

اصلاح نواحی پایداری در دام یونی کشیدهی پائول در حضور نیروی میراکننده

ا یمان ضیائیان^{*(}، سیدمحمود سادات کیایی^۲، مزدک زبردست^۳، علیرضا گوشه^۳ ۱. پژوهشکدهی فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هستهای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۳٤۸۲–۱۱۳۵۵، تهران – ایران ۲. پژوهشکدهی گداخت هستهای، پژوهشگاه علوم و فنون هستهای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۳٤۸۲–۱۱۳۵۵، تهران – ایران ۳. گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی: ۱۹۳۵–۱۹۳۹، تهران – ایران

چکیدد: با تغییر در شکل هندسی دام و تأثیر نیروی میراکننده، نواحی پایداری اول و دوم در دام چهارقطبی کشیدهی پائول، بررسی شد. در این مقله، منظور از تغییر در شکل هندسی دام، تغییر در فواصل بین الکترود حلقه (۲۳) و الکترودهای کلاهک (۲_۵) است. برای این هدف، پارامتر '(₂ / _n) = n در محاسبات وارد شد. هم چنین، تأثیر نیروی میراکننده، با وارد کردن ثابت میرایی *k* در معادلهی ماتی یو بررسی شد. دستگاه معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون درون دام چهارقطبی با توجه به آثار همزمان نیروی میراکننده و هندسهی دام، در نظر گرفته شده است. این همان معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون درون دام چهارقطبی با توجه به آثار همزمان نیروی میراکننده و هندسهی دام، در نظر گرفته شده است. این معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون درون دام چهارقطبی با توجه به آثار همزمان نیروی میراکننده و هندسهی دام، در نظر گرفته شده است. این معادلات با استفاده از روش رونگه کو تای مرتبهی ۵ و مرتبهی ۶ ورنر (RKV56) به دقت محاسبه، و نواحی پایداری به دست آمده با نواحی پایداری در غیاب نیروی میراکننده و هندسهی دام، در نظر گرفته شده است. این معادلات با استفاده از روش رونگه کو تای مرتبهی ۵ و مرتبهی ۶ ورنر (RKV56) به دقت محاسبه، و نواحی پایداری به دست آمده با نواحی پایداری در غیاب نیروی میراکننده در دام یونی ایده آل ('۲ = '۲) مقایسه شده است. نتایج به دست آمده نشان می دهند که در یک دام یونی *fr،* نیروی میرایی و شکل هندسی دام، نقش تعیین کننده یا در جابه جایی نواحی پایداری در نیرای می شود که محاسبه یواحی پایداری در وی میرایی و شکل هندسی دام، نقش تعیین کننده ای در جابه جایی نواحی پایداری دارند. یاد آوری می شود که محاسبه یواحی پایداری در حضور نیروی میراکننده با توجه به تغییر در فاصلهی بین الکترودهای کلاهک با این روش برای اولین بار گزارش می شود.

کلیدواژهها: نیروی میراکننده، پتانسیل چهارقطبی، هندسهی دام، رونگه کوتای ورنر

Modification of the Stability Regions in Stretched Paul Ion Trap by Damping Force

I. Ziaeian*¹, S.M. Sadat Kiai², M. Zebardast³, A.R. Goosheh³

Physics and Accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14155-1339, Tehran – Iran
 Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14399-51113, Tehran – Iran
 Department of Physics, Payame Noor University, P.O. Box: 19395-3697, Tehran – Iran

Abstract: With the change of an ion trap geometrical shape, ring and end-cap electrodes, and also damping force effects, the first and second stability regions are studied in a stretched Paul ion trap. In this article, according to a new idea, we changed the trap geometry based on the change in distances between the ring electrode $(2r_o)$ and end-cap electrodes $(2z_o)$. For this purpose, the geometrical parameter $n=(r_o/z_o)^2$ was introduced in our calculations. Also, for the damping effects, we entered a viscous damping factor (*k*) in the Mathieu equation. The set of differential equation governing the motion of the confined ion is considered, taking into account the effect of damping force and the ion trap geometry. The Mathieu type differential equations were solved using Runge-Kutta Verner fifth-order and sixth-order method (RKV56). Comparisons were made with the corresponding stability diagrams without considering the effects of damping force in an ideal ion trap ($r_c^2 = 2z_c^2$). The numerical results showed that, for a given ion trap mode i.e., rf only mode, the damping force and the trap geometry played important roles in the relocation of the stability diagrams. The first and second stability regions in the presence of the damping force, according to trap's geometry, are reported for the first time.

Keywords: Damping Force, Trap Geometry, Quadrupole Potential, Runge-Kutta Verner

^{*}email: iziaeian@aeoi.org.ir

تاریخ دریافت مقاله: ۹۴/۷/۵ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۵/۳/۱۷



۱. مقدمه

دام یونی به علت توانایی منحصر به فردش در گیراندازی یونهای گازی از سال ۱۹۸۵ به بعد، نقش غیر قابل چشم پوشی در صنایع و آزمایشگاهها داشته است [۱–۳]. به منظور محصورسازی ذرات باردار، دامهای یونی با شکلهای مختلفی ساخته شدهاند که در میان آنها دام یونی با شکل هذلولی برای الکترودهای حلقه و کلاهک که به آن دام یونی چهارقطبی پائول می گویند (QIT)، به طور وسیعی در پژوهشها استفاده می شود.

در دام یونی پائول، میدان *rf* چاه پتانسیلی برای به دام اندازی یون ها ایجاد می کند. برای داشتن یک دام یونی چهارقطبی ایده آل، رابطهی بین _or و _oz به صورت 'r = ۲ است [۴، ۵]. در این حالت مجانب های الکتروده ای حلقه و کلاهک بر یکدیگر منطبق می شوند.

در دام یونی با پتانسیل چهارقطبی، هر گونه تغییر در فاصلهی بین دو الکترود کلاهک، منجر به خارج شدن دام از وضعیت ایده آل خود می شود که اصطلاحاً به آن دام یونی کشیده می گویند [۵، ۶]. در این حالت مجانبهای دو الکترود بر یکدیگر منطبق نخواهند شد. امروزه، دامهای یونی کشیدهی تجاری طوری ساخته می شوند که فاصلهی بین دو الکترود کلاهک به میزان ۱۰٫۶٪ نسبت به حالت ایده آل افزایش یافته است [۷]. البته باید به این نکته توجه داشت که با وجود تغییر در فاصلهی بین الکترودهای کلاهک، اما شکل و اندازهی آنها بدون تغییر باقی می ماند.

نیروی میراکننده به منظور خنگ سازی یون های درون دام استفاده می شود. خنگ سازی، منجر به کاهش انرژی جنبشی یون ها می شود و زمان محصور سازی را به میزان قابل ملاحظه ای کاهش می دهد. شایان ذکر است که نیروی میراکننده در دو صورت برای دام به کار می رود؛ یکی بر اثر بر خورد یون ها با مولکول های گاز بافر، و دیگری بر اثر بر خورد یون ها با فوتون های لیزر درون دام. در فشار پایین، بر خورد یون ها با فوتون های لیزر به منظور خنگ سازی یون های گاز بافر، سهم است، بنابراین بر خورد یون ها با مولکول های گاز بافر، سهم کم تری در جمله ی میرایی خواهد داشت.

هدف از انجام این پژوهش، بررسی چگونگی تغییر در نواحی پایـداری اول و دوم در حضـور نیـروی میراکننـده در دام یـونی

کشیده ی پائول است. برای این منظور، از روش رونگه کوتای مرتبه ی۵ و ۶ ورنر در محاسبات استفاده شده است که به روش رونگه کوتای مرتبه ی۸ نیز معروف است [۸، ۹]. همچنین نتایج به دست آمده، بدون در نظر گرفتن نیروی میرایی در حالت های هندسی متفاوت دام کشیده با نواحی پایداری متناظر مقایسه شده است.

۲. تئوری

شکل ۱، طرحواره ای از یک دام چهارقطبی هذلولی را نشان میدهد، جایی که _۲ شعاع الکترود حلقه تا مرکز دام، و _۲Z فاصلهی جدایی دو الکترود کلاهک در امتداد محور دام است. در عمل، الکترودهای دام یونی باید برش داده شوند و این برش منجر به تولید مؤلفه های چندقطبی بالاتر در پتانسیل می شود [۵]:

$$\varphi(r,z) = C_{\circ}^{\circ} + C_{\gamma}^{\circ}z + C_{\gamma}^{\circ}(\frac{\gamma}{\gamma}r^{\gamma} - z^{\gamma}) + C_{\gamma}^{\circ}z(\frac{\varphi}{\gamma}r^{\gamma} - z^{\gamma}) + C_{\gamma}^{\circ}(\frac{\varphi}{\gamma}r^{\gamma} - z^{\gamma}) + C_{\gamma}^{\circ}(\frac{\varphi}{\gamma}r^{\gamma} - \varphi r^{\gamma}z^{\gamma} + z^{\gamma}) + \dots (1)$$

که در آن ضرایب [°]_n برای n برابر با ^۵، ۱، ۲، ۳ و ۴ متناظر با جملات تک قطبی، دوقطبی، چهارقطبی، شـشقطبی و هشتقطبی است. در این مقاله تنها در مورد تأثیر دام یونی کشیده بر رفتار یون در دام یونی چهارقطبی سهبعدی در حضور نیروی میراکننده بحث می شود.



شکل 1. طرحوارهای از دام یونی پائول.

معادلهی کلی پتانسیل درون دام یونی کشیده (ˈr̥ ˈ = ٢ɛ) به صورت زیر است [۶]:

$$\varphi(r,z) = \frac{\varphi_{\circ}(r^{*} - \mathbf{Y}z^{*})}{r_{\circ}^{*} - \mathbf{Y}z_{\circ}^{*}} + \frac{\mathbf{Y}\varphi_{\circ}z_{\circ}^{*}}{r_{\circ}^{*} - \mathbf{Y}z_{\circ}^{*}}$$
(Y)

با به کار بردن ولتاژهای DC و AC بسامد بالا به الکترودهای کلاهک، U+VcosΩt، داریم:

$$\varphi(r,z) = \frac{(U + V\cos\Omega t)(r^{\mathsf{Y}} - \mathsf{Y}z^{\mathsf{Y}})}{r_{\circ}^{\mathsf{Y}} - \mathsf{Y}z^{\mathsf{Y}}} + \frac{\mathsf{Y}(U + V\cos\Omega t)z^{\mathsf{Y}}}{r_{\circ}^{\mathsf{Y}} - \mathsf{Y}z^{\mathsf{Y}}}$$
(**Y**)

که در آن V بیان کنندهی ولتاژ صفر تا قلم، م۹۲٫ Ω=۲πƒ بسامد زاویهای، U ولتاژ DC، و f بسامد بر حسب Hz است. با توجه به رابطهی (۳)، مؤلفههای میدان الکتریکی درون دام یون چهارقطبی پائول، به صورت روابط (۴) و (۵) بیان می شوند:

$$E_{z} = -\left(\frac{d\varphi}{dz}\right)_{r} = \frac{\mathbf{r}(U + V\cos\Omega t)z}{r_{o}^{*} - \mathbf{r}z_{o}^{*}}$$
(F)

$$E_{r} = -\left(\frac{d\,\varphi}{dz}\right)_{z} = \frac{\mathbf{Y}(U + V\cos\Omega t)r}{r_{o}^{\,\mathrm{Y}} - \mathbf{Y}z_{o}^{\,\mathrm{Y}}} \tag{(b)}$$

همچنین فرض می شود که نیروی میراکننده به صورت خطی با سرعت یونها تغییر می کند. [۱۰]، بنابراین:

$$\vec{F} = -D\vec{v} \tag{9}$$

که در این رابطه، ۷ بیانکنندهی سرعت یون و D ثابت است. یونهای گازی درون دام، دو نوع نیرو را در دو جهت r و z تجربه میکنندکه یکی نیروی حاصل از میدان الکتریکی و دیگری نیروی میراکننده است، بنابراین:

$$\Sigma F_{\rm r} = e E_{\rm r} - D v_{\rm r} \tag{V}$$

$$\Sigma F_z = eE_z - Dv_z \tag{A}$$

مجموعه معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون با جـرم m و بار الکتریکی e داخل دام یونی با توجـه بـه نیـروی میراکننـده بـه صورت [۱۰]:

$$\frac{d^{\mathsf{r}}z}{d\xi^{\mathsf{r}}} + \mathsf{Y}k \, \frac{dz}{d\xi} + (a_z - \mathsf{Y}q_z \cos \mathsf{Y}\xi)z = 0 \tag{9}$$

$$\frac{d^{r}r}{d\xi^{r}} + \mathbf{Y}k \frac{dr}{d\xi} + (a_{r} - \mathbf{Y}q_{r}\cos\mathbf{Y}\xi)\mathbf{r} = 0$$
(1.)

$$\xi = \frac{\Omega t}{r} \tag{11}$$

$$k = \frac{D}{m\Omega} \tag{11}$$

$$\alpha_{z} = -\mathbf{Y}\alpha_{r} = -\frac{\mathbf{Y}eU}{m(r_{o}^{\mathsf{Y}} + \mathbf{Y}z_{o}^{\mathsf{Y}})\Omega^{\mathsf{Y}}}$$

$$q_{z} = -\mathbf{Y}q_{r} = \frac{\Lambda eV}{m(r_{o}^{\mathsf{Y}} + \mathbf{Y}z_{o}^{\mathsf{Y}})\Omega^{\mathsf{Y}}}$$
(117)

۳. روش کار

در ایـن پـژوهش، بـا وارد کـردن پـارامتر $r_n(n/n) = z$ در معادلات (۱۳) و (۱۴)، معادلات (۹) و (۱۰) حل شدهاند. در حـل این معادلات، از روش عددی رونگه کوتای مرتبهی ۵ و ۶ ورنر (RKV56) استفاده شده است. همچنین ضریب میرایی k=1 در نظر گرفته شـدهاند. زمانی که نیروی میرایی ناشی از برخورد یونهای گازی با فوتونها پدیدهی غالب باشد، مقدار k=1 را می توان برای هر فشار پایین گاز بافر در نظر گرفت [۱۱، ۱۲]. شایان ذکر است که درون دام، نیروی حاصل از میدان الکتریکی، می رود. برای مقایسهی دقیق تر، فرض می شود که این دو نیرو



شکل ۲. رفتار یون ^{F.}Ar در صفحهی z-t بدون در نظر گرفتن نیروی میراکننده در شرایط *f*=۱MHz (*U=» f=*۱MHz و ۱۰mm



شکل ۳. رفتار یون ^{۴.}Ar در صفحهی z-t با در نظر گرفتن نیروی میراکننده در شرایط f=1MHz، *U=۰ زJ=۱۰*W و *r*₀ =۱۰mm.



شکل ٤. ناحیهی پایداری اول در دام یونی پائول در صفحهی a-q با در نظر گرفتن نیروی میرایی (k=۱) جایی که n در $r_{\rm o}(r)$ = ($\sqrt{\sqrt{n}}$) = z برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.

$$F = D \upsilon \xrightarrow{\upsilon = \iota^* \mathsf{m/s}} F = \mathsf{Fl}_{\mathcal{V}} \times \iota^{-\iota^*} \mathsf{N}$$
 (19)

$$E = \frac{V}{d} \xrightarrow{\nu = 1 \cdot \cdot \nu, d = 1 \text{ cm}} E = 1 \cdot V/m$$
 (1V)

$$F_{E} = eE \xrightarrow{e=1, \neq \times 1^{-10}} F_{E} = 1, \neq \times 1^{-10} N$$
 (1A)

همان طور که مشاهده می شود، نیروی میراکننده می تواند در مقایسه با نیروی حاصل از میدان الکتریکی قابل ملاحظه باشد که خود عاملی در کاهش انرژی جنبشی یون می شود. دو شکل ۲ و ۳، رفتار یون آرگون را در صفحهی z-t بدون در نظر گرفتن و با در نظر گرفتن نیروی میرا کننده نشان می دهد.

شکل ۴، ناحیهی پایـداری اول در حضور نیـروی میراکننـده (k=۱) در شرایطی که پارامتر n برابر با ۱٫۵، ۲ و ۳ اسـت را نشـان میدهد. ناحیهی نشان داده شده برای دام یونی چهارقطبی ایدهآل (n=۲) در شکل ۲ در مرجع [۱۰] گزارش شده است.

همان طور که در شکل ۴ مشاهده می شود، ناحیه ی پایداری اول در صفحه q-a با در نظر گرفتن نیروی میرایی، با افزایش مقدار n، به طور قابل ملاحظهای کشیده می شود. در تعیین پارامترهای دستگاه به منظور محصورسازی یون، مشخص کردن نقاط a و p در نواحی پایداری حائز اهمیت است. به طور مثال برای گیراندازی یون ^{+A}r در نقطهی ۲۰ = a و 1 = p در دام یونی ایده آل در حضور نیروی میراکننده با ابعاد دام ۱۰۳۳ = vac و بسامد ۱۸۲۲، با توجه به روابط (۱۳) و (۱۴)، ۷₋₄ ۷ و ۷_{ac}

در شکل های ۵ و ۶، ناحیهی پایداری دوم با توجه به دو حالت بدون در نظر گرفتن نیروی میراکننده و با در نظر گرفتن نیروی میراکننده در شرایطی که پارامتر n برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ است، با یک دیگر مقایسه شدهاند. خاطر نشان می شود که نتایج برای ۲=n (دام یونی ایده آل) در شکل ۳ قبلاً در مرجع [۱۰] گزارش شده است.



شکل 0. ناحیهی پایداری دوم در دام یونی پائول در صفحهی q-q بیدون در نظر گرفتن نیروی میرایی (k=0, k=0) جایی که n در $r_{n}(r) = \frac{\sqrt{\sqrt{n}}}{\sqrt{n}}$ برابر ۱٫۵ و ۳ در نظر گرفته شده است.



شکل ۲. ناحیهی پایداری دوم در دام یونی پائول در صفحهی a-q با در نظر گرفتن نیروی میرایی (k=۱) جایی که n در _مr(<u>/ر/</u>) = z برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.

شکل های ۵ و ۶ نشان میدهند که با افزایش متغیر n در رابطهی ۲٫ (__/r) = ۲٫ ناحیهی پایداری دوم در دو حالت «k=۰ و k=۱ نه تنها بزرگنتر میشود، بلکه انتقال نیز مییابد.

شایان ذکر است که نتایج به دست آمده از نواحی پایداری اول با در نظر گرفتن نیروی میراکننده، و نواحی پایداری دوم با در نظر گرفتن و بدون در نظر گرفتن نیروی میراکننده در دام یونی چهارقطبی کشیدهی پائول برای اولین بار گزارش می شود.

محاسبهی q_{max} به منظور طراحی دام یونی پائول بسیار اهمیت دارد. این کمیت در ناحیهی پایداری اول در حالت ^(I) محاسبه میشود. نمودار q_{max} برحسب ضریب میرای k در شرایطی که پارامتر n برابر با ۱٫۵، ۲ و ۳ است در شکل ۷ رسم شده است.



شکل ۲. نمودار q_{max} بر حسب ضریب میرایی k در دام یونی پائول با توجه به q_{max} ناحیهی پایداری اول، ۹٫۸ $k \le 1, \gamma_{n}$ و n در r_{n} ($\sqrt{\sqrt{n}}$) = $z_{s} = (\sqrt{\sqrt{n}})r_{s}$ برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.

٤. نتيجه گيري

در این مقاله بر روی نواحی پایداری اول و دوم دام یونی کشیدهی پائول در حضور نیروی میراکننده بحث و بررسی شد. نواحي پايداري با توجه به برنامهنويسي بر پايهي محاسبات عددي به روش رونگه کوتای مرتبهی ۵ و ۶ ورنر (RKV56) رسم شده است. محاسبات نشان مردهد که تغییر در فاصله ی بین الکترودهای کلاهک، و همچنین وارد کردن نیروی میراکننده، تأثیر به سزایی در تغییر در نواحی پایداری دارد. بنابراین، طراحان دام يوني مي توانند در يک شرايط آزمايشگاهي معيّن، تنها با تغيير در شکل هندسی دام و همچنین ایجاد یک نیروی میراکننده به منظور خنکسازی یون،ها، یون،های گازی متفاوتی را محصور کنند. در شرایطی که _۲ ثابت است، کاهش مقدار n در پارامتر ی منجر به افزایش در فاصله ی بین کلاه که تا $z_{s} = (\frac{1}{\sqrt{n}})r_{s}$ مرکز دام می شود. با توجه به شکل ها می توان این گونه بیان کرد که ناحیهی پایداری اول با در نظر گرفتن نیروی میراکننده، با افزایش مقدار n گسترش می یابد. همچنین ناحیه ی پایداری دوم با افزایش مقدار n نه تنها گسترش می یابد، بلکه جابه جا نیز مى شود.



- J. Eschner, G. Morigi, F. Schmidt, R. Blatt, Laser cooling of trapped ions, *J. Opt. Soc. Am. B.* 20 (2003) 1003-1015.
- [2] P.H. Dawson, Quadrupole mass spectrometry and its applications, AIP, New York (1995) 69.
- [3] X. Zhu, D. Qi, Characteristics of trapped ions in the second stability region of a Paul trap, J. Mod. Opt. 39 (1992) 291-303.
- [4] R.F. Wuerker, H. Shelton, R.V. Langmuir, Electrodynamic containment of charged particles, *J. Appl. Phys.* **30** (1959) 342-349.
- [5] R.E. March, J.F.J. Todd, Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry, 2nd ed., Wiley, New Jersey (2005) 50-58.
- [6] I. Ziaeian, S.M. Sadat Kiai, M. Ellahi, S. Sheibani, A. Safarian, S. Farhangi, Theoretical study of the effect of ion trap geometry on the dynamic behavior of ions in a Paul trap, *Int. J. Mass Spectrom.* **304** (2011) 25-28.
- [7] R.E. March, An introduction to quadrupole ion trap mass spectrometry, J. Mass Spectrom. 32 (1997) 351-369.

TCV

- [8] J.H. Verner, Applied numerical mathematics, *Appl. Numer. Math.* **22** (1996) 345-357.
- [9] T.E. Simos, G. Papakaliatakis, Modified Runge-Kutta Verner methods for the numerical solution, *Appl. Math. Model.* 22 (1998) 657-670.
- [10] I. Ziaeian, H. Noshad, Theoretical study of the effect of damping force on higher stability regions in a Paul trap, *Int. J. Mass spectrom*. 289 (2010) 1-5.
- [11] K. Blaum, F. Herfurth, Trapped Charged Particles and Fundamental Interactions, Lecture Notes in Physics 749, Springer, Berlin (2008) 99-100.
- [12] T. Hasegawa, K. Uehara, Dynamics of single particle in a Paul trap in the presence of the damping force, *Appl. Phys. B.* 61 (1995) 159-163.