

Übungen zur Molekül- und Clusterphysik

SS 2010

6. Übungsblatt

Geometrische und elektronische Struktur metallische Cluster

1. Metallische Cluster

- (a) Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur des Na_2 Clusters/Moleküls. Welche Elektronen tragen hier zur Bindung bei ?
- (b) Berechnen Sie einen Na_4 Cluster unter Berücksichtigung aller Elektronen. Welche Geometrie hat die kleinste Bindungsenergie ?
- (c) Welchen Drehimpuls würden Sie den Valenzorbitalen von ihrer Geometrie her nach zuordnen ?
- (d) (optional) Berechnen Sie den Na_4 Cluster mit Hilfe von "effective core potentials" (ECP). Wie ändern sich die Bindungsenergien der Valenzelektronen und wie stark unterscheiden sich die Orbitale der Valenzelektronen ? Vergleichen Sie alle Werte jeweils mit der Mitte des HOMO-LUMO Abstandes ("Fermi Energie")

2. Elektronische Struktur und Schalenabschluß

- (a) Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur von Li_8 , Li_9 Cluster und Li_8^- Clustern. Berechnen Sie mindestens zwei verschiedene Geometrien.
- (b) Wie würden die Photoelektronenspektren, die man von solchen Clustern messen würde aussehen. Welchen Drehimpuls würden Sie den verschiedenen Photolinien zuweisen ?
- (c) Skizzieren Sie ein Termdiagramm der elektronischen Struktur der Cluster für die besetzten und unbesetzten Valenzzustände. Vergleichen Sie ihr Ergebnis mit dem aus dem Jellium-Modell.