

# Übungen zur Clusterphysik

SS 2012  
Michael Martins  
8. Übungsblatt

Chemie von Clustern

## 1. Bindung von O<sub>2</sub> (oder alternativ CO) an Cu<sub>3</sub>

Berechnen Sie die Bindung eines O<sub>2</sub> Moleküls oder eines CO Moleküls an einen Cu<sub>3</sub> Cluster. Verwenden Sie dazu (mindestens) einen N31 Basissatz

- (a) Wie wird das Molekül geometrisch an den Cluster binden und wie groß ist die Bindungsenergie des Moleküls an den Cluster ?
- (b) Wie unterscheiden sich die elektronischen Strukturen des gebundenen Systems von dem isolierten Cluster und dem Molekül ? Berechnen Sie die Elektronenspektren
- (c) Wie ändert sich die Bindungsenergie des O<sub>2</sub> (oder CO) Moleküls im Vergleich zum freien O<sub>2</sub> Molekül ?

Auf der Webseite der Vorlesung wird eine konvergierte Cu<sub>3</sub> Input-Datei bereit gestellt und kann als Basis für die Rechnungen genutzt werden.