

Teil I.

Festkörperphysik

Literatur

- Hunklinger: Festkörperphysik
- Kittel: Einführung in die Festkörperphysik
- N. W. Ashcroft, N. D. Merim: Festkörperphysik
- H. Ibach, H Luth: Festkörperphysik
- M. P. Marder: Condensed Matter Physics
- A. A. Abrikosov: Fundamentals of the Theory of Metals

Inhaltsverzeichnis

I. Festkörperphysik	i
1. Bindungskräfte	1
1.1. Klassen von Festkörpern	1
1.2. Fundamentale Konzepte	2
1.3. 5 Bindungstypen	2
1.4. zweite Periode	3
1.5. Van-der-Waals-Bindung	3
2. Kovalente Bindungen	4
2.1. Kristalle: C (Diamant), Si, Ge	5
2.2. Metallische Bindung	5
2.3. Wasserstoffbrückenbindung	5
3. Struktur der Kristalle	6

4. Struktur der Festkörper	8
5. Strukturbestimmung und reziproke Gitter	8
6. Strukturelle Defekte	8
7. Gitterdynamik	8
8. Elastische Eigenschaften, Phononen	8
9. Isolatoren	8
10. Fermi-Gas freier Elektronen	8
11. Energiebänder und Fermiflächen/-surfaces	8
12. Dynamik von Kristallelektronen	8
13. Halbleiter	8
14. Magnetismus	8
15. Supraleitung	8

1. Bindungskräfte

- 1) Bindung in Festkörpern
 - (i) Bindungstypen
 - (ii) Bindungsenergie
- 2) Fluktuationsbindung
 - (i) Van-der-Waals-Kräfte
 - (ii) Lennard-Jones-Potential
 - (iii) Edelgaskristalle
- 3) Ionenbindung
 - (i) Bindungsenergie
 - (ii) Ionenkristalle
- 4) Kovalente Bindungen
- 5) Metallische Bindungen
- 6) Wasserstoffbrückenbindung

Festkörperphysik → Eigenschaften fester Materialien

$\underbrace{\text{Atomkerne} + \text{Elektronen}}_{10^{23}}$

1.1. Klassen von Festkörpern

- Isolatoren
- Halbleiter
- Metalle

- Supraleiter

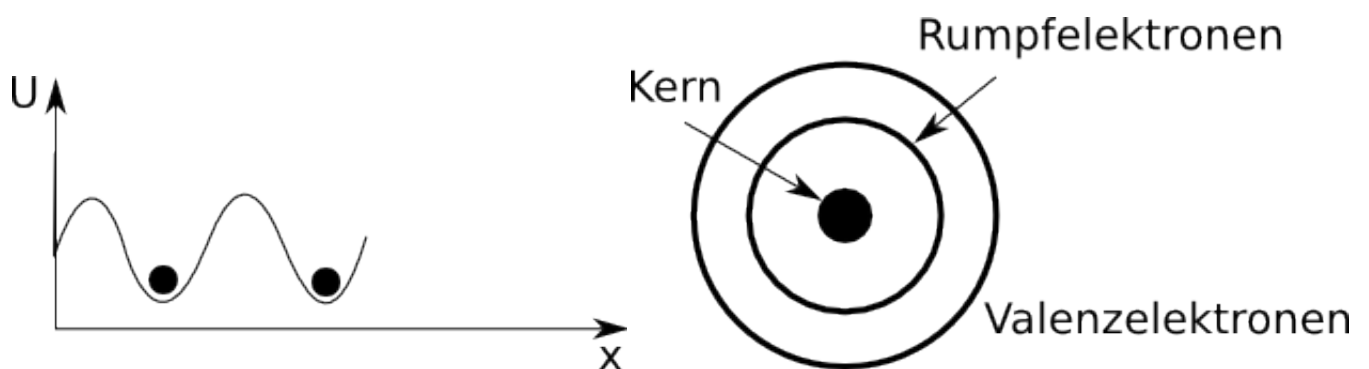
1.2. Fundamentale Konzepte

- Schrödingergleichung
- Pauli-Prinzip
- Coulombsche-Wechselwirkung
- Maxwellgleichungen
- Statistische Mechanik

Unterschiedliche Atomare Ordnung

↙
ideale Kristalle

↘
ideale amorphe Festkörper



1.3. 5 Bindungstypen

- 1) Fluaktions-Bindung
- 2) Ionenbindung
- 3) Kovalente-Bindungen
- 4) metallische Bindungen
- 5) Wasserstoffbrückenbindung

1.4. zweite Periode

	Li	Be	B	C	N ₂	O ₂	F ₂	Ne
Bindungsenergie eV/Atom	1,6	3,3	5,8	7,4	4,9	2,6	0,8	0,02
Schmelztemperatur K	453	1560	2348	4765	62	54	53	24

metall. charakter. Bindung ↘ ↗ kovalente
Molekülkristalle

Potential (Abstoßung) zwischen neutralen Atomen (Molekülen) mit abgeschlossener Elektronenschale

$$\phi(r) = \frac{A}{r^m}, m = 12 \text{ oder } \phi(r) = A'e^{r/\rho}$$

1.5. Van-der-Waals-Bindung

$$\begin{aligned}
 \varphi(r) &\sim \frac{\vec{p}_1 \vec{p}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{p}_1 \vec{r})(\vec{p}_2 \vec{r})}{r^5} \\
 \vec{p}_1 \parallel \vec{p}_2 \rightarrow \varphi(r) &= -\frac{2p_1 p_2}{r^3} \\
 \varphi &\sim -\frac{p_1 p_2}{r^3} \sim \frac{1}{r^6}
 \end{aligned} \tag{1}$$

(1) heißt Van-der-Waal-Potential

$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \equiv \underbrace{4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]}_{\text{Lennard-Jones-Potential}} \quad A = 4\varepsilon\sigma^{12}, B = 4\varepsilon\sigma^6$$

Van der Waals Bindung → Bindungsenergie von Edeltgaskristallen

2. Vorlesung

$$U_B = \frac{1}{2} \sum_m \phi_m = \frac{N}{2} \phi_m = 2N\varepsilon \sum_{n \neq m} \underbrace{\left[\left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^6 \right]}_{\text{Lennard-Jones-Potential}}$$

$$r_{mn} = R p_{mn}; p_{mn} = 1, \underbrace{\sqrt{2}}_{\text{nächster}}, \underbrace{2}_{\text{übernächster Nachbar}}, \dots$$

fcc - face centered cubic,
kubisch
flächenzentrierte
Struktur

Bindungsenergie eines Kristalls mit N Atomen

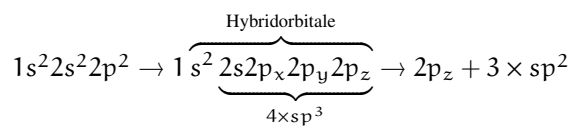
$$U = 2N\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} \underbrace{\left(\frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots \right)}_{12,1319\dots} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \underbrace{\left(\frac{12}{1^6} + \frac{6}{\sqrt{2}^6} + \dots \right)}_{14,4539\dots} \right]$$

$$\left. \frac{dU_B}{dR} \right|_{R=R_0} = 0 \quad \left. \frac{d^2U_B}{dR^2} \right|_{R=R_0} > 0;$$

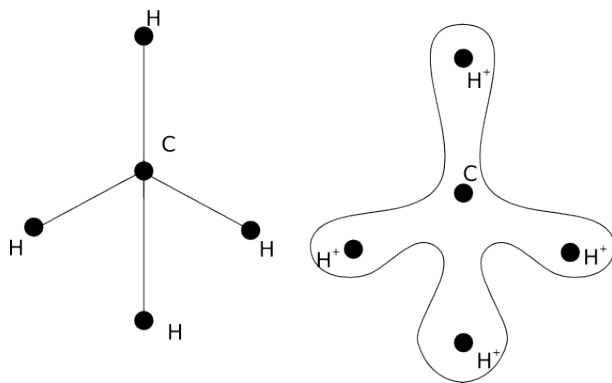
$$R_0 = 1,09\sigma \quad |U_B|_{\text{Atom}} \sim 10^{-2} - 10^{-1} \text{ eV}$$

3. Vorlesung

2. Kovalente Bindungen



CH₄
Methan



FOLIEN

2.1. Kristalle: C (Diamant), Si, Ge

$A^{III}B^V \rightarrow \text{In Sb; Ga As}$

3D Graphit

2D Graphen (2004)

1D Kohlenstoff-Nanoröhren (1991)

0D Fulleren $\underbrace{C_{60}}_{\varnothing 7,1 \text{ \AA}} / C_{70}$ (1985)

2.2. Metallische Bindung

Valenzelektronen sind delokalisiert

\rightarrow Elektronengas

Li-Ionen: $r_1 \sim 0,6 \text{ \AA}$

Li-Kristall: $R_0 \sim 3 \text{ \AA}$

$\left. \frac{R_0}{r_i} \right|_{Cu} \sim 1,33, \quad \left. \frac{R_0}{r_i} \right| \approx 1,05$

2.3. Wasserstoffbrückenbindung

$U_{i|H} \sim 13,6 \text{ eV}; \quad U_{i|Na} \approx 5,1 \text{ eV}$

H \rightarrow Kovalente Bindung nur mit einem Nachbarn

H₂O: GRAFIK

HF₂⁻: GRAFIK

Wichtig für Organismus: DNA Ammoniak: NH₃

3. Struktur der Kristalle

Symmetrie: Transformationen „unverändert“ erscheinen

Mathematik → Gruppentheorie

1) Punktgruppen (mindestens 1 Punkt ist fest)

(i) z. B. Drehung um eine Drehachse GRAFIK, FOLIE

(ii) Spiegelung um eine Spiegelebene GRAFIK

(iii) Punktspiegelung GRAFIK

Spiegelung + Drehung

GRAFIK

Drehinversion

GRAFIK

1) Raumgruppen (translative Symmetrioperationen) 230 Gruppen Fedorov

(i) Gleitspiegelebene GRAFIK

(ii) Schraubung/Torsion GRAFIK

Kristallstruktur=Gitter+Basis

GRAFIK

$$\underbrace{U(\vec{r})}_{\text{Umgebung}} = U(\vec{r} + \vec{R})$$

$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \text{ sind Basisvektoren}$$

GRAFIK

Elementarzelle

primitive Elementarzelle → kleinstmögliche Elementarzelle

(Abb.: primitive Elementarzellen)

3D	Bravais- Gitter	Kristallstrukturen
Punktgruppen	7 Kristallsysteme	32
Raumgruppen	14 Bravais- Gitter	230 Raumgruppen
2D	5	17

Bravais- Gitter (Basisobj. \rightarrow Kugelsymmetrie)

Kristallstruktur (beliebige Symmetrie)

(Abb.: Kristallstruktur= Gitter + Basis)

(Abb.: Rechtwinklige Kristallsysteme)

- 4. Struktur der Festkörper**
- 5. Strukturbestimmung und reziproke Gitter**
- 6. Strukturelle Defekte**
- 7. Gitterdynamik**
- 8. Elastische Eigenschaften, Phononen**
- 9. Isolatoren**
- 10. Fermi-Gas freier Elektronen**
- 11. Energiebänder und Fermiflächen/-surfaces**
- 12. Dynamik von Kristallelektronen**
- 13. Halbleiter**
- 14. Magnetismus**
- 15. Supraleitung**