## Festkörperphysik, SoSe 2023 Übungsblatt 6

Prof. Dr. Thomas Michely

Dr. Wouter Jolie (wjolie@ph2.uni-koeln.de)

II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln

Ausgabe: Mittwoch, 17.05.2023

Abgabe: Mittwoch, 24.05.2023, bis 8 Uhr über ILIAS

Aufgabe Nr.:	1	2	3	Summe
Points:	3	5	5	13
Punkte:				

Bitte Aufgaben zusammen mit Aufgabenblatt als PDF hochladen. Namen, Matrikelnummer und Gruppennummer deutlich lesbar eintragen (sonst Punktabzug). Abgabe in Gruppen zu 2, max. 3 Personen erwünscht. Die Teammitglieder müssen in der gleichen Übungsgruppe sein.

## 1. [3 Punkte] Kurzfragen

Markieren Sie im folgenden die richtigen Satzenden (Mehrfachauswahl möglich).

•	Die kovalente Bindung
	$-$ tritt immer zwischen gleichen Atomen mit nicht vollständig gefüllten Schalen auf. $\Box$
	$-$ ist beispielsweise für die Bindung zwischen den Kohlenstofflagen in Graphit verantwortlich. $\Box$
	$-$ beruht auf der quantenmechanischen Austauschwechselwirkung, die zur Ausbildung von bindenden und antibindenden Orbitalen führt. $\Box$
	$-$ kann über die Symmetrie der Wellenfunktion mit der niedrigsten Coulombenergie auch die Symmetrie der Spinwellenfunktion bestimmen. $\Box$
	<ul> <li>ist immer durch eine Erhöhung der Valenzelektronendichte zwischen den Bindungspartnern charakterisiert.</li> </ul>

• Die metallische Bindung
$-$ tritt in reiner Form bei den Alkalimetallen auf. $\square$
-tritt nicht in reiner Form bei den Übergangsmetallen auf, denn diese besitzen auch kovalente Bindungsanteile durch die gerichteten $d$ -Orbitale.
<ul> <li>basiert auf der Absenkung der kinetischen Energie der Elektronen durch Delokalisierung.</li> </ul>
<ul> <li>wird durch Valenzelektronen vermittelt, die in ihren atomaren Orbitalen im Abstand nächster Nachbarn in einem Kristall noch eine erhebliche Wahrscheinlichkeitsdichte besitzen würden.</li> </ul>
$-$ ist aufgrund ihrer Natur im Wesentlichen ungerichtet. $\square$
• Die Wasserstoffbrückenbindung
<ul> <li>ist relativ schwach. □</li> </ul>
$-$ tritt häufig in biologischen Systemen auf. $\square$
$-$ kann auch für andere leichte Elemente wie Li oder Be auftreten. $\square$
$-$ ist eine im wesentlichen elektrostatische Wechselwirkung zwischen zwei funktionellen Atomgruppen oder Atomen, die über ein Wasserstoffatom vermittelt wird. $\Box$
$-$ ist durch die hohe Ionisationsenergie des Wasserstoffs mitbestimmt, die eine vollständige Ionisation des Wasserstoffs in einer Bindung verhindert. $\Box$
2. [5 Punkte] Ionenkristalle Betrachten Sie die CsCl-Struktur und nehmen Sie an, dass der Radius des Kations immer kleiner wird, während der Radius des Anions konstant bleibt. Zeigen Sie, dass ab einem bestimmten Radius des Kations die NaCl-Struktur bevorzugt wird. Für noch kleinere Kationenradien wird die ZnS-Struktur günstiger. Schätzen Sie die Radien ab, bei denen die Übergänge stattfinden!
3. [5 Punkte] Einfaches Modell der metallischen Bindung Gegeben sind zwei kubische Potenzialtöpfe mit unendlich hohen Wänden und der Kantenlänge a. Jeder Topf beinhaltet ein Elektron.
a) Berechnen Sie die Grundzustandsenergie des Systems. Hinweis: Berechnet wird ein dreidimensionaler Potenzialtopf (z. B. mit Hilfe des Separationsansatzes). Der Hamiltonoperator des Systems lautet: $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + V(\vec{r})$ .
b) Berechnen Sie die Grundzustandsenergie für den Fall, dass beide Potenzialtöpfe zu einem quaderförmigen Topf mit Kantenlängen $a,a,2a$ (ohne Zwischenwand) zusammengefügt werden.
c) Was ergibt sich aus einem Vergleich der Ergebnisse aus a) und b) mit Hinblick auf eine metallische Bindung?

Erreichbare Gesamtpunktzahl: 13