

### 1    Bindung im Festkörper

#### Lennard-Jones Potential

$\varphi(r) = \frac{\mathcal{A}}{r^{12}}$  oder  $\varphi(r) = A'e^{-r/\rho}$  Abstoßung

$\varphi(r) = -\frac{\mathcal{B}}{r^6}$  Van-der-Waals

$\varphi(r) = \frac{\mathcal{A}}{r^{12}} - \frac{\mathcal{B}}{r^6} \equiv 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$

#### Bindungsenergie von Edeltkristallen

$U_B = \frac{1}{2} \sum_m \varphi_m = \frac{N}{2} \varphi_m$

$= 2N\epsilon \sum_{n\neq m} \left[ \left(\frac{\sigma}{r_{mn}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{mn}}\right)^6 \right]$

$r_{mn} = p_{mn}R$ , R: Abstand direkte Nachbarn

$p_{mn}$ : z.B fcc-Kristall:  $= 1, \sqrt{2}, 2, \dots$

$0 = \left. \frac{dU_B}{dR} \right|_{R_0} \Rightarrow R_0 = 1,0902\sigma$

$\rightarrow U_B(R_0) = -8,61N\epsilon$

#### Ionenbindung

$\varphi_m = \sum_{n\neq m} \left[ \frac{\mathcal{A}}{r_{mn}^{12}} \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{mn}} \right]$

$\approx z \frac{\mathcal{A}}{R^{12}} - \sum_{n\neq m} \frac{\pm e^2}{4\pi\epsilon_0 p_{mn}R} = z \frac{\mathcal{A}}{R^{12}} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$

$\alpha \equiv \sum_{n\neq m} \frac{\pm 1}{p_{mn}}$

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

#### Kovalente Bindung ( $H_2^+$ )

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

LCAO-Methode:

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

$E = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} = \frac{c_1^2 H_{aa} + c_2^2 H_{bb} + 2c_1 c_2 H_{ab}}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S}$

$H_{ij} = \int \psi_i^* H \psi_j dV, S = \int \psi_a^* \psi_b dV$

$E_{s;a} = \frac{H_{aa} \pm H_{ab}}{1 \pm S} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$

#### Metallische Bindung

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

$\frac{E_{coul}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{9}{10r_s}$

$\frac{E_{kin}}{N} = \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_s^2}$

$\frac{E_{aus}}{N} = -\frac{3e^2}{16\pi^2\epsilon_0} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$

$\frac{E_B}{N} = \left[ -\frac{24.35}{(r_s/a_0)} + \frac{30.1}{(r_s/a_0)^2} - \frac{12.5}{(r_s/a_0)} \right] \frac{eV}{Atom}$

$a_0 = 0.529\text{\AA}$

#### TODO: Pseudo-Potential

### 2    Struktur der Festkörper

#### Elementarzellen

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

#### Bravais-Gitter

### 3    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

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

#### 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 primitv, 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

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

### 4    Strukturelle Defekte

### 5    Gitterdynamik

### 6    Anharmonische Gittereigenschaften

### 7    Elektronen im Festkörper

### 8    Elektronische Transporteigen-schaften

### 9    Halbleiter

### 10    Supraleitung

### 11    Sonstiges

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