

УДК 621.384.8

*О.В. Рожков, М.А. Буробин*

## ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ КРАЕВЫХ ОБЛАСТЕЙ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОТВЕРСТИЙ В ЭЛЕКТРОДАХ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА В ТРЕХМЕРНОЙ ИОННОЙ ЛОВУШКЕ

*Представлены результаты расчета весовых коэффициентов мультипольных составляющих распределения потенциала в рабочем объеме трехмерной ионной ловушки. Рассматриваются различные конфигурации граничной области электродной системы, а также исследуется влияние технологических отверстий в электродах на распределение потенциала в рабочем объеме анализатора.*

**Введение.** Аналитические характеристики гиперболических масс-спектрометров во многом определяются характером распределения потенциала электрического поля в рабочем объеме анализатора. В идеальном случае это распределение по координатам должно быть квадратичным. Однако электрическое поле внутри реальной электродной системы неизбежно отличается от идеального [1, 2]. Поскольку в ионной ловушке ионы многократно проходят одну и ту же область пространства, каждый раз подвергаясь воздействию одних и тех же искажений поля, то, по сравнению с квадрупольным фильтром масс или монопольным анализатором, происходит более сильное искажение их траекторий, что сказывается на аналитических характеристиках прибора.

Как свидетельствуют экспериментальные исследования [2, 3], на массовых пиках наличие нелинейных искажений проявляется в виде их изрезанности и быстром снижении чувствительности при увеличении времени сортировки.

Среди причин, приводящих к появлению искажений поля, принципиально неустранимыми на практике являются необходимость ограничения гиперболических поверхностей электродов и изготовление в них технологических (функциональных) отверстий для ввода и вывода заряженных частиц.

Целью работы является исследование влияния формы краевых областей и размеров технологических отверстий в электродах на распределение потенциала в рабочем объеме анализатора типа трехмерной ионной ловушки.

**Методика численного моделирования.** Распределение потенциала  $\Phi(\rho, \theta)$  в рабочем объеме трехмерной ионной ловушки в сферической системе координат (при осевой симметрии) может быть записано в виде [4]

$$\Phi(\rho, \theta) = \Phi_0 \sum_{n=1}^{\infty} A_n \left( \frac{\rho}{r_0} \right)^n P_n(\cos \theta), \quad (1)$$

где  $\Phi_0$  – разность потенциалов между кольцевым и торцевыми электродами;  $r_0$  – радиус кольцевого электрода;  $P_n$  – полином Лежандра  $n$ -го порядка,  $A_n$  – весовые коэффициенты мультипольных составляющих.

Электрическое поле в рабочем объеме ионной ловушки создается гиперболическими электродами, поверхность которых задается следующими уравнениями:

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{1 - 3 \cos^2 \theta}} - \text{кольцевой электрод,}$$

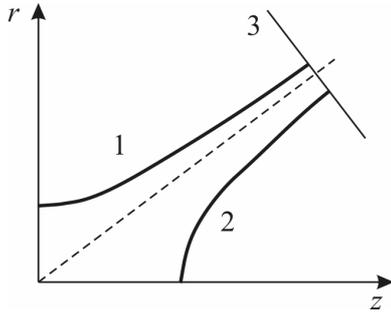
$$\rho = \frac{\sqrt{2/n_0}}{\sqrt{3 \cos^2 \theta - 1}} - \text{торцевые электроды,}$$

где  $n_0$  – геометрический коэффициент, определяемый как  $n_0 = (r_0/d_0)^2$ ; в этом выражении  $d_0$  – расстояние от центра электродной системы до торцевого электрода.

Поскольку потенциалы торцевых электродов ионной ловушки равны и электроды симметрично расположены относительно центра электродной системы, в распределении потенциала присутствуют только четные составляющие. В случае биполярного питания ловушки коэффициент  $A_0$  будет равен нулю. Идеальное квадратичное распределение потенциала создается гиперболическими электродами бесконечной длины. Поэтому ряд (1) ограничивается составляющей второго порядка, при этом  $A_0 = 0$ . Реальные электродные системы ограничены на определенных расстояниях от центра ловушки, и ряд (1) будет бесконечным.

Величины мультипольных коэффициентов высших порядков зависят от распределения потенциала по граничной области. Для их определения предварительно методом граничных эле-

ментов рассчитывалось распределение потенциала по открытой границе – вдоль прямой 3 (рисунок 1), ограничивающей электроды.



**Рисунок 1 – Фрагмент электродной системы: 1 – кольцевой электрод, 2 – торцевой электрод, 3 – линия усечения электродов**

Методика расчета сводилась к минимизации суммы

$$\sum_i (\Phi^*(\rho_i, \theta_i) - \Phi_i)^2 \Delta s_i, \quad (2)$$

где  $\Phi^*(\rho_i, \theta_i)$  – приближение точного решения;  $\rho_i, \theta_i$  – координаты  $i$ -й точки на граничной поверхности;  $\Phi_i$  – фиксированный потенциал на границе;  $\Delta s_i$  – площадь  $i$ -го граничного элемента.

Площадь граничного элемента задавалась следующими формулами:

$$\Delta s_i = \frac{2\pi\rho_i^2}{\sin\theta_i} \Delta\theta \text{ – кольцевой электрод,}$$

$$\Delta s_i = \frac{2\pi\rho_i^2}{\cos\theta_i} \Delta\theta \text{ – торцевой электрод,}$$

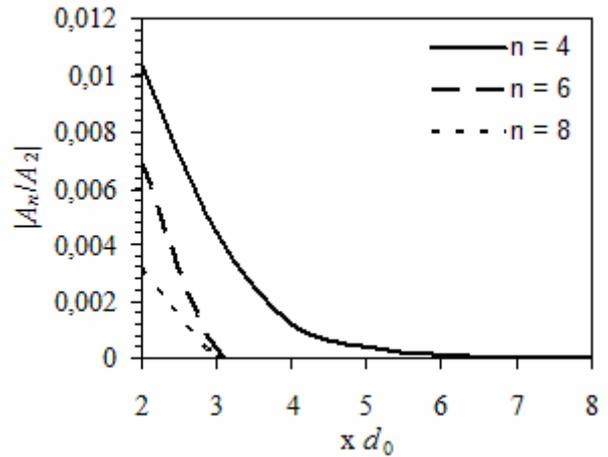
$$\Delta s_i = 2\pi\rho_i^2 \sqrt{\Delta r_i^2 + \Delta z_i^2} \text{ – открытая граница,}$$

где  $\Delta\theta$  – шаг по углу;  $\Delta r_i, \Delta z_i$  – шаг по соответствующим координатам вдоль граничной области.

Минимизация суммы (2) относительно коэффициентов  $A_n$  производилась методом координатного спуска с квадратичной интерполяцией-экстраполяцией.

**Результаты численного моделирования.**

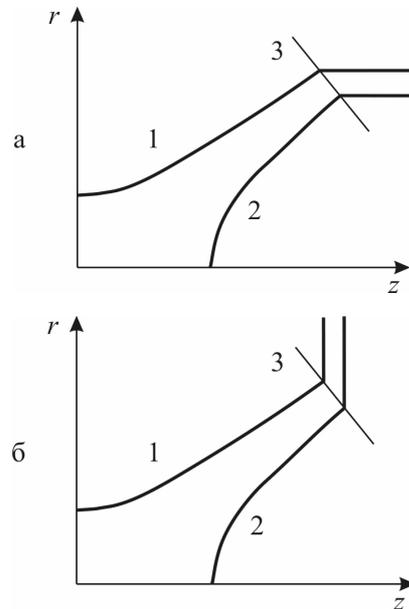
На первом этапе расчетов рассматривалась ионная ловушка с идеальными гиперболическими электродами, в которой расстояние  $d_0$  от центра до торцевого электрода равно радиусу  $r_0$  кольцевого электрода. Расстояние от центра ловушки до точки пересечения асимптоты с ограничительной линией, перпендикулярной к ней, выбиралось равным  $2d_0, 3d_0, \dots, 8d_0$ . Зависимость весовых коэффициентов  $A_n$  мультипольных составляющих высших порядков, отнесенных к квадрупольному члену  $A_2$  ( $A_2 < 0$ ), от расстояния ограничения электродов показана на рисунке 2.



**Рисунок 2 – Зависимость относительных величин мультипольных составляющих высших порядков от расстояния ограничения электродов**

Видно, что при удалении уровня усечения электродов от центра ловушки доля составляющих высших порядков уменьшается, что свидетельствует об улучшении линейности электрического поля в анализаторе.

На следующем этапе производился аналогичный расчет весовых коэффициентов мультиполей для двух наиболее распространенных конфигураций граничной области ионной ловушки: область ограничения электродов ориентирована вдоль оси  $z$  (рисунок 3, а) и вдоль оси  $r$  (рисунок 3, б).



**Рисунок 3 – Фрагменты электродных систем при различных способах усечения: 1 – кольцевой электрод, 2 – торцевой электрод, 3 – линия усечения электродов**

Конфигурация, показанная на рисунке 3, а, названа вариантом «А», на рисунке 3, б – вариантом «Б». Результаты расчетов приведены на гистограмме (рисунок 4). Также для сравнения приведены результаты расчетов для усеченной на том же расстоянии электродной системы без краевых областей – вариант «В», т.е. электроды заканчиваются в местах их пересечения с прямой 3 (см. рисунок 1).

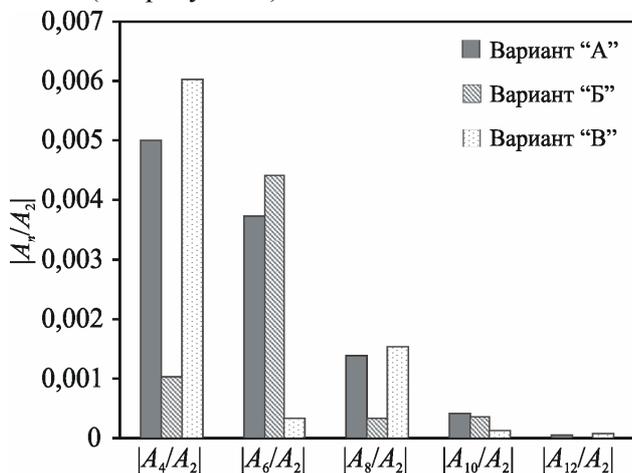


Рисунок 4 – Относительные величины мультипольных коэффициентов высших порядков при различных способах усечения ионной ловушки

Для ввода электронного или ионного потока в анализатор традиционно используют либо отверстие радиусом  $r$  в одном из торцевых электродов 2, либо щель шириной  $h$  в кольцевом электроде 1 (рисунок 5). Вывод отсортированных ионов осуществляют через отверстия в торцевых электродах.

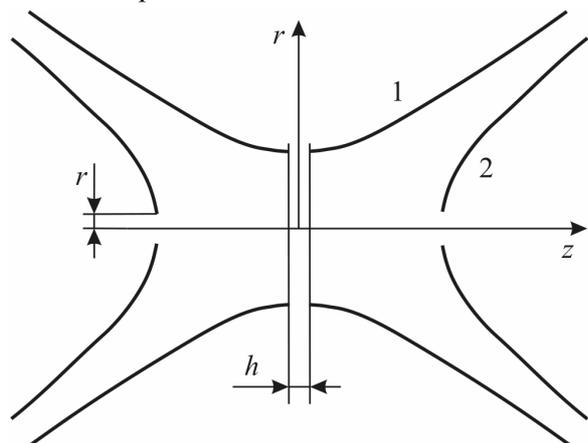


Рисунок 5 – Эскиз электродной системы: 1 – кольцевой электрод, 2 – торцевой электрод

Вначале анализировалась электродная система с одинаковыми отверстиями в торцевых электродах без щели в кольцевом электроде. Гиперболические поверхности электродов ограничивались на расстоянии  $3d_0$  от центра. Предварительно рассчитывалось распределение потен-

циала по диаметру отверстия. Относительные величины мультипольных составляющих высших порядков в зависимости от радиуса  $r$  отверстия представлены на рисунке 6.

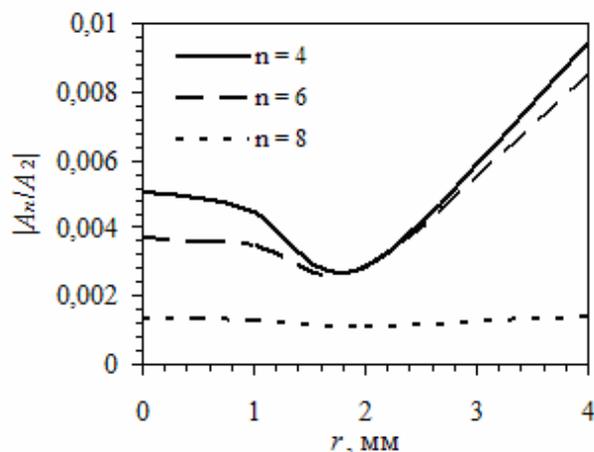


Рисунок 6 – Зависимость относительных величин мультипольных коэффициентов высших порядков от радиуса отверстия в торцевом электроде

По кривым на рисунке 6 можно определить оптимальный радиус  $r_{opt}$  отверстия в торцевом электроде ( $r_{opt} \sim 2$  мм), соответствующий минимальному значению  $|A_n/A_2|$ .

Аналогичные расчеты производились для той же электродной системы с щелью шириной  $h$  в кольцевом электроде (без отверстий в торцевых электродах). Результаты приведены на рисунке 7.

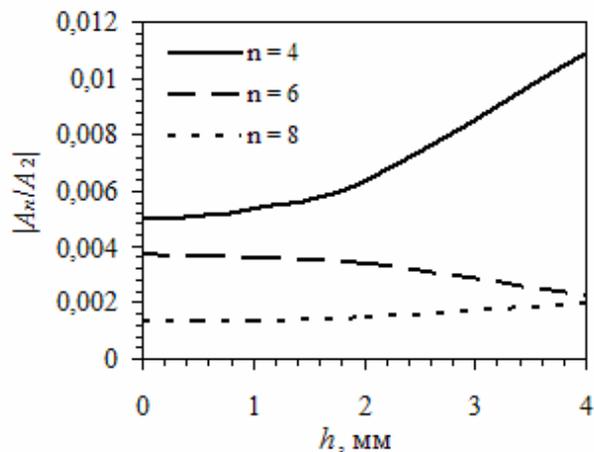


Рисунок 7 – Зависимость относительных величин мультипольных коэффициентов высших порядков от ширины щели в кольцевом электроде

В данном случае с увеличением ширины щели существенно ухудшается линейность электрического поля в рабочем объеме анализатора. Кольцевая щель шириной 4 мм приводит к увеличению коэффициента  $A_4$  в 2 раза, однако составляющая  $A_6$  при этом уменьшается.

**Обсуждение результатов и выводы.** По результатам расчетов можно сделать следующие выводы. Относительная доля составляющей четвертого порядка  $A_4$  в варианте электродной системы «Б» в 5 раз меньше, чем в «А». Однако относительная доля составляющей шестого порядка  $A_6$  в электродной системе вариант «Б» в 10 раз больше, чем в «А». Доли составляющих более высоких порядков уменьшаются с увеличением номера гармоники. Теоретические и экспериментальные исследования показывают, что с увеличением порядка мультипольной составляющей ее влияние на траекторию ионов уменьшается. Следовательно, наиболее предпочтительным является использование варианта электродной системы «Б». Отсутствие краевой области приводит к увеличению составляющей четвертого порядка  $A_4$ , но в то же время примерно в 10 раз уменьшается доля составляющей шестого порядка  $A_6$ .

Кольцевые щели в электродах негативно влияют на распределение потенциала внутри трехмерной ионной ловушки. В то же время наличие радиальных отверстий определенных размеров в торцевых электродах приводит к частичной компенсации искажающего влияния краевых областей электродов.

#### **Библиографический список**

1. *F. von Busch, W. Paul.* Über nichtlineare Resonanzen in Elektrische Massenfilter als Folge von Feldfehlern // *Z. für Physik.* 1961. № 164. S. 588 – 594.
2. *Dawson P.H., Whetten N.R.* Non-linear resonances in Quadrupole Mass Spectrometers due to Imperfect, Fields 1, The Quadrupole Ion Trap // *Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.* 1969. № 2. P. 45-49.
3. *Рожков О.В.* Некоторые методы уменьшения влияния нелинейных искажений поля на параметры гиперболических масс-спектрометров типа трехмерной ионной ловушки: Дис. ... канд. техн. наук. Рязань. 1993.
4. *Y. Wang and J. Franzen* // *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes*, 112 (1992) 167.