

## MO 13 Molecular Clusters I

Zeit: Montag 14:00–16:00

Raum: H10

MO 13.1 Mo 14:00 H10

**Innershell excitation of free nano particles** — ●B. LANGER<sup>1,2</sup>, H. BRESCH<sup>1</sup>, R. LEWINSKI<sup>1</sup>, P. BRENNER<sup>1</sup>, R. FLESCH<sup>1</sup>, C. GRAF<sup>1</sup>, T. MARTCHENKO<sup>3</sup>, O. GHAFUR<sup>3</sup>, M. J. J. VRAKING<sup>3</sup>, and E. RÜHL<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institut für Physikalische Chemie I, Universität Würzburg, Am Hubland, 97074 Würzburg — <sup>2</sup>Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Max-Born-Straße 2A, 12489 Berlin — <sup>3</sup>FOM Institute AMOLF, Amsterdam, The Netherlands

We have studied inner shell excitations in free nano particles using synchrotron radiation. Our particles were transferred into the gas phase by an aerosol generator. An additional differential mobilisation analyser (DMA) made it possible to generate a continuous beam of size selected nano particles that was focussed into the vacuum chamber by an aerodynamical lens. This approach allowed us to prepare free nano particles which were produced by colloidal chemistry. We have measured the total electron yield to characterise the electronic structure of nano particles in the region of their inner shell excitations.

First experiments were performed on size selected NaCl nano particles (radius = 50–175 nm) in the region of the Cl 2*p* and the Na 1*s* excitation. Measurements in the region around the O 1*s* absorption threshold show that these particles contain only little water. In contrast, nanoscopic salt particles (Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>·10 H<sub>2</sub>O) that contain chemically combined water show a significant absorption in this region which might be of interest to study the binding structure of such water. In addition, we have studied the influence of coatings to the electronic structure of free core-shell particles. Here we used ZnS particles (radius = 60 nm) with a 5 nm SiO<sub>2</sub> shell.

MO 13.2 Mo 14:15 H10

**Photoelectron spectroscopy of strontium cluster anions** — ●OLEG KOSTKO<sup>1</sup>, ORI CHESHNOVSKY<sup>2</sup>, and BERND V. ISSENDORFF<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Fakultät für Physik, Universität Freiburg, Stefan-Meier-Str. 21, 79104 Freiburg — <sup>2</sup>School of Chemistry, The Raymond and Beverly Sackler Faculty of Sciences, Tel Aviv University, 69978 Tel Aviv, Israel

Size-selected strontium cluster anions with a temperature of T=100K have been studied by photoelectron spectroscopy. The spectra exhibit clear structures which in combination with ab initio DFT calculations can be used to identify the geometry of the clusters. Comparison of the photoelectron spectra with the spectra of other divalent metals such as magnesium and zinc shows clear distinctions. All of them exhibit a band gap for small sizes. But the photoelectron spectra of larger Mg and Zn clusters reveal free electron-like density of states, whereas in the case of Sr clusters an electron shell structure is not visible. This is the result of strong hybridization of the 5*s* band with the empty 4*d* band (instead of *s-p* hybridization like in Mg and Zn clusters), which perturbs the electron shell structure and leads to a high DOS at E<sub>F</sub> even for smaller clusters.

MO 13.3 Mo 14:30 H10

**Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Natrium-Clustern** — ●CHRISTOF BARTELS, CHRISTIAN HOCK, JÖRG SCHWÖBEL, RAPHAEL KUHNEN, ABDOLLAH MALAKZADEH, PASCAL DIDIER und BERND VON ISSENDORFF — Institut für Physik, Universität Freiburg, Stefan-Meier-Straße 19, 79104 Freiburg

Ein Bildspektrometer zur Messung von winkelaufgelösten Photoelektronenspektren an Clustern wurde aufgebaut. Erste Messungen mit ns-Laserpulsen (XeCl-Excimerlaser, 4,02 eV Photonenenergie) an negativen Natrium-Clusterionen wurden durchgeführt.

Die früher an Natrium gemessenen klassischen (energieauflösenden) Photoelektronenspektren [1] lassen sich im Rahmen des Jelliummodells erklären. Dieses Modell sagt für Photoelektronen aus Zuständen mit verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen unterschiedliche Winkelverteilungen voraus.

Die Messungen an kleinen Na<sub>n</sub><sup>-</sup>-Clustern (*n* = 13, 19, 20, 39) zeigen jedoch stets eine Anisotropie mit Emissionsmaxima entlang der Polarisationsachse des Laserlichts, unabhängig vom Elektronendrehimpuls. Diese Verteilung ist charakteristisch für die Emission von *s*-Elektronen und könnte so gedeutet werden, dass sich hier der Drehimpuls des Valenzelektrons eines Na-Atoms bemerkbar macht und nicht der Drehimpuls der Elektronen im Rahmen des Jelliummodells. Große Cluster (114, ..., 355) jedoch zeigen isotrope Elektronenverteilungen.

[1] Wrigge et al., Phys. Rev. A 65, 063201 (2002)

MO 13.4 Mo 14:45 H10

**Gas Phase Vibrational Spectroscopy of Bimetallic Oxide Cluster Anions** — ●E. JANSSENS<sup>1,2</sup>, G. SANTAMBROGIO<sup>1</sup>, M. BRÜMMER<sup>1</sup>, L. WÖSTE<sup>1</sup>, P. LIEVENS<sup>2</sup>, J. SAUER<sup>3</sup>, G. MEIJER<sup>4</sup>, and K.R. ASMIS<sup>4</sup> — <sup>1</sup>Institut für Experimentalphysik, F.U. Berlin, Arnimallee 14, 14195 Berlin — <sup>2</sup>Laboratorium voor Vaste-Stoffysica en Magnetisme, K.U. Leuven, Celestijnenlaan 200 D, 3001 Leuven, Belgium — <sup>3</sup>Institut für Chemie, H.U. Berlin, Unter den Linden 6, 10099 Berlin — <sup>4</sup>Fritz-Haber Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin

Transition metal oxides on oxide surfaces play a central role in heterogeneous catalysis. However because of the complex interactions between the active sites and the support, the catalytic mechanisms are not completely known. Molecular beam studies on mass-selected particles under well controlled conditions can aid to understand these interesting systems. Here, we present the first systematic infrared study of bimetallic oxide clusters in the gas phase.

Mixed V<sub>n</sub>Ti<sub>m</sub>O<sub>p</sub><sup>-</sup> clusters are studied with IR multiphoton dissociation spectroscopy in the 500 to 1200 cm<sup>-1</sup> range and assigned on the basis of harmonic frequencies calculated with DFT. The clusters are produced in a dual laser vaporization source, stored in an ion trap, and irradiated with IR light of a free electron laser. The closed shell (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)<sub>n-1</sub>(VTiO<sub>5</sub>)<sup>-</sup> (*n* = 2–4) clusters are shown to form caged structures similar to their iso-electronic monometallic counterparts, the neutral vanadium oxide clusters (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)<sub>n</sub> (*n* = 2–4). Titanium-rich anions, V<sub>4-n</sub>Ti<sub>n</sub>O<sub>10</sub><sup>-</sup> (*n* = 1–4), prefer to maintain the tetrahedral shape of V<sub>4</sub>O<sub>10</sub> rather than pairing electrons, leading to a quartet ground state in Ti<sub>4</sub>O<sub>10</sub><sup>-</sup>.

MO 13.5 Mo 15:00 H10

**Pump-Probe-Photoelectron-Spectroscopy of C<sub>60</sub><sup>-</sup>** — ●CHRISTINE WEHRSTEIN, RAPHAEL KUHNEN, ABDOLLAH MALAKZADEH, PASCAL DIDIER, and BERND V. ISSENDORFF — Physikalisches Institut, Universität Freiburg, Stefan-Meier-Str. 21, 79104 Freiburg

The electronic valence structure of fullerenes is determined by the delocalized π-band which can be seen as a spherical two-dimensional electron gas. This makes fullerenes interesting model systems for the study of relaxation processes in a highly correlated many-electron systems.

C<sub>60</sub><sup>-</sup> clusters have been studied by femtosecond laser photoelectron spectroscopy, measuring intensity dependencies for single pulse excitation with 266nm, 400nm and 800nm light as well as two colour pump-probe spectra. In the single pulse spectra structures are observed which can be identified as resonant multiphoton detachment of C<sub>60</sub><sup>-</sup>. The corresponding intermediate excited states exhibit strongly different decay times.

MO 13.6 Mo 15:15 H10

**Electron-Ion-Coincidence Study of C<sub>60</sub> Fragmentation** — ●SANJA KORICA, AXEL REINKÖSTER, JENS VIEFHAUS, DANIEL ROLLES, REINER HENTGES, MARKUS BRAUNE, and UWE BECKER — Fritz-Haber-Institut der MPG, Faradayweg 4-6, Berlin, Germany

In order to get a deeper insight in the valence shell photofragmentation dynamics of C<sub>60</sub> we have performed photoelectron-photoion coincidence measurements (PEPICO) in this energy region. Our results are supported with the previous non-coincident electron and ion measurements. The measurements were performed at the BW3 beamline of HASYLAB. C<sub>60</sub> molecules in the gas phase were ionized by the monochromatic synchrotron radiation and the outgoing electrons and ions were detected with the time-of-flight analysers located opposite to each other. Our results show that the most intense coincidences are between electron and C<sub>60</sub><sup>(q+)</sup> ions (q=1-3), but also coincidences with the C<sub>60-2m</sub><sup>(2+)</sup> ions are clearly discernible. Possible mechanisms for these fragmentation events will be discussed.

MO 13.7 Mo 15:30 H10

**Ionisation von C<sub>60</sub> in intensiven Laserfeldern** — ●A. BECKER<sup>1</sup>, A. JARON-BECKER<sup>2</sup> und F.H.M. FAISAL<sup>3</sup> — <sup>1</sup>Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Nöthnitzer Str. 38, 01187 Dresden — <sup>2</sup>Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden — <sup>3</sup>Fakultät für Physik, Universität Bielefeld, 33501 Bielefeld

Wir haben die Ionisation von Fullerenen in intensiven Laserfeldern theoretisch untersucht. Dazu haben wir einen *S*-Matrix-Ansatz für Atome in starken Feldern <sup>1</sup> auf Fullerene erweitert, indem wir die struk-

turellen Aspekte des Moleküls, wie Radius und Molekülwellenfunktion, berücksichtigt haben. Die Ergebnisse für die Sättigungsintensitäten von  $C_{60}$  sind in sehr guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten<sup>2</sup>. Unsere Analyse der Daten zeigt den Einfluß von Interferenzeffekten auf die laserinduzierte Ionisationsdynamik eines Fullerenes.

<sup>1</sup> A. Becker and F.H.M. Faisal, J. Phys. B **38**, R1 (2005).

<sup>2</sup> V.R. Bhardwaj, P.B. Corkum and D.M. Rajner, Phys. Rev. Lett. **91**, 203004 (2003).

MO 13.8 Mo 15:45 H10

**Ionisationspotentiale von molekularen Diamanten (diamondoids)** — ●KONSTANTIN LENZKE<sup>1</sup>, CHRISTOPH BOSTEDT<sup>1</sup>, MATTHIAS HOENER<sup>1</sup>, HEIKO THOMAS<sup>1</sup>, THOMAS MÖLLER<sup>1</sup>, JEREMY E. DAHL<sup>2</sup>, S. G. LIU<sup>2</sup> und R. M. K. CARLSSON<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Technische Universität Berlin, PN 3-1, Hardenbergstr. 36, 10623 Berlin, Germany — <sup>2</sup>Molecular Diamond Technologies, Chevron, P.O. Box 1627, Richmond, California 94802, USA

Diamondoids sind ideale Diamantcluster am molekularen Limit. Das erste Diamondoid Adamantane besteht aus dem kleinsten zusammenhängenden Käfig im Diamantgitter, alle anderen werden durch Hinzufügen weiterer Käfige gebildet. Cluster können großen- und sogar struktursepariert werden und sind daher ideale Systeme um grundlegende Fragen der Clusterphysik zu untersuchen.

Wir haben die Ionisationspotentiale der ersten Diamondoids von Adamantane (ein Käfig) bis Pentamantane (fünf Käfige) aus Absorptionsspektren im Bereich von 100 bis 200 nm bestimmt. Die Untersuchungen wurden am Strahlrohr I des Hasylab (DESY) in der Gasphase durchgeführt. Die erzeugten Ionen wurden mit einem Flugzeit - Massenspektrometer (TOF) analysiert und Ionenausbeutespektren aufgenommen. Die Ionisationspotentiale skalieren mit der Clustergröße, es zeigen sich aber auch interessante Zusammenhänge zwischen den Ionisationspotentialen und Clusterstrukturen. Die Ergebnisse werden mit aktuellen theoretischen Vorhersagen verglichen und diskutiert.