

## Краткие сообщения

01;10

### Моделирование ионно-оптических систем для масс-спектрометров с квадрупольным фильтром масс

© А.А. Трубицын

Рязанская государственная радиотехническая академия,  
390005 Рязань, Россия  
e-mail: oief@rgta.ryazan.ru

(Поступило в Редакцию 20 февраля 2002 г. В окончательной редакции 25 ноября 2002 г.)

Предложены конструкции и проведено моделирование ионно-оптических систем с промежуточной фокусировкой и параллельным выходом ионного потока, предназначенные для совместного использования с квадрупольным фильтром масс с целью улучшения его аналитических характеристик.

Численное моделирование электронно-(ионно-)оптических систем традиционно включает в себя такие разделы, как моделирование электростатических полей и вычисление траекторий заряженных частиц в этих полях.

Численное моделирование в отличие от аналитического обладает рядом преимуществ, основным из которых является значительно более низкий уровень идеализации реальных конструкций. При этом в наибольшей степени по данной позиции выигрывают методы, базирующиеся на вычислении функции распределения потенциала в неограниченной области, т.е. методы решения внешней задачи Дирихле. К самым продвинутым численным методам решения задач математической физики, появившимся в компьютерную эпоху, следует отнести метод граничных элементов [1]. Однако наряду с несомненными достоинствами методу присущ серьезный недостаток — низкая точность вычислений (ошибка может превышать 100%) потенциала вблизи границы моделируемой области вследствие сингулярного поведения подынтегральной функции.

В предыдущей работе [2] предложена методика вычисления сингулярных интегралов при решении внутренней задачи Дирихле. С целью развития метода предложены формулы оценки сингулярных интегралов при решении внешней задачи, по сути аналогичные формулам (с незначительной коррекцией) оценки соответствующих интегралов при решении внутренней задачи.

Предложенная методика решения внешней задачи Дирихле была протестирована с помощью расчета функции распределения потенциала  $u$  в окружающем пространстве от шара, заряженного до потенциала 1. Точность вычисления потенциала оказывается принципиально ограниченной снизу лишь ошибками округления, а на практике определяется количеством элементарных разбиений границы моделируемой области. В частности, точность оценки функции  $u = 1/R$ , где  $R$  — радиальная координата, оказалась в пределах  $10^{-2}$ – $10^{-6}\%$

при разбиении границы верхней части меридионального сечения шара на 50–1000 прямолинейных граничных элементов.

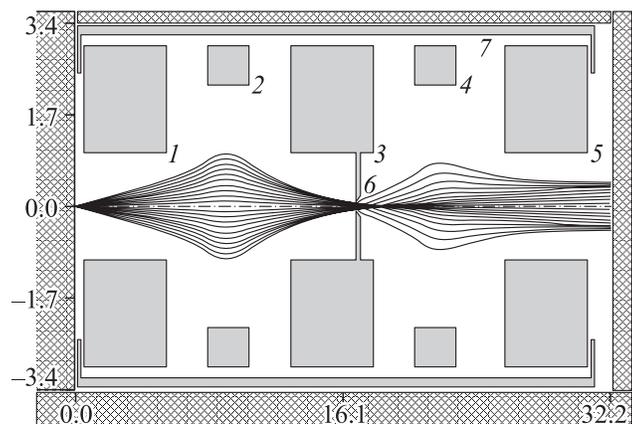
На базе указанного способа вычисления функции распределения потенциала, а также безградиентного метода расчета траекторий заряженных частиц в электростатическом поле [3] и корреляционного метода поиска условий угловой фокусировки высокого порядка [4] разработана прикладная программа „Фокус“ моделирования аксиально-симметричных систем корпускулярной оптики с произвольной геометрией электродов. Программа позволяет в графическом режиме осуществить ввод и модификацию конструкции, вычислить распределение потенциала в выделенной области и провести траекторный анализ системы. Далее будет продемонстрирован пример применения программы для моделирования входных ионно-оптических систем, предназначенных для использования в масс-спектрометрии с квадрупольным фильтром масс (КФМ).

Квадрупольный фильтр масс является одним из наиболее широко используемых устройств в масс-спектрометрии вещества [5]. Основными потребительскими параметрами КФМ являются пропускание и разрешающая способность. Условие получения одновременно высоких значений данных параметров является внутренне противоречивым. На практике данное противоречие может быть сглажено с помощью использования входных ионно-оптических систем согласования потока ионов с фазовыми характеристиками (эллипсами захвата) КФМ.

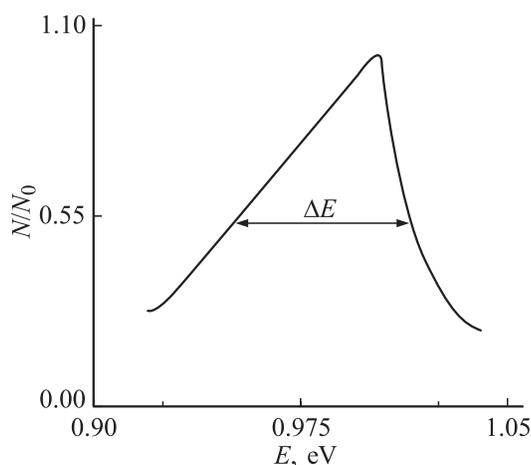
Если ионы входят в анализатор с координатой  $x_0 = y_0 = 0$ , то для 100%-ного пропускания анализатора при разрешении  $\Delta M/M$  поперечная скорость ионов должна быть ограничена условием [6]

$$\dot{x}_0, \dot{y}_0 < 0.16r_0w \left( \frac{\Delta M}{M} \right)^{1/2},$$

где  $r_0$  — „радиус поля“,  $w$  — частота ВЧ напряжения.



**Рис. 1.** Траектории ионов в линзовой системе с промежуточной фокусировкой. 1, 5 — электроды, 6 — диафрагма, 7 — электростатический экран. Соответствующие потенциалы [В]:  $V_1 = 0, V_2 = 1, V_3 = 0, V_4 = 1, V_5 = 0, V_6 = V_3, V_7 = 0$ . Внутренние диаметры электродов:  $d_1 = 2, d_2 = 4.5, d_3 = 2, d_4 = 4.58, d_5 = 2$ . Энергия ионов 1 eV.



**Рис. 2.** Функция пропускания линзовой системы.

Из представленного выражения следует, что отношение разрешающих способностей двух анализаторов с одинаковым пропусканием приблизительно определяется как  $(\sin \alpha_1 / \sin \alpha_2)^2$ , где  $\alpha_1, \alpha_2$  — диапазоны входных углов траекторий ионов первого и второго анализаторов соответственно. Поэтому использование систем преобразования расходящихся потоков в параллельные в значительной степени позволяет разрешить проблему повышения потребительских параметров КФМ.

В качестве базовой электронно-оптической системы выбрана одиночная линза, моделирование которой в работе [7] было проведено в парааксиальном приближении. С помощью программы „Фокус“ указанная линза рассчитана в условиях работы с широким диапазоном входных углов, для чего была проведена соответствующая коррекция ее геометрии. Анализ результатов рас-

четов показал возможность десятикратного уменьшения углового разброса траекторий ионов при использовании такой линзы.

Следующая часть работы заключалась в моделировании ионно-оптической системы, являющейся некоторой комбинацией электродов базовой и обеспечивающей промежуточную фокусировку ионного потока. На рис. 1 представлены результаты ее траекторного анализа.

Такая система позволяет уменьшить диапазон ( $\pm 5^\circ$ ) входных углов до  $\pm 1^\circ$ . Другим и основным ее достоинством является зависимость пропускания от начальной энергии ионного потока. На рис. 2 представлен график относительного пропускания как функции начальной энергии, из которого следует вывод о возможности использования предлагаемой линзовой системы в качестве устройства предварительной энергосепарации ионов. Предварительная энергосепарация ионных потоков с успехом применяется в целях улучшения разрешения по массам в таких видах масс-спектрометрии, где разброс ионов по начальным энергиям составляет сотни или тысячи eV, например в масс-спектрометрии с лазерным, искровым и другим возбуждением. К тому же решение ряда современных физико-химических задач исследования вещества требует одновременного проведения энерго- и масс-анализа потоков ионов (см., например, [8]). Энергетическое разрешение  $\Delta E/E_0$  представленной системы на половине максимума функции пропускания составило  $\sim 5\%$ . Здесь  $E_0$  — энергия, соответствующая максимуму функции пропускания.

### Список литературы

- [1] Бреббия К., Телес Ж., Вроубель Л. Методы граничных элементов. М.: Мир, 1987. 524 с.
- [2] Трубицын А.А. // ЖВММФ. 1995. Т. 35. № 4. С. 532–541.
- [3] Трубицын А.А. // ЖВММФ. 1990. Т. 30. № 4. С. 1113–1115.
- [4] Трубицын А.А. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 5. С. 126–127.
- [5] Сысоев А.А., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977. 504 с.
- [6] Dawson P.H. // Int. Mass Spectrom and Ion Phys. 1975. Vol. 17. P. 423–445.
- [7] Глазер В. Основы электронной оптики. М.: Гостехиздат, 1957. 763 с.
- [8] Tolstogouзов A., Daolio S., Pagura C., Greenwood C.I. // Surf. Sci. 2000. Vol. 466. P. 127–136.