

4. Übungsblatt

Verteilung 16. Oktober 2007
Besprechung 24./25. Oktober 2007

Thema: Bindungsenergie

Aufgabe 1: Kovalente Bindung in einer Dimension

In dieser Aufgabe soll mit einem eindimensionalen Modell das Entstehen einer kovalenten Bindung untersucht werden. Das 'Molekül' bestehe aus zwei 'Atomkernen' und einem Elektron. Die 'Kerne' der zwei beteiligten Atome, die sich im Abstand d voneinander befinden, erzeugen das Potential

$$U_d(x) = -u_0 (\delta(x + d/2) + \delta(x - d/2))$$

für das Elektron (mit der Diracschen Deltafunktion $\delta(x)$ und $u_0 > 0$). Zwischen den Kernen wirke das abstossende elektrostatische Potential

$$V_{KK}(d) = \gamma \frac{u_0^2}{d},$$

wobei γ eine Konstante ist.

1. Welche zwei Zustände $\psi(x)$ gibt es für das Elektron? Welcher ist bindend bzw. antibindend? Skizzieren Sie die beiden Zustände. Geben Sie die Gleichungen an, welche die Energien dieser beiden Zustände bestimmen.

Tipp: Teilen Sie die x -Achse in drei Bereiche. Nutzen Sie die Symmetrie des Systems bezüglich $x = 0$ beim Aufstellen der Stetigkeitsbedingungen. Die Anschlussbedingungen (Unstetigkeit!) für die erste Ableitung der Wellenfunktion an den Orten der Deltafunktionen lauten (mit $\varepsilon \rightarrow 0$):

$$\psi' \left(\pm \frac{d}{2} + \varepsilon \right) - \psi' \left(\pm \frac{d}{2} - \varepsilon \right) = -\frac{2mu_0}{\hbar^2} \cdot \psi \left(\pm \frac{d}{2} \right),$$

2. Wie sieht die Energie der beiden Zustände als Funktion des Kernabstandes d qualitativ aus? Wie gross sind die Energien der beiden Zustände in den Extremfällen $d \rightarrow 0$ und $d \rightarrow \infty$?
3. Wie kommt die typische Bindungslänge des Moleküls zustande? Welche Rolle spielen dabei die abstossende elektrostatische Kraft zwischen den Kernen und der Potentialbeitrag durch das Elektron im bindenden Zustand ("quantenmechanische Kraft")?

Aufgabe 2: NaCl: Bindungsenergie und Kompressibilität

Die Gesamtenergie eines Ionenkristalls wie NaCl (zwei verschachtelte fcc-Gitter) kann häufig in sehr guter Näherung in der Form

$$E(r) = -N \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right)$$

dargestellt werden. Dabei ist r der Abstand nächster Nachbarn, N die Anzahl Ionenverbindungen und A, B sind Konstanten. A wird auch Madelung-Konstante genannt und repräsentiert die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung zwischen den einfach geladenen Ionen. Der zweite Term hingegen stellt das kurzreichweitige Abstossungspotential dar, welches rein quantenmechanischer Natur ist.

1. Leiten Sie aus der Kompressibilität κ (bzw. dem inversen Kompressionsmodul $K=24.42$ GPa), der Madelung-Konstanten $A=1.75$ und dem Abstand nächster ungleicher Nachbarn $r_0 = 2.82\text{\AA}$ von NaCl den Exponenten n ab.

Tipp: Die Kompressibilität ist definiert als $\kappa = -1/V(dV/dp)$ mit V dem Volumen des Kristalls und p einem äusseren, isotropen Druck. Im thermodynamischen Gleichgewicht kann folgende Relation verwendet werden: $dE = -pdV$, wobei E die Energie des Systems darstellt. Benutzen Sie die Gleichgewichtsbedingung $dE/dr_0 = 0$.

2. Berechnen Sie (mit dem n aus Teilaufgabe 1) die Bindungsenergie pro Ionenbindung und vergleichen Sie diese mit gängigen Werten in der Literatur.