

محاسبه نواحی سوم، چهارم و پنجم پایداری در دام پاول

هوشیار نوشاد^۱ و قاسم جانی پور شهروود کلایی^۲

۱. گروه فیزیک، پژوهشکده علوم هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قم

(دریافت مقاله: ۸۶/۱۲/۱۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۷/۹/۱۲)

چکیده

رفتار یون در دام پاول به وسیله حل عددی دستگاه معادلات دیفرانسیل متی‌یو بررسی شده است. سپس مسیرهای حرکت دو یون سبک و سنگین مانند H^+ و $^{208}Pb^+$ در دام پاول با روش رونگه - کوتا مرتبه چهار به دست آمده است. برای دام با ابعاد مشخص و فرکانس معین، ناحیه‌های پایداری برای جداسازی دو یون از یکدیگر مانند یونهای H^+ و $^{208}Pb^+$ بر حسب ولتاژهای مستقیم و متناوب اعمال شده به دام محاسبه شده است. به علاوه، پنج ناحیه پایداری این دستگاه معادلات که برای آنها عمل به دام اندازی یون صورت می‌گیرد، به دقت تعیین شده است. محاسبه ناحیه پنجم پایداری قبلا در مقالات گزارش نشده است.

واژه‌های کلیدی: دام پاول، معادله متی‌یو، روش رونگه - کوتا مرتبه چهار، نواحی پایداری سوم تا پنجم، ناپایداری یون

۱. مقدمه

در بالا و پایین به نام کلاهک تشکیل شده است. این الکترودها در دام پاول به شکل هذلولوی هستند، هر چند که دامهای با اشکال هندسی دیگر مانند استوانه‌ای نیز ساخته شده است [۳]. سپس ولتاژهای مستقیم و متناوب با فرکانس رادیویی به این الکترودها اعمال می‌شود. شکل هذلولوی الکترودها یک میدان چهار قطبی الکتریکی را در فضای دام به وجود می‌آورد [۴]. به همین دلیل دام پاول به دام یون چهار قطبی الکتریکی نیز معروف است. میدان الکتریکی متناوب ایجاد شده در دام باعث حرکت نوسانی یون در ناحیه مرکزی آن می‌شود. دام پاول بخش اساسی از یک طیف سنج جرمی را تشکیل می‌دهد و قابلیت بسیار خوبی در جدا سازی یونها دارد. حساسیت بالا، عملکرد ساده و قیمت پایین دام چار قطبی باعث استفاده روز افزون آن در صنعت، پژوهش، علوم کاربردی و مهندسی شده است [۵].

منظور از به دام اندازی (محصور سازی) یون وادار کردن آن به حرکت نوسانی در ناحیه کوچکی از دام است. این عمل به دو روش صورت می‌گیرد. در یک روش، میدانهای الکتریکی و مغناطیسی ساکن باعث محصور سازی یون می‌شوند. از این شیوه در دام یون پنینگ استفاده می‌شود [۱]. روش دیگر براساس حرکت یون در میدانهای الکتریکی متغیر با زمان است که در آن یونها می‌توانند در ناحیه مرکزی دام شروع به نوسان کنند و مقید شوند. یک دسته از دامهایی که بر این اساس عمل می‌کنند، دام پاول نامیده می‌شوند [۲].

اختراع دام پاول به ولفگانگ پاول (۱۹۱۳-۱۹۹۳) فیزیکدان آلمانی نسبت داده می‌شود. به همین خاطر در سال ۱۹۸۹ جایزه نوبل فیزیک به اتفاق دو نفر دیگر به او داده شد. دام پاول از یک الکتروود فلزی جانبی به نام حلقه و دو الکتروود فلزی دیگر

$$\xi = \frac{\Omega t}{\gamma},$$

$$a_z = -\gamma a_r = \frac{\gamma Q U}{m z_0^2 \Omega^2}, \quad (3)$$

$$q_z = -\gamma q_r = \frac{\gamma Q V}{m z_0^2 \Omega^2}.$$

معادله به فرم $\frac{d^2 w}{d\xi^2} + (a - \gamma q \cos 2\xi)w = 0$ حالت خاصی از معادله دیفرانسیل هیل است [۱۱] و معادله متی یو نامیده می شود [۱۰]. در تحلیل برخی پدیده های فیزیکی مانند ارتعاش غشای بیضی شکل، حل کامل موج تخت در نسبیت عام و مسائل شامل پتانسیلهای متناوب نیز به این معادله می رسیم [۱۲]. معادله متی یو برحسب مقادیری که پارامترهای a و q اختیار می کنند، می تواند جوابهای پایدار و یا ناپایدار داشته باشد. جوابهای پایدار متناظرند با محصور سازی یون در دام پاول. برای حل عددی معادلات (۲) از روش رونگه - کوتا مرتبه چهار استفاده شده است. این روش برای حل معادله متی یو همیشه همگرا است و دقت کافی دارد. بدین منظور یک برنامه کامپیوتری به زبان QBASIC نوشته ایم.

۳. نتایج محاسبات

دستگاه معادلات دیفرانسیل (۲) برای دام چهار قطبی پاول با $z_0 = 20 \text{ mm}$ برای یونهای سبک و سنگین H^+ و $^{208}\text{Pb}^+$ با روش رونگه - کوتا مرتبه چهار [۱۳] حل شده است. شکلهای ۲ و ۳ مسیر حرکت این یونها را در صفحه yz نشان می دهند. پارامترهای U ، V و f برای یون هیدروژن به ترتیب برابر صفر، 15 V و MHz ، و برای یون $^{208}\text{Pb}^+$ نیز برابر صفر، 880 V و 0.4 MHz در نظر گرفته شده اند. در کاربردهای عملی نیز این کمیتها در همین حدود هستند. با این انتخاب برای z_0 ، U ، V و f ، پارامترهای موجود در معادله متی یو (یعنی a_z ، a_r ، q_z و q_r) در ناحیه های پایداری قرار می گیرند و می توان به دام اندازی این یونها و در نتیجه مسیر حرکت آنها را در دام مشاهده نمود. با در نظر گرفتن مقادیر دیگری از ولتاژها ممکن است دستگاه معادلات دیفرانسیل (۲) جوابهای ناپایدار داشته باشد. در این حالت یون به دام نمی افتد. شکل ۴ نمونه ای از وضعیت ناپایدار را برای

اکثر دامهای پاول طوری طراحی می شوند که در ناحیه پایداری اول عمل کنند. این گونه دامها به طور معمول دارای قدرت تفکیک پایین هستند، به گونه ای که کاربرد آنها محدود می شود به آنالیز جرم یونهای که انرژی جنبشی کمی دارند [۶]. برای جدا کردن یونهای اتمی و یونهای مولکولی از یکدیگر، که دارای اختلاف جرم ناچیزی هستند، از دام پاول با قدرت تفکیک بالا استفاده می شود. این گونه دامها در ناحیه های پایداری بالاتر عمل می کنند [۷ و ۸].

در این مقاله مسیر حرکت دو یون نوعی در دام پاول، یکی سبک (H^+) و دیگری سنگین ($^{208}\text{Pb}^+$)، تحت شرایط مفروض به دست آمده است. به علاوه، برای دام با ابعاد مشخص و فرکانس رادیویی داده شده، مقادیر ولتاژهای مستقیم و متناوب را که به ازای آنها می توان یونهای H^+ و $^{208}\text{Pb}^+$ را به دام انداخت، محاسبه شده است. بدین ترتیب می توان این دو یون را از یکدیگر جدا نمود [۹]. سپس ناحیه های اول تا پنجم پایداری یون در دام پاول با دقت خوب محاسبه شده اند.

۲. تئوری

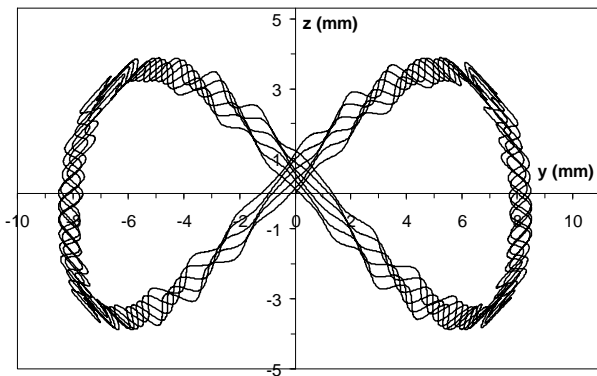
شکل ۱ طرحواره ای از یک دام پاول را نشان می دهد. مطابق شکل، الکترودهای بالا و پایین هم فاز هستند و به اختلاف پتانسیل $U - V \cos \Omega t$ وصل شده اند، در حالی که الکترودهای حلقه به پتانسیل صفر متصل است. با در نظر گرفتن $r_0 = \sqrt{2} z_0$ ، می توان با حل معادله لاپلاس پتانسیل الکتریکی درون دام را به صورت زیر نوشت [۱۰].

$$\phi(r, z) = (U - V \cos \Omega t) \times \frac{z_0^2 - r^2 + r_0^2}{2r_0^2}. \quad (1)$$

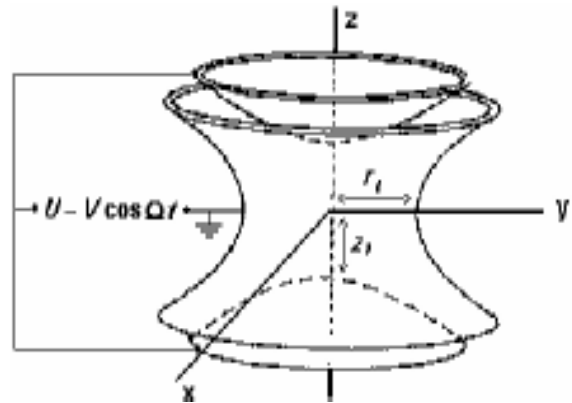
معادلات دیفرانسیل حاکم بر حرکت یون با جرم m و بار الکتریکی Q به صورت زیر خواهد بود [۱۰].

$$\begin{cases} \frac{d^2 z}{d\xi^2} + (a_z - \gamma q_z \cos 2\xi)z = 0 \\ \frac{d^2 r}{d\xi^2} + (a_r - \gamma q_r \cos 2\xi)r = 0 \end{cases} \quad (2)$$

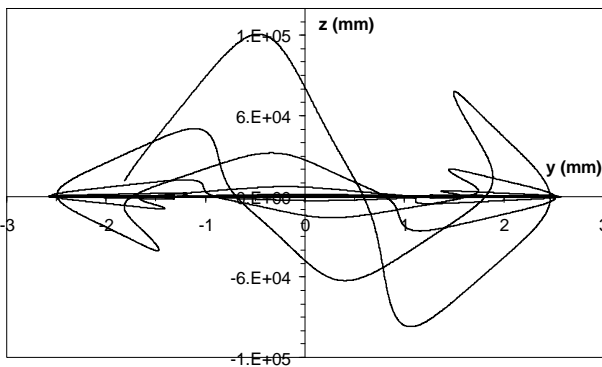
که در آن ξ ، a_z ، a_r ، q_z و q_r کمیتها بدون بعد هستند و به صورت زیر تعریف می شوند:



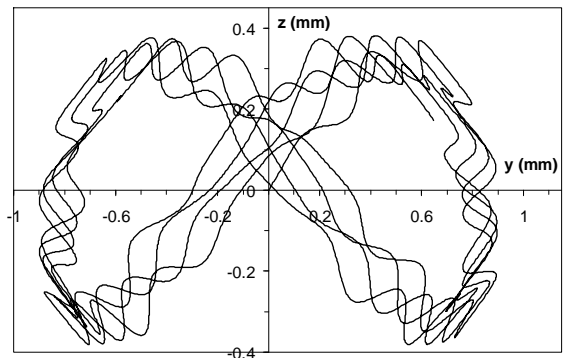
شکل ۲. مسیر حرکت یون H^+ در دام پاول با $z_0 = 20 \text{ mm}$ ، $f = 1 \text{ MHz}$ ، $U = 0$ و $V = 15 \text{ V}$ (محصور سازی یون انجام می شود).



شکل ۱. نمای یک دام چهار قطبی پاول. الکتروود حلقه به زمین و الکتروودهای کلاهک به طور هم فاز به پتانسیلهای مستقیم و متناوب وصل شده اند.



شکل ۴. مسیر حرکت یون H^+ در دام پاول با $z_0 = 20 \text{ mm}$ ، $f = 1 \text{ MHz}$ ، $U = 0$ و $V = 75 \text{ V}$ (محصور سازی یون انجام نمی شود).

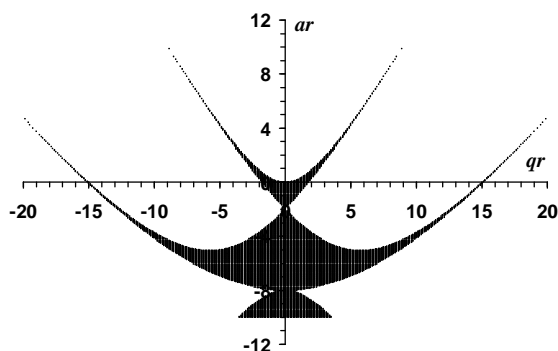


شکل ۳. مسیر حرکت یون $^{208}\text{Pb}^+$ در دام پاول با $z_0 = 20 \text{ mm}$ ، $f = 0.4 \text{ MHz}$ ، $U = 0$ و $V = 880 \text{ V}$ (محصور سازی یون انجام می شود).

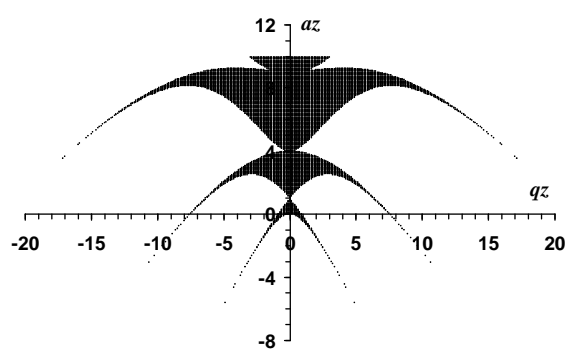
با $a = 0$ داریم $q_{\max} = 0.908$. این کمیت همخوانی خوبی با مقدار متناظر ارائه شده در مراجع دارد [۱۰]. اگر بخواهیم دام پاول را در ناحیه اول پایداری تنظیم کنیم، دانستن این کمیت برای تنظیم ولتاژهای AC، DC و فرکانس RF در عمل محصور سازی یون دارای اهمیت زیادی است. برای دام پاول با ابعاد مشخص و مقدار معین فرکانس سیگنال، می توان با تغییر ولتاژهای AC و DC حالت های پایدار را برای دستگاه معادلات دیفرانسیل (۲) به وجود آورد و یون را به دام انداخت. برای نمونه، ناحیه های پایداری اول برای یونهای H^+ و $^2H^+$ بر حسب مقادیر U و V محاسبه شده اند. شکل ۹ این نواحی را برای $z_0 = 20 \text{ mm}$ و

یون H^+ با پارامترهای $z_0 = 20 \text{ mm}$ ، $f = 1 \text{ MHz}$ ، $U = 0$ و $V = 75 \text{ V}$ نشان می دهد.

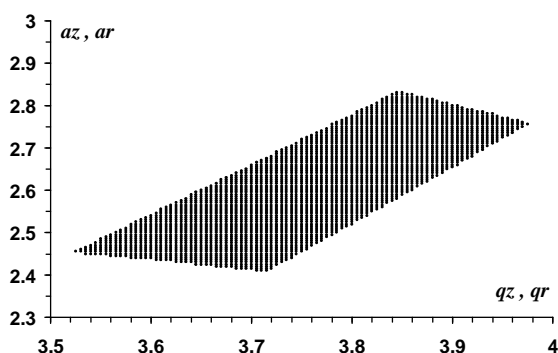
برای محصور سازی یون در دام، باید مقادیری از پارامترهای a و q را تعیین نمود که برای آنها دستگاه معادلات (۲) جواب های پایدار داشته باشند. ناحیه های پایداری برای مولفه های z و r در دام پاول به طور جداگانه در شکل های ۵ و ۶ محاسبه شده اند. نقاط مشترک در این دو شکل، نواحی پایداری دستگاه معادلات (۲) را نشان می دهند. عمل محصور سازی یون فقط برای این نقاط مشترک می تواند انجام شود. در شکل های ۷ و ۸ ناحیه های پایداری اول و دوم برای مقادیر مثبت q محاسبه شده اند. در شکل ۷ به ازای



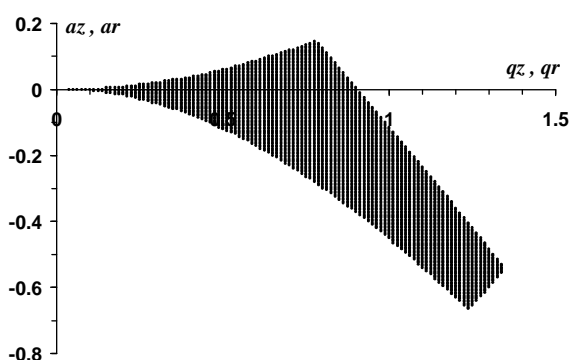
شکل ۶. ناحیه پایداری برای مولفه r در دام پاول.



شکل ۵. ناحیه پایداری برای مولفه z در دام پاول.



شکل ۸. ناحیه پایداری دوم در دام پاول.

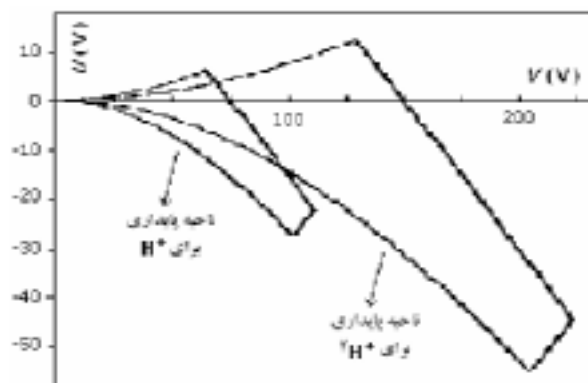


شکل ۷. ناحیه پایداری اول در دام پاول.

محاسبه این نواحی، به ویژه ناحیه پنجم نیاز به زمان زیاد و دقت بالا دارد.

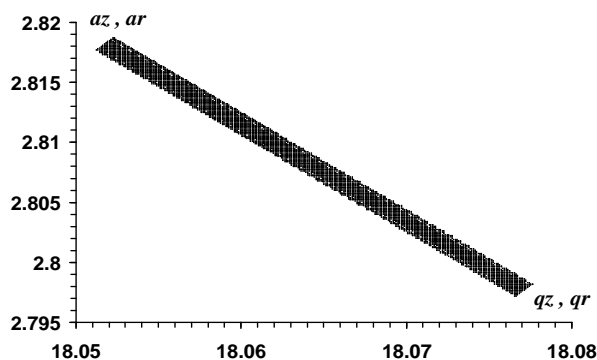
۴. بحث و نتیجه گیری

دام پاول از قابلیت بسیار خوبی برای به دام اندازی یونهای سبک و یا سنگین برخوردار است. برای این منظور لازم است ناحیه‌های پایداری را در اختیار داشته باشیم. برای محصور سازی یون مشخص، باید با تنظیم پارامترهای دام پاول شرایط پایداری را به وجود آورد. به عبارت دیگر، برای دام با ابعاد معین و فرکانس رادیویی مشخص می‌توان محدوده تغییرات ولتاژهای مستقیم و متناوب را به گونه‌ای تعیین نمود که بتوان یک یون خاص را به دام انداخت. به علاوه، با تنظیم ولتاژهای دستگاه می‌توان یونهای با اختلاف جرم کوچک را نیز از هم جدا نمود. در این مقاله این کار برای ایزوتوپ‌های هیدروژن و دوتریم انجام شده است. برای آنالیز جرم یونهای با انرژی‌های بالاتر، دام پاول باید

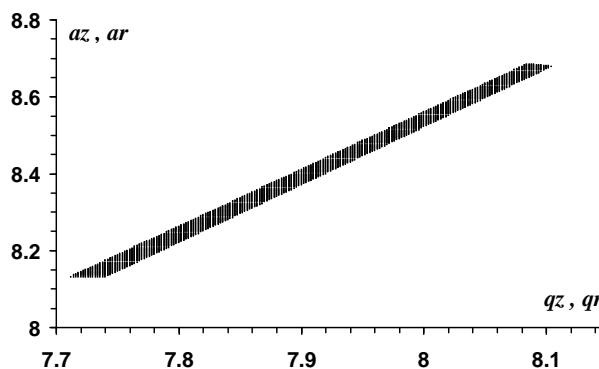


شکل ۹. ناحیه‌های پایداری برای یون‌های H^+ و H^+ برحسب ولتاژهای U و V در دام پاول با $z_0 = 20$ mm و $f = 1$ MHz. با تنظیم ولتاژها در نقاط غیر مشترک می‌توان این دو یون را از هم جدا نمود.

$f = 1$ MHz نشان می‌دهد. با تنظیم ولتاژهای U و V در نقاط غیر مشترک می‌توان این دو یون را از هم جدا نمود. در شکل‌های ۱۰ الی ۱۲ ناحیه‌های پایداری سوم، چهارم و پنجم به دست آمده‌اند.

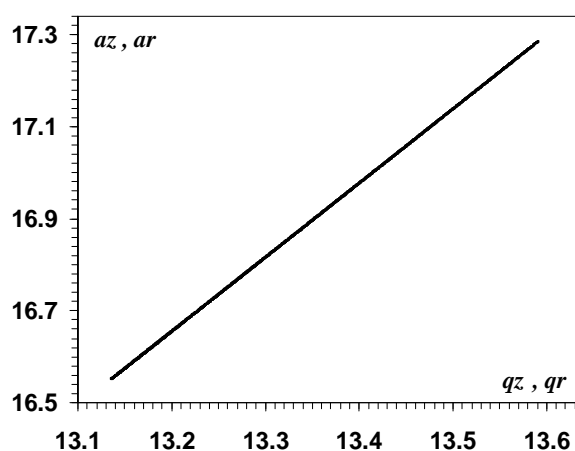


شکل ۱۱. ناحیه پایداری چهارم در دام پاول.



شکل ۱۰. ناحیه پایداری سوم در دام پاول.

یک صافی جرم (Mass filter) را می‌توان در مرجع [۸] مشاهده نمود. در این مرجع، ناحیه پنجم نیز برای یک صافی جرم با استفاده از روش ماتریسی محاسبه شده است. این ناحیه به علت باریک بودن آن کاربردهای خاصی دارد و برای جداسازی یونها با قدرت تفکیک بالا به کار می‌رود. اساس صافی‌های جرم، یک چار قطبی الکتریکی دو بعدی است، در حالی که در دام پاول از چار قطبی الکتریکی سه بعدی استفاده می‌شود. قابل ذکر است که در مرجع [۸] روش ماتریسی برای تحلیل معادله متی‌یو به کار رفته است، در حالی که در این مقاله، روش مورد استفاده روش رونگه - کوتا مرتبه چهارم است. یادآوری می‌شود که محاسبه ناحیه‌های پایداری بالاتر مانند ناحیه پنجم به علت باریک بودن زیاد، کار ساده‌ای نیست و در مقالات نیز این ناحیه پایداری برای صافی جرم به دست آمده است نه برای دام پاول. دامهای چار قطبی الکتریکی (دام پاول) که در نواحی پایداری بالاتر مانند ناحیه پنجم عمل می‌کنند، در مقایسه با دامهایی که در ناحیه‌های پایتتر کار می‌کنند، توانایی به مراتب بیشتری در جداسازی یونها با قدرت تفکیک بالاتر دارند [۸]. ولی به دلیل باریک بودن این ناحیه، گستره اعداد جرمی یونهایی که می‌توان آنها را به دام انداخت، محدودتر می‌شود.



شکل ۱۲. ناحیه پایداری پنجم در دام پاول.

طوری تنظیم شود که در ناحیه‌های پایداری از مرتبه‌های بالاتر عمل کند [۶]. بنابراین پنج ناحیه پایداری در این مقاله با دقت محاسبه شده‌اند. ناحیه‌های پایداری اول و دوم را می‌توان در تعدادی از مقالات یافت [۱۰]. نواحی محاسبه شده در این مقاله با ناحیه‌های به دست آمده در مرجع [۱۰] به خوبی مطابقت دارند. نواحی پایداری سوم و چهارم به علت کاربردهای خاص به ندرت در مقالات محاسبه شده‌اند. همین‌طور تعیین ناحیه‌های پایداری بالاتر، به علت باریک بودن آنها عملاً مشکلتر است. نواحی پایداری سوم و چهارم برای

مراجع

2. J D Prestage, A Williams, L Maleki, M J Djomehri and E Harabetian, *Phys. Rev. Lett.*, **66** (1991) 2964.

1. M D McGuire and E N Fortson, *Phys. Rev. Lett.*, **33** (1974) 737.

- (1995) 511.
10. P H Dawson, *Quadrupole Mass Spectrometry and its Applications*, AIP Press, New York (1995).
 11. W Magnus and S Winkler, *Hill's Equation*, Dover Pub., New York (1979).
 12. www.en.wikipedia.org/wiki/Mathieu_equation
 13. L V Atkinson, P J Harley and J D Hudson, *Numerical Methods with Fortran 77, A Practical Introduction*, Addison Wesley, **345** (1992).
 14. Zhaohui Du, D J Douglas and N. Konenkov, *J. Anal. At. Spectrom.* **14** (1999) 1111.
 3. R F Bonner, J E Fulford and R E March, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **24** (1977) 255.
 4. H Winter and H W Ortjohann, *Am. J. Phys.* **59** (1991) 807.
 5. R E March, *J. Mass Spectrom.* **32** (1997) 351.
 6. W Chen, B A Collings and D J Douglas, *Anal. Chem.* **72** (2000) 540.
 7. Z Du, T N Olney and D J Douglas, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **8** (1997) 1230.
 8. N V Konenkov, M Sudakov and D J Douglas, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **13** (2002) 597.
 9. R Alheit, K Enders and G Werth, *Appl. Phys. B* **62**