

# Übungen zur Molekül- und Clusterphysik

SS 2010

## 7. Übungsblatt

Geometrische und elektronische Struktur kovalent gebundener Cluster

### 1. Kohlenstoffcluster und Graphene

- (a) Berechnen Sie für verschiedene Geometrien (linear, Tetraeder, 2 Ebene Strukturen) die Bindungsenergien eines  $C_4$  und eines  $C_8$  Clusters. In Welcher Geometrie werden die Cluster vorliegen ?
- (b) Berechnen Sie die Bindungsenergien von  $C_k$  Clustern mit  $k = 2 - 14$ . Welcher Cluster wird in einer Clusterquelle am häufigsten sein ?  
Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit denen der metallischen Cluster. Welcher Unterschied ergibt sich zu diesen Clustern sowohl bzgl. der Geometrie als auch der elektronischen Struktur ?
- (c) Berechnen Sie Graphene-Plättchen mit mindestens 5 Ringen. Wie entwickelt sich die Struktur mit der Größe der Plättchen ? Welche Struktur ist am stabilsten ?

### 2. Elektronische Struktur von Silizium-Cluster

- (a) Berechnen Sie  $Si_n$  Cluster der Größe  $n = 3, 4, 5, 7, 10$  und  $13$ . Wie ändert sich die geometrische und elektronische Struktur der Cluster ? Vergleichen Sie mit den experimentellen Daten.
- (b) Wie groß ist die Bandlücke der Cluster ? Verhalten sich die  $Si_n$  Cluster eher wie Leiter, Isolatoren oder Halbleiter ?