

# Übungen zur Clusterphysik

SS 2013  
Michael Martins  
5. Übungsblatt

Geometrische Struktur von Kohlenstoff-Clustern

## 1. Kleine $C_n$ -Cluster

- (a) Berechnen Sie für verschiedene Geometrien (linear, Tetraeder, 2 Ebene Strukturen) die Bindungsenergien eines  $C_4$  und eines  $C_8$  Clusters. In Welcher Geometrie werden die Cluster vorliegen ?
- (b) Berechnen Sie die Bindungsenergien eines größeren  $C_k$  Clustern mit (z.B.  $k = 14$  oder größer, wenn möglich).  
Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit denen der metallischen Cluster. Welcher Unterschied ergibt sich zu diesen Clustern sowohl bzgl. der Geometrie als auch der elektronischen Struktur ?

## 2. Elektronische und geometrische Struktur von Silizium-Cluster

Berechnen Sie die geometrische Struktur und den HOMO-LUMO Abstand (Bandlücke) für zwei bis drei  $Si_n$  Clustern für Cluster im Größenbereich von  $n = 3 - 13$ . Verhalten sich die  $Si_n$  Cluster eher wie Leiter, Isolatoren oder Halbleiter ?

## 3. Kohlenstoff-Käfige (optional und aufwendig)

Versuchen Sie, die Käfigstruktur eines  $C_{20}$  Cluster zu berechnen. Skizzieren Sie Termdiagramm für die Valenzzustände, berechnen Sie die Zustandsdichte (DOS) und vergleichen Sie mit der von  $C_{60}$ . Gibt es beim  $C_{20}$  Orbitale, bei denen die Elektronen komplett über die Oberfläche delokalisiert sind ?

Hinweis:  $C_{20}$  besteht nur aus Fünfecken und ist das kleinste Fulleren