不同参数四极杆组件宽质量范围性能仿真

冯天佑 成永军^{*} 陈联 董猛 赵澜 王星辉 孙雯君 (兰州空间技术物理研究所真空技术与物理重点实验室 兰州 730000)

Performance Simulation of Quadrupole Assemblies with Different Parameters Over a Wide Mass Range

FENG Tianyou, CHENG Yongjun^{*}, CHEN Lian, DONG Meng, ZHAO Lan, WANG Xinghui, SUN Wenjun (Science and Technology on Vacuum Technology and Physics Laboratory, Lanzhou Institute of Physics, Lanzhou 730000, China)

Abstract The continuous expansion of the application demand for guadrupole mass spectrometer has led to a rapid increase in the demand for guadrupole components. In order to meet the requirements, several fixed-size modular quadrupole components need to be developed, and different RF power supplies need to be designed to meet the application requirements. Based on the quadrupole electric field and ion motion theory, the ion optical simulation software SIMION was used to model and calculate the electric field distribution and ion motion trajectory. The simulation analysis results show that under the selected simulation parameters, the field radius mainly determines the shape of the ion transmission probability curve with high mass-to-charge ratio ions, and its impact on the transmission probability varies with different mass-to-charge ratio ions. The impact on resolution decreases as the mass-to-charge ratio increases. The smaller the mass-to-charge ratio, the longer the rod length required for stable ion separation. When the rod length is less than required, the transmission probability decreases with the increase of rod length, and the resolution pattern is opposite. An increase in the U/V will reduce the transmission probability, improve resolution, and have a greater impact on the high mass-to-charge ratio. The increase in frequency will improve the resolution of the wide mass-to-change ratios, increase the ion transmission probability of low mass-to-change ratio, but significantly reduce the ion transmission probability of high mass-tocharge ratio. Large-size quadrupole assembly is particularly suitable for low mass-to-charge ratio ion analysis, and measures must be taken to reduce the influence of edge fields when used for high mass-to-charge ratio ion analysis. The research results can provide a reference for the design of quadrupole mass spectrometers for different application purposes.

Keywords Quadrupole assembly, Wide range of mass-to-charge ratio, Ion transmission probability, Resolution, SIMION

摘要 四极质谱计应用需求的不断扩大对四极杆组件需求量迅速增加,为满足大批量、通用化要求需研发几种固定尺寸 的模块化四极杆组件,再设计不同的射频电源来满足应用需求。基于四极电场和离子运动理论,使用离子光学仿真软件 SIMION 对电场分布和离子运动轨迹进行了建模和计算分析。仿真分析结果表明,在所选定仿真参数下,场半径主要决定大 质荷比离子通过率曲线形状,其对不同质荷比离子通过率影响不同,对分辨率的影响随质荷比增大而减小;质荷比越小,离子 稳定分离所需杆长越长,达到所需杆长前,离子通过率随杆长增加而减小,分辨率相反;直交比的增加会减小通过率、提高分 辨率,对大质荷比段影响更大;频率的增加在全质荷比提高分辨率,增加低质荷比通过率,但显著降低大质荷比通过率;大尺 寸杆特别适用于低质荷比离子分析,用于大质荷比时必须采取降低边缘场影响的措施。研究结果可为不同应用目的四极质 谱计的设计提供参考。

令

关键词 四极杆组件 宽质荷比范围 离子通过率 分辨率 SIMION 中图分类号: TH843 **文献标识码:** A **doi: 10.13922/j.cnki.cjvst.202304004**

近年来,环境保护、食品安全、军事应用等领域 对质谱技术的需求逐渐增加^[1-3],四极质谱计因其灵 敏度高、线性质量标度、结构简单牢固等优点^[4],在 上述领域具有广泛的应用。四极杆组件是四极质 谱计的核心部件,直接影响仪器的质量范围、灵敏 度和分辨率。

当前中国开展四极质谱计研制的科研院所和 公司很多,为了达到不同的仪器性能所使用的四极 杆组件尺寸也是各式各样。而随着四极质谱计需 求的扩大和国产化替代工作的开展,对四极杆组件 的需求量非常大,上述专用研制方式已无法满足要 求。当前比较认可的解决方法为研制几种固定尺 寸的四极杆组件,根据需求设计不同的射频电源来 满足应用需求。

本文对四极杆关键参数在 1~1000 u 质荷比离 子通过率和分辨率的影响进行了仿真研究,并对三 种典型模块化四极杆组件进行了对比分析,尺寸分 别为 Φ6 mm×100 mm、Φ8 mm×200 mm 和 Φ16 mm× 300 mm^[5-7]。本文的相关结果可以为四极质谱计四 极杆组件的选取提供参考依据。

1 理论与建模

1.1 四极场理论

四极杆组件是由 4 根平行对称的杆电极组成, 正对的极杆两两相连形成两组电极,相对极杆间最 小距离为 2r₀, r₀称为场半径。设四极杆组件截面中 心为坐标原点,令 x 轴方向上的两根极杆电位为 Φ, y 轴方向上的两根极杆电位为-Φ(Φ= U+Vcoswt, U 和 V分别为四极杆上施加电压的直流分量和交流 分量的幅值,w 为角速度,t 为时间)。

电极空间任一点(x,y)上的电位为

$$\Phi(x, y, t) = \Phi_0 \frac{x^2 - y^2}{r_0^2}$$
(1)

式中, ϕ 为t时刻(x,y)点的电位。

质荷比 M=m/e 的离子沿 z 轴进入四极场,将受电场作用,其运动方程为

$$m\frac{d^{2}x}{dt^{2}} = -\frac{2e\Phi_{0}}{r_{0}^{2}}x$$

$$m\frac{d^{2}y}{dt^{2}} = \frac{2e\Phi_{0}}{r_{0}^{2}}y$$

$$m\frac{d^{2}z}{dt^{2}} = 0$$
(2)

式中, m 为离子质量, e 为离子电荷。

可以看出,由于 Φ 是随时间周期性变化的,则 离子在四极场中 x、y 方向作振荡运动,z 方向作匀 速运动。

$$\begin{split} \xi &= \frac{\omega t}{2} \\ a &= \frac{8eU}{mr_0^2 \omega^2} \\ q &= \frac{4eV}{mr_0^2 \omega^2} \end{split}$$
 (3)

将式(3)代入式(2)并求解,得到离子的第一稳 定区如图1所示。





当选定 U、V的比值后,在稳定图上会形成一 条通过原点的直线,称作质量扫描线。扫描线切割 稳定区于两个交点,只有位于交点之间质荷比的离 子,才能以有限的振幅通过四极场,到达离子检测 器;而其他离子在 x 或 y 方向作增幅振荡,最终与四 极杆碰撞被收集或移出电场区,不能到达离子检测 器。这就是四极场实现质量分析的原理。

当扫描线通过稳定区顶点时交点变为一个,此时最佳的分辨率但离子通过率极低,顶点坐标为(0.237,0.706),相应的 U/V=0.1678。

1.2 仿真建模

四极电场的模拟方法主要有以下三种。 直接数值计算法,其代表软件为MATLAB。该 方法是根据离子在四极场内的运动方程,采用如四阶 Runge-Kutta 法等进行微分方程求解,得到离子不同时刻位置和速度^{18]}。该方法计算精度较高,但计算速度较慢。

有限差分网格计算(FDM)方法,代表软件为 SIMION^[9]。该方法通过有限差分法求解拉普拉斯 方程,从而得到空间内的电场分布;确定离子的初 始位置和速度后,就可以得到任意时刻离子的位置 和速度。SIMION 软件允许用户自行设计电极,可 以模拟复杂装置的离子轨迹模拟。

有限元网格计算(FEM)方法,代表软件为 COMSOL^[10]。该方法通过将模型划分为网格,先计 算四极电场,然后通过电场数据驱动计算离子轨迹。 COMSOL适用于多物理场的耦合计算。

为了研究不同尺寸结构四极杆组件对性能的 影响,采用 SIMION 进行了建模。考虑到边缘场的 影响,模型包括了离子入射透镜、四极杆组件和离 子出射透镜。由于四极杆组件较长且为平面对称 结构,完全采用 3D 电势阵列建模对计算机 RAM 的 需求会急剧上升,因此采用如下方案进行模型的 建立。

将四极杆组件切割为三段,首尾两段分别随入 射透镜和出射透镜建立 3D 电势阵列,中间一段建 立为 2D 电势阵列,从而形成一个完整的四极杆组 件研究模型。所建立模型如图 2 所示。

2 结果与讨论

仿真模型参数如表1所示。

质谱计的灵敏度和分辨率是表征仪器性能的 重要指标。灵敏度是四极质谱计离子检测器收集 离子信号强度与被测气体分压力之比,这里只讨论 四极场的影响,可以用离子通过率来表征。分辨率 是四极质谱计分辨不同质荷比离子能力的量度,采 用 50% 峰高处的Δ*m*(Full Width at Half Maxima, FWHM)来表征。

当前实际四极质谱计多采用等峰宽电路以在 不同质荷比离子处达到近似相等的分辨率,而文中 仿真在全质量范围采用了恒定的直交比,这一点是 需要特别注意以免混淆的。

2.1 模型网格密度的选取

分别采用 5 gu/mm、10 gu/mm 和 20 gu/mm 网 格密度对 Ø8 mm×100 mm 四极杆组件进行建模,保



- 图2 四极质谱计 SIMION 仿真模型。(a) 入口透镜;(b) 四极 杆;(c) 出口透镜;(d) 整体模型
- Fig. 2 Simulation model of quadrupole mass spectrometer in SIMION. (a) Inlet lens, (b) quadrupole, (c) outlet lens, (d) whole model

表 1	仿真参数

à	b.	1	Simu	lation	param	eter
---	----	---	------	--------	-------	------

Parameter Value		Description	
r_0/mm	3,4,8	场半径	
<i>r</i> /mm	$1.1487r_0$	四极杆半径	
L/mm	100,200,300	四极杆长度	
<i>f</i> /MHz	1.3	交流电压频率	
d_1/mm	1	离子初始位置与入口孔距离	
d_2/mm	4	入口孔与四极杆距离	
D/mm	2.4	人口孔直径	
$\beta/^{\circ}$	5	离子初始速度与轴线最大夹角	
E/eV	2	离子初始动能	
<i>τ</i> /μs	0~1/f	离子产生时间	

持其他参数一致,则三种网格密度模型在 1~1000 u 质量范围的离子通过率如图 3 所示。







由图 3 可知, 三种网格密度模型在 5~500 u 区 间离子通过率基本一致, 该区域之外则 10 gu/mm 和 20 gu/mm 模型离子通过率大于 5 gu/mm 模型, 且 5 gu/mm 曲线在 800 u 处的凸起在另外两条曲线 中前移至 700 u; 10 gu/mm 和 20 gu/mm 曲线离子通 过率在 1~1000 u 基本一致, 因此可以认为对于离子 轨迹的计算, 10 gu/mm 网格密度已经能够满足计算 精度, 文中仿真均采用 10 gu/mm 模型。

2.2 场半径对四极性能的影响

场半径直接影响四极质谱计的径向尺寸,对仪器的选择有重要影响。改变场半径,固定其他参数, U/V=0.97×0.1678=0.1628,仿真计算离子通过率,取 U/V=0.99×0.1678=0.1661,仿真计算分辨率,其结果 如图 4 所示。

由图 4(a) 可知,不同场半径下在 20~200 u 间离 子通过率均接近 100%,表明在所选定的直交比下 场半径对中间质荷比离子通过率影响不大;低质荷 比段,离子通过率随场半径增加而增大,场半径为 8 mm 时 1 u 离子通过率达到 1。与 r₀=3 mm 模型相 比, r₀=4 mm、r₀=8 mm 模型 1 u 处通过率分别增大 42% 和 90%,表明大场半径有利于低质荷比离子传 输;高质荷比段, r₀=8 mm 模型通过率最低,1000 u 处相比 r₀=3 mm 模型减小 22%,这可能来源于边缘 场的影响,场半径 3 mm 和 4 mm 模型曲线基本一致, 但 4 mm 在 650 u 处有凸起,经多次重复仿真,该现 象始终存在。目前尚无恰当的解释。

由图 4(b)可知, r₀=3 mm 和 r₀=4 mm 模型在



图4 不同场半径下四极杆性能与离子质荷比变化关系。 (a) 传输率; (b) 分辨率

Fig. 4 The relationship between quadrupole performance and ion mass to charge ratio at different r_0 . (a) Transmission probability, (b) resolution

1~200 u 分辨率曲线基本重合,在 1~40 u 分辨率优 于 r₀=8 mm 模型,在 100~200 u 三种场半径模型分 辨率相同。能够通过四极杆组件的离子最大振幅 应小于场半径,对于 r₀=3 mm 和 r₀=4 mm 模型,其允 许通过的不稳定离子最大振幅近似,又仿真中分辨 率变化最小为 0.05 u,因此出现了前两者曲线重合 的现象;将场半径增加到 8 mm,容许通过的最大振 幅翻倍,部分无法通过小场半径的离子得以通过, 1~40 u 分辨率变差;100~200 u 时,不稳定离子在四 极场中经历了足够多的射频周期,已经完成了分离, 因此增大场半径不会使分辨率变差,这一点将在杆 长影响一节详细分析。

根据式(4)^[4],对于同样质荷比的离子,频率一 定时,场半径增大会导致所需的交流电压增大,四 极杆端面电极在边缘场中的影响也会增大,离子碰 撞电极的比例会增加且更易损失在四极杆前端。

$$M = \frac{7 \times 10^6 V_{\rm pp}}{f^2 r_0^2}$$
 (4)

式中, Vm 为交流电压峰峰值。

对损失在极杆上的离子进行分析,以 500 u 为 例,仿真结果见图 5,图中红点为离子损失位置。离 子在边缘场度过 6 个射频周期(6 T), r₀=3 mm 模型 离子主要损失在四极杆入口 6~13 T 内, r₀=4 mm 模 型离子主要损失在四极杆入口 7.5~13.5 T 内, 而 r₀=8 mm 模型离子主要损失在四极杆入口 6~34 T 内,并有部分离子损失在入口前。这与预期结果 一致。



- 图5 不同场半径下 500 u 离子碰撞损失位置。(a) r₀=3 mm; (b) r₀=4 mm; (c) r₀=8 mm
- Fig. 5 500 u ions collision loss location at different r_0 . (a) r_0 = 3 mm, (b) r_0 =4 mm, (c) r_0 =8 mm

为了进一步验证这一结果,采用固定场半径, 射频频率分别取 1.0、1.3、2.0 MHz 进行仿真。根据 式(4), $f = r_0$ 在式中起同样作用,仿真结果如 图 6 所示,离子损失位置变化与频率关系同场半径 相似,再次验证了预期结果。



- 图6 不同频率下 500 u 离子碰撞损失位置。(a) f=1.0 MHz; (b) f=1.3 MHz; (c) f=2.0 MHz
- Fig. 6 500 u ions collision loss location at different f. (a) f= 1.0 MHz, (b) f=1.3 MHz, (c) f=2.0 MHz

2.3 四极杆长度对四极性能的影响

四极杆长度的延长会使离子在四极场中的运动周期数增加,部分作增幅振动的离子振幅逐渐增大,能够通过短杆而无法通过长杆。场半径取4mm,固定其他参数,杆长分别取100、200、300mm,仿真计算离子通过率和分辨率,其结果如图7所示。

由图 7(a)可知,随着杆长 L 的增加,10~1000 u 区间离子通过率曲线基本重合,仅在凸起附近有明 显差异,但相对 100 mm 最大变化也小于 10%;1~3 u 离子通过率随长度变化有明显差异,在 1 u 处 300 mm 比 100 mm 减小 48%。这是由于进入四极场的离子, 在经过一定射频周期后不稳定离子碰撞四极杆或 离开四极场实现分离,剩下的稳定离子将作周期振 荡全部通过四极场;仿真中不同质荷比的离子以 相同能量进入四极场,但因速度的不同在四极场内 经历的射频周期数有差异,同样杆长质荷比越小 的离子经历的射频周期数越少;而要分离不稳定离 子需要一定的射频周期,对于图 7 所示曲线,10~ 1000 u 质荷比离子在 100 mm 杆长已达到不稳定离



图7 不同杆长下四极杆性能与离子质荷比变化关系。(a) 通 过率; (b) 分辨率

Fig. 7 The relationship between quadrupole performance and ion mass to charge ratio at different *L*. (a)Transmission probability, (b)resolution

子分离所需周期数,而这一长度还未满足 1~3 u 质荷比离子所需周期数。

为了验证这一分析,对 1~5 u 质荷比离子通过 率随杆长变化开展了进一步研究,结果如图 8 所示。 图中 1 u 离子在 $L \ge 300$ mm 时通过率达到稳定,2 u、 3 u 离子在 $L \ge 200$ mm 时通过率达到稳定,4 u、5 u 离子在 $L \ge 150$ mm 时通过率达到稳定。根据动能 公式

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \tag{5}$$

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \tag{6}$$

式中, *E* 为离子动能, *m* 为离子质量, *v* 为离子速度。 则相同动能的 1~5 u离子其速度比为 1: $\frac{1}{\sqrt{2}}$: $\frac{1}{\sqrt{3}}$: $\frac{1}{2}$: $\frac{1}{\sqrt{5}}$, 按离子需要同样数量的射 频周期数实现分离, 则离子稳定分离所需的杆长比 同样为 1: $\frac{1}{\sqrt{2}}$: $\frac{1}{\sqrt{3}}$: $\frac{1}{2}$: $\frac{1}{\sqrt{5}}$ 。图 8中 1、2、4 u



图8 1~5 u 质荷比离子通过率与杆长变化关系

Fig. 8 The relationship between transmission probability and rod length of 1~5 u ions

离子稳定分离杆长比为 300 : 200 : 150=1 : $\frac{2}{3}$: $\frac{1}{2}$, 与上述理论计算结果基本一致。

图 7(b) 中, 杆长 200 mm 和 300 mm 的分辨率 曲线基本重合, 说明 200 mm 的杆长已能够实现离 子完全分离; 而 100 mm 杆长 1~200 u 分辨率均较差, 这是由于分辨率仿真时 U/V=0.99×0.1678=0.1661, 而离子通过率仿真时 U/V=0.97×0.1678=0.1628, U/V 的增大导致不稳定离子完全分离所需的杆长也随 之增加, 100 mm 杆长已无法满足该范围离子分离 要求。

2.4 四极杆上电压直交比对四极性能的影响

增大四极杆上电压直交比会导致离子所受电场力增大,离子运动振幅增加,传输率下降。场半径取4mm,固定其他参数,U/V分别取0.163、0.165、0.166,仿真计算1~200u离子通过率和分辨率,其结果如图9所示。

由图 9(a)可知,随着 U/V从 0.163 增大到 0.165, 不同质荷比离子通过率均下降,且 100% 传输区间 由 20~200 u缩小到 20~100 u;继续增大到 0.166, 100% 传输区间缩小为 0,传输率最大值 0.768 约在 10 u处;低质荷比段通过率分别下降 7% 和 20%,高 质荷比段下降 21% 和 56%。由图 9(b)可知,随着 U/V的增大,分辨率是逐渐改善的,且质荷比越大, 分辨率改善越明显,10 u处分别为 0.163 曲线的 86% 和 71%,200 u处为 65% 和 37%,而 1~5 u 三条 曲线基本重合。上述结果表明调节电参数可以方 便显著的改变四极质谱计性能,且对高质荷比段影 响更大,对低质荷比影响较小。



图9 不同 U/V下四极杆性能与离子质荷比变化关系。(a) 通 过率; (b) 分辨率

Fig. 9 The relationship between quadrupole performance and ion mass to charge ratio at different U/V. (a) Transmission probability, (b)resolution

2.5 射频电源频率对四极性能的影响

射频电源频率的变化会改变离子在四极场中 经历的射频周期数。场半径取4mm,固定其他参 数,频率f分别取1.0 MHz、1.3 MHz和2.0 MHz,仿 真计算离子通过率和分辨率,其结果如图10所示。

由图 10(a)可知,频率的增加可以一定程度上 提高 1~20 u 离子的通过率,却会显著降低 100~1000 u 离子的通过率;图 4(a)中观察到的凸起,在 2.0 MHz 曲线前移至 300 u。已有两点(1.3,650)和(2.0,300), f=1.0 MHz 时,按线性关系凸起应在 800 u,但在 1.0 MHz 曲线 800 u 处未观察到此现象;以频率平方 的倒数计算,凸起应在 1100~1200 u 处,延长 1.0 MHz 曲线至 1300 u,确实在 1200 u 处观察到了凸起。这 一结果表明凸起的位置与频率的平方有明确的关 系。由图 10(b),频率的增加可以显著改善 1~200 u 离子分辨率,且三条曲线基本平行,说明频率对分 辨率的改善在全质荷比上规律是相同的。频率的



图10 不同频率下四极杆性能与离子质荷比变化关系。 (a)通过率;(b)分辨率

Fig. 10 The relationship between quadrupole performance and ion mass to charge ratio at different f. (a) Transmission probability, (b) resolution

增加使离子在四极场中经历的射频周期数增加, 同样杆长使离子分离更加充分,从而得以改善分 辨率。

2.6 三种模块化四极杆组件仿真分析

对 Φ6 mm×100 mm、Φ8 mm×200 mm 和 Φ16 mm ×300 mm(以下分别简称小杆、中杆和大杆)三种四 极杆组件仿真计算离子通过率和分辨率,其他参数 保持一致,结果如图 11 所示。

由图 11(a)可知,不同尺寸四极杆组件的离子 100%通过率区间分别为 20~200 u、10~200 u和 3~200 u,大杆的 100%通过率区间最大。低质荷比 段,离子通过率随四极杆组件尺寸增大而增大,但 中杆在 1 u 处反而降低 17%;高质荷比段,200~500 u 段小杆和中杆离子通过率曲线重合,500~1000 u 中 杆曲线凸起离子通过率大于小杆,400~1000 u 大杆 离子通过率小于前两者。将图 11(a) 与图 4(a) 对比, 可以发现 100 u 以上曲线形状位置基本一致,说明



图11 三种四极杆组件性能与离子质荷比变化关系。(a) 通 过率; (b) 分辨率

Fig. 11 The relationship between performance and ion mass to charge ratio of three types of quadrupole assembly. (a) Transmission probability, (b) resolution

场半径决定大质荷比离子通过率曲线形状,即场半 径对不同质荷比离子通过率的影响不同;10 u 以下, 图 11(a)相比图 4(a)中杆和大杆离子通过率均有明 显的下降,质荷比越小下降幅度越大,说明 图 4(a)中的杆长尚未满足小质荷比离子稳定分离 的要求。

由图 11(b) 可知, 中杆和大杆相对小杆分辨率 均有明显改善, 1~5 u 和 100~200 u 段大杆分辨率优 于中杆, 而在 10~40 u 两者分辨率曲线重合; 对比 图 11(a), 10~40 u 为 100% 通过率区间, 图 11(b) 所 施加的直交比不足以使离子进一步分离, 因而两者 分辨率曲线重合。可以预测, 当增大直交比后, 图 11(b) 中重合的曲线会发生分离, 大杆分辨率将 会优于中杆。

将图 11(b) 与图 4(b) 对比,可以发现杆长对分 辨率的影响要大于场半径的影响,增加杆长是提高 分辨率的有效方法。 不计算固定四极杆的陶瓷极座时,以上三种四极杆组件外径分别为 19.8、26.4、52.8 mm,质量为 0.145、0.515、3.088 kg(钼杆,密度取 9.7 g/cm³)。大杆体积和重量都远远大于小杆,这是重要的负面因素,进行四极杆组件选择时必须慎重考虑;但大杆也具有相应的优势,对低质荷比段离子传输有明显优势,全质荷比分辨率更佳,且抗污染性能更好^[11]。

3 结论

使用 SIMION 仿真软件, 以 10 gu/mm 的网格 密度对四极杆组件进行了建模和计算分析, 探究了 四极杆组件关键参数变化对 1~1000 u 宽质荷比范 围离子通过率和分辨率的影响。结果表明:

(1)场半径对不同质荷比离子通过率影响不同, 主要决定大质荷比离子通过率曲线形状;大场半径 有利于低质荷比离子传输但会降低分辨率;单级四 极杆由于边缘场电压的影响,频率一定时增大场半 径反而不利于高质荷比离子传输,而场半径对分辨 率影响随质荷比增大逐渐减弱,直至不同场半径分 辨率相同。

(2)同样能量的离子因质荷比不同实现稳定分离所需的杆长不同,质荷比越小,需要的杆长越长; 达到稳定分离杆长前,离子通过率随杆长增加而减小,分辨率随杆长增加而提高;杆长对分辨率的影响大于场半径。

(3)直交比 U/V 的增加会引起离子通过率的减 小和分辨率的提高,且对高质荷比段影响更大,对 低质荷比影响较小;频率的增加能够在全质荷比提 高分辨率,可以一定程度提高低质荷比离子通过率, 却会显著降低高质荷比离子通过率。

(4)对三种模块化四极杆组件进行对比,大尺 寸杆低质荷比段离子通过率最大、分辨率最佳,高 质荷比段通过率最小但分辨率也最佳;中尺寸杆低 质荷比段通过率和分辨率均大于小尺寸杆,高质荷 比段分辨率优于小尺寸杆而两者通过率相同。

(5)在 r₀=4 mm 模型通过率曲线出现凸起点, 经 验证其位置与频率平方成反比, 与杆长无明显关系, 该现象出现原因尚不明确。

本研究探究了四极杆组件关键参数对不同质 荷比离子性能的影响,这为不同应用目的四极质谱 计的设计提供了参考。

参考文献

- [1] Elisabeth S, Jasper H, Michael P, et al. Real-time trace detection of security-relevant compounds in complex matrices by thermal desorption-single photon ionization-ion trap mass spectrometry (TD-SPI-ITMS)[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2009, 395(6): 1795–1807
- [2] Nielen M W F, Hooijerink H, Zomer P, Mol J G J. Desorption electrospray ionization mass spectrometry in the analysis of chemical food contaminants in food[J]. Trends in Analytical Chemistry, 2011, 30(2): 165–180
- [3] Takada Y, Nagano H, Suga M, et al. Detection of military explosives by atmosphere pressure chemical ionization mass spectrometry with counter-flow introduction[J].
 Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2002, 27(4): 224–228
- [4] Peter H D. Quadrupole mass spectrometry and its applications[M]. New York: American Institute of Physics, 1976
- [5] Dong Meng, Sun Wenjun, Wu Chengyao, et al. A UHV standard with option to be used as partial pressure standard[J]. Metrologia, 2020, 57(2): 17–25
- [6] Alper E, Rifat K. Remarks concerning about the characteristics of the extractor vacuum gauge and the Quadrupole Mass Spectrometer[J]. Measurement, 2019,

131:269-276

- [7] Elkatmis A, Kangi R, Becker U, et al. Time stability characterization of quadrupole mass spectrometers[J]. Measurement, 2020, 165: 108–143
- [8] Ma F M, Taylor S. Simulation of ion trajectories through the mass filter of a quadrupole mass spectrometer[J]. IEE Proceedings-Science, Measurement and Technology, 1996, 143(1): 71–76
- [9] Forbes M W, Sharifi M, Croley T, et al. Simulation of ion trajectories in a quadrupole ion trap- a comparison of three simulation programs[J]. Journal of Mass Spectrometry, 1999, 34(12): 1219–1239
- [10] ZHANG Zhiliang, SUN Yueqiang, LI Yongping, et al. Simulation and analysis of spaceborne quadrupole mass spectrometer based on COMSOL[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2022, 42(7): 517-524 (in Chinese) (张志良, 孙越强, 李永平, 等. 基于 COM-SOL 的星载四极质谱仪仿真分析 [J]. 真空科学与技术 学报, 2022, 42(7): 517-524)
- [11] YU Bingqi. Effect of contamination on performance of quadrupole mass spectrometer[J]. Vacuum, 1999(6): 15-19 (in Chinese) (于炳琪. 污染对四极质谱计性能的 影响 [J]. 真空, 1999(6): 15-19)