

Prahové energie iónových produktov analyzovaných hmotnostnou spektrometriou - teoretické štúdium.

Peter Papp, Dušan Kubala, Jaroslav Kočíšek, Štefan Matejčík

papp@fmph.uniba.sk

Predkladaný príspevok sa zaoberá využitím výpočtových metód chemickej fyziky na určenie možných produktov kolíznych reakcií nízkoenergetických elektrónov s molekulami. Experimentálne zariadenie nachádzajúce sa na Katedre experimentálnej fyziky, FMFI UK v Bratislave je vybavené trochoidálnym monochromátorom, pomocou ktorého je možné produkovať energeticky úzky zväzok elektrónov, a kvadrupólového hmotnostného spektrometra na analýzu iónových produktov kolíznych reakcií elektrónov a študovaných molekúl. Teoretické modelovanie týchto reakcií nachádza svoje uplatnenie z dôvodu nedostatočného určenia produktov či už ionizačných alebo záchyťových reakcií, ktoré sú vo väčšine prípadov sprevádzané disociáciou materskej molekuly na menšie iónové a neutrálne produkty. Hmotnostná spektrometria prináša informácie o pomere hmotnosti a náboja ( $m/q$ ) detekovaného iónu a o prahových energiách elektrónu potrebného na vznik iónu. Neutrálne produkty sú navyše nedetekovateľné. Použitím súčasných metód chemickej fyziky je možné navrhnúť také reakcie vedúce k disociácii materskej molekuly na ión s hmotnosťou prislúchajúcou k experimentálne pozorovanému  $m/q$  a neutrálny produkt (prípadne viacej neutrálnych produktov), pre ktoré je ich energetická bilancia porovnateľná s nameranými prahovými energiami.