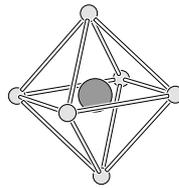


Übungsblatt 2

1. Atom- und Hybrid Orbitale

Unter <http://iffwww.iff.kfa-juelich.de/~ekoch/FKT/orbitals.gnu> finden Sie ein Programm zur Visualisierung von Atom- und Hybrid-Orbitalen.

- i. d -Orbitale: In Perowskiten sind Übergangsmetal-Atome (d -Elektronen!) von einem Sauerstoff-Oktaeder umgeben. Die Entartung der d -Orbitale wird dann durch die Wechselwirkung mit den Sauerstoff Atomen aufgehoben (Kristallfeld-Aufspaltung). Welche Aufspaltung erwarten Sie qualitativ?



- ii. Betrachten Sie die sp^3 und sp^2 Hybride. Machen Sie sich klar, dass die sp^3 Hybride tetraedrische Bindungen wie im Diamant, während sp^2 Hybride ebene Strukturen wie in Graphit liefern. Wie ist das überzählige p -Orbital relativ zu den sp^2 Hybridern orientiert?
- iii. Die sp^3 -Hybride zeigen in die Ecken eines Tetraeders. Bestimmen Sie den Winkel zwischen den Bindungen.

2. Polare kovalente Bindung

Diagonalisieren Sie den Hamilton Operator für eine kovalente Bindung zwischen unterschiedlichen Atomen $H = \begin{pmatrix} \epsilon_A & -t \\ -t & \epsilon_B \end{pmatrix}$. Skizzieren Sie das bindende und antibindende Orbital.

3. Kovalente Bindung und Bänder

- i. Ein einfaches *tight-binding* Modell für Benzol umfaßt nur die p_z -Orbitale der Kohlenstoff Atome. Der Hamilton Operator ist dann gegeben durch

$$H = -t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Finden Sie die Eigenenergien von H für $t \approx 4$ eV.

- ii. Benzol hat 6 p_z -Elektronen, d.h. die drei untersten Eigenzustände sind mit je zwei Elektronen (Spin!) besetzt. Berechnen sie die niedrigste Anregungsenergie in diesem Modell des Benzol.

- iii. Betrachten Sie einen Hamilton-Operator vom obigen Typ mit mehr als sechs Orbitalen. Wie entwickelt sich das Spektrum mit wachsender Ring-Größe?

4. *Kovalente Kristalle*

- Geben Sie zwei primitive Translationsvektoren für eine Graphit-Ebene (Graphen) an. Lassen sich alle Kohlenstoff-Atome in der Ebene durch Translation ineinander überführen?
- Betrachten Sie ein Diamantgitter aus sich berührenden Kugeln. Wie groß ist die Packungsdichte (Kugelvolumen in der Zelle durch Zellenvolumen)? Vergleichen Sie mit der dichtesten Kugelpackung. Vergleichen Sie die Zinkblende mit der NaCl-Struktur. Wie groß ist die Packungsdichte in NaCl (mit den Ionenradien aus dem letzten Übungsblatt)?
- Betrachten Sie ein Modell der Diamantstruktur. Entlang welcher Richtungen gibt es offene Kanäle, d.h. besonders viel Platz in der Struktur?