



## ناحیه پایداری مناسب برای طیف‌سنج جرمی دام یون چهار قطبی RF با ولتاژ ضربه‌ای

مینا برادران\*<sup>۱</sup>، سیدمحمود سادات کیائی<sup>۲</sup>، علیرضا شرفی<sup>۲</sup>

۱- پژوهشکده لیزر و اپتیک، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران - ایران

۲- پژوهشکده علوم هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۳۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران - ایران

**چکیده:** دام یون چهارقطبی در سطح وسیعی برای محصورسازی یونها و طیف‌سنجی جرمی مورد استفاده قرار می‌گیرد و شاهد استفاده روزافزون این طیف‌سنج می‌باشیم. معمولاً برای محصورسازی یونها در این دام، از ولتاژ سینوسی استفاده می‌شود. اما با استفاده از ولتاژ ضربه‌ای می‌توان قدرت تفکیک طیف‌سنج جرمی را افزایش داد بطوری که در زمینه جداسازی ایزوتوپهای سبک کاربرد داشته باشد. در این مقاله برای طراحی این طیف‌سنج با ولتاژ ضربه‌ای محاسباتی روی نواحی اول و دوم انجام دادیم و با بررسی و تحلیل نتایج این محاسبات به این نتیجه رسیدیم که ناحیه اول پایداری، برای عملکرد دام با ولتاژ ضربه‌ای مناسب می‌باشد.

**واژه‌های کلیدی:** یونها، دام یون چهار قطبی، طیف‌سنج‌های جرمی، ولتاژ ضربه‌ای، ناحیه‌های پایداری

## Proper Stability Region of the Impulsional Mode of an Rf Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometer

M. Baradaran\*<sup>1</sup>, S.M. Sadat Kiai<sup>2</sup>, A.R. Sharafi<sup>2</sup>

1- Laser and Optics Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O. Box: 11365-8486, Tehran - Iran  
2- Nuclear Science Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O. Box: 11365-3486, Tehran - Iran

**Abstract:** Quadrupole ion trap is widely used as an ion storage in gaseous phase and as mass spectrometer. In its classical approach, a sinusoidal voltage form is used to confine the ions in a small region. By using an impulsional voltage, on the other hand, it is possible to increase the mass spectrometer resolution so as to be applicable for separation of light isotopes. In this article we present the theoretical treatment based on the first and second ion stability region. The results show that the first stability region is more adaptable to the impulsional mode of ion trap operation.

**Keywords:** Ions, Quadrupole Ion Trap, Mass Spectrometers, Impulsional Mode, Stability Regions

\*email: mbaradaran@aeoi.org.ir

تاریخ دریافت مقاله: ۸۵/۲/۱۶ تاریخ پذیرش مقاله: ۸۵/۸/۲۲



۱- مقدمه

دام یون چهار قطبی RF کاربردهای زیادی در اسپکتروسکوپی، زمان سنجی، مطالعه شیمیایی یونهای گازی، تجزیه یونها و طیف سنجی جرمی دارد. طیف سنج جرمی دام یون چهار قطبی RF با روش نسبتاً آسانی که برای جداسازی جرمی ارائه داده است، تحولی در طیف سنجی جرمی ایجاد کرده و یکی از حساس ترین دستگاههای طیف سنج جرمی است؛ از این جهت که از نظر فیزیکی در مقایسه با دستگاههای قطاع مغناطیسی و الکتریکی خیلی کوچکتر است (کل مجموعه در کف دست جا می گیرد)، دستگاهی فوق العاده بوده و از نظر قیمت نیز ارزان است. بنابراین طیف سنج جرمی دام یون چهار قطبی دستگاهی است با حساسیت زیاد، بازه جرمی وسیع و قدرت تفکیک جرمی بالا [۱ تا ۴].

برای محصورسازی یونها معمولاً ولتاژ سینوسی بکار می رود. اما در سال ۱۹۹۱ یکی از نویسندگان، به جای ولتاژ سینوسی، ولتاژ ضربه ای پرودییک پیشنهاد کرد [۵].

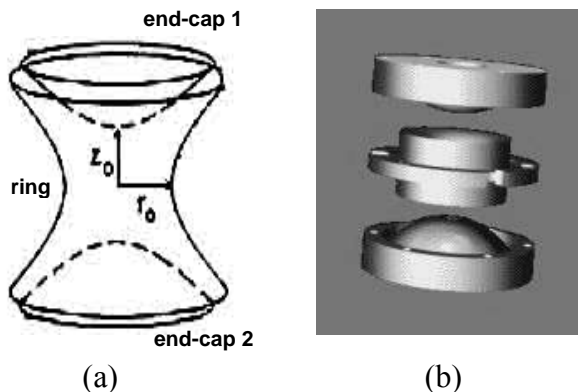
مطالعات مختلفی در مورد نواحی پایداری در فضای (a,q)، شکل نوسان یون، فضای فاز و افزایش قدرت تفکیک طیف سنج جرمی دام یون چهار قطبی RF با ولتاژ ضربه ای انجام داده ایم [۶، ۷ و ۸]. همچنین این ولتاژ را برای جداسازی ایزوتوپهای سبک در بازه جرمی 1-4u پیشنهاد داده و گزارشی از مراحل ساخت دام ارائه داده ایم [۹]. نکته ای که در طراحی دستگاه با ولتاژ ضربه ای باید به آن توجه داشت، انتخاب ناحیه پایداری است که باید در آن کار کرد. در این مقاله با بررسی و تکمیل محاسبات انجام گرفته، به انتخاب ناحیه کاری مناسب برای انجام دادن طیف سنجی جرمی در دام یون چهار قطبی RF با ولتاژ ضربه ای می پردازیم. ابتدا مختصری به مبانی نظری عملکرد دام یون چهار قطبی RF و معادلات مربوط به حالت سینوسی و ضربه ای می پردازیم و روش حل این معادلات را توضیح می دهیم. سپس با بحث درباره خواص مکانیکی یون در دام در حالت سینوسی و ضربه ای، همچنین بررسی نواحی پایداری در فضای تشکیل شده از پتانسیل ثابت و دامنه ولتاژ ضربه ای برای جرمهای مورد نظر در بازه جرمی 1-4u به انتخاب ناحیه مناسب می پردازیم.

۲- مبانی نظری

دام یون چهار قطبی از سه الکتروود تشکیل شده که در شکل ۱ نشان داده شده است. دو تا از این سه الکتروود یکسان هستند و ساختار هذلولی دارند و سوراخهایی در مرکز هر الکتروود وجود دارد. این دو الکتروود، کلاهکها (end-caps) نامیده می شوند. یکی از کلاهکها یک دریچه کوچک مرکزی دارد که الکترونها یا یونها بصورت پرودییک می توانند داخل شوند. در حالیکه الکتروود دیگر چندین دریچه کوچک دارد و یونها از میان آنها به سوی آشکارساز عبور می کنند. در دستگاههای دام یون با چشمه یون خارجی، هر کلاهک یک سوراخ دارد. سومین الکتروود نیز ساختار هذلولی دارد و «الکتروود حلقوی ring» نامیده می شود. شعاع این الکتروود در صفحه مرکزی،  $r_0$  و تقریباً ۱cm است. الکتروود حلقوی بطور متقارن بین دو کلاهک قرار می گیرد [۱]. معمولاً بین ابعاد دام یعنی  $r_0$  و  $Z_0$  رابطه  $r_0^2 = 2Z_0^2$  برقرار است.

برای محصورسازی یونی به جرم m و بار الکتریکی e، پتانسیل RF سینوسی بصورت  $V(t) = V \cos(\Omega t)$  به الکتروود حلقوی و پتانسیل ثابت  $-U$  به دو الکتروود انتهایی (کلاهکها) اعمال می شود (شکل ۲-a). بر اثر اعمال این پتانسیل، یون در راستای  $r$  و  $Z$  (سه بعد) محصور می شود. با اعمال پتانسیل های ذکر شده به الکتروودها، پتانسیل در فضای بین الکتروودها به صورت زیر خواهد بود.

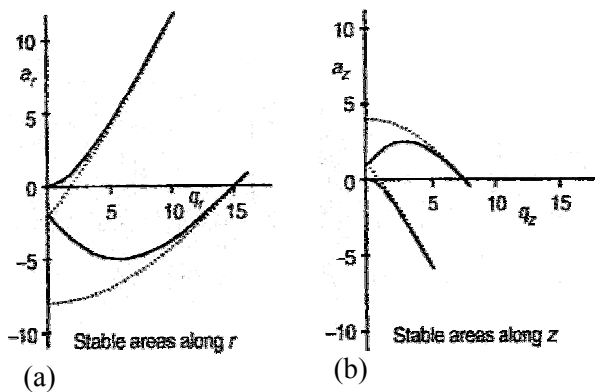
$$\varphi_u = \frac{\varphi_0}{r_0^2} (r^2 - 2z^2) \quad \varphi_0 = U - V(t) \quad (u=r, z) \quad (1)$$



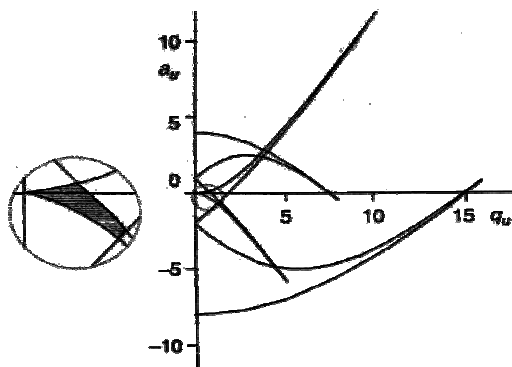
شکل ۱- سه الکتروود دام یون چهار قطبی، (a) بطور شماتیک، (b) واقعی.



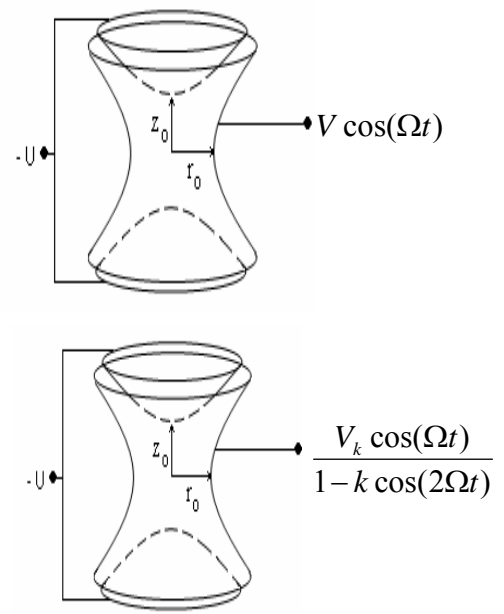
معادله حرکت یون را می‌توان به ازای مقادیر مختلف پارامترهای  $a$  و  $q$  حل کرد. بنابراین، به ازای هر جفت پارامتر  $a$  و  $q$  می‌توان دریافت که آیا حرکت یون پایدار است، یعنی با گذشت زمان به الکترودها برخورد نمی‌کند، یا اینکه حرکت ناپایداری دارد و با گذشت زمان به الکترودها برخورد خواهد کرد. بر همین اساس می‌توان در فضای  $(a, q)$  برای حرکت یون نواحی پایدار و ناپایدار را مشخص کرد. همچنین می‌توان معادله حرکت یون را برحسب پارامترهای  $-U$  و  $V$  (یعنی پتانسیل ثابت و دامنه پتانسیل RF) حل کرد و نواحی پایدار و ناپایدار را در فضای  $(-U, V)$  مشخص کرد. این نواحی نقش تعیین‌کننده‌ای در انتخاب مقادیر پتانسیل مناسب که، بتوان بوسیله آنها یون‌ها را محصور ساخت، ایفا می‌کنند. به عنوان مثال، شکل (۳-ا) این نواحی پایدار را در راستای  $Z$  نشان می‌دهد و شکل (۳-ب) این نواحی پایدار را در راستای  $r$  نشان می‌دهد؛ برای اینکه یون حرکت پایدار در سه بعد داشته باشد باید هم در راستای  $r$  و هم در راستای  $Z$  پایدار باشد، یعنی در برهم نهی این نواحی پایدار قرار بگیرد. شکل ۴ نواحی پایدار در سه بعد را نشان می‌دهد.



شکل ۳- نواحی پایدار برحسب (a)  $r$  و (b)  $z$



شکل ۴- نواحی پایدار در راستای  $r$  و  $Z$  در دام یون.



شکل ۲- دام یون چهار قطبی RF با پتانسیل (a) سینوسی، (b) ضربه‌ای.

برای بدست آوردن معادلات حرکت یون در دام داریم:

$$F = m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -e \frac{\partial \phi}{\partial u} \quad (u=r, z) \quad (2)$$

طبق رابطه‌های (۱) و (۲) و با تغییر متغیر  $\xi = \frac{\Omega t}{2}$ ، معادلات حرکت یون در دام را بدست می‌آوریم:

$$\ddot{z} - \frac{2e}{mr_0^2} [U - V(t)]z = 0 \quad (3-الف)$$

$$\ddot{r} - \frac{e}{mr_0^2} [U - V(t)]r = 0 \quad (3-ب)$$

که با تغییر متغیرهای:

$$q_z = \frac{2eV}{mz_0^2 \Omega^2} = -2q_r \quad (4-الف)$$

$$a_z = \frac{-4eU}{mz_0^2 \Omega^2} = -2a_r \quad (4-ب)$$

معادلات حرکت یون در دام به صورت معادله ماتریو در خواهد آمد [۱ تا ۴]:

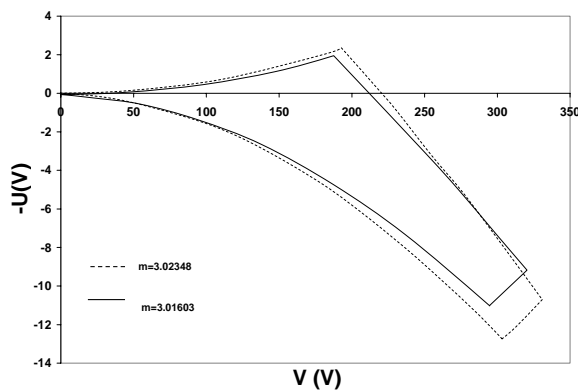
$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + (a_u - 2q_u \cos 2\xi)u = 0 \quad (5-الف)$$

$$\xi = \frac{\Omega t}{2} \quad (u = r, z) \quad (5-ب)$$

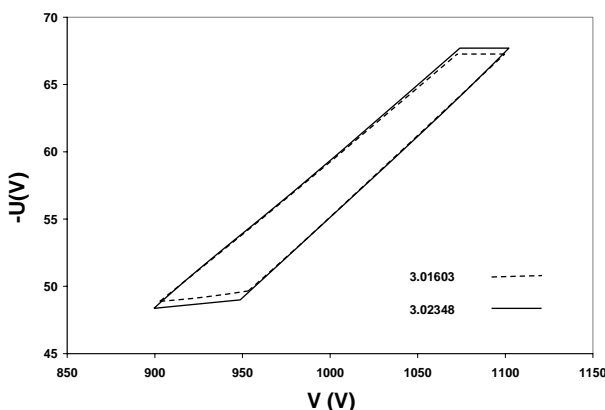


محدود (finite difference) با گام زمانی  $\Delta t = 10^{-11}$  sec به ازای ولتاژ ضربه‌ای و ولتاژ سینوسی با بسامد 1.1 MHz عناصر ماتریس M را به دست آورده‌ایم. (البته برخی از محاسبات با روش Second Order Runge-Kutta حساب شده‌اند). با حل معادله فوق، نواحی پایداری، شکل نوسان یون و نمودارهای فضای فاز را به ازای ولتاژ سینوسی و ضربه‌ای بدست آورده‌ایم [۷]. در اینجا برای انتخاب ناحیه کاری مناسب در حالت ولتاژ ضربه‌ای در طیف‌سنج برای ایزوتوپهای  ${}^3\text{He}^+ = 3.01603u$ ،  $H_3^+ = 3.02348u$  معادلات مربوط را حل کرده و نواحی پایداری اول و دوم را به ازای  $k=0.99$  بدست آورده‌ایم. که در شکل‌های ۵ و ۶ نشان داده شده‌اند.

بطوریکه در این شکل‌ها مشاهده می‌شود ولتاژ کار به ازای ولتاژ ضربه‌ای در ناحیه دوم پایداری نسبت به ناحیه اول پایداری خیلی بالاتر است و این امر باعث بروز مشکلاتی به هنگام کار کردن در ناحیه دوم می‌شود.



شکل ۵- ناحیه اول پایداری به ازای  $k=0.99$  برای ایزوتوپهای  $H_3^+$ ،  ${}^3\text{He}^+$



شکل ۶- ناحیه دوم پایداری به ازای  $k=0.99$  برای ایزوتوپهای  $H_3^+$ ،  ${}^3\text{He}^+$

پارامتر دیگری که در بررسی حرکت یون مهم است، پارامتر  $\beta_u$  می‌باشد که تابع پیچیده‌ای از دو پارامتر  $a$  و  $q$  است و مرزهای نواحی پایداری با خطوط  $\beta_u = cte$  مشخص می‌شوند. مرزهای ناحیه اول پایداری با خطوط  $\beta_r = 0, 1$  و  $\beta_z = 0, 1$  مشخص می‌شوند و شرط پایداری بصورت  $0 < \beta_z < 1$ ،  $0 < \beta_r < 1$  می‌باشد، مرز ناحیه دوم پایداری با خطوط  $\beta_r = 0, 1$  و  $\beta_z = 1, 2$  مشخص می‌شود و شرط پایداری بصورت  $1 < \beta_z < 2$ ،  $0 < \beta_r < 1$  است.

حال اگر به جای اعمال ولتاژ سینوسی  $V(t) = V \cos(\Omega t)$  به الکتروود حلقوی، ولتاژ ضربه‌ای با معادله:

$$V(t) = \frac{V_0 \cos(\Omega t)}{1 - k \cos(2\Omega t)} \quad V_0 = (1-k)V_k \quad 0 \leq k \leq 1 \quad (6)$$

$$V_{k=0} = V$$

را به الکتروود حلقوی اعمال کنیم (شکل b-۲) که در آن  $V_k$  دامنه پتانسیل ضربه‌ای است، معادلات (۴) و (۵) به معادلات (۷) و (۸) تبدیل خواهند شد [۵ و ۶].

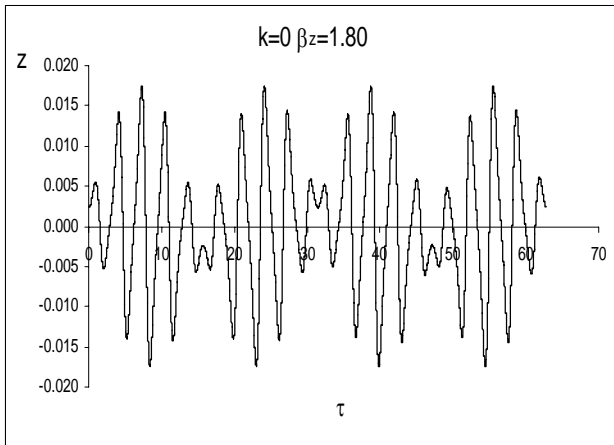
$$\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi^2} + \left[ a_u - 2q_u \frac{\cos(2\xi)}{1 - k \cos(4\xi)} \right] u(\xi) = 0 \quad (7)$$

$$a_z = \frac{-4eU}{mz_0^2 \Omega^2} = -2a_r \quad \text{و} \quad q_z = \frac{2eV_k(1-k)}{mz_0^2 \Omega^2} = -2q_r \quad (8)$$

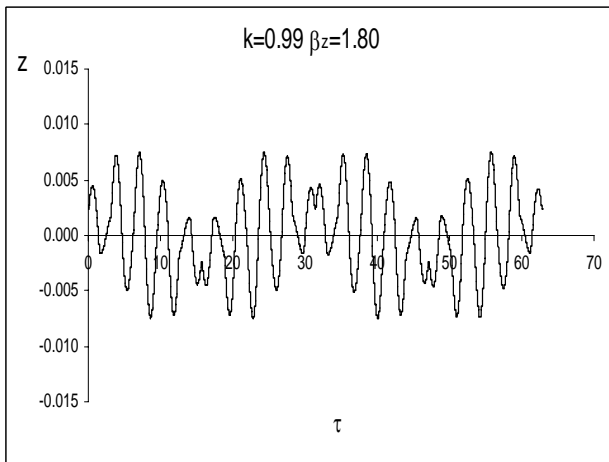
استفاده از ولتاژ ضربه‌ای، به طوری که در مراجع [۵ تا ۹] آمده است دارای محاسنی است، از آن جمله، با وجود این ولتاژ، هنگام تزریق یون‌ها به درون دام، انرژی یون‌ها دستخوش تغییر نمی‌شود و این هم به علت وجود ناحیه وسیع مساوی صفر در این ولتاژ است که می‌توان یون‌ها را هنگام صفر بودن این ولتاژ به درون دام تزریق کرد. همچنین این ولتاژ باعث بالا رفتن قدرت تفکیک در طیف‌سنج جرمی دام یون چهار قطبی RF می‌شود.

### ۳- یافته‌ها و بحث

معادله ۷، صورت کلی معادلات Hill می‌باشد و ما برای حل آن از روش ماتریسی که Pipes [۱۰] آن را ابداع کرده و Dawson [۱۱، ۱۲ و ۱۳] برای حل این قبیل معادلات آن را بکار گرفته است، استفاده کرده‌ایم و با استفاده از روش تفاضل



(a)



(b)

شکل ۸- مسیر حرکت یون به ازای  $\beta_z=1.8$  (ناحیه دوم پایداری) برای (a)  $k=0$  و برای (b)  $k=0.99$ .

با توجه به مطالبی که در مورد نوسان یون در مرجع [۱۴] آمده است به نکات زیر توجه می‌کنیم:

- حرکت یون برای هر دو ناحیه اول و دوم، شامل دو مؤلفه می‌باشد: حرکت اصلی (Secular motion) که با فرکانس مشخصه  $\omega = \frac{\beta\Omega}{2}$  می‌باشد و «ریز حرکت» (micromotion) که از ترکیب چندین مؤلفه با فرکانس اصلی  $\Omega$  و ضربایی از آن  $n\Omega$  ( $n=2,3,4$ ) تشکیل شده که دامنه‌های آنها با فرکانس  $\omega$  مدوله شده است. نسبت دو مؤلفه اصلی و ریز حرکت، مقدار  $\omega$ ، تعداد مؤلفه‌های قابل ارزیابی و وزن آنها به مقادیر  $a, q$  بستگی شدید دارد.

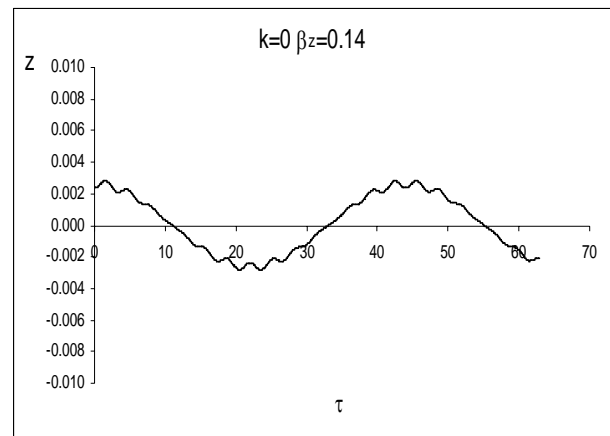
- ریز حرکت در راستای  $Z$  در ناحیه دوم از چند مؤلفه با بسامدهای  $\Omega$  و  $n\Omega$  ( $n=2, 3, 4$ ) معمولاً تا ۳ تشکیل شده است. در حالیکه در ناحیه اول فقط مؤلفه  $\Omega$  مهم می‌باشد. دامنه ریز

اینک به بررسی خواص مکانیکی یون‌های محصور شده می‌پردازیم؛ این خواص عبارتند از: مسیر حرکت یون و فضای فاز، یعنی فضای سرعت برحسب جابجایی  $(\dot{u}, u)$ .

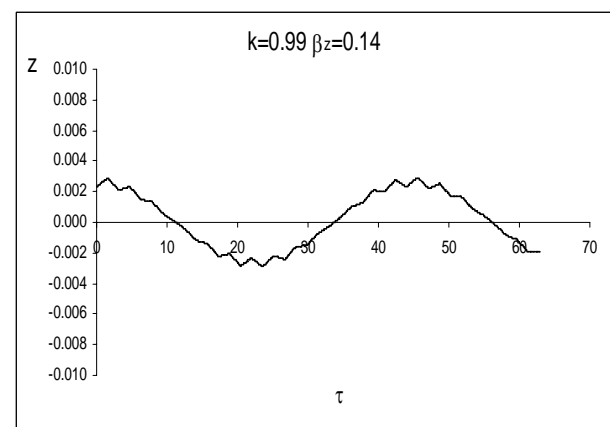
در شکل ۷ مسیر حرکت یون به ازای  $\beta_z=0.14$  (ناحیه اول پایداری) برای (a)  $k=0$  با  $q_z=0.2$  و  $a_z=0$  و برای (b)  $k=0.99$  با  $q_z=0.014$  و  $a_z=0$  رسم شده است.

در شکل ۸ مسیر حرکت یون به ازای  $\beta_z=1.8$  (ناحیه دوم پایداری) برای (a)  $k=0$  با  $q_z=3.836$  و  $a_z=2.789$  و برای (b)  $k=0.99$  با  $q_z=0.297$  و  $a_z=3.765$  رسم شده است.

بطوری که در شکل ۷ برای ناحیه اول پایداری دیده می‌شود، به ازای  $\beta_z$  یکسان، شکل نوسان یون در ناحیه اول در حالت‌های ضربه‌ای و سینوسی فرق چندانی نمی‌کند. اما در شکل ۸ برای ناحیه دوم پایداری مشاهده می‌شود که به ازای  $\beta_z$  یکسان شکل نوسان یون در حالت ضربه‌ای و سینوسی متفاوت است.



(a)



(b)

شکل ۷- مسیر حرکت یون به ازای  $\beta_z=0.14$  (ناحیه اول پایداری) برای (a)  $k=0$  و برای (b)  $k=0.99$ .

پارامترهای مربوط به بیضی‌های فضای فاز به ازای ۴ مقدار متفاوت از فاز اولیه ولتاژ RF برای  $k=0$ ,  $k=0.99$  در ناحیه اول و دوم پایداری حساب شده است.

در جدول ۱ نتایج مربوط به ناحیه اول به ازای مقدار  $\beta_z=0.14$  درج شده است.

در جدول ۲ نتایج مربوط به ناحیه دوم به ازای مقدار  $\beta_z=1.8$  مندرج است.

**جدول ۱-** پارامترهای مربوط به بیضی‌های فضای فاز در فضای فاز در ناحیه اول پایداری ( $\beta_z=0.14$ ) به ازای ۴ مقدار متفاوت از فاز اولیه ولتاژ RF برای  $k=0.99$  (b)  $k=0$  (a)

K=0 $\beta_z=0.14$ $a_z=0$ $q_z=0.2$				
$\xi_0$	$A_z$	$B_z$	$\Gamma_z$	$\epsilon_z$
$\pi/2$	7.89E-05	8.66522	0.115419	0.115405
0	-5.6E-05	5.76655	0.173399	0.115404
$\pi/4$	-1.4456	7.10720	0.434734	0.115404
$-\pi/4$	1.445582	7.10712	0.434734	0.115404

(a)

K=0.99 $\beta_z=0.14$ $a_z=0$ $q_z=0.014$				
$\xi_0$	$A_z$	$B_z$	$\Gamma_z$	$\epsilon_z$
$\pi/2$	0.00058	8.95192	0.111816	0.111706
0	-0.00038	5.78721	0.172687	0.111706
$\pi/4$	-1.10022	7.20983	0.306593	0.111706
$-\pi/4$	1.10021	7.20977	0.306593	0.111706

(b)

**جدول ۲-** پارامترهای مربوط به بیضی‌های فضای فاز در فضای فاز در ناحیه دوم پایداری ( $\beta_z=1.8$ ) به ازای ۴ مقدار متفاوت از فاز اولیه ولتاژ RF برای  $k=0.99$  (b)  $k=0$  (a)

K=0 $\beta_z=1.8$ $a_z=2.789$ $q_z=3.836$				
$\xi_0$	$A_z$	$B_z$	$\Gamma_z$	$\epsilon_z$
$\pi/2$	0.00058	8.95192	0.111816	0.111706
0	-0.00038	5.78721	0.172687	0.111706
$\pi/4$	-1.10022	7.20983	0.306593	0.111706
$-\pi/4$	1.10021	7.20977	0.306593	0.111706

(a)

K=0.99 $\beta_z=1.8$ $a_z=3.765$ $q_z=0.297$				
$\xi_0$	$A_z$	$B_z$	$\Gamma_z$	$\epsilon_z$
$\pi/2$	-5.8E-05	0.08324	12.01198	0.42266
0	-0.00035	0.22197	4.506662	0.42266
$\pi/4$	0.14846	2.36852	0.431406	0.422661
$-\pi/4$	-0.14806	2.36853	0.431354	0.42266

(b)

حرکت در ناحیه دوم با دامنه حرکت اصلی قابل مقایسه است. اما در ناحیه اول، دامنه ریز حرکت در مقایسه با دامنه حرکت اصلی کوچک‌تر، حتی بسیار کوچک‌تر می‌باشد.

حال با توجه به این نکات، می‌توان حرکت یون در شکل‌های ۷ و ۸ را توضیح داد.

در شکل ۷ که مربوط به ناحیه اول پایداری می‌باشد داریم:  $0 < \beta_z < 1$  و بسامد اصلی (Secular) نوسان یون برای هر دو ولتاژ

ضربه‌ای و سینوسی از رابطه  $\omega_z = \frac{\beta_z \Omega}{2}$  بدست می‌آید. بنابراین مؤلفه‌ای از حرکت یون که حرکت اصلی (Secular) می‌باشد در هر دو ولتاژ یکسان است. از طرفی در ناحیه اول می‌دانیم که در ریز حرکت فقط مؤلفه شامل  $\Omega$  مهم می‌باشد، پس برای دو ولتاژ ضربه‌ای و سینوسی بسامد ریز حرکت نیز تقریباً یکسان و دامنه این حرکت نیز در مقایسه با دامنه حرکت اصلی بسیار کوچک است و مقایسه دو ولتاژ نشان می‌دهد که تغییر چندانی در شکل نوسان یون مشاهده نمی‌شود.

اما در شکل ۸ که مربوط به ناحیه دوم پایداری می‌باشد داریم:  $1 < \beta_z < 2$  و بسامد اصلی نوسان یون برای هر دو ولتاژ ضربه‌ای و

سینوسی از رابطه  $\omega_z = \frac{\beta_z \Omega}{2}$  به دست می‌آید. بنابراین مؤلفه‌ای از حرکت یون که حرکت اصلی است، برای هر دو ولتاژ یکسان می‌باشد و اختلاف شکل نوسان یون برای ولتاژ ضربه‌ای و سینوسی در مؤلفه ریز حرکت نهفته است. علت این تفاوت این است که، در ناحیه دوم ریز حرکت علاوه بر فرکانس  $\Omega$  شامل فرکانس‌های  $(n=2, 3, 4)n\Omega$  نیز بوده و دامنه این حرکت نیز بزرگ می‌باشد. چون تعداد مؤلفه‌های  $\Omega$  و اندازه دامنه آنها به پارامترهای  $q, a$  وابسته است و برای ولتاژ سینوسی و ضربه‌ای حتی به ازای  $\beta$  یکسان مقادیر  $a$  و  $q$  متفاوت می‌باشد، شکل مؤلفه ریز حرکت برای  $k=0.99$ ,  $k=0$  حتی برای  $\beta$  یکسان متفاوت خواهد بود. بنابراین شکل نوسان یون تغییر خواهد کرد.

برای یونی که حرکت پایدار دارد، اگر مکان و سرعت یون به ازای فازهای اولیه مختلف (فاز پتانسیل اعمال شده هنگامی که یون وارد دام می‌شود) و برای  $n$  سیکل کامل پتانسیل RF حساب شود. نقاط حساب شده در فضای فاز  $(\dot{u}, u)$  روی بیضی‌هایی قرار خواهند گرفت که هر بیضی مربوط به یک فاز اولیه می‌باشد. معادله این بیضی‌ها بصورت زیر است:

$$\Gamma u^2 + 2Auu + Bu^2 = \epsilon \quad (9)$$



فضای فاز نیز این مسأله مشاهده و پیش‌بینی می‌شود که ویژگی بیضی‌های فضای فاز در ناحیه اول پایداری بیشتر تابع مقدار پارامتر  $\beta$  است. اما در ناحیه دوم، این ویژگی بیضی‌ها نه تنها تابع پارامتر  $\beta$  است بلکه به پارامترهای  $a$  و  $q$  نیز بستگی دارد. به این معنی که حتی برای  $\beta$ های یکسان اگر پارامترهای  $a$  و  $q$  تفاوت داشته باشند ویژگیهای بیضی‌ها نیز متفاوت خواهند بود و با توجه به این که حتی با برابر گرفتن  $\beta$  در حالت‌های  $k=0$  و  $k=0.99$ ، مقادیر  $a$  و  $q$  کاملاً متفاوت خواهد بود، نباید انتظار داشت که رفتار مشابهی مشاهده گردد.

#### ۴- نتیجه‌گیری

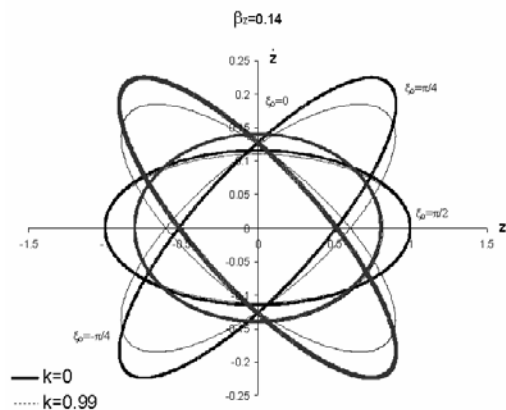
با توجه به محاسن ولتاژ ضربه‌ای در ثابت نگه داشتن انرژی یونهای تزریق شده به درون دام و بالاتر بودن قدرت تفکیک نسبت به ولتاژ سینوسی، کاربرد این ولتاژ را توصیه می‌کنیم اما در طراحی طیف‌سنج با ولتاژ ضربه‌ای، باید ناحیه پایداری مناسب برای کار کردن را مشخص کرد.

از محاسبات و نمودارهایی که درباره آن‌ها بحث شد نتیجه می‌گیریم که در ناحیه اول، ویژگیهای مکانیکی یونهای محصور شده در دام یون چهار قطبی به ازای ولتاژ سینوسی و ضربه‌ای تقریباً یکسانند؛ اما در ناحیه دوم این ویژگیها متفاوتند. از طرف دیگر با توجه به نمودارها در ناحیه دوم، ولتاژ RF که با آن کار می‌شود بالاست و این مسأله با وجود ولتاژ ضربه‌ای تقویت می‌شود. بنابراین در طیف‌سنج جرمی دام یون چهار قطبی RF که از ولتاژ ضربه‌ای استفاده می‌شود، کار کردن در ناحیه دوم پایداری غیر منطقی به نظر می‌رسد و بهتر است که در ناحیه اول پایداری کار کرد.

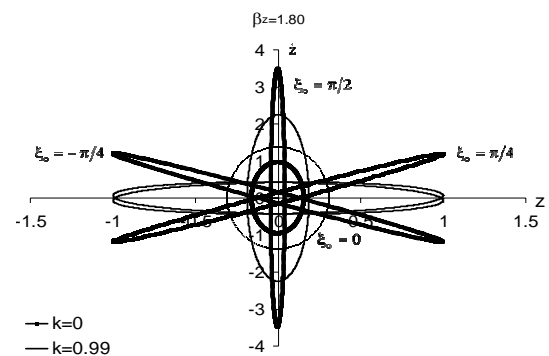
شکل ۹ بیضی‌های فضای فاز را به ازای  $\beta_z=0.14$  (ناحیه اول) برای  $k=0$  و  $k=0.99$  نشان می‌دهد.

شکل ۱۰ بیضی‌های فضای فاز را به ازای  $\beta_z=1.8$  (ناحیه دوم) برای  $k=0$  و  $k=0.99$  نشان می‌دهد.

بطوری که از جدول‌های ۱ و ۲ همچنین از شکل‌های ۹ و ۱۰ پیداست، در ناحیه اول پایداری بیضی‌های فضای فاز برای  $k=0$  و  $k=0.99$  تغییرات زیادی نکرده‌اند. اما در ناحیه دوم پایداری، این بیضی‌ها برای  $k=0$  و  $k=0.99$  تغییرات زیادی خواهند کرد. این مسأله دور از ذهن نیست زیرا همانطور که در مورد شکل نوسان یون بحث شد در ناحیه اول در مورد نوسان یون به این نتیجه رسیدیم که پارامتر اصلی در مورد شکل نوسان یون، پارامتر  $\beta$  می‌باشد، بنابراین رفتار نقاط مختلف را می‌توان با توجه به پارامتر  $\beta$  پیش‌بینی کرد. اما در ناحیه دوم علاوه بر پارامتر  $\beta$ ، دو پارامتر  $a$  و  $q$  نیز اهمیت دارند. یعنی رفتار نقاط مختلف در ناحیه دوم پایداری را باید با توجه به پارامترهای  $\beta$ ،  $a$  و  $q$  بررسی کرد. در



شکل ۹- بیضی‌های فضای فاز به ازای  $\beta_z=0.14$  (ناحیه اول) برای  $k=0$  و  $k=0.99$ .



شکل ۱۰- بیضی‌های فضای فاز به ازای  $\beta_z=1.8$  (ناحیه دوم) برای  $k=0$  و  $k=0.99$ .

**References:**

1. R.E. March, "Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometer," Wiley (1997).
2. R.E. March, "Journal of Mass Spectrometry," An introduction to quadrupole ion trap mass spectrometry. **32**, 351-369 (1997).
3. R.E. March. "Quadrupole ion trap mass spectrometry a view at the turn of the century," Int. J. Mass Spectrometry, **200**, 285-312 (2000).
4. E.D. Hoffmann, Vincent Strootant, "Mass Spectrometry, Principles and Applications," Wiley, (2003).
5. S.M. Sadat Kiai, J. Andre, Y. Zerega, G. Brincourt, R. Catella, "Study of a quadrupole ion trap supplied with a periodic impulsional potential," Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes, **107**, 191-203 (1991).
6. S.M. Sadat Kiai, "Confinement of ions in a radio frequency quadrupole ion trap supplied with a periodic impulsional potential," Int. J. Mass Spectrom, **188**, 177-182 (1999).
7. م. برادران، ع. درودی، س.م. سادات کیائی، "محصول سازی یونها در نواحی پایداری باریک در دام یون چهار قطبی RF"، کنفرانس هسته‌ای بوشهر، "۱۰۸-۱۰۲ (۱۳۸۳)".
8. S.M. Sadat Kiai, M. Baradaran, "Impulsional mode operation for a paul ion trap," Int. J. Mass Spectrum. **247**, 61 (2005).
9. م. برادران، س.م. سادات کیائی و همکاران، "طیف‌سنج جرمی دام یون چهار قطبی RF با قدرت تفکیک بالا با ولتاژ ضربه‌ای،" کنفرانس هسته‌ای مشهد، **۱۹۹ (۱۳۸۴)**.
10. L.A. Pipes, "Martix solution of equations of the Mathieu-Hill type," J. Appl. Phys, **24**, 902 (1953).
11. P.H. Dawson, "A detailed study of the quadrupole mass filter," Int. J. Mass Spectrum. Ion Phys. **14**, 313-337 (1974).
12. P.H. Dawson and C. Lambert, "A detailed study of the quadrupole ion trap," Int. J. Mass Spectrum. Ion Phys, **16**, 269 (1975).
13. P.H. Dawson, "Higher zones of stability for the quadrupole mass filter," J. Vac. Sci. Technol, **11**, 1151 (1974).
14. X. Zhu and D. Qi, "Characteristic of trapped ions in the second stability region of a pual trap," J. of Modern Optics, **39**, 291-303 (1992).