

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
2. Spincluster-Verbindungen	5
2.1 High-Spin-Cluster	5
2.2 Zyklische Eisencluster	10
3. Die numerische Analyse zyklischer Eisencluster	19
3.1 Zyklische Fe^{III} -Cluster	19
3.2 Die isotrope Heisenbergaustausch-Wechselwirkung	20
3.3 $\mathcal{H}$ mit anisotropen Wechselwirkungen	22
3.4 Die Simulation von ESR-Spektren	23
3.4.1 Einfluss eines statischen Magnetfelds - Zeemann-Aufspaltung	23
3.4.2 Effektive Hamilton-Operatoren	25
4. $\text{Fe}_6(\text{bicine})_6$	29
4.1 Kristallstruktur von $\text{Fe}_6(\text{bicine})_6$	29
4.2 Suszeptibilitätsmessungen	31
4.3 Elektronenspinresonanz	39
4.3.1 Experimenteller Befund bei 94 GHz	39
4.3.2 Analyse der Resonanzen zu $S=2$ und $S=3$	39
4.3.3 Analyse der mikroskopischen Wechselwirkungen	52
4.3.4 ESR bei 9.5 GHz	54
5. $\text{Fe}_6(\text{tea})_6$	59
5.1 Kristallstruktur von $\text{Fe}_6(\text{tea})_6$	59
5.2 Suszeptibilität von $\text{Fe}_6(\text{tea})_6$	61
5.3 ESR bei 9.5 GHz	62
5.4 ESR bei 94 GHz	65
5.5 Vergleich des Experiments mit der mikroskopischen Theorie	66
6. $\text{Na@Fe}_6(\text{tea})_6$	75
6.1 Kristallstruktur von $\text{Na@Fe}_6(\text{tea})_6$	75
6.2 Suszeptibilität von $\text{Na@Fe}_6(\text{tea})_6$	78

6.3	ESR bei 94 GHz	80
6.4	Vergleich von ESR-Analyse und kristallographischer Analyse . . .	104
6.5	ESR bei 9.5 GHz	106
7.	Diskussion	111
8.	Zusammenfassung	117
Anhang		121
A.	Zusammenstellung der verwendeten theoretischen Grundlagen	123
A.1	Wechselwirkungen	123
A.1.1	Die isotrope Heisenbergaustausch-Wechselwirkung	123
A.1.2	Die Ligandenfeld-Wechselwirkung	125
A.1.3	Die Dipol-Wechselwirkung	127
A.2	Beschreibung mit irreduzible Tensoroperatoren	128
A.2.1	Irreduzible Tensoroperatoren	128
A.2.2	Transformation der irreduziblen Tensoroperatoren unter Drehungen	130
A.2.3	Die Kopplung von Spins	132
A.2.4	Darstellung der Wechselwirkungen durch irreduzible Tensoroperatoren	134
A.2.5	Reduzierte Matricelemente von gekoppelten Tensoroperatoren	136
A.3	Die Symmetrie	138
A.3.1	Gruppentheoretische Grundlagen	138
A.3.2	Die Permutationssymmetrie	141
A.3.3	Berechnung der Matricelemente von $\mathcal{H}$	143
B.	Kopplungstabellen	145
B.1	Ligandenfeld-Wechselwirkung	145
B.2	Dipol-Wechselwirkung	146
C.	Berechnung des reduzierten Matricelements der Heisenbergaustausch Wechselwirkung	147
D.	Spektrometer	149
D.1	Das X-Band Spektrometer	149
D.2	Das W-Band Spektrometer	151
Literatur		155