Übungen zur Einführung in die Festkörperphysik SS14

Vorlesung: Prof. S.F. Fischer; Übungen: Dr. R. Mitdank, D. Kojda, C. Grosse

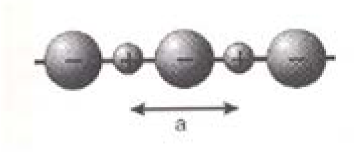
Aufgaben zur 1. Übung - Besprechung am 22.4. bzw. 24.4.15

1. Madelung-Zahl für ein eindimensionales Gitter

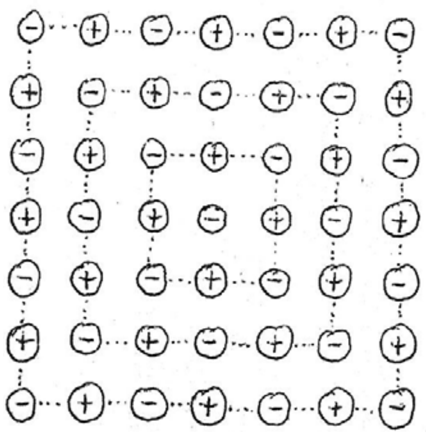
Man bestimme die Madelungzahl A_1 einer unendlich langen, linearen Anordnung von einfach positiv und negativ geladenen Ionen der Gitterkonstante a.

Hinweis: Zur Berechnung von A_1 verwende man folgende Potenzreihenentwicklung:

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + .. - .. \qquad (-1 \le x \le 1)$$



2. Madelungskonstante für ein zweidimensionales Gitter



Gesucht ist die Madelung-Konstante A_2 für ein zweidimensionales Ionengitter, wie es in der Abbildung dargestellt ist. Berechnen Sie diese mittels der Gitterzellenmethode. Um Konvergenz zu sichern, muss die Summe der Ladungen über ein richtig gewähltes Teilgitter immer verschwinden. Es empfiehlt sich daher, die Summation über die durch die gestrichelten Linien dargestellten Teilgitter durchzuführen. Der Sollwert des 2D-Ionengitters beträgt A_2 = 1,61554.

3. Anziehung zwischen Edelgasatomen

Die Gesamtenergie zweier Argonatome, bezogen auf ihre Energie bei unendlichem Abstand, beträgt

$$E = -C\left(\frac{a_o}{r}\right)^6 + B\left(\frac{a_o}{r}\right)^{12}$$

wobei C = $2{,}35 \cdot 10^3$ eV, B = $1{,}69 \cdot 10^8$ eV und a_o der Bohr'sche Radius ist. Das erste Glied entspricht der van der Waals'schen Anziehungskraft der äußeren Elektronen benachbarter Atome, das zweite Glied der Energie der Rumpf-Rumpf Abstoßung .

Berechnen Sie den Gleichgewichtsabstand r = R_o, sowie die Anziehungsenergie, die Abstoßungsenergie und die Gesamtenergie für r = R_o .

4. Van der Waals-Kräfte

Zeigen Sie, dass sich die (anziehende Komponente) der van der Waals-Kräfte durch ein Potential der Form $U = -C/r^6$ beschreiben lässt.

Hinweise: Gehen Sie bei der Diskussion von zwei wechselwirkenden Dipolen aus, deren Verhalten sich durch zwei gekoppelte Oszillatoren beschreiben lässt. Jeder einzelne oszillierende Dipol hat die Eigenfrequenz ω_o, die gekoppelte Schwingung lässt sich durch $\omega_\pm^2 = \omega_o^2\left[1 \pm 2e^2/(kr^3)\right]$ beschreiben (k ergibt sich aus $k = m\omega_o^2$).

Die Gesamtenergie des Oszillators mit den Frequenzen ω_+ und ω_- ergibt sich aus den Energiezuständen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators. Berücksichtigen Sie die Nullpunktsenergie und betrachten Sie nur den Grundzustand.