Aufgabe 8.1

a) Betrachte Gleichgewichtslösung mit $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} = 0$:

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} = 0 = \frac{q^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 r^2} - 12\frac{A}{r^{13}} \tag{1}$$

$$\Rightarrow A = \frac{q^2\alpha}{4\pi\epsilon_0}\frac{r^{11}}{12} = 626\,541\,\text{Å}^{12}\,\text{eV} \tag{2}$$

$$\Rightarrow r_0 = \sqrt[11]{4\pi\epsilon_0\frac{12A}{q^2\alpha}} = \frac{a}{2} = 3.146\,\text{Å} \tag{3}$$

$$\Rightarrow E_{\text{Bind}} = -u(r_0) = 7.33226\,\text{eV} \tag{4}$$

b) Variiere α in obigen Formeln:

$$r_{0,2D} = 3.16855\,\text{Å} \tag{5}$$

$$\Rightarrow E_{\text{Bind}} = -u(r_0) = 6.7301\,\text{eV} \tag{6}$$

c) Die Länge der Gittervektoren von s_i ist identisch mit $a_{Ag,2D}$, dies ergibt sich zu $a_{Ag,2D} = \frac{a_{Ag,3D}}{\sqrt{2}}$. Die Länge von a_i ist $a_i = \sqrt{2}r_{0,2D}$.

d) Da jeweils beide Gittervektoren die gleiche Länge haben und nicht verdreht sind, hat die Matrix die Form $M = \text{diag}(m, m)$, dabei ist:

$$m = \frac{a_1}{s_1} = 2\frac{r_{0,2D}}{a_{Ag,3D}} = 1.55119 \tag{7}$$

Folglich ist es nicht kommensurabel.

Aufgabe 8.2

Allgemein gilt für die Bindungsenergie: $E_B = E_{\text{Mad}} + (I - A)$, dabei sei in diesem Fall:

$$E_{\text{Mad}} = -\alpha\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{A}{R^{12}} \tag{8}$$

Die Bestimmung von A erfolgt nach obiger Formel zu $A^+ = 148\,458\,\text{Å}^{12}\,\text{eV}$ für die einwertigen Ionen und $A^{++} = 4A^+$ für die zweiwertigen Ionen.

Einwertig:

$$E_B = -\alpha\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{A^+}{R^{12}} + (IE_1 - AE_1) \tag{9}$$

$$= -4.62771\,\text{eV} \tag{10}$$

Zweiwertig:

$$E_B = -\alpha\frac{e^2}{\pi\epsilon_0 R} + \frac{4A^+}{R^{12}} + (IE_1 + IE_2 - AE_1 - AE_2) \tag{11}$$

$$= -11.0609\,\text{eV} \tag{12}$$

Entsprechend ist das zweiwertige wahrscheinlicher