J. Space Technol. Appl. 3(1), 86-99 (2023)
https://doi.org/10.52912/jsta.2023.3.1.86

우주기술과 응용
Journal of Space Technology and Applications
pISSN 2765-7469 eISSN 2799-3213

기술논문

질량 분석기의 원형 모델 개발

이진근[1], 이남석[1], 강성원[1], 김선태[1], 장규하[2], 이 유[3,4†], 홍익선[4], 최정림[5], 민경욱[6], 정종일[4]

[1](주)영인에이스
[2]한국원자력연구원
[3]충남대학교 천문우주과학과
[4]충남대학교 우주 · 지질학과
[5]충북대학교 천문우주학과
[6]한국과학기술원

Received: December 13, 2022
Revised: December 30, 2022
Accepted: January 10, 2023

†Corresponding author :
Yu Yi
Tel : +82-42-821-5468
E-mail : euyiyu@cnu.ac.kr

Copyright © 2023 The Korean Space Science Society. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

ORCID
Jingeun Rhee
https://orcid.org/0000-0002-0352-039X
Nam-Seok Lee
https://orcid.org/0000-0001-5386-9955
Sung Won Kang
https://orcid.org/0000-0001-5529-688X
Seontae Kim
https://orcid.org/0000-0002-3268-4924
Kyu-Ha Jang
https://orcid.org/0000-0002-6118-8612
Yu Yi
https://orcid.org/0000-0001-9348-454X
Ik-Seon Hong
https://orcid.org/0000-0002-4529-8002
Cheong Rim Choi
https://orcid.org/0000-0001-9363-4667
Kyoung Wook Min
https://orcid.org/0000-0002-1394-9341
Jongil Jung
https://orcid.org/0000-0003-1623-1033

Development of a Prototype Mass Spectrometer

Jingeun Rhee[1], Nam-Seok Lee[1], Sung Won Kang[1], Seontae Kim[1], Kyu-Ha Jang[2], Yu Yi[3,4†], Ik-Seon Hong[4], Cheong Rim Choi[5], Kyoung Wook Min[6], Jongil Jung[4]

[1]Young In ACE Co., Ltd., Anyang 14081, Korea
[2]Korea Atomic Energy Research Institute, Daejeon 34057, Korea
[3]Department of Astronomy and Space Science Chungnam National University, Daejeon 34134, Korea
[4]Department of Astronomy, Space Science and Geology, Chungnam National University, Daejeon 34134, Korea
[5]Department of Astronomy and Space Science, Chungbuk National University, Cheongju 28644, Korea
[6]Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon 34141, Korea

요 약

질량분석기는 태양계와 생명의 기원을 밝히기 위한 필수 과학 장비로서, 달/행성/소행성/혜성 등의 대기 및 지표에 존재하는 중성 원소와 이온에 대한 정보를 파악하기 위해 1970년대 초반부터 우주 탐사에 활용되어 왔다. 제4차 우주개발진흥 기본계획(2023-2027)에 따르면 우리나라는 2032년에 달 착륙을 2045년에는 화성 착륙을 성공하는 것을 핵심 목표로 삼고 무인 탐사를 위한 능력을 확보하는 데 기술개발의 역점을 두기로 하였다. 따라서 우주 탐사의 과학적 목표 달성을 위한 가장 기본적인 장비이지만 국내 우주탐사에서 한번도 시도되지 않았던 질량분석기의 국내 개발은 필수적이라고 할 수 있다. 본 논문에서는 국내에서 개발된 사중극자 질량분석기의 원리와 원형 모델 및 성능에 대해 소개하고 향후 발전 방향에 대해 논의하고자 한다.

Abstract

The mass spectrometer, being an essential scientific instrument for uncovering the origin of the solar system and life, has been used since the early 1970s on board spacecraft to obtain information of neutral and ionized elements in the atmosphere and surface of the moon, planets, asteroids, and comets.

According to the 4th Basic Plan for the Promotion of Space Development (2023-2027), Korea plans to conduct lunar landing in 2032 and Mars landing in 2045 as the core goals of the plan and focuses on developing the technologies required for unmanned robotic exploration missions. In this regard, it is crucial to develop the technology of a mass spectrometer, which is the most fundamental payload for space exploration for maximized scientific achievements, however never tried before in any domestic space missions. We describe in this paper the principle of a domestically developed quadrupole mass spectrometer, its prototype model, and the test results of its performance. We conclude this paper with intended future improvements.

핵심어 : 우주탐사, 우주 탑재체, 사중극자 질량 분석기, 이온화 장치
Keywords : space exploration, space payload, quadrupole mass spectrometer, Ionization Source

1. 서론

우주과학 관측은 관측 대상에 따라 우주 천문, 우주 탐사, 우주 플라즈마 환경의 세 분야로 나눌 수 있으며, 각각은 우주의 기원, 태양계와 생명의 기원 및 지구 주변 우주 환경과 관련된 연구를 목표로 삼고 있다. 이 중에서 특히 우주 탐사는 달, 행성, 소행성, 혜성 등의 대기와 지표 및 내부의 구성 성분과 구조에 대한 정보를 이들 천체가 존재하는 현장에서 획득한다. 이를 위해 그동안 많은 탐사선(spacecraft), 궤도선(orbiter), 착륙선(lander), 또는 로버(rover)에서 질량 분석기를 탑재해 관측해 왔다.

예를 들면 2004년에 발사된 유럽우주국(European Space Agency, ESA)의 로제타(Rosetta) 탐사선은 2014년 혜성 67P/Churyumov-Gerasimenko과 랑데뷰를 통해 2016년까지 혜성 주위를 공전하면서 질량 분석기(Rosetta spectrometer for ion and neutral analysis, ROSINA)로 혜성 코마에서 물을 비롯하여 황 화합물과 유기물 등 휘발성 물질을 관측하였다[1,2]. 또한 Rosetta의 필레(Philae) 착륙선은 혜성 67P에 착륙하여 질량 분석기(cometary sampling and composition, COSAC)로 혜성 표면 시료 분석 및 휘발성 물질 관측을 수행하여 물과 메탄을 비롯하여 여러 종류의 유기화합물들을 발견하였다[3]. 2011년 발사된 미국 항공 우주국(National Aeronautics and Space Administration, NASA)의 화성 탐사 로버 큐리오시티(Curiosity)에 실린 질량 분석기인 sample analysis at Mars(SAM)은 화성에서 메탄을 비롯한 여러 유기 화합물들을 관측하여 외계생명체 탐사에 대한 관심을 불러 일으킨 바 있다[4]. 2013년에 발사된 NASA의 화성 대기 탐사선 Mars atmosphere and volatile evolution (MAVEN)에 탑재된 질량분석기 neutral gas and ion mass spectrometer(NGIMS)는 과거 화성의 대기와 기후 환경에 대한 추정을 목표로 대기의 성분과 정량 관측을 통해 태양 활동과 열권 내 성분들의 관계를 규명하였다[5]. 또 같은 2013년 NASA에서 발사한 달 외기권 탐사선인 lunar atmosphere and dust environment explorer(LADEE)는 달 표면 50 km 상공에서 질량 분석기 neutral mass spectrometer(NMS)를 통한 관측으로 매우 희박한 달의 대기가 주로 아르곤(Ar)과 헬륨(He)으로 구성되어 있는 것을 밝혀냈다[6]. 이 외에도 1997년에 발사된 카시니-하위헌스(Cassini-Huygens)는 2004년 토성 궤도에 진입하여 토성과 주변 위성들

에 존재하는 수증기, 이산화탄소 및 각종 탄화수소 화합물을 측정하는 등 Fig. 1에서 보는 바와 같이 1970년대 이후 수많은 우주 탐사선에서 질량 분석기가 사용되었다[7].

또 Fig. 1의 질량 분석기 연표에서 보듯 2000년대 초반 Rosetta 임무 이전에는 측정 질량 범위가 150 Da 이하, 분해능이 100 이하로 사중극자(quadrupole) 질량분석기와 자기 섹터(magnetic sector) 형태의 질량 분석기가 주로 사용되었으며, 이후 복잡한 유기물의 분석이나 질량이 비슷한 화합물들의 측정 임무들이 시작되면서 장비에 요구되는 질량 범위는 1,000 Da 이상, 분해능도 1,000 이상으로 확대되었고, 이온트랩이나 비행시간측정(time-of-flight) 장치를 이용한 질량 분석기들이 많이 사용되고 있는 것을 알 수 있다. 예를 들면 비록 발사가 연기되긴 했지만 엑소마스(ExoMars) 2022의 rover에는 화성에서 과거 생명체를 찾기 위한 노력의 일환으로 분자량이 1,000 Da에 이르는 유기 화합물을 측정할 수 있는 질량분석기를 탑재하고 있다.

제4차 우주개발진흥 기본계획(2023-2027년)에서는 우리나라 우주탐사 기술개발 지향점을 한국형 발사체를 이용한 달과 화성 착륙, 이를 위한 전략기술 확보로 명시하고 있으며, 그 내용으로 한국형 발사체의 사용하여 2032년에 착륙선을 보내 달 탐사를 수행하고, 2045년까지 화성 착륙선을 보내는 것으로 되어 있다. 더불어 동 기본계획에는 다양한 우주과학/탐사 연구를 추진하여 대내적으로는 우주 탐사 기반을 조성하고, 대외적으로는 국제협력을 활용하여 NASA, ESA 등의 우주개발 선진국들의 소행성, 화성 탐사 등에 참여하는 전략을 담고 있다. 이와 같은 국내외 우주 탐사의 전개 과정과 향후 발전 방향을 감안하면 미래 우주 탐사의 과학적 목표 달성을 위한 가장 기본적인 장비인 질량 분석기의 국내 개발은 필수적이라고 할 수 있으며, 이런 관점에서 본 논문에서는 지금까지 국내에서 개발된 사중극자 질량 분석기의 원형 모델을 소개하고자 한다.

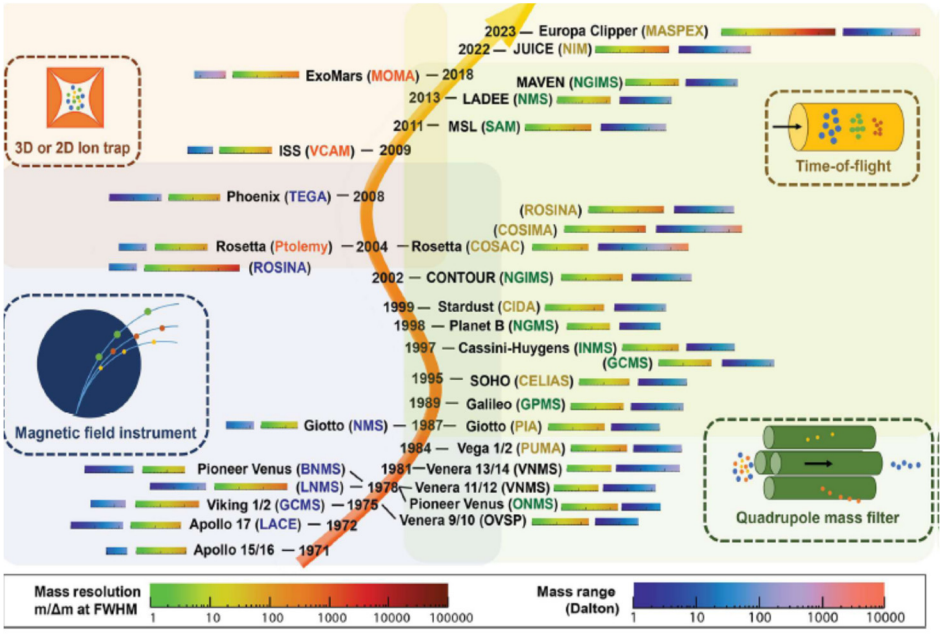


Fig. 1. Major milestones in the evolutionary history of mass spectrometry, applied for planetary exploration (Adapted from Arevalo et al. 2019 [7]).

2. 질량 분석기의 원리

질량 분석기는 다양한 형태의 시료를 원자나 분자 상태로 분해하고 이온화한 후 질량 별로 분리 검출함으로써 시료에 어떤 성분이 얼마나 포함되어 있는 지를 측정하는 장치이다. 일반적으로 질량분석기는 Fig. 2에 보인 바와 같이 (1) 주입된 시료를 이온으로 만들어 주는 이온화 장치(ionization source), (2) 이온들을 질량별로 분리시켜주는 질량 분리 장치(mass filter), (3) 질량별로 분리된 이온들을 검출하는 검출 장치(detector), 및 (4) 검출기에서 출력되는 신호들을 수집하여 질량 스펙트럼을 생성하는 신호 수집 및 처리장치(data acquisition & processing unit)로 구성되며, 이외에도 이온화 장치에서 생성된 이온들을 질량 분리 장치까지 효율적으로 전달하기 위한 이온 렌즈(ion lens)나 이온 가이드(ion guide)가 필요하다[8]. 한편, 지상 실험에서는 추가적으로 다양한 형태의 시료들을 쉽게 이온화될 수 있는 상태로 만들어서 이온화 장치로 주입시켜 주는 시료 도입 장치(sample introduction system)와 질량 분리 장치나 검출기 등이 동작할 수 있는 진공도를 유지하기 위한 진공시스템도 함께 구성되어야 한다. 질량분석기의 측정 결과는 x축은 질량, y축은 측정된 신호의 크기(intensity)로 표시되는 질량 스펙트럼으로 표현되며, 이 스펙트럼을 통해 시료를 구성하는 물질이 어떤 성분으로 구성되어 있고, 각 성분들은 어느 정도 포함되어 있는 지를 알 수 있다. 즉, 정성적 및 정량적 분석이 가능하다. 질량 분석기의 주요 구성 부분에 대한 설명은 다음과 같다.

(1) 이온화 장치: 우주 탐사용 질량분석기에는 전자를 생성시켜 가속한 후 중성 기체와 충돌시켜 이온화 하는 EI(electron impact) 방식의 이온화 장치가 주로 사용되는데, 최근에는 기존의 열을 가해서 전자를 생성시키는 열 전자 방출(thermal emission) 방식에 비해 더 많은 전자를 생성시킬 수 있는 탄소나노튜브를 이용한 전계전자방출(field emission) 방식의 EI 장치들이 개발되어 질량분석기에 사용되고 있다.

(2) 질량 분리 장치: 일반적으로 사용되는 질량 분리 장치에는 사중극자, 이온 트랩, 비행시간 측정장치(TOF), 자기 섹터 등이 있는데, 소형 위성에는 무게와 전력 문제로 사중극자와 이온 트랩이 주로 사용된다. 최근 행성의 생명체 흔적을 탐사하는 임무들이 많아지면서 선형 이온 트랩(linear ion trap)이 우주 탐사에 활용되기도 한다.

(3) 검출 장치: 검출 장치로는 전자증배관(electron multiplier)가 사용되며, 2차원 대면적 검출을 위해서는 micro-channel plate를 사용한다.

특히 본 연구에서 사용된 사중극자의 질량 분리 장치는 Fig. 3과 같이 공통 축을 중심으로 대각선 방향으로 배열된 4개의 평행 막대로 구성되며, 막대에 시간에 따라 주기적으로 변하는 RF(radio frequency)의 양전압과 음전압을 교대로 인가하여 질량 대 전하 비(m/Z)를 기

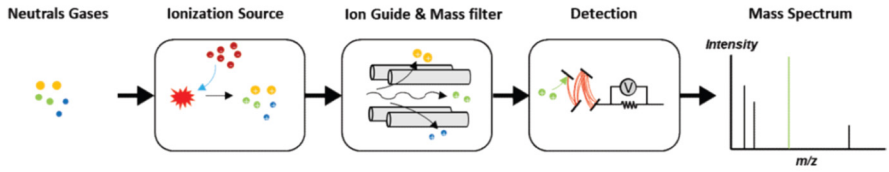


Fig. 2. Components of a mass spectrometer.

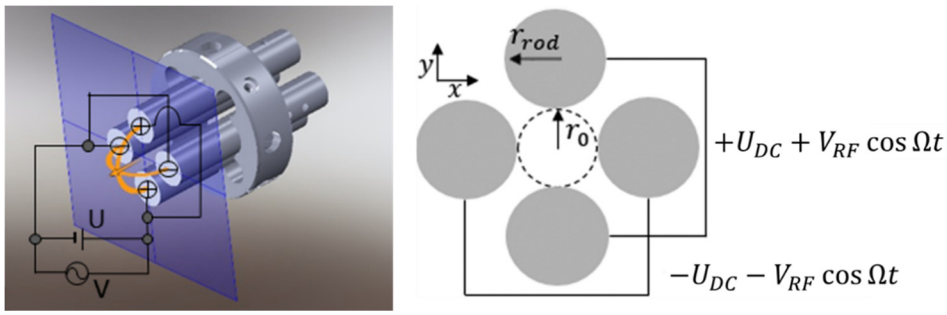


Fig. 3. Quadrupole elements: (left) side view, (right) cross-sectional view.

준으로 이온을 분리한다[9]. Fig. 3의 사중극자 내에서 질량 m, 전하량 Ze인 이온의 운동은 다음과 같은 Mathieu 미분 방정식으로 주어진다.

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + (a_u - 2q_u\cos 2\xi)u = 0 \tag{1}$$

여기서 u는 중심 축으로부터 좌표 (x, y)이고, $\xi = \Omega t/2$, a_u는 $a_x = -a_y = 8ZeU_{DC}/mr_0^2\Omega^2$, q_u는 $q_x = -q_y = 4ZeV_{RF}/mr_0^2\Omega^2$이며 U, V, r_0, Ω는 Fig. 3과 같이 각각 바이어스(bias) 전압, 라디오 주파수(RF) 전압, 막대의 반지름 및 RF 주파수이다. 식 (1)의 Mathieu 미분 방정식은 적당한 값의 a_u 및 q_u 범위에 대해 Fig. 4와 같이 u가 중심축 주위에서 진동하는 안정된 해를 가질 수 있다. 예를 들면 Fig. 4는 Fig. 5와 같이 이온의 질량 m=50 amu, 전하 $Z = 1$, 에너지는 5 eV로 가정하고, Mathieu 계수 비례관계(a_u/q_u)를 2/7로 고정하였을 때 mass filter 내에서 q_u의 변화에 따른 이온의 반응을 보여주는데, q_u가 0.6에서 0.7을 지나면 stability diagram의 안정적인 영역에서 불안정한 영역으로 넘어가는 것을 알 수 있다.

Fig. 6을 보면 안정된 해의 범위는 U_{DC}와 V_{RF}가 증가함에 따라 커지는 것을 알 수 있는데, 피크 부분에서 안정된 범위의 m/z 폭이 줄어들게 되므로 이 부분을 이용하면 질량의 분해능을

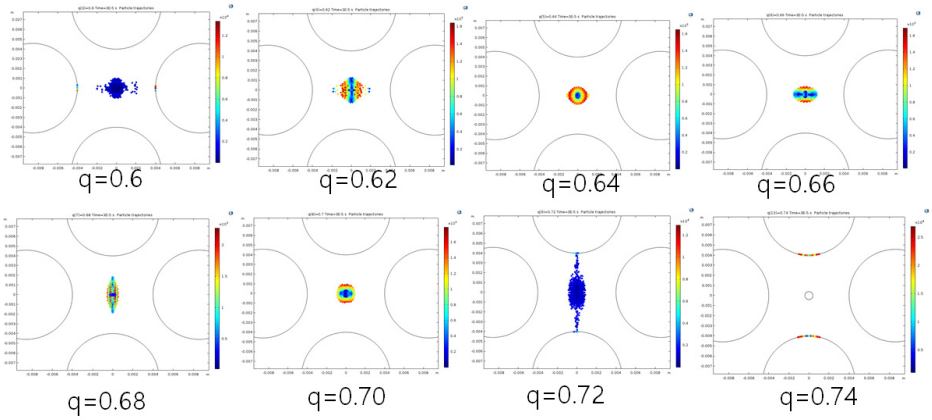


Fig. 4. Ion response according to the changes of RF-DC voltage (q_u, a_u) with constant ratio of RF-DC ($a_u/q_u = 2/7$). RF-DC, radio frequency-direct current.

Name	Expression	Value	Description
re	r0*1.148	0.004592 m	Rod radius
r0	4[mm]	0.004 m	Inscribed radius
rsrc	0.4[mm]	4E-4 m	Source radius
rcase	3.5*re	0.016072 m	Case radius
Lquad	130[mm]	0.13 m	Quadrupole length
a	0.2	0.2	Mathieu coefficient
q	0.7	0.7	Mathieu coefficient
f	2[MHz]	2E6 Hz	Frequency
omega	2*pi*f	1.2566E7 Hz	Angular frequency
mi	50[amu]	8.3027E-26...	Ion mass
Vac	q*mi*omega^2*r0^2/(4*e_const)	229.13 V	AC voltage
Udc	a*mi*omega^2*r0^2/(8*e_const)	32.733 V	DC voltage
A	5[V]	5 V	Accelerating voltage
vx0	sqrt(2*e_const*A/mi)	4392.8 m/s	Initial x velocity
fd	1[mm]	0.001 m	Fringe field depth
tp	Lquad/vx0	2.9594E-5 s	time of ion flight
rft	1/f	5E-7 s	time of one RF cycle
rfn	tp/rft	59.187	number of rf phase chan...

: fixed parameter : variable parameter

Fig. 5. Simulation parameters.

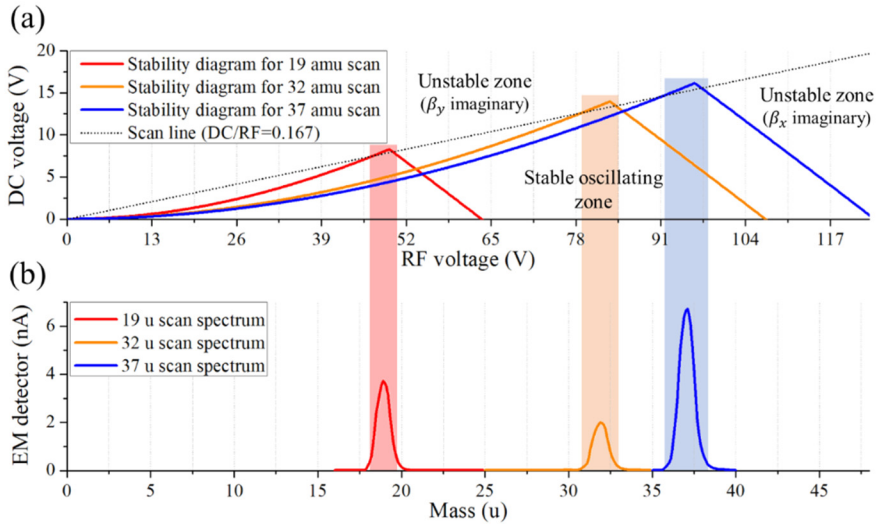


Fig. 6. Mathieu stability and mass spectra analysis of a quadrupole mass analyzer. (a) Mathieu stability diagram calculated based on the quadrupole and RF-DC power supply developed in Young-In Ace. (b) The experimental results of the corresponding mass spectra. RF-DC, radio frequency-direct current.

높일 수 있다. 따라서 그림의 화살표와 같이 SCAN mode에서 U_{DC}와 V_{RF}의 비를 일정하게 유지하면서 피크 바로 아래의 안정된 해의 영역을 지나도록 스캔하면 질량 대 전하 비(m/Z)가 다른 이온 성분들을 모두 측정할 수 있으며, 또는 U_{DC}와 V_{RF}를 고정하여 selected-ion-monitoring(SIM) 모드에서 특정 성분의 이온만 추출할 수 있다. 특히 SIM 모드에서 DC 전압(U_{DC})을 올리면 분해능이 증가하므로 정확히 이온들을 분리하여 검출할 수 있다.

3. 사중극자 질량 분석기 원형 모델의 제작

Mathieu 미분 방정식에 의하면 중심 축 주위의 포텐셜 우물은 쌍곡선 형태를 가지지만 이온 렌즈의 구경을 r_0보다 작게 하여 이온이 중심축 방향으로 입사하도록 하면 오차의 한계 내에서 가공의 편의를 위해 막대의 표면을 원통형으로 가정할 수 있다. Mathieu 미분 방정식의 안정된 이온 반응을 감안한 사중극자의 설계는 질량 범위와 분해능을 고려하여 간단히 다음과 같은 공식을 시용한다[9].

$$U_{DC} = \gamma V_{RF} + \delta \tag{2}$$

$$U_{DC} = 1.212 m f^2 r_0^2 \ \ (m: amu, f: MHz, r_0: cm) \tag{3}$$

$$V_{RF} = 7.219 m f^2 r_0^2 \ \ (m: amu, f: MHz, r_0: cm) \tag{4}$$

$$E_{ion}(eV) < \frac{1}{40} f^2 L^2 \Delta m \ \ (f: MHz, L: cm, \Delta m: amu) \tag{5}$$

여기서 E_{ion}은 이온 입사 에너지의 허용 범위, r_0는 rod aperture 반지름, γ는 DC와 RF의 비, $f(= \Omega/2\pi)$는 RF 주파수, 및 L은 rod의 길이이다. δ는 실제 개발된 DC power supply의 offset이 정확히 0이 아닐 경우 보상하기 위한 offset 미세보정 parameter이다. 식 (3) 및 (4)는 앞서 식 (1)에서 기술한 Mathieu equation of charged particle motion에 존재하는 Mathieu normalization parameters a_u와 q_u를 각 0.237 그리고 0.706으로 고정(stability diagram의 최상단 팁 끝단(즉, 이론상으로 무한대의 분해능 지점)에서 사중극자를 구동)할 때 필요한 DC 및 RF를 주로 사용되는 단위로 변환한 식이다. $a_u = 0.237$와 $q_u = 0.706$는 단극자(monopole) 및 쌍극자(dipole)가 없는 가장 이상적인 사중극자 포텐셜 분포에서의 하전입자 거동해석에만 해당되는 값이다. 일반적으로는 완벽한 사중극자보다는 가공, 조립 및 공차보정 등의 현실성을 고려하여 circular 또는 planar-type rods 형태로 디자인된다. 따라서 디자인 방법에 따라 stability tip의 a_u와 q_u 값이 이상적인 값보다는 조금씩 달라지며 실제 시뮬레이션 및 실험을 할 때에는 파라메터 스터디를 통해 정밀 보정작업이 수행된다.

실제 제작에서 r_0는 0.4 cm로 정했는데, 이는 RF-DC power supply의 출력 전압 특성과 주파수를 고려한 값이다. 즉, (3) 및 (4) 식에 따르면 RF 출력전압은 주파수의 제곱에 비례해서 커지지만 r_0의 제곱에도 비례하므로 제작 가능한 사양의 RF 출력 전압에 대해 r_0를 조정하여 높은 질량 범위를 갖는 이온들도 측정이 가능하도록 하였다. 또 식 (5)는 주파수를 높이고 길이를 길게 할수록 높은 분해능을 갖고 인접한 질량에 대해 잘 분리해 낼 수 있다는 것을 말해준다. 공간적인 제약으로 인해 길이를 줄여야 한다면 주파수를 증가시킴으로써 분해능을 높게 조정할 수 있다. 이 경우, 출력 RF 전압이 커져야 하기 때문에 이것을 줄이기 위해서는 사중극자의 구경(aperture)을 줄임으로서 출력 RF전압을 제작사양 범위안으로 조정할 수 있다. Table 1은 r_0, f, Δm 및 L를 표에 나타난 바와 같이 고정했을 때, 입사되는 에너지의 허용 범위와 DC 및 RF 전압의 크기를 보여준다.

사중극자의 구경을 줄이기 위해서는 이온빔이 사중극자 입력부의 중앙으로 작은 반경과 퍼짐각으로 들어오도록 제어해야 한다. Fig. 7은 이온 빔의 반지름 크기를 0.5 mm, 1.0 mm, 1.5 mm, 2.0 mm로 변경하였을 때 각각 통과한 확률을 모사한 결과이다. 질량분석기의 입구

Table 1. Design parameters

Rod 길이(cm)	8	8	8	8	8
Rod inscribed radius(cm)	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
질량 분해능(ΔM)(amu)	1	1	1	1	1
RF 주파수(MHz)	1	1	1	1	1
Mass(amu)	100	150	200	250	300
DC peak 전압(V)	19.39	29.09	38.78	48.48	58.18
RF peak 전압(V)	115.50	173.26	231.01	288.76	346.51
입사되는 에너지 허용 범위(eV)	1.60	1.60	1.60	1.60	1.60

RF, radio frequency; DC, direct current.

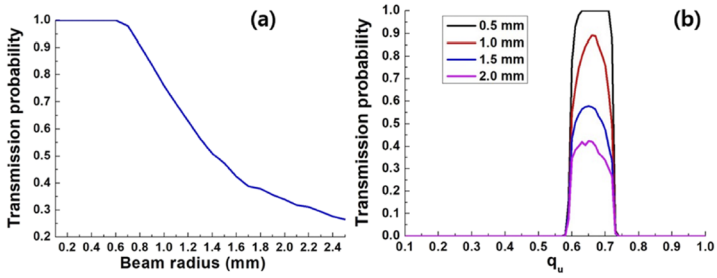


Fig. 7. Transmission probability according to the changes of ion beam radius [10].

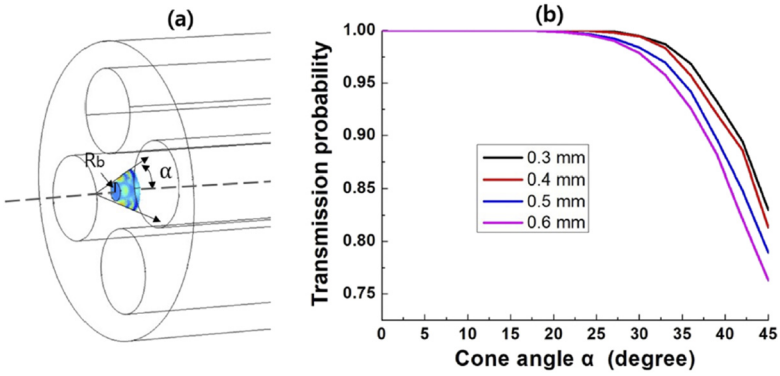


Fig. 8. Transmission probability according to the changes in the ion beam cone angle [10].

전단 렌즈부에서 질량분석기의 입구 중앙 지점에 이온들이 들어온다고 가정했을 때 이온 빔의 반지름이 커질수록 이온들의 통과 확률이 감소하는데, 그림에서 반지름이 0.8 mm 이내이면 사중극자의 설계사양이 만족되지만 이 경계를 넘어가면 질량분석기에 충돌하여 손실이 발생한다는 것을 알 수 있다. 즉, 질량분석기의 입구 전단 렌즈부에서 이온 빔의 반지름을 0.8 mm 이내로 줄일 수 있도록 잘 제어한다면 사중극자의 설계 사양에 대해 이온 빔이 손실 없이 통과가 가능하게 된다.

이온 렌즈의 설계를 위해 입사각의 퍼짐에 따른 이온 빔의 통과 확률을 모사하여 Fig. 8에 나타내었다. Fig. 8은 이온 빔의 반지름은 0.3 mm에서 0.6 mm, 빔의 원뿔각(cone angle)을

0°에서 45°까지 변화시켜가며 수치 모사를 하였다. 이 수치 모사의 결과로 빔의 반지름이 커질수록 빔의 cone angle이 25°을 넘어가면 손실이 점점 크게 발생한다는 것을 알 수 있으며, 특히 반지름 6 mm, 45°에서는 23% 이상 손실율이 발생하게 된다. 따라서 질량분석기 입구의 전단 렌즈부는 입사 빔의 cone angle이 20° 미만으로 제어되도록 해야 한다.

Fig. 9는 이와 같은 수치 모사의 결과를 반영한 설계를 바탕으로 제작된 사중극자를 보여주며, Fig. 10은 제작된 사중극자 구동을 위한 RF-DC 전원 공급(power supply) 보드이다. 사중극자에 정밀한 RF-DC를 인가하기 위해서 주 제어(main control) board를 통해 PID(proportional-integral-differential) 제어를 수행한다. 이러한 PID 제어는 수 ms 내로 완료되며, 그 후 10–30 ms 동안 이온 전류 값을 읽는다. 목적에 따라 검출기는 펄스-계량 모드 또는 아날로그 모드로 작동이 가능한데, 펄스-계량모드는 0에서 10^6 counts/s까지 선형성이 잘 유지되는 것으로 나타났으며, 아날로그 모드는 10^4–10^9 counts/s에 대해 적용이 가능하다.

Fig. 9. Prototype quadrupole mass analyzer.

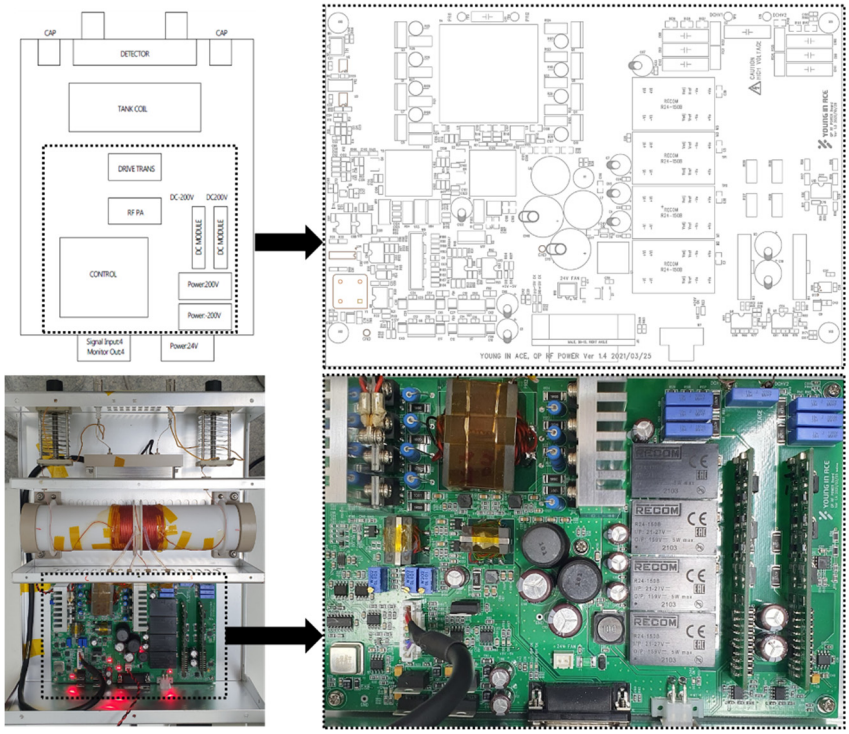


Fig. 10. Quadrupole RF-DC power supply board. RF-DC, radio frequency-direct current.

RF-DC power supply는 출력 전압을 모니터할 수 있는 기능도 포함되어 있는데, Fig. 11의 좌측에 나타낸 바와 같이 피크 전압 40 V에서 400 V에 이르는 범위에 대해 detector에서의 모니터 측정 전압이 RF 인가 전압에 선형적으로 비례해서 출력되고 있다는 것을 볼 수 있고, 선형성의 정도를 나타내는 R^2의 값은 약 1로 나타났다. 마찬가지로 그림의 우측에서는 전원 공급의 입력 전압인 제어 전압에 선형적으로 비례하여 RF에서 전압이 출력되고 있는 것을 확인할 수 있으며, R^2는 0.9987로 1에 가깝다.

4. 사중극자 원형 모델의 성능시험 결과

Fig. 12는 0-400 amu의 범위에 해당하는 RF-DC의 출력 전압을 바탕으로 환산된 질량 분해능(Δm)을 나타낸 그림이다. 측정한 전압의 범위에서 대부분의 경우 Δm이 ±0.2 amu 이내가 됨을 확인하였고, 평균은 -0.0168, 표준편차는 0.0877로 설계 값을 충족하였다.

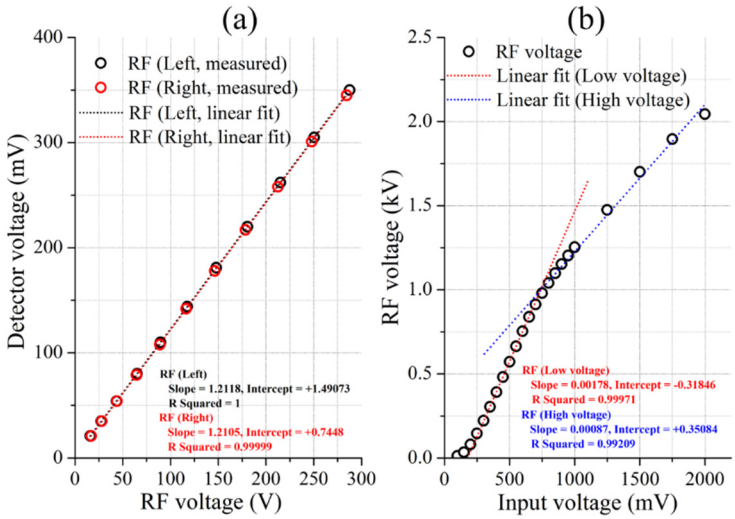


Fig. 11. Linearity analysis of detector monitor voltage, RF peak voltage, and control voltage. (a) Detector monitor voltage plotted against the RF peak voltage. (b) RF peak voltage plotted against the control voltage. RF, radio frequency.

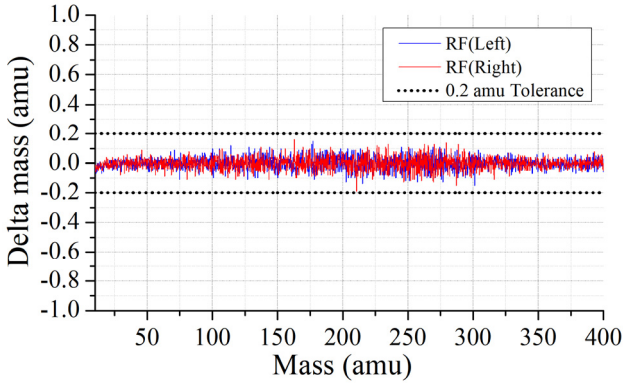


Fig. 12. Mass resolution translated from the RF-DC output voltage. RF-DC, radio frequency-direct current.

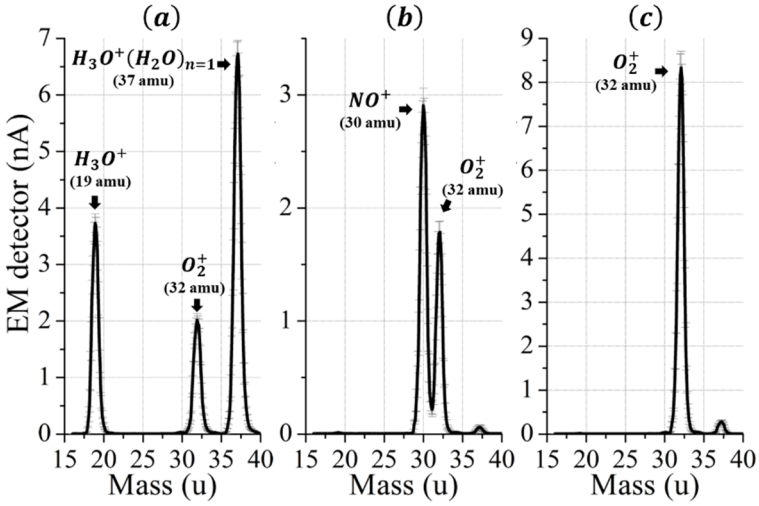


Fig. 13. Mass spectra in the range of 16 amu to 40 amu: (a) H_3O^+ and the ions (O_2^+ and $H_3O^+(H_2O)_{n=1}$) produced from the reaction with oxygen and moist, (b) NO^+ and O_2^+ produced from the reaction with oxygen, and (c) O_2^+.

Fig. 13은 실제 실험으로 16–40 amu 대역에서 얻은 질량 스펙트럼의 결과로, (a) 옥소늄 이온(H_3O^+)과 산소 및 수분과의 반응으로 형성된 product ion들인 O_2^+와 $H_3O^+(H_2O)_{n=1}$, (b) 일산화질소(NO^+) 및 산소와의 반응으로 형성된 product ion인 O_2^+ 및 (c) O_2^+를 보여준다. 그림에서 각 이온의 질량에 해당하는 스펙트럼의 피크가 잘 분리되어 뚜렷하게 관측됨을 알 수 있다.

5. 결론

본 논문에서는 국내에서 개발된 사중극자 질량분석기의 원리, 설계와 제작 및 성능시험 결과를 제시하였다. 질량분석기는 우주 탐사에 필수적인 과학 기기로서, 향후 우리나라의 우주 개발에 발 맞추어 달 및 행성 탐사에 탑재될 가능성이 높은 장비이다. 본 연구에서 개발된 사중극자 질량분석기는 0–400 amu의 범위에 해당하는 이온을 질량 분해능 ±0.2 amu 이내로 측정할 수 있으며, 실험을 통하여 16–40 amu 대역에서 얻은 질량 스펙트럼은 실제로 각 이온의 질량에 해당하는 피크를 잘 분리하여 보여주었다.

한편 본 연구에서는 이온화 장치로서 사중극자 질량분석기의 전단부에 플라즈마 발생장치를 도입하였는데, 우주에서 사용하기 위해서는 열 전자 방출 방식으로 텅스텐(W)이나 필라멘트에 열을 가해 열전자를 방출시킨 뒤 들어오는 중성 기체를 열전자와 충돌시키거나 전계전자방출 방식을 사용하여 전기장에 의해 전도체 표면에서 전자를 방출하여 주변 기체를 이온화하는 방법을 고려해야 한다. 더불어 우주 생명체 탐사를 위한 목적에 부합하여 1,000 Da 이상의 유기 분자 구조를 측정하기 위해서는 사중극자 방식보다 비질량종속 분해능(mass-independent resolving power) 특성을 지닌 디지털 구동 이온 트랩 장치를 이용한 질량분석기가 유용한 해결책이 될 수 있으며, 현재 본 연구팀에서 이를 위한 연구가 진행 중에 있다.

감사의 글

이 연구는 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 과학기술일자리진흥원의 지원을 받아 수행되었습니다(2020 연구장비개발 및 고도화 지원사업). 또한 이 연구는 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행되었습니다(NRF-2022R1A2C1092602).

References

1. Roy LL, Altwegg K, Balsiger H, Berthelier JJ, Bieler A, et al., Inventory of the volatiles on comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from Rosetta/ROSINA, Astron. Astrophys. 583, A1 (2015). https://doi.org/10.1051/0004-6361/201526450
2. Schroeder IRHG, Altwegg K, Balsiger H, Berthelier JJ, Keyser JD, et al., $^{16}O/^{18}O$ ratio in water in the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko measured with the Rosetta/ROSINA double-focusing mass spectrometer, Astron. Astrophys. 630, A29 (2019). https://doi.org/10.1051/0004-6361/201833806
3. Altwegg K, Balsiger H, Berthelier JJ, Bieler A, Calmonte U, et al., Organics in comet 67P: a first comparative analysis of mass spectra from ROSINA–DFMS, COSAC and Ptolemy, Mon. Not. R. Astron. Soc. 469, S130-S141 (2017). https://doi.org/10.1093/mnras/stx1415
4. Pla-Garcia J, Rafkin SCR, Karatekin Ö, Gloesener E, Comparing MSL Curiosity rover TLS-SAM methane measurements with Mars Regional Atmospheric Modeling System atmospheric transport experiments, J. Geophys. Res. Planets. 124, 2141-2167 (2019). https://doi.org/10.1029/2018JE005824
5. Bougher SW, Roeten KJ, Olsen K, Mahaffy PR, Benna M, et al., The structure and variability of Mars dayside thermosphere from MAVEN NGIMS and IUVS measurements: seasonal and solar activity trends in scale heights and temperatures, J. Geophys. Res. Space Phys. 122, 1296-1313 (2016). https://doi.org/10.1002/2016JA023454
6. Benna M, Mahaffy PR, Halekas JS, Elphic RC, Delory GT, Variability of helium, neon, and argon in the lunar exosphere as observed by the LADEE NMS instrument, Geophys. Res. Lett. 42, 3723-3729 (2015). https://doi.org/10.1002/2015GL064120
7. Arevalo R Jr, Ni Z, Danell RM, Mass spectrometry and planetary exploration: a brief review and future projection, J. Mass Spectrom. 55, e4454 (2020). https://doi.org/10.1002/jms.4454
8. De Hoffmann E, Stroobant V, Mass Spectrometry: Principles and Applications (John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 2007).
9. Dawson PH, Quadrupole Mass Spectrometry and its Applications (Elsevier, Amsterdam, Netherland, 2013).
10. Jang KH, Bae S, Woo J, Kang SW, Lee NS, et al., Ion transmission probability through quadrupole mass filter depending on initial ion condition and rod misalignment, AIP Adv. 12, 015121 (2022). https://doi.org/10.1063/5.0076456

Author Information

이 진 근 jgrhee@younginace.com

한국과학기술원에서 우리별 3호의 과학임무 탑재체와 과학기술위성 1호의 원자외선분광기 개발에 참여하였고 2007년 물리학 박사 학위를 취득하였다. 국내 최초로 유도결합 플라즈마 질량분석기 개발을 진행한 경험을 바탕으로 2018년부터 영인에이스를 설립하여 사중극자 기반의 질량분석기 개발을 주도하고 있다.

이 남 석 nslee@younginace.com

서강대학교 물리학과에서 물리학 박사 학위를 취득하였다. 1990년부터 삼성전자 책임연구원 그리고 삼성SDI에서 수석연구원으로 재직하였으며, 2018년부터 영인에이스 연구소장으로 근무하고 있다. 영인에이스 분석기술연구소에서 질량분석장치 개발의 총괄책임자 역할을 담당하고 있다.

강 성 원 swkang@younginace.com

한국과학기술원 물리학과에서 물리학 박사 학위를 취득하였다. 2018년부터 영인에이스 분석기술연구소에서 책임연구원으로 근무하고 있으며, 유도결합 질량분석기 개발 업무를 수행 중에 있다.

김 선 태 skim@younginace.com

서울대학교 물리천문학부에서 물리학 박사 학위를 취득하였다. 2018년부터 서울대학교 차세대융합기술연구원 및 응용물리연구소에서 박사후연구원 과정을 수행하였다. 2021년부터 영인에이스 분석기술연구소에서 선임연구원으로 근무하고 있으며, 질량분석기 개발 업무를 수행 중에 있다.

장 규 하 kyuha@kaeri.re.kr

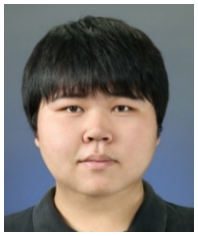
박사 학위(서울대학교 물리학과) 이후 2009년부터 한국원자력연구원에서 재직하고 있다. 양자 광학 연구부 선임연구원을 거쳐 현재는 초고속 방사선 연구실에서 책임연구원으로 연구 활동을 하고 있다. 석·박사 학위 때는 광결정, 진공 전자 소자, 반도체 가공 등의 분야에서 연구 경험을 하였으며, 연구소에서는 테라헤르츠 자유전자레이저, 전자선 조사장치, 고출력 레이저 가속 표적 개발 등에 참여하였다. 최근에는 초고속 전자 회절 장치 개발 및 응용 실험에 참여하고 있다.

이 유 euyiyu@cnu.ac.kr

미국 콜로라도 대학(University of Colorado at Boulder)에서 물리학 박사(1994)를 취득하였고, 그 후 LASP(Laboratory for Atmospheric and Space Physics)에서 Research Associate로 근무하다가 1997년부터는 충남대학교 천문우주과학과(대학원 우주지질학과)에서 교수로 재임 중이다. 다양한 자연현상에 관한 호기심으로 달과 화성에 인류의 미래 기지 조성과 자원 탐사를 위한 기초연구로 용암동굴, 화산 및 절벽 등 지질학적 연구를 하고 있으며, 위성 원격탐사 자료를 활용하여 지구 해양 및 대기 변화의 근원이 되는 열의 기원 등을 연구하고 있다.

Author Information

홍 익 선 ishong@cnu.ac.kr



충남대학교에서 2014년 천문우주과학 석사 학위를 취득하고, 현재 동 대학교에서 우주지질학 박사과정에 재학 중이다. 한국형 달탐사 위성의 탑재체인 고해상도 카메라의 촬영계획 결정 알고리즘 개발에 참여하였으며, 현재는 원격탐사 수치 및 영상자료를 활용하여 과거 화산 활동의 흔적을 가지고 있는 달의 지형과 미래 인류 기지로 사용할 수 있는 달 동굴에 대한 연구를 하고 있다. 또한 달 표면 아래의 물리적 특성을 이해하기 위해 중력장을 이용한 달 내부의 지구물리학적 접근도 시도하고 있다.

민 경 욱 kwmin@kaist.ac.kr

미국 프린스턴 대학에서 천체 물리학 박사 학위를 취득하였으며, 1986년부터 한국과학기술원 교수로 재직하다 2021년에 정년 퇴직하여 현재 동 대학의 명예교수로 강의와 연구를 계속하고 있다. 우리나라 최초의 과학 위성인 과학기술위성 1호의 탑재체 총괄책임자로서 원자외선 분광기(FIMS) 및 우주물리 패키지(SPP)의 개발을 주도하였다.

최 정 림 crchoi@chungbuk.ac.kr

부산대학교 물리학과에서 박사를 취득하였고, 현재 충북대학교 천문우주학과에서 우주플라스마연구를 하고 있다. 차세대 중형 위성 3호의 위성용 자력계 제작 및 magnetic cleanliness program에도 참여하고 있다.

정 종 일 iapetus85@gmail.com

충남대학교 천문우주과학과에서 2014년 석사 학위를 취득하고, 현재 충남대학교 우주지질학과 박사과정에 재학 중이다. 인류가 거주할 수 있는 화성 동굴 탐사에 관하여 연구하였으며, 현재는 우주선 중성자 모니터를 활용하여 태양의 특성 및 우주선및 고에너지 입자가 지구 대기에 미치는 영향에 관하여 관심을 가지고 있다. 최근에는 우주선 중성자 모니터의 GLE 이벤트와 연관된 태양 고에너지 입자 이벤트의 원소 조성 특징에 관한 연구를 진행하고 있다. 또한 대전 우주선 중성자 모니터와 남극 장보고 과학기지의 우주선 중성자 모니터를 운영 및 관리하고 있다.