

УДК 531.75

## Динамический квадрупольный масс-спектрометр в неоднородных магнитных статических полях

Ю. К. Голиков, Н. К. Краснова, К. В. Соловьёв, Т. Д. Ершов,  
В. И. Николаев, В. А. Елохин

*Изучено влияние неоднородного статического магнитного поля на характеристики квадрупольного масс-анализатора. Для конструирования неоднородностей, создаваемых постоянными магнитами, введен скалярный потенциал по аналогии с электрическим. В качестве модели рассмотрен диполь как комбинация кулоновских центров с противоположными зарядами, расположенными близко друг от друга. Представленные результаты численного моделирования с использованием одного, двух и четырех диполей показали, что при определенных параметрах достигается увеличение разрешения в два раза.*

PACS: 07.75.+h; 41.90.+e; 82.80.Ms

*Ключевые слова:* масс-анализ, квадрупольный масс-анализатор, неоднородное статическое магнитное поле, зоны устойчивости, магнитный потенциал, магнитный диполь, безразмерная модель движения.

### Введение

Различные задачи экологического мониторинга, контроля сложных технологических предприятий, контроля производств и другие контролируемые функции, возникающие в последнее время, дали толчок в развитии портативных

аналитических приборов. В большинстве своем в основе работы таких устройств лежит анализ ионного состава пробы. Поэтому создание малогабаритного прибора на основе классического квадрупольного масс-анализатора с высокочастотным электрическим питанием видится как заманчивая перспектива благодаря его небольшим размерам, отработанной технологии изготовления и широкой распространенности, хотя особенности режима работы масс-фильтра — невысокая разрешающая способность, низкая чувствительность и небольшой массовый диапазон — значительно ограничивают сферы применения такого прибора. Для повышения характеристик масс-фильтра было предложено использовать статическое магнитное поле. В работах [1, 2] представлены результаты исследования влияния однородного магнитного поля на работу квадруполя, которые демонстри-

---

Голиков Юрий Константинович, профессор.  
Краснова Надежда Константиновна, доцент.  
Соловьёв Константин Вячеславович, доцент.  
Ершов Тимофей Дмитриевич, аспирант.  
С.-Петербургский политехнический университет.  
Россия, 195251, С.-Петербург, ул. Политехническая, 29.  
Тел. (812) 552-75-16. E-mail: n.k.krasnova@mail.ru  
Николаев Валерий Иванович, заместитель технического директора.  
Елохин Владимир Александрович, технический директор.  
ОАО "Научные приборы".  
Россия, 198103, С.-Петербург, Рижский пр., 26.  
Статья поступила в редакцию 18 ноября 2009 г.

руют его эффект, поскольку увеличивается разрешение масс-сепаратора. Однако в целом эти работы не дают полной картины: как влияет магнитное поле, а значит, и как им можно управлять.

Если же приложить на обычный квадрупольный тракт достаточно сильное и сугубо неоднородное поле, то удастся в два—три раза увеличить разрешающую способность и пропускание масс-анализатора.

Этот эффект был впервые обнаружен В. И. Николаевым, и на его основе был предложен и запатентован новый способ разделения ионов по массам [3]. Природа этого явления весьма сложна и не укладывается в рамки классической теории Пауля квадрупольного масс-спектрометра и, более того, для его объяснения не удастся применить стандартные методы электронной оптики. Причина состоит в том, что сила этого эффекта тесно связана с геометрией распределения неоднородных магнитных полей и проявляется в широком диапазоне вариаций величины и структуры поля.

### Влияние магнитного поля на работу квадрупольного

#### Однородное магнитное поле

Для того чтобы найти качественное и количественное объяснения указанному эффекту, авторами было проведено массивное компьютерное моделирование ситуации: квадруполь в однородном магнитном поле, ориентированном вдоль оси квадрупольного тракта, поперек нее и по касательной и заполняющем весь тракт или его часть. Обнаружились совершенно новые статические режимы, которые можно положить в основу конструкции масс-анализаторов, обобщающих идею фильтра Вина. Следует отметить линейность уравнений движения в этом случае, и потому можно расширить границы теории Пауля.

Проведенное исследование зон устойчивости показало [4], что магнитное поле управляет острой вершиной треугольника устойчивости на диаграмме Матве. Этим обстоятельством вполне можно объяснить и сужение пика данной массы на выходе из анализатора, и повышение разрешающей способности прибора. Однако это оказалось достижимо при наличии поля на всей длине канала, причем значительной величины, что не адекватно отражает эффект, зафиксированный В. И. Николаевым, поэтому следующим шагом был переход к неоднородным магнитным полям.

#### Неоднородное магнитное поле

В этом случае ситуация меняется принципиально. Во-первых, пропадает каноническое пред-

ставление о зонах устойчивости, не зависящих от начальных данных, каковые возникают в линейных дифференциальных уравнениях. Во-вторых, для сильных неоднородностей уравнения движения сугубо нелинейны, и зоны устойчивости определяются не только выбором электрических параметров квадрупольного тракта, но и структурой ансамбля начальных данных движения на входе в анализатор. Кроме того, обнаруживается существенная зависимость названного эффекта от локального расположения неоднородностей магнитного поля и скорости пространственного изменения величины индукции.

Электрические поля, не зависящие от времени, подчиняются условию  $\text{rot } \vec{E} = 0$ , и потому в вакууме всюду описываются однозначными гармоническими (лапласовыми) функциями. Магнитные поля вне областей, занятых токами, также безвихревые ( $\text{rot } \vec{B} = 0$ ) и могут представляться посредством потенциала  $\psi(x, y, z)$ . Однако по своей физической природе силовые линии магнитного поля всегда замкнуты в силу равенства  $\text{div } \vec{B} = 0$  и, следовательно, скалярный магнитный потенциал вполне может быть многозначной гармонической функцией.

В области, занятой токами с плотностью  $\vec{j}(x, y, z)$ , поле подчиняется уравнению  $\text{rot } \vec{B} = \vec{j}$ , и внутренний потенциал можно связать с уравнением Пуассона.

Для постоянных магнитов нет той подвижности источников поля, таких как заряды в проводящих средах, поэтому здесь более естественным является физическое понятие распределенных магнитных масс. По существу это могут быть "размазанные" по всему объему вещества домены с определенной плотностью либо электрические токи. Так или иначе, постоянный магнит — это всегда кусок магнитного материала определенной геометрической формы, из которого выходят силовые линии и в него же возвращаются.

На расстояниях порядка нескольких размеров магнита поле устроено по образу и подобию простого электрического диполя. В ближней зоне, прилегающей к поверхности магнита, поле может быть очень сложным, и хотя оно в принципе описывается гармоническим потенциалом, сказать что-либо определенное о структуре поля на основании знания формы магнита никак нельзя, ибо внешняя поверхность не является эквипотенциальной для магнитного потенциала  $\Psi(x, y, z)$ .

Удобным с точки зрения математического конструирования самого поля и магнитного потенциала и в то же время содержательным по физической наглядности следует признать суммирование

неких распределений простых диполей с заданной объемной плотностью. Эти диполи находятся внутри магнитных масс. Они могут иметь фиктивный математический смысл, но иногда их можно связать с реальным распределением доменов либо с распределением токов.

Таким образом, мы представляем простейшую модель неоднородного магнитного поля как комбинацию двух кулоновских центров с противоположными зарядами большой величины, расположенными близко друг от друга.

### Моделирование режимов работы квадрупольного масс-спектрометра

Сложность этой математической модели, учитывающей неоднородный характер магнитного поля, не позволяет сделать достаточно объективными и верными прогнозы на основе чисто аналитических подходов, поэтому были использованы компьютерные стратегии.

Чтобы оценить эффективность работы масс-фильтра, рассчитывалась функция пропускания прибора, в основе которой заложен расчет ансамбля траекторий частиц в рамках конкретной конструкции с заданными начальными данными. Функция пропускания в нашем моделировании предполагалась как доля прошедших через квадрупольный канал частиц (т. е. невылетевших за границы канала) от общего числа частиц, испускаемых источником в определенном диапазоне при фиксированном соотношении значений электрического питания, подаваемого на стержни.

Для упрощения процедуры расчета однородный точечный монохромный источник ионов расположен на оси масс-фильтра в плоскости входной диафрагмы радиусом 2 мм, имеющей апертурный угол  $2^\circ$ . Размытием пакета частиц по времени пренебрегли, считая, что частицы влетают только в нулевую фазу высокочастотной составляющей поля. За основу квадрупольного масс-анализатора был взят реальный прибор, длина канала которого 123 мм, диаметр стержней 6,3 мм, диаметры входной и выходной диафрагмы 2 мм и частота электрической составляющей поля 2 МГц.

Расчет ансамбля траекторий проводился численным методом решения системы дифференциальных уравнений. Уравнения движения частиц записывались в безразмерной форме. Переход к безразмерным координатам и времени осуществлялся путем выбора следующих размерных величин:  $l$  — характерная длина (суть радиус квадрупольного канала, мм);  $T$  — характерное время (здесь — период частотной составляющей электрического поля), выраженное в единицах времени;  $\Phi_0, \Phi_1$  — значения электрического поля, В;  $B_0$  — характерное значение магнитного поля (на пример, максимальная величина), Тл.

В таком случае обратный переход от безразмерной модели к реальной можно осуществить, если воспользоваться следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} X &= l \cdot x, \quad Y = l \cdot y, \quad Z = l \cdot z, \\ t &= T \cdot \tau, \\ \Phi &= (\Phi_0 + \Phi_1 \cdot \cos(\tau)) \cdot (x^2 - y^2), \\ \vec{B} &= B_0 \cdot \vec{b}, \end{aligned}$$

где  $X, Y, Z$  — реальные декартовы координаты;

$t$  — время;

$\Phi$  — электрическое поле квадрупольного масс-анализатора, В;

$\vec{B}$  — магнитное поле, Тл.

Одна серия численных экспериментов состояла в том, чтобы выяснить, какой эффект производит один магнитный диполь, установленный на границе канала в зависимости от: а — местоположения по отношению ко входу/выходу; б — его силы; в — ориентации (вдоль канала или в поперечной плоскости).

Магнитное поле задавалось через скалярный потенциал

$$\vec{B} = -\nabla\Psi.$$

Если диполь ориентирован вдоль оси квадрупольного канала, то магнитный потенциал имеет вид

$$\Psi_1(x, y, z) = \frac{Q(z - z_c)}{\left[ (x - x_a)^2 + (y - y_b)^2 + (z - z_c)^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad (1)$$

где  $Q$  — весовой коэффициент;

$x_a, y_b, z_c$  — координаты местоположения диполя.

При другой ориентации в поперечном направлении

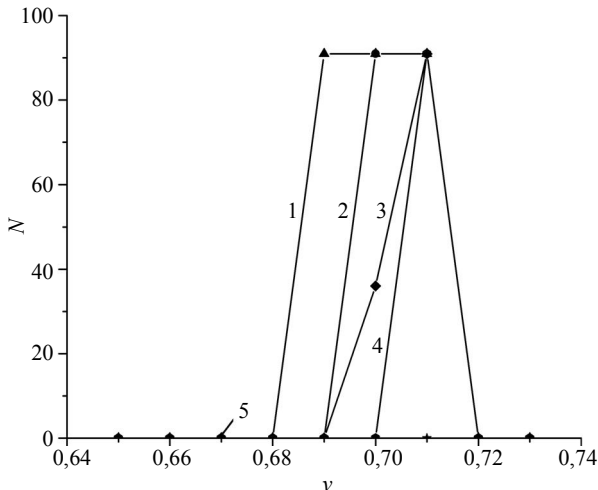
$$\Psi_2(x, y, z) = \frac{Q(x - x_a)}{\left[ (x - x_a)^2 + (y - y_b)^2 + (z - z_c)^2 \right]^{\frac{3}{2}}}. \quad (2)$$

Тогда уравнения движения ионов в квадрупольном масс-анализаторе с магнитным потенциалом запишутся в виде

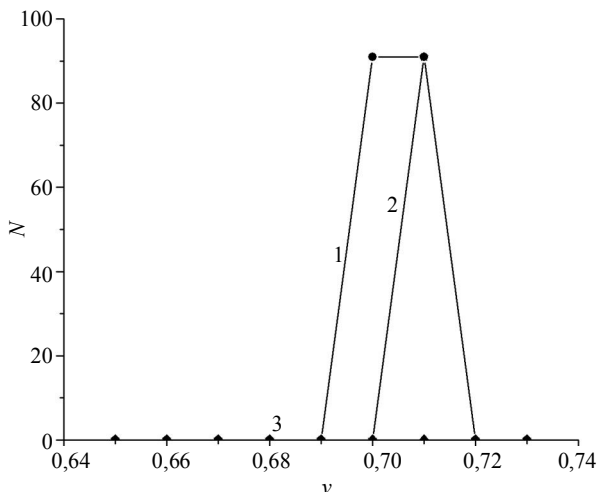
$$\begin{cases} \ddot{x} = -[\mu + \nu \cos(\tau)]x - \lambda \left( \frac{\partial \Psi}{\partial z} \dot{y} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \dot{z} \right), \\ \ddot{y} = [\mu + \nu \cos(\tau)]y - \lambda \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} \dot{z} + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \dot{y} \right), \\ \ddot{z} = -\lambda \left( \frac{\partial \Psi}{\partial y} \dot{x} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \dot{y} \right), \end{cases}$$

$$\mu = \frac{2q\Phi_0 T^2}{m l^2}, \quad \nu = \frac{2q\Phi_1 T^2}{m l^2}, \quad \lambda = \frac{qB_0 T}{m}.$$

На рис. 1 представлены результаты выполненного компьютерного моделирования. Увеличение силы диполя  $Q$ , ориентированного в поперечной плоскости (2), приводит к дискриминации масс и, следовательно, к увеличению разрешающей способности — функция пропускания становится уже. Если сместить область неоднородного поля вдоль канала ближе к началу, то эффект влияния сохранится без заметных изменений (рис. 2).



**Рис. 1.** Функция пропускания квадрупольного масс-анализатора, помещенного в поле магнитного диполя, расположенного в точке (1, 0, 22) и ориентированного в поперечной по отношению к каналу плоскости, в зависимости от силы диполя  $Q$ :  
1 — 0,01; 2 — 0,02; 3 — 0,025; 4 — 0,03; 5 — 0,04



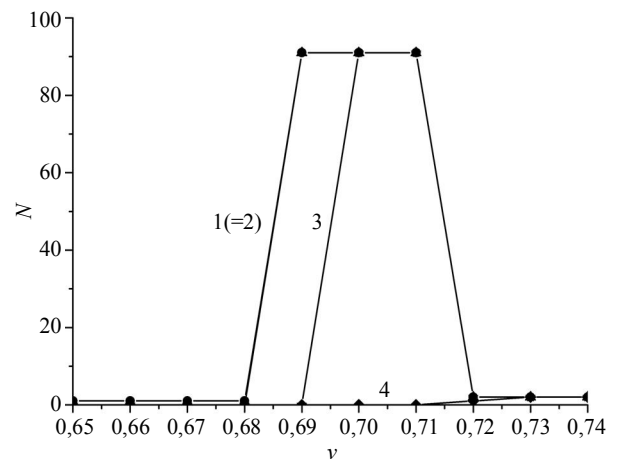
**Рис. 2.** Функция пропускания квадрупольного масс-анализатора, помещенного в поле магнитного диполя, расположенного в точке (1, 0, 12) и ориентированного в поперечной по отношению к каналу плоскости, в зависимости от силы диполя  $Q$ :  
1 — 0,02; 2 — 0,03; 3 — 0,04

Магнитный диполь, ориентированный вдоль квадрупольного тракта (1), при всех прочих равных условиях оказывает меньшее воздействие.

В дальнейшем в целях создания более однородной области внутри квадрупольного канала

просчитывалась модель с двумя диполями, которая составляла комбинацию из диполей вида (1) или (2); вариантов конструкций в этом случае становится больше, поскольку в паре сила диполей может ослабляться либо взаимно усиливаться.

Наибольший эффект влияния неоднородного магнитного поля достигается, если диполи расположены на границе квадрупольного канала симметрично относительно оси  $y$ , и они сонаправлены (рис. 3).



**Рис. 3.** Функция пропускания квадрупольного масс-анализатора, помещенного в поле двух магнитных диполей, расположенных симметрично относительно плоскости  $y = 0$  в точках (1, 0, 22) и (-1, 0, 22) и ориентированных в поперечной по отношению к каналу плоскости, в зависимости от силы диполя  $Q$ :  
1 — 0; 2 — 0,005; 3 — 0,01; 4 — 0,02

Еще более интересной становится картина, когда используются две пары диполей; в каждой паре диполи вновь симметричны относительно оси  $y$  и локализованы в некоей точке на границе канала, но силы могут как складываться, так и вычитаться. Общий магнитный потенциал может быть выражен как

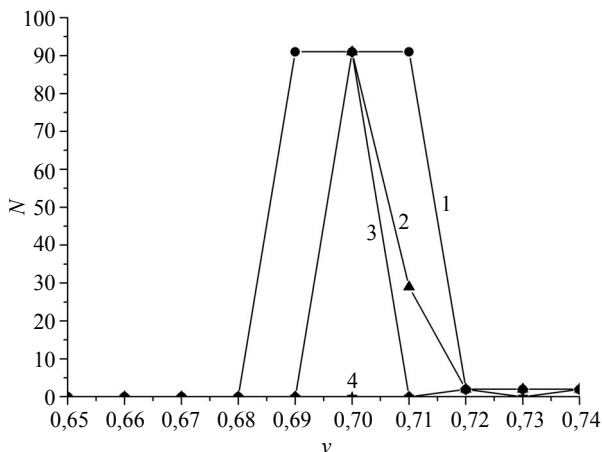
$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x, y, z) + \Psi_2(x, y, z). \quad (3)$$

Например, если диполи ориентированы в поперечной по отношению к каналу плоскости, составляющие магнитного потенциала (3) имеют следующий вид:

$$\Psi_1(x, y, z) = Q \left[ \frac{x - x_a}{\left[ (x - x_a)^2 + (y - y_b)^2 + (z - z_{c1})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \pm \frac{x + x_a}{\left[ (x + x_a)^2 + (y - y_b)^2 + (z - z_{c1})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right];$$

$$\Psi_2(x, y, z) = Q \left[ \frac{x - x_a}{\left[ (x - x_a)^2 + (y - y_b)^2 + (z - z_{c2})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \pm \frac{x + x_a}{\left[ (x + x_a)^2 + (y - y_b)^2 + (z - z_{c2})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right]$$

Имея несколько параметров варьирования — силу диполей, их местоположение и направленность, мы можем добиться увеличения разрешающей способности при малых значениях весовых коэффициентов дипольных пар. На рис. 4 приведены результаты моделирования, когда магнитные диполи ориентированы в поперечной плоскости и в обеих парах диполи усиливают друг друга. Гораздо меньший эффект наблюдается, если дипольные моменты магнитных неоднородностей совпадают с направлением оси квадрупольного тракта и их силы вычитаются (рис. 5).



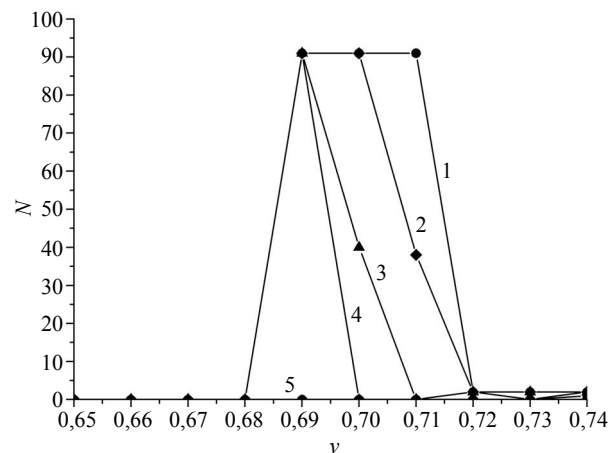
**Рис. 4.** Функция пропускания квадрупольного масс-анализатора, помещенного в поле четырех магнитных диполей, расположенных в точках  $(1, 0, 10)$ ,  $(-1, 0, 10)$ ,  $(1, 0, 34)$ ,  $(-1, 0, 34)$  и ориентированных в поперечной по отношению к каналу плоскости, в зависимости от силы диполя  $Q$ :  
1 — 0,007; 2 — 0,009; 3 — 0,01; 4 — 0,013

### Заключение

Сконструирована новая модель неоднородного магнитного поля, в которой главным "кирпичиком" было взято поле электрического диполя, потенциал которого легко интерпретировать как магнитный потенциал коротенького сильно намагниченного стерженька. Получается сильно неоднородное локально сосредоточенное магнитное поле любой заданной интенсивности. С введением

нескольких диполей эффект с повышением разрешения стал более ярким, таким образом, суммарный потенциал нужно строить из диполей, которые обеспечат наилучшую работу квадруполя. В то же время многовариантность таких конструкций не позволяет утверждать, что мы близки к максимуму эффекта. Скорее надо говорить о приемлемых параметрах с точки зрения масс-анализа и о технологичности реализации найденных магнитных потенциалов с помощью намагниченных масс. Этот вопрос относится к кругу обратных задач теории потенциала, включая гравитирующие, магнитные и электрические массы, и требует дальнейшего плодотворного исследования.

Авторы сознательно уклонились от стандартных пакетов программ расчета магнитных полей с произвольной конфигурацией магнитов, поскольку нет логических оснований выбора этих конфигураций. Именно особенности являются своеобразным "паспортом" полевых структур, и вариация их параметров является определяющим фактором.



**Рис. 5.** Функция пропускания квадрупольного масс-анализатора, помещенного в поле четырех магнитных диполей, расположенных в точках  $(1, 0, 10)$ ,  $(-1, 0, 10)$ ,  $(1, 0, 34)$ ,  $(-1, 0, 34)$  и ориентированных вдоль канала, в зависимости от силы диполя  $Q$ :  
1 — 0,015; 2 — 0,017; 3 — 0,018; 4 — 0,02; 5 — 0,04

Наши модели вполне оправдали интуитивные физические послышки В. И. Николаева и подтвердили эффект улучшения квадрупольных масс-спектрометров с помощью неоднородных магнитных полей.

### Литература

1. Павленко Ю. Г., Торопова А. И. // Радиотехника и электроника. 1996. Т. 41. № 4. С. 508.
2. Tunstall J. J. et al. // Vacuum. 1999. V. 53. P. 211.
3. Николаев В. И. Способ разделения ионов по массам: Патент МПК 7 G 01 N 30/72; дата приоритета 15.06.99.
4. Голиков Ю. К. и др. // Прикладная физика. 2006. № 3. С. 78.

## Dynamic quadrupole mass analyser in inhomogeneous magnetic static fields

*Yu. K. Golikov, N. K. Krasnova, K. V. Solovjev, T. D. Ershov*

St.-Petersburg State Polytechnic University, 29 Polytechnical str., St.-Petersburg, 195251, Russia

E-mail: n.k.krasnova@mail.ru

*V. I. Nikolaev, V. A. Elochin*

Scientific Instruments, Inc., 26 Riga av., St.-Petersburg, 190103, Russia

*In the article an influence of inhomogeneous static magnetic field upon characteristics of quadrupole mass analyser. To design singularities formed by static magnets it is defined a scalar magnetic potential as in electric fields. It is considered a magnetic dipole as a combination of two Coulomb's reverse charges placed near each other. Numerical modelling with one, two and four dipoles is carried out. The obtained results show that under certain parameters resolution of quadrupole mass analyser is increased in two times.*

PACS: 07.75.+h; 41.90.+e; 82.80.Ms

*Keywords:* mass analysis, quadrupole mass analyzer, inhomogeneous static magnetic field, stability zones, magnetic potential, magnetic dipole, dimensionless motion model.

Bibliography — 4 references.

*Received 18 November 2009*