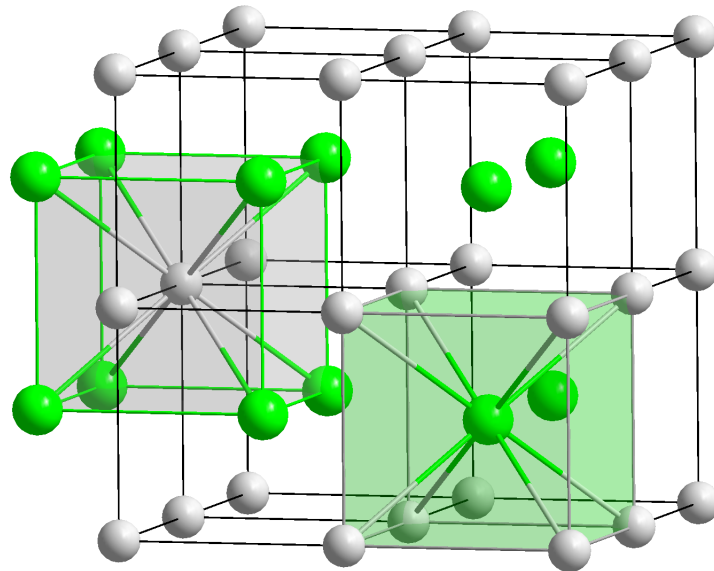


Project Work: Solid State Physics, WS2009/10

Iterative Bestimmung der Madelung-Konstante für CsCl

SHAN, Yao 0631389
KRISPER, Robert 0730885



Projektbeschreibung

Ziel des Projekts ist eine numerische Bestimmung der Madelung-Konstante der CsCl Struktur (siehe Deckblatt Bild).

$$M_i = \sum_j \frac{z_j}{r_{ij}/r_0}$$

z_j ... Anzahl der Atome in Nachbarschale j

r_{ij} ... Abstand der Nachbarschale j zum Atom i (hier Ursprung: $x = y = z = 0$)

r_0 ... Gitterabstand

Um dies zu erreichen, wird ein 3 dimensionales Array der Größe $(2*a)^3$ mit den entsprechenden Atomen (Cs entspricht +1, Cl entspricht -1) besetzt und deren Abstand relativ zum Ursprung berechnet. Anschließend werden die Abstände sortiert und in Nachbarschalen (Atome mit gleichem Abstand) zusammengezählt. Diese Werte sind in der nachfolgenden Tabelle zu sehen.

Auffallend ist, dass die Werte auch nach vielen Nachbarschalen noch stark verrauscht sind. Der Mittelwert hingegen schmiegt sich nach ungefähr 100 Nachbarschalen dem Literaturwert von $\sim 1,7627$ an.

Die Oszillationen beruhen darauf, dass aufgrund der Berechnung der Madelung Konstanten je nach Ladung immer ein Wert abgezogen oder dazuaddiert wird.

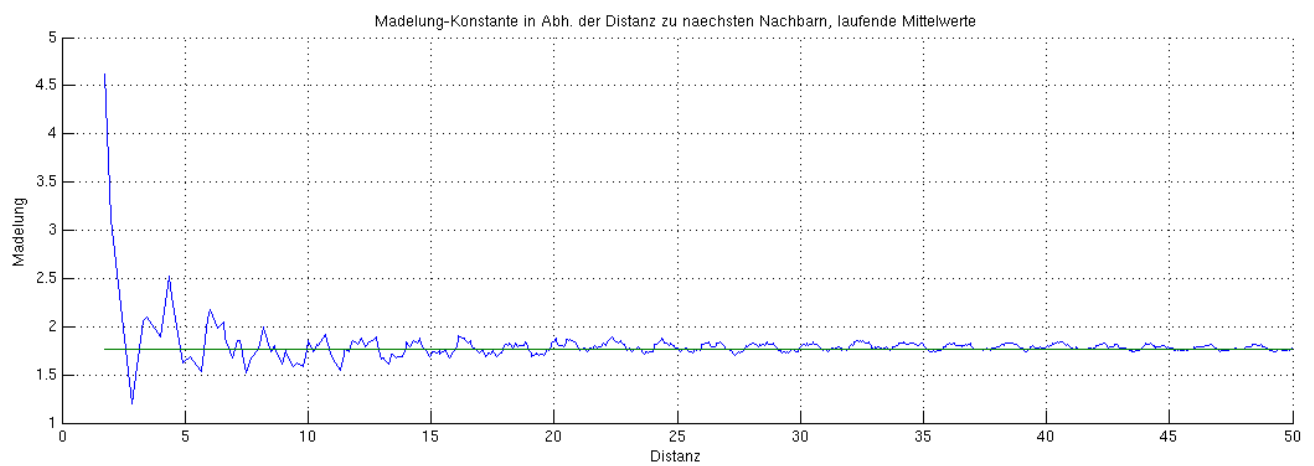
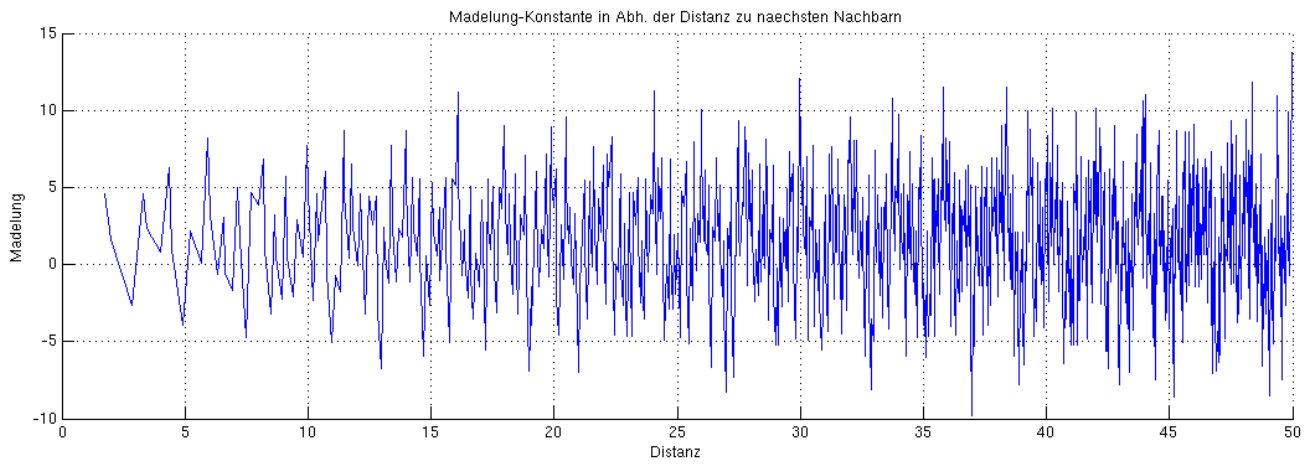
Als weiterer interessanter Punkt sollte erwähnt werden, dass das Erreichen vieler Nachbarschalen noch keinesfalls auch einen großen Abstand vom Ursprung bedeutet. So beträgt die Distanz zur 1000. Schale beispielsweise lediglich etwas mehr als 31 Gitterabstände. Unter diesem Gesichtspunkt wird die hohe Verrauschung plausibler; physikalisch lässt sich das Phänomen nun anhand der starken elektromagnetischen Wechselwirkung, die durch ihre Abnahme $\sim 1/r$ relativ weitreichend ist, nachvollziehen.

In der Folge werden Auszüge aus der Tabelle (beinhaltet Schale, Schalenabstand, Anzahl der Schalenatome, Art der Ladung/der Atome), sowie der Plot der einzelnen und des laufenden Mittelwertes präsentiert. Auch der Programmcode des erstellten Matlab-Skripts `madelung.m` ist angefügt.

Tabelle
(aus Matlab-Konsole)

Shell	Distance	Neighbors	Charge				
1	1.73	8	1
2	2	6	-1	451	36.7	144	1
3	2.83	12	-1	452	36.72	96	-1
4	3.32	24	1	453	36.77	180	-1
5	3.46	8	-1	454	36.81	288	1
6	4	6	-1	455	36.82	144	-1
7	4.36	24	1	456	36.88	48	-1
8	4.47	24	-1	457	36.92	144	1
9	4.9	24	-1	458	36.93	336	-1
10	5.2	32	1	459	36.99	216	-1
11	5.66	12	-1	460	37.03	288	1
12	5.92	48	1	461	37.09	120	-1
13	6	30	-1	462	37.13	384	1
14	6.32	24	-1	463	37.15	96	-1
15	6.56	24	1	464	37.2	120	-1
16	6.63	24	-1	465	37.24	96	1
17	6.93	8	-1	466	37.26	120	-1
18	7.14	48	1	467	37.35	288	1
19	7.21	24	-1	468	37.36	168	-1
20	7.48	48	-1	469	37.42	240	-1
21	7.68	72	1	470	37.46	336	1
22	8	6	-1	471	37.52	24	-1
23	8.19	24	1	472	37.56	96	1
24	8.25	48	-1	473	37.58	192	-1
25	8.49	36	-1	474	37.63	192	-1
26	8.66	56	1	475	37.67	288	1
27	8.72	24	-1	476	37.68	96	-1
28	8.94	24	-1	477	37.74	144	-1
29	9.11	72	1	478	37.78	360	1
30	9.17	48	-1	479	37.79	96	-1
31	9.38	24	-1	480	37.84	72	-1
32	9.54	48	1	481	37.88	96	1
33	9.8	24	-1	482	37.95	120	-1
34	9.95	72	1	483	37.99	192	1
35	10	30	-1	484	38	126	-1
36	10.2	72	-1	485	38.05	216	-1
37	10.34	72	1	486	38.09	312	1
38	10.39	32	-1	487	38.11	104	-1
39	10.72	48	1	488	38.16	48	-1
40	10.77	72	-1	489	38.2	264	1
41	10.95	48	-1	490	38.21	240	-1
42	11.09	48	1	491	38.26	144	-1
43	11.31	12	-1	492	38.3	120	1
44	11.45	120	1	493	38.41	360	1
45	11.49	48	-1	494	38.42	288	-1
46	11.66	48	-1	495	38.47	144	-1
47	11.79	72	1	496	38.51	168	1
48	11.83	48	-1	497	38.52	192	-1
49	12	30	-1	498	38.57	48	-1
50	12.12	56	1	499	38.61	288	1
...	500	38.63	120	-1

Plots



Programmcode

(Matlab-file madelung.m)

```

%% Cs: Ladung +1, Cl: Ladung-1, freier Raum durch 0 realisiert

clear all;
clc;

%% Daten

% Parameter
a = 100; % Groesse

% Caesium
Mcs = -1*ones(2*a+1,2*a+1,2*a+1);
Mcs(2:2:end, :, :) = 0;
Mcs(:, 2:2:end, :) = 0;
Mcs(:, :, 2:2:end) = 0;

% Chlor
Mcl = ones(2*a+1,2*a+1,2*a+1);
Mcl(1:2:end-1, :, :) = 0;
Mcl(:, 1:2:end-1, :) = 0;
Mcl(:, :, 1:2:end-1) = 0;

M = Mcs+Mcl;
%disp(M)

tic;

% Init
sav1 = zeros((2*a+1)^3,5);

% Loops
for z = 1:2*a+1
    for y = 1:2*a+1
        for x = 1:2*a+1
            if M(x,y,z) ~= 0
                pos = (z-1)*(2*a+1)^2 + (y-1)*(2*a+1) + x;
                z_ = z-a-1;
                y_ = y-a-1;
                x_ = x-a-1;
                sav1(pos,1) = sqrt(x_^2+y_^2+z_^2); % Abstand
                sav1(pos,2) = x_;
                sav1(pos,3) = y_;
                sav1(pos,4) = z_;
                sav1(pos,5) = M(x,y,z); % Ladung
            end
        end
    end
end

% Filter
ldg = find(sav1(:,5)~=0);

sav2 = sav1(ldg,:);
sav3 = sortrows(sav2,1);
sav4 = sav3(2:end,:);

bnd = find(sav4(:,1)<a/2);

sav5 = sav4(bnd,:);

% Init
savx = zeros(size(sav5,1),3);
savx(1,:) = [sav5(1,1),1,sav5(1,5)];
dt = sav5(1,1);
id = 1;

```

```

for k = 2:size(sav5,1)
    if sav5(k,1) ~= dt
        id = id + 1;
        savx(id,1) = sav5(k,1);
        savx(id,2) = 1;
        savx(id,3) = sav5(k,5);
        dt = sav5(k,1);
    else
        savx(id,2) = savx(id,2) + 1;
    end
end

flt = find(savx(:,1)~=0);
sav6 = savx(flt,:);
numshell = size(sav6,1);
shell = 1:numshell;
tabl = [shell.',sav6];

tel = toc;

disp('CsCl, bcc, ausgehend von Cs-Atom:')
disp(' ')
fprintf('Shell \t Distance\t Neighbors \t Charge \n')
disp('-----')

for ind = 1:numshell
    fprintf(' % -4d \t % -4.5f \t % 6d \t % 4d
           \n',tabl(ind,1),tabl(ind,2),tabl(ind,3),tabl(ind,4))
end
fprintf('\n')
disp(['Computing time: ',num2str(tel),' s'])

%% Madelung

distance = sav6(:,1);
number = sav6(:,2);

madelung_const = zeros(1,numshell);

madelung_const(1) = 1/distance(1)*number(1);

for l = 2:numshell
    if (sav6(l,3)<0)
        madelung_const(l) = madelung_const(l-1) - 1/distance(l)*number(l);
    else
        madelung_const(l) = madelung_const(l-1) + 1/distance(l)*number(l);
    end
end

%% Visualisierung

figure(1)
subplot(2,1,1)
grid on; hold on;
plot(distance,madelung_const)
title('Madelung-Konstante in Abh. der Distanz zu naechsten Nachbarn')
xlabel('Distanz')
ylabel('Madelung'); hold off;

mw = zeros(1,numshell);
for m = 1:numshell
    mw(m) = sum(madelung_const(1:m))/m;
end
subplot(2,1,2)
grid on; hold on;
plot(distance,mw,[distance(1),distance(end)],[1.7627,1.7627])
title('Madelung-Konstante in Abh. der Distanz zu naechsten Nachbarn, laufende
Mittelwerte')
xlabel('Distanz')
ylabel('Madelung'); hold off;

```

Quellenverzeichnis

Madelung-Konstante (Wert)

http://en.wikipedia.org/wiki/Madelung_constant

[2010-02-04; 15:25]

Caesiumchlorid (Grafik)

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/10/CsCl_polyhedra.png

[2010-02-04; 15:20]