

شبیه سازی فیلتر جرمی چهار قطبی در یک طیف سنج جرمی

حمید جعفری^{۱*}، مجید خرسندی^۱، حمیدرضا انصاری^۱

۱. دانشکده مهندسی هسته ای، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۰/۲۰

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۰/۳۰

چکیده

فیلترهای چهارقطبی، یک جز کلیدی از طیف سنج های جرمی هستند که یون ها را توسط نسبت به جرم به بارشان فیلتر می کنند به صورتی که تنها به یون های با نسبت جرم به بار خاص و برای هر نسبت معین ولتاژ، اجازه عبور می دهند. با استفاده از شبیه سازی چند فیزیکی می توانیم نگاه دقیق تری به این فیلترها داشته باشیم و تاثیر پارامترهای مختلف بر روی کارایی و عملکرد آن را مورد بررسی قرار دهیم. در این کار یک ارزیابی پارامتری بر روی یک ساختار چهار قطبی با استفاده از نرم افزار چند فیزیکی کامسول انجام شده است. از جمله این پارامترها، اثر تغییر شیب خط کاری، جابجایی یا تغییر ابعاد چشمه یونی و یا تاثیر نوسانات ولتاژ بر انتقال یون های مختلف می باشند. همچنین، رابطه بین جرم و ولتاژ های مستقیم و متناوب برای فیلتر جرمی چهارقطبی شبیه سازی شده، مشخص گردیده است.

واژه های کلیدی: فیلتر جرمی چهارقطبی، کامسول، احتمال انتقال یون، ولتاژ مستقیم و متناوب

۱- مقدمه:

یک نوع طیف سنج جرمی، طیف سنج جرمی چهار قطبی است. فیلترهای جرمی چهارقطبی (QMF)، یک جز کلیدی از این طیف سنج ها هستند که یون ها را توسط نسبت جرم به بارشان فیلتر می کنند به صورتی که تنها به یون های با نسبت جرم به بار خاص و برای هر نسبت معین ولتاژ، اجازه عبور می دهند. فیلتر جرمی چهار قطبی در طی سالهای متمادی مورد مطالعه قرار گرفته است و فیزیک و طراحی بهینه آن به خوبی درک شده است. به این ترتیب، یک احتمال انتقال بالایی برای یک یون مشخص در عبور از فیلتر مد نظر می باشد (Gibson et al., 2000. Denison, 1971).

یک فیلتر جرمی چهار قطبی معمولاً از چهار میله استوانه ای فلزی موازی با فاصله مساوی از هم تشکیل شده است. این فیلتر از میدان های الکتریکی جریان

طیف سنج جرمی فرایندی است که یون ها را بر اساس نسبت جرم به بارشان شان تجزیه و تحلیل می کند. طیف سنج های جرمی متداول با یونیزه کردن مولکول ها یا اتم های منفرد کار می کنند سپس این یون ها را با یک میدان الکتریکی خارجی حرکت داده و فیلتر می کنند (Down, Mallet., 2009). حساسیت ذاتی طیف سنج جرمی باعث بکارگیری آن در بسیاری از کاربردها از جمله شناسایی ترکیبات بیولوژیکی ناشناخته، تعیین ترکیبات شیمیایی مخلوط، تشخیص سموم در منابع غذایی و اکتشافات فضایی شده است. امروزه، این دستگاه ها در حال پیشرفت هستند، دستگاه های جدید طیف سنجی جرمی قادر به تجزیه و تحلیل حداکثر تا ۳۰ مؤلفه بصورت همزمان در هر دوفاز گاز و مایع می باشند (Thomson., 1921. Shi et al., 1998).

ماکزیمم ولتاژ بکاررفته بر روی الکترودها، فرکانس پتانسیل متناوب، چشمه یونی و حتی عیوب مکانیکی که از عوامل موثر در کارایی و عملکرد آنها هستند را بررسی کنیم.

در این کار یک ارزیابی پارامتری بر روی یک ساختار چهار قطبی موجود در طیف سنج های جرمی با استفاده از نرم افزار تحلیل فیزیکی COMSOL انجام شده است. اثراتی از قبیل تغییر شیب خط کاری، موقعیت و شعاع چشمه یونی، نوسانات ولتاژ بر احتمال انتقال عبور یون ها از فیلتر جرمی چهارقطبی شبیه سازی شده مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- اصول کاری فیلتر جرمی چهارقطبی

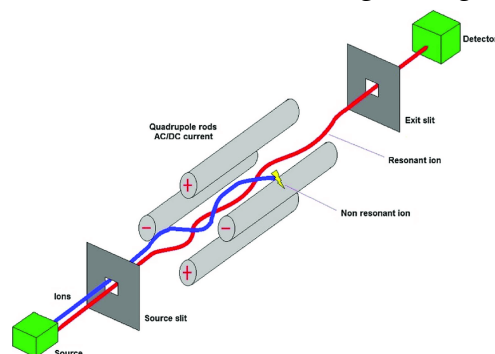
همانطور که گفته شد، فیلتر جرمی چهارقطبی با ترکیبی از ولتاژ مستقیم DC و ولتاژ متناوب AC به عنوان فیلتر جرمی کار می کند. چهارقطبی شامل چهار سطح موازی هم است که در حالت ایده آل به شکل هذلولی هستند. به دلیل مشکلاتی که در ساخت دقیق الکترودهای هذلولی شکل و همچنین تراز کردن این الکترودها وجود دارد در عمل در بسیاری از فیلترهای جرمی از الکترودهای استوانه ای با سطح مقطع دایروی استفاده می کنند. این مسئله سبب ایجاد اغتشاشات کمی در میدان خالص چهارقطبی می شود؛ اما نشان داده شده است که این اغتشاشات در نزدیکی محور چهارقطبی کم اهمیت است (Denison, 1971) و می توان با انتخاب مناسب شعاع الکترودها (r) آن را کاهش داد.

پتانسیل الکتریکی بر روی جفت الکترودهای روبه روی هم برای تولید میدان چهارقطبی به کار می رود که در دستگاه مختصات کارتزین بطور کلی در هر نقطه در آن بصورت رابطه ۱ است (Du et al., 1997).

$$\Phi_{x,y,z} = \frac{\Phi_0}{r_0^2} (\lambda x^2 + \sigma y^2 + \gamma z^2) \quad (1)$$

که Φ_0 پتانسیل به کار رفته بر روی الکترودها و r_0 شعاع میدان (فاصله بین مرکز چهارقطبی و الکترودها) و λ ، σ ، γ ، ثابت های وزنی به ترتیب برای راستاهای x, y, z هستند. مقدار پتانسیل Φ_0 از رابطه ۲

مستقیم DC و جریان متناوب AC برای آنالیز یون های مثبت و منفی توسط نسبت جرم به بار استفاده می کند. جفت میله های مخالف از نظر الکتریکی به هم متصل هستند. میله های مجاور دارای پتانسیل DC مخالف هستند و پتانسیل های AC آنها خارج از فاز است. قطر میله معمولی بین ۵ تا ۱۲ میلی متر با طول میله بین ۱۰۰ تا ۲۰۰ میلی متر است. فرکانس مولفه AC میدان الکتریکی به طور معمول در محدوده ۱ تا ۱۰ مگاهرتز است (Du et al., 1997, Du et al., 1999, Gibson, Taylor, 2001, March, Hughes, 1989). یون ها با استفاده از تکنیک های مختلفی بسته به کاربرد، ایجاد می شوند. آنها در امتداد محور QMF تزیق می شوند. انرژی معمول یون ها در روزنه ورودی ۳ تا ۵ ولت الکترون است. یونها به دلیل وجود میدانهای AC و DC در نزدیکی محور چهار قطبی، نیروهایی را تجربه می کنند. برای برخی از مقادیر میدان AC و DC تنها یک یونی از یک نسبت جرم به بار مشخص منتقل می شود. یونها با اندازه گیری جریان یون در خروجی چهار قطبی شناسایی و آشکارسازی می شوند. شماتیکی از یک ساختار طیف سنج جرمی چهارقطبی در شکل یک نشان داده شده است.



شکل ۱: شماتیکی از ساختار طیف سنج جرمی چهارقطبی

برای اینکه طیف سنج جرمی چهار قطبی بتواند بطور موفقیت آمیزی تجزیه و تحلیل یک مخلوط را انجام دهد، فیلتر جرمی آن نیاز به حفظ احتمال انتقال بالا برای یک یون خاص را دارد. این بدان معنی است که فیلتر باید اطمینان حاصل کند که یونهایی با نسبت جرم به بار خاص از طریق دستگاه عبور پیدا می کنند. با استفاده از شبیه سازی چند فیزیکی می توانیم نگاه دقیق تری به فیلترهای جرمی چهار قطبی داشته باشیم و تاثیر پارامترهای مختلف مانند طول و قطر الکترودها،

برابر است با :

$$\phi_0 = U - V \cos(\omega t) \quad (2)$$

که U ولتاژ مستقیم و V دامنه ولتاژ متناوب بکار رفته بر روی الکترودها، ω فرکانس نوسان و t زمان بر حسب ثانیه است. از آنجایی که در معادله پتانسیل هیچ ترم حاصلضربی از راستاها مثل xy و zx و yz وجود ندارد. این مسئله بیانگر این است که حرکت یون در راستای x و y و z مستقل از هم است و می توان آنها را بطور جداگانه ای مورد بررسی قرار داد.

حرکت یک یون به جرم m توسط قانون حرکت نیوتن $F=ma$ تعیین می شود که a شتاب حرکت یون است. با توجه به رابطه بین نیرو و میدان الکتریکی ($F=qE$) و رابطه میدان الکتریکی با پتانسیل ($\vec{E} = -\nabla\Phi(x,y,z)$) و همچنین هیچ شتابی در راستای طول میله ها وجود ندارد در نتیجه معادلات حرکت در راستاهای x و y در فرم عمومی آن بصورت رابطه (۳) می باشد که به معادله Mathieu معروف هستند (u می تواند x و y باشد).

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + (a_u - q_u \cos(2\xi))u = 0 \quad (3)$$

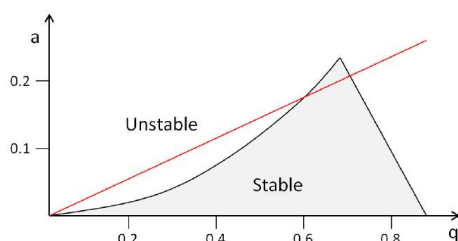
پارامترهای a و q به ترتیب برای ولتاژهای DC و AC مقیاس بندی می شوند و در روابط ۴ و ۵ آورده شده اند که Z عدد اتمی و e بار پایه ($1.6 \times 10^{-19} C$) و U_{dc} ولتاژ مستقیم اعمال شده و m جرم ذره و r_0 شعاع محاط و ω فرکانس زاویه ای می باشند.

$$a = \frac{8eZU_{dc}}{mr_0^2\omega^2} \quad (4)$$

$$q = \frac{4eZV_{ac}}{mr_0^2\omega^2} \quad (5)$$

با حل معادله Mathieu می توان یک نمودار پایداری ساخت که نشان می دهد ذرات تحت حرکت نوسان پایدار یا ناپایدار در پایین QMF قرار دارند یا نه. نمودار پایداری در شکل ۲ ترسیم شده است. تا زمانی که مقادیر a و q (و بنابراین U_{dc} و V_{ac}) در ناحیه خاکستری باقی بمانند، ذرات با میله ها برخورد نمی کنند. اصل عملکرد یک فیلتر جرمی چهارقطبی،

جاروب بازه از مقادیر برای q در حالی که نسبت a/q ثابت نگه داشته شود است. مقادیر a و q هر دو به طور همزمان افزایش می یابد به طوری که آنها از خط قرمز (که به آن خط کاری می گویند) پیروی می کنند. مسیرهای یون در ابتدا ناپایدار هستند، که منجر به احتمال انتقال صفر می شود. هنگامی که مقدار q به حدود ۰.۶ رسید، یونها وارد منطقه عملیاتی پایدار شده و برخی ذرات به آشکارساز منتقل می شوند. با افزایش مقدار q ، یون ها دوباره به ناحیه ناپایدار باز می گردند و احتمال انتقال به صفر کاهش می یابد



شکل ۲: نمودار پایداری برای یک فیلتر جرمی چهارقطبی

۳- مواد و روش ها

نرم افزار کامسول چند فیزیکی (COMSOL Multiphysics) یک مجموعه کامل شبیه سازی است که می تواند معادلات دیفرانسیل سیستم های غیر خطی را توسط مشتق های جزئی به روش اجزاء محدود در فضاهای یک، دو و سه بعدی حل نماید. این نرم افزار می تواند در حضور چالش هایی نظیر میدان های الکترومغناطیسی، کشش، دینامیک سیالات و دینامیک گاز به خوبی راهگشا باشد. COMSOL همچنین فرصتی برای حل مشکل به عنوان یک فرمول ریاضی (در فرم معادلات) و فیزیکی (انتخاب مدل فیزیکی، به عنوان مثال مدل فرایند انتشار) را به کاربر می دهد. بدیهی است، در هر مورد سیستم معادلات حل خواهد شد، تفاوت فقط در امکان استفاده از سیستم های فیزیکی و جسمی و واحدها نهفته است. به اصطلاح حالت فیزیکی، می توان از معادلات پیش تعریف شده برای اکثر پدیده های انجام گرفته در علوم و فناوری استفاده کرد، مانند انواع روش های انتقال حرارت و برق، تئوری الاستیسیته، نفوذ مولکولی و انتقال جرم و انتشار، انتشار موج و جریان سیال (COMSOL)

ساخت میدان الکتریکی کل که ذرات هنگام ورود به حوزه مدل سازی تجربه می کنند، استفاده می کنیم. لازم به ذکر است، بدلیل اینکه معادلات حل شده برای قسمت های AC و DC، خطی هستند، این یک فرض معتبر است. یک میدان الکتریکی ثابت و یکی دیگر متغیر با گذشت زمان، هر دو در میدان الکتریکی کل نقش دارند. کل زمان شبیه سازی ۳۵ میکرو ثانیه است، که برای فرکانس RF ۴ مگاهرتز، برابر با ۱۴۰ چرخه RF در فیلتر جرمی، چهار قطبی، است.

ذرات از روزنه یونی با یک سرعت حرارتی معادل با ۲ الکترون ولت گسیل می شوند. سرعت تنها دارای یک مولفه x می باشد که طبق رابطه (۶) محاسبه می شود.

$$v_x = \sqrt{\frac{2eA}{m}} \quad (6)$$

که A برابر با 2 eV است. ذرات هم در زمان شروع شبیه سازی و هم در زمان هایی با فاصله یکنواخت در اولین چرخه RF میدان AC گسیل می شوند. در طول شبیه سازی، ذرات بازده بار مختلف بین ۰ تا ۰.۲۵ میکروثانه آزاد می شوند. از آنجا که فرکانس میدان AC برای ۴ مگاهرتز تنظیم شده است، این مرحله به یک چرخه کامل RF تمام می شود. پارامترهای ورودی اولیه برای این مدل در جدول ۱ آورده شده اند.

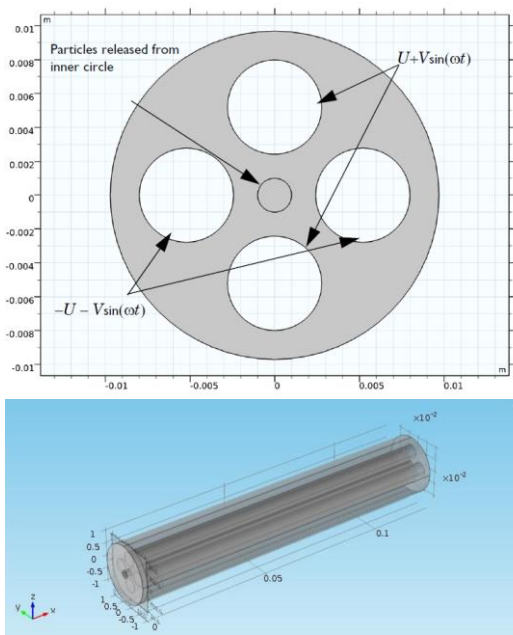
جدول ۱: پارامترهای ورودی برای مدل اول یک فیلتر جرمی چهارقطبی، شیشه سازی شده

نام پارامتر	مقدار	تعریف
R_e	2.78 mm	شعاع الکتروود
R_o	2.42 mm	شعاع محاط شده
R_{src}	1 mm	شعاع چشمه
R_{case}	9.69 mm	شعاع پوشش
η	0.331	شیب برای نسبت a/q
f	4 MHz	فرکانس
ω	2.51 Hz	فرکانس زاویه ای
M_i	40 amu	جرم یون
V_{ac}	269.2 V	ولتاژ AC
U_{dc}	38.45 V	ولتاژ DC

در این کار تاثیر تغییر شیب خط کاری بر احتمال انتقال یون ها در چند رده یون های سبک (هیدروژن)، متوسط (آرگون) و سنگین (اورانیوم) و بررسی اثر

Modeling Software, 2015)

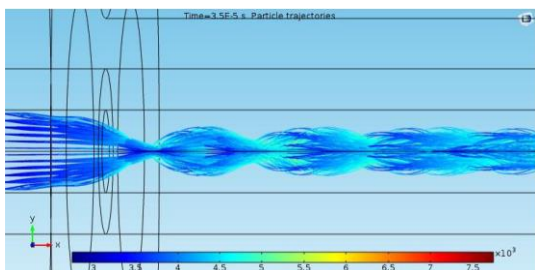
در اینجا شبیه سازی فیلتر جرمی چهارقطبی مورد استفاده در طیف سنجی جرمی توسط نرم افزار COMSOL در دو مرحله انجام شده است. ابتدا محاسبه میدان های DC و AC و سپس محاسبه مسیرهای یون و حرکت آن بررسی شده است. هندسه مدل فیلتر جرمی چهار قطبی شبیه سازی شده و سطح مقطع آن در شکل ۲ نشان داده شده است. یونها به گونه ای تزریق می شوند که سرعت اولیه آنها فقط در جهت خارج از صفحه هدایت می شود. تا زمانی که یونها در فیلتر باقی بمانند، به دلیل وجود میدانهای DC و AC نیروهایی را در جهت x و y تجربه می کنند. شعاع میله ۲.۷۸ میلی متر و شعاع دایره محاط شده حدود ۲.۴۲ میلی متر است. طول میله ها ۱۲۷ میلیمتر در نظر گرفته شده است. شعاع چشمه نیز ۰.۷۵ میلیمتر است.



شکل ۲: هندسه مدل فیلتر جرمی چهار قطبی شبیه سازی شده (واحد بر حسب متر است)

به میله های بالا و پایین یک پتانسیل مثبت به بزرگی U_{dc} و به میله های چپ و راست یک پتانسیل منفی به بزرگی V_{ac} اعمال می شود. یک بایاس DC کوچک نیز روی روزنه یونی برای کمک به شتاب دهی یون به درون فیلتر جرمی اعمال می شود که مقدار آن برابر با ۳ ولت در نظر گرفته شده است.

همچنین از ترکیب میدانهای AC و DC برای

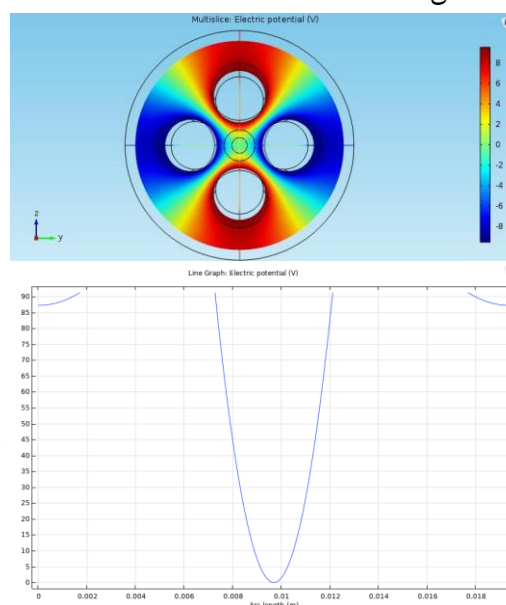


شکل ۴: مسیر ذرات درون چهار قطبی. رنگ نشان دهنده ی سرعت ذرات (m/s) است

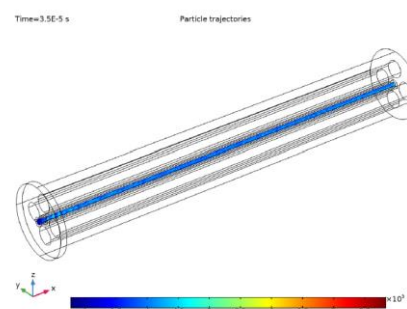
موقعیت و شعاع چشمه یونی بررسی شده است. همچنین تاثیر نوسانات ولتاژ در احتمال انتقال یون ها در این طراحی فیلتر جرمی چهارقطبی مورد ارزیابی قرار گرفته است. در انتها نیز احتمال انتقال عبور های یون های مختلف به ازای مقادیر ولتاژ مشخص توسط رابطه خطی آن تعیین شده است.

۴- نتایج

در شکل ۳ پتانسیل الکتریکی تولید شده بر روی چهارقطبی نشان داده شده است. همچنین نمایی از مسیر یون ها در درون چهار قطبی شبیه سازی شده در شکل ۴ نشان داده شده است.



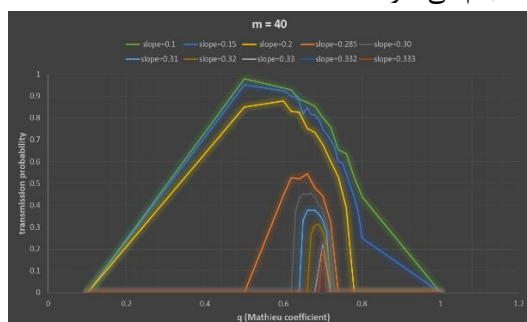
شکل ۳: پتانسیل الکتریکی تولید شده بر روی چهار قطبی و پروفایل عمودی آن



۴-۱ بررسی تغییر شیب خط کاری بر احتمال

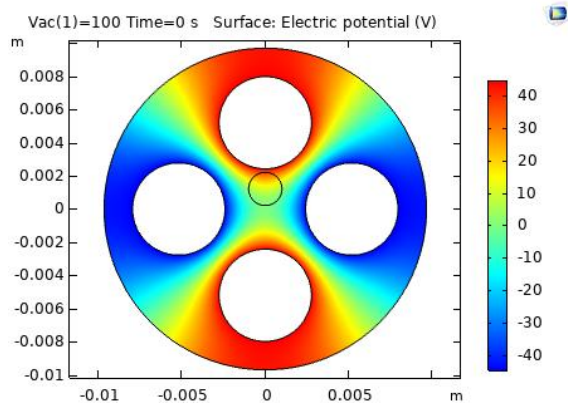
انتقال یون ها

برای مطالعه احتمال انتقال بر حسب تغییر شیب خط کاری، از تغییرات q استفاده شده است و در هر بار اجرای برنامه تنها یک جرم مورد بررسی قرار می گیرد. نمودارهای شکل ۵ نشان دهنده احتمال انتقال یون آرگون بر حسب تغییرات q در شیب های مختلف خط کاری (a/q) است. همانطور که ملاحظه می شود در شیب های پایین ($a/q=0.1$) در تمامی q ها عبور وجود دارد و در ماکزیمم آن ($q=0.5$) احتمال انتقال تقریباً 100% است (شکل ۴). با افزایش شیب خط کاری، احتمال انتقال آرگون کاهش یافته که در حالتی که تقریباً در پیک نمودار پایداری قرار میگیرد ($a/q=0.332$)، عبور تنها برای $q=0.7$ با احتمال حدود 20% انجام می شود.

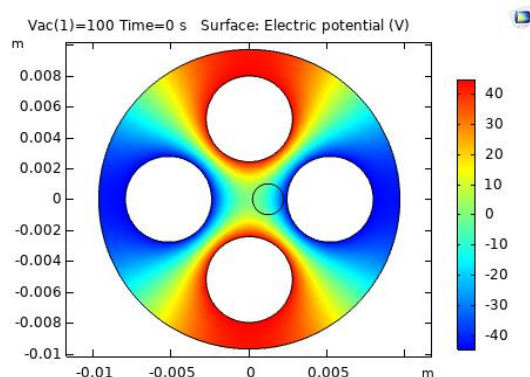


شکل ۵: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر جرمی برای مقادیر مختلف شیب خط کاری برای یون آرگون

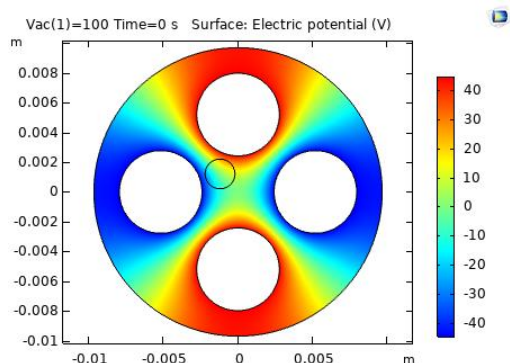
نمودارهای احتمال انتقال یون های هیدروژن ($m=1$) و اورانیوم ($m=235$) نیز بر حسب تغییرات q در شیب های مختلف خط کاری (a/q) به ترتیب در شکل های ۶ و ۷ نشان داده شده است. که روندی مشابه با آرگون را بیان می کنند. به گونه ای که در حالتی که تقریباً در پیک نمودار پایداری قرار میگیرد



حالت شماره ۲



حالت شماره ۳

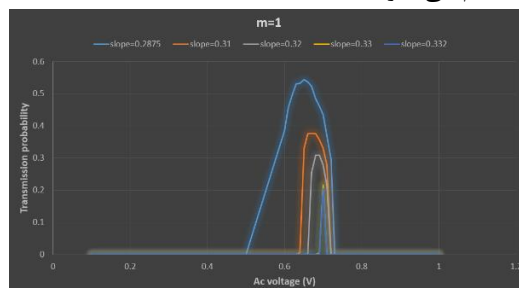


حالت شماره ۴

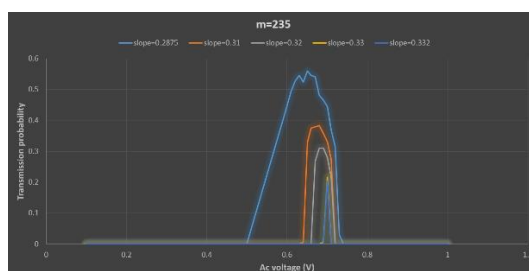
شکل ۸: تغییر موقعیت چشمه یونی در فیلتر جرمی چهارقطبی

نمودار احتمال انتقال یون آرگون در این حالت ها در شکل ۹ نشان داده شده است. همانطور که ملاحظه میشود در حالت هایی که چشمه نسبت به محور

($a/q=0.332$)، عبور تنها برای $q=0.7$ با احتمال حدود 20% انجام می شود.



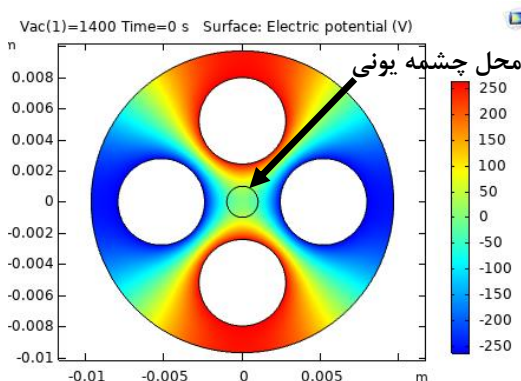
شکل ۶: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر جرمی برای مقادیر مختلف شیب خط کاری (a/q) برای یون هیدروژن



شکل ۷: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر جرمی برای مقادیر مختلف شیب خط کاری (a/q) برای یون اورانیوم

۲-۴ بررسی اثر موقعیت و شعاع چشمه یونی بر احتمال انتقال یون آرگون

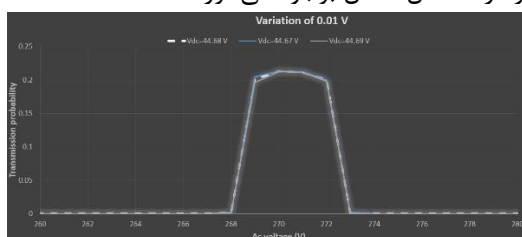
به منظور بررسی اثر موقعیت چشمه در احتمال انتقال ، چهار حالت مختلف در نظر گرفته شد که در شکل ۸ نشان داده شده اند. تمامی این حالت ها برای یون آرگون و برای خط کاری در نوک نمودار پایداری ($a/q=0.332$) و مقدار ولتاژ DC برابر با 44.68 ولت (یعنی در بیشترین احتمال انتقال) می باشند. شعاع چشمه یونی ۱ میلیمتر است.



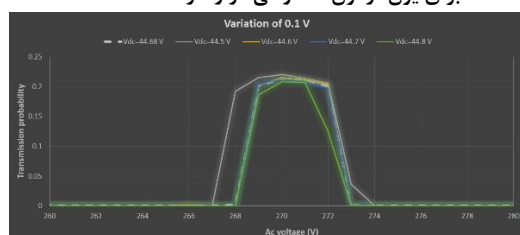
حالت شماره ۱

انتقال یون ها مورد مطالعه قرار گرفته است. تمامی این حالت ها برای خط کاری در نوک نمودار پایداری ($a/q=0.332$) و برای سه دسته از یون های سبک (با نمایندگی هیدروژن) و یون های متوسط (با نمایندگی آرگون) یون های سنگین (با نمایندگی اورانیوم) می باشند.

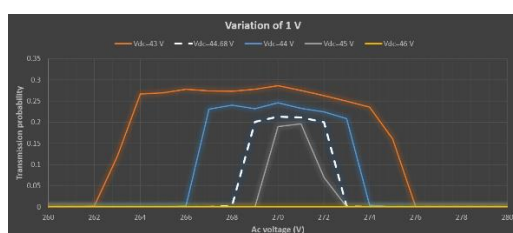
نمودارهای نشان داده شده در شکل های ۱۱ و ۱۲ و ۱۳ احتمال انتقال آرگون بر حسب ولتاژ AC را برای نوسانات ولتاژ 0.01 و 0.1 و 1 ولت می باشد. در این نمودارها مقدار ولتاژ DC اصلی برابر با 44.68 ولت (یعنی در بیشترین احتمال انتقال) با نمودار خط چین سفید رنگ نشان داده شده است. همانگونه که ملاحظه می شود در نوسانات 0.01 ولت هیچ گونه تغییری در بازه ولتاژ های AC و همچنین احتمال انتقال مشاهده نشده است. اما در نوسانات 0.1 ولت می تواند تا حدود ۳۰٪ تغییر در بازه ولتاژ AC بوجود آورد و تغییر محسوسی در احتمال انتقال ندارد. در نوسانات 1 ولت نیز تا حدود ۶۰٪ تغییر در بازه ولتاژ AC و حدود ۱۳٪ تغییر در احتمال انتقال بوجود می آورد.



شکل ۱۱: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات ولتی در ولتاژ DC برای یون آرگون 0.01



شکل ۱۲: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات ولتی در ولتاژ DC برای یون آرگون



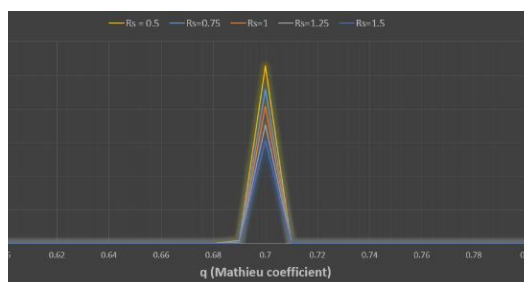
شکل ۱۳: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات ولتی در ولتاژ DC برای یون آرگون

مرکزی چهارقطبی جابجا شده است، احتمال انتقال نیز کاهش پیدا کرده است به گونه ای که در حالت شماره دو، ۱۷.۵٪ و در حالت شماره سه، ۵۹.۲٪ و در حالت شماره چهار، ۶۷.۱٪ نسبت به موقعیت مرکزی (حالت شماره یک) کاهش پیدا کرده است.



شکل ۹: نمودارهای احتمال انتقال برای حالت های مختلف موقعیت چشمه برای یون آرگون

همچنین به منظور بررسی اثر اندازه های متفاوت چشمه یونی، مقادیر مختلفی از شعاع چشمه یونی از 0.5 mm تا 1.5 mm انتخاب گردید. احتمال انتقال آرگون برای حالتی که خط کاری تقریباً در نزدیکی نوک نمودار پایداری یعنی برای $a/q=0.332$ به ازای مقادیر مختلف q برای این مقادیر شعاع یونی محاسبه شد و در شکل ۱۰ نشان داده شده است. نتایج نشان می دهد با تغییر هر 0.25 mm در شعاع چشمه یونی، احتمال انتقال یون ها نیز ۱۳٪ تغییر می یابد که این تغییر به صورت کاهشی با افزایش شعاع چشمه یونی می باشد.

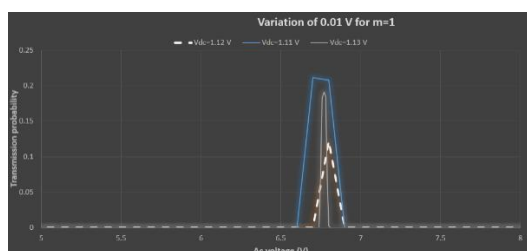


شکل ۱۰: نمودارهای احتمال انتقال برای شعاع های مختلف چشمه یون آرگون (بر حسب mm)

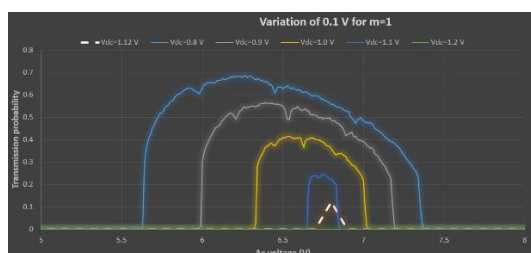
۴-۳ بررسی نوسانات ولتاژ بر احتمال انتقال یون ها

در بررسی دیگری تاثیر نوسانات ولتاژ بر احتمال

مقدار ولتاژ DC اصلی برابر با 1.12 ولت (یعنی در بیشترین احتمال انتقال) با نمودار خط چین سفید رنگ نشان داده شده است. همانگونه که ملاحظه می شود در اینجا به دلیل ولتاژ پایین کاری حتی در نوسانات 0.01 ولتی نیز تغییری در حدود 25% در بازه ولتاژ های AC و حدود 71% تغییر در احتمال انتقال می شود. در نوسانات 0.1 ولت نیز تا حدود 73% تغییر در بازه ولتاژ AC و حدود 68% تغییر در احتمال انتقال بوجود می آورد.



شکل ۱۷: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات 0.01 ولتی در ولتاژ DC برای یون هیدروژن

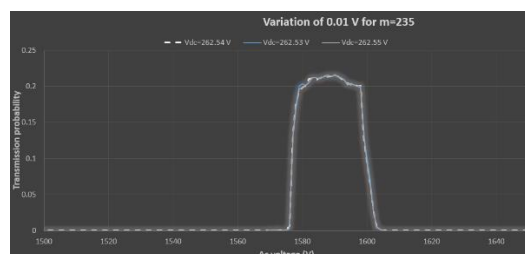


شکل ۱۸: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات ولتی در ولتاژ DC برای یون هیدروژن

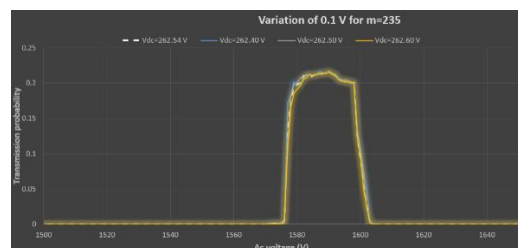
۴-۴ احتمال انتقال عبور های یون های مختلف به ازای مقادیر ولتاژ مشخص

در این بررسی با مشخص کردن ولتاژ های AC و DC با مقادیری معلوم، جستجویی در جرم های مختلف انجام می شود تا این که معلوم گردد آن ولتاژ های مربوط به کدام جرم مشخص می باشد. با توجه به نتایج بخش ۴-۱ بیشترین احتمال برای انتقال یون های هیدروژن و آرگون و اورانیوم به عنوان ۳ نماینده جرم های سبک، میانی و سنگین و ولتاژ های AC و DC مربوط به آنها تعیین شد که در جدول ۲ آورده شده است. نمودار های ولتاژ های DC و AC بر حسب جرم های مختلف به ترتیب در شکل های ۱۹ و ۲۰

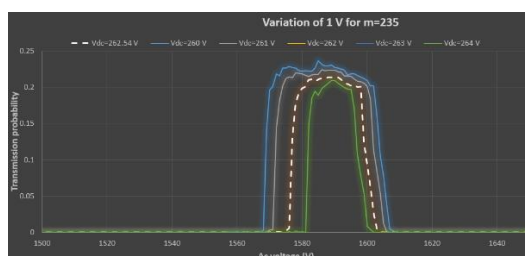
نمودارهای نشان داده شده در شکل های ۱۴ و ۱۵ و ۱۶ احتمال انتقال اورانیوم بر حسب ولتاژ AC را برای نوسانات ولتاژ 0.01 و 0.1 و 1 ولت می باشد. در این نمودارها مقدار ولتاژ DC اصلی برابر با 262.54 ولت (یعنی در بیشترین احتمال انتقال) با نمودار خط چین سفید رنگ نشان داده شده است. همانگونه که ملاحظه می شود در نوسانات 0.01 و 0.1 ولت تغییری محسوسی در بازه ولتاژ های AC و همچنین احتمال انتقال مشاهده نشده است. اما در نوسانات 1 ولت می تواند تا حدود 20% تغییر در بازه ولتاژ AC و حدود 2.6% تغییر در احتمال انتقال بوجود می آورد.



شکل ۱۴: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات 0.01 ولتی در ولتاژ DC برای یون اورانیوم

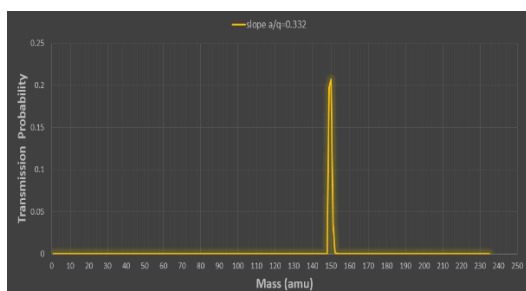


شکل ۱۵: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات ولتی در ولتاژ DC برای یون اورانیوم



شکل ۱۶: نمودارهای احتمال انتقال از فیلتر برای نوسانات ولتی در ولتاژ DC برای یون اورانیوم

نمودارهای نشان داده شده در شکل های ۱۷ و ۱۸ احتمال انتقال هیدروژن بر حسب ولتاژ AC را برای نوسانات ولتاژ 0.01 و 0.1 می باشد. در این نمودارها



شکل ۲۱: احتمال انتقال بر حسب جرم های مختلف برای ولتاژ DC و AC مشخص (167.58 و 1009.50 ولت)

۵- نتیجه گیری

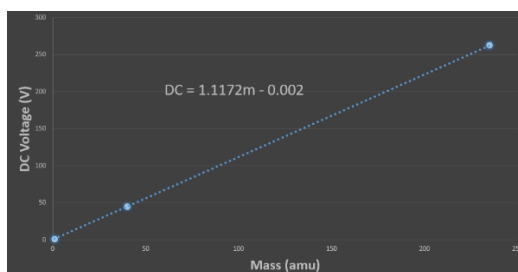
در این کار یک ارزیابی پارامتری بر روی یک ساختار چهار قطبی با استفاده از نرم افزار چند فیزیکی COMSOL انجام شده است. اثر تغییر شیب خط کاری در احتمال عبور یونها نشان داد که در شیب های پایین ($a/q=0.1$) بازه وسیعی از احتمال انتقال یون در تمامی شیب های وجود دارد و با افزایش شیب این بازه کاهش پیدا می کند تا اینکه در شیب 0.332 تنها امکان انتقال برای یک q ($q=0.7$) با احتمال حدود 20% وجود دارد. بررسی اثر تغییرات چشمه مانند جابجایی نسبت به محور مرکزی چهارقطبی یا شعاع چشمه نشان داد که جابجایی نسبت به موقعیت مرکزی باعث کاهش احتمال انتقال یون ها می گردد. همچنین تغییر هر 0.25 mm در شعاع چشمه یونی، احتمال انتقال یون ها را 13% تغییر می دهد که این تغییر به صورت کاهشی با افزایش شعاع چشمه یونی می باشد.

تاثیر نوسانات ولتاژ DC بر انتقال یون آرگون نشان داد که نوسانات 0.1 ولت می تواند تا حدود ۳۰٪ تغییر در بازه ولتاژ AC بوجود آورد و تغییر محسوسی در احتمال انتقال ندارد. در حالیکه در این نوسانات تغییر محسوسی در بازه ولتاژ های AC و همچنین احتمال انتقال یون های هیدروژن و اورانیوم مشاهده نمی شود. در نوسانات 1 ولت نیز تا حدود ۶۰٪ تغییر در بازه ولتاژ AC و حدود ۱۳٪ تغییر در احتمال انتقال یون آرگون بوجود می آورد. در حالیکه این تغییرات در حدود 20% تغییر در بازه ولتاژ AC و حدود 2.6% تغییر در احتمال انتقال یون اورانیوم و تا حدود 20% تغییر در بازه ولتاژ AC و حدود 2.6% تغییر در احتمال انتقال یون هیدروژن بوجود می آورد. همچنین در نوسانات 0.01 ولت تغییری محسوسی در بازه ولتاژ های AC و

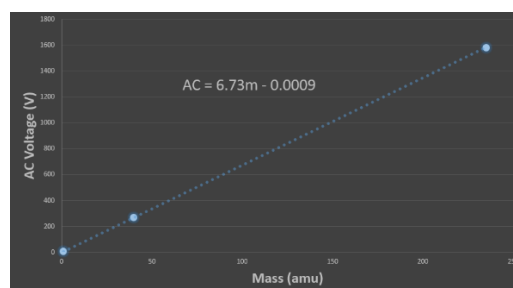
نشان داده شده اند. با در نظر گرفتن فیت خطی بین این داده ها، معادلات مربوط به رابطه بین جرم و هر کدام از این ولتاژ ها نیز در این شکل ها مشخص شده اند.

جدول ۲: ولتاژ های AC و DC مربوط به بیشترین احتمال انتقال های یون های هیدروژن، آرگون و اورانیوم

جرم	ولتاژ DC	ولتاژ AC	نسبت DC/AC
هیدروژن $m=1$	1.12	6.73	0.166
آرگون $m=40$	44.68	269.20	0.166
اورانیوم $m=235$	262.54	1581.56	0.166



شکل ۱۹: نمودار تغییرات ولتاژ DC بر حسب جرم های مختلف در فیلتر جرمی چهارقطبی



شکل ۲۰: نمودار تغییرات ولتاژ AC بر حسب جرم های مختلف در فیلتر جرمی چهارقطبی

به منظور اعتبارسنجی معادلات بدست آمده، مدل سازی را با در نظر گرفتن ولتاژ های بدست آمده از این معادلات برای جرم $m=150$ (به عنوان مثال) انجام می دهیم. طبق معادلات بدست آمده، ولتاژ AC برای این حالت برابر با 1009.50 ولت و ولتاژ DC برابر با 167.58 ولت است. نتیجه مدلسازی در شکل ۲۱ آورده شده است که نشان دهنده درست بودن این روابط و قرار گرفتن پیک مربوط به احتمال عبور دقیقاً برای یون $m=150$ می باشد.

quadrupole mass spectrometer systems. J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 18, no. 1, p. 237.

Gibson, JR., Taylor, S., 2001. Numerical investigation of the effects of electrode size on the behaviour of quadrupole mass filters. Rapid Commun Mass Spectrom 15:1960-1964.

March, R. E., Hughes, R. J., 1989. Quadrupole Storage Mass Spectrometry; John Wiley & Sons: New York.

Thomson, J. J., 1921. Rays of positive electricity and their application to chemical analyses. Longmans. Second edition., London.

Shi, SD., Hendrickso, CL., Marshall, AG., 1998. Counting individual sulfur atoms in a protein by ultrahigh-resolution fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry: Experimental resolution of isotopic fine structure in proteins. Proc Natl Acad Sci U.S.A., (95):11532-7.

همچنین احتمال انتقال هیچکدام از یون ها ملاحظه نشده است.

در این بررسی با مشخص کردن ولتاژ های AC و DC با مقادیری معلوم، جستجویی در جرم های مختلف انجام می شود تا این که معلوم گردد آن ولتاژ های مربوط به کدام جرم مشخص می باشد. با توجه به نتایج بخش ۴-۱ بیشترین احتمال برای انتقال یون های هیدروژن و آرگون و اورانیوم به عنوان ۳ نماینده جرم های سبک، میانی و سنگین و ولتاژ های AC و DC مربوط به آنها تعیین شد که در جدول ۲ آورده شده است. نمودار های ولتاژ های AC و DC بر حسب جرم های مختلف به ترتیب در شکل های ۱۹ و ۲۰ نشان داده شده اند. در نهایت نیز با بدست آوردن ولتاژ های AC و DC مربوط به بیشترین احتمال برای انتقال یون های هیدروژن و آرگون و اورانیوم (به عنوان ۳ نماینده جرم های سبک، میانی و سنگین) معادلات مربوط به رابطه بین جرم و هر کدام از این ولتاژ ها برای فیلتر جرمی چهارقطبی شبیه سازی شده، مشخص گردید.

مراجع

COMSOL Modeling Software 2015. *Comsol, Inc.* Retrieved 20.

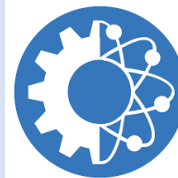
Denison, D.R., 1971. Operating Parameters of a Quadrupole in a Grounded Cylindrical Housing. Journal of Vacuum Science and Technology 8, 266.

Down, S., Mallet, A., 2009. Dictionary of Mass Spectrometry. Wiley.

Du, Z., Olney, T. N., Douglas, D. J. J., 1997. Inductively coupled plasma mass spectrometry with a quadrupole mass filter operated in the third stability region. Am. Soc. Mass Spectrom, 8, 1230-1236.

Du, Z., Douglas, D.j., Glebova, T., Konenkov, N.V., 1999. Elemental Analysis with Quadrupole Mass Filters Operated in Higher Stability Regions. J. Anal. Atom. Spectrom. 14, 1111-1119.

Gibson, J.R., Taylor, S., Leck, J.H., 2000. Detailed simulation of mass spectra for



Quadrupole simulation in a mass spectrometer

H. Jafari^{1*}, M. Khorsandi¹, H. Ansari¹

1-Nuclear Engineering Facility, Shahid Beheshti University, Tehran, IRAN

Received: 09 - 01 - 2021

Accepted: 19 - 01 - 2021

Abstract

Quadrupole mass filter device is a key component in mass spectrometers which analysis ion particles based on their mass to charge ratio; this mean by applying a specific potential on the instrument, crossing most of ions diverge and lost and just some are survived through crossing mass filter. Using multi-physics simulation, one may obtain deep knowledge on performance of the filter and investigate the effect of different variable parameters on operation of the instrument. In this paper by implementing COMSOL multi-physics software the impact of operating line slope stability, ion beam position displacement, and oscillation of potential field on ions filtering is investigated.

Keywords: Quadrupole mass filter, COMSOL, ion transfer probability, direct and alternating voltage

* Corresponding Author E-mail: h_jafari@sbu.ac.ir

