

Yascha
Jonah
David
Lars

$$1) \kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_T = \frac{1}{B} \quad B = v \frac{\partial^2 u}{\partial v^2} = v \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)$$

$$v = \frac{V}{N}, u = \frac{U}{N} \quad \text{fcc: } v = \frac{a^3}{4}, R = \frac{a}{\sqrt{2}} \Rightarrow v = \frac{R^3}{\sqrt{2}}$$

$$dv = R^2 \frac{3}{\sqrt{2}} dR \Rightarrow \frac{\partial}{\partial v} = \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{\partial}{\partial R}$$

in B:

$$B = \frac{R^3}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{2}}{3R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial u}{\partial R} \right) = \frac{\sqrt{2}}{9} R \left(\frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R^2} \right) \frac{\partial u}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 u}{\partial R^2} \right)$$

$$B(R_0) = \frac{\sqrt{2}}{9} R_0 \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R_0^2} \right)}_{=0} \frac{\partial u}{\partial R} \Big|_{R=R_0} + \frac{1}{R_0^2} \frac{\partial^2 u}{\partial R^2} \Big|_{R=R_0} \right)$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{9} \frac{1}{R_0} \frac{\partial^2 u}{\partial R^2} \Big|_{R=R_0} \quad \checkmark \Rightarrow 2P$$

S. 40-42
Cristel Ashcroft

$$2) \frac{U_{\text{tot, bcc}}}{U_{\text{tot, hcp}}} = \frac{12,253^2}{9,114} \cdot \frac{12,1323}{14,4549^2} = 0,9565 \rightarrow \text{hier Verhältnisse hcp}$$

$$\frac{U_{\text{tot, bcc}}}{U_{\text{tot, fcc}}} = \frac{12,253^2}{9,114} \cdot \frac{12,1319}{14,4539^2} = 0,9566$$

hier plötzlich zu fcc
so gel könnte ihm
keine Aussage treffen...

$$\frac{U_{\text{tot, hcp}}}{U_{\text{tot, fcc}}} = \frac{14,4549^2}{12,1323} \cdot \frac{12,1319}{14,4539^2} = 1,00011$$

⇒ Man erwartet eine hcp-Struktur, allerdings sind die Abweichung zwischen fcc und hcp ~~sind~~ sehr gering und das Modell ist nur eine effektive Beschreibung ~~liefert~~, wodurch es durchaus vorkommen ^{kann}, dass die realen Abweichungen andersherum ~~sind~~ sind.
→ ohne Rechnung, aber Begründung ok ⇒ 2P

S. 43

$$3) \text{ Bei ionischer Bindung: } E_{\text{Bin}} = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

Bei Na-Ionen $q=e$ und R angenommen als $R=3,72 \text{ \AA}$

$$\Rightarrow E_{\text{Bin}} = -3,871 \text{ eV} \rightarrow \text{NaCl}$$

Dies ist zwar energetisch günstiger als die metallische Bindungsenergie von Na ($E_B = -1,13 \text{ eV}$), es kommen dann aber noch Ionisationsenergie von $5,14 \text{ eV}$ dazu, die das ganze wieder energetisch ungünstiger machen als

die Metallbindung (-113 eV) plus Elektronenaffinität (0,78 eV).

Die sollte ihr mitrechnen. Dann kommt
ihr bei Ergebnis \approx Bindungsenergie raus,
reins, das sollte dann diskutiert werden

$\rightarrow 0,0$