Aufgabenblatt 4
Donnerstag $15^{15} - 16^{45}$

Sascha Reinhardt

15. November 1999

1 Aufgabe 4.2

Das Spektrum eines Gitters hat im Gegensatz zu einem ungestörten Gitter mehr Beugungsreflexe. Die zusätzlichen Beugungsreflexe entstehen, da durch die Leerstellen Beugungsreflexe möglich sind, die normalerweise durch eine destruktive Interferenz der einzelnen Strahlen nicht zu sehen sind. Da aber an der Leerstelle keine Reflex auftritt, gibt es dann keine Interferenz von Strahlen, die den Phasenunterschied π haben. Die Reflexe sind Beugungen von den Ordnungen, die normalerweise nicht zu sehen sind.

2 Aufgabe 4.3

2.1 Evjen-Zelle 1.Ordnung

In der gewählten Zelle sitzt ein Na^+ in der Mitte und bildet den Koordinatenursprung. An den Ecken des Würfels sitzen Cl^-(grün). In der Mitte jeder Kante sitzt ein Na^+(blau). Die Kantenlänge des Würfels beträgt a und der Abstand zum nächsten Ion ist $a/2$. a ist in dieser Aufgabe mit 1 gleichzusetzen, da relative Abstände interessieren.

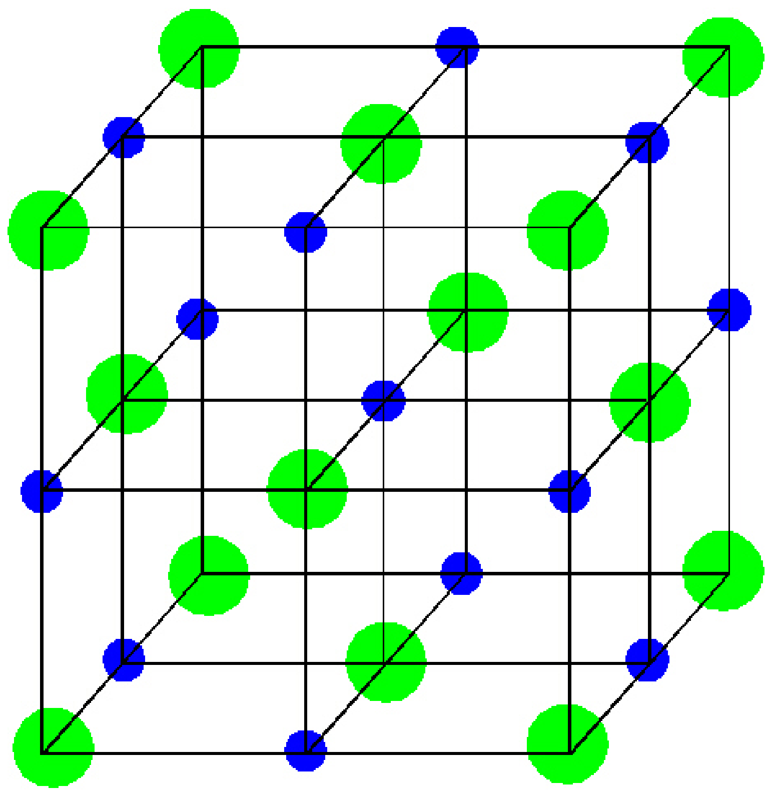

Abbildung 1: Evjen-Zelle 1.Ordnung

Die Formel zur Berechnung der Madelungskonstante ist:

$$\alpha = \sum_j \frac{(\pm)}{p_{ij}} \tag{1}$$

$$p_{ij} = \frac{r_{ij}}{R} \tag{2}$$

$$R = \frac{a}{2}, \text{ Abstand zum nächsten Ion} \tag{3}$$

Man kann den Würfel in 3 Ebenen zerlegen, wobei zwei identisch sind. Berechnung der Abstände zum Bezugsatom und Berücksichtigung der Ladungsanteile:

$$\begin{aligned}\alpha &= \left(12(-1)\frac{1}{4}\frac{1}{\frac{1}{\sqrt{2}}} + 6(1)\frac{1}{2}\frac{1}{\frac{1}{2}} + 8(1)\frac{1}{8}\frac{1}{\frac{\sqrt{3}}{2}}\right) R \\ \alpha &= 1,456\end{aligned}$$

2.2 Evjen-Zelle 2.Ordnung

Die Evjen-Zelle 1.Ordnung wird erweitert indem man die nächsten Ebenen, die parallel zu den Würfelebenen sind dazu nimmt. Man hat jetzt 5 Ebenen, wobei bis auf die mittlere Ebene jeweils zwei identisch sind. Zur Übersichtlichkeit wird jetzt die Berechnung der Konstante in mehreren Teilschritten erfolgen. Die mittlere Ebene ist die 0.Ebene, die Würfelflächne sind die 2.Ebenen und die dazwischenliegende die 1.Ebene. + oder − im Index bedeutet das es der Anteil entgegengesetzte bzw. gleicher Ladungen ist.

$$\alpha_{2-} = \frac{1}{2}(-1)2 + \frac{1}{2}(-1)\frac{1}{\sqrt{\frac{3}{2}}}8 + \frac{1}{4}(-1)\frac{1}{\sqrt{2}}8 + \frac{1}{8}(-1)\frac{1}{\sqrt{3}}8 \quad (4)$$

$$\alpha_{2+} = \frac{1}{2}(1)\frac{1}{\sqrt{\frac{5}{4}}}8 + \frac{1}{4}(1)\frac{1}{\sqrt{\frac{9}{4}}}16 \quad (5)$$

$$\alpha_{1-} = 1(-1)\frac{1}{\sqrt{\frac{2}{4}}}8 + \frac{1}{2}(-1)\frac{1}{\sqrt{\frac{3}{2}}}16 \quad (6)$$

$$\alpha_{1+} = 1(1)\cdot 2\frac{1}{\frac{1}{2}} + 1(1)\frac{1}{\sqrt{\frac{3}{4}}}8 + \frac{1}{2}(1)\frac{1}{\sqrt{\frac{5}{4}}}8 + \frac{1}{4}(1)\frac{1}{\sqrt{\frac{9}{4}}}8 \quad (7)$$

$$\alpha_{0-} = 1(-1)\frac{1}{\sqrt{\frac{2}{4}}}4 + \frac{1}{2}(-1)1\cdot 4 + \frac{1}{4}(-1)\frac{1}{\sqrt{2}}4 \quad (8)$$

$$\alpha_{0+} = 1(1)\frac{1}{\frac{1}{2}}4 + \frac{1}{2}(1)\frac{1}{\sqrt{\frac{5}{4}}}8 \quad (9)$$

α ist also:

$$\begin{aligned}\alpha &= (\alpha_{2-} + \alpha_{2+} + \alpha_{1-} + \alpha_{1+} + \alpha_{0-} + \alpha_{0+})R \\ \alpha &= 1,752\end{aligned}$$