

**EINSTEIN SYMPOSIUM - DER PHOTOEFFEKT IM LICHT NEUESTER FORSCHUNG (SYPE)**

gemeinsam veranstaltet von den Fachverbänden  
Atomphysik (A),  
Molekülphysik (MO),  
Halbleiterphysik (HL) und  
Oberflächenphysik (O)

Uwe Becker  
Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft  
Faradayweg 4-6  
D-14195 Berlin  
E-Mail: becker@fhi-berlin.mpg.de

Ingo Fischer  
Institut für Physikalische Chemie  
Universität Würzburg  
Am Hubland  
D-97074 Würzburg

**EINLEITUNG**

Einsteins Interpretation des Photoeffekts war die erste bedeutende Anwendung der Quantentheorie. Es folgte ein Jahrhundert, das man das Jahrhundert der Quantenphysik nennen kann. Welche Gebiete hat dieser Effekt seitdem maßgeblich beeinflusst und wieviel Neues und Überraschendes kann Forschung heute noch zum Photoeffekt beitragen? Das Symposium ist der Beantwortung dieser Fragen gewidmet. Es soll zeigen, welche bedeutenden Anwendungen der Photoeffekt in Form von ESCA und ZEKE im Bereich der Festkörper- und Molekülphysik gefunden hat, wie sich andere Zustandsformen der Materie, z. B. positiv und negativ geladene Ionen und die Wechselwirkung der Elektronen untereinander auf den Photoeffekt auswirken. Darüber hinaus werden zeit- und intensitätsabhängige Phänomene des Photoeffekts in zunehmendem Maße experimentell untersucht, da Eigenschaften wie hohe Energien, kurze Pulse und starke Felder einander nicht mehr ausschließen, sondern ergänzen, wie die Entwicklung auf dem Gebiet von FEL und HHG zeigt.

**ÜBERSICHT DER HAUPTVORTRÄGE UND FACHSITZUNGEN**  
(Hörsaal HU Senatssaal)

**Hauptvorträge**

SYPE 1.1	Fr	14:00	(HU Senatssaal)	<b>ESCA-50 years after</b> , <a href="#">Svante Svensson</a>
SYPE 1.2	Fr	14:30	(HU Senatssaal)	<b>Photoelektronenspektroskopie als Sonde der elektronischen Struktur von Festkörpern und Oberflächen.</b> , <a href="#">Stefan Hüfner</a>
SYPE 1.3	Fr	15:00	(HU Senatssaal)	<b>Imaging molecules with Angstrom-Attosecond precision</b> , <a href="#">Paul Corkum</a>
SYPE 1.4	Fr	15:30	(HU Senatssaal)	<b>The photoelectric effect of view body systems by one and many photons</b> , <a href="#">Reinhard Dörner</a> , Thorsten Weber, Till Jahnke, Katharina Kreidi, Alexandra Knapp, Lothar Schmidt, Markus Schöffler, Andre Staudte, Matthias Weckenbrock, Matthias Smolarski, Horst Schmidt-Böcking, Paul B. Corkum, Dirk Zeidler, C.Lewis Cocke, Timur Osipov, Mike Prior, Allen Landers
SYPE 2.1	Fr	16:30	(HU Senatssaal)	<b>From Einstein's Photoelectric Effect to ZEKE Rydberg States and a New Molecular Orbital Description</b> , <a href="#">Klaus Müller-Dethlefs</a>
SYPE 2.2	Fr	17:00	(HU Senatssaal)	<b>Time-dependent photoelectron spectroscopy</b> , <a href="#">Daniel Neumark</a>
SYPE 2.3	Fr	17:30	(HU Senatssaal)	<b>Phasen- und zeitaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Atomen und Festkörpern</b> , <a href="#">Ulrich Heinzmann</a>
SYPE 2.4	Fr	18:00	(HU Senatssaal)	<b>The Electronic Structure of Charged Matter: Photoionization of Positive and Negative Ions</b> , <a href="#">Nora Berrah</a>
SYPE 2.5	Fr	18:30	(HU Senatssaal)	<b>Multiphotonionisation von Atomen und Clustern mit weicher Röntgenstrahlung</b> , <a href="#">Thomas Möller</a>

**Fachsitzungen**

SYPE 1	<b>SYPE I</b>	Fr 14:00–16:00	HU Senatssaal	SYPE 1.1–1.4
SYPE 2	<b>SYPE II</b>	Fr 16:30–19:00	HU Senatssaal	SYPE 2.1–2.5

Zusätzlich zum Symposium findet am Freitag vormittag von 10:15 Uhr bis 12:30 Uhr eine Fachsitzung „Photoionisation“ im Hörsaal HU 3075 statt, in der Kurzvorträge aus dem Symposium präsentiert werden. Die Fachsitzung ist im Programm unter A 1 und MO 11 zu finden.

## Fachsitzungen

– Hauptvorträge –

### SYPE 1 SYPE I

Zeit: Freitag 14:00–16:00

Raum: HU Senatssaal

**Hauptvortrag** SYPE 1.1 Fr 14:00 HU Senatssaal  
**ESCA-50 years after** — ●SVANTE SVENSSON — Uppsala Univ., Dept. of Physics, Box 530, SE-751 21 Uppsala, SWEDEN

A review of the first x-ray excited photoelectron spectroscopical experiments will be given. The chemical shift of core levels will be discussed with the vast fields of application. From these pioneering experiments an overview of the current research concerning the chemical shift of core electrons in molecules and in free clusters will be given. A special focus will be on the different effects that have to be disentangled in order to determine chemical shifts with ultra-high precision: Core hole dynamics, molecular field splitting and more subtle correlation effects.

**Hauptvortrag** SYPE 1.2 Fr 14:30 HU Senatssaal  
**Photoelektronenspektroskopie als Sonde der elektronischen Struktur von Festkörpern und Oberflächen.** — ●STEFAN HÜFNER — Universität des Saarlandes, Saarbrücken

Die historische Entwicklung des Photoeffekts wird beschrieben, beginnend mit den ersten Arbeiten von Hertz und Hallwachs und deren Interpretation durch Einstein. Danach werden Beispiele für die auf diesem Effekt beruhende Meßtechnik, der Photoelektronen-Spektroskopie, gegeben. Diese kommen aus der Physik (Bandstrukturuntersuchungen) aber auch aus der Chemie (Chemische Verschiebung von Rumpfniveaus, ESCA). Schließlich werden neuere Entwicklungen beschrieben, die auf der hohen Impuls- und Energieauflösung dieser Technik beruhen: die Untersuchung von Oberflächzuständen, der Energielücke in konventionellen Supraleitern und der Temperaturabhängigkeit von Kondoresonanzen.

**Hauptvortrag** SYPE 1.3 Fr 15:00 HU Senatssaal  
**Imaging molecules with Angstrom-Attosecond precision** — ●PAUL CORKUM — National Research Council of Canada, Ottawa, Canada

Sub-femtosecond photon or electron pulses were both achieved within the past few years using "re-collision" photo-electrons — a technology that is radically different from all ultrafast technology that preceded it. The ability to make measurements in a new time regime will open new areas of science. In the case of attosecond pulses, one implication is the possibility of combining sub-Angstrom spatial resolution with sub-femtosecond temporal precision (Attoseconds & Angstroms). I will show how electrons and photons combine to image electronic orbitals of molecules. Time resolving an attosecond bound state electron wave packet is within reach.

**Hauptvortrag** SYPE 1.4 Fr 15:30 HU Senatssaal  
**The photoelectric effect of view body systems by one and many photons** — ●REINHARD DÖRNER<sup>1</sup>, THORSTEN WEBER<sup>1,2</sup>, TILL JAHNKE<sup>1</sup>, KATHARINA KREIDI<sup>1</sup>, ALEXANDRA KNAPP<sup>1</sup>, LOTHAR SCHMIDT<sup>1</sup>, MARKUS SCHÖFFLER<sup>1</sup>, ANDRE STAUDTE<sup>1</sup>, MATTHIAS WECKENBROCK<sup>1</sup>, MATTHIAS SMOLARSKI<sup>1</sup>, HORST SCHMIDT-BÖCKING<sup>1</sup>, PAUL B. CORKUM<sup>3</sup>, DIRK ZEIDLER<sup>3</sup>, C.LEWIS COCKE<sup>4</sup>, TIMUR OSIPOV<sup>2</sup>, MIKE PRIOR<sup>2</sup>, and ALLEN LANDERS<sup>5</sup> — <sup>1</sup>University Frankfurt — <sup>2</sup>LBNL, Berkeley, USA — <sup>3</sup>SIMS, Ottawa, Canada — <sup>4</sup>KSU, Manhattan, KS, USA — <sup>5</sup>Auburn University, Auburn, AL, USA

The coupling of one photon (synchrotron radiation) and many photons (short laser pulses) to view body systems often leads to complete fragmentation. Experimental techniques today allow to image the complete fragmentation process of the prototype systems Helium and  $H_2$  in both, the single photon and multiphoton regime. These experiments illuminate the coupling mechanisms of light to matter in unprecedented detail.

### SYPE 2 SYPE II

Zeit: Freitag 16:30–19:00

Raum: HU Senatssaal

**Hauptvortrag** SYPE 2.1 Fr 16:30 HU Senatssaal  
**From Einstein's Photoelectric Effect to ZEKE Rydberg States and a New Molecular Orbital Description** — ●KLAUS MÜLLER-DETHLEFS — York Centre for Laser Spectroscopy, Department of Chemistry — The University of York, York YO10 5DD, United Kingdom

From Einstein's discovery of the photo-electric effect, one of the pillars of modern quantum theory, it has taken nearly fifty years until the first practical application of the photoelectric effect to molecules was demonstrated in the 1960's by David Turner at Imperial College. The main advance came from the discovery of a very high intensity He(I) light source. Another twenty years later, we developed rotationally resolved ZEKE (Zero Electron Kinetic Energy) photoelectron spectroscopy, based on the pulsed field ionization of long-lived, very high  $n$ , Rydberg states and, over the last two decades, refined it as a valuable tool for the study of molecular ions and clusters. Here we present a new useful definition for molecular orbitals that is based on the analysis of rotationally resolved ZEKE spectra. The selection rules for ZEKE transitions from a neutral molecule of total angular momentum ( $J$ ) to an ion core ( $J+$ ) and a Rydberg electron ( $l$ ) are more complicated than for neutral transitions since angular momentum is transferred to the final state ZEKE Rydberg electron. Hence for the rotational band contour analysis of ZEKE spectra a suitable model must be employed to account for the ionisation dynamics. In the model presented here we find that the overlap of the ion ground state wave-function with the neutral state wave-function leads to an unambiguous definition of the HOMO of the neutral state. We call this orbital a spectator orbital since it is coupled to a fully elec-

tronically relaxed ion wave-function. The orbital, which is related to the "Dyson" orbital, is well defined for any level of theory used to compute the electronic wavefunctions of the neutral or of the ion.

**Hauptvortrag** SYPE 2.2 Fr 17:00 HU Senatssaal  
**Time-dependent photoelectron spectroscopy** — ●DANIEL NEUMARK — Department of Chemistry, University of California, Berkeley, CA 94720 USA

Time-resolved photoelectron imaging (TRPEI) is applied to the study of dynamics in size-selected anion clusters. Results will be presented for mercury and water cluster anions. In the mercury cluster experiments, TRPEI is used to follow relaxation dynamics subsequent to intraband excitation of the excess p-electron. In the water cluster anions, we show that internal and surface states can be selectively generated and measures size-dependent internal conversion lifetimes for the electronically excited "p" state in both types of clusters. Extrapolation of our results for the internal states supports the non-adiabatic relaxation model proposed for bulk hydrated electrons.

**Hauptvortrag** SYPE 2.3 Fr 17:30 HU Senatssaal  
**Phasen- und zeitaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Atomen und Festkörpern** — ●ULRICH HEINZMANN — Fak. Physik, Universität Bielefeld, 33501 Bielefeld

Der Vortrag gibt über jüngst durchgeführte Experimente zeitaufgelöster Photoelektronenspektroskopie an freien Atomen (Zeitaufklärung 250 as /1/) und zeitaufgelöster Photo-ESCA an Festkörperoberflächen

(Zeitauflösung 50 fs /2,3/) einen Überblick. Auch wenn ein einzelnes Photon keine Phase besitzt, so ist die Phasenlage der elektromagnetischen Schwingungen in einem ultrakurzen as- bzw. fs-Puls experimentell einstellbar und messbar /4/. Auch wird über die experimentelle Bestimmung von Phasendifferenzen der Photoelektronenwellenfunktionen mittels spin aufgelöster Untersuchungen des Photoeffektes an Atomen /5/ und Festkörperoberflächen /6/ berichtet.

- /1/ E. Goulielmakis et al. *Science* 305, 1267 (2004)
- /2/ P. Siffalovic et al. *Europhys. Lett.* 60, 924 (2002)
- /3/ P. Siffalovic et al. *J. Biotechn.* 112, 139 (2004)
- /4/ R. Kienberger et al. *Nature* 427, 817 (2004)
- /5/ G. Snell et al. *Phys. Rev. A* 63, 032712 (2001)
- /6/ N. Müller et al. *J. Electr. Spectr.* 114,777 (2001)

### Hauptvortrag

SYPE 2.4 Fr 18:00 HU Senatssaal

**The Electronic Structure of Charged Matter: Photoionization of Positive and Negative Ions** — ●NORA BERRAH — Physics Department, Western Michigan University, Kalamazoo, Mi, USA

Prior to third generation light sources, the electronic structure of charged matter was investigated in Europe via challenging photoionization studies of positive ions [1, 2], due to tenuous targets and low photon flux. The new and improved light sources have allowed a rebirth in fundamental studies of photon-matter interactions, and in particular of the electronic structure and dynamics of negative and positive ions.

We will present at the symposium, new unprecedented results of photoionization studies in both positive and negative ions conducted at Super-ACO, France [3], ASTRID, Denmark [4], and the ALS [5, 6], USA. Specifically, the electronic dynamics was examined, including the mechanisms of electronic decay processes of multi-excited states, nuclear dynamics and structure. This work will in general extend our quantum

mechanical understanding of complex systems.

### References:

- [1] I. C. Lyon *et al.*, *J. Phys. B.* 19, 4137 (1986).
- [2] F. Wuilleumier, in *AIP Conf. Proc. No. 119*, New York pp 220-232.
- [3] J.-M. Bizau *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 87, 273002 (2001).
- [4] H. Kjeldsen *et al.*, *J. Phys. B.* 34, L353 (2001); T. Andersen, *Physics Report*, 394, 157 (2004).
- [5] A. A. Covington *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 87, 243002 (2001); *J. Phys. B.* 34, L735 (2001).
- [6] N. Berrah *et al.*, *PRL* 87, 253002 (2001); *PRL* 88, 093001 (2002).

### Hauptvortrag

SYPE 2.5 Fr 18:30 HU Senatssaal

**Multiphotonionisation von Atomen und Clustern mit weicher Röntgenstrahlung** — ●THOMAS MÖLLER — Institut für Atomare Physik und Fachdidaktik, Technische Universität Berlin

Durch optisch nicht-lineare Prozesse können Atome und Moleküle auch mit niederenergetischen Photonen ionisiert werden. Neuartige besonders leistungsfähige Lichtquellen wie Freie-Elektronen Laser (FEL) liefern kurzwellige Femtosekunden-Lichtpulse im Bereich von VUV- und weicher Röntgenstrahlung. Sie bieten vollständig neue Forschungsmöglichkeiten und erlauben es nicht-lineare Prozesse mit hochenergetischen Photonen zu induzieren [1]. Im Vortrag wird über erste Ergebnisse an Atomen und Clustern berichtet, die mit einem VUV-FEL erzielt wurden. Einfach und Multiphotonabsorption führt in Atomen und Clustern zu hohen Ladungszuständen. Es zeigt sich, dass bei kurzen Wellenlängen die im optischen Spektralbereich dominanten Feldionisation (Tunnelionisation) keine nennenswerte Rolle spielen. Zukünftige Forschungsprojekte werden im Ausblick vorgestellt.

1 T. Laarmann, H. Wabnitz, J. Schulz, A.R.B. de Castro, P. Gürtler, W. Laasch, T. Möller, *Phys. Rev. Lett.* 92, 143401