

## Übungen zur Physik V: Festkörperphysik (WS 2011/2012)

W. Wulfhekel / P. Bushev

### Übungsblatt 1

Besprechung am 27. Oktober 2010

#### Aufgabe 1

Ionenkristalle bestehen aus positiv und negativ geladenen Ionen. Die Ionen sind kugelsymmetrisch und wechselwirken miteinander mittels Coulomb-Kraft und einer abstoßenden Kraft. Die gesamte Wechselwirkungsenergie eines Kristalls aus  $2N$  Ionen ist

$$U(r) = -\frac{N}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right),$$

für ein hinreichend großes  $N$ .  $e$  ist hierbei die Elementarladung.

- a) Zeigen Sie: Die Kristallenergie  $U(r_0)$ , die für den Gleichgewichtsabstand zwischen den Ionen  $r = r_0$  vorliegt, kann geschrieben werden als

$$U(r_0) = -\frac{N A e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right). \quad (1)$$

(1 Punkt)

- b) Bestimmen Sie  $n$  und  $B$  in Gl. 1 für einen NaCl-Kristall. Der Kompressionsmodul ( $K = -V\partial P/\partial V$ , mit Druck  $P$  und Volumen  $V$ ) ist  $K = 1.25 \times 10^{10}$  N/m<sup>2</sup>. Der Gleichgewichtsabstand (bei  $P = 0$ ) zwischen den Na- und Cl-Ionen beträgt  $r_0 = 2.81\text{Å}$ , die Madelung-Konstante ist  $A = 1.75$ . *Hinweis:* Bedenken Sie, dass bei  $T = 0$  K gilt:  $dU = -PdV$ . (2 Punkt)
- c) Berechnen Sie, wie sich Gleichgewichtsabstand und die Kristallenergie  $U(r_0)$  ändern, wenn die Ladung der Ionen verdoppelt wird. (1 Punkt)

#### Aufgabe 2

Eine Möglichkeit, die Madelung-Konstante zu berechnen, besteht darin, den Kristall in elektrisch neutrale Zellen zu zerlegen, sogenannte „Evjen-Zellen“. Die Energie eines endlichen Teilkristalls bestehend aus  $N$  dieser Zellen ist dann  $N$  mal die Energie einer einzelnen Zelle, zuzüglich der Wechselwirkungsenergie zwischen den Zellen.

- a) Berechnen Sie die Madelung-Konstante einer linearen Kette aus positiven und negativen Ionen mit Hilfe der „direkt“ Methode. (1/2 Punkt)
- b) Die Evjen-Zelle für NaCl ist in Fig.1 dargestellt. Offene Kreise stehen für negativen und volle Kreise für positiven Ionen. Berechnen Sie die Madelung-Konstante für das zentrale Ion und vergleichen Sie ihr Ergebnis mit dem exakten Wert  $A = 1.74756$ . (1.5 Punkt)

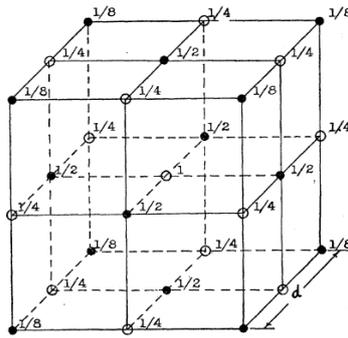
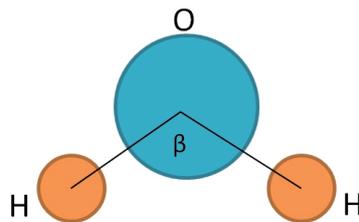


Fig. 1. Elementary cell of the NaCl-type.

### Aufgabe 3

Das Modell starrer Kugeln erklärt grundlegende Eigenschaften einfacher Moleküle, zum Beispiel  $\text{H}_2\text{O}$ , siehe Bild. In diesem Modell werden Ionen als starre Kugeln angenommen. Das zentrale Ion sei elektrisch polarisierbar mit Polarisierbarkeit  $\alpha$ .

- Berechnen Sie den Winkel  $\beta$  zwischen den Wasserstoffbindungen als Funktion von  $\alpha$ . Der Abstand O-H werde mit  $r_{\text{OH}}$  bezeichnet. *Hinweis:* Minimieren Sie die gesamte elektrostatische Energie (Dipol und Coulombabstoßung) des Moleküls. Die Energie des Dipols ist  $U = -1/2 \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}$ , mit dem induzierten Dipolmoment  $\mathbf{P} = \alpha \mathbf{E}$  im statischen elektrischen Feld. (2 Punkt)
- Bei welchem  $\alpha$  kann das Molekül eine stabile Konfiguration einnehmen? (1 Punkt)
- Berechnen Sie den Winkel  $\beta$  für ein reales  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekül mit  $r_{\text{OH}} = 0.96 \text{ \AA}$  und  $\alpha/4\pi\epsilon_0 = 0.255 \times 10^{-30} \text{ m}^3$ . (1 Punkt)



Informationen zur Vorlesung und Übungsblätter:  
<http://www.phi.kit.edu/physik5.php>