

iziacian@aeoi.org.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۸۷/۱۱/۱۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۸۸/۱۲/۳)

$z \quad r$

${}^1\text{H}^+ \quad {}^2\text{H}^+$

هذلولوی را نشان می‌دهد. الکترودهای کلاهیگ به ولتاژ  $U - V \cos \Omega t$  و الکتروده حلقه به زمین متصل شده است.

وارد کردن نیروی میراکننده در معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون در دام پاول شکل واقعی تری به مسئله می‌دهد. اگر یون در ناحیه پایداری در غیاب نیروی میراکننده قرار گیرد، بدون آنکه تغییری در سرعت و انرژی آن رخ دهد به دام می‌افتد در صورتی که نیروی میراکننده می‌تواند انرژی و سرعت یون به دام افتاده را به میزان بسیار زیادی کاهش دهد که این امر می‌تواند شرایطی را به وجود آورد تا یون کم انرژی به صورت یک هدف در آزمایش‌های هسته‌ای توسط پرتابه بمباران شود و یا می‌توان با این روش یون‌ها را با درجه خلوص بسیار بالا از یکدیگر جدا نمود.

دام یون چهارقطبی (QIT) مهم‌ترین بخش از یک طیف‌سنج جرمی را تشکیل می‌دهد. این وسیله برای شناسایی مولکول‌ها و اتم‌ها و تعیین ساختار مولکولی استفاده می‌شود، و گستره کاربرد بسیار وسیعی در علوم، تحقیقات و صنعت دارد. اختراع دام یون چهارقطبی به ولفگانگ پاول فیزیکدان آلمانی نسبت داده می‌شود. بنابراین، دام یون چهارقطبی را اغلب دام پاول نیز می‌نامند [۱]. دام پاول از یک الکتروده فلزی جانبی به نام حلقه (ring) و دو الکتروده فلزی دیگر در بخش‌های بالایی و پایینی به نام کلاهک (end-cap) تشکیل می‌شود. متداول‌ترین شکل هندسی این الکترودها هذلولوی است [۲]. با اتصال الکترودها به ولتاژهای مناسب مستقیم و متناوب با فرکانس رادیویی، میدان الکتریکی در فضای درون دام ایجاد می‌شود و باعث محصور شدن یون‌ها می‌گردد. شکل ۱ طرحواره‌ای از یک دام چهارقطبی

جایی که  $u$  جایگزین  $r$  و  $z$  (در سیستم استوانه‌ای) می‌شود و  $\Omega$  بسامد زاویه‌ای ذره در دام است. همچنین متغیرهای بدون بعد و ثابت  $\xi, \kappa, a_u$  و  $q_u$  به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\xi = \frac{\Omega t}{2}, \quad (2)$$

$$\kappa = \frac{D}{M\Omega}, \quad (3)$$

$$a_r = -\frac{1}{2}a_z = \frac{2QV_{dc}}{mz_0^2\Omega^2}, \quad q_r = -\frac{1}{2}q_z = \frac{QV_{ac}}{mz_0^2\Omega^2}. \quad (4)$$

همان‌طور که مشخص است، وارد شدن ثابت  $\kappa$  در معادله (۱) به علت وارد کردن یک نیروی میراکننده درون دام است، پس به ازای هر  $\kappa > 0$  این حالت میرایی وجود دارد. ثابت میرایی  $\kappa$  به عواملی مانند جرم یون، قابلیت تحرک یون، فشار گاز و دمای گاز درون دام بستگی دارد [۳]. در فشارهای پایین، برخورد یون با فوتون‌های لیزر، به منظور خنک‌سازی یون، پدیده غالب است و برخورد یون با مولکول‌های گاز سهم بسیار کمی در جمله میرایی دارد.

در این مقاله برای آن‌که بتوانیم نتایج خود را با مقاله معتبر چاپ شده در این زمینه [۵] مقایسه کنیم مقدار  $\kappa = 1$  را فرض کرده‌ایم. در حالتی که نیروی میراکننده بر اساس برخورد یون با فوتون باشد، مقدار  $\kappa = 1$  را می‌توان در هر فشار پایین گاز (کمتر از  $10^{-5}$  mbar) در نظر گرفت [۳]. با توجه به رابطه (۳)، برای یون هیدروژن، پارامتر  $\kappa = 1$  متناظر با نیروی  $10^{-17}$  نیوتن به دست می‌آید.

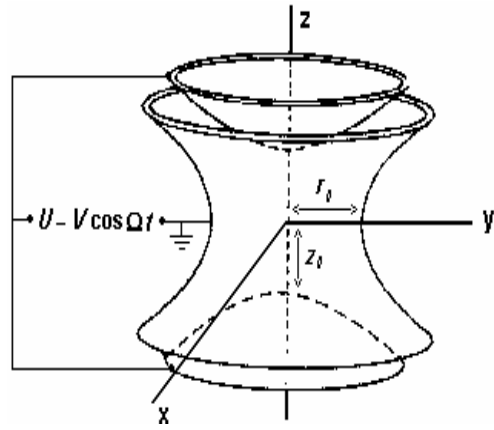
در حالتی که مقدار  $\kappa$  را برابر با یک در نظر بگیریم معادله دیفرانسیل به صورت زیر خواهد شد:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + 2\left(\frac{du}{d\xi}\right) + (a_u - 2q_u \cos 2\xi)u = 0, \quad (5)$$

همان‌طور که مشاهده می‌شود در غیاب نیروی میراکننده یعنی در حالتی که  $\kappa = 0$  (متناظر با  $D = 0$ ) است معادله بالا به معادله معروف ماتئو تبدیل می‌شود:

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

برای حل این معادله دیفرانسیل (رابطه ۵) از روش‌هایی از قبیل روش ماتریسی [۶] و یا تغییر تابع  $u = We^{-\kappa\xi}$  برای تبدیل معادله بالا به معادله ماتئو استفاده شده است [۵]. در این مقاله



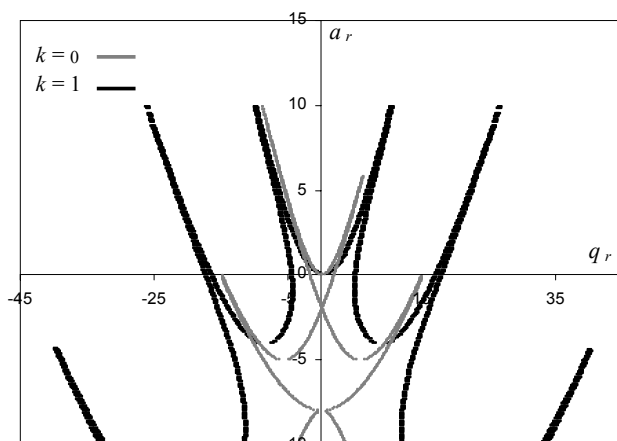
شکل ۱. طرحواره‌ای از یک دام هذلولوی.

ما حالتی که در آن نیروی میراکننده متناسب با سرعت ذره باشد را در نظر گرفته‌ایم و همچنین از افت و خیزهای آماری صرف‌نظر کرده‌ایم. معادلات حرکت، مجموعه‌ای از معادلات ماتئو با جمله میرایی را تشکیل می‌دهد. آنالیز ما نشان می‌دهد که نواحی پایداری نه تنها بزرگ می‌شود، همان‌طور که انتظار آن نیز می‌رود، بلکه منتقل نیز می‌گردد.

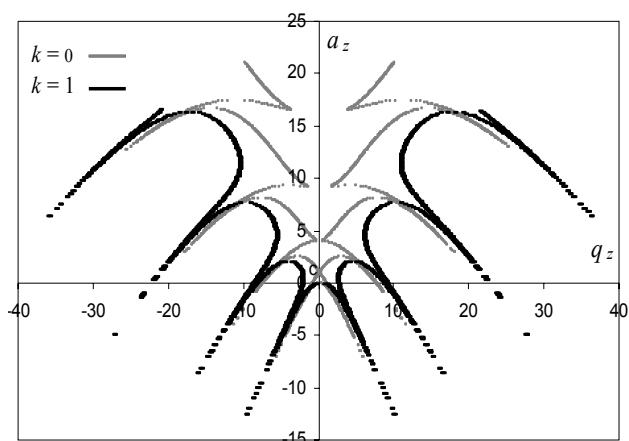
ذره‌ای با جرم  $m$  و بارالکتریکی  $Q$  در دام پاول با قطر حلقه  $2r_0$  و فاصله بخش‌های بالایی و پایینی  $2z_0$  را در نظر می‌گیریم. نیروی میراکننده را می‌توان با رابطه  $F = -Dv$  در نظر گرفت که در آن  $D = M\gamma$  و  $\gamma$  سرعت یون است. در این رابطه  $M$  جرم یون و  $\gamma$  مقداری ثابت است. باید توجه داشت که نیروی میراکننده می‌تواند ناشی از برخورد یون با مولکول‌های گازهای باقی‌مانده (بعد از تخلیه دام از هوا) و یا بر اثر برخورد یون با فوتون‌های لیزر باشد. در حالت اول ثابت  $\gamma$  با توجه به قابلیت تحرک یون و فشار و دمای گاز موجود در دام محاسبه می‌شود [۳]. برخورد یون‌های درون دام با فوتون‌های لیزر، ایجاد نیروی بازدارنده‌ای می‌کند که متناسب با سرعت یون است یعنی  $F = -Dv$ . این پدیده را می‌توان مانند برخورد الکترون‌های آزاد درون یک رسانا با یون‌های مثبت و تحت تأثیر میدان الکتریکی درون رسانا دانست، به طوری که این نیرو متناسب با سرعت الکترون آزاد است [۴].

اگر ولتاژ  $V_{dc} + V_{ac} \cos \Omega t$  به حلقه وصل شود داریم:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + 2^{(2-n)} \kappa \Omega^{(n-1)} \left(\frac{du}{d\xi}\right)^n + (a_r - 2q_r \cos 2\xi)u = 0, \quad (1)$$



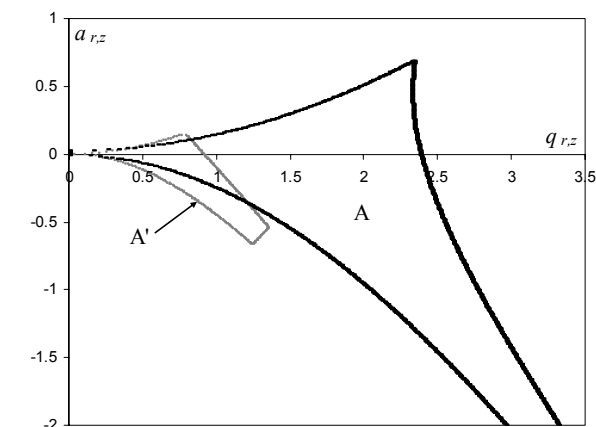
شکل ۳. مقایسه ناحیه پایداری برای مؤلفه  $r$  در QIT. منحنی کم-رنگ در حالت  $\kappa=0$  و منحنی پررنگ در حالت  $\kappa=1$  رسم شده است.



شکل ۴. مقایسه ناحیه پایداری برای مؤلفه  $z$  در QIT. منحنی کم-رنگ در حالت  $\kappa=0$  و منحنی پررنگ در حالت  $\kappa=1$  رسم شده است.

فقط برای این نقاط، عمل به دام اندازی می‌تواند انجام شود. نواحی پایداری می‌تواند شامل ناحیه‌های اول، دوم، سوم و همچنین بالاتر نیز باشد. گیراندازی یون در نواحی پایداری بالا برای آن دسته از یون‌هایی صورت می‌گیرد که دارای انرژی جنبشی بالاتری هستند و چون برای گیراندازی این یون‌ها نیاز به نیروی الکترومغناطیسی قوی‌تری است لذا نواحی پایداری بالاتر مناسب‌تر است [۷]. اما از آنجا که برای گیراندازی یون در این نواحی دقت دستگاه باید بسیار بالا باشد و حتی نوسانات بسیار کم در ولتاژ متناوب می‌تواند باعث شدن یون از ناحیه پایداری شود لذا محققان بیشتر تمایل دارند که در ناحیه پایداری اول که به علت وسیع بودن آن، تغییرات ولتاژ باعث خارج شدن یون از ناحیه پایداری نمی‌شود، عمل به دام اندازی صورت گیرد. به همین جهت وارد کردن یک نیروی میرایی می‌تواند انرژی یون را تا آن اندازه پایین آورد که در ناحیه پایداری اول به دام افتد. لذا ما در این مقاله ناحیه پایداری اول در حضور نیروی میراکننده و در غیاب آن را به دست آورده و با یکدیگر مقایسه کرده‌ایم که در شکل ۴ آورده شده است.

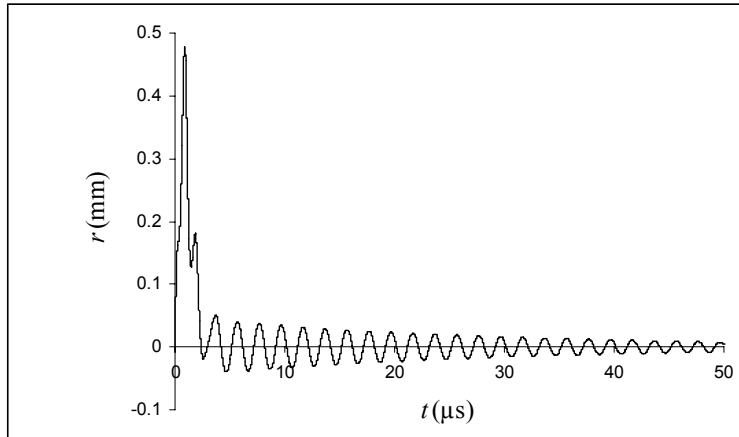
در یک مقایسه برای یون سبک  $H^+$ ، شکل‌های ۵ تا ۸ موقعیت یون بر حسب زمان، مسیر حرکت یون، و منحنی‌های فضای فاز را در ناحیه پایداری اول در حضور نیروی میراکننده برای حالت پایدار  $a_z=0$  و  $q_z=2/35$  که متناظر با



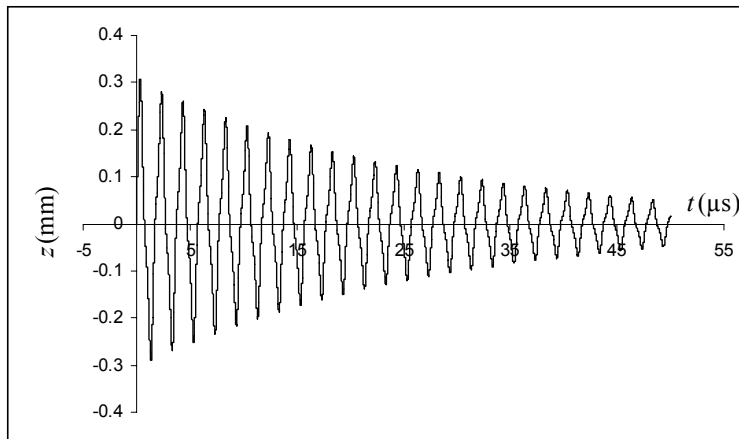
شکل ۵. ناحیه پایداری اول در QIT در صفحه  $a-q$ . ناحیه  $A'$  برای حالت  $\kappa=0$  و ناحیه  $A$  برای حالت  $\kappa=1$  رسم شده است.

برای حل این دستگاه معادلات دیفرانسیل و محاسبه نواحی پایداری در حضور نیروی میراکننده از روش رونگه-کوتا مرتبه ۴ (RK4) استفاده شده است. قابل ذکر است که استفاده از این روش برای محاسبه نواحی پایداری در حضور نیروی میراکننده تاکنون در مقالات گزارش نشده است.

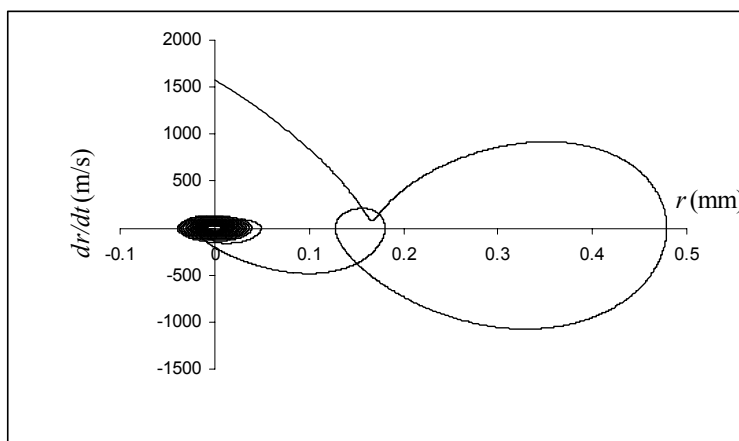
در شکل ۲ ناحیه پایداری برای مؤلفه  $z$  در دو حالت  $\kappa=0$  و  $\kappa=1$  و در شکل ۳ ناحیه پایداری برای مؤلفه  $r$  در همین دو حالت با یکدیگر مقایسه شده است. نواحی مشترک در برخورد منحنی‌های ناحیه‌های پایداری مؤلفه‌های  $r$  و  $z$ ، ناحیه پایداری دستگاه معادلات دیفرانسیل مربوط به QIT را نشان می‌دهند.



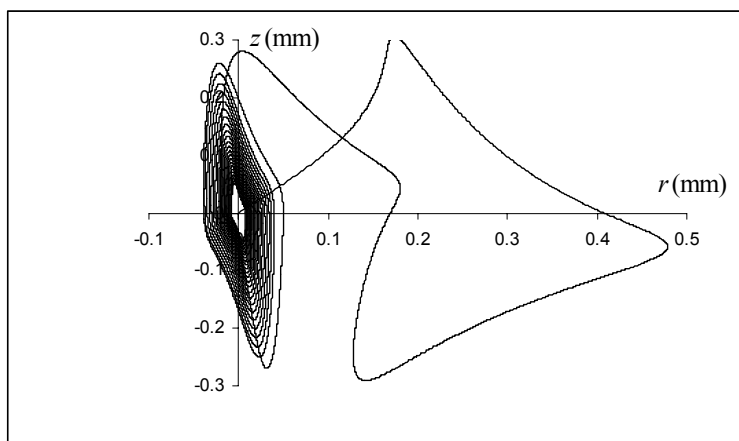
شکل ۵. منحنی موقعیت  $r$  بر حسب زمان در حالت  $\kappa=1$  برای  $H^+$ .  $V_{ac}=54\text{ V}$ ,  $V_{dc}=0\text{ V}$ ,  $f=1\text{ MHz}$  و  $r_0=15\text{ mm}$  متناظر با  $a_z=0$  و  $q_z=2/35$  گیراندازی صورت می گیرد.



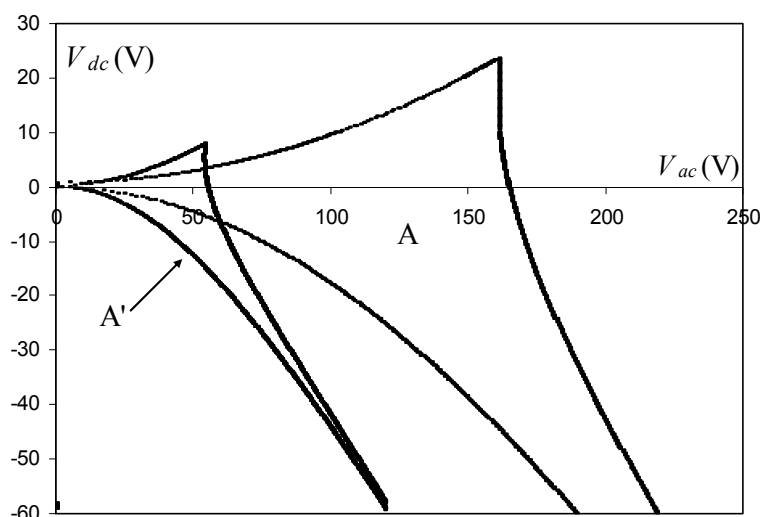
شکل ۶. منحنی موقعیت  $z$  بر حسب زمان در حالت  $\kappa=1$  برای  $H^+$ .  $V_{ac}=54\text{ V}$ ,  $V_{dc}=0\text{ V}$ ,  $f=1\text{ MHz}$  و  $r_0=15\text{ mm}$  متناظر با  $a_z=0$  و  $q_z=2/35$  گیراندازی صورت می گیرد.



شکل ۷. منحنی فضای فاز  $r-dr/dt$  برای  $H^+$  در حالت  $\kappa=1$ .  $V_{ac}=54\text{ V}$ ,  $V_{dc}=0\text{ V}$ ,  $f=1\text{ MHz}$  و  $r_0=15\text{ mm}$  متناظر با  $a_z=0$  و  $q_z=2/35$  گیراندازی صورت می گیرد.



شکل ۸. منحنی مسیر یون  ${}^1\text{H}^+$  در صفحه  $r-z$  در حالت  $\kappa=1$ ،  $f=1\text{ MHz}$ ،  $V_{dc}=0\text{ V}$ ،  $V_{ac}=54\text{ V}$  و  $r_0=15\text{ mm}$  متناظر با  $a_z=0$  و  $q_z=2/25$  گیراندازی صورت می‌گیرد.



شکل ۹. نمودار ولتاژ مستقیم نسبت به ولتاژ متناوب در حالت  $\kappa=1$  متناظر با  $f=1\text{ MHz}$  و  $r_0=15\text{ mm}$ . ناحیه  $A'$  برای  ${}^1\text{H}^+$  و ناحیه  $A$  برای  ${}^2\text{H}^+$  رسم شده است.

سایر یون‌ها از یکدیگر جدا می‌شوند ارائه نماییم. لذا نمودار ولتاژ مستقیم نسبت به ولتاژ متناوب را برای این دو یون در حالت  $\kappa=1$  متناظر با  $f=1\text{ MHz}$  و  $r_0=15\text{ mm}$  در شکل ۹ به دست آورده‌ایم.

برای پایین آوردن انرژی یون به دام افتاده در دام پاول، نیاز به وارد کردن یک نیروی میراکننده به سیستم است. همان‌طور که در شکل ۵ و شکل ۶ مشاهده می‌شود، دامنه نوسان حرکت یون

این حالت  $V_{dc}=0\text{ V}$  و  $V_{ac}=54\text{ V}$  است را نشان می‌دهند. این حالت مثلاً می‌تواند متناظر با  $f=1\text{ MHz}$ ،  $r_0=15\text{ mm}$  باشد. در این محاسبه، موقعیت اولیه یون در مرکز دام، و سرعت اولیه آن برابر محتمل‌ترین سرعت یون در دمای اتاق در نظر گرفته شده است.

برای جداسازی یون‌ها از روش‌های متفاوتی استفاده می‌شود اما یکی از جدیدترین شیوه‌های جداسازی یون که در کشور ما تاکنون انجام نشده است، جداسازی یون با استفاده از دام چهارقطبی است. ما بر آن شدیم تا روشی را برای جداسازی یون‌های  ${}^1\text{H}^+$  و  ${}^2\text{H}^+$  که به دلیل سبک بودن آنها مشکل‌تر از

ایزوتوپ‌های یک عنصر، می‌توان با تنظیم ولتاژهای مستقیم و متناوب و ثابت نگه داشتن فرکانس و ابعاد دام، یون‌ها و یا ایزوتوپ‌ها را با درجه خلوص بسیار بالا از یکدیگر جدا نمود. همان‌طوری که اشاره شد، محاسبات حاصل از وارد کردن نیروی میراکننده به دام پاول با روش رونگه - کوتا مرتبه چهار تا کنون در مقاله‌ای گزارش نشده است.

در دام با گذشت زمان کمتر و کمتر می‌گردد هم‌چنین همان‌طور که در شکل ۷ مشاهده می‌شود نیروی میراکننده می‌تواند سرعت یون را تا حد بسیار زیادی کاهش دهد. وارد کردن نیروی میراکننده به سیستم، نواحی پایداری را گسترش می‌دهد که این امر انتخاب ولتاژهای  $ac$  و  $dc$  فرکانس و ابعاد دام را برای گیراندازی یون متنوع‌تر می‌سازد هم‌چنین با توجه به نمودار ولتاژ مستقیم نسبت به ولتاژ متناوب (شکل ۹) برای یون‌ها یا

(2008).

5. T Hasegawa, K Uehara, *Applied Physics B*. **61** (1995) 159.
6. D W Jordan, P Smith: *Nonlinear Ordinary Differential Equations*, Clarendon, Oxford (1987) 257.
7. W Chen, B A Collings, D J Douglas, *Anal. Chem.* **72** (2000) 540.

1. G C Zhang, J L Shen, J H Dai, H J Zhang, *Phys. Rev. A* **60** (1999) 704.
2. R E March, *J. Mass Spectrometry*, **32** (1997) 351.
3. K Blaum, F Herfurth: "Trapped Charged Particles and Fundamental Interactions," *Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin* **749** (2008) 99-100.
4. J R Reitz, F J Milford, R W Christy, *Foundation of Electromagnetic Theory*, Addison Wesley, Edition 4