

КИРЮШИН ДМИТРИЙ ВЯЧЕСЛАВОВИЧ

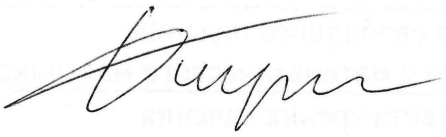
**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В
КВАДРУПОЛЬНЫХ ВЧ ПОЛЯХ В ПРИСУТСТВИИ НЕЙТРАЛЬНОГО ГАЗА**

специальность 05.27.02 – Вакуумная и плазменная электроника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук



Кирюшин Дмитрий Вячеславович

Рязань 2008

Работа выполнена в государственном образовательном учреждении высшего
профессионального образования
«Рязанский государственный радиотехнический университет»

Научный руководитель: кандидат технических наук
Мамонтов Евгений Васильевич

Официальные оппоненты: д.ф.-м.н. Волков Степан Степанович;
к.т.н. Черняк Евгений Яковлевич.

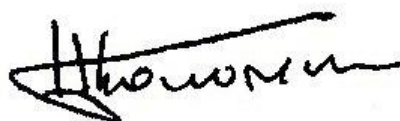
Ведущая организация: Московский физико-технический институт
(Государственный Университет).

Защита состоится «23» декабря 2008 г. в 11 часов на заседании
диссертационного совета Д 212.211.03 в ГОУВПО «Рязанский государственный
радиотехнический университет» по адресу: 390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГОУВПО «Рязанский
государственный радиотехнический университет».

Автореферат разослан «_____» _____ 2008 года

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.211.03, д.т.н., проф.



Колотилин Б.И.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ.

Актуальность. В современном мире с интенсивно протекающим научно-техническим прогрессом и развитыми технологиями требуются высокоточные способы анализа вещества. Одним из них является масс-спектрометрический способ анализа. Масс-спектрометры применяются при контроле технологических процессов, в космических исследованиях, в экологии и т.д. Одним из наиболее распространенных разновидностей подобных приборов являются масс-спектрометры динамического типа, которые сочетают в себе высокие эксплуатационные и аналитические свойства. Работа приборов этого типа основана на разделении заряженных частиц с различным значением удельного заряда в ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала. Используются различные режимы работы приборов этого типа. В некоторых из них для улучшения рабочих характеристик используется заполнение рабочего объема анализатора и смежных устройств легким нейтральным газом.

В масс-спектрометрах и устройствах транспортировки ионов на основе ионной ловушки и фильтра масс этот газ позволяет снизить энергию и размер ионного облака. В этом случае возникает задача оценки влияния нейтрального газа на движение заряженных частиц в двухмерных или трёхмерных ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала.

Цель диссертационной работы заключается в исследовании режимов работы и разработке способов улучшения параметров приборов квадрупольной масс-спектрометрии с газовым наполнением.

Поставленная цель достигалась решением следующих задач

- разработкой аналитической теории движения ионов в квадрупольных ВЧ полях с нейтральным газом;
- построением компьютерной модели движения ионов в квадрупольных ВЧ полях с нейтральным газом, сравнение аналитической и компьютерной модели для оценки их достоверности;
- оптимизацией параметров приборов квадрупольной масс-спектрометрии с газовым наполнением на основе аналитической теории и результатов компьютерного моделирования движения ионов в квадрупольных полях с квадратичным распределением потенциала.

Научная новизна результатов работы заключается в следующем:

- разработана аналитическая теория и численная модель движения ионов в квадрупольных ВЧ полях в присутствии буферного газа, учитывающая

поляризационное взаимодействие и взаимодействие твердых сфер при столкновениях заряженных частиц и нейтральных молекул;

- доказано, что при движении заряженных частиц в квадрупольных ВЧ полях при наличии буферного газа существуют предельные значения амплитуд колебаний ионов по всем координатам;

- установлено, что при движении ионов по стабильным траекториям предельные амплитуды колебаний ионов при наличии буферного газа зависят от температуры газа, отношения масс заряженных и нейтральных частиц, рабочих режимов и не зависят от давления буферного газа;

- установлено, что для нестабильных ионов амплитуда колебаний при наличии буферного газа не являются безгранично возрастающими функциями, а стремятся к предельному значению, зависящему от температуры газа, отношения масс заряженных и нейтральных частиц, рабочих параметров и давления буферного газа.

- показано, что динамика установления предельных амплитуд колебаний заряженных частиц определяется процессами энергообмена между ионами и молекулами, и описывается экспоненциальными функциями с постоянными времени, зависящими от давления буферного газа и отношения масс ионов и нейтральных молекул, длительность переходного процесса не зависит от амплитуды ВЧ поля;

- показана возможность реализации режима масс-селективной нестабильности в трехмерной ионной ловушке без буферного газа за счет использования поперечного ионизирующего электронного потока в сочетании с фазовым вводом ионов;

Достоверность научных выводов работы подтверждается использованием независимых методов определения параметров траекторий заряженных частиц в квадрупольных ВЧ полях (аналитическая теория подтверждена результатами численного моделирования), результатами по экспериментальному исследованию режима масс-селективной нестабильности без буферного газа.

Практическая значимость работы состоит в следующем:

- результаты исследования механизмов взаимодействия заряженных частиц с нейтральными молекулами при движении ионов в квадрупольных ВЧ полях позволяют определять оптимальные условия работы квадрупольных масс-анализаторов с газовым наполнением и улучшать их аналитические параметры;

- полученные зависимости предельных энергий ионов при наличии буферного газа от температуры, отношения масс заряженных и нейтральных частиц, положения

рабочей точки на диаграмме стабильности позволяют минимизировать размеры и энергию ионного облака ионов, удерживаемых в квадрупольных ВЧ полях;

- результаты оптимизации параметров режима масс-селективной неустойчивости без буферного газа позволяют повысить разрешающую способность и чувствительность квадрупольных масс-спектрометров.

Реализация результатов работы.

Результаты диссертационной работы использованы при выполнении научно-технической работы «Масс-анализатор по проекту «Марс 96» по договору № 68-90 от 02.06.90 г. и «Разработка и изготовление макета прибора для определения содержания летучих компонентов в лунном грунте, устанавливаемого на пенетраторе» по договору № 8-97 от 15.09.97 г., выполненных Рязанским Государственным Радиотехническим Университетом и институтом геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского (ГЕОХИ) РАН.

Результаты, полученные в диссертационной работе, использовались при создании лабораторных работ по курсу «Физические основы современных методов анализа вещества».

Основные научные положения, выносимые на защиту

1. Переходной процесс установления средних амплитуд движения заряженных частиц в квадрупольных ВЧ полях с буферным газом описывается экспоненциальными функциями с постоянными времени и предельными значениями, зависящими от температуры газа, отношения масс заряженных частиц и молекул буферного газа, положения рабочей точки ионов на диаграмме стабильности, предельные значения амплитуды колебаний ионов в области стабильности не зависят от давления буферного газа.
2. Средняя амплитуда колебаний ионов в области неустойчивости в присутствии буферного газа стремится к предельному значению, зависящему от давления буферного газа и отношения масс заряженных частиц и нейтральных молекул.
3. Режим масс-селективной неустойчивости в трехмерной ионной ловушке без буферного газа с разрешающей способностью более 500 реализуется при фазовом вводе вдоль оси R ионизирующего электронного потока толщиной не более 0.04 от характерного размера анализатора.
4. Режим масс-селективной неустойчивости в трехмерной ионной ловушке без нейтрального газа позволяет при том же значении разрешающей способности в 3÷5 раз повысить скорость развертки спектра масс по сравнению с режимом с буферным газом.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на 14-й Международной конференции по масс-спектрометрии, Тампере, Финляндия, 1997; на Международной научно-технической конференции «Научные основы высоких технологий», Новосибирск, 1997; на 3-й Международной научно-технической конференции «Физика и радиоэлектроника в медицине и биотехнологии» ФРЭМБ'98, 1998, Владимир; на 2-й Всероссийской конференции с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы», 2007, Москва.

Публикации. По материалам диссертационной работы опубликовано 20 печатных работ, из них 16 статей (в том числе опубликованных в ведущих рецензируемых журналах и изданиях, определенных ВАК Минобрнауки РФ – 4 статьи), 4 работы – в материалах российских и международных научно-технических конференций.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы, включающего 76 наименований. Работа изложена на 129 страницах машинописного текста, содержит 49 рисунков.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель работы, изложены основные решаемые задачи, показана научная новизна и практическая ценность работы, приведены основные научные положения, выносимые на защиту.

В первой главе («Обзор литературы и постановка задачи диссертационной работы») проводится краткий обзор существующих аналитических и модельных методов расчета движения заряженных частиц в квадрупольных ВЧ полях в том числе в присутствии буферного газа. По результатам анализа существующих работ сделан вывод об отсутствии аналитической теории, описывающей движение заряженных частиц в атмосфере буферного газа и недостаточной развитости модельных методов исследования данной проблемы.

Во второй главе («Влияние буферного газа на движение ионов в линейных ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала. Аналитическая теория.») на основании теории зон захвата для квадрупольных масс-спектрометров и газокINETической теории выводятся соотношения для изменения амплитуды колебаний ионов, двигающихся в ВЧ поле с квадратичным распределением потенциала под действием столкновений с легкими нейтральными молекулами. При этом учитывается возможность столкновений, обусловленных как поляризационным взаимодействием молекул и ионов, так и столкновений твердых сфер.

Изменения амплитуд движения ионов, испытавших столкновение в данную фазу ВЧ поля при известных параметрах эллипса захвата, записываемого в виде $(x \cos \alpha + v \sin \alpha)^2 / A^2 + (x \sin \alpha - v \cos \alpha)^2 / B^2 = 1$, находятся интегрированием выражения

$$\langle \Delta \rangle = \left(\int_{S_1} (Z_m'^2 - Z_m^2) p(v) dS - \int_{S_2} (Z_m'^2 - Z_m^2) p(v) dS \right) / \left(\int_{S_1} p(v) dS - \int_{S_2} p(v) dS \right), \quad \text{где } Z_m -$$

амплитуда иона до столкновения, Z_m' - амплитуда иона после столкновения, $p(v)$ - вероятность рассеяния иона с заданной скоростью v . Если имеет место поляризационное рассеяние, то $p = t / \tau_n$, где τ_n - постоянная времени поляризационного рассеяния. При столкновении твердых сфер функция вероятности определяется по формуле $p = 1 - \exp(-l / \lambda)$, где λ - длина свободного пробега. При $t \rightarrow 0$ вероятность $p = |\vec{V}| t / \lambda$.

На основании полученных соотношений установлено, что при преобладании поляризационного механизма столкновений заряженных частиц и нейтралей средний квадрат амплитуды колебаний ионов изменяется по закону

$$Z_m^2 = \left(Z_{m0}^2 - \frac{K_1 v_t^2 \delta}{\eta} \right) \exp\left(-\frac{\eta t}{\tau_i}\right) + \frac{K_1 v_t^2 \delta}{\eta},$$

где Z_{m0} - начальная амплитуда колебаний иона, $v_1 = v_t T / (\pi r_0)$ - нормированная тепловая скорость ионов по данной координате, $\delta = m_0 / m$ - отношение массы молекулы и иона, $K_1 = 1.5 (\sin^2 \alpha / A^2 + \cos^2 \alpha / B^2)$, $\eta = [\delta - \delta^2 K]$, $K = 2.25 + 0.3125 \sin^2 2\theta (A^2 / B^2 + B^2 / A^2 - 2)$, A , B и α определяются из уравнения эллипса захвата.

При описании процесса столкновений моделью твердых сфер, амплитуда колебаний ионов определяется выражением

$$Z_m = Z_{m\lim} \frac{(Z_{m0} + Z_{m\lim}) + (Z_{m0} - Z_{m\lim}) \exp(-\chi t)}{(Z_{m0} + Z_{m\lim}) - (Z_{m0} - Z_{m\lim}) \exp(-\chi t)},$$

где $\chi = \delta \sqrt{(1 - \delta K) K_1 v_1^2} \sqrt{B^2 \cos^2 \alpha + A^2 \sin^2 \alpha} / (\sqrt{6\sqrt{2}} \lambda)$, λ - средняя длина свободного пробега, а $Z_{m\lim} = \sqrt{1.5 v_1^2 K_1 / (1 - \delta K)}$ - предельное значение амплитуды колебаний при длительном удержании ионов в ВЧ поле с квадратичным распределением потенциала в атмосфере буферного газа. При преобладании

поляризационного механизма взаимодействия ионов и молекул предельная амплитуда колебаний в $\sqrt{1,5}$ меньше, чем при столкновениях твердых сфер.

Из анализа полученных соотношений следует, что средняя кинетическая энергия ионов с рабочими точками в глубине области стабильности при длительном взаимодействии с буферным газом стремиться к $3kT$ при поляризационном взаимодействии и к $4,5kT$ при столкновениях твердых сфер и не зависит от массы иона.

В третьей главе («Моделирование движения заряженных частиц в линейных ВЧ полях при наличии буферного газа») предлагается алгоритм моделирования движения ионов в ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала, учитывающий поляризационное взаимодействие и взаимодействие твердых сфер при столкновениях заряженных частиц и нейтралей. Для определения момента столкновения частиц использовался метод Монте-Карло. Плотность вероятности проекции тепловых скоростей молекул на выбранную ось описывалась гауссовым распределением. Проекции скорости ионов на оси координат после столкновения рассчитывались с использованием системы центра масс, при выполнении в ней законов сохранения энергии и импульса. Считалось, что рассеяние в системе центра масс является изотропным и направление скоростей частиц после столкновения определялось случайным образом.

В результате моделирования движения ионов установлено, что колебания ионов имеют нестационарный случайный характер с тенденцией приближения к некоторому установившемуся значению.

Так как столкновения заряженных частиц с молекулами буферного газа носит случайный характер, для получения усредненных параметров траекторий ионов исследовалось поведение ансамбля заряженных частиц, взаимодействующих в ВЧ линейном поле с буферным газом. С этой целью осуществлялось моделирование движения $5 \cdot 10^3$ ионов с различными начальными координатами и скоростями. В процессе моделирования определялась средняя по ансамблю амплитуда колебаний заряженных частиц и ее зависимость от параметров питающего напряжения, характеристик буферного газа и масс ионов.

Из полученных результатов следует, что амплитуда колебаний стремится к некоторому установившемуся значению, не зависящему от давления буферного газа и начальных координат ионов. Результаты моделирования для ионов, имеющих рабочую точку в глубине зоны стабильности, совпадают с результатами

аналитической теории, изложенными во второй главе, с относительной погрешностью 10%.

С приближением рабочей точки к границе стабильности характер движения ионов в условиях столкновений с буферным газом существенным образом меняется. Для рабочих точек, в которых аналитическая теория дает предельное значение амплитуды колебаний $Z_{m\lim} = \infty$, координаты ионов в процессе столкновений изменяются в широком диапазоне и могут превышать размеры электродной системы анализатора. Такие ионы считаются нестабильными и покидают ловушку. Для получения количественных характеристик траекторий движения нестабильных ионов при моделировании

использовался метод, при котором расчетная область не ограничивалась размерами анализатора. Полученные в результате моделирования зависимости средней амплитуды колебаний ионов массы $M=50$ а.е.м. от времени нахождения ионов в анализаторе представлены на рисунке 1.

В процессе развертки спектра масс рабочие точки ионов последовательно перемещаются из стабильной зоны в нестабильную. Амплитуда колебаний ионов в нестабильной зоне в отсутствие буферного газа неограниченно возрастает. При наличии в рабочем объеме газа легких нейтралей зависимость амплитуды колебаний ионов от времени изменяется. Зависимости средней амплитуды колебаний для $5 \cdot 10^3$ ионов от давления буферного газа для ионов $M=10^3$ а.е.м. представлены на рисунке 2. Анализ полученных зависимостей показывает, что амплитуда колебаний ионов в нестабильной зоне при наличии буферного газа не является монотонно возрастающей функцией как это имеет место в условиях вакуума, а имеет предел, зависящего от давления буферного газа.

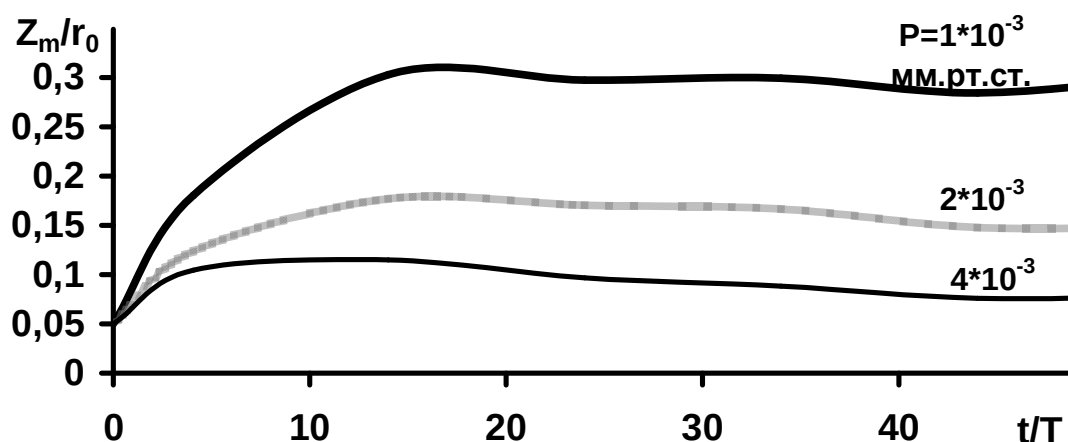


Рисунок 1 Зависимости средней амплитуды колебаний ионов 50 а.е.м. от времени при различных давлениях буферного газа. $q=0,354423$, $a=0$.

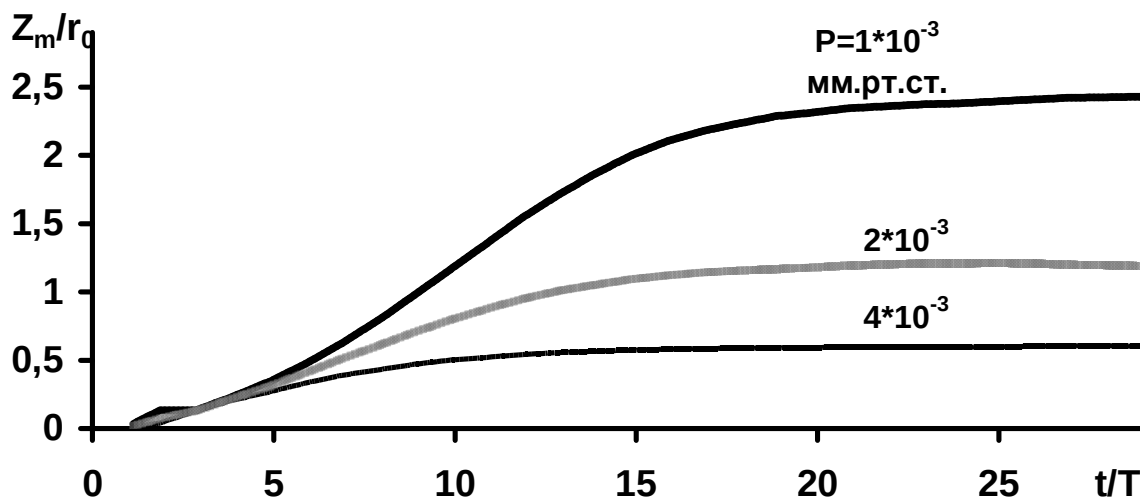


Рисунок 2 Зависимости средней амплитуды колебаний ионов 1000 а.е.м. от времени при различных давлениях буферного газа. $q=0,361154$, $a=0$.

Получено аналитическое соотношение, описывающее изменение амплитуд колебаний ионов в нестабильной области в присутствии буферного газа с течением времени

$$t = \frac{1}{\mu} \left(\ln \left(\frac{Z_m}{Z_{m0}} \right) - \gamma \ln \left(\frac{\mu - \gamma Z_m}{\mu - \gamma Z_{m0}} \right) \right), \quad \text{где} \quad \gamma = \left(1 + \exp \left(\frac{\pi \mu}{\omega} \right) \right) \frac{\omega^2 (3\mu^4 + 31\mu^2 \omega^2 + 6\omega^4)}{2\pi \lambda (\sqrt{\mu^2 + \omega^2})^3 (\mu^2 + 9\omega^2)},$$

μ – параметр нестабильности, зависящий от параметров Матье, ω – частота колебаний иона. Как следует из этого выражения, при больших временах $t \gg 1/\mu$ амплитуда колебаний Z_m стремится к установившемуся значению $Z_{m\lim}$. Это значение равно $Z_{m\lim} = \mu/\gamma$. Результаты расчетов по этим формулам соответствуют результатам моделирования с относительной погрешностью менее 15%.

В четвертой главе («Исследование влияния буферного газа на характеристики режима масс-селективной нестабильности») на основе разработанной модели, определены аналитические характеристики трехмерной ионной ловушки (ТИЛ) в режиме масс-селективной нестабильности с импульсным питанием.

В результате моделирования установлено, что с повышением давления буферного газа форма массового пика ухудшается. На рисунке 3 представлены массовые пики при различных давлениях буферного газа при скорости развертки $v_f = \Delta f / f = 2 \cdot 10^{-5}$, характер изменений которых объясняется результатами, представленными на рисунке 4. Скорость увеличения амплитуды колебаний ионов в нестабильной области обратно пропорциональна давлению буферного газа. «Размывание» ионного облака при больших давлениях ($P=12 \cdot 10^{-3}$ мм.рт.ст)

начинается задолго до достижения границы области стабильности, что также приводит к ухудшению разрешающей способности. Этот результат также находится в соответствии с выводами о характере изменения амплитуд колебаний ионов вблизи границы области стабильности под действием буферного газа.

Ранее показано, что сжатие ионного облака в ТИЛ с буферным газом происходит до некоторого предела, зависящего от режима работы. В режиме масс-селективной нестабильности без буферного газа предложено использовать поперечный ввод ионизирующих электронов, с образованием ионов с малым разбросом координат z . Режим реализуется в ограниченном диапазоне фаз ввода. Исследовано влияние разброса начальных координат и фаз ввода на рабочие характеристики ТИЛ в режиме масс-селективной нестабильности без буферного газа.

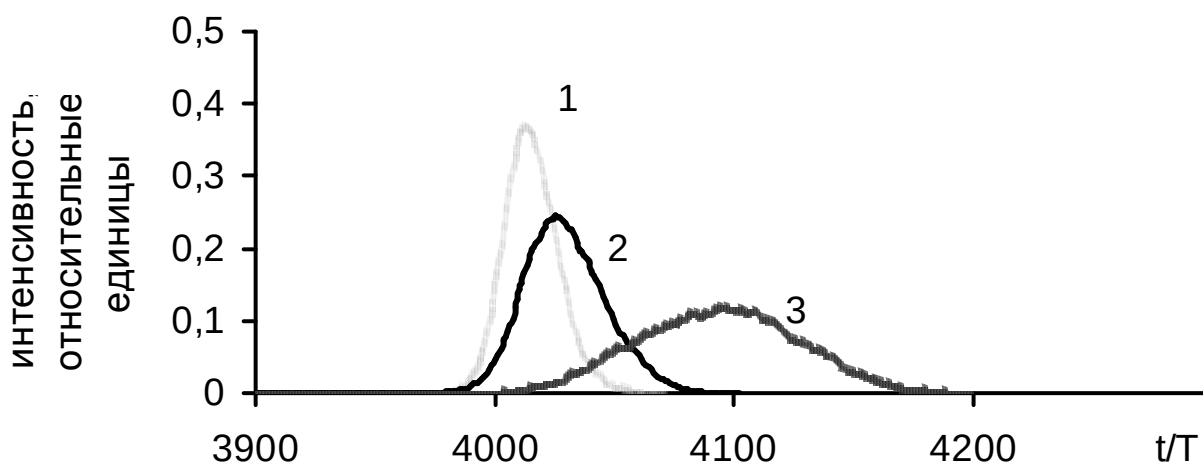


Рисунок 3 Массовые пики в режиме масс-селективной нестабильности в ТИЛ. Скорость развертки $v_f = 2 \cdot 10^{-5}$. 1-3 $P = 0.7$, 3 и $12 \cdot 10^{-3}$ мм.рт.ст.

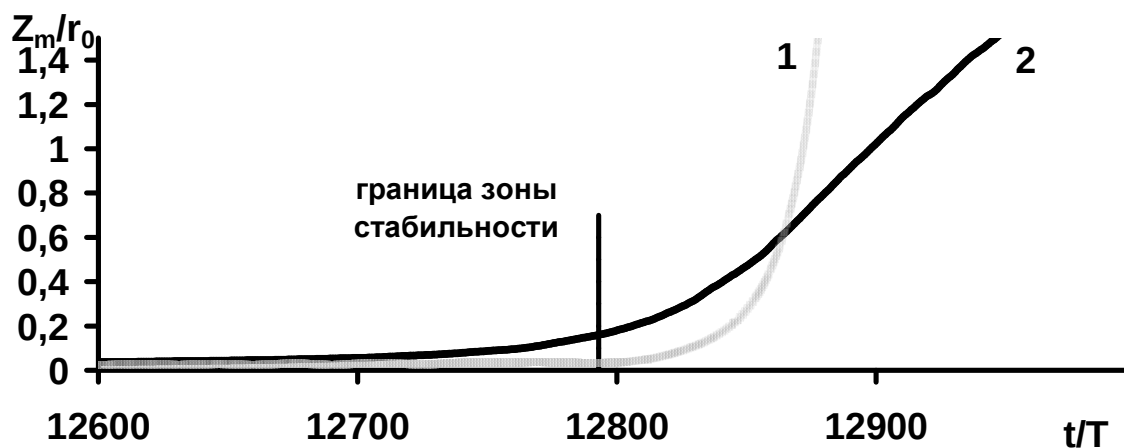


Рисунок 4 Изменение средней амплитуды колебаний ионов $M=10^3$ в процессе развертки в режиме масс-селективной нестабильности. Скорость относительного изменения частоты $v_f = 5 \cdot 10^{-6}$, 1, 2 – $P = 0.7$, $12 \cdot 10^{-3}$ мм.рт.ст.

При моделировании этого режима определено, что разрешающая способность более 500 достигается при локализации начальных координат ионов в области $-0,04 \leq z_0/r_0 \leq 0,04$ в диапазоне фаз ввода $55^\circ \leq \varphi \leq 125^\circ$. Также показано, что режим позволяет повысить скорость развертки спектра масс в 3÷5 раз по сравнению с режимом с буферным газом при давлении порядка 10^{-3} мм.рт.ст.

Приведены результаты экспериментального исследования режима масс-селективной неустойчивости без буферного газа. В эксперименте получены спектры ряда органических соединений и остаточного газа. Спектр толуола при давлении 10^{-5} мм.рт.ст. представлен на рисунке 5. Достигнутая в этом эксперименте разрешающая способность более 500 сравнима с значениями, достигаемыми при работе в режиме масс-селективного удержания в вершине диаграммы стабильности. Таким образом экспериментально подтверждена принципиальная возможность работы ТИЛ в режиме масс-селективной неустойчивости без буферного газа.

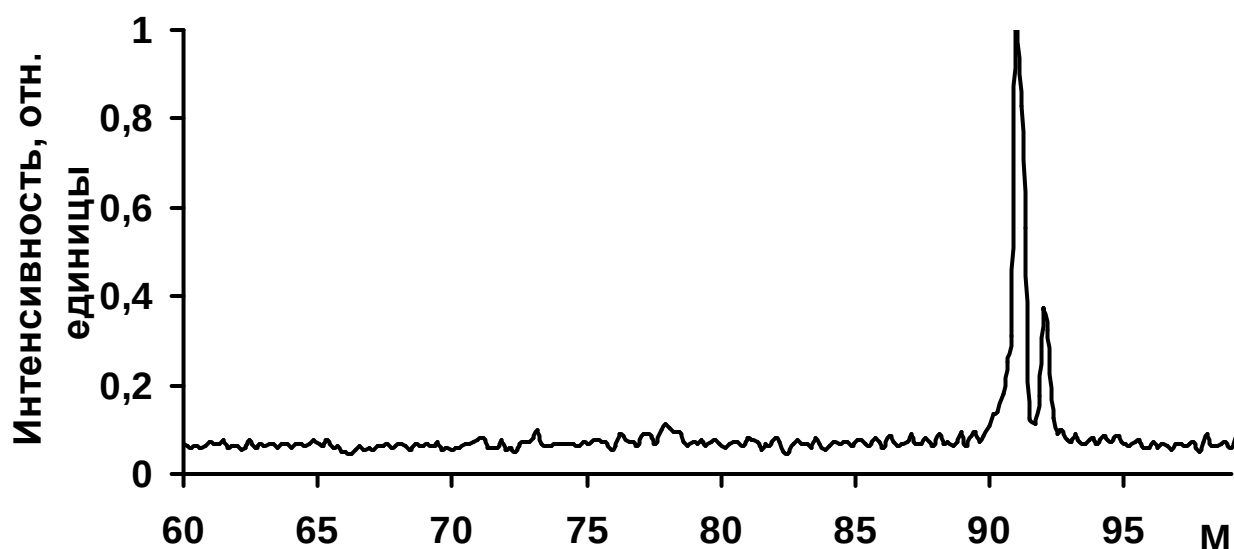


Рисунок 5 Спектр толуола, полученный в режиме масс-селективной неустойчивости без буферного газа с ионизацией электронным ударом.

В конце главы приведены результаты моделирования режима масс-селективной неустойчивости без буферного газа в ТИЛ с нелинейными искажениями поля. Показано, что существенные ухудшения формы массового пика происходят при амплитуде гармоник нечетных порядков выше 0,5% и четных выше 2%. При современной технологии изготовления электродных систем амплитуды гармоник искажения поля на несколько порядков меньше, что подтверждает возможность практической реализации режима масс-селективной неустойчивости без буферного газа.

В пятой главе («Исследование влияния столкновений ионов с молекулами остаточного газа на характеристики гиперболоидных масс-спектрометров»)

проводятся результаты анализа влияния столкновения ионов при движении в ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала с молекулами при соизмеримости масс ионов и нейтральных частиц. Анализ проведен для двух типов приборов: квадрупольного фильтра масс (КФМ) и ТИЛ.

Особенностью КФМ является отсутствие поля вдоль оси Z. Ионы двигаются вдоль этой оси по инерции за счет скорости, полученной в ионном источнике. Изменение этой скорости приводит к изменению времени сортировки. При столкновениях ионов с молекулами соизмеримой массы происходит изменение направления импульса заряженных частиц. Так как в отсутствии столкновений проекции скоростей нестабильных ионов на оси X и Y в среднем превосходят проекции скорости на ось Z, то часть нестабильных ионов при столкновении с молекулами увеличивает скорость движения вдоль оси системы. При моделировании было обнаружено, что минимальное время прохождения подобных ионов может составлять 5 периодов ВЧ поля. При этом нестабильные ионы могут в некоторых случаях проходить через электродную систему КФМ.

На рисунке 6 представлены два массовых пика для КФМ, полученные с помощью моделирования с учетом столкновений ионов с молекулами. Наличие в объеме анализатора тяжелых нейтралей приводит к появлению «хвостов» массовых пиков, а также равномерного фона, снижающего динамический диапазон масс-анализатора.

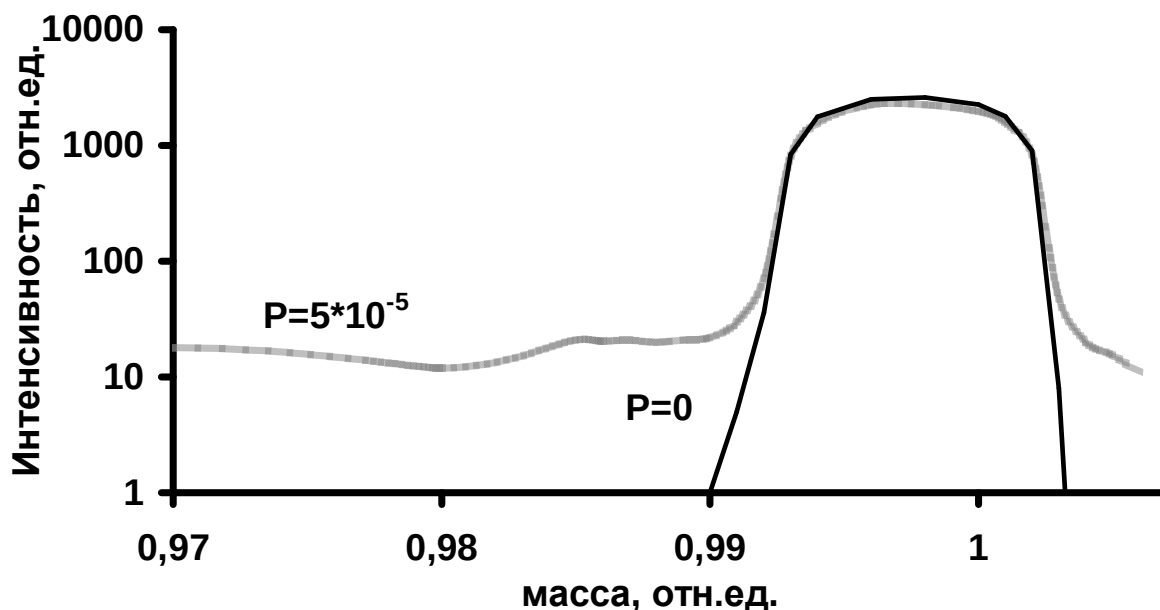


Рисунок 6. Расчетная форма массового пика для КФМ, с учетом столкновений с молекулами при различных давлениях остаточного газа.

По результатам моделирования и экспериментов была получена зависимость отношения сигнал/фон от давления, показанная на рисунке 7. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными. Эта зависимость имеет вид

$$\lg\left(\frac{\text{сигнал}}{\text{фон}}\right) = \lg(P) + b,$$

где P - давление остаточного газа в мм.рт.ст, а b - коэффициент, зависящий от геометрических размеров и режима работы КФМ.

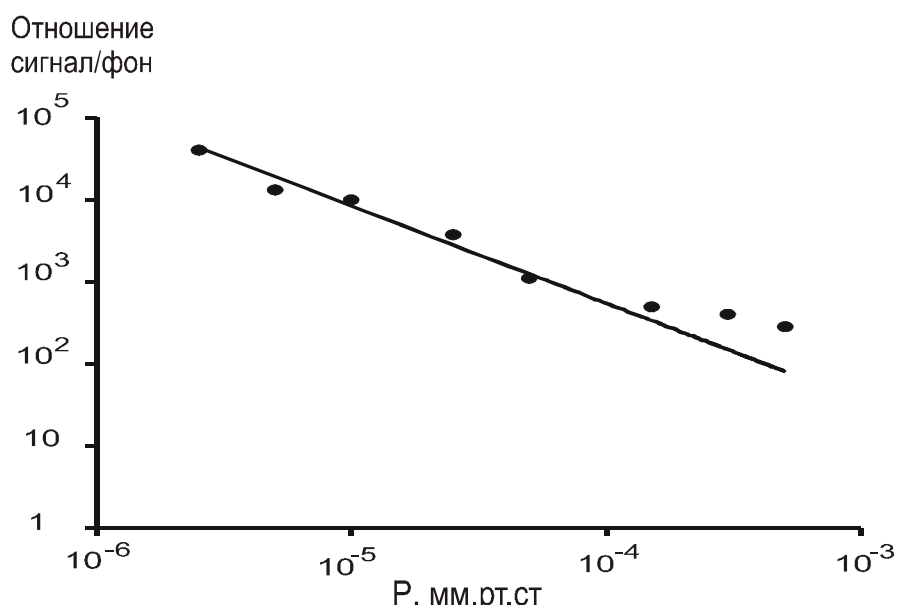


Рисунок 7 Зависимость соотношения сигнал/фон от давления. Сплошная линия – расчетная зависимость, точки – результаты эксперимента.

Исследовано влияние столкновений ионов с тяжелыми молекулами на работу ионной ловушки. Ранее показано, что разрешающая способность в режиме масс-селективной нестабильности зависит от размеров ионного облака вдоль оси Z . Из-за столкновений заряженных частиц с нейтральными молекулами с соизмеримыми массами размеры ионного облака в процессе масс-селективной сортировки увеличиваются, что приводит к ухудшению формы массовых пиков.

Для более полной оценки влияния ион-молекулярных столкновений на характеристики ионной ловушки было проведено моделирование процесса масс-селективного разделения ионов в условиях многокомпонентного состава анализируемого вещества. В качестве исследуемого вещества использовался перфтортрибутиламин. При этом в спектре при моделировании учитывалось наличие десяти наиболее интенсивных составляющих в диапазоне от 69 а.е.м. до 502 а.е.м.

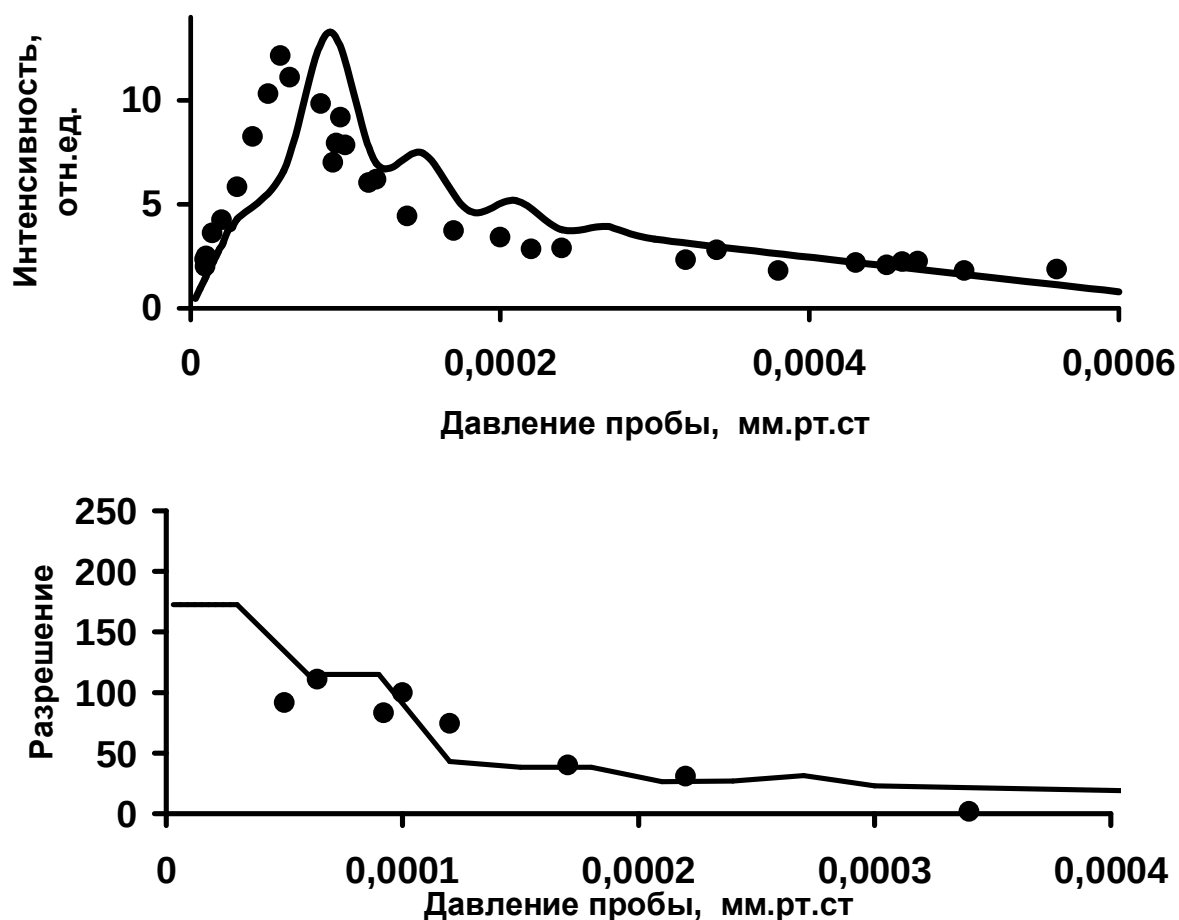


Рисунок 8 Интенсивность и разрешающая способность для пика M=69. Сплошная кривая – результаты моделирования, точки – результаты эксперимента.

Для проверки точности модели был проведен ряд экспериментов по работе ТИЛ в режиме масс-селективной нестабильности при различных давлениях пробы. Сопоставление результатов моделирования и экспериментальных данных проводится на рисунке 8.

Хорошее соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных подтверждает справедливость предложенной модели. На основе разработанной модели определено оптимальное давление исследуемой смеси $8 \cdot 10^{-5}$ - 10^{-4} мм.рт.ст., обеспечивающей наибольшее отношение сигнал/шум ТИЛ в режиме масс-селективной нестабильности без буферного газа.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ.

1. Разработана уточненная аналитическая теория движения заряженных частиц в линейных ВЧ полях с учетом взаимодействия ионов с нейтральными молекулами, достоверность которой подтверждается результатами компьютерного моделирования. В рамках разработанной теории показано, что при движении

заряженных частиц в линейных ВЧ полях при наличии буферного газа существуют предельные значения амплитуд колебаний ионов по всем координатам. Получены аналитические соотношения, определяющие динамику изменения амплитуд колебаний заряженных частиц в атмосфере буферного газа, в зависимости от параметров рабочих режимов, давления буферного газа, соотношения масс ионов и нейтралей. Определены области диаграммы стабильности, где достигаются минимальные значения кинетической энергии и амплитуд колебаний заряженных частиц при их взаимодействии с легким газом. Эти области являются оптимальными для ТИЛ с газовым наполнением в режиме источника ионов и КФМ в режиме транспортировки ионов.

2. Доказано, что в областях неустойчивости диаграммы стабильности столкновения ионов с молекулами ограничивает амплитуду колебаний заряженных частиц значениями, зависящими от давления и температуры нейтрального газа, отношения масс нейтральных и заряженных частиц и величины питающего напряжения, что показывает возможность удержания в ТИЛ с буферным газом нестабильных в его отсутствии ионов.

3. Показано, что при использовании фазового ввода и образовании ионов с малым разбросом начальных координат $|\Delta z/r_0| < 0,04$ режим масс-селективной нестабильности в ТИЛ без буферного газа позволяет достичь значения разрешающей способности $R > 500$. Установлено, что наличие нелинейных искажений поля с относительной амплитудой гармоник разложения потенциала менее $5 \cdot 10^{-3}$ не ухудшает существенным образом аналитические характеристики данного режима. Скорость развертки спектра масс в этом режиме без буферного газа в 3÷5 раз больше, чем в аналогичном режиме с газовым наполнением.

4. Разработанная модель движения ионов в линейных ВЧ полях в присутствии многокомпонентного нейтрального газа позволяет определять диапазон рабочих давлений остаточного газа при работе квадрупольных масс-анализаторов в различных режимах. Показано, что отношение сигнал/фон для квадрупольного фильтра масс является линейной функцией давления остаточного газа в рабочем объеме.

Вышеизложенные результаты позволяют сделать вывод о том, что поставленные задачи решены и цель диссертационной работы достигнута.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Кирюшин Д.В. Математическое моделирование работы гиперболоидного масс-спектрометра типа трехмерной ионной ловушки в режиме масс-селективной неустойчивости. 1993, Депонирована в ЦНИИ «Электроника» N Р-5477, 5 с.
2. Кирюшин Д.В. Оценка возможностей режима масс-селективной неустойчивости при импульсном питании гиперболоидного масс-спектрометра типа трехмерной ионной ловушки. //Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1994, с. 132-135.
3. Кирюшин Д.В. Сравнение скоростных возможностей работы гиперболоидного масс-спектрометра типа трехмерной ионной ловушки в режиме масс-селективной неустойчивости при различных режимах питания. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1995, с. 69-75.
4. Рожков О.В., Кирюшин Д.В. Моделирование работы ГМС типа трехмерной ионной ловушки в режиме масс-селективной неустойчивости без буферного газа. //Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1996, с. 128-139.
5. Кирюшин Д.В. Об использовании ЕС-сигнала в режиме МСН. //Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1997, с. 52-56.
6. Кирюшин Д.В. Влияние буферного газа на удержание ионов в трехмерной ионной ловушке. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1997. с. 123-129.
7. Шеретов Э.П., Рожков О.В., Кирюшин Д.В. О возможности использования масс-анализатора типа трехмерной ионной ловушки в режиме масс-селективной неустойчивости без буферного газа. /Труды международной научно-технической конференции «Научные основы высоких технологий», Новосибирск, 1997.
8. Кирюшин Д.В., Шеретов Э.П., Колотилин Б.И., Гуров В.С., Рожков О.В. Ионные ловушки с поперечным вводом ионизирующего электронного пучка./ Тезисы доклада на 14-ой международной конференции по масс-спектрометрии, Тампере, Финляндия, 1997.
9. Гуров В.С., Кирюшин Д.В. Влияние ион-молекулярных столкновений на параметры квадрупольного фильтра масс. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1998, с. 66-69.

10. Рожков О.В., Кирюшин Д.В., Малютин А.Е. Влияние ион-молекулярных столкновений на рабочие характеристики режима масс-селективной неустойчивости. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1998 с. 129-133.
11. Рожков О.В., Кирюшин Д.В., Малютин А.Е. Использование масс-анализатора типа ионной ловушки в режиме масс-селективной неустойчивости без буферного газа. / Материалы 3-й международной научно-технической конференции « Физика и радиоэлектроника в медицине и биотехнологии» ФРЭМБ'98. 1998, Владимир.
12. Мамонтов Е.В., Кирюшин Д.В. Расчет формы массовых пиков гиперболоидных масс-спектрометров с одномерной однополярной сортировкой ионов. // ЖТФ 1999, том 69, вып. 2. с. 103-106.
13. E. P. Sheretov, O. W. Rozhkov, D.V. Kiryushin, A. E. Malutin. Mass selective instability mode without a light buffer gas. // International Journal of Mass Spectrometry 190/191 (1999) 103-111.
14. Рожков О.В., Кирюшин Д.В., Малютин А.Е. Нелинейные резонансные явления в ГМС в режиме масс-селективной неустойчивости. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 1999, с. 66-72.
15. Рожков О.В., Кирюшин Д.В., Малютин А.Е. Нелинейные резонансы в режиме масс-селективной неустойчивости при импульсном питании. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 2000, с. 46-49.
16. Кирюшин Д.В. Предельное сжатие ионов на буферном газе. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 2000, с. 68-73.
17. Кирюшин Д.В. О возможности потери стабильных частиц при использовании буферного газа в трехмерной ловушке. // Научное приборостроение: межвуз. сб. науч. тр. Рязань, 2002, с. 14-17.
18. Кирюшин Д.В. Асимптотика движения ионов в квадрупольных ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала при наличии буферного газа. // Вестник РГРТА, 2007, вып. 22 с. 82-86.
19. Кирюшин Д.В. Предельная степень охлаждения ионов на буферном газе в квадрупольных масс-спектрометрах. Тезисы доклада на 2-ой Всероссийской

конференции с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы», 2007, Москва.

20. Кирюшин Д.В., Гуров В.С., Мамонтов Е.В. Предельное сжатие ионного облака на буферном газе в ВЧ полях с квадратичным распределением потенциала. // ЖТФ 2008, том 78, вып. 1. с. 109-113.

К и р ю ш и н Дмитрий Вячеславович

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В
КВАДРУПОЛЬНЫХ ВЧ ПОЛЯХ В ПРИСУТСТВИИ НЕЙТРАЛЬНОГО ГАЗА

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Подписано в печать 20.11.08 Формат бумаги 60X84 1/16.

Бумага офсетная. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 2,0.

Уч.-изд. л. 2,0. Тираж 100 экз.

Рязанский государственный радиотехнический университет.

390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Редакционно-издательский центр РГРТУ.