

Struktur der Materie SS12 Übungsserie 1

Robert Müller

21. Oktober 2012

1.1

$$\frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \stackrel{!}{=} 4\varepsilon \frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - 4\varepsilon \frac{\sigma^6}{r^6}$$

Ein Koeffizientenvergleich liefert:

$$A = 4\varepsilon\sigma^{12} \Rightarrow \varepsilon = \frac{A}{4\sigma^{12}}$$

$$-B = -4\varepsilon\sigma^6 \Rightarrow \varepsilon = \frac{B}{4\sigma^6}$$

Gleichsetzen liefert das Gewünschte:

$$\underline{\sigma = \sqrt[6]{\frac{A}{B}}} \qquad \underline{\varepsilon = \frac{B^2}{4A}}$$

$$\frac{dV(r)}{dr} = 4\varepsilon \left[-\frac{12\sigma^{12}}{r^{13}} + \frac{6\sigma^6}{r^7} \right] \stackrel{!}{=} 0$$

$$\frac{12\sigma^{12}}{r^{13}} \stackrel{!}{=} \frac{6\sigma^6}{r^7}$$

$$r^6 \stackrel{!}{=} 2\sigma^6 \Rightarrow \underline{r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma}$$

Durch Einsetzen finden wir, dass: $\underline{V(r_0) = -\varepsilon}$

$$\begin{aligned} V(r) &= 4\varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{\sqrt[6]{2}r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{\sqrt[6]{2}r} \right)^6 \right] \\ &= 4\varepsilon \left[\frac{1}{4} \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \\ &= \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \end{aligned}$$

1.2 Nutzen die Gleichgewichtsgleichung:

$$\frac{dU_{tot}}{dR} \stackrel{!}{=} 0 \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} N 4\varepsilon \left[-12 \frac{\sigma^{12}}{R^{13}} \underbrace{\sum_{ij} \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^{12}}_{p_{12}} + 6 \frac{\sigma^6}{R^7} \underbrace{\sum_{ij} \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^6}_{p_6} \right]$$

Hieraus lässt sich folgern:

$$\left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 = \frac{p_6}{2p_{12}}$$

$$\Rightarrow U_{tot} = \frac{1}{2}N4\epsilon \left[\frac{p_6^2}{4p_{12}} - \frac{p_6^2}{2p_{12}} \right] = N\epsilon \frac{p_6^2}{p_{12}}$$

Einsetzen der Werte liefert:

$$U_{bcc} = N\epsilon 16,4736$$

$$U_{fcc} = N\epsilon 17,2204$$

$$U_{hcp} = N\epsilon 17,2221$$

$$\Rightarrow \frac{U_{bcc}}{U_{hcp}} = 0,95654 \qquad \frac{U_{fcc}}{U_{hcp}} = 0,9999$$

1.3 a)

$$U_0 = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} = \underline{5,1eV}$$

b)

$$U = \alpha U_0 = \underline{8,9eV}$$

c)

$$E_B(r) = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + c e^{-\frac{r}{\rho}}$$

$$\frac{dE_B(r)}{dr} = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{c}{\rho} e^{-\frac{r}{\rho}} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow c = -\frac{\alpha e^2 \rho}{4\pi\epsilon_0 r^2} e^{\frac{r}{\rho}} = \underline{4,113 \cdot 10^{-14}}$$

$$\Rightarrow E_{ab} = \underline{-0,7eV}$$

$$\Rightarrow E_B = E_C + E_{ab} = 8,9eV - 0,7eV = \underline{8,2eV}$$

1.4 a) $C : 1s^2 2s^2 1p^2$

b) $K : 1s^2 2s^2 1p^6 3s^2 2p^6 4s^1$

c) $K^+ : 1s^2 2s^2 1p^6 3s^2 2p^6$

d) $F : 1s^2 2s^2 1p^5$

e) $F^- : 1s^2 2s^2 1p^6$

f) $Cl : 1s^2 2s^2 1p^6 3s^2 2p^5$

g) $Cl^- : 1s^2 2s^2 1p^6 3s^2 2p^6$