

Übungen Clusterphysik

SS 2013

3. Übungsblatt

1. Photoelektronenspektroskopie

Berechnen Sie mit GAMESS die elektronische und geometrische Struktur der angegebenen Moleküle (Benzol und Derivate) und ermitteln Sie daraus deren Photoelektronenspektren ohne Berücksichtigung der Dipolmatrixelemente (Intensität)

- Berechnen Sie die C_6 Kohlenstoffringmoleküle C_6H_{12} , C_6H_6 , C_6H_5Cl und C_6H_4BrCl . Welche Geometrie haben diese jeweils und vergleichen Sie die besetzten Valenzorbitale und die LUMO Zustände der Moleküle.
- Wie würden die Valenz-Photoelektronenspektren dieser Moleküle aussehen? Könnten Sie die verschiedenen Isomere von C_6H_4BrCl mittels UPS (**Ultra-Violet-Photoelectron-Spectroscopy**) unterscheiden?
- Vergleichen Sie die Energie der Valenzorbitale von Benzol mit denen aus dem Hückel-Ansatz.

2. Das ESCA Molekül

Das Molekül $CF_3 - CO - O - CH_2 - CH_3$ wird auch als ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis) Molekül bezeichnet.

- Geben Sie die kinetische Energie der C 1s Photolinien an, wenn Sie mit einer Photonenenergie von 350 eV anregen würden.
- Berechnen Sie die Elektronenspektren der Moleküle $CH_3 - CH_2 - OH$ sowie $CH_3 - CH_2 - O - CO - Cl$ und vergleichen Sie mit dem ESCA Molekül. Diskutieren Sie das Ergebnis. Was könnte die Ursache der Verschiebung der C 1s Zustände?
- Wie würden die C 1s Photoelektronenspektren der Moleküle aus Teil (1a) aussehen?

Hinweis: Berechnen Sie für (1b) und (2c) jeweils nur eines der möglichen Isomere. Sprechen Sie sich mit Ihren Kommilitonen ab, so daß möglichst alle Isomere berechnet werden und die Ergebnisse vergleichbar sind (Basissätze).