МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

УДК 537.534.7

© А. С. Бердников, А. Г. Кузьмин, С. В. Масюкевич

ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ СТРОБОСКОПИЧЕСКИХ ВЫБОРОК ПРИ АНАЛИЗЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В КВАДРУПОЛЬНЫХ РАДИОЧАСТОТНЫХ ПОЛЯХ. І. КРИТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОНЦЕПЦИИ

Анализируется новая концепция эффективного потенциала. предложенная М.Ю. Судаковым и М.В. Апацкой. Указанная концепция разработана на основе огибающих стробоскопических выборок координат и скоростей ионов в радиочастотном квадрупольном поле и представляется весьма интересной. Однако предлагаемые формулы не вполне корректны и требуют некоторого уточнения.

Кл. сл.: высокочастотные электрические поля, квадрупольный масс-фильтр, секулярные колебания, псевдопотенциал

введение

Классическая модель псевдопотенциала [1] обеспечивает наглядное качественное описание движения ионов в радиочастотных электрических полях [2-10]. Однако для задач, связанных с анализом движения ионов в радиочастотных квадруполях (квадрупольных фильтрах масс, квадрупольных радиочастотных ловушках) [11–16], это качественное описание является недостаточно точным. Имеется объективная потребность в создании уточненной теории движения ионов в квадрупольных радиочастотных электрических полях, которая бы соединяла наглядность классической псевдопотенциальной модели [1] с улучшенной точностью описания (в идеале — с абсолютно точным описанием) поведения ионов. Число таких попыток, предпринятых в последнее время, достаточно велико [17-24].

Среди этих теоретических работ выделяется публикация [19]. К сожалению, наряду с интересными и нетривиальными идеями эта публикация содержит серьезные неточности, которые мешают использовать ее результаты на практике. Данная работа посвящена критическому разбору статьи [19].

ИСХОДНАЯ КОНЦЕПЦИЯ

Рассмотрим в тезисной форме основные идеи публикации [19].

1. Исследуется движение иона в квадрупольном радиочастотном поле с электрическим потенциалом $U(x, y, t) = (U_0 + V_0 F(t))(x^2 - y^2)/r_0^2$, где

x, y — декартовы координаты; r_0 — радиус апертуры между гиперболическими электродами линейного квадруполя; U_0 — постоянная компонента напряжения; V_0 — амплитуда радиочастотной компоненты напряжения; F(t) — периодическая функция с периодом $T = 2\pi/\Omega$ для радиочастотной составляющей напряжения; Ω — базовая круговая частота радиочастотной составляющей; t время. В безразмерных координатах движение x(t), y(t) иона с массой *m* и зарядом *e* описывается уравнениями Хилла [25]:

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(a + 2qf\left(\xi\right)\right)x = 0,\tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}\xi^2} - \left(a + 2qf\left(\xi\right)\right)y = 0,\tag{2}$$

где $\xi = \Omega t/2$ — безразмерное время, $a = 8eU_0/(m\Omega^2 r_0^2)$ и $q = 4eV_0/(m\Omega^2 r_0^2)$ — безразмерные параметры, $f(\xi) = F(2\xi/\Omega)$ — периодическая функция с безразмерным периодом $T' = \pi$ (безразмерной круговой частотой $\Omega' = 2$). Для квадруполя с косинусоидальным радиочастотным напряжением $f(\xi) = \cos(2\xi + \phi_0)$, где ϕ_0 — фаза радиочастотного напряжения в момент старта иона. Тогда уравнения Хилла (1), (2) превращаются в уравнения типа Матье [26].

2. Для уравнения (1) вычисляется матрица монодромии M_x [27–32] с постоянными коэффициентами, которая осуществляет сдвиг по времени $\xi' \rightarrow \xi_0 + T'$ вдоль фазовой траектории на один период радиочастотного напряжения и обеспечивает выполнение равенства

$$\begin{pmatrix} x(\xi_0 + T') \\ v(\xi_0 + T') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{xx} & m_{xv} \\ m_{vx} & m_{vv} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(\xi_0) \\ v(\xi_0) \end{pmatrix} = M_x \begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $v(\xi) = dx(\xi)/d\xi$ — безразмерная скорость. Матрица монодромии привязана к выбранному моменту старта $\xi = \xi_0$. Если фундаментальное решение $X_x(\xi)$, $V_x(\xi)$ удовлетворяет начальным условиям $X_x(\xi_0) = 1$, $V_x(\xi_0) = 0$, а фундаментальное решение $X_v(\xi)$, $V_v(\xi)$ удовлетворяет начальным условиям $X_v(\xi_0) = 0$, $V_v(\xi_0) = 1$, то коэффициенты M_x равны $m_{xx} = X_x(\xi_0 + T')$, $m_{yx} = V_x(\xi_0 + T')$, $m_{xy} = X_v(\xi_0 + T')$, $m_{yy} = V_v(\xi_0 + T')$. Для коэффициентов матрицы M_x выполнено условие $m_{xx}m_{yy} - m_{yy}m_{yy} = 1$ (условие Лиувилля о сохранении фазового объема).

В соотношении (3) матрица M_x не зависит от конкретного решения $x(\xi)$, $v(\xi)$ и соответственно от начальных условий x_0, v_0 . Однако матрица M_x зависит от того, между какими именно точками $\xi = \xi_0$ и $\xi' = \xi_0 + T'$ выполняется временной сдвиг. При изменении точки старта ξ_0 (которое эквивалентно изменению начальной фазы ϕ_0) матрица монодромии (3) меняется. Но из-за периодичности коэффициентов уравнения (1) для всех точек $\xi_{k0} = \xi_0 + kT'$ матрица монодромии (3) будет одной и той же, уравнение возвращается в исходное состояние как единое целое при замене ξ_0 на ξ_{k0} .

Критерием, что безразмерные параметры a,q соответствуют режиму устойчивости для уравнения (1), служит условие $-1 < (m_{xx} + m_{yy})/2 < +1$, а параметр Флоке $\beta_x = (1/\pi) \arccos((m_{xx} + m_{yy})/2)$ задает безразмерную круговую частоту секулярных колебаний [27]. Значения $(m_{xx} + m_{yy})/2$ и β_x будут инвариантами, они не меняются при изменении матрицы монодромии (3) в результате изменения точки привязки ξ_0 .

3. Пусть момент старта ионов зафиксирован как $\xi_0 = 0$, а управление начальной фазой радиочастотного поля осуществляется с помощью параметра ϕ_0 . Стробоскопическая выборка $x_n = x(nT')$, $v_n = v(nT')$ в соответствии с (3) подчиняется соотношениям

$$\binom{x_n}{v_n} = M_x \binom{x_{n-1}}{v_{n-1}} = M_x^2 \binom{x_{n-2}}{v_{n-2}} = \dots = M_x^n \binom{x_0}{v_0}, \quad (4)$$

где x_0 , v_0 — начальные значения. Из рекуррентных уравнений

$$x_{n+1} = m_{xx}x_n + m_{xy}v_n, v_{n+1} = m_{xy}x_n + m_{yy}v_n$$
(5)

получаются соотношения

$$v_n = (x_{n+1} - m_{xx} x_n) / m_{xv},$$

$$x_{n+1} - 2\cos \pi \beta_x \cdot x_n + x_{n-1} = 0,$$
(6)

где при выводе используются равенства $m_{xx}m_{yy} - m_{uy}m_{yu} = 1$ и $m_{xx} + m_{yy} = 2\cos\pi\beta_x$. Как уже отмечалось в предыдущем пункте, хотя по отдельности коэффициенты матрицы монодромии m_{xx} , m_{xy} , m_{yx} , m_{yy} и меняются при изменении параметра ϕ_0 (начальной фазы радиочастотного поля), величина $m_{xx} + m_{yy} = 2\cos\pi\beta_x$ является инвариантом и от ϕ_0 не зависит.

Как показано в [19], при $\beta_x \approx 0$ рекуррентное соотношение (6) описывает медленно меняющуюся синусоидальную функцию, однако при $\beta_{r} \approx 1$ результат представляет собой быстро осциллирующую "пилу", скачками переключающуюся от положительных отсчетов к отрицательным и обратно. Для упрощения этой картины в [19] предлагается использовать знакопеременную стробоскопическую выборку $(\tilde{x}_n, \tilde{v}_n)$, именуемую в статье огибающей стробоскопических отсчетов (что с математической точки зрения не вполне верно). Эта выборка задается формулами $\tilde{x}_{n} = (-1)^{n} x_{n}, \quad \tilde{v}_{n} = (-1)^{n} v_{n}$ и описывается рекуррентными конечно-разностными соотношениями

$$\tilde{v}_{n} = -(\tilde{x}_{n+1} + m_{xx}\tilde{x}_{n})/m_{xv},$$

$$\tilde{x}_{n+1} + 2\cos\pi\beta_{x}\cdot\tilde{x}_{n} + \tilde{x}_{n-1} = 0.$$
(7)

В предельном случае $\beta_x \approx 1$ конечноразностное соотношение (7) будет описывать медленно меняющуюся синусоидальную функцию.

Аналогичные соотношения будут выполнены для уравнения (2) с заменой безразмерной скорости $v(\xi) = dx(\xi)/d\xi$ на безразмерную скорость $w(\xi) = dy(\xi)/d\xi$, матрицы монодромии M_x на матрицу монодромии M_y , а параметра Флоке β_x — на параметр Флоке β_y . В окрестности вершины совместной диаграммы стабильности уравнения Матье $a_c = 0.236993$, $q_c = 0.705996$ выполнены условия $\beta_y \approx 0$, $\beta_x \approx 1$, так что уравнения (6) предпочтительны для описания движения по координате *y*, а уравнения (7) — для описания движения по координате *x*.

4. С помощью приближенного соотношения $x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} \approx d^2 x(n)/dn^2$ конечно-разностные соотношения (6) преобразуются в континуальное дифференциальное уравнение

$$\frac{\mathrm{d}^2 x(n)}{\mathrm{d}n^2} + 4\sin^2 \frac{\pi \beta_x}{2} \cdot x(n) = 0 \tag{8}$$

(где дискретные стробоскопические отсчеты x_n , известные, вообще говоря, только при целочисленных значениях параметра n, неявным образом заменяются гладкой функцией x(n), определенной при любых n). Дифференциальное уравнение (8) интерпретируется авторами работы [19] как гармонические колебания в (безразмерной) квадратичной потенциальной яме $U_c(x) = (1/2)c^2x^2$ с параметром $c = 2\sin(\pi\beta_x/2)$, а сама функция $U_c(x)$ получает название эффективного потенциала (точнее, эффективного потенциала стробоскопических отсчетов), который должен с новой стороны характеризовать движение ионов в радиочастотном квадрупольном электрическом поле.

По той же схеме для знакопеременных стробоскопических отсчетов получается дифференциальное уравнение

$$\frac{\mathrm{d}^2 \tilde{x}(n)}{\mathrm{d}n^2} + 4\cos^2\frac{\pi\beta_x}{2} \cdot \tilde{x}(n) = 0 \tag{9}$$

и безразмерный квадратичный эффективный по- $\tilde{U}_{c}(x) = (1/2)\tilde{c}^{2}x^{2}$ тенциал с параметром $\tilde{c} = 2\cos(\pi\beta_x/2)$, характеризующий знакопеременные стробоскопические отсчеты. Следует отметить. что с формальной точки зрения и уравнения (6), (8), и уравнения (7), (9) с равной степенью строгости и достоверности могут использоваться как для описания движения по координате x, так для описания движения по координате у, хотя авторы публикации [19] используют формулы (6), (8) для описания движения лишь по координате x, а формулы (7), (9) для описания движения лишь по координате у, причем только в окрестности вершины первой зоны стабильности.

5. Детально исследуется частный случай уравнений (1), (2), когда $f(\xi) = \cos(2\xi + \phi_0)$, где ϕ_0 — фаза радиочастотного напряжения в момент старта иона, а параметры a,q выбираются в окрестности вершины $a_c = 0.236993$, $q_c = 0.705996$ первой со-

вместной зоны устойчивости. В этом случае, согласно [19],

при $\phi_0 = 0$:

$$\beta_x \approx 1, \ M_x \approx \begin{pmatrix} -1 & \Pi_x \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ \Pi_x = 3.7502787;$$
 (10)

при $\phi_0 = \pi$:

$$\beta_{y} \approx 0, \ M_{y} \approx \begin{pmatrix} 1 & \Pi_{y} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \ \Pi_{y} = 6.8213726$$
 (11)

(значения $\phi_0 = 0$ и $\phi_0 = \pi$ выбраны с целью максимизации отклонения от оси квадруполя для траектории. стартующей на оси квадруполя с единичной скоростью).

Стробоскопические отсчеты x_n , v_n в окрестности вершины первой зоны устойчивости представляют собой биения с медленно меняющейся синусоидальной огибающей ([19, рис. 3]). Вводятся огибающие X(n) и V(n), чтобы выполнялись равенства $x_n = (-1)^n X(n)$ и $v_n = (-1)^{n+1} V(n)$. (Если же определять $v_n = (-1)^n V(n)$, как в [19], то уравнение [19, (17)] изменит знак, и это полностью разрушает последующие рассуждения.) Для X(n) и V(n) как функций континуального параметра *n* из равенств (7) выводятся приближенные дифференциальные соотношения

$$V(n) = \frac{1}{m_{xv}} \frac{dX(n)}{dn} + \frac{1 + m_{xx}}{m_{xv}} X(n), \qquad (12)$$

$$\frac{d^2 X(n)}{dn^2} + 2(1 + \cos \pi \beta_x) X(n) = 0.$$
 (13)

Здесь уравнение (13) для X(n) описывает гармонические колебания с круговой частотой биений $\omega_{xb} = \sqrt{2(1 + \cos \pi \beta_x)} = 2 \cos \pi \beta_x/2$. При выполнении условий (10) выполнены приближенные равенства $\omega_{xb} \approx \pi (1 - \beta_x)$ и $V(n) \approx \frac{1}{\Pi_x} dX(n)/dn$. Переход от безразмерных величин к размерным

переход от оезразмерных величин к размерным имеет вид t = nT, $\hat{x}(t) = r_0 X(n)$, $\hat{v}(t) = r_0 (\Omega/2) V(n)$ (здесь учитывается, что реальная скорость получается путем дифференцирования по t, а безразмерная скорость — путем дифференцирования по $\xi = \Omega t/2$). Тогда для функций $\hat{x}(t)$, $\hat{v}(t)$, *соотносимых* с реальным движением x(t), v(t), получаются уравнения

$$\hat{v} = \frac{\pi}{\Pi_x} \frac{d\hat{x}}{dt}, \quad \frac{d^2\hat{x}}{dt^2} + \Omega_{xb}^2 \hat{x} = 0,$$
 (14)

где $\Omega_{xb} = \omega_{xb}/T \approx \Omega(1-\beta_x)/2$. (Слово "соотносимых" является важным. Поскольку в [19] используется одно и то же обозначение как для функций $\hat{x}(t)$, $\hat{v}(t)$, так и для функций x(t), v(t), есть риск непреднамеренного переноса выводов об особенностях искусственного движения $\hat{x}(t)$, $\hat{v}(t)$ на реальное движение x(t), v(t).)

Уравнения (14) интерпретируются как гамильтоновы эффективным гамильтонианом с $\overline{H}_{x}(\hat{p}_{x},\hat{x}) = \overline{T}_{x}(\hat{p}_{x}) + \overline{U}_{x}(\hat{x}),$ $\hat{p}_{r} = m\hat{v} =$ где $= m_{x} d\hat{x}/dt$ — обобщенный импульс, $\overline{T}_{u}(p) =$ $= p^2/2m_r$ — кинетическая энергия, $\overline{U}_{x}(x) = m_{x}\Omega_{xb}^{2}x^{2}/2$ — потенциальная энергия, а $m_r = \pi m / \Pi_r$ — приведенная масса. Теперь "огибающее" движение $\hat{x}(t)$ будет движением с массой m_r в поле потенциальных сил $\overline{U}_r(x)$, а $\overline{U}_r(x)$ можно интерпретировать как эффективный электрический потенциал нового типа (с поправкой на множитель в виде заряда иона) при $\beta_x \approx 1$.

Точно так же для безразмерного движения по координате *y* строится модель стробоскопических отсчетов $y_n = y(nT')$, $w_n = w(nT')$ в окрестности вершины первой зоны устойчивости. Здесь $\beta_y \approx 0$ и нет биений, а есть медленные колебания. Огибающие функции Y(n) и W(n) определяются как $y_n = Y(n)$, $w_n = W(n)$, и для континуального аргумента *n* из соотношений (6) получаются приближенные соотношения

$$W(n) = \frac{1}{m_{yw}} \frac{dY(n)}{dn} + \frac{1 - m_{yy}}{m_{yw}} Y(n), \qquad (15)$$

$$\frac{d^2 Y(n)}{dn^2} + 2(1 - \cos \pi \beta_y) Y(n) = 0, \qquad (16)$$

где m_{yy} , m_{yw} , m_{wy} , m_{ww} — коэффициенты матрицы монодромии M_y , а β_y — параметр Флоке для уравнения (2). Уравнение (16) для Y(n) описывает гармонические колебания с круговой секулярной частотой $\omega_{ys} = \sqrt{2(1 - \cos \pi \beta_y)} = 2 \sin \pi \beta_y / 2$. При выполнении условий (11) $\omega_{ys} \approx \pi \beta_y$ и $W(n) \approx \frac{1}{\Pi_y} dY(n)/dn$. В размерных обозначениях t = nT,

 $\hat{y}(t) = r_0 Y(n), \quad \hat{w}(t) = r_0 (\Omega/2) W(n), \quad$ и для

"огибающих" функций $\hat{y}(t)$, $\hat{w}(t)$ получаются уравнения

$$\hat{w} = \frac{\pi}{\Pi_{y}} \frac{d\hat{y}}{dt}, \quad \frac{d^{2}\hat{y}}{dt^{2}} + \Omega_{ys}^{2}\hat{y} = 0, \quad (17)$$

где $\Omega_{ys} = \omega_{ys}/T \approx \Omega \beta_y/2$. Уравнения (17) интерпретируются как гамильтоновы с эффективным гамильтонианом $\overline{H}_y(\hat{p}_y, \hat{y}) = \overline{T}_y(\hat{p}_y) + \overline{U}_y(\hat{y})$, где $\hat{p}_y = m\hat{w} = m_y d\hat{y}/dt$ — обобщенный импульс, $\overline{T}_y(p) = p^2/2m_y$ — кинетическая энергия, $\overline{U}_y(y) = m_y \Omega_{ys}^2 y^2/2$ — потенциальная энергия, а $m_y = \pi m/\Pi_y$ — приведенная масса. Теперь "стробоскопическое" движение $\hat{y}(t)$ будет движением с массой m_y в поле потенциальных сил $\overline{U}_y(y)$, а $\overline{U}_y(y)$ можно интерпретировать как эффективный потенциал при $\beta_y \approx 0$.

6. Возможно, стоило бы рассматривать эффективные потенциалы $\overline{U}_x(x)$ и $\overline{U}_y(y)$ как чисто математический трюк. Однако авторы работы [19] умело используют их для вычисления аксептанса квадрупольного масс-фильтра. Это позволяет придать функциям $\overline{U}_x(x)$ и $\overline{U}_y(y)$ физический смысл.

С этой целью вводится понятие глубины псевдопотенциальной ямы, которая определяется как максимальная кинетическая энергия, при которой ион, стартующий с оси квадруполя, еще удерживается радиочастотным полем в пределах апертуры квадруполя. Это важное определение снимает многочисленные дискуссии, что следует понимать под глубиной псевдопотенциальной ямы при больших q [17-24]. Определяя связь между максимумом траектории x(t), v(t) и максимумом "огибающей" $\hat{x}(t)$, $\hat{v}(t)$, можно определить глубину псевдопотенциальной ямы и тем самым аксептанс квадруполя для движения по оси х. Аналогичным образом определяется глубина псевдопотенциальной ямы и аксептанс квадруполя для движения по оси у.

Ожидается, что в стробоскопических точках $t_k = kT$ координаты и скорости "огибающего" движения $\hat{x}(t)$, $\hat{v}(t)$ с точностью до знака совпадают с координатами и скоростями x(t), v(t) истинного движения иона. В частности, $\hat{x}(0) = x_0$, $\hat{v}(0) = -v_0$, где x_0 и v_0 — начальная координата

и начальная скорость для x(t), v(t). С учетом уравнения (14) $\hat{v}(0) = (\pi/\Pi_x) d\hat{x}(0)/dt$, что означает, что эквивалентная "огибающая" траектория $\hat{x}(t)$ должна стартовать с той же начальной координатой, что и x(t), но с масштабированной начальной скоростью.

Максимум \hat{x}_{\max}^{st} "огибающего" движения $\hat{x}(t)$, $\hat{v}(t)$ по стробоскопическим точкам $t_k = kT$, совпадает с максимумом xst истинного движения x(t), v(t) по стробоскопическим точкам. Можно предположить, что стробоскопический максимум $\hat{x}_{\max}^{\mathrm{st}}$ совпадет с максимумом \hat{x}_{\max} , вычисленным по всем точкам "огибающего" движения $\hat{x}(t)$, а стробоскопический максимум xst_{max} совпадет или по крайней мере будет не больше, чем максимум x_{max}, который вычислен по всем точкам истинного движения x(t) (оба этих утверждения используются в [19] в неявном виде и без надлежащего обоснования). В свою очередь, величина x_{max} не должна превышать апертуру квадруполя r₀. Для искусственного движения $\hat{x}(t)$ с уравнениями (14) величина $(d\hat{x}/dt)^2 + \Omega_{xb}^2 \hat{x}^2$ будет первым интегралом, где максимальному отклонению $\hat{x}(t)$ от оси квадруполя соответствует условие $d\hat{x}(t)/dt = 0$. В итоге глубина псевдопотенциальной ямы $E_0 = m v_0^2 / 2$ определится из цепочки равенств

$$\left(-\frac{\Pi_x v_0}{\pi}\right)^2 = \left(\frac{\mathrm{d}\hat{x}_0}{\mathrm{d}t}\right)^2 = \Omega_{xb}^2 \hat{x}_{\max}^2 = \Omega_{xb}^2 \left(\hat{x}_{\max}^{st}\right)^2 =$$
$$= \Omega_{xb}^2 \left(x_{\max}^{st}\right)^2 = \Omega_{xb}^2 x_{\max}^2 = \Omega_{xb}^2 r_0^2$$

и будет равной величине $D_x = (\pi/\Pi_x)^2 m\Omega_{xb}^2 r_0^2/2$, где $\Omega_{xb} \approx \Omega(1-\beta_x)/2$. Это совпадает с формулой [19, (24)], где она выводится из эффективных гамильтоновых уравнений движения с приведенной массой $m_x = \pi m/\Pi_x$.

Аналогично с помощью уравнений (17) определяется глубина псевдопотенциальной ямы для оси *y*. Она равна $D_y = (\pi/\Pi_y)^2 m \Omega_{ys}^2 r_0^2/2$, где $\Omega_{ys} \approx \Omega \beta_y/2$. Это позволяет вычислить максимальные приосевые скорости $v_{\text{max}} = \sqrt{2D_x/m}$ и $w_{\text{max}} = \sqrt{2D_y/m}$ для аксептансов, поскольку начальная фаза $\phi_0 = 0$ радиочастотного поля соот-

ветствует траектории с максимальным отклонением по координате x, а начальная фаза $\phi_0 = \pi$ траектории с максимальным отклонением по координате y (обе траектории стартуют с оси квадруполя с единичной скоростью). Считая, что минимаксные аксептансы (минимизированные по начальной фазе радиочастотного поля) можно заменить на эллипсы с полуосями (r_0, v_{max}) и (r_0, w_{max}) , вычисляются площади аксептансов.

СЛАБЫЕ МЕСТА КОНЦЕПЦИИ

Описанная в предыдущем разделе модель вызывает следующие вопросы.

1) Периодически при выкладках вместо матриц монодромии в рабочей точке a, q авторы используют матрицы монодромии (10), (11) в вершине первой зоны устойчивости a_c, q_c . Эта замена является принципиальным моментом, поскольку только тогда в уравнении (12) исчезает вклад члена X(n), а в уравнении (15) исчезает вклад члена Y(n).

Однако плохо обоснованный переход от точных значений к приближенным и обратно (в зависимости от удобства выполнения выкладок) скорее всего приводит к систематическим ошибкам в конечных выражениях. А именно, стоит ожидать, что при точных вычислениях в конечном счете главный член будет пропорционален ба и δq (где $\delta a = a - a_c$, $\delta q = q - q_c$ — отклонение рабочей точки а, q от вершины устойчивости $a_{c}, q_{c},),$ поскольку точно в вершине зоны устойчивости интересующие нас значения (в частности, глубины псевдопотенциальных ям) обращаются в ноль. Поэтому привнесение ошибок вида $\delta a, \delta q$ на промежуточных этапах является, вообше говоря, неправильным. Конечно, может сложиться так удачно, что все "лишние" линейные поправки сократятся и в конечном итоге формулы совпадут с теми, которые приводятся в [19], но этот факт нуждается в аккуратной проверке.

2) Оценка максимума истинной траектории по стробоскопической выборке может оказаться сильно заниженной, если истинный максимум достигается в промежуточных временн х точках. Действительно, нет никакой гарантии, что когда начальная радиочастотная фаза выбирается так, чтобы обеспечить максимально возможное отклонение от оси для траектории, стартующей строго на оси с единичной скоростью, то этот максимум будет достигаться именно в одной из стробоскопических точек. Но если это так, то тогда оценка глубины псевдопотенциальной ямы по стробоскопической выборке становится сильно завышенной.

Для косинусоидального квадруполя максимум траектории, стартующей в окрестности вершины зоны устойчивости с единичной скоростью с оси квадруполя, достигается для начальных фаз $\phi_0 = 0$ и $\phi_0 = \pi$, и для этих начальных фаз действительно совпадает с максимумом стробоскопической выборки и достигается в той же точке (рис. 1. а и б). Но этот факт является лишь удачным совпадением. поскольку для других радиочастотных сигналов и других начальных условий (см. рис. 1, в и г) это не так.

3) Оценка максимума стробоскопической выборки по максимуму ее непрерывного продолжения на континуальные значения дискретного

параметра *п* может оказаться завышенной (стробоскопическая выборка — лишь узкое подмножество допустимых континуальных значений, см. рис. 2). Этот недостаток концепции не слишком критичен, т. к. если отношение секулярной частоты к основной частоте в достаточной степени иррационально, данный эффект пренебрежимо мал (см. далее). Поэтому значительное отклонение дискретного максимума от его оценки через непрерывный максимум есть только для окрестностей "магических" значений β , когда отношение секулярной частоты к базовой частоте равно отношению двух небольших целых чисел [23, 33]. У авторов [19], впрочем, обоснование близости дискретного и непрерывного максимумов отсутствует, и на возможность возникновения этой проблемы они не обращают внимания.



Рис. 1. Максимум истинной непрерывной траектории (А) и максимум стробоскопической выборки (В) в зависимости от начальной фазы радиочастотного напряжения при a = 0.235, q = 0.705 для разных начальных условий.

 $\dot{a} - x_0 = 0$, $\dot{x}_0 = 1$; $\delta - y_0 = 0$, $\dot{y}_0 = 1$; $b - x_0 = 1$, $\dot{x}_0 = 0$; $r - y_0 = 1$, $\dot{y}_0 = 0$



Рис. 2. Стробоскопическая выборка синусоидальной функции (а) и сопоставление бесконечной стробоскопической выборки с эквивалентными точками отдельно взятого периода синусоидальной функции (б)

Рассмотрим эту проблему. Непрерывное продолжение стробоскопической выборки на континуальные значения дискретного параметра *n* представляет собой синусоидальную функцию либо с периодом биений $T_{\rm b} = 2\pi/\Omega_{\rm b}$, либо с периодом секулярных колебаний $T_s = 2\pi/\Omega_s$. Если отношение периода радиочастотных колебаний $T = 2\pi/\Omega$ к $T_{\rm b}$ либо к $T_{\rm s}$ в достаточной степени иррационально, а t_{*} — момент времени, в который непрерывное продолжение достигает максимума, то существуют такие целые числа k_1 , k_2 , что k_1T и $t_* + k_2 T_{\rm b}$ либо $t_* + k_2 T_{\rm s}$ отличаются друг от друга сколь угодно мало. (Для двух целочисленных решеток $f + k'T_f$ и $g + k''T_g$ с несоизмеримыми периодами T_f , T_g при их наложении друг на друга всегда найдутся сколь угодно близко совпадающие узлы [34–36]). Значит, имеются стробоскопические точки, которые отличаются от максимумов непрерывной синусоиды сколь угодно мало, так что оценка максимума дискретной выборки через максимум непрерывной функции будет состоятельной.

Если отношение периодов периодических решеток, накладывающихся друг на друга, не является иррациональным числом, а представляет собой несократимую дробь вида k/n (k < n), то минимальное расстояние между отсчетами двух разных решеток, ближайших друг к другу, равно T/n, где T — наибольший из двух периодов. Если n достаточно велико, то максимум непрерывной синусоиды отличается от максимума дискретной выборки непрерывной синусоиды, выполненной с шагом π/n , меньше чем на $\pi^2/(8n^2)$, т. е. на весьма небольшое число. В случаях же, когда отношение периодов T/T_b либо T/T_s является рациональной дробью с небольшим знаменателем, оценка максимума истинной траектории по максимуму непрерывной интерполяции секулярного движения может оказаться неверной. Примеры таких исключительных случаев приводятся в [21, 33].

4) Оценка аксептанса квадруполя по предлагаемой авторами методике неверна и является сильно завышенной. А именно минимаксный аксептанс представляет собой пересечение индивилуальных эллиптических аксептансов, соответствующих разным начальным фазам радиочастотного поля, причем в силу симметрии системы это пересечение представляет собой симметричную фигуру, вытянутую вдоль главных фазовых осей [12, 13, 21]. При некоторой удаче эту фигуру, не являющуюся, вообще говоря, эллиптической, можно с приемлемой точностью заменить на эллипс с главными осями, ориентированными вдоль координатных осей фазовой плоскости. Главная ось такого фазового эллипса для оси скоростей определяется через глубину псевдопотенциальной ямы, и здесь ошибок у авторов нет. Однако ниоткуда не следует, что главная ось такого фазового эллипса для оси координат равна апертуре квадруполя r_0 . Действительно, она и не будет равна апертуре квадруполя, поскольку (см., например, [21]) при приближении к дальней границе зоны устойчивости, соответствующей параметрическому резонансу, этот параметр стремится к нулю.

Для корректного расчета аксептанса необходимо вместе с понятием *глубины* псевдопотенциальной ямы ввести понятие *ширины* псевдопотенциальной ямы [21, 24] — максимального начального смещения от оси квадруполя, при котором ион, стартующий с нулевой кинетической энергией, еще удерживается радиочастотным полем в пределах апертуры квадруполя. Очевидно, что при ненулевых q на границе зоны устойчивости ширина псевдопотенциальной ямы стремится к нулю: при малейшем смещении от оси ион тут же раскачивается радиочастотным полем и быстро выходит за пределы электродов. Вычислив ширину псевдопотенциальной ямы с помощью предложенной авторами модели, можно было бы получить более состоятельную оценку аксептанса. Но авторами работы [19] это не сделано.

5) Авторы берут стробоскопическую выборку отсчетов x_n, v_n либо y_n, w_n , строят для нее гладкие огибающие X(n), V(n) и Y(n), W(n), распространяя их на континуальные значения параметра n, после чего выводят для огибающих приближенные дифференциальные уравнения (12), (13) и (15), (16). Нет никаких гарантий, что функции X(n), V(n) и Y(n), W(n), полученные как точные решения уравнений (12), (13) и (15), (16), все еще совпадают при целочисленных значениях параметра n с точными отсчетами x_n, v_n и y_n, w_n .

Как будет показано далее, это не предположение, а факт. Для координаты х при выборе континуального параметра $n = \xi/\pi$ в качестве независимой переменной (в силу того, что при целочисленных *п* дискретные отсчеты связаны соотношением $\xi_n = nT' = n\pi$) точная интерполяция стробоскопических биений представляет собой синусоидальные колебания с частотой $\pi(1-\beta_{r})$, а не с частотой $2\cos(\pi\beta_x/2)$, как в работе [19]. Соответственно, для координаты у точная интерполяция стробоскопических секулярных колебаний представляет собой синусоидальные колебания с частотой $\pi\beta_v$, а не с частотой $2\sin(\pi\beta_v/2)$, как в работе [19]. В результате функции X(n), V(n)и Y(n), W(n) весьма быстро расходятся с истинными стробоскопическими отсчетами. Как ни странно, при этом ошибка в итоговых формулах для псевдопотенциальных ям не столь велика, как могла бы быть: при малом изменении частоты максимальный размах синусоидальных колебаний также меняется мало, хотя, конечно, такая синусоида уже не проходит через исходные стробоскопические отсчеты ни в каком смысле.

Причиной ошибки является переход от конечно-разностных соотношений к дифференциальным соотношениям при отсутствии надлежащего обоснования этой операции. Вопреки ожиданиям здесь вместо "малых" различий между дискретными и континуальными уравнениями можно легко получить глобальное и концептуально значимое различие [37]. Так, например, хорошо известно, что в результате похожей операции классическое вол-

НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2018, том 28, № 3

новое уравнение перестает быть инвариантным относительно преобразования Галилея [38], хотя исходные механические уравнения, из которых оно выводится, как и положено, относительно преобразования Галилея инвариантны.

6) Утверждение авторов, что начальная фаза, при которой обеспечивается максимум ускорения, автоматически приводит к тому, что и отклонение траектории иона от оси квадруполя при такой начальной фазе будет максимальным, не выдерживает никакой критики. Тот факт, что для косинусоидального квадруполя фаза $\phi_0 = 0$ для координаты действительно соответствует максимальной x траектории. стартующей с оси квалруполя с елиничной начальной скоростью, а фаза $\phi_0 = \pi$ действительно соответствует аналогичной траектории для координаты у (см. рис. 1, а, б), является не более чем случайным совпадением, специфичным для косинусоидального сигнала и для траекторий, стартующих с оси квадруполя.

7) Исследуются диаметрально противоположные предельные случаи, когда определяющим является эффект секулярных колебаний ($\beta \approx 0$), либо эффект биений ($\beta \approx 1$). Что следует выбирать для промежуточных вариантов и можно ли использовать эту теорию для произвольных точек a,q, остается загадкой. В результате модель плохо соотносится с титулом "концепция". А именно, она применима лишь для вершины первой зоны устойчивости, лишь тогда, когда матрица монодромии имеет специфическую форму и в текущем варианте лищь для косинусоидального радиочастотного напряжения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Во второй части этой работы будут рассмотрены способы, с помощью которых может быть восстановлена корректность этого интересного теоретического метода анализа движения ионов в радиочастотных квадрупольных полях. Для приведенных в публикации [19] формул будут предложены исправленные варианты.

Данная работа выполнена в рамках Гос. задания № 007-00229-18-00 для ИАП РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика Сер. Теоретическая физика. Т. І. Москва: Физматгиз, 1958. 202 с.
- 2. Гапонов В.А., Миллер М.А. О потенциальных ямах для заряженных частиц в высокочастотном поле // Журнал экспериментальной и технической физики. 1958. Т. 34, № 2. С. 242–243.
- 3. Миллер М.А. Движение заряженных частиц в высоко-

частотных электромагнитных полях // Известия Вузов, сер. Радиофизика. 1958. Т. 1, № 3. С. 110–123.

- 4. Литвак А.Г., Миллер М.А., Шолохов Н.В. Уточнение усредненного уравнения движения заряженных частиц в поле стоячей электромагнитной волны // Известия Вузов, сер. Радиофизика. 1962. Т. 5, № 6. С. 1160– 1174.
- 5. Сивухин Д.В. Дрейфовая теория движения заряженной частицы в электромагнитных полях // Вопросы теории плазмы. М.: Госатомиздат, 1963. Вып. 1. С. 7–97.
- Морозов А.И., Соловьев Л.С. Движение заряженной частицы в электромагнитных полях // Вопросы теории плазмы. М.: Госатомиздат, 1963. Вып. 2. С. 177–261.
- 7. Гейко В.И., Фрайман Г.М. О точности усредненного описания движения заряженных частиц в высокочастотных полях // Журнал экспериментальной и технической физики. 2008. Т. 134, № 6. С. 1125–1129.
- 8. *Капица П.Л.* Электроника больших мощностей // Успехи физических наук. 1962. Т. 78, № 2. С. 181–265.
- 9. Чирков А.Г. Асимптотическая теория взаимодействия заряженных частиц и квантовых систем с внешними электромагнитными полями. СПб.: Изд-во "Нестор", 2001. 257 с.
- Gerlich D. Inhomogeneous RF fields: a versatile tool for the study of processes with slow ions // State-Selected and State-to-State Ion-Molecule reaction Dynamics / C.-Y. Ng, M. Baer (Eds.). Part 1: Experiment, Advances in Chemical Physics Series. John Wiley & Sons Inc., New York, 1992. Vol. LXXXII. P. 1–176. Doi: 10.1002/9780470141397.ch1.
- 11. Слободенюк Г.И. Квадрупольные масс-спектрометры. Москва: Атомиздат, 1974. 271 с.
- Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications / Ed. P.H. Dawson. American Institute of Physics, Woodbury, 1995. 349 p.
- 13. *Dawson P.H.* Ion optical properties of quadrupole mass filters // Advances in Electronics and Electron Physics. Academic Press. Inc., 1980. Vol. 53. P. 153–208.
- 14. *March R.E., Hughes R.J.* Quadrupole Storage Mass Spectrometry. John Wiley and Sons, New York, 1989. 24 p.
- Major F.G., Gheorghe V.N., Werth G. Charged Particle Traps. Physics and Techniques of Charged Particle Field Confinement. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2005. 370 p.
- Werth G., Gheorghe V.N., Major F.G. Charged Particle Traps II. Applications. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. Doi: 10.1007/978-3-540-92261-2.
- Sudakov M. Effective potential and the ion axial beat motion near the boundary of the first stable region in a nonlinear ion trap // International Journal of Mass Spectrometry. 2001. Vol. 206. P. 27–43. Doi: 10.1016/S1387-3806(00)00380-8.
- Baranov V.I., Bandura D.R., Tanner S.D. Limitations of the effective potential for the evaluation of the ion energy in the rf-driven quadrupole field // International Journal of Mass Spectrometry. 2005. Vol. 247. P. 40–47. Doi: 10.1016/j.ijms.2005.08.011.
- 19. Судаков М.Ю., Апацкая М.В. Концепция эффективно-

го потенциала для описания движения ионов в квадрупольном фильтре масс // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. Т. 142. С. 222–229.

- Gao C., Douglas D.J. Can the effective potential of a linear quadrupole be extended to values of the Mathieu parameter q up to 0.90? // Journal of American Society for Mass Spectrometry. 2013. Vol. 24. P. 1848–1852. Doi: 10.1007/s13361-013-0738-2.
- Douglas D.J., Berdnikov A.S., Konenkov N.V. The effective potential for ion motion in a radio frequency quadrupole field revisited // International Journal of Mass Spectrometry. 2015. Vol. 377. P. 345–354. Doi: 10.1016/j.ijms.2014.08.009.
- 22. *Reilly P.T.A., Brabeck G.F.* Mapping the pseudopotential well for all values of the Mathieu parameter q in digital and sinusoidal ion traps // International Journal of Mass Spectrometry. 2015. Vol. 392. P. 86–90. Doi: 10.1016/j.ijms.2015.09.013.
- Brabeck G.F., Reilly P.T.A. Computational Analysis of Quadrupole Mass Filters Employing Nontraditional Waveforms // Journal of American Society for Mass Spectrometry. 2016. Vol. 27. P. 1122–1127. Doi: 10.1007/s13361-016-1358-4.
- Berdnikov A.S., Douglas D.J., Konenkov N.V. The pseudopotential for quadrupole fields up to q = 0.9080 // International Journal of Mass Spectrometry. 2017. Vol. 421. P. 204–223. Doi: 10.1016/j.ijms.2017.04.003.
- 25. Бондаренко Г.В. Уравнение Хилла и его применение в области технических колебаний. Москва-Ленинград: Изд-во АН СССР, 1936. 50 с.
- 26. Мак-Лахлан Н.В. Теория и приложения функций Матье. Москва: Изд-во иностранной литературы, 1953. 476 с.
- Konenkov N.V., Sudakov M., Douglas D.J. Matrix methods to calculate stability diagrams in quadrupole mass spectrometry // Journal of American Society for Mass Spectrometry. 2002. Vol. 13. P. 597–613. Doi: 10.1016/S1044-0305(02)00365-3.
- 28. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. Изд. 2-е, доп. Москва: Наука, 1966. 576 с.
- 29. *Еругин Н.П.* Метод Лаппо-Данилевского в теории линейных дифференциальных уравнений. Ленинград: Изд-во Ленинградского универститета, 1956. 109 с.
- Еругин Н.П. Линейные системы обыкновенных дифференциальных уравнений с периодическими и квазипериодическими коэффициентами. Минск: Изд-во Академии наук БССР, 1963. 273 с.
- Красносельский М.А. Оператор сдвига по траекториям дифференциальных уравнений. Москва: Главная редакция физико-математической литературы, 1966. 332 с.
- 32. Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. Москва: Наука, 1972. 720 с.

- Sheretov E.P., Philippov I.V., Karnav T.B., Kolotilin B.I., Ivanov V.W. Spiking structure of amplitude characteristics for ion trajectories in hyperboloidal mass spectrometers: the theory // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 2002. Vol. 16. P. 1652–1657. Doi: 10.1002/rcm.763.
- 34. Лежен Дирихле П.Г. Лекции по теории чисел. Москва, Ленинград: ОНТИ НКТП СССР, 1936. 404 с.
- 35. Шмидт В. Диофантовы приближения. Москва: Мир, 1983. 230 с.
- Шидловский А.Б. Диофантовы приближения и трансцендентные числа. Москва: Физматлит, 2007. 272 с.
- 37. Бердников А.С., Веренчиков А.Н., Коненков Н.В. О методологических проблемах при замене дискретных масс-спектрометрических моделей на континуальные модели // Масс-спектрометрия. 2017. Т. 14, №3. С. 176–189.
- Босс В. Уравнения математической физики. Серия "Лекции по математике". Т. 11. Изд. 4-е. Москва, URSS, 2016. 224 с.

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Контакты: Бердников Александр Сергеевич, asberd@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 25.06.2018

ON THE USE OF STROBOSCOPIC SAMPLES IN THE ANALYSIS OF THE MOTION OF IONS IN QUADRUPOLE RADIO-FREQUENCY FIELDS. I. CRITICAL ANALYSIS OF THE CONCEPT

A. S. Berdnikov, A. G. Kuzmin, S. V. Masyukevich

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg, Russia

A new concept of effective potential, proposed by M.Yu. Sudakov and M.V. Apatskaya, is analyzed. The said concept is based on the envelopes of stroboscopic samples of coordinates and ion velocities in a radio-frequency quadrupole field and seems rather interesting. However, it is shown that the proposed formulas are not completely correct and require some elaboration.

Keywords: high-frequency electric fields, quadrupole mass filter, secular oscillations, pseudopotential

REFERENCES

- Landau L.D., Lifshic E.M. *Teoreticheskaya fizika*. *T. I. Mekhanika* [Theoretical physics. Vol. I. Mechanics]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1958. 202 p. (In Russ.).
- 2. Gaponov V.A., Miller M.A. [About potential holes for charged particles in the high-frequency field]. *Zhurnal ehksperimental'noj i tekhnicheskoj fiziki* [Journal of experimental and technical physics], 1958, vol. 34, no. 2, pp. 242–243. (In Russ.).
- Miller M.A. [The movement of charged particles in highfrequency electromagnetic fields]. *Izvestiya Vuzov, ser. Radiofizika* [News of Higher education institutions, Radiophysics series], 1958, vol. 1, no. 3, pp. 110–123. (In Russ.).
- 4. Litvak A.G., Miller M.A., Sholohov N.V. [Specification

of the average equation of the movement of charged particles in the field of a standing electromagnetic wave]. *Izvestiya Vuzov, ser. Radiofizika* [News of Higher education institutions, Radiophysics series], 1962, vol. 5, no. 6, pp. 1160–1174. (In Russ.).

- Sivuhin D.V. [The drift theory of the movement of charged particle in electromagnetic fields]. *Voprosy teorii plazmy* [Questions of the theory of plasma]. Moscow, Gosatomizdat Publ., 1963, vol. 1, pp. 7–97. (In Russ.).
- 6. Morozov A.I., Solov'ev L.S. [The movement of charged particle in electromagnetic fields]. *Voprosy teorii plazmy* [Questions of the theory of plasma]. Moscow, Gosatomiz-dat Publ., 1963, vol. 2, pp. 177–261. (In Russ.).
- 7. Geyko V.I., Frayman G.M. [About the accuracy of the average description of the movement of charged particles

in high-frequency fields]. *Zhurnal ehksperimental'noj i tekhnicheskoj fiziki* [Journal of experimental and technical physics], 2008, vol. 134, no. 6, pp. 1125–1129. (In Russ.).

- Kapica P.L. [Electronics of big capacities]. Uspekhi fizicheskih nauk [Achievements of physical sciences], 1962, vol. 78, no. 2, pp. 181–265. (In Russ.).
- Chirkov A.G. Asimptoticheskaya teoriya vzaimodejstviya zaryazhennyh chastic i kvantovyh sistem s vneshnimi ehlektromagnitnymi polyami [The asymptotic theory of interaction of charged particles and quantum systems with external electromagnetic fields]. Saint-Petersburg, Nestor Publ., 2001. 257 p. (In Russ.).
- Gerlich D. Inhomogeneous RF fields: a versatile tool for the study of processes with slow ions. *State-Selected and State-to-State Ion–Molecule reaction Dynamics. Part 1: Experiment, Advances in Chemical Physics Series. C.-Y. Ng, M. Baer (Eds.).* New York, John Wiley & Sons Inc., 1992, vol. LXXXII, pp. 1–176. Doi: 10.1002/9780470141397.ch1.
- Slobodenyuk G.I. Kvadrupol'nye mass-spektrometry [Quadrupole mass spectrometer]. Moscow, Atomizdat Publ., 1974. 271 p. (In Russ.).
- Dawson P.H., ed. *Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications*. Woodbury, American Institute of Physics, 1995. 349 p.
- Dawson P.H. Ion optical properties of quadrupole mass filters. *Advances in Electronics and Electron Physics*. Academic Press. Inc., 1980, vol. 53, pp. 153–208.
- 14. March R.E., Hughes R.J. *Quadrupole Storage Mass Spectrometry*. New York, John Wiley and Sons, 1989. 24 p.
- Major F.G., Gheorghe V.N., Werth G. Charged Particle Traps. Physics and Techniques of Charged Particle Field Confinement. Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag, 2005. 370 p.
- Werth G., Gheorghe V.N., Major F.G. *Charged Particle Traps II. Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. Doi: 10.1007/978-3-540-92261-2.
- Sudakov M. Effective potential and the ion axial beat motion near the boundary of the first stable region in a nonlinear ion trap. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2001, vol. 206, pp. 27–43. Doi: 10.1016/S1387-3806(00)00380-8.
- Baranov V.I., Bandura D.R., Tanner S.D. Limitations of the effective potential for the evaluation of the ion energy in the rf-driven quadrupole field. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2005, vol. 247, pp. 40–47. Doi: 10.1016/j.ijms.2005.08.011.
- Sudakov M.Yu., Apackaya M.V. [The concept of effective potential for the description of the movement of ions in the kvadrupolny filter of masses]. *Zhurnal ehksperimental'noj i tekhnicheskoj fiziki* [Journal of experimental and technical physics], 2012, vol. 142, pp. 222–229. (In Russ.).
- Gao C., Douglas D.J. Can the effective potential of a linear quadrupole be extended to values of the Mathieu parameter q up to 0.90? *Journal of American Society for Mass Spectrometry*, 2013, vol. 24, pp. 1848–1852. Doi: 10.1007/s13361-013-0738-2.
- Douglas D.J., Berdnikov A.S., Konenkov N.V. The effective potential for ion motion in a radio frequency quadru-

pole field revisited. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2015, vol. 377, pp. 345–354. Doi: 10.1016/j.ijms.2014.08.009.

- Reilly P.T.A., Brabeck G.F. Mapping the pseudopotential well for all values of the Mathieu parameter q in digital and sinusoidal ion traps. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2015, vol. 392, pp. 86–90. Doi: 10.1016/j.ijms.2015.09.013.
- Brabeck G.F., Reilly P.T.A. Computational Analysis of Quadrupole Mass Filters Employing Nontraditional Waveforms. *Journal of American Society for Mass Spectrometry*, 2016, vol. 27, pp. 1122–1127. Doi: 10.1007/s13361-016-1358-4.
- Berdnikov A.S., Douglas D.J., Konenkov N.V. The pseudopotential for quadrupole fields up to q = 0.9080. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2017, vol. 421, pp. 204–223. Doi: 10.1016/j.ijms.2017.04.003.
- 25. Bondarenko G.V. Uravnenie Hilla i ego primenenie v oblasti tekhnicheskih kolebanij [Hill's equation and his application in the field of technical fluctuations]. Moscow, Leningrad, AN USSR Publ., 1936. 50 p. (In Russ.).
- 26. Mak-Lahlan N.V. *Teoriya i prilozheniya funkcij Matye* [Theory and applications of functions of Mathieu]. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1953. 476 p. (In Russ.).
- Konenkov N.V., Sudakov M., Douglas D.J. Matrix methods to calculate stability diagrams in quadrupole mass spectrometry. *Journal of American Society for Mass Spectrometry*, 2002, vol. 13, pp. 597–613. Doi: 10.1016/S1044-0305(02)00365-3.
- Gantmaher F.R. *Teoriya matric. Izd. 2-e, dop.* [Theory of matrixes. The edition 2 added]. Moscow, Nauka Publ., 1966. 576 p. (In Russ.).
- 29. Erugin N.P. *Metod Lappo-Danilevskogo v teorii linejnyh differencial'nyh uravnenij* [Lappo-Danilevsky's method in the theory of the linear differential equations]. Leningrad, Leningradskij universitet, 1956. 109 p. (In Russ.).
- Erugin N.P. Linejnye sistemy obyknovennyh differencial'nyh uravnenij s periodicheskimi i kvaziperiodicheskimi koehfficientami [The linear systems of the ordinary differential equations with periodic and quasiperiodic coefficients]. Minsk, Akademiya nauk BSSR, 1963. 273 p. (In Russ.).
- Krasnosel'skij M.A. Operator sdviga po traektoriyam differencial'nyh uravnenij [The operator of shift on trajectories of the differential equations]. Moscow, Glavnaya redakciya fiziko-matematicheskoj literatury Publ., 1966. 332 p. (In Russ.).
- 32. Yakubovich V.A., Starzhinskij V.M. Linejnye differencial'nye uravneniya s periodicheskimi koehfficientami i ih prilozheniya [The linear differential equations with periodic coefficients and their applications]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 720 p. (In Russ.).
- Sheretov E.P., Philippov I.V., Karnav T.B., Kolotilin B.I., Ivanov V.W. Spiking structure of amplitude characteristics for ion trajectories in hyperboloidal mass spectrometers: the theory. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2002, vol. 16, pp. 1652–1657. Doi: 10.1002/rcm.763.
- 34. Lezhen Dirihle P.G. Lekcii po teorii chisel [Lectures on

the theory of numbers]. Moscow—Leningrad, ONTI NKTP OF THE USSR Publ., 1936. 404 p. (In Russ.).

- 35. Shmidt V. *Diofantovy priblizheniya* [Diophantine approximation]. Moscow, Mir Publ., 1983. 230 p.
- Shidlovskiy A.B. *Diofantovy priblizheniya i transzendentnye chisla* [Diophantine approximations and transcendental numbers]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2007. 272 p.
- 37. Berdnikov A.S., Verenchikov A.N., Konenkov N.V. [About methodological problems when replacing discrete

Contacts: *Berdnikov Aleksandr Sergeevich*, asberd@yandex.ru

mass and spectrometer models by continual models]. *Mass-spektrometriya* [Mass-spectrometry], 2017, vol. 14, no. 3, pp. 176–189. (In Russ.).

 Boss V. Uravneniya matematicheskoj fiziki. Seriya "Lekcii po matematike". T. 11. Izd. 4-e [Equations of mathematical physics. Lectures on Mathematics series, vol. 11, ed. 4]. Moscow, URSS, 2016. 224 p. (In Russ.).

Article received in edition 25.06.2018