Научная статья УДК 537.21, 517.958 DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.17208

# АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ РАДИОЧАСТОТНЫХ ИОННЫХ ВОРОНОК С НЕЛИНЕЙНЫМ ПРОФИЛЕМ А. С. Бердников<sup>1</sup> <sup>III</sup>, С. В. Масюкевич<sup>1</sup>, Т. В. Помозов<sup>1</sup>, Ю. И. Хасин<sup>1</sup>, К. В. Соловьев<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

<sup>⊠</sup> asberd@yandex.ru

Аннотация. В статье рассматриваются аналитические выражения для потенциалов электрических полей, которые соответствуют радиочастотным воронкам с квадратичным, кубическим и биквадратным профилями. Электроды воронок представляют собой последовательность диафрагм с круговой или мультипольной структурой и апертурами переменного размера, который изменяется вдоль канала транспортировки по заданному закону. Полученные выражения могут быть полезны для быстрого качественного моделирования радиочастотных устройств, предназначенных для транспортировки и фокусировки ионов.

**Ключевые слова:** уравнение Лапласа, периодические электроды, аналитическое электрическое поле, ионное транспортирующее устройство

Финансирование: 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.

Для цитирования: Бердников А. С., Масюкевич С. В., Помозов Т. В., Хасин Ю. И., Соловьев К. В. Аналитические потенциалы электрических полей для моделирования мультипольных радиочастотных ионных воронок с нелинейным профилем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 2. С.94–119. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.17208

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии СС BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article

DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.17208

# ANALYTICAL ELECTRIC POTENTIALS FOR SIMULATION OF THE MULTIPOLE RADIOFREQUENCY ION FUNNELS WITH NONLINEAR PROFILES

## A. S. Berdnikov<sup>1</sup> <sup>⊠</sup>, S. V. Masyukevich<sup>1</sup>, T. V. Pomozov<sup>1</sup>, Yu. I. Hasin<sup>1</sup>, K. V. Solovyev<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>Institute for Analytical Instrumentation, RAS, St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

<sup>™</sup> asberd@yandex.ru

Abstract. The article considers analytical expressions for electric field potentials that correspond to radiofrequency funnels with quadratic, cubic and biquadratic profiles. The funnel

© Бердников А. С., Масюкевич С. В., Помозов Т. В., Хасин Ю. И., Соловьев К. В., 2024. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого. electrodes are a sequence of diaphragms with a circular or multipole structure and apertures of variable size. The latter varies along the transport channel according to the desired law. The resulting expressions can be useful for fast, high-quality simulation of radiofrequency devices designed to convey ion beams with simultaneous focusing.

Keywords: Laplace equation, periodic electrodes, analytical electric field, ion guide, ion funnel

**Funding:** The reported study was carried out at Institute for Analytical Instrumentation of Russian Academy of Sciences (St. Petersburg, Russia) within the framework of the theme FFZM-2022-0009 (State registration No. 122040600002-3) of the State Assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, No. 075-01157-23-00 dated 29.12.2022.

**For citation:** Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Pomozov T. V., Hasin Yu. I., Solovyev K. V., Analytical electric potentials for simulation of the multipole radiofrequency ion funnels with nonlinear profiles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (2) (2024) 94–119. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.17208

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons. org/licenses/by-nc/4.0/)

#### Введение

Настоящее исследование является прямым продолжением материалов статьи [1], где рассматриваются аналитические выражения для потенциалов электрических полей в цилиндрических транспортирующих каналах [2, 3] (фактически – в цилиндрических радиочастотных ловушках типа SRIG, впервые предложенных в работах [4, 5] и подробно исследованных в [2, 6 – 9]) и конических ионных воронках [10 – 16]. Однако при проектировании ионно-оптических устройств бывает удобно использовать радиочастотные фокусирующие воронки, профиль которых не является коническим (это показано, например, в статье [13]), а также квадрупольно-сегментированные либо мультипольно-сегментированные электроды (см., например, статью [33]).

В данной работе рассматриваются аналитические электрические потенциалы, предназначенные для моделирования ионных воронок с квадратичным, кубическим и биквадратичным профилями; а в более общем случае — для моделирования транспортирующих систем типа SRIG с круговыми, некруговыми и мультипольными диафрагмами, а также с профилем, который описывается полиномом соответствующей степени.

Эти аналитические решения трехмерного уравнения Лапласа представляют самостоятельный интерес, так как могут применяться для решения соответствующих задач математической физики.

### Радиочастотные ловушки с цилиндрическим каналом транспортировки

Ловушки с круговыми электродами. Радиочастотные ловушки и транспортирующие каналы типа SRIG (англ. Stacked Ring Ion Guides) в простейшем случае представляют собой последовательность круговых диафрагм с приложенными к ним радиочастотными напряжениями (в частности, представляют собой последовательности импульсов) со сдвигом фазы  $\pi$  между соседними диафрагмами [2 – 10]. В предположении, что выполнено условие квазистатичности электрического поля, можно выразить высокочастотный потенциал этого поля в виде функции времени, задающей закон изменения напряжений на электродах, которая умножается на потенциал электростатического поля, соответствующий постоянным напряжениям на электродах.

Предположение о квазистатичности высокочастотного электрического поля справедливо, когда время характерного изменения электрических напряжений на электродах существенно превышает время распространения электромагнитного возмущения в пределах устройства. Типичные размеры электродных конфигураций, используемых в конструкциях ионно-оптических систем, составляют не более нескольких десятков сантиметров (как правило, значительно меньше). С учетом равенства скорости света и скорости

© Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Pomozov T. V., Hasin Yu. I., Solovyev K. V., 2024. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

распространения электромагнитного возмущения, указанное предположение заведомо выполняется для частот электрических напряжений, обычно используемых в ионно-оптических устройствах (от сотен килогерц до нескольких мегагерц, редко — несколько гигагерц).

При таких условиях электромагнитное возмущение распространяется практически мгновенно, а высокочастотный электрический потенциал, изменяющийся во времени и пространстве, действительно можно представить как произведение функции времени и электростатического потенциала, зависящего от пространственных координат. Зависящий от времени множитель описывает временное изменение электрических напряжений, а зависящий от координат потенциал соответствует постоянным напряжениям на электродах, которые изменяются во времени синхронно и пропорционально друг другу.

Тем самым в рамках рассматриваемой модели создается электрическое поле, которое синхронно и пропорционально изменяется в каждой точке пространства. Хотя такой шаг есть, по сути, пренебрежение электродинамическими эффектами, т. е. сопутствующей электромагнитной волной — но он вполне допустим, если частота напряжений, прикладываемых к электродам, не слишком велика (в указанном выше смысле).

В типичном случае знаки и амплитуды напряжений, приложенных к отдельным диафрагмам цилиндрической ловушки или цилиндрического транспортирующего канала, чередуются по правилу

$$+U_{R}, -U_{R}, +U_{R}, -U_{R}, +U_{R}, -U_{R}, \dots$$
(1)

В силу симметрии геометрической формы электродов и антисимметрии напряжений, приложенных к электродам, плоскость, вдоль которой электрический потенциал тождественно равен нулю, располагается посередине между соседними электродами. Это позволяет добавить фиктивные диафрагмы с нулевыми напряжениями без искажения электрического поля и тем самым рассмотреть периодические последовательности напряжений, которые чередуются в соответствии с другим правилом:

$$+U_{R}, 0, -U_{R}, 0, +U_{R}, 0, -U_{R}, 0, +U_{R}, 0, -U_{R}, 0, \dots$$
(2)

Если сдвинуть на один шаг вдоль оси *z* конфигурацию электродов и аналитическое выражение для электрического потенциала с напряжениями (2), приложенных к диафрагмам, то получим решение для напряжений на диафрагмах, организованных по правилу

$$0, +U_{R}, 0, -U_{R}, 0, +U_{R}, 0, -U_{R}, 0, +U_{R}, 0, -U_{R}, \dots$$
(3)

На рис. 1 показана цилиндрическая радиочастотная ловушка типа SRIG с круговыми диафрагмами.

Известно [2], что вдали от краев электродов, в окрестности оси транспортирующего канала, электростатический потенциал такой системы электродов с приложенными к ним периодическими напряжениями, соответствующими последовательности напряжений (1), описывается с хорошей точностью выражением



Рис. 1. Структура периодических кольцевых электродов цилиндрической радиочастотной ловушки либо цилиндрического транспортирующего тракта типа SRIG

$$U(z,r) = \frac{U_R}{I_0(\lambda R)} \cos(\lambda z + \varphi) I_0(\lambda r), \qquad (4)$$

где z, r — аксиальная и радиальная координаты ( $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ );  $U_R$  — статические потенциалы, приложенные к диафрагмам;  $I_0$  — модифицированная функция Бесселя нулевого порядка [17 — 19];  $\lambda$  — параметр геометрического масштаба,  $\lambda = \pi/L$  (L — расстояние между соседними диафрагмами); R — радиус круговых диафрагм;  $\varphi$  — параметр, определяющий сдвиг последовательности диафрагм относительно начала координат.

Эквипотенциальные линии и трехмерный график электрического потенциала, заданного формулой (4), в нормированных координатах (z, r) показан на рис. 2.



Рис. 2. Статический электрический потенциал (5) в плоскости (r, z) в нормированных координатах для радиочастотной ловушки типа SRIG: a – эквипотенциальные линии на плоскости, b – трехмерный график

Потенциал (4) включает сумму двух линейно-независимых потенциалов с постоянными коэффициентами:

$$U_{C}(z,r) = \frac{U_{R}}{I_{0}(\lambda R)} \cos(\lambda z) I_{0}(\lambda r), \qquad (5)$$

$$U_{s}(z,r) = \frac{U_{R}}{I_{0}(\lambda R)} \sin(\lambda z) I_{0}(\lambda r).$$
(6)

На оси симметрии r = 0 потенциал (5) ведет себя как  $U_0 cos(\lambda z)$ , а потенциал (6) — как  $U_0 sin(\lambda z)$ , где  $U_0$  — амплитуда пространственных колебаний соответствующего электростатического потенциала на оси системы,  $U_0 = U_R/I_0(\lambda R)$ . Электростатические потенциалы (5), (6) оказываются полезными вспомогательными инструментами при конструировании аналитических моделей электрического поля для более сложных конфигураций электродов.

Функции (5) могут использоваться для описания электростатического поля периодической последовательности кольцевых диафрагм с напряжениями, соответствующими периодической последовательности напряжений (2), а функции (6) — диафрагм с напряжениями, соответствующими периодической последовательности напряжений (3). Для этого, однако, необходимо использовать геометрический масштаб  $\lambda = \pi/(2L)$ .

Действительно, цепочки напряжений (2) и (3) получаются из цепочки напряжений (1) с помощью вставки дополнительных диафрагм с нулевыми напряжениями между исходными диафрагмами (как было отмечено ранее, такая операция не искажает электрического поля для последовательности геометрически одинаковых электродов с антисимметричными периодическими напряжениями вида (1)). Расстояние между соседними диафрагмами становится равным L/2, если считать в исходном масштабе расстояний, поэтому геометрический масштаб  $\lambda$  следует пересчитать.

Практическим примером использования потенциалов (5), (6) в сочетании со схемами подачи электрических напряжений (2) и (3) могут служить аналитические электрические поля, используемые для моделирования ионно-оптических устройств [8, 9, 21 – 32].

Ловушки с квадрупольным сегментированием электродов. Вместо круговых диафрагм можно использовать квадрупольно-сегментированные диафрагмы (рис. 3). А именно, круговые диафрагмы разрезаются на четыре сегмента, а затем на получившиеся электроды подаются электрические напряжения таким образом, чтобы на соседних электродах оказались электрические напряжения противоположной полярности. Подобное устройство — это первая ступень двухкаскадного транспортирующего канала; оно рассматривалось, в частности, в статье [33] с помощью численного моделирования, а не аналитических моделей электрического потенциала.



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

Для конфигурации электродов, показанной на рис. 3, хорошей аппроксимацией в приосевой области при достаточном удалении от краев кольцевых электродов будут электростатические потенциалы вида

$$U_{C}^{(q)}(x, y, z) = \frac{U_{R}^{(q)}}{I_{2}(\lambda R)} \frac{x^{2} - y^{2}}{r^{2}} \cos(\lambda z) I_{2}(\lambda r),$$
(7)

$$U_{S}^{(q)}(x, y, z) = \frac{U_{R}^{(q)}}{I_{2}(\lambda R)} \frac{x^{2} - y^{2}}{r^{2}} \sin(\lambda z) I_{2}(\lambda r),$$
(8)

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  (по-прежнему);  $\pm U_R^{(q)}$  – электрические напряжения с чередующимися знаками, которые приложены к отдельным мультипольным сегментам тонкой квадру-польно-сегментированной диафрагмы;  $I_2$  – модифицированная функция Бесселя второго порядка [17 – 19].

Для функции  $I_2$  при  $r \approx 0$  справедлива оценка  $I_2(r) \sim r^2/8$ . В силу того, что предел выражения  $I_2(r)/r^2$  при  $r \to 0$  конечен, вблизи оси симметрии r = 0 потенциал (7) ведет себя как

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

а потенциал (8) - как

$$U_{S}^{(q)} \sim U_{0}^{(q)} \left( x^{2} - y^{2} \right) \sin\left(\lambda z\right),$$

где  $U_0^{(q)}$  – амплитуда пространственных колебаний соответствующей квадрупольной компоненты поля вблизи оси системы,

$$U_0^{(q)} = \lambda^2 U_R^{(q)} / (8I_2(\lambda R)).$$

Для конфигурации электродов, которая повернута относительно оси симметрии на 45°, хорошими приближениями для электрического поля в приосевой области являются аналитические функции вида

$$U_{C}^{(r)}(x, y, z) = \frac{U_{R}^{(r)}}{I_{2}(\lambda R)} \frac{xy}{r^{2}} \cos(\lambda z) I_{2}(\lambda r), \qquad (9)$$

$$U_{S}^{(r)}\left(x, y, z\right) = \frac{U_{R}^{(r)}}{I_{2}\left(\lambda R\right)} \frac{xy}{r^{2}} \sin\left(\lambda z\right) I_{2}\left(\lambda r\right).$$
(10)

Вблизи оси симметрии r = 0 потенциал (9) ведет себя как  $\sim U_0^{(r)} xy \cos(\lambda z)$ , а потенциал (10) – как  $\sim U_0^{(r)} xy \sin(\lambda z)$ .

Аналитические решения (7) – (10) можно комбинировать, чтобы получить аналитическое решение для квадрупольно-сегментированной ловушки с чередующимися ориентациями соседних электродов (рис. 4).



Рис. 4. Структура периодических квадрупольно-сегментированных электродов цилиндрической радиочастотной ловушки с квазиоктупольной симметрией размещения четных и нечетных электродов

Используем последовательность напряжений (2) для кольцевых диафрагм с традиционным квадрупольным сегментированием (см. рис. 3). Электростатический потенциал такой системы с хорошей точностью описывается аналитическим выражением (7), в котором используется геометрический масштаб  $\lambda = \pi/(2L)$ . Для последовательности напряжений (3) и кольцевых диафрагм с развернутым квадрупольным сегментированием электростатический потенциал описывается с хорошей точностью аналитическим выражением (8) с геометрическим масштабом  $\lambda = \pi/(2L)$ . Теперь объединим эти два решения, чтобы получить аналитическое выражение электрического потенциала для конфигурации кольцевых диафрагм на рис. 4.

Для нулевых потенциалов в первом приближении не имеет особого значения, какую именно форму имеют кольцевые электроды в соответствующем сечении. Для четных позиций напряжений (2) квадрупольно-сегментированные кольцевые электроды, создающие электростатический потенциал (7) в объеме ловушки, можно заменить развернутыми квадрупольно-сегментированными электродами. Точно так же для нечетных позиций напряжений (3) развернутые квадрупольно-сегментированные кольцевые электроды, создающие электростатический потенциал (7) в объеме ловушки, можно заменить обычными квадрупольно-сегментированными электродами. В соответствии с принципом суперпозиции электрических полей, при суммировании напряжений для фиксированной геометрической структуры электродов происходит суммирование соответствующих электрических полей. Это дает нам дополнительные аналитические решения, описывающие электростатическое поле для ловушки с развернутыми квадрупольно-сегментированными электродами (см. рис. 4):

$$U^{(a)}(x, y, z) = \pm U_{C}^{(q)}(x, y, z) \pm U_{S}^{(r)}(x, y, z), \qquad (11)$$

$$U^{(b)}(x, y, z) = \pm U_C^{(r)}(x, y, z) \pm U_S^{(q)}(x, y, z), \qquad (12)$$

в которых функции  $U_C^{(q)}, U_S^{(q)}, U_C^{(r)}, U_S^{(r)}$  определяются выражениями (7) — (10), а параметр геометрического масштаба выбирается в соответствии с равенством  $\lambda = \pi/(2L)$ .

**Примечание**. Указанную схему комбинирования двух аналитических решений можно использовать с разными электрическими напряжениями, разными радиусами кольцевых диафрагм, разными схемами сегментирования электродов (см. следующий раздел) и даже с разной формой некруговых диафрагм для четных и нечетных позиций. Однако такие экзотические решения представляют скорее теоретический, чем практический интерес.

**Ловушки с мультипольным сегментированием электродов.** В общем случае вместо квадрупольного сегментирования круговых электродов можно использовать мультипольное, произвольного порядка *n*. Для этого круговые диафрагмы разрезаются на 2*n* одинаковых сегментов, а затем на получившиеся электроды подаются электрические напряжения таким образом, чтобы на соседних электродах оказались электрические напряжения противоположной полярности. В приосевой области, при достаточном удалении от краев кольцевых электродов, хорошей аппроксимацией (в зависимости от поворота мультипольно-сегментированных электродов относительно оси симметрии) будут электростатические потенциалы вида

$$U_{C}^{(q,n)}(x,y,z) = \frac{U_{R}}{I_{n}(\lambda R)} r^{n} \cos\left(n \operatorname{Arg}(x,y)\right) \cos\left(\lambda z\right) I_{n}(\lambda r) / r^{n}, \qquad (13)$$

$$U_{S}^{(q,n)}(x,y,z) = \frac{U_{R}}{I_{n}(\lambda R)} r^{n} \cos\left(n \operatorname{Arg}(x,y)\right) \sin\left(\lambda z\right) I_{n}(\lambda r) / r^{n}, \qquad (14)$$

$$U_{C}^{(r,n)}(x,y,z) = \frac{U_{R}}{I_{n}(\lambda R)} r^{n} \sin\left(n \operatorname{Arg}(x,y)\right) \cos\left(\lambda z\right) I_{n}(\lambda r)/r^{n}, \qquad (15)$$

$$U_{S}^{(r,n)}(x,y,z) = \frac{U_{R}}{I_{n}(\lambda R)} r^{n} \sin(n \operatorname{Arg}(x,y)) \sin(\lambda z) I_{n}(\lambda r) / r^{n}, \qquad (16)$$

где  $\operatorname{Arg}(x,y)$  — аргумент комплексного числа x + iy;  $\lambda = \pi/L$  — параметр геометрического масштаба;  $I_n$  — модифицированная функция Бесселя *n*-ого порядка [17 — 19], *n* — порядок мультипольного сегментирования круговых диафрагм цилиндрической ловушки.

Функция  $I_n(r)$  при  $r \approx 0$  ведет себя как

$$I_n(r) \sim 2^{-n} r^n / n!,$$

а при  $r \to \infty$  — как

$$I_n(r) \sim \exp(r)/\sqrt{2\pi r}$$

В силу этого потенциалы (13) — (16) ведут себя при  $r \approx 0$  (т. е. вблизи от оси симметрии) как

$$U_C^{(q,n)} \sim U_0 r^n \cos\left(n \operatorname{Arg}(x, y)\right) \cos(\lambda z), \tag{17}$$

$$U_{S}^{(q,n)} \sim U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y))\sin(\lambda z), \qquad (18)$$

$$U_C^{(r,n)} \sim U_0 r^n \sin\left(n \operatorname{Arg}(x, y)\right) \cos(\lambda z), \tag{19}$$

$$U_{S}^{(r,n)} \sim U_{0}r^{n}\sin\left(n\operatorname{Arg}(x,y)\right)\sin(\lambda z),$$
(20)

где  $U_0$  – амплитуда пространственных колебаний соответствующей мультипольной компоненты электрического потенциала вблизи оси системы,

$$U_0 = U_R \left( 2^{-n} \lambda^n \right) / \left[ n! I_n \left( \lambda R \right) \right].$$

Тот факт, что функции (13) — (16) действительно удовлетворяют уравнению Лапласа (равно как и асимптотическое поведение функций при  $r \to 0$  и  $r \to \infty$ ), легко проверяется

прямой подстановкой с помощью программы [38]. Формулы (5), (6) и (7) – (10) являются частными случаями аналитических выражений (13) – (16). Линейные комбинации с постоянными коэффициентами, составленные из осесимметричных потенциалов (5), (6) и мультипольных потенциалов (7) – (10) и (13) – (16) с соответствующими весами, могут использоваться для аналитического описания электрических полей радиочастотных ловушек и транспортирующих устройств типа SRIG с некруговыми диафрагмами.

Как и в случае квадрупольно-сегментированных круговых диафрагм, рассмотренном в предыдущем разделе, мультипольно-сегментированные решения можно комбинировать и получать аналитические решения для мультипольно-сегментированных диафрагм с чередующимися углами поворота:

$$U^{(a,n)}(x,y,z) = \pm U^{(q,n)}_{C}(x,y,z) \pm U^{(r,n)}_{S}(x,y,z), \qquad (21)$$

$$U^{(b,n)}(x,y,z) = \pm U^{(r,n)}_C(x,y,z) \pm U^{(q,n)}_S(x,y,z).$$
(22)

В этих выражениях функции  $U_C^{(q,n)}, U_S^{(q,n)}, U_C^{(r,n)}, U_S^{(r,n)}$  определяются выражениями (13) – (16), а  $\lambda = \pi/(2L)$ .

Двумерные мультипольные множители. В формулах (13) – (20) выражения

$$Q_n(x, y) = r^n \cos(n \operatorname{Arg}(x, y)), \qquad (23)$$

$$R_n(x,y) = r^n \sin(n \operatorname{Arg}(x,y)), \qquad (24)$$

являются гармоническими однородными полиномами, удовлетворяющими двумерному уравнению Лапласа. Свойство однородности по Эйлеру степени *n* для функций  $Q_n(x, y)$  и  $R_n(x, y)$  следует непосредственно из формул (23), (24):

при 
$$\forall \lambda > 0, \forall x, y: Q_n(\lambda x, \lambda y) = \lambda^n Q_n(x, y), R_n(\lambda x, \lambda y) = \lambda^n R_n(x, y),$$

а гармоничность проверяется прямой подстановкой выражений (23), (24) в уравнение Лапласа.

Последовательность двумерных гармонических однородных полиномов  $Q_n(x, y)$  и  $R_n(x, y)$ , вычисляемых в соответствии с формулами (23), (24) и упорядоченных по возрастанию степени однородности (порядка мультипольности), имеет вид:

1, x, y, 
$$x^2 - y^2$$
,  $2xy$ ,  $x^3 - 3xy^2$ ,  $3x^2y - y^3$ , ...

Множители  $Q_n(x, y)$  и  $R_n(x, y)$  обеспечивают мультипольную симметрию относительно оси симметрии OZ для рассматриваемых потенциалов. Выражения (23), (24), подчиняют-ся следующим рекуррентным соотношениям:

$$Q_0(x,y) = 1, R_0(x,y) = 0,$$
 (25)

$$Q_{n+1}(x,y) = xQ_n(x,y) - yR_n(x,y),$$
(26)

$$R_{n+1}(x, y) = yQ_n(x, y) + xR_n(x, y).$$
(27)

Общими выражениями для функций, заданных с помощью рекуррентных соотношений (25) – (27), являются формулы (23), (24). Это либо следует из единственности функций, которые должны вычисляться в соответствии с рекуррентными соотношениями (25) – (27), либо легко доказывается по индукции, либо становится очевидным после записи рекуррентных соотношений (25) – (27) в комплексной форме:

$$Q_0(x,y)+iR_0(x,y)=1,$$

$$Q_{n}(x, y) + iR_{n}(x, y) = (x + iy) [Q_{n-1}(x, y) + iR_{n-1}(x, y)],$$
$$Q_{n}(x, y) + iR_{n}(x, y) = (x + iy)^{n}.$$

Последнее равенство означает, что

$$Q_n = \operatorname{Re}(x+iy)^n$$
,  $R_n = \operatorname{Im}(x+iy)^n$ ,

откуда при использовании тригонометрической формы записи комплексных чисел получаются формулы (23), (24).

Полиномиальная природа функций (23), (24), равно как и однородность этих полиномов (каждый из них является суммой однородных мономов степени *n*, которые имеют вид  $c_k x^k y^{n-k}$ , где k = 0, 1, ..., n), автоматически следуют из рекуррентных соотношений (25) – (27). То, что эти полиномы удовлетворяют двумерному уравнению Лапласа, можно получить и без привлечения общих формул (23), (24): для функций  $Q_n(x, y)$  и  $R_n(x, y)$ , подчиняющихся рекуррентным соотношениям (25) – (27), выполняются соотношения Коши – Римана:

$$\frac{\partial Q_n(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial R_n(x,y)}{\partial y}, \quad \frac{\partial Q_n(x,y)}{\partial y} = -\frac{\partial R_n(x,y)}{\partial x}.$$
(28)

Свойство (28) доказывается по индукции с помощью вспомогательных равенств, которые следуют из рекуррентных соотношений (25) – (27):

$$\frac{\partial Q_{n+1}}{\partial x} - \frac{\partial R_{n+1}}{\partial y} = Q_n + x \frac{\partial Q_n}{\partial x} - y \frac{\partial R_n}{\partial x} - Q_n - y \frac{\partial Q_n}{\partial y} - x \frac{\partial R_n}{\partial y} = x \left( \frac{\partial Q_n}{\partial x} - \frac{\partial R_n}{\partial y} \right) - y \left( \frac{\partial Q_n}{\partial y} + \frac{\partial R_n}{\partial x} \right),$$
$$\frac{\partial Q_{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial R_{n+1}}{\partial x} = x \frac{\partial Q_n}{\partial y} - R_n - y \frac{\partial R_n}{\partial y} + y \frac{\partial Q_n}{\partial x} + R_n + x \frac{\partial R_n}{\partial x} = x \left( \frac{\partial Q_n}{\partial y} + \frac{\partial R_n}{\partial x} \right) + y \left( \frac{\partial Q_n}{\partial x} - \frac{\partial R_n}{\partial y} \right).$$

#### Радиочастотные воронки с коническим каналом транспортировки

Воронки с круговыми электродами. Радиочастотные ионные воронки в классическом варианте представляют собой последовательность круговых диафрагм с уменьшающимися радиусами, которые подчиняются закону изменения радиусов сечения кругового конуса плоскостями, расположенными в плоскости диафрагмы и перпендикулярными к оси конуса (рис. 5). Для такой геометрической конфигурации электродов следует ожидать поведения осесимметричного электрического потенциала V(z, r) на оси системы как сумму потенциалов

$$V_C \sim U_0 z \cos(\lambda z)$$
 и  $V_S \sim U_0 z \sin(\lambda z)$ ,

где  $U_0$  – масштабирующий множитель для линейно-растущей амплитуды пространственных колебаний соответствующего электрического потенциала на оси системы.





В статье [1] для конических радиочастотных воронок с круговыми диафрагмами предложены следующие аналитические формулы:

$$V_{C}(z,r) = U_{0} \Big[ z \cos(\lambda z) I_{0}(\lambda r) + r \sin(\lambda z) I_{1}(\lambda r) \Big],$$
<sup>(29)</sup>

$$V_{S}(z,r) = U_{0} \Big[ z \sin(\lambda z) I_{0}(\lambda r) - r \cos(\lambda z) I_{1}(\lambda r) \Big],$$
(30)

где  $\lambda = \pi/L$  – геометрический масштаб,  $I_1$  – модифицированная функция Бесселя первого порядка [17 – 19].

Для функции  $I_1$  при  $r \approx 0$  справедлива оценка  $I_1(r) \approx r/2$ . На оси *z* системы эти аналитические решения ведут себя как

$$V_C \sim U_0 z \cos(\lambda z), \ V_S \sim U_0 z \sin(\lambda z).$$

Эквипотенциальные линии и трехмерный график электрического потенциала, заданного формулой (29), в нормированных координатах (*z*, *r*) показан на рис. 6. Функция (29) превращается в функцию (30) при замене  $z \rightarrow z + \pi/2\lambda$ , поэтому их графики переходят друг в друга при сдвиге вдоль оси *OZ*.

Решения (29), (30) получаются в результате дифференцирования решений (5), (6) по параметру  $\lambda$  после подстановки

$$U_0 = U_R / I_0 (\lambda R),$$

где  $U_0$  – амплитуда пространственных колебаний электростатического потенциала на оси радиочастотной ловушки типа SRIG.



Рис. 6. Статический электрический потенциал (29) в плоскости (*z*, *r*) в нормированных координатах для радиочастотной воронки типа SRIG: *a* – эквипотенциальные линии на плоскости, *b* – трехмерный график

Воронки с квадрупольно-сегментированными электродами. Точно так же, с помощью дифференцирования по параметру  $\lambda$ , из формул (7) – (10) получаются аналитические решения для конических квадрупольно-сегментированных воронок (по аналогии с рис. 3):

$$V_{C}^{(q)}(x, y, z) = U_{0}^{(q)}(x^{2} - y^{2}) \left\{ z \cos(\lambda z) \frac{8I_{2}(\lambda r)}{\lambda^{2} r^{2}} + 4r^{2} \sin(\lambda z) \frac{\lambda r [I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r)] - 4I_{2}(\lambda r)}{\lambda^{3} r^{2}} \right\},$$
(31)

$$V_{S}^{(q)}(x,y,z) = U_{0}^{(q)}\left(x^{2} - y^{2}\right) \left\{ z \sin\left(\lambda z\right) \frac{8I_{2}\left(\lambda r\right)}{\lambda^{2}r^{2}} - -4r^{2}\cos\left(\lambda z\right) \frac{\lambda r \left[I_{1}\left(\lambda r\right) + I_{3}\left(\lambda r\right)\right] - 4I_{2}\left(\lambda r\right)}{\lambda^{3}r^{2}} \right\},$$
(32)

где  $I_3$  — модифицированная функция Бесселя третьего порядка [17 — 19]. Для функции  $I_3$  при  $r \approx 0$  справедлива оценка  $I_3(r) \sim r^3/48$ .

Подобное устройство как вторая ступень двухкаскадного транспортирующего канала рассматривалось, в частности, в статье [33], но с помощью численного моделирования, а не аналитических моделей электрического потенциала.

Вблизи оси симметрии, когда r = 0, потенциал (31) ведет себя как

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

а потенциал (32) - как

$$V_{S}^{(q)} \sim U_{0}^{(q)} \left( x^{2} - y^{2} \right) z \sin\left(\lambda z\right).$$

Аналогичным образом для конфигурации квадрупольно-сегментированных круговых электродов, которая повернута на 45° относительно оси симметрии, аналитическими решениями для соответствующих статических электрических потенциалов являются функции вида

$$V_{C}^{(r)}(x,y,z) = U_{0}^{(r)}xy\left\{z\cos(\lambda z)\frac{8I_{2}(\lambda r)}{\lambda^{2}r^{2}} + 4r\sin(\lambda z)\frac{\lambda r\left[I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r)\right] - 4I_{2}(\lambda r)}{\lambda^{3}r^{3}}\right\},$$
(33)

$$V_{S}^{(r)}(x,y,z) = U_{0}^{(r)}xy\left\{z\sin(\lambda z)\frac{8I_{2}(\lambda r)}{\lambda^{2}r^{2}} - 4r\cos(\lambda z)\frac{\lambda r\left[I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r)\right] - 4I_{2}(\lambda r)}{\lambda^{3}r^{3}}\right\},\qquad(34)$$

Вблизи оси симметрии (r = 0) потенциал (33) ведет себя как

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

а потенциал (34) - как

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

Как и в случае квадрупольно-сегментированных радиочастотных ловушек типа SRIG, по аналогии с рис. 4, при комбинировании квадрупольных потенциалов с разным разворотом электродов относительно оси симметрии, можно получить аналитические модели электрических потенциалов для конических воронок с разным поворотом составных электродов относительно оси воронки у четных и нечетных диафрагм:

$$V^{(a)}(x, y, z) = \pm V_C^{(q)}(x, y, z) \pm V_S^{(r)}(x, y, z),$$
(35)

$$V^{(b)}(x,y,z) = \pm V_C^{(r)}(x,y,z) \pm V_S^{(q)}(x,y,z).$$
(36)

Воронки с мультипольно-сегментированными электродами. В общем случае аналитические решения для конической радиочастотной ловушки с мультипольно-сегментированными электродами получаются при дифференцировании по параметру  $\lambda$  формул (13) – (16) после подстановки

$$U_0 = U_R / I_0 (\lambda R),$$

где U<sub>0</sub> – амплитуда пространственных колебаний соответствующей мультипольной компоненты электростатического потенциала на оси радиочастотной ловушки:

$$V_{C}^{(q,n)}(x,y,z) = U_{0}^{(q)}r^{n}\cos\left(n\operatorname{Arg}(x,y)\right)\left[z\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + r\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r)\right],$$
(37)

$$V_{S}^{(q,n)}(x,y,z) = U_{0}^{(q)}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y))\left[z\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - r\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r)\right],$$
(38)

$$V_{C}^{(r,n)}(x,y,z) = U_{0}^{(r)}r^{n}\sin\left(n\operatorname{Arg}(x,y)\right)\left[z\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + r\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r)\right],$$
(39)

$$V_{S}^{(r,n)}(x,y,z) = U_{0}^{(r)}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y))\left[z\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - r\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r)\right],$$
(40)

где

$$f_0(\rho) = \frac{2^n n! I_n(\rho)}{\rho^n},\tag{41}$$

$$f_{1}(\rho) = \frac{2^{n-1}n!}{\rho^{n+1}} \{ \rho [I_{n-1}(\rho) + I_{n+1}(\rho)] - 2nI_{n}(\rho) \}.$$
(42)

Выражения (41), (42) не имеют особенностей в нуле, а при  $\rho\approx 0$  выполняются равенства

$$f_0(\rho) \approx 1 + \frac{1}{4(n+1)}\rho^2,$$
  
$$f_1(\rho) \approx \frac{1}{2(n+1)}\rho + \frac{1}{8(n+1)(n+2)}\rho^3$$

По аналогии с мультипольно-сегментированными радиочастотными ловушками типа SRIG с развернутым положением электродов для четных и нечетных диафрагм (см. рис. 4), возможно комбинирование мультипольных потенциалов с разным разворотом мультипольных конфигураций, что позволяет получить аналитические модели электрических потенциалов для соответствующих конических воронок:

$$V^{(a,n)}(x,y,z) = \pm V_C^{(q,n)}(x,y,z) \pm V_S^{(r,n)}(x,y,z),$$
(43)

$$V^{(b,n)}(x,y,z) = \pm V_C^{(r,n)}(x,y,z) \pm V_S^{(q,n)}(x,y,z).$$
(44)

## Радиочастотные воронки с полиномиальным профилем канала

**Круговые электроды.** В работе [13] показано, что радиочастотные воронки с круговыми диафрагмами и квадратичным профилем канала транспортировки (рис. 7) могут обеспечивать дополнительные преимущества, по сравнению с обычными коническими воронками. Чтобы получить аналитические выражения для осесимметричных электрических потенциалов, которые на оси *z* следуют зависимостям

$$W_{C} \sim U_{0} z^{2} \cos(\lambda z)$$
 и  $W_{S} \sim U_{0} z^{2} \sin(\lambda z)$ ,

потребуется продифференцировать выражения (29), (30) по параметру λ.

Это дает следующие формулы:

$$W_{C}(z,r) = U_{0}\left\{z^{2}\cos(\lambda z)I_{0}(\lambda r) + 2rz\sin(\lambda z)I_{1}(\lambda r) - \frac{r^{2}}{2}\cos(\lambda z)\left[I_{0}(\lambda r) + I_{2}(\lambda r)\right]\right\}, \quad (45)$$

$$W_{s}(z,r) = U_{0}\left\{z^{2}\sin(\lambda z)I_{0}(\lambda r) - 2rz\cos(\lambda z)I_{1}(\lambda r) - \frac{r^{2}}{2}\sin(\lambda z)\left[I_{0}(\lambda r) + I_{2}(\lambda r)\right]\right\}.$$
 (46)

Эквипотенциальные линии и трехмерный график электрического потенциала, заданного формулой (45), в нормированных координатах (*z*, *r*) показан на рис. 8. Как и в случае воронок с коническим профилем, функция (45) превращается в функцию (46) при замене  $z \rightarrow z + \pi/(2\lambda)$ , поэтому их графики переходят друг в друга при сдвиге вдоль оси *OZ*.



Рис. 7. Структура периодических кольцевых электродов радиочастотной воронки с квадратичным профилем



Рис. 8. Статический электрический потенциал (45) в плоскости (z, r) в нормированных координатах для радиочастотной воронки типа SRIG: a – эквипотенциальные линии на плоскости, b – трехмерный график

Аналогичным образом получаются аналитические выражения для осесимметричных электрических потенциалов, которые на оси z подчиняются зависимостям

$$G_{C} \sim U_{0}z^{3}\cos(\lambda z), \ G_{S} \sim U_{0}z^{3}\sin(\lambda z), \ H_{C} \sim U_{0}z^{4}\cos(\lambda z), \ H_{S} \sim U_{0}z^{4}\sin(\lambda z),$$

а именно:

$$G_{C}(z,r) = U_{0}\left\{z^{3}\cos(\lambda z)I_{0}(\lambda r) + 3rz^{2}\sin(\lambda z)I_{1}(\lambda r) - \frac{3r^{2}z}{2}\cos(\lambda z)\left[I_{0}(\lambda r) + I_{2}(\lambda r)\right] - \frac{r^{3}}{4}\sin(\lambda z)\left[3I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r)\right]\right\},$$
(47)

$$G_{s}(z,r) = U_{0}\left\{z^{3}\sin(\lambda z)I_{0}(\lambda r) - 3rz^{2}\cos(\lambda z)I_{1}(\lambda r) - \frac{3r^{2}z}{2}\sin(\lambda z)\left[I_{0}(\lambda r) + I_{2}(\lambda r)\right] + \frac{r^{3}}{4}\sin(\lambda z)\left[3I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r)\right]\right\},$$
(48)

$$H_{c}(z,r) = U_{0} \left\{ z^{4} \cos(\lambda z) I_{0}(\lambda r) + 4rz^{2} \sin(\lambda z) I_{1}(\lambda r) - -3r^{2}z^{2} \cos(\lambda z) \left[ I_{0}(\lambda r) + I_{2}(\lambda r) \right] - r^{3}z \sin(\lambda z) \left[ 3I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r) \right] + \frac{r^{4}}{8} \cos(\lambda z) \left[ 3I_{0}(\lambda r) + 4I_{2}(\lambda r) + I_{4}(\lambda r) \right] \right\},$$

$$(49)$$

$$H_{s}(z,r) = U_{0} \left\{ z^{4} \sin(\lambda z) I_{0}(\lambda r) - 4rz^{2} \cos(\lambda z) I_{1}(\lambda r) - -3r^{2}z^{2} \sin(\lambda z) \left[ I_{0}(\lambda r) + I_{2}(\lambda r) \right] + r^{3}z \cos(\lambda z) \left[ 3I_{1}(\lambda r) + I_{3}(\lambda r) \right] + \frac{r^{4}}{8} \sin(\lambda z) \left[ 3I_{0}(\lambda r) + 4I_{2}(\lambda r) + I_{4}(\lambda r) \right] \right\}.$$
(50)

Квадрупольно- и мультипольно-сегментированные электроды. При дифференцировании по параметру  $\lambda$  выражений (37) — (40) получаются аналитические выражения для электрических потенциалов радиочастотных воронок с мультипольным (при n = 2 - c квадрупольным) сегментированием круговых диафрагм и нелинейным (квадратичным, кубическим и биквадратичным) профилем канала транспортировки и соответствующим разворотом мультипольных сегментов относительно оси симметрии:

$$W_{C}^{(q,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{2}\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + 2rz\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - r^{2}\cos(\lambda z)f_{2}(\lambda r)\right],$$
(51)

$$W_{S}^{(q,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \\ \times \left[z^{2}\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - 2rz\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - r^{2}\sin(\lambda z)f_{2}(\lambda r)\right],$$
(52)

$$W_{C}^{(r,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{2}\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + 2rz\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - r^{2}\cos(\lambda z)f_{2}(\lambda r)\right],$$
(53)

$$W_{S}^{(r,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{2}\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - 2rz\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - r^{2}\sin(\lambda z)f_{2}(\lambda r)\right],$$
(54)

$$G_{C}^{(q,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{3}\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + 3z^{2}r\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - 3zr^{2}\cos(\lambda z)f_{2}(\lambda r) - r^{3}f_{3}(\lambda r)\sin(\lambda z)\right],$$
(55)

$$G_{S}^{(q,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{3}\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - 3z^{2}r\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - 3zr^{2}\sin(\lambda z)f_{2}(\lambda r) + r^{3}f_{3}(\lambda r)\cos(\lambda z)\right],$$
(56)

$$G_{C}^{(r,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{3}\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + 3z^{2}r\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - 3zr^{2}\cos(\lambda z)f_{2}(\lambda r) - r^{3}f_{3}(\lambda r)\sin(\lambda z)\right],$$
(57)

$$G_{S}^{(r,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times$$

$$\times \left[z^{3}\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - 3z^{2}r\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - 3zr^{2}\sin(\lambda z)f_{2}(\lambda r) + r^{3}f_{3}(\lambda r)\cos(\lambda z)\right],$$
(58)

$$H_{C}^{(q,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \\ \times \left[z^{4}\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + 4z^{3}r\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - (59)\right] \\ - 6z^{2}r^{2}\cos(\lambda z)f_{2}(\lambda r) - 4zr^{3}f_{3}(\lambda r)\sin(\lambda z) + r^{4}f_{4}(\lambda r)\cos(\lambda z)\right],$$

$$H_{S}^{(q,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\cos(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{4}\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - 4z^{3}r\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - (62^{2}r^{2}\sin(\lambda z)f_{2}(\lambda r) + 4zr^{3}f_{3}(\lambda r)\cos(\lambda z) + r^{4}f_{4}(\lambda r)\sin(\lambda z)\right],$$
(60)

107

$$H_{C}^{(r,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{4}\cos(\lambda z)f_{0}(\lambda r) + 4z^{3}r\sin(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - 6z^{2}r^{2}\cos(\lambda z)f_{2}(\lambda r) - 4zr^{3}f_{3}(\lambda r)\sin(\lambda z) + r^{4}f_{4}(\lambda r)\cos(\lambda z)\right],$$
(61)

$$H_{S}^{(r,n)}(z,r) = U_{0}r^{n}\sin(n\operatorname{Arg}(x,y)) \times \left[z^{4}\sin(\lambda z)f_{0}(\lambda r) - 4z^{3}r\cos(\lambda z)f_{1}(\lambda r) - 6z^{2}r^{2}\sin(\lambda z)f_{2}(\lambda r) + 4zr^{3}f_{3}(\lambda r)\cos(\lambda z) + r^{4}f_{4}(\lambda r)\sin(\lambda z)\right],$$
(62)

где

$$\begin{split} f_{0}(\rho) &= \frac{2^{n} n! I_{n}(\rho)}{\rho^{n}}, \\ f_{1}(\rho) &= \frac{2^{n-1} n!}{\rho^{n+1}} \{ \rho \Big[ I_{n-1}(\rho) + I_{n+1}(\rho) \Big] - 2nI_{n}(\rho) \}, \\ f_{2}(\rho) &= \frac{2^{n-2} n!}{\rho^{n+2}} \{ \rho^{2} \Big[ I_{n-2}(\rho) + 2I_{n}(\rho) + I_{n+2}(\rho) \Big] - \\ &- \rho \Big[ I_{n-1}(\rho) + I_{n+1}(\rho) \Big] + 4n(n+1)I_{n}(\rho) \}, \\ f_{3}(\rho) &= \frac{2^{n-3} n!}{\rho^{n+3}} \{ \rho^{3} \Big[ I_{n-3}(\rho) + 3I_{n-1}(\rho) + 3I_{n+1}(\rho) + I_{n+3}(\rho) \Big] - \\ &- 6n\rho^{2} \Big[ I_{n-2}(\rho) + 2I_{n}(\rho) + I_{n+2}(\rho) \Big] + 12n(n+1)\rho \Big[ I_{n-1}(\rho) + I_{n+1}(\rho) \Big] - \\ &- 8n(n+1)(n+2)I_{n}(\rho) \}, \\ f_{4}(\rho) &= \frac{2^{n-4} n!}{\rho^{n+4}} \{ \rho^{4} \Big[ I_{n-4}(\rho) + 4I_{n-2}(\rho) + 6I_{n}(\rho) + 4I_{n+2}(\rho) + I_{n+4}(\rho) \Big] - \\ &- 8n\rho^{3} \Big[ I_{n-3}(\rho) + 3I_{n-1}(\rho) + 3I_{n+1}(\rho) + I_{n+3}(\rho) \Big] + \\ &+ 24n(n+1)\rho^{2} \Big[ I_{n-2}(\rho) + 2I_{n}(\rho) + I_{n+2}(\rho) \Big] - \\ &- 32n(n+1)(n+2)\rho \Big[ I_{n-1}(\rho) + I_{n+1}(\rho) \Big] + \\ &+ 16n(n+1)(n+2)(n+3)I_{n}(\rho) \}. \end{split}$$

Функции  $f_0(\rho), f_1(\rho), f_2(\rho), f_3(\rho), f_4(\rho)$  не имеют особенностей в нуле; при  $\rho \approx 0$  выполняются следующие приближенные равенства:

$$f_{0}(\rho) \approx 1 + \frac{1}{4(n+1)}\rho^{2},$$

$$f_{1}(\rho) \approx \frac{1}{2(n+1)}\rho + \frac{1}{8(n+1)(n+2)}\rho^{3},$$

$$f_{2}(\rho) \approx \frac{1}{2(n+1)} + \frac{1}{8(n+1)(n+2)}\rho^{2},$$

$$f_{3}(\rho) \approx \frac{3}{4(n+1)(n+2)}\rho + \frac{5}{16(n+1)(n+2)(n+3)}\rho^{3},$$

$$f_{4}(\rho) \approx \frac{3}{4(n+1)(n+2)} + \frac{15}{16(n+1)(n+2)(n+3)}\rho^{2}.$$

Также возможно комбинирование мультипольных потенциалов с разным разворотом мультипольных конфигураций, что позволяет получить аналитические модели электрических потенциалов для соответствующих воронок с нелинейным профилем:

$$\begin{split} W^{(a,n)}(x,y,z) &= \pm W_C^{(q,n)}(x,y,z) \pm W_S^{(r,n)}(x,y,z), \\ W^{(b,n)}(x,y,z) &= \pm W_C^{(r,n)}(x,y,z) \pm W_S^{(q,n)}(x,y,z), \\ G^{(a,n)}(x,y,z) &= \pm G_C^{(q,n)}(x,y,z) \pm G_S^{(r,n)}(x,y,z), \\ G^{(b,n)}(x,y,z) &= \pm G_C^{(r,n)}(x,y,z) \pm G_S^{(q,n)}(x,y,z), \\ H^{(a,n)}(x,y,z) &= \pm H_C^{(q,n)}(x,y,z) \pm H_S^{(r,n)}(x,y,z), \\ H^{(b,n)}(x,y,z) &= \pm H_C^{(r,n)}(x,y,z) \pm H_S^{(q,n)}(x,y,z). \end{split}$$

#### Оценка точности приближения

Как уже отмечено выше, приведенные аналитические выражения не совсем точно описывают требуемые электрические поля вблизи краев электродов. Требуется получить оценку, на какую величину нужно отступить от краев электродов, чтобы можно было гарантированно пользоваться полученными аналитическими выражениями.

Рассмотрим, например, осесимметричный электрический потенциал, заданный формулой (6). В случае, когда расстояние между соседними диафрагмами равно L, радиус диафрагмы равен R, а напряжения на диафрагмах задаются в соответствии с шаблоном (1), это приводит к аналитическому выражению

$$U_{S}(z,r) = \frac{U_{R}}{I_{0}(\pi R/L)} \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_{0}\left(\frac{\pi r}{L}\right).$$
(63)

Для потенциала (63) краевое условие, заданное вдоль линии r = R, представляет собой синусоидальную функцию с амплитудой  $U_R$  (рис. 9,*a*). Однако для реальной геометрии с бесконечно тонкими круговыми диафрагмами потенциал вдоль горизонтальной линии r = R должен быть в точности равен  $+U_p$  в точках

$$z_{2k} = (L/2) + 2Lk,$$

должен быть в точности равен  $-U_{R}$  в точках

$$z_{2k+1} = (3L/2) + 2Lk$$

а в промежуточных точках  $z_{2k} \le z \le z_{2k+1}$  должен представлять собой гладкую монотонную функцию, антисимметричную относительно центральной точки, расположенной между реперными точками  $z_{2k}$  и  $z_{2k+1}$ . В частности, в качестве модельного распределения для краевого распределения потенциала допустимо использовать кусочно-линейную функцию (рис. 9,*b*).

Краевое условие для электрического потенциала, заданное вдоль горизонтальной линии r = R, очевидным образом представляет собой периодическую функцию от координаты z с периодом 2L и поэтому может быть разложено в ряд Фурье. В силу симметричности геометрической конфигурации электродов и антисимметричности потенциалов, приложенных к электродам, в разложении в ряд Фурье будут присутствовать только нечетные синусоидальные гармоники, тогда как косинусоидальные гармоники строго равны нулю.

Например, для кусочно-линейного распределения потенциала, показанного на рис. 9,*b*, рассматриваемый ряд Фурье будет иметь вид

$$U_{\rho}(z) \approx \frac{8U_R}{\pi^2} \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) - \frac{8U_R}{9\pi^2} \sin\left(\frac{3\pi z}{L}\right) + \frac{8U_R}{25\pi^2} \sin\left(\frac{5\pi z}{L}\right) - \frac{8U_R}{49\pi^2} \sin\left(\frac{7\pi z}{L}\right) + \cdots.$$
(64)

Точное аналитическое решение для краевого условия (64) имеет вид:

$$U_{s}^{*}(z,r) = \frac{8U_{R}}{\pi^{2}I_{0}\left(\pi R/L\right)} \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) I_{0}\left(\frac{\pi r}{L}\right) - \frac{8U_{R}}{9\pi^{2}I_{0}\left(3\pi R/L\right)} \sin\left(\frac{3\pi z}{L}\right) I_{0}\left(\frac{3\pi r}{L}\right) +$$

$$8U_{R}\left(5\pi z\right) = \left(5\pi r\right) = 8U_{R}\left(7\pi z\right) = \left(7\pi r\right)$$

$$(65)$$

$$+\frac{8U_{R}}{25\pi^{2}I_{0}(5\pi R/L)}\sin\left(\frac{5\pi z}{L}\right)I_{0}\left(\frac{5\pi r}{L}\right)-\frac{8U_{R}}{49\pi^{2}I_{0}(7\pi R/L)}\sin\left(\frac{7\pi z}{L}\right)I_{0}\left(\frac{7\pi r}{L}\right)+\cdots.$$
109



Рис. 9. Краевые условия (в нормированных координатах) вдоль линии *r* = *R* на интервале между двумя соседними диафрагмами при определении электрического поля ловушки типа SRIG для различных модельных случаев: *a* – аналитического решения (9); *b* – бесконечно тонких диафрагм; *c* –диафрагм конечной толщины; *d* – замены линейной аппроксимации граничного значения потенциала точным аналитическим решением (см. пример 5 в п. 49, § 2, гл. III в книге [34])

Для отношения амплитуды третьей (паразитной) пространственной гармоники к амплитуде первой (основной) пространственной гармоники, на расстоянии *r* от оси симметрии, в соответствии с выражением (65), справедлива формула

$$\Lambda(r) = \frac{1}{9} \frac{I_0(3\pi r/L)}{I_0(3\pi R/L)} \bigg/ \frac{I_0(\pi r/L)}{I_0(\pi R/L)}.$$
(66)

На рис. 10 показаны графики зависимости величины  $\Lambda$  от безразмерной величины r/L для разных значений безразмерного геометрического параметра R/L. Из этих графиков следует, например, что при  $R/L \ge 2$  амплитуда третьей гармоники не превышает 5 % от амплитуды первой, если  $r/L \le 1,75$  (тонкая горизонтальная линия на рис. 10 соответствует уровню 5 % для величины  $\Lambda$ ). Амплитуды остальных паразитных пространственных гармоник будут существенно меньше, и их влиянием можно пренебречь.



Рис. 10. Графики зависимости величины  $\Lambda$  (см. формулу (66)) от безразмерной величины r/L при разных значениях геометрического параметра R/L: R/L = 1,5 (кривая I), R/L = 2,0 (2), R/L = 2,5 (3), R/L = 3,0 (4). Горизонтальной прямой показан уровень 0,05 (5 %)

Следует обратить внимание, что для «идеального» решения (63) связь между амплитудой колебаний  $U_0$  статического электрического потенциала на оси системы и напряжениями  $U_R$ , приложенными к кольцевым диафрагмам, устанавливается соотношением

$$U_0 = U_R / I_0 (\pi R / L).$$

В то же время для модельного ряда Фурье (64) эта связь устанавливается соотношением

$$U_0 = (8/\pi^2) U_R / I_0 (\pi R/L).$$

**Примечание.** Использование кусочно-линейной функции в промежутках между реперными точками не полностью отвечает требуемой точности, однако вполне приемлемо при решении задачи о получении приближенной оценки допустимого расстояния до краев электродов. При необходимости учитывать более реалистичное модельное распределение потенциала вдоль горизонтальной линии r = R можно использовать аналитическое решение для краевого поля плоского конденсатора, которое приводится в книге [34] (см. пример 5 в п. 49, § 2, гл. III указанной монографии). Это аналитически точное распределение потенциала вдоль сечения y = 0 у края плоского конденсатора приводится на рис. 9,*d*; отсюда следует, что кусочно-линейная функция вполне пригодна в качестве модели при оценке вклада начальных корректирующих членов ряда Фурье вдоль горизонтальной линии r = R. В частности, если кольцевые диафрагмы «толстые» (рис. 9,*c*), то в рамках рассматриваемой кусочно-линейной модели графики на рис. 9,*b* становятся кусочно-трапецеидальными, а ряд Фурье (64) приобретает следующий вид:

$$U_{\rho}(z) \approx \frac{8\cos(\pi\gamma/2)U_{R}}{\pi^{2}(1-\gamma)}\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) - \frac{8\cos(3\pi\gamma/2)U_{R}}{9\pi^{2}(1-\gamma)}\sin\left(\frac{3\pi z}{L}\right) + \frac{8\cos(5\pi\gamma/2)U_{R}}{25\pi^{2}(1-\gamma)}\sin\left(\frac{5\pi z}{L}\right) - \frac{8\cos(7\pi\gamma/2)U_{R}}{49\pi^{2}(1-\gamma)}\sin\left(\frac{7\pi z}{L}\right) + \cdots,$$
(67)

где  $\gamma$  — безразмерный параметр, который вычисляется по формуле  $\gamma = h/L \in [0, 1]$  (*h* — толщина диафрагмы, *L* — расстояние между центрами соседних диафрагм (см. выше)).

Интересно, что в рамках этой модели, при значении  $\gamma \approx 1/4$  амплитуда первой пространственной гармоники совпадает с амплитудой «идеального» варианта (63). Однако оптимальным выбором в данном случае является вариант  $\gamma = 1/3$ , когда третья паразитная пространственная гармоника обращается в нуль.

Точно так же строгая форма тонких диафрагм, соответствующих аналитическим решениям (13) – (16), (37) – (40) и (51) – (62) для мультипольно-сегментированных транспортирующих каналов, отличается от одинаковых круговых дуг с изолирующими промежутками между ними, которые изображены на рис. 3, 4. Используя аналогичный подход, можно оценить, насколько быстро при удалении от краев мультипольно-сегментированных круговых диафрагм затухают паразитные гармоники старшего порядка, так что для описания электрического потенциала соответствующего электрического поля с высокой точностью будет достаточно аналитических формул (13) – (16), (37) – (40) и (51) – (62).

В качестве примера рассмотрим квадрупольно-сегментированную круговую ловушку, для электрического поля которой ранее было предложено использовать аналитические выражения (7) – (10), эквивалентные друг другу с точностью до поворота относительно оси и смещения вдоль оси.

На рис. 11,*а* показана форма электродов тонких диафрагм, соответствующих аналитическому выражению (9), на рис. 11,*b* – соответствующих квадрупольно-сегментированным тонким круговым диафрагмам.

Рассмотрим окружности  $x = R\cos\varphi$  и  $y = R\sin\varphi$  с радиусами r = R в сечениях  $z = z_k$  с тонкими диафрагмами, к которым приложены электрические напряжения, чередующиеся по знаку ( $z_{2k} = 2kL$  и  $z_{2k+1} = (2k+1)L$ ).

Вдоль этих окружностей потенциал (9) выражается синусоидальной функцией угловой координаты (рис. 12,*a*). На рис. 12,*b* показано модельное распределение потенциала для квадрупольно-сегментированной круговой диафрагмы радиуса *R*, где для участков



Рис. 11. Форма отдельных элементов тонкой диафрагмы при квадрупольном сегментировании круговых электродов: *a* – для аналитического решения (9), *b* – для сегментированной круговой диафрагмы



Рис. 12. Графики модельных угловых распределений потенциала диафрагм при двух краевых условиях: для аналитического решения (9) (*a*) и для квадрупольно-сегментированных круговых диафрагм (*b*). Краевые условия заданы вдоль окружности *r* = *R* в плоскости тонкой круговой диафрагмы радиочастотной ловушки типа SRIG с квадрупольным сегментированием электродов

окружности, соответствующих изолирующим промежуткам, вместо истинного синусоидального потенциала используется приближенная линейная функция. Разложение этого краевого условия в ряд Фурье по угловой координате

приводит к выражению

$$\varphi = \operatorname{Arg}(x, y) \in [-\pi, +\pi]$$

$$U_{f}(\phi) \approx \frac{8\cos(\pi\delta/2)U_{R}}{\pi^{2}(1-\delta)}\sin(2\phi) - \frac{8\cos(3\pi\delta/2)U_{R}}{9\pi^{2}(1-\delta)}\sin(6\phi) + \frac{8\cos(5\pi\delta/2)U_{R}}{25\pi^{2}(1-\delta)}\sin(10\phi) - \frac{8\cos(7\pi\delta/2)U_{R}}{49\pi^{2}(1-\delta)}\sin(14\phi) + \cdots,$$
(68)

где  $\delta$  — относительный угловой размер одиночного мультипольного сегмента, который вычисляется по формуле  $\delta = 2\beta/\pi \in [0, 1]$  ( $\beta \approx (\pi/2) - (\Delta/R)$  — абсолютный угловой размер указанного сегмента,  $\Delta$  — величина зазора между сегментами, R — радиус кольцевой диафрагмы,  $\pi/2$  — угловое расстояние между центрами мультипольных круговых сегментов при квадрупольном сегментировании).

Коэффициенты ряда Фурье (68) совпадают с коэффициентами ряда Фурье (67). В силу этого факта, несмотря на разный физический смысл величин  $\delta$  и  $\gamma$ , при  $\delta \approx 1/4$  амплитуда первой угловой пространственной гармоники совпадает с амплитудой «идеального» варианта (9). Однако, как и в предыдущем случае, оптимальным выбором будет значение  $\delta = 1/3$ , когда третья паразитная угловая гармоника обращается в нуль.

Точное аналитическое решение, соответствующее краевому условию (68), имеет вид:

$$U_{C}^{(q,*)}(z,x,y) = \frac{8U_{R}}{\pi^{2}(1-\delta)} \left[ \frac{\cos(\pi\delta/2)}{I_{2}(\pi R/L)} \frac{Q_{2}(x,y)}{r^{2}} I_{2} \left( \frac{\pi\sqrt{x^{2}+y^{2}}}{L} \right) - \frac{\cos(3\pi\delta/2)}{9I_{6}(\pi R/L)} \frac{Q_{6}(x,y)}{r^{6}} I_{6} \left( \frac{\pi\sqrt{x^{2}+y^{2}}}{L} \right) + \frac{\cos(5\pi\delta/2)}{25I_{10}(\pi R/L)} \frac{Q_{10}(x,y)}{r^{10}} I_{10} \left( \frac{\pi\sqrt{x^{2}+y^{2}}}{L} \right) - \frac{\cos(7\pi\delta/2)}{49I_{14}(\pi R/L)} \frac{Q_{14}(x,y)}{r^{14}} I_{14} \left( \frac{\pi\sqrt{x^{2}+y^{2}}}{L} \right) + \cdots \right] \cos\left( \frac{\pi z}{L} \right),$$
(69)

где мультипольные множители  $Q_k(x, y)$ , в соответствии с рекуррентными соотношениями (25) – (27), задаются формулами

$$Q_{2}(x,y) = 2xy,$$

$$Q_{6}(x,y) = 2xy(x^{2} - 3y^{2})(3x^{2} - y^{2}),$$

$$Q_{10}(x,y) = 2xy(x^{4} - 10x^{2}y^{2} + 5y^{4})(5x^{4} - 10x^{2}y^{2} + y^{4}),$$

$$Q_{14}(x,y) = 2xy(x^{6} - 21x^{4}y^{2} + 35x^{2}y^{4} - 7y^{6})(7x^{6} - 35x^{4}y^{2} + 21x^{2}y^{4} - y^{6}).$$

Отношение амплитуды шестой (паразитной) пространственно-угловой гармоники к амплитуде второй (основной) пространственно-угловой гармоники на расстоянии *r* от оси симметрии, в соответствии с выражением (69), выражается как

$$\Omega(r) = \frac{1}{9} \frac{\cos(3\pi\delta/2)}{I_6(\pi R/L)} I_6\left(\frac{\pi r}{L}\right) / \frac{\cos(\pi\delta/2)}{I_2(\pi R/L)} I_2\left(\frac{\pi r}{L}\right).$$
(70)

На рис. 13 показаны графики зависимости величины  $\Omega$  от безразмерного отношения r/L при разных значениях геометрического параметра R/L; при этом в данном примере <sup>1</sup> используется значение  $\delta = 1/5$ . Из графиков следует, например, что при  $R/L \ge 2$  амплитуда шестой пространственно-угловой гармоники не превышает 5 % от амплитуды второй такой гармоники, если  $r/L \le 1,75$  (тонкая горизонтальная линия на рис. 13, как и на рис. 10, соответствует уровню 5 % величины  $\Omega$ ). Амплитуды остальных паразитных пространственно-угловых гармоник будут существенно меньше и, как и в предыдущем случае, их влиянием можно пренебречь.



Рис. 13. Графики зависимости величины  $\Omega$  (см. формулу (70)) от безразмерного отношения r/L при разных значениях геометрического параметра R/L: R/L = 1,5 (кривая I), R/L = 2,0 (2), R/L = 2,5 (3), R/L = 3,0 (4). Горизонтальной прямой показан уровень 0,05 (5 %)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Варьирование параметра  $\delta \in [0, 1]$  позволяет менять множитель при величине  $\Omega$  от 0 при  $\delta = 1/3$  до 3 при  $\delta = 1$ . При  $\delta = 1/5$  указанный множитель равен 0,618. Естественно, при  $\delta = 1/3$ , когда шестая гармоника обращается в нуль, надо оценивать отношение десятой гармоники ко второй.

Следует обратить внимание, что для «идеального» решения (9) связь между амплитудой колебаний  $U_0$  статического электрического потенциала на оси системы и квадрупольными напряжениями  $\pm U_R^{(r)}$ , приложенными к квадрупольным сегментам тонких кольцевых диафрагм, устанавливается равенством

$$U_0 = U_R^{(r)} / I_2 \left( \pi R / L \right).$$

В то же время для модельного ряда Фурье (68) эта связь устанавливается соотношением

$$U_{0} = \left[ 8\cos\left(\pi\gamma/2\right) / \pi^{2} \left(1-\gamma\right) \right] U_{R}^{(r)} / I_{2} \left(\pi R/L\right).$$

Для конических радиочастотных воронок и радиочастотных воронок с криволинейным профилем оценка величины отступа от краев электродов, когда допустимо использовать аналитические выражения, приведенные в данной работе, осуществляется по аналогичной процедуре.

Важно отметить, что при анализе конических радиочастотных воронок и радиочастотных воронок с криволинейным профилем, для задания краевого условия следует использовать не прямую линию r = R, а огибающую внутреннего края воронки. Эта огибающая определяется из условия, что в точках  $(z_k, r_k)$  аналитическое выражение равно значению электрического напряжения, прикладываемого к диафрагме и одинакового (с точностью до знака) для всех диафрагм.

#### Заключение

В работе получены аналитические выражения для электрических потенциалов, которые можно использовать для исследования движения ионов в радиочастотных ловушках и радиочастотных воронках с круговыми диафрагмами с полиномиальным профилем, в том числе для мультипольно-сегментированных круговых диафрагм. В частности, с помощью аналитических выражений можно быстро качественно исследовать и оптимизировать поведение ионов в указанных устройствах с помощью псевдопотенциальной модели движения ионов в высокочастотных электрических полях [35 – 37].

Если рассматривать взвешенные суммы аналитических выражений, которые соответствуют круговым диафрагмам и мультипольно-сегментированным диафрагмам с одинаковым периодом размещения диафрагм вдоль оси, то появляется возможность моделировать поведение ионов в ловушках и воронках с несегментированными сечениями, отличными от круговой формы. Если же эти суммы соответствуют случаям кратных периодов размещения диафрагм вдоль оси и/или кратному мультипольному сегментированию электродов, то можно исследовать влияние на движение ионов паразитных пространственноугловых гармоник электрического поля, обусловленных неидеальностью геометрической формы электродов.

Полученные аналитические выражения для трехмерных гармонических функций с полиномиально-осциллирующим поведением на оси могут быть также полезными при решении определенных задач математической физики.

#### Благодарность

Авторы выражают свою искреннюю благодарность доктору физико-математических наук Михаилу Игоревичу Явору, главному научному сотруднику Института аналитического приборостроения РАН (г. Санкт-Петербург), за активное и деятельное участие в обсуждении рассматриваемой проблемы и указание на полезные литературные источники, использованные в данном исследовании.

При проведении вычислений использовалась программа Wolfram Mathematica версии 11 (Home Edition) [38].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сысоев А. А., Бердников А. С., Масюкевич С. В., Соловьев К. В., Краснова Н. К. Аналитическое исследование режимов работы радиочастотных воронок в газодинамических интерфейсах тандемных трехквадрупольных масс-спектрометров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 134–145. 2. 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 1: Experiment (Book Series: Advances in Chemical Physics. Vol. LXXXII). New York: John Wiley & Sons Inc., 1992. Pp. 1–176.

3. **Yavor M. I.** Optics of charged particle analyzers (Book Series: Advances in Imaging and Electron Physics. Vol. 157). Amsterdam: Academic Press, 2009. Pp. 142–168.

4. Bahr R. Diplom thesis. University of Freiburg. 1969 (cited by Refs. [2, 6, 7]).

5. Gerlich D. Diplom thesis. University of Freiburg. 1971 (cited by Refs. [2, 6, 7]).

6. Teloy E., Gerlich D. Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique // Chemical Physics. 1974. Vol. 4. No. 3. Pp. 417–427.

7. **Gerlich D., Kaefer G.** Ion trap studies of association processes in collisions of  $CH^{3+}$  and  $CD^{3+}$  with  $n-H_2$ ,  $p-H_2$ ,  $D_2$  and He at 80 K // The Astrophysical Journal. 1989. Vol. 347. No. 2. Pp. 849–854.

8. 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.

9. Verentchikov A., Berdnikov A., Yavor M. Stable ion beam transport through periodic electrostatic structures and non-linear effects // Physics Procedia. 2008. Vol. 1. No. 1. Pp. 87–97.

10. 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 Communications in Mass Spectrometry. 1997. Vol. 11. No. 16. Pp. 1813–1817.

11. 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 // Analytical Chemistry. 1998. Vol. 70. No. 19. Pp. 4111–4119.

12. 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 // Analytical Chemistry. 1999. Vol. 71. No. 15. Pp. 2957–2964.

13. Tolmachev A. V., Kim T., Udseth H. R., Smith R. D., Bailey T. H., Futrell J. H. Simulationbased 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.

14. 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 // Analytical Chemistry. 2000. Vol. 72. No. 10. Pp. 2247–2255.

15. Lynn E. C., Chung M.-C., Han C.-C. Characterizing the transmission properties of an ion funnel // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 2000. Vol. 14. No. 22. Pp. 2129–2134.

16. 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. No. 2. Pp. 294–312.

17. Ватсон Дж. Н. Теория бесселевых функций. Пер. со 2-го англ. изд. М.: Издательство иностранной литературы, 1949. 799 с.

18. 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.

19. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.

20. 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 «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы» (Москва, 05–09 сентября 2011 г.). 2011. С. 137.

21. 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.

22. 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.

23. Бердников А. С., Андреева А. Д. Устройство для манипулирования заряженными частицами. 2011. Патент Федеральной службы Российской Федерации по интеллектуальной собственности на полезную модель RU 113611 (Дата приоритета/подачи заявки: 05.05.2011, дата публикации: 20.02.2012). 24. Бердников А. С., Андреева А. Д. Устройство для манипулирования заряженными частицами. 2012. Патент Федеральной службы Российской Федерации по интеллектуальной собственности на изобретение RU 2465679 (Дата приоритета/подачи заявки: 05.05.2011, дата публикации: 27.10.2012).

25. **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 US9536721 (Priority date: 05.05.2011, Application date: 04.05.2012, Publication date: 03.01.2017).

26. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. Device for manipulating charged particles. Patent US9812308. (Priority date: 05.05.2011, Application date: 21.10.2016, Publication date: 07.11.2017).

27. **Бердников А. С.** Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. І. // Научное приборостроение. 2011. Т. 21. № 2. С. 77–89.

28. 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.

29. Бердников А. С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 3. Временные сигналы, характеризуемые «медленным» и «быстрым» временами // Научное приборостроение. 2011. Т. 21. № 4. С. 75–85.

30. 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.

31. **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.

32. Бердников А. С. Высокочастотные электромагнитные поля с архимедовыми свойствами // Научное приборостроение. 2014. Т. 24. № 1. С. 104–127.

33. **Bao X., Zhang Q., Liang Q., et al.** Increased sensitivity in proton transfer reaction mass spectrometry by using a novel focusing quadrupole ion funnel // Analytical Chemistry. 2022. Vol. 94. No. 39. Pp.13368–13376.

34. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. Изд. 3-е, испр. М.: «Наука». Гл. ред. физико-математической лит-ры, 1965. 716 с.

35. Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику. От маятника до турбулентности и хаоса. М.: "Наука». Гл. ред. физико-математической лит-ры, 1988. 368 с.

36. Berdnikov A. S. A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields // Microscopy and Microanalysis. 2015. Vol. 21. No. S4. Pp. 78–83.

37. Бердников А. С., Веренчиков А. Н., Кузьмин А. Г. О корректном усреднении уравнений движения ионов в высокочастотных электрических полях // Масс-спектрометрия. 2018. Т. 15. № 4. С. 233–245.

38. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing: URL: http://wolfram.com/ mathematica/

## REFERENCES

1. Sysoyev A. A., Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., et al., Analytical study of operating modes of RF ion funnels in the gas dynamic interfaces of tandem triple-quadrupole mass-spectrometers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 6 (4) (2023) 134–145 (in Russian).

2. **Gerlich D.**, Inhomogeneous RF fields: A versatile tool for the study of processes with slow ions, In book: Ng Ch.-Y., Baer M. (Eds.). State-selected and state-to-state ion-molecule reaction dynamics. Part 1: Experiment (Book Series: Advances in Chemical Physics. Vol. LXXXII). John Wiley & Sons Inc., New York (1992) 1–176.

3. **Yavor M. I.,** Optics of charged particle analyzers (Book Series: Advances in Imaging and Electron Physics. Vol. 157), Academic Press, Amsterdam (2009) 142–168.

4. Bahr R., Diplom Thesis. University of Freiburg. 1969 (cited by Refs. [2, 6, 7]).

5. Gerlich D., Diplom Thesis. University of Freiburg. 1971 (cited by Refs. [2, 6, 7]).

6. Teloy E., Gerlich D., Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The Guided beam technique, Chem. Phys. 4 (3) (1974) 417–427.

7. Gerlich D., Kaefer G., Ion trap studies of association processes in collisions of  $CH^{3+}$  and  $CD^{3+}$  with  $n-H_2$ ,  $p-H_2$ ,  $D_2$  and He at 80 K, Astrophys. J. 347 (2) (1989) 849–854.

8. Berďnikov A. S., Gall N. R., Radio frequency ion guiding traps with periodic electrodes without spurious trapping regions, J. Anal. Chem. 69 (13) (2014) 1285–1290.

9. Verentchikov A., Berdnikov A., Yavor M., Stable ion beam transport through periodic electrostatic structures and non-linear effects, Phys. Procedia 1 (1) (2008) 87–97.

10. Shaffer S. A., Tang K., Anderson G., et al., A novel ion funnel for focusing ions at elevated pressure using electrospray ionization mass spectrometry, Rapid Commun. Mass Spectrom. 11 (16) (1997) 1813–1817.

11. Shaffer S. A., Prior D. C., Anderson G., et al., An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry, Anal. Chem. 70 (19) (1998) 4111–4119.

12. Shaffer S. A., Tolmachev A. V., Prior D. C., et al., Characterization of an improved electrodynamic ion funnel interface for electrospray ionization mass spectrometry, Anal. Chem. 71 (15) (1999) 2957–2964.

13. Tolmachev A. V., Kim T., Udseth H. R., et al., Simulation-based optimization of the electrodynamic ion funnel for high sensitivity electrospray ionization mass spectrometry, Int. J. Mass Spectrom. 203 (1–3) (2000) 31–47.

14. Kim T., Tolmachev A. V., Harkewicz R., et al., Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel, Anal. Chem. 72 (10) (2000) 2247–2255.

15. Lynn E. C., Chung M.-C., Han C.-C., Characterizing the transmission properties of an ion funnel, Rapid Commun. Mass Spectrom. 14 (22) (2000) 2129–2134.

16. Kelly R. T., Tolmachev A. V., Page J. S., et al., The ion funnel: Theory, implementations and applications, Mass Spectrom. Rev. 29 (2) (2010) 294–312.

17. Watson G. N., A treatise on the theory of Bessel functions, 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1945.

18. **Bateman H., Erdélyi A.,** Higher transcendental functions, Vol. II, McGraw-Hill Book Company, New York, Toronto, London, 1953.

19. Abramowitz M., Stegun I. A. (Eds.), Handbook on mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, 10th edition (Applied Mathematics Series, Vol. 55), USA National Bureau of Standards, 1972.

20. Andreyeva A. D., Berdnikov A. S., Ustroystva dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami na osnove printsipa arkhimedova vinta [Devices for manipulating charged particles based on the principle of Archimedean screw], Proc. of the 4-th All-Russian conf. "Mass-Spectrometry and its Applied Problems" organized by the 5-th Congress of All-Russian Mass-Spectrometry Society; Sept. 05–09, 2011, Moscow (2011) 137 (in Russian).

21. Andreyeva A. D., Berdnikov A. S., Mass spectrometric devices with Archimedean radio-frequency electric fields, J. Anal. Chem. 67 (13) (2012) 1034–1037.

22. Berdnikov A. S., Douglas D. J., Konenkov N. V., The pseudopotential for quadrupole fields up to q = 0.9080, Int. J. Mass Spectrom. 421 (2017) 204–223.

23. **Berdnikov A. S., Andreeeva A. D.,** Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami, Patent Federalnoy sluzhby RF po intellektualnoy sobstvennosti na poleznuyu model RU 113611 (Data prioriteta/podchi 05.05.2011) [A device for charge particle manipulation. Patent of the Federal Service for Intellectual Property for a utility model of the Russian Federation] – RU 113611 (Priority/ Application date: 05.05.2011) (in Russian).

24. **Berdnikov A. S., Andreeeva A. D.,** Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami, Patent Federalnoy sluzhby RF po intellektualnoy sobstvennosti na izobreteniye RU 113611 (Data prioriteta/podchi 05.05.2011) [A device for charge particle manipulation. Patent of the Federal Service for Intellectual Property for an invention of the Russian Federation] – RU 2465679 (Priority/ Application date: 05.05.2012) (in Russian).

25. 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 US9536721 (2017).

26. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R., Device for manipulating charged particles, Patent US9812308 (2017).

27. 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]. 21 (2) (2011) 77–89 (in Russian).

28. 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]. 21 (3) (2011) 83–96 (in Russian).

29. **Berdnikov A. S.,** Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 3. Time dependent signals characterized by "slow" and "fast" characteristic time, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 21 (4) (2011) 75–85 (in Russian).

30. Berdnikov A. S., Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 4. Devices and instruments, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 21 (4) (2011) 86–102 (in Russian).

31. **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]. 22 (2) (2012) 105–111 (in Russian).

32. Berdnikov A. S., High frequency electromagnetic fields with Archimedean properties, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 24 (1) (2014) 104–127 (in Russian).

33. Bao X., Zhang Q., Liang Q., et al., Increased sensitivity in proton transfer reaction mass spectrometry by using a novel focusing quadrupole ion funnel, Anal. Chem. 94 (39) (2022) 13368–13376.

34. Lavrentiev M., Shabat B., Methodes de la Theorie des Fonctions d'une Variable Complexe, "Mir" D'Édition, Moscou, 1972.

35. Sagdeev R. Z., Usikov D. A., Zaslavski G. M., Nonlinear physics: From the pendulum to turbulence and chaos (Contemporary Concepts in Physics, Vol. 4), Harwood Academic Publishers, Chur, Switzerland; N. Y., 1988.

36. **Berdnikov A. S.,** A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields, Microsc. Microanal. 21 (S4) (2015) 78–83.

37. Berdnikov A. S., Kuzmin A. G., Verenchikov A. N., On the correct averaging of the equations of ion motion in high-frequency electric fields, J. Anal. Chem. 74 (14) (2019) 1378–1389.

38. Wolfram Mathematica: The system for modern technical computing, URL: http://wolfram. com/mathematica/

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия. 198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А. asberd@yandex.ru ORCID: 0000-0003-0985-5964

**МАСЮКЕВИЧ Сергей Владимирович** — старший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А. serg\_08@mail.ru ORCID: 0000-0002-0873-8849

ПОМОЗОВ Тимофей Вячеславович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия. 198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А. tim-kor@mail.ru ORCID: 0000-0001-8925-7600 ХАСИН Юрий Иосифович — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия. 198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А. yur-khasin@yandex.ru ORCID: 0009-0002-1506-0631

**СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович** — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, младший научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 k-solovyev@mail.ru ORCID: 0000-0003-3514-8577

### THE AUTHORS

## **BERDNIKOV** Alexander S.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS 31–33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia asberd@yandex.ru ORCID: 0000-0003-0985-5964

#### MASYUKEVICH Sergey V.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS 31–33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia serg\_08@mail.ru ORCID: 0000-0002-0873-8849

## **POMOZOV** Timofey V.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS 31–33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia tim-kor@mail.ru ORCID: 0000-0001-8925-7600

## HASIN Yuri I.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS 31–33, Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia yur-khasin@yandex.ru ORCID: 0009-0002-1506-0631

#### **SOLOVYEV** Konstantin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University Institute for Analytical Instrumentation, RAS 29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia k-solovyev@mail.ru ORCID: 0000-0003-3514-8577

Статья поступила в редакцию 20.01.2024. Одобрена после рецензирования 26.02.2024. Принята 26.02.2024. Received 20.01.2024. Approved after reviewing 26.02.2024. Accepted 26.02.2024.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2024