ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2018, том 28, № 4, с. 135–145

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. II. ИСПРАВЛЕНИЕ КОНЦЕПЦИИ

Публикация продолжает исследование новой концепции эффективного потенциала, которая была предложена М.Ю. Судаковым и М.В. Апацкой. Рассматриваются способы восстановления математической корректности рассуждений авторов, приводятся уточненные формулы.

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

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является прямым продолжением публикации [1], посвященной критическому анализу результатов [2]. Номера формул и рисунков из публикации [1], на которые ссылается данная статья, снабжены префиксом "I" и имеют вид (I.1), (I.2) и т. д.

ИСПРАВЛЕНИЕ КОНЦЕПЦИИ ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ СТРОБОСКОПИЧЕСКИХ ВЫБОРОК

Рассмотрим, как можно исправить предложенную в [2] концепцию эффективного потенциала для описания движения ионов в квадрупольном фильтре масс в произвольной рабочей точке и при произвольном профиле радиочастотного сигнала, одновременно устранив перечисленные в [1] недостатки. Для этого будет использоваться математическая модель движения заряженных частиц в квадрупольных радиочастотных полях, предложенная в [3, 4] и основанная на представлении точных решений линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами с помощью матриц Флоке—Ляпунова, выраженных через матрицы монодромии.

В безразмерных координатах в квадрупольном радиочастотном поле движение $x(t)$ по координате x для иона с массой m и зарядом e описывается уравнением Хилла (воспроизводим с нумерацией из [1])

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

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, уравнение Хилла превращается в уравнение типа Матьё.

Внутри зоны устойчивости вследствие того, что для коэффициентов матрицы монодромии выполнено неравенство $-2 < m_{xx} + m_{vv} < 2$ и определитель матрицы монодромии $m_{xx}m_{vv} - m_{xv}m_{vx}$ равен единице, коэффициенты матрицы монодромии могут быть выражены с помощью вспомогательных параметров $\beta_x, \lambda_x, \mu_x$ по формулам [5, 6]

$$\begin{aligned} m_{xx} &= \cos\pi\beta_x - \mu_x \sin\pi\beta_x, \\ m_{vv} &= \cos\pi\beta_x + \mu_x \sin\pi\beta_x, \\ m_{xv} &= \lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\,\sin\pi\beta_x, \\ m_{vx} &= -\sqrt{1+\mu_x^2}\,\sin\pi\beta_x \big/ \lambda_x, \end{aligned} \tag{1}$$

где

$$\beta_x = \frac{1}{\pi}\arccos\left(\frac{m_{xx}+m_{vv}}{2}\right) \in [0,1],$$
$$\mu_x = \frac{m_{vv}-m_{xx}}{2\sin \pi\beta_x}, \qquad (2)$$
$$\lambda_x = \frac{m_{xv}}{\sqrt{1+\mu_x^2}\sin \pi\beta_x}.$$

Стробоскопическая выборка отсчетов $x_n = x(nT')$, $v_n = v(nT')$ в соответствии с [1, (3, 4)] подчиняется соотношениям $\begin{pmatrix} x_n \\ v_n \end{pmatrix} = M_x^n \begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix}$, где $x_0 = x(0)$, $v_0 = v(0)$ — начальные значения.

Для матричной функции

$$S_x(\xi) = \begin{pmatrix} \cos\beta_x\xi - \mu_x \sin\beta_x\xi & \lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\beta_x\xi \\ -\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\beta_x\xi/\lambda_x & \cos\beta_x\xi + \mu_x\sin\beta_x\xi \end{pmatrix} \qquad (3)$$

выполнены соотношения $M_x = S_x(T')$ и $S_x(\xi_1)S_x(\xi_2) = S_x(\xi_1+\xi_2)$, так что $M_x^n \equiv S_x(nT')$. Теперь дискретная выборка x_n, v_n естественным образом доопределяется для любых промежуточных моментов времени с помощью функций $X(\xi), V(\xi)$, заданных по формуле

$$\begin{pmatrix} X(\xi) \\ V(\xi) \end{pmatrix} = S_x(\xi)\begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix}, \qquad (4)$$

т. к. $x_n \equiv X(nT')$ и $v_n \equiv V(nT')$, где $X(\xi)$ и $V(\xi)$ — синусоидальные функции.

Выражения (3), (4) выглядят математическим трюком, но в действительности эти формулы описывают синусоидальные секулярные колебания с секулярной частотой β_x. Действительно, пусть фундаментальное решение $X_x(\xi)$, $V_x(\xi)$ уравнения (I.1) удовлетворяет начальным условиям $X_x(0)=1$, $V_x(0)=0$, а фундаментальное решение $X_v(\xi)$, $V_v(\xi)$ удовлетворяет начальным условиям $X_v(0)=0$, $V_v(0)=1$. Коэффициенты матрицы монодромии M_x для [1, (4)] определяются как $m_{xx} = X_x(T')$, $m_{vx} = V_x(T')$, $m_{xv} = X_v(T')$, $m_{vv} = V_v(T')$, а общее решение (I.1) можно записать как

$$\begin{pmatrix} x(\xi) \\ v(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_x(\xi) & X_v(\xi) \\ V_x(\xi) & V_v(\xi) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = \Phi_x(\xi)\begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix}, \qquad (5)$$

где $\Phi_x(\xi)$ — матрица фундаментального решения. Выражение (5) также можно записать как

$$\begin{pmatrix} x(\xi) \\ v(\xi) \end{pmatrix} = \Phi_x(\xi)S_x(-\xi)S_x(\xi)\begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix} =$$
$$\vdots \qquad = \Lambda_x(\xi)\begin{pmatrix} X(\xi) \\ V(\xi) \end{pmatrix}, \qquad (6)$$

поскольку для матрицы (3) справедливо тождество $S_x(\xi_1)S_x(\xi_2) = S_x(\xi_1+\xi_2)$ и, следовательно, матрица $S_x(-\xi)S_x(\xi)$ будет единичной.

В силу периодичности коэффициентов уравнения (I.1) пары функций $X_x(\xi+T')$, $V_x(\xi+T')$ и $X_v(\xi+T')$, $V_v(\xi+T')$ также являются ее решениями и их можно представить как суперпозицию фундаментальных решений, т. е. в виде равенства

$$\begin{pmatrix} X_x(\xi+T') & X_v(\xi+T') \\ V_x(\xi+T') & V_v(\xi+T') \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} X_x(\xi) & X_v(\xi) \\ V_x(\xi) & V_v(\xi) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_{xx} & m_{xv} \\ m_{vx} & m_{vv} \end{pmatrix}, \qquad (7)$$

(для проверки достаточно убедиться, что правая часть соотношения (7) обеспечивает для функций $X_x(\xi+T')$, $V_x(\xi+T')$ и $X_v(\xi+T')$, $V_v(\xi+T')$ правильные начальные условия в точке $\xi=0$, и воспользоваться утверждением о единственности решения обыкновенного дифференциального уравнения с заданными начальными условиями). В результате матрица $\Lambda_x(\xi) = \Phi_x(\xi)S_x(-\xi)$ оказывается периодической с периодом T':

$$\Lambda_x(\xi+T') = \Phi_x(\xi+T')S_x(-T'-\xi) =$$
$$= \Phi_x(\xi)S_x(T')S_x(-T')S_x(-\xi) =$$

$$= \Phi_x(\xi) S_x(-\xi) = \Lambda_x(\xi), \qquad (8)$$

поскольку $\Phi_x(\xi + T') = \Phi_x(\xi) M_x$, $M_x = S_x(T')$ и $\forall \xi_1, \xi_2:\ S_x(\xi_1) S_x(\xi_2) = S_x(\xi_1 + \xi_2)$. По сути представление решения $x(\xi), v(\xi)$ в двухступенчатом матричном виде

$$\begin{pmatrix} x(\xi) \\ v(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{xx}(\xi) & \Lambda_{xv}(\xi) \\ \Lambda_{vx}(\xi) & \Lambda_{vv}(\xi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X(\xi) \\ V(\xi) \end{pmatrix} = \Lambda_x(\xi) \begin{pmatrix} X(\xi) \\ V(\xi) \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} X(\xi) \\ V(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta_x\xi - \mu_x \sin\beta_x\xi & \lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\beta_x\xi \\ -\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\beta_x\xi/\lambda_x & \cos\beta_x\xi + \mu_x\sin\beta_x\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix}, \qquad (9)$$

где $\Lambda_x(\xi)$ — периодическая матрица с периодом T', не зависящая от начальных условий и обращающаяся в единичную при $\xi = 0$, является представлением Флоке—Ляпунова для линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами [7–11].

Поскольку матрица $\Lambda_x(\xi) = \Phi_x(\xi) S_x(-\xi)$ является периодической, ее достаточно вычислить численно для одного периода времени. После этого формула (9) позволяет вычислить точно решение $x(\xi)$, $v(\xi)$ для любого момента времени без привязки к стробоскопическим дискретам $\xi_n = nT'$, а истинное движение $x(\xi), v(\xi)$ разбивается на секулярное движение $X(\xi), V(\xi)$, заданное аналитически, и на периодическое радиочастотное возмущение, заданное матрицей $\Lambda(\xi)$.

Функции $X(\xi), V(\xi)$, заданные в соответствии с (3), (4), представляют собой общее решение системы стационарных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{dX(\xi)}{d\xi} = (-\mu_x\beta_x) X(\xi) + \left(\lambda_x\beta_x\sqrt{1+\mu_x^2}\right) V(\xi), \\ \dfrac{dV(\xi)}{d\xi} = \left(-\beta_x\sqrt{1+\mu_x^2}/\lambda_x\right) X(\xi) + (\mu_x\beta_x) V(\xi) \end{cases} \qquad (10)$$

с начальными условиями $X(0) = x_0$, $V(0) = v_0$.

Из (10) следует, что $X(\xi)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2 X(\xi)}{d\xi^2} + \beta_x^2 X(\xi) = 0, \qquad (11)$$

которое не совпадает с (I.16) даже с учетом разных масштабов для безразмерного времени ξ и индексов стробоскопических отсчетов $n = \pi\xi$.

Уравнение (11) можно интерпретировать как движение механической частицы с единичной массой в поле с безразмерным эффективным механическим потенциалом $\overline{U}_x(\xi) = \beta_x^2\xi^2/2$. Преобразования для движения по координате y ничем не отличаются от преобразования движения по координате x, за исключением замены матрицы монодромии M_x на матрицу монодромии M_y для уравнения (I.2). Отсюда, в частности, следует, что поскольку частоты в уравнениях (I.16) и (11) отличаются, а функции $X(\xi), V(\xi)$ в точности интерполируют стробоскопические отсчеты, то, за исключением вырожденного случая $\beta_y = 0$, функции $Y(n), W(n)$, вычисленные из уравнений (I.15), (I.16), будут быстро расходиться с истинными стробоскопическими значениями y_n, w_n.

Инвертирование координат и скоростей после умножения на M_x с заменой β_x на $\delta_x = 1 - \beta_x$ позволяет построить континуальный аналог для описания биений:

$$\overline{S}_x(\xi) = \begin{pmatrix} \cos\delta_x\xi + \mu_x\sin\delta_x\xi & -\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\delta_x\xi \\ \sqrt{1+\mu_x^2}\sin\delta_x\xi/\lambda_x & \cos\delta_x\xi - \mu_x\sin\delta_x\xi \end{pmatrix}, \qquad (12)$$

где $M_x^n = (-1)^n \overline{S}_x(nT')$, функции $\overline{X}(\xi)$ и $\overline{V}(\xi)$, заданные с помощью условия

$$\begin{pmatrix} \overline{X}(\xi) \\ \overline{V}(\xi) \end{pmatrix} = \overline{S}_x(\xi) \begin{pmatrix} x_0 \\ v_0 \end{pmatrix},$$

представляют собой синусоидальные функции, а для стробоскопических отсчетов выполняются точные соотношения $x_n = (-1)^n \overline{X}(nT')$, $v_n = (-1)^n \overline{V}(nT')$. Матрица $\overline{\Lambda}_x(\xi) = \Phi_x(\xi)\overline{S}_x(-\xi)$ удовлетворяет условию $\overline{\Lambda}_x(\xi + T') = -\overline{\Lambda}_x(\xi)$, функция $\overline{X}(\xi)$, описывающая биения, удовлетворяет дифференциальному уравнению $\mathrm{d}^2\overline{X}(\xi)/\mathrm{d}\xi^2 + \delta_x^2\overline{X}(\xi) = 0$, а точная траектория $x(\xi)$, $v(\xi)$ может быть представлена как биения $\overline{X}(\xi)$, $\overline{V}(\xi)$, подвергнутые линейному периодическому радиочастотному преобразованию, задаваемому матрицей $\overline{\Lambda}_x(\xi)$. Однако в этом нет особой необходимости, поскольку вся нужная информация может быть извлечена из секулярных колебаний. Отметим только, что соответствующие дифференциальные уравнения снова будут заметно отличаться от уравнений (I.12) и (I.13), полученных в [2]. Поэтому, за исключением вырожденного случая $\beta_x = 1$, функции $X(n), V(n)$, вычисленные из уравнений (I.12), (I.13), и истинные стробоскопические значения $(-1)^n x_n, (-1)^n v_n$, будут достаточно быстро расходиться.

Система уравнений (10) представляет собой гамильтоновы уравнения движения с эффективным гамильтонианом секулярного движения

$$H(V,X) = \frac{\lambda_x\beta_x\sqrt{1+\mu_x^2}}{2}V^2 - \mu_x\beta_x VX + \frac{\beta_x\sqrt{1+\mu_x^2}}{2\lambda_x}X^2. \quad (13)$$

Тот факт, что гамильтониан секулярного движения $X(\xi), V(\xi)$, заданного уравнениями (10), не распадается на сумму кинетической и потенциальной энергий, является неустранимым свойством. Из представления Флоке $x(\xi) = g(\xi)\left(c_a\exp(\mathrm{i}\beta\xi) + c_b\exp(-\mathrm{i}\beta\xi)\right)$, где функция $g(\xi)$ является периодической с периодом T', следует, что вычисленная в точках $\xi_n = nT'$ секулярная скорость $v(\xi_n) = \mathrm{d}x(\xi_n)/\mathrm{d}\xi = c_a'\exp(\mathrm{i}\beta\xi_n) + c_b'\exp(-\mathrm{i}\beta\xi_n)$ будет неизбежно отличаться от формальной производной для вычисленной в стробоскопических точках $\xi_n = nT'$ секулярной координаты $x(\xi_n) = c_a\exp(\mathrm{i}\beta\xi_n) + c_b\exp(-\mathrm{i}\beta\xi_n)$ (надо учесть, что для стробоскопической выборки $g(\xi_n) = 1$ и $g'(\xi_n) \neq 0$ — константы, не зависящие от индекса n). Это связано с тем, что секулярная скорость и секулярное движение — вспомогательные математические конструкции, лишь опосредованно связанные с истинным движением.

В процессе движения, описываемого уравнениями (10), гамильтониан (13) остается константой. Максимальное отклонение секулярных траекторий $X(\xi), V(\xi)$ для заданных безразмерных начальных условий x_0, v_0 определяется из соотношений

$$H(v_0, x_0) = H(V_{\max}, X_{\max}) = \frac{\beta_x}{2\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}}X_{\max}^2, \quad (14)$$

где $V_{\max} = \mu_x / \left(\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\right) X_{\max}$ берется из (10) при наложении условия $\mathrm{d}X_{\max}(\xi)/\mathrm{d}\xi = 0$, соответствующего максимальному отклонению $X(\xi)$ от оси квадруполя. То есть

$$X_{\max}^2 = \left(1+\mu_x^2\right)\left(\lambda_x^2 v_0^2 - \frac{2\mu_x\lambda_x}{\sqrt{1+\mu_x^2}}v_0 x_0 + x_0^2\right), \quad (15)$$

где $v_0 = \mathrm{d}x(\xi)/\mathrm{d}\xi\big|_{\xi=0}$ имеет ту же размерность, что и $x_0 = x(\xi)\big|_{\xi=0}$, а параметры $\beta_x, \lambda_x, \mu_x$ и ξ — безразмерные. (Для начальных условий уравнений (10) и (I.1) используются одни и те же обозначения, поскольку они и в самом деле совпадают: в условии (6) матрица $\Lambda(\xi)$ при $\xi = 0$ — единичная.)

Остается определить, как связаны между собой максимальные отклонения от оси квадруполя для секулярных колебаний $X(\xi), V(\xi)$ и для истинных движений $x(\xi), v(\xi)$. В соответствии с (9),

$$\begin{aligned} x(\xi) &= \Lambda_{xx}(\xi)\times \\ &\times\left(x_0\left(\cos\beta_x\xi - \mu_x\sin\beta_x\xi\right) + v_0\left(\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\beta_x\xi\right)\right) + \\ &+\Lambda_{xv}(\xi)\times \\ &\times\left(x_0\left(-\sqrt{1+\mu_x^2}\sin\beta_x\xi/\lambda_x\right) + v_0\left(\cos\beta_x\xi + \mu_x\sin\beta_x\xi\right)\right). \end{aligned} \quad (16)$$

Тогда

$$\begin{aligned} x^2(\xi) &= X_0(\xi) + X_c(\xi)\cos 2\beta_x\xi + \\ &+ X_s(\xi)\sin 2\beta_x\xi = \\ &= X_0(\xi) + X_R(\xi)\cos\left(2\beta_x\xi - \phi_R(\xi)\right), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\varphi_R(\xi) = \arctan\left(X_s(\xi)/X_c(\xi)\right)$, $X_R(\xi) = \sqrt{X_c^2(\xi) + X_s^2(\xi)}$, а $X_0(\xi)$, $X_c(\xi)$, $X_s(\xi)$ выражены через функции $\Lambda_{xx}(\xi)$, $\Lambda_{xv}(\xi)$ и будут периодическими с периодом T'.

Если периоды $T'_x = 2\pi/\beta_x$ и $T' = \pi$ в достаточной степени несоизмеримы (т. е. их отношение не является простым рациональным числом), то в последовательности чисел $\xi_{k*} = \xi_* + kT'$ (где $\xi_* \in [0, T']$ — произвольное фиксированное значение), для членов которой функции $X_0(\xi)$, $X_c(\xi)$, $X_s(\xi)$ принимают постоянные значения $X_0(\xi_*)$, $X_c(\xi_*)$, $X_s(\xi_*)$, найдутся такие числа ξ_{k*}, что $\cos(2\beta_x\xi_{k*} - \varphi_R)$ будет сколь угодно мало отличаться от единицы. Это означает, что максимум выражения (17) равен величине $X_0(\xi_*) + X_R(\xi_*)$, максимизированной по периоду $\xi_* \in [0, T']$ (исключениями будут точки a, q, для которых β_x — простая дробь). Поскольку $X_R^2(\xi) = X_c^2(\xi) + X_s^2(\xi) \equiv X_0^2(\xi)$, а $X_0^2(\xi)$ раскладывается на два множителя, один из которых зависит от x_0, v_0, а второй от $\Lambda_{xx}(\xi)$, $\Lambda_{xv}(\xi)$, то условие, что $x^2(\xi)$ не превышает r_0^2 (квадрата нормированного радиуса апертуры квадруполя), приобретает вид:

$$\max_{\xi\in(-\infty,+\infty)} x^2(\xi) = \Lambda_{\max}^2\left(1+\mu_x^2\right)\times \left(\overline{x}_0^2 + \lambda_x^2\overline{v}_0^2 - \frac{2\lambda_x\mu_x}{\sqrt{1+\mu_x^2}}\overline{x}_0\overline{v}_0\right) \le r_0^2, \quad (18)$$

$$\Lambda_{\max}^2 = \max_{\xi\in(0,T')}\left(\Lambda_{uu}^2(\xi) + \frac{1}{\lambda_x^2}\Lambda_{uv}^2(\xi) + \frac{2\mu_x}{\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}}\Lambda_{uu}(\xi)\Lambda_{uv}(\xi)\right). \quad (19)$$

После сравнения (18), (19) с (15) ясно видно, что $\Lambda_{\max}$ определяет, во сколько раз радиочастотное возмущение масштабирует амплитуду секулярных колебаний. Так как $\Lambda_{xx}(0) = 1$ и $\Lambda_{xv}(0) = 0$, то $\Lambda_{\max} \ge 1$.

Уравнения (18), (19) описывают фазовые эллипсы аксептансов для фиксированной начальной фазы радиочастотного поля и отличаются от фазовых эллипсов в [12–16] лишь обозначениями. При этом для тех точек a, q, где отношение секулярной частоты β_x к частоте радиочастотного возбуждения близко к отношению двух небольших целых чисел, оценка (18), (19) будет чрезмерно пессимистической, а реальный аксептанс будет заметно больше этой оценки и не будет иметь эллиптическую форму [3, 17].

Условия (18), (19) позволяют определить безразмерную глубину псевдопотенциальной ямы $\overline{D}_x = \overline{V}_x^2/2$ (максимальную кинетическую энергию, для которой ион, стартующий с оси квадруполя, еще удерживается радиочастотным полем в пределах апертуры квадруполя при любой начальной фазе радиочастотного поля) и безразмерную ширину псевдопотенциальной ямы $\overline{R}_x$ (максимальный начальный сдвиг иона от оси, для которого ион, стартующий с нулевой кинетической энергией, еще удерживается радиочастотным полем в пределах апертуры квадруполя при любой начальной фазе радиочастотного поля):

$$\overline{V}_x^2 = \frac{r_0^2}{\max\limits_{\varphi_0\in[0,2\pi]}\left[\lambda_x^2\left(1+\mu_x^2\right)\Lambda_{\max}^2\right]}, \quad (20)$$

$$\overline{R}_x^2 = \frac{r_0^2}{\max\limits_{\varphi_0\in[0,2\pi]}\left[\left(1+\mu_x^2\right)\Lambda_{\max}^2\right]}, \quad (21)$$

(каждый из параметров $\lambda_x, \mu_x, \Lambda_{\max}$ зависит от начальной фазы φ_0), где выражение (20) пересчитано к максимальной начальной безразмерной скорости вместо максимальной начальной кинетической энергии. Зная $\overline{V}_x$ и $\overline{R}_x$, можно оценить минимаксный аксептанс $\pi\overline{V}_x\overline{R}_x$ при движении по оси x, если его можно аппроксимировать фазовым эллипсом $\left(\dot{x}_0/\overline{V}_x\right)^2 + \left(x_0/\overline{R}_x\right)^2 \le 1$.

Движение по направлению y, которое описывается уравнением (I.2), разбирается аналогичным образом. Поскольку процессы движения ионов в радиочастотных квадруполях в условиях устойчивости вполне определяются секулярными частотами ω_s, нет необходимости рассматривать еще и частоты биений $\omega_b = (\Omega - 2\omega_s)/2$, по сути представляющие из себя некоторую математическую фикцию. Однако предложенная в [2] запись секулярных уравнений в безразмерной форме с биениями (что сводится к замене в уравнении (11) β_x на $1-\beta_x$, μ_x на $-\mu_x$, λ_x на $-\lambda_x$) имеет то преимущество, что при $\beta_x \approx 1$ малый параметр

$1-\beta_x$, задающий степень близости рабочей точки к границе зоны устойчивости, входит в уравнения в явном виде.

ДВИЖЕНИЕ ИОНОВ В РАДИОЧАСТОТНОМ КВАДРУПОЛЕ В ОКРЕСТНОСТИ ВЕРШИНЫ ПЕРВОЙ СОВМЕСТНОЙ ЗОНЫ УСТОЙЧИВОСТИ

Рассмотрим на основе предложенной в предыдущем разделе теории поведение движения иона в окрестности вершины первой совместной зоны устойчивости косинусоидального линейного квадруполя. Координаты вершины задаются как $a_c = 0.236994$, $q_c = 0.705996$ [2], а $\delta a = a - a_c$ и $\delta q = q - q_c$ — отклонения рабочих параметров a, q уравнений (I.1), (I.2) от вершины a_c, q_c. Для определения матрицы монодромии (I.3) будем находить численно базовые решения $X_x(\xi)$, $V_x(\xi)$, $X_v(\xi)$, $V_v(\xi)$ уравнения (I.1):

$$\begin{aligned}
&\dot{X}_x = V_x, \quad \dot{V}_x = -\left(a + 2q\cos\left(2\xi + \phi_0\right)\right) X_x, \\
&\dot{X}_v = V_x, \quad \dot{V}_v = -\left(a + 2q\cos\left(2\xi + \phi_0\right)\right) X_v, \\
&X_x(0) = 1, \quad V_x(0) = 0, X_v(0) = 0, V_x(0) = 1.
\end{aligned} \tag{22}$$

Для того чтобы определить вариации коэффициентов матрицы монодромии при варьировании рабочих параметров a, q, добавим к системе уравнений (22) дополнительные функции $\partial X_x(\xi)/\partial a$, $\partial V_x(\xi)/\partial a$, $\partial X_x(\xi)/\partial q$, $\partial V_x(\xi)/\partial q$, $\partial X_v(\xi)/\partial a$, $\partial V_v(\xi)/\partial a$, $\partial X_v(\xi)/\partial q$, $\partial V_v(\xi)/\partial q$, … (при необходимости до второго порядка включительно) и соответствующие им дополнительные уравнения:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \dot{X}_x}{\partial a} = \frac{\partial V_x}{\partial a}, \quad \frac{\partial \dot{V}_x}{\partial a} = -\left(a + 2q\cos\left(2\xi + \phi_0\right)\right)\frac{\partial X_x}{\partial a} - X_x, \\
&\frac{\partial X_x(0)}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial V_x(0)}{\partial a} = 0, \\
&\frac{\partial \dot{X}_x}{\partial q} = \frac{\partial V_x}{\partial q}, \quad \frac{\partial \dot{V}_x}{\partial q} = -\left(a + 2q\cos\left(2\xi + \phi_0\right)\right)\frac{\partial X_x}{\partial q} - \\
&\qquad\qquad - 2\cos\left(2\xi + \phi_0\right) X_x, \\
&\frac{\partial X_x(0)}{\partial q} = 0, \quad \frac{\partial V_x(0)}{\partial q} = 0, \\
&\frac{\partial \dot{X}_v}{\partial a} = \frac{\partial V_v}{\partial a}, \quad \frac{\partial \dot{V}_v}{\partial a} = -\left(a + 2q\cos\left(2\xi + \phi_0\right)\right)\frac{\partial X_v}{\partial a} - X_v, \\
&\frac{\partial X_v(0)}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial V_v(0)}{\partial a} = 0, \\
&\frac{\partial \dot{X}_v}{\partial q} = \frac{\partial V_v}{\partial q}, \quad \frac{\partial \dot{V}_v}{\partial q} = -\left(a + 2q\cos\left(2\xi + \phi_0\right)\right)\frac{\partial X_v}{\partial q} - \\
&\qquad\qquad - 2\cos\left(2\xi + \phi_0\right) X_v, \\
&\frac{\partial X_v(0)}{\partial q} = 0, \quad \frac{\partial V_v(0)}{\partial q} = 0, \\
&......
\end{aligned} \tag{23}$$

(способ аналогичен методу тау-вариаций, предложенному в [18, 19]).

Операции с периодическими функциями $\Lambda_{xx}(\xi)$, $\Lambda_{xv}(\xi)$, $\Lambda_{vx}(\xi)$, $\Lambda_{vv}(\xi)$ можно упростить, если учесть, что для первой зоны устойчивости определяющими членами в них являются первые гармоники $\cos 2\xi$, $\sin 2\xi$, а старшие гармоники обеспечивают лишь незначительные поправки, и их вклад на порядок отличается от основных гармоник:

$$\begin{aligned}
&\Lambda_{xx}(\xi) \approx 1 - A_{xx}^{(1)}\left(1 - \cos 2\xi\right) + B_{xx}^{(1)}\sin 2\xi - \\
&\qquad - A_{xx}^{(2)}\left(1 - \cos 4\xi\right) + B_{xx}^{(2)}\sin 4\xi + \cdots, \\
&\Lambda_{xv}(\xi) \approx -A_{xv}^{(1)}\left(1 - \cos 2\xi\right) + B_{xv}^{(1)}\sin 2\xi - \\
&\qquad - A_{xv}^{(2)}\left(1 - \cos 4\xi\right) + B_{xv}^{(2)}\sin 4\xi + \cdots, \\
&\Lambda_{vx}(\xi) \approx -A_{vx}^{(1)}\left(1 - \cos 2\xi\right) + B_{vx}^{(1)}\sin 2\xi - \\
&\qquad - A_{vx}^{(2)}\left(1 - \cos 4\xi\right) + B_{vx}^{(2)}\sin 4\xi + \cdots, \\
&\Lambda_{vv}(\xi) \approx 1 - A_{vv}^{(1)}\left(1 - \cos 2\xi\right) + B_{vv}^{(1)}\sin 2\xi - \\
&\qquad - A_{vv}^{(2)}\left(1 - \cos 4\xi\right) + B_{vv}^{(2)}\sin 4\xi + \cdots,
\end{aligned} \tag{24}$$

где учитывается $\Lambda_{xx}(0) = 1$, $\Lambda_{xv}(0) = 0$, $\Lambda_{vx}(0) = \nu$, $\Lambda_{vv}(0) = 1$. При этом следует отметить, что хотя по отдельности величины $X_x(\xi)$, $V_x(\xi)$, $X_v(\xi)$, $V_v(\xi)$, β_x, μ_x, λ_x ведут себя как функции параметров a, q при приближении к границе зоны устойчивости нерегулярным образом, но, как и коэффициенты матрицы монодромии, функции $\Lambda_{xx}(\xi)$, $\Lambda_{xv}(\xi)$, $\Lambda_{vx}(\xi)$, $\Lambda_{vv}(\xi)$ вполне регулярны.

Из параметризации (9) и того факта, что функции $x(\xi)$, $v(\xi) = \mathrm{d}x(\xi)/\mathrm{d}\xi$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям (I.1) при $f(\xi) = \cos(2\xi + \varphi_0)$, следует, что $\Lambda_{xx}(\xi)$, $\Lambda_{xv}(\xi)$, $\Lambda_{vx}(\xi)$, $\Lambda_{vv}(\xi)$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям

$$\begin{cases} \Lambda'_{xx}(\xi) = \beta_x\mu_x\Lambda_{xx}(\xi) + \\ \qquad + \dfrac{\beta_x\sqrt{1+\mu_x^2}}{\lambda_x}\Lambda_{xv}(\xi) + \Lambda_{vx}(\xi), \\ \Lambda'_{xv}(\xi) = -\beta_x\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\Lambda_{xx}(\xi) - \\ \qquad - \beta_x\mu_x\Lambda_{xv}(\xi) + \Lambda_{vv}(\xi), \\ \Lambda'_{vx}(\xi) = -\left(a + 2q\cos(2\xi+\phi_0)\right)\Lambda_{xx}(\xi) + \\ \qquad + \beta_x\mu_x\Lambda_{vx}(\xi) + \dfrac{\beta_x\sqrt{1+\mu_x^2}}{\lambda_x}\Lambda_{vv}(\xi), \\ \Lambda'_{vv}(\xi) = -\left(a + 2q\cos(2\xi+\phi_0)\right)\Lambda_{xv}(\xi) - \\ \qquad - \beta_x\lambda_x\sqrt{1+\mu_x^2}\Lambda_{vx}(\xi) - \beta_x\mu_x\Lambda_{vv}(\xi). \end{cases} \tag{25}$$

Подстановка (24) в (25) приводит к чисто алгебраическим соотношениям для неизвестных коэффициентов $A_{xx}^{(k)}$, $B_{xx}^{(k)}$, …, откуда их легко можно вычислить.

Совместное численное решение уравнений (22), (23) для $\varphi_0 = 0$ дает для коэффициентов матрицы монодромии M_x аппроксимацию

$$\begin{aligned} &m_{xx} \approx \\ &\approx -1.000000 - \delta a \cdot 2.527266 - \delta q \cdot 2.917327 + \cdots, \\ &m_{xv} \approx \\ &\approx +3.750278 - \delta a \cdot 5.181347 + \delta q \cdot 2.091033 + \cdots, \\ &m_{vx} \approx \\ &\approx +0.000000 + \delta a \cdot 1.347775 + \delta q \cdot 1.555792 + \cdots, \\ &m_{vv} \approx \\ &\approx -1.000000 - \delta a \cdot 2.527267 - \delta q \cdot 2.917327 + \cdots. \end{aligned} \tag{26}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} &\beta_x \approx \\ &\approx 1.000000 - 0.715633\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}, \\ &\mu_x \approx 0, \\ &\lambda_x \approx \\ &\approx \frac{1.668104 - 2.304636\delta a + 0.930080\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}} \end{aligned} \tag{27}$$

(поскольку $(1/\pi)\arccos(-1+\delta) \approx 1 - \left(\sqrt{2}/\pi\right)\sqrt{\delta}$). В первом приближении вариация положения рабочей точки должна удовлетворять условию $-\delta a - 1.154341\delta q > 0$, чтобы оказаться внутри зоны устойчивости по x.

Как следует из [1, рис. 1, а], в окрестности вершины совместной зоны устойчивости для движения по координате x максимум величины (20) достигается при $\varphi_0 = 0$ (см. также [2, 20]). Тогда максимум величины (19) достигается в точке $\xi = 0$ и равен единице. Оценка (20) дает с точностью до квадратичных поправок

$$\overline{V}_x^2 \approx \overline{r}_0^2 \frac{(-\delta a - 1.154341\delta q)}{2.782571}. \tag{28}$$

Эта оценка в целом совпадает с оценкой глубины псевдопотенциальной ямы для координаты x из публикации [2], но только если используется значение $\omega_{xb} = \pi(1-\beta_x)$ вместо $\omega_{xb} = 2\cos\pi\beta_x/2$.

Вычисление матрицы монодромии M_y для движения по оси y в окрестности вершины зоны устойчивости (23) при $\varphi_0 = \pi$ дает аппроксимацию

$$\begin{aligned} &m_{yy} \approx \\ &\approx +1.000000 - \delta a \cdot 6.205798 + \delta q \cdot 3.972621 + \cdots, \\ &m_{yw} \approx \\ &\approx +6.821373 - \delta a \cdot 7.922811 - \delta q \cdot 2.838210 + \cdots, \\ &m_{wy} \approx \\ &\approx +0.000000 - \delta a \cdot 1.819516 + \delta q \cdot 1.164757 + \cdots, \\ &m_{ww} \approx \\ &\approx +1.000000 - \delta a \cdot 6.205798 + \delta q \cdot 3.972621 + \cdots. \end{aligned} \tag{29}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} &\beta_y \approx 1.121409\sqrt{\delta a - 0.640147\delta q}, \\ &\mu_y \approx 0, \\ &\lambda_y \approx \frac{1.936234 - 2.248876\delta a - 0.805621\delta q}{\sqrt{\delta a - 0.640147\delta q}} \end{aligned} \tag{30}$$

(поскольку $(1/\pi)\arccos(1-\delta) \approx \left(\sqrt{2}/\pi\right)\sqrt{\delta}$). В первом приближении вариация положения рабочей точки должна удовлетворять условию $\delta a - 0.640147\delta q > 0$ чтобы оказаться внутри зоны устойчивости по y.

Как следует из [1, рис. 1, б], в окрестности вершины совместной зоны устойчивости для движения по координате y максимум величины (20) достигается при $\varphi_0 = \pi$ (см. также [2, 20]), причем для этой фазы максимум величины (19) достигается в точке $\xi = 0$ и равен единице. В соответствии с оценкой (20) с точностью до квадратичных поправок

$$\bar{V}_y^2 \approx \bar{r}_0^2 \frac{(\delta a - 0.640147\delta q)}{3.749003}. \quad (31)$$

Эта оценка в целом совпадает с оценкой глубины псевдопотенциальной ямы для координаты y из публикации [2], но только если используется значение $\omega_{ys} = \pi\beta_y$ вместо $\omega_{ys} = 2\sin \pi\beta_y/2$.

Вычисление ширины псевдопотенциальной ямы будет не намного сложнее. Как следует из [1, рис. 1, в] (см. также [20]), в окрестности вершины совместной зоны устойчивости для движения по координате x максимум величины (21) достигается при $\varphi_0 = \pi/2$. Совместное численное решение уравнений (22), (23) при $\varphi_0 = \pi/2$ дает аппроксимацию для коэффициентов матрицы монодромии $\widehat{M}_x$:

$$\begin{aligned}
&\widehat{m}_{xx} \approx \\
&\approx 0.803639 - \delta a \cdot 3.760821 - \delta q \cdot 0.631918 + \cdots, \\
&\widehat{m}_{xv} \approx \\
&\approx +1.344081 - \delta a \cdot 3.714615 - \delta q \cdot 1.992345 + \cdots, \\
&\widehat{m}_{vx} \approx \\
&\approx -2.420326 + \delta a \cdot 0.382213 - \delta q \cdot 5.380316 + \cdots, \\
&\widehat{m}_{vv} \approx \\
&\approx -2.803639 - \delta a \cdot 1.293712 - \delta q \cdot 5.202736 + \cdots.
\end{aligned} \quad (32)$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned}
&\widehat{\beta}_x = \\
&= \beta_x \approx 1.000000 - 0.715633\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}, \\
&\widehat{\mu}_x \approx \frac{-0.401124 + 0.274339\delta a - 0.508269\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{\lambda}_x \approx \frac{1.490410 - 4.119022\delta a - 2.209251\delta q}{\sqrt{1 - 7.582859\delta a - 4.640018\delta q}}.
\end{aligned} \quad (33)$$

Вычисление коэффициентов Фурье для периодической матрицы $\widehat{\Lambda}_x(\xi)$ дает аппроксимацию:

$$\begin{aligned}
&\widehat{A}_{xx}^{(1)} \approx 0.485882 + \\
&\quad + \frac{-0.197740 + 0.128612\delta a - 0.250666\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{B}_{xx}^{(1)} \approx -0.181720 + \\
&\quad + \frac{-0.198896 + 0.326946\delta a - 0.0268753\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{A}_{xv}^{(1)} \approx -0.103534 + \\
&\quad + \frac{0.294714 - 0.360475\delta a + 0.0759960\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{B}_{xv}^{(1)} \approx 0.604030 + \\
&\quad + \frac{-0.296437 + 0.0905267\delta a - 0.394689\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{A}_{vx}^{(1)} \approx -0.399708 + \\
&\quad + \frac{-0.2230758 + 0.769068\delta a + 0.378240\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{B}_{vx}^{(1)} \approx -0.322444 + \\
&\quad + \frac{0.160021 - 0.0102023\delta a + 0.254152\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{A}_{vv}^{(1)} \approx 0.419287 + \\
&\quad + \frac{-0.343924 + 0.0565688\delta a - 0.574189\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}, \\
&\widehat{B}_{vv}^{(1)} \approx 0.0216691 + \\
&\quad + \frac{0.238497 - 0.180302\delta a + 0.105056\delta q}{\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}}.
\end{aligned} \quad (34)$$

Для начальной фазы $\varphi_0 = \pi/2$ и координаты x максимум величины (19) достигается в точке $\xi = 3\pi/4$ и равен

$$\begin{aligned}
&\Lambda_{x\max}^2 \approx \\
&\approx 2.348011 - 0.398533\delta a + 0.019545\delta q + \\
&\quad + 0.138341\sqrt{-\delta a - 1.154341\delta q}.
\end{aligned} \quad (35)$$

Поэтому в соответствии с оценкой (21) с точностью до квадратичных поправок

$$\bar{R}_x^2 \approx \bar{r}_0^2 \frac{(-\delta a - 1.154341\delta q)}{0.377797}. \quad (36)$$

Этот результат очень сильно не совпадает с соответствующими результатами из публикации [2], где предполагается, что $\bar{R}_x^2 \approx \bar{r}_0^2$.

Как следует из [1, рис. 1, г] (см. также [20], в окрестности вершины совместной зоны устойчивости для движения по координате y максимум величины (21) достигается при $\varphi_0 = \pi/2$. Численное решение уравнений (22), (23) при $\varphi_0 = \pi/2$ дает аппроксимацию для коэффициентов матрицы монодромии $\widehat{M}_y$:

$$\begin{aligned}&\widehat{m}_{yy} \approx\\ &\approx -1.467732 - \delta a \cdot 4.625349 + \delta q \cdot 7.155349 + \cdots,\\ &\widehat{m}_{yw} \approx\\ &\approx +3.631194 - \delta a \cdot 6.068713 + \delta q \cdot 2.495370 + \cdots,\\ &\widehat{m}_{wy} \approx\\ &\approx -1.677052 - \delta a \cdot 4.072736 + \delta q \cdot 7.666445 + \cdots,\\ &\widehat{m}_{ww} \approx\\ &\approx 3.467732 - \delta a \cdot 7.786247 + \delta q \cdot 0.789892 + \cdots.\end{aligned} \tag{37}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned}&\widehat{\beta}_y = \beta_y \approx 1.121409\sqrt{\delta a - 0.640147\delta q},\\ &\widehat{\mu}_y \approx\\ &\approx \frac{0.350231 - 0.224304\delta a - 0.451706\delta q}{\sqrt{\delta a - 0.640147\delta q}},\\ &\widehat{\lambda}_y \approx\\ &\approx \frac{2.942941 - 4.918454\delta a + 2.022400\delta q}{\sqrt{1 + 6.871627\delta a - 7.798284\delta q}}.\end{aligned} \tag{38}$$

Вычисление коэффициентов Фурье для периодической матрицы $\widehat{\Lambda}_x(\xi)$ дает аппроксимацию:

$$\begin{aligned}&\widehat{A}_{yy}^{(1)} \approx -0.123565 + 0.095522\delta a + 0.286562\delta q,\\ &\widehat{B}_{yy}^{(1)} \approx +0.374432 + 0.365073\delta a - 0.823364\delta q,\\ &\widehat{A}_{yw}^{(1)} \approx +0.363644 - 0.289647\delta a - 0.358930\delta q,\\ &\widehat{B}_{yw}^{(1)} \approx -0.121185 - 0.0319335\delta a + 0.355190\delta q,\\ &\widehat{A}_{wy}^{(1)} \approx +0.748863 + 0.285615\delta a - 1.362163\delta q,\\ &\widehat{B}_{wy}^{(1)} \approx +0.116244 - 0.0978184\delta a - 0.244715\delta q,\\ &\widehat{A}_{ww}^{(1)} \approx -0.242371 + 0.0800064\delta a + 0.618280\delta q,\\ &\widehat{B}_{ww}^{(1)} \approx -0.342098 + 0.295901\delta a + 0.264479\delta q.\end{aligned} \tag{39}$$

Для начальной фазы $\varphi_0 = \pi/2$ и координаты y максимум величины (19) достигается в точке $\xi = \pi/4$ и равен

$$\begin{aligned}&\Lambda_{y\max}^2 \approx\\ &\approx 1.777564 + 0.720698\delta a - 1.585773\delta q.\end{aligned} \tag{40}$$

Поэтому в соответствии с оценкой (21) с точностью до квадратичных поправок

$$\overline{R}_y^2 \approx \overline{r}_0^2 \frac{(-\delta a - 1.154341\delta q)}{0.218039}. \tag{41}$$

Этот результат очень сильно не совпадает с соответствующими результатами из публикации [2], где предполагается, что $\overline{R}_y^2 \approx \overline{r}_0^2$.

ВЫВОДЫ

Рассмотренные в [1] аргументы вынуждают считать концепцию эффективного потенциала, предложенную в работе [2], не вполне доработанной. Альтернативный вариант квадратичного эффективного потенциала для движения ионов в радиочастотных квадрупольных электрических полях, рассмотренный в этой статье и в работах [3, 4], представляется более работоспособным. Поскольку результаты работы [2] активно используются ее авторами и в последующих публикациях (например, [21, 22]), то скорее всего и эти результаты нуждаются в определенной корректировке. В частности, представляется не совсем надежным использование методов теории возмущений при приближении к границам зон устойчивости, поскольку при $\beta \approx 0$ и $\beta \approx 1$ основные члены для уравнений (I.12), (I.13) оказываются фактически того же порядка малости, что и "малые" поправки, переносимые в правую часть уравнений. (Следует также отметить, что метод возмущений нельзя применять в точке резонанса, в том числе и параметрического резонанса, если предварительно не выделить и не перенести в основное уравнение члены возмущения, связанные с резонансными частотами [23, 24].) При этом необходимо подчеркнуть, что понятие глубины псевдопотенциальной ямы, введенное авторами [2] в самом общем случае без применения обычно используемого допущения о малости параметра q и без привязки к конкретной модели псевдопотенциала, является важным вкладом в общую теорию движения ионов в радиочастотных электрических полях и заслуживает всяческого внимания.

Благодарности

Данная работа выполнена в рамках гос. задания № 007-00229-18-00 для ИАП РАН. Авторы благодарны Николаю Витальевичу Коненкову, Евгению Васильевичу Мамонтову, Анатолию Петровичу Щербакову, Михаилу Игоревичу Явору, Антону Леонидовичу Булянице и Владимиру Ефимовичу Курочкину за полезные консультации по данной тематике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бердников А.С., Кузьмин А.Г., Масюкевич С.В.* Об использовании стробоскопических выборок при анализе движения ионов в квадрупольных радиочастотных полях. I. Критический анализ концепции // Научное приборостроение. 2018. Т. 28, № 3. С. 90–100. URL: http://213.170.69.26/mag/2018/abst3.php#abst12.
2. *Судаков М.Ю., Апацкая М.В.* Концепция эффективного потенциала для описания движения ионов в квадрупольном фильтре масс // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. Т. 142, № 2. С. 222–229. URL: http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/r_142_222.pdf.
3. *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.
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.
5. *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.
6. *Verentchikov A., Berdnikov A., Yavor M.* Stable ion beam transport through periodic electrostatic structures: linear and non-linear effects // Physics Procedia. 2008. Vol. 1. P. 87–97.
7. *Гантмахер Ф.Р.* Теория матриц. 2-е изд., доп. Москва: Наука, 1966. 576 с.
8. *Демидович Б.П.* Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 472 с.
9. *Еругин Н.П.* Метод Лаппо-Данилевского в теории линейных дифференциальных уравнений. Ленинград: Изд-во Ленинградского университета, 1956. 109 с.
10. *Еругин Н.П.* Линейные системы обыкновенных дифференциальных уравнений с периодическими и квазипериодическими коэффициентами. Минск: Изд-во Академии наук БССР, 1963. 273 с.
11. *Якубович В.А., Старжинский В.М.* Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. Москва: Наука, 1972. 720 с.
12. 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. New York: John Wiley and Sons, 1989. 471 p.
15. *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. 354 p.
16. *Werth G., Gheorghe V.N., Major F.G.* Charged Particle Traps II. Applications. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 275 p.
17. *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.
18. *Монастырский М.А.* Методы возмущений в задачах анализа и синтеза эмиссионных электронно-оптических систем. Автореф. дис. … д. физ.-мат. н. Москва: НИИ электронных приборов, 1992.
19. *Greenfield D., Monastyrskiy M.* Selected Problems of Computational Charged Particle Optics. Ser. Advances in Imaging and Electron Physics, vol. 155 / Ed. by P. Hawkes. Amsterdam: Academic Press, 2009.
20. *Бердников А.С., Галль Л.Н., Галль Н.Р., Соловьев К.В.* Обобщение понятия псевдопотенциала для радиочастотных квадрупольных полей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11, № 3. С. 52–64. DOI: 10.18721/JPM.11305.
21. *Судаков М.Ю., Мамонтов Е.В.* Исследование квадрупольного фильтра масс с квадрупольным возбуждением методом уравнения огибающей // Журнал технической физики. 2016. Т. 86, № 11. С. 112–120.
22. *Sudakov M.* Nonlinear equations of the ion vibration envelope in quadrupole mass filters with cylindrical rods // International Journal of Mass Spectrometry. 2017. Vol. 422. P. 62–73.
23. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. Сер. Теоретическая физика. Т. I. Москва: Физматгиз, 1958. 202 с.
24. *Якубович В.А., Старжинский В.М.* Параметрический резонанс в линейных системах. Москва: Наука, 1987. 328 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. II. CORRECTION OF THE CONCEPT

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

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

The publication continues the study of a new concept of effective potential, proposed by M.Yu. Sudakov and M. Apatskaya. Methods for restoring the mathematical correctness of the authors' reasoning are considered, and more precise formulas are given.

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

REFERENCES

1. Berdnikov A.S., Kuzmin A.G., Masyukevich S.V. [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]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2018, vol. 28, no. 3, pp. 90–100. Doi: 10.18358/np-28-3-i90100. (In Russ.).
2. 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. URL: http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/r_142_222.pdf. (In Russ.).
3. 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, pp. 345–354. Doi: 10.1016/j.ijms.2014.08.009.
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.
5. 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. Doi: 10.1016/j.phpro.2008.07.082.
6. Verentchikov A., Berdnikov A., Yavor M. Stable ion beam transport through periodic electrostatic structures: linear and non-linear effects. *Physics Procedia*, 2008, vol. 1, pp. 87–97.
7. Gantmaher F.R. *Teoriya matric. Izd. 2-e, dop*. [Theory of matrixes. The edition 2 added]. Moscow, Nauka Publ., 1966. 576 p. (In Russ.).
8. Demidovich B.P. *Lekcii po matematicheskoj teorii ustojchivosti* [Lectures on the mathematical theory of stability]. Moscow, Nauka Publ., 1967. 472 p. (In Russ.).
9. 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.).
10. 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.).
11. 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.).
12. Dawson P.H., ed. *Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications*. 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, pp. 153–208.
14. March R.E., Hughes R.J. *Quadrupole Storage Mass Spectrometry*. New York, John Wiley and Sons, 1989. 471 p.
15. 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. 354 p.
16. Werth G., Gheorghe V.N., Major F.G. *Charged Particle Traps II. Applications*. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2009. 275 p. Doi: 10.1007/978-3-540-92261-2.
17. 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.
18. Monastyrskij M.A. *Metody vozmushchenij v zadachah analiza i sinteza ehmissionnyh ehlektronno-opticheskih sistem*. Autoref. diss. d-ra fiz.-mat. nauk. [Methods of indignations in tasks of the analysis and synthesis of issue electron-optical systems. Autoref. diss. physical and math. Drs. sciences]. Moscow, Scientific research institute of

electronic devices, 1992. (In Russ.).
19. Greenfield D., Monastyrskiy M., Hawkes P. ed. *Selected Problems of Computational Charged Particle Optics. Ser. Advances in Imaging and Electron Physics*, vol. 155. Amsterdam, Academic Press, 2009.
20. Berdnikov A.S., Gall L.N., Gall N.R., Solov'ev K.V. [Generalization of a concept of a pseudopotential for radio quadrupole frequency fields]. *Nauchno-technicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki* [St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics], 2018, vol. 11, no. 3, pp. 52–64. DOI: 10.18721/JPM.11305. (In Russ.).
21. Sudakov M.Yu., Mamontov E.V. [Research of the kvadrupolny filter of masses with kvadrupolny excitement by method of the equation of bending around]. *Zhurnal tekhnicheskoj fiziki* [Journal of Applied Physics], 2016, vol. 86, no. 11, pp. 112–120. (In Russ.). Doi: 10.21883/jtf.2016.11.43824.1783.
22. Sudakov M. Nonlinear equations of the ion vibration envelope in quadrupole mass filters with cylindrical rods. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2017, vol. 422, pp. 62–73. Doi: 10.1016/j.ijms.2017.08.017.
23. Landau L.D., Lifshic E.M. *Teoreticheskaya fizika. T. I. Mekhanika* [Theoretical physics. Vol. I. Mechanics]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1958. 202 p. (In Russ.).
24. Yakubovich V.A., Starzhinskij V.M. *Parametricheskij rezonans v linejnyh sistemah* [Parametrical resonance in linear systems]. Moscow, Nauka Publ., 1987. 328 p. (In Russ.).

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

Article received in edition 25.06.2018