

1. Übung (Abgabe Di. 31. Oktober zu Beginn der Übung bzw. Vorlesung)

1. Van-der-Waals-Kräfte: klassische Betrachtung

Am Ursprung befinde sich ein elektrischer Dipol mit dem Moment \vec{p} . Am Ort \vec{r} soll sich ein Atom befinden, das durch ein Feld polarisiert werden kann ($\vec{p}' = \alpha \vec{E}$). Berechnen und diskutieren Sie die potentielle Energie des Systems in Abhängigkeit von Größe und Richtung von \vec{r} . Berechnen Sie als Beispiel die potentielle Energie für $p = 10^{-29}$ Asm, $\alpha = 10^{-40}$ AsV $^{-1}$ m 2 , $r = 10$ Å und geben Sie die Energie in Kelvin an!

Hinweis: Die potentielle Energie W eines Dipols \vec{p}' im Feld \vec{E} ist gegeben durch:

$$W = -\frac{1}{2} \vec{p}' \cdot \vec{E}(\vec{r}) \text{ und das Feld eines Dipols durch } \vec{E}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\vec{p}}{r^3} - \frac{3(\vec{p} \cdot \vec{r})\vec{r}}{r^5} \right).$$

(2 Punkte)

2. Gleichgewichtsabstand der van-der-Waals-Kraft

Bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand von zwei identischen Edelgasatomen, die sich durch van-der-Waals-Kräfte anziehen. Vergleichen Sie mit den Gitterkonstanten der Edelgaskristalle (die Werte für R und σ finden Sie in der Tabelle in den Folien auf der Webseite).

(2 Punkte)

3. Ionenkristall in zwei Dimensionen

Betrachten Sie den Fall eines zweidimensionalen, quadratischen, ionischen Kristalls, wie beispielsweise eine isolierte Ebene von NaCl.

Berechnen Sie die Madelung-Konstante auf 5% genau, indem Sie hinreichend viele Nachbarschalen summieren.

Hinweis: Um die Konvergenz zu beschleunigen können Sie elektrisch neutrale Schalen betrachten, indem Sie die Ionen nur anteilmäßig berücksichtigen.

(2 Punkte)

4. NaCl- und CsCl-Struktur

Bestimmen Sie das kritische Verhältnis der Radien von Kation r_A und Anion r_B eines einfachen Salzes A^+B^- , bei dem das Kristallsystem von der CsCl- in die NaCl-Struktur wechselt.

Hinweis: Betrachten Sie zunächst den Spezialfall, dass sich die größeren Ionen gegenseitig berühren.

(2 Punkte)