用Pro /E 实现对离子阱的结构仿真设计

陈 侃¹, 黄元庆¹, 周 振², 蔡子霞¹, 朱建共¹ (1.浙江大学现代光学仪器国家重点实验室,浙江杭州 310027; 2.中国科学院广州地球化学研究所,广东广州 510640)

摘要:简述了三维四极离子阱的基本结构和工作原理。探讨了用 Pro/E 设计三维四极离子阱基本结构模型的一种简要方法,用参数方程建立基准辅助双曲线,得到了三维四极离子阱的一般实体模型图。 关键词:Pro/E;离子阱;结构仿真 中图分类号:0657.63 文献标识码:A 文章编号:1004-2997(2007)01-16-07

Design for the Configuration of Three -Dimensional Quadrupole Ion Trap Based on Pro/Engineer Wildfire

CHEN Kan¹, HUANG Yuan qing¹, ZHOU Zhen², CAI Zi xia¹, ZHU Jian gong¹

(1. State Key Lab of Modern Optical Instrumentation of Zhejiang University, Zhejiang 310027, China; 2. Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Science, Guangzhou 510640, China)

Abstract : The basic structure and working principle of a three dimensional quadrupole ion trap, a vacuum mass spectro meter are described. A brief method of design for the configurable model of three dimensional quadrupole ion trap is discussed by several points. Finally a solidified approximate model is established in Pro /E.

Key words : Pro /E ; ion trap ; configuration

四极滤质器及其派生仪器三维四极离子阱 已被广泛应用于化学、生物、地质、微电子等许多 领域。与同类动态质谱仪器相比,三维四极离子 阱不但具有结构小巧,重量轻,能在极低压强下 长时间储存离子等优点,在离子储存及检测方式 上也独具特点^[1]。本工作拟用优秀的三维实体 建模软件 Pro /Engineer Wildfire 实现对三维四 极离子阱基本结构的构建。

1 三维四极离子阱的结构特点

四极滤质器(四极质谱计)的工作原理是,根

据不同质荷比的离子在直流-高频双曲面电场中 运动轨迹的稳定与否来实现质量分离。它的派 生仪器——三维四极离子阱的基本工作原理与 其相仿,但在结构和性能上有其特殊性。在三维 四极离子阱中,离子在三个坐标方向上都受振荡 力的约束,被捕集在离子阱内部。在极低的压强 下,离子能贮存在仪器内达数天之久^[2]。三维四 极离子阱的质量分析器由三个旋转对称的双曲 面电极构成,结构示于图 1,图中 A、B 分别为 上、下端盖电极,C 为环电极。仪器的电极系统 是三个绕z 轴旋转对称的双曲面,中间形成双曲

收稿日期:2006-06-30;修回日期:2006-11-16

通讯作者:朱建共(1963~),男(汉),江苏无锡人,高级工程师,从事现代分析仪器研究。E-mail jiangongzhu@163.com (C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.

面电场。直流电压 *U* 和高频电压 *V*cos *q* 加在 环形电极和端盖电极之间,两个端盖电极均处于 地电位。环电极内侧距为 $2r_0$,端盖之间的距离 为 $2z_0$ 。当环电极加上高频电压 *V* = *U* - *V*cos *q* 后,则阱内($x^2 + y^2 < r_0^2$, $-z_0 < z < z_0$)任一点 电位为:

 $V(x, y, z) = (U - V_{\cos} q_{i}) \cdot (x^{2} + y^{2} - 2z^{2})/2r_{0}^{2} + (U - V_{\cos} q_{i})/2$ (1)

 $r_0 与 z_0$ 的关系为: $r_0^2 = 2z_0^2$ (2)

式中,V 为高频电压幅值;U 为直流分量; ω 为角频率($\omega = 2\pi f$)^[3]。式(2)将作为用 Pro/E 设计离子阱结构关系的重要参考式。



图 1 离子阱的结构示意图

Fig. 1 Configuration sketch of a ion trap

2 用 Pro /E 设计离子阱结构模型的基本 过程

美国 PTC 公司推出的 Pro /Engineer 是优 秀的三维 CAD /CAM /CAE 集成软件,是强大的 实体建模设计工具。它提出的单一数据库,参数 化、基于特征、全相关的设计概念改变了机械 CAD /CAM 的传统观念,成为业界新标准。本 设计基于 Pro /E Widefire 2.0 版。

由于三维四极离子阱主要由上、下端盖电极 和环电极组成,中间形成双曲面电场,因此设计 的重点在于两个实体旋转双曲面和双曲旋转环 面。设计创建基准双曲线,并对其编辑修剪;在 草绘模式下分别由闭合截面与开环截面生成旋 转曲面是本设计重点中的难点。

2.1 设计要点一:建立基准辅助曲线

运行 Pro /E,设置工作目录,新建文件,选择 进入三维零件实体模式。

单击插入基准曲线图标 ≥, 弹出菜单管理器,出现"曲线选项"菜单,选择"从方程完成"命令,打开"曲线:从方程"对话框,弹出菜单管理器 "得到坐标系"菜单,在 Pro/E 界面工作区选择 坐标系,在菜单"设置坐标系类型"中选取"笛卡 儿"坐标系(系统用 x, y 和z 表示坐标值,即直 角坐标系)。

系统显示编辑器窗口,此时输入曲线方程作 为常规特征关系,输入双曲线参数方程:

$$x = 4 / \cos (t * 89)$$

y = 4 * tan (t * 89)
z = 0

操作界面示于图 2。保存后退出,因参数方 程分母不为 0,故输入的方程只在第一象限显示,如图 3 所示。

▶ rel.ptd – 记事本	
文件 (F) 编辑 (E) 格式 (Q) 查看 (V) 帮助 (H)	
/* 为笛卡儿坐标系输入参数方程	~
/* 根据 t(将从 0 变到 1) 对 x,y 和 z	
/* 例如:对在 x-y 平面的一个圆,中心在原点	
/* 半径 =4, 参数方程将是:	
$x = 4 * \cos(t * 360)$	
$y = 4 * \sin(t * 360)$	
/* z=0	
$x=4/\cos(t * 89)$	
y=4 * tan(t * 89)	
z=0	v

图 2 记事本中的双曲线方程





图 3 创建的基准辅助曲线

Fig. 3 The fiducial assistant curve established

2.2 设计要点二:创建两个实体旋转双曲面

2.2.1 创建旋转特征 点击草绘图标 ☑进入 草绘器,在二维草绘模式下草绘旋转截面,选择 相应的草绘平面、草绘视图方向及参考线。

2.2.2 编辑辅助双曲线 截取旋转双曲面的基本截面:单击创建图元图标□抓取上述创建的双曲线,将鼠标移至基准双曲线附近,待双曲线 变成青色,单击使之变成黄色,即抓取完毕,如图 4 所示。单击插入基准点图标 Ⅰ,在双曲线尾端插入一基准点,移动双曲线并将它适当放大,在前端附近插入另一基准点,双击尺寸线设置其到 x 轴距离为 5.0,如图 5 所示。

甲,在Fro/E,外面工作区远律 在菜单栏上选择"编辑|修剪|删除段",将鼠 员置坐标系类型"中选取"笛卡 httma Academic Journal Electronic Pt标移动到插入的两个基准点之间的线段附近w待.cnki.t



图 4 创建图元抓取双曲线 Fig. 4 Meta plot by the hyperbola snatched



图 5 在前端附近插入基准点 Fig. 5 Datum point inserted at the forepart

其变成青色后单击,变为虚线表示删除,而前段 双曲线仍显示黄色表示保留。单击插入直线工 具图标,点击前端插入的基准点,并移动鼠标 $向_x 轴作垂直线段, 然后沿_x 轴单击双曲线顶$ 点,使保留的前段双曲线闭合,如图6所示。这 样旋转双曲面的基本截面创建完毕。



Fig. 6 Forepart hyperbola closed along x asis

2.2.3 镜像图元 创建两个实体旋转双曲面: 单击直线工具图标后的扩展按钮,选择插入中心 线图标 · , 在 γ 轴不同地方单击两次设置中心 线(使y轴与中心线重合)。按Ctrl键依次选择 上述闭合双曲线,使之全部变为红色,单击镜像 图标,信息栏提示选取一条中心线,单击γ轴 中心线,系统则生成了以γ轴为对称轴的两个 闭合双曲面,如图7所示。



图 7 草绘器中镜像闭合双曲线 Fig. \cdot ⁷ The mirror i mage of closed hyperbola in the sketch

单击v轴中心线,可按 Delete 键删除,重复 上述设置中心线的步骤,重新选择中心线使之与 x 轴重合。单击完成图标√,系统以 x 轴为中心 线生成旋转特征,采用默认生成实体类型,预 览后单击确定完成图标 ✓, 创建两个旋转实体 双曲面,如图8所示。



图 8 双曲面实体视图 Fig. 8 Solid view of hyperboloid

2.2.4 根据关系适当偏移两个实体双曲面 适 当放置两个旋转双曲面后,按Ctrl 键选择两个 双曲面,使两个面变为红色。在菜单栏上选择 "编辑 | 偏移"命令,根据式(2)及输入的双曲线方 程可得:

$$r_{0}^{2} = 2z_{0}^{2} = 4$$

 $z_{0} = \sqrt{2} = 1.414$
得偏移量为: $r_{0} - z_{0} = 2 - 1.414 = 0.586$

则在偏移操控板的文本框中输入 0.586 并

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.

单击确定完成图标 , 生成实体模型, 如图 10 所示, 两个作为三维四极离子阱上下端盖的 实体旋转双曲面创建完毕。



图 9 偏移预览视图 Fig.⁹ Peview of offseted model



图 10 偏移实体视图 Fig.10 Solid view of offseted model

2.3 设计要点三:创建双曲旋转环面

2.3.1 创建旋转特征 进入二维草绘模式,此 步骤类似设计要点二中①部分,所不同的是在单 击草绘按钮前,需先点击生成曲面类型按钮²,因为这里是由开环(即不是闭合)截面生成旋转 环面。在创建旋转特征时,由于系统默认是生成 旋转实体,若采用默认进入二维草绘模式,则旋 转曲面必须闭合,否则完成特征创建时,系统会 提示生成的特征不完全或无法生成特征的错误 信息。若旋转截面是开环,则在进入草绘器前须 先选定生成类型为旋转曲面。

2.3.2 编辑旋转开环草绘截面 按设计要点二
中②部分,抓取基准辅助双曲线并删除后段双曲
线。单击中心线图标:,依次在坐标原点与第
一象限某处单击,双击角度在文本框中添入"45"
并回车,设置一条分别与x、y 轴成 45°角的中心

按设计要点二中③部分对上述保留的前段 双曲线作镜像,如图 11 所示。再做一条与y 轴 重合的中心线,用刚才的镜像作原像再做一次镜 像,如图 12 所示。



图 11 第一次镜像 Fig.11 The first mirror i mage



图 12 第二次镜像 Fig.12 The second mirror i mage

2.3.3 生成双曲旋转环面 只保留两个镜像, 其他两条中心线、原来的前段双曲线及插入点一 律删除,否则在后面完成创建旋转特征时,系统 将提示截面不完整的错误信息。创建一条与*x* 轴重合的中心线,按完成图标 ✔,则以两个镜像 组成的开环双曲截面即以*x* 轴为中心线旋转成 双曲环面。预览后点击确定完成图标 ✔,完成 双曲旋转环面的创建。实体方式视图如图 13、 14 所示。

2·4 设计要点四∶完成三维四极离子阱的基本 结构创建

2.4.1 在上下端盖创建孔特征 在菜单栏上选择"插入│孔"命令,或单击创建孔特征图标□, 弹出孔特征操控板,选取端盖平面放置孔,单击 "放置"按钮弹出上滑面板,在"主参照"放置方式 下拉文本框中选择"同轴",在"次参照"框中单

线(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.

击,在工作区选择三维四极离子阱的中心线,在 直径文本框中和深度文本框中填入适当数值,线 框方式视图如图¹⁵所示。以实体方式视图预览 后,按确定完成图标,完成上端盖孔的创建,如图 16所示。



图 13 实体视图 1 Fig.13 Solid view 1



图 14 实体视图 2 Fig.14 Solid view 2



图 15 线框视图 Fig.15 Line frame view

按上述方法在另一个端盖上创建相同的孔 特征,也可以在菜单栏上选择"编辑 特征操作" 命令, 弹出菜单管理器"特征"菜单,选择"复制"



图 16 实体视图 Fig.16 Solid view

命令后,系统显示"复制特征"菜单,选择"新参 考"或者"镜像"选项,通过相应操作,都可实现在 另一个端盖上复制特征。不同的是"新参考"方 法可改变原特征的尺寸大小,需选择要放置复制 特征的平面位置。"镜像"方法不改变原特征的 大小,需选择进行镜像的对称面或对称轴。具体 操作可见参考文献^[5,7]。复制特征后的线框视 图和实体视图分别如图 17、18 所示。



图 17 复制孔特征线框视图 Fig.17 Line frame view of copyed hole feature

2.4.2 创建拉伸特征 在菜单栏上选择"插入 拉伸"命令,或单击拉伸图标 , 主视区方向出 现拉伸特征操控板,单击草绘图标 , 弹出"剖 面"对话框,选择下端盖面为参考面,单击"草绘" 按钮进入二维草绘模式。

单击"关闭"按钮,单击创建圆特征图标^O, 拾取坐标原点作为圆心,在附近任意处单击,双 击圆直径尺寸线,在文本框内输入"3.0"回车,绘 制拉伸截面,如图 19 所示。完成后,选择生成类 型为拉伸曲面^O,在拉伸长度文本框中填入适 当数值,预览后单击确定完成图标,生成实体模



图 18 复制孔特征实体视图 Fig.18 Solid view of copyed hole feature



图 19 草绘器中圆截面 Fig.19 Round section in the sketch



图 20 实体方式生成拉伸特征 Fig.20 Extended feature in the solid view

至此,即完成三维四极离子阱基本结构的创 建。图 ²¹ 为线框视图、图 ²²、²³ 分别为实体视 图。

3 小 结

探求用参数方程建立基准辅助双曲线是最 大的瓶颈,输入常规完整双曲线方程始终无法显 示。笔者认为双曲线是无限延伸的开环(非闭 合)曲线,Pro/E 可能难以创建。用圆替代双曲 线,效果又很不好。通过对参数取值范围的修 改,在第07象限看作连续来显示,可以创建成功,



图 21 线框视图 Fig.21 Line frame view



图 22 实体视图 1 Fig.22 Solid view 1



图 23 实体视图 2 Fig.23 Solid view 2

此处可以作为用 Pro /E 参数方程建立双曲线的 读者一点参考。

线,效果又很不好。通过对参数取值范围的修 改,在第94条限看作连续来显示,可以创建成功, 这,在第94条限看作连续来显示,可以创建成功, 正线的绝大部分后段曲线不是所需要的,直接旋 转后将带有后面冗余实体,如何修剪或删除后段 曲线是又一难点。因父子关系,一旦基准父特征 修改或删除将导致所有子特征删除或无法显示。 通过沿边创建图元抓取双曲线,再采取插入基准 点分段修剪删除的方法,可以得到所需的前段双 曲线。也有另一种思路:先创建旋转特征后,再 用去除材料的方法将后段冗余实体删除,实现方 法不唯一。

对于用 Pro /E 实现对离子阱结构的仿真设计,可以让人们在设计时很方便地改变质谱仪的结构参数,特别是用在对离子的光学特性进行 CAD /CAM 时,它的优点可以很突出地表现出来。

参考文献:

- [1] 朱建共,郭光真.四极滤质器中离子轨迹的计算 方法研究[J].厦门大学学报,2005,44(1):41-43.
- [2] 达道安·真空设计手册[M]·北京:国防工业出版

社,2004.

- [3] 朱建共,季 欧·三维四极离子阱的设计[J]·分析仪器,1998,(4):22-26.
- [4] 朱景梓·汉英机电工程技术词汇[M]·北京:科学 出版社,1992.
- [5] 孙印杰,田效伍,郑延斌.野火中文版 Pro /EN-GINEER 基础与实例教程[M].北京:电子工业 出版社,2004.
- [6] 黄圣杰,王俊祥. Pro /ENGINEER 2001 基础及应 用教程[M].北京:电子工业出版社,2002.
- [7] 龙马工作室·Pro/ENGINEER Wildfire 2.0 中文 版完全自学手册[M]·北京:人民邮电出版社, 2005.
- [8] 郝利剑,张宏波,李晓辉,等.中文版Pro/ENG-NEER WildFire 基础教程[M].北京:清华大学出版社,2004.
- [9] 郝泳涛,李 旸,王 利,等.三维计算机辅助设 计教程——Pro/ENGINEER[M].上海:同济大 学出版社,2004.

中国分析测试协会培训中心 2007 年上半年培训计划

为提高广大仪器分析工作者的仪器使用水平和应用水平,并且为大家提供高质量的培训服务,中国分析测试协会联合中国分析仪器学会和仪器信息网于 2006 年 12 月正式成立"仪器培训中心"。培训中心的主要工作是举办技术交流活动、培训班和企事业单位的内训等。培训中心的所有课程和通知都将预先公布在仪器信息网培训栏目(http://wwwinstrument.com.cn/training)和中国分析测试协会网站(http://www.caia.org.cn)上,请大家随时关注。

培训中心 2007 年上半年培训计划如下表所示:

课程名称	授课老师	开班日期	地点
仪器分析的样品前处理与数据处理(第一期)	邓 勃、汪正范、闫 军等	4月10日-13日	北京
实验室管理(第一期)	邓 勃、王庚辰、汪正范等	5 月 22-25 日	北京
气相色谱(第一期)	傅若农、刘虎威、庞增义、杨永坛等	4月17-20日	北京
液相色谱(第一期)	刘国诠、于世林、刘虎威、汪正范等	5 月 15-18 日	北京
原子吸收光谱(第一期)	邓 勃、郑永章、高介平、章诒学等	6月5-8日	北京
红外光谱(第一期)	徐振华、孙素琴、翁诗甫等	6 月 19-22 日	北京

中国分析测试协会培训中心联系人:杨老师 电话:010-51654077-8015 e-mail training @nstrument com en

(仪器信息网供稿)