

# Vorbemerkung

Festkörperphysik: Aufbau und Eigenschaften fester Materialien

Festkörper: Ansammlung von Atomkernen und Elektronen  $\approx 10^{23}$  die über elektrostatische Kräfte miteinander wechselwirken

Klassen

1. Isolatoren
2. Halbleiter
3. Metalle+Supraleiter

Fundamentale Konzepte in der Festkörperphysik:

1. Schrödinger-Gleichung
2. Pauli-Prinzip
3. Coulomb-WW
4. Maxwell-Gleichungen
5. Thermodynamik
6. Statistische Physik

*MaxBorn* Phononen=elastische Schwingungen

# Chapter 1

## Bindungskräfte im Festkörper

### 5 Grundtypen der Bindung

1. Fluktuationsbindung (Van-der-Waals Kraft)
2. Ionenbindung (NaCl)
3. Kovalente Bindung (Diamant)
4. Metallische Bindung
5. Wasserstoffbrückenbindung

Bindungsenergie die Arbeit, die bei der Zerlegung des Festkörper in seine Bestandteile (Atome oder Moleküle) aufgewendet werden muss.

	Li	Be	B	C(Diamant)
z.B. die Elemente der zweiten Periode des Periodensystems:				
Bindungsenergie $\left[\frac{eV}{Atom}\right]$	1,6	3,3	5,8	7,4
Schmelztemperatur [K]	453	1560	2348	4765

(\*) Molekülkristalle  $N_2, O_2, F_2$ . Aus diesem Grund behält die Flüssigkeit die meiste Energie.

<http://de.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones-Potential> Das Lennard Jones Potential: Potential zwischen neutralen Atomen (oder Molekülen) mit abgeschlossener  $e^-$ -Schale a) der anziehende Teil  $\approx -r^{-6}$  b) der abstoßende Teil  $\approx r^{-12}$

$$\phi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

pic TODO

Van-der-Waals-Bindung

pic TODO

$$\phi_{12}(\vec{r}) \propto \frac{\vec{p}_1 \vec{p}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{p}_1 \vec{r})(\vec{p}_2 \vec{r})}{r^5}$$

## 1.1 Bindungsenergie von Edalgaskristallen

<http://de.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones-Potential> Das Lennard Jones Potential:

$$\phi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad (1.1)$$

$$= 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1.2)$$

das Potential minimum tritt bei  $r_0 = 2^{\frac{1}{6}} \sigma \approx 1,12\sigma$  Bindungsenergie von N Atomen

$$V_B = \frac{1}{2} \sum_i \phi_i = \frac{N}{2} \phi_1 = 2N\epsilon \sum_{j \neq 1} \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Kubisch flächenzentrierte Struktur fcc=face centered cubic  $r_{ij} = R = 12; R\sqrt{2} = 6; 2R...$

$$U_B = 2N\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \cdot \underbrace{\left( \frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots \right)}_{\approx 12,13} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \cdot \underbrace{\left( \frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots \right)}_{\approx 14,45} \right]$$

$R_0 \approx 1,09\sigma \rightarrow$  nur für  $E_{kin} = 0$  (in qm  $E_{kin} \neq 0 \Rightarrow R_{0qm} > R_0$ ) ein Minimum von  $U_B(R)$  beim  $R = R_0 \Rightarrow$

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

	Ne	Ar	Kr	Xe
$\sigma(A^\circ)$	2,74	3,40	3,65	3,98
$\epsilon(meV)$	3,1	10,4	14,1	20,0
$\frac{R_0}{\sigma}$	1,15	1,11	1,09	1,09

Nullpunktenergie