Zur Theorie der für alle Massen doppelfokussierenden Massenspektrographen

Von ALFRED KLEMM

Aus dem Kaiser-Wilhelm-Institut für Chemie, Tailfingen

(Z. Naturforschg. 1, 137—141 [1946]; eingegangen am 1. März 1946)

Es wird die Theorie von Massenspektrographen, bei denen für alle Massen Doppelfokussierung herrscht, auf Grund von Arbeiten aus der Mattauchschen Schule neu dargestellt. Die ionenoptischen Eigenschaften des homogenen Magnetfeldes werden rein geometrisch abgeleitet. Die Geschwindigkeitsfokussierungsbedingung ergibt sich durch Gleichsetzung der Geschwindigkeitsdispersionen des elektrischen und magnetischen Feldes. Die Beziehungen $s'' = sa/a_e$ für die Bildbreite und $d = a_e/(2s)$ für das Auflösungsvermögen werden unmittelbar abgeleitet. Die graphische Darstellung der Ergebnisse vermittelt einen guten Überblick der möglichen Anordnungen. Durch ein Zahlenbeispiel wird auf einen speziellen Fall mit 180° magnetischer Ablenkung hingewiesen.

R. Herzog¹, J. Mattauch und R. Herzog² sowie R. Herzog und V. Hauk³ haben eine allgemeine Theorie doppelfokussierender Massenspektrographen angegeben, die auch die Spezialfälle mit geradliniger Magnetfeldbegrenzung und Bildkurve umfaßt. Einer dieser Spezialfälle ist der bekannte Mattauch-Herzogscher Massenspektrograph, mit dem seit 1936 von Mattauch und Mitarbeitern zahlreiche Untersuchungen durchgeführt worden sind, und den neuerdings H. Ewald technisch vervollkommen hat. Da die Fälle geradliniger Polschuhbegrenzung und Bildkurve konstruktive und meßtechnische Vorteile bieten, und deshalb den Experimentator besonders interessieren, soll ihre Theorie in der vorliegenden Arbeit noch einmal für sich behandelt werden.

Die Theorie

Die Theorie ist zweidimensionale Ionenoptik erster Näherung. Das Ionenbündel geht erst durch ein elektrisches und dann durch ein magnetisches Feld (Abb. 1). Denkt man sich den Objektspalt punktförmig und sieht man von den auszublenden- den bzw. zu fokussierenden Nebenstrahlen ab, so laufen alle Ionen bis zum Eintritt ins Magnetfeld auf dem Mittelstrahl. Sie haben, wenn sie alle einwertig sind, die gleiche Energie, da sie im elektrischen Feld den gleichen Weg durchlaufen. Im

Magnetfeld, das homogen angenommen wird, beschreiben sie Kreisbahnen, die der Gleichung

$$Ha = 144 \sqrt{MV} \quad (1)$$

genügen. Dabei ist H (Gauss) die Feldstärke, a (cm) der Krümmungsradius, M (ME) das Isotopengewicht und V (Volt) die Energie des Ions.

Abb. 1. Lage der Felder und Winkel.

Die hintere Magnetfeldbegrenzung und die photographische Platte liegen bei den betrachteten Anordnungen auf Geraden durch den Eintrittspunkt des Mittelstrahls in das Magnetfeld. Dann gilt für den Abstand q eines Punktes auf der Platte vom Eintrittspunkt:

$$q = (q/a) (144 \sqrt{VM}/H) \quad (2)$$

Es sei g'' der auf einem Mittelstrahl gemessene Abstand des Brennpunktes des Magnetfeldes vom Austrittspunkt aus dem Magnetfeld. Wir werden zeigen [siehe Gl. (11)], daß g'' proportional zu a ist und von der durch ϵ' gegebenen Richtung der

¹ Z. Physik 89, 447 [1934].

² Z. Physik 89, 786 [1934].

³ Ann. Physik 33, 89 [1938].

⁴ Z. Naturforschg. 1, 131—136 [1946].

Abb. 2. Brennweite g'' des Magnetfeldes.

vorderen Magnetfeldbegrenzung abhängt. Die Brennpunktlinie des Magnetfeldes ist also eine Gerade durch den Eintrittspunkt ins Magnetfeld, und es besteht die Möglichkeit, durch geeignete Wahl von ϵ' die Brennpunktlinie des Magnetfeldes mit der photographischen Platte zur Deckung zu bringen. Bringt man nun den Objektspace in den Brennpunkt des elektrischen Feldes, so entstehen auf der photographischen Platte Bilder des Objektspace, deren Lage von der Masse abhängt. Weiter werden wir zeigen, daß durch geeignete Wahl des noch frei verfügbaren elektrischen Ablenkungswinkels Φ_e erreicht werden kann, daß auch Strahlen, die den Objektspace mit vom Mittelstrahl abweichender Geschwindigkeit verlassen, in den Bildern des Objektspace auf der photographischen Platte fokussiert werden.

Wir wollen nun die Beziehungen ableiten, die man zum Verständnis der hier besprochenen Anordnungen benötigt. Bei der Herleitung werden Produkte kleiner Größen stets vernachlässigt. Kleine Größen sind solche dimensionslose Größen, die beim Übergang von einem Nebenstrahl zum Mittelstrahl verschwinden.

Als erstes bestimmen wir die *Lage des Brennpunktes eines homogenen Magnetfeldes* mit scharfen Begrenzungen, wobei die hintere Begrenzung auf einer Geraden durch den Eintrittspunkt liegt. Wir betrachten einen Mittelstrahl mit dem Radius a (Abb. 2) und fragen, wo ein Nebenstrahl mit gleichem Radius, der um y_1 gegen den Mittelstrahl parallel-verschoben ins Feld eintritt, den Mittel-

strahl schneidet. Der Schnittpunkt ist der Brennpunkt. Wir bestimmen den Abstand g'' des Brennpunktes vom Austrittspunkt durch die Gleichung

$$g'' = -y_2/A'' \quad (3)$$

Dabei ist A'' der Winkel, um den man den austretenden Nebenstrahl gegen den Uhrzeigersinn drehen muß, um ihm die Richtung des austretenden Mittelstrahls zu geben. y_2 ist der Abstand des Nebenstrahls vom Mittelstrahl beim Austritt. (Die Indices 1 und 2 bezeichnen Eintritt und Austritt.)

Aus Dreiecken der Abb. 2 folgt:

$$y_1 = b \cos \epsilon', \quad (4)$$

$$y_2 = b \cos (\Phi - \epsilon'), \quad (5)$$

$$c = b \cos [(\Phi/2) - \epsilon'], \quad (6)$$

$$c = d \sin (\Phi/2), \quad (7)$$

$$d = -a A''. \quad (8)$$

Durch Elimination von b in (4) und (5) erhält man

$$y_2 = y_1 \frac{\cos (\Phi - \epsilon')}{\cos \epsilon'}. \quad (9)$$

Weiter folgt aus (4), (6), (7) und (8) durch Elimination von b , c und d :

$$A'' = -\frac{y_1 \cos [(\Phi/2) - \epsilon']}{a \cos \epsilon' \sin (\Phi/2)}. \quad (10)$$

Einsetzen von (9) und (10) in (3) ergibt

$$\begin{aligned} \frac{g''}{a} &= \frac{\cos (\Phi - \epsilon') \sin (\Phi/2)}{\cos [(\Phi/2) - \epsilon']} = \\ &= [\operatorname{ctg} (\Phi/2) + \operatorname{tg} (\Phi - \epsilon')]^{-1}. \end{aligned} \quad (11)$$

Als zweites berechnen wir die *Geschwindigkeitsdispersion des Magnetfeldes* und lassen zu diesem Zweck ein Ion auf dem Mittelstrahl vom Radius a ins Magnetfeld eintreten, geben ihm aber einen Ra-

Abb. 3. Geschwindigkeitsdispersion des Magnetfeldes bei beliebiger hinterer Magnetfeldbegrenzung.

dus $a(1+\beta)$, wo β eine kleine Größe ist, und fragen nach dem Austrittswinkel A'' dieses Ions. Die Richtung der hinteren Magnetfeldbegrenzung wählen wir bei dieser Betrachtung beliebig. Aus Abb. 3 entnehmen wir für die Strecke AB :

$$AB = a\beta(1 - \cos \Phi). \quad (12)$$

Aus $OC = AC = BD = a$ und $CD = y_2$ folgt $AB = y_2$, also mit (12)

$$y_2 = a\beta(1 - \cos \Phi). \quad (13)$$

Ferner entnimmt man der Abb. 3 die Beziehungen

$$A'' = \delta + \alpha'' \quad (14)$$

$$a\delta = y_2 \operatorname{tg} \epsilon'' \quad (15)$$

$$a\alpha'' = a\beta \sin \Phi \quad (16)$$

Einsetzen von (13), (15) und (16) in (14) ergibt

$$A'' = \beta [\sin \Phi + (1 - \cos \Phi) \operatorname{tg} \epsilon'']. \quad (17)$$

Wir gehen nun zum *elektrischen Feld* über. Das Feld ist in einem sektorförmigen Gebiet vom Scheitelwinkel Φ , in dem man die ebenen Polarkoordinaten r und φ benutzt. Die Feldstärke ist radial gerichtet und unabhängig von φ . Der Mittelstrahl tritt tangential ein und aus und beschreibt im Feld eine Kreisbahn vom Radius a . Man betrachtet dem Mittelstrahl benachbarte Bahnen, führt also ein

$$r = a(1 + z), \quad (18)$$

wo z eine kleine Größe ist. Die Feldstärke ist

$$E = E_0 a/r = E_0(1 - z) \quad (19)$$

und das Potential

$$V = -aE_0 \ln(r/a) = aE_0 z. \quad (20)$$

Für Ionen, die sich auf Kreisen bewegen, gilt

$$mv_0^2/r = -eE, \quad (21)$$

wo e , m und v_0 Ladung, Masse und Geschwindigkeit der Ionen sind.

Der *Brennpunkt des elektrischen Feldes* ist der Schnittpunkt eines um y_1 gegen den Mittelstrahl parallel-verschobenen eintretenden Nebenstrahles der Energie $mv_0^2/2$ mit dem Mittelstrahl. Beim Eintritt in das Feld gewinnt jener Strahl die potentielle Energie

$$eV_1 = -eaE_0 z_1 = mv_0^2 z_1, \quad (22)$$

wobei seine kinetische Energie um den gleichen Betrag kleiner wird:

$$mv_1^2/2 = (mv_0^2/2) - mv_0^2 z_1. \quad (23)$$

Seine Anfangsgeschwindigkeit im Feld ist also

$$v_1 = v_0(1 - z_1). \quad (24)$$

Demnach lauten die Anfangsbedingungen für die Bahn im Feld:

$$z = z_1, \dot{z} = 0, \varphi = 0, \dot{\varphi} = v_1/r_1 = (v_0/a)(1 - 2z_1). \quad (25)$$

Wegen der Konstanz des Drehimpulses bei Wirksamkeit einer Zentralkraft folgt aus dem Anfangsdrehimpuls

$$mr_1^2 \dot{\varphi}_1 = m a v_0 \quad (26)$$

für die Winkelgeschwindigkeit

$$\dot{\varphi} = (v_0/a)(1 - 2z). \quad (27)$$

Weiter liefert die Gleichgewichtsbedingung der Radialkräfte

$$m\ddot{r} = m\dot{r}\varphi^2 + eE, \quad (28)$$

wenn man r , $\dot{\varphi}$ und eE durch a , z , v_0 und m ausdrückt:

$$\ddot{z} = -2(v_0^2/a^2)z. \quad (29)$$

Mit Berücksichtigung der Anfangsbedingungen lautet die Lösung

$$z = z_1 \cos[\sqrt{2}(v_0/a)t]. \quad (30)$$

Beim Austritt ist also der Abstand des Nebenstrahls vom Mittelstrahl

$$y_2 = y_1 \cos(\sqrt{2}\Phi), \quad (31)$$

und der Winkel zwischen Nebenstrahl und Mittelstrahl

$$A'' = \frac{1}{a} \frac{dy_2}{d\Phi} = -\frac{y_1}{a} \sqrt{2} \sin(\sqrt{2}\Phi). \quad (32)$$

Aus $g'' = -(y_2/A'')$ folgt für den Abstand des Brennpunktes vom Austrittspunkt

$$g'' = (a/\sqrt{2}) \operatorname{ctg}(\sqrt{2}\Phi). \quad (33)$$

Zur Berechnung der *Geschwindigkeitsdispersion des elektrischen Feldes* lassen wir ins elektrische Feld auf dem Mittelstrahl ein Ion eintreten, dessen Geschwindigkeit um $v_0\beta$ größer ist als die Geschwindigkeit von einem Ion gleicher Masse, das im Feld auf dem Mittelstrahl bleibt. Die Anfangsbedingungen für die Bahn im Feld sind dann:

$$z = 0, \dot{z} = 0, \varphi = 0, \dot{\varphi} = (v_0/a)(1 + \beta). \quad (34)$$

Der Satz der Erhaltung des Drehimpulses liefert diesmal

$$\dot{\varphi} = (v_0/a)(1 + \beta - 2z). \quad (35)$$

Das gibt, in die Gleichgewichtsbedingung der Radialkräfte eingesetzt:

$$\ddot{z} = 2(v_0^2/a^2)(\beta - z). \quad (36)$$

Die Lösung lautet

$$z = \beta [1 - \cos(\sqrt{2} \Phi - a)] \quad (37)$$

Demnach ist

$$y_2 = a\beta [1 - \cos(\sqrt{2} \Phi)] \quad (38)$$

und

$$A'' = \frac{1}{a} \frac{dy_2}{d\Phi} = \beta \sqrt{2} \sin(\sqrt{2} \Phi). \quad (39)$$

Man macht nun die Richtung A_e'' , mit der ein auf dem Mittelstrahl ins elektrische Feld eintretendes Ion der Geschwindigkeit $v_0(1+\beta)$ und der Masse m (wobei $m v_0^2/a_e = -e E_0$) aus dem elektrischen Feld austritt, gleich der Richtung $-A'$, mit der ein Ion der Geschwindigkeit $v_0(1+\beta)$ und der Masse m ins Magnetfeld eintreten muß, um auf dem zu $m v_0$ gehörenden Mittelstrahl aus dem Magnetfeld auszutreten. Dadurch erhält man *Geschwindigkeitsfokussierung*, denn bei der vorliegenden Art der Optik sind Parallelverschiebungen von Strahlen zwischen dem elektrischen und dem magnetischen Feld ohne Einfluß auf den Fokussierungsort. Die Geschwindigkeitsfokussierungsbedingung lautet also mit (17) und (39):

$$\sqrt{2} \sin(\sqrt{2} \Phi_e) = -[\sin \Phi + (1 - \cos \Phi) \tan \epsilon']. \quad (40)$$

Dabei wurde die Umkehrbarkeit des Strahlenganges im Magnetfeld benutzt. Nun ist nach (11)

$$g''/a = \left[\tan \frac{\Phi}{2} + \frac{\tan \Phi - \tan \epsilon'}{1 + \tan \Phi \tan \epsilon'} \right]^{-1}. \quad (41)$$

Eliminiert man hier $\tan \epsilon'$ mittels (40), so erhält man die Geschwindigkeitsfokussierungsbedingung in der Form

$$g''/a = \sin \Phi + \frac{1 - \cos \Phi}{\sqrt{2} \sin(\sqrt{2} \Phi_e)}. \quad (42)$$

Um die *Breite des Spaltbildes* s'' zu berechnen, suchen wir den Bildpunkt eines Objektpunktes, der im Abstand s (wo s die Spaltbreite ist) vom Brennpunkt des elektrischen Feldes und vom Mittelstrahl liegt. Zur Bildkonstruktion wählen wir einen Strahl der Masse m , der den Objektpunkt parallel zum Mittelstrahl mit der Geschwindigkeit $v_0(1+\beta)$ verläßt, wo $\beta = s/a_e$ und $m v_0^2/a_e = -e E_0$ ist. Dieser Strahl behält in und nach dem elektrischen Feld seinen Abstand s vom Mittelstrahl bei, denn er tritt tangential ein und hat im Feld die Geschwindigkeit v_0 . Zwischen dem elektrischen und dem magnetischen Feld gehen wir nun zu einem Ion gleicher Masse und Geschwindigkeit über, das dort auf dem Mittelstrahl läuft. Auch dieses Ion gelangt zum

⁵ Größe des elektr. Feldes verstehen wir von nun an mit dem Index e .

gesuchten Bildpunkt. Sein Impuls und damit Bahnradius ist prozentual um β größer als beim Mittelstrahl. Es tritt daher im Abstand s'' parallel zum Mittelstrahl aus dem Magnetfeld aus, wo

$$s'' = a\beta = s a/a_e. \quad (43)$$

Auf der Platte erscheint das Spaltbild um $1/\cos \omega$ breiter.

Zur Berechnung des *Auflösungsvermögens* d betrachten wir ein Ion der Masse $m(1+\gamma)$ und der Geschwindigkeit $v_0(1-\gamma/2)$, das bis zum Eintritt ins Magnetfeld auf dem Mittelstrahl läuft. Dieses Ion besitzt den Impuls $m v_0(1+\gamma/2)$, es tritt deshalb um

$$s'' = a\gamma/2 \quad (44)$$

parallelverschoben gegen den Mittelstrahl aus dem Magnetfeld aus. Wenn s die Objektsplattbreite ist und γ so groß gewählt wird, daß die Verschiebung $a\gamma/2$ gleich der Spaltbildbreite $s a/a_e$ ist, dann ist γ^{-1} das Auflösungsvermögen d . Es ist also

$$d = a_e/(2s). \quad (45)$$

Der *Einfallswinkel* ω der Strahlen gegen die Normale der Bildgeraden ist gegeben durch

$$g''/a = [\sin \omega - \sin(\Phi + \omega)]/\cos \omega. \quad (46)$$

Die möglichen Anordnungen

Die Lage des Brennpunktes auf einem Austrittsstrahl hängt von der Richtung ϵ' der vorderen Magnetfeldbegrenzung ab, und zwar nach der Beziehung

$$g''/a = [\tan(\Phi/2) + \tan(\Phi - \epsilon')]^{-1}. \quad (11)$$

Dabei ist ϵ' der Winkel, um den man den ins Magnetfeld eintretenden Mittelstrahl entgegen dem Uhrzeigersinn drehen muß, um ihn mit der Normalen der vorderen Magnetfeldbegrenzung zur Deckung zu bringen ($-\pi/2 < \epsilon' < \pi/2$). Die Bedeutung von (11) wird durch Abb. 4 veranschaulicht. Abb. 4 zeigt den Eintrittsstrahl, einen Kreis, sowie „Linien gleichen Eintrittswinkels“. Dort, wo der Eintrittsstrahl den Kreis berührt, sei der Eintrittspunkt ins Magnetfeld, und ein anschließendes Kreisstück sei eine Bahn im Magnetfeld. Legt man eine Tangente an den Kreis, so sei damit ein Ablenkwinkel Φ und ein Austrittsstrahl festgelegt. Der Schnittpunkt eines solchen in die Abb. 4 eingezeichneten Austrittsstrahls mit einer „Linie gleichen Eintrittswinkels“ ist Brennpunkt des Magnetfeldes, wenn der Eintrittswinkel den an die Linie geschrie-

benen Wert hat. In Abb. 4 entsprechen dem jenseits der gekrümmten Linie $\epsilon' = \mp 90^\circ$ gelegenen Gebiet Strahlengänge, bei denen schon innerhalb des Magnetfeldes ein erster Brennpunkt liegt, und zwar in Abb. 4 an der mit dem betreffenden ϵ' bezeichneten Stelle des Kreises.

Ist durch Wahl von ϵ' für Richtungsfokussierung gesorgt, so kann durch geeignete Wahl des elektrischen Ablenkwinkels Φ_e zusätzlich Ge-

Abb. 4. Linien gleichen Eintrittswinkels ϵ' .

es ist $|\Phi_e'| = |\Phi_e| + \pi/2$. Zu Φ_e' gehören Strahlengänge, bei denen im elektrischen Feld ein Brennpunkt liegt. In dem Gebiet, das in Abb. 5 schraffiert ist, ist keine Doppelfokussierung möglich, weil es für die diesem Gebiet entsprechenden Wertepaare Φ und g''/a keine Φ_e gibt, die der Gl. (42) genügen.

Der Abstand g_e des Brennpunktes des elektrischen Feldes vom Eintrittspunkt in das elektrische Feld ist

Abb. 5. Linien gleichen elektrischen Ablenkwinkels Φ .

schwindigkeitsfokussierung erreicht werden. Φ_e hat den richtigen Wert, wenn es der Beziehung

$$g''/a = \sin \Phi + \frac{1 - \cos \Phi}{\sqrt{2} \sin(\sqrt{2} \Phi_e)} \quad (42)$$

genügt. Negatives Φ_e bedeutet, daß die elektrische Ablenkung im Uhrzeigersinn erfolgt. Über die Größe von Φ_e auf Grund von (42) bei allen möglichen Lagen der Brennpunkte hinter dem Magnetfeld gibt Abb. 5 Auskunft. In Abb. 5, die ebenso wie Abb. 4 zu verstehen ist, sind der Eintrittsstrahl, eine Kreisbahn im Magnetfeld und „Linien gleichen elektrischen Ablenkwinkels“ eingezeichnet. Der Schnittpunkt eines Austrittsstrahls mit einer „Linie gleichen elektrischen Ablenkwinkels“ ist Geschwindigkeitsfokus, wenn Φ_e den zur Linie gehörigen Wert hat. Außer dem Winkel Φ_e gehört zu jeder Linie der Abb. 5 noch ein zweiter elektrischer Ablenkwinkel Φ_e' , der in Abb. 5 nicht eingetragen ist. Φ_e' hat das umgekehrte Vorzeichen von Φ_e , und

$$g_e = (\Phi_e/|\Phi_e|) (a_e/\sqrt{2} \operatorname{ctg}(\sqrt{2} \Phi_e)), \quad (33)$$

wobei Φ_e negativ sein kann. Ist g_e negativ, so gibt es keinen Brennpunkt.

Ein Zahlenbeispiel

Es sei $\Phi = 180^\circ$ und der Einfallswinkel der Strahlen auf die photographische Platte $\omega = 60^\circ$. Dann ist nach (46): $g''/a = 2\sqrt{3}$. Setzt man dies, sowie $\Phi = 180^\circ$ in (11) oder (41) ein, so erhält man $\operatorname{tg} \epsilon' = -(2\sqrt{3})^{-1} = -0,289$, also $\epsilon' = -16^\circ 6'$. Weiter ergibt das Gleiche in (42) eingesetzt: $\sin(\sqrt{2} \Phi_e) = \sqrt{1/6}$, also $\Phi_e = 17^\circ$. In den Abb. 4 und 5 sind die diesem Falle entsprechenden Punkte durch Kreuze angedeutet. Mit $\sin(\sqrt{2} \Phi_e) = \sqrt{1/6}$ wird nach (33): $g_e/a_e = \sqrt{5/2} = 1,58$.

Hrn. Prof. J. Mattauch danke ich für die Anregung dieser Arbeit und der Deutschen Forschungsgemeinschaft für ein Stipendium.