7. Übung zur Struktur der Materie WS 2018/19

Ausgabe: 23.11.2018 Prof. Dr. D. Suter
Abgabe: bis 30.11.2018 12:00 Uhr Dr. J. Weingarten

Aufgabe 1: Atomformfaktor von Wasserstoff 10 Punkte

Die Elektronendichte für ein Wasserstoffatom im Grundzustand ist durch

$$\rho(r) = \left|\psi_{100}(r)\right|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \tag{1}$$

mit dem Bohrschen Radius a_0 gegeben. Zeigen Sie damit, dass der Atomformfaktor $f(q)$ des Wasserstoffatoms durch

$$f(q) = \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{qa_0}{2}\right)^2\right)^2} \tag{2}$$

gegeben ist. Mit q ist der Betrag des Streuvektors $\vec{q} = \Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$ bezeichnet.

Hinweis: Da die Elektronendichte kugelsymmetrisch ist, bietet es sich an Kugelkoordinaten zu verwenden. Außerdem wird im Laufe der Rechnung die Relation (3) nützlich sein.

$$\begin{aligned} \int x \sin(bx) e^{-ax} \mathrm{d}x = &-\Big(\frac{bx}{a^2+b^2} + \frac{2ab}{(a^2+b^2)^2}\Big) e^{-ax} \cos(bx) \\ &-\Big(\frac{ax}{a^2+b^2} + \frac{a^2-b^2}{(a^2+b^2)^2}\Big) e^{-ax} \sin(bx) \end{aligned} \tag{3}$$

Aufgabe 2: Lennard-Jones-Potential 4 Punkte

Die Bindungsenergie zweier ungeladener Atome im Abstand R in einem Molekül kann näherungsweise mit dem sogenannten Lennard-Jones-Potential

$$U(R) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \right) \tag{4}$$

beschrieben werden.

a) Berechnen Sie die Position $R_{\min}(\sigma)$ des Minimums und den zugehörigen Wert des Potentials $U(R_{\min})$. Skizzieren Sie den Potentialverlauf.

b) Was geben die Parameter ϵ und σ an? Welche physikalische Bedeutung haben die in verschiedenen Potenzen auftretenden σ/R−Terme?

Aufgabe 3: Madelungkonstante **6 Punkte**

Die Madelungkonstante eines Gitters ist definiert durch

$$\alpha = -\sum_{j=1}^{N} \frac{q_i\, q_j}{p_{ij}}, \tag{5}$$

wobei die $q_{i,j}$ Ladungen in Einheiten der Elementarladung sind und p_{ij} der relative Abstand zwischen Atom i und j in Einheiten des Gleichgewichtsabstands ist. Die Madelungkonstante taucht in den Bindungspotentialen auf und gilt für einen Gittertyp. Ein Potential zwischen zwei Ionen i und j ist näherungsweise durch

$$U_j(r) = \frac{A}{r_{ij}^n} - \frac{q_i\, q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}, \tag{6}$$

gegeben und setzt sich aus einem repulsiven Term und einem anziehendem Coulombterm zusammen. Der Exponent n kann aus Messungen der Kompressibilität bestimmt werden und soll hier $n = 10$ betragen. Die Größe A betrage $1\,\mathrm{eV\AA}^{10}$.

a) Betrachten Sie eine unendliche Kette aus Ionen mit alternierenden Ladungen ±e. Berechnen Sie das Gesamtpotential.

b) Stellen Sie eine Gleichung für den Gleichgewichtsabstand auf und setzen Sie das Ihnen bekannte Ergebnis für die Madelungkonstante dieser Anordnung ein.

c) Inwiefern entspricht das Potential (6) dem Potential einer Feder? Berechnen Sie die Federkonstante.

d) Berechnen Sie die Madelungkonstante eines ebenen quadratischen Kristallgitters. Die vier nächsten Nachbarn jedes Ions haben eine zu diesem Ion entgegesetzte Ladung. Legen Sie dafür Quadrate durch die Mittelpunkte der Nachbaratome. Diese Quadrate sollten insgesamt ladungsneutral sein. Die Konstante soll für die ersten drei Quadrate berechnet werden.