

12

О сохранении идеальной фокусировки пучка в меняющемся во времени квадратичном по координате электрическом поле

© К.В. Соловьев

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
E-mail: k-solovyev@mail.ru

Поступило в Редакцию 19 марта 2013 г.

Показан факт сохранения идеальной фокусировки ионов в квадратичном по координате меняющемся во времени поле. Рассмотрены примеры использования данного факта.

Принцип идеальной пространственно-временной фокусировки в статических электрических полях с потенциалом, содержащим аддитивную квадратичную по одной декартовой координате составляющую был предложен в работе [1]. В дальнейшем этот принцип развился в целое направление динамической масс-спектрометрии [2–4]. Одной из трудностей реализации новых систем масс-анализа, основанных на идее идеальной пространственно-временной фокусировки пучка, является проблема ввода ионных пакетов в рабочее пространство прибора через внешние электроды без ухудшения качества фокусировки ионов. В данной статье предлагается новый подход к проблеме, связанный с переменным во времени электрическим питанием электродов, реализующим переходный процесс со специальным временным профилем. Оказывается, в данном случае удастся сохранить идеальную пространственно-временную фокусировку ионного пакета по одной координате.

Рассмотрим движения заряженных частиц в полях с квадратичными по координате потенциалами, меняющимися во времени:

$$u(x, y, z, t) = g(\tau)\varphi(x, y, z) = g(\tau)(z^2 + f(x, y)), \quad f_{xx} + f_{yy} + 2 = 0. \quad (1)$$

Здесь, как и ранее [2], введены безразмерные координаты и потенциал φ . Безразмерное время τ связано с физическим временем t коэффициентом

том T :

$$t = T\tau, \quad T = l \sqrt{\frac{m_0}{|q\Phi_0|}}, \quad (2)$$

где q — заряд, m_0 — некоторая характерная масса ионов исследуемого ионного пакета, l и Φ_0 — характерные габарит и потенциал системы. Соотношением $m = \mu m_0$ вводится безразмерный параметр массы иона. Напряжение на полезадающих электродах $G(t)$ определяет вид временной зависимости $g(\tau) = G(T\tau) = G(t)$ потенциала (1). Уравнение движения иона: $\mu \ddot{r} = -g(\tau) \text{grad } \varphi$. Движение частицы по z задается уравнением

$$\ddot{z} + \frac{2}{\mu} g(\tau) z = 0, \quad (3)$$

решение которого можно представить линейной комбинацией двух его линейно независимых решений $\varsigma_1(\tau)$, $\varsigma_2(\tau)$, удовлетворяющих условиям

$$\varsigma_1(0) = 0, \quad \dot{\varsigma}_1(0) = 1, \quad \varsigma_2(0) = 1, \quad \dot{\varsigma}_2(0) = 0. \quad (4)$$

Очевидно, для $z_0 = z(0)$, $\dot{z}_0 = \dot{z}(0)$ имеем

$$z(\tau) = \dot{z}_0 \varsigma_1(\tau) + z_0 \varsigma_2(\tau). \quad (5)$$

Рассмотрим далее возможные физические ситуации.

Пусть $\dot{z}_0 = 0$, т.е. ионы стартуют из некоторой плоскости с нулевой z -скоростью. Тогда $z(\tau) = z_0 \varsigma_2(\tau)$ и при наличии нулей τ_i , $i \in N$ функции $\varsigma_2(\tau)$ ионы, вылетающие при $\tau = 0$ из любой плоскости $z = z_0$, в моменты $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots$ соберутся в плоскости $z = 0$. Данная ситуация при соответствующем выборе функции g может быть ассоциирована, в частности, с изменением (например, включением) поля в момент ввода ионов в z^2 -ловушку ортогонально оси z (см. далее пример 1).

Другой случай. Ионы стартуют из плоскости $z = z_0$ с произвольной z -компонентой скорости \dot{z}_0 , $z(\tau) = \dot{z}_0 \varsigma_1(\tau) + z_0 \varsigma_2(\tau)$. Если τ_k , $k \in N$ — нули функции $\varsigma_1(\tau)$, то в моменты времени τ_k ионы будут находиться в плоскости $z(\tau_k) = z_0 \varsigma_2(\tau_k)$. Поскольку величины $\varsigma_2(\tau_k)$ в общем случае различны для различных k и зависят от параметра массы μ , положения плоскости идеальной фокусировки будут различаться как для различных k , так и для ионов различных масс. Исключение — старт из плоскости $z_0 = 0$, при котором фокусировка каждый раз осуществляется в той же плоскости. Для осуществления идеальной фокусировки

функции $\zeta_1(\tau)$, $\zeta_2(\tau)$ должны иметь нули в рассматриваемом диапазоне времени.

Обратимся далее к примерам.

1. Переходный процесс при включении поля ионной ловушки (зарядка RC -цепочки) определяет движение иона в ловушке по z уравнением (3) с временной зависимостью

$$g(\tau) = 1 - \exp(-k\tau), \quad k > 0, \quad (6)$$

приводимым подстановкой $\xi = (2\sqrt{2/\mu}/k) \exp(-k\tau/2)$ к уравнению, разрешимому в модифицированных функциях Бесселя с мнимым индексом (теория таких функций развита в [5]). Решение (3)–(6) — линейная комбинация элементов пары

$$\left\{ I_{i \frac{2\sqrt{2}}{k\sqrt{\mu}}} \left(\frac{2\sqrt{2}}{k\sqrt{\mu}} \exp(-k\tau/2) \right), K_{i \frac{2\sqrt{2}}{k\sqrt{\mu}}} \left(\frac{2\sqrt{2}}{k\sqrt{\mu}} \exp(-k\tau/2) \right) \right\}. \quad (7)$$

Имея любые два линейно независимых решения $z_1(\tau)$, $z_2(\tau)$ уравнения (3), очевидно, всегда можно получить его решения $\zeta_1(\tau)$ и $\zeta_2(\tau)$, удовлетворяющие условиям (4).

На рис. 1 показан вид $\zeta_1(\tau)$, $\zeta_2(\tau)$ и их линейных комбинаций при различных начальных данных, графически подтверждающий факт идеальной пространственно-временной фокусировки пучка в линейных системах с меняющимся во времени полем. При $\tau \rightarrow \infty$ (реально — уже при $\tau \approx 5/k$) данная система становится стационарной, положение точек фокусировки и временные интервалы между моментами фокусировки стабилизируются. Качество идеальной фокусировки в результате переходного процесса не падает. Предположим, что в орбитальную ловушку с отключенным питанием ортогонально плоскости (xOz), вбрасываются ионы и по достижении ими (одновременно) указанной плоскости включается электрическое поле ловушки. Переходный процесс, учитывающий только емкость ловушки и сопротивление цепи, модулирует поле Орбитрепа $\varphi(r, z) = z^2 - r^2/2 + \ln r$ временной функцией (6). Проекция траекторий ионов на плоскость (xOy) в поле $u = g\varphi$ представлены на рис. 2. Реализуется захват ионов полем ловушки.

2. Выключение питания ловушки в простейшем случае описывается спадающим по экспоненте $g(\tau) = \exp(-k\tau)$, $k > 0$ потенциалом, также порождающим интегрируемое уравнение движения по z , решение

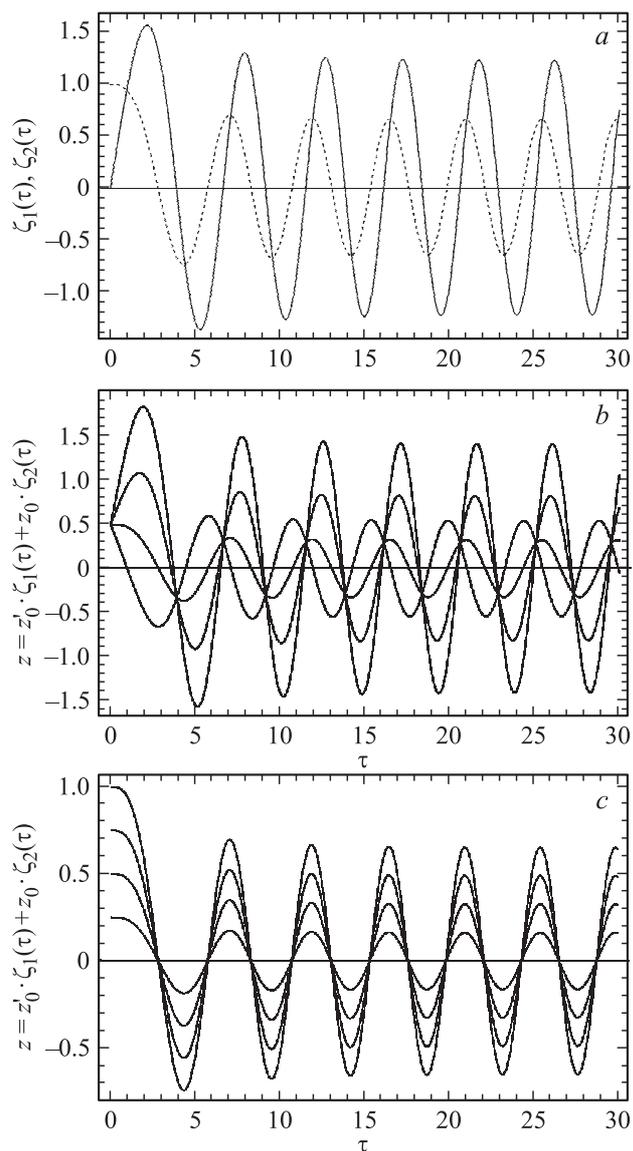


Рис. 1. Решения уравнения (3)–(6), удовлетворяющие условиям: *a* — (4), *b* — $z(0) = z_0$, *c* — $\dot{z}(0) = 0$.

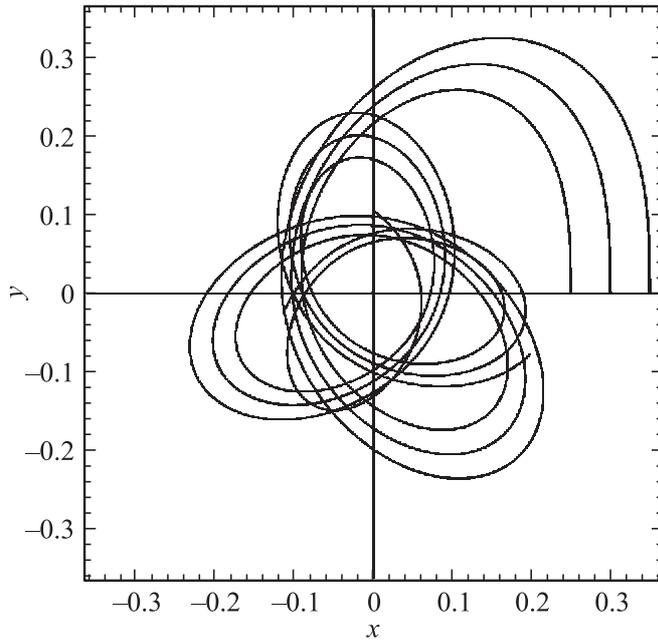


Рис. 2. Поперечное движение в поле Орбитрепа при включении питания (6).

которого комбинируется из функций

$$\left\{ J_0 \left(\frac{2\sqrt{2}}{k\sqrt{\mu}} \exp(-k\tau/2) \right), Y_0 \left(\frac{2\sqrt{2}}{k\sqrt{\mu}} \exp(-k\tau/2) \right) \right\}. \quad (8)$$

Количество колебаний (нулей $\zeta_1(\tau)$, $\zeta_2(\tau)$), в данном случае конечно, при некотором значении τ траектории перестают быть финитными.

3. Уравнение (3) с линейно меняющимся во времени полем $g(\tau) = a\tau + b$ подстановкой $\xi = (2/\mu)^{1/3} a^{-2/3} (a\tau + b)$ можно привести к уравнению $z'' + \xi z = 0$, решения которого выражаются через осциллирующие (при $a > 0$) функции Эйри

$$\left\{ \text{Ai} \left(-(2/\mu)^{1/3} a^{-2/3} (a\tau + b) \right), \text{Bi} \left(-(2/\mu)^{1/3} a^{-2/3} (a\tau + b) \right) \right\}. \quad (9)$$

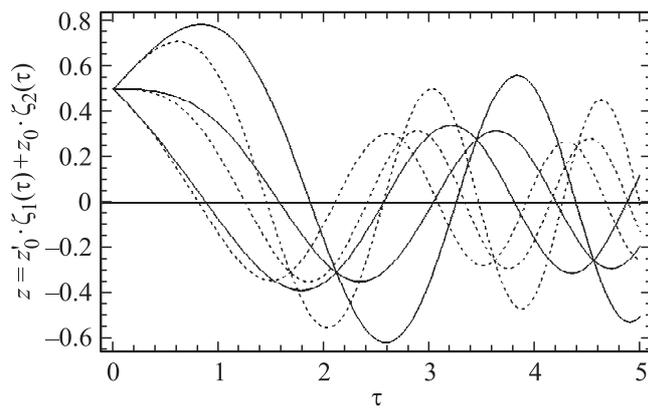


Рис. 3. Решения $z(\tau)$ уравнения (3) с линейно меняющейся функцией $g(\tau)$ ($a = 1, b = 0$) для ионов массы $\mu = 1$ (сплошная линия) и $\mu = 0.5$ (пунктирная линия).

Изучая $z(\tau)$ для различных масс (рис. 3), наблюдаем как временное, так и пространственное смещение точки идеальной фокусировки в зависимости от массы иона, что дает возможность организовать позиционно-чувствительное детектирование спектра масс.

4. „Ступенчатая“ функция $g(\tau) = d - a \operatorname{arctg} \frac{\tau - \tau_0}{\epsilon}$ имеет предельные значения $g(\infty) = d - a\pi/2$, $g(-\infty) = d + a\pi/2$. Это позволяет в управляемой таким модулирующим напряжением ловушке задать в момент времени τ_0 смену режима работы — изменение амплитуды и частоты колебаний ионов при сохранении идеальной фокусировки по z . Уравнение (3) для данной $g(\tau)$ аналитически не интегрируется. На рис. 4 приведены полученные для него численно решения $z(\tau)$ для одной точки старта при различных начальных скоростях \dot{z}_0 . Изменение (увеличение) амплитуды колебаний ионов дает возможность в некоторый момент времени начать их вывод на детектор, реализовав в ловушке времяпролетную схему масс-анализа.

Таким образом, в работе показано, что в меняющемся во времени поле с квадратичным по одной из координат потенциалом возможно сохранение идеальной пространственно-временной фокусировки пучка по этой координате.

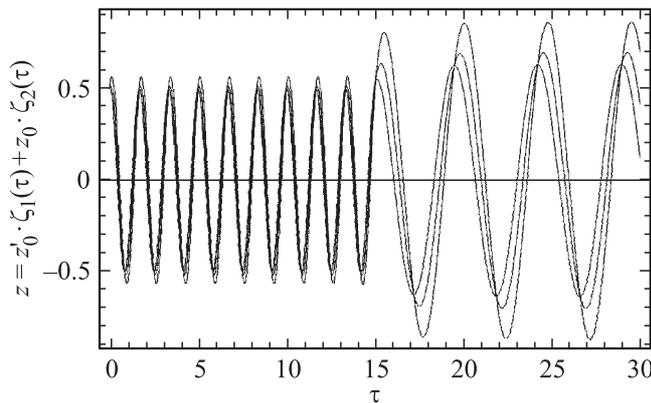


Рис. 4. Результат „ступенчатого“ изменения напряжения на электродах. Параметры функции $g(\tau)$: $a = 2$, $\tau_0 = 15$, $c = 0.1$, $d = 4$.

Возможно адекватное описание режимов ввода/вывода ионов в/из ловушки с меняющимся во времени по физически обусловленному закону полем.

Возможен перевод ловушки из одного стационарного режима в другой, отличающийся частотой и амплитудой колебаний ионов. Увеличение амплитуды колебаний в некоторый момент времени может позволить осуществить времяпролетное детектирование масс исследуемого пакета ионов.

Возможно не только временное, но и пространственное разделение ионов по массе при сохранении идеальной пространственно-временной фокусировки в плоскости детектирования.

Список литературы

- [1] Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др. // А.с. № 1247973 от 01.04.1986. Приоритет от 16.01.1985.
- [2] Голиков Ю.К. и др. // Прикладная физика. 2006. № 5. С. 50–57.
- [3] Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A. et al. // J. Mass Spectrom. 2005. V. 40. P. 430–443.
- [4] Golikov U., Solovyev K. et al. / Patent US 8,237,111 B2. Aug 7, 2012.
- [5] Матышев А.А. Изотракторная корпускулярная оптика. СПб.: Наука, 2000.