

## Übungsaufgaben zur Vorlesung

# Physik der Kondensierten Materie I

## WS 2020/2021

### 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<sub>3</sub>, CF<sub>4</sub>.

#### 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  $1 \text{ amu} = 1.66 \times 10^{-27}$  kg.

- Bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand  $R_0$  in Abhängigkeit von den Parametern  $\sigma$  und  $\epsilon$ .
- Berechnen Sie die Schwingungsfrequenz des zweiatomigen Argon-Moleküls in harmonischer Näherung.
- 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

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

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:  $\sigma = 2.74 \text{ \AA}$ ,  $B(R_0) = 18.1 \times 10^8 \text{ N/m}^2$ ,  $M = 3.35 \times 10^{-26} \text{ kg}$ )

### 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.

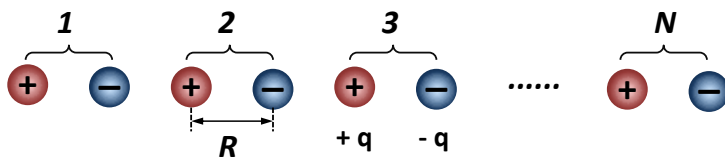


Abbildung 1: Eindimensionaler Ionenkristall.

- Berechnen Sie zunächst die Madelung-Konstante für den unendlich ausgedehnten, eindimensionalen Ionenkristall.
- Zeigen Sie, dass für den Gleichgewichtsabstand des Kristalls folgendes gilt

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

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