

イオントラップ内における弾性散乱衝突のシミュレーション

(環境計測) 甲斐 裕章

1. はじめに

当研究室では、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。蓄積されたイオン数は蓄積時間と共に減少する。この減衰の原因として、トラップ内の残留ガスとの弾性散乱と電子捕獲による中性化反応が考えられる。それぞれの起こる確率を弾性散乱断面積、電子捕獲断面積という。

過去に当研究室では、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 に剛体球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トラップ内の蓄積イオン量の減衰を再現した¹⁾。しかし、この結果を実験値と比較したが誤差が大きかった。誤差の原因として、2 粒子間の距離に依存したポテンシャルを考慮していないことが考えられた。

そこで本研究では、実際の散乱ポテンシャルを表すために、原子衝突理論でよく用いられるポテンシャルを組み込んだ弾性散乱衝突プログラムを作成し、弾性散乱による蓄積イオンの減衰を再現した。そして、シミュレーション結果を実験結果と比較することで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

今回のシミュレーションでは、イオン光学系の設計とイオンの軌道計算が行えるシミュレーションソフトウェアである SIMION ver8.0 を用いた。

図1は Ar と Ar の衝突における散乱ポテンシャルの比較図である。縦軸はポテンシャルエネルギー、横軸は原子間距離を表している。点線は Ar の核同士に働くクーロンポテンシャルである。実線は電子による核の遮蔽効果を考慮したモ

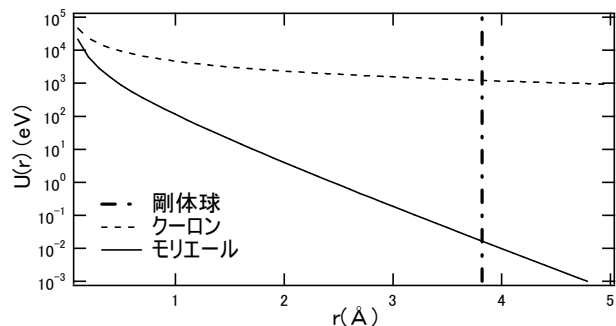


図1. Ar-Ar 衝突におけるポテンシャル比較図

リエールポテンシャル²⁾で、一般的な原子衝突計算に用いられる。参考までに、剛体球ポテンシャルを図中の一点鎖線で示す。作成したプログラムは、ある衝突径数で入射したイオンのモリエールポテンシャルによる散乱角と、散乱後の速度を計算する。事前の計算で、衝突径数が 4 Å 以上ではトラップ内からほとんどイオンが消えることがないことを確認しているため、衝突径数は正面衝突から微小角散乱が生じる 0~4 Å 程度の間でランダムに発生させた。SIMION 上で本研究室の静電トラップとそのポテンシャルを作成し、この中でイオン軌道計算に弾性散乱衝突プログラムを組み込むことで、蓄積イオンの減衰を求めた。今回のシミュレーションでは、1.2 keV の Ar⁺ と Ne、Kr の衝突を計算した。Ar⁺-Ne、Ar⁺-Kr の衝突では、電子捕獲断面積が弾性散乱断面積に比べて 1/100 以下と小さく³⁾、トラップ内で起こる反応のほとんどが弾性散乱衝突と考え

られる。

3. 結果

図2はトラップ真空度 1.0×10^{-7} Torr のシミュレーション値と実験値の結果である。横軸は蓄積時間、縦軸は減衰率を表し、蓄積時間が 24 msec で1に規格化している。図2の細線はモリエールポテンシャルの弾性散乱シミュレーション結果を表し、点は実験値を表している。この結果を実験値と比較するためには中

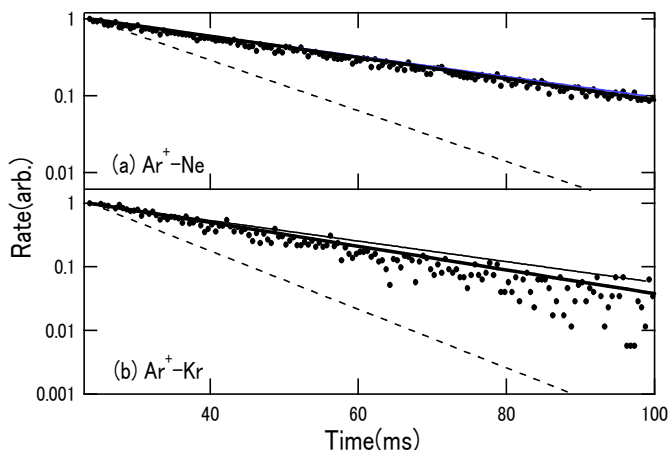


図2. シミュレーション値と実験値の比較

性化による減衰を考慮しなければいけない。過去の電子捕獲断面積³⁾を用いて中性化による減衰を考慮したものが図中の太線である。Ar⁺-Ne の衝突では、非常に電子捕獲断面積が小さいため、細線と実線の違いが見てとれない。また、点線は剛体球ポテンシャルのシミュレーション結果である。(a)、(b)どちらの場合もモリエールポテンシャルの方が剛体球ポテンシャルと比べ実験値の傾向を良く再現している。定量的に実験値と比較するために、トラップからイオンが消える全衝突断面積を定義する。これは、弾性散乱断面積と電子捕獲断面積を足し合わせたものである。イオントラップ内に蓄積されたイオンは、残留ガスとの衝突により指数関数で減少していき、以下の式で表すことができる。

$$I(t) = I(0) \exp(-\rho \sigma v t) \quad (1)$$

ここで、 $I(t)$ は蓄積開始から t 秒後に蓄積されているイオン数、 $I(0)$ は蓄積開始直後にトラップされているイオン数、 ρ はトラップ内残留ガスの原子数密度、 σ は全断面積、 v はイオンの速度を表している。図2のシミュレーション結果と実験結果に(1)式をフィッティングをすることで、全断面積 σ の値を得た。結果を表1に示す。剛体球ポテンシャルでは、シミュレーション値と実験値の誤差が Ar⁺-Ne で 141%、Ar⁺-Kr で 95%と、非常に大きくなってしまふことが確認できた。一方で、モリエールポテンシャルでは、シミュレーション値と実験値の誤差は、Ar⁺-Ne で 1%以下、Ar⁺-Kr で 25%と、よく一致する結果を得た。

表1. シミュレーションと実験から求めた全断面積

	Ar ⁺ -Ne ($\times 10^{-15} \text{ cm}^2$)	Ar ⁺ -Kr ($\times 10^{-15} \text{ cm}^2$)
剛体球	3.52 ± 0.02	4.70 ± 0.11
モリエール*	1.45*	1.80*
実験値	1.46 ± 0.02	2.41 ± 0.03

*) 誤差は有効数字3桁以下であった。

参考文献

- 1) 後藤佳津也 : 「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」, 京都府立大学 人間環境学部 環境情報学科 卒業論文 (2009)
- 2) G. Molier, Z. f. Naturforsh A2, 133(1947)
- 3) H. Martinez et al, International Journal of Mass Spectrometry 228 (2003) 107 - 116