

5. Übungsblatt zur Vorlesung "Einführung in die Festkörperphysik"

Aufgabe 1

In Ionenkristallen ist keine Richtungsabhängigkeit der Bindungskräfte vorhanden, daher erwartet man eine möglichst dicht gepackte Kristallstruktur. Für eine AB-Verbindung ist die Bindungsenergie am größten, wenn der $A^+ - B^-$ - Abstand minimal ist. In einem stark vereinfachten Modell harter Kugeln müssen sich also Ionen entgegengesetzter Ladung „berühren“ können, ansonsten wird die Bindungsenergie wesentlich herabgesetzt.

Berechnen Sie anhand geometrischer Betrachtungen die Verhältnisse der Ionenradien, für die die Ionen in den folgenden Kristallstrukturen kristallisieren:

NaCl-Struktur (fcc); CsCl-Struktur (bcc); Zinkblende-Struktur (Diamant)

Bem.: Die Ionenradien A^+ (z.B. Na) und B^- (z.B. Cl) sind unterschiedlich.

Aufgabe 2

a) Die Verbindungen LiCl (Gitterkonstante $a = 5.14 \text{ \AA}$), NaCl ($a = 5.64 \text{ \AA}$) und KCl ($a = 6.3 \text{ \AA}$) kristallisieren in der fcc-Struktur, während CsCl ($a = 4.11 \text{ \AA}$) in der bcc-Struktur kristallisiert. Für die Madelungkonstante des fcc-Gitters erhält man den Wert $\alpha_{fcc} \cong 1.7476$ und für das bcc-Gitter $\alpha_{bcc} \cong 1.7627$.

Berechnen Sie für diese Verbindungen jeweils die auf ein Ionenpaar bezogene Coulombenergie U_C .

b) Die gesamte potentielle Energie von Ionen im Kristall setzt sich zusammen aus der bindenden Coulombenergie U_C und einem abstoßenden Anteil $U(r_{ij})$, für den die Ansätze

$$U_{BM}(r_{ij}) = \lambda \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right) \quad \text{oder} \quad U_{BL}(r_{ij}) = \frac{\lambda}{r_{ij}^n}$$

(BM: Born-Mayer; BL: Born-Landé bzw. Pauling)

gemacht werden können. Für die in Teil a) genannten Ionenkristalle erhält man experimentell folgende Bindungsenergien pro Ionenpaar

$U(\text{LiCl}) = 8.93 \text{ eV}$, $U(\text{NaCl}) = 8.23 \text{ eV}$, $U(\text{KCl}) = 7.23 \text{ eV}$ und $U(\text{CsCl}) = 6.80 \text{ eV}$.

Berechnen Sie mit Hilfe dieser Werte und der Ergebnisse aus Teil a) die Parameter ρ und n (für beide Ansätze).

Bemerkung: Aufgrund der kurzen Reichweite der abstoßenden Kräfte sind dabei lediglich die Beiträge der nächsten Nachbarionen zu berücksichtigen.

Aufgabe 3

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

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

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 .

- Geben Sie an, welche Beziehung zwischen dem Abstand r_0 und σ aus der Gleichgewichtsbedingung folgt.
- Bestimmen Sie für den Fall $n = 12$ die Parameter σ/r_0 und die Bindungsenergien für die drei kubischen Gitter (sc, fcc, bcc). Hierbei sei $\epsilon = 0.01 \text{ eV}$.
- Skizzieren Sie die Bindungsenergien in Abhängigkeit von der Potenz n .