



Title	Ion optical study of mass analyzers
Author(s)	石原, 盛男
Citation	大阪大学, 1991, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/37702
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名・（本籍）	いし 石	はら 原	もり 盛	お 男
学位の種類	理	学	博	士
学位記番号	第	9841	号	
学位授与の日付	平成3年6月18日			
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当			
学位論文名	Ion optical study of mass analyzers (質量分析装置に関するイオン光学的研究)			
論文審査委員	(主査) 教授	松尾 武清	(副査) 教授	高橋 憲明
	教授	南園 忠則	助教授	交久瀬五雄 助教授 中田 博保

論文内容の要旨

質量分析法は原子物理学，原子核物理学，表面科学等の分野で重要な分析手法であるが，最近のイオン化手法の発達によって特に生化学の分野での重要性が高まっている。それに伴い，高性能質量分析装置の研究開発が必要となっている。ここで高性能とは，分解能が高いこと，高質量まで分析できること，高感度であること及び容易に他の分析機器とオンライン接続できることである。本論文は高性能質量分析装置の研究開発と，装置開発の基礎となるイオン光学の数値計算手法を用いた研究で構成されている。

〔1〕 磁場型質量分析装置のイオン光学系の設計には3次近似の変換マトリックスが用いられる。その際，種々のイオン光学パラメータを最適化する必要があるが，そのためシンプレックス法に基づく自動最適化プログラムを作成した。本研究で設計した質量分析装置は，(1)通常の装置と比べ高質量まで測定できる二重収束質量分析計，(2)四重極レンズトリプレットをインターフェイスとしたタンデム質量分析計，(3)四重極－八重極－四重極の構成による質量分散可変のためのズームレンズである。これらの装置は実際に製作しそのイオン光学的特性を実験的に求め，それが計算による予測と良く一致していることを確認した。これら装置の主目的は生化学の分野で重要な高質量有機化合物を分析することである。得られた主な結果は，(1)牛インシュリン (M.W. 5730) 等の高質量化合物の高分解能スペクトルが得られたこと，(2)異常ヘモグロビンの構造をタンデム質量分析計のよって決定できたこと，(3)ズームレンズにより25%の質量範囲のスペクトルが同時検出器で得られたこと等である。このスペクトルは現在得られているこの種のもので最も広い質量範囲を持つものである。

〔2〕 変換マトリックスを用いたイオン光学計算は近軸軌道に限られるが，一般的な軌道計算のため

に軌道追跡プログラムを作成した。この種の計算では電磁場の与え方が最も重要であるがこのプログラムでは高精度の期待できる表面電荷法を用いた。この計算手法を用いてまず四重極レンズの端縁場の変換マトリックスの計算に必要な定積分を求めた。次に扇型電場の端縁場の高次効果の計算を行い、7次までの効果の評価を行った。その結果3次以上までは特に5次の効果が重要であることを見出した。さらに扇型磁場の境界の形状が理想的な円からずれた場合に発生する収差の検討を行った。その結果、広いビームを扱う際に観測されていた変換マトリックス法では説明できない大きな収差がこの境界形状のずれで良く説明できた。最後に自動最適化プログラムと軌道追跡プログラムの組合せによる装置の自動設計を試みた。設計した装置は(1)磁場一様性の高い広いギャップを持つ磁石、(2)減速レンズシステムである。これら装置は原子物理学、原子核物理学の研究のために有用なものである。

論文審査の結果の要旨

質量分析法は広範な適用分野をもつが近年はとくに生化学の分野での重要性が高くなっている。それに伴い高性能質量分析装置の開発が重要な課題となっている。石原君は本研究でまず自己の開発になる最適化プログラムを3次近似の変換マトリックスによるイオン光学計算手法と組合せることにより効率的なイオン光学系設計システムを作り上げた。これを用いて高質量有機化合物の分析を主な目的とするところの(1)高性能二重収束質量分析装置、(2)タンデム質量分析計、(3)質量分散可変のズームレンズ系の設計を行った。これらは実際に製作され、実験により計算通りの性能を有することが確認された。

また、このタンデム質量分析計によって、異常ヘモグロビンの一次構造を迅速に決めることが可能となり、本装置の有用性が示された。

次に石原君は近軸軌道に限らない、一般的な軌道計算のため、精密な電磁場計算手法に基づく軌道追跡プログラムを開発した。これを用いて四重極レンズ、円筒電場、一様磁場の端縁場のイオン光学的効果について、いくつかの新しい重要な知見を得た。さらに最適化プログラムと軌道追跡プログラムの組合せによる自動設計システムの検討を行い、この手法が実際の装置の設計に有用であることを示した。

以上の研究はイオン光学の基礎的研究のみならず、それを用いて設計した新装置は質量分析法およびその適用分野の発展に大いに寄与し得るものであり、理学博士の学位論文として十分価値あるものと認められるものである。