ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ҒЫЛЫМДАРЫ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

МРНТИ 29.35.37; 29.35.39

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ КВАДРУПОЛЬ С ЦИЛИНДРИЧЕСКИМИ ЭЛЕКТРОДАМИ

И.Ф. СПИВАК-ЛАВРОВ, М.М. КОПТЛЕУОВА, С.У. ШАРИПОВ

Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова,

Актобе, Казахстан

Аннотация. Получено решения задачи Дирихле для уравнения Лапласа в цилиндрических координатах для осесимметричного квадруполя с граничными условиями, заданными на поверхности кругового цилиндра. Решение сведено к вычислению гармонического потенциала, для нахождения которого используются методы ТФКП. Найдена простая аналитическая формула, которая точно описывают электростатический потенциал поля квадруполя с цилиндрическими электродами. Используя найденные формулы для потенциала и его производных можно точно рассчитывать области стабильности квадрупольных ионных ловушек при включении дополнительных радиочастотных полей.

Ключевые слова: поле квадруполя, квадрупольный массс-спектрометр, квадрупольная ионная ловушка.

Abstract. The solutions of the Dirichlet problem for the Laplace equation in cylindrical coordinates are obtained for an axisymmetric quadrupole with boundary conditions specified on the surface of a circular cylinder. The solution is reduced to calculating the harmonic potential, for the determination of which the TFKP methods are used. A simple analytical formula is found that accurately describes the electrostatic potential of the field of a quadrupole with cylindrical electrodes. Using the formulas found for the potential and its derivatives, it is possible to accurately calculate the stability regions of quadrupole ion traps when additional radio-frequency fields are turned on.

Key words: quadrupole field, quadrupole mass spectrometer, quadrupole ion trap.

Аңдатпа. Дөңгелек цилиндрдің бетіндегі шекаралық шарттары бар оське симметриялы квадруполь үшін цилиндрлік координаталардағы Лаплас теңдеуі үшін Дирихле есебінің шешімі алынды. Комплекс айнымалы функциялар теориясының әдістерін қолдану арқылы гармониялық потенциалды есептеуге негізделген. Цилиндрлік электродтары бар квадруполь өрісінің электростатикалық потенциалын анық сипаттайтын қарапайым аналитикалық формула табылды. Потенциал және оның туындылары үшін табылған формулаларды қолдана отырып қосымша радиожиілікті өрістерді қосқан кезде квадрупольды ионды тұзақтардың тұрақтылық аймағын дәл есептеуге болады.

Кілт сөздер: квадруполь өрісі, квадрупольды масс-спектрометр, квадрупольды иондық тұзақ.

1. Введение

Квадрупольные электростатические поля широко используются в аналитическом приборостроении. Квадрупольные и октупольные электростатические системы применяются для коррекции аберраций электростатических линз и зеркал [1-3]. Широкое распространение в настоящее время получили квадрупольные масс-спектрометры, а также различные ионные ловушки, в которых используются квадрупольные поля. Линейная ионная ловушка была предложена В. Паулем в 1952 г., который за эти разработки был удостоен Нобелевской премии в 1989 году [4]. Линейная ионная ловушка по сути являлась все тем же квадрупольным масс-спектрометром, претерпевшим некоторые конструктивные изменения для возможности трехмерной стабильной локализации заряженных частиц [4-7]. Со временем появились многочисленные модификации линейной ловушки, такие как ионная поверхностная ловушка [8], микроловушка на поверхности для реализации квантового процессора [9], тороидальная ионная ловушка [10], которые, изменяя пространственную форму и ориентацию электродов [11], оставляли без изменения саму идею квадрупольного масс-спектрографа [12].

Работа линейных ловушек основана на масс-селективном резонансном выводе ионов из объёма ловушки. Вывод ионов из ловушки осуществляется путем дипольного или квадрупольного резонансного возбуждения колебаний ионов. Физический принцип фокусировки и захвата частиц в квадрупольное электрическое поле заключается в приложении потенциала, который имеет квадратичную зависимость от декартовых координат. Такое поле точно реализуется с помощью электродов с гиперболическими поверхностями, которые практически трудно изготовить с высокой точностью, поэтому на практике квадрупольное поле создается с помощью четырех цилиндрических стержней [4-7]. Отметим, что в случае упрощенных цилиндрических электродов проявляется слабая нелинейность поля, влияние которой на масс-селективные характеристики приборов трудно учесть. Поэтому разработка квадрупольных электростатических систем с простой конфигурацией электродов, поле которых можно точно описать аналитически, является достаточно актуальной задачей аналитического приборостроения.

2. Осесимметричные поля, сводимые к двумерным

Обычно для вычисления потенциалов, описывающих поля корпускулярно-оптических систем (КОС) используются системы координат, которые соответствуют симметрии КОС. В случае двумерных полей скалярный потенциал φ не изменяется вдоль некоторого направления. Если вдоль этого направления направить одну из осей декартовой системы координат, например ось z, то потенциал будут зависеть только от двух других координат x, y. Потенциал, описывающий такие поля, удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}=0\,. \tag{1}$$

Решения уравнения (1) являются гармонической функцией декартовых координат x, y, поэтому в этом случае для расчета потенциала можно использовать мощный аппарат теории функций комплексной переменной (ТФКП) [13-15].

При расчете осесимметричных полей используют цилиндрическую систему координат ρ, ψ, z, в которой уравнение Лапласа для потенциала φ имеет вид:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\psi^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=0\,. \tag{2}$$

В том случае, когда потенциал φ зависит только от ρ и ψ, получим уравнение:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\psi^2}=0\,. \tag{3}$$

С помощью замены

$$\eta=\ln\rho \tag{4}$$

уравнение (3) преобразуется в двумерное уравнение Лапласа:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\psi^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial\eta^2}=0\,, \tag{5}$$

решения которого являются гармоническими функциями переменных ψ и η. Однако в этом случае задачу можно решать и в декартовых координатах x, y, z, при этом потенциал будут зависеть только от координат x, y.

3. Квадруполь на цилиндре

В качестве примера рассмотрим квадрупольную электростатическую систему, в которой квадрупольное поле создается заданием потенциалов $\pm V$ на поверхности проводящего кругового цилиндра радиуса R, как показано на рис. 1. Измеряя линейные размеры в единицах R, получим граничную задачу на единичном круге, решение которой приводит к интегралу Пуассона для потенциала [13]:

$$\varphi(\rho,\psi)=\frac{1-\rho^2}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi}\frac{V(t)\,dt}{1+\rho^2-2\rho\cos(t-\psi)}\,. \tag{6}$$

Здесь $V(t)$ – угловое распределение потенциала на поверхности цилиндра. Перепишем выражение (6) в следующем виде:

$$\varphi(\rho,\psi)=\frac{1-\rho^2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{V(t)dt}{1+\rho^2-2\rho\left(\cos t\cos\psi+\sin t\sin\psi\right)}. \tag{7}$$

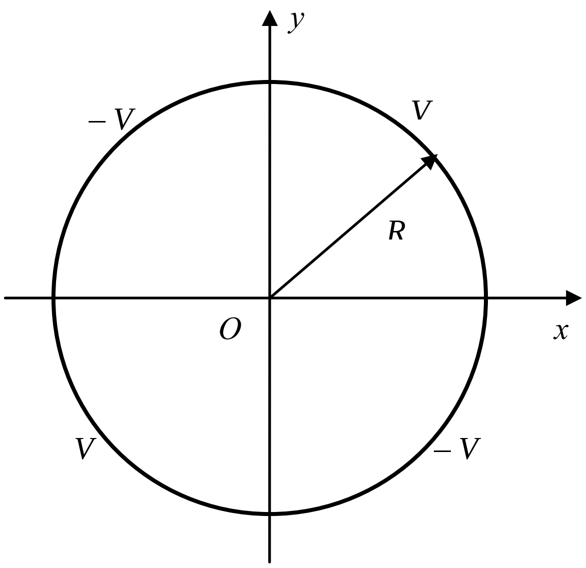

Рис. 1 – Квадруполь на цилиндре

Для вычисления интеграла (7) используем следующую формулу:

$$\int\frac{dx}{a+b\cos x+c\sin x}=\frac{2}{\sqrt{a^2-\left(b^2+c^2\right)}}\operatorname{arctg}\frac{(a-b)\operatorname{tg}\frac{x}{2}+c}{\sqrt{a^2-\left(b^2+c^2\right)}}. \tag{8}$$

Вывод формулы (8) приведен ниже:

$$\int\frac{dx}{a+b\cos x+c\sin x}=\int\frac{dx}{a+b\left(\cos^2\frac{x}{2}-\sin^2\frac{x}{2}\right)+c\,2\sin\frac{x}{2}\cos\frac{x}{2}}=$$

$$=\int\frac{dx\Big/\cos^2\frac{x}{2}}{\dfrac{a}{\cos^2\frac{x}{2}}+b\left(1-\dfrac{\sin^2\frac{x}{2}}{\cos^2\frac{x}{2}}\right)+c\,2\dfrac{\sin\frac{x}{2}}{\cos\frac{x}{2}}}=\int\frac{2d\left(\operatorname{tg}\frac{x}{2}\right)}{a\left(1+\operatorname{tg}^2\frac{x}{2}\right)+b\left(1-\operatorname{tg}^2\frac{x}{2}\right)+c\,2\operatorname{tg}\frac{x}{2}}=\left|u=tg\frac{x}{2}\right|=$$

$$=2\int\frac{du}{a\left(1+u^2\right)+b\left(1-u^2\right)+c\,2u}=2\int\frac{du}{a+b\;+(a-b)\left[u^2+2\frac{c}{a-b}u+\left(\frac{c}{a-b}\right)^2-\left(\frac{c}{a-b}\right)^2\right]}=$$

$$=2\int\frac{du}{a+b-\dfrac{c^2}{a-b}+\;(a-b)\left[u^2+2\dfrac{c}{a-b}u+\left(\dfrac{c}{a-b}\right)^2\right]}=$$

$$=\frac{2(a-b)}{a^2-b^2-c^2}\int\frac{du}{1+\dfrac{(a-b)^2}{a^2-b^2-c^2}\left(u+\dfrac{c}{a-b}\right)^2}=\left|v=\frac{a-b}{\sqrt{a^2-(b^2+c^2)}}\left(u+\frac{c}{a-b}\right)\right|=$$

$$=\frac{2}{\sqrt{a^2-(b^2+c^2)}}\int\frac{dv}{1+v^2}=\frac{2}{\sqrt{a^2-(b^2+c^2)}}\operatorname{arctg}v=\frac{2}{\sqrt{a^2-(b^2+c^2)}}\operatorname{arctg}\frac{(a-b)\operatorname{tg}\dfrac{x}{2}+c}{\sqrt{a^2-(b^2+c^2)}}$$

С помощью формулы (8) запишем следующее выражение для потенциала (7):

$$\varphi(\rho,\psi)=\frac{V}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{\left(1+\rho^2+2\rho\cos\psi\right)\operatorname{tg}\dfrac{t}{2}-2\rho\sin\psi}{1-\rho^2}\Bigg|_0^{\frac{\pi}{2}}-$$

$$-\frac{V}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{\left(1+\rho^2+2\rho\cos\psi\right)\operatorname{tg}\dfrac{t}{2}-2\rho\sin\psi}{1-\rho^2}\Bigg|_{\frac{\pi}{2}}^{\pi^-}+\frac{V}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{\left(1+\rho^2+2\rho\cos\psi\right)\operatorname{tg}\dfrac{t}{2}-2\rho\sin\psi}{1-\rho^2}\Bigg|_{\pi^+}^{\frac{3\pi}{2}}-$$

$$-\frac{V}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{\left(1+\rho^2+2\rho\cos\psi\right)\operatorname{tg}\dfrac{t}{2}-2\rho\sin\psi}{1-\rho^2}\Bigg|_{\frac{3\pi}{2}}^{2\pi}. \qquad (9)$$

В декартовых координатах x, y, z , найденный потенциал можно записать в виде:

$$\varphi(x,y)=\frac{2V}{\pi}\left(\operatorname{arctg}\frac{1+\rho^2+2x-2y}{1-\rho^2}-\operatorname{arctg}\frac{1+\rho^2+2x+2y}{1-\rho^2}+\operatorname{arctg}\frac{2y}{1-\rho^2}\right). \qquad (10)$$

Здесь $\rho=\sqrt{x^2+y^2}$. Легко проверить, что $\varphi(x,0)=\varphi(0,y)=0$, как и следовало ожидать, на осях координат потенциал обращается в нуль. Теперь найдем производные потенциала:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x}=\frac{2V}{\pi}\left\{\frac{2\left(1-\rho^2\right)+4x(1+x-y)}{\left(1-\rho^2\right)^2+\left[1+\rho^2+2(x-y)\right]^2}-\frac{2\left(1-\rho^2\right)+4x(1+x+y)}{\left(1-\rho^2\right)^2+\left[1+\rho^2+2(x+y)\right]^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{4xy}{\left(1-\rho^2\right)^2+4y^2}\right\}. \qquad (11)$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial y}=\frac{2V}{\pi}\left\{\frac{-2\left(1-\rho^2\right)+4y(1+x-y)}{\left(1-\rho^2\right)^2+\left[1+\rho^2+2(x-y)\right]^2}-\frac{2\left(1-\rho^2\right)+4y(1+x+y)}{\left(1-\rho^2\right)^2+\left[1+\rho^2+2(x+y)\right]^2}+\right.$$

$$+\frac{2\left(1-\rho^2+2y^2\right)}{\left(1-\rho^2\right)^2+4y^2}\Bigg\}. \tag{12}$$

Найденные формулы описывают также и поле монополя, создаваемого частью цилиндрического электрода с потенциалом V и двумя взаимно перпендикулярными полуплоскостями *xz* и *yz* с нулевым потенциалом. Картина поля монополя представлена на рис. 2, где изображены эквипотенциальные линии поля, потенциал которых равен: $0.1V$, $0.2V$, …, $0.9\,V$.

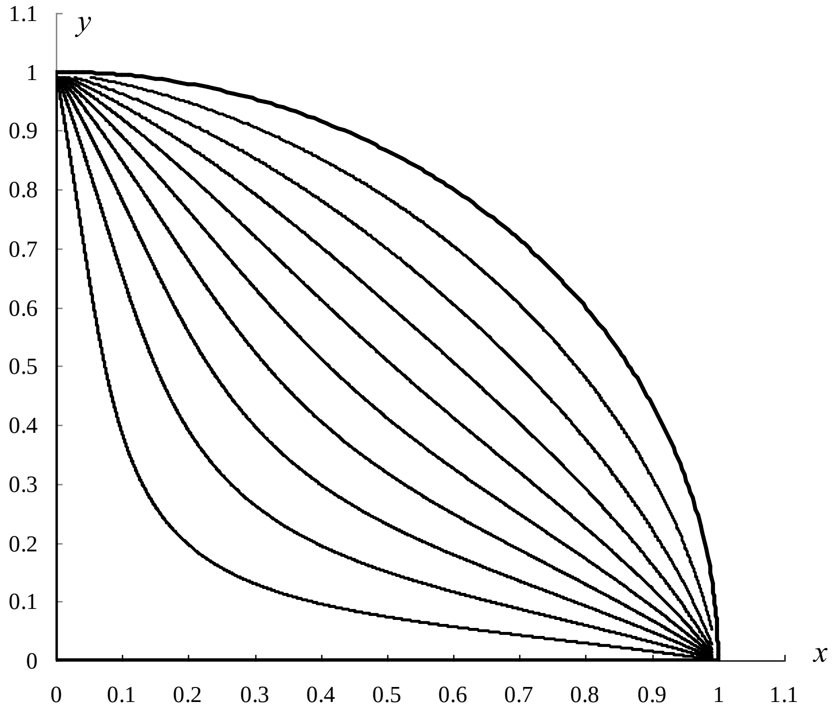

Рис. 2 – Картина эквипотенциалей поля цилиндрического монополя.

Эквипотенциали находились путем численного интегрирования дифференциальных уравнений:

$$\frac{dy}{dx}=-\frac{\partial\varphi}{\partial x}\Bigg/\frac{\partial\varphi}{\partial y}, \qquad \frac{dx}{dy}=-\frac{\partial\varphi}{\partial y}\Bigg/\frac{\partial\varphi}{\partial x}. \tag{13}$$

Начальные условия для уравнений (13) задавались на прямой $y=x$ и по формуле (10) находились такие значения x, при которых потенциал принимал значения 0.1 V, 0.2 V, …, $0.9V$. Эти значения x привелены ниже в таблице.

Таблица. Значения координаты x эквипотенциальных линий на прямой $y=x$.

φ/V	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$x=y$	0.19840	0.28143	0.34648	0.40307	0.45510	0.50475	0.55354	0.60274	0.65348

4. Заключение

Решение уравнения Лапласа для осесимметричного квадруполя с граничными условиями, заданными на поверхности кругового цилиндра, сведена к вычислению гармонического потенциала, для нахождения которого используются методы ТФКП. Найдена простая аналитическая формула (10), которая точно описывают электростатический потенциал поля квадруполя. Используя найденные формулы для потенциала и его производных можно точно рассчитывать области стабильности квадрупольных ионных ловушек при наложении дополнительных радиочастотных полей.

Применяя метод инверсии можно также найти аналитические выражения для потенциала квадрупольных систем с измененной геометрией электродов, модифицируя выражение (10).

Список использованной литературы

1. Preikszas D., Rose H. Correction properties of electron lenses and mirrors // Electron microscopy. – 1997, Vol. 46, N. 1. – P. 1–9.
2. Силадьи М. Электронная и ионная оптика. – М.: Мир, 1990. – 639 с.
3. Hawkes P.W., Spence J.C.H. (Eds.), Springer Handbook of Microscopy, Springer Handbooks. – Springer Nature Switzerland AG, 2019. – 1543 p. (https://doi.org/10.107/978-3-030-00069-1).
4. Пауль В. Нобелевские лекции по физике – 1989. Электромагнитные ловушки для заряженных и нейтральных частиц // УФН. – 1990, Т. 60, № 12. – С. 109–127.
5. D.J. Douglas, A.J. Frank, D.M. Mao. Linear ion traps in mass spectrometry // Mass Spectrom. Rev. 2005, 24 (1). – P. 1–29.
6. J.W. Hager. A new linear ion trap mass spectrometer // Rapid Commun. Mass Spectrom. – 2002, 16. – P. 512–526.
7. March R.E, Todd J.F.J. Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry. / Ed. by J.D. Winefordner. 2005. Vol. 165. – P. 1–78.
8. H. Qiao, C. Gao, D. Mao, N. Konenkov, D.J. Douglas. Spacecharge effects with mass selective axial ejection from a linear quadrupole ion trap // Rapid Commun. Mass Spectrom. – 2011, 25. – P.3509–3520.
9. Amini J.M., Britton J., Leibfried D., Wineland D.J. Microfabricated Chip Traps for Ions Atom Chips. / Ed. by J. Reichel, V. Vuletic WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. ´ KGaA, Weinheim. 2011.
10. Douglas D.J., Konenkov N.V. Ion Cloud Model for a Linear Quadrupole Ion Trap // Euro. J. Mass Spectrom. – 2012, 18. – P. 419–429.

11. D. J. Douglas, A.S. Berdnikov, N. V. Konenkov. The effective potential for ion motion in a radio frequency quadrupole field revisited // Int. J. Mass Spectrom. – 2015, V. 377. – P. 345–354.
12. Рождественский Ю.В., Рудый С.С. Линейная ионная ловушка с детерменированнм напряжением общего вида // ЖТФ. – 2017, т. 87, вып. 4. – С. 604–611.
13. Лаврентьев М.А. , Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1976. – 716 с.
14. Spivak-Lavrov I.F. Analytical Methods for The Calculation and Simulation of New Schemes of Static and Time-of-Flight Mass Spectrometers // Advances in Imaging and Electron Physics. – Burlington: Academic Press. – 2016. – V. 193. – P. 45–128.
15. Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Sharipov S.U. Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to 2D harmonic potentials // Advances in Imaging and Electron Physics. – Burlington: Academic Press. – 2020. – V. 215. – P. 181–193.

ҒТАМР 20.01.45

ИНФОРМАТИКАНЫ ОҚЫТУДАҒЫ САБАҚТАСТЫҚ ЖӘНЕ АҚПАРАТТЫҚ ТЕХНОЛОГИЯЛАР ЖҮЙЕСІНДЕ “ЖОО”

З. ТАЖИДДИНОВА

Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

Аңдатпа. Қазіргі уақытта Қазақстанда ақпараттық қоғам жағдайына көшудің бірқатар объективті алғышарттары бар. Олардың ішіндегі ең маңыздыларын ақпараттық саланың материалдық базасының тез дамуы, өндіріс пен басқарудың әртүрлі салаларын ақпараттандыру, әлемдік ақпараттық қоғамдастыққа белсенді кіру, жоғары кадрлық және ғылыми-техникалық әлеует, есептеу және ақпараттық технологиялар саласында терең білім алу қажеттілігіне қоғамдық сананың дайындығы деп атауға болады.

Қазақстанның Білім және ғылым министрлігі қазіргі мектеп түлегі информатиканың негізгі курсында нені игеруі керек екенін көрсететін бағдарламалар жасады. Жоғары мектепте информатиканы оқу оның іргелі ғылыми пән ретінде одан әрі ашылуын көздейді. Информатика және ақпараттық технологиялар бойынша Мемлекеттік стандарт оқу процесіне, оқушылардың жалпы білім беру мен оқытудың кең кешенін дамытуға қызметтік тәсілге басымдық береді.

Пәндік дағдыларды меңгеруге тәсілдермен қызметін қалыптастыратын танымдық, ақпараттық, коммуникациялық құзыреттілік, жүйелілік, үздіксіздік және сабақтастық тұрғысынан мектеп пен ЖОО-да Информатика және ақпараттық технологияларды оқыту.

Кілттік сөздер: ақпарат, сабақтастық, ақпараттық технологиялар, мемлекеттік стандарт, нысан, мектеп және ЖОО

Аннотация. В настоящее время в Казахстане существует ряд объективных предпосылок перехода к состоянию информационного общества. Наиболее значимыми из них можно назвать быстрое развитие материальной базы информационной сферы, информатизацию различных сфер производства и управления,