

Übungen zur Clusterphysik

SS 2013
Michael Martins
4. Übungsblatt

Geometrische und elektronische Struktur metallische Cluster

1. Metallische Cluster

- Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur des Na_2 Clusters/Moleküls. Welche Elektronen tragen hier zur Bindung bei ?
- Berechnen Sie einen Na_4 Cluster unter Berücksichtigung aller Elektronen. Welche Geometrie hat die kleinste Bindungsenergie ?
- Welchen Drehimpuls würden Sie den Valenzorbitalen von ihrer Geometrie her nach zuordnen ?
- (optional) Berechnen Sie den Na_4 Cluster mit Hilfe von "effective core potentials" (ECP). Wie ändern sich die Bindungsenergien der Valenzelektronen und wie stark unterscheiden sich die Orbitale der Valenzelektronen ? Vergleichen Sie alle Werte jeweils mit der Mitte des HOMO-LUMO Abstandes ("Fermi Energie")

2. Elektronische Struktur und Schalenabschluß

- Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur eines Li_8 , Li_8^- , Li_8^+ und eines Li_9 Clusters. Welchen Einfluß hat die Ladung des Clusters auf die Geometrie ?
- Wie würden die Photoelektronenspektren, die man von solchen Clustern messen würde aussehen. Worin besteht der Unterschied und wie ist das zu interpretieren ?
- Skizzieren Sie ein Termdiagramm der Cluster und vergleichen Sie ihr Ergebnis mit dem aus dem Jellium-Modell.

3. Antimon – Halbmetalle

- Schätzen Sie die Häufigkeit von Antimoncluster (Sb_n) im Größenbereich von $n=1-5$ in einem Massenspektren ab.
- Betrachten Sie die HOMO und LUMO Orbitale der Cluster. Wären Sb_n Cluster eher "Metalle" oder "Isolatoren" ?