



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 40129—2021/ISO 13084:2018

---

## 表面化学分析 二次离子质谱 飞行时间二次离子质谱仪质量标校准

Surface chemical analysis—Secondary ion mass spectrometry—Calibration of the  
mass scale for a time-of-flight secondary ion mass spectrometer

(ISO 13084:2018, IDT)

2021-05-21 发布

2021-12-01 实施

国家市场监督管理总局  
国家标准化管理委员会 发布

## 目 次

前言 .....	III
引言 .....	IV
1 范围 .....	1
2 规范性引用文件 .....	1
3 术语和定义 .....	1
4 符号和缩略语 .....	1
4.1 符号 .....	1
4.2 缩略语 .....	2
5 方法概述 .....	2
6 提高质量准确度的方法 .....	3
6.1 获取用于优化的参考样品 .....	3
6.2 制备聚碳酸酯样品 .....	3
6.3 获取 SIMS 质谱数据 .....	3
6.4 计算质量准确度 .....	3
6.5 优化仪器参数 .....	5
6.6 谱图校准程序 .....	7
附录 A (资料性) 校准不确定度 .....	9
附录 B (资料性) 内部添加法 .....	10
参考文献 .....	12

## 前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

本文件使用翻译法等同采用 ISO 13084:2018《表面化学分析 二次离子质谱 飞行时间二次离子质谱仪质量标校准》。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由全国微束标准化技术委员会(SAC/TC 38)提出并归口。

本文件起草单位：中山大学。

本文件主要起草人：陈建、谢方艳、龚力、杨慕紫、杨皓、张浩、张卫红。

## 引 言

二次离子质谱(Secondary ion mass spectrometry, SIMS)是用于分析有机表面和分子表面的一种强有力技术。在过去的十年中,二次离子质谱仪器已经有了显著的改进,因此现代仪器具有非常高的重复性和稳定性<sup>[2]</sup>,而且通过准确测量二次离子的质量来确定复杂分子的化学组成的需求越来越多。因此做到这一点以及区分含有不同化学成分但具有相同标称质量(取整到最接近的整数质量)分子的相对质量准确度是一个重要参数。需要优于  $10 \times 10^{-5}$  的相对质量准确度来区分总质量高达 1 000 u 的母离子中  $C_2H_4$  (28.031 30 u) 和 Si (27.976 92 u) 和总质量高达 300 u 的母离子中  $CH_2$  (14.015 65 u) 和 N (14.003 07 u)。然而,在最近的实验室间研究中<sup>[3]</sup>,发现碎片平均质量准确度为  $1.5 \times 10^{-4}$ 。这明显比明确识别离子所要求的相对质量准确度要差。详细的研究表明,使准确度降低的关键因素包括二次离子的宽动能分布、非优化的仪器参数和质量标度校准的外推。

本文件描述了一种使用当地材料以优化仪器参数的简单方法和程序,以确保在可选择的不确定度范围内实现质量标的准确校准。

# 表面化学分析 二次离子质谱

## 飞行时间二次离子质谱仪质量标校准

### 1 范围

本文件描述了一种用于优化一般分析目的的飞行时间二次离子质谱(SIMS)仪器的质量校准准确度的方法。本文件仅适用于飞行时间仪器,但并不限于任何特定的仪器设计。本文件提供了一些仪器参数优化的指导,这些参数能使用此程序进行优化,还提供了适用于校准质量标以获得最佳质量准确度的一般峰的类型。

### 2 规范性引用文件

本文件没有规范性引用文件。

### 3 术语和定义

本文件没有需要界定的术语和定义。

ISO 和 IEC 使用的标准化术语数据库保存在下列网址中:

——ISO 在线浏览平台:<https://www.iso.org/obp>

——IEC 电工百科:<http://www.electropedia.org>

### 4 符号和缩略语

下列符号和缩略语适用于本文件。

#### 4.1 符号

$m$ :待测质量

$m_1$ :校准质量 1

$m_2$ :校准质量 2

$M$ :质量(u)

$M_0$ :峰中心(u)

$\Delta M$ :质量准确度(u)

$M_P$ :测得谱峰的质量(u)

$M_T$ :真实质量(u)

$U(m)$ :校准产生的质量  $m$  的质量不确定度

$U_1$ : $m_1$  准确质量测量的不确定度

$U_2$ : $m_2$  准确质量测量的不确定度

$U_0$ :准确质量测量的平均不确定度

$V_R$ :反射器或接收电压(V)

$W$ :相对质量准确度

$x$ :碳原子数

$y$ :氢原子数

$G_0$ :缩放项

$\alpha$ :不对称项

$\sigma(\Delta M)$ :多个峰的质量准确度的标准偏差

$\sigma_M$ :碳原子数为 4,6,7 和 8 的四个  $C_x H_y^+$  系列的每个系列的  $\Delta M$  标准偏差的平均值