

03;12

Характер струйных течений в интерфейсах масс-спектров при различных давлениях и длинах камеры

© С.В. Булович, А.Н. Баженов, Н.Р. Галль

Санкт-Петербургский политехнический университет
ВНИИОкеангеология им. И.С. Грамберга, Санкт-Петербург
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
E-mail: gall@ms.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 2011 г.

Ввод пробы в масс-спектрометр, особенно при изучении биоорганических объектов, как правило, проводится со стороны атмосферного давления в высокий вакуум через газодинамический интерфейс — камеру с промежуточным вакуумом или систему камер с постепенным понижением давления. Описана трансформация расчетного характера струйных течений в однокамерном интерфейсе в зависимости от его длины и давления. Это позволяет сознательно использовать параметры прибора для получения высокой трансмиссии ионов и снижения их дискриминаций по массе.

Масс-спектрометрия с ионизацией при атмосферном давлении и вводом сигнала в высокий вакуум через газодинамический интерфейс является сегодня важнейшим научным инструментом исследований в области биологии и биохимии [1], и значение усилий, направленных на повышение чувствительности, точности и воспроизводимости метода, трудно переоценить. За развитие этого метода американскому физика Дж. Фенну присуждена Нобелевская премия 2003 года. Понимание характера течения газа в интерфейсе, в области промежуточного вакуума, создает научную базу для целенаправленного управления потоками ионов в этой области. По интерпретации Американского масс-спектрометрического общества число научных публикаций, посвященных процессам в газодинамических интерфейсах, за последние 5 лет превысило 4000, выдано более 120 патентов [2]. Целью данной работы является представление прецизионных расчетов, показывающих

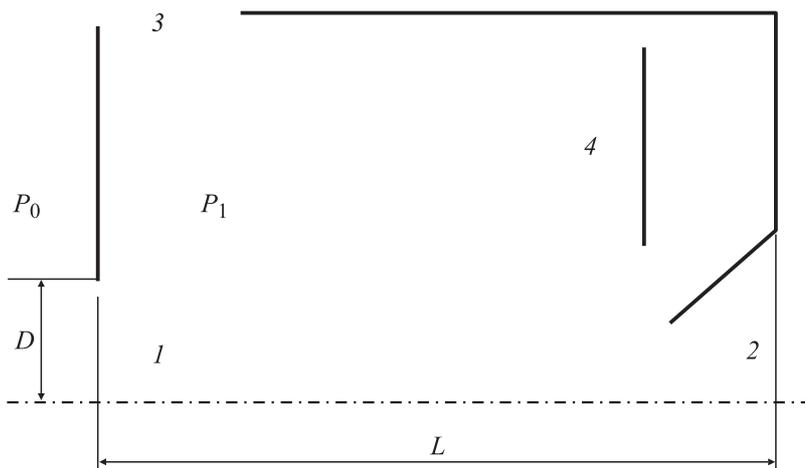


Рис. 1. Модельный газодинамический интерфейс масс-спектрометра: 1 — входное отверстие (сопло), 2 — выходное отверстие (скиммер), 3 — отверстие для откачки интерфейса, 4 — фокусирующая диафрагма (стенка), P_0 — атмосферное давление, P_1 — статическое давление в интерфейсе, D — диаметр входного отверстия, L — длина интерфейса.

резкое изменение характера струйных течений газа в зависимости от длины интерфейса и давления в нем. Эти параметры, особенно второй, часто являются параметрами настройки прибора, и понимание того, как искажается характер течений при изменении давления, важен для разработки и реализации научного подхода к алгоритму настройки и эксплуатации масс-спектрометра.

На рис. 1 представлен модельный газодинамический интерфейс, выполненный в рамках схемы Конторовица–Грея [3]. В реальности в интерфейсе, как правило, располагаются электроды для фокусировки и транспортировки ионов, но в данной работе мы их присутствием пренебрежем. Электрод 4, служащий для направления ионов с скиммер, в расчете рассматривается просто как твердая преграда для газа.

Как правило, газодинамический интерфейс работает в интервале давлений 200–1000 Па, причем ввод ионов вместе с газом осуществляется через сопло 1 из области с атмосферным давлением P_0 . Сопло может быть как очень коротким (диафрагма), так и длинным (капилляр),

но для данной работы эта разница незначительна. Диаметр сопла (калибр) D является естественной мерой как длины камеры L , так и всех остальных размеров. Размер камеры в поперечном направлении практически всегда намного больше ее длины.

Попадающий в камеру газ откачивается через отверстие 3 форвакуумным насосом и частично проникает через отверстие 2 (скиммер) в следующую, обычно высоковакуумную камеру прибора. Диаметр скиммера, как правило, много меньше откачного отверстия 3, так что поток газа через него составляет лишь малую величину от входного потока. Название „скиммер“ носит исторический характер и обязано срезанию струи острием преграды, что в современных приборах не всегда имеет место.

Из-за большого отношения давлений в атмосферной области и в интерфейсе врывающийся через сопло газ образует характерную систему ударных волн, скачков уплотнений и трансзвуковых и дозвуковых струйных течений [4]. Для расчетов использована программа ANSYS FLUENT; расчеты проводились в осесимметричном приближении, а все подробности, касающиеся процедуры расчетов и их верификации, опубликованы нами ранее [5,6].

На рис. 2 представлены три различные картины течения газа. Рис. 2, *a* соответствует течениям в условно „короткой“ камере с длиной 7 мм, т.е. 14 калибров сопла. Рис. 2, *b* и *c* соответствуют пространственному распределению течений в условно „длинной“ камере с длиной 40 мм, т.е. 80 калибров сопла.

Обсудим, какие изменения в структуре газовых потоков происходят при изменении одного из параметров интерфейса: длины камеры и давления. Рассмотрим в первую очередь влияние длины камеры. На рис. 2, *a* и *b* представлено течение газа для случаев „короткой“ и „очень длинной“ камер интерфейса (значение этих определений мы поясним ниже). В случае короткой камеры основное влияние на структуру течения газа оказывает ее задняя стенка, которая выступает как твердая преграда на пути газового потока и состоит из скиммера и фокусирующего электрода. Непосредственно за соплом образуется бочка Маха, длина h которой примерно соответствует классической формуле

$$h = \frac{2}{3} D (P_0/P_1)^{1/2}$$

и в нашем случае составляет величину 3 мм (обозначения на рис. 1). После скачка уплотнения струя снова разгоняется, поворачивает на

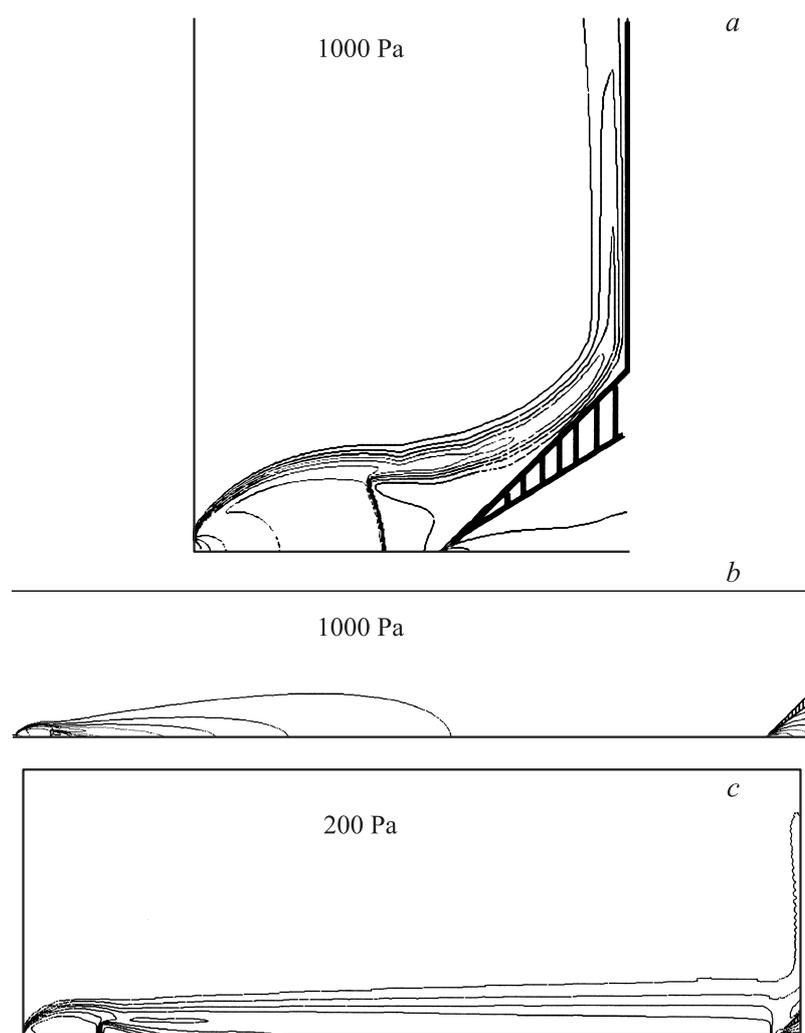


Рис. 2. Рассчитанные распределения скоростей газового потока в газодинамических интерфейсах: *a* — камера длиной 7 mm, $P = 1000$ Pa; *b* — 40 mm, $P = 1000$ Pa; *c* — 40 mm, $P = 200$ Pa. Линии равных скоростей проведены через каждые 100 m/s.

90° и основной поток газа движется вдоль фокусирующего электрода, образуя вихри разных масштабов. Течение носит существенно нестационарный характер, с накоплением газа перед преградой в виде скиммера и последующим сбросом давления. Природа возникающих при этом колебаний давления, температуры и положения скачка уплотнения, а также их частота и амплитуда выявлены и описаны в наших работах [6,7].

В случае длинной камеры (рис. 2, *b* и *c*) преграда расположена далеко и не оказывает влияния на основную структуру течения. Истечение газа из области атмосферного давления происходит через сопло в объем интерфейса и сопровождается классической картиной образования структуры Маха с последующим вторичным разгоном струи и ее постепенным торможением в результате диффузионного распыливания и подтекания газа на периферию струи. Движение газа носит ламинарный характер, особенно при 200 Pa.

Чем длиннее камера, тем ближе будет течение струи к свободному режиму и выше степень автомодельности течения. Под автомодельностью принято понимать уменьшение скорости струи в последовательных поперечных сечениях по степенному закону, зависящему от характера течения. Так, для турбулентных струй это $1/x$, а для ламинарных — $1/x^{1/3}$, где x — расстояние от точки, принятой за расположение „источника“ до текущей, вниз по потоку.

Видимо, следует ожидать, что при промежуточных длинах возможен режим течения, в котором уже не будет колебаний из-за отражения потока от задней стенки, но камера окажется недостаточно длинной, чтобы обеспечить развитие автомодельной струи.

Большая часть движения в случае длинной камеры является ламинарной, однако на расстоянии порядка 40 калибров от выхода сопла начинает развиваться турбулентность. Область турбулентного движения ограничена длиной порядка 10–15 калибров, и ее можно охарактеризовать коэффициентом турбулентной вязкости, в максимуме достигающим 20.

Рассмотрим теперь влияние давления на течение газа в длинной камере. Сравним данные, представленные на рис. 2, *b* и *c*. Видно, что основная структура течений остается без изменений: непосредственно после выхода газа из сопла формируется бочка Маха, затем идет область автомодельного течения, вблизи задней стенки газ растекается вдоль нее. В то же время детали течения при 200 Pa достаточно

сильно отличаются от условий при 1000 Pa: длина и ширина бочки Маха примерно в 5 раз больше, струя широкая и слабо расходящаяся. В отличие от ситуации при 1000 Pa струя сохраняет ламинарность на всем протяжении.

Описанная ситуация является частным случаем трансформации картины струйных течений при изменении фонового давления в большую или меньшую сторону. При повышении фонового давления в камере область сверхзвукового течения будет уменьшаться, а тенденция к автомодельному торможению — возрастать. Это соответствует как бы повышению эффективной длины камеры.

Наоборот, при уменьшении давления увеличивается поперечный размер струи и уменьшается область развития ее автомодельности. Это в какой-то степени эквивалентно эффективному „укорачиванию“ камеры. При снижении давления также возрастает роль диффузии и снижается уровень турбулентности течения.

Таким образом, при выборе геометрии интерфейса и рабочего режима по давлению можно выделить следующие тенденции. Увеличение длины интерфейса и увеличение фонового давления в нем приводят к более предсказуемому струйному характеру течения, близкого к автомодельному. Струя достаточно узка в начале и быстро расплывается. Снижение фонового давления приводит к большей ширине струи и ее относительно меньшей расходимости. При совсем коротком интерфейсе, соизмеримом по длине с бочкой Маха, течение носит существенно нестационарный характер, и перенос массы начинает осуществляться ортогонально первоначальному направлению течения практически сразу за скачком уплотнения. Этот эффект следует учитывать при выборе давления в сочетании с установкой электродов, фокусирующих ионы в интерфейсах [8].

Работа выполнена при поддержке Shimadzu Corp., Япония, за что авторы приносят ей благодарность.

Список литературы

- [1] Fenn J.B., Mann V.V., Meng C.K., Wong S.F., Whitehouse C.M. // Science. 1989. V. 246. P. 64–71.
- [2] www.asms.org/whaisms/p16.html
- [3] Yamashita M., Fenn J.B. // J. Chem. Phys. 1984. V. 88. N 20. P. 4451–4459.

- [4] *Entwistle A., Andreyeva A., Bulovich S., Lapushkin M., Bazhenov A., Giles R., Gall N.* // Abstracts of Conf. of American Society for Mass-Spectrometry, ASMS-2011. June 02–05, Denver, USA. P. 1633.
- [5] *Булович С.В., Виколайнен В.Э., Петров Р.Л.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. В. 23. С. 81–86.
- [6] *Булович С.В., Баженов А.Н., Петров Р.Л.* // ЖТФ. 2009. Т. 79. В. 12. С. 92–94.
- [7] *Баженов А.Н., Булович С.В., Галль Л.Н., Галль Н.Р.* // Масс-спектрометрия. 2011. Т. 8. № 1. С. 27–32.
- [8] *Ryan T. Kelly, Aleksey V. Tolmachev, Jason S. Page, Keqi Tang, Richard D. Smith* // Mass-Spectrometry Reviews. 2009. V. 28. P. 56–78.