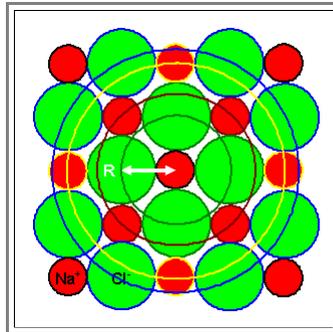


## Madelungkonstante

Advanced

- Wir berechnen mal die Madelungkonstante für die einfachsten Ionenkristalle, z.B. für **NaCl**. Wie dieser Kristall aussieht, kann man im [Link](#) betrachten
- Im Zentrum des Koordinatensystem sitzt also ein **Na<sup>+</sup>** Ion. Es hat **6 Cl<sup>-</sup>** Ionen als nächste Nachbarn im Abstand  **$R = a/2$** ; dabei ist  **$a$**  die [Gitterkonstante](#).
- Wie das halbwegs maßstabsgetreu und zweidimensional aussieht, zeigt das folgende Bild.



- Die zweitnächsten Nachbarn sind dann **12 Na<sup>+</sup>** Ionen im Abstand  **$2^{1/2} \cdot R$** .
  - Es folgen **8 Cl<sup>-</sup>** Ionen im Abstand  **$3^{1/2} \cdot R$** , dann **6 Na<sup>+</sup>** Ionen im Abstand  **$2 \cdot R$** , und so weiter und so fort.
- Die zugehörigen potentiellen Energien betrachten wir uns gleich in einer strukturierten Tabelle

Nachbartyp	Zahl	Abstand	Typ Potential	Formel
1.	6 Cl <sup>-</sup>	$R$	anziehend	$U = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 6 \cdot 2^{-1/2}$
2.	12 Na <sup>+</sup>	$2^{1/2} \cdot R$	abstoßend	$U = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 12 \cdot 2^{-1/2}$
3.	8 Cl <sup>-</sup>	$3^{1/2} \cdot R$	anziehend	$U = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 8 \cdot 3^{-1/2}$
4.	6 Na <sup>+</sup>	$4^{1/2} \cdot R$	abstoßend	$U = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 6 \cdot 4^{-1/2}$
5.	...	...	...	...

Damit ist die gesamte potentielle Energie

$$\begin{aligned}
 U &= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \left( \frac{6}{1^{1/2}} - \frac{12}{2^{1/2}} + \frac{8}{3^{1/2}} - \frac{6}{4^{1/2}} + \dots \right) \\
 &= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \alpha
 \end{aligned}$$

- Der Ausdruck in der Klammer ist die Madelungkonstante  $\alpha$ .
- Alles, was wir noch zu tun haben ist das Bildungsgesetz der unendlichen Reihe zu finden, und dann die mathematische Aufgabe der Aufsummierung zu lösen.

● Das ist zwar nicht unbedingt einfach, aber machbar, und wir finden  $\alpha = 1.7476$ . Leider konvergiert die Summe nur langsam; die 4 oben gezeigten Terme ergeben z.B. erst  $-0.866$ .

▮ Für kompliziertere Kristalle wird die Berechnung der Madelungkonstanten zwar noch nicht unbedingt zur Lebensaufgabe, aber doch zu einer anspruchsvollen mathematisch-geometrischen Übung.