

Научная статья

УДК 537.534.7, 543.51

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16411>

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЖИМОВ РАБОТЫ РАДИОЧАСТОТНЫХ ВОРОНОК В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ИНТЕРФЕЙСАХ ТАНДЕМНЫХ ТРЕХКВАДРУПОЛЬНЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ

А. А. Сысоев ¹✉, А. С. Бердников ², С. В. Масюкевич ²,

К. В. Соловьев ^{3, 2}, Н. К. Краснова ³

¹ Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия;

² Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия;

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ aasysoyev@mephi.ru

Аннотация. В статье рассмотрены аналитические модели высокочастотных электрических полей, которые можно эффективно использовать для быстрого качественного моделирования процессов фокусировки и транспорта ионных потоков в радиочастотных воронках. В частности, применение таких устройств в конструкции тандемного трехквადрупольного масс-спектрометра увеличивает количество ионов, собираемых в форвакуумной области газодинамического интерфейса электроспрейного источника ионов. Проанализированы случаи функционирования воронок с двух- и четырехфазными электрическими напряжениями (варианты I и II), а также с амплитудно-модулированными электрическими напряжениями, обеспечивающими режим псевдопотенциала с архимедовой волной (III). В результате проведенного анализа наиболее предпочтительной конструкцией оказался III вариант. Использование подобных аналитических моделей позволяет эффективно проверять перспективные варианты и тем самым существенно снизить трудозатраты на предварительный выбор принципиальной схемы устройства с заданными характеристиками, в том числе и в других масс-спектрометрических разработках.

Ключевые слова: масс-спектрометрия, источник ионов, электрораспыление, газодинамический интерфейс, радиочастотная ловушка, тандемный трехквадрупольный масс-спектрометр

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-03-2023-097.

Для цитирования: Сысоев А. А., Бердников А. С., Масюкевич С. В., Соловьев К. В., Краснова Н. К. Аналитическое исследование режимов работы радиочастотных воронок в газодинамических интерфейсах тандемных трехквадрупольных масс-спектрометров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 134–145. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16411>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16411>

ANALYTICAL STUDY OF OPERATING MODES OF RF ION FUNNELS IN THE GAS DYNAMIC INTERFACES OF TANDEM TRIPLE-QUADRUPOLE MASS-SPECTROMETERS

A. A. Sysoev ¹ ✉, A. S. Berdnikov ², S. V. Masyukevich ²,
K. V. Solovyev ^{3, 2}, N. K. Krasnova ³

¹ National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),
Moscow, Russia;

² Institute for Analytical Instrumentation of RAS, St. Petersburg, Russia;

³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ aasysoyev@mephi.ru

Abstract. The article considers analytical models of high-frequency electric fields which can be used effectively for fast, high-quality simulation of ion flow focusing and transport processes in the radio-frequency funnels. In particular, the use of such devices in the design of a tandem three-quadrupole mass spectrometer increases the amount of ions collected in the forevacuum region of the gas-dynamic interface of the electrospray ion source. The cases of funnels with two- and four-phase electrical voltages (options I and II), as well as with amplitude-modulated electrical voltages providing a pseudopotential mode with an Archimedean wave (III) have been analyzed. As a result, the most preferable design turned out to be option III. The use of such analytical models makes it possible to test effectively promising options and thereby significantly reduce costs for the preliminary selection of a principal scheme of a device with specified characteristics, including similar cases of other mass spectrometric designs.

Keywords: mass spectrometry, gas dynamic interface, radio-frequency trap, tandem mass spectrometer, triple-quadrupole mass-spectrometer

Funding: The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-03-2023-097).

For citation: Sysoev A. A., Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Solovyev K. V., Krasnova N. K., Analytical study of operating modes of RF ion funnels in the gas dynamic interfaces of tandem triple-quadrupole mass-spectrometers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 134–145. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16411>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

В статье рассматривается один из элементов тандемного трехквadrupольного масс-анализатора с ионизацией электрораспылением, а именно – радиочастотная воронка, размещаемая в форвакуумной области газодинамического интерфейса источника ионов. Ведущим исполнителем разработки такого масс-спектрометра, которая проводится в настоящее время в рамках федерального проекта «Развитие отечественного приборостроения гражданского назначения для научных исследований», осуществляемого под патронажем Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, является Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ [1 – 10].

Особенности функционирования радиочастотных фокусирующих воронок [11], предназначенных для снижения потерь ионов в газодинамическом интерфейсе источника ионов, изучаются в данной работе с помощью аналитических моделей. Прямое моделирование такого устройства требует, к сожалению, интенсивных ресурсоемких компьютерных

расчетов. Использование же аналитических моделей хотя и обеспечивает лишь качественные, а не количественные результаты функционирования воронок, позволяет эффективно отбирать перспективные направления оптимизации итогового конструктивного решения. Тем самым можно существенно уменьшить трудозатраты на первичный отбор перспективных вариантов, а в конечном счете добиться существенно лучших характеристик итогового варианта конструкции.

В работе исследуются аналитические модели высокочастотных электрических полей радиочастотных воронок и на этой основе делается предварительный выбор, каким может быть базовое конструктивное решение такого элемента газодинамического интерфейса источника ионов с электрораспылением. При этом принимаются решения о перспективности той или иной конструкции. Настоящая статья имеет статус краткого научного сообщения; более подробно эти результаты будут представлены в виде отдельной публикации.

Модельные электрические поля для каналов транспортировки с круговыми диафрагмами

Радиочастотные электрические ловушки типа SRIG (Stacked Ring Ion Guide), подробно рассмотренные в статьях [12, 13], представляют собой цепочку круговых диафрагм (рис. 1), к которым прикладываются высокочастотные электрические напряжения с противоположными фазами на соседних диафрагмах.

Для этих устройств запирающее действие радиочастотного электрического поля при удалении от оси и приближении к границам электродов растет экспоненциально с расстоянием, тогда как для обычных мультипольных радиочастотных ловушек с длинными цилиндрическими электродами запирающее действие подобного электрического поля при удалении от оси и приближении к границам электродов растет полиномиально. Тем самым ловушки типа SRIG обеспечивают более надежное удержание заряженных частиц (в нашем случае ионов), чем классические мультипольные радиочастотные ловушки.

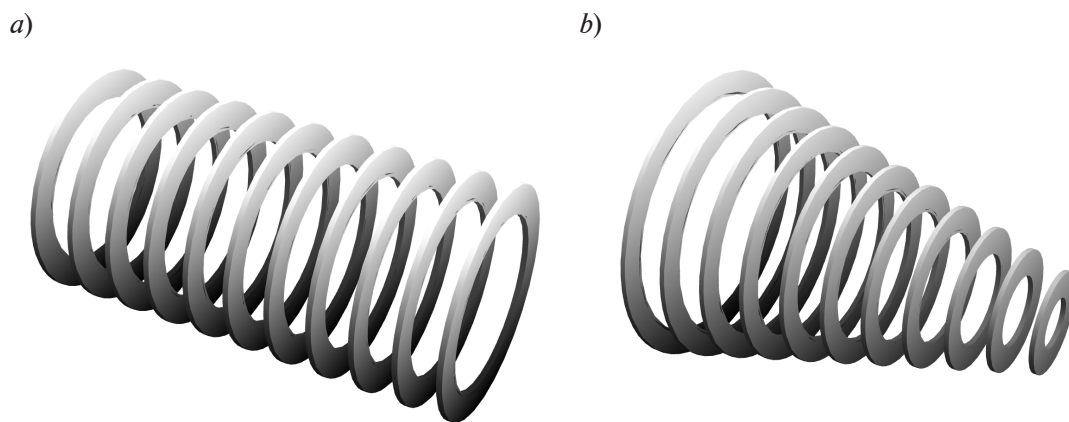


Рис. 1. Электродные конфигурации радиочастотных ловушек типа SRIG с цилиндрическим (а) и коническим (б) каналами удержания и транспортировки ионов

Для классической радиочастотной электрической ловушки типа SRIG с диафрагмами одинакового радиуса (см. рис. 1,а), у которой разность фаз радиочастотных напряжений, приложенных к соседним диафрагмам, равна π , электрический потенциал $U(z, r, t)$ вблизи оси описывается с хорошей точностью любой из двух формул:

$$U(z, r, t) = U_c(z, r) \cos(\omega t + \varphi), \quad U(z, r, t) = U_s(z, r) \cos(\omega t + \varphi), \quad (1)$$

где

$$U_c(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\pi R/L)} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right), \quad (2)$$

$$U_s(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\pi R/L)} \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right).$$

В формулах (1), (2) U_R , ω , φ – амплитуда, круговая частота и фаза радиочастотных напряжений, приложенных к электродам; R – внутренний радиус круговых диафрагм; L – расстояние между соседними диафрагмами; $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ – расстояние в радиальном направлении до оси от точки с декартовыми пространственными координатами (x, y, z) ; t – время; I_0 – модифицированная функция Бесселя нулевого порядка [14].

Для радиочастотной ловушки с конически сужающимся каналом транспортировки (см. рис. 1, б), у которого разность фаз радиочастотных напряжений, приложенных к соседним диафрагмам, равна π , электрический потенциал вблизи оси с хорошей точностью описывается любой из двух формул:

$$V(z, r, t) = V_C(z, r) \cos(\omega t + \varphi), \quad V(z, r, t) = V_S(z, r) \cos(\omega t + \varphi), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} V_C(z, r) &= \frac{U_R}{I_0(\pi R/L)} \left[z \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) + r \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right) \right], \\ V_S(z, r) &= \frac{U_R}{I_0(\pi R/L)} \left[z \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) - r \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

В этих формулах к прежним обозначениям добавляется I_1 – модифицированная функция Бесселя первого порядка [14].

В случае необходимости, когда для достижения того или иного дополнительного эффекта требуется нелинейным образом модифицировать электрическое поле воронки, можно использовать аддитивные корректирующие поправки, квадратичные по координате z . При внесении подобных искажений поля, соответствующим образом должна изменяться и конструкция воронки, т. е. положения и диаметры отдельных круговых диафрагм. Задача расчета положения и формы электродов по заданному электрическому полю является элементарной, в отличие от противоположной задачи, что еще раз показывает преимущества аналитического подхода с использованием модельных распределений электрического поля.

Для аналитического описания корректирующего потенциала $W(z, r, t)$ с квадратичной зависимостью от координаты z (вдоль оси устройства) можно воспользоваться любой из этих формул:

$$W(z, r, t) = W_C(z, r) \cos(\omega t + \varphi), \quad W(z, r, t) = W_S(z, r) \cos(\omega t + \varphi), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} W_C(z, r) &= \frac{U_R}{I_0(\pi R/L)} \left\{ z^2 \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) + 2zr \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} r^2 \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \left[I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) + I_2\left(\frac{\pi r}{L}\right) \right] \right\}, \\ W_S(z, r) &= \frac{U_R}{I_0(\pi R/L)} \left\{ z^2 \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) - 2zr \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_1\left(\frac{\pi r}{L}\right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} r^2 \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) \left[I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) + I_2\left(\frac{\pi r}{L}\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

I_2 – модифицированная функция Бесселя второго порядка [14].

Чтобы проверить, удовлетворяют ли функции (2), (4), (6) трехмерному уравнению Лапласа и, следовательно, могут ли они рассматриваться как электрические потенциалы некоторого электростатического поля, можно воспользоваться программой Wolfram Mathematica [15], обеспечивающей эффективный инструмент для символьных вычислений.

Примечание. Для формул модельных электрических потенциалов (1), (3), (5) использовано предположение о квазистатичности высокочастотного электрического поля. Оно справедливо, когда время характерного изменения электрических напряжений на электродах существенно превышает время распространения электромагнитного возмущения в пределах устройства. Типичные размеры электродных конфигураций, используемых в конструкциях масс-спектрометров, составляют десятки сантиметров. С учетом равенства скорости света и скорости распространения электромагнитного возмущения, это предположение заведомо выполняется для частот электрических напряжений, используемых в масс-спектрометрах (они составляют несколько гигагерц). В таком случае высокочастотный электрический потенциал, изменяющийся во времени и пространстве, можно выразить в виде произведения функции от времени (она описывает временное изменение электрических напряжений) на электростатический потенциал (соответствует постоянным напряжениям на электродах). Такой шаг есть, по сути, пренебрежение электродинамическими эффектами, т. е. сопутствующей электромагнитной волной.

Псевдопотенциальная модель движения ионов при наличии эффекта вязкого трения

Для качественного описания движения заряженных частиц в высокочастотных электрических полях полезно использовать псевдопотенциальную модель движения, согласно которой движение распадается на сумму из двух слагаемых: «медленной» составляющей в некотором эффективном квазистационарном силовом поле и движения в форме высокочастотных осцилляций с малой амплитудой.

Пусть рассматривается движение ионов в высокочастотном электрическом поле, потенциал которого имеет вид [16]:

$$U_{эф}(x, y, z, t) = \sum_k \left[p_k(t) \cos(\omega_k t + \varphi_k) U^{(k)}(x, y, z) + q_k(t) \sin(\omega_k t + \varphi_k) V^{(k)}(x, y, z) \right], \quad (7)$$

где $p_k(t)$, $q_k(t)$ – «медленные» функции времени; ω_k – «быстрые» частоты, далеко отстоящие друг от друга на частотной шкале; $U^{(k)}(x, y, z)$, $V^{(k)}(x, y, z)$ – электростатические поля, соответствующие постоянным электрическим напряжениям на электродах устройства.

Здесь стоит отметить, что понятия «медленные», «быстрые» и «далеко отстоящие» соотносятся с характерным временем T_0 перемещения ионов в транспортирующем канале:

$$dp_k(t)/dt \sim 1/T_0, \quad dq_k(t)/dt \sim 1/T_0, \quad \omega_k \gg 1/T_0, \quad \forall i \neq j: |\omega_i - \omega_j| \gg 1/T_0,$$

в соответствии с псевдопотенциальной моделью движения ионов (см. статьи [16, 18] и библиографию в них).

В присутствии нейтрального газа, его действие можно заменить наличием эффективного вязкого трения, сила которого задается законом Стокса [17]. Далее, e , m – заряд и масса иона; $\Omega = \gamma / m$ – эффективная частота столкновений ионов с молекулами нейтрального газа ($\gamma = \gamma(x, y, z, t)$ – коэффициент Стокса для эффективной вязкости, обусловленной столкновениями ионов с молекулами нейтрального газа в окрестности рассматриваемой точки пространства в рассматриваемый момент времени; этот коэффициент медленно меняется во времени и не зависит (в первом приближении) от относительной скорости ионов).

В дальнейших выкладках нижние индексы при функциях $U^{(k)}(x, y, z)$ и $V^{(k)}(x, y, z)$ будут обозначать частные производные потенциалов по соответствующим пространственным переменным, аргументы потенциалов для краткости будут опущены.

После аккуратного усреднения уравнений движения в высокочастотном электрическом поле оказывается, что упомянутое медленное движение иона осуществляется в псевдопотенциальном электрическом поле с псевдопотенциалом $\bar{U}(x, y, z, t)$, который обусловлен пространственным градиентом амплитуды высокочастотного электрического поля. Этот псевдопотенциал выражается как [18]:

$$\bar{U}(x, y, z, t) = \sum_k \frac{e}{4m(\Omega^2 + \omega_k^2)} \left\{ p_k^2(t) \left[(U_x^{(k)})^2 + (U_y^{(k)})^2 + (U_z^{(k)})^2 \right] + q_k^2(t) \left[(V_x^{(k)})^2 + (V_y^{(k)})^2 + (V_z^{(k)})^2 \right] \right\}. \quad (8)$$

Кроме того, в уравнениях медленного движения присутствует непотенциальное псевдоэлектрическое поле с компонентами $(\bar{E}_x, \bar{E}_y, \bar{E}_z)$, связанное с наличием вязкого трения и с пространственным градиентом фазы высокочастотного электрического поля:

$$\bar{E}_x(x, y, z, t) = \sum_k \frac{e(\Omega/\omega_k)}{2m(\Omega^2 + \omega_k^2)} p_k(t) q_k(t) (U_x^{(k)} V_{xx}^{(k)} - U_{xx}^{(k)} V_x^{(k)} + U_y^{(k)} V_{xy}^{(k)} - U_{xy}^{(k)} V_y^{(k)} + U_z^{(k)} V_{xz}^{(k)} - U_{xz}^{(k)} V_z^{(k)}), \quad (9)$$

$$\bar{E}_y(x, y, z, t) = \sum_k \frac{e(\Omega/\omega_k)}{2m(\Omega^2 + \omega_k^2)} p_k(t) q_k(t) (U_x^{(k)} V_{xy}^{(k)} - U_{xy}^{(k)} V_x^{(k)} + U_y^{(k)} V_{yy}^{(k)} - U_{yy}^{(k)} V_y^{(k)} + U_z^{(k)} V_{yz}^{(k)} - U_{yz}^{(k)} V_z^{(k)}), \quad (10)$$

$$\bar{E}_z(x, y, z, t) = \sum_k \frac{e(\Omega/\omega_k)}{2m(\Omega^2 + \omega_k^2)} p_k(t) q_k(t) (U_x^{(k)} V_{xz}^{(k)} - U_{xz}^{(k)} V_x^{(k)} + U_y^{(k)} V_{yz}^{(k)} - U_{yz}^{(k)} V_y^{(k)} + U_z^{(k)} V_{zz}^{(k)} - U_{zz}^{(k)} V_z^{(k)}). \quad (11)$$

Кроме этих псевдосил, в уравнения медленного движения входит также сила вязкого трения (изначально в них присутствовавшая) с компонентами $(\bar{F}_x, \bar{F}_y, \bar{F}_z)$:

$$\begin{aligned} \bar{F}_x(x, y, z, t) &= -\gamma(x, y, z, t) [\dot{x}(t) - u_x(x, y, z, t)], \\ \bar{F}_y(x, y, z, t) &= -\gamma(x, y, z, t) [\dot{y}(t) - u_y(x, y, z, t)], \\ \bar{F}_z(x, y, z, t) &= -\gamma(x, y, z, t) [\dot{z}(t) - u_z(x, y, z, t)], \end{aligned} \quad (12)$$

где (u_x, u_y, u_z) – компоненты скорости потока газа (она медленно меняется во времени) в окрестности рассматриваемой точки пространства в рассматриваемый момент времени; $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ – компоненты скорости медленного (усредненного по быстрым осцилляциям) движения иона.

Анализ свойств конической воронки с двухфазным питанием

Используем псевдопотенциальную модель для описания движения ионов в высокочастотном электрическом поле (3). Псевдопотенциал вычисляется по общей формуле (8). Пространственный градиент фазы высокочастотного электрического поля в данном случае отсутствует, так что мы имеем дело с непотенциальной псевдоэлектрической силой. Трехмерный график псевдопотенциала имеет форму некоего желоба с краями, резко растущими при удалении от оси и приближении к электродам, причем наклон краев желоба растет по мере приближения к выходу из воронки. Это означает, что такое высокочастотное электрическое поле эффективно «прижимает» ионы к оси устройства, и это прижимающее усилие существенно возрастает по ходу движения, делая пучок ионов все более узким.

Неприятным эффектом можно считать наличие гофрировки псевдопотенциала на оси системы, так как она может создавать паразитные локальные ловушки для ионов. Кроме того, в такой конструкции не приходится надеяться на охлаждение ионов (сброс их избыточной кинетической энергии), поскольку высокочастотное электрическое поле на оси не равно нулю и, значит, ионы постоянно раскачиваются этим полем.

Помимо этих недостатков, распределение псевдопотенциальной функции по оси воронки медленно растет к ее выходу, что будет тормозить движение ионов и затруднять их выход через выходное отверстие. Для такой воронки оказывается необходимым прикладывать дополнительное тянущее электрическое поле. Такую меру можно реализовать, если к диафрагмам прикладывать дополнительные статические потенциалы и обеспечить постоянное приращение статического электрического потенциала между соседними диафрагмами.

Анализ свойств конической воронки с четырехфазным питанием

Для радиочастотной ловушки с коническими электродами (см. рис. 1, *b*), у которой разность фаз радиочастотных напряжений, приложенных к соседним диафрагмам, равна $\pi/2$, электрический потенциал вблизи оси с хорошей точностью описывается выражением

$$V(z, r, t) = V_C^*(z, r) \cos(\omega t + \varphi) + V_S^*(z, r) \sin(\omega t + \varphi), \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} V_C^*(z, r) &= \frac{U_R}{I_0(\pi R/2L)} \left[z \cos\left(\frac{\pi z}{2L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{2L}\right) + r \sin\left(\frac{\pi z}{2L}\right) I_1\left(\frac{\pi r}{2L}\right) \right], \\ V_S^*(z, r) &= \frac{U_R}{I_0(\pi R/2L)} \left[z \sin\left(\frac{\pi z}{2L}\right) I_0\left(\frac{\pi r}{L}\right) - r \cos\left(\frac{\pi z}{2L}\right) I_1\left(\frac{\pi r}{2L}\right) \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

В этом случае на графике псевдопотенциала тоже возникает желоб, который эффективно «прижимает» ионы к оси устройства, причем сила такого воздействия квадратично возрастает по мере приближения к выходу из воронки. А вот гофрировки псевдопотенциала вдоль оси нет, что гарантирует отсутствие локальных паразитных ловушек для ионов вдоль оси их перемещения. Однако значение псевдопотенциала на оси все же не нулевое, а значит формируется высокочастотное электрическое поле, которое раскачивает ионы. Следовательно, в такой конструкции также не приходится надеяться на охлаждение ионов (сброс их избыточной кинетической энергии). Кроме того, распределение псевдопотенциальной функции по оси воронки медленно растет при увеличении расстояния от нуля по координате z , что несколько тормозит движение ионов и препятствует их прохождению через выходное отверстие, аналогично предыдущему случаю.

Помимо описанных особенностей модели, в случае высокочастотного электрического поля вида (13), имеется пространственный градиент его фазы. Но он играет позитивную роль, так как возникающая при этом непотенциальная электрическая псевдосила лишь дополнительно прижимает ионы к оси устройства и обеспечивает постоянное тянущее усилие, направленное к выходу из воронки. Этот фактор мог бы позволить обойтись без дополнительного тянущего статического электрического поля, однако тянущая электрическая псевдосила зависит от массы и, следовательно, возможно новое препятствие — дополнительная дискриминация по массам ионов. Может возникнуть ситуация, когда для слишком больших значений массы тянущее усилие псевдосилы окажется неспособным преодолеть торможение движущихся ионов и возникнет препятствие для их выхода из воронки.

Анализ свойств конической воронки с архимедовой волной псевдопотенциала

Системы с бегущей волной псевдопотенциала рассматриваются в работах [19 – 21]. В данном случае исследуются свойства радиочастотной ловушки с коническими электродами, у которой высокочастотное электрическое поле формирует вдоль оси устройства медленно бегущую волну псевдопотенциала. В минимумах волны псевдопотенциала высокочастотное электрическое поле равно нулю, и именно в этих точках формируются локальные сгустки ионов, которые затем перемещаются вдоль оси устройства на выход из воронки, причем синхронно с перемещением локальных минимумов псевдопотенциальной волны. Существенно, что таким образом обеспечивается транспортировка ионов, не зависящая от их массы, поскольку скорость перемещения минимумов волны



псевдопотенциала определяется параметрами высокочастотных напряжений, приложенных к электродам устройства (и ничем иным).

Для такой радиочастотной ловушки электрический потенциал вблизи оси описывается с хорошей точностью следующей формулой:

$$V(z, r, t) = [V_C^*(z, r) \cos(2\pi t/T) + V_S^*(z, r) \sin(2\pi t/T)] \cos(\omega t + \varphi), \quad (15)$$

где T – период «медленного» времени, определяющий скорость транспортировки; потенциалы $V_C^*(z, r)$ и $V_S^*(z, r)$ задаются формулами (14).

В этом случае график также показывает гофрированный желоб псевдопотенциала, а по мере развития процесса во времени гофрировка медленно перемещается вместе с транспортирующей волной псевдопотенциала, эффективно прижимая ионы к оси устройства. Кроме того, на оси системы возникает медленно бегущая волна псевдопотенциала, пригнудительно транспортирующая ионы от входа к выходу.

Бегущая волна псевдопотенциала на оси радиочастотной воронки характеризуется переменной максимальной амплитудой, которая квадратично растет по мере приближения к выходу из воронки, но при этом в точках минимума значение псевдопотенциала бегущей волны равно нулю. Как уже отмечалось выше, в точках минимума происходит захват ионов и формирование их сгустков, а при медленном перемещении волны псевдопотенциала вдоль оси устройства осуществляется синхронизированная транспортировка ионов, не зависящая от их массы. Поскольку в центрах сгустков ионов высокочастотное электрическое поле равно точно нулю, а при незначительных отклонениях ионов в пределах объема сгустка высокочастотное электрическое поле оказывается очень малым, вполне можно рассчитывать хотя бы на частичное охлаждение ионов в процессе транспорта через форвакуумную область газодинамического интерфейса.

Пространственный градиент фазы высокочастотного электрического поля для электрического потенциала (15) равен нулю, поэтому какие-либо дополнительные эффекты, связанные с наличием непотенциальной псевдоэлектрической силы (см. формулы (9) – (11)), в такой системе отсутствуют.

Заключение

Для радиочастотных ионных воронок с круговыми диафрагмами были построены аналитические модели высокочастотного электрического поля. С их помощью был выполнен качественный анализ функционирования радиочастотных ионных воронок в разных режимах работы. В результате из всех рассмотренных вариантов наиболее перспективной конструкцией представляется радиочастотная воронка с коническим каналом транспортировки и электрическим питанием, обеспечивающим формирование транспортирующей архимедовой волны псевдопотенциала на оси устройства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ketola R. A., Kiuru J. T., Tarkiainen V., Kotiaho T., Sysoev A. A. Comparison of analytical performance of a micro array quadrupole instrument and a conventional quadrupole mass spectrometer equipped with membrane inlets // *Rapid Communications in Mass Spectrometry*. 2003. Vol. 17. No. 7. Pp. 753–756.
2. Adamov A., Viidanoja J., Kärpänoja E., Paakkanen H., Ketola R. A., Kostiaainen R., Sysoev A., Kotiaho T. Interfacing an aspiration ion mobility spectrometer to a triple quadrupole mass spectrometer // *Review of Scientific Instruments*. 2007. Vol. 78. No. 4. P. 044101.
3. Troyan V. I., Borisjuk P. V., Krasavin A. V., Vasiliev O. S., Palchikov V. G., Avdeev I. A., Chernyshev D. M., Poteshin S. S., Sysoev A. A. Multisectional linear ion trap and novel loading method for optical spectroscopy of electron and nuclear transitions // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2015. Vol. 21. No. 1. Pp. 1–12.
4. Борисюк П. В., Васильев О. С., Деревяшкин С. П. и др. Захват, удержание и лазерное охлаждение ионов Th^{3+} в многосекционной линейной квадрупольной ловушке // *Квантовая электроника*. 2017. Т. 47. № 5. С. 406–411.

5. **Borisyyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.** Loading of mass spectrometry ion trap with Th ions by laser ablation for nuclear frequency standard application // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2017. Vol. 23. No. 4. Pp. 146–151.
6. **Borisyyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.** Mass selective laser cooling of $^{229}\text{Th}^{3+}$ in a multisectional linear Paul trap loaded with a mixture of thorium isotopes // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2017. Vol. 23. No. 4. Pp. 136–139.
7. **Konenkov A. N., Konenkov N. V., Sysoev A. A.** Modeling dipolar excitation for quadrupole mass filter // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2022. Vol. 28. No. 1–2. Pp. 65–72.
8. **Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.** Balance of the 6th and 10th spatial harmonics amplitudes of a quadrupole mass filter with round rods // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2022. Vol. 482. December. P. 116949.
9. **Bugrov P. V., Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.** Properties of the multipole fields formed by round electrodes // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2023. Vol. 490. August. P. 117081.
10. **Бугров П. В., Сысоев А. А., Коненков Н. В.** Моделирование квадрупольного фильтра масс с окупольным полем // *Масс-спектрометрия* 2022. Т. 19. № 3. С. 197–200.
11. **Yavor M. I.** Optics of charged particle analyzers. Amsterdam: Academic Press, 2009 (*Advances of Imaging and Electron Physics*. Vol. 157). Pp. 142–168.
12. **Teloy E., Gerlich D.** Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique // *Chemical Physics*. 1974. Vol. 4. No. 3. Pp. 417–427.
13. **Gerlich D., Kaefer G.** Ion trap studies of association processes in collisions of CH^{3+} and CD^{3+} with $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, D_2 and He at 80 K // *The Astrophysical Journal*. 1989. Vol. 347. No. 2. Pp. 849–854.
14. **Абрамовиц М., Стиган И.** Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
15. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing; URL: <http://wolfram.com/mathematica/>
16. **Berdnikov A. S.** A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields // *Microscopy and Microanalysis*. 2015. Vol. 21. No. S4. Pp. 78–83.
17. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Курс теоретической физики. В 10 тт. Т. 10. Физическая кинетика (Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.). М.: Физматлит, 2007. 536 с.
18. **Tolmachev A. V., Chernushevich I. V., Dodonov A. F., Standing K. G.** A collisional focusing ion guide for coupling an atmospheric pressure ion source to a mass spectrometer // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1997. Vol. 124. No. 1. Pp. 112–119.
19. **Андреева А. Д., Бердников А. С.** Масс-спектрометрические устройства на основе радиочастотных электрических полей с архимедовыми свойствами // *Масс-спектрометрия*. 2011. Т. 8. № 4. С. 293–296.
20. **Бердников А. С., Андреева А. Д.** Устройство для манипулирования заряженными частицами. 2011. Патент Федеральной службы Российской Федерации по интеллектуальной собственности на полезную модель RU 113611 (Дата приоритета/подачи заявки: 05.05.2011).
21. **Бердников А. С., Андреева А. Д.** Устройство для манипулирования заряженными частицами. 2012. Патент Федеральной службы Российской Федерации по интеллектуальной собственности на изобретение RU 2465679 (Дата приоритета/подачи заявки: 05.05.2011).

REFERENCES

1. **Ketola R. A., Kiuru J. T., Tarkiainen V., et al.**, Comparison of analytical performance of a micro array quadrupole instrument and a conventional quadrupole mass spectrometer equipped with membrane inlets, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 17 (7) (2003) 753–756.
2. **Adamov A., Viidanoja J., Kärpänoja E., et al.**, Interfacing an aspiration ion mobility spectrometer to a triple quadrupole mass spectrometer, *Rev. Sci. Instrum.* 78 (4) (2007) 044101.
3. **Troyan V. I., Borisyyuk P. V., Krasavin A. V., et al.**, Multisectional linear ion trap and novel loading method for optical spectroscopy of electron and nuclear transitions, *Eur. J. Mass Spectrom.* 21 (1) (2015) 1–12.
4. **Borisyyuk P. V., Vasiliev O. S., Derevyashkin S. P., et al.**, Trapping, retention and laser cooling of Th^{3+} ions in a multisection linear quadrupole trap, *Quant. Electron.* 47 (5) (2017) 406–411.



5. **Borisyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.**, Loading of mass spectrometry ion trap with Th ions by laser ablation for nuclear frequency standard application, *Eur. J. Mass Spectrom.* 23 (4) (2017) 146–151.
6. **Borisyuk P. V., Derevyashkin S. P., Khabarova K. Y., et al.**, Mass selective laser cooling of $^{229}\text{Th}^{3+}$ in a multisectional linear Paul trap loaded with a mixture of thorium isotopes, *Eur. J. Mass Spectrom.* 23 (4) (2017) 136–139.
7. **Konenkov A. N., Konenkov N. V., Sysoev A. A.**, Modeling dipolar excitation for quadrupole mass filter, *Eur. J. Mass Spectrom.* 28 (1–2) (2022) 65–72.
8. **Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.**, Balance of the 6th and 10th spatial harmonics amplitudes of a quadrupole mass filter with round rods, *Int. J. Mass Spectrom.* 482 (December) (2022) 116949.
9. **Bugrov P. V., Sysoev A. A., Konenkov A. N., Konenkov N. V.**, Properties of the multipole fields formed by round electrodes, *Int. J. Mass Spectrom.* 490 (August) (2023) 117081.
10. **Bugrov P. V., Sysoev A. A., Konenkov N. V.**, Modeling of a quadrupole mass filter with octupole field, *Mass-Spektrometriya.* 19 (3) (2022) 197–200 (in Russian).
11. **Yavor M. I.**, Optics of charged particle analyzers (*Advances of Imaging and Electron Physics.* Vol. 157), Academic Press, Amsterdam (2009) 142–168.
12. **Teloy E., Gerlich D.**, Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique, *Chem. Phys.* 4 (3) (1974) 417–427.
13. **Gerlich D., Kaefer G.**, Ion trap studies of association processes in collisions of CH^{3+} and CD^{3+} with $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, D_2 and He at 80 K, *Astrophys. J.* 347 (2) (1989) 849–854.
14. **Abramowitz M. A., Stegun I. A. (Eds.)**, Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, Tenth edition, National Bureau of Standards, Washington, 1972.
15. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing, URL: <http://wolfram.com/mathematica/>
16. **Berdnikov A. S.**, A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields, *Microsc. Microanal.* 21 (S4) (2015) 78–83.
17. **Landau L. D., Lifshitz E. M.**, Course of theoretical physics. Vol. 10. **Pitayevskii L. P., Lifshitz E. M.**, Physical kinetics, First edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, UK. 1981.
18. **Tolmachev A. V., Chernushevich I. V., Dodonov A. F., Standing K. G.**, A collisional focusing ion guide for coupling an atmospheric pressure ion source to a mass spectrometer, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B.* 124 (1) (1997) 112–119.
19. **Andreeva A. D., Berdnikov A. S.**, Mass spectrometric devices with Archimedean radio frequency electric fields, *J. Anal. Chem.* 67 (13) (2012) 1034–1037.
20. **Berdnikov A. S., Andreeva A. D.**, *Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami*, patent Federalnoy sluzhby RF po intellektualnoy sobstvennosti na poleznuyu model RU 113611 (Data prioriteta/podchi 05.05.2011) [A device for charge particle manipulation. Patent of the Federal Service for Intellectual Property for a utility model of the Russian Federation] – RU 113611 (05.05.2011) (in Russian).
21. **Berdnikov A. S., Andreeva A. D.**, *Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami*, patent Federalnoy sluzhby RF po intellektualnoy sobstvennosti na izobreteniyе RU 113611 (Data prioriteta/podchi 05.05.2011) [A device for charge particle manipulation. Patent of the Federal Service for Intellectual Property for an invention of the Russian Federation] – RU 2465679 (2012) (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЫСОЕВ Алексей Александрович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Национального исследовательского ядерного университета МИФИ, Москва, Россия.

115409, Россия, г. Москва, Каширское шоссе, 31

aasysoyev@mephi.ru

ORCID: 0000-0003-0985-5964

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.
198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.
asberd@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

МАСЮКЕВИЧ Сергей Владимирович – старший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.
198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.
serg_08@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0873-8849

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, младший научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия. Санкт-Петербург, Россия.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
k-solovyev@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3514-8577

КРАСНОВА Надежда Константиновна – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.k.krasnova@mail.ru
ORCID: 0000-0002-6162-9481

THE AUTHORS

SYSOEV Alexey A.

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute)
31 Kashirskoe HWY, Moscow, 115409, Russia
aasysoyev@mephi.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

BERDNIKOV Alexander S.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31–33, Ivana Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
asberd@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

MASYUKEVICH Sergey V.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31–33, Ivana Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
serg_08@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0873-8849

SOLOVYEV Konstantin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Institute for Analytical Instrumentation, RAS
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
k-solovyev@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3514-8577



KRASNOVA Nadezhda K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

n.k.krasnova@mail.ru

ORCID: 0000-0002-6162-9481

*Статья поступила в редакцию 25.09.2023. Одобрена после рецензирования 16.10.2023.
Принята 16.10.2023.*

Received 25.09.2023. Approved after reviewing 16.10.2023. Accepted 16.10.2023.