

9. Zusammenfassung

In dieser Arbeit sind verschiedene Polymermaterialien für den Einsatz als optische Chemosensoren untersucht worden, deren Funktionsprinzip auf der Eindiffusion von Molekülen in dünne Polymerschichten basiert.

Durch Messung der durch Feuchte induzierten effektiven Doppelbrechung wurde am Beispiel von Polyimid-Wellenleitern aufgezeigt, wie der variabel einstellbare Vernetzungsgrad des Materials Einfluß auf die Sensitivität bei der Detektion einer nachzuweisenden Substanz nimmt. Die geeignete Auswahl oder die gezielte Modifikation der Polymermatrix ermöglicht eine selektive Messung von Substanzen, deren Moleküle sich in Form und Größe unterscheiden. Im speziellen Falle wurde so gezeigt, wie der ansonsten schwer zu trennende n-Heptan Anteil im Gasgemisch mit Iso-Oktan selektiv meßbar ist.

Im weiteren Verlauf wurde die optische Untersuchungsmethode der Metallfilm unterstützten Leckwellenspektroskopie mit einem Transfer-Matrix-Formalismus dahingehend erweitert, daß sie neben der quantitativen Bestimmung von Brechungsindex und Schichtdicke eines beliebigen Vielschichtsystems nun auch die Möglichkeit bietet, kontinuierliche Brechungsindexprofile zu behandeln. Somit steht über die Berechnung der winkelabhängigen Reflektivität und der modalen Feldverteilungen auch die Rekonstruktion eines Profils aus gemessenen Reflexionsspektren zur Verfügung.

Über eine Feinzerlegung der sensitiven Schicht in Subschichten konnte unter Hinzunahme eines angepaßten Diffusionsmodells das dynamische Ansprechverhalten der Sensoren vollständig beschrieben werden und die zeitliche Entwicklung der Brechungsindexprofile während der Ein- und Ausdiffusion modelliert werden.

Aus der Anpassung des Modells wird der Diffusionskoeffizient der zu messenden Substanz in der sensitiven Polymerschicht ermittelt. Damit kann jetzt die beobachtete Dynamik der Sensoren auf eine objektive physikalische Größe, den Diffusionskoeffizienten zurückgeführt werden und somit ist eine Klassifizierung von sensitiven Schichten und Nachweissubstanzen erreicht.

Zudem wurde die unterschiedliche Wechselwirkung zwischen den verschiedenen optischen Moden und der inhomogenen Brechungsindexverteilung infolge eines zeitlich variierenden Diffusionsprofils über die berechneten modalen Feldverteilungen erklärt.

Anhand von technisch bedeutenden Nachweissubstanzen, die zur systematischen Vergleichbarkeit aus chemisch homologen Reihen ausgewählt wurden, konnten die entwickelten Modelle mit den optischen Methoden verifiziert werden. Als empfindliche Schichten wurden Polymere gewählt, die eine gewisse Selektivität gegenüber dem Analyten erwarten lassen und sich durch eine hervorragende Beständigkeit und sehr gute optische Eigenschaften auszeichnen. Gemessen wurde sowohl in der flüssigen Phase als auch in Dämpfen. Mit der geeigneten Wahl der Materialien wurden für die äußerst interessanten aromatischen Kohlenwasserstoffe minimale Nachweisgrenzen von wenigen ppm (Parts per Millions) erzielt. Des Weiteren wurde eine Anordnung zur

wellenlängenabhängigen Reflexionsspektroskopie vorgestellt, die eine problemlose Ankopplung an faseroptische Meßsysteme erlaubt.

Der Einfluß der Molekülgröße, der Polarisierbarkeit und des Dipolmoments des Analyten auf die Sensitivität und das Ansprechverhalten des Sensors wurde systematisch klassifiziert. Die Sensitivität eines optischen Dünnsfilmsensors ist durch die induzierte Brechungsindexänderung festgelegt. Dabei zeigen die vorgestellten Ergebnisse, daß der vornehmliche Einfluß auf die Sensitivität die Polarisierbarkeit der nachzuweisenden Substanzen ist. Bei gleicher Polarisierbarkeit läßt sich über die Stärke des Dipolmoments der Moleküle eine Erhöhung der Sensitivität ausmachen, die offenbar in der erhöhten Wechselwirkung mit der Polymermatrix begründet ist. Bedingt durch die sterischen Effekte beeinflussen auch Form und Größe der Moleküle sehr deutlich die Diffusionsgeschwindigkeit und damit das Ansprechverhalten des Sensors.

Mit dem gewonnenen Verständnis über die Wechselwirkung zwischen Molekül und Wirtsmatrix, den Diffusionsabläufen im Polymer und der Verifizierung des bereitgestellten mathematischen Modells ist es nunmehr möglich, Sensoren der beschriebenen Art zu modellieren und gezielt hinsichtlich ihrer Funktionalität zu optimieren.