(19)国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 116864367 A
(43)申请公布日 2023.10.10

(21)申请号 202310656854.4

(22)申请日 2012.12.31

(62)分案原申请数据
201280078246.X 2012.12.31

(71)申请人 九零八图案公司
地址 美国马萨诸塞州

(72)发明人 安德鲁·J·巴特费伊-萨博
克里斯多佛·D·布朗
迈克尔·乔宾 凯文·J·诺普
叶夫根尼·克雷洛夫
斯科特·米勒

(74)专利代理机构 北京安信方达知识产权代理有限公司 11262
专利代理师 张瑞 杨明钊

(51)Int.Cl.
H01J 49/00(2006.01)
H01J 49/24(2006.01)

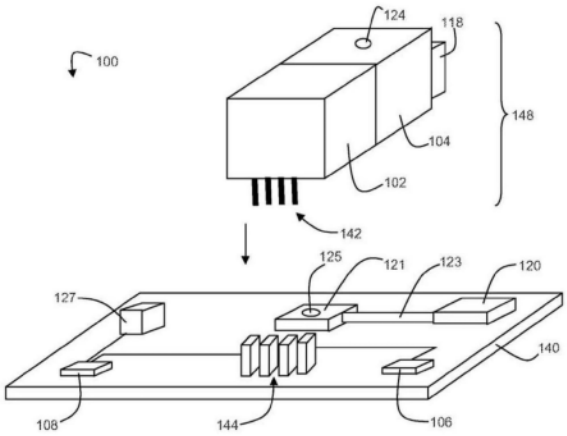
权利要求书1页 说明书50页 附图20页

(54)发明名称

质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法

(57)摘要

本申请公开了质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法。质谱仪包括离子源、离子阱、离子检测器和气压调节系统，其中，在运行质谱仪期间，气压调节系统经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间的气压，并且离子检测器经配置根据由离子源生成的离子的质荷比检测离子。



CN 116864367 A

1.一种质谱仪,其包括:

支撑基部,所述支撑基部包括第一多个电极、泵和安装构件;以及

可插模块,所述可插模块包括:

第二多个电极;

离子源;以及

离子阱;

其中,所述可插模块被配置为通过以下动作可释放地连接到所述支撑基部:

将所述第二多个电极与所述第一多个电极接合;以及

接合所述安装构件以形成从所述泵延伸穿过所述离子阱和所述离子源的内部区域的连续流体路径。

2.根据权利要求1所述的质谱仪,其中,所述泵被配置为使得在运行所述质谱仪期间,所述泵在所述离子阱中、在所述离子源中、以及在离子检测器中将气体粒子的压力维持在100mTorr到100Torr的范围内。

3.根据权利要求1所述的质谱仪,其中,所述泵被配置为使得在运行所述质谱仪期间,所述泵在所述离子阱中、在所述离子源中、以及在离子检测器中维持差异量小于10mTorr的气体粒子的压力。

4.根据权利要求1所述的质谱仪,其中,所述第二多个电极包括管脚,并且其中所述第一多个电极包括被配置为容纳所述管脚的管座。

5.根据权利要求1所述的质谱仪,其中,所述支撑基部包括第一附接机构,并且所述可插模块包括被配置为与所述第一附接机构接合的第二附接机构。

6.根据权利要求5所述的质谱仪,其中,所述第一附接机构和所述第二附接机构被配置为使得所述可插模块只能在一个方向上可释放地连接到所述支撑基部。

7.根据权利要求5所述的质谱仪,其中,所述第一附接机构和所述第二附接机构中的一个包括不对称延伸件,并且所述第一附接机构和所述第二附接机构中的另一个包括被配置为容纳所述延伸件的凹槽。

8.根据权利要求5所述的质谱仪,其中,所述第一附接机构和所述第二附接机构中的至少一个包括柔性密封件。

9.根据权利要求5所述的质谱仪,其中,所述第一附接机构和所述第二附接机构中的至少一个包括夹紧装置和凸轮中的至少一个。

10.根据权利要求1所述的质谱仪,还包括连接到所述流体路径的气体入口。

质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法

[0001] 本申请是申请日为2012年12月31日,申请号为202010069903.0,发明名称为“质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法”的申请的分案申请。

[0002] 申请日为2012年12月31日,申请号为202010069903.0,发明名称为“质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法”的申请是申请日为2012年12月31日,申请号为201711304468.X,发明名称为“质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法”的申请的分案申请。

[0003] 申请日为2012年12月31日,申请号为201711304468.X,发明名称为“质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法”的申请是申请日为2012年12月31日,申请号为201280078246.X,发明名称为“质谱仪和使用质谱仪测量关于样品的信息的方法”(原名称为“紧凑型质谱仪”)的申请的分案申请。

技术领域

[0004] 本公开涉及使用质谱测定法的物质鉴定。

背景技术

[0005] 质谱仪广泛用于化学物质的检测。在典型质谱仪中,分子或粒子被激发或电离,这些被激发物种往往分解形成更小质量的离子或与其他物种反应形成其他特征离子。离子形成图案可以被系统操作员解译以推断出化合物的身份。

发明内容

[0006] 总的来说,在第一方面,本公开表征包括离子源、离子阱、离子检测器和气压调节系统的质谱仪,其中,在运行质谱仪期间,气压调节系统经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间的气压,并且离子检测器经配置根据由离子源生成的离子的质荷比检测离子。

[0007] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0008] 在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源和离子阱中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。

[0009] 离子源可以包括辉光放电电离源。离子源可以包括电容性放电电离源。离子源可以包括介质势垒放电电离源。

[0010] 气压调节系统可以包括气泵,其经配置控制离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个的气压。质谱仪可以包括控制器,其经配置激活气泵以控制离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个的气压。气泵可以包括涡旋泵。

[0011] 在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少

两个中维持在500mTorr与10Torr之间的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持差异量小于10Torr的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中维持差异量小于10Torr的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持相同的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中维持相同的气压。

[0012] 质谱仪可以包括:气路,其中,离子源、离子阱和离子检测器连接到气路;以及气体入口,其连接到气路并经配置使得在运行期间,要被分析的气体粒子通过气体入口被引入气路,并且气路中要被分析的气体粒子压力在100mTorr与100Torr之间。气体入口可以经配置使得在运行期间,包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子的气体粒子混合物被吸入气体入口,并且气体粒子的混合物在引入气路之前未被过滤以去除大气气体粒子。

[0013] 质谱仪可以包括连接到气路的样品气体入口,以及连接到气路的缓冲气体入口,其中,样品气体入口和缓冲气体入口经配置使得在质谱仪的运行期间:要被分析的气体粒子通过样品气体入口被引入到气路中;缓冲气体粒子通过缓冲气体入口被引入到气路中;并且气路中要被分析的气体粒子和缓冲气体粒子的组合压力在100mTorr与100Torr之间。缓冲气体粒子可以包括氮气分子和/或惰性气体分子。

[0014] 离子源和离子阱可以被封闭在包括第一多个电极的外壳内,并且质谱仪还可以包括表征第二多个电极的支撑基部,第二多个电极经配置可释放地接合第一多个电极,使得外壳可从支撑基部重复连接和断开。质谱仪可以包括附接机构,其经配置当第一多个电极接合第二多个电极时将外壳固定到支撑基部。附接机构可以包括夹紧装置和凸轮中的至少一个。

[0015] 第一多个电极可以包括管脚,以及第二多个电极可以包括经配置容纳该管脚的管座。

[0016] 离子检测器可以被封闭在外壳内。气压调节系统可以包括泵,并且该泵可以被封闭在外壳内。

[0017] 支撑基部可以包括耦接到第二多个电触点的电压源,以及连接到电压源的控制器,其中,当外壳连接到支撑基部时,控制器还连接到离子源和离子阱。在运行期间,控制器可以经配置确定离子源、离子阱和离子检测器中的至少一个的气压,并且通过激活气压调节系统控制气压。

[0018] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0019] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0020] 在另一方面,本公开表征方法,该方法包括:在质谱仪的离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间的气压,并且根据由离子源生成的离子的质荷比检测离子。

[0021] 该方法的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0022] 该方法可以包括在离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。该方法可以包括在离子源和离子阱中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。该方法可以包括在离子源和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。该方法可以包括

在离子源、离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在500mTorr与10Torr之间的气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持差异量小于10Torr的气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中维持差异量小于10Torr的气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持相同的气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中维持相同的气压。

[0023] 该方法可以包括:通过气体入口将要被分析的气体粒子引入连接离子源、离子阱和离子检测器的气路中,使得气路中要被分析的气体粒子的压力在100mTorr与100Torr之间。该方法可以包括:通过气体入口将气体粒子的混合物引入连接离子源、离子阱和离子检测器的气路中,其中,气体粒子的混合物包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子,并且气体粒子的混合物在被引入气路之前未被过滤以去除大气气体粒子。

[0024] 该方法可以包括:通过样品气体入口将要被分析的气体粒子引入连接离子源、离子阱和离子检测器的气路中,并且通过缓冲气体入口将缓冲气体粒子引入气路中,其中,气路中要被分析的气体粒子和缓冲气体粒子的组合压力在100mTorr与100Torr之间。缓冲气体粒子可以包括氮气分子和/或惰性气体分子。

[0025] 在任何组合中,在适当时,该方法的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0026] 在另一方面,本公开表征质谱仪,该质谱仪包括:表征第一多个电极的支撑基部,以及表征第二多个电极的可插模块。其中,可插模块经配置通过使第二多个电连接器与第一多个电连接器接合来可释放地连接到支撑基部,并且,可插模块包括连接到气路的离子阱。

[0027] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0028] 可插模块可以包括连接到气路的离子阱。第二多个电极可以包括管脚,以及第一多个电极可以包括经配置容纳该管脚的管座。

[0029] 支撑基部包括第一附接机构,以及可插模块包括经配置与第一附接结构接合的第二附接机构。

[0030] 第一和第二附接机构可以经配置使得可插模块只能在一个方向可释放地连接到支撑基部。第一和第二附接机构中的一个可以包括不对称延伸构件,并且第一和第二附接机构中的另一个可以包括经配置容纳该延伸构件的凹槽。第一和第二附接机构中的至少一个可以包括柔性密封构件。第一和第二附接机构中的至少一个可以包括夹紧装置和凸轮中的至少一个。

[0031] 质谱仪可以包括连接到气路的气体入口。质谱仪可以包括附接到支撑基部的离子检测器。可插模块可以包括连接到气路的离子检测器。离子检测器可以被安置在支撑基部上,使得当可插模块连接到支撑基部时,离子检测器连接到气路。

[0032] 质谱仪可以包括附接到支撑基部的泵。可插模块可以包括连接到气路的泵。泵可以被安置在支撑基部上,使得当可插模块连接到支撑基部时,该泵连接到气路。泵可以包括涡旋泵。

[0033] 离子源可以包括辉光放电电离源和/或电容性放电电离源。

[0034] 质谱仪可以包括连接到气路的离子检测器,以及附接到支撑基部并连接到离子阱

的控制器。在运行质谱仪期间，控制器可以经配置使用检测器检测由离子源生成的离子，确定与被检测离子的身份相关的信息，并且使用输出界面显示该信息。

[0035] 质谱仪可以包括连接到气路并经配置将气体粒子的压力维持在从100mTorr到100Torr的范围的泵。质谱仪可以包括连接到离子阱和泵的控制器，其中，在运行质谱仪期间，控制器可以经配置确定气路中的气体粒子的压力，并激活该泵以将气体粒子的压力维持在从100mTorr到100Torr的范围。

[0036] 该泵可以经配置将气体粒子的压力维持在从100mTorr到100Torr的范围。

[0037] 质谱仪可以包括环绕支撑基部和可插模块的封闭罩，该封闭罩包括邻近可插模块安置的开口，以允许质谱仪的用户通过该开口从支撑基部连接和断开可插模块。质谱仪可以包括覆盖件，当部署该覆盖件时，其封住该封闭罩中的开口。覆盖件可以包括可收缩门。覆盖件可以包括可从封闭罩完全拆下的盖件。

[0038] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0039] 在任何组合中，在适当时，质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0040] 在另一方面，本公开表征质谱仪系统，该系统包括本文公开的质谱仪中的任一种，这些质谱仪表征第一可插模块，以及一个或多个附加可插模块，其中，每个附加可插模块包括离子阱和第三多个电极，并且每个附加可插模块经配置通过使第三多个电极与第一多个电极接合可释放地连接到支撑基部。

[0041] 系统的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0042] 附加可插模块中的至少一个可以包括与第一可插模块中的离子阱大致类似的离子阱。

[0043] 第一可插模块可以包括离子源，并且附加可插模块中的至少一个可以包括与第一可插模块的离子源不同的离子源。例如，第一可插模块的离子源可以包括辉光放电电离源，以及附加可插模块中的至少一个可以包括与辉光放电电离源不同的电离源(例如，电喷雾电离源，介质势垒放电电离源，和/或电容放电电离源)。

[0044] 附加可插模块中的至少一个可以包括与第一可插模块中的离子阱不同的离子阱。第一可插模块的离子阱的直径可以与附加可插模块中的至少一个的离子阱的直径不同。另选地或附加地，第一可插模块的离子阱的横截面形状可以与附加可插模块中的至少一个的离子阱的横截面形状不同。

[0045] 第一可插模块可以包括离子检测器，并且附加可插模块中的每个可以包括离子检测器，并且第一可插模块的离子检测器可以与附加可插模块中的至少一个的离子检测器不同。

[0046] 第一可插模块的至少一个表面可以包括第一涂层，并且附加可插模块中的至少一个的至少一个表面可以包括与第一涂层不同的第二涂层。

[0047] 在任何组合中，在适当时，该系统的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0048] 在另一方面，本公开表征质谱仪，该质谱仪包括支撑基部，安装到支撑基部的离子源，安装到支撑基部的离子阱，安装到支撑基部的离子检测器，以及安装到支撑基部并通过支撑基部电连接到离子源、离子阱和离子检测器的电力电源，其中，在运行质谱仪时，电力

电源经配置向离子源、离子阱和离子检测器提供电力。

[0049] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0050] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0051] 质谱仪可以包括安装到支撑基部并通过支撑基部电连接到电力电源的气压调节系统，其中，在运行质谱仪时，电力电源经配置向气压调节系统提供电力。质谱仪可以包括安装到支撑基部并通过支撑基部电连接到离子源、离子阱、离子检测器和气压调节系统的控制器。离子源、离子阱和离子检测器可以被连接到气路，并且在运行质谱仪期间，气压调节系统可以经配置将气路中的气压维持在从100mTorr到100Torr的范围内(例如，在从500mTorr到10Torr的范围内)。气压调节系统可以包括涡旋泵。

[0052] 支撑基部可以包括印刷电路板。

[0053] 质谱仪可以包括连接到气路的气体入口，其中，气体入口经配置使得在运行质谱仪期间，气体粒子的混合物通过气体入口被引入气路中，该混合物包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子，并且气体粒子的混合物在没有过滤大气气体粒子的情况下被引入气路中。气体入口可以包括电连接到控制器的阀，并且在运行质谱仪期间，控制器可以经配置在至少30秒钟的间隔时间通过气体入口将气体粒子的混合物引入气路中。

[0054] 在运行质谱仪期间，控制器可以经配置使用离子检测器检测由离子源生成的离子，并基于检测到的离子来调节离子源的占空比。控制器可以经配置通过调节离子源生成离子的时间间隔来调节离子源的占空比。控制器可以经配置通过调节施加到离子源电极的电位的持续时间和幅值中的至少一个来调节离子源的占空比。

[0055] 在运行质谱仪期间，控制器可以经配置确定与被检测离子的身份相关的信息，并且使用输出界面显示该信息。

[0056] 离子源可以包括辉光放电电离源和/或介质势垒放电电离源。

[0057] 在任何组合中，在适当时，质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0058] 在另一方面，本公开表征质谱仪，该质谱仪包括：连接到气路的离子源、离子阱和检测器；连接到气路并表征阀的气体入口；经配置控制气路中的气压的压力调节系统；以及连接到阀、离子源、离子阱和检测器的控制器，其中，在质谱仪的运行期间，压力调节系统经配置将气路中的气压维持在大于100mTorr，并且控制器经配置：(a)激活阀以将气体粒子的混合物引入气路，其中，混合物包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子，并且其中，气体粒子的混合物在没有过滤大气气体粒子的情况下被引入；(b)激活离子源以从要被分析的气体粒子生成离子；以及(c)激活检测器以根据离子的质荷比检测离子。

[0059] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0060] 大气气体粒子可以包括氮气粒子和氧气粒子中的至少一种。压力调节系统可以经配置将气路中的气压维持在大于500mTorr(例如，大于1Torr)。控制器可以经配置激活阀以在至少10秒的时间内(例如，在至少30秒的时间内，在至少1分钟的时间内，在至少2分钟的时间内)将气体粒子的混合物连续引入气路中。

[0061] 质谱仪可以包括：外壳，其封闭离子源和离子阱，并表征连接到离子源和离子阱的第一多个电极；以及表征第二多个电极的支撑基部，第二多个电极经配置接合第一多个电极，其中，该外壳形成经配置可释放地连接到支撑基部的可插模块。控制器可以连接到支撑

基部。

[0062] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0063] 在运行期间,控制器可以经配置基于所检测到的离子调节离子源的占空比。例如,控制器可以经配置调节离子源,使得离子在10秒或更长时间的持续时间内(例如,持续时间为30秒或更长,持续时间为1分钟或更长,持续时间为2分钟或更长)从要被分析的气体粒子产生。

[0064] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0065] 在另一方面,本公开表征方法,包括:将气体粒子的混合物引入质谱仪的气路中,其中,该混合物包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子,并且其中,气体粒子的混合物在没有过滤大气气体粒子的情况下被引入;使气路中的气压维持在大于100mTorr;使用连接到气路的离子源从要被分析的气体粒子生成离子;并使用连接到气路的检测器根据离子的质荷比检测离子。

[0066] 该方法的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0067] 大气气体粒子可以包括氮气粒子和氧气粒子中的至少一种。

[0068] 该方法可以包括将气路中的气压维持在大于500mTorr(例如,大于1Torr)。该方法可以包括在至少10秒的时间内(例如,在至少30秒的时间内,在至少2分钟的时间内)将气体粒子的混合物连续引入气路中。该方法可以包括调节离子源,使得离子在10秒或更长时间的持续时间内(例如,持续时间为30秒或更长,持续时间为2分钟或更长)从要被分析的气体粒子产生。

[0069] 在任何组合中,在适当时,该方法的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0070] 在另一方面,本公开表征质谱仪,其包括离子源、离子阱、离子检测器、表征单机械泵的压力调节系统,以及连接到离子源、离子阱和离子检测器的控制器,该单机械泵经配置控制离子源、离子阱和离子检测器中的气压,其中,单机械泵在小于每分钟6000转的频率运行以控制气压,并且其中,在运行质谱仪期间,控制器经配置激活离子检测器以根据由离子源生成的离子的质荷比来检测离子。

[0071] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0072] 单机械泵可以包括涡旋泵。单机械泵可以在小于每分钟4000转的频率运行以控制气压。

[0073] 在运行质谱仪期间,单机械泵可以在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。在运行质谱仪期间,单机械泵可以在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在500mTorr与10Torr之间的气压。在运行质谱仪期间,单机械泵可以在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持共同气压。在运行质谱仪期间,单机械泵可以在离子源、离子阱和离子检测器中维持差异量为10mTorr或更小的气压。

[0074] 控制器可以连接到泵,并且在运行质谱仪期间,控制器可以经配置控制泵的频率。在运行质谱仪期间,控制器经配置使用离子检测器检测由离子源生成的离子,并基于检测到的离子来调节泵的频率。

[0075] 离子源可以包括辉光放电电离源、介质势垒放电电离源和/或电容性放电电离源。

[0076] 质谱仪可以包括:外壳,其封闭离子源和离子阱,并表征连接到离子源和离子阱的第一多个电极;以及表征第二多个电极的支撑基部,第二多个电极经配置接合第一多个电极,其中,该外壳是经配置可释放地连接到支撑基部的可插模块。外壳可以封闭泵。控制器可以被安装在支撑基部上。支撑基部可以包括印刷电路板。电子处理器可以通过支撑基部电连接到离子源和离子阱。

[0077] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量小于4.5kg。

[0078] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0079] 在另一方面,本公开表征方法,其包括:使用单机械泵控制质谱仪中的离子源、离子阱和离子检测器中的气压,并根据离子的质荷比使用离子检测器来检测由离子源生成的离子,其中,使用单机械泵控制气压包括在小于每分钟6000转的频率运行该泵以控制气压。

[0080] 该方法的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0081] 该方法可以包括在小于每分钟4000转的频率运行泵以控制气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间的气压(例如,在500mTorr与10Torr之间)。

[0082] 该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持共同气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中维持相差10mTorr或更少的量的气压。

[0083] 该方法可以包括基于检测到的离子(例如,基于检测到离子的丰度)调节泵的频率。

[0084] 在任何组合中,在适当时,该方法的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0085] 另一方面,本公开表征质谱仪,其包括离子源、离子阱、离子检测器、用户界面以及连接到离子源、离子阱、离子检测器和用户界面的控制器,其中,在运行质谱仪期间,控制器经配置使用离子检测器检测由离子源生成的离子,确定与测到的离子相关联的化学名称,并且在用户界面上显示化学名称,并且其中,用户界面包括控件,当在显示化学名称后该控件被用户激活时,该控件促使控制器在用户界面上显示测到离子的频谱。

[0086] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0087] 显示测到离子的频谱包括显示作为离子的质荷比的函数的测到离子的丰度。控件可以包括按钮、开关和触摸屏显示器的区域中的至少一种。在运行质谱仪期间,控制器还可以经配置在用户界面上显示与测到离子相关联的危害。

[0088] 离子源可以包括辉光放电电离源、电容性放电电离源和介质势垒放电电离源中的至少一种。

[0089] 在运行质谱仪期间,控制器可以经配置使得测到离子的频谱未被显示直到控件被激活。

[0090] 离子检测器可以包括法拉第检测器。

[0091] 质谱仪可以包括压力调节系统,其中,在运行质谱仪期间,压力调节系统经配置在离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间(例如,在500mTorr与10Torr之间)的气压。

[0092] 压力调节系统可以包括涡旋泵。

[0093] 质谱仪可以包括:可插模块,其表征离子源和离子阱以及连接到离子源和离子阱的第一多个电极;以及表征电压源和第二多个电极的支撑基部,第二多个电极经配置接合第一多个电极,其中,该可插模块经配置可释放地连接到支撑基部。

[0094] 可插模块可以包括离子检测器。可插模块可以包括压力调节系统。

[0095] 质谱仪可以包括外壳,该外壳封闭可插模块和支撑基部,并表征一开口,该开口邻近可插模块安置,配置为允许可插模块通过该开口插入以可释放地连接到支撑基部。

[0096] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0097] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0098] 在另一方面,本公开表征质谱仪,包括:离子源、离子阱、离子检测器、用户界面以及连接到该离子源、离子阱、离子检测器和用户界面的控制器,其中,用户界面包括可以被质谱仪的用户激活到至少两种状态中的一种的控件,其中,在质谱仪运行期间,控制器经配置使用离子检测器来检测由离子源生成的离子,确定与测到离子相关联的化学名称,并且:如果控件被激活到第一状态,则在用户界面上显示化学名称;并且如果控件被激活到第二状态,则在用户界面上显示测到离子的频谱。

[0099] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0100] 如果控件被激活到第二状态,则控制器还可以经配置在用户界面上显示化学名称。显示测到离子的频谱可以包括显示作为离子的质荷比的函数的测到离子的丰度。控件可以包括按钮、开关和触摸屏显示器的区域中的至少一种。

[0101] 离子源可以包括辉光放电电离源、电容性放电电离源和/或介质势垒放电电离源中的至少一种。

[0102] 质谱仪可以包括连接到控制器的压力调节系统,其中,在运行质谱仪期间,压力调节系统经配置在离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间(例如,在500mTorr与10Torr之间)的气压。压力调节系统可以包括涡旋泵。

[0103] 质谱仪可以包括:可插模块,其包括离子源和离子阱,以及连接到离子源和离子阱的第一多个电极;以及包括电压源和第二多个电极的支撑基部,第二多个电极经配置接合第一多个电极,其中,该可插模块经配置可释放地连接到支撑基部。可插模块可以包括离子检测器和/或压力调节系统。

[0104] 质谱仪可以包括外壳,该外壳封闭可插模块和支撑基部,并表征一开口,该开口邻近可插模块安置,并配置为允许可插模块通过该开口插入以可释放地连接到支撑基部。

[0105] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0106] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0107] 在另一方面,本公开表征质谱仪,其包括:离子源、离子阱、离子检测器、样品入口和压力调节系统,其中,离子源、离子阱、离子检测器、样品入口和压力调节系统连接到气路,并且其中,在运行质谱仪期间,气体粒子仅通过样品入口被引入到气路中,压力调节系统经配置将气路中的气压维持在100mTorr与100Torr之间,并且离子检测器经配置根据离子的质荷比来检测由气体粒子的离子源生成的离子。

[0108] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0109] 压力调节系统可以经配置将气压维持在500mTorr与10Torr之间。压力调节系统可以经配置将气压维持在500mTorr之上。

[0110] 离子源可以包括辉光放电电离源、电容性放电电离源和介质势垒放电电离源中的至少一种。

[0111] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0112] 压力调节系统可以包括涡旋泵。

[0113] 样品入口可以经配置使得被引入到气路中的气体粒子包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子。

[0114] 质谱仪可以包括连接到样品入口的阀以及连接到阀的控制器，其中，在运行质谱仪期间，控制器可以经配置通过样品入口在至少30秒的时间内(例如，至少1分钟的时间，至少2分钟的时间)将气体粒子连续引入气路中。

[0115] 质谱仪可以包括连接到离子源的控制器，其中，在运行质谱仪期间，控制器可以经配置调节施加到离子源的电位，使得离子在至少30秒的时间内(例如，至少1分钟的时间，至少2分钟的时间)从离子源的气体粒子连续产生。

[0116] 质谱仪可以包括：可插模块，其表征离子源和离子阱以及连接到离子源和离子阱的第一多个电极；以及表征电压源和第二多个电极的支撑基部，第二多个电极经配置接合第一多个电极，其中，该可插模块经配置可释放地连接到支撑基部。可插模块可以包括压力调节系统。

[0117] 质谱仪可以包括外壳，该外壳封闭可插模块和支撑基部，并表征一开口，该开口邻近可插模块安置，并配置为允许可插模块通过该开口插入以可释放地连接到支撑基部。

[0118] 压力调节系统可以包括单机械泵，其中，在运行质谱仪期间，单机械泵经配置在每分钟6000转或更小的频率运行以维持气路中的气压。

[0119] 在任何组合中，在适当时，质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0120] 在另一方面，本公开表征方法，其可以包括：通过单气体入口将气体粒子的混合物引入质谱仪的气路中，其中，气体粒子的混合物只包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子；将气路中的气压维持在100mTorr与100Torr之间；并根据离子的质荷比来检测从要被分析的气体粒子生成的离子。

[0121] 该方法的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0122] 该方法可以包括将气压维持在500mTorr与10Torr之间。该方法可以包括将气压维持在500mTorr之上。

[0123] 该方法可以包括在至少30秒的时间内(例如，在至少1分钟的时间内，在至少2分钟的时间内)通过单气体入口将气体粒子的混合物连续引入气路中。

[0124] 该方法可以包括：调节施加到质谱仪的离子源上的电位，使得离子在至少30秒的时间内(例如，在至少1分钟的时间内，在至少2分钟的时间内)从要被分析的气体粒子连续生成。

[0125] 该方法可以包括在每分钟6000转或更小的频率运行单机械泵以维持气路中的气压。

[0126] 在任何组合中，在适当时，该方法的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0127] 在另一方面，本公开表征质谱仪，其包括：表征出口电极的离子源，通过该出口电极，离子离开离子源；表征邻近出口电极安置的入口电极的离子阱；离子检测器；以及压力调节系统，其中：出口电极包括定义出口电极的横截面形状的一个或多个小孔，以及入口电极包括定义入口电极的横截面形状的一个或多个小孔；出口电极的横截面形状大致匹配入口电极的横截面形状；并且在运行质谱仪期间，压力调节系统经配置在离子阱中维持至少100mTorr的气压，并且离子检测器经配置根据离子的质荷比来检测由离子源生成的离子。

[0128] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0129] 离子阱可以包括一个或多个离子室，该一个或多个离子室定义离子阱的横截面形状，并且离子阱的横截面形状可以大致匹配入口电极的横截面形状。

[0130] 出口电极的一个或多个小孔可以包括以矩形或方形矩阵布置的多个小孔。出口电极的一个或多个小孔可以包括以六边形矩阵布置的多个小孔。出口电极的一个或多个小孔可以包括具有矩形横截面形状的小孔。出口电极的一个或多个小孔可以包括具有螺旋横截面形状的小孔。出口电极的一个或多个小孔可以包括具有蛇形横截面形状的小孔。出口电极的一个或多个小孔可以包括4个或多于4个小孔(例如，8个或多于8个小孔，24个或多于24个小孔，100个或多于100个小孔)。出口电极的一个或多个小孔可以包括以蛇形图案布置的多个小孔。

[0131] 质谱仪可以包括连接到离子源的出口电极和第一电极的电压源，以及连接到电压源的控制器，其中，在运行质谱仪期间，控制器可以经配置通过向第一电极和出口电极施加不同的电位来在至少两种模式中的一种中运行离子源，不同的电位参考共同的接地电位。在至少两种模式中的第一模式中，控制器可以经配置向第一电极和出口电极施加电位，使得第一电极相对于共同接地电位在正电位，以及在至少两种模式中的第二模式中，控制器可以经配置向第一电极和第二电极施加电位，使得第一电极相对于共同接地在负电位。

[0132] 质谱仪可以包括表征可选择控件的用户界面，该可选择控件经配置使得当该控件在运行质谱仪时被激活，控制器改变离子源的运行模式。

[0133] 离子源可以包括辉光放电电离源。

[0134] 质谱仪可以包括连接到控制器的检测器，其中，在运行质谱仪期间，控制器可以经配置使用离子检测器来检测由离子源生成的离子，并且基于测到的离子调节施加到第一电极和出口电极的电位，以控制离子源连续生成离子的持续时间。在运行质谱仪期间，离子源可以在定义离子源频率的多个电离周期中生成离子，每个电离周期可以包括生成离子的第一时间间隔，以及未生成离子的第二时间间隔，第一和第二时间间隔定义占空比，并且控制器可以经配置将占空比调节到在1％与40％之间的值(例如，在1％与20％之间的值，在1％与10％之间的值)。

[0135] 在运行质谱仪期间，控制器可以经配置基于测到的离子确定离子源应当何时被清理，将离子源的占空比调节到在50％与90％之间的值，以及运行离子源至少30秒的时间以清理离子源。

[0136] 压力调节系统可以经配置在离子阱中维持在100mTorr与100Torr之间(例如，在500mTorr与10Torr之间)的气压。

[0137] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0138] 在任何组合中，在适当时，质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0139] 在另一方面，本公开表征质谱仪，其包括：离子源，离子阱，离子检测器，压力调节系统，连接到离子源、离子阱、离子检测器和压力调节系统的电压源，以及连接到离子源、离子阱、离子检测器和电压源的控制器，其中，在运行质谱仪期间，控制器经配置激活离子源以从气体粒子生成离子，激活离子检测器以检测由离子源生成的离子，并且基于测到的离子调节质谱仪的分辨率。

[0140] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0141] 控制器可以连接到压力调节系统并经配置通过激活压力调节系统以改变离子源和离子阱中的至少一个的气压来调节分辨率。控制器可以经配置通过激活压力调节系统以减少离子源和离子阱中的至少一个的气压来增加分辨率。

[0142] 控制器可以经配置使用电压源向离子阱的中心电极重复施加电位以从阱中喷射离子，电位的重复施加定义电位的重复频率，并且通过改变电位的重复频率来调节分辨率。控制器可以经配置通过增加电位的重复频率来增加分辨率。

[0143] 控制器可以经配置通过改变电压源施加到离子阱的中心电极的电位的最大幅值来调节分辨率。

[0144] 控制器可以经配置使用电压源在离子阱的相对端部的电极之间施加轴向电位差，并且通过改变轴向电位差的幅值来调节分辨率。控制器可以经配置通过增加轴向电位差的幅值来增加分辨率。

[0145] 控制器可以经配置使用电压源在离子源的电极之间重复施加电位差以生成离子，电位的重复施加定义离子源的重复频率，并且通过改变离子源的重复频率来调节分辨率。控制器可以经配置使离子源的重复频率和施加到离子阱的中心电极的电位的重复频率同步。

[0146] 控制器可以经配置：使用电压源在离子源的电极之间重复施加电位差，其中，电位的重复施加定义离子源的重复时间，并且该重复时间包括在离子源的电极之间施加电位差的第一时间间隔，以及未在离子源的电极之间施加电位差的第二时间间隔；并且通过调节离子源的占空比来调节分辨率，其中，占空比对应于第一时间间隔对重复时间的比率。控制器可以经配置通过减少离子源的占空比来增加分辨率。

[0147] 质谱仪可以包括气路，其中，离子源、离子阱、离子检测器和压力调节系统连接到该气路；以及缓冲气体入口，其连接到气路，并且表征连接到控制器的阀，其中，控制器经配置控制该阀以调节通过缓冲气体入口被引入气路中的缓冲气体粒子的速率，从而调节分辨率。控制器可以经配置增加缓冲气体粒子被引入气路中的速率以增加分辨率。

[0148] 在运行质谱仪期间，控制器可以经配置：重复激活离子源以从气体粒子生成离子，激活离子检测器以检测由离子源生成的离子，并基于测到的离子调节质谱仪的分辨率，直到质谱仪的分辨率达到阈值；激活离子检测器以当质谱仪的分辨率至少与阈值一样大时检测从气体粒子生成的离子；基于当质谱仪的分辨率至少与阈值一样大时测到的离子确定关于气体粒子身份的信息；并且在用户界面上显示信息。该信息可以包括气体粒子的化学名称和/或关于与气体粒子相关联的危害的信息和/或关于气体粒子相对应的物质类别的信

息。

[0149] 在运行质谱仪期间,控制器可以经配置调节电压源,使得仅当分辨率达到阈值时,电位被施加到离子阱的中心电极。

[0150] 在运行质谱仪期间,压力调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间(例如,在500mTorr与10Torr之间)的气压。

[0151] 质谱仪可以包括:可插模块,其表征离子源、离子阱和检测器,以及连接到离子源、离子阱和检测器的第一多个电极;以及表征第二多个电极的支撑基部,第二多个电极经配置接合第一多个电极,其中,电压源和控制器被安装在支撑基部上,并且其中,该可插模块经配置可释放地连接到支撑基部。

[0152] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0153] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0154] 在另一方面,本公开表征方法,其包括:将气体粒子引入质谱仪的离子源中,从气体粒子生成离子,使用质谱仪的检测器来检测离子,并且基于测到的离子调节质谱仪的分辨率。

[0155] 该方法的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0156] 调节分辨率可以包括在离子源和离子阱中的至少一个中改变气压。该方法可以包括通过减少离子源和离子阱中的至少一个的气压来增加分辨率。

[0157] 该方法可以包括向离子阱的中心电极重复施加电位以从阱中喷射离子,电位的重复施加定义电位的重复频率,并且通过改变电位的重复频率来调节分辨率。该方法可以包括通过增加电位的重复频率来增加分辨率。该方法可以包括通过改变施加到离子阱的中心电极的电位的最大幅值来调节分辨率。

[0158] 该方法可以包括在离子阱的相对端部的电极之间施加轴向电位差,并且通过改变轴向电位差的幅值来调节分辨率。该方法可以包括通过增加轴向电位差的幅值来增加分辨率。

[0159] 该方法可以包括在离子源的电极之间重复施加电位差以生成离子,电位的重复施加定义离子源的重复频率,并且通过改变离子源的重复频率来调节分辨率。该方法可以包括使离子源的重复频率和施加到离子阱的中心电极的电位的重复频率同步。

[0160] 该方法可以包括:在离子源的电极之间重复施加电位差,其中,电位的重复施加定义离子源的重复时间,并且该重复时间包括在离子源的电极之间施加电位差的第一时间间隔,以及未在离子源的电极之间施加电位差的第二时间间隔;并且通过调节离子源的占空比来调节分辨率,其中,占空比对应于第一时间间隔与重复时间的比率。该方法可以包括通过减少离子源的占空比来增加分辨率。

[0161] 该方法可以包括调节缓冲气体粒子被引入质谱仪的气路中的速率以调节分辨率。该方法可以包括增加缓冲气体粒子被引入气路中的速率以增加分辨率。

[0162] 该方法可以包括:重复激活离子源以从气体粒子生成离子,激活离子检测器以检测由离子源生成的离子,并基于测到的离子调节质谱仪的分辨率,直到质谱仪的分辨率达到阈值;激活离子检测器以当质谱仪的分辨率至少与阈值一样大时检测从气体粒子生成的离子;基于当质谱仪的分辨率至少与阈值一样大时测到的离子确定关于气体粒子身份的信

息;并且在用户界面上显示信息。该信息可以包括气体粒子的化学名称和/或关于与气体粒子相关联的危害的信息和/或关于气体粒子相对应的物质类别的信息。

[0163] 该方法可以包括仅当分辨率达到阈值时向离子阱的中心电极施加电位。

[0164] 该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间(例如,在500mTorr与10Torr之间)的气压。

[0165] 在任何组合中,在适当时,该方法的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0166] 在另一方面,本公开表征质谱仪,其包括:离子源,离子阱,离子检测器,表征单机械泵的气压调节系统,以及连接到离子源、离子阱和离子检测器的控制器,其中,在运行质谱仪期间,气压调节系统经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持在100mTorr与100Torr之间的气压,并且控制器经配置激活离子检测器以根据离子的质荷比来检测由离子源生成的离子,并且其中,单机械泵在小于每分钟6000转的频率运行以维持气压。

[0167] 质谱仪的实施例可以包括下列特征中的一个或多个。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源和离子阱中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中维持在100mTorr与100Torr之间的气压。

[0168] 单机械泵可以是涡旋泵。

[0169] 在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持差异量小于10Torr的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中维持差异量小于10Torr的气压。在运行期间,气压调节系统可以经配置在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持相同的气压。

[0170] 质谱仪可以包括:气路,其中,离子源、离子阱、离子检测器和气压调节系统连接到气路;以及气体入口,其连接到气路并经配置使得在运行质谱仪期间,要被分析的气体粒子通过气体入口被引入气路,并且气路中的总气压在100mTorr与100Torr之间。气体入口可以经配置使得在运行质谱仪期间,包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子的气体粒子混合物被吸入气体入口,其中,气体粒子的混合物在引入气路之前未被过滤以去除大气气体粒子。

[0171] 质谱仪可以包括气路,其中,离子源、离子阱、离子检测器和气压调节系统连接到气路;连接到气路的样品气体入口;以及连接到气路的缓冲气体入口,其中,样品气体入口和缓冲气体入口经配置使得在运行质谱仪期间:要被分析的气体粒子通过样品气体入口被引入到气路中,缓冲气体粒子通过缓冲气体入口被引入到气路中,并且气路中要被分析的气体粒子和缓冲气体粒子的组合压力在100mTorr与100Torr之间。缓冲气体粒子可以包括氮气分子和惰性气体分子中的至少一种。

[0172] 质谱仪可以包括:可插模块,其表征离子源和离子阱以及连接到离子源和离子阱的第一多个电极;以及表征第二多个电极的支撑基部,第二多个电极经配置可释放地接合第一多个电极,使得该可插模块可以连接到支撑基部并从其断开。质谱仪可以包括附接机构,其经配置当第一多个电极接合第二多个电极时将可插模块固定到支撑基部。第一多个

电极可以包括管脚,以及第二多个电极可以包括经配置容纳该管脚的管座。

[0173] 可插模块可以包括离子检测器,并且第一多个电极可以连接到离子检测器。可插模块可以包括机械泵。

[0174] 质谱仪可以包括电压源,其中,电压源和控制器附接到支撑基部并且连接到第二多个电极。

[0175] 支撑基部可以包括印刷电路板。当可插模块连接到支撑基部时,控制器可以连接到离子源和离子阱。

[0176] 单机械泵可以在小于每分钟4000转的频率运行以控制气压。

[0177] 质谱仪的最大尺寸可以小于35cm。质谱仪的总质量可以小于4.5kg。

[0178] 在任何组合中,在适当时,质谱仪的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0179] 在另一方面,本公开表征方法,其包括:使用在小于每分钟6000转的频率运行的单机械泵以维持质谱仪的离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中的气压,并且根据离子的质荷比来检测由离子源生成的离子,其中,离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中的气压维持在100mTorr与100Torr之间。

[0180] 该方法的实施例可以包括下列特征中的任一个或多个。

[0181] 离子源和离子阱中的气压可以维持在100mTorr与100Torr之间。离子阱和离子检测器中的气压可以维持在100mTorr与100Torr之间。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中的至少两个中维持差异量小于10Torr的气压。该方法可以包括在离子源、离子阱和离子检测器中维持相同的气压。

[0182] 该方法可以包括:将气体粒子的混合物引入连接离子源、离子阱和离子检测器的气路中,其中,气体粒子的混合物包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子,并且气体粒子的混合物在被引入气路之前未被过滤以去除大气气体粒子。

[0183] 该方法可以包括在小于每分钟4000转的频率运行机械泵以控制气压。

[0184] 在任何组合中,在适当时,该方法的实施例还可以包括在本文公开的其他特征中的任一个。

[0185] 除非特别声明,本文使用的所有技术和科学术语具有本公开所属领域的普通技术人员通常理解的相同意思。虽然类似或等效于本文所述的方法和材料也可以被用于本主题的实施例的实践或试验,但是本文下面将描述合适的方法和材料。本文提及的所有出版物、专利申请、专利和其他参考文献通过引用全部并入本文。在冲突的情况下,将以本说明书(包括定义)为主。另外,所述材料、方法和示例仅是示例性的,并不是为了限制。

[0186] 一个或多个实施例的细节在附图和下面的具体实施方式中阐述。从所述具体实施方式、附图和权利要求,其他特征和优点将变得明显。

附图说明

[0187] 图1A是紧凑型质谱仪的示意图。

[0188] 图1B是质谱仪的实施例的横截面示意图。

[0189] 图1C是质谱仪的另一实施例的横截面示意图。

[0190] 图1D是具有安装到支撑基部的部件的质谱仪的示意图。

[0191] 图1E是具有可插模块的质谱仪的示意图。

[0192] 图1F是用于将质谱仪的模块连接到支撑基部的附接机构的示意图。

[0193] 图2A和2B是辉光放电离子源的示意图。

[0194] 图2C-2H是示出具有小孔的离子源的电极的示意图。

[0195] 图2I是施加到离子源的电极的偏置电位的曲线图。

[0196] 图2J是施加到离子源的电极以清理离子源的偏置电位的曲线图。

[0197] 图2K是电容性放电离子源的示意图。

[0198] 图3A是离子阱的实施例的横截面示意图。

[0199] 图3B是离子阱的另一实施例的示意图。

[0200] 图3C是图3B的离子阱的横截面示意图。

[0201] 图4A是电压源的示意图。

[0202] 图4B是示出用于离子阱的未放大调制信号的曲线图。

[0203] 图4C是示出用于离子阱的修正信号的曲线图。

[0204] 图4D是示出基准载波的曲线图。

[0205] 图4E是示出用于离子阱的放大调制信号的曲线图。

[0206] 图4F是示出用于放大图4E的信号的谐振电路的曲线图。

[0207] 图5A是法拉第杯带电粒子检测器的实施例的透视图。

[0208] 图5B是图5A的法拉第杯检测器的示意图。

[0209] 图5C是法拉第杯检测器的另一实施例的示意图。

[0210] 图5D是法拉第杯检测器的矩阵的示意图。

[0211] 图6A是表征涡旋泵的压力调节子系统的示意图。

[0212] 图6B是涡旋泵法兰的示意图。

[0213] 图7A是紧凑型质谱仪的透视图。

[0214] 图7B和7C是紧凑型质谱仪的实施例的横截面示意图。

[0215] 图8A是示出用于测量样品的质谱信息并显示信息的一系列步骤的流程图。

[0216] 图8B是紧凑型质谱仪的实施例的示意图。

[0217] 图8C是示出用于测量质谱信息并调节质谱仪的配置的一系列步骤的流程图。

[0218] 在各个绘图中的相同参考数字标号表示相同的元件。

具体实施方式

[0219] I总体概述

[0220] 用于化学物质鉴定的质谱仪通常是消耗相当功率的大型复杂仪器。此类仪器往往过于笨重以致难以携带，并因此其应用被限制在可以基本保持平稳的环境中。此外，传统的质谱仪通常是昂贵的并需要训练有素的操作员解译仪器产生的离子形成图案的频谱以推断出被分析化学物质的身份。

[0221] 为获得高的灵敏度和分辨率，传统质谱仪通常使用经设计在低气压下工作的各种不同部件。例如，传统的离子检测器诸如电子倍增器在约10mTorr之上的压力不能高效工作。作为另一示例，用在传统离子源中的热离子发射体也最佳适合在小于10mTorr的压力下工作，并且甚至当存在适度的氧浓度时通常不能使用。此外，传统质谱仪通常包括质量分析

仪，该质量分析仪具有经专门设计仅用于在小于10mTorr的压力并且具体在微托范围的压力下运行的几何形状。结果，传统的质谱仪不仅仅是被配置为在低压下运行，而且由于传统的质谱仪所使用的部件，它们通常也不能在更高的气压下运行。更高的气压可能会破坏传统质谱仪的某些部件。不那么明显的情况下，某些部件可能会难以在更高气压运行，或非常差运行以致质谱仪不再能采集有用的质谱信息。结果，具有明显不同配置和部件的质谱仪需要在高压下运行(例如，大于100mTorr的压力)。

[0222] 为实现低压，传统质谱仪通常包括用于疏散质谱仪内部容量的一系列泵。例如，传统的质谱仪可以包括快速降低系统内部压力的粗泵，以及将内部压力进一步降低到微托值的涡轮分子泵。涡轮分子泵体积大并且消耗相当的功率。不过，这仅是传统质谱仪的次重要考量；主重要考量是在测定质谱时能实现高分辨率。通过使用前述在低压下运行的部件，传统质谱仪一般能实现0.1原子质量单位(amu)或更好的分辨率。

[0223] 与笨重的传统质谱仪相比，本文公开的紧凑型质谱仪经设计低功耗、高效率运行。为实现低功耗运行，本文公开的紧凑型质谱仪不包括涡轮机械或其他耗电的真空泵。反而紧凑型质谱仪通常只包括在低频运行的单机械泵，这明显降低功耗。

[0224] 通过使用更小的泵，本文公开的紧凑型质谱仪通常在100mTorr至100Torr的压力范围内运行，这明显比传统质谱仪的运行压力范围更高。传统质谱仪不可更改为在这些更高压力下运行，因为用在传统仪器中的部件(例如，电子倍增器、热离子发射体和离子阱)不能在本文公开的紧凑型质谱仪运行的压力范围内运行。此外，传统质谱仪通常不能更改为在更高的内部压力下运行，因为此类装置如此做时通常会产生测量质谱非常差的分辨率。因为获得最高可能分辨率的质谱通常是我们使用此类装置的目的，很少有原因去更改装置以提供更差的分辨率。

[0225] 不过，本文公开的紧凑型质谱仪向用户提供与传统质谱仪不同类型的信息。具体地，本文公开的紧凑型质谱仪通常报告诸如被分析化学物质的名称、与该物质相关的危害信息和/或该物质属于类别的信息。本文公开的紧凑型质谱仪还能报告例如物质是或不是特定目标物质。通常，所记录的质谱不向用户显示，除非用户激活引起质谱显示的控件。结果，不像传统质谱仪，本文公开的紧凑型质谱仪不需要获得具有最高可能分辨率的质谱。反而，只要获得的质谱质量高到足以确定报告给用户的信息，进一步增加分辨率不是关键性能标准。

[0226] 通过在较低分辨率下运行(通常，质谱在1amu与10amu之间的分辨率获得)，本文公开的紧凑型质谱仪比传统的质谱仪消耗明显更少的功率。例如，本文公开的紧凑型质谱仪表征微型离子阱，其在从100mTorr到100Torr的压力高效运行以分离不同质荷比的离子，而同时消耗远比传统质量分析仪诸如离子阱更少的功率，因为其减小的尺寸。例如，随着圆柱形离子阱的尺寸减少，施加到阱以分离离子的最大电压减小，以及施加电压的频率增加。结果，用在电源线路中的电感器和/或谐振器的尺寸得以减小，并且用于生成最大电压的其他部件的尺寸和功耗需求也得以减小。

[0227] 此外，本文公开的紧凑型质谱仪表征高效离子源诸如辉光放电电离源和/或电容性放电电离源，相对于离子源诸如一般可在传统质谱仪中发现的热离子发射体，这进一步降低功耗。高效低功耗检测器诸如法拉第检测器用在本文公开的紧凑型质谱仪中，而不是使用存在于传统质谱仪中的更耗电电子倍增器。由于这些低功耗部件，本文公开的紧凑型

质谱仪高效运行并消耗相对少量的电功率。它们可以通过标准的基于电池的电源(例如,锂离子电池)供电,并且由于手持式外形而便于携带。

[0228] 因为传统的质谱仪向用户直接提供高分辨率质谱,其一般不适合未经专门训练的人员对物质移动扫描的应用。具体地,对于在交通枢纽诸如机场和火车站的现场安全扫描的应用,传统的质谱仪不是实用的解决方案。相反,此类应用反而受益于紧凑需要相对少运行功率并且提供容易被未经高级训练的人员解译的信息的质谱仪,如上所述。紧凑、低成本的质谱仪对于各种其他应用也是有用的。例如,此类装置可以在实验室中使用以提供未知化学化合物的快速鉴定。由于其成本低,占用空间小,实验室可以向工人提供私人质谱仪,减少或消除在集中的质谱设备规划分析时间的需要。紧凑的质谱仪也可用在诸如医疗诊断测试包括在临床设置和个别病人住宅的应用。执行此类测试的技术员可以很容易解译由此类质谱仪提供的信息,以向别人实时提供反馈,并且也向医疗设施、医师和其他医疗保健提供商快速更新信息。

[0229] 本公开表征的紧凑低功耗质谱仪向用户提供各种信息,包括质谱仪扫描的化学物质的鉴定和/或相关联的背景信息,包括有关物质属于类别的信息(例如,酸、碱、强氧化剂、爆炸物、硝基化合物),与该物质相关联的危害有关的信息,以及安全建议和/或信息。该质谱仪在比传统质谱仪更高的内部气压下运行。通过在更高压力下运行,相对于传统的质谱仪,紧凑型质谱仪的尺寸和功耗明显下降。而且,即使质谱仪在更高压力下运行,质谱仪的分辨率足以允许各种化学物质的准确鉴定和量化。

[0230] 图1A是紧凑型质谱仪100的实施例的示意图。质谱仪100包括离子源102、离子阱104,电压源106,控制器108,检测器118,压力调节子系统120,以及样品入口124。样品入口124包括阀129。可选地,质谱仪100包括缓冲气源150。质谱仪100的部件密封在外壳122内。控制器108包括电子处理器110,用户界面112,存储单元114,显示器116,以及通信接口117。

[0231] 控制器108经由控制线127a-127g分别连接到离子源102、离子阱104、检测器118、压力调节子系统120、电压源106、阀129以及可选的缓冲气源150。控制线127a-127g允许控制器108(例如,控制器108中的电子处理器110)向其所连接的每个部件发出运行命令。此类命令可以包括例如激活离子源102、离子阱104、检测器118、压力调节子系统120、阀129以及缓冲气源150的信号。激活质谱仪100的各种部件的命令可以包括至电压源106以向部件元件施加电位的指令。例如,为激活离子源102,控制器108可以向电压源106发送向离子源102中的电极施加电位的指令。作为另一示例,为激活离子阱104,控制器108可以向电压源106发送向离子阱104中的电极施加电位的指令。作为进一步示例,为激活检测器118,控制器108可以向电压源106发送向检测器118中的检测元件施加电位的指令。控制器108还可以发送激活压力调节子系统120的信号(例如,通过电压源106),以控制在质谱仪100的各个部件中的气压,以及向阀129(例如,通过电压源106)发送信号以允许气体粒子通过样品入口124进入质谱仪100。

[0232] 此外,控制器108可以通过控制线127a-127g从质谱仪100的每个部件接收信号。例如,此类信号可以包括关于离子源102和/或离子阱104和/或检测器118和/或压力调节子系统120的运行特性的信息。控制器108还可以接收由检测器118检测的离子的信息。信息可以包括由检测器118测量的离子电流,其与具有特定质荷比的离子的丰度有关。该信息还可以包括在特定离子丰度在由检测器118测量时施加到离子阱104的电极的特定电压的信息。特

定施加的电压与离子的质荷比的特定值有关。通过电压信息与所测的丰度信息相关，控制器108可以确定作为质荷比的函数的离子的丰度，并且可以使用显示器116以质谱的形式呈现这个信息。

[0233] 电压源106经由控制线126a-e分别连接到离子源102、离子阱104、检测器118、压力调节子系统120以及控制器108。电压源106通过控制线126a-e向这些部件中的每个提供电位和电力。电压源106建立对应于相对电压为0伏的电接地的基准电位。电压源106施加到质谱仪100的各个部件的电位参考这个接地电位。一般来说，电压源106经配置向质谱仪100的部件施加相对于基准接地电位为正的电位和为负的电位。通过向这些部件(例如，向各部件的电极)施加不同符号的电位，不同符号的电场可以在各部件内生成，这导致离子在不同方向移动。因此，通过向质谱仪100的部件施加合适的电位，控制器108(通过电压源106)可以控制质谱仪100内离子的移动。

[0234] 离子源102、离子阱104和检测器118被连接，使得用于气体粒子和离子的内部通道即气路128在这些部件之间延伸。样品入口124和压力调节子系统120也被连接到气路128。如果存在的话，可选的缓冲气源150也连接到气路128。气路128的部分在图1A中简要示出。一般来说，气体粒子和离子在气路128的任何方向移动，并且移动方向可以通过质谱仪100的配置来控制。例如，通过向离子源102和离子阱104中的电极施加合适的电位，在离子源102中生成的离子可以被引导从离子源102流入离子阱104中。

[0235] 图1B示出质谱仪100的局部横截面示意图。如图1B所示，离子源102的输出孔130耦接到离子阱104的输入孔132。此外，离子阱104的输出孔134耦接到检测器118的输入孔136。结果，离子和气体粒子可以在离子源102、离子阱104和检测器118之间的任何方向流动。在运行质谱仪100期间，运行压力调节子系统120以将气路128中的气压降低到小于大气压的值。结果，要被分析的气体粒子从环绕质谱仪100的环境(例如，在外壳122外面的环境)进入样品入口124并移入气路128中。通过气路128进入离子源102的气体粒子通过离子源102被离子化。离子从离子源102扩散到离子阱104中，离子在离子阱中被当电压源106向离子阱104的电极施加合适电位形成的电场捕获。

[0236] 被捕获离子在离子阱104内循环。为分析循环离子，在控制器108的控制下，电压源106改变施加到离子阱104的一个或多个电极的射频捕获场的幅值。幅值的变化重复出现，从而定义离子阱104的扫频。在改变场的幅值时，具有特定质荷比的离子落在轨道外面以及有些从离子阱104喷出。喷出的离子由检测器118检测，并且关于测到离子的信息被发送到控制器108(例如，检测器118测量的离子电流，以及当测量到特定离子电流时施加到离子阱104的特定电压)。

[0237] 虽然样品入口124在图1A和1B中安置，使得气体粒子从外壳122外面的环境进入离子阱104，但是更普遍的是，样品入口124也可以被安置在其他位置。例如，图1C示出质谱仪100的局部横截面示意图，其中，样品入口124被安置使得气体粒子从外壳122外面的环境进入离子源102。除了图1C中示出的配置以外，假如样品入口124的位置允许气体粒子从外壳122外面的环境进入气路128，样品入口124通常可以安置在沿气路128的任何位置。

[0238] 一般来说，通信接口117可以是有线或无线的通信接口(或两者全部)。通过通信接口117，控制器108可以经配置与各种各样的装置通信，该装置包括远程计算机、移动电话以及监测和安全扫描仪。通信接口117可以经配置在各种网络上发送和接收数据，各种网络包

括但不限于以太网、无线WiFi网、蜂窝网和蓝牙无线网。控制器108可以使用通信接口117与远程装置通信以获得各种信息，各种信息包括质谱仪100的运行和配置设定，以及有关感兴趣物质的信息，该信息包括已知物质的质谱的记录，与粒子物质相关联的危害，感兴趣物质属于的类别，和/或已知物质的光谱特征。这种信息可以被控制器108用于分析样品测量。控制器108还可以向远程装置发送信息，该信息包括被质谱仪100测出的特定物质(例如，危险和/或爆炸物)的告警消息。

[0239] 本文公开的质谱仪既紧凑又能低功耗运行。为实现紧凑尺寸和低功耗运行，各种质谱仪部件，包括离子源102、离子阱104、检测器118、压力调节子系统120和电压源106经仔细设计和配置以将空间需求和功耗减到最小。在传统质谱仪中，用于实现低内部运行压力的真空泵(例如，$1x10^{-3}$Torr或更少)既大又消耗相当量的电功率。例如，为达到此类压力，传统的质谱仪通常采用一系列两个或更多的泵，所述泵包括将内部系统压力从大气压快速降低到约0.1-10Torr粗泵，以及将内部系统压力从10Torr降低到预期内部运行压力的一个或多个涡轮分子泵。粗泵和涡轮分子泵两者均是需要相当量的电力来运行的机械泵。粗泵(其可以包括例如基于活塞的泵)通常生成明显的机械振动。涡轮分子泵通常对振动和机械冲击是敏感的，并且由于高转速会产生类似于陀螺仪的效果。结果，传统的质谱仪包括足以满足真空泵功耗需求的电源，以及确保这些泵保持运行的隔离机构(例如，振动和/或转动隔离机构)。传统的质谱仪甚至可以要求在运行时，涡轮分子泵不能移动，因为如此做会产生破坏这些泵的机械振动。结果，用于传统质谱仪的真空泵和电源的组合使得传统质谱仪变得大、笨重和难以移动。

[0240] 相反，本文公开的质谱仪系统和方法是紧凑、可移动的并实现低功耗运行。这些特性部分通过去除对于传统质谱仪是常见的涡轮分子泵、粗泵和其他大型机械泵来实现。替代这些大型泵，小型低功耗单机械泵用于控制质谱仪系统内的气压。本文公开的用于质谱仪系统中的单机械泵不能达到与传统涡轮分子泵一样低的压力。结果，本文公开的系统在比传统质谱仪更高的内部气压下运行。

[0241] 诸如下面所详细解释的，由于各种机制诸如碰撞引起的谱线展宽和分子碎片之间的电荷交换，在更高压力下运行通常降低质谱仪的分辨率。如本文所使用的，“分辨率”定义为在所测质量峰值的半峰全宽(FWHM)。特定质谱仪的分辨率通过测量在从100到125amu的质荷比范围内出现的所有峰值的FWHM，并选择作为分辨率对应于单峰值的最大FWHM来确定(例如，对应于两个或更多峰值的紧密间隔集的峰值宽度被排除)。为确定分辨率，可以使用具有已知质谱的化学物质诸如甲苯。

[0242] 虽然在更高压力运行的质谱仪的分辨率会下降，但是本文公开的质谱仪经配置使得降低的分辨率不危及质谱仪的有效性。具体地，本文公开的质谱仪经配置使得当感兴趣的化学物质使用质谱仪扫描时，质谱仪向用户报告有关物质身份的信息，而不是如在传统质谱仪中常见的分子离子的质量解析光谱。在某些实施例中，用在本文公开的质谱仪中的算法可以比较所测的离子碎片图案和已知碎片图案的信息以确定诸如感兴趣物质的身份的信息、有关感兴趣物质的危害信息和/或感兴趣物质属于的一个或多个化合物类别。在特定实施例中，该算法可以包括确定有关感兴趣物质的身份的信息的专家系统。例如，数字滤波器可以用于搜索感兴趣物质的所测光谱中的特定特征，并且基于光谱中存在或不存在所述特征，物质可以被鉴定为对应于特定目标物质或不对应于目标物质。

[0243] 当控制器108执行前述分析时，由于在更高压力下运行所减小的分辨率可以通过本文公开的系统来补偿。就是说，倘若可以实行所测碎片图案与基准信息之间的可靠对应，则由于高压运行的较低分辨率对于本文公开的质谱仪的用户来说是没有影响的。因此，即使本文公开的质谱仪在比传统质谱仪更高的压力下运行，它们在各种各样的应用诸如安全扫描、医疗诊断和实验室分析仍然是有用的，在这些应用中，用户主要关注的是感兴趣物质的鉴定而不是详细检查物质的离子碎片图案，并且其中，用户可以未经质谱解译的高级训练。

[0244] 通过使用单一小型机械泵，本文公开的质谱仪的重量、尺寸和功耗相对于传统质谱仪大大下降。因此，本文公开的质谱仪通常包括压力调节子系统120，其表征小型机械泵，并且该机械泵经配置将内部气压(例如，气路128中的气压，以及连接到气路128的离子源102、离子阱104和检测器118中的气压)维持在100mTorr与100Torr之间(例如，在100mTorr与500mTorr之间，在500mTorr与100Torr之间，在500mTorr与10Torr之间，在500mTorr与5Torr之间，在100mTorr与1Torr之间)。在某些实施例中，压力调节子系统经配置将本文公开的质谱仪中的内部气压维持在超过100mTorr(例如，超过500mTorr，超过1Torr，超过10Torr，超过20Torr)。

[0245] 在前述压力，本文公开的质谱仪在10amu或更好的分辨率检测离子。例如，在某些实施例中，本文公开的质谱仪的分辨率如上面所测量的是10amu或更好的分辨率(例如，8amu或更好，6amu或更好，5amu或更好，4amu或更好，3amu或更好，2amu或更好，1amu或更好)。一般来说，这些分辨率的任一个可以使用本文公开的质谱仪在任一前述压力下实现。

[0246] 除了泵以外，压力调节子系统120可以包括各种其他部件。在某些实施例中，压力调节子系统120包括一个或多个压力传感器。一个或多个压力传感器可以经配置测量压力调节子系统120所连接的流体管道例如气路128中的气压。气压的量度可以被发送到压力调节子系统120内的泵和/或控制器108，并且可以在显示器116上显示。在特定实施例中，压力调节子系统120可以包括用于流体处理的其他元件，诸如一个或多个阀、小孔、密封件和/或流体管道。

[0247] 为确保压力调节子系统高效运行以控制本文公开的质谱仪中的内部压力，质谱仪的内部体积(例如，通过压力调节子系统泵送的体积)相对于传统质谱仪的内部体积明显减小。减小的内部体积增加了减小本文公开的质谱仪的整体尺寸的益处，使得所述质谱仪紧凑、便携并且用户能够单手操作。

[0248] 如图1B和1C所示，本文公开的质谱仪的内部体积包括离子源102、离子阱104和检测器118以及这些部件之间的区域的内部体积。更为普遍的，本文公开的质谱仪的内部体积对应于气路128的体积-就是说，质谱仪100内气体粒子和离子能够循环的所有连接空间的体积。在某些实施例中，质谱仪100的内部体积是10cm^3或更小(例如，7.0cm^3或更小，5.0cm^3或更小，4.0cm^3或更小，3.0cm^3或更小，2.5cm^3或更小，2.0cm^3或更小，1.5cm^3或更小，1.0cm^3或更小)。

[0249] 在某些实施例中，本文公开的质谱仪完全集成在单个支撑基部上。图1D是质谱仪100的实施例的示意图，其中，质谱仪100的所有部件被集成到单个支撑基部140上。如图1D所示，离子源102、离子阱104、检测器118、控制器108和电压源106中的每个安装在支撑基部140上并电连接到支撑基部140。支撑基部140是印刷电路板，并且包括在质谱仪100的各部

件之间延伸的控制线。因此，例如，电压源106通过集成到支撑基部140中的控制线(例如，控制线126a-e)向离子源102、离子阱104、检测器118、控制器108和压力调节子系统120提供电力。此外，离子源102、离子阱104、检测器118、压力调节子系统120和电压源106中的每个通过集成到支撑基部140中的控制线(例如，控制线127a-e)连接到控制器108，使得控制器108可以通过支撑基部140向这些部件中的每个发送电信号和由此接收电信号。

[0250] 在单一支撑基部诸如印刷电路板上的集成提供若干重要优点。支撑基部140提供质谱仪100的部件的稳定平台，确保每个部件被稳定和可靠安装，并减少质谱仪100的粗处理期间各部件遭损坏的可能性。另外，在单一支撑基部上安装所有部件简化质谱仪100的制造工艺，因为支撑基部140提供各种部件彼此安置和连接的可复制模板。此外，通过在支撑基部上集成所有控制线，使得电力和控制信号两者通过支撑基部140在各部件之间发送，各部件之间的电气连接的完整性得以保持-此类连接比通过在各部件之间延伸的各别导线形成的连接更不易磨损和/或断线。

[0251] 此外，通过在单个支撑基部上集成质谱仪100的各部件，质谱仪100具有紧凑的外形。具体地，支撑基部140的最大尺寸(例如，支撑基部140上任意两个点之间的最大直线距离)可以是25cm或更小(例如，20cm或更小，15cm或更小，10cm或更小，8cm或更小，7cm或更小，6cm或更小)。

[0252] 如图1D所示，支撑基部140经使用安装管脚被安装在外壳122上。在某些实施例中，安装管脚经设计使支撑基部140(以及安装到支撑基部140的各部件)与机械冲击隔离。例如，安装管脚可以包括冲击吸收材料(例如，柔性材料诸如软橡胶)以使支撑基部140与机械冲击隔离。作为另一示例，从冲击吸收材料形成的绝缘垫圈或隔片可以被安置在支撑基部140与外壳122之间以使支撑基部140与机械冲击隔离。

[0253] 在某些实施例中，本文公开的质谱仪包括可插、可替代模块，多个系统部件被集成到该模块中。图1E是质谱仪100的实施例的示意图，质谱仪100包括可插、可替代模块148以及经配置接纳模块148的支撑基部140。离子源102、离子阱104、检测器118和样品入口124中的每个被集成到模块148中。

[0254] 模块148也包括从模块向外延伸的多个电极142。在模块148内，电极142被连接到模块内的每个部件，例如，连接到离子源102、离子阱104和检测器118。

[0255] 图1E中还显示了支撑基部140(例如，印刷电路板)，控制器108、电压源106和压力调节子系统120被安装在该支撑基部140上。支撑基部140包括多个电极144，其经配置可释放啮合和脱离模块148的电极142。在某些实施例中，例如，电极142是管脚，以及电极144是经配置容纳电极142的管座。另选地，电极144可以是管脚，以及电极142可以是经配置容纳该管脚的管座。通过模块148的电极142与支撑基部的对应电极144对准，模块148可以通过在图1E中的箭头所示的方向施加力来连接到支撑基部140，使得模块148可以可释放地连接到支撑基部140或从支撑基部140断开。通过在与所述箭头相反的方向施加力，模块148可以从支撑基部140脱离。

[0256] 支撑基部140的电极144可以连接到控制器108和电压源106，如图1E所示。当在电极142与电极144之间建立连接时，控制器108可以向/从集成到模块148内的每个部件发送和接收信号，如上面关于控制线127所讨论的。此外，电压源106可以向集成到模块148内的每个部件提供电力，如上面关于控制线126所讨论的。

[0257] 安装到支撑基部140的压力调节子系统120经由导管123连接到歧管121。包括一个或多个小孔125的歧管121被安置在支撑基部140上，使得当模块148连接到支撑基部140时，在歧管121与模块148之间建立密封的流体连接。具体地，在歧管121中的小孔125与模块148中的对应小孔之间建立流体连接(未在图1E中示出)。模块148中的小孔可以在离子源102、离子阱104和/或检测器118的壁中形成。当建立密封流体连接时，通过歧管121将气体粒子泵送出模块，压力调节子系统120可以控制模块148的各部件内的气压。

[0258] 模块148的其他配置也是可能的。在某些实施例中，例如，检测器118不是模块148的一部分，而是改为安装到支撑基部140。在此类配置中，检测器118被安置在支撑基部140上，使得当模块148连接到支撑基部140时，在离子阱104与检测器118之间建立密封的流体连接。建立密封流体连接允许在离子阱104内的循环离子从阱喷出并使用检测器118检测，并且也允许压力调节子系统120在检测器118中维持减小的气压(例如，在100mTorr与100Torr之间)。

[0259] 在特定实施例中，压力调节子系统120可以被集成到模块148中。例如，压力调节子系统120可以附接到离子阱104的下侧并直接连接到模块148内的气路128。压力调节子系统120也电连接到模块148的电极142。当模块148连接到支撑基部140时，压力调节子系统120可以通过电极142向/从控制器108和电压源106发送和接收电信号。

[0260] 在图1E中示出的质谱仪100的模块化配置提供若干优点。例如，在运行质谱仪100期间，特定部件会被分析物残留污染。例如，分析物残留会粘到离子阱104的壁，降低离子阱104能够分离离子的效率，并污染其他物质的分析物。通过将离子阱104集成到模块148内，如果离子阱104被污染，整个模块148可以在现场容易和快速替换，确保质谱仪100可以快速返回到运行状态，即使未受训练的用户也可进行上述操作。同样，如果离子源102或检测器118被污染或遭受失效，模块148可以容易被质谱仪100的用户替换以使质谱仪100返回运行。

[0261] 在图1E中示出的模块化配置也确保质谱仪100保持紧凑和便于携带。在某些实施例中，例如，模块148的最大尺寸(例如，模块148上任意两个点之间的最大直线距离)是10cm或更小(例如，9cm或更小，8cm或更小，7cm或更小，6cm或更小，5cm或更小，4cm或更小，3cm或更小，2cm或更小，1cm或更小)。

[0262] 减少功能的模块148(例如，被粘到离子源102、离子阱104和/或检测器118的内壁的分析物粒子污染的模块)可以再生并返回使用。在某些实施例中，为使模块148返回正常运行，该模块可以在其安装到质谱仪100内时被加热。加热可以使用安装到支撑基部140上的加热元件127来完成。如图1E所示，加热元件127被安置在支撑基部140上，使得当模块148连接到支撑基部140时，加热元件127接触模块148的各部件中的一个或多个(例如，离子源102、离子阱104和检测器118)。

[0263] 通过引导电压源106向加热元件127施加合适的电位，控制器108可以经配置激活加热元件127。加热的开始以及加热的温度和持续时间可以由质谱仪100的用户来控制，例如，通过激活显示器116上的控件和/或将用户配置设定输入到存储单元114中。在特定实施例中，控制器108可以经配置自动确定模块148的再生是恰当的。例如，控制器108可以监测一段时间内的测出离子电流，并且如果离子电流在特定时间内(例如，1小时或更多，5小时或更多，10小时或更多，24小时或更多，2天或更多，5天或更多，10天或更多)下降超过阈值

量(例如,25%或更多,50%或更多,60%或更多,70%或更多),那么,控制器108确定模块148的再生是必要的。

[0264] 虽然在图1E中,加热元件127安装在支撑基部140上,其他配置也是可能的。在某些实施例中,例如,加热元件147是模块148的一部分,并且可以附接,使得其直接接触模块148的各部件的部分或全部(例如,离子源102,离子阱104,以及检测器118)。

[0265] 在特定实施例中,模块148可以从质谱仪100移出以用于再生。例如,当模块148表现出减少的功能(例如,由质谱仪100的用户确定,或使用上述标准通过控制器108自动确定)时,模块148可以从质谱仪100移除并加热以恢复其正常运行状态。加热可以通过各种方式来完成,这包括在通用烘箱中加热。在某些实施例中,质谱仪100可以包括专用插入加热器,其包括经配置容纳模块148的狭槽。当模块插入到狭槽中并且加热器被激活时,模块被加热以恢复其功能。

[0266] 虽然离子源102、离子阱104和检测器118通常经配置检测和鉴定各种化学物质,但是在特定实施例中,这些部件可以经具体更改用于检测特定类别的物质。在某些实施例中,离子源102可以经具体配置用于特定物质。例如,可以向离子源102的电极施加不同电位以从气体粒子生成正或负的离子。此外,施加到离子源102的电极的电位的幅值可以改变以控制特定物质离子化的效率。一般来说,根据化学结构,不同物质具有不同的电离亲和力。通过调节离子源102的各电极之间的极性和电位差,各种物质的电离可以被周密控制。

[0267] 在特定实施例中,离子阱104可以经具体配置用于特定物质。例如,离子阱104的内部尺寸(例如,内部直径)可以经选择有利于具有更高质荷比的离子的捕获和检测。

[0268] 在某些实施例中,在离子源102、离子阱104和检测器118中的一个或多个内的内部气压可以经选择有利于更软或更硬的电离机制,或正或负的离子生成。此外,施加到离子源102和离子阱104的各电极的电位的幅值和极性可以经选择有利于特定电离机制。如上所讨论的,不同物质具有不同的电离亲和力,并且可以以一种比其他方式更有效的方式电离(例如,根据一个机制)。通过调节气压和施加到质谱仪100内的各个电极的电位,该质谱仪可适于具体检测各种各样的物质和各种类别的物质。另外,通过调节离子阱104的几何形状和/或施加到其电极的电位,可以选择离子阱104的质量窗(例如,可以保持在离子阱104内的循环轨道中的离子的质荷比的范围)。

[0269] 在特定实施例中,离子源102可以包括经更改用于特定类型物质的特定类型的电离器。例如,基于辉光放电电离、电喷雾质谱电离、电容性放电电离、介质势垒放电电离的电离源以及本文公开的其他电离器类型的任何电离源可以用在离子源102中。

[0270] 在某些实施例中,检测器118可以经具体更改用于特定类型的检测任务。例如,检测器118可以是本文公开的检测器中的任一个或多个。检测器可以在具体配置中例如以矩阵形式布置,具有多个检测元件,诸如随后将要讨论的多个法拉第杯检测器,和/或在检测器118内具有任何布置。除了经更改用于检测特定物质以外,检测器118还可以经更改用于特定类型的离子源和离子阱。例如,检测器118内的检测元件的布置和类型可以经选择对应于离子阱104内的离子室的布置,具体地,其中,离子阱104具体包括多个离子室。

[0271] 在特定实施例中,(例如,离子源102和/或离子阱104和/或检测器118的)模块148的一个或多个内部表面可以包括一种或多种涂层和/或表面处理。该涂层和/或表面处理可以适于特定应用,包括检测特定类型的物质,在特定气压范围内运行,和/或在特定施加的

电位运行。可以用于更改用于特定物质和/或应用的模块148的涂层和表面处理的示例包括特氟隆®(更为普遍的,含氟聚合物涂料)、阳极氧化处理的表面、镍、铬。

[0272] 模块148的其他部件也可以适于检测特定物质或类别物质。例如,样品入口124可以配有过滤器(例如,图7B中的过滤器706,其将在后面的章节中讨论)其经配置选择性只允许特定类别的物质进入质谱仪100,或同样,与其他通道相比,延缓特定材料进入质谱仪。在某些实施例中,例如,过滤器可以包括HEPA过滤器(或类似类型的过滤器),其从进入样品入口124的气体粒子的流量去除固态、微米大小的粒子诸如尘粒。在特定实施例中,过滤器可以包括分子筛型过滤器,其从进入样品入口124的气体粒子的流量去除水蒸气。这两种类型的过滤器不过滤大气气体粒子(例如,氮分子和氧分子),并改为允许大气气体粒子通过并进入质谱仪100的气路128。在本公开提到过滤器-诸如不去除或过滤大气气体粒子的过滤器706的情况下,应当理解该过滤器允许碰到该过滤器的大气气体粒子的至少95%或更多通过。

[0273] 因此,在某些实施例中,质谱仪100可以包括多个可替换模块148。某些模块可以是相同的,并且可以彼此直接替换(例如,在污染的情况下)。其他模块可以经配置用于不同的运行模式。例如,多个可替换模块148可以经配置检测不同类别的物质。操作质谱仪100的用户可以选择合适的模块用于特定类别的物质,并且可以在开始分析之前,将选定模块插到支撑基部140中。为分析不同类别的物质,用户可以从支撑基部140脱离第一模块,选择新模块并将新模块插到支撑基部140中。结果,质谱仪100的各部件用于各种不同应用的再配置是快速和直接了当的。模块也可以经具体配置用于不同类型的量度(例如,使用不同的电离方法,施加到离子阱104的各电极的不同捕获和/或喷射电位,和/或不同检测方法)。一般来说,多个可替换模块148中的每个可以包括本文公开的任一特征。因此,某些模块可以基于离子源而不同,某些模块可以基于离子阱而不同,以及某些模块可以基于检测器而不同。特定模块可以基于这些部件中的不止一个部件而彼此不同。

[0274] 在某些实施例中,一个或多个附接机构可以用于将模块148固定到支撑基部140。参照图1F,模块148包括第一附接机构195,其以延伸件的形式在支撑基部140上与第二附接机构197啮合。在某些实施例中,附接机构195可以被安置在支撑基部140上,并且互补的附接机构包含在模块148上。在某些实施例中,附接机构195可以是与附接机构197可旋转啮合的凸轮,例如,附接机构197包括经配置容纳凸轮的凹槽。在特定实施例中,由柔性材料诸如橡胶和/或硅酮形成的一个或多个密封件193(例如,O环,垫片,和/或其他密封件)可以被安置以密封模块148与支撑基部140之间的连接。

[0275] 在特定实施例中,附接机构195和197可以被键控,使得模块148将只能在单一方向连接到支撑基部140。键控附接机构具有防止用户在不正确方向安装模块148的优点。

[0276] 在某些实施例中,可以使用其他的附接机构。例如,支撑基部140和/或模块148可以包括将模块148固定到支撑基部140的夹紧装置199。可以使用一个或多个夹紧装置。另外,除了其他附接机构以外,还可以使用夹紧装置。

[0277] 在下列章节中,将详细讨论质谱仪100的不同部件,并且也将讨论质谱仪100的不同运行模式。

[0278] II离子源

[0279] 一般来说,离子源102经配置生成电子和/或离子。在离子源102从要被分析的气体

粒子直接生成离子的情况下，通过施加到离子源192和离子阱104的合适电位，离子随后从离子源102传送到离子阱104。根据施加到离子源102的电极的电位的幅值和极性以及要被分析的气体粒子的化学结构，通过离子源102生成的离子可以是正或负离子。在某些实施例中，通过离子源102生成的电子和/或离子可以与要被分析的中性气体粒子碰撞以从气体粒子生成离子。在运行离子源102期间，根据要被分析的气体粒子的化学结构和离子源102的运行参数，各种离子化机制可以同时在离子源102内出现。

[0280] 通过在比传统质谱仪更高的内部气压下运行，本文公开的紧凑型质谱仪可以使用各种离子源。具体地，小的并且需要相对适度的电功率量运行的离子源可以用在质谱仪100中。在某些实施例中，例如，离子源102可以是辉光放电电离(GDI)源。在特定实施例中，离子源102可以是电容性放电离子源。

[0281] 根据运行所需的功率量和离子源的尺寸，各种其他类型的离子源也可以用在质谱仪100中。例如，适合用在质谱仪100中的其他离子源包括介质势垒放电离子源和热离子放射源。作为进一步示例，基于电喷雾电离(ESI)的离子源可以用在质谱仪100中。此类源可以包括但不限于采用解吸电喷雾电离(DESI)、二次离子电喷雾电离(SESI)、萃取电喷雾电离(EESI)和纸喷雾电离(PSI)的源。作为另一示例，基于激光解吸电离(LDI)的离子源可以用在质谱仪100中。此类源可以包括但不限于采用电喷雾辅助的激光解吸电离(ELDI)和矩阵辅助的激光解吸电离(MALDI)的源。更进一步，基于技术诸如大气固体分析探针(ASAP)、解吸常压化学电离(DAPCI)、解吸常压光致电离(DAPPI)和声波喷雾电离(SSI)的离子源可以用在质谱仪100中。基于纳米纤维阵列(例如，碳纳米纤维阵列)的离子源也适合使用。前述离子源的其他方面和特征以及适用于质谱仪100中的离子源的其他示例例如在下列出版物中公开，每个出版物的全部内容通过引用并入本文：Alberici等人在Anal.Bioanal.Chem.398:265-294(2010)中发表的“Ambient mass spectrometry:bringing MS into the‘real world’”Chem.bringing MS into the‘real world’”；Harris等人在Anal Chem.83:4508-4538(2011)中发表的“Ambient Sampling/Ion Mass Spectrometry:Applications and Current Trends”；以及Chen等人在IEEE Trans.Electron Devices 58(7):2149-2158(2011)中发表的“A Micro Ionizer for Portable Mass Spectrometers using Double-gated Isolated Vertically Aligned Carbon Nanofiber Arrays”。

[0282] GDI源用在质谱仪100中是特别有利的，因为它们紧凑并且很适于在低功率下运行。不过仅当气压充足这些源出现活跃时，才发生辉光放电。通常，例如，GDI只限于约200mTorr和以上的气压下运行。在低于200mTorr的气压下，保持稳定的辉光放电是困难的。结果，GDI不用于在1mTorr或更小的气压下运行的传统的质谱仪中。不过，因为本文公开的质谱仪通常在100mTorr与100Torr之间的气压下运行，所以可以使用GDI源。

[0283] 图2A示出GDI源200的示例，其包括前电极210和后电极220。两个电极210和220与外壳122一起形成GDI室230。在某些实施例中，GDI源200也可以包括包住源的电极的外壳。例如，在图2B中示出的实施例中，GDI室230具有独立的外壳232，其包住电极210和220。外壳232经由固定元件250(例如，夹紧装置、螺丝、螺纹紧固件或其他类型紧固件)被固定或安装到外壳122。

[0284] 如图2A和2B所示，前电极210具有小孔202，要被分析的气体粒子通过该小孔进入

GDI室230。如在本文所使用的，术语“气体粒子”是指气体状态的原子、分子或作为独立实体存在的聚集气体分子。例如，如果要被分析的物质是有机化合物，那么，该物质的气体粒子是该物质的气相单分子。

[0285] 小孔202被绝缘管204环绕。在图2A和2B中，小孔202连接到样品入口124(未示出)，使得由于在质谱仪100外面的大气与GDI室230之间的压力差，要被分析的气体粒子被吸入GDI室230中。除了要被分析的气体粒子以外，大气气体粒子也由于压力差被吸入GDI室230中。如在本文中所使用的，术语“大气气体粒子”是指空气中的气体原子、分子，诸如氧气和氮气分子。

[0286] 在某些实施例中，另外的气体粒子可以被引入GDI源200中以帮助在源中生成电子和/或离子。例如，如上面关于图1A所解释的，质谱仪100可以包括连接到气路128的缓冲气源150。来自缓冲气源150的缓冲气体粒子可以被直接引入GDI源200中，或可以被引入气路128的另一部分中和扩散到GDI源200中。缓冲气体粒子可以包括氮分子和/或惰性气体原子(例如，He、Ne、Ar、Kr、Xe)。部分缓冲气体粒子可以被电极210和220电离。

[0287] 另选地，在某些实施例中，包括要被分析的气体粒子和大气气体粒子的气体粒子的混合物才是被引入GDI室230中的气体粒子。在此类实施例中，只有要被分析的气体粒子可以在GDI室230中被电离。在某些实施例中，要被分析的气体粒子和准许的大气气体粒子两者可以在GDI室230中被电离。

[0288] 虽然在图2A和2B中小孔202被安置在前电极210的中心，但是更普遍地，小孔202可以被安置在GDI源200中的不同位置。例如，小孔202可以被安置在GDI室230的连接到样品入口124的侧壁中。此外，如先前所描述的，在某些实施例中，样品入口124可以被安置使得要被分析的气体粒子被直接吸入质谱仪100的各部件的另一部件中，诸如离子阱104或检测器118。当气体粒子被吸入不同于离子源102的部件中时，气体粒子通过气路128扩散到离子源102中。另选或附加地，当要被分析的气体粒子被直接吸入部件诸如离子阱104中时，离子源102可以生成随后与离子阱104内要被分析的气体粒子碰撞的离子和/或电子，从而从离子阱中的气体粒子直接生成离子。

[0289] 因此，根据要被分析的气体粒子在什么地方(例如，样品入口124的位置)被引入质谱仪100，离子可以从在各种不同位置的气体粒子生成。离子生成可以直接发生在离子源102中，并且所生成的离子可以通过向离子源102和离子阱104的电极施加合适的电位被传送到离子阱104中。离子生成也可以发生在离子阱104中，当带电粒子诸如由离子源102所生成的离子(例如，缓冲气体离子)和电子进入离子阱104时，其与要被分析的气体粒子碰撞。离子生成可以同时发生在多个地方(例如，在离子源102和离子阱104中)，所有生成的离子最终在离子阱104内被捕获。虽然在本节的讨论主要集中离子从离子源102内的感兴趣气体粒子直接生成，但是本文公开的各方面和特征也普遍适用于离子从质谱仪100的其他部件中的感兴趣气体粒子的二次生成。

[0290] 电极210和电极220之间可以使用各种不同的间距。一般来说，生成离子的效率由若干因素确定，包括在电极210与220之间的电位差，GDI源200内的气压，电极210与220之间的距离234，以及被电离气体粒子的化学结构。通常，距离234相对小以确保GDI源200保持紧凑。在某些实施例中，例如，电极210与220之间的距离234是1.5cm或更小(例如，1cm或更小，0.75cm或更小，0.5cm或更小，0.25cm或更小，0.1cm或更小)。

[0291] GDI室230中的气压通常通过压力调节系统120来调节。在某些实施例中,GDI室230中的气压与离子阱104和/或检测器118中的气压大致相同。在某些实施例中,GDI室230中的气压与离子阱104和/或检测器118中的气压不同。通常,GDI室230中的气压是100Torr或更小(例如,50Torr或更小,20Torr或更小,10Torr或更小,5Torr或更小,1Torr或更小,0.5Torr或更小)和/或100mTorr或更大(例如,200mTorr或更大,300mTorr或更大,500mTorr或更大,1Torr或更大,10Torr或更大,20Torr或更大)。

[0292] 在运行期间,当由在控制器108的控制下的电压源106在前电极210与后电极220之间施加电压差时,GDI源200生成自持的辉光放电(或等离子体)。在某些实施例中,电压差可以是200V或更高(例如,300V或更高,400V或更高,500V或更高,600V或更高,700V或更高,800V或更高)以保持辉光放电。如上面所讨论的,检测器118检测由GDI源200生成的离子,并且电极210与220之间的电位差可以由控制器108调节以控制由GDI源200生成的离子的速率。

[0293] 在某些实施例中,GDI源200直接安装在支撑基部140上,并且电极210和220通过支撑基部140直接连接到电压源106,如图1D所示。在某些实施例中,GDI源200形成模块148的一部分,并且电极210和220连接到模块148的电极142,如图1E所示。当模块148插入支撑基部140中时,电极210和220通过接合电极142的电极144连接到电压源106。

[0294] 通过施加与由电压源106建立的接地电位不同极性的电位,GDI源200可以经配置在不同电离模式运行。例如,在GDI源200的典型运行期间,气体粒子的少部分由于随机过程(例如,热碰撞)在GDI室230中被初始电离。在某些实施例中,电位施加到前电极210和后电极220,使得前电极210充当阴极以及后电极220充当阳极。在这个配置中,在GDI室230中生成的正离子由于室内的电场被驱向前电极210。阴离子和电子被驱向后电极220。电子和离子可以与其他气体粒子碰撞,生成更大数量的离子。负离子和/或电子通过后电极220退出GDI室230。

[0295] 在某些实施例中,合适电位施加到前电极210和后电极220,使得前电极210充当阳极以及后电极220充当阴极。在这个配置中,在GDI室230中生成的带正电离子通过后电极220离开该室。带正电离子可以与其他气体粒子碰撞,生成更大数量的离子。

[0296] 在某些实施例中,用户界面112可以包括允许用户选择上述电离模式中的一种的控件。恰当电离模式的选择可以取决于要被质谱仪100分析的物质的性质。某些物质更高效电离为正离子,以及运行模式经选择使得后电极220充当阴极。在这种模式运行所生成的正离子通过后电极220退出GDI源200。另选地,某些物质更高效电离为负离子,以及运行模式经选择使得后电极220充当阳极。在这种模式运行所生成的负离子通过后电极220退出GDI源200。一般来说,控制器108经配置监测由检测器118测量的离子电流,并且基于离子电流选择GDI源的合适运行模式。另选或附加地,质谱仪100的用户可以使用在用户界面112上显示的控件或通过将合适配置设定输入质谱仪100的存储单元114中来选择合适的运行模式。

[0297] 在离子生成并通过任一运行模式从后电极220离开GDI室230后,离子通过端盖电极304进入离子阱104中。一般来说,后电极220可以包括一个或多个小孔240。小孔240的数量和它们的横截面形状通常被选择以形成入射到端盖电极304的相对均匀离子空间分布。在GDI室230中生成的离子通过后电极220中的一个或多个小孔240离开该室时,由于碰撞和空间电荷相互作用,各离子相互之间空间散开。结果,离开GDI源200的各离子的整体空间分

布是发散的。通过选择具有特定横截面形状的合适数量小孔240，离开GDI源200的离子的空间分布可以被控制，使得该分布交叠或填充在端盖电极304中形成的所有小孔240。在某些实施例中，附加的离子光学元件(例如，离子透镜)可以被安置在后电极220与端盖电极304之间以进一步操控从GDI源200涌出的离子的空间分布。不过，本文公开的紧凑离子源的特别优点在于可以获得合适的离子分布而没有在后电极220与端盖电极304之间附加元件。

[0298] 在某些实施例中，后电极220包括单孔240。小孔240的横截面形状可以是圆形、方形、矩形的，或可以更普遍对应于规则或不规则的n边多边形。在某些实施例中，小孔240的横截面形状可以是不规则的。

[0299] 在某些实施例中，后电极220包括不止一个小孔240。一般来说，后电极220可以包括任何数量的小孔(例如，2个或更多，4个或更多，8个或更多，16个或更多，24个或更多，48个或更多，64个或更多，100个或更多，200个或更多，300个或更多，500个或更多)，小孔之间的间隔可以是任何量，假设在GDI源200中使用时后电极220充分保持机械稳定的情况下。图2C-2H示出后电极220的各个实施例，每个实施例具有不同的小孔240。如图2C-2H所示，后电极220通常可以是圆形、矩形或任何其他形状。

[0300] 图2C示出具有圆形小孔阵列242的后电极220。虽然在图2C中示出25个小孔242，但是更普遍地，可以存在任何数量的小孔242。此外，虽然小孔242具有圆形横截面形状，但是更普遍地，可以使用具有任何规则的或不规则横截面形状的小孔242。具有不同横截面形状的小孔也可以用在单个电极220中。一般来说，通过小孔242形成的开口的大小可以根据需要来选择，并且不同大小的小孔242可以存在于单后电极220中。通常，在后电极220中形成的小孔的数量和小孔的大小控制穿过电极的气体压降。因此，小孔大小和数量也可以被选择以实现在运行质谱仪100期间穿过后电极220的特定目标压降。

[0301] 图2D-2G还分别示出具有开口243、244、245和246的后电极220的示例性实施例。在图2D-2G中，开口243、244、245和246可以通过狭缝(例如，连续开口)或在后电极220中形成并彼此隔开的一系列小孔形成。如图2D-2G所示，开口243、244、245和246可以被布置以形成线性开口阵列、同心圆阵列、蛇形通路和螺旋通路。不过，在图2D-2G中示出的实施例仅是示例性的。更为普遍地，各种各样具有不同横截面形状和大小的小孔的布置可以用在后电极220中。

[0302] 图2H示出包括小孔247的六边形阵列的后电极220的实施例。在图2H中示出的六边形阵列和在图2C中示出的方形或矩形阵列是可以在后电极220中形成的规则小孔阵列的示例。不过更为普遍地，各种不同规则小孔阵列可以用在后电极220中，诸如(但不限于)圆形阵列和放射阵列。

[0303] 如图2A和2B所示，离子阱104的端盖电极304也可以包括一个或多个小孔294。在某些实施例中，端盖电极304包括具有圆形、方形、矩形或其他n边多边形形状的横截面形状的单孔294。在某些实施例中，小孔具有不规则横截面形状。

[0304] 更为普遍地，端盖电极304可以包括多个小孔294。为端盖电极304选择特定小孔类型的小孔类型及其布置和标准一般与上面关于后电极220所讨论的类型、布置和标准类似。因此，前述讨论等同适用于在端盖电极304中形成小孔294。

[0305] 如图2A和2B所示，后电极220与端盖电极304的间距隔开一定量244。这些电极之间的间距允许从后电极220涌出的离子尽可能均匀地空间发散填充在端盖电极304中形成的

小孔294。为进一步提高小孔294的均匀填充，在某些实施例中，在后电极220中形成的小孔240的图案可以与在端盖电极304中形成小孔294的图案匹配。

[0306] 更具体地，如图2H中的示例所示，在后电极220中形成的小孔247的图案定义后电极220的横截面形状。同样，在端盖电极304中形成的小孔的图案定义端盖电极304的横截面形状。在某些实施例中，后电极220和端盖电极304的横截面形状是大致匹配的。如在本文所使用的，“大致匹配”意指在后电极220中形成的小孔的相对位置与在端盖电极304中形成的小孔的相对位置至少70％或更多是相同的。对于每个小孔，其位置对应于其质量中心的位置。

[0307] 在某些实施例中，在后电极220中形成的小孔240的图案实际匹配在端盖电极304中形成的小孔294的图案，即，各小孔之间有一一对应关系。一般来说，随着后电极220和端盖电极304的小孔匹配程度的增加，后电极220与端盖电极304之间的距离244可以减小，因为从后电极220涌出的离子更均匀填充端盖电极304中的小孔294。当各电极之间的小孔精确或近乎精确匹配时，距离244甚至可以减小到零(即，后电极220可以被安置直接毗邻于端盖电极304)，使得GDI源200高度紧凑。此外，随着各小孔之间匹配的程度增加，通过减少离子在小孔之间击打端盖电极304的部分的数量，进入小孔294的离子的数量可以达到最大值。结果，离子阱104的离子收集效率可以增加。此外，通过增加离子源102所生成的离子在离子阱104内收集的效率，相对于单孔电极和/或具有不匹配小孔的电极，后电极220和端盖电极304的整体尺寸可以减小。

[0308] 在某些实施例中，后电极220和端盖电极304可以作为单个元件形成，并且在GDI室230中形成的离子可以途径该元件直接进入离子阱104中。在此类实施例中，组合的后电极和端盖电极可以包括如上所述的单孔或多孔。

[0309] 此外，在某些实施例中，离子阱104的端盖电极可以充当GDI源200的前电极210和后电极220。如将在后面详细讨论的，离子阱104包括安置在阱的相对面上的两个端盖电极304和306。通过向这些电极施加合适的电位(例如，如上面引用前电极210和后电极220所述)，端盖电极304可以充当前电极210，以及端盖电极306可以充当后电极220。因此，在这些实施例中，离子阱104也充当辉光放电离子源102。

[0310] 各种运行模式可以用于在GDI源200中生成带电粒子。例如，在某些实施例中，使用连续运行模式。图2I包括曲线图260，其示出恒定偏置电压262施加在GDI源200的前电极210和后电极220之间的连续运行模式的实施例。在这个模式中，带电粒子在离子源内连续生成。

[0311] 在某些实施例中，GDI源200经配置脉冲运行。图2I包括曲线图270，其示出偏置电位272施加在前电极210和后电极220之间持续时间274的脉冲模式运行的实施例。偏置电位272的重复施加定义脉冲运行的重复频率，其对应于连续脉冲之间时间间隔276的倒数。一般来说，在偏置电位272施加到电极期间，时间间隔276的持续时间可以明显大于时间274的持续时间(例如，大约100倍)。在某些实施例中，例如，持续时间274可以是约0.1ms，以及时间间隔276可以是约10ms。更为普遍地，持续时间274可以是5ms或更少(例如，4ms或更少，3ms或更少，2ms或更少，1ms或更少，0.8ms或更少，0.6ms或更少，0.5ms或更少，0.4ms或更少，0.3ms或更少，0.2ms或更少，0.1ms或更少，0.05ms或更少，0.03ms或更少)以及时间间隔276可以是50ms或更少(例如，40ms或更少，30ms或更少，20ms或更少，10ms或更少，5ms或更

少)。

[0312] 当偏置电位272施加到电极时,离子在时间274的持续时间内生成。在某些实施例中,在脉冲模式运行期间的脉冲偏置电位272的时序可以与用于生成高压RF信号482的调制信号412同步,高压RF信号482施加在离子阱104的中心电极,如随后将要详细讨论的。图2I中的曲线图280是用于生成施加在离子阱104的中心电极的RF信号482的调制信号412的曲线。比较曲线图280和曲线图270,当脉冲偏置电位272施加在GDI源200的电极时,调制信号412被断开。这个时间间隔期间,离子在GDI源200中生成。随后,偏置电位272被关闭,并且调制电位282被接通。在时间间隔284期间,离子被捕获并稳定在离子阱104中。随后,在时间间隔286期间,通过增加施加到离子阱104的中心电极的电位的幅值,被捕获离子从离子阱104喷入检测器118中。

[0313] 脉冲模式运行可以具有几种优点。例如,脉冲偏置电位272的重复频率和持续时间和/或幅值可适应存在的要被分析的气体粒子的量和在离子阱104中的气压。一般来说,控制器108监测通过检测器118测量的离子电流,并且基于离子电流的幅值,控制器108可以调节与脉冲模式运行相关联的一个或多个参数。

[0314] 在某些实施例中,例如,控制器108可以调节偏置电位272的幅值。增加偏置电位可以增加在GDI源200中产生离子的速率。

[0315] 在某些实施例中,控制器108可以调节偏置电位272的重复频率。对于某些感兴趣的分析物,增加重复频率可以增加在GDI源200中产生离子的速率。对于其他分析物,减小重复频率可以增加在GDI源200中产生离子的速率。控制器108可以经配置以自适应的方式调节重复频率,直到在GDI源200中生成离子的速率达到合适值。

[0316] 在某些实施例中,控制器108可以经配置调节GDI源200的占空比。参考曲线图270,GDI源200的占空比是指施加偏置电位272的时间274的持续时间对总时间间隔276的比率。控制器108可以经配置调节GDI源200的占空比。例如,占空比可以被减小以减小在GDI源200中产生离子的速率。通过减小产生离子的速率,可以改进所测量离子信号的信噪比,并且可以消除不想要的假峰(例如,当测量源200被断开的离子时,由于由GDI源200产生的不想要带电粒子的峰值)。另选地,占空比可以被增加以增加在GDI源200中产生离子的速率。

[0317] 在某些实施例中,控制器108可以经配置将占空比的值调节在1%与50%之间(例如,在1%与40%之间,在1%与30%之间,在1%与20%之间,在1%与10%之间)。

[0318] 脉冲模式运行的另一重要优点在于当不需要时,例如当源200已生成离子时,施加在电极210与220之间的偏置电位可以被断开。在源200的占空比的大多数时间里,断开偏置电位可以导致运行质谱仪所需的功率的明显减少。

[0319] 另外,脉冲模式运行避免安置在GDI源200与检测器118之间的门或护罩的使用。消除通常用在传统质谱仪中的门和护罩可以节约相当的空间并进一步减少运行质谱仪100所需的功率量。

[0320] 在某些实施例中,GDI源200的运行条件可以使用自动化的校准过程来检查。例如,用户可以激活一个或多个已知基准样品被连续分析的校准过程。假峰的检测(即,不应该在测量频谱中存在的峰值)可以指示GDI源200被污染。例如,电极210和220中的任一个可以被可能产生假峰检测的粘性粒子或残屑嵌入。在某些校准过程中,无样品被喷入,并且假峰在对照质谱仪噪音的背景下检测。GDI源200是否需要被替换的确定可以基于校准结果,例如

基于所检测的假峰的数量和大小。

[0321] 为便于替换，在某些实施例中，离子源102可以被配置为与质谱仪100的其他部件不同的独立模块。例如，如图2B所示，GDI源200可以被实施为通过释放固定元件250容易从质谱仪100的其他部件或从外壳122拆下的单独模块。另选地，电极210和220可以经配置可从GDI室230独立移除的。电极210和220的移除可以通过例如移除集成到毗邻于电极位置的外壳122中的盖子来实现。当盖子从外壳122移除时，裸露的电极可以从GDI室230移除。

[0322] 在某些实施例中，GDI源200可以被清理，而不是被替换。例如，GDI源200可以通过向电极210和220施加对应于逆占空比的偏置电位来清理。图2J示出逆占空比的曲线图263，其中，相对于曲线图270中示出的脉冲模式偏置电位是逆的偏置电位264在清理过程期间被施加到电极210和220。大多数占空比施加的是恒定DC电位，并且仅被持续时间274的短暂电位降中断。这些电位降以时间间隔276重复。不希望被理论约束，据认为快速电压变化便于去除嵌入在电极210和220中的粘性粒子。一旦确定GDI源200被清理(例如，使用上述的校准过程)，GDI源200可以切换到用于生成离子的正常运行(例如，脉冲模式运行)。

[0323] 在某些实施例中，控制器108可以经配置将清理期间的占空比的值调节在50％与100％之间(例如，在50％与90％之间，在50％与80％之间，在50％与70％之间，在50％与60％之间)。逆占空比可以被施加5s或更长的总时间(例如，10s或更长，20s或更长，30s或更长，40s或更长，50s或更长，1分钟或更长，2分钟或更长，3分钟或更长，5分钟或更长)。

[0324] 也可以使用其他方法清理GDI源200的电极，如果它们被污染的话。在某些实施例中，清理气体可以喷入GDI室230中以促进清理电极210和220上的粘性粒子。合适的清理气体可以包括例如惰性气体。此外，在某些实施例中，GDI源200的电极清理也可以通过加热电极210和220变得更容易。在某些实施例中，电极210和220可以从GDI室230去除并在合适的清理液中清理。

[0325] 前述讨论围绕假峰的测量以确定GDI源200是否被污染。更为普遍地，除了假峰检测以外或作为假峰检测的替代方案，也可以使用其他方法。例如，控制器108可以经配置监测检测器118对离子电流的测量。如果检测器118测量的离子信号闪烁或突然改变(例如，跳跃或下降)超出阈值量，或如果平均检测离子/电子信号已衰落到低于特定阈值，那么，控制器108可以自动确定GDI源200的清理或替换是所希望的。

[0326] 各种材料可以用于在离子源102中形成电极，包括GDI源200中的电极210和220。在某些实施例中，离子源102的电极可以从诸如铜、铝、银、镍、金和/或不锈钢的材料制成。一般来说，不容易吸附粘性粒子的材料是有利的，从此类材料形成的电极通常很少需要频繁清理或替换。

[0327] 前述讨论围绕质谱仪100中GDI源200的使用。不过，上述的特征、设计标准、算法和方面同样适用于可以用在质谱仪100中的其他类型离子源，诸如电容性放电源和热离子放射源。具体地，电容性放电源很好适用于运行质谱仪100的相对高气压。因此，前面的描述也适用于此类源。例如，图2K示出包括电离源266阵列的电容性放电源265的示例。图2K中的插图示出单电离源266，其具有导线267和涂覆绝缘体的导线268。当偏置电位由电压源106施加到导线267时，从源266中的每个源发生等离子体放电。通过电容性放电源265生成的离子进入离子阱104中，离子在此被捕获并选择性喷出用于检测。电容性放电源的附加方面和特征在例如美国专利No.7274015中公开，该专利的全部内容通过引用并入本文。

[0328] 由于紧凑、间隔紧密电极的使用，离子源102的整体尺寸可以很小。离子源102的最大尺寸是指离子源上任何两点之间的最大线性距离。在某些实施例中，例如，离子源102的最大尺寸是8.0cm或更小(例如，6.0cm或更小，5.0cm或更小，4.0cm或更小，3.0cm或更小，2.0cm或更小，1.0cm或更小)。

[0329] III离子阱

[0330] 如上面章节I所描述的，通过离子源102生成的离子在离子阱104内被捕获，该离子在通过向离子阱104的电极施加电位所形成的电场的影响下循环。在收到来自控制器108的控制信号后，电压源106向离子阱104的电极施加电位。为使循环离子从离子阱104喷出用于检测，控制器108向电压源106传输控制信号，这促使电压源106调制离子阱104内射频(RF)场的幅值。RF场的幅值的调制促使离子阱104内的循环离子从轨道脱落并退出离子阱104，进入它们被检测的检测器118。

[0331] 如在上面章节I所解释的，为确保质谱仪100紧凑并在运行期间消耗相对少量的电功率，质谱仪100仅在压力调节子系统120中使用单个小机械泵以调节其内部气压。结果，质谱仪100在比传统质谱仪中的内部压力更高的内部气压下运行。为确保吸入到质谱仪100的气体粒子被快速电离和分析，质谱仪100的内部体积比传统质谱仪的内部体积小的多。通过减小质谱仪100的内部体积，压力调节子系统120能够将气体粒子快速吸入到质谱仪100中。此外，通过确保快速电离和分析，质谱仪100的用户可以快速获得关于特定物质的信息。质谱仪100的更小内部体积已添加在运行期间易于污染的更小内部表面面积的优点。传统质谱仪使用各种不同质量分析仪，它们中的许多具有在运行时维持在低压的较大内部体积，和/或在运行期间消耗大量功率。例如，某些质谱仪使用线性四极质量滤波器，由于其在轴方向的延伸故具有较大内部体积，这允许质量过滤和大的电荷存储容量。某些传统质谱仪使用磁扇形质量过滤器，这通常也较大并会消耗大量功率以生成质量过滤的磁场。传统质谱仪还可以使用双曲型离子阱，其具有大的内部体积，并且也会难以制造。

[0332] 与前述传统离子阱技术相反，本文公开的质谱仪使用紧凑、圆柱形离子阱用于捕获和分析离子。图3A是离子阱104的实施例的横截面示意图。离子阱104包括圆柱形中心电极302，两个端盖电极304和306，以及两个绝缘垫片308和310。电极302、304和306分别经由控制线312/314和316连接到电压源106。电压源106经由控制线127e连接到控制器108，控制器108经由控制线127e向电压源106传送信号，命令电压源106向离子阱104的电极施加电位。

[0333] 在运行期间，由离子源102生成的离子通过电极304中的小孔320进入离子阱104。电压源106向电极304和306施加电位以在离子阱104内形成轴向场(例如，围绕轴318对称)。轴向场将离子轴向限制在电极304与306之间，确保离子不通过电极306中的小孔320或通过小孔322离开离子阱。电压源106也向中心电极302施加电位以在离子阱104内生成径向限制场。径向场将离子径向限制在电极302的内部小孔内。

[0334] 轴向场和径向场两者均存在于离子阱104内，离子在阱内循环。每个离子的轨道几何由若干因素确定，包括电极302、304和306的几何、施加到电极的电位的幅值和符号和离子的质荷比。通过改变施加到中心电极302的电位的幅值，特定质荷比的离子将从阱104内的轨道掉出并通过电极306退出阱进入检测器118。因此，为选择性分析不同质荷比的离子，电压源106(在控制器108的控制下)以渐进的方式改变施加到电极302的电位的幅值。随着

施加电位的幅值改变，不同质荷比的离子从离子阱104喷出并由检测器118检测。

[0335] 离子阱104内的电极302、304和306通常由导电材料诸如不锈钢、铝或其他金属形成。垫片308和310通常由绝缘材料诸如陶瓷、特氟隆®(例如，氟化聚合物材料)、橡胶或各种塑料制成。

[0336] 在端盖电极304和306、在中心电极302以及在垫片308和310中的中心开口可以具有相同的直径和/或形状或不同的直径和/或形状。例如，在图3A中示出的实施例中，在电极302以及垫片308和310中的中心开口具有圆形横截面形状和直径c_0。并且端盖电极304和306具有横截面形状为圆形以及直径为$c_2<c_0$的中心开口。如图3A所示，电极和垫片中的开口与轴318轴向对准，使得当电极和垫片被组装到夹层结构中时，电极和垫片中的开口形成通过离子阱104延伸的轴向开口。

[0337] 一般来说，电极302中的中心开口的直径c_0可以根据需要来选择以实现当从离子阱104选择性喷出离子时的特定目标分辨能力并且也控制质谱仪100的总体内部体积。在某些实施例中，c_0约为0.6mm或更大(例如，0.8mm或更大，1.0mm或更大，1.2mm或更大，1.4mm或更大，1.6mm或更大，1.8mm或更大)。端盖电极304和306中的中心开口的直径c_2也可以根据需要来选择以实现当从离子阱104喷出离子时的特定目标分辨能力并且确保对未被喷出的离子的适当限制。在某些实施例中，c_2约为0.25mm或更大(例如，0.35mm或更大，0.45mm或更大，0.55mm或更大，0.65mm或更大，0.75mm或更大)。

[0338] 电极302以及垫片308和310中的组合开口的轴向长度c_1也可以根据需要来选择以确保适当的离子限制并实现当离子从离子阱104喷出时的特定目标分辨能力。在某些实施例中，c_1约为0.6mm或更大(例如，0.8mm或更大，1.0mm或更大，1.2mm或更大，1.4mm或更大，1.6mm或更大，1.8mm或更大)。

[0339] 根据经验已确定当c_0和c_1被选择使得c_1/c_0大于0.83时，质谱仪100的分辨能力更大。因此，在某些实施例中，c_0和c_1被选择使得c_1/c_0的值是0.8或更大(例如，0.9或更大，1.0或更大，1.1或更大，1.2或更大，1.4或更大，1.6或更大)。

[0340] 由于离子阱104的相对小尺寸，可以在离子阱104内被同时捕获的离子的数量由若干因素限制。一个此类因素是离子之间的空间电荷相互作用。随着被捕获离子的密度增加，被捕获循环离子的平均间距减小。随着离子(可以是正电荷或负电荷中的任一种)被迫靠近在一起，被捕获离子的推斥力的幅值增加。

[0341] 为克服可以在离子阱104内同时被捕获的离子数量的限制并增加质谱仪100的容量，在某些实施例中，质谱仪100可以包括具有多个室的离子阱。图3B示出具有以六边形阵列布置的多个离子室330的离子阱104的示意图。每个室330以与图3A中的离子阱104相同的方式起作用，并且包括两个端盖电极和圆柱形中心电极。端盖电极304以及端盖电极306的一部分在图3B中示出。端盖电极304通过连接点334连接到电压源106，以及端盖电极306通过连接点332连接到电压源106。

[0342] 图3C是图3B沿截面线A-A的横截面示意图。其示出沿截面线A-A下降的五个离子室330中的每个。电压源106经由单连接点(未在图3C中示出)连接到中心电极302。结果，通过向电极302施加合适的电位，电压源106(在控制器108的控制下)可以在每个室330内同时捕获离子，并且从每个室330喷出选定质荷比的离子。

[0343] 在某些实施例中，离子阱104中离子室330的数量可以与在端盖电极304中形成的

小孔的数量匹配。如在章节II中所述，端盖电极304一般可以包括一个或多个小孔。当端盖电极304包括多个小孔时，离子阱104也可以包括多个离子室330，使得在端盖电极304中形成的每个小孔对应于不同的离子室330。通过这种方式，在离子源102内生成的离子可以通过离子阱104高效收集并在离子室330内捕获。如上所述，多个室的使用减少了被捕获离子之间的空间电荷相互作用，增加了离子阱104的捕获能力。一般来说，离子室330的位置和横截面形状可以与在章节II中讨论的小孔240和294的布置和形状相同。

[0344] 作为示例，参考图3B，端盖电极304包括以六边形阵列布置的多个小孔。在电极304中形成的每个小孔与对应的离子室330匹配，并因此，离子室330也以六边形阵列来布置。

[0345] 在某些实施例中，离子室330的数量、布置和/或横截面形状不与端盖电极304中的小孔的布置匹配。例如，端盖电极304可以只包括一个或少量的小孔294，而离子阱104可以包括多个离子室330。因为使用多个离子室330增加离子阱104的捕获能力，使用多个离子室可以提供多个优点，即使离子室的布置不与端盖电极304中的小孔的布置匹配。

[0346] 离子阱104的附加特征在例如美国专利No.6469298在美国专利No.6762406在美国专利No.6933498中公开，上述每个专利的全部内容通过引用并入本文。

[0347] IV电压源

[0348] 电压源106基于控制器108在控制线127e上传送的信号向质谱仪100的部件提供运行功率和电位。如上面在章节I中所讨论的，本文公开的质谱仪的主要优点是其紧凑尺寸和相对于传统质谱仪明显减少的功耗。虽然质谱仪100通常可以以各种电压源运行，但是如果电压源106是高效源，尽可能多地减少质谱仪100的功耗是有利的。

[0349] 不过，尺寸既小又能生成足以驱动质谱仪100的部件的电压的高效电压源并不容易商业获得。图4A示出高效电压源106的实施例的示意图，其经配置提供施加到离子阱104的中心电极302的高压RF信号482。在运行期间，电压源106可以放大从电源440接收的电压，同时更改高压RF信号482的波形以适合用于特定质谱仪测量。

[0350] 电源106的设计允许质谱仪100在高压RF信号482的整个不同扫描阶段以高功率效率运行。在每个阶段，功率效率被定义为输入电功率对输出电功率的比率。在某些实施例中，电源106的效率在电压放大的所有阶段可以是40％或更高(例如，50％或更高，60％或更高，70％或更高，80％或更高，90％或更高)。相反，传统的功率放大器(射极跟随器或A类放大器)通常在最高放大级具有最大效率，但是在较低放大级具有明显下降的效率。因此，传统功放对需要扫描电压放大的应用可能是低效和不适合的。

[0351] 除了高效运行以外，电压源106允许相对低电源(例如，电池)提供激活质谱仪100的各个部件所需的电力和电位。结果，质谱仪100具有紧凑的形状并且比传统质谱仪更轻。

[0352] 参考图4A，电压源106包括比例-积分-微分(PID)控制回路420，开关式电源430，可选的线性调节器450，D类放大器460，以及谐振电路480。在某些实施例中，电压源106的各个部件可以被集成到一模块中，该模块可以被插入到支撑基部140中。这允许电压源106如果有缺陷，容易用另外模块替换。另选地，在某些实施例中，电压源106的任何或更多部件可以被实施为独立模块，并且可以单独更换。在某些实施例中，某些或全部部件可以直接安装到支撑基部140。在图4A中示出的每个部件是相对低成本并且通常可商业购得，这允许电压源106以成本的有效方式来制造。

[0353] 在运行期间，PID控制回路420从调制信号发生器410接收调制信号412，该发生器

可以是或可以不是电压源106的部件。图4B示出调制信号412的示例，其中，信号的幅值变化(即，包络)被示为时间的函数。调制信号412的包络与输出高压RF信号482的包络近似相关。基于调制信号412，PID控制回路420分别向开关式电源430和线性调节器450(如果存在的话)发送控制信号422和424。

[0354] 开关式电源430经配置接收来自电源440的输入功率信号442，该电源可以包括电池(例如，锂离子、锂聚合物、镍镉或镍氢电池)。由电源440提供的电压通常在0.5V与约13V之间。作为示例，电压可以是约7.2V。开关式电源430基于控制信号422放大输入功率信号442，从而产生调制电压信号432，该信号被发送到线性调节器450(如果存在的话)。调制电压信号432的示例在图4C中示出。调制电压信号432通常具有在0V与约25V之间的幅值。

[0355] 在某些实施例中，开关式电源430包括用于高效功率放大的切换调节器。在运行期间，输入功率信号442可以小于、等于或大于输出电压信号432。当电源440是电池时，这个特征是特别有利的。不像线性电源，开关式电源430(其是非线性放大器)可以在不同放大状态之间切换时耗散很少功率或不耗散功率，从而导致高功率转换。另外，由于更小的内部变压器尺寸和重量，开关式电源430通常比传统线性电源更紧凑和更轻。

[0356] 线性调节器450可选包含在电压源106中。如果线性调节器450不在电压源106中存在，那么，更改的电压信号432从开关式电源430直接发送到D类放大器460。另选地，当线性调节器450在电压源106中存在时，线性调节器450从开关式电源430接收调制电压信号432和从PID控制回路420接收控制信号424。

[0357] 线性调节器450起过滤更改的电压信号432中的不规则的作用。来自线性调节器450的过滤的电压信号442由D放大器460接收。通常，线性调节器450包括低压降稳压器，其中，恒定低压降可以确保电压源106的整体效率由于线性调节器450的存在而仅轻微下降。在某些实施例中，由线性调节器450接收的控制信号424用于将输出电压信号442的包络更改为适合测量特定物质的质谱。

[0358] 基准波发生器470可选包含在电压源106中。如果存在，基准波发生器470向D类放大器460提供基准波信号472。一般来说，基准波信号472具有在射频范围(例如，从约0.1MHz至约50MHz)的频率。例如，在某些实施例中，基准波信号472可以具有1MHz或更高(,2MHz或更高，4MHz或更高，6MHz或更高，8MHz或更高，15MHz或更高，30MHz或更高)的频率。

[0359] 图4D示出基准波信号472的示例。在图4D中，基准波信号472是方波。不过，更为普遍地，基准波发生器470可以生成各种不同波形的基准波信号472。在某些实施例中，例如，基准波信号472可以对应于三角波、正弦波或近正弦波中的任一种。

[0360] D类放大器460接收基准波信号472(如果基准波发生器470存在)和过滤的电压信号442(或更改的电压信号432，如果线性调节器450不存在)两者，并且从这些输入信号生成调制的RF信号462。图4E示出调制RF信号462的示例。在这个示例中，信号462的时间间隔是约10ms。信号462的幅值在0V与约30V之间改变。RF信号462中载波的频率与基准波信号472的频率相同或近似相同。RF信号462的包络(例如，由图4E中的虚线表示)与过滤的电压信号442(或更改的电压信号432)的包络相同或近似相同。

[0361] 图4F示出D类放大器460的实施例的示意图。D类放大器460包括一对晶体管441。在D类放大器460内，基准波信号472被过滤的电压信号442(或更改的电压信号432)的包络调制以生成RF信号462。

[0362] RF信号462由谐振电路480接收，该电路也在图4F中简要示出。谐振电路480包括电感器486和电容器488。在某些实施例中，电感器486和电容器488的位置可以相对于在图4F中示出的位置交换。电感器486的电感值和电容器488的电容值通常被选择成使得电路480的谐振频率大致匹配于基准波信号472的频率。

[0363] 在某些实施例中，谐振电路480具有60或更大(例如，80或更大，100或更大)的Q因数。当RF信号462被施加到谐振电路480时，高压RF信号482在电容器488上生成。一般来说，高压RF信号482的波形与RF信号462的波形相同或近似相同，除了高压RF信号482的幅值明显大于RF信号462的幅值以外。例如，在某些实施例中，高压RF信号482的最大幅值是100V或更高(例如，500V或更高，1000V或更高，1500V或更高，2000V或更高)。一般来说，谐振电路480的高Q因数允许在RF信号482中生成大幅值电压。

[0364] D类放大器460和谐振电路480的组合是有利的，有几个原因，包括低功耗和频率调节。另一个重要的优点是，并不需要纯正弦基准波信号472这一事实。相反，D类放大器460和谐振电路480的组合可以使用具有不同波形的基准波信号。特定波形诸如方波往往可以以比纯正弦波形更高的保真度生成。结果，D类放大器460和谐振电路480的组合允许以高稳定性的基准波信号运行。

[0365] 返回图4A，高压RF信号482可以通过可选的信号监测器490来监测，该监测器可以存在或不存在于电压源106中。信号监测器490从谐振电路480接收反馈信号484，该信号通常是高压RF信号482的较低幅值副本。虽然反馈信号484通常具有比高压RF信号482更小的幅值，但是在所有点上，反馈信号484的幅值通常与高压RF信号482的幅值成正比。

[0366] 由信号监测器490从谐振电路接收的反馈信号可以作为控制信号492被传送到PID控制回路420和/或基准波发生器470。基于控制信号492，PID控制回路420可以向开关式电源430和线性调节器450发送经更改的控制信号422和424，以优化高压RF信号482的波形和幅值。例如，PID控制回路420可以基于控制信号492更改经更改的电压信号432的包络，从而使高压RF信号482的幅值最大。

[0367] 在某些实施例中，谐振电路480的谐振频率可以不与基准波信号472的频率精确匹配。例如，这是可能发生的，因为电感器486的电感值和/或电容器488的电容值不精确。此外，电感器486的电感和/或电容器488的电容会随着时间改变。这是可能发生的，例如，如果D类放大器460使RF信号462的输出频率变形，使得RF信号462的频率不再与基准波信号472的频率匹配。这种不匹配可能潜在降低电压源106的效率，因为谐振电路480不再是RF信号462的有效谐振器。

[0368] 可以实施几种技术以补偿这种不匹配。在某些实施例中，在监测控制信号492时，基准波信号472的频率可以被基准波发生器470扫描。基准波发生器470可以将基准波信号472的最佳频率选择为使控制信号492的幅值最大的频率。

[0369] 在某些实施例中，电容器488的电容可以在谐振电路480中改变，以确定哪个电容值使控制信号492的幅值最大。为此目的，电容器488可以是可变电容器。

[0370] 用于补偿频率不匹配的前述技术可以在硬件、软件或两者中直接实施。例如，控制器108可以经配置执行这些方法中的一种或多种以补偿频率不匹配。控制器108可以经配置自动和/或不断地执行这些方法以持续地优化频率匹配。另选地，控制器108可以经配置仅在从用户接收指令时，例如，当用户激活用户界面112上的控件时执行这些方法。当由控制

器108执行时，本文公开的用于补偿频率不匹配的技术通常在5分钟或更短(例如，3分钟或更短，2分钟或更短，1分钟或更短)的时间内完成。

[0371] 高压RF信号482被施加到离子阱104(例如，离子阱104的中心电极302)以选择性喷出被捕获离子供检测器118检测。除了其他因素之外，使用离子阱104可以被分析的质荷比的范围还取决于RF信号482的轮廓(例如，包络和最大幅值)。通过改变RF信号482的这些特征，电压源106(在控制器108的控制下)可以选择被分析质荷比的范围。

[0372] 在某些实施例中，电压源106可以包括多个基准波发生器470和/或多个谐振电路480。在运行期间，特定基准波发生器470和特定谐振电路480的组合可以被控制器108选择以生成使用离子阱104用于分析特定质荷比范围的合适高压RF信号482。为改变被分析质荷比的范围，控制器108选择不同的基准波发生器470和/或谐振电路480。

[0373] V检测器

[0374] 检测器118经配置检测离开离子阱104的带电粒子。带电粒子可以是正离子、负离子、电子或这些的组合。

[0375] 范围广泛的不同检测器可以用在质谱仪100中。图5A示出包括法拉第杯500的检测器118的实施例。法拉第杯500具有圆形基部502和圆柱形侧壁504。一般来说，法拉第杯500的形状和几何可以被改变以优化质谱仪100的灵敏度和分辨率。

[0376] 例如，基部502可以具有各种横截面形状，包括方形、矩形、椭圆形、圆形或任何其他规则或不规则形状。基部502例如可以是扁平或弯曲的。

[0377] 图5B示出法拉第杯500的侧视图。在某些实施例中，侧壁504的长度506可以是20mm或更短(例如，10mm或更短，5mm或更短，2mm或更短，1mm或更短，或甚至0mm)。一般来说，长度506可以根据不同标准来选择，包括保持质谱仪100的紧凑性，提供在检测带电粒子期间所需的选择性，以及分辨率。在某些实施例中，侧壁504符合基部502的横截面形状。不过更为普遍地，侧壁504未被要求符合基部502的形状，并且可以具有不同于基部502的形状的各种横截面形状。而且，侧壁504不必一定是圆柱形的形状。在某些实施例中，例如，侧壁504可以沿法拉第杯500的轴线方向是曲线的。

[0378] 一般来说，法拉第杯500可以是相对小的。法拉第杯500的最大尺寸对应于杯上任何两点之间的最大线性距离。在某些实施例中，例如，法拉第杯500的最大距离是30mm或更小(例如，20mm或更小，10mm或更小，5mm或更小，3mm或更小)。

[0379] 通常，基部502的厚度和/或侧壁504的厚度被选择以确保带电粒子的有效检测。在某些实施例中，例如，基部502和/或侧壁504的厚度是5mm或更小(例如，3mm或更小，2mm或更小，1mm或更小)。

[0380] 法拉第杯500的侧壁504和基部502通常从一种或几种金属形成。可以应用制造法拉第杯500的金属包括例如铜、铝和银。在某些实施例中，法拉第杯500可以在基部502和/或侧壁504的表面上具有一层或多层涂层。涂层可以从诸如铜、铝、银和金的材料形成。

[0381] 在运行质谱仪100期间，在带电粒子从离子阱104喷出时，带电粒子可以漂移或加速到法拉第杯500中。一旦在法拉第杯500中，带电粒子在法拉第杯500的表面被捕获(例如，基部502和/或侧壁504的表面)。被基部502或侧壁504中的任一个捕获的带电粒子生成电流，该电流被测量(例如，通过检测器118内的电路)并报告给控制器108。如果带电粒子是离子，所测量的电流是离子电流，并且其幅值与被测量离子的丰度成本比。

[0382] 为获得分析物的质谱，施加到离子阱104的中心电极302的电位的幅值被改变(例如，可变幅值信号，高压RF信号482被施加)以从离子阱104选择性喷出特定质荷比的离子。对于对应于不同质荷比的幅值的每个变化，对应于选定质荷比的喷出离子的离子电流使用法拉第杯500来测量。随施加到电极302的电位而变的测量离子电流-其对应于质谱-被报告给控制器108。在某些实施例中，控制器108基于用于离子阱104的算法和/或校准信息将所施加的电压转换为用于离子阱104的算法和/或校准信息的特定质荷比。

[0383] 在带电粒子通过端盖电极306从离子阱104喷出后，通过在检测器118与端盖电极306之间形成电场，带电粒子可以被加速以撞击检测器118。在某些实施例中，在检测器118包括法拉第杯500的情况下，例如，法拉第杯500的导电表面保持在由电压源106建立的接地电位，并且正电位被施加到端盖电极306。通过这些施加的电位，正离子从端盖电极306被排斥到法拉第杯500的接地导电表面。此外，流经端盖电极306的电子被吸引到端盖电极306，并因此不撞击法拉第杯500。因此，这种配置导致改进的信噪比。更为普遍地，在这个配置中，法拉第杯500可以是不同于接地的电位，只要其在比端盖电极306更低的电位即可。

[0384] 在某些实施例中，检测带负电粒子(例如，负离子和/或电子)是所期望的。为检测此类粒子，法拉第杯500被偏置比端盖电极306更高的电压以将带负电粒子吸引到法拉第杯500。

[0385] 在某些实施例中，检测器118可以包括法拉第杯500，其具有被绝缘区域隔开的两个区域。不同偏置电位可以被施加被每个区域。例如，图5C示出法拉第杯500，其具有被绝缘区域530隔开的两个导电区域510和520。通过将端盖电极306接地和向区域510和520分别施加正和负偏置电压，区域510可以检测带负电粒子以及区域520可以检测带正电粒子。这种配置可以在测量质谱期间提供附加信息，因为带正电离子和带负电离子可以同时被检测。另选地，通过施加偏置电位首先激活区域510和520中的一个，并且然后激活另一个区域，带正电离子和带负电离子的测量可以按顺序进行。作为替代，在某些实施例中，检测器118可以包括两个法拉第杯500，其中不同的偏置电压被施加到每个法拉第杯500用于检测带正电离子和带负电离子。

[0386] 在某些实施例中，检测器118可以被直接固定到外壳122。例如，图5C示出外壳122，其包括接触法拉第杯500的一个或多个电极550和552。另选地，在某些实施例中，一个或多个电极550和552可以被直接附接到法拉第杯500。在某些实施例中，一个电极可以用于偏置法拉第杯500，而另一个电极可以用于测量由法拉第杯500生成的电流。另选地，在某些实施例中，可以使用相同电极施加偏置电压并且测量电流。

[0387] 在某些实施例中，外壳122可以经配置使得检测器118容易被安装或移除。例如，如图5C所示，外壳122包括开口，法拉第杯500可以由夹持元件540(例如，螺丝或其他紧固件)稳固安装和保持在其中。这在法拉第杯500破损或受污染时是特别有利的，所示法拉第杯破损或受污染可以在如上所述的质谱测量期间通过检测等离子体峰值来确定。受污染的法拉第杯500可以通过从外壳122中的开口移除杯500来替换，并且安装替换件。受污染的法拉第杯可以现场修理或清理。例如，法拉第杯500可以在轻便烘箱中烘烤，使得法拉第杯500表面上的粘性粒子被蒸发。经清理的法拉第杯可以被插回外壳122中。这种可替换性允许质谱仪100的最小停机时间，即使质谱仪的特定部件被污染。在某些实施例中，受污染的法拉第杯500可以通过加热来清理(例如，通过基部502和侧壁504施加高电流)，同时法拉第杯仍然安

装在外壳122中。从基部502和/或侧壁504的表面释放的受污染粒子可以通过压力调节子系统120来去除。

[0388] 在某些实施例中，法拉第杯500可以被实施为可插、可替换模块148的部件，如在章节I中所述。在模块化配置中，法拉第杯500可以形成为例如导电材料的板中的凹槽。该板可以直接附接到模块148的另一部件，诸如离子阱104，使得端盖电极306中的小孔与凹槽对准，并且从离子阱104喷出的离子直接进入法拉第杯。具有不同法拉第杯直径的模块可以用于提供不同类型分析物的选择性检测。

[0389] 图5D示出检测器118，其包括法拉电杯检测器500的阵列，其可以是或可以不是单片形成。检测器阵列可以是有利的，例如，当离子阱104包括离子室330的阵列时。端盖电极306可以包括与每个离子室对准的多个小孔560，使得从每个室喷出的离子只经过小孔560中的一个。在经过小孔560中的一个小孔时，离子入射到法拉第杯检测器500阵列中的一个杯上。这种基于阵列喷射和检测离子的方法可以明显增加检测喷出离子的效率。在如图5D所示的阵列几何中，每个法拉第杯500的大小可以符合在端盖电极306中形成的每个小孔560的大小。

[0390] 在某些实施例中，偏置的排斥栅格或磁场可以被置于法拉第杯500的前面或防止二次电荷粒子放射，这会使从离子阱104喷出的粒子的测量失真。另选地，在某些实施例中，来自法拉第杯500的二次放射可以用于检测喷出离子。

[0391] 虽然前面的讨论围绕低功耗运行和紧凑大小的法拉第杯检测器，更为普遍地，各种其他检测器可以用在质谱仪100中。例如，其他合适的检测器包括电子倍增器，光电倍增管探测器，闪烁检测器，图像电流检测器，戴利检测器，基于荧光的检测器，以及入射带电粒子生成光子并且光子随后被检测的其他检测器(即，采用电荷到光子转导机制的检测器)。

[0392] VI压力调节子系统

[0393] 压力调节子系统120一般经配置调节气路128中的气压，气路128包括离子源102、离子阱104和检测器118的内部体积。如上面在章节I中所述，在运行质谱仪100期间，压力调节子系统120将质谱仪100内的气压维持在100mTorr或更大(例如，200mTorr或更大，500mTorr或更大，700mTorr或更大，1Torr或更大，2Torr或更大，5Torr或更大，10Torr或更大)，和/或100Torr或更小(例如，80Torr或更小，60Torr或更小，50Torr或更小，40Torr或更小，30Torr或更小，20Torr或更大)。

[0394] 在某些实施例中，压力调节子系统120将质谱仪100的某些部件内的气压保持在上述范围内。例如，压力调节子系统120可以将离子源102和/或离子阱104和/或检测器118中的气压保持在100mTorr与100Torr之间(例如，在100mTorr与10Torr之间，在200mTorr与10Torr之间，在500mTorr与10Torr之间，在500mTorr与50Torr之间，在500mTorr与100Torr之间)。在某些实施例中，在离子源102、离子阱104和检测器118中的至少两个中的气压是相同的。在某些实施例中，在所有三个部件中的气压是相同的。

[0395] 在某些实施例中，在离子源102、离子阱104和检测器118中的至少两个中的气压相对少量不同。例如，压力调节子系统120可以将离子源102、离子阱104和检测器118中的至少两个的气压保持100mTorr或更小(例如，50mTorr或更小，40mTorr或更小，30mTorr或更小，20mTorr或更小，10mTorr或更小，5mTorr或更小，1mTorr或更小)的不同。在某些实施例中，在离子源102、离子阱104和检测器118的所有三个中的气压相差100mTorr或更小(例如，

50mTorr或更小,40mTorr或更小,30mTorr或更小,20mTorr或更小,10mTorr或更小,5mTorr或更小,1mTorr或更小)。

[0396] 如图6A所示,压力调节子系统120可以包括涡旋泵600,其具有泵容器606,其带有一个或多个交替涡旋法兰602和604。涡旋法兰602和604之间的相对轨道运动捕获气体和液体,导致泵送动作。在某些实施例中,涡旋法兰604可以被固定,而涡旋法兰602偏心地按轨道运动,伴有旋转或不旋转。在某些实施例中,涡旋法兰602和604两者偏离旋转中心运动。图6B示出涡旋法兰602的示意图。涡旋法兰几何的示例包括(但不限于)渐开线、阿基米德螺旋和混合曲线。

[0397] 涡旋法兰602和604的轨道运动允许涡旋泵600在运行期间只生成少量的振动和低噪音。因此,涡旋泵600可以直接耦接到离子阱104,并在质谱测量期间没有引入实质的不利影响。为进一步降低振动耦合,沿轨道运动的涡旋法兰602可以用简单的质量块来均衡。因为涡旋泵具有少量的运动部件并只生成很少量的振动,此类泵的可靠性通常非常高。

[0398] 涡旋泵600通常在尺寸上是紧凑的,并且质量很轻。在某些实施例中,例如,涡旋泵600的最大尺寸(例如,涡旋泵600上任何两点间的最大线性距离)小于10cm(例如,小于8cm,小于6cm,小于5cm,小于4cm,小于3cm,小于2cm)。在某些实施例中,涡旋泵600的重量小于1.0kg(例如,小于0.8kg,小于0.7kg,小于0.6kg,小于0.5kg,小于0.4kg,小于0.3kg,小于0.2kg)。

[0399] 涡旋泵600的小尺寸和重量允许其以各种配置被并入质谱仪100中。在某些实施例中,例如,如图1D和1E所示,涡旋泵600(作为压力调节子系统120的一部分)可以直接安装到支撑基部140(例如,印刷电路板)。在某些实施例中,涡旋泵600(作为压力调节子系统120的一部分)可以被实施为可插、可替换模块148的部件,并且可以直接附接到模块148的其他部件中的一个或多个,诸如离子源102、离子阱104和/或检测器118。

[0400] 图6A示出直接安装到印刷电路板608的涡旋泵600。泵入口610直接连接到歧管121的泵入口620。涡旋泵600通过紧固元件630和固定元件632固定到板608,紧固元件630和固定元件632可以被安置在与泵入口610和620的位置间隔1cm或更大(例如,2cm或更大,3cm或更大,4cm或更大)的位置,从而减小泵600与板608之间的振动耦接。另选地,代替在泵600与歧管121之间的直接连接,在某些实施例中,导管(例如,柔性和刚性管)可以将泵入口610连接到泵入口620。

[0401] 适合用在压力调节子系统120中的涡旋泵可以从例如安捷伦技术公司(加利福尼亚州的圣克拉拉)购得。除了涡旋泵以外,其他泵也可用在压力调节子系统120中。合适泵的示例包括隔膜泵、隔膜泵和罗茨鼓风机泵。

[0402] 使用小的简单机械泵提供相对于用在传统质谱仪中的泵送方案的若干优点。具体地,传统质谱仪通常使用多个泵,所述泵中的至少一个在高旋转频率运行。在高旋转频率运行的大型机械泵生成耦合到质谱仪的其他部件中的机械振动,从而在测量信息中生成不良噪音。另外,即使采取措施隔离此类振动的部件,隔离机构通常增加质谱仪的尺寸,有时候增加的相对大。此外,在高频运行的大型泵消耗大量的电功率。因此,传统质谱仪包括用于满足这些要求的大型电源,这进一步增大此类仪器的尺寸。

[0403] 相反,单机械泵诸如涡旋泵可以用在本文公开的质谱仪中,以控制系统的每个部件中的气压。通过在相对低旋转频率运行机械泵,振动进入质谱仪的其他部件中的机械耦

合可以减少很多或消除。此外，通过在低旋转频率运行，泵消耗的功率量小到其恰当要求可以由电压源106满足。

[0404] 根据经验确定在某些实施例中，通过在每分钟小于6000转(例如，每分钟小于5000转，每分钟小于4000转，每分钟小于3000转，每分钟小于2000转)的频率运行单机械泵，该泵能够保持质谱仪100内的期望气压，并且与此同时，其功耗要求可以由电压源106满足。

[0405] VII外壳

[0406] 如在章节I中所述，质谱仪100包括外壳122，其密闭质谱仪的部件。图7A示出外壳122的实施例的示意图。样品入口124被集成到外壳122内并经配置将气体粒子引入气路128中。被集成到外壳122中的还有显示器116和用户界面112。

[0407] 在某些实施例中，显示器116是无源或有源液晶或发光二极管(LED)显示器。在某些实施例中，显示器116是触摸屏显示器。控制器108连接到显示器116，并且可以使用显示器116向质谱仪100的用户显示各种信息。被显示信息可以包括例如关于被质谱仪100扫描的一种或多种物质的身份的信息。该信息还可以包括质谱(例如，作为质荷比的函数的由检测器118检测的离子丰度的测量结果)。另外，被显示信息可以包括用于质谱仪100的运行参数和信息(例如，所测量的离子电流，施加到质谱仪100的各种部件的电压，与安装在质谱仪100中的当前模块148相关联的名称和/或身份，与通过质谱仪100识别的物质相关联的警告，以及所定义的用户运行质谱仪100的偏好)。信息诸如所定义的用户偏好和运行设定可以被存储在存储单元114中并由控制器108检索用于显示。

[0408] 在某些实施例中，如图7A所示，用户界面112包括集成到外壳122中的一系列控件。可以通过质谱仪100的用户激活的控件可以包括按钮、滑块、摇杆、开关和其他类似的控件。通过激活用户界面112的控件，质谱仪100的用户可以开始各种功能。例如，在某些实施例中，所述控件中的一个控件的激活开始质谱仪100的扫描，在此期间，质谱仪通过样品入口124吸入样品(例如，气体粒子)，从气体粒子生成离子，并随后使用离子阱104和检测器118捕获并分析离子。在某些实施例中，在执行新扫描之前，所述控件中的一个控件的激活复位质谱仪100。在某些实施例中，质谱仪100包括当被用户激活时重新启动质谱仪100的控件(例如，在改变质谱仪100的一个部件诸如模块148和/或连接到样品入口124的过滤器之后)。

[0409] 当显示器116是触摸屏显示器时，用户界面112的一部分甚至或全部可以被实施为显示器116上的一系列触摸屏控件。就是说，用户界面112的控件的某些或全部可以被表示为用户通过手指接触显示器116被激活的显示器116的触敏区。

[0410] 如在章节I中所述，在某些实施例中，质谱仪100包括可替换、可插模块148，其包括离子源102、离子阱104和(可选地)检测器118。当质谱仪100包括可插模块148时，外壳122可以包括开口以允许用户进入外壳122内部以替换模块148，而无需拆下外壳122。图7B是包括可插模块148的质谱仪100的横截面视图。在图7B中，外壳122包括开口和密封开口的隔板704。当模块148要被替换时，质谱仪100的用户可以打开隔板704以暴露质谱仪100的内部。隔板704被安置，使得其提供对可插模块148的直接访问，允许用户从支撑基部140拔掉模块148，并将另一模块安装就位，而无需拆下外壳122。用户随后可以通过紧固隔板704再次密封开口。

[0411] 在图7B中，隔板704以可收缩门的形式实施。不过更为普遍的，各种各样的隔板可

以用于密封外壳122中的开口。例如，在某些实施例中，隔板704可以被实施为可从外壳122完全可拆卸的盖。

[0412] 一般来说，质谱仪100可以包括各种各样的不同样品入口124。例如，在某些实施例中，样品入口124包括小孔，其经配置将质谱仪100周围环境的气体粒子直接吸入气路128中。样品入口124可以包括一个或多个过滤器706。例如，在某些实施例中，过滤器706是HEPA过滤器，并阻止灰尘和固体粒子进入质谱仪100。在某些实施例中，过滤器706包括捕获水分子的分子筛材料。

[0413] 如先前所讨论的，传统质谱仪在低内部气压下运行。为保持低气压，传统质谱仪包括附接到样品入口的一个或多个过滤器。这些过滤器是选择性的，并且滤除特定类型物质的粒子，诸如大气气体粒子(例如，氮分子和/或氧分子)以阻止其进入质谱仪。过滤器还可以经具体修改用于特定类别的分析物，诸如生物分子，并且可以滤除其他类型的分子。结果，用于传统质谱仪的过滤器(其可以包括夹紧阀，以及从诸如聚二甲基硅氧烷的材料形成的膜滤器，其中，聚二甲基硅氧烷允许物质的选择性传输)过滤气体粒子的进入流以从该流去除特定类型的粒子。没有此类过滤器，传统质谱仪不能运行，因为不能保持低内部气压，并且，准许进入质谱仪的某些粒子将阻止某些部件的运行。作为示例，用在传统质谱仪中的热电离离子源在存在适度浓度的大气氧时不运行。

[0414] 在传统质谱仪中使用特定物质过滤器具有若干缺陷。例如，因为过滤器是选择性的，在没有改变过滤器和/或运行条件的情况下只可以分析少量的分析物，这是很麻烦的。具体地，对于质谱仪的未受训用户，选择正确的选择性过滤器来再配置用于指定分析物的质谱仪可能是困难的。此外，用于传统质谱仪中的过滤器引入时间延迟，因为分析物粒子不通过过滤器瞬间扩散。根据过滤器的选择性和分析物的浓度，在首次遭遇分析物的时间与足够数量的分析物离子被测到以生成质谱信息的时间之间引入相当大的延迟。

[0415] 不过，本文公开的质谱仪在更高压力下运行，没有必要包括过滤器诸如膜滤器以保持质谱仪内的低气压。通过在没有使用在传统质谱仪中使用的类型的过滤器的情况下运行，本文公开的质谱仪可以分析更大数量或不同类型的样品而无需重要的再配置，并且可以更快执行分析。而且，因为本文公开的质谱仪的部件通常对大气气体诸如氮气和氧气不敏感，质谱仪可准许这些气体与感兴趣分析物的粒子一起，这明显增加分析速度并减少质谱仪的其他部件(例如，压力调节子系统120的泵送负载)的运行要求。

[0416] 因此，一般来说，用在本文公开的质谱仪中的过滤器(例如，过滤器706)不过滤进入样品入口124的气体粒子的流中的大气气体粒子(例如，氮分子和氧分子)。具体地，过滤器706允许遭遇过滤器的至少95％或更多的大气气体粒子通过。

[0417] 不同类型的过滤器706是可替换的，并且如果它们变脏或无效，可以由质谱仪100的用户更换。在某些实施例中，质谱仪100可以包括多个过滤器706，并且用户可以根据被分析样品的性质选择性安装任一种或多种过滤器。

[0418] 在某些实施例中，样品入口124可以经配置接收直接入射的要被分析的物质。例如，过滤器706可以由附接到样品入口124的样品入射口来更换。在使用质谱仪100期间，通过样品入射口入射到样品入口124的物质被引入气路128，被离子源102电离，并被离子阱104和检测器118分析。

[0419] 在某些实施例中，质谱仪100可以包括附接到外壳122将不同类型的分析物引入质

谱仪100的各种样品引入模块。样品引入模块750在图7C中简要示出。模块750附接到外壳122，使得外壳122中的电极752建立到模块750中的对应电极的电气连接。电极752连接到支撑基部140上的控制器108和电压源106。电压源106可以通过电极752向模块750供应电力，并且控制器108可以向/从模块750传送和接收信号。当模块750连接到外壳122(例如，使用螺栓或键控连接，或磁附接机构，或各种其他附接机构中的任一种)时，电压源106自动供应电力以激活模块750。一旦激活，模块750向控制器108报告其身份，控制器108可以在显示器116上显示关于激活模块的信息。控制器108可以从存储单元114检索配置设定和其他运行参数，使得质谱仪100经配置自动分析通过模块750引入的样品。

[0420] 一般来说，各种样品引入模块可以与质谱仪100一起使用。例如，在某些实施例中，模块750是蒸汽热吸收模块。在某些实施例中，模块750是低温等离子体模块。在某些实施例中，模块750是电喷雾电离模块。这些模块中的每个模块可以互换地用于质谱仪100，以分析范围广泛的不同样品。

[0421] 除了可更换模块750以外，质谱仪100还可以包括各种传感器。例如，在某些实施例中，质谱仪100可以包括耦接到控制器108的极限传感器708。极限传感器708检测质谱仪周围环境中的气体粒子，并向控制器108报告气体浓度。在用户运行质谱仪100期间，控制器108监测极限传感器708测量气体的时间长度和浓度，并且如果气体粒子对用户的暴露超出阈值浓度或阈值时间限值，向用户显示告警(例如，经由显示器116)。关于阈值暴露浓度和时间限值的信息可以被存储在例如存储单元114中，并由控制器108检索。可以被用在质谱仪100中的示例极限传感器包括可燃/LEL气体传感器、光致电离传感器、电化学传感器以及温度和湿度传感器。

[0422] 在某些实施例中，质谱仪100可以包括爆炸危险传感器710。连接到控制器108的爆炸危险传感器710检测质谱仪100附近爆炸物质的存在。各种爆炸物质的阈值浓度可以存储在存储单元114中，并由控制器108检索。在运行质谱仪100期间，当由传感器710测量的一种或多种爆炸物质的浓度超出阈值时，控制器108可以经由显示器116向质谱仪100的用户显示告警消息。在某些实施例中，告警消息可以建议用户停止使用质谱仪100，或在辅助护罩(例如，笼状物)中使用以阻止点燃一种或多种爆炸物质。可以用于质谱仪100的爆炸危险传感器包括例如可燃传感器，该传感器可购自MSA(宾夕法尼亚蔓越橘镇区)和RAE Systems(加利福尼亚圣若泽)。

[0423] 外壳122的形状通常经设计使得用户能使用任一只手或两只手舒适操作。一般来说，外壳122可以具有范围广泛的不同形状。不过，由于选择和集成了本文公开的质谱仪100的部件，外壳122通常是紧凑的。如图7A和7B所示，不管整体形状如何，外壳122具有对应于外壳外表面上任意两点间最长直线距离的最大尺寸a_1。在某些实施例中，a_1是35cm或更小(例如，30cm或更小，25cm或更小，20cm或更小，15cm或更小，10cm或更小，8cm或更小，6cm或更小，4cm或更小)。

[0424] 此外，由于质谱仪100内的部件的选择，质谱仪100的整体重量相对于传统质谱仪明显下降。在某些实施例中，例如，质谱仪100的总重量是4.5kg或更轻(例如，4.0kg或更轻，3.0kg或更轻，2.0kg或更轻，1.5kg或更轻，1.0kg或更轻，0.5kg或更轻)。

[0425] VIII运行模式

[0426] 一般来说，质谱仪100根据各种不同的运行模式来运行。图8A是示出在不同运行模

式中被执行以扫描和分析样品的一般步骤顺序的流程图800。在第一步骤802中，开始样品的扫描。在某些实施例中，扫描由质谱仪100的用户开始。例如，质谱仪100可以经配置以“一键式”模式运行，在此模式中，用户可以简单通过激活用户界面112中的控件来开始样品的扫描。图8B示出质谱仪100的实施例，其中，用户界面112包括用于开始扫描的控件820。当控件820被用户激活时，样品(在图8B中示为气体粒子822)的扫描被开始。

[0427] 在某些实施例中，控制器108可以基于一个或多个传感器读数自动开始扫描。例如，当质谱仪100包括极限传感器诸如光致电离检测器和/或LEL传感器时，控制器108可以监测这些传感器的信号。如果传感器指示潜在感兴趣的物质已被测出，例如，控制器108可以开始扫描。一般来说，范围广泛的不同传感器类事件或情况可以被控制器108自动用于开始扫描。

[0428] 在某些实施例中，质谱仪100可经配置在“连续扫描”模式中运行。在质谱仪100已被置于连续扫描模式之后，在固定时间间隔期满后，扫描被重复开始。时间间隔由用户配置，并且时间间隔的值可以被存储在存储单元114中并由控制器108检索。因此，在图8A的步骤802中，当质谱仪100处于连续扫描模式中时，扫描由该质谱仪开始。

[0429] 在扫描已开始后，样品在步骤804被引入到质谱仪100中。各种不同的方法可以用于将样品引入质谱仪中。在某些实施例中，在样品由气体粒子(例如，图8B中的气体粒子822)组成的情况下，控制器108激活阀129，打开该阀以准许气体粒子进入质谱仪100中(例如，进入气路128中)。如果样品入口124包括过滤器706，则气体粒子经过过滤器，过滤器滤除气体粒子流中的灰尘和其他固态材料。如上面所公开的，压力调节子系统将气路128中的气压保持在低于大气压的程度。结果，当阀129打开时，气体粒子822通过气路128与质谱仪100周围环境之间的压力差被吸入样品入口124中。另选或附加地，压力调节子系统120可以促使气体粒子流入质谱仪100中。

[0430] 在某些实施例中，样品可以经由直接入射被引入质谱仪100中。如上面在章节VII中所公开的，质谱仪100可以包括连接到样品入口124的样品入射口。样品入射口允许质谱仪100的用户将样品直接入射到样品入口124供分析。一旦入射，样品进入气路128。

[0431] 在某些实施例中，处于部分电离状态的样品可以被静电或电动力吸入质谱仪100中。例如，通过向质谱仪100中的电极施加合适的电位，带电粒子可以加速进入质谱仪100中(例如，通过样品入口124)。

[0432] 接下来，在步骤806中，样品在离子源102中电离。如上面所公开的，样品入口124可以相对于质谱仪100的其他部件被安置在沿气路128的不同位置。例如，在某些实施例中，样品入口124被安置，使得被引入质谱仪100中的气体粒子首先从样品入口124进入离子阱104。在某些实施例中，样品入口124被安置，使得被引入质谱仪100中的气体粒子首先从样品入口124进入离子源102。在某些实施例中，样品入口124被安置，使得气体粒子首先从样品入口124进入检测器118。而且，样品入口124可以被安置，使得进入质谱仪100的气体粒子进入在离子源102和/或离子阱104和/或检测器118之间的点的气路128。

[0433] 在样品(例如，气体粒子822)在沿气路128的点被引入质谱仪100之后，某些气体粒子进入离子源102。如果样品入口124未被安置使得气体粒子822直接进入离子源102，那么，气体粒子822进入源102的运动可以通过扩散来实现。一旦在离子源102中，控制器108激活离子源102以电离气体粒子，如在章节II中所公开的。

[0434] 接下来，在步骤806中生成的离子在步骤808中在离子阱104中被捕获。如在上面章节II中所公开的，离子从离子源102到离子阱104的运动通常在离子源102与离子阱104之间生成的电场的影响下发生。一旦在离子阱104内，离子被在阱内的电场捕获，并在中心电极302中的开口内循环，以及在端盖电极304与306之间循环。离子阱104内的电场在控制器108的控制下由电压源106生成，电压源106向电极302、304和306施加合适的电位以生成捕获场。

[0435] 在步骤810中，在离子阱104中的循环离子从该阱选择性喷出。如在章节III中所讨论的，离子从阱104的选择性喷出在控制器108的控制下发生，控制器108向电压源106传送信号以改变施加到中心电极302的RF电压的幅值。在电位的幅值改变时，在中心电极302的内部中心的电场的幅值也改变。此外，在中心电极302内的场的幅值改变时，具有特定质荷比的循环离子从中心电极302内的循环轨道掉出，并通过端盖电极306中的一个或多个小孔从离子阱104喷出。控制器108经配置根据定义函数(例如，线性幅值扫掠)命令电压源106扫掠施加电位的幅值，以选择性将特定质荷比的离子从离子阱104喷入检测器118中。扫掠施加电位的速率可以由控制器108自动确定(例如，以实现质谱仪100的目标分辨能力)，和/或可以由质谱仪100的用户来设定。

[0436] 在离子已从离子阱104选择性喷出之后，它们在步骤812中被检测器118检测。如在章节V中所公开的，可以使用各种不同的检测器来检测离子。例如，在某些实施例中，检测器118包括用于检测喷出离子的法拉电杯。

[0437] 对于由施加到离子阱104中的中心电极302的电位的幅值来选择的每个质荷比，检测器118测量与具有选定质荷比的被测出的离子的丰度相关的电流。所测出的电流被传送到控制器108。结果，控制器108从检测器118接收的信息对应于测出的离子的丰度，离子丰度作为离子质荷比的函数。这个信息对应于样品的质谱。

[0438] 更为普遍地，控制器108经配置根据离子的质荷比检测离子，这意味着控制器108检测或接收与离子的检测相关并与离子的质荷比相关的信号。在某些实施例中，控制器108检测离子或接收关于离子的直接作为质荷比的函数的信息。在某些实施例中，控制器108检测离子或接收关于离子的作为另一量的函数的信息，该量可以是诸如施加到离子阱104的电位并与离子的质荷比相关。在所有此类实施例中，控制器108根据质荷比检测离子。

[0439] 在步骤814中，从检测器118接收的信息由控制器108分析。一般来说，为分析该信息，控制器108(例如，控制器108中的电子处理器110)比较样品的质谱和基准信息以确定样品的质谱是否表示任何已知的物质。基准信息可以被存储在例如存储单元114中，并由控制器108检索以执行分析。在某些实施例中，控制器108还可以从存储在远处位置的数据库检索基准信息。例如，控制器108可以使用通信接口117与此类数据库通信以获得已知物质的质谱，以用于分析由检测器118测量的信息。

[0440] 通过检测器118测量的信息由控制器108分析以确定关于样品身份的信息。如果样品包括多种化合物，通过比较检测器118的测量信息和基准信息，控制器108可以确定关于多种化合物的部分或全部的身份的信息。

[0441] 控制器108经配置确定关于样品身份的各种信息。例如，在某些实施例中，该信息包括样品通用名称、IUPAC名称、CAS号、UN号和/或其化学式中的一种或多种。在某些实施例中，关于样品身份的信息包括关于该样品是否属于某类物质的信息(例如，爆炸物，高能材

料，燃料，氧化剂，强酸或碱，有毒物质）。在某些实施例中，该信息可以包括关于与样品相关联的危害性、处理规程、安全警告和报告规程的信息。在某些实施例中，该信息可以包括关于质谱仪所测量的样品的浓度或等级的信息。

[0442] 在某些实施例中，该信息可以包括样品是否对应于目标物质的指示。例如，当扫描在步骤802中开始时，质谱仪100的用户可以将质谱仪置于目标模式，在此模式中，质谱仪100扫描样品以具体确定样品是否对应于一系列已识别目标物质中的任一种。控制器108可以使用各种各样的数据分析技术诸如数字过滤和专家系统在测出的质谱信息中搜索特定谱特征。对于特定目标物质，控制器108可以搜索表征目标物质的特定质谱特征，诸如在特定质荷比的峰值。如果测出的质谱信息缺少某谱特征，或如果测出的信息包括不应有任何东西出现的谱特征，那么关于由控制器108确定的样品的身份的信息可以包括样品不与目标物质相对应的指示。控制器108可以经配置确定用于多种目标化合物的此类信息。

[0443] 在样品分析完成后，控制器108使用显示器116在步骤816中向用户显示关于样品的信息。被显示信息取决于质谱仪100的运行模式和用户的动作。如在章节I中所公开的，质谱仪100经配置使得该质谱仪可以被未接受质谱解译的专门训练的人使用。对于未经此类训练的人员，完整的质谱（例如，作为质荷比的函数的离子丰度）往往承载较少的含义。结果，质谱仪100经配置使得在步骤816中，不向用户显示测出的样品质谱。相反，质谱仪100仅向用户显示在步骤814中确定的关于样品身份的某些（或全部）信息。对于未经专门训练的用户，关于样品身份的信息是主要的。

[0444] 除了关于样品身份的信息以外，控制器108还可以显示其他信息。例如，在某些实施例中，质谱仪100可以访问（例如，存储在存储单元114中，或可经由通信接口117可访问的）已知危险材料的数据库。如果关于样品的身份的信息存在于危险材料的数据库中，那么控制器108可以向用户显示预警消息和/或附加信息。该预警消息可以包括例如关于样品的相关危害性的信息。附加信息可以包括例如用户应当考虑采取的行动，包括限制用户或其他人对该物质的暴露，以及其他安全相关的行动。

[0445] 在某些实施例中，质谱仪100经配置当控件被激活时向用户显示样品的质谱。参考图8B，用户界面112包括控件824，当该控件被用户激活时，在显示器116上显示样品的质谱。控件824允许经过质谱解译训练的用户直接观看从检测器118测量的信息。该信息可以是有用的，例如，当未获得测出的质谱信息与基准信息之间的决定性匹配时。此外，当质谱仪100用在实验室中的分析时，例如，用户可以激活控件824以试图推断出更多的详细化学信息，诸如特定离子的裂解机理。在某些实施例中，质谱仪100经配置仅当控件824被用户激活时显示样品的质谱，和/或在已显示关于样品的身份的信息以后。就是说，质谱仪100可以经配置使得在正常运行时，详细的质谱信息未向用户显示；仅在用户激活控件824希望查看这个详细信息的情况下显示。

[0446] 在某些实施例中，控件824可以经配置允许两种不同的运行模式。例如，当控件824被质谱仪100的用户激活到第一状态时，关于样品身份的信息在分析完成时在显示器116上向用户显示。当控件824被激活到第二状态时，显示质谱信息（例如，作为质荷比的函数的离子丰度）。因此，控件824可以具有双路开关的形式，其允许用户在运行质谱仪期间选择期望的信息显示模式。在某些实施例中，当控件824被激活到第二状态时，除了质谱信息以外，质谱仪100也可以经配置显示关于样品身份的信息。

[0447] 在步骤818中，在流程图800中示出的过程终止。如果扫描在步骤802中通过用户激活控件820来开始，那么，在开始另一扫描之前，质谱仪100等待控件820再次激活。另选地，如果质谱仪100处于连续扫描模式中，那么，质谱仪100等待定义时间间隔，并随后在该时间间隔已逝去后，自动开始另一扫描，或等待另一外部触发诸如传感器信号。

[0448] 如先前所讨论的，一般来说，质谱仪100不使用过滤大气气体粒子的过滤器。结果，当分析物粒子被引入质谱仪中时，大气气体粒子也被引入，从而在质谱仪100中形成气体粒子的混合物。因为质谱仪100在比传统质谱仪中的内部压力更高的压力下运行，并且因为质谱仪100的部件通常对大气气体粒子不敏感，本文公开的质谱仪可用于以传统质谱仪不可能的方式引入分析物。具体地，分析物的粒子可以通过连续吸入分析物粒子和大气中气体粒子的混合物来被引入，从而未过滤任何粒子。在某些实施例中，质谱仪100可以经配置通过样品入口124在至少10s(例如，至少15s、至少20s、至少30s、至少45s至少1分钟、至少1.5分钟、至少2分钟、至少3分钟、至少4分钟、至少5分钟)或更长的时间内将气体粒子的混合物连续引入气路128中。

[0449] 当分析物粒子在延长的时间间隔内被连续引入时，质谱仪100也可以调节离子源102的占空比，使得离子源102在延长的时间间隔内生成离子(例如，分析物粒子被引入期间整个时间间隔的一部分)。如先前所解释的，离子源102的占空比通常可以被调节(例如，通过调节图2I中的持续时间274)以控制产生离子的时间间隔。在某些实施例中，质谱仪100经配置调节离子源102的占空比，使得离子由离子源102在10s或更长(例如，20s或更长，30s或更长，40s或更长，50s或更长，1分钟或更长，1.5分钟或更长，2分钟或更长，3分钟或更长，4分钟或更长，5分钟或更长)的时间内连续生成。

[0450] 如上面所讨论的，质谱仪100既实现紧凑性又通过去除通常可在传统质谱仪中发现的某些高功耗部件实现低功耗运行。在这些部件之中，真空泵-尤其是涡轮分子泵既重又消耗大量功率。质谱仪100不包括此类泵，并且结果，比传统质谱仪既轻又消耗明显少的功率。

[0451] 通过使用压力调节子系统120，质谱仪100在比传统质谱仪中的内部压力明显高的内部气压下运行。一般来说，在更高的压力，由于各种机理，包括碰撞诱导线增宽和离子中子电荷交换，质谱仪的分辨率会退化。因此，为获得最高可能的分辨率质谱，质谱仪中的内部气压应当保持尽可能低。

[0452] 不过如上面所解释的，当质谱仪的分辨率比最佳可能值恶化时，关于样品的有用信息，诸如关于样品身份的信息可以通过测量样品的质谱来获得并提供给用户。具体地，即使当质谱仪100在比传统质谱仪更高的内部气压下运行并因此比传统质谱仪具有更差的分辨率时，仍然可以实现测出的质谱信息与基准信息之间的足够准确对应。

[0453] 因为质谱仪100在比传统质谱仪更低的分辨率下运行，在某些实施例中，质谱仪100还可以经配置自适应调节某些部件的运行以进一步降低其整体功耗。部件自适应运行以实现测出的质谱信息的目标分辨率，或实现质谱信息与已知物质或条件的基准信息之间足够对应中的任一种。

[0454] 图8C示出包括用于质谱仪100的自适应运行的一系列步骤的流程图850，该步骤实现已测出质谱信息与已知物质或条件的基准信息之间的足够对应。目标分辨率可以由质谱仪100的用户来设定(例如，通过用户定义的设定，或通过已测出质谱信息的视觉检测)，或

由控制器108自动设定。在第一步骤852中，以与上面步骤802中公开的相同方式开始扫描。接下来，在步骤854中，以与上面步骤804中公开的相同方式将样品引入质谱仪100中。在步骤856中，样品粒子被电离以产生离子，如在上面步骤806中所公开的。

[0455] 随后，在步骤858中，由离子源102生成的样品离子使用检测器118来检测。步骤858可以被执行而无需激活离子阱104以捕获或选择性喷出离子。相反，在步骤858中，由离子源102生成的离子直接经过离子阱104的端盖电极304和306，并入射到检测器118上。电压源106可以经配置向离子源102和检测器118中的电极施加电位以在离子源102与检测器118之间形成电场以促进离子的传输。

[0456] 接下来，在步骤860中，控制器108确定阈值离子电流是否被检测器118测出。阈值离子电流可以是质谱仪100的用户定义和/或用户调节的设定。另选地，阈值离子电流可以基于例如控制器108对检测器118中的暗电流和/或噪音的测量由质谱仪100自动确定。如果还未达到阈值电流，样品的电离和样品离子的检测继续在步骤856和858中进行。另选地，如果已达到阈值离子电流，控制器108在步骤862中激活离子阱104并选择性将离子喷入检测器118中。喷入的离子由检测器118检测，并且质谱信息在步骤864中由控制器108分析以试图确定关于样品身份的信息。

[0457] 作为在步骤864中的分析的一部分，控制器108可以确定已测出的样品质谱信息源自已知物质或条件的概率。在步骤866中，控制器108比较已确定概率和阈值概率以确定质谱信息的分析是否受限于质谱仪100的分辨率。如果概率大于阈值，那么，控制器108使用显示器116显示关于样品的信息(例如，样品的身份和/或关于样品身份的信息)，并且过程在步骤870结束。

[0458] 不过，如果在步骤866中，概率小于阈值概率值，那么，质谱信息的分析可能受限于质谱仪100的分辨率。为增加质谱仪100的分辨率，在控件返回步骤862之前，控制器108自适应调节质谱仪的配置。

[0459] 控制器108经配置以各种方式调节配置以增加质谱仪100的分辨率。在某些实施例中，控制器108经配置激活缓冲气源150以将缓冲气体粒子引入气路128中。引入的缓冲气体粒子可以包括例如氮分子、氢分子或惰性气体诸如氦、氖、氩或氪的原子。缓冲气源150可以包括容纳缓冲气体粒子的可替换圆柱体，以及经由控制线127g连接到控制器108的阀，或缓冲气体发生器。控制器108可以经配置激活缓冲气源150中的阀，使得缓冲气体粒子的受控量被释放到气路128中。一旦释放到气路128中，缓冲气体粒子与由离子源102生成的离子混合，并促进捕获并将离子选择性喷入检测器118中，从而增加质谱仪100的分辨能力。

[0460] 在某些实施例中，控制器108降低质谱仪100中的内部气压以增加质谱仪100的分辨能力。为降低内部气压，控制器108经由控制线127d激活压力调节子系统120。另选或附加地，控制器108可以关闭阀129以降低内部气压。在某些实施例中，阀129可以以具有特定占空比的脉冲方式交替打开和关闭以降低内部气压。在某些实施例中，质谱仪100可以包括多个样品入口，以及阀129可以被关闭以密封样品入口124，而在较小直径样品入口中的另一在线阀可以被打开。通过使用不同的样品入口以降低质谱仪100中的气压，泵送速度没有变化是必要的。降低质谱仪100中的内部气压，通过减小离子源102、离子阱104和检测器118中的离子之间的碰撞频率，增加质谱仪100的分辨率。

[0461] 在某些实施例中，为提高质谱仪100的分辨率，控制器108增加施加到中心电极302

的电位变化的频率。通过减小施加电位变化的速率，电极302内的内部电场变化的速率也减小。结果，离子从离子阱104喷出的选择性增加，从而提高质谱仪100的分辨率。

[0462] 在某些实施例中，控制器108经配置改变离子阱104内的轴向电场频率或幅值以改变质谱仪100的分辨率。改变离子阱104中的轴向电场可以移位离子阱的喷射边界，从而延伸或降低质谱仪的高质量范围并更改质谱仪100的分辨能力和/或分辨率。

[0463] 在某些实施例中，控制器108经配置通过改变离子源102的占空比增加质谱仪100的分辨率。经实验观察，降低电离时间可以提高质谱仪100的分辨率。因此，参考图2I中的曲线图270，通过降低施加到离子源102的偏置电位272的持续时间274(例如，降低离子源102的占空比)，可以提高质谱仪100的分辨率。

[0464] 相反，降低质谱仪100的分辨率在某些情况下也是有用的。例如，参考图2I中的曲线图270和280，通过增加施加到离子源102的偏置电位272的持续时间274(例如，增加离子源102的占空比)，并因此降低了在加大施加到离子阱104的电极302的电位幅值时的持续时间(例如，在曲线图280中的时间间隔284和286)，质谱仪100的分辨率得以下降，但是质谱仪100的灵敏度增加，从而增加使用质谱仪100测量的质谱信息的信噪比。增加的灵敏度在试图检测某些物质的非常低浓度时是特别有用的。

[0465] 在某些实施例中，控制器108经配置通过增加在加大施加到离子阱104的电极302的电位时的持续时间(例如，图2I中的时间间隔286)来增加质谱仪100的分辨率。通过增加扫掠持续时间，循环离子更缓慢地从离子阱104喷出，从而增加测出的质谱信息的分辨率。

[0466] 在某些实施例中，控制器108经配置通过调节与施加到电极302的电位的幅值扫描相关联的斜坡剖面来改变质谱仪100的分辨率。如图2I中的曲线图280所示，施加到电极302的电位的幅值通常根据线性斜坡函数而增加。不过，更为普遍地，控制器108可以经配置根据不同的斜坡剖面增加施加到电极302的电位的幅值。例如，斜坡剖面可以由控制器108调节，使得所施加的电位根据一系列不同的线性斜坡剖面增加，所述每个不同斜坡剖面表示电位增加的不同速率。作为另一示例，斜坡剖面可以被调节，使得施加到电极302的电位的幅值根据非线性函数诸如指数函数或多项式函数增加。

[0467] 如上面所讨论的，控制器108经配置采取上述动作中的任一种或多种以改变质谱仪100的分辨率。采取这些动作的顺序可以由质谱仪100或由用户偏好确定。例如，在某些实施例中，质谱仪100的用户可以指定上述步骤中的哪一个，以何种顺序，控制器108采取来增加质谱仪100的分辨率和/或降低其功耗。用户选择可以作为一组偏好存储在存储单元114中。另选地，在某些实施例中，控制器108所采取的动作的顺序可以被永久编码到控制器108的逻辑线路中，或作为不可变设定存储在存储单元114中。

[0468] 在某些实施例中，控制器108可以基于其他考虑确定动作的顺序。例如，为确保质谱仪100尽可能少消耗电功率，控制器108所采取的提高质谱仪100的分辨能力的动作的顺序可以根据作为每次动作的结果的功耗的增加来确定。控制器108可以配有关于上面公开的每个动作如何增加整体功耗的信息，并且可以基于功耗信息选择适当的动作顺序，导致功耗最小增加的动作首先出现。另选地，控制器108可以经配置测量与每个动作相关联功耗的增加，并且可以基于所测量的功耗值选择适当的动作顺序。

[0469] 虽然在流程图850中，对质谱仪100的配置的调节基于测出的质谱信息对应于已知基准信息的概率，但是，对质谱仪100的配置的调节也可以基于其他标准来进行。在某些实

施例中，例如，对质谱仪100的配置的调节可以基于质谱仪100的目标分辨率是否已实现来进行。在步骤864中，控制器108基于测出的质谱信息(例如，基于质谱仪100的测量窗口内单离子峰值的最大FWHM)确定质谱仪100的实际分辨率。在步骤866中，实际分辨率由控制器108与质谱仪100的目标分辨率比较。如果实际分辨率小于目标分辨率，那么，在步骤872中，控制器108如上面所讨论的调节质谱仪100的配置以提高质谱仪的分辨率。

[0470] 硬件、软件和电子处理

[0471] 本文公开的任何方法步骤、特征和/或属性可以由控制器108执行(例如，控制器108的电子处理器110)和/或基于标准编程技术执行程序的一个或多个附加电子处理器(诸如计算机或预编程集成电路)。此类程序经设计在可编程计算设备或经专门设计的集成电路上执行，每个设备包括处理器、数据存储系统(包括存储器和/或存储元件)、至少一个存储装置和至少一个示出装置，诸如显示器或打印机。程序代码被应用到输入数据以执行功能并生成应用于一个或多个输出装置的输出信息。每个此类计算机程序可以以高级程序或面向对象编程语言或汇编或机器语言来实施。此外，语言可以是编译或解译语言。每个此类计算机程序可以被存储在计算机可读存储介质(例如，CD-ROM或磁盘)上，当程序由计算机读取时，可以促使计算机中的处理器执行分析并控制本文所述的功能。

[0472] 其他实施例

[0473] 在某些实施例中，质谱仪100经配置在更高气压，例如在高达1atm的压力下(例如，760Torr)运行。就是说，当质谱仪100根据离子的质荷比检测离子时，在离子源102、离子阱104和/或检测器118中的一个或多个中的内部气压在100Torr与760Torr之间(例如，200Torr或更多，300Torr或更多，400Torr或更多，500Torr或更多，600Torr或更多)。

[0474] 本文公开的某些部件也适用于在高达1atm(并且甚至更高压力)的压力下运行。例如，本文公开的某些离子源诸如辉光放电离子源可以在没有更改或很少更改的情况下在高达1atm的压力下运行。另外，某些类型的检测器诸如法拉第检测器(例如法拉第杯检测器及其阵列)也可以在没有更改或很少更改的情况下在高达1atm的压力下运行。

[0475] 本文公开的离子阱能够经更改在高达1atm的压力下运行。例如，参考图3A，为在1atm的压力下运行，离子阱104的尺寸c_0应减少到在1.5微米与0.5微米之间(例如，在1.5微米与0.7微米之间，在1.2微米与0.5微米之间，在1.2微米与0.8微米之间，近似1微米)。此外，为在高达1atm的气压下运行，电压源106可以经更改向离子阱104提供扫掠电压，该电压在GHz例如1.0GHz或更高的频率(例如，1.2GHz或更高，1.4GHz或更高，1.6GHz或更高，2.0GHz或更高，5.0GHz或更高或甚至更高)的范围内重复。通过对离子阱104和电压源106的这些更改，质谱仪100可以在高达1atm的压力下运行，使得压力调节子系统120的使用明显减少。在某些实施例中，甚至从质谱仪100去除压力调节子系统120使得例如质谱仪100是无泵质谱仪也是可能的。

[0476] 已描述若干实施例。不过，应当理解，在没有偏离本公开的实质和范围的情况下，可以进行各种更改。因此，其他实施例在本发明权利要求的范围内。

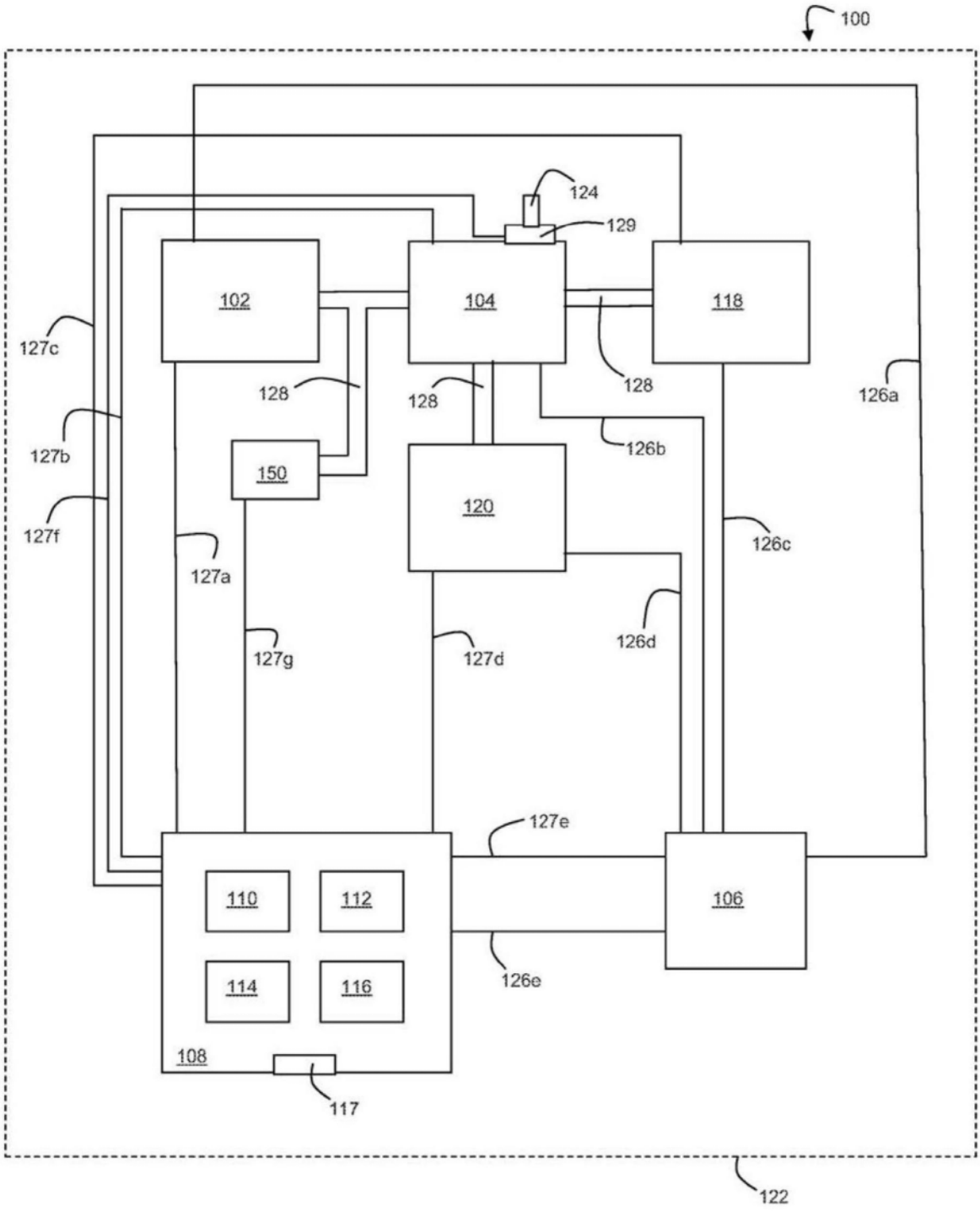

100
124
129
102
104
118
127c
128
128
128
126a
127b
126b
150
120
127f
126c
127a
126d
127g
127d
127e
110
112
106
114
116
126e
108
117
122

图1A

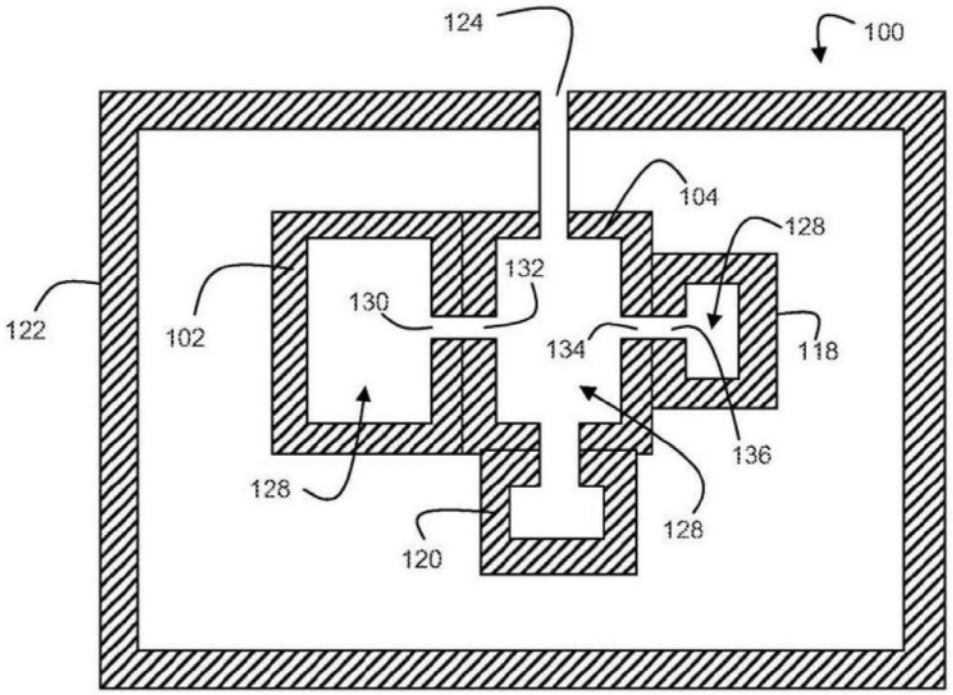

124
100
104
128
132
130
122
102
134
118
136
128
128
120

图1B

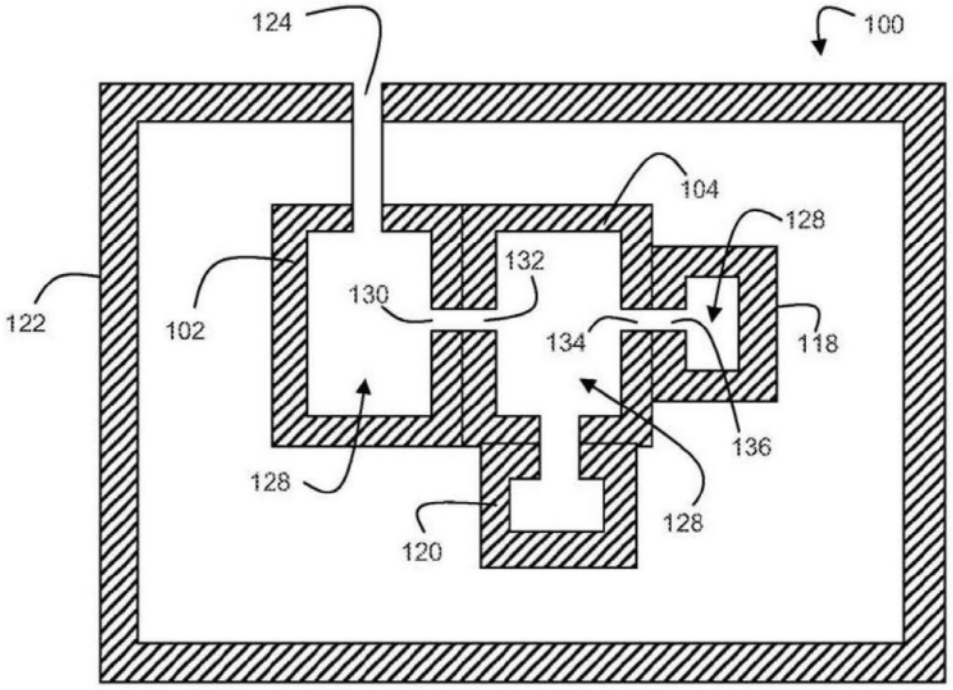

124
100
104
128
132
130
122
102
134
118
136
128
128
120

图1C

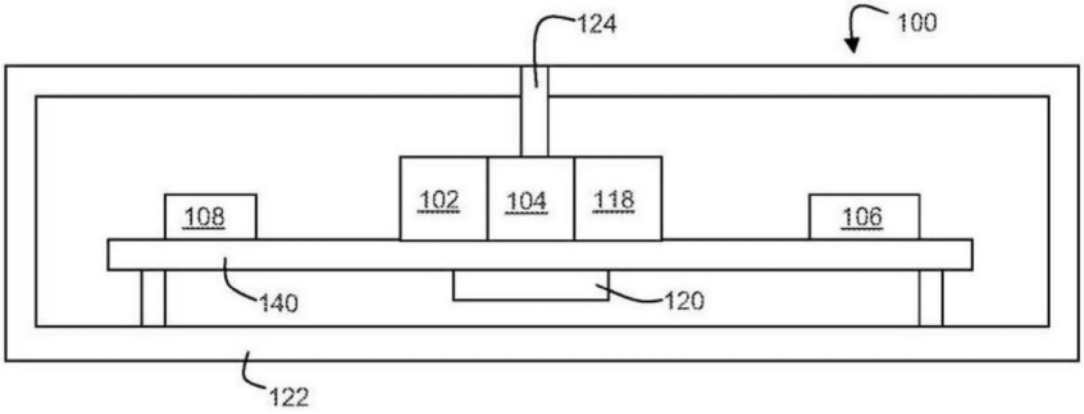

124
100
102
104
118
108
106
140
120
122

图1D

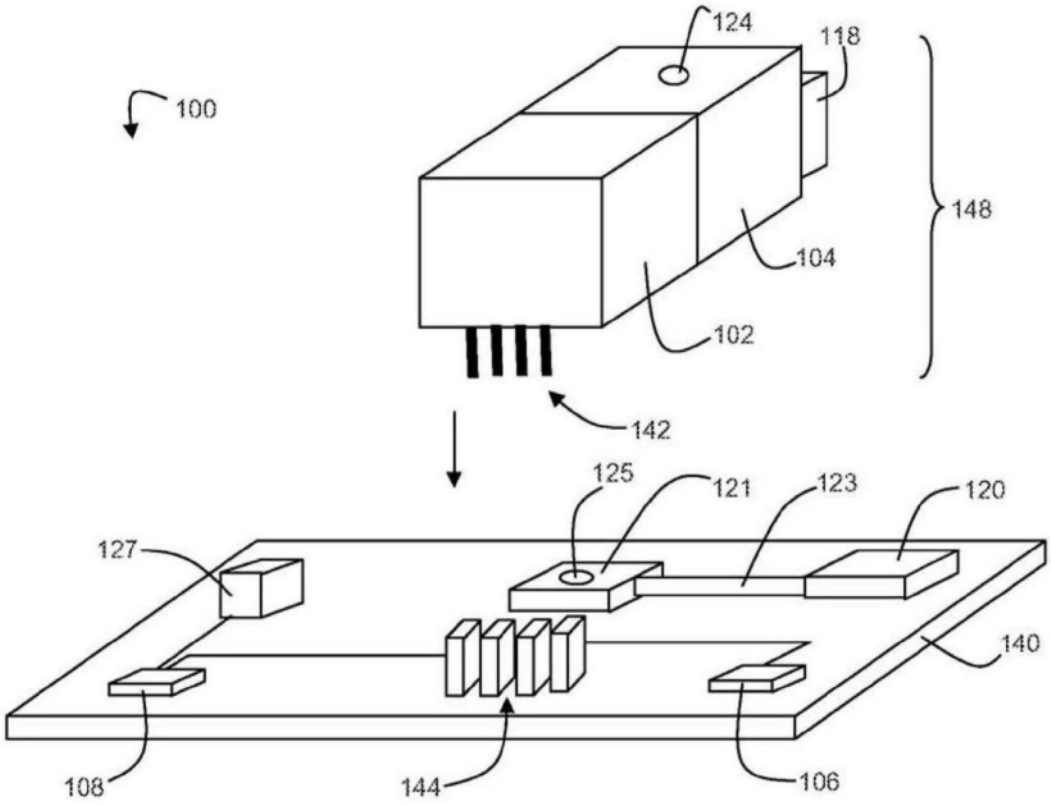

124
118
100
148
104
102
142
125
121
123
120
127
140
108
144
106

图1E

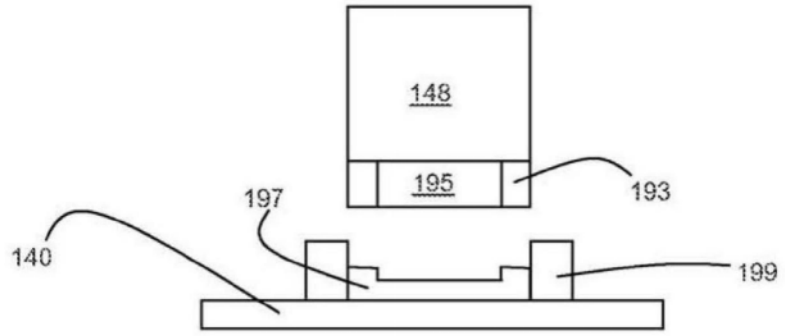

148
195
193
197
140
199

图1F

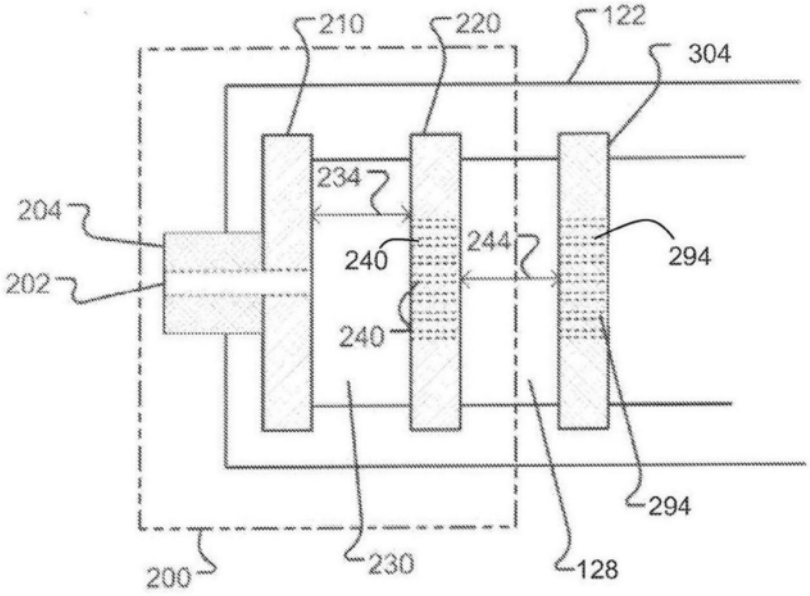

210
220
122
304
234
204
240
244
294
202
240
294
200
230
128

图2A

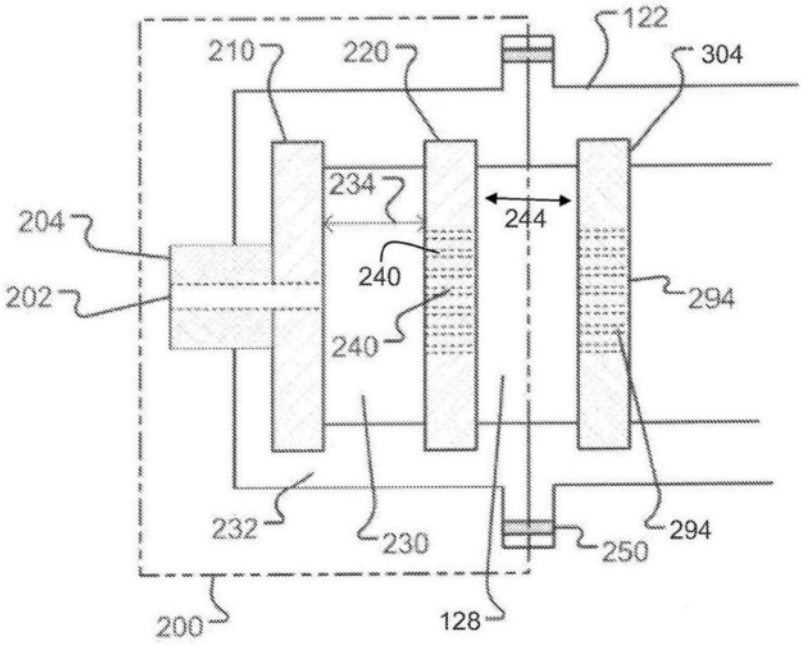

122
210
220
304
234
244
204
240
202
294
240
232
230
294
250
200
128

图2B

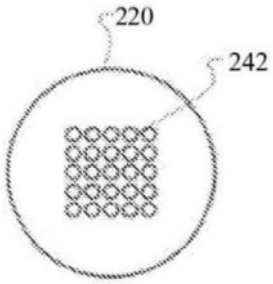

220
242

图2C

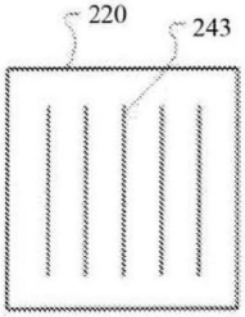

220
243

图2D

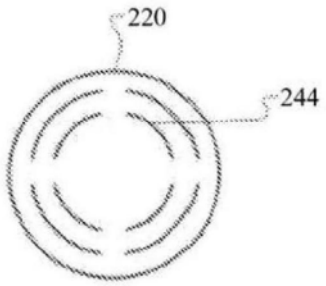


图2E

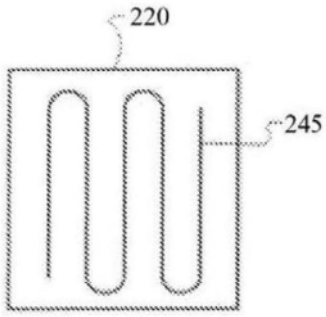


图2F

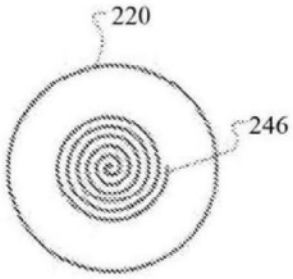


图2G

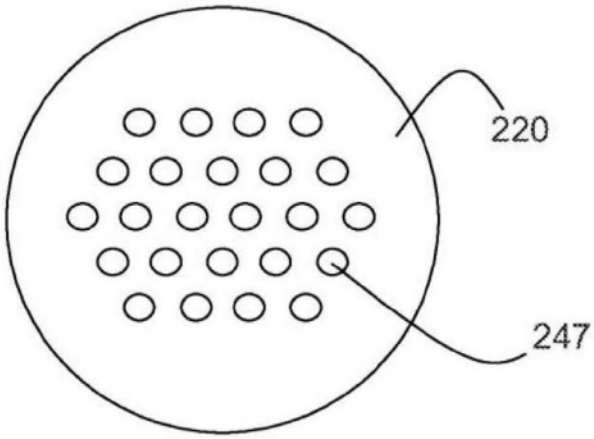

220
247

图2H

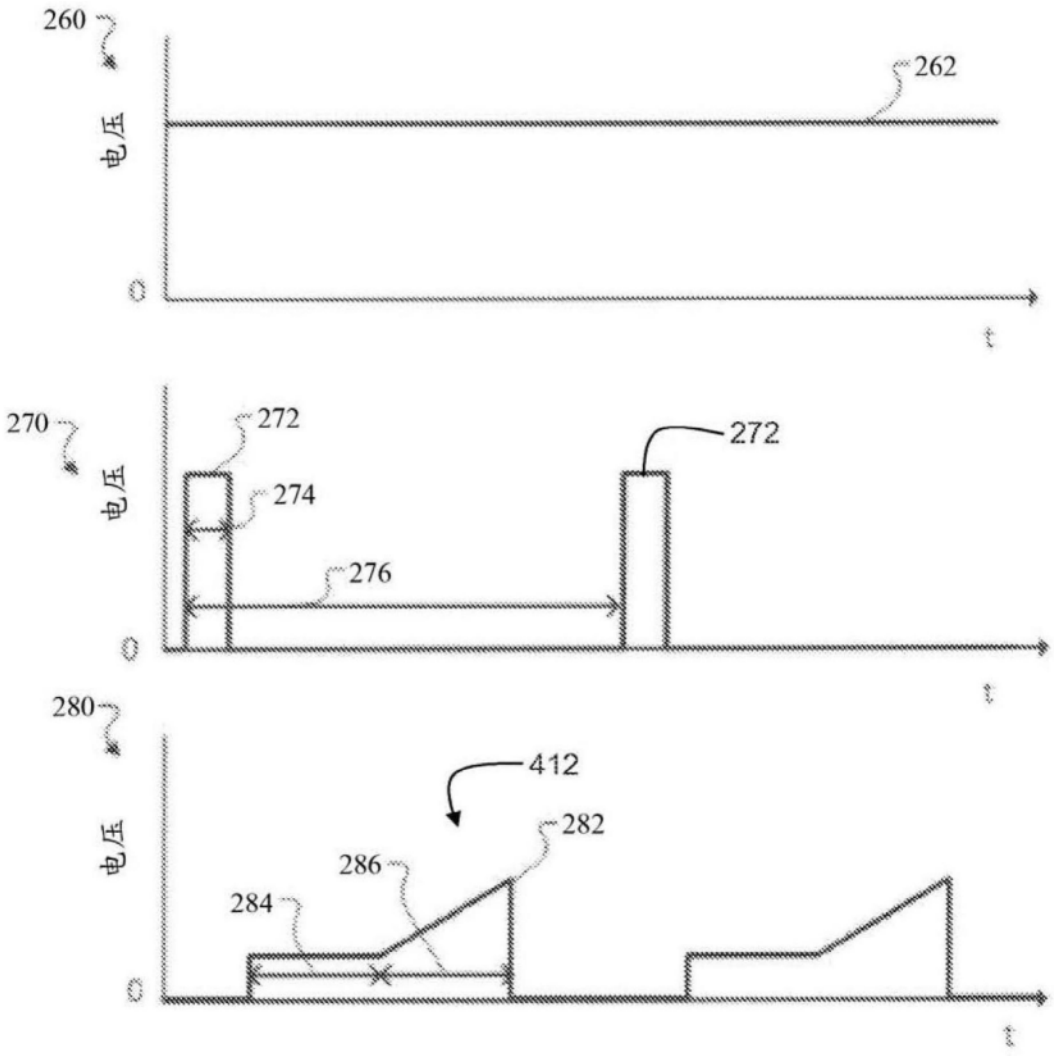

260
电压
262
0
t
270
电压
272
274
276
272
0
t
280
电压
412
282
286
284
0
t

图2I

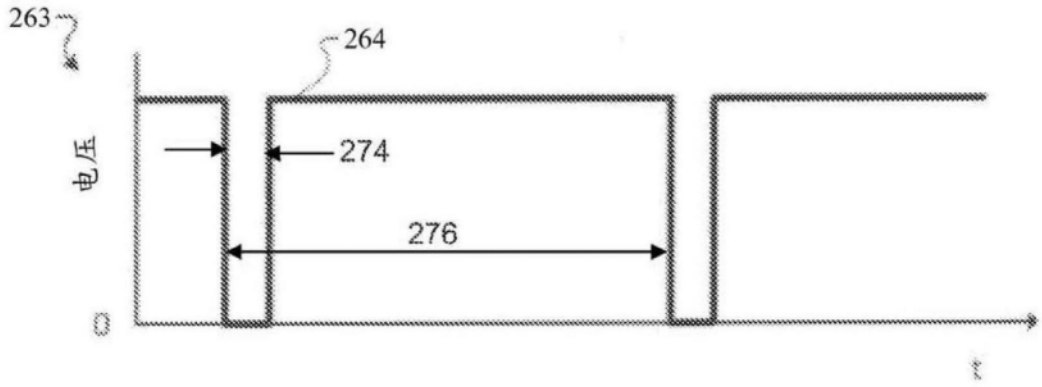


图2J

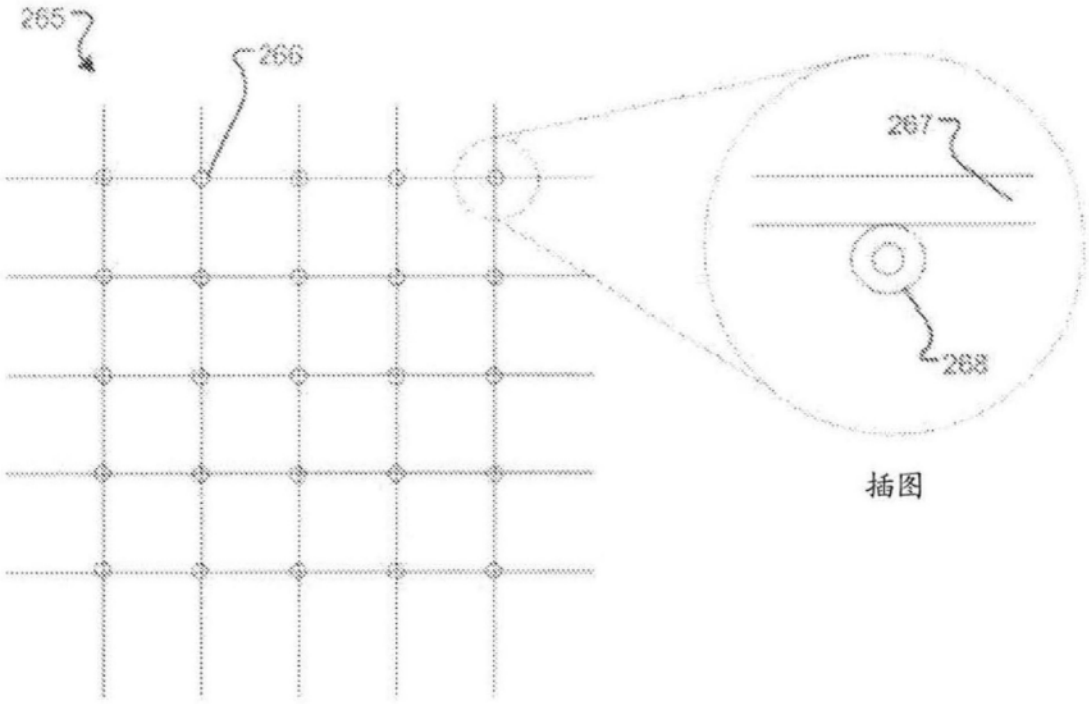


图2K

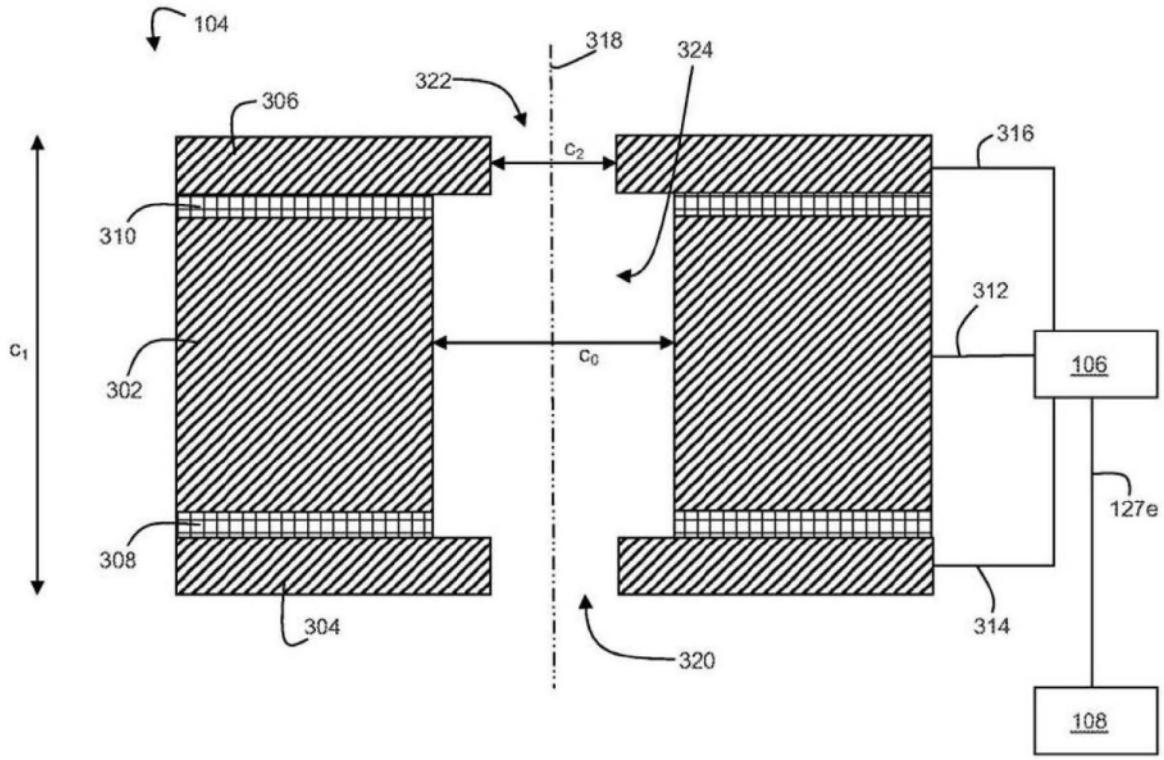

104
318
324
322
306
316
c_2
310
312
c_1
c_0
302
106
127e
308
304
314
320
108

图3A

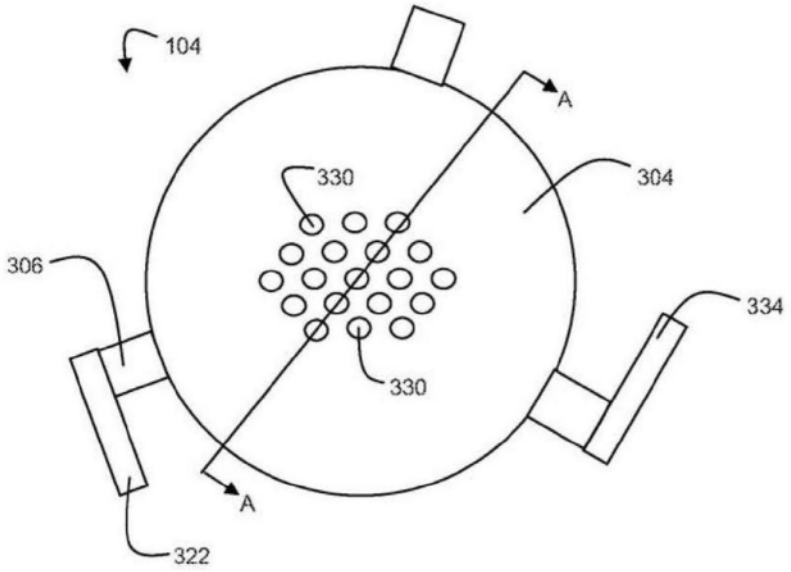

104
A
330
304
306
334
330
A
322

图3B

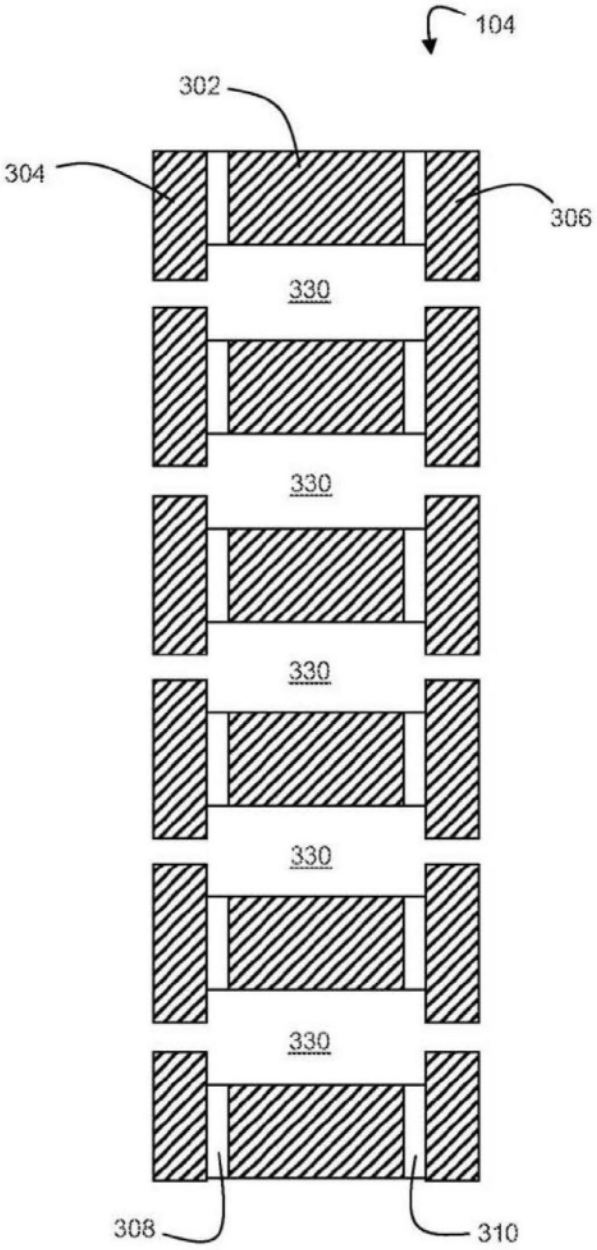


图3C

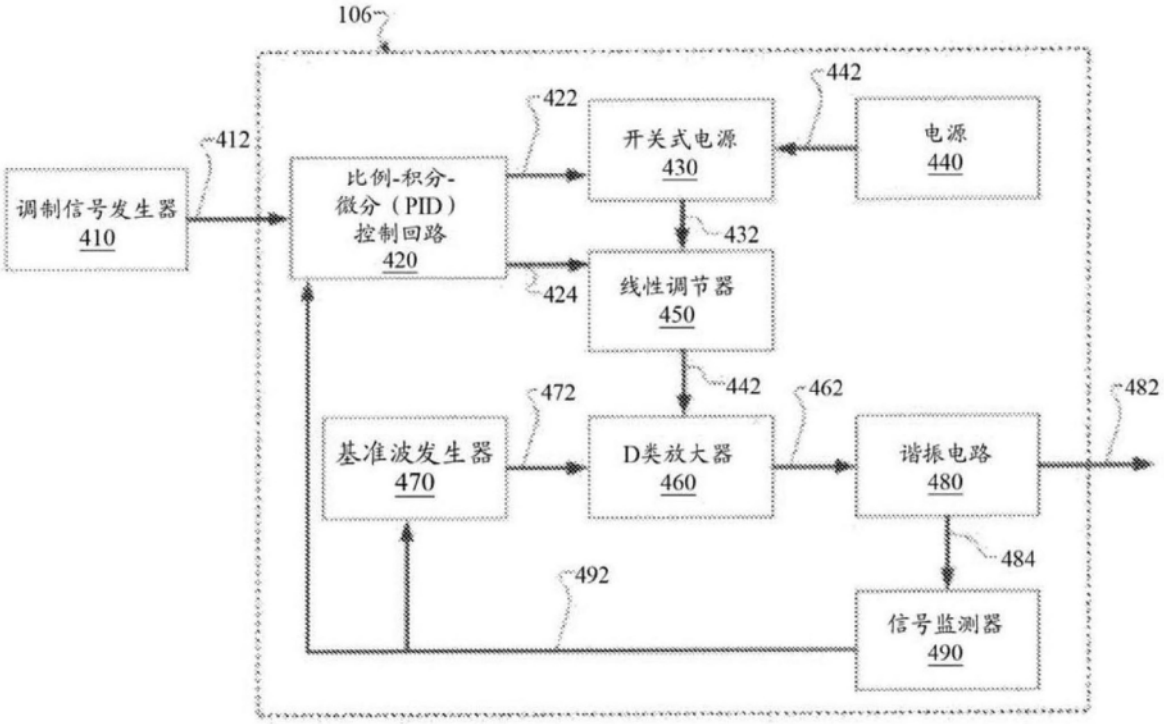

106
412
调制信号发生器
410
比例-积分-
微分（PID）
控制回路
420
422
开关式电源
430
442
电源
440
432
424
线性调节器
450
442
462
482
472
基准波发生器
470
D类放大器
460
谐振电路
480
484
492
信号监测器
490

图4A

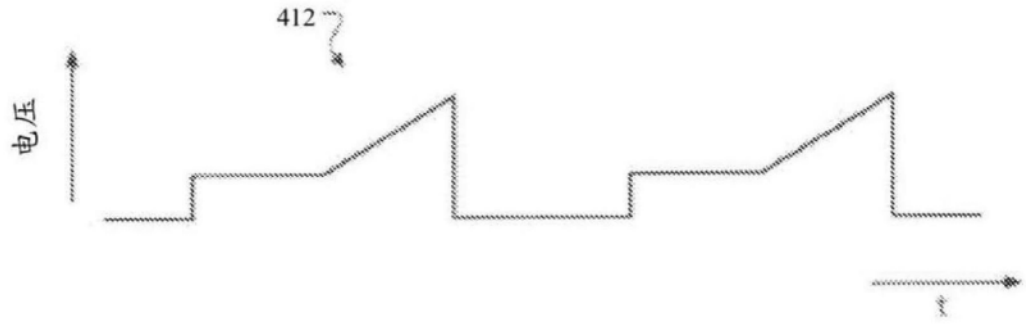

412
电压
t

图4B

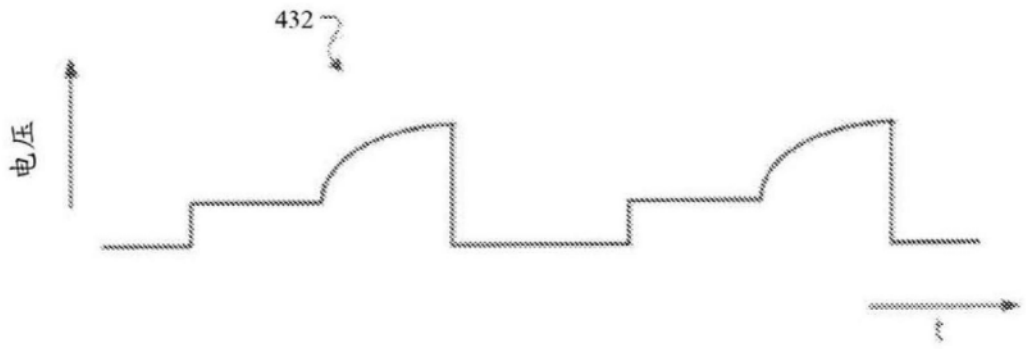

432
电压
t

图4C

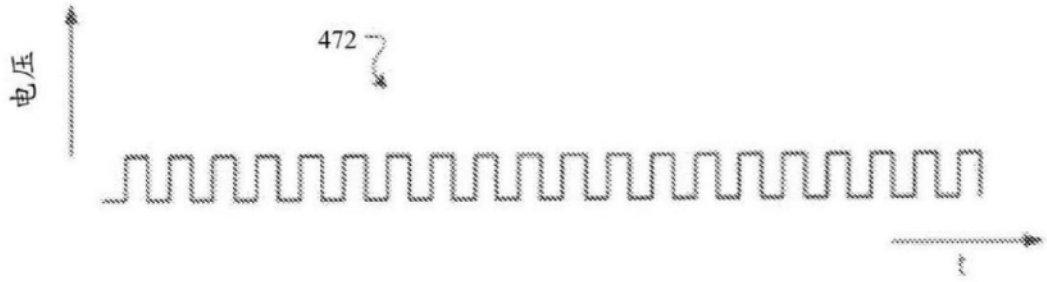


图4D

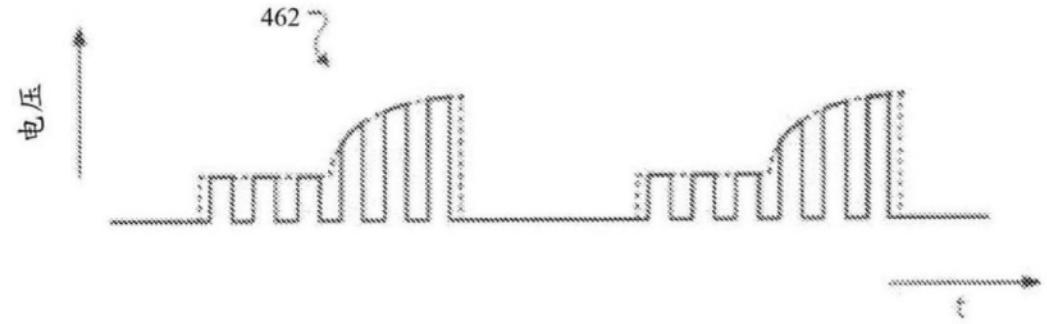


图4E

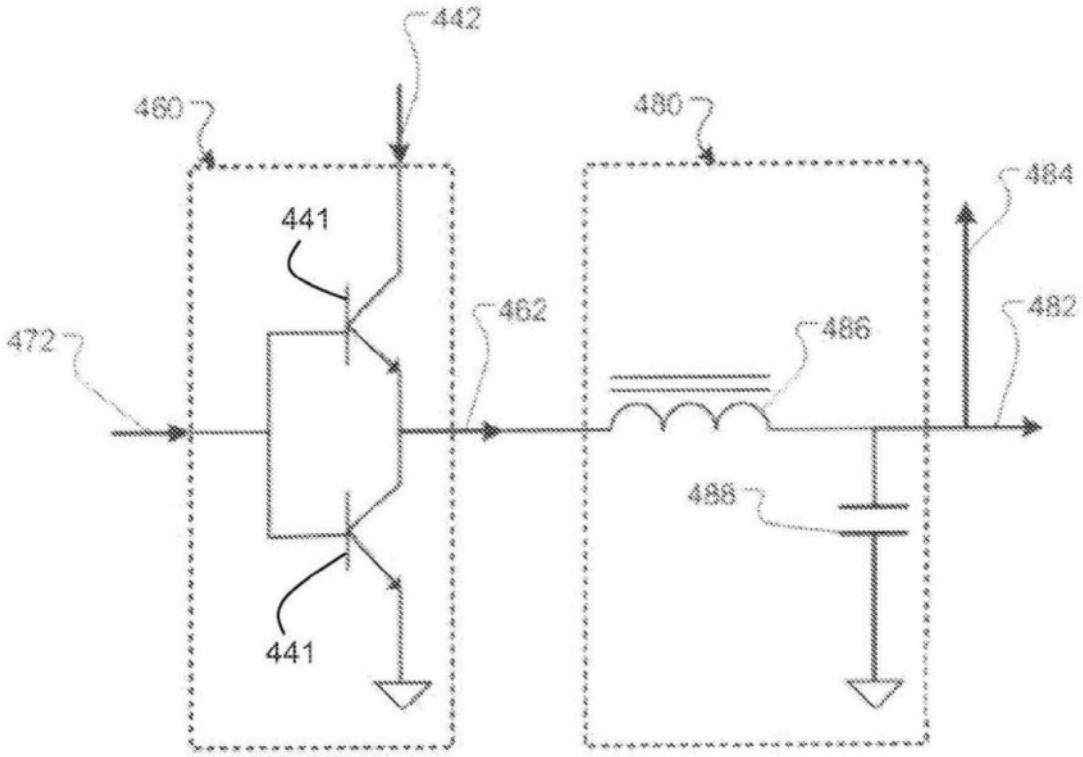


图4F

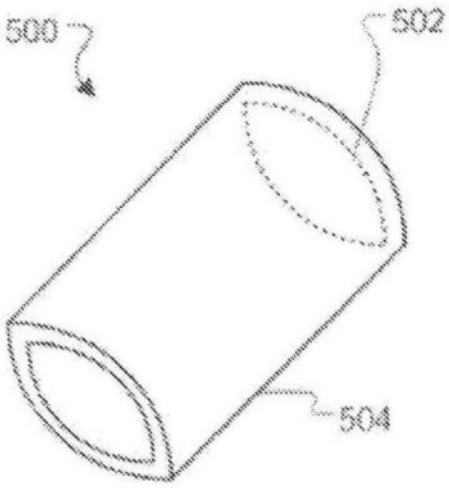


图5A

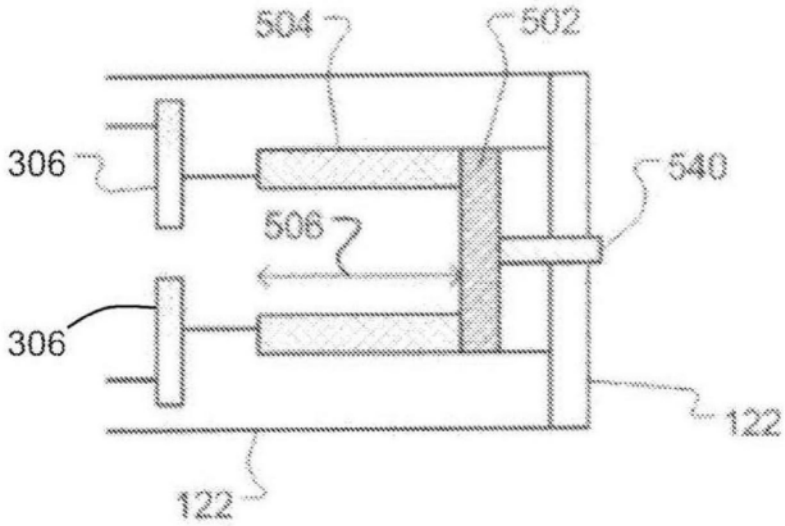


图5B

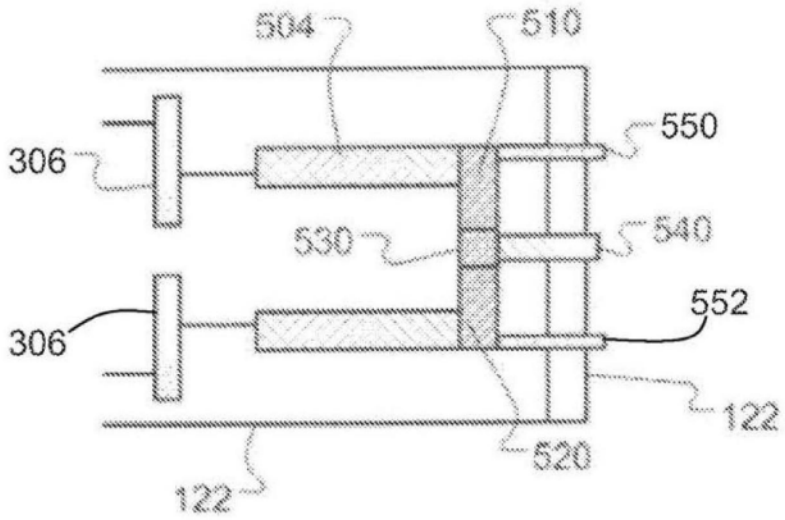


图5C

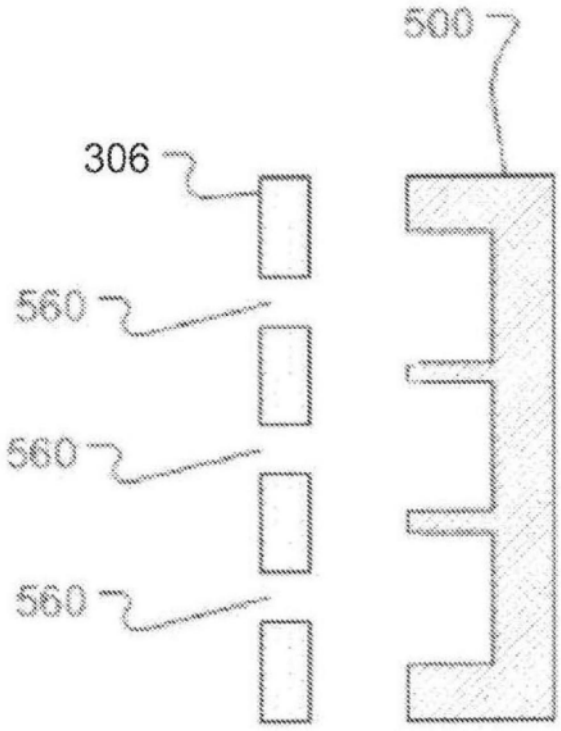


图5D

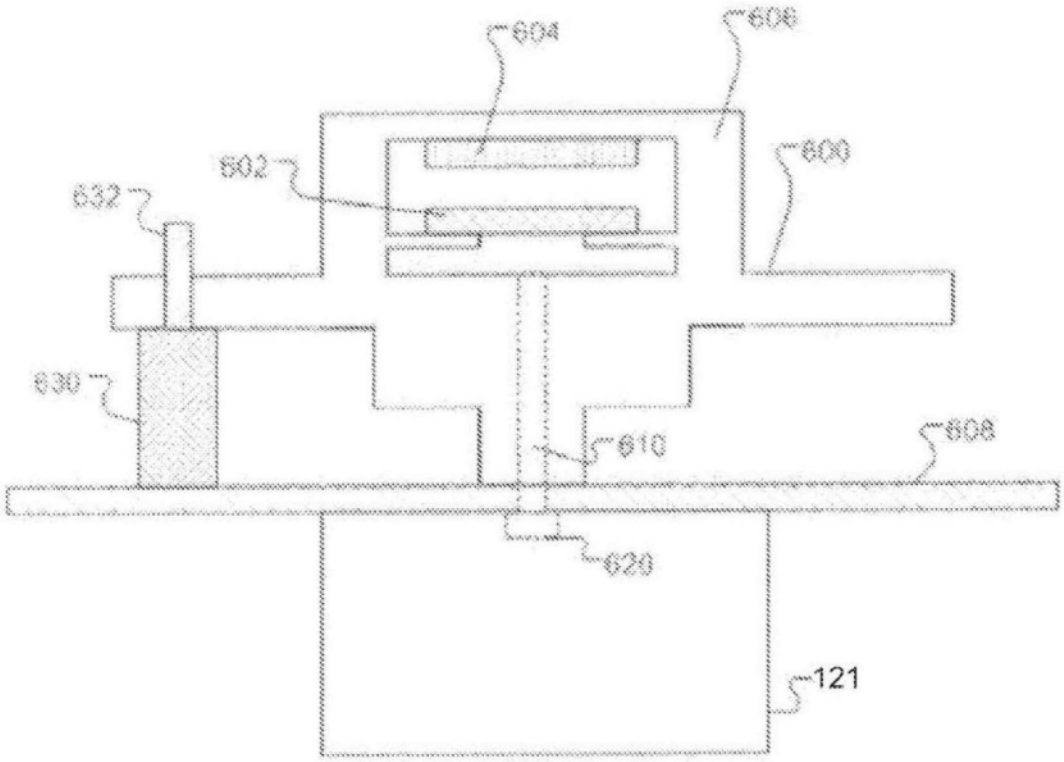


图6A

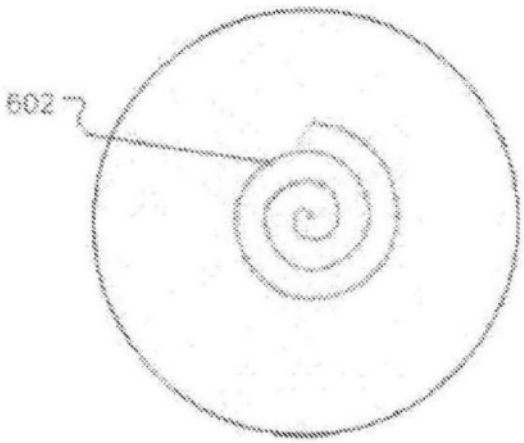


图6B

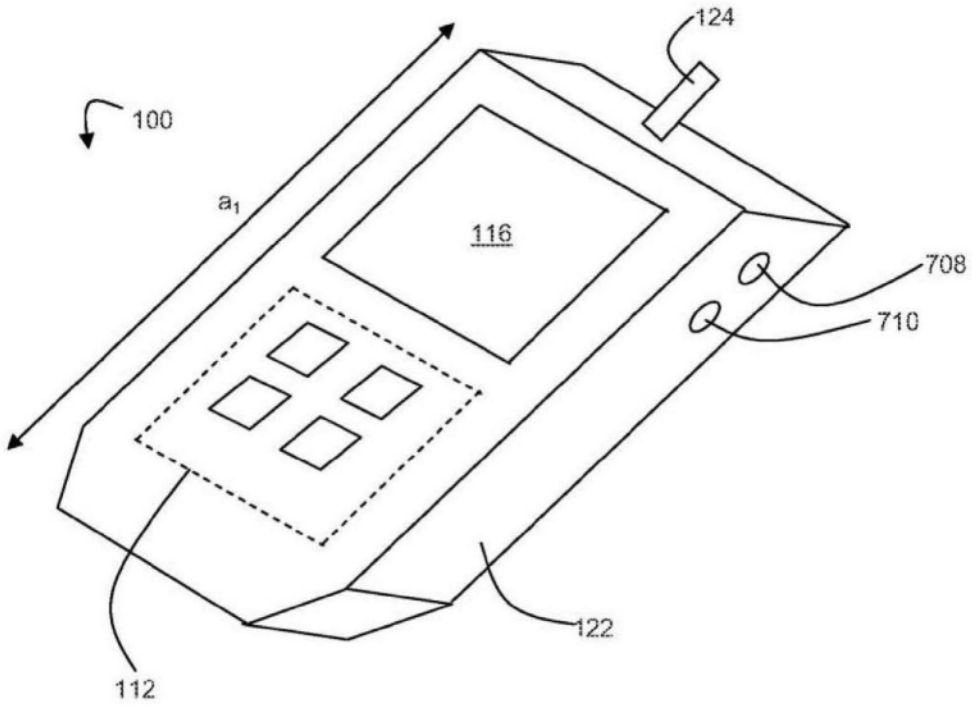

124
100
a_1
116
708
710
122
112

图7A

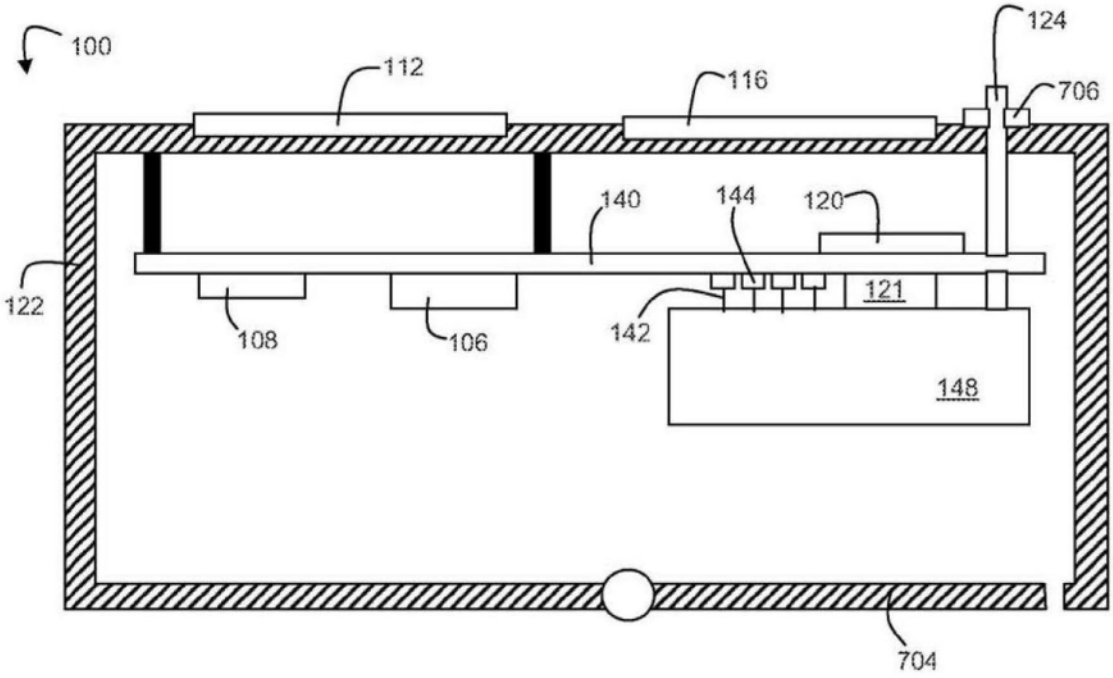

100
112
116
124
706
140
144
120
122
121
108
106
142
148
704

图7B

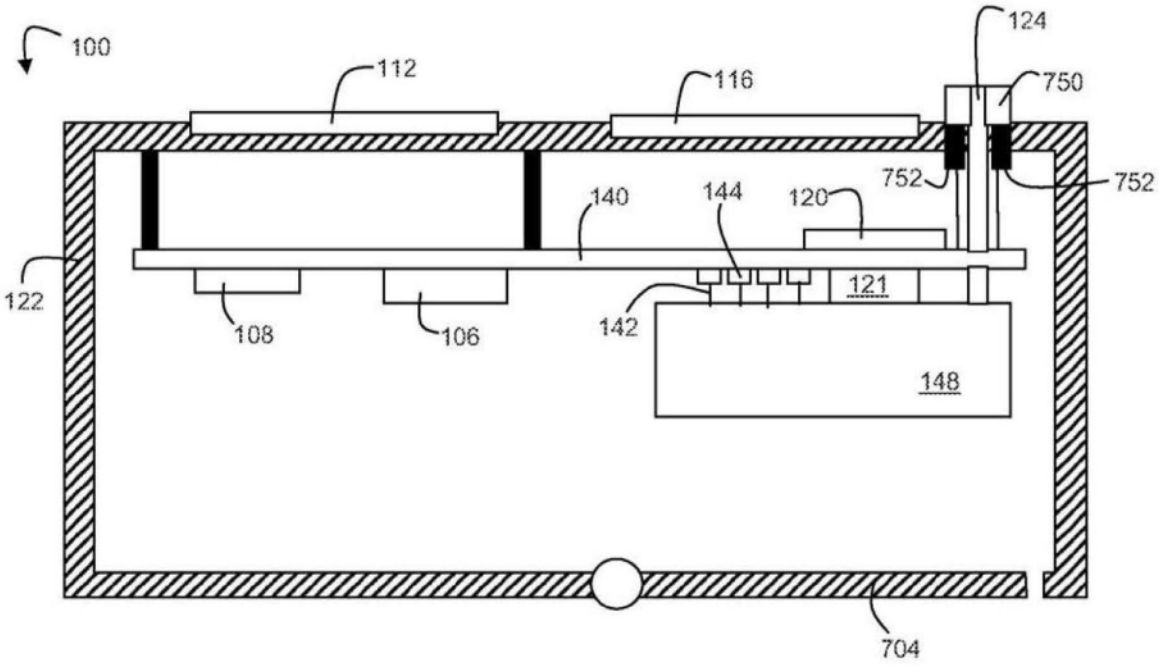

100
112
116
124
750
752
752
140
144
120
122
121
108
106
142
148
704

图7C

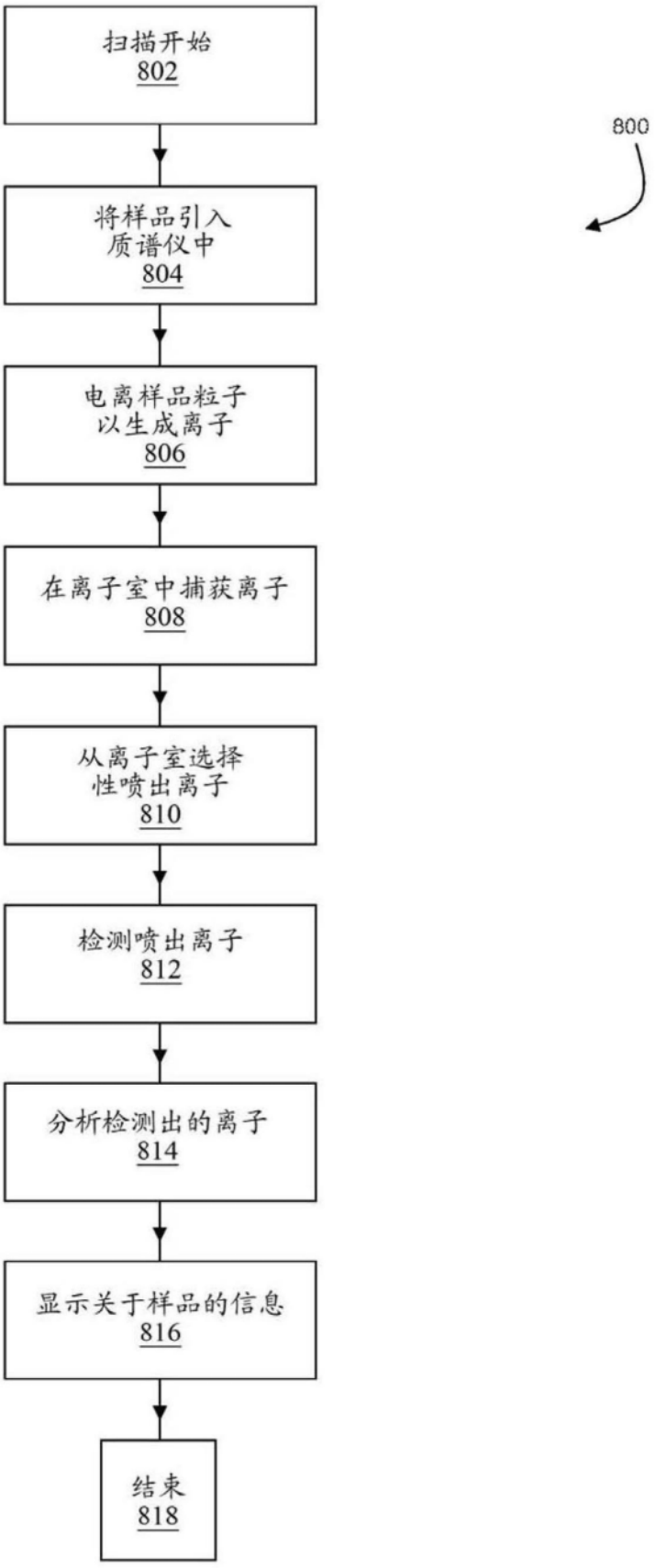

扫描开始
802
800
将样品引入
质谱仪中
804
电离样品粒子
以生成离子
806
在离子室中捕获离子
808
从离子室选择
性喷出离子
810
检测喷出离子
812
分析检测出的离子
814
显示关于样品的信息
816
结束
818

图8A

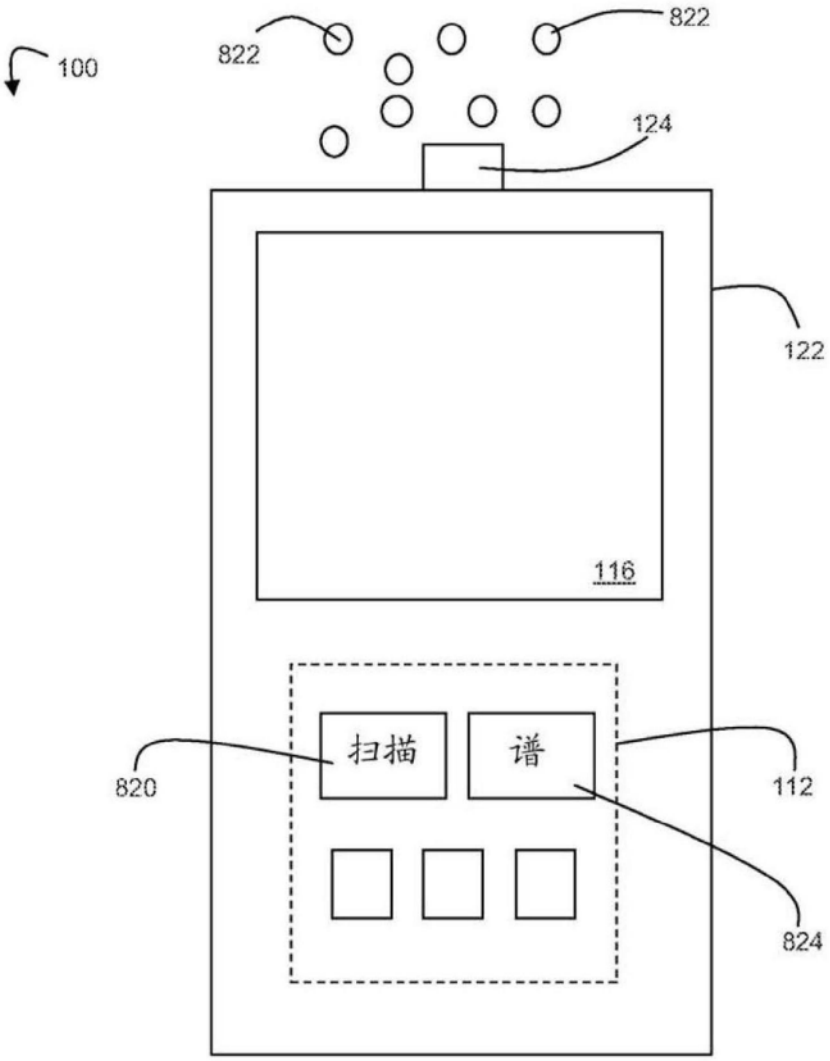


图8B

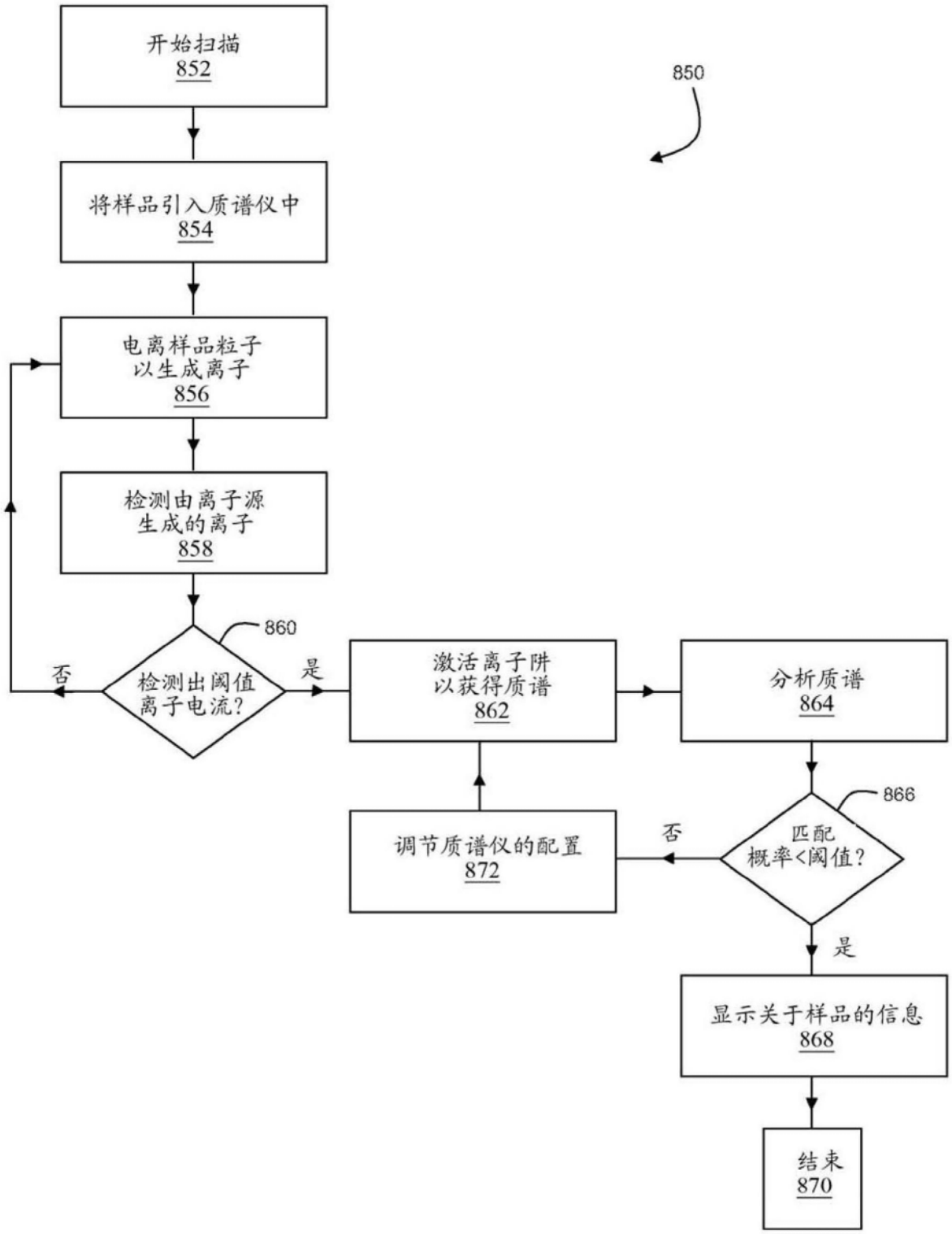

开始扫描
852
850
将样品引入质谱仪中
854
电离样品粒子
以生成离子
856
检测由离子源
生成的离子
858
860
否
检测出阈值
离子电流?
是
激活离子阱
以获得质谱
862
分析质谱
864
866
调节质谱仪的配置
872
否
匹配
概率<阈值?
是
显示关于样品的信息
868
结束
870

图8C