

Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Bachelorarbeit

Im Studiengang Physik

vorgelegt von

Viktor Adam

geboren in

Wolodarskoje

Mai 2016



# **Design und Charakterisierung einer Wasserclusterquelle für den Einsatz am FLASH in Hamburg**

Diese Bachelorarbeit wurde am  
Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg  
in der Arbeitsgruppe „Experimentelle Mehrteilchen-Quantendynamik“ und am  
Freie-Elektronen-Laser in Hamburg unter Betreuung von

Priv.-Doz. Dr. Robert Moshhammer

durchgeführt.



## **Abstract**

Here english text.

## **Zusammenfassung**

Hier deutscher Text.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Experimentelle Realisierung</b>	<b>11</b>
2.1	Cluster . . . . .	11
2.1.1	Definition . . . . .	11
2.1.2	Überschallexpansion . . . . .	12
2.2	Jet . . . . .	12
2.3	(REMI?) eher Quadrupol . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Design der Düse</b>	<b>13</b>
3.1	Auf wichtige Details und Gründe bei der Konstruktion eingehen . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Experiment</b>	<b>15</b>
4.1	Weiß noch nicht was da so bei rumkommt, aber denke dass man da erste Drücke auslesen kann. Evtl steht ein Quadrupol-Spektrometer zur verfügung mit dem man das was rasukommt analysieren kann . . . . .	15
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>17</b>
<b>6</b>	<b>Anhang</b>	<b>19</b>





# 1 Motivation

Wasser ist auf der Erde ein allgegenwärtiges Molekül, das auch Grundbestandteil allen Lebens darstellt. Deswegen ist es sehr wichtig es so gut wie möglich zu untersuchen und zu verstehen. Wir haben mit dem Reaktionsmikroskop und dem FLASH in Hamburg gute Voraussetzungen es genauer zu untersuchen.

Das Ziel dieser Bachelorarbeit ist es einen Wasserjet zu erzeugen mit dem kleine Wassercluster untersucht werden können. Wir untersuchen hierbei kleine Cluster, weil diese leichter theoretisch zu berechnen sind und man somit erhaltene Ergebnisse gut mit der Theorie vergleichen kann. Am einfachsten zu berechnen sind natürlich Wasserdimere, weshalb wir auch gezielt diese Moleküle zu erzeugen versuchen.

Interessante Anwendungsgebiete sind zum Beispiel die von [referenzGökhbergoderso] theoretisch behandelte steuerbare ICD. (Genauer beschreiben was das für ein Versuch ist) Mit einer Apparatur die Wasserdimere erzeugt(?), die man mit höhermassigen Atomen, z.B. Edelgasen, „dopt“ und einem starken Laser, wie er uns am FLASH zur Verfügung steht, können solche Experimente durchgeführt werden. Mögliche Anwendungen in der Realität sind die Untersuchung von Auswirkungen der spontanen ICD auf Biomoleküle [Referenz von Kirsten nehmen]

Eine weitere interessante Anwendung ist die Untersuchung von der proton transfer dynamic bei der Reaktion von  $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}^+ \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}$ . Diese  $\text{H}_3\text{O}^+$  - Radikale sind dafür bekannt Biomoleküle anzugreifen und in ihrer Struktur zu verändern. Auch dies kann man mithilfe der Wasserdimerquelle und einem Ionisierenden Laser mittels des Pump-Probe-Verfahrens zeitlich auflösen.

Und dafür ist nun die Idee eben eine Jetdüse zu bauen, die ein internes Wasserreservoir besitzt und während des Betriebs wiederbefüllt werden kann. Die Düse soll  
Am Ende der Motivation noch kurz die Inhaltsangabe machen



## 2 Experimentelle Realisierung

### 2.1 Cluster

Für die in der Motivation erwähnten Experimente benötigen wir eine Quelle, die ein Target aus Wasserdimeren zur Verfügung stellt. Wir haben uns entschieden, durch adiabatische Überschallexpansion solche Wassercluster zu realisieren. Die entsprechende Düse wurde von uns eigens zu diesem Zweck designt und wird im weiteren Verlauf der Arbeit noch eingehend besprochen[Referenz zum entsprechenden Kapitel].

#### 2.1.1 Definition

Als Cluster bezeichnet man Agglomerate aus Atomen oder Molekülen. Diese können bei kleinen Exemplaren 2 bis mehrere Hundert Teilchen enthalten und bei großen Clustern aus bis zu ca.  $10^6$  Teilchen bestehen. Je nach Größe besitzen Cluster verschiedene Eigenschaften und bilden damit eine Brücke zwischen der Atomphysik, der Molekülphysik und der Festkörperphysik.

Bei kleinen Clustern lassen sich noch alle Eigenschaften anhand der Atom- und Molekülphysik beschreiben. Ähnlich wie beim Atom besitzen kleine Cluster diskrete Energieniveaus. Bis zu einer gewissen Größe, strukturieren sich die Cluster beim Dazukommen eines weiteren Atoms vollständig um und verändern auf diese Weise auch ihre physikalischen und chemischen Eigenschaften. Sobald das Cluster eine Größe von etwa 100 Atomen oder Molekülen erreicht, kann man allmählich die Anordnung in einer Gitterstruktur wie bei Festkörpern beobachten. Auch die anfangs diskreten Energieniveaus gehen langsam in ein kontinuierliches Energieband über[Referenzen zu Büchern einfügen]. Sogenannte Mikrokristalle sind Cluster die aus ca 1000 Atomen oder Molekülen bestehen. Die besitzen schon einige Eigenschaften von Festkörpern und bei Clustern in der Größe von etwa 50000 Konstituenten kann man von Festkörpern sprechen, da sie diesen in allen Eigenschaften ähneln.

Cluster können aus fast jeder Art von Atomen oder Molekülen erzeugt werden. Diese werden je nach ihren Bestandteilen und Bindungstypen in verschiedene Gruppen eingeteilt[HierReferenzWiki-Buch?].

Da gibt es zum einen die Gruppe der metallischen Cluster. Diese z.B.  $Al_n$ -Cluster bilden untereinander eine metallische Verbindung mit einem halbvollen Band delocalisierter Bindungselektronen. Die Bindungsenergien sind hierbei in einem Bereich von 0,5 - 3 eV. Metallische Cluster bestehen oft aus  $n > 200$  Atomen.

## 2 Experimentelle Realisierung

Dann gibt es die Gruppe der ionischen Cluster. Hier weisen die Bestandteile oft einen großen Unterschied in Elektronegativität auf und werden durch Coulombwechselwirkung zusammengehalten. Ihre Struktur ist meist kubisch wie wir das von  $\text{NaCl}_n$  kennen und die Bindungsenergien liegen zwischen 2 - 4 eV.

Eine weitere bekannte Gruppe ist die der kovalenten Cluster, die vor allem durch C-Cluster wie Fullerene bekannt wurde. Diese besitzen eine ausgerichtete Bindung durch Elektronenpaare, mit einer mittleren Bindungsenergie von 1 - 4 eV. Bei diesem Typ liegt die charakteristische Clustergröße bei  $30 < n < 80$ .

Weiterhin gibt es die Van-der-Waals-Cluster, die durch eine Dipol-Wechselwirkung zwischen Atomen und Molekülen verbunden werden. Sie besitzen nur eine geringe mittlere Bindungsenergie von 0,001 - 0,3 eV. Repräsentanten dieser Gruppe sind z.B. Edelgascluster wie  $\text{H}_2$ -Cluster. Diese Cluster bestehen meist aus  $n < 10$  Atomen oder Molekülen. Und zum Schluss gibt es noch die Gruppe, mit der wir uns in dieser Arbeit befassen werden, und zwar die Gruppe der Cluster mit Wasserstoffbindung. Die Dipol-Dipol-Anziehung hält diese Cluster mit einer mittleren Bindungsenergie von 0,15 - 0,5 eV zusammen.

*Doch was ist nun der Grund warum wir Cluster als Target nehmen? Bei den von uns angestrebten Versuchen wollen wir 2 Wassermoleküle isoliert betrachten. Dazu eignen sich Cluster ideal, denn durch die Einphoton-Ionisation, die wir auf das Target anwenden, wählen wir gezielt ein Cluster aus dem Jet-Target aus und beobachten durch das Remi wie die darauffolgende Reaktion abläuft. Was das Remi ist und wie es funktioniert wird im Kapitel [Referenz] kurz zusammengefasst.*

### 2.1.2 Überschallexpansion

Die Überschallexpansion ist ein adiabatischer Prozess, bei dem Gas durch eine kleine Öffnung von einem Bereich mit hohem Druck, in einen Bereich mit niedrigem Druck strömt. Da die räumliche Dichte abnimmt, muss die Dichte im Impulsraum zunehmen, was einer Temperaturabnahme entspricht. Diese Temperaturabnahme ist sehr bemerkenswert, da sie es ermöglicht van-der-Waals-gebundene Moleküle wie z.B.  $^4\text{He}_2$  zu produzieren und anschließend zu detektieren bzw. zu untersuchen [Liu and McLean(1989)].

## 2.2 Jet

Skimmer und Jetstages und Fokussierung des Strahls ins Remi → Dump

## 2.3 (REMI?) eher Quadrupol

Grundlegendes Prinzip des REMIs, Ionisation, Detektoren, MCP, DelayLineAnode

## 3 Design der Düse

Wie und wieso wurde die Düse konstruiert wie sie ist. Konische Spitze wegen Gradient und Düsenöffnung so groß usw.

Wie detailliert wird das? Aber schon alle Gedanken die wichtig waren erwähnen?

### 3.1 Auf wichtige Details und Gründe bei der Konstruktion eingehen



## 4 Experiment

Inbetriebnahme/Charakterisierung der Quelle

Mal schaun was ich bekomme. Zuerst hab ich nur die Drücke der Jetstages zu Verfügung. Wenn ich irgendwie sicher sein kann, dass das ganze sauber funktioniert vielleicht mit REMI ausprobieren um zu sehen welche Cluster man denn bekommt?

Sicher sein heißt, dass die Drücke alle im „richtigen“ Bereich bleiben und stabil sind?

**4.1 Weiß noch nicht was da so bei rumkommt, aber denke dass man da erste Drücke auslesen kann. Evtl steht ein Quadrupol-Spektrometer zur verfügung mit dem man das was rasukommt analysieren kann**





## **5 Zusammenfassung**



## 6 Anhang

Hier alle Konstruktionszeichnungen und Referenzen



# Literaturverzeichnis

[Liu and McLean(1989)] B. Liu and A. D. McLean. The interacting correlated fragments model for weak interactions, basis set superposition error, and the helium dimer potential. *The Journal of Chemical Physics*, 91(4), 1989.

egu