

Научная статья

УДК 621.384.8

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18206>

ВЛИЯНИЕ НЕСООСНОСТИ ПОЛЕЙ И АСИММЕТРИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЗОНЫ УСТОЙЧИВОСТИ КОМБИНИРОВАННОЙ ИОННОЙ ЛОВУШКИ

А. С. Бердников¹, А. В. Егорова², Н. К. Краснова²,

С. В. Масюкович¹, К. В. Соловьев^{2, 1} □

¹ Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

□ k-solovyev@mail.ru

Аннотация. Данное исследование продолжает цикл статей, посвященных особенностям функционирования ионно-оптических устройств с периодическим электрическим питанием и постоянным однородным магнитным полем, применяемых в масс-спектрометрии. В статье показано, как диаграмма устойчивости комбинированной ионной ловушки меняет свою структуру при отклонении конфигурации ловушки от идеальной. Определено влияние величины угла между осью симметрии электрического поля и направлением магнитной индукции, а также влияние нарушения осевой симметрии электрического поля на картину зон устойчивости. Полученные результаты целесообразно использовать как для оценки влияния дефектов изготовления либо юстировки на работу классической комбинированной ловушки, так и для проектирования новых ловушек, не использующих осевую симметрию.

Ключевые слова: комбинированная ионная ловушка, зона устойчивости, масс-спектрометрия, удержание ионов

Финансирование: Работа частично профинансирована в рамках темы FFZM-2022-0009 (номер гос. регистрации 12204060002-3) Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-01157-23-00 от 29.12.2022 для Института аналитического приборостроения Российской академии наук (Санкт-Петербург).

Для цитирования: Бердников А. С., Егорова А. В., Краснова Н. К., Масюкович С. В., Соловьев К. В. Влияние несоосности полей и асимметрии электрического поля на зоны устойчивости комбинированной ионной ловушки // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 60–68. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18206>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article
DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18206>

THE INFLUENCE OF FIELD MISALIGNMENT AND ELECTRIC FIELD ASYMMETRY ON THE STABILITY ZONES OF A COMBINED ION TRAP

A. S. Berdnikov¹, A. V. Egorova², N. K. Krasnova²,

S. V. Masyukevich¹, K. V. Solovyev^{2, 1} □

¹ Institute for Analytical Instrumentation of RAS, St. Petersburg, Russia;

² Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

□ k-solovyev@mail.ru

Abstract. This study continues a series of articles devoted to the operating features of ion-optical devices with periodic electric power supply and constant homogenous magnetic field, used in mass spectrometers. It has been shown how the structure of combined ion trap stability diagram is changed when the trap configuration deviates from the ideal one. The influence of an angle between the electric field symmetry axis and a magnetic field direction as well as the influence of the electric field asymmetry on the pattern of stability zones were found. The results obtained are worthy of use both for estimating the impact of manufacturing defects and for designing new ion traps without axial symmetry.

Keywords: combined ion trap, stability zones, mass spectrometry, ion confinement

Funding: The research was funded in part within the framework of the FFZM-2022-0009 topic (State registration No. 122040600002-3) of the State Assignment No. 075-01157-23-00, dated 29.12.2022, of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation for Institute for Analytical Instrumentation of RAS (St. Petersburg).

For citation: Berdnikov A. S., Egorova A. V., Krasnova N. K., Masyukevich S. V., Solovyev K. V., The influence of field misalignment and electric field asymmetry on the stability zones of a combined ion trap, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (2) (2025) 60–68. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18206>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Комбинированной ионной ловушкой обычно называют ловушку Пеннинга с поданным на ее электроды периодическим питанием. Фактически эта ловушка представляет собой комбинацию ловушек Пеннинга и Пауля [1, 2]. Комбинированная ионная ловушка хотя и обладает недостатками каждой из составляющих, однако имеет ряд достоинств, в частности увеличенную зону стабильности.

Построение областей устойчивости ионов в комбинированной ловушке удобно проводить во вращающейся системе координат, позволяющей разделить переменные и получить пару независимых уравнений Хилла [3] (в частном случае — уравнений Матье). Область устойчивости системы в этом случае строится как область пересечения зон устойчивости полученных уравнений Хилла.

Однако данный прием эффективен лишь для систем с осевой симметрией. В то же время существует ряд вариаций конфигурации комбинированной ловушки, выводящих систему из числа осесимметричных, но сохраняющих линейность уравнений движения ионов. Последний факт дает возможность изучать характер движения ионов, применяя аналитические средства теории Флоре [4, 5]. Подход с использованием указанной теории уже использовался нами ранее [6 – 8]. Он позволяет непосредственно прояснить условия устойчивости движения ионов, а значит, облегчать исследование системы и делать предположения о возможных режимах ее работы.

В данной статье показана возможность использования теории Флеке для анализа ионных ловушек на основе неосесимметричных гиперболических электрических полей с периодическим питанием, погруженных в однородное магнитное поле произвольного направления.

Исследование устойчивости безразмерной модели ловушки

Для упрощения дальнейшего изложения введем безразмерные единицы измерения [6], полагая, что размерные координаты $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$ и время t связаны с соответствующими безразмерными координатами $\mathbf{r} = (x, y, z)$ и временем τ следующими соотношениями:

$$\mathbf{R} = \ell \mathbf{r}, t = T \tau, \quad (1)$$

где ℓ , T – линейный и временной масштабы, выбранные из физических соображений.

Движение частицы заряда e и массы m в ловушке происходит в однородном постоянном магнитном поле с вектором магнитной индукции, определяемом его величиной B_0 и направлением, задаваемым полярным и азимутальным углами (θ, ϕ) относительно системы координат, привязанной к геометрии электрического квадруполя:

$$\mathbf{B} = B_0 (\sin \theta \cdot \cos \phi, \sin \theta \cdot \sin \phi, \cos \theta) \quad (2)$$

и в электрическом поле (с периодическим питанием), квадратичном по координатам:

$$\begin{aligned} U = & [U_0 - U_1 f(\omega t)] \frac{\alpha X^2 + \beta Y^2 + \gamma Z^2}{\ell^2}, \\ f(\omega(t + \sigma)) = & f(\omega t), \\ \alpha + \beta + \gamma = & 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где U_0 , U_1 – амплитуды постоянной и переменной составляющих питающего напряжения; ω – круговая частота последнего, σ – его период; α , β , γ – параметры, которые задают геометрию поля.

Безразмерные уравнения движения в указанных полях образуют систему

$$\begin{aligned} \ddot{x} = & -2\alpha [a - 2q \cdot f(2\tau)]x + \dot{y}b_z - \dot{z}b_y, \\ \ddot{y} = & -2\beta [a - 2q \cdot f(2\tau)]y + \dot{z}b_x - \dot{x}b_z, \\ \ddot{z} = & -2\gamma [a - 2q \cdot f(2\tau)]z + \dot{x}b_y - \dot{y}b_x, \end{aligned} \quad (4)$$

где компоненты безразмерного магнитного поля определяются равенством

$$\mathbf{b} = b (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) = (b_x, b_y, b_z), \quad (5)$$

а коэффициенты a , q , b , при выборе масштаба времени $T = 2/\omega$, задаются соотношениями

$$a = \frac{4eU_0}{\omega^2 m \ell^2}, \quad q = \frac{2eU_1}{\omega^2 m \ell^2}, \quad b = \frac{2eB_0}{\omega m}. \quad (6)$$

Точки над переменными в уравнениях (4) обозначают дифференцирование по безразмерному времени τ .

Система (4) имеет в общем случае шесть независимых параметров, влияющих на устойчивость:

традиционные a и q ;

новые – b , θ , ϕ , которые связаны с индукцией и направлением магнитного поля;

два параметра геометрии электрического поля, например α , β (с учетом последнего уравнения системы (3)).

Визуализация многомерной зоны возможна, очевидно, лишь сечениями с размерностью не более трех. Здесь мы ограничимся традиционными двумерными диаграммами.

Для безразмерного магнитного поля $\mathbf{b} = b (0, 0, 1)$, направленного вдоль оси симметрии поля электрического, вид уравнений (4) упрощается:

$$\begin{aligned} \ddot{x} = & -2\alpha (a - 2q \cdot f(2\tau))x + b \dot{y} \\ \ddot{y} = & -2\beta (a - 2q \cdot f(2\tau))y - b \dot{x} \\ \ddot{z} = & -2\gamma (a - 2q \cdot f(2\tau))z = - (a_z - 2q_z \cdot f(2\tau))z \end{aligned} \quad (7)$$



Электрическому полю с осевой симметрией соответствует набор параметров $(\alpha, \beta, \gamma) = (-1/4, -1/4, 1/2)$.

Дальнейшие изображения зонных диаграмм будут приведены в координатах $(q, a) = (q_z, a_z)$.

Устойчивость движения ионов в осесимметричном гиперболическом электрическом и продольном магнитном полях исследуется в системе координат, вращающейся вокруг оси z . Напомним, что если ввести комплексную переменную $\xi = x + iy$ при $\alpha = \beta = -1/4$, то из первых двух уравнений системы (7) мы получаем следующее уравнение:

$$\ddot{\xi} = \frac{1}{2} [a - 2q \cdot f(2\tau)] \xi - ib\dot{\xi}. \quad (8)$$

Далее, переходя к вращающейся системе координат $\eta = x^* + iy^*$, используя преобразование

$$\xi = \eta \exp(-ib\tau/2),$$

приводим уравнение (8) к следующему виду:

$$\ddot{\eta} - \frac{1}{2} \left[a - \frac{b^2}{2} - 2q \cdot f(2\tau) \right] \eta = 0. \quad (9)$$

Таким образом мы получаем уравнение Хилла со смещением по параметру a . И тогда систему, включающую третье уравнение системы (7) и уравнения (8), (9), можно легко исследовать на устойчивость традиционным способом суперпозиции зон устойчивости уравнения Хилла [1, 2].

Случай I. Рассмотрим вариант, когда электрическое поле осесимметрично, а именно $(\alpha, \beta, \gamma) = (-1/4, -1/4, 1/2)$, а магнитное направлено под углом θ к оси z , т. е. имеет место несоосность магнитного поля и оси симметрии поля электрического. Зависимости от азимутального угла нет, вектор индукции безразмерного магнитного поля $\mathbf{b} = b(\sin \theta, 0, \cos \theta)$. Тогда система (4) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= (1/2)(a - 2q f(2\tau))x + b \dot{y} \cos \theta, \\ \ddot{y} &= (1/2)(a - 2q f(2\tau))y + b(\dot{z} \sin \theta - \dot{x} \cos \theta), \\ \ddot{z} &= -(a - 2q f(2\tau))z - b \dot{y} \sin \theta. \end{aligned} \quad (10)$$

Систему (10) уже невозможно свести к набору уравнений Хилла, но она остается линейной с периодическими коэффициентами и потому подлежит исследованию по методике статьи [6].

Перепишем систему уравнений (4) в следующем виде:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(\tau)\mathbf{x}, \quad \mathbf{A}(\tau + A) = \mathbf{A}(\tau), \quad (11)$$

где

$$\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ x_5 \ x_6)^T = (x \ \dot{x} \ y \ \dot{y} \ z \ \dot{z})^T \quad (12)$$

(верхним индексом T обозначено транспонирование);

$$\mathbf{A}(\tau) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2\alpha[a - 2q \cdot f(2\tau)] & 0 & 0 & b_z & 0 & -b_y \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -b_z & -2\beta[a - 2q \cdot f(2\tau)] & 0 & 0 & b_x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & b_y & 0 & -b_x & -2\gamma[a - 2q \cdot f(2\tau)] & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Вынести суждение об устойчивости решений (13) позволяет, согласно теории Флоке [4, 5], анализ собственных чисел матрицы монодромии системы (11). Процедура построения диаграмм устойчивости системы (11) – (13) достаточно подробно описана в статье [6];

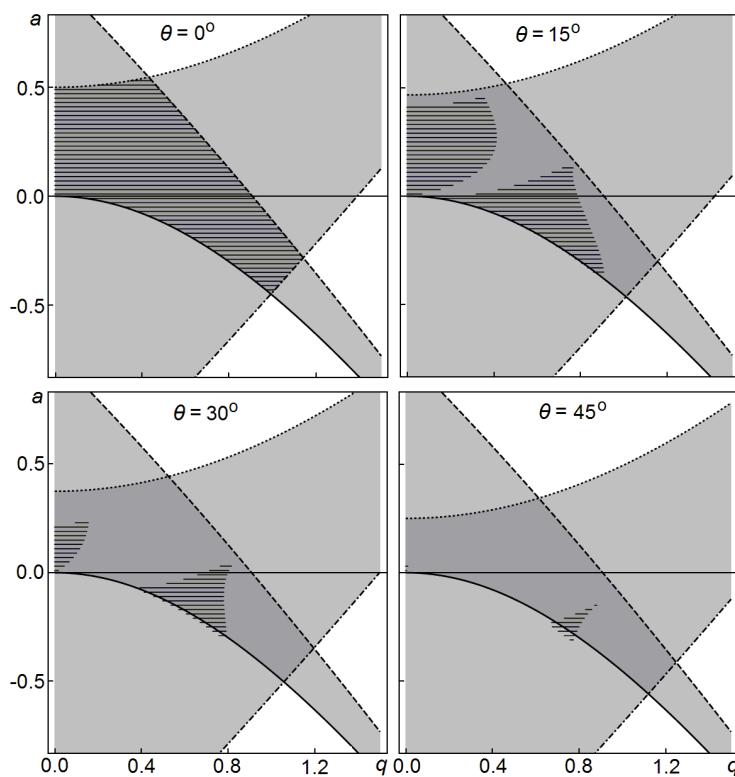


Рис. 1. Зоны устойчивости (показаны горизонтальной штриховкой) для различных значений угла θ – угла рассогласования оси симметрии электрического поля с направлением магнитного поля; $b = 1$; $f(\tau) = \cos \tau$ (случай I)

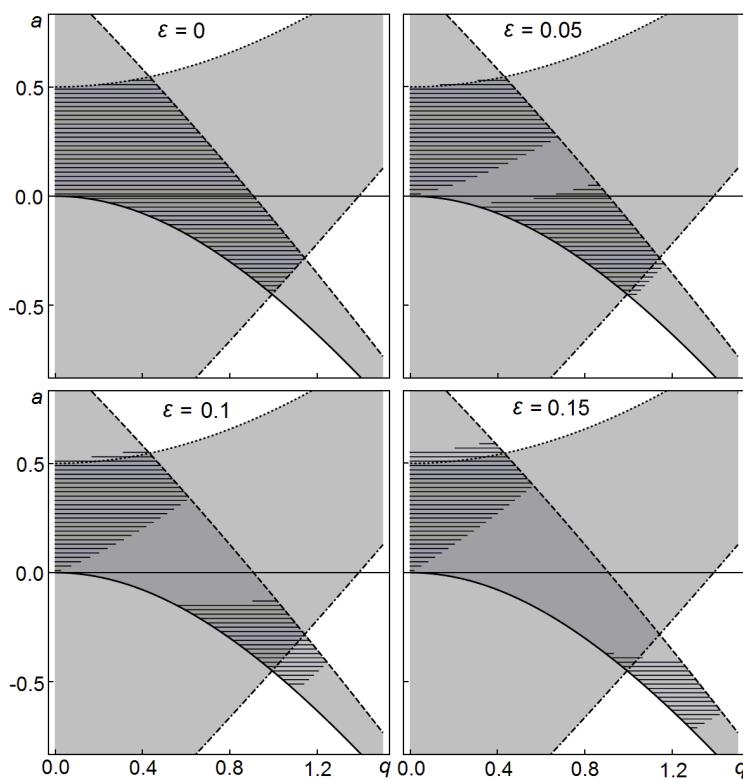


Рис. 2. Зоны устойчивости (показаны горизонтальной штриховкой) для различных значений параметра асимметрии ϵ электрического поля; $b = 1$, $f(\tau) = \cos \tau$ (случай II)



кратко напомним ее суть: строится фундаментальная матрица решений $\mathbf{X}(\tau)$, $\mathbf{X}(0) = \mathbf{E}$. Далее исследуется спектр матрицы монодромии $\mathbf{X}(A)$. Значениям параметров, соответствующим устойчивому движению, отвечает спектральный радиус, равный единице.

Рис. 1 иллюстрирует динамику изменения конфигурации первой зоны устойчивости для $f(\tau) = \cos \tau$ при $b = 1$ и варьировании параметра θ .

Случай II. Рассмотрим ситуацию, когда нарушена осевая симметрия электрического поля. Введем параметр ε , который лежит в интервале $0 < \varepsilon < \min(\alpha, \beta)$, и проанализируем случай электрического поля с геометрическими параметрами $(\alpha, \beta, \gamma) = (-1/4 - \varepsilon, -1/4 + \varepsilon, 1/2)$. Условие равенства нулю суммы параметров соблюдается, при $\varepsilon = 0$ имеем поле с эквипотенциалами — гиперболоидами вращения, при $\varepsilon \neq 0$ — гармоническое неосесимметричное поле. Система уравнений движения — та же: (11) — (13). Хотя в этом случае важны все компоненты (5) вектора магнитного поля \mathbf{b} , для простоты визуализации остановимся на варианте $\mathbf{b} = b(0, 0, 1)$. Представленный далее результат получен при выполнении уже указанной выше последовательности действий. Рис. 2 демонстрирует изменение конфигурации первой зоны устойчивости комбинированной ловушки для $f(\tau) = \cos \tau$ при $b = 1$ и изменении ε .

Заметим, что при получении диаграмм (рис. 1, 2) была реализована методика уточнения точек границы как точек перехода к/от неединичности спектрального радиуса матрицы монодромии, ранее использованная для более простой системы [7, 8]. Указанный подход иллюстрирует рис. 3, в верхней части которого показана зависимость спектрального радиуса матрицы монодромии L от параметра q уравнений (10) при значении параметра $a = 0,02$ (вариант $b = 1, \varepsilon = 0,05$); в нижней части рисунка показано соответствие значений q изменения спектрального радиуса границам областей устойчивости системы (10).

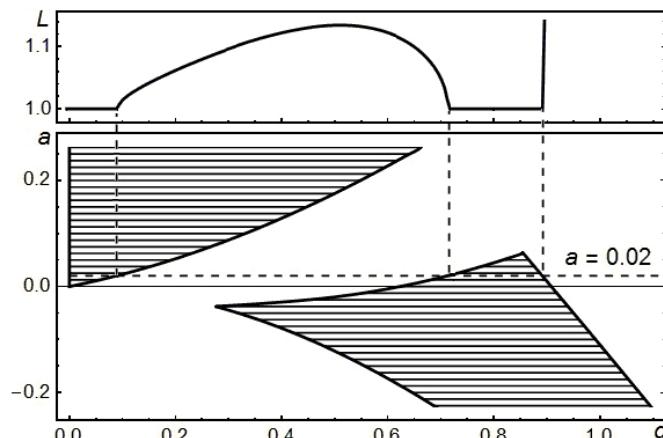


Рис. 3. Диаграмма (q, a) (нижняя часть рисунка) и зависимость $L(q)$ (его верхняя часть): первая показывает конфигурацию областей устойчивости в координатах (q, a) , вторая — смену значения спектрального радиуса матрицы монодромии L с единичного на неединичное и обратно на границах областей устойчивости при изменении параметра q вдоль линии $a = 0,02$ (горизонтальная пунктирная линия)

Заключение

Несоосность электрического и магнитного полей, как и неосесимметричность электрического поля существенно влияют на структуру диаграммы устойчивости традиционной (осесимметричной) комбинированной ионной ловушки и приводят к изменению этой диаграммы. Последняя дробится на фрагменты, определяя по-новому поведение системы в зависимости от значений параметров неидеальности.

Полученные результаты и методику можно использовать как для оценки влияния дефектов изготовления и юстировки на работу традиционной ионной ловушки, так и для проектирования новых ловушек, не использующих осевую симметрию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Major F. G., Gheorghe V. N., Werth G. Charged particle traps. Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. 354 p.
2. Vogel M. Particle confinement in penning traps. 2nd ed. Cham, Switzerland: Springer Int. Pub. AG, part of Springer Nature, 2024. 467 p.
3. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976. 576 с.
4. Floquet G. Sur les équations différentielles linéaires coefficients périodiques // Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure. 2e Serie, 1883. Tome 12. Pp. 47–88.
5. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 471 с.
6. Голиков Ю. К., Краснова Н. К., Соловьев К. В., Елохин В. А., Николаев В. И. Зоны устойчивости квадрупольного масс-спектрометра в продольном магнитном поле // Прикладная физика. 2006. № 3. С. 78–81.
7. Berdnikov A., Kapralov V., Solovyev K., Krasnova N. Algorithm for constructing a multidimensional stability domain of a charged particle in an ion-optical system with periodic supply voltage // Proc. of 2021 IEEE Int. Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech-2021), Oct. 14–15, 2021. Pp. 51–54.
8. Бердников А. С., Краснова Н. К., Масюкевич С. В., Соловьев К. В. Визуализация трехмерной зоны устойчивости квадрупольного фильтра масс в постоянном продольном магнитном поле // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 2. С. 26–33.

REFERENCES

1. Major F. G., Gheorghe V. N., Werth G., Charged particle traps, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg, 2005.
2. Vogel M., Particle confinement in penning traps., 2nd ed., Cham, Switzerland: Springer Int. Pub. AG, part of Springer Nature, 2024.
3. Kamke E., Differentialgleichungen Lösungsmethoden und Lösungen, Band 1. 10 Ed. B. G. Teubner, Springer, Leipzig, 1977.
4. Floquet G., Sur les équations différentielles linéaires coefficients périodiques, Ann. Sci. Éc. Norm. Supér. 2e Serie. 12 (1883) 47–88.
5. Demidovich B. P., Lektsii po matematicheskoy teorii ustoychivosti [Lectures on the mathematical stability theory], Nauka, Moscow, 1967 (in Russian).
6. Golikov Yu. K., Krasnova N. K., Solovyev K. V., et al., Stability zones of quadrupole mass spectrometer in longitudinal magnetic field, Appl. Phys. (Prikladnaya fizika). (3) (2006) 78–81 (in Russian).
7. Berdnikov A., Kapralov V., Solovyev K., Krasnova N., Algorithm for constructing a multidimensional stability domain of a charged particle in an ion-optical system with periodic supply voltage, In: Proc. of 2021 IEEE Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech-2021), Oct. 14–15, 2021. St. Petersburg, Russia. (2021) 51–54.
8. Berdnikov A. S., Krasnova N. K., Masyukovich S. V., Solovyev K. V., Visualization of the 3D stability zone of a quadrupole mass filter in the static longitudinal magnetic field, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (2) (2022) 26–33 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Россия.

190103, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.

asberd@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-0985-5964



ЕГОРОВА Анастасия Васильевна — студентка Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

e4av2abao@mail.ru

ORCID: 0009-0001-8247-6410

КРАСНОВА Надежда Константиновна — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

n.k.krasnova@mail.ru

ORCID: 0000-0002-6162-9481

МАСЮКЕВИЧ Сергей Владимирович — старший научный сотрудник ФГБУН «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.

serg_08@mail.ru

ORCID: 0000-0002-0873-8849

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

k-solovyev@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3514-8577

THE AUTHORS

BERDNIKOV Alexander S.

Institute for Analytical Instrumentation of RAS

31–33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia

asberd@yandex.ru

ORCID: 0000-0003-0985-5964

EGOROVA Anastasia V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

e4av2abao@mail.ru

ORCID: 0009-0001-8247-6410

KRASNOVA Nadezhda K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

n.k.krasnova@mail.ru

ORCID: 0000-0002-6162-9481

MASYUKEVICH Sergey V.

Institute for Analytical Instrumentation of RAS

31–33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia

serg_08@mail.ru

ORCID: 0000-0002-0873-8849

SOLOVYEV Konstantin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

k-solovyev@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3514-8577

*Статья поступила в редакцию 03.11.2024. Одобрена после рецензирования 05.12.2024.
Принята 05.12.2024.*

Received 03.11.2024. Approved after reviewing 05.12.2024. Accepted 05.12.2024.