

MO 13 He and Molecular Clusters

Zeit: Freitag 14:30–16:00

Raum: HU 2097

MO 13.1 Fr 14:30 HU 2097

Van der Waals Cluster in superflüssigen Helium-Nano-Tropfen — ●ALKWIN SLENCZKA¹ und RUDOLF LEHNIG² — ¹Institut f. Physikalische und Theoretische Chemie, Uni Regensburg, 93040 Regensburg — ²Department of Chemistry, University of Alberta, Edmonton Alberta, Canada.

Die Analyse von van der Waals Clustern umfaßt Angaben zur Größe und Struktur. Die Wahl der Analysemethoden ist durch die geringen Bindungskräfte der van der Waals Komplexe eingeschränkt. Heliumtropfen als Wirtssystem zur Bildung und zur optischen Spektroskopie von van der Waals Clustern kann dabei vorteilhaft genutzt werden. Zum einen kühlen alle Cluster auf die Tropfentemperatur von 380 mK ab. Dadurch erhält man scharf strukturierte elektronische Spektren. Jede Linie im elektronischen Anregungsspektrum kann bezüglich der Clustergröße zerstörungsfrei analysiert werden. Darüber hinaus erlauben die Fluoreszenzspektren der Cluster in Heliumtropfen Anregungen der van der Waals Moden von Strukturisomeren zu unterscheiden. Schließlich kann mit dem Dotierungsverfahren Einfluß auf die Struktur der Cluster genommen werden. Dies wird am Beispiel von Phthalocyanin-Arn Clustern in Heliumtropfen demonstriert.

MO 13.2 Fr 14:45 HU 2097

Rydberg Zustände in Heliumclustern — ●KLAUS VON HAEFTEN¹, TIM LAARMANN², HUBERTUS WABNITZ³ und THOMAS MÖLLER⁴ — ¹Lehrstuhl für Phys. Chemie II, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum — ²Max-Born-Institut, Max-Born Str. 2a, D-12489 Berlin — ³CEA-SPAM, Centre d'Etudes de Saclay, 91191 Gif sur Yvette, France — ⁴Institut für Atomare Physik und Fachdidaktik, Technische Universität Berlin, Hardenbergstr. 36, D-10623 Berlin

Rydbergzustände sind eine wohlbekanntere Erscheinung bei Atomen und Molekülen, jedoch in festen oder flüssigen Stoffen nicht nachweisbar, da dort ausgedehnten Orbitalen der Platz fehlt. Eine exotische Ausnahme stellen die elektronisch angeregten Zustände von Heliumclustern dar, die wir mit monochromatischem Synchrotronlicht und Fluoreszenzspektroskopie untersuchen. Anhand der Spektren können wir die Existenz von zwei Arten von Rydbergzuständen nachweisen: (i) Kleine He-Cluster sind positiv geladen und werden von Rydbergelektronen umkreist. (ii) Auf großen He-Tröpfchen können einzelne Oberflächenatome in Rydbergzustände angeregt und stabilisiert werden. Dies wird durch eine niedrige Polarisierbarkeit begünstigt und daher bei großen ³He-Tröpfchen verstärkt beobachtet [1].

[1] K. von Haefen, T. Laarmann, H. Wabnitz, and T. Möller, zur Publikation in J. Phys. B akzeptiert

MO 13.3 Fr 15:00 HU 2097

Size Dependent Spectral Shifts in Core-to-Valence Transitions of Molecular Van der Waals Clusters — ●IOANA L. BRADEANU¹, ROMAN FLESC¹, NOBUHIRO KOSUGI², ANDREY A. PAVLYCHEV³, and ECKART RÜHL^{1,2} — ¹Institut für Physikalische Chemie, Universität Würzburg, Am Hubland, 97074 Würzburg, Germany — ²Institute for Molecular Science, Myodaiji, Okazaki, 444-8585, Japan — ³St. Petersburg State University, St. Petersburg 198904, Russian Federation

Core-to-valence transitions of molecular clusters containing benzene and pyridine are investigated in the C 1s- and N 1s-regime ((C 1s and N 1s) → π^* transitions). The vibrationally resolved bands show in clusters the same shape as in the isolated molecule, but in the case of C 1s-excited benzene clusters there is a cluster size dependent redshift relative to the bare molecule ranging between 45 meV and 65 meV. In contrast, there is a blueshift by 60 meV in N 1s-excited small pyridine clusters. The experimental results are assigned in comparison with *ab initio* calculations and the core-to-valence transition energies, oscillator strengths, term values, and core ionization energies of core-excited molecules and clusters are calculated using the GSCF3 package. This approach is optimized for core-excited species. It is based on the improved virtual approximation (IVO), which takes the effect of the core hole in the Hartree-Fock Hamiltonian into account. This allows us to derive an assignment of site specific spectral shifts in molecular clusters containing aromatic molecules as well as gas-to-solid shifts.

MO 13.4 Fr 15:15 HU 2097

Solid State Valence Electron Distributions of C₇₀ examined by photoelectron intensity variations — ●SANJA KORICA¹, AXEL REINKÖSTER¹, DANIEL ROLLES¹, JENS VIEFHAUS¹, MARKUS BRAUNE¹, UWE BECKER¹, and BURKHARD LANGER² — ¹Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin, Germany — ²Max-Born-Institut, Max-Born-Str. 2a, 1248 Berlin, Germany

We have performed high resolution measurements of emitted photoelectrons from the valence shell of solid C₇₀ to derive branching ratios and partial cross sections. Our PES results give evidence for photon energy dependent oscillations in the partial photoionization cross sections of the two highest occupied molecular orbitals HOMO and HOMO-1. The results are compared with advanced *ab initio* theoretical calculations [1] based on the local density approximation (LDA). The characteristic oscillations are analysed in terms of geometrical properties, the analysis is based on the Fourier transform of the cross section oscillations. We compare our results for amorphous condensed phase C₇₀ with corresponding measurements of the free molecules.

[1] P. Decleva, private communication

MO 13.5 Fr 15:30 HU 2097

Quantenchemische Berechnungen zu IR Spektren des Fluorbenzol-Kations mit Wasser oder Methanol — ●ULRICH LORENZ, NICOLA SOLCA und OTTO DOPFER — Institut für Physikalische Chemie, Universität Würzburg, Am Hubland, 97074 Würzburg

Es wurden quantenchemische Berechnungen zu Clustern des Fluorbenzol-Kations mit Wasser bzw. Methanol durchgeführt, um zu einer Deutung von Photodissoziationsspektren dieser Systeme im Bereich der OH-Streckschwingungen zu gelangen. Die Berechnungen erlauben die Unterscheidung verschiedener isomerer Komplexe im Spektrum. Für das reaktive System mit zwei Methanol Liganden, bei dem man eine Substitutionsreaktion analog der Ullmann-Ethersynthese beobachtet, wurden potentielle Vorläufergeometrien der Reaktion identifiziert.

MO 13.6 Fr 15:45 HU 2097

Laser desorption of nanoclusters and biomolecules — ●LUCIA HACKERMÜLLER, GREGOR KIESEWETTER, MARTIN BERNINGER, and MARKUS ARNDT — Institut für Experimentalphysik, Universität Wien, Boltzmannng. 5, A-1090 Wien

Molecule interferometry requires sufficiently intense sources of cold, neutral and intrinsically mass selected molecular beams. Laser desorption is known to generate a large fraction of neutral particles at moderate velocities. We investigate the matrix-free desorption behaviour of ligand-stabilized Au₁₁ and 'Au₅₅' nanoparticles as well as molecules of biological relevance such as tripeptides and porphyrins. We characterize the neutral content of the emerging plume by velocity-selective multi-photon ionization at 266 nm followed by time-of-flight mass spectrometry.

Gold nanoclusters: Gold nanocrystals exist in a quasi-monomodisperse form in solution, because of their protecting ligand-shell. In the desorption process the organic shell is completely removed and a full series of pure gold clusters up to Au₂₅ appears. The observed cluster number distribution can be well represented by a double power law, with exponents in good numerical agreement with predictions for clusters near their critical point. The measured mean velocities are mass dependent and range from 500 to 600 m/s.

Biomolecules: Porphyrins and amino acids can be desorbed without major fragmentation or clustering, showing a velocity distribution centred at 300 m/s. We discuss the proposed use of laser desorption sources in Talbot-Lau interferometry and Moiré deflectometry