

Bibliography

- [1] Cho, A. *Science* **2003**, *299*, 1684-1685.
- [2] Daniel, M.-C.; Astruc, D. *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 293-346.
- [3] Haruta, M.; Kobayashi, T.; Samo, H.; Yamada, N. *Chem. Lett.* **1987**, *2*, 405-408.
- [4] Haruta, M.; Yamada, N.; Kobayashi, T.; Ijima, S. *J. Catal.* **1989**, *115*, 301-309.
- [5] Haruta, M.; Tsubota, S.; Kobayashi, T.; Kageyama, H.; Genet, M. J.; Delmon, B. *J. Catal.* **1993**, *144*, 175-192.
- [6] Haruta, M. *Catal. Today* **1997**, *36*, 153-166.
- [7] Bond, G. C.; Thompson, D. T. *Catal. Rev. - Sci. Eng.* **1999**, *41*, 319-388.
- [8] Meiwes-Broer, K. H.; Lutz, H. O. *Phys. Blätter* **1991**, *47*, 283-288.
- [9] Landman, U. "Small is Different". In *Book of Abstracts ISSPIC 11*; Strasbourg, Sept. 9-13, 2002.
- [10] Sanchez, A.; Abbet, S.; Heiz, U.; Schneider, W. D.; Häkkinen, H.; Barnett, R. N.; Landman, U. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 9573-9578.
- [11] Herrmann, A.; Hofmann, H.; Leutwyler, S.; Wöste, L.; Schumacher, E. *Chem. Phys. Lett.* **1979**, *62*, 216-222.
- [12] Mühlbach, J.; Recknagel, E.; Sattler, K. *Surf. Sci.* **1981**, *106*, 188-194.
- [13] Hoareau, A.; Cabaud, B.; Mélinon, P. *Surf. Sci.* **1981**, *106*, 195-203.

- [14] Devienne, F. M.; Combarieu, R.; Teisseire, M. *Surf. Sci.* **1981**, *106*, 204-211.
- [15] Delacrétaz, G.; Wöste, L. *Surf. Sci.* **1985**, *156*, 770-776.
- [16] Zewail, A. H. *Femtochemistry: Ultrafast Dynamics of the Chemical Bond*; World Scientific: Singapore, 1994.
- [17] Manz, J.; Wöste, L., Eds.; *Femtosecond Chemistry*; VCH Verlag: Weinheim, 1995.
- [18] Zewail, A. H. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 5660-5694.
- [19] Wolf, S.; Sommerer, G.; Rutz, S.; Schreiber, E.; Leisner, T.; Wöste, L.; Berry, R. S. *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *74*, 4177-4180.
- [20] Steinfeld, J. I.; Francisco, J. S.; Hase, W. L. *Chemical Kinetics and Dynamics*; Prentice-Hall: New Jersey, 1998.
- [21] Laidler, K. J. *Chemical Kinetics*; Harper Collins Publishers: New York, 1987.
- [22] Levine, R. D.; Bernstein, R. B. *Molecular Reaction Dynamics and Chemical Reactivity*; Oxford University Press: New York, 1987.
- [23] Schnabel, P.; Irion, M. P.; Weil, K. G. *J. Phys. Chem.* **1991**, *95*, 9688-9694.
- [24] Wesendrup, R.; Schwarz, H. *Organometallics* **1997**, *16*, 461-466.
- [25] Shi, Y.; Ervin, K. M. *J. Chem. Phys.* **1998**, *108*, 1757-1760.
- [26] Bérces, A.; Hackett, P. A.; Lian, L.; Mitchell, S. A.; Rayner, D. M. *J. Chem. Phys.* **1998**, *108*, 5476-5490.
- [27] Koszinowski, K.; Schröder, D.; Schwarz, H. *Organometallics* **2004**, *23*, 1132-1139.
- [28] Hoff, J. H. V. *Études de Dynamique Chimique*; Muller: Amsterdam, 1884.
- [29] Arrhenius, S. *Z. Phys. Chem.* **1889**, *4*, 226-248.
- [30] Mann, A. P. C.; Williams, D. A. *Nature* **1980**, *283*, 721-725.

- [31] Böhringer, H.; Glebe, W.; Arnold, F. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **1983**, *16*, 2619-2626.
- [32] Leuchtner, R. E.; Harms, A. C.; Castleman, A. W. *J. Chem. Phys.* **1990**, *92*, 6527-6537.
- [33] Andersson, M.; Person, J. L.; Rosén, A. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 12222-12234.
- [34] Knickelbein, M. B. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **1999**, *50*, 79-115.
- [35] Ervin, K. M. *Int. Rev. Phys. Chem.* **2001**, *20*, 127-164.
- [36] Langevin, P. *Ann. Chem. Phys.* **1905**, *5*, 245-288.
- [37] Chesnavich, W. J.; Su, T.; Bowers, M. T. *J. Chem. Phys.* **1980**, *72*, 2641-2655.
- [38] Su, T.; Chesnavich, W. J. *J. Chem. Phys.* **1982**, *76*, 5183-5185.
- [39] Lindemann, F. A. *Trans. Faraday Soc.* **1922**, *17*, 598.
- [40] Meot-Ner, M.; Solomon, J. J.; Field, F. H.; Gershinowitz, G. *J. Phys. Chem.* **1974**, *78*, 1773-1774.
- [41] Hiraoka, K.; Kebarle, P. *J. Chem. Phys.* **1975**, *63*, 746-749.
- [42] Böhringer, H.; Arnold, F. *J. Chem. Phys.* **1982**, *77*, 5534-5541.
- [43] Clary, D. C.; Smith, D.; Adams, N. G. *Chem. Phys. Lett.* **1985**, *119*, 320-326.
- [44] Herbst, E. *J. Chem. Phys.* **1979**, *70*, 2201-2204.
- [45] Bohme, D. K.; Dunkin, D. B.; Fehsenfeld, F. C.; Ferguson, E. E. *J. Chem. Phys.* **1969**, *51*, 863-872.
- [46] Gilbert, R. G.; Smith, S. C. *Theory of Unimolecular and Recombination Reactions*; Blackwell Scientific Publications: Oxford, 1990.
- [47] Rice, O. K.; Ramsperger, H. C. *J. Am. Chem. Soc.* **1927**, *49*, 1617-1629.
- [48] Kassel, L. S. *J. Phys. Chem.* **1928**, *32*, 225-242.

- [49] Jarrold, M. F. Introduction to Statistical Reaction Rate Theories. In *Clusters of Atoms and Molecules - Theory, Experiment and Clusters of Atoms*; Haberland, H., Ed.; Springer-Verlag: 1994.
- [50] Kassel, L. S. *J. Phys. Chem.* **1928**, *32*, 1065-1079.
- [51] Marcus, R. A. *J. Chem. Phys.* **1952**, *20*, 359-364.
- [52] Cox, D. M.; Reichmann, K. C.; Trevor, D. J.; Kaldor, A. *J. Chem. Phys.* **1988**, *88*, 111-119.
- [53] Moore, W. J. *Physikalische Chemie*; Walter de Gruyter: Berlin, 1986.
- [54] Brdička, R. *Grundlagen der Physikalischen Chemie*; VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften: Berlin, 1958.
- [55] Riedel, E. *Anorganische Chemie*; Walter de Gruyter: Berlin, 1999.
- [56] Atkins, P. W. *Physical Chemistry*; Oxford University Press: Oxford, 1994.
- [57] Socaciu, L. D.; Hagen, J.; Bernhardt, T. M.; Wöste, L.; Heiz, U.; Häkkinen, H.; Landman, U. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 10437-10445.
- [58] Bell, A. T. *Science* **2003**, *299*, 1688-1691.
- [59] Henry, C. R. *Surf. Sci. Reports* **1998**, *31*, 235-325.
- [60] Heiz, U.; Schneider, W.-D. Physical Chemistry of Supported Clusters. In *Metal Clusters at Surfaces-Structure, Quantum Properties, Physical Chemistry*; Meiwes-Broer, K. H., Ed.; Springer Verlag: 2000.
- [61] Heiz, U.; Sanchez, A.; Abbet, S.; Schneider, W. D. *Chem. Phys.* **2000**, *262*, 189-200.
- [62] Häkkinen, H.; Abbet, S.; Sanchez, A.; Heiz, U.; Landman, U. *Angew. Chem.* **2003**, *115*, 1335-1338.
- [63] Piccolo, L.; Becker, C.; Henry, C. R. *Appl. Surf. Sci.* **2000**, *164*, 156-162.
- [64] Heiz, U.; Sanchez, A.; Abbet, S.; Schneider, W. D. *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 3214-3217.

- [65] Haruta, M.; Daté, M. *Appl. Catal. A* **2001**, *222*, 427-437.
- [66] Valden, M.; Lai, X.; Goodman, D. W. *Science* **1998**, *281*, 1647-1650.
- [67] Kappes, M. M.; Stanley, R. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, *103*, 1286-1287.
- [68] Born, M.; Oppenheimer, R. *Ann. Phys.* **1927**, *84*, 457-484.
- [69] Haken, H.; Wolf, H. C. *Molekülphysik und Quantenchemie*; Springer Verlag: Berlin, 2003.
- [70] Reinhold, J. *Quantentheorie der Moleküle*; Teubner Verlag: Stuttgart, 1994.
- [71] Wöste, L. *Z. Phys. Chemie* **1996**, *196*, 1-41.
- [72] Leisner, T.; Vajda, Š.; Wolf, S.; Wöste, L.; Berry, R. S. *J. Chem. Phys.* **1999**, *111*, 1017-1021.
- [73] Hess, H.; Kwiet, S.; Socaciu, L.; Wolf, S.; Leisner, T.; Wöste, L. *Appl. Phys. B* **2000**, *71*, 337-341.
- [74] Hess, H.; Asmis, K. R.; Leisner, T.; Wöste, L. *Eur. Phys. J. D* **2001**, *16*, 145-149.
- [75] Heß, H. *Femtosekunden-Spektroskopie an kalten Metallclustern*, Thesis, Freie Universität Berlin, 1999.
- [76] Wolf, S. *Zeitaufgelöste Spektroskopie an Silberclustern*, Thesis, Freie Universität Berlin, 1997.
- [77] Hartmann, M.; Pittner, J.; Bonačić-Koutecký, V.; Heidenreich, A.; Jortner, J. *J. Chem. Phys.* **1998**, *108*, 3096-3113.
- [78] Hartmann, M.; Heidenreich, A.; Pittner, J.; Bonačić-Koutecký, V.; Jortner, J. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 4069-4074.
- [79] Hagen, J. *Reaktivität und Femtosekundendynamik kleiner Silbercluster und gemischter Silber-Gold-Cluster*, Thesis, Freie Universität Berlin, 2004.
- [80] Schmidt, M.; Cahuzac, P.; Bréchnignac, C.; Cheng, H.-P. *J. Chem. Phys.* **2003**, *118*, 10956-10962.

- [81] Stolcic, D.; Fischer, M.; Ganteför, G.; Kim, Y. D.; Sun, Q.; Jena, P. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 2848-2849.
- [82] Dietz, T. G.; Duncan, M. A.; Powers, D. E.; Smalley, R. E. *J. Chem. Phys.* **1981**, *74*, 6511-6512.
- [83] Frank, F.; Schulze, W.; Tesche, B.; Urban, J.; Winter, B. *Surf. Sci.* **1985**, *156*, 90-99.
- [84] Keller, R.; Nöhmayer, F.; Spädtke, P.; Schöneberg, M. H. *Vacuum* **1984**, *34*, 31-35.
- [85] Lee, T. H.; Ervin, K. M. *J. Phys. Chem.* **1994**, *98*, 10023-10031.
- [86] Balteanu, I.; Balaj, O. P.; Fox, B. S.; Beyer, M. K.; Bastl, Z.; Bondybey, V. E. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, *5*, 1213-1218.
- [87] Dietrich, G.; Krükeberg, S.; Lützenkirchen, K.; Schweikhard, L.; Walther, C. *J. Chem. Phys.* **2000**, *112*, 752-760.
- [88] Asmis, K. R.; Brümmer, M.; Kaposta, C.; Santambrogio, G.; Helden, G. V.; Meijer, G.; Rademann, K.; Wöste, L. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2002**, *4*, 1101-1104.
- [89] Paul, W.; Lücke, B.; Schlemmer, S.; Gerlich, D. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.* **1995**, *149/150*, 373-387.
- [90] Socaciu, L. D.; Hagen, J.; Heiz, U.; Bernhardt, T. M.; Leisner, T.; Wöste, L. *Chem. Phys. Lett.* **2001**, *340*, 282-288.
- [91] Lide, D. R., Ed.; *CRC Handbook of Chemistry and Physics*; CRC Press, Inc.: Florida, 2000.
- [92] Krämer, B. "Der "Phasenraumkompressor": Eine neuartige Methode zur Erzeugung eines intensiven Strahls von Metallclusterionen", Master's thesis, Freie Universität Berlin, 1993.
- [93] Busolt, U. *Zwei-Photonen-Photoemission an massenselektierten Silber-Clustern auf Graphit*, Thesis, Freie Universität Berlin, 2000.

- [94] Paul, W.; Steinwedel, H. *Z. Naturforschung* **1953**, *8a*, 448-450.
- [95] Paul, W.; Raether, M. *Z. Physik* **1955**, *140*, 262-273.
- [96] Paul, W.; Reinhard, H. P.; Zahn, U. V. *Z. Physik* **1958**, *152*, 143-182.
- [97] Gerlich, D. *Inhomogeneous RF Fields: A Versatile Tool for the Study of Processes with Slow Ions*; volume LXXXII of *Advances in Chemical Physics Series* John Wiley and Sons, Inc.: 1992.
- [98] Rothe, E. W. *J. Vac. Sci. Technol.* **1964**, *1*, 66-68.
- [99] Lorient, G.; Moran, T. *Rev. Sci. Instrum.* **1975**, *46*, 140-143.
- [100] Westergren, J.; Grönbeck, H.; Kim, S.-G.; Tománek, D. *J. Chem. Phys.* **1997**, *107*, 3071-3079.
- [101] Westergren, J.; Grönbeck, H.; Rosén, A.; Nordholm, S. *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 9848-9858.
- [102] Krenz, M. "Aufbau eines sub-30 fs Ti:Saphir Oszillators und dessen Erweiterung um ein Multipass-Verstärkersystem mit nachgeschalteten TOPAS - Pulscharakterisierung mittels eines eigenkonstruierten Photodioden-Autokorrelators", Master's thesis, Freie Universität Berlin, 2001.
- [103] Huang, C.-P.; Kapteyn, H. C.; McIntosh, J. W.; Murnane, M. M. *Opt. Lett.* **1992**, *17*, 139-141.
- [104] Silfvast, W. T. *Laser Fundamentals*; Cambridge University Press: Cambridge, 1996.
- [105] Backus, S.; Durfee, C. G.; Murnane, M. M.; Kapteyn, H. C. *Rev. Sci. Instrum.* **1998**, *69*, 1207-1223.
- [106] Blanc, C. L.; Curley, P.; Salin, F. *Opt. Commun.* **1996**, *131*, 391-398.
- [107] Schröder, B. *Opt. and Quant. Electronics* **1983**, *15*, 57-63.
- [108] Rullière, C. *Femtosecond Laser Pulses - Principles and Experiments*; Springer Verlag: Berlin, 1998.

- [109] Aeschlimann, M.; Bauer, M.; Pawlik, S. *Chem. Phys.* **1996**, *205*, 127-141.
- [110] Knight, W. D.; Clemenger, K.; de Heer, W. A.; Saunders, W. A.; Chou, M. Y.; Cohen, M. L. *Phys. Rev. Lett.* **1984**, *52*, 2141-2143.
- [111] Cox, D. M.; Brickman, R.; Creegan, K.; Kaldor, A. *Z. Phys. D - Atoms, Molecules and Clusters* **1991**, *19*, 353-355.
- [112] Yoon, B.; Häkkinen, H.; Landman, U. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 4066-4071.
- [113] Lian, L.; Hackett, P. A.; Rayner, D. M. *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 2583-2590.
- [114] Mills, G.; Gordon, M. S.; Metiu, H. *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *359*, 493-499.
- [115] Sun, Q.; Jena, P.; Kim, Y. D.; Fischer, M.; Ganteför, G. *J. Chem. Phys.* **2004**, *120*, 6510-6515.
- [116] Rao, C. N. R.; Kamath, P. V.; Yashonath, S. *Chem. Phys. Lett.* **1982**, *88*, 13-16.
- [117] Nakatsuji, H.; Hu, Z.-M.; Nakai, H.; Ikeda, K. *Surf. Sci.* **1997**, *387*, 328-341.
- [118] Manard, M. J.; Kemper, P. R.; Bowers, M. T. *Int. J. Mass. Spectrom.* **2003**, *228*, 865-877.
- [119] Irion, M. P.; Selinger, A. *Chem. Phys. Lett.* **1989**, *158*, 145-151.
- [120] Schwerdtfeger, P. *Heteroat. Chem.* **2002**, *13*, 578-584.
- [121] Pyykkö, P. *Angew. Chem.* **2002**, *114*, 3723-3728.
- [122] Jug, K.; Zimmermann, B.; Calaminici, P.; Köster, A. M. *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 4497-4507.
- [123] Bonačić-Koutecký, V.; Češpiva, L.; Fantucci, P.; Koutecký, J. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 7981-7994.
- [124] Weis, P.; Bierweiler, T.; Gilb, S.; Kappes, M. M. *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *355*, 355-364.

- [125] Gilb, S.; Weis, P.; Furche, F.; Ahlrichs, R.; Kappes, M. M. *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 4094-4101.
- [126] Häkkinen, H.; Moseler, M.; Landman, U. *Phys. Rev. Lett.* **2002**, *89*, 033401-1 to 033401-4.
- [127] Blyholder, G. *J. Phys. Chem.* **1964**, *68*, 2772-2778.
- [128] Wu, X.; Senapati, L.; Nayak, S. K.; Selloni, A.; Hajaligol, M. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 4010-4015.
- [129] Salisbury, B. E.; Wallace, W. T.; Whetten, R. L. *Chem. Phys.* **2000**, *262*, 131-141.
- [130] Hagen, J.; Socaciu, L. D.; LeRoux, J.; Popolan, D.; Bernhardt, T. M.; Wöste, L.; Mitrić, R.; Noack, H.; Bonačić-Koutecký, V. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 3442-3443.
- [131] Socaciu, L. D.; Hagen, J.; LeRoux, J.; Popolan, D.; Bernhardt, T. M.; Vajda, Š.; Wöste, L. *J. Chem. Phys.* **2004**, *120*, 2078-2081.
- [132] Taylor, K. J.; Pettiette-Hall, C. L.; Cheshnovsky, O.; Smalley, R. E. *J. Chem. Phys.* **1992**, *96*, 3319-3329.
- [133] Schumacher, E. “*Detmech - Chemical Reaction Kinetics Software*”, University of Bern, Chemistry Department, 1997, <http://dcbwww.unibe.ch/>.
- [134] Hinsberg, B.; Houle, F. “*Chemical Kinetics Simulator*”, IBM Almaden Research Center, 1996, <http://www.almaden.ibm.com>.
- [135] Drahos, L.; Vékey, K. “*MassKinetics Scientific*”, Hungarian Academy of Sciences, Chem. Res. Center, Inst. of Chemistry, 2001, <http://www.chemres.hu/ms/masskinetics>.
- [136] Drahos, L.; Vékey, K. *J. Mass Spectrom.* **2001**, *36*, 237-263.
- [137] Yuan, D. W.; Zeng, Z. *J. Chem. Phys.* **2004**, *120*, 6574-6584.
- [138] Ho, J.; Ervin, K. M.; Lineberger, W. C. *J. Chem. Phys.* **1990**, *93*, 6987-7002.

- [139] Bürgel, C.; Mitrić, R.; Bonačić-Koutecký, V. private communication.
- [140] Wallace, W. T.; Leavitt, A. J.; Whetten, R. L. *Chem. Phys. Lett.* **2003**, *368*, 774-777, and references therein.
- [141] Varganov, S. A.; Olson, R. M.; Gordon, M. S.; Metiu, H. *J. Chem. Phys.* **2003**, *119*, 2531-2537.
- [142] Wallace, W. T.; Wyrwas, R. B.; Whetten, R. L.; Mitrić, R.; Bonačić-Koutecký, V. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 8408-8414.
- [143] Bürgel, C. “*Theoretische Untersuchung der Struktur-Reaktivitäts-Beziehung von anionischen Gold-Clustern bei der Oxidation von CO*”, Master’s thesis, Humboldt Universität Berlin, 2004.
- [144] Hagen, J.; Socaciu, L. D.; Heiz, U.; Bernhardt, T. M.; Wöste, L. *Eur. Phys. J. D* **2003**, *24*, 327-330.
- [145] Wallace, W. T.; Whetten, R. L. *J. Phys. Chem. B* **2000**, *104*, 10964-10968.
- [146] Nygren, M. N.; Siegbahn, P. E. M.; Jin, C.; Guo, T.; Smalley, R. E. *J. Chem. Phys.* **1991**, *95*, 6181-6184.
- [147] Ekardt, W. *Phys. Rev. B* **1984**, *29*, 1558-1564.
- [148] Mitrić, R.; Bonačić-Koutecký, V. private communication.
- [149] Furche, F.; Ahlrichs, R.; Weis, P.; Jacob, C.; Gilb, S.; Bierweiler, T.; Kappes, M. M. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 6982-6990.
- [150] Häkkinen, H.; Landman, U. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 9704-9705.
- [151] Lüttgens, G.; Pontius, N.; Bechthold, P. S.; Neeb, M.; Eberhardt, W. *Phys. Rev. Lett.* **2002**, *88*, 076102-1 to 076102-4.
- [152] Hagen, J.; Socaciu, L. D.; Elijazyfer, M.; Heiz, U.; Bernhardt, T. M.; Wöste, L. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2002**, *4*, 1707-1709.
- [153] Mitrić, R. *Structure-Reactivity Relation, Optical Properties and Real-Time Study of Ultrafast Processes in Atomic Clusters*, Thesis, Humboldt Universität Berlin, 2003.

- [154] Kimble, M. L.; Castleman, A. W.; Mitrić, R.; Bürgel, C.; Bonačić-Koutecký, V. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 2526-2535.
- [155] Huber, H.; McIntosh, D.; Ozin, G. A. *Inorg. Chem.* **1977**, *16*, 975-979.
- [156] Mitrić, R.; Bürgel, C.; Burda, J.; Bonačić-Koutecký, V.; Fantucci, P. *Eur. Phys. J. D* **2003**, *24*, 41-44.
- [157] Bonačić-Koutecký, V.; Burda, J.; Mitrić, R.; Ge, M.; Zampella, G.; Fantucci, P. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 3120-3131.
- [158] Handschuh, H.; Ganteför, G.; Bechthold, P. S.; Eberhardt, W. *J. Chem. Phys.* **1994**, *100*, 7093-7100.
- [159] Negishi, Y.; Nakamura, Y.; Nakajima, A.; Kaya, K. *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 3657-3663.
- [160] Handschuh, H.; Cha, C.-Y.; Bechthold, P. S.; Ganteför, G.; Eberhardt, W. E. *J. Chem. Phys.* **1995**, *102*, 6406-6422.
- [161] Balasubramanian, K. *Relativistic Effects in Chemistry (Part B - Applications)*; John Wiley & Sons, Inc.: New York, 1997.
- [162] Lee, H. M.; Ge, M.; Sahu, B. R.; Tarakeshwar, P.; Kim, K. S. *J. Phys. Chem. B* **2003**, *107*, 9994-10005.
- [163] Häkkinen, H.; Yoon, B.; Landman, U.; Li, X.; Zhai, H.-J.; Wang, L.-S. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 6168-6175.
- [164] Bishea, G. A.; Morse, M. D. *J. Chem. Phys.* **1991**, *95*, 5646-5659.
- [165] Barysz, M.; Pyykkö, P. *Chem. Phys. Lett.* **2000**, *325*, 225-231.
- [166] Okazaki, T.; Saito, Y.; Kasuya, A. *Molec. Phys.* **1999**, *96*, 143-145.
- [167] Klotzbücher, W. E.; Ozin, G. A. *Inorg. Chem.* **1980**, *19*, 3767-3776.
- [168] Harbich, W.; Fedrigo, S.; Buttet, J.; Lindsay, D. M. *J. Chem. Phys.* **1992**, *96*, 8104-8108.
- [169] Fedrigo, S.; Harbich, W.; Buttet, J. *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 5712-5717.

- [170] Wesendrup, R.; Hunt, T.; Schwerdtfeger, P. *J. Chem. Phys.* **2000**, *112*, 9356-9362.
- [171] Wang, X.; Wan, X.; Zhou, H.; Takami, S.; Kubo, M.; Miyamoto, A. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **2002**, *579*, 221-227.
- [172] Itkin, I.; Zaitsevskii, A. *Chem. Phys. Lett.* **2003**, *374*, 143-150.
- [173] Herzberg, G. *Molecular Spectra and Molecular Structure - I. Spectra of Diatomic Molecules*; D. Van Nostrand Company, Inc.: Princeton, 1950.
- [174] James, A. M.; Kowalczyk, P.; Simard, B.; Pinegar, J. C.; Morse, M. D. *J. Mol. Spectrosc.* **1994**, *168*, 248-257.
- [175] Bishea, G. A.; Morse, M. D. *J. Chem. Phys.* **1991**, *95*, 8779-8792.
- [176] Guo, R.; Balasubramanian, K.; Wang, X.; Andrews, L. *J. Chem. Phys.* **2003**, *117*, 1614-1620.
- [177] Balasubramanian, K.; Das, K. K. *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *186*, 577-582.
- [178] Mitrić, R.; Bonačić-Koutecký, V. private communication.