

極低温気相光解離分光装置の設計と開発：高質量イオン観測の試み

(広島大院先進¹・広島大理²) ○廣川 靖明¹・松山 晃仁¹・入口 時代¹・中東 祐貴¹・小山 雅大²・村松 悟¹・井口 佳哉¹

Development of Photodissociation Spectrometer for High-Mass Ions under the Cold Gas-Phase Condition (¹*Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University*, ²*School of Science, Hiroshima University*) ○Yasuaki Hirokawa,¹ Akihito Matsuyama,¹ Jidai Iriguchi,¹ Yuki Nakahigashi,¹ Masahiro Koyama,² Satoru Muramatsu,¹ Yoshiya Inokuchi¹

We report a current status of our new apparatus under development aiming for cryogenic gas-phase spectroscopy of high-mass ions such as ligand-protected metal clusters. We have newly designed and developed an electrospray ionization (ESI) source, an octupole ion guide (OPIG), a cryogenic quadrupole ion trap (QIT), and a time-of-flight mass spectrometer (TOF-MS). We have successfully obtained an ultraviolet photodissociation (UVPD) spectrum of a test sample, $K^+(\text{benzo-18-crown-6})$, in the spectrometer. It exhibits well-resolved vibronic bands due to cryogenic cooling, which well reproduces the previous report.

Keywords : Photodissociation Spectroscopy; Electrospray Ionization; Cryogenic Ion Trap; Time-of-Flight Mass Spectrometry; Ion Trajectory Simulation

現在我々は、極低温気相条件下に孤立させた配位子保護金属クラスターの分光により、“トポロジカル異性体¹⁾”の分光観測や触媒機能²⁾の分子レベルでの解明を目指して研究を進めている。当初は研究室で現有する分光装置での測定を試みたが、金属クラスターの大きな質量に起因して検出感度が低下し、スペクトル測定が困難であった。そのような背景から、本研究では高質量種観測に最適化した新たな装置の開発に取り組んだ。Fig. 1 に装置の概略図を示す。装置はエレクトロスプレーイオン化 (ESI) 源・八極子イオンガイド (OPIG)・極低温(~4 K)四重極型イオントラップ (QIT)・飛行時間型質量分析計 (TOF-MS) で構成し、これら全ての設計・製作・立ち上げを行った。QIT に捕捉されたイオンに波長可変レーザー光を照射し、波長ごとに光解離イオン量を TOF-MS でモニターすることで紫外光解離 (UVPD) 分光を行った。現状で、テストサンプルとしてベンゾ-18-クラウン-6・カリウム包接錯体 ($K^+(\text{B18C6})$) を用い、既報³⁾を再現する振電スペクトルの取得に成功した。現在は、この装置に高電圧パルスイオン加速電源 (最大~30 kV) を実装することで高質量イオンの検出感度向上を試みている。講演では、イオン光学シミュレーションの結果も交えながらその現状を議論する。

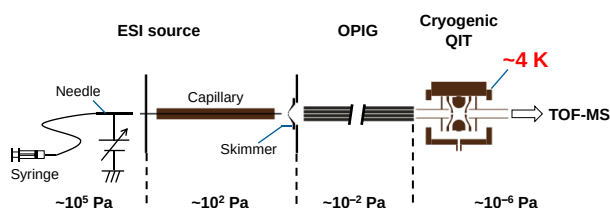


Fig. 1. Photodissociation spectrometer for cryogenic ions under development.

- 1) Kalenius, E. et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143, 1273. 2) Nie, X. et al., *ACS Nano* **2012**, 6, 6014.
3) Inokuchi, Y. et al., *J. Phys. Chem. A* **2012**, 116, 4057.