

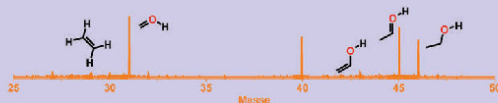
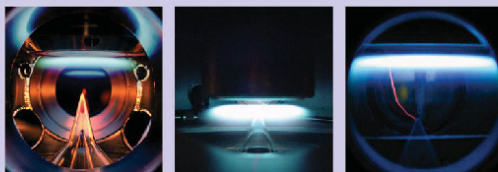


Tina Kasper (Autor)

Molekularstrahlmassenspektrometrie zur Analytik in Flammen oxygenierter Brennstoffe

Tina Kasper

Molekularstrahlmassenspektrometrie zur Analytik in Flammen oxygenierter Brennstoffe



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/1752>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Grundlagen	13
2.1	Verbrennungsprozesse	13
2.2	Oxygenierte Brennstoffe	14
2.2.1	Modellsubstanzen für Biobrennstoffe	14
2.2.2	Verbrennungschemie der Alkohole	16
2.2.2.1	Ethanol	17
2.2.2.2	1-Propanol und 2-Propanol	19
2.2.2.3	Propanal	20
2.3	Analytik in Flammen	20
2.3.1	Laminare Niederdruck-Flammen	22
2.3.2	Temperaturbestimmung	25
2.3.2.1	LIF-Messungen am NO Radikal	26
2.3.2.2	Zwei-Linien-Thermometrie an OH	27
2.3.2.3	Thermoelemente	30
2.3.3	Molekularstrahlmassenspektrometrie	33
2.3.3.1	Prozesse im Molekularstrahl	35
2.3.3.2	Einfluß der Probenentnahme-Düse auf die Höhenprofile .	42
2.3.3.3	Time-of-Flight Massenanalyse	45
2.4	Ionisationsprozesse	52
2.4.1	Elektronen-Ionisation	53
2.4.2	Photoionisation	56
2.4.3	Ionisationsquerschnitte	59
2.4.3.1	Elektronen-Ionisation in der Nähe des Ionisationspotentials	59

2.4.3.2	Photoionisation in der Nähe des Ionisationspotentials . .	62
2.4.4	Ionisationspotentiale	63
2.4.5	EI- und PI-MBMS	64
3	Flammen	67
3.1	Brennstoffe und Flammenbedingungen	67
3.2	Verdampfer	70
4	Molekularstrahlmassenspektrometrie	73
4.1	Aufbau des EI- und PI-MBMS-Systems	73
4.1.1	Brenner	74
4.1.2	Probenentnahme und Vakuumsystem	76
4.2	Ionenerzeugung und Massenanalyse	80
4.2.1	Elektronenquelle	80
4.2.2	ToF-Massenspektrometer mit Reflektron	83
4.2.3	Datenerfassung und Verarbeitung am EI-MBMS-System	84
4.2.4	Synchrotronstrahlung und Beamline	85
4.2.5	Lineares ToF-Massenspektrometer	87
4.2.6	Datenerfassung und Verarbeitung am PI-MBMS-System	87
4.2.7	Vergleich der Apparaturen	88
4.3	Flammen-Messungen	90
4.4	Rohdaten	90
4.5	Kalibrationsmessungen	93
4.5.1	EI-MBMS	94
4.5.1.1	Bestimmung von Fragmentierungsmustern	96
4.5.1.2	Direkte Bestimmung von Kalibrationsfaktoren	97
4.5.1.3	Energieverteilung der Elektronen	98
4.5.1.4	Indirekte Bestimmung von Kalibrationsfaktoren	103
4.5.1.5	Abschätzung von EI-Ionisationsquerschnitten	107
4.5.1.6	Bestimmung der Massendiskriminierung	109
4.5.2	PI-MBMS	110
4.5.2.1	Bestimmung der Massendiskriminierung	111
4.5.2.2	Bestimmung von Ionisationsquerschnitten	112

4.6	Datenauswertung	112
4.6.1	Bestimmung von Molenbrüchen	114
4.6.1.1	Elektronen-Ionisation	114
4.6.1.2	PI-Ionisation	117
4.6.1.3	Bestimmung des Argon-Molenbruchs und der Gerätefunktion	125
4.7	Vergleich der Molenbrüche der EI- und PI-Messungen	131
5	Temperaturbestimmung und optische Messungen	137
5.1	Temperaturmessungen	137
5.1.1	NO-LIF-Messungen	137
5.1.1.1	Optischer Aufbau und Datenaufnahme	138
5.1.1.2	Bestimmung von Temperaturen aus den Rohdaten	140
5.1.2	Thermoelemente	140
5.1.2.1	Halterung und Beschichtung	140
5.1.2.2	Bestimmung von Temperaturen	144
5.1.3	Temperaturbestimmung aus der Gerätefunktion	148
5.2	Zweidimensionale OH-LIF Messungen	156
5.2.1	Experimenteller Aufbau	156
5.2.2	Rohdaten	161
5.2.3	Temperaturmessungen	163
5.2.4	OH-Profil	166
5.2.5	Düseneinfluß	170
6	Diskussion der Flammenstrukturen	175
6.1	Ethanol	176
6.1.1	Isomerentrennung	181
6.2	1-Propanol und 2-Propanol	185
6.2.1	Erste Oxidationsschritte	185
6.2.2	2-Propanol-Flammen	195
6.2.3	1-Propanol-Flammen	201
6.3	Vergleich der 1-Propanol- und 2-Propanol-Flammen	206
6.4	Propanal	211

6.4.1	Vergleich der Propanal- und Propanol-Flammen	215
7	Zusammenfassung und Ausblick	219
8	Summary	227
A	Kalibrations-Messungen	233
A.1	Direkte Kalibration	233
A.2	Indirekte Kalibration	238
B	Spezies-Zuordnung und Molenbrüche	245
B.1	Flamme 1	247
B.1.1	Molenbrüche Flamme 1	247
B.2	Flamme 2	259
B.2.1	Molenbrüche Flamme 2	259
B.3	Flamme 3	272
B.3.1	Energiescans Flamme 3	272
B.3.2	Molenbrüche Flamme 3	276
B.4	Flamme 4	291
B.4.1	Energiescans Flamme 4	291
B.4.2	Molenbrüche Flamme 4	295
B.5	Flamme 5	309
B.5.1	Energiescans Flamme 5	309
B.5.2	Molenbrüche Flamme 5	313
B.6	Flamme 6	328
B.6.1	Energiescans Flamme 6	328
B.6.2	Molenbrüche Flamme 6	332
B.7	Flamme 7	349
B.7.1	Energiescans Flamme 7	349
B.7.2	Molenbrüche Flamme 7	353
B.8	Flamme 8	370
B.8.1	Molenbrüche Flamme 8	370
B.9	Flamme 9	387
B.9.1	Molenbrüche Flamme 9	387

B.10 Flamme 10	403
B.10.1 Energiescans Flamme 10	403
B.10.2 Molenbrüche Flamme 10	407
B.11 Flamme 11 und 12	424
B.11.1 Molenbrüche Flamme 11	424
B.11.2 Molenbrüche Flamme 12	427
B.11.3 Graphische Darstellungen der Flammen 11 und 12	430
C Auswertungsprogramme	437
D Origin-Skripte	465
E Abürzungen	473