

Übungen zur Clusterphysik

SS 2012
Michael Martins
7. Übungsblatt

Geometrische Struktur von Kohlenstoff-Clustern

1. Kleine Cluster

(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 $k = 2 - 14$ (größer, wenn möglich). 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 ?

2. Käfige

Versuchen Sie, die Käfigstruktur eines C_{20} Cluster zu berechnen. Skizzieren Sie Termdiagramm für die Valenzzustände, berechnen Sie die Zustandsdichte (DOS) und vergleichen Sie mit der von C_{60} . Gibt es beim C_{20} Orbitale, bei denen die Elektronen komplett über die Oberfläche delokalisiert sind ?

Hinweis: C_{20} besteht nur aus Fünfecken und ist das kleinste Fulleren