

## Ist Eka-Quecksilber (Element 112) ein Metall der Gruppe 12?\*

Nicola Gaston, Ingo Opahle, Heinz W. Gäggeler und Peter Schwerdtfeger\*

Die Synthese superschwerer Elemente stellt die Experimentalphysik vor eine große Herausforderung. Gleichzeitig werden dabei fundamentale Fragen zur Kernstruktur und -stabilität aufgeworfen.<sup>[1]</sup> Es gab bereits große Erfolge bei der Herstellung der Elemente mit einer Ordnungszahl bis zu  $Z = 118$ <sup>[2–5]</sup> und auch bei der Entwicklung einer echten Einzelatomchemie für die Elemente mit einer Ordnungszahl bis zu  $Z = 108$ <sup>[6,7]</sup> zur Erforschung ihres häufig ungewöhnlichen Verhaltens. Der Nachweis solcher Elemente hängt jedoch von einem guten Verständnis ihrer chemischen und physikalischen Eigenschaften ab.

Für die Transactinoide, deren erstes Element Rutherfordium ( $Z = 104$ ) ist, wurden bereits Experimente durchgeführt, um diese korrekt in das Periodensystem einzuordnen oder um gar die grundsätzliche Frage zu beantworten, ob das Periodensystem für die Kategorisierung dieser Elemente überhaupt noch geeignet ist. Wegen der sehr kurzen Lebensdauern dieser Elemente [ $t_{1/2} = 78$  s ( $^{261}_{104}\text{Rf}$ ) bis 14 s ( $^{269}_{108}\text{Hs}$ )] liegen solche Experimente weit außerhalb jeglicher Standardverfahren und stützen sich für eine eindeutige Interpretation häufig auf theoretische Vorhersagen.<sup>[8,9]</sup>

Das nächste superschwere Element, für das Einzelatomchemie in Vorbereitung ist, ist das Element 112<sup>[10–12]</sup> ( $t_{1/2}$  für  $^{283}112$  beträgt ungefähr 4 s<sup>[13]</sup>), das auch als Eka-Quecksilber bekannt ist. Die chemischen Eigenschaften des Elements 112 sind umstritten: Frühere Vorhersagen reichen von quecksilberähnlichen Eigenschaften<sup>[16,17]</sup> bis hin zu einem Verhalten ähnlich dem der Edelgase,<sup>[8,18,19]</sup> letzteres wegen der starken relativistischen Kontraktion des 7s-Schale. Dementsprechend sind bereits Modellstudien durchgeführt worden,<sup>[10–12,14,15]</sup> die

auf der angenommenen Ähnlichkeit von Element 112 entweder zum Edelgas Rn oder zum Übergangsmetall Hg basieren. Vorhergesagte Daten<sup>[20,21]</sup> für die Elemente 112 und 114 wurden zudem verwendet, um die beiden Elemente mit Sublimations- oder Adsorptionsdaten zu korrelieren. Solche Vorhersagen sind für den Entwurf komplexer experimenteller Versuchsanordnungen zur chemischen Untersuchung der Transactinoide auf der Basis von Einzelatomen von außerordentlichem Wert.

Die relativistische Kontraktion der s-Valenzschale ist bereits für Quecksilber von grundlegender Bedeutung. Sie führt bei dessen Dimer wegen der inerten geschlossenen 6s-Schale zu einer Van-der-Waals-Bindung, die für das unterschiedliche Verhalten von Quecksilber gegenüber dem von Zink und Cadmium verantwortlich ist. Im kondensierten Zustand ist der Metallcharakter von Quecksilber viel schwächer ausgeprägt, mit einem spezifischen Widerstand von  $5.8 \mu\Omega\text{cm}$  bei 77 K (Zink:  $1.1 \mu\Omega\text{cm}$ , Cadmium:  $1.6 \mu\Omega\text{cm}$ ).<sup>[22]</sup> Zudem nimmt es eine seltene, rhomboedrische Festkörperstruktur an.<sup>[23]</sup> Relativistische Effekte lassen sich auch für die ungewöhnlich niedrige Schmelztemperatur des festen Elementes verantwortlich machen. Im festen Zustand ist Quecksilber allerdings sehr verschieden von den Edelgasfestkörpern. Im Fall des Elements 112 sollte man erwarten, dass diese Effekte noch weiter verstärkt werden.<sup>[24–27]</sup> Dies führt uns zu der Frage, ob Element 112 tatsächlich metallisch ist oder ob es mehr mit den Edelgasfestkörpern gemeinsam hat.

Zur Beantwortung der grundlegenden Frage, ob Eka-Quecksilber im Festkörper metallisch ist oder nicht, führten wir nichtrelativistische (NR-), skalar-relativistische (SR-) sowie vierkomponentige relativistische (FR-)Bandstrukturrechnungen an Element 112 durch (siehe *Methoden*). Da Quecksilber in einer rhomboedrischen Struktur kondensiert, die man über eine Verzerrung durch Veränderung des rhomboedrischen Winkels von  $60^\circ$  nach  $70^\circ$  ausgehend von fcc erreicht, jedoch Zink und Cadmium eine hexagonale dichteste Kugelpackung (hcp) annehmen, entschieden wir uns, die energetisch günstigste Anordnung von Element 112 in beiden Gittern zu berechnen. Im rhomboedrischen Fall erhalten wir auf SR-Niveau energieminierte Gitterparameter mit  $a = 3.28 \text{ \AA}$  und  $\alpha = 61.5^\circ$  sowie einer Kohäsionsenergie von  $E_{\text{Koh.}} = 1.07 \text{ eV}$ . Da dies nahezu einem fcc-Gitter entspricht, lässt sich folgern, dass die Ursache für die rhomboedrische Verzerrung mit einem Winkel von  $70^\circ$ , wie er bei Quecksilber vorgefunden wird, für das Element 112 nicht mehr vorhanden ist. Die entsprechende Rechnung für das hcp-Gitter stützt dieses Argument: Hier erhalten wir Gitterparameter von  $a = 3.34$  und  $c = 5.36 \text{ \AA}$  sowie eine Bindungsenergie von  $E_{\text{Koh.}} = 1.13 \text{ eV}$ . Eine zusätzliche Energieminimierung des Gitters auf FR-Niveau ändert die Gitterparameter nur unwesentlich:  $a = 3.32$  und  $c = 5.40 \text{ \AA}$ . Entsprechend unseren LDA-Rechnun-

[\*] Prof. Dr. P. Schwerdtfeger  
Center of Theoretical Chemistry and Physics  
Institute of Fundamental Sciences  
Massey University (Auckland Campus)  
Private Bag 102904, North Shore MSC, Auckland (Neuseeland)  
Fax: (+64) 9-443-9779  
E-Mail: p.a.schwerdtfeger@massey.ac.nz

Dr. N. Gaston  
Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme  
Nöthnitzer Straße 38, 01187 Dresden (Deutschland)

Dr. I. Opahle  
IFW Dresden  
P.O. Box 270116, 01171 Dresden (Deutschland)

Prof. Dr. H. W. Gäggeler  
Labor für Radio- und Umweltchemie  
Universität Bern  
3012 Bern (Schweiz)  
und  
Labor für Radio- und Umweltchemie  
Paul Scherrer Institut  
5232 Villigen PSI (Schweiz)

[\*\*] Diese Arbeit wurde durch einen Marsden Grant der Royal Society of New Zealand und den ISAT Linkage Fund finanziert.

gen (LDA = lokale Dichtenäherung) kristallisiert Element 112 somit im hcp-Gitter.

Bemerkenswerterweise ergeben die berechneten  $c/a$ -Werte, 1.61 (SR) und 1.63 (FR), nahezu das ideale  $c/a$ -Verhältnis 1.63 einer hexagonal dichtesten Kugelpackung, anders als im Fall von Zink und Cadmium mit dem  $c/a$ -Verhältnis 1.86 bzw. 1.89. Somit unterscheidet sich Element 112 bereits strukturell deutlich von seinen leichteren Homologen und ähnelt in dieser Beziehung mehr den Edelgasfestkörpern.<sup>[28]</sup> Allerdings ist die Bindungsenergie von Element 112 etwas größer als jene von Hg und liegt um eine Größenordnung höher als die der festen Edelgase.<sup>[28]</sup> Dieses Ergebnis ist in Einklang mit dem bereits früher untersuchten Verhalten der Bindungsenergien der Dimere innerhalb der Gruppe 12.<sup>[19]</sup> Der Abstand des nächsten Nachbarn im festen Element 112 beträgt 3.30 Å und ist somit deutlich größer als im rhomboedrischen Quecksilber mit 3.00 Å.<sup>[29]</sup>

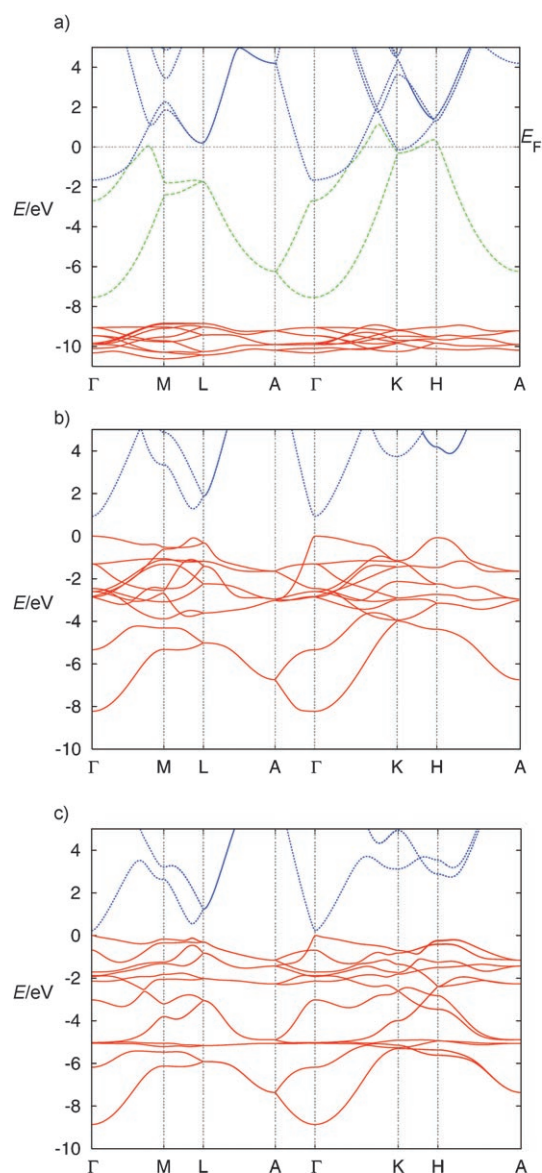
Die berechneten hcp-Gitterparameter unter Vernachlässigung relativistischer Effekte sind  $a = 3.44$  und  $c = 6.06$  Å. Das NR-Gitter weist dementsprechend mit einem  $c/a$ -Verhältnis von 1.76 eine deutliche Ähnlichkeit zu den Gitterstrukturen von Zink und Cadmium auf. Erwartungsgemäß ergibt sich durch die Vernachlässigung relativistischer Effekte auch eine höhere Bindungsenergie  $E_{\text{Koh.}} = 1.66$  eV, da die größere Ausdehnung der 7s-Schale zu einer stärkeren Hybridisierung mit der 7p-Schale führt.

Abbildung 1 zeigt die relativistischen und nichtrelativistischen Bandstrukturen für die energieminierten hcp-Gitterparameter. Die NR-Bandstruktur ist mit denen von Zink und Cadmium vergleichbar: Auch dort findet man sehr flache 6d-Bänder, die sich weit unterhalb des Fermi-Niveaus befinden, während das 7s-Valenzband das Fermi-Niveau schneidet. Die 7p-Leitungsbänder kreuzen das Fermi-Niveau in der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes, sodass das System metallisch wird.

Die SR-Bandstruktur unterscheidet sich allerdings stark: Am offensichtlichsten ist das Entstehen einer Bandlücke von 0.88 eV, die aus dem Element 112 einen Nichtleiter macht. Die 6d-Bänder überlappen nun mit dem 7s-Band. LDA überschätzt normalerweise die Bindungsstärke und tendiert daher normalerweise eher zu einer metallischen Struktur. Es ist somit unwahrscheinlich, dass die hier gefundene Nichtleiterstruktur von unserer Wahl des Funktional abhängt.

Zusätzlich haben wir die Bandstruktur in der energieminierten rhomboedrischen Gitterstruktur berechnet. Hier finden wir eine etwas kleinere Bandlücke mit 0.85 eV. Die Ursache liegt an dem etwas kleineren Abstand zum nächsten Nachbarn in der rhomboedrischen Struktur: 3.28 Å gegenüber 3.30 Å im hcp-Gitter. Die NR-Bandstruktur an der relativistisch energieminierten Geometrie ist der ursprünglichen NR-Bandstruktur sehr ähnlich, was wiederum zeigt, dass das metallische Verhalten nur schwach von der Gitterstruktur (und hauptsächlich von den Abstandsparametern) abhängt.

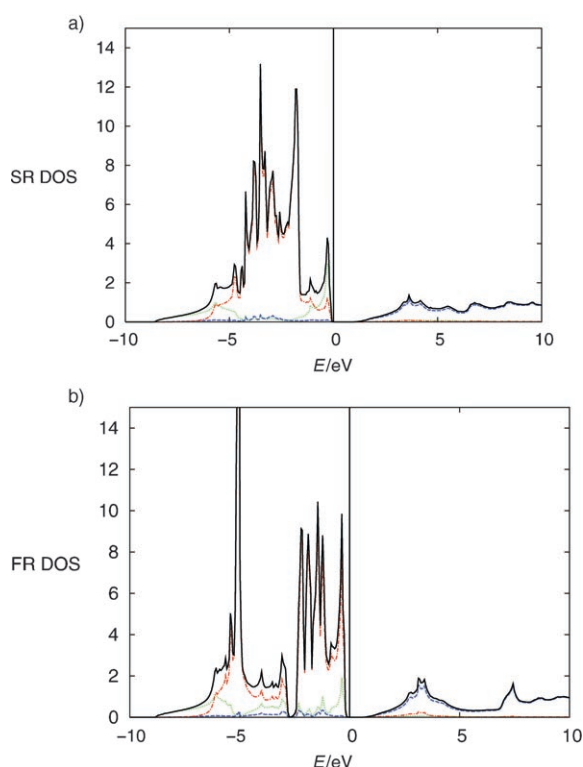
In der bisherigen Diskussion der Bandstruktur haben wir die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt. Die Aufspaltung der 7p-Zustände in  $7p_{1/2}$  und  $7p_{3/2}$  ist jedoch für die superschweren Elemente sehr groß,<sup>[30]</sup> sodass sich eine Absenkung der Energie des  $7p_{1/2}$ -Leitungsbandes und damit eine Verringerung der Bandlücke erwarten lässt. Somit lässt sich anhand der



**Abbildung 1.** a) Nichtrelativistische, b) skalar-relativistische und c) voll-relativistische Bandstrukturen für das Element 112 im hcp-Gitter an der durch LDA energieminierten Geometrie. Rote Linien: d-Bänder, grüne Linien: s-Bänder, blaue Linien: unbesetzte (oder Leitungs-)p-Bänder. (In den relativistischen Fällen gibt es, wie in der Zustandsdichte zu erkennen ist, eine beträchtliche Mischung zwischen den s- und d-Bändern, siehe Abbildung 2. Folglich werden die stark gemischten s- und d-Bänder durch rote Linien dargestellt.) Das Fermi-Niveau  $E_F$  (das höchste besetzte Niveau) ist auf null gesetzt.

bisherigen Rechnungen die Möglichkeit nicht ausschließen, dass das Element 112 doch metallisch ist. Um die Frage nach dem Metallcharakter zu beantworten, sind daher vollrelativistische Berechnungen notwendig. Die Bandstruktur, die sich aus einer vierkomponentigen vollrelativistischen Rechnung für Element 112 ergibt, ist ebenfalls in Abbildung 1 gezeigt. In der Tat führt die Spin-Bahn-Kopplung zu einer wesentlich kleineren, jedoch immer noch vorhandenen Bandlücke von 0.2 eV.

Die SR- und FR-Zustandsdichten (DOS) für die hcp-Struktur sind in Abbildung 2 dargestellt. Hier sehen wir



**Abbildung 2.** Vergleich zwischen a) der skalar-relativistischen und b) der vollrelativistischen Zustandsdichten (schwarze Linien). Die partiellen s- (grüne Linien), p- (blaue Linien), und d-Beiträge (rote Linien) sind ebenfalls gezeigt. Der Effekt der Spin-Bahn-Kopplung ist deutlich sichtbar. Das Fermi-Niveau ist auf null gesetzt.

deutlich den Einfluss der Spin-Bahn-Aufspaltung: die  $6d_{3/2}$ - und  $6d_{5/2}$ -Niveaus sind mit ca. 3.2 eV stark aufgespalten, und die zwei Spitzen über der Bandlücke kann man den  $7p_{1/2}$ - und  $7p_{3/2}$ -Niveaus zuordnen, für die die Spin-Bahn-Aufspaltung ungefähr 5 eV beträgt. Wegen der relativistischen 6d-Expansion und der relativistischen 7s-Kontraktion haben die Valenzbänder überwiegend 6d-Charakter, und es kommt zu einer starken Überlappung der voll besetzten 7s- und 6d-Bänder.

Wir schlussfolgern, dass Element 112 kein Metall mehr ist; vielmehr ist es (unter Normalbedingungen) ein Halbleiter mit einer Bandlücke von mindestens 0.2 eV, wie aus der lokalen Dichtefunktionalnäherung hervorgeht, die als untere Schranke dient. Die Bandlücke ist jedoch recht klein, weshalb Element 112 mehr den Gruppe-12-Metallen als den Edelgasen ähnelt.

## Methoden

Wir haben skalar-relativistische (SR-) und nichtrelativistische (NR-) Bandstrukturrechnungen mit einem energieadjustierten Stuttgart-Pseudopotential mit kleinem Rumpf,<sup>[25]</sup> das den  $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}5f^{14}$  Kern modelliert, durchgeführt.<sup>[31]</sup> Von den ursprünglich optimierten diffusen Valenz-Basissätzen wurden die Exponenten, die kleiner als 0.1 waren, entfernt, da man sonst mit linearen Abhängigkeiten und Nichtkonvergenz des Selbstkonsistenz-Verfahrens rechnen muss. Die übrigen diffusen Funktionen wurden ausgehend von einem (8s7p5d)-Basissatz nachoptimiert und auf [7s6p4d] kontrahiert. Die Kohäsi-

onsenergie ist Counterpoise-korrigiert und wurde durch Berechnung der Atomenergie in Gegenwart von Basisfunktionen auf den Positionen der benachbarten Atome im Festkörper erhalten. Diese Korrektur ist mit den ersten 18 Nachbaratomen auskonvergiert. 133 *k*-Punkte wurden für den irreduziblen Teil der Brillouin-Zone verwendet.

Die lokale Dichtenäherung (LDA)<sup>[32]</sup> wurde wegen ihrer allgemein guten Eignung für Metalle und besonders für die rhomboedrische Struktur des festen Quecksilbers verwendet.<sup>[33]</sup> Wir überprüften außerdem unterschiedliche LDA- und GGA-Funktionale (GGA = verallgemeinertes Gradientenverfahren) im CRYSTAL03-Programm, von denen keine eine kleinere Bandlücke ergibt (z.B. wurde eine Zunahme der SR-Bandlücke auf 1.4 eV mit dem GGA-Funktional PW91 berechnet),<sup>[34,35]</sup> was unsere Vermutung des LDA-Wertes als unterer Schranke stützt.

Zusätzlich führten wir vierkomponentige Kohn-Sham-Dirac-(-FR-)Bandstrukturrechnungen an der relativistisch energieminierten Geometrie mit der relativistischen Version<sup>[36]</sup> der „full potential local orbital“-Methode<sup>[37]</sup> (RFPLO) durch. Der Basissatz besteht aus einer Bloch-Summe atomähnlicher lokaler Orbitale. Die lokalen Orbitale sind Lösungen einer Einteilchen-Dirac-Gleichung im sphärisch gemittelten Kristallpotential. Auf Valenzzustände wird zusätzlich noch ein  $r^4$ -Potential mit einem orbitalabhängigen Variationsparameter angewendet, der so optimiert wird, dass die Gesamtenergie minimiert wird.

Für die vorliegenden Rechnungen nutzten wir 5f-, 6d-, 7s- und 7p-Zustände als Basis. Die Spin-Bahn-aufgespaltenen 5f-Zustände ergeben dispersionslose Bänder, die ungefähr 63 und 69 eV unterhalb des Fermi-Niveaus liegen. Die Einbeziehung der 5f-Zustände in den Valenzbasissatz beeinflusst die berechnete Gesamtenergie nur unmerklich (ca. 1  $\mu\text{Hartree/Atom}$ ), was ihre Vernachlässigung in den vorhergehenden Energieminimierungen der Geometrie mit dem CRYSTAL03-Programm rechtfertigt. Die Einbeziehung von 6f-Polarisationszuständen führt ebenso nur zu unwesentlichen Änderungen in der Bandstruktur.

Für die Entwicklung der atomzentrierten Potential- und Dichtebeiträge nach Kugelflächenfunktionen wurde ein Cut-off von  $l_{\text{max}} = 12$  verwendet. Die Zahl der *k*-Punkte im irreduziblen Teil der Brillouin-Zone betrug 133. Der LDA-Parametrisierung von Perdew und Wang<sup>[38]</sup> wurde für das Austausch- und Korrelationspotential verwendet.

Die SR-Bandlücke, die mit RFPLO erhalten wurde, ist mit 0.7 eV ein wenig kleiner als in der CRYSTAL03-Rechnung, die 0.9 eV ergibt. Dieser Unterschied liegt nicht an der unterschiedlichen Parametrisierung des LDA-Funktional: Die Bandlücke in der CRYSTAL03-Rechnung bleibt unverändert, wenn wir das PW92-Funktional einsetzen, was wiederum zeigt, dass die Differenz von 0.2 eV an den unterschiedlichen Programmcodes liegen muss. Eine mögliche Quelle für diese Abweichung könnten unterschiedliche Definitionen der SR-Näherung oder die verschiedenen Basissätze sein, die in beiden Programmen verwendet werden.

Eingegangen am 18. Oktober 2006

Online veröffentlicht am 26. Januar 2007

**Stichwörter:** Dichtefunktionalrechnungen · Elektronische Struktur · Element 112 · Halbleiter · Relativistische Effekte

- [1] *The Chemistry of Superheavy Elements* (Hrsg.: M. Schädel), Kluwer Academic, Dordrecht, **2003**.
- [2] S. Hofmann, G. Münzenberg, *Rev. Mod. Phys.* **2000**, 72, 733–767.
- [3] Yu. Ts. Oganessian, V. K. Utyonkoy, Yu. V. Lobanov, F. Sh. Abdullin, A. N. Polyakov, I. V. Shirokovsky, Yu. S. Tsyganov, G. G. Gulbekian, S. L. Bogomolov, A. N. Mezentssev, S. Iliev, V. G. Subbotin, A. M. Sukhov, A. A. Voinov, G. V. Buklanov, K.



- Subotic, V. I. Zagrebaev, M. G. Itkis, J. B. Patin, K. J. Moody, J. F. Wild, M. A. Stoyer, N. J. Stoyer, D. A. Shaughnessy, J. M. Kenneally, R. W. Loughheed, *Phys. Rev. C* **2004**, *69*, 021601.
- [4] Yu. Ts. Oganessian, V. K. Utyonkov, Yu. V. Lobanov, F. Sh. Abdullin, A. N. Polyakov, I. V. Shirokovsky, Yu. S. Tsyganov, G. G. Gulbekian, S. L. Bogomolov, B. N. Gikal, A. N. Mezentssev, S. Iliev, V. G. Subbotin, A. M. Sukhov, A. A. Voinov, G. V. Buklanov, K. Subotic, V. I. Zagrebaev, M. G. Itkis, J. B. Patin, K. J. Moody, J. F. Wild, M. A. Stoyer, N. J. Stoyer, D. A. Shaughnessy, J. M. Kenneally, R. W. Loughheed, *Phys. Rev. C* **2004**, *69*, 054607.
- [5] Yu. Ts. Oganessian, V. K. Utyonkov, Yu. V. Lobanov, F. Sh. Abdullin, A. N. Polyakov, R. N. Sagaidak, I. V. Shirokovsky, Yu. S. Tsyganov, A. A. Voinov, G. G. Gulbekian, S. L. Bogomolov, B. N. Gikal, A. N. Mezentssev, S. Iliev, V. G. Subbotin, A. M. Sukhov, K. Subotic, V. I. Zagrebaev, G. K. Vostokin, M. G. Itkis, K. J. Moody, J. B. Patin, D. A. Shaughnessy, M. A. Stoyer, N. J. Stoyer, P. A. Wilk, J. M. Kenneally, J. H. Landrum, J. F. Wild, R. W. Loughheed, *Phys. Rev. C* **2006**, *74*, 044602.
- [6] M. Schädel, *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 378–414; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 368–401.
- [7] C. E. Düllmann, W. Brühle, R. Dressler, K. Eberhardt, B. Eichler, R. Eichler, H. W. Gäggeler, T. N. Ginter, F. Glaus, K. E. Gregorich, D. C. Hoffman, E. Jäger, D. T. Jost, U. W. Kirbach, D. M. Leek, H. Nitsche, J. B. Patin, V. Pershina, D. Piguet, Z. Qin, M. Schädel, B. Schausten, E. Schimpf, H.-J. Schött, S. Soverna, R. Sudowe, P. Thörle, S. N. Timokhin, N. Trautmann, A. Türler, A. Vahle, G. Wirth, A. B. Yakushev, P. M. Zielinski, *Nature* **2002**, *418*, 859–862.
- [8] B. Fricke, *Struct. Bonding (Berlin)* **1975**, *21*, 90–145.
- [9] V. Pershina in *Relativistic Electronic Structure Theory: Part 2. Applications* (Hrsg.: P. Schwerdtfeger), Elsevier, Amsterdam, **2004**, S. 1–80.
- [10] R. Eichler, W. Brühle, R. Buda, S. Bürger, R. Dressler, C. E. Düllmann, J. Dvorak, K. Eberhardt, B. Eichler, C. M. Folden III, H. W. Gäggeler, K. E. Gregorich, F. Haenssler, D. C. Hoffman, H. Hummrich, E. Jäger, J. V. Kratz, B. Kuczewski, D. Liebe, D. Nayak, H. Nitsche, D. Piguet, Z. Qin, U. Rieth, M. Schädel, B. Schausten, E. Schimpf, A. Semchenkov, S. Soverna, R. Sudowe, N. Trautmann, P. Thörle, A. Türler, B. Wierczinski, N. Wiehl, P. A. Wilk, G. Wirth, A. B. Yakushev, A. von Zweidorf, *Radiochim. Acta* **2006**, *94*, 181–191.
- [11] R. Eichler, N. V. Aksenov, A. V. Belozerov, G. A. Bozhikov, V. I. Chepigin, R. Dressler, S. N. Dmitriev, H. W. Gäggeler, V. A. Gorshkov, F. Haenssler, M. G. Itkis, V. Ya. Lebedev, A. Laube, O. N. Malyshev, Yu. Ts. Oganessian, O. V. Petrushkin, D. Piguet, P. Rasmussen, S. V. Shishkin, A. V. Shutov, A. I. Svirikhin, E. E. Tereshatov, G. K. Vostokin, M. Wegrzecki, A. V. Yerebin, unveröffentlichte Ergebnisse.
- [12] H. W. Gäggeler, W. Brühle, C. E. Düllmann, R. Dressler, K. Eberhardt, B. Eichler, R. Eichler, C. M. Folden, T. N. Ginter, F. Glaus, K. E. Gregorich, F. Haenssler, D. C. Hoffman, E. Jäger, D. T. Jost, U. W. Kirbach, J. V. Kratz, H. Nitsche, J. B. Patin, V. Pershina, D. Piguet, Z. Qin, U. Rieth, M. Schädel, E. Schimpf, B. Schausten, S. Soverna, R. Sudowe, P. Thörle, N. Trautmann, A. Türler, A. Vahle, P. A. Wilk, G. Wirth, A. B. Yakushev, A. von Zweidorf, *Nucl. Phys. A* **2004**, *734*, 208–212.
- [13] Yu. Ts. Oganessian, V. K. Utyonkov, Yu. V. Lobanov, F. Sh. Abdullin, A. N. Polyakov, I. V. Shirokovsky, Yu. S. Tsyganov, G. G. Gulbekian, S. L. Bogomolov, B. N. Gikal, S. Iliev, V. G. Subbotin, A. M. Sukhov, A. A. Voinov, G. V. Buklanov, K. Subotic, V. I. Zagrebaev, M. G. Itkis, J. B. Patin, K. J. Moody, J. F. Wild, M. A. Stoyer, N. J. Stoyer, D. A. Shaughnessy, J. M. Kenneally, P. A. Wilk, R. W. Loughheed, R. I. Il'kaev, S. P. Vesnovskii, *Phys. Rev. C* **2004**, *70*, 064609-1-14.
- [14] R. Eichler, *Radiochim. Acta* **2005**, *93*, 245–248.
- [15] S. Soverna, R. Dressler, C. E. Düllmann, B. Eichler, R. Eichler, H. W. Gäggeler, F. Haenssler, J.-P. Niklaus, D. Piguet, Z. Qin, A. Türler, A. B. Yakushev *Radiochim. Acta* **2005**, *93*, 1–8.
- [16] B. Eichler, *Kernenergie* **1976**, *19*, 307–311.
- [17] N. S. Mosyagin, T. A. Isaev, A. V. Titov, *J. Chem. Phys.* **2006**, *124*, 224302.
- [18] K. S. Pitzer, *J. Chem. Phys.* **1975**, *63*, 1033.
- [19] J. Anton, B. Fricke, P. Schwerdtfeger, *Chem. Phys.* **2005**, *311*, 97–103.
- [20] V. Pershina, T. Bastug, B. Fricke, T. Jacob, S. Varga, *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *365*, 176–183.
- [21] V. Pershina, T. Bastug, C. Sarpe-Tudoran, J. Anton, B. Fricke, *Nucl. Phys. A* **2004**, *734*, 200–203.
- [22] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Brooks-Cole, Cornell University, **1976**.
- [23] J. A. Moriarty, *Phys. Lett. A* **1988**, *131*, 41–46.
- [24] E. Eliav, U. Kaldor, Y. Ishikawa, *Phys. Rev. A* **1995**, *52*, 2765–2769.
- [25] M. Seth, P. Schwerdtfeger, M. Dolg, *J. Chem. Phys.* **1996**, *106*, 3623–3632.
- [26] P. Pykkö, S. Riedel, M. Patzschke, *Chem. Eur. J.* **2005**, *11*, 3511–3520.
- [27] C. S. Nash, *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 3493–3500.
- [28] P. Schwerdtfeger, N. Gaston, R. P. Krawczyk, R. Tonner, G. E. Moyano, *Phys. Rev. B* **2006**, *73*, 064112.
- [29] *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 78th ed. (Hrsg.: D. R. Lide), CRC, New York, **1997**.
- [30] P. Schwerdtfeger, M. Seth in *The Encyclopedia of Computational Chemistry* (Hrsg.: P. von R. Schleyer, N. L. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. Kollman, H. F. Schaefer III), Wiley, New York, **1998**, S. 2480–2499.
- [31] V. R. Saunders, R. Dovesi, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, N. M. Harrison, K. Doll, B. Civalleri, I. J. Bush, Ph. D'Arco, M. Llunell, CRYSTAL03, (<http://www.crystal.unito.it>), Turin, **2003**.
- [32] S. H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, *Can. J. Phys.* **1980**, *58*, 1200–1211.
- [33] N. Gaston, B. Paulus, K. Rosciszewski, P. Schwerdtfeger, H. Stoll, *Phys. Rev. B* **2006**, *74*, 094102.
- [34] J. P. Perdew, Y. Wang, *Phys. Rev. B* **1991**, *43*, 8911–8916.
- [35] J. P. Perdew, Y. Wang, *Phys. Rev. B* **1991**, *44*, 13298–13307.
- [36] H. Eschrig, M. Richter, I. Opale in *Relativistic Electronic Structure Theory: Part 2. Applications* (Hrsg.: P. Schwerdtfeger), Elsevier, Amsterdam, **2004**, S. 723–776.
- [37] K. Koepf, H. Eschrig, *Phys. Rev. B* **1999**, *59*, 1743–1757; <http://www.FPLO.de>.
- [38] J. P. Perdew, Y. Wang, *Phys. Rev. B* **1992**, *45*, 13244–13249.