



#### 4. Übung

##### Aufgabe 17. (15 Punkte)

Graphit besteht aus Kohlenstoffschichten, wobei die Bindungen innerhalb der Schichten wesentlich stärker sind als die zwischen den Schichten. Die Kohlenstoffatome jeder Schicht ( $xy$ -Ebene) besetzen die Ecken von regelmäßigen Sechsecken. Jedes Kohlenstoffatom besitzt also eine dreizählige Symmetrie bezüglich der  $z$ -Achse. Durch Lineararkombinationen der drei konventionellen ( $s$ - und  $p$ -) Orbitale ( $r, \theta, \varphi$  sind Kugelkoordinaten)

$$|s\rangle \equiv \psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \quad (1)$$

$$|p_x\rangle \equiv \psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (2)$$

$$|p_y\rangle \equiv \psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \sin(\theta) \sin(\varphi) \quad (3)$$

lassen sich symmetrieadaptierte Bindungsorbitale bilden ( $sp^2$ -Hybridisierung). Bestimmen Sie diese Orbitale. Benutzen Sie dabei, daß die Bindungsorbitale folgende Bedingungen erfüllen müssen:

- Sie müssen normiert sein.
- Sie müssen zueinander orthogonal sein.
- Sie müssen durch Drehung um  $120^\circ$  um die  $z$ -Achse ineinander überführt werden können.

(Ein Beispiel als Hinweis:  $|p_{xy}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|p_x\rangle + |p_y\rangle)$  beschreibt ein normiertes  $p$ -Orbital, welches entlang der  $[11]$ -Richtung ausgerichtet ist.)

Aufgabe 18. (10 Punkte) Zeigen Sie, daß die Madelungkonstante  $\alpha$  einer eindimensionalen Kette von Ionen mit alternierendem Vorzeichen  $\alpha = 2 \cdot \ln 2$  beträgt.

(Verwenden Sie  $\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$ )

Aufgabe 19. (10 Punkte) **Bragg-Reflexe im Ni:** Nickel kristallisiert in der fcc-Struktur mit der Gitterkonstante  $a = 3.52 \text{ \AA}$ . Bestimmen Sie für Röntgenstrahlung mit  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$  mit Hilfe der Bragg-Bedingung den Winkel  $2\Theta$  der Röntgen-Reflexe für die (100), (111), (200) und die (220)-Ebenen.