



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 111653472 B

(45) 授权公告日 2021. 10. 29

(21) 申请号 202010535945.9

G01N 27/622 (2021. 01)

(22) 申请日 2020.06.12

(56) 对比文件

(65) 同一申请的已公布的文献号

CN 101593660 A, 2009.12.02

申请公布号 CN 111653472 A

CN 110277302 A, 2019.09.24

(43) 申请公布日 2020.09.11

US 2018061625 A1, 2018.03.01

(73) 专利权人 中国科学院地质与地球物理研究所

WO 2020106310 A1, 2020.05.28

地址 100029 北京市朝阳区北土城西路19号

刘颖超等. 静电轨道离子阱离子切相引入的新方式和模拟.《质谱学报》.2020,第41卷(第2期),第160-166页.

(72) 发明人 黄超

黄超. 傅里叶变换静电场离子阱的离子入射条件优化研究.《真空科学与技术学报》.2014,第34卷(第1期),第21-24页.

(74) 专利代理机构 北京集佳知识产权代理有限公司 11227

徐国宾. 飞行时间质谱及串联质谱关键技术的系统研究.《中国博士学位论文全文数据库 工程科技I辑》.2015,第149-179页.

代理人 郭化雨

审查员 孔敏

(51) Int. Cl.

H01J 49/42 (2006.01)

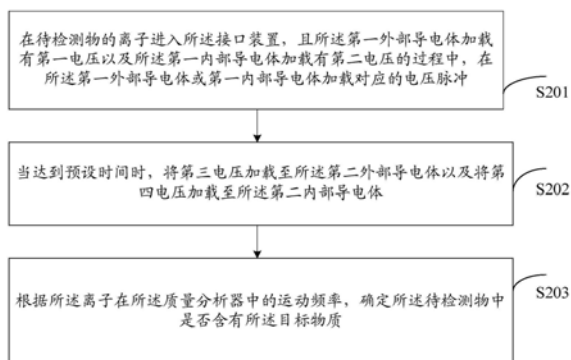
权利要求书5页 说明书17页 附图3页

(54) 发明名称

一种物质分析方法、装置和静电离子阱质量分析器

(57) 摘要

本申请实施例公开了一种物质分析方法、装置和静电离子阱质量分析器,静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述方法包括:在待检测物的离子进入接口装置,且第一外部导电体加载有第一电压以及第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;当达到预设时间时,将第三电压加载至第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定待检测物中是否含有目标物质。该方法中提高了质量分析器的分析灵敏度。



1. 一种物质分析方法,其特征在于,应用于静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,所述第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,所述第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间;所述第一内部导电体与所述第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述方法包括:

在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;其中,目标物质对应的离子进入所述接口装置的最佳入射条件包括:第一最佳入射条件为离子进入所述接口装置的初始动能保证所述离子在接口装置内做圆周运动;

当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导电体的第一时间,以及从所述第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的;

根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有所述目标物质;其中,通过所述质量分析器对所述离子进行质量分析还具有其他两个最佳入射条件,包括:第二最佳入射条件为所述离子的径向初速度为零,所述离子入射至所述第二外部导电体的入射速度方向与位矢垂直,第三最佳入射条件为所述离子的径向加速度大小为零;

其中,所述第一时间的确定方式包括:

根据所述电压脉冲 ΔU 、离子入射至所述接口装置的入射位置 r_0 、所述第一外部导电体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导电体对应的第二半径 R_2 、所述目标物质的质量数 m 和电荷量 q , 确定离子在不同位矢 r 下受到的径向加速度 a_r , 即 $a_r = \frac{1}{m \ln(R_1/R_2)} \left[\Delta U \cdot \frac{1}{r} - (U_1 - U_2) \frac{r_0^2 - r^2}{r^3} \right]$; 其中, r' 为离子在质量分析器中做匀速圆周运动对应的半径; U_1 为所述第一电压, U_2 为所述第二电压;

根据所述第一半径 R_1 、离子入射至所述接口装置的入射位置 r_0 、所述第二半径 R_2 和所述径向加速度 a_r , 确定所述第一时间 t_1 , 即: $t_1 = n \sqrt{\frac{r_0 - R_2}{y}}$; 其中 $y = [(n-1) * a_{r_0} + (n-2) * a_{r_1} + \dots + 2a_{r_{n-3}} + 1 * a_{r_{n-2}}] + 1/2 (a_{r_0} + a_{r_1} + \dots + a_{r_{n-2}} + a_{r_{n-1}})$, 其中 n 为将目标物质对应的离子从位矢大小为 r_0 运动到位矢大小为 r 的时间分为 n 等分, 此时 a_r 对应取值为 $a_{r_0}, \dots, a_{r_{n-1}}$;

其中,所述第二时间的确定方式包括:

根据所述电压脉冲 ΔU 、所述第一外部导电体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导电体对应的第二半径 R_2 和所述第一电压 U_1 、所述第二电压 U_2 和所述目标物质的电荷量 q , 确定离

子运动至所述第二外部导电体的入射角度 θ_Q ,即 $\sin\theta_Q = \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{\frac{1}{2\ln\frac{R_1}{R_2}}(U_1-U_2)q}{\frac{\ln\frac{r_0}{R_2}}{\ln\frac{R_1}{R_2}}\Delta Uq + (1+2\ln\frac{r_0}{R_2})\cdot\frac{1}{2\ln\frac{R_1}{R_2}}(U_1-U_2)q}}$;

根据所述第二外部导体对应的第三半径 R_3 、所述入射角度 θ_Q 、所述质量分析器对应的离子阱特征半径 E_{ESIT_in} 、所述目标物质的质量数 m 和电荷量 q ,确定所述第二时间 t_2 ,即

$$t_2 = \frac{R_3 \sin\theta_Q}{\sqrt{2E_{ESIT_in} \frac{q}{m}}}$$

2. 根据权利要求1所述的方法,其特征在于,所述电压脉冲满足如下条件:

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二外部导体对应的第三半径和所述目标物质的电荷量确定的第一条件;

和/或,

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二内部导体对应的第四半径和所述目标物质的电荷量确定的第二条件。

3. 根据权利要求1所述的方法,其特征在于,所述电压脉冲满足如下条件:

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压和所述第二电压确定的第三条件。

4. 根据权利要求1所述的方法,其特征在于,所述电压脉冲的确定方式如下:

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压和所述质量分析器对应的离子阱特征半径,确定所述电压脉冲。

5. 一种物质分析装置,其特征在于,应用于静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导体和第一内部导体,所述第一外部导体和第一内部导体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导体和同心圆柱状的第二内部导体,所述第二外部导体和第二内部导体形成第二离子运动空间;所述第一内部导体与所述第二外部导体中包括离子通过的通道;所述装置包括:

第一加载单元,用于在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导体加载有第一电压以及所述第一内部导体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导体或第一内部导体加载对应的电压脉冲;其中,目标物质对应的离子进入所述接口装置的最佳入射条件包括:第一最佳入射条件为离子进入所述接口装置的初始动能保证所述离子在接口装置内做圆周运动;

第二加载单元,用于当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导体以及将第四电压加载至所述第二内部导体;其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导体的第一时间,以及从所述第一内部导体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所

述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的；

确定单元,用于根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有所述目标物质;其中,通过所述质量分析器对所述离子进行质量分析还具有其他两个最佳入射条件,包括:第二最佳入射条件为所述离子的径向初速度为零,所述离子入射至所述第二外部导电体的入射速度与位矢垂直,第三最佳入射条件为所述离子的径向加速度大小为零;

其中,所述第一时间的确定方式包括:

根据所述电压脉冲 ΔU 、离子入射至所述接口装置的入射位置 r_0 、所述第一外部导体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导体对应的第二半径 R_2 、所述目标物质的质量数 m 和电荷量 q ,确定离子在不同位矢 r 下受到的径向加速度 a_r ,即 $a_r = \frac{1}{m} \frac{q}{\ln(R_1/R_2)} \left[\Delta U \cdot \frac{1}{r} - (U_1 - U_2) \frac{r_0^2 - r^2}{r^3} \right]$;其中, r' 为离子在质量分析器中做匀速圆周运动对应的半径; U_1 为所述第一电压, U_2 为所述第二电压;

根据所述第一半径 R_1 、离子入射至所述接口装置的入射位置 r_0 、所述第二半径 R_2 和所述径向加速度 a_r ,确定所述第一时间 t_1 ,即: $t_1 = n \sqrt{\frac{r_0 - R_2}{y}}$;其中 $y = [(n-1) * a_{r_0} + (n-2) * a_{r_1} + \dots + 2a_{r_{n-3}} + 1 * a_{r_{n-2}}] + 1/2 (a_{r_0} + a_{r_1} + \dots + a_{r_{n-2}} + a_{r_{n-1}})$,其中 n 为将目标物质对应的离子从位矢大小为 r_0 运动到位矢大小为 r 的时间分为 n 等分,此时 a_r 对应取值为 $a_{r_0}, \dots, a_{r_{n-1}}$;

其中,所述第二时间的确定方式包括:

根据所述电压脉冲 ΔU 、所述第一外部导体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导体对应的第二半径 R_2 和所述第一电压 U_1 、所述第二电压 U_2 和所述目标物质的电荷量 q ,确定离

子运动至所述第二外部导电体的入射角度 θ_Q ,即 $\sin \theta_Q = \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{\frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q}{\frac{\ln \frac{r_0}{R_2} \Delta U q + (1 + 2 \ln \frac{r_0}{R_2}) \cdot \frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q}}}$;

根据所述第二外部导体对应的第三半径 R_3 、所述入射角度 θ_Q 、所述质量分析器对应的离子阱特征半径 E_{ESIT_in} 、所述目标物质的质量数 m 和电荷量 q ,确定所述第二时间 t_2 ,即

$$t_2 = \frac{R_3 \sin \theta_Q}{\sqrt{2 E_{ESIT_in} \frac{q}{m}}}$$

6. 根据权利要求5所述的装置,其特征在于,所述电压脉冲满足如下条件:

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二外部导体对应的第三半径和所述目标物质的电荷量确定的第一条件;

和/或,

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二内部导体对应的第四半径和所述目标物质的电荷量确定的第二条件。

7. 一种静电离子阱质量分析器,其特征在于,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导体和

一内部导体,所述第一外部导体和第一内部导体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导体和同心圆柱状的第二内部导体,所述第二外部导体和第二内部导体形成第二离子运动空间;所述第一内部导体与所述第二外部导体中包括离子通过的通道;所述静电离子阱质量分析器,用于:

在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导体加载有第一电压以及所述第一内部导体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导体或第一内部导体加载对应的电压脉冲;其中,目标物质对应的离子进入所述接口装置的最佳入射条件包括:第一最佳入射条件为离子进入所述接口装置的初始动能保证所述离子在接口装置内做圆周运动;

当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导体以及将第四电压加载至所述第二内部导体;其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导体的第一时间,以及从所述第一内部导体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的;

根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有所述目标物质;其中,通过所述质量分析器对所述离子进行质量分析还具有其他两个最佳入射条件,包括:第二最佳入射条件为所述离子的径向初速度为零,所述离子入射至所述第二外部导体的入射速度方向与位矢垂直,第三最佳入射条件为所述离子的径向加速度大小为零;

其中,所述第一时间的确定方式包括:

根据所述电压脉冲 ΔU 、离子入射至所述接口装置的入射位置 r_0 、所述第一外部导体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导体对应的第二半径 R_2 、所述目标物质的质量数 m 和电荷量 q ,确定离子在不同位矢 r 下受到的径向加速度 a_r ,即 $a_r = \frac{1}{m \ln(R_1/R_2)} \left[\Delta U \cdot \frac{1}{r} - (U_1 - U_2) \frac{r_0^2 - r^2}{r^3} \right]$;其中, r' 为离子在质量分析器中做匀速圆周运动对应的半径; U_1 为所述第一电压, U_2 为所述第二电压;

根据所述第一半径 R_1 、离子入射至所述接口装置的入射位置 r_0 、所述第二半径 R_2 和所述径向加速度 a_r ,确定所述第一时间 t_1 ,即: $t_1 = n \sqrt{\frac{r_0 - R_2}{y}}$;其中 $y = [(n-1) * a_{r_0} + (n-2) * a_{r_1} + \dots + 2a_{r_{n-3}} + 1 * a_{r_{n-2}}] + 1/2 (a_{r_0} + a_{r_1} + \dots + a_{r_{n-2}} + a_{r_{n-1}})$,其中 n 为将目标物质对应的离子从位矢大小为 r_0 运动到位矢大小为 r 的时间分为 n 等分,此时 a_r 对应取值为 $a_{r_0}, \dots, a_{r_{n-1}}$;

其中,所述第二时间的确定方式包括:

根据所述电压脉冲 ΔU 、所述第一外部导体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导体对应的第二半径 R_2 和所述第一电压 U_1 、所述第二电压 U_2 和所述目标物质的电荷量 q ,确定离

子运动至所述第二外部导体的入射角度 θ_Q ,即 $\sin\theta_Q = \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{\frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q}{\frac{\ln \frac{r_0}{R_2}}{\ln \frac{R_1}{R_2}} \Delta U q + (1 + 2 \ln \frac{r_0}{R_2}) \cdot \frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q}}$;

根据所述第二外部导体对应的第三半径 R_3 、所述入射角度 θ_Q 、所述质量分析器对应的

离子阱特征半径 $E_{\text{ESIT_in}}$ 、所述目标物质的质量数 m 和电荷量 q ,确定所述第二时间 t_2 ,即

$$t_2 = \frac{R_3 \sin \theta Q}{\sqrt{2E_{\text{ESIT_in}} \frac{q}{m}}}。$$

8. 根据权利要求7所述的静电离子阱质量分析器,其特征在于,所述电压脉冲满足如下条件:

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二外部导体对应的第三半径和所述目标物质的电荷量确定的第一条件;

和/或,

根据所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二内部导体对应的第四半径和所述目标物质的电荷量确定的第二条件。

一种物质分析方法、装置和静电离子阱质量分析器

技术领域

[0001] 本申请涉及数据处理领域,特别是涉及一种物质分析方法、装置和静电离子阱质量分析器。

背景技术

[0002] 目前,二十世纪九十年代,提出了利用静电场实现离子的束缚进而进行质量分析,该装置为傅里叶变换静电离子阱质谱。与传统的磁场式傅里叶变换离子阱相比较,傅里叶变换静电离子阱质谱在保证分辨率和质量精度的同时能够降低制造成本,减轻重量,使其得以广泛的应用。

[0003] 傅里叶静电离子阱质量分析器可以用于检测待检测物中是否含有需要检测的目标物质。

[0004] 傅里叶变换静电场离子阱由一个纺锤状的内导体和一个的桶状外部导体组成。两导体同轴,且均为轴对称,它们的导体形状,尺寸由公式(1)决定。

$$[0005] \quad z_{1,2}(r) = \sqrt{\frac{r^2}{2} - \frac{(R_{1,2})^2}{2} + (R_m)^2 \ln\left(\frac{R_{1,2}}{r}\right)} \quad (1)$$

[0006] 这里, z 是轴向位置,其下标1表示内导体,2表示外导体。 $R_{1,2}$ 是所对应内外导体的最大半径。 r 是在与 z 方向垂直平面上的位矢大小,其大小为 $\sqrt{x^2 + y^2}$, R_m 为离子阱特征半径。

[0007] 这种形状的导体所形成的静电场的电势数学形式由公式(2)给出:

$$[0008] \quad U(r, z) = \frac{k}{2}\left(z^2 - \frac{r^2}{2}\right) + \frac{k}{2}(R_m)^2 \ln\left(\frac{r}{R_m}\right) + C \quad (2)$$

[0009] 由式(2)可知,离子在 Z 方向上的运动是简谐振动,其运动方程是 $\frac{d^2z}{dt^2} = -\frac{q}{m}kz$, 振

动频率 $\omega = \sqrt{\frac{q}{m} \cdot k}$ 。由于离子在 Z 方向上的振动频率只与质荷比有关,傅里叶变换静电场离

子阱便采用这一特性,通过检测镜像电流和后续的快速傅里叶变换获得轴向频率和离子质荷比的对应关系,实现质量分析。

[0010] 然而,傅里叶变换静电场离子阱在进行实际应用时也有着问题。傅里叶变换静电场离子阱是一种近似封闭的质量分析器,若待检测物中包括需要检测的目标物质,在对接口装置加载电压脉冲后,目标物质对应的离子从接口装置进入质量分析器后在质量分析器中进行圆周运动的可能性较小。可见,如何提高目标物质对应的离子在质量分析器中进行圆周运动的可能性,以提高保证傅里叶变换静电场离子阱能够获得足够的分析灵敏度,是该种质谱能够在实际中得到应用的关键。

发明内容

[0011] 为了解决上述技术问题,本申请提供了一种物质分析方法、装置和静电离子阱质量分析器,提高了目标物质对应的离子在质量分析器中做圆周运动的机会,进而提高了质量分析器的分析灵敏度。

[0012] 本申请实施例公开了如下技术方案:

[0013] 一方面,本申请实施例提供了一种物质分析方法,应用于静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,所述第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,所述第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间;所述第一内部导电体与所述第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述方法包括:

[0014] 在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;

[0015] 当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;

[0016] 其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导电体的第一时间,以及从所述第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的;

[0017] 根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有目标物质。

[0018] 另一方面,本申请实施例提供了一种物质分析装置,应用于静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,所述第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,所述第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间;所述第一内部导电体与所述第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述装置包括:

[0019] 第一加载单元,用于在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;

[0020] 第二加载单元,用于当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;

[0021] 其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导电体的第一时间,以及从所述第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的;

[0022] 确定单元,用于根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有目标物质。

[0023] 另一方面,本申请实施例提供了一种静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,所述第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,所述第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间;所述第一内部导电体与所述第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述静电离子阱质量分析器,用于:

[0024] 在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;

[0025] 当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;

[0026] 其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导电体的第一时间,以及从所述第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的;

[0027] 根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有目标物质。

[0028] 由上述技术方案可以看出,该方法应用于静电离子阱质量分析器,静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;质量分析器包括位于与接口装置处于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间。第一内部导电体与第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述方法包括:在待检测物的离子进入接口装置,且第一外部导电体加载有第一电压以及第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;当达到预设时间时,将第三电压加载至第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;其中,预设时间包括离子从接口装置的第一圆轨道运动到第一内部导电体的第一时间,以及从第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间;离子在目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的。根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定待检测物中是否含有目标物质。该方法中,通过预先根据目标物质确定一个预设时间,以使在待检测物包括目标物质的情况下,目标物质对应的离子可以从接口装置运动到目标位置,由于目标物质对应的离子在目标位置时对应的速度方向,其和该离子在目标位置时对应位矢方向垂直,即为该离子在第二离子运动空间做圆周运动提供了条件,此时在质量分析器加载第三电压和第四电压,提高了目标物质对应的离子在质量分析器中做圆周运动的机会,进而提高了质量分析器的分析灵敏度。

附图说明

[0029] 为了更清楚地说明本申请实施例或现有技术中的技术方案,下面将对实施例或现有技术描述中所需要使用的附图作简单地介绍,显而易见地,下面描述中的附图仅仅是本申请的一些实施例,对于本领域普通技术人员来讲,在不付出创造性劳动性的前提下,还可以根据这些附图获得其他的附图。

[0030] 图1为本申请实施例提供的一种静电离子阱质量分析器示意图;

[0031] 图2为本申请实施例提供的一种物质分析方法流程图;

[0032] 图3为本申请实施例提供的一种静电离子阱质量分析器的切面示意图;

[0033] 图4为本申请实施例提供的另一种静电离子阱质量分析器的切面示意图;

[0034] 图5为本申请实施例提供的另一种静电离子阱质量分析器的切面示意图;

[0035] 图6为本申请实施例提供的一种物质分析装置示意图。

具体实施方式

[0036] 下面结合附图,对本申请的实施例进行描述。

[0037] 为了便于理解本申请的技术方案,下面对静电离子阱质量分析器进行介绍。

[0038] 参见图1,该图示出了本申请实施例提供的一种静电离子阱质量分析器示意图,如图1所示,静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间。质量分析器包括与接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间。其中,质量分析器也可以称为傅里叶变换静电场离子阱。第一内部导电体与第二外部导电体中包括离子通过的通道。即离子可以从穿过第一内部导电体和第二内部导电体。

[0039] 也就是说,第一外部导电体、第一内部导电体、第二外部导电体和第二内部导电体处于同一平面,且对应同一个圆心O。

[0040] 静电离子阱质量分析器可以检测待检测物中是否包括需要检测的目标物质。在待检测物的离子在进入接口装置前,可以具有适合的动能,以在进入接口装置中,可以在第一离子运动空间进行圆周运动,通过向接口装置施加电压脉冲(如向第一外部导电体或第一内部导电体施加对应的电压脉冲),若待检测物中包括目标物质,目标物质对应的离子可以被推向质量分析器,其中,离子可以通过第一内部导电体及第二外部导电体中的通道,进入质量分析器,并希望目标物质对应的离子可以在第二离子运动轨道进行圆周运动,从而根据运动频率进行对待检测物进行目标物质检测。

[0041] 本申请实施例提供的技术方案可以应用于静电离子阱质量分析器中。

[0042] 本申请实施例提供的技术方案可以由数据处理设备来执行,包括终端设备和服务器等。

[0043] 参见图2,该图示出了本申请实施例提供的一种物质分析方法流程图,如图2所示,所述方法包括:

[0044] S201:在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内

部导体加载对应的电压脉冲。

[0045] 本申请实施例提供的方法可以用于对待检测物检测其中是否具有目标物质。目标物质可以是需要进行检测的一种物质,待检测物可以是任意物质,如待检测物为混合物,也可以为一种物质。

[0046] 本申请实施例不限定获取待检测物的离子的方式,可以选择适合方式来获取。

[0047] 在本申请实施例中,离子可以通过离子源的加速,进入静电离子阱质量分析器中的接口装置,为使离子在接口装置内做圆周运动,需要满足如下初始条件,具体包括:

[0048] 接口装置也称为静电分析器,其结构类似于圆柱形电容器,包括第一内部导体和第一外部导体。参见图3,该图示出了本申请实施例提供的一种静电离子阱质量分析器的切面示意图,针对接口装置,其中包括的第一外部导体的半径为 R_1 (单位m),第一内部导体的半径为 R_2 (单位m);第一外部导体对应的第一电压是 U_1 (单位V),第一内部导体对应的第二电压是 U_2 (单位V)。通过向第一外部导体和第一内部导体施加对应的电压,可以在第一离子运动空间构成电场,以使离子在该空间内运动。

[0049] 由于这两个导体之间无电荷,所以可利用拉普拉斯方程 $\nabla^2 u = 0$ 计算两个导体间的电势。

[0050] 其中,在柱坐标内有: $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) = 0$; r 可以是指在第一离子运动空间内各位置对应的位矢,即第一外部导体或第一内部导体所对应圆心 O 指向各位置的矢量。

[0051] 再通过两次积分,得到 $u(r) = A \ln r + B$;

[0052] 并根据边界条件确定 A 和 B 的值。

[0053] 当 $r = R_1$ 时, $u = U_1$, $U_1 = A \ln R_1 + B$; 当 $r = R_2$ 时, $u = U_2$, $U_2 = A \ln R_2 + B$ 。

[0054] 所以, $A = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)}$, $B = \frac{U_2 \ln R_1 - U_1 \ln R_2}{\ln(R_1/R_2)}$ 。

[0055] 因此有 $u(r) = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \ln r + \frac{U_2 \ln R_1 - U_1 \ln R_2}{\ln(R_1/R_2)}$ 。

[0056] 离子所受的电场力的大小为: $F = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$ 。

[0057] q 是离子所带的电荷量,电场力的方向总是指向圆心 O ,离子所受的力只与 r (做匀速圆周运动对应的半径)有关。

[0058] 如图3所示,待检测物的离子从 P 点进入接口装置,令其入射至接口装置对应的半径为 r_0 ,初始速度为 v_0 ,初始速度方向与所受电场力垂直。其中, r_0 为离子进入接口装置的初始位置(单位m), $r_0 = R_2 + (R_1 - R_2) / 2$,即待检测物的离子从接口装置入口的中心处入射。离子的初始动能为:

[0059] $E_0 = \frac{1}{2} m v_0^2$;

[0060] 若待检测物的离子进入接口(静电分析器)装置后,受到电场力 $F = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$;

[0061] 因待检测物的离子的初始速度方向与电场力方向垂直,由此做圆周运动,则有:

[0062] $F = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r} = \frac{m v_0^2}{r}$;

[0063] 所以,当 $E_0 = \frac{U_1 - U_2}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} q$ 时,待检测物的离子在接口装置中做圆周运动。如果换成以

前级离子加速器的加速电压 U_{acc} ,可表示为: $U_{acc} = \frac{U_1 - U_2}{2 \ln(R_1/R_2)}$ 。

[0064] 举例来说,设: $U_1 = 100V, U_2 = 100V, R_1/R_2 = 4$,则当待检测物的离子的初始动能等于 $\frac{(U_1 - U_2)q}{2 \ln(R_1/R_2)} = \frac{100}{2 \ln 4} = 36eV$ 时,待检测物的离子的运动为圆周运动。在离子光学模拟软件中设定 $U_1 = 100V, U_2 = 100V, R_1/R_2 = 4$ 。将待检测物的离子的初始动能设定为 $36eV$ 时,离子运动轨迹为圆形,若增加离子的初始动能如设置为 $37eV$ 时,离子的轨迹相对于的上述情况下的圆形轨迹要发生偏离。若减小离子的初始动能如设置为 $35eV$ 时,同样的,离子的轨迹相对于的上述情况下的圆形轨迹要发生偏离。

[0065] 如此,当待检测物的离子从离子源离开时,该离子对应的初始动能应当满足上述

条件,即, $E_0 = \frac{U_1 - U_2}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} q$, 以使离子进入接口装置后,在第一外部导电体加载第一电压 U_1 以

及第一内部导电体加载有第二电压 U_2 ,可以使离子在接口装置内做圆周运动。

[0066] 另外,在此过程中,可以在第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲,以用于对待检测物的离子施加一个额外的力,将其推入至质量分析器中,以希望离子在质量分析器中做圆周运动。

[0067] 在本申请实施例中,可以向接口装置的第一内部导电体施加对应的电压脉冲,也可以向第一外部导电体施加对应的电压脉冲,以使离子进入质量分析器。

[0068] 若待检测物中包括目标物质,在一种可能的实现方式中,为使待检测物质中目标物质对应的离子可以进入质量分析器中,所述脉冲电压满足如下条件:

[0069] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压和所述第二电压确定的第三条件。

[0070] 下面对该第三条件的确定进行详细介绍。

[0071] 以在接口装置的第一外部导电体施加电压脉冲 ΔU 为例进行说明,通过施加 ΔU ,使得在接口装置中做圆周运动的离子的轨迹发生变化,以进入质量分析器即傅里叶变换静电场离子阱。如图3所示,假设离子运动至P点时施加了电压脉冲,第一外部导电体的电压变为 U_1' ($U_1' > U_1$),离子将沿图3中的虚线运动至第一内部导电体上的Q点。在第一外部导电体电压变为 U_1' 的一瞬间,离子的动能为 E_p ,也就是前述的 E_0 。当离子运动到Q点时,离子的动能为 $E_q = E_p + \Delta U_q$ 。

[0072] 此时,离子在Q点的速度为: $v_Q = \sqrt{\frac{2(E_p + \Delta U_q)}{m}}$, m为离子质量。

[0073] 又根据角动量守恒定律:

[0074] $m r_0 v_0 \sin \theta_0 = m R_2 v_Q \sin \theta_Q$;

[0075] 其中, θ_0 为离子在P点时的速度与离子受到的电场力间的夹角, θ_Q 为离子在Q点时的速度与离子受到的电场力间的夹角。

[0076] 如此,可得, $\sin\theta_Q = \frac{r_0 v_0}{R_2 v_Q} \sin\theta_0$ 。

[0077] 又因为离子在P点时的速度方向与所受电场力的方向垂直,所以 $\sin\theta_0 = 1$ 。因此,

$$[0078] \quad \sin\theta_Q = \frac{r_0 v_0}{R_2 v_Q} = \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{2Ep}{2(Ep + \Delta Uq)}}。$$

[0079] 所以,根据 $r_0, U_1', R_1, R_2, q, v_0$, 就可以算出 θ_Q 。只有当 ΔU 达到一定值时,目标物质对应的离子才有可能运动到半径为 R_2 的位置,如果 ΔU 的取值不够大,那么目标物质对应的离子不会运动到半径为 R_2 的位置。所以,根据 $\sin\theta_Q$ 需要小于 1, 来确定 ΔU 的取值范围,确保目标物质对应的离子能够运动到半径为 R_2 的位置。

[0080] 从而,得到 ΔU 的取值范围,记为第三条件:

$$[0081] \quad \Delta U > \frac{\left(\frac{r_0^2}{R_2^2} - 1\right) \cdot (U_2 - U_1)}{2 \cdot \ln \frac{r_0}{R_2}} + U_2 - U_1。$$

[0082] 通过令电压脉冲满足上述第三条件,以提高目标物质对应的离子运动到半径为 R_2 的位置的可能性,进而提高了目标物质对应的离子进入质量分析器的可能性。

[0083] 为了提高目标物质对应的离子进入质量分子器内做圆周运动的可能性,在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲满足如下条件:

[0084] 根据第一外部导体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导体对应的第二半径 R_2 、所述第一电压 U_1 、所述第二电压 U_2 、所述第二外部导体对应的第三半径 R_3 和所述目标物质的电荷量 q 确定的第一条件。

[0085] 和/或,

[0086] 根据第一外部导体对应的第一半径 R_1 、所述第一内部导体对应的第二半径 R_2 、所述第一电压 U_1 、所述第二电压 U_2 、第二内部导体对应的第四半径 R_4 和所述目标物质的电荷量 q 确定的第二条件。

[0087] 下面对该第一条件和第二条件的确定进行详细介绍。

[0088] 参见图4,该图示出了本申请实施例提供的另一种静电离子阱质量分析器的切面示意图,如图4所示,为了尽量保证离子进入质量分析器时不撞击至第二外部导体,应当令离子在Q点时的速度与离子受到的电场力间的夹角满足下述条件:

$$[0089] \quad \sin\theta_Q < \sin\theta_{Q\max}, \sin\theta_{Q\max} = \frac{R_3}{R_2}。$$

$$[0090] \quad \text{即, } \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{2E_0}{2(E_0 + \Delta Uq)}} < \frac{R_3}{R_2},$$

[0091] 如此,得到电压脉冲的第一条件为:

$$[0092] \quad \Delta U > \frac{2E_0 r_0^2}{R_3^2 q} - \frac{2E_0}{q}。$$

[0093] 另,为了尽量保证目标物质对应的离子进入质量分析器时不撞击至第二内部导体,应当令目标物质对应的离子在Q点时的速度与该离子受到的电场力间的夹角满足下述第二条件:

$$[0094] \quad \sin\theta_Q > \sin\theta_{Q\min}, \sin\theta_{Q\min} = \frac{R_4}{R_2}.$$

$$[0095] \quad \text{即, } \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{2E_0}{2(E_0 + \Delta Uq)}} > \frac{R_4}{R_2},$$

[0096] 如此,得到电压脉冲的第二条件为:

$$[0097] \quad \Delta U < \frac{2E_0 r_0^2}{R_4^2 q} - \frac{2E_0}{q}.$$

[0098] 若电压脉冲满足上述第一条件和第二条件中的任意一个或多个,均可以提高目标物质对应的离子进入质量分析器做圆周运动的可能性。

[0099] 针对静电离子阱质量分析器,对其中的质量分析器设置了固定动能,即在质量分析器中做圆周运动的离子应具备有特定的动能,以通过质量分析器对该离子进行质量检测。其中,针对为质量分析器设置的固定动能为 $E_{\text{ESIT_in}} = \frac{k \cdot q}{4} (R_m^2 - r'^2)$ 。

[0100] 也就是说,目标物质的离子进入质量分析器的第一个最佳入射条件包括:离子切向初始动能为 $E_{\text{ESIT_in}} = \frac{k \cdot q}{4} (R_m^2 - r'^2)$ 。

[0101] 其中,k为质量分析器内静电场的场曲率,即为一个参数,k的数值由第二外部导电体和第二内部导电体对应的第三电压和第四电压、以及对应的半径决定的。 R_m 可以是质量分析器对应的离子阱特征半径,单位m,其为质量分析器的一个参数,在具体实现中, R_m 的取值可以是: $R_m = 0.032388$, r' 可以是离子在质量分析器中做匀速圆周运动对应的半径。

[0102] 由此,在一种可能的实现方式中,电压脉冲的确定方式包括:

[0103] 根据第一外部导电体对应的第一半径 R_1 、第一内部导电体对应的第二半径 R_2 、第一电压 U_1 、第二电压 U_2 和质量分析器对应的离子阱特征半径 R_m ,确定电压脉冲。

[0104] 其中,为保证目标物质对应的离子进入质量分析器时的动能能够达到上述为质量分析器设置的固定动能,可以通过电压脉冲 ΔU 为离子补充动能后使得离子进入质量分析器时的动能达到 $E_{\text{ESIT_in}}$ 。

[0105] 即,根据能量守恒,基于接口装置的两个导电体电势差 $U_1 - U_2$ 和电压脉冲 ΔU 须满足如下条件:

$$[0106] \quad \frac{\ln \frac{r_0}{R_2}}{\ln \frac{R_1}{R_2}} \Delta U + (1 + 2 \ln \frac{r_0}{R_2}) \cdot \frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) = \frac{k}{4} (R_m^2 - r'^2);$$

$$[0107] \quad \text{得到对应的电压脉冲 } \Delta U = \frac{\frac{k}{4} (R_m^2 - r'^2) - (1 + 2 \ln \frac{r_0}{R_2}) \cdot \frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2)}{(\ln \frac{r_0}{R_2}) / (\ln \frac{R_1}{R_2})}.$$

[0108] 并通过该电压脉冲 ΔU 对接口装置进行施加。

[0109] S202:当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体。

[0110] 可以理解,目标物质对应的离子进入接口装置的最佳入射条件包括:离子进入接口装置的初始动能能够保证它能够在接口装置内做圆周运动。

[0111] 另外,通过质量分析器对离子进行质量分析还具有其它两个最佳入射条件,分别

为：

[0112] 第二个最佳入射条件为：离子的径向初速度为零，即离子入射至第二外部导电体的入射速度方向与位矢垂直；

[0113] 第三个最佳入射条件为：离子的径向加速度大小为零，以使离子在质量分析器内可以做圆周运动。

[0114] 为了能够使目标物质对应的离子从接口装置进入质量分析器，须在接口装置中的第一外部导体或第一内部导体施加电压脉冲。在接口装置内做圆周运动的离子在接口装置的导体施加电压脉冲后，其运动轨迹发生变化，它的位矢大小在运动过程中会随着时间发生变化。接口装置的电势差 U_1-U_2 和接口装置的电压脉冲 ΔU ，将决定离子进入质量分析器的初始入射状态。为了满足离子在质量分析器内被分析的第二个最佳入射条件和第三个最佳入射条件，可以在接口装置施加电压脉冲与在质量分析器中的导体施加电压如负高压时产生一个延迟时间，记为预设时间 t_{total} 。

[0115] 其中，预设时间 t_{total} 包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导体的第一时间 t_1 ，以及从所述第一内部导体运动到达目标位置的第二时间 t_2 。且预设时间 t_{total} 是根据目标物质的质量数 m 和电荷量 q 确定的。

[0116] 其中，离子在目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直，离子在目标位置时对应的位矢为第二外部导体或第二内部导体所对应圆心 O 指向目标位置的矢量。

[0117] 下面对该第一时间 t_1 的确定方式进行介绍。

[0118] 在一种可能的实现方式中，第一时间 t_1 的确定方式包括：

[0119] S301：根据所述电压脉冲、离子入射至所述接口装置的入射位置、所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径、目标物质的质量数和电荷量，确定离子在不同位矢下受到的径向加速度。

[0120] 可以理解，目标物质对应的离子进入接口装置的初始动能(E_0)为：

$$[0121] \quad E_0 = \frac{U_1 - U_2}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} q;$$

[0122] 目标物质对应的离子离开接口装置的最终动能，即离子进入质量分析器的初始动能(E_{ESA_out})：

$$[0123] \quad E_{ESA_out} = \frac{\ln \frac{r_0}{R_2}}{\ln \frac{R_1}{R_2}} \Delta U q + (1 + 2 \ln \frac{r_0}{R_2}) \cdot \frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q;$$

[0124] 目标物质对应的离子离开接口装置的角度、即目标物质对应的离子进入质量分析器的初始角度 θ_Q 满足：

$$[0125] \quad \sin \theta_Q = \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{2E_0}{E_{ESA_out}}};$$

[0126] 目标物质对应的离子进入质量分析器的初始动能(E_{ESIT_in})：应尽量保证目标物质对应的离子进入质量分析器的初始动能使其能够在质量分析器内做圆周运动，即 E_{ESIT_in} 需满足以下等式：

$$[0127] \quad E_{\text{ESIT_in}} = \frac{k \cdot q}{4} (R_m^2 - r^2);$$

[0128] 参见图5,该图示出了本申请实施例提供的另一种静电离子阱质量分析器的切面示意图,如图5所示,在接口装置施加电压脉冲之前,离子的运动轨迹是圆。离子所受的电场力大小恰好等于离子做圆周运动所需向心力, r 为离子在接口装置中的位矢, r 的大小为离子在接口装置中所处位置与对应圆心间的距离:

$$[0129] \quad F = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r} - \frac{mv_0^2}{r};$$

[0130] 在接口装置施加电压脉冲的一瞬间,目标物质对应的离子所受的电场力增加了 $\frac{\Delta U}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$,此时目标物质对应的离子所受的电场力为: $F = \frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r} + \frac{\Delta U}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$ 。所以,

目标物质对应的离子所受的电场力大于离子做圆周运动所需的向心力,离子所受的电场力除了提供离子做圆周运动的向心力以外,还为离子提供了一个径向力,该径向力的大小为 $\frac{\Delta U}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$,方向指向接口装置对应的圆心。在这个力的作用下,目标物质对应的离子在做

圆周运动的同时还沿着径向做加速运动。目标物质对应的离子在径向的加速度大小为:

$\frac{1}{m} \frac{\Delta U}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$ 。如图5所示,在接口装置施加电压脉冲后,离子的运动半径减小。

[0131] 在接口装置施加电压脉冲后,当目标物质对应的离子的运动位矢大小等于 r 时,所需的向心力为 $F_r = \frac{mv_r^2}{r}$ 。其中,所述的运动位矢大小即为离子所处位置与接口装置所对应圆心的距离。

[0132] 又根据角动量守恒定律 $v_0 r_0 = v_r \cdot r \cdot \sin \theta_r = v_{r\perp} r$,其中 v_r 是目标物质对应的离子运动到位矢大小为 r 时的速度大小, θ_r 是 v_r 与位矢 r 的夹角, $v_{r\perp}$ 是 v_r 与位矢 r 垂直方向的分量。所以, $F_r = \frac{mv_0^2 r_0^2}{r^3}$,而此时目标物质对应的离子所受的电场力为: $F_r = \frac{U_1 + \Delta U - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r}$ 。所

以,目标物质对应的离子在径向的加速度为: $a_r = \frac{1}{m} \frac{U_1 + \Delta U - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r} - \frac{mv_0^2 r_0^2}{r^3}$,又因

$$\frac{U_1 - U_2}{\ln(R_1/R_2)} \frac{q}{r} = \frac{mv_0^2}{r}, \text{ 所以, } a_r = \frac{1}{m} \frac{q}{\ln(R_1/R_2)} \left[\Delta U \cdot \frac{1}{r} - (U_1 - U_2) \frac{r_0^2 - r^2}{r^3} \right]。$$

[0133] 根据加速度的表达式,目标物质对应的离子径向的加速运动是一个变加速运动,其加速度的大小与位矢大小 r 有关。

[0134] S302:根据所述第一半径、离子入射至所述接口装置的入射位置、所述第二半径和所述径向加速度,确定所述第一时间。

[0135] 在本申请实施例中,将目标物质对应的离子从位矢大小为 r_0 运动到位矢大小为 r 的时间分为 n 等分(n 足够大),等分后的共有 $n+1$ 个时间点,分别是 $t_0, t_1, t_2, \dots, t_{n-1}, t_n$,这 $n+1$ 个时间点对应的位矢大小分别为 $r_0 (r_0), r_1, r_2, \dots, r_{2n-1}, r_n (R_2)$,可以将离子从位矢大小为 r_{i-1} 处到到矢大小为 r_i 处的运动近似为匀加速直线运动, i 为大于0且小于等于1的正整数。

[0136] 如此,可以通过微积分的方式确定离子从位矢大小为 r_{i-1} ($i=1,2,\dots,n$) 处运动到位矢大小为 r_i 的位置的时间分别为:

$$[0137] \quad r_0 - r_1 = 0 + 1/2 * a_{r0} * \Delta t^2;$$

$$[0138] \quad r_1 - r_2 = a_{r0} * \Delta t + 1/2 * a_{r1} * \Delta t^2;$$

$$[0139] \quad r_2 - r_3 = (a_{r0} * \Delta t + a_{r1} * \Delta t) + 1/2 * a_{r2} * \Delta t^2;$$

[0140] ...;

$$[0141] \quad r_{n-2} - r_{n-1} = (a_{r0} * \Delta t + a_{r1} * \Delta t + \dots + a_{rn-3} * \Delta t) * \Delta t + 1/2 * a_{rn-2} * \Delta t^2;$$

$$[0142] \quad r_{n-1} - R_2 = (a_{r0} * \Delta t + a_{r1} * \Delta t + \dots + a_{rn-2} * \Delta t) * \Delta t + 1/2 * a_{rn-1} * \Delta t^2.$$

[0143] 其中, a_{ri} 可以是指离子在位矢 r_i 处对应的加速度;

[0144] $(a_{r0} * \Delta t + a_{r1} * \Delta t + \dots + a_{ri} * \Delta t)$ 可以是指离子在位矢 r_{i+1} 处对应的速度。

[0145] 将上述 n 个式子相加,得到:

$$[0146] \quad r_0 - R_2 = [(n-1) * a_{r0} + (n-2) * a_{r1} + \dots + 2a_{rn-3} + 1 * a_{rn-2}] * \Delta t^2 + 1/2 (a_{r0} + a_{r1} + \dots + a_{rn-2} + a_{rn-1}) * \Delta t^2;$$

$$[0147] \quad \text{每个时间间隔 } \Delta t \text{ 为: } \Delta t = \sqrt{\frac{r_0 - R_2}{x}};$$

$$[0148] \quad x = [(n-1) * a_{r0} + (n-2) * a_{r1} + \dots + 2a_{rn-3} + 1 * a_{rn-2}] + 1/2 (a_{r0} + a_{r1} + \dots + a_{rn-2} + a_{rn-1});$$

$$[0149] \quad \text{因此,第一时间 } t_1 \text{ 为: } t_1 = n \sqrt{\frac{r_0 - R_2}{y}};$$

$$[0150] \quad y = [(n-1) * a_{r0} + (n-2) * a_{r1} + \dots + 2a_{rn-3} + 1 * a_{rn-2}] + 1/2 (a_{r0} + a_{r1} + \dots + a_{rn-2} + a_{rn-1});$$

[0151] 再根据 $a_{ri} = \frac{1}{m} \frac{q}{\ln(R_1/R_2)} [\Delta U \cdot \frac{1}{ri} - (U_1 - U_2) \frac{r_0^2 - ri^2}{ri^3}]$, 便可以获得不同质量

数 m 的离子的 t_1 值。

[0152] 在具体实现中,可以通过计算设备根据上述关于第一时间 t_1 的公式和加速度公式,确定针对质量数 m 的离子的第一时间 t_1 。

[0153] 将 n 取足够大,就能够近似的得到离子从位矢为 r_0 运动到位矢为 R_2 所需的第一时间 t_1 。

[0154] 在一种可能的实现方式中,上述第二时间的确定方式可以包括:

[0155] S401:根据所述电压脉冲、所述第一外部导体对应的第一半径、所述第一内部导体对应的第二半径和所述第一电压、所述第二电压和所述目标物质的电荷量,确定离子运动至所述第二外部导体的入射角度。

[0156] 可以根据电压脉冲、第一外部导体对应的第一半径、第一内部导体对应的第二半径、第一电压、第二电压和所述目标物质的电荷量,并根据公式

$$\sin \theta_Q = \frac{r_0}{R_2} \sqrt{\frac{\frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q}{\frac{\ln \frac{r_0}{R_2} \Delta U q + (1 + 2 \ln \frac{r_0}{R_2}) \cdot \frac{1}{2 \ln \frac{R_1}{R_2}} (U_1 - U_2) q}}, \text{ 确定离子运动至第二外部导体的入射}$$

角度 θ_Q 。

[0157] S402:根据所述第二外部导体对应的第三半径、所述入射角度、所述质量分析器对应的离子阱特征半径、所述目标物质的质量数和电荷量,确定所述第二时间。

[0158] 参见图5,该图示出了本申请实施例提供的再一种静电离子阱质量分析器的切面示意图,如图5所示,由于目标物质对应的离子在Q点进入质量分析器时的出射速度方向与位矢R3方向的夹角小于90°,即目标物质对应的离子并未到达最佳入射角度。因此,在目标物质对应的离子刚进入质量分析器时不施加第三电压和第四电压即负高压,以束缚进入质量分析器的离子。

[0159] 当目标物质对应的离子从Q点进入质量分析器后,以速度v做匀速直线运动,当离子运动到目标位置即图5中的B点时,离子的速度v的方向与离子此时的位矢方向垂直,离子的最佳入射角度得到满足。其中,该位矢可以是指质量分析器对应的圆心(即第二外部导体或第二内部导体对应的圆心)指向离子所在目标位置的矢量。

[0160] 此时,通过对质量分析器施加电压,即将第三电压加载至第二外部导体以及将第四电压加载至所述第二内部导体,将束缚住该目标物质对应的离子,以使目标物质对应的离子在第二离子运动空间做匀速圆周运动。

[0161] 因此,目标物质对应的离子从进入质量分析器的一瞬间到向质量分析器施加电压的一瞬间,目标物质对应的离子做匀速直线运动的第二时间为 $t_2 = \frac{QB}{v}$ 。QB=R₃sinθ_Q,由

此,做匀速直线运动的速度 $v = \sqrt{2E_{ESIT_in} \frac{q}{m}}$,由此,第二时间 $t_2 = \frac{R_3 \sin \theta_Q}{\sqrt{2E_{ESIT_in} \frac{q}{m}}}$ 。

[0162] 在具体实现中,可以依据下述参数进行预设时间的确定,从而执行上述 S201-S203的方法。

[0163] 针对于接口装置的系统参数:接口装置第一外部导电体的电压(单位V):U₁;接口装置第一内部导电体的电压(单位V):U₂;接口装置第一外部导电体的半径(单位m):R₁=0.03;接口内电极半径(单位m):R₂=0.02;离子进入接口装置的初始位置(单位m):r₀=R₂+(R₁-R₂)/2(离子从接口装置入口的中心入射);接口装置电势差(单位V):ΔU_{内外}=U₁-U₂;接口装置的电压脉冲(单位V):ΔU;单位电荷电量:q=1.602*10⁻¹⁹;离子质量数:m=(280*10⁻³)/(6.022*10²³)。

[0164] 针对于质量分析器的系统参数:质量分析器第二外部导体电压(单位V):U₃=0;质量分析器第二内部导体电压(单位V):U₄=-1000;质量分析器第二外部导体半径(单位m):R₃=0.02;质量分析器第二内部导体半径(单位m):R₄=0.0075;离子进入质量分析器的初始位置(单位m):r₁=R₃sinθ_Q(θ是离子从接口出射的角度);离子阱特征半径(单位m):R_m=0.032388。

[0165] 正如以上分析,离子从接口装置出射,进入质量分析器的一瞬间,其速度方向并不与离子所处位置的位矢垂直,这也就不满足离子进入质量分析器的最佳入射角度(即离子的速度方向与位矢垂直),因此在向接口装置施加电压脉冲之后,需要延迟一段时间即预设时间t_{total},向质量分析施加负高压。

[0166] 预设时间t_{total}包括第一时间t₁和第二时间t₂,在接口装置施加电压脉冲后,目标物质对应的离子首先在接口装置内做轨迹为类似椭圆的运动,其中,施加的电压脉冲可以足够大,以保证离子的最小位矢小于或等于R₂。目标物质对应的离子从接口装置施加电压

脉冲的时刻到离子运动到位矢大小等于 R_2 的时刻所用的时间为第一时间 t_1 。

[0167] 目标物质对应的离子从接口装置出射,进入质量分析器,开始以速度大小为

$v = \sqrt{2E_{ESIT_in} \frac{q}{m}}$ 做匀速直线运动,当目标物质对应的离子运动到速度方向与在目标位

置的位矢方向垂直的时刻,向质量分析器的第二外部导电体和第二内部导电体施加电压如负高压。

[0168] 从目标物质对应的离子从接口装置出射,进入质量分析器的时刻到向质量分析器施加电压的时刻的时间为第二时间为 t_2 。

[0169] 所以,从接口装置施加电压脉冲到质量分析器施加电压需要延迟时间 $t_{total} = t_1 + t_2$ 。

[0170] S203:根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有目标物质。

[0171] 本申请不限定上述S203的确定方式,可以根据相关技术中的方式,以根据离子在质量分析器中的运动频率,确定待检测物中是否含有目标物质。

[0172] 由上述技术方案可以看出,该方法应用于静电离子阱质量分析器,静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;质量分析器包括位于与接口装置处于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间。第一内部导电体与第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述方法包括:在待检测物的离子进入接口装置,且第一外部导电体加载有第一电压以及第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;当达到预设时间时,将第三电压加载至第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;其中,预设时间包括离子从接口装置的第一圆轨道运动到第一内部导电体的第一时间,以及从第一内部导电体运动到达目标位置的第二天;离子在目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的。根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述离子的质量。该方法中,通过预先根据目标物质确定一个预设时间,以使在待检测物包括目标物质的情况下,目标物质对应的离子可以从接口装置运动到目标位置,由于目标物质对应的离子在目标位置时对应的速度方向,其和该离子在目标位置时对应位矢方向垂直,即为该离子在第二离子运动空间做圆周运动提供了条件,此时在质量分析器加载第三电压和第四电压,提高了目标物质对应的离子在质量分析器中做圆周运动的机会,进而提高了质量分析器的分析灵敏度。

[0173] 本申请实施例提供了一种物质分析装置,参见图6,该图示出了本申请实施例提供的一种物质分析装置示意图,如图6所示,应用于静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,所述第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,所述第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间;所述第一内部导电体与所述第二外部导电体中包括离子通过的通道;所

述装置包括：

[0174] 第一加载单元601,用于在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲；

[0175] 第二加载单元602,用于当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体；

[0176] 其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导电体的第一时间,以及从所述第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间；离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的；

[0177] 确定单元603,用于根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有目标物质。

[0178] 在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲满足如下条件：

[0179] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二外部导电体对应的第三半径和所述目标物质的电荷量确定的第一条件；

[0180] 和/或,

[0181] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二内部导电体对应的第四半径和所述目标物质的电荷量确定的第二条件。

[0182] 在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲满足如下条件：

[0183] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压和所述第二电压确定的第三条件。

[0184] 在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲的确定方式如下：

[0185] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压和所述质量分析器对应的离子阱特征半径,确定所述电压脉冲。

[0186] 在一种可能的实现方式中,所述第一时间的确定方式包括：

[0187] 根据所述电压脉冲、离子入射至所述接口装置的入射位置、所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述目标物质的质量数和电荷量,确定离子在不同位矢下受到的径向加速度；

[0188] 根据所述第一半径、离子入射至所述接口装置的入射位置、所述第二半径和所述径向加速度,确定所述第一时间。

[0189] 在一种可能的实现方式中,所述第二时间的确定方式包括：

[0190] 根据所述电压脉冲、所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径和所述第一电压、所述第二电压和所述目标物质的电荷量,确定离子运动至所述第二外部导电体的入射角度；

[0191] 根据所述第二外部导电体对应的第三半径、所述入射角度、所述质量分析器对应的离子阱特征半径、所述目标物质的质量数和电荷量,确定所述第二时间。

[0192] 本申请实施例提供了一种静电离子阱质量分析器,所述静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,所述接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,所述第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;所述质量分析器包括与所述接口装置位于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,所述第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间;所述第一内部导电体与所述第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述静电离子阱质量分析器,用于:

[0193] 在待检测物的离子进入所述接口装置,且所述第一外部导电体加载有第一电压以及所述第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在所述第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;

[0194] 当达到预设时间时,将第三电压加载至所述第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;

[0195] 其中,所述预设时间包括离子从所述接口装置的第一圆轨道运动到所述第一内部导电体的第一时间,以及从所述第一内部导电体运动到达目标位置的第二时间;离子在所述目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,所述预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的;

[0196] 根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定所述待检测物中是否含有目标物质。

[0197] 在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲满足如下条件:

[0198] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二外部导电体对应的第三半径和所述目标物质的电荷量确定的第一条件;

[0199] 和/或,

[0200] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压、所述第二内部导电体对应的第四半径和所述目标物质的电荷量确定的第二条件。

[0201] 在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲满足如下条件:

[0202] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压和所述第二电压确定的第三条件。

[0203] 在一种可能的实现方式中,所述电压脉冲的确定方式如下:

[0204] 根据所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述第一电压、所述第二电压和所述质量分析器对应的离子阱特征半径,确定所述电压脉冲。

[0205] 在一种可能的实现方式中,所述第一时间的确定方式包括:

[0206] 根据所述电压脉冲、离子入射至所述接口装置的入射位置、所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径、所述目标物质的质量数和电荷量,确定离子在不同位矢下受到的径向加速度;

[0207] 根据所述第一半径、离子入射至所述接口装置的入射位置、所述第二半径和所述径向加速度,确定所述第一时间。

[0208] 在一种可能的实现方式中,所述第二时间的确定方式包括:

[0209] 根据所述电压脉冲、所述第一外部导电体对应的第一半径、所述第一内部导电体对应的第二半径和所述第一电压、所述第二电压和所述目标物质的电荷量,确定离子运动至所述第二外部导电体的入射角度;

[0210] 根据所述第二外部导电体对应的第三半径、所述入射角度、所述质量分析器对应的离子阱特征半径、所述目标物质的质量数和电荷量,确定所述第二时间。

[0211] 由上述技术方案可以看出,该方法应用于静电离子阱质量分析器,静电离子阱质量分析器包括接口装置和质量分析器,接口装置包括位于同一平面内的同心圆弧状的第一外部导电体和第一内部导电体,第一外部导电体和第一内部导电体形成第一离子运动空间;质量分析器包括位于与接口装置处于同一平面内的同心圆弧状的第二外部导电体和同心圆柱状的第二内部导电体,第二外部导电体和第二内部导电体形成第二离子运动空间。第一内部导电体与第二外部导电体中包括离子通过的通道;所述方法包括:在待检测物的离子进入接口装置,且第一外部导电体加载有第一电压以及第一内部导电体加载有第二电压的过程中,在第一外部导电体或第一内部导电体加载对应的电压脉冲;当达到预设时间时,将第三电压加载至第二外部导电体以及将第四电压加载至所述第二内部导电体;其中,预设时间包括离子从接口装置的第一圆轨道运动到第一内部导电体的第一时间,以及从第一内部导电体运动到达目标位置的所述第二时间;离子在目标位置时对应的速度方向和对应的位矢方向垂直,预设时间是根据目标物质的质量数和电荷量确定的。根据所述离子在所述质量分析器中的运动频率,确定待检测物中是否含有目标物质。该方法中,通过预先根据目标物质确定一个预设时间,以使在待检测物包括目标物质的情况下,目标物质对应的离子可以从接口装置运动到目标位置,由于目标物质对应的离子在目标位置时对应的速度方向,其和该离子在目标位置时对应位矢方向垂直,即为该离子在第二离子运动空间做圆周运动提供了条件,此时在质量分析器加载第三电压和第四电压,提高了目标物质对应的离子在质量分析器中做圆周运动的机会,进而提高了质量分析器的分析灵敏度。

[0212] 通过以上的实施方式的描述可知,本领域的技术人员可以清楚地了解到上述实施例方法中的全部或部分步骤可借助软件加必需的通用硬件平台的方式来实现。基于这样的理解,本申请的技术方案本质上或者说对现有技术做出贡献的部分可以以软件产品的形式体现出来,该计算机软件产品可以存储在存储介质中,如ROM/RAM、磁碟、光盘等,包括若干指令用以使得一台计算机设备(可以是个人计算机,服务器,或者诸如媒体网关等网络通信设备,等等)执行本申请各个实施例或者实施例的某些部分所述的方法。

[0213] 需要说明的是,本说明书中各个实施例采用递进的方式描述,每个实施例重点说明的都是与其他实施例的不同之处,各个实施例之间相同相似部分互相参见即可。对于实施例公开的装置而言,由于其与实施例公开的方法相对应,所以描述的比较简单,相关之处参见方法部分说明即可。

[0214] 还需要说明的是,在本文中,诸如第一和第二等之类的关系术语仅仅用来将一个实体或者操作与另一个实体或操作区分开来,而不一定要求或者暗示这些实体或操作之间存在任何这种实际的关系或者顺序。而且,术语“包括”、“包含”或者其任何其他变体意在涵盖非排他性的包含,从而使得包括一系列要素的过程、方法、物品或者设备不仅包括那些要素,而且还包括没有明确列出的其他要素,或者是还包括为这种过程、方法、物品或者设备

所固有的要素。在没有更多限制的情况下,由语句“包括一个……”限定的要素,并不排除在包括所述要素的过程、方法、物品或者设备中还存在另外的相同要素。

[0215] 对所公开的实施例的上述说明,使本领域专业技术人员能够实现或使用本申请。对这些实施例的多种修改对本领域的专业技术人员来说将是显而易见的,本文中所定义的一般原理可以在不脱离本申请的精神或范围的情况下,在其它实施例中实现。因此,本申请将不会被限制于本文所示的这些实施例,而是要符合与本文所公开的原理和新颖特点相一致的最宽的范围。

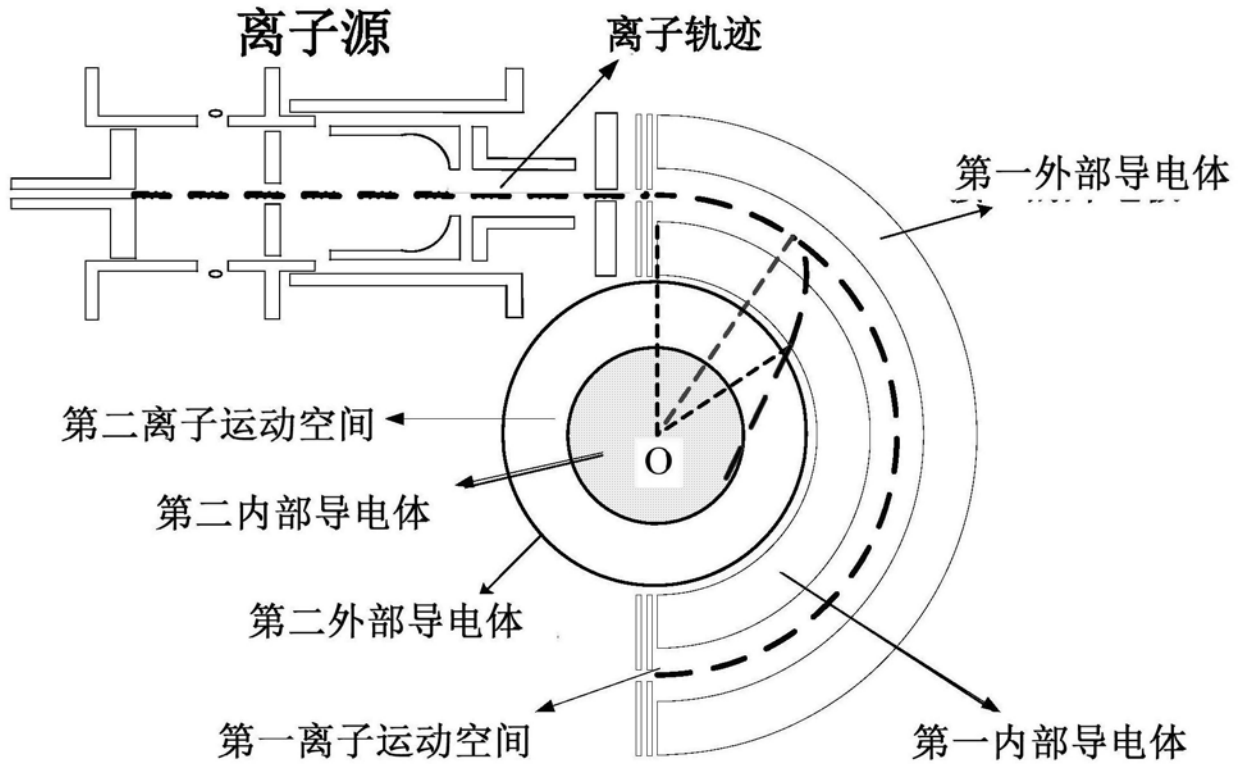


图1

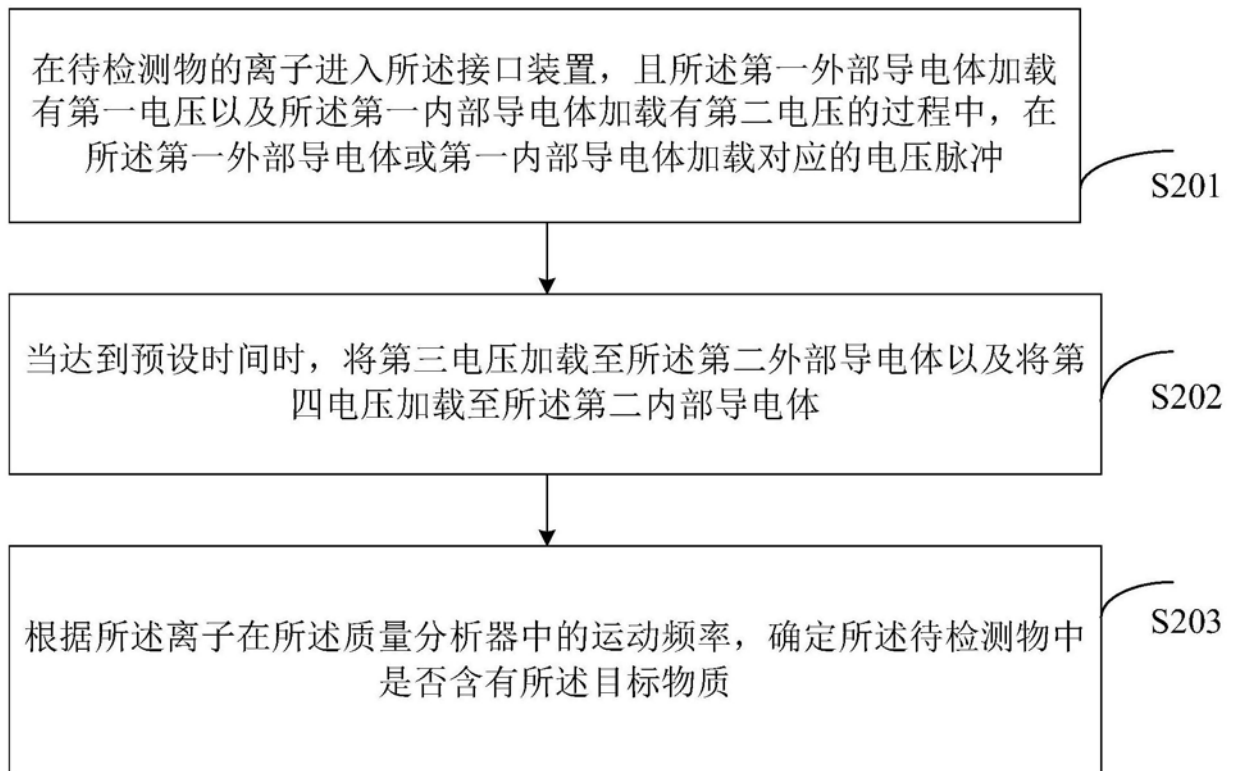


图2

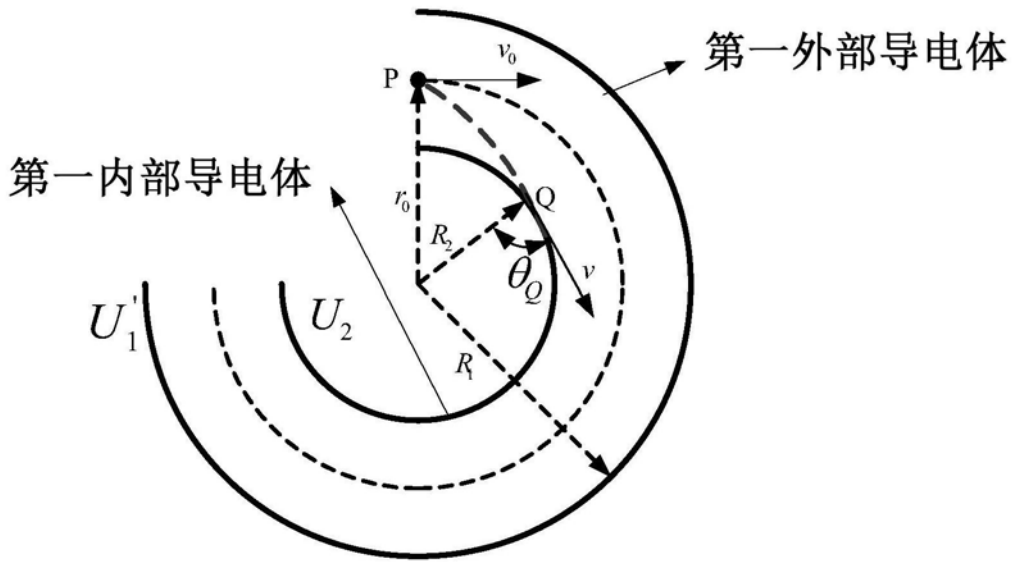


图3

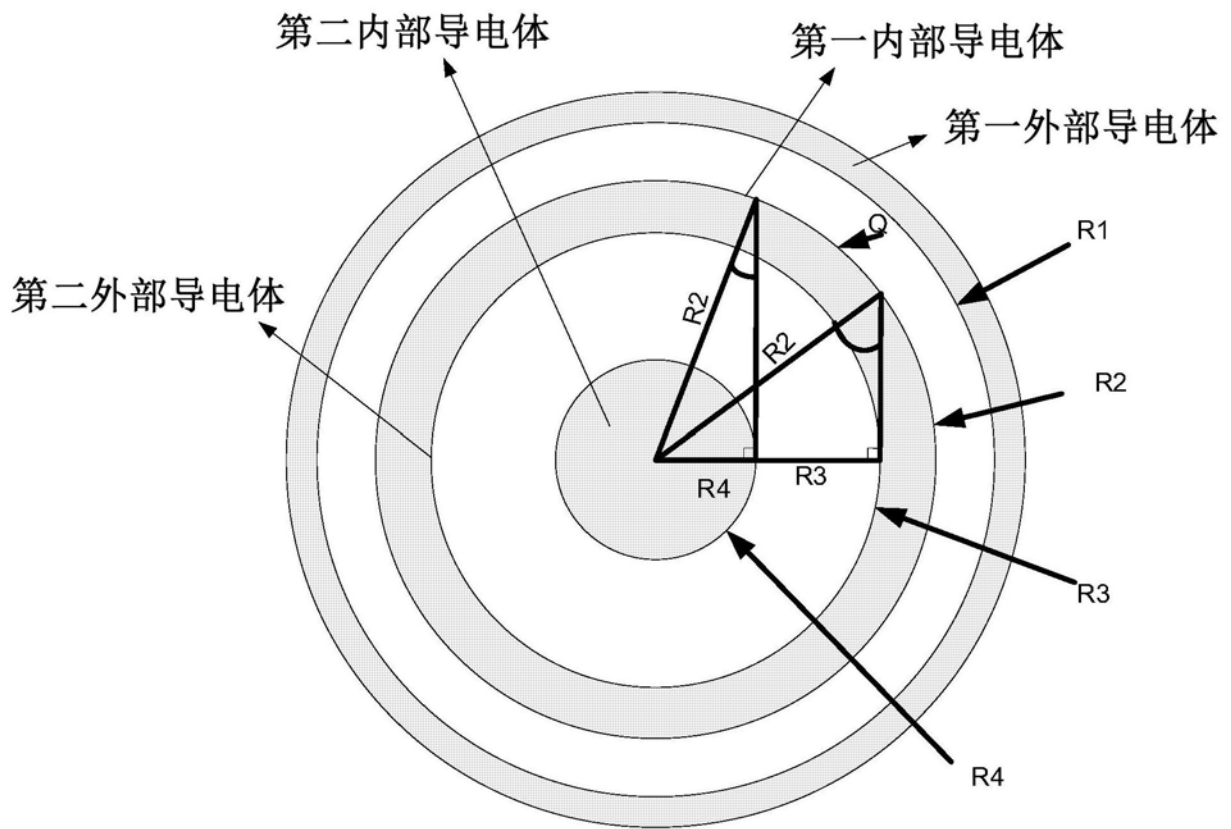


图4

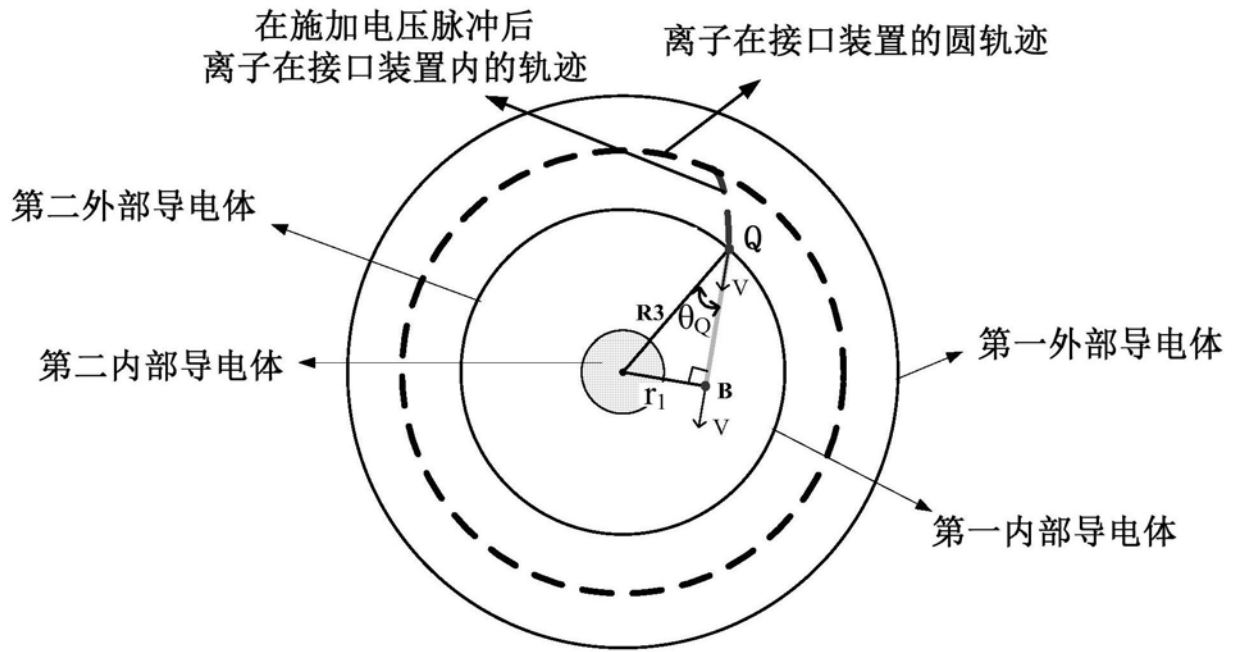


图5

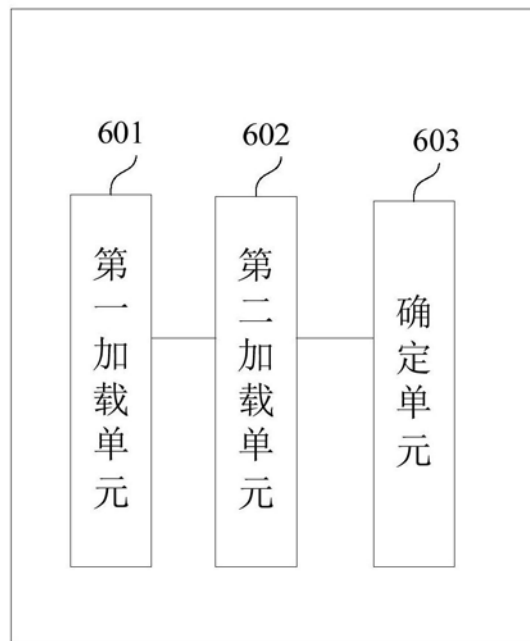


图6