

ТЕХНИЧЕСКИЙ ДОКУМЕНТ

Использование библиотеки спектров Национального института стандартов и технологий США (NIST)

Анализаторы остаточных газов используются в вакуумных исследовательских приложениях уже в течение 25 лет. За последние 10 лет их роль изменилась, и они эволюционировали из исключительно исследовательского прибора в производственный инструмент. Применение анализатора остаточных газов на производстве может способствовать повышению производительности, увеличению выпуска годных изделий, пропускной способности и снижению издержек, а в итоге – увеличению прибыли.

Анализатор остаточных газов общепринятый прибор для идентификации остаточных газов в вакуумной камере. В анализаторе остаточных газов происходит ионизация молекул остаточных газов, разделение ионов по отношению массы к заряду, а регистрируемые интенсивности ионов выводятся на графике в виде масс-спектра. Значения отношения массы к заряду уникальны для молекул каждого газа, следовательно, каждое химическое вещество имеет характеризующий его масс-спектр. При анализе газовых смесей во многих случаях затруднительно идентифицировать какие именно газы вовлечены в процесс. Например пик, соответствующий массе 28 а.е.м., может быть порождён ионами либо азота, либо угарного газа. Используя библиотеку масс-спектров, анализатор остаточных газов способен определять газы, ионизированные молекулы которых вносят вклад в формирование пиков, соответствующих определённым массам.

СХЕМА ФРАГМЕНТАЦИИ

Масс-спектр, полученный при распаде родительской молекулы в результате электронного удара, часто называют схемой фрагментации (распада). Схема фрагментации индивидуальна для каждого химического соединения и может быть использована для идентификации молекул газа или пара. Чем более сложная молекула, тем более сложной будет её схема фрагментации. Имеются ещё два других фактора, которые влияют на формирование различных пиков: изотопные отношения и многократная ионизация.

ИЗОТОПНЫЕ ОТНОШЕНИЯ

Атомная единица массы (а.е.м.) элемента указывает число протонов и нейтронов, входящих в природный состав этого элемента. Изотоп – это элемент, число нейтронов в котором отличается от числа протонов его природного элемента. Изотопные отношения помогают значительно облегчить распознавание особых материалов. При нормальных условиях ионизации, отношение интенсивностей пиков для различных изотопов одного элемента будет совпадать с отношением их распространённости в природе. Рассмотрим к примеру аргон, основной или родительский пик, порождаемый аргоном, появляется на массе 40 а.е.м. (22 нейтрона и 18 протонов), а пики, порождаемые изотопами аргона, – на массе 36 а.е.м. (18 нейтронов и 18 протонов) и на массе 38 а.е.м. (20 нейтронов и 18 протонов).

МНОГОКРАТНАЯ ИОНИЗАЦИЯ

Столкновение электрона, имеющего достаточную энергию, с молекулой газа может привести к развитию различных процессов. В некоторых случаях это приводит к отрыву от молекулы нескольких электронов, как правило, двух. Этот образованный ион будет иметь заряд ++, а не +, и пролетит через фильтр масс. Рассмотрим к примеру газ аргон: основной пик будет формироваться однозарядными ионами Ar^+ , попадающими в детектор, но некоторая часть двухзарядных ионов Ar^{++} также достигнет детектора. Присутствие обоих пиков, порождаемых ионами Ar^+ и Ar^{++} , называют схемой фрагментации аргона. На спектре, полученном анализатором остаточных газов, по оси X отложены значения отношения массы к заряду. Пик, формируемый однозарядным ионом Ar^+ молекулы аргона Ar , появляется на значении $40 / +1 = 40$ отношения массы к заряду. Пик, формируемый двухзарядным ионом Ar^{++} молекулы аргона Ar , появляется на значении $40 / +2 = 20$ отношения массы к заряду.

Значения отношения массы к заряду уникальны для молекул каждого газа, а амплитуды пиков зависят от газа и характеристик прибора. Высота пика на масс-спектре пропорциональна парциальному давлению вещества, ионы которого сформировали этот пик. Парциальное давление определяется как давление отдельного компонента в газовой смеси. Отношения между амплитудами пиков, формируемых ионами молекул газа, определяются прибором и источником газа. Поэтому спектры одного и того же вещества, полученные на разных приборах, будут несколько отличаться. Кроме того энергии иона и электронов влияют на вероятность распада и образования ионов с более высоким зарядовым состоянием.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИБЛИОТЕКИ СПЕКТРОВ NIST

Библиотека масс-спектров NIST содержит масс-спектры химических веществ и сопутствующие сведения. Основная коллекция содержит по одному спектру для каждого химического вещества и создана в качестве источника надёжных масс-спектрометрических «индивидуальных отпечатков» для облегчения идентификации веществ. Схемы фрагментации и другие сведения можно получить на веб-сайте института NIST, по ссылке <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. Веб-книга по химии (NIST Chemistry WebBook) предоставляет пользователям лёгкий доступ к данным о физических и химических свойствах химических веществ через Интернет. Сайт предоставляет доступ к данным из коллекций, поддерживаемых в рамках программы стандартных справочных данных NIST и предоставленным другими участниками. Данные в веб-книге (WebBook) организованы по химическим веществам. Для всех химических веществ набор общих сведений отображается вверху веб-страницы. Эти сведения содержат: название вещества, молекулярный вес, регистрационный номер CAS (если имеется), изображение структуры (если имеется), масс-спектр, ссылки на другие данные, меню выбора системы единиц.

ПОИСК ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Веб-книга NIST Chemistry WebBook поддерживает несколько вариантов прямого поиска химических веществ. Доступные варианты поиска: по формуле, химическому названию, энергии ионизации, уровню электронной энергии, молекулярному весу, сродству к протону или электрону и др. Например при поиске по химической формуле (результаты которого приведены на рис. 1 и 2), появится приглашение ввести химическую формулу нужного вещества.

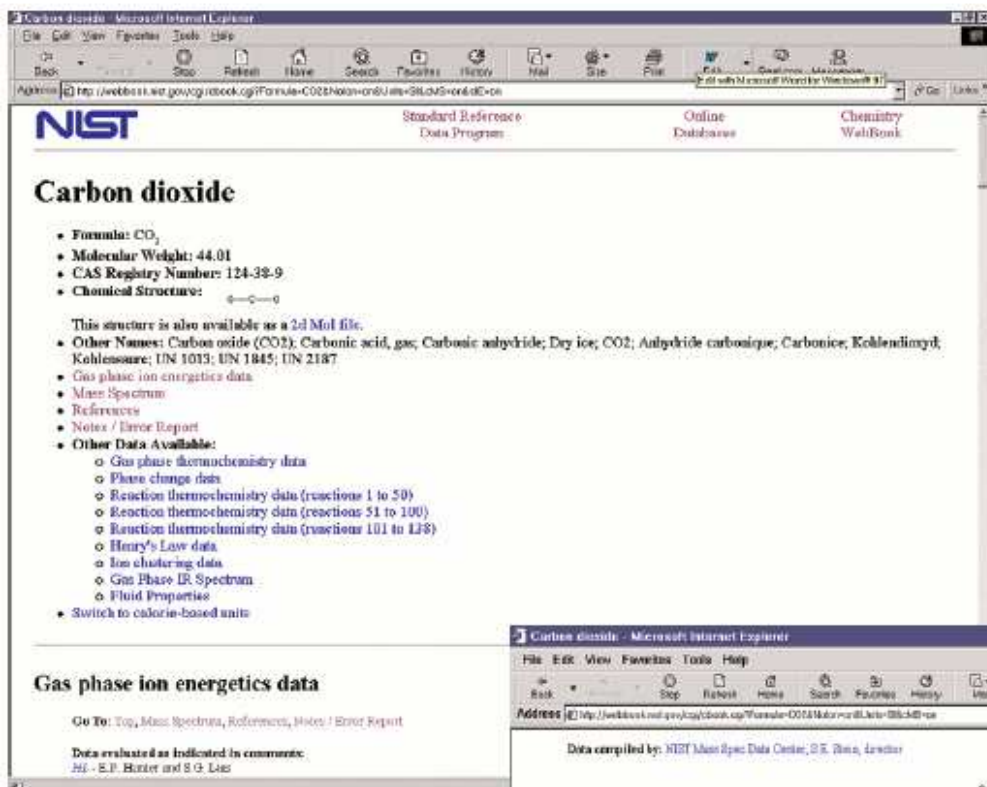
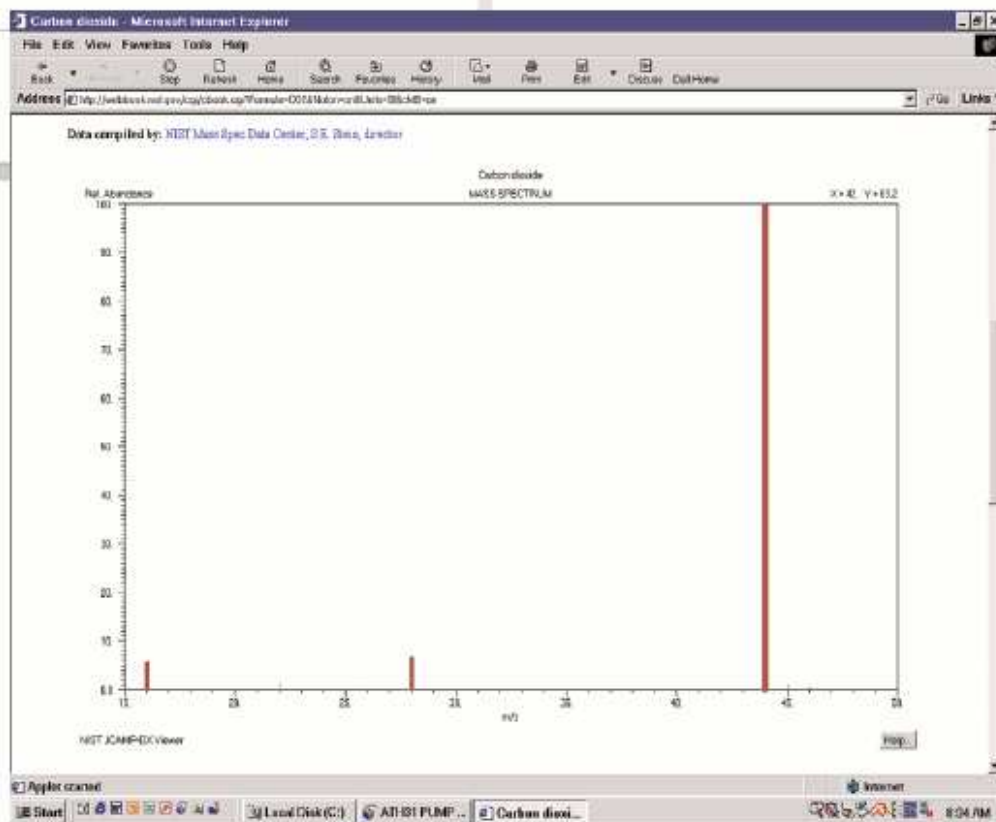


Рис. 1. Результат поиска по формуле CO₂

Рис. 2. Схема фрагментации CO₂



Правила использования химических формул:

- Элементы можно указывать в любом порядке, но символы элемента необходимо вводить, используя правильный регистр. В противном случае формула может оказаться неоднозначной, а выбранная интерпретация может не соответствовать требуемой.
- Чтобы указать любую букву в названии элемента, используйте знак (?) после символа элемента.
- Чтобы указать любое число в названии элемента, используйте знак (*) после символа элемента. Чтобы явно задать ион, укажите заряд в конце формулы (например C₆₀-2).
- Каждый вариант поиска регламентируется собственными правилами, с которыми можно ознакомиться щелкнув ссылку (Help) (Справка) на странице выбранного варианта поиска.

Каждый вариант прямого поиска позволяет пользователю выбрать единицы, в которых будут отображаться данные (рис. 2). Пользователь может выбрать отображение данных в единицах Международной системы единиц или на основе калории. Выбор последнего варианта приведёт к отображению значений энергии и давления в калориях и атмосферах, а не в джоулях и барах. Если результаты поиска содержат несколько химических веществ, соответствующих условиям поиска, то найденные вещества будут отображены на странице выбора.

Большинство вариантов поиска, рассмотренных выше, имеют несколько общих возможностей, включая: возможность выбора единиц для отображения данных, типов отображаемых данных и общий формат отображения результатов поиска, когда условиям поиска соответствуют несколько химических веществ.

Использование веб-сайта института NIST – это лёгкий способ идентификации неизвестных химических веществ, которые могут встретиться в вашем анализе.



МЕЖДУНАРОДНЫЙ ГЛАВНЫЙ ОФИС: Two Technology Place, East Syracuse, NY 13057 USA (США)

Тел.: +1.315.434.1100

Факс: +1.315.437.3803

Эл. почта: reachus@inficon.com

США **ФРАНЦИЯ** **ГЕРМАНИЯ** **ЛИХТЕНШТЕЙН** **ШВЕЙЦАРИЯ** **ВЕЛИКОБРИТАНИЯ**
КИТАЙ **ЯПОНИЯ** **КОРЕЯ** **СИНГАПУР** **ТАЙВАНЬ**

Контактную информацию и сведения о представительствах нашей компании в других регионах мира см. на нашем веб-сайте:
www.inficon.com

Tware 32 является торговым знаком компании INFICON Inc.