

A 19: Photoionization

Zeit: Donnerstag 11:30–13:00

Raum: 5M

Hauptvortrag

A 19.1 Do 11:30 5M

Photophysics of DNA: Relation between structure and dynamics in isolated clusters — •THOMAS SCHULTZ¹, ELENA SAMOYLOVA¹, HANS-HERMANN RITZE¹, WOLFGANG RADLOFF¹, YULIYA RULYK¹, and INGOLF VOLKER HERTEL^{1,2} — ¹Max-Born-Institut Berlin, Max-Born-Str. 2A, 12489 Berlin — ²Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin, Arnimallee 14, 14195 Berlin

The photophysics of DNA is governed in part by intrinsic properties of the DNA bases, but also by intermolecular interactions with the local environment. Investigation of the latter is particularly difficult due to the multitude of relevant noncovalent interactions and the intimate relationship between the local structure and the position and shape of excited state potential energy surfaces, which determine the outcome of excited state dynamic processes.

We reduce this complexity by investigating the photophysics in small, isolated molecular clusters, e.g. hydrogen-bound or stacked base pairs and microhydrated bases. Pump-probe photoionization spectroscopy identified ultrafast processes involving bright and dark electronic states, a hydrogen transfer reaction and delocalized excimer states. Most observed processes lead to ultrafast excited state relaxation and help to explain the extraordinary photostability of DNA. Comparison to ab initio calculations offered insight into the importance of particular interactions such as specific hydrogen bonds or the environment polarizability. Small clusters with suitable geometry seem to reproduce processes in real DNA and may extend our detailed understanding of isolated molecules towards complex biological systems.

A 19.2 Do 12:00 5M

Photoionization sequences of multi-ionic neon — •BERND LOHMANN^{1,2}, ULRICH KLEIMAN³, MARKUS BRAUNE², AXEL REINKÖSTER², BURKHARD LANGER⁴, and UWE BECKER² — ¹Institut für Theoretische Physik, Universität Münster, 48149 Münster — ²Fritz-Haber-Institut der MPG, 14195 Berlin — ³MPI für Physik Komplexer Systeme, 01187 Dresden — ⁴MBI für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, 12489 Berlin

The thriving results currently emerging from the free electron laser FLASH for the multi-photoionization of ions require for a theoretical interpretation. In a first attempt, we are employing the semi-relativistic Hartree-Fock code of Cowan [1] combined with the schemes of Racah algebra and fractional parentage [2], in order to relate the open-shell dipole transition matrix elements with the one electron dipole matrix elements provided by the Cowan code. First numerical cross section results for selected ionic photoionization sequences of neon will be presented.

[1]Cowan, R. D. (1981). "The Theory of Atomic Structure and Spectra." UCLA Press, Berkeley, Los Angeles, London.

[2]Racah, G. (1942). Phys. Rev. 62, 438.

A 19.3 Do 12:15 5M

Interferenzeffekte in der Photoionisation von H₂ — •AXEL REINKÖSTER¹, MARKUS BRAUNE¹, RAINER HENTGES¹, SANJA KORICA¹, JENS VIEFHAUS¹, RALPH PÜTTNER², BURKHARD LANGER³ und UWE BECKER¹ — ¹Fritz-Haber-Institut der MPG, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin — ²Freie Universität Berlin, Institut für Experimentalphysik, Arnimallee 14, 14195 Berlin — ³Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Max-Born-Str. 2a, 12489 Berlin

Molekularer Wasserstoff ist der Prototyp für das Auftreten von Interferenzen in der Photoelektronenemission analog zum Young'schen

Doppelspaltexperiment mit Lichtwellen. Die richtungsaufgelöste Photoelektronenspektroskopie im molekularen Bezugssystem offenbart diesen Effekt besonders deutlich. Die Experimente wurden bei BESSY in Berlin durchgeführt. Von besonderem Interesse war in diesem Zusammenhang die Frage, ob die modifizierte Cohen-Fano Oszillation als Ausdruck der Interferenz der beiden Photoelektronenwellen exakt mit der zur Bindungslänge des H₂ Moleküls proportionalen Frequenz auftreten würde. Da die Einfach-Photoionisation von H₂ zu dem stabilen Molekülion H₂⁺ führt, stehen für winkelaufgelöste Elektron-Fragmention-Koinzidenzexperimente nur Photoelektronen-Satellitenlinien zur Verfügung. Die normierte Satellitenlinienintensität bei geringster kinetischer Energie zeigt eine deutliche Oszillation mit einer Frequenz, die genau der Bindungslänge von H₂ entspricht. Darüber hinaus tritt bei einer de Broglie Wellenlänge von $\lambda=4R$ eine markante Shaperesonanz auf, die bisher so weder beobachtet noch diskutiert worden ist.

A 19.4 Do 12:30 5M

Symmetrie- und Interferenzeffekte in der Photoionisation von Fullerenen — •UWE BECKER¹, SANJA KORICA¹, AXEL REINKÖSTER¹, MARKUS BRAUNE¹, RAINER HENTGES¹, JENS VIEFHAUS¹ und BURKHARD LANGER² — ¹Fritz-Haber-Institut der MPG, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin — ²Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Max-Born-Str. 2a, 12489 Berlin

Fullerene, insbesondere C₆₀ und C₇₀, zeigen ausgeprägte Oszillationen ihrer partiellen Photoionisations-Wirkungsquerschnitte, bedingt durch die Interferenz zwischen verschiedenen Wegen, die das Photoelektron von verschiedenen Emissions-Orten auf der delokalisierten Ladungsschale nehmen kann. Das Verzeigungsverhältnis zwischen den beiden ungeraden und geraden Valenzorbitalen HOMO und HOMO-1 ist ein besonders sensitiver Indikator für das Auftreten dieser Oszillationen. Trägt man die normierten Wirkungsquerschnitte über den Impulsvektor $K(D^{-1})$ in Einheiten des inversen Durchmessers von C₆₀ auf, so sieht man, dass die de Broglie Wellenlänge $\lambda=D$ genau einer vollen Periode von 2π in K entspricht. Dies ist genau das gleiche Verhalten wie es für homonukleare zweiatomige Moleküle wie H₂ und N₂ beobachtet wird. Es ist die von Cohen und Fano vorhergesagte doppelspaltartige Interferenz der beiden von zwei kohärenten Emitterpunkten auslaufenden Photoelektronen. Um dieses Modell auf die Fullerene anwenden zu können, muss man die kohärenten Emitter-Punkte nur durch eine kohärente Emitter-Schale ersetzen. Dies erklärt insbesondere die Interpretation der Oszillationsminima als stehende Wellen.

A 19.5 Do 12:45 5M

Above threshold interchannel coupling effects in the Cs 3d spin orbit doublet — •TOBIAS RICHTER¹, ELKE HEINECKE¹, PETER ZIMMERMANN¹, KAI GODEHUSEN², METHAP YALÇINKAYA³, DENIS CUBAYNES⁴, and MICHAEL MEYER⁴ — ¹Technische Universität Berlin, Institut für Optik und Atomare Physik, Berlin, Germany — ²BESSY GmbH, Berlin, Germany — ³Istanbul University, Physics Department, Istanbul, Turkey — ⁴LIXAM, Orsay, France

The asymmetry parameter β and partial cross section σ of Cs 3d_{5/2} photo electrons were investigated near the threshold of the 3d_{3/2} channel at about 750 eV. The interchannel coupling has a dramatic influence on $\beta_{5/2}$ in the energy region where the mixing with the 3d_{3/2} channel produces a pronounced minimum in the partial cross section $\sigma_{5/2}$. Obviously the phase difference of the outgoing p and f waves dominates the behaviour of $\beta_{5/2}$ there. This above threshold effect is activated by the spin orbit interaction.