

Übungen zur Physik V: Festkörperphysik (WS 2010/2011)

A. Ustinov / G. Fischer

Übungsblatt 1

Besprechung am 28. Oktober 2010

Aufgabe 1

Um die Bindung zwischen Gitterbausteinen zu beschreiben, setzt man deren Wechselwirkungsenergie φ_{ij} aus einem anziehenden und abstoßenden Term zusammen:

$$\varphi_{ij} = -a/r_{ij}^m + b/r_{ij}^n$$

- a) Diskutieren Sie mögliche Ursachen für anziehende und abstoßende Wechselwirkungen im Potential zwischen Gitterbausteinen.
- b) Zeigen Sie, dass ein stabiler Zustand nur für $n > m$ möglich ist.
- c) Zeigen Sie, dass sich aus der Form von $\varphi_{i,j}$ bei $T = 0$ die statistische Gleichgewichtsenergie ergibt zu:

$$U_{b0}|_{T=0} = -\frac{N_P A}{V_0^{m/3}} \left(1 - \frac{m}{n}\right) \quad (1)$$

Hinweis: Vereinfachen Sie die Gleichgewichtsenergie zunächst zu $U_b = -\frac{N_P A}{V^{m/3}} + \frac{N_P B}{V^{n/3}}$. Setzen Sie dazu $r_{ij} = p_{ij} r_0$, wobei r_0 = Abstand nächster Nachbarn und $r_0^3 = V/N$ mit V = Volumen des Körpers bei beliebiger Temperatur, V_0 = Volumen des Körpers bei $T = 0$, N = Zahl der Gitterbausteine und N_P = Zahl der wechselwirkenden Paare. Zur Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts bei der Temperatur T betrachtet man dann die freie Energie $F = U - TS$.

- d) Welcher Zusammenhang besteht zwischen n, m und dem isothermen Kompressionsmodul $K = -V_0(\partial p/\partial V)_T$ bei $T = 0$? Hinweis: Benutzen Sie $dU_b = -pdV$ bzw. $p = -\frac{\partial U_b}{\partial V}$ und setzen Sie erst am Schluss die Beziehung zwischen den Koeffizienten A und B ein, die Sie im Teil c) für $T = 0$ gefunden haben.

Aufgabe 2

In Edelgaskristallen läßt sich die Wechselwirkung zweier Atome näherungsweise durch das Lennard-Jones-Potential beschreiben:

$$\varphi_{ij} = 4\epsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6].$$

- a) Berechnen Sie mit Hilfe von Aufgabe 1(c) aus den gemessenen Atomabständen nächster Nachbarn den Parameter σ und vergleichen Sie das Ergebnis mit den experimentell gefundenen Werten:

	r_0 [nm]	σ_{exp} [nm]
Ne	0.313	0.274
Ar	0.376	0.340
Kr	0.401	0.365
Xe	0.435	0.398

Hinweis: Die Gittersummen der für Edelgase relevanten kubisch-flächen-zentrierten (fcc) Struktur sind: $\sum_j p_{ij}^{-12} = 12.13$ und $\sum_j p_{ij}^{-6} = 14.45$.

- b) Der Kompressionsmodul für Krypton (Kr) beträgt nahe am absoluten Nullpunkt $K = 2.56 \cdot 10^9 \text{ N/m}^2$. Berechnen Sie mit Hilfe von Aufgabe 1(d) und unter Annahme des Lennard-Jones-Potentials den Parameter ε . Der experimentell gefundene Wert ist $\varepsilon = 2.25 \cdot 10^{-21} \text{ J}$.
- c) Berechnen Sie mit diesen Werten die Bindungsenergie von Kr für $T = 0$. Experimentell ergibt sich $U_b = 11.2 \text{ kJ/mol}$.

Aufgabe 3

- a) Bariumoxid zeigt NaCl-Struktur (Madelung-Konstante $\alpha_M \approx 1.747$). Schätzen Sie die Bindungsenergie pro Ionenpaar für die hypothetischen Kristalle Ba^+O^- und $\text{Ba}^{2+}\text{O}^{2-}$ ab.
- b) Das erste und zweite Ionisierungspotential von Ba ist 5.19 eV bzw. 9.96 eV; die Elektronenaffinitäten des ersten und zweiten Elektrons, die zum neutralen bzw. einfach negativ geladenen Sauerstoff hinzugefügt werden, sind -1.5 und +9.0 eV. Welches der beiden Gitter (Ba^+O^- oder $\text{Ba}^{2+}\text{O}^{2-}$) ist das stabilere?

Hinweis: Nehmen Sie an, dass n sehr groß ist und dass der Kernabstand der nächsten Nachbarn für beide Formen gleich ist ($r_0 = 2.76 \text{ \AA}$).

Informationene zur Vorlesung und Übungsblätter:
<http://www.phi.kit.edu/studium-lehre.php>