

Längerfristige GästeTeilprojekt A8Dr. E. Cottancin, Toulouse, Frankreich

Sept. 97/Aug. 98

Herr Dr. E. Cottancin hat als Humboldt-Stipendiat aus dem Laboratoire de Spectrometrie Ionique et Moleculaire der Universität Lyon kommend einen einjährigen Forschungsaufenthalt in unserer Gruppe dazu genutzt, zeitaufgelöste Spektroskopie an Clustern in der Gasphase durchzuführen. Hierzu wurde das in unserer Gruppe entwickelte NeNePo-Verfahren eingesetzt, mit dem geometrische Veränderungen an Clustern nach photoinduzierter Umladung in Echtzeit beobachtet werden können. Außerdem hat er an einem Softlanding-Experiment von massenselektierten Silberclustern auf Graphitoberflächen teilgenommen, an denen daraufhin Zweiphotonen-Ionisationsspektroskopie-Experimente durchgeführt wurden.

Dr. O. Echt, New Hampshire, USA

Mai 97

Im Verlauf des Aufenthaltes von Herrn Dr. Echt wurden zeitaufgelöste Photonenionisationspektroskopie-Experimente an Fulleren (C_{60}) durchgeführt. Herr Echt verfügt über große Erfahrungen der experimentellen Untersuchung von C_{60} . Angesichts seines Besuches wurden diese Erfahrungen mit den Möglichkeiten kombiniert, die wir auf dem Gebiet der zeitaufgelösten Photoelektronenspektroskopie haben.

Prof. A. Nakajima, Jokohama, Japan

Juli 98/Sept. 98

Prof. Nakajima verbrachte drei Monate in unserem Labor, um Femtosekunden Pump-Probe-Experimente an gespeicherten Silberclusterionen durchzuführen. So sollte eine Vorstudie durchgeführt werden, um mit demselben methodischen Ansatz anorganische Komplexe mittels ultrakurzer Lichtpulse nicht nur zu untersuchen (Pump&Probe), sondern auch chemisch zu verändern (Pump&Control).

Liana Daniela Socaciu, Craiova, Rumänien

Aug. 98/Dez. 98

Frau Socaciu hat im Verlauf der fünf Monate ihres Aufenthalts in unserem Labor eine Diplomarbeit durchgeführt, in deren Rahmen sie - betreut von Frau Busolt - Silberclusterionen mittels der Sputtermethode erzeugte, sie abkühlte, massenselektierte und sanft auf Oberflächen deponierte. Die so präparierten Proben untersuchte sie dann mit Mitteln der zeitaufgelösten Zweiphotonen-Photoelektronenspektroskopie.

Andreea-N. Spiridon, Bukarest, Rumänien

Sept. 98/Dez. 98

Frau Andreea Spiridon hat im Verlauf ihres Aufenthaltes innerhalb unserer Arbeitsgruppe an der Untersuchung des optischen Verhaltens levitierter Mikrotröpfchen teilgenommen, die in einer elektrodynamischen Paul-Falle gespeichert wurden. Dabei konnten sehr genaue Aussagen über die Größe, den Brechungsindex, das Gefrierverhalten, die Verdampfung und die Gasaufnahme dieser Teilchen getroffen werden.

Teilprojekt B3

Prof. K. Salikhov, Kazan, Rußland

Nov.- Dez. 1995/Okt. - Dez. 1997/Aug. und Nov. 1998

Nach der intensiven Kooperationsarbeit 92/93 als „Fellow“ am Wissenschaftskolleg Berlin bestand mit diesen Aufenthalten die Möglichkeit, die Mitarbeit in zahlreichen Vorhaben des Teilprojektes fortzusetzen und auszubauen. Projekte zur Spinpaardynamik und kohärenten Spinphänomenen in lichtangeregten korrelierten Radikalpaaren wurden abgeschlossen. Es wurde ein Programm zur Berechnung des Spinpolarisationsübertrages bei sequentiellen Elektronentransferschritten erarbeitet. Zuletzt wurde die theoretische Arbeit an dem vielversprechenden Konzept eines Beobachter Spins in Wechselwirkung mit einem transienten Radikalpaar aufgenommen.

Prof. Dr. A. Berg, Jerusalem, Israel

Jan. 1996 – Febr. 1996 und Sept./Okt. 1997

Bei diesen Aufenthalten wurden Experimente zur Charakterisierung von elektrostatisch gebundenen Porphyrindimeren durchgeführt sowie die wirksamen Spinpolarisationsmechanismen erarbeitet.

Dr. S. Dvinskikh, St. Petersburg, Rußland

Nov./Dez. 1996

Aufbau eines Probenkopfes für Messungen der ^1H -stimulierten Kernspin-Polarisation bei 300 MHz Pumpfrequenz der Elektronenspinübergänge. Testmessungen und erste zeitauflösende Experimente an Zykloketonen mit gepulstem Laser.

Dr. R. Groseanu, Bukarest, Rumänien

Sept. – Dez. 1996

Vergleich der Beweglichkeit der Fluor-Anionen in CeF_3 und LaF_3 mit Tysonit-Struktur. Analyse der starken paramagnetischen Verschiebung der Spektrallinien im ^{19}F NMR-Spektrum des CeF_3 , die die Auflösung von drei F^- -Untergittern ermöglicht, wobei die Inäquivalenz von F_2 und F_3 bei Temperaturerhöhung verschwindet. Aus dem spektralen Austausch Bestimmung der Heterogenität der Ionenbewegung in beiden Kristallsystemen.

Dr. S. Dvinskikh, St. Petersburg, Rußland

Mai – Sept. 1997

Apparative Entwicklungen und Messungen zur Zeitauflösung von optischer Spinpolarisation in Biradikalsystemen. Im Rahmen dieses Gastaufenthalts wurden erste ^{13}C -SNP-Experimente im Niederfeld durchgeführt und mit ^1H -Ergebnissen verglichen.

Y. Kandrashkin, Kazan, Rußland

Jan./Okt. 1997 und Nov. 1998

Theoretische Behandlung des sequentiellen Elektronentransfers in photosynthetischen Reaktionszentren, insbesondere Entwicklung der Spinpolarisation in den gekoppelten Radikalionen-Paaren von Donor (P) und Akzeptor (A) beim Elektronentransfer $\text{P}^+\text{A}_1^-\text{A}_2^- \rightarrow \text{P}^+\text{A}_1\text{A}_2^-$. Erstellung eines Programms zur Projektion der jeweiligen Spinzustände aufeinander bzw. zur Behandlung der Gesamtspindynamik.

Prof. Dr H. Manikowski, Poznan, Polen

Sept./Okt. 1997

Untersuchungen an Triplettzuständen des primären Donators in photosynthetischen Reaktionszentren

Dr. Motoko Asano-Someda, Tokio, Japan

Febr. 97 – April 97 und Jan. 98 – März 98

Energietransfer in kovalent gebundenen Porphyrin-Dimeren

Dr. A. Yurkovskaya, Novosibirsk, Rußland

Sept. 1997 – Mai 1999

CIDNP Experimente bei variablem Magnetfeld zur Untersuchung mehrstufiger Reaktionen mit kurzlebigen Biradikal-Zwischenstufen. Analyse der Reaktionszweige und deren Kinetik. Rechnungen zum Einfluß der Wechselwirkung mit dem Reaktionsmedium und der intramolekularen Dynamik auf Relaxation und Polarisierungseffizienz. Zeitaufgelöste Hochfeld-CIDNP zur Evolution der Spinpolarisation nach T_0 -S Intersystem Crossing.

Prof. I. Y. Chan, Brandeis Univ., N.H., USA

Mai – Aug. 1998

Basierend auf gemeinsamer Vorarbeit /CWS 94/ wurde ein Vorhaben zur genaueren Charakterisierung der reaktionsfördernden Gitter- und Molekül-Schwingungsmoden einer H-Transfer Photoreaktion realisiert. Hierzu wurde die Druckabhängigkeit der Schwingungsmoden zwischen $80 \dots 4000 \text{ cm}^{-1}$ mittels Ramanspektroskopie vermessen. Hierzu konnte auf die apparative Ausrüstung von B7 (Quitmann) zurückgegriffen werden und im Gegenzug Drucktechnologie im Sfb etabliert werden. Die Druckabhängigkeit des Isotopeneffektes der H-Transfer Reaktion wurde ebenso DDwie die der Fluoreszenzlebensdauer in J-Aggregaten untersucht und veröffentlicht.

Dr. S. Dvinskikh, St. Petersburg, Rußland

ab Nov. 1998

Experimente zur Dispersion der Spin-Gitter-Relaxation in kristallinen Superionenleitern bei Variation von Temperatur und Dotierung. Erweiterung des Temperaturbereichs bei CIDNP/SNP-Messungen auf $180 \text{ K} < T < 450 \text{ K}$. Untersuchungen zum Wechselspiel von Spin- und Moleküldynamik bei mehrstufigen Photoreaktionen in Abhängigkeit von Temperatur und Lösungsmittelviskosität.

R. Galeev, Kazan, Rußland

August 1998

Programmentwicklung zur Dynamik der transienten Dreispinwechselwirkung

Dr. F. Gubaidullin, Kazan, Rußland

Aug. und Okt. 1998

Mitarbeit bei der Entwicklung eines MAS-Probenkopfes mit optischer Einstrahlung zur Verbesserung der spektralen Auflösung bei CIDNP/SNP-Experimenten an Makromolekülen. Bau einer aktiven Magnetfeldabschirmung zur Vermeidung von Feldverzerrungen und Schalttransienten bei schneller Feldzyklisierung.

Dr. Olga Morozova, Novosibirsk, Rußland

Febr./März 1998 und Aug. 1998

Programmentwicklung zur numerischen Analyse von dynamischer Kernspin-Polarisation bei Biradikal-Reaktionen. Erweiterung des Reaktionsmodells um Variabilität der Rekombinationsraten bei niedrigen Temperaturen. CIDNP-Messungen im Hoch- und Niederfeld zur Wechselwirkung von Aminosäuren mit Farbstoffmolekülen.

Dr. Y. Tsentalovich, Novosibirsk, Rußland

Juni/Juli 1998

Gepulste und stationäre CIDNP-Untersuchungen im Hochfeld zur Wechselwirkung von Flavin und Bipyridin mit Histidin, Tyrosin und Tryptophan. Vergleich mit Lysozym. Verbesserung der spektralen Auflösung beim hochauflösenden NMR-Nachweis.

Teilprojekt C3

M. Bienati

Jan. bis Febr. 96

Theoretische Unterstützung der Experimente an $\text{Ni}_m^+(\text{CO})_n$ Clustern die in dem AK Prof. L. Wöste durchgeführt werden

Prof. Dr. P. Fantucci, Universita di Milano

Dez- 95 und März 96

Weiterentwicklung der theoretischen Methoden der Moleküldynamik

Dr. A. Heidenreich, Tel Aviv University

Nov. 96 bis März 97

Zusammenarbeit zur Klärung von Ultrakurzzeit-Experimenten (NeNePo) am Silbercluster im
AK Prof. Wöste

Dr. M.F. Guest, SERC Daresbury Laboratory, Warrington

Dez. 96

Die Entwicklung der Programm-Pakete für die Beschreibung der angeregten elektronischen
Zustände

Dr. M. Boiron, Univerisite Claude Bernard, Lyon

Sept. 97 bis Sept. 98

Theoretical Study of Structural, optical and dynamical properties of metal-oxide clusters

Dr. J. Pittner, Akademy of Sciences of the Czech Republic, Prag

Febr. / März 98; Aug. bis Okt. 98

Weiterentwicklung der Theorie zur Ultrakurzzeit-Spektroskopie

Prof. Dr. Joshua Jortner, Tel Aviv University

Juni 98

Zusammenarbeit an der Theorie zur Pump-Dump fs-Spektroskopie

Dr. H. van Dam, Humboldt-Universität, Berlin

Juni /Juli 98

Arbeitsaufenthalt zur Erweiterung der Computer Programme für die Dynamik in angeregten
elektronischen Zuständen