

1 Molekülanregungen

$E = h\nu$ $\nu = \frac{c}{\lambda}$

$E = h \cdot \frac{1}{\lambda}$

$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$

2-atomiges Molekül als starrer Rotator

$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{J^2}{2I}$

$I = M_1 R_1^2 + M_2 R_2^2 = \left(\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \right) R^2$

$J^2 = J(J+1)\hbar^2; \quad |J| = I\omega$

$E_{rot} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$

$\nu_{J \rightarrow J+1} = \frac{\hbar}{2\pi I} (J+1)$

$\frac{N_J}{N_0} = (J+1) \exp\left(\frac{-E_J}{k_B T}\right)$

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

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

$\varphi(r) = -\frac{B}{r^6}$ 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

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

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

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

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

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

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

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 (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:

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

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

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

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

Metallische Bindung

r_s 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:

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

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

An was wird gestreut

- Schale: γ, e, a
 - Kern: n
 - Volumen: γ, n
 - Oberfläche: e, a und Ionen
 - Kohärente Streuung: alle Atome strahlen mit gleicher Phase ab
 - Inkohärente Streuung: unterschiedliche Phasenverschiebung, keine Strukturbestimmung möglich
 - Elastische Streuung: Ortsinformation \rightarrow Strukturbestimmung
 - Inelastische Streuung: Dynamik, Phononen, Zusammenstellung

5 Strukturelle Defekte

Leerstellendiffusion

$J_{diff} = -D \nabla n_L; \quad n_L = \frac{N_L}{V}$

$D = \frac{1}{6} a^2 \nu \quad \nu$: Sprungfrequenz

$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_D}{k_B T}\right)$

$L = \sqrt{6Dt}$

6 Gitterdynamik

Lineare Kette

$F_s = \sum_n c_n (u_{s+n} - u_s)$

$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_n c_n (u_{s+n} - u_s)$

$u_{s+n} = U \exp(-i(\omega t - q(s+n)a))$

Nächste Nachbar Wechselwirkung:

$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_n c(u_{s+1} - 2u_s + u_{s-1})$

$U_{s\pm 1} = U \exp(-i(\omega t - q(s\pm 1)a))$

$\omega = 2\sqrt{\frac{c}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$

Γ -Punkt

$\lambda \gg a : qa \rightarrow 0 \quad \sin(x) \approx x :$

$\omega = \sqrt{\frac{a^2 c}{M}} q = v q$

$v_p = \frac{\omega}{q} \approx \frac{\partial \omega}{\partial q} = v_g$

Zweiatomige Basis

$\omega_{a,o}^2 = \frac{C}{\mu} \mp C \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$

$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}$

p-atomige Basis

- 3 akustische Zweige (1xL, 2xT)

- 3(p-1) optische Zweige

7 Anharmonische Gittereigenschaften

8 Elektronen im Festkörper

9 Elektronische Eigenschaften

Transporteigen-

10 Halbleiter

11 Supraleitung

12 Sonstiges

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