MUSTERLÖSUNG 6

Aufgabe 1: In dieser Aufgabe ist die Formel für die Wechselwirkungsenergien $V(r)$ zwischen den Atomen in einem Kristall allgemein gegeben:

$$V(r) = \frac{-\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

Dabei ist der erste Term auf rechter Seite für die Energie, die durch anziehende interatomare Kräfte erzeugt wird. Diese anziehende Natur dieses Terms erkennt man an seinem negativen Vorzeichen. Dagegen steht der zweite Term für die abstoßende Wechselwirkungsenergie, die eine kürzere Reichweite als die anziehende hat. Deshalb gilt $m > n$.

a) Nun soll allgemein die Formel für die interatomare Kraft hergeleitet und daraus der Gleichgewichtsabstand r_0 ermittelt werden. Für den Zusammenhang zwischen $F(r)$ und $V(r)$ gilt:

$$F(r) = \frac{-dV(r)}{dr}$$

Man braucht also die Formel für $V(r)$ abzuleiten und dann mit negativem Vorzeichen zu versehen:

$$\boxed{F(r) = \frac{-d}{dr}V(r) = \frac{-d}{dr}\left(\frac{-\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}\right) = -\left(\frac{n\alpha}{r^{n+1}} - \frac{m\beta}{r^{m+1}}\right) = \frac{-n\alpha}{r^{n+1}} + \frac{m\beta}{r^{m+1}}}$$

Nun soll man die Definition des Gleichgewichts als $F(r_0) = 0$ anwenden, um r_0 zu bestimmen:

$$F(r_0) = \frac{-n\alpha}{r_0^{n+1}} + \frac{m\beta}{r_0^{m+1}} \overset{!}{=} 0 \Leftrightarrow \frac{n\alpha}{r_0^{n+1}} = \frac{m\beta}{r_0^{m+1}} \Leftrightarrow \frac{r_0^{m+1}}{r_0^{n+1}} = \frac{m\beta}{n\alpha} \Leftrightarrow r_0^{m+1-n-1} = \frac{m\beta}{n\alpha} \Leftrightarrow r_0^{m-n} = \frac{m\beta}{n\alpha}$$

$$\Rightarrow \boxed{r_0 = \left(\frac{m\beta}{n\alpha}\right)^{\frac{1}{m-n}}}$$

b) Um einen geschlossenen Ausdruck für E zu finden, soll man zunächst den folgenden Zusammenhang zwischen E und $F(r)$ nutzen:

$$E = \frac{-1}{r_0} \cdot \left.\frac{dF(r)}{dr}\right|_{r=r_0}$$

Dabei braucht man die Kraft abzuleiten:

$$\frac{dF(r)}{dr} = \frac{d}{dr}\left(\frac{-n\alpha}{r^{n+1}} + \frac{m\beta}{r^{m+1}}\right) = \frac{(n+1)n\alpha}{r^{n+2}} - \frac{(m+1)m\beta}{r^{m+2}}$$

Diese kann man in den obigen Zusammenhang einsetzen:

$$E = \frac{-1}{r_0} \cdot \left.\left(\frac{(n+1)n\alpha}{r^{n+2}} - \frac{(m+1)m\beta}{r^{m+2}}\right)\right|_{r=r_0} = \frac{-1}{r_0}\left(\frac{(n+1)n\alpha}{r_0^{n+2}} - \frac{(m+1)m\beta}{r_0^{m+2}}\right) = \frac{-(n+1)n\alpha}{r_0^{n+3}} + \frac{(m+1)m\beta}{r_0^{m+3}}$$

Nun kann man für r_0 den Term aus Teilaufgabe a) einsetzen und einen geschlossenen Ausdruck bestimmen. Es geht aber einfacher und schneller, wenn man β mithilfe der Kenntnisse aus a) eliminiert:
↳ (da in dem gegebenen Ergebnis in der Angabe kein β steht!)

(aus a) $r_0^{m-n} = \frac{m\beta}{n\alpha} \Leftrightarrow \beta = \frac{n\alpha}{m} \cdot r_0^{m-n}$

Jetzt kann man dieses einsetzen:

$$E = \frac{-(n+1)n\alpha}{r_0^{n+3}} + \frac{(m+1)m\,\frac{n\alpha}{m}r_0^{m-n}}{r_0^{m+3}} = \frac{-(n+1)n\alpha}{r_0^{n+3}} + \frac{(m+1)n\alpha}{1} \cdot \overbrace{\frac{r_0^{m-n}}{r_0^{m+3}}}^{=r_0^{m-n-m-3} = r_0^{-n-3}} = \frac{-(n+1)n\alpha}{r_0^{n+3}} + (m+1)n\alpha \cdot r_0^{-(n+3)}$$

$$= \frac{-(n+1)n\alpha}{r_0^{n+3}} + \frac{(m+1)n\alpha}{r_0^{n+3}} = \frac{n\alpha}{r_0^{n+3}}(m+\cancel{1}-n-\cancel{1}) = \frac{n\alpha}{r_0^{n+3}}(m-n)$$

Damit hat man das gegebene Ergebnis hergeleitet:

$$\boxed{E = n\cdot(m-n)\cdot\frac{\alpha}{r_0^{n+3}}}$$

→ <u>Anmerkung</u>: Der Zusammenhang zwischen der interatomaren Kraft $F(r)$ und dem Elastizitätsmodul ergibt sich wie folgt:

Laut des Hookeschen Gesetzes beschreibt E den linearen Zusammenhang zwischen der Dehnung $\varepsilon = \frac{\Delta \ell}{\ell}$ und der Spannung $\sigma = \frac{F}{A}$, wobei A die Fläche ist, auf die die Kraft ausgeübt wird.
Zwei Atome befinden sich normalerweise mit einem Abstand r_0 (Gleichgewicht) zueinander. Wenn durch eine äußere Kraft eine Änderung der Kraft ΔF stattfindet, dann verursacht diese eine Änderung des interatomaren Abstands Δr und damit eine Dehnung $\varepsilon = \frac{\Delta r}{r_0}$. Diese Dehnung ruft dann eine Spannung hervor, indem sich eine Rückstellkraft $-\Delta F$ bildet, da das System zurück zum Gleichgewichtszustand gehen möchte. Diese Rückstellkraft wirkt auf die Fläche r_0^2 und damit gilt $\sigma = \frac{-\Delta F}{r_0^2}$. Wegen des Hookschen Gesetzes kann man nun schreiben:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\frac{-\Delta F}{r_0^2}}{\frac{\Delta r}{r_0}} = \frac{-1}{r_0}\cdot\frac{\Delta F}{\Delta r} = \frac{-1}{r_0}\cdot\frac{dF(r)}{dr}\bigg|_{r=r_0}$$

c) Nun ist das Elastizitätsmodul des MgO-Kristalls gegeben. In dieser Teilaufgabe soll man davon ausgehen, dass der anziehende Term an der Formel für $V(r)$ nur auf Coulombanziehung beruht, also folgendes gilt:

$$V(r) = V_c(r) + \frac{\beta}{r^m} \quad \text{mit } V_c(r) = -\frac{\alpha}{r^n} = +\frac{q_1\cdot q_2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r} = \frac{-4e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}$$

Dabei soll man darauf achten, dass im Zähler nicht e^2, sondern $4e^2$ steht, da die Ionen Mg^{2+}, O^{2-}, zwischen denen diese Bindungsenergie gibt, jeweils 2-fach geladen sind und $(-2e)\cdot 2e = -4e^2$ gilt.
Um m zu bestimmen, soll man die Formel aus Teilaufgabe b) nutzen, wobei dafür α und n durch folgenden Vergleich berechnet werden sollen:

$$\frac{-\alpha}{r^n} = \frac{-4e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r} \Rightarrow \begin{array}{l} n = 1 \\ \alpha = \frac{4e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} = \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\end{array}$$

In der Angabe fehlt (meiner Meinung nach), dass $\varepsilon_{r_{MgO}} = 8$ gilt. Mithilfe dieses Wertes kann man auch m berechnen, wobei man zuerst den Zusammenhang aus b) nach m auflösen soll:

$$E = n(m-n)\cdot\frac{\alpha}{r_0^{n+3}} \Leftrightarrow \frac{E\cdot r_0^{n+3}}{n\alpha} = m-n \Leftrightarrow m = n + \frac{E\cdot r_0^{n+3}}{n\alpha}$$

Dabei kann man r_0 aus den gegebenen Ionenradien folgendermaßen berechnen:

$$r_0 = r(Mg^{2+}) + r(O^{2-}) = 57\,pm + 138\,pm = 195\,pm = 195\cdot 10^{-12}\,m$$

Damit gilt für m:

$$m = 1 + \frac{3\cdot 10^{11}\frac{N}{m^2}\cdot(195\cdot 10^{-12}\,m)^4}{\alpha} = 1 + \frac{3\cdot 10^{11}\frac{N}{m^2}(195\cdot 10^{-12}\,m)^4}{\frac{e^2}{\pi\varepsilon_0\varepsilon_{r_{MgO}}}} = 1 + \frac{3\cdot 10^{11}\frac{N}{m^2}\cdot(195\cdot 10^{-12}\,m)^4\cdot\pi\cdot 8{,}85\cdot 10^{-12}\frac{As}{Vm}\cdot 8}{(1{,}6\cdot 10^{-19}\,As)^2}$$

$$= 1 + 3{,}768 \approx 4{,}8$$

d) Wenn ein hydrostatischer Druck vorhanden ist, dann kann man das Hookesche Gesetz nicht anwenden, da dieses lediglich im Falle eines uniaxialen Drucks gültig ist. Hier soll man also den Zusammenhang zwischen dem Druck p und der Volumenänderung $\frac{\Delta V}{V}$ über das Kompressionsmodul K benutzen:

$$-p = K\cdot\frac{\Delta V}{V}$$

K wird mithilfe der sogenannten Poisson-Zahl ν, die der Querkontraktion bei einer Längenänderung Rechnung trägt (siehe auch Übungsblatt 5), mit E folgendermaßen in Zusammenhang gesetzt:

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$$

Da E gegeben ist und die Poisson-Zahl für die meisten Materialien ca. 0,3 beträgt, kann man die Volumenänderung $\frac{\Delta V}{V}$ bei einem gegebenen hydrostatischen Druck bestimmen. Dafür setze man die Formel für K zunächst ein:

$$-p = K \cdot \frac{\Delta V}{V} = \frac{E}{3(1-2\nu)} \cdot \frac{\Delta V}{V}$$

Löse man diese Gleichung nach $\frac{\Delta V}{V}$ auf und setze die Werte ein, so ergibt sich:

$$\frac{\Delta V}{V} = -p \cdot \frac{3(1-2\nu)}{E} = -10 \cdot 10^3 \frac{N}{m^2} \cdot \frac{3\underbrace{(1-2\cdot 0{,}3)}_{=0{,}4}}{3 \cdot 10^{11} \frac{N}{m^2}} = \frac{-10 \cdot 10^3 \cdot 3 \cdot 0{,}4}{3 \cdot 10^{11}} = -4 \cdot 10^{-8}$$