

1 Bindung im Festkörper

Lennard-Jones Potential

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

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

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

Bindungsenergie von Edelmetallen

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

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

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

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

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

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

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 (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

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

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

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

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

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

$$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$$

TODO: Pseudo-Potential

2 Struktur der Festkörper

Elementarzellen

- 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

3 Strukturbestimmung

4 Strukturelle Defekte

5 Gitterdynamik

6 Anharmonische Gittereigenschaften

7 Elektronen im Festkörper

8 Elektronische Transporteigenschaften

9 Halbleiter

10 Supraleitung

11 Sonstiges