**国家市场监管技术创新中心（质谱）**

**2023年度开放课题申请指南**

**1、分子离子反应机制研究**

**拟解决问题：** 基于反应质谱方法，结合理论化学计算，系统研究团簇与有机小分子的反应，探究过渡金属掺杂效应、电荷效应等因素对金属与碳原子之间相互作用的影响，得到影响团簇反应活性的本质因素。详细分析反应的微观机理，探索特殊的反应机制，为新型的催化剂的合理设计提供理论依据。

**研究内容：** 在市场监管技术创新中心原有质谱仪器基础上进行适度改造，搭建分子离子反应质谱，选取典型团簇体系，进行反应质谱实验，得到团簇与小分子反应的实验数据，反应产物、反应速率等信息，并采用理论计算进行验证与分析。

**考核指标：**发表学术论文一篇（提供论文首页或接收证明）。

**2、FTICR质谱模拟仿真研究**

**拟解决的关键问题：**FTICR（Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance）质谱是一种高分辨率、高灵敏度的质谱分析技术。它通过将离子置于磁场中，使其在电场磁场作用下发生回旋运动，从而获得离子的质量-电荷比以及其它相关信息。本研究旨在使用计算机模拟仿真的方法，使用相关模拟软件研究FTICR质谱分析技术中的一些关键问题，包括离子回旋运动的理论模型、磁场的优化设计、离子注入和激发方式等。通过对FTICR质谱的模拟仿真研究深入了解FTICR质谱的工作原理和性能特点，为未来的仪器开发奠定基础。

**研究内容：**主要研究内容包括：1. 离子回旋运动的理论模拟：建立离子在磁场中回旋运动的模型，分析不同参数对回旋半径、回旋频率等的影响。2. 磁场的优化设计：通过计算机仿真优化磁场设计，了解磁场精度对质谱分辨率和灵敏度的影响。3.离子注入和激发方式：比较不同离子注入和激发方式对质谱分析结果的影响，寻找最佳的操作条件。4. 离子的信号处理：离子镜像电流的检测和放大和傅里叶变换方法，研究FTICR信号处理算法，提高信号的稳定性和准确性。

**考核指标：**

1. 建立7-10T磁场下的FTICR质量分析器池模型，实现以下功能：离子收集，质量选择，激发分析，信号检测功能。建立FTICR中信号的采集，放大，和傅里叶变化过程的模拟仿真，研究影响其性能参数的因素。

 2. 申请专利一项（受理通知书），发表学术论文一篇（论文首页或提交界面）。