

令和 5 年 6 月 1 日現在

機関番号：32686

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2022

課題番号：21K13982

研究課題名(和文) 分子雲における異性体存在比と温度の相関についての実験的研究

研究課題名(英文) Experimental study on correlation between isomer abundance rate and temperature in molecular clouds

研究代表者

椎名 陽子 (Shiina, Yoko)

立教大学・理学部・助教

研究者番号：70845221

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では分子雲の環境(温度・ガス密度・ガス組成・放射線強度など)を観測から知るための手がかりとすべく、分子雲中において異性体が関わる化学反応の断面積や分岐比を詳細に調べるため、液体窒素温度に冷却した高分解能移動度分析装置の開発を行った。新たに一から組み立てたエレクトロスプレーイオン源によって、アルキニンなどの高分子イオンを生成することが可能になり、移動度分析を行えるイオンの幅が大きく広がった。また、冷凍機の導入と合わせて移動管全体のアライメントを見直し、移動度分析装置のイオンの透過率が改善したことで、移動度分析の時間効率が向上し測定できるイオン種の幅が広がった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では分子雲の環境(温度・ガス密度・ガス組成・放射線強度など)を観測から知るための手がかりとすべく、分子雲中において異性体が関わる化学反応の断面積や分岐比を詳細に調べるため、液体窒素温度に冷却した高分解能移動度分析装置の開発を行った。移動度分析では、電場・磁場による分析で不可能な質量電荷比が等しい異性体イオンの分析が可能だが、2-20原子数ほどの小さな分子を測定する研究は比較的少なく、本研究で構築した装置で今後得られる成果には大きな意義があると考えられる。

研究成果の概要(英文)：A cryogenic ion mobility analyzer (77-300 K) was developed for investigating reactions involving isomers in molecular clouds. An electron impact ion source and electrospray ion source were installed to the ion mobility analyzer, which generate various ions like formate ions or amino acid ions. Also the analyzer's alignment was carefully arranged to maximize ion transmission rate so that the time efficiency of measurements were greatly improved. As a result, ion species with lower intensities became measurable.

研究分野：原子分子衝突

キーワード：宇宙科学 移動度分析

### 1. 研究開始当初の背景

星間分子観測を目的として日米欧の協力により建設された、従来を大きく超える高感度・高解像度の電波望遠鏡「ALMA 望遠鏡」が 2013 年に本格稼働を開始し、次々と新たな観測データが報告されている。観測技術の発展でより大きな星間分子が発見されるのに伴い、同組成で構造の異なる分子(異性体)も多く見つかっている。さまざまな分子雲における異性体の存在比の違いは、環境の温度・ガス密度・ガス組成・放射線強度などを知るための手がかりとなるため積極的に観測されている。例えばギ酸の立体異性体 (cis-HCOOH と trans-HCOOH) は trans-HCOOH の方が安定構造で、trans-HCOOH から cis-HCOOH への遷移にはおよそ 7000 K のエネルギーが必要だが、それよりはるかに低温である the Orion Bar photodissociation region (光解離領域) において cis-HCOOH の存在が観測されている [1]。これはこの分子雲の近くにある大質量星から発せられる遠紫外線によって、trans-HCOOH から cis-HCOOH への光異性化が起こるためと考えられており、分子雲の表面付近から分子雲内部へ進むに従って遠紫外線が減衰する様子が、cis-HCOOH 量の減少として観測されている。これらの観測結果をもとに分子雲の環境 (温度・ガス密度・ガス組成・放射線強度など) を明らかにするには、実験室において分子雲の低温・低密度環境を模擬し、異性体が関わる化学反応の断面積や分岐比を詳細に調べる必要がある。

異性体は質量が同じであるため、電場・磁場による通常の質量分析法では分別することができず、特定の異性体を分別して化学反応を調べるような実験的研究は限られた対象にしか行われていない。本研究では、従来エアロゾルの粒径分析などに用いられてきた移動度分析法をより小さな分子に適用する。ごく最近、立教大学において移動度分析装置の緩衝ガスを液体窒素温度まで冷却することでイオン選別の分解能が大幅に向上することが実証された [2]。この技術を応用し、わずかに構造が異なるだけの異性体を分別可能な、今までにない高分解能の移動度分析技術を開発する。

### 2. 研究の目的

本研究では、液体窒素温度に冷却した移動度分析装置と温度可変イオントラップを組み合わせ特定異性体を分別・蓄積する装置を開発し、異性体イオン-中性ガス反応の反応速度定数の温度依存性を測定する。さらに測定結果をそれらの異性体の分子雲中での存在比の観測結果と比較し、観測から分子雲の温度を推定するための新たな手法を構築する。

### 3. 研究の方法

計画当初に構築予定だった装置構成について以下に述べる。まず電子衝撃型イオン源で分子イオンを生成し、四重極質量分析器で目的のイオンを質量選別する。選別されたイオンは異性体選別のため、移動度分析装置へ導入される。移動度分析装置はヘリウムガス (~ 30 Pa) で満たされ、入射イオンを進行方向へ加速する一様電場が印加された管であり、入射イオンはヘリウムガスと衝突を繰り返しながら装置内を進む。この際入射イオンが到達する速さはイオンの幾何的断面積やヘリウムガスとの分極相互作用で決まるため、質量が同じ異性体でも構造によって移動度分析装置の通過時間に差が出る。移動度分析装置の下流には原子分子科学分野でよく用いられる高周波イオントラップが設置されており、目的の異性体イオンの通過時間に合わせてイオントラップ入り口の電極をスイッチすることで、特定の異性体イオンだけをトラップに蓄積することができる。構造選別された異性体イオンをイオントラップに蓄積したのち、中性ガス分子と一定時間反応させ、その後トラップ内に蓄積されているイオンをパルス電場によって引き出し、飛行時間型質量分析器で質量分析してマイクロチャンネルプレートで検出する。得られた質量スペクトルから生成物を同定し、生成物の検出数から反応速度定数を算出する。さらにイオントラップの温度を変化させることで反応温度を制御し、反応速度定数の温度依存性を測定する予定だった。

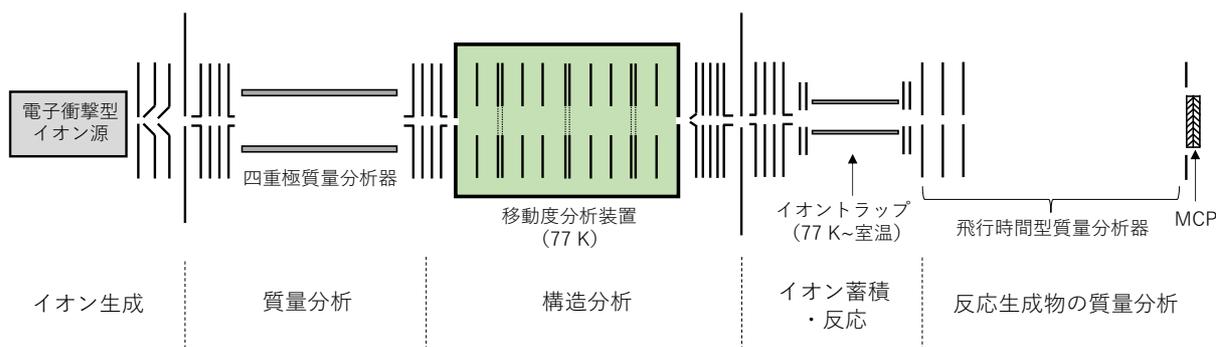


図 1. 構築予定だった異性体分別装置の概略。現状ではイオントラップ部分は未導入である。

#### 4. 研究成果

冷凍機の導入と合わせて移動管全体のアライメントを見直し、移動度分析装置のイオンの透過率が改善したことで、移動度分析の時間効率が向上し測定できるイオン種の幅が広がった。77 K-300 Kまでの温度範囲で運用する装置であるため、金属の熱収縮を考慮してアライメントを調整する必要があることがわかった。移動度分析装置の位置を実験中に調整できる機構を設計済みであり、今後導入してさらにイオンビームの透過率を安定させる予定である。

また、新たに一から組み立てたエレクトロスプレーイオン源によって、アルギニンなどの高分子イオンを生成することが可能になり、移動度分析を行えるイオンの幅が大きく広がった。電子衝撃イオン源で生成できるギ酸などの小さい分子に加え、アミノ酸のような大きな分子でも移動度分析実験が行えるようになった。

移動度分析では、電場・磁場による分析で不可能な質量電荷比が等しい異性体イオンの分析が可能である。また、移動度分析は大気分析などで広く利用されている技術だが、2-20 原子数ほどの小さな分子を測定するのに適した低温・高分解能移動度分析の研究は比較的少なく、本研究で構築した装置で今後得られる成果には大きな意義があると考えられる。今後、電子衝撃イオン源・エレクトロスプレーイオン源から生成される種々のイオンに対して移動度分析を行い、異性体イオン-中性ガス反応の反応速度定数の温度依存性を測定するとともに、測定結果をそれらの異性体の分子雲中での存在比の観測結果と比較し、観測から分子雲の温度を推定するための新たな手法を構築する予定である。

[1] S. Cuadrado et al., *Astronomy and Astrophysics* 596, L1 (2016).

[2] K. Takaya et al., *Chemical Physics Letters* 739, 137045 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 椎名 陽子, 江淵 欣久, 中野 祐司
2. 発表標題 低温移動度分析を用いた異性体イオンを含む反応の反応速度係数の測定
3. 学会等名 原子衝突学会第46回年会（ポスター発表）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 椎名陽子, 中野祐司
2. 発表標題 低温移動度分析を用いた星間空間における異性体存在比についての研究
3. 学会等名 第10回イオン移動度研究会（オンライン）（招待講演）
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------