Übung 4

Ausgabe: 11.11.2024 Abgabe: 18.11.2024 Besprechung: 25.11.2024

Verständnisfragen und Vorlesungswiederholung:

(keine schriftliche Beantwortung; mündliche Diskussion in der Übung)

1. Erläutern Sie das Konzept der elektronischen Zustandsdichte.
2. Welche Bedeutung besitzt die Plasmafrequenz?
3. Benennen Sie die wichtigsten Bindungstypen und ihre Eigenschaften.
4. Was ist die physikalische Ursache der van-der-Waals-Bindung?
5. Was unterscheidet Kristalle von Quasikristallen? Worin bestehen Gemeinsamkeiten?

1. Aufgabe: Dimensionsabhängigkeit von Zustandsdichte und Fermi-Energie (5 P)

Berechnen Sie die Zustandsdichte und die Fermi-Energie eines Gases aus N freien Elektronen in d Dimensionen, und geben Sie die Ergebnisse für $d = 1$, 2 und 3 explizit an:

a) Zeigen Sie, dass die Zustandsdichte $D_d(E) \propto E^{\frac{d}{2}-1}$ ist. Welche Besonderheiten ergeben sich hieraus in niedrigen Dimensionen? (3 P)

b) Bestimmen Sie die Fermi-Energie als Funktion der Teilchendichte $n = \dfrac{N}{L^d}$! (2 P)

Anleitung: Wählen Sie periodische Randbedingungen für die k-Auswahl. Die Zustandsdichte ist gegeben durch $D_d(E)dE = 2\dfrac{O_d(k)dk}{(2\pi/L)^d}$, *wobei* L *die Kantenlänge des Periodizitätsvolumens und* $O_d(k) = \alpha_d\, k^{d-1}$ *die Oberfläche einer d-dimensionalen Kugel mit Radius* k *ist. Der Vorfaktor kann zu* $\alpha_d = \frac{2\,\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})}$ *berechnet werden. Für die Gamma-Funktion gilt* $\Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x)$ *und* $\Gamma(1) = 1$ *bzw.* $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$.

2. Aufgabe: Plasmaschwingungen in Metallen (2 P)

Berechnen Sie im Rahmen eines Modells freier Elektronen

a) die Plasmafrequenz von Natrium, (1 P)

b) die Energien der zugehörigen plasmonischen Anregungen. (1 P)

Hinweis: Die Dichte der Leitungselektronen von Na beträgt $n = 2{,}53 \cdot 10^{22}\ cm^{-3}$.

3. Aufgabe: Born-Mayer-Potential für NaCl (6 P)

Das gesamte Wechselwirkungspotential U eines Ionenkristalls setzt sich zusammen aus einem Coulomb-Anteil $U^{(C)}$ und einem abstoßenden Anteil $U^{(B)}$, der häufig als Born-Mayer-Potential parametrisiert wird:

$$U^{(C)}(r) = -N \frac{e^2}{4\pi\,\epsilon_0\,r}\,\alpha,$$

$$U^{(B)}(r) = NzB\exp\left(-\frac{r}{\rho}\right).$$

Dabei ist N die Anzahl der Ionenpaare in einem Kristall endlicher Größe, z die Anzahl nächster Nachbarn und r deren Abstand. Die Konstante α ist spezifisch für die jeweilige Kristallstruktur. Die Parameter B und ρ des Born-Mayer-Potentials kennzeichnen dessen Stärke bzw. Reichweite. Sie lassen sich aus der Kenntnis der Kompressibilität des Kristalls und des Gleichgewichtsabstandes bestimmen, wofür zwei unabhängige Gleichungen benötigt werden. Diese sollen im Folgenden hergeleitet und auf einen NaCl-Kristall angewendet werden ($\alpha = 1,7476$, Gleichgewichtsabstand nächster Nachbarn $r_0 = 2{,}820$ Å sowie Kompressibilität $\kappa = 4,17 \cdot 10^{-11}$ m^2/N).

a) Verschaffen Sie sich die erste Gleichung aus der Forderung, dass das Minimum des Wechselwirkungspotentials $U = U^{(C)} + U^{(B)}$ den Gleichgewichtsabstand r_0 definiert. (1 P)

b) Verwenden Sie für die zweite Gleichung die Kompressibilität in folgender Weise:
Aus der Definition der Kompressibilität $\kappa = -\frac{1}{V}\frac{dV}{dp}$ folgt mit $dU = -p\,dV$ der Zusammenhang $\frac{1}{\kappa} = V\,\frac{d^2U}{dV^2}$. Da $U(V)$ nicht direkt, sondern über $U(r)$ gegeben ist, muss die Kettenregel angewendet werden. Zeigen Sie, dass für $r = r_0$ gilt:

$$\left.\frac{d^2U}{dV^2}\right|_{r=r_0} = \left.\frac{d^2U}{dr^2}\right|_{r=r_0} \cdot \left(\left.\frac{dr}{dV}\right|_{r=r_0}\right)^2.$$

Werten Sie diesen Ausdruck für das NaCl-Gitter aus, für welches $V = 2\,r_0^3\,N$ gilt. (3 P)

c) Berechnen Sie nun für NaCl mit Hilfe der beiden in Teil a) und b) hergeleiteten Beziehungen Zahlenwerte für B und ρ. Kommentieren Sie die numerischen Ergebnisse! (2 P)

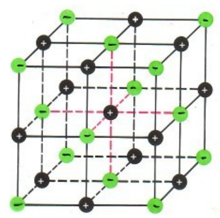

Abbildung 1: NaCl-Kristall. Jedes Ion besitzt 6 nächste Nachbarn entgegengesetzter Ladung.

4. Aufgabe: Lennard-Jones-Potential (4 P)

Das interatomare Potential zwischen Edelgasatomen wird sehr genau durch das Lennard-Jones-Potential beschrieben:

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

wobei ϵ und σ atomspezifische Konstanten sind.

a) Bestimmen Sie für das Lennard-Jones-Potential den Gleichgewichtsabstand sowie die Bindungsenergie als Funktion der Parameter ϵ und σ. Wie können die Parameter einem experimentellen Potentialverlauf einfach entnommen werden? (1 P)

b) Für Argon gilt $\epsilon = 10$ meV und $\sigma = 3{,}4$ Å. Schätzen Sie im Rahmen eines eindimensionalen Modells die Schallgeschwindigkeit in kondensiertem Argon quantitativ ab! (3 P)
Anleitung: Entwickeln Sie das Potential in eine Taylorreihe um den Gleichgewichtsabstand r_0, und brechen Sie nach dem harmonischen Term ab. Drücken Sie den Gleichgewichtsabstand r_0 sowie die Federkonstante durch die Lennard-Jones-Parameter ϵ und σ aus!

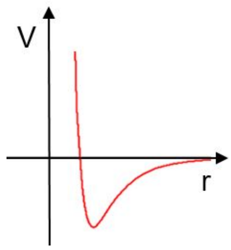

Abbildung 2: Lennard-Jones-Potential.

5. Aufgabe: Fibonacci-Multilayer (3 P)

Konstruieren Sie einen eindimensionalen Quasikristall mittels der Fibonacci-Folge:

a) Definieren Sie die Fibonacci-Folge durch ein Rekursionsgesetz, und übertragen Sie dieses auf den Aufbau eines selbstähnlichen Schichtsystems aus zwei verschiedenen Bausteinen A und B. Jeder Baustein ist dabei eine Doppelschicht der Dicke d_A bzw. d_B. Geben Sie explizit die Schichtabfolge derartiger Multilayer bis hin zur sechsten Fibonacci-Generation an. (1 P)

b) Bestimmen Sie das Verhältnis r_i der Anzahl der Bausteine A und B in jeder Generation. Welchem Grenzwert strebt r_i für große i zu? (1 P)

c) Mit Hilfe von Substitutionsregeln lassen sich die Schichtabfolgen aus Teilaufgabe a) ebenfalls erzeugen. Vervollständigen Sie die Regeln A $\rightarrow$ AB, B $\rightarrow$? und formulieren Sie die Substitutionsregeln in Matrixform $\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$. Welche Bedeutung besitzt der Eigenwert der Matrix? (1 P)