

Übungen zur Molekül- und Clusterphysik

SS 2010

5. Übungsblatt

1. Edelgascluster

- (a) Berechnen Sie für die Dimere der Edelgase Ne, Ar und Kr den Gleichgewichtsabstand.
- (b) Welchen Einfluß hat der Basissatz auf die Lösung und welche Rolle spielen Polarisationssterme ?
- (c) Für welche Elemente erhalten Sie ein sinnvolles Ergebnis ?

2. Geladene Argon Dimere und Trimere

- (a) Bestimmen Sie die Gleichgewichtsabstände bzw. die Geometrie positiv geladener Argon Dimere und Trimere
- (b) Wie ist die Ladung über die Cluster verteilt ?
- (c) Wie ändert sich der Gleichgewichtsabstand und die Gesamtbindungsenergie beim Übergang vom neutralen zum geladenen Cluster ?

3. Regel von Friedel

Berechnen Sie die geometrische Struktur für einfach positiv geladene Argoncluster für drei Clustergrößen ($n > 3$) ihrer Wahl. Ist die Geometrie eindeutig oder ergeben sich mehrere Isomere mit ähnlichen Bindungsenergie. Welches ist die Grundzustandskonfigurationen ? Vergleichen Sie mit der Regel von Friedel