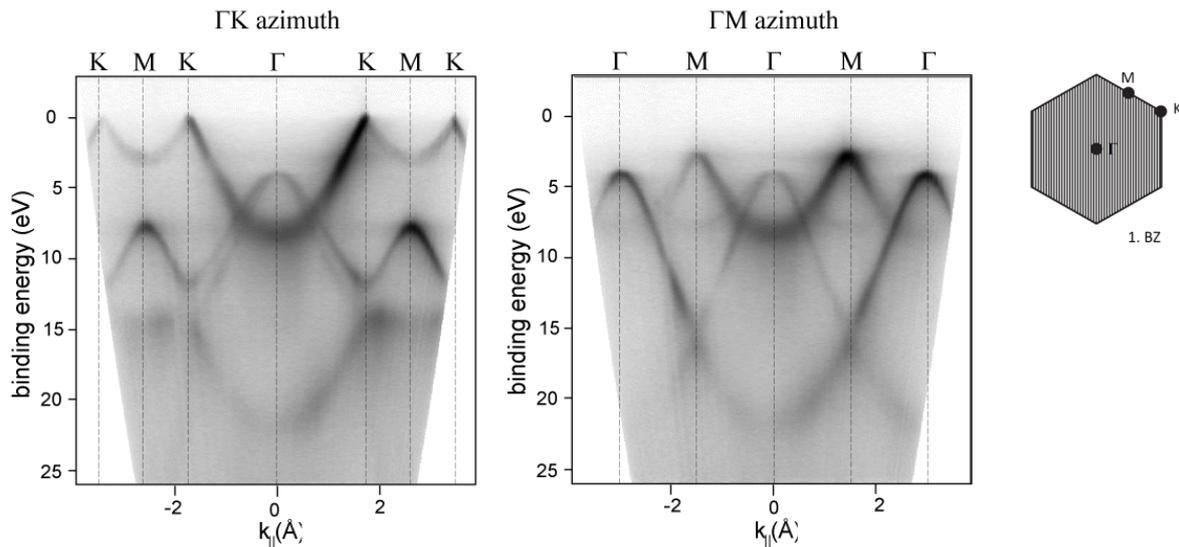


### Übungsblatt 3

#### Aufgabe 1: Bandstruktur

Die Abbildung zeigt die experimentell mittels winkelaufgelöster Photoelektronenspektroskopie bestimmte elektronische Bandstruktur einer Graphitschicht. Versuchen Sie, die Bänder den Valenzorbitalen von Kohlenstoff zuzuordnen und begründen Sie, warum die Bänder unterschiedlich (aufwärts oder abwärts) dispergieren. Skizzieren Sie die Zustandsdichte sowie die Wellenfunktion des  $p_z$ -Bandes am Punkt  $\Gamma$ .



Abbildungen: Prof. T. Seyller, Universität Chemnitz

#### Aufgabe 2: Photoelektronenspektroskopie

Das He-I Photoelektronenspektrum (Photonenenergie  $h\nu = 21.22$  eV) von Sauerstoff in der Gasphase zeigt mehrere Banden mit Schwingungsprogressionen (siehe Abbildung).

(a) Ordnen Sie den beiden Banden mit den niedrigsten Ionisierungsenergien die entsprechenden Valenzorbitale zu und schätzen Sie deren Orbitalenergien ab! Schlussfolgern Sie aus der Ausdehnung der jeweiligen Schwingungsprogression, ob die Orbitale bindend oder antibindend bzw. nichtbindend sind!

(b) Die Progression mit der kleinsten Ionisierungsenergie (12 -13 eV) besteht aus Schwingungslinien mit einem Abstand von 0.23 eV. In der nächstfolgenden Progression (16 -18 eV) beträgt der Linienabstand 0.11 eV. Vergleichen Sie mit der Fundamentalschwingung des neutralen  $O_2$  Moleküls, die bei  $1580.4$   $cm^{-1}$  erscheint, und bestimmen Sie den Bindungscharakter der Orbitale, aus denen die Photoelektronen emittiert wurden (bindend, antibindend oder nichtbindend)!

