

# КОНЦЕПЦИЯ ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В КВАДРУПОЛЬНОМ ФИЛЬТРЕ МАСС

*М. Ю. Судаков\*, М. В. Апацкая*

*Рязанский государственный радиотехнический университет  
390035, Рязань, Россия*

Поступила в редакцию 13 января 2012 г.

Предлагается обобщение теории эффективного потенциала для движения частиц в быстро осцилирующем электрическом поле для параметров стабильности, лежащих вблизи границ диаграммы, где стандартная теория эффективного потенциала неприменима. Для движения ионов вблизи вершины стабильности первой зоны квадрупольного фильтра масс получены динамические уравнения изменения огибающей колебаний ионов и приведены к форме уравнений Гамильтона для колебаний материальной точки в поле потенциальных сил. Получены выражения для глубины эффективной потенциальной ямы, показано, что, несмотря на большую кинетическую энергию колебаний, глубина эффективной потенциальной ямы для ионов в квадруполе составляет менее 1 эВ при фильтрации с разрешающей способностью по массе более 200 единиц. Вычислен аксептанс фильтра масс в зависимости от параметров стабильности и от разрешающей способности.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Техника захвата заряженных частиц в переменных электрических полях получила широкое развитие в последние 50 лет для нужд масс-спектрометрии. Теоретическая основа этих методов разработана в основном трудами российских ученых. П. Л. Кашица впервые обратил внимание специалистов на возможность стабилизации верхнего неустойчивого состояния маятника путем периодических колебаний точки его подвеса [1]. Гапонов и Миллер развили теорию удержания электронов в СВЧ-полях [2]. Ландау разработал общую теорию движения частиц в быстро осцилирующих полях, которая с тех пор входит в стандартные учебники по теоретической физике [3]. Теория эффективного потенциала является основой многих приложений в технике удержания ионов в высокочастотных (ВЧ) электрических полях. К сожалению, данная теория применима для не слишком больших значений параметров стабильности (напряженностей переменного поля), хотя многие устройства масс-спектрометрии оперируют именно в таких режимах. В данной работе на примере квадрупольного фильтра масс, работающе-

го в вершине первой зоны стабильности уравнения Матье, показано, что и в этом случае можно описать движение заряженных частиц с помощью уравнений движения частиц в поле потенциальных сил, а также введено понятие эффективного потенциала, обобщающее данную теорию на случай движения частиц при больших значениях параметров стабильности.

## 2. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ. ПРИНЦИП ФИЛЬТРАЦИИ

Квадрупольный фильтр масс [4] образован четырьмя стержнями с гиперболическим профилем, расположенными симметрично относительно общей оси (рис. 1). При приложении напряжения (положительной фазы к паре противоположных стержней, расположенных вдоль направления  $x$ , а отрицательной — к паре стержней вдоль  $y$ ) в пространстве между стержнями образуется переменное квадрупольное поле

$$\Phi(x, y) = [U + V \cos(\Omega(t - t_0))] \frac{x^2 - y^2}{r_0^2}. \quad (1)$$

Здесь  $U$  и  $V$  — постоянная составляющая и амплитуда переменной составляющей периодического питающего напряжения на электродах фильтра,  $\Omega$  —

---

\*E-mail: m.soudakov@gmail.com

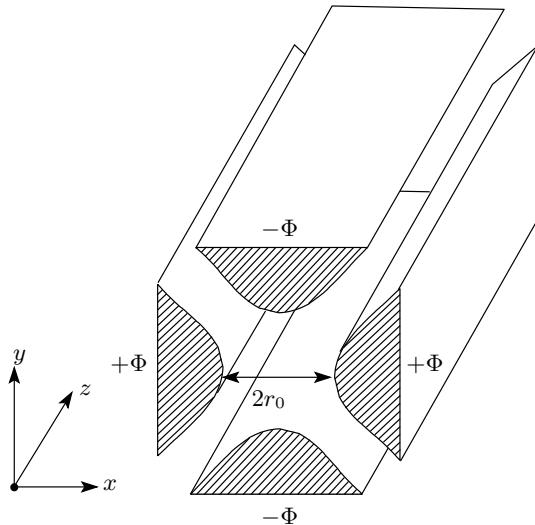


Рис. 1. Электродная система и схема питания квадрупольного фильтра масс с гиперболическими электродами

частота питающего напряжения,  $t_0$  — начальная фаза,  $r_0$  — так называемый «радиус поля» (радиус окружности, вписанной между электродами фильтра). Движение ионов массой  $m$  с зарядом  $e$  в таком поле описывается парой уравнений Матье [5], которые обычно записывают с использованием безразмерных единиц:

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} + (a + 2q \cos(2\xi)) x = 0, \quad (2a)$$

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} - (a + 2q \cos(2\xi)) y = 0, \quad (2b)$$

где

$$\xi = \frac{\Omega}{2}(t - t_0), \quad a = \frac{8eU}{m\Omega^2r_0^2}, \quad q = \frac{4eV}{m\Omega^2r_0^2}. \quad (3)$$

Принцип фильтрации ионов в таком поле состоит в использовании значений параметров стабильности вблизи значений, соответствующих вершине первой зоны стабильности:  $a_1 = 0.236993$  и  $q_1 = 0.705996$ . В этой точке на плоскости параметров системы уравнений (2) сходятся две границы стабильности движения по  $x$  и по  $y$  (см. рис. 2). При фиксированных напряжениях питания параметры стабильности для ионов разных масс лежат на одной «рабочей» прямой  $a = 2\lambda q$ . Подбором параметра  $\lambda = U/V$  можно добиться того, чтобы рабочая прямая проходила чуть ниже самой вершины первой зоны стабильности (см. рис. 2). Поэтому при пропускании ионов вдоль оси такого фильтра на выход пройдут только

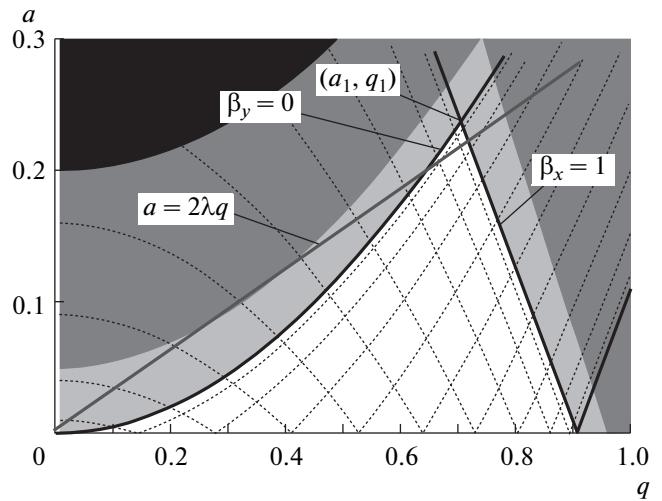


Рис. 2. Первая зона стабильности совместной диаграммы квадрупольного фильтра масс. Зоны нестабильных движений показаны оттенками серого цвета. Пунктиром показаны некоторые из изолиний  $\beta$  с шагом 0.1

те ионы, массы которых попадают в узкий диапазон между границами стабильности, а остальные ионы осядут на электродах.

### 3. РЕКУРРЕНТНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Наиболее удобным методом решения уравнений с периодическими коэффициентами является матричный метод [6]. В нем доказывается, что координаты и скорости ионов, взятые через один период в одной и той же фазе ВЧ- поля (стробоскопические координаты) удовлетворяют рекуррентным уравнениям

$$x_{n+1} = m_{11}x_n + m_{12}v_n, \quad (4a)$$

$$v_{n+1} = m_{21}x_n + m_{22}v_n. \quad (4b)$$

Здесь

$$x_n = \frac{1}{r_0}x(nT + t_0), \quad v_n = \frac{2}{r_0\Omega}\dot{x}(nT + t_0) \quad (5)$$

— безразмерные координата и скорость иона, взятые в начальной фазе  $t_0$ ,  $\dot{x}$  — производная по времени,  $T = 2\pi/\Omega$  — период ВЧ- поля,  $n$  — номер периода,  $m_{i,j}$  — элементы так называемой матрицы монодромии

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} u_1(\pi) & u_2(\pi) \\ u'_1(\pi) & u'_2(\pi) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

которая выражается через пару фундаментальных решений уравнения (2а) с начальными условиями

$$\begin{aligned} u_1(0) &= 1, \quad u'_1(0) = 0 \quad \text{и} \\ u_2(0) &= 0, \quad u'_2(0) = 1. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь штрих означает дифференцирование по безразмерной переменной  $\xi$ . Данные решения необходимо рассчитать всего на одном периоде ВЧ-поля (от 0 до  $\pi$  в безразмерных единицах), что может быть легко выполнено любым из численных методов.

Из системы (4) можно получить уравнение, не содержащее скоростей. Для этого выразим  $v_n$  из (4а) как

$$v_n = \frac{x_{n+1} - m_{11}x_n}{m_{12}} \quad (8)$$

и подставим это выражение в уравнение (4б), записанное для предыдущего периода. Получим

$$\begin{aligned} x_{n+1} - (m_{11} + m_{12})x_n + \\ + (m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21})x_{n-1} = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь  $m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21} = \det(\mathbf{M}) = 1$  как определитель Вронского линейного уравнения (2а). Введем параметр стабильности  $\beta$  согласно определению  $\cos(\pi\beta) = (m_{11} + m_{22})/2$  и перепишем уравнение (7) в виде

$$x_{n+1} - \cos(\pi\beta)x_n + x_{n-1} = 0. \quad (10)$$

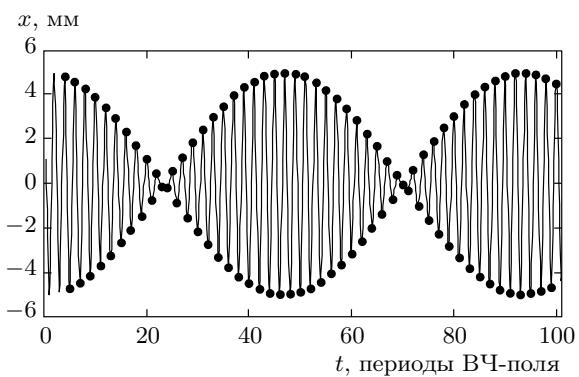
Уравнение (10) является точным рекуррентным уравнением, которое связывает координаты иона на двух последовательных периодах и не содержит скоростей ионов.

#### 4. УРАВНЕНИЯ ОГИБАЮЩЕЙ

Расчет фундаментальных решений для уравнения (2а) при значениях параметров, соответствующих вершине зоны стабильности ( $a = a_1$ ,  $q = q_1$ ), дает следующее выражение для матрицы монодромии:

$$\mathbf{M}_x = \begin{bmatrix} -1 & \Pi_x \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \Pi_x = 3.7502787. \quad (11)$$

Из вида матрицы (11) следует, что для параметров  $a$ ,  $q$ , лежащих вблизи вершины стабильности, во-первых, величина  $\beta_x$  близка к единице и, во-вторых, значения координат ионов на соседних периодах различаются знаком, но мало различаются по величине. В качестве примера на рис. 3 показана траектория колебаний однозарядного иона массой



**Рис. 3.** Колебания иона в направлении  $x$  в квадрупольном фильтре масс при параметрах, описанных в тексте. Точками отмечены координаты иона в начале каждого периода ВЧ-поля

609 Да (1 Да  $= 1.66053873 \cdot 10^{-27}$  кг) вдоль направления  $x$  в квадрупольном фильтре масс с  $r_0 = 5$  мм, работающем на частоте 2 МГц. Начальное положение иона вдоль оси  $x$  — в точке  $r_0$ , начальная скорость равна нулю. Параметры стабильности иона приходятся на центр линии, соответствующей разрешающей способности по массе  $R = m/\Delta m$ , равной 200 единиц ( $U = 735.399$  В,  $V = 4398.0279$  В,  $\beta_x = 0.97859605$ ). Жирными точками на рис. 3 показаны стробоскопические значения координат, взятые в начале каждого периода.

Очевидно, что для описания движения иона удобно ввести непрерывную функцию огибающей колебаний  $X(n)$ , определяемую из соотношения

$$x_n = (-1)^n X(n). \quad (12)$$

Для величин  $x_{n+1}$  и  $x_{n-1}$  воспользуемся разложением функции  $X(n)$  в ряд Тейлора:

$$x_{n\pm 1} = -(-1)^n \left[ X(n) \pm \frac{dX(n)}{dn} + \frac{1}{2} \frac{d^2X(n)}{dn^2} + \dots \right]. \quad (13)$$

Подставляя последнее выражение в рекуррентное соотношение (10) и удерживая в ряде Тейлора члены до второго порядка включительно, получим

$$\frac{d^2X(n)}{dn^2} + 2[1 + \cos(\pi\beta_x)]X(n) = 0. \quad (14)$$

Данное уравнение описывает гармонические колебания с частотой биений

$$\omega_b = \sqrt{2(1 - \cos(\pi\beta_x))} = 2 \cos \frac{\pi\beta_x}{2} \approx \pi(1 - \beta_x). \quad (15)$$

Уравнение (14) необходимо дополнить выражением для вычисления скоростей ионов, которое получим из (8). Учитывая вид матрицы монодромии (11), имеем

$$v_n \approx \frac{1}{\Pi_x} (-1)^n \frac{dX(n)}{dn}. \quad (16)$$

Удобно ввести огибающую для скорости  $V(n)$ , определяемую из соотношения

$$v_n = (-1)^n V(n), \quad V(n) \approx \frac{1}{\Pi_x} \frac{dX(n)}{dn}. \quad (17)$$

Уравнения (13) и (17) записаны в безразмерных единицах. Переход к нормальным физическим единицам проводится по формулам

$$n = \frac{t}{T}, \quad x(t) = r_0 X(n), \quad v(t) = \frac{r_0 \Omega}{2} V(n). \quad (18)$$

Здесь  $x(t)$  и  $v(t)$  — огибающие координаты и скорости иона, но мы используем для них то же обозначение, что для обычных координат иона. Получим окончательно уравнения для размерных величин в виде

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \Omega_b^2 x = 0, \quad v = \frac{1}{\Pi_x} \frac{\Omega}{2T} \frac{dx}{dt} = \frac{\pi}{\Pi_x} \frac{dx}{dt}. \quad (19)$$

Здесь

$$\Omega_b = \frac{\omega_b}{T} = \frac{\Omega}{2} (1 - \beta_x)$$

— размерная частота биений.

## 5. ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Как видно из уравнения (19), скорость частиц не равна производной от координат, а только пропорциональна ей. Чтобы придать данной системе уравнений стандартный вид уравнений Гамильтона [3, с. 171], введем обобщенный импульс частиц  $p$  как

$$p = m_x \frac{dx}{dt}, \quad m_x = \frac{\pi}{\Pi_x} m, \quad (20)$$

и запишем кинетическую и потенциальную энергии в виде

$$T(p) = \frac{p^2}{2m_x}, \quad U_x(x) = \frac{m_x \Omega_b^2 x^2}{2}. \quad (21)$$

Тогда уравнения (19) запишутся в обычной гамильтоновой форме

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad H = T(p) + U_x(x). \quad (22)$$

Величина полной энергии  $E = T(p) + U_x(x)$  является интегралом движения, поэтому для колебаний

с максимально допустимой амплитудой  $r_0$  соответствующие амплитуды импульса и скорости равны

$$p_{max} = \sqrt{m_x U_x(r_0)} = m_x \Omega_b r_0, \\ v_{max} = \frac{p_{max}}{m} = \frac{m_x}{m} \Omega_b r_0 = \frac{\pi}{\Pi_x} \Omega_b r_0. \quad (23)$$

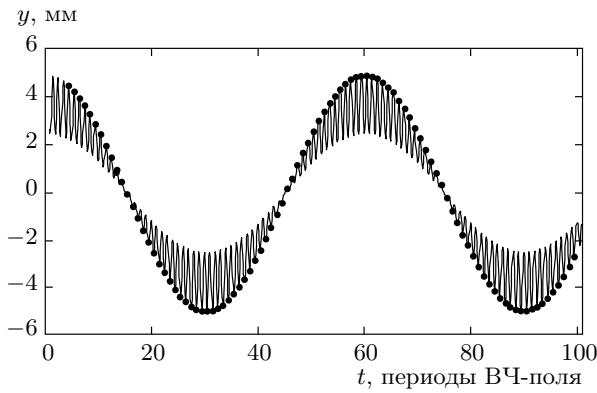
Изложенное выше показывает, что движение вблизи границы  $\beta_x = 1$  можно описать как движение частицы в поле потенциальных сил. Эффективный потенциал иона в этом случае следует определять согласно уравнению (21). В связи с этим заметим, что уравнение (21) является «потенциальной энергией». «Эффективный потенциал» отличается от этой величины делением на полный заряд частицы. В дальнейшем для простоты мы используем понятие «эффективный потенциал», не различая данных понятий, что является общепринятым. Для практического определения максимальной кинетической энергии частиц, удерживаемых ВЧ-полем, при движении вблизи границы стабильности  $\beta_x = 1$  удобно использовать глубину эффективной потенциальной ямы:

$$D_x = \frac{\pi}{\Pi_x} U(r_0) = \left( \frac{\pi}{\Pi_x} \right)^2 \frac{m \Omega_b^2 r_0^2}{2}. \quad (24)$$

Физический смысл данной величины — максимальная кинетическая энергия ионов, стартующих с оси квадруполя в направлении  $x$  в нулевой фазе ВЧ- поля, при которой амплитуда их колебаний не превышает  $r_0$  и они еще удерживаются ВЧ-полем. Пользуясь величиной (24), можно непосредственно рассчитать максимальную скорость частиц, удерживаемых квадрупольным полем, по формулам с обычной, а не приведенной массой:

$$v_{max} = \sqrt{\frac{2D_x}{m}} = \frac{\pi}{\Pi_x} \Omega_b r_0 = \frac{\pi}{\Pi_x} \frac{\Omega r_0}{2} (1 - \beta_x). \quad (25)$$

В качестве примера используем расчет движения ионов массой 609 Да, показанный на рис. 3. Для приведенных в примере параметров фильтра масс ( $r_0 = 5$  мм,  $\Omega/2\pi = 2$  МГц) вычисление по формуле (24) для  $\beta_x = 0.97859605$  дает  $v_{max} = 563.2$  м/с и соответствующую кинетическую энергию 1.0 эВ. Заметим, что фактическая кинетическая энергия иона в данных условиях в максимуме равна 2036 эВ. Столь большое значение кинетической энергии иона, тем не менее, не отражает удерживающей способности ВЧ- поля в данных условиях.



**Рис. 4.** Колебания иона в направлении  $y$  в квадрупольном фильтре масс при параметрах, описанных в тексте. Точками отмечены координаты иона в середине каждого периода ВЧ- поля

## 6. ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ ДВИЖЕНИЯ ВДОЛЬ ОСИ $y$

Рассмотрим аналогичный подход для движения в направлении  $y$ . Ввиду противоположного знака параметров в уравнении (2b) максимумы по  $y$  наблюдаются в середине периода ВЧ- поля или в фазе  $\pi/2$  в безразмерных единицах. Для движения вдоль  $y$  удобно вычислять стробоскопические значения координат и скоростей ионов именно в этой фазе ВЧ.

Вычисление матрицы монодромии для уравнения (2b) в начальной фазе  $\pi/2$  и с параметрами в вершине зоны стабильности  $a = a_1$ ,  $q = q_1$  дает

$$\mathbf{M}_y = \begin{bmatrix} 1 & \Pi_y \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \Pi_y = 6.8213726. \quad (26)$$

Рекуррентные уравнения (4) и (9) остаются справедливыми и в этом случае для координат  $y_n$  и скоростей иона  $w_n$  вдоль направления  $y$ . По виду матрицы (26) можно утверждать, что для параметров  $a$ ,  $q$ , лежащих вблизи вершины стабильности, во-первых, величина  $\beta_y$  близка к нулю и, во-вторых, значения координат  $y_n$  ионов на соседних периодах мало различаются по величине.

На рис. 4 рассчитана траектория колебаний иона массой 609 Да вдоль направления  $y$  в тех же условиях, что использовались для рис. 3. Начальное отклонение иона по оси  $y$  равно 2.5 мм, начальная скорость — нулю. Жирными точками отмечены координаты иона в середине каждого периода ВЧ- поля. При использованных значениях параметров ВЧ-питания ( $U = 735.399$  В,  $V = 4398.0279$  В) расчет дает значение  $\beta_y = 0.033520$ . Из рис. 4 сле-

дует, что огибающая колебаний имеет период  $2/\beta_y$ , равный примерно 60 периодам ВЧ- поля.

В этом случае удобно ввести непрерывную функцию огибающей колебаний  $Y(n)$  согласно соотношению  $y_n = Y(n)$ . Тогда рекуррентное уравнение (9) сводится к следующему:

$$\frac{d^2 Y(n)}{dn^2} + 2 [1 - \cos(\pi\beta_y)] Y(n) = 0. \quad (27)$$

Данное уравнение описывает гармонические колебания с «секулярной» частотой

$$\omega_s = \sqrt{2(1 - \cos(\pi\beta_y))} = 2 \sin \frac{\pi\beta_y}{2} \approx \pi\beta_y. \quad (28)$$

Из уравнения (8) с учетом специального вида матрицы монодромии (26) получим для огибающей скоростей иона  $w_n = W(n)$  следующее уравнение:

$$W(n) \approx \frac{1}{\Pi_y} \frac{dY(n)}{dn}. \quad (29)$$

Переходя к размерным величинам, из формул, аналогичных (18), получим

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + \Omega_s^2 y = 0, \quad w = \frac{1}{\Pi_y} \frac{\Omega}{2T} \frac{dy}{dt} = \frac{\pi}{\Pi_y} \frac{dy}{dt}. \quad (30)$$

Здесь

$$\Omega_s = \frac{\omega_s}{T} = \frac{\Omega}{2} \beta$$

— размерная секулярная частота. Переход к гамильтоновой форме уравнений (30) совершается совершенно аналогично формулам (20)–(22), поэтому приведем сразу выражение для глубины эффективной потенциальной ямы для движения вдоль направления  $y$ :

$$D_y = \frac{\pi}{\Pi_y} U_y(r_0) = \left( \frac{\pi}{\Pi_y} \right)^2 \frac{m\Omega_s^2 r_0^2}{2}. \quad (31)$$

Физический смысл данной величины — максимальная кинетическая энергия ионов, стартующих с оси квадруполя в направлении  $y$  в середине периода ВЧ- поля, при которой амплитуда их колебаний не превышает  $r_0$  и они ещедерживаются ВЧ- полем. Соответствующая максимальная скорость

$$w_{max} = \sqrt{\frac{2D_y}{m}} = \frac{\pi}{\Pi_y} \Omega_s r_0 = \frac{\pi}{\Pi_y} \frac{\Omega r_0}{2} \beta_y. \quad (32)$$

В качестве примера используем траекторию иона в условиях, показанных на рис. 4. Для  $\beta_y = 0.033520$  расчет по формуле (32) дает значение 0.742 эВ, тогда как максимальное значение кинетической энергии вдоль  $y$  составляет 791 эВ.

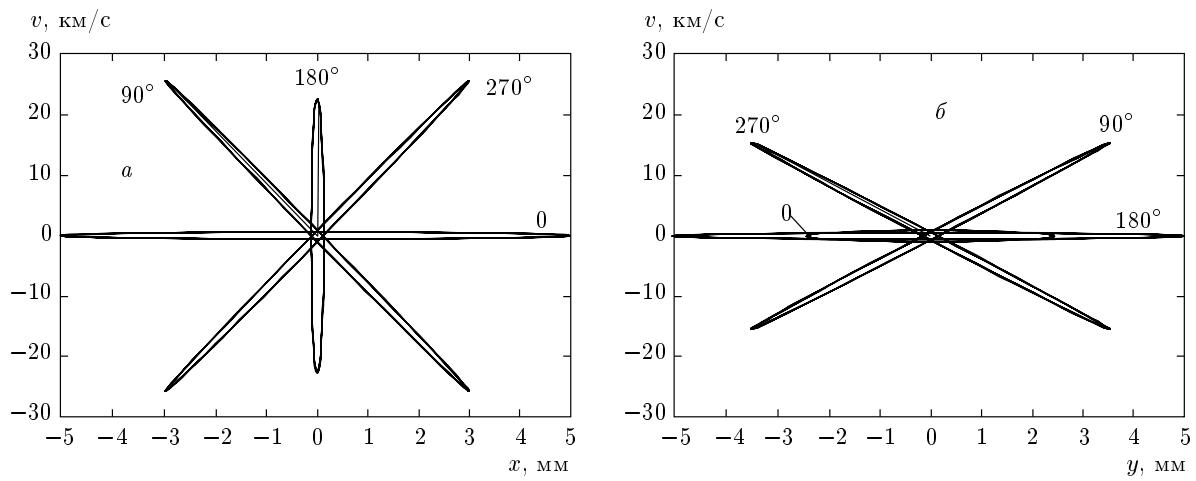


Рис. 5. Фазовые эллипсы захвата частиц в квадрупольном фильтре масс по  $x$  (а),  $y$  (б) для нескольких значений фазы ВЧ- поля при параметрах, описанных в тексте

## 7. АКСЕПТАНС ФИЛЬТРА МАСС

«Аксептансом» прибора называют область фазового пространства начальных условий для тех частиц, которые будут пропущены прибором на детектор без потерь. Для устройств, использующих ВЧ-удержание частиц, форма и положение такой области зависят от фазы ВЧ- поля [4, с. 25]. На рис. 5 показаны «области захвата» частиц для нескольких значений начальной фазы ВЧ- поля в квадрупольном фильтре масс с описанными выше параметрами в центре линии, соответствующей разрешающей способности 200 единиц. Их еще называют «фазовыми эллипсами захвата», так как при начальных условиях попадающий внутрь каждого из эллипсов ион не попадает на электроды фильтра и передается на детектор. В силу теоремы Луивилля [3, с. 191] площади эллипсов для каждой фазы равны, поэтому естественно определять аксептанс фильтра масс как площадь эллипса в той фазе, где достигается максимально допустимое отклонение иона, равное  $r_0$ . Для движения вдоль  $x$  такой фазой является  $0$ , а для движения вдоль  $y$  — середина каждого периода,  $180^\circ$ . Данные эллипсы захвата для условий рис. 5 подробнее показаны на рис. 6.

Развитый выше формализм позволяет легко определить параметры этих эллипсов и, следовательно, площадь аксептанса фильтра масс. Так, для движения вдоль  $x$  площадь эллипса с размером  $r_0$  по оси координат равна

$$\Sigma_x = \pi r_0 v_{max} = \frac{\pi^2}{2\Pi_x} r_0^2 \Omega (1 - \beta_x). \quad (33)$$

Аналогично, аксептанс по  $y$  равен

$$\Sigma_y = \pi r_0 w_{max} = \frac{\pi^2}{2\Pi_y} r_0^2 \Omega \beta_y. \quad (34)$$

Известны [4, с. 23] приближенные выражения параметров  $\beta$  в центре линии пропускания фильтра масс через разрешающую способность  $R$ :

$$\beta_x \approx 1 - \frac{0.302332}{\sqrt{R}}, \quad \beta_y \approx \frac{0.473758}{\sqrt{R}}. \quad (35)$$

Используя данные соотношения, можно получить выражения для аксептанса фильтра масс в виде, удобном для практических вычислений:

$$\Sigma_x \left[ \frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right] = 2.500 r_0^2 f \frac{1}{\sqrt{R}}, \quad (36a)$$

$$\Sigma_y \left[ \frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right] = 2.153 r_0^2 f \frac{1}{\sqrt{R}}. \quad (36b)$$

Здесь  $r_0$  [мм] — радиус поля,  $f$  [МГц] =  $\Omega/2\pi$  — частота напряжения питания. Можно убедиться, что данные расчеты в точности соответствуют точным вычислениям, приведенным на рис. 6.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе теория эффективного потенциала в целях простоты изложена для случая идеального квадрупольного поля. В этом случае движение ионов описывается линейными уравнениями движения и существует точная теория, определяющая условия стабильности и удержания ионов. Тем

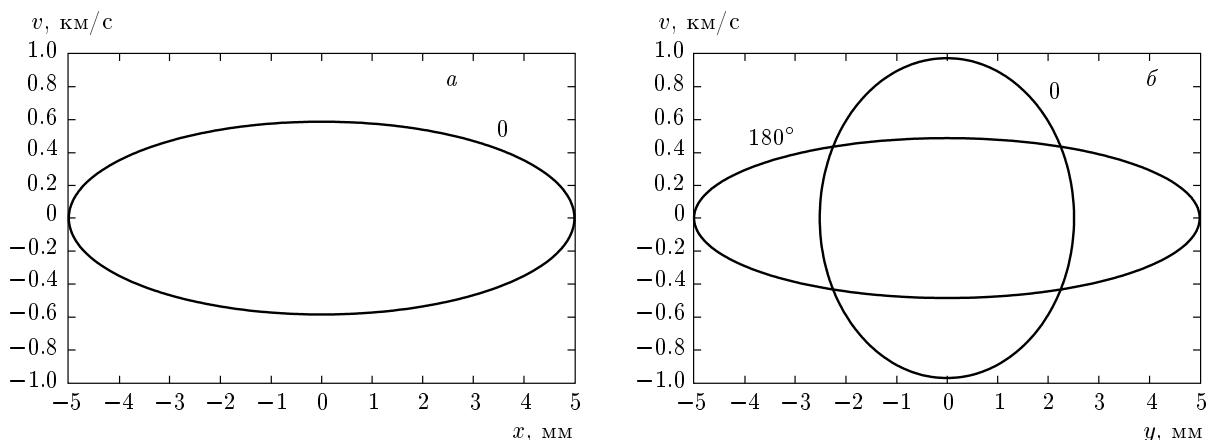


Рис. 6. То же, что на рис. 5 для фаз., в которых достигается максимальное отклонение иона от оси

не менее, и в случае наличия небольших искажений квадрупольного поля можно показать, что уравнения изменения огибающих колебаний ионов имеют потенциальный характер [7]. К сожалению, не представляется возможным провести теоретический анализ в общем случае, но это, по-видимому, не имеет практической ценности, поскольку в случае мультипольных полей условия стабильности ионов зависят не только от параметров удержания, но также и от начальных координат, так что четкие границы стабильности движения отсутствуют.

Как и в случае стандартной теории эффективного потенциала, довольно трудно указать конкретные рамки применимости данной теории. Для стандартной теории областью применимости считается диапазон значений параметра стабильности  $q < 0.4$  [8], хотя использование данной теории приводит к весьма осмысленным практическим результатам и далеко за пределами этого диапазона [9]. По всей видимости, ответ на данный вопрос зависит от конкретной задачи и от требуемой точности расчетов. По поводу последнего заметим, что относительная величина отброшенных в точном уравнении (10) членов при получении приближенного уравнения (15) составляет  $\omega_b^2 = \pi^2(1 - \beta_x)^2$ . Поэтому представляется разумным считать данную теорию применимой для движений вдоль направления  $x$  в тех областях, где  $|\beta_x| > 0.9$ , а для движений в направлении  $y$  — при  $|\beta_y| < 0.1$ .

Заметим также, что данная теория переходит в стандартную теорию эффективного потенциала, если рассматривается движение вблизи точки с параметрами  $a = q = 0$ . Действительно, в этом случае фундаментальные решения уравнения (2b) имеют вид  $u_1(\xi) = 1$  и  $u_2(\xi) = \xi$ . Поэтому  $\Pi_y = u_1(\pi) = \pi$

и уравнение (31) сводится к известному выражению для глубины эффективной потенциальной ямы линейной ловушки [10]

$$D_y = \frac{mr_0^2\Omega_s^2}{2} = \frac{mr_0^2\Omega^2}{8}\beta^2 = \frac{mr_0^2\Omega^2}{16}q^2 = \frac{qeV}{4}. \quad (37)$$

Здесь учтено, что в этом приближении  $\beta = q/\sqrt{2}$  и использовано определение (3) для параметра  $q$ .

В заключение заметим, что, как и стандартный, эффективный потенциал, введенный в данной работе, служит количественной мерой эффективности удержания частиц ВЧ-полем. При огромной средней кинетической энергии частиц в фильтре масс фактическая глубина эффективного потенциала составляет менее 1 эВ при разрешающей способности в несколько сотен и убывает обратно пропорционально последней. Из этого становится понятными высокие требования к стабильности и «чистоте» питающих напряжений, а также сильное влияние на форму линий пропускания фильтра масс сравнительно небольших временных [11] и пространственных [12] гармоник поля.

## ЛИТЕРАТУРА

- П. Л. Капица, УФН **44**, 7 (1951).
- А. В. Гапонов, М. А. Миллер, Письма в ЖЭТФ **34**, 242 (1958).
- Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 1, Физматлит, Москва (2004), с. 124.

4. P. H. Dawson, *Quadrupole Mass Spectrometry and its Applications*, Amer. Inst. of Phys., Woodbury, New York (1995), p. 1.
5. Н. В. Мак Лахлан, *Теория и применение функций Матъе*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
6. N. V. Konenkov, M. Yu. Sudakov, and D. J. Douglas, J. Amer. Soc. Mass Spectrom. **13**, 597 (2002).
7. М. Ю. Судаков, ЖТФ **70**, 108 (2000).
8. D. Gerlich, in *Advances in Chem. Phys. Series*, ed. by Cheuk-Yiu Ng and Michael Baer, Vol. LXXXII, J. Wiley & Sons (1992), p. 1.
9. A. A. Makarov, Ann. Chem. **68**, 4257 (1996).
10. R. E. Mach and J. F. J. Todd, *Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry*, J. Willey & Sons, New Jersey (2005).
11. N. V. Konenkov, L. M. Cousins, V. I. Baranov, and M. Yu. Sudakov, Int. J. Mass Spectrom. **208**, 17 (2001).
12. C. F. D. Ding, N. V. Konenkov, and D. J. Douglas, Rapid Comm. Mass Spectrom. **17**, 2495 (2003).