

Übungen zur Clusterphysik

SS 2012
Michael Martins
8. Übungsblatt

Chemie von Clustern

1. Bindung von O₂ (oder alternativ CO) an Cu₃

Berechnen Sie die Bindung eines O₂ Moleküls oder eines CO Moleküls an einen Cu₃ 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 O₂ (oder CO) Moleküls im Vergleich zum freien O₂ Molekül ?

Auf der Webseite der Vorlesung wird eine konvergierte Cu₃ Input-Datei bereit gestellt und kann als Basis für die Rechnungen genutzt werden.