

1. Übungsblatt zur "Einführung in die Festkörperphysik" WS 05/06

M. Wolf/K.Starke

Ausgabe: 26.10.05

Abgabe: Mittwoch, den 2.11.2005 (vor der Vorlesung)

1. Kristallstruktur (4 P)

Betrachten Sie ein bcc Gitter aus sich berührenden (identischen) harten Kugeln.

Berechnen Sie den Kugelradius R für eine gegebene Gitterkonstante a.

2. Ionenkristall in zwei Dimensionen (10 P)

Betrachten Sie den Fall eines zweidimensionalen quadratischen ionischen Kristalls, wie beispielsweise eine isolierte (100)- Ebene von NaCl.

- Berechnen Sie die Madelung-Konstante mit einer Genauigkeit von 10^{-2} , indem Sie hinreichend viele Nachbarschalen summieren.
- Berechnen Sie den Gleichgewichtsabstand unter der Annahme, dass der abstoßende Teil des Potentials die Form $U = B / R^p$ hat und p so groß sein soll, dass nur nächste Nachbarn berücksichtigt werden müssen.

3. Edelgaskristalle (10 P)

Bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand und die Bindungsenergie für Edelgaskristalle mit dem Lennard-Jones-Potential in der fcc Struktur. Benutzen Sie dazu die Parameter ϵ und σ aus der Tabelle. Warum ist die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten für schwere Edelgase besser?

Die van der Waals Wechselwirkung beruht auf der Polarisierung der Edelgasatome auf Grund von Nullpunktsschwingungen der Valenzelektronen gegen den Ionenrumpf. Schätzen Sie die resultierende mittlere räumliche Auslenkung des Ladungsschwerpunkts der Elektronen im Vergleich zum atomaren Abstand im Edelgaskristall ab.

Abstand zwischen nächsten Nachbarn, in Å	Bindungsenergie,		Schmelzpunkt, in K	Ionisierungsenergie des freien Atoms, in eV	Parameter im Lennard-Jones-Potential	
					ϵ , in meV	σ , in Å
		kJ/Mol	eV/Atom			
He		flüssig bei 0 atm.		24,58	0,9	2,56
Ne	3,13	1,88	0,02	24	21,56	3,1
Ar	3,76	7,74	0,080	84	15,76	10,4
Kr	4,01	11,2	0,116	117	14,00	14,0
Xe	4,35	16,0	0,17	161	12,13	19,8

Eigenschaften von Edelgaskristallen. (Auf 0 K und 0 atm Druck extrapoliert.)