

Übungen zur Molekül- und Clusterphysik

SS 2010

8. Übungsblatt

Cluster und Adsorbate

1. Pt und CO

- (a) Berechnen sie die elektronische und geometrische Struktur eines Pt_3 Clusters
- (b) Wie wird ein CO Molekül an diesen Cluster binden ? Geben Sie zu den möglichen Konfigurationen jeweils die Zustandsdichte an. Welche wird die stabilste Konfiguration sein ? Über welche Elektronen des Pt wird in den Konfigurationen das CO gebunden ?
- (c) Wie sieht die optimale Geometrie für den Fall von drei CO Molekülen aus ? Geben Sie wieder die Zustandsdichte an.

2. CdSe, H_2O und Ethanol

- (a) Berechnen Sie die optimale Geometrie eines CdSe "Nanokristall".
- (b) Wie werden ein Wasser bzw. ein Ethanol Molekül ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) an diesen "Kristall" adsorbieren ?

Hinweis: Verwenden Sie bei den Rechnungen jeweils ECP Basissätze, da ansonsten die Rechenzeiten sehr lang werden können