

# Übungen zur Clusterphysik

SS 2012  
Michael Martins  
9. Übungsblatt

Molekulare Cluster

## 1. Struktur von Wasser Clustern

Berechnen Sie die geometrische Struktur von  $(\text{H}_2\text{O})_n$  Clustern aus  $n = 4$  und  $n = 10$  Molekülen. Vergleichen Sie die Struktur mit denen ihrer Kommolitionen? Wie läßt sich damit die Struktur von Wasserclustern am einfachsten beschreiben?

(a) Wie ändern sich die Struktur für  $n = 10$ , wenn Sie ein einzelnes Proton ( $\text{H}^+$ ) dem Cluster hinzufügen

## 2. Vibration von Wasser und Wasser-Clustern

Mittels Infrarotspektroskopie läßt sich auch die Struktur von Clustern bestimmen. Berechnen Sie die Vibrationsspektren von  $\text{H}_2\text{O}$  und den oben berechneten Clustern und skizzieren Sie das IR Spektrum. Wie ändert das IR Spektrum vom Molekül zum Cluster?

Hinweis: Vibrationen werden berechnet, in dem Hess-Matrix berechnet wird. Diese enthält die notwendigen Potentiale und Gradienten.