

УДК 537.534.3

Ю.К. Голиков, К.В. Соловьёв

АНАЛИТИЧЕСКОЕ СШИВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ИОННО-ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИДЕАЛЬНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ ФОКУСИРОВКОЙ

Yu.K. Golikov, K.V. Solovyev

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

ANALYTICAL CONNECTION OF IDEAL SPACE-TIME FOCUSING ION SYSTEM ELEMENTS

В статье дано описание новой идеологии синтеза идеально фокусирующих ионно-оптических систем путем сшивания их элементов без потери качества фокусировки в местах сшивки. Описанная теория применена для построения электростатической ионной ловушки.

ИОННАЯ ОПТИКА, ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ ИОННАЯ ЛОВУШКА, ИДЕАЛЬНАЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЯ ФОКУСИРОВКА.

A new approach to ideal ion optical system synthesis using analytical connection of ion optical elements is described. The method discussed prevents loss of ideal focusing in a place of elements junction. The theory described is used to build electrostatic ion trap.

ION OPTICS, ELECTROSTATIC ION TRAP, IDEAL SPACE-TIME FOCUSING.

Принцип идеальной пространственно-временной фокусировки (ИПВФ) в статических электрических полях с потенциалом, содержащим аддитивную компоненту, квадратичную по одной декартовой координате, был впервые предложен в работе [1]. Этот принцип дал начало целому направлению динамической масс-спектрометрии [2 – 5], интенсивно развивающемуся в последние несколько лет и приведшему к появлению нового класса аналитических приборов с рекордными параметрами. Конструирование традиционных корпускулярно-оптических систем позволяет использовать дискретные элементы ионного тракта, обеспечивая оптимальное сочетание фокусирующих и диспергирующих элементов прибора. В процессе же синтеза систем с ИПВФ необходимо решать задачу сохранения непрерывной квадратичной зависимости потенциала по одному из направлений (для определенности – по координате z) вдоль

всего пути следования ионного пакета, так как в противном случае идеальная фокусировка разрушится. В то же время следует обеспечивать удержание (и даже фокусировку) пучка в плоскости его поперечного движения. Аналогичная проблема удержания решается в ловушках Пауля [6] за счет переменного поля, а в ловушках Орбитреп [3 – 4] – за счет использования углового момента и, соответственно, существующей при определенных начальных данных эффективной радиальной потенциальной ямы. Если мы строим, например, электростатическую систему с плоскостью симметрии, то лишены указанных способов решения данной задачи. Рассмотрим поле гиперболоида, определяемое соотношением

$$\begin{aligned} \varphi &= -\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2; \\ -\alpha + \beta + \gamma &= 0; \alpha, \beta, \gamma \geq 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Данное поле обеспечивает финитность движения ионов по координатам z и y , но

не по x . В то же время из фрагментов потенциалов (1) с различными коэффициентами вполне можно собрать систему, в которой реализуется и удержание по x . Действительно, зависимость потенциала (1) от x представляется перевернутой параболой, с которой «скатываются» частицы. Если же взять три смещенных друг относительно друга параболы, то их фрагменты позволяют реализовать потенциальную яму, в которой две крайние (с большей амплитудой) будут служить берегами, а средняя парабола – дном ямы. Этой идее использования фрагментов, как кажется на первый взгляд, противоречит требование аналитичности потенциала. Покажем, что это не так.

Рассмотрим далее некоторую одномерную кусочно-непрерывную функцию:

$$f(x) = \{f_0(x), x \in]-\infty, x_1]; f_1(x), x \in]x_1, x_2]; \dots f_n(x), x \in]x_n, +\infty[\}. \quad (2)$$

Введем в рассмотрение также функцию Хевисайда:

$$H(x) = \{0, x < 0; 1, x \geq 0\}.$$

Очевидно, что

$$H(-x) = \{1, x < 0; 0, x \geq 0\}.$$

Построим также вспомогательную П-образную функцию:

$$G(x, x_1, x_2) = (H(x_2 - x) + H(x - x_1)) / 2 = \{1, x \in [x_1, x_2]; 0, x \notin [x_1, x_2]\}.$$

Тогда функция $f(x)$ (см. формулу (2)) может быть записана в виде

$$f(x) = f_0(x) H(x_1 - x) + f_n H(x - x_n) + \sum_{i=1}^{n-1} f_i(x) G(x, x_i, x_{i+1}), \quad (3)$$

где $f_i, i = 0, \dots, n$, могут обладать на всей числовой оси любой степенью гладкости, а их сшивка определяется обобщенными функциями Хевисайда.

В общем случае (3) не будет даже кусочно-непрерывной. Функция H может определяться как пределы некоторых непрерывных функций, взятых с соответствующими коэффициентами, например таких, как гиперболический тангенс (th) или арктангенс (arctg). Если точного совпадения значений $f(x)$ и $f_i(x)$ вблизи точек x_i (x_i – точки сочленения фрагментов) не требуется, вполне резонным будет заменить функции Хевисайда в выражении (3) приближающими их непрерывными агрегатами – например, такими (рис. 1, а):

$$\tilde{H}(x) = (1 + \text{th } ax) / 2. \quad (4)$$

Данная идея может быть реализована и при синтезе ионно-оптического тракта ионной ловушки из фрагментов полей вида (1) или каких-либо иных. Алгоритм такого построения использует методы теории функций комплексного переменного для распространения поля с плоскости симметрии системы в пространство. Существенной яв-

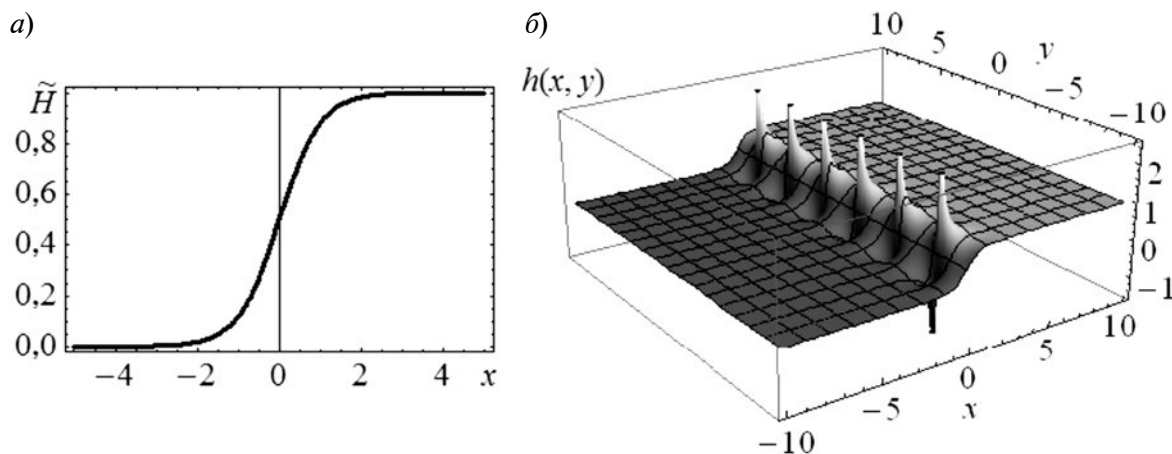


Рис. 1. Функция $\tilde{H}(x)$, $a = 1$ (а) и построенный на ее базе аннулятор $h(x, y)$ (б) (см. формулы (4), (5))

ляется структура двумерно-гармонических функций-аннуляторов, определяемых соотношениями

$$h(x, y) = \text{Im}(i \tilde{H}(x + iy)) = \frac{1}{2} + \frac{\text{sh } 2ax}{2(\cos 2ay + \text{ch } 2ax)} \quad (5)$$

и дающая возможность осуществить указанную стыковку фрагментов полей.

Вид аннулятора (5) при $a = 1$ представлен на рис. 1, б.

Итак, рассмотрим применение аннуляторов для синтеза ионных ловушек с квадратичной зависимостью потенциала от z .

Поле ловушки можно представить в виде

$$\varphi = z^2 - y^2 + g(x, y), \quad (6)$$

где $\Delta_{x,y}g(x, y) = 0$, т. е. трехмерно-гармоническая функция представлена суммой двух двумерно-гармонических.

При этом вторая функция в выражении (6) в значительной степени произвольна, и зависимость от x входит в него только через структуру функции g . Следовательно, конструируя определенным образом g , можно обеспечить пространственно-временную фокусировку пучка по этой координате. Задавая зависимость $g(x, y)$, не следует забы-

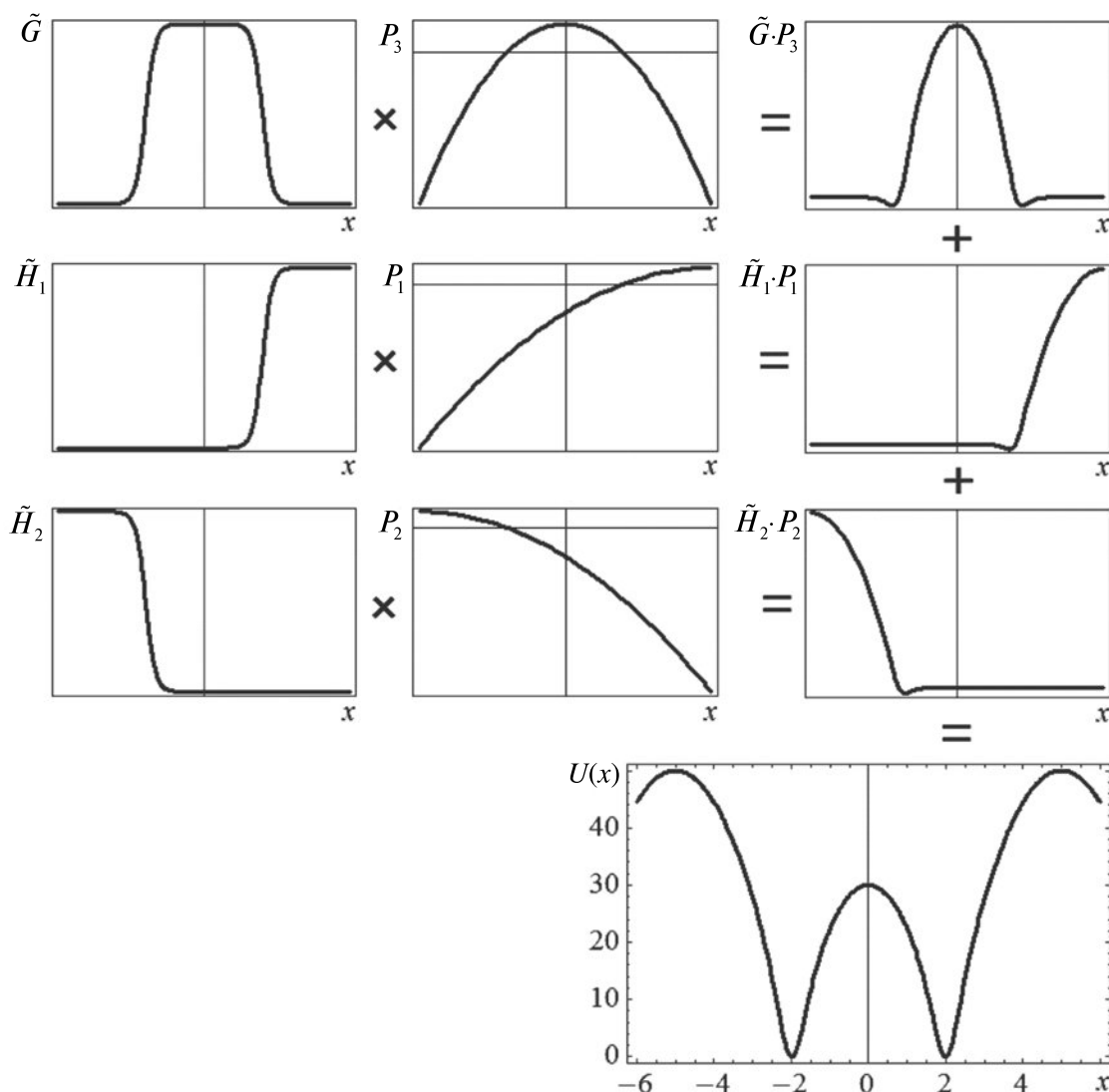


Рис. 2. Технология построения требуемого одномерного потенциала с использованием аннуляторов; \tilde{G} , \tilde{H}_1 , \tilde{H}_2 – аннуляторы, P_1 , P_2 , P_3 – параболы

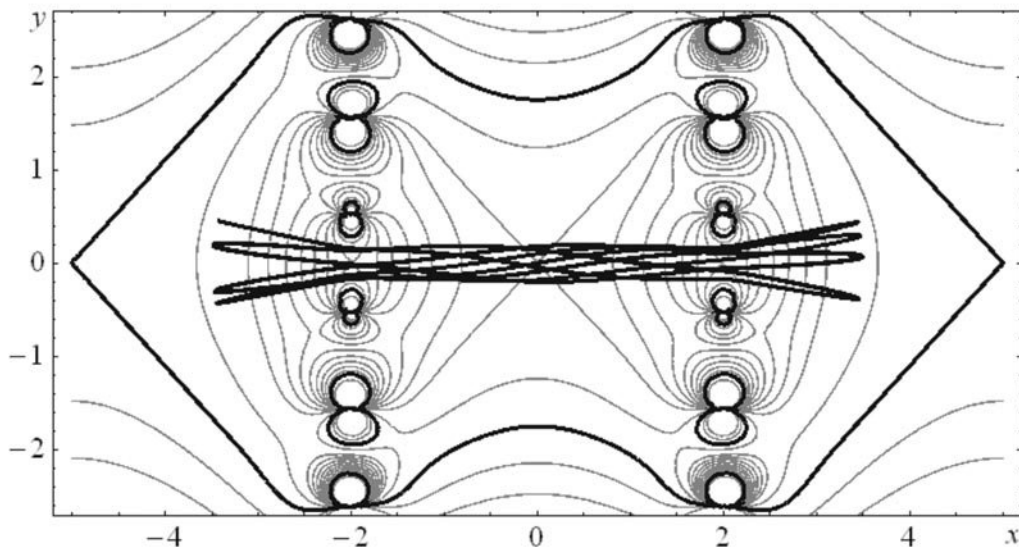


Рис. 3. Эквипотенциальный портрет и траектории поля ионной ловушки в плоскости $z = 0$

вать, что необходимо также гарантировать удерживающее воздействие поля на пучок по координате y .

Рассмотрим для начала процесс построения функции $f(x) = g(x, 0)$ как процедуру сшивания квадратичных функций, обеспечивающую создание требуемого x -профиля потенциала. Идея состоит в выделении участков парабол путем умножения этих парабол на аннуляторы с последующим сложением результатов умножений:

$$g(x, 0) = \sum_{i=1}^4 k_i ((x - x_i)^2 + c_i) \times \frac{\text{th } a(x - d_i) + 1}{2}, \quad (7)$$

где k_i , x_i , c_i , d_i — параметры согласования.

Графически схема данного алгоритма представлена на рис. 2. Результат построения искомого одномерного потенциала приведен в правом нижнем углу рисунка.

Следующий шаг — восстановление поля в пространстве — следует за распространением (аналитическим продолжением) функции g с прямой на плоскость:

$$g(x, y) = \text{Im}(i f(x + i y)). \quad (8)$$

При переходе к трехмерному рассмотрению процесс синтеза может интерпретироваться как процесс сочленения трех гиперболоидов (1).

Аналитическое сшивание элементов посредством аннуляторов приводит к тому, что происходит существенная деформация эквипотенциалей вблизи области сшивания, обусловленная структурой поля аннуляторов. Дело в том, что функции аннуляторов (в данном случае) имеют особые точки. Однако при соответствующем выборе параметра (параметр a на рис. 1) особенности поля расположены на достаточном расстоянии от области распространения пучка и представляется возможным обеспечить вполне приемлемую конфигурацию полезающих электродов (рис. 3).

Потенциал системы дается выражением

$$\varphi = z^2 - y^2 + \sum_{i=1}^4 (x - x_i) y \times s_1(x - x_i, y, a_i, b_i) + \frac{1}{2} ((x - x_i)^2 - y^2 + c_i) \times s_2(x - x_i, y, a_i, b_i), \quad (9)$$

где

$$s_1 = \frac{-\sin(2ay)}{\cos(2ay) + \text{ch}(2a(x - b))}, \quad (10)$$

$$s_2 = 1 + \frac{-\text{sh}(2a(x - b))}{\cos(2ay) + \text{ch}(2a(x - b))}.$$

Значения входящих в выражение (9) параметров определяются в процессе оптимизации ионно-оптических свойств ловушки.

Таким образом, в работе описан новый принцип синтеза идеальных ионно-оптических систем, базирующийся на введении специальных функций-аннуляторов, позволяющих обеспечить «бесшовное» со-

единение элементов системы. Идеи проиллюстрированы примером синтеза электростатической ионной ловушки с идеальной пространственно-временной фокусировкой пучка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. С. SU № 1247973, СССР, МПК⁷ H 01 J 49/40. Времяпролетный масс-спектрометр / Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л., Печалина Е.Э., Холин Н.А.; заявл. 16.01.1985; опубл. 30.07.86, Бюл. № 28. – 3 с., ил.

2. Голиков, Ю.К., Краснова Н.К., Соловьев К.В., Никитина Д.В. Интегрируемые электростатические ионные ловушки // Прикладная физика. 2006. № 5. С. 50 – 57.

3. Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A., Hardman M., Cooks G. The Orbitrap: a new mass spectrom-

eter// J. Mass Spectrom. 2005. Vol. 40. P. 430–443.

4. Perry R.H., Cooks G.R., Noll R.J. Orbitrap mass spectrometry: instrumentation, ion motion and applications// Mass Spectrometry Reviews. 2008. Vol. 27. P. 661–699.

5. Golikov U., Solovyev K., Sudakov M., Kumashiro S. Multi-Reflecting Ion Optical Device. Patent US. No. 8 237 111 B2, 2012.

6. March R.E., Todd J.F. Quadrupole ion trap mass spectrometry. Hoboken: J. Wiley & Sons, 2005. 346 p.

REFERENCES

1. Gall L.N., Golikov Yu.K., Aleksandrov M.L., Pechalina E.E., Kholin N.A. Vremyaproletnyi mass-spektrometr [Time-of-flight Mass Spectrometer]. Certificate of Authority SU, 1986, No. 1247973. (rus)

2. Golikov Yu.K., Krasnova N.K., Solovyev K.V., Nikitina D.V. Integrable electrostatic ion traps. *Prikladnaya Fizika*, 2006, No. 5, pp. 50-57. (rus)

3. Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A., Hardman M., Cooks G. The Orbitrap: a new mass spectrometer. *J. Mass Spectrom*, 2005, Vol. 40, pp. 430–443.

4. Perry R.H., Cooks G.R., Noll R.J. Orbitrap mass spectrometry: instrumentation, ion motion and applications. *Mass Spectrometry Reviews*, 2008, Vol. 27, pp. 661–699.

5. Golikov U., Solovyev K., Sudakov M., Kumashiro S. Multi-Reflecting Ion Optical Device. Patent US, 2012, No 8 237 111 B2.

6. March R.E., Todd J.F. Quadrupole ion trap mass spectrometry. Hoboken. J. Wiley & Sons, 2005. 346 p.

ГОЛИКОВ Юрий Константинович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

СОЛОВЬЁВ Константин Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 k-solovyev@mail.ru