

УДК 543.51

© А. И. Иванов, П. В. Бугров, Н. В. Коненков, 2025

ЛИНЕЙНАЯ ИОННАЯ ЛОВУШКА С ОСТРОВом СТАБИЛЬНОСТИ, ФОРМИРУЕМЫМ КВАДРУПОЛЬНЫМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ

Рассмотрены условия масс-селективного выброса ионов на границе острова стабильности, формируемого квадрупольным дополнительным напряжением с частотой $\omega = \Omega / 2$. В пределах острова найдены параметры β_x и β_y , определяющие спектр колебаний ионов по поперечным координатам X и Y квадрупольного фильтра масс. Представлен контур возбуждения вблизи границы стабильности $q_b = 0.9082$ с относительной шириной $q_b / \Delta q \approx 3000$.

Ключевые слова: квадрупольный фильтр масс, квадрупольное возбуждение, остров стабильности, линейная ионная ловушка, контур возбуждения

ВВЕДЕНИЕ

Резонансное квадрупольное возбуждение колебаний ионов в квадрупольном фильтре масс (КФМ) вызывает появление полос нестабильности на a – q диаграмме Матье, следующих вдоль изолиний параметра β [1, 2]. Параметр β зависит от координаты (a, q) и определяет спектр колебаний ионов в квадрупольном электрическом поле [3]. Уравнения движения ионов при наличии дополнительного квадрупольного напряжения $V_a = V_x \cos \omega t$ имеют вид [2]

$$\frac{d^2 x}{d\xi^2} = -\left[a - 2q \cos(2(\xi - \xi_0)) - 2q_x \cos 2\nu\xi \right] x, \quad (1)$$

$$\frac{d^2 y}{d\xi^2} = +\left[a - 2q \cos(2(\xi - \xi_0)) - 2q_x \cos 2\nu\xi \right] y, \quad (2)$$

где a и q — параметры уравнения Матье, определяемые, как

$$a = \frac{8eU}{(m/z)\Omega^2 r_0^2}, \quad q = \frac{4eV}{(m/z)\Omega^2 r_0^2}, \quad (3)$$

$$q_x = \frac{4eV_x}{(m/z)\omega^2 r_0^2}, \quad \nu = \frac{\omega}{\Omega}.$$

Здесь x и y — поперечные координаты квадрупольного фильтра масс (КФМ), $\pm(U + V \cos \Omega t + V_x \cos \omega t)$ — напряжение, прикладываемое к электродам КФМ, ze — заряд иона, r_0 — радиус вписанной окружности между вершинами электродов.

Цель настоящей работы состоит в изучении ионно-оптических свойств острова стабильности

по оси q , создаваемого квадрупольным возбуждением на частоте $\nu = 0.5$. Это означает, что, если частота основного напряжения равна 2 МГц, то частота дополнительного квадрупольного напряжения составляет 1 МГц. В частности, работа включает расчет положения острова стабильности в функции от амплитуды q_x и частоты ν , определение параметра β и глубины потенциальной ямы в зависимости от положения рабочей точки q , на основе этого моделирование контура пропускания КФМ и контура возбуждения при масс-селективном выбросе ионов из ловушки на границе стабильности.

ДИАГРАММА СТАБИЛЬНОСТИ

На рис. 1 показана модифицированная диаграмма стабильности КФМ при квадрупольном возбуждении с безразмерной амплитудой $q_x = 0.01$ и $q_x = 0.1$. Поскольку частота резонансного возбуждения $\nu = 0.5$, полосы нестабильности следуют вдоль изолиний $\beta_x = \beta_y = 0.5$. С увеличением амплитуды q_x ширина полосы нестабильности возрастает — на порядок при $q_x = 0.1$, при этом размеры острова стабильности (В), расположенного по оси q , уменьшаются. Нас интересует интервал стабильности по оси q при $a = 0$.

Метод построения диаграммы стабильности (рис. 1) заключается в задании прямоугольной сетки на a – q плоскости. В заданных узлах сетки (a_i, q_i) рассчитывалась матрица M преобразования координат и скоростей, как и в случае уравнения Матье [3, 4]. Элементы матрицы M рассчитываются численным интегрированием уравнений (1) и (2) при начальных условиях: $(a) u_0 = 0, u_0' = 1$

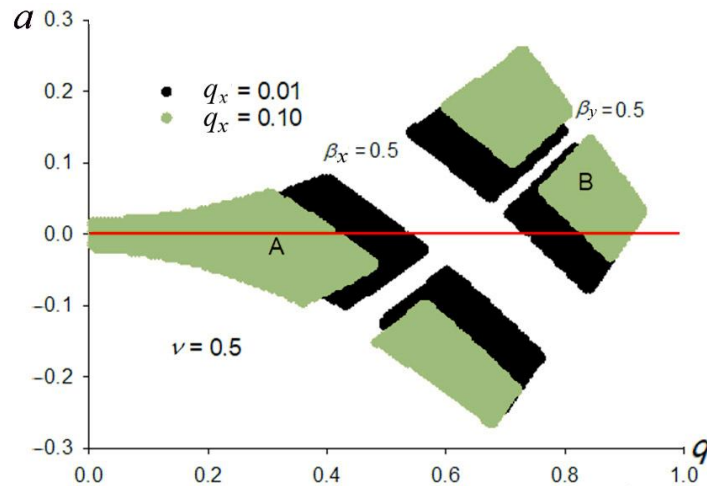


Рис. 1. Острова стабильности (А, В).

При параметрах квадрупольного возбуждения: частота $\nu = 0.5$, амплитуды $q_x = 0.01$ и $q_x = 0.1$; параметры стабильности $\beta_x = \beta_y = 0.5$

и (b) $u_0 = 1, u_0' = 0$. Здесь $u = x$ или y . В нашем случае уравнения движения (1) и (2) — это уравнения Хилла. Поэтому интегрирование осуществлялось на интервале $(0, 2\pi)$, поскольку функции $2q \cdot \cos[2(\xi - \xi_0)]$ и $2q_x \cdot \cos 2\nu\xi$ имеют наименьший общий период 2π . Если след матрицы

$$|m_{11} + m_{22}|_x \leq 2 \text{ \& } |m_{11} + m_{22}|_y \leq 2,$$

то точка (a_i, q_i) попадает в область стабильности [5]. Далее формируется массив стабильных точек (a_i, q_i) , который и определяет расположение островов стабильности (рис. 1 и рис. 2). Число точек на прямоугольную область a $(-0.3, 0.3)$, q $(0, 1)$ составляет 10 000.

РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 2 представлен в деталях остров стабильности при параметре возбуждения $q_x = 0.1$ и частоте $\nu = 0.5$.

Интервал стабильности (q_1, q_2) по оси q при $a = 0$ контролируется амплитудой возбуждения q_x . Это иллюстрируется на рис. 2. Из рис. 1 видно, что при увеличении q_x полоса пропускания (q_1, q_2) уменьшается. Однако режим сепарации только в высокочастотном (ВЧ) режиме в этом острове стабильности практически невозможен, поскольку первый остров стабильности вблизи начала координат "затеняет" рабочий остров В (рис. 1). Это означает, что масс-спектры от островов будут накладываться.

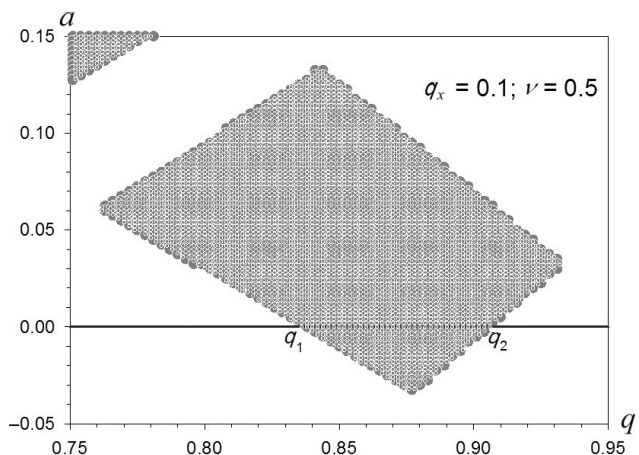


Рис. 2. Остров стабильности В.

При $a = 0$ в интервале (q_1, q_2) с амплитудой возбуждения $q_x = 0.1$ и частотой $\nu = 0.5$

На рис. 3 приведены зависимости [6] частотных параметров β_x и β_y от параметра Матье q для острова В ($a = 0$). Эти зависимости показывают, что частотный спектр колебаний ионов по X и Y координатам отличается. В области совместной стабильности по двум координатам, отмеченной пунктирными вертикальными линиями, колебания ионов по X лежат в низкочастотной области, а по Y — в высокочастотной.

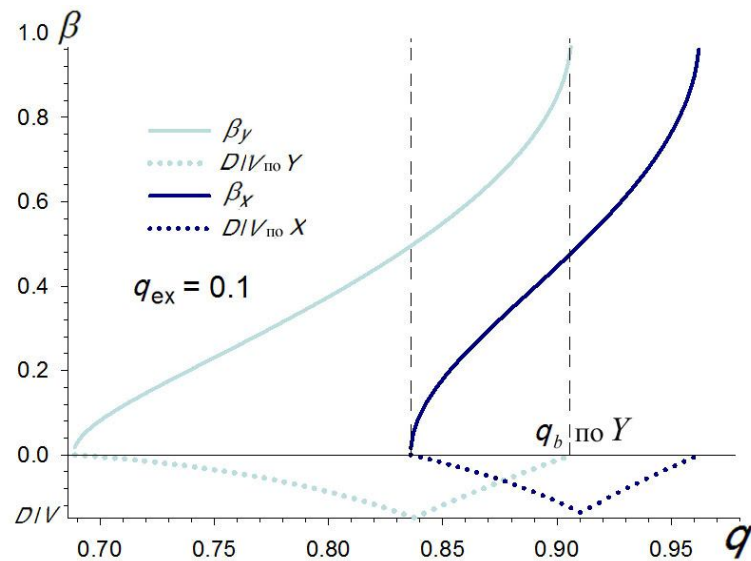


Рис. 3. Зависимости параметров β_x и β_y от параметра q и глубины потенциальной ямы D/V для X и Y поперечных координат при $a = 0$.

Также на рис. 3 приведены зависимости глубины D/V потенциальной ямы квадрупольного поля [7] для модели, предложенной в работе [8]. В центре области стабильности одновременная глубина достигает максимума. Важно отметить, что максимум глубины потенциальной ямы достигает наибольшей величины по координате X при значении q_b , когда по Y координате величина q достига-

ет границы стабильности. Это может служить основанием реализации масс-селективного выброса ионов через Y стержни при достижении границы q_b (рис. 3) [6, 9].

На рис. 4 иллюстрируется масс-селективность резонансного выброса на границе $q_b = 0.9064$ ($q_x = 0.1$) и на границе $q_b = 0.9082$ ($q_x = 0.01$).

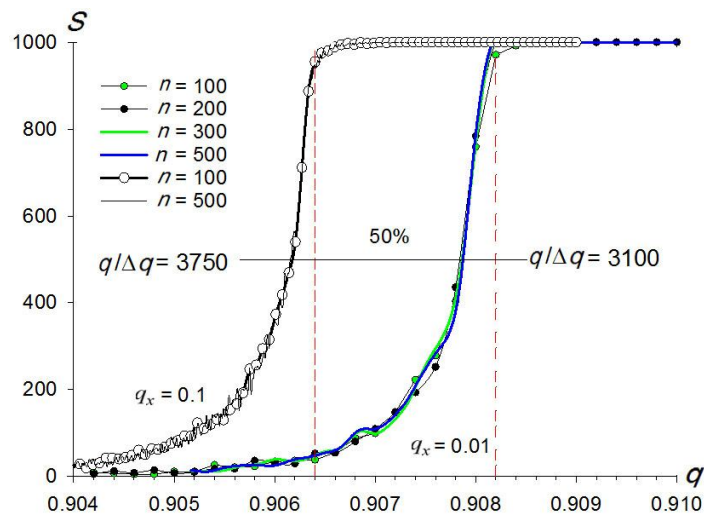


Рис. 4. Зависимости числа ионов S , достигших поверхности электродов Y , от параметра q . Для двух значений амплитуды квадрупольного возбуждения $q_x = 0.01$ и $q_x = 0.1$; n — число периодов интегрирования уравнений движения в точке q

Построение зависимостей $S(q)$ производилось следующим образом. В точке q вблизи границы рассчитывалось 1000 траекторий на интервале $(0, \pi)$ и определялось число S траекторий, амплитуда которых превышала r_0 . Количественно масс-селективность можно определить как отношение q_b к полосе Δq по 50% уровню числа выброшенных ионов из ловушки. Величина $q_b / \Delta q$ составляет порядка 3000 и слабо зависит от скорости сканирования f/n , где $f = \Omega / 2\pi$ — частота ВЧ-генератора, n — число периодов интегрирования. Контур возбуждения $T(q)$ трансформируется крайними полями электрода и входными полями детектора в массовый пик.

Последовательный выброс ионов по массам из ловушки достигается увеличением амплитуды V ВЧ-генератора. Из формул (3) следует, что

$$V_x = \frac{q_x}{q_b} V = \frac{0.1}{0.9064} V = 0.1103V \text{ для } q_x = 0.1$$

и $V_x = 0.01103V$ для $q_x = 0.01$.

Второй случай ($q_x = 0.01$) более предпочтителен, поскольку требуемая амплитуда V_x дополнительного квадрупольного напряжения [10, 11] на порядок меньше, а массовая емкость ловушки больше и составляет

$$\frac{M_2}{M_1} = \frac{q_2}{q_1} \cong \frac{0.91}{0.65} = 1.4.$$

При амплитудной развертке по шкале масс отношение V_x / V должно быть постоянным. Так, при амплитуде $V = 2000$ В максимальная амплитуда добавочного напряжения равна 22 В.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе описаны острова стабильности по оси q , формируемые дополнительным квадрупольным напряжением [12–15] с частотой $\omega = 0.5 \Omega$. На данной частоте первая область стабильности КФМ расщепляется на четыре острова, причем два из них пересекают ось $a = 0$. Показано, что существуют благоприятные условия, при которых в острове В в случае $a = 0$ происходит масс-селективный выброс ионов на Y границе, что одновременно соответствует максимуму глубины потенциальной ямы по X координате. В этом режиме достигается масс-селективность $q_b / \Delta q \approx 3000$. Требуется малая величина дополнительного квадрупольного напряжения порядка нескольких десятков вольт, что упрощает схему формирования дополнительного квадрупольного напряжения на электродах фильтра масс.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. *Konenkov N.V., Cousins L.M., Baranov V.I., Sudakov M.* Quadrupole mass filter operation with auxiliary quadrupolar excitation: theory and experiment // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2001. Vol. 208, no. 1-3. P. 17–27. DOI: 10.1016/S1387-3806(01)00375-X
2. *Konenkov N.V.* Dipole and quadrupole resonance excitation in linear quadrupoles // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2024. Vol. 30, no. 1. P. 3–37. DOI: 10.1177/14690667231204359
3. *Dawson P.H.* Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications. Amsterdam: Elsevier, 1976. 349 p.
4. *Мак-Лаклан Н.В.* Теория и применение функций Маттьё. М.: Издательство иностранной литературы, 1953. 474 с.
5. *Konenkov N.V., Sudakov M.Yu., Douglas D.J.* Matrix methods for the calculation of stability diagrams in quadrupole mass spectrometry // *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*. 2002. Vol. 13, no. 6. P. 597–613. DOI: 10.1016/S1044-0305(02)00365-3
6. *Ivanov A.I., Sysoev A.A., Konenkov N.V.* Mass-selective instability and resonance ejection modes for DIT with rectangular asymmetric wave shape // *European Journal of Mass Spectrometry*. 2024. Vol. 30, no. 3-4. P. 143–149. DOI: 10.1177/14690667241270234
7. *Судаков М.Ю., Анацкая 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://jetp.ras.ru/cgi-bin/r/index/r/142/2/p222?a=list>
8. *Reilly P.T.A., Brabeck G.F.* Mapping the pseudopotential well for all values of the Mathieu parameter q in digital and sinusoidal ion traps // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2015. Vol. 392. P. 86–90. DOI: 10.1016/j.ijms.2015.09.013
9. *Ivanov A.I., Sysoev A.A., Konenkov A.N., Konenkov N.V.* Modeling of a Linear Ion Trap with Driving Rectangular Waveforms // *Journal of Mass Spectrometry*. 2024. Vol. 59, no. 6. Id. e5030. DOI: 10.1002/jms.5030
10. *Судаков М.Ю.* Диаграмма стабильности секулярного движения ионов, захваченных в радиочастотном квадрупольном поле, при наличии дополнительного гармонического квадрупольного возбуждения // *Письма в журнал технической физики*. 2000. Т. 26, № 19. С. 46–51. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/37929>
11. *Поляков А.С., Коненков Н.В., Бердников А.С.* Форма массового пика линейной ионной ловушки с цилиндрическими электродами при квадрупольном резонансном возбуждении колебаний ионов // *Научное приборостроение*. 2014. Т. 24, № 3. С. 49–61. URL: <http://iairas.ru/mag/2014/abst3.php#abst7>
12. *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. DOI: 10.21883/jtf.2016.11.43824.1783

13. Бердников А.С., Коненков Н.В., Кузьмин А.Г., Масюкевич С.В. О применении метода стробоскопических выборок при изучении квадрупольного возбуждения и квадрупольного резонанса // Научное приборостроение. 2019. Т. 29, № 1. С. 126–134. URL: <http://iairas.ru/mag/2019/abst1.php#abst19>
14. Douglas D.J., Polyakov A., Konenkov N.V. Quadrupolar ion excitation for radiofrequency-only mass filter operation // European Journal of Mass Spectrometry. 2014. Vol. 20, no. 3. P. 207–214. DOI: 10.1255/ejms.1278
15. Douglas D.J., Konenkov N.V. Quadrupole mass filter operation with dipole direct current and quadrupole radiofrequency excitation // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 2018. Vol. 32, no. 22. P. 1971–1977. DOI: 10.1002/rcm.8266

Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина, г. Рязань (Иванов А.И., Бугров П.В., Коненков Н.В.)

Рязанский государственный медицинский университет им. акад. И.П. Павлова, г. Рязань (Иванов А.И.)

Контакты: Коненков Николай Витальевич,
n.konenkov@rsu-rzn.ru

Материал поступил в редакцию 27.06.2025

LINEAR ION TRAP WITH AN ISLAND OF STABILITY FORMED BY QUADRUPOLE EXCITATION

A. I. Ivanov^{1,2}, P. V. Bugrov¹, N. V. Konenkov¹

¹Ryazan State University named for S.A. Yesenin, Ryazan, Russia

²Ryazan State Medical University named after acad. I.P. Pavlov, Ryazan, Russia

The conditions of mass-selective ion ejection at the boundary of the island of stability formed by a quadrupole additional voltage with a frequency of $\omega = \Omega / 2$ are considered. Within the island, the parameters β_x and β_y are found, which determine the spectrum of ion oscillations along the transverse coordinates X and Y of the quadrupole mass filter. An excitation contour near the stability boundary $q_b = 0.9082$ with a relative width of $q_b / \Delta q \approx 3000$ is presented.

Keywords: quadrupole mass filter, quadrupole excitation, island of stability, linear ion trap, excitation contour

REFERENCES

1. Konenkov N.V., Cousins L.M., Baranov V.I., Sudakov M. Quadrupole mass filter operation with auxiliary quadrupolar excitation: theory and experiment. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2001, vol. 208, no. 1-3, pp. 17–27. DOI: 10.1016/S1387-3806(01)00375-X
2. Konenkov N.V. Dipole and quadrupole resonance excitation in linear quadrupoles. *European Journal of Mass Spectrometry*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 3–37. DOI: 10.1177/14690667231204359
3. Dawson P.H. *Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications*. Amsterdam, Elsevier, 1976. 349 p.
4. McLachlan N.W. *Theory And Application Of Mathieu Functions*. London: Oxford Clarendon Press; Amen House, 1947. 423 p. (Russ. ed.: Mak-Lakhlan N.V. *Teoriya i primeneniye funktsii Mat'e*. Moscow: Izdatel'stvo inostrannoi literatury, 1953. 474 p.).
5. Konenkov N.V., Sudakov M.Yu., Douglas D.J. Matrix methods for the calculation of stability diagrams in quadrupole mass spectrometry. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2002, vol. 13, no. 6, pp. 597–613. DOI: 10.1016/S1044-0305(02)00365-3
6. Ivanov A.I., Sysoev A.A., Konenkov N.V. Mass-selective instability and resonance ejection modes for DIT with rectangular asymmetric wave shape. *European Journal of Mass Spectrometry*, 2024, vol. 30, no. 3-4, pp. 143–149. DOI: 10.1177/14690667241270234
7. Sudakov M.Yu., Apatskaya M.V. [The concept of effective potential for describing the motion of ions in a quadrupole mass filter]. *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki* [Journal of Experimental and Theoretical Physics], 2012, vol. 142, no. 2, pp. 222–229. URL: <http://jetp.ras.ru/cgi-bin/r/index/r/142/2/p222?a=list> (In Russ.).
8. Reilly P.T.A., Brabeck G.F. Mapping the pseudopotential well for all values of the Mathieu parameter q in digital and sinusoidal ion traps. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2015, vol. 392, pp. 86–90. DOI: 10.1016/j.ijms.2015.09.013
9. Ivanov A.I., Sysoev A.A., Konenkov A.N., Konenkov N.V. Modeling of a Linear Ion Trap with Driving Rectangular Waveforms. *Journal of Mass Spectrometry*, 2024, vol. 59, no. 6, Id. e5030. DOI: 10.1002/jms.5030
10. Sudakov M.Yu. [Stability diagram of secular motion of ions trapped in a radiofrequency quadrupole field in the presence of additional harmonic quadrupole excitation]. *Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoi fiziki* [Letters to the Journal of Technical Physics]. 2000, vol. 26, no. 19, pp. 46–51. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/37929> (In Russ.).
11. Polyakov A.S., Konenkov N.V., Berdnikov A.S. [Mass peak shape of the linear ion trap with cylindrical rods at quadrupolar resonance excitation of the confined ions]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2014, vol. 24, no. 3, pp. 49–61. (In Russ.). URL: <http://iairas.ru/mag/2014/abst3.php#abst7>
12. Sudakov M.Yu., Mamontov E.V. [Study of a quadrupole mass filter with quadrupole excitation by the envelope equation method]. *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki* [Journal of Technical Physics], 2016, vol. 86, no. 11, pp. 112–120. DOI: 10.21883/jtf.2016.11.43824.1783 (In Russ.).
13. Berdnikov A.S., Konenkov N.V., Kuzmin A.G., Masyukovich S.V. [On the application of the method of stroboscopic samples in the study of quadrupole excitation and quadrupole resonance]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2019, vol. 29, no. 1, pp. 126–134. DOI: 10.18358/np-29-1-i126134 (In Russ.).
14. Douglas D.J., Polyakov A., Konenkov N.V. Quadrupolar ion excitation for radiofrequency-only mass filter operation. *European Journal of Mass Spectrometry*, 2014, vol. 20, no. 3, pp. 207–214. DOI: 10.1255/ejms.1278

15. Douglas D.J., Konenkov N.V. Quadrupole mass filter operation with dipole direct current and quadrupole radio-frequency excitation. *Rapid Communications in Mass*

Spectrometry, 2018, vol. 32, no. 22, pp. 1971–1977. DOI: 10.1002/rcm.8266

Contacts: *Konenkov Nikolai Vitalievich*,
n.konenkov@rsu-rzn.ru

Article received by the editorial office on 27.06.2025

INTRODUCTION

Resonant quadrupole excitation of ion oscillations in a quadrupole mass filter (QMF) causes the appearance of instability bands on the a - q Mathieu diagram, following the isolines of the parameter β [1, 2]. The parameter β depends on the coordinate (a, q) and determines the spectrum of ion oscillations in a quadrupole electric field [3]. The equations of ion motion given an additional quadrupole voltage $V_a = V_x \cos \omega t$ have the form [2]

$$\frac{d^2 x}{d\xi^2} = -\left[a - 2q \cos(2(\xi - \xi_0)) - 2q_x \cos 2\nu\xi \right] x, \quad (1)$$

$$\frac{d^2 y}{d\xi^2} = +\left[a - 2q \cos(2(\xi - \xi_0)) - 2q_x \cos 2\nu\xi \right] y, \quad (2)$$

where a and q are the parameters of the Mathieu equation, defined as

$$a = \frac{8eU}{(m/z)\Omega^2 r_0^2}, \quad q = \frac{4eV}{(m/z)\Omega^2 r_0^2}, \quad (3)$$

$$q_x = \frac{4eV_x}{(m/z)\omega^2 r_0^2}, \quad \nu = \frac{\omega}{\Omega}.$$

Here x and y are the transverse coordinates of the quadrupole mass filter (QMF), $\pm(U + V \cos \Omega t + V_x \cos \omega t)$ is the voltage applied to the QMF electrodes, ze is the ion charge, r_0 is the radius of the circle inscribed between the electrode vertices.

The aim of this work is to study the ion-optical properties of the stability island along the q axis created by quadrupole excitation at a frequency of $\nu = 0.5$. This means that if the frequency of the main voltage is 2 MHz, then the frequency of the additional quadrupole voltage is 1 MHz. In particular, the work includes the calculation of the position of the stability island as a function of the amplitude q_x and frequency ν , determination of the parameter β and the depth of the potential well depending on the position of the operating point q , and, based on this, modeling the transmission contour of the QFM and the excitation contour during mass-selective ejection of ions from the trap at the stability boundary.

STABILITY DIAGRAM

Figure 1 shows a modified stability diagram of the QFM under quadrupole excitation with a dimensionless amplitude $q_x = 0.01$ and $q_x = 0.1$. Since the resonant excitation frequency $\nu = 0.5$, the instability bands follow the isolines $\beta_x = \beta_y = 0.5$. With an increase in the amplitude q_x , the width of the instability band increases — by an order of magnitude at $q_x = 0.1$, while the dimensions of the stability island (B), located

along the q axis, decrease. We are curious about the stability interval along the q -axis at $a = 0$.

Fig. 1. Stability islands (A, B).

With the quadrupole excitation parameters: frequency $\nu = 0.5$, amplitudes $q_x = 0.01$ and $q_x = 0.1$; stability parameters $\beta_x = \beta_y = 0.5$

The method for constructing the stability diagram (Fig. 1) consists of specifying a rectangular grid on the a - q plane. At the specified grid nodes (a_i, q_i) , the matrix M of coordinate and velocity transformations was calculated, as in the case of the Mathieu equation [3, 4]. The elements of the matrix M are calculated by numerically integrating equations (1) and (2) under the initial conditions: (a) $u_0 = 0, u'_0 = 1$ and (b) $u_0 = 1, u'_0 = 0$. Here $u = x$ or y . In our case, the equations of motion (1) and (2) are the Hill equations. Therefore, the integration was performed on the interval $(0, 2\pi)$, since the functions $2q \cdot \cos[2(\xi - \xi_0)]$ and $2q_x \cdot \cos 2\nu\xi$ have the least common period of 2π . If the trace of the matrix

$$|m_{11} + m_{22}|_X \leq 2 \text{ \& } |m_{11} + m_{22}|_Y \leq 2,$$

then the point (a_i, q_i) falls into the stability region [5]. Next, an array of stable points (a_i, q_i) is formed, which determines the location of the stability islands (Figs. 1 and 2). The number of points per the rectangular region $a \in (-0.3, 0.3)$, $q \in (0, 1)$ is 10 000.

Fig. 2. Stability island B.

For $a = 0$ in the interval (q_1, q_2) with excitation amplitude $q_x = 0.1$ and frequency $\nu = 0.5$

RESULTS

Figure 2 shows in detail the stability island for the excitation parameter $q_x = 0.1$ and the frequency $\nu = 0.5$.

The stability interval (q_1, q_2) along the q axis for $a = 0$ is controlled by the excitation amplitude q_x . This is illustrated in Fig. 2. It is evident from Fig. 1 that with increasing q_x the passband (q_1, q_2) decreases. However, the separation mode only in the high-frequency (HF) mode is practically impossible in this stability island, since the first stability island near the origin "shadows" the working island B (Fig. 1). This means that the mass spectra from the islands will overlap.

Figure 3 shows the dependences [6] of the frequency parameters β_x and β_y on the Mathieu parameter q for island B ($a = 0$). These dependencies show that the frequency spectrum of ion oscillations along the X and Y coordinates differs. In the region of joint stability lying along two coordinates and marked by dashed

vertical lines, ion oscillations along X lie in the low-frequency region, and along Y — in the high-frequency region.

Fig. 3. Dependencies of the parameters β_x and β_y on the parameter q and the depth of the potential well D/V for the X and Y transverse coordinates at $a = 0$.

Figure 3 also shows the dependences of the depth D/V of the potential well of the quadrupole field [7] for the model proposed in [8]. In the center of the stability region, the simultaneous depth reaches a maximum. It is important to note that the maximum of the potential well depth reaches its greatest value along the X coordinate at the value of q_b , when the value of q along the Y coordinate reaches the stability boundary. This can serve as the basis for the implementation of mass-selective ejection of ions through the Y rods upon reaching the boundary q_b (Fig. 3) [6, 9].

Figure 4 illustrates the mass selectivity of the resonant ejection at the boundary $q_b = 0.9064$ ($q_x = 0.1$) and the boundary $q_b = 0.9082$ ($q_x = 0.01$).

Fig. 4. Dependencies of the number of ions S that reached the surface of the Y electrodes on the parameter q . For two values of the quadrupole excitation amplitude $q_x = 0.01$ and $q_x = 0.1$; n is the number of periods of integration of the equations of motion at point q

The construction of the $S(q)$ dependencies was performed as follows. At the point q near the boundary, 1000 trajectories were calculated on the interval $(0, n\pi)$ and the number S of trajectories which amplitude exceeded r_0 was determined. Quantitatively, mass selectivity can be defined as the ratio of q_b to the bandwidth Δq at the 50% level of the number of ions ejected from the trap. The value of $q_b/\Delta q$ is about 3000 and weakly depends on the scanning rate f/n , where $f = \Omega/2\pi$ is the frequency of the HF generator,

n is the number of integration periods. The excitation contour $T(q)$ is transformed by the edge fields of the electrode and the input fields of the detector into a mass peak.

Sequential ejection of ions by mass from the trap is achieved by increasing the amplitude V of the HF generator. From formulas (3) it follows that

$$V_x = \frac{q_x}{q_b} V = \frac{0.1}{0.9064} V = 0.1103V \text{ for } q_x = 0.1$$

and $V_x = 0.01103V$ for $q_x = 0.01$.

The second case ($q_x = 0.01$) is more preferable, since the required amplitude V_x of the additional quadrupole voltage [10, 11] is an order of magnitude smaller, and the mass capacitance of the trap is larger and is

$$\frac{M_2}{M_1} = \frac{q_2}{q_1} \cong \frac{0.91}{0.65} = 1.4.$$

With amplitude scanning on the mass scale, the ratio V_x/V should be constant. Thus, with an amplitude of $V = 2000$ V, the maximum amplitude of the additional voltage is 22 V.

CONCLUSION

The paper describes the islands of stability along the q axis formed by an additional quadrupole voltage [12–15] with a frequency of $\omega = 0.5 \Omega$. At this frequency, the first stability region of the QFM splits into four islands, two of which intersect the axis $a = 0$. It is demonstrated that there exist advantageous circumstances in which, on island B, if $a = 0$, a mass-selective ion ejection takes place at the Y boundary and concurrently correlates with the potential well's maximum depth along the X coordinate. In this mode, the mass selectivity $q_b/\Delta q \approx 3000$ is achieved. A small value of the additional quadrupole voltage of the order of several tens of volts is required, this simplifies the scheme for forming the additional quadrupole voltage on the mass filter electrodes.