Sfb 450 Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen

HÖRSAAL A, Raum 1.3.14

Arnimallee 14

Vorstellungsvortrag zur Habilitation

Am **Dienstag, den 26. Oktober 2004, 17 h c.t.**

spricht **Dr. Knut R. Asmis**

FHI

Über **Schwingungsspektroskopie an massenselektierten Clusterionen in der Gasphase**

Nur wenige experimentelle Methoden ermöglichen eine direkte Strukturaufklärung von Clustern in der Gasphase. Im Gegensatz zur kondensierten Phase sind direkte Absorptionsmessungen an isolierten Ionen aufgrund der kleineren erreichbaren Teilchendichten ungeeignet. Die Beobachtung der Photodissoziation als Folgeprozess der Photoabsorption stellt sich als weitaus empfindlicher und selektiver heraus, benötigt jedoch intensive und durchstimmbare Laserstrahlung im Infrarotbereich. Geeignete Strahlungsquellen waren lange nur in eingeschränkten spektralen Bereichen kommerziell erhältlich, so dass die Schwingungsspektroskopie an Gasphasenionen auf den Bereich über 2000 cm^{-1}, den Bereich der O-H Streckschwingungen und Kombinationsbanden, beschränkt war. Erst Ende der 90er Jahre konnten Meijer, von Helden und Mitarbeiter zeigen, dass die Strahlung des Freien Elektronen Lasers FELIX geeignet ist, auch den Bereich unterhalb 2000 cm^{-1} für die Infrarotspektroskopie an Gasphasenclustern zu erschliessen.
Im Rahmen der Habilitationsarbeit wurde diese Methodik nun erweitert. Mit einem maßgeschneiderten Tandem-Massenspektrometer mit kühlbarer Ionenfalle konnten erstmals IR-Photodissoziationsspektren an kalten, massenselektierten Clusterkationen und -anionen in der Gasphase am FELIX gemessen werden. Untersucht wurden Vanadiumoxidcluster (SFB 546) und Systeme mit starken Wasserstoffbrücken (GK 766). Während das typische Strukturmerkmal zweikerniger $V_2O_y^+$ Kationen ein viergliedriger V-O-V-O Ring ist, ordnen sich die größeren $V_xO_y^-$ Anionen zu hochsymmetrischen Käfigstrukturen an. Der Vergleich mit Elektronenstrukturrechnungen ermöglicht darüber hinaus auch Aussagen über den elektronischen Zustand sowie den Lokalisierungsgrad ungepaarter d-Elektronen. Im zweiten Projekt sorgte die erstmalige Messung des Infrarotspektrums des protonierten Wasserdimers $H_2O\cdots H^+\cdots OH^2$ im spektralen Bereich der Schwingungsmoden des zentralen Protons für internationales Aufsehen, obschon die Zuordnung der beobachteten Banden stark umstritten bleibt.