

Inhaltsverzeichnis

Abstract.....	i
Kurzfassung.....	i
Inhaltsverzeichnis	v
Abkürzungsverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
2 Elektronenbeugung in der Gasphase (GED)	5
2.1 Einführung in die Streutheorie	7
2.2 Streuung am Molekül	9
2.3 Anwendung der Streutheorie	10
2.4 Näherungen.....	11
3 Das TIED-Experiment	15
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
4 Heuristik der Clusterstrukturfindung.....	35
4.1 Dichtefunktionaltheorie	35
4.2 Genetischer Algorithmus (GA)	42
5 Strukturen von Metallclusterionen.....	45
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 ≤ n ≤ 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

6	Der Temperatureinfluss auf die Gleichgewichtsstruktur von Metalclusterionen	205
6.1	Kupfercluster (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 (Al_n^- , $55 \leq n \leq 147$).....	240
7	Statistische Untersuchungen zur Datenanalyse	259
8	Zusammenfassung und Ausblick.....	273
Anhang A: Beugungsdaten weiterer Metalclusterionen.....		279
A.1	Entwicklung der Clusterstruktur verschiedener Elemente der Gruppe 14 (Si, Sn, Pb)	279
A.2	Schmelzen des Clusters 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 (Ag_n^- , $n = 80-98$)	295
A.7	Reine Goldcluster größer 20 Atome	296
Anhang B: Apparative Entwicklung		305
B.1	Erhöhung der Sensitivität.....	305
B.2	Designstudie zur Auflösungserhöhung des TOF-Instruments	306
Anhang C: Einfluss der Fallengeometrie auf große Streuwinkel		311
Anhang D: CNA-Analyse des zehnatomigen Strukturensembles.....		313
Abbildungsverzeichnis		321
Tabellenverzeichnis		331
Literaturverzeichnis.....		333
Lebenslauf.....		xi
Publikationsliste		xii
Danksagung.....		xi