

## Исследование динамики движения ионов и диаграмм стабильности в радиочастотных ионных ловушках нового типа

Е.В. Жданова, Е.Н. Николаев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Институт энергетических проблем химической физики РАН

Этап масс-селекции в масс-спектрометрическом анализе очень важен, так как использование того или иного метода разделения ионов в целом определяет важнейшие аналитические характеристики прибора (разрешающая способность, динамический диапазон и др.). Одним из самых распространенных в лабораторных исследованиях типом масс-анализаторов являются ионные ловушки разных типов (использующие магнитное поле – ловушки Пеннинга, чисто электростатические – Кингдона и радиочастотные ловушки Пауля) [1]. Среди основных типов ловушек свое значимое место занимают радиочастотные трехмерные ловушки [2], (рис.1,2). Радиочастотные ловушки имеют высокую скорость

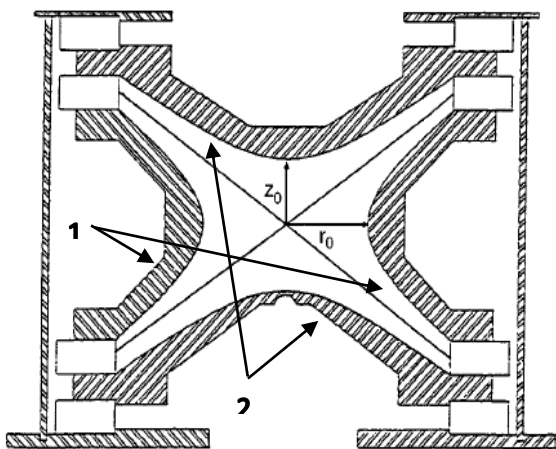


Рисунок 1. Схема электродов в квадрупольной ловушке. 1 – кольцевой электрод, 2 – концевые электроды

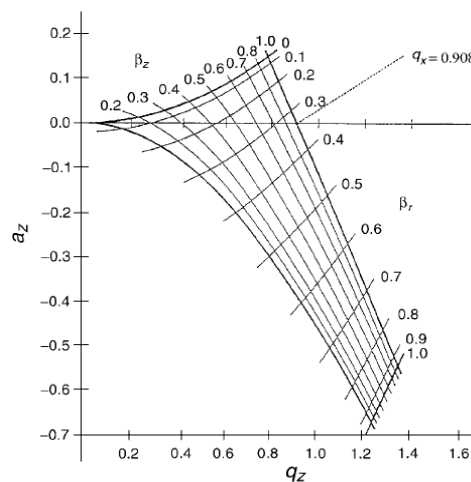


Рисунок 2. Диаграмма стабильности радиочастотной трехмерной ионной ловушки

измерения спектра и успешно совмещаются с газовыми или жидкостными хроматографами (метод ЖХ-МС, ГХ-МС). Внутри ионных ловушек реализуется тандемная масс-спектрометрия во времени. Из-за своей относительно низкой стоимости, аналитических характеристик и возможности работы при среднем вакууме ( $\sim 10^{-3}$  торр), именно этот прибор широко используется в рутинных исследованиях.

Цель настоящей работы состояла в том, чтобы охарактеризовать пространственную

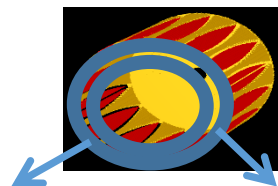


Рисунок 3. Ячейка ИЦР с динамической гармонизацией

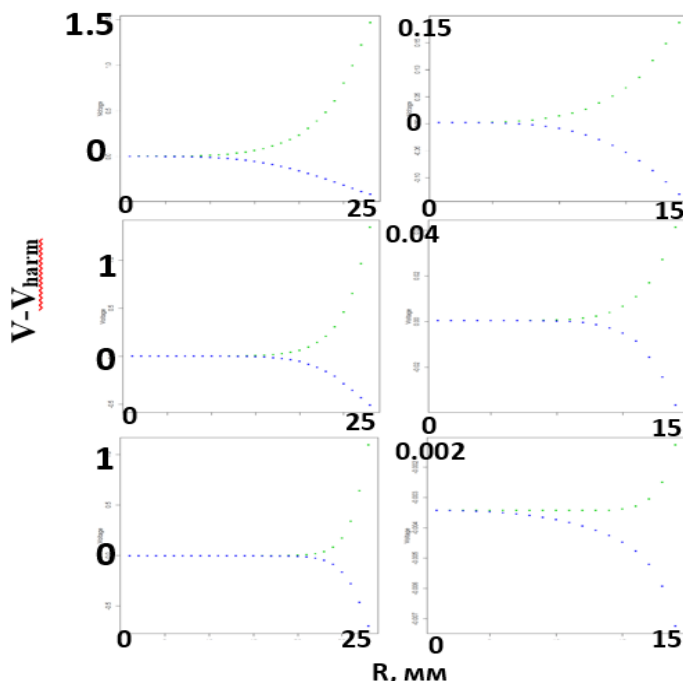


Рисунок 4. Максимальная (верхняя кривая) и минимальная (нижняя) разница между полем внутри статически гармонизованной ловушки и идеальным гиперболическим полем ( $N=4,8,16$ )

конфигурацию электродов, ранее используемую как ячейку масс-спектрометра ионного циклотронного резонанса [3,4], (рис.3), в качестве радиочастотной ловушки (идея принадлежит Е.Н. Николаеву). Было показано, что ловушка, называемая «ячейкой с динамической гармонизацией», является гармонизованной статически в некотором объеме вокруг оси симметрии (рис.4) Соответственно, потенциал поля в такой ловушке можно считать квадрупольным и при подаче на определенные электроды радиочастотного поля ячейка может функционировать как ионная ловушка. Движение частиц подчиняется уравнениям Матве.

Полученные диаграммы стабильности для ловушек с 16-ю и 32-мя электродами имеют вид, аналогичный виду диаграммы для стандартной трехмерной ионной ловушки с гипербоидальной геометрией электродов и демонстрируют возможность использования ловушки со статической гармонизацией в качестве масс-селективного устройства. При этом, полученные диаграммы стабильности позволяют параметрически (в пространстве основных рабочих параметров ловушки ( $a, q$ )) разделять радиальную и аксиальную нестабильность. Также диаграммы являются устойчивыми в некотором диапазоне начальных данных, которые физически соответствуют нахождению частиц в пределах области идеального гипербоидального поля. В эксперименте условие

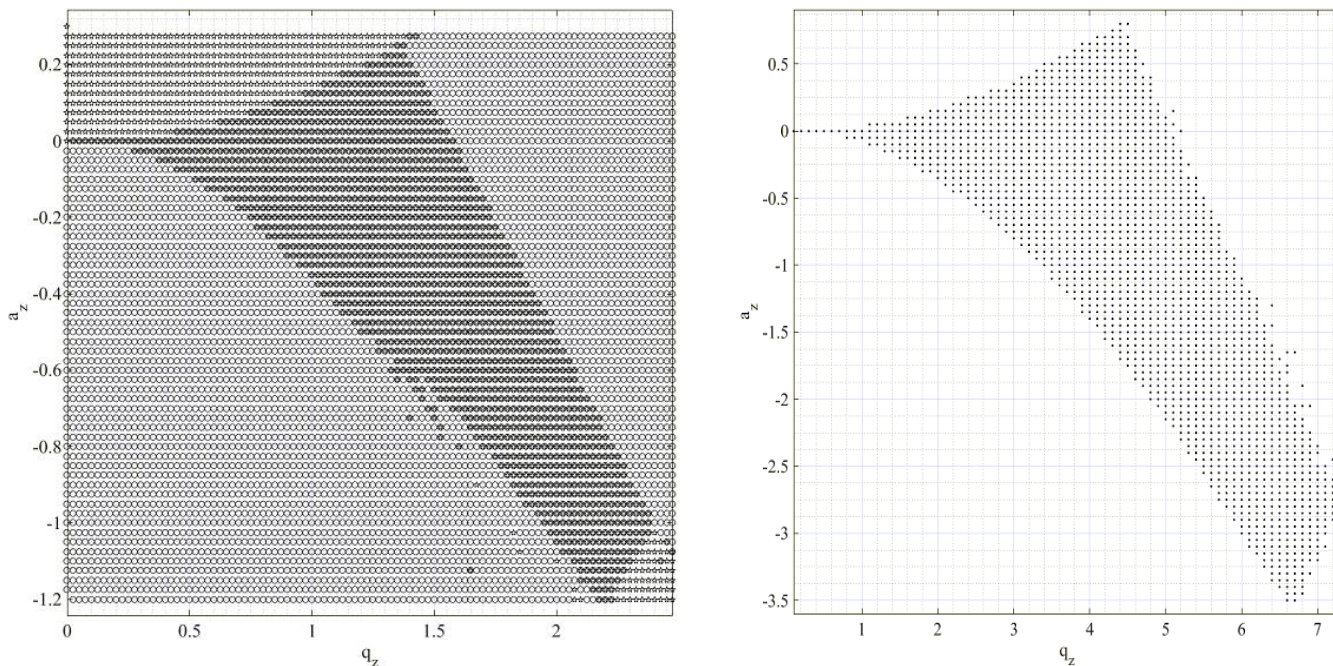


Рисунок 4. Диаграммы стабильности для ловушки со статической гармонизацией ( $N=16, 32$ )

нахождения частиц вблизи центра ловушки может быть реализовано напуском столкновительного газа. Также столкновительное охлаждение буферным газом обеспечивает условие удержания частиц «ямой» эффективного потенциала (энергия ионов меньше глубины «ям»).

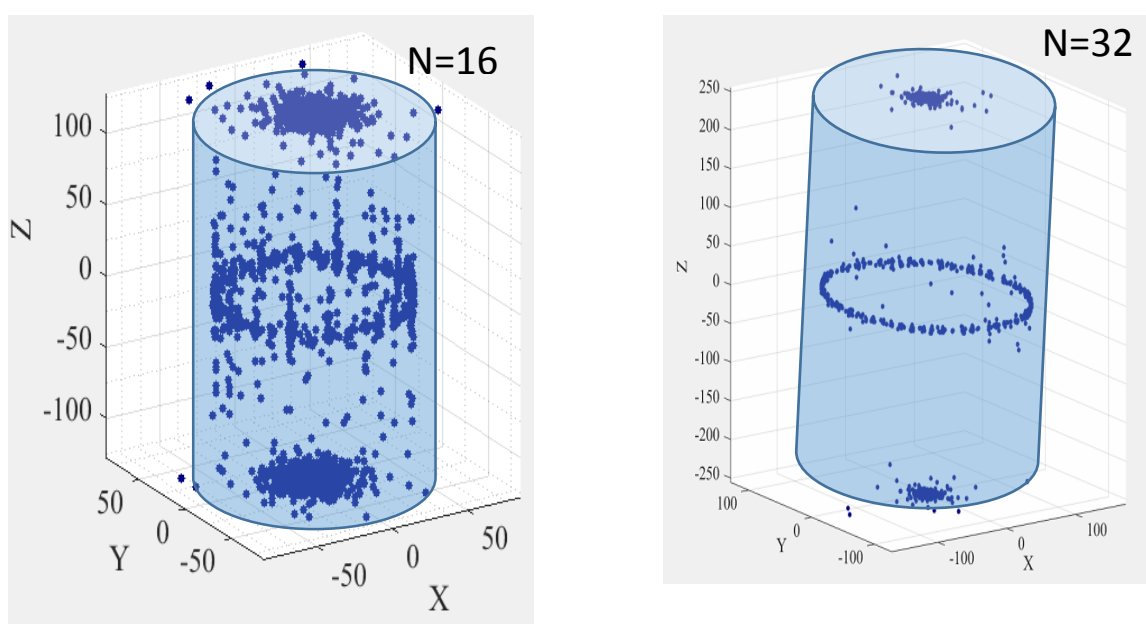


Рисунок 5. Геометрическое место касания электродов и траекторий нестабильных частиц

Проведенное исследование геометрических мест касания электродов ионами и траекторий нестабильных ионов (рис.5), позволяет сделать несколько важных выводов. Во-первых, мы можем пространственно разделить радиальную и аксиальную нестабильность, что позволяет подобрать оптимальный метод оперирования масс-анализатором и детектирования ионов. Также, для начальных параметров, при которых диаграмма стабильности устойчива, распределение мест касания электродов ионами имеет

небольшой размер в пространстве (несколько мм), что обеспечивает минимальные потери при детектировании.

Подачу высоких напряжения трудно реализовать технически. При среднем вакууме существует опасность пробоя. Из-за этих и других особенностей максимально достижимые амплитуды – 10÷15 кВ. В связи с этими ограничениями необходим перерасчет геометрических параметров ловушки.

Сделаем некоторые оценки. В соответствии с (12), максимальное значение массы ионов, которые можно удерживать в ловушке, определяется соотношением:

$$m_{max} = - \frac{4eV \left[ 1 - \frac{N}{60} \right]}{L^2 q_z \omega^2}$$

Варьируемые параметры для достижения определенной массы – частота поля, полудлина ловушки и значение  $q_z$ , при котором траектория частицы становится нестабильной.

Например, для массы 1000 Да и  $V_{max} = 10 \text{ kV}$ ,  $q_z = 0.903$  :  $L\omega \sim 2\pi \cdot 10^4$ . Для частоты 1kHz  $L \sim 10 \text{ мм}$ .

Полученные результаты показывают возможность реализации ловушки со статической гармонизацией при создании мини-масс-спектрометров. Простота конструкции требует меньшей точности при изготовлении, что удешевляет производство (по сравнению с трехмерными ионными ловушками с гиперболоидальной поверхностью электродов) и позволяет использовать методы 3D печати.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант 14-24-00114

Литература:

1. *March R.E., Todd J.F.J.* Practical Aspects of Trapped Ion Mass Spectrometry, Volume IV: Theory and Instrumentation / ed. March R.E., Todd J.F.J. CRC Press, 2010.
2. *March R.E., Todd J.F.J.* Radio frequency quadrupole technology: Evolution and contributions to mass spectrometry // International Journal of Mass Spectrometry. 2014.
3. *Nikolaev E.N. et al.* Initial experimental characterization of a new ultra-high resolution FTICR cell with dynamic harmonization // J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2011. Vol. 22, № 7. P. 1125–1133.
4. *Boldin I. A., Nikolaev E.N.* Fourier transform ion cyclotron resonance cell with dynamic harmonization of the electric field in the whole volume by shaping of the excitation and detection electrode assembly // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2011. Vol. 25, № 1. P. 122–126.