

Aufbau und Test eines Ionenführungssystems zur Untersuchung von Ionen-Molekül-Reaktionen

DISSERTATION
zur Erlangung des akademischen Grades
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

eingereicht im Fachbereiche Biologie, Chemie, Pharmazie
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von
Dipl. Chem. Helmar Waiczies
Berlin Okt. 2004

Disputation am 10. Dez. 2004

1. Gutachter: Prof. Dr. K.-M. Weitzel

2. Gutachter: Prof. Dr. H. Baumgärtel

Disputation am:

Die vorliegende Arbeit wurde am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Freien Universität Berlin in der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Weitzel im Zeitraum von Juni 2001 bis Juni 2004 angefertigt.

Herzlich möchte ich mich bei Prof. Dr. K.-M. Weitzel für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe, die Themenstellung sowie die Hilfe und Anregungen bedanken.

Herrn Prof. Dr. H. Baumgärtel danke ich für die Erstellung des Zweitgutachtens.

Mein Dank geht auch an Prof. Dr. K. Möbius, Fachbereich Physik der FU-Berlin, der uns das Lasersystem zur Verfügung stellte.

Außerdem möchte ich Prof. Dr. D. Gerlich für die Überlassung eines seiner Drahtvierpole danken.

Meinen KollegInnen an der Freien Universität danke ich für die mannigfaltige ideelle, fachliche und technische Unterstützung.

Meiner Familie und besonders meiner Frau möchte ich für die ständige Unterstützung und Geduld danken.

Inhaltsverzeichnis

INHALTSVERZEICHNIS	1
1 EINLEITUNG	5
2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN	11
2.1 Die Theorie des Quadrupols	11
2.2 Betrachtung der kinetischen Energie	17
2.2.1 Die „center of mass“ \leftrightarrow Labor Transformation ^[67]	17
2.2.2 Dopplerverbreiterung bei Ionenstrahlexperimenten ^[68]	20
2.3 Wechselwirkung von Licht und Materie	25
2.3.1 Eigenschaften von Licht.....	25
2.3.2 Auswahlregeln.....	29
2.3.2.1 Drehimpulsänderung	29
2.3.2.2 Änderung der Parität	30
2.3.2.3 Die Ionisation.....	30
2.3.3 Ein-, Mehrphotonen- und Autoionisation	32
2.3.4 REMPI.....	34
2.3.4.1 Rydbergzustände	35
2.3.4.2 Rydbergzustände des Ammoniaks	39
2.3.4.3 REMPI-Spektroskopie	39
3 EXPERIMENTELLER AUFBAU	43
3.1 Die Vakuumapparatur	47
3.1.1 Ionisations- und Beschleunigungsbereich	48
3.1.2 Reaktionszone und Ion-Guide	50
3.1.3 Massenanalyse und Detektor	50
3.2 Der Drahtvierpol	53
3.3 Der rf-Generator	59
3.3.1 Beschreibung der Schaltungen.....	65
3.3.2 Stromlaufplan des rf-Generators.....	70
3.3.3 Stromlaufplan des Spannungsversorgung.....	71

3.4	Das Lasersystem	73
3.4.1	Der LPX100 XeCl ⁺ -Exciplex-Laser	73
3.4.2	Der FL2002 Farbstofflaser	74
3.4.3	Die Laserfarbstoffe	76
3.5	Datenerfassung	79
3.6	Berechnung des k-Wertes	81
3.6.1	analytische Methode	81
3.6.2	Druckkalibrierung	83
3.6.3	Flugzeitmessung	84
3.6.4	numerische Methode	85
3.6.5	Simulation über Geradengleichung	86
4	ERGEBNISSE UND DISKUSSION	87
4.1	HBr⁺ + HBr → H₂Br⁺ + Br[·]	89
4.2	HBr⁺ + CO → HCO⁺ + Br[·]	99
4.3	NH₃⁺ + NH₃ → NH₄⁺ + NH₂	103
4.3.1	Reaktionsenergien	104
4.3.2	Betrachtung der kinetischen Energie der Reaktion 3	105
4.3.3	k-Wert-Analyse und Ergebnisse	111
4.4	NH₃⁺ + H₂CO → CH₂NH⁺ + H₂O	117
5	ZUSAMMENFASSUNG	121
6	SUMMARY	125
7	AUSBLICK	129
8	LITERATURVERZEICHNIS	131
9	CURRICULUM VITAE	147
10	ANHANG	153
10.1	Abkürzungsverzeichnis	153

10.2	Igor Routinen	155
10.2.1	Aufnahme der Flugzeitsignale vom Oszilloskop.....	155
10.2.2	Erzeugung des Massenspektrums	157
10.3	Origin-Script	159
10.4	MathCAD Programm	163
10.5	MathConnex-Programm.....	165

