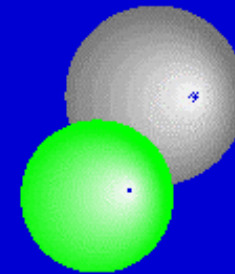
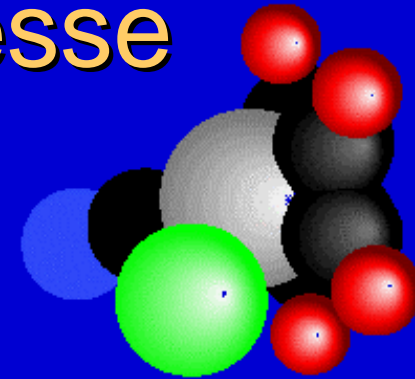
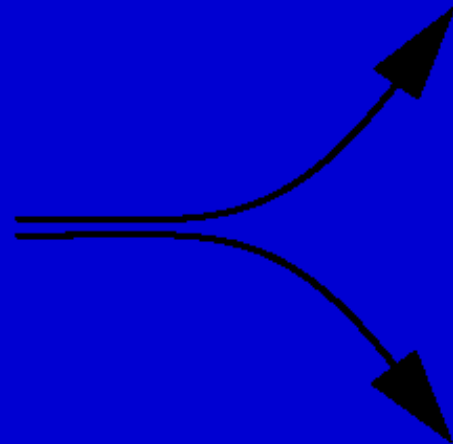
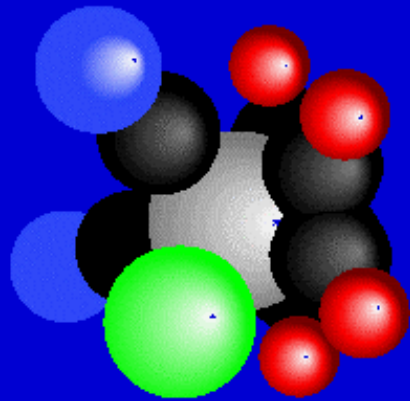


Lehrseminar B: Kurzpulslaser und Anwendung

Ultraschnelle Prozesse in der



FEMTOCHEMIE

von Alexander Kaebe

Inhalt

- | Einführung
- | Experimenteller Aufbau
- | Ultraschnelle Prozesse in der Femtochemie
- | Steuerung photochemischer Prozesse
- | Zusammenfassung und Ausblicke
- | Literatur

Einführung

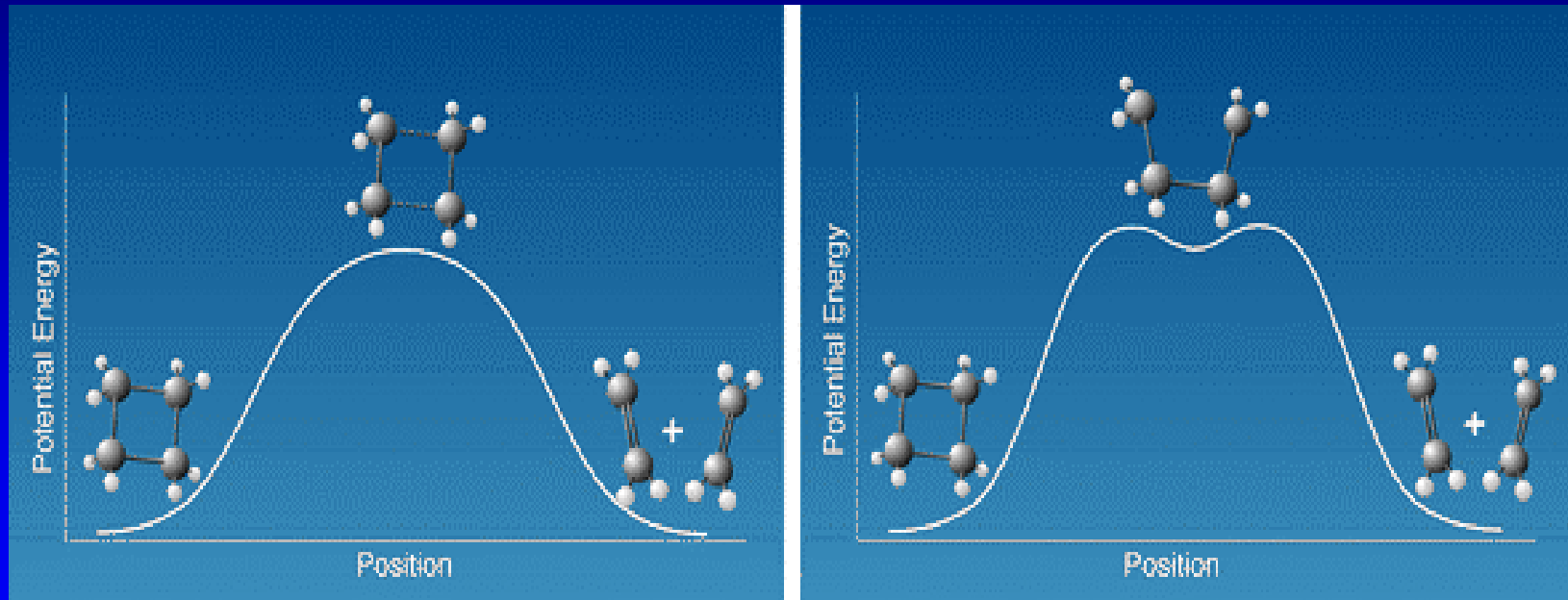
- | Entwicklung der Femtosekundenlaser brachte die Geburt der Femtochemie
- | A. H. Zewail erhielt dafür 1999 den Nobelpreis
- | Die Femtochemie erforscht den Ablauf chemischer Reaktionen
- | Diese erfolgen in Zeiträumen der Größenordnung von Molekülschwingungen

Einführung

- | Die Beobachtung erfolgt also auf der ultraschnellen Zeitskala weniger Femtosekunden
- | Mit dieser “Hochgeschwindigkeitskamera” entstehen “Filme” der beobachteten Prozesse
- | Von besonderem Interesse sind dabei die Intermediaten (Übergangszustände)

Einführung

- Wie läuft die Reaktion vom Cyclobutan zu zwei Ethylen-Molekülen?



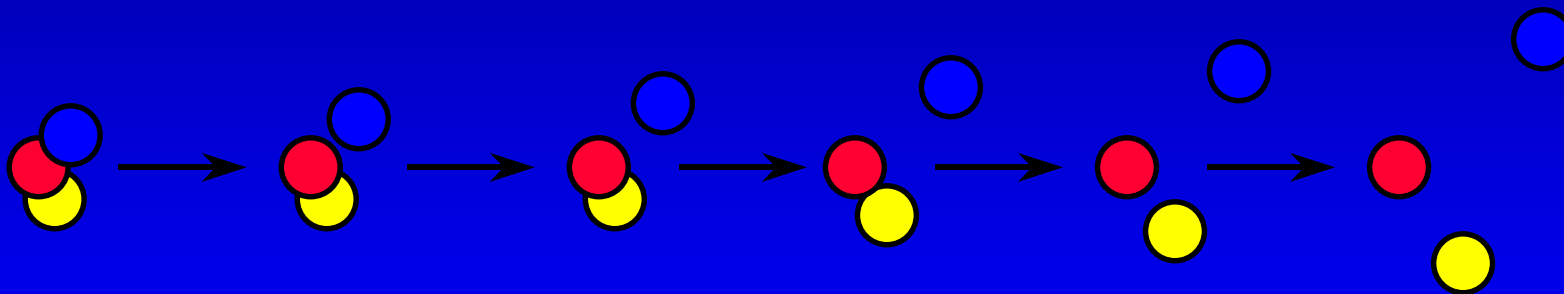
Links: Lageenergie bei strecken und brechen beider Bindungen
Rechts: Lageenergie, wenn eine Bindung nach der anderen bricht

Einführung

- | Speziell ausgewählte Zustände werden durch Photonen angeregt (Pump-Puls)
- | Dadurch werden die zu untersuchenden Prozesse gestartet
- | Nach einer bestimmten Zeit wird mit einem zweiten Photon der momentane Zustand abgefragt (Probe-Puls)

Einführung

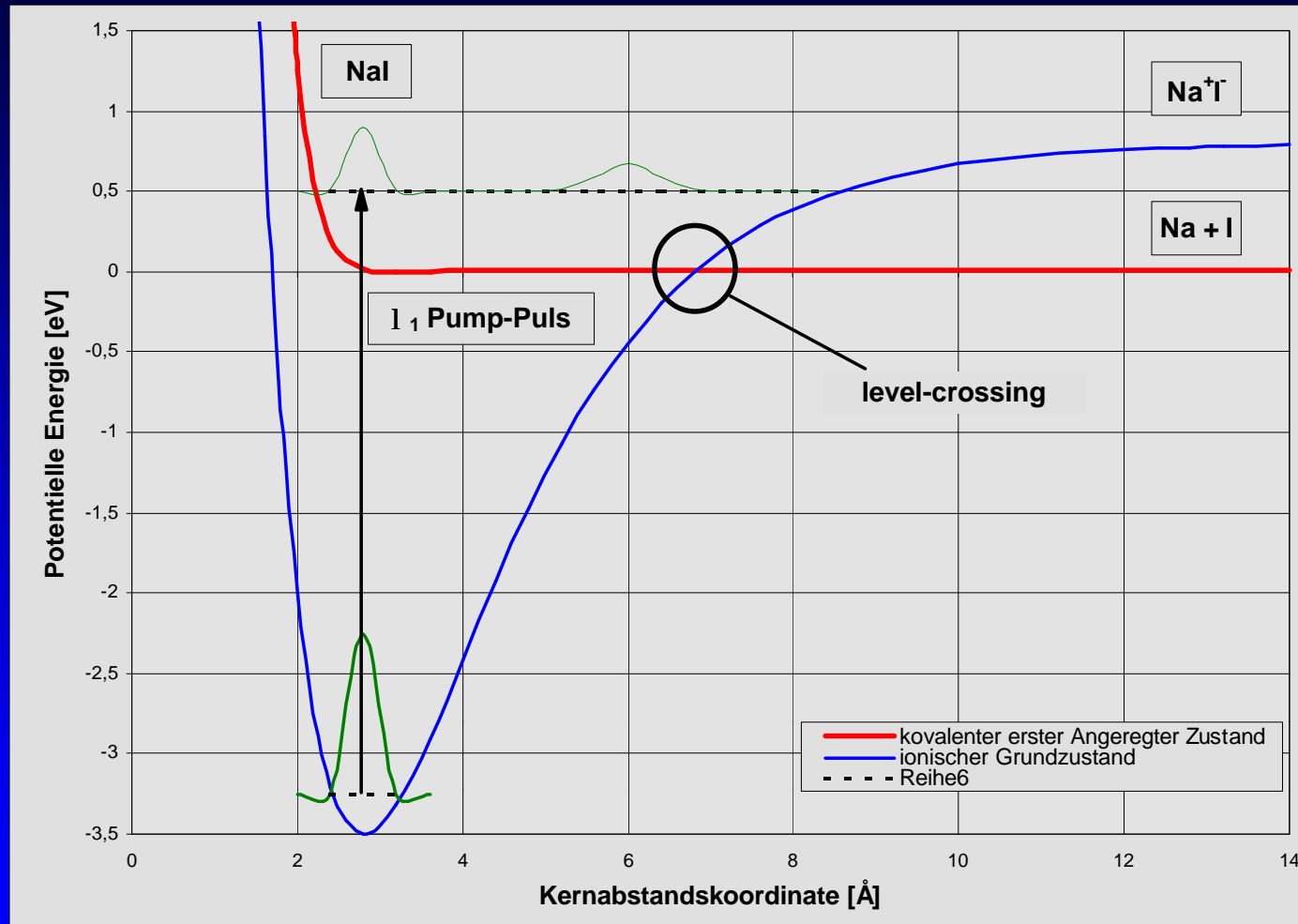
- | Durch die Variierung der Verzögerungszeit entsteht so ein "Film" der Reaktion



Ultraschnelle Prozesse in der Femtochemie

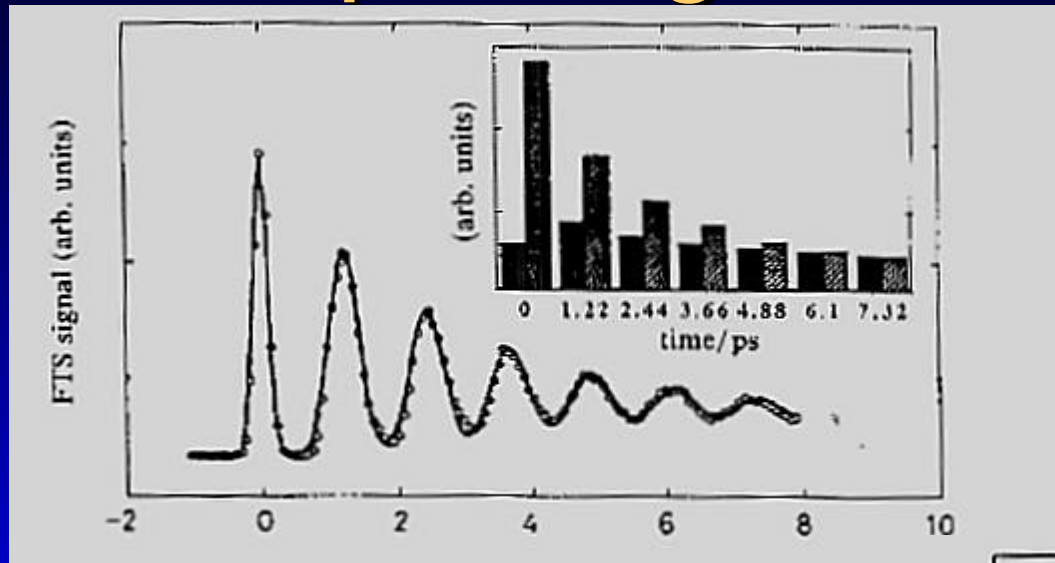
- | Spaltung von Natriumjodid (Zewail et al.)
- | Photoinduzierte Harpunreaktion in Ba...FCH₃ (Radloff und Mitarbeiter)
- | Isomerisierungsreaktionen (Zewail et al.)

Spaltung von Natriumjodid



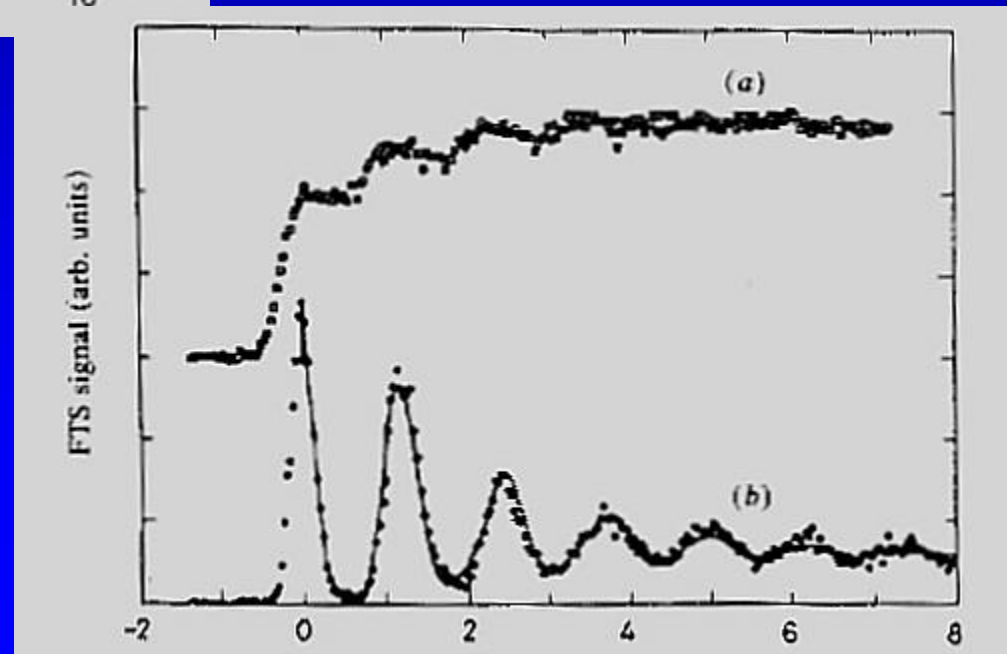
Molekülschwingungen von NaI

Spaltung von Natriumjodid

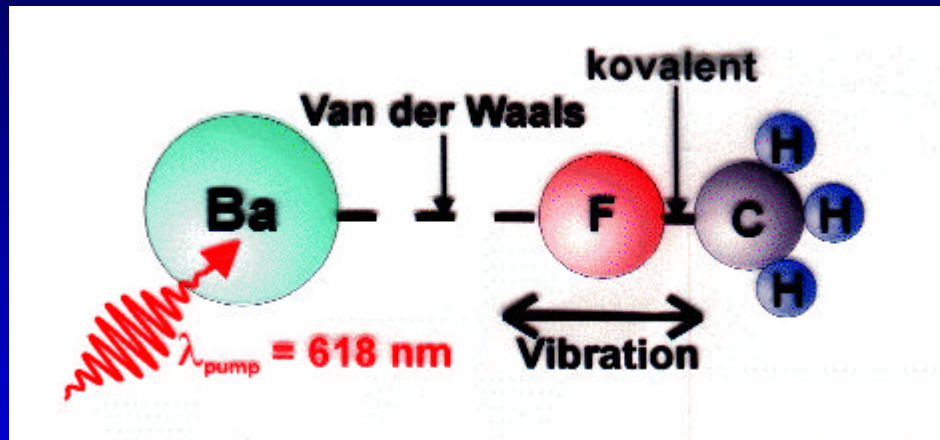


Detektion des aktivierten Komplexes im Übergangszustand

Detektion der freien Fragmente (a) und des aktivierten Komplexes (b)

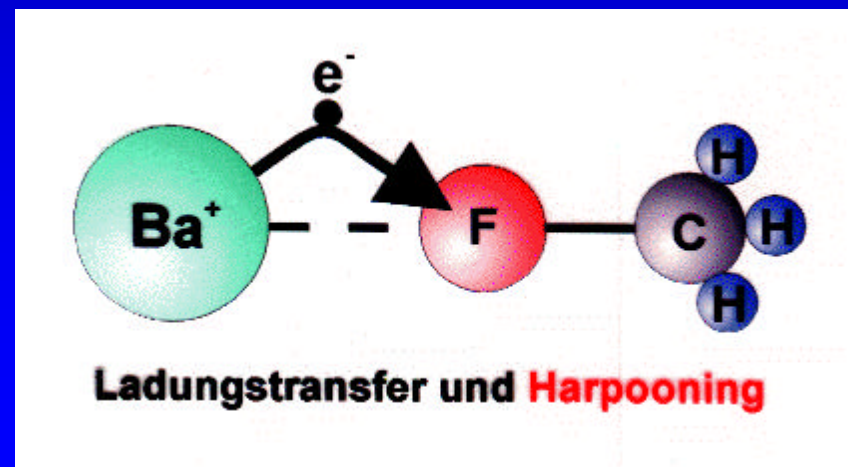


Photoinduzierte Harpunreaktion in Ba...FCH₃

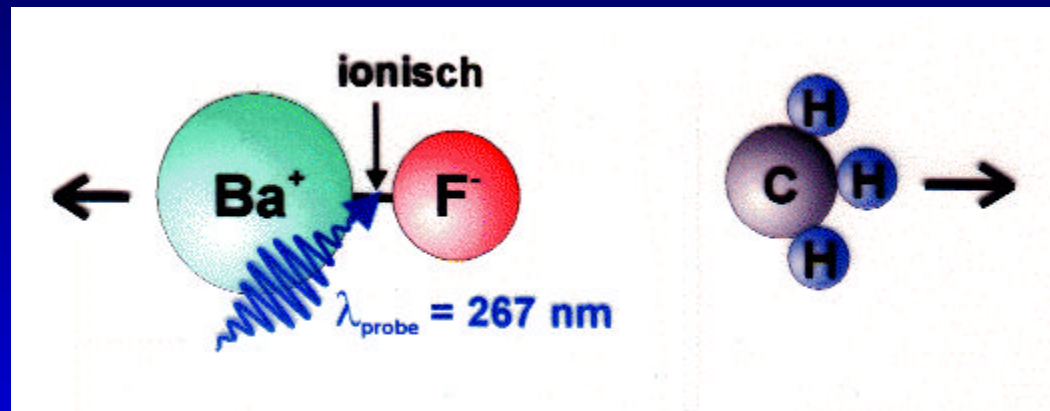


Präparation über Van der Waals Bindung und Anregung mit dem Pump Laserpuls

Das Barium "fängt" mit seinem angeregte Elektron das Fluor ein

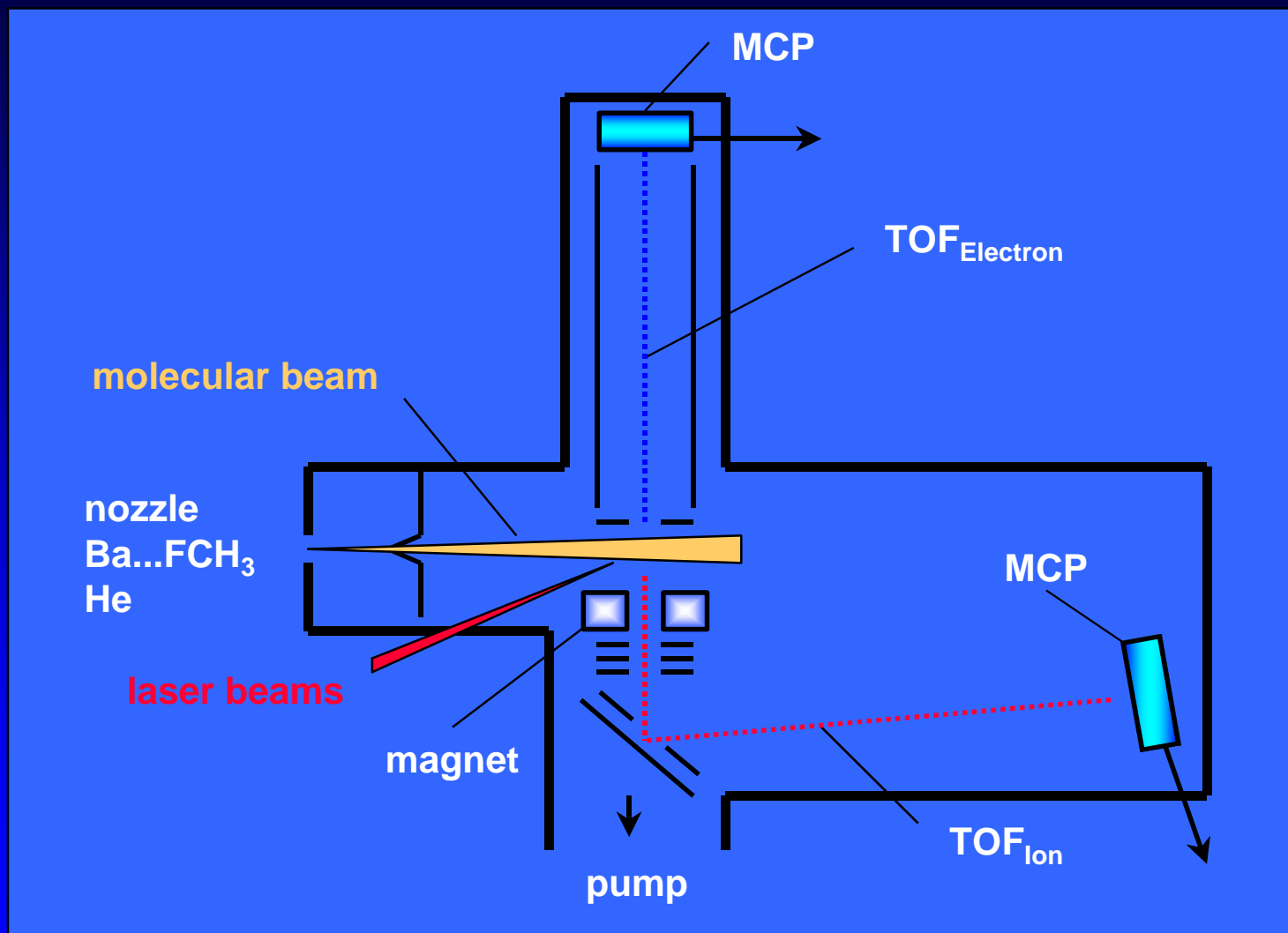


Photoinduzierte Harpunreaktion in Ba...FCH₃

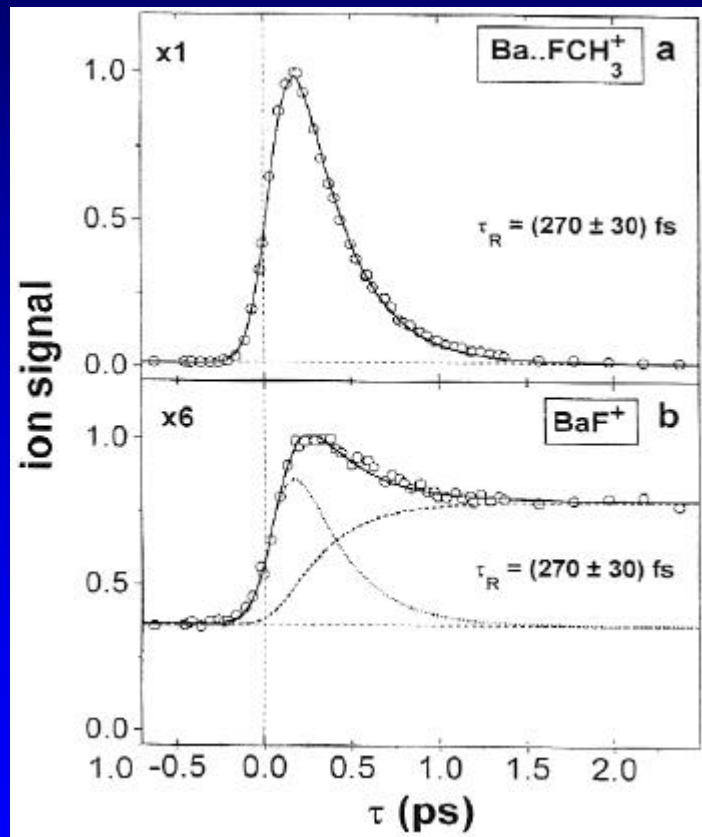


Schliesslich löst sich die Bindung zum Kohlenstoff und es entsteht Bariumfluorid. Dieses lässt sich mit dem Probe Laserpuls detektieren

Experimenteller Aufbau



Photoinduzierte Harpunreaktion in Ba...FCH₃



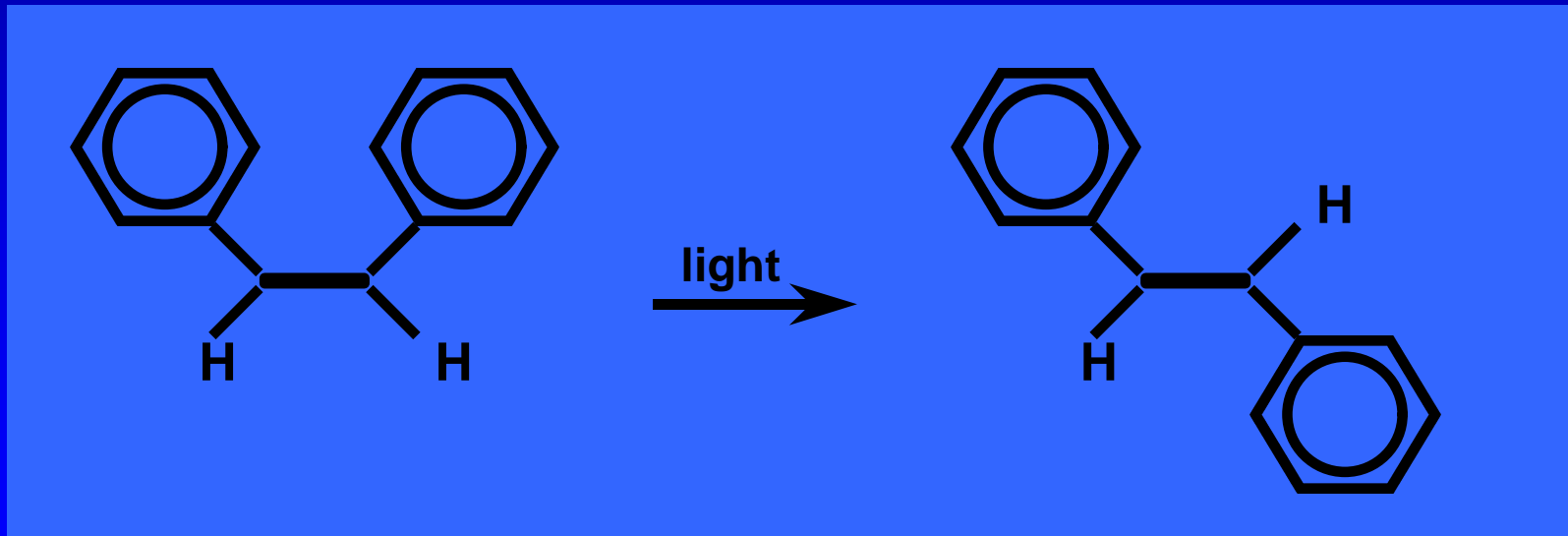
Zeitlicher Verlauf der Reaktion:
Oben die Edukte und unten das
Produkt. Man erkennt, daß
beide Vorgänge mit derselben
Zeitkonstanten ablaufen.

Isomerisierung in Stilben

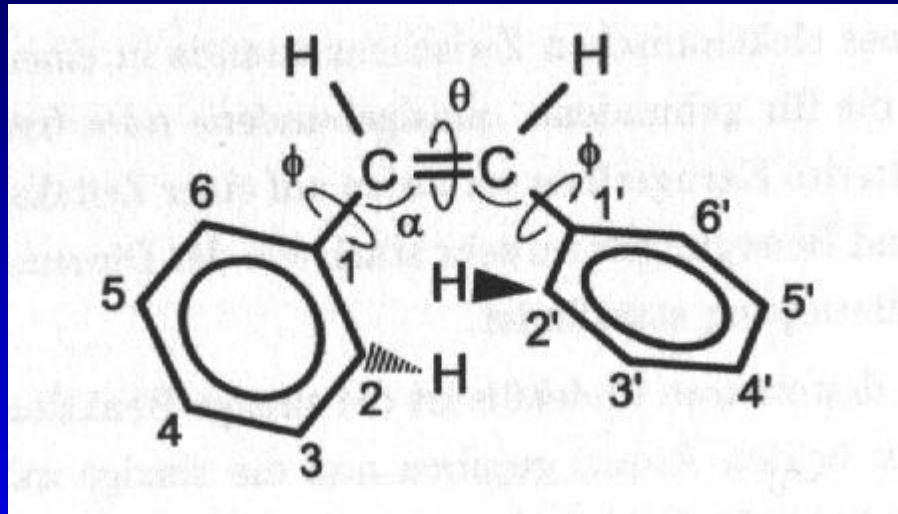
Durch Anregung mit Licht wird die Isomerisierung eingeleitet

cis - Stilben

trans - Stilben



Isomerisierung in Stilben

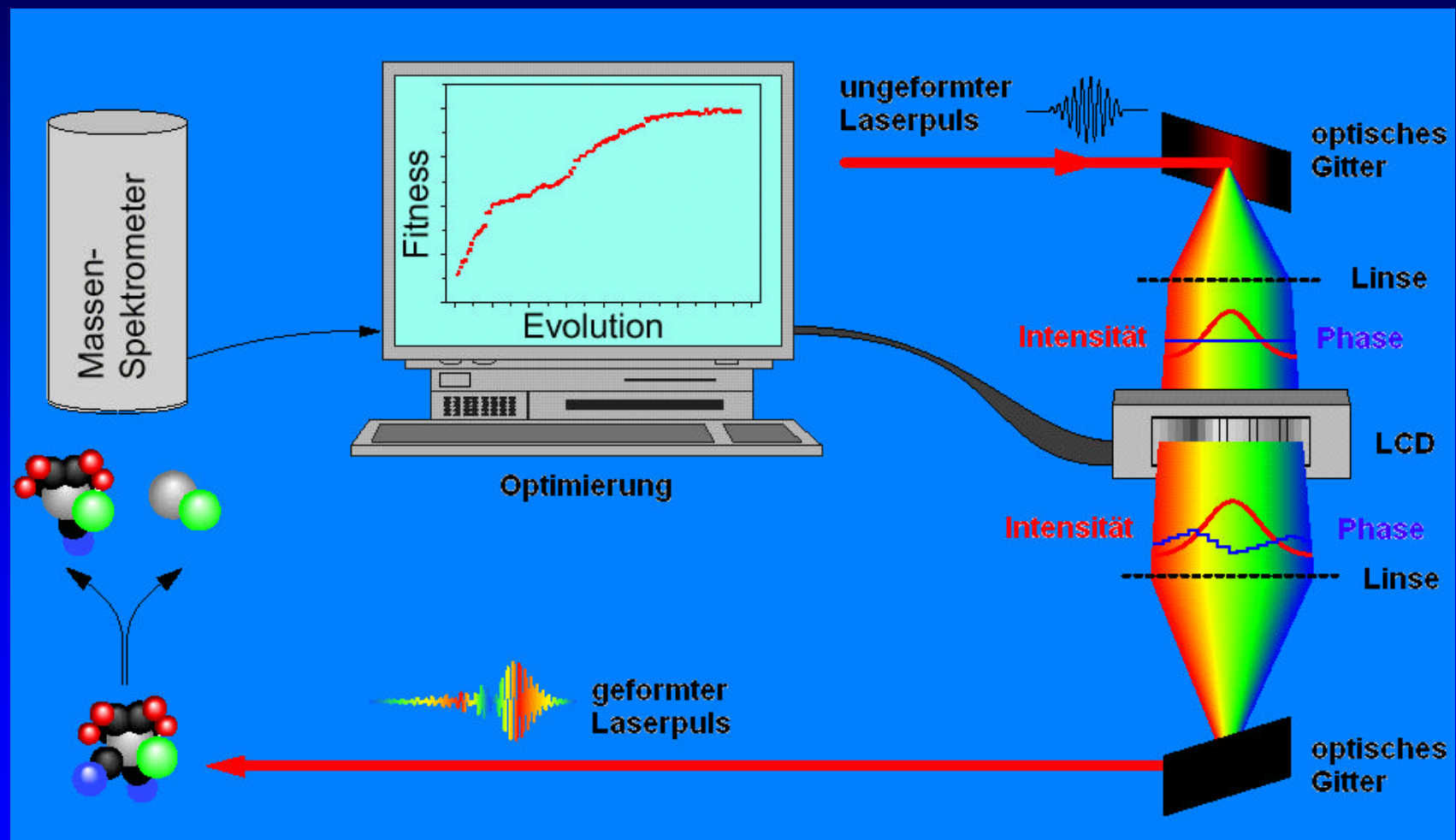


Torsionswinkel im (cis-) Stilben. Die Isomerisierungsreaktion erfolgt durch Torsion der Doppelbindung des Ethens (Winkel θ)

Steuerung photochemischer Prozesse

- | Steuerung photochemischer Prozesse:
 - Phasenkontrolle (Brumer und Shapiro)
 - Zeitkontrolle (Tanner, Kosloff und Rice)
 - STIRAP-Kontrolle (Bergmann et al.)
 - optimale Kontrolltheorie (Kosloff et al.)
 - adaptive Pulsformung (Rabitz und Mitarbeiter)

Steuerung photochemischer Prozesse



Zusammenfassung und Ausblicke

- | Femtosekundenspektroskopie hat unsere Sicht auf chemische Reaktionen grundlegend geändert
- | Heute sind wir in der Lage, die Bewegungen der einzelnen Atome in Echtzeit zu verfolgen
- | Das ist auch der Grund für die explosive Entwicklung auf diesem Forschungsgebiet

Zusammenfassung und Ausblicke

- | Langfristig besteht die Möglichkeit zur Herstellung einer Prozesstechnik
- | Daraus folgt eventuell eine gezielte Produktion von neuen Arzneien oder Materialien
- | Mit der schnellsten Kamera der Welt in den Händen setzt nur die Phantasie Grenzen für neue Probleme, die es zu erforschen gilt

Literatur

- | Kiefer, B.: Femtochemie: Beobachtung und Steuerung molekularer Dynamik. Dissertation. Universität Würzburg 2000.
- | Brixner, T. und G. Gerber: Laser-optimierte Femtochemie. In: Phys. Blätter 57 (2001) Nr.4. Weinheim 2001.
- | Bergt, M.: Photodissoziationsdynamik metallorganischer Moleküle. Dissertation. Universität Würzburg 1999.
- | Seyfried, V.: Beobachtung und Kontrolle molekularer Dynamik durch Femtosekundenlaserpulse. Dissertation. Universität Würzburg 1998.

Literatur

- | Bartelt, A.: Steuerung der Wellenpaketdynamik in kleinen Alkaliclustern mit optimierten Femtosekundenpulsen. Inauguraldissertation. Freie Universität Berlin 2002.
- | Frohnmeier, T.: Abbildung molekularer Dynamik mittels Femtosekunden-Photoelektronenspektroskopie. Dissertation. Universität Würzburg 2001.
- | Zewail, A. H.: Femtochemistry, Band I-II. Singapore 1994.
- | Radloff, W.: Ultrafast dynamics and energetics of the intrcluster harpooning reaction in Ba...FCH₃. In: Chemical Physics Letters.