WALTHER–MEIßNER–INSTITUT 16. November 2017
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Lehrstuhl für Technische Physik E23, Technische Universität München
Prof. Dr. Rudolf Gross, Dr. Stephan Geprägs
Tel.: +49 (0)89 289 14225
E-mail: stephan.gepraegs@wmi.badw.de **Blatt 5**

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I
WS 2017/2018

3 Bindungskräfte in Festkörpern

3.1 Bindungstypen

Obwohl wir zwischen verschiedenen Bindungstypen unterscheiden, treten diese in Festkörpern üblicherweise nicht in reiner Form auf. Diskutieren Sie, welche Bindungstypen in folgenden Festkörpern relevant sind und welcher Bindungstyp dominiert: Krypton, Kochsalz (NaCl), Natrium, Graphit, Diamant, Ar, GaAs, ZnO, Quarz, NH_3, CF_4.

3.2 Zweiatomige Moleküle

Wir betrachten ein zweiatomiges Argon-Molekül. Die Bindungsenergie als Funktion des Abstands R der Atome ist gegeben durch

$$U(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6} \right] ,$$

wobei $\epsilon = 1.67 \times 10^{-21}$ J und $\sigma = 0.34$ nm. Die Atommasse M von Ar beträgt 40 amu mit 1 amu $= 1.66 \times 10^{-27}$ kg.

(a) Bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand R_0 in Abhängigkeit von den Parametern σ und ϵ.

(b) Berechnen Sie die Schwingungsfrequenz des zweiatomigen Argon-Moleküls in harmonischer Näherung.

(c) Diskutieren Sie die Kraft $F(R) = -dU/dR$. In welchem Abstand $R > R_0$ ist die Kraft maximal?

3.3 Bindungsenergien eines Neonkristalls mit bcc-, hcp- und fcc-Struktur

Berechnen Sie das Verhältnis der Bindungsenergien von Neonkristallen mit einer bcc-, hcp- und fcc-Struktur mit Hilfe des Lennard-Jones-Potenzials. Die Gittersummen für das bcc-Gitter ist mit $\alpha_{ij} = r_{ij}/R$ durch

$$A_{12} = \sum_{j \neq j} \alpha_{ij}^{-12} = 9.114; \quad A_6 = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-6} = 12.253,$$

für das hcp-Gitter durch

$$A_{12} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-12} = 12.1323; \quad A_6 = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-6} = 14.4549,$$

und für das fcc-Gitter durch

$$A_{12} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-12} = 12.1319; \quad A_6 = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-6} = 14.4539$$

gegeben. Welche Struktur erwartet man theoretisch für den Neonkristall? Experimentell stellt man fest, dass Neon in der fcc-Struktur kristallisiert und einen Gleichgewichtsabstand von $R_0 = 1.14\sigma$ besitzt. Vergleichen Sie diese Ergebnisse mit den theoretischen Vorhersagen und diskutieren Sie eventuelle Abweichungen zwischen Theorie und Experiment. (Angaben zu Neon: $\sigma = 2.74\,\text{Å}$, $B(R_0) = 18.1 \times 10^8 \text{N/m}^2$, $M = 3.35 \times 10^{-26}$kg)

3.4 Eindimensionaler Ionenkristall

Betrachten Sie eine Kette aus $2N$ Ionen mit der abwechselnden Ladung $\pm q$ und dem abstoßenden Potential A/R^n zwischen nächsten Nachbarn.

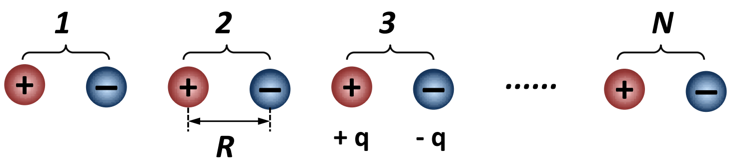

Abbildung 1: Eindimensionaler Ionenkristall.

(a) Berechnen Sie zunächst die Madelung-Konstante für den unendlich ausgedehnten, eindimensionalen Ionenkristall.

(b) Zeigen Sie, dass für den Gleichgewichtsabstand des Kristalls folgendes gilt

$$U(R_0) = -2\ln 2 \frac{Nq^2}{4\pi\epsilon_0 R_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right). \tag{1}$$

(c) Betrachten Sie nun einen endlichen Kristall. Der Kristall soll zusammengedrückt werden, so dass $R_0 \to R_0 - \delta R$. Zeigen Sie, dass die Kompressionsarbeit pro Längeneinheit in erster Näherung durch den Term $Nk(\delta R)^2$ bestimmt ist, wobei für die Kraftkonstante $k = (n-1)\alpha q^2/8\pi\epsilon_0 R_0^3$ gilt. Benutzen Sie hierzu den vollständigen Ausdruck für $U(R)$.