

线形/线性离子阱术语辨析

目前,质谱学界常常把二维离子阱称作线性离子阱(LIT, linear ion trap)。追本溯源,最先用这种说法的是热电公司。2005年8月,热电集团(Thermo)推出新一代离子阱质谱——Finnigan™ LXQ™,在中国面市时,将原本的线形离子阱(LIT, linear ion trap)翻译成线性离子阱^[1]。因此,日后国内学者在引用中,经常将这两个词混淆。

线形离子阱和线性离子阱只有一字之差,但表征的科学概念是不同的。主要的差别在于“线形”和“线性”的区分。线形侧重于空间位置、几何形状的表达,在《辞海》中解释与“条形”相近,是指实物形状狭而长,两侧平行。线性则侧重于数学关系的表达,指变量与变量之间按比例、成直线的关系;在空间和时间上代表规则和光滑的运动,在数学上可理解为一阶导数为常数的函数。因此,虽然线形和线性在英文中都是“linear”,但释义大不相同。线形离子阱和线性离子阱代表了不同的离子阱类型。

线形离子阱是不同结构质量分析器中的一种,也可以称为直线形离子阱^[2]。它与传统的三维离子阱差别在于:在三维离子阱中,离子云被囚禁在以场中心点为球心的小球空间内^[3-4];线形离子阱中,离子云被囚禁在沿阱中心轴向排列的条形空间内,使得离子的囚禁空间从一个点变成一条线,直线形离子阱因此而得名。与传统的三维离子阱相比,直线形离子阱的射频场不再是对离子在 x 、 y 和 z 三个方向上的同时囚禁,而是只有 x 和 y 方向(径向 r),离子在 z 轴方向没有受到射频电场的作用力,因此又称为二维离子阱。

线性离子阱的概念最初是由Franzen等^[5]提出。他指出:从数学角度来讲,射频(RF, radio frequency)场的电场强度在 r 和 z 方向上随距离线性增加,具备此电场场型的离子阱称为线性离子阱。与线性离子阱相对应的是非线性离子阱。非线性离子阱的特征在于RF场的电场强度在 r 和 z 方向上随着距离的增大非线性增加,这种非线性也被称为场缺陷。场缺陷可以看作是四极电场成分与多极场或者高阶场的叠加。因此,线性/非线性离子阱依赖于离子阱内部的电场分布情况,线形离子阱则依赖于离子阱的几何结构。

布鲁克公司曾经推出三维非线性离子阱的组合——高容量阱(HCT, high-capacity trap)^[6],设计者利用非线性离子阱中的高阶场分量来“加热”离子,使得阱内的待测离

子处于高能激发态,以此来提高离子在共振逐出过程中的出射速度,缩短逐出时间,达到提高离子阱分析速度、灵敏度和分辨率的目的。由此可得,三维线性/三维非线性离子阱、线形线性/线形非线性离子阱的组合都是可以的。

我们这里对线形和线性离子阱概念的理解与辨析,是为了分析成因,正本清源,消除误解,避免因科学概念的混淆而有损学术的严谨。也希望读者在阅读资料过程中,多发现和讨论相类似的问题,便于大家的沟通和交流。

参考文献:

- [1] 热电科学仪器部. 热电集团(Thermo)推出新一代线性离子阱质谱仪——Finnigan™ LXQ™. 客户通讯, 2005 (No. 2): p[EB/OL]. <http://www.thermo.com.cn/e-newsletter/2/pdf/b2.pdf>.
- [2] SCHWARTZ J C, SENKO M W, SYKA J E P. A two-dimensional quadrupole ion trap mass spectrometer [J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2002, 13(6): 659-669.
- [3] PAUL W, STEINWEDEL H. German Patent 944900; 1956[P]. 1960, 2 939: 952.
- [4] TODD J F. Ion trap mass spectrometer-past, present, and future[J]. Mass Spectrometry Reviews, 1991, 10 (1): 3-52.
- [5] FRANZEN J, GABLING R, SCHUBERT M, et al. Nonlinear ion traps[M]. Practical Aspects of Ion Trap Mass Spectrometry, 1995: 49-167.
- [6] KAPLAN D, HARTMER R, BREKENFELD A, et al. An examination of the physics of the high capacity trap (HCT) [M]. Practical Aspects of Trapped Ion Mass Spectrometry, 2009: 593-618.

作者:孙露露^{1,2}, 薛兵², 黄正旭¹, 丁传凡³, 丁力⁴, 周振¹

单位:1. 暨南大学质谱仪器与大气环境研究所;

2. 上海卫星装备研究所;

3. 复旦大学化学系激光化学研究所;

4. 岛津分析技术研发(上海)有限公司