

イオン軌道シミュレーションを用いた線形イオントラップ内のイオン密度分布の解析

(九大院理) ○飯田 岳史・寺崎 亨

Ion-Trajectory Simulation for Evaluation of an Ion-Density Distribution in a Linear Multipole Ion Trap (*Department of Chemistry, Kyushu University*) ○Takefumi Handa, Akira Terasaki

An ion-density distribution in a linear rf ion trap is quantitatively simulated by the SIMION software. Considering a space charge and ion-buffer He collisions, we were able to reproduce a ring profile of an ion distribution experimentally observed¹⁾ for a linear octopole trap at a high density of ions close to the space-charge limit. In contrast, a quadrupole trap was found to locate ions around the central axis of the trap. The present study aims at optimizing the ion density in the trap for a specific experiment, e.g., laser spectroscopy, of gas-phase clusters.

Keywords: Linear Ion Trap; Ion Density Distribution; Space Charge; SIMION

希薄な気相クラスターの試料密度を向上し、分光計測などを可能とする実験技術の一つにイオントラップがある。本研究は、イオントラップ内のイオン雲をシミュレーションで解析し、計測に最適なイオン密度および分布形状を実現することを目的とした。先行研究で、八極子トラップ内に空間電荷制限値に近い 5.5×10^8 個の Ag_2^+ を導入し、その空間分布をレーザー光解離実験で測定した Fig. 1 の結果が報告されており¹⁾、まずこの実測結果の再現を試みた。イオン光学系解析ソフト SIMION を利用し、イオン間反発や緩衝ガスとの衝突を考慮したイオン飛跡シミュレーションを行った結果、Fig. 2 のようにリング状の分布が再現され、イオン密度やリング径など、定量性も確認された。このリング形状は、八極子が作る比較的平坦なポテンシャルの中に閉じ込められた多数のイオンが互いに反発しあって形成されたと考えられる。発表では、イオンが中心部に分布する四極子トラップも紹介し、捕捉イオン量や、円筒もしくは双曲面など、電極面の形状の違いによるイオン分布の変化についても議論する。

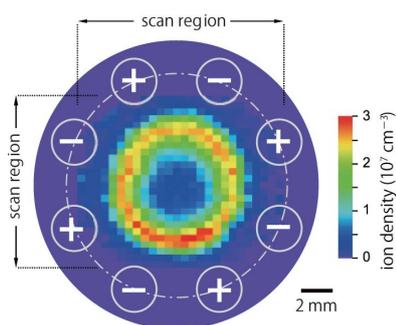


Fig.1 Spatial distribution of Ag_2^+ in a linear octopole trap measured by experiment.¹⁾ The eight circles represent electrodes of the ion trap.

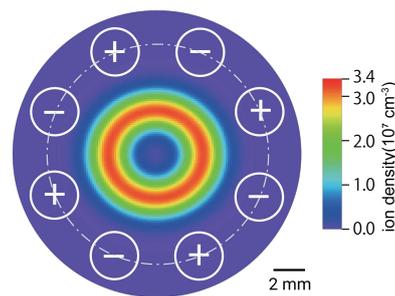


Fig.2 Trajectory simulation of Ag_2^+ in a linear octopole trap reproducing the experimental result in Fig. 1.

1) T. Majima, G. Santambrogio, C. Bartels, A. Terasaki, T. Kondow, J. Meinen, T. Leisner, *Phys. Rev. A* **2012**, 85, 053414.