

УДК 537.533

Интегрируемые электростатические ионные ловушки

Ю. К. Голиков, Н. К. Краснова, К. В. Соловьев, Д. В. Никитина
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Россия

Проведен анализ свойств ансамблей траекторий в системах с разделяющимися переменными, полезных при синтезе новых конструкций времяпролетных масс-спектрометров. Найденное многообразие лапласовых потенциалов редуцируется к каноническому виду с минимальным числом структурных параметров, управляющих геометрией полей и спецификой движения ионов в них. Обсуждаются перспективы применения данного класса полевых структур в масс-анализе.

Постановка проблемы

Времяпролетный способ измерения масс ионов занимает доминирующее положение в современной масс-спектропии. Достоинства его хорошо известны, особенно применительно к тяжелой органике, кластерам, фуллеренам и т. п. В качестве главного диспергирующего элемента во времяпролетных масс-анализаторах используется достаточно протяженная дрейфовая трубка, в которой и реализуется расщепление ионного пакета на отдельные сгустки, содержащие ионы одной массы. Эти сгустки расплываются в силу углового и энергетического разброса ионов на источнике, налагаются один на другой, и потому при дефиците дисперсии фиксируются на детекторе с весьма невысоким разрешением. Ряд новых идей, таких как выталкивание сгустков в дрейфовую трубку поперек оптической оси источника, применение компенсирующих электрических зеркал (масс-рефлектор), компьютерная обработка сигналов существенно расширили порог разрешения и чувствительности, но еще явно недостаточно, чтобы конкурировать со статическими магнитными масс-спектрометрами.

В процессе такой эволюции прибор усложняется, удорожается, но прогресс в наращивании разрешающей способности и чувствительности гораздо ниже желаемого. По нашему мнению, чтобы решительно продвинуться в этом направлении, необходимо радикально поменять взгляд на устройство и теорию синтеза времяпролетных инструментов. В первую очередь следует отказаться от мысли, что дрейфовая трубка — самый удобный дисперсионный фактор, а остальные элементы служат лишь для улучшения ее работы. Неоднородные электрические поля в этом смысле неизмеримо перспективней. В них можно управлять временной дисперсией и фокусировкой ионных пакетов по

нашему усмотрению за счет специальной конфигурации электродов. В результате на этом пути могут быть построены

принципиально новые малогабаритные приборы с весьма простой геометрией, доступной современной технологии. Цель данной работы — разработка новых физических и математических подходов к синтезу эффективных полевых структур с большим запасом временной дисперсии и высоким качеством пространственной фокусировки.

Принцип идеальной пространственно-временной фокусировки ионных пакетов

Теорию времяпролетных масс-спектрометров, как и энергоанализаторов удобней всего изучать с помощью безразмерной математической модели с минимальным числом символов. Для этого введем в качестве линейного масштаба какую-нибудь характерную длину реальной системы l , например ее габарит, а единицу времени T выберем таким образом, чтобы из функции Лагранжа выделился единый постоянный множитель, который можно опустить. Физические декартовы координаты X, Y, Z и время t свяжем с безразмерными параметрами x, y, z, τ , причем производные по безразмерному времени будем обозначать точкой сверху

$$\dot{X} = l\dot{x}, \quad \dot{Y} = l\dot{y}, \quad \dot{Z} = l\dot{z}, \quad \dot{t} = T\dot{\tau}.$$

Потенциал электростатического поля запишем в виде $\Phi = \Phi_0 \varphi(x, y, z)$, где Φ_0 — характерное значение потенциала, выбранное из каких-либо физических или инженерных соображений, а $\varphi(x, y, z)$ — безразмерный лапласов потенциал, подчиняющийся уравнению

$$\varphi_{xx} + \varphi_{yy} + \varphi_{zz} = 0. \quad (1)$$

Единицу времени T определим формулой

$$T = l \sqrt{\frac{m}{|q\Phi_0|}}, \quad (2)$$

где m и q — масса и заряд иона.

В этих условиях унифицированная функция Лагранжа иона в безразмерных переменных примет вид

$$L = \frac{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}{2} - \varphi(x, y, z),$$

а уравнения движения

$$\begin{cases} \ddot{x} = -\varphi_x \\ \ddot{y} = -\varphi_y, \\ \ddot{z} = -\varphi_z \end{cases} \quad (3)$$

где нижние символы обозначают производные по соответствующим переменным.

Пусть реальные физические данные движения

$$\begin{aligned} X|_{t=0} &= X_0, & Y|_{t=0} &= Y_0, & Z|_{t=0} &= Z_0, \\ \frac{dX}{dt}|_{t=0} &= V_1, & \frac{dY}{dt}|_{t=0} &= V_2, & \frac{dZ}{dt}|_{t=0} &= V_3. \end{aligned}$$

При переходе к безразмерным переменным мы получим новый набор отвлеченных чисел вида

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{X_0}{l}, & y_0 &= \frac{Y_0}{l}, & z_0 &= \frac{Z_0}{l}, \\ \dot{x}_0 &= \frac{T}{l} V_1, & \dot{y}_0 &= \frac{T}{l} V_2, & \dot{z}_0 &= \frac{T}{l} V_3, \end{aligned} \quad (4)$$

а вместо начальной кинетической энергии $\varepsilon_0 = \frac{mV_0^2}{2}$,

где $V_0 = \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$, появится безразмерный параметр $W = \frac{\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2 + \dot{z}_0^2}{2}$, имеющий весьма ясный

физический смысл. Если воспользоваться единицей времени (2) и выразить W , то окажется, что $W = \frac{\varepsilon_0}{|q\Phi_0|}$. Иначе говоря, безраз-

мерная кинетическая энергия W выражает реальную кинетическую энергию ε_0 в долях характерной потенциальной энергии $q\Phi_0$ иона в данном поле. Если далее выразить $\dot{x}_0, \dot{y}_0, \dot{z}_0$ через W , то становится очевидным, что весь набор безразмерных начальных данных (4) зависит не от массы иона, а от его энергии старта ε_0 . Это означает, что любой пакет ионов разной массы, но одинаковой энергии, можно рассматривать как своеобразную абстрактную обезличенную частицу, для которой вся динамика и кинематика определяется только параметрами (4) и структурой безразмерного потенциала $\varphi(x, y, z)$.

Теперь сконструируем класс лапласовых потенциалов вида

$$\varphi = f(x, y) + az^2. \quad (5)$$

Подставляя в уравнение Лапласа (1), получим двухмерное уравнение Пуассона для функции $f(x, y)$

$$f_{xx} + f_{yy} + 2a = 0, \quad (6)$$

а уравнения движения (3) примут вид

$$\begin{cases} \ddot{x} = -f_x(x, y) \\ \ddot{y} = -f_y(x, y), \\ \ddot{z} = -2az \end{cases}$$

причем движение вдоль оси z отделено от движения в плоскости xy , и связано с ним только посредством начальных данных. Если $a > 0$, то движение вдоль оси z немедленно находится, поскольку оно эквивалентно линейному осциллятору

$$z = z_0 \cos \sqrt{2a}\tau + \frac{\dot{z}_0}{\sqrt{2a}} \sin \sqrt{2a}\tau. \quad (7)$$

Пусть в момент старта пакет частиц, распределенный по скоростям $\dot{x}_0, \dot{y}_0, \dot{z}_0$, имел вид плоскости $z = z_0$. Из (7) легко заметить, что в моменты

$$\tau_n = \frac{\pi n}{\sqrt{2a}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

функция z перестает зависеть от z_0 , поскольку $\sin \pi n = 0$, а координата z_n принимает значения

$$z_n = (-1)^n z_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Иначе говоря, лист снова стал бесконечно тонким несмотря на распределение частиц по скорости \dot{z}_0 .

Физическое время полета и координата получатся с помощью T и l :

$$t_n = T \tau_n = l\pi \sqrt{\frac{m}{2a|q\Phi_0|}} n, \quad (8)$$

$$Z_n = l z_n = (-1)^n Z_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Это важно для времяпролетной масс-спектрометрии явление можно назвать принципом идеальной пространственно-временной фокусировки. Как видно из (8), ионы каждой массы m проходят плоскости фокусировки $Z = \pm Z_0$ в разные моменты времени t_n и, следовательно, они уже диспергированы по времени полета пропорционально \sqrt{m} . За несколько циклов этого колебательного процесса можно накопить большую дисперсию.

Можно сказать, что квадратичная часть потенциальной энергии воплощает собой идею идеального масс-рефлектрона с полной компенсацией энергетического разброса в ионном пакете. Если бы реальный пакет имел вид таблетки толщиной d вдоль оси z и проекцию на плоскость xy в виде небольшого пятна, то с течением времени это пятно расплывется и займет кольцевую область достаточно больших размеров, если только силы электрического поля не помешают этой деформации пакета. Поэтому необходимо выработать правила вы-

бора потенциала $f(x, y)$, гарантирующие нужную структуру сил, при которой пакет удерживается в заданных нами размерах.

Конструирование потенциала $f(x, y)$

Общее решение уравнения (6) легко составить из частного решения неоднородного уравнения и общего решения однородного, т. е. произвольной гармонической функции, которую удобно записать с помощью аналитической функции комплексного переменного $\Omega(\xi)$

$$f = -\frac{a}{2} \xi \bar{\xi} + \frac{\Omega(\xi) + \bar{\Omega}(\bar{\xi})}{2}, \quad (9)$$

$$\xi = x + iy, \quad \bar{\xi} = x - iy.$$

Первый член $f_0 = -\frac{a}{2}(x^2 + y^2)$ при $a > 0$ всегда дает силу, отталкивающую ионы от оси z и, следовательно, только способствующую быстрому расплыванию пакета в плоскости $xу$. Однако выбор подходящей функции $\Omega(\xi)$ вполне может компенсировать расталкивающую силу. В частности, при $\Omega = \ln \xi$ мы имеем такой случай, когда вдоль оси z натянута заряженная нить с отрицательным зарядом. Чтобы глубже понять природу поперечного движения ионов в полях данного класса, надо располагать некоторым запасом модельных потенциалов $f(x, y)$, позволяющих проинтегрировать уравнения движения в замкнутой аналитической форме.

Интегрируемые случаи поперечного движения

Силы в плоскости $xу$ независимы от силы вдоль z , поэтому в нашей ситуации можно записать уравнение Гамильтона-Якоби только для поперечного движения

$$\frac{S_x^2 + S_y^2}{2} = g - f(x, y), \quad (10)$$

$$g = \frac{\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2}{2} + f(x_0, y_0).$$

Если удастся найти полный интеграл $S(x, y, g, c)$ (укороченное действие), содержащий кроме g еще одну произвольную постоянную c , то по теории К. Якоби уравнения траекторий запишутся в виде

$$\frac{\partial S(x, y, g, c)}{\partial c} = D,$$

$$\frac{\partial S(x, y, g, c)}{\partial g} = \tau - \tau_0.$$

Постоянные g, c, D, τ_0 определяются через начальные данные движения.

В работе [1] найдены все типы двухмерных гармонических потенциалов, допускающих интегрирование уравнения (10) в квадратурах. Для структур (9) дело обстоит несколько сложнее, но и здесь применима наша аналитическая техника. На плоскости $xу$ введем кон-

формные координаты с помощью аналитических функций комплексного переменного

$$x + iy = \xi(\omega), \quad \omega = u + iv,$$

$$x - iy = \bar{\xi}(\bar{\omega}), \quad \bar{\omega} = u - iv.$$

Преобразуем (10)

$$\frac{S_u^2 + S_v^2}{2} = g \xi_{\omega} \bar{\xi}_{\bar{\omega}} - f(\omega, \bar{\omega}) \xi_{\omega} \bar{\xi}_{\bar{\omega}}. \quad (11)$$

Полный интеграл для (11) сразу же найдется в форме

$$S = S_1(u) + S_2(v), \quad (12)$$

если при любых g оба члена в (11) порознь распадутся на суммы

$$\xi_{\omega} \bar{\xi}_{\bar{\omega}} = A(u) + B(v) = A\left(\frac{\omega + \bar{\omega}}{2}\right) + B\left(\frac{\omega - \bar{\omega}}{2i}\right); \quad (13)$$

$$f \xi_{\omega} \bar{\xi}_{\bar{\omega}} = I(u) + K(v) = I\left(\frac{\omega + \bar{\omega}}{2}\right) + K\left(\frac{\omega - \bar{\omega}}{2i}\right). \quad (14)$$

Из этих условий необходимо найти все координаты функции $\xi(\omega)$ и все потенциалы $f(\omega, \bar{\omega})$ в соответствии со структурой (9), преобразованной к переменным ω и $\bar{\omega}$.

Введем операторы частного комплексного дифференцирования

$$\frac{\partial}{\partial \omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial u} - i \frac{\partial}{\partial v} \right), \quad \frac{\partial}{\partial \bar{\omega}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial u} + i \frac{\partial}{\partial v} \right).$$

С их помощью можно образовать более сложные операторы второго порядка $\frac{\partial^2}{\partial \omega^2}, \frac{\partial^2}{\partial \omega \partial \bar{\omega}}, \frac{\partial^2}{\partial \bar{\omega}^2}$ и комбинации из них, чрезвычайно полезные в процедурах разделения переменных. Чтобы избавиться от неизвестных пока функций A и B в (12), применим к обеим частям этого уравнения оператор $\frac{\partial^2}{\partial \omega^2} - \frac{\partial^2}{\partial \bar{\omega}^2}$. Образуется уравнение вида

$$\xi_{\omega\omega\omega} \bar{\xi}_{\bar{\omega}} - \xi_{\omega} \bar{\xi}_{\bar{\omega}\bar{\omega}\bar{\omega}} = 0,$$

которое сразу же дает разделение переменных

$$\frac{\xi_{\omega\omega\omega}}{\xi_{\omega}} = \frac{\bar{\xi}_{\bar{\omega}\bar{\omega}\bar{\omega}}}{\bar{\xi}_{\bar{\omega}}} = \lambda.$$

Постоянная разделения λ должна быть вещественным числом, ибо справа и слева стоят две комплексно сопряженные функции. Для координатной функции $\xi(\omega)$ получили простое уравнение

$$\frac{d^2 \xi}{d\omega^2} = \lambda \frac{d\xi}{d\omega}.$$

При $\lambda = 0$ его интеграл задает произвольно расположенные на плоскости xu параболические координаты

$$\xi = \alpha_1 \omega^2 + \alpha_2 \omega + \alpha_3, \quad \lambda = 0, \quad (15)$$

а при $\lambda \neq 0$ — общие эллиптические координаты

$$\xi = \beta_1 e^{\sqrt{\lambda} \omega} + \beta_2 e^{-\sqrt{\lambda} \omega} + \beta_3, \quad \lambda \neq 0.$$

Произвольные комплексные числа $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ и вещественный параметр λ определяют положение координатной сетки на плоскости xu и ее размеры, но не влияют на ее внутреннюю структуру. Сдвигами и поворотами от них можно избавиться, и в результате получатся всего три криволинейные системы конформных координат, в которых только и возможно строить искомые потенциалы с разделением переменных, их канонические формы:

$\xi = \omega^2$ — параболические координаты;

$\xi = e^\omega$ — конформные полярные координаты; (16)

$\xi = Ch\omega$ — эллиптические координаты.

Сами декартовы координаты xu можно рассматривать как вырождение параболических, если положить в (15) $\alpha_1 = \alpha_3 = 0$ и $\alpha_2 = 1$.

Подставим в (14) структуру (9) и запишем в виде

$$-R(\omega)\bar{R}(\bar{\omega}) + Q(\omega)\bar{P}(\bar{\omega}) + \bar{Q}(\bar{\omega})P(\omega) = 2I\left(\frac{\omega + \bar{\omega}}{2}\right) + 2K\left(\frac{\omega - \bar{\omega}}{2i}\right), \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} P &= \xi_\omega, & \bar{P} &= \bar{\xi}_{\bar{\omega}}, \\ Q &= \xi_\omega \Omega, & \bar{Q} &= \bar{\xi}_{\bar{\omega}} \bar{\Omega}, \\ R &= \sqrt{a} \xi_\xi \xi_\omega, & \bar{R} &= \sqrt{a} \bar{\xi}_{\bar{\xi}} \bar{\xi}_{\bar{\omega}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Избавимся от неизвестных функций $I(u), K(v)$, действуя на (17) оператором $\frac{\partial^2}{\partial \omega^2} - \frac{\partial^2}{\partial \bar{\omega}^2}$. Получим уравнение относительно $Q(\omega)$ и $\bar{Q}(\bar{\omega})$, ибо функции P и R вычисляются через (16).

$$R\bar{R}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} - R_{\omega\omega}\bar{R} + Q_{\omega\omega}\bar{P} - Q\bar{P}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} + \bar{Q}P_{\omega\omega} - \bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}}P = 0. \quad (19)$$

Далее будем решать (19) относительно $Q(\omega)$, каждый раз вычисляя P и R с помощью формул (18) и опуская тривиальные выкладки.

Параболические координаты $\xi = \omega^2$

$$\begin{aligned} P &= 2\omega, & R &= 2\sqrt{a}\omega^3, \\ \bar{P} &= 2\bar{\omega}, & \bar{R} &= 2\sqrt{a}\bar{\omega}^3. \end{aligned}$$

Подставляя в (19), получим

$$6a\omega^3\bar{\omega} - 6a\omega\bar{\omega}^3 + \bar{\omega}Q_{\omega\omega} - \bar{\omega}\bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} = 0.$$

Разделим в нем функции от сопряженных переменных ω и $\bar{\omega}$.

$$\frac{Q_{\omega\omega}}{\omega} + 6a\omega^2 = \frac{\bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}}}{\bar{\omega}} + 6a\bar{\omega}^2 = 6\mu, \quad (20)$$

где 6μ — вещественная постоянная разделения.

Интегрируем (20) и находим Q , а затем $\Omega = \frac{Q}{\xi_\omega}$.

$$\Omega = -\frac{3}{10}a\omega^4 + \mu\omega^2 + \frac{\nu + i\delta}{\omega},$$

где μ, ν, δ — произвольные вещественные числа.

Заменяя далее ω через ξ , восстанавливая f и φ , найдем окончательно

$$\varphi = a\left(z^2 - \frac{4}{5}x^2 - \frac{1}{5}y^2\right) + \mu x + \operatorname{Re} \frac{\nu + i\delta}{\sqrt{x + iy}}, \quad (21)$$

где Re — реальная часть комплексной величины.

Полярные координаты $\xi = e^\omega$

$$\begin{aligned} P &= e^\omega, & \bar{P} &= e^{\bar{\omega}}, \\ R &= \sqrt{a}e^\omega, & \bar{R} &= \sqrt{a}e^{\bar{\omega}}. \end{aligned} \quad (22)$$

Из (19) с помощью (22) находим уравнение для Q , которое в разделенном виде запишется так

$$\frac{Q_{\omega\omega} - Q}{e^\omega} = \frac{\bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} - \bar{Q}}{e^{\bar{\omega}}} = 2\mu, \quad (23)$$

где μ — вещественная постоянная.

Интегрирование (23) дает $\Omega = \frac{Q}{\xi_\omega}$.

$$\Omega = \mu\omega + (\nu + i\delta)e^{-2\omega}.$$

Реконструируя $f(\omega)$ и далее φ в декартовых координатах, получим выражение

$$\varphi = a\left(z^2 - \frac{x^2 + y^2}{2}\right) + \mu \ln \sqrt{x^2 + y^2} + \operatorname{Re} \frac{\nu + i\delta}{(x + iy)^2}. \quad (24)$$

Эллиптические координаты $\xi = Ch\omega$

$$\begin{aligned} P &= Sh\omega, & \bar{P} &= Sh\bar{\omega}, \\ R &= (\sqrt{a}/2)Sh2\omega, & \bar{R} &= (\sqrt{a}/2)Sh2\bar{\omega}. \end{aligned} \quad (25)$$

Из (19) и (25) получим для Q

$$(Q_{\omega\omega} - Q)Ch\bar{\omega} - (\bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} - \bar{Q})Ch\omega = 0,$$

отсюда

$$\frac{Q_{\omega\omega} - Q}{Ch\omega} = \frac{\bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} - \bar{Q}}{Ch\bar{\omega}} = 2\mu. \quad (26)$$

Интегрирование (26) и определение $\Omega = \frac{Q}{Sh\omega}$ дает

$$\Omega = \mu\omega \frac{Ch\omega}{Sh\omega} + (\nu + i\delta) \frac{Ch\omega}{Sh\omega}.$$

Если выразить ω через ξ , то получим для Ω выражение

$$\Omega = \mu \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} \ln \left(\xi \pm \sqrt{\xi^2 - 1} \right) + \frac{(v + i\delta)\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}}.$$

Достраивая f и затем φ , получим окончательно

$$\begin{aligned} \varphi = a \left(z^2 - \frac{x^2 + y^2}{2} \right) + \operatorname{Re} \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} \times \\ \times \left[\mu \ln \left(\xi \pm \sqrt{\xi^2 - 1} \right) + v + i\delta \right], \quad (27) \\ \xi = x + iy. \end{aligned}$$

Декартовы координаты $\xi = \omega$

$$\begin{aligned} P = \bar{P} = 1, \\ R = \omega, \quad \bar{R} = \bar{\omega}. \end{aligned}$$

Из (19) имеем для Q

$$Q_{\omega\omega} = \bar{Q}_{\bar{\omega}\bar{\omega}} = 2\mu.$$

С точностью до константы находим

$$\Omega = \mu\omega^2 + (v + i\delta)\omega.$$

Окончательное выражение для φ

$$\varphi = az^2 + \left(\mu - \frac{a}{2} \right) x^2 - \left(\mu + \frac{a}{2} \right) y^2 + vx - \delta y. \quad (28)$$

Найденными структурами исчерпывается многообразие полей вида (5), в которых траектории можно записать в квадратурах. Эта их исключительность и в то же время достаточная гибкость благодаря наличию управляющих свободных параметров μ , v , δ делают их весьма ценным материалом для синтеза новых электронно-оптических систем и особенно время-пролетных масс-спектрометров. Следует отметить, что комплексная часть потенциалов $\Omega(\xi)$ отвечает интегрируемым в квадратурах двумерным полям [2], и только в параболических координатах появляется дополнительный член с параметром a .

Эквипотенциальные портреты

Геометрию эквипотенциальных поверхностей $\varphi = \text{const}$ полей класса (5) удобно изучать с помощью сечения их плоскостями $z = \text{const}$, ортогональными к оси z , и меридиональными плоскостями, проходящими через ось z .

Пусть $\varphi = M = \text{const}$, $z = N = \text{const}$, тогда из (5) получим эквипотенциальный портрет в виде семейства кривых линий, которые являются следами пересечения пространственных эквипотенциалей с ортогональными к z плоскостями.

$$f(x, y) = M - aN^2.$$

Форма и характер распределения этих кривых дают главную информацию об устройстве особенностей поля и соотношении сил, действующих на ионы. Если ввести полярные координаты r , γ : $x = r \cos \gamma$, $y = r \sin \gamma$ и записать (5) в виде $f(r \cos \gamma, r \sin \gamma) + az^2 = M$, то, фиксируя

$\gamma = \text{const}$, будем иметь один из меридиональных эквипотенциальных портретов. Меняя γ , можно получить полную картину поля.

Обсудим структуру найденных интегрируемых полей. Геометрия квадратичных потенциалов с ее гиперболическими эквипотенциалами общеизвестна. Она не удобна для нашей цели, ибо в ней нельзя организовать силы, удерживающие ионы вблизи оси z . Самое большое при $\mu > a/2$ можно обеспечить устойчивость движения вдоль оси x , но по y ионы будут убегать.

Более интересна со всех точек зрения структура (24), являющаяся суперпозицией полей осесимметричного гиперблоида, заряженной нити и квадрупольной особенности. Совместим плоскость симметрии квадрупольной особенности с плоскостью xy , положив $\delta = 0$, и введем простые полярные координаты, тогда

$$\varphi = a \left(z^2 - \frac{r^2}{2} \right) + \mu \ln r + v \frac{\cos 2\gamma}{r^2}. \quad (29)$$

При $v = 0$, $\mu > 0$ мы имеем многообразие эквипотенциальных квазиконических поверхностей, чрезвычайно выгодных для времяпролетных систем, ибо сила от логарифмической особенности позволяет удерживать ионы от разбегания вдоль r . Это поле уже служит основой эффективного энергоанализатора [3], и на его базе нами впервые предложены масс-анализатор с идеальной пространственно-временной фокусировкой [4] и новая схема компактного универсального прибора: энерго-масс-анализатора с угловым разрешением [2]. Если изобразить эквипотенциальный меридиональный портрет при $a = 1$, $\mu = 1$, $v = 0$, то можно увидеть, что наиболее выгодная часть поля лежит ниже седла $r < 1$. Квадрупольный член при $v \neq 0$ лишает поле осевой симметрии, и с ростом v роль его становится доминирующей в окрестности оси z , однако это поле быстро гаснет с ростом r , и конфигурация все более приближается к осесимметричной. Особый интерес может представлять смесь гиперблоида и квадрупольной особенности при $\mu = 0$. Здесь можно организовать режим азимутальных колебаний ионов.

Потенциал (21), интегрируемый в параболических координатах, состоит из поля гиперболического конденсатора эллиптического сечения, который можно двигать вдоль оси x за счет изменения параметра μ и поля кардиоидного типа с особенностью порядка $(-1/2)$. Этот член в полярных координатах имеет вид $\rho^{-1/2} [\cos(\gamma/2) + \delta \sin(\gamma/2)]$, но здесь нельзя избавиться от δ поворотом вокруг оси z без нарушения структуры поля, и оба параметра v и δ существенные. С помощью данной особенности также можно создать благоприятное распределение сил в некотором секторе

азимутальных углов γ для удержания пакетов ионов от распыливания.

Структура поля (27), интегрируемого в эллиптических координатах, качественно не отличается от предыдущих, ибо она имеет две особенности: $\xi = \pm 1$ или $y = 0, x = \pm 1$ и, кроме этого, вся картина усложняется логарифмическим членом. При $\mu = 0$ потенциал алгебраический и оба параметра ν, δ существенные. Его эквипотенциальный портрет при $a = 1, \mu = 0, \nu = 1, \delta = 0$ показывает весьма интересную расстановку поперечных сил, также способную удерживать ионные пакеты в ограниченной области пространства.

Ансамбль траекторий

Наши качественные физические соображения, следующие из созерцания распределения эквипотенциалей, могут быть подкреплены аналитическим аппаратом представления траекторий. Интегрирование уравнения (11) по методу разделения переменных в условиях (13, 14) дает укороченное действие в следующей общей форме:

$$S = \sqrt{2} \int \sqrt{c + gA(u) + I(u)} du + \sqrt{2} \int \sqrt{-c + gB(v) + K(v)} dv.$$

Интегралы уравнений движения запишутся в виде

$$\int \frac{du}{\sqrt{c + gA(u) + I(u)}} - \int \frac{dv}{\sqrt{-c + gB(v) + K(v)}} = D; \quad (30)$$

$$\int \frac{A(u) du}{\sqrt{c + gA(u) + I(u)}} - \int \frac{B(v) dv}{\sqrt{-c + gB(v) + K(v)}} = \sqrt{2}(\tau - \tau_0). \quad (31)$$

Уравнение (30) выражает связь между переменными u и v для каждой конкретной траектории, и с ее помощью можно определить из формул преобразования координат (16) реальные траектории на плоскости xu . В то же время в силу конформности преобразования плоскостей xu в uv многие черты поведения ансамблей траекторий сохраняются при отображении их на плоскость uv , в частности, углы пересечения траекторий между собой, связность областей, занимаемых ионами, ограниченность или, напротив, инфинитность траекторий и т. п.

Поэтому поведение ионных пакетов в поперечном к оси z направлении вполне адекватно описывается уравнениями (30), (31) без перехода на реальную плоскость xu .

За недостатком места мы не можем произвести полномасштабное исследование ансамблей траекторий и ограничимся анализом ситуаций, когда найденные полевые структуры удерживают пакеты ионов от разбегаания вдоль осей x, y , что позволяет использовать при времяпролетном анализе большее число циклов осевых колебаний ионных пакетов (вдоль z). При этом нам вполне достаточно выражения (30), с помощью которого можно отследить эволюцию очертаний ионного пакета в процессе движения. Мгновенное положение ио-

нов в плоскости uv (и xu) следует изучать с помощью (31).

Опуская элементарное вычисление функций $A(u), B(v), I(u), K(v)$, приведем формулы для траекторий во всех найденных интегрируемых ситуациях, за исключением квадратичного потенциала (28), для которого уравнения движения легко интегрируются в явной форме в декартовых координатах.

Траектории в полях (21)

$$\int \frac{du}{\sqrt{c + \frac{4}{5}au^6 - \mu u^4 + gu^2 - \nu u}} - \int \frac{dv}{\sqrt{-c + \frac{4}{5}av^6 + \mu v^4 + gv^2 - \delta v}} = D. \quad (32)$$

Хотя интегралы (32) по своей природе гиперэллиптические и не берутся в элементарных функциях, тем не менее из анализа подрадикальных выражений легко установить связи между коэффициентами, при которых обе координаты могут колебаться в пределах некоторой потенциальной ямы в ограниченных пределах. Более того, центр этой ямы можно назначить по нашему усмотрению за счет подходящего выбора параметров, исключая только вариант $u = 0, v = 0$, отвечающий положению этого центра в особой точке поля.

Положим для простоты расчетов $a = 5/4$ и запишем две функции

$$\begin{aligned} f_1(u) &= -u^6 + \mu u^4 - gu^2 + \nu u; \\ f_2(v) &= -v^6 - \mu v^4 - gv^2 + \delta v. \end{aligned} \quad (33)$$

В качестве центра поперечных колебаний ионов (дно ямы) выберем точку $u = 1, v = 0$, что немедленно накладывает условия на выбор μ, ν, δ, g , которые следуют из равенства нулю первых производных функций (33) на дне ямы. Получаем

$$\begin{aligned} \left. \frac{df_1}{du} \right|_{u=1} &= -6 + 4\mu - 2g + \nu = 0, \\ \left. \frac{df_2}{dv} \right|_{v=0} &= \delta = 0. \end{aligned}$$

Условия того, что выбранная точка действительно является дном ямы, дают неравенства:

$$\left. \frac{d^2 f_1}{du^2} \right|_{u=1} > 0, \quad \left. \frac{d^2 f_2}{dv^2} \right|_{v=0} > 0$$

или

$$\mu > \frac{g+15}{6}, \quad g < 0.$$

При вариации энергии иона g в небольших пределах дно ямы перемещается с места на место, при этом меняется и глубина ямы. В конце концов, яма исчезает, и ионы уже ничто не удерживает в ограниченной области плоскости xu . Полный анализ эволюции ямы требует достаточно обширных вычислений.

Траектории в полях (29)

Наиболее наглядную картину движения ионов мы получаем при $\mu > 0$ и $\nu = 0$, т. е. в полях квазиконических осесимметричных структур. Физически очевидно, что при наличии азимутальной компоненты начальной скорости ионов в определенных пределах эффективная радиальная сила с учетом цикличности угловой координаты и вводом соответствующего центробежного члена образует потенциальную яму переменной глубины, в которой и может удерживаться пакет ионов, вращаясь вокруг оси z и одновременно совершая вдоль нее гармонические колебания.

Включение азимутальной силы при $\nu \neq 0$ со стороны квадрупольной особенности меняет всю ситуацию, и появляется возможность реализации потенциальной ямы и в азимутальном направлении. В результате ионный пакет перестает вращаться и начинает циклически колебаться как по радиусу, так и по азимуту в некотором интервале (γ_1, γ_2) . Электродная конфигурация в этом случае лишена осевой симметрии и более компактна и может составить немалый интерес для реализации принципа идеальной пространственно-временной фокусировки в направлении z в сочетании с поперечной фокусировкой. Траектории мы запишем в конформных полярных координатах u, v

$$\int \frac{du}{\sqrt{-c + \frac{a}{2} e^{4u} + (g - \mu u) e^{2u}}} - \frac{dv}{\sqrt{c - \nu \cos 2v}} = D.$$

Потенциальная яма по азимуту $v = \gamma$ образуется, очевидно, при $\nu < 0$, если сектор колебаний прилегает к полуоси $x > 0$ ($\gamma = 0$). Замечательно то, что параметр ν не входит в радиальную часть (вдоль) траектории и, следовательно, радиальная потенциальная яма в основном определяется логарифмической особенностью поля.

При $\mu = 0$ движение иона выражается непосредственно через эллиптические функции от азимутального угла, но устойчивое радиальное движение ионов организовать трудно. Тем не менее, мы считаем этот случай также интересным для практической реализации благодаря компактности фрагмента полевой структуры, которую можно положить в основу малогабаритного времяпролетного масс-спектрометра с падающими вдоль z траекториями и несколькими циклами осевых (по z) колебаний, обеспечивающих достаточный запас временной дисперсии по массам.

Траектории в полях (27)

При $\mu = 0$ поля данного класса имеют алгебраическую особенность вблизи точек $x = \pm 1, y = 0$. Если $\mu \neq 0$, то эта особенность дополнительно осложняется логарифмическим членом. В целом поведение как самой структуры при вариации

параметров μ, ν, δ, a , так и траекторий весьма сложное и требует дополнительных исследований. Однако траектории в координатах u, v записываются в квадратурах, достаточно простых для общих исследований финитности движения.

$$\int \frac{du}{\sqrt{-c + \frac{a}{8} Ch4u + gCh2u - (\mu u + \nu) Sh2u}} - \int \frac{dv}{\sqrt{c - \frac{a}{8} \cos 4v - g \cos 2v - (\mu v + \delta) \sin 2v}} = D.$$

Уже из вида подрадикальных выражений легко усмотреть возможность существования потенциальных ям по обеим координатам u и v при дополнительных условиях на коэффициенты и начальные данные движения ионов.

Геометрия этих полей существенно иная по сравнению с рассмотренными выше и открывает новые перспективы в синтезе времяпролетных систем, функционирующих в режиме финитных поперечных колебаний ионных пакетов и с неограниченным наращиванием дисперсии.

Заключение

Найдено с исчерпывающей полнотой многообразие электростатических полей, в которых реализуется принцип идеальной пространственно-временной фокусировки ионных пакетов в сочетании с возможностью аналитического представления всех траекторий. Ценность этих структур состоит в том, что многие из них могут быть реализованы на практике, и с их помощью легко реализовать финитные устойчивые движения ионных пакетов. Отталкиваясь от этих базовых структур, можно расширить наш поиск полей с функциями $f(x, y)$, не обеспечивающими интегрируемость, но более приспособленными к решению технологических проблем реализации приборов и вопросов взаимодействия с источниками и детекторами ионов.

Литература

1. Голиков Ю. К., Коломенков В. Е. //ЖТФ. 1980. Т. 50. № 10. С. 2061.
2. Голиков Ю. К., Давыдов С. Н., Кораблев В. В., Краснова Н. К., Кудинов Ю. А. Спектрометр заряженных частиц: Пат. 2076387. 27.03.1997. Приоритет от 06.07.1994.
3. Бережковский М. А., Галль Л. Н., Галль Р. Н., Голиков Ю. К., Матышев А. А., Уткин К. Г., Холин Н. А., Чепарухин В. В. Электростатический спектрометр энергий заряженных частиц: А.с. 845674. 06.03.1981. Приоритет от 04.03.1980.
4. Галль Л. Н., Голиков Ю. К., Александров М. Л., Печалина Е. Э., Холин Н. А. Времяпролетный масс-спектрометр: А. с. 1247973. 01.04.1985. Приоритет от 16.01.1985.

Integrating electrostatic traps

Yu. K. Golikov, N. K. Krasnova, K. V. Solovyev, D. V. Nikitina
St.-Petersburg State Polytechnic University, Russia

In the article the properties of trajectory ensembles in the systems with separated variables are analysed. These systems are efficient to design new constructions of time-of-flight mass-spectrometers. The found variety of the Laplace's potentials is reduced into canonical form with a minimum numbers of structure parameters. The last control a geometry of the fields and character of ion movement there. The atlas of equipotential portraits is created. The perspective of using the field structures of the given class in mass analysis is discussed.