УДК 517.9 : 621.384.8

Влияние краевого поля на зоны устойчивости квадрупольного масс-спектрометра. **Саченко В. Д., Кайдалова М. Н., Усачева Т. В.** — В кн.: Научное приборостроение. Теоретические и экспериментальные исследования. Л.: Наука, 1984, с. 34—38.

Рассмотрена система дифференциальных уравнений, описывающая поведение ионов в поле квадрупольного масс-спектрометра с учетом его краевого искажения в случае линейной модели; получена функция, описывающая зоны в области стабильности, оптимальные по чувствительности для прибора. Лит. — 6 назв., ил. — 2.

В. Д. Саченко, М. Н. Кайдалова, Т. В. Усачева

ВЛИЯНИЕ КРАЕВОГО ПОЛЯ НА ЗОНЫ УСТОЙЧИВОСТИ КВАДРУПОЛЬНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

Теория квадрупольного масс-спектрометра, развитая в основном В. Паули [1, 2] и основанная на свойствах решений дифференциального уравнения Матье [3], предполагает постоянство потенциала поля вдоль оси z. Фактически независимость потенциала от третьей координаты справедлива только при $z \geqslant d+r=R$ (рис. 1). При $z \in [0, R]$ гиперболическое поле искажается, возникает так называемое краевое поле с неизвестным потенциалом. В литературе [4], посвященной изучению поведения ионов в квадрупольном анализаторе, наиболее распространенной является линейная модель потенциала краевого поля, т. е. предполагается, что при $z \in [0, R]$

$$\varphi(t, x, y, z)=\varphi_0(t, x, y)\, z/R,$$

где $\varphi(t, x, y, z)$ — потенциал краевого поля; $\varphi_0(t,x,y)=(u+v\cos\omega t)(x^2-y^2)r^{-2}$ — потенциал гиперболического поля ($u+v\cos\omega t$ — напряжение на электродах анализатора).

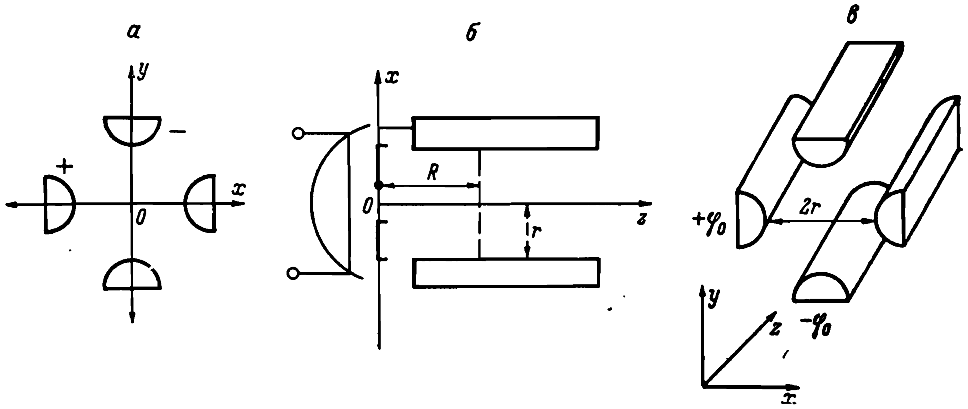

Рис. 1. Расположение электродов квадрупольного масс-спектрометра относительно осей координат.

а — в плоскости *xoy*; *б* — в плоскости *zoy*; *в* — в пространстве.

На настоящем этапе исследования мы также принимаем линейную аппроксимацию, т. е. будем считать, что распределение потенциала поля анализатора описывается функцией

$$\bar{\varphi}(t, x, y, z)=\begin{cases}\varphi(t, x, y, z), & z\in[0, R],\\ \varphi_0(t, x, y), & z>R.\end{cases}$$

Тогда поведение заряженных частиц в поле анализатора определяется решениями следующей системы дифференциальных уравнений:

$$\left.\begin{aligned}\dot{\xi}_1&=\xi_2,\\ \dot{\xi}_2&=F_1(t, \xi_1, \xi_5),\\ \dot{\xi}_3&=\xi_4,\\ \dot{\xi}_4&=F_2(t, \xi_3, \xi_5),\\ \dot{\xi}_5&=\xi_6,\\ \dot{\xi}_6&=F_3(t, \xi_1, \xi_3).\end{aligned}\right\} \qquad (1)$$

Здесь

$$F_1(t,\ \xi_1,\ \xi_5)=\begin{cases}\varkappa(t)\,\xi_1\xi_5, & t\leqslant t_{\text{п}},\\ \varkappa(t)\,\xi_1, & t>t_{\text{п}},\end{cases}\qquad F_2(t,\ \xi_3,\ \xi_5)=\begin{cases}\varkappa(t)\,\xi_3\xi_5, & t\leqslant t_{\text{п}},\\ \varkappa(t)\,\xi_3, & t>t_{\text{п}},\end{cases}$$

$$F_3(t,\ \xi_1,\ \xi_3)=\begin{cases}\varkappa(t)\,(\xi_3^2-\xi_1^2)/2, & t\leqslant t_{\text{п}},\\ 0, & t>t_{\text{п}},\end{cases}$$

где $\varkappa(t)=-2e\,(u+v\cos\omega t)\,(mr^2R)^{-1}$, $(\xi_1,\ \xi_2,\ \xi_3,\ \xi_4,\ \xi_5,\ \xi_6)=(x,\ \dot{x},\ y,\ \dot{y},\ z,\ \dot{z})$; e — заряд иона; m — масса иона; $t_{\text{п}}$ — время пролета ионами области краевого поля.

Исследуя систему (1) и используя соотношения между параметрами прибора и краевого поля [5], мы, во-первых, получим необходимые условия, которым должны удовлетворять координаты и скорости стабильных ионов при входе в гиперболическое поле, и, во-вторых, определим оптимальные по чувствительности

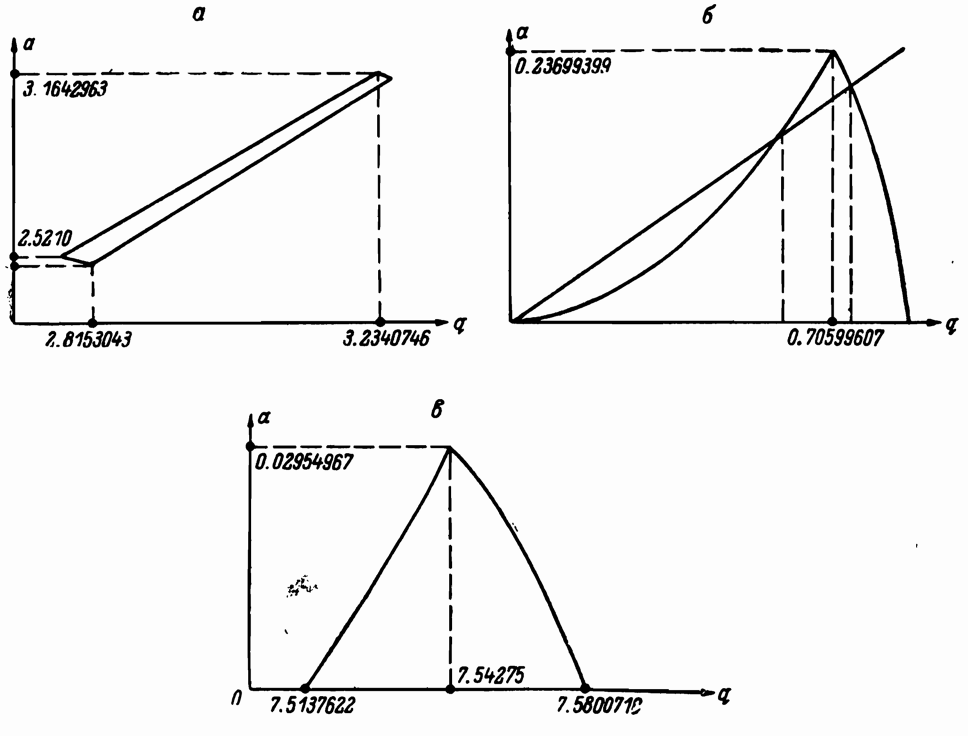

Рис. 2. Зоны стабильности: криволинейный четырехугольник (*а*), первый (*б*) и второй (*в*) треугольники стабильности.

области в зонах стабильности (рис. 2). Для этого рассмотрим сначала вопрос о времени пролета ионами области краевого поля. Из системы (1) следует, что ускорение ионов вдоль оси z определяется выражением

$$\left(\frac{\varkappa(t)}{2}\right)(\xi_3^2-\xi_1^2)\equiv\left(\frac{\varkappa(t)}{2}\right)(y^2-x^2).$$

Для того чтобы покинуть область краевого поля, заряженная частица должна пройти вдоль оси z расстояние R. Расстояние, пройденное частицей за время t, определяется по формуле

$$\int\limits_0^t v(\tau)\,d\tau,$$

где $v(t)$ — скорость частицы.

Следовательно, время пролета ионами краевой области определяется из уравнения

$$R=\int\limits_0^{t_{\text{п}}}\left[v_{0z}+\int\limits_0^{\tau}\frac{\varkappa(\sigma)}{2}\left(y^2(\sigma)-x^2(\sigma)\right)d\sigma\right]d\tau,$$

где v_{0z} — начальная скорость иона вдоль оси z.

Вернемся теперь к системе (1). Любое ее решение может быть представлено в виде $\xi(t)=\|\xi_0(t_{\text{п}})\|\,\xi_0(t)$, где $\xi_0(t)$ — решение системы

$$\left.\begin{aligned}\ddot{x}&=-(a-2q\cos 2\xi)\,x,\\ \ddot{y}&=(a-2q\cos 2\xi)\,g,\\ \ddot{z}&=0.\end{aligned}\right\}\tag{2}$$

Здесь $\xi=\omega t/2$; $a=8eu\,(mr^2\omega^2)^{-1}$; $q=4ev\,(mr^2\omega^2)^{-1}$.
Норма $\xi_0(t)$ в момент $t_{\text{п}}$ равна единице. В силу сказанного, характеристические показатели решений системы (1) и (2) совпадают [6]. Поэтому для всех m/e совпадают множества значений параметров a и q, для которых характеристические показатели решений систем (1) и (2) при данных m/e равны нулю. Далее будем рассматривать движение ионов в гиперболическом поле с учетом их поведения в краевом, выясняя при этом, какие значения скоростей по осям x, y и координат x, y могут приобрести заряженные частицы пучка в момент входа в гиперболическое поле в зависимости от значения параметров прибора и поля. Это даст возможность определить, с какими значениями координат и скоростей вдоль осей x и y в момент $t_{\text{п}}$ стабильные ионы пройдут область гиперболического поля, не разрядившись на электродах, и при каких значениях

$$a=\frac{8eu}{mr^2\omega^2},\quad q=\frac{4ev}{mr^2\omega^2},$$

принадлежащих области стабильности, бóльшая доля стабильных ионов пройдет область гиперболического поля, не разрядившись на электродах.

Пусть $x^{(1)}(\xi)$, $x^{(2)}(\xi)$, $y^{(1)}(\xi)$, $y^{(2)}(\xi)$ — двумерные векторы-решения, составляющие нормальную фундаментальную матрицу системы

$$\left.\begin{aligned}\dot{x}_1&=x_2\\ \dot{x}_2&=-(a-2q\cos 2\xi)\,x_1\end{aligned}\right\},\qquad \left.\begin{aligned}\dot{y}_1&=y_2\\ \dot{y}_2&=(a-2q\cos 2\xi)\,y_1\end{aligned}\right\}\ \text{соответственно.}$$

Первые компоненты этих векторов представляются в виде [3]

$$\sum_{-\infty}^{+\infty}c_{n(x)}\cos(2n+\beta)\,\xi,\quad \sum_{-\infty}^{+\infty}c_{n(x)}\sin(2n+\beta)\,\xi,\quad \sum_{-\infty}^{+\infty}c_{n(y)}\cos(2n+\beta)\,\xi,$$
$$\sum_{-\infty}^{+\infty}c_{n(y)}\sin(2n+\beta)\,\xi.$$

Введем следующие обозначения:

$$\alpha_1=\rho_1\frac{\dot{x}_1^2(\xi_0)+\dot{x}_2^2(\xi_0)}{W_1(\xi_0)},\quad \alpha_2=\rho_2\frac{\dot{y}_1^2(\xi_0)+\dot{y}_2^2(\xi_0)}{W_2(\xi_0)},\quad \rho_1=\sum_{-\infty}^{+\infty}|c_{n(x)}|,\quad \rho_2=\sum_{-\infty}^{+\infty}|c_{n(y)}|,$$
$$\xi_0=\omega t_{\text{п}}/2;$$

$$\beta_1=-\rho_1\frac{4\left(x_1(\xi_0)\,\dot{x}_1(\xi_0)+x_2(\xi_0)\,\dot{x}_2(\xi)\right)}{\omega^2W_1(\xi_0)},\quad \beta_2=-\rho_2\frac{4\left(y_1(\xi_0)\,\dot{y}_1(\xi_0)+y_2(\xi_0)\,\dot{y}_2(\xi_0)\right)}{\omega^2W_2(\xi_0)};$$

$$\gamma_1=\rho_1\frac{4\left(x_1^2(\xi_0)+x_2^2(\xi_0)\right)}{\omega^2W_1(\xi_0)},\quad \gamma_2=\rho_2\frac{4\left(y_1^2(\xi_0)+y_2^2(\xi_0)\right)}{\omega^2W_2(\xi_2)};$$

$$W_1(\xi_0)=\det\begin{pmatrix}x_1(\xi_0)&x_2(\xi_0)\\ \dot{x}_1(\xi_0)&\dot{x}_2(\xi_0)\end{pmatrix},\quad W_2(\xi_0)=\det\begin{pmatrix}y_1(\xi_0)&y_2(\xi_0)\\ \dot{y}_1(\xi_0)&\dot{y}_2(\xi_0)\end{pmatrix}.$$

В гиперболическом поле траектории стабильных ионов описываются функциями

$$x(\xi) = Ax_1(\xi) + Bx_2(\xi),$$
$$y(\xi) + Cy_1(\xi) + Dy_2(\xi),$$
$$z(\xi) = v_{0z}\xi,$$

где $A = [x_0\dot{x}_2(\xi_0) - 2x_0x_2(\xi_0)\omega^{-1}]W_1^{-1}(\xi_0)$; $B = [2\dot{x}_0x_1(\xi_0)\omega^{-1} - x_0\dot{x}_1(\xi_0)]W_1^{-1}(\xi_0)$; $C = [y_0\dot{y}_2(\xi_0) - 2y_0y_2(\xi_0)\omega^{-1}]W_2^{-1}(\xi_0)$; $D = [2\dot{y}_0y_1(\xi_0)\omega^{-1} - y_0\dot{y}_1(\xi_0)]W_2^{-1}(\xi_0)$; v_{0z} — начальная скорость ионов вдоль оси z.

Для того чтобы стабильный ион прошел область гиперболического поля и попал на приемник, его координаты в момент вылета из краевого поля $x_0 = x(t_п)$, $y_0 = y(t_п)$ и его скорости вдоль осей x и y в тот же момент $\dot{x}_0 = \dot{x}(t_п)$, $\dot{y}_0 = \dot{y}(t_п)$ должны удовлетворять следующим двум неравенствам:

$$\alpha_1x_0^2 + \beta_1x_0\dot{x}_0 + \gamma_1\dot{x}_0^2 < r, \tag{3}$$

$$\alpha_2y_0^2 + \beta_2y_0\dot{y}_0 + \gamma_2\dot{y}_0^2 < r. \tag{4}$$

Обозначив квадратичные формы, стоящие в левых частях этих неравенств через $F_1(x_0, \dot{x}_0)$ и $F_2(y_0\dot{y}_0)$ соответственно, получим, что x_0, $\dot{x}_0$, y_0, $\dot{y}_0$ должны удовлетворять следующим неравенствам:

$$|x_0| \leqslant \left(\frac{\alpha_1 r}{4\alpha_1\gamma_1 - \beta_1^2}\right)^{1/2}, \quad |y_0| \leqslant \left(\frac{\alpha_2 r}{4\alpha_2\gamma_2 - \beta_2^2}\right)^{1/2},$$

$$|\dot{x}_0| \leqslant \left(\frac{\gamma_1 r}{4\alpha_1\gamma_1 - \beta_1^2}\right)^{1/2}, \quad |\dot{y}_0| \leqslant \left(\frac{\gamma_2 r}{4\alpha_2\gamma_2 - \beta_2^2}\right)^{1/2}.$$

Правые части указанных неравенств обозначим через Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3, Ψ_4 соответственно, а объединение областей, в которых функции $F_1(x_0, \dot{x})$, $F_2(y_0, \dot{y}_0)$ отрицательны, через θ_1 и θ_2 соответственно и введем множества

$$\Omega_1 = \theta_1 \cap ([0, \Psi_1) \times [0, \Psi_3]),$$
$$\Omega_2 = \theta_2 \cap ([0, \Psi_2] \times [0, \Psi_4]).$$

Далее следует выяснить, при каких значениях (a, q), принадлежащих области стабильности, наибольшее количество стабильных ионов сможет достигнуть приемника. Для этого введем следующую функцию:

$$T(a, q) = \max_{\Omega_1 \times \Omega_2} [(x_0^2 + y_0^2)^{1/2}(\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2)^{1/2}],$$

определенную в области стабильности.

Используя оценки координат и скоростей ионов в момент ввода в гиперболическое поле [5], получаем функцию

$$Q(a, q) = T(a, q)\left\{\left[V \exp\left|\int_0^{t_п} R\varkappa(\tau)\frac{\operatorname{tg}\sqrt{c}\,\tau}{\sqrt{c}}\right|\right]^2 \left(\frac{\operatorname{tg}(\sqrt{c}\,t_п)}{\sqrt{c}}\right)\right\}^{-1},$$

где $V = \max(v_{0x}, v_{0y})$, $c = 2e(u + v)(mr^2R)^{-1}$, характеризующую долю стабильных ионов пучка, которые попадут на приемник, относительно всех стабильных ионов в пучке. Функция $Q(a, q)$, изменяясь в зонах стабильности, описывает области, в которых доля стабильных ионов, доходящих до приемника, наиболее существенна.

Выводы

1. Получена формула для вычисления времени пролета ионами области краевого поля.
2. Определены необходимые условия — формулы (3), (4), которым должны удовлетворять координаты и скорости стабильных ионов при входе в гиперболическое поле, для того чтобы попасть на приемник.
3. Найдена функция $Q(a, q)$, определяющая оптимальные по чувствительности области в зонах стабильности.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Paul W.* — Z. Phys., 1958, Bd 152, S. 143.
2. *Paul W.* — Z. Naturforsch., 1953, 8a, S. 448.
3. *Уиттекер Е. Т., Ватсон Т. Н.* Курс современного анализа. М., 1963, т. 2.
4. *Dawson P. H., Whetten N. R.* — Advances in Electronic and Physics, 1969.
5. *Усачева Т. В., Кузьмин А. Ф.* — ЖТФ, 1982, т. 52, вып. 5, с. 950.
6. *Ляпунов А. М.* Общая задача об устойчивости движения. М.; Л., 1950.