
**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ**

УДК 537.21, 517.958

© А. С. Бердников, С. В. Масюкевич, 2024

**АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТРАНСПОРТИРУЮЩИХ КАНАЛОВ
С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ**

В статье рассматриваются аналитические выражения для потенциалов электрических полей, которые соответствуют транспортирующим каналам с периодической геометрической структурой электродов, и потенциалов, приложенных к электродам. Электроды транспортирующего канала представляют собой последовательность круговых диафрагм или имеют похожую структуру. Полученные выражения могут быть полезны для быстрого качественного моделирования радиочастотных устройств, предназначенных для транспортировки и фокусировки ионов.

Кл. сл.: уравнение Лапласа, периодические электроды, аналитические электрические поля, ионные транспортирующие устройства, ионные ловушки, ионные воронки

ВВЕДЕНИЕ

Радиочастотные транспортирующие каналы [1, 2], радиочастотные ловушки типа SRIG [3–8], фокусирующие ионные воронки [9–15] и тому подобные устройства являются эффективным инструментом для повышения чувствительности и аналитических возможностей масс-спектрометрических приборов. Прямое моделирование фокусирующего воздействия трехмерного радиочастотного поля требует интенсивных компьютерных расчетов, ресурсоемких как по отношению к вычислительным мощностям вычислительных устройств, так и по отношению к времени, требуемому для полноценного моделирования выбранной геометрии электродов устройства. Это не позволяет полноценно перебирать в процессе оптимизации широкий диапазон возможных конструктивных решений и тем самым ограничивает возможность нахождения оптимального конструкторского решения. Использование аналитических моделей электрического поля позволяет эффективным образом отбирать перспективные направления оптимизации для итогового конструктивного решения. Тем самым имеется возможность существенно уменьшить трудозатраты на первичный отбор перспективных вариантов, а в конечном счете добиться существенно лучших характеристик для итогового варианта устройства.

В данной работе рассматриваются аналитические модели для электрических полей, характеризующих транспортирующие каналы с периодическими электродами и периодическими потенциа-

лами, приложенными к электродам. Полученные аналитические решения для трехмерного уравнения Лапласа представляют определенный интерес и сами по себе, т.к. могут применяться для решения соответствующих задач математической физики.

КРУГОВЫЕ РАДИОЧАСТОТНЫЕ ЛОВУШКИ

Радиочастотные ловушки и транспортирующие каналы типа SRIG (Stacked Ring Ion Guides) представляют собой последовательность круговых диафрагм с приложенными к ним радиочастотными напряжениями (в частности, представляющими собой последовательности импульсов) со сдвигом фазы π между соседними диафрагмами (рис. 1) [1, 2, 3–8].

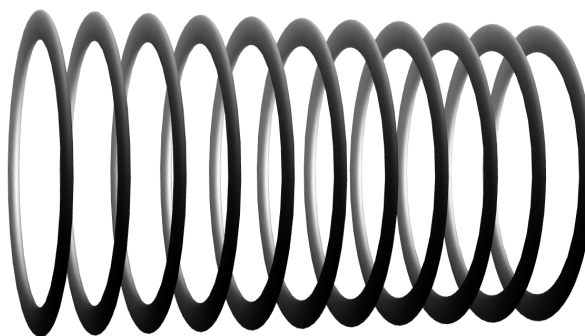


Рис. 1. Структура периодических кольцевых электродов для цилиндрической радиочастотной ловушки

В предположении, что выполнено условие квазистатичности электрического поля (характерное время изменения напряжений на электродах много больше времени распространения со скоростью света электромагнитного возмущения на расстояние порядка геометрического размера системы электродов), можно считать, что высокочастотный потенциал электрического поля представляет собой функцию времени, задающую изменение напряжений на электродах, на электрический потенциал электростатического поля с потенциалами на электродах, знаки которых чередуются по правилу:

$$+U_R, -U_R, +U_R, -U_R, +U_R, -U_R, \dots \quad (1)$$

Известно [1, 12], что вдали от краев электродов в окрестности оси транспортирующего канала такой потенциал описывается с хорошей точностью выражением

$$U(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \cos(\lambda z + \varphi) I_0(\lambda r), \quad (2)$$

где z — аксиальная координата, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ — радиальная координата, R — радиус круговых диафрагм, U_R — статические потенциалы, приложенные к диафрагмам, φ — параметр, определяющий сдвиг последовательности диафрагм относительно начала координат, $\lambda = \pi/L$ — параметр геометрического масштаба, L — расстояние между соседними диафрагмами, I_0 — модифицированная функция Бесселя нулевого порядка [16–18]. По сути, потенциал вида (2) представляет собой сумму с постоянными коэффициентами двух линейно независимых потенциалов, которые в дальнейшем будет удобно рассматривать по отдельности:

$$U_C(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \cos(\lambda z) I_0(\lambda r), \quad (3)$$

$$U_S(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \sin(\lambda z) I_0(\lambda r). \quad (4)$$

На оси симметрии $r = 0$ потенциал (3) ведет себя как $U_C \sim U_0 \cos(\lambda z)$, а потенциал (4) как $U_S \sim U_0 \sin(\lambda z)$, где $U_0 = U_R / I_0(\lambda R)$ — это амплитуда пространственных колебаний соответствующего электрического потенциала на оси системы.

Потенциалы (3) и (4) могут использоваться также для описания случая, когда напряжения на соседних диафрагмах меняются периодическим

образом согласно правилу:

$$+U_R, 0, -U_R, 0, +U_R, 0, -U_R, 0, \dots \quad (5)$$

Для этого, однако, необходимо использовать геометрический масштаб $\lambda = \pi/(2L)$, где L — расстояние между соседними диафрагмами. Практическим примером использования потенциалов (3), (4) и схемы подачи электрических напряжений (5) могут служить электрические поля, используемые в устройствах [7, 8, 20–31].

КРУГОВЫЕ РАДИОЧАСТОТНЫЕ ВОРОНКИ

Радиочастотные ионные воронки представляют собой последовательность круговых диафрагм с последовательно уменьшающимися радиусами, которые соответствуют закону изменения радиусов сечений кругового конуса плоскостями, расположенными в плоскости диафрагмы и перпендикулярными оси конуса (рис. 2). Для такой геометрической конфигурации электродов следует ожидать поведения осесимметричного электрического потенциала $V(z, r)$ на оси системы как сумму потенциалов $V_C(z, r) \sim U_0 z \cos(\lambda z)$ и $V_S \sim U_0 z \sin(\lambda z)$, где U_0 это масштабирующий множитель для линейно растущей амплитуды пространственных колебаний соответствующего электрического потенциала на оси системы. Соответствующие решения уравнения Лапласа имеют вид:

$$V_C(z, r) = U_0 [z \cos(\lambda z) I_0(\lambda r) + r \sin(\lambda z) I_1(\lambda r)], \quad (6)$$

$$V_S(z, r) = U_0 [z \sin(\lambda z) I_0(\lambda r) - r \cos(\lambda z) I_1(\lambda r)], \quad (7)$$

где $\lambda = \pi/(2L)$ — геометрический масштаб,

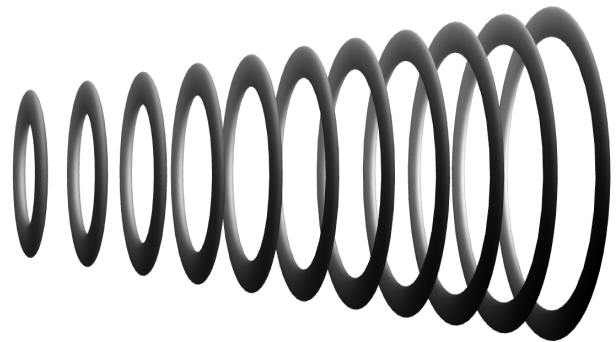


Рис. 2. Структура периодических кольцевых электродов для конической радиочастотной воронки

L — расстояние между соседними диафрагмами, I_1 — модифицированная функция Бесселя первого порядка [16–18], для которой при $r \sim 0$ справедлива оценка $I_1(r) \sim r/2$. В силу этого на оси системы $V_C \sim U_0 z \cos(\lambda z)$, $V_S \sim U_0 z \sin(\lambda z)$.

Решения (6) и (7) получаются в результате дифференцирования решений (3) и (4) по параметру λ . Как и в случае решений (3) и (4), их можно использовать для эффективного описания поля воронки с потенциалами, чередующимися по закону (5), если использовать геометрический масштаб $\lambda = \pi/(2L)$, где L — расстояние между соседними диафрагмами.

КВАДРУПОЛЬНО-СЕГМЕНТИРОВАННЫЕ КРУГОВЫЕ РАДИОЧАСТОТНЫЕ ЛОВУШКИ

Каждую круговую диафрагму можно разрезать на четное число сегментов и затем подать на получившиеся электроды электрические напряжения таким образом, чтобы на соседних электродах оказались электрические напряжения противоположной полярности. В частности, при использовании разбиений, состоящих из четырех сегментов, получается базовое статическое электрическое поле для квадрупольно-сегментированной радиочастотной ловушки (рис. 3). Подобное устройство, в частности, рассматривалось в [32] — правда, с помощью численного моделирования, а не с помощью аналитических моделей электрического потенциала.

Для конфигурации электродов, показанной на рис. 3, аналитическими решениями для соответствующих статических электрических потенциалов являются функции

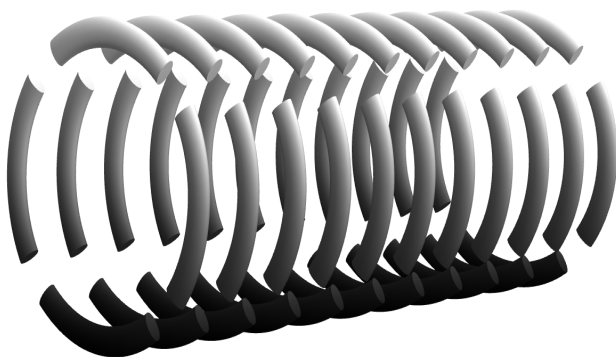


Рис. 3. Структура периодических квадрупольно-сегментированных электродов для цилиндрической радиочастотной ловушки

$$U_C^{(q)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} (x^2 - y^2) \cos(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2, \quad (8)$$

$$U_S^{(q)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} (x^2 - y^2) \sin(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2, \quad (9)$$

где по-прежнему $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, а I_2 это модифицированная функция Бесселя второго порядка [16–18], для которой при $r \sim 0$ справедлива оценка $I_2(r) \sim r^2/8$. Вблизи оси симметрии $r = 0$ потенциал (8) ведет себя как

$$U_C^{(q)} \sim U_0 (x^2 - y^2) \cos(\lambda z),$$

а потенциал (9) как

$$U_S^{(q)} \sim U_0 (x^2 - y^2) \sin(\lambda z),$$

где $U_0 = \lambda^2 U_R / 8 I_2(\lambda R)$ — это амплитуда пространственных колебаний квадрупольной компоненты электрического потенциала вблизи оси системы.

Для "повернутой" конфигурации электродов, которая понадобится в нашем рассмотрении далее, аналитическими решениями для соответствующих статических электрических потенциалов являются функции

$$U_C^{(r)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} xy \cos(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2, \quad (10)$$

$$U_S^{(r)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} xy \sin(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2. \quad (11)$$

Соответственно, вблизи оси симметрии $r = 0$ потенциал (10) ведет себя как $\sim U_0 xy \cos(\lambda z)$, а потенциал (11) как $\sim U_0 xy \sin(\lambda z)$.

КВАДРУПОЛЬНО-СЕГМЕНТИРОВАННЫЕ КРУГОВЫЕ РАДИОЧАСТОТНЫЕ ВОРОНКИ

Аналогичным образом мультипольному сегментированию могут быть подвергнуты круговые электроды радиочастотной ионной воронки. Как упоминалось выше, это было сделано, например, в [32]. Для квадрупольного сегментирования конфигурация электродов показана на рис. 4.

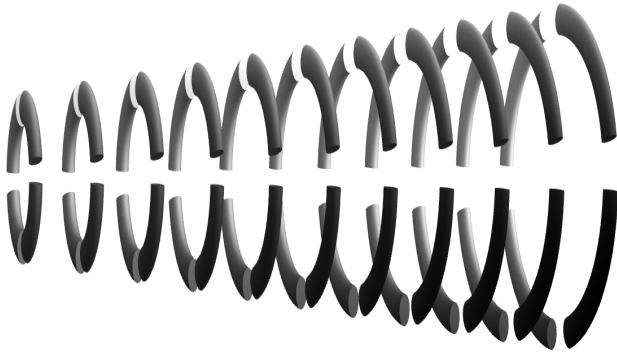


Рис. 4. Структура периодических квадрупольно-сегментированных электродов для конической радиочастотной воронки

Аналитическими решениями для соответствующих статических электрических потенциалов являются функции

$$V_C^{(q)}(x, y, z) = U_0(x^2 - y^2) \left[z \cos(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} + 4r^2 \sin(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) + 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right], \quad (12)$$

$$V_S^{(q)}(x, y, z) = U_0(x^2 - y^2) \left[z \sin(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} - 4r^2 \cos(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) - 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right], \quad (13)$$

где новый символ I_3 — это модифицированная функция Бесселя третьего порядка [16–18], для которой при $r \sim 0$ справедлива оценка $I_3(r) \sim r^3/48$. Вблизи оси симметрии $r = 0$ потенциал (12) ведет себя как

$$V_C^{(q)} \sim U_0(x^2 - y^2) z \cos(\lambda z),$$

а потенциал (13) как

$$V_S^{(q)} \sim U_0(x^2 - y^2) z \sin(\lambda z).$$

Эти решения получаются при дифференцировании потенциалов (8) и (9) по параметру λ , при этом к полученному результату необходимо

добавить линейную комбинацию потенциалов (8) и (9), чтобы обеспечить необходимое асимптотическое поведение решения на оси системы $r \sim 0$.

Для "повернутой" конфигурации электродов, которая понадобится в следующем разделе, аналитическими решениями для соответствующих статических электрических потенциалов являются функции

$$V_C^{(r)}(x, y, z) = U_0 xy \left[z \cos(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} + 4r^2 \sin(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) + 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right], \quad (14)$$

$$V_S^{(r)}(x, y, z) = U_0 xy \left[z \sin(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} - 4r^2 \cos(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) - 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right]. \quad (15)$$

Соответственно, вблизи оси симметрии $r = 0$ потенциал (14) ведет себя как

$$V_C^{(r)} \sim U_0 xyz \cos(\lambda z),$$

а потенциал (15) как

$$V_S^{(r)} \sim U_0 xyz \sin(\lambda z).$$

ЛОВУШКИ И ВОРОНКИ С ОКРУПЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ КВАДРУПОЛЬНО-СЕГМЕНТИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

При мультипольном сегментировании соседние электроды можно развернуть друг относительно друга на половину мультипольного угла, как это показано на рис. 5 для цилиндрической ловушки и на рис. 6 для конической воронки. Это придает электродной конфигурации дополнительную октагональную симметрию и может использоваться, чтобы более гибко управлять параметрами устройства.

Для цилиндрической ловушки с развернутыми квадрупольно-сегментированными электродами (рис. 5) в зависимости от того, разворачиваются четные диафрагмы или же нечетные диафрагмы, аналитические потенциалы вычисляются следующим образом:

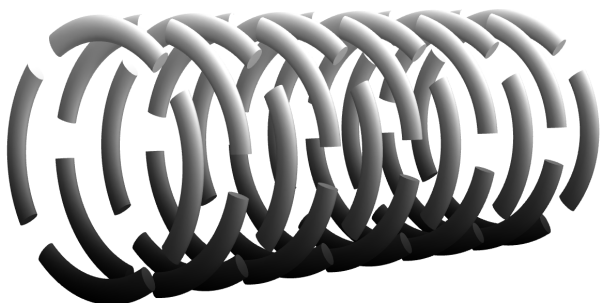


Рис. 5. Структура периодических квадрупольно-сегментированных электродов для цилиндрической радиочастотной ловушки с октупольной симметрией размещения электродов

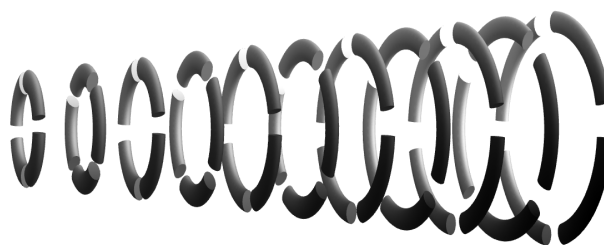


Рис. 6. Структура периодических квадрупольно-сегментированных электродов для конической радиочастотной воронки с октупольной симметрией размещения электродов

$$W_C(x, y, z) = U_C^{(q)}(x, y, z) + U_S^{(r)}(x, y, z), \quad (16)$$

$$W_S(x, y, z) = U_C^{(r)}(x, y, z) + U_S^{(q)}(x, y, z), \quad (17)$$

где $U_C^{(q)}(x, y, z)$, $U_S^{(q)}(x, y, z)$, $U_C^{(r)}(x, y, z)$ и $U_S^{(r)}(x, y, z)$ — это потенциалы, заданные выражениями (8)–(11), а геометрический масштаб должен вычисляться как $\lambda = \pi/(2L)$, где L — расстояние между соседними диафрагмами.

Аналогичным образом для конической воронки с развернутыми квадрупольно-сегментированными электродами (рис. 6) в зависимости от того, разворачиваются четные диафрагмы или же нечетные диафрагмы, аналитические потенциалы вычисляются как

$$H_C(x, y, z) = V_C^{(q)}(x, y, z) + V_S^{(r)}(x, y, z), \quad (18)$$

$$H_S(x, y, z) = V_C^{(r)}(x, y, z) + V_S^{(q)}(x, y, z), \quad (19)$$

где $V_C^{(q)}(x, y, z)$, $V_S^{(q)}(x, y, z)$, $V_C^{(r)}(x, y, z)$ и $V_S^{(r)}(x, y, z)$ — это потенциалы, заданные выражениями (12)–(15), а геометрический масштаб должен вычисляться как $\lambda = \pi/(2L)$, где L — расстояние между соседними диафрагмами.

Примечание.

Формулы (16)–(19) получаются при комбинировании краевых условий вида (5) для электродов в стандартном положении и сдвинутых на один шаг краевых условий вида (5) для электродов в развернутом положении. При этом для поля, соответствующего стандартному положению электродов, плоскости с электродами и приложенными к ним ненулевыми электрическими напря-

жениями совмещаются с плоскостями с тождественно нулевым потенциалом поля, сдвинутого на один шаг вдоль оси OZ и соответствующего развернутому положению электродов, и наоборот. В результате при суммировании двух электрических потенциалов краевые условия в соответствующих сечениях суммируются с нулями и не меняются, поэтому для суммарного поля форма электродов, положение электродов и потенциалы на электродах в рассматриваемых плоскостях остаются такими же, какими они были для каждой из суммируемых компонент по отдельности. Этот же принцип можно использовать при суммировании полей с разными порядками мультипольного сегментирования.

ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ТЕМЫ

В общем случае для электродной конфигурации, которая соответствует цилиндрической ловушке с мультипольно-сегментированными электродами, базовые электрические потенциалы вычисляются согласно формулам:

$$U_C^{(q,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (20)$$

$$U_S^{(q,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (21)$$

$$U_C^{(r,n)}(x, y, z) =$$

$$= \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (22)$$

$$U_S^{(r,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (23)$$

где n — это порядок мультипольного сегментирования круговых диафрагм цилиндрической ловушки, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, I_n — это модифицированная функция Бесселя n -го порядка [16–18]. При $r \sim 0$ для этой функции справедлива оценка $I_n(r) \sim 2^{-n} r^n / n!$, а при $r \rightarrow \infty$ она экспоненциально быстро растет: $I_n(r) \sim \exp(r) / \sqrt{2\pi r}$. Тот факт, что функции (20)–(23) действительно удовлетворяют уравнению Лапласа, легко проверяется прямой подстановкой с помощью программы [33].

В формулах (20)–(23) выражения

$$Q_n(x, y) = r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right), \quad (24)$$

$$R_n(x, y) = r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right), \quad (25)$$

являются гармоническими однородными многочленами, удовлетворяющими двумерному уравнению Лапласа:

$$1, x, y, x^2 - y^2, 2xy, x^3 - 3xy^2, 3x^2y - y^3, \dots$$

Полиномиальная природа функций (24), (25) следует из рекуррентных соотношений:

$$Q_0(x, y) = 1, R_0(x, y) = 0,$$

$$Q_{n+1}(x, y) = xQ_n(x, y) - yR_n(x, y),$$

$$R_{n+1}(x, y) = yQ_n(x, y) + xR_n(x, y).$$

Именно эти множители обеспечивают требуемую мультипольную симметрию вокруг оси симметрии для рассматриваемых потенциалов.

Потенциалы (20)–(23) ведут себя при $r \sim 0$ (т.е. вблизи от оси симметрии) как

$$U_C^{(q,n)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z), \quad (26)$$

$$U_S^{(q,n)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z), \quad (27)$$

$$U_C^{(r,n)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z), \quad (28)$$

$$U_S^{(r,n)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z), \quad (29)$$

где $U_0 = U_R (2^{-n} \lambda^n) / (n! I_n(\lambda R))$ — амплитуда пространственных колебаний мультипольной компоненты электрического потенциала вблизи оси системы. За счет k -кратного дифференцирования выражений (20)–(23) по параметру λ (возможно, при этом из результата дифференцирования потребуется вычесть линейную комбинацию потенциалов (20)–(23) и их производных по параметру λ меньшего порядка, чтобы обеспечить необходимое асимптотическое поведение на оси системы) можно сконструировать базовые аналитические потенциалы $U_C^{(q,n,k)}(x, y, z)$, $U_S^{(q,n,k)}(x, y, z)$, $U_C^{(r,n,k)}(x, y, z)$ и $U_S^{(r,n,k)}(x, y, z)$, которые будут вести себя как

$$U_C^{(q,n,k)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \cos(\lambda z), \quad (30)$$

$$U_S^{(q,n,k)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \sin(\lambda z), \quad (31)$$

$$U_C^{(r,n,k)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \cos(\lambda z), \quad (32)$$

$$U_S^{(r,n,k)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \sin(\lambda z). \quad (33)$$

Такие потенциалы можно использовать для описания электрических полей в неконических и/или некруговых радиочастотных воронках и ловушках.

Благодарности

Работа выполнена в Институте аналитического приборостроения Российской академии наук (Санкт-Петербург) в рамках темы FFZM-2022-0009 (номер гос. регистрации 122040600002-3) государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-01157-23-00 от 29.12.2022.

При проведении вычислений использовалась программа Wolfram Mathematica версии 11 (Home Edition) [33]. Авторы выражают свою искреннюю благодарность Михаилу Игоревичу Явору за интенсивное участие в обсуждении рассматриваемой проблемы и полезные ссылки на литературу, использованные в данной статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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 / Ng Ch.Y., Baer M. (Eds.). Experiment, advances in chemical physics series, vol. LXXXII, John Wiley & Sons Inc., New York, 1992. P. 1–176.
2. Yavor M.I. Optics of charged particle analyzers // Ser. Advances of Imaging and Electron Physics. Elsevier, 2009. Vol. 157. P. 142–168.
3. Bahr R. Diplom thesis. University of Freiburg. 1969.
4. Gerlich D. Diplom thesis. University of Freiburg. 1971.
5. Telay E., Gerlich D. Integral cross sections for ion–molecule reactions. Part I. The Guided beam technique // Chem. Phys. 1974. Vol. 4, no. 3. P. 417–427. DOI: 10.1016/0301-0104(74)85008-1
6. Gerlich D., Kaefer G. Ion trap studies of association processes in collisions of CH_3^+ and CD_3^+ with $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, D_2 and He at 80 K // The Astrophysical Journal. 1989. Vol. 347, iss. 2. P. 849–854. DOI: 10.1086/168174
7. Бердников А.С., Галль Н.Р. Радиочастотные транспортирующие ловушки с периодическими электродами без паразитных областей захвата // Масс-спектрометрия. 2013. Т. 10, № 4. С. 224–229. URL: <http://mass-spektrometria.ru/pre-t10n4-radiochast/>
8. Berdnikov A.S., Gall N.R. Radio frequency ion guiding traps with periodic electrodes without spurious trapping regions // J. Anal. Chem. 2014. Vol. 69, no. 13. P. 1285–1290. DOI: 10.1134/S1061934814130024
9. Shaffer S.A., Tang K., Anderson G., Prior D.C., Udseth H.R., Smith R.D. A novel ion funnel for focusing ions at elevated pressure using electrospray ionization mass spectrometry // Rapid Commun. Mass Spectrom. 1997. Vol. 11, no. 16. P. 1813–1817. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0231(19971030)11:16<1813::AID-RCM87>3.0.CO;2-D
10. Shaffer S.A., Prior D.C., Anderson G., Udseth H.R., Smith R.D. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry // Anal. Chem. 1998. Vol. 70, iss. 19. P. 4111–4119. DOI: 10.1021/ac9802170
11. Shaffer S.A., Tolmachev A.V., Prior D.C., Anderson G.A., Udseth H.R., Smith R.D. Characterization of an improved electrodynamic ion funnel interface for electrospray ionization mass spectrometry // Anal. Chem. 1999. Vol. 71, no. 15. P. 2957–2964. DOI: 10.1021/ac990346w
12. Tolmachev A.V., Kim T., Udseth H.R., Smith R.D., Bailey T.H., Futrell J.H. Simulation-based optimization of the electrodynamic ion funnel for high sensitivity electrospray ionization mass spectrometry // International Journal of Mass Spectrometry. 2000. Vol. 203, no. 1–3. P. 31–47. DOI: 10.1016/S1387-3806(00)00265-7
13. Kim T., Tolmachev A.V., Harkewicz R., Prior D.C., Anderson G., Udseth H.R., Smith R.D. Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel // Anal. Chem. 2000. Vol. 72, iss. 10. P. 2247–2255. DOI: 10.1021/ac991412x
14. Lynn E.C., Chung M.-C., Han C.-C. Characterizing the transmission properties of an ion funnel // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2000. Vol. 14, no. 22. P. 2129–2134. DOI: 10.1002/1097-0231(20001130)14:22<2129::AID-RCM144>3.0.CO;2-M
15. Kelly R.T., Tolmachev A.V., Page J.S., Tang K., Smith R.D. The Ion Funnel: Theory, Implementations and Applications // Mass Spectrometry Reviews. 2010. Vol. 29, iss. 2. P. 294–312. DOI: 10.1002/mas.20232
16. Ватсон Дж.Н. Теория бесселевых функций. М.: Изд-во иностранной литературы, 1949. 799 с.
17. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 2: Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены. Серия "Справочная математическая библиотека". Изд. 2-е. М.: Наука, 1974. 296 с.
18. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
19. Андреева А.Д., Бердников А.С. Устройства для манипулирования заряженными частицами на основе принципа архимедова винта // Сборник тезисов докладов IV Всероссийской конференции и V съезда Всероссийского масс-спектрометрического общества "Массспектрометрия и ее прикладные проблемы" (Москва, 05–09 сентября 2011 г.). 2011. С. 137.
20. Андреева А.Д., Бердников А.С. Масс-спектрометрические устройства на основе радиочастотных электрических полей с архимедовыми свойствами // Масс-спектрометрия. 2011. Т. 8, № 4. С. 293–296. URL: <http://mass-spektrometria.ru/pre-8n4-pismo/>
21. Andreyeva A.D., Berdnikov A.S. Mass spectrometric devices with Archimedean radio frequency electric fields // J. Anal. Chem. 2012. Vol. 67, no. 13. P. 1034–1037. DOI: 10.1134/S1061934812130023
22. Бердников А.С., Андреева А.Д. Устройство для манипулирования заряженными частицами. Патент РФ на полезную модель RU 113611. 2011. URL: <https://patents.google.com/patent/RU113611U1/ru>
23. Бердников А.С., Андреева А.Д. Устройство для манипулирования заряженными частицами. Патент РФ RU 2465679C1. 2012. URL: <https://patents.google.com/patent/RU2465679C1/ru>
24. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. Device for manipulating charged particles via field with pseudo potential having one or more local maxima along length of channel. Patent US9536721B2. 2017. URL: <https://patents.google.com/patent/US9536721B2/en>
25. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. Device for manipulating charged particles. Patent US9812308B2. 2017. URL: <https://patents.google.com/patent/US9812308B2/en>
26. Бердников А.С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. I // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 2. С. 77–89. URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst2.php#abst12>
27. Бердников А.С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 2. Общая формула // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 3. С. 83–96. URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst3.php#abst10>
28. Бердников А.С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного

- движения заряженных частиц. Ч. 3. Временные сигналы, характеризующиеся "медленным" и "быстрым" временами // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 4. С. 75–85.
URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst4.php#abst11>
29. Бердников А.С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 4. Приборы и устройства // Научное приборостроение. 2011. Т. 21, № 4. С. 86–102.
URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst4.php#abst12>
30. Бердников А.С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 5. Комментарии к общей формуле для меняющихся во времени псевдопотенциалов // Научное приборостроение. 2012. Т. 22, № 2. С. 105–111.
URL: <http://iairas.ru/mag/2012/abst2.php#abst14>
31. Бердников А.С. Высокочастотные электромагнитные поля с архимедовыми свойствами // Научное приборостроение. 2014. Т. 24, №1. С. 104–127. URL: <http://iairas.ru/mag/2014/abst1.php#abst13>
32. Bao X., Zhang Q., Liang Q., Sun Q., Xu W., Lu Y., Xia L., Liu Y., Zou X., Huang C., Shen C., Yannan Chu Y. Increased sensitivity in proton transfer reaction mass spectrometry by using a novel focusing quadrupole ion funnel // Anal. Chem. 2022. Vol. 94, iss. 39. P. 13368–13376. DOI: 10.1021/acs.analchem.2c01893
33. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing. URL: <http://wolfram.com/mathematica/>

**Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург**

Контакты: Бердников Александр Сергеевич,
asberd@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 04.10.2023

ANALYTICAL POTENTIALS OF ELECTRIC FIELDS FOR SIMULATION OF ION GUIDES WITH A PERIODIC STRUCTURE

A. S. Berdnikov, S. V. Masyukevich

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia

The article discusses analytical expressions for the potentials of electric fields that correspond to transport channels with a periodic geometric structure of electrodes and potentials applied to the electrodes. The electrodes of the transport channel are a sequence of circular diaphragms or have a similar structure. The derived expressions can be useful for rapid qualitative simulation of radio frequency devices used for ion conveying and focusing.

Keywords: Laplace's equation, periodic electrodes, analytical electric fields, ion guides, ion traps, ion funnels

REFERENCES

1. Gerlich D. Inhomogeneous RF fields: a versatile tool for the study of processes with slow ions. Ng Ch.Y., Baer M. (Eds.). *State-selected and state-to-state ion-molecule reaction dynamics. Part I. Experiment*, advances in chemical physics series, vol. LXXXII, New York, John Wiley & Sons Inc., 1992, pp. 1–176.
2. Yavor M.I. Optics of charged particle analyzers. *Advances of Imaging and Electron Physics*, vol. 157, Elsevier, 2009, pp. 142–168.
3. Bahr R. *Diplom thesis*. University of Freiburg. 1969.
4. Gerlich D. *Diplom thesis*. University of Freiburg. 1971.
5. Teloj E., Gerlich D. Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The Guided beam technique. *Chem. Phys.*, 1974, vol. 4, no. 3, pp. 417–427. DOI: 10.1016/0301-0104(74)85008-1
6. Gerlich D., Kaefer G. Ion trap studies of association processes in collisions of CH_3^+ and CD_3^+ with $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, D_2 and He at 80 K. *The Astrophysical Journal*, 1989, vol. 347, iss. 2, pp. 849–854. DOI: 10.1086/168174
7. Berdnikov A.S., Gall N.R. [Radiofrequency transport traps with periodic electrodes without parasitic trapping regions]. *Mass-Spektrometria* [Mass-spectrometry], 2013, vol. 10, no. 4, pp. 224–229. (In Russ.). URL: <http://mass-spektrometria.ru/pre-t10n4-radiochast/>
8. Berdnikov A.S., Gall N.R. Radio frequency ion guiding traps with periodic electrodes without spurious trapping regions. *J. Anal. Chem.*, 2014, vol. 69, no. 13, pp. 1285–1290. DOI: 10.1134/S1061934814130024
9. Shaffer S.A., Tang K., Anderson G., Prior D.C., Udseth H.R., Smith R.D. A novel ion funnel for focusing ions at elevated pressure using electrospray ionization mass spectrometry. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 1997, vol. 11, no. 16, pp. 1813–1817. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0231(19971030)11:16<1813::AID-RCM87>3.0.CO;2-D
10. Shaffer S.A., Prior D.C., Anderson G., Udseth H.R., Smith R.D. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry. *Anal. Chem.*, 1998, vol. 70, iss. 19, pp. 4111–4119. DOI: 10.1021/ac9802170
11. Shaffer S.A., Tolmachev A.V., Prior D.C., Anderson G.A., Udseth H.R., Smith R.D. Characterization of an improved electrodynamic ion funnel interface for electrospray ionization mass spectrometry. *Anal. Chem.*, 1999, vol. 71, no. 15, pp. 2957–2964. DOI: 10.1021/ac990346w
12. Tolmachev A.V., Kim T., Udseth H.R., Smith R.D., Bailey T.H., Futrell J.H. Simulation-based optimization of the electrodynamic ion funnel for high sensitivity electrospray ionization mass spectrometry. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2000, vol. 203, no. 1-3, pp. 31–47. DOI: 10.1016/S1387-3806(00)00265-7
13. Kim T., Tolmachev A.V., Harkewicz R., Prior D.C., Anderson G., Udseth H.R., Smith R.D. Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel. *Anal. Chem.*, 2000, vol. 72, iss. 10, pp. 2247–2255. DOI: 10.1021/ac991412x
14. Lynn E.C., Chung M.-C., Han C.-C. Characterizing the transmission properties of an ion funnel. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 2000, vol. 14, no. 22, pp. 2129–2134. DOI: 10.1002/1097-0231(20001130)14:22<2129::AID-RCM144>3.0.CO;2-M
15. Kelly R.T., Tolmachev A.V., Page J.S., Tang K., Smith R.D. The Ion Funnel: Theory, Implementations and Applications. *Mass Spectrometry Reviews*, 2010, vol. 29, iss. 2, pp. 294–312. DOI: 10.1002/mas.20232
16. Watson G.N. *A treatise on the theory of Bessel functions*. Cambridge at the University Press, 1922. 788 p. (Russ. ed.: Watson J.N. *Teoriya besselevykh funktsiy*. Translate V.S. Berman. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1949. 799 p.).
17. Bateman H., Erdelyi A. *Higher Transcendental Functions. Vol. 2: Tables of Integral Transforms*. Bombay–New Dehli, TATA McGraw Hill Publ. Comp., 1953. 396 p. (Russ. ed.: *Beitmen G., Ehrdeii A. Vysshie transtsendentnye funktsii. T. 2: Funktsii Besselya, funktsii parabolicheskogo tsilindra, ortogonal'nye mnogochleny*. Seriya "Spravochnaya matematicheskaya

- библиотека", Izd. 2-e, Moscow, Nauka Publ., 1974. 296 p.).
18. Abramowitz M., Stegun I.A. *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. New York, Dover Publications Inc., 1965. 1046 p. (Russ. ed.: Abramovits M., Stigan I. *Spravochnik po spetsial'nym funktsiyam s formulami, grafikami i matematicheskimi tablitsami*. Moscow, Nauka Publ., 1979. 832 p.).
 19. Andreyeva A.D., Berdnikov A.S. [Charged particle manipulation devices based on the Archimedean screw principle]. *Sbornik tezisov dokladov IV Vserossiiskoi konferentsii i V syezda Vserossiiskogo mass-spektrometricheskogo obshchestva "Massspektrometriya i ee prikladnye problemy"* [Proc. IV All-Russ. Conf. and V Congr. All-Russ. Mass Spectrom. Soc. "Mass spectrometry and its applications"], Moscow, 2011, pp. 137. (In Russ.).
 20. Andreyeva A.D., Berdnikov A.S. [Mass spectrometric devices based on radio-frequency electric fields with Archimedean properties]. *Mass-Spektrometriya* [Mass spectrometry], 2011, vol. 8, no. 4, pp. 293–296. URL: <http://mass-spektrometriya.ru/pre-8n4-pismo/>
 21. Andreyeva A.D., Berdnikov A.S. Mass spectrometric devices with Archimedean radio frequency electric fields. *J. Anal. Chem.*, 2012, vol. 67, no. 13, pp. 1034–1037. DOI: 10.1134/S1061934812130023
 22. Berdnikov A.S., Andreyeva A.D. *Ustroistvo dlya manipulyrovaniya zaryazhennymi chastitsami. Patent RF no. RU113611U1* [Patent for useful model for device for manipulating charged particles]. Prioritet 2011. (In Russ.). URL: <https://patents.google.com/patent/RU113611U1/ru>
 23. Berdnikov A.S., Andreyeva A.D. *Ustroistvo dlya manipulyrovaniya zaryazhennymi chastitsami. Patent RF no. RU 2465679C1* [Patent for apparatus for manipulating charged particles]. Prioritet 2012. (In Russ.). URL: <https://patents.google.com/patent/RU2465679C1/ru>
 24. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. *Device for manipulating charged particles via field with pseudo potential having one or more local maxima along length of channel. Patent US9536721B2*. Priority 2017. URL: <https://patents.google.com/patent/US9536721B2/en>
 25. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. *Device for manipulating charged particles. Patent US9812308B2*. Priority 2017. URL: <https://patents.google.com/patent/US9812308B2/en>
 26. Berdnikov A.S. [Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part. I]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2011, vol. 21, no. 2, pp. 77–89. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst2.php#abst12>
 27. Berdnikov A.S. [Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 2. General expression for time-dependent pseudopotentials]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2011, vol. 21, no. 3, pp. 83–96. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst3.php#abst10>
 28. Berdnikov A.S. [Time-dependent pseudopotential and its application for the description of the charged particles averaged motion. Part 3. Time dependent signals characterized by "slow" and "fast" characteristic time]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2011, vol. 21, no. 4, pp. 75–85. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst4.php#abst11>
 29. Berdnikov A.S. [Time-dependent pseudopotential and its application for the description of the charged particles averaged motion. Part 4. Devices and instruments]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2011, vol. 21, no. 4, pp. 86–102. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst4.php#abst12>
 30. Berdnikov A.S. [Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 5. Comments to a general expression for time-dependent pseudopotentials]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2012, vol. 22, no. 2, pp. 105–111. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2012/abst2.php#abst14>
 31. Berdnikov A.S. [High frequency electromagnetic fields with "Archimedean" properties which are calculated taken Maxwell's terms into account]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2014, vol. 24, no. 1, pp. 104–127. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2014/abst1.php#abst13>
 32. Bao X., Zhang Q., Liang Q., Sun Q., Xu W., Lu Y., Xia L., Liu Y., Zou X., Huang C., Shen C., Yannan Chu Y. Increased sensitivity in proton transfer reaction mass spectrometry by using a novel focusing quadrupole ion funnel. *Anal. Chem.*, 2022, vol. 94, iss. 39, pp. 13368–13376. DOI: 10.1021/acs.analchem.2c01893
 33. *Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing*. URL: <http://wolfram.com/mathematica/>

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

Article received by the editorial office on 04.10.2023

INTRODUCTION

Radiofrequency ion guides [1, 2], SRIG-type radiofrequency traps [3–8], focusing ion funnels [9–15] and similar devices are effective tools for increasing the sensitivity and analytical capabilities of mass spectrometric instruments. Direct modeling of the focusing effect of a three-dimensional radio frequency field requires intensive computer calculations, which are resource-intensive both in terms of the computing power of computing devices and of the time required for a full simulation of the selected geometry of the device electrodes. This does not allow us to fully explore a wide range of possible design solutions in the optimization process and thereby limits the possibility of finding the optimal design solution. The use of analytical models of the electric field makes it possible to effectively select promising areas of optimization for the final design solution. Thus, it is possible to significantly reduce labor costs for the initial selection of promising options and ultimately achieve significantly better characteristics for the final version of the device.

This paper discusses analytical models for electric fields characterizing transport channels with periodic electrodes and periodic potentials applied to the electrodes. The obtained analytical solutions for the three-dimensional Laplace equation are of certain interest in themselves because they can be used to solve corresponding problems in mathematical physics.

CIRCULAR RADIO FREQUENCY TRAPS

Radiofrequency traps and transport channels of the SRIG (Stacked-Ring Ion Guides) type are a sequence of circular diaphragms with radio frequency voltages (in particular, representing a sequence of pulses) applied to them with a phase shift π between adjacent diaphragms (Fig. 1) [1, 2, 3–8].

Fig. 1. Structure of periodic ring electrodes for a cylindrical radiofrequency trap

Assuming that the condition of a quasi-static electric field is satisfied (the characteristic time of change in voltages on the electrodes is much greater than the time of propagation of electromagnetic disturbance at the speed of light over a distance of the order of the geometric size of the electrode system), we can assume that the high-frequency potential of the electric field is a function of time that sets the change in voltages on the electrodes to the electric potential of an electrostatic field with potentials on electrodes, which

signs alternate according to the rule:

$$+U_R, -U_R, +U_R, -U_R, +U_R, -U_R, \dots \quad (1)$$

It is known [1, 12] that far from the edges of the electrodes in the vicinity of the axis of the ion guide, such a potential is described with good accuracy by the expression

$$U(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \cos(\lambda z + \varphi) I_0(\lambda r), \quad (2)$$

where z is the axial coordinate, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ is the radial coordinate, R is the radius of the circular diaphragms, U_R is the static potentials applied to the diaphragms, φ is the parameter that determines the shift of the sequence of diaphragms relative to the origin, $\lambda = \pi/L$ is the geometric scale parameter, L is the distance between adjacent diaphragms, I_0 is the modified Bessel function of zero order [16–18]. In essence, a potential of type (2) is a sum with constant coefficients of two linearly independent potentials, which are convenient to consider separately:

$$U_C(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \cos(\lambda z) I_0(\lambda r), \quad (3)$$

$$U_S(z, r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \sin(\lambda z) I_0(\lambda r). \quad (4)$$

On the axis of symmetry $r = 0$, potential (3) behaves as $U_C \sim U_0 \cos(\lambda z)$, and potential (4) as $U_S \sim U_0 \sin(\lambda z)$, where $U_0 = U_R/I_0(\lambda R)$ is the amplitude of spatial oscillations of the corresponding electric potential on the axis of the system.

Potentials (3) and (4) can also be used to describe the case when voltages on adjacent diaphragms change periodically according to the rule:

$$+U_R, 0, -U_R, 0, +U_R, 0, -U_R, 0, \dots \quad (5)$$

To do this, however, it is necessary to use a geometric scale, where is the distance between adjacent apertures. A practical example of the use of potentials (3), (4) and electrical voltage supply circuits (5) can be the electric fields used in devices [7, 8, 20–31].

CIRCULAR RADIO FREQUENCY FUNNELS

Radiofrequency ion funnels are a sequence of circular diaphragms with successively decreasing radii, which correspond to the law of changes in the radii of the section of a circular cone by planes located in the plane of the diaphragm and perpendicular to the axis

of the cone (Fig. 2). For such a geometric configuration of electrodes, the behavior of the axisymmetric electric potential $V(z, r)$ on the axis of the system is expected to be the sum of potentials $V_C(z, r) \sim U_0 z \cos(\lambda z)$ and $V_S \sim U_0 z \sin(\lambda z)$, where U_0 is a scaling factor for the linearly increasing amplitude of spatial oscillations of the corresponding electric potential on the axis of the system. The corresponding solutions to Laplace's equation have the form:

$$V_C(z, r) = U_0 [z \cos(\lambda z) I_0(\lambda r) + r \sin(\lambda z) I_1(\lambda r)], \quad (6)$$

$$V_S(z, r) = U_0 [z \sin(\lambda z) I_0(\lambda r) - r \cos(\lambda z) I_1(\lambda r)], \quad (7)$$

where $\lambda = \pi/(2L)$ is the geometric scale, L is the distance between adjacent diaphragms., I_1 is a modified first-order Bessel function [16–18], for which $I_1(r) \sim r/2$ is valid if $r \sim 0$. Due to this, on the system axis $V_C \sim U_0 z \cos(\lambda z)$, $V_S \sim U_0 z \sin(\lambda z)$.

Fig. 2. Structure of periodic ring electrodes for a conical radiofrequency funnel

Solutions (6) and (7) are obtained by differentiating solutions (3) and (4) with respect to the parameter λ . As in the case of solutions (3) and (4), they can be used to effectively describe the field of a funnel with potentials alternating according to the law (5), if we use a geometric scale, $\lambda = \pi/(2L)$ where L is the distance between adjacent diaphragms.

QUADRUPOLE SEGMENTED CIRCULAR RADIO FREQUENCY TRAPS

Each circular diaphragm can be cut into an even number of segments, and then electrical voltages can be applied to the resulting electrodes so that adjacent electrodes experience electrical voltages of opposite polarity. In particular, when using partitions consisting of four segments, a basic static electric field is obtained for a quadrupole-segmented radio frequency trap (Fig. 3). A similar device, in particular, was considered in [32] — however, using numerical simulations rather than analytical models of electric potential.

For the electrode configuration shown in Fig. 3, analytical solutions to the corresponding static electric potentials are the functions

$$U_C^{(q)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} (x^2 - y^2) \cos(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2, \quad (8)$$

$$U_S^{(q)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} (x^2 - y^2) \sin(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2, \quad (9)$$

where $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, as before, and I_2 is a modified second-order Bessel function [16–18], for which $I_2(r) \sim r^2/8$ is valid if $r \sim 0$. Near the symmetry axis $r = 0$, potential (8) behaves as

$$U_C^{(q)} \sim U_0 (x^2 - y^2) \cos(\lambda z),$$

and potential (9) as

$$U_S^{(q)} \sim U_0 (x^2 - y^2) \sin(\lambda z),$$

where $U_0 = \lambda^2 U_R / 8 I_2(\lambda R)$ is the amplitude of spatial oscillations of the quadrupole component of the electric potential near the axis of the system.

Fig. 3. Structure of periodic quadrupole-segmented electrodes for a cylindrical radiofrequency trap

For the “rotated” configuration of electrodes, which will be needed in our discussion below, the analytical solutions to the corresponding static electric potentials are the functions

$$U_C^{(r)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} xy \cos(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2, \quad (10)$$

$$U_S^{(r)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_2(\lambda R)} xy \sin(\lambda z) I_2(\lambda r) / r^2. \quad (11)$$

Accordingly, near the axis of symmetry $r = 0$, potential (10) behaves as $\sim U_0 xy \cos(\lambda z)$, and potential (11) as $\sim U_0 xy \sin(\lambda z)$.

QUADRUPOLE-SEGMENTED CIRCULAR RADIO FREQUENCY FUNNELS

In a similar way, the circular electrodes of a radio-frequency ion funnel can be subjected to multipole segmentation. (A similar device, in particular, was considered in [32], however, using numerical modeling and not using analytical models of the electric po-

tential). For quadrupole segmentation, the electrode configuration is shown in Fig. 4.

Fig. 4. Structure of periodic quadrupole-segmented electrodes for a conical radiofrequency funnel

Analytical solutions for the corresponding static electric potentials are the functions

$$V_C^{(q)}(x, y, z) = U_0(x^2 - y^2) \left[z \cos(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} + 4r^2 \sin(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) + 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right], \quad (12)$$

$$V_S^{(q)}(x, y, z) = U_0(x^2 - y^2) \left[z \sin(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} - 4r^2 \cos(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) - 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right], \quad (13)$$

where the new symbol I_3 is a modified third-order Bessel function [16–18], for which $I_3(r) \sim r^3/48$ is valid if $r \sim 0$. Near the symmetry axis $r = 0$, potential (12) behaves as

$$V_C^{(q)} \sim U_0(x^2 - y^2) z \cos(\lambda z),$$

and potential (13) as

$$V_S^{(q)} \sim U_0(x^2 - y^2) z \sin(\lambda z).$$

These solutions are obtained by differentiating potentials (8) and (9) with respect to the parameter λ . It is necessary to add a linear combination of potentials (8) and (9) to the obtained result in order to ensure the needed asymptotic behavior of the solution on the system axis.

For the "rotated" electrode configuration, which will be needed in the next section, the analytical solutions to the corresponding static electric potentials are the functions

$$V_C^{(r)}(x, y, z) = U_0 xy \left[z \cos(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} +$$

$$+ 4r^2 \sin(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) + 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right], \quad (14)$$

$$V_S^{(r)}(x, y, z) = U_0 xy \left[z \sin(\lambda z) \frac{8I_2(\lambda r)}{\lambda^2 r^2} - 4r^2 \cos(\lambda z) \frac{\lambda r(I_1(\lambda r) + I_3(\lambda r)) - 4I_2(\lambda r)}{\lambda^3 r^2} \right]. \quad (15)$$

Accordingly, near the symmetry axis $r = 0$, potential (14) behaves as

$$V_C^{(r)} \sim U_0 xyz \cos(\lambda z),$$

and potential (15) as

$$V_S^{(r)} \sim U_0 xyz \sin(\lambda z).$$

TRAPS AND FUNNELS WITH OCTUPOLINE SYMMETRY OF QUADRUPOLE-SEGMENTED ELECTRODES

With multipole segmentation, adjacent electrodes can be rotated relative to each other by half the multipole angle, as shown in Fig. 5 for a cylindrical trap and in Fig. 6 for a conical funnel. This gives additional octupole symmetry to the electrode configuration and can be used to more flexibly control device parameters.

For a cylindrical trap with rotated quadrupole-segmented electrodes (Fig. 5), depending on whether even or odd diaphragms are rotated, the analytical potentials are calculated as follows:

$$W_C(x, y, z) = U_C^{(q)}(x, y, z) + U_S^{(r)}(x, y, z), \quad (16)$$

$$W_S(x, y, z) = U_C^{(r)}(x, y, z) + U_S^{(q)}(x, y, z), \quad (17)$$

where $U_C^{(q)}(x, y, z)$, $U_S^{(q)}(x, y, z)$, $U_C^{(r)}(x, y, z)$ и $U_S^{(r)}(x, y, z)$ and are the potentials given by expressions (8)–(11), and the geometric scale should be calculated as $\lambda = \pi/(2L)$, where L is the distance between adjacent diaphragms.

Fig. 5. Structure of periodic quadrupole-segmented electrodes for a cylindrical radiofrequency trap with octupole symmetry of electrode placement

Similarly, for a conical funnel with rotated quadrupole-segmented electrodes (Fig. 6), depending on whether even diaphragms or odd diaphragms are rotated, the analytical potentials are calculated as

$$H_C(x, y, z) = V_C^{(q)}(x, y, z) + V_S^{(r)}(x, y, z), \quad (18)$$

$$H_S(x, y, z) = V_C^{(r)}(x, y, z) + V_S^{(q)}(x, y, z), \quad (19)$$

where $V_C^{(q)}(x, y, z)$, $V_S^{(q)}(x, y, z)$, $V_C^{(r)}(x, y, z)$ and $V_S^{(r)}(x, y, z)$ are the potentials given by expressions (12)–(15), and the geometric scale should be calculated as $\lambda = \pi/(2L)$, where L is the distance between adjacent diaphragms.

Fig. 6. Structure of periodic quadrupole-segmented electrodes for a conical radio frequency funnel with octupole symmetry of electrode placement

Note.

Formulas (16)–(19) are obtained by combining boundary conditions of type (5) for electrodes in the standard position and boundary conditions of type (5) shifted by one step for electrodes in a rotated position. For a field corresponding to the standard position of the electrodes, the planes with the electrodes and non-zero electric voltages applied to them are combined with planes with an identically zero potential of the field shifted by one step along the OZ axis and corresponding to the rotated position of the electrodes, and vice versa. As a result, when summing two electric potentials, the boundary conditions in the corresponding cross sections are summed with zeros and do not change, therefore, for the total field, the shape of the electrodes, the position of the electrodes and the potentials on the electrodes in the considered planes remain the same as they were for each of the summed components separately. The same principle can be used when summing fields with different orders of multipole segmentation.

FURTHER DEVELOPMENT OF THE THEME

In general, for an electrode configuration that corresponds to a cylindrical trap with multipole-segmented electrodes, the basic electrical potentials are calculated according to the formulas:

$$U_C^{(q,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (20)$$

$$U_S^{(q,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (21)$$

$$U_C^{(r,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (22)$$

$$U_S^{(r,n)}(x, y, z) = \frac{U_R}{I_n(\lambda R)} r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z) I_n(\lambda r) / r^n, \quad (23)$$

where n is the order of multipole segmentation of the circular diaphragms of a cylindrical trap, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, I_n is the modified Bessel function of the n -th order [16–18]. For this function, $I_n(r) \sim 2^{-n} r^n / n!$ is valid if $r \sim 0$, and for $r \rightarrow \infty$ it grows exponentially quickly: $I_n(r) \sim \exp(r) / \sqrt{2\pi r}$. The fact that functions (20)–(23) really satisfy the Laplace equation can be easily verified by direct substitution using the program [33].

In formulas (20)–(23) the expressions

$$Q_n(x, y) = r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right), \quad (24)$$

$$R_n(x, y) = r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right), \quad (25)$$

are harmonic homogeneous polynomials satisfying the two-dimensional Laplace equation:

$$1, x, y, x^2 - y^2, 2xy, x^3 - 3xy^2, 3x^2y - y^3, \dots$$

The polynomial nature of functions (24), (25) follows from the recurrence relations:

$$Q_0(x, y) = 1, R_0(x, y) = 0,$$

$$Q_{n+1}(x, y) = xQ_n(x, y) - yR_n(x, y),$$

$$R_{n+1}(x, y) = yQ_n(x, y) + xR_n(x, y).$$

It is these factors that provide the required multipole symmetry around the symmetry axis for the potentials under consideration.

Potentials (20)–(23) behave at $r \sim 0$ (i.e., close to the symmetry axis) as

$$U_C^{(q,n)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z), \quad (26)$$

$$U_S^{(q,n)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z), \quad (27)$$

$$U_C^{(r,n)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \cos(\lambda z), \quad (28)$$

$$U_S^{(r,n)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) \sin(\lambda z), \quad (29)$$

where $U_0 = U_R (2^{-n} \lambda^n) / (n! I_n(\lambda R))$ is the amplitude of spatial oscillations of the multipole component of the electric potential near the axis of the system. Due to k -fold differentiation of expressions (20)–(23) with respect to the parameter λ (it is possible that it will be necessary to subtract the linear combination of potentials from the result of differentiation (20)–(23) and their derivatives with respect to the parameter λ of the smaller order, so that to ensure the necessary

asymptotic behavior on the system axis), it is possible to construct basic analytical potentials $U_C^{(q,n,k)}(x, y, z)$, $U_S^{(q,n,k)}(x, y, z)$, $U_C^{(r,n,k)}(x, y, z)$ and $U_S^{(r,n,k)}(x, y, z)$, which will behave as

$$U_C^{(q,n,k)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \cos(\lambda z), \quad (30)$$

$$U_S^{(q,n,k)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \sin(\lambda z), \quad (31)$$

$$U_C^{(r,n,k)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \cos(\lambda z), \quad (32)$$

$$U_S^{(r,n,k)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \arctan\left(\frac{y}{x}\right)\right) z^k \sin(\lambda z). \quad (33)$$

Such potentials can be used to describe electric fields in non-conical and/or non-circular radio frequency funnels and traps.