



河合 明雄

東京工業大学理工学研究科化学専攻

プロフィール：1992年東京工業大学理工学研究科博士課程終了、学振特別研究員、カリフォルニア大博士研究員を経て現職。趣味は、釣り、ボクシング鑑賞、スキー。好きなことわざは、“苔の一念岩をも砕く”。

不均一磁場を用いたクラスター質量分析装置の開発

要旨

【序】

分子が複数個集合してできた分子クラスターは、気液固体と比べて物理的性質や化学反応性が異なる場合があり、大変興味深い系です。クラスターの諸性質はそのサイズに依存し、サイズという気液固体にはない新たな因子が重要です。このようなクラスター研究の多くでは、特定サイズのクラスターをイオン化法で質量選別して調べます。イオン化法は簡便ですが、クラスター破壊などの問題点があります。ところで、不対電子を持つラジカルやそのクラスターの気体は、不均一磁場中を飛行する際に質量や量子数に依存して軌跡が異なります。これを利用すれば、クラスター破壊をせずに質量選別することが可能です。本研究では、不対電子を持つ分子やクラスターの不均一磁場による分離を目的に六極電磁石フィルターを製作し、質量分離実験を試みました。

【質量選別原理】

多極電磁石での質量分析は、ラジカルなどの不対電子を持つ化学種が並進速度のそろった分子線として六極磁場中に導入されます。そこでは質量に応じて飛行軌跡が変わるため、磁場の制御で飛行軌跡をコントロールすれば、異なる質量数の化学種を空間的に分離できます。図1(a)は、六極磁石の断面の概念図です。ラジカルの分子線は、紙面に垂直方向で6磁極の円の中心を進行します。図1(a)の六極磁石の場合、円の中心では磁場強度がゼロで、中心から外に向って磁場強度が強くなります。このような磁場勾配中にラジカルを置くと、 α スピンでは外方向に押し出され、 β スピンでは中心に押し返す力が働きます。分子線の場合、進行方向に垂直な速度成分が若干あり、飛行距離が長いほど分子線が発散し分子密度が著しく減少します。しかし、六極磁場中の中心に β スピンを持つ分子線が導入されると、勾配磁場の力で中心方向に押し返されるため、ある距離を進むと β スピン分子線のみが収束します。今回製作した六極電磁石フィルターでは、分子線は図1(b)のような飛行経路をとります。分子線は左の入射口から一定速度で入り、区間a(12.5cm)を飛行中に分子線の進行方向と垂直方向に分散されます。電磁石区間L(25cm)を通過中は、不均一磁場により中心に押しもどされますが、完全に収束しないうちに電磁石を通過します。その後に区間b(50cm)を飛行し、遠方で収束します。収束点での化学種質量Mと磁場強度 B_0 の関係は簡単な式で計算できます。製作した六極電磁石は磁極の円半径が5mmであり、この場合 $M = 0.025B_0$ となります。

例えば磁場強度が0.5Tでは分子量125が出射口に収束します。選別可能な質量最大値は、印加する磁場の最大強度で決まります。有機ラジカルや溶媒和クラスター等を研究対象とする場合、分子量数百程度までは欲しくなるので、最大磁場強度は2T程度は必要です。

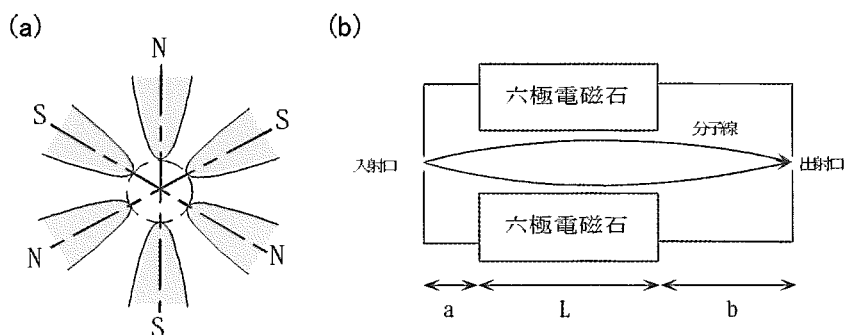


図1 (a)六極磁極概念図と(b)分子線飛行経路概念図

【電磁石設計と試作】

図2上段に、製作前に考案した2種類の六極磁極形状と磁場空間分布のシミュレーションを示します。図中の矢印は磁力

線の向きで、磁場強度は赤から青へと小さくなります。下段は、対をなす2つの磁極先端間での位置を横軸にとり、磁場強度 (T) をプロットしたものです。磁極最大磁場は、磁極先端が平らなもので約1.2T、丸形で約1.6Tと計算されます。同じ六極電磁石でも、磁極先端形状で最大磁場は大きく変わり、収束可能な最大質量数も変化します。本製作では、最大磁場強度を優先項目とし、丸型磁極を採用しました。

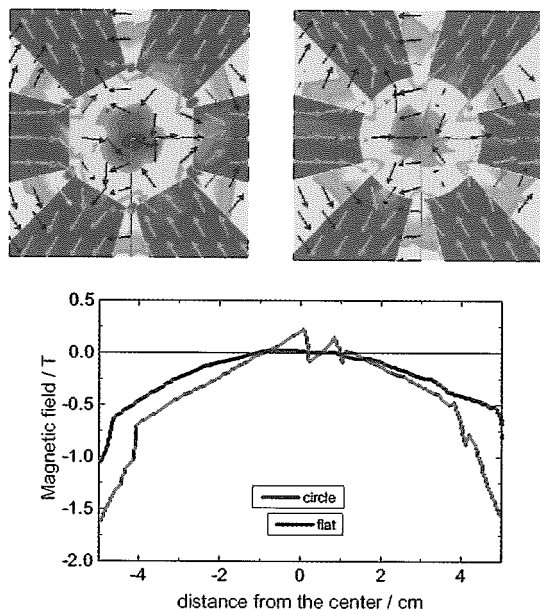


図2 (上) 考案した2つの磁極先端形状で、左図が平面型、右図が丸型。(下) シミュレーションで得た磁場空間分布で、赤が丸型磁極、青が平面磁極

図3は、製作品の6磁極のうち隣り合った3磁極のみを使い、100A通電した時の磁場強度空間分布です。横軸は六極磁極先端の同心円中心位置をゼロとして磁極方向への距離を、縦軸は磁場強度を示します。実測値では5mmの距離で1.6Tに達しており、期待される収束可能な最大質量数は400です。過去の六極電磁石では最大磁場が1T程度のもが多く、今回試作した電磁石は最大磁場強度に関し進展いたしました。

製作した六極電磁石フィルターは、本研究での特色であるクラスターを作るための分子線生成用真空チャンバーおよび分子検出装置と接続して真空テストなども完了しています。現在、簡単なラジカル分子を用いて質量選別テストを行い、選別能力や最適条件などを調査中です。報告会ではその結果も交えて議論し、今後の発展を議論したく思います。

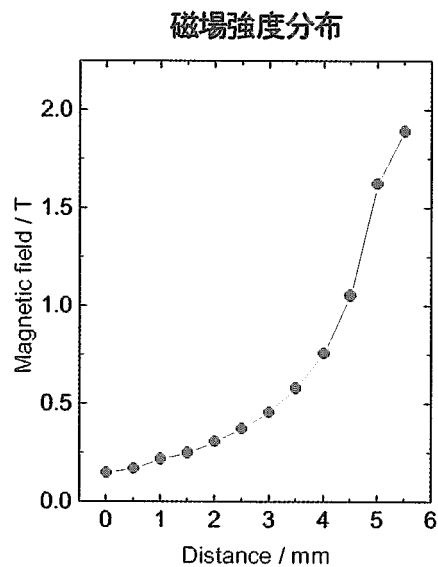


図3 試作した電磁石の発生磁場強度分布

研究成果

研究期間中の公表文献

1. “常磁性分子の質量選別を目的とした六極磁場フィルターの試作”、河合明雄、日本分光学会誌「分光研究」2000年第49巻4号p193
2. “電子スピン分極プローブ法による凝縮相での励起消光過程の研究”、河合明雄、日本分光学会誌「分光研究」2001年 第50巻4号p1-10.
3. “Time resolved ESR study on energy difference of quartet and doublet states in radical-triplet encounter pairs”, Akio Kawai, Yasuyuki Watanabe and Kazuhiko Shibuya, Mol.Phys. submitted.