

Abstrakt

<i>Autor:</i>	Mgr. Ján Blaško
<i>Názov práce:</i>	Štúdium excitačných procesov v molekulách indukovaných nárazom elektrónov
<i>Univerzita:</i>	Univerzita Komenského v Bratislave
<i>Fakulta:</i>	Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
<i>Katedra:</i>	Katedra experimentálnej fyziky
<i>Vedúci práce:</i>	doc. RNDr. Juraj Országh, PhD.
<i>Mesto:</i>	Bratislava
<i>Druh záverečnej práce:</i>	Dizertačná práca

V tejto dizertačnej práci sme študovali formáciu neutrálov a kladných iónov zlúčenín pyridínu (C_5H_5N), pyridazínu ($C_4H_4N_2$) a dusíka (N_2). Zlúčeniny pyridínu a pyridazínu sme študovali na aparátúre Crossed Electron Molecular Beams Ionization Apparatus (CEMBIA). Zlúčeniny pyridínu a dusíka sme študovali pomocou aparatúry Electron Induced Fluorescence Apparatus (EIFA). Obe aparatúry využívajú skrížené elektrónové a molekulové zväzky. Študovali sme interakcie zlúčenín s nízkoenergetickými elektrónmi za použitia vysokého vákuu. Produkty daných interakcií sme analyzovali prostredníctvom hmotnostnej spektrometrie a optickej emisnej spektroskopie.

V oboch aparátúrach bol trochoidálnym elektrónovým monochromátorom generovaný elektrónový zväzok a molekulový zväzok bol generovaný efuzívnou kapilárou. V prípade aparatúry CEMBIA sú generované ióny z interakcie usmernené elektrickým poľom do kvadrupólového hmotnostného spektrometra (QMS). V QMS prebieha separácia iónov na základe pomeru náboja a hmotnosti. Detektor dosiahne iba vyseparovaná skupina iónov. Ako detektor je použitý channeltron. V prípade aparatúry EIFA sú emitované fotóny z interakcie (pri deexcitácii vzbudených produktov) vedené optickým systémom z vákuovej komory do optického monochromátora. Fotóny sú detegované buď fotonásobičom, alebo CCD kamerou.

Prostredníctvom kvadrupólového hmotnostného spektrometra, optickej emisnej spektroskopie a monochromatického elektrónového lúča sme mohli opísať procesy elektrónovej excitácie, elektrónovej ionizačnej excitácie, elektrónovej disociatívnej excitácie, elektrónovej disociatívno-ionizačnej excitácie, elektrónovej ionizácie a elektrónovej disociatívnej ionizácie.

Fragmentácia študovaných zlúčenín sa vyznačuje sekvenčnými disociáciami uhlíkových a vodíkových atómov. Ionizačná energia molekuly pyridínu bola stanovená na hodnotu 9,37 eV. Ionizačná energia molekuly pyridazínu bola stanovená na hodnotu

8,98 eV. Boli merané hmotnostné spektrá pri elektrónovej energii 70 eV v rozsahu 10 – 85 amu pre pyridín a pyridazín. Pre vybrané fragmenty sa namerali účinné prierezy v oblasti prahových energií, ktoré sú porovnané s inými publikáciami. Pri elektrónmi indukovanej fluorescencii pyridínu sme pravdepodobne ako prví pozorovali migráciu vodíka, vedúcu k tvorbe neutrálneho NH radikálu.

Výsledky fluorescencie dusíka a pyridínu boli prezentované vo forme 2D spektrálnej mapy, ktorá poskytuje komplexné informácie o excitačno-emisných interakciách elektrónu so zlúčeninou. 2D mapa obsahuje emisné spektrá a excitačno-emisné funkcie (EEF). Navyše po integrácii plochy pod spektrálnymi štruktúrami možno z 2D mapy určiť aj absolútne hodnoty excitačno-emisných účinných prierezov. Spektrálny rozsah 2D mapy pyridínu je 200 – 700 nm, dusíka 330 – 1030 nm. Energetický rozsah 2D spektrálnej mapy pyridínu je 15 – 100 eV a dusíka 6 – 100 eV. 2D mapa pyridínu je v spektrálnom rozsahu 200 – 700 nm a v energetickom rozsahu 15 – 100 eV.

Realizované experimenty na dvoch aparatúrach poskytujú nové alebo doplnujúce dáta vo forme hmotnostných spektier a emisných spektier. Experimenty poskytujú aj dáta o interakciách elektrónov a zlúčenín, ako sú účinné prierezy pre špecifické reakcie. Tieto údaje sú dôležité aj pre teoretické štúdie a modelovanie.

Kľúčové slová: elektrónová ionizácia; ionizačná, excitačná a disociatívna energia; hmotnostná spektrometria; fluorescencia; optická emisná spektroskopia