

Статическая гармонизация динамически гармонизированной ячейки

Е.В. Жданова^{1,3}, Ю.И. Костюкевич^{1,2,3,4}, Е.Н. Николаев^{1,2,3,4}

¹Институт энергетических проблем химической физики РАН

²Институт биохимической физики им. Эмануэля РАН

³Московский физико-технический институт

⁴Сколковский институт науки и технологий

Использование ловушки с динамической гармонизацией (с $N=8$) приводит к увеличению разрешающей способности масс-спектрометрии ионного циклотронного резонанса с преобразованиями Фурье практически на порядок величины. Разрешающая способность около 10 миллионов сегодня достижима в обычном эксперименте в приборах ПФ ИЦР нового поколения с магнитными полями 7 Т и выше.

Динамическая гармонизация ловушки ИЦР ПФ - это процесс достижения гиперболического поля внутри ячейки путем усреднения распределения потенциала вдоль циклотронной траектории. Если усреднение распределения потенциала вдоль смещенной траектории удовлетворяет уравнению Лапласа и совпадает с распределением потенциала от гипербоидальных электродов, то ячейка считается гармонизированной. Стандартная гармонизированная ловушка имеет симметрию C_N (N - число сегментов) и чистое циклотронное движение вокруг геометрической оси ячейки позволяет провести усреднение и считать симметрию усредненного поля цилиндрической.

Не ясным остается поведение ионов, получаемых вне оси ловушки в методах мс/мс. При их возбуждении не из центра ловушки их движение не является цилиндрически симметричным и усредненное по траектории этого движения поле может не быть гипербоидальным. В связи с этим возникает вопрос о степени статической гармонизации, т.е. насколько статическое (не усредненное) поле ловушки отличается от гиперболического в рабочем объеме ловушки при заданном числе N гармонизирующих электродов.

Работа состояла в том, чтобы определить объем ловушки, в котором поле статически гармонизировано - то есть не отличается от аналитического гипербоидального без дополнительного усреднения по траектории при заданном количестве электродов и ионы в облаке при движении в пределах этого объема не теряют фазу и не образуют комет. Для ответа на эти вопросы были использованы различные подходы к моделированию электрического поля для ячейки с различным числом сегментов (N). Электрическое поле, индуцированное электродами ячейки было рассчитано с помощью метода конечных разностей для уравнения Лапласа и с помощью программы SIMION (версия 8.1) и метода конечных разностей в радиальных координатах. Анализ расфазировки ионного облака был проведен с помощью скриптов в программном пакете Matlab.

В результате мы установили, что, как и следовало ожидать, при увеличении числа сегментов растет объем статически гармонизированного поля внутри ячейки. Также ионы в облаках при движении в пределах области статической гармонизованности не испытывают большого расплывания "по фазе" из-за неоднородностей электрического поля в течение времени детектирования, соответствующего разрешающей способности 10 000 000 (моделирование проводилось без учета ион-ионного взаимодействия).