

Festkörperphysik, SoSe 2023

Übungsblatt 5

Prof. Dr. Thomas Michely

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

II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln

Ausgabe: **Mittwoch, 10.05.2023**

Abgabe: **Mittwoch, 17.05.2023, bis 8 Uhr über ILIAS**

| | | | | | |
|--------------|---|---|---|---|--------------|
| Aufgabe Nr.: | 1 | 2 | 3 | 4 | Summe |
| Points: | 5 | 5 | 5 | 5 | 20 |
| 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. [5 Punkte] Kurzfragen

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

- Die van der Waals Wechselwirkung
 - wirkt auf Atome in Festkörpern und Flüssigkeiten, aber nicht auf Atome in Gasen. ☐
 - ist eine fluktuierende Quadrupol-Quadrupol Wechselwirkung. ☐
 - zeigt $-\frac{1}{r^{12}}$ Abstandsabhängigkeit. ☐
 - zeigt Interferenzeffekte, d.h. wenn ein Atom mit vielen anderen Atomen wechselwirkt, dann ist die Wirkung auf dieses Atom nicht rein additiv, sondern die Wechselwirkungsbeiträge unterschiedlicher Atome können sich gegenseitig auslöschen. ☐
 - führt dazu, dass alle Edelgase Kristalle bilden. ☐
- Die Pauli Repulsion
 - tritt auf, wenn die Wahrscheinlichkeitsdichte zweier Elektronen mit gleichen Quantenzahlen sich überlappt. ☐
 - zeigt eine r^{-6} Abstandsabhängigkeit. ☐
 - wird durch das Born-Mayer Potential parametrisiert. ☐
 - tritt nicht zwischen Atomen verschiedener chemischer Elemente auf, da für die Elektronen dieser Elemente die Quantenzahlen nicht übereinstimmen. ☐
 - vermindert bei Ionenkristallen die Bindungsenergie im Gleichgewichtsabstand um ca. 10 – 15%. ☐

- Ionenkristalle
 - bestehen typischerweise aus zwei Sorten von Ionen in der Edelgaskonfiguration. ☐
 - werden durch die Coulombwechselwirkung zwischen Ionen mit unterschiedlichem Vorzeichen der Ladung gebunden. ☐
 - zeigen in drei Dimensionen eine schlechte Konvergenz ihrer Madelung-Konstanten. ☐
 - gewinnen ihre Bindungsenergie im Wesentlichen aus der Differenz von Ionisationsenergie und Elektronenaffinität beim Transfer des Elektrons von einem Atom der einen Sorte auf ein Atom der anderen Sorte. ☐
 - besitzen eine Kristallstruktur, bei der sich die gleichnamigen Ionen mit Ionenradius r gegenseitig nicht berühren. ☐
- Der Gleichgewichtsabstand in einem Kristall
 - wird notwendig bestimmt durch die Forderung, dass die Ableitung der Gesamtenergie nach dem nächsten Nachbarabstand identisch zu Null sein muss. ☐
 - kann bei Ionenkristallen typischerweise als Summe der Ionenradien der beiden beteiligten Ionensorten verstanden werden. ☐
 - kann nicht ohne Berücksichtigung der Pauli Repulsion ermittelt werden. ☐
 - kann nicht ohne Berücksichtigung des Born-Haber Kreisprozesses bestimmt werden. ☐
 - wird in einem Edelgaskristall auch durch die quantenmechanischen Nullpunktsfluktuationen mitbestimmt. ☐
- Die Bindungsenergie eines Kristalls
 - wird bei 1-elementigen Kristallen durch die Kohäsivenergie beschrieben. ☐
 - wird bei Ionenkristallen pro Ionenpaar angegeben. ☐
 - kann bei Ionenkristallen durch den Born-Haberkreisprozess bestimmt werden. ☐
 - hängt bei Ionenkristallen auch von der Van der Waals Wechselwirkung ab. ☐
 - ist im Gleichgewichtsabstand der Atome maximal. ☐

2. [5 Punkte] Gittersummen

Schätzen Sie die Gittersummen A_6 und A_{12} für das bcc-Gitter ab, indem Sie nur die Beiträge bis inklusive eines Abstands von $2R$ berücksichtigen (R = Abstand nächster Nachbarn). Wie groß ist die Änderung der Abschätzung von A_k , wenn Sie den nächstgrößeren Abstand mitberücksichtigen?

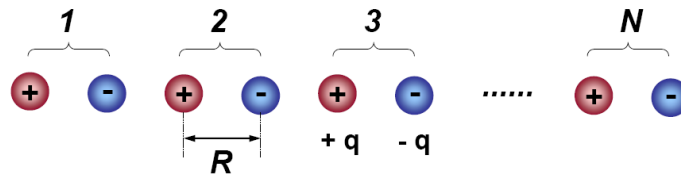
3. [5 Punkte] Madelung-Konstante

(a) Erklären Sie in eigenen Worten die physikalische Bedeutung der Madelung-Konstante.

(b) Der anziehenden Wechselwirkung der Ionen steht ein repulsives Potential entgegen, dass wir als von der Form A/R^n annehmen. Sei R_0 der Gleichgewichtsabstand, der sich in Folge einstellt. Zeigen Sie, dass für die potentielle Energie des Kristalls dann gilt:

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

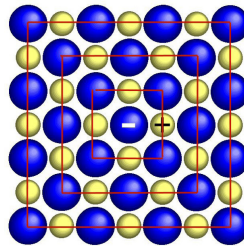
mit $N \rightarrow \infty$ der Anzahl der Ionenpaare.



4. [5 Punkte] NaCl

Approximieren Sie die Madelung-Konstante α für ein zweidimensionales Gitter einfach geladener Ionen (siehe Abbildung). Berechnen Sie dazu Näherungswerte α_n analog zum in der Vorlesung behandelten dreidimensionalen Fall.

Vergleichen Sie das Ergebnis mit der 1- und 3-dimensionalen NaCl-Struktur (siehe Vorlesung)! Wie groß ist jeweils die Coulombenergie für ein einzelnes Ionenpaar, wenn man annimmt, dass es möglich wäre, die entsprechenden 1- und 2-dim. NaCl-Strukturen mit der realen Gitterkonstanten von $a = 0.562$ nm zu erzeugen.



Erreichbare Gesamtpunktzahl: 20