

Sfb 450 Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen

HÖRSAAL A, Raum 1.3.14

Arnimallee 14

Am Dienstag, den 13. November 2001, 16 h c.t.

spricht Dr. Claus-Peter Schulz

Max-Born-Institut

über **Metallatom-Molekül-Cluster: Modellsysteme für Lösungsprozesse**

Beim Lösen von metallischem Natrium in flüssigem Ammoniak wird das Valenzelektron vom Ionenrumpf getrennt und in einem von Lösungsmittel-Molekülen umgebenen Hohlraum gebunden: es wird das "solvatisierte Elektron" gebildet. Die optischen und chemischen Eigenschaften einer solchen Lösung werden ausschließlich durch das solvatisierte Elektron bestimmt. Trotz zahlreicher Studien sind die mikroskopischen Details dieser Lösungsprozesse noch weitgehend unverstanden.

Cluster bestehend aus einem Alkaliatom und polaren Lösungsmittel-Molekülen sind daher interessante Modellsysteme zur Untersuchung des Lösungsprozesses auf mikroskopischer Ebene. Wir haben die spektroskopische Eigenschaften von Natrium-Ammoniak- und Natrium-Wasser-Cluster eingehend untersucht. Neben den Ionisationspotentialen wurde von uns die energetische Lage des niedrigsten elektronisch angeregten Zustands dieser Cluster bestimmt. Im Fall von Ammoniak als Lösungsmittel wurde eine Verschiebung des gelben Natrium $s \rightarrow p$ Übergangs in den nahen infraroten Spektralbereich nach einer Anlagerung von nur 4 Molekülen beobachtet. Für Natrium-Wasser-Cluster ist die Verschiebung der Absorption etwas geringer. Die Absorptionsmessungen deuten auf eine starke Kopplung der elektronischen Anregung an die internen Schwingungen der Lösungsmittelmoleküle hin, die zu einer gegenüber der reinen Strahlungsrelaxation verkürzten Lebensdauer führt. Wir haben daher die Lebensdauer des angeregten Zustands von Natrium-Ammoniak- und Natrium-Wasser-Clustern direkt mit Hilfe der Femtosekunden Pump-Probe-Technik vermessen und eine starke Abnahme der Lebensdauer auf ca. 150 fs für Komplexe mit 10 Lösungsmittelmolekülen gefunden. Die experimentellen Resultate können mit Hilfe neuester quantenchemischer Rechnungen interpretiert werden.