

5. Übung zur Festkörperphysik WS 2016/17

Ausgabe: 18.11.2016
Abgabe: bis 25.11.2016 12:00 Uhr
Briefkästen: 247-249

Prof. Dr. D. Suter

Aufgabe 1: Madelungkonstante von Natriumchlorid

4 Punkte

Berechnen Sie für das dreidimensionale Natriumchlorid-Gitter die ersten zwei Folgenglieder ($n = 1, 2$) der dimensionslosen Madelungkonstante

$$\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n \quad \text{mit} \quad \alpha_n = - \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{p_{ij}} \quad , \quad (1)$$

wobei die q_{ij} die Ladungen in Einheiten der Elementarladung und die p_{ij} die relativen Koordinaten sind. Damit die Madelungfolge konvergiert, berücksichtigen Sie in jedem Iterationsschritt n die Coulombwechselwirkung des zentral gelegenen Ions mit denjenigen Ionen die innerhalb oder auf dem Rand eines Würfels der Kantenlänge $2na$ liegen. Für das erste Folgenglied α_1 muss somit der in Abbildung 1 rot gekennzeichnete Würfel betrachtet werden. Beachten Sie weiterhin, die zum Folgenglied beitragenden Ionen gemäß dem im Würfel liegenden Anteil ihres Volumens zu gewichten.

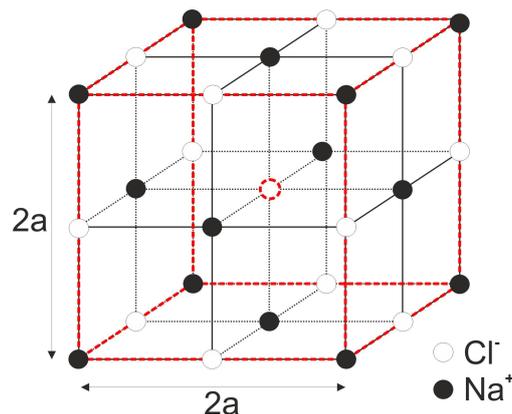


Abbildung 1: Schematische Darstellung der NaCl-Struktur. Der rot markierte Würfel dient zur Berechnung von α_1 , wobei alle benachbarten Ionen zum zentral gelegenen Cl^- -Ion (ebenfalls rot markiert) betrachtet werden.

Aufgabe 2: Das Lennard-Jones-Potential

3 Punkte

Das Lennard-Jones-Potential zwischen zwei Teilchen lautet

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad . \quad (2)$$

- Berechnen Sie die Position des Minimums $r_{min}(\sigma)$, sowie die Energie im Minimum $V_{LJ}(r_{min})$ und skizzieren sie den Potentialverlauf.
- Welche Wechselwirkung wird durch das Potential annähernd beschrieben? Aus welchen zwei Termen setzt sich das Potential zusammen und welche physikalische Bedeutung haben diese?

- c) Was ändert sich unter Variation der Parameter ϵ und σ ? Wovon sind diese beiden Parameter abhängig?
- d) Betrachten Sie nun einen fcc-Kristall, bei dem der Abstand zwischen dem i -ten und j -ten Atom r_{ij} beträgt und die Atome über das Lennard-Jones-Potential wechselwirken. Drücken Sie r_{ij} über den Abstand nächster Nachbarn R aus und berechnen Sie die Parameter $\sigma(R_0)$ und $U_{ges}(R_0)$ durch Minimierung der Gesamtenergie

$$U_{ges} = \frac{1}{2}N \cdot \sum_{i \neq j}^N V_{LJ}(r_{ij}) \quad (3)$$

des Kristalls. N beschreibt dabei die Anzahl aller Atome und R_0 den Gleichgewichtsabstand in einem unendlich ausgedehnten Kristall.

Tipp: Für einen fcc-Kristall gilt $\sum_{i \neq j}^N p_{ij}^{-12} = 12,13188$ und $\sum_{i \neq j}^N p_{ij}^{-6} = 14,45392$.

Aufgabe 3: Symmetrieeigenschaften der Fourier-Transformation 3 Punkte

Die Fourier-Transformation erfüllt verschiedene Symmetrieeigenschaften. Zeigen Sie anhand der folgenden Funktionen, dass für reelle Funktionen $f(t)$ die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:

Falls $f(t)$ reell und gerade, so ist $F(\omega)$ reell und gerade.

Falls $f(t)$ reell und ungerade, so ist $F(\omega)$ imaginär und ungerade.

1. $f_1(t) = e^{-a|t|}$

2. $f_2(t) = \begin{cases} \sin(t) & , -\pi \leq t \leq \pi \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$