

A 22: Poster II - Atomic clusters

Zeit: Donnerstag 16:30–18:30

Raum: Poster B

A 22.1 Do 16:30 Poster B

Erzeugung und Laseranregung mehrfach negativ geladener Aluminiumcluster — NOELLE WALSH¹, ●FRANKLIN MARTINEZ¹, FALK ZIEGLER¹, GERRIT MARX¹, LUTZ SCHWEIKHARD¹ und JOSEF M. OLIVA² — ¹Institut für Physik, Ernst-Moritz-Arndt Universität, 17487 Greifswald, Deutschland — ²Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC, E-28006 Madrid, Spain

Einfach geladene anionische Aluminiumcluster werden in einer Penningfalle einem Elektronenbad ausgesetzt. Dabei nehmen sie weitere Elektronen auf und können zweifach oder dreifach negativ geladen werden. Der Nachweis der Produkte erfolgt durch Flugzeitmassenspektrometrie. Der Transfer in höhere Ladungszustände ist abhängig von der Clustergröße. Insbesondere wird eine gewisse Größe benötigt, um überhaupt stabile Systeme bei höheren Ladungszuständen erzeugen zu können. Die experimentellen Ergebnisse werden mit Abschätzungen aus einfachen Modellansätzen und mit DFT-Rechnungen in der GGA-Näherung (Generalised Gradient Approximation) verglichen.

A 22.2 Do 16:30 Poster B

Interaction of Xe clusters in He nanodroplets with a strong laser pulse — ●ALEXEY MIKABERIDZE, ULF SAALMANN, and JAN-MICHAEL ROST — Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden, Germany

Dynamics of small Xe clusters (~100 atoms) embedded into medium-sized He droplets (~1000 atoms) under the action of strong femtosecond (pulse length ~100 fs) laser pulses is studied microscopically by means of classical molecular dynamics. The results are compared with those for pure Xe clusters.

He droplets are found to enhance considerably inner and outer ionization of Xe clusters. Presumably, transfer of hot electrons from He shell to Xe core and subsequent electron-impact ionization of Xe ions enhance inner ionization of Xe.

Our theoretical studies were stimulated by recent experiments on Xe clusters grown in He droplets and exposed to strong femtosecond laser pulses conducted at Rostock University [1]. Surprisingly high ionic charges at rather low laser intensities ($I \sim 10^{14}$ W/cm²) were observed in these experiments.

[1] T. Döppner, talk at Atomic Physics 2006, Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden.

A 22.3 Do 16:30 Poster B

Size-selected cluster deposition as studied by STM — ●CHUNRONG YIN¹, BERND VON ISSENDORFF¹, STEFANIE DUFFE², THOMAS IRAWAN², MARKUS BIELETZKI², TORSTEN RICHTER², BENEDIKT SIEBEN², and HEINZ HÖVEL² — ¹Universität Freiburg, FMF, 79104 Freiburg, Germany — ²Universität Dortmund, Experimentelle Physik I, 44221 Dortmund, Germany

It is very interesting to compare the electronic structure of identical clusters in the free beam and supported on surfaces.

For free clusters the quantized electronic structure as well as the charging in the photoemission process can be studied with photoemission. For clusters at surfaces a topographic investigation with STM was combined with STS and UPS for the study of the electronic structure. Here we will present results for the deposition of mass selected Ag clusters using a cluster machine consisting of a magnetron sputter gas aggregation source, a differential pumping stage with a cryopump and a high transmission infinite range mass selector ($m/\Delta m \geq 50$). The cluster source is combined with a surface-science facility containing a low-temperature STM and high-resolution UPS. With cluster currents of e.g. up to 93 pA for Ag₅₅⁺, the deposition time for a reasonable cluster coverage was of the order of 10 minutes. Extremely narrow height distributions ($h/\Delta h \approx 20$) were observed with STM for mass-selected clusters in the size range of Ag₅₅⁺ to Ag₉₂₃⁺ deposited with low kinetic energy.

A 22.4 Do 16:30 Poster B

Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Natrium-Clustern — ●JAN HUWER, CHRISTOF BARTELS, CHRISTIAN HOCK, RAPHAEL KUHNEN, ABDOLLAH MALAKZADEH, JÖRG SCHWÖBEL und BERND V. ISSENDORFF — Fakultät für Mathematik und Physik, Universität Freiburg, Stefan-Meier-Straße 19, 79104 Freiburg

Mit einem neu aufgebauten Bildspektrometer wurden Photoelektronenspektren an massenselektierten, kalten Natrium-Clusterionen gemessen.

Es wurden Na_n⁻-Clusterionen in einem weiten Größenbereich ($n = 2 \dots 268$) mit ns-Laserpulsen bei den Wellenlängen 308 nm und 500 nm untersucht. Die erhaltenen Energiespektren sind in Übereinstimmung mit den früher gemessenen Spektren ohne Winkelauflösung. Die zusätzlich erhaltenen Winkelverteilungen geben neue Information: Beispielsweise sieht man, dass manche Linien des Energiespektrums aus mehreren Komponenten mit unterschiedlichen Anisotropien zusammengesetzt sind.

Für ausgewählte Größen ($n = 3, 4, 5, 7, 19, 21, 33, 34, 55, 147$) wurden Spektren bei veränderlicher Wellenlänge im Bereich von 290...755 nm in kleinen Schritten aufgenommen. Deren Entwicklung kann für die kleinen Cluster mit einem einfachen Molekülorbital-Modell verglichen werden. Für die größeren Cluster können die β -Parameter aus den Jellium-Potentialen berechnet werden. Ein Vergleich mit den aus den Experimenten extrahierten Werten wird vorgenommen.

A 22.5 Do 16:30 Poster B

Structure and Dynamics of Na Clusters Deposited on Insulator Surfaces — ●MATTHIAS BÄR¹, MATHIAS WINKLER², LYUDMILA MOSKALEVA², PAUL-GERHARD REINHARD¹, ERIC SURAUD³, and NOTKER RÖSCH² — ¹Institut für Theoretische Physik II, Universität Erlangen-Nürnberg — ²Institut für Theoretische Chemie, Technische Universität München — ³Laboratoire de Physique Théorique, Université Paul Sabatier, Toulouse

We study small Na clusters deposited on insulating surfaces like Ar or MgO(001). For this purpose, we employ the time-dependent local-density approximation for the electrons combined with molecular dynamics for the cluster ions (TDLDA-MD). The surface atoms/ions are treated as classical particles interacting with the cluster electrons via local pseudopotentials, while the long range dipole interaction is taken into account through polarization potentials.

In a first exploration, we investigate the influence of the surface on the structure and optical response of small Na clusters. In all cases, we find ground-state configurations which maintain the geometry of the free clusters. Planar isomers which would indicate wetting are energetically disadvantageous.

The optical spectrum is still dominated by the Mie plasmon peaks which are shifted surprisingly little because the two large effects, namely core repulsion of the surface atoms/ions (blue shift) and dynamical polarizability of the surface (red shift), almost cancel each other.

In a further step, we discuss the detailed dynamics of cluster deposition on the surface.

A 22.6 Do 16:30 Poster B

Röntgenabsorptionsspektroskopie an freien und deponierten Kobaltclustern — ●VICENTE ZAMUDIO-BAYER¹, LEIF GLASER², JOCHEN RITTMANN¹, MARLENE VOGEL¹, WILFRIED WURTH², THOMAS MÖLLER¹, BERND VON ISSENDORFF³ und TOBIAS LAU¹ — ¹Technische Universität Berlin, Institut für Optik und Atomare Physik, PN 3-1, Hardenbergstraße 36, D-10623 Berlin — ²Universität Hamburg, Institut für Experimentalphysik, Luruper Chaussee 149, D-22761 Hamburg — ³Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fakultät für Physik/FMF, Stefan-Meier-Straße 21, D-79104 Freiburg

Die L_{2,3}-Röntgenabsorption freier und deponierter Kobaltcluster wurde bei BESSY untersucht. Kleine massenseparierte Kobaltcluster wurden auf der Cu(100)-Oberfläche als schwachwechselwirkende Unterlage deponiert. In den L_{2,3}-Röntgenabsorptionsspektren von Monomer, Dimer und Trimer zeigt sich ein Trend, der als Unterdrückung atomarer Linien interpretiert werden kann. Im Vergleich mit freien Kobaltclustern ist der Einsatz der Röntgenabsorption in deponierten Cluster zu höheren Photonenenergien hin verschoben, was auf Abschirmungseffekte durch delokalisierte Valenzelektronen des Substrats hinweist.

Freie Kobaltcluster wurden mittels Ionenaussbeutespektroskopie untersucht. Die Relaxation des rumpfniveaueingeregten Zustands führt zu höheren Ladungszuständen und anregungsenergieabhängiger Fragmentation der Cluster. Bereits kleine Cluster ($n \approx 50$) zeigen festkörperähnliche Absorptionsspektren.

A 22.7 Do 16:30 Poster B

Röntgenabsorptionsspektroskopie an Übergangsmetall-

Clustern in der Gasphase: Erste Resultate für Titan — ●MARLENE VOGEL¹, VICENTE ZAMUDIO-BAYER¹, JOCHEN RITTMANN¹, THOMAS MÖLLER¹, BERND VON ISSENDORFF² und TOBIAS LAU¹ — ¹Technische Universität Berlin, Institut für Optik und Atomare Physik, PN 3-1, Hardenbergstraße 36, D-10623 Berlin — ²Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fakultät für Physik/FMF, Stefan-Meier-Straße 21, D-79104 Freiburg

Ein neues Experiment zur Röntgenabsorptionsspektroskopie an freien neutralen Übergangsmetall-Clustern in der Gasphase wird vorgestellt.

Die Cluster werden in einer Magnetron-Sputter-Gasaggregationsquelle erzeugt, durch Synchrotronstrahlung (BESSY) ionisiert und in einem gepulsten, zweistufigen Flugzeitmassenspektrometer massenaufgelöst detektiert. Die Ionenausbeute wird als Funktion der Anregungsenergie im Bereich der $L_{2,3}$ -Kanten gemessen, wodurch die Clustergrößenabhängigkeit der resonanten $2p-3d$ -Anregung untersucht werden kann. Das Verhältnis der Intensitäten von L_2 - und L_3 -Kanten, die energetische Verschiebung und die Unterstruktur der Kanten bei Titanclustern werden als Funktion der Clustergröße untersucht. Die Fragmentation und der Ladungszustand der Cluster nach der Anregung werden diskutiert. Die spektroskopierten Cluster haben Größenverteilungen von etwas unter 20 bis einige hundert Atome, mit einem Maximum der Verteilung bei ungefähr 50 Atomen.

A 22.8 Do 16:30 Poster B

Wellenlängen- und temperaturabhängige Photoelektronenspektroskopie an C_{60}^- — CHRISTINE WEHRSTEIN, ELISABETTA MARIA FIORDALISO, ●RAPHAEL KUHNEN und BERND VON ISSENDORFF — Department of Physics, University of Freiburg, Stefan-Meier-Strasse 21, 79104 Freiburg

Photoelektronenspektroskopie an C_{60}^- wurde mit ns-Laserpulsen verschiedener Wellenlänge durchgeführt. Die Spektren zeigen zusätzlich zur normalen Emission eine Auger-Emission, bei welcher die Elektronen unabhängig von der eingestrahlten Laserwellenlänge die selbe kinetische Energie beibehalten und welche eine starke vibratorische Verbreiterung aufweist. Dies deutet darauf hin, dass immer der gleiche angeregte Zustand für diesen Auger-Prozess verantwortlich ist.

Bei temperaturabhängiger Photoelektronenspektroskopie tritt eine Verschiebung der Emission aus dem höchsten besetzten molekularen Orbital mit zunehmender Temperatur zu höheren Bindungsenergien auf. Diese lässt sich mit einer erhöhten Anzahl von Vibrationszuständen erklären, die durch die thermisch induzierte Symmetrierniedrigung des Clusters im angeregten Zustand erreicht werden können.

A 22.9 Do 16:30 Poster B

Optimizing the interaction of silver clusters with intense laser fields — ●NGUYEN XUAN TRUONG, TILO DÖPPNER, JAN MÜLLER, ANDREAS PRZYSTAWIK, and KARL HEINZ MEIWES-BROER — Universität Rostock, Fachbereich Physik, Universitätsplatz 3, 18051 Rostock

Silver clusters are generated by pick-up into helium droplets and exposed to intense fs laser fields. The charging processes of the metal kernel are most efficient when a resonance between the laser frequency and the collective excitation has been established. It has been shown in dual-pulse and focus-scan experiments [1,2] that the dynamics of the process depends on the optical delay and the chosen laser intensity. A self-learning technique is introduced in order to optimize the signal of the highly charged atomic fragments by changing simultaneously the pulse duration, the dual-pulse delay, and the lens position. For 2.5mJ laser pulses the maximum signal of Ag^{+q} (with $q = 14, 16, 17$) is obtained for a delay of 240fs and a lens position of 6mm.

[1] T. Döppner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 013401 (2005).

[2] T. Döppner *et al.*, Eur. Phys. J. D, *submitted*.

A 22.10 Do 16:30 Poster B

Optimal control of the ionization dynamics of the intense fs laser-cluster interaction — NGUYEN XUAN TRUONG, TILO DÖPPNER, SEBASTIAN GÖDE, ●ROBERT IRSIG, ANDREAS PRZYSTAWIK,

JOSEF TIGGESBÄUMKER, and KARL-HEINZ MEIWES-BROER — Universität Rostock, Fachbereich Physik, Universitätsplatz 3, 18051 Rostock

Recent experiments on intense fs laser-cluster interactions have confirmed the dependence of the charging processes on the temporal pulse shape and the laser intensity [1,2]. In this studies we have extended our recent work by modulating both amplitude and phase of the laser pulses in order to optimize the charging process. For this purpose an acousto-optic programmable dispersive filter (Dazzler) is used. The laser pulse resulting from the optimization procedure is fully characterized by frequency-resolved optical gating technique (FROG). First results on metal clusters embedded on helium nanodroplets are presented.

[1] T. Döppner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 013401 (2005).

[2] T. Döppner *et al.*, Eur. Phys. J. D, *submitted*.

A 22.11 Do 16:30 Poster B

Coherent Diffractive Imaging of Atomic Clusters with XFEL Pulses — ●CHRISTIAN GNODTKE, ULF SAALMANN, and JAN-MICHAEL ROST — Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Nöthnitzer Straße 38, 01187 Dresden, Germany

We study the possibility of coherent diffractive imaging of atomic clusters with intense, femtosecond pulses from X-ray free electron lasers (XFEL). We simulate the diffraction patterns of rare-gas clusters with radii ranging from a few to tens of nanometers in X-ray pulses with laser wavelengths of 32nm, as currently available at FLASH, down to 1Å as will be available from the XFEL at DESY in Hamburg in the future. At large wavelengths intrinsic or induced density inhomogeneities within the cluster on a length-scale comparable to the laser wavelength may become visible in an imaging experiment. Towards shorter wavelengths we approach atomic resolution, which, at a wavelength of 1Å, is limited only by the radiation damage inflicted on the sample by the pulse. We calculate the damage threshold by detailed microscopic simulation of the laser-induced dynamics using quantum-mechanical transition rates combined with a molecular dynamics simulation of the (quasi-)free electrons and ions. Finally, we make use of iterative oversampling algorithms to invert the simulated diffraction patterns to real-space images of the cluster.

A 22.12 Do 16:30 Poster B

Inner Shell Photoelectron Spectroscopy using VUV-FEL Radiation of Mass-Selected Pb-Clusters: A Single Shot Analysis — ●TIM FISCHER¹, VOLKMAR SENZ², PATRICE OELSSNER², JOHN NEVILLE³, MARKUS SCHÖFFLER⁴, JÖRG STANZEL⁵, HEIKO THOMAS⁶, MATTHIAS NEEB⁵, JOSEF TIGGESBÄUMKER², MICHAEL MARTINS⁷, ECKART RÜHL⁸, CHRISTOPH BOSTEDT⁶, WOLFGANG EBERHARDT⁵, GERD GANTEFÖR¹, THOMAS MÖLLER⁶, HORST SCHMIDT-BÖCKING⁴, REINHARD DÖRNER⁴, WILFRIED WURTH⁷, and KARL-HEINZ MEIWES-BROER² — ¹Universität Konstanz — ²Universität Rostock — ³University of New Brunswick, Canada — ⁴Universität Frankfurt am Main — ⁵BESSY Berlin — ⁶Technische Universität Berlin — ⁷Universität Hamburg — ⁸Freie Universität Berlin

For clusters the catalytic, chemical and magnetic properties depend strongly on the number of atoms. VUV photoelectron spectroscopy provides a powerful access to these electronical and geometrical set of problems. Currently, no light source is suitable to measure the entire valence and shallow core levels, except the free-electron-laser FLASH at HASYLAB/DESY. It provides the appropriate radiation of several tens of eV with sufficient high photon flux, but with shot-per-shot fluctuation up to a factor of 10. Furthermore the FEL multibunch structure allows to investigate more than one cluster size per shot.

For measuring the clusters, a resolution and pressure optimised UHV-build up with fast data acquisition were used. Electron time-of-flight data, photon flux and cluster intensity were accumulated for every single shot via ROOT and enables laser intensity related analysis.