

可实现大质量数检测的四极杆质谱计的关键参数设计及仿真研究

郭琦 韩琰 袁翠平 孙伟 孙立臣 孟冬辉 闫荣鑫*
(北京卫星环境工程研究所 北京 100094)

Design and Simulation of Key Parameters of Quadrupole Mass Spectrometer for Large Mass Detection

GUO Qi, HAN Yan, YUAN Cuiping, SUN Wei, SUN Lichen, MENG Donghui, YAN Rongxin*
(Beijing Institute of Spacecraft Environment Engineering, Beijing 100094, China)

Abstract With the advancement of science and technology in our country and the development of technology, the gas composition in the closed environment of special projects needs to be accurately detected. In addition to the gas composition of small m/z (within 200 amu), the detected object also contains important organic large m/z components; one of the most effective gas detection instruments for components is the quadrupole mass spectrometer. Most of the research and development institutions of mass spectrometers in China focus on the design and production of low m/z products. There are seldom reports on the design of quadrupole mass spectrometers that can measure large m/z (up to 1000 amu). In this article, mechanical parameters such as rod length, field radius, entrance aperture, and assembly precision of the quadrupole mass spectrometer are designed, as well as electrical parameters such as RF voltage and DC voltage, ion pass rate, resolution of the mass spectrometer and other index parameters were simulated and calculated, and a measurable large mass quadrupole mass spectrometer with a mass detection line up to 1000 amu was designed, which can meet the application requirements of confined spaces in special fields.

Keywords Large m/z , Quadrupole mass spectrometer, Electromechanical design, Simulation calculation, Gas analysis

摘要 随着中国科技的进步、技术的发展,特殊工程密闭环境内的气体成分需要精确检测,被检测对象除了小质量数(200 amu 以内)气体成分之外,还包含重要的有机大质量数成分;气体成分最有效的检测仪器之一就是四极质谱计,中国质谱计研发单位大多数都集中在小质量数产品的设计生产,可测大质量数(可达 1000 amu)的四极质谱计设计报道很少;文章设计了四极质谱计杆长、场半径、入口孔径、装配精度等机械参数,以及射频电压、直流电压等电参数,结合机械参数和电参数对离子的运动轨迹、离子的入射能量、离子的通过率、质谱计的分辨率等指标参数进行了模拟仿真计算,设计了质量数检测上限可达 1000 amu 的可测大质量数四极质谱计,能满足特殊领域密闭空间的应用需求。

关键词 大质量数 四极质谱计 机电设计 仿真计算 气体分析

中图分类号: TH843

文献标识码: A

doi: 10.13922/j.cnki.cjvst.202407010

在载人航空气空间站、潜艇的各个舱室、坦克密闭舱、飞机座舱等这样的密闭空间中均会存在各种各样的有害气体,例如人体代谢、非金属材料脱气、

材料热解、偶然事故泄漏、设备运行等情况产生的气体。这些有害气体将会对密闭空间内的工作人员带来健康上的潜在危害,甚至有些毒害气体直接

危及人员的生命安全。为了保障人员的身体健康和生命安全,在密闭空间内亟需配备实时监测毒害气体浓度的分析测试仪器,特别是对苯类物质、氟化物、氯化物等大质量数的有毒气体监测。

在空间站中,国外对于密闭空间气体的分析测试仪器多基于质谱、色谱、离子迁移谱及傅里叶变换红外光谱的原理。其中基于电化学原理的系统不适用于长期连续监测,而光学式气体传感器灵敏度较高且系统复杂^[1]。在上述技术中,质谱仪在灵敏度、检出限、速度和多样性上有不可替代的地位。

四极杆质量分析器在质谱仪中大量使用,主要基于以下优势:一是使用场景包容性更强,可与多种离子源配合使用;二是针对不同质量数样品分析时可通过调节仪器参数获得更好的分析性能。

四极杆质谱计在国际上发展较早,在机械加工和装配、性能参数、价格方面均处于领先地位。长久以来,四极杆质谱计依赖进口,国产化起步较晚,特别是在四极杆加工和装配、射频电路设计等核心技术上差距明显,导致仪器指标稍有逊色。同时,国内研发工作主要集中于小质量数(200 amu 以内),少有人开展大质量数(可达 1000 amu)质谱计的研制。如今国外对关键技术进行严格把控,许多特殊领域限制进口,亟需研制适合特定场景和需求的大质量数四极杆质谱计^[2]。

本文通过理论计算和仿真分析优化设计了一款适用于分析大质量数的四极质谱计,可用于监测密闭空间内的污染情况,分析有毒有害气体的成分和含量,确保密闭空间内工作人员的身体安全和健康。

1 四极质谱理论及仿真平台

1.1 四极质谱分析理论

质谱分析时,首先将样品分子电离成带电离子,带电离子在电场或磁场的作用下按照质荷比的不同在空间或时间上分离,分离后的离子依次进入检测器,最后经过相关数据处理后得到其质荷比与相对强度的质谱图,图1为四极杆工作原理图。

四极杆由四根经过精密加工和排列的金属电极杆组成,杆之间相互平行且两两相对为一组。其中相对电极耦合在一起施加极性相同的信号,相邻电极施加极性相反的信号,信号为带有直流偏置的交流信号,可表示为:

$$\Psi = U - V \cos \Omega t \quad (1)$$

式中: Ψ 为总电势, U 为直流偏置电压,约数百伏特; V 为射频交流电压; Ω 为射频频率,通常为 500 kHz~15 MHz。图1是圆杆组成的四极杆质量分析器。

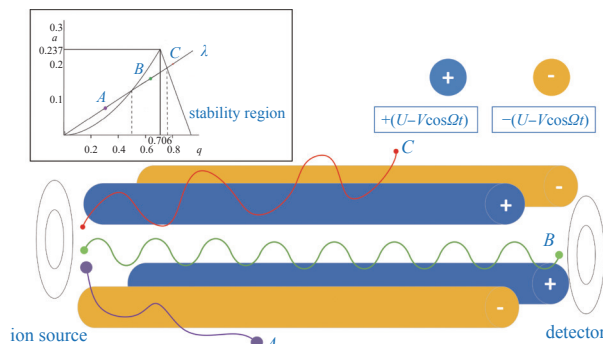


图1 四极杆工作原理图

Fig. 1 Principle diagram of quadrupole mass filter

四极杆的原理是利用不同质荷比(m/z)的离子在特定参数电场作用下会有不同的运动特性来进行质量分析的。在一定四极电场参数下,只有唯一质荷比(m/z)的离子才能通过。离子在四极场中的运动方程用 Mathieu 方程 (2) 式表示:

$$\frac{d^2 u}{d\delta^2} + (a_u - 2q_u \cos 2\delta)u = 0 \quad (2)$$

$$a = \frac{8eU}{m\Omega^2 r_0^2} \quad (3)$$

$$q = \frac{4eV}{m\Omega^2 r_0^2} \quad (4)$$

$$\lambda = \frac{U}{V} \quad (5)$$

式中: u 为 x 、 y 的位移,无量纲; a 和 q 是表征确定离子在四极场中稳定性的参量,无量纲。通过操控 a 与 q 两个参数,可决定离子在四极场中的运动模式。因此可将离子 x 与 y 方向的稳定与不稳定边界在 a 与 q 坐标上呈现出来,并将两方向的图形重叠画出,重叠部分即为稳定区,通常会选择在第一稳定区操作,第一稳定区如图1插图所示。当离子处于稳定区内,离子运动轨迹近似于简谐运动;当离子处在不稳定区内,离子会以指数增加或减少的方式离开平衡的场^[3]。

通常,四极杆会在 Mathieu 方程第一稳定区做质量选择,当杆上的所加的直流电压随射频发生变化时,就会对离子具有选择性,对于不同质量数的离子所需要的四极杆参数也不同,这种操作模式称作质量选择稳定性操作模式。当在扫描时同时改

变直流电压 U 和交流电压 V , 二者比值所成的斜线称作操作线 λ 。当操作线越接近稳定区尖端, 即 Mathieu 方程第一稳定区的顶点 $(a, q) = (0.236, 0.706)$ 附近^[4], 质量选择性越好, 但能通过的离子数量也会变少。

1.2 仿真平台介绍

本文仿真基于 MATLAB 平台, 采用四阶 Runge-Kutta 算法对离子轨迹进行仿真模拟研究, 可实现四极质量分析器的离子运动轨迹仿真, 在仿真研究中通过对四极杆的机械形状、电压施加方式, 实验外部环境及离子入射条件等多项参数进行调节, 计算其内部的电场分布及离子运动状态, 并对峰形、通过率、分辨率等仿真结果进行讨论, 这对优化仪器结构及开发新方法的应用有指导作用。

仿真平台的结构包括四个模块, 各模块间相互连接并配合仿真。电场计算与分析模块通过定义四极杆尺寸并计算该尺寸下多极场的成分, 进而对仪器性能进行预测; 可靠性模型模块通过对离子在空间中因空间电荷效应及离子分子碰撞模型受到影响后的运动轨迹进行预测, 当离子数较多 ($>10^5$) 时, 需要考虑空间电荷效应, 当真空度在 $1 \times 10^{-3} \sim 5 \times 10^{-3}$ Pa 范围内需要考虑分子碰撞模型。可靠性模型作为轨迹仿真的底层支撑, 继而可进行高精度的预测和计算。以上模块都需要通过时序进行控制并对数据进行采集和分析, 仿真平台结构如图 2 所示^[5-6]。

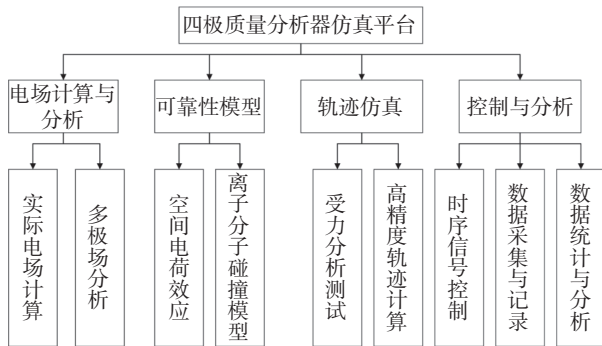


图2 仿真平台结构

Fig. 2 The structure of simulation platform

仿真主要有以下几步: 第一步是对离子运动的初始条件进行参数设置; 第二步是根据设置的参数对离子在一段时间内的运动路径进行记录; 第三步是记录所有离子的位置状态; 第四步对离子的运动轨迹进行分析。

2 四极杆参数设计及仿真验证

2.1 机械参数设计

四极杆机械参数需要从极杆长度、电极半径与场半径、边缘场、场入口孔径、加工与装配精度、材质这六个方面进行设计^[7-8]。

过长或过短的极杆长度都不利于质谱分析, 若极杆选择太长, 会因为机械加工误差引起的场畸变和极杆污染, 使其无法满足极杆机械加工的精度要求; 但若极杆选择太短, 会使部分不稳定振荡的离子通过四极杆, 从而降低四极杆的分辨率。相关研究中表明, 200 mm 的杆已能实现离子分离的需求^[9]。本文选取的四极杆长度为 200 mm。

为构建完美的四极场分布, 需采用理想的双曲面杆, 但在实际的工程加工和装配中会非常困难, 常采用圆柱杆代替双曲面杆来获得近似的四极场。当采用圆柱杆时, 可通过调整杆半径 r 和场半径 r_0 的比值来获得接近于理想的四极场, 从而获得更好的峰形。研究表明^[10], 当 $r = 1.145r_0$ 时, 此时产生的场型与理想四极场更为接近。测试大质量数的四极质谱计选择直径小、长度短的四极杆, 测试小质量数的质谱计选择选直径大、长度长的四极杆。当选取四极杆长度为 200 mm 时, 杆半径 r 为 4 mm, 场半径 r_0 为 3.49 mm 的圆柱四极杆。

由于边缘场的存在, 在四极杆的两端, 会产生不是纯四极场成分, 因此离子在进入和离开四极场时会受边缘场影响产生较大振幅, 影响仪器灵敏度和分辨率。在该状态下, 许多状态不稳定的离子会在杆的入口处 ($3r_0$) 逐渐形成沉积物, 导致四极杆对离子筛选能力变差; 另外, 在四极场出口处, 离子靠近四极杆时, 边缘场效应将使得离子不能被探测器接收, 形成峰形的凹陷、分裂。对于该情况, 可在分析器前安装预置杆解决^[11]。

当离子传输率为 100%, 分析场的入口孔径为

$$D \approx \frac{r_0}{\sqrt{M/\Delta M}} \quad (6)$$

式中: D 为入口直径 [cm]; $M/\Delta M$ 为分辨本领; ΔM 为半峰高的峰宽。

当 r_0 为 3.49 mm, 分辨率需达到 1000 时, 代入式(6), 可得此时分析场入口孔径为 0.11 mm。

对于四极杆装配精度设计, 场畸变在很大程度上限制了仪器的性能, 引起场畸变的因素有很多, 其中包括: (a) 一个或多个极杆偏离其正确位置的位

移; (b)一个或多个极杆的旋转; (c)极杆的扭曲; (d)极杆的弯曲; (e)因极杆污染和表面电荷引起的误差; (f)极杆的激励电压不平衡; (g)射频中的谐波和次谐波等。显然这些因素是很难克服的。只能在设计中尽量减小它们对场畸变产生的影响。为此, 必须对极杆的机械加工和装配精度以及射频供电系统提出严格的要求。

四极杆的加工、装配精度很大程度上决定了质谱仪的分辨能力, 通过对四极杆主要部件及装配件的精密几何量测量可提高效率并降低成本, 是保证产品质量的有效途径^[12-13]。

只考虑机械加工对质量分辨的影响, 则

$$2 \frac{M}{\Delta M} < \frac{r_0}{\Delta r_0} \quad (7)$$

通过上式可看出, 影响四极杆质量分辨率的因素由 Δr_0 、 r_0 决定, r_0 是场半径, 对单杆而言, Δr_0 的变化可以是圆度、直线度、圆柱度和粗糙度等几何量的反映。其中圆柱度是影响其分析性能的关键因素。

对于分辨率 $M/\Delta M=1000$ 、场半径为 $r_0=3.49$ mm, 要求场半径偏差小于 $\Delta r_0 < 1.745 \times 10^{-3}$ mm。

由于四极杆上需要施加高频高压的交流电, 其上的高频趋肤效应会逐步氧化四极杆表面层, 同时还需要在高真空条件下烘烤仪器。因此本文选用钼作为四极杆材料, 同时钼与固定极杆的陶瓷具有相同的温度膨胀性能。

综合上述分析过程, 本项目设计的四极杆系统, 设定质量分辨本领在 1000 的情况下, 具体的设计参数如见表 1, 四极杆机械结构示意图见图 3。

表 1 四极杆机械参数设计表

Tab. 1 The mechanical design parameters of quadrupole mass filter

序号	名称	设计参数
1	杆材料	钼圆杆
2	杆直径	$\Phi=8$ mm
3	杆长度	200 mm
4	场半径	3.49 mm
5	场入口孔径	0.11 mm
6	加工精度	优于 2 μ m
7	装配精度	优于 2 μ m

2.2 电路参数确定

四极杆的电路参数需要从射频电压、直流电压、射频频率, 离子轴向能量进行设计, 这些参数直接

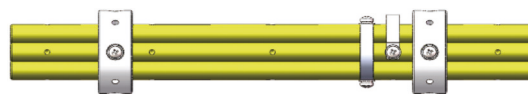


图3 四极杆机械结构示意图

Fig. 3 Schematic diagram of quadrupole mechanical structure

影响了四极杆的分辨本领和质量测试范围^[4,14]。

对于质量数为 M 的单电荷离子, 对应于稳定区顶点(0.237,0.706)的高频电压幅值和直流电压数值为:

$$V = 7.219 M f^2 r_0^2 \quad (8)$$

$$U = 1.212 M f^2 r_0^2 \quad (9)$$

式中: V 为交流电压幅值; U 为直流电压; M 为离子质量; f 为射频电压频率; r_0 为分析场半径。

对于场半径为 $r_0=3.49$ mm, 可测试质量数范围为 1~1024 amu 的四极杆, 在不同射频频率下的射频 V_{op} 和直流电压 U 如表 2 所示。

表 2 不同射频频率下的射频和直流电压

Tab. 2 RF and DC voltages at different RF frequencies

射频频率 f /MHz	射频电压 V_{op} /V	直流电压 U /V
0.8	576	97
1	900	151
1.3	1296	217
1.5	2026	340
1.7	2602	437
2	3601	605

设定射频的频率为 1.7 MHz, 计算得到射频电压范围 V_{op} 为 2.54~2602.1 V, 直流电压范围 $U=0.427$ ~436.8 V。

当离子传输率为 100% 时, 离子轴向能量的最大值和分辨本领的关系为:

$$U_{iMAX} \approx \frac{4.2 \times 10^2 \times f^2 L^2 M}{M/\Delta M} \quad (10)$$

式中: U_{iMAX} 为离子轴向能量最大值(eV), L 为分析场长度(cm)。

离子在分析场经历的射频周期数和分辨本领之间的关系为:

$$n \approx 3.5 \times \left(\frac{M}{\Delta M} \right)^2 \quad (11)$$

当分辨率需达到 1000 时, 代入式(11), 可得离子经过分析场的射频周期数为 111 次。

离子在四极分析场的轴向为匀速运动, 在四极场经历的时间为:

$$t_L = 7.25 \times 10^{-7} L \sqrt{\frac{M}{U_i}} \quad (12)$$

式中: t_L 为离子在分析场经历的时间(s); L 为分析场长度(cm), U_i 为离子加速电压(eV); M 为离子质量(amu)。

对于质量数为 1024 amu 的离子, 采用的离子加速电压 $U_i=10$ eV, 当选择杆的长度为 200 mm 长时, 分辨率需达到 1000 时, $t_L=1.47 \times 10^{-4}$ s。

2.3 仿真思路

2.3.1 参数设置

为保证离子轨迹仿真的连续性, 仿真平台记录每个离子的空间位置, 且同时考虑空间电荷效应、真空度及分子碰撞的影响。

在仿真过程中, 对参数的设置如表 3 所示。

表 3 四极杆仿真参数设置

Tab. 3 Parameters setting of quadrupole mass filter simulation

序号	名称	仿真参数
1	离子数量	100
2	离子质量数	$m/z=609$
3	离子入射能量	5 eV
4	温度	1000 K
5	缓冲气体	He
6	离子初始位置分布	$\sigma_x=\sigma_y=0.01r_0$
7	离子横向速度分布	$\sigma_{vx}=\sigma_{vy}=6.4 \times 10^{-3} \Omega r_0$
8	杆长度	$L=200 \times 10^{-3}$ m
9	场半径	$r_0=3.49 \times 10^{-3}$ m
10	射频信号	1.7 MHz

2.3.2 性能提升

在进行质量分析时, 四极杆的直流电场不为 0, 通过改变扫描线的斜率来调整四极杆分辨率, 其中 $\lambda=U/V$ 。当操作线斜率越接近顶点时, 分辨率越高, 但通过率越低, 四极杆的分辨率与离子通过四极杆的射频周期数的关系为:

$$R \propto n^2 \propto \frac{mf^2L^2}{zV_z} \quad (13)$$

式中: f 为射频信号的频率, L 为四极杆长度, z 为电荷数, V_z 为离子源到质量分析器的电势差, zV_z 为离子在四极杆中的动能。其中, 离子入射状态、四极杆机械参数、电路参数均会对四极杆的分辨率产生影响。为提高四极杆分辨率通常有以下方法:

(1) 根据能量守恒原理, 离子的入射的轴向能量决定了离子在分析场中经历的运动周期数, 当离

子在分析场中经历的射频周期数越多, 其分辨率会越高。而影响离子入射轴向能量的有端盖电压, 传输杆电压等;

(2) 当四极杆长度越长, 离子在四极场内飞行时间越久, 其分辨率会越高。但四极杆长度也不宜过长, 这会影响机械加工和装配以及实际使用的场景;

(3) 当四极杆上所施加的射频电压频率越高, 离子在分析场中经历的运动周期数越多, 其分辨率将会提升。但对于特定质荷比的离子进行分析时, 根据式 (8), 其射频电压幅度也会升高, 这会增加射频电源的设计制造难度, 并且离子受高阶场的影响程度会增加^[15]。

3 仿真结果讨论

3.1 优化扫描线

根据 Mathieu 方程, 当确定 r_0 、 Ω 、 U 、 V 后, 对于质荷比为 m/z 的离子, 将会得到确定的工作点(a 、 q 值), 若该值在稳定区内, 则离子运动轨迹是稳定的。

$$\lambda = \frac{a}{q} = 2 \frac{U}{V} = \text{常数} \quad (14)$$

在稳定区内, λ 为扫描线。对于同一工作频率的四极杆, λ 值仅由直流电压 U 和交流电压 V 的比值决定, 当改变 U 和 V 的数值, 但保持 λ 值不变, 可实现四极杆质量扫描。 λ 值会直接影响四极杆分辨率, 随着 λ 值增大, 其与稳定区交会区域越小, 此时只有固定质荷比的离子才能通过四极杆, 分辨会提高, 但 λ 值增大的同时会增加离子振荡幅度从而影响灵敏度, 其扫描原理图如图 1 所示。

仿真结果如图 4(a)、(b) 所示, 当 $\lambda=0.1662$, 离子通过率较高, 但分辨较差, 随着 λ 的增加, 离子通过率逐渐下降, 分辨率有所上升, 但当 λ 增加到一定程度时, 离子通过率过低不利于后续分析, 因此选择 $\lambda=0.1674$ 作为后期仿真扫描线的参数。

3.2 优化电压参数

对于分辨率高且质量范围宽的四极杆, 其对射频电源的工作频率和电压都有较高的要求, 商用四极质谱仪根据不同的应用场景, 射频电源的工作频率在 0.8 MHz~3 MHz 之间。虽然提高该频率有助于提升仪器对低质荷比离子的分辨率, 但也存在着不足。

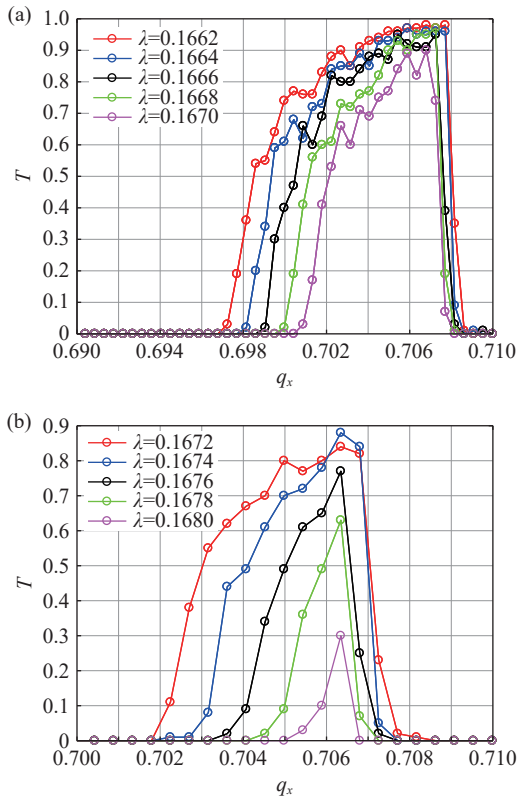


图4 不同斜率扫描线离子的通过率曲线。(a) 扫描线斜率较小($\lambda < 0.167$); (b) 扫描线斜率较大($\lambda > 0.167$)

Fig. 4 Transmittance curves of ions with different slopes of the scanline ions. (a) The slope of scanning line is small ($\lambda < 0.167$), (b) the slope of scanning line is larger ($\lambda > 0.167$)

(1) 射频电源的工作频率每提高 30%, 射频升压线圈的次级电感量需要降低 42%, 交流电压 V 需提高 70%, 在不改变线圈直径与绕法的情况下, 绕组长度将增加 2 倍以上。制作出的线圈体积大, 不易于安装集成, 导致外壳重量增加;

(2) 由耦合线圈变压关系 $V_2/V_1 = N_2/N_1$ 可知, 为了实现交流电压 V 的提高, 需增加次级线圈的匝数。根据电阻计算公式 $R = \rho L/S$, 匝数越多, 线径越小的线圈电阻越大, 使得线圈损耗大, 增加了仪器功耗;

(3) 射频电源的工作频率过高会导致仪器检测灵敏度的降低。依据表 2 计算结果进行仿真。从计算结果可以看出, 随着频率的增高, 射频电压也随之增加, 但过高的电压和频率增加了射频电路的制造难度。首先仿真了相同质量数的离子在不同射频和电压情况下的通过率。

仿真结果如图 5(a) 所示, 当 $m/z=609$ 时, 随着扫描频率的增加离子通过率较低, 但随着频率的上升, 离子通过率逐渐上升, 但当频率增加到一定范围时,

效果不再明显。接着仿真了不同质量数离子的情况, 如图 5(b) 所示, 当设定 $m/z=1000$ 时, 频率小于 1.5 MHz 时离子无法通过, 而选择过高的射频频率会导致诸多问题。

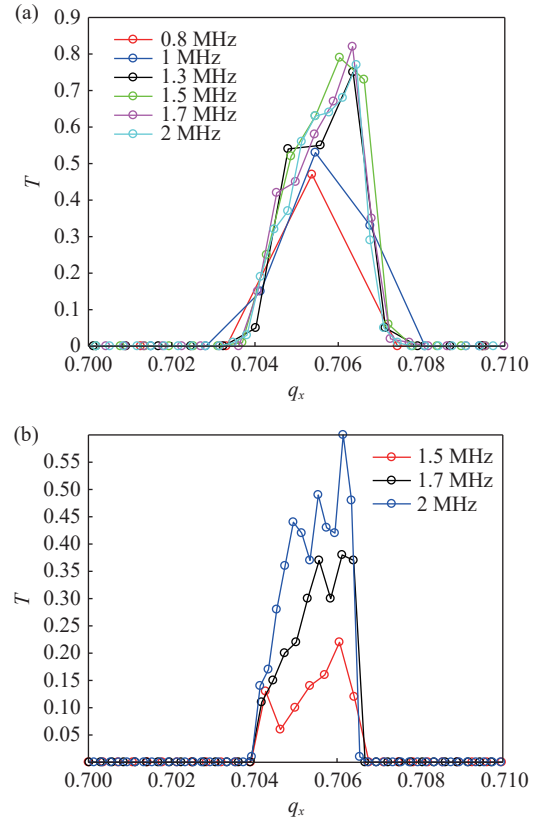


图5 不同射频频率和电压的通过率曲线。(a) 离子质荷比较小($m/z=609$); (b) 离子质荷比较大($m/z=1000$)

Fig. 5 Pass rate curves for different RF frequencies and voltages. (a) The ion mass-charge ratio is small ($m/z=609$), (b) the ion mass-charge ratio is large ($m/z=1000$)

故选择设定的射频的频率为 1.7 MHz, 计算得到射频电压范围 V_{op} 为 2.54~2602.1 V, 直流电压范围 $U=0.427\sim 436.8$ V。

3.3 优化入射能量

入口处所加的直流电压可决定离子入射腔体的能量, 当离子入射能量较低时, 离子可在四极杆中经历较多的周期, 分辨率较好, 但灵敏度较差; 当离子入射能量较高时, 灵敏度较好, 但分辨率较差。在仿真程序中, 离子能量可决定离子的入射速度, 根据:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (15)$$

式中, E 为离子入射能量 (eV); m 为离子质量 (kg); v

为离子速度 (m/s)。

仿真所设定的射频周期数为:

$$n = \frac{t}{t_{rf}} = \frac{L}{v} f_{rf} \quad (16)$$

式中, n 为离子在四极场中的运行射频周期; L 为四极杆长度 (m); v 为离子速度 (m/s)。计算不同能量下离子运动速度和运动周期, 如表 4 所示。

表 4 不同能量下的离子入射速度和运动周期

Tab. 4 Ion incident velocity and motion period at different energies

入射能量/eV	离子速度/(m/s)	运动周期 n
1	563	603
3	974	349
5	1258	270
7	1489	228
10	1779	191

从计算结果可以看出, 当离子能量不同时, 会影响入射速度和离子在四极场内运动的周期。不稳定的离子在四极场中运动时, 离子运动轨迹处于发散状态, 经过一定 RF 周期数后, 离子振荡幅度超过四极场径被四极杆吸收。另外稳定离子在四极场中的运动具有周期性, 但其振荡幅度会随着四极场中经历的射频周期逐步增加。适当延长离子在四极场中的运动时间可以提高分辨率。但无限制延长离子的运动时间, 会使稳定离子振荡幅度持续增加, 以致被四极杆过滤掉。仿真结果如图 6 所示。

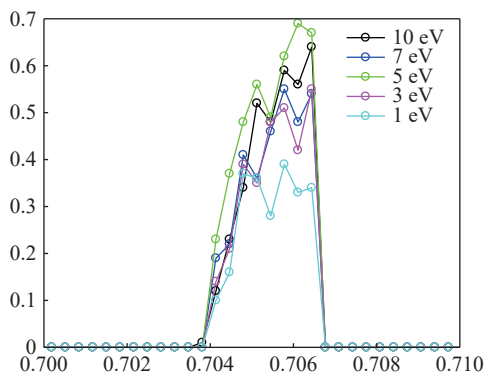


图6 不同能量下离子的通过率曲线

Fig. 6 The passage rate curves of ions at different energies

离子入射能量较低时, 离子在四极杆中经历较多的周期, 离子损失较多, 通过率降低。但当离子

入射能量大过一定值时, 离子会较易撞到杆上, 通过率比较低能量有所降低, 选择仿真能量为 5 eV。

4 结论与展望

本文设计了可测大质量数(1000 amu)的四极质谱计, 通过对其杆长、场半径、入口孔径、装配精度等机械参数, 以及射频电压、直流电压等电参数进行设计, 并结合机械参数和电参数对离子的运动轨迹、离子的入射能量、离子的通过率、质谱计的分辨率等指标参数进行了模拟仿真计算, 得到了一种能满足特殊领域密闭空间应用需求的大质量数四极质谱计。该四极质谱计具体参数如下: 杆为金属钼圆杆, 杆直径为 8 mm, 杆长为 200 mm, 场半径为 3.49 mm, 场入口孔径为 0.11 mm, 加工精度和装配精度优于 2 μm ; 设定射频的频率为 1.7 MHz, 射频电压范围 V_{op} 为 2.54~2602.1 V, 直流电压范围 $U=0.427\sim 436.8$ V。

参 考 文 献

- [1] Macatangay A, Townsend S, Prokhorov K, et al. Maintaining and monitoring the habitable environment of the international space station[J]. *SAE International Journal of Aerospace*, 2008, 1(1): 420-428
- [2] Fang X, Qin L L, Bai G. An introduction to quadrupole mass filter[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2005, 26(4): 234-234 (方向, 覃莉莉, 白岗. 四极杆质量分析器的研究现状及进展 [J]. *质谱学报*, 2005, 26(4): 234-234 (in Chinese))
- [3] March R E, Todd J F. *Quadrupole ion trap mass spectrometry*[M]. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons Inc, 2005
- [4] Luo C, Jiang G Y, Kononkov N V, et al. Two stability islands of quadrupole mass filter near $q = 0.9$ created by auxiliary radio frequency voltage[J]. *European Journal of Mass Spectrometry*, 2009, 15(6): 673-679
- [5] Wang Y Z, Ma P P, Feng Y, et al. Modeling and simulation of ion trajectory in quadrupole mass spectrometry[J]. *Transactions of Beijing institute of Technology*, 2015, 35(8): 876-880 (王玉琢, 马萍萍, 冯焱, 等. 四极质谱离子轨迹建模与仿真 [J]. *北京理工大学学报自然版*, 2015, 35(8): 876-880 (in Chinese))
- [6] Guo Q, Jiang T, Tang Y, et al. Simulation of using dipolar combined quadrupole excitation for quadrupole mass spectrometry[J]. *Vacuum& Cryogenics*, 2019, 25(6): 355-360 (郭琦, 姜婷, 汤扬, 等. 四极质谱仪中偶极辅助

- 四极激发仿真研究[J]. *真空与低温*, 2019, 25(6): 355–360 (in Chinese))
- [7] Batey J H. The physics and technology of quadrupole mass spectrometers[J]. *Vacuum*, 2014, 101(3): 410–415
- [8] Jiang Y, Fang X, Huang Z J, et al. Development of atmospheric pressure interface-single quadrupole mass spectrometer[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2010, 31(6): 337–341 (江游, 方向, 黄泽建, 等. 大气压接口-单四极杆质谱仪的研制[J]. *质谱学报*, 2010, 31(6): 337–341 (in Chinese))
- [9] Feng T Y, Cheng Y J, Chen L, et al. Performance simulation of quadrupole assemblies with different parameters over a wide mass range[J]. *Chines Journal Vacuum Science and Technology*, 2023, 43(12): 1003–1011 (冯天佑, 成永军, 陈联, 等. 不同参数四极杆组件宽质量范围性能仿真[J]. *真空科学与技术学报*, 2023, 43(12): 1003–1011(in Chinese))
- [10] Jia B, Yang M L, Liu J X, et al. Discussion on design ideas of quadrupole field of mass spectrometry[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2023, 44(3): 348–356 (贾滨, 杨茂璘, 刘吉星, 等. 质谱相关四极场的设计思路探讨[J]. *质谱学报*, 2023, 44(3): 348–356 (in Chinese))
- [11] Yang Q Y, Huang Z J, Zhao T Q, et al. Research on the efficiency of ion transmission in a quadrupole mass filter under various fringing field conditions[J]. *Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry*, 2023, 13(9): 1037–1046 (杨青源, 黄泽建, 赵天琦, 等. 四极滤质器在不同边缘场条件下的离子传输效率研究[J]. *中国无机分析化学*, 2023, 13(9): 1037–1046 (in Chinese))
- [12] Chen P, Yuan D C. The effect of the angular error of the opposite electrodes on the property of quadrupole mass filter[J]. *Modern Instruments & Medical Treatment*, 2012, 18(5): 36–39 (陈鹏, 袁道成. 对径极杆角度误差对四极杆质谱性能的影响[J]. *现代仪器与医疗*, 2012, 18(5): 36–39 (in Chinese))
- [13] Wu D Z, Liu X B, Jiang J D, et al. Research on a manufacturing process of the hyperboloidal quadrupole mass filter[J]. *Machinery Design& Manufacture*, 2013(10): 122–123,127 (吴定柱, 刘兴宝, 蒋家东, 等. 双曲面四极质量分析器制造工艺研究[J]. *机械设计与制造*, 2013(10): 122–123,127 (in Chinese))
- [14] Xu F X, Yang K, Wang Q, et al. Application and development of quadrupole electrode system in mass spectrometry[J]. *Journal of Chinese Mass Spectrometry Society*, 2015, 36(6): 481–491 (徐福兴, 杨凯, 王强, 等. 四极杆电极系统的应用与研究进展[J]. *质谱学报*, 2015, 36(6): 481–491(in Chinese))
- [15] Zhang H, Dou R C, Liu K, et al. Structural design and optical system simulation of ion source for microscale mass spectrometer[J]. *Spacecraft Environment Engineering*, 2019, 36(1): 83–88 (张浩, 窦仁超, 刘坤, 等. 微尺度质谱仪离子源结构设计及离子光学系统仿真[J]. *航天器环境工程*, 2019, 36(1): 83–88(in Chinese))