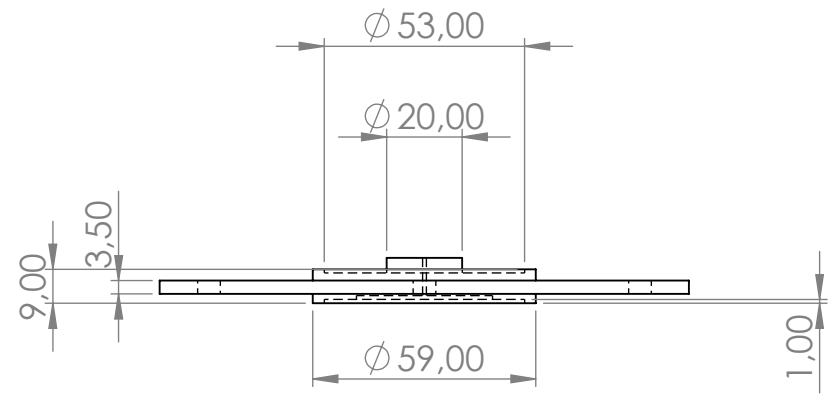
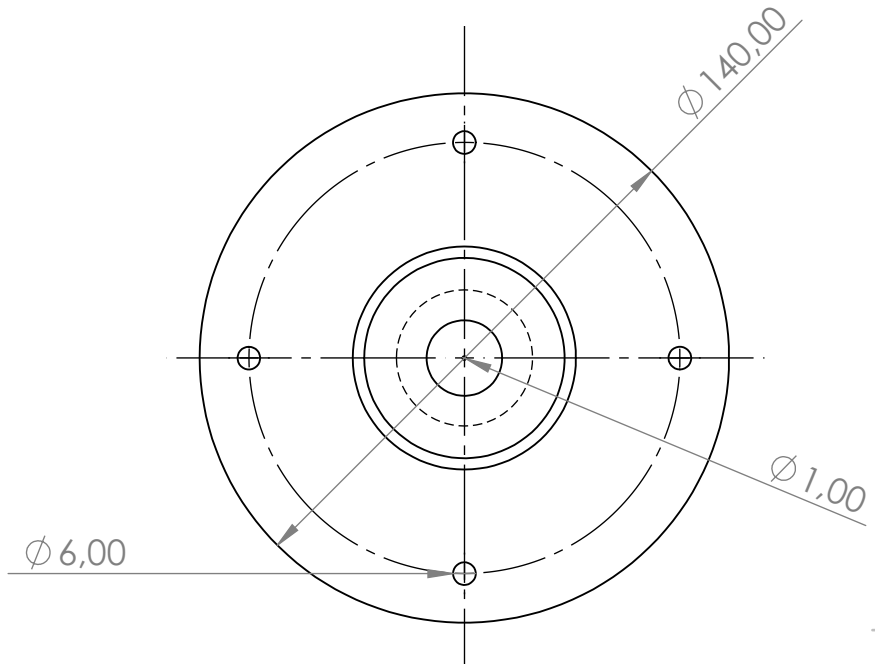
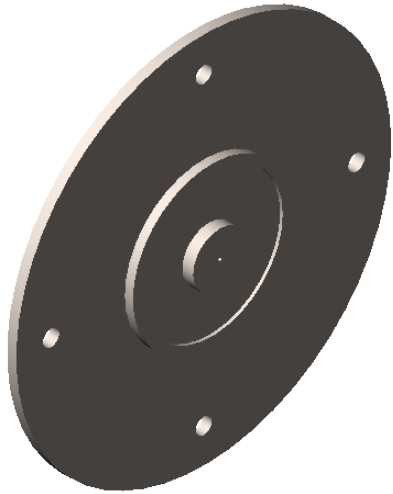
D

C

C

B

B



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION **1.0**

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		30 Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:

ED 2

DWG NO. **ED_TFL** A4

WEIGHT: **516g** SCALE:1:2 SHEET 3 OF 17

4 3 2 1

A

A

4 3 2 1

F

F

E

E

D

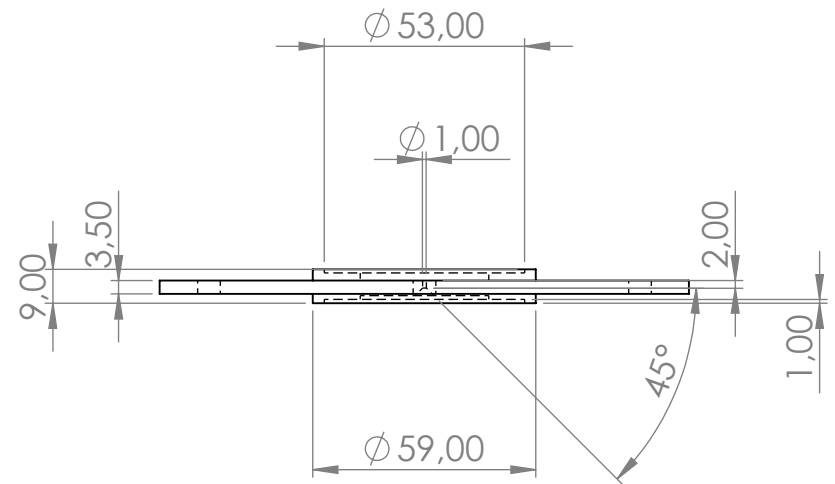
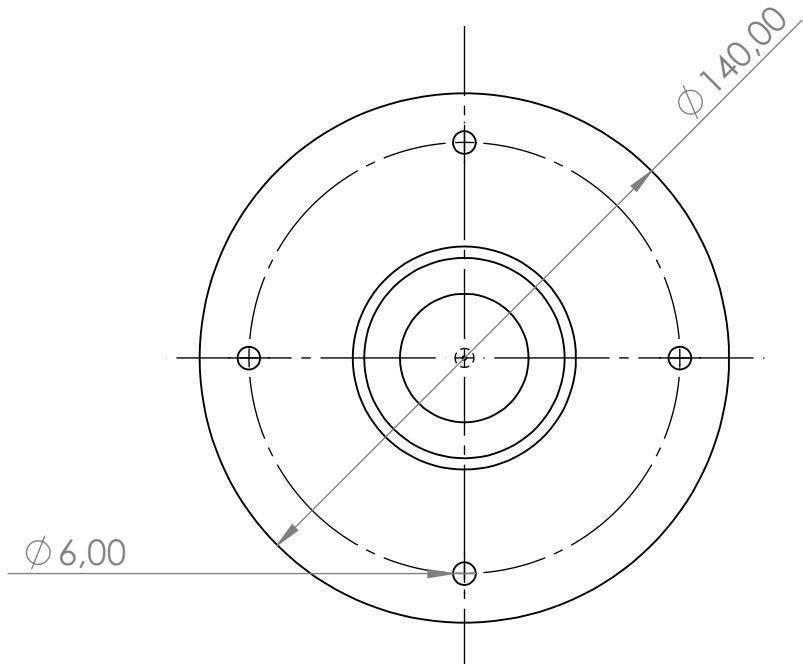
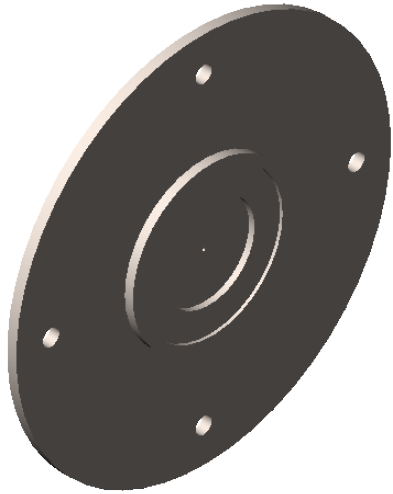
D

C

C

B

B



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION **1.0**

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		30 Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:	
ED 3	
MATERIAL:	DWG NO.
316L Stainless steel	ED_TFL
WEIGHT: 493g	SCALE: 1:2
	SHEET 4 OF 17

A

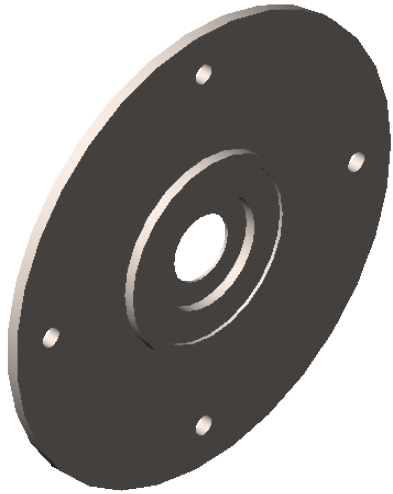
A

4 3 2 1

4 3 2 1

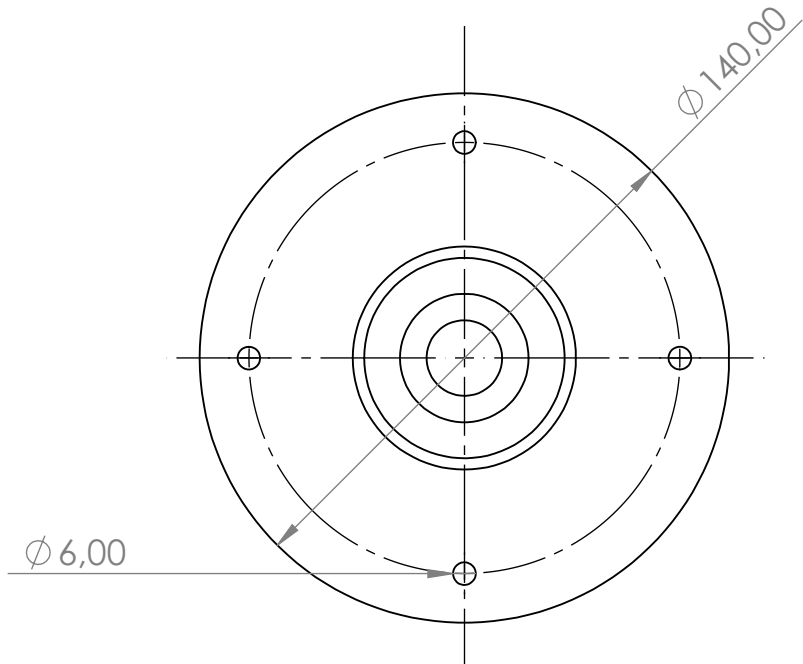
F

F



E

E

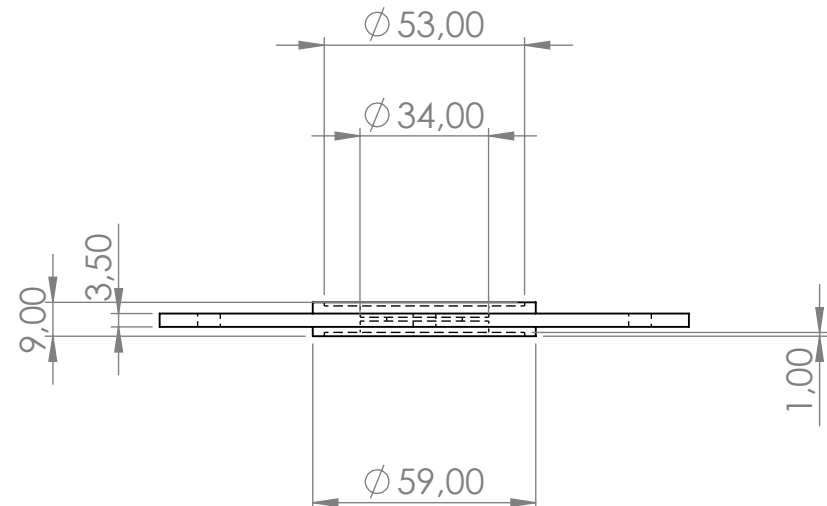


D

D

C

C



B

B

UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION **1.0**

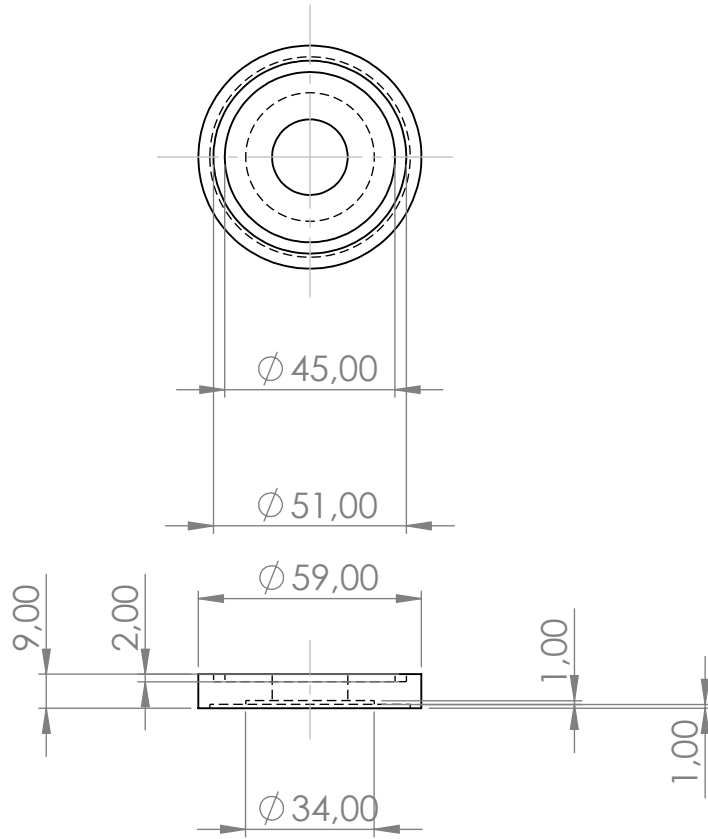
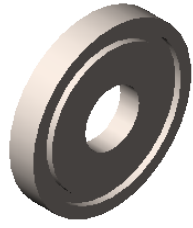
	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		30 Sept. 2023
CHKD			
APPVD			
MFG			
Q.A			

TITLE:	
ED 4	
MATERIAL:	DWG NO.
316L Stainless steel	ED_TFL
WEIGHT: 468g	SCALE: 1:2
	SHEET 5 OF 17

A

A

4 3 2 1



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

1.0

NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN Catarina Guerreiro		30 Sept. 2023
CHK'D		
APPV'D		
MFG		
Q.A		
MATERIAL:		
316L Stainless steel		
WEIGHT:		148g

TITLE:

IL

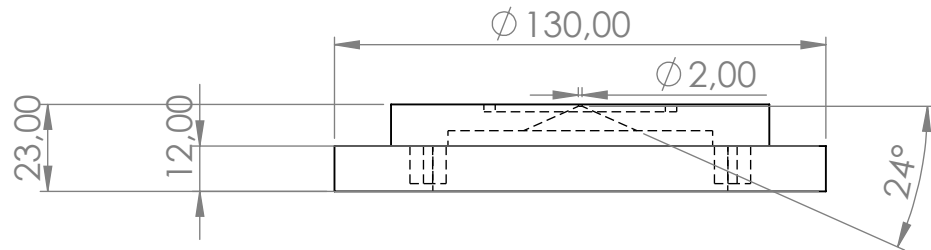
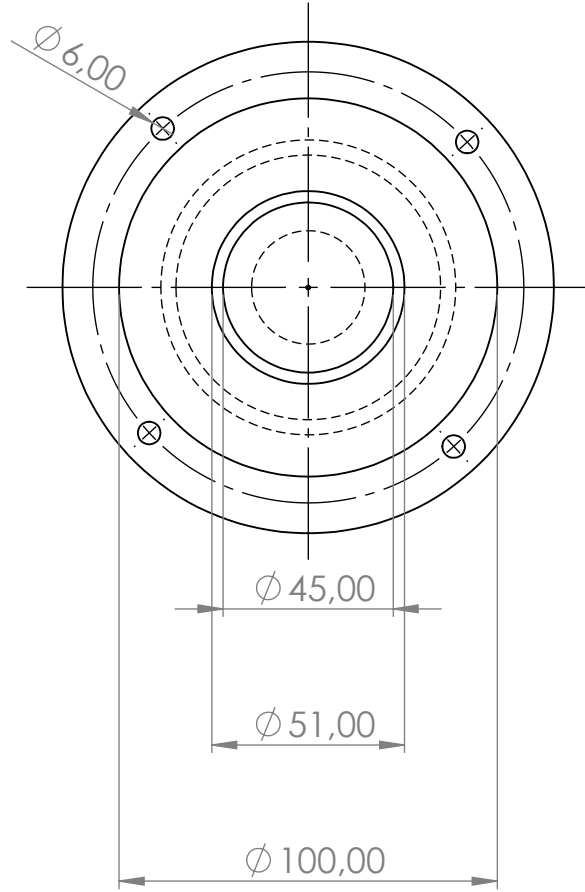
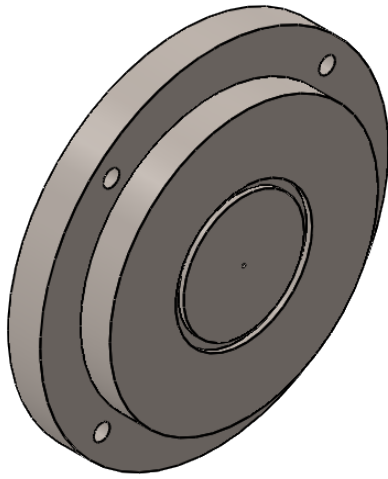
DWG NO.

ED_TFL

A4

SCALE:1:2

SHEET 6 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

1.0

NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN Catarina Guerreiro		30 Sept. 2023
CHK'D		
APPV'D		
MFG		
Q.A		
MATERIAL:		
316L Stainless steel		
WEIGHT:		1360g

TITLE:

OP

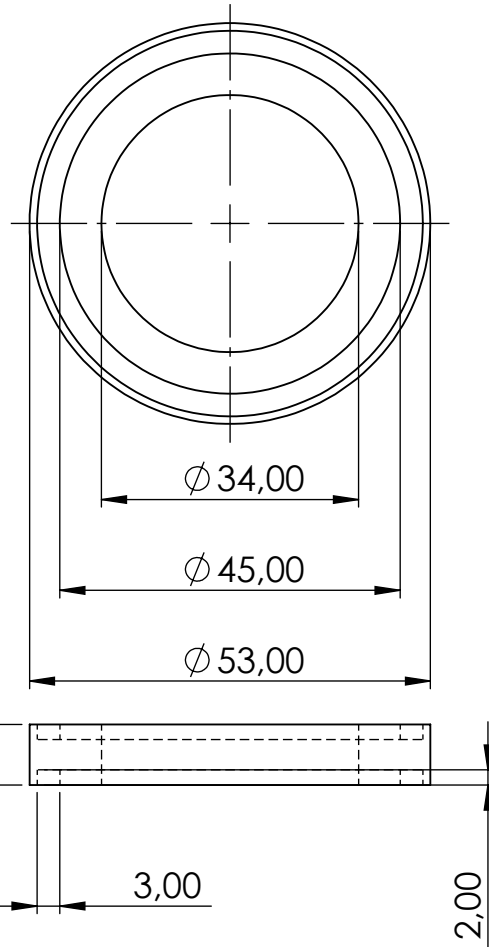
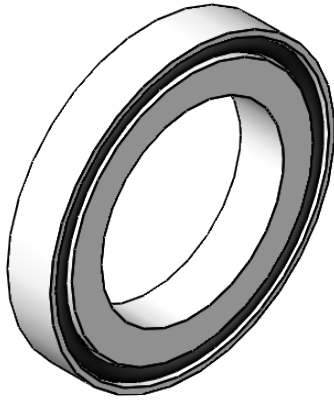
DWG NO.

ED_TFL

A4

SCALE:1:2

SHEET 7 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:

T1

MATERIAL:

Teflon

DWG NO.

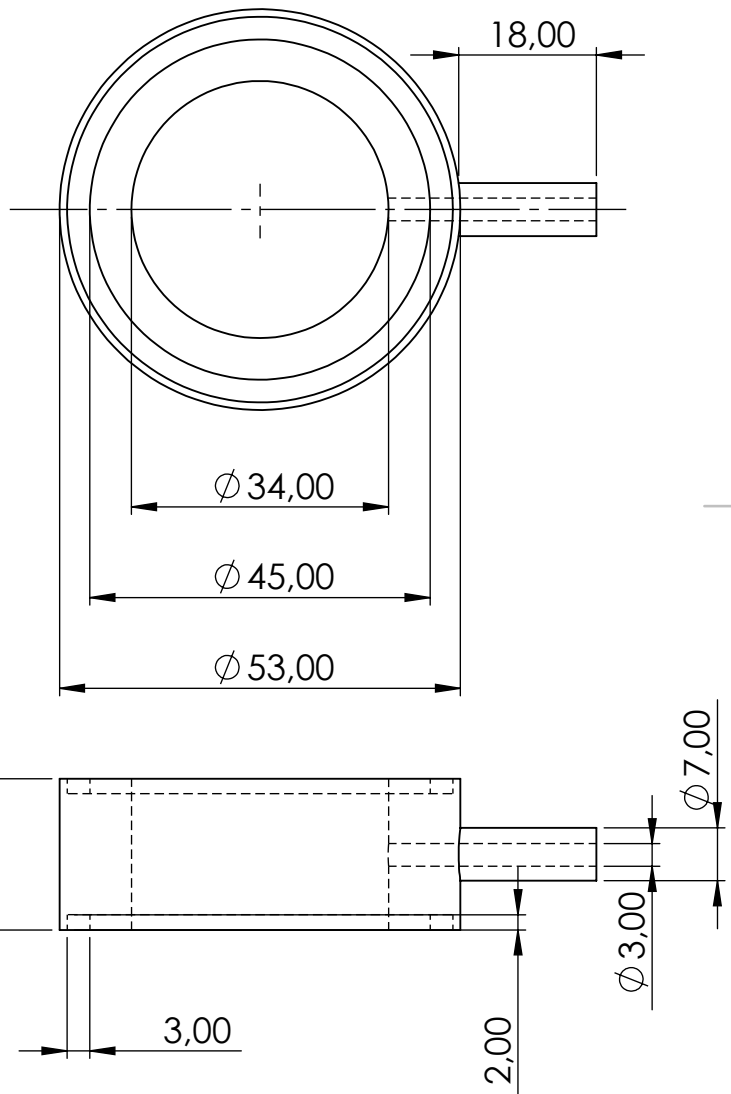
ED_TFL

A4

WEIGHT: **9g**

SCALE:1:1

SHEET 8 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

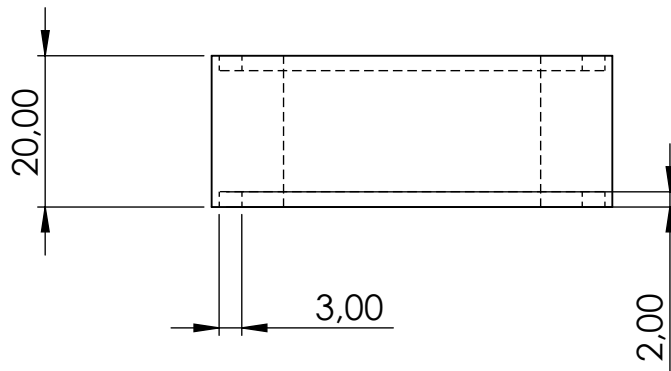
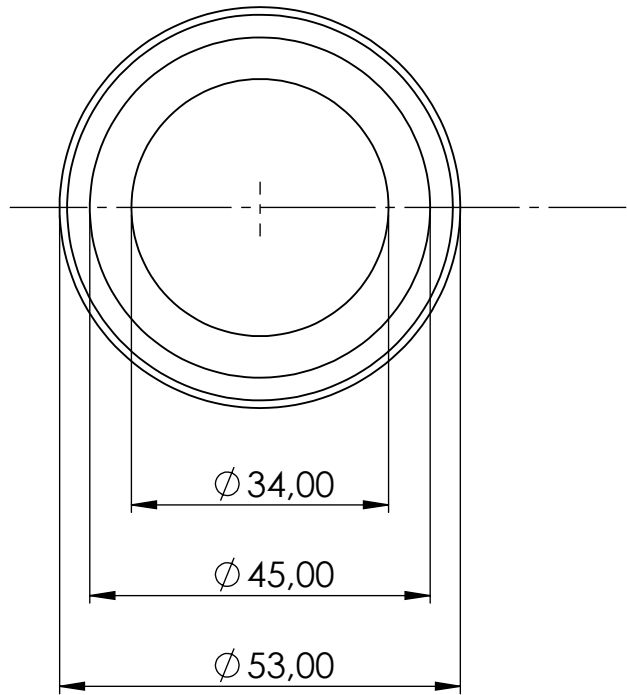
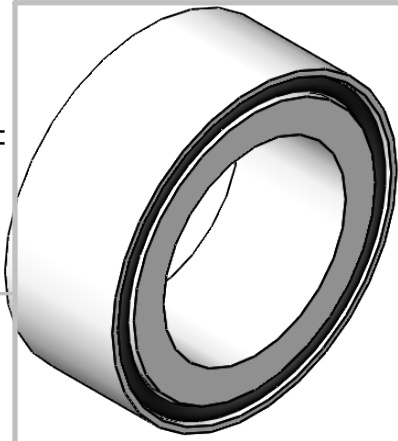
DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHKD			
APPVD			
MFG			
Q.A			

TITLE:	T3	
DWG NO.	ED_TFL	A4
MATERIAL:	Teflon	
WEIGHT:	25.2g	
SCALE:	1:1	
SHEET 10 OF 17		



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:

T4

MATERIAL:

Teflon

DWG NO.

ED_TFL

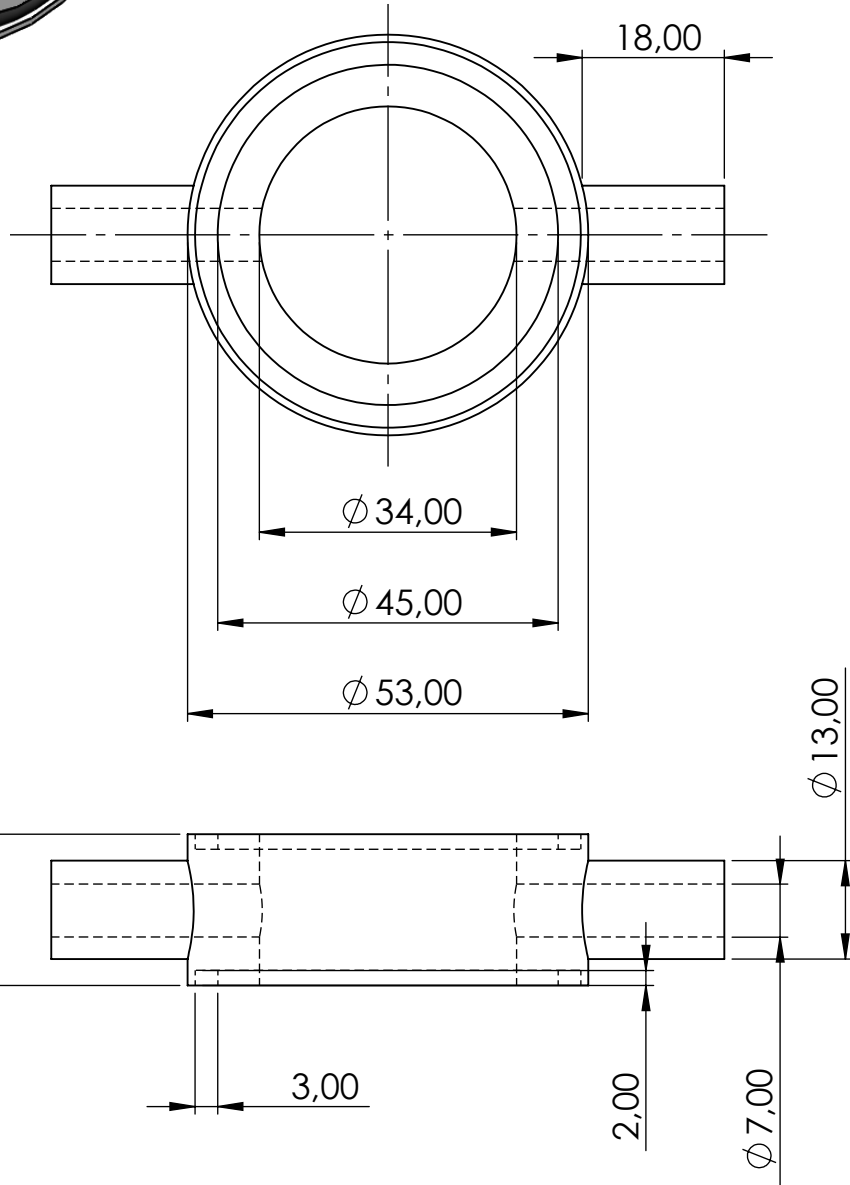
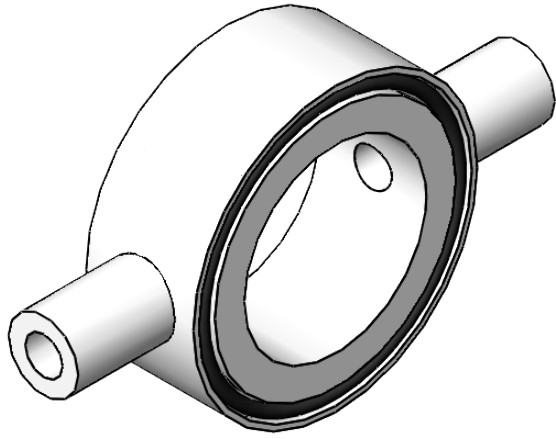
A4

WEIGHT:

24.6g

SCALE:1:1

SHEET 11 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:

T5

MATERIAL:

Teflon

DWG NO.

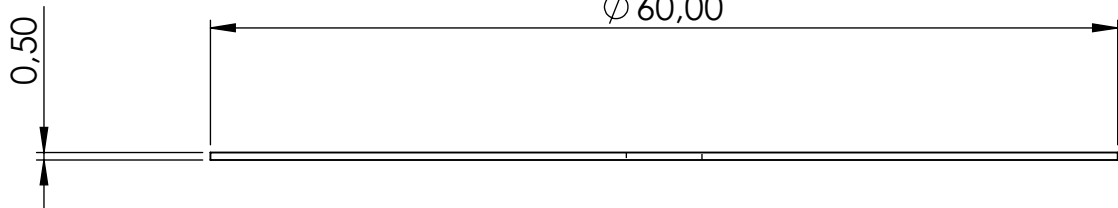
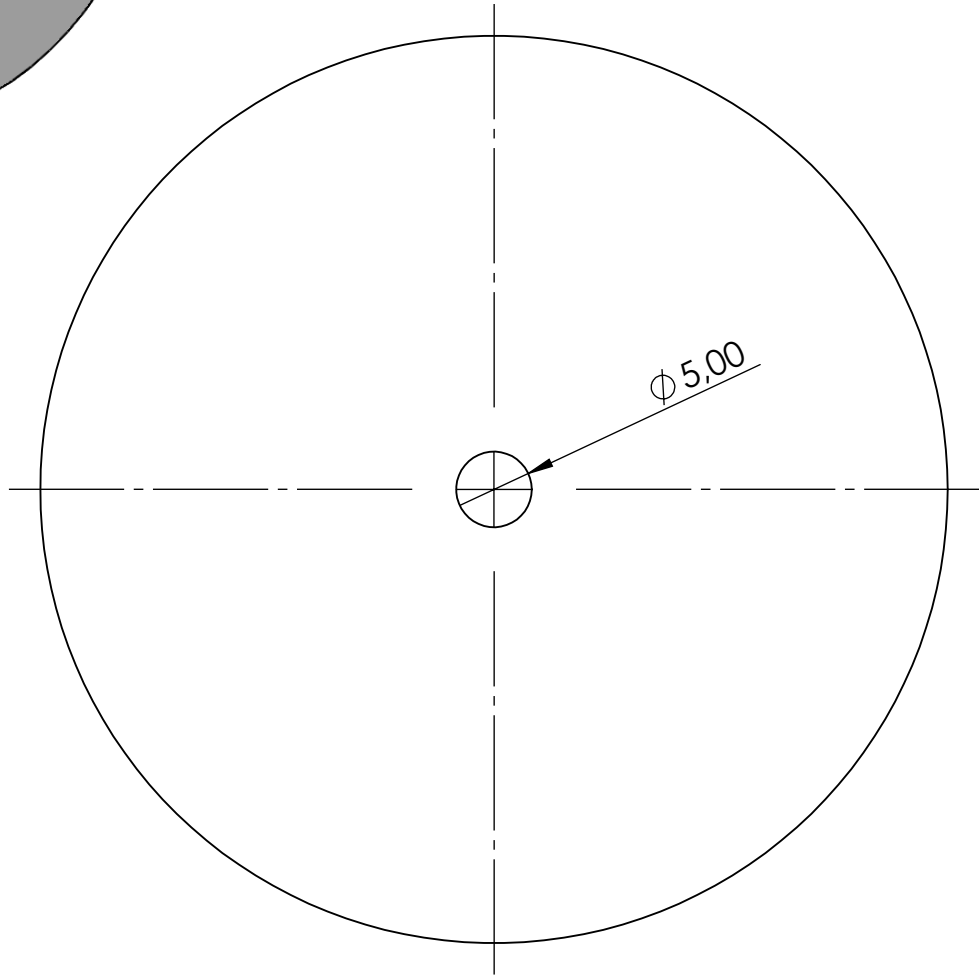
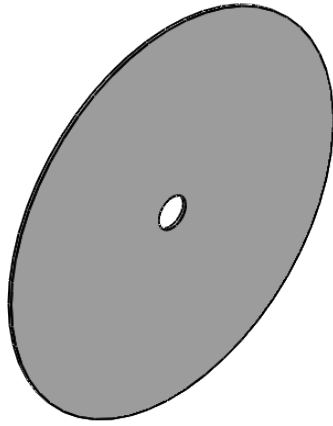
ED_TFL

A4

WEIGHT: **27.4g**

SCALE:1:1

SHEET 12 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
SURFACE FINISH:
TOLERANCES:
LINEAR:
ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
BREAK SHARP
EDGES

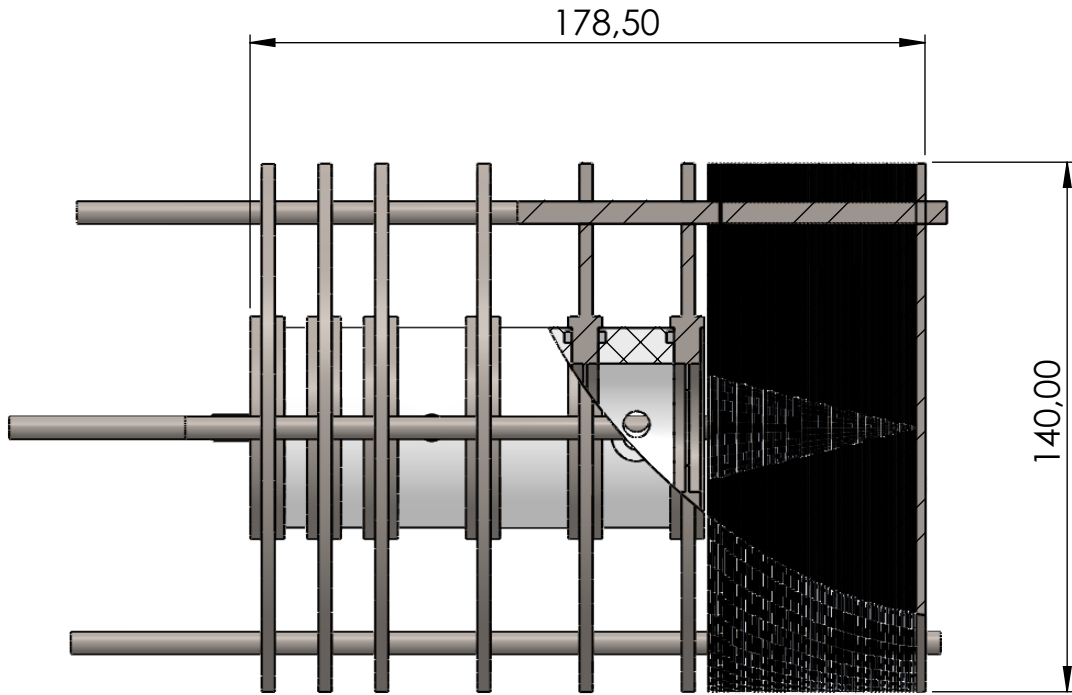
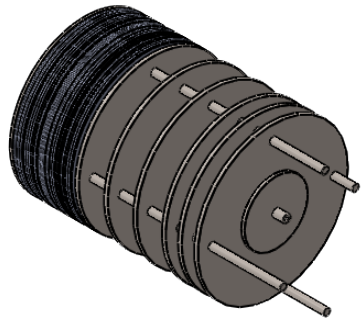
DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:	
T6	
MATERIAL:	DWG NO.
Teflon	ED_TFL
WEIGHT:	SCALE:1:0.5
1.4g	SHEET 13 OF 17

A4



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:

F11 - Assembly

MATERIAL:

Several

DWG NO.

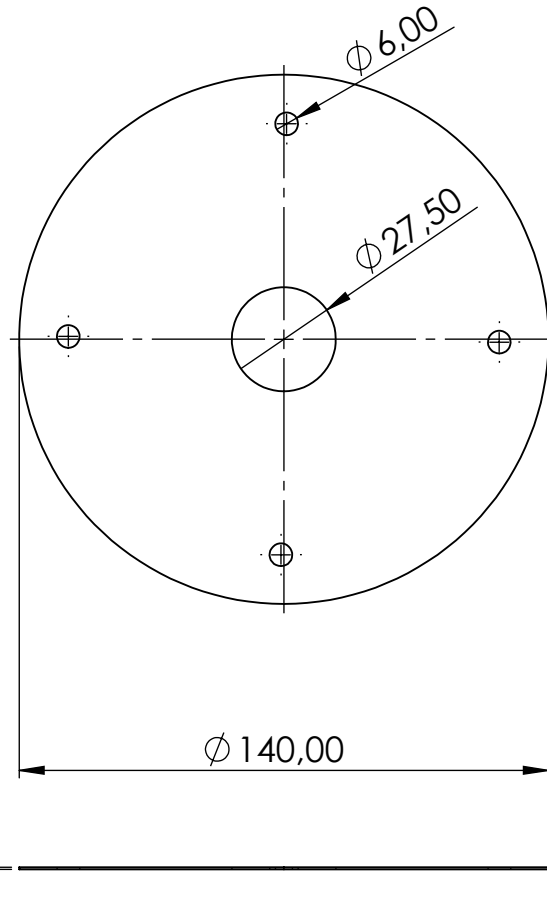
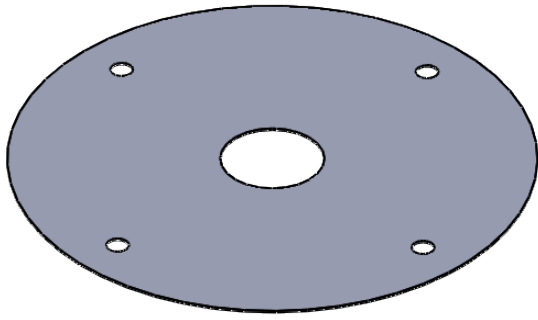
ED_TFL

A4

WEIGHT:

SCALE:1:2

SHEET 14 OF 17



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

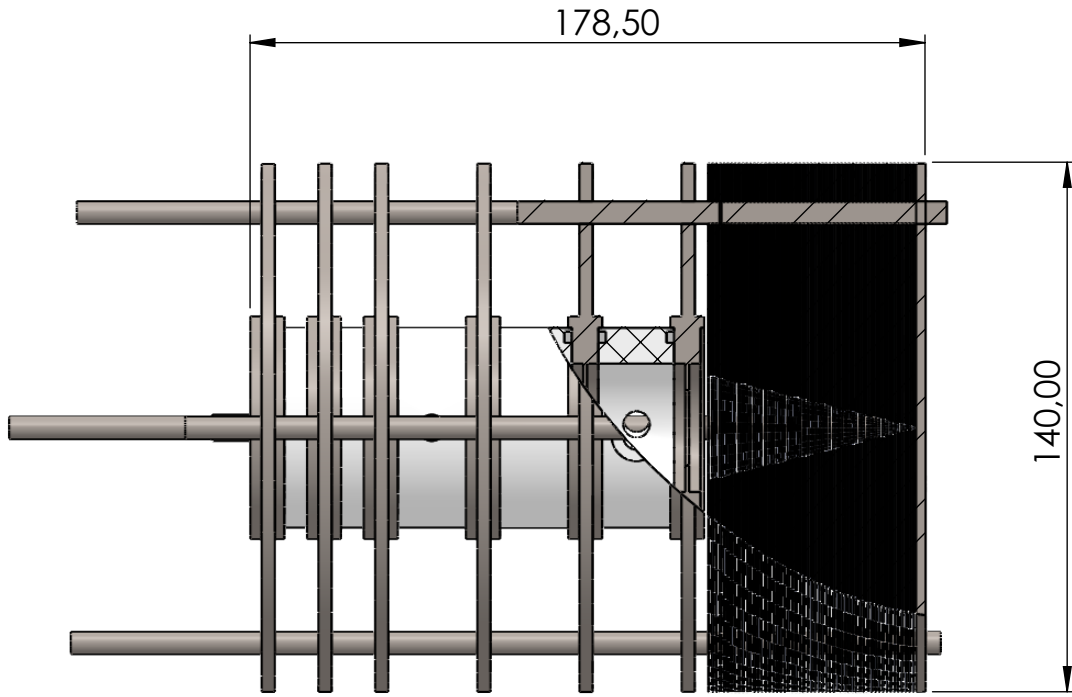
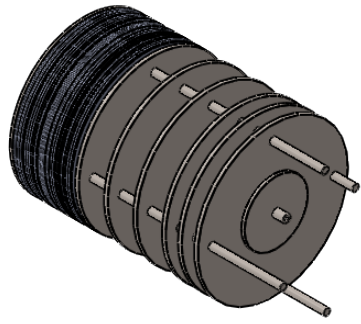
DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:	
F11_1	
MATERIAL:	DWG NO.
316L Stainless steel	ED_TFL
WEIGHT:	SCALE:1:2
7.3g	SHEET 15 OF 17

A4



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED:
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 SURFACE FINISH:
 TOLERANCES:
 LINEAR:
 ANGULAR:

FINISH:

DEBURR AND
 BREAK SHARP
 EDGES

DO NOT SCALE DRAWING

REVISION

	NAME	SIGNATURE	DATE
DRAWN	Catarina Guerreiro		Sept. 2023
CHK'D			
APPV'D			
MFG			
Q.A			

TITLE:

F11 - Assembly

MATERIAL:

Several

DWG NO.

ED_TFL

A4

WEIGHT:

SCALE:1:2

SHEET 16 OF 17

