

## MS 3 Cluster und Aerosole

Zeit: Freitag 14:00–15:45

Raum: HU 3088

**Hauptvortrag**

MS 3.1 Fr 14:00 HU 3088

**Laser fragmentation and mass spectrometry of binary clusters** — ●PETER LIEVENS, SVEN NEUKERMANS, EWALD JANSSENS, XIN WANG, NELE VELDEMAN, and ROGER E. SILVERANS — Laboratorium voor Vaste-Stoffysica en Magnetisme, K.U.Leuven, B-3001 Leuven, Belgium

We report on recent studies of metal atom doped clusters of noble metals (Ag and Au) and group IVa elements (Si, Ge, Sn, Pb). Beams of binary clusters are produced with a dual-target dual-laser vaporization source. Size and composition dependent stability fluctuations are investigated with photofragmentation and mass spectrometry. Evidence is presented for the existence of combined highly symmetric closures of shells of atoms and shells of electrons for specific binary cluster species. Phenomenological interpretations of new electronic shell closures are given and compared with density functional theory calculations of their geometrical and electronic structure.

This work was supported by the Fund for Scientific Research - Flanders (FWO), the Flemish Concerted Action (GOA) program, and the Belgian Interuniversity Poles of Attraction (IAP) program.

MS 3.2 Fr 14:30 HU 3088

**Gold cluster carbonyls: Saturated adsorption of CO on gold clusters, vibrational spectroscopy and implications for the cluster structures** — ●ANDRÉ FIELICKE<sup>1</sup>, GERT VON HELDEN<sup>1</sup>, GERARD MEIJER<sup>1</sup>, DAVID P. PEDERSEN<sup>2</sup>, BENOIT SIMARD<sup>2</sup>, and DAVID M. RAYNER<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Fritz-Haber-Institut der MPG, Faradayweg 4-6, D-14195 Berlin — <sup>2</sup>Steeacie Institute for Molecular Sciences, NRC, 100 Sussex Drive, Ottawa, Ontario K1A 0R6, Canada

We report on the interaction of carbon monoxide, CO, with cationic and anionic gold clusters in the gas phase. Successive adsorption of CO molecules on the gold clusters proceeds until a cluster size specific saturation coverage is reached. Structural information for the bare gold clusters is obtained by comparing the saturation composition with the number of available equivalent sites presented by candidate structures. By inference we also establish the structure of the saturated  $Au_n(CO)_m$  complexes. In certain cases we find evidence suggesting that successive adsorption of CO can distort the metal cluster framework. We measure the vibrational spectra of the  $Au_n(CO)_m$  complexes in both the CO stretching region and in the region of the Au-C stretch and the Au-C-O bend using infrared multiple photon dissociation spectroscopy. The vibrational spectra further aid in the  $Au_n$  structure determination, provide information on the structure of the CO complexes and allow comparison with CO adsorbates on deposited clusters or surfaces.

MS 3.3 Fr 14:45 HU 3088

**Adsorption und Reaktion von (nicht)aromatischen Kohlenwasserstoffmolekülen auf Übergangsmetallcluster-Oberflächen** — ●GEREON NIEDNER-SCHATTEBURG, ANITA LAGUTSCHENKOV, BRITTA PFEFFER, STEFFI WIES, JENS BRÜCK, MATTHIAS VETTER und TOBIAS PANKEWITZ — Fachbereich Chemie, TU Kaiserslautern, 67661 Kaiserslautern

Isolierte Übergangsmetallcluster-Ionen werden in der Ionenfalle eines FT-ICR-Massenspektrometers gespeichert und anschließend wahlweise aromatischen oder nicht-aromatischen Kohlenwasserstoffmolekülen ausgesetzt. Aus der Kinetik der Adsorption und Reaktivität an den Clusteroberflächen ergeben sich clustergrößenabhängige Geschwindigkeitskonstanten, die erste Auskünfte über die elektronischen und geometrischen Strukturen der Cluster geben können, wo ein Zugang über andere Methoden nicht möglich ist.

MS 3.4 Fr 15:00 HU 3088

**Zerfall und Reaktivität metalloider Cluster** — ●RALF BURGERT, KATHARINA KOCH und HANSGEORG SCHNÖCKEL — Institut für Anorganische Chemie, Universität Karlsruhe (TH), Engesserstr. 15, Geb. 30.45, 76128 Karlsruhe

Unsere Arbeitsgruppe beschäftigt sich seit vielen Jahren mit der Darstellung metalloider Clusterverbindungen der dritten Hauptgruppe, insbesondere mit Aluminium- und Galliumclustern. Beispiele dafür sind  $Al_7R_6^-$ ,  $Ga_{19}R_6^-$ , ( $R$ =Ligand, z.B.  $[C(SiMe_3)_3]$ ). Die von uns eingeführte Definition "metalloid" besagt, dass die Anzahl der direkten Metallatom-Metallatom-Bindungen in solchen Clustern größer ist als die Anzahl der

Metallatom-Ligand-Bindungen. Alle metalloiden Cluster bestehen aus Metallatomen im Zentrum, das von einer schützenden Hülle organischer Liganden umgeben ist. Dadurch wird die Reaktivität der Clustermoleküle soweit herabgesetzt, dass diese in ausreichender Menge synthetisiert, als Kristalle erhalten und strukturell aufgeklärt werden können. Aufgrund ihrer Löslichkeit in THF lassen sich einige Vertreter durch ESI (Elektrospray-Ionisierung) unzersetzt in die Gasphase überführen. Daneben gibt es Beispiele für die erfolgreiche Anwendung von LDI (Laserdesorptions-Ionisierung). Im Rahmen des Vortrags sollen FT-ICR-massenspektrometrische Untersuchungen zum Abbau und zur Reaktivität solcher Cluster anhand aktueller Beispiele vorgestellt werden.

**Gruppenbericht**

MS 3.5 Fr 15:15 HU 3088

**Real-time characterization of individual bioaerosol particles with bioaerosol mass spectrometry** — ●MATTHIAS FRANK<sup>1</sup>, JAMES M. BIRCH<sup>1</sup>, ABNEESH SRIVASTAVA<sup>1</sup>, PAUL T. STEELE<sup>1</sup>, KEITH R. COFFEE<sup>1</sup>, DAVID P. FERGENSON<sup>1</sup>, HERBERT J. TOBIAS<sup>1</sup>, MAURICE E. PITESKY<sup>2</sup>, VINCENT J. RIOT<sup>1</sup>, SUE I. MARTIN<sup>1</sup>, ERIC E. GARD<sup>1</sup>, CARLITO LEBRILLA<sup>2</sup>, GREGG A. CZERWIENIEC<sup>2</sup>, SCOTT C. RUSSELL<sup>2</sup>, and ERICA L. MCJIMPSEY<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore CA 94551, USA — <sup>2</sup>University of California Davis, Davis CA 95616, USA

We are developing a single-particle bioaerosol mass spectrometry system that can rapidly analyze individual biological particles (e.g. spores or vegetative bacteria) that are sampled directly from air into a mass spectrometer. Mass spectra from both positive and negative ions created by matrix-free or matrix-assisted laser desorption and ionization are recorded simultaneously and can be analyzed and classified in real-time. Our present system is capable of discriminating, particle by particle, between bacterial spores and other biological and non-biological background materials using the mass fingerprints obtained from those particles. We will describe recent results including the comprehensive identification of critical marker peaks from spores by isotope labeling, the reduction of the shot-to-shot mass spectral variability by laser profile conditioning, and the demonstration of sub-attomole detection limits for peptide standards. We will also discuss the prospects for potential future applications in the detection of respiratory diseases.