

УДК 537.534.7: 621.319.7

© А. С. Бердников

МЕНЯЮЩИЙСЯ ВО ВРЕМЕНИ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ К ОПИСАНИЮ УСРЕДНЕННОГО ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ. Ч. I

В данном цикле работ рассматривается новый метод управления движением заряженных частиц с помощью высокочастотных электрических полей, характеризующихся медленно меняющимися во времени эффективными потенциалами. На основе разработанной общей теории предложен новый класс устройств для транспортировки заряженных частиц, использующих высокочастотные электрические поля с архимедовыми свойствами эффективного потенциала. Показана работоспособность указанного класса масс-спектрометрических устройств на выбранном модельном примере.

Кл. сл.: транспортирующие устройства заряженных частиц, ионные ловушки, фильтры масс, масс-спектрометрические приборы, радиочастотные приборы, эффективный потенциал, высокочастотные электрические поля, радиочастотные электрические поля

ВВЕДЕНИЕ

В данной работе рассматриваются теоретические основы нового способа управления движением заряженных частиц с помощью высокочастотных электрических полей. А именно с помощью специальным образом организованных высокочастотных полей можно захватывать в локальные зоны устойчивости заряженные частицы с разными массами, энергиями и зарядами и синхронно перемещать указанные зоны захвата заряженных частиц в выбранной области пространства. Захваченные заряженные частицы перемещаются синхронно с перемещением областей захвата заряженных частиц, и тем самым осуществляется целенаправленное управление транспортировкой заряженных частиц. Характерной особенностью указанного способа является то, что в локальной области захвата объединяются как положительно, так и отрицательно заряженные частицы.

Как будет показано далее, с помощью такого способа управления заряженными частицами возможно, в частности, разбиение непрерывного пучка заряженных частиц (или содержимого накопительного устройства заряженных частиц) на дискретные и синхронизированные во времени пакеты заряженных частиц без потери исходных заряженных частиц. Тем самым на его основе возможно создание устройств, обеспечивающих стыковку непрерывно работающих источников ионов (в частности, газонаполненных) и дискретно работающих масс-анализаторов в полном объеме. При этом обеспечиваются а) непрерывное накопление заряженных частиц, поступающих из внешнего

источника, и импульсный вброс накопленных заряженных частиц в масс-анализатор без потерь заряженных частиц в течение времени, необходимого для выполнения анализа ранее поступившего в масс-анализатор пакета заряженных частиц; б) эффективная локализация заряженных частиц в окрестности канала транспортировки даже в тех случаях, когда демпфирующее действие нейтрального газа незначительно или отсутствует; в) разбиение без потерь совокупности заряженных частиц на отдельные пространственно сепарированные пакеты, объединяющие частицы с разными массами, разными зарядами и разными начальными условиями (скоростями и координатами); г) синхронная транспортировка указанных пакетов заряженных частиц от входа к выходу в соответствии с требуемым законом от времени; д) загрузка пакетов заряженных частиц в работающий в дискретном режиме масс-анализатор в соответствии с временным графиком рабочего цикла указанного масс-анализатора; е) возможность объединять в едином транспортируемом пакете положительно и отрицательно заряженные частицы; ж) возможность дополнительных внешних воздействий на локализованные пространственные пакеты заряженных частиц в процессе их транспортировки.

1. ТЕОРИЯ ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Использование высокочастотных электрических полей для манипулирования заряженными частицами в масс-спектрометрии имеет давнюю традицию. Обзор основных классов подобных

устройств и описание основных закономерностей их функционирования может быть найден, например, в [1–3].

Основой функционирования большинства радиочастотных масс-спектрометрических устройств является свойство высокочастотного электрического поля "выталкивать" заряженные частицы независимо от знака заряда из области с большой амплитудой электрического поля в область с меньшей амплитудой электрического поля. Это свойство является следствием инерции движения заряженных частиц с ненулевой массой, происходящего под воздействием быстро осциллирующего электрического поля.

Количественно данный эффект описывается с помощью теории эффективного потенциала, или псевдопотенциала, впервые введенного, по видимому, П.Л. Капицей [4–6]. А именно, если частота ω осцилляций электрического поля $\mathbf{E}(x, y, z, t)$, происходящих по закону $\mathbf{E}(x, y, z, t) = \mathbf{E}_0(x, y, z) \cos(\omega t + \varphi)$, достаточно высока, а смещение заряженной частицы с массой m и зарядом q за один период изменения электрического поля мало, то движение заряженной частицы можно представить в виде "усредненного", или "медленного" движения, к которому добавлено быстро осциллирующее движение, имеющее, впрочем, маленькую амплитуду. В таком случае уравнение для усредненного движения выглядит так, как будто усредненное движение происходит в электрическом поле с потенциалом $\bar{U}(x, y, z) = q|\mathbf{E}_0(x, y, z)|^2 / (4m\omega^2)$. Подробности и обоснование теории эффективного потенциала можно найти в упомянутых выше ссылках [4–6], некоторые тонкие моменты указанной теории рассматриваются также в [7–13].

В силу того что в выражение для потенциала $\bar{U}(x, y, z)$ входят заряд и масса, потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ одинаково действует на положительные и отрицательные заряженные частицы, а также его действие оказывается зависящим от массы заряженной частицы. В случае истинного электрического потенциала $U(x, y, z)$ на положительно заряженные частицы действует сила, направленная против градиента электрического потенциала, а на отрицательно заряженные частицы — сила, направленная по градиенту электрического потенциала, причем эта сила не зависит от массы частицы. Из выражения для потенциала $\bar{U}(x, y, z)$ следует, что заряженная частица "выталкивается" из области, где амплитуда осцилляций высокочастотного поля высока, в область, где указанная амплитуда осцилляций высокочастотного поля будет

меньше (т. е. из области, где потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ имеет большее значение, частица перемещается в область, где потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ имеет меньшее значение). Выталкивающее действие высокочастотного электрического поля не зависит от знака заряженной частицы и перемещает как положительные, так и отрицательные заряженные частицы в одном и том же направлении. На заряженные частицы с большей массой выталкивающее действие высокочастотного электрического поля влияет с меньшей силой, чем на более легкие заряженные частицы. Выталкивающее действие высокочастотного электрического поля поддается регулировке за счет изменения частоты осцилляций электрического поля.

Потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ называется эффективным потенциалом, или псевдопотенциалом, и является удобным математическим инструментом для описания и анализа усредненного движения заряженной частицы (хотя на самом деле он, конечно же, не соответствует никаким физическим полям). Приведем без доказательства некоторые утверждения, справедливые для эффективного потенциала.

Для строго гармонического электрического поля $\mathbf{E}_0(x, y, z) \cos(\omega t + \varphi)$ с постоянным сдвигом фаз $\varphi = \text{const}$ эффективный потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ вычисляется по приведенной выше формуле $\bar{U}(x, y, z) = q|\mathbf{E}_0(x, y, z)|^2 / (4m\omega^2)$. Если фаза φ высокочастотного электрического поля не является постоянной во всем пространстве, а меняется от точки к точке по заданному закону $\varphi = \varphi(x, y, z)$, так что поле имеет вид

$$\mathbf{E}_0(x, y, z) \cdot \cos(\omega t + \varphi(x, y, z)) = \mathbf{E}_c(x, y, z) \cdot \cos \omega t + \mathbf{E}_s(x, y, z) \cdot \sin \omega t,$$

то соответствующий ему эффективный потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ вычисляется по формуле

$$\bar{U}(x, y, z) = q(|\mathbf{E}_c(x, y, z)|^2 + |\mathbf{E}_s(x, y, z)|^2) / (4m\omega^2).$$

Если высокочастотное поле является периодической во времени функцией, так что напряженность электрического поля представляется рядом Фурье

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \sum \mathbf{E}_c^{(k)}(x, y, z) \cos(k\omega t) + \mathbf{E}_s^{(k)}(x, y, z) \sin(k\omega t),$$

где функции $\mathbf{E}_c^{(k)}(x, y, z)$ и $\mathbf{E}_s^{(k)}(x, y, z)$ — это ам-

плитуды соответствующих гармоник электрического поля, то значение эффективного потенциала $\bar{U}(x, y, z)$ в точке пространства (x, y, z) вычисляется в соответствии с формулой

$$\bar{U}(x, y, z) = q \sum \left(|\mathbf{E}_c^{(k)}(x, y, z)|^2 + |\mathbf{E}_s^{(k)}(x, y, z)|^2 \right) / (4m\omega^2 k^2).$$

Если кроме высокочастотного электрического поля $\mathbf{E}(x, y, z, t)$ имеется статическое электрическое поле с потенциалом $U(x, y, z)$, статический потенциал $U(x, y, z)$ и эффективный потенциал $\bar{U}(x, y, z)$ суммируются. Если имеется несколько различных высокочастотных электрических полей с существенно разными частотами, суммируются индивидуальные эффективные потенциалы для этих электрических полей. (Но если частоты высокочастотных полей отличаются незначительно, это правило уже не действует). Если для имитации гашения кинетической энергии заряженной частицы в результате столкновений с молекулами газа мы введем эффективное вязкое трение, действующее на заряженную частицу с силой $\mathbf{F} = -\gamma(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)$, где $\mathbf{v}(t)$ — скорость частицы в момент времени t , $\mathbf{v}_0(x, y, z)$ — скорость газа в точке (x, y, z) , а γ — не зависящий ни от времени, ни от координат, ни от электрического поля коэффициент вязкого трения, то результат "медленного" движения заряженной частицы будет такой, как будто все три фактора (статический потенциал, эффективный потенциал и вязкое трение) действуют на заряженную частицу одновременно и независимо.

Следует подчеркнуть, что описание движения заряженной частицы с помощью эффективного потенциала является лишь математическим приближением, полученным при определенных допущениях относительно движения заряженной частицы, и может не соответствовать ее истинному движению. Так, для анализа движения заряженных частиц в упомянутых выше радиочастотных квадрупольных масс-фильтрах и радиочастотных ионных ловушках необходимо использовать полноценный анализ движения заряженной частицы в истинном электрическом поле (т. е. теорию уравнения Матвеева), чтобы получить правильную структуру зон устойчивости движения. Подход, основанный на эффективном потенциале, не даст в этом случае правильный ответ, поскольку в условиях, когда заряженная частица движется на границе зоны устойчивости и происходит резонанс между "медленными" осцилляциями заряженной частицы и высокочастотным электрическим полем, смещение заряженной час-

тицы за один период изменения высокочастотного электрического поля никак нельзя считать малым.

В случае, когда высокочастотное электрическое поле не может быть представлено в простой форме

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \sum \mathbf{E}_c^{(k)}(x, y, z) \cos(k\omega t) + \mathbf{E}_s^{(k)}(x, y, z) \sin(k\omega t),$$

поскольку его изменение во времени подчиняется более сложному закону, классическая теория эффективного потенциала требует уточнения. К сожалению, "пальцевый" подход к выводу соответствующих уравнений движения, как правило, приводит к достаточно странным результатам. Так, например, в [5] в результирующем выражении возникает мистическое вихревое поле (в реальных электрических полях, естественно, не имеющее смысла в силу закона сохранения энергии и потенциальной природы электрических полей), а в [11] уравнения для случая стоячей электромагнитной волны $\mathbf{E}_{\parallel}(x, y, z) \cos \omega t$, $\mathbf{H}_{\perp}(x, y, z) \sin \omega t$ содержат во втором порядке мистическую эффективную силу, которая отсутствует при строгом выводе соответствующих уравнений [7] (и которая и должна отсутствовать в силу симметрии исходных уравнений).

Конечно, очень часто правильную формулу наряду с ее строгим и математически корректным выводом можно обосновать также более простым способом с помощью нестрогих и интуитивных соображений. Однако это не делает нестрогие подходы более корректными, и без надлежащего обоснования всегда есть опасность, что на этот раз с помощью некорректных рассуждений был получен некорректный результат.

Математически строгий вывод обобщения понятия эффективного потенциала на класс высокочастотных электрических полей, характеризующихся "медленными" и "быстрыми" характерными временами изменения поля, будет рассмотрен в следующих работах серии. Ограничимся пока что краткими тезисами, связанными с полученными в данном направлении результатами.

Пусть дано некоторое устройство для управления движением заряженных частиц, обладающее набором электродов и создающее в объеме движения заряженных частиц высокочастотное электрическое поле при приложении к электродам устройства высокочастотных электрических напряжений.

Будем считать, что сигналы, прикладываемые к электродам, относятся к специальному классу, характеризующему "медленными" и "быстрыми" временами эволюции сигнала во времени. Пусть спектр $F(\omega)$ такого сигнала $f(t)$ распадается на отдельные узкие и достаточно далеко отстоящие

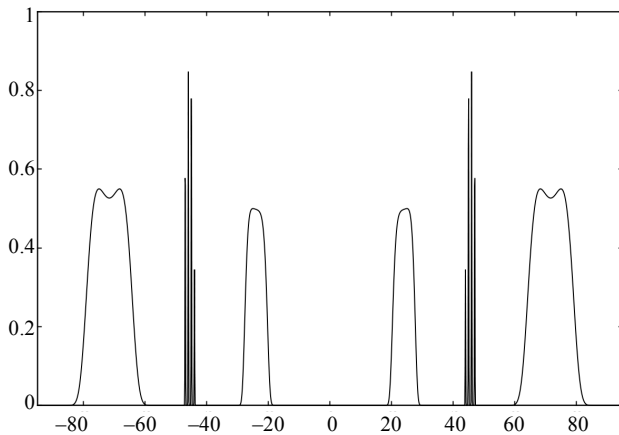


Рис. 1. Спектр временного сигнала, допускающего разбиение на "медленные" и "быстрые" частоты

друг от друга интервалы, вне которых спектр сигнала настолько мал, что может считаться равным нулю (см. рис. 1). В таком случае электрический сигнал может быть представлен в виде $f(t) = \sum A_n(t) \cos(\omega_n t) + B_n(t) \sin(\omega_n t)$, где $A_n(t)$ и $B_n(t)$ — "медленные" функции, а ω_n — "быстрые" и "далеко отстоящие" друг от друга частоты. (Обоснование универсальности такого представления сигналов со спектром указанного вида будет приведено в одной из следующих работ цикла.)

Дадим более-менее строгое математическое определение, что следует понимать под "быстрыми" и "медленными" временами в этом случае. Пусть имеются верхняя граница "медленных" частот δ и нижняя граница "быстрых" частот Δ . Очевидным образом предполагается, что $\Delta \gg \delta$. Функция $h(t)$ называется "медленной", если ее спектр равен нулю (или пренебрежимо мал) вне интервала частот $\omega \in (-\delta, +\delta)$. Функция $H(t)$ называется "быстрой", если ее спектр равен нулю (или пренебрежимо мал) на интервале частот $\omega \in (-\Delta, +\Delta)$. Физический смысл указанного условия состоит в том, что функция $H(t)$ содержит только высокочастотные компоненты и не содержит низкочастотных, а функция $h(t)$ содержит только низкочастотные компоненты и не содержит высокочастотных. Интервалы частот для низкочастотных и для высокочастотных компонентов не пересекаются и достаточно далеко разнесены друг от друга. Конкретные значения для параметров δ и Δ выбираются сообразно рассматриваемой физической задаче.

Указанные ограничения на спектр функций влекут за собой справедливые "в среднем" неравенства

$$|dh(t)/dt|^2 / |h(t)|^2 \leq \delta^2$$

и

$$|dH(t)/dt|^2 / |H(t)|^2 \geq \Delta^2,$$

$|f(t)|^2 \sim \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-T}^{t+T} (f(\tau))^2 d\tau$, а временной сигнал $f(t)$ предполагается вещественным. В силу указанных соотношений для функций $H(t)$ и $h(t)$ в выражении $d(H(t)h(t))/dt = h(t)dH(t)/dt + H(t)dh(t)/dt$ для полной производной по времени для произведения $H(t)h(t)$ вклад члена $h(t)dH(t)/dt$ существенно превышает вклад члена $H(t)dh(t)/dt$, поскольку очевидным образом выполняется соотношение

$$|dH(t)/dt|^2 / |H(t)|^2 \gg |dh(t)/dt|^2 / |h(t)|^2.$$

Этот факт может использоваться при процедуре усреднения самым активным образом для разделения членов уравнения, имеющих разные порядки малости. Описание техники усреднения для наших уравнений движения заряженной частицы в высокочастотном электрическом поле отложим до следующих работ данного цикла.

Для гармонических функций $\cos(\omega_n t)$ и $\sin(\omega_n t)$ термин "быстрые" означает выполнение условия $|\omega_n| \geq \Delta$. Условие, что частоты ω_m и ω_n "достаточно далеко" разнесены друг от друга, эквивалентно неравенству $|\omega_m - \omega_n| \geq \Delta$. Условие, что функции $A_n(t)$ и $B_n(t)$ являются "медленными" функциями времени, соответствует условию, что спектры $F_n^{(a)}(\omega)$ и $F_n^{(b)}(\omega)$ этих функций после преобразования Фурье по переменной t сосредоточены на интервале частот $\omega \in (-\delta, +\delta)$ и пренебрежимо малы вне этого интервала:

$$\left(\int_{-\infty}^{-\delta} |F_n^{(a,b)}(\omega)|^2 d\omega + \int_{+\delta}^{+\infty} |F_n^{(a,b)}(\omega)|^2 d\omega \right) < \mu^2,$$

где $\mu \ll 1$ — выбранный порог среза спектра. Как и параметры Δ и δ , параметр μ выбирается сообразно рассматриваемой физической задаче.

Пусть $E_k(x, y, z)$ — электростатическое поле, создаваемое в объеме устройства при приложении к группе электродов k некоторых статических электрических напряжений, а $f_k(t)$ — модуляция

указанных электрических напряжений во времени. При справедливости предположения, что частоты временных сигналов достаточно малы и что можно пренебречь максвелловскими эффектами, электрическое поле в объеме устройства после модулирования напряжений на указанных электродах по закону $f_k(t)$ имеет вид $E_k(x, y, z)f_k(t)$. Если имеется подходящий набор высокочастотных функций $f_k(t)$, то результирующее высокочастотное электрическое поле, которое возникает, если на электроды k -й группы вместо постоянных напряжений подать напряжения, меняющиеся во времени по закону $f_k(t)$, будет иметь вид $\sum E_k(x, y, z)f_k(t)$ (принцип суперпозиции электрических полей, являющийся следствием линейности уравнения Лапласа).

Если используемые нами управляющие сигналы могут быть представлены в форме $f_k(t) = \sum A_{kn}(t)\cos(\omega_n t) + B_{kn}(t)\sin(\omega_n t)$, где $A_{kn}(t)$ и $B_{kn}(t)$ — "медленные" функции, а ω_n — "быстрые" частоты, то полное высокочастотное электрическое поле оказывается представлено в виде

$$\begin{aligned} E(x, y, z, t) &= \sum_k E_k(x, y, z)f_k(t) = \\ &= \sum_k E_k(x, y, z) \sum_n (A_{kn}(t)\cos(\omega_n t) + B_{kn}(t)\sin(\omega_n t)) = \\ &= \sum_n \cos(\omega_n t) \sum_k (E_k(x, y, z)A_{kn}(t)) + \\ &\quad + \sum_n \sin(\omega_n t) \sum_k (\bar{E}_k(x, y, z)B_{kn}(t)) = \\ &= \sum_n E_n^{(c)}(x, y, z, t)\cos(\omega_n t) + E_n^{(s)}(x, y, z, t)\sin(\omega_n t), \end{aligned}$$

где компоненты высокочастотного электрического поля $E_n^{(c)}(x, y, z, t)$ и $E_n^{(s)}(x, y, z, t)$ являются "медленными" функциями, а ω_n — "быстрыми" и "далеко разнесенными" частотами. Неявно использованное, но важное условие состоит в том, чтобы набор характерных частот ω_n ($n=1, 2, 3, \dots$) был выбран одинаковым для всех сигналов $f_k(t)$. Очевидно, что при этом в спектре некоторых сигналов $f_k(t)$ некоторые частоты ω_n могут отсутствовать, но для нас важно, чтобы в представлении рассматриваемых сигналов в канонической тригонометрической форме не присутствовали "близкие" частоты.

Наряду с высокочастотными компонентами в прикладываемых к электродам сигналах могут присутствовать и низкочастотные компоненты

(т. е. функции $f_{k0}(t)$, характеризующиеся спектром, лежащим в интервале частот $\omega \in (-\delta, +\delta)$). В таком случае к полученному выше представлению электрического поля надо добавить низкочастотную компоненту $E_0(x, y, z, t)$, являющуюся "медленной" функцией времени.

При таком представлении высокочастотного электрического поля движение заряженной частицы может быть приближенно представлено в виде суммы "медленного" усредненного движения и быстро осциллирующей добавки, имеющей, однако, небольшую амплитуду. Усредненное движение описывается уравнениями, идентичными движению заряженной частицы с той же массой и с тем же зарядом в электрическом поле с потенциалом $U_0(x, y, z, t) + \bar{U}(x, y, z, t)$, где $U_0(x, y, z, t)$ — это квазистатистический электрический потенциал, соответствующий низкочастотной компоненте электрического поля, а функция $\bar{U}(x, y, z, t)$, называемая медленноменяющимся эффективным потенциалом, вычисляется через низкочастотные амплитуды высокочастотного электрического поля, как

$$\begin{aligned} \bar{U}(x, y, z, t) &= \\ &= q \sum \left(|E_n^{(c)}(x, y, z, t)|^2 + |E_n^{(s)}(x, y, z, t)|^2 \right) / (4m\omega_n^2). \end{aligned}$$

Математически строгий вывод данной формулы отложим до следующей статьи нашего цикла работ. Очевидно, что эффективный потенциал $\bar{U}(x, y, z, t)$ является "медленной" (низкочастотной и квазистатистической) функцией времени. В отличие от истинного электрического потенциала функция $\bar{U}(x, y, z, t)$ уже не обязана удовлетворять уравнению Лапласа, что обеспечивает нам новые интересные возможности по управлению заряженными частицами. Приведенное здесь обобщение классической теории эффективного потенциала на класс медленноменяющихся эффективных потенциалов является новым и ранее не использовалось.

2. ВЫСОКОЧАСТОТНОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ С АРХИМЕДОВЫМ ЭФФЕКТОМ

Рассмотрим в качестве примера канал для транспортировки заряженных частиц, использующий осевое высокочастотное электрическое поле вида $E_z(z, t) = (U_0/L)\cos(z/L - t/T) \cdot \cos(\omega t)$, где L — характерный пространственный масштаб вдоль оси, T — характерный временной масштаб "медленного" времени, ω — частота осцилляций электрического поля. Условие квазистатичности

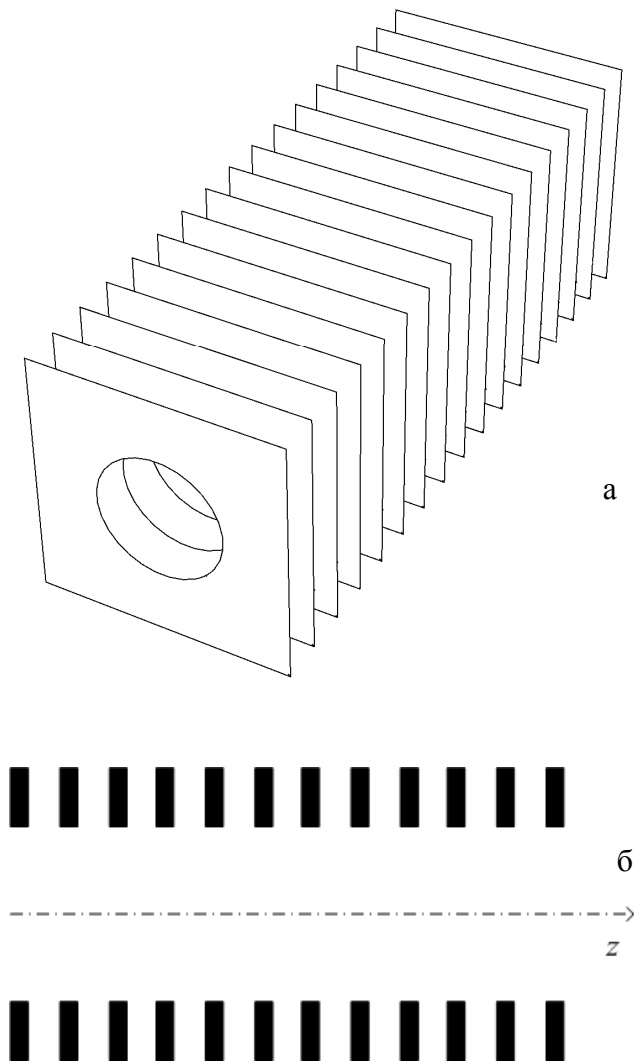


Рис. 2. Периодическая последовательность кольцевых диафрагм, образующих канал для транспортировки заряженных частиц.
а — трехмерный вид, б — сечение вдоль оси

амплитуды осцилляций электрического поля и допустимости рассмотрения "медленных" и "быстрых" масштабов времени в отдельности сводится к условию $\omega T \gg 1$. Данному высокочастотному электрическому полю соответствует осевой эффективный потенциал

$$\bar{U}(z, t) = \left(U_0^2 / (2L)^2 \right) (1 + \cos(2z/L - 2t/T))$$

и классический трехмерный электрический потенциал

$$U(z, r, t) = U_0 \sin(z/L - t/T) \times \\ \times (1 + r^2/4L^2 + r^4/64L^4 + \dots) \cdot \cos(\omega t)$$

(здесь величина r определена, как $r = \sqrt{x^2 + y^2}$). Осевому распределению амплитуды высокочастотного электрического поля $E_*(z, t) = (U_0/L) \cos(z/L - t/T)$ соответствует осевое распределение потенциала $U_*(z, t) = U_0 \sin(z/L - t/T) = U_0 \sin(z/L) \cos(t/T) - U_0 \cos(z/L) \sin(t/T)$, т. е. искомый электрический потенциал $U(z, r, t)$ представляет из себя суперпозицию статических электрических потенциалов с осевыми распределениями потенциала $U_0 \sin(z/L)$ и $U_0 \cos(z/L)$, модулированных во времени по закону $\cos(t/T)$ и $\sin(t/T)$ соответственно.

Хорошее приближение к осесимметричному электростатическому полю, имеющему осевое распределение $U_0 \sin(z/L)$, может быть организовано следующим способом. Рассмотрим последовательность соосных кольцевых диафрагм с радиусом R , объединенных в четверки электродов, периодически повторяющиеся по длине канала транспортировки с периодом $2\pi L$ (см. рис. 2). Если к первому и второму электродам приложить потенциалы $+U_R$ (где $U_R = U_0 (1 + R^2/4L^2 + R^4/64L^4 + \dots)$), а к третьему и четвертому электродам приложить потенциалы $-U_R$, то при достаточно большом радиусе R в точках на оси симметрии образуется распределение потенциала вида $U_0 \sin(z/L)$. Соответственно, если к первому и четвертому электродам приложить потенциалы $+U_R$, а ко второму и третьему электродам приложить потенциалы $-U_R$, то на оси симметрии образуется распределение потенциала вида $U_0 \cos(z/L)$. (Альтернативный и более наглядный вариант для создания на оси устройства распределений потенциала, близких к нужным нам распределениям, — это приложить к четверке электродов потенциалы $(0, +U_R, 0, -U_R)$ для синуса и потенциалы $(+U_R, 0, -U_R, 0)$ для косинуса. Однако на практике результирующие осевые распределения будут сдвинутыми и масштабированными относительно ожидаемых нами значений. Что в данном случае не слишком существенно для рассматриваемого далее "архимедова" эффекта.)

Осталось вычислить суперпозицию указанных электрических полей. Итак, к первому электроду в каждой четверке электродов надо приложить высокочастотное электрическое напряжение вида $\cos(\omega t + \varphi)$, амплитудно-модулированное по закону $U_R (\cos(t/T) - \sin(t/T)) = \sqrt{2} U_R \times$

$\times \cos(t/T + \pi/4)$; ко второму — напряжение, амплитудно-модулированное по закону $U_R \times (\cos(t/T) + \sin(t/T)) = \sqrt{2}U_R \sin(t/T + \pi/4)$; к третьему — напряжение, амплитудно-модулированное по закону $U_R(-\cos(t/T) + \sin(t/T)) = -\sqrt{2}U_R \cos(t/T + \pi/4)$; к четвертому — напряжение, амплитудно-модулированное по закону $U_R(-\cos(t/T) - \sin(t/T)) = -\sqrt{2}U_R \sin(t/T + \pi/4)$. Осевое распределение эффективного потенциала, подчиняющегося нужному нам закону, показано в Приложении на рис. П1. Там же на рис. П2 показаны зоны захвата заряженных частиц, порожденные чередующимися минимумами этого эффективного потенциала. На рис. П3 показаны электрические напряжения, которые необходимо прикладывать к соответствующим электродам.

С помощью указанного приема можно легко синтезировать электрические напряжения, требуемые для периодически повторяющейся системы диафрагм, создающих на оси устройства высокочастотное электрическое поле с эффективным потенциалом $\bar{U}_*(z, t)$, имеющим вид $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]^N$ и $1 - [(1 - \cos(z/L - t/T))/2]^N$. Рассмотрим для этого осевое электрическое поле, которое может быть представлено в форме

$$E(z, t) = (a_0 + \sum a_k \cos kx + b_k \sin kx) \cdot \cos \omega t$$

$$E(z, t) = (a_0 + \sum a_k \cos kx + a_k \sin kx) \cdot \cos \omega t,$$

где a_k , b_k , c_k и d_k — "медленные" функции времени, выражающиеся через тригонометрические функции вида $\cos(k\delta t)$ и $\sin(k\delta t)$, δ — "медленная" частота, а ω — "быстрая" частота. Указанное электрическое поле может быть синтезировано как суперпозиция надлежащим образом амплитудно-модулированных высокочастотных электрических полей с разными фазами, имеющих осевое распределение $\cos kx$ и $\sin kx$. Осевое распределение эффективного потенциала для такого высокочастотного поля имеет вид

$$\bar{U}(z, t) = (q/4m\omega^2) \left((a_0 + \sum a_k \cos kx + b_k \sin kx)^2 + (c_0 + \sum c_k \cos kx + c_k \sin kx)^2 \right),$$

и при должным образом подобранных коэффициентах a_k , b_k , c_k и d_k можно добиться желаемого поведения эффективного потенциала на оси устройства. Например, на рис. П4 (см. Приложение) показано осевое распределение эффективного потенциала, подчиняющегося закону

$$[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]^3.$$

На рис. П5 показаны зоны захвата заряженных частиц, порожденные чередующимися минимумами этого эффективного потенциала. На рис. П6 показаны электрические напряжения, которые необходимо прикладывать к соответствующим электродам.

Высокочастотные поля с медленноменяющимися эффективными потенциалами, имеющими вид $f(z/L - t/T)$, где $f(z)$ — функция с чередующимися максимумами и минимумами, образуют важный класс высокочастотных электрических полей, особенно полезных для транспортировки заряженных частиц. Действительно, в этом случае образуется волна эффективного потенциала, медленно перемещающаяся вдоль оси устройства. Заряженные частицы захватываются локальными областями захвата заряженных частиц, сформированными минимумами эффективного потенциала, и перемещаются вдоль оси устройства синхронно с перемещением волны эффективного потенциала. Данный процесс схематически показан на рис. 3. Указанный класс высокочастотных полей удобно назвать архимедовыми по аналогии с архимедовым винтом и в честь этого выдающегося греческого ученого.

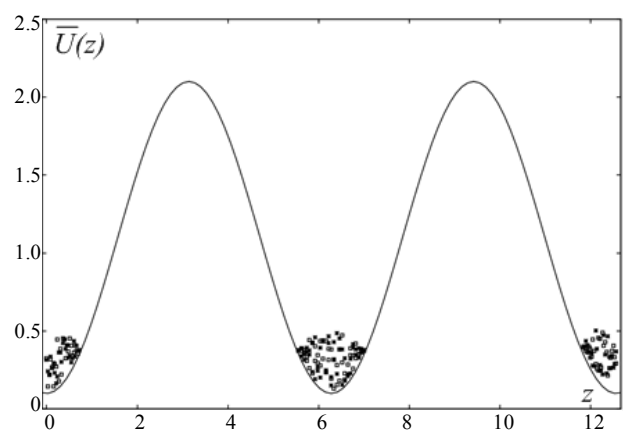


Рис. 3. Волна эффективного потенциала, захватывающая как положительные, так и отрицательно заряженные частицы и синхронно перемещающая образовавшиеся локальные пакеты заряженных частиц вдоль оси

Рассмотрим, например, более детально поведение заряженных частиц в устройстве с осевым распределением высокочастотного поля $E_z(z, t) = (U_0/L) \cos(z/L - t/T) \cdot \cos(\omega t)$, заполненном молекулами нейтрального газа. Заряженные частицы отталкиваются высокочастотным электрическим полем от электродов и, по мере того как начальная скорость заряженных частиц "гасится" в результате столкновений с молекулами газа, концентрируются вблизи оси устройства. Однако, подобно тому как заряженные частицы отталкиваются псевдопотенциальным барьером от электродов и концентрируются вблизи оси, максимумы эффективного потенциала также отталкивают от себя заряженные частицы и заставляют их концентрироваться в окрестностях тех точек оси, где быстро меняющееся электрическое поле характеризуется минимумами эффективного потенциала. Вблизи минимумов эффективного потенциала одинаково хорошо концентрируются заряженные частицы с зарядами обоих знаков. Перемещение минимумов эффективного потенциала вдоль оси устройства, медленное по сравнению с процессами релаксации заряженных частиц внутри локальной области захвата, заставляет их двигаться синхронно с перемещением минимумов эффективного потенциала.

Численное моделирование движения заряженных частиц в указанном высокочастотном электрическом поле при наличии нейтрального газа подтверждает приведенную здесь качественную картину движения. На рис. 4 показаны решения соответствующих дифференциальных уравнений для набора заряженных частиц, равномерно распределенных в начальный момент времени на некотором отрезке канала транспортировки с некоторым смещением в радиальном направлении относительно оси. На рис. 4, а, показана зависимость координаты $z(t)$ (которая соответствует оси устройства) от времени t . На рис. 4, б, показана зависимость $z(t) - vt$, где v — скорость перемещения минимумов эффективного потенциала вдоль канала транспортировки, являющаяся характеристикой высокочастотного электрического поля. На рис. 4, в, показана зависимость координаты $r(t)$ (которая соответствует радиальному направлению) от времени t . Видно, что происходит разбиение совокупности заряженных частиц на пространственно сепарированные пакеты, которые затем синхронно транспортируются с постоянной скоростью v вдоль канала транспортировки в соответствии с перемещением минимумов эффективного потенциала быстро осциллирующего электрического поля.

Указанная картина происходит как при транспортировке заряженных частиц в вакууме, так и

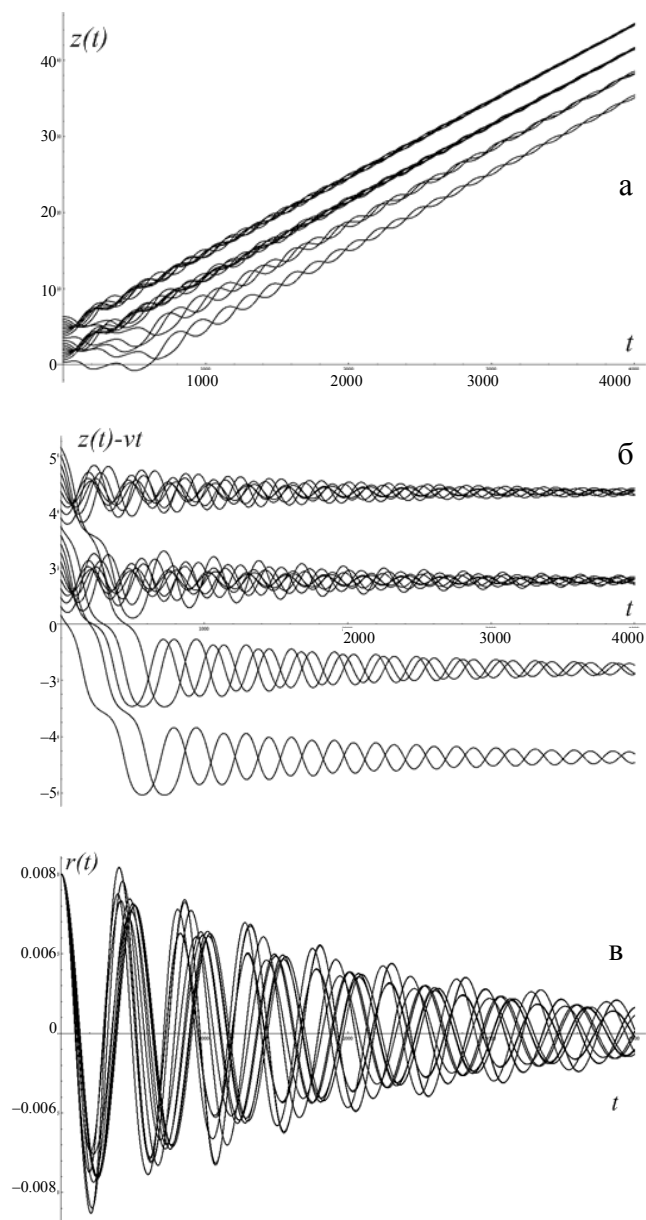


Рис. 4. Результаты численного моделирования движения заряженных частиц в высокочастотном электрическом поле при наличии нейтрального газа.

а — зависимость координаты $z(t)$ (соответствует оси устройства) ионных траекторий от времени t для устройства с осевым распределением электрического поля $E_z(z, t) = E_0 \cos(z/L - t/T) \cdot \cos(\omega t)$; б — зависимость $z(t) - vt$ от времени t , где v — скорость перемещения минимумов псевдопотенциала вдоль канала для перемещения заряженных частиц. Данная зависимость демонстрирует синхронное перемещение ионных пакетов с общей средней скоростью v ; в — зависимость координаты $r(t)$ (соответствует радиальному направлению относительно оси канала для перемещения заряженных частиц) от времени t

при транспортировке заряженных частиц в разреженном газе, когда рассеяние заряженных частиц при столкновениях с молекулами нейтрального газа моделируется методом Монте-Карло. Различие состоит в том, что при наличии демпфирующего газа те заряженные частицы, которые не попали изначально в область устойчивости в окрестности минимума эффективного потенциала, перескакивают в одну из предшествующих областей устойчивости, захватываются ею и продолжают синхронно двигаться вдоль канала транспортировки с соответствующим постоянным смещением пакета заряженных частиц вдоль канала транспортировки (этот процесс наглядно виден на рис. 4, б). При отсутствии демпфирующего действия газа частицы, оказавшиеся вне области устойчивости, последо-

вательно перескакивают назад по каналу транспортировки от одной области неустойчивости к другой, одновременно раскачиваясь в радиальном направлении, пока в конце концов не выйдут за пределы устройства или не столкнутся с электродами.

Приведенный пример иллюстрирует общий принцип. Если высокочастотное поле некоторого устройства характеризуется меняющимся во времени эффективным потенциалом, у которого вдоль канала транспортировки заряженных частиц имеется одиночный минимум, перемещающийся во времени вдоль канала транспортировки, то заряженные частицы в результате воздействия указанного высокочастотного поля группируются

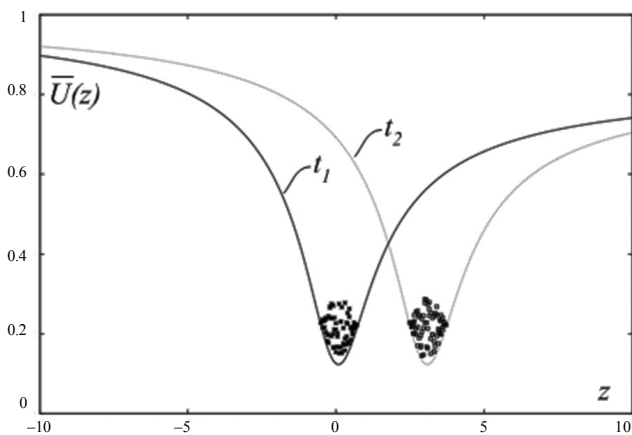


Рис. 5. Синхронизированное во времени перемещение пакета заряженных частиц и минимума псевдопотенциала $\bar{U}(z)$ вдоль канала для перемещения заряженных частиц (ось z).

Показан процесс перемещения минимума псевдопотенциала для разных моментов времени t_1 и t_2 ($t_1 < t_2$)

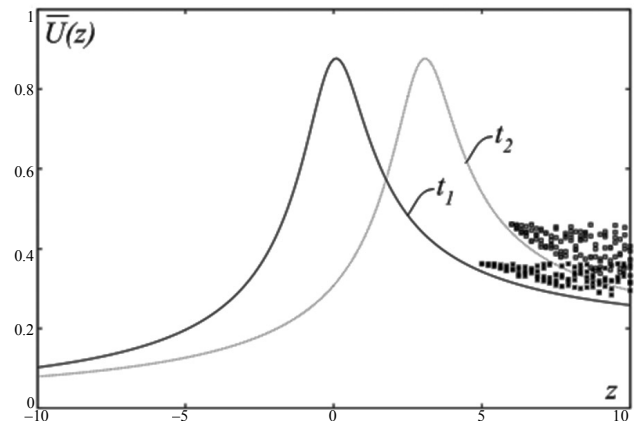


Рис. 6. "Выпихивание" заряженных частиц максимумом псевдопотенциала $\bar{U}(z)$ вдоль канала для перемещения заряженных частиц (ось z) со временем.

Показан процесс перемещения максимума псевдопотенциала для разных моментов времени t_1 и t_2 ($t_1 < t_2$)

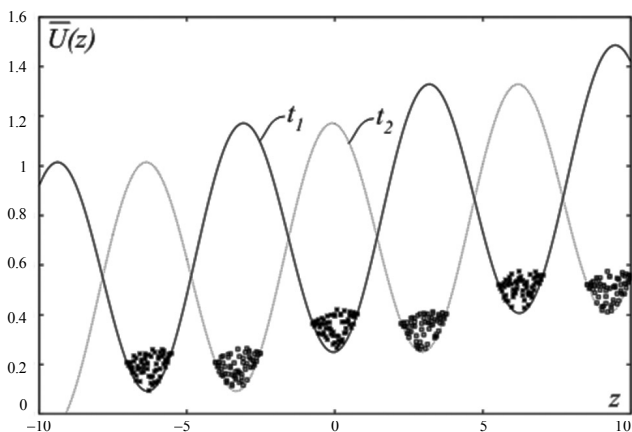


Рис. 7. Разбиение совокупности заряженных частиц, попавших в канал для перемещения заряженных частиц, на пространственно сепарированные пакеты заряженных частиц, синхронно перемещаемые от входа к выходу в случае, когда псевдопотенциал $\bar{U}(z)$ имеет вдоль канала для перемещения заряженных частиц (ось z) перемежающиеся максимумы и минимумы. Показан процесс перемещения максимумов и минимумов псевдопотенциала для разных моментов времени t_1 и t_2 ($t_1 < t_2$)

в окрестности минимума эффективного потенциала, а при перемещении минимума вдоль канала транспортировки осуществляется синхронизированное во времени перемещение образовавшегося пакета заряженных частиц, как это показано на рис. 5. Точно также наличие вдоль канала транспортировки движущегося максимума эффективного потенциала "выпихивает" из канала транспортировки заряженные частицы, оказавшиеся впереди максимума, как это показано на рис. 6. В случае, если эффективный потенциал имеет вдоль канала транспортировки перемежающиеся максимумы и минимумы, как в приведенном выше примере, происходит разбиение совокупности заряженных частиц, попавших в канал транспортировки, на локализованные в пространстве пространственно сепарированные пакеты заряженных частиц, синхронно перемещаемых от входа к выходу, как это показано на рис. 7.

В силу специфики эффективного потенциала указанные пакеты заряженных частиц объединяют как положительно заряженные, так и отрицательно заряженные частицы с разными массами и кинетическими энергиями. Кинетическая энергия не должна быть настолько большой, чтобы заряженные частицы имели шанс преодолеть псевдопотенциальные барьеры, ограничивающие пространственно сепарированные пакеты заряженных частиц. В случае наличия буферного газа в результате столкновения ионов и нейтральных молекул происходит "гашение" скоростей заряженных частиц до теплового уровня, и данное условие оказывается выполненным. Наличие буферного газа для гашения кинетической энергии заряженных частиц не является безусловно необходимым, если псевдопотенциальные барьеры достаточно высоки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

"Сущность предлагаемого класса устройств для транспортировки заряженных частиц заключается в том, что устройство для манипулирования заряженными частицами содержит совокупность электродов, расположенных с образованием канала для перемещения заряженных частиц, а также средство электропитания, обеспечивающее приложение к электродам питающего напряжения, обуславливающего создание в канале неоднородного высокочастотного электрического поля, эффективный потенциал которого имеет один или более локальных экстремумов вдоль длины канала для перемещения заряженных частиц, по меньшей мере, на

некотором интервале времени, причем, по меньшей мере, один из указанных экстремумов эффективного потенциала перемещается во времени, по меньшей мере, по части длины канала для перемещения заряженных частиц, по меньшей мере, на некотором интервале времени" (патентная формула из заявленного автором патента).

В следующих работах данного цикла будет детально показана универсальность представления временных сигналов, характеризующихся "медленными" и "быстрыми" временами, в форме $f(t) = \sum A_n(t) \cos(\omega_n t) + B_n(t) \sin(\omega_n t)$, где $A_n(t)$ и $B_n(t)$ — "медленные" функции, а ω_n — "быстрые" и "далеко отстоящие" друг от друга частоты. Будет выведена формула для медленноменяющегося во времени эффективного потенциала для случая электрических напряжений такого класса, прикладываемых к электродам устройства. Рассмотрены технические способы создания требуемых электрических напряжений $f_k(t)$ и соответствующих им высокочастотных электрических полей в объеме устройства. Приведены примеры использования высокочастотных электрических полей указанного вида для управления движением заряженных частиц. Наконец, будут рассмотрены перспективные способы применения нового метода управления движением заряженных частиц для создания новых классов масс-спектрометрических приборов.

Благодарности

Я хочу выразить свою благодарность Михаилу Явору за многочисленные консультации по тонким вопросам оптики заряженных частиц, Алине Андреевой за экспериментальную проверку на примере моделирования конкретных устройств общих математических формул, полученных в данной работе, и за помощь при подготовке рисунков, Николаю Галлю за неоценимую помощь в решении разнообразных организационных вопросов во время проведения данной работы, а также Сумио Кумаширо, Роджеру Джайлсу, Вячеславу Щепунову и Михаилу Судакову за их высокую и восторженную оценку полученных в данной работе результатов во время моей первой презентации указанных результатов на закрытом лабораторном семинаре в мае 2010 года. Отдельная благодарность Михаилу Судакову за последующие полезные совместные обсуждения указанной тематики.

ПРИЛОЖЕНИЕ

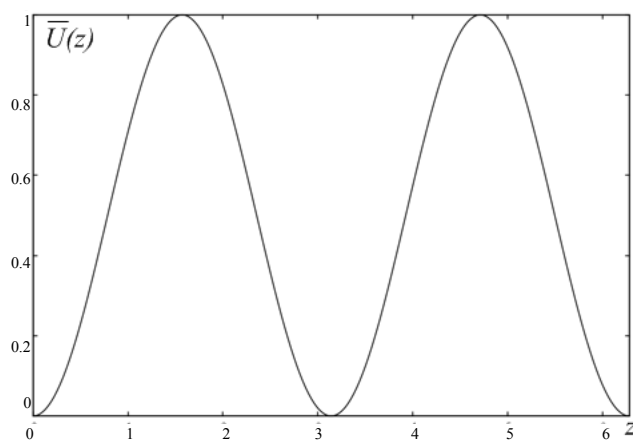


Рис. П1. Осевое распределение эффективного потенциала, подчиняющееся закону $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]$

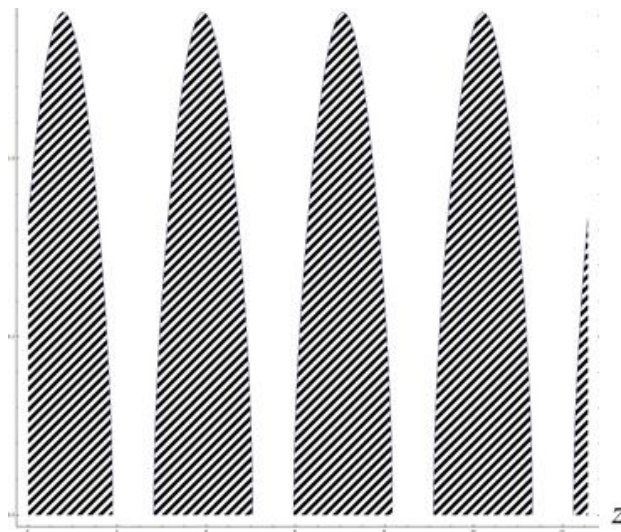


Рис. П2. Перемещающиеся вдоль оси объемные зоны захвата заряженных частиц, соответствующие высокочастотному электрическому полю с эффективным потенциалом, подчиняющимся закону $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]$

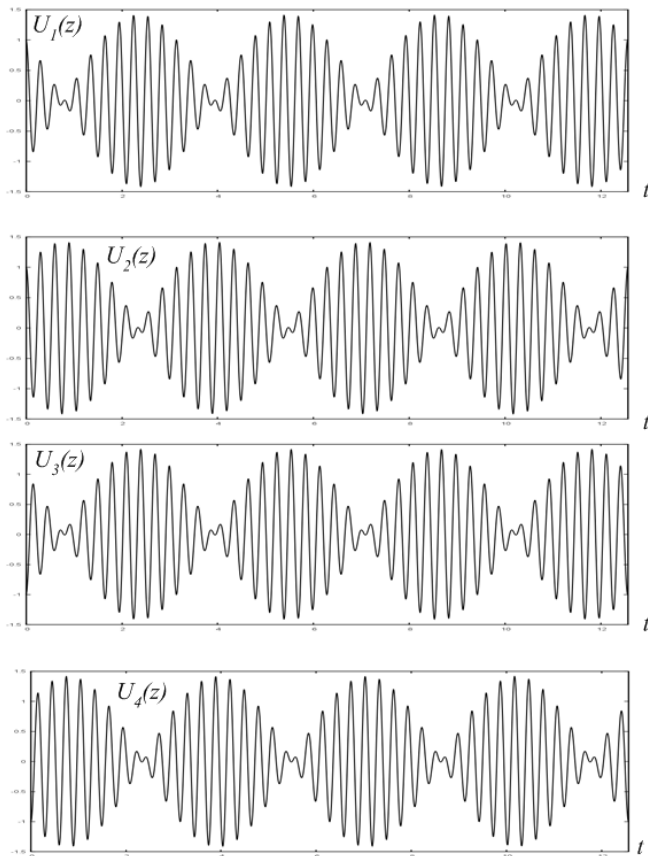


Рис. П3. Электрические напряжения, которые надо прикладывать к периодической последовательности повторяющихся четверок электродов для создания высокочастотного электрического поля с эффективным потенциалом на оси $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]$

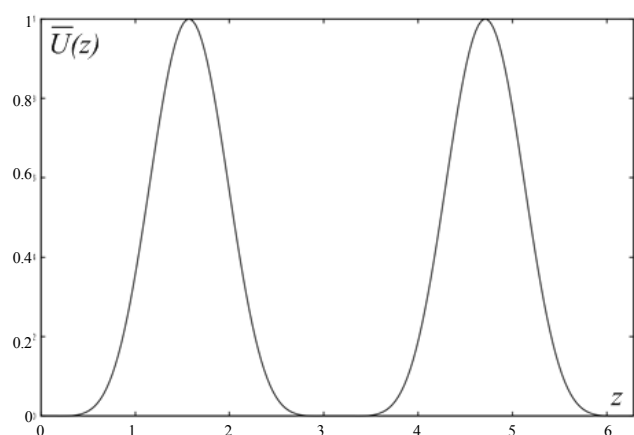


Рис. П4. Осевое распределение эффективного потенциала, подчиняющееся закону $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]^3$

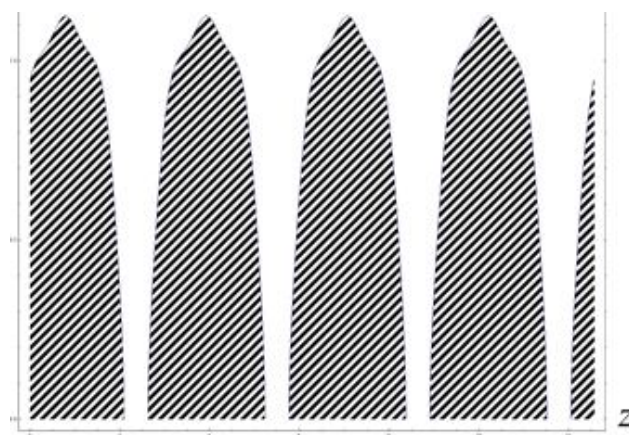


Рис. П5. Перемещающиеся вдоль оси объемные зоны захвата заряженных частиц, соответствующие высокочастотному электрическому полю с эффективным потенциалом, подчиняющимся закону $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]^3$.

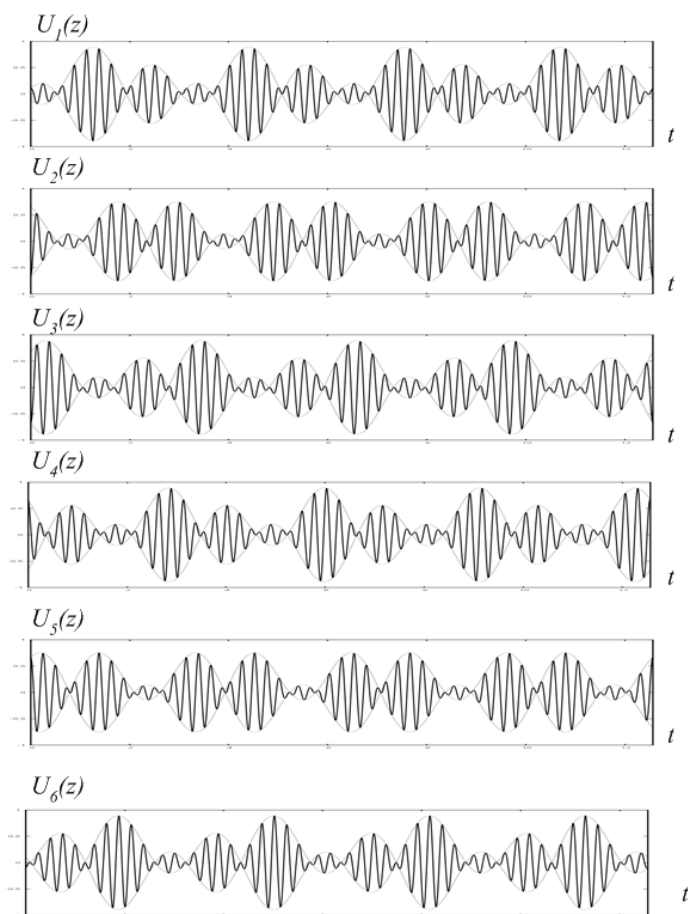


Рис. П6. Электрические напряжения, которые надо прикладывать к периодической последовательности повторяющихся шестерок электродов для создания высокочастотного электрического поля с эффективным потенциалом на оси $[(1 - \cos(z/L - t/T))/2]^3$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *March R.E., Todd J.F.J.* Quadrupole ion trap mass spectrometry, 2nd edition. Wiley-InterScience, 2005. 346 p.
2. *Major F.J., Gheorghe V.N., Werth G.* Charged particle traps. Springer, 2005. 354 p.
3. *Werth G., Gheorghe V.N., Major F.J.* Charged particle traps II. Springer, 2009. 275 p.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика, сер. Теоретическая физика. М.: Физматлит, 2004. 220 с.
5. *Заславский Г.М., Сагдеев Р.З.* Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука, 1988. 368 с.
6. *Yavor M.I.* Optics of charged particle analyzers, Ser. Advances of imaging and electron physics, V. 157. Elsevier, 2009.
7. *Чирков А.Г.* Асимптотическая теория взаимодействия заряженных частиц и квантовых систем с внешними электромагнитными полями. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001.
8. *Гапонов В.А., Миллер М.А.* О потенциальных ямах для заряженных частиц в высокочастотном поле // ЖЭТФ. 1958. Т. 34, № 2. С. 242–243.
9. *Миллер М.А.* Движение заряженных частиц в высокочастотных электромагнитных полях // Известия вузов, сер. Радиофизика. 1958. Т. 1, № 3. С. 110–123.
10. *Буриштейн Э.Л., Соловьев Л.С.* Гамильтониан усредненного движения // ДАН СССР. 1961. Т. 139, № 4. С. 855–858.
11. *Литвак А.Г., Миллер М.А., Шолохов Н.В.* Уточнение усредненного уравнения движения заряженных частиц в поле стоячей электромагнитной волны // Известия вузов, сер. Радиофизика. 1962. Т. 5, № 6. С. 1160–1174.
12. *Сивухин Д.В.* Дрейфовая теория движения заряженной частицы в электромагнитных полях // Вопросы теории плазмы. Вып. 1. М.: Госатомиздат, 1963. С. 7–97.
13. *Морозов А.И., Соловьев Л.С.* Движение заряженной частицы в электромагнитных полях // Вопросы теории плазмы. Вып. 2. М.: Госатомиздат, 1963. С. 177–261.

*Институт аналитического приборостроения РАН,
г. Санкт-Петербург*

Контакты: *Бердников Александр Сергеевич,*
asberd@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 20.04.2011.

TIME-DEPENDENT PSEUDOPOTENTIAL AND ITS APPLICATION FOR DESCRIPTION OF THE AVERAGED MOTION OF THE CHARGED PARTICLES. PART. I

A. S. Berdnikov

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg

The series of publications describes a new method to control the movement of the charged particles by a high frequency electric fields. This new class of a high frequency electric fields is characterized by pseudopotentials slowly evolving in time. Using the developed general theory a new class of mass spectrometric devices is proposed — i. e., the ion guides which use the said high frequency electric fields with Archimedean properties for its pseudopotentials. It is demonstrated that the proposed ion guides really work using the numerical simulations of some test example.

Keywords: ion guides, ion traps, mass filters, mass spectrometric devices, radio frequency devices, pseudopotentials, high frequency electric fields, radio frequency electric fields