

1P012

分子イオンの幾何学的構造決定のためのイオントラップ電子回折装置

(東大院理) ○田中秀昂、加藤景子^{a)}、歸家令果、山内薫

Trapped ion electron diffraction apparatus for determination of geometrical structure of molecular ions

(Univ. Tokyo) ○Hideaki Tanaka, Keiko Kato^{a)}, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi

【序】 気体電子回折法は孤立分子種の幾何学的構造の測定手法として確立されており、これまでに数多くの中性分子種の幾何学的構造が高い精度で決定されてきた。1999年に Maier-Borst ら[1]は、この気体電子回折法をさらに発展させることによって、イオン種の幾何学的構造を決定するイオントラップ電子回折 (Trapped Ion Electron Diffraction: TIED) 法を開発した。この手法では、真空中のイオン種をイオントラップによって質量選択的に捕捉し、捕捉したイオン種に対して電子線を照射して、その電子回折像を測定することによってイオン種の幾何学的構造を決定する。しかし、これまでに TIED 法によって構造決定されたイオン種は、 C_{60}^+ [1]や Ru_{20}^- [2]などの散乱断面積 (σ) が大きなクラスターイオン ($\sigma \sim 10^1\text{-}10^2 a_0^2$) に限られており (a_0 はボーア半径)、さらに σ が小さな分子イオン種に対する電子回折法による構造決定は報告されていない。

そこで本研究では、通常分子イオン種 ($\sigma \sim 10^{-1}\text{-}10^0 a_0^2$) の構造決定を可能とする TIED 装置の開発を目指した。イオンどうしのクーロン反発のため、イオントラップ内に捕捉できるイオン種の数密度は 10^7 cm^{-3} 程度以下に制限される。したがって、 σ の小さなイオン種からの電子回折像を得るためには、長時間の露光とともに背景電子信号の抑制が必要となる。そこで、背景電子信号を大幅に抑制するために特殊な形状のファラデーカップを作成し、開発した TIED 装置の性能を評価するために背景電子信号の測定を行った。

【装置】 我々が開発した TIED 装置の概略図を図 1 に示す。Paul 型イオントラップ中に中性分子試料を導入し、フェムト秒レーザー照射による光イオン化によって、イオントラップ内にイオン種を生成する。イオントラップの電圧条件を調整することによって、光イオン化によって生成されたイオン種のうち、目的のイオン種のみがイオントラップ内に安定的に捕捉されるように設定する。質量選択的に捕捉されたイオン種に対して 20 keV の電子線を照射し、イオンによって散乱

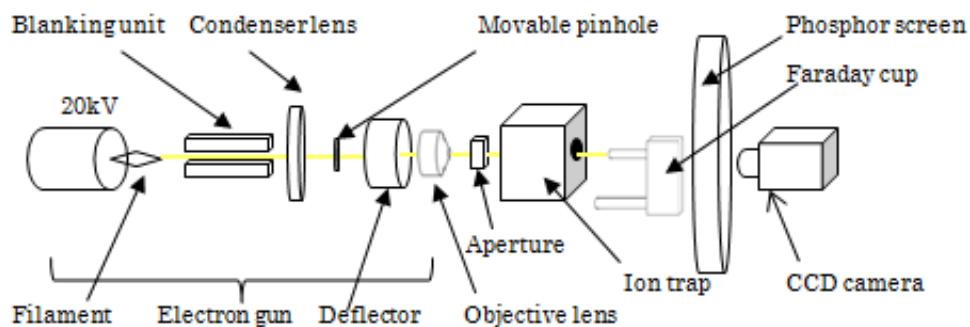


図 1. TIED 装置の概略図.

された電子を蛍光スクリーン付マイクロチャンネルプレート (MCP) で二次元画像として検出する。蛍光スクリーン上に現れた散乱電子の像を冷却 CCD カメラで観測することによって、目的のイオン種からの電子回折像が得られる。

非散乱電子は MCP 前に設置されたファラデーカップに導入される。ファラデーカップ内には一対の偏向電極が設置されており、進入した非散乱電子は 180°偏向された後に、電流測定電極に衝突し阻止される構造になっている。したがって、非散乱電子の金属表面への衝突によって大量に生成する二次電子や反跳電子は、ファラデーカップ内に留められ、MCP には検出されない。また、イオントラップ電極は液体窒素によって冷却されており、電極表面によるクライオポンプ効果によってイオントラップ内の中性残留ガスは電極に吸着除去される。

【実験】 開発した装置の検出限界を見積もるために、イオントラップ電極を 77 K に冷却し、イオントラップ内にイオン種を捕捉せずに電子線を入射した場合の背景信号を測定した (露光時間は 17 min)。入射電子線の電流値は 5.09 μA 、真空チャンバー内の圧力は 1.7×10^{-7} Pa であった。

【結果と考察】 得られた背景信号の像を図 2 に示す。図 2 の中心部の長形状の影はファラデーカップの影である。入射電子線に対する背景信号の量(η_b)は 1.4×10^{-8} 程度である。背景信号の検出面上での強度分布は中央で最も強く、外側に行くにつれて強度が急激に減少していることから、背景信号の主な原因は残留ガスによる散乱電子であると考えられる。真空チャンバーにベーキングを施すことにより、 5.4×10^{-8} Pa まで真空度を上げることができるので、 η_b を 4.6×10^{-9} 程度にまで抑えることができると予想される。一方、 $\sigma \sim 10^0 a_0^2$ の分子イオン種を試料とした場合、イオン種の数密度を 10^7 cm^{-3} と仮定すると、入射電子線に対するイオンからの散乱信号の量(η_s)は 10^{-10} 程度と見積もられ、イオンからの散乱信号は背景信号に対して 2%程度の変化として現れると考えられる。一方、計数法検出による約 6 時間の露光時間を仮定すると背景信号の誤差は、背景信号強度の 0.02%程度までに抑えられると見積もられることから、開発した装置は分子イオン種の電子回折像の測定に十分な性能を持つと考えられる。

【謝辞】 この研究は JSPS 科研費 (18205001, 19002006, 24245003, 24750011, 26288004, 15H05696)、グローバル COE プログラム (理工連携による化学イノベーション)、イノベーションシステム整備事業の支援を受けて行われた。

- [1] M. Maier-Borst, D. B. Cameron, M. Rokni, and J. H. Parks, *Phys. Rev. A* **59**, R3162 (1999).
- [2] E. Waldt, A.-S. Hehn, R. Ahlrichs, M. M. Kappes, and D. Schooss, *J. Chem. Phys.* **142**, 024319 (2015).

a) 現、NTT 物性科学基礎研究所.

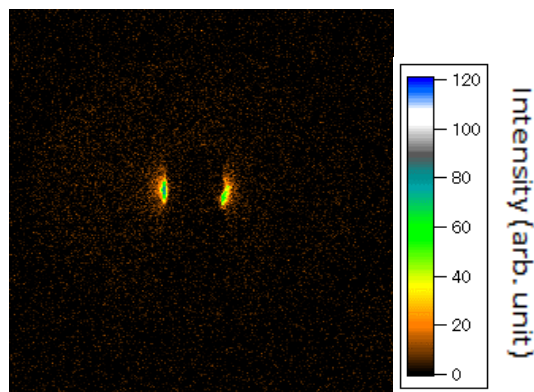


図 2. 背景信号の像.イオンは捕捉されておらず、残留ガスによってのみ電子線が散乱されている。