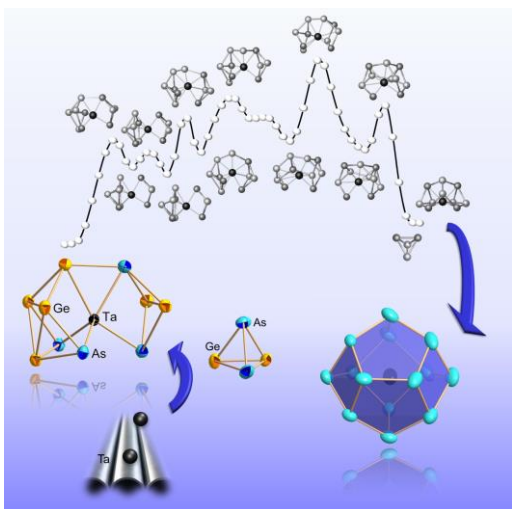


## Nature Communications: Wie Metallcluster wachsen

Forscherteam aus Marburg und Karlsruhe bringt Licht in die Blackbox der Clusterbildung / Grundlage für maßgeschneiderte opto-elektronische und magnetische Materialien



*Schritt für Schritt zur vollständigen Hülle: Bildung eines Metallclusters von den atomaren Bestandteilen bis zur fertigen Verbindung. (Bild: AG Dehnen, Philipps-Universität Marburg)*

**Erst der Kern, dann die Schale: Forscher aus Marburg und Karlsruhe haben den schrittweisen Aufbau von Metallcluster-Verbindungen, den kleinsten Ausschnitten von Metallen in molekularer Form, verfolgt. Die Hülle formt sich schrittweise um das innere Atom und nicht indem sich das zentrale Atom erst nachträglich einnistet. Das Wissen über die Entwicklungsschritte könnte maßgeschneiderte opto-elektronische und magnetische Eigenschaften ermöglichen, wie die Forscher im Wissenschaftsmagazin „Nature Communications“ berichten. (DOI: 10.1038/NCOMMS10480)**

Um chemische Verbindungen gezielt synthetisieren zu können, muss man die Mechanismen kennen, die für ihre Bildung verantwortlich sind. „Rein anorganische Verbindungen sind in dieser Hinsicht weitgehend eine Blackbox“, erklären Florian Weigend vom Karlsruher Institut für Technologie und Stefanie Dehnen von der Philipps-Universität Marburg, die Korrespondenzautoren der aktuellen Studie. „Das gilt insbesondere für die Bildung vielkerniger Me-

**Monika Landgraf**  
Pressesprecherin

Kaiserstraße 12  
76131 Karlsruhe  
Tel.: +49 721 608-47414  
Fax: +49 721 608-43658  
E-Mail: [presse@kit.edu](mailto:presse@kit.edu)

**Weiterer Kontakt:**

Kosta Schinarakis  
PKM – Themenscout  
Tel.: +49 721 608 41956  
Fax: +49 721 608 43658  
E-Mail: [schinarakis@kit.edu](mailto:schinarakis@kit.edu)

tallkomplexe, sogenannter Cluster.“ Die Prozesse beim Umbau metallhaltiger Cluster gehen so schnell vonstatten, dass es normalerweise nicht möglich ist, diese Vorgänge und die Zwischenprodukte zu beobachten. „Schon die allerersten Schritte sind noch weitgehend unerforscht und lassen sich nur aufklären, indem man Synthese, Messung und computerchemische Modellierung miteinander kombiniert“, erklären die Experten. Würde man alle Entwicklungsschritte kennen, so ließen sich für technische Anwendungen Metall-Cluster maßschneidern, die fein justierbare opto-elektronische und magnetische Eigenschaften aufweisen.

In der aktuellen Studie verfolgte das Team die Bildung eines vielkernigen Metallclusters, indem es zunächst eine Serie von Clustern verschiedener Größe synthetisierte, die aus den Halbmetallen Germanium und Arsen bestehen. Bei den größeren Vertretern befindet sich ein Atom des Übergangsmetalls Tantal im Zentrum der Käfigmoleküle. Die Befunde aus Messung und Computersimulation legen nahe, dass das Übergangsmetall bei der Clusterbildung sehr früh ins Spiel kommt. „Es kann als ein Art Katalysator angesehen werden, der das Knüpfen und Lösen von Bindungen anstößt“, so Weigend und Dehnen. Alles in allem zeigen die Befunde, dass sich das Übergangsmetall nicht in eine vorweg entstandene Clusterhülle einfügt, sondern dass sich die Schale des Clusters schrittweise um das Atom im Zentrum herum bildet. „Die Ergebnisse lassen sich für eine ganze Familie metallischer Clusterverbindungen verallgemeinern“, sind sich Weigend und Dehnen sicher.

Ergänzend zu den chemischen Synthesen und Messungen in Marburg wurden für die vorliegende Studie umfangreiche Computersimulationen in Karlsruhe mit dem in großen Teilen am KIT entwickelten Quantenchemie-Programmpaket TURBOMOLE vorgenommen. Dadurch wurde es möglich die Rolle der vielen Isomere in der Reaktion aufzudecken. Isomere sind chemische Verbindungen gleicher Zusammensetzung, die sich aber in der räumlichen Anordnung der Atome unterscheiden. „Dank der Berechnung der Reaktionspfade haben wir herausgefunden, dass Umwandlungen zwischen Isomeren unter verhältnismäßig geringem Energieaufwand möglich sind“, so Weigend.

Neben Dehnen und Weigend sowie dem Doktoranden Stefan Mitzinger sind die Humboldt-Stipendiatin Lies Broeckaert und Werner Massa, ehemaliger Leiter der Marburger Abteilung für Kristallstrukturanalyse, an der aktuellen Veröffentlichung beteiligt. Die zugrunde liegenden Forschungsarbeiten wurden durch die Alexander von Humboldt-Stiftung, die Friedrich-Ebert-Stiftung sowie die Deutsche Forschungsgemeinschaft finanziell unterstützt.

Stefan Mitzinger & al.: Understanding of Multimetallic Cluster Growth, Nature Communications 25. Januar 2016, DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/NCOMMS10480>

Webportal der Forschergruppe Weigend:

<http://www.ipc.kit.edu/theochem/753.php>

**Das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) verbindet seine drei Kernaufgaben Forschung, Lehre und Innovation zu einer Mission. Mit rund 9 400 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern sowie 24 500 Studierenden ist das KIT eine der großen natur- und ingenieurwissenschaftlichen Forschungs- und Lehrinrichtungen Europas.**

**KIT – Die Forschungsuniversität in der Helmholtz-Gemeinschaft**

*Das KIT ist seit 2010 als familiengerechte Hochschule zertifiziert.*

Diese Presseinformation ist im Internet abrufbar unter: [www.kit.edu](http://www.kit.edu)

Das Foto steht in druckfähiger Qualität auf [www.kit.edu](http://www.kit.edu) zum Download bereit und kann angefordert werden unter: [presse@kit.edu](mailto:presse@kit.edu) oder +49 721 608-47414. Die Verwendung des Bildes ist ausschließlich in dem oben genannten Zusammenhang gestattet.