

気相移動度分析システムと解析ソフトウェアの開発
(東邦大理) ○菅井 俊樹、廣芝 泰祐、陣内 涼太、三上 仁奈子

Development of Ion Mobility Measurement System and Analysis Program
(Department of Chemistry, Toho University) ○T. Sugai, Y. Hiroshiba, R. Jinnouchi, N. Mikami

【序】

イオンの気相移動能測定は気相中のイオンの静電場下の運動を測定する測定手法であり、構造に直結する情報が得られることが特徴である[1,2]。従来の手法ではイオンの気相中での拡散を制御することができず、分解能と感度が損なわれてきた。最近繰り返し移動度測定を行い、分解能を向上させる試みが行われ、分解能1000程度の高い構造分解能[3]および、同位体分離[4]などが実現されつつある。しかしながら、これらの測定では全移動度領域走査が長時間化し、測定効率が減少する問題なども出ている。我々は、イオントラップを活用して、この気相中の拡散を押さえ、高分解能と長時間測定を実現した[5]。これらの測定は全て単独粒子について行われ、最終的な必要な多数粒子の高効率統計的測定はなされていなかった。今回この多数粒子の高効率測定を行うシステムをイオンファンネルと多段トラップ移動度測定を活用して開発した。

また、移動度は主に衝突断面積の逆数として現れ、分子イオンと中性バッファーガスの相互作用によって変化する。移動度とイオン構造の対応を計算するためのソフトウェアも、Indiana大学のM.F.Jarrold教授らが開発したMobcal[6]を初めとして、移動度測定機器メーカーからも多数提供されている。我々は、移動度研究者が実験結果を解析するだけでなく、実験システムそのものに組み込み、拡張しやすいシステムを開発した。

【実験】

今回の移動度測定システムは図1に示すように、イオン化した粒子を移動度測定システムに収束して導入させる、イオンファンネルと多段のリニアイオントラップで構成されている。荷電微粒子はイオンスプレーのような噴霧システムによる飽和食塩水粒子とレーザー

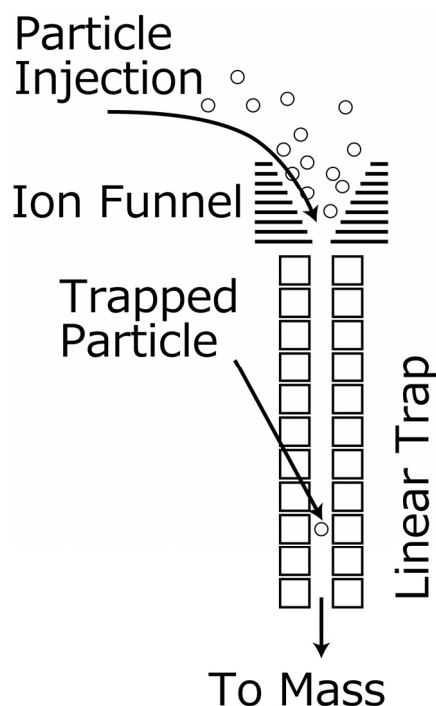


図1 測定システム

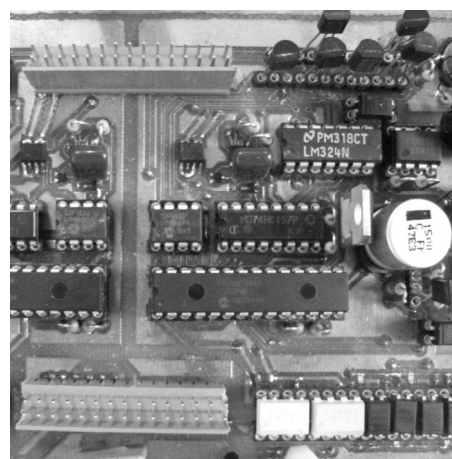


図2 RF-DC ハイブリッド電源

脱離イオン化したポリスチレン粒子を用いた。粒子測定はレーザーによる光散乱と共に、質量分析を行うシステムを付加している。イオンファンネルおよびイオントラップには図 2 で示す、新規開発した多チャンネル RF-DC ハイブリッド電源を導入し、イオン収束と保持を行っている。イオンファンネルを導入したことにより、これまで難しかった多数の粒子を装置内に導入することが可能になり、統計的な多粒子測定が出来るようになった。さらに多段のリニアイオントラップでは移動度測定と分別保持ができる。

移動度と分子イオン構造を対応させるプログラムは、理論計算などで与えられる三次元構造に、バッファーガスを照射し、運動量のやりとりを熱的に平均化することで得られる。従来の Mobcal に比べ、オブジェクト指向と並列化処理を施すことにより、高速化図った。

【結果と考察】

イオンファンネルの動作を確認するために、ファンネルに印加する RF を ON/OFF して動作/非動作の粒子数計測をすると、粒子数比は 1.5 倍であった。シミュレーションではこの比は 40 倍にも達する場合があります、その最高性能を実現するために、現在条件チューニングと収束性能の阻害となる粒子生成時のガス流の低減を図っている。

Species	観測/ms	計算/ms
C ₆₀	57.52	59.41
C ₇₀	62.88	61.83
C ₈₀ (Ih)	69.20	67.67
C ₈₀ (D _{5d})	69.20	68.28
C ₈₂ (Cs)	69.68	69.45
C ₈₂ (C _{3v})	69.68	69.95

図 3 解析結果

多段トラップに多チャンネル RF-DC ハイブリッド電源から周波数 50kHz, 2kVpp の高電圧高周波を発生させることができた。この多段トラップに荷電粒子を導入すると、全てのトラップに粒子が保持されることが観測された。各トラップ間に DC バイアスを印加することにより、移動度測定を現在試みている。

今回開発した移動度解析プログラムの結果とフラーレンイオン測定値の比較を図 3 に示す。実験結果は He 293K, 500Torr, 630mm, 10kV の条件[2]で得られ、その条件を元に解析した。特にパラメーターなどを調整すること無く、観測された多種類のフラーレンイオンのドリフトタイムを、誤差数%以内に予測できており、モデルと計算プログラムの正確さを示している。現在イオンの構造や相互作用による違いを性格に予測できるかどうかを、複数の種類のイオンを用いて確認している。

【参考文献】

- [1] P. Dugard *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **69**, 1122 (1997).
- [2] T. Sugai *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 6427 (2001).
- [3] D.E.Clemmer *et al.*, *Anal. Chem.* **81**, 1482 (2009)
- [4] A.Shvartsburg *et al.*, *Anal. Chem.* **82**, 8047 (2010)
- [5] 澤西慶彦、菅井俊樹、第5回分子科学討論会 **3B04**.
- [6] M.F.Mesleh *et al.*, *J. Phys. Chem.* **100**, 16082 (1996)