

УДК 531.75

Т.А.Семенов (6 курс, каф. ФЭ), Ю.О.Цыбин, к.ф.-м.н., докторант

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИНЖЕКЦИИ ИОНОВ В ЯЧЕЙКУ ПЕННИНГА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

ABSTRACT: The 3D modelling of ion trap (Penning-cell) with electric and magnetic fields as unit of FT-ICR MS was performed. The influence of the coordinates of the ion's entrance point on the magnetron and cyclotron radius was studied.

В работе проведено исследование движения молекулярных ионов в ячейке Пеннинга в сильном магнитном поле. Данная ячейка являлась ионной ловушкой-анализатором масс-спектрометра на ионно-циклотронном резонансе с преобразованием Фурье (ИЦР ФП МС). Аналитические возможности таких приборов чрезвычайно высоки, но существенно зависят от эффективности управления движением ионов. Детальное понимание процессов, происходящих в ловушке ИЦР ФП МС, необходимо для решения ряда задач. Актуальными являются, например, задачи аксиализации возбужденных ионов (возврата ионов в приосевую область после реализации цикла измерений), оптимизации взаимодействия группы исследуемых ионов с электронами и фотонами и другие.

Исследования проводились путем компьютерного моделирования в среде симулятора SIMION 3D 7.0. Была создана трехмерная компьютерная модель ловушки, имеющая реальные геометрические конфигурацию и размеры, распределения электрического и магнитного полей. Рассматривалось влияние смещения точки влета группы ионов от оси системы на вид траекторий, магнетронный и циклотронный радиусы вращения ионов.

Результатом явились графики траекторий, полученные для набора параметров (различные смещения точки влета от центра, значения удельной массы и скорости ионов). Программа SIMION 3D 7.0 была модифицирована с помощью дополнительного программного приложения, с помощью которого из пакетов графических траекторий определены численные значения магнетронных и циклотронных радиусов. Также была разработана концепция повышения точности модели, включающая создание программного приложения, обеспечивающего возможность аналитического задания конфигурации полей.

Осуждаются полученные результаты, которые представляются полезными для оптимизации ионных ловушек в ИЦР ФП МС и разработки новых методов анализа молекулярных ионов.