

Übungen zur Clusterphysik

SS 2012
Michael Martins
6. Übungsblatt

Magnetische Eigenschaften von Fe Clustern

1. Fe Dimer

Berechnen Sie zunächst einen Fe Dimer.

- (a) Mit welchem Basis-Satz können Sie Fe_2 zur Konvergenz bringen ? Beachten Sie hierbei, daß ein Zustand mit Gesamtspin $S = 0$ nicht zwingend stabil sein muß
- (b) Wie hängt die Bindungsenergie vom Gesamtspin des Dimers ab ?

2. Fe Trimer

Nutzen Sie den in Aufgabe 1 erfolgreichen Basissatz, um den Fe Trimer zu berechnen

- (a) Für welchen Gesamtspin ergibt sich der Grundzustand von Fe_3 und wie ändert sich die Geometrie mit dem Gesamtspin ?
- (b) Wie groß ist die Spindichte der einzelnen Atome für die unterschiedlichen Gesamtspins ?
- (c) Stellen Sie die Zustandsdichte für die α und β Orbitale der Valenzzustände des Grundzustandes dar. Schätzen Sie daraus die Austauschspaltung von Fe_3 ab ?