

10 Anhang

10.1 Abkürzungsverzeichnis

Symbol	Erklärung
$\Delta_f H^\circ$	Bildungswärme
$\tilde{\nu}$	Wellenzahl
I	Intensität
δ	Quantendefekt
γ	Spin-Rotations-Kopplungskonstante
μ	elektrisches Dipolmoment
μ	reduzierte Masse
ν	Frequenz
ω	Winkelgeschwindigkeit
ψ	Wellenfunktion
λ_γ	Wellenlänge
AADO	angular average dipole orientation
ADO	average dipole orientation
ASE	amplified spontaneous emission
BBO	β -Bariumborat (β -BaB ₂ O ₄)
c	Lichtgeschwindigkeit
c.m.	center of mass
cgs	centimeter, gram, second
DC	direct current = Gleichspannung
e	Elementarladung
E	Energie
eV	Elektronenvolt
FWHM	Full width at half maximum, Halbwertsbreite
h	Plancksches Wirkungsquantum
IE	Ionisierungsenergie
ISM	Interstellar Medium = interstellares Medium

J	Gesamtdrehimpulsquantenzahl
k_B	Boltzmannkonstante
LIF	laser induced fluorescence
m	Masse
MPI	multiphoton ionization
QMS	Quadrupol-Massenspektrometer
R	Rydbergkonstante
REMPI	Resonance enhanced multiphoton ionisation
rf	Radiofrequenz
rms	root mean square
s	Flugstrecke
$S_{(J,J)}$	Übergangsintensität
s, S	Spindrehimpulsquantenzahl
SHG	second harmonic generation
t	Flugzeit
T	Temperatur
TOF	time of flight
U	Spannung
UHV	Ultrahochvakuum
UV	ultraviolett
v	Geschwindigkeit
ν	Schwingungsquantenzahl
τ	Lebensdauer

10.2 Igor Routinen

10.2.1 Aufnahme der Flugzeitsignale vom Oszilloskop

```
#pragma rtGlobals=1
```

```
macro massenscan2 (schritte,m1,dm)
```

```
    string wavename, inrantwort, datenpunkte
```

```
    variable schritte, k, abbruch, eloc, coloc, array, m1, dm
```

```
    prompt schritte "Anzahl der Schritte eingeben"
```

```
    prompt m1 "Startmasse (in Volt) eingeben"
```

```
    prompt dm "Masseninkrement (in Volt) eingeben"
```

```
    Silent 1
```

```
    SetupGPIB ()
```

```
    KillWaves/A/Z
```

```
    k = 0
```

```
    do
```

```
        wavename = "Meszstuetzpunkt" + num2str (k)
```

```
        make /o/n = 50500 messwave
```

```
        gpibWrite /F = "%s" "CLSW"
```

```
        gpibWrite/F = "%s" "CHDR OFF"
```

```
            do
```

```
                gpibWrite/F = "%s" "INR?"
```

```
                gpibRead/T = "\n" inrantwort
```

```
            abbruch = str2num (inrantwort)
```

```
                if (abbruch == 257)
```

```
                    break
```

```
            endif
```

```
        while (1)
```

```
            gpibWrite/F = "%s" "CFMT DEF 9, WORD, BIN"
```

```
gpiBWrite/F = "%s" "TA:WF? DAT1"
gpiBReadBinaryWave/W/F = 1 messwave
gpiBWrite/F = "%s" "TA:INSP? 'WAVE_ARRAY_COUNT'"
gpiBRead/T = "\n" datenpunkte
coloc = strsearch (datenpunkte, ":",0)
eloc = strlen (datenpunkte)
datenpunkte = datenpunkte [coloc+2,eloc]
eloc = strsearch (datenpunkte," ",0)
datenpunkte = datenpunkte [0,eloc]
array = str2num (datenpunkte)
duplicate /R = [8, array] messwave, $wavename
    |sleep 00:00:1
k = k + 1
while (k != schritte + 1)
SPEKTRUM2(schritte)
End
```

10.2.2 Erzeugung des Massenspektrums

```
#pragma rtGlobals=1

macro SPEKTRUM2(schritte)
string name, wave
variable schritte, norm1, norm2, FensterAn, FensterEnd, integral, k, norm,

silent 1
norm1 = 10
norm2 = 1900
FensterAn = 2500
FensterEnd = 20000
k = 0
make /o/n = (schritte+1) Massenspektrum

do
    name = "Massenspektrum"

    wave = "Meszstuetzpunkt" + num2str (k)
    Duplicate /O/R = (norm1, norm2) $wave, Normierung
    norm = faverage (Normierung, norm1, norm2)
    Duplicate /O/R = (FensterAn, FensterEnd) $wave, Ausschnitt
    Ausschnitt = Ausschnitt-norm

    integral = area (Ausschnitt, FensterAn, FensterEnd)
    $name(k) = integral

    KillWaves Ausschnitt, Normierung
    k=k+1
while(k!=schritte+1)
Display Massenspektrum
Save/G/M="\r\n"/W Massenspektrum as "Massenspektrum.dat"
end
```


10.3 Origin-Script

```

////////////////////////////////////
//   Massenspektrenauswertung   //
//   Baselinekorrektur und Integration   //
//       für NH3+/NH4+           //
////////////////////////////////////;
ECHO=1;
//----- Fensternamen -----//
%i=%H;
%n=Druck;
//-----Integrationsgrenzen NH3+/NH4+-----//
Intgr1=10; //linke Grenze;
Intgr2=80; //rechte Grenze;
Intgr3=80; //linke Grenze;
Intgr4=140; //rechte Grenze;
bcgrenze1=1; //linke Grenze;
bcgrenze2=20; //rechte Grenze;
//-----Anzahl der Datensätze bzw. Spalten-1-----//
spalten_anzahl=%!wks.ncols;
anzahl=spalten_anzahl;
anzahl=;
//-----neues Worksheet wird erstellt-----//
%r=ResNH3%m;
create.wksName$=%r;
create.wkslabel$=%r;
create.type1=1;
create.type2=1;
create.type3=1;
create.wks(Druck FlaecheNH3 FlaecheNH4);
%r=create.wksName$;
win %r;
//-----Start der Baselinekorrektur für NH3+/NH4+-----//

```

```
k=1;
repeat anzahl {
  ii=1;
  korrw=0;
  i=1;
  %!wks.col=k;
  %A=%!wks.col.name$;
  repeat 1 {
    nz=bcgrenze2-bcgrenze1+1;
    kk=bcgrenze1;
    repeat nz {
      korrw=korrw+%!_%A[kk];
      kk=kk+1;
    };
    i=i+1;
  };
  korrw=korrw/(nz);
  k=;
  %A=;
  korrw=;
  win -a %!;
  col(%A)=col(%A)-korrw;
  ii=ii+1;
  k=k+1;
};
//-----Integration wird gestartet-----//
i=1;
k=1;
repeat anzahl {
  %!wks.col=i;
  %A=%!wks.col.name$;
  %B=%!wks.col.label$;
  %B=;
  %r_Druck[k]$=%B;
```

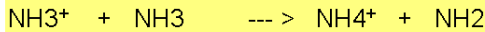
```
%A=;
//-----Integration von NH3+/NH4+-----//;
integrate %l_%A -b Intgr1 -e Intgr2;
%r_FlaecheNH3[k]=integ.area;
integrate %l_%A -b Intgr3 -e Intgr4;
%r_FlaecheNH4[k]=integ.area;
k=k+1;
i=i+1;
};
win -a %r;
```


10.4 MathCAD Programm

Programm zur Modellierung bimolekularer Reaktionen

Angenommene Reaktionen

Step 1



Educated guess for rate constants

$$\begin{aligned} \text{npts} &:= 10 & \text{art} &:= & k_0 &:= 2.137698898 \cdot 10^{-9} \\ & & & & \text{tmax} &:= 0.000230 \\ & & & \text{C:\DatenNH3+_NH4+.txt} & & \end{aligned}$$

$$i := 0.. \text{letzte}(\text{art}^{(1)}) \quad \text{Zeilenanzahl} \quad \text{art2} := \text{art}^T \quad \text{Spaltenanzahl}$$

$$j := 0.. \text{letzte}(\text{art2}^{(0)}) \quad h := 0.. \text{letzte}(\text{art2}^{(0)}) + 1 \quad \text{für das Results-array}$$

$$y_i := \begin{pmatrix} 5 \cdot 10^5 \\ \text{art}_{i,0} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{NH}_3^+ \\ \text{NH}_3 \\ \text{NH}_4^+ \end{array} \quad D(t, Y) := \begin{pmatrix} -k_0 \cdot Y_0 \cdot Y_1 & & \\ -k_0 \cdot Y_0 \cdot Y_1 & & \\ k_0 \cdot Y_0 \cdot Y_1 & & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{NH}_3^+ \\ \text{NH}_3 \\ \text{NH}_4^+ \end{array}$$

$$J(t, Y) := \begin{pmatrix} 0 & -k_0 \cdot Y_1 & -k_0 \cdot Y_0 & 0 \\ 0 & -k_0 \cdot Y_1 & -k_0 \cdot Y_0 & 0 \\ 0 & k_0 \cdot Y_1 & k_0 \cdot Y_0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Produkt}(i) := \text{Stiffb}(y_i, 0, \text{tmax}, \text{npts}, D, J)$$

$$\text{Results}_{i,h} := (\text{Produkt}(i)^{(h)})_{\text{npts}}$$

$$\text{Summe}_i := (\text{Results}_{i,1}) + (\text{Results}_{i,3})$$

$$\text{faResults}_{i,0} := \text{Results}_{i,2}$$

$$\text{faResults}_{i,1} := \frac{(\text{Results}_{i,1})}{\text{Summe}_i} \quad \text{faResults}_{i,2} := \frac{(\text{Results}_{i,3})}{\text{Summe}_i}$$

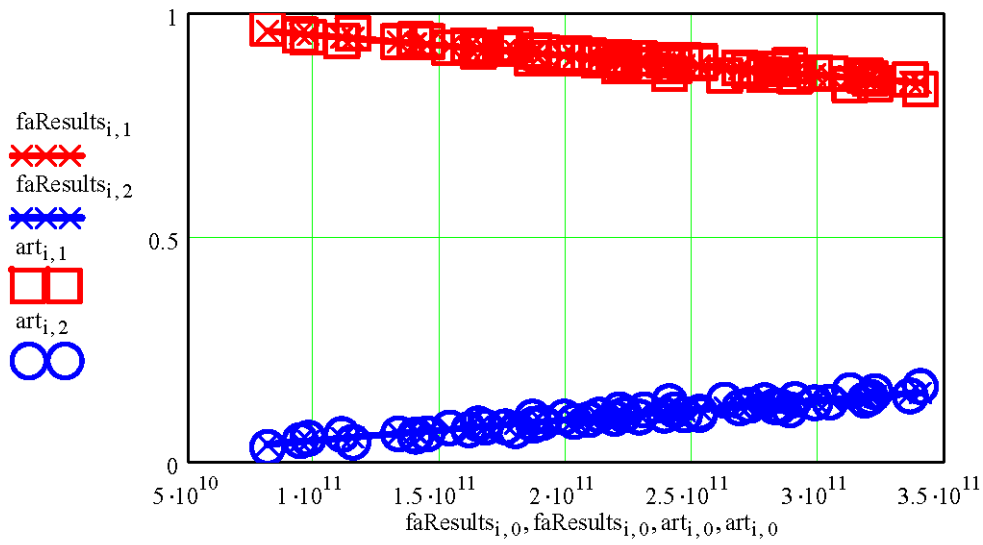
Berechnung der Standardabweichung

$$\text{ms}_1 := \sum_i (\text{faResults}_{i,1} - \text{art}_{i,1})^2 \quad \text{ms}_2 := \sum_i (\text{faResults}_{i,2} - \text{art}_{i,2})^2$$

$$\text{Sum_ms} := \text{ms}_1 + \text{ms}_2$$

$$\text{rms} := \sqrt{\text{Sum_ms}}$$

$$\text{rms} = 0.08554804$$



	TZDichte NH3	faNH3+	faNH4+
	0	1	2
0	$8.1477 \cdot 10^{10}$	0.96073	0.03927
1	$9.4426 \cdot 10^{10}$	0.95463	0.04537
2	$9.7613 \cdot 10^{10}$	0.95314	0.04686
3	$1.1096 \cdot 10^{11}$	0.94691	0.05309
4	$1.1534 \cdot 10^{11}$	0.94487	0.05513
5	$1.3347 \cdot 10^{11}$	0.93648	0.06352
6	$1.4004 \cdot 10^{11}$	0.93346	0.06654
7	$1.4024 \cdot 10^{11}$	0.93337	0.06663
8	$1.4483 \cdot 10^{11}$	0.93127	0.06873
9	$1.5379 \cdot 10^{11}$	0.92717	0.07283
10	$1.6136 \cdot 10^{11}$	0.92373	0.07627
11	$1.6515 \cdot 10^{11}$	0.92201	0.07799
12	$1.6793 \cdot 10^{11}$	0.92075	0.07925
13	$1.759 \cdot 10^{11}$	0.91715	0.08285
14	$1.7989 \cdot 10^{11}$	0.91535	0.08465
15	$1.8666 \cdot 10^{11}$	0.91231	0.08769
16	$1.8726 \cdot 10^{11}$	0.91204	0.08796
17	$1.8726 \cdot 10^{11}$	0.91204	0.08796
18	$1.9044 \cdot 10^{11}$	0.91062	0.08938
19	$1.9921 \cdot 10^{11}$	0.9067	0.0933
20	$2.0319 \cdot 10^{11}$	0.90493	0.09507
21	$2.0917 \cdot 10^{11}$	0.90227	0.09773
22	$2.1315 \cdot 10^{11}$	0.9005	0.0995
23	$2.1913 \cdot 10^{11}$	0.89786	0.10214

10.5 MathConnex-Programm

