

## 光刺激イオン脱離の 2 次元検出装置の設計とシミュレーション

(広大院理) ○伴英軌, 光森綾子, 和田真一, 関谷徹司, 田中健一郎

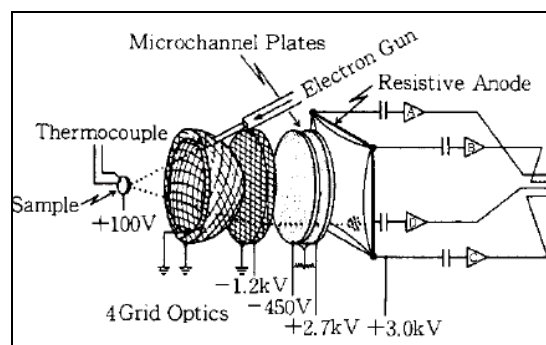
## 【序論】

放射光の利用と共に軟 X 線領域の研究が数多くなされ、様々なアプローチによる内殻励起反応の解明が試みられてきた。これまでに当研究室では、軟 X 線を用いた元素選択的な内殻共鳴励起によるサイト選択的な化学結合切断に着目した研究を行ってきた。近年は官能基を最表面に規則正しく配列する自己組織化単分子膜 (SAM) を用い、その高配向性から選択性が向上する事が見出された<sup>1)</sup>。この研究において脱離イオン種の測定は、放射光リングの単バンチ運転により発生する軟 X 線パルス特性を利用した飛行時間型質量分析法 (TOF-MS) を用いている。高エネルギー加速器研究機構の PF リングでは、放射光パルス間隔は 624 ns であり、放射光の繰り返しパルス特性が極めて優れているため、全てのイオンを 0~624 ns の間に正確に重ねて記録する事ができる。しかし、通常の TOF-MS は  $(m/q)^{1/2}$  に関連した飛行時間から得られるため、イオン種についての情報のみしか得られないという原理上の限界があり、その反応に関する動的な知見を得ることができない。そこで我々は、表面からの脱離イオン種の角度分布を検出できる装置の開発を試みた。本研究では、既に開発されている電子刺激イオン脱離の 2 次元検出装置を参考にシミュレーションを行い、2 次元検出装置の設計を行った。

## 【シミュレーション評価と考察】

装置の設計及び評価には Scientific Instrument Services, Inc. の SIMION 3D Ver.7.00 を使用した。また、装置は広島大学放射光科学研究センター (HiSOR) の軟 X 線表面化学ビームライン BL13 で使用する事を前提とし、脱離イオンの角度分布像を得ることを当面の目標として設計を行った。また脱離イオン分布は、放射光のスポットサイズを  $\phi 2\text{mm}$  とし、運動エネルギー 10eV の 1 価のイオンが表面垂直を  $0^\circ$  として脱離極角  $80^\circ$  の範囲内で放射すると仮定した。

装置設計を始めるにあたり、Fig.1 で示した Yates らが半球グリッドを用い開発した電子刺激脱離イオン角度分布 (ESDIAD) 装置<sup>2)</sup>を元にシミュレーションを行った。半球グリッドタイプは、脱離イオンの初期運動エネルギーベクトルと、サンプルホルダーと第 1 半球グリッド間の電場ベクトルの和で脱離イオンの軌道が決定され、脱離角度分布が決まる。この電場は、グリッドの形状により若干の差が生じるが、概ね一樣な電場と見なせる。そのため、半球グリッドタイプの角度分解能は脱離中心の範囲、すなわちスポットサイズにのみ依存する。また、その原理上、スポットサイズが大きくなると角度分解能が悪くなり、異なる脱離角度の分布同士が大きく重なって

Fig1 : 半球グリッドタイプ ESDIAD 装置<sup>2)</sup>

しまう事も分かった。そこで我々は、2種類の角度分布を持つ装置を設計し、そのシミュレーションを Fig.2 に示した。

2種類の角度分布のうち、高角度分解能検出モードは、サンプルバイアスを掛けず、イオンの取り込み口を静電レンズとして用いる事で可能となった。Fig.3 に機能で大別した静電レンズのポテンシャル図を示す。この静電レンズは、平坦なポテンシャルを形成し、脱離角度を保存したまま取り込むための点線部分と、台錐形のポテンシャルを形成し、生じた分布をそのまま第1グリッド側に引き込む実線部分から構成されており、その取り込み口の形状で脱離極角の検出可能な範囲が決定される。チャンバー内に既に設置されている光電子分光装置の取り込み口との接触を避けるように形の修正を行ったため、検出可能な脱離極角の範囲は

制限された。そのため、本モードの角度分解能は高いため、異なる脱離角度の分布は重ならないが、脱離極角  $50^\circ$  の範囲である。一方、広角度捕集検出モードは、サンプルバイアスを掛け、基本的な原理は半球グリッドタイプと同じである。本モードでは、角度分解能は低いが、脱離極角  $80^\circ$  の範囲で検出が可能である。また広角度捕集検出モードは中性化確率を抑える働きも併せ持つ。これら2つの原理の異なる角度分布像の比較・検討から、より信頼性の高い脱離角度分布が得られる事が期待でき、その反応機構の解明にも役立つと考えられる。

またこの装置の設計に際し、光を通すホールが像の歪みに及ぼす影響を出来るだけ抑えることや、追い返し電極を入れて運動エネルギーに制約を課した分布を得られるようにするなどの工夫も施した。発表ではここまでの概要に沿い、行ったシミュレーションの結果、および設計した装置の仕組み、今後の展望などを加えた詳説を発表する。

[1] S. Wada *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) S1629.

[2] M.J. Dresser, M. D. Alvey and J.T. Yates, Jr., Surf. Sci. 169 (1986) 91.

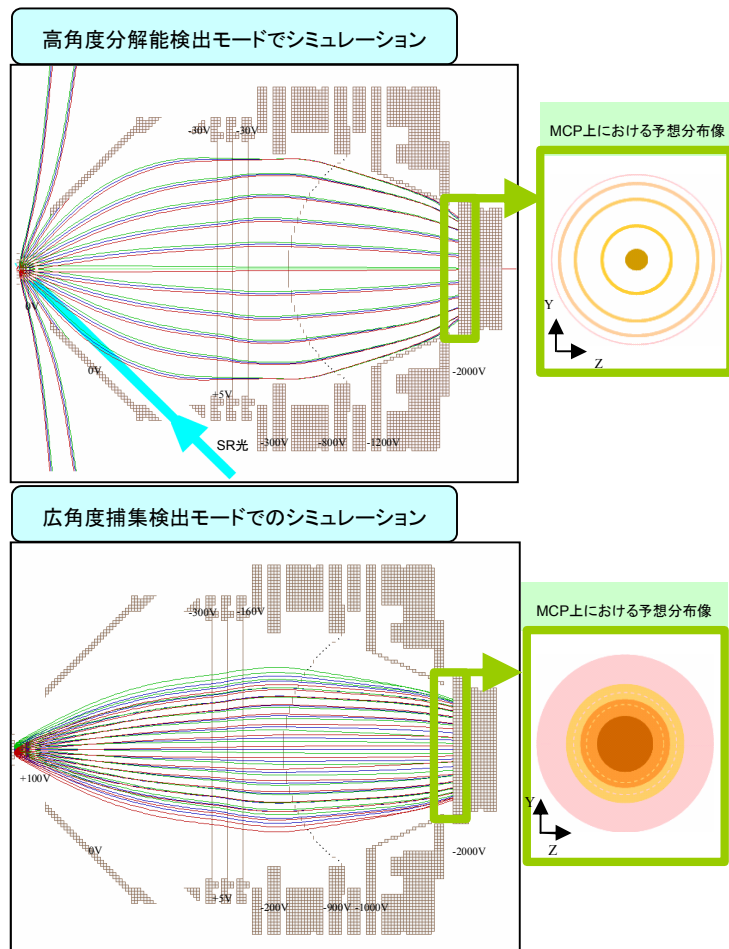


Fig.2(上): 高角度分解能検出モード

Fig.2(下): 広角度捕集検出モード

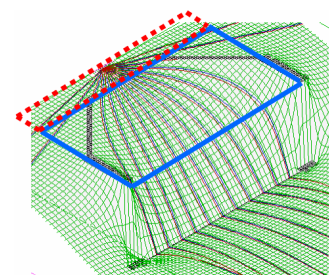


Fig.3 静電レンズのポテンシャル