

Übungsblatt 1

1. van der Waals Kristalle

Gittersummen für dicht gepackte Strukturen:

	C_6	C_{12}
<i>fcc</i>	14.4539	12.1319
<i>hcp</i>	14.4549	12.1323

Lennard-Jones Parameter $V(R) = 4\epsilon [(\sigma/R)^{12} - (\sigma/R)^6]$ sowie experimenteller nächste-Nachbar Abstand und Kompressions-Modul für Edelgaskristalle:

	<i>Ne</i>	<i>Ar</i>	<i>Kr</i>	<i>Xe</i>
ϵ/eV	0.0031	0.0104	0.0140	0.0200
$\sigma/\text{Å}$	2.74	3.40	3.65	3.98
d/σ	1.14	1.10	1.09	1.09
$B/10^8 \text{ Pa}$	11	27	35	36

- i. Welche Kristallstruktur erwarten Sie für die verschiedenen Edelgase?
 Experimentell findet man, dass Edelgaskristalle *fcc* Struktur haben. Bestimmen Sie den erwarteten Gleichgewichtsabstand durch Minimieren der klassischen Kohäsionsenergie für die *fcc* Struktur. Womit erklären Sie sich die Abweichungen bei den leichten Edelgasen?
- ii. Schätzen Sie Quantenfluktuationen um das Minimum des Lennard-Jones Potentials ab. Wählen Sie dazu *einen* der folgenden Zugänge
 - (a) analytisch: Nähern Sie $V(|R - R_{\min}|)$ durch ein harmonisches Potential und bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle R^2 \rangle$ im Grundzustand des harmonischen Oszillators. Wie wirken sich Atommasse und Kraftkonstante aus?
 - (b) numerisch: Lösen Sie die Kern Schrödinger-Gleichung mit Lennard-Jones Potential numerisch und bestimmen Sie die Erwartungswerte von R und R^2 für die niedrigsten gebundenen Zustände. Wie ändert sich die mittlere Lage $\langle R \rangle$ beim Übergang zu höher angeregten Zuständen?
<http://iffwww.iff.kfa-juelich.de/~ekoch/DFT/qm1d.html>
- iii. Wie groß ist der Abstand zwischen den Atomlagen in der dichtesten Kugelpackung? Schneiden Sie einen Würfel der Kantenlänge $\sqrt{2}d$ aus einem *fcc* Gitter. Wie groß ist das Volumen der Kugelstücke, die *innerhalb* dieses Würfels liegen? Geben Sie das Ergebnis in Einheiten des Kugelvolumens sowie des Würfelvolumens an.
- iv. Bestimmen Sie den Kompressions-Modul B der Edelgaskristalle (*fcc*):

$$B = -V \frac{dp}{dV} = V \frac{d^2 E_{\text{coh}}}{dV^2}$$

2. Ionenkristalle

- i. Auf <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/btype.html> finden Sie eine ganze Reihe von Kristallstrukturen. Suchen Sie NaCl und CsCl, und betrachten Sie die Kristallstrukturen mittels des verlinkten JMOL Applet.
- ii. Betrachten Sie einen Ionenkristall vom Typ ACl, wobei A^+ ein Ion vom Radius $R_{A^+} < R_{Cl^-}$ sei. Wie klein muß R_{A^+} sein, damit sich in der CsCl bzw. der NaCl Struktur die Cl^- -Ionen gerade berühren? Was finden Sie für die experimentellen Ionen-Radien $R_{Na^+} = 1.0 \text{ \AA}$, $R_{Cs^+} = 1.7 \text{ \AA}$ und $R_{Cl^-} = 1.8 \text{ \AA}$?

3. Gittersummen (fakultativ)

- i. Schreiben Sie ein Programm zur Berechnung von $C_k = \sum_{\alpha \neq 0} 1/|R_\alpha|^k$, $k = 6$ und 12 , für ein fcc Gitter mit nächste-Nachbar Abstand 1. Summieren Sie über Würfel wachsender Größe bis sich das Ergebnis nicht mehr ändert.
- ii. Schreiben Sie ein Programm zur Berechnung der Madelung-Summe für die NaCl Struktur. Untersuchen Sie die Konvergenz des Resultats mit wachsender Clustergröße. Überzeugen Sie sich, dass die Summe sehr schlecht konvergiert. Sie können die Konvergenzprobleme folgendermaßen umgehen: Berechnen Sie die Madelung-Summe für die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung $e^{-\lambda R}/R$ für verschiedene Werte von λ und extrapolieren Sie $\lambda \rightarrow 0$.