

MO 41 Hauptvorträge

Zeit: Dienstag 10:15–11:45

Raum: HU 2091

Hauptvortrag

MO 41.1 Di 10:15 HU 2091

Molecular dynamics following resonant core excitation —
 ●MARIA NOVELLA PIANCASTELLI — Physics Department, Uppsala University, 75 121 Uppsala, Sweden

The study of electron decay spectra in isolated atoms or molecules following a primary electronic excitation to an empty level (such as an empty molecular orbital or a Rydberg state) below a core ionization threshold provides a wealth of information on the nature of the intermediate state and on the dynamics of the whole relaxation process. These studies are very usefully complemented with absorption and absorption-type experiments such as partial and total ion yield spectroscopies.

These experimental methods have allowed us to obtain a deep insight in photoexcitation and photoionization dynamics. In particular, the phenomenon of ultrafast dissociation, i.e. molecular fragmentation taking place on the same time scale as resonant Auger decay, is nowadays possible to investigate in great detail. Several examples will be provided, including ultrafast dissociation occurring in water [1], electron Auger Doppler effect in atomic oxygen produced following ultrafast dissociation of core-excited molecular oxygen [2], and novel insight on the nature of resonant processes by ion spectroscopy [3,4].

[1] I.Hjelte, M.N.Piancastelli, R.F.Fink, O.Björneholm, M.Bässler, R.Feifel, A.Giertz, H.Wang, K.Wiesner, A.Ausmees, C.Miron, S.L.Sorensen and S.Svensson, *Chem.Phys.Lett.* 334, (2001) 151

[2] O.Björneholm, M.Bässler, I.Hjelte, R.Feifel, H.Wang, C.Miron, M.N.Piancastelli, S.Svensson, S.L.Sorensen, F.Gel,mukhanov and H.Agren, *Phys.Rev.Lett.* 84, (2000) 2826

[3] W.C.Stolte, D.L.Hansen, M.N.Piancastelli, I.Dominguez Lopez, A.Rizvi, O.Hemmers, H.Wang, A.S.Schlachter, M.S.Lubell and D.W.Lindle, *Phys.Rev.Lett.* 86, (2001) 4504

[4] M.N.Piancastelli, W.C.Stolte, R.Guillemain, A.Wolska, S.-W.Yu, M.M.Sant,Anna and D.W.Lindle, *J.Chem.Phys.*, in press

Hauptvortrag

MO 41.2 Di 10:45 HU 2091

Infrarotspektroskopie an Molekülen in Heliumclustern —
 ●KLAUS VON HAEFTEN, STEPHAN RUDOLPH, ANJA METZELTHIN, ANDREAS RÜDIGER und MARTINA HAVENITH — Lehrstuhl für Phys. Chemie II, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

Die Infrarotspektroskopie von zweiatomigen Molekülen ist ideal, um die Wechselwirkung zwischen Rotation und elementaren Anregungen suprafluiden Heliumtröpfchen im Detail zu verstehen. Unsere Untersuchungen zeigen, dass neben molekularer Rotationsgeschwindigkeit und Zustandsdichte des Heliums auch der Grad der Anisotropie des intermolekularen Potentials entscheidend die Kopplungsstärke an die Heliumflüssigkeit beeinflusst. Alle drei Faktoren bestimmen wie stark sich die Rotationskonstante der Moleküle in Heliumtröpfchen vermindert und mit welcher Effizienz die Rotationsenergie in das Helium übertragen wird. NO ist als offenschaliges Molekül ein Sonderfall. Die Kopplung zwischen Rotation und elektronisch angeregten Molekülzuständen führt zur λ -Aufspaltung der Rotationslevel, welche wir in Heliumtröpfchen um mehr als 50 % gegenüber der Gasphase vergrößert finden. Wir interpretieren diesen Effekt im Licht der starken Beeinflussung der molekularen Rydbergzustände durch die Heliumumgebung.

Hauptvortrag

MO 41.3 Di 11:15 HU 2091

Anwendung genetischer Algorithmen zur automatisierten Zuordnung rotationsaufgelöster Spektren — ●MICHAEL SCHMITT¹ und W. LEO MEERTS² — ¹Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Institut für Physikalische Chemie, Düsseldorf — ²Radboud University Nijmegen, Department of Molecular and Laser Physics, The Netherlands

Rotationsaufgelöste elektronische Spektren großer Moleküle sind wegen der starken Überlappung vieler rovibronischer Linien mit herkömmlichen Methoden schwierig oder unmöglich zuzuordnen und zu interpretieren. Dies trifft vor allem dann zu, wenn sich mehrere Spektren, z.B. verschiedener Isotopomere oder verschiedene Tunnelkomponenten, überlagern. Wir haben ein Verfahren zur automatisierten Anpassung der Parameter an mehrere rovibronische Spektren gleichzeitig entwickelt, das auf der Anwendung genetischer Algorithmen zur Untersuchung der Kostenfläche und auf der Kreuzkorrelation zur Bestimmung der Kostenfunktion beruht. Die Methode wird vorgestellt und anhand verschiedener Beispiele die Vorzüge gegenüber einer klassischen Spektrenzuordnung gezeigt. Un-

ter den untersuchten und interpretierten Systemen befinden sich sowohl solche mit überlappenden Isotopomerspektren (7-Azaindol), als auch solche mit unterschiedlichen Tunnelkomponenten mehrerer interner Rotoren (4-Methylstyrol, 4-Methylphenol). In allen Fällen konnte eine gute bis perfekte Übereinstimmung zwischen experimentellem und simuliertem Spektrum erreicht werden.