РАЗРАБОТКА ПРИБОРОВ И СИСТЕМ _____

УДК 621.384.8

© Т. В. Помозов, Н. В. Краснов, 2021

ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В СИСТЕМЕ ДИАФРАГМ НА ТРАНСПОРТИРОВКУ ПОТОКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ

Представлены результаты численного моделирования ионно-оптической схемы для транспортировки ионов при атмосферном давлении. Показана возможность эффективной транспортировки ионов в рассматриваемой системе при увеличении локального искривления эквипотенциальных линий электростатического поля в окрестности сопла при помощи шейпинга (изменения формы) этого электрода. Шейпинг сопла позволяет увеличить величину *I*_{сопло} приблизительно в 1.6 раза. Учет газодинамического влияния на транспортировку ионного пучка через сопло позволяет в перспективе увеличить значения тока еще в 1.7 раза.

Кл. сл.: спектрометр ионной подвижности, транспортировка ионов при атмосферном давлении, электростатическое поле

введение

В связи с растущим применением спектрометров ионной подвижности в сложных аналитических комплексах LC-ESI-IMS-MS в качестве одной из систем разделения сложных смесей, которые анализируются при исследованиях в биохимии, медицине, контроле лекарств, проводится много разработок новых спектрометров ионной подвижности с целью увеличения их разрешающей способности и чувствительности [1-4]. Использование таких аналитических комплексов увеличивает возможность идентификации анализируемых веществ в сложных смесях за счет учета времени удерживания t в LC, подвижности К в IMS и отношения массы к заряду (m/z) в MS. В современных комплексах LC-ESI-IMS-MS используют спектрометр ионной подвижности, являющийся частью интерфейса источника ионов ESI, работающего при атмосферном давлении, и MS, являющийся высоковакуумным прибором. Давление в области дрейфа спектрометра ионной подвижности составляет несколько Торр, при этом для получения необходимой разрешающей способности спектрометра существенно увеличивается и область дрейфа, и общая длина спектрометра: в работах [1-6] размер спектрометра ионной подвижности достигает порядка 2 м и более. Низкое давление газа в области дрейфа приводит к использованию напряженности электрического поля в несколько десятков вольт на сантиметр, что позволяет избежать электрического пробоя в приборе. Для ввода пучка заряженных частиц из области высокого давления сначала в дрейфовую область, а потом из дрейфовой области в следую-

щую ступень дифференциальной откачки массспектрометра предложено использовать электродинамические ионные воронки (ion funnel) [5, 6]. Эта идея применена в работах [2, 3]. Устройство электродинамической воронки представляет собой набор плоских электродов с переменным внутренним диаметром от 50 до 2 мм, толщина которых составляет 0.5 мм, толщина разделяющих их диэлектрических прокладок из тефлона также составляет 0.5 мм. Количество электродов в зависимости от конструкции и места применения электродинамических воронок варьирует от 100 до 80 штук. Внутренние диаметры электродов от электрода к электроду изменяются в зависимости от конструкции и выполняемой задачи. На электроды подается постоянное строго определенное для электродов напряжение от десятков до нескольких сотен вольт и переменная составляющая с частотой порядка 500 кГц и амплитудой от пика до пика порядка 100 В. Основная идея применения электродинамической воронки заключается в преобразовании сечения расходящегося пучка заряженных частиц, полученного в источнике ESI (API), в меньшее сечение без потери общего ионного тока, т.е. в увеличении плотности тока по оси спектрометра ионной подвижности, что в свою очередь сопровождается увеличением чувствительности прибора.

Альтернативный подход к преобразованию сечения расходящегося пучка заряженных частиц представлен в работах [7–9], в которых спектрометр ионной подвижности работает при атмосферном давлении. Это позволяет использовать напряженность электрического поля до 1 кВ/см и электроды толщиной 0.1 мм, благодаря чему

количество электродов, установленных после распылителя в источнике ионов с распылением в бескапельном режиме при нормальных условиях (*p* = 760 Торр, *T* = 300 К), сокращается до 3–4 [10– 12]. При этом величина входного диаметра системы транспортировки (первого электрода) должна составлять 4-6 мм, чтобы заряженные частицы с минимальными потерями прошли через систему электродов, последний из которых разделяет систему транспортировки и область дрейфа и имеет диаметр отверстия 1.2 мм (32% от тока коронного разряда). В дрейфовом пространстве пучок заряженных частиц имеет поперечное сечение 2 мм на всей длине 55 мм [9] входа в аналогичную выходную систему транспортировки перед коллектором, при этом последний электрод имеет отверстие диаметром 0.5 мм, что вполне подходит для сочленения интерфейса с высоковакуумной частью масс-спектрометра.

В процессе транспортировки ионов к выходной диафрагме (соплу), отделяющей область спектрометра ионной подвижности с атмосферным давлением от вакуумной системы масс-анализатора, пакеты разделенных ионов движутся в неоднородном электрическом поле и в потоке спутного газа у сопла. Движение ионов осуществляется по силовым линиям электрического поля, которые замыкаются на плоскости сопла и краях входного отверстия в сопло. В покоящемся газе ионы осаждаются на сопле и не проходят за него. При организации потока газа через сопло в вакуумную часть прибора "вмороженные" в плотный газ ионы перераспределяются и частично с газом проникают за сопло. Учитывая высокую напряженность электрического поля у края входного отверстия в сопло, в вакуумную систему прибора попадает часть ионов, находящихся в окрестности входного отверстия. Увеличение отверстия в сопле для большего проникновения ионов в вакуумную область является нецелесообразным, т.к. ухудшающиеся вакуумные условия не позволяют эффективно проводить транспортировку и фокусировку потока ионов в интерфейсе. Эти недостатки присущи практически всем источникам ионов с ионизацией при атмосферном давлении. Таким образом, транспортировка ионов в таких источниках основана на сочетании двух механизмов: движении ионов в постоянном электрическом поле и движении ионов и нейтральных частиц в потоке газа у входа в сопло.

В настоящей работе при помощи методов численного моделирование проводится сравнение качества транспортировки ионов при атмосферном давлении в системе на основе плоских тонких диафрагм и в системе, в которой форма сопла имеет геометрическую особенность.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В ГАЗЕ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Траектории положительно заряженных ионов, эквипотенциальные линии электростатического поля в исследуемой транспортирующей схеме на основе тонких диафрагм в плоскости, проходящей через оптическую ось, а также геометрические и электрические параметры схемы приведены на рис. 1, а.



Рис. 1. Траектории положительно заряженных ионов и эквипотенциальные линии электростатического поля в исследуемой транспортирующей системе в плоскости, проходящей через оптическую ось. Стрелками (на (б)) обозначены направления вектора напряженности поля. Геометрические параметры: L = 5 мм, $L_1 = 1$ мм, $d_1 = 4$ мм, $d_2 = 2.65$ мм, $d_3 = 1.2$ мм, $d_4 = 0.5$ мм, толщина диафрагм 1–4 составляет 0.1 мм. Электрические параметры: $U_{игла} = 7000$ В, $U_1 = 3000$ В, $U_2 = 2000$ В, $U_3 = 1000$ В, $U_4 = 0$ В, $U_{колл} = -100$ В

На структуру поля влияют как геометрические, так и электрические параметры исследуемого устройства, т.е. при малых диаметрах отверстий более эффективно электрическое поле отбирает ионы из коронного разряда в основном по оси исследуемого устройства, качественно это представлено на рис. 1, б.

Численное моделирование электростатического поля и траекторий заряженных частиц в плотном газе (воздух) проводилось в программном пакете "SIMION 8.0" с использованием статистической диффузионной модели (statistical diffusion simulation (SDS)), которая представлена в качестве пользовательской программы к пакету. В качестве модельного пучка использовались положительные ионы азота (m = 14 а.е.м.) со сферическим пространственным распределением (d = 1.5 мм). Моделирование проводилось при нормальных условиях (T = 300 K, p = 760 Торр) без учета влияния объемного заряда.

Толщина диафрагм системы транспортировки составляет 0.1 мм. Выбор в пользу как можно более тонких диафрагм обусловлен следующими моментами. Во-первых, силовые линии замыкаются на электродных поверхностях, поскольку все они являются эквипотенциальными поверхностями, поэтому чем тоньше электроды, тем меньше зон потенциальной потери ионов. Во-вторых, чем тоньше диафрагмы, тем более выраженными фокусирующими свойствами обладает система ввиду отсутствия локальных областей дефокусировки в канале электрода.

Разность потенциалов между смежными диафрагмами 1-4 составляет 1000 В, поскольку при больших значениях при атмосферном давлении может наблюдаться пробой. Фокусирующие свойства ионно-оптической схемы легко объясняются картиной эквипотенциальных линий. Заметим, что в рассматриваемой геометрии в окрестности третьей диафрагмы напряженность поля практически постоянна, так что данная диафрагма может быть исключена из конструкции ионного источника. Четвертая диафрагма с диаметром отверстия d = 0.5 мм может рассматриваться как плоскость сопла.

Результаты численного моделирования показывают, что в рассматриваемой ионно-оптической схеме трансмиссия ионов до коллектора составляет примерно 1.5% при используемом начальном распределении ионов. Такая низкая величина пропускания объясняется наличием дефокусирующего поля вблизи плоскости сопла, в результате чего большая часть ионов, движущихся с почти тепловыми скоростями, теряется в окрестности канала электрода. В реальном ионном источнике неизбежно присутствует поток спутного газа у входа в сопло, и величина трансмиссии ионов за плоскость сопла должна быть заметно выше. Поэтому в качестве оценки эффективности фокусировки рассматриваемой схемы может служить доля заряженных частиц, приходящих на сопло в область пространства, ограниченную $|x| \le 0.25$ мм и $|y| \le$ ≤ 0.25 мм, которая составляет примерно $I_{
m conno}$ pprox $\approx 8.3\%$.

Эффективность фокусировки ионов в рассматриваемой системе можно повысить локальным искривлением эквипотенциальных линий электростатического поля в окрестности сопла при помощи шейпинга (изменения формы) этого электрода.



Рис. 2. Траектории положительно заряженных ионов и эквипотенциальные линии электростатического поля в фокусирующей системе с выпуклым соплом в плоскости, проходящей через оптическую ось.

Геометрические параметры: $L_1 = 5 \text{ мм}, L_2 = L_5 = 1 \text{ мм}, L_3 = 0.65 \text{ мм}, L_4 = 1.65 \text{ мм}, d_1 = 4 \text{ мм}, d_2 = 2.65 \text{ мм}, d_3 = 0.5 \text{ мм}, R = 1.5 \text{ мм}, \text{ толщина диа-фрагм 1–3 составляет 0.1 мм}.$

Электрические параметры: $U_{\text{игла}} = 6000 \text{ B}, U_1 = 2000 \text{ B}, U_2 = 1000 \text{ B}, U_3 = 0 \text{ B}, U_{\text{колл}} = -100 \text{ B}$

На рис. 2, а, показана ионно-оптическая схема транспортирующей системы, в которой электрод, выполняющий функцию сопла, имеет выпуклую форму. Численное моделирование показывает, что шейпинг сопла позволяет увеличить величину *I*_{сопло} приблизительно в 1.6 раза. Учет газодинамического влияния на транспортировку ионного пучка через сопло позволяет в перспективе увеличить значения тока еще в 1.7 раза [12].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты численного моделирования показывают, что в ионно-оптической системе для транспортировки ионов при атмосферном давлении на основе тонких диафрагм шейпинг сопла позволяет заметно улучшить эффективность транспортировки ионов. Так, сопло выпуклой формы, рассматриваемое в наших численных экспериментах, позволяет увеличить величину тока, проходящего через сопло, приблизительно в 1.6 раза. Учет газодинамического влияния на транспортировку ионного пучка через сопло позволяет в перспективе увеличить значения прошедшего еще в 1.7 раза.

Работа выполнена в рамках НИР 0074-2019-0009 (номер гос. регистрации АААА-А19-119053190069-2), входящей в состав Госзадания №075-00980-19-02 ИАП РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Tang K., Li F., Shwartsburg A., Stritmatter E.F., Smith R.D. Two-dimensional gas-phase separations coupled to mass spectrometry for analysis of complex mixtures // Anal. Chem. 2005. Vol. 77, no. 19. P. 6381– 6388. DOI: 10.1021/ac050871x
- Tang K., Shwartsburg A., Lee H.N., Prior D.C., Buschtbach M.A., Li F., Tolmachev A., Anderson G.A., Smith R.D. High-sensitivity ion mobility spectrometry/mass spectrometry using electrodynamic ion funnel interfaces // Anal. Chem. 2005. Vol. 77, no. 10. P. 3330– 3339. DOI: 10.1021/ac048315a
- Ibrahim Y.M., Baker E.S., Danielson III W.F., Norhem R.V., Prior D.C., Anderson G.A., Belov M.E., Smith R.D. Development of a new ion mobility (quadrupole) time-of-flight mass spectrometer // Int. J. Mass Spektrom. 2015. Vol. 377, no. 1. P. 655–662. DOI: 10.1016/j.ijms.2014.07.034
- Cumeras R., Fiqueras E., Davis C.E., Baumbach J.L., Gracia I. Review on ionmobility spectrometry. Part 1: Current instrumentation // Analyst. 2015. Vol. 140, no. 5. P. 1376–1390. DOI: 10.1039/c4an01100g
- 5. Kim T., Tolmachev A.V., Harkewicz R., Prior D.C., Anderson G., Udseth H.R., Smith R.D., Bailey T.H., Ra-

kov S., Futrell J.H. Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel // Anal. Chem. 2000. Vol. 72, no. 10. P. 2247–2255. DOI: 10.1021/ac991412x

- Shaffer S.A., Prior D.C., Anderson G.A., Udseth H.R., Smith R.D. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry // Anal. Chem. 1998. Vol. 70, no. 19. P. 4111–4119. DOI: 10.1021/ac9802170
- 7. Кузьмин Д.А, Мурадымов М.З., Помозов Т.В., Арсеньев А.Н., Краснов Н.В. Транспортировка ионов в источниках с ионизацией при атмосферном давлении. І. Субстантивная геометрия // Научное приборостроение. 2017. Т. 27, № 4. С. 8–16. DOI: 10.18358/np-27-4-i816
- 8. Арсеньев А.Н., Мурадымов М.З., Краснов М.Н., Кузьмин Д.А., Помозов Т.В., Краснов Н.В. Транспортировка ионов в источниках с ионизацией при атмосферном давлении. II. Инверсная геометрия // Научное приборостроение. 2017. Т. 27, № 4. С. 17–23. DOI: 10.18358/np-27-4-i1723
- Arseniev A.N., KurninI.V., KrasnovN.V., Muradymov M.Z., Yavor M.I., Pomozov T.V., Krasnov M.N. Optimization of ion transport from atmospheric pressure ion sources // International Journal for Ion Mobility Spectrometry. 2019. Vol. 22, no. 1. P. 31–38, DOI: 10.1007/s12127-018-0242-2
- Arseniev A.N., Muradymov M.Z., Krasnov N.V. Investigation of electrospray stability with dynamic liquid flow splitter // J. of Anal. Chem. 2014. Vol. 69, no. 14. P. 30–32. DOI: 10.1134/S1061934814140020
- Mutin E.M., Muradymov M.Z., Krasnov N.V., Krasnov M.N., Kurnin I.V. Spatial distribution of the dropless ESI charged particles at IMS entrance // International Journal for Ion Mobility Spectrometry. 2020. Vol. 23. P. 91–96. DOI: 10.1007/s12127-020-00269-w
- 12. Куприй П.А., Мурадымов М.З., Краснов Н.В, Курнин И.В., Арсеньев А.Н. Влияние газодинамического течения на транспортировку ионов через сопло источника ионов с ионизацией при атмосферном давлении // Научное приборостроение. 2020. Т. 30, № 4. С. 75–83. DOI: 10.18358/пр-30-4-i7583

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Контакты: *Краснов Николай Васильевич*, krasnov @alpha-ms.com

Материал поступил в редакцию 05.07.2021

INFLUENCE OF FEATURES OF THE ELECTRIC FIELD IN THE DIAPHRAGM SYSTEM ON THE TRANSPORTATION OF THE FLOW OF CHARGED PARTICLES AT ATMOSPHERIC PRESSURE

T. V. Pomozov, N. V. Krasnov

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia

The results of numerical simulation of the ion-optical scheme of ion transport at atmospheric pressure are presented. The possibility of efficient transport of ions in the system under consideration with an increase in the local curvature of the equipotential lines of the electrostatic field in the vicinity of the nozzle by shaping (changing the shape) of this electrode is shown. Shaping the nozzle allows to increase the value of I_{conno} by approximately 1.6 times. Taking into account the gas-dynamic effect on the transport of the ion beam through the nozzle makes it possible to obtain the values of the transmission by 70% higher.

Keywords: ion mobility spectrometer, ion transport at atmospheric pressure, electrostatic field

INTRODUCTION

The use of ion mobility spectrometers in complex analytical devices LC-ESI-IMS-MS is growing as one of the systems for separating complex mixtures that are analyzed in biochemistry, medicine, and drug control research. In this regard, many developments of new ion mobility spectrometers are being carried out in order to increase their resolution and sensitivity [1-4]. The use of such analytical devices increases the possibility of identifying analytes in complex mixtures by accounting for the retention time t in LC, mobility K in IMS and mass-to-charge ratio (m/z) in MS. Modern LC-ESI-IMS-MS complexes use an ion mobility spectrometer, which is part of the ESI ion source interface operating at atmospheric pressure, and MS, which is a high vacuum instrument. The pressure in the drift region of the ion mobility spectrometer is several Torr, while both the drift region and the total length of the spectrometer increase substantially to obtain the required resolution of the spectrometer: in [1–6] the size of the ion mobility spectrometer reaches about 2 m or more. Low gas pressure in the drift area results in the use of an electric field strength of several tens of volts per centimeter, which avoids electrical breakdown in the device.

Electrodynamic ion funnels have been proposed to introduce a beam of charged particles from the highpressure region first into the drift region, and then from the drift region to the next stage of differential pumping of the mass spectrometer [5, 6]. This idea was condidered in works [2, 3]. Electrodynamic funnel device is a set of flat electrodes with a variable inner diameter from 50 to 2 mm, the thickness of which is 0.5 mm; the thickness of the Teflon dielectric spacers separating them is 0.5 mm too. The number of electrodes, depending on the design and place of application of electrodynamic funnels, varies from 100 to 80 pieces. The inner diameters of the electrodes vary from electrode to electrode depending on the design and the task being performed. A constant strictly defined voltage from tens to several hundred volts and an alternating component with a frequency of about 500 kHz and an amplitude from peak to peak of about 100 V are applied to the electrodes. The main idea of using an electrodynamic funnel is to convert the cross section of a diverging beam of charged particles obtained in an ESI (API) source into a smaller cross section without losing the total ion transmission, i.e. in an increase in the transmission density along the axis of the ion mobility spectrometer, which in turn is accompanied by an increase in the sensitivity of the device.

An alternative approach to transforming the cross section of a diverging beam of charged particles is presented in [7–9], in which the ion mobility spectrometer operates at atmospheric pressure. This allows the use of an electric field strength of up to 1 kV / cmand electrodes 0.1 mm thick, due to which the number of electrodes installed behind the nebulizer in the ion source with sputtering in a drip-free mode under normal conditions (p = 760 Torr, $\hat{T} = 300$ K) is reduced to 3–4 [10–12]. In this case, the size of the inlet diameter of the transportation system (the first electrode) is to be 4–6 mm so that the charged particles would pass through the system of electrodes with minimal losses, the last of electrodes separates the transportation system and the drift region and has a hole diameter of 1.2 mm (32% of the corona discharge current). In drift space, the beam of charged particles has a cross section of 2 mm along the entire length of 55 mm [9] of the entrance to a similar outlet transport system in front of the collector, while the last electrode has a hole 0.5 mm in diameter which is quite suitable for coupling the interface with the high-vacuum part of the mass spectrometer.

In the process of transporting ions to the outlet diaphragm (nozzle), that separates the region of the ion mobility spectrometer with the atmospheric pressure from the vacuum system of the mass analyzer, separated ion packets move in an inhomogeneous electric field and in the flow of concurrent gas at the nozzle. The movement of ions is carried out along the lines of flux, which fall to the plane of the nozzle and the edges of the inlet to the nozzle. In a gas at rest, ions are deposited on the nozzle and do not pass behind it. When forming the gas flow through the nozzle into the vacuum part of the device, the ions "frozen" into the dense gas get redistributed and partially penetrate with the gas behind the nozzle. Given the high intensity of the electric field at the edge of the inlet into the nozzle, some of the ions located in the vicinity of the inlet enter the vacuum system of the device. Increasing the nozzle orifice for larger penetration of ions into the vacuum region is impractical, since deteriorating vacuum conditions do not allow efficient transportation and focusing of the ion flow at the interface. These disadvantages are inherent in almost all ion sources with ionization at atmospheric pressure. Thus, the transport of ions in such sources is based on a combination of two mechanisms: the movement of ions in a constant electric field and the movement of ions and neutral particles in gas flow at the inlet to the nozzle.

In this work, using numerical simulation methods, we compare the quality of ion transport at atmospheric pressure in a system based on flat thin diaphragms and in a system in which the nozzle shape has a geometric feature.

SIMULATION OF ION MOTION IN GAS, TAKING INTO ACCOUNT THE INFLUENCE OF THE FEATURES OF THE ELECTRIC FIELD

Trajectories of positively charged ions, equipotential lines of the electrostatic field in the investigated transport scheme on the basis of thin diaphragms in the plane passing through the optical axis, as well as the geometric and electrical parameters of the circuit, are shown in Fig. 1, a.

The structure of the field is influenced by both geometric and electrical parameters of the investigated device, i.e. if diameters of the holes are small, the electric field more effectively selects ions out from the corona discharge, mainly along the axis of the device under study, nature of it is presented in Fig. 1, δ .

Numerical modeling of the electrostatic field and trajectories of charged particles in a dense gas (air) was carried out in the SIMION 8.0 software package using a statistical diffusion simulation (SDS), which is

Fig. 1. Trajectories of positively charged ions and
equipotential lines of the electrostatic field in the inves-
tigated transport system in the plane passing through
the optical axis.
Arrows (on (6)) indicate the direction of the field
strength vector.
Geometric parameters: $L = 5 \text{ mm}, L_1 = 1 \text{ mm}, d_1 = 4 \text{ mm},$
$d_2 = 2.65$ mm, $d_3 = 1.2$ mm, $d_4 = 0.5$ mm, the thickness
of diaphragms 1–4 is 0.1 mm.
Electrical parameters: $U_{\mu\nu\mu} = 7000 \text{ V}, U_1 = 3000 \text{ V},$
$U_2 = 2000 \text{ V}, U_3 = 1000 \text{ V}, U_4 = 0 \text{ V}, U_{\text{колл}} = -100 \text{ V}$

presented as a user program for the package. Positive nitrogen ions (m = 14 a.m.u.) with a spherical spatial distribution (d = 1.5 mm) were used as a model beam. The simulation was carried out under normal conditions (T = 300 K, p = 760 Torr) without taking into account the effect of the space charge.

The thickness of the diaphragms of the transport system is 0.1 mm. The choice in favor of the thinnest possible diaphragms is due to the following points. First, the lines of force fall on the electrode surfaces, since they are all equipotential surfaces, therefore, the thinner the electrodes, the fewer the zones of potential ion loss. Second, the thinner the diaphragm, the more pronounced focusing properties the system possesses due to the absence of local defocusing regions in the electrode channel.

The potential difference between adjacent diaphragms 1–4 is 1000 V, since higher values can lead to a breakdown in terms of atmospheric pressure. The focusing properties of the ion-optical scheme are easily explained by the pattern of equipotential lines. Note that in the geometry under consideration, in the vicinity of the third diaphragm, the field strength is practically constant, so that this diaphragm can be excluded from the ion source design. Fourth diaphragm with hole diameter d = 0.5 mm can be considered as the plane of the nozzle.

The results of numerical simulations show that, in the considered ion-optical scheme, the transmission of ions to the collector is approximately 1.5% for the initially applied distribution of ions. Such a low transmission value is explained by the presence of a defocusing field near the nozzle plane, as a result most of the ions moving with almost thermal velocities are lost in the vicinity of the electrode channel. In a real ion source, there is inevitably a flow of catenary gas at the inlet into the nozzle, and the amount of ion transmission beyond the plane of the nozzle should be noticeably higher. Therefore, the fraction of charged particles arriving at the nozzle in the region of space bounded by $|x| \le 0.25$ mm and $|y| \le 0.25$ mm, which is approximately $I_{\text{COLIDO}} \approx 8.3\%$.

The efficiency of ion focusing in the system under consideration can be increased by local curvature of **Fig. 2.** Trajectories of positively charged ions and equipotential lines of the electrostatic field in a focusing system with a convex nozzle in a plane passing through the optical axis. Geometric parameters: $L_1 = 5 \text{ mm}$, $L_2 = L_5 = 1 \text{ mm}$, $L_3 = 0.65 \text{ mm}$, $L_4 = 1.65 \text{ mm}$, $d_1 = 4 \text{ mm}$, $d_2 = 2.65 \text{ mm}$, $d_3 = 0.5 \text{ mm}$, R = 1.5 mm, the thickness of diaphragms 1–3 is 0.1 mm. Electrical parameters: $U_{\text{HFIRA}} = 6000 \text{ V}$, $U_1 = 2000 \text{ V}$, $U_2 = 1000 \text{ V}$, $U_3 = 0 \text{ V}$, $U_{\text{KORR}} = -100 \text{ V}$

the equipotential lines of the electrostatic field in the vicinity of the nozzle by changing the shape of this electrode.

In Fig. 2, a, an ion-optical diagram of the transport system is shown, in which the electrode, acting as a nozzle, has a convex shape. Numerical modeling shows that nozzle shaping allows increasing the value of I_{conno} by approximately 1.6 times. Taking into account the gas-dynamic effect on the transport of the ion beam through the nozzle makes it possible to increase the transmission values by a factor of 1.7 [12] subsequently.

CONCLUSION

The results of numerical simulations show that in an ion-optical system for transporting ions based on thin diaphragms at atmospheric pressure nozzle shaping can significantly improve the efficiency of ion transport. Thus, a convex nozzle considered in our numerical experiments makes it possible to increase the value of the transmission passing through the nozzle by approximately 1.6 times. Taking into account the gas-dynamic effect on the transport of the ion beam through the nozzle makes it possible to increase the transmission value by a factor of 1.7 in the prospect yet.

The work was carried out within the framework of research work 0074-2019-0009 (state registration number AAAA-A19-119053190069-2, which is part of the State assignment No. 075-00980-19-02 of the IAP RAS.

REFERENCES

- Tang K., Li F., Shwartsburg A., Stritmatter E.F., Smith R.D. Two-dimensional gas-phase separations coupled to mass spectrometry for analysis of complex mixtures. *Anal. Chem.*, 2005, vol. 77, no. 19, pp. 6381– 6388. DOI: 10.1021/ac050871x
- 2. Tang K., Shwartsburg A., Lee H.N., Prior D.C., Buschtbach M.A., Li F., Tolmachev A., Anderson G.A.,

Contacts: Krasnov Nikolay Vasil'evich, krasnov @alpha-ms.com

Smith R.D. High-sensitivity ion mobility spectrometry/mass spectrometry using electrodynamic ion funnel interfaces. *Anal. Chem.*, 2005, vol. 77, no. 10, pp. 3330– 3339. DOI: 10.1021/ac048315a

- Ibrahim Y.M., Baker E.S., Danielson III W.F., Norhem R.V., Prior D.C., Anderson G.A., Belov M.E., Smith R.D. Development of a new ion mobility (quadrupole) time-of-flight mass spectrometer. *Int. J. Mass Spektrom.*, 2015, vol. 377, no. 1, pp. 655–662. DOI: 10.1016/j.ijms.2014.07.034
- Cumeras R., Fiqueras E., Davis C.E., Baumbach J.L., Gracia I. Review on ionmobility spectrometry. Part 1: Current instrumentation. *Analyst.*, 2015, vol. 140, no. 5, pp. 1376–1390. DOI: 10.1039/c4an01100g
- Kim T., Tolmachev A.V., Harkewicz R., Prior D.C., Anderson G., Udseth H.R., Smith R.D., Bailey T.H., Rakov S., Futrell J.H. Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel. *Anal. Chem.*, 2000, vol. 72, no. 10, pp. 2247–2255. DOI: 10.1021/ac991412x
- Shaffer S.A., Prior D.C., Anderson G.A., Udseth H.R., Smith R.D. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry. *Anal. Chem.*, 1998, vol. 70, no. 19, pp. 4111–4119. DOI: 10.1021/ac9802170
- Kuzmin D.A., Muradymov M.Z., Krasnov N.V., Pomozov N.V., Arseniev A.N. [Transport of ions in sources with ionization at atmospheric pressure. I. Substantive geometry]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2017, vol. 27, no. 4, pp. 8–16. DOI: 10.18358/np-27-4-i816 (In Russ.).
- Kuzmin D.A., Muradymov M.Z., Krasnov N.V., Pomozov N.V., Arseniev A.N., Krasnov M.N. [Transport of ions in sources with ionization at atmospheric pressure. II. Inverse geometry]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2017, vol. 27, no. 4, pp. 17–23. DOI: 10.18358/np-27-4-i1723 (In Russ.).
- Arseniev A.N., Kurnin I.V., Krasnov N.V., Muradymov M.Z., Yavor M.I., Pomozov T.V., Krasnov M.N. Optimization of ion transport from atmospheric pressure ion sources. *International Journal for Ion Mobility Spectrometry*, 2019, vol. 22, no. 1, pp. 31–38, DOI: 10.1007/s12127-018-0242-2
- Arseniev A.N., Muradymov M.Z., Krasnov N.V. Investigation of electrospray stability with dynamic liquid flow splitter. *J. of Anal. Chem.*, 2014, vol. 69, no. 14, pp. 30–32. DOI: 10.1134/S1061934814140020
- Mutin E.M., Muradymov M.Z., Krasnov N.V., Krasnov M.N., Kurnin I.V. Spatial distribution of the dropless ESI charged particles at IMS entrance. *International Journal for Ion Mobility Spectrometry*, 2020, vol. 23, pp. 91–96. DOI: 10.1007/s12127-020-00269-w
- Kupriy P.A., Muradymov M.Z., Krasnov N.V., Kurnin I.V., Arseniev A.N. [Effect of gas-dynamic flow on ion transport through the nozzle of an ion source with ionization at atmospheric pressure]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2020, vol. 30, no. 4, pp. 75–83. DOI: 10.18358/np-30-4-i7583 (In Russ.).

Article received by the editorial office on 05.07.2021