

三角形电极离子阱单向出射及高阶场影响的理论模拟研究

姚如娇^{1,2} 何洋^{1,2} 齐晓军^{1,2} 肖育^{1,2}

(1. 上海卫星装备研究所, 上海, 200240; 2. 上海裕达实业有限公司, 上海, 200240)

摘要:为了扩展离子阱质谱仪在航天领域中的应用范围, 本文利用模拟研究方式来提高三角形电极线性离子阱 (Triangular-electric linear ion trap, TeLIT) 的离子检测效率。本文利用模拟软件 SIMION 和 AXSIM 进行理论模拟, 采用施加不对称射频电压的方式, 研究 TeLIT 离子单向出射, 并通过改变电极角度 α 来探究高阶电场成分对离子单向出射性能的影响。实验结果表明: 当 α 取目前报道的最优参数 140° 时, 在射频电压差 $\Delta=20\%$ 处, 获得的离子单向出射率可达 89.5% 。而当 $\alpha=135^\circ$ 时, 获得的最高离子单向出射效率接近 95% , 优于 TeLIT 最优参数 $\alpha=140^\circ$ 时的出射率。此外, 本文还讨论了不同 α 情况下, 获得最高出射效率时, 模拟质谱峰的质量分辨率, 结果表明扫描速率约为 $1\,500\text{ Th/s}$ 时, $\alpha=135^\circ$ 时获得的质量分辨率可达 $2\,500$ 。

关键词: 三角形电极线性离子阱; 离子单向出射效率; 高阶电场; 质量分辨率

中图分类号: O657.63

文献标志码: A

文章编号: 1005-2615(2018)S2-0063-06

Theoretical Simulation for Ion Directional Ejection and Higher Fields Effects in Triangular-Electric Linear Ion Trap

YAO RuJiao^{1,2}, HE Yang^{1,2}, QI XiaoJun^{1,2}, XIAO Yu^{1,2}

(1. Institute of Spacecraft Equipment, Shanghai, 200240, China;

2. Shanghai Yuda Industrial Limited Company, Shanghai, 200240, China)

Abstract: In order to extend the application range of linear ion trap spectrometer in aerospace field, the ion ejection efficiency of Triangular-electric linear ion trap (TeLIT) is improved by simulation studies in the research. Asymmetric radio frequency (RF) is applied on the electrodes to investigate the ion directional ejection by simulation software SIMION and AXSIM, and the influence of higher fields on ion directional ejection efficiency is studied by changing the angles of triangular electrodes. It's turned out that, when α is adopted the optimal parameter reported of 140° , the ion directional ejection efficiency could reach 89.5% with asymmetric RF voltage ratio of 20% . When $\alpha=135^\circ$, the ion directional ejection efficiency could be up to 95% , which is higher than the ejection efficiency of TeLIT with $\alpha=140^\circ$. What's more, the highest ion ejection efficiency with different α is investigated and the mass resolution of each mass spectrum is calculated. It shows that a mass resolution of $2\,500$ could be obtained with $\alpha=135^\circ$ when the scan rate is $1\,500\text{ Th/s}$.

Key words: triangular-electric linear ion trap (TELIT); ion directional ejection efficiency; higher fields; mass resolution

基金项目: 上海市经济信息委员会 2015 年上海市军民结合 (专项 (2015)413 号) 资助项目。

收稿日期: 2018-03-23; **修订日期:** 2018-05-30

通信作者: 肖育, E-mail: xiaoyush812@126.com。

引用格式: 姚如娇, 何洋, 齐晓军, 等. 三角形电极离子阱单向出射及高阶场影响的理论模拟研究[J]. 南京航空航天大学学报, 2018, 50(S2): 63-68. YAO RuJiao, HE Yang, Qi XiaoJun, et al. Theoretical simulation for ion directional ejection and higher fields effects in triangular-electric linear ion trap[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2018, 50(S2): 63-68.

质谱仪作为现代分析系统的重要代表之一,是一种用于检测物质化学成分的高灵敏度、高分辨率的仪器。近年来,质谱仪在现代社会中的作用愈加凸显,其应用领域随着时代的进步不断扩展,已经涉及到医学、地质、化学、环境检测和航空航天等众多领域。

小型化便携式质谱仪具有体积小、质量轻和功耗低等优点,正好满足载人航天以及长期宇宙飞行有效载荷越低越好的要求,被广泛应用于航天器舱内空气监控和医学气体监测、舱内污染物监测、航天员出舱活动、地面模拟测试以及其他宇宙探索等方面^[1]。质量分析器是质谱仪的核心部件之一,其中线性离子阱质量分析器因其具有结构简单、对真空度要求低等特点,成为小型化便携式质谱仪的首选。

线性离子阱质量分析器(Linear ion trap, LIT)由 Schwartz 等^[2]于2002年首次提出,其结构主要由4个双曲面的柱状电极和2个平面端盖电极围成。与传统的三维离子阱(Paul trap)^[3]相比,LIT具有较优的离子存储能力,且对外部离子源注入的离子的束缚效率较高,因而得到了较为广泛的应用。然而,LIT电极为双曲面结构,对机械加工和装配精度的要求极高,导致其造价成本高,难以推广和普及,同时也极其不利于离子阱的小型化研究^[4]。因此,LIT双曲面电极结构简化的研究成为人们关注的热点,其中就包括三角形电极线性离子阱(Triangular-electric linear ion trap, TELIT)的研究。

TELIT由 Sudakov 等^[5]通过模拟验证首次提出,报道得出当场半径为5 mm,电极角度为 140° 时,内部电场主要成分为四极场 A_2 并伴随少量的高阶场成分,TeLIT的质量分析性能较为优良。Xiao 等^[6]根据上述结构参数,对TeLIT进行加工装配,通过实验得出:当扫描速率为1 307 Th/s时,质荷比为609的离子质量分辨率可达1 500,充分证实了在电极形状改动较大的情况下,TeLIT仍具有优秀的质量分析能力。因此TeLIT也成为简化电极结构线性离子阱领域的研究热点,出现了较多相关报道。姚如娇等^[7]研究了场半径比(r_x/r_y)对TeLIT分析性能的影响,杨海洋等^[8]还将TeLIT与圆环离子阱结合,同样获得较为优秀的质量分析结果。

通常,离子在线性离子阱中出射方式为“双向出射”,即朝着离子振动的两个相反方向出射^[2]。检测离子时需离子阱两侧各安装一个离子通道倍增器用于检测离子信号,这就增加了质谱仪器结构的复杂性,同时也增加了质量分析的成本,局限

了线性离子阱在质谱仪小型化领域的发展。由于结构简化和降低检测成本方面的要求,一般只在其中一侧安装一个离子通道倍增器用于离子检测,这就导致了检测的效率和准确度都会有所降低。1999年,Splendore 等^[9]提出了一种新的离子出射方式-单向出射,通过对三维离子阱的环电极上施加额外的辅助电压产生不平衡的射频场,最终使得离子朝着同一个方向出射,极大地提升了离子的出射效率。在线性离子阱方面,张在越等^[10]对印刷电路板分压离子阱的离子单向出射性能进行了模拟理论研究,通过对两组离散电极施加不同的射频分压比,最终得出射频分压比为20%时,获得最高可达90%的离子单向出射效率,同时分辨率可达2 700。

离子阱内部高阶场的分布是决定离子阱分析性能的关键因素,直接影响离子在阱内的运动轨迹与出射情况^[11]。离子在高阶场的作用下会发生非线性共振,这会导致质谱峰形畸变、质量漂移和质量分辨率下降等问题^[12],但是恰当比例的电场成分组合能降低这种性能损失,甚至能提高离子阱特性的分析性能^[13]。之前也已经有较多关于这方面的报道,Michaud 等^[11]报道称在四极场中添加4%的 A_4 部分可提高串联质谱(MS/MS)的效率。Wang 等^[14]在研究 A_3 和 A_4 的耦合作用的理论过程中,分析了两者对离子单向出射性能的影响,结果表明 A_3 和 A_4 所占比例对离子单向出射效率具有较大的影响。Splendore 等^[9]和张在越等^[10]都是通过改变离子阱内部电场比例最终实现离子单向出射。

鉴于TeLIT优异的分析性能,为了进一步提高其离子检测效率以扩大其应用范围,本研究采用施加不对称的射频电压方式,研究TeLIT的离子单向出射。同时,通过改变电极角度以引入不同占比的高阶场成分,分析高阶场对TeLIT单向出射性能的影响。

1 实验部分

1.1 三角形电极离子阱模型结构

本文利用模拟软件SIMION 8.0建立TeLIT的径向截面模型,如图1所示,该模型的选取基于Xiao报道的实验数据^[5-6],简化了离子阱基座的部分,其中场半径 $r_0=5$ mm,电极角度 α 的选取是影响内部电场分布的关键因素之一。离子阱电极上不可避免开设的离子出射槽会引起内部电场畸变,离子引出槽宽度 d 对TeLIT的性能影响较大。一般来说,引出槽宽度 d 越大,离子阱内部的电场畸变越严重,而 d 过小,又会影响离子的通过效率。

本文中设定 $d=0.4\text{ mm}$,此参数由本模拟实验获得,在确保离子通过率的同时,对离子阱内部电场造成的影响最低。图 1 中 O 为离子阱的几何中心; r_0 为电场半径; α 为三角形电极角度; d 为离子引出槽的宽度。

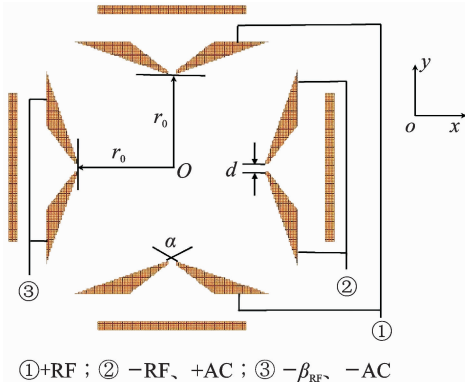


图 1 三角形电极离子阱的径向截面图

Fig. 1 Radial section of triangular electrode linear ion (TeLIT)

通常情况下,TeLIT 工作时,在两组电极上分别施加两组幅值相等、相位相反的射频 RF 信号以形成束缚离子的四极场。本文通过在 TeLIT 电极上施加不对称的射频 RF 信号实现离子单向出射,与张在越等^[10]研究的不同之处在于:本文仅改变其中一个电极上的射频电压幅值,施加方式更为简单,具体电压施加方式如图 1 所示:电极 1 和 2 上施加幅值相同,相位相反的射频电压 RF,电极 3 上施加射频电压 β_{RF} , β 为一个变量,其取值范围为 $(0,1]$,通过改变 β 值,实现施加不对称射频 RF 信号的目的。本文设定的离子出射方向为 x 方向,电极 2 和电极 3 上施加共振激发电压 AC。

施加不平衡的射频 RF 的目的就是为了在离子阱内部引入一定比例的高阶场成分,这将有利于实现离子单向出射。为了便于讨论,设定射频电压差为 $\Delta=1-\beta$,当 $\Delta>0$ 时,电极 3 上的电压小于其他电极上的电压,使得电场中心由离子阱原来的几何中心向电压小的方向偏移(即 x 的负方向),从而有利于离子往电极 3 方向的离子出射槽单向出射。高阶场具体所占比例对离子单向出射效果的影响也会在下面的实验中进行讨论。

1.2 TeLIT 内部电场计算

在二维线性离子阱中,离子阱内部任意一点 (x,y) 的电势可以表示为^[15]

$$\phi(x,y,t) = V_{rf} \operatorname{Re} \left(\sum_{N=2}^{\infty} A_N \left(\frac{x+iy}{r_0} \right)^N \right) \cos \Omega t \quad (1)$$

式中: V_{rf} 和 Ω 分别代表射频电压 RF 的幅值和频

率,Re 为多项式实部, r_0 为场半径, A_N 为相应多级场成分的大小。本研究中 TeLIT 内部的电场参数由 Pan33 软件计算得到,取样半径为场半径 r_0 ,即该软件对场中心到电极边缘的单位圆上的电势进行傅里叶变换,从而得到离子阱内部多级场成分数值。

在纯四极场中,离子的运动轨迹虽然复杂,但是在 x 方向和 y 方向的运动是独立的,而一旦内部电场存在高阶场成分,离子在 x 方向和 y 方向的运动轨迹会发生耦合,且离子的振动频率和稳定轨迹取决于初始状态。因此在高阶场中,离子的运动不遵循稳定图,其振动频率与振动的幅值相关。高阶场成分所占比例对离子单向出射性能造成的影响值得深入研究。

1.3 模拟方法

本研究采用“模拟射频扫描”方式^[7],射频电压 RF 信号为频率恒定的正弦信号,通过扫描 RF 电压的幅度实现质量分辨。所加的共振激发信号 AC 同为正弦信号,本文中 RF 频率固定设置为 1 MHz,RF 和 AC 的幅值具体取决于实验中的优化结果。

本仿真实验利用 AXSIM 完成质谱峰的模拟,模拟测试的样品离子质荷比分别为 609,610 和 611,每个离子各有 100 个,共 300 个,其初始位置随机分布在离子存储区域的中心附近,碰撞模式选择硬球碰撞模式。本文计算离子单向出射效率的方式为:打在 x 负方向接收电极上的离子数比上总离子数(300)。

2 结果与讨论

2.1 射频电压差 Δ 对离子单向出射性能的影响

本模拟实验中,电极角度 α 选取目前报道的最优参数 140° ,设置讨论的射频电压差 Δ 取值范围为 $[0,60\%]$,每 5%取一组数据,共计 14 组。不同 Δ 对应的高阶场变化趋势如图 2 所示。由图 2 可见,随着射频电压差 Δ 的逐渐增大,六极场 A_3 所占比例呈线性趋势增大,而八极场 A_4 和十极场 A_5 成分受 Δ 变化的影响较小,略微有些降低,再高阶次场同样没有显著变化。明显地,在射频电压差 Δ 逐渐拉大的过程中, A_3 的变化最为显著,具体对离子单向出射效率的影响可通过生成模拟质谱峰进一步分析。

质谱峰模拟过程中,扫描速率约为 1 500 Th/s,AC 频率设置为 0.32 MHz,其幅值为能够使 TeLIT 中所有离子完全出射的最小电压值。离子单向出射率与射频电压差 Δ 的关系如图 3 所示。由图 3 可见,当 $\Delta=0$ 时,即 TeLIT 电极上施加了

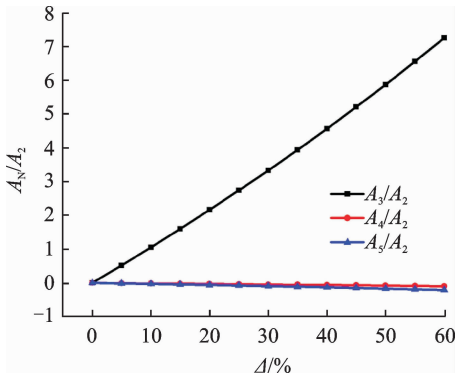


图2 不同射频电压差 Δ 情况下,高阶场与四极场比例 (A_N/A_2) 的变化趋势

Fig. 2 Multipole coefficients A_N/A_2 for different Δ

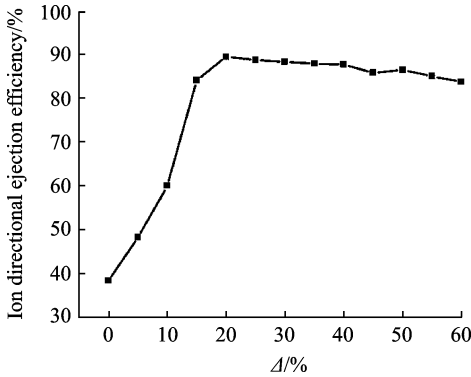


图3 离子单向出射效率与射频电压差 Δ 的变化关系

Fig. 3 Ion directional ejection efficiency as function of Δ

对称的射频 RF 信号,离子阱内部电场为较为完整的四极场,理论上离子在两个方向上的出射效率相同,皆为 50%。而在实际模拟过程中,不可避免有部分离子在出射过程中撞击到电极上湮灭而造成损失,此时离子在单个方向上的出射效率一般都低于 50%。

在 $\Delta < 20\%$ 的阶段,离子单向出射效率呈快速增长趋势,在 $\Delta = 20\%$ 处达到最高,接近 90%。而 $\Delta > 20\%$ 时,离子单向出射效率仍保持较高的水平,较 $\Delta = 20\%$ 处略微降低。结合内部电场变化趋势分析,显然地,六极场比例成分 A_3 的增加对离子单向出射效率的提升起到明显的促进作用,因为 A_3 成分会使得离子运动的中心发生偏移 (x 负方向),有利于离子的单向出射。而 $\Delta > 20\%$ 的部分,虽然离子单向出射效率较高,但分析结果中的质量分辨率逐渐下降,这可能是由于过大的射频电压差引入过多的不合理高阶电场成分,导致阱内电场畸变严重,从而损害了质量分析性能。

2.2 高阶场对离子单向出射效率的影响

在 TeLIT 最优的结构参数情况下,改变射频电压差 Δ 的值会影响六极场 A_3 的占比,从而对离子单向出射效率造成影响。然而,固定的电极结构

参数使得其他更高阶场所占比例并未随着 Δ 的变化而发生显著变化,无法探究其他高阶场与离子单向出射性能的关系。

考虑到 TeLIT 目前最优结构中的电极 α 角度为 140° ,本文还讨论了 α 为 135° 和 145° 时,随着 Δ 的变化,TeLIT 离子单向出射的情况。同样的, Δ 的取值范围为 $[0, 60\%]$,每 5% 取一组,一共 14 组。不同角度 α 对应的 TeLIT 结构中电场分布与 Δ 的关系如图 4 所示。

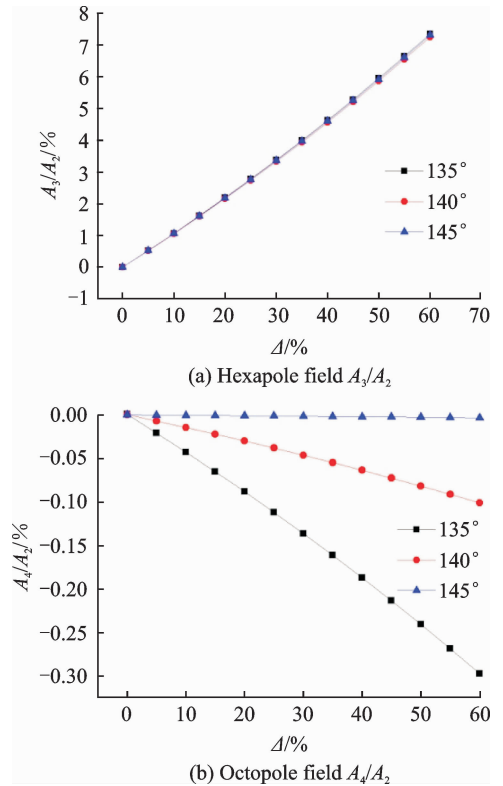


图4 不同角度 α 情况下,TeLIT 内部高阶场与射频电压差 Δ 的变化关系

Fig. 4 Multipole coefficients A_N/A_2 for Δ with different α

图 4(a) 中,3 条直线几乎重合,意味着电极角度 α 的变化对六极场成分 A_3/A_2 几乎没有影响,随着射频电压差 Δ 的变化, A_3 所占比例变化趋势和大小都一致。图 4(b) 为八极场 A_4 在不同角度 α 情况下与射频电压差 Δ 的变化关系。 $\alpha = 145^\circ$ 时, A_4/A_2 随着 Δ 的增大而略微减小,在 α 减小的情况下, A_4/A_2 随 Δ 增大而下降的趋势越明显。其余更高阶场的所占比例和变化趋势都较小,因此不进行相关讨论。

在 α 分别为 135° , 140° 和 145° 的情况下,离子单向出射效率与射频电压差 Δ 的关系如图 5 所示。

由图可见,3 组曲线的变化趋势基本相同。在射频电压差 Δ 为 0 时, α 在 135° , 140° 和 145° 情况下,离子单向出射的效率大致相同,都在 40% 附近。随着 Δ 的增大,离子单向出射效率逐渐上升,

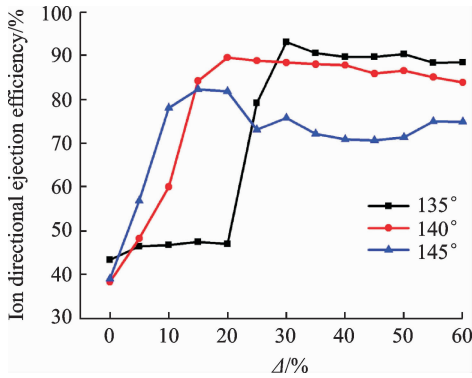


图5 α 分别为 135° 、 140° 和 145° 条件下,离子单向出射效率与射频电压差 Δ 的关系

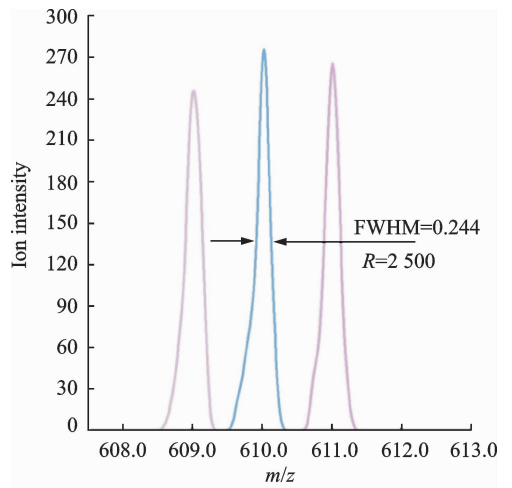
Fig. 5 Ion directional ejection efficiency for Δ with α of 135° , 140° and 145°

可以观察到, α 不同的情况下,达到最高出射效率对应的 Δ 值也不相同。图中, $\alpha=145^\circ$ 时, Δ 在15%处达到最高值82.2%, $\Delta=140^\circ$ 时, Δ 在20%处达到最高值89.5%,而 $\alpha=135^\circ$ 时, Δ 在30%处达到最高值93%。离子出射效率达到最高之后,不管是 135° 、 140° 还是 145° 对应的离子单向出射效率都维持一个较高的水平,较为稳定,受 Δ 变化的影响不大。

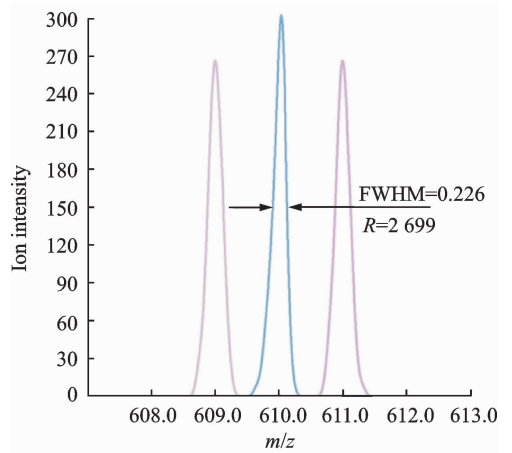
结合图4的电场分析可知,3组数据中, A_3/A_2 变化的大小和趋势一致,这部分决定了离子单向出射效率随着 Δ 变化的趋势是大体相同的。而 135° 时的离子单向出射效率最高,甚至优于在TeLIT的最优角度参数 140° 情况下的,这可能是因为当 $\alpha=135^\circ$ 时,离子阱内部具有较大比例的负值 A_1/A_2 部分,对 A_3 起到一定的修正和弥补的作用,从而改善过分增大 Δ 情况下离子单向出射的性能,这也是 $\alpha=135^\circ$ 条件下取得最高出射效率对应的 $\Delta=30%$ 大于 140° 条件下 $\Delta=20%$ 的原因。而 $\alpha=145^\circ$ 时,在 $\Delta=15%$ 处就达到了出射效率最高值,且最高值小于 140° 时的89.5%,这也反映了 A_4 过小,对 A_3 的修正作用越弱,离子单向出射性能较差。

2.3 质量分辨率

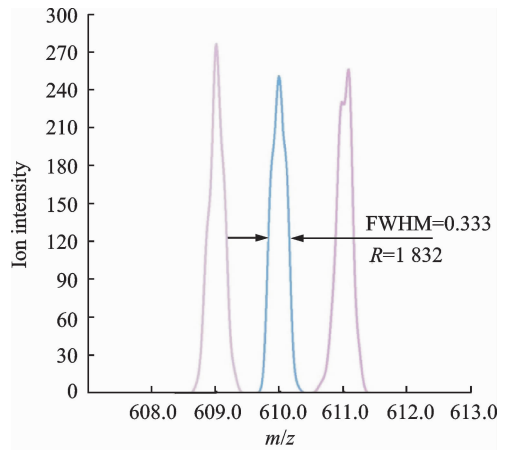
质量分辨率是离子阱分析性能的重要指标,通常被用来直观地评判质量分析结果的好坏。本文在研究不同电极角度的TeLIT的离子单向出射效率的同时,也分析了其在获得最高出射效率时,质量分辨率的优劣情况。图6分别为 $\alpha=135^\circ$ 、 140° 和 145° 时取得最高离子出射效率的模拟质谱峰图,对应的 Δ 分别为30%、20%和15%。FWHM为半峰宽(Full width half maximum),质量分辨率 R 由质荷比(m/z)/FWHM计算得到。由图6可见,扫描速率相同的情况下(约1500 Th/s), $\alpha=$



(a) 135°



(b) 140°



(c) 145°

图6 不同角度 α 情况下,获取最高离子单向出射效率时的模拟质谱峰

Fig. 6 Mass spectrum peaks with the highest ion directional ejection efficiency for different α

135° 时对应的模拟质谱峰离子出射效率最高值接近95%,对应的质量分辨率为2500,而 $\alpha=140^\circ$ 时对应的模拟质谱峰离子出射效率为最高值90%,其质量分辨率为2699。 $\alpha=135^\circ$ 时的质量分辨率略小于 $\alpha=140^\circ$ 时情况下的,这说明在追求极高离子单向出射效率的同时,不可避免地会引起质量分辨率的损失,这是由离子阱内部电场决定的,负值

A_4 成分的增大会影响离子分析的质量分辨率。而 $\alpha=145^\circ$ 时,离子单向出射效率最高只有83%,且峰形不佳,分辨率仅有1 832,尤其 m/z 为611的离子峰已经略微有些畸变。

3 结 论

目前国内外关于离子单向出射方面的研究比较少,本文采用模拟研究的方式,通过施加不对称射频电压,研究分析了TeLIT的离子单向出射。此外本文还讨论了不同电极角度 α 参数结构下,TeLIT离子单向出射性能的变化情况。最终在 $\alpha=135^\circ$ 处获得最高离子单向出射效率接近95%,并不是在目前报道的最优结构参数 $\alpha=140^\circ$ 处获得。这表明了离子阱内部的电场综合作用对提高TeLIT离子单向出射性能是有利的。本研究实现了TeLIT的离子单向出射,大幅度提高了线性离子阱的检测效率,同时分析了高阶场对出射效率的影响。本理论分析成果将为下一阶段的实验提供有力支撑,可极大地提高线性离子阱质谱仪在航空航天应用中的检测效率。

参考文献:

- [1] 王桂友,臧斌,顾昭. 质谱仪技术发展与应用[J]. 现代仪器科学,2009,12(6): 124-128.
WANG Guiyou, ZANG Bin, GU Zhao. Development and application of the mass spectrometry[J]. Modern Scientific Instruments, 2009,12(6): 124-128.
- [2] SCHWARTZ J C, SENKO W. A two-dimensional quadrupole ion trap mass spectrometer[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2002, 13(6):659-669.
- [3] GUO D, WANG Y Z, XIONG X C, et al. Space charge induced nonlinear effects in quadrupole ion traps[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2014, 25(3):498-508.
- [4] 李晓旭,蒋公羽,罗婵,等. PCB离子阱质量分析器[J]. 生命科学仪器,2009,7(1):47-51.
LI Xiaoxu, JIANG Gongyu, LUO Chan, et al. PCB ion trap mass analyzer[J]. Life Science Instruments, 2009,7(1):47-51
- [5] SUDAKOV M Y, APATSKAYA M V, VITUKHIN V V, et al. A new linear ion trap with simple electrodes[J]. Journal of Analytical Chemistry, 2012,67(14):1057-1065.
- [6] XIAO Y, DING Z Z, XU C S, et al. Novel linear ion trap mass analyzer built with triangular electrodes[J]. Analytical Chemistry, 2014,86(12):5733-5739.
- [7] 姚如娇,何洋,肖育,等. 三角形电极离子阱的理论模拟及性能优化[J]. 分析化学,2016,44(11):1793-1797.
YAO Rujiao, HE Yang, XIAO yu, et al. Optimization of linear ion trap mass analyzer with triangular electrodes by simulation[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2016, 44(11):1793-1797.
- [8] 杨海洋,许崇晟,岳磊,等. 新型三角形电极圆环离子阱的理论模拟研究[J]. 分析化学,2016,44(3):482-488.
YANG Haiyang, XU Chongsheng, YUE Lei, et al. Theoretical study of a toroidal ion trap mass analyzer with triangular electrode[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2016,44(3):482-488.
- [9] SPLENDORE M, MARQUETTE E, OPPENHEIMER J, et al. A new ion ejection method employing an asymmetric trapping field to improve the mass scanning performance of an electrode dynamic ion trap[J]. International Journal of Mass Spectrometry, 1999(190/191):129-143.
- [10] 张在越,袁广洲,何洋,等. 印刷线路板分压离子阱的离子单向出射效率[J]. 分析化学,2017,45(2):297-302.
ZHANG Zaiyue, YUAN Guangzhou, HE Yang, et al. Research of unidirectional ion ejection in printed-circuit-board ion trap[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2017,45(2):297-302.
- [11] MICHAUD A L, FRANK A J, DING C, et al. Ion excitation in a linear quadrupole ion trap with an added octopole field[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2005, 16(6):835-849.
- [12] LI H Y, PLASS W R, PATTERSON G E, et al. Chemical mass shifts in resonance ejection experiments in the quadrupole ion trap[J]. Journal of Mass Spectrometry, 2002, 37(10):1051-1058.
- [13] SONG Q Y, KOTHARI S, SENKO M A. et al. Rectilinear ion trap mass spectrometer with atmospheric pressure interface and electrospray ionization source[J]. Analytical Chemistry, 2006, 78(3):718-725.
- [14] WANG Y Z, HUANG Z J, JIANG Y, et al. The coupling effects of hexapole and octopole fields in quadrupole ion traps: A theoretical study[J]. Journal of Mass Spectrometry, 2013,48(8):937-944.
- [15] DOUGLAS D J, KONENKOV N V. Mass resolution of linear quadrupole ion traps with round rods[J]. Rapid Commun Mass Spectrom, 2014,28(21):2252-2258.