



Übungen zur Physik V: Festkörperphysik

WS 2007/2008

Übungsblatt 1

Besprechung am 8. November 2007

Aufgabe 1.1: Bindung zwischen Gitterbausteinen

Um die Bindung zwischen Gitterbausteinen zu beschreiben, setzt man deren Wechselwirkungsenergie Φ_{ij} aus einem anziehenden und abstoßenden Term zusammen:

$$\Phi_{ij} = -a/r_{ij}^m + b/r_{ij}^n$$

- Diskutieren Sie mögliche Ursachen für anziehende und abstoßende Wechselwirkungen im Potential zwischen Gitterbausteinen.
- Zeigen Sie, daß ein stabiler Zustand nur für $n > m$ möglich ist.
- Welche statische Gleichgewichtsenergie U_b ergibt sich bei $T = 0$ aus der Form von $\Phi_{i,j}$? (Hinweis: Setzen Sie $r_{ij} = p_{ij}r_0$, wobei $r_0 =$ Abstand nächster Nachbarn und $r_0^3 = V/N$ mit $V =$ Volumen des Körpers und $N =$ Zahl der Gitterbausteine.)
- Welcher Zusammenhang besteht zwischen n, m und dem isothermen Kompressionsmodul $K = -V_0(\partial p/\partial V)_T$ bei $T = 0$?

Aufgabe 1.2: Edelgaskristalle

In Edelgaskristallen läßt sich die Wechselwirkung zweier Atome näherungsweise durch das Lennard-Jones-Potential beschreiben:

$$\Phi_{ij} = 4\epsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6].$$

- Berechnen Sie mit Hilfe des Ergebnisses aus Aufg. 1 (c) aus den gemessenen Atomabständen nächster Nachbarn den Parameter σ und vergleichen Sie das Ergebnis mit den experimentell gefundenen Werten:

	r_0 [nm]	σ_{exp} [nm]
Ne	0.313	0.274
Ar	0.376	0.340
Kr	0.401	0.365
Xe	0.435	0.398

Hinweis: Die Gittersummen der für Edelgase relevanten kubisch-flächen-zentrierten (fcc) Struktur sind: $\sum_j p_{ij}^{-12} = 12.13$ und $\sum_j p_{ij}^{-6} = 14.45$.

- b) Der Kompressionsmodul für Kr beträgt nahe am absoluten Nullpunkt $K = 2.56 \cdot 10^9 \text{ N/m}^2$. Berechnen Sie mit Hilfe des Ergebnisses von Aufg. 1(d) und unter Annahme des Lennard-Jones-Potentials den Parameter ε . Der experimentell gefundene Wert ist $\varepsilon = 2.25 \cdot 10^{-21} \text{ J}$.
- c) Berechnen Sie mit diesen Werten die Bindungsenergie von Kr für $T = 0$. Experimentell ergibt sich $U_b = 11.2 \text{ kJ/mol}$.

Aufgabe 1.3: Madelung-Konstante

Berechnen Sie die Madelung-Konstante α_M einer unendlichen, linearen Kette bestehend aus abwechselnd positiven und negativen Ionen im Abstand r_0 (Hinweis: $\ln(1+x) = x - x^2/2 + x^3/3 - x^4/4 + \dots$)

Aufgabe 1.4: Bariumoxid

- a) Bariumoxid zeigt NaCl-Struktur (Madelung-Konstante $\alpha_M \approx 1.747$). Schätzen Sie die Bindungsenergie pro Ionenpaar für die hypothetischen Kristalle Ba^+O^- und $\text{Ba}^{2+}\text{O}^{2-}$ ab.
- b) Das erste und zweite Ionisierungspotential von Ba ist 5.19 eV bzw. 9.96 eV; die Elektronenaffinitäten des ersten und zweiten Elektrons, die zum neutralen bzw. einfach negativ geladenen Sauerstoff hinzugefügt werden, sind -1.5 und -9.0 eV. Welches der beiden Gitter (Ba^+O^- oder $\text{Ba}^{2+}\text{O}^{2-}$) ist das stabilere?

Hinweis: Nehmen Sie an, daß n sehr groß ist und daß der Kernabstand der nächsten Nachbarn für beide Formen gleich ist ($r_0 = 2.76 \text{ \AA}$).

Die Übungsblätter finden Sie auch unter
<http://www-pi.physik.uni-karlsruhe.de/lehre/lehre.html>