

---

# Photoionisation von freien Aerosolpartikeln mit Synchrotronstrahlung

---

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

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

vorgelegt von  
Harald Bresch  
aus Osnabrück



Berlin, Juni 2007

1. Gutachter: Prof. Dr. E. Rühl
2. Gutachter: Prof. Dr. H. Baumgärtel

Disputation am 05. Juli 2007

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>9</b>
2.1	Aerodynamik von Nanopartikeln . . . . .	9
2.1.1	Strömungen durch eine Blende . . . . .	9
2.1.2	Bewegung von Partikeln durch eine Blende . . . . .	11
2.1.3	Relaxationszeit . . . . .	12
2.1.4	Knudsen-Zahl und mittlere freie Weglänge . . . . .	13
2.1.5	Stokessches Gesetz und Cunningham-Korrekturfaktor . . . . .	14
2.1.6	Stopping distance . . . . .	15
2.1.7	Stokeszahl . . . . .	16
2.1.8	Strömungsfeld . . . . .	17
2.1.9	Aerodynamischer Durchmesser . . . . .	17
2.2	Elektrooptische Grundlagen . . . . .	19
2.2.1	Vektorfeld und Maxwellgleichungen . . . . .	19
2.2.2	Ebene Wellen in nichtleitenden Medien . . . . .	21
2.2.3	Leistung und Querschnitte . . . . .	23
2.2.4	Dispersion und Resonanzfrequenz . . . . .	28
2.2.5	Absorption . . . . .	33
2.2.6	Externe Totalreflexion . . . . .	34
2.3	Lichtstreuungstheorie . . . . .	36
2.3.1	Streuung an Partikeln . . . . .	36
2.3.2	Miestreuung . . . . .	37

2.3.3	Rayleigh-Gans Theorie . . . . .	46
2.3.4	Diffuse Reflexion an sphärischen Oberflächen . . . . .	47
2.4	NEXAFS Spektroskopie . . . . .	48
2.4.1	Grundprinzip . . . . .	48
2.4.2	Resonanzen unterhalb der Ionisierungsenergie . . . . .	50
2.4.3	Resonanzen oberhalb der Ionisierungsenergie . . . . .	51
<b>3</b>	<b>Experimentelle Grundlagen</b>	<b>53</b>
3.1	Aerosolgeneration . . . . .	53
3.1.1	Ultraschallvernebler . . . . .	53
3.1.2	Luftdruckzerstäuber . . . . .	54
3.1.3	Elektrospray . . . . .	58
3.2	Aeroselselektion und -analyse . . . . .	60
3.2.1	Klassifizierer . . . . .	60
3.2.2	Kondensationskernzähler . . . . .	66
3.2.3	Nanopartikelsammler . . . . .	69
3.3	Aerodynamische Linsen . . . . .	70
3.3.1	Aerodynamische Linsen für $d > 50$ nm . . . . .	70
3.3.2	Impaktor als aerodynamische Linse . . . . .	76
3.3.3	Aerodynamische Linsen für $d < 30$ nm . . . . .	78
3.4	Elektronenspeicherring . . . . .	83
3.4.1	BESSY II . . . . .	84
3.4.2	Strahlrohr UE49/2 PGM1 . . . . .	85
3.4.3	Strahlrohr UE52 SGM . . . . .	85
3.5	Detektion . . . . .	86
3.5.1	Elektronendetektor . . . . .	86
3.5.2	Photonendetektor . . . . .	89

---

<b>4</b>	<b>Innerschalenanregung freier Nanopartikel</b>	<b>91</b>
4.1	Experiment	91
4.1.1	Experimenteller Aufbau	91
4.1.2	Abschätzung der Elektronenausbeute	94
4.1.3	Datenaufbereitung	95
4.1.4	Probenpräparation	95
4.2	Kristallwasser	96
4.2.1	Wasser	96
4.2.2	Glaubersalz	101
4.2.3	Ammoniumsulfat	109
4.2.4	Abschätzung zu den Wassermodellen	112
4.2.5	Natriumchlorid	114
4.2.6	Zusammenfassung	119
4.3	Strukturierte Nanopartikel	121
4.3.1	Siliciumdioxid	121
4.3.2	Zinksulfid	124
4.3.3	Kern-Schale-System (ZnS/SiO <sub>2</sub> )	127
4.4	Multikern-Nanopartikel	130
4.4.1	Aufbau der Partikel	130
4.4.2	Silicium $L_{3,2}$ -Kante	132
4.4.3	Kohlenstoff $K$ -Kante	133
4.4.4	Schwefel $L_{3,2}$ -Kante und Selen $M_{3,2}$ -Kante	135
4.4.5	Cadmium $M_{5,4}$ -Kante	137
<b>5</b>	<b>Lichtstreuung an freien Nanopartikeln</b>	<b>139</b>
5.1	Experiment	139
5.1.1	Aerosolpräparation	139
5.1.2	Experimenteller Aufbau	140
5.2	Partikelgrößenanalyse	142
5.3	Energieabhängige Messungen	146

5.3.1	Miestreuung an Sphären . . . . .	148
5.3.2	Miestreuung mit Partikelgrößenverteilung . . . . .	151
5.3.3	Vergleich mit experimentellen Daten . . . . .	155
5.3.4	Optimierung der Simulationen . . . . .	158
5.4	Winkelabhängige Messungen . . . . .	165
5.4.1	Miestreuung an Sphären . . . . .	165
5.4.2	Analyse der Verteilung der Streuzentren . . . . .	166
5.4.3	Streudiagramm von beschichteten Sphären . . . . .	170
5.4.4	Raue Oberfläche . . . . .	171
5.4.5	Optimierung der rauen Oberfläche . . . . .	174
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>181</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>189</b>