РАДИОТЕХНИКА И ЭЛЕКТРОНИКА, 2020, том 65, № 2, с. 197–202

ЭЛЕКТРОННАЯ И ИОННАЯ ОПТИКА

УДК 621.384.8

СВОБОДНЫЕ И ВЫНУЖДЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ИНЕРЦИОННО-НЕСТАЦИОНАРНЫХ БЫСТРООСЦИЛЛИРУЮЩИХ КВАДРУПОЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

© 2020 г. Е. В. Мамонтов[a], М. Ю. Судаков[a], Р. Н. Дятлов[a], *

[a] *Рязанский государственный радиотехнический университет, ул. Гагарина, 59/1, Рязань, 390005 Российская Федерация*

**E-mail: kaitp@list.ru*

Поступила в редакцию 27.11.2018 г.
После доработки 28.12.2018 г.
Принята к публикации 11.01.2019 г.

Исследованы свободные и вынужденные колебания заряженных частиц в инерционно-нестационарных квадрупольных электрических ВЧ-полях. Используя линейные соотношения между коэффициентами ряда, являющиеся решением дифференциального уравнения Матье, полигармонические колебания заряженных частиц в быстроосциллирующих полях с медленно изменяющимися параметрами представляются моделью нестационарного гармонического осциллятора. С помощью функции Грина получены выражения для резонансных колебаний заряженных частиц в нестационарных ВЧ-полях с наложенными на них возбуждающими однородными полями. Рассмотрен частный случай полигармонического осциллятора с линейно изменяющейся собственной частотой колебаний, получены выражения для параметров его функции возбуждения. Аналитические соотношения подтверждаются результатами компьютерного моделирования.

DOI: 10.31857/S003384942002014X

ВВЕДЕНИЕ

Свойства колебаний заряженных частиц в квадрупольных ВЧ-полях и их композициях с однородными полями, описываемые дифференциальными уравнениями с периодическими коэффициентами, широко используются в аналитических приборах и системах для удержания, транспортировки и сепарации ионов по удельному заряду. При исследовании колебаний частиц в быстроосциллирующих полях с линейной возвращающей силой полезной моделью является гармонический осциллятор с квадратичным распределением статического потенциала [1]. Полигармонические колебания заряженных частиц в квадрупольных ВЧ полях также можно рассматривать как усредненные гармонические колебания с секулярной частотой [2]. Масс-анализаторы ионов, как правило, работают в режимах с разверткой масс, предполагающей изменение в процессе анализа одного или нескольких параметров квадрупольного поля [3]. По сравнению с секулярными колебаниями заряженных частиц эти изменения носят медленный характер и могут быть описаны моделью инерционно-нестационарного гармонического осциллятора. Линейная связь коэффициентов полигармонического решения дифференциальных уравнений Матье [4] позволяет использовать собственные и вынужденные колебания нестационарного гармонического осциллятора для решения задач резонансного воздействия однородных возбуждающих полей на колебания заряженных частиц в квадрупольных ВЧ-полях с медленно изменяющимися параметрами.

1. СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ИНЕРЦИОННО-НЕСТАЦИОНАРНОМ ВЧ-ПОЛЕ

Электрическое поле двумерного квадрупольного анализатора описывается распределением потенциала [3]

$$\varphi(x, y) = \frac{u}{r_0^2}(x^2 - y^2), \tag{1}$$

где $u = U + V\cos\omega t$ – питающее напряжение, r_0 – геометрический параметр анализатора. В поле с постоянными параметрами движение заряженных частиц по координате x (или y) описывается дифференциальным уравнением Матье [3, 4]

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\omega^2}{4}(a - 2q\cos\omega t)x = 0, \tag{2}$$

где $a = 8eU/r_0^2\omega^2 m$, $q = 4eV/r_0^2\omega^2 m$, e и m – заряд и масса частицы. Устойчивое решение уравнения (2) имеет вид гармонического ряда [4]

$$x(t) = A\sum_{r=-\infty}^{\infty} C_{2r}\cos\left[\left(r+\frac{\beta}{2}\right)\omega t+\theta\right], \tag{3}$$

где A и θ – постоянные интегрирования, зависящие от начальных координат x_0 и скоростей v_{0x} частиц, C_{2r} и β – коэффициенты ряда и параметр стабильности, зависящие от a и q. Наибольший интерес представляют колебания заряженных частиц в первой зоне стабильности, заключенной между границами [4]

$$\begin{gathered} a_0(q) = -\frac{1}{2}q^2 + \frac{7}{128}q^4 - \frac{29}{2304}q^6 + Q(q^8), \\ b_1(q) = 1 - q - \frac{1}{8}q^2 + \frac{1}{64}q^3 + Q(q^4). \end{gathered} \tag{4}$$

В стабильной зоне $0 \le \beta \le 1$. Коэффициенты C_{2r} ряда (3) зависят от параметров a, q и β и связаны между собой рекуррентным соотношением [4]

$$\begin{gathered} \frac{C_{2r}}{C_{2r-2}} = \frac{-(2r-2+\beta)^2 + a}{q} + \\ + \frac{q/(2r-4+\beta)^2}{1 - a/(2r-4+\beta)^2 - \ldots}. \end{gathered} \tag{5}$$

Выражение (5) указывает на пропорциональность коэффициентов $C_{2r} \sim C_0$, которая определяет линейную связь амплитуд X_{mr} высших гармоник колебаний с амплитудой X_{m0} секулярной составляющей. Это свойство решений уравнений Матье позволяет задачи полигармонических колебаний заряженных частиц в квадрупольных ВЧ-полях, а также в их суперпозициях с однородными полями, сводить к задачам свободных и вынужденных колебаний гармонического осциллятора. Такой же подход, изложенный в [1], рассматривает движение частиц в быстроосциллирующих полях как усредненные колебания в поле постоянной “эффективной потенциальной энергии” с квадратичной зависимостью от амплитуды колебаний. Модель гармонического осциллятора используется также для описания колебаний с секулярной частотой в поле “псевдопотенциала” квадрупольных анализаторов с параметрами $a = 0$, $q < 0.3$ [3]. Основываясь на отмеченных свойствах дифференциальных уравнений Матье, рассмотрим свободные и вынужденные колебания заряженных частиц в квадрупольных ВЧ-полях с медленно изменяющимися параметрами.

Нестационарность гармонических осцилляторов, как правило, выражается в изменении во времени собственной частоты колебаний $\Omega(\xi)$, где $\xi = t/T$ (T – интервал нестационарности). Под собственной частотой будем понимать частоту секулярных колебаний $\Omega_s(\xi) = \beta(\xi)\omega/2$ заряженных частиц в квадрупольном ВЧ-поле, изменение которой происходит при изменении (сканировании) одного или нескольких параметров питающего напряжения $u(\xi)$. Сканирование считаем инерционным при выполнении условия

$$T\Omega_{\min} \geqslant 2\pi, \tag{6}$$

где $\Omega_{\min}$ – минимальное на интервале $[0, T]$ значение секулярной частоты.

Колебания гармонического осциллятора без потерь с изменяющейся собственной частотой $\Omega(\xi)$ при внешнем воздействии $f(\xi)$ описываются дифференциальным уравнением

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} + \Omega^2(\xi)x = f(\xi). \tag{7}$$

Для решения линейного неоднородного дифференциального уравнения (7) используем метод Грина [5]

$$x(\xi) = \int_0^{\xi} G(\eta) f(\xi-\eta)d\eta + \sum_{k=1}^{2} A_k x_k(\xi), \tag{8}$$

где $G(\xi)$ – функция Грина, $x_k(\xi)$ – частные решения однородного дифференциального уравнения, A_k – постоянные интегрирования. Согласно теории линейных дифференциальных уравнений функцией Грина колебаний материальной точки с массой m является частное решение $x_1(\xi)$ однородного уравнения (7) при начальных условиях $x(0) = 0$, $x'(0) = 1/m$ [5]. Представим функцию $x_1(\xi)$ гармоническим колебанием с медленно изменяющейся амплитудой $X(\xi)$ и фазой $\varphi(\xi)$ [6]

$$x_1(\xi) = X(\xi)\sin\varphi(\xi), \tag{9}$$

где $\varphi(\xi) = \int_0^{\xi}\Omega(\eta)d\eta$. После подстановки $x_1(\xi)$ в (7) получаем уравнение огибающей

$$\begin{gathered} X''(\xi)\sin\varphi(\xi) - [2X'(\xi)\Omega(\xi) + \\ + X(\xi)\Omega'(\xi)]\cos\varphi(\xi) = 0. \end{gathered} \tag{10}$$

При выполнении условия (6) величина $X''(\xi)$ имеет второй порядок малости и уравнение (10) упрощается

$$2X'(\xi)\Omega(\xi) + X(\xi)\Omega'(\xi) \simeq 0. \tag{11}$$

Его решением является функция

$$X(\xi) \simeq C/\sqrt{\Omega(\xi)}, \tag{12}$$

где C – постоянная, определяемая начальными условиями. Тогда частное решение однородного дифференциального уравнения (7) примет вид

$$x_1(\xi) \simeq \frac{C}{\sqrt{\Omega(\xi)}}\sin\varphi(\xi). \tag{13}$$

После подстановки в (13) начальных условий $x(0) = 0$, $x'(0) = 1/m$, $\Omega(0) = \Omega_0$ получаем функцию Грина инерционно-нестационарного гармонического осциллятора

$$G(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi < 0, \\ \dfrac{1}{m\sqrt{\Omega_0\Omega(\xi)}}\sin\varphi(\xi), & 0 \le \xi \le 1. \end{cases} \quad (14)$$

Далее, учитывая пропорциональность коэффициентов $C_{2r} \sim C_0$, получаем выражение для функции Грина полигармонических колебаний заряженных частиц в квадрупольном ВЧ-поле с медленно изменяющимися параметрами

$$G(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi < 0, \\ \dfrac{1}{m\sqrt{\Omega_0\Omega(\xi)}}\sum\limits_{F=-\infty}^{\infty} C_{2r}(\xi)[v_r\xi + \varphi(\xi) + \theta_r], & 0 \le \xi \le 1, \end{cases} \quad (15)$$

где $v_r = r\omega T$ – нормированные частоты высших гармоник колебаний.

Рассмотрим частный случай свободных колебаний в гармоническом осцилляторе с линейно изменяющейся собственной частотой

$$\Omega(\xi) = \Omega_0 + \Delta\Omega\xi. \quad (16)$$

Дифференциальное уравнение для этого случая имеет вид

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} + [\Omega_0 + \Delta\Omega\xi]^2 x = 0. \quad (17)$$

Уравнение (17) приводится к дифференциальному уравнению параболического цилиндра

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \left(\frac{x^2}{4} - a\right)y = 0, \quad (18)$$

решением которого при $x \gg a$ являются функции Вебера [7]

$$W(0,x) \cong \frac{1}{\sqrt{x}}\left[B_1\cos\frac{x^2}{2} + B_2\sin\frac{x^2}{2}\right]. \quad (19)$$

Функцию Грина гармонического осциллятора с линейно изменяющейся собственной частотой колебаний получаем подстановкой (16) в (14):

$$G(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi < 0, \\ \dfrac{1}{m\sqrt{\Omega_0(\Omega_0 + \Omega\xi)}}\sin[v_0\xi + \Delta v\xi^2], & 0 \le \xi \le 1, \end{cases} \quad (20)$$

где $v_0 = \Omega_0 T$, $\Delta v = \Delta\Omega T/2$. При соответствующей замене переменных решения уравнений (17) и (18) совпадают, что подтверждает справедливость выражения (12) для огибающей функции Грина инерционно-нестационарного гармонического осциллятора.

Функции Грина, полученные численным моделированием свободных колебаний заряженных частиц в квадрупольном ВЧ-поле с линейно нарастающей и убывающей амплитудой (соответствуют прямому и обратному линейному сканированию секулярной частоты), приведены на рис. 1.

Огибающие секулярной составляющей функции Грина, рассчитанной по формуле (20) и полученной в результате компьютерного моделирования, при $\Omega T > 23$ отличаются не более чем на 1%. Высокочастотные составляющие свободных колебаний, показанные на рис. 1 в увеличенном масштабе, при сканировании изменяются в соответствии с зависимостями коэффициентов C_{2r} от параметра ВЧ-поля q.

С помощью выражения (12) для огибающей функции Грина устанавливается связь полной энергии колебаний нестационарного гармонического осциллятора с инерционным параметрическим воздействием на его собственную частоту. После подстановки в формулу для энергии гармонических колебаний материальной точки

$$W = \frac{x^2\Omega^2}{2}m$$

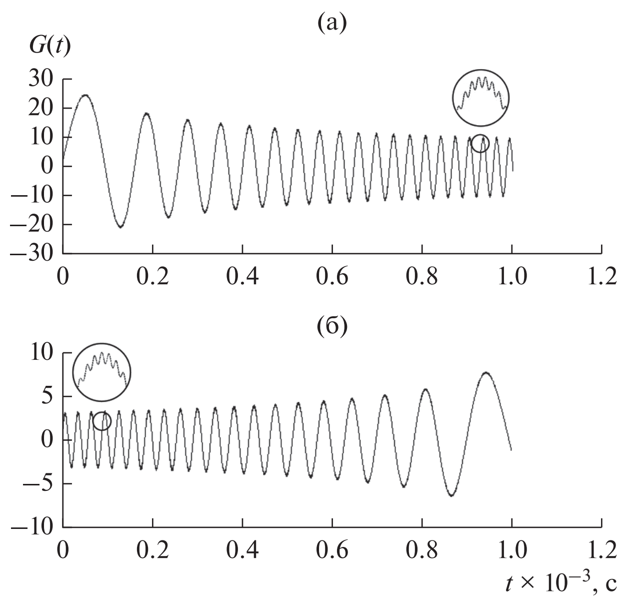

Рис. 1. Свободные колебания заряженных частиц в квадрупольном ВЧ-поле с линейно нарастающей (а) и линейно убывающей амплитудой (б); на вставках – увеличенный масштаб отмеченных участков.

зависимости (12) амплитуды от частоты получаем

$$W(\xi) = \frac{C^2 m}{2}\Omega(\xi). \tag{21}$$

Согласно (21) полная энергии колебаний инерционного параметрического осциллятора изменяется пропорционально частоте его собственных колебаний. В радиоэлектронике для усиления слабых сигналов используются быстрые, синхронные с частотой принимаемых колебаний, параметрические воздействия на колебательные системы [8]. В аналитических системах изменение полной энергии колебаний инерционным параметрическим воздействием на частоту собственных колебаний может использоваться для управления движением заряженных частиц при их транспортировке, удержании и сепарации в квадрупольных ВЧ-полях.

2. ВЫНУЖДЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ИНЕРЦИОННО-НЕСТАЦИОНАРНЫХ КВАДРУПОЛЬНЫХ ВЧ-ПОЛЯХ

Современные масс-спектрометрические методы микроанализа вещества используют свойства колебаний заряженных частиц в композициях полей с различающимися пространственно-временными распределениями потенциала. Эффективным является метод резонансного вывода ионов из квадрупольных анализаторов путем наложения на линейное ВЧ-поле возбуждающего поля [9, 10], в качестве которого используют близкое к однородному переменное поле

$$E_{\text{ex}}(\xi) \approx \frac{V_{\text{ex}}}{2r_0}\cos v_{\text{ex}}\xi, \tag{22}$$

где V_{ex} и $v_{\text{ex}} = T\Omega_{\text{ex}}$ – амплитуда и нормированная частота возбуждающего напряжения, приложенного к паре противоположных электродов квадрупольного анализатора с геометрическим параметром r_0.

Для базовых колебаний с секулярной частотой $\Omega_s(\xi)$ квадрупольный анализатор с резонансным выводом ионов и амплитудной разверткой масс можно рассматривать как нестационарный гармонический осциллятор с внешней силой

$$f(\xi) = F_m \cos v_{\text{в}}\xi,$$

($F_m = ev_{\text{в}}/2r_0$), описываемый неоднородным дифференциальным уравнением (7). Его решением в форме (8) при нулевых начальных условиях $x(0) = 0$, $x'(0) = 0$ является функция возбуждения

$$x_s(\xi) = F_m\int_0^{\xi} G(\eta)\sin[v_{\text{ex}}(\xi-\eta)]d\eta. \tag{23}$$

После подстановки в (23) функции Грина (14) получаем

$$x_s(\xi) = \frac{F_m}{m\sqrt{\Omega_0}}\int_0^{\xi}\frac{\sin\varphi(\eta)\sin[v_{\text{ex}}(\xi-\eta)]}{\sqrt{\Omega(\eta)}}d\eta. \tag{24}$$

При выполнении условия (6) инерционной нестационарности функция $\sqrt{\Omega(\eta)}$ в (24) по сравнению с гармоническими функциями является медленно изменяющейся, и с некоторым приближением можно записать

$$x_s(\xi) \simeq F(\xi)\int_0^{\xi}\sin[\varphi(\eta)]\sin[v_{\text{ex}}(\xi-\eta)]d\eta, \tag{25}$$

где $F(\xi) = F_m\big/m\sqrt{\Omega_0\Omega(\xi)}$. Для вычисления интеграла в (25) применим метод стационарной фазы [11].

Используя (25), найдем функцию возбуждения гармонического осциллятора с линейно изменяющейся частотой собственных колебаний $\Omega(\xi) = \Omega_0 + \Delta\Omega\xi$.

Текущая фаза $\varphi(\xi)$ колебаний при линейном сканировании частоты описывается функцией

$$\varphi(\xi) = \Omega_0 T\xi + \frac{\Delta v}{2}\xi^2. \tag{26}$$

После подстановки $\varphi(\xi)$ в (25), тригонометрических преобразований и пренебрежения малыми составляющими получаем

$$x_{se}(\xi) = \frac{F_m}{m\sqrt{\Omega_0(\Omega_0+\Delta\Omega\xi)}}\times$$
$$\times\left\{-\sin\left[\frac{\Delta v}{2}\left(\xi^2+\xi_{\text{ex}}^2\right)\right]\int_0^{\xi}\sin\left[\frac{\Delta v}{2}(\eta-\xi_{\text{ex}})^2\right]d\xi + \right. \tag{27}$$
$$\left. + \cos\left[\frac{\Delta v}{2}\left(\xi^2+\xi_{\text{ex}}^2\right)\right]\int_0^{\xi}\cos\left[\frac{\Delta v}{2}(\eta-\xi_{\text{ex}})^2\right]d\eta\right\},$$

где $\xi_{\text{ex}} = (\Omega_{\text{ex}} - \Omega_0)/\Delta\Omega$ – нормированное время возбуждения. Введя обозначение $H(\xi) = F_m\sqrt{T}\big/m\sqrt{2\Delta\Omega\Omega_0(\Omega_0+\Delta\Omega\xi)}$ и используя стандартные формы интегралов Френеля $S(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^y \sin y^2 dy$ и $C(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^y \cos y^2 dy$ запишем функцию возбуждения в следующем виде:

$$x_{se}(\xi) = H(\xi)\left\{-\left[\frac{1}{2}S\left(\frac{\Delta v}{2}(\xi+\xi_{\text{ex}})\right)\right]\times\right.$$
$$\times\sin\left[\frac{\Delta v}{2}\left(\xi^2+\xi_{\text{ex}}^2\right)\right] + \tag{28}$$
$$\left.+\left[\frac{1}{2}+C\left(\frac{\Delta v}{2}(\xi+\xi_{\text{ex}})\right)\right]\cos\left[\frac{\Delta v}{2}\left(\xi^2+\xi_{\text{ex}}^2\right)\right]\right\}.$$

В полигармоническом осцилляторе с суперпозицией квадрупольных ВЧ- и однородных возбуждающих полей функции (25) и (28) описывают колебания заряженных частиц с секулярной

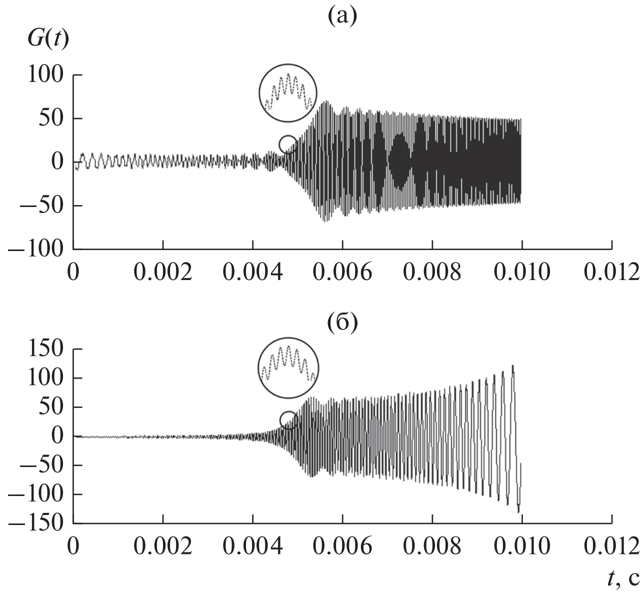

Рис. 2. Вынужденные колебания заряженных частиц в квадрупольном ВЧ-поле с прямым (а) и обратным (б) линейным сканированием амплитуды; на вставках – увеличенный масштаб отмеченных участков.

частотой. Функция возбуждения, учитывающая высшие гармоники колебаний, может быть получена с помощью функции Грина (15) или на основе рекуррентного соотношения (5) между коэффициентами C_{2r}:

$$x_p(\xi) = H(\xi)\sum_{r=-\infty}^{\infty} C_{2r}(\xi)\sin\left[\omega_r T\xi + \varphi(\xi) + \theta_r\right]. \quad (29)$$

Функции возбуждения полигармонического осциллятора с прямым и обратным линейным сканированием секулярной частоты, полученные компьютерным моделированием колебаний ионов с массой $M = 3900$ а. е. м. в квадрупольном ВЧ-поле с параметрами $r_0 = 5$ мм, $f = 1$ МГц, $V = (100 + 900\xi)$ В, $V = (1000 - 900\xi)$ В, и наложенным на него возбуждающим полем с $f_{\text{ex}} = 20$ кГц, $V_{\text{ex}} = 50$ В, показаны на рис. 2. Амплитуда секулярных колебаний ионов с приближением частоты $\Omega_s(\xi)$ к частоте Ω_{ex} возбуждающего поля резонансно возрастает и достигает наибольшего значения

$$X_{\max} = \frac{F_m\sqrt{\pi T}}{m\Omega_{\text{ex}}\sqrt{2}\sqrt{\Delta\Omega}}. \quad (30)$$

После прохождения резонанса амплитуда возбужденных колебаний изменяется в соответствии с функцией $1\big/\sqrt{\Omega(\xi)}$.

Для оценки разрешающей способности масс-анализатора важным параметром является время возбуждения, которое при линейном сканировании секулярной частотой рассчитывается по формуле

$$t_{\text{ex}} = 2\sqrt{\pi T/\Delta\Omega}. \quad (31)$$

Оценивать разрешающую способность квадрупольных масс-анализаторов с резонансным выводом ионов только по скорости изменения секулярного колебания, как в [10], не совсем корректно. Высшие гармоники колебаний придают огибающей функции возбуждения немонотонный характер и искажают шкалу масс M, соответственно, снижают разрешающую способность и точность определения масс-анализатора. При оптимизации частоты Ω_{ex} возбуждающего поля следует учитывать все факторы, влияющие на время t_{ex} достижения ионами границ $x = r_0$ электродной системы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе линейной зависимости коэффициентов C_{2r} высших гармоник решения дифференциального уравнения Матье от коэффициента C_0 секулярной составляющей обоснованно использование модели гармонического осциллятора для исследования колебаний заряженных частиц в квадрупольных ВЧ-полях и в их суперпозиции с однородными полями. При решении неоднородного дифференциального уравнения инерционно-нестационарного осциллятора используется функция Грина, определенная как гармоническое колебание с переменной частотой $\Omega(\xi)$ и огибающей $X(\xi) \sim 1\big/\sqrt{\Omega(\xi)}$. На ее основе получена функция Грина полигармонического осциллятора, описывающая свободные колебания заряженных частиц в квадрупольных ВЧ-полях с изменяющейся амплитудой. Для инерционно-нестационарного осциллятора с внешним воздействием найдена функция возбуждения. Рассмотрены свободные и вынужденные колебания заряженных частиц в квадрупольном ВЧ-поле с линейным сканированием секулярной частоты. Аналитические соотношения, подтвержденные результатами компьютерного моделирования, свидетельствуют об эффективности использования модели нестационарного гармонического осциллятора для исследования колебаний заряженных частиц в быстроосциллирующих полях с медленно изменяющимися параметрами.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-07-00429) и Министерства образования и науки Российской Федерации (тема 8.8760.2017/8.9).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Физматлит, 2001. С. 124.
2. *Миллер М.А.* // Изв. вузов. Радиофизика. 1958. Т. 1. С. 110.
3. *Dawson P.H.* Quadrupole Mass Spectrometry and its Applications. N.Y.: Amer. Inst. Phys., 1995.
4. *Мак-Лахлан Н.В.* Теория и приложения функций Матье. М.: Изд-во иностр. лит., 1958.
5. *Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д.* Элементы прикладной математики: М.: Наука, 1967. С. 255.
6. *Митропольский Ю.А.* Нестационарные процессы в нелинейных колебательных системах. Киев: Изд-во АН УССР, 1955.
7. Справочник по специальным функциям / Под ред. Абрамовица М., И. Стиган. М.: Наука, 1979. С. 494.
8. *Баскаков С.И.* Радиотехнические цепи и сигналы. М.: Высшая школа, 2000.
9. *Xu W., Chappell W.J., Ouyang Z.* // Int. J. Mass Spectrometry. 2011. V. 308. № 1. P. 49.
10. *Douglas D.J., Konenkov N.V.* // Rapid Commun. Mass Spectrometry. 2014. V. 28. P. 430.
11. *Мэтьюз Дж., Уокер Р.* Математические методы физики. М.: Атомиздат, 1972.