

A 4: Atomic Clusters II

Zeit: Montag 14:00–16:00

Raum: 6G

Hauptvortrag

A 4.1 Mo 14:00 6G

Effiziente Autoionisation schwach gebundener Cluster durch Interatomaren Coulomb-Zerfall (ICD) — ●UWE HERGENHAHN¹, SILKO BARTH¹, VOLKER ULRICH¹, SIMON MARBURGER¹, MARKUS LUNDWALL², GUNNAR ÖHRWALL² und OLLE BJÖRNEHOLM² — ¹Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, EURATOM Association, Boltzmannstr. 2, 85748 Garching — ²University of Uppsala, Dept. of Physics, Box 530, Uppsala, SE

In den letzten Jahren hat die Autoionisation schwach gebundener Cluster großes Interesse gefunden. In diesen Systemen ist für Lochzustände in den Innervalenz-Orbitalen ein strahlungsloser Zerfall möglich, bei dem in einem nicht-lokalen Ein-Stufen-Prozess gleichzeitig die primäre Vakanz aufgefüllt und ein Elektron eines anderen Systems im Cluster ionisiert wird. Dieser Prozess ist ICD (Interatomic/-molecular Coulombic Decay) benannt worden.

Unsere Untersuchungen zeigen experimentell, dass für $2s^{-1}$ Zustände in Ne Clustern ICD der *einzig*e relevante Zerfallskanal ist. Für NeAr Heterocluster wird der Zusammenhang zwischen ihrer Zusammensetzung und der Effizienz von ICD in Ne^+Ar^+ Zustände diskutiert. Als Perspektive könnte ICD zur Erforschung der Zusammensetzung unbekannter Systeme verwendet werden.

A 4.2 Mo 14:30 6G

Semiklassische Hybriddynamik für Vielteilchensysteme — ●FRANK GROSSMANN — Institut für Theoretische Physik, TU Dresden, 01062 Dresden

Basierend auf der zeitabhängigen, semiklassischen Wellenpaketpropagationsmethode von Herman und Kluk [1] kann eine semiklassische Hybridmethode abgeleitet werden, die einen Teil der Freiheitsgrade im Rahmen von einfacher Gaußscher Wellenpaketdynamik beschreibt [2]. Dieses Verfahren eignet sich besonders für komplexe Quantensysteme, die an eine Vielzahl harmonischer Freiheitsgrade gekoppelt sind. In diesem Vortrag stellen wir die Methode vor und diskutieren mögliche Anwendungen im Bereich der Atom- und Molekülphysik.

[1] M. F. Herman and E. Kluk, *Chem. Phys.* 91, 27 (1984)[2] F. Großmann, *J. Chem. Phys.* 125, 014111 (2006)

A 4.3 Mo 14:45 6G

Magic Numbers and Superfluid Sizes in Small Para-Hydrogen Clusters — ●PETER TOENNIES¹, SAAD KHAIRALLAH², MIKHAIL SEVRYUK¹, and DAVID CEPERLEY² — ¹Max Planck Institut für Dynamik und Selbstorganisation, D-37073 Göttingen — ²Dept. Physics, University of Illinois at Urbana-Champaign, IL 61801 USA

The Path Integral Monte Carlo method is used to study the low temperature structures and superfluidity of para-hydrogen clusters with up to 40 molecules. Clusters with sizes $N < 26$ and $T \leq 1.5$ K have nearly 100% superfluid fractions. In larger clusters superfluidity is quenched at the icosahedral-derived magic numbers $N = 26, 29, 32$, and 37 found in "classical" rare gas ion clusters, while below 1 K superfluidity is recovered for the pairs (27,28), (30,31), and (35,36) with loosely attached outer molecules. In all the clusters superfluidity is largely localized in the surface thereby explaining the apparent "super-solid" behavior discussed in the past.

A 4.4 Mo 15:00 6G

Optical properties of isomer resolved diamond clusters — ●LASSE LANDT¹, CHRISTOPH BOSTEDT¹, KATHRIN KLÜNDER¹, THOMAS MÖLLER¹, JEREMY DAHL², SG LIU², and ROBERT CARLSON² — ¹Technische Universität Berlin, Germany — ²MolecularDiamond Technologies, Richmond, CA, U.S.A.

The optical absorption of perfectly size- and structure-selected, neutral, and surface-passivated diamond clusters, so-called diamondoids, was measured in the gas phase with synchrotron radiation at beamline I of HASYLAB at DESY. For this purpose a novel absorption cell for gas phase measurements in the vacuum ultraviolet spectral regime was developed. Optical absorption spectra in the energy range of 5-10 eV were recorded for nine different diamondoids, ranging in size from 10 to 26 carbon atoms, among them several isomeric structures. Our results reveal that the absorption of these subnanometer group IV semiconductor clusters depends on both size and shape. The observed isomeric dependencies will be discussed in terms of the electronic structure of the diamond clusters and compared to recent theoretical predictions.

A 4.5 Mo 15:15 6G

Harmonic generation in the laser-cluster interaction — ●MRITYUNJAY KUNDU and DIETER BAUER — Max-Planck-Institut für Kernphysik, Postfach 103980, 69029 Heidelberg, Germany

Laser-atom or laser-molecule interaction typically shows higher order harmonics of the incident laser frequency. Experiments with atomic clusters, on the other hand, demonstrate the generation of low-order harmonics of higher intensity than with rare-gas atoms. By particle-in-cell (PIC) simulations of Ar_N clusters (with N up to 92096 atoms) in 800 nm, short (< 30 fs) laser pulses, we investigate why the emission is restricted to lower order harmonics. We show that the dipole radiation of the *bound* electrons and the *free* electrons counteract each other, and the resulting *destructive interference* limits the harmonics in to low orders. In this short-pulse regime the *free* electron population increases by absorbing laser energy only via the nonlinear resonance NLR [1,2]. We find that occurrence of the NLR coincides with predominant dipole radiation. However, the total dipole radiation shows enhanced third and fifth harmonic emission at times when the Mie-frequency of the ionizing and expanding cluster linearly resonates with the respective harmonics. The harmonic emission may be used to study the cluster dynamics with pump-probe experiments. By PIC simulations, we discuss a possible pump-probe experiment to predict the maximum of the cluster charge density at a given laser intensity.

[1] M. Kundu and D. Bauer, *Phys. Rev. Lett.*, 96, 123401 (2006).[2] M. Kundu and D. Bauer, *Phys. Rev. A.*, 74, 063202 (2006).

A 4.6 Mo 15:30 6G

Real-time spectroscopy of photo-chemical reactions on mass-selected clusters — ●MARCO NIEMIETZ¹, KIICHIROU KOYASU¹, MATTHIAS GÖTZ¹, MARKUS ENGELKE¹, YOUNG DOK KIM², and GERD GANTEFÖR¹ — ¹Department of Physics, University of Konstanz, 78457 Konstanz, Germany — ²Division of Nano Sciences and Department of Chemistry, Ewha Womans University, 120-750 Seoul, Korea

The surprising catalytic properties of small nanoparticles of noble metals [1,2] motivate the research on the reaction dynamics and photochemistry of such particles. Their interaction with oxygen has been suggested to be one of the most important elementary steps in heterogeneous catalysis [3]. To shed light on the underlying mechanisms, we study the dynamics of reacted Ag and Au clusters by femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy.

The relaxation of photo-excited Ag_nO_2^- clusters with even number of atoms accompany ultrafast direct O_2 photodesorption with an unusual high quantum yield compared to the bulk. In contrast, for the odd-numbered cluster Ag_3O_2^- , a long-living excited state is observed, since O_2 might be dissociatively chemisorbed here.

For Au_2O^- , the time-dependent evolution of the electronic states shows evidence for a photoactivated structural transition and subsequent fragmentation via several decay channels.

[1] A. Sanchez et al., *J. Phys. Chem. A* 103, 9573 (1999)[2] D. C. Lim et al., *Surf. Sci.* 598, 96 (2005)[3] T. S. Kim et al., *J. Am. Chem. Soc.* 125, 2018 (2003)

A 4.7 Mo 15:45 6G

Spektroskopie an Magnesium in superfluiden Heliumtropfen — ●SEBASTIAN GÖDE, ANDREAS PRZYSTAWIK, JOSEF TIGGESBÄUMKER und K.H. MEIWES-BROER — Universität Rostock, Institut für Physik, Universitätsplatz 3, 18051 Rostock

Bei einer Düsenstrahlexpansion von Helium ins Vakuum entstehen ultrakalte Heliumtröpfchen, die beim Passieren einer Pickup-Zelle Atome aus einem Dampf niedriger Dichte aufnehmen.

Die resonante Zwei-Photonen-Spektroskopie an Magnesiumatomen zeigt, dass sich die Atome im Inneren des Tropfens befinden. Neben der Anregung des atomaren $3s3p \leftarrow 3s^2$ -Übergangs findet man bei höherer Dotierung der Tropfen einen zweiten resonanten Übergang nahe der atomaren Resonanz, der von größeren Aggregaten stammt. Während die Intensität dieses Beitrages eine starke Abhängigkeit vom Grad der Dotierung aufweist, findet man überraschenderweise keine spektrale Verschiebung als Funktion der Anzahl von Magnesiumatomen im Tropfen. Dies ist ein Hinweis darauf, dass Magnesium in superfluiden Heliumtropfen keine kompakten Cluster bildet. Der Bindungszustand der

Mg-Atome im Tropfen wird diskutiert.

|