

# AK Asmis

## Struktur, Reaktivität und Dynamik isolierter Cluster und Nanopartikel



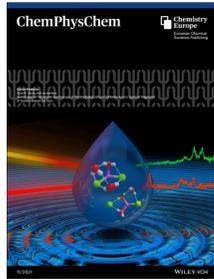
UNIVERSITÄT  
LEIPZIG



Wilhelm-Ostwald-Institut  
für Physikalische und Theoretische Chemie

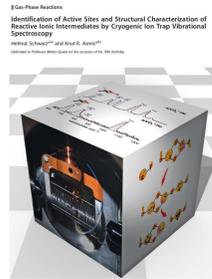
### Warum forschen wir an nanoskaligen Teilchen?

Ziel unserer Forschung ist die Überbrückung der Wissenslücke zwischen isolierten nanoskaligen Teilchen in der Gasphase und kondensierter, heterogener Materie. Dazu entwickeln wir neue Methoden zur Charakterisierung der Struktur, Reaktivität und Dynamik isolierter Cluster und Nanopartikel in der Gasphase unter Verwendung modernster massenspektrometrischer und laserspektroskopischer Techniken.



#### Anwendungsgebiete

- Reaktionsintermediate
- Heterogene Katalyse
- Ionensolvatation
- Wasserstoffbrücken
- Atmosphärenchemie
- Aerosolbildung/Nukleation
- Kernquanteneffekte



#### Methoden

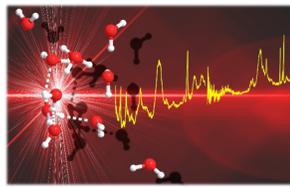
- kryogene Ionenfallen
- Photodissoziation
- Freier-Elektronen-Laser (Berlin)
- Femtosekunden-Spektroskopie
- Einzel-Nanopartikel-MS



Besuch der Weinberge in Essenheim (Sep. 2021).

### Welche Struktur haben die Cluster?

Gasphasencluster stellen eine intermediäre Form der Materie dar, welche sich durch ihre größenabhängigen, einzigartigen und nicht-skalierbaren Eigenschaften auszeichnet. Im Gegensatz zu größeren Aggregaten können diese mit präzisen quantenmechanischen Rechenverfahren behandelt werden und eignen sich deswegen insbesondere als Modellsysteme, um komplexe physikochemische Prozesse, wie z. B. Nukleation, Solvatation oder Katalyse, zu verstehen. Zur Charakterisierung der Cluster kommen moderne massenspektrometrische und laserspektroskopische Methoden zum Einsatz, insbesondere die von uns ständig weiterentwickelte Methode der Infrarot-Photodissoziationsspektroskopie (IRPD-Spektroskopie).



Photodissoziation eines Wasserclusters.

#### Forschungsschwerpunkte

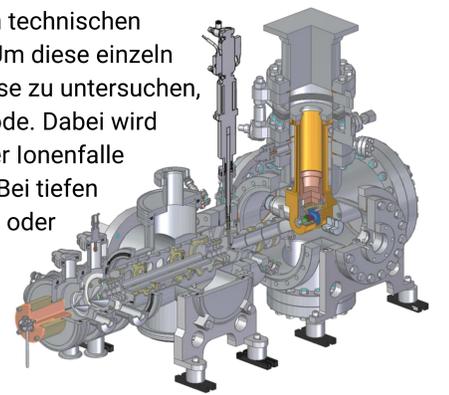
- Metall- und Metalloxydcluster als Modellsysteme für heterogene Katalysatoren
- Mikrohydratisierung
- Isotopeneffekte
- Borhaltige Cluster (z. B. elektrophile Anionen)
- Reaktionsintermediate und -mechanismen



Schematische Darstellung des maßgeschneiderten Massenspektrometers mit integrierter, auf 6 K kühlbarer Ionenfalle zur Messung der IRPD-Spektren.

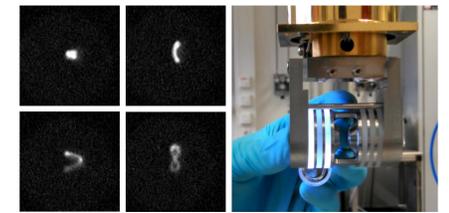
### Wieso charakterisieren wir einzelne NPs?

Nanopartikel spielen in unserer Umwelt sowie in technischen Anwendungen eine zunehmend zentrale Rolle. Um diese einzeln und unabhängig von störenden Einflüssen präzise zu untersuchen, entwickeln wir im AK eine neuartige Messmethode. Dabei wird die Masse eines einzelnen Nanopartikels in einer Ionenfalle mittels Lichtstreuung kontinuierlich gemessen. Bei tiefen Temperaturen werden Edelgasatome adsorbiert oder durch Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung desorbiert. Die daraus resultierende Massenänderung erlaubt indirekt Rückschlüsse auf die Oberflächenbeschaffenheit des Nanopartikels.



#### Forschungsschwerpunkte

- Spektroskopie an einzelnen Nanopartikeln
- UV/Vis- und IR-Spektroskopie
- Bestimmung von Adsorptionsenergien
- Aufklärung größenabhängiger Effekte im Größenbereich von 5 bis 100 nm



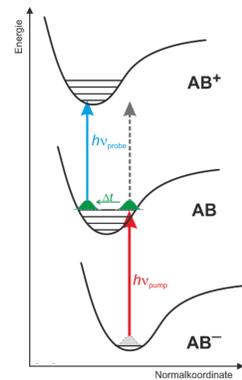
Schnitt durch das Einzel-Nanopartikel-Massenspektrometer (oben), charakteristische Schwingungen des Teilchens (links) und Aufnahme der maßgeschneiderten Ionenfalle (rechts).

### Wie untersuchen wir die Clusterdynamik?

Mittels der Infrarot-Photodissoziationsspektroskopie kann man vor allem Rückschlüsse auf die geometrische Struktur der Cluster ziehen. Um die Kerndynamik und die elektronische Struktur der Cluster untersuchen zu können, werden zeitliche deutlich kürzere Laserpulse benötigt. Wir verwenden einen Femtosekunden-Laser, um Anionen mittels zweier Laserpulse erst zu neutralisieren und dann zu kationisieren. Variieren wir die Zeit zwischen diesen beiden Ladungsübergängen, können wir die Dynamik der Atome im Cluster direkt beobachten.



Blick ins Innere des Femtosekunden-Lasers.



Pump-Probe-Anregungsschema.

#### Forschungsschwerpunkte

- Homo- und heterogene (Halb-)Metallcluster
- Charakterisierung von Energieumverteilungsprozessen
- Beschreibung nicht-adiabatischer Effekte
- Kernquanteneffekte
- Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie mittels VMI-Detektor

### Was machen wir sonst noch so?



Besuch der Arbeitsgruppen von Roland Wester, Paul Scheier und Martin K. Beyer in Innsbruck (Aug. 2022).



Besuch der Weinberge in Essenheim (Sep. 2021).

#### Konferenzen

- Gordon Research Conferences
- Clustertreffen
- Bunsentagung
- DPG

#### Auszeichnungen

- DPG-Posterpreis für Francine Horn (2022)
- DGMS-Dissertationspreis Tim Esser (2019)



Kanutour auf dem Karl-Heine-Kanal (Jul. 2022).

### Ausgewählte Publikationen



Mayer and Asmis, *J. Phys. Chem. A* **125**, 2801 (2021)  
*Online Monitoring of Isomeric Reaction Intermediates*



Hoffmann, Esser, Abel, Asmis, *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 6051 (2020)  
*Electronic Action Spectroscopy on Single Nanoparticles in the Gas Phase*



Schwarz and Asmis, *Chem. Eur. J.* **25**, 2112 (2019)  
*Identification of Active Sites and Structural Characterization of Reactive Ionic Intermediates by Cryogenic Ion Trap Vibrational Spectroscopy*



Wolke, Fournier, Dzugan, Fagiani, Odbadrakh, Knorke, Jordan, McCoy, Asmis, Johnson, *Science* **354**, 1131 (2016)  
*Spectroscopic Snapshots of the proton Transfer Mechanism in Water*

### Kooperationspartner

- Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin
- Leibniz-Institut IOM, Leipzig
- University of California, Berkeley (US)
- Yale University, New Haven (US)
- Humboldt-Universität zu Berlin
- Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf
- University of Utah, Salt Lake City (US)
- Chinese Academy of Sciences, Beijing (CN)

### Kontaktaufnahme

**M.Sc. Sophia Leippe**  
Raum TA 422  
Sophia.Leppe@uni-leipzig.de



AK Asmis - Stellenangebote