

· 电子机械工程 ·

## 非对称波形射频电压对FAIMS的影响分析

徐利梅<sup>1</sup>, 吴福民<sup>1</sup>, 钟其水<sup>1</sup>, 杨敏<sup>2</sup>

(1. 电子科技大学空天科学技术研究院 成都 611731; 2. 成都安可信电子股份有限公司 成都 610211)

**【摘要】**研究了射频电压的大小、占空比的改变对高场非对称波形离子迁移谱(FAIMS)热量的影响。随着射频电压增大, FAIMS的迁移管产生的热量绝对值增大; 占空比越大, FAIMS迁移管产生的热量绝对值越小。研究表明, 射频电压的变化会导致FAIMS系统产生温度差而传递热量, 从而影响FAIMS的可靠性和稳定性。通过理论分析及仿真可知, 当占空比为0.1且射频电压为2 700 V时, 系统工作所产生的温度对FAIMS的影响最小, 为便携式FAIMS的设计提供了重要的参考数据。

**关键词** 高场非对称波形离子迁移谱; 射频电压; 可靠性; 稳定性; 温度

中图分类号 TH843

文献标识码 A

doi:10.3969/j.issn.1001-0548.2012.06.025

## Analysis of Asymmetric Waveform Radio-Frequency Voltage on FAIMS

XU Li-mei<sup>1</sup>, WU Fu-min<sup>1</sup>, ZHONG Qi-shui<sup>1</sup>, and YANG Min<sup>2</sup>

(1. Institute of Astronautics and Aeronautics, University of Electronic Science and Technology of China Chengdu 611731;

2. Chengdu Action Electronics Joint-Stock Co., LTD Chengdu 610211)

**Abstract** According to the first and second principles of thermodynamics, the influence of the magnitude of radio-frequency voltage and variations of duty ratio on the heat of high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry (FAIMS) is studied. The absolute value of heat produced by migration tube of FAIMS increases with increasing size of radio-frequency voltage. However, the absolute value is smaller with increasing duty ratio. The result shows that a change in radio-frequency voltage could lead to the temperature difference generated by FAIMS system, which causes the heat transfer and then affects the reliability and stability of FAIMS. By theoretical analysis and algorithm processing, it can be found that the influence of the temperature caused by the performance of the system on FAIMS is minimal when duty ratio is 0.1 and radio-frequency voltage is 2 700 V, which provides essential data for the design of portable FAIMS.

**Key words** high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry; radio-frequency voltage; reliability; stability; temperature

近年来, 世界各国都投入了大量的人力、财力研究生化检测装置, 使其能够在战争以及反恐环境中进行快速、精确的检测<sup>[1]</sup>。除了军事应用外, 工业技术发展所带来的环境污染, 以及人们对居住环境、生活环境的要求越来越高, 引发对气体检测仪器的巨大需求。基于高场非对称波形离子迁移谱(FAIMS)技术的离子检测器, 因其能够快速准确检测化学试剂、爆炸物、有毒气体、大气和水中有机污染物等, 且灵敏度高、检测时间短、检测物质种类齐全、体积小、成本低等优点<sup>[2]</sup>, 引起了国内外研究者的广泛关注。迁移管是FAIMS的核心部件, 有平板型和圆柱型<sup>[3]</sup>

两种结构, 本文的研究基于平板型迁移管展开。有关迁移管的研究已见文献报道的主要有: 1) 迁移管内部离子的运动情况及其灵敏度和分辨率。文献[4]利用蒙特卡罗的方法在SIMION软件中模拟了离子在迁移管中的运动情况, 基于离子和分子的弹性碰撞, 从流体动力学和非对称射频电压方面研究了气体流速、补偿电压以及离子迁移系数与非对称电场的相互关系; 文献[5]研究了载气流速对FAIMS的影响, 当射频电压为定值, 载气流速为3.67 L/min时仪器的灵敏度最高。2) 温度变化对FAIMS的影响。文献[6]研究了最优化波形对FAIMS的影响。文献[7]探讨了不同

收稿日期: 2011-01-20; 修回日期: 2011-12-08

基金项目: 中央高校基本科研业务费(ZYGX2009J088); 部级预研基金; 四川省科技计划(2011JY0001)

作者简介: 徐利梅(1969-), 女, 博士, 教授, 主要从事微机电系统(MEMS)方面的设计和测试研究。

的温度对FAIMS系统的影响, 随着温度的升高, 实际补偿电压值将偏离理论的补偿电压值。目前对于FIAMS温度升高的因素<sup>[8]</sup>主要归咎于环境温度的变化、离子在射频非对称波形迁移电场中的振动以及离子与分子的碰撞。

当非对称波形射频电压和固定不变的补偿电压加至迁移管板两极时, 随着射频电压周期变化, 迁移管极板上的电荷将发生移动, 电荷的移动必然对迁移系统做功, 从而使迁移管内气体温度升高, 而温度升高将促使实际补偿电压偏离理论电压值。本文研究了射频电压的变化对FAIMS补偿电压的影响。首先通过理论分析估算射频电压的变化对温度大小的影响以及实际补偿电压和理论补偿电压的变化趋势。通过数值仿真, 选择了合适的占空比和射频电压, 减小了温度对FAIMS的影响, 从而提高FAIMS的可靠性和稳定性, 为FAIMS设计提供必要的理论基础。

### 1 平行板电容器模型

FAIMS的理论是把一个高频且周期变化的射频电压  $V_{rf}$  和固定不变的补偿电压  $v_{dc}$  施加在迁移管上下的极板上。当气流携带离子通过过滤电极之间的迁移区时, 离子将会受电场力的作用。低电场时, 离子迁移率与电场强度无关, 但当电场的强度超过 11 000 V/cm时, 离子的迁移率以一种非线性的方式  $(K(E)=K_0 \times [1 + a(E)], a(E)=a_1(E/N)^2 + a_2(E/N)^4 + \dots)$  随电场强度<sup>[9]</sup>而变化。

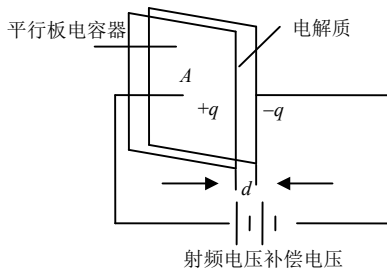


图1 平行板电容器模型

当非对称波形射频电压和固定不变的补偿电压加到迁移管两端时, 平行板电容器上的电荷将发生移动, 迁移管上下极板是电容的极板, 迁移管中的离子混合物是平行板电容器的电解质。为了定量分析射频电压的大小和占空比的改变对FAIMS的影响, 将迁移管和迁移管中的离子和中性分子混合气体看成一个系统, 将FAIMS迁移管系统可简化为平行板电容器模型, 如图1所示。本文围绕平行板电容器模型进行讨论, 同时设定:

1) 射频电压可看作一个理想变化的射频电压, 其变化如图2所示, 由  $f=1/T=t_h+t_l$ , 可知  $t_h \varphi_{max} = t_l \varphi_{min}$ ,  $t_h+t_l=T$ , 占空比  $\beta=t_h/t_l < 1$ , 其中  $f$  为频率,  $t_h$  为高电压时的时间,  $t_l$  为低电场时的时间。

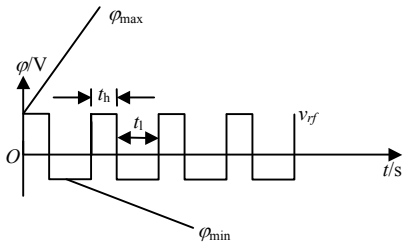


图2 理想的不对称波形射频电压变化图

2) 在一个射频电压变化的周期内,  $\varphi_{min} \rightarrow \varphi_{min}$  的变化时间一般远远小于 5  $\mu s$ , 离子混合物气体在迁移管的水平方向上基本没有移动, 故可认为外界在水平方向上对离子混合物气体没有做功。

3) 文献[4]提及离子和分子的碰撞是弹性碰撞, 文献[10]讨论了碰撞积分的相关问题, 本文将离子和分子碰撞作为弹性碰撞。

### 2 射频电压对FAIMS影响的理论分析

当射频电压周期变化时, 平行板电容器上电荷  $q$  发生移动, 其做功为  $dw = \varphi dq$ 。

由系统热力学基本方程可得:

$$dU = TdS + \varphi dq \tag{1}$$

式中,  $T$  为温度;  $U$  为热能;  $S$  为熵。引入吉布斯函数  $G = U - TS - \varphi q$ , 则微分形式为:

$$dG = d(U - TS - \varphi q) = du - TdS - SdT - \varphi dq - qd\varphi \tag{2}$$

将式(1)代入式(2)可得:

$$dG = -SdT - qd\varphi \tag{3}$$

由式(3)的全微分方程, 可得麦克斯韦关系:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)_T = \left(\frac{\partial q}{\partial T}\right)_\varphi \tag{4}$$

平行板电容器的电容为  $C = \varepsilon(T)A/d$ , 其中,  $A$  为电容器的上下平行板面积,  $d$  为上下极板距离,  $\varepsilon(T)$  为电解质介电数。电容器的电荷量为  $q = C\varphi = \varepsilon(T)A\varphi/d$ , 其微分形式为  $dq = C\varphi = d\varepsilon(T)A\varphi/d$ 。平行板迁移管系统的熵只与  $\varphi$  和  $T$  有关, 设其关系式为  $S = S(T, \varphi)$ , 且  $C_\varphi = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\varphi$ , 其中  $C_\varphi$  为电压

保持不变时电容器的比热容, 则有:

$$TdS = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\varphi dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)_T d\varphi \tag{5}$$

射频电压从高电压向低电压的变化时间不到 5  $\mu s$ ,

该时间内可认为系统在恒温条件下  $T=298\text{ K}$  ( $dT=0$ ), 则有:

$$TdS = T \left( \frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)_T d\varphi \quad (6)$$

由式(4)可得:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)_T = \left( \frac{\partial q}{\partial T} \right)_\varphi = \frac{TA}{d} \frac{d\varepsilon}{dT} \varphi$$

则有:

$$TdS = \frac{TA}{d} \frac{d\varepsilon}{dT} \varphi d\varphi \quad (7)$$

则平行板容器在充满介电常数为  $\varepsilon(T)$  的电介质时, 系统所获得的热量为:

$$Q = \int TdS = \int \frac{TA}{d} \frac{d\varepsilon}{dT} \varphi d\varphi$$

式中,  $A$  为平板面积;  $d$  为板间距离。

射频电压的变化所产生的热量  $Q$  一部分传递到迁移管外, 另一部分传递给迁移管内的离子和分子混合气体。而由热力学定理可知, 热量是由于系统与系统之间或同一个系统的不同部分存在温度差而传递能量<sup>[11]</sup>。因此, 热量的传递会使迁移管中气体温度升高或者降低。温度可利用热量公式  $CM(T-298)=Q'$  求出, 其中  $C$  为载气的比热,  $M$  为在迁移管中的质量。

通过上面分析可知, 迁移管气体温度的改变与射频电压有很大的关系。而在一个周期内 ( $\varphi_{\max} \rightarrow \varphi_{\min} \rightarrow \varphi_{\max} \rightarrow \varphi_{\min}$  的变化) 射频电压的变化分成两部分<sup>[12]</sup>: 1) 射频电压由  $\varphi_{\min} \rightarrow \varphi_{\max}$  变化; 2) 射频电压由  $\varphi_{\max} \rightarrow \varphi_{\min}$  变化。

### 2.1 射频电压从 $\varphi_{\max} \rightarrow \varphi_{\min}$ 变化对FAIMS的影响

在射频电压由  $\varphi_{\max} \rightarrow \varphi_{\min}$  变化时, 鉴于FAIMS迁移管中施加的补偿电压  $V_{dc}$ , 则FAIMS迁移管上下极板的电压变化是从  $\varphi_{\max} + V_{dc} \rightarrow \varphi_{\min} + V_{dc}$ , 且温度为  $T=298\text{ K}$ , 则放出热量为:

$$Q_a = \int TdS = \int_{\varphi_{\max} + V_{dc}}^{\varphi_{\min} + V_{dc}} \frac{TA}{d} \frac{d\varepsilon}{dT} \varphi d\varphi = \frac{TA}{2d} \frac{d\varepsilon}{dT} [(\varphi_{\min} + V_{dc})^2 - (\varphi_{\max} + V_{dc})^2] \quad (8)$$

本文已讨论了有关射频电压大小和占空比的关系, 则式(8)可改写为:

$$Q_a = \frac{TA}{2d} \frac{d\varepsilon}{dT} (\beta^2 \varphi_{\max}^2 - \varphi_{\max}^2 + 2V_{dc}\beta - \varphi_{\max}) \quad (9)$$

本文采用检测电离气体是  $H^+(H_2O)$ , 载气是水蒸气(温度298 K时, 氮气的相对介电数为1.000 548, 则离子分子混合气体介电常数可由Moore的计算法得到混合气体的介电常数)。介电常数表示电介质在

外电场作用下电极化性的物理量, 与温度、气压等参数相关。在大气压恒定条件下 ( $P=3.03 \times 10^5\text{ Pa}$ ), 气体的介电常数的修正为<sup>[13]</sup>:

$$\frac{(\varepsilon-1)_{T,P}}{(\varepsilon-1)_{298,1atm}} = \frac{3}{[1+0.003\ 411(T-298)]} \quad (10)$$

则可对式(10)求导如下:

$$\frac{d(\varepsilon-1)_{T,P}}{dT} = -\frac{0.010\ 233}{[1+0.003\ 411(T-298)]^2} (\varepsilon-1)_{298,P}$$

可得温度为:

$$T = k \frac{298A}{CM2d} \frac{d\varepsilon}{dT} (\varphi_{\max}^2 - \beta^2 \varphi_{\max}^2 + 2V_{dc}\varphi_{\max} - 2\beta\varphi_{\max}V_{dc}) + 298 \quad (11)$$

式中,  $k$  为迁移管中气体吸收热量的比例系数。迁移管的上下极板面积为  $600\text{ mm}^2$ , 间距为  $2\text{ mm}$ 。为了确保离子气体在迁移管中流动, 需要在迁移管中左右加上隔离绝缘块, 本文采用  $SrTiO_3$  陶瓷的绝缘块, 其介电常数温度系数约为  $-2\ 500 \times 10^{-6}/\text{K}$ , 在常温下其相对介电常数为250。假设迁移区中流过的气体体积约为  $400\text{ mm}^3$ 。通过分析式(11)可知, 迁移管气体温度和占空比、射频电压大小的关系如下: 在射频电压  $\varphi_{\max}$  为固定值时, 占空比越小迁移管气体温度越偏离迁移管中气体的初始温度; 占空比为固定值、射频电压逐渐增大时迁移管气体温度也逐渐升高, 偏离迁移管中气体的初始温度。

温度的改变必然会影响到离子迁移率从而影响到补偿电压值。本文将补偿电压分为理论补偿电压和实际补偿电压, 理论补偿电压<sup>[7]</sup>是指温度不影响补偿电压值而只考虑电场强度对离子迁移率的影响, 则有:

$$V_{dct} = \varphi_{\max} / (1 + K_0\beta / (K(E) - K_0)) \quad (12)$$

实际补偿电压是在考虑电场强度的影响外还考虑温度对补偿电压的影响, 离子迁移率<sup>[7]</sup>为:

$$K(E, T_{\text{eff}}) = \nu / E = q / (N(1/3\mu k T_{\text{eff}})^{0.5} W(T_{\text{eff}}))$$

则实际补偿电压为:

$$V_{dca} = \varphi_{\max} / (1 + K_0\beta / (K(E, T_{\text{eff}}) - K_0)) \quad (13)$$

离子在迁移管中的有效温度为  $T_{\text{eff}} \approx T + 8.09 \times 10^{-3} (E/N)^2$ , 分子与分子碰撞的有效面积  $W(T_{\text{eff}}) = \pi r_m^2 \Omega(1,1) T_{\text{eff}}$ , 其中  $r_m$  为分子与分子之间最小半径。

为了定量分析射频电压的占空比和大小改变对补偿电压的影响, 本文分析了式(11)~式(13)取不同射频电压的占空比, 以及较小的值得实际补偿电压和理论补偿电压之间关系。当射频电压为  $2\ 700\text{ V}$  时, 占空比从  $0.1 \sim 1$  的逐渐增大, 实际补偿电压与

理论补偿电压差逐渐增大到变小, 如图3所示。当占空比为0.1时, 射频电压大小从2 700~3 700 V增大时, 实际补偿电压与理论补偿电压差越来越大, 如图4所示。

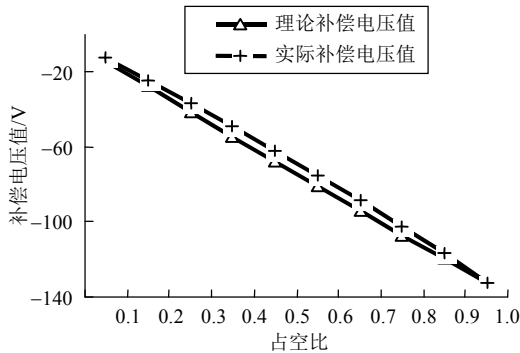


图3 占空比对补偿电压影响趋势图

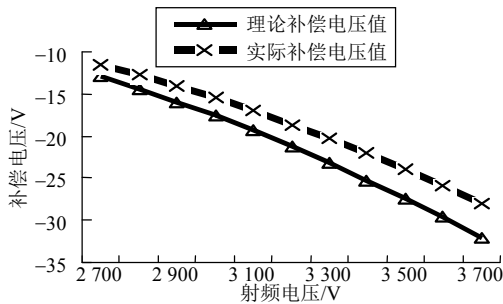


图4 射频对补偿电压的影响趋势图

**2.2 射频电压从  $\varphi_{\min}$   $\rightarrow$   $\varphi_{\max}$  变化对补偿电压的影响**  
在射频电压由  $\varphi_{\min}$   $\rightarrow$   $\varphi_{\max}$  变化, 迁移管两端电压从  $\varphi_{\max} + v_{dc}$   $\rightarrow$   $\varphi_{\min} + v_{dc}$  变化时, 则吸收热量为:

$$Q_e = \int TdS = \int_{\varphi_{\min} + v_{dc}}^{\varphi_{\max} + v_{dc}} \frac{TA}{d} \frac{d\varepsilon}{dT} \varphi d\varphi = \frac{TA}{2d} \frac{d\varepsilon}{dT} [(\varphi_{\max} + v_{dc})^2 - (\varphi_{\min} + v_{dc})^2] = \frac{298A}{2d} \frac{d\varepsilon}{dT} (\varphi_{\max}^2 - \beta^2 \varphi_{\max}^2 + 2v_{dc} \varphi_{\max} - 2\beta \varphi_{\max} v_{dc}) \quad (14)$$

通过分析式(14)可知迁移管气体温度和占空比、大小的关系: 在射频电压  $\varphi_{\max}$  为固定值时随着占空比逐渐增大, 迁移管气体温度越接近于迁移管系气体的初始温度。在占空比为固定值时, 射频电压逐渐增大, 则FAIMS的迁移管气体温度也逐渐升高, 偏离迁移管气体的初始温度。为了清楚地定量分析射频电压的占空比和大小改变对补偿电压的影响。取不同射频电压的占空比和小的值得实际补偿电压和理论补偿电压之间差值关系。结果如下: 当射频电压在2 700 V时, 占空比从0.1~1的逐渐增大实际补偿电压与理论补偿电压差逐渐增大到变小, 如图5所示。当占空比为0.1时, 射频电压大小从2 700~3 700 V增大时, 实际补偿电压与理论补偿电压差值保持不

变, 如图6所示。

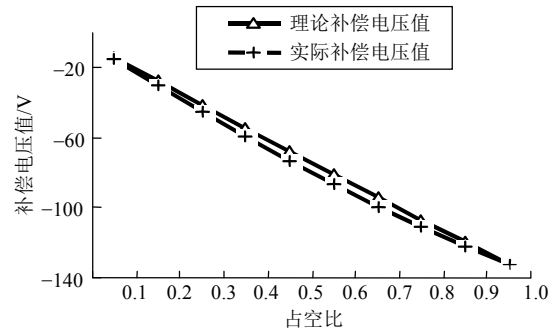


图5 占空比改变对补偿电压影响趋势图

通过数据分析可知, 射频电压的占空比、大小改变使FAIMS的使迁移管系统的温度改变, 从而使实际补偿电压偏离理论补偿电压, FAIMS的可靠性和稳定性就会降低。有效地对FAIMS迁移管温度进行控制, 可以提高FAIMS系统的稳定性和可靠性。

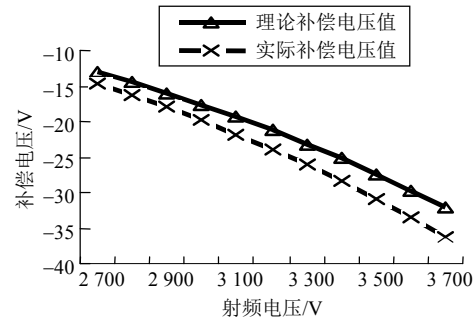


图6 射频电压大小改变对补偿电压的影响趋势图

### 3 数值仿真

在仿真过程中, 只改变射频电压占空比和大小寻找射频电压改变对FAIMS的影响最小。为了找出射频电压变化对FAIMS影响最小点, 只需要找出理论补偿电压与实际补偿电压差值的最小点。理论和实际补偿电压的差随着射频电压的占空比和大小改变而变化, 如图7所示。通过MATLAB仿真可得理论补偿电压值与实际补偿电压值差值最小点, 即射频电压对FAIMS影响越小。当占空比  $\beta = 1$ , 即  $\varphi_{\max} = \varphi_{\min}$  时, 理论补偿电压值与实际补偿电压值差值最小, 然而FAIMS是根据高低电场不同对离子进行分离, 故占空比  $\beta = 1$  的情况可不加考虑。结合相关文献可知, 由于FAIMS在非对称射频电压下工作, 对射频电压源要求很严格, 且现在实验受器材的限制, 射频电压一般在2 700~4 000 V变化, 占空比  $\beta$  一般在  $0.1 < \beta < 0.4$  变化<sup>[1,14-15]</sup>。由于以上条件的限制, 通过MATLAB仿真可得到一个理论补偿电压与实际补偿电压差值的最小点, 即最优点。当占空比为0.1且射频电压为2 700 V时, 系统工作所产生的温

度对FAIMS的影响最小。

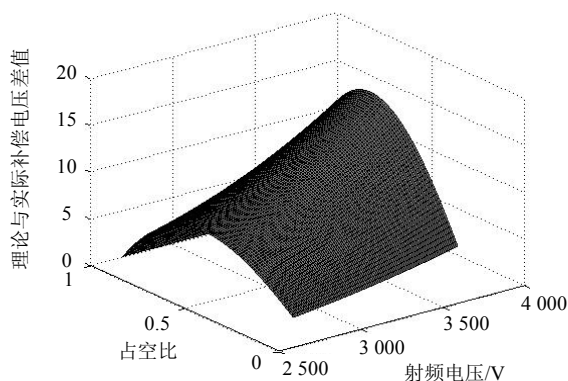


图7 理论及实际补偿电压差值与射频电压关系

## 4 总结

本文通过分析计算得到的最优点,减小了射频电压变化对迁移管中气体温度的改变以及补偿电压的影响。理论上合适的占空比和射频电压大小可以减小射频电压对FAIMS的影响。但除了射频电压对FAIMS的影响外,还有检测物质的介电常数温度系数、绝缘块介电常数温度系数大小不同、离子和分子碰撞以及外部电子器件工作等因素所产生的温度也会对FAIMS有影响。

### 参考文献

- [1] 高磊. 高场不对称波形离子迁移谱仪(FAIMS)关键技术初步研究[D]. 太原: 中北大学, 2007.  
GAO Lei. A preliminary research of the key technology no high field asymmetric waveform ion mobility spectrometry (FAIMS)[D]. Taiyuan: North University of China, 2007.
- [2] 张东风, 孔德义, 梅涛, 等. 离子迁移谱仪微型化的现状与进展[J]. 仪器仪表学报, 2006, 27(2): 199-204.  
HANG Dong-feng, KONG De-yi, MEI Tao, et al. Present status and Prospect of the miniaturized ion mobility spectrometry[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2006, 27(2): 199-204.
- [3] 林丙涛, 孔德义. 高场强不对称波形迁移谱原理与性能探讨[J]. 传感器与微系统, 2008, 27(2): 25-38.  
LIN Bing-tao, KONG De-yi. Principle and performance analysis of high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry[J]. Transducer and Microsystem Technologies, 2008, 27(2): 25-38.
- [4] JUN Xu, YUAN Liu. Monte Carlo simulation of ion transport in non-linear ion mobility spectrometry[J]. Int J Ion Mobil Spec, 2009(12): 149-156.
- [5] 林丙涛. 载气流速对高场非对称离子迁移偶的影响[J]. 分析化学, 2010, 38(7): 1027-1030.  
LIN Bing-tao. Effect of carrier gas flow rate on high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2010, 38(7): 1027-1030.
- [6] ALEXANDRE A S, KEQI T, RICHARD D S. Optimum waveforms for differential ion mobility spectrometry (FAIMS)[J]. Am Soc Mass Spectrom, 2005(5): 2-12.
- [7] MILLER R A, EICEMAN G A, NAZAROV A E, et al. A MEMS ratio frequency ion mobility spectrometer for chemical vapor detection[J]. Sensors and Actuators A, 2001, 91(3): 301-312.
- [8] DAVID A B. Characterization of a temperature-FAIMS system[J]. Am Soc Mass Spectrom, 2007(18): 1653-1663.
- [9] MILLER R A. A micromachined field asymmetric ion mobility spectrometer (FAIMS)[J]. Charles Stark Draper Laboratory, 2002(2): 118-134.
- [10] 贾绍义, 柴诚敬. 化工传质与分离过程[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.  
JIA Shao-yi, CAI Cheng-jing. Chemical mass transfer and separation process[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [11] 李洪芳. 热学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001.  
LI Hong-fang. Thermal[M]. Beijing: Higher Education Press, 2001.
- [12] ALEANDRE A, SMITHE D R. Scaling of the resolving power and sensitivity for planar FAIMS and mobility-based discrimination in flow- and field-driven analyzers[J]. Am Soc Mass Spectrom, 2007(18): 1672-1681.
- [13] 张向宇. 实用化学手册[M]. 北京: 化学出版社, 2001.  
ZHANG Xiang-yu. Practical chemistry manual[M]. Beijing: Chemical Press, 2001.
- [14] SHVARTSBURG A A, TANG K. Modeling the resolution and sensitivity of FAIMS analyses[J]. Am Soc Mass Spectrom, 2004(15): 1487-1498.
- [15] 郭江, 唐飞, 杨涛, 等. 基于FAIMS的高场非对称方波电源系统设计[J]. 西南科技大学学报, 2010, 25(1): 50-55.  
GUO Jiang, TANG Fei, YANG Tao, et al. Design of high field asymmetric pulse power supply for faims[J]. Journal of South West University of Science and Technology, 2010, 25(1): 50-55.

编辑 黄莘