Übungen zur Vorlesung Festkörperphysik WS 07/08

Prof. G. Maret

Blatt 3, Besprechung am 15./16.11.07

1. Aufgabe: Formfaktor von atomarem Wasserstoff
Die Elektronendichte des Wasserstoffatoms im Grundzustand ist gegeben durch $n(r) = (\pi a_0^3)^{-1} \exp(-2r/a_0)$, wobei a_0 der Bohrsche Radius ist. Zeigen Sie, dass der atomare Formfaktor $f_q = 16/(4 + q^2 a_0^2)^2$ ist.

2. Aufgabe: Lineare Ionenkette
Gegeben sei eine lineare Kette von 2N abwechselnd positiven und negativen Ionen mit der Ladung $\pm q$. Das abstoßende Potential zwischen nächsten Nachbarn sei A/R^n (mit $1 \neq n$ groß, für steile Potentialwände).
a) Berechnen Sie die totale potentielle Energie $U_{tot} = NU_i$ der Kette, wobei U_i die Energie eines Referenzions ist. (Hinweis $N >> 1$; jedes Ion ist bis auf das Vorzeichen mit seinem Nachbarion identisch)
b) Zeigen Sie, daß für den Gleichgewichtsabstand R_0 nächster Nachbarionen gilt:

$$U_{tot} = -\frac{Nq^2 \ln(2)}{2\pi\epsilon_0 R_0}(1 - 1/n) \quad .$$

c) Der Kristall werde komprimiert, d.h. $R_0 \to R_0(1 - \delta)$. Zeigen Sie durch Taylorentwicklung von U_{tot}, daß in dieser Näherung die Arbeit durch $\Delta U = NC\delta^2$ darstellbar ist, mit

$$C = \frac{(n-1)q^2 \ln(2)}{4\pi\epsilon_0 R_0} \quad .$$

3. Aufgabe: Madelungkonstante eines 2D Ionengitters
Abb. 1 skizziert ein unendlich ausgedehntes zweidimensionales Gitter (Gitterkonstante= a) einfach geladener Ionen, die auf fixierten Gitterplätzen sitzen. Berechnen sie

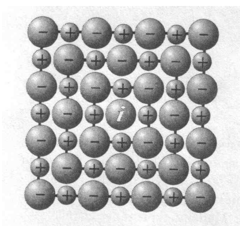

Abbildung 1: Zweidimensionaler Ionenkristall.

Näherungswerte α_n für die Madelungskonstante derart, dass jeweils die Coulomb-Wechselwirkung eines Ions i mit denjenigen Ionen berücksichtigt wird, die innerhalb eines Quadrates mit der Kantenlänge na liegen (inklusive derer auf dem Rand).

a) Berechnen sie α_1 bis α_3. Ist mit anwachsender Zahl der berücksichtigten Nachbarionen eine brauchbare Konvergenz der Folge α_n zu erkennen?
b) Berechnen sie nun α_n indem sie die Ionen auf dem Rand des Quadrates jeweils mit ihrem Winkelanteil wichten, mit dem sie innerhalb des Quadrates liegen. Warum konvergiert die Folge jetzt viel schneller?

4. Aufgabe: Lennard-Jones Potential
Die Wechselwirkung zwischen zwei getrennten Edelgasatomen im Abstand R wird durch das Lennard-Jones Potential beschrieben. Dabei ist

$$U(R) = 4\epsilon\left((\frac{\sigma}{R})^{12} - (\frac{\sigma}{R})^{6}\right) \quad .$$

a) Berechnen Sie die Energie und den Abstand im Gleichgewichtszustand.
b) Bestimmen Sie die Energie pro Atom im Gleichgewichtszustand für das fcc-Gitter

$$E(R) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} U(R_{ij}) \quad .$$

Dabei treten die folgenden Summationen mit $R_{ij} = p_{ij}R$ (R =Abstand zum nächsten Nachbarn) bei festem Gitterindex auf: i) $\sum_j (\frac{1}{p_{ij}})^{12} = 12,13$ sowie $\sum_j (\frac{1}{p_{ij}})^{6} = 14,45$. Wie lautet der Zusammenhang zwischen dem Gleichgewichtszustand R_0 und σ für das fcc-Gitter? Vergleichen Sie mit dem Resultat in a). Prüfen Sie in Fall i), bis zu welcher Stufe nächster Nachbarn die Summation durchgeführt werden muss, um die angegebene Genauigkeit zu erreichen.