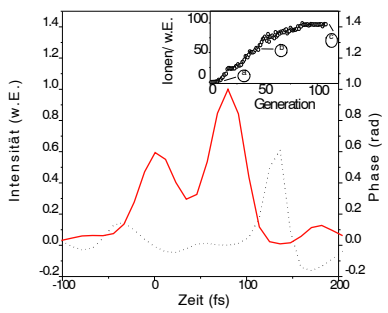
Gesteuerte selektive Liganden-Photodesorption von metallorganischen Komplexen

Untersuchung der optimalen Ionisierung und Fragmentierung in $CpMn(CO)_3$

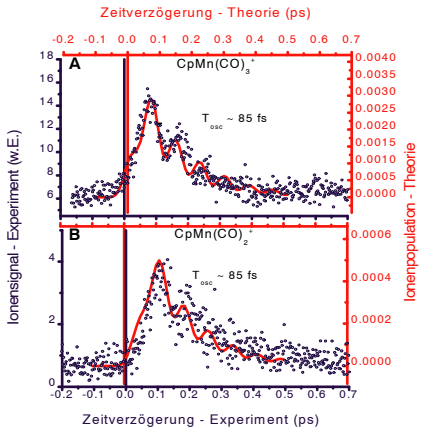
Optimale Pulsform für $CpMn(CO)_3^+$



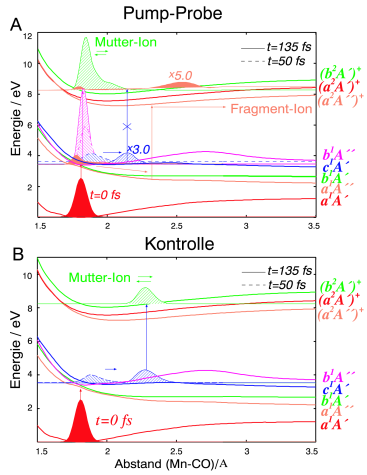
Entschlüsselung des Optimierungsprozesses mit Hilfe von Pump-Probe Experimenten und Simulationen der Wellenpaketdynamik. [DFG03]

(Zusammenarbeit mit TP C1)

Experimentelle (blau) und theoretische (rot) Pump-Probe Spektren von A) $CpMn(CO)_3^+$ und B) $CpMn(CO)_2^+$

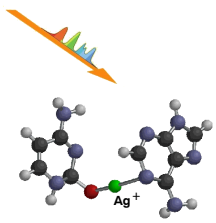


Potentialkurven von $CpMn(CO)_3$

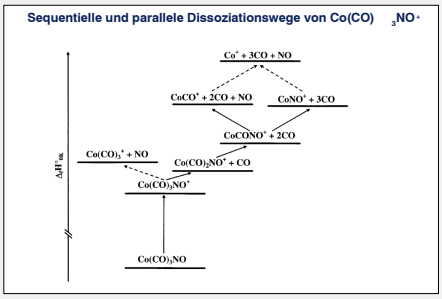


Geplante Experimente in der Gasphase

Steigerung der Systemkomplexität	Neutrales Molekül (M = Cu, Ag)	Molekülion (M = Cu, Ag)
↓	Br - M - Cl	Br - M - Cl+
		Cy - M - Ad (Pu)+
↓	Br - M - S $(CH_3)_2$	Br - M - S $(CH_3)_2^+$
	Co $(CO)_3$ NO	Co $(CO)_3$ NO+
	Co Cp (NO) (CH_3)	Co Cp (NO) $(CH_3)^+$



Cytosine – Ag+ – Adenine

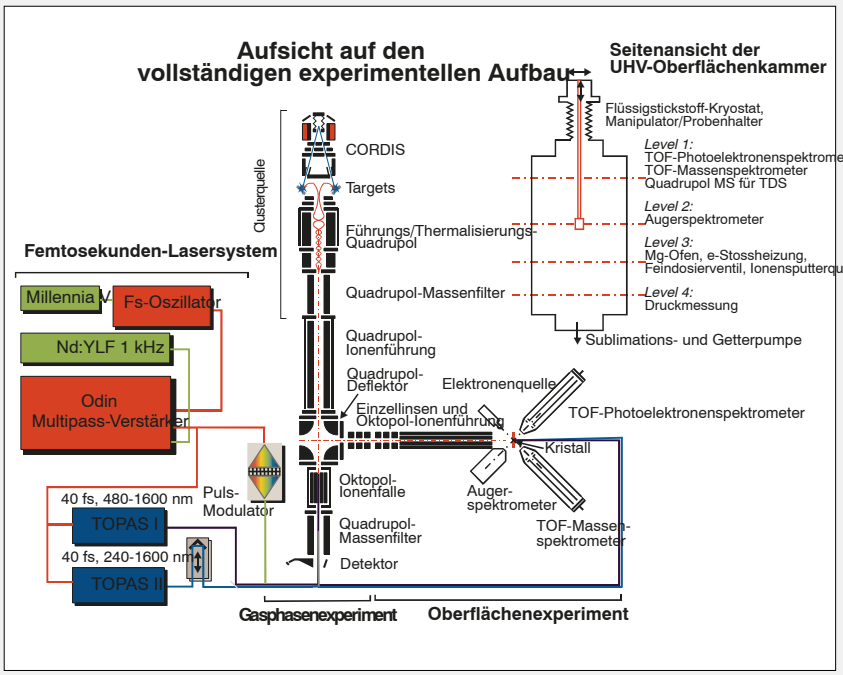


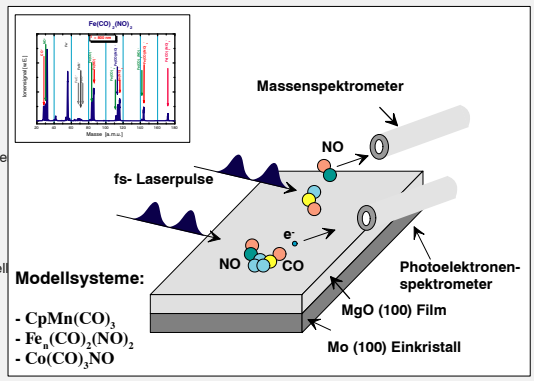
In massenspektrometrischen Optimierungsexperimenten werden sowohl die Anregung der gewünschten Kerndynamik als auch die Photoionisierung des gewünschten Produkts durch den zu optimierenden Laserpuls erreicht. Die Optimierung auf das Mutterion kann Aussagen über die Photoionisation selbst liefern. Bei der Optimierung auf Reaktionsprodukte oder Fragmentionen kann jedoch oftmals nicht klar entschieden werden, wie groß der Beitrag dieser beiden Prozesse am erhaltenen optimalen Laserfeld ist. Da primär ein Interesse an der Optimierung der Kerndynamik besteht, wird vorgeschlagen, in vergleichenden Experimenten, direkt von ionischen Systemen auszugehen, da dort der Schritt der Photoionisierung zur Detektion wegfällt und die Optimierung auf die gewünschte Kerndynamik alleine stattfindet. Untersucht werden soll hier die selektive Ligandenabspaltung von metallorganischen Komplexen.
(Zusammenarbeit mit TP C1, Prof. Seppelt (FU Berlin))

Literatur:

[1] S. Niles, D. A. Prinslow, C. A. Wight, P. B. Armentrout, J. Chem. Phys. 93, 6186, (1990).
[2] J. Sponer, M. Sabat, J. V. Burda, J. Leszczynski, P. Hobza, B. Lippert, J. Biomol. Inorg. Chem. 4, 537, (1999).
[3] B. Sztaray, T. Baer, J. Phys. Chem. A, 106, 8046, (2002).

Geplante Experimente auf der Oberfläche





Die bereits in der Gasphase untersuchten metallorganischen Komplexe sollen auf einer isolierenden Oberfläche deponiert werden. Dadurch kann der Einfluß der Ankopplung an ein thermisches und elektronisches Reservoir auf die selektive Ligandendesorption studiert werden. Schließlich wird ein Übergang zur kondensierten Phase, d. h. die Untersuchung von Metall-Liganden-Komplexen in Lösung, angestrebt.
(Zusammenarbeit mit TP B1, A6)

Literatur:

[DFG03] C. Daniel, J. Full, L. Gonzalez, C. Lupulescu, J. Manz, A. Merli, S. Vajda, L. Wöste, Science , 299, 536 (2003)
[VRK01] S. Vajda, P. Rosendo Francisco, C. Kaposta, M. Krenz, C. Lupulescu, L. Wöste, Eur. Phys. J. D, 16, 161 (2001).