

جداسازی ایزوتوپی با توجه به تأثیر همزمان شکل هندسی دام و نیروی میراکننده در دام

یونی پائول کشیده

ایمان ضیائیان^{۱*}، نصیبه فلاح^۲

^۱ سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده علوم هسته‌ای، گروه پژوهشی علوم مهندسی

^۲ دانشگاه پیام نور مرکز مشهد، گروه فیزیک

چکیده:

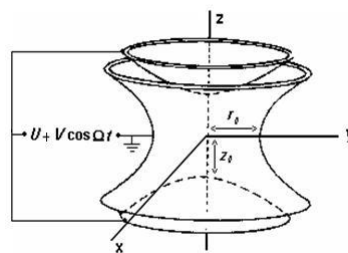
تأثیر نیروی میراکننده و تغییر در شکل هندسی دام در دستگاه معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار یون در دام یونی پائول و همچنین در نواحی پایداری حرکت ذره منفرد بررسی شده است. با توجه به تأثیر همزمان نیروی میراکننده و شکل هندسی دام، نواحی پایداری اول و دوم در صفحه $a-q$ و همچنین ولتاژهای مورد نیاز برای محصورسازی یون گازهای نادر ${}^4\text{He}^+$ ، ${}^{20}\text{Ne}^+$ ، ${}^{40}\text{Ar}^+$ ، ${}^{84}\text{Kr}^+$ و ${}^{136}\text{Xe}^+$ به دقت محاسبه شده‌اند. محاسبات با استفاده از روش رونگه-کوتا مرتبه ۵-۶ و رنر صورت گرفته است. قابل ذکر است که محاسبات انجام شده تا کنون در مقالات گزارش نشده است. نتایج نشان می‌دهد که نیروی میراکننده و شکل هندسی دام یونی پائول نقش بسزایی در جابجایی نواحی پایداری دارد.

کلیدواژه: نیروی میراکننده، دام یونی کشیده پائول، معادله ماتیو، روش رونگه-کوتا مرتبه ۵-۶ و رنر

مقدمه:

موضوع دام‌های یونی مورد استفاده در طیف سنج جرمی، به سال ۱۹۵۰ بر می‌گردد. پائول یکی از دانشمندان پیشرو در این زمینه معتقد است که دام‌های یونی با به کارگرفتن تخصص‌های مختلفی مانند فیزیک پرتو یونی، طیف‌سنج جرمی و با استفاده از فناوری‌های پیشرفته به تکامل رسیده‌اند. ایده به دام اندازی یون به وسیله فرکانس RF نتیجه مطالعات فراوان در آزمایشگاه‌های مختلف است [۱]. تکنیک محصورسازی یون‌ها در دام

یونی فرکانس رادیویی کمک شایانی به پژوهش‌های مدرن همچون خنک‌سازی لیزری ذرات باردار و طیف-سنجی جرمی کرده است. در یک دام یونی، یون‌های بوجود آمده بر اساس میدان‌های الکترومغناطیسی محصور می‌شوند که زمان این محصورسازی به مشخصات الکتریکی و مکانیکی سیستم بستگی دارد. دام یونی چهارقطبی پائول مهمترین بخش از یک طیف‌سنج جرمی را نشان می‌دهد. دام یونی پائول از سه الکتروود شامل یک الکتروود فلزی جانبی به نام حلقه (ring) و دو الکتروود فلزی دیگر در بخش‌های بالایی و پایینی به نام کلاهک (end-cap) تشکیل شده است. این الکتروودها به صورت هذلولی هستند [۲]. شکل خاص این نوع از دام موجب ایجاد پتانسیل چهارقطبی در داخل دام می‌شود لذا دام یونی پائول را دام یونی چهارقطبی نیز می‌گویند. در دام یونی پائول، تنها از میدان‌های الکتریکی استفاده می‌شود. محصورسازی توسط نوسانات فرکانس رادیویی RF صورت می‌گیرد. با اعمال پتانسیل‌های RF (V) و DC (U) به الکتروودها، چاه پتانسیلی ایجاد می‌شود که یون‌ها در داخل آن در جهت z و r محصور می‌گردند. نمای طرح‌وار از دام یونی چهارقطبی پائول در شکل (۱) نشان داده شده است. الکتروودهای کلاهک به ولتاژ $U + V\cos\Omega t$ و الکتروود حلقه به زمین متصل شده است.



شکل (۱). نمای طرح‌وار از دام یونی چهارقطبی پائول.

روش کار:

دام یونی چهارقطبی به عنوان یک دستگاه دینامیک شناخته می‌شود زیرا مسیر یون‌ها در این سیستم تحت تأثیر مجموعه‌ای از نیروهای وابسته به زمان قرار دارد. با در نظر گرفتن پتانسیل اولیه $\phi_0 = U + V\cos\Omega t$ پتانسیل چهارقطبی اعمال شده به دام را می‌توان با رابطه کلی زیر در نظر گرفت [۲]:

$$\varphi_{r,z} = \frac{(U+V\cos\Omega t)(r^2 - rz^2)}{r_0^2 + rz_0^2} + \frac{2(U+V\cos\Omega t)z_0^2}{r_0^2 + rz_0^2} \quad (1)$$

اکثر محققین برای رسیدن به دام یونی ایده آل، فاصله بین حلقه و کلاهک را طوری تنظیم می کنند که مجانب های الکترودهای حلقه و کلاهک بر روی یکدیگر قرار گیرند در این حالت رابطه $r_0^2 = 2z_0^2$ برقرار است [۶-۳]. با توجه به قانون دوم نیوتن و با استفاده از پتانسیل (۱)، به معادله حرکت یون درون دام یونی چهارقطبی می رسمیم که به معادله ماتیو معروف است [۲]:

$$\left(\frac{d^2 u}{d\xi^2}\right) + (a_u - 2q_u \cos 2\xi)u = 0 \quad (2)$$

جایی که u جایگزین r و z در مختصات استوانه ای می شود. کمیت های بدون بعد a_u ، q_u و ξ به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\xi = \frac{\Omega t}{2} \quad (3)$$

$$a_z = -2a_r = -\frac{16eU}{m(r_0^2 + rz_0^2)\Omega^2} \quad (4)$$

$$q_z = -2q_r = -\frac{16eV}{m(r_0^2 + rz_0^2)\Omega^2} \quad (5)$$

که در آن Ω بسامد زاویه ای ذره در دام، m جرم یون و e بار الکتریکی یون است.

ما حالتی را که نیروی میراکننده متناسب با سرعت یونها است را در نظر می گیریم ($F = -Dv$) در این رابطه $D = M\gamma$ که در آن M جرم یون و γ ثابت است. یون درون دام می تواند با دو نوع نیروی میراکننده مواجه شود، یکی بر اساس برخورد یونها با مولکول های گاز بافر ایجاد می شود و دیگری بر اساس برخورد یونها با فوتون های لیزر به منظور خنک سازی مورد استفاده قرار می گیرد. در برخورد یون با مولکول های گاز، ثابت γ بر مبنای تحرک پذیری یون و فشار و دمای گاز بدست می آید [۷].

معادله دیفرانسیل حاکم بر حرکت یون با در نظر گرفتن نیروی میراکننده با رابطه زیر داده می شود [۳]:

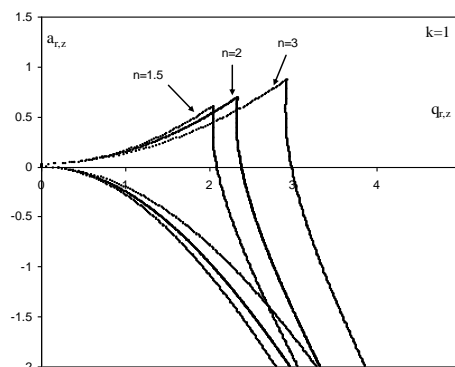
$$\left(\frac{d^2u}{d\xi^2}\right) + \gamma k \left(\frac{du}{d\xi}\right) + (a_u - \gamma q_u \cos^2 \xi)u = 0 \quad (6)$$

$$k = \frac{D}{M\gamma} \quad \text{که در آن: (7)}$$

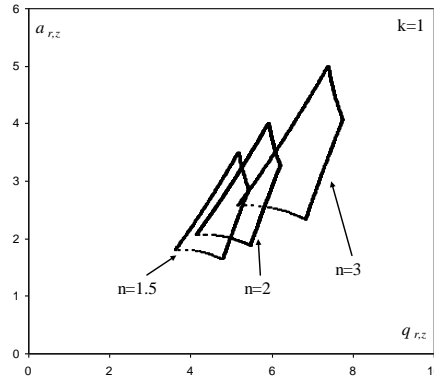
همانطور که بیان شد برای رسیدن به یک دام یون چهارقطبی ایده آل بایستی رابطه $r_0^2 = \gamma z_0^2$ رعایت شود. هرگونه تغییری در این رابطه منجر به تغییر در فاصله بین الکترودها خواهد شد که این امر به نوبه خود موجب تغییر در نواحی پایداری و حرکت یون درون دام می‌شود. از آنجا که الکترودها حلقه ثابت است، تغییر فاصله بر اساس تغییر فاصله کلاهیک از مرکز دام می‌باشد. ما در این مقاله بر اساس یک ایده جدید، با وارد کردن رابطه $Z_0 = \frac{1}{\sqrt{n}} r_0$ در پارامترهای a_u و q_u و حل معادله (۸) به روش رونگه-کوتا مرتبه ۵-۶ ورنر، این تغییر را بررسی کرده‌ایم. همچنین اگر نیروی میرایی بر اساس برخورد یون با فوتونها غالب باشد مقدار $k=1$ را می‌توان برای تمامی فشارهای گاز بافر کمتر از 10^{-5} میلی بارن بکار برد [۷].

نتایج:

با ثابت بودن پتانسیل چهارقطبی و ایجاد تغییرات در فواصل بین الکترودها کلاهیک تا مرکز دام، دام یونی پائول کشیده ایجاد می‌شود [۲]. ما در این مقاله برای اولین بار ناحیه پایداری اول و دوم را با توجه به نیروی میرایی و به ازای $n = 1/5$ ، ۲ و ۳ بدست آورده‌ایم که در شکل‌های (۲) و (۳) نشان داده شده است. خاطر نشان می‌شود که $n = 2$ همان دام یونی پائول ایده‌آل است.



شکل (۲): ناحیه پایداری اول در دام یونی پائول با در نظر گرفتن حالت میرایی که برای نمونه مقدار n در رابطه $Z_0 = \frac{1}{\sqrt{n}} r_0$ برابر $1/5$ ، ۲ و ۳ در نظر گرفته شده است.



شکل (۳): ناحیه پایداری دوم در دام یونی پائول با در نظر گرفتن حالت میرایی که برای نمونه مقدار n در رابطه $Z_0 = \frac{1}{\sqrt{n}} r_0$ برابر $1/5$ ، 2 و 3 در نظر گرفته شده است.

گیراندازی یون درون دام یونی پائول، به اندازه ولتاژهای متناوب و مستقیم برای تشکیل پتانسیل چهارقطبی درون

دام وابسته است. مقادیر ولتاژها نیز به نوبه خود به نوع یون و نقطه پایداری بر حسب a و q مربوط می‌شود. لذا محققین کمیت‌های دستگاه را بر اساس نوع یون گیراندازی شده و نقطه ثابت درون ناحیه پایداری تنظیم می‌کنند. لذا ولتاژ متناوب (V_{ac}) مورد نیاز برای به دام اندازی یون گازهای نادر را با توجه به شکل هندسی دام به طور دقیق محاسبه کرده و در جدول (۱) آورده‌ایم. برای این منظور از نقطه ثابت ($q = 2, a = 0$) در ناحیه پایداری اول برای حالت ($k=1$) استفاده کرده‌ایم. شایان ذکر است که با توجه به صفر بودن مقدار a ,

ولتاژ مستقیم نیز صفر است

جدول (۱): مقادیر ولتاژ متناوب مورد نیاز برای محصورسازی یون گازهای نادر با توجه به تأثیر شکل هندسی دام و نیروی میراکننده.

	$n = 1/5$ $k = 1$	$n = 2$ $k = 1$	$n = 3$ $k = 1$
${}^4_2\text{He}^+$	۲۳/۸۳ V	۲۰/۴۳ V	۱۷/۰۲ V
${}^{20}_{10}\text{Ne}^+$	۱۱۹/۱۷ V	۱۰۲/۱۵ V	۸۵/۱۲ V
${}^{40}_{18}\text{Ar}^+$	۲۳۸/۳۵ V	۲۰۴/۳۶ V	۱۷۰/۲۵ V
${}^{84}_{36}\text{Kr}^+$	۵۰۰/۵۳ V	۴۲۹/۰۳ V	۳۵۷/۵۲ V
${}^{131}_{54}\text{Xe}^+$	۷۸۰/۶۰ V	۶۶۹/۰۸ V	۵۵۷/۵۷ V

بحث و نتیجه گیری:

با توجه به شکل‌های (۲) و (۳) تغییر در فاصله بین کلاهک‌ها در دام یونی پائول موجب انتقال در نواحی پایداری اول و دوم می‌شود لذا با ثابت نگاه داشتن ولتاژ و شرایط آزمایشگاهی و تنها با تغییر در این فاصله می‌توان یون‌های مختلفی را محصور کرد. همانطور که در جدول (۱) مشاهده می‌شود برای محصورسازی یون‌های گازهای نادر، با افزایش مقدار n در دام کشیده چهارقطبی پائول، ولتاژ متناوب کمتری مورد نیاز است. این تنوع ولتاژها بر اساس تأثیر شکل هندسی و نیروی میرایی، می‌تواند برای محققین در این زمینه بسیار حائز اهمیت باشد. بطوریکه با توجه به ولتاژ مورد نظر، شکل دام را به صورتی انتخاب کنند تا یون مورد نظر به دام بیافتد.

مراجع:

- [۱] P.H. Dawson, Quadrupole Mass Spectrometry, AIP, New York, ۱۹۹۵.
 [۲] R. E. March, J. F. J. Todd, Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry, second ed., Wiley, New Jersey, ۲۰۰۵, pp. ۵۰-۵۸.
 [۳] I. Ziaeian, H. Noshad, International Journal of Mass Spectrometry, ۲۸۹ (۲۰۱۰) ۱-۵.
 [۴] I. Ziaeian, S. M. Sadat kiai, M. Ellahi, S. Sheibani, A. Safarian, S. Farhangi, J. Mass Spectrometry ۳۰۴ (۲۰۱۱) ۲۵-۲۸.
 [۵] Y. Lee, W. W. Lee, Ch. Oh, P. Kim, J. Korean. Phy. Soc, ۳۹ (۲۰۰۱) ۹۰۲.
 [۶] H. Noshad, A. Doroudi, Int. J. Mass Spectrom., ۲۸۱ (۲۰۰۹) ۷۹.
 [۷] K. Blaum, F. Herfuth, Lecture Notes in Physics ۷۴۹: Trapped Charged Particles and Fundamental Interactions, Spring, Berlin, ۲۰۰۸, pp. ۹۹-۱۰۰.