

线形离子阱的装配误差仿真计算研究

李晓龙¹, 王伟民^{1,2}, 徐福兴^{1,2}, 丁传凡^{1,2}

(1. 宁波大学材料科学与化学工程学院, 浙江 宁波 315211;

2. 浙江省先进质谱技术与分子检测重点实验室, 浙江 宁波 315211)

摘要: 离子阱质量分析器作为便携式质谱仪的核心部分, 相当于“发动机”, 其决定了质谱仪的分析能力。离子阱质量分析器需要很高的加工和组装精度。然而, 在离子阱质量分析器的实际加工和装配过程中会不可避免地存在一定的误差, 这些误差会引入一些成分的高阶场, 造成质量分析器的分析性能下降。本文探讨了在质量分辨率较为稳定时, 离子阱质量分析器允许的最大装配误差。在双曲面线形离子阱结构的基础上, 通过优化离子出射方向上 x 电极的拉伸距离 Δr_x , 引入合理的高阶电场, 以提高离子阱的分辨率。利用 SIMION 软件对离子阱进行建模、借助 PAN33 软件分析双曲面线形离子阱的内部电场分布、使用 AXSIM 软件模拟离子运动轨迹及质谱图。结果表明, 在 $\Delta r_x=0.9$ mm 时, 通过优化交流电压(AC)幅值、频率等参数, 双曲面线形离子阱在 m/z 609 处的质量分辨率达到最佳, 为 3 958。然后, 讨论了 x 、 y 和 xy 方向的 3 种装配误差情况, 每个误差变量的步长为 0.01 mm (10 μ m), 依次开展仿真研究。当 x 、 y 和 xy 方向的装配误差分别小于 0.06、0.06、0.04 mm 时, 分辨率较稳定, 可为后续的实际装配误差提供参考。

关键词: 离子阱; 电场分析; 装配误差; AXSIM; SIMION

中图分类号: O657.63

文献标志码: A

文章编号: 1004-2997(2025)04-0464-11

DOI: 10.7538/zpxb.2024.0193

CSTR: 32365.14.zpxb.2024.0193

Simulation and Calculation of Assembly Error of Linear Ion Trap

LI Xiao-long¹, WANG Wei-min^{1,2}, XU Fu-xing^{1,2}, DING Chuan-fan^{1,2}

(1. School of Materials Science and Chemical Engineering, Ningbo University, Ningbo 315211, China;

2. Zhejiang Provincial Key Laboratory of Advanced Mass Spectrometry Technology and Molecular Detection, Ningbo 315211, China)

Abstract: As the core part of the portable mass spectrometers, the ion trap mass analyzer is equivalent to the "engine", which determines the analytical capability of the mass spectrometer. Ion trap mass analyzers require a high degree of precision in both machining and assembly. However, there will inevitably be certain errors in the actual machining and assembly processes of the ion trap, which introduce the high-order field of some components and affect the analytical performance of the ion trap mass analyzer, thereby causing the analytical performance of the mass spectrometer to deteriorate. In this paper, when the mass resolution remained stable, the tolerated maximum assembly error for a ion trap mass analyzer was discussed. On the basis of the hyperboloid linear ion trap structure, the resolution of the ion trap was improved by optimizing the tensile distance Δr_x of the x

electrode in the ion exit direction, and a reasonable high-order electric field was introduced. The ion trap was modeled by SIMION software, PAN33 software was used to analyze the internal electric field distribution of a hyperboloid linear ion trap, and AXSIM software was used to simulate ion motion trajectories and mass spectra. The results showed that when Δr_x is 0.9 mm, by optimizing parameters such as the alternating voltage (AC) amplitude and frequency, the best mass resolution of the hyperboloid linear ion trap reach 3 958 at m/z 609. Then, three cases of assembly error in the x , y and xy directions were discussed, and the step size of each error variable was 0.01 mm (10 microns), and the simulation studies were successively given. When the assembly error in the x , y and xy directions are less than 0.06, 0.06, 0.04 mm, respectively, the resolution is relatively stable, which can provide a reference for the subsequent actual assembly error.

Key words: ion trap; electric field analysis; assembly error; AXSIM; SIMION

离子阱质量分析器作为质谱仪的核心部件,凭借结构简单、灵敏度高、对真空度要求低和具有多级质谱分析功能等优势,成为小型化质谱仪^[1]的首选,已广泛应用于新能源^[2]、医学^[3]、环境^[4]、石油化工^[5]和食品安全^[6]等领域。三维离子阱(3D ion trap)^[7]是最早出现的商用离子阱质量分析器,由1个环电极和2个端盖电极构成,但其对外部注入的离子捕获效率低、易产生空间电荷效应,存在质量歧视严重的问题。二维的线形离子阱(linear ion trap, LIT)^[8]改善了3D离子阱的缺点,显著提高了离子的存储容量和捕获效率,质量歧视明显减小。传统的线形离子阱由三段式双曲面柱状电极和2个端盖电极组成,仅中间段的1对电极中央开设离子引出槽,且双曲面电极存在加工难度高、组装精度要求高等局限性。因此,多种简化电极^[9]结构的LIT相继问世,如矩形离子阱(rectilinear ion trap, RIT)^[10]、印刷电路板离子阱(printed circuit board ion trap, PCBIT)^[11]、三角形电极线形离子阱(triangular electrode linear ion trap, TeLIT)^[12]及半圆弧面线形离子阱(half-round-rode electrode linear ion trap, HreLIT)^[13]等。然而,用简化的电极结构取代传统的双曲面电极,离子阱内部会产生非线性高阶场,在一定程度上削弱了LIT的分析性能。近年来,随着精密机械加工技术^[14]的迅速发展,如双曲面慢走丝技术和双曲面组件加工工艺等,双曲面电极的加工精度得到大幅提高,制造和加工成本也在逐步降低。同时,传统的双曲面电极LIT理论完善、灵敏度高、分析性能良好,且双曲面离子阱的离子储存能力强,其 z 轴的横截面具有双曲线性质,能构成以四极场为主的射频电场,减少复杂的高

阶场成分,便于研究和分析。

由于模拟计算仿真是基于理想条件,在实际实验中,离子阱的结构和空间位置均会不可避免地出现误差,因此需要保证精准的制造加工精度。目前,高精密技术已用于离子阱的加工,如低温共烧陶瓷(LTCC)^[15]和微机电系统(MEMS)被用于制造小型化圆柱形离子阱,立体光刻设备(SLA)^[16]用于在印刷电路板(PCB)^[17]上实现多通道直线离子阱。虽然离子阱的电极加工精度较高,但在组装中可能会产生一定的装配误差,从而导致离子阱的性能存在一定波动。例如,有报道分析了小型化线形金属丝离子阱3个方位的电极错位(剪切、倾斜和扭曲)对离子阱电场的影响^[18];针对由2个图案板制成的线形离子阱,研究了所有6个自由度的不对准对分辨能力和离子检测效率的影响^[19];以及通过高精度电场模拟方法研究3种不同几何形状电极(双曲线、圆形和矩形)的线形离子阱内微米级几何偏差(平移和角位移)对质量分辨率的影响^[20]。本文将研究在 x 、 y 和 xy 方向存在装配误差对分辨能力的影响。

1 模拟实验部分

1.1 双曲面模型建立

利用SIMION软件建立的离子阱几何模型示于图1。双曲面LIT的初始结构呈中心对称,4个电极上均设有离子引出槽, x 轴电极两侧各设有1块长电极,作为离子探测器。主要几何参数设置如下:离子阱的场半径(r_0)为4.8 mm,离子引出槽的宽度(d)为0.8 mm,深度(a)为0.5 mm。定义 r_x 为离子出射方向上的电极与离子阱几何中心的距离(电极半径); Δr_x 为 x 轴两侧电极在

r_0 基础上向外拉伸的距离, 且 $r_x = r_0 + \Delta r_x$ 。通过拉伸和压缩来优化 r_x , 模拟双曲面离子阱最优分辨率下的 r_x 。

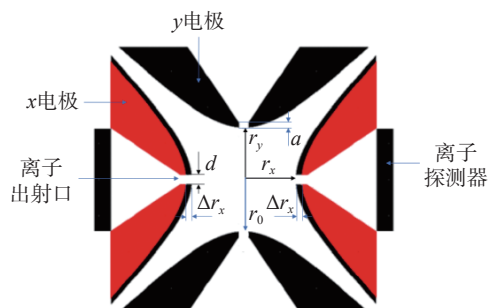


图1 线形离子阱对称结构的径向横截面及主要参数
Fig. 1 Radial cross-section and main parameters of the symmetrical structure of the linear ion trap

1.2 内部电场分析及计算方法

离子阱的电极形状、离子引出槽及装配精度都会产生高阶场^[21]成分, 不同比例的高阶场对离子阱的性能有着不同影响。一般情况下, 高阶场的存在会降低离子阱的分辨率, 但适当的高阶场含量会提高离子阱的分析性能。根据二维多极场理论, 线形离子阱内任意一点的电势都必须满足 Laplace 方程, 其表达式为:

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

式中, V_{RF} 和 Ω 分别为射频(RF)电压的幅值和频率; Re 为多项式的实部; A_N 为相应多极场的成分大小; x 和 y 为笛卡尔坐标; r_0 为场半径。

本研究利用 PAN33 软件对场中心到电极边缘单位圆上的电势分布进行傅里叶变换, 计算离子阱高阶多极场成分的数值。

离子阱的质量分辨率表达式为:

$$R = M / \Delta M \quad (2)$$

式中, M 为测试样品的质荷比, ΔM 为模拟所得质谱峰的半峰高宽。

本实验将基于 SIMION 软件建立的离子阱模型加载到 AXSIM 软件, 对离子运动轨迹进行模拟仿真, 得到离子的质谱峰。模拟样品为利血平, m/z 609、610、611 离子的数目均为 400 个, 离子的初始位置分布在离子阱的几何中心区域。模拟中选用硬球碰撞模型, 相当于实验中使用缓冲气体, 使离子经碰撞冷却后束缚在离子阱的几何中心。整个模拟过程只记录离子在 x - y 方向上

的运动轨迹。

在模拟中, 本研究采用模拟扫描射频电压的工作模式, 即射频信号 RF 为频率恒定的正弦信号, 通过扫描 RF 电压的幅值来实现质量分辨扫描, 而耦合的共振激发交流(AC)电压的频率为 RF 频率 1/3 附近的正弦信号。当离子的固有振动频率与 AC 频率相近或相等时, 离子发生共振运动, 其振荡幅度不断增大, 直至弹出离子阱, 从而实现质量扫描。本研究设置 RF 信号频率为 0.9 MHz, 起始幅值为 650 V_{0-p}, 以 1 mV/μs 速率进行幅值扫描, AC 频率设置为 RF 频率的 1/3 附近, 后续的 AC 电压和频率还需进一步优化, 以获得最佳的质谱峰。

1.3 研究方法流程

首先, 针对中心对称的离子阱拉伸 x 方向上的场半径 r_x , 得到最佳分辨率的尺寸, 并分析电场含量和分辨率之间的关系。在此基础上, 分别对只有 x 方向、只有 y 方向、 x 和 y 方向同时存在这 3 种情况的离子阱进行装配误差分析, 发现在一定误差范围内离子阱的分析性能不受显著影响, 其方法流程图示于图 2。

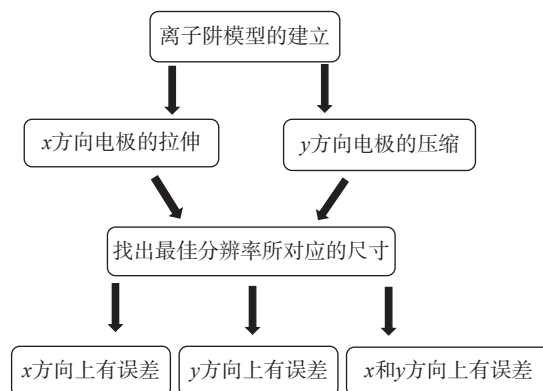


图2 方法流程图

Fig. 2 Methodology flow chart

2 结果与讨论

2.1 双曲面线形离子阱的结构优化

在线形离子阱中, 通常采用拉伸电极的方式补偿离子引出槽带来的内部电场畸变^[13]。本研究以通过优化 x 轴两侧电极向外拉伸的距离(Δr_x), 以改善离子阱中电场含量, 提高离子阱的分析性能。在模拟过程中, 离子阱的场半径 $r_0 = 4.8$ mm 保持不变, 分别对 Δr_x 进行拉伸和压缩, 其取值范围分别为 [0 mm, 1.1 mm] 和 [-1.1 mm, 0 mm]。

每隔 0.1 mm 取 1 组数据,利用 PAN33 软件计算不同拉伸与压缩距离下的内部高阶场成分含量。

电极的拉伸与压缩使双曲面 LIT 由中心对称结构变成关于 x 轴对称结构。不同 Δr_x 取值时,双曲面 LIT 内部高阶场的含量趋势列于表 1。内部高阶场与四极场的比值(A_n/A_2)的变化情况示于图 3。在压缩尺寸时,随着尺寸的减小,

A_6/A_2 、 A_8/A_2 、 A_{10}/A_2 比值基本保持不变, A_4/A_2 比值急剧下降,示于图 3a。在拉伸尺寸时,随着拉伸尺寸的增加, A_4/A_2 比值变化最大, A_6/A_2 比值变化幅度较大, A_8/A_2 和 A_{10}/A_2 比值变化幅度相对较小,示于图 3b。而双曲面 LIT 内部多极场分布的变化对分析性能的影响,需结合离子运动轨迹和质谱峰进一步分析。

表 1 压缩与拉伸电极下不同尺寸的高阶场含量

Table 1 Higher-order field contents of different sizes under compressive and tensile electrodes

电极半径 Electrode radius r_x/mm	四极场系数 A_2	八极场系数 A_4	十二极场系数 A_6	十六极场系数 A_8	二十极场系数 A_{10}
3.7	0.7316	-0.0219	-0.0144	-0.0063	-0.0068
3.8	0.7580	-0.0203	-0.0146	-0.0061	-0.0070
3.9	0.7838	-0.0185	-0.0147	-0.0058	-0.0074
4.0	0.8091	-0.0167	-0.0149	-0.0055	-0.0074
4.1	0.8337	-0.0148	-0.0149	-0.0051	-0.0076
4.2	0.8578	-0.0128	-0.0150	-0.0046	-0.0079
4.3	0.8813	-0.0107	-0.0151	-0.0040	-0.0082
4.4	0.9042	-0.0086	-0.0152	-0.0034	-0.0087
4.5	0.9265	-0.0065	-0.0153	-0.0026	-0.0091
4.6	0.9482	-0.0043	-0.0153	-0.0018	-0.0097
4.7	0.9692	-0.0021	-0.0155	-0.0009	-0.0104
4.8	0.9897	-0.00001	-0.01564	-0.0000005	-0.0111
4.9	0.9689	0.0020	-0.0140	0.0009	-0.0101
5.0	0.9483	0.0037	-0.0125	0.0017	-0.0090
5.1	0.9282	0.0052	-0.0113	0.0023	-0.0082
5.2	0.9084	0.0064	-0.0102	0.0027	-0.0075
5.3	0.8890	0.0075	-0.0092	0.0031	-0.0069
5.4	0.8700	0.0083	-0.0084	0.0034	-0.0065
5.5	0.8514	0.0090	-0.0077	0.0036	-0.0061
5.6	0.8332	0.0096	-0.0071	0.0038	-0.0057
5.7	0.8154	0.0100	-0.0066	0.0039	-0.0054
5.8	0.7980	0.0104	-0.0061	0.0040	-0.0052
5.9	0.7810	0.0106	-0.0057	0.0040	-0.0050

不同 Δr_x 值下,所获得的最佳质谱峰分辨率列于表 2。其中,峰形畸形的形成是由于理想的双曲面电极电场为纯四极场,但实际的双曲面离子阱是截断的,且存在离子喷射孔,导致离子阱中会引入高阶场。例如,负 A_4 、负 A_6 叠加在四极场会导致离子弹出延迟,从而产生峰形畸形,影响离子阱的性能。在模拟仿真中,常见的峰形较差的质谱峰示于图 4。

由图 3 不同尺寸下各高阶场含量与四极场含量的比值及表 2 中不同尺寸下质谱峰的最佳分辨率分析可知,在压缩电极时,主要考虑 A_4 的影响, A_4 为负值且含量越高,会导致离子阱性能变差。

在电极拉伸时,随着拉伸尺寸的增加, A_4/A_2 比值从 -0.001% 增至 1.36%, A_6/A_2 比值从 -1.58% 变化到 -0.73%; 而 A_8/A_2 和 A_{10}/A_2 比值变化幅度

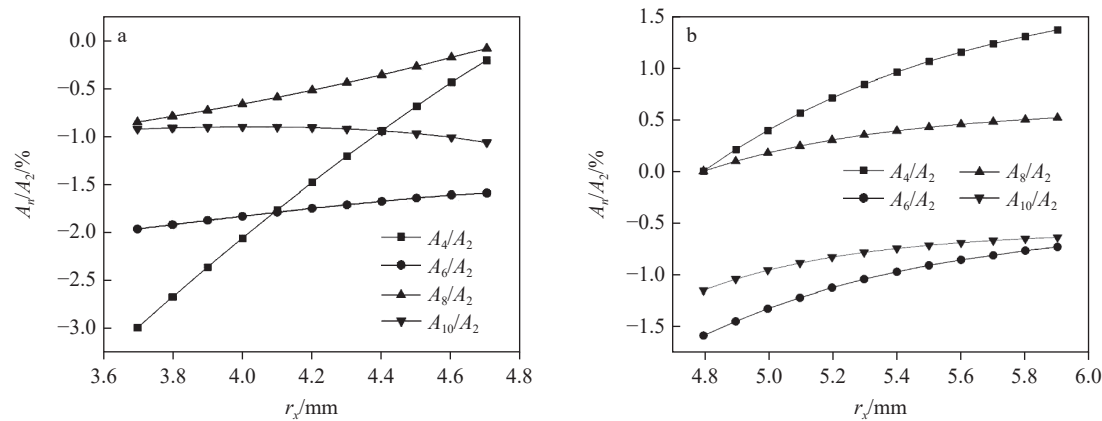


图3 压缩(a)和拉伸(b)尺寸下的高阶场比值

Fig. 3 Higher-order field ratios for compression (a) and tensile (b) dimensions

表2 压缩和拉伸情况下不同尺寸的分辨率

Table 2 Resolutions of different dimensions under compression and tensile conditions

电极半径 Electrode radius r_x/mm	最佳分辨率 Optimal resolution	电极半径 Electrode radius r_x/mm	最佳分辨率 Optimal resolution
3.7	峰形畸形	4.9	峰形畸形
3.8	峰形畸形	5.0	峰形畸形
3.9	峰形畸形	5.1	1276
4.0	峰形畸形	5.2	682
4.1	峰形畸形	5.3	1421
4.2	峰形畸形	5.4	2940
4.3	峰形畸形	5.5	3166
4.4	峰形畸形	5.6	3665
4.5	峰形畸形	5.7	3958
4.6	峰形畸形	5.8	3613
4.7	峰形畸形	5.9	3442
4.8	峰形畸形		

相对较小, A_8/A_2 比值从-0.000 05%变化到 0.512%, A_{10}/A_2 比值从-1.122%变化到-0.64%, 示于图 3b。因此, 改变 r_x 时, 仅对内部 A_4 、 A_6 值产生较大影响, 故只需考虑 A_4 、 A_6 含量对离子阱性能的影响。

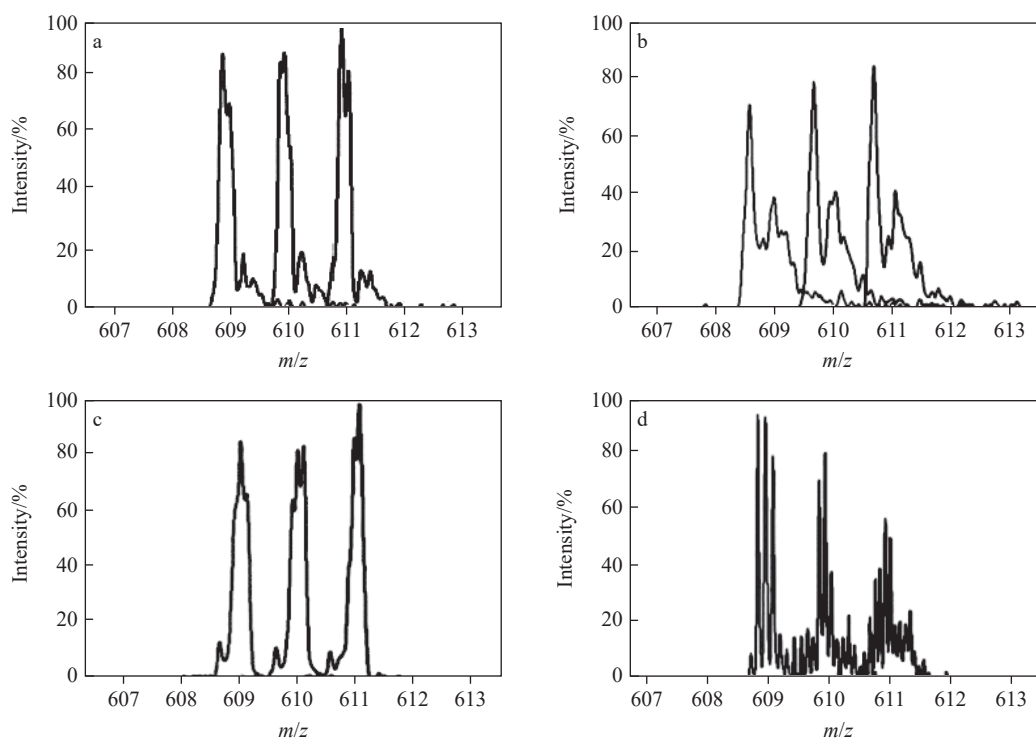
从表 2 可知, $r_x=4.8$ mm 尺寸下的峰形发生畸变, 此时 A_4 和 A_6 为负^[26], 导致质谱峰畸变。 r_x 为 4.9、5.0 mm 尺寸下的峰形仍发生畸变, 此时 A_4 为正但 A_6 为负, 可能原因是正的 A_4 不足以弥补负的 A_6 带来的场缺陷, 从而使离子喷射延迟, 峰形畸变^[27]; 5.1~5.7 mm 尺寸下的离子阱分辨率随尺寸增加而提升, A_4 值随尺寸增加而增大, 负 A_6 值随尺寸增加而减小, 可能是增加的正 A_4 能够弥补负 A_6 ^[28] 的场缺陷; 当 r_x 大于

5.7 mm 时, 其中的高阶场含量比例可能失衡, 导致分辨率下降。因此, 选择 $r_x=5.7$ mm 进行后续模拟。

在 Δr_x 为 0.8、0.9、1.0 mm 时, 得到的最佳质谱图示于图 5, m/z 609 处的分辨率分别为 3 665、3 958、3 613。尽管 Δr_x 为 1.0 mm 时分辨率达到 3 613, 但离子质谱峰的峰形较差, 可能是由于此时的高阶场在离子出射口引发非线性共振, 导致离子在共振出射时出现不稳定性。因此, 当 Δr_x 为 0.9 mm 时, 可获得最佳分辨率。

2.2 组装误差分析

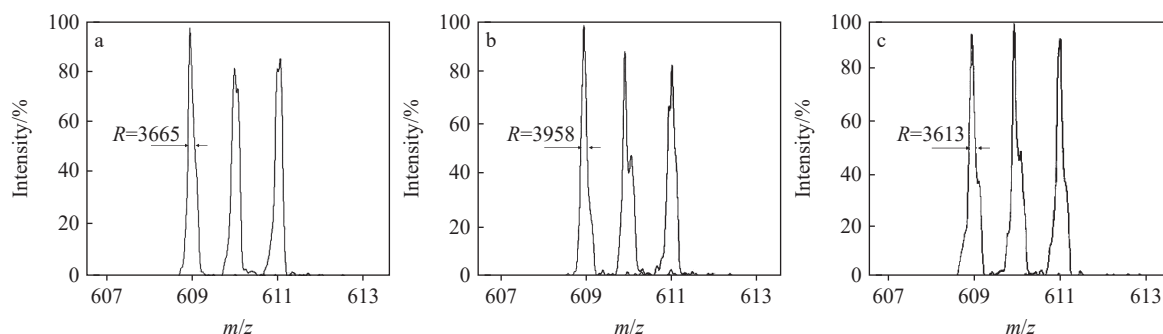
在 $x:y=5.7$ mm:4.8 mm 的基础上进行组装误差分析, 分为仅 x 方向存在误差、仅 y 方向存在误差、 x 和 y 方向同时存在误差 3 种情况。误差



注: a. 峰形拖尾; b. 峰形分叉; c. 峰形前缀; d. 峰形畸形

图4 常见峰形较差的质谱峰^[22]

Fig. 4 Mass spectral peaks with commonly poor peak shape^[22]



注: a. 0.8 mm; b. 0.9 mm; c. 1.0 mm

图5 x 方向不同拉伸尺寸下的最佳质谱峰

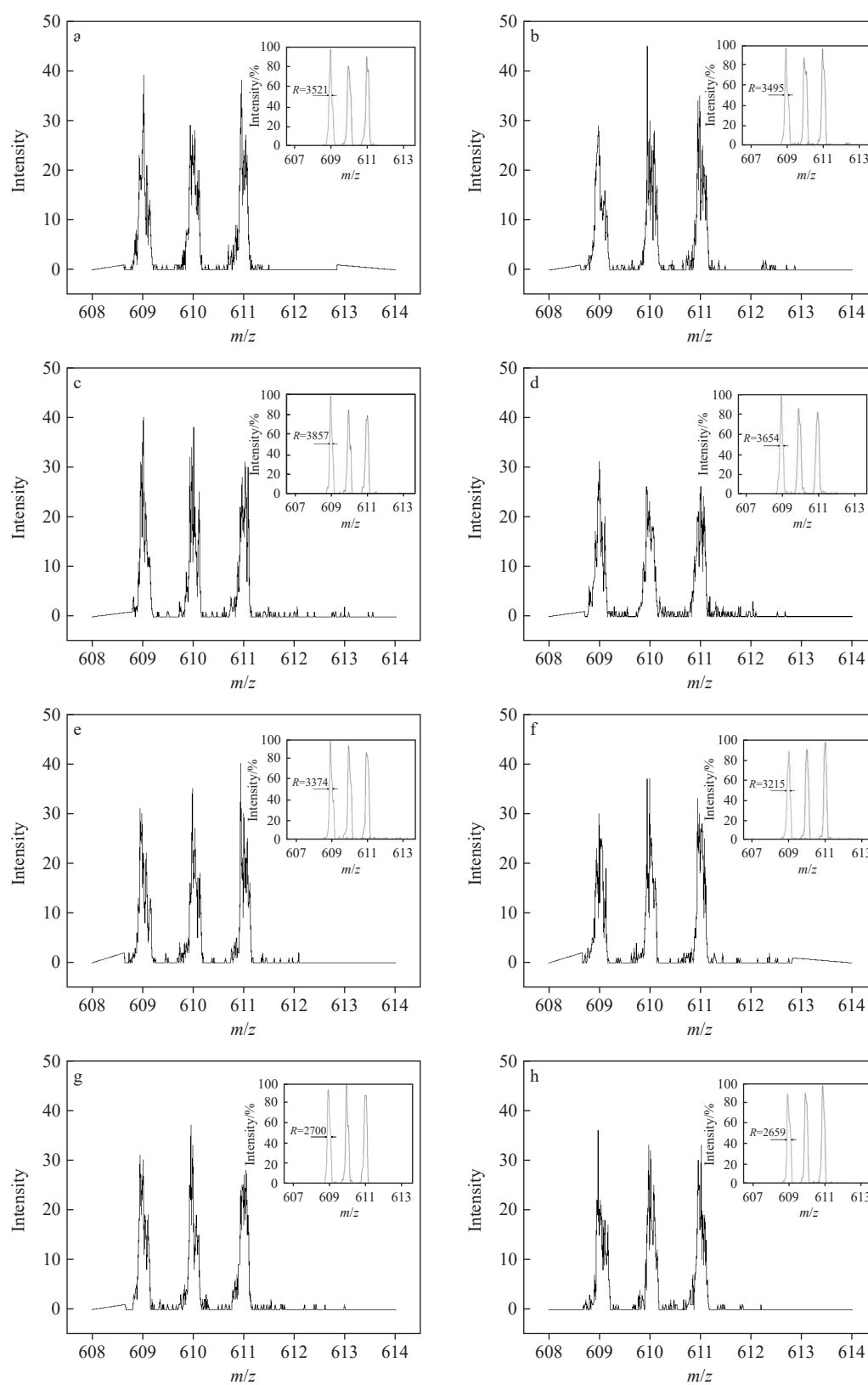
Fig. 5 Optimal mass spectral peaks under different stretch sizes in the x direction

变量增加为 0.01 mm。

2.2.1 x 方向进行装配误差 经模拟仿真后,得到 x 方向上的装配误差在 0.06 mm 范围内时,分辨率最低可达 3 215;而当装配误差大于 0.06 mm 时,分辨率显著下降(分辨率下降超过 1 000 表明此时分析性能减弱),当误差为 0.07、0.08 mm 时,分辨率只能达到 2 700、2 659。而上文中提到,当 r_x 为 5.8 mm 时,尽管分辨率为 3 613,但图中可观察到离子峰形较差。因此,只要离子阱 x 方向上的装配误差保持在 0.06 mm 以内,分辨

率变化幅度较小。 x 方向上不同装配误差的质谱峰示于图 6。

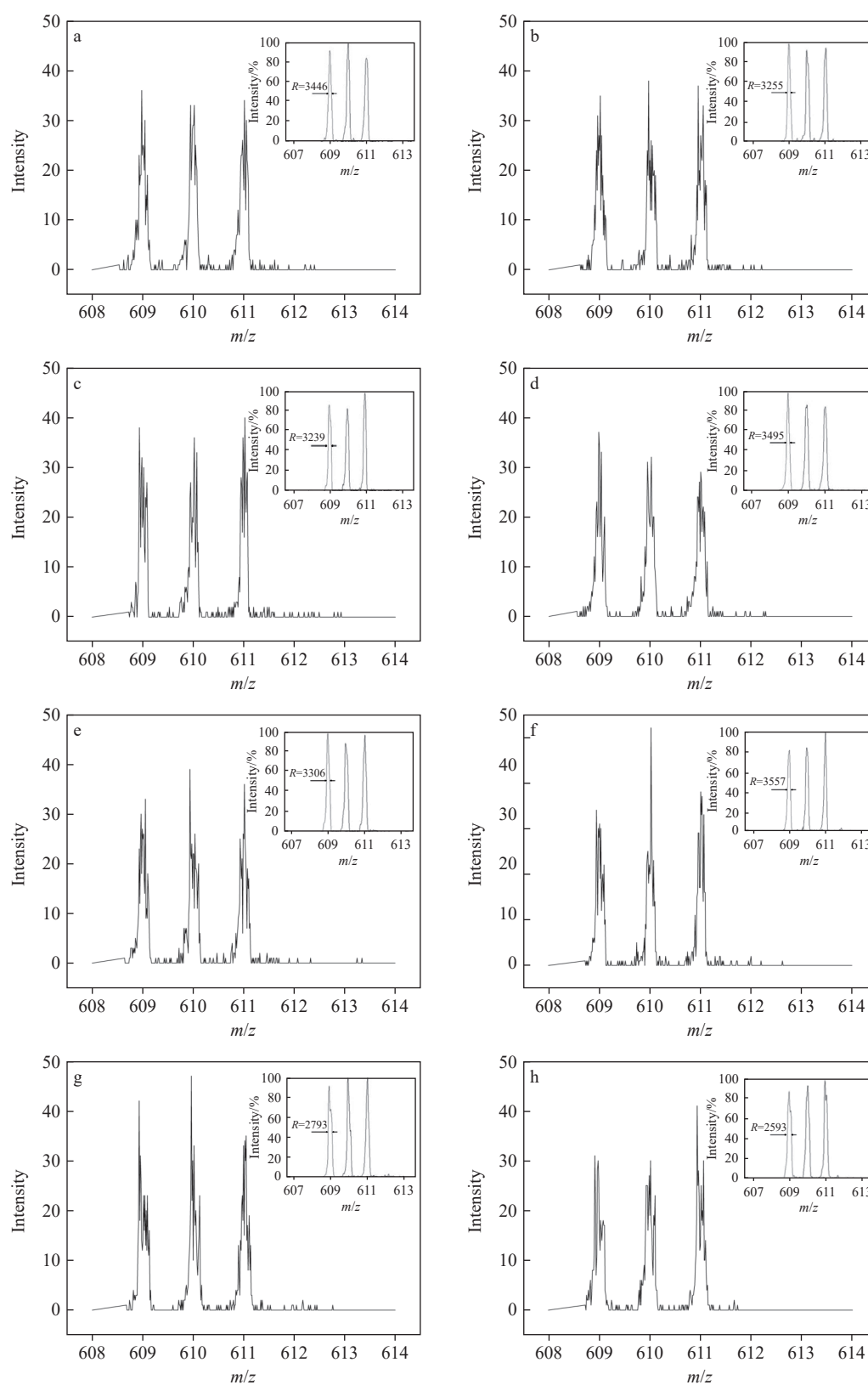
2.2.2 y 方向进行装配误差 保持 x 方向上装配尺寸 r_x 为 5.7 mm 不变,仅改变 y 方向上的 r_y ,且 $\Delta r_y=0.01$ mm,模拟不同误差尺寸下的最佳分辨率,结果示于图 7。可以看出,当 r_y 为 4.86 mm 时,分辨率保持在 3 557;而 r_y 为 4.87 mm 时,分辨率显著下降,只能达到 2 793。因此,当 y 方向存在装配误差且误差范围不超过 0.06 mm 时,分辨率变化幅度较小。



注: a. 0.01 mm; b. 0.02 mm; c. 0.03 mm; d. 0.04 mm; e. 0.05 mm; f. 0.06 mm; g. 0.07 mm; h. 0.08 mm

图6 x 方向上不同装配误差的质谱峰和处理后的质谱峰(插图)

Fig. 6 Mass spectral peaks and processed mass spectral peaks (illustration) with different assembly errors in the x direction



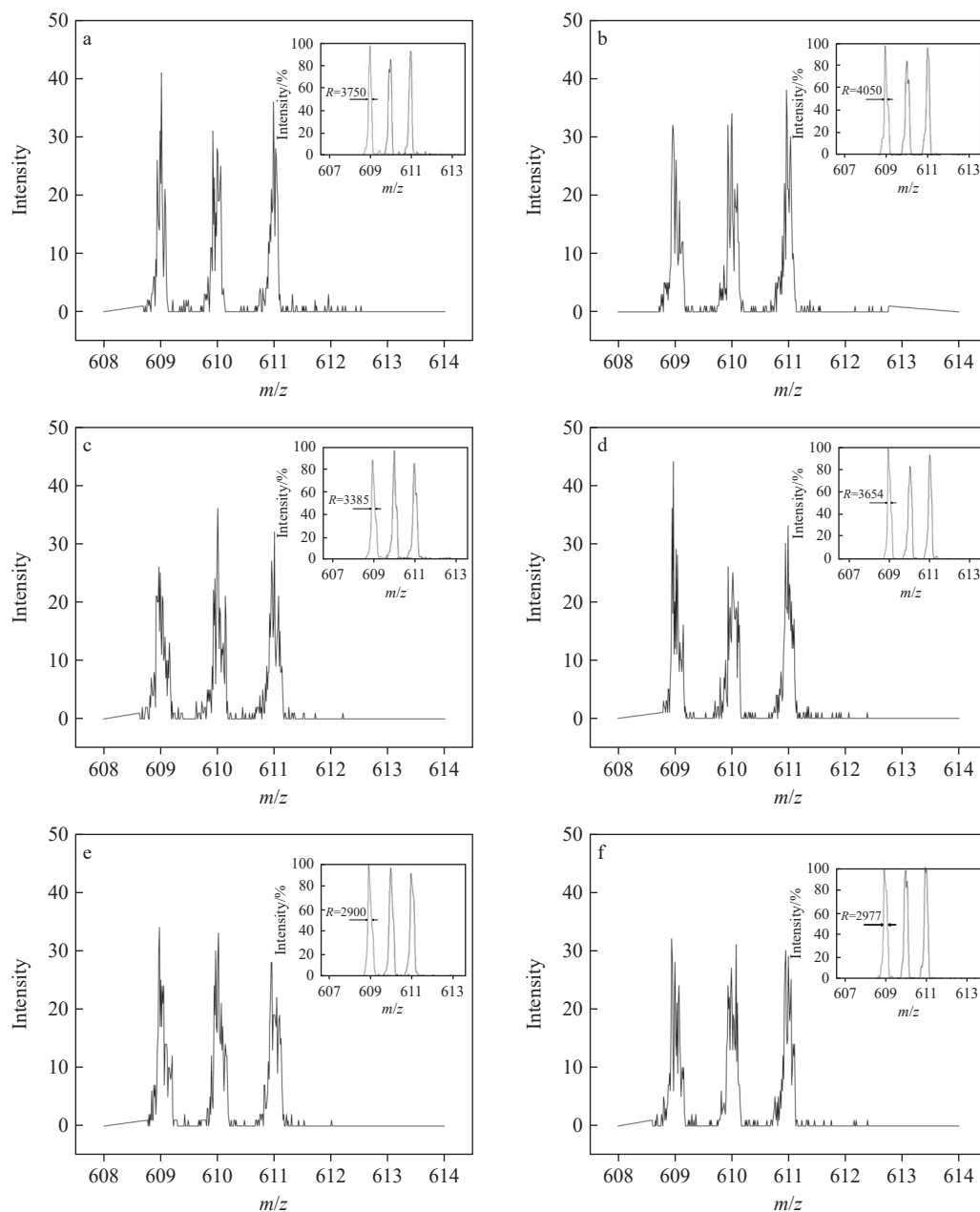
注: a. 0.01 mm; b. 0.02 mm; c. 0.03 mm; d. 0.04 mm; e. 0.05 mm; f. 0.06 mm; g. 0.07 mm; h. 0.08 mm

图7 y 方向上不同装配误差的质谱峰和处理后的质谱峰(插图)

Fig. 7 Mass spectral peaks and processed mass spectral peaks (illustration) with different assembly errors in the y direction

2.2.3 x 和 y 方向上同时存在误差 当 x 和 y 方向上同时存在误差且保持相同时, 即 $\Delta r_x = \Delta r_y = 0.01$ mm, 模拟不同误差尺寸下的最佳分辨率, 示于图 8。可以看出, 当误差为 0.02 mm 时, 分辨率可达 4 050, 但离子丰度较低, 在约半峰高处的离

子峰发生变形; 当误差为 0.04 mm 时, 分辨率为 3 654; 当误差为 0.05、0.06 mm 时, 分辨率显著下降, 只能达到 2 900、2 977。因此, 在 x 和 y 方向上同时存在装配误差且误差范围不超过 0.04 mm 时, 分辨率保持稳定。



注: a. 0.01 mm; b. 0.02 mm; c. 0.03 mm; d. 0.04 mm; e. 0.05 mm; f. 0.06 mm

图 8 x 和 y 方向上同时存在装配误差的质谱峰和处理后的质谱峰(插图)

Fig. 8 Mass spectral peaks and processed mass spectral peaks (illustration) with different assembly errors in the x and y directions

3 结论

本文研究了离子阱装配误差对质量分辨率的影响。通过模拟仿真, 对中心对称的离子阱进

行 x 方向的电极拉伸, 确定了最佳分辨率对应的尺寸。当 $r_x:r_y=5.7$ mm:4.8 mm 时, 质量分辨率达到 3 958, 并分析了不同尺寸下的高阶场含量。

在此基础上,对离子阱装配误差进行分析,得到当仅 x 方向存在装配误差、仅 y 方向存在装配误差、 x 和 y 方向同时存在装配误差时,误差范围分别在0.06、0.06、0.04 mm以内,分辨率变化幅度较小。因此,只要将离子阱装配误差控制在合理的范围内,对其分析性能的影响不大。

参考文献:

- [1] WU G, GRAHAM COOKS R, OUYANG Z, YU M, CHAPPELL W J, PLASS W R. Ion trajectory simulation for electrode configurations with arbitrary geometries[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2006, 17(9): 1 216-1 228.
- [2] 栗世涵, 钱超, 周少东. 质谱技术在新能源领域的应用[J]. *质谱学报*, 2024, 45(5): 587-599.
LI Shihan, QIAN Chao, ZHOU Shaodong. Application of mass spectrometry in new energy fields[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2024, 45(5): 587-599 (in Chinese).
- [3] SAKURAI T, IRII T, IWADATE K. Simultaneous quantification of urea, uric acid, and creatinine in human urine by liquid chromatography/mass spectrometry[J]. *Legal Medicine*, 2022, 55: 102 011.
- [4] 秦静怡, 欧阳津, 那娜. 基于常压质谱的环境污染物检测及研究进展[J]. *质谱学报*, 2023, 44(2): 158-169.
QIN Jingyi, OUYANG Jin, NA Na. Recent applications of ambient ionization mass spectrometry for environmental pollutant detection[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2023, 44(2): 158-169(in Chinese).
- [5] 张艳芬. 基于大气压化学电离及多维质谱的石油中含硫化化合物的分析[D]. 北京: 中国石油大学(北京), 2021.
- [6] 黄景初, 陈嘉欣, 何咏欣. 高分辨质谱技术在食品检测中的应用[J]. *中国食品工业*, 2024(10): 92-94.
HUANG Jingchu, CHEN Jiaxin, HE Yongxin. Application of high resolution mass spectrometry in food detection[J]. *China Food Industry*, 2024(10): 92-94(in Chinese).
- [7] JOSHI M K, SATYAJIT K T, RAO P M. Influence of a geometrical perturbation on the ion dynamics in a 3D Paul trap[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2015, 800: 111-118.
- [8] 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.
- [9] PENG Y, AUSTIN D E. New approaches to miniaturizing ion trap mass analyzers[J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2011, 30(10): 1 560-1 567.
- [10] HUO X, CHEN D, TIAN Y, LI M, YU Q, GUO C, WANG X. Asymmetric rectilinear ion trap with unidirectional ion ejection capability[J]. *Journal of Mass Spectrometry*, 2020, 55(10): e4606.
- [11] JIANG D, JIANG G, LI X, XU F, WANG L, DING L, DING C. Printed circuit board ion trap mass analyzer: its structure and performance[J]. *Analytical Chemistry*, 2013, 85(12): 6 041-6 046.
- [12] XIAO Y, DING Z, XU C, DAI X, FANG X, DING C. Novel linear ion trap mass analyzer built with triangular electrodes[J]. *Analytical Chemistry*, 2014, 86(12): 5 733-5 739.
- [13] LI X, ZHANG X, YAO R, HE Y, ZHU Y, QIAN J. Design and performance evaluation of a linear ion trap mass analyzer featuring half round rod electrodes[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2015, 26(5): 734-740.
- [14] 李佳伟, 吉方, 赵舜. 双曲面型离子阱极杆精密车削方法[J]. *制造技术与机床*, 2022(4): 103-109.
LI Jiawei, JI Fang, ZHAO Shun. Hyperbolic ion trap rod fabricated using precision turning method[J]. *Manufacturing Technology & Machine Tool*, 2022(4): 103-109(in Chinese).
- [15] CHAUDHARY A, van AMEROM F H W, SHORT R T, BHANSALI S. Fabrication and testing of a miniature cylindrical ion trap mass spectrometer constructed from low temperature co-fired ceramics[J]. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2006, 251(1): 32-39.
- [16] CLARE A T, GAO L, BRKIĆ B, CHALKER P R, TAYLOR S. Linear ion trap fabricated using rapid manufacturing technology[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2010, 21(2): 317-322.
- [17] MAAS J D, HENDRICKS P I, OUYANG Z, COOKS R G, CHAPPELL W J. Miniature monolithic rectilinear ion trap arrays by stereolithography on printed circuit board[J]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2010, 19(4): 951-960.
- [18] GAMAGE R W, AUSTIN D E. The effects of electrode misalignments on the performance of a miniaturized linear wire ion trap mass spectrometer[J]. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2020, 453: 116 344.
- [19] WU Q, TIAN Y, LI A, AUSTIN D E. Simulations of electrode misalignment effects in two-plate linear ion

- traps[J]. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2015, 393: 52-57.
- [20] WANG Y, ZHANG X, FENG Y, SHAO R, XIONG X, FANG X, DENG Y, XU W. Characterization of geometry deviation effects on ion trap mass analysis: a comparison study[J]. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2014, 370: 125-131.
- [21] MAKAROV A A. Resonance ejection from the Paul trap: a theoretical treatment incorporating a weak octapole field[J]. *Analytical Chemistry*, 1996, 68(23): 4 257-4 263.
- [22] 周晓煜. 离子阱质谱的非线性理论研究[D]. 武汉: 武汉大学, 2012.
- [23] WANG Y, HUANG Z, JIANG Y, XIONG X, DENG Y, FANG X, XU W. 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.
- [24] SUDAKOV M, DOUGLAS D J. Linear quadrupoles with added octopole fields[J]. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2003, 17(20): 2 290-2 294.
- [25] DANG Q, XU F, HUANG X, FANG X, WANG R, DING C. Linear ion trap with added octopole field component: the property and method[J]. *Journal of Mass Spectrometry*, 2015, 50(12): 1 400-1 408.
- [26] DAWSON P H, WHETTEN N R. Non-linear resonances in quadrupole mass spectrometers due to imperfect fields[J]. *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Physics*, 1969, 3(1/2): 1-12.
- [27] FRANZEN J. The non-linear ion trap. Part 4. Mass selective instability scan with multipole superposition[J]. *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, 1993, 125(2/3): 165-170.
- [28] FRANZEN J. The non-linear ion trap. Part 5. Nature of non-linear resonances and resonant ion ejection[J]. *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, 1994, 130(1/2): 15-40.
- (收稿日期: 2024-11-12; 修回日期: 2024-12-23)