

## 双螺旋离子漏斗设计及仿真研究

吴斌<sup>1</sup>, 徐家辉<sup>1</sup>, 李丹丹<sup>2</sup>, 何星亮<sup>1</sup>, 邓辅龙<sup>1</sup>,  
孙红恩<sup>1</sup>, 赵忠俊<sup>1,3</sup>, 段忆翔<sup>1,3</sup>

(1. 四川大学机械工程学院, 四川 成都 610064; 2. 四川省纤维检验局, 四川 成都 610100;  
3. 成都艾立本科技有限公司, 四川 成都 611930)

**摘要:** 离子传输系统沿离子转移路线对离子进行调控和传输, 是影响质谱仪性能的重要部件。本研究报道了一种用于粗真空区域离子传输的新型双螺旋离子漏斗(double-helix ion funnel, DH-IF), 其结合了多极杆电极对称连续和堆叠环结构在离子捕获方面的优点。使用 COMSOL Multiphysics 6.0 研究其内部电场特性, 并在 SIMION 8.1 中构建 DH-IF 离子轨迹仿真模型, 探究电极间距、射频频率及电压幅值等参数对离子传输效率的影响。结果表明, DH-IF 具有陡峭的径向赝势分布, 有效抑制粗真空离子云发散; 由于连续对称的电极结构, DH-IF 相比传统的堆叠环离子漏斗(ion funnel, IF)具有改善的轴向电场分布, 受电势“陷阱”影响微弱。此外, DH-IF 在测试气压范围(200~1 200 Pa)内, 对中低质荷比离子均呈现较高的传输效率, 工作气压范围较宽。同时, 在粗真空离子导向器典型的工作气压(266.6 Pa)下, 当射频反相电极间距为 0.5 mm、射频频率为 1.5 MHz 时, 离子传输效率最高。此外, DH-IF 相比 IF 提高了宽质量范围离子( $m/z$  68~1 755)同时传输的效率。

**关键词:** 粗真空; 双螺旋; 离子漏斗; 质量歧视; 离子轨迹仿真

中图分类号: O657.63 文献标志码: A 文章编号: 1004-2997(2026)01-0018-08

DOI: 10.7538/zpxb.2025.0027 CSTR: 32365.14.zpxb.2025.0027

## Design and Simulation of Double-Helix Ion Funnel

WU Bin<sup>1</sup>, XU Jia-hui<sup>1</sup>, LI Dan-dan<sup>2</sup>, HE Xing-liang<sup>1</sup>, DENG Fu-long<sup>1</sup>,  
SUN Hong-en<sup>1</sup>, ZHAO Zhong-jun<sup>1,3</sup>, DUAN Yi-xiang<sup>1,3</sup>

(1. School of Mechanical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, China; 2. Sichuan Province Fiber Inspection Bureau, Chengdu 610100, China; 3. Aliben Science & Technology, Chengdu 611930, China)

**Abstract:** The ion guide system, functioning as a pivotal component in mass spectrometers, governs ion regulation and transmission along the ion transfer route, and serves as an important part influencing the performance of mass spectrometry instruments. In this work, a novel double-helix ion funnel (DH-IF) was designed for ion transmission in the rough vacuum region, which combined the advantages of multipole electrodes in symmetry and continuity and stacked-ring ion guides in ion capturing. The electric field properties of DH-IF were investigated using COMSOL Multiphysics 6.0. The results showed that the steep radial pseudopotential distribution of DH-IF is effective in reducing the divergence of ion clouds in rough vacuum region. In addition, the DH-IF improves the axial electric field distributions compared with the conventional stacked-ring ion funnels (IF) benefiting

from the continuous symmetric electrode, and suffers little from the potential traps. Then, the model of ion trajectory simulation in rough vacuum was constructed in SIMION8.1 to assess the impacts of structural parameters (electrode spacing), operational conditions (operating pressure), and radiofrequency (RF) parameters (frequency and amplitude) on ion transmission efficiency. The results showed that DH-IF maintains high transmission efficiency across a broad operating pressure range (200-1 200 Pa) for low-to-medium mass-to-charge ratio ( $m/z$ ) ions. Under typical operating pressure for rough vacuum ion guides (266.6 Pa), optimal ion transmission efficiency was achieved with a distance between  $RF^+$  and  $RF^-$  electrodes of 0.5 mm and RF frequency of 1.5 MHz. Additionally, the influence of RF amplitude on the transmission efficiency of ions ranging from  $m/z$  68 to  $m/z$  1 755 was studied. The results showed that the transmission efficiency of all ions increases rapidly with the increase of the RF voltage amplitude and remains stable after reaching the peak value. It was worth noting that DH-IF improves the efficiency of the simultaneous transferring of low and medium  $m/z$  ions compared with IF, which is attributed to its improved electric field distribution. The structure design and transmission performance of DH-IF were elaborated and simulated, hoping to provide some theoretical support for the practical application. This study of DH-IF provides a new idea for the design of ion guides used in rough vacuum region, and the DH-IF is expected to be widely used as an ion import device in MS instruments, which is due to its improved performance and advantages in, e.g., integration and power supply design.

**Key words:** rough vacuum; double-helix; ion funnel; mass discrimination; ion trajectory simulation

以电喷雾电离源 (electrospray ionization, ESI) 为代表的大气压电离源是目前质谱系统中应用最广泛的离子源之一<sup>[1-2]</sup>, 可在大气压下工作而无需真空设备, 在简化样品制备、降低设备成本、扩大分析应用范围等方面具有显著优势。在电喷雾电离-质谱 (electrospray ionization mass spectrometry, ESI-MS) 仪中, 样品在大气压环境电离产生分析物离子, 而质量分析器通常在  $10^{-4} \sim 10^{-5}$  Pa 高真空环境中工作, 两者之间通过差分真空室级联以维持真空度, 相邻真空室之间通过限流孔结构供离子转移。研究表明<sup>[3]</sup>, 电离源产生的分析物离子最终只有一小部分 (约 0.01%~0.1%) 会到达质量分析器并被检测, 绝大部分将沿离子转移路线湮灭。其中, 粗真空区域 (第一真空室) 的离子损失尤为严重, 该区域位于大气压电离源的下游、真空系统的始端, 气压通常较高 ( $10 \sim 3\ 000$  Pa), 离子-分子碰撞和空间电荷效应导致的离子运动复杂<sup>[4-5]</sup>。因此, 开发高效的提升粗真空区域离子传输效率, 实现更高的检测灵敏度, 已成为高性能质谱仪发展和多元化应用的关键问题。

早期, 静电透镜<sup>[6-8]</sup>、毛细管<sup>[9-10]</sup>等装置因结构简单被用作粗真空离子导向装置, 即大气压接

口 (atmospheric pressure interface, API)。然而, 此类装置对离子缺乏强有力的约束和聚焦, 导致传输效率较低, 应用受限。自 Gerlich 等<sup>[11]</sup>证明离子可以被周期性交变的射频电场有效限制以来, 大量研究集中到射频离子导向器的开发上。多极杆离子导向器 (multipole ion guide) 是最常见的射频离子导向器之一, 其由 4 根或更多沿圆周均匀分布的金属电极组成, 相邻电极施加反相射频电压以产生径向约束离子的“赝势”<sup>[11-12]</sup>, 结合碰撞聚焦能够在中等真空中有效传输、聚焦离子。不同阶数的多极杆在使用中有优劣之分, 如, 高阶杆的质量歧视较小、离子捕获能力强, 但聚焦能力弱; 四极杆离子聚焦能力强, 但质量歧视较严重<sup>[13]</sup>。2021 年, Bradley 等<sup>[14]</sup>报道了一种用于粗真空离子传输的场半径逐渐缩小的十二极离子导向器, 增强了高阶杆的离子聚焦性能, 离子传输效率比传统的四极杆提高了 5~6 倍, 拓宽了多极杆离子导向器在粗真空区域中的应用。2022 年, 翟雁冰团队<sup>[15]</sup>报道了一种场梯度聚焦离子导向器, 其入口为十二极场并平滑过渡到四极场, 该装置结合了高阶场离子捕获和四极场离子聚焦的优势, 提高了粗真空中低质荷比离子同时传输的效率。

离子漏斗(ion funnel, IF)是目前质谱系统中使用最广泛的 API 之一,其源于 Gerlich 等在 1969 年提出的堆叠环结构(stacked ring ion guide, SRIG),该装置由一系列内径逐渐缩小的环形电极按顺序排列而成,相邻电极施加反相射频电压<sup>[16]</sup>。2000 年, Kim 等<sup>[17]</sup>在此结构的基础上增加了恒定内径电极部分作为漂移管,改善了离子漏斗内部气压分布,提高了离子传输的质量上限,被认为是离子漏斗较为成熟的结构设计并沿用至今。相对于多极杆离子导向器,离子漏斗具有更陡峭的“赝势”分布,结合漏斗形电极设计,具有较强的离子捕获和聚焦性能。然而,由于非连续的电极结构,IF 中心轴线“赝势”浮动导致电势“陷阱”,对离子产生质荷比( $m/z$ )依赖性阻碍,即质量歧视效应<sup>[18-19]</sup>。1999 年, Shaffer 等<sup>[20]</sup>通过扩大离子漏斗出口内径显著减小了质量歧视。2016 年,田地团队<sup>[21]</sup>使用调相矩形波替换反相射频电压,削弱了电势“陷阱”对离子传输的干扰。2021 年, Wang 等<sup>[22]</sup>报道了一种四极离子漏斗,每个环形电极由 4 个 1/4 环组成,且射频施加方法与四极杆类似,在  $m/z$  低于 70 的范围内,该装置的传输效率比传统的离子漏斗提高了约 10%。2023 年,丁传凡团队<sup>[23]</sup>研究了四极离子漏斗的电极结构参数对离子传输的影响,为进一步增强低质荷比离子传输效率提供了重要指导。此外,“V”型离子漏斗<sup>[3]</sup>、方形离子漏斗<sup>[24]</sup>等也被用于灵敏度提升和与其他离子导向装置的联用。总之,针对 IF 的优化非常必要,可以发挥其在粗真空区域强大的离子捕获和聚焦性能。

本文将介绍一种新型双螺旋离子漏斗(double-helix ion funnel, DH-IF),其结合了多极杆电极对称连续和堆叠环结构较强离子捕获能力的特点。在 SIMION 8.1 中对 DH-IF 的几何尺寸、供电参数进行优化,并使用 COMSOL Multiphysics 6.0 研究其内部电场特性,评估和对比 DH-IF 与传统 IF 的传输性能差异。

## 1 实验部分

### 1.1 DH-IF 的工作原理及结构设计

射频离子导向器的离子约束机制是在相邻电极上施加相位相反、幅值相同的射频电压,构建周期性交变的偶极阵列,以此生成空间不均匀射频场,实现离子径向束缚<sup>[12]</sup>。作为多极杆的变

体,双螺旋结构采用 2 组螺旋电极相互缠绕的几何设计。在施加反相射频电压后,得到电极配置,示于图 1a。该电极配置与堆叠环结构(图 1c)类似,沿中心轴线( $z$  轴)形成射频正负交替的偶极阵列,产生径向限制离子的有效电势,即“赝势”;但该电极配置又与堆叠环结构具有显著差异,双螺旋结构电极连续且在径向截面上的射频正负对称,与多极杆类似,示于图 1b。

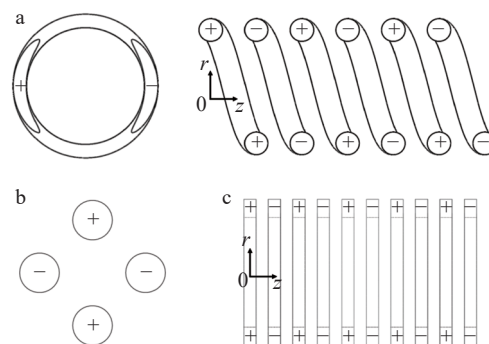


图 1 双螺旋(a)、四极杆(b)、堆叠环结构(c)射频供电示意图

Fig. 1 RF supply schematics of double-helix (a), quadrupole (b), stacked ring structure (c)

基于双螺旋结构的 DH-IF 结构示意图示于图 2。图中,  $\pm V\cos\omega t$  为射频电压;  $U$  为射频电压的直流偏置,配合入口、出口直流偏置电压构成直流场以提供离子轴向驱动。螺旋电极由 2 部分组成:第 1 部分( $z: 0\sim 20$  mm)具有 20 mm 恒定内径;第 2 部分( $z: 20\sim 54$  mm)内径可变并逐渐缩小至 2 mm。恒定内径部分可改善导向器内部气压分布,而电极内径收缩将增强离子聚焦性能。此外,先前研究表明<sup>[25]</sup>,该形状电极内部气流表现出湍流特性,羽流剪切层形成的部分涡流向上游方向运动,并最终重新加入中心射流形成较为显著的回流区。该回流机制可增加离子和液滴在装置内部的停留时间,有利于增强带电液

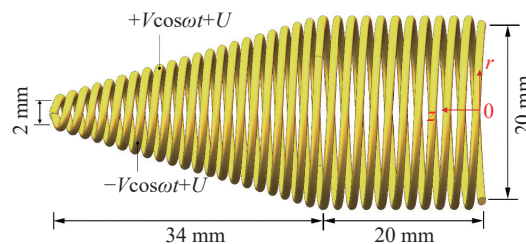


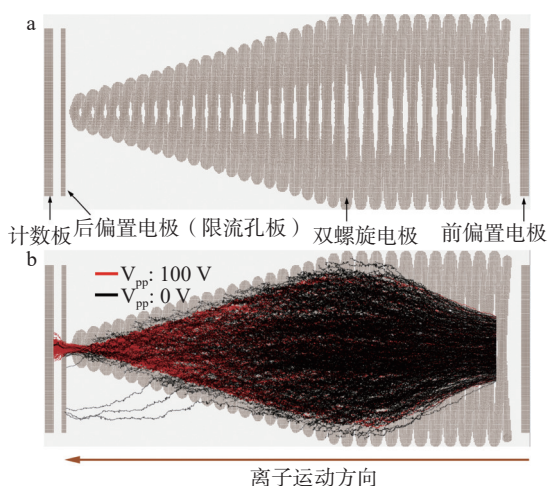
图 2 DH-IF 三维结构图

Fig. 2 3D structure diagram of DH-IF

滴的去溶剂化效果。螺旋电极线径 1 mm, 反相电极间距作为可变参数将在后文中探索优化。

## 1.2 仿真模型的建立

根据图 2 中 DH-IF 结构设计, 在 SIMION 8.1 中建立粗真空离子轨迹仿真模型。为探究射频正负电极间距对离子传输的影响, 对间距为 0.5、1、1.5、2 mm 的 4 种螺旋电极分别建模和离子轨迹仿真, 以得到最优值。电极间距为 0.5 mm 的 DH-IF 仿真模型示于图 3a, 包含前直流偏置电极、双螺旋电极、后偏置电极(限流孔板)以及计数板 4 部分。其中, 后偏置电极厚度 0.5 mm, 其上开有直径 2 mm 限流孔供离子转移, 尺寸与实际限流孔板一致; 计数板用于统计通过粗真空区域到达第 2 真空室的离子数, 以计算离子传输效率。



注: a. 三维仿真模型; b.  $m/z$  609 离子轨迹测试

图 3 DH-IF 的 SIMION 仿真模型图

Fig. 3 SIMION model diagram of DH-IF

在 SIMION 8.1 平台中, 利用“Define Particles”定义释放离子。分别选择  $m/z$  68、195、406、609、1 006、1 399、1 755 离子进行仿真, 各离子的种类、碰撞截面信息列于表 1, 每种离子释放的数量设为 1 000, 采用硬球碰撞(HS)模型模拟离子-分子间的碰撞。离子采用“圆形分布”, 位于导向器中心, 分布半径 4 mm。为模拟伴随粗真空复杂超音速气流的离子云膨胀, 离子的初始速度分布呈圆锥形, 半角  $30^\circ$ , 动能设为 0.1~1 eV, 缓冲气体为空气(质量 28)。为弥补离子与缓冲气体分子碰撞导致的动能损失, 设置前直流偏置 28 V, 射频电压直流偏置 8 V, 后直流偏置 0 V。

表 1 仿真使用的离子信息

Table 1 Details of tested ions in simulations

名称 Name	加合物 Adduct	质荷比 $m/z$	碰撞截面 CCS <sup>[26]</sup> ( $\text{\AA}^2$ ) $\cdot 10^{-20}$
Pyrazole	[M+H] <sup>+</sup>	68	125.47
Caffeine	[M+H] <sup>+</sup>	195	141.8
Hexnac-Hex	[M+H] <sup>+</sup>	406	190.2
Reserpine	[M+H] <sup>+</sup>	609	208.8
Lacto-N-difucohexaose	[M+H] <sup>+</sup>	1006	301.4
TVMENFVAFVDK	[M+H] <sup>+</sup>	1399	390.2
TAGIQIVADDLTVINPK	[M+H] <sup>+</sup>	1755	450.6

为模拟 DH-IF 内部气流对离子的轴向驱动, 仿真中设置  $z$  轴向气流 10 m/s, 该值约为本实验室质谱仪粗真空区域的平均流速, 其计算过程如下: 本实验室质谱系统采用 Nano-ESI 电离源, 以内径(直径  $d$ )为 0.7 mm、长度  $L$  为 60 mm 的毛细管作为常压接口, 毛细管入口端为大气压 101 325 Pa, 粗真空区域气压约 265 Pa。

粘滞流长管道气体流量计算公式示于式(1):

$$Q_n = \frac{\pi d^4}{128\eta L} \frac{(p_1 + p_2)}{2} (p_1 - p_2) \quad (1)$$

式中,  $d$  为毛细管内径;  $L$  为毛细管长度;  $\eta$  为气体粘滞系数 ( $1.8 \times 10^{-5} \text{ N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$ );  $p_1$  和  $p_2$  分别为毛细管两端压强。由此计算出质谱仪粗真空区域气体流量  $Q_n = 28.009\ 707 \text{ m}^3/\text{s}$ 。

平均流速计算公式示于式(2):

$$\bar{V} = \frac{Q_n}{P \cdot S} \quad (2)$$

式中,  $P$  为压强,  $S$  为质谱仪粗真空腔体截面积。本实验室质谱仪粗真空腔体的截面为圆角矩形, 边长 102 mm, 截面积  $0.010\ 404 \text{ m}^2$ 。由式(2)可计算得到质谱仪粗真空区域的平均流速为 10.159 m/s。因此, 仿真中设置  $z$  轴向气流 10 m/s 来模拟质谱仪粗真空区域平均流速。

设置好参数后, 初步测试仿真模型, 电极间距为 0.5 mm 的 DH-IF 内部离子轨迹示于图 3b。可知, 不施加射频场时, 离子因初始动能参数设置向外发散, 并最终湮灭在电极表面, 而射频场的引入能够显著提升离子的聚焦效果和传输效率, 表明该仿真模型的各项参数设置符合要求。

## 2 结果与讨论

### 2.1 射频反相电极间距优化

在相同电参数条件下, 射频反相电极间距影

响射频电压产生的电场强度,最终表现为离子束束缚能力的差异。固定射频电压峰值为  $100\text{ V}_{\text{pp}}$ , 频率  $1\text{ MHz}$ , 气压  $266.6\text{ Pa}$ , 使用  $m/z\ 195$ 、 $609$  离子分别对正负电极间距为  $0.5$ 、 $1.0$ 、 $1.5$ 、 $2.0\text{ mm}$  的 4 种双螺旋离子漏斗进行离子轨迹仿真, 结果示于图 4。在固定电参数下,  $m/z\ 195$  离子的传输效率整体低于  $m/z\ 609$  离子。低  $m/z$  离子受射频场作用振荡更剧烈, 离子束更宽, 通过限流孔到达计数板的离子数量更少。DH-IF 电极间距为  $0.5$ 、 $1.0\text{ mm}$  时的离子传输性能较高且差异较小; 然而, 随着射频反相电极间距的持续增大, 目标离子的传输效率均呈现显著衰减的趋势。值得注意的是, 当间距扩展至  $2.0\text{ mm}$  时,  $m/z\ 195$ 、 $609$  离子的传输效率相较于电极间距  $0.5\text{ mm}$  时降低超过  $50\%$ , 表明采用较小射频正负电极间距的双螺旋结构对离子聚焦更有利。在后续的仿真中, 将采用射频反相电极间距  $0.5\text{ mm}$  的双螺旋电极

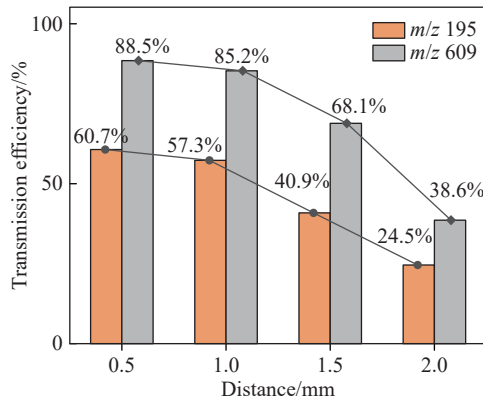


图 4 射频反相电极间距对离子传输效率的影响  
Fig. 4 Effect of the distance between  $\text{RF}^+$  and  $\text{RF}^-$  electrodes on ion transmission efficiency

作为 DH-IF 的优化结构, 并考察其余电参数对离子传输的影响。

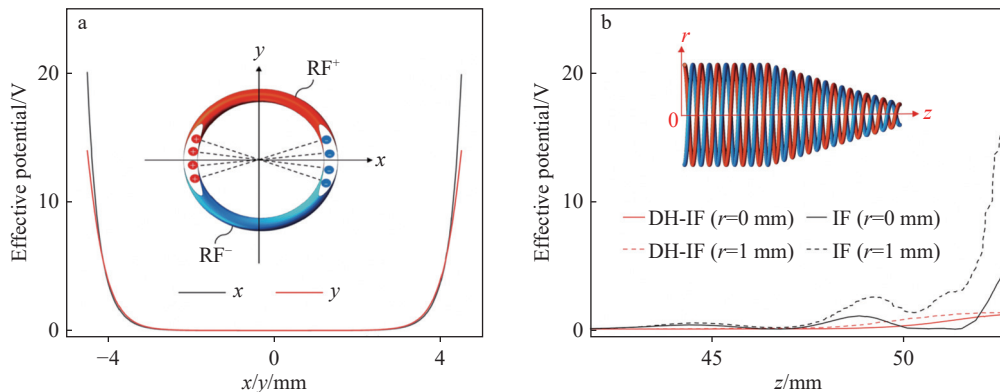
## 2.2 DH-IF 电场特性

基于 DH-IF 优化结构, 使用 COMSOL Multiphysics 6.0 软件研究其内部电场特性。射频偶极子阵列产生的有效电势(即“赝势”)计算公式示于式(3):

$$V^* = \frac{qE^2}{4m\omega^2} \quad (3)$$

其中,  $m$  和  $q$  分别为离子的质量和电荷;  $E$  和  $\omega$  分别为射频场的振幅和角频率。固定射频电压峰值  $100\text{ V}_{\text{pp}}$ , 频率  $1\text{ MHz}$ 。以  $m/z\ 195$  为例, 根据式(3)计算 DH-IF 内部有效电势分布。  $z$  坐标为  $42\text{ mm}$  处的径向截面有效电势分布示于图 5a。可知, DH-IF 内部约束离子的势阱在中心区域宽而平坦, 离子捕获容量大; 而靠近电极电势分布陡峭、变化梯度较大, 这有利于捕获随超音速气流膨胀的离子云; 随着螺旋电极内径不断收缩, 自由电场面积减小、势阱变窄, 离子逐渐被聚焦到导向器中心。

为对比 DH-IF 与传统堆叠环 IF 的电场特性差异, 对 IF 的电场分布进行研究。IF 的尺寸如下: 恒定内径部分直径  $20\text{ mm}$ , 离子出口内径  $2\text{ mm}$ , 环形电极厚度  $0.5\text{ mm}$ , 电极间距  $0.5\text{ mm}$ 。DH-IF 和 IF 轴向( $z$  轴)有效电势变化示于图 5b,  $r=0\text{ mm}$  为中心轴线,  $r=1\text{ mm}$  为距中心轴线  $1\text{ mm}$ 。可以看出, 由于不连续的堆叠环结构, IF 电势存在浮动, 即电势“陷阱”。随着环形电极内径逐渐减小, IF 有效电势浮动幅度增大, 并在离子出口处表现出较强的边界场, 阻碍离子传输。而 DH-IF 的有效电势几乎没有起伏, 仅在离子出口



注: a. 径向( $z=42\text{ mm}$ ); b. 轴向

图 5 DH-IF 内部电场分布

Fig. 5 Internal electric field distributions of DH-IF

处存在相对较弱的边界场。因此, DH-IF 相对于 IF 具有改善的轴向电场分布, 降低了有效电势起伏造成的离子损失。

### 2.3 DH-IF 在不同气压下的传输性能

固定射频频率为 1 MHz, 射频幅值分别为 100 V<sub>pp</sub> 和 150 V<sub>pp</sub>, 考察 DH-IF 在不同工作气压下对 *m/z* 195、609 离子的传输效果, 结果示于图 6。在 2 种射频电压幅值下, 2 种离子的传输效率随气压升高, 均呈现先增大后减小的趋势。低气压时, 离子碰撞冷却效果稍差, 随射频场变化振荡幅度较大, 导致传输效率稍低; 随着气压持续升高, 恒定电压幅值的射频场对离子约束有限, 传输效率在达到峰值后降低。同时, 更高电压幅值的射频场对离子约束能力更强, 因此, 电压幅值为 150 V<sub>pp</sub> 时的离子传输效率整体高于 100 V<sub>pp</sub>。此外, 在测试气压范围内, 观察到 2 种离子均具有较高的传输效率, 表明 DH-IF 工作气压范围较宽。

### 2.4 射频频率对离子传输的影响

射频频率是射频场关键电参数之一, 固定射频电压峰峰值 100 V<sub>pp</sub>, 气压 266.6 Pa, 考察射频频率对离子传输的影响, 结果示于图 7。频率初值为 0.5 MHz, 间隔 0.5 MHz 增加至 4.5 MHz, 统计 *m/z* 68~1 755 共 7 种离子达到计数板的数量, 并计算传输效率。结果表明, *m/z* 68、195 离子传

输效率先上升后缓慢下降, 而更大 *m/z* 离子在测试频率范围内均呈下降趋势。低 *m/z* 离子惯性小, 对射频场的变化更灵敏, 初始频率小幅增加有利于电场对离子运动的调整。此外, 在固定射频幅值电压时, 提高射频频率有利于拓宽低 *m/z* 离子运动的稳定区。因此, *m/z* 68、195 离子传输效率随频率升高先上升, 并在 1.5 MHz 时达到最大值; 继续提高频率, 有效电势将降低, 限制离子的势阱变弱, 各离子传输效率逐渐下降, 高 *m/z* 离子下降尤为明显。从图 7 可知, 射频频率为 1.5 MHz 时, 几乎所有离子传输效率均达到较高值, 虽然高 *m/z* 离子传输效率略有下降, 但在可接受范围内。

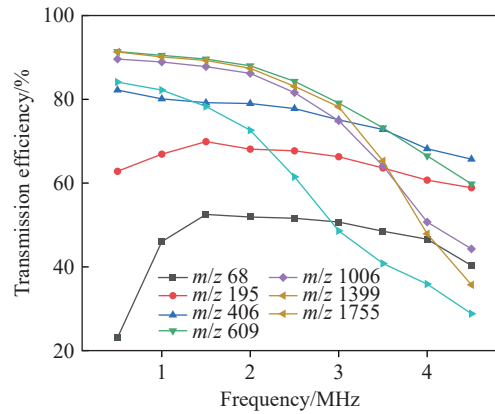
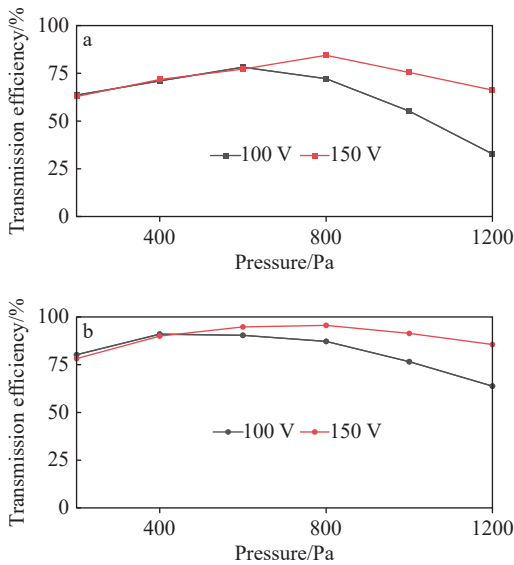


图 7 射频频率对离子传输效率的影响

Fig. 7 Effect of RF frequency on ion transmission efficiency

### 2.5 射频幅值对离子传输的影响

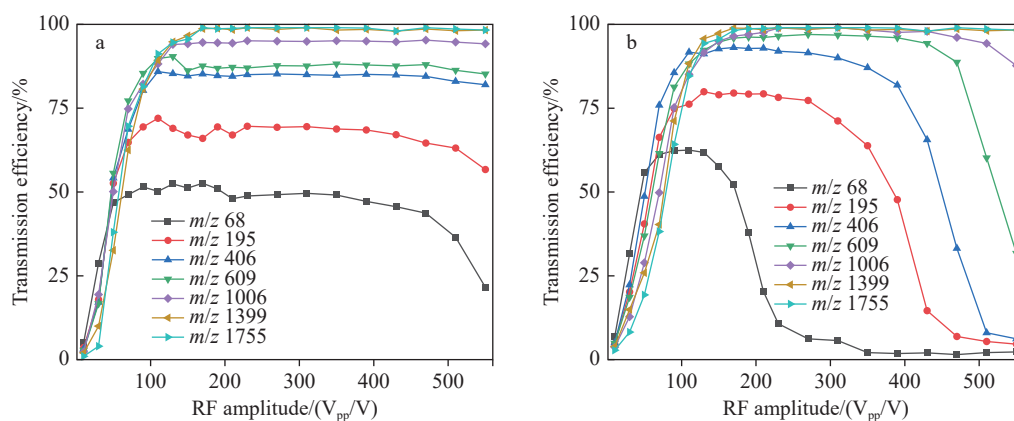
根据图 7 的结论, 射频频率为 1.5 MHz 时, DH-IF 对 *m/z* 68~1 755 离子的聚焦能力较强。固定射频频率为 1.5 MHz, 考察射频幅值对离子传输的影响, 结果示于图 8a。射频幅值(峰峰值)变化范围为 10~550 V, 其中, 10~230 V 步进值 20 V, 230~550 V 步进值 40 V。从图 8a 可以看出, 所有离子的传输效率对射频幅值的依赖趋势相似。*m/z* 68 离子的传输效率在 130 V<sub>pp</sub> 时达到峰值, 而较高 *m/z* 离子则需要更高幅值的射频电压以实现最佳传输。另外, 当射频电压超过低 *m/z* 离子的最佳传输点时, 其传输效率曲线呈现缓慢变化的趋势, 即获得 1 个平台而不是快速下降。传统堆叠环 IF 的射频幅值对离子传输效率的影响示于图 8b。可见, 持续增大射频幅值将导致低 *m/z* 离子传输效率急剧下降。这种急剧下降与先前报道<sup>[19]</sup>的结果一致, 归因于轴向电



注: a. *m/z* 195; b. *m/z* 609

图 6 DH-IF 在不同工作气压下的离子传输效率

Fig. 6 Ion transmission efficiency of DH-IF under different working pressures



注: a. DH-IF; b. IF

图8 射频幅值对离子传输效率的影响

Fig. 8 Effect of RF amplitude on ion transmission efficiency

势“陷阱”对离子的捕获。为直观展示电势“陷阱”对离子的捕获效果, IF在射频峰峰值为200 V时,  $m/z$  68离子轨迹示于图9。可以看出,离子在IF出口附近被电势“陷阱”囚禁,无法通过限流孔进入下游真空。因此,相对于IF, DH-IF质量歧视效应更小,能够提高宽质量范围离子同时传输的效率。

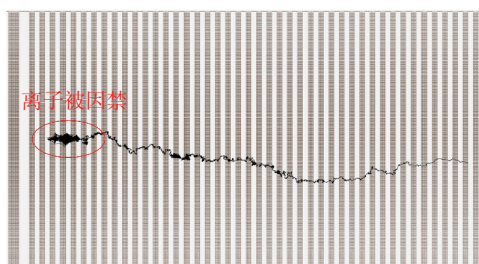


图9 IF中,  $m/z$  68离子在200  $V_{pp}$ 时的离子轨迹  
Fig. 9 Ion trajectories of  $m/z$  68 at 200  $V_{pp}$  in IF

### 3 结论

本文详细介绍了用于粗真空区域离子传输的新型双螺旋离子漏斗设计与仿真。基于SIMION 8.1平台对DH-IF的电极间距、工作气压、射频频率及射频幅值对离子传输的影响进行系统仿真,并使用COMSOL Multiphysics 6.0研究其内部电场分布特性。仿真结果表明, DH-IF结合了多极杆电极对称连续和堆叠环结构陡峭势分布的优点,在具有较强离子捕获能力的同时,轴向势电势分布更平滑。此外, DH-IF工作气压范围较宽,在测试气压范围(200~1 200 Pa)内对中、低质荷比离子均具有较高的传输效率。在优化的射频反相电极间距(0.5 mm)和射频频率

(1.5 MHz)参数下,探究了装置的离子传输效率随射频幅值变化的传输特性。相较于IF, DH-IF质量歧视效应更小,显著提升了  $m/z$  68~1 755范围内离子同时传输的效率。本研究可为新型粗真空离子导向器设计提供思路,今后将搭建实验装置对DH-IF进行系统测试。

### 参考文献:

- [1] ZHAO J, LUBMAN D M. Detection of liquid injection using an atmospheric pressure ionization radiofrequency plasma source[J]. *Analytical Chemistry*, 1993, 65(7): 866-876.
- [2] ANDRADE F J, SHELLEY J T, WETZEL W C, WEBB M R, GAMEZ G, RAY S J, HIEFTJE G M. Atmospheric pressure chemical ionization source. 2. Desorption-ionization for the direct analysis of solid compounds[J]. *Analytical Chemistry*, 2008, 80(8): 2 654-2 663.
- [3] DENG L, CHEN X, LI W, WANG Z, WONG Y E, CHAN T W. Sensitivity and robustness enhancements by using a V-shape ion funnel in FTICR-MS[J]. *Analytical Chemistry*, 2015, 87(16): 8 073-8 077.
- [4] LIN B, SUNNER J. Ion transport by viscous gas flow through capillaries[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 1994, 5(10): 873-885.
- [5] CECH N B, ENKE C G. Practical implications of some recent studies in electrospray ionization fundamentals[J]. *Mass Spectrometry Reviews*, 2001, 20(6): 362-387.
- [6] FENN J B, MANN M, MENG C K, WONG S F, WHITEHOUSE C M. Electrospray ionization for mass spectrometry of large biomolecules[J]. *Science*, 1989,

- 246(4 926): 64-71.
- [7] YU Q, CHEN L, HUANG R, HANG W, HUANG B, HANG W, HE J. Laser ionization time-of-flight mass spectrometry for direct elemental analysis[J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2009, 28(10): 1 174-1 185.
- [8] HUANG R, LIN Y, LI L, HANG W, HE J, HUANG B. Two-dimensional separation in laser ionization orthogonal time-of-flight mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 2010, 82(7): 3 077-3 080.
- [9] LIANG G, GRAHAM COOKS R, OUYANG Z. Breaking the pumping speed barrier in mass spectrometry: discontinuous atmospheric pressure interface[J]. *Analytical Chemistry*, 2008, 80(11): 4 026-4 032.
- [10] WEI X, CHARIPAR N, KIRLEIS M A, YU X, OUYANG Z. Study of discontinuous atmospheric pressure interfaces for mass spectrometry instrumentation development[J]. *Analytical Chemistry*, 2010, 82(15): 6 584-6 592.
- [11] DOUGLAS D J, FRENCH J B. Collisional focusing effects in radio frequency quadrupoles[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 1992, 3(4): 398-408.
- [12] GERLICH D. Inhomogeneous RF fields: a versatile tool for the study of processes with slow ions[M]. *Advances in Chemical Physics*, 1992.
- [13] 王健, 朱治祥, 邓柳林, 刘成园, 潘洋. 质谱仪离子导向装置的原理、应用和进展[J]. *质谱学报*, 2012, 33(3): 139-148.  
WANG Jian, ZHU Zhixiang, DENG Liulin, LIU Chengyuan, PAN Yang. Principles, applications and progress of mass spectrometric ion guides[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2012, 33(3): 139-148 (in Chinese).
- [14] JAVAHERI H, SCHNEIDER B B. Ion guide for improved atmosphere to mass spectrometer vacuum ion transfer[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2021, 32(8): 1 945-1 951.
- [15] DU S, JIA H, XU W, ZHAI Y. Field-gradient-focusing ion guide for enhanced transfer efficiency of low-mass ions[J]. *Analytical Chemistry*, 2023, 95(3): 2 079-2 086.
- [16] SHAFFER S A, PRIOR D C, ANDERSON G A, UDSETH H R, SMITH R D. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 1998, 70(19): 4 111-4 119.
- [17] KIM T, TOLMACHEV A V, HARKEWICZ R, PRIOR D C, ANDERSON G, UDSETH H R, SMITH R D. Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel[J]. *Analytical Chemistry*, 2000, 72(10): 2 247-2 255.
- [18] IBRAHIM Y, BELOV M E, TOLMACHEV A V, PRIOR D C, SMITH R D. Ion funnel trap interface for orthogonal time-of-flight mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 2007, 79(20): 7 845-7 852.
- [19] KELLY R T, TOLMACHEV A V, PAGE J S, TANG K, SMITH R D. The ion funnel: theory, implementations, and applications[J]. *Mass Spectrometry Reviews*, 2010, 29(2): 294-312.
- [20] SHAFFER S A, TOLMACHEV A, PRIOR D C, ANDERSON G A, UDSETH H R, SMITH R D. Characterization of an improved electrodynamic ion funnel interface for electrospray ionization mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 1999, 71(15): 2 957-2 964.
- [21] XU H, ZHANG X, WANG Y, LING X, TIAN D. Design and performance evaluation of a novel ion funnel driven by a phase-modulated rectangular wave[J]. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2016, 30(8): 1 079-1 086.
- [22] WANG X, WU B, GAO R, ZHOU S, WU Y, YU J, TANG K. A new ion funnel for improving the transmission of low mass ions[J]. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2021, 470: 116 702.
- [23] QIU C, LI X, LI Z, YANG L, WANG W, XU F, DING C. Simulation study of three new quadrupole ion funnels to improve low-mass ion transmission[J]. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2023, 37(24): e9648.
- [24] CHEN T C, WEBB I K, PROST S A, HARRER M B, NORHEIM R V, TANG K, IBRAHIM Y M, SMITH R D. Rectangular ion funnel: a new ion funnel interface for structures for lossless ion manipulations[J]. *Analytical Chemistry*, 2015, 87(1): 716-722.
- [25] HE X, GUO X, DENG F, ZENG P, WU B, SUN H E, ZHAO Z, DUAN Y. A study of the transient gas flow affected ion transmission in atmospheric pressure interfaces based on large eddy simulation for electrospray ionization mass spectrometry[J]. *Talanta*, 2024, 274: 125 980.
- [26] ROSS D H, CHO J H, XU L. Breaking down structural diversity for comprehensive prediction of ion-neutral collision cross sections[J]. *Analytical Chemistry*, 2020, 92(6): 4 548-4 557.

(收稿日期: 2025-03-04; 修回日期: 2025-04-15)