

< 논문 >

단일 입자 질량분석기의 효과적인 이온검출을 위한 이온계의 이론적인 설계

조 성 우* · 이 동 근†

(2005년 12월 30일 접수, 2006년 5월 16일 심사완료)

Theoretical Design of Ion Optics for Effective Ion Detection in Single Particle Mass Spectrometer

Sung-Woo Cho and Donggeun Lee

Key Words: Single Particle Mass Spectrometer(단일입자 질량분석기), Nanoparticle(나노입자), Ion Loss(이온 손실), Ion Optics(이온계)

Abstract

Recently, we reported that significant ion loss occurred prior to its detection in the conventional single particles mass spectrometry and more seriously the loss is ion-kinetic-energy-dependent. These lead to significant error in the measured chemical composition of nanoparticles. Here we attempted to design a novel ion optics that is capable of 100% detection of ions generated from single nanoparticle. Using a commercial software SIMION, we simulated the trajectories of ions launched at different speeds inside the previous single particle mass spectrometer. We tested how affect changes in shape of repelling plate, adding Einzel lens, substitution of tube electrode between extraction and acceleration grids. As a results, we could find a best design by assembling the trials in the present condition.

1. 서 론

고체 또는 기체의 화학적 조성을 측정하기 위해 일반적으로 사용되는 질량분석(Mass Spectroscopy) 방법은 1912년 전자의 발견자인 J. J. Thomson에 의해 개발된 Parabola Spectrograph라 불리는 질량분석법에서 시작되었다. 그 이후 발전을 거듭하여, 현재 레이저, 열, 전자총들 등의 다양한 이온화 방법을 이용하여 화학 및 관련 산업분야에서 핵심 분석기기로서 이용되고 있다.⁽¹⁻⁶⁾

공기 중에 부유하는 에어로졸 입자의 크기는 상용화된 Scanning Mobility Particle Sizer(SMPS)를 이용하여 실시간으로 높은 정확도로써 측정할 수

있다. 이에 비하여 조성의 실시간 분석은 아직 개발 중인 기술로 받아들여 진다.⁽⁴⁻⁷⁾ Prather 그룹에서 개발된 최초의 에어로졸 비행튜브형 질량분석기 (Aerosol Time-of-Flight Mass Spectroscopy, ATOFMS)를 이용하여, 단일 입자 개개의 조성을 실시간으로 측정할 수 있음을 보인 후, 미국을 중심으로 대기, 에어로졸 분야에서 많은 연구결과를 발표하고 있다. 특히 미국의 TSI 사는 광산란을 이용하여 입자의 공기역학직경을 측정함과 동시에 이온화 레이저의 조사 시간을 산란신호에 동기화하여 측정률을 향상시켰다. 이는 ATOFMS가 단일 나노입자의 크기와 조성을 동시에 측정할 수 있는 이상적인 도구에 가장 가까운 것임을 나타내는 획기적인 발전이었다.⁽¹⁾

광산란의 특성상 산란강도는 입자의 크기에 아주 민감하므로, 측정하고자 하는 입자가 작을 경우 그 산란강도가 측정범위 이하로 작아져서 이온화 레이저를 동기화 할 수 없게 된다. 따라서, 통상적

† 책임저자, 회원, 부산대학교 기계공학부

E-mail : donglee@pusan.ac.kr

TEL : (051)510-2365 FAX : (051)512-5236

* 부산대학교 대학원 기계공학과

인 ATOFMS의 측정가능한 입자의 크기 범위는 200nm 이상으로 제한된다. 현재 대기환경에서 건강에 영향을 미치는 입자는 핵-모드(< 30nm)와 축적모드(30 - 200nm)로서 존재하여, 200nm 이하의 작은 입자의 크기와 조성을 실시간으로 측정할 수 있는 새로운 질량분석장비의 개발이 필요하다.⁽⁴⁾

최근 Reents 그룹⁽³⁾은 측정된 질량분광의 크기를 이용하여 초기 입자의 부피를 예측할 수 있음을 처음으로 제안하였고, 질량분광과 입자의 부피와의 관계는 선형적임을 실험적으로 보고하였다. 선형적인 관계를 보정관계식으로 사용하여 단일 입자로부터의 질량 분광 신호를 입자의 부피등가직경으로 변환할 수 있고, 그 결과 단일 입자의 크기와 조성을 동시에 측정할 수 있었다. 또한 입자를 증발/이온화 시키는데 필요한 에너지보다 훨씬 강한 레이저 펄스를 조사할 경우, 모든 입자는 다차로 대전된 양이온으로 변환되는데, 이온간 쿨롬 반발력에 의해 서로의 충돌을 막아서, 이온화 포텐셜(IP)이 높은 이온에서 낮은 IP를 가지는 이온으로 대전이 전달되는 현상(Matrix Effect)을 막을 수 있다고 주장하였다. 그런데, 넓은 크기분포를 가지는 입자의 경우, 평균 크기는 질량분석을 통하여 잘 예측할 수 있으나, 전체 크기분포를 예측할 때는 특히 크기가 큰 영역에서 과소 예측하는 경향을 나타내었다.⁽³⁾

선행연구로서, 본 연구자는 Reents와는 달리 입자의 초기부피와 질량분광신호의 크기 관계가 비선형적임을 보고하였고, 입자크기에 의존하는 이온 검출효율의 개념으로 설명하였다.^(6,7) 입자가 클수록 더 강한 운동에너지를 가지는 이온이 생성되며, 더 많은 이온이 검출기에 도달하기 전에 비행튜브의 벽과 충돌하여 손실되는 것을 이온궤적의 모사를 통하여 밝혔다.

레이저 조사 후 생성된 양이온은 구형의 이온 구름을 형성할 것으로 가정⁽⁸⁻¹⁰⁾하면, 최초 양이온 구름의 표면에 존재하던 이온(입자표면에 존재하던 원자)은 내부의 이온에 비하여 더 큰 쿨롬 반발력을 느끼게 되고, 이에 의하여 더 빠른 속도로 방출될 것이다. 분자동력학 모사의 결과, 이온의 초기 운동에너지(Kinetic Energy, KE)는 이온구름내에서 이온의 위치가 내부에서 표면으로 갈수록 증가하는 것을 확인하였다.⁽⁷⁾ 운동에너지가 증가할수록 이온의 손실율이 증가함을 고려할 때, 이 결과는 아주 중요한 점을 시사한다. 즉, 핵-껍

질(Core-Shell) 구조를 가지는 복합체 입자의 경우, 핵에 비해 껍질의 조성이 과소평가될 수 있다.

따라서 이온의 운동에너지 또는 입자의 크기에 무관한 효율로 나노입자의 조성을 검출할 수 있는 새로운 이온계(Ion Optics)의 개발이 필요하다. 200nm 이하의 에어로졸 입자에서 생성된 이온의평균 운동에너지를 측정된 결과 약 200eV 이하였다. 이것을 고려하여, 0 - 200eV의 다양한 운동성의 이온을 100% 효율로 검출할 수 있는 이온계를 이론적으로 설계하는 것에 본 연구의 목적을 둔다. 이에 향후 새로운 단일입자 질량분석기의 핵심 설계 기술을 확보하고자 한다. 기존의 평판형 이온계를 기반으로 이온반사기의 형상의 변화, 아인젤 렌즈의 추가, 튜브형전극을 추가 등을 점검하여 수치해석적으로 100% 검출이 가능한 설계와 전압조건을 제시한다.

2. 단일입자 질량분석기

Fig. 1에서 선행연구에서 사용된 SPMS의 개략도를 나타내었다. Liu 등이 제시한 공기역학렌즈 입구로 샘플 에어로졸이 들어가게 되면 입구와 첫 번째 챔버와의 압력차(700torr 이상)에 의해 다단의 오리피스를 통과하면서 입자들이 포커싱된다.^(4-6,11,12) 형성된 입자빔이 두 번째 챔버를 투

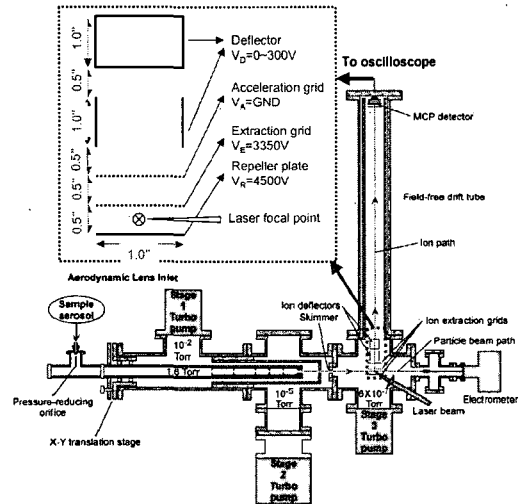


Fig. 1 Schematic of single particle mass spectrometer and details of ion optics

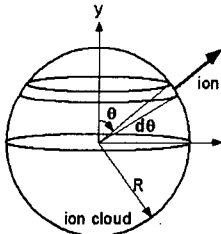


Fig. 2 Geometrical configuration of an ion cloud

과하는 동안 10mJ, 5ns의 고출력 Nd:YAG 레이저 펄스를 10Hz로 입자빔에 대하여 수직으로 반복 조사한다. 레이저 펄스와 입자가 만나는 순간, 수피코초 내로 입자의 이온화와 이온구름의 팽창을 통해 강한 운동성(0 - 200eV)의 이온이 방사상으로 방출된다.⁽⁷⁾ Fig. 1의 이온계(Ion Optics)를 확대한 그림에서 나타난 바와 같이, 평판형 이온 반사판(Ion Repeller)과 추출 그리드(Extraction Grid) 사이의 직류전기장과 그 다음의 가속 그리드(Acceleration Grid) 사이의 전기장에 의하여, 양 이온은 이온질량에 따라 서로 다른 속도로 추출/가속된다. 다음으로, 이온은 비행튜브 내부를 등속 비행하여 최종 검출기(Microchannel Plate, MCP)에 도달한다. 이온은 그 질량에 따라 서로 다른 비행시간(Time of Flight)으로 도달하며, 그 도달시간을 고속 오실로스코프로써 연속적으로 모니터하고 PC에 저장한다.

새 개의 이온 추출/가속 그리드, 이온 굴절기(Ion Deflector), 그리고 검출기를 합쳐 본 연구에서는 이온계라 칭한다. 기존의 평판형 이온계에서는, 반경방향으로 방출되는 이온의 운동에너지가 커질수록, 비행튜브(Time-of-Flight Tube)의 내벽과 충돌할 확률이 커져서 이온의 손실률이 증가한다.⁽⁶⁾ 예를 들면, 100eV의 에너지에서도 전체 이온의 0.1% 정도만이 검출되어 미량분석이 어렵게 되는 직접적인 원인이 된다.

3. 기존 이온계의 한계

3.1 이온계적의 모사

Fig. 2에서 레이저 초점을 중심으로 구형 이온구름에 대한 좌표계를 나타내었다. y축은 비행튜브의 중심축을 따라 검출기(MCP)를 향한다. 선행 연구에서는 y축에 대하여 각도 θ 로서 방출되는 이온이 검출기에 도달할 때까지의 이동 궤적을 다음과 같이 계산하였다. 평판형 이온계에서는

전기장의 세기(E)가 그리드에 평행하게 형성되므로, 식 (1), (2)를 이용하여 1가 대전된 Na^+ 이온에 미치는 전기력과 속도를 x, y방향 성분으로 각각 계산하였고, 그 속도를 시간에 대하여 적분하여 다음시간 $t+dt$ 에서의 위치를 얻었다. 그러나 본 연구에서 시도할 곡면형 반사판, 아인젤 렌즈(Einzel lens), 그리고 튜브형 전극 등의 복잡한 형상의 이온계의 해석과 이온의 궤적 해석에는 상용 소프트웨어 SIMION(Idaho National Engineering & Environmental Lab.)을 사용하여 계산하였다. 이온계 주위의 전기장의 세기, 전압, 이온의 초기 운동에너지등을 계산시 고려하였다.

$$\vec{v}(t+dt) = \vec{v}(t) + \int_t^{t+dt} \vec{F}(t)/m dt \quad (1)$$

$$E = \Delta V/\Delta L \quad [V/m] \quad (2)$$

Fig. 2에서와 같이 이온의 축방향 대칭성을 고려하면, $d\theta$ 의 띠에 존재하는 이온들이 θ 의 각도로 방출되면 모두 같은 비행시간을 가지고 각도에 따라 검출기에 도달할 수도 있고 비행튜브의 내벽에서 손실되기도 한다. 각도 θ 가 90° 까지 증가할수록, $d\theta$ 로 정의된 띠의 면적과 전체 표면적의 비는 $2\sin(\theta)d\theta$ 로 증가하게 된다. 균일한 이온밀도를 가정하면 각도 θ 가 증가할수록 미소면적의 증가분 만큼 더 많은 이온이 방출됨을 의미한다. θ 가 0° 에서 증가하여 θ_{max1} 을 넘으면, 벽손실이 발생하여 검출이 되지 않는다. 90° 를 넘어 θ_{max2} 를 넘어서면 다시 측정이 되기 시작한다. 임의의 각 θ_i 에서 검출된 이온의 개수 N_i 는 $2\sin(\theta_i)d\theta_i$ 에 비례하므로, 검출효율 (Detection efficiency, DE)을 식 (3)과 같이 표현할 수 있다.

$$DE = \frac{\int_0^{\theta_{max1}} N_i d\theta + \int_{\theta_{max2}}^{\pi} N_i d\theta}{\int_0^{\pi} N_i d\theta} \quad (3)$$

3.2 이온의 검출효율에 미치는 운동에너지 효과
전술한 바와 같이, 고려하여야 할 이온의 운동에너지(KE)는 0 - 200eV로 넓게 분포한다. 대표적인 예로, 1가로 대전된 Na^+ 이온이 다양한 KE를 가지며 방사상으로 레이저의 초점(Fig. 1에서의 반사판과 추출그리드 사이의 중간지점)에서 방출될 때, 이온의 궤적을 Fig. 3에서 나타내었다.

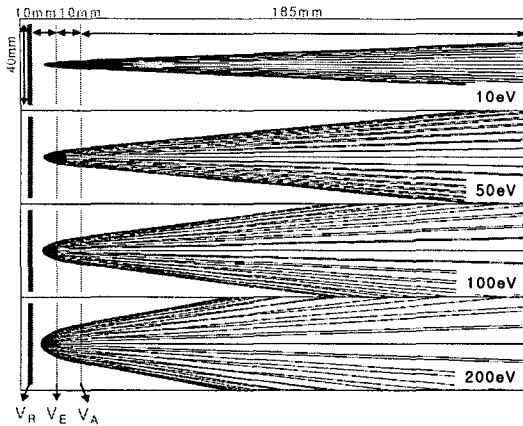


Fig. 3 Ion trajectories of flat reflector with various kinetic energy($V_R=4500V$, $V_E=3350V$, $V_A=GND$)

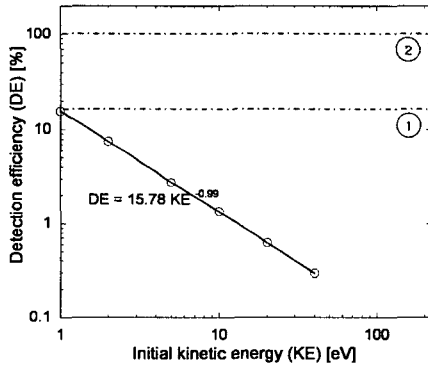


Fig. 4 Strong kinetic effect on DE

그리고, $V_R=4500V$, $V_E=3350V$, $V_A=GND$ 로 설정된 평판형 반사판에 대하여 계산된 검출효율(DE)를 Fig. 4에 제시한다. Fig. 3에서 나타난 바와 같이 기존의 평판형 이온계에서는, 이온의 초기 운동 에너지(KE)가 증가할수록 그 궤적은 방사상으로 더 퍼진다. 그 결과, 더 좁은 방출각 구간의 이온만이 검출되고, DE는 지수 함수적으로 감소하게 된다(Fig. 4참조). 한 예로, KE가 100eV일 경우 검출효율이 0.17% 정도로 매우 낮다.

질량분석을 위하여 레이저 이온빔을 이용하는 한, 입자의 크기에 비례하여 더 큰 에너지로 이온이 생성/방출되는 것을 피할 수는 없다. 따라서 크기-다분산(Size-Polydisperse) 입자의 넓은 크기분포를 정확히 예측하기 위해서는 초기 운동에너지에 무관한 검출효율을 가지는 이온계의 개발이 필요하다. 즉, Fig. 4에서 ① 또는 ②와 같은 검출효율을 가져야 한다. 이러한 필요성에 따라 새로

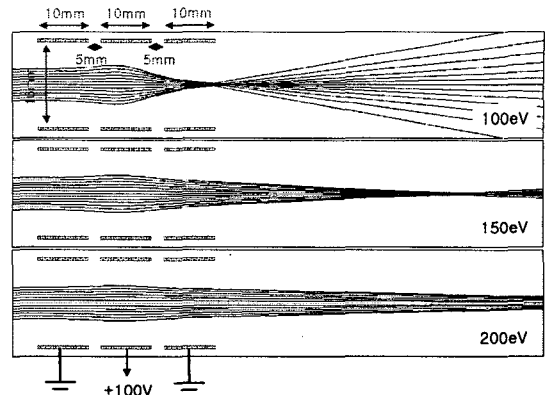


Fig. 5 Trajectories of ions with different KEs

운 이온계의 이론적인 설계과정과 성능을 다음 장에서 기술한다.

4. 새로운 이온계의 설계

새로운 이온계에 대하여 SIMION을 사용하기 위하여 선행연구에서와 동일한 조건의 이온을 사용하였다. 이온이 비행중 질량과 전하량의 변화는 없는 것으로 판단된다. 장치의 특성상(Fig. 1 참조) 입자 빔이 공기역학렌즈 입구(Aerodynamic Lens Inlet)를 통과하여 이온계의 레이저 초점으로 전송됨과 동시에 이온화 레이저가 입자빔을 가로질러야 한다. 이를 고려하여 Fig. 1의 점선으로 확대한 부분과 같이 레이저 초점, 즉 입자가 이온화 되는 지점을 반사판과 이온추출그리드의 중심지점으로 가정하였다.

주목할 점은 본 연구에서 제시되는 새로운 이온계의 설계는 단일입자 질량분석기에 적용하는 것을 목표로 하기 때문에, 전자의 집속과 같은 일반적인 이온계와는 다른 제한조건이 있다. 첫째, 넓은 범위로 분포하는 다양한 운동성의 이온을 손실 없이 검출기(MCP)에 도달하게 집속하여야 한다. 둘째, 견출한 장치상의 제한조건을 고려하여야 한다. 따라서 본 연구에서 시도한 다양한 형상의 이온계는 위의 두 가지 목표에 기초하여 순차적으로 점검되었다.

4.1 아인젤 렌즈를 이용한 이온 집속

먼저 전자빔의 집속에 흔히 사용되는 아인젤 렌즈의 적용 가능성을 알아보았다. 일반적으로 3개의 튜브형 전극으로 구성되는 아인젤 렌즈는

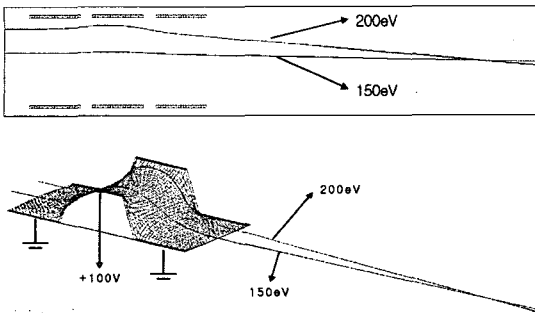


Fig. 6 Concurrent focusing ions with two different KEs and the corresponding electrical energy view

전기적으로 중성인 양단의 전극과 특정 전압이 유지되는 중앙의 전극 사이의 전기장에 의해, 이온빔의 입구와 출구의 에너지가 크게 변화하지 않고 이온을 집속시켜주는 장치로 알려져 있다.

Fig. 5에서와 같이 튜브의 중심축에 평행하게 입사하는 이온빔의 경우에, 이온의 KE가 증가할수록 초점거리는 길어진다. 또한 아인젤 렌즈의 전압(그림에서 100V로 표시)을 증가시키면, 전체적인 초점거리가 짧아지지만, 여전히 KE에 따라서 다른 위치에서 집속된다. 즉, 본 연구의 목적에 따라 200eV이하의 이온을 동시에 집속시키지 못하는 한계가 있다. 그러나, 첫 번째 그림(100eV의 경우)에서 렌즈의 중심부보다 외곽에 있는 이온이 더 빨리 과다 집속(Overfocusing)되는 것을 관찰할 수 있다. 여기서 중요한 단서를 얻을 수 있는데, 렌즈의 중심부에 쉽게 집속할 수 있는 낮은 KE의 이온을 위치시키고 외곽부에 높은 KE의 이온을 위치시킬 수 있다면 거의 유사한 지점에서 서로 다른 KE의 이온을 동시에 집속시킬 수 있을 것이다.

Fig. 6에서 앞의 가능성을 명확히 보여주고 있다. 사용된 예에서, 150eV의 이온은 중심축과 가깝게 비행하게 하고, 200eV의 이온은 축에서 멀리 떨어져서 비행하게 할 때, 동시에 집속되는 지점에 검출기를 위치시키면 효과적인 이온 검출이 될 것이다. Fig. 5의 하단 그림은 아인젤 렌즈의 등전압선도를 나타낸 것이며, 중심축의 외곽 지역에서 더 높은 포텐셜을 가지기 때문에 집속 정도가 더 커져서 이온의 비행위치에 따라 초점거리를 변화시킬 수 있는 이유가 된다. 이 결과를 질량분석기에 적용하기 위하여서는, 아인젤 렌즈입구에서 이온을 최대한 렌즈의 축에 평행하

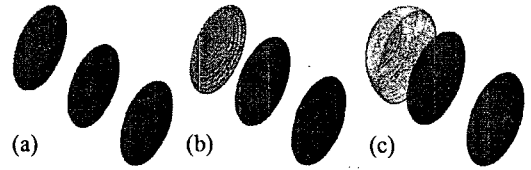


Fig. 7 Shapes of reflector. (a) flat type, (b) parabolic type, (c) hemispherical type

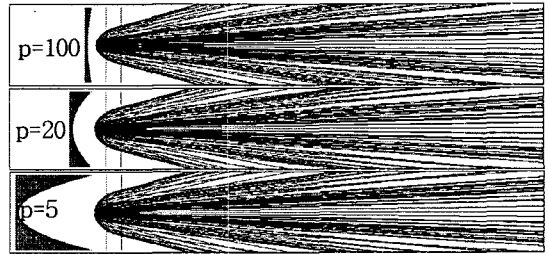


Fig. 8 Ion trajectories for parabolic-type reflector with various curvature; Blue, red, and black lines correspond to KE=50, 100, 200eV, respectively. Note that curvature p is defined by $y^2=4px$

게, 그리고 그 KE에 따라 비행 위치를 조절하여야 한다. 좁은 지역에서 방사상으로 방출되는 이온을 최대한 그 축 방향으로 굴절하기 위하여 이온추출부의 반사판 형상을 먼저 변경하고자 한다.

4.2 반사판의 형상에 따른 이온 집속

기존의 평판형 반사판과 이온추출그리드 사이의 전기장은 전극의 형태로부터 Fig. 1의 비행튜브 축에 평행하게 이온을 밀어주지만 하므로, 측면 및 후방으로 방사되는 이온들의 손실이 발생하였다. 평판형 반사판에 곡률을 추가하면, 전기장에 의한 힘도 반사판에 수직한 방향으로 변화하므로 이온추출구간에서 이온의 궤적을 더 급격히 변화시킬 것으로 기대된다. 따라서, Fig. 7과 같이 다양한 곡률을 가지는 반사판의 영향을 먼저 점검한다.

Fig. 8은 곡률을 가진 반사판의 형상에 대한 결과이며, 이 경우의 이온원의 위치는 반사판과 추출그리드의 최단 거리의 중심에 위치한다. 즉 곡면형 반사판의 끝단은 Fig. 3의 평면형 반사판의 위치와 동일하다. 그 외의 추출/가속 그리드 사이의 간격과 지름, 가해진 전압은 Fig. 3에서와 동일하다. 평판형과 비교하면 이온의 집속 정도에는 큰 차이가 없다. 이는 반사판과 추출 그리드 사

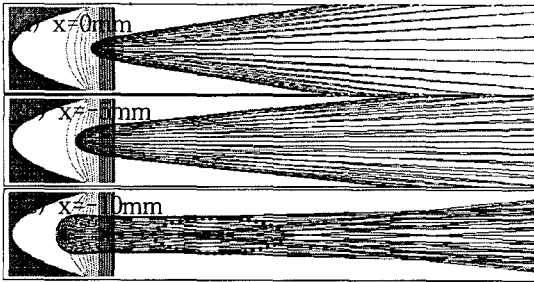


Fig. 9 Effect of location of laser ionization region; KE=100eV; x denotes the position of laser focus while the origin corresponds to that in Fig. 3

이의 간격이 증가하게 되어, 이온을 굴절시킬 전기장의 세기가 상대적으로 작아지기 때문이다.

반사면의 형상의 영향을 높이기 위해서, 이온의 출발점, 즉 레이저 초점의 위치가 반사판에 가까워져야 한다. 그러나 4장에서 기술한 바와 같이, 본 연구에서 고려된 이온계는 입자의 투과와 레이저 빔의 투과가 이루어져야 한다. 반사판에 입자빔과 레이저의 투과를 위하여 구멍을 가공할 수 있더라도, Fig. 9에서와 같이 집속효율의 상승은 가능하지만, Fig. 9(c)에서 점선으로 표시한 것과 같이 과다 집속되어 세 번째 가속그리드로부터 약 1m 떨어진 검출기에 도달하기 전에 많은 이온의 손실을 피할 수 없다.

또한 Fig. 9에서는 100eV의 이온에 대해서도 아인젤 렌즈의 입사면으로 평행하게 굴절시키지 못하므로, 동시에 다양한 KE의 이온을 집속하는 것을 불가능하다. 결론적으로 반사면의 형상만을 변화시키는 것으로는 불충분하며, 입자와 레이저의 투과를 고려하면, Fig. 8의 결과로부터 평판형 반사판을 그대로 두고, 추가적인 집속장비가 필요하다.

4.3 튜브형 전극을 이용한 이온 집속

주목할 점은 하류에 위치할 아인젤 렌즈의 입사부에서, 이온을 렌즈 축에 평행하게, 그리고 이온의 KE에 따라 서로 다른 위치로 입사시켜야 한다는 것이다. 이를 위하여 전절에서 시도한 반사면의 형상변화로는 불가능하였으므로, 최대한 이온화지점과 가까운 곳에서 이온 궤적을 수정할 수 있는 장치, 즉 여기서는 튜브형 전극을 추출/가속 그리드 사이에 위치시켰다.

두 개의 평판그리드는 전기적으로 중성이고 중간에 위치하는 튜브형 전극에 상대적으로 고전압

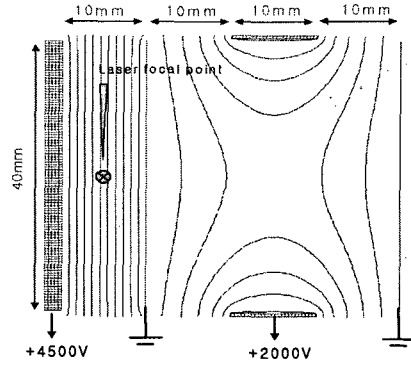


Fig. 10 Assembly of the tubular electrode and example of equi-potential contour

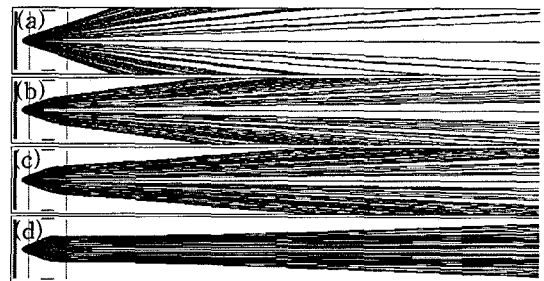


Fig. 11 Trajectories of energetic ions with different KEs by the tubular electrode assembly; V_{tube} : (a)0V, (b)2000V, (c)2500V, (d)3000V

을 가하는 전압조건은 기존의 아인젤 렌즈와 유사하다. Fig. 10의 전기장의 분포도는 기존의 아인젤 렌즈의 특성을 재확인한다. 따라서 본 절에서 검토될 Fig. 10의 이온계는 수정된 아인젤 렌즈가 결합된 형태로서 간주될 수 있다. 이때, 높은 KE의 이온은 평판형(곡면형이어도 무관함) 반사판에 의해 비행튜브 축(Fig. 2에서 y축)에서 떨어진 채로 튜브형 전극으로 입사된다. Fig. 5와 6의 결과를 참고하면, 높은 KE의 이온은 낮은 KE의 이온에 비해 더 많이 굴절되어, 두 이온이 모두 하류에 위치하는 아인젤 렌즈로 거의 평행하게 입사할 수 있을 것으로 예상된다.

다양한 KE의 이온이 거의 동일하게 집속됨을 Fig. 11(d)에서 명확히 확인할 수 있다. 또한, 3000V를 튜브형 전극에 가할 경우, 이온화 지점에서 500mm 떨어진 곳에 지름 40mm의 검출기를 설치하면, Fig. 10의 이온계 만으로도, 200eV 이하의 이온을 손실없이 검출할 수 있다. 그러나 이렇게 비행거리가 짧을 경우, 이온의 도달 시간

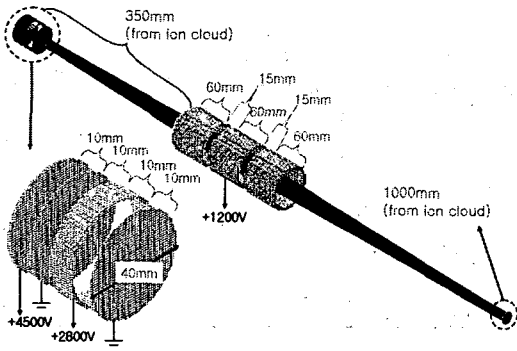


Fig. 12 Final design of ion optics which is capable of 100% detection of 0-200eV energetic ions in single particle mass spectrometer

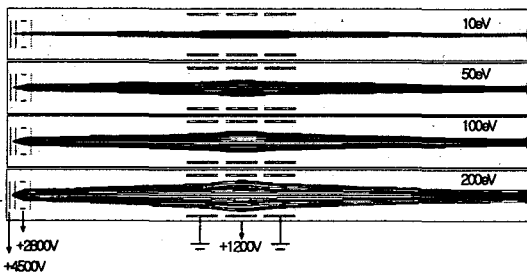


Fig. 13 Trajectories of ions ejected with different KEs for the final design of ion optics

이 짧아져서 더 높은 샘플링이 가능한 오실로스코프가 필요하게 될 뿐 아니라, 검출기의 크기가 커지는 단점이 있다. 따라서, 추가적인 아인젤 렌즈를 하류에 위치시키고 전절의 이온계에 의한 굴절을 완화시키면, 200eV 이하의 이온을 충분한 비행 시간으로 100% 검출 가능할 것으로 기대된다.

4.4 100% 검출 가능한 이온계 형상의 이론설계
4.3절의 모사에서 사용된 조건을 유지하면서 추가된 아인젤 렌즈의 위치와 전압을 조절하여 0-200eV로 넓은 범위의 KE를 가지는 이온을 동시에 검출기로 집속할 수 있는 설계조건을 찾아내었다. Fig. 12와 Fig. 13에서 성공적으로 이온 손실없는 이온계의 이온 집속 성능을 확인하였다. 특히, 통상적으로 질량분석기에 적용되는 고전압인 4500V를 반사판에 부가하여도, 본 연구에서 새롭게 설계된 튜브형전극과 아인젤 렌즈의 결합을 통하여 이온의 집속에 성공하였음을 강조하고 싶다. 또한 본 연구 결과로 제시된 조건 이외에도 전극간의 간격이 일부 달라지면 최적 조

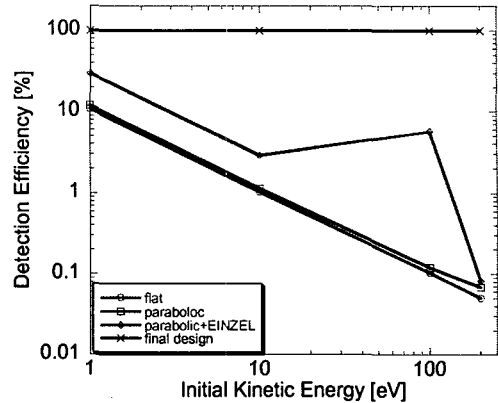


Fig. 14 Comparison of detection efficiencies for the tested ion optics

건은 변화할 수 있지만, 4.3절에서 언급한대로 아인젤 렌즈의 성능을 극대화하기 위한 조건을 만족하는 개념으로 접근되어야 한다.

4.5 검출효율의 비교

앞서 시도한 형상의 이온계에 대한 이온검출효율을 이온의 초기 KE에 대하여 Fig. 14에 나타내었다. 평판형과 반구형에 대해서는 이온의 초기 운동에너지에 대해서 지수적으로 감소하지만 반구형 반사판과 원통형 전극, 아인젤 렌즈를 이용하여 검출효율이 100%로 유지됨을 수치해석적으로 재확인하였다. 검출효율의 계산방법은 3.1절에서 설명한 방법과 동일하다. 파라볼릭형 반사판과 아인젤 렌즈만을 이용하여 이온을 집속하는 경우에는, 검출기 크기(d=18mm) 이내로 도달한 이온들 중에서 과다 포커싱이 되어 서로 교차된 이온들도 포함할 때, 100eV에서 검출효율이 급격히 상승하였으나 이것 역시 이온의 KE에 따라 변화하는 한계를 가진다.

5. 결론

본 연구에서는 기존의 단일입자질량분석기의 이온계에서 이온의 손실에 의해 발생하는 질량분석 결과가 왜곡될 수 있음을 지적하고, 이온손실을 제거할 수 있는 새로운 이온계설계의 기본 개념을 수치해석을 통하여 정립하였다. 복잡한 형상의 전극내부의 전기장과 이온궤적을 모사하기 위하여 SIMION을 사용하였고, 곡면형 반사판, 추

출그리드, 튜브형 전극, 가속그리드, 추가적인 아인젤 렌즈의 결합을 통하여, 0-200eV로 넓은 범위의 운동에너지로써 방출되는 이온을 본 수치해석 범위내에서 100% 검출 할 수 있음을 처음으로 밝혔다. 단일입자 질량분석기의 성능향상을 위하여 시도된 다양한 형상의 이온계를 설계할 때 주의하여야 할 점으로서, 이온화 지점에 최대한 가깝게 튜브형 전극을 삽입하여 다양한 KE의 이온을 비행튜브축에 평행하게 이동하게 하여야 하고, 추가적인 아인젤 렌즈의 성능을 극대화하여야 한다. 향후 본 연구에서 제시된 이온계를 단일입자 질량분석기에 적용하여 그 효과를 실험적으로 검증할 계획이다.

이와 같은 결과로 입자의 크기에 의존하여 다른 운동에너지로 생성되는 이온을 모두 검출함으로써 단일입자 개개의 크기와 화학적 조성을 동시에 분석함과 동시에 조성결과의 정확도를 획기적으로 향상시킬 것으로 기대한다.

후 기

본 연구는 환경부 차세대핵심환경기술개발사업(과제번호: 102-041-029)의 지원으로 수행되었으며, 이에 관계자 여러분께 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Noble, C.A. and Prather, K.A., 2000, "Real-Time Single Particle Mass Spectrometry: A Historical Review of a Quarter Century of Chemical Analysis of Aerosols," *Mass Spectrum Rev.*, Vol. 19, pp. 248~274.
- (2) Carson, P.G., Neubauer, K.R., Johnston, M.V. and Wexler, A.X., 1994, "On-line Chemical Analysis of Aerosols by Rapid Single-Particle Mass Spectrometry," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 26, p. 535.
- (3) Reents, W. D. and GE, Z., 2000, "Simultaneous Elemental Composition and Size Distributions of Submicron Particles in Real Time Using Laser Atomization/Ionization Mass Spectrometry," *Aerosol Sci. Technol.*, Vol. 33, pp. 122~134.
- (4) Lee, D., Miller, A., Kittelson, D.B. and Zachariah, M.R., 2005, "Characterization of Metal-bearing Diesel Nanoparticles Using Single Particle Mass Spectrometry," *J. Aerosol Sci.*, in press.
- (5) Park, K., Lee, D., Rai, A., Mckherjee, D. and Zachariah, M.R., 2005, "Size-Resolved Kinetic Measurements of Aluminum Nanoparticle Oxidation with Single Particle Mass Spectrometry," *J. Phys. Chem. B*, Vol. 109, No. 15, pp. 7290~7299.
- (6) Lee, D. and Zachariah, M.R., 2005, "Characterization of Submicron Particles Using a Single Particle Mass Spectrometer (I) - Nonlinear Correlation Between Particle Size and Mass Spectra Signals," *Transactions of the KSME B*, Vol. 29, No. 4, pp. 453~459.
- (7) Lee, D., Park, K. and Zachariah, M.R., 2003, "Determination of Total Particle Mass From Single Particle Mass Spectrometry," The 22nd AAAR Conference, Anaheim, CA, USA, Oct. 20-24; Lee, D., 2005, "Energetic Ion Formation from a Nanoparticle by Nanosecond Nd: YAG Laser Pulse During a Single Particle Mass Measurement," will be submitted to *Phys. Rev. B*.
- (8) Ditmire, T., Donnelly, t., Rubenchik, A. M., Falcone, R. W. and Perry, M. D., 1996, "Interaction of Intense Laser Pulses with Atomic Clusters," *Phys. Rev. A*, Vol. 53, No. 5, pp. 3379~3402.
- (9) Ditmire, T., 1998, "Simulation of Exploding Clusters Ionized by High-Intensity Femtosecond Laser Pulses," *Phys. Rev. A*, Vol. 57, No. 6, pp. R4094.
- (10) Milchberg, H.M., McNaught, S.J. and Parra, E., 2001, "Plasma Hydrodynamics of the Intense Laser-Cluster Interaction," *Phys. Rev. E*, Vol. 64, p. 056402.
- (11) Liu, P., Ziemann, P. J., Kittelson, D. B. and McMurry, P. H., 1995, "Generating Particle Beams of Controlled Dimensions and Divergence: II. Experimental Evaluation of Particle Motion in Aerodynamic Lenses and Nozzle Expansions," *Aerosol Sci. Technol.*, Vol. 22, pp. 314~324.
- (12) Liu, P., Ziemann, P.J., Kittelson, D.B. and McMurry, P.H., 1995, "Generating Particle Beams of Controlled Dimensions and Divergence: I. Theory of Particle Motion in Aerodynamic Lenses and Nozzle Expansions," *Aerosol Sci. Tech.*, Vol. 22, pp. 293~313.