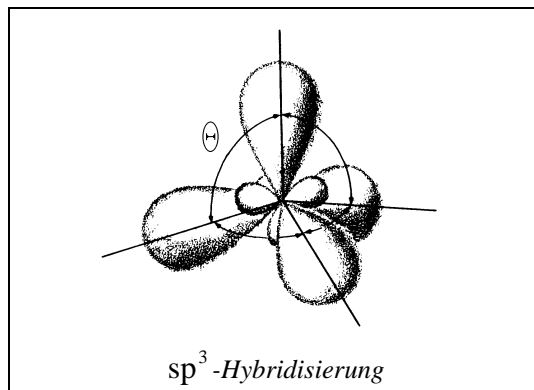


## Übungen " Materialwissenschaft I"

### Blatt 3

#### Aufgabe 8:

Beim Kohlenstoff liegen die 2s- und die 2p-Zustände fast auf gleichem Niveau. Daher erfordert das Überführen des C-Atoms in den ersten angeregten Zustand sehr wenig Energie. Bedingt durch die sog. sp-Wechselwirkung ergeben sich durch Linearkombination der 2s- und der 2p-Zustände des ersten angeregten Zustandes neue Wellenfunktionen, die alle zur gleichen Energie gehören (Hybridbildung):



$$\psi_1 = \frac{1}{2}(\varphi_s + \varphi_{p_x} + \varphi_{p_y} + \varphi_{p_z})$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2}(\varphi_s + \varphi_{p_x} - \varphi_{p_y} - \varphi_{p_z})$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}(\varphi_s - \varphi_{p_x} + \varphi_{p_y} - \varphi_{p_z})$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2}(\varphi_s - \varphi_{p_x} - \varphi_{p_y} + \varphi_{p_z})$$

wobei die Wellenfunktionen des p-Zustandes die Gestalt  $\varphi_{p_i} \sim f(r) \cdot \frac{i}{r}$ ,  $i = (x, y, z)$  haben.  $f(r)$

und  $\varphi_s(r)$  sind radialsymmetrische Funktionen und  $r$  ist der Abstand vom Zentrum des C-Atoms. Durch diese Ortsabhängigkeit der  $\varphi_{p_i}(r)$  ergeben sich die vier asymmetrischen Keulen, wie in Abb. 5 dargestellt.

- Zeichnen Sie die Orientierung (Richtungsvektor) dieser Hybridwellenfunktionen in ein Koordinatensystem ein.
- Berechnen Sie den Winkel zwischen zwei beliebigen Hybridwellenfunktionen.

#### Aufgabe 9:

Der Potentialverlauf einer Bindung sei gegeben durch:

$$V(r) = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m} \quad (1)$$

- Begründen Sie, daß  $r_0$  der Bindungsabstand und  $V_B$  die Bindungsenergie sind, wenn gilt:

$$V(r_0) = -V_B \quad (2a)$$

$$\left. \frac{dV}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad (2b)$$

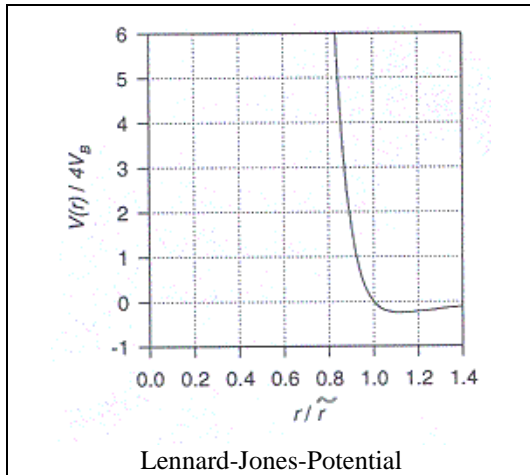
Die Konstanten  $A$  und  $B$  lassen sich mit Hilfe der Bedingungen (2a) und (2b) durch  $m$ ,  $n$ ,  $r_0$  und  $V_B$  ausdrücken:

$$A = \frac{m}{m-n} V_B r_0^n$$

$$B = \frac{n}{m-n} V_B r_0^m$$

b) Man zeige für den E-Modul:  $E = \frac{m \cdot n}{r_0^3} V_B$ . Man benutze die Ausdrücke für  $A$  und  $B$  wie

angegeben. Hinweis:  $E = \frac{1}{r_0} \frac{d^2 V}{dr^2} \Big|_{r=r_0}$



c) Mit  $m = 12$ ,  $n = 6$ ,  $A = 4V_B \tilde{r}^6$  und  $B = 4V_B \tilde{r}^{12}$  nimmt

der Potentialverlauf folgende spezielle Gestalt an:

$$V(r) = 4V_B \left[ -\left(\frac{\tilde{r}}{r}\right)^6 + \left(\frac{\tilde{r}}{r}\right)^{12} \right]$$

Dieses Potential ist das sogenannte Lennard-Jones-Potential (siehe Abb.). Berechnen Sie den E-Modul eines Argon-Edelgaskristalls ( $V_B = 167 \cdot 10^{-23} \text{ J}$ ,  $\tilde{r} = 3.40 \text{ \AA}$ ). Geben Sie den Wert in  $\text{N/m}^2$  an.

d) Schätzen Sie die Schmelztemperatur des Argon-Edelgaskristalls ab.

e) Mit Hilfe der dritten Ableitung des Potentials läßt sich der lineare Ausdehnungskoeffizient des Argon-Edelgaskristalls ausdrücken durch:

$$\alpha = \frac{m + n + 3}{2mn} \frac{k_B}{V_B}$$

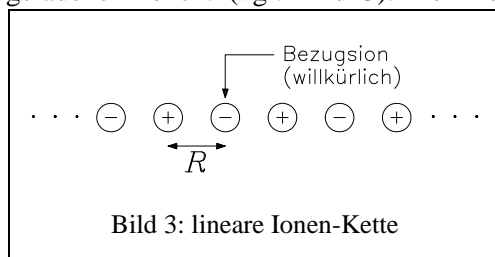
mit  $k_B$ : Boltzmann-Konstante. Berechnen Sie  $\alpha$  für den Argon-Edelgaskristall.

f) Um wieviel Prozent hat sich der Argon-Edelgaskristall von 0K an ausgedehnt, wenn er schmilzt?

g) Skizzieren Sie die erste Ableitung von  $V(r)$ . Bei welcher Länge  $r$  zerreißt die Bindung, wenn sich die ziehende Kraft immer weiter vergrößert? Begründen!

### Aufgabe 10:

Man betrachte eine unendlich lange, lineare Kette von positiv und negativ geladenen Ionen. (vgl. Bild 3). Der Betrag der Ladungen aller Ionen der Kette sei gleich. Man berechne die Madelung-Konstante



$$\alpha = \sum_{j, j \neq 0} \frac{\pm 1}{\rho_j}$$

mit  $\rho_j = r_j / R$  für ein beliebig gewähltes Bezugslon. Das Zeichen ( $\pm$ ) bedeutet, daß der  $j$ -te Summand je nach Ladung des  $j$ -ten Ions ein positives oder negatives

Vorzeichen erhält. Dabei sind  $r_j$  der Abstand des  $j$ -ten Ions vom Bezugslon und  $R$  der Abstand zwischen zwei Nachbarn.

### Aufgabe 11:

Schätzen Sie die Bindungsenergie eines HF-Moleküls ab (Ionisationsenergie von Wasserstoff:  $13.6 \text{ eV}$ ; Elektronenaffinität von Fluor:  $3.6 \text{ eV}$ ; Gleichgewichtsabstand der Kerne:  $r_0 = 0.9 \text{ \AA}$ ). Gemeint ist die Energie, die notwendig ist, um ein H-Atom und ein F-Atom in einem HF-Molekül zu vereinigen.