

# Metallcluster

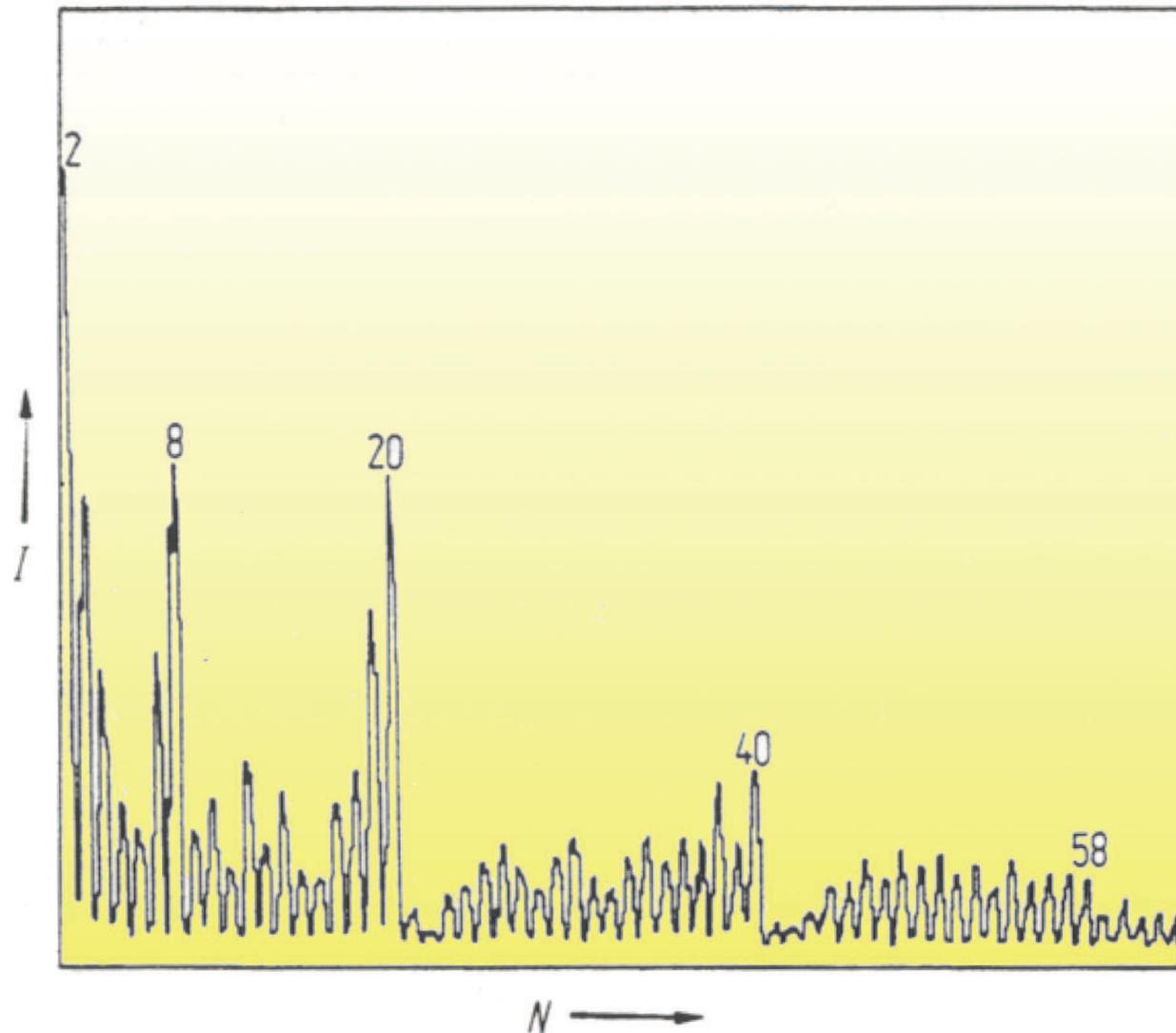
# Metallcluster

- Neben den Van-der-Waals Clustern stellen Metallcluster eine zweite Gruppe von elementaren, atomaren Clustern dar
- Wie der Name schon erahnen läßt spielt bei Metallclustern die metallische Bindung die entscheidene Rolle
- Wir werden zwei Gruppen von Metallclustern behandeln
  - Alkalicluster
  - Übergangsmetallcluster

# Alkalicluster

- Alkalicluster, also Cluster, die aus Alkalimetallatomen (Li, Na, K, Rb, Cs) bilden eine Gruppe von Clustern, die experimentell und theoretisch sehr häufig untersucht worden sind (und immer noch werden)
- Ursachen sind
  - Alkalicluster können relativ leicht experimentell hergestellt werden, da sie leicht verdampfbar sind und damit in Gasaggregationsquellen oder Düsenstrahlapparaturen clustern
  - Aufgrund der einfachen elektronischen Struktur des Atoms – einer Edelgaskonfiguration mit einem zusätzlichem Elektron – stellen sie ideale Modellsysteme für das freie Elektronenmodell dar
- Wir wollen zunächst die geometrische Struktur der Cluster betrachten und das Verhalten von Massenspektren verstehen

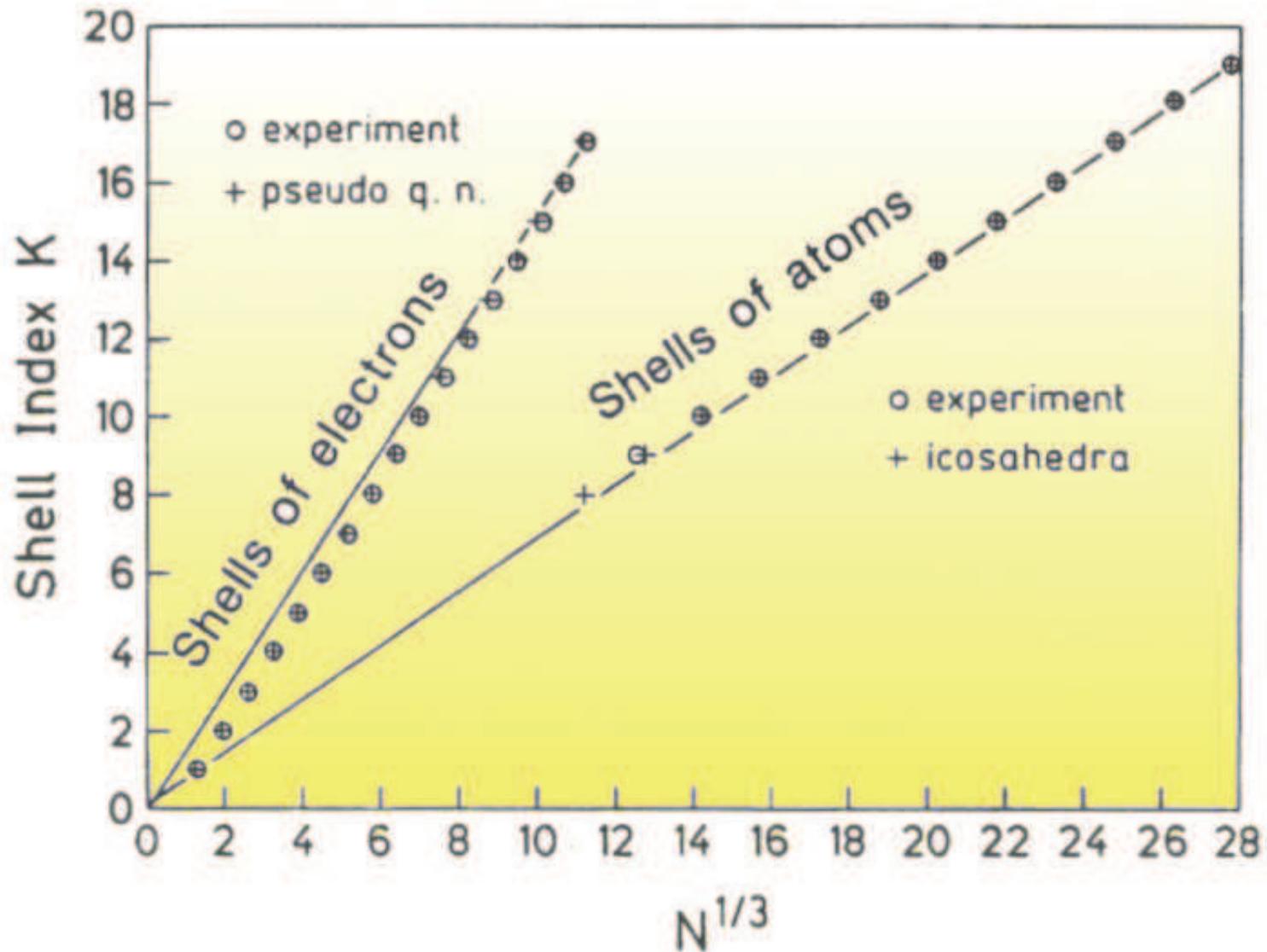
# Geometrische Struktur – Massenspektren $\text{Na}_n$



# Geometrische Struktur

- Das Na-Cluster Massenspektrum zeigt ein vollkommen anderes Verhalten, als das von Edelgas-Clustern
- Es gibt ausgeprägte Sprünge bei den Massenzahlen 2, 8, 20, 40 und 58 Atomen, die sich nicht mit geometrischen Schalenabschlüssen vereinbaren lassen
- Auch bei Alkaliclustern liegen ikosaedrische Strukturen vor, wie Rechnungen und Messungen bei größeren Clustern zeigen
- Was ist die Ursache für die abweichende Struktur bei kleinen Clustern ?

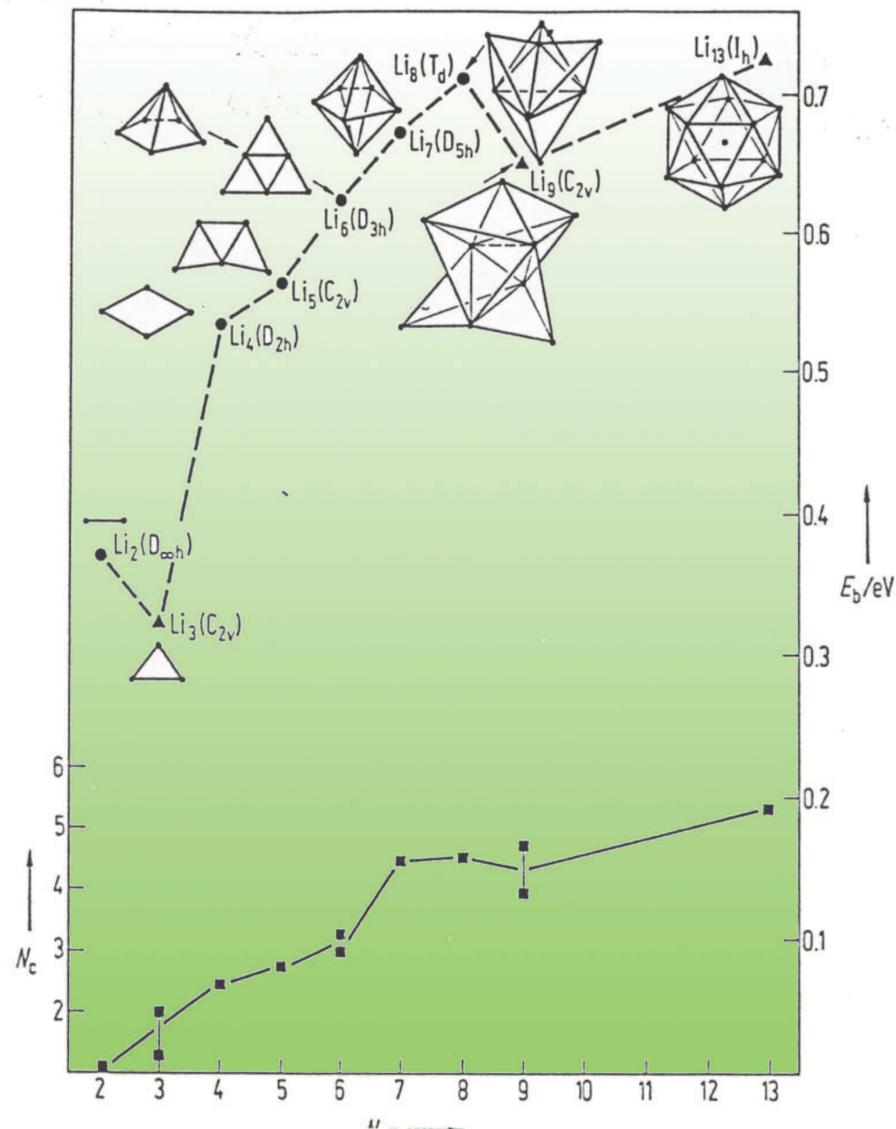
# Geometrische Struktur – Magische Zahlen



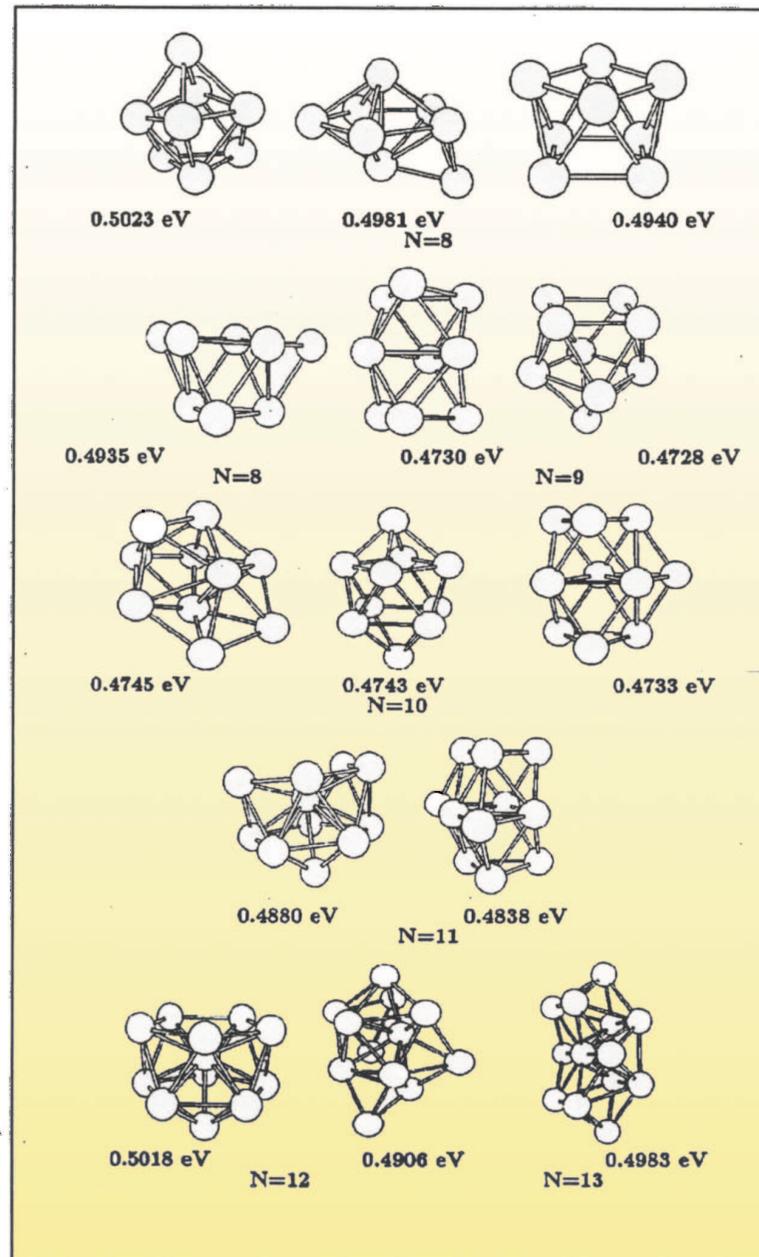
# Alkalicluster – Geometrische Struktur

- Zusätzliche zu den geometrischen Abschlüssen in Van-der-Waals Clustern spielen bei Metallclustern auch elektronischen Schalenabschlüsse eine entscheidene Rolle für die Stabilität der Cluster

# Geometrische Struktur – Lithium Cluster



# Geometrische Struktur – Isomere Strukturen



# Geometrische Struktur

- Schalenabschluß im Fall von Alkaliclustern hängt von der Temperatur der Cluster ab
- kalte Na-Cluster:  
Steigung 1.5, was einer Ikosaeder/Kubooktaederstruktur entspricht
- warme Na-Cluster:  
Steigung 0.6, elektronische Schalenabschlüsse

