

# Übungen zur Physik V: Festkörperphysik (WS 2010/2011)

A. Ustinov / G. Fischer

## Übungsblatt 1

Besprechung am 28. Oktober 2010

### Aufgabe 1

Um die Bindung zwischen Gitterbausteinen zu beschreiben, setzt man deren Wechselwirkungsenergie  $\varphi_{ij}$  aus einem anziehenden und abstoßenden Term zusammen:

$$\varphi_{ij} = -a/r_{ij}^m + b/r_{ij}^n$$

- Diskutieren Sie mögliche Ursachen für anziehende und abstoßende Wechselwirkungen im Potential zwischen Gitterbausteinen.
- Zeigen Sie, dass ein stabiler Zustand nur für  $n > m$  möglich ist.
- Zeigen Sie, dass sich aus der Form von  $\varphi_{i,j}$  bei  $T = 0$  die statistische Gleichgewichtsenergie ergibt zu:

$$U_{b0}|_{T=0} = -\frac{N_P A}{V_0^{m/3}} \left(1 - \frac{m}{n}\right) \quad (1)$$

Hinweis: Vereinfachen Sie die Gleichgewichtsenergie zunächst zu  $U_b = -\frac{N_P A}{V^{n/3}} + \frac{N_P B}{V^{m/3}}$ . Setzen Sie dazu  $r_{ij} = p_{ij} r_0$ , wobei  $r_0 =$  Abstand nächster Nachbarn und  $r_0^3 = V/N$  mit  $V =$  Volumen des Körpers bei beliebiger Temperatur,  $V_0 =$  Volumen des Körpers bei  $T = 0$ ,  $N =$  Zahl der Gitterbausteine und  $N_P =$  Zahl der wechselwirkenden Paare. Zur Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts bei der Temperatur  $T$  betrachtet man dann die freie Energie  $F = U - TS$ .

- Welcher Zusammenhang besteht zwischen  $n, m$  und dem isothermen Kompressionsmodul  $K = -V_0(\partial p/\partial V)_T$  bei  $T = 0$ ? Hinweis: Benutzen Sie  $dU_b = -pdV$  bzw.  $p = -\frac{\partial U_b}{\partial V}$  und setzen Sie erst am Schluss die Beziehung zwischen den Koeffizienten A und B ein, die Sie im Teil c) für  $T = 0$  gefunden haben.

### Aufgabe 2

In Edelgaskristallen läßt sich die Wechselwirkung zweier Atome näherungsweise durch das Lennard-Jones-Potential beschreiben:

$$\varphi_{ij} = 4\epsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6].$$

- Berechnen Sie mit Hilfe von Aufgabe 1(c) aus den gemessenen Atomabständen nächster Nachbarn den Parameter  $\sigma$  und vergleichen Sie das Ergebnis mit den experimentell gefundenen Werten:

	$r_0$ [nm]	$\sigma_{exp}$ [nm]
Ne	0.313	0.274
Ar	0.376	0.340
Kr	0.401	0.365
Xe	0.435	0.398

Hinweis: Die Gittersummen der für Edelgase relevanten kubisch-flächen-zentrierten (fcc) Struktur sind:  $\sum_j p_{ij}^{-12} = 12.13$  und  $\sum_j p_{ij}^{-6} = 14.45$ .

- b) Der Kompressionsmodul für Krypton (Kr) beträgt nahe am absoluten Nullpunkt  $K = 2.56 \cdot 10^9 \text{ N/m}^2$ . Berechnen Sie mit Hilfe von Aufgabe 1(d) und unter Annahme des Lennard-Jones-Potentials den Parameter  $\varepsilon$ . Der experimentell gefundene Wert ist  $\varepsilon = 2.25 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ .
- c) Berechnen Sie mit diesen Werten die Bindungsenergie von Kr für  $T = 0$ . Experimentell ergibt sich  $U_b = 11.2 \text{ kJ/mol}$ .

### Aufgabe 3

- a) Bariumoxid zeigt NaCl-Struktur (Madelung-Konstante  $\alpha_M \approx 1.747$ ). Schätzen Sie die Bindungsenergie pro Ionenpaar für die hypothetischen Kristalle  $\text{Ba}^+\text{O}^-$  und  $\text{Ba}^{2+}\text{O}^{2-}$  ab.
- b) Das erste und zweite Ionisierungspotential von Ba ist 5.19 eV bzw. 9.96 eV; die Elektronenaffinitäten des ersten und zweiten Elektrons, die zum neutralen bzw. einfach negativ geladenen Sauerstoff hinzugefügt werden, sind -1.5 und +9.0 eV. Welches der beiden Gitter ( $\text{Ba}^+\text{O}^-$  oder  $\text{Ba}^{2+}\text{O}^{2-}$ ) ist das stabilere?

Hinweis: Nehmen Sie an, dass  $n$  sehr groß ist und dass der Kernabstand der nächsten Nachbarn für beide Formen gleich ist ( $r_0 = 2.76 \text{ \AA}$ ).

Informationene zur Vorlesung und Übungsblätter:  
<http://www.phi.kit.edu/studium-lehre.php>