

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abstract</b> .....	<b>i</b>
<b>Kurzfassung</b> .....	<b>i</b>
<b>Inhaltsverzeichnis</b> .....	<b>v</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b> .....	<b>vii</b>
<b>1 Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>2 Elektronenbeugung in der Gasphase (GED)</b> .....	<b>5</b>
2.1 Einführung in die Streutheorie .....	7
2.2 Streuung am Molekül .....	9
2.3 Anwendung der Streutheorie .....	10
2.4 Näherungen.....	11
<b>3 Das TIED-Experiment</b> .....	<b>15</b>
3.1 Das Vakuumsystem .....	17
3.2 Die Clusterquelle .....	17
3.3 Das Flugzeitmassenspektrometer .....	20
3.4 Der Massenfilter .....	21
3.5 Die Paulfalle .....	23
3.6 Durchführung des Beugungsexperiments.....	27
3.7 Datenanalyse.....	29
<b>4 Heuristik der Clusterstrukturfindung</b> .....	<b>35</b>
4.1 Dichtefunktionaltheorie .....	35
4.2 Genetischer Algorithmus (GA) .....	42
<b>5 Strukturen von Metallclusterionen</b> .....	<b>45</b>
5.1 Kleine Käfigstrukturen magnetisch dotierter Goldcluster ( $M@Au_n^-$ , $M = Fe, Co, Ni$ ; $n = 12-15$ ).....	45
5.2 Ladungsabhängige Strukturunterschiede von kleinen Bismutclustern.....	68
5.3 Palladiumcluster ( $Pd_n^{+/+}$ , $13 \leq n \leq 147$ ).....	91
5.4 Wasserstoffadsorptionseigenschaften von massenselektierten Palladiumclustern .....	128
5.5 3d-/4d-/5d-Übergangsmetallcluster aus 55 Atomen.....	152
5.6 Strukturelle Entwicklung später Übergangsmetallcluster (Co, Ni, Cu, Ag) .....	184

<b>6</b>	<b>Der Temperatureinfluss auf die Gleichgewichtsstruktur von Metallclusterionen .....</b>	<b>205</b>
6.1	Kupfercluster ( $\text{Cu}_n^-$ , $19 \leq n \leq 71$ ) .....	205
6.2	Thermisch induzierte Oberflächenrekonstruktion beinahe geschlossenschaliger Kupfercluster ( $\text{Cu}_{55 \pm x}^-$ , $x = 1-2$ ) .....	226
6.3	Aluminiumcluster ( $\text{Al}_n^-$ , $55 \leq n \leq 147$ ) .....	240
<b>7</b>	<b>Statistische Untersuchungen zur Datenanalyse .....</b>	<b>259</b>
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>273</b>
	<b>Anhang A: Beugungsdaten weiterer Metallclusterionen .....</b>	<b>279</b>
A.1	Entwicklung der Clusterstruktur verschiedener Elemente der Gruppe 14 (Si, Sn, Pb) .....	279
A.2	Schmelzen des Clusters $\text{Pb}_{55}^-$ .....	283
A.3	Der Zinncluster $\text{Sn}_{13}^{+ 379}$ .....	286
A.4	Strukturmotiv von Clustern des bcc-Elements Tantal .....	288
A.5	Thermisch induzierte Oberflächenrekonstruktion beinahe geschlossenschaliger Silbercluster ( $\text{Ag}_{55 \pm x}^-$ , $x = 1-2$ ) .....	290
A.6	Möglicher Strukturübergang bei Silberclusterionen ( $\text{Ag}_n^-$ , $n = 80-98$ ) .....	295
A.7	Reine Goldcluster größer 20 Atome .....	296
	<b>Anhang B: Apparative Entwicklung .....</b>	<b>305</b>
B.1	Erhöhung der Sensitivität .....	305
B.2	Designstudie zur Auflösungserhöhung des TOF-Instruments .....	306
	<b>Anhang C: Einfluss der Fallengeometrie auf große Streuwinkel .....</b>	<b>311</b>
	<b>Anhang D: CNA-Analyse des zehnatomigen Strukturenssembles .....</b>	<b>313</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis .....</b>	<b>321</b>
	<b>Tabellenverzeichnis .....</b>	<b>331</b>
	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>333</b>
	<b>Lebenslauf .....</b>	<b>xi</b>
	<b>Publikationsliste .....</b>	<b>xii</b>
	<b>Danksagung .....</b>	<b>xi</b>