

氏名(本籍)	よし なり きよ み 吉 成 清 美 (茨 城 県)		
学位の種類	博 士 (理 学)		
学位記番号	博 乙 第 1701 号		
学位授与年月日	平成 13 年 2 月 28 日		
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 2 項該当		
審査研究科	数理物質科学研究科		
学位論文題目	Numerical Study of Ion Behaviors in Radiofrequency Quadrupole Mass Spectrometers (高周波数四重極場型質量分析計におけるイオン挙動の数値解析的研究)		
主査	筑波大学教授	理学博士	古野 興 平
副査	筑波大学教授	理学博士	香村 俊 武
副査	筑波大学教授	理学博士	工藤 博
副査	筑波大学助教授	理学博士	石井 亀 男
副査	(株) 日立製作所日立研究所 情報制御第 5 研究部計算科学グループ グループリーダー 福本 英 士		

論 文 の 内 容 の 要 旨

イオン質量分析は、前世紀初頭、原子核の質量を精密に測定したことにその端を発するが、今日では、物理学はもとより、医学、生物学、薬学、工学、天文学、地球科学、化学、環境科学に至るまで、自然科学における広範囲の分野で重要な研究手段となっている。最近の質量分析計には、質量分解能で 100 万分の 1 に迫る大規模の装置もあるが、一方、環境科学等では、分解能も重要ではあるが、それに優先して持ち運びが容易なコンパクト・低価格の分析計も要求されている。高周波四重極電場型の質量分析計はこれらの要求に応じ易いが、その反面、高分解能と高感度を達成するために必要な電極の組み立て精度、動作方法、動作条件等に未知の部分が多い。そこで著者はこの高周波四重極電場を用いた質量分析計の性能向上を目的として、分析計内におけるイオン挙動の解析に適した電場計算法、及びイオン運動方程式の逐次積分法を開発し、フィルター型質量分析計(QMF)並びにイオントラップによる蓄積型質量分析計(ITMS)の質量分解能や感度に対する理論的・数値解析的研究を行った。

本論文において、著者は序文で上記のような研究の背景と動機を述べた後、第二章において主要な質量分析計を概説し、高周波四重極質量分析計の今日的な必要性和位置付けを記述している。第三章には、高周波四重極質量分析計の原理、及びイオンの運動力学の一般理論が、後進の初学者にも理解できるように平易にまとめられている。著者の独創的研究は第四章と第五章に記述されている。

第四章には、著者が独自に作成したコンピュータープログラム PISA-QMS について記述されている。第一に電場計算に対する従来の環境要素法を改良することにより、メモリー容量の小さな小型コンピューターを用いて、短時間に QMF 内の高周波電場を 0.01% の高精度で計算することが可能になった。第二に ITMS については多重極展開法の採用により、四重極電場のみならず高次の電場が質量分析性能に及ぼす効果を計算できるようにした。第三にイオン運動の逐次積分については、所謂 Shanks 法が高周波四重極質量分析計に対して最も高速で、最適であることを確認広範囲にわたるシミュレーションによって確認した。また、著者が作成したプログラムは分析対象イオンと他の残留気体との衝突や空間電荷効果など、現実の分析計に即したパラメーターも含めることができる。

著者が開発・作成したプログラム PISA-QMS によって QMF と ITMS の性能評価を試みた結果は第五章に纏めら

れている。本論文の重要な結論として著者は次の三点を強調している。すなわち、

- 1) QMFの感度向上には分析計への入射イオンの焦点位置が一定の範囲でなければならない。
- 2) ITMSへの入射イオンの捕捉効率、高周波電場の位相、振幅、イオン入射エネルギーに依存する。従来、この捕捉効率の評価にはイオン振動のうち $n=0$ の基本振動のみしか考慮されていないが、著者の数値解析的研究によって、 $n=1$ 及び $n=-1$ の振動モードが非常に重要であり、捕捉効率は勿論、分析感度の質量依存性に大きな効果を与えることが明らかになった。
- 3) ITMSを用いて広く質量範囲に及ぶ質量スペクトルを測定する際、質量掃引を従来のように一定速度で行うのではなく、掃引速度を質量範囲によって変化させると、高速で高分解能の質量スペクトルの測定が可能となることが明らかになった。

審 査 の 結 果 の 要 旨

近年、質量分析器は広範囲の分野で数多く使用されており、分析対象や分析条件も益々多様化している。それに対応するため、各種の型の質量分析器が要求される。質量分析器の開発は、従来一般に、モデル分析器の作製やテスト実験を繰り返すことによって行なわれ、その開発及び建設には長い時間と多額の費用を必要とするものであった。

本論文の著者は、高周波四重極質量分析器の性能評価において、従来の方法に代わって小型のコンピューターによる数値計算・数値解析により、短時間に正確に評価を行い得ることを示した。この研究は、数理解析の分野における優れた研究であると同時に、今後、高周波四重極電場型質量分析計の技術開発に新たな手段を提供するものとして高く評価される。

よって、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。