



Claudia Schrodtr (Autor)

Untersuchungen binärer Metall- und Halbleitercluster mit Dichtefunktionalmethoden

Claudia Schrodtr

**Untersuchungen von Übergangsmetall-
und Halbmetallclustern mit
Dichtefunktionalmethoden**



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2377>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Methoden	5
2.1	Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie	5
2.2	Technische Aspekte der Dichtefunktionaltheorie	9
2.2.1	Näherungen für das Austausch-Korrelationsfunktional	10
2.2.2	Näherungen des Coulomb-Terms J	12
2.2.3	Basissätze	17
2.2.4	Bestimmung der Besetzungszahlen der Orbitale	18
2.3	Stabilität von Metallclustern	19
2.3.1	Identifizierung stationärer Punkte	19
2.3.2	Charakterisierung binärer Metallcluster mit Hilfe der Störungstheorie erster Ordnung	20
3	Ligandenfreie Platin-Iridium-Cluster	25
3.1	Technische Details der Dichtefunktionalrechnungen	26
3.2	Das System $\text{Pt}_{5-m}\text{Ir}_m$	27
3.3	Das System $\text{Pt}_{13-m}\text{Ir}_m$	30
3.3.1	Ausgewählte Strukturen von Pt_{13} und Ir_{13}	30
3.3.2	Heteroatomare Metallcluster $\text{Pt}_{13-m}\text{Ir}_m$	32
3.4	Das System $\text{Pt}_{55-m}\text{Ir}_m$	40
3.4.1	Ausgewählte Strukturen von Pt_{55} und Ir_{55}	41

3.4.2	Heteroatomare Metallcluster $\text{Pt}_{55-m}\text{Ir}_m$	41
4	Positionszuordnung von Atomsorten in Halbleiterclustern	47
4.1	Technische Details der Dichtefunktionalrechnungen	48
4.2	Zuordnung der Atompositionen in Halbleiterclustern – Beispiele .	48
4.2.1	$[\text{Ru}_3\text{Rh}(\text{CO})_{13}]^-$	50
4.2.2	$[\text{RhRu}_4(\text{CO})_{14}\text{B}\{\text{Au}(\text{dppm})\text{Au}\}]$	52
4.2.3	$[\text{Cd}_{16}\text{In}_{64}\text{Sn}_{134}]^{44-}$	54
4.2.4	$[\text{Ag}_{26}\text{In}_{18}\text{S}_{36}\text{Cl}_6(\text{dppm})_{10}]^{2+}$	56
5	Zusammenfassung	61
A	Mathematische Symbole und Kurzschreibweisen	63
B	Abkürzungen	65
C	Tabellen zu Kapitel 3	67

Abbildungsverzeichnis

2.1	Ladungsverteilungen in der MARI- J -Näherung	15
3.1	Struktur und Bindungsabstände der Pt ₅ - und Ir ₅ -Cluster in D_{3h} -Symmetrie	27
3.2	Relative Energien E_{est} , E_{rel}^{SP} und E_{rel}^{GO} des Systems Pt _{5-m} Ir _{m}	28
3.3	Strukturen und relative Energien der Pt ₁₃ - und Ir ₁₃ -Cluster	31
3.4	Relative Stabilitäten $E_{rel}^{SP/GO}$ vs. E_{est} für Pt ₁₂ Ir ₁ und Pt ₁ Ir ₁₂	34
	(a) E_{rel}^{SP} vs. E_{est}	34
	(b) E_{rel}^{GO} vs. E_{est}	34
3.5	Abgeschätzte Stabilitäten E_{est} der symmetrierverschiedenen Pt/Ir-Distributionen des Systems Pt _{13-m} Ir _{m}	36
3.6	Relative Stabilitäten $E_{rel}^{SP/GO}$ vs. E_{est} des Systems Pt _{13-m} Ir _{m}	38
	(a) E_{rel}^{SP} vs. E_{est}	38
	(b) E_{rel}^{GO} vs. E_{est}	38
3.7	Relative Stabilitäten E_{rel}^{GO} vs. E_{rel}^{SP} des Systems Pt _{13-m} Ir _{m}	39
3.8	Strukturen und relative Energien der Pt ₅₅ - und Ir ₅₅ -Cluster	41
3.9	Struktur und symmetrierverschiedene Atompositionen eines D_{5h} -symmetrischen M ₅₅ -Clusters	42
3.10	Abgeschätzte Stabilitäten E_{est} der Platin-Iridium-Distributionen des Systems Pt _{55-m} Ir _{m}	43
3.11	Relative Stabilitäten $E_{rel}^{SP/GO}$ vs. E_{est} des Systems Pt _{55-m} Ir _{m}	45
	(a) E_{rel}^{SP} vs. E_{est}	45
	(b) E_{rel}^{GO} vs. E_{est}	45

4.1	Struktur von $[\text{Ru}_3\text{Rh}(\text{CO})_{13}]^-$ und elektrostatische Potentialwerte der Metallatompositionen verschiedener Referenzsysteme	51
4.2	Struktur von $[\text{Ru}_4\text{Rh}(\text{CO})_{14}\text{B}\{\text{Au}(\text{dppm})\text{Au}\}]$ und elektrostatische Potentialwerte der Metallatompositionen verschiedener Referenzsysteme	53
4.3	Struktur von $[\text{Cd}_{16}\text{In}_{64}\text{S}_{134}]^{44-}$ und elektrostatische Potentialwerte der Metallatompositionen verschiedener Referenzsysteme	55
4.4	Struktur von $[\text{Ag}_{26}\text{In}_{18}\text{S}_{36}\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{PCH}_2\text{PH}_2)_{10}]^{2+}$ und elektrostatische Potentialwerte der Metallatompositionen verschiedener Referenzsysteme	58
4.5	Elektrostatische Potentialwerte der Ligandenatompositionen des Referenzsystems $[\text{E}_{44}\text{U}_{42}(\text{H}_2\text{UCH}_2\text{UH}_2)_{10}]^{2+}$	59

Tabellenverzeichnis

3.1	Atomverteilungen der neun stabilsten binären Isomere F–Q des Systems $\text{Pt}_{55-m}\text{Ir}_m$	46
C.1	Bindungsabstand und Dissoziationsenergie von Pt_2 in Abhängigkeit vom Basissatz und des Dichtefunktionals	67
C.2	Ausgewählte Bindungsabstände der C_s -symmetrischen Pt_{13} - und Ir_{13} -Cluster	68
C.3	Ausgewählte Bindungsabstände der fünf stabilsten binären Isomere A–E des Systems $\text{Pt}_{13-m}\text{Ir}_m$	69
C.4	Ausgewählte Bindungsabstände der D_{5h} -symmetrischen Pt_{55} - und Ir_{55} -Cluster	70

