

DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J2413601

# 小型四极杆质谱仪性能仿真系统研究

周文兴<sup>1,2,3</sup>, 黄刚<sup>2,3</sup>, 蔡红华<sup>2,3</sup>, 董文平<sup>2</sup>, 杨清宇<sup>1</sup>

(1. 西安交通大学自动化科学与工程学院 西安 710049; 2. 中国航天员科研训练中心 北京 100094;  
3. 人因工程全国重点实验室 北京 100094)

**摘要:**针对小型四极杆质谱仪研制中工程约束条件多、技术迭代代价高、研制周期长等问题,为满足特殊场景对仪器小体积、轻量化、低功耗、长寿命及高可靠性的严苛要求,在系统分析产品特性和工程研制难点的基础上,建立了涵盖电离、传输、筛选、检测全过程的四极杆质谱仪物理模型和数学表达,并基于 Lua 语言集成开发了四极杆质谱仪性能仿真系统。该系统实现了温度场、流体场、真空场与电磁场的耦合计算,集成了离子全生命周期轨迹追踪、参数批量处理等 12 项核心功能,显著提升了工程适用性。通过批量化仿真,系统研究了 EI 源透镜出口孔径(1.5~3.5 mm)、EI 源伸入 QMA 深度(-0.5~0.5 mm)及进样速率(0~1 mL/min)3 项关键工程参数对仪器性能的影响,确定了各参数最优的取值范围。仿真结果表明:透镜出口孔径为 3.0 mm 时离子传输效率最高;EI 源伸入深度为 0.2 mm 时可有效抑制边缘场效应,使离子束空间分布更集中;进样速率在 0.3 mL/min 时能在保证高信号强度的同时维持系统真空度。搭建实验平台验证了仿真系统的有效性,优化后质谱仪质量覆盖范围为  $m/z$  10~180,对全氟三丁胺(PFTBA)的检测信噪比(SNR)优异,性能满足设计要求。该性能仿真系统为小型四极杆质谱仪研发提供了关键技术支撑。

**关键词:**小型四极杆质谱仪;多物理场耦合;离子轨迹模拟仿真;参数优化设计

**中图分类号:** TH743 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 460.40

## Research on the performance simulation system for miniature quadrupole mass spectrometers

Zhou Wenxing<sup>1,2,3</sup>, Huang Gang<sup>2,3</sup>, Cai Honghua<sup>2,3</sup>, Dong Wenping<sup>2</sup>, Yang Qingyu<sup>1</sup>

(1. School of Automation Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. China Astronaut Research and Training Centre, Beijing 100094, China; 3. National Key Laboratory of Human Factors Engineering, Beijing 100094, China)

**Abstract:** To address problems of multiple engineering constraints, high technical iteration cost, and prolonged development cycle in the development of miniature quadrupole mass spectrometers, and meet the stringent requirements of compact size, light weight, low power consumption, long service life, and high reliability in special scenarios, a physical model and corresponding mathematical expressions for the quadrupole mass spectrometer are established based on a comprehensive analysis of product characteristics and engineering difficulties. An independent performance simulation system for quadrupole mass spectrometers is developed using the Lua language. The system achieves the coupled calculation of temperature field, fluid field, vacuum field, and electromagnetic field, and integrates 12 core functions, including ion full-life-cycle trajectory tracking and batch parameter processing, thereby enhancing engineering applicability. Furthermore, batch simulations are implemented to systematically investigate the effects of three key engineering parameters on instrument performance, i. e., the exit aperture of the EI source lens (1.5~3.5 mm), the insertion depth of the EI source into the QMA (-0.5~0.5 mm), and the sample injection rate (0~1 mL/min). The optimal value range of each parameter is determined. Simulation results show that the ion transmission efficiency reaches the maximum when the lens exit aperture is 3.0 mm; the edge field effect can be effectively suppressed with the EI source insertion depth of 0.2 mm, leading to a more concentrated spatial distribution of the ion beam. The system vacuum degree can be maintained while ensuring high signal intensity when the sample injection rate is

0.3 mL/min. An experimental platform is constructed to verify the effectiveness of the proposed simulation system. The optimized mass spectrometer has a mass range of  $m/z$  10~180, exhibits excellent signal-to-noise ratio (SNR) in the detection of perfluorotributylamine (PFTBA), and its overall performance meets the design requirements. The developed performance simulation system provides key technical support for the precise research and development of miniature quadrupole mass spectrometers.

**Keywords:** miniature quadrupole mass spectrometers; multi-physics field coupling; ion trajectory simulation; parameter optimization design

## 0 引言

质谱仪 (mass spectrometer, MS) 是通过测量不同质荷比 ( $m/z$ ) 的离子实现样品成分解析的高精尖仪器。小型四极杆质谱仪 (quadrupole mass spectrometer, QMS) 作为质谱仪小型化和便携化的重要分支, 凭借结构紧凑、质量轻便、环境适应性强等技术优势, 在环境监测、公共安全和深空探测等前沿领域中扮演着至关重要的角色<sup>[1-3]</sup>。

为满足特定场景的严苛要求, 小型 QMS 需同步实现小体积、重量轻、低功耗、长寿命、高可靠和国产化等关键指标, 研制过程具有高度定制化、可借鉴经验少、技术壁垒高的显著特征, 技术反复将引发严重的声誉损失、经费浪费及进度延误。数值仿真模拟技术作为复杂精密仪器开发的有效方法, 在电子雪崩、气溶胶颗粒生成、空间电荷分布、多物理场耦合等复杂工况模拟和参数优化设计等方面取得了一些成效<sup>[4-6]</sup>。在四极质谱仪性能模拟方向也取得了较大突破: 如基于 COMSOL Multiphysics、SIMION 的商业仿真软件<sup>[7-10]</sup>, 实现了离子运动轨迹、离子束的聚焦效果、扩散效应等功能的仿真; 基于神经网络等新的数值模拟方法来预测离子运动轨迹, 取得了较高精度和效率的方法<sup>[11]</sup>; 还有基于深度学习技术预测离子运动轨迹的方法<sup>[12-14]</sup>等等。但 COMSOL 擅长于复杂几何建模和多物理场耦合, 对离子轨迹的追踪能力较弱; SIMION 纯离子轨迹快速仿真方面具有优势, 缺乏热力学、流体场耦合计算功能, SIMION 附加工具 Virtual Device 气体流动模拟仅限于高速流动, 且不能覆盖靠近壁面/电极的区域; 自行开发的仿真系统一般边界条件简化较多, 且多聚焦于通用影响趋势分析, 在与具体应用场景结合度、工程难点针对性上还有差距<sup>[15]</sup>。

因此, 在充分分析某小型 QMS 的产品特性和运行工况的基础上, 基于 Lua 语言集成开发了小型 QMS 性能仿真系统, 实现了温度场、流体场、真空场和电磁场的耦合计算, 特别对离子全生命周期 (离子产生、迁移、选择、检测) 进行了运动轨迹模拟。面对工程研制中参数匹配、空间电荷效应等具体难题, 对重点关注参数 (即 EI 源透镜出口口径、EI 源伸入四极质量分析器的深度和进样速率) 的影响进行了仿真分析, 确定了此类参数取值范围。

并通过搭建实验平台, 验证了仿真的有效性, 为小型 QMS 的工程研制提供了支撑。

## 1 模型建立

### 1.1 研究对象

本研究的某小型四极质谱仪主要由进样系统、电子轰击离子源 (EI 源)、透镜系统、四极杆质谱分析器 (quadrupole mass analyzer, QMA)、离子检测器和真空系统组成。其中, 进样系统用于把样品传输到电子轰击电离 (electron impact ionization, EI) 源中; EI 源是通过灯丝产生高能电子, 进而对样品分子进行电离; 透镜系统由排斥电极、提取透镜和汇聚透镜等部件组成, 可以将电离产生的离子, 传输送入后端的 QMA 中; QMA 由两对圆柱形电极平行且对称组装而成, 用于离子选择; 检测器主要用来接收和放大被分离后的离子, 进而转换为可供分析的数据; 真空系统用来构建和维持质谱仪运行的高真空环境。图 1 是某小型四极质谱仪局部物理模型构成图 ( $yz$  横截面)。

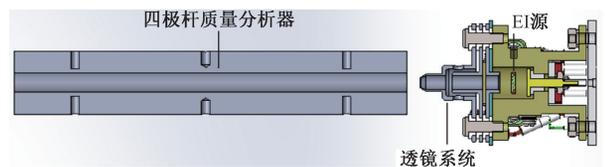


图 1 某小型四极质谱仪局部物理模型构成 ( $yz$  横截面)  
Fig. 1 Composition of the local physical model of the miniature quadrupole mass spectrometer ( $yz$  cross section)

### 1.2 数学模型

#### 1) EI 源电离

EI 源是 QMS 中最常用的气体离子产生方式。通过在发射电子的灯丝上施加  $-70$  V 的 DC 电压, 产生具有  $70$  eV 动能的电子。分子在电子的轰击下, 丢失外层电子, 并导致分子内化学键的断裂, 形成带正电的分子离子及碎片离子<sup>[16]</sup>。EI 源中配置的 3 个电极 (排斥、聚焦和提取电极) 由高压模块供电, 用于控制离子和电子的运动轨迹。此外, 辅助以磁场进行电子运动轨迹的调控。在离子生成及运动过程中, 不可避免地发生碰撞。其中, 电子-离子碰撞的影响最为显著, 这是因为电子与离子的质

量差异及碰撞参数较大;而离子-离子、电子-电子以及离子-中性粒子之间的碰撞,其动量传递相对较弱。电子平均自由程的计算式<sup>[17]</sup>为:

$$\lambda_{ei} = \frac{V_{th}}{v_{ei}} \quad (1)$$

其中,  $V_{th}$  是电子热运动速度,  $v_{ei}$  是电子-离子碰撞频率。碰撞频率的估算方法为:

$$v_{ei} = \frac{ne^2}{m_e} \left( \frac{\pi e^2 m_e^{\frac{1}{2}}}{(4\pi\epsilon_0)^2 (KT_e)^{\frac{3}{2}}} \ln\Lambda \right) \quad (2)$$

其中,  $n$  是离子密度,  $e$  是电子电荷,  $m_e$  是电子的质量,  $\epsilon_0$  是空间介电常数,  $K$  是玻尔兹曼常数,  $T_e$  是开尔文电子温度,  $\ln\Lambda$  是影响参数。离子的初始  $y$  方向动能被设定为 0.1 eV, 背景气体的初始流速为 0。在连续进气的操作模式下, 毛细管中的进气流量(即  $Q_{in}^1$ , 单位时间内流入初级真空的气体量)等于通过真空泵抽出气体的流量( $Q_{out}^1$ )<sup>[18]</sup>。

$$Q_{in}^1 = C_1(P_0 - P_1) \quad (3)$$

$$C_1 = \frac{\pi d_1^4}{128\eta L} \frac{P_0 + P_1}{2} \quad (4)$$

$$Q_{out}^1 = P_1 S_1 \quad (5)$$

其中,  $C_1$  是毛细管在 20℃ 时的流导,  $P_0$  是大气压力,  $P_1$  是第 1 级真空腔的压力,  $d_1$  是毛细管的内径,  $L$  是毛细管的长度,  $\eta$  是空气的粘度,  $S_1$  是隔膜泵在压力  $P_1$  时的抽速。选定隔膜泵和毛细管尺寸后, 初级真空腔的压力和流速可根据式(5)计算得出。

## 2) 质量分析

QMA 由两对圆柱形电极构成, 其结构特征为平行且对称排列。在电极上施加有 DC 电压及 RF 电压, 两对电极 RF 电压幅值相同, 相位相反。当带电粒子进入该高频电场区域时, 会沿着 QMA 轴方向聚焦和振荡。对于双曲面外形的 QMA, 运动式<sup>[19]</sup>为:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + (a_u - q_u \cos 2\xi) u = 0 \quad (6)$$

其中,  $a_u$  和  $q_u$  可以用式(7)和(8)表示。

$$a_u = \frac{8eU}{mr_0^2\omega^2} \quad (7)$$

$$q_u = \frac{4eV}{mr_0^2\omega^2} \quad (8)$$

其中,  $u$  为离子在  $x, y$  方向上的位移, 通过求解式(6)可以得到离子在 QMA 中的运动轨迹。  $r_0$  是场半径,  $\omega$  是角频率,  $V$  为 RF 电压的幅值,  $U$  为 DC 电压。在特定的参数设置下, 仅具有特定  $m/z$  值或一定  $m/z$  范围内的离子能够顺利通过 QMA 并被离子检测器检测。其余离子由于其运动轨迹未处于稳定区域, 最终将撞击至电极或仪器壁而湮灭, 因而无法被检测。离子路径的稳

定性由 RF 电压  $V$  的大小和  $U/V$  的值确定。为保证理想的质量分辨率, 一般取  $a=0.237$  和  $q=0.706$ 。圆柱杆的直径一般选择为内切圆直径  $2r_0$  的 1.16 倍<sup>[20]</sup>。

## 3) 检测

与光电倍增管的情况类似, 电子倍增管的电流放大或增益表示公式<sup>[21]</sup>为:

$$Gain(\mu) = A \times E_{bb}^{kn} \quad (9)$$

其中,  $E_{bb}$  是供给电压,  $k$  是电极结构和材料决定的常数,  $n$  是打拿极的级数。

## 4) 轨迹计算

采用计算流体动力学方法对离子在流体场中的运动轨迹进行仿真。在常压及低真空环境 ( $>100$  Pa) 下, 离子在流体场中的运动轨迹模拟基于连续流的 Navier-Stokes 式<sup>[22]</sup>。如式(10)所示, 它描述了  $dt$  时间内, 由于密度变化产生的有限单元的质量变化。输入模型的初始边界参数, 包括初始入口和出口的气压及速度。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\mu_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\mu_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho\mu_z)}{\partial z} = 0 \quad (10)$$

对于高真空下的离子运动轨迹仿真 ( $<1$  Pa), 则只需要在真空环境下的气压, 仅需考虑真空状态下的气压, 并将其代入硬球 (hard-sphere) 碰撞模型, 即可模拟高真空条件下气压及气体速度对离子运动轨迹的影响。当气压处于 1~100 Pa 的过渡区域时, 两种情况均可采用近似模拟。在硬球碰撞模型中, 离子的碰撞截面被视为常数, 通常等同于离子的物理尺寸。离子和中性分子之间的碰撞概率与离子运动速度相关。因此, 离子运动式可以写为:

$$u'' + \omega_0^2 u = -\delta_2 u' |u'| \quad (11)$$

$\delta_2$  是硬球碰撞模型的衰减系数。静电场的计算在有限元模型上叠加。静电场计算基于 Laplace 式, 用式(12)表示, 即:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \quad (12)$$

将待求解区域划分为正方形或矩形网格单元。通过采用网格中相邻节点的差分方法, 代替相应的偏微分式, 构建并求解与各节点电位相关的线性式组, 计算得出该区域的电位分布和电场。

## 2 功能需求和边界条件

### 2.1 仿真系统构建

为集成各商业仿真软件优势并实现应用场景的参数灵活配置, 基于 Lua 语言开发了性能仿真系统, 实现了流体场、真空场、温度场与离子轨迹模拟的耦合计算, 仿真系统的参数设置如图 2 所示。



图2 性能仿真系统参数设置界面

Fig. 2 Performance simulation system parameter settings interface

对于仿真系统的构建,有以下3个步骤:

1) 具体分为的软件启动,模型建模,网格化,流体场计算,循环判断计算结果是否收敛,以及导出插值后数据。模型的建模是通过工程文件下的 DesignModeler 子程序建模,抽象出连续气体的流动区域。网格化是通过工程文件下的 Meshing 子程序,它本质上一种利用 FEM (有限元的方法),以利用正六面体为主要方式进行网格化。流体场的计算是通过工程文件下的 Fluent 子程序,自动进行 CFD 计算。计算结果是否收敛由 Fluent 软件自行判断,通过迭代连续流式 (Navier Stokes) 式和波尔兹曼式,从而得到一段时间内气体连续流动时的流体运动结果。利用 Fluent 的自带的导出程序,可以将 CFD 计算的结果导出。

2) 具体分为数据格式转换,产生格式为 .pa 的文件,包括速度分布,气压分布和温度分布等。数据格式的转换是通过利用 Matlab 编写的数据处理程序进行矩阵的转置自动实现。转置后的数据,另存为 simion 可以读取和加载的 .pa 格式文件。数据转置后可以得到几个影响离子在低真空中运动的关键参数,包括速度分布场,气压分布场和温度分布场等。

3) 具体分为建模,refine,加载流体场文件,网格尺寸矫正和流体场匹配,计算和离子光学分析。加载流体场文件和网格尺寸矫正与流体场匹配这两步是同时完成的,网格尺寸矫正与流体场匹配的目的就是准确进行加载流体场文件,否则会造成计算误差。

图3展示了仿真计算得到的离子、电子的运动轨迹。磁场区域的径向上线条表征了电子的运动轨迹,点阵区域代表了磁场。在磁场的作用下,电子旋转进入电离区与分子碰撞,产生带电粒子。轴向上线条

表示了  $m/z$  为 16 和 150 的各 100 个离子的运动轨迹,这些离子从电子轰击电离源出发,经过静电透镜的聚焦,进而在 QMA 中进行质量筛选,最终抵达电子倍增器。

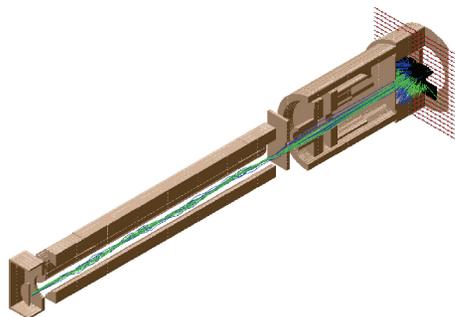


图3 仿真得到的离子、电子运动轨迹

Fig. 3 The software graphical interface: Ion and electron trajectories

## 2.2 边界条件设置

考虑到工程背景和前期产品研发经验,重点确定了 EI 源透镜出口孔径、EI 源伸入四极质量分析器的深度和进样速率 3 个待优化参数及优化区间,并对质谱仪其他参数的取值进行了明确。四极质谱仪的参数设置如表 1 所示。

表1 小型四极质谱仪参数设置

Table 1 The quadrupole mass spectrometer parameters settings

参数类型	参数名称	类型	数值
机械结构/mm	四极杆半径		3.175
	四极场半径	常量	2.737
	四极杆长度		114.3
	EI 源伸入 QMA 深度	待优化	-0.5 ~ 0.5
	EI 源透镜出口孔径	待优化	1.5 ~ 3.5
电学参数	射频振幅/V		100
	直流电压/V		-5
	相位值		0
	频率/MHz	常量	1
	排斥电极/V		-70
	汇聚电极 1/V		-15
	汇聚电极 2/V		-150
	提取透镜/V		-5
泵参数	离子泵抽速/( $L \cdot s^{-1}$ )		25
其他参数	进样速率/( $ml \cdot min^{-1}$ )	待优化	0~1

### 3 仿真结果分析

#### 3.1 EI 源透镜出口孔径内径和伸入 QMA 深度对性能的影响分析

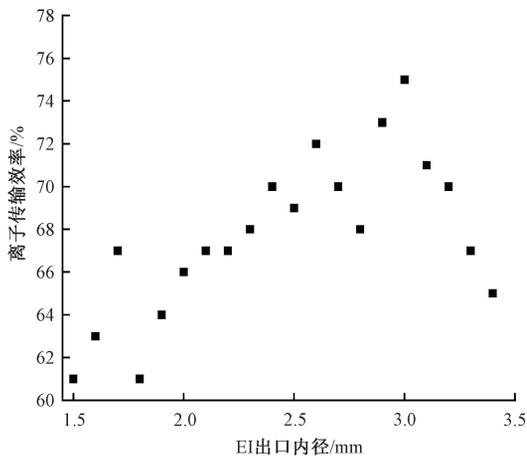
相较于单纯的电压变化仿真,入射孔径内径的优化涉及物理结构的调整,并需重建电势阵列,使得仿真过程更为复杂。为了实现参数影响的高效仿真,仿真软件根据参数变化步长,在 GEM 文件中重建 PA(参数数组文件)文件,实现批量化仿真计算。如图 4(a)所示,将 EI 源透镜出口孔径变化范围设置为[1.5 mm, 3.5 mm]步长 0.1 mm,电极电压保持恒定,仿真记录不同内径下的离子通过四极杆的数量,经分析出口孔径内径的最优值约为 3 mm。图 4(b)中,将 EI 源伸入 QMA 深度的变化

范围设置为[-0.5 mm, 0.5 mm],步长为 0.1 mm,仿真记录了离子进入四极杆瞬间的空间分布和传输效率,探讨了对边缘场的抑制情况,经分析得出最佳值为-0.2 mm,即 EI 源的出口插入四极杆内 0.2 mm,此时离子的空间分布更加聚焦。

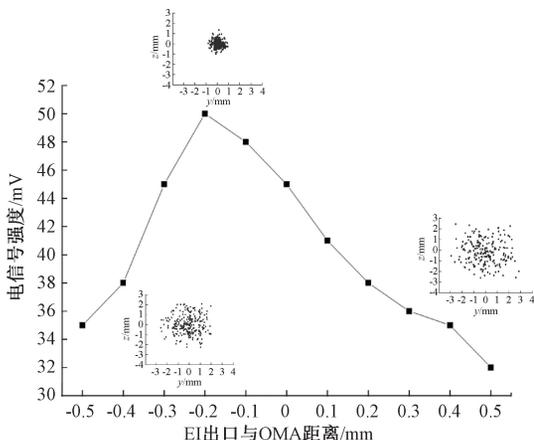
#### 3.2 进样速率对样品信号的影响

考虑到整个系统为进样口进样,真空泵抽真空维持真空度在一定范围,整体上是压力梯度的平衡,简化仿真模型为进样口压力为 101 325 Pa,真空泵端的压力为 0,计算质谱仪内的压力梯度场。图 5(a)为仿真计算得到的 QMS 腔体内的压力梯度场,压力范围在  $1 \times 10^{-3} \sim 0.1$  Pa。

图 5(b)展示了在 38.16  $\mu\text{s}$  时刻,不锈钢毛细管进样口处气体膨胀的流体场模拟结果。可见,膨胀波形成并传播至自由喷射边界,同时表现为微弱的压缩波。流体场的等势线图如图 5(c)所示,进一步叠加电场,实现了流体场和电场的耦合计算。



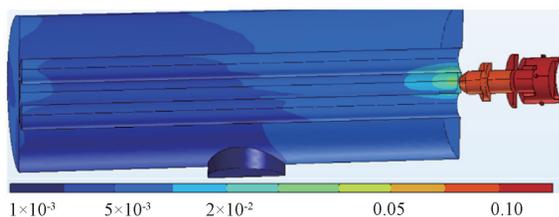
(a) EI源出口孔径批量自动调整对离子传输效率的影响  
(a) Effect of batch automatic adjustment of the EI source exit aperture on ion transmission



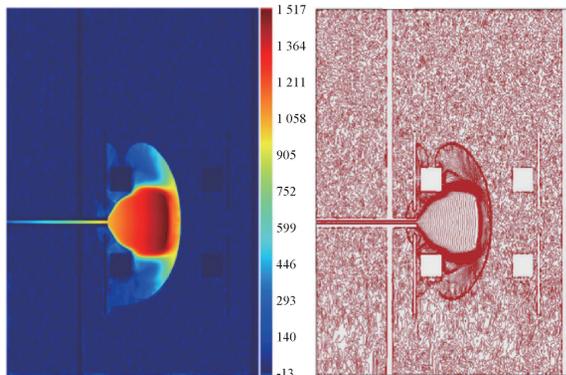
(b) EI出口与QMA之间的间距对信号强度影响  
(b) Effect of spacing between EI outlet and QMA on signal strength

图 4 EI 源透镜出口孔径内径和伸入 QMA 深度对性能的影响分析

Fig. 4 Analysis of the influence of the inner diameter of the EI source lens exit aperture and the depth of insertion into the QMA on performance



(a) QMS腔体内的压力梯度场  
(a) Pressure gradient field in the QMS chamber



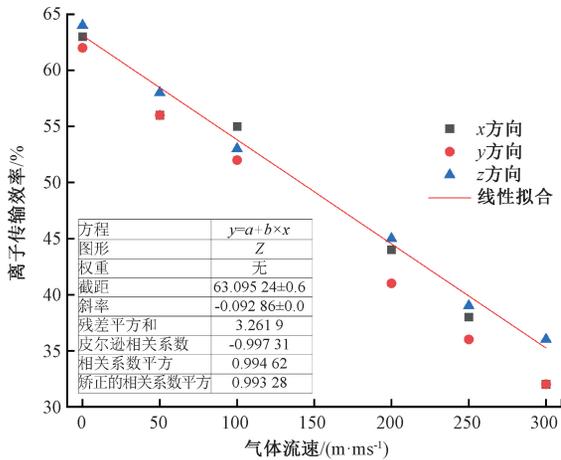
(b) 38.16  $\mu\text{s}$ 时气体动力学速度场  
(b) Velocity field of gas dynamics at 38.16  $\mu\text{s}$   
(c) 38.16  $\mu\text{s}$ 时速度场  
(c) The imported velocity field at 38.16  $\mu\text{s}$

图 5 流体场模拟和软件处理

Fig. 5 Fluid field simulation and software processing

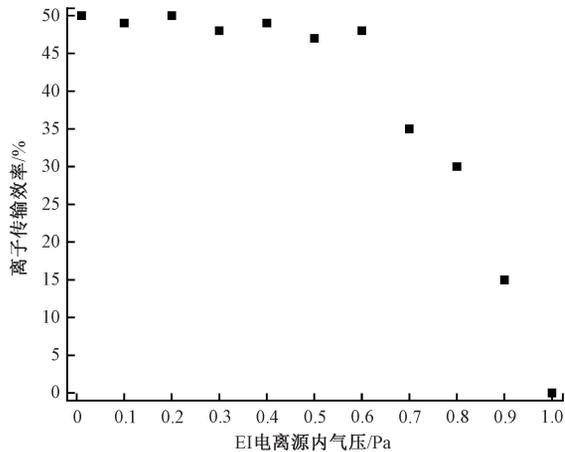
通过调节不同方向气流速度,探讨了流体场对离子传输效率的影响。如图 6(a)所示,随着气流速度的提升,离子传输效率呈现出下降趋势,其中  $z$  方向的影响相对较弱,而  $y$  方向的影响最为显著。这一现象的可能原因是  $y$  方向的气流速度过高时,离子易于与四极杆发生碰撞并湮灭。如图 6(b)所示,随着 EI 源内气压的升高,

离子与中性气体分子之间的碰撞频率增加,导致离子部分动能损失,这有助于减少离子偏离轴向的振幅,从而降低离子损失。然而,随着压力的进一步升高,离子传输效率出现下降,这是因为离子的轴向动能亦随之降低,不易通过透镜。



(a) 气流流速对离子传输效率的影响

(a) Effect of air flow rate on ion transmission efficiency



(b) EI源内气压对离子传输效率的影响

(b) The effect of air pressure within EI source on ion transmission efficiency

图6 进样速率对样品信号的影响

Fig. 6 Effect of injection rate on sample signal

进样速率的提高通常会致信号强度的增加。然而,进样量的持续增大将引起真空腔体内气压的升高,这不会仅会缩短EI源灯丝的使用寿命,而且可能影响离子在真空中的传输效率。基于建立的模型,通过将流体场计算收敛性与电场结合,分析每个网格点的场强,从而通过积分得出离子的运动轨迹。离子传输效率=到达目标点的离子个数/初始离子个数。如图7所示,质谱信号强度呈现出先上升后下降的趋势。通过仿真分析,得出该系统的最佳进样气体流速约为0.3 mL/min。

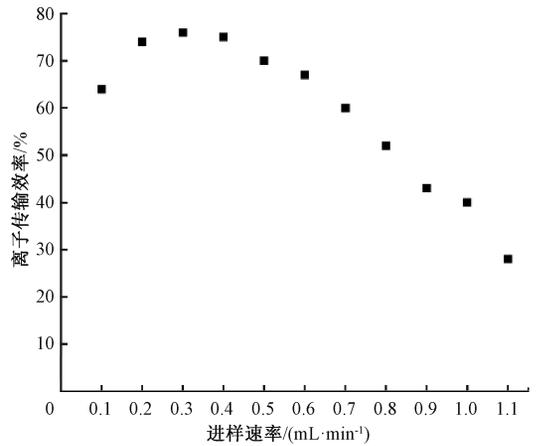


图7 仿真研究进样速率对信号强度的影响

Fig. 7 Simulation on sample injection speed influence on signal intensities

## 4 实验验证

为验证仿真系统的有效性,结合质谱仪研发历程,加工了5种孔径尺寸的EI源透镜出口,如图8所示。搭建了性能验证平台,如图9所示,主要由质谱仪相关功能产品、可调节毛细管直径的进样系统、真空系统、可调节支撑架、离子电流强度测试仪(吉时利6517A微电流计)等单元构成。真空系统(泵组)维持真空腔体运行在 $5 \times 10^{-4} \sim 1 \times 10^{-3}$  Pa的高真空环境下;离子接收挡板与微电流计相连用于收集和测量不同工况下的离子流强度;可调节支撑架用于调节EI源深入四极质量分析器的深度。标气通过毛细管进样到离子源组件中,可通过调节节流阀控制进样流量。



图8 5种孔径尺寸的EI源透镜出口

Fig. 8 EI source lens outputs with 5 aperture sizes

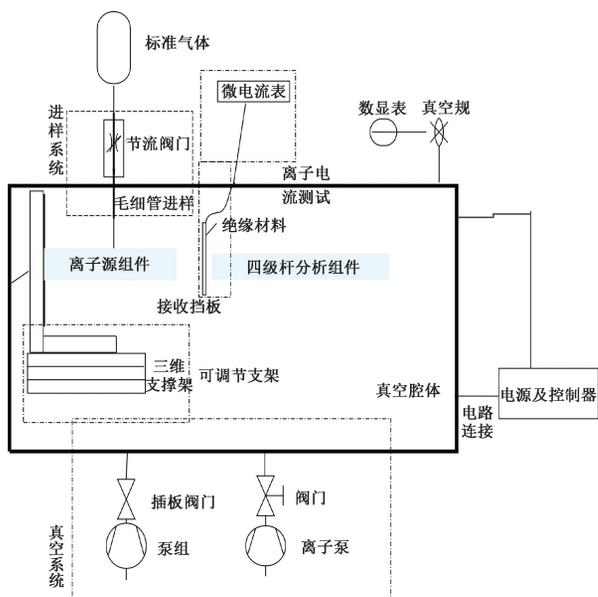


图 9 调试平台

Fig. 9 Instrument platform

#### 4.1 关键参数的验证结果分析

首先,通过可调节支撑架对 EI 源伸入 QMA 的深度进行了设置,如图 10 所示。然后进样标准苯气体,测量 EI 源透镜引出的离子流强度。如图 11 所示,实验测得信号强度随伸入深度的变化趋势与仿真预测高度一致。当伸入深度约为 0.1~0.3 mm 时,信号强度达到最大值。该结果证实了仿真关于“适度伸入可改善离子注入条件,抑制入口边缘场不利影响”的结论。深度过小(<0)导致离子束在进入 QMA 前发散严重;深度过大(>0.3 mm)则可能使离子束过度收敛并撞击 QMA 入口端壁,导致传输效率下降。

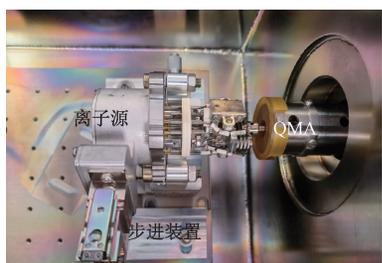


图 10 EI 源深入 QMA 深度调节装置

Fig. 10 EI depth adjusting devices

调换不同内径的 EI 透镜出口进行测试。如图 12 所示, EI 透镜出口的内径越大,离子强度越大;但信噪比 (signal to noise ratio, SNR) 随着尺寸的增加呈先增大再减小的趋势,约在 2 mm 内径处得到 SNR 最大值。

最后,对进样速率的影响进行测试。由于进样速率、泵的抽吸速率共同决定了腔体的真空度,且不同真空度

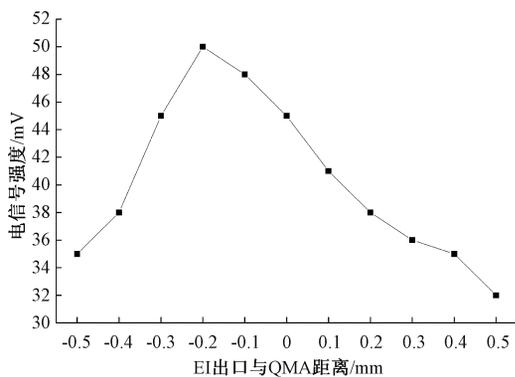


图 11 EI 源深入 QMA 不同深度电信号强度

Fig. 11 EI depth in the QMA and signal intensities

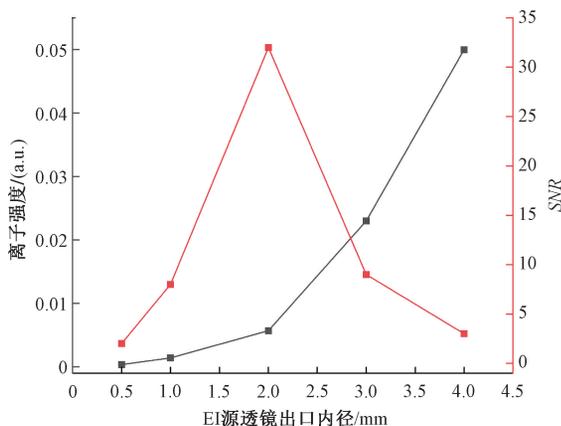


图 12 不同孔径尺寸 EI 源透镜出口的离子强度与 SNR

Fig. 12 Ion intensity and SNR at the exit of EI source lens with different aperture sizes

条件下泵的抽吸负荷不同,为便于测试,首先建立  $5 \times 10^{-4}$  Pa 的初始压力,通过真空规进行检测,尽可能维持真空度在  $1 \times 10^{-3}$  Pa 以上,调节进样速率时,监测分子泵和离子泵电流值,由于离子泵为离子溅射原理,电流值越小,泵将有更好的运行环境,寿命也就更长。经测试,进样速率在 0.3~0.5 mL/min 时,质谱仪运行在较好工况。考虑到调试设备腔室远大于真实产品状态,选取较小的进样速率 0.3 mL/min。

#### 4.2 整机性能评估

依据以上四极杆质谱软件系统分析和 EI 源深入 QMA 深度试验结果,确定了产品研制工程参数:EI 源出口直径为 3 mm, EI 源伸入 QMA 深度为 0.2 mm, EI 出口内径为 3 mm,样品进样速率为 0.3 mL/min。装配完成质谱仪征集后,采用 1 ppm 全氟三丁胺 (perfluorotributylamine, PFTBA) 作为标样进行了测试,结果如图 13 所示,满足任务要求。除了质谱分辨率和灵敏度外,质量覆盖范围是另一个需要表征的性能指标。如图 13 所

示,显示了从  $m/z$  10~180 的质谱图。其中, $m/z$  28 的质谱峰来自背景中  $N_2^+$  的信号。 $m/z=31,69,131$  和 158 来自 PTEBA 的碎片离子信号。

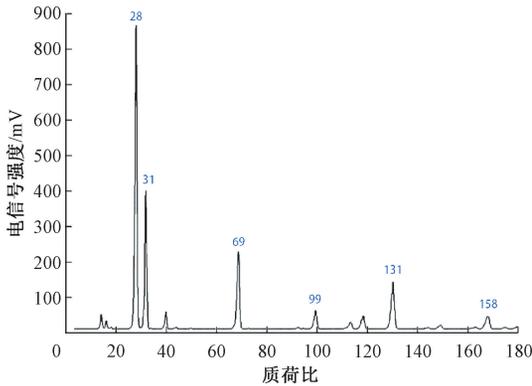


图 13 全氟三丁胺检测质谱图

Fig. 13 Mass spectrum of perfluorotributylamine

## 5 结 论

本研究面向某小型 QMS 工程研制的具体需求,系统开展了基于数值仿真技术的性能优化与实验验证工作,主要结论为:

1) 研制开发了 QMS 性能仿真系统。基于 QMS 物理模型与离子运动式,集成开发了集多物理场(电场、磁场、流场)耦合计算、离子全生命周期(电离、传输、过滤、检测)轨迹动态模拟以及参数批量处理于一体的专用仿真平台。该系统有效弥补了商用软件在特定工程场景下针对性不足的缺陷,为复杂工况下的仪器性能预测与优化提供了核心工具支持。

2) 针对性的开展了 EI 源透镜出口孔径、EI 源伸入四极杆质量分析器(QMA)的深度以及进样速率 3 个工程关键参数的仿真研究。仿真结果表明:EI 源伸入 QMA 的最佳深度为 0.2 mm,该尺寸能有效抑制入口边缘场效应,离子的空间分布更加聚焦;EI 源透镜出口孔径的最佳尺寸为 3.0 mm,此时可获得最大的离子流密度;最佳进样速率约为 0.3 mL/min,在此条件下可在获得高信号强度的同时维持系统高真空度,保障灯丝寿命与离子传输效率。

3) 通过实验验证了仿真系统的有效性 with 优化方案的可行性。搭建了专用实验测试平台,对仿真确定的关键参数进行了实验验证。实验结果与仿真预测结果有较好的吻合度:在优化参数下(出口孔径 3.0 mm,伸入深度

0.2 mm),实测信号强度达到最大,验证了仿真模型的有效性。整机性能测试表明,优化后的质谱仪对 PFTBA 能获得 SNR 优良的质谱图,质量范围覆盖  $m/z$  10~180,满足指标要求。基于软件仿真设计的四极杆质谱系统,具有质谱分析能力,尤其适合分析一些小分子样品。

本研究开发的性能仿真系统及由此得出的参数优化方案,为小型 QMS 的精密设计、性能提升和研制周期的缩短提供了有效的技术支撑。

## 参考文献

- [1] 沈辉,于佳佳,侍尉,等. 一种小型化过程检测质谱仪的设计与研制[J]. 真空, 2024, 61(2): 53-57.  
SHEN H, YU J J, SHI W, et al. Design and development of miniaturized process mass spectrometer [J]. Vacuum, 2024, 61(2): 53-57.
- [2] 刘子恒,叶汉青,贺怀宇,等. 行星挥发分提取和分析[J]. 中国科学:物理学 力学 天文学, 2022, 52(1): 124-132.  
LIU Z H, YE H Q, HE H Y, et al. Extraction and analysis of planetary volatiles [J]. Scientia Sinica (Physica, Mechanica & Astronomica), 2022, 52(1): 124-132.
- [3] 于佳佳,沈辉,王玉涵,等. 基于不同背景选取方式四极质谱仪数据库匹配分析[J]. 分析试验室, 2024, 43(5): 726-730.  
YU J J, SHENG H, WANG Y H, et al. Quadrupole mass spectrometer database identification analysis based on different background selection methods [J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2024, 43(5): 726-730.
- [4] 龚雨程,黄骥,吴国新,等. 辐射生物效应纳剂量探测器参数设计研究[J]. 电子测量技术, 2025, 48(2): 7-13.  
GONG Y CH, HUANG J, WU G X, et al. Research on parameter design of radiation biological effect nanodosimeter [J]. Electronic Measurement Technology, 2025, 48(2): 7-13.
- [5] 郭皓天,刘俊杰,韩晓霞,等. 凝结核粒子计数器的流场数值模拟及流量配比优化[J]. 仪器仪表学报, 2022, 43(8): 225-234.  
GUO H T, LIU J J, HAN X X, et al. Flow field simulation and flow ratio optimization of condensation particle counter [J]. Chinese Journal of Scientific

- Instrument, 2022, 43(8): 225-234.
- [ 6 ] 张志良, 孙越强, 李永平, 等. 基于 COMSOL 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.
- ZHANG ZH L, SUN Y Q, LI Y P, et al. Simulation and analysis of spaceborne quadrupole mass spectrometer based COMSOL[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2020, 42(7): 517-524.
- [ 7 ] 钟志荣, 左洪福, 郭家琛, 等. 基于阵列式静电传感器的颗粒带电量估计方法[J]. 仪器仪表学报, 2020, 41(7): 80-90.
- ZHONG ZH R, ZUO H F, GUO J CH, An estimation method of particle charge based on array electrostatic sensors[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2020, 41(7): 80-90.
- [ 8 ] WU G X, COOKS R G, OUYANG ZH, et al. Ion trajectory simulation for electrode configurations with arbitrary geometries[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2006, 17(9): 1216-1218.
- [ 9 ] GUO D, HE M Y, WANG Y ZH, et al. GPU assisted simulation study of ion-ion reactions within quadrupole ion traps[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2015, 26(7): 1233-1241.
- [ 10 ] OUYANG ZH, GAO L, FICO M, et al. Quadrupole ion traps and trap arrays: Geometry, material, scale, performance [ J ]. European Journal of Mass Spectrometry, 2007, 13(1): 13-18.
- [ 11 ] MOSHKBAR-BAKSHAYESH K, MOHTASHAMI S. Developing an approach for fast estimation of range of ion in interaction with material using the Geant4 toolkit in combination with the neural network [ J ]. Nuclear Engineering and Technology, 2022, 54 ( 11 ): 4209-4214.
- [ 12 ] DJORDJEVIĆ B Z, KEMP A J, KIM J, et al. Modeling laser-driven ion acceleration with deep learning [ J ]. Physics of Plasmas, 2021, 28(4): 043105.
- [ 13 ] 丁明亮, 宋娟, 赵树飞, 等. 基于八激励模式数据融合的电阻抗成像优化算法[J]. 电子测量与仪器学报, 2025, 39(6): 284-292.
- DING M L, SONG J, ZHAO SH F, et al. Electrical impedance tomography imaging algorithm based on eight-mode excitation mode data fusion[J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2025, 39(6): 284-292.
- [ 14 ] 何存富, 王永慷, 高杰, 等. 表面波相控变频电磁声传感器的研制[J]. 仪器仪表学报, 2024, 45(5): 90-98.
- HE C F, WANG Y K, GAO J, et al. Development of surface wave phase-controlled frequency-conversion electromagnetic acoustic transducer [ J ]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2024, 45(5): 90-98.
- [ 15 ] ZHANG ZH Y, LI B Q, ZHANG L, et al. Simulation and development of an ion funnel for miniature mass spectrometers [ J ]. Rapid Communications in Mass Spectrometry, 2025, 39(22): e10123.
- [ 16 ] 王伟民, 靳留雨, 钱炳君, 等. 电子轰击电离源-离子阱质谱的质量范围优化程序研究[J]. 分析化学, 2022, 50(2): 198-205.
- WANG W M, JIN L Y, QIAN B J. et al. Optimization procedure of mass range for electron impact ion source ion trap mass spectrometry [ J ]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2022, 50(2): 198-205.
- [ 17 ] ROBERTSON E, EARLE G, GREEN J, et al. A configurable ion source for validating spaceflight-based thermal plasma measurement systems [ J ]. Review of Scientific Instruments, 2019, 90(9): 093302.
- [ 18 ] ZHAI Y B, JIANG T, HUANG G Y, et al. An aerodynamic assisted miniature mass spectrometer for enhanced volatile sample analysis [ J ]. Analyst, 2016, 141(18): 5404-5411.
- [ 19 ] SNYDER D T, PENG W P, COOKS R G. Resonance methods in quadrupole ion traps [ J ]. Chemical Physics Letters, 2017, 668: 69-89.
- [ 20 ] 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.
- 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.
- [ 21 ] Hamamatsu Photonics K K Editorial Committee. Photomultiplier tubes basics and applications [ M ]. 3rd ed. Hamamatsu Photonics K K Electron Tube Division, 2006.
- [ 22 ] GIMELSHEIN N, GIMELSHEIN S, LILLY T, et al. Numerical modeling of ion transport in an ESI-MS

system[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2014, 25(5): 820-831.

## 作者简介



**周文兴** (通信作者), 2006 年于装备指挥技术学院获得学士学位, 2009 年于中国航天员科研训练中心获得硕士学位, 现为中国航天员科研训练中心副研究员, 主要研究方向为环境控制与生命保障总体技术、装备自主健康管理技术。

E-mail: 158190424@qq.com

**Zhou Wenxing** (Corresponding author) received his B. Sc. degree from the Command and Control Engineering Institute in 2006, and his M. Sc. degree from the China Astronaut Research and Training Center in 2009. He is currently an associate researcher at the China Astronaut Research and Training Center. His main research interests include environmental control and life

support systems, autonomous health management technology for equipment.



**杨清宇**, 1996 年于西安交通大学获得学士学位, 1999 年于西安交通大学获得硕士学位, 2003 年于西安交通大学获得博士学位, 现为西安交通大学教授, 主要研究方向为智能优化与决策、信息物理融合能源系统优化与安全、工业智能与 AI 安全。

E-mail: yangqingyu@xjtu.edu.cn

**Yang Qingyu** received his B. Sc., M. Sc., and Ph. D. degrees all from Xi'an Jiaotong University in 1996, 1999, and 2003, respectively. He is currently a professor at Xi'an Jiaotong University. His main research interests include intelligent optimization and decision-making, optimization and security of cyber-physical integrated energy systems, industrial intelligence and AI security.