

1 Molekülanregungen

$$E = h\nu \qquad \nu = \frac{c}{\lambda}$$
$$E = h \cdot \frac{1}{\lambda}$$
$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

2-atomiges Molekül als starrer Rotator

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{J^2}{2I}$$
$$I = M_1 R_1^2 + M_2 R_2^2 = \left(\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \right) R^2$$
$$J^2 = J(J+1) \hbar^2; \qquad |J| = I \omega$$
$$E_{rot} = \frac{J(J+1) \hbar^2}{2I}$$
$$\nu_{J \rightarrow J+1} = \frac{\hbar}{2\pi I} (J+1)$$
$$\frac{N_J}{N_0} = (J+1) \exp\left(\frac{-E_J}{k_B T}\right)$$

Verbindungsanregungen

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$
$$\omega = \sqrt{\frac{\omega}{M}}$$
$$\Delta v = \pm 1$$

kombinierte Spektren

$$E_{v,J} = E_v + E_J$$
$$E_{v,J} = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + J(J+1) \frac{\hbar^2}{2I}$$

- betrachte: $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$
- $\Delta J = -1$ P-Zweig
- $\Delta J = 0$ Q-Zweig (meist verboten)
- $\Delta J = +1$ R-Zweig

Auswahlregel (2-atomige Moleküle)

$$M_{ij} = \int \psi_i^* p \psi_j d\tau_{el} d\tau_N$$
$$p = -e \sum_i r_i + Z_1 e R_1 + Z_2 e R_2 = p_{el} + p_N$$
$$\psi(r, R) = \chi_N(R) + \varphi(r) \rightarrow$$
$$M_{ij} = \int \chi_i^* \left[\int \varphi_i^* p_{el} \varphi_j d\tau_{el} \right] \chi_j d\tau_N +$$
$$= \int \chi_i^* p_N \left[\int \varphi_i^* \varphi_j d\tau_{el} \right] \chi_j d\tau_N$$

$$(|i\rangle = |j\rangle) \rightarrow (\varphi_i = \varphi_j)$$
$$\rightarrow M_{ij} = \int \chi_i^* p_N \chi_j d\tau_N$$
$$(|i\rangle \neq |j\rangle)$$
$$\rightarrow M_{ij} = \int \chi_i^* \left[\int \varphi_i^* p_{el} \varphi_j d\tau_{el} \right] \chi_j d\tau_N$$

2 Bindung im Festkörper Lennard-Jones Potential

$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} \text{ oder } \varphi(r) = A' e^{-r/\rho} \text{ Abstoßung}$$
$$\varphi(r) = -\frac{B}{r^6} \text{ Van-der-Waals}$$
$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \equiv 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Bindungsenergie von Edelmetallen

$$U_B = \frac{1}{2} \sum_m \varphi_m = \frac{N}{2} \varphi_m$$
$$= 2N\epsilon \sum_{n \neq m} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^6 \right]$$
$$r_{mn} = p_{mn} R, \text{ R: Abstand direkte Nachbarn}$$
$$p_{mn}: \text{ z.B fcc-Kristall: } = 1, \sqrt{2}, 2, \dots$$
$$0 = \left. \frac{dU_B}{dR} \right|_{R_0} \Rightarrow R_0 = 1,0902\sigma$$
$$\rightarrow U_B(R_0) = -8,61 N \epsilon$$

Ionenbindung

$$\varphi_m = \sum_{n \neq m} \left[\frac{A}{r_{mn}^{12}} \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{mn}} \right]$$
$$\approx z \frac{A}{R^{12}} - \sum_{n \neq m} \frac{\pm e^2}{4\pi\epsilon_0 p_{mn} R} = z \frac{A}{R^{12}} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$
$$\alpha \equiv \sum_{n \neq m} \frac{\pm 1}{p_{mn}}$$

$$U_B = N \cdot \varphi_m \stackrel{\text{Edelgaskr.}}{=} -\frac{N \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{12} \right)$$

Kovalente Bindung (H₂⁺)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

LCAO-Methode:

$$\psi = c_1 \varphi_a + c_2 \varphi_b$$

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} = \frac{c_1^2 H_{aa} + c_2^2 H_{bb} + 2c_1 c_2 H_{ab}}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S}$$
$$H_{ij} = \int \psi_i^* H \psi_j dV, \quad S = \int \psi_a^* \psi_b dV$$
$$E_{s;a} = \frac{H_{aa} \pm H_{ab}}{1 \pm S} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

Metallische Bindung

$$r_s \text{ definiert über: } \frac{V}{N} = \frac{4}{3} \pi r_s^3$$

$$\frac{E_{coul}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{9}{10 r_s}$$
$$\frac{E_{kin}}{N} = \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_s^2}$$
$$\frac{E_{aus}}{N} = -\frac{3e^2}{16\pi^2\epsilon_0} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$$
$$\frac{E_B}{N} = \left[-\frac{24.35}{(r_s/a_0)} + \frac{30.1}{(r_s/a_0)^2} - \frac{12.5}{(r_s/a_0)} \right] \frac{eV}{Atom}$$
$$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$$

TODO: Pseudo-Potential

3 Struktur der Festkörper Elementarzellen

- Primitiv: Je ein Gitterpunkt
- nicht-primitiv: 2/4/...
- Wigner-Seitz-Zelle: Gitterpunkt im Mittelpunkt. schließt Raum ein der näher als jedem anderen Punkt ist.

Bravais-Gitter

4 Strukturbestimmung Reziprokes-Gitter

$$a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{V_Z} (a_2 \times a_3)$$

$$b_2 = \frac{2\pi}{V_Z} (a_3 \times a_1)$$

$$b_3 = \frac{2\pi}{V_Z} (a_1 \times a_2)$$

Bragg-Bedingung

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin(\Theta); \quad \lambda n = 2d \sin(\Theta)$$

Strukturfaktor

$$r_\alpha = u_\alpha a_1 + v_\alpha a_2 + w_\alpha a_3$$
$$S_{hkl} = \sum_\alpha f_\alpha(G) e^{-2\pi i(hu_\alpha + kv_\alpha + lw_\alpha)}$$

kubisch primitiv, zweiatomige Basis CsCl

$$S_{hkl} = \begin{cases} f_{Cs} + f_{Cl} \pi & h+k+l \text{ gerade} \\ f_{Cs} - f_{Cl} & h+k+l \text{ ungerade} \end{cases}$$

kubisch raumzentriert, einfache Basis

$$S_{hkl} = \begin{cases} 2f\pi & h+k+l \text{ gerade} \\ 0 & h+k+l \text{ ungerade} \end{cases}$$

kubisch flächenzentriert, einfache Basis

$$S_{hkl} = \begin{cases} 4f\pi & \text{alle gerade / ungerade} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Atom-Strukturfaktor

$$f_\alpha(K) = \int_{V_\alpha} \rho_\alpha(r) e^{iK \cdot r} dV$$

Neutronen-Streuung $K \cdot r \ll 1$:

$$f_\alpha \approx \int_0^{R_\alpha} 4\pi r^2 \rho(r) dr = Z$$

Röntgen-Streuung:

$$\rho(r) = |\Psi_0(r)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

$$f_H(K) = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{1}{2} a_0 K \right)^2 \right]^2}$$

5 Strukturelle Defekte

6 Gitterdynamik

7 Anharmonische Gittereigenschaften

8 Elektronen im Festkörper

9 Elektronische Transporteigen-schaften

10 Halbleiter

11 Supraleitung

12 Sonstiges

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$