Strukturaufkärung von Clustern mit Sensormolekülen: Methanol auf Goldclustern

Roger Rousseau [1] und Dominik Marx [2]

[1] Steacie Institute for Molecular Science, NRC, Ottawa, Ontario, K1N 0R6
[2] Max–Planck–Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstr. 1, 70569 Stuttgart

Experimente an der Mainzer Clusterfalle mit $[Au_n–CH_3OH]^+$ Clusterkomplexen zeigen eine starke Variation der Rotverschiebung $\Delta\nu$ der intramolekularen C–O Streckschwingung bei Variation von n. Um diesen Effekt mikroskopisch zu verstehen werden *ab initio* MD Rechnungen als Funktion der Goldclustergröße $1 \leq n \leq 15$ durchgeführt. Die Simulationen zeigen klar, daß die abrupte Änderung von $\Delta\nu$ bei $n = 7$ durch die Änderung der Dimensionalität des Clusters von 2D zu 3D und eine damit verbundene Erhöhung der lokalen Koordinationszahl induziert wird. Zudem wird die Art der Bindung zwischen Methanol und dem Goldcluster durch eine Analyse der Elektronenstruktur als Komplexbindung klassifiziert.