ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2019, том 29, № 1, с. 143–148

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

УДК 537.534.3:621.384.8 (075.8)

© **К. В. Соловьев, М. В. Виноградова,** 2019

УТОЧНЕНИЕ УСЛОВИЙ УСТОЙЧИВОСТИ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ, ИНТЕГРИРУЕМОЙ В ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Для электростатических полей идеально фокусирующих ловушек, реализующих разделяемое в эллиптической системе координат движение заряженной частицы, уточнены условия, при которых обеспечивается финитное по всем координатам движение частицы. Для нулевых и близких к ним значений параметра поля μ найдены аналитические точные и приближенные соотношения, связывающие начальные данные и параметры поля, гарантирующие финитность движения.

Кл. сл.: идеальная пространственно-временная фокусировка, масс-спектрометрия, ионная ловушка

ВВЕДЕНИЕ

Впервые предложенный Ю.К. Голиковым и в 1985 г. запатентованный [1] принцип идеальной пространственно-временно́й фокусировки (ИПВФ) ионов в квадратичном по одной из координат электростатическом поле является в настоящее время теоретической основой синтеза обширного класса перспективных масс-спектрометрических приборов [2]. Интерес к полям данного типа не ослабевает, в том числе благодаря появившимся в последнее время новым технологическим возможностям, делающим потенциально доступным изготовление с хорошей точностью систем с криволинейными трехмерными электродами [3].

Среди множества реализующих принцип ИПВФ электростатических потенциалов вида

$$\varphi(x,y,z) = z^2 + f(x,y) \tag{1}$$

выделяется класс полей, обеспечивающих движение, интегрируемое методом разделения переменных в уравнении Гамильтона—Якоби [4]. Свойства ионных ловушек, создаваемых на базе таких полей, часто могут быть исследованы аналитически, что позволяет получить прозрачные связи между параметрами задачи.

Настоящая статья продолжает изучение интегрируемых электростатических ловушек, предпринятое ранее в работах [4–8]. В данной работе делается попытка уточнить условия устойчивости движения заряженной частицы в интегрируемой ловушке с разделением переменных в эллиптических координатах, ранее рассматривавшейся в [6, 7].

ИССЛЕДУЕМАЯ СИСТЕМА

Потенциал исследуемой системы в декартовых координатах имеет вид [6]:

$$\phi(x,y,z) = z^2 - \frac{x^2+y^2}{2} + \\ + \mathrm{Re}\left(\frac{\zeta}{\sqrt{\zeta^2-1}}\left(\mu\ln\left(\zeta \pm \sqrt{\zeta^2-1}\right) + \varepsilon + \mathrm{i}\delta\right)\right), \tag{2}$$

где

$$\varsigma = x + \mathrm{i}\,y, \tag{3}$$

Re — реальная часть комплексной величины, μ, ε и δ — вещественные константы.

В эллиптических координатах $\omega = u + \mathrm{i}v$, связанных с декартовыми (3) соотношением $\varsigma = \mathrm{ch}\,\omega$, или $x = \mathrm{ch}\,u\cos v$, $y = \mathrm{sh}\,u \sin v$, потенциал (2) приобретает вид

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

Движение иона в поле (4) — синусоидальное по координате *z*, по *u* и *v* оно определяется уравнениями

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

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

$$U(u) = -\frac{1}{2}\operatorname{sh}^4 u - \left(\frac{1}{2} + E\right)\operatorname{sh}^2 u + \\ + \frac{1}{2}(\mu u + \varepsilon)\operatorname{sh} 2u, \quad (6)$$

$$V(v) = \frac{1}{2}\sin^4 v - \left(\frac{1}{2} + E\right)\sin^2 v + \\ + \frac{1}{2}(\mu v + \delta)\sin 2v. \quad (7)$$

Величины C, E в (5)–(7) — константы разделения переменных в уравнении Гамильтона—Якоби, связанные с начальными условиями движения частицы.

Возможность удержания иона в объеме ловушки, гарантированная по z квадратичностью соответствующей составляющей потенциала, определяется фактом одновременного наличия ям потенциалов (6), (7). При этом дно по крайней мере одной из этих ям должно находиться в области отрицательных значений, а берега другой обеспечивать удержание иона в области значений положительных. Эти требования вытекают из специфики уравнений (5), в правые части которых входит с противоположным знаком одна и та же константа C.

В работе [6] третьи слагаемые эффективных потенциалов (6), (7) рассмотрены как возмущения структуры ям, определяемой первыми двумя слагаемыми (6), (7). Этот подход позволил подтвердить удерживающие способности обеих ям, выявив условие $E < -1/2$ в качестве необходимого для наличия ямы по u. В данной работе мы хотим продвинуться дальше, уточнив условия финитности движения заряженных частиц в поле ловушки для случая $\delta \neq 0$.

УТОЧНЕНИЕ УСЛОВИЙ УСТОЙЧИВОСТИ

Потенциалы (6), (7) существенно упрощаются при $\mu = 0$, вновь открывая возможности для использования аналитических подходов.

Начнем с рассмотрения движения по v. Преобразуем (7) с учетом $\mu = 0$:

$$V(v) = \frac{1}{16}\cos 4v + \frac{E}{2}\cos 2v + \\ + \frac{\delta}{2}\sin 2v - \frac{1}{2}\left(E + \frac{1}{8}\right). \quad (8)$$

Периодичность функции $V(v)$ гарантирует наличие ямы при любых значениях E, δ. Очевидно, при $\delta = 0$ значение $V(0) = 0$ для любых E, причем для $E \le -1/2$ это значение является минимумом $V(v)$ — дном v-ямы (поскольку $V''(0) = -2E - 1$; при $E > -1/2$ это уже не так, имеем локальный максимум). Наибольшее значение $V_{\sup} = V(\pm\pi/2) = -E$ (для $\delta = 0$, $E \le 0$) позволяет определить глубину ямы при $\delta = 0$. В случае $\delta \neq 0$ определение параметров ямы требует решения уравнения

$$V'(v) = -\frac{1}{4}\sin 4v - E\sin 2v + \delta\cos 2v = 0, \quad (9)$$

которое подстановкой $q = \exp 2\mathrm{i}v$ (в предположении $q \neq 0$) приводится к разрешимому в радикалах алгебраическому уравнению четвертой степени с комплексными коэффициентами

$$q^4 + 4(E - \mathrm{i}\delta)q^3 - 4(E + \mathrm{i}\delta)q - 1 = 0. \quad (10)$$

Решая (10) для заданных E, δ и выделяя корни q_i, для которых $V'(-\mathrm{i}\ln q_i/2) = 0$, получаем возможность построить поверхности $V_{\inf}(E,\delta)$, $V_{\sup}(E,\delta)$, определяющие глубину v-ямы и диапазон возможных значений эффективного потенциала V (рис. 1).

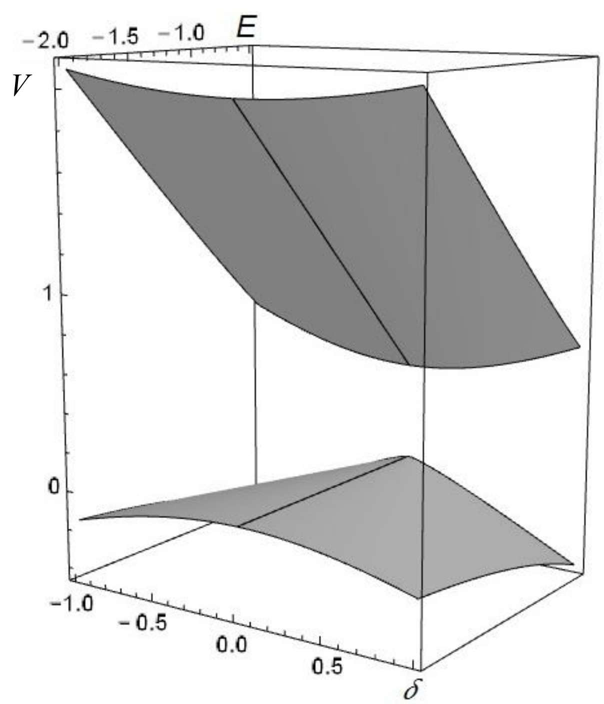

Рис. 1. Параметры $V_{\inf}(E,\delta)$ (дно), $V_{\sup}(E,\delta)$ (max уровень удержания в финитном состоянии) потенциальной ямы

Рассмотрим далее функцию (6), определяющую движение иона по u. Поскольку $U(u) \to -\infty$ при $u \to \pm\infty$ и $U(0) = 0$, (6) имеет по крайней мере один экстремум (максимум, если экстремум единственный). Необходимые для получения ямы три экстремума (два максимума и минимум между ними) при $\mu = 0,\ \varepsilon = 0$ обеспечиваются положительностью коэффициента при $\operatorname{sh}^2 u$ в (6), т.е. выполнением условия $E < -1/2$ [6].

С учетом $\mu = 0$ удобно переписать (6) в виде

$$U(u) = -\frac{1}{16}\operatorname{ch} 4u - \frac{E}{2}\operatorname{ch} 2u + \frac{\varepsilon}{2}\operatorname{sh} 2u + \frac{1}{2}\left(E + \frac{1}{8}\right). \quad (11)$$

Положение экстремумов определяется нулями производной

$$U'(u) = -\frac{1}{4}\operatorname{sh} 4u - E\operatorname{sh} 2u + \varepsilon\operatorname{ch} 2u\,. \quad (12)$$

При $\varepsilon = 0$ для $E \ge -1/2$ имеем только максимум $U_{\max} = U(0) = 0$, для $E < -1/2$ — минимум $U_{\min} = U(0) = 0$ и два максимума $U_{\max} = U\left(\pm\frac{1}{2}\operatorname{Arch}(-2E)\right) = \frac{1}{2}\left(E^2 + E + \frac{1}{4}\right)$ (рис. 2).

Исследование случая $\varepsilon \ne 0$ требует решения уравнения $U'(u) = 0$, трансформирующегося в результате подстановки $q = \exp 2u$ в (12) (с учетом $q \ne 0$) в уравнение

$$q^4 + 4(E - \varepsilon)q^3 - 4(E + \varepsilon)q - 1 = 0\,. \quad (13)$$

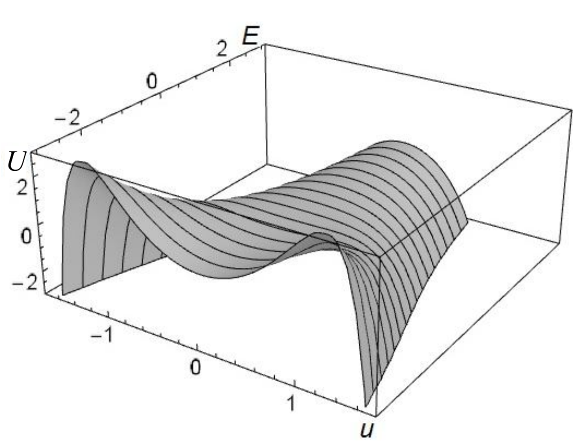

Рис. 2. Эволюция конфигурации потенциальной ямы (6) для случая $\mu = 0$

В отличие от периодической функции (8), здесь наличие ямы при $\varepsilon \ne 0$ для $E < -1/2$ не гарантировано. Яма будет существовать для тех комбинаций $E,\ \varepsilon$, при которых (13) обладает по крайней мере тремя вещественными положительными корнями, обеспечивая три вещественных решения уравнения $U'(u) = 0$. Поскольку произведение всех корней уравнения (13) равно минус единице, этот вариант возможен, (13) должно иметь три положительных и один отрицательный корень. Область финитности движения по u в координатах ($E,\ \varepsilon$) может быть построена селекцией "правильных" вариантов решений (13). По факту эта область может быть задана неравенством — условием наличия только вещественных корней у резольвенты (13) [9, (1.8-15)] — кубического уравнения $y^3 + 16(\varepsilon^2 - E^2 + 1/4)y - 64E\varepsilon = 0$. Данное неравенство имеет вид в [9] — условие $Q < 0$, где Q вычисляется согласно [9, п. 1.8-3, (1.8-7)]):

$$4(\varepsilon^2 - E^2 + 1/4)^3 + 27(E\varepsilon)^2 < 0\,, \quad (14)$$

выделяя совместно с неравенством $E < -1/2$ область допустимых значений $E,\ \varepsilon$ (рис. 3).

Вычисление значений эффективного потенциала U в точках экстремумов позволяет построить границы изменения U: $U_{\min} < U < U_{\min\max} = \min(U_{\max 1}, U_{\max 2})$, в рамках которых реализуется финитное u-движение (рис. 4).

Далее рассмотрим случай малых $\mu \ne 0$. Оставаясь в рамках аналитического подхода, можем использовать лишь аппроксимации $u \approx \operatorname{sh} 2u/2$, $v \approx \sin 2v/2$, причем приближения вводим непосредственно в выражения для производных (что

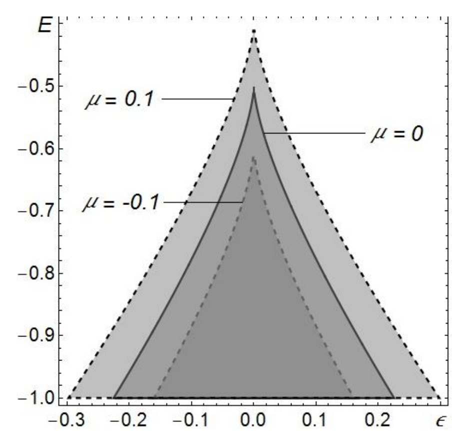

Рис. 3. Область значений (ε, E), обеспечивающих устойчивость движения иона по координате u для значений $\mu = 0$ (точно) и $\mu = \pm 0.1$ (приближенно, согласно (16))

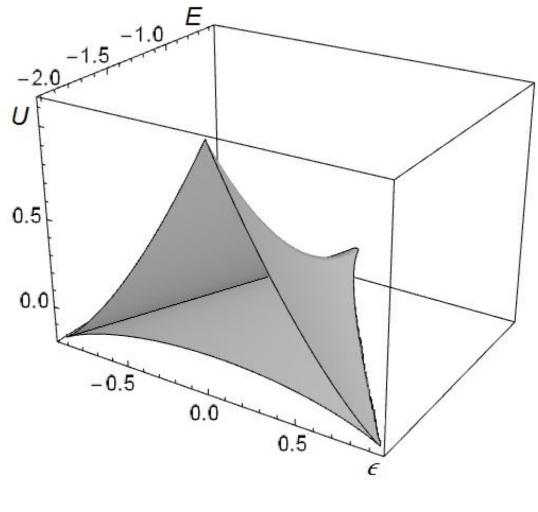

Рис. 4. Параметры $U_{\min}(E,\varepsilon)$ (дно), $U_{\min\max}(E,\varepsilon)=\min(U_{\max 1}(E,\varepsilon), U_{\max 2}(E,\varepsilon))$ (max уровень удержания в финитном состоянии) потенциальной ямы (6) для случая $\mu=0$

дает более точный результат, чем аппроксимация u и v в исходных потенциалах (6) и (7)). В этом случае (10) заменяем уравнением

$$q^4+4\frac{E-i\delta-\mu/2}{1-\mu}q^3-$$
$$-4\frac{E+i\delta-\mu/2}{1-\mu}q-1=0, \tag{15}$$

а (13) — уравнением

$$q^4+4\frac{E-\varepsilon-\mu/2}{1-\mu}q^3-$$
$$-4\frac{E+\varepsilon-\mu/2}{1-\mu}q-1=0. \tag{16}$$

Приближения достаточно грубы, однако применение большего количества членов разложения приводит к уравнениям порядка выше четвертого, решение которых в радикалах становится невозможным. Впрочем, до значений примерно $|\mu|<1/4$ результат данной аппроксимации вполне может служить в качестве оценки либо точки старта уточняющего итерационного процесса.

Для меньших единицы значений μ при $\varepsilon=0$ можно приближенно определить положение максимумов (6). Используя уравнение $U'(u)|_{\varepsilon=0}=0$ или эквивалентное ему при условии $u\neq 0$ уравнение $\operatorname{ch}2u=-2E+\mu(2u\operatorname{cth}2u+1)$, организуем итерационный процесс

$$u_i=\frac{1}{2}\operatorname{Arch}(-2E+\mu(2u_{i-1}\operatorname{cth}2u_{i-1}+1)),$$
$$i=1,2,...;\quad u_0=\frac{1}{2}\operatorname{Arch}(-2E), \tag{17}$$

полагая, что под знаком арккосинуса стоит не меньшая единицы величина. Уже формула для u_2 дает приемлемое приближение для правого максимума, здесь не приводим ее ввиду громоздкости.

Поскольку условия финитности по u и v связаны общей константой разделения C, входящей в (5), есть возможность построить проекцию зоны устойчивости в пространство (ε, δ, C) при фиксированном значении E. Действительно, полагая $C>0$, из (5) имеем $U_{\min}<C<U_{\min\max}$, $V_{\inf}\leq$ $\leq -C<V_{\sup}$ или $-V_{\sup}\leq C<-V_{\inf}$. Следовательно, для каждого ε, δ можно получить $\max(U_{\min},-V_{\sup})\leq$ $\leq C<\min(U_{\max\min},-V_{\inf})$, определяя тем самым границы изменения C. При $\mu=0$, $\varepsilon=0$, $\delta=0$ дно обеих ям расположено на нулевом уровне, следовательно, $C=0$ и возможны лишь колебания ионов на оси z с нулевым фазовым объемом. Неравенство нулю любого из параметров μ,ε,δ устраняет это ограничение.

Заметим, что условие $\mu\neq 0$ нарушает периодичность (7) и снимает ограничение по v на допустимые значения C ввиду линейного (с коэффициентом $\mu/2$) нарастания амплитуды члена $\sin 2v$ в (7). Для движения по u условие $\mu\neq 0$ приводит к сдвигу области устойчивости по E, при $\varepsilon=0$ критерий существования u-ямы меняется на $E<\mu-1/2$ (рис. 3).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе определены новые и уточнены найденные ранее в [6] условия финитности движения ионов в интегрируемой эллиптической электростатической ловушке. Для полей с нулевым и близким к нулю значением параметра μ в (2), (4) удалось получить результаты в аналитическом виде, дающем ясные взаимосвязи между характеристиками поля и допустимыми начальными данными. Применение новых подстановок в ходе решения задачи позволило упростить алгоритм ее решения. Результаты статьи могут быть использованы при синтезе новых масс-спектрометрических систем на базе электростатических ловушек с идеальной пространственно-временнóй фокусировкой.

Данная работа частично выполнена в рамках государственного задания № 075-00780-19-00 для Института аналитического приборостроения РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др.* Времяпролетный масс-спектрометр. Авторское свидетельство СССР № 1247973 от 01.04.1986. Приоритет от 16.01.1985.
2. *Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A., Hardman M., Cooks G.R.* The Orbitrap: a new mass spectrometer // J. Mass Spectrom. 2005. Vol. 40. P. 430–443. DOI: 10.1002/jms.856
3. *Nikolaev E., Sudakov M., Vladimirov G., et al.* Multi-electrode harmonized kingdon traps // J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2018. Vol 29, no. 11. P. 2173–2181. DOI: 10.1007/s13361-018-2032-9
4. *Голиков Ю.К., Краснова Н.К., Соловьев К.В., Никитина Д.В.* Интегрируемые ионные ловушки // Прикладная физика. 2006. № 5. С. 51–57.
5. *Голиков Ю.К., Соловьев К.В.* Электростатические ионные ловушки с разделением переменных в параболических координатах // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36, № 7. С. 82–88.
6. *Голиков Ю.К., Соловьев К.В.* Критерий поперечной устойчивости в ионных ловушках с интегрируемым в эллиптических координатах движением // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37, № 22. С. 43–49.
7. *Соловьев К.В., Виноградова М.В.* Об уточнении критериев устойчивости движения ионов в электростатических ловушках с интегрируемым движением // Тезисы VIII съезда ВМСО 9-13 окт. 2017. М., 2017. С. 110. URL: http://www.spsl.nsc.ru/FullText/konfe/VMSO_2017.pdf
8. *Соловьев К.В., Виноградова М.В.* Условия финитности движения иона в электростатической ловушке с разделением переменных в параболических координатах // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44, № 14. С. 34–41. DOI: 10.21883/PJTF.2018.14.46342.17215
9. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1984. 833 с.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург
(*Соловьев К.В., Виноградова М.В.*)

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург (*Соловьев К.В.*)

Контакты: *Соловьев Константин Вячеславович*, k-solovyev@mail.ru

Материал поступил в редакцию 18.09.2018

UPDATING THE ION MOTION STABILITY CONDITIONS FOR ELECTROSTATIC TRAP INTEGRABLE IN ELLIPTIC COORDINATES

K. V. Solovyev[1,2], M. V. Vinogradova[1]

[1]*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Saint-Petersburg, Russia*
[2]*Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg, Russia*

For ideal focusing traps electrostatic fields having charged particle motion separated in elliptic coordinates the ion motion stability conditions are updated. Analytical exact and approximate expressions are found for fields with zero and close to zero field parameter μ values. These expressions connect initial data and field parameters to guarantee the ion motion finiteness.

Keywords: ideal space-time focusing, mass spectrometry, ion trap

REFERENCES

1. Gall' L.N., Golikov Yu.K., Aleksandrov M.L. et al. *Vremyaproletnyj mass-spektrometr*. Copyright certificate of the USSR no. 1247973. [Time-of-flight mass spectrometer]. Prioritet 16.01.1985. (In Russ.).
2. Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A., Hardman M., Cooks G.R. The Orbitrap: a new mass spectrometer. *J. Mass Spectrom*., 2005, vol. 40, pp. 430–443. DOI: 10.1002/jms.856
3. Nikolaev E., Sudakov M., Vladimirov G., et al. Multi-electrode harmonized kingdon traps. *J. Am. Soc. Mass Spectrom*., 2018, vol. 29, no. 11, pp. 2173–2181. DOI: 10.1007/s13361-018-2032-9
4. Golikov Yu.K., Krasnova N.K., Solovyev K.V., Nikitina D.V. [Integrating electrostatic traps]. *Prikladnaya fizika* [Applied physics], 2006, no. 5, pp. 51–57. (In Russ.).
5. Golikov Yu.K., Solovyev K.V. [Electrostatic ionic traps with a separation of variables in parabolic coordinates]. *Pis'ma v ZhTF* [Applied Physics Letters], 2010, vol. 36, no. 7, pp. 82–88. (In Russ.).
6. Golikov Yu.K., Solovyev K.V. [Criterion of cross stability in ionic traps with the driving integrated in elliptical axials]. *Pis'ma v ZhTF* [Applied Physics Letters], 2011, vol. 37, no. 22, pp. 43–49. (In Russ.).
7. Solovyev K.V., Vinogradova M.V. [About specification of stability criterions of driving of ions in electrostatic traps with integrable driving]. *Tezisy VIII s'ezda VMSO* [Theses of the VIII congress of VMSO], 9-13 October 2017, Moscow, 2017, pp. 110. URL: http://www.spsl.nsc.ru/FullText/konfe/VMSO_2017.pdf (In Russ.).
8. Solovyev K.V., Vinogradova M.V. [Conditions of a finitnost of driving of an ion in an electrostatic trap with a separation of variables in parabolic coordinates]. *Pis'ma v ZhTF* [Applied Physics Letters], 2018, vol. 44, no. 14, pp. 34–41. DOI: 10.21883/PJTF.2018.14.46342.17215 (In Russ.).
9. Korn G., Korn T. *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers: Definitions, Theorems, and Formulas for Reference and Review*. General Publishing Company, 2000. 1151 p. (Russ. ed.: Korn G., Korn T. *Spravochnik po matematike dlya nauchnyh rabotnikov i inzhenerov*. Moscow, Nauka Publ., 1984. 833 p.). (In Russ.).

Contacts: *Solovyev Konstantin Vyacheslavovitch*,
k-solovyev@mail.ru

Article received by editing board 18.09.2018