

# Übungen zur Clusterphysik

SS 2012  
Michael Martins  
5. Übungsblatt

Geometrische und elektronische Struktur metallische Cluster

## 1. Metallische Cluster

- Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur des  $\text{Na}_2$  Clusters/Moleküls. Welche Elektronen tragen hier zur Bindung bei ?
- Berechnen Sie einen  $\text{Na}_4$  Cluster unter Berücksichtigung aller Elektronen. Welche Geometrie hat die kleinste Bindungsenergie ?
- Welchen Drehimpuls würden Sie den Valenzorbitalen von ihrer Geometrie her nach zuordnen ?
- (optional) Berechnen Sie den  $\text{Na}_4$  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

- Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur eines  $\text{Li}_8$ ,  $\text{Li}_8^-$ ,  $\text{Li}_8^+$  und eines  $\text{Li}_9$  Clusters. Welchen Einfluß hat die Ladung des Clusters auf die Geometrie ?
- Wie würden die Photoelektronenspektren, die man von solchen Clustern messen würde aussehen. Worin besteht der Unterschied und wie ist das zu interpretieren ?
- Skizzieren Sie ein Termdiagramm der Cluster und vergleichen Sie ihr Ergebnis mit dem aus dem Jellium-Modell.

## 3. Antimon – Halbmetalle

- Schätzen Sie die Häufigkeit von Antimoncluster ( $\text{Sb}_n$ ) im Größenbereich von  $n=1-5$  in einem Massenspektren ab.
- Betrachten Sie die HOMO und LUMO Orbitale der Cluster. Wären  $\text{Sb}_n$  Cluster eher "Metalle" oder "Isolatoren" ?