J. of Nucl Sci. and Tech.
78, 2017, 12-17

مجله‌ی علوم و فنون هسته‌ای
۷۸، ۱۳۹۵، ۱۲-۱۷

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

ایمان ضیائیان*[۱]، 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: ۳۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران ـ ایران
۲. پژوهشکده‌ی گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۳۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران ـ ایران
۳. گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی: ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران ـ ایران

چکیده: با تغییر در شکل هندسی دام و تأثیر نیروی میراکننده، نواحی پایداری اول و دوم در دام چهارقطبی کشیده‌ی پائول، بررسی شد. در این مقاله، منظور از تغییر در شکل هندسی دام، تغییر در فواصل بین الکترود حلقه ($2r_0$) و الکترودهای کلاهک ($2z_0$) است. برای این هدف، پارامتر $n=(r_0/z_0)^2$ در محاسبات وارد شد. هم‌چنین، تأثیر نیروی میراکننده، با وارد کردن ثابت میرایی k در معادله‌ی ماتیو 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 معادلات با استفاده از روش رونگه کوتای 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 ایده‌آل ($r_0^2=2z_0^2$) مقایسه شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که در یک دام یونی rf، نیروی میرایی و شکل هندسی دام، نقش تعیین کننده‌ای در جابه‌جایی نواحی پایداری دارند. یادآوری می‌شود که محاسبه‌ی نواحی پایداری در حضور نیروی میراکننده با توجه به تغییر در فاصله‌ی بین الکترودهای کلاهک با این روش برای اولین بار گزارش می‌شود.

***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 Kiai[2], M. Zebardast[3], A.R. Goosheh[3]
1. Physics and Accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14155-1339, Tehran – Iran
2. Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14399-51113, Tehran – Iran
3. 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 ($2r_0$) and end-cap electrodes ($2z_0$). For this purpose, the geometrical parameter $n=(r_0/z_0)^2$ 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 ($r_0^2=2z_0^2$). 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 چشم‌پوشی 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 می‌گویند (QIT)، به طور وسیعی در پژوهش‌ها استفاده می‌شود.

در دام یونی پائول، میدان rf چاه پتانسیلی برای به دام‌اندازی یون‌ها ایجاد می‌کند. برای داشتن یک دام یونی چهارقطبی ایده‌آل، رابطه‌ی بین r_0 و z_0 به صورت $r_0^2 = 2z_0^2$ است [۴، ۵]. در این حالت مجانب‌های الکترودهای حلقه و کلاهک بر یک‌دیگر منطبق می‌شوند.

در دام یونی با پتانسیل چهارقطبی، هرگونه تغییر در فاصله‌ی بین دو الکترود کلاهک، منجر به خارج شدن دام از وضعیت ایده‌آل خود می‌شود که اصطلاحاً به آن دام یونی کشیده می‌گویند [۵، ۶]. در این حالت مجانب‌های دو الکترود بر یک‌دیگر منطبق نخواهند شد. امروزه، دام‌های یونی کشیده‌ی تجاری طوری ساخته می‌شوند که فاصله‌ی بین دو الکترود کلاهک به میزان ۱۰٫۶٪ نسبت به حالت ایده‌آل 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 می‌ماند.

نیروی میراکننده به منظور خنک‌سازی یون‌های درون دام استفاده می‌شود. خنک‌سازی، منجر به کاهش انرژی جنبشی یون‌ها می‌شود و زمان محصورسازی را به میزان قابل‌ملاحظه‌ای کاهش می‌دهد. شایان ذکر است که نیروی میراکننده در دو صورت برای دام به کار می‌رود؛ یکی بر اثر برخورد یون‌ها با مولکول‌های گاز بافر، و دیگری بر اثر برخورد یون‌ها با فوتون‌های لیزر درون دام. در فشار پایین، برخورد یون‌ها با فوتون‌های لیزر به منظور خنک‌سازی یون‌ها پدیده‌ای غالب است، بنابراین برخورد یون‌ها با مولکول‌های گاز بافر، سهم کم‌تری در جمله‌ی میرایی خواهد داشت.

هدف از انجام این پژوهش، بررسی چگونگی تغییر در نواحی پایداری اول و دوم در حضور نیروی میراکننده در دام یونی کشیده‌ی پائول است. برای این منظور، از روش رونگه کوتای مرتبه‌ی ۵ و ۶ ورنر در محاسبات استفاده شده است که به روش رونگه کوتای مرتبه‌ی ۸ نیز معروف است [۸، ۹]. هم‌چنین نتایج به دست آمده، بدون در نظر گرفتن نیروی میرایی در حالت‌های هندسی متفاوت دام کشیده با نواحی پایداری متناظر مقایسه شده است.

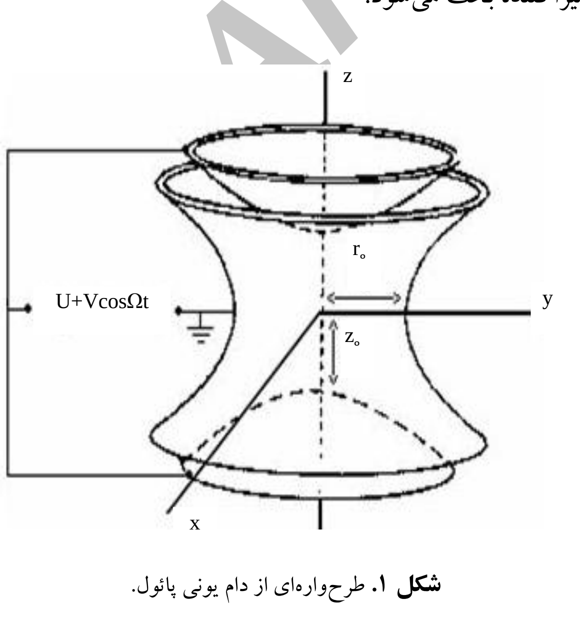
۲. تئوری

شکل ۱، طرح‌واره‌ای از یک دام چهارقطبی هذلولی را نشان می‌دهد، جایی‌که r_0 شعاع الکترود حلقه تا مرکز دام، و $2z_0$ 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 مؤلفه‌های چندقطبی بالاتر در پتانسیل می‌شود [۵]:

$$\varphi(r,z) = C_0^0 + C_1^0 z + C_2^0\left(\frac{1}{2}r^2 - z^2\right) + C_3^0 z\left(\frac{3}{2}r^2 - z^2\right) + C_4^0\left(\frac{3}{8}r^4 - 3r^2z^2 + z^4\right) + \dots \quad (1)$$

که در آن ضرایب C_n^0 برای n برابر با ۰، ۱، ۲، ۳ و ۴ متناظر با جملات تک‌قطبی، دوقطبی، چهارقطبی، شش‌قطبی 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 می‌شود.



شکل ۱. طرح‌واره‌ای از دام یونی پائول.

معادله‌ی کلی پتانسیل درون دام یونی کشیده ($r_0^2 = 2z_0^2$) به صورت زیر است [۶]:

$$\varphi(r,z) = \frac{\varphi_0 (r^2 - 2z^2)}{r_0^2 - 2z_0^2} + \frac{2\varphi_0 z_0^2}{r_0^2 - 2z_0^2} \qquad (2)$$

با به کار بردن ولتاژهای DC و AC بسامد بالا به الکترودهای کلاهک، $U+V\cos\Omega t$، داریم:

$$\varphi(r,z) = \frac{(U + V\cos\Omega t)(r^2 - 2z^2)}{r_0^2 - 2z_0^2} + \frac{2(U + V\cos\Omega t) z_0^2}{r_0^2 - 2z_0^2} \qquad (3)$$

که در آن V بیان‌کننده‌ی ولتاژ صفر تا قله، V_{0-p}، $\Omega=2\pi f$ بسامد زاویه‌ای، U ولتاژ DC، و f بسامد برحسب Hz است. با توجه به رابطه‌ی (۳)، مؤلفه‌های میدان الکتریکی درون دام یون چهارقطبی پائول، به صورت روابط (۴) و (۵) بیان می‌شوند:

$$E_z = -\left(\frac{d\varphi}{dz}\right)_r = \frac{4(U + V\cos\Omega t) z}{r_0^2 - 2z_0^2} \qquad (4)$$

$$E_r = -\left(\frac{d\varphi}{dz}\right)_z = \frac{2(U + V\cos\Omega t) r}{r_0^2 - 2z_0^2} \qquad (5)$$

هم‌چنین فرض می‌شود که نیروی میراکننده به صورت خطی با سرعت یون‌ها تغییر می‌کند. [۱۰]، بنابراین:

$$\vec{F} = -D\vec{v} \qquad (6)$$

که در این رابطه، v بیان‌کننده‌ی سرعت یون و D ثابت است.

یون‌های گازی درون دام، دو نوع نیرو را در دو جهت r و z تجربه می‌کنند که یکی نیروی حاصل از میدان الکتریکی و دیگری نیروی میراکننده است، بنابراین:

$$\Sigma F_r = eE_r - Dv_r \qquad (7)$$

$$\Sigma F_z = eE_z - Dv_z \qquad (8)$$

مجموعه معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون با جرم m و بار الکتریکی e داخل دام یونی با توجه به نیروی میراکننده به صورت [۱۰]:

$$\frac{d^2 z}{d\xi^2} + 2k\frac{dz}{d\xi} + (a_z - 2q_z \cos 2\xi) z = 0 \qquad (9)$$

$$\frac{d^2 r}{d\xi^2} + 2k\frac{dr}{d\xi} + (a_r - 2q_r \cos 2\xi) r = 0 \qquad (10)$$

در این روابط، پارامتر بدون بعد ξ و ضریب میرایی k از روابط (۱۱) و (۱۲) تعیین می‌شوند:

$$\xi = \frac{\Omega t}{2} \qquad (11)$$

$$k = \frac{D}{m\Omega} \qquad (12)$$

در دام یونی کشیده، پارامترهای a و q به صورت روابط (۱۳) و (۱۴) تعریف می‌شوند [۵، ۷]:

$$\alpha_z = -2\alpha_r = -\frac{16eU}{m(r_0^2 + 2z_0^2)\Omega^2} \qquad (13)$$

$$q_z = -2q_r = \frac{8eV}{m(r_0^2 + 2z_0^2)\Omega^2} \qquad (14)$$

۳. روش کار

در این پژوهش، با وارد کردن پارامتر $z_0 = (1/\sqrt{n})r_0$ در معادلات (۱۳) و (۱۴)، معادلات (۹) و (۱۰) حل شده‌اند. در حل این معادلات، از روش عددی رونگه کوتای مرتبه‌ی ۵ و ۶ ورنر (RKV56) استفاده شده است. هم‌چنین ضریب میرایی k=۱ در نظر گرفته شده‌اند. زمانی که نیروی میرایی ناشی از برخورد یون‌های گازی با فوتون‌ها پدیده‌ی غالب باشد، مقدار k=۱ را می‌توان برای هر فشار پایین گاز بافر در نظر گرفت [۱۱، ۱۲]. شایان ذکر است که درون دام، نیروی حاصل از میدان الکتریکی، یک نیروی پیشران در مقابل نیروی میراکننده به یون به کار می‌رود. برای مقایسه‌ی دقیق‌تر، فرض می‌شود که این دو نیرو

برای یون $^{۴۰}Ar^{+}$ درون دام یونی به کار رفته باشد. بنابراین در شرایط متعارف آزمایشگاهی برای نیروی میراکننده:

$$k=۱\Rightarrow D=m\Omega\Rightarrow D=۲\pi fm\xrightarrow{f=۱MHZ}D=۴۱٫۷\times۱۰^{-۲۰} \quad (۱۵)$$

$$F=D\upsilon\xrightarrow{\upsilon=۱۰^{۴}\,m/s}F=۴۱٫۷\times۱۰^{-۱۶}\,N \quad (۱۶)$$

و برای نیروی حاصل از میدان الکتریکی:

$$E=\frac{V}{d}\xrightarrow{v=۱۰۰v,d=۱cm}E=۱۰^{۴}\ V/m \quad (۱۷)$$

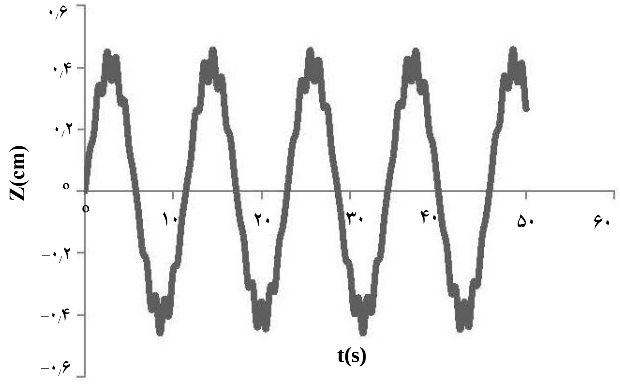
$$F_{E}=eE\xrightarrow{e=۱٫۶\times۱۰^{-۱۹}}F_{E}=۱٫۶\times۱۰^{-۱۵}\,N \quad (۱۸)$$

همان‌طور که مشاهده می‌شود، نیروی میراکننده می‌تواند در مقایسه با نیروی حاصل از میدان الکتریکی قابل ملاحظه باشد که خود عاملی در کاهش انرژی جنبشی یون می‌شود. 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 می‌دهد.

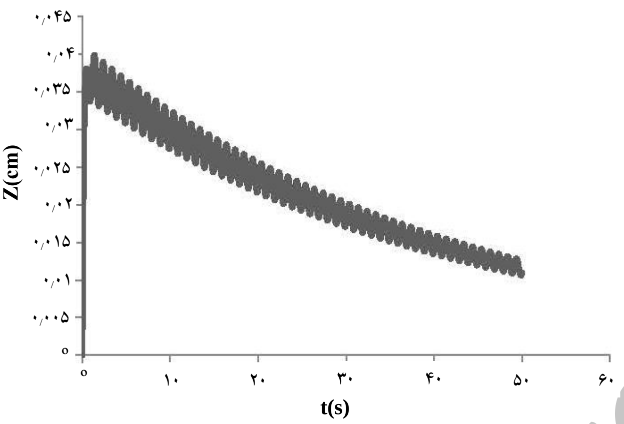
شکل ۴، ناحیه‌ی پایداری اول در حضور نیروی میراکننده (k=۱) در شرایطی که پارامتر n برابر با ۱٫۵، ۲ و ۳ است را نشان می‌دهد. ناحیه‌ی نشان داده شده برای دام یونی چهارقطبی ایده‌آل (n=۲) در شکل ۲ در مرجع [۱۰] گزارش شده است.

همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، ناحیه‌ی پایداری اول در صفحه a-q با در نظر گرفتن نیروی میرایی، با افزایش مقدار n، به طور قابل‌ملاحظه‌ای کشیده می‌شود. در تعیین پارامترهای دستگاه به منظور محصورسازی یون، مشخص کردن نقاط a و q در نواحی پایداری حائز اهمیت است. به طور مثال برای گیراندازی یون $^{۴۰}Ar^{+}$ در نقطه‌ی a=۰٫۱ و q=۱ در دام یونی ایده‌آل در حضور نیروی میراکننده با ابعاد دام $r_{\circ}$ =۱۰mm و بسامد ۱MHz، با توجه به روابط (۱۳) و (۱۴)، V_{ac}=۴۰۸٫۶V و U_{dc}=۲۰٫۴V به دست می‌آیند.

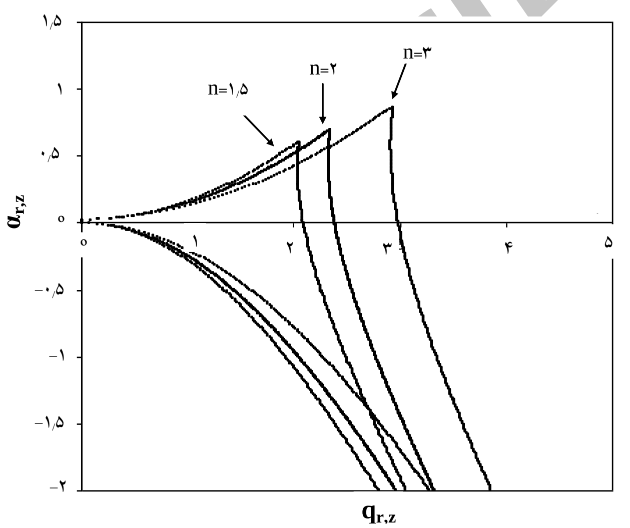
در شکل‌های ۵ و ۶، ناحیه‌ی پایداری دوم با توجه به دو حالت بدون در نظر گرفتن نیروی میراکننده و با در نظر گرفتن نیروی میراکننده در شرایطی که پارامتر n برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ است، با یک‌دیگر مقایسه شده‌اند. خاطر نشان می‌شود که نتایج برای n=۲ (دام یونی ایده‌آل) در شکل ۳ قبلاً در مرجع [۱۰] گزارش شده است.



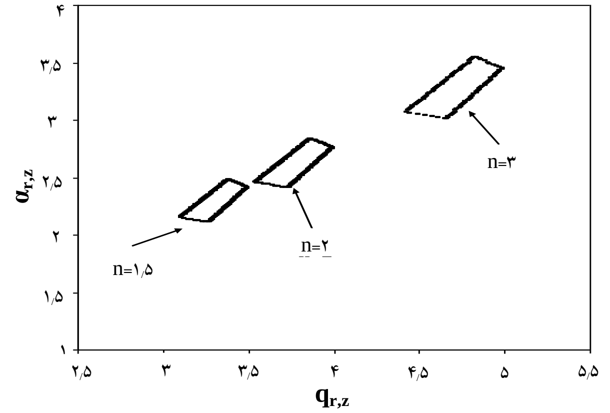
شکل ۲. رفتار یون ^{۴۰}Ar در صفحه‌ی z-t بدون در نظر گرفتن نیروی میراکننده در شرایط f=۱MHz، U=۰، V=۱۰۰V و $r_{\circ}$ =۱۰mm.



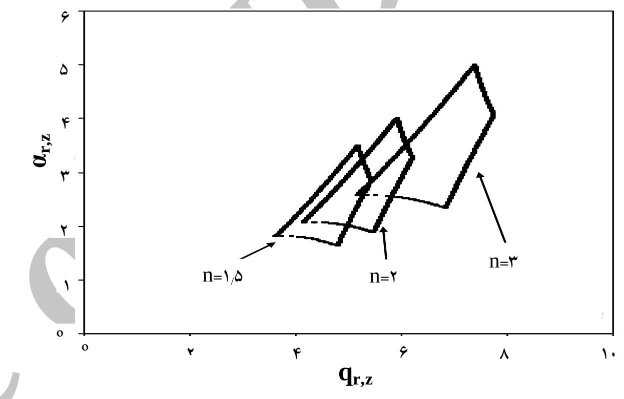
شکل ۳. رفتار یون ^{۴۰}Ar در صفحه‌ی z-t با در نظر گرفتن نیروی میراکننده در شرایط f=۱MHz، U=۰، V=۱۰۰V و $r_{\circ}$ =۱۰mm.



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 $z_{\circ}=(1/\sqrt{n})r_{\circ}$ برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.



شکل ۵. ناحیه‌ی پایداری دوم در دام یونی پائول در صفحه‌ی a-q بدون در نظر گرفتن نیروی میرایی (k=۰) جایی که n در $z_0 = (1/\sqrt{n})r_0$ برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.

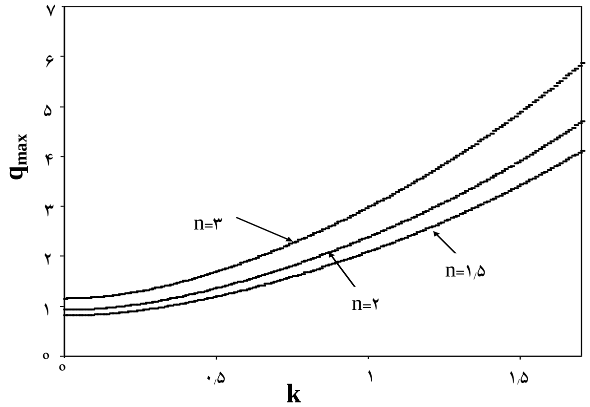


شکل ٦. ناحیه‌ی پایداری دوم در دام یونی پائول در صفحه‌ی a-q با در نظر گرفتن نیروی میرایی (k=۱) جایی که n در $z_0 = (1/\sqrt{n})r_0$ برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.

شکل‌های ۵ و ۶ نشان می‌دهند که با افزایش متغیر n در رابطه‌ی $z_0 = (1/\sqrt{n})r_0$، ناحیه‌ی پایداری دوم در دو حالت k=۰ و k=۱ نه تنها بزرگ‌تر 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 می‌شود.

محاسبه‌ی q_{max} به منظور طراحی دام یونی پائول بسیار اهمیت دارد. این کمیت در ناحیه‌ی پایداری اول در حالت U=۰ 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 ۷. نمودار q_{max} برحسب ضریب میرایی k در دام یونی پائول با توجه به ناحیه‌ی پایداری اول، $0 \le k \le 1.7$ و n در $z_0 = (1/\sqrt{n})r_0$ برابر ۱٫۵، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.

٤. نتیجه‌گیری

در این مقاله بر روی نواحی پایداری اول و دوم دام یونی کشیده‌ی پائول در حضور نیروی میراکننده بحث و بررسی شد. نواحی پایداری با توجه به برنامه‌نویسی بر پایه‌ی محاسبات عددی به روش رونگه کوتای مرتبه‌ی ۵ و ۶ ورنر (RKV56) رسم شده است. محاسبات نشان می‌دهد که تغییر در فاصله‌ی بین الکترودهای کلاهک، و هم‌چنین وارد کردن نیروی میراکننده، تأثیر به سزایی در تغییر در نواحی پایداری دارد. بنابراین، طراحان دام یونی می‌توانند در یک شرایط آزمایشگاهی معیّن، تنها با تغییر در شکل هندسی دام و هم‌چنین ایجاد یک نیروی میراکننده به منظور خنک‌سازی یون‌ها، یون‌های گازی متفاوتی را محصور کنند. در شرایطی که r_0 ثابت است، کاهش مقدار n در پارامتر $z_0 = (1/\sqrt{n})r_0$ منجر به افزایش در فاصله‌ی بین کلاهک‌ها تا مرکز دام می‌شود. با توجه به شکل‌ها می‌توان این گونه بیان کرد که ناحیه‌ی پایداری اول با در نظر گرفتن نیروی میراکننده، با افزایش مقدار n گسترش می‌یابد. هم‌چنین ناحیه‌ی پایداری دوم با افزایش مقدار n نه تنها گسترش می‌یابد، بلکه جابه‌جا نیز می‌شود.

مراجع

[1] 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.

[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.