

Anhang A

A.1 Spektroskopische Eigenschaften von $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ -Clustern

Die Buchstaben I bzw. S kennzeichnen die Geometrie der Cluster. In Clustern mit „Interior“-Geometrie (I) ist das Natriumatom im Wassercluster eingebettet, während es sich in Clustern mit “Surface“-Geometrie (S) an der Clusteroberfläche befindet.

Ionisationspotential / eV der $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ -Cluster:

n	Parinello ^{a)}		Landman ^{b)}		Hashimoto ^{c)}		Experiment ^{d)}
	I	S			I	S	
0	5.37						5.139
1		4.8	4.62			4.15	4.379
2	4.3	4.34	4.2		3.75		3.8
3	4.03	4.04	3.79		3.4	3.45	3.48
4	3.51	3.83	3.35		3.1	3.4	3.174
5	3.52	3.89	3.12		2.95	3.4	3.174
∞							3.3

a: aus [RBP98]

b: aus [BL93]

c: aus [HM94]

d: aus [HHN91] Für $n \geq 4$ ist das Ionisationspotential nahezu gleich dem Schwellwert für die Photoemission (PET) der makroskopischen Lösung.

Bindungsenergie / eV der $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ -Cluster

n	Parinello ^a		Landman ^b	Hashimoto ^c		Exp. ^d
	I	S		I	S	
1	0.28		0.27	0.26	0.26	0.28 (4)
2	0.37	0.3	0.31	0.3	0.3	0.28 (10)
3	0.45	0.34	0.3	0.3	0.36	0.37 (15)
4	0.26	0.32	0.4	0.41	0.36	0.32 (20)
5	0.5	0.51	0.26	0.43	0.5	0.53 (24)
6			0.29	0.36	0.42	

a: Parrinello und Mitarbeiter [RBP98]

b: Landman und Mitarbeiter [BL93]

c: Hashimoto und Mitarbeiter [HM94]

d: Hertel und Mitarbeiter [SHT88]

Bindungsenergie / eV der $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n^+$ -Cluster

n	Parinello ^a	Landman ^b	Hashimoto ^c	Experiment ^d
1	1.02	1.06	1.14	1.04 (4)
2	0.87	0.73	1.03	0.68 (5)
3	0.74	0.71	0.86	0.69 (5)
4	0.58	0.84	0.70	0.60 (5)
5	0.50	0.49	0.59	0.53 (5)
6		0.47	0.58	0.46 (5)

a: aus [RBP98]

b: aus [BL93]

c: aus [HM94]

d: aus [DK70]

A.1. SPEKTROSKOPISCHE EIGENSCHAFTEN VON $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_N$ -CLUSTERN 121

$\tilde{X} \rightarrow \tilde{A}$ Übergangsenergie der $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ -Cluster

n	$E_{\text{vert}}^a / \text{cm}^{-1}$	$E_{\text{adiab}}^a / \text{cm}^{-1}$	$\sigma^{a,b} / \text{\AA}^2$	$f_{\tilde{X} \rightarrow \tilde{A}}^{a,c}$
0	16960	-		0.982 ^d
1	14000	13450		
2	10085	7302	1.043	0.62
3	9470	6176	1.213	0.66
4	9580	6141	1.046	0.56
5	9864	7327	0.910	0.48
6	10173	7388	0.977	0.59
7	10536	7822	0.947	
8	10470	7830		
9	11132	8282		
10	10544	8088		
11	10367	-		
12	10566	-		
∞	14100 ^e	10100 ^e		0.75 ^e

a: aus dieser Arbeit

b: Absorptionsquerschnitt bei 10000cm^{-1}

c: Oszillatorstärke des $\tilde{X} \rightarrow \tilde{A}$ Übergangs im Intervall von 6000 bis 16000cm^{-1}

d: aus [IS79]

e: aus [JF79]

A.2 Spektroskopische Eigenschaften von $\text{Na}(\text{NH}_3)_n$ -Clustern

Ionisationpotential und Bindungsenergie der $\text{Na}(\text{NH}_3)_n$ -Cluster

n	IP ^a / eV	D ₀ / eV	
		neutral ^a	Ion ^b
1	4.27	0.39	1.26
2	3.58	0.3	0.993
3	3.14	0.31	0.742
4	2.92	0.42	0.638
5	2.82	0.36	0.464
6	2.75	0.35	0.421
7	2.61		
8	2.58		
9	2.5		
10	2.48		

a: aus [NSG92]

b: aus [JHL78]