НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2026, том 36, № 4, с. 34–40 *ISSN 0868-5886*

ФИЗИКА ПРИБОРОСТРОЕНИЯ

УДК 537.534.7, 537.291
EDN: CNAJTD

© И. В. Курнин, 2026

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАЗРУШИТЕЛЕЙ СТРУИ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ ДЛЯ ПОДАВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕИСПАРИВШИХСЯ КАПЕЛЬ ВО ВХОДНОМ ИНТЕРФЕЙСЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

В работе представлены результаты самосогласованного газодинамического и ионно-оптического моделирования движения ионов и неиспарившихся капель, поступающих через транспортный капилляр во входной интерфейс масс-спектрометра с радиочастотной ионной воронкой и разрушителем струи. В предположении, что различия во взаимодействии с газовой струей могут привести к заметному снижению ионных потерь, в качестве разрушителя струи рассматриваются несколько вариантов, различающиеся по геометрии: разрушители в виде диска, полусферы и конуса, располагаемые за капилляром на оси воронки. Показано, что дисковая геометрия разрушителя струи является предпочтительной для минимизации загрязнения и химического шума. В случае конического разрушителя наблюдается лучшая средняя трансмиссия ионов из рассматриваемого массового диапазона 100–1000 Да при сравнительно небольшом ухудшении сепарации нанокапель.

Ключевые слова: электроспрей, транспортный капилляр, газовая струя, ионная радиочастотная воронка, разрушитель струи, неиспарившиеся капли

ВВЕДЕНИЕ

Ионизация электрораспылением является одним из основных методов мягкого перевода полярных и биологических молекул из раствора в газовую фазу. Возможность получения целых, в том числе многозарядных, ионов пептидов, белков и нуклеиновых кислот сделала электроспрей базовым методом современной масс-спектрометрии [1, 2]. Формирование газофазных ионов сопровождается испарением растворителя, ростом поверхностной плотности заряда и каскадом кулоновских делений капель при приближении к пределу Рэлея [1]. При этом часть капель не успевает полностью испариться до входа в прибор.

Переход от атмосферного давления в источнике к промежуточному давлению входного интерфейса масс-анализатора осуществляется через диафрагму или нагреваемый транспортный капилляр на выходе которых формируется сверхзвуковая струя газа. Экспериментально было показано, что большая часть (до 90%) полного тока может поступать в интерфейс масс-спектрометра в виде заряженных капель [3]. Неиспарившиеся капли и аэрозольные частицы, сохраняющие значительную инерцию, способны загрязнять электроды и диафрагмы, создавать локальную зарядку поверхностей и повышать химический шум. Поэтому входной интерфейс должен одновременно обеспечивать передачу ионов с минимальными потерями и при этом подавлять перенос жидкой дисперсной фазы.

Ионная воронка, состоящая из системы кольцевых электродов с радиочастотным удержанием и продольным постоянным полем, позволяет эффективно собирать расширяющийся ионный поток при давлениях порядка единиц – десятков Торр [4, 5]. Разрушитель струи (jet disruptor) в виде диска, располагаемого на оси за капилляром, перенаправляет газовый поток и капли к межэлектродным зазорам, тогда как ионы могут удерживаться радиочастотным полем [6]. При этом резкое нормальное отклонение потока может увеличивать радиальный вынос ионов.

Ранее эффективность использования дискового разрушителя струи для предотвращения распространения неиспарившихся капель во входном интерфейсе масс-спектрометра рассматривалась в [7]. В данной статье в качестве

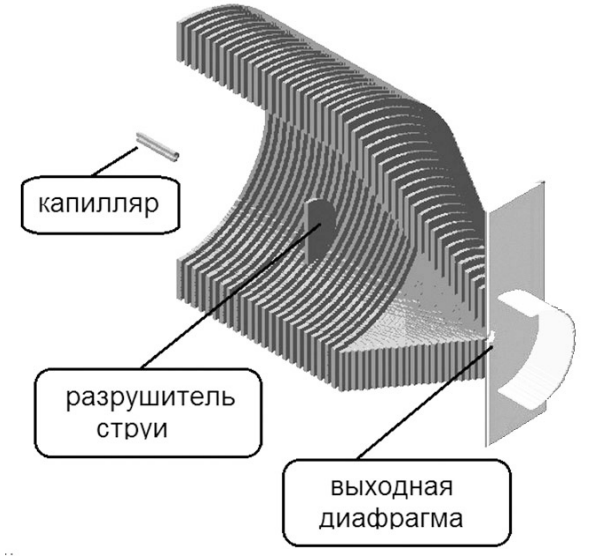

Рис. 1. Схема ионной воронки с входным капилляром и разрушителем струи (в виде диска) в разрезе по осевой плоскости

разрушителя струи рассматриваются несколько вариантов, различающиеся геометрически: разрушители в виде диска, полусферы и конуса, располагаемые за капилляром на оси воронки. Предполагается, что различия во взаимодействии с газовой струей могут привести к заметному снижению ионных потерь при сравнительно небольшом ухудшении сепарации капель. С целью нахождения оптимальной геометрии разрушителя сначала проводилось моделирование динамики газовых потоков в ионной воронке с разрушителем каждой геометрии. Затем, после переноса расчетных пространственных распределений газодинамических параметров в пользовательский алгоритм программы ионно-оптических расчетов SIMION 8.1 [8], проводилось самосогласованное моделирование движения ионов и капель в электрических и газодинамических полях рассматриваемой конфигурации.

РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ И УСЛОВИЯ ПРОВЕДЕНИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Общий вид моделируемой области в разрезе по осевой плоскости представлен на рис. 1. Показаны ионная воронка с входным капилляром и разрушителем струи (в виде диска). Транспортный капилляр с внутренним диаметром 0.6 мм и длиной 20 мм расположен соосно ионной воронке. Толщина кольцевых электродов и расстояние между соседними электродами составляют по 0.5 мм. В области расположения разрушителя струи внутренний диаметр первых 24 колец равен 26 мм. Уменьшение диаметра с шагом по радиусу 0.57 мм начиналось с кольца, отстоящего от задней плоскости разрушителя на расстояние 4.5 мм. На сходящую часть приходится 21 кольцо. Диаметр отверстия выходной диафрагмы брался равным 1.4 мм.

Разрушитель струи в виде диска диаметром 8 мм и толщиной 0.5 мм располагался на расстоянии 19.5 мм от выходного торца капилляра. Разрушители других форм строятся, исходя из положения и поперечных размеров задней поверхности дискового разрушителя: для конуса эта поверхность является основанием, а для полусферы — поперечным сечением по диаметру, что обеспечивает одинаковое перекрытие струи во всех случаях. При этом высота (длина по оси) конуса определяется радиусом полусферы, в свою очередь, равным радиусу основания дискового разрушителя.

Моделирование газодинамики во входном интерфейсе с разрушителями струи разных геометрий и ионной воронкой проводилось с помощью программы газодинамического моделирования, решающей систему уравнений Навье – Стокса. Моделирование проводилось в осесимметричном приближении. Предполагалось, что на границах всего объема теплопередача отсутствует. Уравнение состояния воздуха отвечало идеальному. Температура газа на входе в капилляр составляла 300 K. Для моделирования турбулентности использовалась k-ω SST-модель [9]. Рассматривалось установившееся движение струи. Давление на входе в капилляр задавалось атмосферным, а на боковой поверхности камеры с ионной воронкой — 3 Торр.

Посредством переноса газодинамических пространственных распределений параметров буферного газа в пользовательский алгоритм программы ионно-оптических расчетов SIMION 8.1 проводился самосогласованный расчет движения ионов и капель в электрическом поле воронки при наличии сверхзвуковой струи газа из капилляра [10]. Для моделирования динамики ионов при низких давлениях буферного газа используется пользовательская программа, которая учитывает единич-

ные столкновения ионов с молекулами газа с помощью метода Монте-Карло [11]. Модель статистической диффузии, SDS-модель [12], которая существенно ускоряет процесс счета в случае плотного буферного газа, здесь неприменима. При давлении газа в несколько Торр и частоте 0.75 МГц число столкновений, приходящееся на временной шаг, ограничиваемый величиной радиочастотного периода, недостаточно для набора необходимой статистики — не менее 10^5 за шаг по времени. Амплитуда радиочастотного потенциала, прикладываемого к кольцам воронки в противофазе относительно соседних, составляла 70 В (0-р) при частоте 0.75 МГц. Протягивающее электростатическое поле определялось последовательным по кольцам наложением спадающего потенциала: нулевой потенциал на первом кольце, потенциал на выходной диафрагме равнялся 40 В. При этом напряженность протягивающего электрического поля составляла 0.87 В/мм. Также постоянный отталкивающий потенциал в несколько вольт (3 В) мог быть приложен к разрушителю струи. Таким образом, рассматривается эффективность разрушителей струи разных конфигураций с точки зрения предотвращения попадания неиспарившихся капель в вакуумную часть масс-спектрометра при одновременном увеличении трансмиссии ионов.

На начальный момент времени капли и ионы располагались на выходе капилляра, откуда они увлекались сверхзвуковой газовой струей вглубь воронки с разрушителем струи на пути. Предполагается, что капли с начальным диаметром 10–100 мкм [1] уже претерпели ряд актов распада и на выходе транспортного капилляра имеют диаметры от 0.01 до 0.1 мкм. Частицы с массами в диапазоне 0.3–300 МДа интерпретируются как нанокапли. Поскольку отношение массы к заряду велико, капли представляются как электрически нейтральные, т.е. влиянием прикладываемых электрических полей на их движение пренебрегаем. Частица массой 300 Да представляется как модельная нейтральная частица, на которую действуют только газодинамические поля, что дает возможность определить степень влияния на динамику ионов газовых потоков и электрических полей. Ионы с массами 100, 300 и 1000 Да представлялись однозарядными.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2–5 приведены распределения скорости газового потока, исходящего из капилляра в ионной воронке: на рис. 2 — без разрушителя струи, на рис. 3 — с разрушителем струи в виде диска, на рис. 4 — с разрушителем струи в виде полусферы, на рис. 5 — с разрушителем струи в виде конуса.

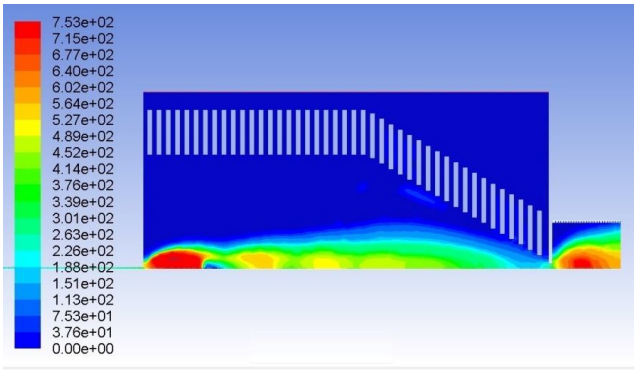

Рис. 2. Распределение скорости газового потока (в м/с), исходящего из капилляра в ионной воронке (без разрушителя струи). Осевая симметрия

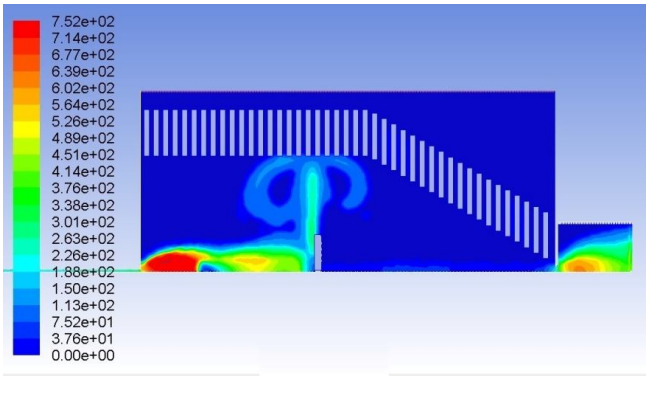

Рис. 3. Распределение скорости газового потока (в м/с), исходящего из капилляра в ионной воронке с разрушителем струи в виде диска

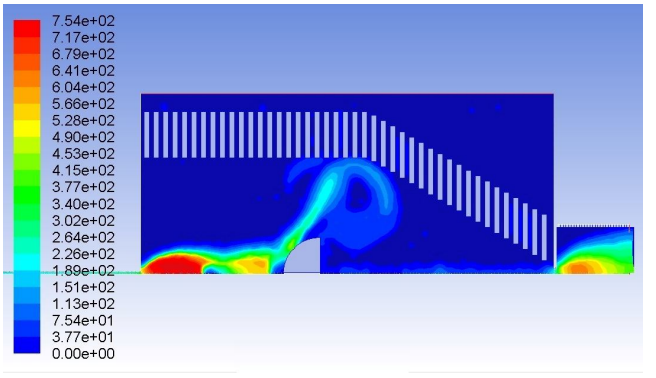

Рис. 4. Распределение скорости газового потока (в м/с), исходящего из капилляра в ионной воронке с разрушителем струи в виде полусферы

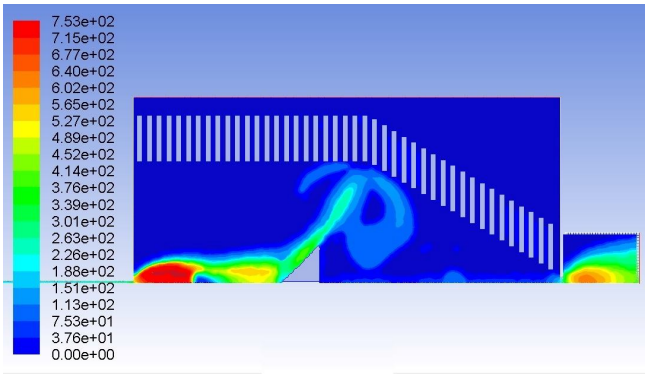

Рис. 5. Распределение скорости газового потока (в м/с), исходящего из капилляра в ионной воронке с разрушителем струи в виде конуса

На рисунках показана только половина сечения, поскольку геометрия относительно общей оси капилляра и выходной диафрагмы воронки — симметричная. Без разрушителя (рис. 2) высокоскоростная область сохраняет преимущественно осевое направление и проходит далеко в сходящуюся часть воронки. При установке диска (рис. 3) набегающий поток резко тормозится и отклоняется преимущественно по нормали к оси: значительная доля потока направляется к кольцам и в межэлектродные зазоры, а за диском формируется зона пониженной скорости и рециркуляции. Коническая поверхность (рис. 5) перенаправляет струю более плавно: высокоскоростная область скользит вдоль образующей конуса и выходит к внутренней поверхности воронки под меньшим углом. Полусфера (рис. 4) создает широкую область обтекания и симметричную рециркуляционную структуру. Таким образом, диск обеспечивает наиболее сильный радиальный импульс, конус — наиболее плавное тангенциальное перенаправление, а полусфера реализует промежуточный режим.

В табл. 1 приводятся значения трансмиссии модельной нейтральной частицы массой 300 Да и капель с массами 0.3 и 300 МДа через отверстие выходной диафрагмы ионной воронки при разных конфигурациях разрушителя струи и без него. Видно, что разрушители струи всех конфигураций значительно снижают вероятность попадания небольших неиспарившихся капель за выходную диафрагму воронки, при этом капли с массами 0.3 и 300 МДа отклоняются и теряются полностью. Различие геометрий проявляется главным образом на нижней границе масс.

Табл. 1. Значения трансмиссии (в % от начального числа на выходе капилляра) модельной нейтральной частицы массой 300 Да и капель с массами 0.3 и 300 МДа через отверстие выходной диафрагмы ионной воронки при разных конфигурациях разрушителя струи и без него

Форма разрушителя струи	Масса частиц		
	300 Да	0.3 МДа	300 МДа
Без разрушителя	8	5.8	0.8
Диск	0.4	0	0
Конус	3.2	0	0
Полусфера	2	0	0

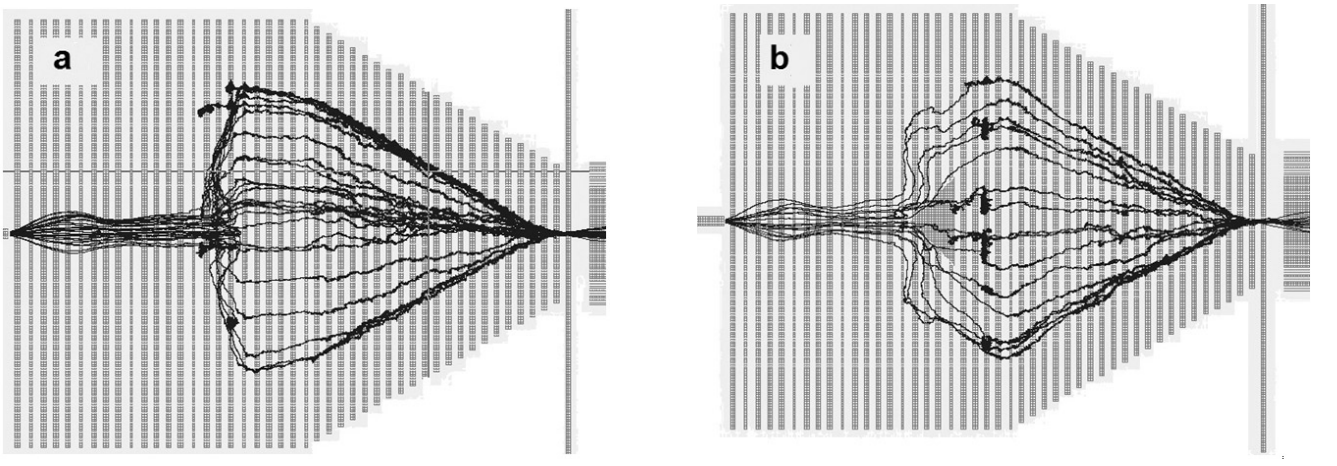

Рис. 6. Характерные траектории (в проекции на плоскость рисунка) ионов массой 300 Да при рассматриваемых условиях в случае, когда разрушитель струи представлен в виде (a) диска, (b) в виде конуса

В случае дискового разрушителя небольшие капли отклоняются и теряются на кольцах наиболее эффективно, поскольку газовый поток отклоняется разрушителем по нормали к оси и капли, захваченные потоком, выносятся прямо на кольца и в межкольцевое пространство. Однако это же обстоятельство влияет и на продвижение ионов. В случае, например, конусного разрушителя ионы выносятся на внутреннюю поверхность воронки по касательной, что заметно снижает потери.

Характерные траектории ионов массой 300 Да при рассматриваемых условиях в случае, когда разрушитель струи представлен в виде конуса и диска, приведены на рис. 6. В табл. 2 приводятся значения трансмиссии ионов с массами 100, 300 и 1000 Да через отверстие выходной диафрагмы ионной воронки при разных конфигурациях разрушителя струи и без него. Из таблицы видно, что конусный разрушитель в рассматриваемых условиях лучше обеспечивает трансмиссию ионов за выходную диафрагму воронки, при этом (табл. 1) наблюдается прохождение и некоторой доли небольших неиспарившихся капель. Среднее значение трансмиссии ионов по трем массам составляет 71% для диска, 81.3% для конуса и 40.3% для полусферы. Эти средние значения показывают, что в случае конуса трансмиссия ионов в заданном диапазоне масс является оптимальной.

Табл. 2. Значения трансмиссии (в % от начального числа на выходе капилляра) ионов с массами 100, 300 и 1000 Да через отверстие выходной диафрагмы ионной воронки при разных конфигурациях разрушителя струи и без него

Форма разрушителя струи	Масса ионов		
	100 Да	300 Да	1000 Да
Без разрушителя	34	71	100
Диск	70	68	75
Конус	69	100	75
Полусфера	78	42	1

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты самосогласованного газодинамического и ионно-оптического моделирования движения ионов и неиспарившихся капель, поступающих через транспортный капилляр во входной интерфейс масс-спектрометра с радиочастотной ионной воронкой и разрушителем струи. В предположении, что различия во взаимодействии с газовой струей могут привести к заметному снижению ионных потерь, в качестве разрушителя струи рассматриваются несколько вариантов различающиеся по геометрии: разрушители в виде диска, полусферы и конуса, располагаемые за капилляром на оси воронки.

Результаты моделирования показывают, что дисковая геометрия разрушителя струи является предпочтительной для минимизации загрязнения и химического шума. Она обеспечивает максимальное подавление прохождения капель, сохраняя при этом ионную трансмиссию 68–75%. В случае конического разрушителя наблюдается лучшая средняя трансмиссия ионов из рассматриваемого массового диапазона. При этом сепарация капель хуже, чем у диска. Полусфера заняла промежуточное положение по сепарации частиц, при этом с ростом массы ионов трансмиссия снижается.

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. *Kebarle P., Verkerk U.H.* Electrospray: from ions in solution to ions in the gas phase, what we know now // Mass Spectrometry Reviews. 2009. Vol. 28, no. 6. P. 898–917. DOI: 10.1002/mas.20247
2. *Wilm M.* Principles of electrospray ionization // Molecular & Cellular Proteomics. 2011. Vol. 10, no. 7. Id. M111.009407. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1535947620301997
3. *Fomina N.S., Kretinina A.V., Masyukevich S.V., Bulovich S.V., Lapushkin M.N., Gall L.N., Gall N.R.* Transport of ions and charged droplets from the atmospheric region into a gas dynamic interface // J. Anal. Chem. 2013. Vol. 68, no. 13. P. 1151–1157. DOI: 10.1134/S1061934813130054
4. *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 // Analytical Chemistry. 1998. Vol. 70, no. 19. P. 4111–4119. DOI: 10.1021/ac9802170
5. *Kelly R.T., Tolmachev A.V., Page J.S., Tang K., Smith R.D.* The ion funnel: theory, implementations, and applications // Mass Spectrometry Reviews. 2010. Vol. 29, no. 2. P. 294–312. DOI: 10.1002/mas.20232
6. *Ibrahim Y.M., Belov M.E., Tolmachev A.V., Prior D.C., Smith R.D.* Ion funnel trap interface for orthogonal time-of-flight mass spectrometry // Analytical Chemistry. 2007. Vol. 79, no. 20. P. 7845–7852. DOI: 10.1021/ac071091m
7. *Курнин И.В.* Эффективность использования разрушителя струи для предотвращения распространения неиспарившихся капель во входном интерфейсе масс-спектрометра // Научное приборостроение. 2024. Т. 34, № 3. С. 79–86. URL: http://iairas.ru/mag/2024/abst3.php#abst7
8. *Manura D., Dahl D.A.* SIMION 8.0 User Manual. Scientific Instrument Services, Idaho National Laboratory, 2006. URL: https://simion.com/manual/chap2.html
9. *Wilcox D.C.* Turbulence modeling for CFD. 3rd edition, DCW Industries, 2006. 522 p. URL: https://cfd.spb.ru/agarbaruk/doc/2006_Wilcox_Turbulence%20modeling%20for%20CFD.pdf
10. *Курнин И.В.* Самосогласованное моделирование движения ионов, выносимых газовым потоком из капилляра в радиочастотный квадруполь // Научное приборостроение. 2026. Т. 36, № 1. С. 103–108. URL: http://iairas.ru/mag/2026/abst1.php#abst11
11. *Курнин И.В., Явор М.И.* Особенности транспортировки ионных пучков в газонаполненных радиочастотных квадруполях на промежуточных давлениях // Журнал технической физики. 2009. Т. 79, № 9. С. 112–119. URL: https://journals.ioffe.ru/articles/9799
12. *Appelhans A.D., Dahl D.A.* SIMION ion optics simulations at atmospheric pressure // International Journal of Mass Spectrometry. 2005. Vol. 244, no. 1. P. 1–14. DOI: 10.1016/j.ijms.2005.03.010

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

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

Материал поступил в редакцию 23.07.2026

COMPARATIVE EFFICIENCY OF DIFFERENTLY SHAPED JET DISRUPTORS FOR SUPPRESSING NON-EVAPORATED DROPLET TRANSPORT IN THE INLET INTERFACE OF A MASS-SPECTROMETER

I. V. Kurnin

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia

The paper presents the results of self-consistent gas-dynamic and ion-optical modeling of the motion of ions and non-vaporized droplets entering through a transport capillary into the input interface of a mass spectrometer with a radio-frequency ion funnel and a jet disruptor. Assuming that differences in interaction with the gas jet can lead to a noticeable decrease in ion losses, several options are considered a jet disruptor, differing in geometry: disruptors in the form of a disk, hemisphere, and cone located behind the capillary on the funnel axis. It has been shown that the disk geometry of the jet disruptor is preferable to minimize contamination and chemical noise. In the case of a conical disruptor, the best average ion transmission from the considered mass range of 100–1000 Da is observed with a relatively small deterioration in the separation of nanodroplets.

Keywords: electrospray, transport capillary, gas jet, radio-frequency ion funnel, jet disruptor, non-evaporated droplets

REFERENCES

1. Kebarle P., Verkerk U.H. Electrospray: from ions in solution to ions in the gas phase, what we know now. *Mass Spectrometry Reviews*, 2009, vol. 28, no. 6, pp. 898–917. DOI: 10.1002/mas.20247
2. Wilm M. Principles of electrospray ionization. *Molecular & Cellular Proteomics*, 2011, vol. 10, no. 7, id. M111.009407. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1535947620301997
3. Fomina N.S., Kretinina A.V., Masyukevich S.V., Bulovich S.V., Lapushkin M.N., Gall L.N., Gall N.R. Transport of ions and charged droplets from the atmospheric region into a gas dynamic interface. *J. Anal, Chem*., 2013, vol. 68, no. 13, pp. 1151–1157. DOI: 10.1134/S1061934813130054
4. 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. *Analytical Chemistry*, 1998, vol. 70, no. 19, pp. 4111–4119. DOI: 10.1021/ac9802170
5. Kelly R.T., Tolmachev A.V., Page J.S., Tang K., Smith R.D. The ion funnel: theory, implementations, and applications. *Mass Spectrometry Reviews*, 2010, vol. 29, no. 2, pp. 294–312. DOI: 10.1002/mas.20232
6. Ibrahim Y.M., Belov M.E., Tolmachev A.V., Prior D.C., Smith R.D. Ion funnel trap interface for orthogonal time-of-flight mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 2007, vol. 79, no. 20, pp. 7845–7852. DOI: 10.1021/ac071091m
7. Kurnin I.V. [The effectiveness of a jet disruptor to prevent the non-evaporated droplets from passing through the inlet interface of the mass spectrometer]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2024, vol. 34, no. 3, pp. 79–86. (In Russ.). URL: http://iairas.ru/en/mag/2024/abst3.php#abst7
8. Manura D., Dahl D.A. *SIMION 8.0 User Manual. Scientific Instrument Services*, Idaho National Laboratory, 2006. URL: https://simion.com/manual/chap2.html
9. Wilcox D.C. *Turbulence modeling for CFD*. 3rd edition, DCW Industries, 2006. 522 p. URL: https://cfd.spb.ru/agarbaruk/doc/2006_Wilcox_Turbulence%20modeling%20for%20CFD.pdf
10. Kurnin I.V. [Self-consistent simulation of the motion of ions carried out by a gas jet from a capillary into a radio frequency quadrupole]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2026, vol. 36, no. 1, pp. 103–108. URL: http://iairas.ru/en/mag/2026/abst1.php#abst11 (In Russ.).
11. 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.).
12. Appelhans A.D., Dahl D.A. SIMION ion optics simulations at atmospheric pressure. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2005, vol. 244, no. 1, pp. 1–14. DOI: 10.1016/j.ijms.2005.03.010

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

The article was received by the editorial office on 23.07.2026

INTRODUCTION

Electrospray ionization is one of the primary methods for gently transferring polar and biological molecules from solution to the gas phase. The ability to obtain intact ions of peptides, proteins, and nucleic acids, including multiply charged ones, has made electrospray a fundamental method of modern mass spectrometry [1, 2]. The formation of gas-phase ions is accompanied by solvent evaporation, an increase in surface charge density, and a cascade of Coulomb droplet fission events as the Rayleigh limit is approaching [1]. Some droplets do not completely evaporate before entering the instrument.

The transition from atmospheric pressure in the source to the intermediate pressure of the mass analyzer's inlet interface is accomplished through a diaphragm or heated transport capillary, at their outlet a supersonic gas jet is formed. Experiments have shown that a large portion (up to 90%) of the total current can enter the mass spectrometer interface in the form of charged droplets [3]. Unevaporated droplets and aerosol particles, which retain significant inertia, can contaminate electrodes and diaphragms, create local surface charging, and increase chemical noise. Therefore, the input interface must simultaneously ensure ion transfer with minimal losses while suppressing the transfer of the liquid dispersed phase.

An expanding ion flow can be efficiently collected at pressures of several to tens of Torr using an ion funnel, which is made up of a system of ring electrodes with radiofrequency confinement and a longitudinal constant magnetic field [4, 5]. A jet disruptor, a disk-shaped device located on the axis behind the capillary, redirects the gas flow and droplets toward the interelectrode gaps, while ions can be confined by a radiofrequency field [6]. A sharp normal flow deflection can increase the radial ion transport.

The effectiveness of using a disk-shaped jet disruptor to prevent the propagation of unevaporated droplets in the mass spectrometer input interface was previously considered in [7]. In this article, several variants of jet disruptor, differing geometrically, are considered: disk-shaped, hemispherical, and conical jet disruptors, located behind the capillary on the funnel axis. It is assumed that differences in interaction with the gas jet can lead to a significant reduction in ion losses with a relatively small deterioration in droplet separation. To find the optimal disruptor geometry, we first simulated the gas flow dynamics in an ion funnel with disruptors of each geometry. Then, after transferring the calculated spatial distributions of gas-dynamic parameters to the user algorithm of the SIMION 8.1 ion-optical calculation program [8], self-consistent simulations of ion and droplet motion in the electric and gas-dynamic fields of the configuration under consideration were performed.

COMPUTATIONAL MODEL AND SIMULATION CONDITIONS

A general cross-sectional view of the simulated region along the axial plane is shown in Fig. 1. The ion funnel with an inlet capillary and a jet disruptor (in the form of a disk) is shown. The transport capillary, with an inner diameter of 0.6 mm and a length of 20 mm, is located coaxially with the ion funnel. The thickness of the ring electrodes and the distance between adjacent electrodes are each 0.5 mm. In the jet disruptor region, the inner diameter of the first 24 rings is 26 mm. The diameter reduction in 0.57 mm radial increments began with a ring located 4.5 mm from the disruptor's rear plane. The converging section contains 21 rings. The diameter of the outlet diaphragm opening was taken to be 1.4 mm.

Fig. 1. Schematic diagram of an ion funnel with an inlet capillary and a jet disruptor (disk-shaped), cross-section along the axial plane

A jet disruptor, shaped like a disk with a diameter of 8 mm and a thickness of 0.5 mm, was positioned 19.5 mm from the capillary outlet. Disruptors of other shapes are designed based on the position and transverse dimensions of the rear surface of the disk disruptor: for a cone, this surface serves as the base, and for a hemisphere, it is the cross-section along the diameter, ensuring uniform jet occlusion in all cases. The height (axial length) of the cone is determined by the radius of the hemisphere, which in turn is equal to the base radius of the disk disruptor.

Fluid dynamics simulations at the input interface with jet disruptors of different geometries and an ion funnel were performed using a gas-dynamics program that solves the Navier – Stokes equations. The simulations were conducted in an axisymmetric approximation. It was assumed that there is no heat transfer at the boundaries of the entire volume. The air equation of state was ideal. The gas temperature at the capillary inlet was 300 K. The k-ω SST model [9] was used to simulate turbulence. Steady-state jet motion was considered. The pressure at the capillary inlet was determined by atmospheric pressure, and at the side surface of the ion funnel chamber, it was 3 Torr.

By transferring the gas-dynamic spatial distributions of the buffer gas parameters to the user algorithm of the ion-optical calculation program SIMION 8.1, a self-consistent calculation of the motion of ions and droplets in the electric field of the funnel was performed in the presence of a supersonic gas jet from the capillary [10]. To simulate ion dynamics at low buffer gas pressures, a user program was employed that takes into account single collisions of ions with gas molecules using the Monte-Carlo method [11]. The statis-

tical diffusion model, the SDS model [12], which significantly accelerates the calculation process in the case of a dense buffer gas, is not applicable here. At a gas pressure of several Torr and a frequency of 0.75 MHz, the number of collisions per time step limited by the radiofrequency period is insufficient to collect the required statistics — at least 105 per time step. The amplitude of the radiofrequency potential applied to the funnel rings in antiphase relative to the adjacent ones was 70 V (0-p) at a frequency of 0.75 MHz. The pulling electrostatic field was determined by successively applying a decreasing potential over the rings: zero potential on the first ring, the potential on the output diaphragm was 40 V. The strength of the pulling electric field was 0.87 V/mm. A constant repulsive potential of several volts (3 V) could also be applied to the jet disruptor. Thus, the effectiveness of jet disruptors of various configurations is examined in terms of preventing unevaporated droplets from entering the vacuum section of the mass spectrometer while simultaneously increasing ion transmission.

Initially, the droplets and ions were located at the capillary outlet, from where they were entrained by the supersonic gas jet into the funnel with the jet disruptor in their path. It is assumed that droplets with an initial diameter of 10–100 μm [1] have already undergone a series of disintegration events and, at the exit of the transport capillary, have diameters from 0.01 to 0.1 μm with masses from 300 Da to 300 MDa. Particles of 0.3–300 MDa are interpreted as nanodroplets. Since the mass-to-charge ratio is high, the droplets are represented as electrically neutral, i.e., the influence of applied electric fields on their motion is neglected. A particle with a mass of 300 Da is represented as a model neutral particle, which is affected only by gas-dynamic fields. It makes it possible to determine the degree of influence of gas flows and electric fields on the ion dynamics. Ions with masses of 100, 300, and 1000 Da were represented as singly charged.

SIMULATION RESULTS

Figures 2–5 show the velocity distributions of the gas flow emanating from a capillary in an ion funnel: Figure 2 — without a jet disruptor, Figure 3 — with a disk-shaped jet disruptor, Figure 4 — with a hemispherical jet disruptor, and Figure 5 — with a cone-shaped jet disruptor.

Fig. 2. Gas flow velocity distribution (in m/s) emerging from a capillary in an ion funnel (without a jet disruptor). Axial symmetry

Fig. 3. Gas flow velocity distribution (in m/s) emerging from a capillary in an ion funnel with a disk-shaped jet disruptor

Fig. 4. Gas flow velocity distribution (in m/s) emerging from a capillary in an ion funnel with a hemispherical jet disruptor

Fig. 5. Gas flow velocity distribution (in m/s) emerging from a capillary in an ion funnel with a cone-shaped jet disruptor

The figures show only half of the cross-section, as the geometry is symmetrical relative to the common axis of the capillary and the funnel outlet diaphragm. Without the disruptor (Fig. 2), the high-velocity region maintains a predominantly axial direction and extends far into the converging part of the funnel. When the disk is installed (Fig. 3), the incoming flow is sharply decelerated and deflected predominantly normal to the axis: a significant portion of the flow is directed toward the rings and into the interelectrode gaps, while a zone of reduced velocity and recirculation forms behind the disk. The conical surface (Fig. 5) redirects the jet more smoothly: the high-velocity region slides along the cone's generatrix and exits the funnel's inner surface at a shallower angle. The hemisphere (Fig. 4) creates a wide flow region and a symmetrical recirculation structure. Thus, the disk provides the strongest radial impulse, the cone provides the smoothest tangential redirection, and the hemisphere implements an intermediate regime.

Table 1 presents the transmission values for a model neutral particle with a mass of 300 Da and droplets with masses of 0.3 and 300 MDa through the outlet diaphragm of the ion funnel, with and without a jet disruptor.

Tab. 1. Values of transmission (in % of the initial number at the capillary outlet) of a model neutral particle with a mass of 300 Da and droplets with masses of 0.3 and 300 MDa through the outlet diaphragm of an ion funnel with different configurations of the jet disruptor and without it

It can be seen that jet disruptors of all configurations significantly reduce the probability of small, unevaporated droplets falling behind the outlet diaph-

ragm of the funnel, while droplets with masses of 0.3 and 300 MDa are deflected and completely lost. The difference in geometry is primarily evident at the lower mass boundary.

In the case of a disk-shaped jet disruptor, small droplets are deflected and lost on the rings most effectively, since the gas flow is deflected by the disruptor along the normal to the axis and drops, and droplets captured by the flow are carried directly onto the rings and into the inter-ring space. However, this same circumstance also affects the propagation of ions. In the case of a cone-shaped jet disruptor, for example, ions are carried tangentially to the inner surface of the funnel, and it significantly reduces losses.

The characteristic trajectories of ions with a mass of 300 Da under the given conditions, for a jet disruptor shaped as a cone and disk, are shown in Fig. 6.

Fig. 6. Characteristic trajectories (in projection onto the plane of the figure) of ions with a mass of 300 Da under the conditions under consideration in the case where the jet disruptor is in the form of (a) a disk, (b) in the form of a cone

Table 2 presents the transmission values for ions with masses of 100, 300, and 1000 Da through the outlet diaphragm of the ion funnel, with and without the jet disruptor.

Tab. 2. Values of transmission (in % of the initial number at the capillary outlet) of ions with masses of 100, 300, and 1000 Da through the outlet diaphragm of the ion funnel with and without different configurations of the jet disruptor

The table shows that, under the conditions considered, the cone-shaped disruptor provides better ion transmission beyond the funnel's outlet diaphragm, while (Tab. 1) some small, unevaporated droplets are also observed to pass through. The average ion transmission for the three masses is 71% for the disk, 81.3% for the cone, and 40.3% for the hemisphere. These average values indicate that, in the case of the cone, ion transmission in the given mass range is optimal.

CONCLUSION

This paper presents the results of self-consistent gas-dynamic and ion-optical modeling of the motion of ions and unevaporated droplets entering the input interface of a mass spectrometer with a radiofrequency ion funnel and a jet disruptor through a transport capillary. Assuming that differences in interaction with the gas jet can lead to a significant reduction in ion losses, several jet disruptor geometries are considered: disk-shaped, hemispherical, and conical jet disruptors, positioned behind the capillary on the funnel axis.

The modeling results show that the disk-shaped jet disruptor geometry is preferable for minimizing contamination and chemical noise. It ensures maximum suppression of droplet passage while maintaining ion transmission of 68–75%. The conical disruptor exhibits the best average ion transmission for the mass range under consideration. However, droplet separation is worse than that of the disk. The hemisphere occupies an intermediate position in particle separation, with transmission decreasing with increasing ion mass.