

*Stille! Se hvor Maskinen
den vældige Tingest staar rolig og syder
og hyller sig i Røg, den er taalmodig.*

Johs. V. Jensen, *Paa Memphis Station* (1906)

3 Hvordan ser eksperimentet ud?

EI massespektrometret

Molekylarioner i ionkilden

Metastabile ioner og MIKE spektre

Metastabile toppe, topformer

MIKE spektre

Isotopforurening, HR-MIKE

Lavvoltspektre

Ionmængder og tophøjder, detektordiskrimination

Reproducibilitet

Forureninger, baggrund

Kollisionsinducerede processer

Et eksempel, Kemisk Instituts 4-sektor massespektrometer

Hvordan ser eksperimentet ud

I meget kort form: Ved det typiske eksperiment ioniseres prøvemolekylet ved elektronbeskydning, de mest energirige molekylarioner lades reagere (i ionkilden), og derefter betragtes de resterende molekylarioners langsomme (på massespektrometrets lidt usædvanlige tidsskala) fragmentering. De fleste eksperimentelle undersøgelser heri vedrører disse metastabile kationradikalers unimolekylære reaktioner, udført ved hjælp af dobbeltfokuserende massespektrometre.

I mange år var der ingen instrumenter i Danmark der på fornuftig måde gjorde det muligt at undersøge metastabile ioners reaktioner. Den del af det eksperimentelle arbejde der sigtede på disse måtte derfor foregå i udlandet. De fleste tidlige resultater blev frembragt ved målinger foretaget på to instrumenter¹ der imidlertid ikke adskiller sig mere fra hverandre, eller fra det instrument som Kemisk Institut fik i 1991, end at resultaterne kan bruges i flæng, når bortses fra semikvantitative måleserier (fx af isotopeffekter), hvor forskelle i accelerationsspænding og instrumenternes fysiske dimensioner kan bevirke mindre afvigelse, eftersom den konkrete reaktionstid da er en anden.

EI massespektrometret

Med et massespektrometer som reaktionsbeholder er det muligt at undersøge prøvemolekylers egenskaber og unimolekylære reaktioner efter ionisering i gasfase. Ved elektronionisering skydes en elektronstråle forbi prøvemolekylerne (på dampform); derved overføres energi, og de molekyler der har modtaget tilstrækkelig meget udsender spontant en elektron. Det således ioniserede molekyle, *molekylarionen*, er et kationradikal. Da vekselvirkningen oftest meddeler molekylerne mere energi end nødvendigt for ionisering vil mange molekylarioner efterfølgende kunne reagere spontant, dvs fragmentere, eventuelt efter omlejring.

¹ To instrumenter, men i 5 byer: det ene, et usædvanligt stort dobbeltfokuserende massespektrometer (spøgende kaldt MMM [1]) med BE-opbygning, blev benyttet i Melbourne, Sydney og Warwick; P. J. Derrick havde selv konstrueret instrumentet, og flyttede ved jobskifte de mange tons med sig. At tale om 'det andet' er for såvidt en tilsnigelse; det drejer sig egentlig om to instrumenter, i Bielefeld og Paris, men af samme fabrikat og model, VG ZAB-2F (ligeledes BE-opbygning).

Ionkilde	Masseanalysator(er)	Detektor
ionerne dannes og lades reagere	ionerne adskilles efter masse	ionmængder måles

Figur 3.1. Principskitse af massespektrometret.

Molekylarioner og fragment-ioner (datterioner) føres løbende ud af ionkilden af et svagt elektrisk felt, accelereres, passerer elektriske og magnetiske felter der adskiller dem efter impuls og kinetisk energi, og frem til en detektor. Signalet herfra giver et massespektrum.

I massespektrometrets indre er der højvacuum (ca 10^{-6} Torr), for at undgå spredning forårsaget af kollisioner mellem ioner og neutrale molekyler under de ioniserede prøvemolekylers vej gennem instrumentet. På grund af det lave tryk er alle reaktioner hos molekylarioner og fragment-ioner derfor unimolekylære, og energiudveksling med omgivelserne finder ikke sted (bortset fra den energitilførsel der fandt sted under ioniseringsprocessen). Reaktioner i massespektrometret er oftest endoterme og fragmenteringen irreversibel.

Molekylarionerne. Det almindelige massespektrum viser hvilke ioner der blev dannet i massespektrometrets ionkilde ved ionisering og ved den efterfølgende fragmentering, ligeledes i ionkilden. Ionerne tilbringer kun ganske kort tid i denne, af størrelsesorden et μsec , så fragment-ionerne fremkommer ved meget hurtige reaktioner. Elektronionisering med 70 eV elektroner indebærer at de fleste molekylarioner dannes med tilstrækkelig indre energi til at reagere hurtigt. Der er dog stor spredning på molekylarionernes energi, og de reaktioner der finder sted i ionkilden har hastighedskonstanter der dækker fem-seks størrelsesordner, fra $\sim 10^{11}$ til $\sim 10^6 \text{ sec}^{-1}$.

Det er ikke muligt nemt at bestemme hvor megen energi der overføres fra den forbigående elektron til molekylet, og dermed kendes heller ikke molekylarionernes energifordeling efter elektronionisering. Fotoelektronspektret kan bruges som rettesnor, men der vil kunne være betydelige forskelle, da energioverførslen fra elektron til det neutrale molekyle ikke er underlagt de samme udvalgsregler som fotonabsorption (hvis nogen overhovedet; detaljerne ved elektronionisering er kun ufuldstændigt beskrevet i litteraturen, [2]).

Udgangspunktet er dermed, at det blot vides at nogle ioner dannes med rigtig megen indre energi, og disse kan dermed reagere ved ret energi-krævende reaktioner såvel som meget hurtigt (relationen mellem indre energi og hastighedskonstant diskuteres i Kapitel 4). Andre fik mindre, men stadig tilstrækkeligt til at reagere hurtigt, og et fåtal fik så lidt at de enten ikke kan reagere overhovedet eller ikke når at reagere mens de endnu befinder sig i ionkilden. Det er disse sidste der giver anledning til massespektrets moltop. Molekylarionsignalet (moltoppen) skyldes således de ioner der ikke fragmenterer i ionkilden; det kan være relativt svagt, få % af det samlede ionsignal, men det er som oftest rigeligt til at disse ikke-voldsomt-energirige molekylarioners reaktioner kan undersøges.

Det kan være vanskeligt at give en fyldestgørende redegørelse for det ioniserede molekyles reaktioner i EI massespektrometrets ionkilde, givet den store spredning på den oprindelige ionpopulations indre energi. Det betyder, at den beskrivelse af reaktionerne der ligger til grund for fx tolkningen af EI massespektre nok kan sammenfatte karakteristiske træk ved reaktionsforløbet, mens det som oftest ikke lader sig gøre at beskrive og begrunde årsagssammenhænge på tilfredsstillende vis.

Det stiller sig imidlertid anderledes med de ioniserede molekyler der først reagerer efter at have forladt ionkilden. Størsteparten af de energirige ioner har forlængst reageret, så den indre energi hos de tilbageværende er temmelig moderat. Ionkildereaktionerne fungerer så at sige som et energifilter, et emne der udvikles yderligere i Kapitel 4.

Metastabile ioner og MIKE spektre

Metastabile ioner. En del langsomt reagerende ioner går først i stykker efter at have forladt ionkilden, dvs et sted ude i massespektrometret. Disse ioner er således tilstrækkeligt stabile til at kunne forlade ionkilden intakt, men ikke stabile nok til at nå frem til detektoren; deraf betegnelsen *metastabile*.

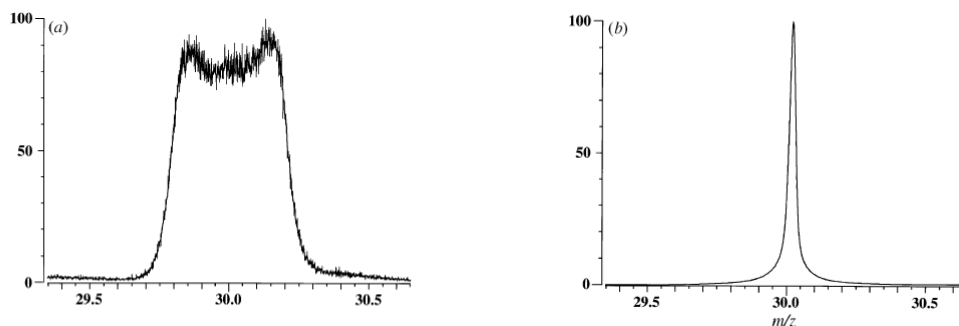
Massespektrometre med flere analysatorer giver de bedste muligheder for at undersøge metastabile ioners reaktioner. Disse instrumenter er som oftest dobbeltfokuserende, men høj opløsningsevne er i denne sammenhæng kun sjældent nyttig.

Kun de reaktioner der finder sted i massespektrometrets feltfri områder (dvs mellem analysatorerne) kan i praksis observeres, idet det kun er i disse områder at tilstrækkeligt mange ioner reagerer under ens betingelser (uden ydre felter) og dermed giver et signal af målelig styrke. De reaktioner der finder sted under ionernes passage af analysatorområderne kan normalt ikke gøres til genstand for undersøgelse. Dobbeltfokuserende instrumenters dimensioner bevirker at de metastabile ioners observerede reaktioner gerne finder sted mellem 10 og 100 μsec efter ionisering.

De metastabile ioners indre energi diskuteres nærmere i Kapitel 4, men de besidder ofte ikke meget mere end tærskelenergien. Eftersom det område i instrumentet hvor reaktionerne observeres er fast er reaktant-ionernes levetid kendt; den defineres af ionernes masse og instrumentets dimensioner og accelerationsspænding. Hastighedskonstanterne for de metastabile ioners reaktioner spænder derfor over et ret begrænset interval; typisk omkring 10^5 sec^{-1} . Dermed er egenskaberne relativt velafgrænsede, og det lader sig ofte gøre at beskrive og fortolke metastabile ioners reaktioner, hvor det kan være mere problematisk med de processer der finder sted i massespektrometrets ionkilde.

Metastabile toppe. I massespektre optaget på sektorinstrumenter (dvs instrumenter hvor masseadskillelsen sker i et magnetfelt) ser man ofte såkaldte *metastabile toppe*. Disse skyldes de produkt-ioner som dannes ved de metastabile ioners reaktioner i det feltfri område umiddelbart foran magneten. I modsætning til spektrets normale toppe er de metastabile toppe svage og relativt brede signaler.

Topformer. Dersom en dissociationsreaktion i massespektrometret forløber uden synderlig energibarriere vil produkterne i almindelighed 'glide' blidt fra hinanden. Har reaktionen derimod en kendelig barriere vil produkterne stødes fra hinanden når barrieren er passeret, idet en del af energien da frigøres som translationsenergi. Dette afspejles direkte i formen på de metastabile toppe. Er der ingen (eller kun ringe) barriere er toppene relativt slanke og Gauss-formede, hvorimod de kan være brede, evt. tallerkenformede, hvis reaktionen har en betydelig energibarriere (Figur 3.2). Dermed kan en analyse af topformerne i et MIKE spektrum belyse dissociationsreaktionernes dynamiske forløb. Den metastabile tops bredde er et mål for hvor meget translationsenergi der frigøres ved reaktionen; denne størrelse er imidlertid ikke på ligefrem måde relateret til barrierehøjden.



Figur 3.2 Fladtoppede og gauss-formede metastabile toppe (dannelse af ioner med m/z 30 fra $\text{CH}_3\text{NH}_2\text{CH}_2^+$ og $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2^+$ kationradikaler) (taget fra [3]).

MIKE spektre. De metastabile ioners reaktioner undersøges bedst ved hjælp af MIKE spektre (MIKE: Mass-analyzed Ion Kinetic Energy [4]). Her ser man på de samme ioner som giver anledning til metastabile toppe, men med betydeligt bedre følsomhed. MIKE spektre optages på massespektrometre med en magnetisk analysator og en efterfølgende elektrisk analysator (BE-opbygning); her fokuseres magneten (dvs magnetfeltet låses) på den ion hvis reaktioner ønskes undersøgt, og den elektriske sektor bruges til at bestemme massen på de produkt-ioner der dannes ved de metastabile ioners fragmentering i det feltfrie område mellem de to sektorer.

Ionkilde	B-felt	Feltfrit område	E-felt	Detektor
Elektron-ionisering	Bestemt m/z udvælges med magneten	Område hvor de udvalgte ioner kan fragmentere	Produkternes masse bestemmes ved scan af elektrisk sektor	

Figur 3.3. Principskitse af MIKE eksperimentet.

I dette arbejdes sammenhæng er det i reglen denne metode der anvendes til undersøgelse af de metastabile molekylarioners reaktioner. Disse er alle ét-trinsprocesser; sekventielle reaktioner giver normalt ikke anledning til signaler af målelig styrke i MIKE spektret.

MIKE-eksperimentet minder således noget om kollisionsaktivering (MS-MS), se nedenfor; ved sådanne undersøgelser lades ionerne passere en celle med kendeligt højere gastryk anbragt i det feltfrie område (Figur 3.3), hvorved de ved strejfende kollisioner tilføres energi og efterfølgende fragmenterer.

Med MIKE spektre optaget på Kemisk Instituts 4-sektorinstrument undersøgte reaktioner i instrumentets 3. feltfrie område (instrument-skitse sidst i kapitlet); den fjerde sektor anvendtes ikke. Lidt langsommere reaktioner kunne undersøges i det 4. feltfrie område, men det blev kun gjort systematisk i forbindelse med studier af isotopeffekter. Her udvælges reaktant-ionen ved hjælp af instrumentets første tre analytatorer, og reaktionernes udfald (produkternes masse) bestemmes med den fjerde (magnet). Fremgangsmåden blev lokalt spøgende omtalt som MIMS (metastable ion momentum spectroscopy).

Isotopforurening. Dersom der i ionkilden er dannet ioner med (heltallig) masse en u lavere end den eksperimentet vedrører kan isotopforureninger bidrage til MIKE-spektret. Det gør sig fx gældende ved undersøgelser af molekylarionens reaktioner i de tilfælde hvor $[M-H]^+$ ioner giver et kraftigt signal, idet ^{13}C og ^{15}N holdige $[M-H]^+$ ioner vil have samme heltallige masse som M^+ . Ved hjælp af referencespektre (af de 'rene' $[M-H]^+$ ioner) er det som oftest muligt at korrigere herfor, men i visse tilfælde kan det være nødvendigt at søge at optage spektre der er fri for disse komplikationer.

HR-MIKE. Med Kemisk Instituts 4-sektorinstrument (Figur 3.4) var det muligt at optage MIKE-spektre med høj opløsningsevne, dvs udnytte fokuseringsegenskaberne i instrumentets første halvdel således at reaktant-ionens masse kunne udvælges med meget større nøjagtighed

end normalt (det er ion-udvælgelsen der foregik med høj opløsnings- evne, ikke optagelsen af MIKE-spektret). Dette gjorde det ofte muligt at fjerne isobare forureninger fra den undersøgte ionstråle, eftersom fx ^{12}CH er 0.0045 u tungere end ^{13}C . De eksperimentelle betingelser der gør den høje opløsningsevne mulig mindskede imidlertid signalets styrke i ganske alvorlig grad. Når den oprindelige ionstråle ikke var ret kraftig var det i praksis problematisk at optage et HR-MIKE-spektrum med acceptabelt signal-støj forhold.

Lavvolt-spektre. Elektron-ionisering udføres sædvanligvis med 70 eV elektroner, med ioniseringseffektivitet som begrundelse. Denne værdi er dog ret arbitrært fastlagt, og kunne lige så vel have været 50 eV eller 100 eV. Sænkes de ioniserende elektroners kinetiske energi falder ionudbyttet, og kommer energien ned under 20 eV ændres også masse-spektrrets udseende. Med den lavere elektronenergi dannes færre ioniserede molekyler med høj indre energi, og dermed formindskes bidraget fra de toppe der skyldes produkter fra sekundærreaktioner. Ligheden med MIKE spektret forøges, da den relative andel af molekylarioner med lav indre energi vokser, og dermed favoriseres reaktioner med lav E_0 noget. Imidlertid benyttes lavvoltsmasse-spektrometri ikke meget; sammenlignet med 70 eV ionisering er følsomheden drastisk forringet pga den formindskede ioniserings-effektivitet, og da spredningen på de ioniserende elektroners energi er ret stor opnås ikke en egentlig kontrol over energioverførslen fra elektronstråle til neutralt molekyle, blot en forskydning mod lavere middelværdi. Dertil kommer praktiske vanskeligheder af forskellig art (især at glødetråde meget hyppigt brænder over). Metoden er blevet anvendt som led i flere forskellige forfatteres arbejde med nogle af de problemstillinger der beskrives her, men kun sjældent af os selv.

Ionmængder og tophøjder. Den simpleste måde at anslå relative ionudbytter er at måle toppenes højde i MIKE-spektret. Dette er dog ikke en uproblematisk fremgangsmåde, af flere grunde. Dersom der frigøres translationsenergi i forskelligt omfang ved to konkurrerende reaktioner vil topformerne blive forskellige, og da kan en bred top måske svare til flere produkt-ioner end en smal men måske højere. Det komplicerer sagen yderligere at toppenes bredde og højde tillige influeres af hvordan lysningen er i instrumentets forskellige justerbare spalter. Det er derfor ikke altid bedre (eller rigtigere) at erstatte måling af tophøjder med måling af arealet under toppene. Normalt er forskel- lene imidlertid ret små, og der opstår kun sjældent vanskeligheder, så

længe de målinger der siden danner grundlag for sammenligninger er foretaget under stort set identiske betingelser.

Detektordiskrimination. Ved kvantitative målinger som fx af isotop-effekter kan en eventuel detektordiskrimination give anledning til uro. Der er imidlertid kun få undersøgelser heraf i litteraturen, og ikke mange måder at undersøge problemstillingen eksperimentelt. For traditionelle Cu-Be multiplier-detektorer antages det gerne [5] at en eventuel diskrimination skyldes forskelle mellem de registrerede ioners impuls, og at der er en lineær masseafhængighed, således at en lidt tungere ion giver anledning til et lidt kraftigere signal. Om dette umiddelbart kan overføres til off-axis post-accelerationsdetektorer (hvor ionerne afbøjes og accelereres af et 20 kV felt i detektorens munding) som de der sad på Kemisk Instituts instrument vides ikke. Rumpf, Allison og Derrick [6] skønner at den impulsafhængige diskrimination nok udlignes af post-accelerationen. De påpeger imidlertid at ioner med forskellig masse dannet ved fragmentering i de feltfrie områder ikke vil transmitteres helt ens gennem instrumentet. Signalstyrken vil afhænge af den kinetiske energifrigørelse der ledsagede datterionernes dannelse, og af disses masse. Denne instrument-diskrimination kan være omkring 1%, hvilket kunne indvirke på måling af fx isotopeffekter; det er muligt at korrigere herfor efterfølgende [6], men kun sjældent gjort.

De resultater vi har opnået på Kemisk Instituts instrument er imidlertid ikke systematisk forskellige fra de resultater vi har fået (for de samme forbindelsestyper) ved måling på andre massespektrometre, og det er nok rimeligt at antage at detektordiskrimination ikke er af større betydning dersom målingerne vedrører ioner med ikke ret forskellig masse.

Reproducibilitet. EI massespektre er ganske reproducerbare, også på tværs af instrumenternes konstruktion og fabrikat. Det samme synes at gælde MIKE spektre, såvel tophøjder som topformer. Vi har efterhånden haft anledning til at sammenligne mange MIKE spektre af de samme forbindelser optaget på forskellige instrumenter, og forskellene er at finde i småtingsafdelingen. Der må dog tages forbehold hvad angår nøjagtige kvantitative målinger, fx af sekundære isotopeffekter, eftersom forskelle i instrumenternes konstruktion, accelerationsspænding og dimensioner medfører mindre forskelle i ionlevetid og dermed nogen forskel på det interval af hastighedskonstanter som eksperimentet omfatter.

Baggrund. Højvacuumeksperimenter som de der udføres med massepektrometre lider af den vanskelighed, at baggrundsspektre ikke umiddelbart er til nogen nytte. I fravær af en konkret prøve er forureninger i instrumentet stort set ikke til stede på gasform; de sidder typisk adsorberet på en indre overflade og frigøres først når en ny prøve med tilsvarende overfladeegenskaber indføres. Dette giver anledning til en særlig form for 'memory effects', der er specielt problematiske med prøvemolekyler som bindes til adsorberende overflader; således har fx aminer og amider i ganske særlig grad affinitet for plastics og gummi i fx vacuumforseglinger eller elektrisk isolering. De adsorberede molekyler frigøres først når prøvemolekyler med lignende overfladeegenskaber indføres ved en senere lejlighed, i grelle tilfælde først flere måneder senere. Dårlige erfaringer har ført til to retningslinier: Hvor spektre af flere beslægtede forbindelser (isomere, homologe, isotopmærkede) har skullet optages indenfor et kort tidsrum er prøverne altid blevet undersøgt efter stigende molvægt, og det er altid søgt undgået at isomere forbindelser undersøges på samme dag eller på tilstødende dage. Desuden er det tilrådeligt at arbejde med så lavt prøvetryk som muligt.

Kollisionsinducerede processer. Et stort massespektrometer har utallige sammenføjninger, og selv ganske små utætheder kan medføre forhøjet baggrundstryk og dermed risiko for at reaktant-ionens spontane reaktioner overlejres med et bidrag fra kollisionsinducerede processer. På de fleste kommercielle instrumenter er det ret vanskeligt at konstatere hvornår problemer af denne art gør sig gældende, hvis ikke eksperimentets udfald gør det iøjnefaldende. Årsagen er, at trykmåling oftest foretages i umiddelbar nærhed af højvacuum-pumperne, da målingens primære formål set fra konstruktørens side er at beskytte disse (de skal slå fra hvis trykket stiger for meget).

For at råde bod på disse vanskeligheder var der på Kemisk Instituts instrument installeret temmelig nøjagtige supplerende trykmålere i de feltfri områder, og der var dermed mulighed for umiddelbart at konstatere om trykket der hvor eksperimenterne foregår lå indenfor det nødvendige, meget lave område. I tvivlstilfælde undersøgte vi en ganske særligt trykfølsom reaktion (tab af $\text{Cl}\cdot$ fra dichlormethans molekylarion), hvor topformerne meget tydeligt afslører om trykket er for højt. Denne metode blev udviklet af Allan C. Petersen [7].

De metastabile ioners reaktioner er unimolekylære, uanset om de er spontane eller kollisionsinducerede. Forskellen er reaktantionernes energifordeling; for de spontant reagerende metastabile ioner er denne bestemt af ionkildereaktionernes energiforhold (Kapitel 4) – kun reaktanter med lav indre energi er tilbage. Finder strejfende kollisioner med neutrale molekyler sted, på grund af utæthed eller som konsekvens af ventilåbning, bliver ionernes energifordeling radikalt ændret, med en spredning der minder om den der gør sig gældende i ionkilden, umiddelbart efter ioniseringen. Den efterfølgende fragmentering er som ionkildereaktionerne strukturspecifik, gerne så karakteristisk at den kan tjene som en art fingeraftryk. Denne fremgangsmåde, kaldet kollisionsaktivering (CA) eller MS-MS, er kun udnyttet i få tilfælde i disse undersøgelser.

Litteraturhenvisninger til Kapitel 3

- 1 A. W. Colburn, P. J. Derrick og R. D. Bowen, *Peter J Derrick and the grand scale 'Magnificent Mass Machine' mass spectrometer at Warwick*. *Europ. J. Mass Spectrom.*, **23**, 319-26 (2017).
- 2 (a) T. D. Märk og G. H. Dunn, *Electron Impact Ionization*. Springer, Wien 1985.
(b) K. K. Irikura, *Ab initio computation of energy deposition during electron ionization of molecules*. *J. Phys. Chem. A*, **121**, 7751-60 (2017).
- 3 S. Hammerum, A. C. Petersen, T. I. Sølling, T. Vulpius og H. Zappey, *The expulsion of alkyl radicals from the methyliumaminomethyl radical cation, $\text{CH}_3\text{NH}_2\text{CH}_2^+$, and related distonic ions*. *J. Chem. Soc., Perkin Trans 2*, **1997**, 391-95.
- 4 R. G. Cooks, J. H. Beynon, R. M. Caprioli og G. R. Lester, *Metastable Ions*. Elsevier, Amsterdam, 1973.
- 5 C. LaLau, i *Topics in Organic Mass Spectrometry*. Red. A. Burlingame. Wiley, New York 1970; pp 93-120.
- 6 B. A. Rumpf, C. E. Allison og P. J. Derrick, *Mass discrimination in collisionally activated decomposition (CAD) and mass-analysed ion kinetic energy (MIKE) spectra*. *Org. Mass Spectrom.*, **21**, 295-99 (1986).
- 7 A. C. Petersen og S. Hammerum, *The methylene chloride radical cation and its distonic isomers in the gas phase*. *Int. J. Mass Spectrom.*, **210**, 403-15 (2001).

Figur 3.4. Kemisk Instituts 4-sektor JEOL-instrument ('Fred', opkaldt efter og indviet af Fred W. McLafferty i 1991 og taget ud af drift 2015) (næste side)

Når dette instrument benyttes til optagelse af MIKE-spektre udnyttes dets forskellige sektorer på følgende måde:

Ionisering finder sted i ionkilden (øverst til venstre på afbildningen, umiddelbart foran den første E-sektor).

Første E-sektor medvirker til fokusering af ionstrålen.

Med første B-sektor (magnet) udvælges den ønskede reaktant-ion (strengt taget, ioner med den ønskede masse).

I det halvanden meter lange feltfri område mellem første B-sektor og anden E-sektor finder de spontane spaltningsreaktioner sted (dvs de reaktioner der ligger bag MIKE-spektret). De feltfri områder er på figuren betegnet FFR, nummereret regnet fra ionkilden.

Med anden E-sektor adskilles produkt-ionerne efter kinetisk energi; da alle reaktionsprodukter har samme hastighed (reaktant-ionens hastighed) er dette det samme som en adskillelse efter masse.

Anden B-sektor anvendes ikke i denne sammenhæng, men det var muligt (ved andre eksperimenter) at foretage MIKE-lignende undersøgelser ved lade de ioner der blev udvalgt med første B-sektor passere anden E-sektor, og først foretage masseanalysen med anden B-sektor; derved undersøges de reaktioner der finder sted i det feltfri område efter anden E-sektor (dvs lidt senere, og dermed lidt langsommere reaktioner).

En meget detaljeret beskrivelse af instrumentet findes i Kion Normans specialrapport (Kemisk Institut, 1993).

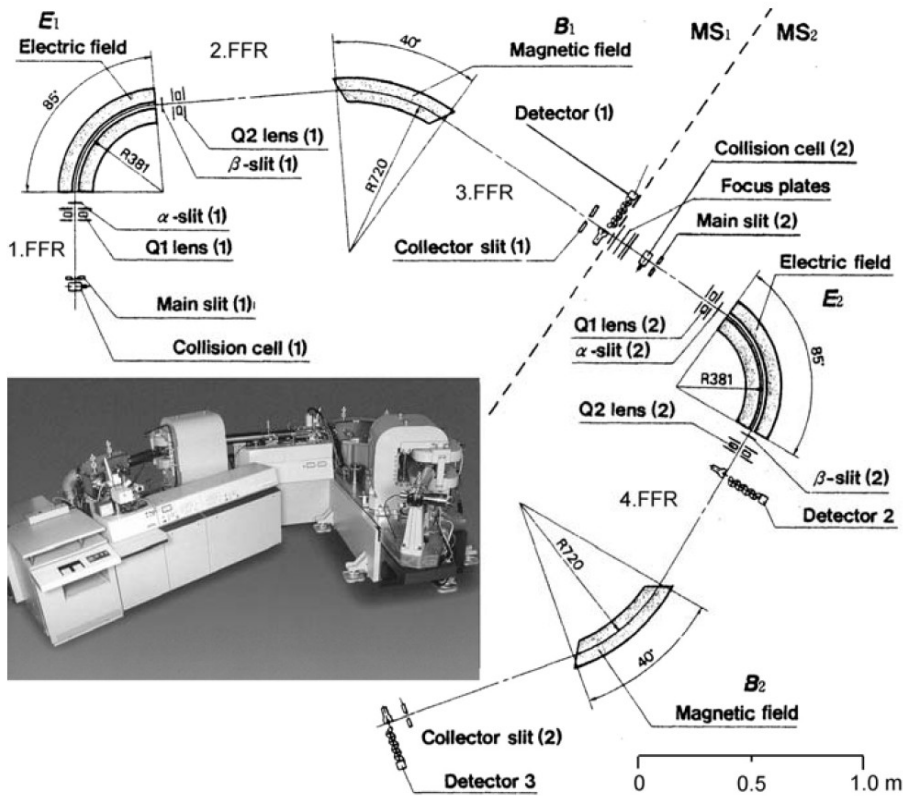


Fig. 4.30. Schematic and photograph (inset) of the JEOL HX110/HX110A tandem sector instrument with EBEB ion optics. By courtesy of JEOL, Tokyo.

December 2017, Steen Hammerum, steen@kiku.dk
 (mindre rettelser, august 2018)