



ÜBUNGSAUFGABEN (III)

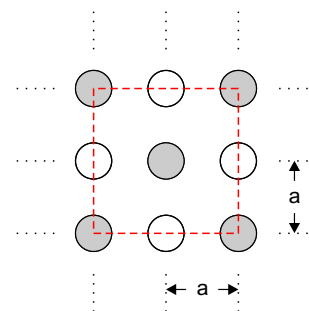
(Besprechung am Donnerstag, 14.11.2013)

Aufgabe 1: (4 Punkte)

Berechnen Sie das Volumen der primitiven Elementarzelle von Diamant (fcc-Gitter, Gitterkonstante $a = 3.57 \text{ \AA}$) mit Hilfe elementarer Vektoralgebra und schließen Sie daraus auf die Dichte von Diamant (vgl. mit Literaturwert).

Aufgabe 2: (4 Punkte)

Bestimmen Sie näherungsweise die Madelung-Konstante α für die abgebildete zweidimensionale Anordnung von Ionen (Gitterkonstante a). Teilen Sie dazu den Kristall in Schalen S_i mit quadratischen Seiten ein, so dass die Ladungen in einer Schale etwa den gleichen Abstand zum zentralen Ion haben. Berechnen Sie die numerischen Teilbeiträge α_i von S_i , beginnend mit $i = 1$, bis die Änderung von α durch die Schale j kleiner als 1% wird, $\alpha \simeq \sum_{i=1}^j \alpha_i$.



Hinweise: Die Ionenladungen sind $q = +e$ (grau) und $q = -e$ (weiß). Um eine schnelle Konvergenz zu erreichen, sollten die Schalen so gewählt werden, dass der Teilkristall nach Hinzufügen einer Schale ladungsneutral ist. Dies wird erreicht, indem die Trennlinie zwischen benachbarten Schalen inmitten der Ionen verläuft (siehe z.B. die gestrichelte Linie für S_1). Ein Ion liefert Beiträge zu den verschiedenen Schalen entsprechend seiner Teilung.

Aufgabe 3: (6 Punkte)

Die Wechselwirkung in Edeltgaskristallen wird in guter Näherung durch ein Lenard-Jones-Potential beschrieben. Argon (Atommasse M) kristallisiert in der fcc-Struktur (Gitterkonstante a) und sein Wechselwirkungspotential pro Atom ist gegeben durch

$$U(r) = 2\epsilon \left(p \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - q \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right).$$

Der zweite, negative Term entspricht der anziehenden Van der Waals-Wechselwirkung (vgl. Vorlesung) während der erste, abstoßende Term ein Resultat des Paulischen Ausschließungsprinzips¹ ist.

- Bestimmen Sie σ aus der Gleichgewichtsbedingung bei $r = r_0$ mit dem Abstand r_0 nächster Nachbarn im Kristall.
- Betrachten Sie die aus $U(r)$ resultierende Kraft zwischen benachbarten Atomen in der Umgebung von r_0 und leiten Sie daraus die Federkonstante D ab.

Zahlenwerte: $M = 6.63 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$; $a = 5.23 \cdot 10^{-10} \text{ m}$; $\epsilon = 1.67 \cdot 10^{-21} \text{ J}$; $p = 12.13$; $q = 14.45$

¹Zwei Elektronen können nicht in allen ihren Quantenzahlen übereinstimmen