



# 飛行時間型質量分析装置の高性能化 —イオンクーリング効果とクーロン相互作用を考慮した 高精度イオン軌道計算—

研究・開発機関 : 株式会社島津製作所 基盤技術研究所  
 利用施設 : 自社内設備、FOCUSスパコン  
 計算規模 : 1 ケース約 20 時間  
 利用ソフトウェア : 自社開発コード Optdesign

## Before

- 質量分析の際に必要なイオントラップ内でのイオン分布を把握するには、バッファガスとイオンの衝突によるクーリング効果とイオン間のクーロン相互作用を同時に考慮したイオン軌道計算が必要ですが、計算量が膨大になるため、通常はクーリング効果のみを扱い、クーロン相互作用は無視していました。
- しかし、イオントラップ内イオン分布が正確に把握できないため、それに続く質量分離部を適切に設計するには限界がありました。

## After

- クーリング効果とクーロン相互作用を同時に考慮したイオン軌道計算ツールを自社開発し、FOCUSスパコン等の大規模並列計算機を利用することで、イオントラップ内イオン分布(位置や速度)の正確な把握が120時間必要としたのが20時間で可能となりました。
- 計算で得たイオン分布をもとに、後に続く質量分離部の設計精度が上がり、より高性能(高分解能、高感度)な質量分析装置の開発が可能になりました。

## ■ 背景と目的

質量分析とは、物質を構成している原子や分子を気体状のイオンにして(イオン化)、その質量と数を測定することで物質が何からできているか(同定)や、どれだけの量があるか(定量)を調べることです。

イオンは真空中に保たれた分析室で質量ごとに分けられますが(質量分離)、その一つの方法として飛行時間型質量分析法があります。この分析法では、イオンを一定のエネルギーで加速し真空中を飛行させてその飛行時間を測定します。飛行時の速度はイオン質量の平方根の逆数に比例するため、一定の距離を飛行した時間を測定して、質量を知ることができます。

その際、飛行時間を高精度に測定するには、イオンをできるだけ同じ位置から、また、できるだけ同時にスタートさせる技術が必要になります。すなわち、100m走で横一列に並んで静止し、一斉にスタートするイメージです。そのためには、バッファガス(ヘリウムやアルゴン)との衝突により、イオンのエネルギーを低下させ、さらに空間中に広く分布しているイオンを微小な領域に集め、かつ、その動き(速度)を小さくする技術(クーリング)が必要になります。そこで、大規模並列計算機を用いたシミュレーション解析により、静電型イオントラップにおけるイオンクーリング効果の様子を明らかにしていきます。

## ■ 利用成果

飛行時間型質量分析装置は図1に示すように、①大気圧下でイオン化されたイオンを真空部に取り込み、イオントラップまでを搬送するイオン導入部、②イオンをクーリングし後続部分にイオンを射出するイオントラップ部、③質量を測定する質量分離部(リフレクトロン)からなります。

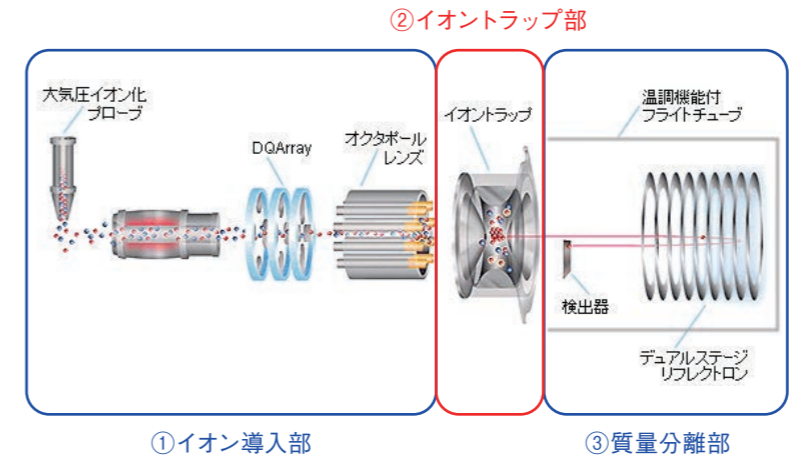


図1 飛行時間型質量分析装置 (真空容器省略)

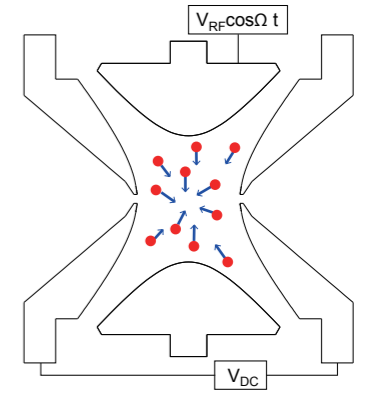


図2 イオントラップ部

図2に示すように、イオントラップ部では最初広がって分布していたイオンをまず電界とクーリング効果により中央部に集めます。次に集められたイオンは質量分離部に向かって一斉に加速排出され飛行し、検出器に到達する時間が計測され、最終的に質量に変換されます。高い質量分解能を得るには、図3に示すスペクトルの幅を小さくすることが重要です(横軸:質量、縦軸:イオン強度)。

スペクトル幅が大きくなる要因の一つがイオントラップ部でのイオンの広がりとその速度です(両者とも小さいほうが望ましい)。図4は、①衝突だけを考慮した場合、②今回新たに可能となった衝突とクーロン相互作用を同時に考慮した場合、のイオン軌道計算結果です。これまでの計算によるイオン分布よりクーロン相互作用によって実際は大きく広がっていることがわかります。さらに詳細な解析によると、イオンの数やイオンの価数によってもその広がりは異なります。この広がった分布を正確に知ることで、後続の質量分離部の最適設計につながります。

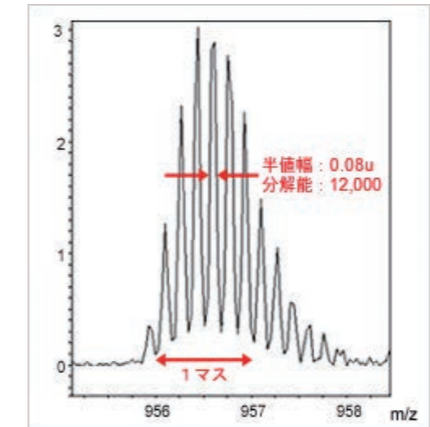


図3 質量スペクトル

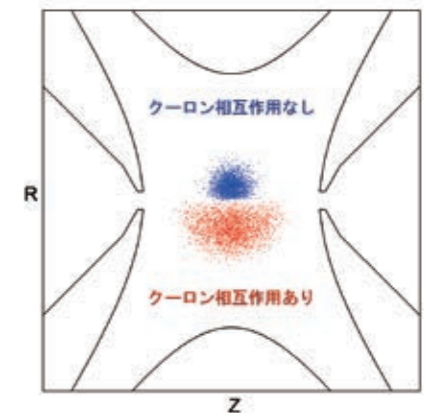


図4 イオン分布(クーロン相互作用 上なし下あり)  
(注:イオンの分布は拡大して表示)