

جداسازی یونهای گازی هلیوم از میان ایزوتوپ‌هایش در مناطق اول و سوم پایداری یک فیلتر

جرمی چهارقطبی

شرافت، شایسته^۱؛ قلمبردزفولی، عبدالمحمد^۲

^۱گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

^۲گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

در این مقاله، یک فیلتر جرمی چهار قطبی با سطح مقطع هندلولوی طراحی شده است. این فیلتر با استفاده از نرم افزار *simion3D version07* شبیه سازی شده و برای عبور یونهای گازی هلیوم در دو منطقه ی اول و سوم پایداری این فیلتر بهینه شده است. همچنین تأثیر تغییرات شعاع پرتو یونی، انرژی و توزیع زاویه ای آنها بر میزان قدرت تفکیک و درصد انتقال یون این فیلتر جرمی در منطقه ی اول با پارامتر های مات $a=0.237$ و $q=0.706$ و منطقه ی پایداری سوم با پارامتر های مات $a=3.16$ و $q=3.23$ بررسی شده است.

Separation of helium gas ions form their isotopes in the first and third stability zones of a quadrupole mass filter

sherafat, shayesteh¹; Ghalambor dezfooli, abdol mohammad²

¹ Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

² Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

Abstract

In this article a quadrupole mass filter with hyperbolic cross section will be designed. This filter has been simulated with *simion3D version07* software and has been optimize for Transmission of helium gas ions in the first and third stability zones. Also the effect of change in the ion beam reduce, energy and its angular distribution on the resolving power and percentage of transmission efficiency of this mass filter with $a=0.237$ and $q=0.706$ parameters in the first stability zone and $a=3.16$ and $q=3.23$ parameters in the third stability zone, has been studied.

مقدمه

های متقابل یون-مولکول، پراکندگی‌ها و خنثی شدن یون‌ها

جلوگیری می‌کند. [۱]

یکی از انواع این طیف سنج ها، طیف سنج جرمی چهار قطبی می باشد که اولین بار در سال ۱۹۵۳، ولفگانگ پاول فیزیکدان آلمانی و همکارانش در دانشگاه Boon این سیستم را ساخته و یونها را با نسبت جرم به بار آنها جدا کردند [۲]. به خاطر خصوصیات برجسته ای که این فیلتر دارد نظیر کارایی، قیمت ارزان، وزن سبکتر، زمان رویش سریع و کارکردن در فشارهای نسبتاً بالاتر؛ کاربردهای فراوانی در بسیاری از جمله علوم شیمی،

طیف سنج های جرمی استفاده های بسیار گسترده ای در شاخه های مختلف علوم دارند و به منظور جداسازی جرم های مختلف اتمی و مولکولی مورد استفاده قرار می گیرند. به طور کلی هر طیف-سنج جرمی، از پنج بخش اساسی تشکیل شده است: سیستم ورودی، محفظه ی یونیزاسیون، آنالیزور جرمی، آشکارساز و پمپ خلاء. محفظه ی یونیزاسیون، فیلتر جرمی و آشکارساز باید در یک سیستم خلاء قرار بگیرند. زیرا خلاء بالا (فشار پایین)، فاصله ی آزاد میانگین ذرات را به بیشترین مقدار خود رسانده و از واکنش-

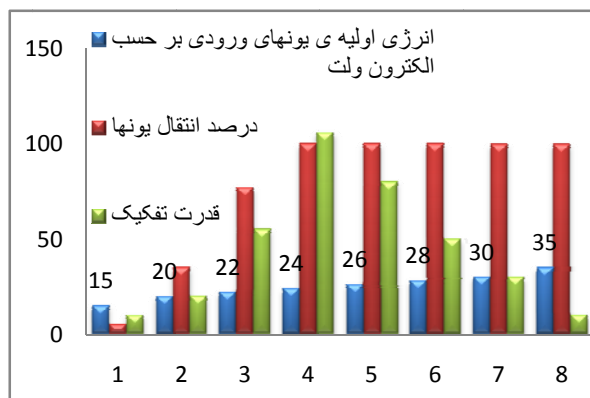
شخصی می‌باشد که با زبان برنامه نویسی C نوشته شده و قابلیت مدل‌سازی مسائل پیچیده‌ی اپتیک یونی در ۳ بعد را دارد.

نواحی پتانسیل در این نرم افزار با استفاده از حل معادله‌ی لاپلاس به روش عددی فراواهلش که یکی از روشهای تفاضل متناهی می‌باشد، حاصل می‌شود. اما برای حل معادلات مربوط به مسیر حرکت یونها و شبیه‌سازی مسیر آنها از انتگرال‌گیری به روش رونگ کوتاه مرتبه چهارم استفاده می‌کند [5] در این نرم افزار فشار خلاء 10^{-12} تور فرض شده است.

شبیه سازی

فیلتر طراحی شده در این تحقیق دارای سطح مقطع هذلولوی، شعاع میدان ۲ سانتیمتر و طول ۳۲ سانتیمتر بوده و در فرکانس ۶.۵ مگاهرتز برای عبور یونهای گازی هلیوم به جرم 4.003 amu بهینه شده است.

در منطقه ی اول پایداری پارامترهای ماتيو $a = 3/16$ و $q = 3/23$ انتخاب گردیده اند. درصد انتقال یونهای هلیوم بر حسب تغییرات شعاع پرتو یونی (شکل ۱)، انرژی اولیه ی یونهای ورودی (شکل ۲) و همچنین توزیع زاویه‌ای پرتو یونی نسبت به محور چهارقطبی (شکل ۳)، مورد محاسبه قرار گرفته است.



شکل ۱: منحنی تغییرات انرژی اولیه ی یونهای ورودی بر حسب درصد انتقال و قدرت تفکیک یونها در منطقه ی اول پایداری

صنعت نفت، فیزیک اتمی و هسته‌ای به منظور جداسازی ایزوتوپ‌ها پیدا کرده است و در بسیاری از پژوهشگاه‌های علمی و صنعتی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۳].

هر فیلتر جرمی چهارقطبی از چهار میله ی موازی با سطح مقطع هذلولوی تشکیل شده است. با اعمال همزمان ولتاژهای مستقیم و تناوبی به آنها، یک میدان هذلولوی تقریباً ایده‌آل در فضای بین میله‌ها ایجاد می‌شود. به طوریکه پتانسیل ایجاد شده در فضای بین میله‌ها از رابطه ی زیر تبعیت می‌کند:

$$\Phi = [U + V \cos(\omega t)] \left(\frac{x^2}{r_1^2} - \frac{y^2}{r_2^2} \right) \quad (1)$$

r_1 شعاع میدان، یعنی فاصله‌ی بین محور چهارقطبی و نزدیکترین نقطه روی الکترود ها، U ولتاژ مستقیم و V دامنه ی ولتاژ تناوبی می باشد.

هنگامیکه جریانی از یونها وارد فیلتر چهارقطبی می‌شود، میدان چهارقطبی روی مسیر حرکت یون‌هایی که درون فیلتر حرکت می‌کنند، تأثیر گذاشته و نواحی پایداری را در فضای بین میله‌ها ایجاد می‌کند. به طوری که معادلات حرکت آن‌ها در دو جهت x و y از معادله ماتيو زیر پیروی می‌کند:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + (a_u - 2q_u \cos(2\xi))u = 0 \quad (2)$$

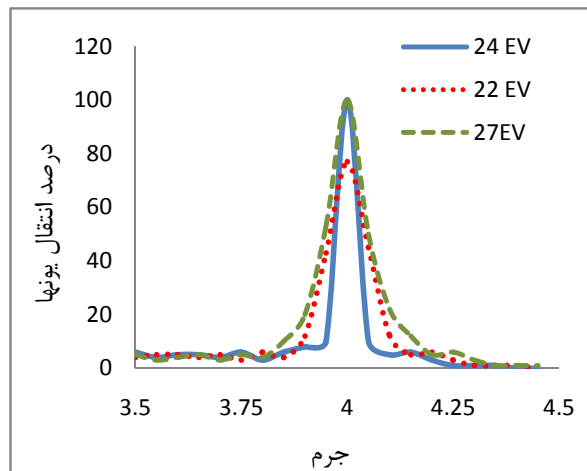
در این رابطه u می‌تواند x یا y با $\xi = \omega t/2$ می‌باشد. و پارامترهای ماتيو a_u و q_u به صورت زیر می باشند:

$$a = \frac{16eU}{m\omega^2 r_1^2} = a_x = -a_y \quad q = \frac{4eV}{m\omega^2 r_2^2} = q_x = -q_y \quad (3)$$

ذراتی که درون ناحیه ی پایدار قرار می‌گیرند، با یک نسبت جرم به بار مشخص طول چهارقطبی را پیموده و آشکارسازی می‌شوند. ولی ذرات بیرون از این ناحیه، به میله‌ها برخورد کرده و خنثی می‌شوند. به این ترتیب چهارقطبی الکتریکی نظیر یک فیلتر جرمی عمل کرده و بعضی از یونها را بسته به نسبت جرم به بار آنها عبور داده و از عبور بعضی ممانعت می‌کند [۴].

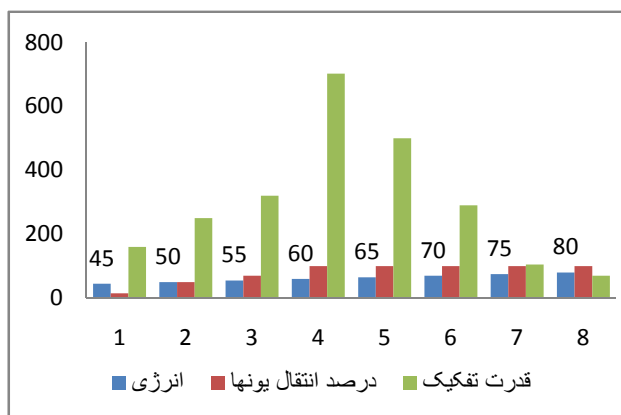
روش مطالعه

در این مطالعه به‌منظور طراحی فیلتر جرمی چهارقطبی و شبیه‌سازی مسیر حرکت ذرات در آن از نرم افزار simion3D version07 استفاده گردیده است. این نرم افزار برای کامپیوترهای

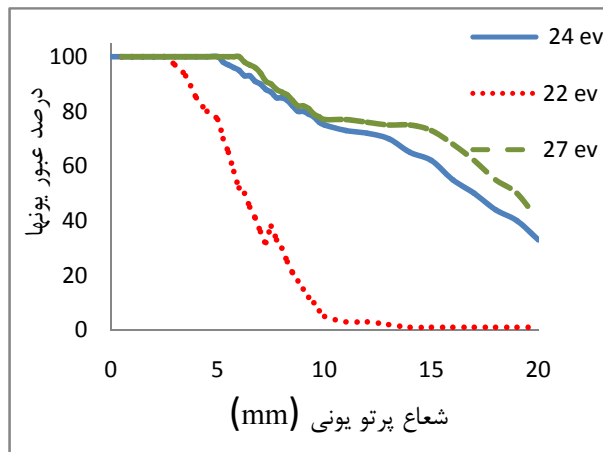


شکل ۴: پیک حاصل از جداسازی یونهای هلیوم گازی به جرم 4.003 amu از ایزوتوپهای آن در منطقه ی اول پایداری

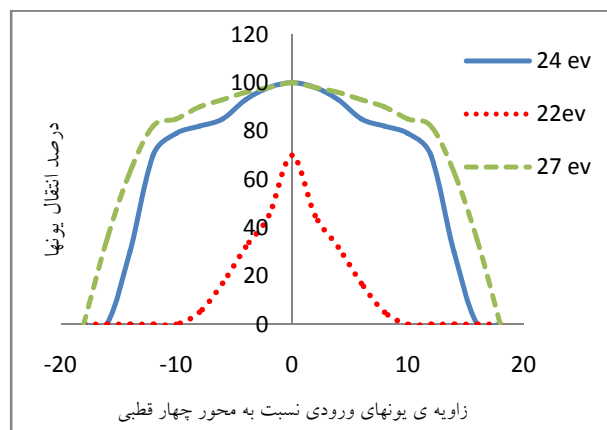
با استفاده از پهنای پیک در نصف عرض ماکزیمم (FWHM)، قدرت تفکیک در این منطقه برای این فیلتر 106 محاسبه شده است. در منطقه ی سوم پایداری، پارامترهای $a=3/16$ و $q=3/23$ انتخاب شده اند [۶]. در این منطقه نیز درصد انتقال یونهای هلیوم بر حسب تغییرات شعاع پرتو یونی (شکل ۵)، انرژی اولیه ی یونهای ورودی (شکل ۶) و همچنین توزیع زاویه‌ای پرتو یونی نسبت به محور چهارقطبی (شکل ۷)، مورد محاسبه قرار گرفته است. این تغییرات به صورت زیر می باشند:



شکل ۵: منحنی تغییرات انرژی اولیه ی یونهای ورودی بر حسب درصد انتقال یونها و قدرت تفکیک این فیلتر در منطقه ی سوم پایداری

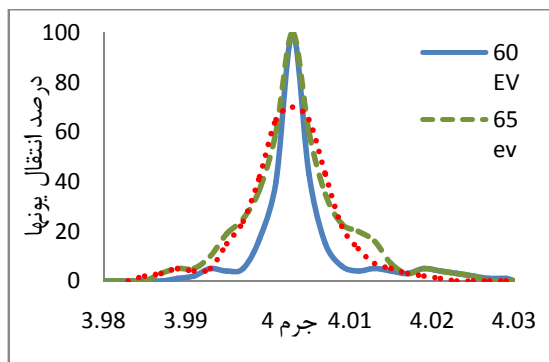


شکل ۶: منحنی تغییرات شعاع پرتو یونی بر حسب درصد انتقال یونها در منطقه ی اول پایداری

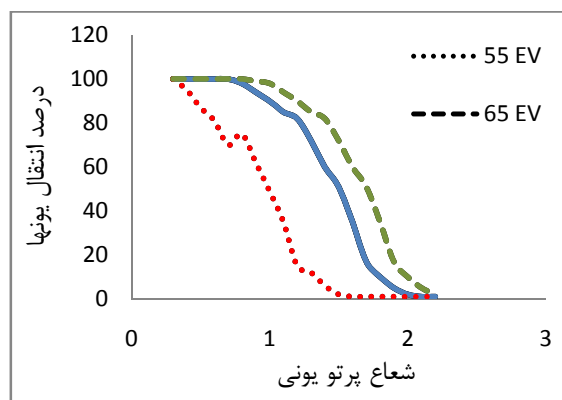


شکل ۷: منحنی تغییرات زاویه ورود یونها نسبت به محور چهارقطبی بر حسب درصد انتقال یونها در منطقه ی اول پایداری

با توجه به شکل های (۱) تا (۳) درمی یابیم که در این منطقه، یونهایی که از یک منبع یونی به شعاع ۵ میلیمتر و با انرژی اولیه ی 24 الکترون ولت به صورت موازی با محور به این فیلتر جرمی وارد می شوند می توانند به گونه ای جداسازی شوند که بهترین انتقال را برای این فیلتر ایجاد کنند. به طوریکه سیگنال حاصل از این پارامترها که قابل مشاهده در آشکارساز می باشد، در شکل (۴) نمایش داده شده است. این شکل همچنین شامل سیگنال حاصل از پارامترهای متفاوت انرژی نیز می باشد.



شکل ۸: پیک حاصل از جداسازی یون هلیوم گازی به جرم 4.003 amu از ایزوتوپهای سوم پایدار

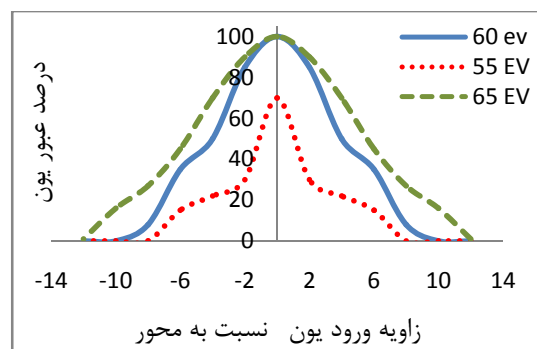


شکل ۶: منحنی تغییرات شعاع منبع یونی (mm) بر حسب درصد انتقال یونها در منطقه ی سوم پایدار

عناصر سبک از جمله هلیوم است. از طرفی، با توجه به شکل - های (۵) و (۶) و (۷) نتیجه می گیریم که چنانچه منطقه ی سوم پایداری به جهت قدرت تفکیک بالاتر برای هلیوم و یا عناصر سبک مورد استفاده قرار گیرد، بایستی منبع تولید یونها دارای مشخصات زیر باشد: (۱) بسیار متمرکز (۲) انرژی بالا (۳) توزیع زاویه ای محدود حول محور چهار قطبی داشته باشد. زیرا در این منطقه ولتاژ تناوبی بسیار بیشتر از منطقه ی اول بوده و پرتوهایی که از محور دور می باشند، تحت تاثیر این ولتاژ منحرف شده و به الکتورها برخورد می کنند و ختنی می شوند. به همین جهت معمولاً محققان در کارهای تجاری از منطقه ی اول پایداری استفاده می کنند.

مرجع ها

- [۱] H. J. Gross; “*Mass Spectrometry a Textbook*”; Springer. (2004)
- [۲] W. Paul and H. Steinwedel; “Ein neues massenspektrometer ohneMagnetfeld”; *Zeitschrift f ur Naturforschung*, **8a** (1953) 448.
- [۳] O. Shimizu et al. “isotopic measurement of Re, Os, Ir and Rn by quadrupole negative thermal ionization mass spectrometry”; *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, **52**;No. 4(2004)189-195.
- [۴] E. Hoffmann; “*Mass Spectrometry: Principles and Application*”; 3th edition; Wiley . (2007)
- [۵] H.Lai et al. “The predictive power of SIMION/SDS simulation software for modeling ion mobility spectrometry instruments”; *International Journal of Mass Spectrometry*, **276** (2008) 1-8.
- [۶] T. J. Hogan and S. Taylor; ‘Performance simulation of a quadrupole mass filter operating in the first and third stability zones’; *IEEE TRANSACTIONS ON INSTRUMENTATION AND MEASUREMENT* **57**; NO.3 (2008) 498-508.



شکل ۷: منحنی تغییرات زاویه ورود یونها نسبت به محور چهارقطبی بر حسب درصد انتقال یونها در منطقه ی سوم پایدار

شکل های (۵) تا (۷) نشان می دهند که در این منطقه هنگامی که یونهایی با انرژی 60 eV از یک منبع یونی به شعاع 0.7 mm و در جهت موازی با محور فیلتر به این سیستم وارد شوند، درصد انتقال برای فیلتر 100% می شود. سیگنال حاصل از این پارامترها، در شکل (۸) نمایش داده شده است. با توجه به این سیگنال، در این منطقه قدرت تفکیک این فیلتر 70.2 محاسبه شده است.

نتیجه گیری

از مقایسه ی شکل های (۴) و (۸) در می یابیم که در منطقه ی سوم پایداری قدرت تفکیک خیلی بیشتر از منطقه ی اول می باشد و لذا این منطقه دارای ویژگی خاصی برای فیلتر نمودن