UNIVERSITÄT DORTMUND Ausgabe: Do, 22.11.2001

Prof. Dr. D. Suter Abgabe : Mi, 28.11.2001 bis $10^{00}$

# 5. Übungsblatt zur Vorlesung "Einführung in die Festkörperphysik"

## Aufgabe 1

Die Bindungsenergie $E_B$ eines Atoms in einem Gitter sei gegeben durch eine verallgemeinerte Lennard-Jones Wechselwirkung:

$$E_B = \frac{1}{2}(4\varepsilon)\left[A_n\left(\frac{\sigma}{r}\right)^n - A_6\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]$$

Die $A_n$ sind definiert durch $A_n = \sum_{j\neq i}\left(\frac{1}{p_{ij}}\right)^n$ mit $p_{ij} = r_{ij} / r_0$ ; $r_0$= Abstand nächster Nachbarn.

a) Geben Sie an, welche Beziehung zwischen dem Abstand $r_0$ und $\sigma$ aus der Gleichgewichtsbedingung folgt.

b) Bestimmen Sie für den Fall n= 12 die Parameter $\sigma/r_0$ und die Bindungsenergien für die drei kubischen Gitter (sc, fcc, bcc). Hierbei sei $\varepsilon = 0.01$ eV .

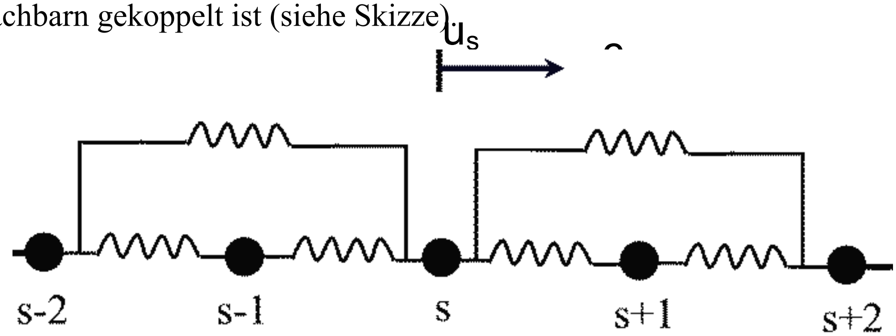
c) Skizzieren Sie die Bindungsenergien in Abhängigkeit von der Potenz n.

d) Berechnen Sie $A_{12}$ für die hexagonal dichteste Kugelpackung (mit idealem c/a Verhältnis) und vergleichen Sie die Bindungsenergie und das Verhältnis $\sigma/r_0$ mit dem fcc-Fall. Geben Sie dazu die Abstände und Koordinationszahlen der n-ten Schale an (n = 1,2,3,...).

Hinweis: Benutzen Sie die Tabelle im Ashcroft/Mermin auf S.400.

## Aufgabe 2

In der Vorlesung wurde die Dispersionsrelation einer monoatomaren linearen Kette hergeleitet. Nehmen Sie nun an, daß jeder Massenpunkt dieser Kette zusätzlich durch eine Federkonstante $c_2$ ($c_2 \ll c_1$) an den übernächsten Nachbarn gekoppelt ist (siehe Skizze).




a) Stellen Sie die Bewegungsgleichung für einen beliebigen Massenpunkt auf und bestimmen Sie die Dispersionsrelation.

b) Welches Ergebnis ist zu erwarten, wenn die Wechselwirkung mit noch weiter entfernten Nachbarn berücksichtigt wird?