

Übungen zur Modernen Experimentalphysik II

Festkörperphysik WS 2015/2016

Übungsblatt 1 · Besprechung am 29. Oktober 2015

<http://www.phi.kit.edu/exphys2.php> ILIAS Kurspasswort: MP11@2015

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 $K = 1.25 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$. Der Gleichgewichtsabstand (bei $P = 0$) zwischen den Na- und Cl-Ionen beträgt $r_0 = 2.81 \text{ \AA}$, die Madelung-Konstante ist $A = 1.75$. *Hinweis:* Bedenken Sie, dass bei $T = 0 \text{ K}$ 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 Punkte)

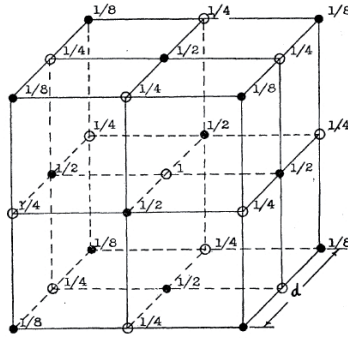


Fig. 1. Elementary cell of the NaCl-type.

Aufgabe 3

Das Modell starrer Kugeln erklärt grundlegende Eigenschaften einfacher Moleküle, zum Beispiel H_2O , siehe Bild. In diesem Modell werden Ionen als starre Kugeln angenommen. Das zentrale Ion sei elektrisch polarisierbar mit Polarisierbarkeit α .

- Berechnen Sie den Winkel β zwischen den Wasserstoffbindungen als Funktion von α . Der Abstand O-H werde mit r_{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 Punkte)
- Bei welchem α kann das Molekül eine stabile Konfiguration einnehmen? (1 Punkt)
- Berechnen Sie den Winkel β für ein reales H_2O -Molekül mit $r_{OH} = 0.96 \text{ \AA}$ und $\alpha/4\pi\epsilon_0 = 0.255 \times 10^{-30} \text{ m}^3$. (1 Punkt)

