

# Von Ionen zu Daten

... am Beispiel Quadrupol-Massenspektrometer

---

Sally Marcher

38c3, Hamburg, 2024

Wie kommt es dazu?

---

# Wie kommt es dazu?



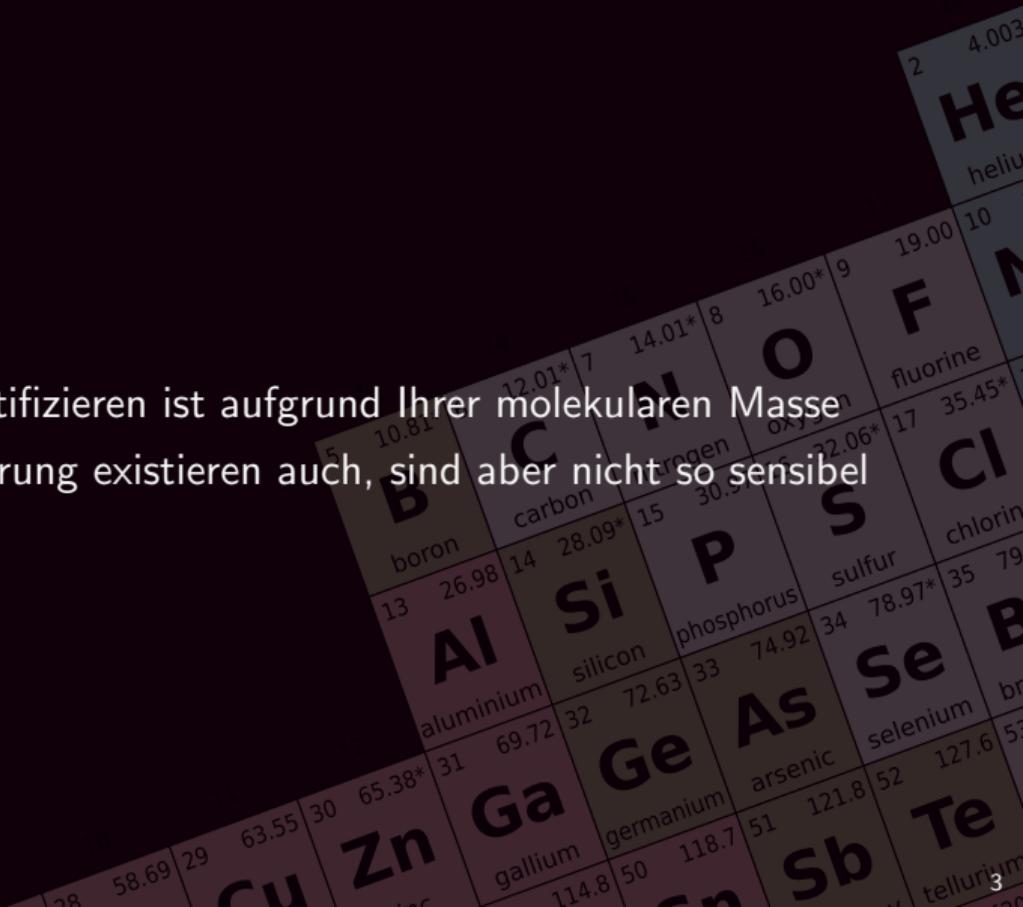
- ▶ Dickson Wambua
- ▶ Martin de Wendt (Sciex)

**Was kann man damit jetzt machen?**

---

## Was kann man damit jetzt machen?

- ▶ Die leichteste Art Stoffe zu identifizieren ist aufgrund Ihrer molekularen Masse
- ▶ Andere Arten der Stoffidentifizierung existieren auch, sind aber nicht so sensibel



## Also praktisch gesehen...



- ▶ Eine molekulare Waage?

## Also praktisch gesehen...



- ▶ Eine molekulare Waage?
- ▶  $1\text{u} = \frac{1}{12} {}^{12}\text{C} \text{ Masse} = 1.66\dots \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$

## Also praktisch gesehen...



- ▶ Eine molekulare Waage?
- ▶  $1\text{u} = \frac{1}{12} {}^{12}\text{C}$  Masse =  $1.66... \cdot 10^{-27}$  Kg  $\rightarrow$  Wir müssen kreativ werden...

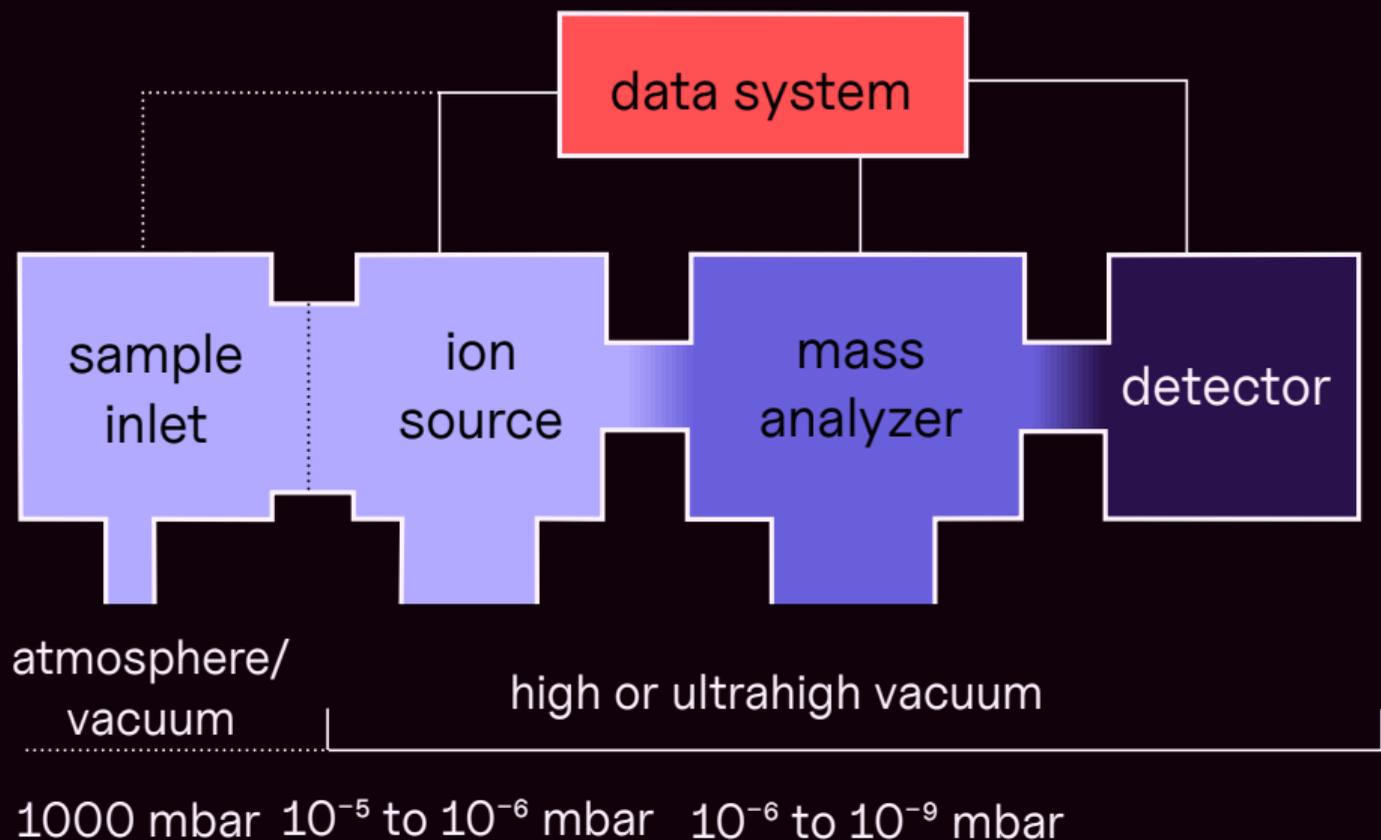
# Die Welt der Massenspektrometer

---

# Die Welt der Massenspektrometer



# Grundsätzlicher Aufbau



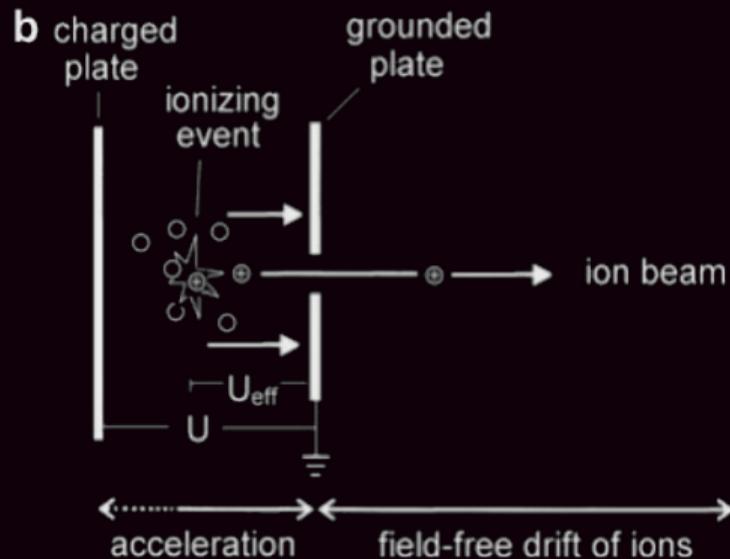
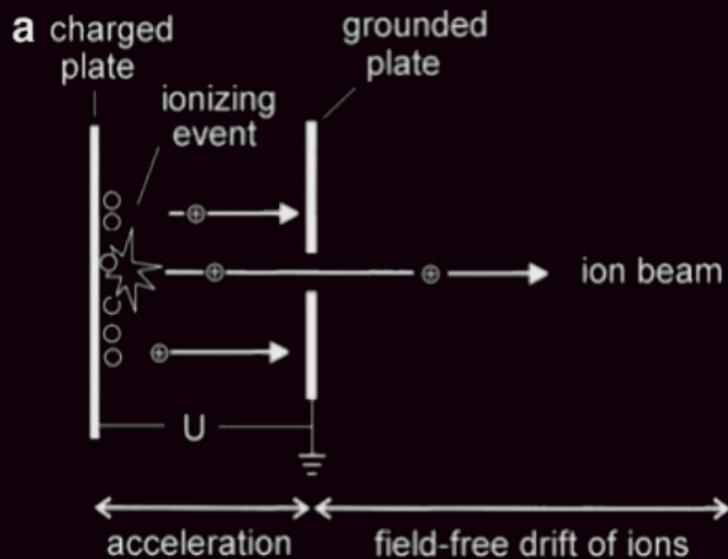
## Flow regimes for gases

- ▶ Viscous flow regime
- ▶ Transitional flow regime
- ▶ Molecular flow regime

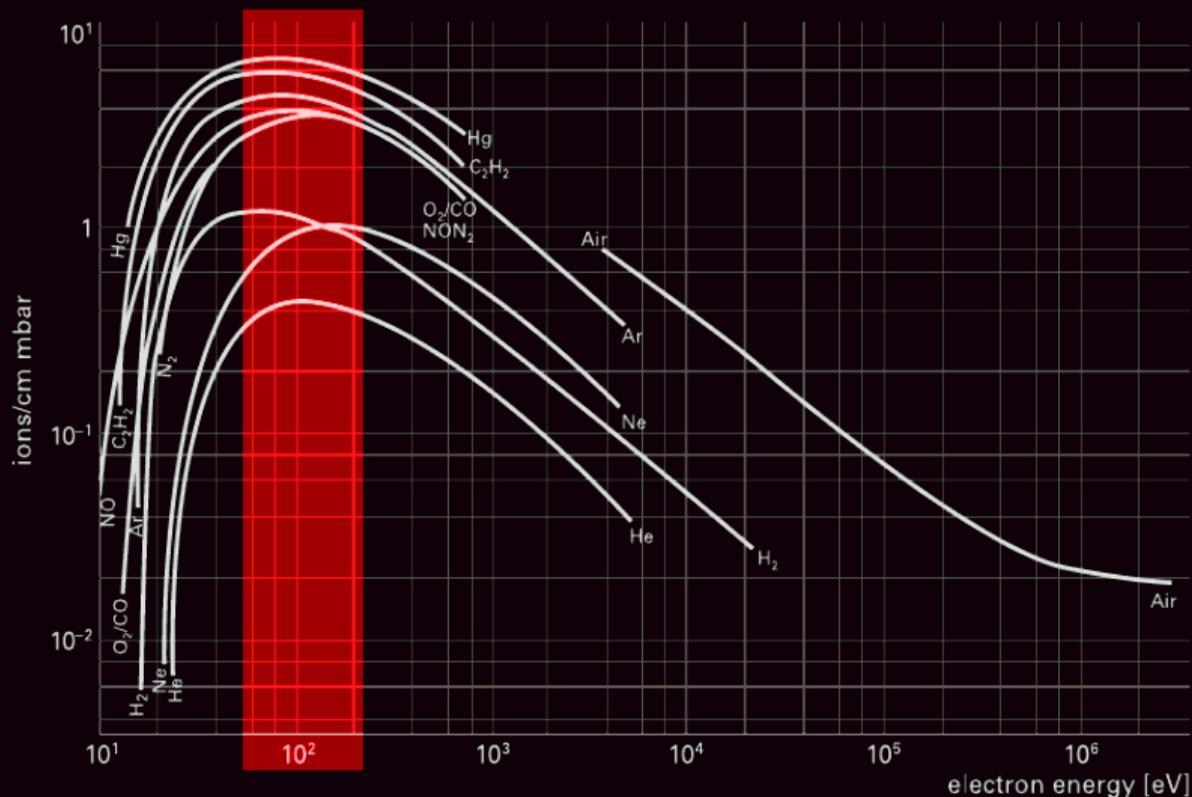
# Ionenquelle

---

# Wie macht man einen Ionenstrahl?



# Electron Ionization



↑

## Electron Ionization: Probleme



▶ Fragmentierung

## Electron Ionization: Probleme



- ▶ Fragmentierung
- ▶ Mehrfache Ionisierung (zB  $Ar^{++}$  statt  $Ar^{+}$ )

## Electron Ionization: Probleme



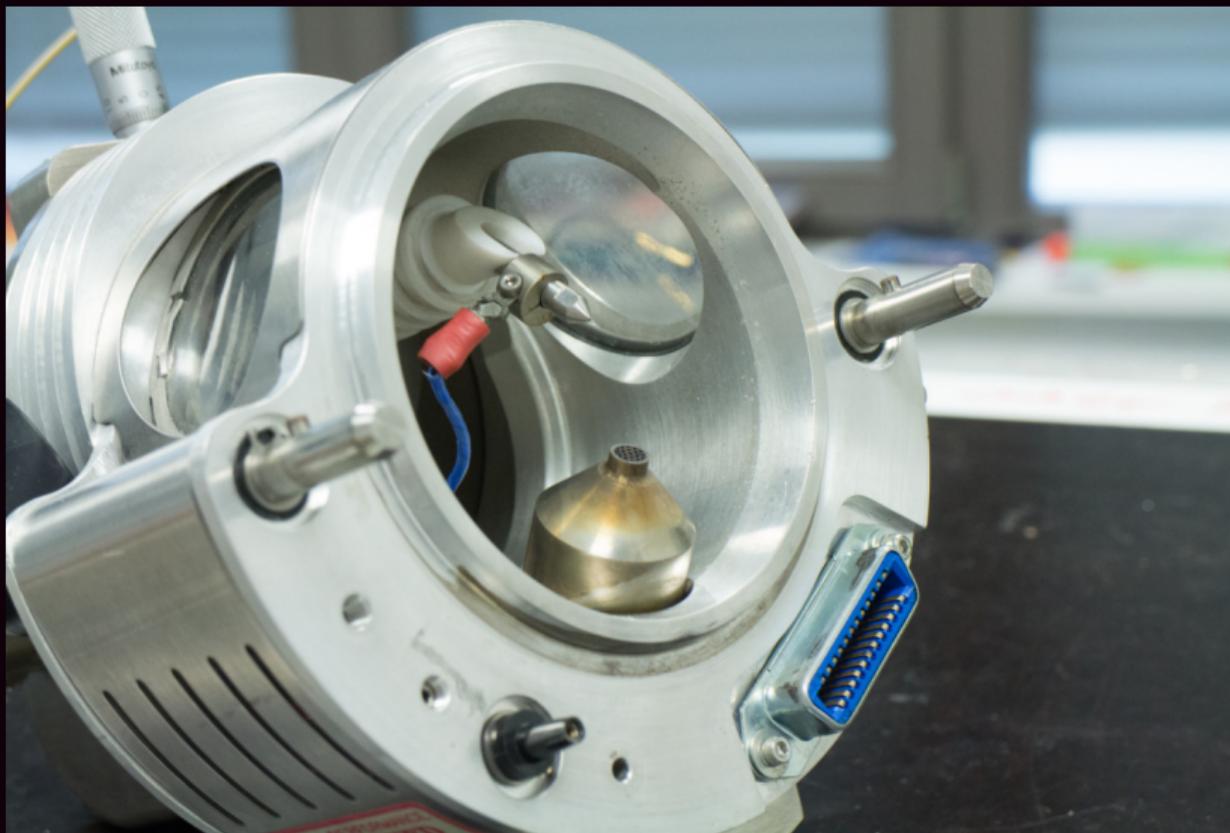
- ▶ Fragmentierung
- ▶ Mehrfache Ionisierung (zB  $Ar^{++}$  statt  $Ar^{+}$ )
- ▶ Ausgasen in der Umgebung des Glühdrahtes

## Electron Ionization: Probleme

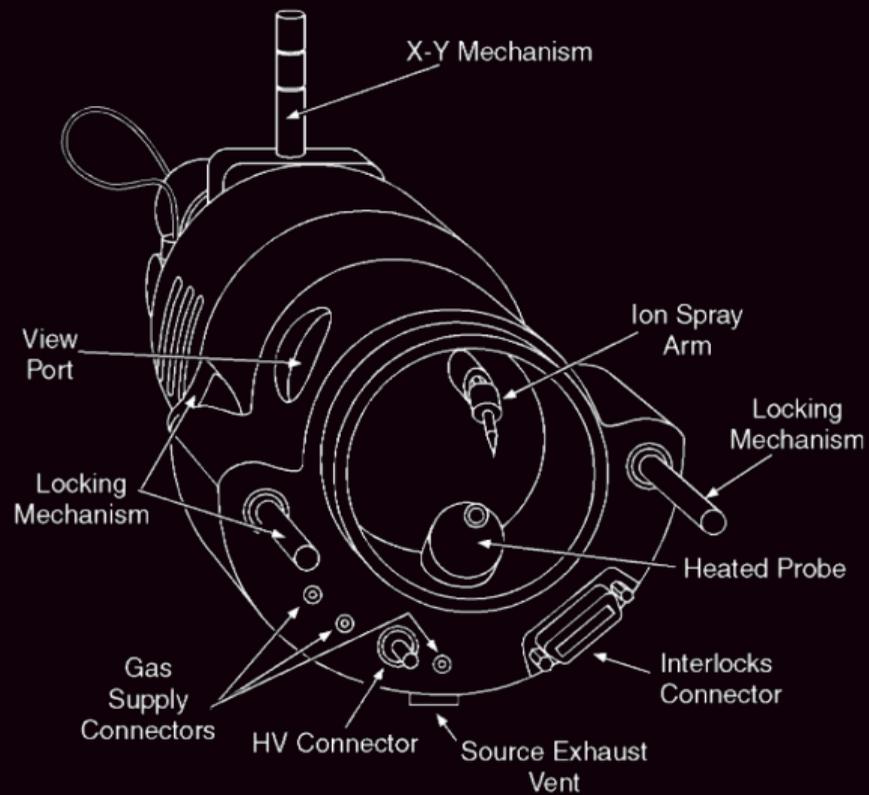


- ▶ Fragmentierung
  - ▶ Mehrfache Ionisierung (zB  $Ar^{++}$  statt  $Ar^{+}$ )
  - ▶ Ausgasen in der Umgebung des Glühdrahtes
- Wir müssen wieder kreativ werden

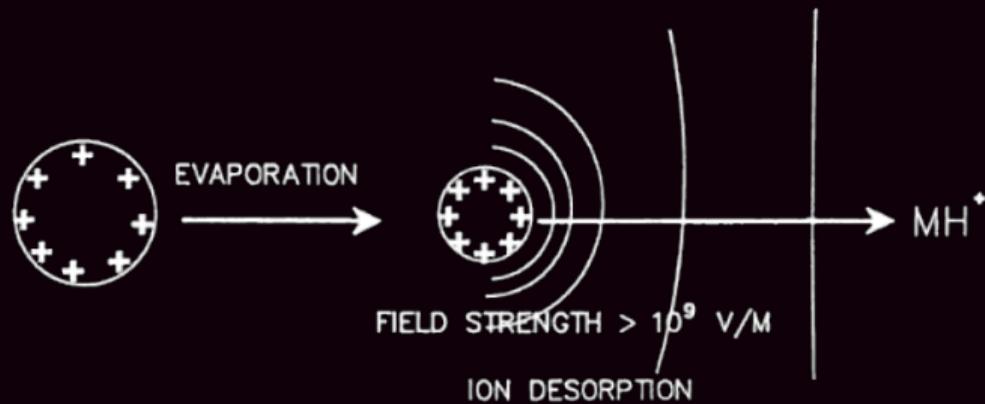
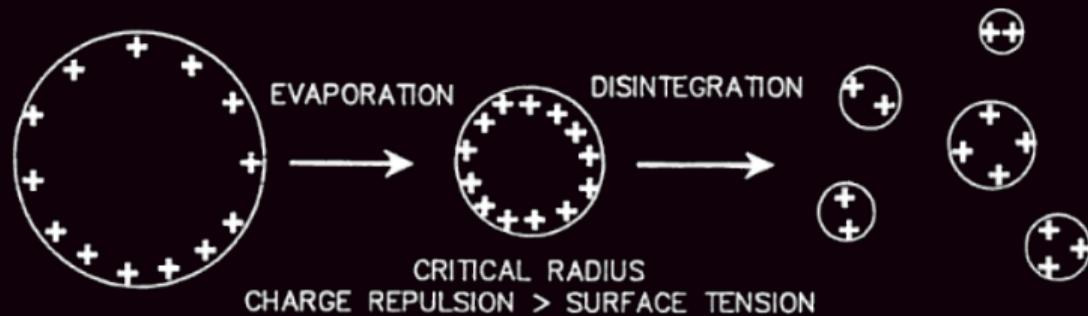
## ESI - Thermospray



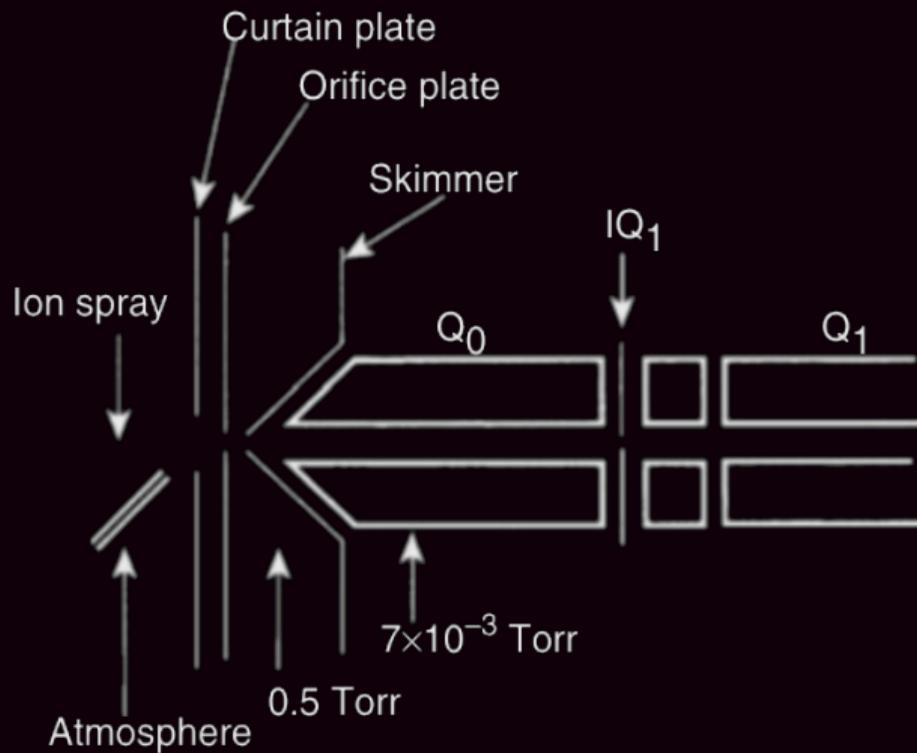
# ESI - Thermospray



# ESI - Thermospray

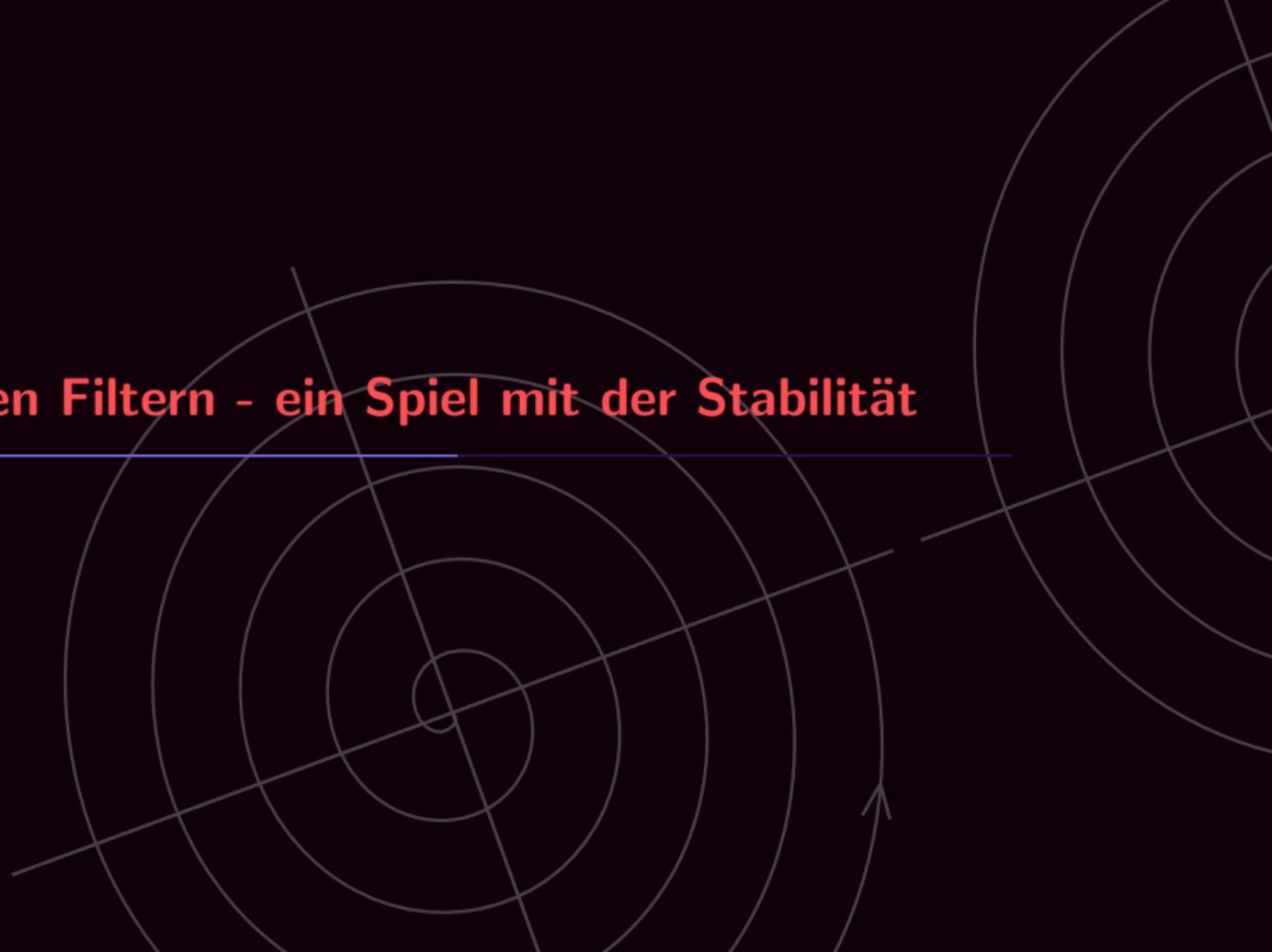


# API interface



# Massen Filtern - ein Spiel mit der Stabilität

---



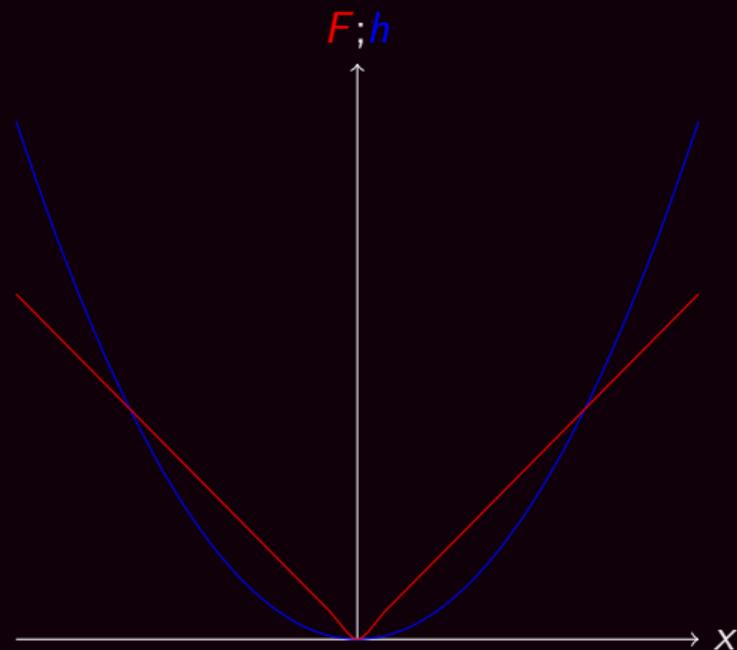
- ▶ Rücktreibende Kraft - Vorzeichen!

- ▶ Rücktreibende Kraft - Vorzeichen!
- ▶ Größer mit mehr Auslenkung

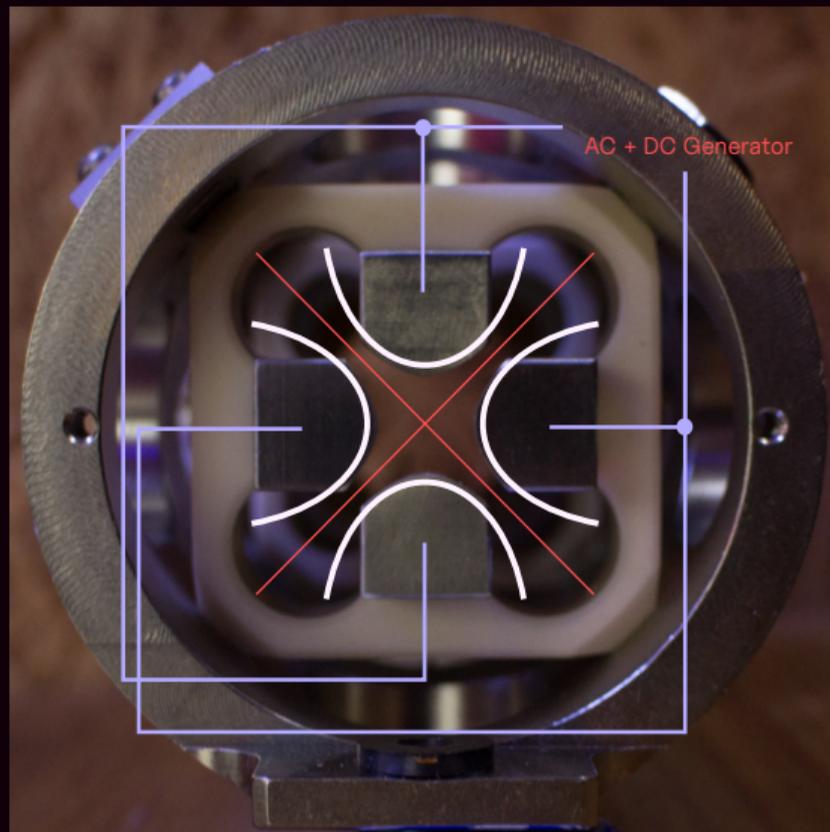
# Stabilität?

- ▶ Rücktreibende Kraft - Vorzeichen!
- ▶ Größer mit mehr Auslenkung

$$\rightarrow F = -c \cdot x$$



## Praktisch ergibt sich dann



Ich habe etwas verschwiegen...

## Ich habe etwas verschwiegen...

▶  $F = q \cdot E$

▶  $F = m \cdot a \rightarrow a = \frac{F}{m}$

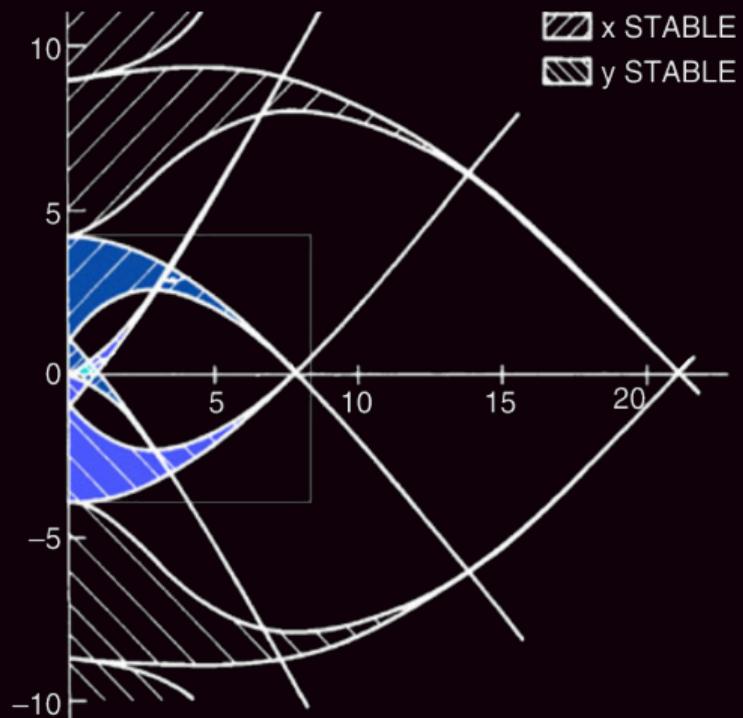
## Ich habe etwas verschwiegen...

▶  $F = q \cdot E$

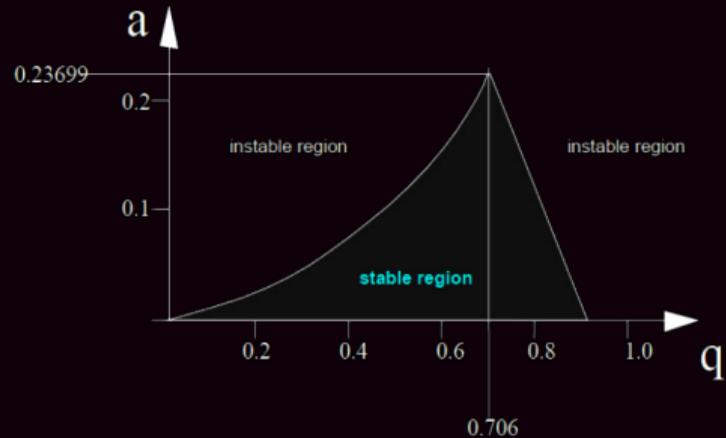
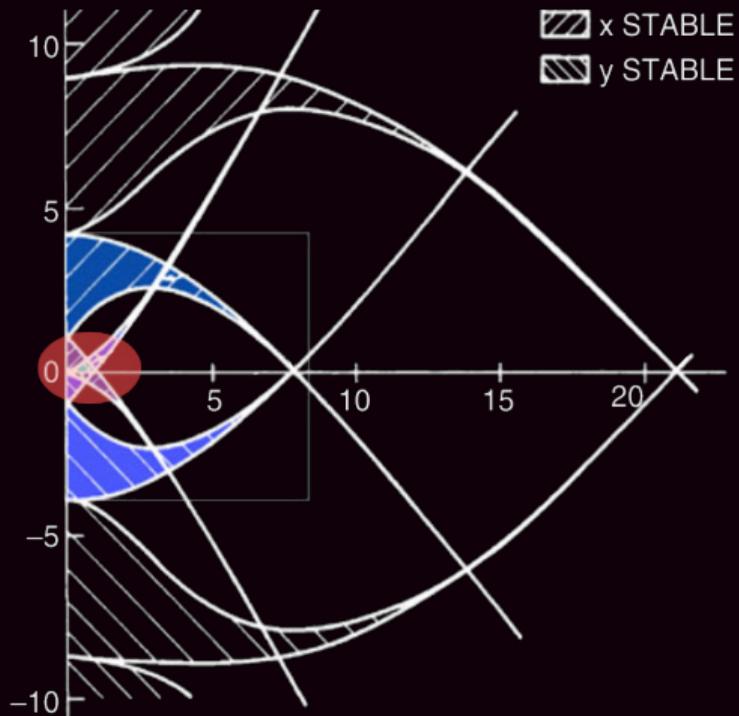
▶  $F = m \cdot a \rightarrow a = \frac{F}{m}$

$\rightarrow a = \frac{q \cdot E}{m} \rightarrow$  wir können also leider nicht direkt  $m$  bestimmen :(

# Zurück zur Stabilität



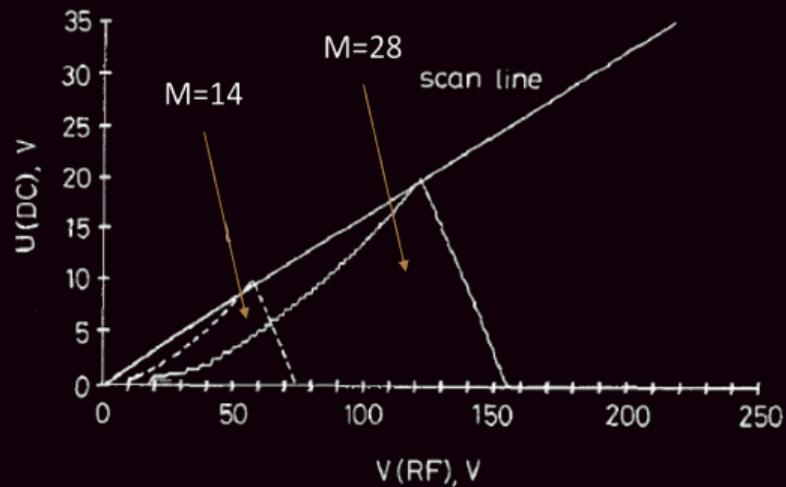
# Zurück zur Stabilität



$$a = \frac{4qU}{mr_0^2\omega^2}, \quad q = \frac{2qV}{mr_0^2\omega^2}$$

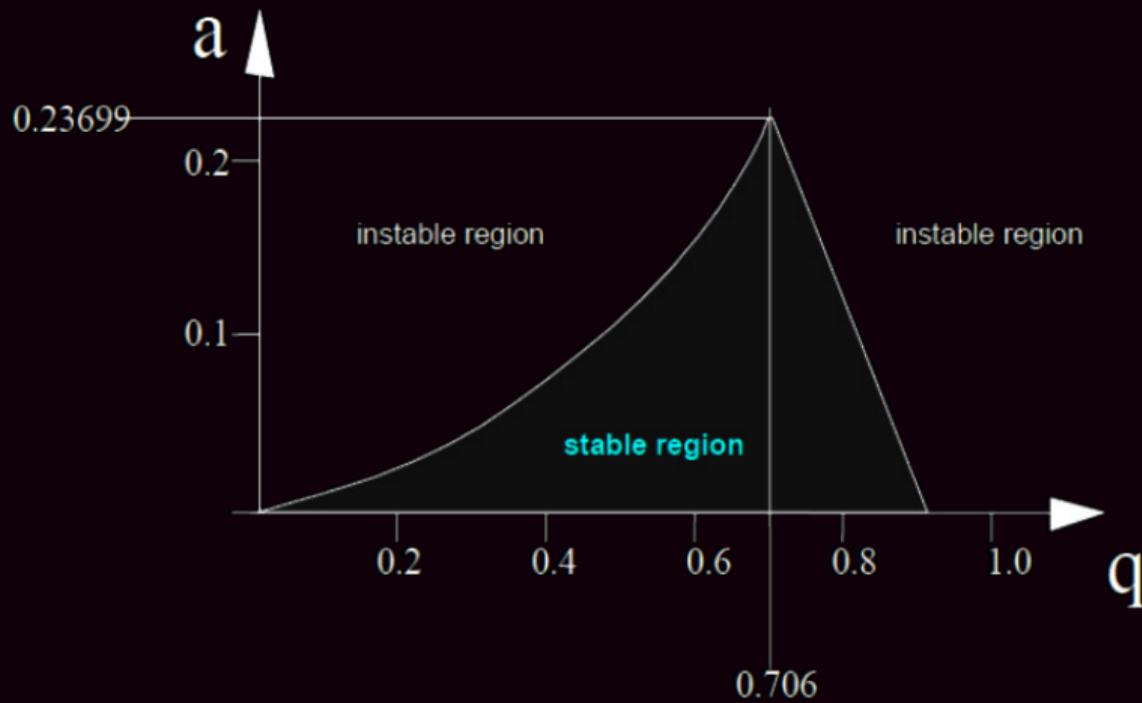
$$[\Phi(t) = U + V \cdot \cos(\omega \cdot t)]$$

# Vom Filter zum Spektrum



- ▶ Parameter des Geräts variieren  
→ unterschiedliche Massen stabil

# Unendliche Auflösung?

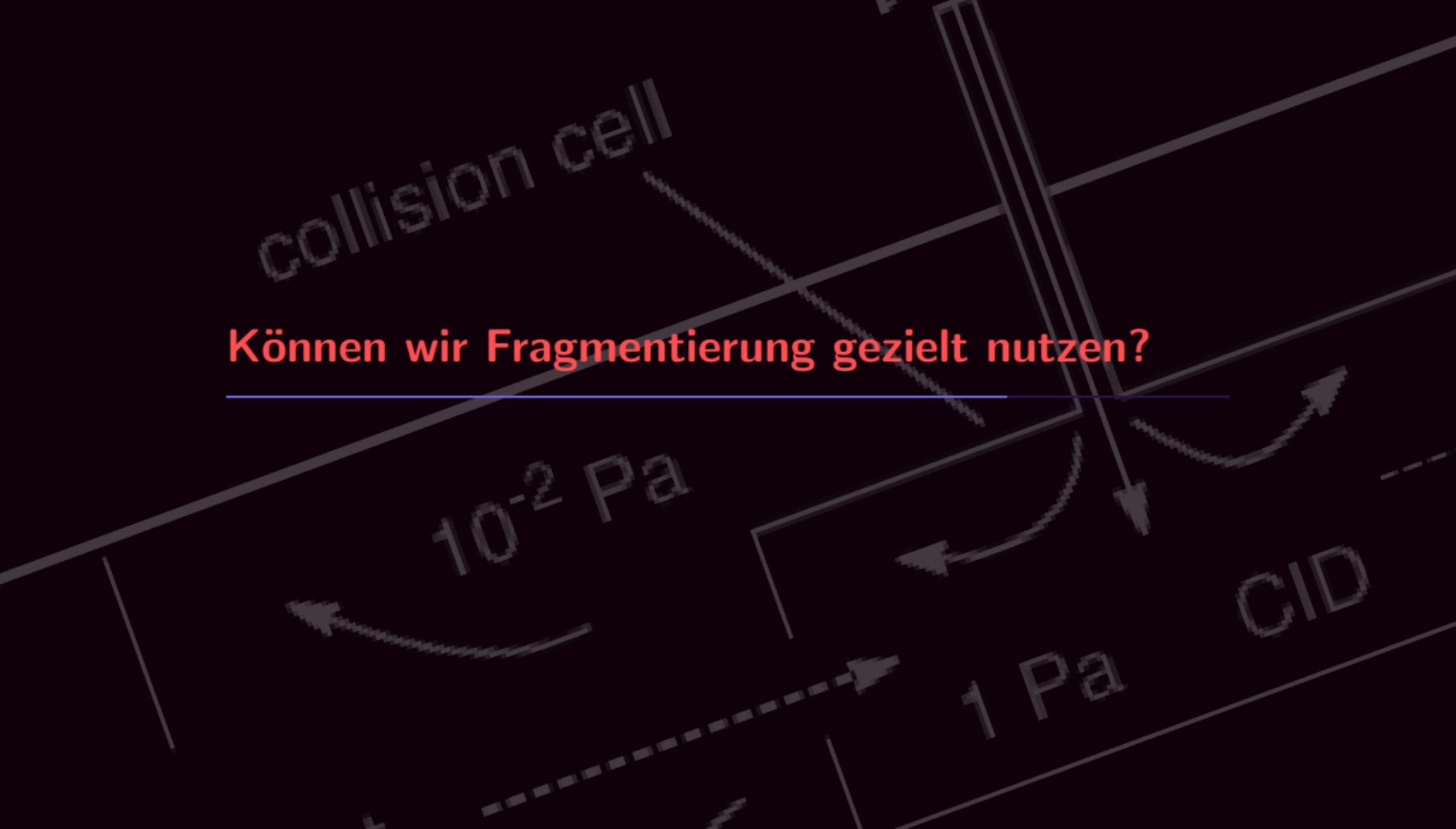


## Vom Quad zum Triple Quad

---



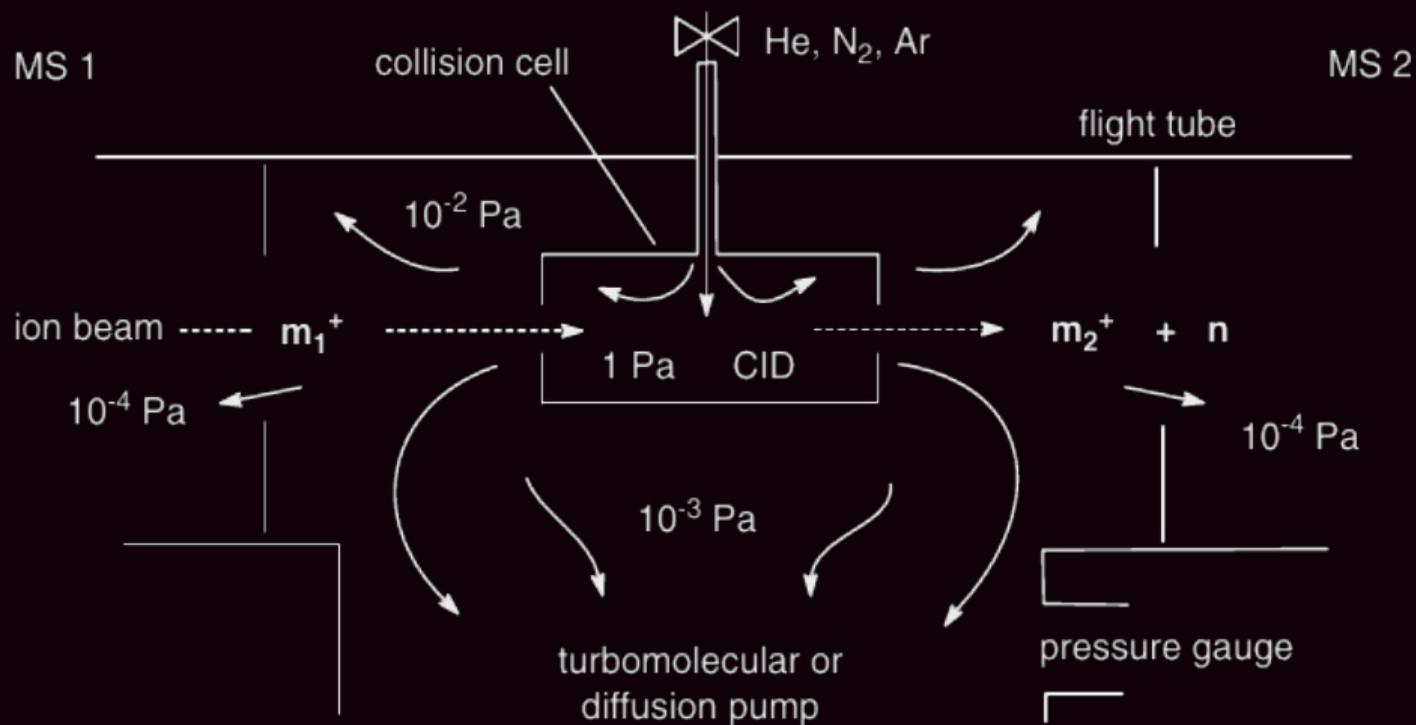
- ▶ **Fragmentierung**
  - ▶ Mehrfache Ionisierung (zB  $Ar^{++}$  statt  $Ar^{+}$ )
  - ▶ Ausgasen in der Umgebung des Glühdrahtes
- Wir müssen wieder kreativ werden



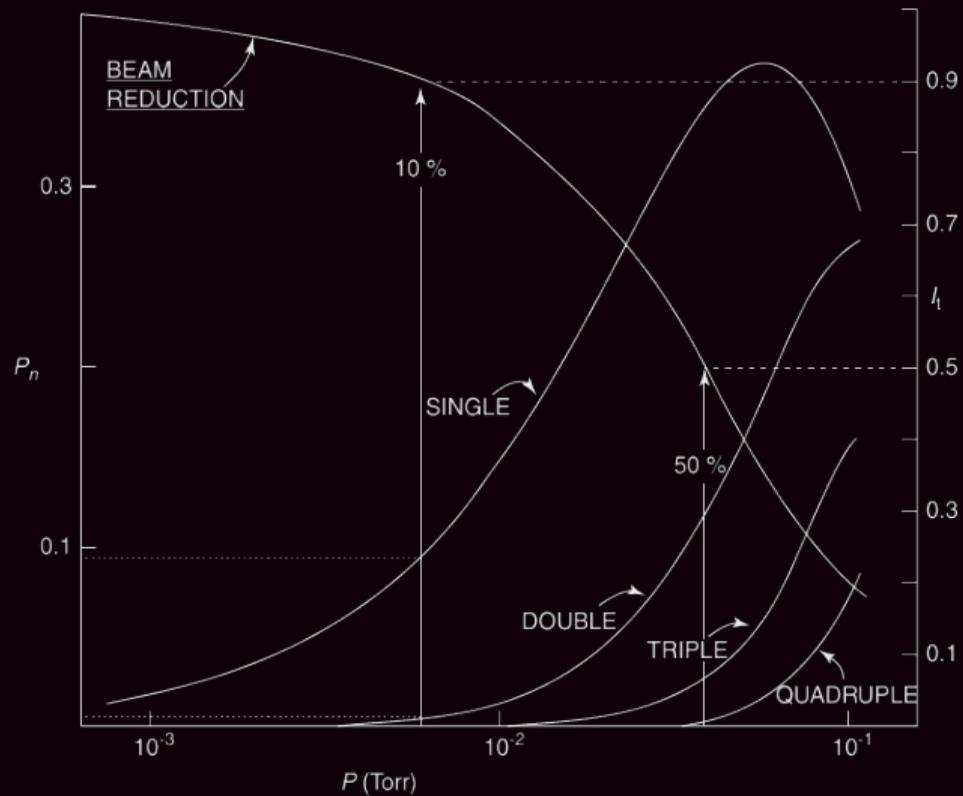
Können wir Fragmentierung gezielt nutzen?

---

# Collision Cell



# Collision Cell

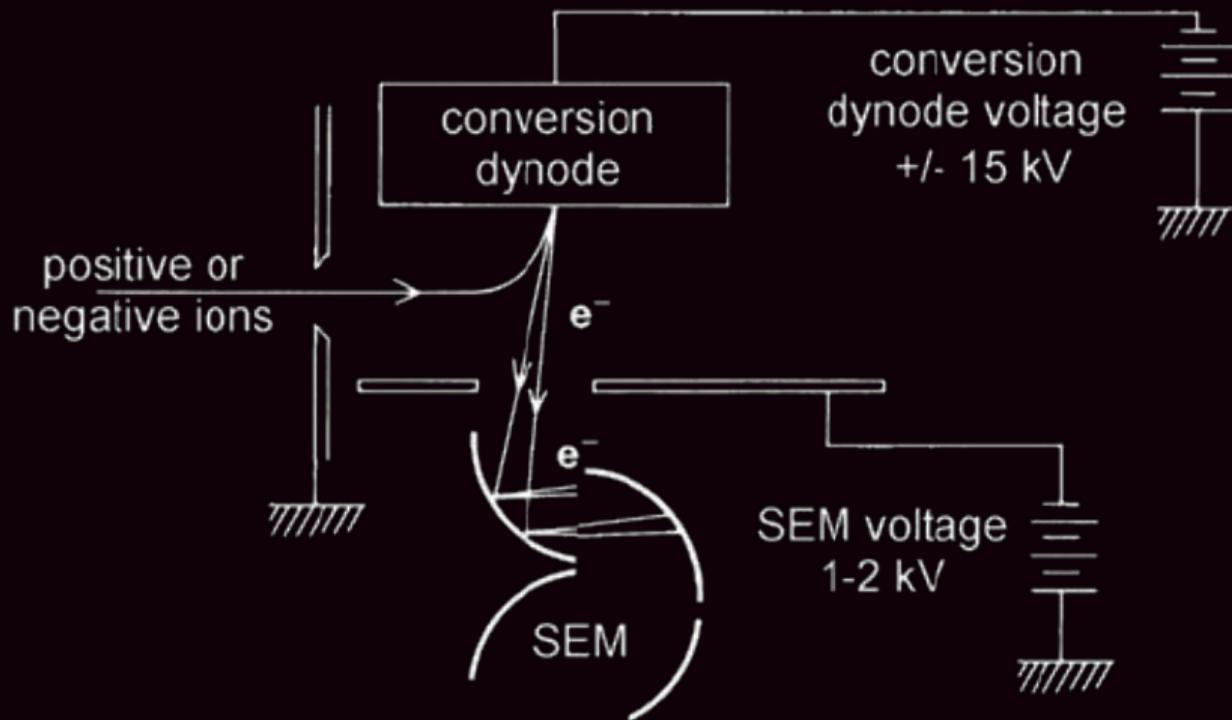


T

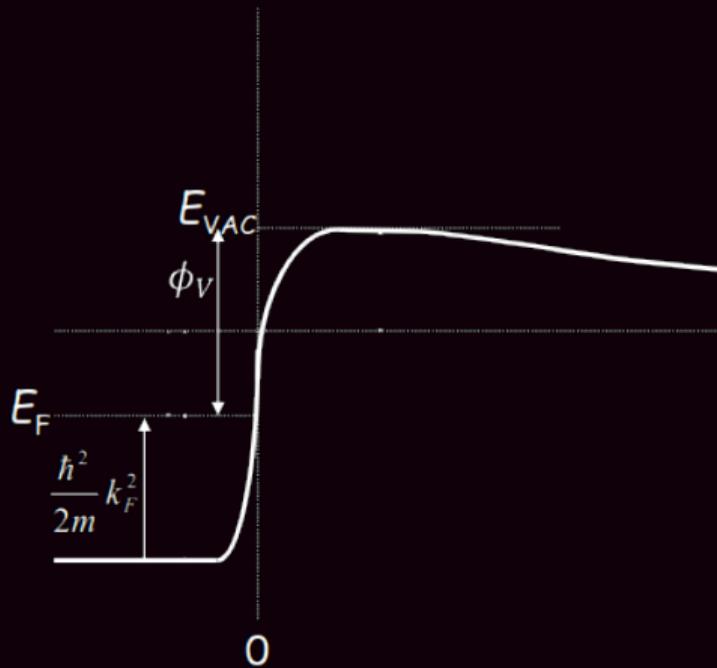
# Detektion

---

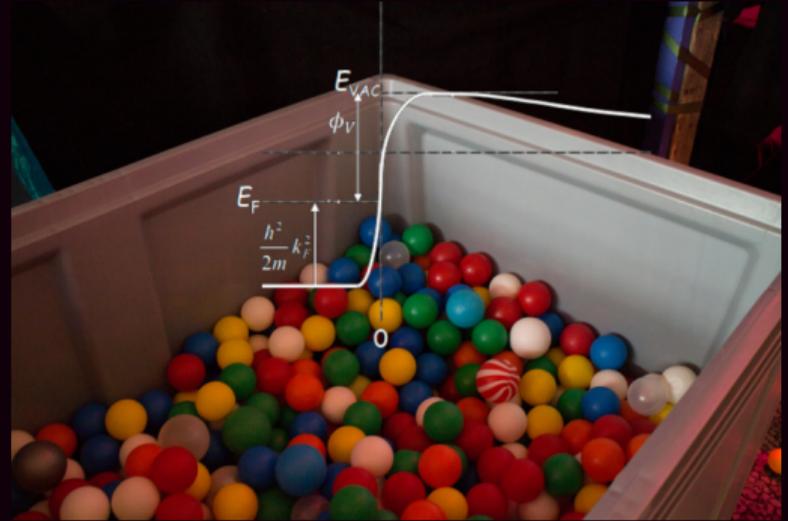
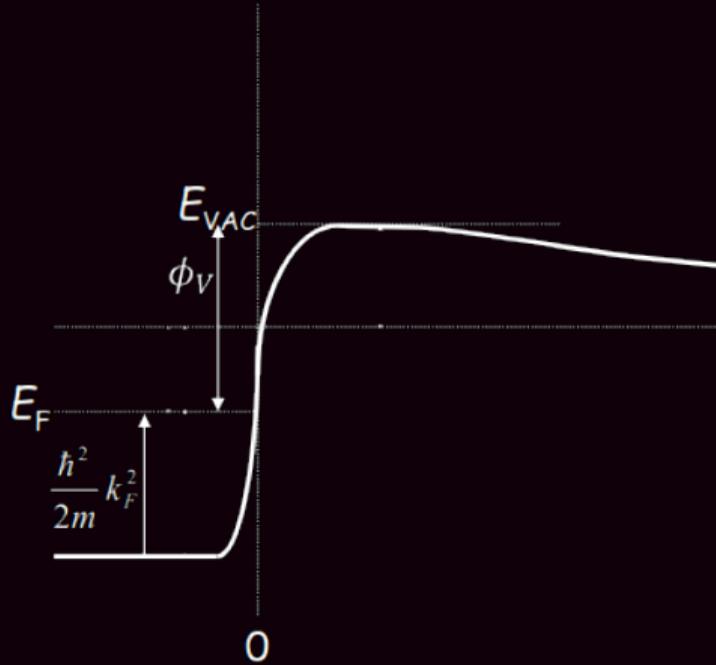
# SEM



# Work Function



# Work Function

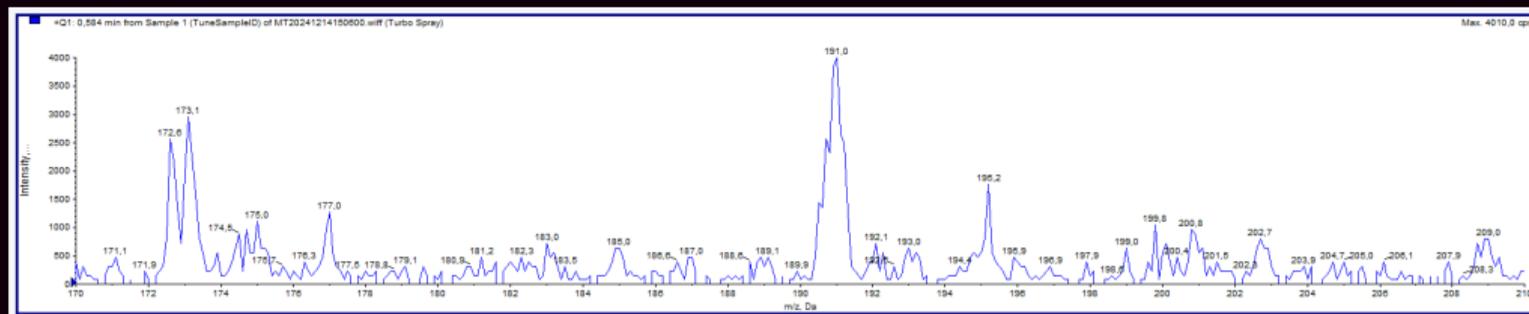




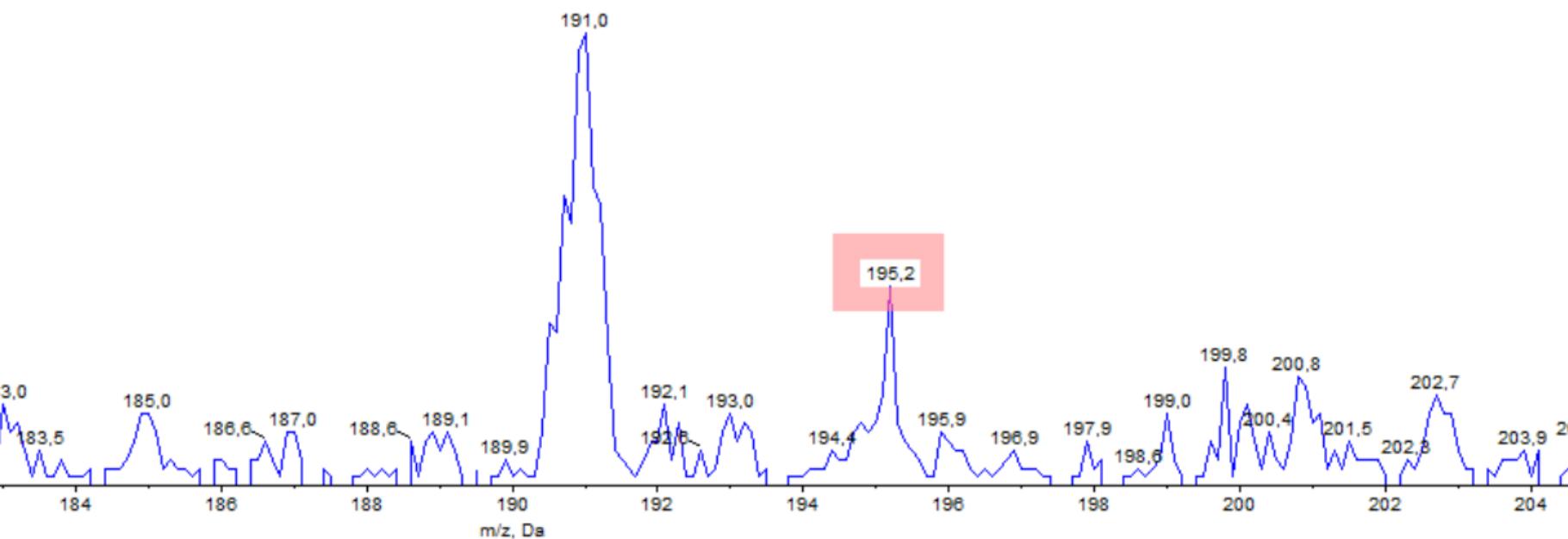
... zu Daten

---

# Koffein in meinem Kaffee? Q1



# Koffein in meinem Kaffee? Q1





**Vielen Dank!**

---

Randnotizen (und Quellen): [https://gry.sh/lecture\\_notes.pdf](https://gry.sh/lecture_notes.pdf)

Noch Fragen? Mail: [me@gry.sh](mailto:me@gry.sh); Fedi: [@greyhash@tech.lgbt](https://mstdn.social/@greyhash@tech.lgbt)