

【目的】 当研究室では星間分子の生成過程の解明において重要な、極性分子と分子イオン間の反応速度定数の測定を行っている。従来の実験方法では線形ポールトラップ中でレーザー冷却された Ca^+ クーロン結晶内の分子イオンと極性分子を衝突させ、 Ca^+ レーザー誘起蛍光画像の時間変化を観察し、反応速度定数を決定してきた。しかし、この方法ではクーロン結晶の内外で生成されるイオンの種類や数を判別することができないため、反応分岐比の特定が難しい。そこで当研究室では生成された分子イオンを外部に引き出し質量分析するためのイオントラップ飛行時間型質量分析計を開発してきた[1]。しかしイオンの引出し効率が悪く、分子イオンの観測には至っていない。本研究では、従来のイオントラップ飛行時間型質量分析計(TOF-MS)に新たに Einzel レンズを導入し、シミュレーションによって飛行時間信号の質量分解能の変化を観察することで最適な設定電圧を探索することを目的とした。

【シミュレーション】 本研究では荷電粒子軌道計算ソフトウェア (SIMION8.0) を用いて、イオントラップ内に生成された混合クーロン結晶の外部引き出しによる TOF-MS シミュレーションを行い、レンズ電圧と各電極電圧が質量分解能に及ぼす効果を詳細に調べた。図 1 に本研究で用いた線形ポールトラップと Einzel レンズの電極構造を示す。イオントラップ内でレーザー冷却によって生成される Ca^+ と分子イオンを含む混合クーロン結晶内の極低温イオンは、トラップポテンシャルとイオン-イオン間のクーロン相互作用によってその運動が制限されるため、規則的に配列した状態にある。そのため、イオン引出し時の初速を 0 と近似することができる。また、 Ca^+ より軽い分子イオンは円柱状に分布する。このことから本研究では①円柱状に一樣に分布するイオン配置、②分子動力学シミュレーションによって求めた実際の混合クーロン結晶のイオン配置、の 2 種類の初期条件を設定し、TOF-MS シミュレーションを行った。電極に印加する電圧を変えることによって得られる飛行時間スペクトルから質量分解能の変化を求め、最適な設定電圧を探索した。

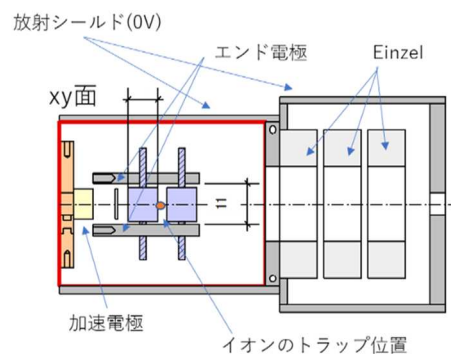


図1 電極構造

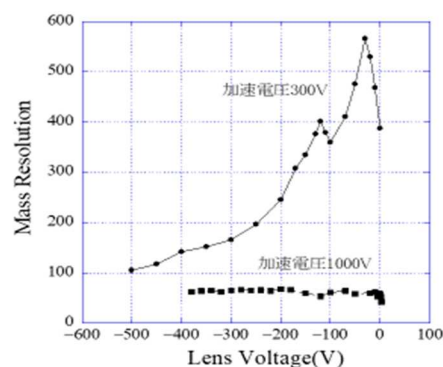


図2 質量分解能のレンズ電圧依存性

【結果と考察】 図 2 にエンド電極電圧と四重極電極電圧を 2 V、加速電極電圧を 1000 V または 300 V に設定し、レンズ電圧を変えたときの質量分解能の変化を示す。加速電圧が 1000 V のときはレンズ電圧 -200 V、加速電圧が 300 V のときはレンズ電圧 -30 V としたときに最大の質量分解能が得られた。また、加速電圧の値が 1000 V の場合、レンズ電圧による分解能の変化が小さい一方で、300V の場合にはレンズ電圧の値によって得られる質量分解能が大きく変化することが分かった。発表では混合クーロン結晶のイオン配置でのシミュレーション結果についても併せて報告し、イオントラップ飛行時間型質量分析計による最適な質量分析条件について議論する。

【参考文献】

[1]白石裕也,上智大学修士論文 (2017).