

02

## Локализация иона в плоской ловушке с периодическим псевдопотенциалом

© С.С. Рудый, Ю.В. Рождественский

«ОАО» Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова, ОАО  
Санкт-Петербург  
E-mail: rud\_sem@mail.ru

Поступило в Редакцию 22 июля 2015 г.

Рассматриваются особенности захвата и принцип стабилизации иона под действием динамически изменяющегося псевдопотенциала, возникающего вследствие фазовой модуляции удерживающего поля. Показано, что происходит деформация зон устойчивости относительно случая гармонической модуляции электрического поля. Найдены условия локализации иона при аperiodически модулированном напряжении и получено выражение удерживающего псевдопотенциала для общего случая возбуждающего сигнала.

В настоящее время ионная ловушка является универсальным экспериментальным инструментом для пространственной локализации широкого спектра заряженных частиц — от отдельных атомных и молекулярных ионов до сложных кластеров и даже белков. Физической основой действия линейной ионной ловушки является то, что влияние быстро осциллирующего поля на динамику заряженной частицы аналогично действию некоторого эффективного потенциала, обратно пропорционального квадрату частоты приложенного поля [1]. В результате при высокочастотной гармонической модуляции напряжения (с частотой  $\Omega$  и амплитудой  $V$ ), приложенной к электродам ловушки, возможно удержание заряженной частицы с зарядом  $e$  и массой  $m$ . При этом уравнения движения в случае линейной плоской ловушки

представляют собой два уравнения Матье для движения частицы в ортогональных направлениях  $XU$

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} = -(a + 2q \cos 2\tau)x, \quad \frac{d^2y}{d\tau^2} = (a + 2q \cos 2\tau)y, \quad (1)$$

$$a = \frac{4eU}{mr_0^2\Omega^2}, \quad q = \frac{2eV}{mr_0^2\Omega^2}, \quad \tau = \frac{\Omega t}{2},$$

где  $r_0$  — расстояние от центра ловушки до электродов и  $U$  — величина постоянного электрического поля, которая создает возможность селекции ионов по отношению заряда к массе.

Подчеркнем, что, несмотря на многообразие разного вида электродов, на сегодняшний день использование гармонической модуляции напряжения для удержания заряженной частицы является основным видом модуляции, который применяется в оптических стандартах частоты, в экспериментах по удержанию ионов, созданию ионных кристаллов и реализации квантовых вычислений [2,3]. В то же время известно, что приложение аperiodического напряжения ведет к сильной модификации областей устойчивости, которая дает возможность провести эффективную селекцию ионов в зависимости от их приведенных зарядов в случае сжатия области устойчивости, либо возможность захватить недоступные ранее ионы в случае расширения области [4]. Для физических приложений особенно интересна модификация зон устойчивости в результате параметрического возбуждения ионов дополнительным слабым гармоническим полем. В этом случае траектория ионов становится инфинитной для целого набора частот, что ведет к рассеянию диаграммы устойчивости полосами неустойчивости и появлению отдельных „островов устойчивости“ [5].

В данной работе мы исследуем захват иона переменным псевдопотенциалом, который имеет место при приложении к электродам ловушки напряжения, меняющегося по аperiodическому закону.

Рассмотрим теперь динамику иона в плоской ловушке в случае закона изменения приложенного напряжения общего вида  $F(\tau)$ . Тогда уравнения движения иона, инжектированного в переменное электрическое квадрупольное поле

$$\Phi = U + VF(\tau), \quad (2)$$

в плоскости  $XU$  примут вид

$$\begin{aligned}\frac{d^2x}{d\tau^2} &= -\frac{e\Phi}{mr_0^2}x = -\frac{e}{mr_0^2}[U + VF(\tau)]x, \\ \frac{d^2y}{d\tau^2} &= \frac{e\Phi}{mr_0^2}y = \frac{e}{mr_0^2}[U + VF(\tau)]y.\end{aligned}\quad (3)$$

При этом зависимость  $F(\tau)$  из (2) может являться как периодической, так и аperiodической функцией времени. Покажем, что в системе, описываемой уравнениями (3), также существуют области стабильности, обусловленные, как и в случае с гармоническим законом изменения напряжения, существованием определенного вида псевдопотенциала. В качестве примера аperiodического сигнала мы рассмотрим сигнал фазовой модуляции

$$F(\tau) = (\cos(2\tau + \alpha \sin \tau_\phi)) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(\alpha) \cos(2\tau + k\tau_\phi), \quad (4)$$

где  $\alpha$  — коэффициент модуляции, обуславливающий интенсивность колебания фазы с частотой  $\tau_\phi = \frac{\omega t}{2}$ , а  $J_k(\alpha)$  — целочисленные функции Бесселя.

Подставив выражение (4) в уравнения (3), получим уравнения движения

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -\frac{e}{mr_0^2} \left( U + V \cos \left( \Omega t + \alpha \sin \frac{\Omega t}{n} \right) \right) x, \\ \ddot{y} &= \frac{e}{mr_0^2} \left( U + V \cos \left( \Omega t + \alpha \sin \frac{\Omega t}{n} \right) \right) y.\end{aligned}\quad (5)$$

Поскольку модулирующий сигнал является аperiodическим, то мгновенную частоту можно получить как

$$\tilde{\Omega} = \frac{d\psi}{dt} = \Omega + \frac{\alpha}{n} \cos \frac{\Omega t}{n}. \quad (6)$$

В соответствии с этим введем эквивалентную систему, в каждый момент времени которой на систему действует гармоническое возбуждение с частотой (6), что позволяет произвести усреднение по величине

$\tilde{\Omega}\tilde{t}$ , не зависящей от  $t$ . В этом случае уравнения движения примут вид

$$\ddot{x} = -\frac{e}{mr_0^2} (U + V \cos \omega\tilde{t})x = -\frac{e}{mr_0^2} \left( U + V \cos \left( \Omega + \frac{\alpha}{n} \cos \frac{\Omega t}{n} \right) \tilde{t} \right) x, \quad (7)$$

$$\ddot{y} = \frac{e}{mr_0^2} (U + V \cos \omega\tilde{t})y = \frac{e}{mr_0^2} \left( U + V \cos \left( \Omega + \frac{\alpha}{n} \cos \frac{\Omega t}{n} \right) \tilde{t} \right) y. \quad (8)$$

Найдем теперь значение потенциальной функции и псевдопотенциала для выбранной системы уравнений методом полного разделения движения в случае координаты  $x$  (для  $y$  усреднение производится аналогично) [5]. Проведем усреднение уравнений (5) методом прямого разделения движения на „медленную“  $X$  и „быструю“  $\xi(\tilde{t})$  составляющие [6]. После подстановки  $x = X + \xi(\tilde{t})$  уравнение (8) примет вид

$$\dot{X} + \ddot{\xi}(\tilde{t}) = -\frac{e}{mr_0^2} (U + V \cos \tilde{\Omega}\tilde{t}) (X + \xi(\tilde{t})). \quad (9)$$

В уравнении (9) присутствуют члены, определяющие как „медленные“, так и „быстрые“ колебания. Тогда для осциллирующих членов достаточно записать

$$\ddot{\xi}(\tilde{t}) = f(X, \tilde{t}) = -\frac{e}{mr_0^2} V \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t})X, \quad (10)$$

поскольку остальные члены (9) содержат малый множитель  $\xi(\tilde{t})$ . В результате эффективный потенциал определяется как средняя кинетическая энергия осцилляционного движения

$$\dot{\xi} = -\frac{e}{mr_0^2} \frac{V}{\tilde{\Omega}} \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t})X, \quad (11)$$

$$\langle \dot{\xi} \rangle = -\frac{e}{mr_0^2} \frac{VX}{2\tilde{\Omega}}. \quad (12)$$

Произведем усреднение скорости осцилляционных движений по периоду  $\tilde{\Omega}\tilde{t}$ , представляя функцию псевдопотенциала в виде

$$D = \frac{d^2}{dX^2} \left( \frac{\langle \dot{\xi} \rangle^2}{2} \right) = \frac{1}{4} \left( \frac{eV}{mr_0^2} \right)^2 \frac{1}{\tilde{\Omega}^2}. \quad (13)$$

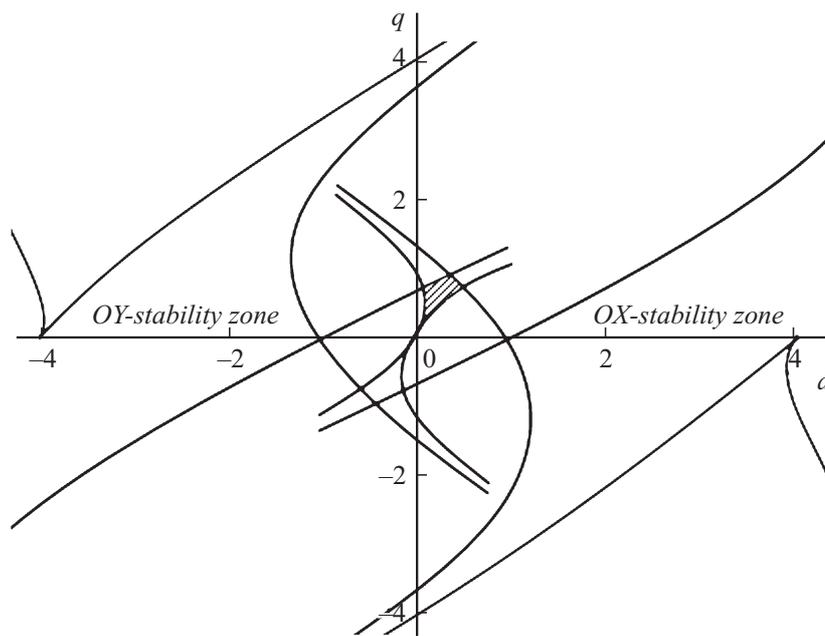
После возвращения к переменным (6) и общепринятым (1) получим выражение для псевдопотенциала системы (5)

$$D = \frac{d^2}{dX^2} \left( \frac{\langle \dot{\xi} \rangle^2}{2} \right) = \frac{\left( \frac{eV}{mr_0^2} \right)^2}{4 \left( \Omega + \frac{\alpha}{n} \cos \frac{\Omega r}{n} \right)^2} = \frac{q^2}{4 \left( 2 + \frac{\alpha}{n} \cos \frac{2r}{n} \right)^2}. \quad (14)$$

Из выражения (14) следует периодичность псевдопотенциала, поскольку сам псевдопотенциал зависит от мгновенной частоты (6). Как видно из (5), для малых значений параметра модуляции  $\alpha \ll 1$  или для большой разницы между несущей и модуляционной частотами ( $n \rightarrow \infty$ ) величина псевдопотенциала постоянна и соответствует гармоническому возбуждению.

В то же время для  $\alpha \neq 0$  и конечного  $n$  псевдопотенциал осциллирует с амплитудой, зависящей от параметра модуляции  $\alpha$ . В этом случае отличие от гармонического сигнала напряжения состоит в том, что действие псевдопотенциала на ион непостоянно. Соответственно для эффективной локализации период действия такого псевдопотенциала должен быть синхронизован с динамикой иона, которая в простейшем случае гармонического сигнала определяется значением параметров  $\alpha$ ,  $q$ . Результат такой синхронизации проявляется в искажении области устойчивости на плоскости  $\alpha$ ,  $q$ , изображенной на рис. 1.

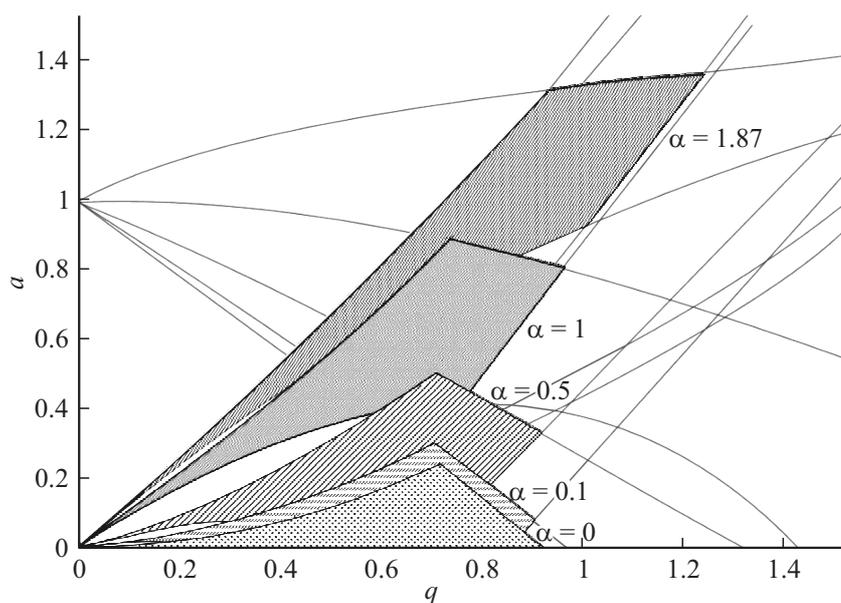
Наиболее интересным с точки зрения формирования диаграмм Айнса–Стретта является случай совпадения несущей частоты и частоты колебания фазы, т.е.  $n = 1$  в уравнениях (5), и сигнал сводится к периодическому. В случае  $\alpha = 0$  первая зона устойчивости для уравнений (1) показана на рис. 2 (кривая 1). По мере увеличения параметра  $\alpha$  начинает происходить деформация зоны устойчивости, которая уже для  $\alpha = 0.5$  становится существенной, а для  $\alpha = 1$  происходит полная перестройка вида зоны устойчивости, что показано на рис. 2 (кривые 2 и 3). Так, например, в области с  $\alpha$ ,  $q > 0$  появляется дополнительная вершина, которая позволяет ловушке селективно захватывать ионы с другим значением приведенного заряда. Таким образом, использование сигнала (4) позволяет при одном типе сигнала иметь две области селективного захвата, отличающиеся по приведенному заряду. Максимальная модификация первой зоны устойчивости достигается для  $\alpha = 1.83$ . Как видно из рис. 2, зона стабильности представляет собой узкую область, верхняя граница которой определяется границей



**Рис. 1.** Диаграмма Айнса–Стретта в плоскости  $a$ – $q$ , образованная пересечением устойчивых решений уравнений движения для значений параметров  $\alpha = 0.5$ ,  $\tau_\phi = 2\tau$ . Заштрихована первая зона устойчивости.

устойчивости иона по оси  $X$ , а нижняя — по оси  $Y$ . Очевидно, что вид траектории иона зависит от начальных условий. Однако для сигнала (4) в области значений параметров  $0 < q < 0.4$  в траектории движения будет практически полностью отсутствовать составляющая с частотой внешнего поля  $\Omega$ . Стоит отметить, что квадрупольный масс-фильтр, работающий в таком режиме, обладает двумя пиками чувствительности, что позволяет произвести захват сложной структуры (такой как система двух ионов с жесткой связью с возможностью подавления угловой составляющей колебания).

Таким образом, мы исследовали движение ионов при переменном значении псевдопотенциала ловушки, произведя обобщение возникновения параметрического возбуждения ионов. На основе численного



**Рис. 2.** Фрагменты диаграмм Айнеса–Стретта в плоскости  $a$ – $q$ : заштрихована первая зона устойчивости для различных значений коэффициентов модуляции  $\alpha = 0, 0.1, 0.5, 1, 1.87$  при  $\tau_\phi = 2\tau$ .

расчета траекторий движения ионов были построены зоны устойчивости для различных типов переменного напряжения. За счет изменения соотношения параметров  $\alpha$ – $\omega$  при фазовой модуляции достигается необходимое положение как одной или нескольких вершин области устойчивости уравнений (5). Подобное поведение частицы в осциллирующем псевдопотенциале, обусловленное исключительно изменением модуляции переменного напряжения, позволяет не только достигнуть хороших динамических характеристик иона относительно микродвижений, но и открывает возможность стабилизации и транспортировки сложных систем частиц.

Данная работа поддержана грантом Российского научного фонда, проект № 14-12-00894.

## Список литературы

- [1] Пауль В. // УФН. 1990. Т. 60. № 12. С. 109–127.
- [2] Madsen M.J., Skowronski A.D. // Am. J. Phys. 2014. V. 82. P. 934.
- [3] Xiao Y., Ding Z., Xu C., Dai X., Fang X., Ding C.F. // Anal. Chem. 2014. V. 86 (12). P. 5733–5739.
- [4] Sarkhosh Seddighi Chaharborj, Seyyed M. Sadat Kiai, Ismail Fudziaha, Zanariah A. Majida // Eur. J. Mass Spectrom. 2012. V. 18. P. 431–438.
- [5] Sudakov M.U., Kononkov N.V., Douglas D.J., Glebova T.A. // J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2000. V. 11. P. 11–18.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. Теоретическая физика. Изд. 4-е, испр. М.: Наука, 1988. Т. 1. С. 123.