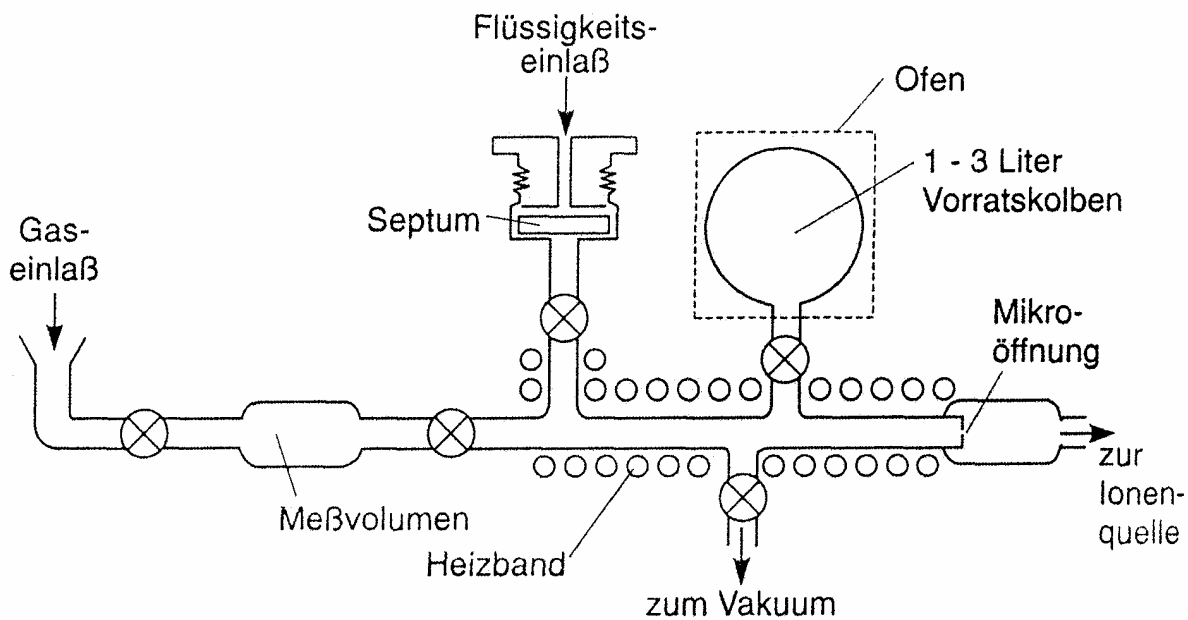
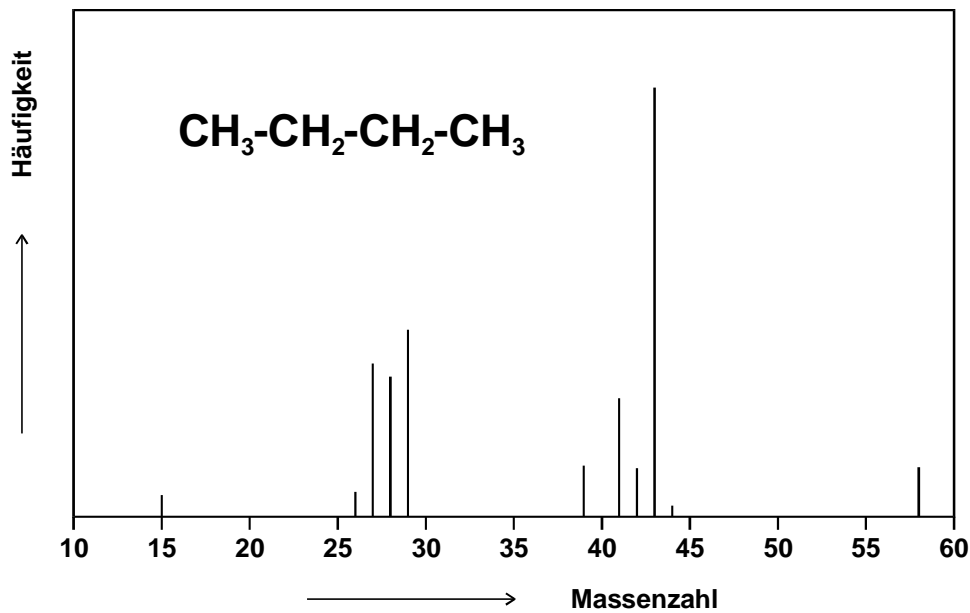


Schema eines Massenspektrometer-Systems



#### Einlasssystem für direkte Probenaufnahme

Es wird ein Molekularstrahl erzeugt, der in die Ionenquelle eintritt. Die Probe kann auch über eine beheizte Sonde direkt in der Ionenquelle verdampft werden.

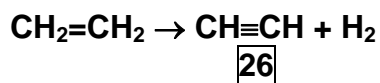
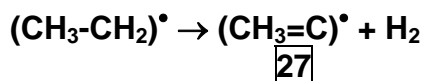
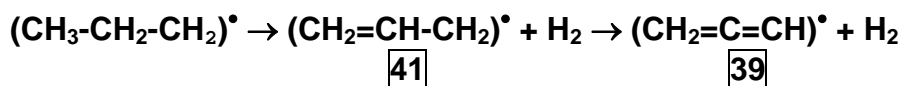
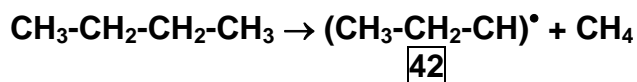
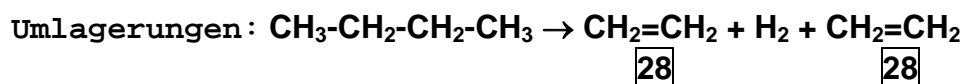
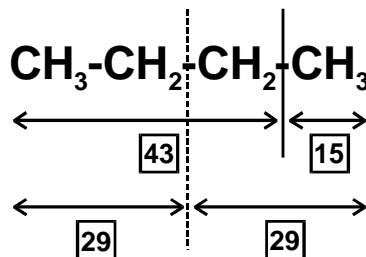


Massenspektrum von n-Butan (Elektronenstoß-Ionisation mit 70 eV)  
Gemessen werden einfach positiv geladene Ionen.

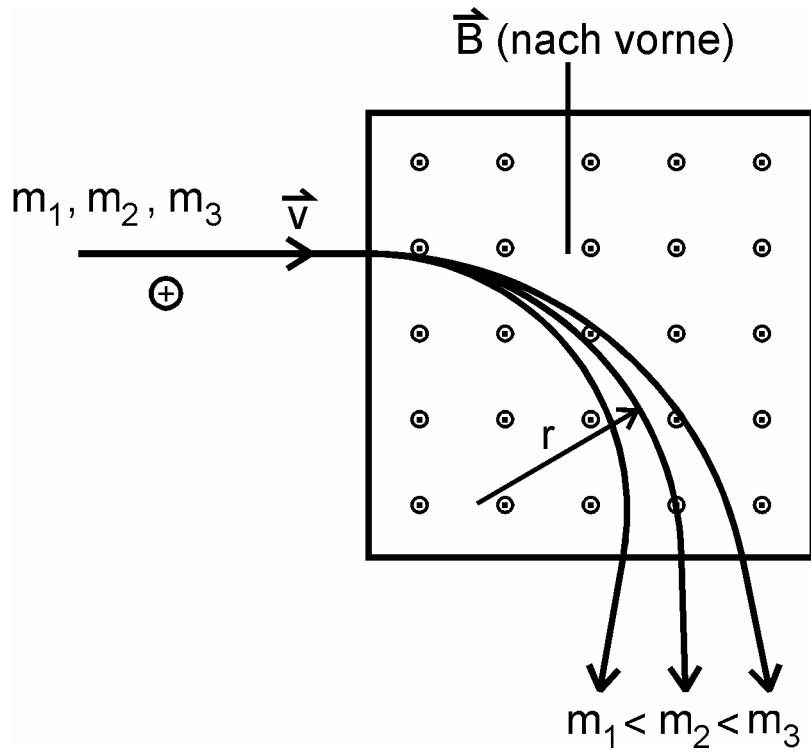
Massenzahl des Molekülions M<sup>+</sup>: 58

Die übrigen Ionenmassen entstehen folgendermaßen:

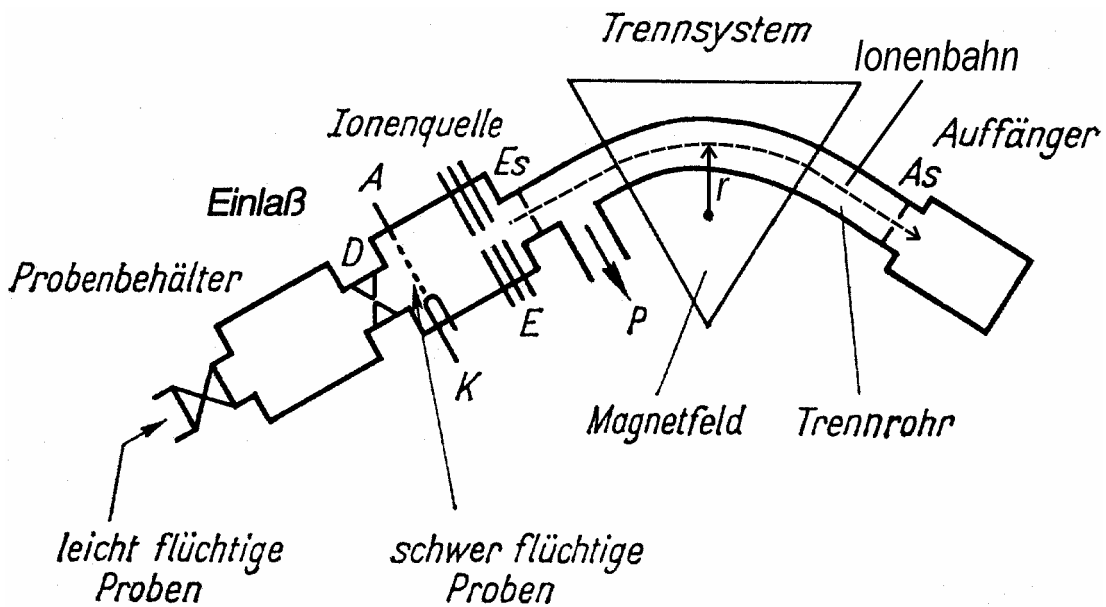
Fragmentierungen:



Die schwache Linie bei der Massenzahl 44 entsteht durch ein <sup>13</sup>C-Atom im Radikal-Ion (CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>)<sup>•+</sup>.

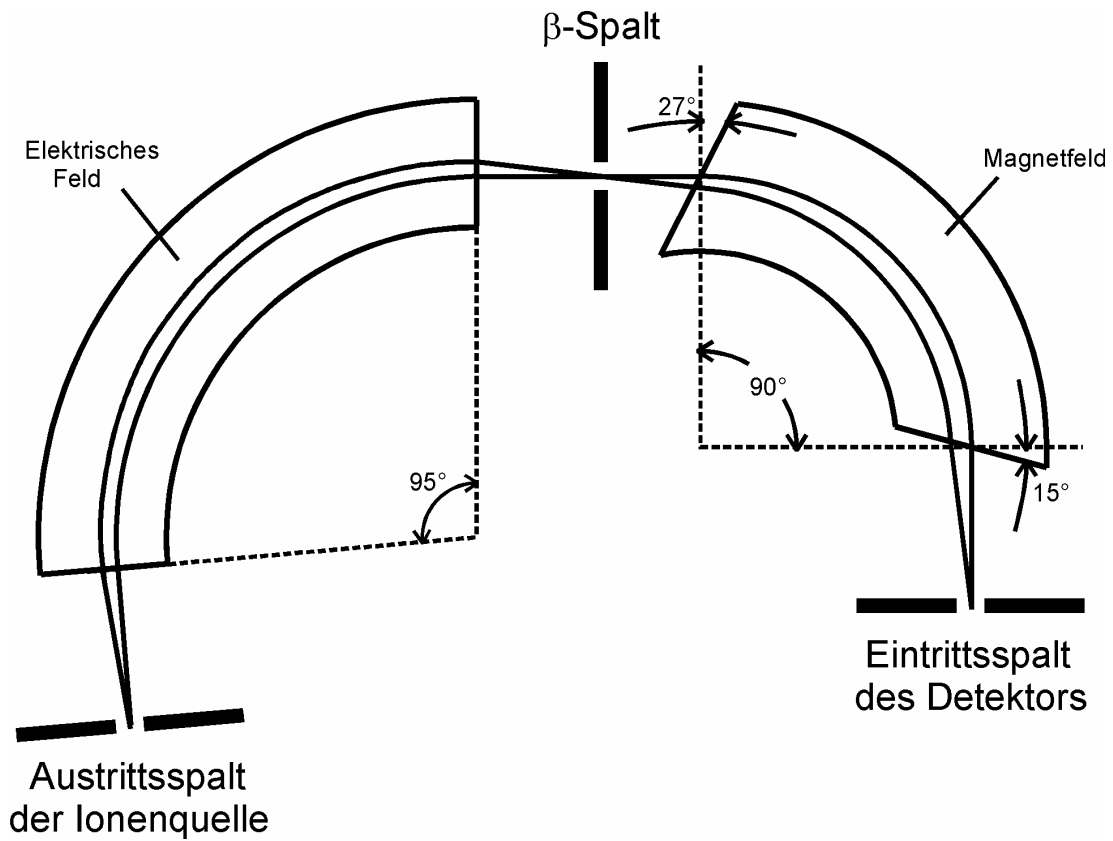


Magnetische Ablenkung

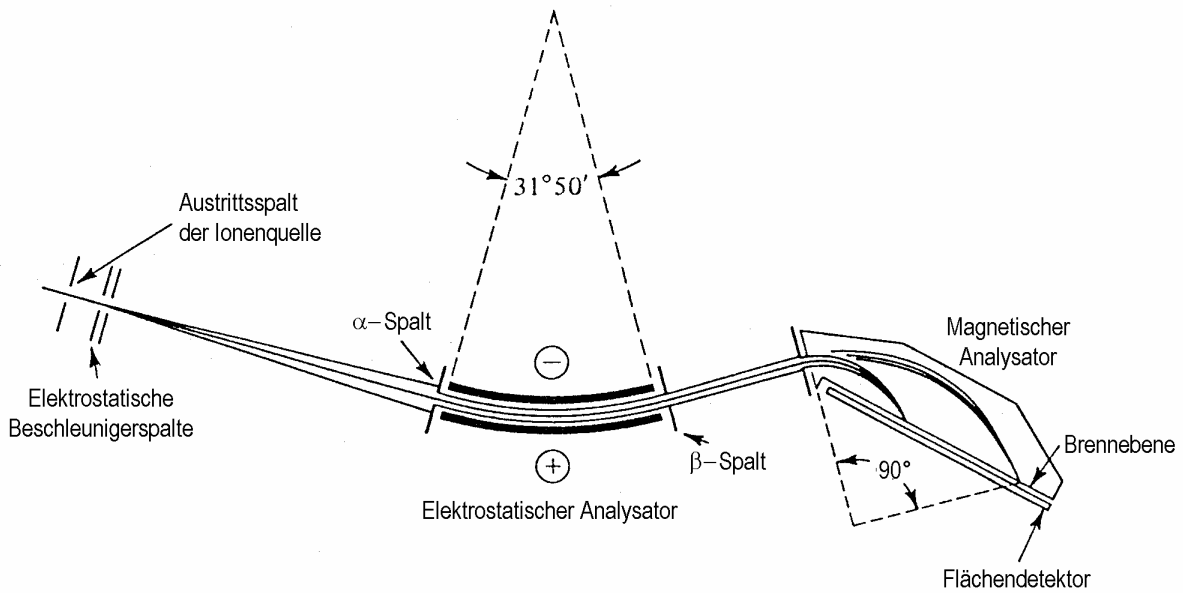


Schema eines einfachen 60°-Sektorfeld-Massenspektrometers mit Elektronenstoßionisation

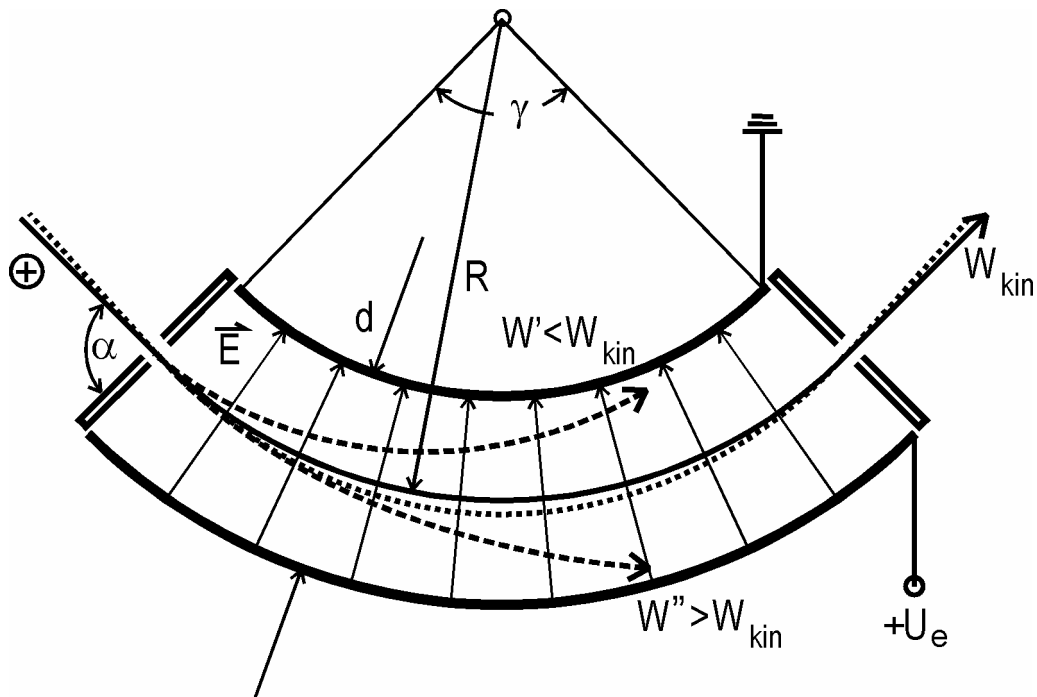
A: Anode; K: Kathode; D: Düse; E: Beschleunigungselektroden;  
P: Vakuumpumpe; Es: Eintrittsspalt; As: Austrittsspalt



Doppelt-fokussierendes Massenspektrometer in Nier-Johnson-Geometrie



Doppelt-fokussierendes Massenspektrometer in Mattauch-Herzog-Geometrie



Elektrische Trennstufe zur Energiefokussierung

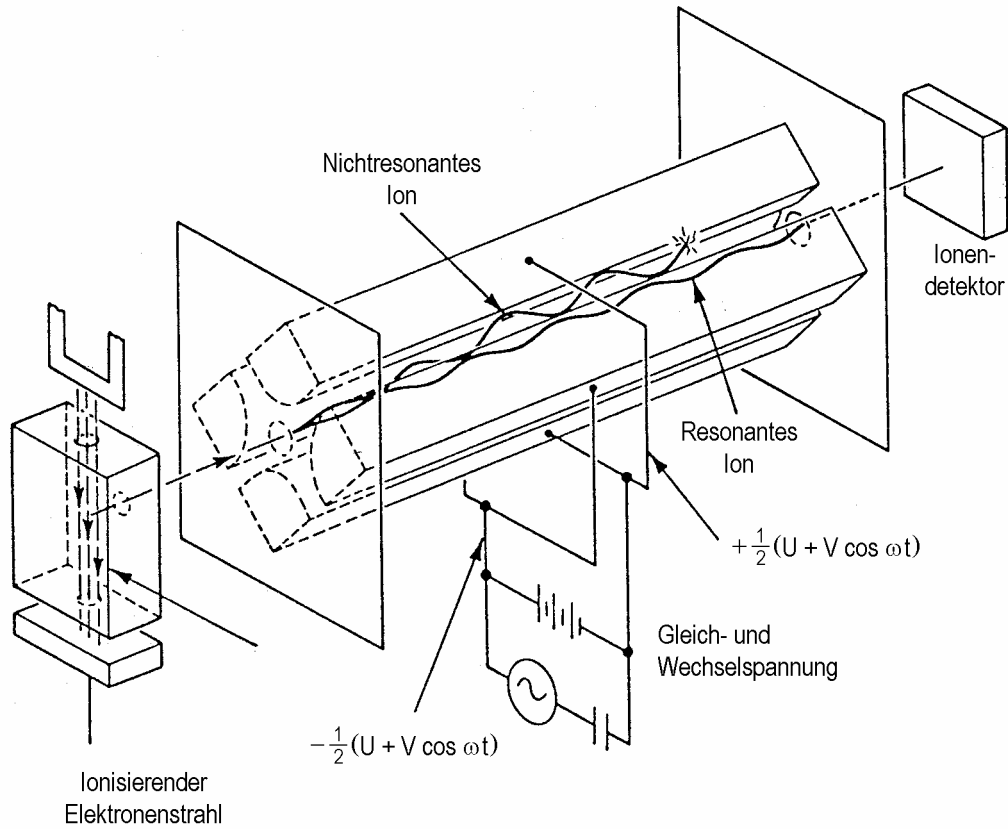
In der Realität ist  $d \ll R$ , d.h.  $|\vec{E}| = \frac{U_e}{d}$

Die durchgezogene Linie ist eine zu den Kondensatorplatten konzentrische Bahn positiver Ionen mit der Energie  $W_{kin}$ .

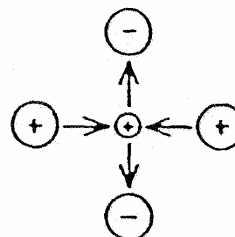
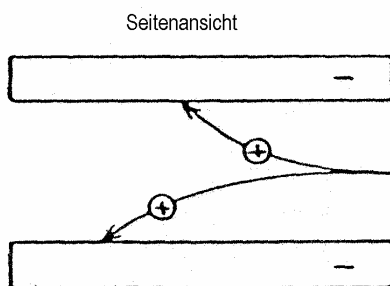
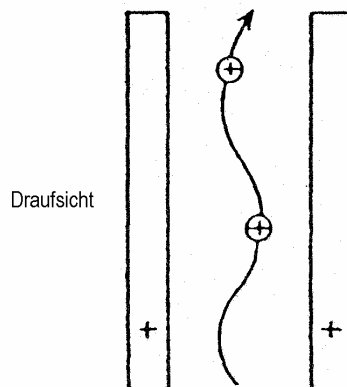
Aus den Bewegungsgleichungen geladener Teilchen im Zylinderfeld folgt, daß auch Ionen, die unter einem Winkel  $\alpha$  von etwas mehr als  $90^\circ$  gegen den Vektor  $\vec{E}$  in das Feld eintreten (gepunktete Bahn), dann auf den Austrittsspalt treffen, wenn sie auch die Energie  $W_{kin}$  aufweisen. Für Eintrittswinkel  $\alpha < 90^\circ$  gilt dies nicht.

Für die dargestellte Geometrie, bei der die Brennpunkte der Ionenbahnen im Ein- bzw. Austrittsspalt liegen, ergibt sich  $\gamma \approx 120^\circ 37'$ .

Die gestrichelten Bahnen gelten für Energien  $W' \neq W_{kin}$ .

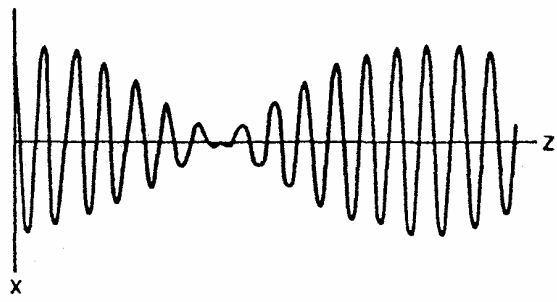


Schema eines Quadrupol-Massenspektrometers

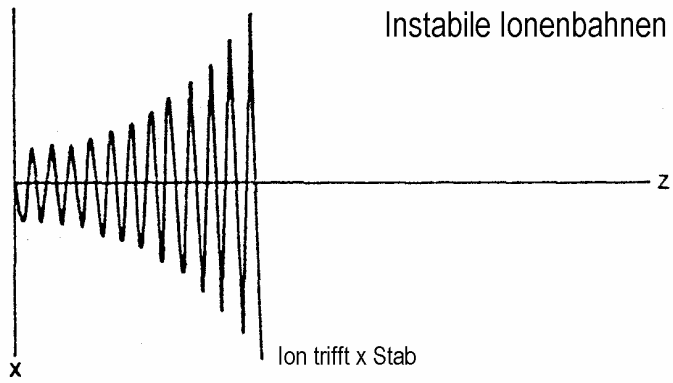
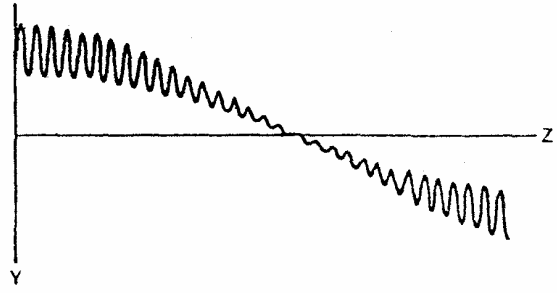
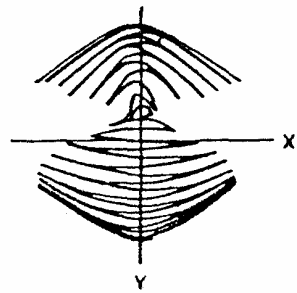


Ansicht in Richtung der Ionenbahn

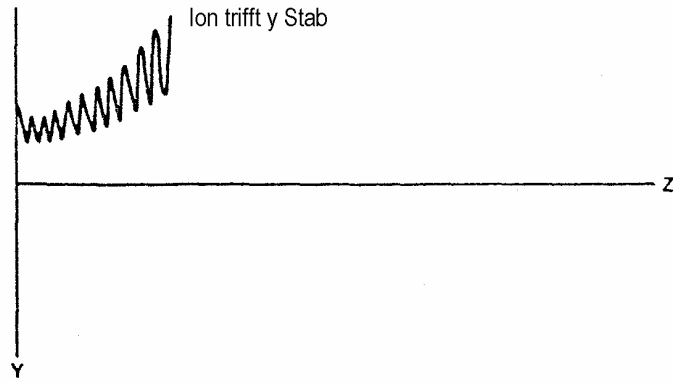
Plausibilitätsbetrachtung zur Stabilität von Ionenbahnen im Quadrupolfeld

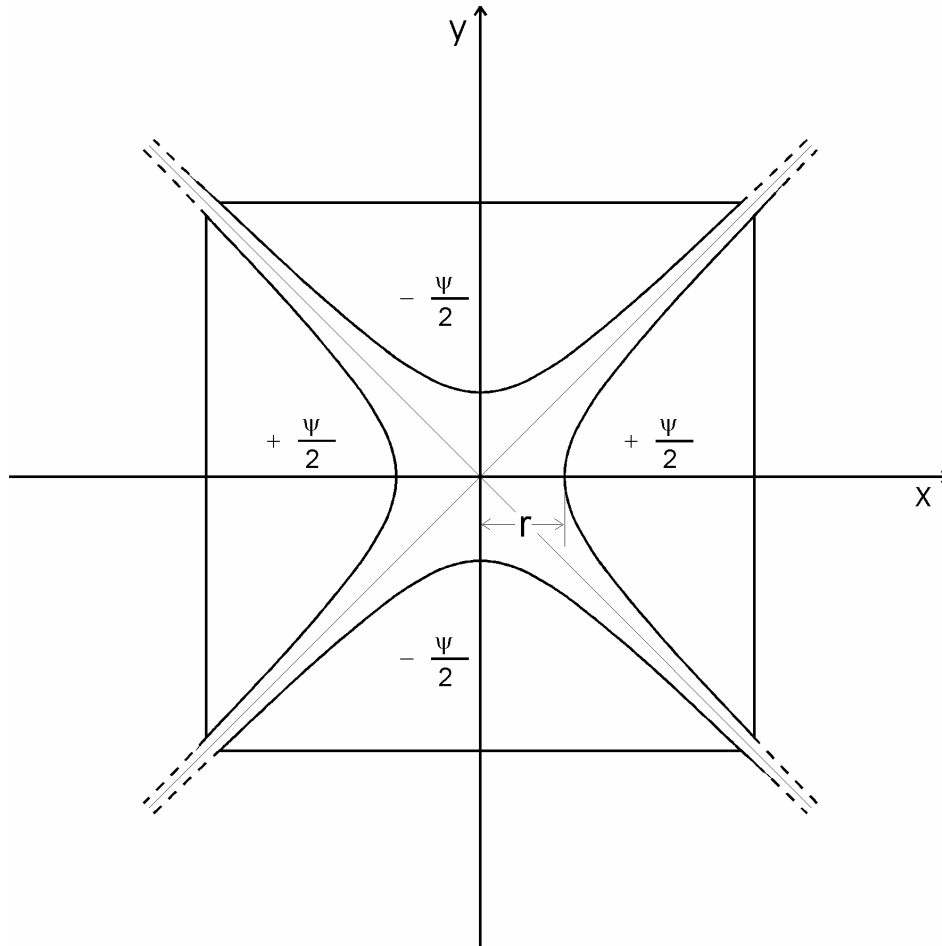


Stabile Ionenbahnen



Instabile Ionenbahnen





Geometrie des Quadrupolfeldes

Es ist:  $\psi = U + V \cos \omega t$

Für das elektrische Potential zwischen den Stäben gilt dann:

$$\phi(x, y) = \frac{\psi}{2r^2} (x^2 - y^2)$$

Die Bewegungsgleichungen  $\bar{F} = m\bar{a} = e\bar{E} = -e \text{ grad } \phi$  lauten:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{e}{mr^2} (U + V \cos \omega t) x = 0; \quad \frac{d^2y}{dt^2} - \frac{e}{mr^2} (U + V \cos \omega t) y = 0; \quad \frac{d^2z}{dt^2} = 0$$

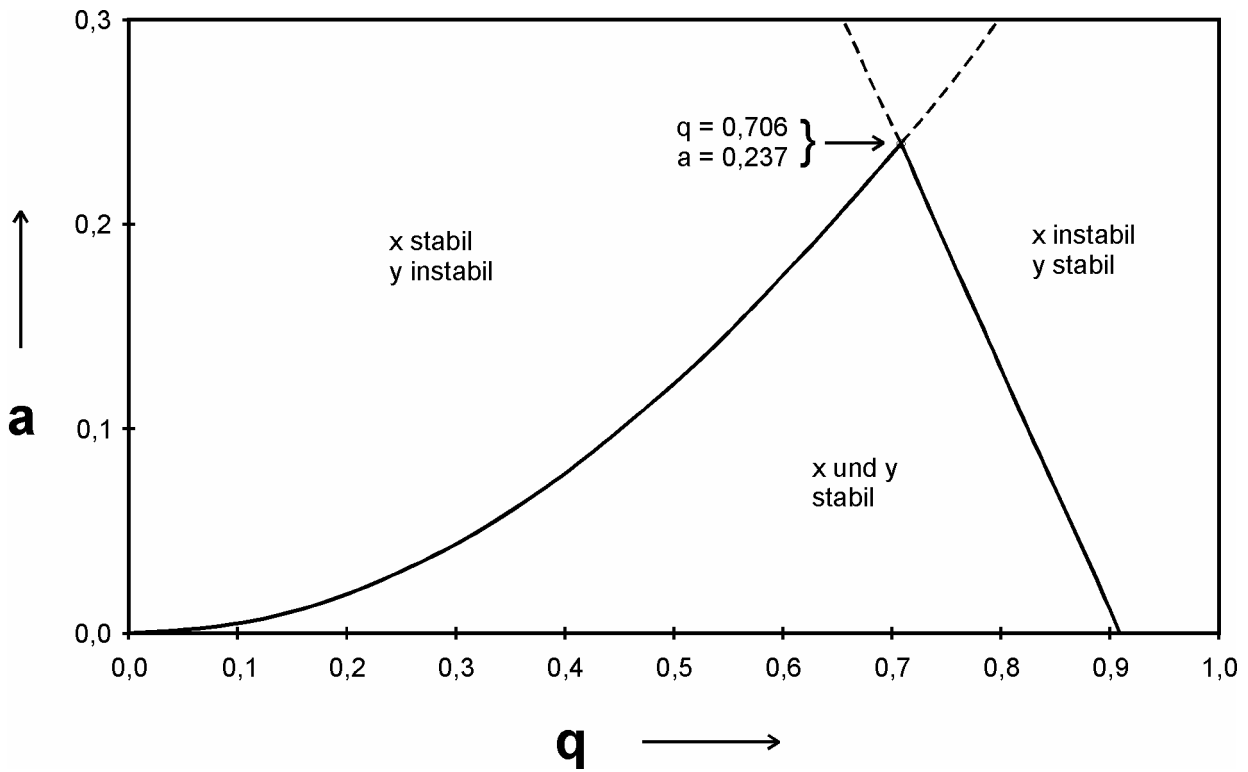
Mit der Transformation  $\Phi = \frac{\omega t}{2}$  und den Abkürzungen

$$a = \frac{4eU}{m\omega^2 r^2}; \quad q = \frac{2eV}{m\omega^2 r^2}$$

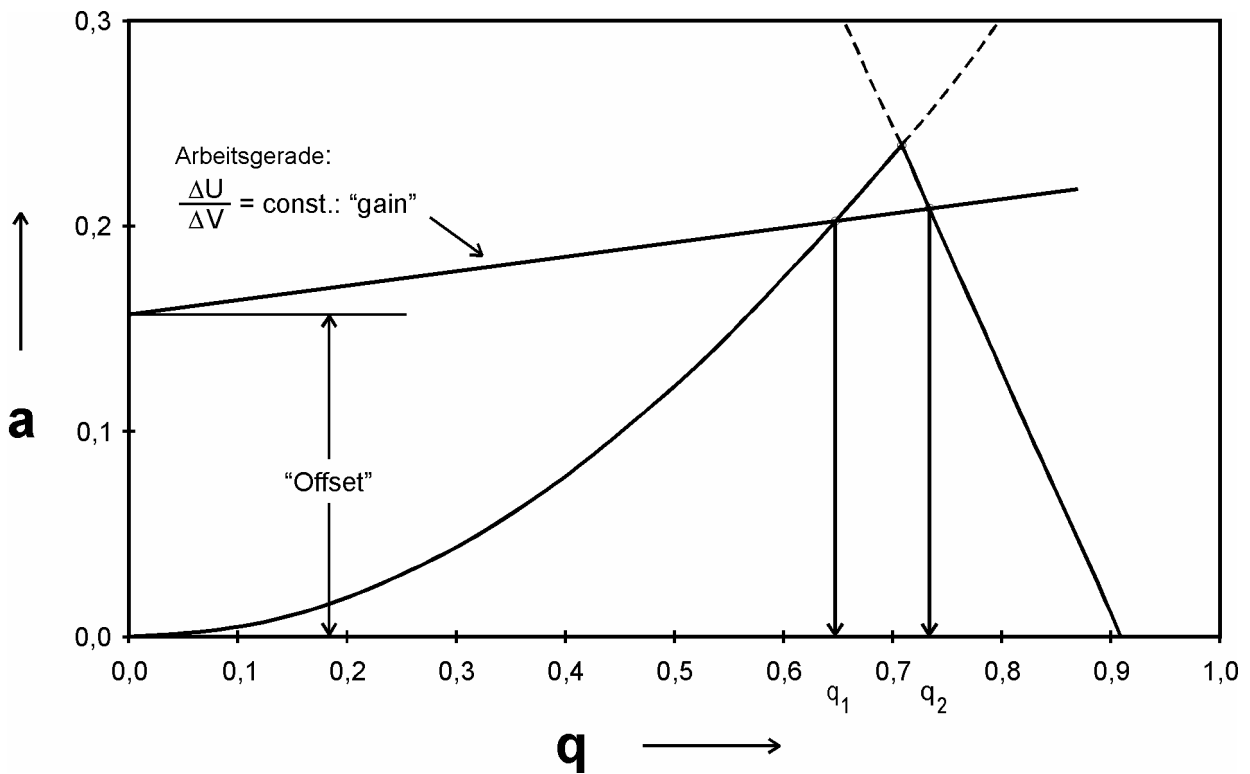
ergeben sich die Mathieschen Differentialgleichungen:

$$\frac{d^2x}{d\Phi^2} + (a + 2q \cos 2\Phi)x = 0 \quad \text{und} \quad \frac{d^2y}{d\Phi^2} - (a + 2q \cos 2\Phi)y = 0$$

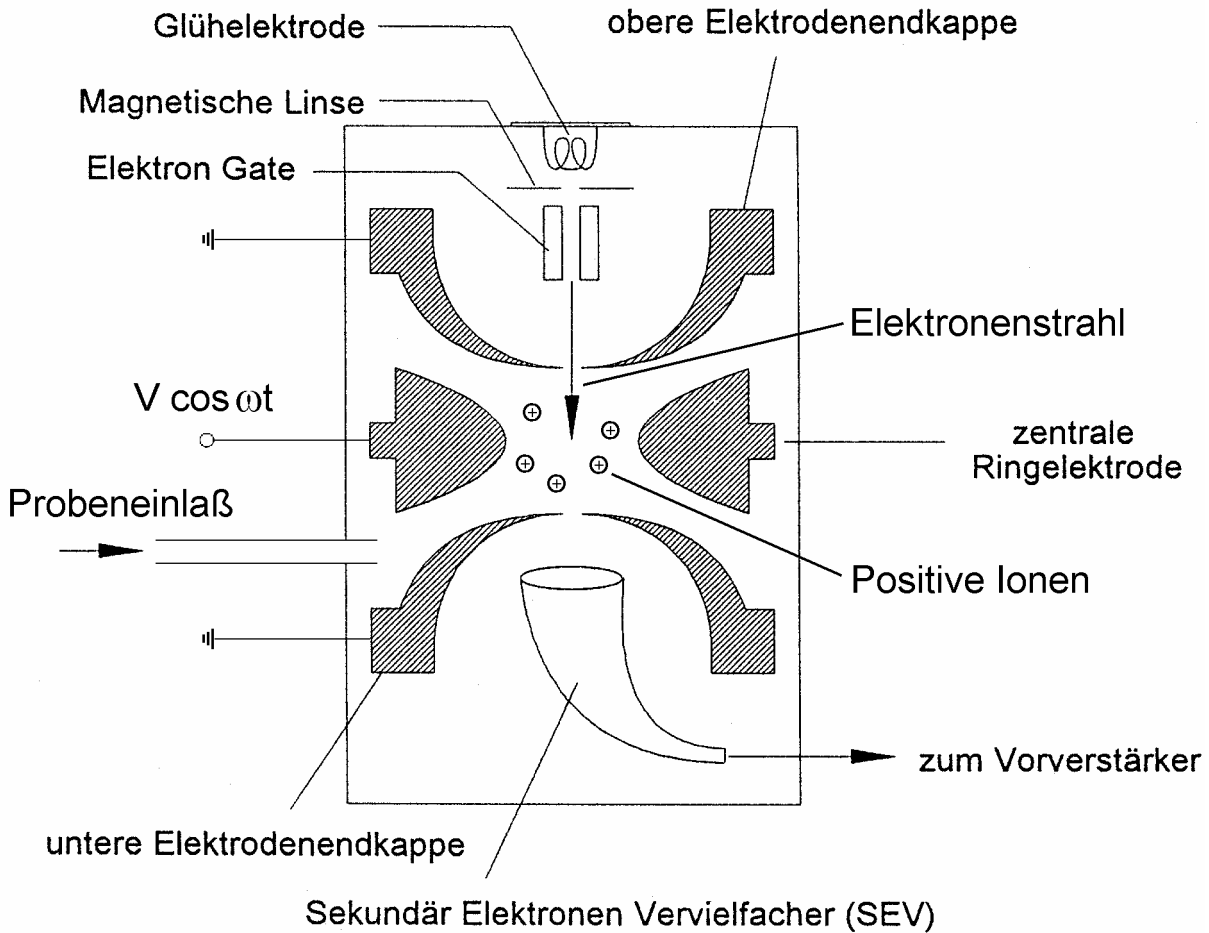




Gebiete stabiler Lösungen der Mathieuschen Differentialgleichungen



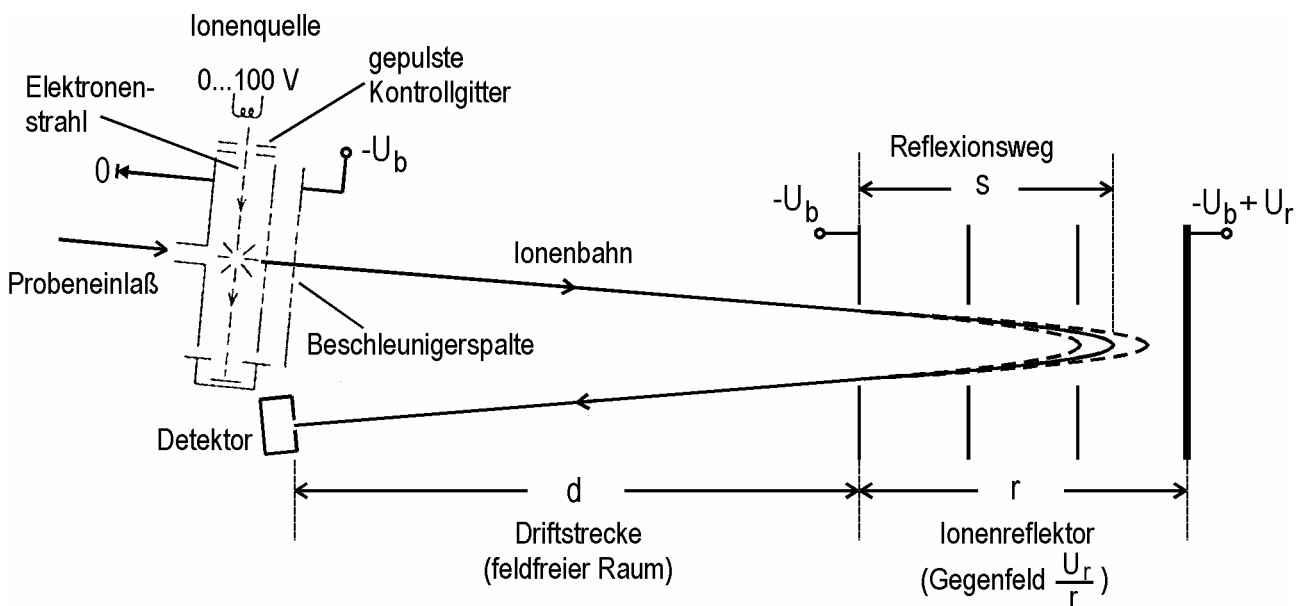
Der Massenbereich wird durch gleichzeitige Variation von  $\Delta U$  und  $\Delta V$  mit  $\Delta U/\Delta V = \text{const.}$  durchlaufen. Der Stabilitätsbereich zwischen  $q_1$  und  $q_2$  bleibt dabei konstant.



Schema einer Ionenfalle (Ion Trap)

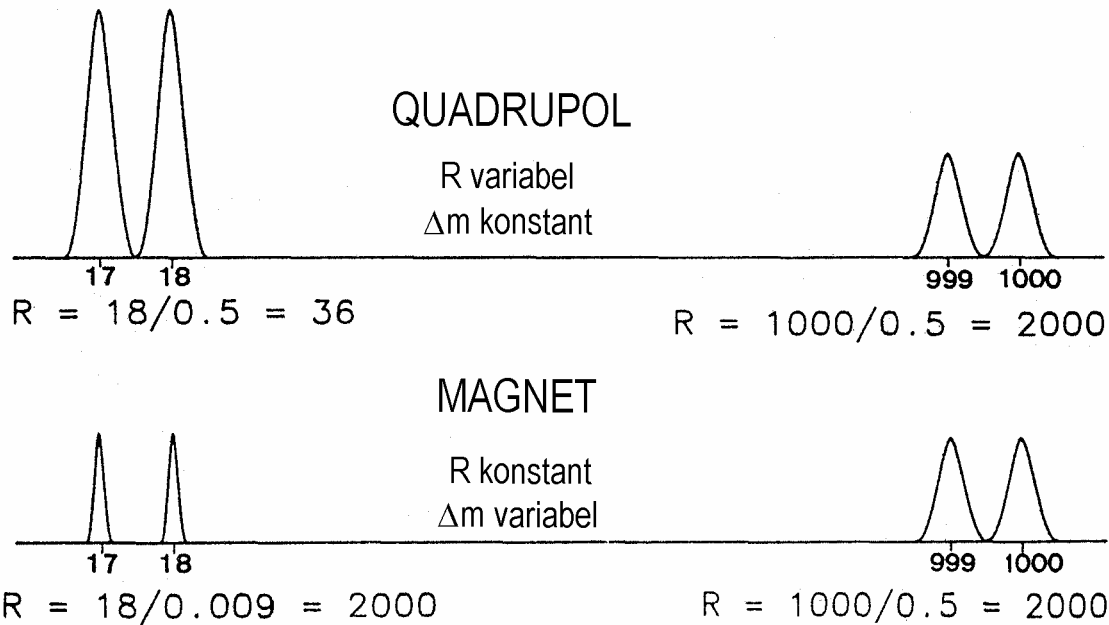
Die Elektroden haben die Form von Rotationshyperboloiden.

Die Ionisation kann als Elektronenstoß- oder als chemische Ionisation erfolgen.



Schema eines Flugzeit-Massenspektrometers mit Ionenreflektor

## Auflösungsvermögen von Magneten und Quadrupolen



### Quadrupol:

Bei einer bestimmten Hochfrequenzspannung  $V$  wird bei  $q_1$  das Ion mit der Masse  $m_1 = \frac{2eV}{q_1 \omega^2 r^2}$  stabil, während das Ion mit der Masse  $m_2 = \frac{2eV}{q_2 \omega^2 r^2}$  gerade noch stabil ist. Für die Auflösung gilt also

$$\Delta m = m_2 - m_1 = \frac{2eV}{\omega^2 r^2} \left( \frac{1}{q_2} - \frac{1}{q_1} \right) = \text{const.}$$

### Magnet:

Für die Ionenbahn im Magnetfeld gilt:  $m \frac{v^2}{r} = evB$  und  $m \frac{v^2}{2} = eU_b$

Elimination von  $v$  und Auslösen nach  $m$  liefert:  $m = \frac{r^2 B^2 e}{2U_b}$

Daraus folgt:  $\frac{dm}{m} = 2 \frac{dr}{r}$ ;

dabei ist  $dr$  der Bereich der Radien derjenigen Bahnen, die noch in den Detektor führen; somit ist  $dr = \text{const.}$

Also ist:  $R = \frac{m}{\Delta m} = \frac{1}{2} \frac{r}{dr} = \text{const.}$