

MO 27: Poster: Cluster

Time: Thursday 16:00–18:30

Location: Lichthof

MO 27.1 Th 16:00 Lichthof

Structural investigation of platinum and ruthenium cluster cations — ●CHRISTIAN KERPAL¹, DANIEL HARDING¹, YUNJIE XU², ANDRÉ FIELICKE¹, and GERARD MEIJER¹ — ¹Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin, Germany — ²University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada

Small clusters of both platinum and ruthenium represent models for potentially important industrial catalysts. In the case of ruthenium the catalytic abilities include, for example, its low temperature activity in ammonia synthesis, whereas for platinum, its role in the activation of C-H bonds and its potential usage in fuel cells have been of great interest. The long term goal of such cluster model studies is to understand the chemistry occurring at specific low coordinated metal sites in heterogeneous catalysis. However, the properties of metal clusters often differ dramatically with particle size and as most of the physical and chemical properties of clusters are directly related to their geometries the determination of the precise structure is essential. Structural information can be obtained via infrared multiple photon dissociation of metal-cluster-argon complexes in the range of the clusters' vibrational fundamentals. This yields the cluster-size specific far-IR spectra. Here we present the far-IR spectra of platinum and ruthenium cluster cations containing up to 10 metal atoms in the 130-320 cm⁻¹ range. By comparison with quantum chemical calculations the clusters structures can be deduced. This also provides a benchmark for the challenging calculations allowing their further improvement.

MO 27.2 Th 16:00 Lichthof

Photoionisation von Helium-Dimeren — ●TILO HAVERMEIER¹, TILL JAHNKE¹, KATHARINA KREIDI¹, ROBERT WALLAUER¹, STEFAN VOSS¹, MARKUS SCHÖFFLER¹, SVEN SCHÖSSLER¹, LUTZ FOUCAR¹, NADINE NEUMANN¹, JASMIN TITZE¹, HENDRIK SANN¹, MATTHIAS KÜHNEL¹, JÖRG VOIGTSBERGER¹, ABDULAH MALAKZADEH¹, NICOLAS SISOURAT², WIELAND SCHÖLLKOPF³, HORST SCHMIDT-BÖCKING¹, ROBERT E. GRISENTI¹ und REINHARD DÖRNER¹ — ¹Institut für Kernphysik, Goethe Universität, Max-von-Laue-Str.1, D-60438 Frankfurt — ²Institut für physikalische Chemie, Universität Heidelberg, Im Neuenheimer Feld 229, 69120 Heidelberg — ³Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin

Helium Dimere gehören zu den am schwächsten gebundenen Systemen die in der Natur auftreten. Ihr internuklearer Abstand erstreckt sich über mehrere 100 Atomdurchmesser bei einem Mittelwert der Verteilung von 52 Å. Im hier vorgestellten Experiment wurde die Wechselwirkung der Dimere mit Synchrotronstrahlung im Energiebereich von 64 bis 78 eV untersucht. Dazu wurde linear polarisierte Synchrotronstrahlung des BESSY II in Berlin verwendet. Die Impulse aller geladenen Fragmente wurden mit einem COLTRIMS System detektiert. Es konnten zwei verschiedene Ionisationsprozesse gefunden werden, welche die Doppelionisation eines Helium Dimers über große internukleare Abstände mit einem einzelnen Photon ermöglichen. Die Messdaten konnten schließlich mit einer Theorie von Sisourat et. al. verglichen werden.

MO 27.3 Th 16:00 Lichthof

Electron spectroscopy of weakly bound clusters with a magnetic bottle spectrometer — ●MELANIE MUCKE¹, TORALF LISCHKE¹, MARKO FÖRSTEL^{1,2}, TIBERIU ARION¹, ALEX BRADSHAW^{1,3}, and UWE HERGENHAHN¹ — ¹Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, 85748 Garching — ²Max-Planck-Institut für Kernphysik, 69117 Heidelberg — ³Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, 14195 Berlin

In previous experiments a spectrometer of the magnetic bottle type proved to be well-suited for investigating electron-electron coincidences since the detection efficiency is large even for electrons of very low kinetic energies. We have now realized and successfully tested a new magnetic bottle spectrometer dedicated to the study of weakly bound clusters. In this contribution, specific features of the apparatus will be highlighted and new results on the Interatomic Coulombic Decay in neon clusters will be presented.

MO 27.4 Th 16:00 Lichthof

Ionisation von Argon und Neon Dimeren, Trimeren und Tetrameren in Laserfeldern — ●BIRTE ULRICH, TILL JAHNKE, AR-

NO VREDENBORG, ABDOLLAH MALAKZADEH, KYRA COLE, MATHIAS SMOLARSKI, ROBERT WALLAUER, STEFAN VOSS, JASMIN TITZE, NADINE NEUMANN, HORST SCHMIDT-BÖCKING und REINHARD DÖRNER — Institut für Kernphysik, Frankfurt, Deutschland

Aufgrund ihrer geringen Bindungsenergien und der großen internuklearen Abstände verglichen mit Molekülen, sind Untersuchungen an Clustern von besonderem Interesse. In dem hier vorgestellten Experiment wurden mit Hilfe der COLTRIMS Technik die Ionisationsmechanismen von kleinen Neon und Argon Clustern in intensiven Laserfeldern untersucht. Im Unterschied zu Neon besitzt Argon mehrere unterschiedliche Ionisationsmechanismen.

Desweiteren konnte die räumliche Struktur der Argon und Neon Trimeren und Tetrameren aus den Messungen rekonstruiert werden. Dabei weisen Neon Trimeren, eine breitere Winkelverteilung auf, als Argon Trimeren, was in guter Übereinstimmung mit theoretischen Berechnungen ist.

MO 27.5 Th 16:00 Lichthof

ICD an Helium-Neon-Dimeren — ●HENDRIK SANN, TILL JAHNKE, TILO HAVERMEIER, FELIX STURM, HORST SCHMIDT-BÖCKING und REINHARD DÖRNER — Goethe-Universität, Frankfurt, Deutschland

Mithilfe der COLTRIMS-Messtechnik wurde der Interatomic Coulombic Decay (ICD) an Helium-Neon-Dimeren nach Photoionisation untersucht.

ICD ist ein Prozess, welcher zwischen, durch Van-der-Waals-Wechselwirkung, schwach gebundenen Atomen auftreten kann.

Dabei wird zunächst das erste Atom ionisiert und in einen angeregten Zustand gebracht. Wenn dieser angeregte Zustand wieder zerfällt, kann die freiwerdende Energie mittels eines virtuellen Photons auf das zweite Atom übertragen und dieses ebenfalls ionisiert werden.

Dieser Prozess wurde bereits an verschiedenen Dimeren, wie zum Beispiel NeNe [1] oder HeHe [2] beobachtet. Im Rahmen dieses Experiment war es möglich ihn erstmals an einem heteronuklearen Dimer, HeNe, nachzuweisen.

Das Experiment wurde mittels Synchrotronstrahlung am Elektronenspeicherring BESSY II in Berlin durchgeführt. Zur koinzidenten Messung aller vier Reaktionsteilchen wurde ein Coltrims-Reaktionsmikroskop [3] verwendet.

- [1] T. Jahnke et al., Phys. Rev. Lett., 93(2004)163401
 [2] T. Havermeier et al., submitted to Phys. Rev. Lett.
 [3] R. Dörner et al., Physics Reports 330 (2000) 95-192

MO 27.6 Th 16:00 Lichthof

Ionisationsprozesse in He⁺-Ne₂ Stößen bei einer Projektilenergie von 650 keV — ●HONG-KEUN KIM¹, JASMIN TITZE¹, MARKUS SCHÖFFLER², FLORIAN TRINTER¹, MARKUS WAITZ¹, LOTHAR SCHMIDT¹, TILL JAHNKE¹, ACHIM CZASCH¹, OTTMAR JAGUTZKI¹, HORST SCHMIDT-BÖCKING¹ und REINHARD DÖRNER¹ — ¹Goethe Universität Frankfurt, Max-von-Laue-Str. 1 60438 Frankfurt/M — ²LBNL, 1 Cyclotron Rd, Berkeley CA 94720

In einem Ionenstoßexperiment wurde die Reaktionsdynamik bei Ionisationsprozessen von Neondimeren untersucht. Dabei konnten im Stoßsystem He⁺ + Ne₂ -> He⁺ + 2Ne⁺ + 2e⁻ bei einer Projektilenergie von 650 keV drei Zerfallskanäle beobachtet werden. Das Experiment wurde mit Hilfe des ColTRIMS-Reaktionsmikroskops am 2,5 MeV Van-de-Graaff-Beschleuniger des Stern-Gerlach-Zentrums in Frankfurt durchgeführt.

MO 27.7 Th 16:00 Lichthof

Ultraviolett photoluminescence of ideal nanodiamonds - diamondoids — ●DAVID WOLTER¹, LASSE LANDT¹, WITOSLAW KIELICH², MATTHIAS STAIGER¹, CHRISTOPH BOSTEDT³, and THOMAS MÖLLER¹ — ¹Technische Universität Berlin — ²Universität Kassel — ³LCLS Stanford

Nanodiamonds, so called diamondoids are carbon clusters with perfect bulk diamond structure and complete hydrogen passivation. Diamondoids can be perfectly size-selected and isomer resolved even in their neutral state. This has made possible a variety of investigations on the size and shape dependence of their electronic structure and optical properties.

We studied the photoluminescence of nanodiamonds and found intrinsic photoluminescence in the ultraviolet regime for adamantane ($C_{10}H_{16}$), the smallest one in a series of hydrogen-passivated diamond clusters (diamondoids)[1]. The luminescence can be ascribed to recombination of selftrapped excitons. The inclusion of high amounts of nitrogen into the nanodiamonds crystal lattice, using the example of urotropine (hexamethylenetetramine), is found to quench the luminescence.

[1] L.Landt, D.Wolter et al. Phys. Rev. B 80, 205323 (2009)

MO 27.8 Th 16:00 Lichthof

Influence of Functionalization on the Electronic Structure of Ideal Diamond Clusters - Diamondoids — ●STEPHANIE WUTSCHIK¹, DAVID WOLTER¹, LASSE LANDT¹, MATTHIAS STAIGER¹, PETER R. SCHREINER², JEREMY E. DAHL³, ROBERT M. K. CARLSON³, CHRISTOPH BOSTEDT⁴, and THOMAS MÖLLER¹ — ¹Technische Universität Berlin, Germany — ²Justus-Liebig-Universität Gießen, Germany — ³MolecularDiamond Technologies, USA — ⁴LCLS Stanford, USA

Diamondoids are ideal hydrogen passivated diamond clusters in the (sub-) nanometer regime which can be isolated from petroleum and perfectly size and isomer selected. They have opened new possibilities for a variety of experimental studies concerning size and shape dependence of the electronic structure and optical properties [1] of semiconductor clusters. The selective functionalization of diamondoids now allows for a detailed investigation of its effect on the surface and on the electronic and optical properties of semiconductor nanocrystals. Furthermore, functionalization is needed to include diamondoids in solid-state devices which opens a wide range of possible applications.

We studied the effect of functionalization on optical and electronic properties for differently sized diamondoids and for various functional groups (thiol, hydroxyl, bromine, oxygen, iodine and amine). We find that functionalization can be used to tune the optical gap of diamondoids and to modify their electronic structure.

[1] L. Landt, et al. Phys. Rev. Lett. **103**, 047402 (2009)

MO 27.9 Th 16:00 Lichthof

Spectroscopic investigation of para-dichlorobenzene-water cluster cations by IR and VIS photodissociation — SHAMIK

CHAKRABORTY, ●ALEXANDER PATZER, ANITA LAGUTSCHENKOV, JUDITH LANGER, and OTTO DOPFER — Institut für Optik und Atomare Physik, Technische Universität Berlin, Hardenbergstrasse 36, 10623 Berlin, Germany

Spectroscopy utilizing the process of photodissociation is a powerful approach to record infrared and visible spectra of molecular ions and cluster ions.

This contribution presents the infrared spectra of para-dichlorobenzene-water cluster cations $[pDCB^+(H_2O)_n; n = 1, 2]$ in the wavenumber range $2800\text{ cm}^{-1} - 3900\text{ cm}^{-1}$ and the visible spectra ranging from 19000 cm^{-1} to 21000 cm^{-1} . The experimentally observed IR spectra are compared to quantum chemical calculations carried out at the B3LYP/6-311++G** level of theory. The IR spectrum of $pDCB^+(H_2O)_2$, produced in an electron ionization source, suggests the existence of two types of isomers under the conditions employed in this experiment. In the first type, a water dimer is bound to the $pDCB^+$ ion, whereas in the second type the water is attached as two individual H_2O molecules. The visible spectrum of the $pDCB^+H_2O$ B←X transition provides support for the conclusion that the examined ionic clusters are unreactive with respect to nucleophilic substitution [1].

[1] S. Chakraborty et al. Chem. Phys. Lett. (in press).

MO 27.10 Th 16:00 Lichthof

Sublimation of the endohedral fullerene $Er_3N@C_{80}$ — ALEXANDER STIBOR, ●HANNAH SCHEFZYK, and JÓZSEF FORTÁGH — Center for Collective Quantum Phenomena and their Applications, Universität Tübingen

Evaporation studies of the endohedral metallofullerene $Er_3N@C_{80}$ were performed via Knudsen effusion mass spectrometry. The macromolecule consists of a C_{80} fullerene cage which is stabilized by comprising a complex of three erbium atoms bounded to a nitrogen atom and has a mass of 1475 amu. The mass spectrum at a temperature of 1045 K and the relative intensities of the thermal fractions of $Er_3N@C_{80}$ are provided, proving its high stability. By measuring the quantity of evaporated molecules in thermal equilibrium through a quadrupole mass spectrometer in a temperature range between 782 K and 1128 K, the heat of sublimation was obtained from the second law method to be $H_{sub} = 237 \pm 7 \frac{kJ}{mol}$.