

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

УДК 537.534.7, 537.291

EDN: WQVMTK

© И. В. Курнин, 2025

САМОСОГЛАСОВАННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ, ВЫНОСИМЫХ ГАЗОВЫМ ПОТОКОМ ИЗ КАПИЛЛЯРА В РАДИОЧАСТОТНЫЙ КВАДРУПОЛЬ

В работе представлена процедура переноса расчетных пространственных распределений газодинамических параметров в пользовательский алгоритм программы ионно-оптических расчетов SIMION 8.1 для проведения самосогласованного расчета движения ионов в электрическом поле при наличии газового потока. На примере захвата радиочастотным квадруполем пучка ионов, выносимых газовым потоком из капилляра, проведен самосогласованный расчет движения ионов. Показана эффективность транспортировки ионов в массовом диапазоне 100–2000 а.е.м. через область промежуточного давления в квадруполе и их трансмиссии через диафрагму дифференциальной откачки на выходе квадруполь без наложения продольного протягивающего электростатического поля.

Ключевые слова: транспортный капилляр, газовая струя, радиочастотный квадруполь, входной интерфейс масс-спектрометра

ВВЕДЕНИЕ

При использовании источников ионов при атмосферном давлении образующиеся ионы необходимо доставить к масс-анализатору, работающему при давлении на несколько порядков ниже. Для сопряжения источника ионов на атмосферном давлении с масс-спектрометром, как правило, используются либо диафрагма с диаметром отверстия около 100 мкм, либо капилляр, через которые ионы поступают в камеру с давлением несколько Торр, а затем отбираются в масс-спектрометр через конический скиммер [1]. Входной газовый поток может влиять на эффективность переноса ионов. Конструкция впуска газа, будь то через маленькое отверстие или длинный капилляр, является основным фактором регулирования расхода газа и перепадов давления и должна обеспечивать оптимальную передачу ионов в вакуумные ступени.

В интерфейсах переход от высокого давления к низкому создает свободное расширение струи. Столкновения с молекулами газа и турбулентность в газовом потоке существенно влияют на траектории ионов и их энергию. При этом имеются различия в вовлеченности ионов разных масс газовым потоком. Все эти факторы влияют на эффективность транспортировки ионов во входном интерфейсе. Кроме того, при использовании такого метода ионизации при атмосферном давлении, как ионизация электрораспылением, газодинамика имеет решающее значение для испарения заряженных капель и высвобождения ионов анализируемого вещества.

Таким образом, при моделировании входных интерфейсов масс-спектрометров необходимо учитывать множество физических процессов. Важнейшим аспектом является точное описание поведения ионов в условиях наложения газодинамических потоков и электрических полей, что требует самосогласованного подхода, при котором эти процессы моделируются одновременно.

В данной работе представлена процедура переноса расчетных пространственных распределений газодинамических параметров буферного газа в пользовательский алгоритм программы SIMION 8.1 для проведения самосогласованного расчета движения ионов в электрическом поле при наличии буферного газа. Результат такого сопряжения показан на примере расчета эффективности захвата пучка ионов в диапазоне масс 100–2000 а.е.м., выносимых газовым потоком из капилляра, радиочастотным квадруполем.

ПЕРЕНОС МАССИВОВ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ БУФЕРНОГО ГАЗА И ИХ УЧЕТ ПРИ САМОСОГЛАСОВАННОМ РАСЧЕТЕ В ПРОГРАММЕ SIMION

Результатом моделирования газодинамических потоков являются числовые массивы с пространственными распределениями газодинамических величин, такими как локальные компоненты скорости, давление и температура газа. Как правило, расчетные массивы, определяемые на нерегулярной расчетной сетке, посредством процедуры

интерполяции преобразуются в регулярные. Записываемые пространственные распределения отвечают геометрии моделируемой области. Преобразование исходных расчетных массивов в регулярные необходимо, поскольку программа ионно-оптических расчетов SIMION [2] оперирует именно с такими массивами.

После того как газодинамическая сетка экспортирована из программы газодинамики и проведена процедура интерполяции, необходимо каким-то образом загрузить ее в SIMION и интерпретировать. Другими словами, когда частица, пролетающая через систему, находится в некотором произвольном положении (x, y, z), модель столкновения каким-то образом должна знать состояние газового потока в этой точке. В программе SIMION 8.1 есть возможность считать сетку газового потока как обычный PA (Potential Array) файл. В этом случае SIMION сам выполнит интерполяцию данных газодинамической сетки относительно своей сетки. Массив потенциалов (PA-файл) представляет собой двухмерную или трехмерную прямоугольную сетку со значениями газодинамических величин в моделируемой области. Ее назначение — сохранять геометрию электродов и/или потенциалы в каждой точке этой геометрии. PA-файл также содержит раздел заголовка с общей информацией о массиве потенциалов, такой как размеры области, ее симметрия. Аналогично этому формату представляются и газодинамические поля. Поточковые данные записываются в виде обычных PA-файлов, по одному на каждое скалярное поле: для компонент скорости, давления и температуры газа.

С помощью Lua-алгоритма, который использует встроенные функции программы SIMION, запускается преобразование газодинамических массивов в PA-массивы. В результате генерируются PA-файлы с пространственными распределениями давления газового потока, его температуры, x -составляющей вектора скорости, y -составляющей вектора скорости и z -составляющей вектора скорости соответственно.

Обращение к PA-массивам с пространственными распределениями газодинамических величин осуществляется в пользовательской программе расчета движения ионов в электрическом поле при наличии буферного газа. В результате происходит обращение к газодинамическим PA-файлам и считывание газодинамических параметров, соответствующих точке нахождения иона. По давлению и температуре газового потока в точке нахождения иона, согласно закону состояния идеального газа, определяется значение плотности, используемое при расчете вероятности столкновения иона с молекулой газа. Для моделирования динамики ионов при низких давлениях буферного газа, как правило, используется модель, которая

учитывает единичные столкновения ионов с молекулами газа с помощью метода Монте-Карло [3], либо в случае высоких давлений газа используется так называемая "статистическая диффузионная модель" (Statistical Diffusion Simulation, SDS [4]), которая учитывает диффузию иона в плотном газе в дополнение к описанию движения, базирующемуся на уравнении подвижности. Компоненты скорости газового потока участвуют в определении результирующей скорости иона после столкновения.

Поскольку исходные пространственные распределения газодинамических величин отвечают расчетной области в соответствии с симметрией (для осесимметричного случая — продольное сечение, для трехмерного случая — элементарный сегмент), то для расчета динамики ионов в полной моделируемой области газодинамические распределения учитываются следующим образом. В случае осевой симметрии: при нахождении иона в точке (x, y, z) поперечные координаты y, z определяют расстояние (радиус R) от оси. Тогда газодинамические значения, соответствующие точке нахождения иона, будут такими же, как в расчетной плоскости ($x, R, 0$), на которой они определены в газодинамических PA-файлах. В трехмерном случае, когда, например, моделируется с учетом газодинамических полей движение ионов в квадруполе, расчетная газодинамическая область представляет собой четверть объема. Поэтому в программе SIMION учет таких газодинамических величин, как скорость потока, давление и температура, во всем объеме осуществляется посредством отражения значений в точке (x, y, z) в исходной четверти относительно плоскостей симметрии.

РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЗАХВАТА ПУЧКА ИОНОВ, ВЫНОСИМЫХ ГАЗОВЫМ ПОТОКОМ ИЗ КАПИЛЛЯРА, РАДИОЧАСТОТНЫМ КВАДРУПОЛЕМ.

Рассмотрим результат переноса газодинамических пространственных распределений параметров буферного газа в пользовательский алгоритм программы SIMION 8.1 и проведения самосогласованного расчета движения ионов в электрическом поле при наличии буферного газа на примере захвата радиочастотным квадруполом пучка ионов, выносимых газовым потоком из капилляра. Эффективность транспортировки ионов разных масс через область промежуточного давления рассматривалась в случае размещения капилляра вдоль оси квадруполя, так что ионы, выносимые газовой струей, удерживались бы радиочастотным полем на оси квадруполя, а газовый поток подерживал их движение к выходной диафрагме дифференциальной откачки.

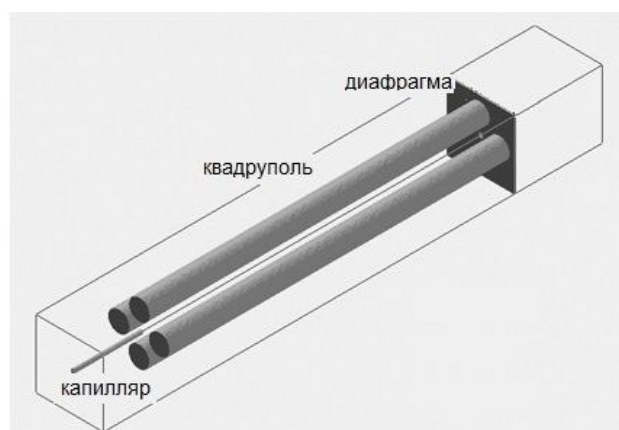


Рис. 1. Общий вид моделируемой в программе SIMION области. Капилляр, 100-мм квадруполь с выходной диафрагмой с диаметром отверстия 1.5 мм

На рис. 1 показан общий вид моделируемой в программе SIMION области. Капилляр с внутренним диаметром 0.6 мм располагается на входе в квадруполь. Диаметр стержней квадруполя составляет 6 мм, диаметр вписанной апертуры также равен 6 мм. Длина квадруполя — 100 мм, диаметр отверстия выходной диафрагмы — 1.5 мм. Амплитуда радиочастотного (РЧ) напряжения составляет 150 В, частота 0.5 МГц. Рассматриваются ионы в диапазоне масс 100–2000 а.е.м. Давление на входе капилляра составляет 760 Торр, на границах области откачки — 1, 3 либо 5 Торр. Откачка осуществляется по всей боковой поверхности камер, которая ограничивает область вокруг квадруполя. Моделирование газодинамики во входном интерфейсе проводилось с помощью программы газодинамического моделирования путем решения системы уравнений Навье – Стокса. Предполагалось, что на границах всего объема теплопередача отсутствует, уравнение состояния воздуха

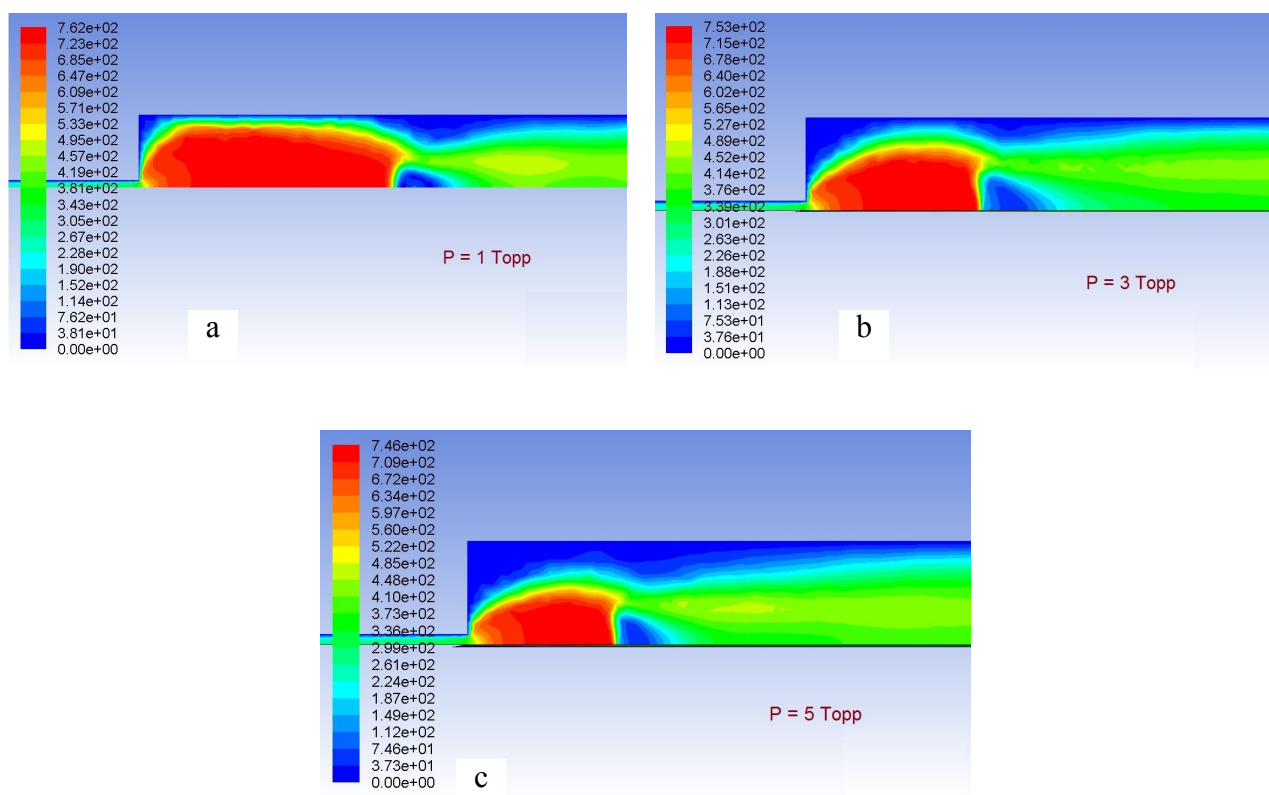


Рис. 2. Пространственное распределение скорости газового потока, исходящего из капилляра, при давлениях в квадруполе 1 (а), 3 (b) и 5 (с) Торр. Показаны распределения в верхней полуплоскости, проходящей через центр стержня и ось квадруполя; область ограничена стержнем квадруполя при радиусе вписанной апертуры, равной 3 мм

отвечало идеальному, а температура газа на входе в капилляр составляла 300 К. Для моделирования турбулентности использовалась $k-\varepsilon$ модель.

Рассматривалось установившееся движение струи. С учетом симметрии полной расчетной области моделирование проводилось в ее четверти.

На рис. 2 приведены пространственные распределения скорости газового потока, исходящего из капилляра, при давлениях в квадруполе 1, 3 и 5 Торр. Показаны распределения в верхней полуплоскости, проходящей через центр стержня квадрупольного и его ось. Размеры бочки Маха зависят от отношения давлений на входе капилляра и выходе. Видно, что в зависимости от давления поперечные размеры бочки Маха либо превышают вписанный диаметр квадрупольного при давлении газа внутри квадрупольного 1 Торр, примерно равны вписанному диаметру при давлении 3 Торр и заметно меньше вписанного диаметра при давлении 5 Торр.

Из рис. 3, а, б, где показаны характерные траектории ионов с массами 100 (рис. 3, а) и 2000 а.е.м.

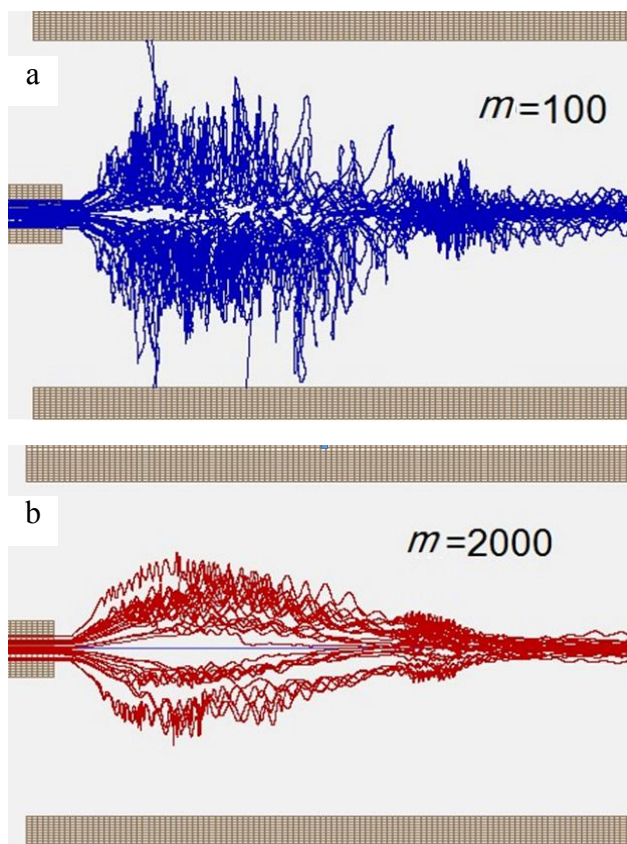


Рис. 3. Характерные траектории ионов с массами 100 а.е.м. (а) и 2000 а.е.м. (б) с учетом динамики газовой струи на выходе из капилляра. Внутренний диаметр капилляра 0.6 мм, давление газа в квадруполе 3 Торр

(рис. 3, б) на выходе из капилляра, видно, что ионы увлекаются в стороны газовой струей, а затем прижимаются к оси радиочастотным полем. Все ионные потери происходят в области бочки Маха. При давлении буферного газа 1 Торр вследствие отражения волн от стержней квадрупольного наблюдается область завихрения.

При давлении в квадруполе 3 Торр, когда граница сверхзвуковой струи лишь слегка касается стержней, такого завихрения не наблюдается.

В результате при давлении 1 Торр часть ионов застревает в области завихрения и может находиться там бесконечно долго. Причем чем легче ион, тем вероятнее он попадает в эту газодинамическую яму, поскольку пространственный разброс ионных траекторий у легких ионов больше.

ТРАНСМИССИЯ ИОНОВ ЧЕРЕЗ ВЫХОДНУЮ АПЕРТУРУ РАДИОЧАСТОТНОГО КВАДРУПОЛЯ

Эффективность транспортировки ионов определяется степенью удержания ионов в квадруполе при их выносе газовым потоком из капилляра и поддержки газовым потоком их движения к выходной диафрагме с диаметром отверстия 1.5 мм без наложения продольного протягивающего электростатического поля. При давлении газа в квадруполе 1 Торр наблюдается задержка ионов в области за диском Маха, что особенно заметно в случае легких ионов. Феноменологический учет объемного заряда в форме выталкивания ионов из газодинамической ямы позволяет выделить ионные потери во входной области, обусловленные

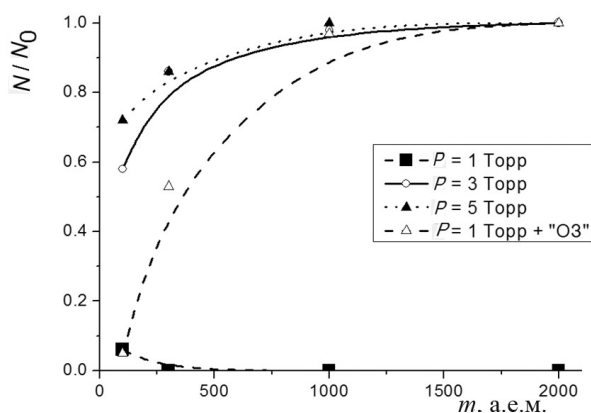


Рис. 4. Трансмиссия ионов (относительное количество) с массами 100–2000 а.е.м. через выходную диафрагму квадрупольного с диаметром отверстия 1.5 мм при промежуточных давлениях буферного газа 1, 3 и 5 Торр.

"ОЗ": феноменологический учет действия объемного заряда — выталкивание ионов из области завихрения за диском Маха при давлении 1 Торр

выносом ионов за стержни или потерей на них. На рис. 4 приведена трансмиссия ионов с массами 100–2000 а.е.м. через выходную диафрагму квадруполя с диаметром отверстия 1.5 мм при промежуточных давлениях буферного газа 1, 3 и 5 Торр. Длина стержней квадрупольной сборки 100 мм, диаметр стержней 6 мм, диаметр вписанной апертуры 6 мм, частота поля 0.5 МГц с амплитудой 150 В. Вариант расчета, помеченный "ОЗ", — феноменологический учет действия объемного заряда с продольным выталкиванием ионов из области завихрения за диском Маха при давлении 1 Торр. Потери на входе в квадруполь характерны для легких ионов, поскольку они легче увлекаются исходящим газовым потоком. Далее на выходной диафрагме квадруполя с диаметром отверстия 1.5 мм потерь нет. Таким образом, использование радиочастотного канала позволяет существенно сократить потери ионов при их транспортировке через область промежуточного давления 1–5 Торр.

На рис. 5 представлена трансмиссия ионов с массами 100–2000 а.е.м. через выходную диафрагму квадруполя при давлении в квадруполе 1 Торр и РЧ, равных 0.5 и 0.8 МГц, с выталкиванием ионов из области завихрения. Видно, что при увеличении частоты до 0.8 МГц потери ионов легких масс уменьшаются.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена процедура переноса расчетных пространственных распределений газо-

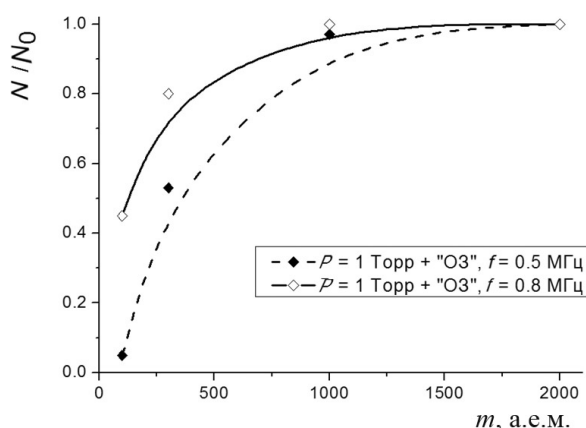


Рис. 5. Трансмиссия ионов (относительное количество) с массами 100–2000 а.е.м. через выходную диафрагму квадруполя с диаметром отверстия 1.5 мм при давлении в квадруполе 1 Торр и РЧ, равных 0.5 и 0.8 МГц.

"ОЗ": феноменологический учет действия объемного заряда — выталкивание ионов из области завихрения за диском Маха при давлении 1 Торр

динамических параметров буферного газа в пользовательский алгоритм программы ионно-оптических расчетов SIMION 8.1 для проведения самосогласованного расчета движения ионов в электрическом поле при наличии газовой струи. На примере захвата радиочастотным квадруполем пучка ионов, выносимых газовым потоком из капилляра, проведен самосогласованный расчет движения ионов.

Показано, что эффективность захвата ионов в диапазоне масс 100–2000 а.е.м., выносимых газовым потоком из капилляра в квадруполь, существенно зависит от соотношения вписанного диаметра квадруполя и поперечного размера бочки Маха, который зависит от давления буферного газа. При давлении буферного газа 1 Торр вследствие отражения волн от стержней квадруполя, наблюдается область завихрения. В результате ионы застревают в области завихрения и без учета объемного заряда, способствующего выталкиванию ионов из газодинамической ямы, могут находиться там бесконечно долго. При давлении буферного газа 3 Торр, когда граница сверхзвуковой струи лишь слегка касается стержней, такого завихрения не наблюдается. При увеличении частоты до 0.8 МГц потери ионов легких масс уменьшаются.

Потери на входе в квадруполь характерны для легких ионов, поскольку они легче увлекаются исходящим газовым потоком. На выходной диафрагме квадруполя с диаметром отверстия 1.5 мм потерь нет. Таким образом, использование радиочастотного канала позволяет существенно сократить потери ионов при их транспортировке через область промежуточного давления 1–5 Торр.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00444-25-00 (от 26.12.2024), тема НИР FFZM-2025-0006.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Covey T.R., Thomson B.A., Schneider B.B. Atmospheric pressure ion sources // *Mass Spectrometry Reviews*. 2009. Vol. 28, no. 6. P. 870–897. DOI: 10.1002/mas.20246
2. Manura D., Dahl D.A. SIMION 8.0 User's Manual. Sci. Instrument Services, Inc. Idaho Nat. Lab, 2006. URL: <https://simion.com/info/manual.html>
3. Курнин И.В., Явор М.И. Особенности транспортировки ионных пучков в газонаполненных радиочастотных квадруполях на промежуточных давлениях // *ЖТФ*. 2009. Т. 79, № 9. С. 112–119. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/9799>
4. Appelhans A.D., Dahl D.A. SIMION ion optics simulations at atmospheric pressure // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2005. Vol. 244. P. 1–14. DOI: 10.1016/j.ijms.2005.03.010

**Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург**

Материал поступил в редакцию 24.12.2025

Контакты: **Курнин Игорь Васильевич**,
igor.kurnin@gmail.com

SELF-CONSISTENT SIMULATION OF THE MOTION OF IONS CARRIED OUT BY A GAS JET FROM A CAPILLARY INTO A RADIO FREQUENCY QUADRUPOLE

I. V. Kurnin

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia

The paper presents a procedure for transferring calculated spatial distributions of gas-dynamic parameters to the users algorithm of the SIMION 8.1 ion-optical calculation program for self-consistent calculation of ion motion in an electric and gasdynamic fields. The simulation of the capturing an ion beam, emitted out from a capillary with a gas jet, by a radio frequency quadrupole, is carried out as the example of the self-consistent simulation of the ion motion. The efficiency of the ion transportation (in the mass range of 100–2000 a.m.u.) through the area of intermediate pressure in the quadrupole and the efficiency of the ion transmission through the differential pumping diaphragm at the outlet of the quadrupole without applying a longitudinal drawing electrostatic field are shown.

Keywords: transport capillary, gas jet, RF quadrupole, interface of mass spectrometer

REFERENCES

1. Covey T.R., Thomson B.A., Schneider B.B. Atmospheric pressure ion sources. *Mass Spectrometry Reviews*, 2009, vol. 28, no. 6, pp. 870–897. DOI: 10.1002/mas.20246
2. Manura D., Dahl D.A. *SIMION 8.0 User's Manual*. Sci. Instrument Services, Inc. Idaho Nat. Lab, 2006. URL: <https://simion.com/info/manual.html>
3. Kurnin I.V., Yavor M.I. [Peculiarities of ion beam transportation in gas-filled radio-frequency quadrupoles at intermediate pressures]. *Zhurnal technicheskoy fiziki* [Journal of Technical Physics], 2009, vol. 79, no. 9, pp. 112–119. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/9799> (In Russ.).
4. Appelhans A.D., Dahl D.A. SIMION ion optics simulations at atmospheric pressure. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2005, vol. 244, pp. 1–14. DOI: 10.1016/j.ijms.2005.03.010

Contacts: **Kurnin Igor' Vasil'evich**,
igor.kurnin@gmail.com

Article received by the editorial office on 24.12.2025

INTRODUCTION

When using ion sources at atmospheric pressure, the generated ions must be delivered to a mass analyzer operating at pressures several orders of magnitude lower. To interface an atmospheric-pressure ion source with a mass spectrometer, there are typically two methods: either a diaphragm with an opening diameter of approximately 100 μm or a capillary through which ions enter a chamber at a pressure of several Torr and then are collected into the mass spectrometer through a conical skimmer [1]. The inlet gas flow can affect the efficiency of ion transfer. The design of the gas inlet, whether through a small orifice or a long capillary, is a key factor in regulating gas flow and pressure drops and must ensure optimal ion transfer to the vacuum stages.

At interfaces, the transition from high pressure to low pressure creates free expansion of the jet. Collisions with gas molecules and turbulence in the gas flow significantly affect ion trajectories and their energy. And there are differences in the entrainment of ions of different masses by the gas flow. All these factors influence the efficiency of ion transport at the inlet interface. Furthermore, when using an atmospheric-pressure ionization method such as electrospray ionization, gas dynamics are crucial for the evaporation of charged droplets and the release of analyte ions.

Therefore, when modeling the inlet interfaces of mass spectrometers, many physical processes must be taken into account. A crucial aspect is the accurate description of ion behavior under conditions of superimposed gas-dynamic flows and electric fields, which requires a self-consistent approach in which these processes are modeled simultaneously.

This paper presents a procedure for transferring calculated spatial distributions of the gas-dynamic parameters of a buffer gas to a user-defined algorithm in SIMION 8.1 for self-consistent calculations of ion motion in an electric field in the presence of a buffer gas. The result of such a coupling is demonstrated using the example of calculating the capture efficiency of an ion beam in the mass range of 100–2000 amu, carried by a gas flow from a capillary, using a radio-frequency quadrupole.

TRANSFER OF ARRAYS OF SPATIAL DISTRIBUTIONS OF GAS-DYNAMIC PARAMETERS OF A BUFFER GAS AND THEIR ACCOUNTING IN SELF-CONSISTENT CALCULATION IN SIMION SOFTWARE

The results of gas-dynamic flow simulations are numerical arrays with spatial distributions of gas-dynamic quantities, such as local velocity compo-

nents, gas pressure, and temperature. Typically, the calculated arrays, determined on an irregular computational grid, are transformed into regular ones through interpolation. The resulting spatial distributions correspond to the geometry of the simulated region. Transforming the initial computational arrays into regular ones is necessary because the SIMION ion-optical calculation program [2] operates with such arrays.

After the gas-dynamic grid has been exported from the gas-dynamics program and the interpolation procedure has been performed, it must somehow be loaded into SIMION and interpreted. In other words, when a particle flying through the system is at some arbitrary position (x, y, z), the collision model must somehow know the state of the gas flow at this point. SIMION 8.1 offers the ability to read the gas flow grid as a regular PA (Potential Array) file. In this case, SIMION will automatically interpolate the gas-dynamic grid data relative to its own grid. A potential array (PA file) is a two-dimensional or three-dimensional rectangular grid with the values of gas-dynamic quantities in the simulated domain. Its purpose is to store the electrode geometry and/or potentials at each point of this geometry. The PA file also contains a header section with general information about the potential array, such as the region's dimensions and symmetry. Gas-dynamic fields are represented in a similar format. Flow data are written as regular PA files, one for each scalar field: for the velocity, pressure, and temperature components of the gas.

Using a Lua algorithm that utilizes SIMION's built-in functions, the conversion of gas-dynamic arrays into PA arrays is initiated. This generates PA files with spatial distributions of the gas flow pressure, temperature, x -component of the velocity vector, y -component of the velocity vector, and z -component of the velocity vector, respectively.

PA arrays with spatial distributions of gas-dynamic quantities are accessed in a user program for calculating ion motion in an electric field in the presence of a buffer gas. This accesses the gas-dynamic PA files and reads the gas-dynamic parameters corresponding to the ion location. Based on the pressure and temperature of the gas flow at the ion location, according to the ideal gas law, the density value is determined, which is used to calculate the probability of an ion colliding with a gas molecule. To simulate ion dynamics at low buffer gas pressures, a model that accounts for single ion-gas collisions using the Monte Carlo method [3] is typically used. For high gas pressures, a so-called "statistical diffusion model" (Statistical Diffusion Simulation, SDS [4]) is used, which accounts for ion diffusion in a dense gas in addition to the description of motion based on the mobility equation. The components of the gas flow velocity are involved

in determining the resulting ion velocity after the collision.

Since the initial spatial distributions of gas-dynamic quantities correspond to the computational domain in accordance with symmetry (for the axisymmetric case, a longitudinal section; for the three-dimensional case, an elementary segment), the gas-dynamic distributions are taken into account to calculate ion dynamics in the entire simulated domain as follows. In the case of axial symmetry: when an ion is located at a point (x, y, z) , the transverse coordinates y, z define the distance (radius R) from the axis. Then, the gas-dynamic values corresponding to the ion's location will be the same as in the calculated plane $(x, R, 0)$, where they are defined in the gas-dynamic PA files. In a three-dimensional case, for example, when ion motion in a quadrupole is modeled taking into account gas-dynamic fields, the calculated gas-dynamic domain represents a quarter of the volume. Therefore, in the SIMION program, gas-dynamic quantities such as flow velocity, pressure, and temperature are taken into account throughout the volume by reflecting the values at the point (x, y, z) in the original quadrant relative to the planes of symmetry.

CALCULATION OF THE EFFICIENCY OF CAPTURE OF A BEAM OF IONS CARRIED OUT OF A CAPILLARY BY A GAS FLOW USING A RADIOFREQUENCY QUADRUPOLE

We will consider the result of transferring the gas-dynamic spatial distributions of buffer gas parameters to the user-defined algorithm of SIMION 8.1 and performing a self-consistent calculation of ion motion in an electric field in the presence of a buffer gas, using the example of capturing a beam of ions carried out of a capillary by a radiofrequency quadrupole. The efficiency of transporting ions of different masses through the intermediate-pressure region was examined with the capillary positioned along the quadrupole axis. This ensured that the ions carried by the gas jet were held by the radiofrequency field on the quadrupole axis, and the gas flow supported their movement toward the differential pumping outlet diaphragm.

Figure 1 shows a general view of the region simulated in the SIMION program. A capillary with an internal diameter of 0.6 mm is positioned at the quadrupole entrance. The quadrupole rods have a diameter of 6 mm, and the inscribed aperture diameter is also 6 mm. The quadrupole length is 100 mm, and the outlet diaphragm opening diameter is 1.5 mm. The RF voltage amplitude is 150 V, and the frequency is 0.5 MHz. Ions in the mass range of 100–2000 u are considered. The pressure at the capillary inlet is 760 Torr, and at the boundaries of the pumping region, it is 1, 3, or 5 Torr. Pumping is performed over

the entire lateral surface of the chamber, which bounds the region around the quadrupole. The gas dynamics in the inlet interface were simulated using a gas-dynamics simulation program by solving the Navier – Stokes system of equations. It was assumed that there is no heat transfer at the boundaries of the entire volume, and the equation of air state corresponded to an ideal flow, and the gas temperature at the capillary inlet was 300 K. The $k-\varepsilon$ model was used to simulate turbulence.

Fig. 1. General view of the region simulated in the SIMION program. Capillary, 100-mm quadrupole with an exit diaphragm with a 1.5-mm opening diameter

Steady-state jet motion was considered. Given the symmetry of the full computational domain, the simulation was performed in a quadrant.

Figure 2 shows the spatial velocity distributions of the gas flow emanating from the capillary at quadrupole pressures of 1, 3, and 5 Torr. The distributions are shown in the upper half-plane passing through the center of the quadrupole rod and its axis. The dimensions of the Mach barrel depend on the ratio of the pressures at the capillary inlet and outlet. It can be seen that, depending on the pressure, the transverse dimensions of the Mach barrel either exceed the inscribed diameter of the quadrupole at a gas pressure of 1 Torr, are approximately equal to the inscribed diameter at a pressure of 3 Torr, and are significantly smaller than the inscribed diameter at a pressure of 5 Torr.

Fig. 2. Spatial distribution of the gas flow velocity leaving the capillary at quadrupole pressures of 1 (a), 3 (b), and 5 (c) Torr. The distributions are shown in the upper half-plane passing through the center of the rod and the quadrupole axis; the region is bounded by the quadrupole rod with an inscribed aperture radius of 3 mm. The upper velocity scale (m/s) refers to the Mach barrel, while the lower scale refers to the flow behind the Mach disk and the flows at the periphery

From Fig. 3, a, b, which shows the characteristic trajectories of ions with masses of 100 (Fig. 3, a) and 2000 u (Fig. 3, b) at the capillary exit, it is evident that the ions are pulled sideways by the gas jet and then pressed toward the axis by the RF field. All ion losses occur in the Mach barrel region. At a buffer gas pressure of 1 Torr, a vortex region is observed due to wave reflection from the quadrupole rods.

Fig. 3. Characteristic trajectories of ions with masses of 100 u (a) and 2000 u (b), taking into account the dynamics of the gas jet at the capillary exit. The inner diameter of the capillary is 0.6 mm, and the gas pressure in the quadrupole is 3 Torr

At a quadrupole pressure of 3 Torr, when the boundary of the supersonic jet only slightly touches the rods, such a vortex is not observed.

As a result, at a pressure of 1 Torr, some of the ions become trapped in the vortex region and can remain there indefinitely. Moreover, the lighter the ion, the more likely it is to fall into this gas-dynamic well, since the spatial spread of ion trajectories is greater for light ions.

ION TRANSMISSION THROUGH THE OUTPUT APERTURE OF A RADIOFREQUENCY QUADRUPOLE

The efficiency of ion transport is determined by the degree of ion retention in the quadrupole as it is carried out of the capillary by the gas flow and the gas flow's support of its movement toward the outlet diaphragm with an opening diameter of 1.5 mm without the imposition of a longitudinal electrostatic field. At a gas pressure in the quadrupole of 1 Torr, ion retention is observed in the region behind the Mach disk, which is especially noticeable for light ions. Phenomenological consideration of the space charge in the form of ion expulsion from the gas-dynamic well allows us to isolate ion losses in the entrance region, caused by the ion transport beyond the rods or losses on them. Figure 4 shows the transmission of ions with masses of 100–2000 u through the quadrupole's outlet diaphragm with an opening diameter of 1.5 mm at intermediate buffer gas pressures of 1, 3, and 5 Torr.

Fig. 4. Transmission of ions (relative quantity) with masses of 100–2000 u through a quadrupole outlet diaphragm with an opening diameter of 1.5 mm at intermediate buffer gas pressures of 1, 3, and 5 Torr. "O3": phenomenological consideration of the effect of space charge—expulsion of ions from the vortex region behind the Mach disk at a pressure of 1 Torr.

The quadrupole assembly's rod length is 100 mm, the rod diameter is 6 mm, the inscribed aperture diameter is 6 mm, and the field frequency is 0.5 MHz with an amplitude of 150 V. The calculation variant labeled "O3" takes into account the phenomenological effect of a space charge with longitudinal expulsion of ions from the vortex region behind the Mach disk at a pressure of 1 Torr. Losses at the quadrupole entrance are typical for light ions, since they are more easily

entrained by the outgoing gas flow. Further, at the quadrupole's outlet diaphragm with an opening diameter of 1.5 mm, there are no losses. Thus, the use of a radio frequency channel allows for a significant reduction in ion losses during their transport through the intermediate pressure region of 1–5 Torr.

Figure 5 shows the transmission of ions with masses of 100–2000 u through the quadrupole's output diaphragm at a quadrupole pressure of 1 Torr and RF frequencies of 0.5 and 0.8 MHz, with ion expulsion from the vortex region. It can be seen that as the frequency increases to 0.8 MHz, the loss of light ions decreases.

Fig. 5. Transmission of ions (relative quantity) with masses of 100–2000 u through a quadrupole outlet diaphragm with a 1.5 mm diameter opening at a quadrupole pressure of 1 Torr and RF frequencies of 0.5 and 0.8 MHz

"O3": phenomenological consideration of the space charge effect — the expulsion of ions from the vortex region behind the Mach disk at a pressure of 1 Torr.

CONCLUSION

This paper presents a procedure for transferring the calculated spatial distributions of the gas-dynamic parameters of a buffer gas to a user-defined algorithm in the SIMION 8.1 ion-optical calculation program for self-consistent calculations of ion motion in an electric field in the presence of a gas jet. Using the example of a radiofrequency quadrupole capturing a beam of ions carried by a gas flow from a capillary, a self-consistent calculation of ion motion is performed. It is shown that the efficiency of ion capture in the mass range of 100–2000 u, carried by the gas flow from the capillary to the quadrupole, depends significantly on the ratio of the inscribed diameter of the quadrupole to the transverse dimension of the Mach barrel, which depends on the buffer gas pressure. At a buffer gas pressure of 1 Torr, a vortex region is observed due to wave reflection from the quadrupole rods. As a result, the ions become trapped in the vortex region and, without taking into account the space charge that helps push the ions out of the gas-dynamic well, can remain there indefinitely. At a buffer gas pressure of 3 Torr, when the supersonic jet boundary only slightly touches the rods, such vortex formation is not observed. As the frequency increases to 0.8 MHz, the loss of light ions decreases.

Losses at the quadrupole entrance are typical for light ions, as they are more easily entrained by the outgoing gas flow. There are no losses at the quadrupole's exit diaphragm, which has an aperture diameter

of 1.5 mm. Thus, the use of a radio frequency channel significantly reduces ion losses during their transport through the intermediate pressure region of 1–5 Torr.