

УДК 621.384.668.8: 621.3.032.26

© А. Г. Кузьмин, П. В. Михновец

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ СИСТЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ИОННО-ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ SIMION 7 3D ПРИ РАСЧЕТАХ ХАРАКТЕРИСТИК КВАДРУПОЛЬНЫХ МАСС-АНАЛИЗАТОРОВ

В статье рассматриваются основные принципы моделирования квадрупольных масс-анализаторов с помощью программы моделирования ионно-оптических систем SIMION 7 3D. На основе модели квадрупольного масс-анализатора с электродами круглой формы была рассчитана форма масс-спектрометрического пика, исследовано влияние режима работы и длины масс-анализатора на коэффициент трансмиссии. Отмечается хорошее согласие полученных результатов с данными аналитической теории и результатами численного моделирования, представленными в литературе, что говорит о корректности построенной модели и возможности ее применения для проектирования и расчета аналитических характеристик квадрупольных масс-спектрометров.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время квадрупольные масс-анализаторы широко применяются в аналитической практике. За рубежом разработаны и серийно выпускаются десятки моделей квадрупольных масс-спектрометров, отличающихся источниками ионов, аналитическими характеристиками, размерами, областью применения. Хорошо разработана аналитическая теория квадрупольных масс-спектрометров [1]. Численными методами детально исследовано поведение ионов в поле идеально-го квадрупольного масс-анализатора с гиперболическим распределением поля [2], большое количество работ посвящено анализу влияния искажений поля на характер движения ионов и, как следствие, на аналитические характеристики масс-анализаторов [3–6]. Мощным инструментом анализа ионно-оптических систем является программа моделирования ионно-оптических систем SIMION [7]. В литературе имеются данные о применении этой программы для моделирования квадрупольных масс-анализаторов [8–9].

Однако вследствие особенностей алгоритма программы SIMION при расчете аналитических характеристик квадрупольных масс-анализаторов могут возникнуть некоторые трудности. Так, для достижения приемлемой точности расчета полей, образованных криволинейными электродами, оказывается необходимым использовать большое число ячеек. Возникает необходимость применения пользовательских подпрограмм для реализации изменения во времени потенциалов на электродах, генерации начальных условий ионов

в пучке и т.д. Кроме того, поскольку для достижения приемлемой статистической точности расчетов требуется анализ большого числа траекторий, возникает необходимость использования дополнительных программных средств для математической обработки результатов. Целью настоящей работы является анализ основных принципов моделирования квадрупольных масс-анализаторов с применением программы SIMION 7 3D, а также оценка возможности применения программы SIMION 7 3D при разработке квадрупольных масс-спектрометров.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Вид моделируемой системы в разрезе показан на рис. 1. Система представляет собой четыре цилиндрических попарно соединенных электрода, помещенные внутрь цилиндрического экрана. Расстояние от оптической оси до электродов, составляло $r_0 = 3.1$ мм, радиус электродов $r = 3.5$ мм, радиус экрана $R = 13.3$ мм. Длина системы — 200 мм. Общий моделируемый объем составил 1340×1340 ячеек, длина одной ячейки составляла 10 микрон.

Форма, размеры и взаимное расположение электродов системы задавались математически — с помощью программы генерации геометрии электродов. Этот способ имеет некоторые преимущества по сравнению с "ручным" построением, поскольку, во-первых, исключает возможность ошибок построения и, во-вторых, позволяет легко менять размеры, форму и взаимное расположение электродов моделируемой системы.

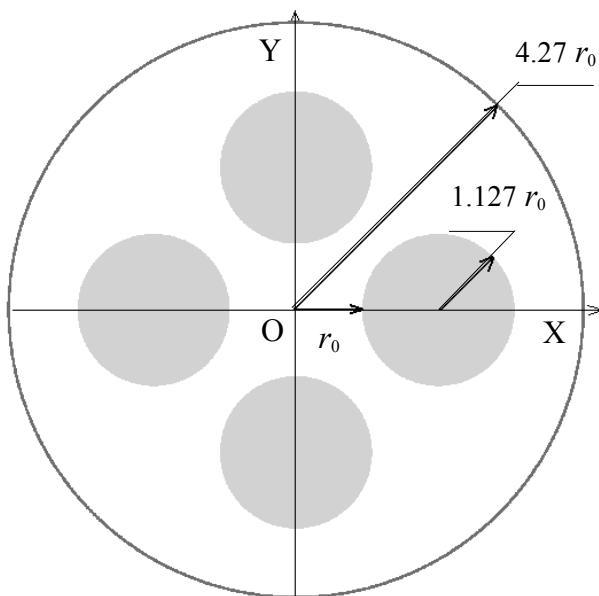


Рис. 1. Общий вид моделируемой системы

С помощью подпрограммы, написанной на входном языке системы SIMION, осуществлялось изменение во времени потенциалов на электродах

$$U(t) = \pm(U_0 + V_0 \cos(\omega \cdot t)),$$

где U_0 — постоянное напряжение, V_0 — амплитуда переменного напряжения, t — время движения иона, ω — круговая частота переменного напряжения. Амплитуды постоянной и переменной составляющих определяются массой анализируемого иона m и рабочей точкой на диаграмме стабильности (a, q):

$$U_0 = \frac{r_0^2 \cdot \omega^2 \cdot a}{8 \cdot e} m,$$

$$V_0 = \frac{r_0^2 \cdot \omega^2 \cdot q}{4 \cdot e} m,$$

где e — заряд электрона.

Временной шаг обновления потенциалов на электродах устанавливался равным $5 \cdot 10^{-8}$ с; таким образом, на период $T = 2\pi / \omega = 6.7 \cdot 10^{-6}$ с приходится более 100 точек (синусоида аппроксимируется ломаной, состоящей из 100 прямых участков). Кроме того, подпрограмма позволяла разгнать условия влета ионов в моделируемую систему (начальные координаты и компоненты скоростей).

Для достижения приемлемой статистической точности (порядка нескольких процентов) производился расчет 10^3 – 10^4 траекторий ионов. Математическая обработка результатов расчетов проводилась в системе Mathcad.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Распределение потенциала

Характерный вид распределения потенциала представлен на рис. 2. Существенное отличие кривых от гладкой формы, вызванное дискретностью построения электродов, сказывается только на расстояниях порядка шага сетки, т. е. нескольких десятков микрон.

Распределение поля внутри моделируемой системы сравнивалось с полем идеального квадрупольного

$$E_{id}(x) = \frac{U \cdot x}{r_0^2},$$

где x — координата точки на прямой ОХ. Было показано, что для $x < 0.7 \cdot r_0$ относительное отличие

$$\eta = \frac{E_{id} - E_{mod}}{E_{id}}$$

составило порядка 10^{-3} , что согласуется с данными работы [8], в которой проводилось сравнение полей, образованных электродами гиперболического и круглого сечений.

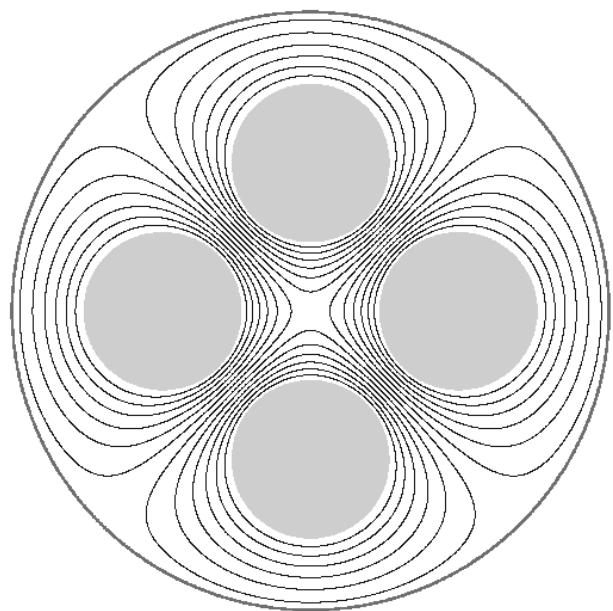


Рис. 2. Распределение эквипотенциальных поверхностей моделируемой системы

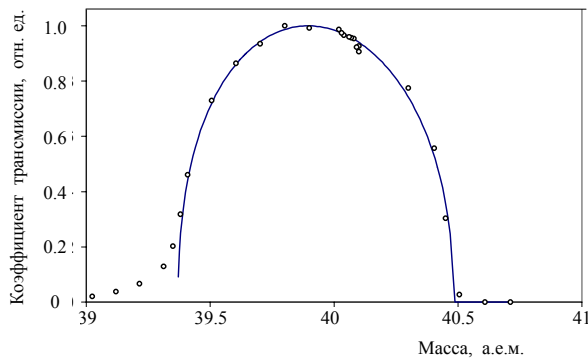


Рис. 3. Форма линии масс-спектра. Точки — численный расчет на основании модели; сплошная кривая — аналитический расчет [1]

Форма линии масс-спектра

Результаты расчета формы линии масс-спектра при подаче на вход масс-анализатора квадратного в сечении моноэнергетического параллельного пучка ионов массы 40 а.е.м. представлены на рис. 3. Форма линии асимметрична, что качественно согласуется с данными численного моделирования [2, 5, 9]. Отличие от формы, предсказываемой аналитической теорией [1] и также представленной на рис. 3, проявляется в наличии длинного склона со стороны меньших масс, что вызвано конечностью длины рассматриваемой системы.

Влияние режима работы масс-анализатора и времени пребывания ионов в масс-анализаторе на коэффициент передачи пучка

Режим работы масс-анализатора определяется величиной, называемой параметром настройки, равной отношению постоянной и переменной составляющих поля, приложенного к электродам

$$\lambda = \frac{U_0}{V_0}$$

Чем ближе это отношение к теоретически предсказанному значению $\lambda_0 = 0.19784$ [1], тем выше будет достигаемое разрешение и меньше коэффициент передачи пучка. Для удобства в настоящей работе параметр настройки измерялся как отношение λ/λ_0 .

Влияние параметра настройки масс-анализатора на коэффициент передачи параллельного

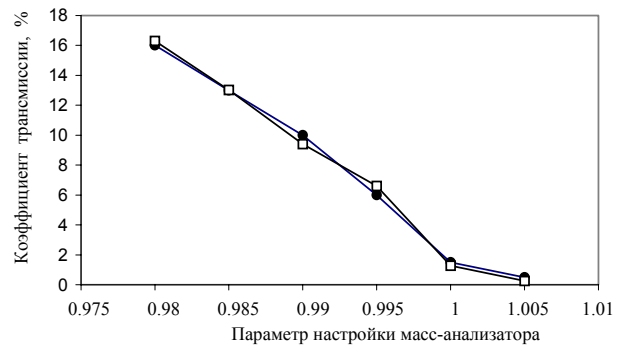


Рис. 4. Влияние режима работы масс-анализатора на коэффициент передачи моноэнергетического пучка ионов массы 40 а.е.м., ширины $0.35 r_0$. □ — результаты расчета; • — данные работы [5]

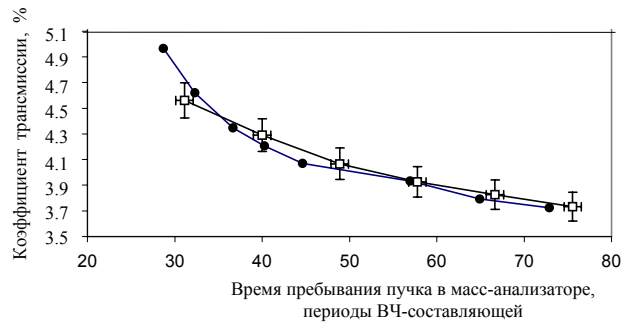


Рис. 5. Влияние времени пребывания ионов в масс-анализаторе на коэффициент передачи моноэнергетического пучка ионов массы 40 а.е.м., ширины $0.35 r_0$. □ — результаты расчета; • — данные работы [5]

моноэнергетического пучка шириной $0.35 r_0$ представлено на рис. 4. Расчетные данные сравнивались с результатами работы [5], в которой проводился расчет аналитических характеристик квадрупольных масс-анализаторов с помощью специализированного программного обеспечения. В обоих случаях расчеты были проведены для времени пребывания ионов в области масс-анализатора, равного 48 периодам ВЧ-поля. Полученные данные совпадают в пределах погрешности с данными литературы.

На рис. 5 представлена зависимость коэффициента трансмиссии пучка от длины масс-анализатора, выраженной в периодах ВЧ-составляющей. Расчеты проводились для параллельного пучка ионов массы 40 а.е.м., шириной $0.35 r_0$, при параметре настройки масс-анализатора $\lambda = 0.9975 \lambda_0$. Расчетные данные совпадают в пределах погрешности с данными работы [5].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Модель квадрупольного масс-анализатора с электродами круглой формы состоит из следующих элементов:

- программы генерирования геометрии электродов моделируемой системы;
- подпрограммы, реализующей генерацию начальных условий для ионов, подаваемых в моделируемую систему;
- набора подпрограмм, реализующих различные режимы работы масс-анализатора;
- набора подпрограмм математической обработки результатов расчета в среде Mathcad.

Наблюдающееся согласие характеристик квадрупольного масс-анализатора, вычисленных с помощью построенной модели, с данными аналитической теории и расчетными данными, представленными в литературе, свидетельствует об адекватности построенной модели и возможности ее применения при разработке и расчете аналитических характеристик квадрупольных масс-спектрометров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слободенюк Г.И. Квадрупольные масс-спектрометры. М.: Атомиздат, 1974. 272 с.

2. Dawson P.H. A detailed study of the quadrupole mass filter // *Int. J. of Mass Spectrometry and Ion Physics*. 1974. V. 14, N 4. P. 317–337.
3. Титов В.В. Аналитические и численные методы моделирования ионно-оптических систем квадрупольного масс-спектрометра // *Атомная энергия*. 1993. Т. 75, вып. 2. С. 109–120.
4. Titov V. Ion separation in imperfect fields of the quadrupole mass analyzer // *Int. J. of Mass Spectrometry and Ion Processes*. 1995. V. 141. P. 13–56.
5. Gibson J.R., Taylor S. Prediction of quadrupole mass filter performance for hyperbolic and circular cross section electrodes // *Rapid Communications in Mass Spectrometry*. 2000. V. 14. P. 1669–1673.
6. Reuben A.J., Smith G.B., Moses P., Vagov A.V. Ion trajectories in exactly determined quadrupole fields // *Int. J. of Mass Spectrometry and Ion Processes*. 1996. V. 154. P. 43–59.
7. Dahl D.A. SIMION 3D Version 6.0 // 43 ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, May 21–26 1995, Atlanta, Georgia. P. 717.
8. Blaum K., Geppert Ch., Muller P. et al. Properties and performance of a quadrupole mass filter used for resonance ionization mass spectrometry // *Int. J. of Mass Spectrometry*. 1998. V. 181. P. 67–87.
9. Blaum K., Geppert Ch., Muller P. et al. Peak shape for quadrupole mass spectrometer: comparison of computer simulation and experiment // *Int. J. of Mass Spectrometry*. 2000. V. 202. P. 81–89.

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург*

Материал поступил в редакцию 2.03.2004.

SOME SPECIFIC FEATURES OF SIMION 7 3D SIMULATION SOFTWARE APPLICATION TO COMPUTATION OF QUADRUPOLE MASS ANALYZER ANALYTICAL CHARACTERISTICS

A. G. Kuzmin, P. V. Mikhnovets

Institute for Analytical Instrumentation RAS, St. Petersburg

The general principles of quadrupole mass analyzer modeling using the ion optics simulation software SIMION 7 3D were analyzed. A model of quadrupole mass analyzer with circular electrodes was developed. The shape of the mass peak was calculated. The influence of the mass analyzer operating mode and length on transmission was investigated. The data obtained were compared with analytical theory and data of numerical calculations. Good agreement was observed.