

Teilprojekt C1: **Theorie für die Struktur und die elektronischen Eigenschaften kleiner Aggregate und für selektiven Bindungsbruch**

Teilprojektleiter: **Prof. Dr. Karl-Heinz Bennemann**

Dienstanschrift: **Freie Universität Berlin, Institut für theoretische Physik, Arnimallee 14, 14195 Berlin**

Kommunikation: Tel: 0049 30 8385503 Fax: 0049 30 8386799

E-Mail: khb@physik.fu-berlin.de

Internet: <http://www.physik.fu-berlin.de/~ag-bennemann>

Stellv. Teilprojektleiter: **Dr. Martin E. Garcia**

Dienstanschrift: **Freie Universität Berlin, Institut für theoretische Physik, Arnimallee 14, 14195 Berlin**

Kommunikation: Tel: 0049 30 8386124 Fax: 0049 30 8386799

E-Mail: garcia@physik.fu-berlin.de

Internet: <http://www.physik.fu-berlin.de/~garcia>

Fachgebiet und Arbeitsrichtung: **Elektronische Theorie, Cluster, Festkörperphysik, allgemeine Eigenschaften, Optik, Kollisionen, Magnetismus, Wachstum**

Keywords: **electronic theory, cluster, solid state physics, general properties, optical properties, collisions, magnetism, growth**

Report for Subproject C1: Theory for the structure and electronic properties of clusters and for selective bond breaking

Overview of the main results obtained between 1996 and 1998

In the last two years we have focussed on the following problems:

I. Linear and nonlinear optical response of clusters

II. Dynamics of electrons in clusters and collisions between clusters and surfaces

III. Magnetic properties of small and large clusters

In I we have determined the absorption spectra of clusters with different sizes and structures and we have also calculated the cross sections for nonlinear scattering of light on water drops. Both problems are subject intensive research in cluster physics.

The absorption cross section of van der Waals bonded (small Hg_n) and covalently bonded (large Hg_n) has been determined using the theory developed in our group in the period 1993-95. Moreover, we have extended the theory to take into account the influence of d electrons on the absorption spectra of noble metal clusters. We have applied the extended theory in combination with molecular dynamics simulations to determine the temperature

dependence of the optical properties of small silver clusters

The main problem addressed in II was the dynamics of electronic degrees of freedom and its interplay with the emission of electrons in collisions between clusters and surfaces. We have also calculated the Auger decay probabilities in excited metallic clusters.

We have shown that the time scales for Auger decay are strongly dependent on the cluster size, and that the Auger-electron emission and fragmentation of the clusters are competitive processes for certain sizes. The Auger effect in small clusters is a new and interesting problem, which is now being studied experimentally. Our theory should serve as a basis for these investigations.

We have also developed a theory for the neutralization dynamics of charged clusters during their collisions with surfaces.

We have determined the nonadiabatic survival probability $P_s(t_0)$ of the charged clusters. We have shown that the survival probability of the clusters exhibits Stückelberg oscillations as a function of the cluster size, when the density of states of the target is narrow. The very good agreement between our results for the cluster size dependence $P_s(t_0)$ and that of the measured electron emission yield suggests that new mechanisms for electron emission have to be considered, which take into account the dynamics during the collision.

In III the magnetic properties of small clusters and magnetic islands on surfaces are investigated theoretically. In the case of free ferromagnetic clusters the influence of collective excitations onto their internal magnetic ordering has been calculated. The magnetic properties show a transition from the ones for small particles to the ones for bulk systems. In particular the cluster magnetization at low temperatures exhibits an exponential decay for small clusters, and an almost algebraic behavior (Bloch law) for large clusters.

Furthermore, the magnetic properties of an ensemble of ferromagnetic islands during the growth of ultrathin films have been simulated. In this case the magnetic properties depend sensitively on the atomic structure and other preparation conditions. These films are in general not in thermodynamic equilibrium. Rather, during the coalescence of islands energy barriers hinder the relaxation towards the stable single domain state. These barriers consist of competing volume (anisotropies, magnetic field) and surface contributions (exchange interaction between distinct islands). If the islands become too big too fast, the film will end up in a metastable multidomain state. We emphasize that the islands are irregularly (randomly) shaped and not according to a certain geometry. The consideration of such realistic island shapes seems to have a considerable influence on their magnetic properties.

In order to treat the problems described above we have used and extended existing theoretical methods like tight-binding, numerical integration of equations of motion, random phase approximation, molecular dynamics and Monte-Carlo simulations. Furthermore, we have developed new models. For instance, a theoretical description of the electron

emission in cluster-surfaces collisions and for the growth of magnetic nanostructures was proposed.

Within the Collaborative Research Center there were collaborations with various experimental groups, especially with B6 Matthias/Reichling, A8 Wöste, A2 Schulze/Froben, A5 Illenberger, A11 Hertel/Schulz/de Vivie-Riedle and A12 Campbell. Outside the Collaborative Research Center collaborations existed with Prof. G. Gerber (University of Würzburg), Prof. W. Hübner (MPI Halle), Prof. R. Kerner (Curie University Paris), Prof. P. Joyes (CNRS Orsay), Prof. V. Bortolani (Modena University), Dr. G. Pastor (CNRS Toulouse), Prof. Rasing (Nymwegen University), Prof. B. Alascio (Bariloche University), Prof. Y. Okiji (Osaka University), Prof. J. Jellinek (National Laboratory Argonne), Prof. D. Tomanek (Michigan State University), Prof. J. Moran-Lopez und Prof. J. Dorantes (S. L. Potosi University).

Übersicht über die Ergebnisse aus den Jahren 1996-98

In den vergangenen drei Jahren wurden schwerpunktmäßig folgende Probleme untersucht:

I. Lineare und nichtlineare optische Eigenschaften von Clustern

II. Elektronische Dynamik in Clustern und in Kollisionen von Clustern mit Oberflächen

III. Magnetische Eigenschaften von kleinen und großen Clustern

Im UP I wurden zum einen Absorptionsspektren von Clustern verschiedener Größen und Strukturen berechnet und zum anderen Wirkungsquerschnitte für nichtlineare Mie-Streuung an Wassertröpfchen bestimmt. Beide Probleme sind nach wie vor Gegenstand intensiver Forschung in der Clusterphysik.

Der Absorptionsquerschnitt für van-der-Waals-gebundene (kleine Hg_n) und kovalentgebundene (große Hg_n) Cluster wurde mit Hilfe der in der Periode 1993-95 in unserer Arbeitsgruppe entwickelten Theorie berechnet. Darüberhinaus wurde die Theorie erweitert, um d -Elektronen berücksichtigen zu können. Damit ist uns gelungen, Absorptionsspektren kleiner Edelmetallcluster (Ag_n^+) zu bestimmen. Diese Rechnungen wurden mit Molekulardynamik-Simulationen kombiniert, so dass die Absorptionsspektren bei verschiedenen Temperaturen bestimmt werden konnten.

Das Hauptthema des UP II war die Dynamik der elektronischen Freiheitsgrade in angeregten Metallclustern und in Cluster-Oberflächen-Kollisionen. Wir haben die Wahrscheinlichkeit für den Auger-Zerfall in angeregten Jellium-Clustern untersucht. Es wurde gezeigt, dass die Auger-Zeitskalen stark von der Clustergröße abhängen, und dass Auger-Emission und Cluster-Fragmentation durchaus konkurrierende Prozesse sein können. Der

Auger-Effekt in Clustern ist ein interessantes und neues Problem. Erste experimentelle Untersuchungen sind geplant. Unsere Theorie soll als Basis für diese Untersuchungen dienen.

Desweiteren haben wir in diesem UP eine Theorie für die Neutralisierungsdynamik geladener Cluster während ihrer Kollisionen mit verschiedenen Oberflächen entwickelt. Die nichtadiabatische Überlebenswahrscheinlichkeit $P_s(t_0)$ des Clusters beim Erreichen der Oberfläche (Zeitpunkt t_0) wurde bestimmt. Wir haben gezeigt, dass für Oberflächen mit schmalen Zustandsdichten $P_s(t_0)$ als Funktion der Clustergröße Stückelberg-Oszillationen aufweist. Der Vergleich zwischen unseren und den experimentellen Resultaten suggeriert, dass neue Mechanismen für Elektronen-Emission vorgeschlagen werden müssen.

In UP III wurden die magnetischen Eigenschaften kleiner Cluster bzw. magnetischer Inseln auf Oberflächen theoretisch untersucht. Im Falle freier ferromagnetischer Cluster wurde insbesondere der Einfluss kollektiver Anregungen auf die innere magnetische Ordnung berechnet. Als Funktion der Clustergröße gehen die magnetischen Eigenschaften kleiner Teilchen über zu denen ausgedehnter Volumensysteme. Insbesondere zeigt die Magnetisierung bei niedrigen Temperaturen eine exponentielle Abnahme für kleine Cluster und ein eher abgebräusches Verhalten für große Cluster (Bloch-Gesetz).

Weiterhin wurden in diesem Unterprojekt die magnetischen Eigenschaften eines Ensembles ferromagnetischer Inseln im Anfangsstadium des Wachstums eines sehr dünnen Filmes simuliert. In diesem Fall hängen die magnetischen Eigenschaften stark ab von der atomaren Struktur und den sonstigen Präparationsbedingungen. Derartige Filme befinden sich im allgemeinen nicht im thermodynamischen Gleichgewicht. Infolge von Energiebarrieren wird während des Zusammenwachsens der Inseln das Erreichen des stabilen Eindomänenzustandes erschwert. Diese Barrieren bestehen aus konkurrierenden Volumen- (Anisotropien, Magnetfeld) sowie Oberflächenanteilen (Austauschwechselwirkung zwischen unterschiedlichen Inseln). Falls die Inseln zu schnell zu groß werden, wird der magnetische Film insbesondere bei niedrigen Temperaturen in einem metastabilen Viel-domänenzustand verbleiben. Es wird hervorgehoben, dass die Inseln unregelmässig (zufällig) geformt sind und nicht einer bestimmten Geometrie entsprechen. Die Beachtung derartiger realistischer Inselnformen scheint einen erheblichen Einfluss auf die erhaltenen Resultate für die magnetischen Eigenschaften zu haben.

In den genannten drei Unterprojekten wurden zum einen bereits bestehende Methoden (Tight-Binding, Bewegungsgleichungen, Random-Phase-Approximation, Molekulardynamik, Monte-Carlo) weiter entwickelt. Zum anderen wurden neue Theorien vorgeschlagen. So wurde zum Beispiel eine theoretische Beschreibung der Elektronenemission in Kollisionen zwischen Clustern und Oberflächen entwickelt sowie das Wachstum magnetischer Nanostrukturen auf neue Weise studiert.

Innerhalb des SFB wurde mit verschiedenen experimentellen Gruppen zusammengearbei-

tet, vor allem mit TP B6 Matthias/Reichling, TP A8 Wöste, TP A2 Schulze/Froben, TP A5 Illenberger, TP A11 Hertel/Schulz/de Vivie-Riedle und TP A12 Campbell. Außerhalb des SFB bestanden Zusammenarbeiten mit Prof. G. Gerber (Universität Würzburg), Prof. W. Hübner (MPI Halle), Prof. R. Kerner (Curie Universität Paris), Prof. P. Joyes (CNRS Orsay), Prof. V. Bortolani (Universität Modena), Dr. G. Pastor (CNRS Toulouse), Prof. Rasing (Universität Nymwegen), Prof. B. Alascio (Universität Bariloche), Prof. Y. Okiji (Universität Osaka), Prof. J. Jellinek (National Laboratory Argonne), Prof. D. Tomanek (Michigan State University), Prof. J. Moran-Lopez und Prof. J. Dorantes (Universität S. L. Potosi).

Einzelberichte aus den Jahren 1996-98

Die wichtigsten Ergebnisse aus den drei Unterprojekten werden im folgenden ausführlich beschrieben:

UP I. Lineare und nichtlineare optische Eigenschaften von Clustern

(1) Theorie für die optische Absorption kleiner kovalenter und van-der-Waals-Cluster.

(S. Grabowski, M. E. Garcia, K. H. Bennemann)

Zur theoretischen Beschreibung der Photoabsorption kleiner Cluster wurde eine in unserer Arbeitsgruppe entwickelte Theorie[3] benutzt, die in der Lage ist, den optischen Response kleiner Cluster mit beliebiger Struktur zu berechnen, Oberflächeneffekte zu studieren und die entsprechenden Spektren zu analysieren.

Die Theorie basiert auf folgender Matrixgleichung in der Random-Phase-Approximation:

$$\chi_{n_1 n_2 m_1 m_2}(\omega) = \chi_{n_1 n_2 m_1 m_2}^0(\omega) + \sum_{j_1, j_2, l_1, l_2} \chi_{n_1 n_2 j_1 j_2}^0(\omega) V_{l_1 l_2}^{j_1 j_2} \chi_{l_1 l_2 m_1 m_2}(\omega),$$

wobei $\chi_{n_1 n_2 m_1 m_2}^0(\omega)$ die Matrixelemente der Lindhard-Funktion des ungestörten Systems (H_0) und $V_{l_1 l_2}^{j_1 j_2}$ die Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung $V(r^{\vec{r}'}, r^{\vec{r}''})$ in der lokalen Basis sind. Mit Hilfe der so gewonnenen Antwortfunktion des Clusters auf ein externes Feld können in einem weiteren Schritt die Polarisierbarkeit $\alpha(\omega)$ und daraus der experimentell messbare Photoabsorptions-Wirkungsquerschnitt bestimmt werden.

Mit Hilfe der so entwickelten Theorie haben wir eine systematische Studie der optischen Eigenschaften von Hg_n -Clustern durchgeführt:

- Für eine feste Clustergröße zeigten lineare Clusterstrukturen im allgemeinen intensive Resonanzen in der optischen sp -Bandlücke, die als Anregung von exzitonischen Zuständen gedeutet werden konnten. Kompakte, hochsymmetrische atomare Strukturen unterdrücken Anregungen in der sp -Bandlücke, während sie starke plasmonische Resonanzen im Bereich der Mie-Frequenz fördern.
- Die Photoabsorptionsspektren ionisierter Hg_n^+ -Cluster sind stark abhängig von der atomaren Struktur. Oftmals werden kollektive Übergänge schon durch relativ kleine Störungen unterdrückt: Plasmonische Anregungen unterliegen somit einer intensiven Landau-Dämpfung. Für kleine, van-der-Waals-gebundene Cluster ist das Spektrum wesentlich schmaler als für kovalent gebundene Cluster.
- Die optischen Anregungen wurden für verschiedenen Clustergrößen systematisch charakterisiert. Kollektive Anregungen treten für kleine Cluster ($n < 8$) selten auf.

Veröffentlichungen: /GGB 96a/, /GGB 96b/, /GGB 96c/.

Unsere Theorie ermöglicht die Berechnung von Absorptionsspektren von Clustern beliebiger Struktur. Dies bedeutet, dass auch Temperatureffekte untersucht werden können. Die Erweiterung der Theorie auf endlichen Temperaturen wird im folgenden dargestellt.

(2) Elektronische Theorie der Photoabsorption kleiner Edelmetall-Cluster.

(T. Zabel, M. E. Garcia, K. H. Bennemann)

Die in (1) erwähnte Theorie, die ursprünglich für van-der-Waals-Cluster entwickelt worden war, wurde erweitert, um jetzt die Photoabsorption in Edelmetallclustern untersuchen zu können. Bei diesen Rechnungen haben wir direkten Bezug auf die in Rostock gewonnenen experimentellen Resultate genommen.

In der Arbeitsgruppe Meiwes-Broer an der Universität Rostock wurden Photoabsorptionsexperimente an freien, einfach positiv und negativ geladenen Silberclustern durchgeführt. Deren Spektren zeigen große Resonanzen im Bereich von 3-4 eV.

Die Absorptionsspektren der positiv geladenen und neutralen Silbercluster zeigen im Vergleich zu den Alkaliclustern eine entgegengesetzte Verschiebung der Dipolresonanz in Abhängigkeit von der Clustergröße. Die mittlere Resonanzenergie bei kleinen positiv geladenen und kleinen neutralen Silberclustern ist blauverschoben in bezug auf die mittlere Resonanzenergie sehr großer Cluster. Man vermutete die Ursache dieses Verhaltens in der kleinen Energielücke zwischen den 5s- und 4d-Elektronen des Silberatoms.

Wir haben dieses Problem theoretisch studiert. Die Untersuchungen der Abhängigkeiten der Dipolresonanzen von der Clustergröße, von der Clusterstruktur als auch von der Clustertemperatur standen im Vordergrund unserer Arbeit. Die Berücksichtigung der 4d-Elektronen und die Untersuchung ihres Einflusses war dabei die zentrale Aufgabe dieser Arbeit. Dazu untersuchten wir positiv geladene Silbercluster mit bis zu 13 Atomen.

Wir formulierten eine mikroskopische Theorie, die vom Tight-Binding-Modell zur Beschreibung des elektronischen Grundzustandes ausgeht. Wir berücksichtigten dabei die 4d-Elektronen von Silber, wodurch wir auf die Untersuchung kleiner Silbercluster beschränkt waren.

Das optische Verhalten der Cluster wurde innerhalb der zeitabhängigen Störungstheorie durch die Bestimmung der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion mittels Random-Phase-Approximation behandelt.

Der Tight-Binding-Ansatz berücksichtigt die atomare Struktur des Clusters und ermöglicht es dadurch, Größenabhängigkeiten, Strukturabhängigkeiten und damit Temperatureffekte des optischen Verhaltens realistisch zu beschreiben. Wir haben dazu Molekulardynamiksimulationen, die auf einem Tight-Binding-Hamiltonoperator der Gesamtenergie basieren,

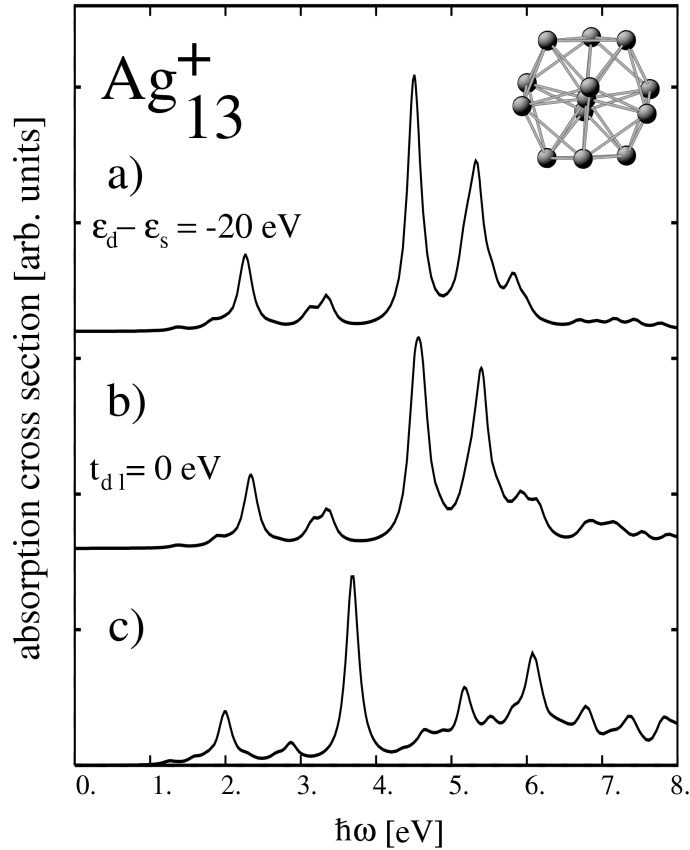


Abbildung 1: Einfluss der $4d$ -Elektronen auf den Absorptionsquerschnitt $\sigma(\omega)$ von Ag_{13}^+ bei $T = 0$ (siehe Struktur im Grundzustand). In a) und b) werden die Beiträge der $4d$ -Elektronen ausgeschaltet, entweder durch eine sehr große Verschiebung der On-site Energien ϵ_d (a) oder durch Vernachlässigung aller Hopping-Elemente t_{dl} zwischen $l = s, p_x, p_y, p_z$ - und d -Orbitalen (b). c) Volle Spektrum (inklusive Beiträge der d -Elektronen).

durchgeführt.

Zur Bestimmung des Absorptionsspektrums bei einer Clustertemperatur T wurde das Absorptionsspektrum einzelner Repräsentanten eines Ensembles mit der Temperatur T berechnet. Die Mittelung dieser Spektren ergibt dann das Absorptionsspektrum bei einer Clustertemperatur T .

Die Resultate, die wir mit unserer Theorie erhielten, können die wesentlichen Tendenzen der größenabhängigen Entwicklung der optischen Resonanzen der positiv geladenen Silbercluster beschreiben. Wir wollen die Resultate hier kurz auflisten:

- Unsere Berechnungen des Absorptionsverhaltens des Clustergrundzustandes ($T=0$ K) zeigen mit zunehmender Clustergröße eine anfängliche Blauverschiebung der optischen Resonanzen im Bereich von 3-5 eV. Eine derartige Blauverschiebung ist eben-

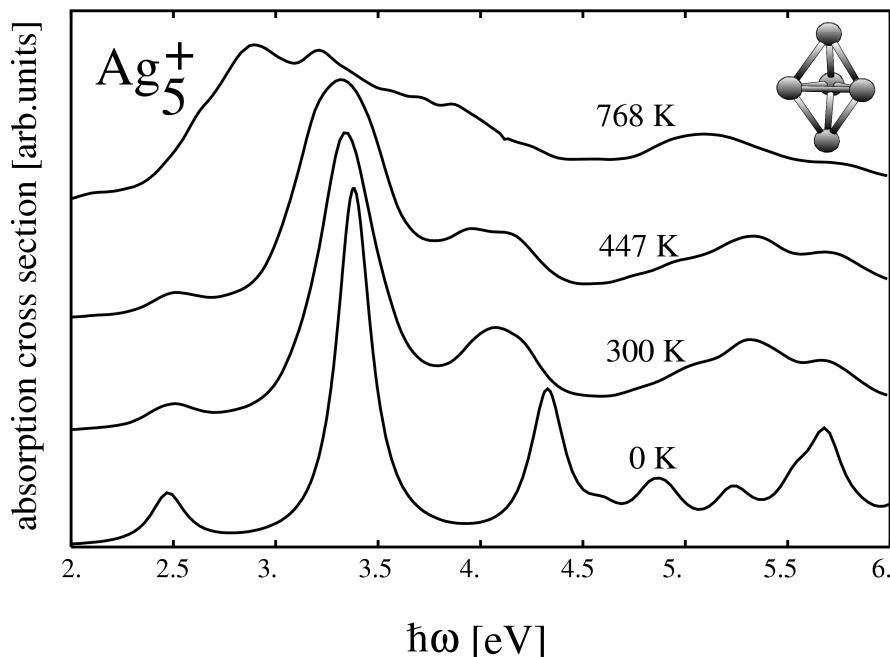


Abbildung 2: Temperatur-Abhängigkeit des über ein Ensemble gemittelten Absorptionsquerschnitts $\bar{\sigma}(\omega, T)$ von Ag_5^+ . Die Inset-Figur bezieht sich auf die Struktur bei $T = 0$ (Grundzustand-Struktur)

falls bei den Alkaliclustern zu finden und geht allein auf die s-Elektronen zurück.

- Die Blauverschiebung der optischen Resonanzen nimmt mit zunehmender Clustergröße ab und ist beim Ag_{13}^+ -Cluster sogar rückläufig. Dieses Verhalten zeigen ebenfalls die experimentellen Spektren. Durch die Untersuchungen zum Einfluss der d-Elektronen auf die optischen Resonanzen können wir den Effekt der Umkehrung der Blauverschiebung eindeutig auf die polarisierbaren d-Elektronen zurückführen.
- Unsere Absorptionsspektren der $\text{Ag}_{7,9}^+$ -Cluster bei der Clustertemperatur $T=0$ K zeigen weitere Absorptionspeaks im Bereich von 3-4 eV. Mit zunehmender Clustertemperatur gehen diese Details der Spektren verloren und es bildet sich jeweils ein breiter Absorptionspeak. Experimentell konnte ein solches Verhalten bereits bei Na-Clustern festgestellt werden. Derartige Experimente für Silbercluster wurden noch nicht durchgeführt.
- Beim Ag_{13}^+ -Cluster ist durch die thermische Ausdehnung des Clusters und den damit verbundenen starken Abfall der d-Hopping-Integrale die Polarisierbarkeit der d-Elektronen und damit ihr Einfluss reduziert. Die oben angesprochene Blauverschiebung der optischen Resonanzen mit zunehmender Clustergröße ist bei höheren Clustertemperaturen beim Ag_{13}^+ -Cluster nicht mehr rückläufig, sondern ebenfalls

blauverschoben.

Veröffentlichung: /ZGB 99/.

(3) THG an μm -Wassertröpfchen

(Jörg Dewitz, Wolfgang Hübner und K. H. Bennemann)

Bei der Untersuchung der Winkelabhängigkeit der dritten Harmonischen (THG) an Wassertröpfchen kommen Theorie und Experiment unabhängig voneinander zu den drei Erkenntnissen:

- (i) Das Streuprofil der Wassertröpfchen mit Radien im Bereich von $a \approx 8 \mu\text{m}$ wird nur von einigen Intensitätsmaxima in der Nähe der Vorwärts- ($\theta = 0$) und Rückwärtsrichtung ($\theta = 180$) dominiert (siehe Abb. 3).
- (ii) Die Intensität und Winkelabhängigkeit des THG-Signals hängt nur schwach von der Tröpfchengröße und der Wellenlänge des Lasers ab

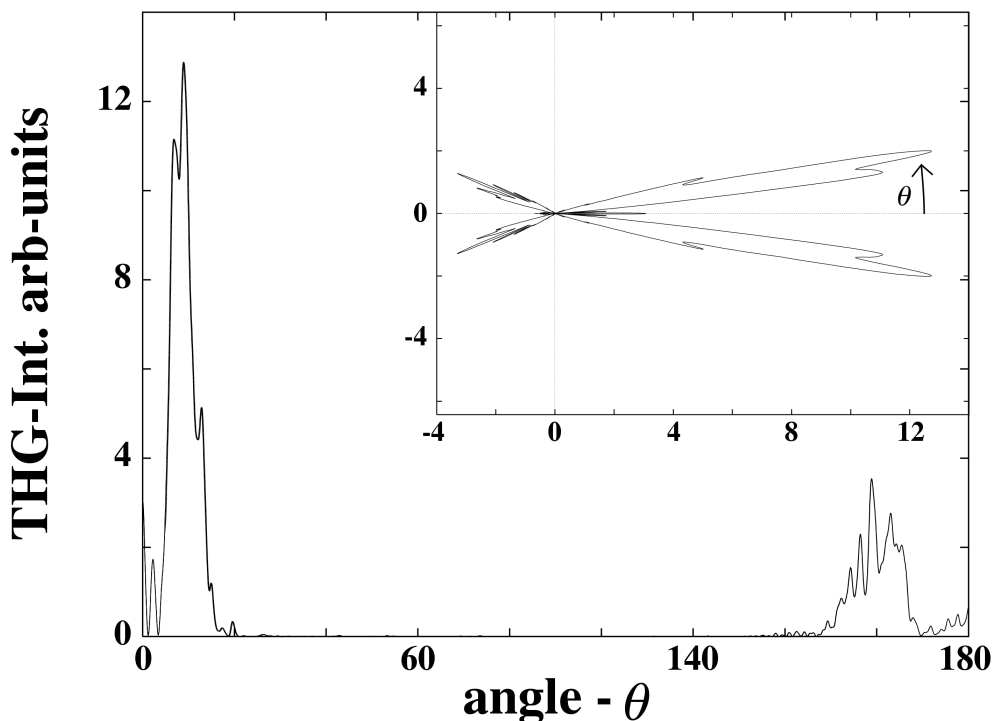


Abbildung 3: Winkelabhängigkeit der Intensitäten von Wassertröpfchen für Größenparameter ka um 79. Die Intensitäten sind einmal in linearer Abhängigkeit vom Winkel θ , sowie als Polar-Plot aufgetragen. Der Winkel θ liegt in der Ebene, die aus Ausbreitungsrichtung und Polarisationsrichtung des einfallenden Lichts gebildet wird ($\theta = 0$ entspricht der Ausbreitungsrichtung).

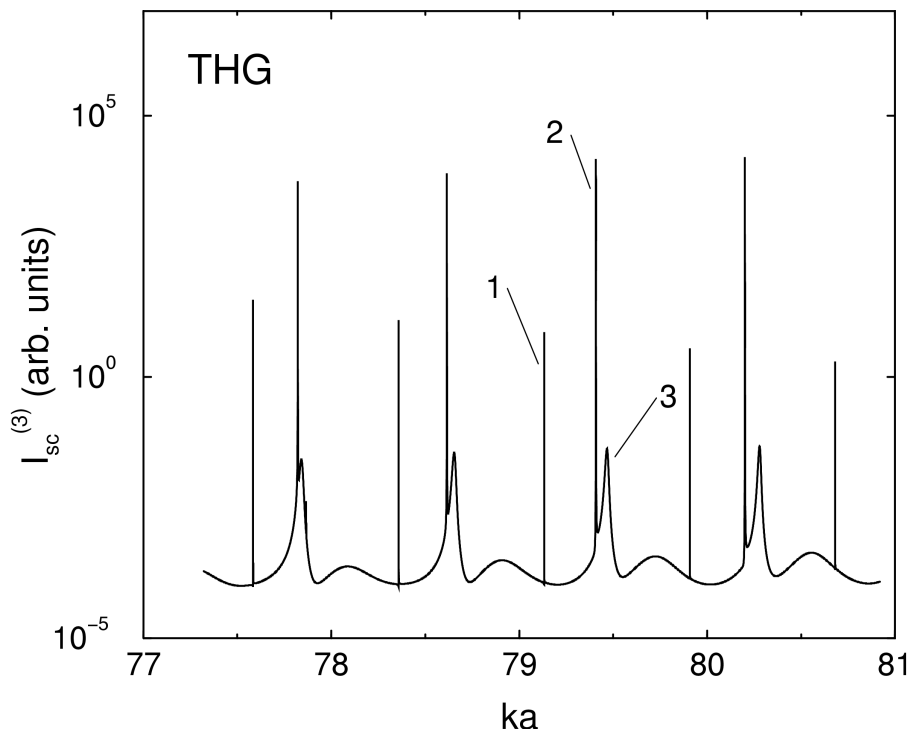


Abbildung 4: Integrierte Intensitäten der THG an Wassertröpfchen in Abhängigkeit vom Größenparameter ka .

- (iii) Theorie und Experiment finden, dass die Intensitäten nahe der Vorwärts- und Rückwärtsrichtung von vergleichbarer Größenordnung sind.

Alle drei Ergebnisse unterscheiden sich stark von dem, was man in der linearen Optik erwarten würde. Die Anzahl der Multipole bzw. Maxima sollte mit zunehmender Teilchengröße immer mehr zunehmen, d. h. es würden viele Maxima auftauchen. Die Intensitäten in der Vorwärtsrichtung sollten um einen Faktor von einigen Tausend größer sein als in der Rückwärtsrichtung, und die Winkelabhängigkeit sollte stark von der Variation der Tröpfchengröße bzw. Wellenlänge abhängen.

Unsere Rechnungen zur THG an Wassertröpfchen zeigen, dass im Bereich von $77 < ka < 81$ vier Maxima in den Intensitäten auftauchen, die die anderen stark überragen (siehe Abb. 4, logarithmische Skalierung der Intensitäten). Berücksichtigt man, dass in Experimenten mit Femtosekunden-Lasern eine Anregungsbreite von $\Delta ka \approx 1$ auftritt, so wird immer eines dieser starken Maxima angeregt. Die erzeugten THG-Intensitäten resultieren damit mehr oder weniger vollständig aus einem der dominanten Maxima, alle anderen Beiträge können vernachlässigt werden. Betrachtet man die Winkelabhängigkeit in den Maxima, so ist sie äußerst stabil. Die schwache Abhängigkeit der THG-Intensitäten vom Winkel resultiert daher aus der Tatsache, dass in den Femtosekunden-Experimenten immer ein dominanter Peak angeregt wird.

Veröffentlichungen: /DHB 96/, /KKD 97/, /DH 98/.

UP II. Elektronische Dynamik in Clustern und in Kollisionen von Clustern mit Oberflächen

(4) Mikroskopische Bestimmung der Auger-Zerfallswahrscheinlichkeiten angeregter Metallcluster.

(M. E. Garcia)

Die Zerfallszeit für ein Loch in einer tiefen elektronischen Schale eines Natrium-Clusters wegen der Emission von Auger-Elektronen wurde theoretisch untersucht. Wir haben nur sphärisch symmetrische Cluster analysiert und die Wahrscheinlichkeit für die verschiedenen Auger-Übergänge bestimmt. Dabei haben wir die aus der lokalen Dichtenäherung (LDA) berechneten Energieniveaus und Wellenfunktionen benutzt.

Unsere Resultate zeigen, dass sich die Wahrscheinlichkeit für Auger-Prozesse in Clustern stark von dem atomaren Fall unterscheidet. Die Auger-Zerfallszeiten in Na_N^- -Clustern weisen eine komplexe Größenabhängigkeit auf. Diese Zerfallszeiten sind für die meisten studierten Cluster einige Größenordnungen länger als die Auger-Zerfallszeiten in Atomen und können sogar vergleichbar mit typischen Fragmentationszeiten (Piko- und Nanosekunden) werden.

Veröffentlichung: /GSGB 98/.

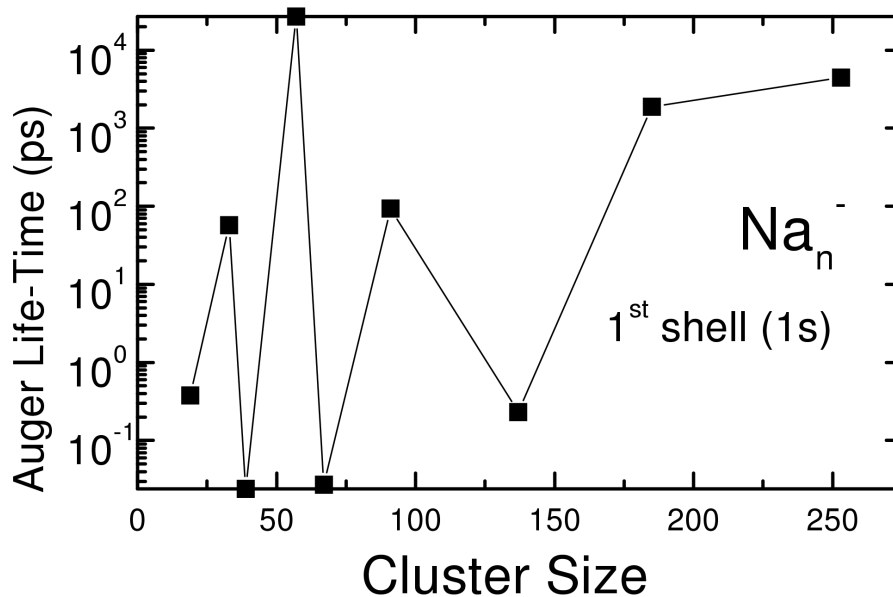


Abbildung 5: Größenabhängigkeit der Auger-Lebensdauern (in Pikosekunden) für ein Loch in der ersten elektronischen Schale ($1s$) von kugelförmigen Na_N^- -Clustern.

Diese Arbeit soll als Basis für weitere theoretische und experimentelle Untersuchungen dienen. Insbesondere können mit Hilfe dieser Theorie Photoemissionsexperimente interpretiert werden[1, 2].

(5) Wechselspiel zwischen Elektronenemission und ultraschneller Neutralisierungsdynamik in Kollisionen von Clustern mit Oberflächen

(O. Speer, M. E. Garcia, K. H. Bennemann)

Ausgehend von neuartigen und überraschenden Messergebnissen für die Elektronenemission bei Kollisionen von geladenen Metallclustern (Pt_N^- , Pb_N^- , Pb_N^+) mit Festkörperoberflächen (HOPG, Al), haben wir eine Theorie entwickelt, die zunächst einmal die Femtosekunden-Neutralisierungsdynamik der Cluster bei Annäherung an die Oberfläche beschreibt, aber zusätzlich auch das Verhalten der Elektronenausbeute $\gamma(N)$ bei verschiedenen kinetischen Energien und Projektil-Target-Kombinationen vorhersagt.

Wir haben dazu die fundamentale Annahme gemacht, dass die Elektronenausbeute bei fester kinetischer Energie eine monotone Funktion der nichtadiabatischen Überlebenswahrscheinlichkeit $P_s(N)$ ist. Dies bedeutet in vereinfachter Form, dass nur dann ein Elektron emittiert wird, wenn ein Cluster die Oberfläche erreicht, ohne neutralisiert worden zu sein.

Das neue Modell liefert auch und gerade für jene Aspekte des Elektronenemissionsverhaltens eine Erklärung, bei denen andere Modelle versagen.

Wenn Cluster verschiedener Größe mit der gleichen kinetischen Energie auf eine Oberfläche geschossen werden, so ist der zugehörige eindeutige Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit v und der Clustergröße N der Ansatzpunkt für die Beschreibung der unterschiedlichen Elektronenausbeuten γ in Abhängigkeit von N . Bei Targetmaterialien mit sehr breiten elektronischen Bändern, wie z. B. Aluminium, zeigt sich eine gleichmäßige Abnahme von γ mit zunehmender Clustergröße. Die nichtadiabatische Überlebenswahrscheinlichkeit und damit, nach der gemachten Annahme, auch γ ist für kleine Cluster am größten, da sich diese am schnellsten bewegen und dadurch den räumlichen Bereich, in dem die Neutralisierungen erfolgen, nur in sehr kurzer Zeit durchlaufen.

Bei Oberflächenmaterialien mit schmalen Bändern, wie z. B. Graphit, kann ein quasisresonanter Ladungsaustausch zwischen Projektil und Target stattfinden, der sich in zeitlichen Oszillationen von P_s bei Annäherung des Clusters an die Oberfläche äußert. Eine unmittelbare Folge dieser zeitlichen Oszillationen sind Oszillationen von P_s bzw. γ bezüglich $1/v$. Mit dieser Betrachtungsweise erscheint dann das oszillatorische Verhalten von $\gamma(N)$ und die zusätzliche Abhängigkeit der Form der entsprechenden Messkurve von der kinetischen Energie nicht mehr als überraschend.

Die Annahme eines Zusammenhangs zwischen Neutralisierungsdynamik und Elektronenemission lässt offen, auf welche Weise die Elektronen emittiert werden und ob sie aus der Oberfläche oder aus dem Cluster stammen. Hierzu sind weitere Untersuchungen erforderlich, die unter Umständen zur Entdeckung eines neuen Emissionsmechanismus führen können. Abschließend bleibt zu erwähnen, dass diese Interpretation der Messergebnisse bedeutet, dass hier zum erstenmal Stückelbergoszillationen bei der Kollision von metal-

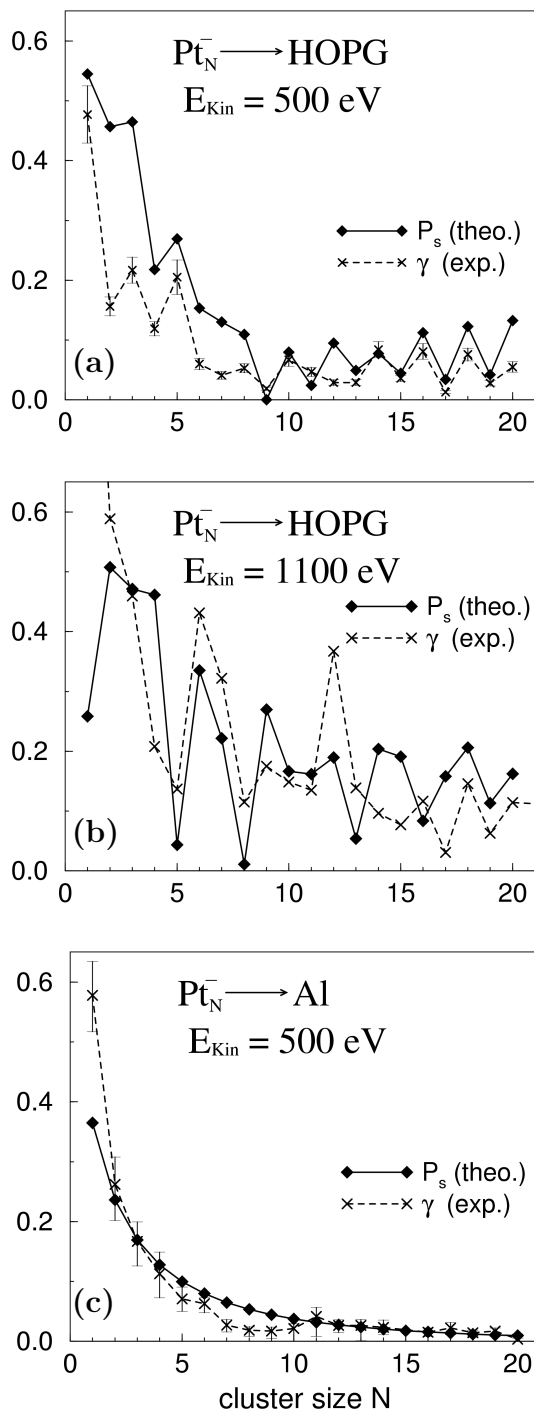


Abbildung 6: Theoretische Ergebnisse (s. P_s (theo.) in der Figur) für die Überlebenswahrscheinlichkeit $P_s(N)$ von Pt_N^- -Clustern, die mit (a) einer Oberfläche von highly ordered pyrolytic graphite (HOPG) bei $E_{\text{coll}} = 500 \text{ eV}$, (b) einer HOPG-Oberfläche bei $E_{\text{coll}} = 1100 \text{ eV}$, und (c) einer Al-Oberfläche bei $E_{\text{coll}} = 500 \text{ eV}$ kollidieren. $P_s(N)$ ändert sich dramatisch, wenn die Kollisionsenergie E_{coll} variiert. Die zugehörigen experimentellen Resultate für die Elektronenausbeute $\gamma(N)$ sind auch gezeigt (s. γ (exp.) in der Figur).

lischen Projektilen mit einem nichtmetallischen Target beobachtet wurden, was einen Anstoß für weitere Untersuchungen liefern kann.

Veröffentlichungen: /WMSG 97/, /GSWM 98/, /SGWM 99/.

UP III. Magnetische Eigenschaften von kleinen und großen Clustern

(6) Kollektive magnetische Anregungen in ferromagnetischen Clustern

(P. J. Jensen)

Messungen der Magnetisierung eines freien Clusterstrahles mittels Stern-Gerlach- Versuchen [4] ergeben, dass bereits kleine Fe-, Co- und Ni-Cluster ferromagnetisch geordnet sind. Bemerkenswert ist, dass die so bestimmte Magnetisierung pro Clusteratom ein oszillierendes Verhalten als Funktion der Clustergröße zeigt, welches durch das Auftreten von elektronischen und atomaren Schalenstrukturen erklärt werden kann [7]. Um genaue Aussagen über das magnetische Moment für $T = 0$ zu machen, und um einen Vergleich mit Rechnungen [5] durchführen zu können, muss die Magnetisierung des Clusterstrahles als Funktion von Clustertemperatur und äußeres Magnetfeld genau bekannt sein. Diese setzt sich zusammen aus der magnetischen Ordnung des Clusterensembles $M(T, H)$ sowie der inneren magnetischen Ordnung $m_{int}(T, N)$ eines jeden Clusters. Bisher wurde im allgemeinen für die Gesamtmagnetisierung nur der erste Teil berücksichtigt, wobei der Clusterstrahl als Ensemble unabhängiger, sehr großer magnetischer Momente konstanter Länge (Superparamagnet) angesehen wird und $M(T, H)$ mittels der Langevin-Funktion beschrieben wird [8]. Die Reduktion der inneren magnetischen Ordnung der Cluster, welches zu einer reduzierten Länge des Gesamtspins pro Cluster führt, wird dabei jedoch vollkommen vernachlässigt. Im allgemeinen muss auch die Möglichkeit einer nichtkollinearen magnetischen Ordnung in diesen Clustern beachtet werden.

Die innere magnetische Ordnung $m_{int}(T, N)$ eines einzelnen Clusters wurde bisher mittels einer Molekularfeld Näherung berechnet, welche allerdings kollektive magnetische Anregungen (Spinwellen) vernachlässigt, sowie auch mit sehr aufwendigen Monte-Carlo-Simulationen [9]. Die Spinwellen verursachen die Abnahme der Magnetisierung proportional zu $T^{3/2}$ (Bloch-Gesetz) in ferromagnetischen Volumensystemen. Ein vergleichbares Verhalten wird für große Cluster erwartet. Für kleine Cluster hingegen existiert eine Energielücke vom Grundzustand zum ersten angeregten Zustand (endliche Wellenzahl aufgrund der begrenzten Clusterausdehnung), und es wird eher eine exponentielle Abnahme der Magnetisierung wie für isolierte atomare Spins erwartet. Es stellt sich die Frage, wie sich die innere Magnetisierung der Cluster als Funktion der Clustergröße verhält, speziell wie und wo sich die Magnetisierung von einem atomaren zu einem Festkörper-artigen Verhalten wandelt. Bisher wurden dafür Holstein-Primakoff-Rechnungen vorgenommen [10], welche allerdings nur bei niedrigen Temperaturen gültig sind, da dieser Ansatz Wechselwirkungen zwischen Spinwellen vernachlässigt.

In diesem Unterprojekt wurde die inneren Magnetisierung $m_{int}(T, H, N)$ eines Clusters als Funktion der Temperatur T , eines angewandten Magnetfelds H , sowie der Clustergröße N berechnet, um eine möglichst genaue Beschreibung der Gesamtmagnetisierung

des Clusterstrahles zu erhalten. Außerdem soll damit der Übergang des magnetischen Verhaltens mit zunehmender Clustergröße von einem kleinen Teilchen zu einem ausgedehnten Festkörper studiert werden. Um eine angemessene Beschreibung der Magnetisierung im gesamten Temperaturbereich zu erhalten, wird ein Greens-Funktions-Ansatz verwendet und mittels einer Holstein-Primakoff-Näherung oder mit der Tyablikov-(RPA-) Entkoppelung berechnet [11]. Dafür wurde eine Heisenberg-Hamilton-Funktion mit einem isotropen Austausch J , mit einer Gitteranisotropie K , sowie mit einem angewandten Magnetfeld H angenommen:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z ,$$

wobei \vec{S}_i für einen lokalisierten Spin am Gitterplatz i steht. Als Beispiel für die atomare Clusterstruktur wurden sogenannte Kubo-Oktaeder mit geschlossenen atomaren Schalen betrachtet, die Ausschnitte aus einem fcc-Gitter darstellen. Für die Rechnungen müssen N_G Greens Funktionen $G_{ij} = \langle\langle S_i^+; S_j^- \rangle\rangle$ verwendet werden. Unter Beachtung von atomaren Symmetrien ergeben sich für die ersten vier Kubo-Oktaeder mit geschlossenen Schalen die folgenden Zahlen, wobei N die Anzahl der Clusteratome und N_{ne} die nichtäquivalenten Gitterplätze angibt:

Schale	1	2	3	4
N	13	55	147	309
N_{ne}	2	5	9	16
N_G	8	92	462	1963

Aus dem resultierenden linearen Gleichungssystem ergibt sich die Matrix \mathbf{A} mit den Eigenwerten ω_l , $l = 1, \dots, N_G$. Die interne Magnetisierung $\langle S_i^z \rangle = m_{i,int}(T, N)$ des i -ten Spins wird mit Hilfe des Spektraltheorems berechnet:

$$m_{i,int}(T, N) = \langle S_i^z \rangle = S - \langle S_i^- S_i^+ \rangle = S - 2m_i \sum_n \frac{\prod_k (\omega_n - \omega_k)}{\prod_{l \neq n} (\omega_n - \omega_l)} \frac{1}{\exp(\omega_n/k_B T) - 1} ,$$

wobei die ω_k , $k = 1, \dots, N_G - 1$, die Eigenwerte der Adjungierten von \mathbf{A} hinsichtlich G_{ii} sind. Die interne Magnetisierung $m_{int}(T, N)$ des gesamten Clusters ist der Mittelwert über alle $m_{i,int}(T, N)$.

Um das Verhalten der internen Magnetisierung bei niedrigen Temperaturen zu untersuchen, wurde ein doppeltlogarithmisches Diagramm $\ln \Delta m_{int}(T, N)$ als Funktion von $\ln T$ für verschiedene Clustergrößen N aufgestellt, s. Abb. 7. Um überhaupt eine endliche Magnetisierung zu erhalten, musste ein kleines äußeres Magnetfeld H angenommen werden. Vorläufige Resultate zeigten, dass sich für kleine Cluster ($N = 13, 55$) ein eher atomares

Verhalten zeigt, nämlich eine exponentielle Abnahme von $\Delta m_{int}(T) \propto \exp(-J/T)$, wobei J die Austauschkopplung ist. Für größere Cluster ($N = 147,309$) hingegen ergibt sich eine lineare Abhängigkeit, also eine algebraische Abnahme $\Delta m_{int}(T, N)$ der inneren Magnetisierung mit einer Steigung von ca. $3/2$ (Bloch-Gesetz). Dieses Verhalten reflektiert die Existenz kollektiver magnetischer Anregungen in diesen großen Clustern.

Insgesamt ergibt sich eine deutliche Variation der inneren Magnetisierung als Funktion der Clustergröße, welche sich auch in der Gesamtmagnetisierung eines Clusterstrahles bemerkbar macht. Die Beachtung der reduzierten inneren Magnetisierung ist wichtig für den Vergleich der Messungen bei endlichen Temperaturen mit Rechnungen der magnetischen Momente bei $T = 0$. Weitere Rechnungen müssen diese vorläufigen Ergebnisse untermauern, etwa die Ermittlung der inneren Magnetisierung in einem größeren Temperaturbereich. Außerdem sollen weitere Clustergrößen berechnet werden, um das Verhalten der Magnetisierung bei einem Übergang von einem Teilchen zu einem Festkörper genauer zu studieren.

Veröffentlichungen: /JB 96/, /J 96/.

(7) Simulation der magnetischen Eigenschaften während des Wachstumes von nanostrukturierten dünnen Filmen

(R. Brinzanik, P. J. Jensen und K. H. Bennemann)

Es ist bekannt, dass die atomare Morphologie entscheidend ist für die magnetischen Eigenschaften. Die Wechselwirkung von atomarer und magnetischer Struktur ist besonders stark für sehr dünne Filme bzw. kleine Inseln auf nichtmagnetischen Unterlagen. Insbesondere während des Wachstumes eines Filmes ändert sich die atomare Morphologie andauernd, welches sich entsprechend auswirkt auf die magnetischen Eigenschaften, beispielweise auf die Magnetisierung und auf die magnetischen Domänenstruktur [12]. Außerdem ist hierbei zu beachten, dass wegen der dauernden Änderung der Randbedingungen weder die atomaren noch die magnetischen Zustände sich im thermodynamischen Gleichgewicht befinden und damit, außer von den sonstigen Präparationsbedingungen, auch von der Vorgeschichte des Systemes abhängen. So wird die Art der Domänenstruktur dünner Filme und ihre Relaxation in den stabilen Eindomänenzustand beispielsweise von der Richtung der Magnetisierung bestimmt [13].

In diesem Unterprojekt wurde die Entwicklung der magnetischen Ordnung und der Domänenstruktur im frühen Stadium des Filmwachstums unterhalb einer gefüllten Monolage untersucht, insbesondere unter Beachtung von Nichtgleichgewichtszuständen. Als Wachstumsmodell wurde das sogenannte Eden-Modell verwendet [14], welches verhältnismäßig einfach zu rechnen ist, doch bereits realistische Wachstumsmoden ergibt. Innerhalb die-

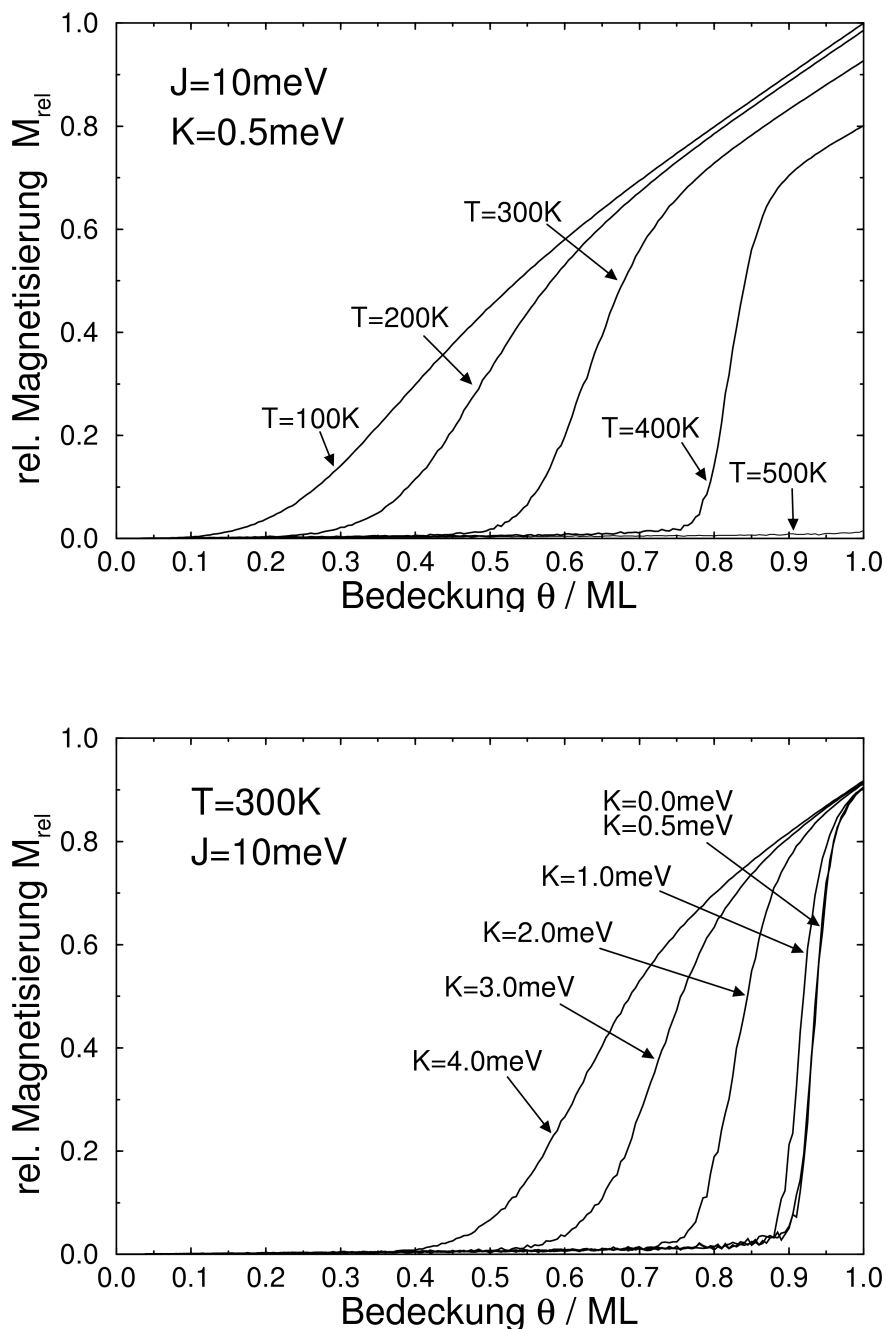


Abbildung 7: Magnetisierung eines dünnen Filmes als Funktion der Bedeckung bis zu einer Monolage. Nach jedem Schritt wird der Film homogen magnetisiert, und beginnt danach in Richtung Gleichgewicht zu relaxieren. Die Magnetisierung wird nach 5 sec bestimmt, und ist für (obere Figur) unterschiedliche Temperaturen T , und (untere Figur) unterschiedliche Gitteranisotropien K angegeben.

ses Modells werden zusätzliche Atome zufällig an bereits vorhandene Inseln angelagert und bleiben danach ortsfest. Damit wird also eine schnelle Oberflächendiffusion und eine langsame Diffusion entlang der Inselränder simuliert, was der Fall ist für viele metallische Dünnschichtsysteme bei Raumtemperatur. Auf dieses Wachstumsmodell werden nun magnetische Wechselwirkungen aufgesetzt, insbesondere die isotrope Austauschwechselwirkung J , die Gitteranisotropie K , die langreichweitige magnetische Dipolkopplung, sowie ein angewandtes Magnetfeld H . Durch die magnetischen Anisotropien werden bestimmte Raumrichtungen der Magnetisierung ausgezeichnet; hier beschränken wir uns der Einfachheit halber auf nur zwei 'leichte' Richtungen (uniaxiale Anisotropie). Während des Wachstums hat jede ferromagnetisch geordnete Insel die Möglichkeit, ihre Richtung der Magnetisierung zu wechseln, wobei nur eine kohärente Drehung der gesamten Insel erlaubt wird. Die magnetischen leichten Richtungen sind durch Energiebarrieren ΔE voneinander getrennt, welche durch thermische Anregungen überwunden werden können. Die Wahrscheinlichkeit dafür wird durch ein Arrhenius-Gesetz simuliert: $f = f_o \exp(\Delta E/k_B T)$, wobei f_o die Spinpräzessionsfrequenz und T die Temperatur ist. Diese Barrieren bestehen aus miteinander konkurrierenden Oberflächen- und Volumenanteilen, nämlich infolge der Austauschkopplung an den Berührungslinien zweier entgegengesetzt orientierter Inseln, sowie infolge der magnetischen Anisotropien und Magnetfelder proportional zum Inselvolumen. Für das Wachstum wie für das Überspringen der Energiebarrieren werden kinetische Monte-Carlo-Simulationen eingesetzt, wobei die Zeiteinheit durch den Vorfaktor f_o bestimmt wird. Die Inseldichte wird dem Experiment entnommen. Jede Insel wird als getrennte Einheit behandelt, auch wenn sie andere Inseln berührt.

In Abb. 8 wird die Domänenstruktur für unterschiedliche Geschwindigkeiten des Filmwachstums und unterschiedliche Temperaturen gezeigt. Die Wachstumsgeschwindigkeit hat Auswirkungen auf die Größe der entstehenden magnetischen Domänen. Für kleine Geschwindigkeiten haben die einzelnen Inseln mehr Zeit, vorhandene Energiebarrieren zu überwinden, und es sollten sich größere Domänen entwickeln. Andererseits werden für eine hohe Wachstumsgeschwindigkeit die Inseln zu schnell zu groß, um die Barrieren zu überwinden, und die Domänen sind kleiner. Eine höhere Temperatur begünstigt ebenfalls die Entwicklung größerer Domänen.

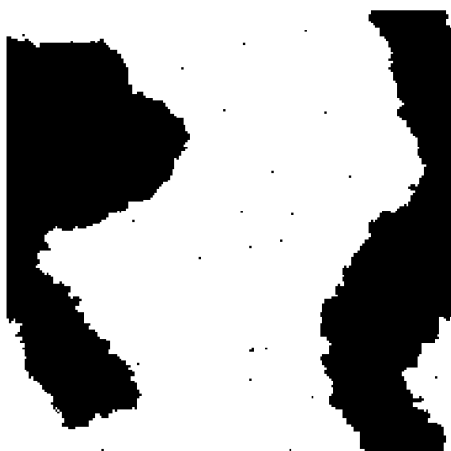
Weiterhin wurde die Wirkung der Temperatur sowie der Gitteranisotropie auf die langreichweitige Magnetisierung untersucht. Um das Experiment zu simulieren [15], wird der Film nach jedem Wachstumsschritt durch ein Magnetfeld homogen magnetisiert. Nach Abschalten des Feldes relaxiert der Film; die resultierende Magnetisierung wird nach einer bestimmten Zeit aufgenommen. Eine größere Temperatur erleichtert das Erreichen des thermischen Gleichgewichts, die resultierende Magnetisierung ist kleiner, und eine magnetische Fernordnung mit einer endlichen Curie-Temperatur entwickelt sich erst für etwas stärkere Bedeckungen. Dem steht die Anisotropie entgegen, durch die entsprechenden



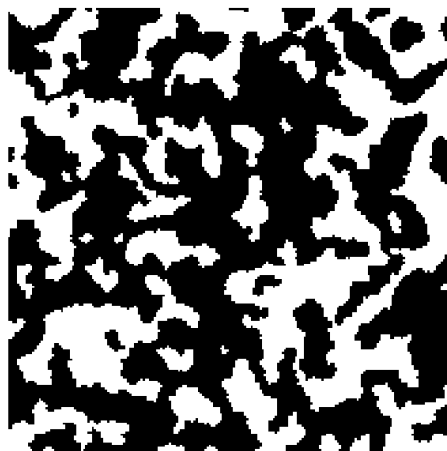
$T = 300$ K
0.01 ML/sec



$T = 300$ K
0.1 ML/sec



$T = 400$ K
0.01 ML/sec



$T = 100$ K
0.01 ML/sec

Abbildung 8: Domänenstruktur einer magnetischen Monolage für unterschiedliche Wachstumsgeschwindigkeiten und Temperaturen. Der Ausschnitt entspricht 2000×2000 Gitterkonstanten eines quadratischen (001)-Gitters.

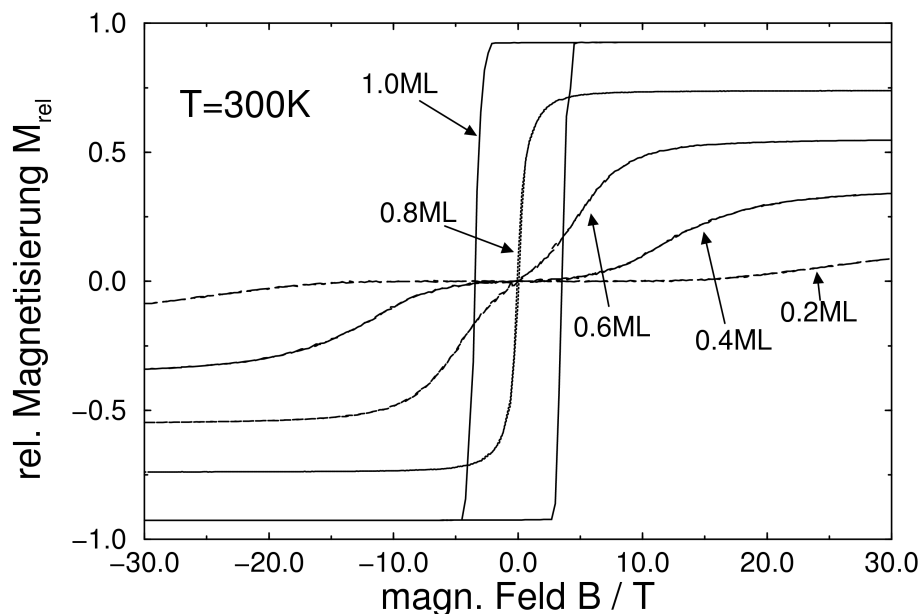


Abbildung 9: Hystereseschleife für unterschiedliche Bedeckungen bei einer Temperatur $T = 300$ K.

Energiebarrieren wird das Erreichen des Gleichgewichts behindert, und die resultierende Nichtgleichgewichts-Magnetisierung ist größer, s. Abb. 9. Es ist hervorzuheben, dass die magnetische Anisotropie die Entwicklung der magnetischen Fernordnung behindert, falls der Film nicht nach jedem Wachstumsschritt magnetisiert wird.

Schließlich wurde versucht, die magnetische Hysterese und die entsprechenden Koerzitivfeldstärken für unterschiedliche Temperaturen und Gitteranisotropien zu simulieren, s. Abb. 10. Das Verhalten des Koerzitivfeldes entspricht qualitativ den experimentellen Resultaten. Jedoch ist dessen Stärke übermässig groß, da eine Wanderung von Domänenwänden durch das vorhandene Modell noch schlecht beschrieben wird.

Zusammenfassend wurde ein Modell aufgestellt, welches die zeitliche und räumliche Entwicklung der magnetischen Domänenstruktur und anderen magnetischen Eigenschaften während des Wachstumes eines dünnen Filmes simuliert. Es können endliche Temperaturen sowie thermodynamische Nichtgleichgewichtszustände berücksichtigt werden. Eine deutliche Variation der Domänengröße mit der Temperatur und der Wachstumsgeschwindigkeit wurde erhalten. Dieses Modell soll verfeinert werden, um einen quantitativen Vergleich mit experimentellen Resultaten zu erlauben.

Veröffentlichungen: /BJB 99/.

Literatur

- [1] G. Ganteför, W. Eberhardt, H. Weidele, D. Kreisle and E. Recknagel, Phys. Rev. Lett. **77**, 4524 (1996).
- [2] Th. Reiners and H. Haberland, Phys. Rev. Lett. **77**, 2440 (1996).
- [3] S. Grabowski, M. E. Garcia and K. H. Bennemann, Phys. Rev. Lett. **72**, 3969 (1994).
- [4] W. A. de Heer, P. Milani, and A. Châtelain, Phys. Rev. Lett. **65**, 488 (1990); J. P. Bucher, D. C. Douglass, and L. A. Bloomfield, Phys. Rev. Lett. **66**, 3052 (1991).
- [5] A. Vega, J. Dorantes-Dávila, L. C. Balbás, and G. M. Pastor, Phys. Rev. B **47**, 4742 (1992).
- [6] A. J. Cox, J. G. Louderback, and L. A. Bloomfield, Phys. Rev. Lett. **71**, 923 (1993); B. V. Reddy, S. N. Khanna, and B. I. Dunlap, Phys. Rev. Lett. **70**, 3323 (1993).
- [7] I. M. L. Billas, A. Châtelain, and W. A. de Heer, Science **265**, 1682 (1994); S. E. Apsel, J. W. Emmert, J. Deng, and L. A. Bloomfield, Phys. Rev. Lett. **76**, 1441 (1996); P. J. Jensen, and K. H. Bennemann, Z. Phys. D **35**, 67 (1995).
- [8] S. N. Khanna and S. Linderöth, Phys. Rev. Lett. **67**, 742 (1991).
- [9] P. J. Jensen, S. Mukherjee, and K. H. Bennemann, Z. Phys. D **21**, 356 (1991); K. Binder, H. Rauch, and V. Wildpaner, J. Phys. Chem. Solids **31**, 391 (1970); J. Merikoski, J. Timonen, and M. Manninen, Phys. Rev. Lett. **66**, 928 (1991).
- [10] P. V. Hendriksen, S. Linderöth, and P. A. Lindgård, J. Phys. C **31**, 5675 (1993); Phys. Rev. B **48**, 7259 (1993).
- [11] S. W. Tyablicov, Quantentheoretische Methoden des Magnetismus, Teubner Verlag, Stuttgart (1969).
- [12] R. Allenspach et al., Phys. Rev. Lett. **65**, 3344 (1990).
- [13] H. P. Oepen et al., Phys. Rev. B **55**, 2752 (1997).
- [14] M. Eden, in Symp. on Information Theory in Biology, p. 359 (H. P. Yockey, ed.) Pergamon Press, New York (1958).
- [15] G. Fahsold, thesis, FU Berlin (1994).

Publikationen

- GGB 96a S. Grabowski, M. E. Garcia and K. H. Bennemann
Alternative Microscopic Approach to the Photoabsorption of Small Clusters.
Modern Physics Letters B **10**, p. 241-268 (1996).
- GGB 96b M. E. Garcia, S. Grabowski and K. H. Bennemann
Wannier-Type Theory for the Optical Excitations in Small Clusters.
Clusters and Nanostructured Materials, edited by P. Jena and S. N. Behera,
Nova Science Publishers, Inc., New York 1996, p. 285-294.
- GGB 96c S. Grabowski, M. E. Garcia and K. H. Bennemann
On the Electron-Hole and Collective Excitations in Small Clusters: Dependence on Atomic Structure and Size.
Structures and Dynamics of Clusters, Frontiers Science Series No. 16, edited by T. Kondow, K. Kaya and A. Terasaki, Universal Academic Press, Inc., Tokyo 1996, p. 547-551.
- ZGB 99 T. Zabel, M. E. Garcia and K. H. Bennemann
Eur. Phys. J. D **7**, p. 219-227 (1999).
- DHB 96 J. P. Dewitz, W. Hübner und K. H. Bennemann
Theory for nonlinear Mie-scattering from spherical metal clusters.
Z. Phys. D **37**, p. 75-84 (1996)
- KKD 97 J. Kasparian, B. Krämer, J. P. Dewitz, S. Vajda, P. Rairoux, B. Vezin, V. Boutou, T. Leisner, W. Hübner, J. P. Wolf, L. Wöste und K. H. Bennemann
Angular Dependences of Third Harmonic Generation from Microdroplets.
Phys. Rev. Lett. **78**, p. 2952-2955 (1997).
- DH 98 J. P. Dewitz und W. Hübner
Reply.
Phys. Rev. Lett. **81**, p. 4273-4273 (1998)
- GSGB 98 M. E. Garcia, Ll. Serra, F. Garcias and K. H. Bennemann
Nonradiative Deexcitation Time Scales of Spherical Metal Clusters.
Phys. Rev. B **57**, p. 4895-4899 (1998).
- WMSG 97 Bu. Wrenger and K. H. Meiwes-Broer, O. Speer and M. E. Garcia
Femtosecond Neutralization Dynamics in Cluster-Solid Surface Collisions.
Phys. Rev. Lett. **79**, p. 2562-2565 (1997).
- GSWM 98 M. E. Garcia, O. Speer, B. Wrenger and K. H. Meiwes-Broer
Electron emission induced by Cluster-Surface Collisions: a fingerprint for the neutralization dynamics?
Proceedings of the 21st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Marseille, France, July 26-31, (1998).

- SGWM 99 O. Speer, M. E. Garcia, B. Wrenger and K. H. Meiwes-Broer
Interplay between emission of electrons and quasiresonant ultrafast electron tunneling in cluster-surface collisions.
Surf. Sci. **443**, p. 195-211 (1999).
- JB 96 P. J. Jensen and K. H. Bennemann
Magnetic properties of transition metal and rare earth metal clusters.
Proceedings of the International Workshop on Clusters and Nanostructured Materials, Dec 1994 – Jan 1995, Puri, India, p. 277 - 284 (P. Jena and S. N. Behera, eds.; Nova Science Publishers Inc., New York (1996)).
- J 96 P. J. Jensen
Theory for the collective magnetic excitations in ferromagnetic clusters.
Eight International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (IS-SPIC 8), Kopenhagen, Denmark, 1.-6.7.1996 (abstract).
- BJB 99 R. Brinzanik, P. J. Jensen and K. H. Bennemann
Simulation of the magnetic properties during the growth of nanostructured thin films.
4th International Conference on Nanostructured Materials (Nano'98), Jun 1998, Stockholm, Sweden, Nanostruct. Mater. **12**, p. 9-12 (1999).

Wissenschaftliche Mitarbeiter des Teilprojektes C1 in den Jahren 1996-98

Prof. Dr. Karl-Heinz Bennemann, Prof. Dr. Wolfgang Hübner, Dr. Martin E. Garcia, Dr. Peter J. Jensen, Dr. Jörg Dewitz, Dr. Sören Grabowski, Harald O. Jeschke, Thomas Zabel, Oliver Speer, Roman Brinzanik, Kirsten Zickfeld.

Diplom-Arbeiten

Jeschke, Harald: Theorie für die ultraschnellen strukturellen Veränderungen nach Anregung mit Femtosekunden-Laserpulsen in kleinen Clustern und im Festkörper (Dez 1996).

Zabel, Thomas: Elektronische Theorie der Photoabsorption kleiner Ag-Cluster (Mai 1997).

Speer, Oliver: Elektronenemission und Femtosekunden-Neutralisierungsdynamik bei Kollisionen von Clustern mit Oberflächen (Sep 1997).

Zickfeld, Kirsten: Laserinduziertes Schmelzen und Femtosekunden-Metallisierung von Silizium-Clustern (Apr 1998).