

ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И НАНОЭЛЕКТРОНИКА

УДК 621.384.8:543.51

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАХВАТА ИОНОВ В КВАДРУПОЛЬНОЙ ИОННОЙ ЛОВУШКЕ**А. Е. Малютин**, к.ф.-м.н., доцент кафедры ОиЭФ РГРТУ, Рязань, Россия;

orcid.org/0000-0002-1704-0792, e-mail: aemalutin@mail.ru

В. В. Иванов, к.т.н., доцент кафедры ОиЭФ РГРТУ, Рязань, Россия;

orcid.org/0000-0002-5655-0111, e-mail: oief@rsreu.ru

Ю. В. Черкасова, к.т.н., доцент кафедры ОиЭФ РГРТУ, Рязань, Россия;

orcid.org/0000-0003-2474-3629, e-mail: oief@rsreu.ru

Целью работы является исследование возможности применения аналитического подхода к решению вопроса об эффективности квадрупольных масс-спектрометров. Производится теоретический вывод выражений, описывающих коэффициент захвата ионов в квадрупольной ионной ловушке с учетом распределения их начальных параметров в фазовом пространстве. Рассматриваются несколько возможных распределений начальных параметров: точечная область ионизации, аксиальная ионизация, ионизация ленточным пучком и ввод ионов извне. Показано, что во всех случаях возможно получение аналитических выражений для коэффициента захвата ионов или достаточно точных аналитических приближений.

Ключевые слова: масс-спектрометрия, квадрупольная ионная ловушка, коэффициент захвата ионов, фазовое пространство, эллипсы захвата.

DOI: 10.21667/1995-4565-2022-80-189-199**Введение**

В 1953 году Пауль и Штайнведель описали принципы действия квадрупольных масс-анализаторов [1] и три года спустя, в 1956 году, ими был получен патент Германии на масс-анализаторы пролетного типа и ионную ловушку [2]. В этом же году в тезисах Берклинга [3] появилось и первое сообщение о практической реализации квадрупольной ионной ловушки. Однако, несмотря на это, вплоть до 1970-х годов данное направление приборостроения было представлено только приборами пролетного типа (фильтрами масс и монополярными масс-анализаторами). И только в 1970-х годах начинается активное экспериментальное исследование ионной ловушки и разрабатываются методы математического моделирования процессов движения заряженных частиц в квадрупольных полях.

В 1966 году Бруком [4, 5] была высказана оригинальная идея идентичности принципов работы циклического ускорителя заряженных частиц и квадрупольного фильтра масс. Используя эту аналогию и методы математического описания бетатронных генераторов, Барил и Септье [6] в статье 1974 года применяют матричный метод анализа и понятие фазового пространства к расчёту оптимальных рабочих точек для генерации и захвата однозарядных ионов при питании электродов квадрупольного анализатора гармонических сигналов. В том же году Доусон [7] публикует работу, в рамках которой реализовано дальнейшее развитие матричного метода для получения амплитудно-фазовых характеристик фильтра масс и оценки формы массовых пиков. И с этого момента в западной квадрупольной масс-спектрометрии указанный метод математического описания стал преобладающим.

В это же время в СССР выходит цикл статей [8, 9, 10], в которых закладываются основы альтернативного способа аналитического описания решения дифференциальных уравнений движения ионов в квадрупольных полях. Указанный метод, подобно матричному, дает возможность расчета амплитудно-фазовых характеристик и эллипсов захвата в фазовых пространствах квадрупольных анализаторов.

Таким образом, с момента создания квадрупольных анализаторов прошло уже более 60 лет. Однако до сих пор практически единственным методом анализа параметров данных приборов является статистический метод исследования с определёнными его вариациями. Проверка эффективности различных модификаций, будь то изменение конструкции, формы, частоты и амплитуды питающего электрода ВЧ сигнала или характеристик, вводимых в анализатор ионов, как правило, сводится к заданию массива ионов с последующим отслеживанием их траекторий движения [11]. При таком анализе могут использоваться как специализированные программные средства, так и узкоспециализированные программы, разрабатываемые самими исследователями. Метод прост, надёжен и универсален, но довольно затратен с точки зрения времени реализации большого количества однотипных расчётных операций.

В данной работе предлагается аналитический подход к решению вопроса анализа эффективности работы квадрупольных масс-анализаторов. В основе метода лежит возможность получения прямых аналитических формул для расчета коэффициентов захвата ионов с учетом разброса их начальных параметров в фазовом пространстве. Реализация указанного подхода даёт возможность производить моделирование структуры массовых пиков без необходимости обработки большого массива данных и расчетов траекторий движения отдельно взятых заряженных частиц.

Общие положения

Для определения коэффициента $P_{захв}$ захвата частиц полем можно использовать представления о зонах захвата только с учетом распределения ионов в шестимерном фазовом пространстве координат-скоростей. По определению $P_{захв}$ есть отношение числа захваченных полем ионов к общему числу образованных или введенных ионов:

$$P_{захв} = \frac{\int_{\Phi_a} f(\vec{r}, \vec{v}) d^6\Phi}{\int_{\Phi} f(\vec{r}, \vec{v}) d^6\Phi}, \quad (1)$$

где $f(\vec{r}, \vec{v})$ – функция распределения, $d^6\Phi$ – элемент шестимерного фазового пространства, Φ_a – область захвата, Φ – все фазовое пространство.

Для решения задачи примем следующие допущения.

1. Распределение ионов по скоростям не зависит от места образования ионов. То есть:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = \rho(\vec{r}) \cdot \upsilon(\vec{v}). \quad (2)$$

2. Распределение ионов по скоростям в случае внутренней ионизации является максвелловским, а, следовательно, не имеет выделенных направлений:

$$\upsilon(\vec{v}') = \frac{1}{\pi^{3/2}} \exp(-v'^2), \quad (3)$$

где v' – нормированная скорость

$$v' = v \sqrt{\frac{m}{2kT}}. \quad (4)$$

3. Распределение ионов по скоростям в случае ввода извне является одномерным смещенным нормальным распределением:

$$\upsilon(\vec{v}') = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-(v' - v'_d)^2), \quad (5)$$

где $v' = v \sqrt{\frac{m}{2e\Delta U}}$ — нормированная скорость; $v'_d = \sqrt{\frac{U}{\Delta U}}$ — нормированная средняя скорость ввода ионов (в дальнейшем нормированную скорость будем обозначать просто v).

4. Распределение ионов по координатам является равномерным в области ионизации.

5. Для определения пределов интегрирования в числителе (1) воспользуемся представлениями об областях захвата на соответствующих фазовых плоскостях. В случае больших времен сортировки, когда динамические зоны захвата вырождаются в эллипсы захвата, уравнения для последних можно записать в виде обобщенной системы:

$$a_\xi \cdot \xi^2 + 2 \cdot b_\xi \cdot \xi \cdot \dot{\xi} + c_\xi \cdot \dot{\xi}^2 = 1, \quad (6)$$

где $\xi = x, y, z$ — безразмерная координата, а $\dot{\xi}$ — соответствующая безразмерная скорость, a_ξ, b_ξ, c_ξ — параметры эллипса захвата по соответствующей координате.

Решение задачи проведем для нескольких видов области ионизации:

1) точечная область в центре ловушки, которая образуется при использовании метода селективной лазерной ионизации, когда ионы образуются при перекрещивании двух тонких лазерных лучей в центре анализатора;

2) аксиальная область ионизации, которая образуется при вводе тонкого ионизирующего потока вдоль оси z , — способ ионизации, используемый в большинстве зарубежных ионных ловушек;

3) ионизация широким и тонким по z -координате ленточным электронным лучом в плоскости симметрии, перпендикулярной к оси симметрии датчика;

4) ввод ионов извне узким потоком вдоль оси z .

Точечная область ионизации

Приступим к рассмотрению первого случая. Так как область ионизации является точечной, то интегрирование по координатам можно отбросить. Область захвата в пространстве скоростей имеет цилиндрическую форму, так как ограничение движения ионов происходит при условии $r \leq 1$ и $z \leq 1$, что приводит к ограничению как радиальной, так и аксиальной составляющей скорости:

$$v_r \leq v_{r \max} \quad \text{и} \quad |v_z| \leq v_{z \max}. \quad (7)$$

Из соотношения (7) следует существование критического модуля скорости частиц, начиная с которого они не могут захватываться:

$$v_{кр}^2 = v_{r \max}^2 + v_{z \max}^2. \quad (8)$$

Важно отметить, что отсечку по скорости захватываемых частиц метод произведения площадей не предполагает, и потому приводит к существенной ошибке, особенно в случае, когда площади зон захвата по разным координатам существенно отличаются по величине. Последнее характерно для работы в высших зонах диаграммы стабильности.

С учетом формы области ионизации выражение (1) существенно упрощается и может быть записано в цилиндрических координатах по скорости:

$$\begin{aligned} P_{захв} &= \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_0^{2\pi} \int_0^{v_{r \max}} \int_{-v_{z \max}}^{v_{z \max}} \exp(-v_r^2 - v_z^2) v_r d\varphi dv_r dv_z = \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{v_{z \max}} \exp(-v_z^2) dv_z \cdot 2 \int_0^{v_{r \max}} \exp(-v_r^2) v_r dv_r = P_z(v_{z \max}) P_r(v_{r \max}). \end{aligned} \quad (9)$$

Выражение распадается на два независимых интеграла, определяющих вероятности захвата в радиальном и аксиальном направлениях. Оба эти интеграла могут быть взяты аналитически. P_z представляет собой функцию ошибок:

$$P_z(v_{z \max}) = \text{erf}(v_{z \max}) \quad (10)$$

а вероятность радиального захвата:

$$P_r(v_{r \max}) = 1 - \exp(-v_{r \max}^2) \quad (11)$$

Введем следующие обозначения:

$$k_0 = \sqrt{3 \frac{kT}{eU_{\text{разм}}}}, \quad (12)$$

где $U_{\text{разм}}$ – размах импульсного сигнала, подаваемого на электроды анализатора;

$$a_0^2 = a_1^2 + a_2^2 = \frac{2eT_0^2 U_{\text{разм}}}{3md^2}, \quad (13)$$

где a_1 и a_2 – импульсные параметры, T_0 – период импульсного сигнала, d – характерный размер электродной системы датчика ионной ловушки.

Безразмерной скорости можно поставить в соответствие некоторый ускоряющий потенциал:

$$\xi = \frac{T_0}{d} \sqrt{2 \frac{e}{m} U_{\text{уск}}}. \quad (14)$$

Из (4), (12-14) можно получить:

$$v_{r \max} = \frac{\dot{r}_{\max}}{a_0 k_0}; \quad v_{z \max} = \frac{\dot{z}_{\max}}{a_0 k_0}, \quad (15)$$

где \dot{r}_{\max} и \dot{z}_{\max} – величины, обратные безразмерным амплитудам колебаний ионов $r_{(0,1)}$ и $z_{(0,1)}$ соответственно, определяемых по АФХ II-го рода. С учетом этого можно записать:

$$v_{r \max} = \frac{1}{r_{(0,1)} a_0 k_0}; \quad v_{z \max} = \frac{1}{z_{(0,1)} a_0 k_0}. \quad (16)$$

Эти же величины могут быть выражены и через параметры эллипсов захвата (6):

$$v_{r \max} = \frac{1}{a_0 k_0 \sqrt{c_r}}; \quad v_{z \max} = \frac{1}{a_0 k_0 \sqrt{c_z}}. \quad (17)$$

Из (12) – (16) можно получить выражение для критического ускоряющего потенциала $U_{\text{уск.кр}}$:

$$\frac{U_{\text{уск.кр}}}{U_{\text{разм}}} = \frac{1}{r_{(0,1)}^2} + \frac{1}{z_{(0,1)}^2}, \quad (18)$$

По соотношению (18) легко определить условия отсечки по начальной энергии частиц. Например, для меандра ($a_1 = 4,07$, $a_2 = 5,99$) в оптимальной фазе первого рода по r -координате $z_{(0,1)} = 2,65$, $r_{(0,1)} = 16,4$. При этих данных получаем:

$$U_{\text{уск.кр}} = 9,279 \cdot 10^{-4} \cdot U_{\text{разм}}. \quad (19)$$

Если размах принять за 300 В, то получим $U_{\text{уск.кр}} = 0,278$ В, что только на порядок превышает температурный потенциал.

Теперь с учетом принятых обозначений получим выражения для коэффициента захвата в методе объема захвата (20), методе произведения площадей захвата (21) и предлагаемом методе расчета (22):

$$P_{\text{захв}} = 1; \quad (20)$$

$$P_{\text{захв}} = \dot{r}_{\max} \cdot \dot{z}_{\max} = \frac{1}{\sqrt{c_r c_z}}; \quad (21)$$

$$P_{\text{захв}} = \left[1 - \exp(-v_{r \max}^2) \right] \cdot \operatorname{erf}(v_{z \max}) = \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{c_r a_0^2 k_0^2}\right) \right] \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{1}{a_0 k_0 \sqrt{c_z}}\right). \quad (22)$$

Обсудим полученные результаты. Предположение о нулевых начальных скоростях частиц в методе объема захвата приводит к абсолютно неверному результату (20), по которому происходит полный захват любых частиц при любых условиях. Произведение площадей эл-

липсов захвата дает более точный результат, однако он не учитывает большого количества факторов, влияющих на коэффициент захвата.

Согласно (22) коэффициент захвата растет, если:

– уменьшается амплитуда колебаний членов по АФХ II рода [единственное, что учитывает (21)];

– уменьшается a_0 , то есть рабочая точка на диаграмме стабильности расположена ближе к началу координат, а следовательно, при работе в высших зонах стабильности при прочих равных условиях коэффициент захвата будет меньше, чем в первой зоне;

– увеличивается $U_{разм}$, то есть уменьшается k_0 (12);

– уменьшается температура газа T , то есть уменьшается k_0 (12).

График функции (22) представлен на рисунке 1.

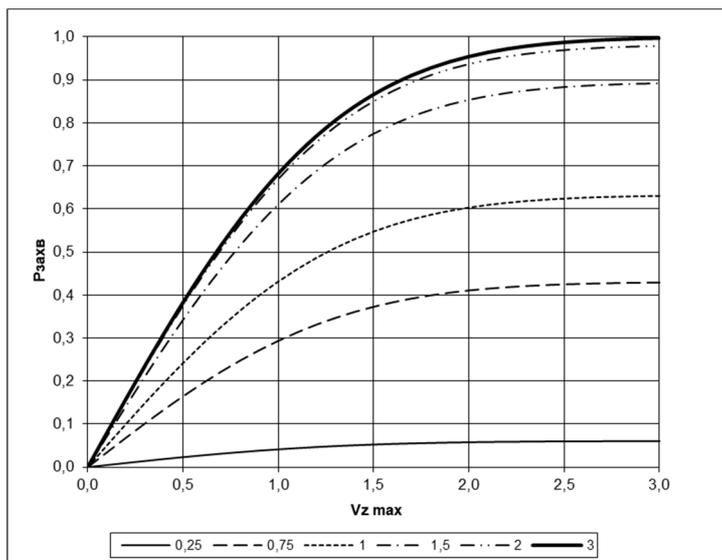


Рисунок 1 – Зависимость коэффициента захвата $P_{захв}$ от нормированной скорости $v_{z\ max}$ при различных значениях $v_{r\ max}$

Figure 1 – Dependence of capture coefficient $P_{захв}$ on normalized velocity $v_{z\ max}$ at different values of $v_{r\ max}$

Если принять для температурного потенциала значение 25.2 мВ, то в приведенном выше примере получим по формуле (21) $P_{захв} = 0,023$, а по формуле (22) $P_{захв} = 0,245$. Таким образом, метод произведения площадей эллипсов захвата дает в данном случае значение, заниженное на порядок.

Соотношение (22) определяет $P_{захв}$ в одной точке фазовой характеристики. Если нейтральные атомы ионизируются в течение продолжительной части периода ВЧ или в течение всего периода, то коэффициент захвата будет определяться по формуле:

$$P_{захв} = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{c_r(t) a_0^2 k_0^2}\right) \right] \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{1}{a_0 k_0 \sqrt{c_z(t)}}\right) dt \quad (23)$$

где $c_r(t)$ и $c_z(t)$ есть функции фазы t , а t_1 и t_2 определяют диапазон фаз ввода ионов. Соотношение (23) является базовым для построения формы массового пика на ЭВМ и реализации идей оптимизации режима.

Аксиальная ионизация

Приступим к рассмотрению второго случая – аксиальной ионизации. Считаем, что пучок электронов является бесконечно тонким, следовательно, выпадает интегрирование по координатам x и y . Распределение по координате z является равномерным и полный интеграл по пространственным координатам равен 2. Область захвата по скоростям v_x и v_y является круговой с максимальным модулем скорости $v_{r\ max}$. Область захвата по z и \dot{z} является эллипсом.

В связи с этим, нам удобнее для решения задачи вновь выбрать цилиндрическую систему координат в пространстве скоростей:

$$P_{захв} = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{v_r \max} \exp(-v_r^2) v_r dv_r \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \iint_{\Phi_z} \exp(-v_z^2) dv_z dz = P_r P_z. \quad (24)$$

Как видим, коэффициент захвата и в этом случае распадается на радиальный и аксиальный коэффициенты, причем радиальный определяется формулой (11). В аксиальном же коэффициенте перейдем к безразмерным скоростям:

$$P_z = \frac{1}{2a_0 k_0 \sqrt{\pi}} \iint_{\Phi_z} \exp\left(-\frac{\dot{z}^2}{(a_0 k_0)^2}\right) dz d\dot{z}. \quad (25)$$

Проведем интегрирование по z в пределах от z_1 до z_2 , считая \dot{z} постоянной. Пределы определяются из уравнения эллипса захвата (6) и равны:

$$z_{1,2} = \frac{-b_z \dot{z} \pm \sqrt{a_z - (a_z c_z - b_z^2) \dot{z}^2}}{a_z}. \quad (26)$$

Из (26) следует, что существует некоторая максимальная скорость \dot{z}_{\max} , выше которой выражение становится мнимым, то есть частицы перестают захватываться:

$$\dot{z}_{\max} = \sqrt{\frac{a_z}{a_z c_z - b_z^2}}. \quad (27)$$

С учетом (26) и (27) интеграл (25) может быть записан как:

$$\begin{aligned} P_z &= \frac{1}{2a_0 k_0 \sqrt{\pi}} \int_{-\dot{z}_{\max}}^{\dot{z}_{\max}} \exp\left(-\frac{\dot{z}^2}{(a_0 k_0)^2}\right) (z_2 - z_1) d\dot{z} = \\ &= \frac{2}{a_0 k_0 \sqrt{\pi a_z}} \int_0^{\dot{z}_{\max}} \exp\left(-\frac{\dot{z}^2}{(a_0 k_0)^2}\right) \sqrt{1 - \left(\frac{\dot{z}}{\dot{z}_{\max}}\right)^2} d\dot{z}. \end{aligned} \quad (28)$$

Вводя еще одну замену переменных получаем:

$$P_z = \frac{1}{\sqrt{a_z}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} v_{z \max} \int_0^1 \exp(-v_{z \max}^2 x^2) \sqrt{1-x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{a_z}} I(v_{z \max}). \quad (29)$$

Полученный интеграл $I(v_{z \max})$ не берется аналитически и может быть посчитан численно. Однако можно получить аналитическое приближение этого интеграла. Приближение первого порядка дается формулой

$$I_1(\xi) = \left(1 - \frac{1}{4\xi^2}\right) \cdot \operatorname{erf}(\xi) + \frac{1}{2\xi\sqrt{\pi}} \exp(-\xi^2). \quad (30)$$

Приближение второго порядка:

$$I_2(\xi) = \left(1 - \frac{1}{4\xi^2} - \frac{3}{32\xi^4}\right) \cdot \operatorname{erf}(\xi) + \frac{5}{8\xi\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{3}{10\xi^2}\right) \cdot \exp(-\xi^2). \quad (31)$$

Зависимость $I(\xi)$ и погрешности приближенных вычислений приведены на рисунке 2. По рисунку 2, б видно, что даже первое приближение дает достаточно точное значение интеграла – не хуже 6 %. Использование второго приближения дает погрешность менее 3 %, так что применение приближений более высокого порядка не имеет смысла.

Подводя итог, запишем выражение для коэффициента захвата при аксиальной ионизации для метода объема захвата (32), метода произведения площадей захвата (33) и предлагаемого метода расчета (34):

$$P_{захв} = z_{\max} = \frac{1}{\sqrt{a_z}}. \quad (32)$$

$$P_{захв} = \frac{1}{4} \pi z_{\max} \dot{z}_{\max} \dot{r}_{\max} = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_r \cdot (a_z c_z - b_z^2)}}. \quad (33)$$

$$P_{захв} = (1 - \exp(-v_{r \max}^2)) \cdot z_{\max} \cdot I(v_{z \max}) = \\ = \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{a_0^2 k_0^2 c_r}\right)\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{a_z}} \cdot I\left(\frac{1}{a_0 k_0} \cdot \sqrt{\frac{a_z}{a_z c_z - b_z^2}}\right). \quad (34)$$

где $I(\xi)$ определяется формулами (30) или (31), а $a_{z,r}$, $b_{z,r}$ и $c_{z,r}$ – параметры эллипсов захвата по фазовым плоскостям (r, \dot{r}) и (z, \dot{z}) .

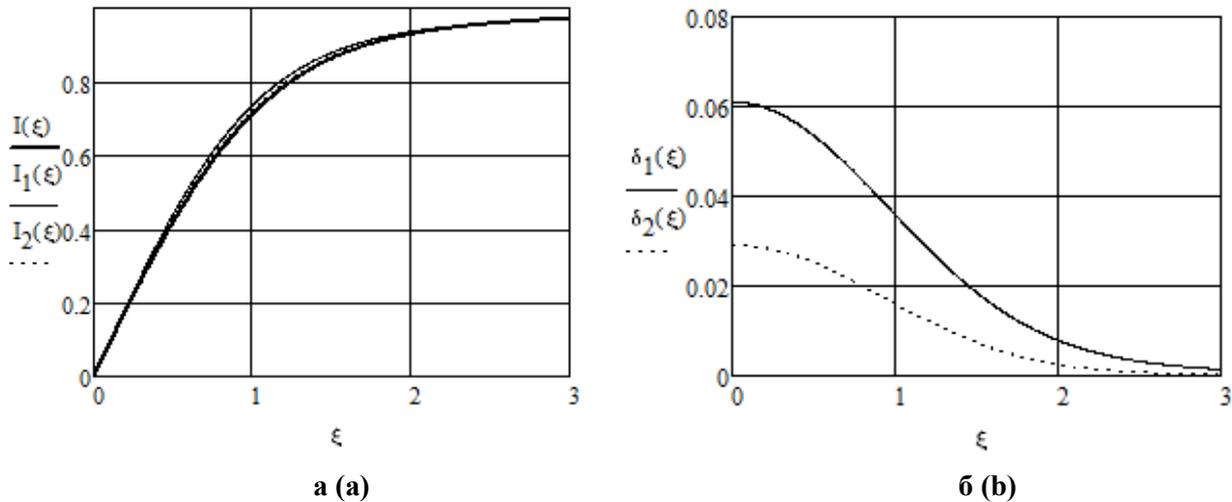


Рисунок 2 – Графики функции $I(\xi)$ и ее первого $I_1(\xi)$ и второго $I_2(\xi)$ приближений (а); графики погрешностей первого $\delta_1(\xi)$ и второго $\delta_2(\xi)$ приближений (б)
Figure 2 – Graphs of function $I(\xi)$ and its first $I_1(\xi)$ and second $I_2(\xi)$ approximations (а); error graphs of the first $\delta_1(\xi)$ and second $\delta_2(\xi)$ approximations (б)

Обсудим полученные результаты. В методе объема захвата (32) коэффициент захвата будет определяться только одним параметром эллипса захвата – a_z . В методе произведения площадей эллипсов коэффициент захвата (33) будет определяться уже всеми параметрами эллипса захвата по z и амплитудой колебаний членов по АФХ II рода по r . Дополнительные факторы, влияние которых проявляется в предлагаемом методе, согласно (34) аналогичны факторам, рассмотренным при анализе точечной области ионизации.

Ионизация ленточным пучком

Теперь рассмотрим третий случай – ионизация широким ленточным электронным пучком в плоскости симметрии, перпендикулярной оси симметрии датчика. В связи с тем что вдоль оси z область ионизации считаем бесконечно тонкой, у нас выпадает интегрирование по z -координате. При этом выражение (1) будет записываться:

$$P_{захв} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{v_z \max} \exp(-v_z^2) dv_z \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \iint_{\Phi_x} \exp(-v_x^2) dv_x dx \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \iint_{\Phi_y} \exp(-v_y^2) dv_y dy, \quad (35)$$

где Φ_x и Φ_y – области эллипсов акцептанса на фазовых плоскостях (x, \dot{x}) и (y, \dot{y}) . При рассмотрении осесимметричного датчика эти области будут идентичными и мы можем записать:

$$P_{захв} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{v_z \max} \exp(-v_z^2) dv_z \cdot \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \iint_{\Phi_r} \exp(-v_r^2) dv_r dr \right]^2 = P_z \cdot P_r^2. \quad (36)$$

Все части этого выражения уже были получены нами ранее. P_z , введенное в выражении (9), определяется по формуле (10), а вывод P_r идентичен выводу P_z из выражения (24). Таким образом, P_r будет определяться по формуле (29) с соответствующим индексом.

Подводя итог, запишем выражение для коэффициента захвата при радиальной ионизации для метода объема захвата (32), метода произведения площадей захвата (33) и предлагаемого метода расчета (34):

$$P_{захв} = r_{\max}^2 = \frac{1}{a_r}. \quad (37)$$

$$P_{захв} = \left(\frac{1}{4} \pi r_{\max} \dot{r}_{\max} \right)^2 \dot{z}_{\max} = \frac{\pi^2}{16} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_z} \cdot (a_r c_r - b_r^2)}. \quad (38)$$

$$P_{захв} = \operatorname{erf}(v_{z \max}) \cdot [r_{\max} \cdot I(v_{r \max})]^2 = \operatorname{erf} \left(\frac{1}{a_0 k_0 \sqrt{c_z}} \right) \cdot \frac{1}{a_r} \cdot I \left(\frac{1}{a_0 k_0} \cdot \sqrt{\frac{a_r}{a_r c_r - b_r^2}} \right)^2. \quad (39)$$

где $I(\xi)$ определяется формулами (30) или (31), а $a_{z,r}$, $b_{z,r}$ и $c_{z,r}$ – параметры эллипсов захвата по фазовым плоскостям (r, \dot{r}) и (z, \dot{z}) .

Ввод ионов извне

Четвертый случай – ввод ионного потока извне узким пучком вдоль оси z . Малая толщина пучка позволяет нам отбросить интегрирование по координатам x и y . Распределение скоростей задается выражением (5) и является одномерным – предполагаем, что расхождение пучка практически отсутствует. При таких условиях выпадает интегрирование по скоростям v_x и v_y . Таким образом, в выражении (1) остается только интегрирование по эллипсу захвата в фазовой плоскости (z, \dot{z}) – Φ_z . С учетом значения интеграла функции распределения от 0 до ∞ можем записать:

$$P_{захв} = \frac{1}{\sqrt{\pi} (1 + \operatorname{erf}(v_d))} \cdot \iint_{\Phi_z} \exp(-(v_z - v_d)^2) dv_z dz. \quad (40)$$

Повторяя с измененной подынтегральной функцией действия, проведенные при разборе случая аксиальной ионизации (формулы 25 – 29), получаем выражение для коэффициента захвата:

$$P_{захв} = \frac{1}{\sqrt{a_z}} I_d(v_{z \max}, v_d), \quad (41)$$

где

$$I_d(v, v_d) = \frac{2v}{\sqrt{\pi} (1 + \operatorname{erf}(v_d))} \int_0^1 \exp[-(v \cdot x - v_d)^2] \sqrt{1 - x^2} dx. \quad (42)$$

Для интеграла I_d , как и для интеграла I , могут быть получены аналитические приближения: первое (43) и второе (44).

$$I_d(v, v_d) = \frac{1}{1 + \operatorname{erf}(v_d)} \cdot \left[\left(1 - \frac{2v_d^2 + 1}{4v^2} \right) \cdot (\operatorname{erf}(v - v_d) + \operatorname{erf}(v_d)) + \frac{v + v_d}{2v^2 \sqrt{\pi}} \exp[-(v - v_d)^2] - \frac{v_d}{2v^2 \sqrt{\pi}} \exp(-v_d^2) \right]. \quad (43)$$

Второе приближение:

$$I_d(v, v_d) = \frac{I_1 + I_2 - I_3}{1 + \operatorname{erf}(v_d)}, \quad (44)$$

где

$$I_1 = \left(1 - \frac{2v_d^2 + 1}{4v^2} - \frac{4v_d^4 + 12v_d^2 + 3}{32v^2} \right) \cdot (\operatorname{erf}(v - v_d) + \operatorname{erf}(v_d)),$$

$$I_2 = \frac{20v^3 + 10(2v^2 + 1)v_d + (4v_d^2 + 6)v + 4v_d^3}{32v^4\sqrt{\pi}} \exp\left[-(v - v_d)^2\right],$$

$$I_3 = \frac{v_d(16v^2 + 4v_d^2 + 10)}{32v^4\sqrt{\pi}} \exp(-v_d^2).$$

Графики функции $I_d(v, v_d)$ и ее приближений приведены на рисунке 3. Как видно из графиков, погрешности аппроксимации в этом случае выше, чем для $I(\xi)$, и предпочтительнее использовать второе аналитическое приближение. Анализ характера зависимости $I_d(v, v_d)$ от аргументов показывает в целом монотонный рост функции с увеличением v и спад с ростом v_d . При этом спад при больших значениях v происходит медленнее, начальная часть функции при этом является выпуклой и содержит слабо зависящий от v_d участок.

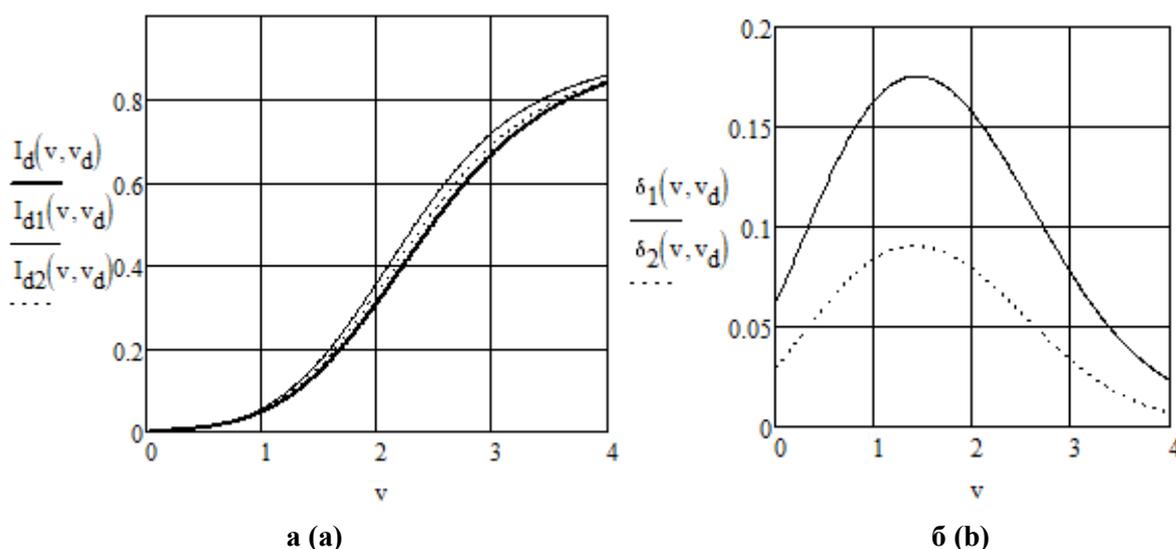


Рисунок 3 – Графики функции $I_d(v, v_d)$ и ее первого $I_{d1}(v, v_d)$ и второго $I_{d2}(v, v_d)$ приближений (а); графики погрешностей первого $\delta_1(v, v_d)$ и второго $\delta_2(v, v_d)$ приближений (б)
Figure 3 – Graphs of function $I_d(v, v_d)$ and its first $I_{d1}(v, v_d)$ and second $I_{d2}(v, v_d)$ approximations (а); error graphs of the first $\delta_1(v, v_d)$ and second $\delta_2(v, v_d)$ approximations (b)

Заключение

На основании проведенного теоретического анализа коэффициентов захвата ионов в ионной ловушке, было показано, что для всех рассмотренных распределений начальных параметров ионов в фазовом пространстве возможно получение аналитических выражений либо достаточно точных аналитических приближений коэффициента захвата ионов. Полученные выражения могут быть использованы для дальнейшего анализа влияния параметров распределения ионов и параметров эллипсов захвата на аналитические параметры квадрупольной ионной ловушки. Для таких целей аналитическое представление коэффициентов захвата ионов имеет значительное преимущество перед статистическим, поскольку дает явный вид функциональной связи между параметрами.

Библиографический список

1. Paul W., Steinwedel H. A new mass spectrometer without a magnetic field // Z. Naturforsch, 8a, 1953. P. 448-450.
2. Paul W., Steinwedel H. Apparatus for separating charged particles of different specific charges // German Patent 944, 900, 1956. U. S. Patent 2, 939, 952, 7 June 1960.
3. Berkling K. aus Leipzig. Der Entwurf eines Partialdruckmessers // Physikalisches Institut der Universität Bonn, West Germany, 1956.

4. **Bruck H.** Accélérateurs circulaires de particules. Introduction à la théorie // Paris: Inst. national des sciences et techniques nucléaires. Presses univ. de France, 1966. 359 p.
5. **Брук Г.** Циклические ускорители заряженных частиц. Введение в теорию // Пер. с фр.: В.Ф. Алешина, В.В. Жукова, В.А. Уварова. Под ред. А.И. Дзергача. М.: Атомиздат, 1970. 313 с.
6. **Baril M., Septier A.** Piégeage des ions dans un champ quadrupolaire tridimensionnel a haute fréquence // Rea. Phys. Appl., 9 (1974) p. 525-531.
7. **Dawson P.H.** A detailed study of the quadrupole mass filter // Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 14 (1974) p. 317-337.
8. **Шеретов Э. П., Терентьев В. И.** Основы теории квадрупольных масс-спектрометров при импульсном питании // ЖТФ. 1972. Т. 42. Вып. 5. С. 953-962.
9. **Шеретов Э. П., Колотилин Б. И.** Использование метода «характерных решений» при определении экстремальных характеристик уравнений Хилла // Применение средств вычислительной техники: Сб. трудов. РРТИ, Рязань, 1974, с. 24-31.
10. **Шеретов Э. П., Колотилин Б. И.** К расчёту динамических зон захвата заряженных частиц для квадрупольных масс-спектрометров // ЖТФ. 1975. № 2. С. 420-424.
11. **Серегин К. Е., Коненков Н. В., Дягилев А. А.** Статистический акцептанс X-острова стабильности квадрупольного фильтра масс // Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета. 2020. № 73. С. 154-160.

UDC 621.384.8:543.51

ANALYTICAL REPRESENTATION OF ION CAPTURE COEFFICIENT IN QUADRUPOLE ION TRAP

A. E. Malyutin, Ph.D. (Phys. and Math.), associate professor, Department of general and experimental physics, RSREU, Ryazan, Russia;

orcid.org/0000-0002-1704-0792, e-mail: aemalutin@mail.ru

V. V. Ivanov, Ph.D. (Tech.), associate professor, Department of general and experimental physics, RSREU, Ryazan, Russia;

orcid.org/0000-0002-5655-0111, e-mail: oief@rsreu.ru

Yu. V. Cherkasova, Ph.D. (Tech.), associate professor, Department of general and experimental physics, RSREU, Ryazan, Russia;

orcid.org/0000-0003-2474-3629, e-mail: oief@rsreu.ru

The aim of the work is to research the possibility of applying an analytical approach to solve the problem of the effectiveness of quadrupole mass spectrometers. The theoretical derivation of expressions describing ion capture coefficient in a quadrupole ion trap, taking into account the distribution of their initial parameters in phase space, is made. Several possible distributions of initial parameters are considered: point ionization region, axial ionization, ionization by a ribbon beam and the input of ions from the outside. It is shown that in all cases it is possible to obtain analytical expressions for ion capture coefficient or sufficiently accurate analytical approximations.

Keywords: mass spectrometry, quadrupole ion trap, ion capture coefficient, phase space, capture ellipses.

DOI: 10.21667/1995-4565-2022-80-189-199

References

1. **Paul W., Steinwedel H.** A new mass spectrometer without a magnetic field. *Z. Naturforsch*, 8a. 1953, pp. 448-450.
2. **Paul W., Steinwedel H.** Apparatus for separating charged particles of different specific charges. German Patent 944, 900, 1956. U. S. Patent 2, 939, 952, 7 June 1960.
3. **Berkling K.** aus Leipzig. Der Entwurf eines Partialdruckmessers. *Physikalisches Institut der Universität Bonn*, West Germany, 1956.

4. **Bruck H.** *Accélérateurs circulaires de particules. Introduction à la théorie.* Paris: Inst. national des sciences et techniques nucléaires. Presses univ. de France, 1966. 359 с.

5. **Bruck H.** *Ciklicheskie uskoriteli zaryazhennyh chastic. Vvedenie v teoriyu* (Cyclic accelerators of charged particles. Introduction to Theory). Translated from French: V.F. Alyoshina, V.V. Zhukova, V.A. Uvarova. Edited by A.I. Dzergach. Moscow: Atomizdat, 1970. 313 p. (in Russian).

6. **Baril M., Septier A.** Piégeage des ions dans un champ quadropolaire tridimensionnel a haute fréquence. *Rea. Phys. Appl.*, 9 (1974) p. 525-531.

7. **Dawson P.H.** A detailed study of the quadropole mass filter. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 14 (1974) p. 317-337.

8. **Sheretov E. P., Terentyev V. I.** Osnovy teorii kvadropol'nyh mass-spektrometrov pri impul'snom pitanii. *ZHTF.*1972. vol.42, no.5, pp.953-962. (in Russian).

9. **Sheretov E. P., Kolotilin B. I.** Ispol'zovanie metoda «harakternyh reshenij» pri opredelenii ekstremal'nyh harakteristik uravnenij Hilla. *Primenenie sredstv vychislitel'noj tekhniki: Sb. trudov.* RRTI, Ryazan, 1974, pp. 24-31. (in Russian).

10. **Sheretov E. P., Kolotilin B. I.** K raschyotu dinamicheskikh zon zahvata zaryazhennyh chastic dlya kvadropol'nyh mass-spektrometrov. *ZHTF.* 1975, no. 2, pp. 420-424. (in Russian).

11. **Seregin K.E., Konenkov N.V., Dyagilew A.A.** Statisticheskij akseptans X-ostrova stabil'nosti kvadropol'nogo fil'tra mass. *Vestnik Ryazanskogo gosudarstvennogo radiotekh-nicheskogo universiteta.* 2020. No. 73, pp. 154-160. (in Russian).