

01;10

Критерий поперечной устойчивости в ионных ловушках с интегрируемым в эллиптических координатах движением

© Ю.К. Голиков, К.В. Соловьев

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

Поступило в Редакцию 3 мая 2011 г.

Рассмотрены электростатические ловушки с идеальной пространственно-временной фокусировкой по одному из направлений движения ионов и интегрируемым движением в поперечных направлениях. Определены условия удержания ионов в поле ловушки. Численным интегрированием уравнений Лагранжа проведена независимая проверка финитности движения ионов в поле при выполнении условий их удержания.

В ранее опубликованной статье [1] исследованы идеально фокусирующие по одной из координат электростатические ловушки с интегрируемым в параболических координатах движением. Данная работа является продолжением [1] и содержит результаты изучения ловушек с движением, интегрируемым методом разделения переменных в уравнении Гамильтона–Якоби в эллиптических координатах. Напомним, что электростатические ионные ловушки с идеальной пространственно-временной фокусировкой запатентованы Ю.К. Голиковым и др. в 1985 г. [2]. Практическая ценность идеи подтверждена работами А.А. Макарова по реализации системы OrbTrap [3]. Отличительный признак таких ловушек — квадратичная зависимость потенциала от одной из координат. В безразмерных переменных потенциал ловушки записывается в виде [4]:

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

Очевидно, движение ионов по z в поле (1) отделено и представляет собой гармонические колебания, следствием чего является возможность организовать идеальную пространственно-временную фокусировку ион-

ного пакета по z . Более подробное изложение этого вопроса приведено в работе [1].

Необходимое для создания ионной ловушки удержание заряженных частиц в плоскости, поперечной плоскости идеальной фокусировки, осуществляется выбором соответствующей функции $f(x, y)$. Анализ возможности финитного поперечного движения существенно упрощается в случае использования $f(x, y)$, допускающих полное разделение переменных в уравнении Гамильтона–Якоби. В работе [4] найдены все типы таких функций. Рассматриваемый в данной статье вариант ловушки допускает интегрирование уравнений движения в конформных эллиптических координатах (u, v) , связанных с декартовыми соотношениями

$$\xi = \operatorname{ch} \omega, \quad \zeta = x + iy, \quad \omega = u + iv. \quad (2)$$

Соответствующий случаю разделения переменных потенциал может быть записан в декартовых координатах следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi(x, y, z) = & \left(z^2 - \frac{x^2 + y^2}{2} \right) \\ & + \operatorname{Re} \left(\frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} \left(\mu \ln \left(\xi \pm \sqrt{\xi^2 - 1} \right) + \varepsilon + i\delta \right) \right), \\ & \xi = x + iy, \end{aligned} \quad (3)$$

где Re — реальная часть комплексной величины, μ , ε и δ — вещественные константы. В эллиптических координатах (u, v) потенциал (3) имеет вид

$$\varphi(u, v, z) = z^2 - \frac{\operatorname{sh}^2 u + \cos^2 v}{2} + \frac{1}{2} \frac{(\mu u + \varepsilon) \operatorname{sh} 2u + (\mu v + \delta) \sin 2v}{\operatorname{sh}^2 u + \sin^2 v}. \quad (4)$$

Проведя разделение переменных в уравнении Гамильтона–Якоби для поперечного движения (движения по координатам u, v), получим соотношения

$$\frac{p_u^2}{2} + U(u) = C, \quad \frac{p_v^2}{2} + V(v) = -C, \quad (5)$$

где p_u, p_v — u, v -импульсы, а $U(u), V(v)$ — соответствующие эффективные потенциалы:

$$U(u) = -\frac{1}{2} \operatorname{sh}^4 u - \left(\frac{1}{2} + g\right) \operatorname{sh}^2 u + \frac{1}{2}(\mu u + \varepsilon) \operatorname{sh} 2u,$$

$$V(v) = \frac{1}{2} \sin^4 v - \left(\frac{1}{2} + g\right) \sin^2 v + \frac{1}{2}(\mu v + \delta) \sin 2v. \quad (6)$$

Величины C, g в (5), (6) — константы разделения переменных в уравнении Гамильтона–Якоби. Финитность поперечного движения по x, y (по u, v) имеет место при наличии формируемых функциями (6) потенциальных ям и одновременном удержании иона в обеих, причем с учетом того, что константа C входит в равенства (5) с противоположными знаками.

Рассмотрим потенциалы $U(u), V(v)$. Для упрощения анализа введем вспомогательные функции $U_0(u) = U(u)|_{\mu=0, \varepsilon=0}, V_0(v) = V(v)|_{\mu=0, \delta=0}$:

$$U_0(u) = -\frac{1}{2} \operatorname{sh}^4 u - \left(\frac{1}{2} + g\right) \operatorname{sh}^2 u,$$

$$V_0(v) = \frac{1}{2} \sin^4 v - \left(\frac{1}{2} + g\right) \sin^2 v. \quad (7)$$

Потенциалы (6) можно трактовать как возмущения выражений (7) добавками $\frac{1}{2}(\mu u + \varepsilon) \operatorname{sh} 2u$ и $\frac{1}{2}(\mu v + \delta) \sin 2v$, малыми при условии малости параметров μ, ε, δ . Рассмотрим функцию $U_0(u)$. Поскольку коэффициент при $\operatorname{sh}^4 u$ в (7) отрицателен, появление потенциальной ямы возможно лишь при положительном коэффициенте при $\operatorname{sh}^2 u$, т.е. при

$$-\left(\frac{1}{2} + g\right) > 0, \quad g < -\frac{1}{2}. \quad (8)$$

Наличие потенциальной ямы функции $V_0(v)$ при выполнении (8), очевидно, также гарантировано. Расположенные в точках $u = 0, v = 0$ минимумы функций U_0, V_0 имеют нулевое значение (Рис. 1, а). Поскольку константа C входит в (5) с противоположными знаками, по крайней мере одна из постоянных μ, ε, δ должна быть отлична от нуля для обеспечения отрицательных значений $U(u)$ либо $V(v)$ в области финитности движения.

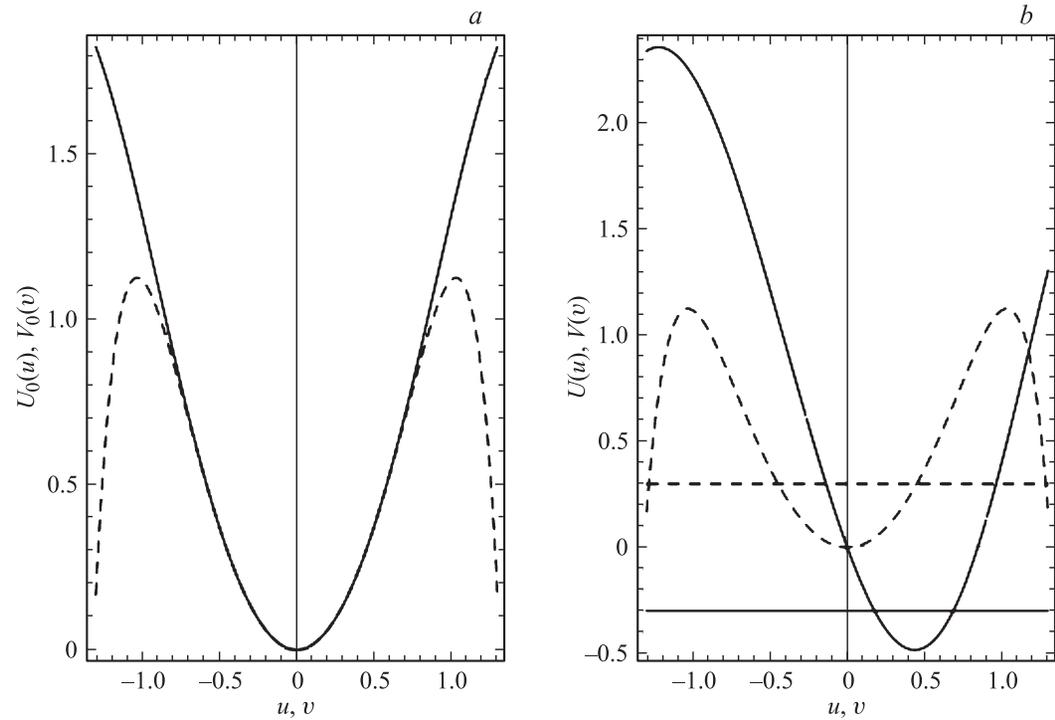


Рис. 1. Вид функций $U(u)$ (пунктир) и $V(v)$ (сплошная). Горизонтальные прямые (только рис. *b*) — функции $U=C$ (пунктир) и $V=-C$ (сплошная). Равенства $U(u)=C$, $V(v)=-C$ определяют границы области финитного движения. $\mu=0$, $g=-2$. *a* — $\varepsilon=0$, $\delta=0$; *b* — $\varepsilon=0$, $\delta=-2$, $C=0.3$.

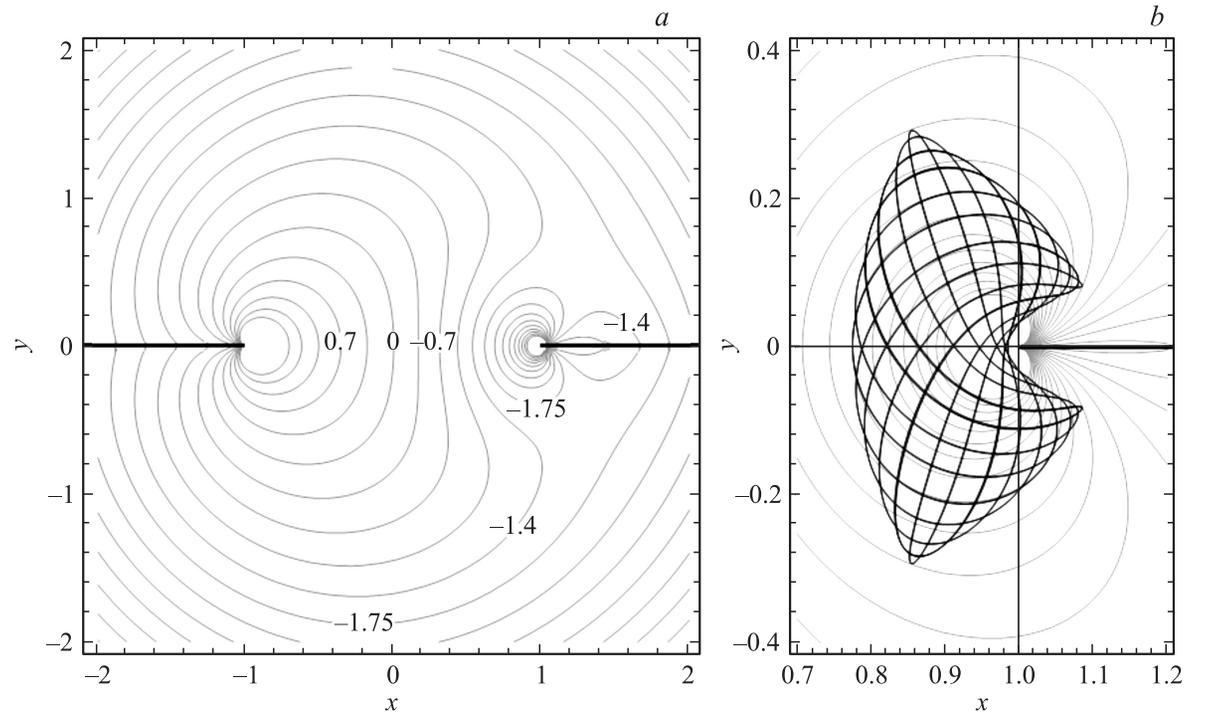


Рис. 2. Сечения эквипотенциальных поверхностей плоскостью $z = 0$ (a) и траектория (b) иона в проекции на плоскость x, y . $\mu = 0, g = -2, \varepsilon = 0, \delta = -2, C = 0.3$.

Уравнения движения ионов в ловушке в эллиптических координатах имеют вид

$$2h^2\ddot{u} = h(\operatorname{sh}(2u)(-\dot{u}^2 + \dot{v}^2 + 1) - 2\sin(2v)\dot{u}\dot{v}) - 2(\mu u + \varepsilon)\operatorname{ch}(2u) + \left(\frac{(\mu u + \varepsilon)\operatorname{sh}(2u) + (\mu v + \delta)\sin(2v)}{h} - \mu \right) \operatorname{sh}(2u), \quad (9)$$

$$2h^2\ddot{v} = h(\sin(2v)(\dot{u}^2 - \dot{v}^2 - 1) - 2\operatorname{sh}(2u)\dot{u}\dot{v}) - 2(\mu v + \delta)\cos(2v) + \left(\frac{(\mu u + \varepsilon)\operatorname{sh}(2u) + (\mu v + \delta)\sin(2v)}{h} - \mu \right) \sin(2v), \quad (10)$$

где $h = \operatorname{sh}^2 u + \sin^2 v$. В случае финитного движения для координат точки старта (u_0, v_0) должны выполняться неравенства $C - U(u_0) > 0$, $-C - V(v_0) > 0$. Начальные скорости \dot{u}_0, \dot{v}_0 могут быть найдены из (11) по формулам

$$\dot{u}_0 = \frac{\sqrt{2(C - U(u_0))}}{\operatorname{sh}^2 u + \sin^2 v}, \quad \dot{v}_0 = \frac{\sqrt{2(-C - V(v_0))}}{\operatorname{sh}^2 u + \sin^2 v}. \quad (11)$$

Пример полученной численным интегрированием системы (9)–(10) траектории иона в ловушке в проекции на плоскость x, y для случая b потенциальных ям (рис. 1) приведен на рис. 2, b . Вид траектории полностью подтверждает справедливость найденных ранее условий удержания ионов в поле (3).

Отметим некоторую особенность построения чертежей рис. 2. Непосредственные вычисления эквипотенциалей и траекторий ионов в проекции на плоскость (x, y) требуют осторожности из-за наличия точек ветвления аналитической функции, действительная часть которой входит в состав потенциала (3). В то же время построения на плоскости (u, v) могут быть выполнены без проблем ввиду относительной простоты функции (4). Однако уже при отображении (2) построенных на (u, v) кривых на плоскость (x, y) следует учесть, что на всю плоскость (x, y) взаимно однозначно отображается лишь полоса $\{(u, v) | -\infty < u < +\infty, 0 \leq v < \pi\}$ плоскости (или любая другая горизонтальная полоса (u, v) шириной π , смещенная по v относительно указанной на $\pi k, k \in \mathbb{Z}$). На чертеже эквипотенциального портрета (рис. 2, a) показаны линии разреза, выделяющие используемую

при данной физической интерпретации ветвь многозначной функции комплексного потенциала, вещественная часть которого входит в состав (3).

Список литературы

- [1] Голиков Ю.К., Соловьев К.В. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 10. В. 7. С. 82–88.
- [2] Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др. // Авт. свид. № 1247973 от 01.04.1986. Приоритет от 16.01.1985.
- [3] Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A., Hardman M., Cooks G. // J. Mass Spectrom. 2005. V. 40. P. 430–443.
- [4] Голиков Ю.К., Краснова Н.К., Соловьев К.В. и др. // Прикладная физика. 2006. № 5. С. 50–57.