

1. Mathematische Grundlagen

1.1. Sinus, Cosinus $\sin^2(x) + \cos^2(x) = 1$

x	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{1}{2}\pi$	π	$1\frac{1}{2}\pi$	2π
φ	0°	30°	45°	60°	90°	180°	270°	360°
sin	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	0	-1	0
cos	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2}$	0	-1	0	1
tan	0	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	1	$\sqrt{3}$	$\pm\infty$	0	$\mp\infty$	0

Additionstheoreme	Stammfunktionen
$\cos(x - \frac{\pi}{2}) = \sin x$	$\int x \cos(x) dx = \cos(x) + x \sin(x)$
$\sin(x + \frac{\pi}{2}) = \cos x$	$\int x \sin(x) dx = \sin(x) - x \cos(x)$
$\sin 2x = 2 \sin x \cos x$	$\int \sin^2(x) dx = \frac{1}{2}(x - \sin(x) \cos(x))$
$\cos 2x = 2 \cos^2 x - 1$	$\int \cos^2(x) dx = \frac{1}{2}(x + \sin(x) \cos(x))$
$\sin(x) = \tan(x) \cos(x)$	$\int \cos(x) \sin(x) dx = -\frac{1}{2} \cos^2(x)$
$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \sin y \cos x$	
$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y$	

1.2. Integrale $\int e^x dx = e^x = (e^x)'$

$F(x)$	$f(x)$	$f'(x)$
$\frac{1}{q+1} x^{q+1}$	x^q	qx^{q-1}
$\frac{2\sqrt{a^3}}{3}$	\sqrt{ax}	$\frac{a}{2\sqrt{ax}}$
$x \ln(ax) - x$	$\ln(ax)$	$\frac{a}{x}$
$\frac{1}{a^2} e^{ax} (ax - 1)$	$x \cdot e^{ax}$	$e^{ax} (ax + 1)$
$\frac{a^x}{\ln(a)}$	a^x	$a^x \ln(a)$
$-\cos(x)$	$\sin(x)$	$\cos(x)$

$$\int e^{at} \sin(bt) dt = e^{at} \frac{a \sin(bt) + b \cos(bt)}{a^2 + b^2}$$

$$\int \frac{dt}{\sqrt{at+b}} = \frac{2\sqrt{at+b}}{a}$$

$$\int t^2 e^{at} dt = \frac{(a-1)^2 + 1}{a^3} e^{at}$$

$$\int te^{at} dt = \frac{at-1}{a^2} e^{at}$$

$$\int xe^{ax^2} dx = \frac{1}{2a} e^{ax^2}$$

1.3. Exponentialfunktion und Logarithmus

$a^x = e^{x \ln a}$	$\log_a x = \frac{\ln x}{\ln a}$	$\ln x \leq x - 1$
$\ln(x^a) = a \ln(x)$	$\ln(\frac{x}{a}) = \ln x - \ln a$	$\log(1) = 0$

2. Einheiten

SI-Präfixe

Symbol	Vorsatz	Faktor	Symbol	Vorsatz	Faktor
Y	Yotta	10^{24}	d	Dezi	10^{-1}
Z	Zetta	10^{21}	c	Zenti	10^{-2}
E	Exa	10^{18}	m	Milli	10^{-3}
P	Peta	10^{15}	μ	Mikro	10^{-6}
T	Tera	10^{12}	n	Nano	10^{-9}
G	Giga	10^9	p	Piko	10^{-12}
M	Mega	10^6	f	Femto	10^{-15}
k	Kilo	10^3	a	Atto	10^{-18}
h	Hekto	10^2	z	Zepto	10^{-21}
da	Deka	10^1	y	Yokto	10^{-24}

3. Konstanten und Basisgleichungen

Naturkonstanten

Lichtgeschwindigkeit	$c_0 = 299\,792\,458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
Elementarladung	$e = 1.602\,177 \times 10^{-19} \text{ C}$
PLANCK-Konst.	$h = 6.626\,069\,57 \times 10^{-34} \text{ J s}$
	$h = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,57 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Elektr. Feldkonst.	$\epsilon_0 = 8.854\,188 \times 10^{-12} \frac{\text{F}}{\text{m}}$
Magn. Feldkonst.	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{\text{H}}{\text{m}}$
AVOGADRO-Konst.	$N_A = 6.022\,141 \times 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}$
Atomare Masse	$u = 1.660\,539 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Elektronenmasse	$m_e = 9.109\,383 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Protonenmasse	$m_p = 1.674\,927 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Neutronenmasse	$m_n = 1.672\,622 \times 10^{-27} \text{ kg}$
BOLTZMANN-Konst.	$k_b = 1.380\,655 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$
allg. Gaskonstante	$R = k_b N_A = 8,3144 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$

4. Aufbau der Materie

Planck'sches Postulat In der Quantenmechanik kann der harmonische Oszillator mit der Schwingungsfrequenz f nur diskrete Energiewerte annehmen:

$$E_n = hf \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Heisenberg'sche Unschärferelation Ort und Impuls (bzw. Energie und Zeit) können nicht gleichzeitig scharf definiert werden.

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \text{ und } \Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Welle-Teilchen-Dualismus Materie kann sowohl Eigenschaften von Teilchen als auch von Wellen haben.

4.1. Quanten

Hierbei wird die Materie als Menge von Teilchen betrachtet. Sie haben eine Energie E und einen Impuls p sowie eine Masse m .

Das Photon Für das Photon gilt:

$$E_{\text{ph}} = f \cdot h = \hbar \cdot \omega = \frac{\hbar c}{\lambda} = m_{\text{ph}} c^2$$

$$m_{\text{ph}} = \frac{\hbar \omega}{c^2} \quad p_{\text{ph}} = m_{\text{ph}} \cdot c = \frac{\hbar}{\lambda}$$

4.2. Materiewellen

4.2.1 Allgemeine Wellenfunktion $\Psi(\underline{r}, t) = C \cdot e^{i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{r})}$

Im eindimensionalen Fall: $\Psi(x, t) = C \cdot e^{i(\omega t - kx)}$

Größe	Beziehung
Energie	$E = \frac{1}{2} m v^2 = \hbar \omega$
De-Broglie-Wellenlänge	$\lambda = \frac{h}{p}$
Impuls	$\underline{p} = m \underline{v} = \hbar \underline{k}$
Kreisfrequenz	$\omega = 2\pi f = \frac{\hbar}{2m} k^2$
Phasengeschwindigkeit	$v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{v_{\text{Teilchen}}}{2}$
Wellenzahl	$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

4.2.2 Das Wellenpaket

Der bewegten Korpuskel wird eine im Raum begrenzte Wellenfunktion zugeordnet, die sich aus der Überlagerung einzelner Wellen zu einem Wellenpaket ergibt. Ein Teilchenstrom entspricht der Folge einzelner Wellenpakete.

$$\Psi(\underline{r}, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} C(k) \cdot e^{i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{r})} dk$$

Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets:

$$v_{\text{gr}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v_{\text{Teilchen}}$$

$$\text{Phasengeschwindigkeit } v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k}$$

4.3. Die Schrödingergleichung

Beschreibt die Dynamik der quantenmech. Zustände eines Systems.

Allgemeine Schrödingergleichung:

$$E = E_{\text{kin}} + V_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m} + V \quad \text{mit } p = \hbar \nabla \Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}, t) + V(\underline{r}, t) \cdot \Psi(\underline{r}, t)$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}) = (E - V) \Psi(\underline{r})$$

Herleitung Durch den Separationsansatz $\Psi(\underline{r}, t) = \Psi(\underline{r})\Phi(t)$ lässt sich die Zeitabhängigkeit abtrennen.

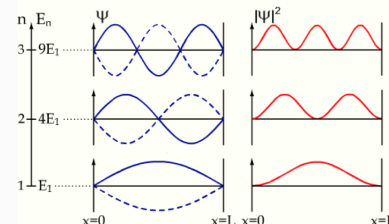
Aufenthaltswahrscheinlichkeit $d w(\underline{r}) = \Psi^*(\underline{r}, t) \cdot \Psi(\underline{r}, t) \cdot d \underline{r}$

Normierungsbedingung: $\int_{\text{Volumen}} \Psi^* \Psi d \underline{r}' = 1 \Rightarrow C_i = \sqrt{\frac{2}{L_i}}$

Herleitung der Schrödingergleichung

- Aus De-Broglie-Beziehungen: $\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 \rightarrow \hbar \omega = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$
- Multipliziere beide Seiten mit Ψ und ersetze $\omega \rightarrow \frac{\partial}{\partial t}$ sowie $k^2 \rightarrow \text{div grad}$ es folgt: $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}, t)$
- In einem Kraftfeld $\underline{F}(\underline{r}, t)$ mit $\underline{F}(\underline{r}, t) = -\text{grad } V(\underline{r}, t)$ gilt: $E = \frac{p^2}{2m} + V(\underline{r}, t) \quad \text{mit } p = \hbar \nabla \Psi$
- Die allg. Schrödingergleichung folgt aus Multiplikation mit Ψ und den Operatoren $E \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ und $\frac{p^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

4.4. Potentialtopf



Schrödingergleichung (im eindimensionalen Potentialtopf)

- Separation: Ist das Potential zeitunabhängig? Wenn ja $\Rightarrow v(\underline{r}, t) \rightarrow v(\underline{r})$
- Bereichseinteilung: $x < a$, $a < x < b$ (im Topf), $b < x$
- Aufstellen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung
- Ansatz: $\Phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ oder $A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- Bestimme Koeffizienten A , B und k über die Randbedingungen
- Amplitude aus der Normierungsbedingung bestimmen
- Einsetzen und Umformen $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m a^2} n^2$ mit $k = \frac{\pi}{a} n$

δ -Dim., unendl., zeitinvar. Potentialtopf: $i = \{x, y, \dots, \delta\}$

$$\text{Lösung der DGL: } \Psi(\underline{r}) = \sqrt{\frac{2}{\prod L_i}} \prod_{i=1}^{\delta} \sin(k_i \cdot r_i)$$

$$\text{Energie: } E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \sum k_i^2$$

für $\delta = 1$ (eindimensionaler PT)

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2} = E_1 n^2$$

$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

4.5. Moleküle - Bindungstypen

Bindung	Eigenschaften	Energie
Ionisch	Elektronenaustausch, stark, starr	3.4 eV
Kovalent	Gemeinsame Elektronen	
Metallisch	„Elektronensee“	
Dipol	Coulombkräfte von Partialladungen	

4.5.1 Ionische Bindung

Voraussetzung: unterschiedliche Atome, leicht zu ionisieren

Ionisierung

- Anion und Kation ziehen sich an bis auf einen Abstand der Ionenmitelpunkte $r_0 = (r_{\text{Cl}^-} + r_{\text{Na}^+})$ (bis sich die Elektronenschalen gerade noch berühren)
- Dabei wird die Energie frei: $E_{\text{el}} = \int_{\infty}^{r_0} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$
- Bindungsenergie beträgt $\frac{3.4 \text{ eV}}{\text{Ionenpaar}}$ oder $\frac{328 \text{ kJ}}{\text{Mol}}$
- Coulombanziehung nicht gerichtet \rightarrow positive und negative Ionen lagern so dicht aneinander wie möglich \rightarrow Ionenkristall (nicht verformbar)
- Elektronen sind an den Ionen lokalisiert \rightarrow keine freien Elektronen vorhanden \rightarrow Isolator
- Differenz der Elektronegativität meist $\Delta E > 1.7$

4.5.2 Kovalente Bindung

Spinabsättigung der äußeren Elektronenschale durch gemeinsame Elektronen

- Valenz-Elektronen zwischen den Atomen lokalisiert
- keine Kugelsymmetrische Ladungsverteilung mehr im Atom
- Die Anzahl der Elektronen mit ungepaartem Spin zeigt an wie vielfache kovalente Bindungen eingegangen werden können
- treten bei und zwischen Elementen der IV. bis VII. Hauptgruppe auf
- gerichtete Bindungen \rightarrow mögliche Kristallstrukturen werden eingeschränkt
- Differenz der Elektronegativität meist $\Delta E < 1.7$
- kovalente gebundene Kristalle sind üblicherweise schlechte Leiter

4.5.3 Metallische Bindung

Sonderfall der kovalenten Bindung, bei der die Valenz-Elektronen nicht lokalisiert sind.

- Vorwiegend Elemente mit nur wenigen Außenelektronen
- freie Elektronen \rightarrow hohe elektrische Leitfähigkeit, hohe Wärmeleitfähigkeit
- Bindung nicht gerichtet \rightarrow hohe Packungsdichte
- Bindungen mit gleich- und ungleichartigen Metallen eingegangen werden
- Metallische Bindung ist schwächer als die ionische oder kovalente Bindung
- Bindungsstärke hängt von der Zahl der Leitungselektronen ab

4.5.4 Dipolbindung

- zwischen Molekülen mit permanentem Dipolmoment \rightarrow Moleküle mit positiver und negativer Ladung
- Dipole ordnen sich im Dipolfeld der Nachbaratome so an, dass möglichst geringe Abstand und durch die Coulombkräfte gebunden werden

4.5.5 Van-der-Waals-Bindung:

- Atome/Moleküle haben kein permanentes Dipolmoment
- Bindung zwischen Dipolen durch statistische Fluktuationen der Ladungsschwerpunkte.
- Sehr schwache Bindung

4.5.6 Wasserstoffbrückenbindung

Voraussetzung: Äußere Schale $>$ vier Elektronen, zwischen 2 Atomen.

- Bindungen über Wasserstoffbrücken der Form A-H-A
- Das H-Atom geht eine kovalente Bindung mit Atom der Sorte A ein und gibt sein Elektron ab. Das Proton bleibt fest an Reaktionspartner gebunden und bindet nun zusätzlich das andere negative Atom
- Bindungsenergie ist gering (0.1 eV)

4.6. Das Periodensystem (Siehe Seite 4)

Hauptquantenzahl	$n = 1, 2, \dots (= K, L, \dots - \text{Schale})$
Nebenquantenzahl	$l = 0, \dots, n - 1 (= s, p, d, f - \text{Zustände})$
Magnetische Quantenzahl	$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$
Spinquantenzahl	$s = \pm \frac{1}{2}$

Zu jedem Wert n gehören n^2 Zustände durch Variation von l und m . Außerdem ist jeweils ein Spin $s = \pm \frac{1}{2}$ möglich.

Entartungsgrad: Kombination der QZ mit gleicher Energie: $2n^2$

4.7. Atome - Hundse Regeln

Legen fest, nach welchem Schema jedes einzelne Orbital eines Atoms mit Elektronen besetzt wird.

- Die Schale wird so aufgefüllt, dass $|S| = |\sum s_i| = \max$
- Quantenzahl $|L| = |\sum m_i| = \max$
- Falls die Schale weniger als halbvoll ist:
 - Bahndrehimpuls und Spin antiparallel
 - Gesamtdrehimpuls $J: |J| = ||L| - |S||$
- Falls die Schale mehr als halbvoll ist:
 - Bahndrehimpuls und Spin parallel
 - Gesamtdrehimpuls $J: |J| = ||L| + |S||$

Merke: Volle Schalen liefern keinen Beitrag zu S, L und J

Pauli-Prinzip: Alle Elektronen unterscheiden sich in mindestens einer Quantenzahl

$n \backslash l$	0 = s	1 = p	2 = d
K 1s	$\uparrow\downarrow$		
L 2s 2p	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	
M 3s 3p 3d	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$
N 4s 4p 4d 4f	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$
O 5s 5p 5d 5f	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$
P 6s 6p 6d ...	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

4.8. Kunststoffe

Bestehen im wesentlichen aus C, H, N und O

Polymérisation: Reaktion von Monomeren mit Doppelbindungen zu makromolekularen Ketten

Polykondensation: Reaktion von Monomere mit reaktiven Endgruppen unter Abspaltung von z.B. H_2O oder HCL

Polyaddition: Vernetzung von Epoxiden mit Aminen oder Alkoholen ohne weiteres Reaktionsprodukt

4.9. Legierungen und Schmelze

5. Mechanische Eigenschaften von Festkörpern

a_0	Gitterkonstante ($\approx 10^{-10}$ m)
N	Anzahl Atome in EZ (Anzahl Atome geteilt durch die Zellen, die sich dieses Atom teilen)

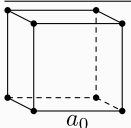
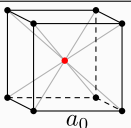
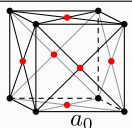
5.1. Dichte

Dichte: $\rho = \frac{dm}{dV} = \frac{mP}{\frac{4}{3}\pi r^3} = \frac{mN}{a_0^3} = \frac{1}{V} \frac{N}{N_A} A_r$

→ A_r in kg umrechnen!

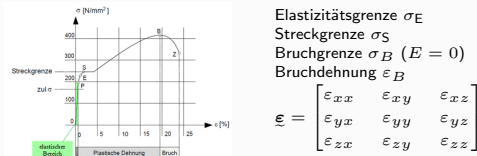
Packungsdichte: $P = \frac{\text{Volumen (Atome)}}{\text{Volumen (Einheitszelle)}} = \frac{N \frac{4}{3}\pi r^3}{V_{EZ}}$

5.2. Kristallstrukturen

SC/PK simple cubic	BCC/KRZ body-centered cubic	FCC/KFZ face-centered cubic
		
a_0	a_0	a_0
$P = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$	$P = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$	$P = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$
$r_A = \frac{\sqrt{4}}{4} a_0$	$r_A = \frac{\sqrt{3}}{4} a_0$	$r_A = \frac{\sqrt{2}}{4} a_0$
KZ = 6	KZ = 8	KZ = 12
HCP hexagonal	Tetraeder	Diamant
$P = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74$	$P = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0.34$	$P = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0.34$
$V_{\text{hex}} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 h$	$V_{\text{Tetra}} = \frac{\sqrt{2}}{12} a^3$	$V_{\text{Diamant}} = a_0^3$
KZ = 6, 12	KZ = 4	KZ = 4

KZ: Koordinationszahl (Zahl der nächsten Nachbarn)
Polymorphie: Ein Stoff hat mehrere Kristallgitterstrukturen.

5.3. Elastische Verformung



Dehnung $\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$ $\epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}$ $\epsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$

Scherdeformation

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}$$
$$\epsilon_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}$$
$$\epsilon_{xz} = \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}$$

Spannungen Normalspannungen $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ sind Zug bzw. Druckspannungen. Tangentialspannungen (Scherspannungen) σ_{xy}, σ_{yz}

Verallgemeinertes Hookesches Gesetz

$\underline{\sigma} = \underline{C} \underline{\epsilon}$ mit \underline{C} ist 81 Komponenten Elastizitätstensor 4. Stufe

Uniaxial: $\sigma_{xx} = \left(c - \frac{2\lambda^2}{c+\lambda}\right) \epsilon_{xx} = E \cdot \epsilon_{xx}$ $\epsilon_{xx} = \frac{\Delta l}{l}$

$|\underline{\sigma}| = \frac{|F|}{A} = \frac{EF}{cl} = E \cdot \frac{\Delta l}{l} = \epsilon E$

Hydrostatisch: ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = -p$)

Kompressionsmodul $K = -V_0 \frac{dp}{dV} \text{ isotrop} = \frac{E}{3-6\nu}$ Metall $\nu \approx 0.3$

Mikroskopische Ebene: Bindungskräfte zwischen Atomen

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

anziehend abstoßend

Zw. atomare Kraft $F(r) = -\frac{dV(r)}{dr}$ im GG-Fall $F(r = r_0) = 0$

Elastizitätsmodul $E := -\frac{1}{r} \frac{dF}{dr} = \sigma \frac{r_0}{\Delta r} = \frac{\sigma}{\epsilon} = n(m-n) \frac{\alpha}{r_0^{n+3}}$

Akustische Wellen in Festkörpern: $v_{||} = \sqrt{\frac{c}{\rho}}$ $v_{\perp} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$

Gitterschwingungen / Phononen: (Für kleine k)

$$\omega_1 = \sqrt{2c\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)} \quad \omega_2 = ka\sqrt{\frac{2c}{M_1 + M_2}}$$

6. Thermische Eigenschaften von Festkörpern

Druck	$[p]$	$\frac{N}{m^2}$
Seebeck-Ko.	$[S]$	$\frac{mV}{K}$
Wärmeleitf.	$[\lambda]$	$\frac{W}{m K}$
Wärmemenge	$[Q]$	$J = W s$
Wärmekapazität	$[C]$	$\frac{J}{K}$
Wärmeleitwert	$[G]$	$\frac{W}{K}$
Innere Energie	$[U]$	J
spez. Wärmekapazität	$[c_m]$	$\frac{J}{K kg}$

Wärmekapazität $C = \frac{\partial U}{\partial T} = cn = c_m \cdot m = c_m \rho V$
Innere Energie $U = 3Nk_B T$ für 1 mol: $\Delta U = \Delta T c_m$
Spezifische Wärme für hohe Temp. $c_m = 3R = 24.9 \frac{J}{mol K}$
Wärmemenge $Q = CT$
Wärmeleitwert $G = \lambda \frac{A}{l}$

Wärmestrom $\dot{Q} = -\lambda \text{grad}(T) A = C \dot{T} = G \Delta T$

Wärmestromdichte $w = \frac{\dot{Q}}{A} = \frac{\Delta Q}{A \Delta t} = nvc \Delta T = -\lambda \text{grad}(T)$

Phononen: $\lambda_{ph} = \frac{1}{3} C_{ph} v_{Schall} l_{ph}$

Elektronen $\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_{el} v_{el} l_{el}$

Mittlere freie Weglänge $l = v \tau$ $C_{el} \approx 6nk_B^2 \frac{T}{E_F}$

6.1. Thermische Ausdehnung

Ausdehnungskoeffizient $\alpha = \frac{\beta}{3} = \frac{\Delta l}{l} \cdot \frac{1}{\Delta T}$

Volumenänderung: $\frac{\Delta V}{V_0} = 3\alpha \Delta T = \beta \Delta T$

Grüneisenregel für Metalle: $\alpha \propto \frac{1}{T_S}$ Schmeltemperatur T_S

6.2. Ideales Gas

Ideales Gasgesetz: $pV = n_m RT = Nk_B T = N_v k_B T$

Kinetische Energie $E_{kin} = \frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} k_B T$

Teilchendichte: $N = \frac{n \cdot N_A}{V} = \frac{\rho N_A}{A_r} = \frac{p}{k_B T}$

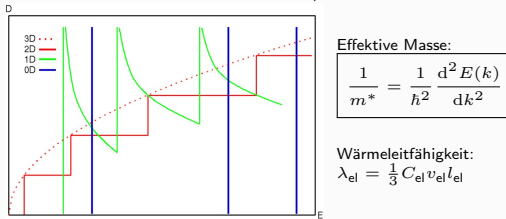
Stoffmenge: $n = \frac{N}{N_A} = \frac{m}{A_r}$ Druck $p = \frac{1}{3} N m \overline{v^2}$

Gaskonstante: $R = k_B N_A = 8,3144 \frac{J}{mol K}$

6.3. Freies Elektronengas

Zustandsdichte 3D: $D(E) = \frac{1}{V} \frac{dZ}{dE} = \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{E}}{2\pi^2}$

2D: $D = \frac{m^*}{\pi h^2 a}$ 1D: $D = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi h a^2} \frac{1}{\sqrt{E - E_{x,j} - E_{z,j}}}$



Energieeigenwerte: $E_{nml} = \frac{h^2 k^2}{2m_e^*} = \frac{h^2 \pi^2}{2m_e^* L^2} (n^2 + m^2 + l^2)$

Wiedemann-Franzsches Gesetz: $\frac{\lambda}{\sigma_{el} T} = L := \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} = 2.44 \times 10^{-8} V^2 / K^2$ (L : Lorentzzahl)

7. Elektrische Eigenschaften von Festkörpern

Spez. Wid. $[\rho] = \Omega m$ Leitfäh. $[\sigma] = \frac{1}{\Omega m}$ $[\mu] = \frac{m^2}{Vs}$

7.1. Ladungstransport

Je kleiner a_0 , desto flacher die Potentialbarrieren zwischen den Atomen, desto breiter werden die Energiebänder.

Freies Teilchen	Eingesperstes Teilchen
$v_{gr} = \frac{h}{m} k$	$\frac{1}{h} \frac{dE(k)}{dk}$
$v_{ph} = \frac{E}{p}$	

7.2. Widerstand

$R = \rho \frac{L}{A} = \frac{1}{\sigma} \frac{L}{A}$

Fermiradius $k_F = \frac{\sqrt{2mE_F}}{h}$

$\sigma = \frac{-en \Delta p_x}{m^* E_x} = n \frac{e^2}{m^*} \cdot \tau$

Elektronen verbinden sich zu Cooper-Paaren

7.3. Elektrochemische Spannung, Korrosion

kathodisch	→ edel	→ positives Potential	Das unedlere Metall wird zuerst in Wasser mit Efeld aufgelöst
anodisch	→ unedel	→ negatives Potential	

7.4. Piezo-Effekt

Mechanische Verformung erzeugt elektrische Spannung in Kristallen.

$\underline{D} = -k_p \frac{F}{AE}$ $\sigma_{xx} = c \frac{\Delta l}{l} + k_p E_x$

7.5. Pyroelektrizität

$\Delta P = \lambda \Delta T$

8. Thermoelektrische Effekte

elektrische Leitfähigkeit	$[\sigma]$	$\frac{S}{m}$
Wärmeleitfähigkeit	$[\lambda]$	$\frac{W}{m K}$
Seebeck-Koeffizient	$[S]$	$\frac{V}{K}$

Durch thermische Teilchenbewegung entsteht eine Diffusionsstromdichte:

$j_{diff} = -e(n_1 v_{1x} - n_2 v_{2x}) = e \frac{d}{dT} (D_n \cdot n) \frac{dT}{dx}$

Diffusionskoeffizient $D_n = v_x l_x = v_x^2 \tau$, Fermigeschw. $v_x^2 = \frac{1}{3} v_F^2$
Effektive Teilchengeschw. $\frac{1}{2} m^* v^2 = \frac{1}{2} k_B T$

Seebeck Koeffizient:

$S := -\frac{e}{\sigma} \frac{d}{dT} (D_n \cdot n)$ $\Delta U = S \cdot \Delta T$

8.1. Peltier-Effekt

Wärmestromdichte $w = \Pi \cdot j$ Peltierkonstante: $\Pi = S \cdot T$

Gütezahl $Z = |\Delta S|^2 \cdot \frac{\sigma}{\lambda}$ mit Gütefaktor $\Delta S = \Pi_1 - \Pi_2$

8.2. Supraleitung

Starke Abnahme des Widerstands um Faktor $\leq 10^{-14}$ bei einer Sprungtemperatur T_c
Kritisches Magnetisches Feld: $H_c = H_0(1 - (\frac{T}{T_c})^2) \rightarrow$ siehe Tabelle

Skript S.107

Londongl. $\underline{E} = \lambda_L \dot{j}_s$ $\underline{B} = -\lambda_L \text{rot } j_s$

Londonsche Eindringtiefe $\lambda_L = \sqrt{\frac{\lambda_L}{\mu_0}}$ $\lambda_L = \frac{m}{n_s e^2}$

9. Halbleiter

Valenzbandenergie	E_V
Leitungsbandenergie	E_L
Bandlückenenergie	$E_G = E_L - E_V$
Fermi-Energie	$E_F = k_B T_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3}$
Fermi-Temperatur	$T_F = \frac{\hbar^2}{2m_e k_B} (3\pi^2 n)^{2/3}$

Fermi-Verteilung für Elektronen:

$$f_e(E, T) = 1 / \left(1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right)$$

$f_h(E, T) = 1 - f_e(E, T)$
 E_F : Energieniveau mit Besetzungswahrsch. 0.5 im thermischen Gleichgewicht. Bei $T = 0\text{ K}$ entspricht E_F dem maximalen Energiezustand eines Elektrons.

$$E_F = \frac{E_V + E_L}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left(\frac{N_V^*}{N_L^*} \right)$$

$$\sigma = n_i e \mu_n + p_i e \mu_p$$

$$\underline{v} = \pm \mu \underline{E}$$

mit $np = n_i^2$ gilt: $0 = n^2 e \mu_n - \sigma n + n_i^2 e \mu_p$

$$m^* \cdot \mu = e \cdot \tau$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{ph}}$$

Stromdichte $\underline{j} = -ne \underline{v}_n +$

$$pe \underline{v}_p$$

9.1. Effektive Masse

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E(k) / dk^2} \quad m^* = \sqrt[3]{m_{||}^* m_{\perp}^{*2}}$$

$$m_h^* = \left(m_{hl}^{*2} + m_{hh}^{*2} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Fermi-Verteilung	f_e	$[1]$
Elektronen/Löcherdichte	n, p	$[\frac{1}{\text{cm}^3}]$
Zustandsdichte	D_L / V	$[\frac{1}{\text{cm}^3 \text{ eV}}]$
effkt. Zustandsdichte Leitungsband	N_L^*	$[\frac{1}{\text{m}^3}]$
effkt. Zustandsdichte Valenzband	N_V^*	$[\frac{1}{\text{m}^3}]$
Intrinsische Ladungsträgerdichte	$n_i = \sqrt{N_L^* N_V^*} e^{-\frac{E_G}{2k_B T}}$	

Leitungsband	Valenzband
Elektronendichte	Löcherdichte
$n = \int_{E_L}^{\infty} D_L \cdot f_e dE$	$p = \int_{-\infty}^{E_V} D_V \cdot f_h dE$
Zustandsdichte	Zustandsdichte
$D_L = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_L}$	$D_V = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_V - E}$
Effektive Zustandsdichte	Effektive Zustandsdichte
$N_L^* = 2 \left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$	$N_V^* = 2 \left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$
$n = N_L^* \exp \left(-\frac{E_L - E_F}{k_B T} \right)$	$p = N_V^* \exp \left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T} \right)$

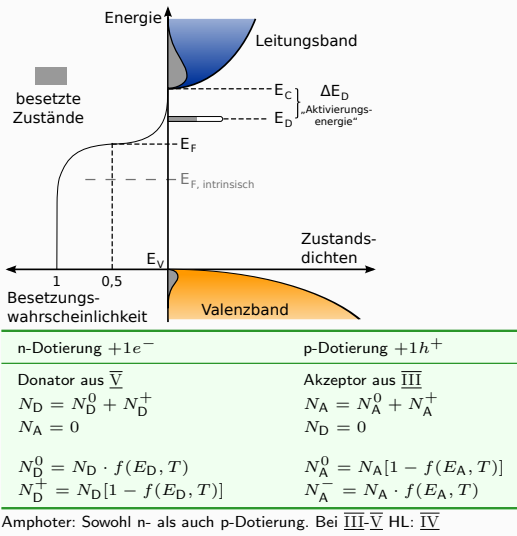
Boltzmann-Näherung: $f_e(E, T) \approx \exp \left(-\frac{E - E_F}{k_B T} \right)$

Damit gilt: $n \cdot p = n_i^2 = N_L^* \cdot N_V^* \cdot e^{-\frac{E_G}{k_B T}}$

Dotierungs-Bilanzgleichung: $n + N_A^- = p + N_D^+$

Leitfähigkeit: $\sigma = n \cdot e \cdot \mu_n + p \cdot e \cdot \mu_p$

9.2. Dotierung von Halbleitern



9.3. Temperaturnäherungen für dotierte HL

niedrige T: $n \approx \exp \left(-\frac{E_L - E_D}{2k_B T} \right)$

mittlere T: $n \approx N_D = \text{const.}$

hohe T: $n \approx n_i$

Trick: $\sqrt{N_L^* N_V^*} \sim T^{\frac{3}{2}}$

9.4. Ausgleichsvorgänge

Generationsrate: $G = G_T + G_L$ (Thermisch, Optisch)

Rekombinationsrate: $R = r(T)np$

9.5. Diffusionsströme

$j_{n/p}^{\text{diff}} = e D_{n/p} \frac{dn/p}{dx}$ Einstein Beziehung: $D_{n/p} = \frac{k_B T}{e} \mu_{n/p}$

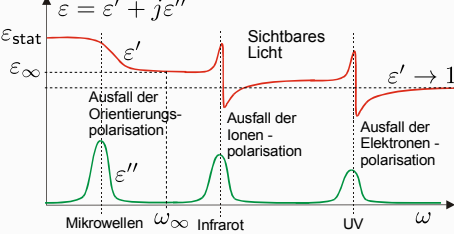
Diffusionslänge $L_{n/p} = \sqrt{D_{n/p} \tau_{n/p}}$ Debye-Länge $L_D = \sqrt{D \tau_R}$

10. Dielektrische Eigenschaften

Dielekt. Verschiebung $\underline{D} = \epsilon_r \epsilon_0 \underline{E} = \epsilon_0 \underline{E} (1 + \chi^{\text{el}}) = \epsilon_0 \underline{E} + \underline{P}$

Komplexe Permittivität: $\epsilon_r = \epsilon_r' + i\epsilon_r'' = |\epsilon_r| e^{i\delta}$

$\epsilon'(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2}$ $\epsilon''(\omega) = \frac{\omega \tau (\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_{\infty})}{1 + \omega^2 \tau^2}$



Polarisation $[P] = \frac{A \cdot s}{m^2}$ Polarisierbarkeit $[\alpha] = m^3$

Äußeres Feld $\underline{E}_{\text{ext}}$ Induziertes Gegenfeld $\underline{E}_{\text{in}}$

10.1. Polarisation (S. 144)

Dipolmoment $\underline{p} = \underline{s} \cdot q = \epsilon_0 \alpha \underline{E}_{\text{ext}}$ Polarisierung $\underline{P} = N \underline{p}$

Im Kristallgitter $N = \frac{1}{8R^3}$

Claudius-Mosotti-Gleichung: $\frac{\alpha N_V}{3} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \Rightarrow \epsilon_r = 1 + \frac{\alpha N}{1 - \frac{\alpha N}{3}}$

Suszeptibilität $\chi^{\text{el}} = \epsilon_r - 1 = \frac{P}{\epsilon_0 E} = \frac{P_{\text{in}}}{\epsilon_0 E_{\text{in}}} = \frac{\alpha N}{1 - \frac{\alpha N}{3}}$

Elektronische Polarisation

Elektronenhülle verschiebt sich durch äußeres Feld

$\underline{p} = \epsilon_0 \alpha \underline{E}_{\text{ext}}$ Polarisierbarkeit $\alpha = 4\pi R^3$

Ionische Polarisation

Ionen werden durch äußeres Feld verschoben

$p = q \Delta r_{\text{Atom}} = \epsilon_0 \alpha E \quad \alpha = \frac{q^2}{2\epsilon_0}$

Orientierungspolarisation

Permanente Dipole werden durch E-Feld ausgerichtet. $\nu = \frac{Ep}{k_B T}$ Energie eines Dipols: $U(\theta) = -\underline{p} \underline{E} = -pE \cdot \cos(\theta)$

Energieverteilung $w(\theta) = \exp \left(-\frac{U(\theta)}{k_B T} \right)$

$\cos(\theta) = \frac{w(\theta) \cos(\theta)}{w(\theta)}$

11. Magnetische Eigenschaften

Magnetische Flussdichte	\underline{B}	$[T = \frac{Vs}{m^2}]$
Magnetische Feldstärke	$\underline{H} = \underline{M}$	$[\frac{A}{m}]$
Bahndrehimpuls	\underline{L}	$[V A s^2]$
Magnetisches Moment	\underline{m}	$[A m^2]$
magn. Quantenzahl	m od. M	
Spinquantenzahl	S	
gyromagnetisches Verhältnis	g	
Gesamtdrehimpuls	\underline{J}	$[T = \frac{Vs}{m^2}]$
Magnetische Suszeptibilität	χ^m	

Bohrsches Magneton: $\mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ A m}^2$

	Dielektrika	Magnetika
Polarisation	$\underline{P} = \epsilon_0 \chi \underline{E}_{\text{netto}}$	$\underline{J} = \mu_0 \underline{M}$
Flussdichte	$\underline{D} = \epsilon_0 \underline{E}_{\text{netto}} + \underline{P}$	$\underline{B} = \mu_0 \underline{H} + \underline{J}$

Gesamtdrehimpuls $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$

permanentes mag. Dipolmoment $M_z = g(-\mu_B) J$

Magnetische Suszeptibilität $\chi^m = \mu_r - 1 = \frac{1}{\mu_0} \frac{J}{H} = \frac{M}{H}$

Magnetische Flussdichte $\underline{B} = \mu_r \mu_0 \underline{H} = \mu_0 \underline{H} + \underline{J} = \mu_0 (\underline{H} + \underline{M})$

Elementare Dipole:

Mechanischer Drehimpuls $\underline{L} = \underline{r} \times m_0 \underline{v} = m_0 r^2 \underline{\omega}$

Magnetisches Moment $\underline{m} = I \underline{A} = -\frac{1}{2} e r^2 \underline{\omega} = -\frac{e}{2m_0} \underline{L}$

Gyromagn. Verhältnis: $g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

Spezial: $S = 0 \Rightarrow g = 1$ (unreal) $L = 0 \Rightarrow g = 2$

Diamagnetismus ($\mu_r < 1$)

Wirkung der Lorentzkraft. Immer aktiv, wird aber von Para- und Ferro-mag. überlagert. Temperaturunabhängig.

$\chi_{\text{dia}}^m = \frac{M}{H} = -\frac{N Z^* e^2 r^2 \mu_0}{6 m_e}$

Paramagnetismus ($\mu_r > 1$)

Material besitzt magnetische Dipolmomente. (Unvollständige Elektronenschalen) dominiert oberhalb der Curie-Temperatur

Curiesches Gesetz: $\chi_{\text{para}}^m = \frac{N \mu_0 g^2 J(J+1) \mu_B^2}{3 k_B T}$

Leitungselektronen ($\mu_r \gg 1$)

$\chi_{\text{para,le}}^m = \frac{3}{2} \frac{n \mu_0 \mu_B^2}{k_B T_F}$ $\chi_{\text{dia,le}}^m = -\frac{1}{3} \chi_{\text{para,le}}^m$ $\chi_{\text{le}}^m = \chi_{\text{para,le}}^m + \chi_{\text{dia,le}}^m = \frac{n \mu_0 \mu_B^2}{k_B T_F}$ (mit $n = \frac{\text{freie } e}{V \text{ ez}}$)

Ferromagnetismus

($\mu_r \gg 1$) gekoppelte, parallele Ausrichtung der Momente. Wirkung nur bis Curie-Temp.

$E_A = -\mu_0 \int_{V_W} \underline{H}_G \underline{H}_A dV$

Curie-Weiss-Gesetz: $\chi^m = \frac{C}{T - \Theta}$ mit $\Theta = \frac{E_F}{k_B}$

Hystereseverluste $w_v = \oint B dH$

Antimagnetismus

gekoppelte, antiparallele Ausrichtung.

Ferimagnetismus

In eine Richtung stärkere Magnetisierung.

$\underline{m} = I \underline{A}$ ist antiparallel zu \underline{L}

12. Skizzen und Tabellen

12.1. Skizzen

Name	Seite
molare spezifische Wärme	70
Thermoelement	104
Peltier-Effekt	105
Peltier-Element	105
Leitfähigkeit/Supraleitung	106
Wärmeleitfähigkeit	75
Temp. dot. Halbleiter	122
Berthe-Slater-Kurve	164
Magnetische Sättigung	167
Magnetisierungskurve	171
Legierungssystem ohne Mischlücke	42
Legierungssystem ohne Mischkristallbildung	44
Legierungssystem mit Mischlücke	45
Legierungssystem mit intermetallischen Verbindungen	46
Abstandsabhängigkeit interatomarer Kräfte	59
Spannungs/Dehnungsdiagramm	63
Festigkeit bei wechselnder Belastung	67
Dotierkonzentrationen	126
Hystereskurve eines Ferroelettrikums	149

12.2. Tabellen / Werte

Name	Seite
Wärmeleitfähigkeit	75
Thermopaare	104
Kritische Feldstärke Supraleiter	107
Orbitalebestetzung	23
Elektronenhülle	24

<http://www.pse-online.de>

Relative Atommasse [Massenzahl des langlebigsten Isotops]	243,0614 [Rn]5f ⁷ 7s ²
Ordnungszahl	95 Am 3,4,5,6
Schmelzpunkt [°C]	994
Siedepunkt [°C]	2607
Elementname	Americium

- Oxidationszahlen (häufigste)
- Elektronegativität
- Erste Ionisierungsenergie [eV]

Tc = kein stabiles Isotop bekannt
N = gasförmig
Br = flüssig (bei 20 °C)
Am = fest

[illegible]

138,9055 [Xe]5d ⁵ 6s ²		140,116 [Xe]4f ⁶ 6s ²		140,90765 [Xe]4f ⁶ 6s ²		144,24 [Xe]4f ⁶ 6s ²		[145] [Xe]4f ⁶ 6s ²		150,36 [Xe]4f ⁶ 6s ²		151,964 [Xe]4f ⁶ 6s ²		157,25 [Xe]4f ⁵ 5d ¹ 6s ²		158,92534 [Xe]4f ⁶ 6s ²		162,50 [Xe]4f ¹⁰ 6s ²		164,93032 [Xe]4f ¹¹ 6s ²		167,26 [Xe]4f ¹² 6s ²		168,93421 [Xe]4f ¹³ 6s ²		173,04 [Xe]4f ¹⁴ 6s ²		174,967 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	
57La		58Ce		59Pr		60Nd		61 <i>Pm</i>		62Sm		63Eu		64Gd		65Tb		66Dy		67Ho		68Er		69Tm		70Yb		71Lu	
3		3,4		3,4		3		3		2,3		2,3		3		3,4		3		3		3		2,3		2,3		3	
920 3454 Lanthan		798 3257 Cer		1.1 5.6 931 3212 Praseodym		1.1 5.4 1010 3127 Neodym		1.1 5.5 1080 2730 Promethium		1.1 5.6 1072 1778 Samarium		1.1 5.6 822 1597 Europium		1.1 6.1 1311 3233 Gadolinium		1.1 5.9 1360 2730 Terbium		1.1 6.0 1406 2533 Dysprosium		1.1 6.1 1470 2720 Holmium		1.1 6.1 1522 2510 Erbium		1.1 6.2 1545 2720 Thulium		1.1 6.3 824 1193 Ytterbium		1.1 5.4 1656 3315 Lutetium	
[227] [Rn]6d ⁷ 7s ²		[232] [Rn]6d ⁷ 7s ²		[231] [Rn]5f ⁶ 6d ¹ 7s ²		[238] [Rn]5f ⁶ 6d ¹ 7s ²		[237] [Rn]5f ⁶ 6d ¹ 7s ²		[244] [Rn]5f ⁷ 7s ²		[243] [Rn]5f ⁷ 7s ²		[247] [Rn]5f ⁶ 6d ¹ 7s ²		[247] [Rn]5f ⁷ 7s ²		[251] [Rn]5f ¹⁰ 7s ²		[252] [Rn]5f ¹¹ 7s ²		[257] [Rn]5f ¹² 7s ²		[258] [Rn]5f ¹³ 7s ²		[259] [Rn]5f ¹⁴ 7s ²		[262] [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²	
89 <i>Ac</i>		90 <i>Th</i>		91 <i>Pa</i>		92 <i>U</i>		93 <i>Np</i>		94 <i>Pu</i>		95 <i>Am</i>		96 <i>Cm</i>		97 <i>Bk</i>		98 <i>Cf</i>		99 <i>Es</i>		100 <i>Fm</i>		101 <i>Md</i>		102 <i>No</i>		103 <i>Lr</i>	
3		4		4,5		3,4,5,6		3,4,5,6		3,4,5,6		3,4,5,6		3,4		3,4		3,4		3		3		3		2,3		3	
1047 3197 Actinium		1750 4787 Thorium		1.1 7.0 1554 4030 Protactinium		1.1 - 1132 3818 Uran		1.2 6.1 640 3902 Neptunium		1.2 5.8 641 3327 Plutonium		1.2 5.8 994 2607 Americium		~1.2 6.0 1340 3100 Curium		~1.2 986 Berkelium		~1.2 900 Californium		~1.2 860 Einsteinium		~1.2 Fermium		~1.2 Mendelevium		~1.2 Nobelium		~1.2 Lawrencium	