

РАБОТЫ ШКОЛЫ ПРОФ. Ю.К. ГОЛИКОВА:  
РАБОТЫ С НЕПОСРЕДСТВЕННЫМ УЧАСТИЕМ Ю.К. ГОЛИКОВА

УДК 537.534.3:621.384.8 (075.8)

© Ю. К. Голиков, К. В. Соловьев

## ОСЕСИММЕТРИЧНАЯ ИОННАЯ ЛОВУШКА

В статье изложены элементы теории осесимметричной ионной ловушки с квадратичной зависимостью потенциала от одной из координат. Изучена и классифицирована динамика ионов в осесимметричной ловушке в различных режимах.

*Кл. сл.:* электростатическая ионная ловушка, масс-спектрометрия

### ОСЕСИММЕТРИЧНЫЕ ПОЛЕВЫЕ СТРУКТУРЫ ДЛЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ИДЕАЛЬНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ ФОКУСИРОВКОЙ

Несмотря на почти тридцатилетнюю историю открытия систем с идеальной пространственно-временной фокусировкой (ИПВФ) [1] и интенсивную работу по их реализации в течение всех последующих лет [2–4], теория идеально фокусирующих ловушек, в том числе и с осевой симметрией, по-прежнему предоставляет простор для исследования. В частности, данная работа посвящена изучению и классификации динамики ионов в осесимметричной ловушке в различных режимах, в том числе далеких от типичных для использования в ловушке Орбитреп [2].

Среди гармонических (лапласовых) потенциалов, допускающих полное разделение переменных в методе Гамильтона—Якоби в различных системах координат и обладающих квадратичной зависимостью от одной из координат, присутствует осесимметричное семейство вида

$$\varphi = a \ln r + b \left( -\frac{r^2}{2} + z^2 \right), \quad (1)$$

интегрируемое в цилиндрических координатах  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $\gamma = \arctg \frac{y}{x}$ ,  $z$ . При  $a \neq 0$ ,  $b \neq 0$  это семейство можно привести к двум каноническим (простейшим) формам

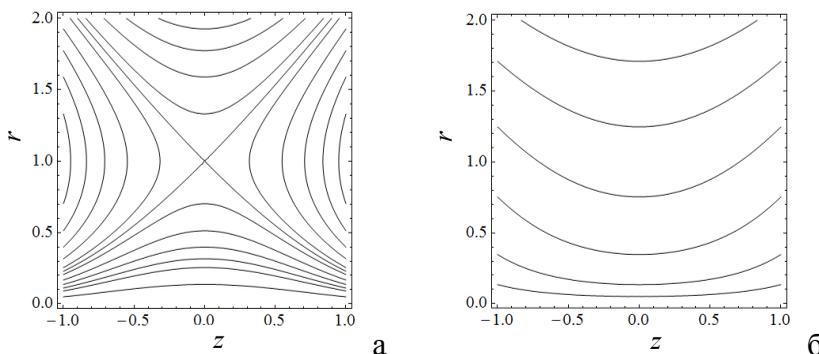
$$\varphi = \ln r - \frac{r^2}{2} + z^2, \quad (2)$$

и

$$\varphi = -\ln r - \frac{r^2}{2} + z^2. \quad (3)$$

Весь класс (1) строится из (2), (3) преобразованием подобия, за исключением вырожденных случаев  $a = 0$ ,  $b \neq 0$  и  $a \neq 0$ ,  $b = 0$ .

Меридиональные сечения эквипотенциальных портретов для (2) и (3) приведены на рис. 1, а и б соответственно. Обе структуры можно использовать для построения эффективных осесимметричных энергоанализаторов большой светосилы и разрешения, и в то же время они принципиально пригодны для реализации масс-анализаторов различного типа.



**Рис. 1.** Эквипотенциальные портреты полей.  
а — по ф-ле (2), б — по (3)

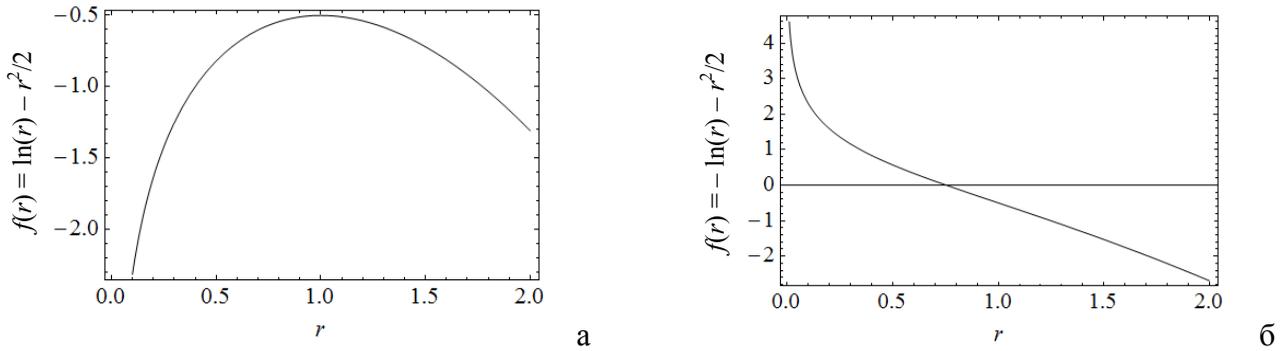


Рис. 2. Зависимость потенциала от радиуса в плоскости  $z = 0$ .  
а — по ф-ле (2), б — по (3)

В обеих системах в равной мере существует идеальная пространственно-временная фокусировка по направлению  $z$ , однако свойства удерживать ионы по радиальному направлению (по  $r$ ) у этих систем диаметрально противоположны. В системе (3) движение по  $r$  инфинитно, ионы уходят от оси симметрии. В системе же (2), напротив, имеется множество динамических ситуаций, когда ионы "крепко" удерживаются по  $r$  в некоей эффективной потенциальной яме. Механизм этого удержания имеет физические черты сходства с удержанием электронов в атоме и планет вблизи звезды. Он основан на комбинировании центростремительных и центробежных сил. На рис. 2, а и б, приведен радиальный ход потенциалов (2) и (3) в плоскости симметрии  $z = 0$ . Легко видеть, что окружность  $r=1$  в плоскости  $z=0$  состоит из седловых точек поля, где его величина равна нулю. В области  $r < 1$  на ион действует центростремительная сила, тянущая его к оси симметрии  $r = 0$ , а за его пределами, при  $r > 1$ , сила, наоборот, отталкивает ионы. Таким образом, в области  $r < 1$  поля (2) и (3) радикально отличаются друг от друга. Для нас наиболее интересны режимы движения в области  $r < 1$ , где происходит конкуренция центробежных и центростремительных сил.

### ПРИНЦИП ЦЕНТРОБЕЖНОЙ ФОКУСИРОВКИ

Запишем функцию Лагранжа для иона в поле

$$\varphi = \ln r - \frac{r^2}{2} + z^2 \quad (4)$$

в цилиндрических координатах:

$$L = \frac{\dot{r}^2 + r^2\dot{\gamma}^2 + \dot{z}^2}{2} - \ln r + \frac{r^2}{2} - z^2. \quad (5)$$

Соответствующие уравнения движения имеют вид:

$$\ddot{r} = r\dot{\gamma}^2 - \frac{1}{r} + r, \quad (6)$$

$$\frac{d}{d\tau} r^2\dot{\gamma} = 0, \quad (7)$$

$$\ddot{z} = -2z. \quad (8)$$

Интегрируя (7), получим

$$r^2\dot{\gamma} = M = r_0^2\dot{\gamma}_0 \quad (9)$$

закон сохранения момента количества движения, с помощью которого из (6) можно исключить азимутальную скорость  $\dot{\gamma}$ . Тогда радиальное движение будет описываться уравнением

$$\ddot{r} = \frac{M^2}{r^3} - \frac{1}{r} + r = -\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{M^2}{2r^2} + \ln r - \frac{r^2}{2} \right). \quad (10)$$

Тем самым описание радиального движения во вращающейся (неравномерно) азимутальной плоскости приводится к некому одномерному варианту движения, которое происходит под действием суммарной силы с эффективным потенциалом

$$f^* = \frac{M^2}{2r^2} + \ln r - \frac{r^2}{2}. \quad (11)$$

Характерная особенность этой физической ситуации состоит в том, что при каждом фиксированном значении момента импульса движение происходит в своем эффективном поле центростремительных и центробежных сил. Так что мы имеем дело не с одним потенциалом  $f^*$ , а с целым семейством, определяемым значением параметра  $M$ .

На рис. 3 показаны профили для  $f^*$ , и они имеют вид потенциальных ям различной глубины,

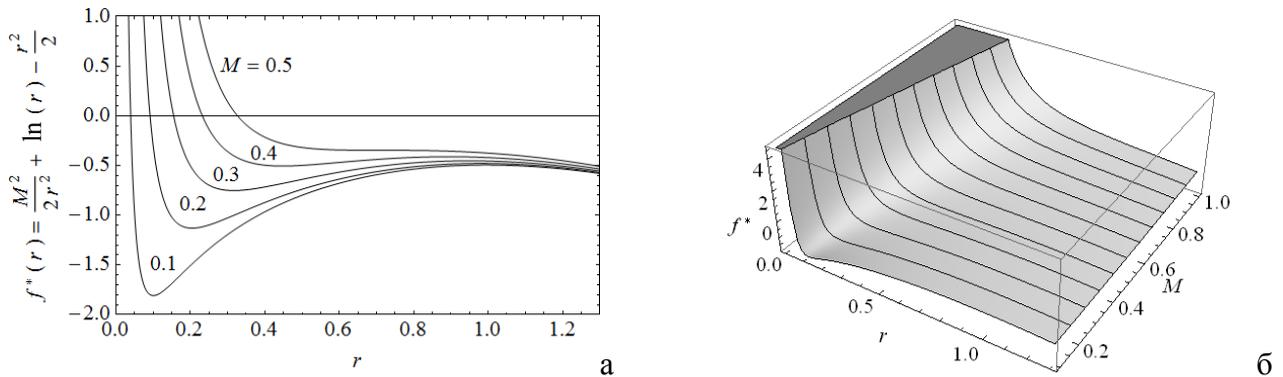


Рис. 3. Профили потенциальной ямы для различных значений  $M$

если  $M$  лежит в диапазоне

$$0 < M < \frac{1}{2}. \quad (12)$$

При  $M = 1/2$  яма исчезает, центробежная сила начинает доминировать над центростремительной, ничто уже не удерживает ионы в радиальном направлении, ионы с течением времени уходят по радиусу  $r$  сколь угодно далеко. Таким образом, неравенство (12) задает интересные для создания ионных ловушек многообразия динамических режимов удержания ионов в финитной области. Уравнению (10) отвечает интеграл энергии

$$\frac{\dot{r}^2}{2} + \frac{M^2}{2r^2} + \ln r - \frac{r^2}{2} = E = \frac{\dot{r}_0^2}{2} + \frac{M^2}{2r_0^2} + \ln r_0 - \frac{r_0^2}{2}, \quad (13)$$

из которого мы находим связь времени  $\tau$  и радиуса  $r$  в виде интеграла

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{r_0}^r \frac{dr}{\pm \sqrt{E - \left( \frac{M^2}{2r^2} + \ln r - \frac{r^2}{2} \right)}}. \quad (14)$$

Знак радикала должен совпадать со знаком  $\dot{r}_0$ . Досадным и, к сожалению, существенным затруднением является тот факт, что данный интеграл в принципе не выражается в элементарных функциях. Если бы из (14) удалось выразить явно зависимость  $r(\tau)$ , то азимутальное движение нашлось бы из (9) по очевидной формуле

$$\gamma(\tau) = \gamma_0 + \int_0^\tau \frac{M}{r^2(\tau)} d\tau. \quad (15)$$

Движение по  $z$  определяется одинаковой для всех систем с идеальной пространственно-вре-

менной энергетической фокусировкой (ИПВФ) формулой

$$z = z_0 \cos \sqrt{2}\tau + \frac{\dot{z}_0}{\sqrt{2}} \sin \sqrt{2}\tau, \quad (16)$$

которая и определяет свойство ИПВФ.

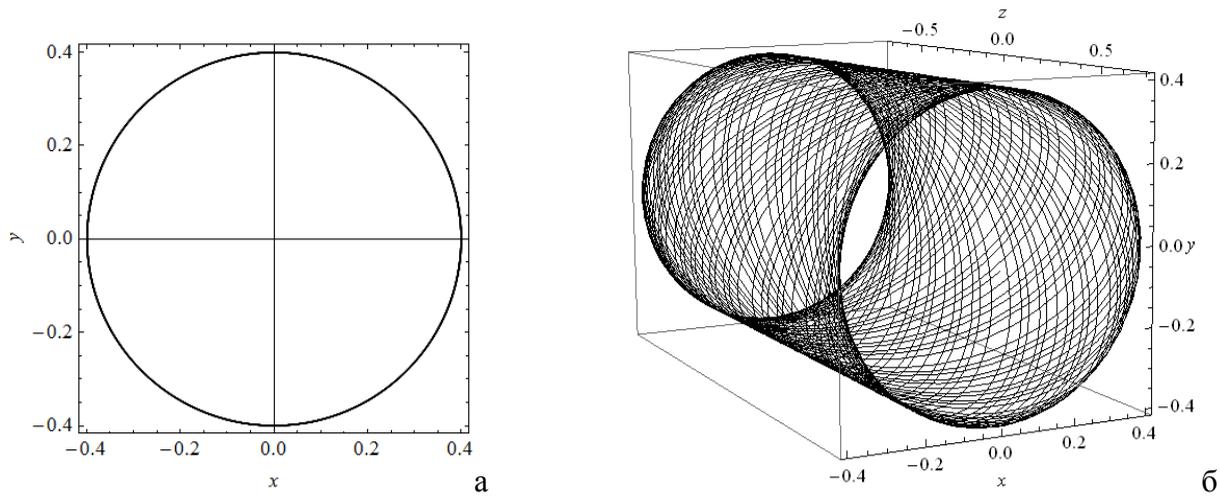
Таким образом, соблюдая условие (12), есть возможность сформировать ионный пакет с фазовым объемом неограниченно большой ширины по направлению  $\dot{z}_0$  и с большим размахом по радиально-азимутальному направлению  $\dot{r}_0, \dot{\gamma}_0$ . Такой пакет будет удерживаться бесконечно долго в финитной области пространства, заключенной между двумя цилиндрами  $r_1, r_2$  и торцами  $-z_k, z_k$ . Само движение ионов пакета в азимутальной плоскости  $r\gamma$  в общих чертах напоминает розетку Зоммерфельда. По направлению  $z$  ионный пакет периодически распухает с периодом  $\tau^* = \sqrt{2}\pi$  и возвращается в исходное состояние. Однако в плоскости  $r\gamma$  происходит сильная и трудно прогнозируемая трансформация пакета, приводящая при определенных условиях к его расплыванию.

#### АНАЛИЗ АЗИМУТАЛЬНО-РАДИАЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ

Для любой осесимметричной электростатической системы всегда интересен самый простой и очевидный вариант движения ионов вокруг оси  $z$  по окружности с равномерными угловой и линейной скоростями. В нашем случае этот круговой режим легко находится из (10). Поскольку уравнение круговой траектории в этом случае имеет вид

$$r = r_0 = \text{const}, \quad (17)$$

получим, подставив (17) в (10), следующее уравнение:



**Рис. 4.** Круговое движение (начальные данные:  $r_0 = 4/10$ ,  $z_0 = 0$ ,  $\dot{r}_0 = \sqrt{21}/5$ ,  $\dot{z}_0 = 1$ ).  
 а — проекция траектории на плоскость  $xу$ , б — траектория в трехмерном пространстве

$$\frac{M^2}{r_0^3} - \frac{1}{r_0} + r_0 = 0. \quad (18)$$

Для момента  $M$  имеем необходимую связь

$$M = r_0 \sqrt{1 - r_0^2}. \quad (19)$$

Далее, с помощью (9) находим линейную скорость  $v_0$  на окружности:

$$v_0 = \sqrt{1 - r_0^2}. \quad (20)$$

Предельная скорость, при которой достигается равновесие центробежных и центростремительных сил —  $v_0 = 0$  (при  $r_0 = 1$ ), т. е. траектория в этом случае проходит по седловым точкам поля. Покажем теперь, что равновесные окружности  $r_0$  отвечают дну ямы эффективного потенциала. Условие  $\frac{df^*}{dr} = 0$  для (11) дает равенство

$$-\frac{M^2}{r^3} + \frac{1}{r} - r = 0. \quad (21)$$

Следовательно, дну ямы отвечает точно то же условие на  $M$ , что и условие (18) для окружности. Однако, из неравенства (12) следует, что яма существует не при всех значениях момента  $M$ . С помощью (21) мы устанавливаем, что устойчивые круговые траектории, соответствующие дну ямы, могут лежать только в интервале

$$0 < r_0 < \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (22)$$

Азимутальное движение при этих круговых траекториях имеет постоянную угловую скорость  $\dot{\gamma}_0$ .

### ЛОВУШКА С КРУГОВОЙ ОСЕВОЙ ТРАЕКТОРИЕЙ

В осесимметричном поле с потенциалом (2) можно организовать вариант идеального масс-рефлектрона со временем пролета вдоль  $z$ , равном половине периода  $z$ -колебаний

$$\tau^* = \pi / \sqrt{2}. \quad (23)$$

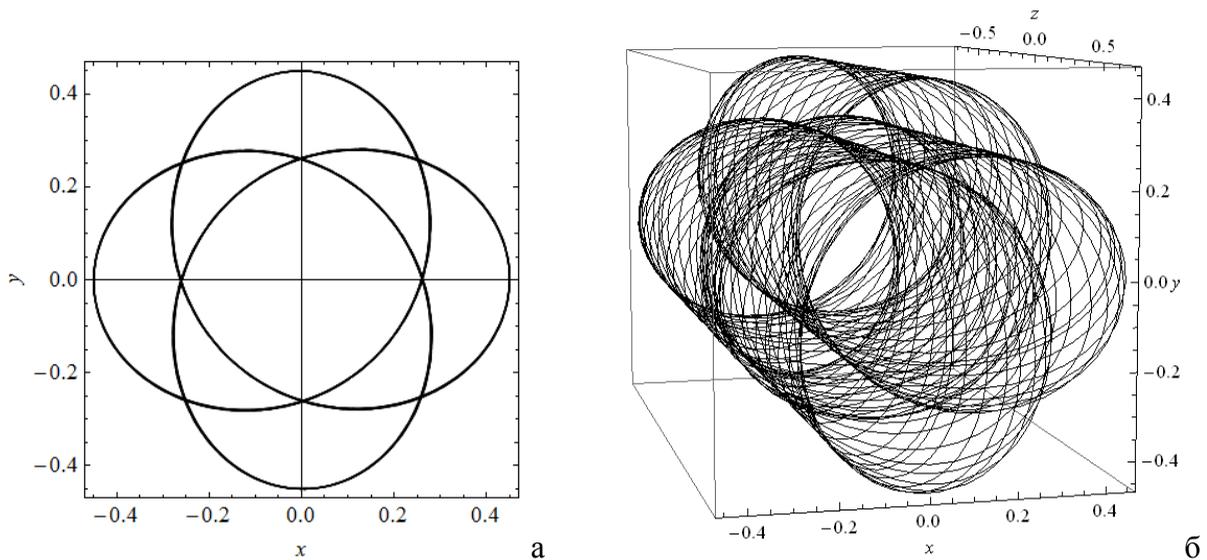
Однако возможности у этого поля гораздо шире. Если использовать центробежную фокусировку (удержание пакета в радиальном направлении в малых пределах), то можно организовать многоциклический режим колебаний вдоль  $z$  с любым числом полупериодов

$$\tau^* = n \frac{\pi}{\sqrt{2}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (24)$$

В целом пакет будет описывать некую спираль вокруг оси — нечто вроде намотки (с переменным шагом) провода на катушку (рис. 4, б). Эта спираль в проекции на плоскость  $xу$  в простейшем случае будет иметь вид окружности (рис. 4, а). В более общем случае, когда условие существова-

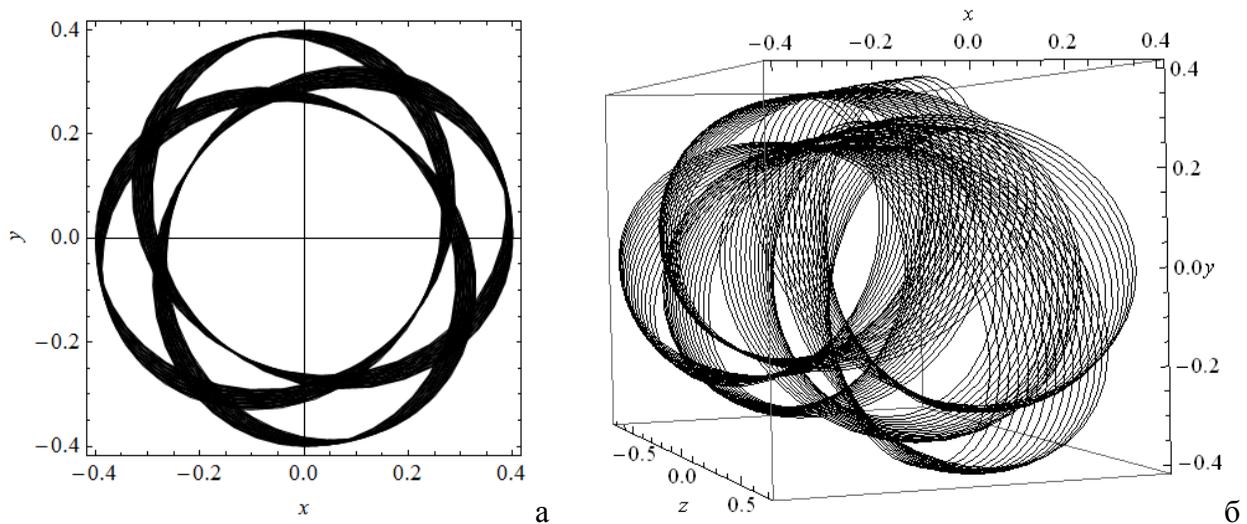
ния окружности не выполняется, форма проекции траектории на плоскость  $xу$  значительно усложняется. Это может быть некая неподвижная розетка, причем число лепестков может быть самым разным. Либо, напротив, образуется розетка медленно вращающаяся. В релятивистской физике мы

встречаем похожий тип движения под названием "розетка Зоммерфельда", однако в нашем случае геометрия этих движений неизмеримо сложнее и разнообразнее. На рис. 5 и 6 приведены примеры характерных розеток в проекции на плоскость  $xу$ , а также даны пространственные траектории.



**Рис. 5.** Неподвижная четырехлепестковая розетка (начальные данные:  $r_0 = 0.4$ ,  $z_0 = 0$ ,  $\dot{r}_0 = 0.7465$ ,  $\dot{z}_0 = 1$ ).

а — проекция траектории на плоскость  $xу$ , б — траектория в трехмерном пространстве



**Рис. 6.** Вращающаяся розетка (начальные данные:  $r_0 = 0.4$ ,  $z_0 = 0$ ,  $\dot{r}_0 = 0.7065$ ,  $\dot{z}_0 = 1$ ).

а — проекция траектории на плоскость  $xу$ , б — траектория в трехмерном пространстве

Вычислим линейную скорость на равновесной окружности, исходя из равенства центробежной и центростремительной сил:

$$\frac{v_0^2}{r_0} = \frac{1}{r_0} - r_0, \quad (25)$$

$$v_0 = \sqrt{1 - r_0^2}. \quad (26)$$

Время одного оборота выразится величиной

$$\tau_r = \frac{2\pi r_0}{\sqrt{1 - r_0^2}}. \quad (27)$$

Пространственный характер движения одного "равновесного" иона, находящегося на цилиндре  $r = r_0$ , вытянутом вдоль оси  $z$ , определяется соотношением периодов вращения и  $z$ -колебаний:

$$\lambda = \frac{\tau_r}{2\tau^*} = \frac{\sqrt{2}r_0}{\sqrt{1 - r_0^2}}. \quad (28)$$

При этом

$$r_0 = \frac{\lambda}{\sqrt{2 + \lambda^2}}. \quad (29)$$

Если  $\lambda$  точно равно отношению двух целых чисел, то траектория замкнута и ее можно рассматривать как своеобразную пространственную фигуру Лиссажу (рис. 7, а-д).

Если отношение (28) иррационально, то траектория постепенно зарисовывает всю поверхность цилиндра (рис. 7, е). Как известно, при отклонении отношения частоты развертки к частоте сигнала от рационального числа фигура Лиссажу на осциллографе медленно перемещается (диффундирует), то же будет происходить и в нашем случае движения иона по поверхности цилиндра. Если условие баланса сил (25) не выполняется, то проекция движения иона на плоскость  $xy$  напоминает прецессирующий эллипс, и здесь уже нельзя ввести строгую частоту вращения. Тем не менее, сочетание прецессии и вращения вокруг оси  $z$  приводит к тому, что появляется вариант замкнутой фигуры с одним, двумя, тремя и т. д. лепестками. Такие фигуры (см., например, рис. 5) характеризуются своим периодом репродуцирования (аналог периоду вращения).

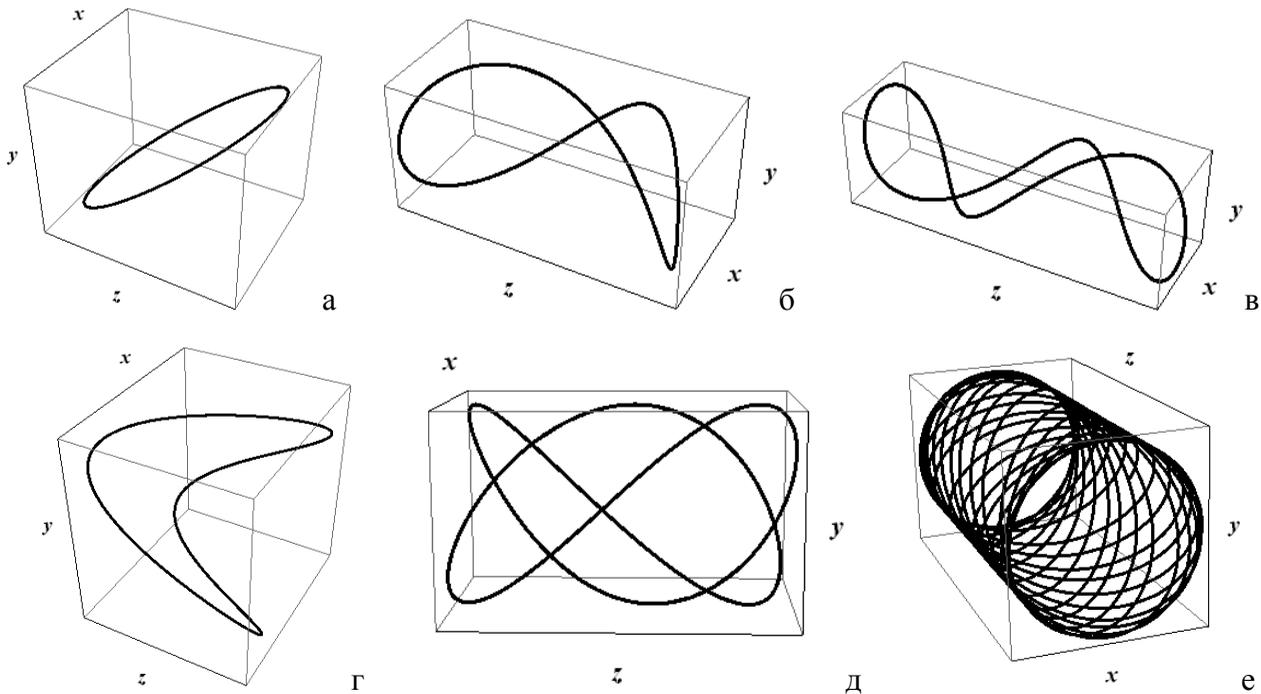


Рис. 7. Замкнутые траектории (а-д), незамкнутая — (е).

а — при параметрах  $(\lambda = 1, r_0 = \frac{1}{\sqrt{3}})$ ; б —  $(\lambda = \frac{1}{2}, r_0 = \frac{1}{3})$ ; в —  $(\lambda = \frac{1}{3}, r_0 = \frac{1}{\sqrt{19}})$ ; г —  $(\lambda = 2, r_0 = \frac{\sqrt{2}}{3})$ ; д —  $(\lambda = \frac{2}{3}, r_0 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{11}})$ ; е —  $(\lambda = \frac{1}{\sqrt{3}}, r_0 = \frac{1}{\sqrt{7}})$

В случае, когда этот период обобщенного вращения находится в кратных отношениях с периодом колебаний по  $z$ , возникает новый обобщенный тип пространственных фигур Лиссажу, которые уже никак не привязаны к какому-либо цилиндру  $r = r_0$ .

Таким образом, многообразие финитных траекторий в поле осесимметричной системы имеет свою и весьма непростую иерархию, в которой обобщенные пространственные фигуры Лиссажу играют роль своеобразного каркаса, на который нанизано движение реального ионного пакета. Если взять какую-нибудь из таких фигур Лиссажу в качестве некоей криволинейной оптической оси, то реальный пакет с произвольным разбросом по скорости  $\dot{z}_0$  и малой вариацией поперечных скоростей  $\dot{x}_0, \dot{y}_0$  вблизи условия равновесия будет периодически возвращаться в исходное состояние. Сам пакет в плоскости  $xu$  будет уширяться по азимутальному направлению, ибо движение по окружности либо розетке в любом случае носит монотонный характер с накоплением aberrаций.

Как видно из формулы (28) для чисто вращательного движения, точка старта пакета  $r_0$  должна иметь вполне определенные дискретные значения, если мы хотим получить замкнутую фигуру Лиссажу на поверхности цилиндра. Однако реальный пакет имеет разброс  $\pm \delta r_0$ , потому линейные скорости на концах сегмента  $[r_0 - \delta r_0, r_0 + \delta r_0]$ , обеспечивающие равновесие сил на окружности, будут разными. Соответственно будут разными и частоты вращений, и в конце концов этот разброс приводит к значительному распуханию азимутального размера пакета  $\Delta \gamma$  по мере увеличения числа наблюдаемых оборотов. Для розеточного движения наблюдаются похожие эффекты, но благодаря неравномерности вращения вдоль розетки появляется возможность снизить темп вредного азимутального распухания.

### ОБ АППРОКСИМАЦИИ ОДНОМЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Для построения приближенной аналитической теории ловушек с некруговыми  $xu$ -траекториями следует еще раз вернуться к вопросам аппроксимации потенциала. Рассмотрим выражение для периода колебаний в одномерной потенциальной яме

$$T = \sqrt{2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{E - f(x)}}. \quad (30)$$

Данный интеграл при произвольной функции  $f(x)$  не берется. Вычисление также осложняется тем, что в точках поворота  $x_1, x_2$  радикал, выражающий скорость  $\dot{x}$ , обращается в нуль, и интеграл становится несобственным. Поэтому замена данного выражения потенциала  $f(x)$  более подходящим и удобным для вычисления выражением  $\tilde{f}(x)$  есть дело весьма тонкое. В одних случаях ошибка может быть приемлемо малой, а в некоторых случаях катастрофически большой несмотря на то, что точность аппроксимации кажется вполне удовлетворительной. Число профилей  $f(x)$ , для которых можно вычислить интеграл (30) в известных функциях, достаточно мало, что не позволяет строить аппроксимирующие алгоритмы произвольной точности.

Обозначим  $\tau^*$  время подъема иона в поле ловушки по радиусу  $r$  от  $r_{\min}$  до  $r_{\max}$

$$\tau^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{dr}{\sqrt{E - \left[ \ln r - \frac{r^2}{2} + \frac{M^2}{2r^2} \right]}}, \quad (31)$$

$$E = \frac{\dot{r}_0^2}{2} + \ln r_0 - \frac{r_0^2}{2} + \frac{M^2}{2r_0^2}.$$

Численное моделирование позволяет выделить интервал значений величины  $r$ , в котором необходима аппроксимация. Будем приближать логарифм линейной комбинацией квадратичной и обратноквадратичной функций. Для экономии символов запишем

$$2 \ln r = Ar^2 + \frac{B}{r^2} + C. \quad (32)$$

Положим

$$r^2 = \xi, \quad (33)$$

тогда наша задача — построить аппроксимацию

$$\ln \xi \approx A\xi + \frac{B}{\xi} + C, \quad (34)$$

на интервале

$$\xi_{\min} < \xi < \xi_{\max}. \quad (35)$$

Выбор коэффициентов  $A, B, C$  можно подчинить различным условиям. Наиболее естественно задать три значения  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  и потребовать точного равенства (34) в этих точках. Получим линейную систему

$$\begin{aligned} A \xi_1 + \frac{B}{\xi_1} + C &= \ln \xi_1, \\ A \xi_2 + \frac{B}{\xi_2} + C &= \ln \xi_2, \\ A \xi_3 + \frac{B}{\xi_3} + C &= \ln \xi_3. \end{aligned} \quad (36)$$

Вычитая второе уравнение из первого и третье из второго, исключаем  $C$ :

$$\begin{aligned} A(\xi_1 - \xi_2) + B\left(\frac{1}{\xi_1} - \frac{1}{\xi_2}\right) &= \ln \frac{\xi_1}{\xi_2}, \\ A(\xi_2 - \xi_3) + B\left(\frac{1}{\xi_2} - \frac{1}{\xi_3}\right) &= \ln \frac{\xi_2}{\xi_3}, \end{aligned} \quad (37)$$

или

$$\begin{aligned} A - \frac{B}{\xi_1 \xi_2} &= \frac{1}{\xi_1 - \xi_2} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2}, \\ A - \frac{B}{\xi_2 \xi_3} &= \frac{1}{\xi_2 - \xi_3} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3}. \end{aligned} \quad (38)$$

Из системы (38) находим  $A$  и  $B$ :

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & -\frac{1}{\xi_1 \xi_2} \\ 1 & -\frac{1}{\xi_2 \xi_3} \end{vmatrix} = \frac{\xi_3 - \xi_1}{\xi_1 \xi_2 \xi_3}, \quad (39)$$

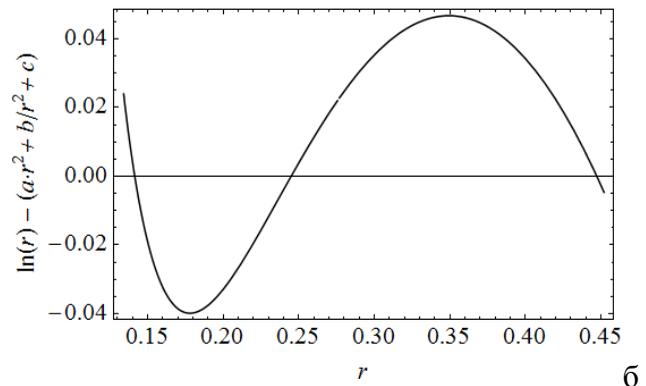
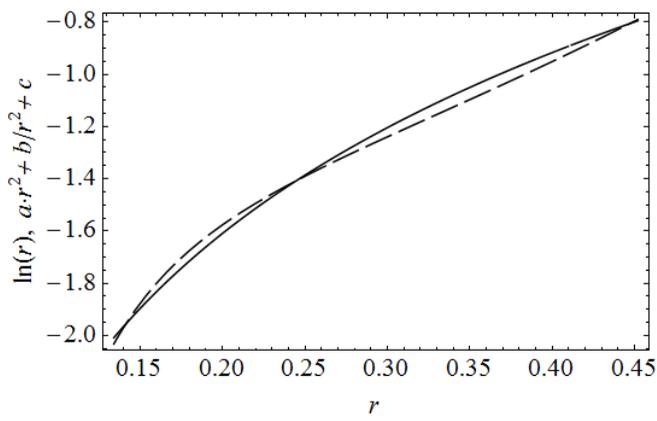
$$\begin{aligned} \Delta A &= \begin{vmatrix} \frac{1}{\xi_1 - \xi_2} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2} & -\frac{1}{\xi_1 \xi_2} \\ \frac{1}{\xi_2 - \xi_3} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3} & -\frac{1}{\xi_2 \xi_3} \end{vmatrix} = \\ &= -\frac{1}{\xi_2 \xi_3 (\xi_1 - \xi_2)} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2} + \frac{1}{\xi_1 \xi_2 (\xi_2 - \xi_3)} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3}, \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \Delta B &= \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{\xi_1 - \xi_2} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2} \\ 1 & \frac{1}{\xi_2 - \xi_3} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3} \end{vmatrix} = \\ &= -\frac{1}{\xi_1 - \xi_2} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2} + \frac{1}{\xi_2 - \xi_3} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3}, \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} A &= -\frac{\xi_1}{(\xi_1 - \xi_2)(\xi_3 - \xi_1)} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2} + \\ &+ \frac{\xi_3}{(\xi_2 - \xi_3)(\xi_3 - \xi_1)} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3}, \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} B &= \xi_1 \xi_2 \xi_3 \times \\ &\times \left( -\frac{1}{(\xi_1 - \xi_2)(\xi_3 - \xi_1)} \ln \frac{\xi_1}{\xi_2} + \frac{1}{(\xi_2 - \xi_3)(\xi_3 - \xi_1)} \ln \frac{\xi_2}{\xi_3} \right). \end{aligned}$$

Таким образом, для заданных значений  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  определяются коэффициенты аппроксимации  $A, B$  и  $C$ .



**Рис. 8.** Графики приближения и его ошибки.  
а — логарифм и его аппроксимация; б — ошибка аппроксимации между точками коллокации

**Пример**

Аппроксимация для набора значений  $\xi_1 = 0.02$ ,  $\xi_2 = 0.06$ ,  $\xi_3 = 0.2$  дает коэффициенты  $A \approx 6.5$ ,  $B = -0.025$ ,  $C = -2.78$ .

Тогда  $\ln r \approx 3.25r^2 - 0.025/r^2 - 1.39$ . Графики приближения и его ошибки представлены соответственно на рис. 8, а и б.

**ИНТЕГРАЛЫ  
АЗИМУТАЛЬНО-РАДИАЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ  
В ЦЕНТРОБЕЖНОЙ ЛОВУШКЕ**

В центробежной ловушке с идеальной пространственно-временной фокусировкой радиальная часть движения определяется интегралом

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{E - \left( \ln r - \frac{r^2}{2} + \frac{M^2}{2r^2} \right)}}, \quad (43)$$

где

$$E = \frac{\dot{r}_0^2}{2} + \ln r_0 - \frac{r_0^2}{2} + \frac{M^2}{2r_0^2}, \quad M = r_0^2 \dot{\gamma}_0. \quad (44)$$

Далее, используя аппроксимацию (34) для логарифма, замечаем, что эффективный потенциал  $f^*$  представляется (после сокращения несущественной константы  $C$ , входящей в выражение как потенциала, так и начальной энергии) в виде суммы

$$f^* \approx ar^2 + \frac{b}{r^2}. \quad (45)$$

При этом

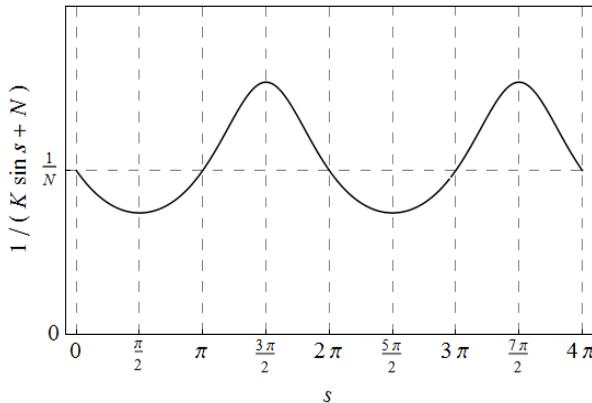


Рис. 9. Непрерывная подынтегральная функция

$$\frac{1}{K \sin s + N}$$

$$E \approx \frac{\dot{r}_0^2}{2} + ar_0^2 + \frac{b}{r_0^2}, \quad a = \frac{A-1}{2}, \quad b = \frac{M^2+B}{2}. \quad (46)$$

В результате интеграл (43) легко вычисляется:

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{E - ar^2 - \frac{b}{r^2}}} = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2a}} \arcsin \frac{2ar^2 - E}{\sqrt{E^2 - 4ab}} \Big|_{r_0}^r, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\tau = \frac{1}{2\sqrt{2a}} \left( \arcsin \frac{2ar^2 - E}{\sqrt{E^2 - 4ab}} - \arcsin \frac{2ar_0^2 - E}{\sqrt{E^2 - 4ab}} \right). \quad (48)$$

Разрешая уравнение (48) относительно  $r^2(\tau)$ , имеем

$$r^2(\tau) = K \sin(\omega\tau + \sigma) + N, \quad (49)$$

где

$$\begin{aligned} \omega &= 2\sqrt{2a}, & \sigma &= \arcsin \frac{2ar_0^2 - E}{\sqrt{E^2 - 4ab}}, \\ K &= \frac{\sqrt{E^2 - 4ab}}{2a}, & N &= \frac{E}{2a}. \end{aligned} \quad (50)$$

Из формулы (49) следует, что для потенциала (45) величина  $r^2$  колеблется как идеальный гармонический осциллятор с круговой частотой  $\omega$ .

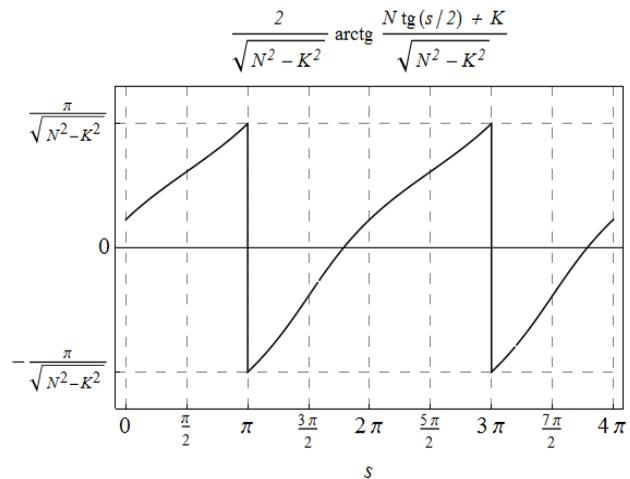


Рис. 10. Интеграл (55)

Поскольку  $\omega$  не зависит от начальных данных  $r_0, \dot{r}_0, \gamma_0, \dot{\gamma}_0$ , радиальное движение обладает свойством изохронности, что весьма важно при выборе режима движения ионных пакетов. Ввиду того, что нами используется аппроксимация точного потенциала, в реальной ситуации идеальная изохронность разрушается, но незначительно. Мера уклонения от идеальности зависит от точности аппроксимации, а последняя зависит от размаха колебаний. Чем он меньше, тем совершеннее изохронность. В частности, вблизи кругового режима можно подобрать  $A$  и  $B$  так, что радиальные колебания будут практически изохронными.

Рассмотрим азимутальное движение иона. Из закона сохранения момента количества движения можно записать

$$\gamma = \gamma_0 + \int_0^\tau \frac{M d\tau}{r^2(\tau)}. \quad (51)$$

Подставляя  $r^2(\tau)$  из (49) в (51), получим

$$\gamma = \gamma_0 + M \int_0^\tau \frac{d\tau}{K \sin(\omega\tau + \sigma) + N}. \quad (52)$$

Положим

$$\omega\tau + \sigma = s \quad (53)$$

и преобразуем (52) в

$$\gamma = \gamma_0 + \frac{M}{\omega} \int_\sigma^{\omega\tau + \sigma} \frac{ds}{K \sin s + N}. \quad (54)$$

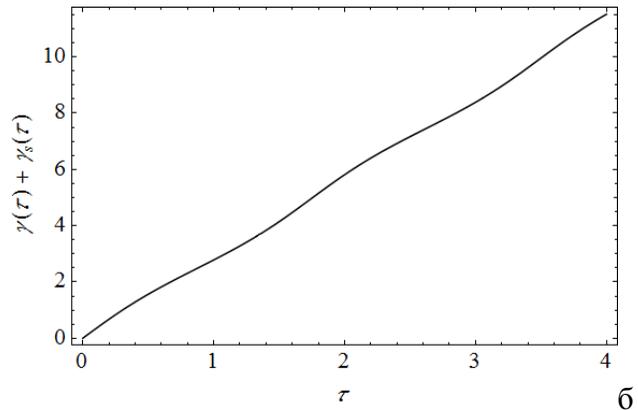
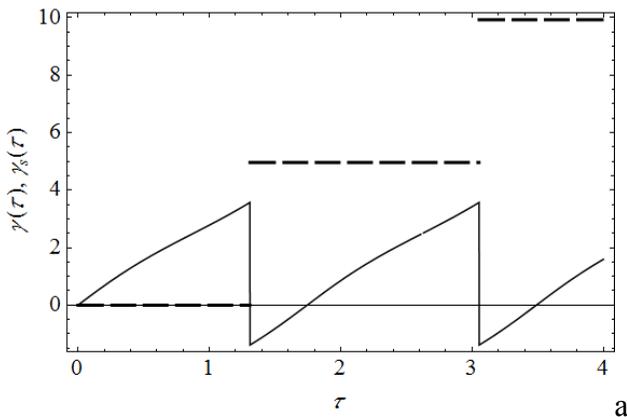
Первообразная в данном случае имеет вид

$$I = \int \frac{ds}{K \sin s + N} = \frac{2}{\sqrt{N^2 - K^2}} \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{s}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} + \operatorname{const}. \quad (55)$$

При прохождении через точки  $s = \pi, 3\pi, 5\pi, \dots$  функция (55) скачком меняет знак, т. е. становится разрывной. В то же время при  $|N| > |K|$  интеграл (54) от положительной периодической функции (имеющей график, показанный на рис. 9) должен быть гладкой монотонно растущей функцией.

Чтобы сделать (55) гладкой аналитической функцией, достаточно в места разрыва вставить подходящие постоянные. Для вычисления нужных величин следует изучить поведение (55) на интервале  $(0, 2\pi)$ , учитывая, что главное значение функции арктангенс меняется на интервале  $(-\pi/2, \pi/2)$ . Для (55) на интервале  $(0, 2\pi)$  имеем график рис. 10.

В силу периодичности подынтегрального выражения в (55) достаточно исследовать поведение интеграла на длине периода  $(0, 2\pi)$  и его полную вариацию на этом отрезке. Тогда интеграл в  $n$ -ом периоде выразится основной функцией и добавлением  $n$ -кратно увеличивающейся постоянной величины. Эта постоянная компонента интеграла — вариация на длине периода — может быть легко вычислена:



**Рис. 11.** Построение корректной угловой зависимости.

а — разрывная функция  $\gamma(\tau)$  (58) (сплошная линия) и ступенчатая функция  $\gamma_s(\tau)$  (60) (пунктир);

б — непрерывная функция  $\gamma(\tau) + \gamma_s(\tau)$

$$P = \int_0^{2\pi} \frac{ds}{K \sin s + N} = \frac{2\pi}{\sqrt{N^2 - K^2}}. \quad (56)$$

В силу указанных свойств сместим кривую на интервале  $(\pi, 2\pi)$  (рис. 10) на величину  $\frac{2\pi}{\sqrt{N^2 + K^2}}$ . Тогда на интервале  $(0, 2\pi)$  первообразная  $I$  запишется так:

$$I = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{N^2 - K^2}} \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{s}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}}, & 0 < s < \pi, \\ \frac{2}{\sqrt{N^2 - K^2}} \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{s}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} + \\ + \frac{2\pi}{\sqrt{N^2 - K^2}}, & \pi < s < 2\pi. \end{cases} \quad (57)$$

Несмотря на различие аналитической записи этой функции на разных участках, в целом на всем интервале  $(0, 2\pi)$  она задает гладкую непрерывную и даже аналитическую функцию, и в таком виде ее можно уже применять для вычисления интеграла (54).

Пусть  $0 < \sigma < \pi$  и  $\omega\tau + \sigma < \pi$ , тогда с помощью (57) и (52) для азимутального угла получим выражение

$$\gamma = \gamma_0 + \frac{2M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}} \times \left( \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{\omega\tau + \sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} - \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{\sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} \right). \quad (58)$$

Если по-прежнему  $0 < \sigma < \pi$ , а  $\pi < \omega\tau + \sigma < 2\pi$ , то интеграл для  $\gamma$  приобретает вид

$$\gamma = \gamma_0 + \frac{2M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}} \times \left( \pi + \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{\omega\tau + \sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} - \operatorname{arctg} \frac{N \operatorname{tg} \frac{\sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} \right). \quad (59)$$

В интервале  $(2\pi, 4\pi)$  надо пользоваться фор-

мулами (58), (59), добавив к ним величину  $\frac{MP}{\omega}$ ; в следующем интервале  $(4\pi, 6\pi)$  нужно добавить  $2\frac{MP}{\omega}$  и так далее. Иными словами, для получения монотонной зависимости  $\gamma(\tau)$  к (58) следует добавить ступенчатую функцию

$$\gamma_s = \left[ \frac{\omega\tau + \sigma + \pi}{2\pi} \right] \frac{2M\pi}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}}. \quad (60)$$

Здесь квадратными скобками обозначена операция взятия целой части (антье). Построение требуемой непрерывной функции — суммы (58) и (60) — показано на рис. 11.

Выведенные формулы позволяют качественно анализировать в аналитическом виде все особенности (специфику) розеточных режимов. При рассмотрении радиальных колебаний с умеренной амплитудой, в пределах изменения радиуса которых можно обеспечить достаточную точность аппроксимации, анализ может носить и количественный характер. На рис. 12 представлена траектория иона в проекции на плоскость  $xu$ , рассчитанная как численно, так и по приведенным выше приближенным формулам. Вдоль оси  $z$ , как всегда для систем с ИПВФ, движение синусоидально.

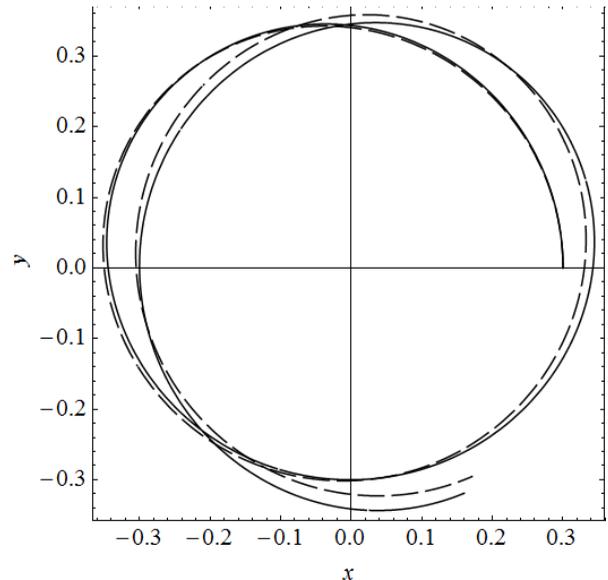


Рис. 12. Траектория иона в проекции на плоскость  $xu$ , рассчитанная точно (сплошная линия) и по приведенным выше приближенным формулам (пунктир). Начальные условия:  $(x_0, y_0) = (r_0, 0)$ ,  $(\dot{x}_0, \dot{y}_0) = (0, M/r_0)$ ,  $r_0 = 0.3$ ,  $M = 0.31$

**АНАЛИТИЧЕСКАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ РОЗЕТОЧНЫХ РЕЖИМОВ**

Построенная приближенная аналитическая модель движения позволяет по-новому оценить картину розеточных режимов и образование ионных струй в виде пространственных фигур Лиссажу. Радиальные колебания определяются формулой (49). Из нее

$$r = \sqrt{K \sin(\omega\tau + \sigma) + N}. \quad (61)$$

Ближайший к точке старта апогей  $r_a$  определяется моментом  $\tau_1$  таким, что

$$\omega\tau_1 + \sigma = \frac{\pi}{2}, \quad (62)$$

а перигей  $r_p$  определяется моментом  $\tau_2$

$$\omega\tau_2 + \sigma = \frac{3\pi}{2}. \quad (63)$$

Разница

$$\tau_2 - \tau_1 = \frac{\pi}{\omega} \quad (64)$$

дает время между перигеем и апогеем. Соответственно полный период колебаний, а также время между двумя ближайшими перигеями (или апогеями) будет

$$\tau^* = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (65)$$

Определим теперь угловые положения точек траектории, отвечающих двум соседним радиальным апогеям, учитывая период (65) и полагая  $\gamma_0 = 0$  в формулах (58), (59):

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{2M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}} \times \\ &\times \left( \arctg \frac{N \operatorname{tg} \frac{\pi}{4} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} - \arctg \frac{N \operatorname{tg} \frac{\sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} \right) = \\ &= \frac{2M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}} \times \\ &\times \left( \arctg \frac{N + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} - \arctg \frac{N \operatorname{tg} \frac{\sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} \right). \quad (66) \end{aligned}$$

Добавляя период и пользуясь теперь формулой (59), получим

$$\begin{aligned} \gamma_2 &= \frac{2M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}} \times \\ &\times \left( \arctg \frac{N \operatorname{tg} \frac{\pi/2 + 2\pi}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} - \arctg \frac{N \operatorname{tg} \frac{\sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} + \pi \right) = \end{aligned}$$

Связь количества лепестков  $k$  розетки (для первых пяти  $k$ ), целых величин  $n, m$  и момента импульса  $M$

$k$	$n$	$m$	$M$
1	1	1	$2\sqrt{\beta/3}$
2	2	3	$3/2 \cdot \sqrt{\beta/2}$
3	3	2	$4\sqrt{\beta/7}$
4	4	3	$3\sqrt{\beta/5}$
5	5	4	$8\sqrt{\beta/39}$

$$= \frac{2M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}} \times \left( \arctg \frac{N+K}{\sqrt{N^2 - K^2}} - \arctg \frac{N \operatorname{tg} \frac{\sigma}{2} + K}{\sqrt{N^2 - K^2}} + \pi \right). \quad (67)$$

Угловое положение одного апогея относительно другого выразится формулой

$$\Delta\gamma = \gamma_2 - \gamma_1 = \frac{2\pi M}{\omega \sqrt{N^2 - K^2}}. \quad (68)$$

Преобразуем это соотношение с помощью выражений (46), (50). В окончательном виде имеем

$$\Delta\gamma = \pi \frac{M}{\sqrt{M^2 + B}}. \quad (69)$$

С помощью этой простой формулы легко построить логичную классификацию розеточных режимов. В данном приближении тип розетки задается всего одним параметром — моментом количества движения  $M$ . Розетки в  $x$ -плоскости характеризуются числом лепестков. Если образуется неподвижная розетка с конечным числом лепестков — некая разновидность фигуры Лиссажу, — то ионы движутся по ней вокруг оси  $z$  строго периодически. Для этого величина  $\Delta\gamma$  и полная окружность  $2\pi$  должны находиться в кратных (рациональных) отношениях. Если соотношение  $\Delta\gamma$  и  $2\pi$  иррационально, то розетка начинает вращаться, постепенно заполняя кольцо между  $r_p$  и  $r_a$ .

Итак, чтобы получить неподвижные розетки, положим

$$\lambda = \frac{\Delta\gamma}{2\pi} = \frac{M}{2\sqrt{M^2 + B}} = \frac{m}{n}, \quad m, n = 1, 2, 3, \dots \quad (70)$$

Из (69) видно, что при любых  $M$ , таких что  $M^2 + B > 0$  и  $B < 0$  (последнее справедливо ввиду специфики аппроксимируемой функции), угол между двумя апогеями (или перигеями) всегда больше  $\pi$ . Следовательно, на выбор целых чисел  $m$  и  $n$  надо наложить условие

$$\lambda = \frac{m}{n} > \frac{1}{2}. \quad (71)$$

Разрешим уравнение относительно  $M$ . Имеем, приводя (70) к форме

$$M^2 = 4 \left( \frac{m}{n} \right)^2 (M^2 + B). \quad (72)$$

Отсюда с учетом отрицательности  $B$  находим

$$M = \frac{2m\sqrt{\beta}}{\sqrt{4m^2 - n^2}}, \quad \beta = |B|. \quad (73)$$

Связь количества лепестков  $k$  розетки (для первых пяти  $k$ ), целых величин  $n$ ,  $m$  и момента импульса  $M$  представлена в таблице.

Таким образом, в данном приближении можно найти дискретный ряд значений момента  $M$ , при которых реализуются неподвижные розетки. Небольшое отклонение  $M$  от этих значений приводит к медленному вращению розетки. Если рассмотреть вращение вместе с колебаниями по  $z$ , то в случае неподвижной розетки ион описывает пространственную замкнутую линию, которую можно рассматривать как своеобразное обобщение фигуры Лиссажу. Движение по этой замкнутой линии в целом, однако, не будет периодическим, если период колебаний по  $z$   $\tau_z = \pi\sqrt{2}$  и полный период розеток находятся в иррациональных отношениях.

## ВЫВОДЫ

Таким образом, в работе классифицированы и изучены различные типы движения ионов в орбитальной ловушке. Приведены аппроксимации радиального распределения потенциала, позволяющие получить явное представление траектории заряженной частицы. Приближенный анализ траекторий движения позволяет качественно, а в случае точной аппроксимации — и количественно анализировать динамику ионного потока в исследуемой системе. Полученные результаты статьи являются теоретической базой синтеза современных масс-анализирующих приборов высокого разрешения.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др. Времяпролетный масс-спектрометр. Авторское свидетельство № 1247973 СССР. (СССР, № 3840525); заявлено 16.01.1985; опубликовано 01.04.1986.
2. Makarov A., Hardman M., Schwarz J., Senko M. Electrostatic trap. UK Patent Application GB 2404784A. 2005 (Priority 2001).
3. Makarov A., Giannakopoulos A. Charged particle analyzers and methods of separating charged particles. Patent Application WO 2010/136534 A1. 2010 (Priority 2009).
4. Golikov U., Solovyev K. et al. A multi-reflecting ion optical device. Patent application WO 2009/001909 A2. 2009 (Priority 2007).

Санкт-Петербургский государственный  
политехнический университет

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

Материал поступил в редакцию 10.01.2014

## AXISYMMETRIC ION TRAP

**Yu. K. Golikov, K. V. Solovyev**

*Saint-Petersburg State Polytechnical University, RF*

Elements of the theory of axisymmetric ion trap with quadratic dependence on one coordinate are given. Ion dynamics in the trap is investigated and classified for different ion motion modes.

*Keywords:* electrostatic ion trap, mass-spectrometry

### REFERENCES

1. *Gall L.N., Golikov Yu.K., Aleksandrov M.L. i dr. Vremyaproletnyy mass-spektrometr. Avtorskoye svidetelstvo № 1247973 SSSR. (SSSR, № 3840525); zayavleno 16.01.1985; opublikovano 01.04.1986. (in Russian).*
2. *Makarov A., Hardman M., Schwarz J., Senko M. Electrostatic trap. UK Patent Application GB 2404784A. 2005 (Priority 2001).*
3. *Makarov A., Giannakopoulos A. Charged particle analyzers and methods of separating charged particles. Patent Application WO 2010/136534 A1. 2010 (Priority 2009).*
4. *Golikov U., Solovyev K. et al. A multi-reflecting ion optical device. Patent application WO 2009/001909 A2. 2009 (Priority 2007).*