

MO 56 Poster: Molecular Clusters

Zeit: Donnerstag 16:30–18:30

Raum: Labsaal

MO 56.1 Do 16:30 Labsaal

Hochauflösende Spektroskopie von Methan-Dimer im Bereich der ν_4 -Schwingung bei 1300 cm^{-1} — ●GERHARD SCHWAAB, ABDULLAH HAMDAN und MARTINA HAVENITH — Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

Spektren von Methan-Dimer (CH_4)₂ im Bereich von 1300 cm^{-1} wurden mit Hilfe eines hochauflösenden Bleisalz-Diodenlaser-Spektrometers aufgenommen. Es besteht aus einer wahlweise kontinuierlich oder gepulst betriebenen $5\text{ cm} \times 5\text{ }\mu\text{m}$ Schlitzdüse und einem computergesteuerten Bleisalz-Diodenlaser. Durch eine Herriott-Zelle wird der Absorptionsweg auf bis zu 180 cm verlängert. Damit ergibt sich eine Nachweissensitivität $\frac{\Delta I}{I_0}$ von 10^{-5} – 10^{-6} .

Zur Unterscheidung von Methan-Dimer und anderen Komplexen, z.B. $\text{Ar} - \text{CH}_4$ wurde Methan alternativ mit Ar und mit He-Ne koexpandiert. Ein Teil der vermessenen Linien konnte den $^R P_0$ -, $^Q R_0$ - und $^R Q_0$ -Zweigen des R(0)-Übergangs des dreifach entarteten ν_4 -Schwingungszustandes von Methan zugeordnet werden. (CH_4)₂ zeigt, ähnlich zu $\text{Ar} - \text{CH}_4$ und $\text{Kr} - \text{CH}_4$ eine starke Corioliswechselwirkung zwischen den $K=0$ und $K=1^+$ Zuständen des angeregten Vibrationszustandes. Aus der Corioliskopplungskonstanten konnte ein effektiver Drehimpuls $j^* = 0.95$ für den angeregten Zustand abgeleitet werden. Dies entspricht etwa dem Wert für $\text{Ne} - \text{CH}_4$ ($= 0.97$) und legt eine weitgehend freie Rotation der Methan-Monomere im angeregten Zustand nahe.

MO 56.2 Do 16:30 Labsaal

Winkelaufgelöste fs-Photoelektronenspektroskopie an Na-Clustern — ●CHRISTIAN HOCK, CHRISTOF BARTELS, 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 fs-Laserpulsen (400 nm , 100 fs) an positiven und negativen Natrium-Clusterionen wurden durchgeführt, um frühere Ergebnisse zur Emission thermischer Elektronen aus einem hochangeregten Elektronengas [1] zu überprüfen. Wie erwartet, zeigt sich eine perfekt isotrope Winkelverteilung der thermischen Photoelektronen.

Durch Ein- oder Mehrphotonenabsorption kann eine kollektive Anregung des Elektronengases (Plasmon) stattfinden. Die lokale Feldverstärkung sollte in diesem Falle zur Emission von Elektronen mit einer stark anisotropen Winkelverteilung führen, die allerdings immer von der isotropen Verteilung thermischer Elektronen überlagert wird. Messungen mit kurzen Laserpulsen ($< 50\text{ fs}$) zum Nachweis dieses Effekts sind in Vorbereitung.

[1] Schlipper et al., Appl. Phys. A 72, 255–259 (2001)

MO 56.3 Do 16:30 Labsaal

Probing the Stepwise Solvation of the Sulfate Dianion: Gas Phase Infrared Spectroscopy of $\text{SO}_4^{2-} \cdot (\text{H}_2\text{O})_n$ Clusters ($n=3-24$) — ●GABRIELE SANTAMBROGIO¹, JIA ZHOU², MATHIAS BRÜMMER¹, DAVE MOORE², LUDGER WÖSTE¹, GERARD MEIJER³, DANIEL M. NEUMARK^{2,4}, and KNUT R. ASMIS³ — ¹Institut für Experimentalphysik, Freie Universität Berlin, Arnimallee 14, D 14195 Berlin, Germany — ²Department of Chemistry, University of California, Berkeley, CA 94720, USA — ³Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, D-14195 Berlin, Germany — ⁴Chemical Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94720, USA

Hydrated sulfate dianions are of paramount importance in diverse branches of science. However, a microscopic, molecular level understanding of the nature of the solute-solvent interaction as well as the composition of the solvation shell has not yet been achieved. Here we report the first gas phase infrared spectra of multiple charged anions in general, namely of mass-selected $\text{SO}_4^{2-} \cdot (\text{H}_2\text{O})_n$ dianions ($n=3-24$) employing the infrared multiple photon dissociation technique in combination with radiation from the free electron laser FELIX. The infrared spectra ($550-1800\text{ cm}^{-1}$) were measured in the region of the stretching and bending modes of the sulfate core as well as characteristic intra- and intermolecular water modes, allowing an unprecedented, atomic level insight into structure of the complex as well as the nature and strength of the underlying hydrogen bonding interaction.

MO 56.4 Do 16:30 Labsaal

Pump-Probe-Spectroscopy of C_{60}^- and C_{70}^- using Hollow-Capillary-Compressor — ●ABDOLLAH MALAKZADEH, PASCAL DIDIER, CHRISTINE WEHRSTEIN, RAPHAEL KUHNEN, 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 excitation and relaxation processes in a highly correlated many-electron systems.

In photoelectron-spectra of C_{60}^- and C_{70}^- irradiated by fs-laserpulses multiphoton-electron detachment processes have been observed. In order to study the pulse length dependence of this effects the pulses of the amplified 100fs Ti:Sa-lasersystem have been shortened by spectral broadening in hollow capillary waveguides. The compressor gives pulses of 25fs at $200\mu\text{J}$ pulse energy centered at 790 nm wavelength. The short pulses increase the higher order effects in the photoelectron-spectra.

MO 56.5 Do 16:30 Labsaal

Reactivity and Infrared Spectroscopy of mass selected vanadium oxide cluster ions — ●MATHIAS BRÜMMER¹, JENS DÖBLER², SARA FONTANELLA¹, GABRIELE SANTAMBROGIO¹, JOACHIM SAUER², LUDGER WÖSTE¹, and KNUT ASMIS³ — ¹Freie Universität Berlin, Institut für Experimentalphysik, Arnimallee 14, 14195 Berlin — ²Humboldt Universität Berlin, Institut für Chemie, Unter den Linden 6, 10099 Berlin — ³Fritz Haber Institut der Max Planck Gesellschaft, Abteilung Molekülphysik, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin

Despite the enormous importance of transition metal oxides based catalysts very little is known about their microscopic details. Vanadium oxides catalyze the oxidation of SO_2 to SO_3 , an important step in the production of sulfuric acid. We performed experiments in which we spectroscopically followed the reaction of vanadium oxide anions $(\text{V}_2\text{O}_5)_n^-$, for $n=2$ to 4 , with sulfur dioxide via infrared multiphoton photodissociation. All spectra show absorption bands in both the vanadyl and the V-O-V region of the spectrum. Differences in the spectra of the bare vanadium oxide anions were interpreted as a consequence of size-induced localization of the extra electron. The spectra measured after SO_2 absorption indicate a chemisorption of sulfur dioxide. Recent calculations on $[\text{V}_4\text{O}_{10}\text{SO}_2]^-$ indicate that here SO_2 is inserted into the vanadium oxide cage. For the larger systems the vanadyl bond on which the extra electron is located seems to be the active site. Here a chemical reaction between the vanadyl-oxygen and SO_2 to SO_3 is expected.