

イオンビームの空間収束性を高める リフレクトロン型飛行時間質量分析計の設計

¹九大理, ²九大院理

○飯田岳史¹, 荒川 雅^{1,2}, 堀尾琢哉^{1,2}, 寺寄 亨^{1,2}

Formation of spatially focused ion beam in reflectron time-of-flight mass spectrometer

○Takefumi Handa¹, Arakawa Masashi^{1,2}, Takuya Horio^{1,2}, Akira Terasaki^{1,2}

¹Department of Chemistry, School of Science, Kyushu University, Japan

²Department of Chemistry, Faculty of Science, Kyushu University, Japan

【Abstract】 Reflectron time-of-flight mass spectrometer (RTOF-MS) is widely used to improve mass resolution of Wiley–McLaren type TOF-MS. Upon extracting ions that spread over the ion-acceleration region, it is usually difficult to detect all the ions due to divergence of the ion beam after the reflectron. Here we present a novel design of RTOF-MS that enables us to focus such ions on an ion detector. Ions are extracted from non-linear Wiley–McLaren electric fields and are reflected by a two-stage gridless ion reflector coupled with an additional ion lens, which successfully compensates for divergence of the ion beam. Our novel design of a reflectron will be presented along with its performance based on ion trajectory simulations.

【序】 Mamyrin らによって提案されたリフレクトロン型飛行時間質量分析計(RTOF-MS)[1]は, Wiley–McLaren 型加速電極[2] (以下, 加速電極) によるイオンの空間収束効果に, イオンの初期エネルギー分布の収束効果を加えることで質量分解能を向上させる. 一般的な RTOF-MS では, イオン発生領域が加速電極 s 領域に比べて小さく, 質量分解能や検出器上におけるイオンの空間的広がりに関して大きな問題は生じない. しかし, 線形イオントラップから引き出されたイオンなど, 空間的に大きく広がったイオン集団に対しては, 全てのイオンが検出器に入射して検知されるとは限らず, また, 質量分解能 $M/\Delta M$ も大幅に低下してしまう. そこで本研究では, 加速領域で空間的に大きく広がったイオンに対しても適用可能な新たな RTOF-MS を設計し, その性能評価を行った.

【方法】 RTOF-MS 装置全体の 3D モデルを CAD ソフト Fusion360 を用いて作成し, イオン光学系シミュレーションソフト SIMION8.0 に取り込んでイオンの飛跡を計算した. 加速電極には, 以前我々の研究室で開発した非線形電場勾配による Wiley–McLaren 型加速電極を用いた[3]. イオンの初期位置は, 加速電極の s 領域に直径 12 mm ×長さ 16 mm の円柱状に一様に分布するものとした. 時間分解能が最適となる電極電圧に調節後, 10,000 個のイオンを飛行させて検出器上でのイオン集団の空間分布を評価した. その結果をもとにリフレクトロン電極の形状を改良し, 繰り返しシミュレーションを行って新たなリフレクトロン電極を設計した.

【結果・考察】 まず, 従来の一般的なリフレクトロン電極についてイオンの飛跡のシミュレーションを行った. その結果を Fig.1 に示す. イオンの初期配置として直径 1 mm の小さな球内の一様に分布すると仮定した場合には, Fig. 1(a)のように, すべてのイオンを検出できている. 一方, 直径 12 mm ×長さ 16 mm の円柱形イオン分布を仮定した場合, Fig. 1(b)のように, イオンの運動エネルギーの違いからイオンビームが広がり, 検出器 ($\phi 14.5$ mm) に比べて大きな空間分布となった. イオンビームが広がる原因は, リフレクトロンの入射電極(0 V)近傍の電場によるレンズ効果によるものと推定された.

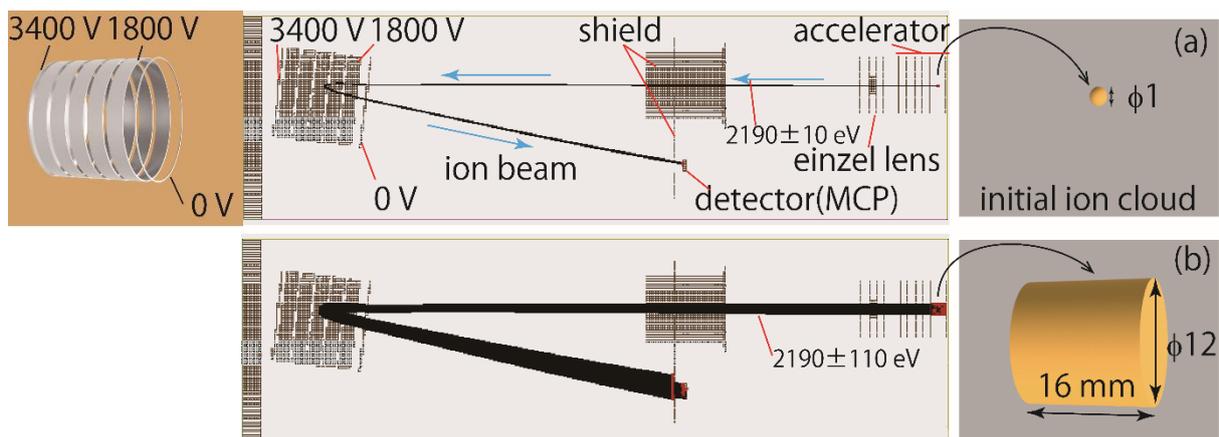


Fig. 1. A 3D model of conventional reflectron and the results of ion trajectory simulations for the ions that are uniformly distributed in (a) a sphere of $\phi 1$ mm and (b) a column of $\phi 12$ and 16 mm long.

この問題を解決するために、入射電極を改造して Fig. 2(a)のように二つの開口を設けた円板とし、シミュレーションを行った。その結果、リフレクトロンで折り返した後にイオンビームが収束傾向を示すことが分かった。ただし、Fig. 2(a'')の挿入図のように、紙面垂直方向に対する収束効果が不十分であった。

そこでさらに、リフレクトロン入射電極の前面に筒形の補償レンズを搭載した既報 [4]の設計を参考に、Fig. 2(b)に示すメガネ型の補償レンズ電極を入射電極前面に配置した(Fig. 2(b'))。このメガネ型電極に引き込み電位を与えてシミュレーションを行った結果、Fig. 2(b'')に示すようにイオンビームは紙面垂直方向にも収束し、加速電極内のすべてのイオンを検出器まで導くことができた。飛行時間のヒストグラムより質量分解能を見積もったところ、およそ $M/\Delta M = 1400$ であり、金属クラスターの反応実験や光解離分光を行うには十分な分解能を有していることが分かった。

今後、新しく設計したこのリフレクトロンを実際に作製し、飛行時間スペクトルやイオンの空間分布を測定して性能評価を行う予定である。

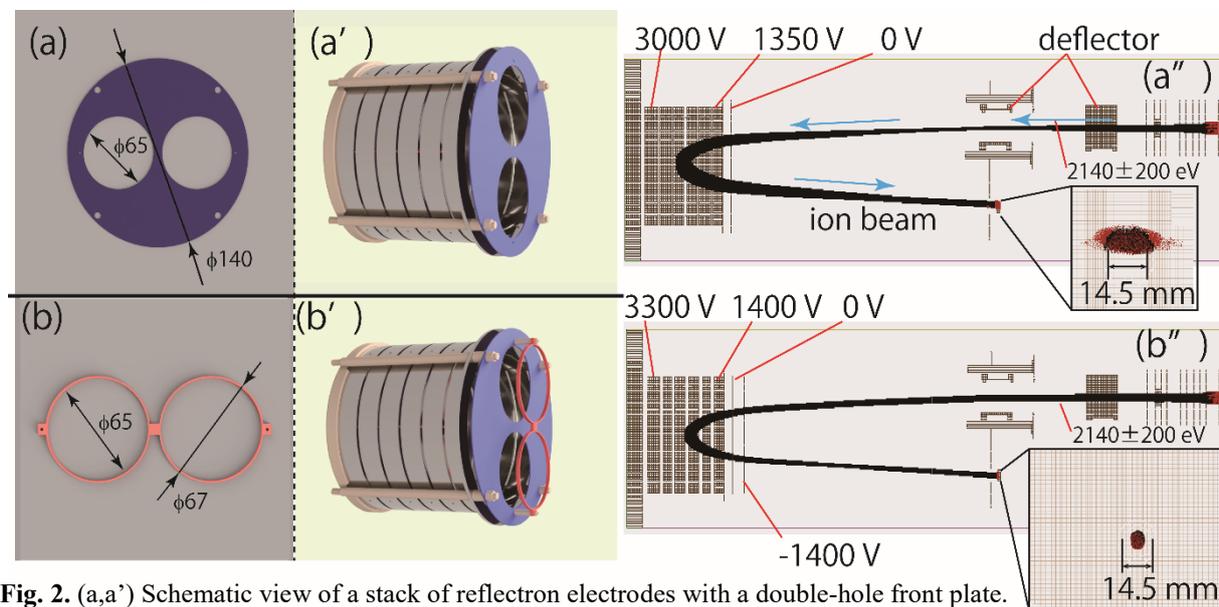


Fig. 2. (a,a') Schematic view of a stack of reflectron electrodes with a double-hole front plate. (a'') A result of ion trajectory simulation for (a'). (b,b') Schematic view of a stack of reflectron electrodes with a glassframe-type extra ion lens. (b'') A result of ion trajectory simulation for (b').

【参考文献】

- [1] B.A. Mamyurin, V.I. Kataev, D.V. Shmikk, and V.A. Zagulin, *Sov. Phys. -JETP* **37**, 45 (1973).
- [2] W.C. Wiley and I. H. McLaren, *Rev. Sci. Instrum.* **26**, 1150 (1955).
- [3] S. Sarugaku, M. Arakawa, and A. Terasaki, *Int. J. Mass Spectrom.* **414**, 65 (2017).
- [4] S. Scherer, K. Altwegg, H. Balsiger, J. Fischer, A. Jäckel *et al.*, *Int. J. Mass Spectrom.* **251**, 73 (2006).