

# 1. Übungsblatt zur " Festkörperphysik für Bachelor" WS 2009/10

M. Wolf/A. Melnikov

**Ausgabe: 20. 10. 2009**

**Abgabe: Dienstag, den 27. 10. 2009 (vor der Vorlesung)**

## 1. Edelgaskristalle (4 P)

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

Abstand zwischen nächsten Nachbarn, in Å	Bindungsenergie		Schmelzpunkt, in K	Ionisierungsenergie des freien Atoms in eV	Parameter im Lennard-Jones-Potential	
	kJ/Mol	eV/Atom			$\epsilon$ , in meV	$\sigma$ , in Å
He	flüssig bei 0 atm.			24,58	0,9	2,56
Ne 3,13	1,88	0,02	24	21,56	3,1	2,74
Ar 3,76	7,74	0,080	84	15,76	10,4	3,40
Kr 4,01	11,2	0,116	117	14,00	14,0	3,63
Xe 4,35	16,0	0,17	161	12,13	19,8	3,98

Eigenschaften von Edelgaskristallen, auf 0 K und 0 atm Druck extrapoliert.

## 2. Ionenkristalle (10 P)

Die Energie eines Ions im Feld aller anderen Bausteine eines Ionenkristalls besteht aus einem anziehenden Coulomb-Anteil und einem abstoßenden Anteil:

$$E_{ion} = -\frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}, \quad \text{Glg. (1)}$$

wobei  $r$  der Abstand nächster Nachbarn und  $A$  die Madelungkonstante bezeichnet.

- Zeichnen Sie den Verlauf der potentiellen Energie für  $n = 12$ .
- Berechnen Sie die Madelungkonstante  $A$  für eine lineare Kette von Ionen gleichen Abstands und abwechselnder Ladung durch Aufsummieren des Coulomb-Anteils.

(Hinweis:  $\ln(1+x) = 1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{3} - \frac{x^3}{4} \pm \dots$  für  $-1 \leq x \leq 1$ )

- Berechnen Sie die Madelungkonstante eines zweidimensionalen quadratischen Ionenkristalls (Ionenladung  $\pm e$ ) unter Berücksichtigung der Beiträge in der Gittersumme bis zum fünften Nachbarn.
- Berechnen Sie die Gitterenergie  $E_G$  (in Abhängigkeit von  $A$ ) eines aus  $2N$  Ionen bestehenden Kristalls, wenn der Gleichgewichtsabstand nächster Nachbarn  $r = r_0$  ist.

- f) Die Madelungkonstante für NaCl beträgt  $A \cong 1.7476$ . Bestimmen Sie für NaCl (Gitterkonstante  $a = 5.64 \text{ \AA}$ , Bindungsenergie pro Ionenpaar  $-8.23 \text{ eV}$ ) den Exponenten  $n$  des abstoßenden Potentialanteils.
- e) Gegeben sind die isotherme Kompressibilität  $\kappa$ , die Madelungkonstante  $A$  und der Gleichgewichtsabstand  $r_0$ . Wie groß ist der Exponent  $n$  im abstoßenden Anteil der Glg. (1) für einen kubischen Kristall?

Hinweise:

$$\kappa = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_{T=\text{const.}} \quad \text{und} \quad U = p \cdot dV$$

Für einen kubischen Kristall müssen wir nur eine Raumrichtung betrachten. Zeigen Sie zunächst, dass im Gleichgewicht gilt:

$$\frac{d^2 U}{dV^2} = \frac{d^2 U}{dr^2} \left( \frac{dr}{dV} \right)^2$$