Aufgabenteil B (Anteil 50%)

Aufgabe B1: Ionische Bindung (7 Punkte)

a) Zeigen Sie, dass für eine eindimensionale Kette aus alternierenden positiven und negativen Ionen die Madelung Konstante $\alpha = 2 \cdot ln2$ ist.
Hinweis: Verwenden Sie hierfür die Taylorreihenentwicklung für $ln(1+x)$:

$$ln(1+x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} x^k.$$

Lösung
Abstand zwischen zwei Ionen sei R.
Zwei Ionen i und j (jeweils mit der Ladung $\pm q$) im Abstand R bilden je einen Potentialterm der Form:

$$U_{ij} = \pm \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Betrachtet man nun ein Ion an der Stelle x=0 so ergibt sich das Gesamtpotential:

$$U(0) = -2A/R + 2A/(2R) - 2A/(3R) + ... = -2A/R \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k}$$

mit $A = q^2/(4\pi\epsilon_0)$.
Mit der Taylorentwicklung:

$$ln(1+x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} x^k.$$

folgt

$$ln(1+1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k}$$

und somit:

$$U(0) = -2A/R \cdot ln(1+1) = -2 \cdot ln2 \cdot (A/R) = -\alpha \cdot (A/R) = -\alpha \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R}.$$

b) Berechnen Sie die Bindungsenergie (in eV) pro Ion in einem NaCl Kristall. Nehmen Sie dazu eine Madelung Konstante von $\alpha = 1,75$ und einen repulsiven Exponenten von 8, also $U_{rep} \propto 1/r^8$ und einen Gleichgewichtsabstand von $r_0 = 0,28\ nm$ an.
Lösung
Das Gesamtpotential lässt sich schreiben als:

$$U(r) = -\alpha A/r + B/r^m$$

mit $A = q^2/(4\pi\epsilon_0)$. Auf der Suche nach dem Gleichgewichtspotential setzt man die Ableitung gleich null:

$$\frac{dU}{dr} = \alpha A r^{-2} - Bm/r^{m+1} = 0$$

für $m = 8$ und den Gleichgewichtsabstand $r = r_0$ ergibt sich daraus:

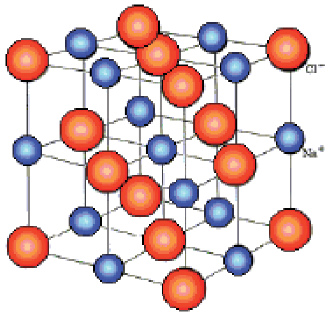
$$B = \frac{r_0^7 \alpha A}{8}$$

oder

$$U(r_0) = -\alpha A/r_0(1 - \frac{1}{8})$$

mit $A = q^2/(4\pi\epsilon_0)$. Setzt man die Werte ein, so findet man $U(r_0) = -1,259 \cdot 10^{-18} J = -7,87\ eV$.

c) Der Abstand zweier nächster Nachbarn von Na und Cl Ionen in einem NaCl Kristall ist $a = 0,24\ nm$.
Wie gross ist der Abstand zweier benachbarter Na Ionen?
Lösung
NaCl hat eine fcc-Struktur.



$$r_{Na-Na}^2 = a_{Na-Cl}^2 + a_{Na-Cl}^2$$

oder

$$r_{Na-Na} = \sqrt{2} \cdot 0,24\ nm = 0,34\ nm$$

d) Warum sind Ionenkristalle keine elektrischen Leiter?
Warum sind ionische Kristalle im optischen Bereich durchsichtig?
Lösung
Die Bindungselektronen sind stark gebunden. Also sind diese im Kristall kaum frei beweglich. Das macht Sie zu sehr schlechten Leitern, es folgt eine grosse Bandlücke und die Materialien werden dadurch im optischen Bereich durchsichtig.

Aufgabe B2: Das freie Elektronengas (7 Punkte)

a) Berechnen Sie unter der Annahme eines freien Elektronengases (bei T=0K) die Fermi-Energie (in eV), die Fermi-Wellenzahl, die Fermi-Temperatur und die Fermi-Geschwindigkeit für Lithium (Li).
Hinweis: Dichte $\varrho_{Li} = 0,534\ \frac{g}{cm^3}$, molare Masse $M_{Li} = 6,941\ \frac{g}{mol}$.
Lösung:
Für ein freies Elektronengas (bei $T = 0K$) enthält die Fermi-Kugel im k-Raum alle besetzten Zustände. Der Radius k_F der Fermi-Kugel ist der Fermi-Wellenvektor, der sich aus der Bedingung ergibt, dass die Anzahl der Zustände innerhalb der Fermi-Kugel gleich der Elektronenzahl N ist. Die Anzahl der Zustände innerhalb der Fermi-Kugel ergibt sich aus dem Entartungsfaktor g_s und dem Verhältnis vom Volumen der Fermi-Kugel ($\frac{4}{3}\pi k_F^3$) zum Volumen jedes Zustands im k-Raum ($(2\pi)^3/V$):

$$N = g_s \left(\frac{4}{3}\pi k_F^3\right) \frac{V}{(2\pi)^3} \tag{1}$$

Führt man die Teilchendichte $n = N/V$ ein, folgt für k_F

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \tag{2}$$

Die Elektronendichte von Lithium ergibt sich zu

$$n = \frac{\varrho_{Li} \cdot N_A}{M_{Li}} \approx 4,63 \cdot 10^{22}\ \frac{1}{cm^3} \tag{3}$$

Damit ergeben sich die folgenden Größen

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \approx 1,11 \cdot 10^8\ \frac{1}{cm}, \tag{4}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_F^2 \approx 4,7\ eV, \tag{5}$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \approx 54.565\ K, \tag{6}$$

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e} \approx 1,29 \cdot 10^6\ \frac{m}{s}. \tag{7}$$

b) Ermitteln Sie die Fermi-Energie (in eV) von Zink aus der (temperaturabhängigen) molaren Wärmekapazität seiner Elektronen von $c_{v,mol} = \alpha T$ mit $\alpha = 3,74 \cdot 10^{-4}\ \frac{J}{molK^2}$.
Hinweis: Zink hat die Wertigkeit $Z = 2$ und die Stoffmenge n ergibt sich durch $n = \frac{N}{ZN_A}$.

Lösung:
Die Wärmekapazität c_V des freien Elektronengases beträgt

$$c_V = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{k_B T}{E_F} \tag{8}$$

entsprechend ist die Fermi-Energie

$$E_F = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{k_B T}{c_V} \tag{9}$$

Die molare Wärmekapazität $c = c_V/n$ ergibt sich als Quotient aus Wärmekapazität und Stoffmenge $n = (N/Z)/N_A$ mit Z als Wertigkeit des Metalls und N_A als Avogadro-Konstante. Damit folgt

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{k_B T}{c_V} && (10)\\ &= \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{k_B T}{c \cdot n} && (11)\\ &= \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{k_B T}{c \frac{N}{Z N_A}} && (12)\\ &= \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B^2 T Z N_A}{c} && (13) \end{aligned}$$

Mit der molaren Wärmekapazität $c = \alpha T$ mit $\alpha = 3,74 \cdot 10^{-4} \frac{J}{mol K^2}$ und der Wertigkeit $Z = 2$ von Zink folgt schließlich

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B^2 T Z N_A}{\alpha T} && (14)\\ &= \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B^2 Z N_A}{\alpha} && (15)\\ &\approx 3,0 \cdot 10^{-18}\ J = 18.9\ eV && (16) \end{aligned}$$

Aufgabe B3: Phononen (6 Punkte) (*)
Untersuchen Sie die Normalschwingungen einer linearen Kette, in der die Kraftkonstante der Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn abwechselnd C und $10C$ betragen. Die Massen seien gleich und der Abstand nächster Nachbarn sei $a/2$. Dies stellt ein einfaches Modell für einen Kristall aus zweiatomigen Molekülen wie z.B. H_2 dar.

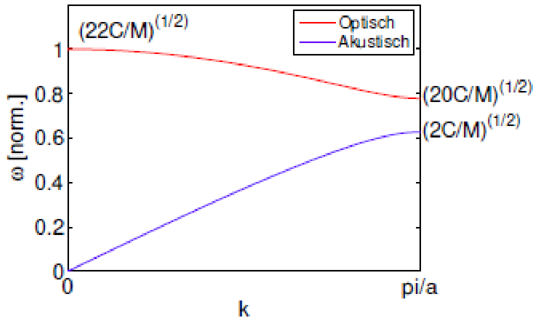
a) Bestimmen Sie $\omega(k)$ bei $k = 0$ und $k = \pi/a$.
Hinweis: Verwenden Sie die Ansätze $u_s = u e^{iska} e^{-i\omega t}$ und $v_s = v e^{iska} e^{-i\omega t}$.
Lösung:

$$\begin{aligned} M d^2 u_s/dt^2 &= C_1(v_s - u_s) + C_2(v_{s-1} - u_s)\\ M d^2 v_s/dt^2 &= C_1(u_s - v_s) + C_2(u_{s+1} - v_s)\\ -\omega^2 M u &= C_1(v - u) + C_2(v e^{-ika} - u)\\ -\omega^2 M v &= C_1(u - v) + C_2(u e^{ika} - v) \end{aligned}$$

$$\begin{vmatrix} (C_1 + C_2) - M\omega^2 & -(C_1 + C_2 e^{-ika}) \\ -(C_1 + C_2 e^{ika}) & (C_1 + C_2) - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \tag{17}$$

Für $ka = 0$ folgt $\omega^2 = 0$ und $2(C_1 + C_2)/M$
Für $ka = \pi$ folgt $\omega^2 = 2C_1/M$ und $2C_2/M$

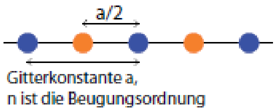
b) Skizzieren Sie den Verlauf der Dispersionsrelation (Achsenbeschriftung!), tragen Sie die Extremwerte ein und kennzeichnen Sie den optischen sowie den akustischen Zweig.
Lösung:



Aufgabe B4: Beugung (4 Punkte)
Betrachten Sie eine lineare Atomfolge $ABABA..AB$ mit einer Bindungslänge $A-B$ gleich $a/2$.
Die Formfaktoren der Atome A, B seien f_A und f_B.
Der einfallende Röntgenstrahl steht senkrecht auf der Atomkette.
Zeigen Sie, dass die Intensität des gebeugten Strahls

a) für ungerade Beugungsordnungen n proportional zu $|f_A - f_B|^2$
b) für gerade n proportional zu $|f_A + f_B|^2$ ist.

Hinweis: Berechnen Sie den Strukturfaktor.
Lösung:



$$S_G = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} = f_A + f_B e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_B}$$

$$\vec{G} = n\frac{2\pi}{a}\vec{x}$$

$$r_B = \frac{a}{2}\cdot\vec{x}$$

$$\vec{G}\cdot\vec{r}_B = n\frac{2\pi}{a}\frac{a}{2}\vec{x}\cdot\vec{x} = n\pi$$

$$S_G = f_A + f_B e^{-i\pi n}$$

Die Streuintensität ist damit gegeben als:

$$I(\vec{k}) \approx |S_G|^2 \cdot |\delta(\vec{k}-\vec{G})|^2$$

für n=0,2,4,... ergibt sich damit $|f_A + f_B|^2$
für n=1,3,5,... ergibt sich damit $|f_A - f_B|^2$