



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

یک رویکرد جدید برای محاسبه توزیع پتانسیل الکترواستاتیکی سنج جرمی چهار قطبی با میله - های سطح مقطع گرد

وحید شکوئی فر - نوید پورصالحی* - احمد رضا ذوالفقاری

دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته ای، گروه راکتور

چکیده:

برای پیش بینی مسیر حرکت یون داخل تحلیلگر چهار قطبی، توزیع پتانسیل الکترواستاتیکی باید معین باشد. برای تحلیلگر با الکترودهای هذلولی مقطع، شکل پتانسیل به طور دقیق مشخص است، درحالیکه برای الکترودهای گرد مقطع، توزیع پتانسیل با روشهایی به طور تقریبی بدست می آید. در این مقاله، روش جدیدی برای محاسبه پتانسیل ارائه می شود که هم ساده تر است و هم با روش های قبل سازگار است. در این تحقیق، میدان الکترواستاتیکی یک میله فلزی استوانه ای با شعاع کوچک، به وسیله اعمال قانون گاوس بدست آمده و پتانسیل مربوطه از انتگرالگیری حاصل گردید. با استفاده از اصل برهم نهی، پتانسیل چهار میله موازی از جمع پتانسیل تک تک میله ها محاسبه شد. مسیر حرکت یون با استفاده از روش رانگ-کوتای مرتبه چهار بدست آمد که این مسیر یون با مسیر حاصل از سایر روش ها هم خوانی بسیار خوبی دارد.

کلید واژه: طیف سنج چهار قطبی، قانون گاوس، اصل برهم نهی، روش رانگ-کوتا

مقدمه: طیف سنج های چهار قطبی در دهه ۱۹۵۰ توسط پائول و همکارانش توسعه یافت. تحلیلگر این نوع طیف سنج در حالت ایده آل از چهار الکتروود هذلولی مقطع تشکیل شده است که به دو تا از الکترودهای روبرو ولتاژ مستقیم و به دو تای دیگر ولتاژ متناوب RF متصل شده است. معادله حرکت یک یون یا یک ذره باردار در میدان الکترواستاتیکی بین الکترودها، معادله شناخته شده متیو^۱ است. از حل معادله متیو، می توان به مسیر حرکت یون رسید [۱]. با توجه به مسیرها برای یون های با جرمها، ولتاژها، فرکانس ها یا شعاعهای میدان الکترواستاتیکی مختلف؛ مشاهده می شود که تحت شرایط خاصی که پارامترهای a و q دیکته می کنند، یونها می توانند داخل محدوده شعاع میدان r_0 از تحلیلگر عبور کنند. به یک چنین مسیری که یون بتواند بدون برخورد به الکترودها یا بدون خارج شدن از کنار آنها در داخل محدوده r_0 به انتهای تحلیلگر برسد، مسیر پایدار گفته می شود که پارامترهای a و q مربوط به آن، در نمودار پایداری مشخص می شود [۱]. در واقع تحلیلگر چهار قطبی دو کار روی یونها انجام می دهد: برخی از یونهایی را که a و q پایدار ندارند در طی مسیر از مجموعه یونهای موجود خارج می کند، به عبارت دیگر با این کار طیف جرمی برای چند جرم مد نظر بزرگنمایی می کند. دومین عمل این است که یون ها بسته به مشخصه جرم به بارشان مسیر های گوناگونی را تا انتهای تحلیلگر طی می کنند، پس به تعداد فراوانی جرم یونها مسیر وجود دارد که طولشان نیز

¹Mathieu

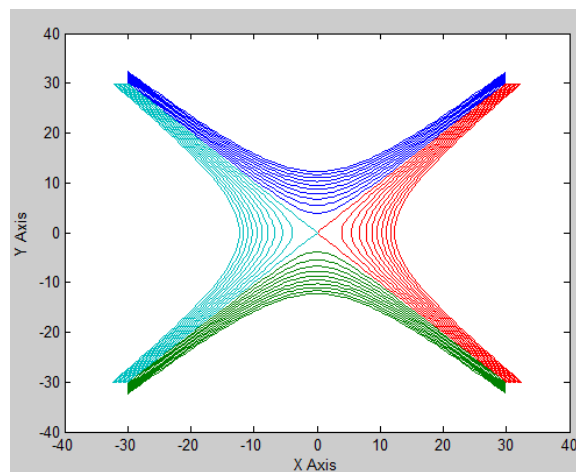


بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

با هم متفاوت است و این تفاوت در طول مسیر موجب می شود که یونها نوع به نوع با یک اختلاف زمانی به آشکارساز برسند و طیف جرمی را تشکیل دهند.
روش کار: توزیع پتانسیل برای تحلیلگر با الکترودهای هذلولی مقطع در معادله (۱) آمده است [۱]. شکل (۱) این توزیع را نشان می دهد.

$$\Phi = \frac{\Phi_0(x^2 - y^2)}{2r_0^2}$$



شکل (۱). خطوط هم پتانسیل برای الکترودهای با سطح مقطع هذلولی.

همانطور که می دانیم، گرادیان پتانسیل الکتریکی، میدان الکتریکی را بدست می دهد [۲]. با استفاده از قانون دوم نیوتن معادلات حرکت را بدست می آید.

$$\begin{aligned} \ddot{x} + (e/mr_0^2)\Phi_0 x \\ \ddot{y} - (e/mr_0^2)\Phi_0 y \end{aligned}$$

شکل انتخاب شده برای Φ_0 ، معمولاً $(U - V \cos \omega t)$ است. یعنی یک ولتاژ مستقیم U و یک ولتاژ سینوسی از صفر تا دامنه قله V و فرکانس زاویه ای ω . با جایگذاری در معادلات حرکت داریم:

$$\begin{aligned} \ddot{x} + (e/mr_0^2)(U - V \cos \omega t) x \\ \ddot{y} - (e/mr_0^2)(U - V \cos \omega t) y \end{aligned}$$

یونها در امتداد محور z به تحلیلگر تزریق می شوند و در این امتداد موقعیت و سرعت ذره تحت تاثیر هیچ نیرویی قرار نمی گیرد. استفاده از الکترودهای با سطح مقطع هذلولی موجب می شود، حرکت ذره در امتداد هر یک از سه محور مختصات مستقل بماند [۱]. با تعریف پارامترهای a و q و اعمال یک تغییر متغیر به شکل متعارف معادله متیو (۸) می رسیم.

$$q_u = q_x = -q_y =$$



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + [a_u + 2q_u]$$

در ساخت انواع تجاری تحلیلگر چهارقطبی از الکترورد گرد مقطع استفاده می شود که خطای عملکردی آن با بهینه سازی شعاع الکترودها کاهش داده می شود. توزیع پتانسیل مربوط به این ساختار را می توان به صورت یک بسط چندقطبی بینهایت در مختصات استوانه ای به صورت زیر بیان نمود [۳].

$$\Phi(r, t) = [U + V \cos(\omega t)] \sum_{m=0}^{\infty} C_m \left(\frac{r}{r_0}\right)^m \cos(m\theta) \quad (9)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$$

معادله (۹) معادله لاپلاس را ارضا می کند. چون پتانسیل با تغییر θ به اندازه $\frac{\pm\pi}{2}$ تغییر علامت می دهد، پس شرط $\cos\left(m\frac{\pm\pi}{2}\right) = -1$ باید ارضا شود.

$$\Phi(r, t) = [U + V \cos(\omega t)] \sum_{n=0}^{\infty} C_n \left(\frac{r}{r_0}\right)^{2(2n+1)} \cos(2(2n+1)\theta) \quad (10)$$

جمله اول بسط چندقطبی، عبارت چهارقطبی، دومی، دوازده قطبی، سومی یک بیست قطبی و ... است. برای بدست آوردن معادلات حرکت، از معادله (۱۰) در مختصات کارتزین دیفرانسیل می گیریم.

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} = -[a + 2q \cos(2\theta)]$$

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} = -[a + 2q \sin(2\theta)]$$

با بهینه سازی شعاع الکترودها و تعیین ضرایب C_n به صورت تابعی از شعاع الکترودها با تکنیک های خاص می توان مسیر یون را شبیه سازی کرد [۳]. به منظور ایجاد اختلال از مرتبه بالای جملات چند قطبی، پتانسیل الکتریکی با استفاده از روش المان محدود محاسبه شده است [۴].

در این پژوهش، برای بدست آوردن میدان الکتریکی تحلیلگر، ابتدا میدان را برای یک تک میله محاسبه می کنیم. همانطور که می دانیم میدان الکتریکی در داخل یک رسانا صفر است و لذا با استفاده از قانون گاوس میدان الکتریکی پیرامون یک میله استوانه ای به شعاع R و به طول L در نقطه ای به فاصله محوری ρ به صورت زیر حساب می شود. در حال حاضر از میدان سر و ته میله صرفه نظر می کنیم.

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{A} = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

$$\vec{E} = \frac{Q}{2\pi\epsilon_0 L \rho} \hat{\rho} \quad (1)$$

$$\phi = \frac{-Q}{2\pi\epsilon_0 L} \ln(\rho)$$

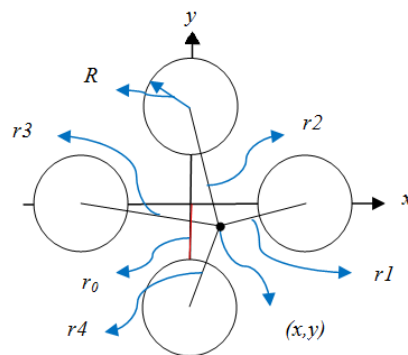
که $\epsilon_0 = 8.8542 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$ ثابت گذردهی خلاء و ρ مختصه شعاعی در مختصات استوانه ای است. Q بار کل سطح الکتروود است.



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳، دانشگاه اصفهان

که C ابعاد ظرفیت خازنی را دارد. حال با استفاده از اصل برهم نهی می توان پتانسیل و در نتیجه میدان ناشی از چهار میله موازی را بدست آورد، ولی قبل از آن لازم است مختصات بر اساس هندسه به صورت زیر بازتعریف گردد. شکل (۲). چینش الکترودها و نمایش مختصات به کار رفته.



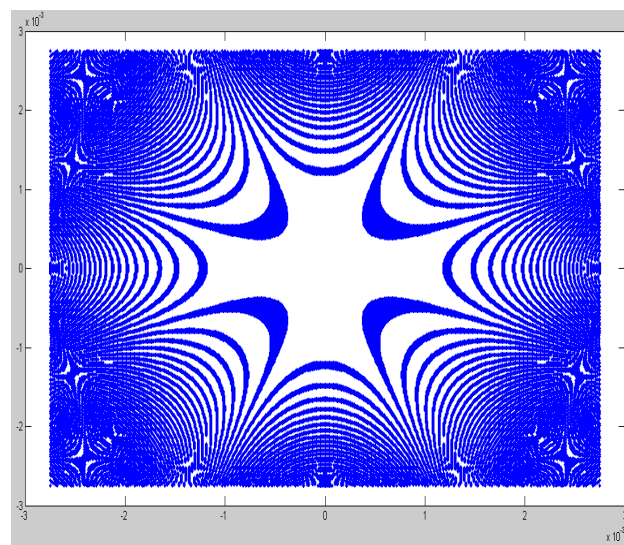
فاصله مرکز مختصات تا محور میله $r=r_0+R$ می باشد.

$$r1=[(r-x)^2+y^2]^{0.5}, r2=[x^2+(r-y)^2]^{0.5}, r3=[(-r-x)^2+y^2]^{0.5}, r4=[x^2+(-r-y)^2]^{0.5} \quad (17)$$

در نتیجه، توزیع پتانسیل الکتریکی مدنظر چنین است.

$$\Phi = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 = \frac{-Q}{2\pi\epsilon_0 L} [\ln r1 + \ln r2 + \ln r3 + \ln r4] + cons. \quad (18)$$

خطوط هم پتانسیل برای این توزیع نیز به صورت زیر است.



شکل ۳. خطوط هم پتانسیل برای الکترودهای با سطح مقطع دایره.

حال از معادله (۱۶) نسبت به x و y مشتق می گیریم و میدان الکتریکی در هر دو راستا را بدست می آوریم. با اعمال قانون دوم نیوتن، دو معادله دیفرانسیل حرکت را خواهیم داشت. این معادلات وابسته به هر دو مختصه و به هم

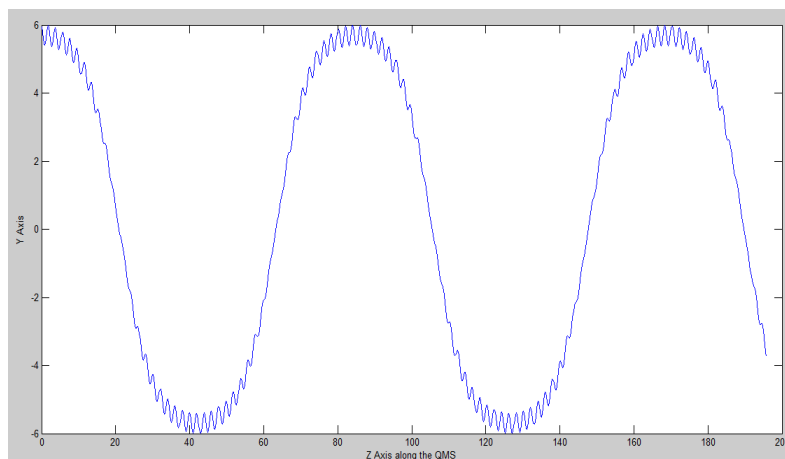


بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

کوپل هستند. برای حل عددی این معادلات از روش رانگ-کوتای مرتبه چهار استفاده شده است. این روش جدید برای محاسبه پتانسیل نسبت به روش های دیگر، به دلیل عدم نیاز به تعیین ضرایب خاص سرراست تر و به دلیل نداشتن خطای قطع بسط، دقیق تر می باشد.

نتایج: یون های تزریق شده در راستای محور z در حین گذر از تحلیلگر، تحت تاثیر میدان الکتریکی، مسیرهای پر پیچ و خمی طی می کنند. شکل (۴)، که خروجی برنامه کامپیوتری نوشته شده

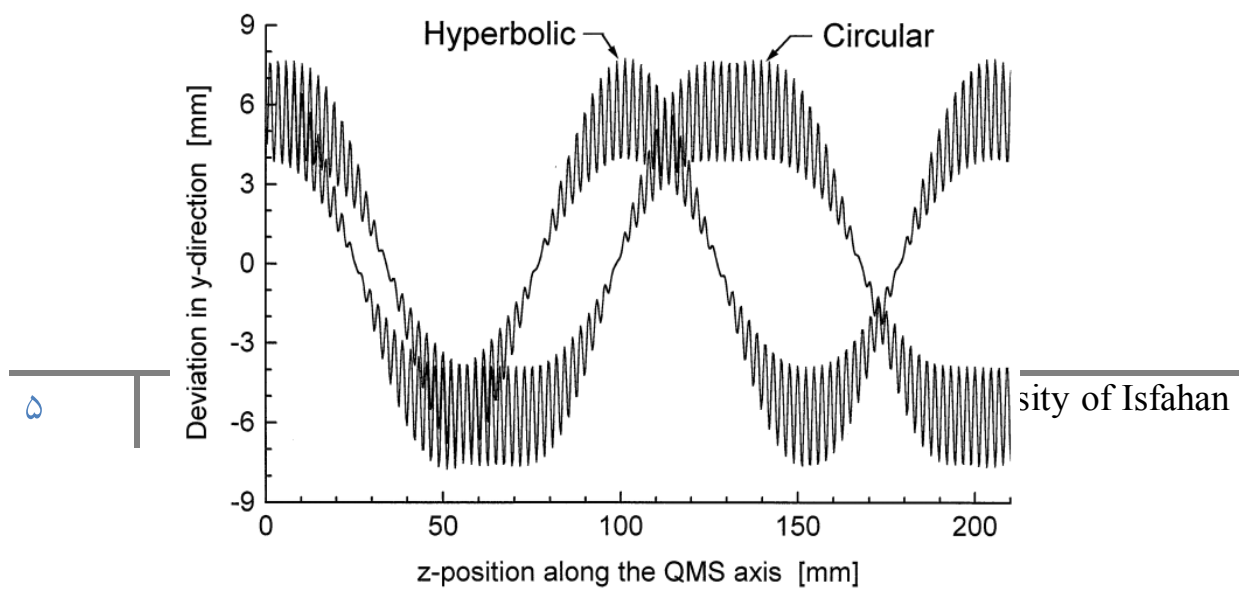


در MATLAB برای یک تحلیلگر جرمی چهار قطب است، تصویری از آن مسیر در صفحه yz می باشد. شکل (۵) قیاسی از مسیریون در دو نوع تحلیلگر چهار قطب با الکترون و هیدروژن و دیوایدیرو است [۳] که روش محاسبه توزیع پتانسیل آنها متفاوتی باشد.

شکل (۴) مسیر یون در تحلیلگر با الکترون گرد مقطع، این مسیر از پتانسیل پیشنهادی در این مقاله حاصل شده است.

شکل (۵) مسیر حرکت یون هم در تحلیلگر هذلولی مقطع و هم در تحلیلگر گرد مقطع.

با توجه به شکل های (۴) و (۵) و مقایسه مسیرها، می توان نتیجه گرفت که اولاً انتخاب الکترون گرد مقطع به جای الکترون هذلولی مقطع انتخاب مناسبی بوده است، دوماً اصلاح کردن توزیع پتانسیل الکتریکی تاثیر زیادی در رسیدن به مسیر یون واقعی تر دارد.





بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

بحث و نتیجه گیری: مراحل شبیه سازی مسیر یون بدین قرار است که ابتدا باید پتانسیل و میدان الکتریکی تعیین گردد؛ سپس معادله حرکت و به تبع آن نمودار پایداری مشخص می شود. در نهایت، با حل معادله حرکت، می توان به مسیر یون پایدار دست یافت. در واقع سه نوع مسیر ارائه شده در نتایج، تنها در مرحله تعیین پتانسیل باهم متفاوتند. همانطور که ملاحظه شد در محاسبه پتانسیل به وسیله بسط بینهایت، باید بسط را با مرتبه‌ای از خطا قطع کرد که این مرتبه به تبع دقت مورد نیاز تعیین می شود. از طرفی ضرایب نیز باید با تکنیک هایی مشخص شوند، در حالیکه در روش جدید این ضرایب گویی حساب شده‌اند و همچنین نیازی به قطع بسط و نیز اعمال روش المان محدود برای بدست آوردن جملات مرتبه بالای بسط وجود ندارد. ساده بودن این روش مزیتی است که شبیه سازی مسیر حرکت یون را تسهیل می کند.

مراجع:

- [1]. Dawson, P.H, Editor, Quadrupole Mass Spectrometry and Its Application, AIP Press, 1995
- [2]. John R. Ritz & Frederick J. Milford, Foundations of Electromagnetic Theory, Addison-Wesley publishing company, INC, USA, 1960
- [3]. K. Blaum, Ch. Geppert, P. Muller, W. Nortershauser, E.W. Otten, A. Schmitt, N. Trautmann, K. Wendt, B.A. Bushaw, Properties and performance of a quadrupole mass filter used for resonance ionization mass spectrometry, International Journal of Mass Spectrometry, 181, 67-87, 1998
- [4]. Gianangelo Bracco, Comparison of quadrupole mass filters equipped with rods of different convexity: An analysis by finite element methods and trajectory simulations, International Journal of Mass Spectrometry, 287, 75-88, 2008