

4. Übung zur Einführung in die Festkörperphysik WS 2012

Ausgabe: 02.11.2012

Abgabe: bis 09.11.2012, 10:15 Uhr, Kästen 246-250

Prof. Dr. D. Suter

Aufgabe 1: Eindimensionales Gitter

3 Punkte

Ein lineares Gitter bestehe aus einer Grundzelle mit einem zentralen Ion doppelt positiver Ladung umgeben von zwei Ionen einfach negativer Ladung. Die Zelle wiederholt sich periodisch. Die Abstände zwischen allen benachbarten Atomen ist R .

- Skizzieren Sie die Situation.
- Schreiben Sie eine kompakte Formel für die Madelungkonstante auf. Die Madelungkonstante ergibt sich in diesem Fall als Mittelwert aller Ionen der Basis. **Hinweis:** Es genügt, wenn die Summe aus mehreren Summanden pro Index besteht.
- Grenzen Sie den Wert der Madelungkonstante nach oben und nach unten ein.

Aufgabe 2: Das Lennard-Jones-Potential

3 Punkte

Xenon kristallisiert im kubisch-flächenzentrierten Gitter. Der Abstand zwischen den nächsten Nachbarn beträgt $r_m = 0,435$ nm.

- Zeichnen Sie das Lennard-Jones-Potential für zwei Ionen und kennzeichnen Sie die markanten Punkte in dem Graphen.
- Die Gitterenergie von Xenon beträgt $3,83$ kcal/mol = 16 kJ/mol. Berechnen Sie die Parameter ϵ und σ in der Potentialdarstellung nach Lennard-Jones.

Aufgabe 3: Coulombenergie

3 Punkte

Die Verbindungen LiCl (Gitterkonstante $a = 5.14$ Å), NaCl ($a = 5.64$ Å) und KCl ($a = 6.3$ Å) kristallisieren in der fcc-Struktur, während CsCl ($a = 4.11$ Å) in der bcc-Struktur kristallisiert. Für die Madelungkonstante des fcc-Gitters erhält man den Wert $\alpha_{\text{fcc}} = 1.7476$ und für das bcc-Gitter $\alpha_{\text{bcc}} = 1.7627$. Berechnen Sie für diese Verbindungen jeweils die auf ein Ionenpaar bezogene Coulombenergie U_C .