

## پایداری یون در دام چهار قطبی هذلولوی

هوشیار نوشاد\*، علیرضا درودی

بخش فیزیک نظری و ریاضیات، مرکز تحقیقات هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

### چکیده:

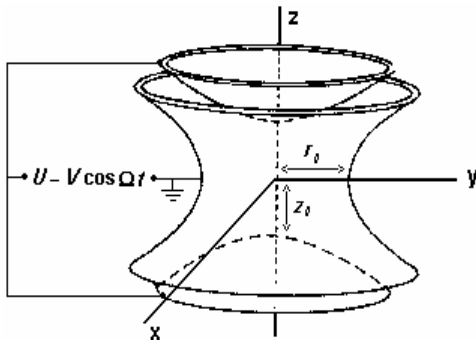
دستگاه معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون در دام چهار قطبی الکتریکی هذلولوی حل شده است. منحنی‌های موقعیت یون به دام افتاده به صورت تابعی از زمان، مسیر حرکت یون و منحنی‌های فضای فاز به دست آمده‌اند. نواحی پایداری اول تا چهارم این دستگاه معادلات برای به دام اندازی یون محاسبه شده است. کلید واژه‌ها: دام چهار قطبی هذلولوی، پایداری یون، نواحی پایداری، معادله متی‌یو، روش رونگه - کوتا مرتبه چهار

### مقدمه:

دام یون چهار قطبی (QIT) مهم‌ترین بخش از یک طیف‌سنج جرمی را تشکیل می‌دهد. این وسیله برای شناسایی مولکول‌ها و اتم‌ها و تعیین ساختار مولکولی استفاده می‌شود، و گستره کاربرد بسیار وسیعی در علوم، تحقیقات و صنعت دارد [۱]. اختراع دام یون چهار قطبی به ولفگانگ پاول فیزیکدان آلمانی نسبت داده می‌شود. به همین خاطر در ۱۹۸۹ جایزه نوبل فیزیک به اتفاق دو نفر دیگر به وی اعطا شد. بنابراین، دام یون چهار قطبی را اغلب دام پاول نیز می‌نامند [۲]. این وسیله ساده و در عین حال بسیار حساس، قابلیت به دام اندازی انواع یون‌ها را دارد. دام پاول از یک الکتروود فلزی جانبی به نام حلقه (ring) و دو الکتروود فلزی دیگر در بخش‌های بالایی و پایینی به نام کلاهک (end-cap) تشکیل می‌شود. متداول‌ترین شکل هندسی این الکتروودها هذلولوی است [۱]، هر چند که دام‌های با اشکال هندسی دیگر مانند استوانه‌ای نیز ساخته شده است [۳]. با اتصال الکتروودها به ولتاژهای مناسب مستقیم و متناوب با فرکانس رادیویی، میدان الکتریکی در فضای درون دام ایجاد می‌شود و باعث محصور شدن یون‌ها می‌گردد. در این مقاله، منحنی‌های موقعیت یون  ${}^{20}\text{Ne}^+$  نسبت به زمان، مسیر حرکت یون و منحنی‌های فضای فاز برای این یون به دست آمده است. به علاوه، چهار ناحیه پایداری برای این سیستم که می‌توان یون را به دام انداخت نیز محاسبه شده است.

\* بخش فیزیک نظری و ریاضیات، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی ۱۳۳۹-۱۴۱۵۵، تهران

## روش کار:



شکل ۱- طرحواره‌ای از یک دام هذلولوی

شکل ۱ طرحواره‌ای از یک دام چهار قطبی هذلولوی را نشان می‌دهد. الکترودهای کلاهک به ولتاژ  $U - V \cos \Omega t$  و الکتروده حلقه به زمین متصل شده است. پتانسیل الکتریکی در فضای دام باید در معادله لاپلاس صدق کند. چنانچه بخواهیم نیروی نوسان فیزیکی به یون وارد شود، پتانسیل الکتریکی در فضای دام باید به فرم زیر باشد [۴]:

$$\varphi(r, z) = (U - V \cos \Omega t) \times \frac{r_0^2 - r^2 + z^2}{r_0^2} \quad (1)$$

میدان الکتریکی در دام به صورت زیر خواهد بود:

$$\vec{E}(r, z) = (U - V \cos \Omega t) \times \left( \frac{2r}{r_0^2} \hat{r}_r - \frac{2z}{r_0^2} \hat{a}_z \right) \quad (2)$$

که در آن  $r_0 = \sqrt{a_r^2 + a_z^2}$  در نظر گرفته شده است. با استفاده از معادلات حرکت، موقعیت یون با جرم  $m$  و بار  $Q$  در هر لحظه به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{cases} \frac{d^2 z}{d\xi^2} + (a_z - q_z \cos \xi) z = 0 \\ \frac{d^2 r}{d\xi^2} + (a_r - q_r \cos \xi) r = 0 \end{cases} \quad (3)$$

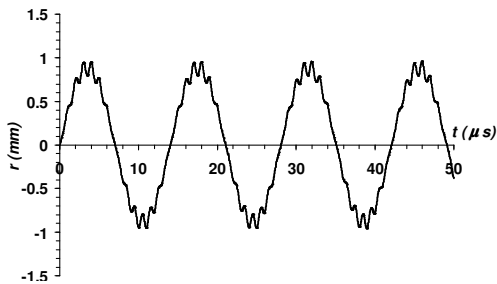
که در آن  $\xi$ ،  $a_z$ ،  $a_r$ ،  $q_z$  و  $q_r$  کمیت‌های بدون بعد هستند و به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{\Omega t}{\Omega} \\ a_z &= -\frac{Q U}{m z_0 \Omega^2} \\ q_z &= -\frac{Q V}{m z_0 \Omega^2} \end{aligned} \quad (4)$$

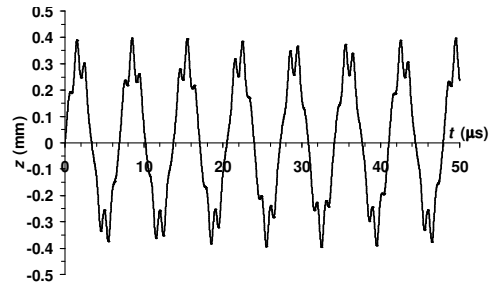
معادله به فرم  $\frac{d^2 w}{d\xi^2} + (a - q \cos \xi) w = 0$  حالت خاصی از معادله دیفرانسیل هیل (Hill) [۴] است و معادله ماتیو (Mathieu) نامیده می‌شود. به ازای مقادیری که پارامترهای  $a$  و  $q$  اختیار می‌کنند، این معادله ممکن است جواب‌های پایدار یا ناپایدار داشته باشد که در این صورت، یون می‌تواند درون دام گرفتار شود و یا به دام نیفتد.

## نتایج:

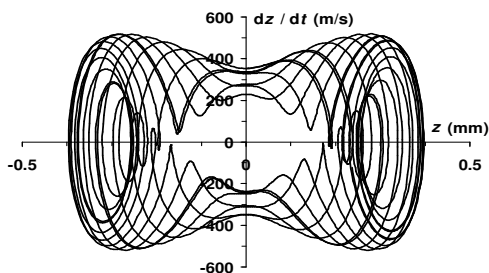
برای حل این دستگاه معادلات دیفرانسیل از روش عددی رونگه - کوتا مرتبه چهار استفاده شده است. منحنی‌های ۲ الی ۶ موقعیت یون بر حسب زمان، مسیر حرکت یون، و منحنی‌های فضای فاز را برای حالت پایدار  $a_z = 0$  و  $q_z = 1$  نشان می‌دهند. برای یون  $^{20}\text{Ne}^+$ ، این حالت مثلاً می‌تواند متناظر با  $\Omega = 2\pi \times 1 \text{ MHz}$ ،  $U = 0$ ،  $V = 100 \text{ V}$  و  $r_0 = 11/05 \text{ mm}$  باشد. در این محاسبه، موقعیت اولیه یون در مرکز دام، و سرعت اولیه آن برابر محتمل‌ترین سرعت یون در دمای اتاق در نظر گرفته شده است. یون مورد نظر در دام محصور شده است و به حرکت نوسانی خود ادامه می‌دهد. معمولاً یون در ناحیه کوچکی از دام حرکت می‌کند (در این جا  $|z| < 0/5 \text{ mm}$  و  $|r| < 1 \text{ mm}$ )، بنابراین هیچ‌گاه به جداره آن برخورد نمی‌کند.



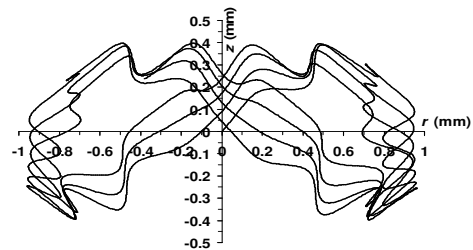
شکل ۱- منحنی موقعیت  $r$  برای  $^{20}\text{Ne}^+$  بر حسب زمان.  
 $r_0 = 11/05 \text{ mm}$  و  $V = 100 \text{ V}$ ،  $U = 0$ ،  $f = 1 \text{ MHz}$   
 ( $a_z = 0$  و  $q_z = 1$ ). گیراندازی صورت می‌گیرد.



شکل ۲- منحنی موقعیت  $z$  برای  $^{20}\text{Ne}^+$  بر حسب زمان.  
 $r_0 = 11/05 \text{ mm}$  و  $V = 100 \text{ V}$ ،  $U = 0$ ،  $f = 1 \text{ MHz}$   
 ( $a_z = 0$  و  $q_z = 1$ ). گیراندازی صورت می‌گیرد.



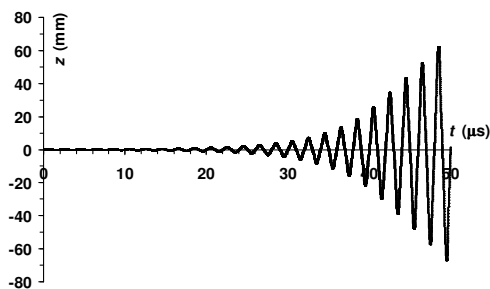
شکل ۳- منحنی فضای فاز  $z - dz/dt$  برای یون  $^{20}\text{Ne}^+$   
 تحت همان شرایط. گیراندازی صورت می‌گیرد.



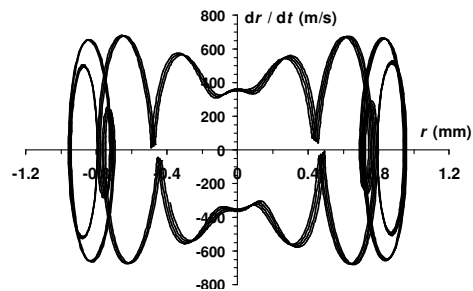
شکل ۴- منحنی مسیر یون  $^{20}\text{Ne}^+$  در صفحه  $r - z$   
 تحت همان شرایط. گیراندازی صورت می‌گیرد.

می‌توان حالت‌هایی را نیز بررسی نمود که معادله جواب پایدار نداشته باشد، یعنی عمل به دام اندازی صورت نگیرد. شکل‌های ۷، ۸ و ۹ نمونه‌ای از حالت ناپایدار را برای  $a_z = 0$  و  $q_z = 1$  نشان می‌دهند. در این

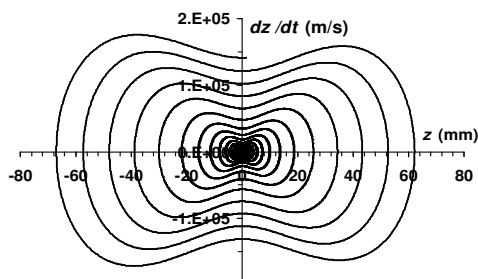
مورد، معادله برای مولفه  $z$  جواب پایدار ندارد. ناحیه‌های پایداری برای مولفه‌های  $r$  و  $z$  در QIT نیز به طور جداگانه در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ محاسبه شده است. نقاط مشترک در این دو شکل، ناحیه پایداری دستگاه معادلات دیفرانسیل مربوط به QIT را نشان می‌دهند. فقط برای این نقاط، عمل به دام اندازی می‌تواند انجام شود. در شکل‌های ۱۲، ۱۳، ۱۴ و ۱۵ نواحی پایداری اول، دوم، سوم و چهارم برای مقادیر مثبت  $q$  محاسبه شده‌اند. در شکل ۱۲ به ازای  $a = 0$  داریم:  $q_{\max} = \dots$



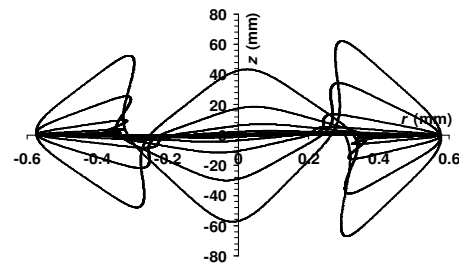
شکل ۷- منحنی موقعیت  $z$  برای  ${}^{21}\text{Ne}^+$  بر حسب زمان  $r_0 = 11/0.5 \text{ mm}$  و  $V = 227/5 \text{ V}$ ،  $U = 0$ ،  $f = 1 \text{ MHz}$   $(q_z = \dots)$  و  $a_z = 0$  گیراندازی صورت نمی‌گیرد.



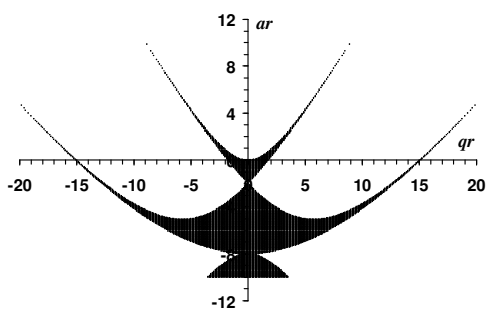
شکل ۶- منحنی فضای فاز  $r - dr/dt$  برای یون  ${}^{21}\text{Ne}^+$   $r_0 = 11/0.5 \text{ mm}$  و  $V = 100 \text{ V}$ ،  $U = 0$ ،  $f = 1 \text{ MHz}$   $(q_z = \dots)$  و  $a_z = 0$  گیراندازی صورت می‌گیرد.



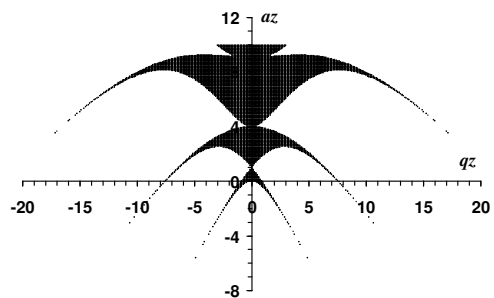
شکل ۹- منحنی فضای فاز  $z - dz/dt$  برای یون  ${}^{21}\text{Ne}^+$  تحت همان شرایط. گیراندازی صورت نمی‌گیرد.



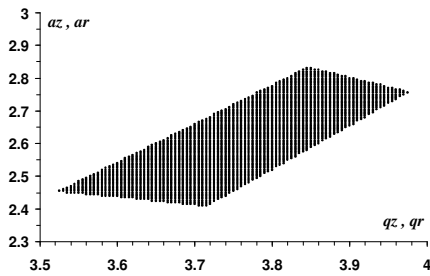
شکل ۸- منحنی مسیر یون  ${}^{21}\text{Ne}^+$  در صفحه  $r - z$  تحت همان شرایط. گیراندازی صورت نمی‌گیرد.



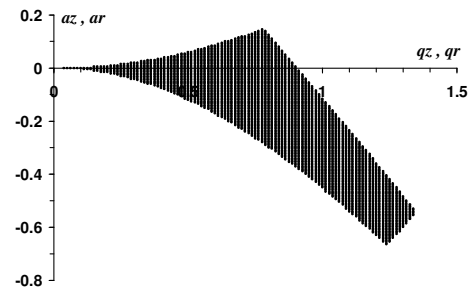
شکل ۱۱- ناحیه پایداری برای مولفه  $r$  در QIT



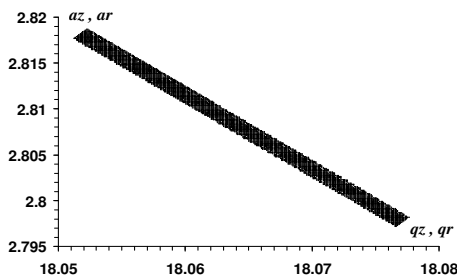
شکل ۱۰- ناحیه پایداری برای مولفه  $z$  در QIT



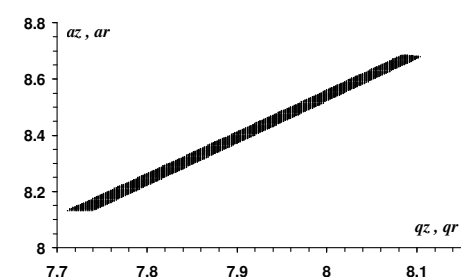
شکل ۱۳- ناحیه پایداری دوم برای QIT



شکل ۱۲- ناحیه پایداری اول برای QIT



شکل ۱۵- ناحیه پایداری چهارم برای QIT



شکل ۱۴- ناحیه پایداری سوم برای QIT

### بحث و نتیجه‌گیری:

در این مقاله، ناحیه‌های اول، دوم، سوم و چهارم پایداری برای دام چهار قطبی هذلولوی محاسبه شده‌اند. بدین ترتیب برای به‌دام اندازی یک یون مشخص، باید ولتاژهای  $U$  و  $V$ ، فرکانس  $f$ ، و ابعاد دام را به‌گونه‌ای اختیار نمود که پارامترهای  $a_z$ ،  $a_r$ ،  $q_z$  و  $q_r$  درون این نواحی قرار گیرند. با این روش می‌توان حتی برای مدتی برابر چند هفته یک یون را نیز در فضای کوچکی به‌دام انداخت. البته برای این منظور، یون باید به‌وسیله لیزر سرد شود.

### مراجع:

- [1]. R.E. March, An introduction to quadrupole ion trap mass spectrometry, Journal of Mass Spectrometry, Vol. 32, 351-369, 1997.
- [2]. G.C. Zhang, J.L. Shen, J.H. Dai, H.J. Zhang, Cooling charged particles in a Paul trap by feedback control, Phys. Rev. A, Vol. 60, 704, 1999.
- [3]. R.F. Bonner, J.E. Fulford, R.E. March, The cylindrical ion trap. Part 1. General introduction, International Journal of Mass Spectrometry and Ion Physics, Vol. 24, 255, 1977.
- [4]. P.E. Dawson, Quadrupole mass spectrometry and its applications, AIP press, New York, 1995, pp. 9-15, and p. 66.