

УДК 541.128

Т.А.Семенов (5 курс, каф. ФЭ), Ю.О.Цыбин, к.ф.-м.н., инж.

АНАЛИЗ ПРОЦЕССА ИНЖЕКЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ В ЛОВУШКУ ПЕННИНГА

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.

Исследование строения и свойств макромолекул является одним из важнейших направлений современной науки. Структурный анализ макромолекул методами масс-спектрометрии получил интенсивное развитие в результате ряда открытий 1980-х годов в области мягкой ионизации крупных молекул. В настоящее время наиболее высокие аналитические параметры измерений обеспечивает масс-спектрометр на ионном циклотронном резонансе с преобразованием Фурье наведенных токов молекулярных ионов в ловушке Пеннинга, находящейся в сильном магнитном поле (до 10 Тл). Детальное понимание процессов, происходящих в ловушке Пеннинга, необходимо для решения ряда задач и совершенствования масс-спектрометрического анализа. В данной работе проведено исследование процесса инжекции молекулярных ионов в ловушку Пеннинга при использовании метода отклоняющих потенциалов.

Исследования проводились путем компьютерного моделирования в среде симулятора SIMION 3D 7.0. Создана трехмерная компьютерная модель ловушки Пеннинга, имеющая близкие к экспериментальным геометрические конфигурацию и размеры, распределения электрического и магнитного полей. Определяли магнетронный и циклотронный радиусы вращения ионов, захваченных в ловушку в зависимости от параметров инжекции: точки влета ионов, амплитуды и длительности прикладываемого отклоняющего потенциала, значения удельной массы и начальной скорости ионов. Значения магнетронных и циклотронных радиусов вычисляли с помощью специально разработанной программы с использованием графического пакета Origin.

В работе обсуждаются полученные результаты, которые представляются полезными для оптимизации ионных ловушек в масс-спектрометрии на ионном циклотронном резонансе с преобразованием Фурье и разработки новых методов анализа молекулярных ионов. Полученные зависимости положения молекулярных ионов предполагается использовать для объяснения экспериментально наблюдаемых зависимостей эффективности фрагментирующего взаимодействия молекулярных ионов с пучками фотонов и электронов.