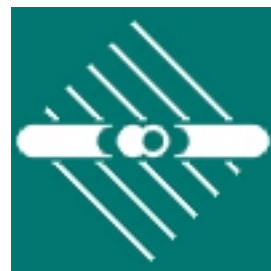


**Press release****Max-Planck-Institut für Kernphysik****Dr. Bernold Feuerstein**

11/22/2023

<http://idw-online.de/en/news824416>Research results, Scientific Publications  
Physics / astronomy  
transregional, national**Sauerstoff-Zerfall zeitaufgelöst mit erstmaliger Kombination von extrem-ultravioletten Lichtquellen**

**Forschenden ist es erstmals gelungen, ein Sauerstoff-Molekül durch eine Kombination zweier extrem-ultravioletter Lichtquellen selektiv anzuregen, damit einen Zerfall des Moleküls herbeizuführen und dies sogar zeitlich zu verfolgen. Das ist ein weiterer Schritt zu einer spezifischen quantenmechanischen Kontrolle von chemischen Reaktionen, die in Zukunft neue, bisher unbekannte Reaktionskanäle ermöglichen könnte.**

Die Interaktion von Licht mit Materie, insbesondere mit Molekülen, spielt in vielen Bereichen der Natur eine wichtige Rolle, so etwa in biologischen Prozessen wie der Photosynthese. Zudem wird sie in Technologien wie Solarzellen genutzt. Auf der Erdoberfläche handelt es sich dabei meistens um sichtbares, ultraviolettes oder infrarotes Licht. Extrem-ultraviolettes (XUV) Licht, also Strahlung mit deutlich mehr Energie als sichtbares Licht, wird von der Atmosphäre absorbiert und erreicht die Erdoberfläche daher nicht. Aber diese XUV-Strahlung kann im Labor dazu genutzt werden, ganz gezielt die Anregung von Elektronen in Molekülen zu ermöglichen. Während in einem Molekül die einzelnen Atome durch ihre äußersten Elektronen in einer Art negativ geladenen Wolke zusammengehalten werden (sie dienen quasi als „chemischer Kleber“), sind weiter innen liegende Elektronen näher an einem Atomkern gebunden und daher auch im Molekül stärker lokalisiert. Genau diese Elektronen können nun aber mit XUV-Strahlung ganz spezifisch angeregt werden. Dies ermöglicht neue chemische Reaktionsprozesse, die auf der Erdoberfläche natürlicherweise nicht vorkommen.

Eine Kollaboration von Forschenden der Gruppe um Christian Ott in der Abteilung Pfeifer am Max-Planck-Institut für Kernphysik ist es nun erstmalig gelungen, zwei unterschiedliche XUV-Lichtquellen zu kombinieren, um einen quantenmechanischen Zerfallsmechanismus in Sauerstoff-Molekülen zeitlich aufzulösen. Grundlage dafür sind einerseits der Prozess der Erzeugung hoher Harmonischer (high harmonic generation, HHG), bei dem infrarotes Licht, das durch eine Gaszelle gestrahlt wird, in XUV-Strahlung umgewandelt wird – u. a. bekannt durch den diesjährigen Nobelpreis für Physik. Zudem wird ein Freie-Elektronen-Laser (FEL) verwendet, bei dem beschleunigte Elektronen XUV-Licht abstrahlen. Beide Methoden erzeugen XUV-Lichtblitze mit einer Dauer von Femtosekunden, also dem Millionstel einer Milliardstel Sekunde.

Entscheidend dabei ist, dass die Spektren der beiden Laserpulse sehr unterschiedlich sind. „Die HHG-Pulse haben ein sehr breites Spektrum, d.h. sie bestehen aus Licht mit vielen verschiedenen Frequenzen – im sichtbaren Bereich könnte man dies als verschiedene Farben auffassen. Die FEL-Pulse dahingegen sind spektral deutlich eingeschränkt“, erklärt Doktorand und Erstautor der Studie Alexander Magunia. Die FEL-Pulse werden am Freie-Elektronen-Laser in Hamburg (FLASH@DESY) erzeugt und genutzt, um die Elektronen des Sauerstoffmoleküls in einen bestimmten Zustand anzuregen. Es ist bekannt, dass dieser anschließend über zwei verschiedene Kanäle das Molekül zum Zerfall bringen kann. Wie schnell dies passiert, war bisher aber noch umstritten. Die Atome im Sauerstoff-Molekül müssen nämlich einen „Quanten-Tunnel“-Prozess durchlaufen, was theoretische Beschreibungen erschwert. Durch die Hinzunahme des zweiten HHG-Pulses mit einstellbarer zeitlicher Verzögerung zum ersten, anregenden FEL Puls, kann nun dieser molekulare Zerfall experimentell aufgenommen werden – wie in einer schnellen Fotoreihe. Die HHG-Pulse erlauben es

nämlich, alle entstehenden Fragmente durch ihre spektralen Absorptions-Fingerabdrücke auf einmal zu „fotografieren“ – ein entscheidender Schritt. Je größer die zeitliche Verzögerung zwischen den beiden Pulsen, desto mehr Moleküle sind bereits zerfallen. Durch diese Zunahme an Fragmenten können schließlich die Zeitdauer des Prozesses sowie die jeweiligen Raten für die beiden Zerfallskanäle ermittelt werden.

Die Möglichkeit mit schmalbandigen FEL-Pulsen gezielte elektronische oder molekulare Prozesse einzuleiten und mit den breitbandigen HHG-Spektren unabhängig eine große Breite an quantenmechanischen Zustandsinformationen über das Molekül oder seine einzelnen Fragmente auszulesen, erlaubt es hoffentlich in Zukunft komplexere chemische Reaktionen mit Licht aufzunehmen, zu verstehen und schließlich auch zu steuern.

contact for scientific information:

Alexander Magunia  
MPI für Kernphysik  
Tel.: +496221 516-335  
E-Mail: alexander.magunia@mpi-hd.mpg.de

PD Dr. Christian Ott  
MPI für Kernphysik  
Tel.: +496221 516-577  
E-Mail: christian.ott@mpi-hd.mpg.de

Prof. Dr. Thomas Pfeifer  
MPI für Kernphysik  
Tel.: +496221 516-380  
E-Mail: thomas.pfeifer@mpi-hd.mpg.de

Original publication:

Time-resolving state-specific molecular dissociation with XUV broadband absorption spectroscopy  
A. Magunia, M. Rebholz, E. Appi, C. C. Papadopoulou, H. Lindenblatt, F. Trost, S. Meister, T. Ding, M. Straub, G. D. Borisova, J. Lee, R. Jin, A. von der Dellen, C. Kaiser, M. Braune, S. Düsterer, S. Ališauskas, T. Lang, C. Heyl, B. Manschwetus, S. Grunewald, U. Frühling, A. Tajalli, A. Bin Wahid, L. Silletti, F. Calegari, P. Mosel, U. Morgner, M. Kovacev, U. Thumm, I. Hart, R. Treusch, R. Moshhammer, C. Ott and T. Pfeifer  
Science Advances, 22 Nov 2023, DOI: 10.1126/sciadv.adk1482

URL for press release: <https://www.mpi-hd.mpg.de/mpi/de/forschung/abteilungen-und-gruppen/quantendynamik-und-kontrolle/forschung/angeregte-atomemolekuele-in-starken-feldern-ag-ott> Gruppe „Angeregte Atome und Moleküle in starken Feldern“ am MPIK

URL for press release: [https://www.desy.de/forschung/anlagen\\_projekte/flash/index\\_ger.html](https://www.desy.de/forschung/anlagen_projekte/flash/index_ger.html) Freie-Elektronen-Laser FLASH (DESY, Hamburg)

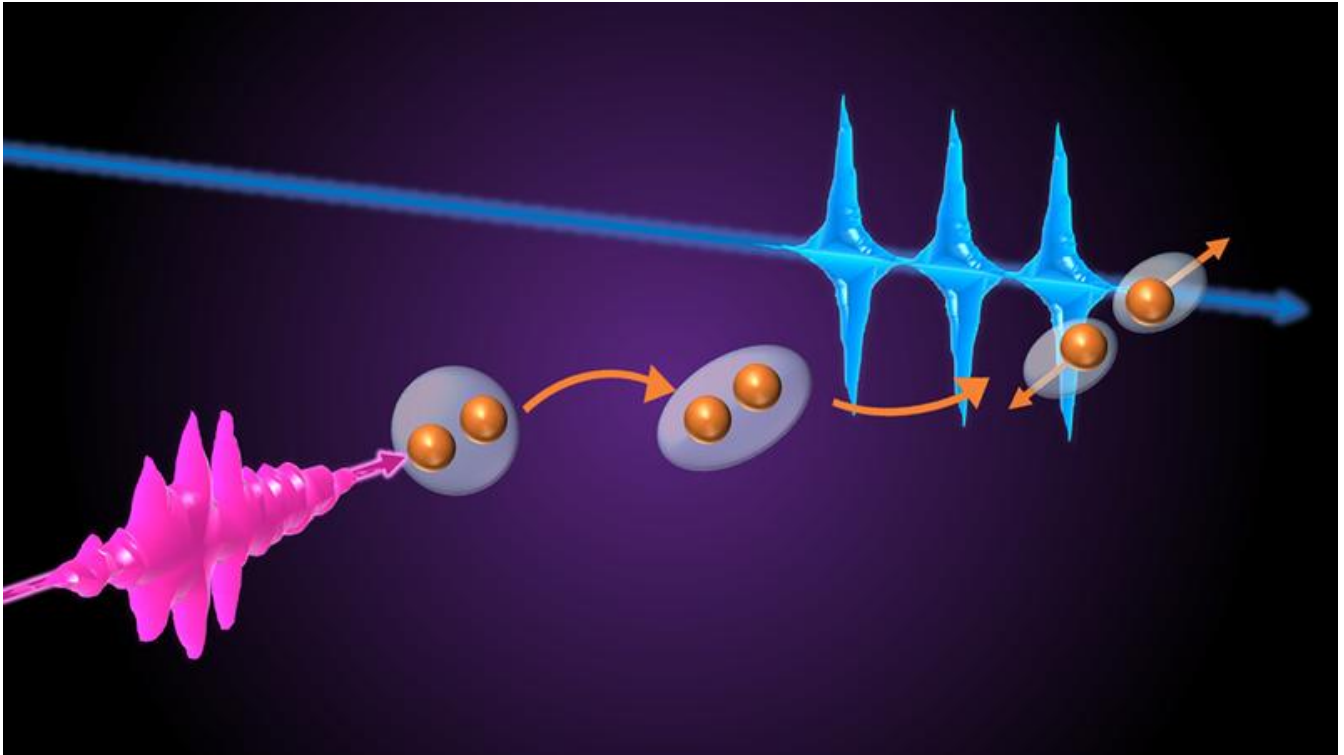


Abb. 1: Ein XUV-Laserpuls (pink) regt ein Sauerstoff-Molekül (orange) an, welches in verschiedene atomare Fragmente zerfällt, die von einem anderen XUV-Laserpuls (blau) „fotografiert“ werden.  
Grafik: MPI für Kernphysik