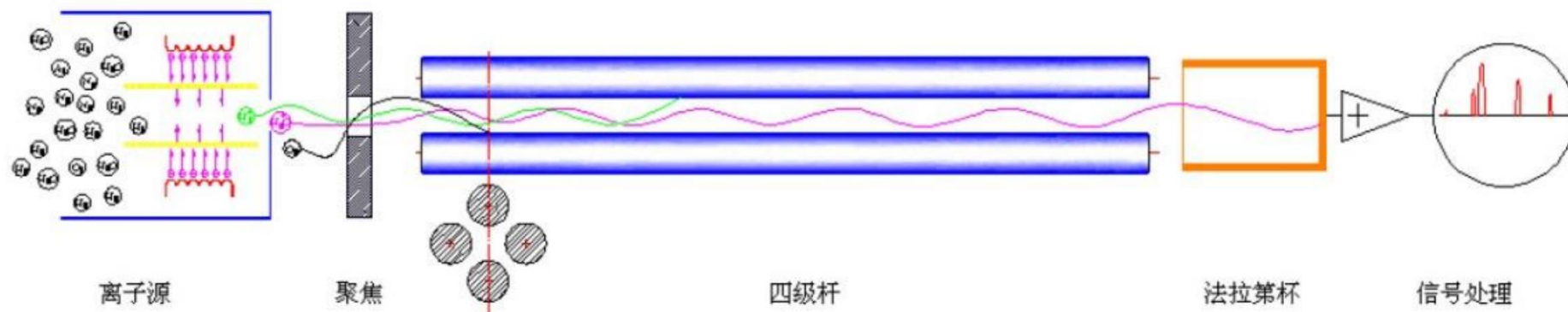


四极杆质谱实验

钞宇通 16307110136

李进之 16307110219

四极杆质谱仪结构



离子源：加速电子，待测气体电离化

四级杆：根据粒子荷质比过滤

法拉第杯：收集经过滤的离子

信号处理：离子流产生信号并放大，获得荷质比图谱

四极杆运动理论

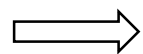
交流信号+直流信号

电势分布 $\varphi(x, y) = (U + V_0 \cos \omega t) \frac{x^2 - y^2}{r_0^2}$

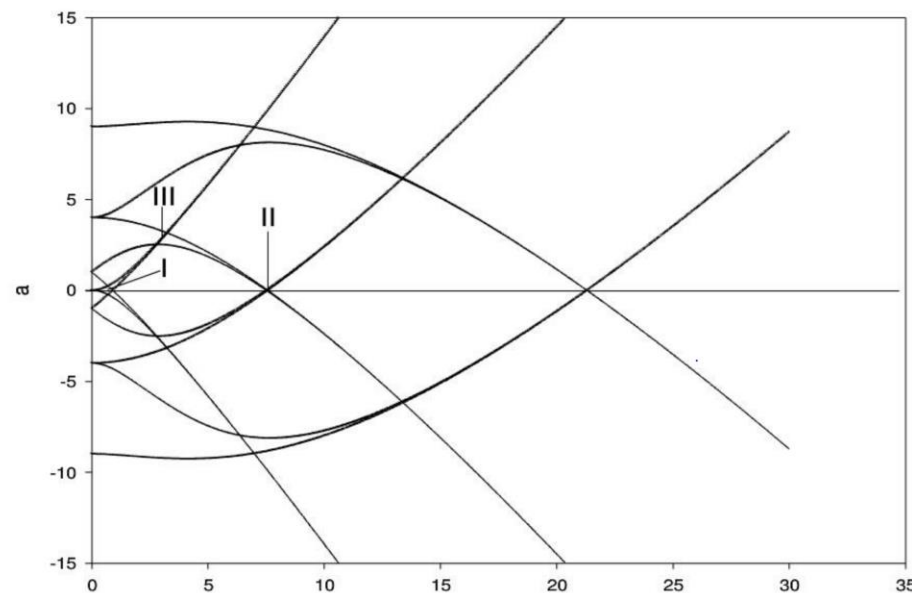
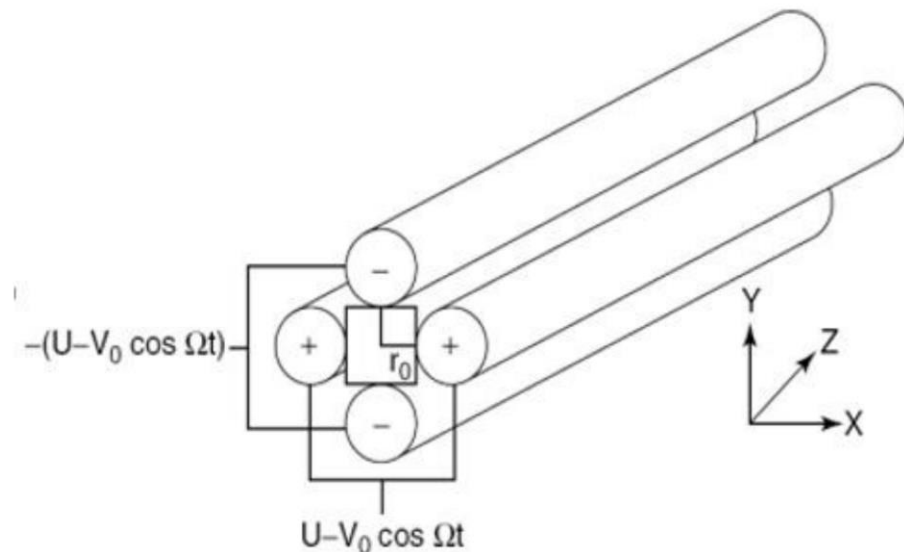
运动方程 $\begin{cases} m\ddot{x} + (2e/r_0^2)(U + V_0 \cos \omega t)x = 0 \\ m\ddot{y} - (2e/r_0^2)(U + V_0 \cos \omega t)y = 0 \end{cases}$

变量替换 $\xi = \frac{\omega t}{2}, a = \frac{8eU}{m\omega^2 r_0^2}, q = \frac{4eV_0}{m\omega^2 r_0^2}$

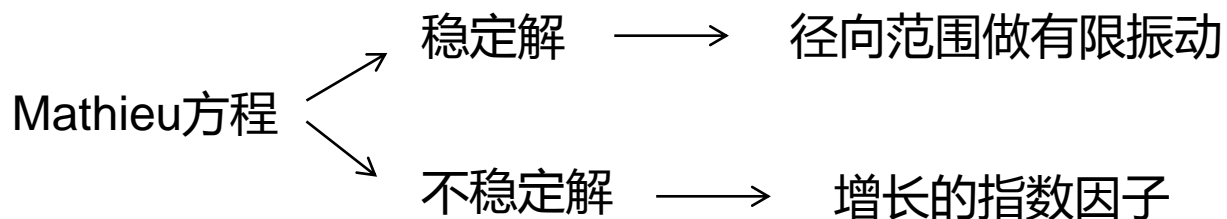
标准Mathieu方程 $\begin{cases} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + (a + 2q \cos 2\xi)x = 0 \\ \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - (a + 2q \cos 2\xi)y = 0 \end{cases}$



解的稳定性?



四极杆运动理论

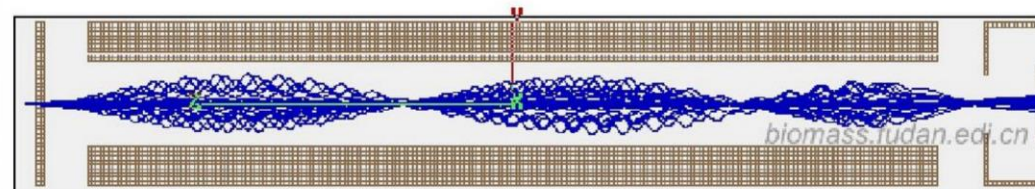
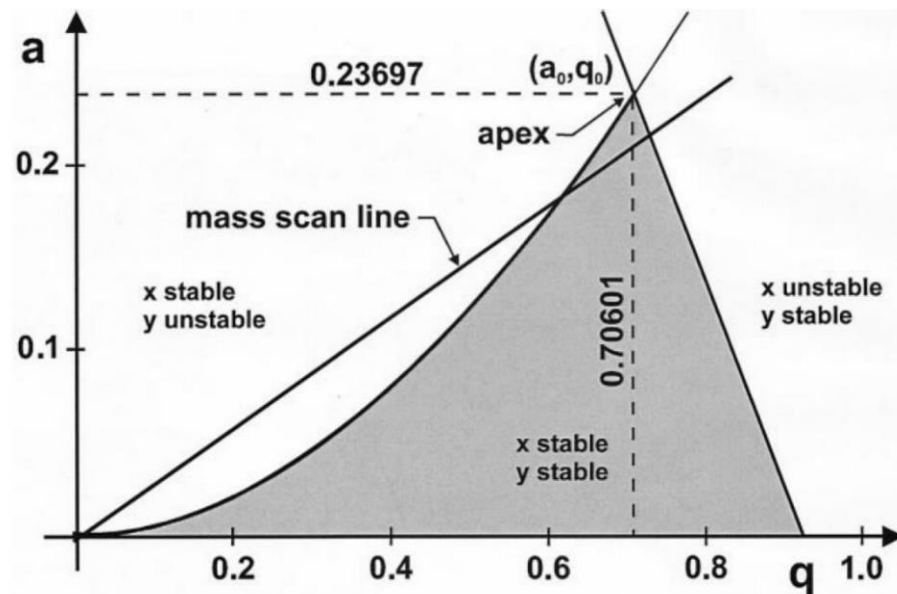


x,y方向Mathieu方程参数不同

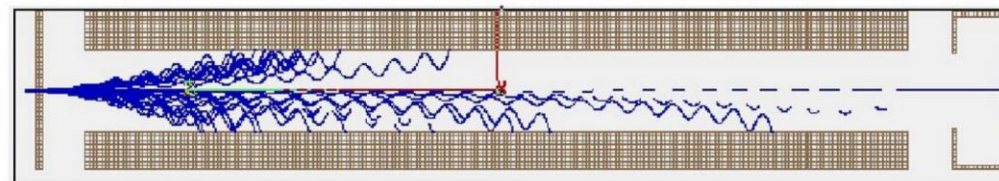
x,y稳定区的交集离子才能通过

斜率 $\frac{a}{q} = \frac{2U}{V_0}$ 对应质量扫描线

当 $0 \leq \frac{a}{q} \leq \frac{0.23699}{0.70600} = 0.33568$ 时，可以得到不同的质量扫描线



离子顺利的通过四极杆质量分析器



离子没有能够顺利的通过四极杆，撞死在四极杆的表面上

分辨率

M为两个刚刚分开的峰的平均质量，刚刚分开时两峰之间的质量距离是 DM，分辨率
 $R=M/DM$

单峰法：FWHM $\approx DM$

$$R \propto n^2 \propto \frac{mf^2 L^2}{U_z}$$

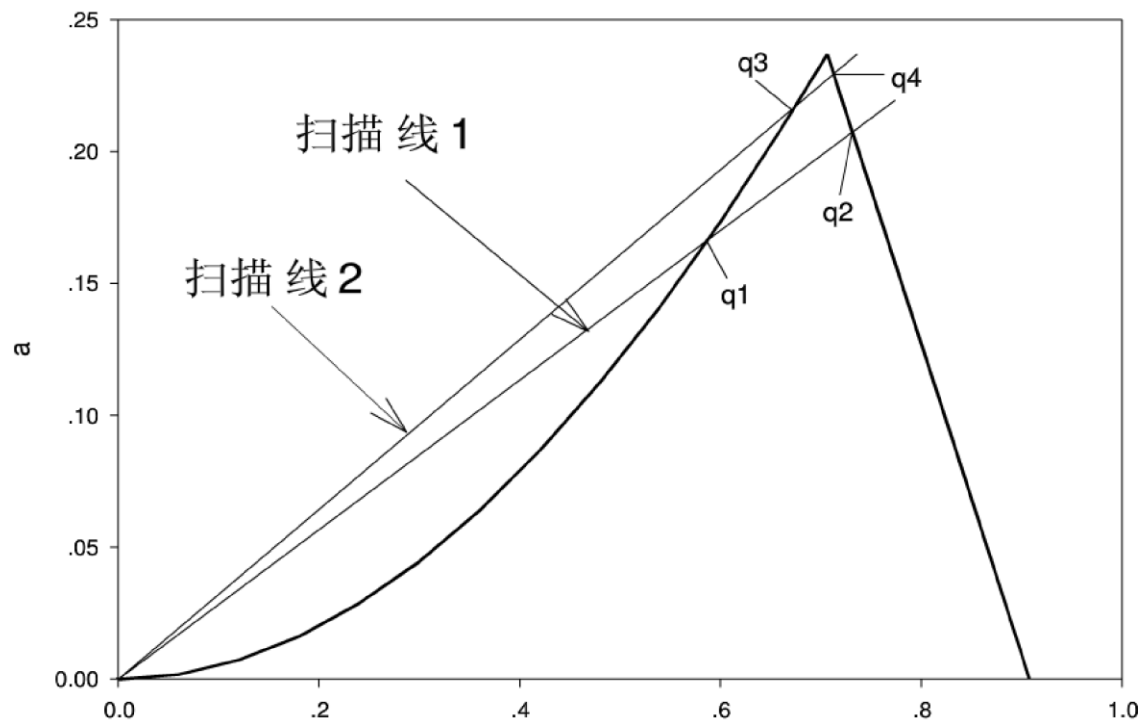
f：射频电压的频率
L：极杆长度
Uz：加速电压
r：极杆半径

传输率公式： $m = C \frac{2e}{\pi^2 a} \frac{U}{f^2 r^2}$

代入得 $R = C \frac{U_z L^2}{V r^2}$

其它表达形式： $R = \frac{q_2 - q_1}{q_0}$

$\frac{U}{V} = \frac{1}{2} \times \frac{a}{q} = 0.168$ 时，分辨率无穷大



实验步骤

真空化装置：大气压 $\xrightarrow{\text{机械泵}}$ 10Pa以下 $\xrightarrow{\text{分子泵}}$ 10^{-5} Pa

扫描

剩余空气测定

参数影响

电子能量

聚焦电位

交流电频率

酒精测定



实验记录

目的：分析未知样品

准备工作：

1.确定峰的位置

——选择高分辨率的实验条件

2.修正峰的偏移

——修正零点偏移

实验记录

空气质谱图：

参数：

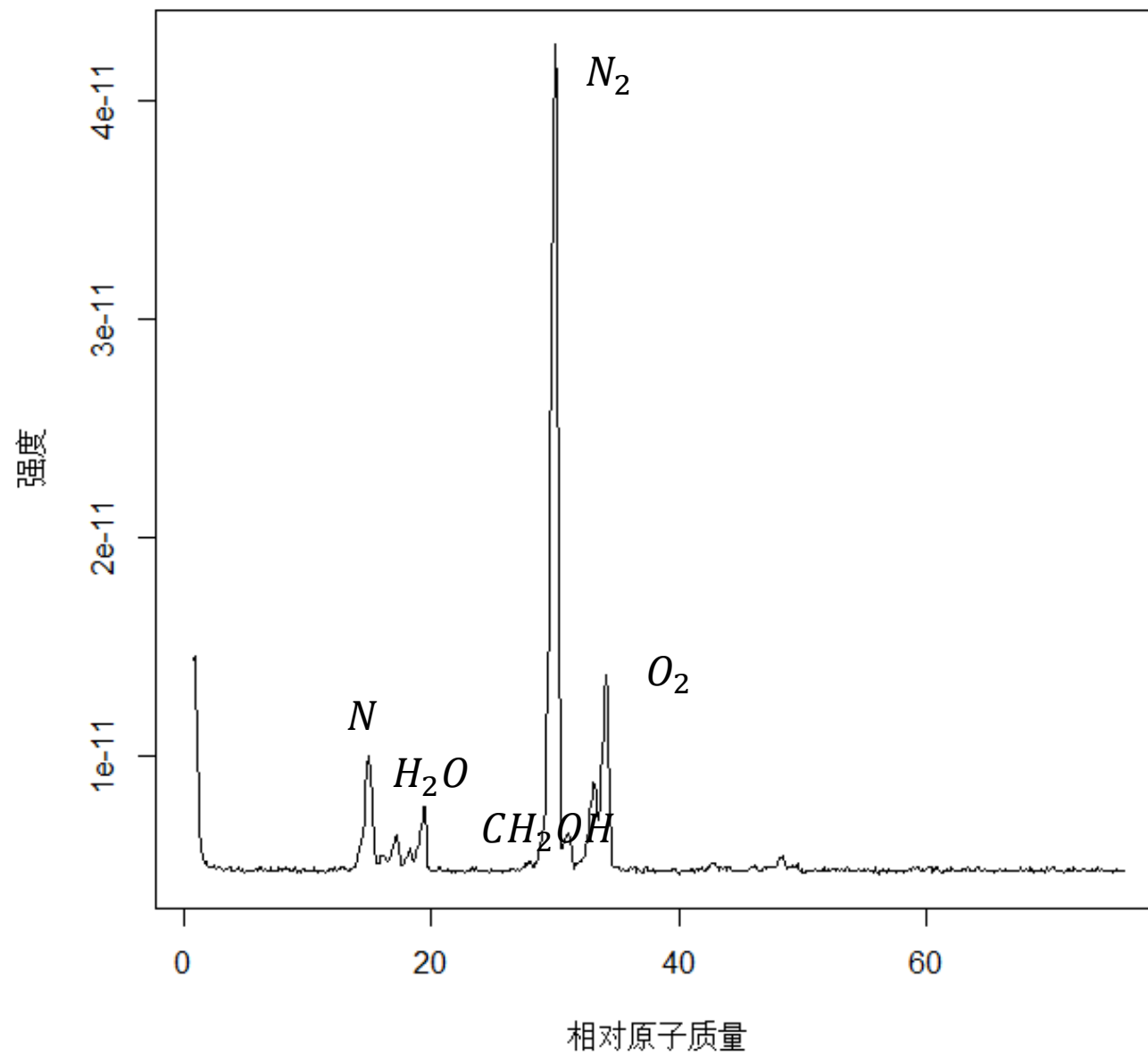
1.57MHz

60eV

40V (绝对值)

五个较为明显峰：

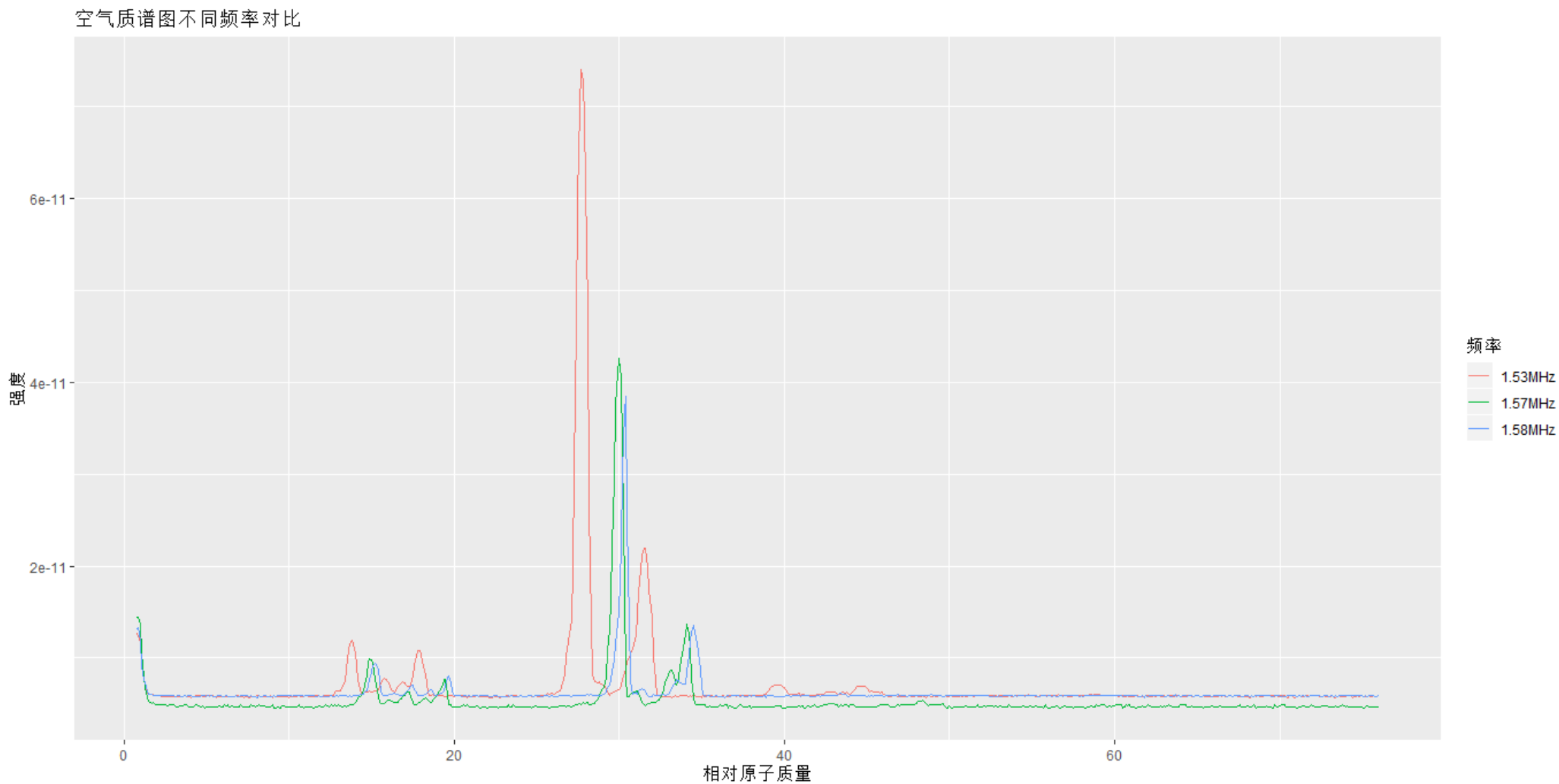
空气质谱图



实验记录

不同频率对比：

参数：
60eV
40V (绝对值)



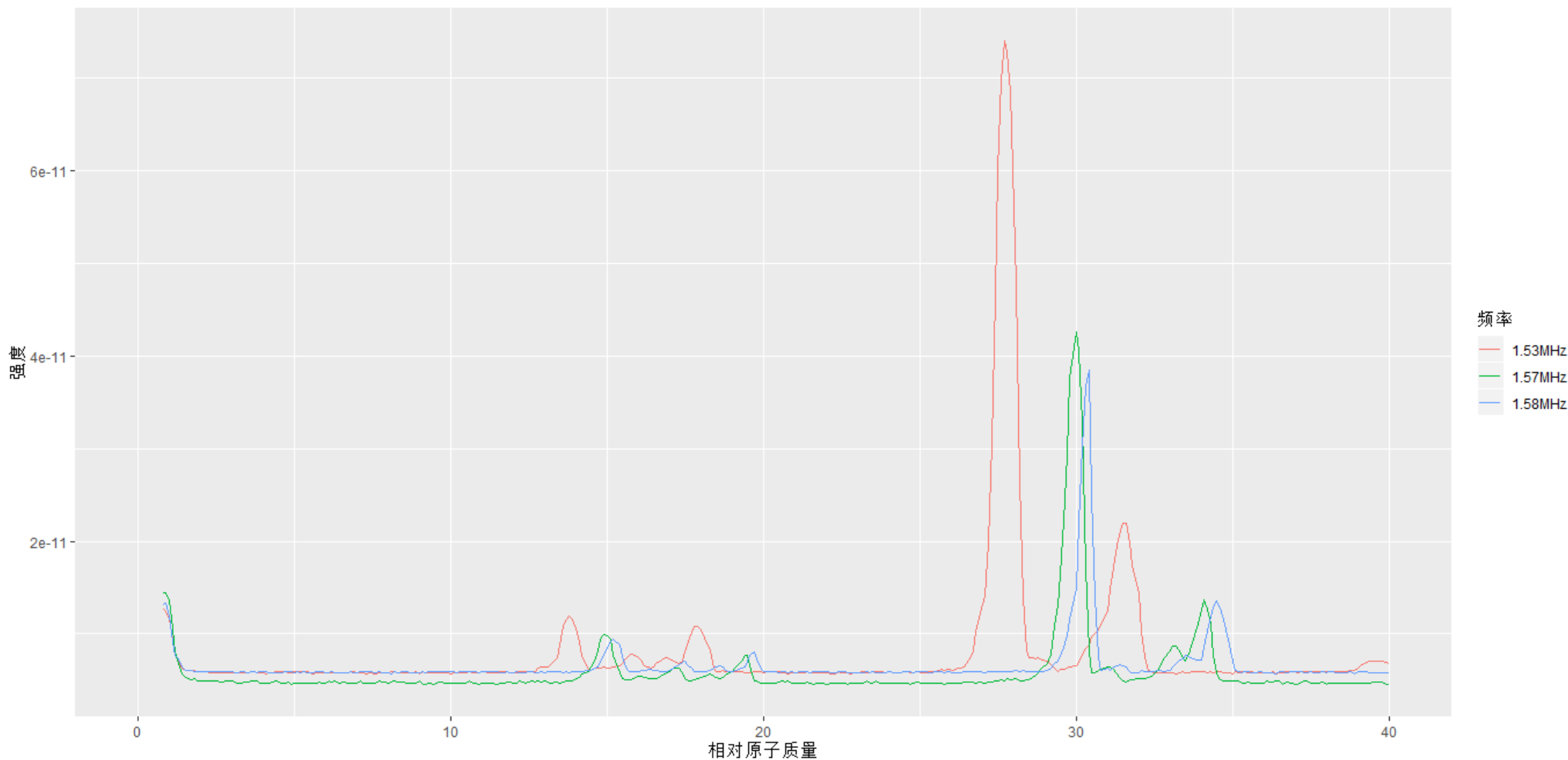
实验记录

不同频率对比：

随着频率增大：

1. 峰值横坐标“右移”：
等比例放大
2. 峰值降低

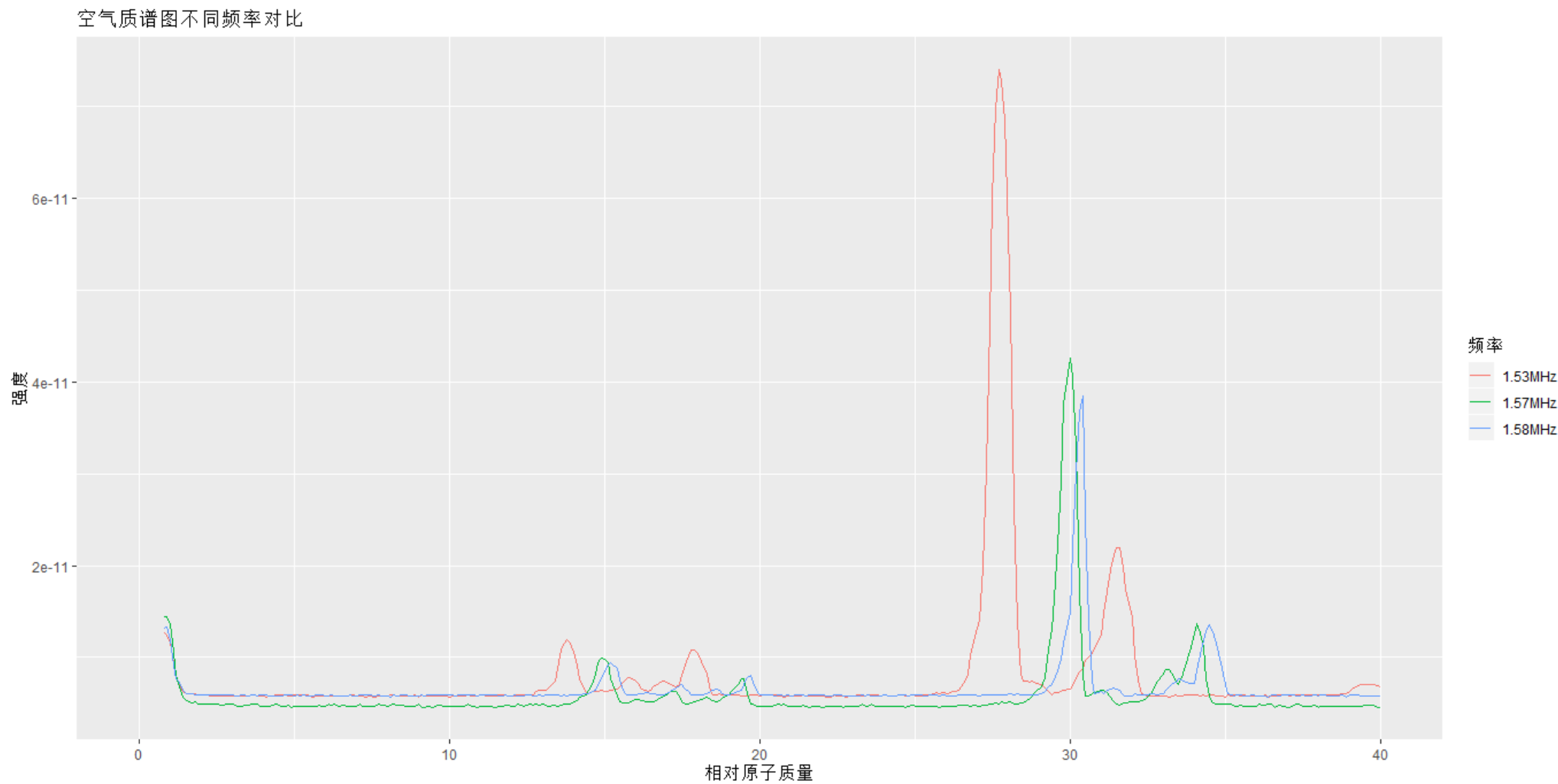
空气质谱图不同频率对比



实验记录

不同频率对比：

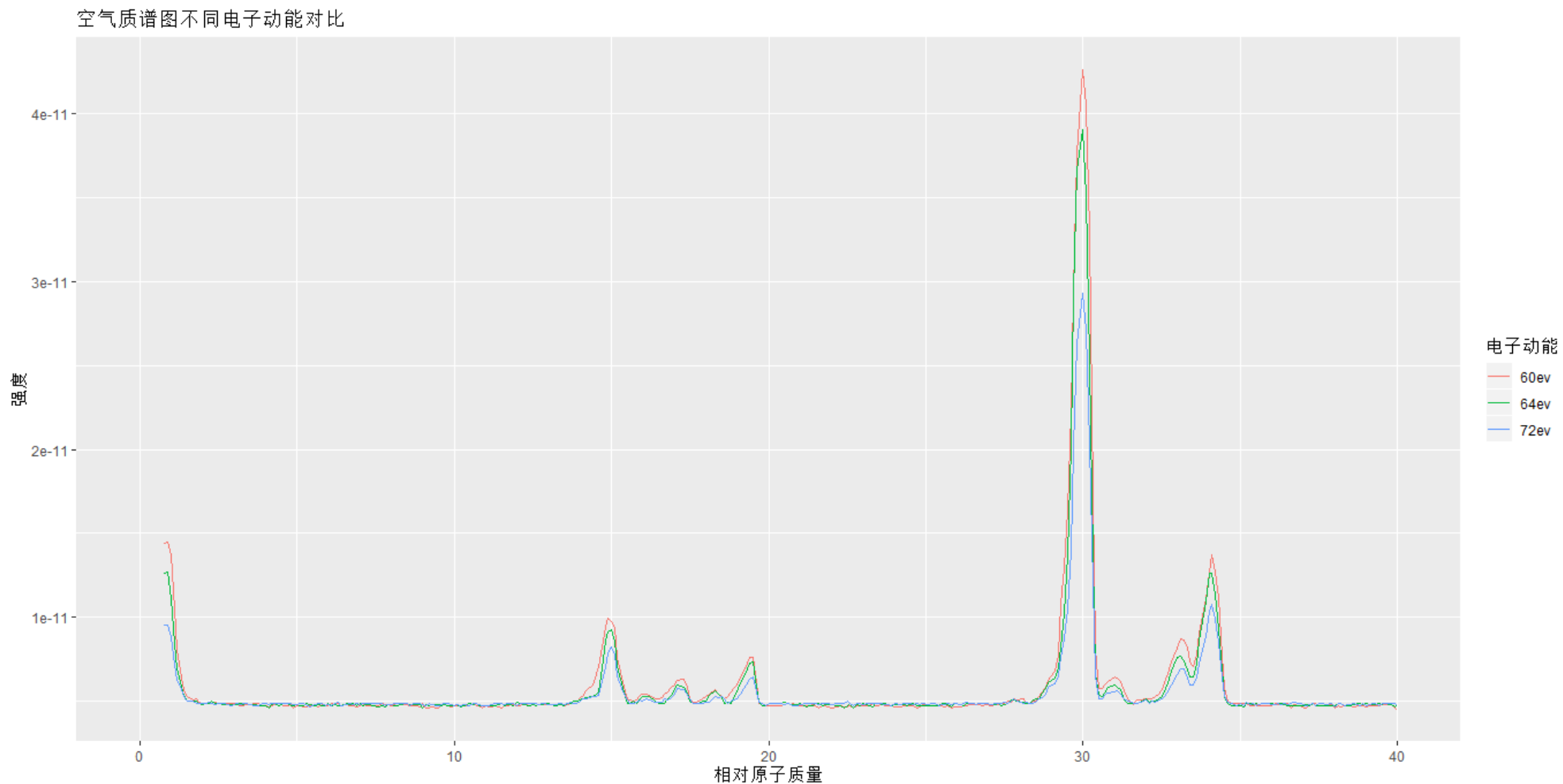
1.58MHz半峰宽最小



实验记录

不同电子能量对比：

参数：
1.58MHz
40V



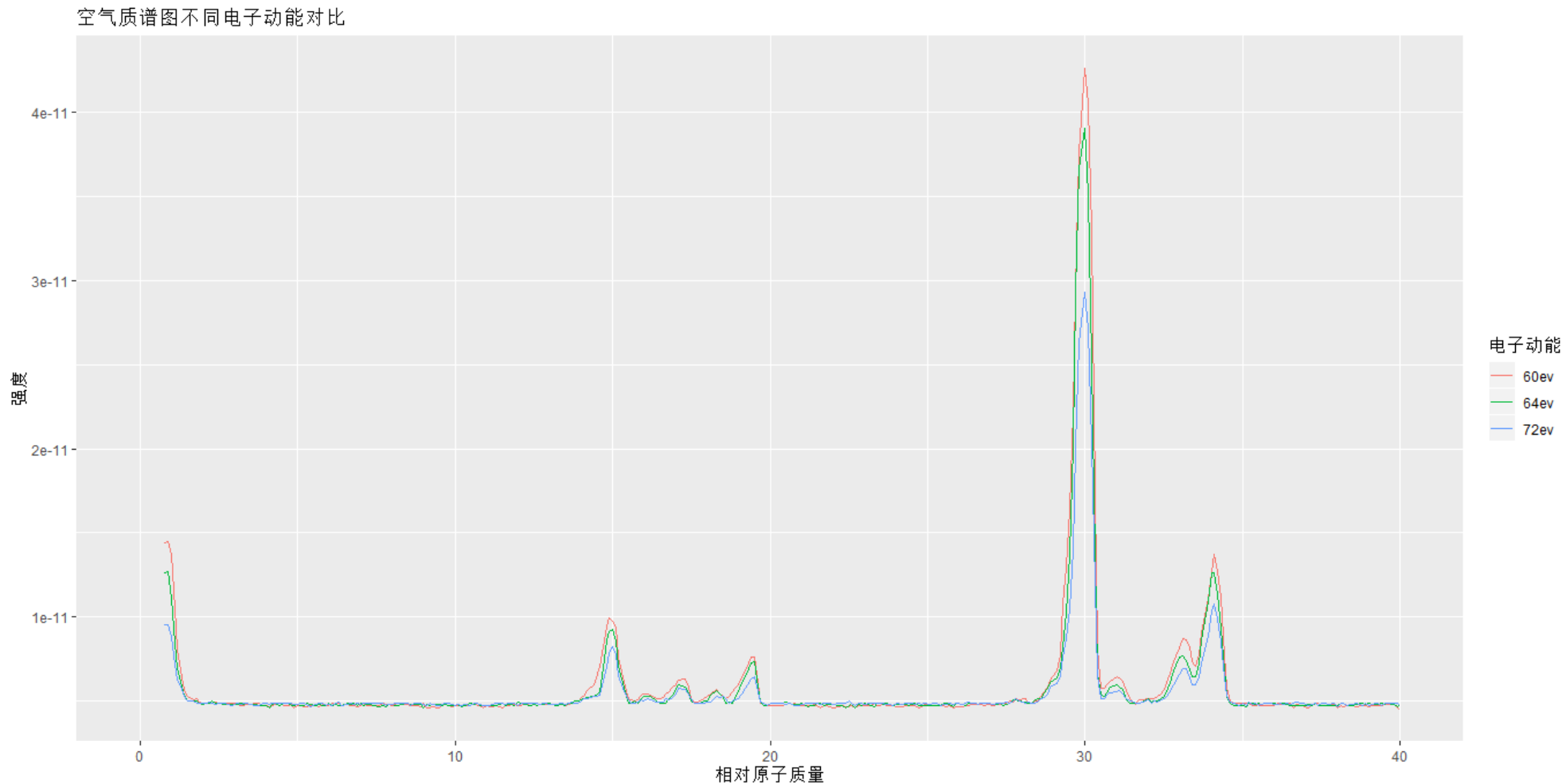
实验记录

不同电子能量对比：

随着电子能量增大：

峰值降低

72eV半峰宽最小

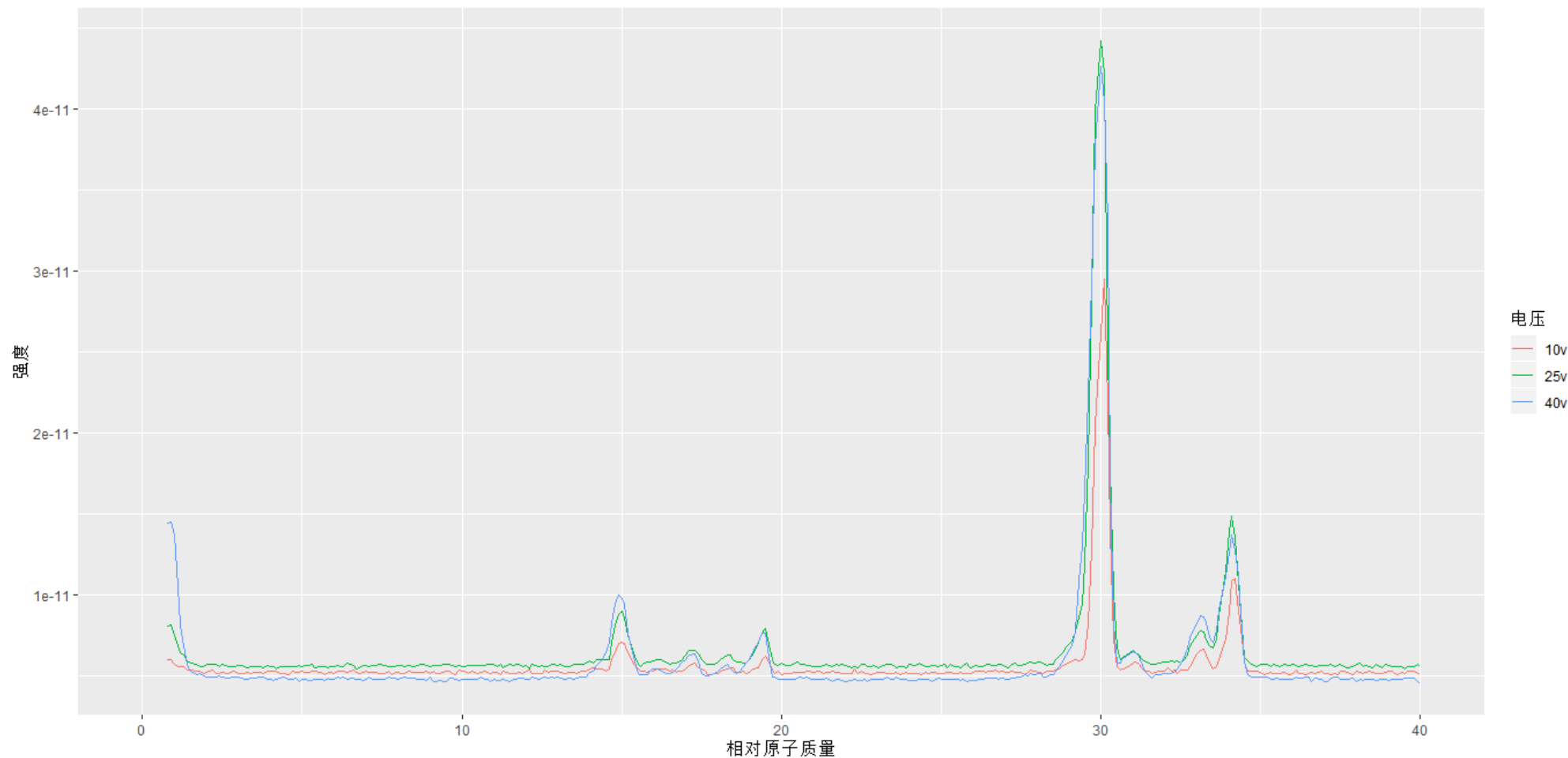


实验记录

不同聚焦电压对比：

参数：
72eV
1.58MHz

空气质谱图不同电压对比



实验记录

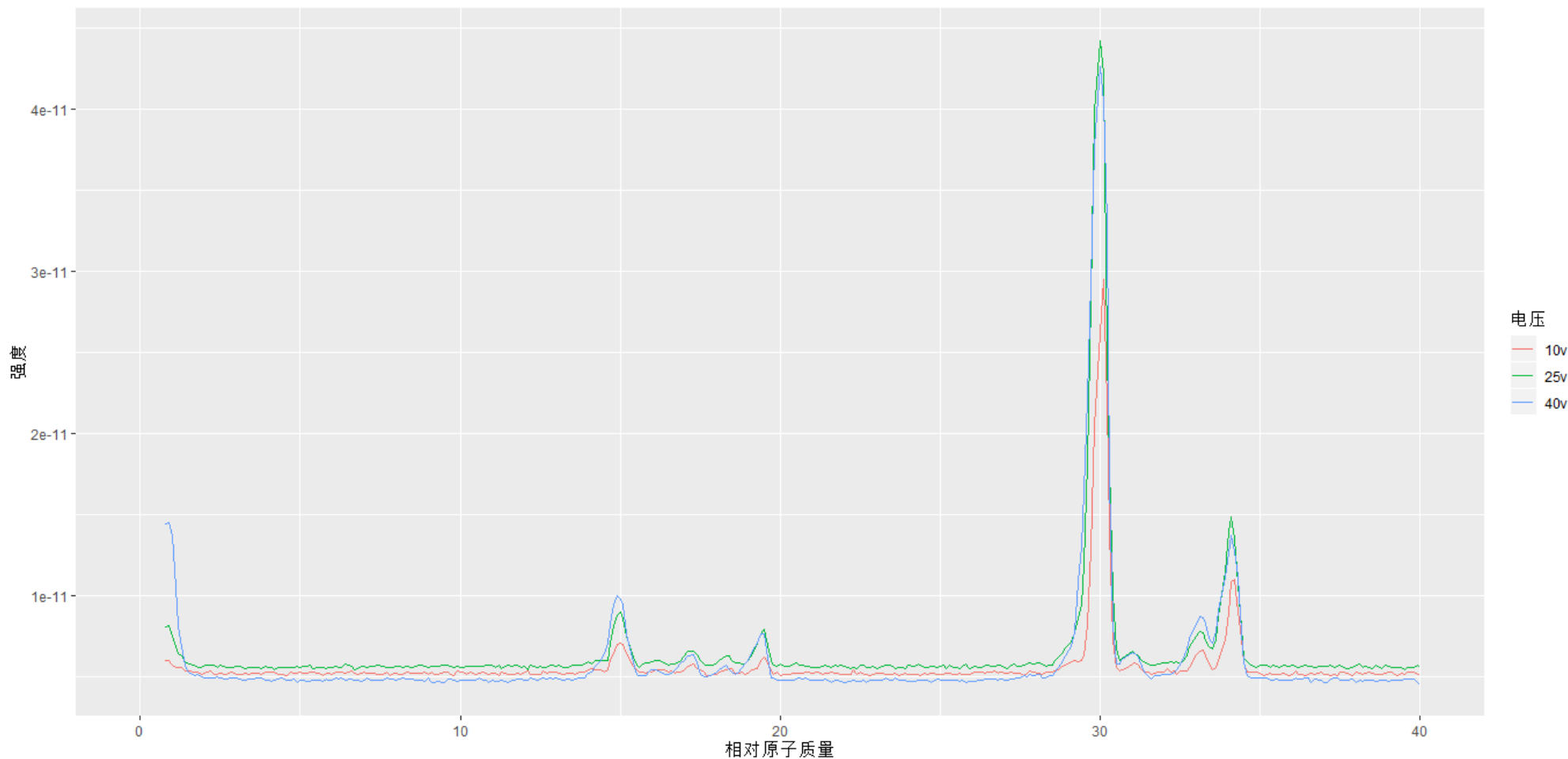
不同聚焦电压对比：

随着电压绝对值增大：

峰值升高

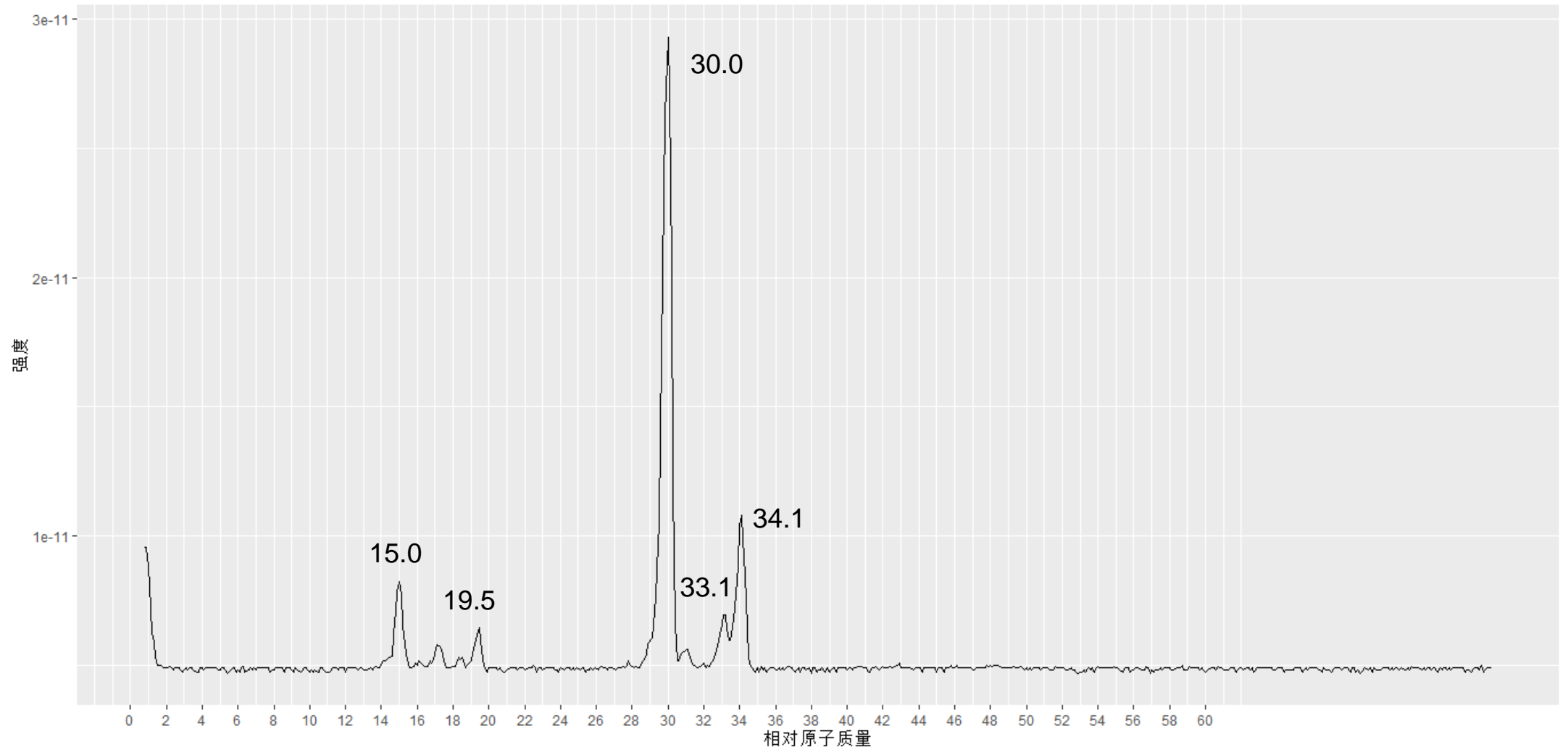
实际上半峰宽最小的是40V

空气质谱图不同电压对比



空气定标

空气质谱图

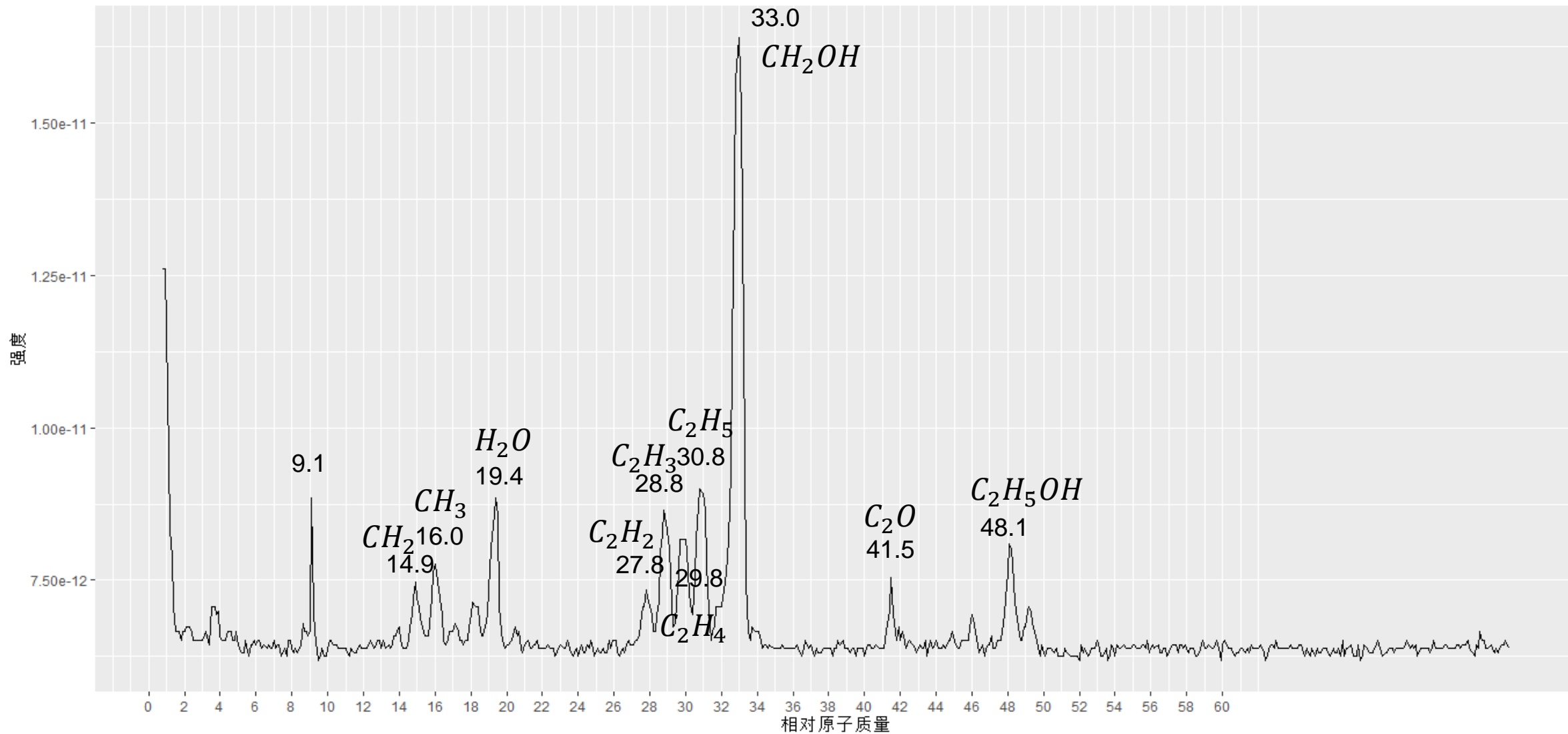


平均偏移：

-1.73

未知样品

未知样品质谱图



实验结论

1.空气质谱图：

最多的是 N_2 ，其次是 O_2 ， H_2O ， N ，乙醇残留

2.研究了实验参数对于质谱图的影响。

3.乙醇质谱图：

最多的小分子基团是 CH_2OH ，其次是 CH_3CH_2 和 CH_3CH_2OH 。

参考文献

1. 《质谱的应用——四级杆质谱研究应用研究》（复旦大学毕业论文）唐漪波