

## Gas Cluster 실험에서 Reflectron을 이용한 Mass Selection

김성수†

목원대학교

(논문접수일 : 2003년 4월 22일)

### Mass Selection using Reflectron in gas cluster experment.

Sung-Soo Kim

Mokwon University

(Received Apr. 22, 2003)

#### 요 약

Gas cluster 실험에서 reflectron을 mass selector로서 사용 가능한지를 알아보기 위하여 'SIMION' program을 이용하여 computer simulation하였다. Reflectron 내에서 입자의 비행경로는 질량과는 무관하고 에너지에 따라 변한다. 그러나  $(CO_2)_n$  gas cluster의 경우, reflectron을 통과한 직후 cluster의 위치는 cluster의 질량에 따라 공간적으로 분포한다는 것을 알았다. 이것은 cluster의 E/m이 일정하기 때문에 나타난 것으로, 이러한 질량의 공간 분해능이 있기 때문에 reflectron을 mass selector로서 이용할 수 있다는 것을 확인하였다. 질량 분해능은 cluster size와 입사각에는 무관하고, 입사위치에 비례한다는 것을 알았다. 이것은 reflectron의 크기를 조정함으로써 질량 분해능을 향상시킬 수 있다는 것을 의미한다. 그러므로 gas cluster 실험에서 reflectron은 질량 분해능이 대단히 우수한 mass selector로서 응용할 수 있다는 것을 확인하였다.

주제어 : 질량선택, 리플렉트론, 가스 클러스터,  $CO_2$

#### Abstract

In order to find out whether a reflectron can be used as a mass selector in the gas cluster experiment, computer simulation are performed using the SIMION' program. Flight paths of energetic particles in the reflectron does not depend on their mass but energy. In the case of  $(CO_2)_n$  gas cluster, however, the position of clusters just after passing through the reflectron are spacially distributed with respect to the mass. The reason that the masses spacially distributes is the E/m ratio of clusters is constant, and it is the key reason that a reflectron can be used as a mass selector. Mass resolution does not depend on the cluster size and incident angle of clusters, and it is proportional to the incident position of clusters. This means that mass resolution can be enhanced by resizing the dimension of a reflectron. Therefore, it is concluded that a reflectron can be used as a mass selector with excellent mass resolution in the gas cluster experiment.

Key Words : mass selection, reflectron, gas cluster,  $CO_2$

## 1. 서 론

Gas cluster ion beam 기술은 shallow implantation [1], surface sputtering [2,3], surface smoothing [3], film formation [4] 등과 같은 새로운 표면 개질 기술로서 주목받고 있다. Cluster ion beam이 갖는 중요한 장점 중의 하나는, cluster를 구성하는 입자들의 평균 에너지가 수십 eV 정도로 낮아서 cluster와 표면과의 상호작용이 얇은 표면층에서만 일어난다는 점이다. 그러나 노즐에서 cluster가 형성될 때 수십에서 수천 개의 구성입자로 이루어진 다양한 크기의 cluster가 만들어지기 때문에, 표면과 상호 작용하는 입자들의 평균에너지가 항상 낮은 것이 아니다. 예를 들어 100kV로 가속된  $(CO_2)_n$  cluster의 경우,  $CO_2$  분자 한 개의 평균 에너지는 0.096eV 이므로,

노즐에서 방출될 때  $n = 100$ 과  $n = 1000$ 인 cluster의 에너지는 각각  $(CO_2)_{100} = 9.6eV$ ,  $(CO_2)_{1000} = 96eV$ 이다. 그러나 가속 후 cluster의 에너지는 둘 다 약 100keV이지만,  $CO_2$  분자당 에너지는 각각 약 1000eV와 100eV로서 큰 차이가 있다. 이 차이로 인하여 cluster와 표면과의 상호작용에서 예기치 않은 결과가 야기될 수 있다. 그러므로 노즐에서 방출된 다양한 크기의 cluster 중에서 원하는 크기만 selection 할 수 있는 방법이 요구된다. 또한, cluster와 고체표면과의 상호작용을 정확히 이해하기 위해서도 cluster ion beam의 mass selection이 반드시 필요할 것으로 예상된다.

Reflectron [5-7]은 제작이 쉽고 원리가 간단하기 때문에 많이 응용되고 있다. TOF(Time of Flight) 기술과 결합한 Reflectron-TOF mass spectrometer는 질량 분해능이 좋을 뿐만 아니라, 원리적으로 무한대의 질량까지 측정할 수 있다. Reflectron-TOF를 이용한 질량 측정은, 기본적으로  $E/m \propto (L/t)^2$ 로부터 나타나는 시간분해능을 이용한다. 즉, 에너지 혹은 질량이 다르면 입자의 비행시간이 달라지기 때문에, 비행시간을 측정함으로써 질량 혹은 에너지를 분석할 수 있다. 반면 gas cluster의 경우,  $E/m$  비가 항상 일정하기 때문에 질량이 달라도 비행시간의 차이가 없기 때문에, 시간 분해능을 이용해서는 질량을 분해해 낼 수 없다. 그러나 reflectron만 이용할 경우 질량의 공간 분해능이 있다. 이 점에 착안하

여, 본 연구에서는 reflectron을 이용하여 cluster ion 들의 mass selection이 가능한지를 확인하고자 한다.

## 2. Computer simulation

### 1) Simulation 조건

그림 1은 'SIMION' program [8]으로 simulation하기 위한 reflectron의 구조이다. 입사입자는 reflectron의 접지면에 수직인 방향에 대하여  $\alpha$ 의 각도로  $y_{in}$  위치에서 입사된다고 가정하였다. 입사된 입자는, reflectron bias voltage  $V_B$ 에 의해 reflectron 내부에 균일하게 분포된 전기장으로 인하여 반사된 후,  $y_{out}$  위치에서 reflectron을 빠져 나간다고 가정하였다. Simulation에 사용된 기호는,  $y_{in}$  = 입사 입자의 y 축 좌표(mm),  $y_{out}$  = Reflectron을 빠져나가는 입자의 y축 좌표(mm),  $\alpha$  = 입사각,  $E_0$  = 입사 입자의 에너지,  $V_B$  = Reflectron에 걸어준 bias voltage,  $m$  = 입사입자의 질량(amu)이다. Reflectron의 구조는 내경 170mm, 외경 140mm, ring의 두께 1.0mm, ring의 간격은 7.0mm이고, 각 ring 사이에는 동일한 저항 R로서 연결되어 있다고 가정하였다.

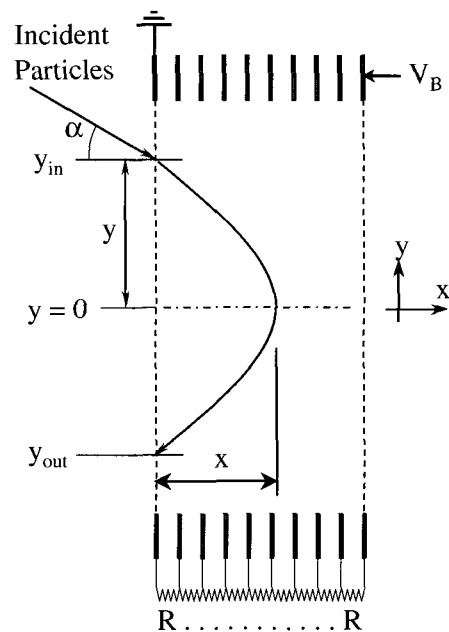


그림 1. 'SIMION' program으로 simulation하기 위한 reflectron의 구조.

2) 입사입자의 질량과 에너지에 따른 비행경로 및 비행시간

그림 2는 입사입자가  $y_{in} = -y_{out}$  의 비행경로를 지날 때, 입사입자의 에너지 E 와 bias voltage  $V_B$  의 관계를 simulation한 것이다. 여기서 입사입자의 조건은  $\alpha = 300$ ,  $y_{in} = 60$ ,  $m = 50amu$  이다. 그림 2에서, 입사입자의 에너지와  $V_B$  는 선형적으로 비례한다는 것을 알 수 있다. 이것은 정전기장내에서 에너지를 가진 하전입자의 운동이기 때문에 예상되는 결과이다. 즉, reflectron 내부에는 x축과 평행으로 균일한 전기장이 형성되기 때문에, reflectron을 통과하는 동안 입사입자의 y축 에너지 성분의 변화는 없다. 반면, x축 에너지 성분은 역방향 전기장에 의해 점점 감소하여 0이 되었다가 다시 반대방향을 가속되어, reflectron을 빠져나갈 때는 입사할 때의 에너지를 회복한다. 입사입자의 x축 방향의 에너지 성분이  $E_0 \cos \alpha$ 이므로,  $y_{in} = -y_{out}$  의 비행경로를 지날 때,  $x/x_0 = E_0 \cos \alpha / eV_B$  이어야 한다. 여기서,  $x_0$ 는 reflectron의 x 축 길이이다. 그러므로 입사각이 결정되고 비행경로가 같을 경우,  $E_0$ 와  $V_B$ 는 비례한다. 그러나 질량이 다르면, 동일 경로를 비행하더라도 입자의 비행시간은 달라진다.

그림 3은 그림 2에서와 같은 조건으로, 입사입자의 에너지와 질량의 변화에 따른 비행시간을 simulation

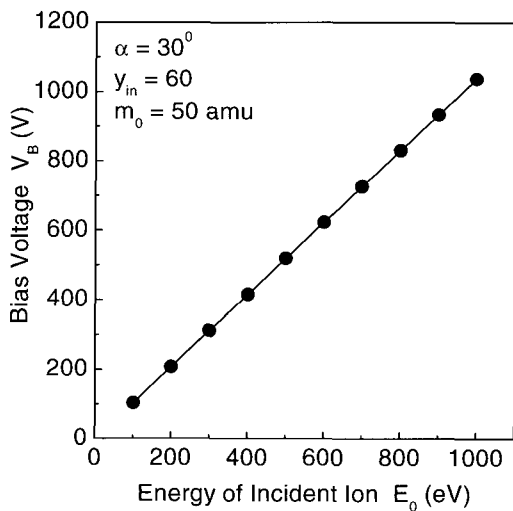


그림 2. 입사입자가  $y_{in} = -y_{out}$  의 비행경로를 지날 때, 입사입자의 에너지 E와  $V_B$ 의 관계.

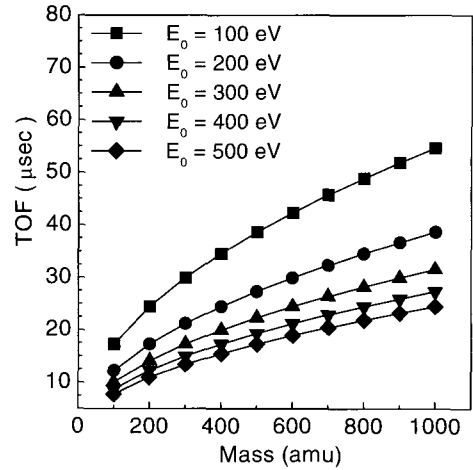


그림 3. 입사입자의 질량과 에너지에 따른 비행시간.

한 결과이다. 동일한 입사 조건에서 입사입자의 질량이 클수록, 그리고 입사입자의 에너지가 작을수록, 입자의 속도가 작아지기 때문에 비행시간이 길어짐을 알 수 있다. 일반적으로 reflectron을 이용한 질량분석은 이러한 시간 분해능을 이용한다. 그러나 시간 분해능을 이용할 경우 입자들의 질량분포나 에너지 분포는 측정할 수 있지만, 원하는 질량 영역만을 선택해서 분리해 낼 수는 없다.

3) CO<sub>2</sub> Gas cluster 실험에서 mass selector 로서의 reflectron.

n개의 CO<sub>2</sub> 분자로 이루어진 (CO<sub>2</sub>)<sub>n</sub> cluster의 에너지는 CO<sub>2</sub> 분자 한 개가 같은 에너지의 n배이다. 즉, nozzle로부터 방출되는 (CO<sub>2</sub>)<sub>n</sub> cluster의 에너지는  $0.096n$  eV이고, 질량은 약  $44n$  amu 이다. 그러므로 cluster의 질량에 대한 에너지 비는  $E/m = 2.18 \times 10^{-3}$  eV/amu로서, CO<sub>2</sub> 분자의 개수(n : 이하 cluster size)에 상관없이 항상 일정하다.

그림 4는 cluster size가 n = 200, 400, 600, 800, 1000, 1200인 cluster가 동시에 입사되었을 때,  $V_B$ 의 변화에 따른 cluster의 비행경로를 그린 것이다. 여기서 cluster의 입사위치와 입사각은 각각  $y_{in} = 60$ ,  $\alpha = 300$  이다. 그림 4(a)는  $V_B = 79.816V$  일 때이고 그림 4(b)는  $V_B = 119.724V$  일 때로서, y축에 도달하는 cluster의 위치는 cluster size에 따라 선형적으로 비례함을 알 수 있다. 그림 5는 그림 4에서와 같은

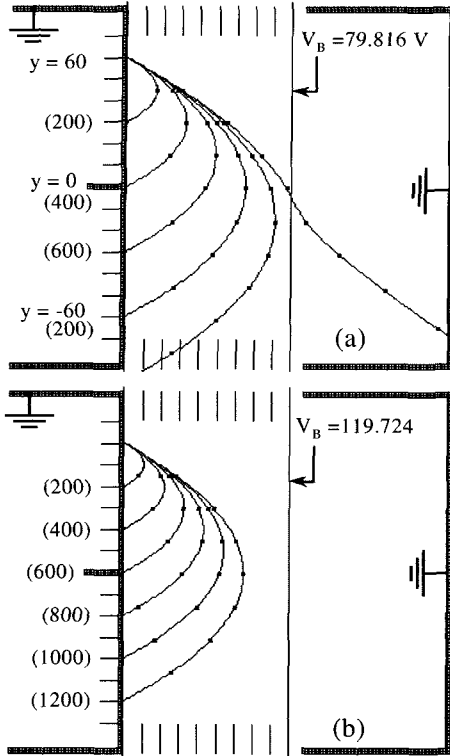


그림 4. CO<sub>2</sub> 분자의 개수가 n = 200, 400, 600, 800, 1200인 cluster를 동시에 입사시켰을 때, V<sub>B</sub>에 따른 cluster의 비행경로. (a)는 V<sub>B</sub> = 79.816V 일 때, (b) V<sub>B</sub> = 119.724V일 때. 여기서, y<sub>in</sub> = 60, α = 300 이고, y축 눈금 한 개의 간격은 10mm이다. 괄호 속은 CO<sub>2</sub> 분자의 개수이고, 해당 cluster가 도달하는 위치 옆에 기입하였다.

방법으로, y<sub>in</sub> = -y<sub>out</sub>의 경로를 따라 비행하는 cluster의 size와 그때의 V<sub>B</sub> 값을 simulation한 결과이다.

그림 5(a)는 입사각을 α = 30°로 고정하고 입사 위치 y<sub>in</sub>을 변화시킨 결과이고, 그림 5(b) 입사 위치를 y<sub>in</sub> = 60으로 고정하고 입사각을 변화시킨 결과이다. 그림 4와 그림 5에서 다음과 같은 두 가지 중요한 사실을 알 수 있다. 첫번째는, 그림 4에서 y<sub>out</sub>에 도달하는 cluster의 위치가 cluster size에 따라 선형적으로 비례한다는 것이다. 즉, cluster의 비행 경로가 질량의 함수라는 사실이다. 이것은 reflectron 내부에서 입자의 비행경로가 에너지의 함수라는

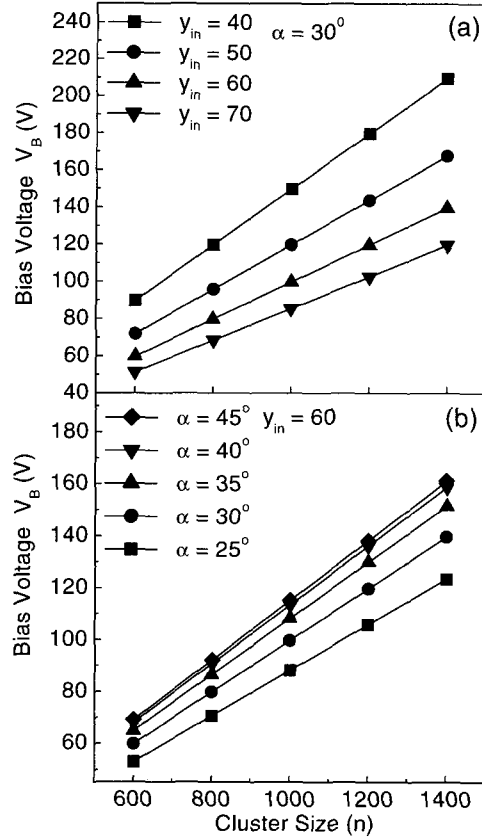


그림 5. Cluster가 y<sub>in</sub> = -y<sub>out</sub>의 경로를 따라 비행할 때, cluster의 size(n)에 따른 V<sub>B</sub>값. (a) 입사각을 α = 30°로 고정하고 입사 위치를 변화시켰을 때. (b) 입사 위치를 y<sub>in</sub> = 60으로 고정하고 입사각을 변화시켰을 때.

그림 2에서의 결과와 상반된다. 이러한 차이는, (CO<sub>2</sub>)<sub>n</sub> gas cluster의 경우 질량에 대한 에너지 비 (E/m)가 항상 일정하기 때문에 나타나는 것이다. 즉 E/m 비가 일정하기 때문에, 질량이 변하면 에너지가 변하고, 에너지가 변하면 비행경로가 변한다. 따라서 그림 4에서 보는 바와 같이 cluster size에 따라 y<sub>out</sub>에 도달하는 위치가 달라지게 된다. 그러므로 E/m 비가 일정한 cluster 실험에서는, reflectron은 질량에 대한 공간분해능을 가지게 된다. 이것이 reflectron을 mass selector로서 응용할수 있는 중요한 근거이다. 두 번째는, 그림 5에서 보는 바와 같이 cluster

가  $y_{in} = -y_{out}$ 의 경로를 따라 비행할 때, cluster size에 따른  $V_B$ 가 선형적으로 비례한다는 사실이다. 이것은  $V_B$ 를 조정함으로써, 원하는 크기의 cluster를  $y_{in} = -y_{out}$ 의 경로를 따라 비행하도록 할 수 있다는 것을 의미한다. 즉,  $y_{out}$ 에 도달하는 cluster size의 선택은 단순히  $V_B$ 를 조정함으로써 가능하다는 것이다. 이러한 특성은 실험장치나 data의 분석을 단순하게 해 주기 때문에, reflectron을 mass selector로서 응용할 때 큰 장점이 된다.

4) 질량 분해능(Mass resolution)

그림 6은 reflectron의 질량 분해능을 알아보기 위하여 simulation한 결과이다. 그림 6(a)는  $y_{in} = 60$ ,  $\alpha = 300$ 의 입사조건으로,  $n = 995$ 에서 1005개사이의 cluster가 동시에 입사되었을 때 cluster의 비행 경로를 그린 것이다. 여기서  $V_B = 99.7693V$ 는,  $n = 1000$ 인 cluster가  $y_{in} = -y_{out}$ 인 경로를 비행할 때의 bias voltage이다. 그림 6(b)는 그림 6(a)에서 사각형 점선부분을 확대한 것으로, cluster size에 따라 y축에 도달하는 위치가 선형적으로 변함을 알 수 있다.  $\Delta y_n$ 은  $n$ 과  $n+1$ 인 cluster가  $y_{out}$  부근에 도달할 때의 위치차이로서,  $\Delta y_n = y_{out(n)} - y_{out(n-1)}$  [mm/molecule]로 정의하였다.

그림 7은 입사위치를  $y_{in} = 60$ 으로 고정하고 입사각과 cluster size를 변화시키면서 simulation한 결과이다. 입사각이 변하더라도  $\Delta y_n$ 값은 일정한 반면, cluster size가 커짐에 따라  $\Delta y_n$ 값은 점점 감소함을 알 수 있다.

$n = 600, 800, 1000, 1200, 1400$ 일 때,  $\Delta y_n$ 값은 각각 0.20, 0.15, 0.12, 0.10, 0.0857 [mm/molecule]이었다. 만약  $y_{out} = 60$ 인 위치에 적당한 폭의 slit을 둔다면, slit을 통하여 cluster를 선택적으로 통과시킬 수가 있기 때문에, 질량 분해능을 다음과 같이 정의하였다.

$$\frac{m}{\Delta m} = \frac{m_n}{\Delta m_s} = \frac{n \times 44}{(W_s / \Delta y_n) \times 44} = \frac{n \cdot \Delta y_n}{W_s} \quad (1)$$

여기서,  $m_n$ 은  $y_{out}$ 에 도달하는 cluster의 질량,  $\Delta m_s$ 은 slit을 통과하는 질량의 차,  $W_s$ 는 slit의 폭이다. 예를 들어  $y_{out} = -60$ 인 위치에 폭이 0.1mm인 slit( $W_s = 0.1$ )을 둔다면,  $n = 1200$ 일 때의 위치 차이는  $\Delta y_{1200} = 0.1$  이므로 (1)식에 의하여 질량 분해능은  $m/\Delta m$

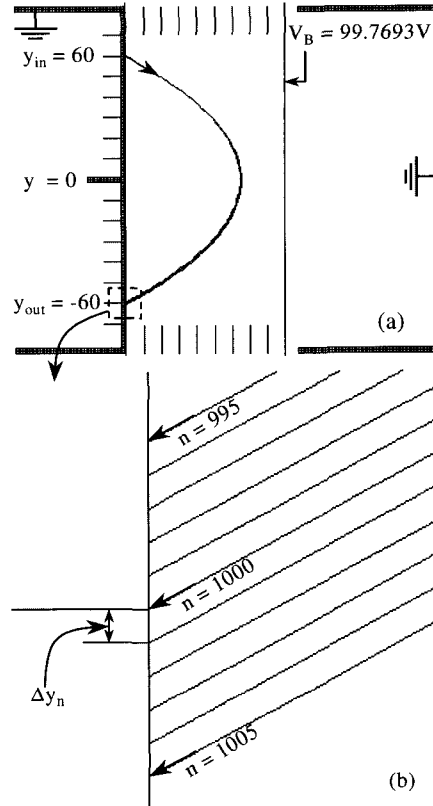


그림 6. (a)  $\alpha = 300$ ,  $V_B = 99.7693V$  일 때, cluster의 size를  $n = 995$ 에서 1005개 까지 한 개씩 증가시키면서 입사시켰을 때의 비행경로. (b) 사각형 부분을 확대한 것.

$= 1200$ 이다. 즉,  $n=1200$ 인 cluster와  $n=1201$ 인 cluster를 분해할 수 있다는 의미이다.

이 결과로부터 질량 분해능은  $n$ 값에 무관하고 slit의 폭에 의해 결정됨을 확인할 수 있다. 예를 들어,  $W_s = 0.1mm$ 인 경우, (1)식으로부터

$$\left(\frac{m}{\Delta m}\right)_{n=600} = \frac{n \cdot \Delta y_n}{W_s} = \frac{600 \cdot 0.2}{0.1} = 1200$$

$$\left(\frac{m}{\Delta m}\right)_{n=1000} = \frac{n \cdot \Delta y_n}{W_s} = \frac{1000 \cdot 0.12}{0.1} = 1200$$

이다. 그러므로  $n$  값이 변하더라도 질량 분해능은  $m/\Delta m = 1200$ 으로 일정함을 알 수 있다. 또 그림 7에서 보는 바와 같이, 입사각의 변화에 따른  $\Delta y_n$ 값이 일정하기 때문에, 입사각이 변하더라도 질량 분해능은  $m/\Delta m = 1200$ 으로 일정하다. 따라서 질량 분

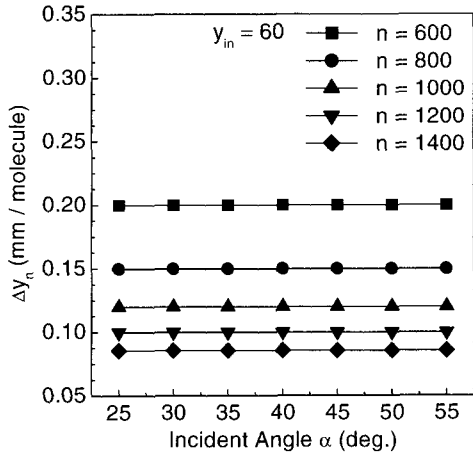


그림 7.  $y_{in} = 60$ 일 때, 입사각에 따른  $\Delta y_n$ [mm/molecule]의 변화.

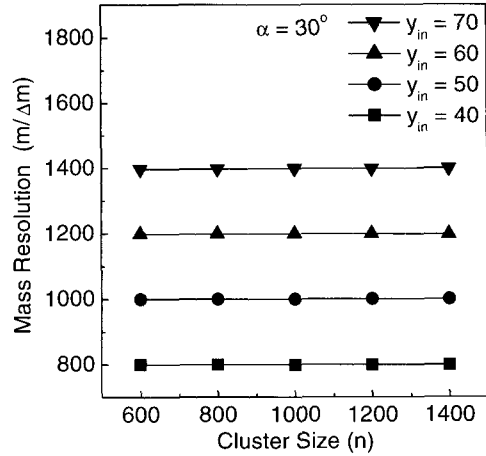


그림 9. Slit 폭이 0.1mm일 때, cluster size와 입사위치에 따른 질량 분해능.

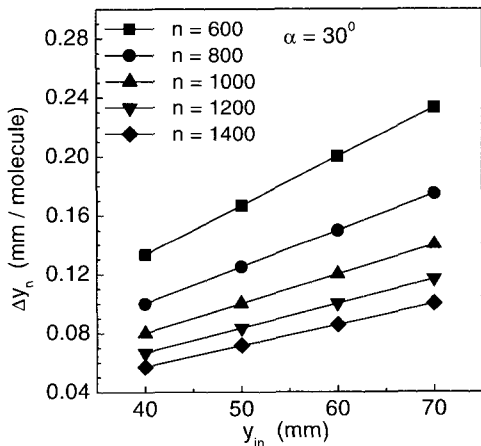


그림 8.  $\alpha = 30^\circ$  일 때, 입사위치에 따른  $\Delta y_n$ [mm/molecule]의 변화.

해능은 slit의 폭에 의해 결정되고, cluster size와 입사각에 무관함을 알 수 있다.

그림 8 은 입사각을  $\alpha = 30^\circ$  로 고정해 두고, 입사위치  $y_{in}$ 과 cluster size를 변화시키면서 simulation 한 결과이다.  $y_{in}$ 이 증가함에 따라  $\Delta y_n$ 도 선형적으로 증가함을 알 수 있는데, 이는  $y_{in}$ 이 증가함에 따라 cluster가 y축 방향으로 비행하는 시간이 길어지기 때문이다. 그림 9는 slit의 폭이 0.1mm일 때, 그림 8의 결과로부터 (1)식을 이용하여 질량 분해능을 계산한 결과이다. Cluster size에 따른 질량 분해능의 변화는 일정하지만, 입사위치가 증가함에 따른 질

량 분해능은 선형적으로 증가함을 알 수 있다. 그림 9에서 입사위치  $y_{in}$  과 질량 분해능과는

$$m/\Delta m = 20 \times y_{in} \quad (2)$$

의 관계가 있음을 알 수 있다. 이상의 결과로부터 reflectron의 질량분해능은 cluster size와 입사각에는 무관하고, 입사위치  $y_{in}$ 에 의해 결정된다는 것을 알 수 있다.

실제 실험에서는 mass selection 후의 beam current 문제 때문에 slit의 폭이 수 mm 정도는 되어야 할 것이다. 만약 slit의 폭을 2.0mm로 한다면 질량 분해능은  $m/\Delta m = 60$ 이고, 이때는  $n = 1200 \sim 1220$  사이에 있는 cluster들이 slit을 통과하게 된다. 이 정도 영역의 cluster만 분리하여도 gas cluster 실험에서 많은 연구를 할 수 있을 것으로 예상된다. 그러나 reflectron의 질량 분해능은  $y_{in}$ 의 함수이기 때문에,  $y_{in}$ 을 크게 하면 원리적으로 무한대까지의 질량 분해능을 얻을 수 있다. 그러므로 원하는 크기의 cluster만 분리하는 것도 가능할 것이라고 생각된다.

### 3. 요약

Reflectron 내에서  $(CO_2)_n$  gas cluster의 운동을 'SIMION' program으로 simulation 하였다. 일반 입자의 운동에서 나타나는 질량의 시간 분해능이 사라지는 대신, 질량에 따라 비행경로가 변하는, 즉 질

량의 공간 분해능이 생긴다는 것을 확인하였다. 이것은 E/m이 일정한  $(\text{CO}_2)_n$  gas cluster의 특성 때문에 나타난 것이다. 공간 분해적 특성은 reflectron을 mass selector로서 이용할 수 있는 결정적 근거가 된다. 질량 분해능은 cluster size나 입사각에는 무관하고, 입사위치에 비례한다는 사실을 밝혀내었다. 이것은 입사위치를 변화시키면 원리적으로 무한대의 질량 분해능까지도 얻을 수 있다는 것을 의미한다. 결론적으로, gas cluster 실험에서 reflectron은 질량 분해능이 대단히 우수한 mass selector로서 응용할 수 있음을 밝혀내었다.

### 감 사 의 글

본 연구는 목원대학교 2002 특성화 기반조성 사업의 지원으로 수행되었습니다.

### 참 고 문 헌

- [1] I. Yamada, J. Matsuo, Z. Insepov and M. Akizuki, Nucl. Instr. Methods B **106**, 165 (1995).
- [2] J. H. Song, D. K. Choi and W. K. Choi, Nucl. Instr. Methods B **196**, 268 (2002).
- [3] J. H. Song, D. K. Choi and W. K. Choi, Nucl. Instr. Methods B **196**, 275 (2002).
- [4] M. Akizuki, J. Matsuo, I. Yamada, M. Harada, S. Ogawara and A. Doi, Nucl. Instr. Methods B **112**, 83 (1996).
- [5] B. A. Mamyryn, V. I. Karataev, D. V. Shmikk and V. A. Zagulin, Sov. Phys. JETP **37**, 45 (1973).
- [6] B. A. Mamyryn and D. V. Shmikk, Sov. Phys. JETP **49**, 762 (1979)
- [7] H. J. Neusser, U. Bosel, R. Weinkauff and E. W. Schlag, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. **60**, 147 (1984).
- [8] <http://www.sisweb.com/simion.html>.