

УДК 621.384.8

*М.В. Дубков, А.В. Николаев*

## ВЛИЯНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ИСКАЖЕНИЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЭЛЛИПСЫ ЗАХВАТА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОЛЁТНЫХ КВАДРУПОЛЬНЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРАХ

*Рассмотрено влияние нелинейных искажений электрического поля в квадрупольных масс-анализаторах пролетного типа (квадрупольный фильтр масс, монополь) на изменение формы и площади эллипса захвата. Показано, что при наличии некоторых неквадратичных членов разложения потенциала в степенной ряд наблюдается увеличение площади эллипса захвата в два и более раза.*

**Введение.** В основе работы квадрупольного масс-спектрометра лежит возможность удержания заряженных частиц с определённым значением удельного заряда в высокочастотных полях с квадратичным распределением потенциала. Важнейшей задачей теории таких анализаторов является исследование условий, при которых частицы захватываются высокочастотным полем. Основными параметрами, определяющими условия захвата, являются начальные координата и скорость частицы, а также начальная фаза высокочастотного поля.

Фундаментальная теория квадрупольных масс-спектрометров базируется на понятии объёма захвата заряженных частиц в шестимерном фазовом пространстве. В нем по осям координат откладываются значения начальных координат и начальных скоростей частицы. Пространство включает в себя всю совокупность фазовых точек частиц, удерживаемых в рабочем объёме датчика к заданному моменту времени. Для проведения реальных расчётов вводится понятие динамических зон захвата, которые представляют собой проекции шестимерного объёма захвата на соответствующие фазовые плоскости [1].

При больших временах сортировки зона захвата представляет собой эллипс, площадь которого определяется параметром стабильности и не зависит от времени сортировки и начальной фазы. Площадь эллипса захвата определяет вероятность захвата частиц полем, то есть в конечном счёте – чувствительность анализатора. Поэтому важной задачей является расчет площади эллипса захвата при различных условиях сортировки заряженных частиц.

Подобные расчёты производились ранее лишь для идеального случая, в котором электрическое поле имеет квадратичную зависимость потенциала от координаты [2]. Влияние нелинейных искажений электрического поля на эллипс захвата не исследовалось.

**Методика расчета эллипса захвата при наличии нелинейных искажений электрического поля.** Отклонение распределения потенциала от квадратичного непременно присутствует в объеме масс-анализатора по следующим причинам:

1) отступление конфигурации электродов анализатора от идеальной (негиперболическая форма поперечного сечения электродов, непрямолинейность и шероховатость поверхности электродов и т. д.);

2) отступление взаимного расположения электродов от идеального (параллельное смещение электродов, непараллельность их друг другу и т. п.);

3) неизбежные искажения поля на краях электродов анализатора, связанные с ограничением электродов в пространстве и прочие [3].

Если предположить, что вдоль оси анализатора потенциал постоянен, то есть  $\varphi \neq f(z)$ , то по координатам  $x$  и  $y$  в общем случае его распределение можно представить в виде степенного ряда:

$$\varphi(x, y) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} A_{mn} x^m y^n. \quad (1)$$

С учетом условия удовлетворения уравнению Лапласа разложение потенциала в степенной ряд удобно представить в виде

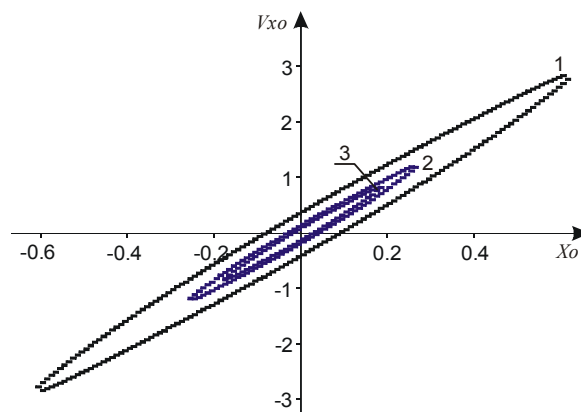
$$\begin{aligned} \varphi(x, y) = & \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_{2n} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (2n)!}{(2n-2k)!(2k)!} x^{2(n-k)} y^{2k} + \right. \\ & + b_{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(-1)^k (2n-1)!}{(2n-(2k+1))!(2k+1)!} x^{2(n-k)-1} y^{2k+1} + \\ & + c_{2n+1} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (2n+1)!}{(2n+1-2k)!(2k)!} x^{2k} y^{2(n-k)+1} + \\ & \left. + d_{2n+1} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (2n+1)!}{(2n+1-2k)!(2k)!} x^{2(n-k)+1} y^{2k} \right]. \quad (2) \end{aligned}$$

В этом случае коэффициенты  $a_{2n}$  и  $b_{2n}$  объединяют в себе члены ряда с четными степенями  $x$  и  $y$ , а  $c_{2n+1}$  и  $d_{2n+1}$  – члены с нечетными степенями.

После нормировки уравнения движения по размерам масс-анализатора и по периоду ВЧ напряжения коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  можно использовать как характеристики нелинейных искажений. При этом члены разложения, имеющие порядок более второго, отражают нелинейные искажения электрического поля в анализаторе.

Для решения уравнения движения заряженных частиц и расчета формы эллипса захвата в этом случае требуется использовать один из численных методов. В данной работе для этого использовался метод Рунге-Кутты, с помощью которого было проведено исследование влияния различных нелинейных искажений на форму и площадь эллипса захвата в случае применения импульсного сигнала типа «меандр» для рабочей точки, находящейся в области стабильности вблизи вершины диаграммы стабильности. Расчеты проводились для различных фаз ввода заряженных частиц в рабочую область масс-анализатора для коэффициентов с номерами не более 10, так как нелинейные искажения более высоких порядков оказывают существенное влияние на условия захвата заряженных частиц только при достаточно больших абсолютных значениях соответствующих коэффициентов, а на практике такие искажения не возникают.

**Результаты расчетов.** Расчеты показали, что в большинстве случаев наличие нелинейных искажений, как и следовало ожидать, приводит к уменьшению площади эллипса захвата и, как следствие, – к уменьшению чувствительности масс-анализатора. Например, на рисунке 1 приведены эллипсы захвата в координатах  $V_{x0}(X_0)$  для фазы ввода, равной 0. Как видно из приведенных результатов, увеличение коэффициента  $a_4$  от 0,01 до 0,1 приводит к значительному уменьшению эллипса захвата. В некоторых случаях, кроме этого, наблюдается искажение формы эллипса захвата, что также сопровождается уменьшением его площади.



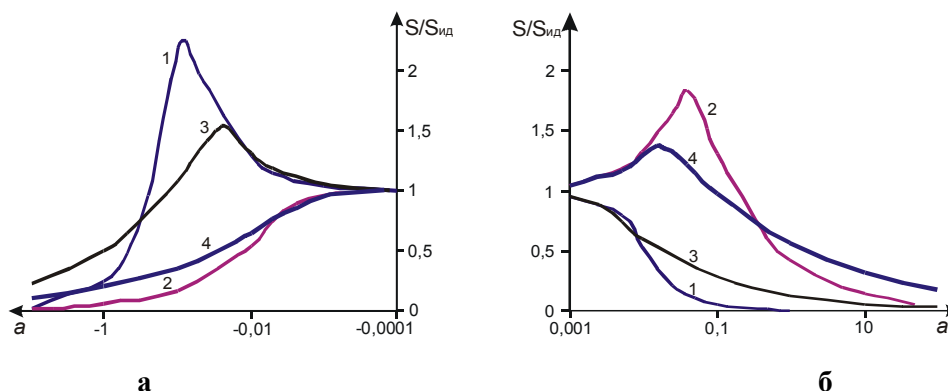
**Рисунок 1 – Зависимость формы эллипса захвата от величины коэффициента  $a_4$ :**  
(1) –  $a_4=0,01$ ; (2) –  $a_4=0,05$ ; (3) –  $a_4=0,10$

Однако, как показали исследования, наличие в разложении потенциала некоторых членов ряда с определенными коэффициентами приводит к увеличению площади эллипса захвата. В некоторых случаях это увеличение достигает двух и более раз. На рисунке 2 приведены зависимости площади эллипса захвата в координатах  $V_{y0}(Y_0)$ , нормированной на площадь эллипса в отсутствие искажений, от величины коэффициентов  $a$  разложения потенциала в степенной ряд.

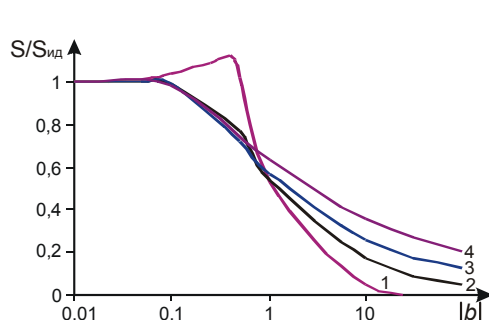
Как видно из представленных зависимостей, на графиках просматриваются ярко выраженные максимумы при значениях  $a_4=-0,075$ ,  $a_6=0,04$ ,  $a_8=-0,025$ ,  $a_{10}=0,015$ . При этом увеличение площади эллипса захвата наблюдается однократно либо в отрицательной, либо в положительной области соответствующего коэффициента  $a$ . Наибольшее увеличение площади наблюдается для коэффициента  $a_4$ . Так, при  $a_4=-0,075$  площадь увеличивается в 2,3 раза.

Аналогичные максимумы нормированной площади эллипса захвата присутствуют и при коэффициентах  $b_4=\pm 0,45$  и  $c_3=\pm 0,15$  (рисунки 3, 4).

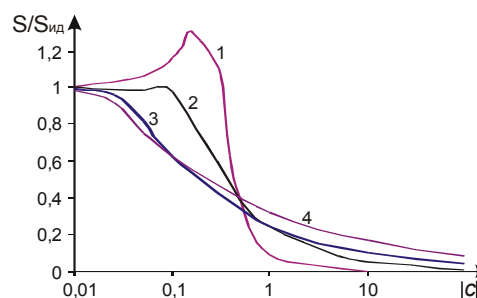
Однако в этом случае зависимость нормированной площади от величины коэффициентов  $b$  и  $c$  носит симметричный характер, в результате чего максимумы присутствуют как в положительной, так и в отрицательной области значений соответствующих коэффициентов.



**Рисунок 2 – Зависимость нормированной площади эллипса захвата от величины коэффициента  $a$  в разложении потенциала в степенной ряд:**  
(1) –  $a_4$ ; (2) –  $a_6$ ; (3) –  $a_8$ ; (4) –  $a_{10}$



**Рисунок 3 – Зависимость нормированной площади эллипса захвата от величины коэффициента  $b$  в разложении потенциала в степенной ряд:**  
(1) –  $b_4$ ; (2) –  $b_6$ ; (3) –  $b_8$ ; (4) –  $b_{10}$



**Рисунок 4 – Зависимость нормированной площади эллипса захвата от величины коэффициента  $c$  в разложении потенциала в степенной ряд:**  
(1) –  $c_3$ ; (2) –  $c_5$ ; (3) –  $c_7$ ; (4) –  $c_9$

**Заключение.** Отклонение распределения потенциала от квадратичного в пролетных квадрупольных масс-анализаторах в большинстве случаев негативно влияет на характеристики приборов. Наличие нелинейных искажений электрического поля приводит к ухудшению как разрешающей способности, так и чувствительности масс-спектрометров.

Однако проведенные исследования показали возможность позитивного воздействия нелинейных искажений на сортирующие свойства масс-анализаторов.

Наличие определенного рода нелинейных искажений приводит к увеличению площади эллипса захвата, что благоприятно сказывается на чувствительности квадрупольного масс-анализатора и может привести к улучшению аналитических характеристик гиперболического масс-спектрометра.

При этом увеличение площади эллипса захвата наблюдалось в большей степени при наличии в распределении потенциала ненулевых коэффициентов низких порядков, таких как  $a_4$ ,  $a_6$ ,  $b_4$ ,  $c_3$ . Нелинейные искажения более высоких

порядков оказывают в этом случае менее существенное влияние.

Во всех рассмотренных случаях максимумы имеют достаточно резкий характер, что свидетельствует о сильной зависимости траекторий заряженных частиц в анализаторе от величины коэффициентов разложения потенциала в степенной ряд. Поэтому следует ожидать, что к формированию электрического поля с заданными параметрами нелинейных искажений потребуются предъявлять не менее жесткие требования чем к электродной системе, формирующей электрическое поле с квадратичным распределением потенциала.

Анализ проведенных исследований позволяет утверждать, что нелинейные искажения могут играть не только отрицательную, но и положительную роль при применении масс-анализаторов пролетного типа.

#### **Библиографический список**

1. Слободенюк Г.И. Квадрупольные масс-спектрометры. М.: Атомиздат, 1974.
2. Шеретов Э.П., Колотилин Б.И. К расчету динамических зон захвата заряженных частиц для квад-

рупольных масс-спектрометров // Журнал технической физики. 1975. № 2. С. 420-424.

3. Дубков М.В. Исследование особенностей

работы квадрупольного фильтра масс и разработка анализаторов с тонкостенными гиперболическими электродами. – Дис. канд. техн. наук. – Рязань, 1997.