ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2004, том 14, № 2, с. 46–58

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ ДЛЯ БИОТЕХНОЛОГИИ

УДК 537.534.7: 621.319.7

© А. Н. Веренчиков, М. И. Явор

УСТОЙЧИВОСТЬ ИОННОГО ДВИЖЕНИЯ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

В работе исследованы вопросы устойчивого удержания ионов в периодических и неоднородных электростатических полях. В качестве примеров рассмотрены ионные каналы, образованные последовательностью линз, а также электростатические ловушки и многоотражательные времяпролетные масс-спектрометры, сформированные ионными зеркалами. В линейном приближении показано, что периодические плоско- и осесимметричные поля обладают фокусирующими свойствами и удерживают ионные пучки в большом диапазоне энергии ионов. Введено понятие эффективного удерживающего потенциала, характеризующего стабильность ионного движения как сопротивляемость системы внешним воздействиям, включая электростатические или магнитные отклонения или случайное рассеивание. Обнаружены эффекты нелинейной устойчивости ионного движения в периодических системах. Показано, что движение ионных пучков в зеркальных периодических системах становится более стабильным при компенсации хроматических аберраций.

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию устойчивости транспортировки пучков заряженных частиц в периодических фокусирующих электромагнитных системах уделяется большое внимание, прежде всего в ускоряющих или накопительных кольцевых системах, где пучки ионов или электронов высоких энергий совершают миллионы оборотов [1]. В таких устройствах, где фазовый объем пучков относительно невелик, наибольшее значение имеют обеспечение устойчивости движения в линейном приближении и устранение эффектов резонанса. В последнее время все больший интерес вызывают периодические ионно-оптические системы другого типа: многооборотные времяпролетные спектрометры и электростатические ловушки. Эти устройства работают в условиях значительно более низких энергий заряженных частиц и существенно больших (относительно размеров системы) фазовых объемов удерживаемых пучков. Поэтому успешное функционирование указанных систем возможно при обеспечении устойчивости движения ионов при наличии нелинейных эффектов (аберраций) и сопротивляемости внешним полевым воздействиям (например, паразитным магнитным полям).

В настоящей работе на примерах расчетов показано, что движение, являющееся устойчивым в периодических электростатических системах в линейном приближении, остается таковым и при наличии существенных нелинейных эффектов, а также демонстрирует устойчивость к внешним воздействиям в нелинейном приближении. Проведена аналогия между удержанием ионных пучков в радиочастотных (RF) динамических системах и электростатических периодических структурах и введено понятие эффективного удерживающего потенциала периодических статических полей. Рассмотрены характерные свойства нелинейного устойчивого движения пучков частиц в периодических системах и особенности зеркальных электростатических ловушечных систем. Предварительный анализ устойчивости проведен в работе авторов [2].

ЛИНЕЙНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДВИЖЕНИЯ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Периодическая электростатическая транспортирующая система состоит из последовательности большого числа идентичных ячеек. Поскольку на практике, как правило, полевые структуры таких ячеек являются зеркально-симметричными относительно середины ячейки, мы рассмотрим именно такой случай. Для простоты ограничимся рассмотрением плоской задачи, т. е. движения вдоль оси Z пучка частиц с поперечным разбросом по координате x и углу $\alpha = \arctan a$, где $a = \mathrm{d}x/\mathrm{d}z$. В линейном приближении преобразование фазового вектора $\{x, \alpha\}$ траектории произвольной частицы одной ячейкой системы описывается матрицей перехода

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = T\begin{pmatrix} x_0 \\ \alpha_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (x|x) & (x|\alpha) \\ (\alpha|x) & (\alpha|\alpha) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_0 \\ \alpha_0 \end{pmatrix},$$

причем для зеркально-симметричной ячейки $(x|x) = (\alpha|\alpha)$. При условии, что ячейка не является иммерсионной (т. е. энергии частицы на входе в ячейку и на выходе из ячейки одинаковы), выполняется

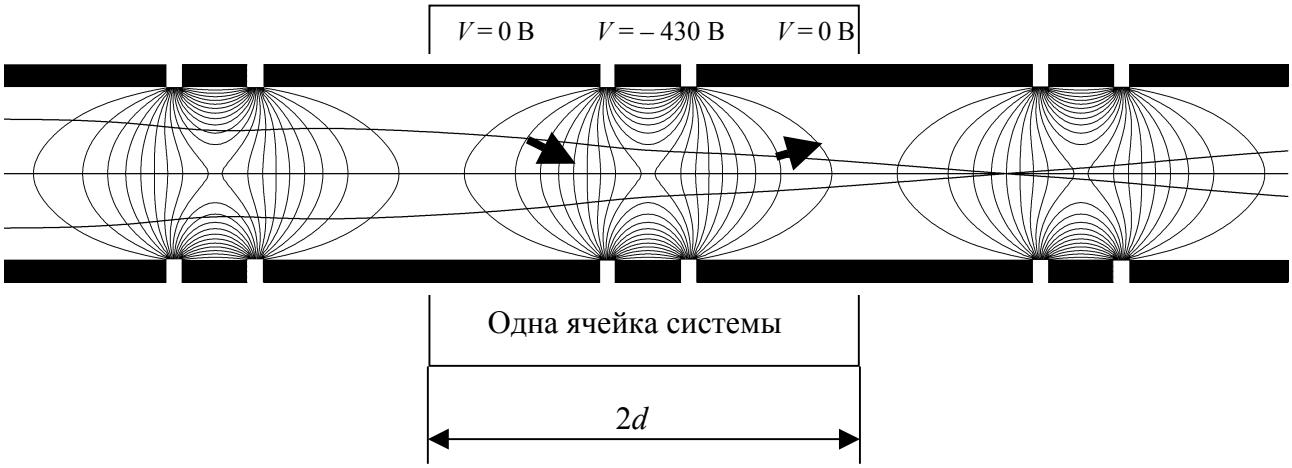

Рис. 1. Периодическая электростатическая система, состоящая из идентичных двумерных зеркально-симметричных ячеек (одиночных линз) с периодом $2d$ = 80 мм, расстоянием между электродами линз 32 мм и длинами незаземленных электродов 15 мм. Показаны эквипотенциали поля и траектории заряженных частиц. Стрелки указывают направление действующих на частицу фокусирующих и дефокусирующих сил

условие сохранения фазового объема

$$(x|x)(\alpha|\alpha)-(x|\alpha)(\alpha|x)=1.$$

Известно [3], что линейное движение через последовательность рассматриваемых ячеек устойчиво при условии $-1 < (x|x) < 1$. Действительно, обозначим при выполнении указанного условия $(x|x) = \cos\sigma$. Тогда матрица перехода T примет вид

$$T=\begin{pmatrix} \cos\sigma & \beta\sin\sigma \\ -(1/\beta)\sin\sigma & \cos\sigma \end{pmatrix},$$

где β — некоторый произвольный параметр, а матрица перехода последовательности n ячеек запишется как

$$T^n=\begin{pmatrix} \cos n\sigma & \beta\sin n\sigma \\ -(1/\beta)\sin n\sigma & \cos n\sigma \end{pmatrix},$$

откуда и следует ограниченность координаты x и угла α после прохождения любого количества ячеек. Параметр σ называют "набегом фазы" частиц в ячейке периодической системы.

Условие устойчивости $-1 < (x|x) < 1$ означает, что движение пучка частиц через периодическую электростатическую систему устойчиво в некотором наборе диапазонов энергий, которые мы будем называть "зонами устойчивости по энергии" [4]. Действительно, пусть ячейка представляет собой последовательность фокусирующих и дефокусирующих полей (простейшим примером такой ячейки может являться симметричная одиночная двумерная линза, см. рис. 1). При очень большой начальной кинетической энергии K заряженных частиц такая ячейка обладает лишь очень слабым фокусирующим действием (фокусное расстояние f ячейки значительно больше длины ячейки $2d$), так что $(x|x) = 1 - d/f \approx 1$. При уменьшении энергии фокусное расстояние f линзы уменьшается, так что при некоторой энергии K_1 выполняется условие $f = d/2$ и $(x|x) = -1$. При дальнейшем уменьшении энергии K движение становится неустойчивым. Однако при еще меньших энергиях внутри ячейки появляется внутренний фокус, и в некотором диапазоне энергий $K_2 < K < K_3$ опять выполняется условие устойчивости $-1 < (x|x) < 1$. При дальнейшем уменьшении энергии движение снова становится неустойчивым, пока в ячейке не появится второй внутренний фокус, и тогда образуется третья зона устойчивости по энергии. Аналогичным образом образуются и последующие зоны устойчивости.

Зоны устойчивости с высокими номерами охватывают очень узкие относительные диапазоны энергий, поэтому для реальных ионно-оптических систем рабочими являются первая и вторая зоны устойчивости. На рис. 2 показаны траектории ионов, стартующих с оптической оси с одинаковыми поперечными составляющими кинетической энергии K_r = 0.025 эВ и проходящих через 100 ячеек системы, представленной на рис. 1 с различными значениями продольной составляющей кинетической энергии K. Для указанной системы первая зона устойчивости занимает диапазон K > 40 эВ, а вторая — диапазон 2 эВ < K < 10 эВ.

Зонная структура устойчивости движения ионов

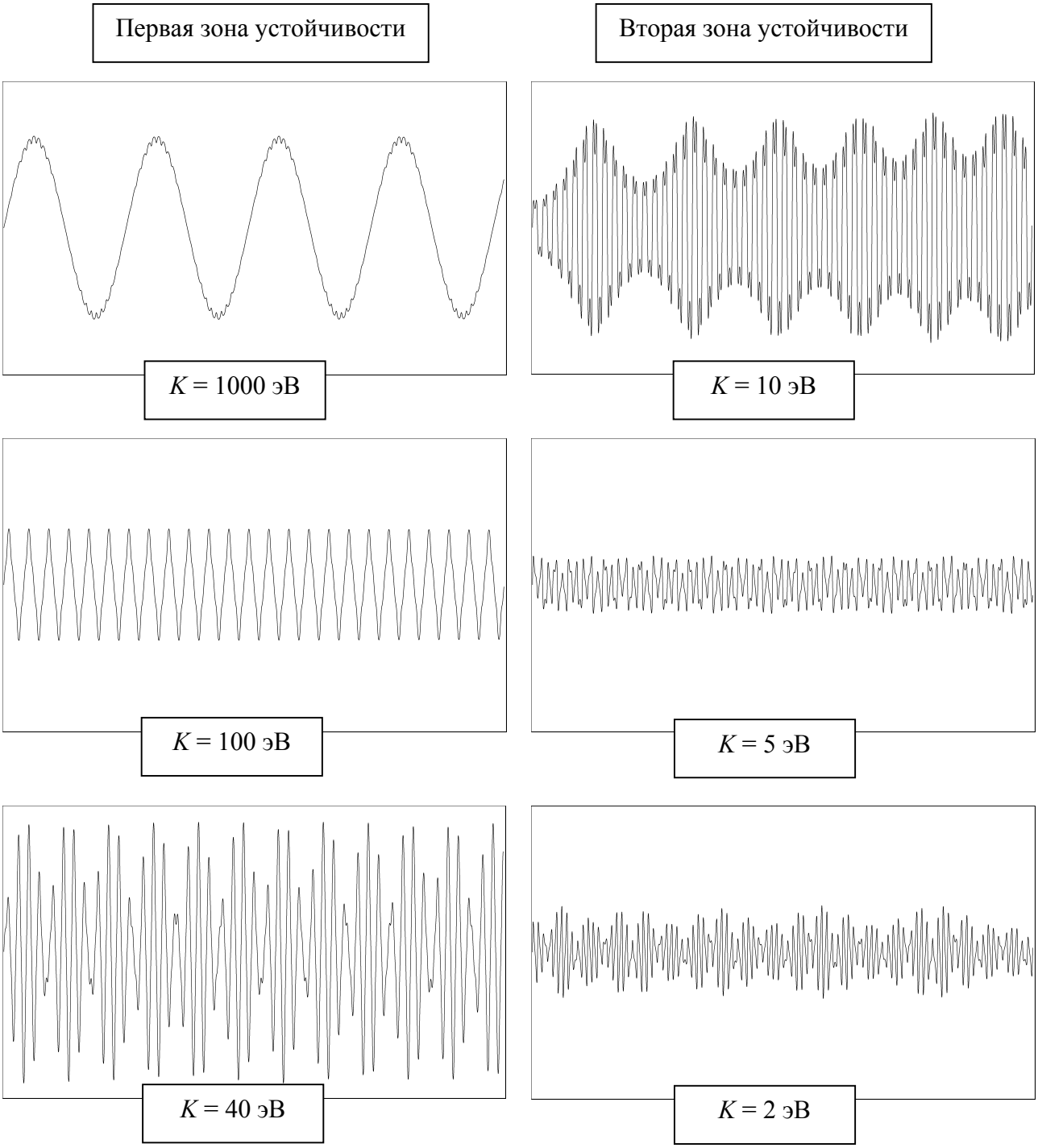

Рис. 2. Траектории заряженных частиц в периодической системе, показанной на рис. 1, для разных значений энергии продольного движения K в бесполевом пространстве. Длина рамок рисунков соответствует 100 ячейкам системы (8000 мм), высота рамок соответствует масштабу 5 мм. Во всех случаях поперечная энергия частиц на оси системы одинакова и равна $K_r = 0.025$ эВ

в электростатических периодических системах аналогична такой структуре в динамических квадрупольных RF-системах, только в последних роль энергии играет параметр $1/q = m\omega^2 r^2/(4eV)$, где q — так называемый параметр устойчивости, m и e — масса и заряд частицы, ω — круговая частота RF-поля, V — его амплитуда, r — радиус апертуры квадруполя. Таким образом, в RF-системах зоны устойчивости отвечают определенным диапазонам масс транспортируемых частиц, а в периодических электростатических системах — диапазонам энергий этих частиц.

ЭФФЕКТИВНЫЙ УДЕРЖИВАЮЩИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Рассмотрим движение заряженной частицы через периодическую электростатическую систему в первой зоне устойчивости при высоких энергиях, т. е. при слабой фокусировке в одной ячейке системы, когда величина $(x \mid x) = \cos\sigma = 1 - d/f$ достаточно близка к единице. Тогда $\sigma \approx \sqrt{2d/f}$, а параметр β также выражается через величины d и f, поскольку $1/f = -(\alpha \mid x) = (\sin\sigma)/\beta$, т. е. $\beta \approx \approx \sqrt{2df}$. Таким образом, координата x_n частицы после прохождения n ячеек системы равна

$$x_n = x_0 \cos\left(n\sqrt{2d/f}\right) + \\ + \alpha_0 \sqrt{2df} \sin\left(n\sqrt{2d/f}\right).$$

Если не принимать во внимание детальное поведение траекторий внутри фокусирующей ячейки, траектория частицы в системе близка к гармонической (как это видно на рис. 2 при значении $K = 1000$ эВ):

$$x(z) = x_0 \cos kz + \frac{\alpha_0}{k} \sin kz,$$

с периодом $z = 2\pi/k$, где $k = 1\big/\sqrt{2df}$.

Подобное гармоническое движение для частицы с кинетической энергией K продольного (вдоль оси Z) движения наблюдалось бы в поле квадратичного потенциала

$$U(x) = U_0 \frac{x^2}{r_0^2},$$

где U_0 — потенциал при $x = r_0$. Назовем этот потенциал "эффективным удерживающим потенциалом" периодического электростатического поля. Градиент напряженности эффективного удерживающего поля равен

$$g = -\frac{\mathrm{d}E(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{2U_0}{r_0^2}$$

и связан с параметром k соотношением $k^2 = ge/(2K)$, т. е.

$$g = \frac{K}{edf}.$$

Таким образом, градиент напряженности эффективного удерживающего поля зависит от энергии K продольного движения заряженной частицы через периодическую электростатическую структуру. Зависимость фокусного расстояния от энергии для электростатических линзовых полей можно приближенно описать эмпирическим соотношением

$$\frac{f_0}{f} = \left(\frac{K_0}{K}\right)^{\lambda},$$

где f_0 — фокусное расстояние, соответствующее энергии K_0, а λ — некоторый параметр, величина которого зависит от типа линзового поля (для двумерных и осесимметричных одиночных линз значение этого параметра находится в диапазоне $2 < \lambda < 3$ [5]). В описанном приближении зависимость градиента напряженности эффективного удерживающего поля от энергии имеет вид

$$g = \frac{K_0}{df_0} \frac{1}{K^{\lambda-1}}.$$

Введенное понятие эффективного удерживающего потенциала аналогично понятию динамического потенциала, используемого при рассмотрении RF-систем [6]. Напомним, что в RF-системах амплитуда динамического потенциала равна

$$U_0 = \frac{qV}{4},$$

где q — параметр устойчивости, V — амплитуда RF-поля. В отличие от электростатических периодических систем амплитуда динамического потенциала в RF-системах зависит от массы частицы, а не от энергии ее продольного движения.

В рассматриваемых условиях слабой фокусировки усредненное движение заряженных частиц через периодическую структуру представляется как равномерное по оси Z движение под воздействием удерживающей силы $F(x) = -egx$, подчиняющееся уравнению

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}z^2} + k^2 x = 0.$$

Если на частицу воздействует дополнительно внешняя сила $H(z)$, то указанное уравнение становится неоднородным:

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}z^2} + k^2 x = h(z),$$

где $h(z) = H(z)/(2eK)$. Решение этого уравнения

$$x(z) = x_0 \cos kz + \frac{\alpha_0}{k} \sin kz + \\ + \frac{1}{k}\int_0^z h(t) \sin[k(z-t)]\mathrm{d}t$$

остается ограниченным, за исключением случая резонанса, наступающего при условии периодичности возмущающей функции $h(z)$ с периодом, равным $Z = 2\pi/k$ или его дробной части.

В приближении модели эффективного удерживающего потенциала качество удержания пучков частиц является тем более высоким, чем выше значение g, т. е. чем меньше энергия частицы. Однако при малых положительных и при отрицательных значениях коэффициента $(x \mid x)$ приближение эффективного потенциала перестает быть справедливым, поэтому после достижения некоторого наилучшего качества удержания устойчивость транспортировки пучков заряженных частиц ухудшается при дальнейшем уменьшении энергии K. В реальности наилучшая устойчивость движения наблюдается при значениях коэффициента $(x|x)$, близких к нулю, т. е. при $f = d$.

Для периодической системы линз, представленной на рис. 1, значения коэффициента $(x \mid x)$ в зависимости от энергии K представлены на верхнем из графиков на рис. 3. В первой зоне устойчивости значению $(x \mid x) = 0$ соответствует энергия $K \approx 100$ эВ, а во второй зоне устойчивости — энергия $K \approx 5$ эВ. Из рис. 2 видно, что этим значениям энергии действительно соответствуют меньшие амплитуды колебательных поперечных движений, чем значениям энергии, соответствующим краям зон устойчивости.

Для оценки справедливости модели эффективного удерживающего потенциала на рис. 3 представлено сравнение в первой зоне устойчивости теоретически предсказываемого по значениям K и f значения градиента эффективного динамического удерживающего потенциала $g_t = K/(edf)$ (в рассматриваемой периодической системе линз с длиной ячейки $2d = 80$ мм) и рассчитанного с помощью численного моделирования траекторий (для такого моделирования использовалась программа SIMION 7.0 [7]) значения $g = 2K_r/(er_0^2)$, где r_0 — амплитуда колебаний траектории, стартующей с оси системы с поперечной энергией K_r. Из сравнения видно, что амплитуда поперечных

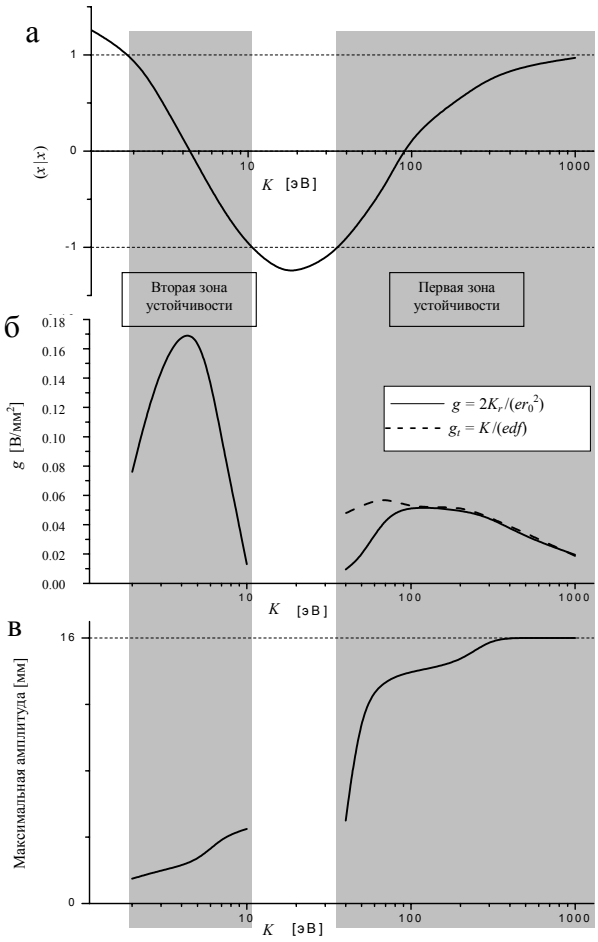

Рис. 3. Зависимости коэффициента $(x|x)$ (а), функции $g = K_r/(er_0^2)$ (б) и максимальной амплитуды устойчивого движения от энергии продольного движения K (в) в системе, показанной на рис. 1

колебаний ионов хорошо описывается моделью эффективного удерживающего потенциала при значениях $(x|x) > 0$, т. е. при $f > d$.

Хотя модель эффективного удерживающего потенциала теряет смысл при $f < d$, а тем более во второй зоне устойчивости, величина "эффективного удерживающего градиента" $g = 2K_r/(er_0^2)$ и в этих случаях по-прежнему характеризует силу поперечного удержания заряженной частицы полем периодической системы. Поэтому на рис. 3 рассчитанные численным моделированием значения величины g представлены в первой и второй зонах устойчивости. Из результатов видно, что эффективный удерживающий градиент в середине второй зоны устойчивости в несколько раз выше, чем в первой зоне устойчивости. Этот факт также очевиден из сравнения амплитуд колебаний при раз-

личных энергиях продольного движения и одной и той же энергии поперечного движения на рис. 2.

НЕЛИНЕЙНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДВИЖЕНИЯ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

В реальных ионно-оптических системах структура периодической линейной фокусировки нарушается нелинейными эффектами (аберрациями), возрастающими при увеличении фазового объема пучка заряженных частиц. Аберрации любого фиксированного порядка быстро растут по величине при прохождении все большего числа ячеек системы, поэтому из аберрационной теории следовало бы ожидать потери свойства устойчивости движения в периодических системах по мере увеличения фазового объема пучка, как только вклад нелинейных эффектов становится заметен. Однако, как показывает численное моделирование, удивительное свойство периодических ионно-оптических систем заключается в том, что в условиях устойчивости линейного движения монохроматический пучок заряженных частиц остается устойчивым в широком диапазоне величин фазового объема пучка, когда вклад аберраций в траектории заряженных частиц является очень большим. Более того, указанная нелинейная устойчивость сохраняется и при воздействии на пучок внешних сил (например, внешнего магнитного поля). Заметим, что этот факт не следует из закона сохранения фазового объема или более общих симплектических соотношений [3]. Скорее, нелинейную устойчивость можно рассматривать как результат удержания пучка заряженных частиц в поле эффективного удерживающего потенциала (хотя бы и возмущенного внешними воздействиями и нелинейными эффектами). К сожалению, авторам неизвестны методы численной оценки устойчивости нелинейного движения в периодических электростатических ионно-оптических системах. Однако численные эксперименты убедительно показывают факт наличия рассматриваемой нелинейной устойчивости.

В качестве первой иллюстрации продолжим рассмотрение движения ионов в системе, представленной на рис. 1. Такое движение является линейным лишь для малых начальных значений поперечной кинетичекой энергии K_r на оси системы (порядка K_r = 0.03 эВ). В этом случае, как видно

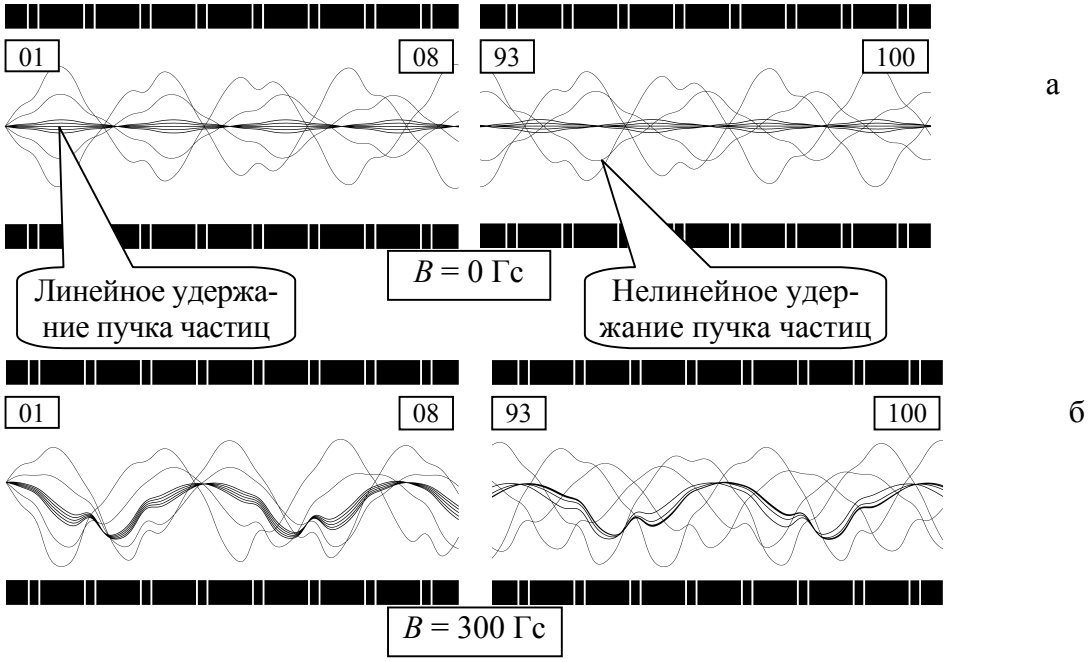

Рис. 4. Устойчивость пучка заряженных частиц с энергией K = 100 эВ в периодической системе, показанной на рис. 1, в первых (1–8-й) и последних (93–100-й) ячейках системы. Показаны линейная (для частиц с поперечными энергиями на оси системы порядка 0.025 эВ) и нелинейная (для частиц с поперечными энергиями на оси системы порядка 0.2 эВ) устойчивость движения частиц в отсутствие внешних возмущений и в присутствии внешнего магнитного поля, направленного перпендикулярно плоскости рисунка

из рис. 4, периодическая фокусировка пучка при условии $(x|x) = 0$ в первой зоне устойчивости (т. е. при энергии продольного движения 100 эВ) сохраняется после прохождения пучком большого числа ячеек системы. При начальных значениях K_r порядка нескольких десятых эВ (при которых пучок занимает около половины апертуры системы) геометрические аберрации третьего порядка системы заметно проявляются уже в первых ячейках системы, а после прохождения восьми ячеек периодическая фокусировка для указанных значений K_r полностью разрушается. Однако амплитуда поперечных колебаний ионов остается неизменной и после прохождения сотни ячеек системы и продолжает оставаться таковой независимо от количества пройденных ячеек и в дальнейшем.

Аналогичный эффект наблюдается и при наличии сильных возмущающих факторов, как например при поперечном смещении пучка частиц магнитным полем. Для величины магнитного поля 300 Гс, указанной на рис. 4, б, при отсутствии электростатической фокусировки ионы с массой m = 100 а.е.м. были бы уже во второй ячейке системы выброшены на электроды линзы. При наличии периодического электростатического поля, однако, ионы даже с характерно нелинейным поведением траекторий удерживаются в системе на протяжении сотен ячеек.

Отметим, что степень нелинейной устойчивости зависит от близости энергии заряженных частиц к границам зоны устойчивости. На рис. 5 показаны траектории ионов с теми же значениями начальной поперечной компоненты кинетической энергии, что и приведенные на рис. 4, но для других значений энергии продольного движения. Для высокой энергии K = 300 эВ, находящейся вдали от границы первой зоны устойчивости, все показанные траектории являются устойчивыми, несмотря на меньший по сравнению с энергией K = = 100 эВ градиент удерживающего поля g (см. рис. 3). Однако в случае K = 50 эВ, когда энергия близка к границе зоны устойчивости, траектории с максимальным из показанных на рис. 5 значением поперечной составляющей начальной кинетической энергии перестают быть устойчивыми. Для линзовой системы, представленной на рис. 1, зависимость максимальной амплитуды устойчивого движения от энергии продольного движения частиц показана на нижнем из графиков на рис. 3.

Поведение траектории заряженной частицы в периодической системе можно описывать последовательностью точек, характеризующих эту траекторию после прохождения каждой ячейки, на фазовой плоскости $\{x, \alpha\}$. Очевидно, что в линейном приближении такие точки для каждой траектории лежат на эллипсе, а набег фазы σ в каждой ячейке одинаков. При наличии аберраций указанные точки в фазовом пространстве продолжают оставаться на некоторой эллипсоподобной замкнутой кривой, но величина набега фазы в ячейках становится отличной от этой величины в линейном приближении и может меняться от ячейки к ячейке. На рис. 6, а показаны фигуры, образуемые рассматриваемыми точками в случае движения частиц в системе, представленной на рис. 1. В линейном приближении при энергии продольного движения K = 100 эВ набег фазы σ = 90º, что видно в случае угла старта частицы по отношению к оптической оси α_0 = 1º. При больших углах старта набег фазы зависит от этого угла и становится непостоянным.

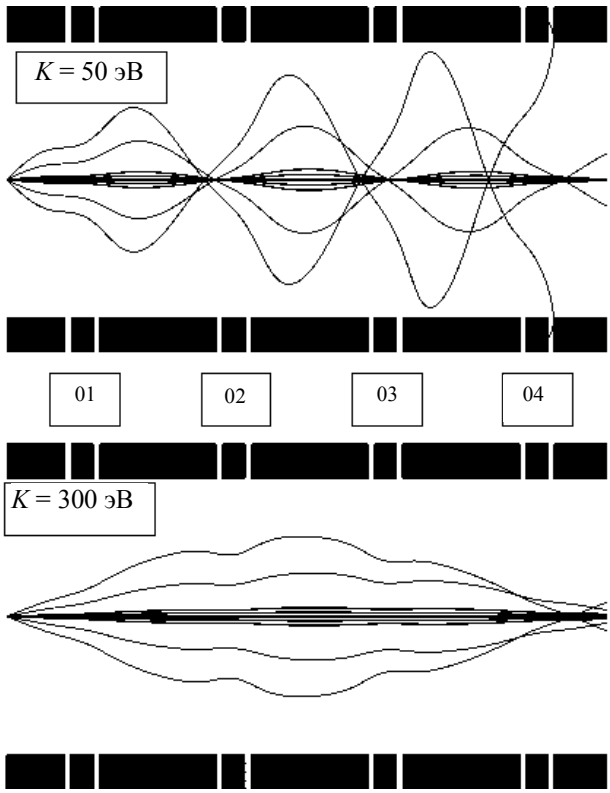

Рис. 5. Траектории заряженных частиц с такими же значениями поперечной кинетической энергии, как и траектории на рис. 4, при различных значениях энергии продольного движения

При наличии внешних воздействий на частицу (например, отклоняющего магнитного поля) точки, характеризующие частицу в фазовом пространстве, при устойчивом характере движения по-прежнему лежат на некоторой замкнутой кривой. Примеры таких кривых, соответствующих

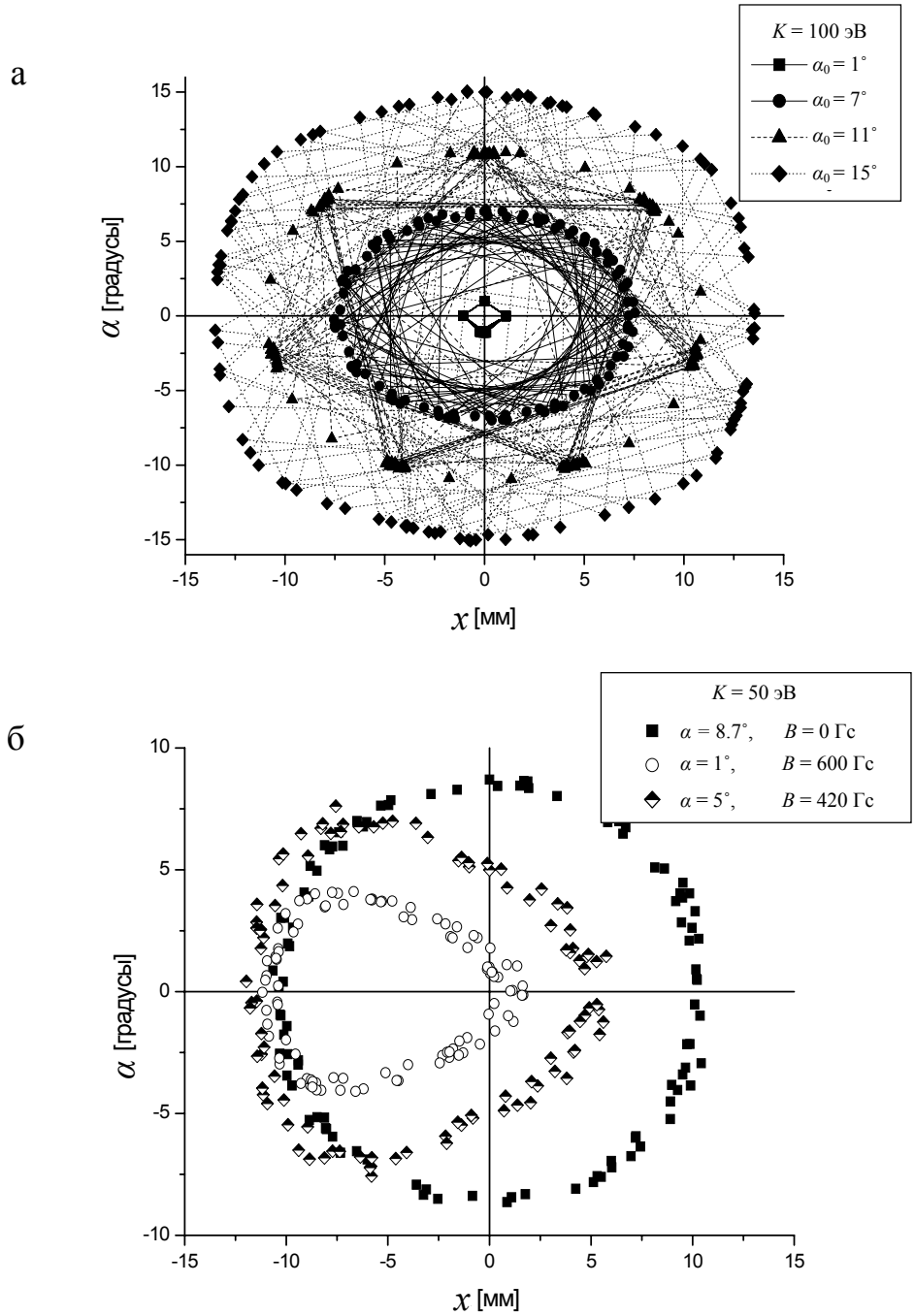

Рис. 6. Перемещение точек, характеризующих траекторию заряженной частицы в фазовом пространстве после прохождения каждой ячейки системы, представленной на рис. 1. Частица стартует с оптической оси под некоторым углом α_0 к этой оси. Точки, соответствующие соседним ячейкам, соединены линиями: а — точки, соответствующие различным начальным углам α (различным амплитудам движения) при отсутствии внешних воздействий; б — точки, соответствующие максимальным амплитудам устойчивого движения при различных значениях внешнего магнитного поля, отклоняющего частицы поперек оптической оси

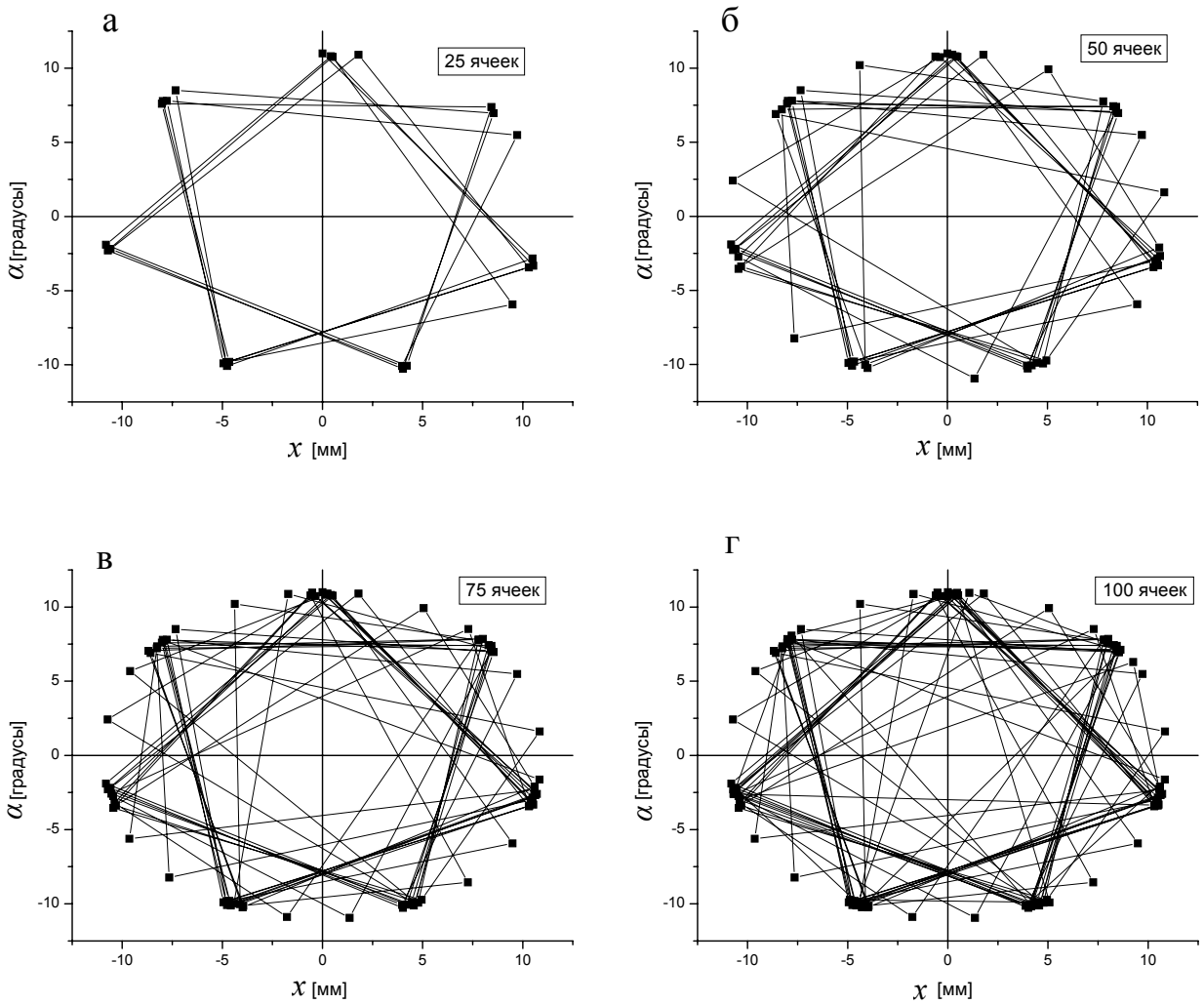

Рис. 7. Набор точек на фазовой плоскости после прохождения различного количества ячеек системы, представленной на рис. 1, при энергии продольного движения $K = 100$ эВ и угле старта частицы $\alpha_0 = 11°$

предельным устойчивым амплитудам движения для различных значений отклоняющего магнитного поля, показаны на рис. 6, б.

Интересной особенностью нелинейного движения является наличие в некоторых случаях "предпочтительных" фаз, где рассматриваемые точки на фазовой плоскости сгущаются. На рис. 6, а такой случай реализуется при $\alpha_0 = 11°$, с предпочтительным значением набега фазы в одной ячейке $\sigma = 2\pi / 7$. Более подробно формирование картины точек на фазовой плоскости в рассматриваемом случае показано на рис. 7. Из приведенных на этом рисунке графиков видно, что даже при существенном отклонении после прохождения некоторых ячеек фазы набега от "предпочтительных" значений в дальнейшем набег фазы все равно стремится принимать значения, близкие к $2\pi n / 7$.

ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ЗЕРКАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

Движение в периодической системе идентичных ячеек реализуется не только в длинных линзовых каналах, но и в замкнутых ловушечных системах. Простейшая из таких систем, состоящая из двух отражающих и одного среднего фокусирующего электродов, приведена на рис. 8. Возможность устойчивого удержания пучка заряженных частиц, занимающего некоторый ограниченный начальный фазовый объем, в ловушках подобной

геометрии отмечалась и ранее (см., например, [8]). Такой пучок может удерживаться в ловушке бесконечное время.

Общие закономерности удержания заряженных частиц в зеркальных ловушечных системах ничем не отличаются от таких закономерностей в периодических линзовых каналах. В зеркальных системах сохраняются зонная структура устойчивости движения, устойчивость в условиях нелинейных эффектов (аберраций) и при наличии возмущающих факторов. Один из примеров сопротивляемости зеркальной ловушечной системы к возмущающим воздействиям показан на рис. 8, где возмущающим фактором является поперечное смещающее электростатическое поле.

Следует отметить, что сохранение устойчивости движения при наличии постоянных возмущающих воздействий (как в ловушечных, так и в линзовых системах) является следствием того, что такие воздействия могут рассматриваться как искажающие эффективный удерживающий потенциал, но сохраняющие его способность к удержанию частиц в некотором диапазоне поперечных энергий, поскольку полная энергия самой частицы в периодической системе остается неизменной. Другая ситуация реализуется, если энергия частицы периодически меняется под воздействием внешних факторов (например, молекул остаточного газа в системе). В этом случае даже малые случайные воздействия в конце концов приводят к расшатыванию траектории частицы и нарушению устойчивости ее движения. Пример фазовой картины развития неустойчивости движения в ловушке, представленной на рис. 8, под влиянием случайной периодической отклоняющей силы показан на рис. 9.

Вообще говоря, ширина энергетических зон устойчивости в ловушечных системах, как правило, является существенно более узкой, чем в линзовых каналах. Например, для ловушки, приведенной на рис. 8, первая зона устойчивости занимает диапазон энергий от 50 до 60 эВ, т. е. всего около

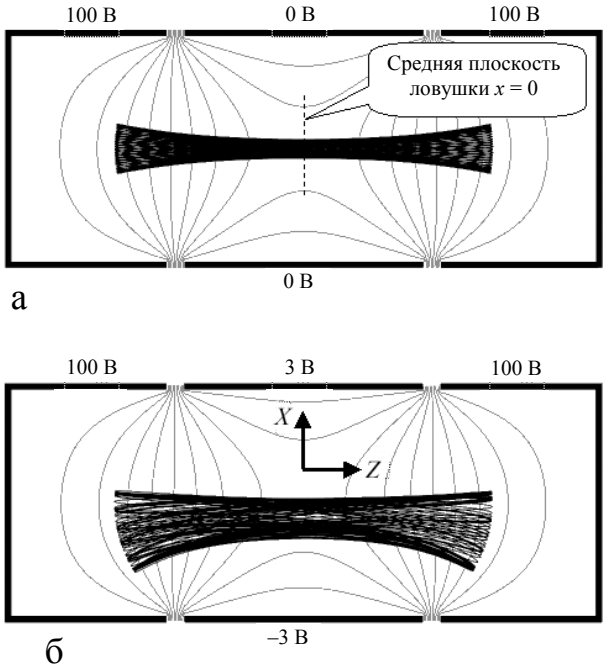

Рис. 8. Модель простейшей двумерной электростатической ловушки. Показано удержание пучка заряженных частиц в первой зоне устойчивости в режиме $(x|x) = 0$, реализующемся после прохождения одной ячейки (т. е. половины оборота в ловушке), при симметричном поле ловушки (а) и при наличии смещающих потенциалов на средних электродах ловушки (б)

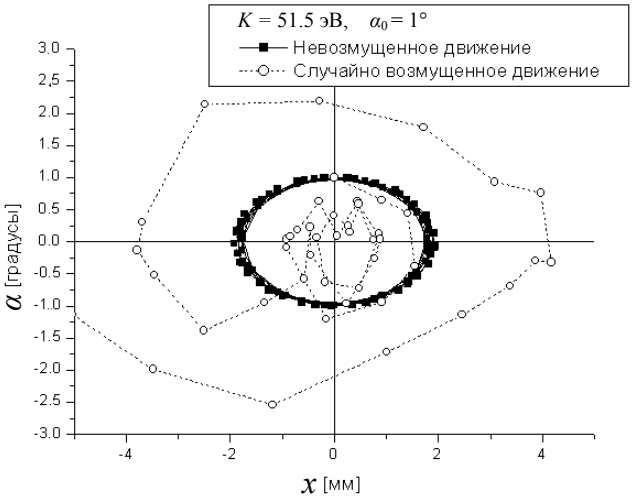

Рис. 9. Набор точек на фазовой плоскости, характеризующей траекторию в средней плоскости ловушки $x = 0$ после последовательных отражений от зеркал:
–■– при отсутствии внешних воздействий;
--○-- при наличии периодических воздействий, случайным образом меняющих поперечную энергию частицы

20 % от величины средней энергии частиц в зоне устойчивости. В связи с этим в электростатических ловушках могут наблюдаться существенные потери, вызванные разбросом энергии заряженных частиц.

Разброс по энергиям продольного движения в пучке приводит к тому, что часть заряженных частиц, энергии которых менее всего отстоят от границ зон устойчивости, в меньшей степени удерживаются периодической системой. Иначе говоря, если, например, для некоторой "номинальной" энергии K_0 после прохождения ионом, изначально параллельным оси Z, одной ячейки системы в линейном приближении выполняется условие

$$x_1 = (x \mid x)x_0 = 0,$$

то для другой энергии K с относительным отклонением $\delta = (K - K_0) / K_0$ по отношению к номинальной

$$x_1 = (x \mid x)x_0 + (x \mid x\delta)x_0\delta + \\ + (x \mid x\delta\delta)x_0\delta^2 + \ldots \neq 0.$$

Для того чтобы приблизить условия удержания немонохроматического пучка частиц в системе к условиям удержания монохроматического пучка в середине зоны устойчивости, желательно выполнение условия ахроматичности системы в приближении второго порядка

$$(x \mid x\delta) = 0$$

(для зеркально-симметричных ячеек одновременно с этим условием автоматически выполняется и условие $(a \mid a\delta) = 0$).

Как известно, в системах осесимметричных и двумерных линз выполнение таких условий невозможно [9]. Однако в зеркальных системах ахроматичность может иметь место, и выполнение условия ахроматичности позволяет существенно расширить диапазон энергий частиц, устойчиво удерживаемых зеркальными ловушками.

В качестве примера приведем две модельные двумерные ловушки, одна из которых работает в первой зоне устойчивости (в одной ячейке системы, т. е. в одной половине ловушки, нет внутреннего пересечения траекторией, изначально параллельной оси ловушки, этой оси), а вторая — во второй зоне устойчивости (у соответствующей траектории есть одно внутреннее пересечение оси ловушки). Ловушки представляют собой сочетание двух ионных зеркал, симметричных относительно средней плоскости. Правые половины обеих ловушек (т. е. одно зеркало каждой из ловушек) показаны на рис. 10. Зеркала состоят из отражающего и линзовых фокусирующих электродов.

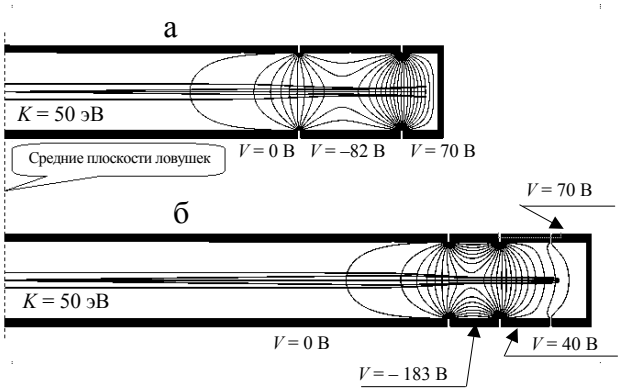

Рис. 10. Линейные (параксиальные) траектории заряженных частиц в ахроматических симметричных ловушках при условии $(x|x) = 0$ после половины оборота в ловушке в первой (а) и второй (б) зонах устойчивости. Для укрупнения деталей траекторий показаны только правые половины электродов ловушек при сохранении пропорциональности горизонтального и вертикального масштабов. Полные длины ловушек равны 130 мм и 230 мм соответственно

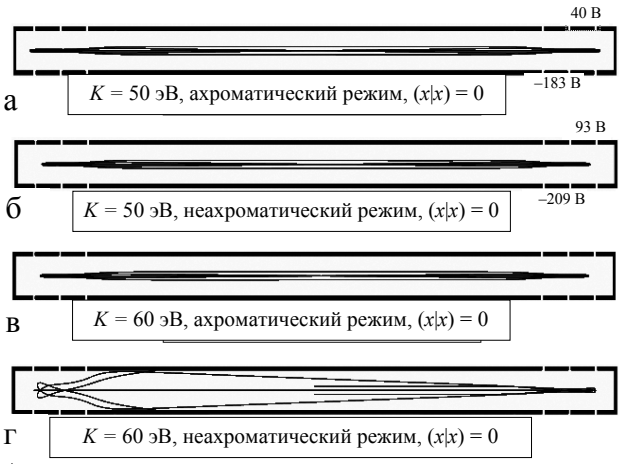

Рис. 11. Устойчивость движения во второй зоне устойчивости для ловушки, показанной на рис. 8, при вариации энергии на 20 % (а, в) и неустойчивость движения при той же вариации энергии в случае, если ловушка не настроена на ахроматический режим работы (б, г)

Для обоих зеркал выполнено условие ахроматичности во втором порядке $(x \mid x\delta) = 0$.

Сравнение удерживающих свойств ахроматической и неахроматической ловушек второго из приведенных на рис. 8 типов показано на рис. 11. При номинальной энергии пучок ионов, движу-

щихся в окрестности оптической оси ловушки, остается ограниченным независимо от того, настроена ли ловушка на ахроматический режим работы или нет (для устойчивости одинакового качества достаточно лишь выполнения линейного геометрического условия $(x \mid x) = 0$). Однако при увеличении энергии на 20 % картины, наблюдаемые в двух режимах работы ловушки, резко расходятся. В ахроматическом режиме пучок ионов удерживается примерно с тем же качеством (т.е. амплитудой поперечного движения), что и при номинальной энергии. При неахроматической настройке ловушки ионы с теми же начальными условиями не проходят в ловушке даже одного полного витка. В целом, в то время как нижние границы второй зоны устойчивости для представленных ахроматичной и неахроматичной ловушек почти совпадают (около 33 эВ), верхние границы существенно различны: для неахроматичной ловушки эта граница равна 55 эВ, а для ахроматичной она достигает 70 эВ (т. е. предельного значения, ограничиваемого потенциалом на отражающем электроде ловушки).

Таким образом, для улучшения удержания пучков заряженных частиц в электростатических линейных ловушках необходимо выполнение в таких ловушках условий ахроматичности, которые в частном случае зеркально-симметричной ловушки во втором порядке сводятся к одному условию $(x|x\delta) = 0$. При очень больших относительных значениях энергоразброса частиц в пучке может потребоваться и выполнение условий более высоких аберрационных порядков.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При движении заряженной частицы в периодических и неоднородных полях возникает эффект динамического удержания частиц вблизи оси симметрии. Такие поля реализуются в ионных каналах и электростатических ловушках. Проявление эффекта во многом сходно с удержанием в потенциальном желобе или в радиочастотных квадрупольных полях. Устойчивое удержание возникает при энергии выше пороговой и постепенно ослабевает с ростом продольной энергии. Однако и при более низких энергиях существуют узкие зоны устойчивости.

Эта ионно-оптическая модель дополняет классическую, рассматривающую лишь центральную траекторию и аберрации, накапливаемые в системе, и позволяет объяснить разнообразие эффектов, таких как устойчивость к внешним статическим и динамическим воздействиям и нелинейную устойчивость.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Courant E.D. et al.* // Phys. Rev. 1952. V. 88. P. 1190.
2. *Verentchikov A.*, Yavor M. // Extended abstract ASMS 2003 (www.asms.org).
3. *Вольник Г.* Оптика заряженных частиц. СПб.: Энергоатомиздат, 1992. 280 с.
4. *Бенфорд А.* Транспортировка пучков заряженных частиц. М.: Атомиздат, 1969. 240 с.
5. *Harting E., Read F.H.* Electrostatic lenses. Amsterdam: Elsevier, 1976. 322 p.
6. *Tolmachev A.V., Udseth H.R., Smith R.D.* // Anal. Chem. 2000. V. 72. P. 970–978.
7. *Dahl D.A.* SIMION 3D, version 7.0: User's Ma nual. Idaho National Eng. Envir. Lab., 2000.
8. *Rockwood A.L.* // JSMS. 1999. V. 10. P. 241.
9. *Силадьи М.* Электронная и ионная оптика. М.: Мир, 1990. 639 с.

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Материал поступил в редакцию 7.04.2004.

STABILITY OF ION MOTION IN PERIODIC ELECTROSTATIC FIELDS

A. N. Verenchikov, M. I. Yavor

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The work studies the effect of stable ion confinement in periodic and nonuniform electrostatic fields. As an example of periodic systems, there are considered ion guides formed by a sequence of lenses as well as electrostatic traps and multireflecting time-of-flight mass spectrometers formed by ion mirrors. Using a first-order approximation, it is shown that cylindrical and planar symmetric periodic fields have focusing properties and retain ions near the axis of symmetry in a wide range of energies. A new term "effective retaining potential" is introduced to characterize stability of ion motion as an ability to withstand external perturbations like electrostatic or magnetic deflection as well as random ion scattering. Effects of nonlinear terms are observed. It is shown that compensation of chromatic aberrations improves ion stability in reflecting periodic systems.