

Ankündigung von Abschlussarbeiten:

Simulation von geladenen Nanotropfen in Massenspektrometern

In der modernen analytischen Massenspektrometrie wird meist Elektrospray-ionisation (ESI) verwendet, um Ionen zu erzeugen. Dabei wird eine flüssige Lösung der nachzuweisenden Substanz (Analyt) in einem elektrischen Feld versprührt und es entstehen geladene Tropfen. Es gibt inzwischen zahlreiche experimentelle Hinweise, dass diese geladenen Tropfen nicht in der Ionenquelle vollständig verdampfen, sondern tief in das Massenspektrometer eindringen können. Die Anwesenheit derartiger Flüssigkeitstropfen kann potentiell stark störende Auswirkungen auf die analytische Anwendung eines Massenspektrometers haben.

In Massenspektrometern sind die Tropfen starken elektrischen Feldern und niedrigem Hintergrundgasdruck ausgesetzt und erleben potentiell sehr energiereiche Kollisionen mit anderen Teilchen.

Wir möchten mit mehreren Abschlussarbeiten die molekulare Dynamik geladener Tropfen unter derartigen Bedingungen durch Simulationen im Rechner besser verstehen. Dabei sind sowohl die Bewegung der Tropfen als auch die molekularen Interaktionen der Moleküle im inneren der Tropfen von Interesse. Fragen für Abschlussarbeiten in diesem Bereich sind beispielsweise: Welche internen Temperaturen erreichen Tropfen in einem Ionenfallen-Massenspektrometer? Wie fragmentieren Tropfen wenn sie hohe interne Temperaturen erreichen?

Die Simulationen werden wir vor allem mit einem klassischen Moleküldynamik-Programm (LAMMPS) und einem spezialisierten Simulationsprogramm für die Berechnung der Flugbahnen von geladenen Teilchen (IDSimF) durchführen.

Vorherige Programmierkenntnisse sind nicht erforderlich. Die Modellierungen und vor allem die Analyse der Simulationsergebnisse erfolgt zwar mit Python-Skripten, die hierfür nötigen Grundlagen sind aber leicht im Verlauf der Arbeit zu erlernen.

Die Arbeiten sind geeignet für

- Bachelor oder Master Chemie
- Bachelor Applied Science:
Chemie / Physik, Chemie / Mathematik, Chemie / Informatik

Ansprechpartner:

Walter Wißdorf

V. 08.072

wissdorf@uni-wuppertal.de