

静電トラップ内における弾性散乱衝突のシミュレーションと評価

(環境計測) 後藤 佳津也

1. はじめに

当研究室では、分子イオンの解離性電子捕獲反応を行うことを目的として、静電型イオントラップの開発に取り組んできた。イオントラップは分子イオンを数十～数百 msec のオーダーで蓄積することができる性能を持つ。蓄積されたイオンの量は蓄積時間とともに減少する。この減衰には残留ガスとの間の弾性衝突による反応と中性化による反応が考えられる。よって中性化断面積を求めることは、原子物理の理論の発展や実験上で重要である。中性化断面積はトラップ内の弾性衝突の寄与が分かれば、中性化の断面積を蓄積イオンの減衰の測定値より求めることができる。

本研究では、電場内でのイオン軌道シミュレーションソフトである SIMION に弾性散乱衝突プログラムを組み込み、シミュレーションを行うことで弾性散乱による蓄積イオンの減衰を求めた。さらに、実験値と比較し、このシミュレーションの精度を評価した。

2. シミュレーションの概要

SIMION とは 2D、3D の静電位・磁界配列をそれぞれ組み合わせることで、イオンの軌道計算が自由に行えるシミュレーションソフトウェアである。また、C 言語を用いたプログラムにより、SIMION 上での衝突条件を変更することができる。今回は SIMION の ver8.0 を用いてシミュレーションを行った。

SIMION 上で本研究室の静電トラップを作成し、これに弾性衝突プログラムを組み込むことで、弾性散乱により蓄積イオンがどれだけ減衰するかを求めた。トラップ内を進むイオンはトラップ電極により軌道を変えられ周回運動を起こす。これを繰り返すことでイオンはトラップ内に蓄積される。蓄積されたイオンは残留ガスとの衝突

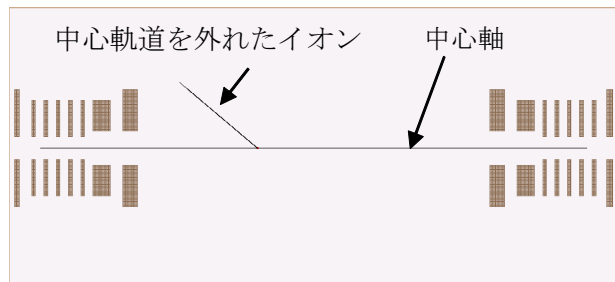


図 1 シミュレーション画像

により蓄積軌道から外れる。蓄積軌道から外れることで、トラップ内の蓄積イオンは失われる。

プログラムでは、実験との比較のために 1.2keV の Ar^+ と Ar ガスとの衝突を用いている。衝突モデルとして剛体球散乱を使用し、 Ar の分子直径 3.67 \AA を用いた。今回のシミュレーションは中心軸上で蓄積しているイオンを対象とした。図 1 は SIMION 上に実際に表示されているシミュレーション画像である。図の四角い部分がトラップ電極を表している。

3. 結果

3.1 シミュレーション結果

図2はトラップ真空度 1.0×10^{-7} Torr と 1.0×10^{-8} Torr におけるシミュレーション値と実験値の結果である。横軸は時間を表し、縦軸は減衰率を表している。 1.0×10^{-7} Torr のデータを 25 msec で、 1.0×10^{-8} Torr のデータを 50 msec で 1 に規格化している。

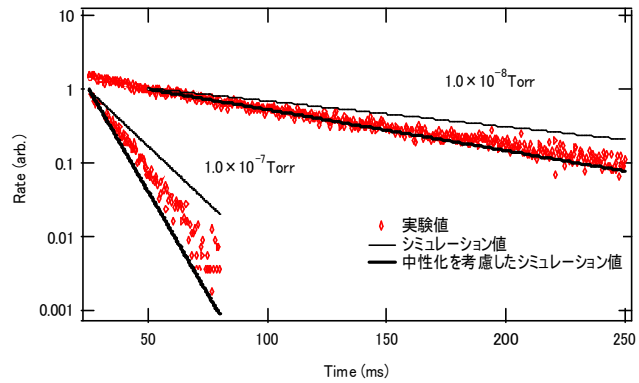


図2 シミュレーション値と実験値の比較

図2の細線は弾性散乱シミュレーション結果を表している。なお、検出されるイオン数が $1/e$ になる時間をトラップ内の蓄積イオンの寿命として測定している。 1.0×10^{-8} Torr の場合、シミュレーションから求められる寿命を τ_{el} とすると、 $\tau_{el} = 130.4$ msec である。この結果を実験結果と比較するためには中性化による減衰を考慮しなければならない。全断面積 σ について、中性化断面積を σ_{el} 、弾性散乱断面積を σ_{cap} とすると $\sigma = \sigma_{cap} + \sigma_{el}$ が成立する。トラップ内の粒子の寿命 τ は、ガス密度を ρ 、速度を v とすると $1/\tau = \rho\sigma v$ と表すことができる。よって中性化を考慮に入れたシミュレーション値から求められる寿命 τ_{eff} は

$$1/\tau_{eff} = \rho\sigma_{cap}v + 1/\tau_{el}$$

と表すことができる。過去に測定された中性化断面積 $\sigma_{cap} = (2.05 \pm 0.41) \times 10^{-15} \text{ (cm}^2\text{)}^2$ を用いると、中性化を考慮したシミュレーション値は $\tau_{eff} = 78.0 \pm 5.8$ msec となる。これを示したのが図2の太線である。

3.2 実験結果

実験値は図2の点で表している。実験値の寿命は $\tau_{exp} = 98.2 \pm 3.4$ msec である。シミュレーションである太線は実験値の傾向を良く再現していることがわかる。

シミュレーション値 τ_{eff} および実験値 τ_{exp} について、それぞれの誤差を考慮すると 10~30% の違いで、今回の弾性散乱のシミュレーションはトラップ内のイオンビームの減衰を見積もることができた。誤差の原因について以下の原因が考えられる。弾性散乱シミュレーションについて、剛体球モデルとして単純化した但实际上には2粒子間の距離に依存したポテンシャルが存在している。しかし、これについてはまだ検証できていない。また直径について常温における値を用いたが、入射イオンのエネルギーは keV であるため実際には小さくなる。すなわち剛体球散乱を用いた場合より寿命が長くなる。この結果より、正確な分子直径を求めることができれば精度を上げることができる。

参考文献

- 1) 社団法人 日本化学会編, 「化学便覧 基礎編II 改訂4版」, 丸善株式会社(1993).
- 2) H.Martinez et al, International Journal of Mass Spectrometry 228 (2003) 107 - 116.