



## اثر پتانسیل بار فضایی در رفتار یون‌های $^{238}\text{UF}_6$ گازی محصور شده در دام یونی پاول

نوشین پیش‌بین\*، سید محمود سادات کیایی، مجید الهی، پروین یورتچی، سیدرضا شفاعی

پژوهشکده‌ی پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۱۴۳۹۹-۵۱۱۱۳، تهران-ایران

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۸/۵/۲۶ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۸/۸/۲۰

### چکیده

رفتار یون‌های  $^{238}\text{UF}_6$  گازی محصور شده در دام یونی چهار قطبی پاول تحت تأثیر میدان ناشی از اعمال پتانسیل‌های RF و DC به الکترودهای کلاهدک و حلقه دام و پتانسیل بار فضایی، با حل معادله دیفرانسیل خطی مرتبه دوم ماتریو مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج محاسبات و شبیه‌سازی در دو حالت غیاب و وجود اثر پتانسیل بار فضایی بررسی و با یکدیگر مقایسه شده است. نتایج تحلیلی و عددی، جابه‌جایی نمودار پایداری یون‌های  $^{238}\text{UF}_6$  گازی محصور شده در دام چهار قطبی پاول در اثر اعمال پتانسیل بار فضایی را نشان می‌دهد. علاوه بر این، تأثیر پتانسیل بار فضایی بر بیشینه چگالی یون‌های  $^{238}\text{UF}_6$  محصور شده، تابع توزیع سرعت یون‌ها و دیگر کمیت‌های آماری نیز محاسبه شده است. دام یون چهار قطبی مهم‌ترین بخش از یک طیف‌سنج جرمی را تشکیل می‌دهد و طیف‌سنج جرمی در صنعت غنی‌سازی اورانیم کاربرد گسترده و قابل توجهی دارد.

**کلیدواژه‌ها:** طیف‌سنج جرمی پاول، یون گازی  $^{238}\text{UF}_6$ ، معادله ماتریو، پتانسیل بار فضایی، بیشینه چگالی، تابع توزیع سرعت

## Effect of space charge potential on the behavior of confined gaseous $^{238}\text{UF}_6$ ions in paul ion trap

N. Pishbin\*, S.M. Sadat Kiai, M. Elahi, P. Yourtchi, S.R. Shafaei

Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14399-51113, Tehran - Iran

Research Article

Received 17.8.2019, Accepted 11.11.2019

### Abstract

This paper examined the behavior of confined  $^{238}\text{UF}_6$  gaseous ions in Paul's quadrupole mass spectrometer under the influence of the field induced by the RF and DC potential applied to the end cap and ring electrodes and space charge potential, based on the solutions of Mathieu's second-order linear differential equation. The results of calculation and simulation were compared in the absence and presence of space charge potential effects. The analytical and numerical results demonstrated the displacement of stability diagram of the confined  $^{238}\text{UF}_6$  gaseous ions in Paul's quadrupole trap due to the space charge potential. In addition, the space charge effect on the maximum density of the confined  $^{238}\text{UF}_6$  ions, the velocity distribution function of the confined ions and other statistical quantities were also calculated. The quadrupole ion trap forms the most important part of a mass spectrometer, and the mass spectrometer is widely used in the uranium enrichment industry.

**Keywords:** Paul's mass spectrometer,  $^{238}\text{UF}_6$  gaseous ions, Mathieu equation, Space charge potential, Maximum density, Velocity distribution function

\*Email: NPishbin@aeoi.org.ir

## ۱. مقدمه

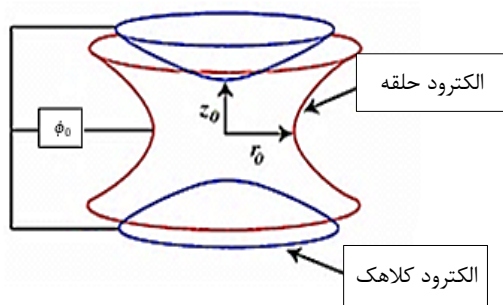
هگزا فلوراید اورانیم (UF<sub>6</sub>) ترکیبی است که در غنی‌سازی اورانیم به کار می‌رود و از آن در تولید سوخت رآکتورهای هسته‌ای استفاده می‌شود. در حال حاضر یکی از مراحل توسعه چرخه سوخت هسته‌ای، فرایند غنی‌سازی ایزوتوپ اورانیم است که میزان اورانیم غنی شده برای تولید سوخت هسته‌ای را تأمین می‌کند. منظور از غنی‌سازی اورانیم، افزایش غلظت ایزوتوپ اورانیم ۲۳۵ در UF<sub>6</sub> است از این‌رو این فرایند با برچسب <sup>235</sup>U٪ مشخص می‌شود. ایزوتوپ‌های <sup>235</sup>U و <sup>238</sup>U دارای خواص شیمیایی یکسان ولی خواص فیزیکی متفاوت هستند. اختلاف جرم ایزوتوپ‌های <sup>235</sup>U و <sup>238</sup>U قابلیت جداسازی و افزایش درصد غنی‌سازی <sup>235</sup>U را فراهم می‌آورد. تمام فرایندهای غنی‌سازی گذشته و فعلی به طور مستقیم یا غیرمستقیم از این اختلاف جرم استفاده می‌کنند. روش‌های مختلفی برای تحلیل این ایزوتوپ‌ها وجود دارد که در میان آن‌ها طیف‌سنج جرمی از نوع دام یون چهار قطبی (با عملکرد پیوسته یا ضربه‌ای) به لحاظ عملکرد سریع در تحلیل، حساسیت بالا، حجم کوچک، هزینه کم و سادگی کار با دستگاه از دیگر روش‌ها مناسب‌تر است. این طیف‌سنج با عملکرد ضربه‌ای به لحاظ دارا بودن قابلیت هم‌زمان به‌عنوان چشمه یونی و تحلیل‌گر از حساسیت بالایی برخوردار است. اختراع دام یون چهار قطبی به ولفگانگ پاول<sup>۱</sup> فیزیکدان آلمانی نسبت داده می‌شود که در سال ۱۹۵۳ به پژوهش بر روی فیلترهای جرمی چهار قطبی غیرمغناطیسی پرداخت و مطالعه او منجر به ساخت دام یون چهار قطبی شد که با دام پاول شناخته می‌شود [۱]. دام یون چهار قطبی مهم‌ترین بخش از یک طیف‌سنج جرمی را تشکیل می‌دهد که علاوه بر دقت و حساسیت بالا در تفکیک جرم، به عنوان یک ذخیره‌کننده یون نیز محسوب می‌شود و در آن یون‌های گازی می‌توانند در مدت‌های زمانی چند صد میلی‌ثانیه محصور شوند. همین امر سبب مورد توجه قرار گرفتن دام یون چهار قطبی پاول توسط محققان و کاربردهای وسیع آن در علوم و فن‌آوری شد [۲-۸]. از جمله پدیده‌های مؤثر در به دام اندازی یون‌ها اثر بار فضایی<sup>۲</sup> ناشی از برهم‌کنش کولنی یون‌ها است که بیشینه تعداد یون‌های محصور شده در دام یونی پاول را تعیین می‌کند. اثر

پتانسیل بار فضایی بر پایداری مسیر حرکت یون در دام یونی، نخستین بار در سال ۱۹۵۹ توسط گروه بن<sup>۳</sup> مورد بررسی قرار گرفت و در مقاله فیشر<sup>۴</sup> به چاپ رسید [۹]. دملت<sup>۵</sup> اولین کسی بود که یک مدل تفصیلی را برای رفتار بار فضایی و دمای تعادلی ابر یون‌های ذخیره شده بر اساس رهیافت چاه پتانسیل فرمول‌بندی کرد [۱۰]. شیوسلر<sup>۶</sup> در سال ۱۹۷۹ با استفاده از جابه‌جایی فرکانس حرکت یون ناشی از اثر بار فضایی، تعداد یون‌های به دام افتاده را تخمین زد [۱۱]. پژوهش در این زمینه هم‌چنان ادامه یافت به‌طوری‌که اویناش<sup>۷</sup> و همکارانش در سال ۱۹۹۵ به بررسی اثر بار فضایی بر پارامترهای تعادلی بارهای محصور شده پرداختند. آن‌ها دریافتند که بارفضایی منجر به ایجاد دو اثر متضاد در پتانسیل محصورسازی می‌شود، یکی اثر دافعه الکتروستاتیکی بین بارهای هم‌نام که عمق چاه پتانسیل را کاهش می‌دهد و دیگری پاسخ جمعی پلاسما که سبب عمیق‌تر شدن چاه پتانسیل می‌شود [۱۲]. گائو<sup>۸</sup> در سال ۲۰۱۰ در رساله دکتری خود اثر بارفضایی را بر دام یونی خطی مورد مطالعه قرار داد و با محاسبات عددی و نتایج تجربی نشان داد که این اثر منجر به جابه‌جایی جرم<sup>۹</sup>، جابه‌جایی فرکانس و غیره می‌شود [۱۳]. شونگ<sup>۱۰</sup> و همکارانش در سال ۲۰۱۲ با استفاده از روش GPU مسیر حرکت یون‌های شتاب‌دار در دام یونی خطی و سه بعدی را شبیه‌سازی کرده و اثر بار فضایی را بر شکل ابر یونی، جابه‌جایی فرکانس حرکت یون، طیف جرمی یون‌ها و گنجایش به دام اندازی، نشان دادند [۱۴]. گوا<sup>۱۱</sup> و همکارانش در سال ۲۰۱۴ با استفاده از یک روش نظری اثرات غیرخطی پتانسیل بار فضایی را در دام یونی چهار قطبی بررسی کردند و نشان دادند که میدان الکتریکی ایجاد شده توسط اثر بار فضایی می‌تواند به‌صورت مجموعی از میدان‌های مرتبه زوج نظیر میدان چهار قطبی، میدان هشت قطبی و غیره ظاهر شود [۱۵].

در این پژوهش برآنیم تا اثر پتانسیل بار فضایی را بر مسیر حرکت یون‌های UF<sub>6</sub> گازی محصور شده در دام یونی، جابه‌جایی مرزهای نمودار پایداری این یون‌ها و در نهایت تعیین

3. Bonn  
4. Fischer  
5. Dehmelt  
6. Schuessler  
7. Avinash  
8. Gao  
9. Mass Shift  
10. Xiong  
11. Guo

1. Wolfgang Paul  
2. Space Charge Effect



شکل ۱. تصویری الگووار از دام یون چهار قطبی هذلولوی.

یک یون در حالت تعادل پایدار در میدان دام یونی چهار قطبی تحت تأثیر نیروی بازگرداننده‌ای است که در صورت خارج شدن یون از حالت تعادل، سعی می‌کند آن را به مکان اولیه بازگرداند. اما یون‌ها به دلیل داشتن اینرسی در مکان‌های تعادلی باقی نمی‌مانند بلکه حول این مکان‌ها نوسان خواهند کرد. بنابراین حرکت یون‌ها در دام یونی یک حرکت نوسانی است. با توجه به جفت نبودن میدان در دستگاه‌های چهار قطبی، می‌توان نیروها را در سه جهت مختصات به طور مجزا تعیین کرد. با توجه به شکل پتانسیل نوسانی، پتانسیل الکتروستاتیک نوسانی در دستگاه چهار قطبی به صورت رابطه (۱) در نظر گرفته می‌شود [۶]:

$$\phi = A(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2) + C \quad (1)$$

این پتانسیل در فضای آزاد و خالی از بار شرط لاپلاس را ارضا می‌کند، بنابراین خواهیم داشت:

$$\alpha + \beta + \gamma = 0 \quad (2)$$

با توجه به قید بالا، دو حالت برای پتانسیل الکتروستاتیک نوسانی امکان‌پذیر است:

۱. پتانسیل چهار قطبی دو بعدی

$$\alpha = -\beta = 1, \gamma = 0 \rightarrow \phi = A(x^2 - y^2) + C$$

۲. پتانسیل چهار قطبی سه بعدی

$$\alpha = \beta = -1, \gamma = 2 \rightarrow \phi = A(-x^2 - y^2 + 2z^2) + C$$

بیشینه چگالی یون‌های محصور شده در دام را مورد مطالعه و بررسی قرار دهیم. بدین منظور ابتدا مباحث نظری و معادلات حرکت یون  $UF_6$  در دام پاول را در بخش دوم بیان می‌کنیم و نمودارهای پایداری آن را ترسیم می‌نماییم، در بخش سوم رفتار یون  $UF_6$  محصور شده را با اعمال اثر پتانسیل بار فضایی به صورت تحلیلی و عددی مورد بررسی قرار می‌دهیم و نتایج را با رسم نمودار ارایه می‌کنیم. در نهایت در بخش چهارم، بحث مختصری بر نتایج حاصل شده از این پژوهش را بیان می‌نماییم.

## ۲. اصول نظری

در دام یونی چهار قطبی، مسیرهای یون تحت تأثیر مجموعه‌ای از نیروهای وابسته به زمان یا نیروهای دینامیکی هستند که پیش‌بینی مسیر ذره را مشکل‌تر می‌کنند. حرکت یون‌ها در میدان‌های چهار قطبی به طور ریاضی با حل معادله دیفرانسیل خطی مرتبه دوم مشهور به معادله ماتیو<sup>۱</sup> [۱۶] شرح داده می‌شود. دام یونی چهار قطبی به طور اساسی شامل سه الکتروود با هندسه هذلولوی است که دو الکتروود آن مشابه و به شکل بشقاب‌های کوچک وارونه در بخش‌های بالایی و پایینی قرار گرفته و الکتروودهای کلاهک<sup>۲</sup> نامیده می‌شوند. الکتروود سوم به طور متقارن بین دو الکتروود کلاهک قرار دارد و الکتروود حلقه<sup>۳</sup> نامیده می‌شود. نحوه قرارگیری الکتروودها در این نوع دام منجر به شکل‌گیری پتانسیل چهارقطبی در دام می‌شود. پتانسیل الکتريکی اعمال شده به الکتروود حلقه یا یک پتانسیل رادیو فرکانسی ( $RF$ ) به صورت  $V \cos \Omega t$  و یا ترکیبی از پتانسیل مستقیم ( $DC$ ) به صورت  $U$  و پتانسیل  $RF$ ، به صورت  $\Phi_0 = U + V \cos \Omega t$  می‌باشد. که در آن،  $\Omega$  فرکانس زاویه‌ای ( $\text{rad.s}^{-1}$ ) میدان  $RF$  و برابر با  $2\pi \mathcal{Q}$  است ( $\mathcal{Q}$  فرکانس برحسب هرتز). میدان الکتريکی حاصل از این پتانسیل‌های اعمال شده منجر به محصورسازی یون در دام یونی می‌شود. در شکل ۱ تصویری الگووار از نحوه قرار گرفتن دو الکتروود کلاهک و یک الکتروود حلقه در دام یونی پاول نمایش داده شده است. در این شکل  $r_0$  شعاع الکتروود حلقه در صفحه مرکزی و  $z_0$  جدایی دو الکتروود کلاهک در امتداد محور دام یونی می‌باشد.

1. Mathieu
2. End Cap
3. Ring

قابل توجه است که در یک شرایط ایده‌آل میدان چهار قطبی،  $r_o^2 = 2z_o^2$  [۱۷].

معادله ماتیو به روش رونگ کوتا مرتبه ۴ حل [۱۸] و در نهایت پاسخ آن برحسب پارامترهای بی‌بعد  $a$  و  $q$  بیان می‌شود. در ادامه می‌توان مسیرهای پایداری و ناپایداری یون‌ها را برحسب پاسخ‌های این معادله به شرح ذیل توصیف کرد:

۱. حرکت پایدار: ذرات به دام افتاده با دامنه محدود نوسان می‌کنند، این ذرات از میدان چهارقطبی در راستای  $z$  بدون برخورد به الکترودها عبور می‌کنند. نواحی هم‌زمان پایدار در دو راستای  $r$  و  $z$  نواحی پایدار دستگاه معادلات دیفرانسیل دام یون چهار قطبی را نشان می‌دهند. وجود پایداری تنها به پارامترهای بی‌بعد  $a$  و  $q$  بستگی دارد و از پارامترهای اولیه حرکت نظیر سرعت یون مستقل است.
۲. حرکت ناپایدار: دامنه‌های نوسان ذرات در هر راستایی به‌صورت نمایی افزایش می‌یابد و ذرات به الکترودها برخورد کرده و از بین می‌روند.

نمودارهای پایداری یون‌های محصور شده در دام یونی در فضای  $(a, q)$ ، که شامل نواحی پایداری اول، دوم و سوم و نواحی بالاتر است، را می‌توان در پژوهش‌های منتشر شده مشاهده کرد [۱۹]. در این پژوهش با توجه به رابطه موجود بین  $a_u, q_u$  و پتانسیل‌های  $DC$  و  $RF$  اعمال شده به الکترودهای دام  $(U$  و  $V)$ ، نمودارهای پایداری یون‌های محصور شده در دام در فضای  $(U, V)$  رسم شده است. شکل ۲ اولین ناحیه پایداری را برای UF<sub>6</sub><sup>۲۳۸</sup> گازی و UF<sub>6</sub><sup>۲۳۸</sup> در فضای پتانسیل نشان می‌دهد. ناحیه پایداری اول نسبت به نواحی پایداری بالاتر مساحت بیشتری دارد و پهنای آن امکان اعمال ولتاژهای متنوعی را فراهم می‌کند و لذا با تغییر اندک ولتاژ، یون از ناحیه پایداری خارج نمی‌شود. نواحی پایداری بالاتر برای به دام‌اندازی آن دسته از یون‌هایی صورت می‌گیرد که دارای انرژی جنبشی بالاتری هستند و نیاز به ولتاژ بالاتر دارند [۲۰]. در ادامه، مسیر حرکت یون UF<sub>6</sub><sup>۲۳۸</sup> محصور شده در دام یونی پاول را به ازای  $q_z = 0.7$  نشان می‌دهیم (شکل ۳). همان‌طور که مشاهده می‌شود، به دلیل این‌که مرز پایداری به ازای پتانسیل  $DC$  صفر در مقادیر  $q_z = 0.908, q_z = 0$ ، شکل می‌گیرد، حرکت یون در  $q_z = 0.7$  یک حرکت پایدار است.

اکنون با به‌کارگیری مختصات استوانه‌ای و استفاده از تبدیل‌های استاندارد  $x = r \cos \theta, y = r \sin \theta, z = z$ ، پتانسیل چهار قطبی سه بعدی به صورت زیر حاصل می‌شود [۶]:

$$\phi_{r,z} = A(r^2 - 2z^2) + C \quad (3)$$

پتانسیل چهار قطبی  $\phi_o$  که بر یک یون درون دام اعمال می‌شود، از اختلاف پتانسیل اعمال شده به الکترودهای کلاهدک و حلقه به دست می‌آید. با اتصال الکترودها کلاهدک به زمین و پتانسیل  $RF$  و ولتاژ  $DC$  به الکترودها حلقه، در نهایت داریم [۶]:

$$\phi_{r,z} = \frac{\phi_o}{r_o^2 + 2z_o^2} [(r^2 - 2z^2) + 2z_o^2]$$

$$\phi_o = U + V \cos \Omega t \quad (4)$$

که در آن،  $V$  دامنه ولتاژ (برحسب ولت)،  $\Omega$  فرکانس زاویه‌ای میدان  $RF$  و  $t$  زمان محصورسازی یون است. بنابراین میدان الکتروستاتیک ناشی از پتانسیل چهار قطبی برابر است با:

$$E_{r,z} = -\nabla \phi_{r,z} \rightarrow \begin{cases} E_r = -2r \frac{\phi_o}{r_o^2 + 2z_o^2} \\ E_z = 2z \frac{\phi_o}{r_o^2 + 2z_o^2} \end{cases} \quad (5)$$

اکنون با در نظر گرفتن نیروی ناشی از پتانسیل الکتروستاتیک، معادله حرکت یک یون به جرم  $m$  و بار  $e$  در دام یونی با معادله دیفرانسیل خطی مرتبه دوم ماتیو توصیف می‌شود [۶]:

$$\frac{d^2 u}{d \xi^2} + (a_u - 2q_u \cos 2\xi) u = 0 \quad (6)$$

که در آن،  $u$  بیان‌گر مختصات  $r$  و  $z$  در مختصات استوانه‌ای است،  $\xi$  یک پارامتر بدون بعد و برابر است با  $\frac{\Omega t}{2}$  و  $a_u$  و  $q_u$  نیز پارامترهای بدون بعدی هستند که به‌عنوان پارامترهای محصورکنندگی شناخته می‌شوند و برابر هستند با [۶]:

$$a_z = \frac{-16eU}{m(r_o^2 + 2z_o^2)\Omega^2} = -2a_r$$

$$q_z = \frac{16eV}{m(r_o^2 + 2z_o^2)\Omega^2} = -2q_r \quad (7)$$

ناشی از یون‌ها در تعادل باشد. لذا به‌منظور تعیین بیشینه چگالی تعداد یون‌ها در دام و تعیین اثر بار فضایی، ابتدا میانگین نیروی ناشی از میدان  $RF$  اعمال شده در طول یک دوره زمانی را محاسبه می‌کنیم. معادله حرکت یک ذره به جرم  $m$  در یک میدان نوسانی به‌صورت رابطه (۸) نوشته می‌شود [۲۲]:

$$m \frac{d^2 \vec{u}}{dt^2} = ZeE_0(u) \cos \Omega t \quad (8)$$

که در آن،  $\Omega$  فرکانس میدان  $RF$  اعمال شده به الکترودهای دام است. با فرض این‌که فرکانس  $\Omega$  میدان از فرکانس نوسان ذره بزرگ‌تر باشد، این معادله می‌تواند به دو بخش شامل یک جمله کند تغییر  $\vec{u}_0(t)$  و یک جمله نوسان‌کننده  $\alpha$  با فرکانس میدان و دامنه کم، تقسیم شود [۲۳]. با بسط میدان حول مرکز نوسان در رابطه (۸)، داریم:

$$m \frac{d^2 \vec{u}_0(t)}{dt^2} + m \frac{d^2 \alpha}{dt^2} = Ze \left[ E_0(u_0) \cos \Omega t + \alpha \left( \frac{\partial E_0}{\partial u} \right)_{u_0} \cos \Omega t \right] \quad (9)$$

با متناظر قرار دادن جملات هم مرتبه، در نهایت رابطه (۱۰) حاصل می‌شود:

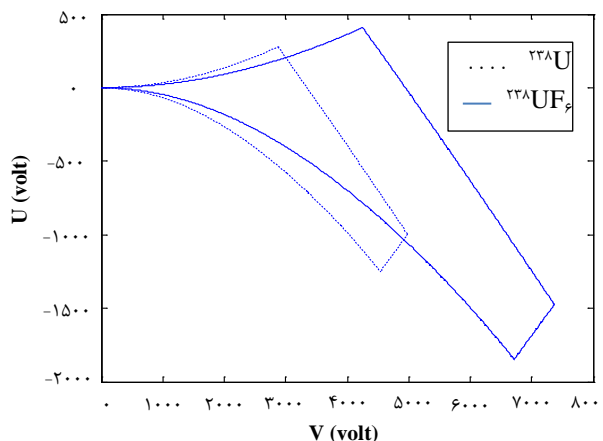
$$m \frac{d^2 \vec{u}_0(t)}{dt^2} = - \frac{(Ze)^2}{4m\Omega^2} \left( \frac{\partial E_0}{\partial u} \right)_{u_0} \cos^2 \Omega t \quad (10)$$

بنابراین متوسط نیروی ناشی از میدان  $RF$  برابر است با:

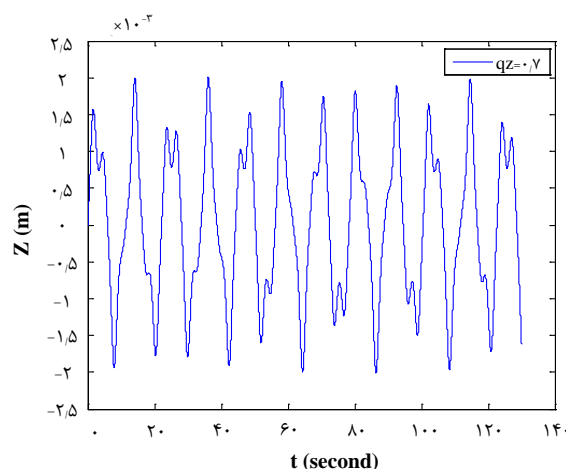
$$\overline{F(u_0)} = m \frac{d^2 \vec{u}_0(t)}{dt^2} = - \frac{(Ze)^2}{4m\Omega^2} \left( \frac{\partial E_0}{\partial u} \right)_{u_0} \quad (11)$$

همان‌طور که قبلاً بیان شد، به منظور محصور کردن بیشینه تعداد یون در دام یونی، متوسط نیروی میدان با نیروی ناشی از اثر بار فضایی در تعادل است:

$$F_{sc} = -\overline{F(u_0)} = - \frac{(Ze)^2}{4m\Omega^2} \left( \frac{\partial E_0}{\partial u} \right)_{u_0} \quad (12)$$



شکل ۲. اولین ناحیه پایداری  $^{238}UF_6$  و  $^{238}U$  در فضای  $(U, V)$ .



شکل ۳. مسیر حرکت یون محصور شده در آنالیزور پاول به ازای  $q_z = 0.7$  و با شرایط اولیه  $a_z = 0, z(0) = 0, \dot{z}(0) = 10^{-3} \text{ m/s}$ .

### ۳. اثر بار فضایی

در بررسی‌های فوق، استخراج معادلات حرکت یون در دام یونی چهار قطبی پاول، با فرض وجود تنها یک یون در دام انجام شده است. در حالی‌که در بسیاری از کاربردهای عملی تعداد یون‌های زیادی در دام وجود دارند و به دلیل برهم‌کنش‌های کولنی، هریک از یون‌ها بر رفتار دیگری تأثیر می‌گذارد. در این مطالعه با فرض این‌که بار فضایی به طور یکنواخت بر میدان کل دام اثر می‌گذارد [۲۱]، اثر بار فضایی را بر نمودار پایداری و رفتار یون‌های  $^{238}UF_6$  محصور شده در دام پاول مورد بررسی قرار می‌دهیم.

اثرات بار فضایی در نهایت تعیین‌کننده بیشینه تعداد یون‌های محصور شده در دام می‌باشد. بیشینه این تعداد زمانی حاصل می‌شود که میانگین نیروی اعمال شده توسط میدان  $RF$  با نیروی اعمال شده توسط پتانسیل الکتروستاتیک دافعه

بنابراین برای پارامترهای بی‌بعد معادله ماتریو خواهیم داشت:

$$a_r = a_{r_0} + a_{rsc} \quad (21)$$

$$a_{r_0} = \frac{4ZeU_0}{m\Omega^2 r_0^2} \quad \& \quad a_{rsc} = -\frac{2Ze\rho_i}{3m\epsilon_0\Omega^2}$$

$$a_z = a_{z_0} + a_{zsc} \quad (22)$$

$$a_{z_0} = -\frac{\lambda ZeU_0}{m\Omega^2 z_0^2} \quad \& \quad a_{zsc} = -\frac{\lambda Ze\rho_i}{3m\epsilon_0\Omega^2}$$

$$a_{rsc} = \frac{1}{4} a_{zsc}$$

قابل توجه است که پارامتر  $q_u$  معادله ماتریو بدون تغییر باقی مانده است. تغییر پارامتر  $a_u$  منجر به پدیده جابه‌جایی جرم  $(\Delta m)$  می‌شود که این امر دقت تفکیک‌پذیری جرم در طیف جرمی را کاهش می‌دهد. به طوری که برای تغییر جرم ناشی از  $a_{rs}$  داریم:

$$m = \frac{4ZeU_0}{a_{r_0} r_0^2 \Omega^2} \quad (23)$$

$$m + \Delta m = \frac{4ZeU_0}{(a_{r_0} + a_{rs}) r_0^2 \Omega^2}$$

برای نمونه مقدار  $\Delta m$  برای یونهای  $^{238}\text{UF}_6$  گازی در  $a_{r_0} = 0.788$  و به ازای مقادیر مشخصه  $z_0 = 0.707 \times 10^{-7} \text{ m}$ ،  $\Omega = 2\pi \times 10^6 \text{ rad.s}^{-1}$  برابر است با:

$$\Delta m = 248 \text{ Da} = 4.12 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

علاوه بر این، تغییر پارامترهای معادله حرکت یونها منجر به جابه‌جایی مرزهای پایداری خواهد شد. بنابراین یونی که قبلاً در غیاب اثر بار فضایی در ناحیه پایداری قرار داشت اکنون با در نظر گرفتن این اثر ممکن است از مرز پایداری عبور کرده و در نتیجه ناپایدار شود و یا به عکس.

با استفاده از نتایج این محاسبات، در شکل ۴ ناحیه پایداری اول را برای یونهای  $^{238}\text{UF}_6$  در غیاب و وجود اثر بار فضایی در فضای  $(a_z, q_z)$  نشان می‌دهیم. همان‌طور که مشاهده می‌شود مرزهای پایداری با اعمال اثر بار فضایی کاملاً جابه‌جا شده‌اند. شکل ۵ نیز نتایج حاصل از محاسبات فوق را در تعیین اثر بار فضایی بر مسیر حرکت یونها به ازای  $q_z = 0.7$  به نمایش می‌گذارد.

از طرفی  $F_{sc}$  ناشی از پتانسیل بار فضایی است و در رابطه (۱۳) صدق می‌کند:

$$F_{sc} = -Ze\nabla\phi_{sc} \quad (13)$$

بنابراین با ترکیب رابطه (۱۲) و (۱۳)، پتانسیل بار فضایی به دست می‌آید:

$$\phi_{sc} = -\frac{Ze}{4m\Omega^2} E_0^*(u_0) \quad (14)$$

با توجه به شکل میدان چهار قطبی و با فرض برقراری شرایط ایده‌آل  $r_0^* = 2z_0^*$ ، داریم:

$$\phi_{sc} = -\frac{Ze}{4m\Omega^2} \frac{V^*}{r_0^*} (r^{*2} + 4z^{*2}) \quad (15)$$

اکنون با استفاده از معادله پواسن، بیشینه چگالی بار محصور شده در دام یونی حاصل می‌شود:

$$\nabla^* \phi_{sc} = -\frac{\rho_{i-\max}}{\epsilon_0} \quad (16)$$

$$\rho_{i-\max} = \frac{3\epsilon_0 Ze V^*}{m\Omega^2 r_0^{*4}} \quad (17)$$

و به دنبال آن بیشینه تعداد یونهای محصور شده برابر است با:

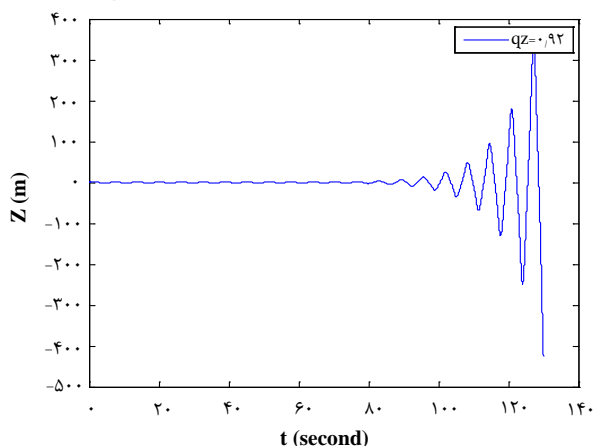
$$\rho_{i-\max} = ZeN_{i-\max} \quad (18)$$

$$N_{i-\max} = \frac{3\epsilon_0 V^*}{m\Omega^2 r_0^{*4}}$$

اکنون به منظور تعیین اثر پتانسیل بار فضایی در نمودارهای پایداری یونهای محصور شده، پتانسیل بار فضایی را در معادله حرکت یونها وارد می‌کنیم:

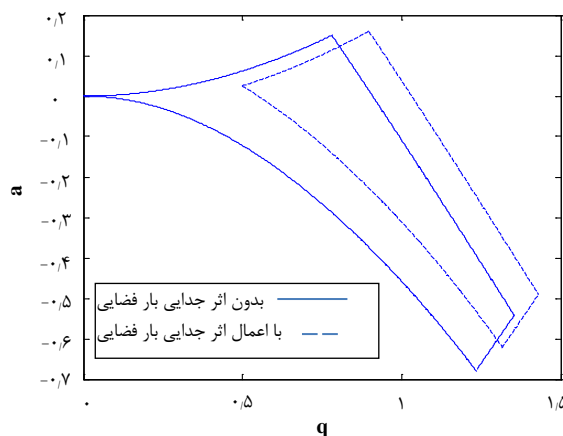
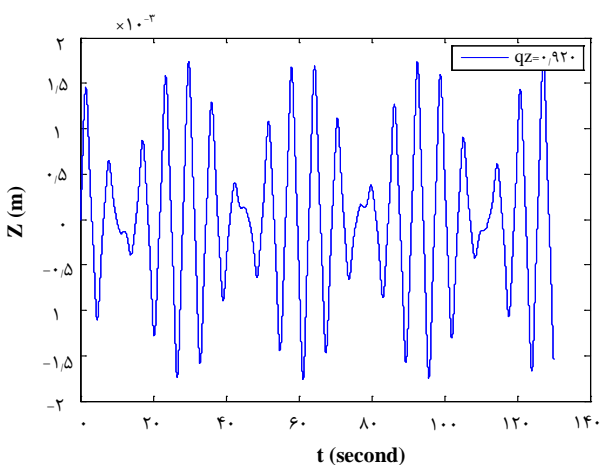
$$m \frac{d^* r}{dt^*} = Ze (E_{or} + E_{scr}) = Ze \left( -\frac{U_0 + V \cos \Omega t}{r_0^*} + \frac{\rho_{i-\max}}{6\epsilon_0} \right) r \quad (19)$$

$$m \frac{d^* z}{dt^*} = Ze (E_{oz} + E_{scz}) = Ze \left( -\frac{U_0 + V \cos \Omega t}{r_0^*} + \frac{2\rho_{i-\max}}{3\epsilon_0} \right) z \quad (20)$$



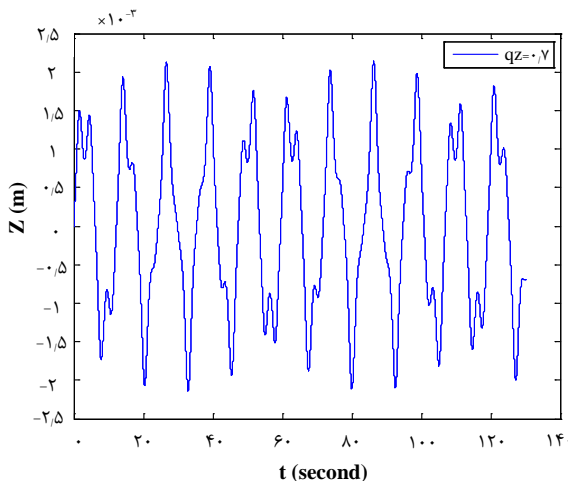
با مقایسه شکل ۳ و ۵ مشاهده می‌شود که مسیر حرکت یون به ازای  $q_z$  های یکسان، در غیاب و وجود اثر بار فضایی متفاوت است. اما این تفاوت خود را در  $q_z$  های نزدیک‌تر به مرز پایداری، بیش‌تر نشان می‌دهد (شکل‌های ۶ و ۷). همان‌طور که مشاهده می‌شود، یون محصور شده  $UF_6^{238}$  در غیاب اثر بار فضایی به ازای  $q_z = 0.920$  از نمودار پایداری خارج شده و ناپایدار می‌شود؛ در حالی‌که با اعمال اثر بار فضایی مرزهای پایداری جابه‌جا شده و به ازای همان مقدار  $q_z = 0.920$  هم‌چنان نوسانات پایدار دارد.

شکل ۶. مسیر حرکت یون  $UF_6^{238}$  محصور شده در آنالیزور پاول به ازای  $q_z = 0.920$ ، در غیاب اثر بار فضایی و با شرایط اولیه:  $a_z = 0, z(0) = 0$ .



شکل ۴. جابه‌جایی مرزهای پایداری ناحیه پایداری اول برای یون‌های  $UF_6^{238}$  محصور شده در دام یونی چهار قطبی، در شرایط اولیه:  $\theta = 10^\circ \text{Hz}, z_0 = 0.707 \text{ cm}, N_i = 10^{15} / \text{m}^3$ .

شکل ۷. مسیر حرکت یون  $UF_6^{238}$  محصور شده در آنالیزور پاول با اعمال اثر بار فضایی در شرایط اولیه:  $\theta = 10^\circ \text{Hz}, z_0 = 0.707 \text{ cm}, N_i = 10^{15} / \text{m}^3, z(0) = 0, \dot{z}(0) = 10^{-7} \text{ m/s}$ .



شکل ۵. مسیر حرکت یون  $UF_6^{238}$  محصور شده در آنالیزور پاول با اعمال اثر بار فضایی در شرایط اولیه:  $\theta = 10^\circ \text{Hz}, z_0 = 0.707 \text{ cm}, N_i = 10^{15} / \text{m}^3, z(0) = 0, \dot{z}(0) = 10^{-7} \text{ m/s}$ .

#### ۴. بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ابتدا رفتار یون گازی  $UF_6^{238}$  محصور شده در دام یونی چهار قطبی طیف‌سنج جرمی پاول تحت تأثیر میدان ناشی از پتانسیل‌های  $RF$  و  $DC$  به الکترودهای کلاهدک و حلقه دام، بدون در نظر گرفتن اثرات بار فضایی مورد بررسی و شبیه‌سازی قرار گرفت. معادله حاکم بر حرکت این یون‌ها معادله ماتیو می‌باشد که از حل آن نمودارهای پایداری در فضای  $(q_z, a_z)$  و  $(U, V)$  حاصل شد. در ادامه با در نظر گرفتن شرایط واقعی‌تر مسأله، یعنی اعمال اثر بار فضایی، رفتار یون‌های  $UF_6^{238}$  محصور شده مورد مطالعه قرار گرفت. اثر بار فضایی یون‌ها منجر به تغییر پارامترهای معادله ماتیو حاکم بر حرکت یون‌ها و بنابراین جابه‌جایی مرزها و نمودار پایداری شد. پتانسیل ناشی از بار فضایی در نهایت تعیین‌کننده بیشینه



11. H.A. Schuessler, *Physics of atoms and molecules*, in W. Hanle and H. Kleinpoppen (Eds.), **Progress in Atomic Spectroscopy, Part B**, Plenum, New York, 999 (1979).
12. K. Avinash, et al, *Space charge effects in the Paul trap*, **Physics of Plasmas**, **4**, 1238 (1998).
13. C. Gao, *Space Charge Effects in Linear Quadrupole Ion Traps*, **Peking University, Columbia**, Ph.D Thesis (2010).
14. X. Xiong, et al, *Accelerated Simulation Study of Space Charge Effects in Quadrupole Ion Traps Using GPU Techniques*, **J. Am. Soc. Mass Spectrom.** **23**, 1799 (2012).
15. D. Guo, et al, *Space Charge Induced Nonlinear Effects in Quadrupole Ion Traps*, **J. Am. Soc. Mass Spectrom.** **25**, 498 (2014).
16. J.A. Richards, *The Mathieu Equation. In: Analysis of Periodically Time-Varying Systems. Communications and Control Engineering Series.* **Springer, Berlin, Heidelberg** (1983).
17. R.E. March, *An Introduction to Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry*, **Journal Of Mass Spectrometry**, **32**, 351 (1997).
18. N.W. McLachlan, *Theory and application of Mathieu functions.* **Clarendon. Oxford U.P.** (1947). **Reprinted by Dover**, New York (1964).
19. F.G. Major, V.N. Gheorghe, G. Werth, *Charged Particle Traps Physics and Techniques of Charged Particle Field Confinement*, **Springer Berlin Heidelberg New York** (2005).
20. Wei Chen, B.A. Collings, D.J. Douglas, *High-Resolution Mass Spectrometry with a Quadrupole Operated in the Fourth Stability Region.* **Anal. Chem.**, **72**, 540 (2000).
21. M.F. Finlan, R.F. Sunderland, J.F.J. Todd, *The Quadrupole Mass Filter as a Commercial Isotope Separator*, **Nucl. Instrum. Methods**, **195**, 447 (1982).
22. C. Schwebel, P.A. Möller Et Pham Tu Manh, *Formation And Confinement of Multicharged Ions In A High-Frequency Quadrupolar Field*, **Journal of Applied Physics**, **10**, 227 (1975) (In French).
23. A.V. Gaponov, M.A. Miller, *Use of Moving High-Frequency Potential Wells for the Acceleration of Charged Particles*, **JETP**, **7**, 515 (1958).

چگالی یونهای محصور شده در دام یونی است. از آنجا که جداسازی ایزوتوپی در طیفسنج جرمی بر اساس قله طیف جرمهای یون گازی  $^{238}\text{UF}_6$  صورت میگیرد، لذا پتانسیل بار فضایی باعث جابهجایی این قله طیف شده و در عمل منجر به کاهش دقت جداسازی می شود. علاوه بر این، پتانسیل بار فضایی منجر به کاهش تعداد یونهای محصور شده می شود و حتی در آشکارسازی یونهای گازی  $^{238}\text{UF}_6$  پرتاب شده به بیرون از دام، مشکلاتی هم چون ایجاد ابر یونی را پدید می آورد. تعداد یونهای گازی  $^{238}\text{UF}_6$  محصور شده در دام مستقیماً به فشار گاز  $^{238}\text{UF}_6$  بستگی دارد، لذا با کمینه کردن فاصله بین نمودار پایداری در حضور و غیاب اثر بار فضایی، می توان بهترین فشار عملیاتی گاز را به دست آورد و این امر منجر به افزایش دقت جداسازی ایزوتوپی می شود.

با توجه به تأثیرات مخرب و اجتنابناپذیر پتانسیل بار فضایی در به دام اندازی یون و جداسازی ایزوتوپی، به منظور خنثی سازی این اثر و کاهش اثرات مخرب آن، شناخت و بررسی این پدیده بسیار مهم است و محاسبات تحلیلی و عددی فوق گامی مؤثر در این راستا می باشد.

#### مراجع

1. G.C. Zhang, et al, *Cooling charged particles in a Paul trap by feedback control*, **Phys. Rev. A** **60**, 704 (1999).
2. R.E. March, R.J. Hughes, J.F.J. Todd, *Quadrupole Storage Mass Spectrometry*, **Wiley-Interscience, New York** (1989).
3. J.F.J. Todd, *Ion trap mass spectrometer-past, present, and future (?)*. **Mass Spectrom, Rev.** **10**, 3 (1991).
4. P.H. Dawson, *Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications*, **Elsevier, Amsterdam** (1976).
5. R.E. March, J.F.J. Todd (Eds), *Practical Aspects of Ion Trap Mass Spectrometry*, **CRC Press, Boca Raton, FL**, Vols **1**, **2** and **3**. (1995).
6. R.E. March, J.F.J. Todd, *Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometer*, **J. Wiley**, Vol. **165**, (2005).
7. H. Okamoto, et al, *A New Experimental Approach to Space Charge Effects*, **Proceeding of EPAC 2002**, 1386-1388, Paris- France (2002).
8. S.M. Sadat Kiai, *Basics of Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometer*, **Institute for Nuclear Science and Technology**, (2011) (In Persian).
9. E. Fischer, *Die dreidimensionale Stabilisierung von Ladungsträgern in einem Vierpolfeld*, **Z. Phys.** **156**, 1 (1959).
10. H.G. Dehmelt, *Radiofrequency spectroscopy of stored ions I: Storage*, in D. R. Bates (Ed.), **Advances in Atomic and Molecular Physics**, Academic, New York, **3**, 53 (1967).