

## 1. Mathematische Grundlagen

### 1.1. Sinus, Cosinus $\sin^2(x) + \cos^2(x) = 1$

$x$	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{1}{2}\pi$	$\pi$	$1\frac{1}{2}\pi$	$2\pi$
$\varphi$	0°	30°	45°	60°	90°	180°	270°	360°
$\sin$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	0	-1	0
$\cos$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2}$	0	-1	0	1
$\tan$	0	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	1	$\sqrt{3}$	$\pm\infty$	0	$\mp\infty$	0

Additionstheoreme	Stammfunktionen
$\cos(x - \frac{\pi}{2}) = \sin x$	$\int x \cos(x) dx = \cos(x) + x \sin(x)$
$\sin(x + \frac{\pi}{2}) = \cos x$	$\int x \sin(x) dx = \sin(x) - x \cos(x)$
$\sin 2x = 2 \sin x \cos x$	$\int \sin^2(x) dx = \frac{1}{2}(x - \sin(x) \cos(x))$
$\cos 2x = 2 \cos^2 x - 1$	$\int \cos^2(x) dx = \frac{1}{2}(x + \sin(x) \cos(x))$
$\sin(x) = \tan(x) \cos(x)$	$\int \cos(x) \sin(x) dx = -\frac{1}{2} \cos^2(x)$
$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \sin y \cos x$	
$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y$	

### 1.2. Integrale $\int e^x dx = e^x = (e^x)'$

$F(x)$	$f(x)$	$f'(x)$
$\frac{1}{0} \cdot 1em] 1q + 1x^{q+1}$	$x^q$	$qx^{q-1}$
$\frac{1}{0} \cdot 1em] 2\sqrt{ax^3} 3$	$\sqrt{ax}$	$\frac{1}{0} \cdot 1em] a2\sqrt{ax}$
$x \ln(ax) - x$	$\ln(ax)$	$\frac{a}{x}$
$\frac{1}{a^2} e^{ax} (ax - 1)$	$x \cdot e^{ax}$	$e^{ax} (ax + 1)$
$\frac{a^x}{\ln(a)}$	$a^x$	$a^x \ln(a)$
$-\cos(x)$	$\sin(x)$	$\cos(x)$

$\int e^{at} \sin(bt) dt = e^{at} \frac{a \sin(bt) + b \cos(bt)}{a^2 + b^2}$	
$\int \frac{dt}{\sqrt{at+b}} = \frac{2\sqrt{at+b}}{a}$	$\int t^2 e^{at} dt = \frac{(a-1)^2 + 1}{a^3} e^{at}$
$\int te^{at} dt = \frac{at-1}{a^2} e^{at}$	$\int xe^{ax^2} dx = \frac{1}{2a} e^{ax^2}$

### 1.3. Exponentialfunktion und Logarithmus

$a^x = e^{x \ln a}$	$\log_a x = \frac{\ln x}{\ln a}$	$\ln x \leq x - 1$
$\ln(x^a) = a \ln(x)$	$\ln(\frac{x}{a}) = \ln x - \ln a$	$\log(1) = 0$

## 2. Einheiten

### SI-Präfixe

Symbol	Vorsatz	Faktor	Symbol	Vorsatz	Faktor
Y	Yotta	$10^{24}$	d	Dezi	$10^{-1}$
Z	Zetta	$10^{21}$	c	Zenti	$10^{-2}$
E	Exa	$10^{18}$	m	Milli	$10^{-3}$
P	Peta	$10^{15}$	$\mu$	Mikro	$10^{-6}$
T	Tera	$10^{12}$	n	Nano	$10^{-9}$
G	Giga	$10^9$	p	Piko	$10^{-12}$
M	Mega	$10^6$	f	Femto	$10^{-15}$
k	Kilo	$10^3$	a	Atto	$10^{-18}$
h	Hekto	$10^2$	z	Zepto	$10^{-21}$
da	Deka	$10^1$	y	Yokto	$10^{-24}$

## 3. Konstanten und Basisgleichungen

### Naturkonstanten

Lichtgeschwindigkeit	$c_0 = 299\,792\,458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
Elementarladung	$e = 1.602\,177 \times 10^{-19} \text{ C}$
PLANCK-Konst.	$h = 6.626\,069\,57 \times 10^{-34} \text{ J s}$
	$h = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,57 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Elektr. Feldkonst.	$\epsilon_0 = 8.854\,188 \times 10^{-12} \frac{\text{F}}{\text{m}}$
Magn. Feldkonst.	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{\text{H}}{\text{m}}$
AVOGADRO-Konst.	$N_A = 6.022\,141 \times 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}$
Atomare Masse	$u = 1.660\,539 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Elektronenmasse	$m_e = 9.109\,383 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Protonenmasse	$m_p = 1.674\,927 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Neutronenmasse	$m_n = 1.672\,622 \times 10^{-27} \text{ kg}$
BOLTZMANN-Konst.	$k_b = 1.380\,655 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$
allg. Gaskonstante	$R = k_b N_A = 8,3144 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$

## 4. Aufbau der Materie

**Planck'sches Postulat** In der Quantenmechanik kann der harmonische Oszillator mit der Schwingungsfrequenz  $f$  nur diskrete Energiewerte annehmen:  
 $E_n = hf \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

**Heisenberg'sche Unschärferelation** Ort und Impuls (bzw. Energie und Zeit) können nicht gleichzeitig scharf definiert werden.  
 $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  und  $\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

**Welle-Teilchen-Dualismus** Materie kann sowohl Eigenschaften von Teilchen als auch von Wellen haben.

### 4.1. Quanten

Hierbei wird die Materie als Menge von Teilchen betrachtet. Sie haben eine Energie  $E$  und einen Impuls  $p$  sowie eine Masse  $m$ .

**Das Photon** Für das Photon gilt:  
 $E_{\text{ph}} = f \cdot h = \hbar \cdot \omega = \frac{h \cdot c}{\lambda} = m_{\text{ph}} c^2$   
 $m_{\text{ph}} = \frac{h \cdot \omega}{c^2} \quad p_{\text{ph}} = m_{\text{ph}} \cdot c = \frac{h}{\lambda}$

### 4.2. Materiewellen

#### 4.2.1 Allgemeine Wellenfunktion $\Psi(\underline{r}, t) = C \cdot e^{i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{r})}$

Im eindimensionalen Fall:  $\Psi(x, t) = C \cdot e^{i(\omega t - kx)}$

Größe	Beziehung
Energie	$E = \frac{1}{2} m v^2 = \hbar \omega$
De-Broglie-Wellenlänge	$\lambda = \frac{h}{p}$
Impuls	$\underline{p} = m \underline{v} = \hbar \underline{k}$
Kreisfrequenz	$\omega = 2\pi f = \frac{h}{2m} k^2$
Phasengeschwindigkeit	$v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{v_{\text{Teilchen}}}{2}$
Wellenzahl	$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

#### 4.2.2 Das Wellenpaket

Der bewegten Korpuskel wird eine im Raum begrenzte Wellenfunktion zugeordnet, die sich aus der Überlagerung einzelner Wellen zu einem Wellenpaket ergibt. Ein Teilchenstrom entspricht der Folge einzelner Wellenpakete.

$$\Psi(\underline{r}, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} C(k) \cdot e^{i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{r})} dk$$

Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets:

$$v_{\text{gr}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v_{\text{Teilchen}}$$

$$\text{Phasengeschwindigkeit } v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k}$$

### 4.3. Die Schrödingergleichung

Beschreibt die Dynamik der quantenmech. Zustände eines Systems.

**Allgemeine Schrödingergleichung:**

$$E = E_{\text{kin}} + V_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m} + V \quad \text{mit } p = \hbar \nabla \Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}, t) + V(\underline{r}, t) \cdot \Psi(\underline{r}, t)$$

**Zeitunabhängige Schrödingergleichung:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}) = (E - V) \Psi(\underline{r})$$

**Herleitung** Durch den Separationsansatz  $\Psi(\underline{r}, t) = \Psi(\underline{r})\Phi(t)$  lässt sich die Zeitabhängigkeit abtrennen.

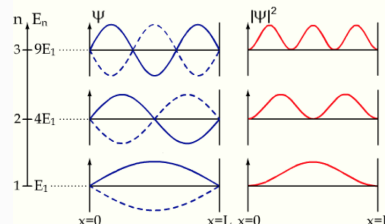
**Aufenthaltswahrscheinlichkeit**  $d w(\underline{r}) = \Psi^*(\underline{r}, t) \cdot \Psi(\underline{r}, t) \cdot d \underline{r}$

**Normierungsbedingung:**  $\int_{\text{Volumen}} \Psi^* \Psi d \underline{r}' = 1 \Rightarrow C_i = \sqrt{\frac{2}{L_i}}$

#### Herleitung der Schrödingergleichung

- Aus De-Broglie-Beziehungen:  $\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 \rightarrow \hbar \omega = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$
- Multipliziere beide Seiten mit  $\Psi$  und ersetze  $\omega \rightarrow \frac{\partial}{\partial t}$  sowie  $k^2 \rightarrow \text{div grad}$  es folgt:  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}, t)$
- In einem Kraftfeld  $\underline{F}(\underline{r}, t)$  mit  $\underline{F}(\underline{r}, t) = -\text{grad } V(\underline{r}, t)$  gilt:  
 $E = \frac{p^2}{2m} + V(\underline{r}, t) \quad \text{mit } p = \hbar \nabla \Psi$
- Die allg. Schrödingergleichung folgt aus Multiplikation mit  $\Psi$  und den Operatoren  $E \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  und  $\frac{p^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

### 4.4. Potentialtopf



#### Schrödingergleichung (im eindimensionalen Potentialtopf)

- Separation: Ist das Potential zeitunabhängig? Wenn ja  $\Rightarrow v(\underline{r}, t) \rightarrow v(\underline{r})$
- Bereichseinteilung:  
 $x < a$   
 $a < x < b$  (im Topf)  
 $b < x$
- Aufstellen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung
- Ansatz:  $\Phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$  oder  $A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- Bestimme Koeffizienten  $A, B$  und  $k$  über die Randbedingungen
- Amplitude aus der Normierungsbedingung bestimmen
- Einsetzen und Umformen  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m a^2} n^2$  mit  $k = \frac{\pi}{a} n$

$\delta$ -Dim., unendl., zeitinvar. Potentialtopf:  $i = \{x, y, \dots, \delta\}$

$$\text{Lösung der DGL: } \Psi(\underline{r}) = \sqrt{\frac{2}{\prod L_i}} \prod_{i=1}^{\delta} \sin(k_i \cdot r_i)$$

$$\text{Energie: } E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \sum k_i^2$$

für  $\delta = 1$  (eindimensionaler PT)

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2} = E_1 n^2$$

$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

### 4.5. Moleküle - Bindungstypen

Bindung	Eigenschaften	Energie
Ionisch	Elektronenaustausch, stark, starr	3.4 eV
Kovalent	Gemeinsame Elektronen	
Metallisch	„Elektronensee“	
Dipol	Coulombkräfte von Partialladungen	

#### 4.5.1 Ionische Bindung

Voraussetzung: unterschiedliche Atome, leicht zu ionisieren

##### Ionisierung

- Anion und Kation ziehen sich an bis auf einen Abstand der Ionenmitelpunkte  
 $r_0 = (r_{\text{Cl}^-} + r_{\text{Na}^+})$  (bis sich die Elektronenschalen gerade noch berühren)
- Dabei wird die Energie frei:  $E_{\text{el}} = \int_{\infty}^{r_0} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$
- Bindungsenergie beträgt  $\frac{3.4 \text{ eV}}{\text{Ionenpaar}}$  oder  $328 \frac{\text{kJ}}{\text{Mol}}$
- Coulombanziehung nicht gerichtet  $\rightarrow$  positive und negative Ionen lagern so dicht aneinander wie möglich  $\rightarrow$  Ionenkristall (nicht verformbar)
- Elektronen sind an den Ionen lokalisiert  $\rightarrow$  keine freien Elektronen vorhanden  $\rightarrow$  Isolator
- Differenz der Elektronegativität meist  $\Delta E > 1.7$

#### 4.5.2 Kovalente Bindung

Spinabsättigung der äußeren Elektronenschale durch gemeinsame Elektronen

- Valenz-Elektronen zwischen den Atomen lokalisiert
- keine Kugelsymmetrische Ladungsverteilung mehr im Atom
- Die Anzahl der Elektronen mit ungepaartem Spin zeigt an wie vielfache kovalente Bindungen eingegangen werden können
- treten bei und zwischen Elementen der IV. bis VII. Hauptgruppe auf
- gerichtete Bindungen  $\rightarrow$  mögliche Kristallstrukturen werden eingeschränkt
- Differenz der Elektronegativität meist  $\Delta E < 1.7$
- kovalente gebundene Kristalle sind üblicherweise schlechte Leiter

#### 4.5.3 Metallische Bindung

Sonderfall der kovalenten Bindung, bei der die Valenz-Elektronen nicht lokalisiert sind.

- Vorwiegend Elemente mit nur wenigen Außenelektronen
- freie Elektronen  $\rightarrow$  hohe elektrische Leitfähigkeit, hohe Wärmeleitfähigkeit
- Bindung nicht gerichtet  $\rightarrow$  hohe Packungsdichte
- Bindungen mit gleich- und ungleichartigen Metallen eingegangen werden
- Metallische Bindung ist schwächer als die ionische oder kovalente Bindung
- Bindungsstärke hängt von der Zahl der Leitungselektronen ab

#### 4.5.4 Dipolbindung

- zwischen Molekülen mit permanentem Dipolmoment  $\rightarrow$  Moleküle mit positiver und negativer Ladung
- Dipole ordnen sich im Dipolfeld der Nachbaratome so an, dass möglichst geringe Abstand und durch die Coulombkräfte gebunden werden

#### 4.5.5 Van-der-Waals-Bindung:

- Atome/Moleküle haben kein permanentes Dipolmoment
- Bindung zwischen Dipolen durch statistische Fluktuationen der Ladungsschwerpunkte.
- Sehr schwache Bindung

#### 4.5.6 Wasserstoffbrückenbindung

Voraussetzung: Äußere Schale  $>$  vier Elektronen, zwischen 2 Atomen.

- Bindungen über Wasserstoffbrücken der Form A-H-A
- Das H-Atom geht eine kovalente Bindung mit Atom der Sorte A ein und gibt sein Elektron ab. Das Proton bleibt fest an Reaktionspartner gebunden und bindet nun zusätzlich das andere negative Atom
- Bindungsenergie ist gering (0.1 eV)

4.6. Das Periodensystem (Siehe Seite 4)

Hauptquantenzahl	$n = 1, 2, \dots (= K, L, \dots - \text{Schale})$
Nebenquantenzahl	$l = 0, \dots, n - 1 (= s, p, d, f - \text{Zust\u00e4nde})$
Magnetische Quantenzahl	$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$
Spinquantenzahl	$s = \pm \frac{1}{2}$

Zu jedem Wert  $n$  geh\u00f6ren  $n^2$  Zust\u00e4nde durch Variation von  $l$  und  $m$ . Au\u00dferdem ist jeweils ein Spin  $s = \pm \frac{1}{2}$  m\u00f6glich.

**Entartungsgrad:** Kombination der QZ mit gleicher Energie:  $2n^2$

4.7. Atome - Hundse Regeln

Legen fest, nach welchem Schema jedes einzelne Orbital eines Atoms mit Elektronen besetzt wird.

- Die Schale wird so aufgef\u00fcllt, dass  $|S| = |\sum s_i| = \max$
- Quantenzahl  $|L| = |\sum m_i| = \max$
- Falls die Schale weniger als halbvoll ist:
  - Bahndrehimpuls und Spin antiparallel
  - Gesamtdrehimpuls  $J: |J| = ||L| - |S||$
- Falls die Schale mehr als halbvoll ist:
  - Bahndrehimpuls und Spin parallel
  - Gesamtdrehimpuls  $J: |J| = ||L| + |S||$

Merke: Volle Schalen liefern keinen Beitrag zu  $S, L$  und  $J$

**Pauli-Prinzip:** Alle Elektronen unterscheiden sich in mindestens einer Quantenzahl

$n \backslash l$	0 = s	1 = p	2 = d
K 1s	$\uparrow\downarrow$		
L 2s 2p	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	
M 3s 3p 3d	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	
N 4s 4p 4d 4f	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$
O 5s 5p 5d 5f	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$
P 6s 6p 6d ...	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

4.8. Kunststoffe

Bestehen im wesentlichen aus C,H,N und O

**Polymmerisation:** Reaktion von Monomeren mit Doppelbindungen zu makromolekularen Ketten

**Polykondensation:** Reaktion von Monomere mit reaktiven Endgruppen unter Abspaltung von z.B  $H_2O$  oder  $HCL$

**Polyaddition:** Vernetzung von Epoxiden mit Aminen oder Alkoholen ohne weiteres Reaktionsprodukt

4.9. Legierungen und Schmelze

5. Mechanische Eigenschaften von Festk\u00f6rpern

$a_0$	Gitterkonstante ( $\approx 10^{-10}$ m)
$N$	Anzahl Atome in EZ (Anzahl Atome geteilt durch die Zellen, die sich dieses Atom teilen)

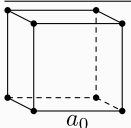
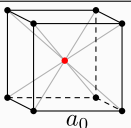
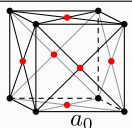
5.1. Dichte

$$\text{Dichte: } \rho = \frac{dm}{dV} = \frac{mP}{\frac{4}{3}\pi r^3} = \frac{mN}{a_0^3} = \frac{1}{V} \frac{N}{N_A} A_r$$

→  $A_r$  in kg umrechnen!

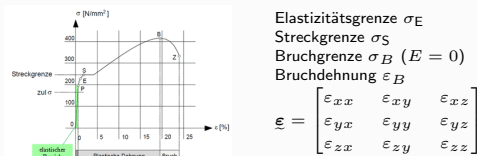
$$\text{Packungsdichte: } P = \frac{\text{Volumen (Atome)}}{\text{Volumen (Einheitszelle)}} = \frac{N \frac{4}{3}\pi r^3}{V_{EZ}}$$

5.2. Kristallstrukturen

SC/PK simple cubic	BCC/KRZ body-centered cubic	FCC/KFZ face-centered cubic
		
$a_0$	$a_0$	$a_0$
$P = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$	$P = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$	$P = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$
$r_A = \frac{\sqrt{4}}{4} a_0$	$r_A = \frac{\sqrt{3}}{4} a_0$	$r_A = \frac{\sqrt{2}}{4} a_0$
KZ = 6	KZ = 8	KZ = 12
HCP hexagonal	Tetraeder	Diamant
$P = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74$	$P = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0.34$	$P = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0.34$
$V_{\text{hex}} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 h$	$V_{\text{Tetra}} = \frac{\sqrt{2}}{12} a^3$	$V_{\text{Diamant}} = a_0^3$
KZ = 6, 12	KZ = 4	KZ = 4

KZ: Koordinationszahl (Zahl der n\u00e4chsten Nachbarn)  
Polymorphie: Ein Stoff hat mehrere Kristallgitterstrukturen.

5.3. Elastische Verformung



**Dehnung**  $\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$   $\epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}$   $\epsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$

Scherdeformation

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \quad \epsilon_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \quad \epsilon_{xz} = \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}$$

**Spannungen** Normalspannungen  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$  sind Zug bzw. Druckspannungen. Tangentialspannungen (Scherspannungen)  $\sigma_{xy}, \sigma_{yz}$

**Verallgemeinertes Hookesches Gesetz**

$$\underline{\sigma} = \underline{C} \underline{\epsilon} \quad \text{mit } \underline{C} \text{ ist 81 Komponenten Elastizit\u00e4tstensor 4. Stufe}$$

**Uniaxial:**  $\sigma_{xx} = \left( c - \frac{2\lambda^2}{c+\lambda} \right) \epsilon_{xx} = E \cdot \epsilon_{xx} \quad \epsilon_{xx} = \frac{\Delta l}{l}$

$$|\underline{\sigma}| = \frac{|F|}{A} = \frac{EF}{cl} = E \cdot \frac{\Delta l}{l} = \epsilon E$$

**Hydrostatisch:** ( $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = -p$ )

Kompressionsmodul  $K = -V_0 \frac{dp}{dV} \stackrel{\text{isotrop}}{=} \frac{E}{3-6\nu}$  Metall  $\nu \approx 0.3$

**Mikroskopische Ebene:** Bindungskr\u00e4fte zwischen Atomen

Potential  $V(r) = -\underbrace{\frac{\alpha}{r^n}}_{\text{anziehend}} + \underbrace{\frac{\beta}{r^m}}_{\text{absto\u00dfend}} \quad m > n$

Zw. atomare Kraft  $F(r) = -\frac{dV(r)}{dr}$  im GG-Fall  $F(r=r_0) = 0$

Elastizit\u00e4tsmodul  $E := -\frac{1}{r} \frac{dF}{dr} = \sigma \frac{r_0}{\Delta r} = \frac{\sigma}{\epsilon} = n(m-n) \frac{\alpha}{r_0^{n+3}}$

Akustische Wellen in Festk\u00f6rpern:  $v_{||} = \sqrt{\frac{c}{\rho}} \quad v_{\perp} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$

Gitterschwingungen / Phononen: (F\u00fcr kleine  $k$ )

$$\omega_1 = \sqrt{2c \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \quad \omega_2 = ka \sqrt{\frac{2c}{M_1 + M_2}}$$

6. Thermische Eigenschaften von Festk\u00f6rpern

Druck	$[p]$	$\frac{N}{m^2}$
Seebeck-Ko.	$[S]$	$\frac{mV}{K}$
W\u00e4rmeleitf.	$[\lambda]$	$\frac{W}{m K}$
W\u00e4rmemenge	$[Q]$	$J = W s$
W\u00e4rmekapazit\u00e4t	$[C]$	$\frac{J}{K}$
W\u00e4rmeleitwert	$[G]$	$\frac{W}{m K}$
Innere Energie	$[U]$	$J$
spez. W\u00e4rmekapazit\u00e4t	$[c_m]$	$\frac{J}{K kg}$

W\u00e4rmekapazit\u00e4t  $C = \frac{\partial U}{\partial T} = cn = c_m \cdot m = c_m \rho V$   
Innere Energie  $U = 3Nk_B T$  f\u00fcr 1 mol:  $\Delta U = \Delta T c_m$   
Spezifische W\u00e4rme f\u00fcr hohe Temp.  $c_m = 3R = 24.9 \frac{J}{mol K}$   
W\u00e4rmemenge  $Q = CT$   
W\u00e4rmeleitwert  $G = \lambda \frac{A}{l}$

W\u00e4rmestrom  $\dot{Q} = -\lambda \text{grad}(T) A = C \dot{T} = G \Delta T$

W\u00e4rmestromdichte  $w = \frac{\dot{Q}}{A} = \frac{\Delta Q}{A \Delta t} = nvc \Delta T = -\lambda \text{grad}(T)$

Phononen:  $\lambda_{ph} = \frac{1}{3} C_{ph} v_{Schall} l_{ph}$

Elektronen  $\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_{el} v_{el} l_{el}$

Mittlere freie Wegl\u00e4nge  $l = v \tau \quad C_{el} \approx 6nk_B^2 \frac{T}{E_F}$

6.1. Thermische Ausdehnung

Ausdehnungskoeffizient  $\alpha = \frac{\beta}{3} = \frac{\Delta l}{l} \cdot \frac{1}{\Delta T}$

Volumen\u00e4nderung:  $\frac{\Delta V}{V_0} = 3\alpha \Delta T = \beta \Delta T$

Gr\u00fcneisenregel f\u00fcr Metalle:  $\alpha \propto \frac{1}{T_S}$  Schmeltemperatur  $T_S$

6.2. Ideales Gas

Ideales Gasgesetz:  $pV = n_m RT = Nk_B T = N_v k_B T$

Kinetische Energie  $E_{kin} = \frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} k_B T$

Teilchendichte:  $N = \frac{n \cdot N_A}{V} = \frac{\rho N_A}{A_r} = \frac{p}{k_B T}$

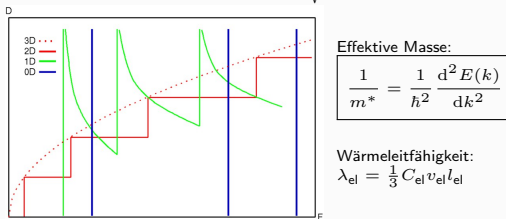
Stoffmenge:  $n = \frac{N}{N_A} = \frac{m}{A_r}$  Druck  $p = \frac{1}{3} N m \overline{v^2}$

Gaskonstante:  $R = k_B N_A = 8,3144 \frac{J}{mol K}$

6.3. Freies Elektronengas

Zustandsdichte 3D:  $D(E) = \frac{1}{V} \frac{dZ}{dE} = \frac{2}{\sqrt{2}} \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{E}}{2\pi^2}$

2D:  $D = \frac{m^*}{\pi h^2 a}$  1D:  $D = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi h a^2} \frac{1}{\sqrt{E - E_{x,j} - E_{z,j}}}$



Effektive Masse:  
 $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{h^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2}$

W\u00e4rmeleitf\u00e4higkeit:  
 $\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_{el} v_{el} l_{el}$

Energieeigenwerte:  $E_{nml} = \frac{h^2 k^2}{2m_e^*} = \frac{h^2 \pi^2}{2m_e^* L^2} (n^2 + m^2 + l^2)$

Wiedemann-Franzsches Gesetz:

$$\frac{\lambda}{\sigma_{el} T} = L := \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} = 2.44 \times 10^{-8} V^2 / K^2 \quad (L : \text{Lorentzzahl})$$

7. Elektrische Eigenschaften von Festk\u00f6rpern

Spez. Wid.  $[\rho] = \Omega m$  Leitf\u00e4h.  $[\sigma] = \frac{1}{\Omega m}$   $[\mu] = \frac{m^2}{Vs}$

7.1. Ladungstransport

Je kleiner  $a_0$ , desto flacher die Potentialbarrieren zwischen den Atomen, desto breiter werden die Energieb\u00e4nder.

Freies Teilchen	Eingesperstes Teilchen
$v_{gr} = \frac{h}{m} k$	$\frac{1}{h} \frac{dE(k)}{dk}$
$v_{ph} = \frac{E}{p}$	

7.2. Widerstand

$$R = \rho \frac{L}{A} = \frac{1}{\sigma} \frac{L}{A}$$

Fermiradius  $k_F = \frac{\sqrt{2mE_F}}{h}$

$$\sigma = \frac{-en \Delta p_x}{m^* E_x} = n \frac{e^2}{m^*} \cdot \tau$$

Elektronen verbinden sich zu Cooper-Paaren

7.3. Elektrochemische Spannung, Korrosion

kathodisch	→ edel	→ positives Potential	Das unedlere Metall wird zuerst in Wasser mit Efeld aufgel\u00f6st
anodisch	→ unedel	→ negatives Potential	

7.4. Piezo-Effekt

Mechanische Verformung erzeugt elektrische Spannung in Kristallen.

$$\underline{D} = -k_p \frac{F}{AE} \quad \sigma_{xx} = c \frac{\Delta l}{l} + k_p E_x$$

7.5. Pyroelektrizit\u00e4t

$$\Delta P = \lambda \Delta T$$

8. Thermoelektrische Effekte

elektrische Leitf\u00e4higkeit	$[\sigma]$	$\frac{S}{m}$
W\u00e4rmeleitf\u00e4higkeit	$[\lambda]$	$\frac{W}{m K}$
Seebeck-Koeffizient	$[S]$	$\frac{V}{K}$

Durch thermische Teilchenbewegung entsteht eine Diffusionsstromdichte:

$$j_{diff} = -e(n_1 v_{1x} - n_2 v_{2x}) = e \frac{d}{dT} (D_n \cdot n) \frac{dT}{dx}$$

Diffusionskoeffizient  $D_n = v_x l_x = v_x^2 \tau$ , Fermigeschw.  $v_x^2 = \frac{1}{3} v_F^2$

Effektive Teilchengeschw.  $\frac{1}{2} m^* v^2 = \frac{1}{2} k_B T$

Seebeck Koeffizient:

$$S := -\frac{e}{\sigma} \frac{d}{dT} (D_n \cdot n) \quad \Delta U = S \cdot \Delta T$$

8.1. Peltier-Effekt

W\u00e4rmestromdichte  $w = \Pi \cdot j$  Peltierkonstante:  $\Pi = S \cdot T$

G\u00fctezahl  $Z = |\Delta S|^2 \cdot \frac{\sigma}{\lambda}$  mit G\u00fctefaktor  $\Delta S = \Pi_1 - \Pi_2$

8.2. Supraleitung

Starke Abnahme des Widerstands um Faktor  $\leq 10^{-14}$  bei einer Sprungtemperatur  $T_c$

Kritisches Magnetisches Feld:  $H_c = H_0 (1 - (\frac{T}{T_c})^2) \rightarrow$  siehe Tabelle

Skript S.107

Londongl.  $\underline{E} = \lambda_L \underline{j}_s \quad \underline{B} = -\lambda_L \text{rot } \underline{j}_s$

Londonsche Eindringtiefe  $\Lambda_L = \sqrt{\frac{\lambda_L}{\mu_0}} \quad \lambda_L = \frac{m}{n_s e^2}$

9. Halbleiter

Valenzbandenergie	$E_V$
Leitungsbandenergie	$E_L$
Bandlückenenergie	$E_G = E_L - E_V$
Fermi-Energie	$E_F = k_B T_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3}$
Fermi-Temperatur	$T_F = \frac{\hbar^2}{2m_e k_B} (3\pi^2 n)^{2/3}$

Fermi-Verteilung für Elektronen:

$$f_e(E, T) = 1 / \left( 1 + \exp \left( \frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right)$$

$f_h(E, T) = 1 - f_e(E, T)$   
 $E_F$ : Energieniveau mit Besetzungswahrsch. 0.5 im thermischen Gleichgewicht. Bei  $T = 0\text{ K}$  entspricht  $E_F$  dem maximalen Energiezustand eines Elektrons.

$$E_F = \frac{E_V + E_L}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{N_V^*}{N_L^*} \right)$$

$$\sigma = n_i e \mu_n + p_i e \mu_p$$

$$\underline{v} = \pm \mu \underline{E}$$

mit  $np = n_i^2$  gilt:  $0 = n_i^2 e \mu_n - \sigma n + n_i^2 e \mu_p$

$$m^* \cdot \mu = e \cdot \tau$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{ph}}$$

Stromdichte  $\underline{j} = -ne \underline{v}_n +$

$$pe \underline{v}_p$$

9.1. Effektive Masse

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E(k) / dk^2} \quad m^* = \sqrt[3]{m_{||}^* m_{\perp}^{*2}}$$

$$m_h^* = \left( m_{hl}^{*2} + m_{hh}^{*2} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Fermi-Verteilung	$f_e$	$[1]$
Elektronen/Löcherdichte	$n, p$	$\left[ \frac{1}{\text{cm}^3} \right]$
Zustandsdichte	$D_L / V$	$\left[ \frac{1}{\text{cm}^3 \text{ eV}} \right]$
effkt. Zustandsdichte Leitungsband	$N_L^*$	$\left[ \frac{1}{\text{m}^3} \right]$
effkt. Zustandsdichte Valenzband	$N_V^*$	$\left[ \frac{1}{\text{m}^3} \right]$
Intrinsische Ladungsträgerdichte	$n_i = \sqrt{N_L^* N_V^*} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$	

Leitungsband	Valenzband
Elektronendichte	Löcherdichte
$n = \int_{E_L}^{\infty} D_L \cdot f_e \, dE$	$p = \int_{-\infty}^{E_V} D_V \cdot f_h \, dE$
Zustandsdichte	Zustandsdichte
$D_L = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_L}$	$D_V = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_V - E}$
Effektive Zustandsdichte	Effektive Zustandsdichte
$N_L^* = 2 \left( \frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$	$N_V^* = 2 \left( \frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$
$n = N_L^* \exp \left( -\frac{E_L - E_F}{k_B T} \right)$	$p = N_V^* \exp \left( -\frac{E_F - E_V}{k_B T} \right)$

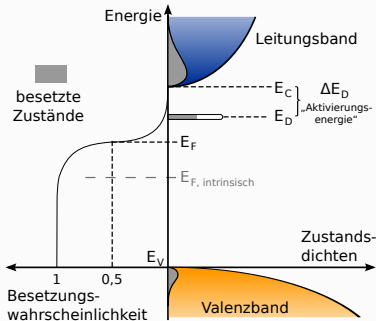
Boltzmann-Näherung:  $f_e(E, T) \approx \exp \left( -\frac{E - E_F}{k_B T} \right)$

Damit gilt:  $n \cdot p = n_i^2 = N_L^* \cdot N_V^* \cdot e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$

Dotierungs-Bilanzgleichung:  $n + N_A^- = p + N_D^+$

Leitfähigkeit:  $\sigma = n \cdot e \cdot \mu_n + p \cdot e \cdot \mu_p$

9.2. Dotierung von Halbleitern



n-Dotierung +1e <sup>-</sup>	p-Dotierung +1h <sup>+</sup>
Donator aus $\overline{V}$	Akzeptor aus $\overline{III}$
$N_D = N_D^0 + N_D^+$	$N_A = N_A^0 + N_A^+$
$N_A = 0$	$N_D = 0$
$N_D^0 = N_D \cdot f(E_D, T)$	$N_A^0 = N_A [1 - f(E_A, T)]$
$N_D^+ = N_D [1 - f(E_D, T)]$	$N_A^- = N_A \cdot f(E_A, T)$

Amphoter: Sowohl n- als auch p-Dotierung. Bei  $\overline{III-V}$  HL:  $\overline{IV}$

9.3. Temperaturnäherungen für dotierte HL

niedrige T:  $n \approx \exp \left( -\frac{E_L - E_F}{2k_B T} \right)$

mittlere T:  $n \approx N_D = \text{const.}$

hohe T:  $n \approx n_i$

Trick:  $\sqrt{N_L^* N_V^*} \sim T^{\frac{3}{2}}$

9.4. Ausgleichsvorgänge

Generationsrate:  $G = G_T + G_L$  (Thermisch, Optisch)

Rekombinationsrate:  $R = r(T) np$

9.5. Diffusionsströme

$j_{n/p}^{\text{diff}} = e D_{n/p} \frac{dn/p}{dx}$  Einstein Beziehung:  $D_{n/p} = \frac{k_B T}{e} \mu_{n/p}$

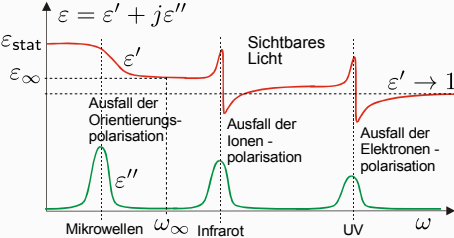
Diffusionslänge  $L_{n/p} = \sqrt{D_{n/p} \tau_{n/p}}$  Debye-Länge  $L_D = \sqrt{D \tau_R}$

10. Dielektrische Eigenschaften

Dielekt. Verschiebung  $\underline{D} = \epsilon_r \epsilon_0 \underline{E} = \epsilon_0 \underline{E} (1 + \chi^{\text{el}}) = \epsilon_0 \underline{E} + \underline{P}$

Komplexe Permittivität:  $\epsilon_r = \epsilon_r' + i \epsilon_r'' = |\epsilon_r| e^{i\delta}$

$\epsilon'(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2}$   $\epsilon''(\omega) = \frac{\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_{\infty}}{2} \omega \tau$



Polarisation  $[P] = \frac{A_s}{m^2}$  Polarisierbarkeit  $[\alpha] = m^3$

Äußeres Feld  $\underline{E}_{\text{ext}}$  Induziertes Gegenfeld  $\underline{E}_{\text{in}}$

10.1. Polarisation (S. 144)

Dipolmoment  $\underline{p} = \underline{s} \cdot q = \epsilon_0 \alpha \underline{E}_{\text{ext}}$

Polarisation  $\underline{P} = N \underline{p}$

Im Kristallgitter  $N = \frac{1}{8R^3}$

Claudius-Mosotti-Gleichung:  $\frac{\alpha N_V}{3} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 1} \Rightarrow \epsilon_r = 1 + \frac{\alpha N}{1 - \frac{\alpha N}{3}}$

Suszeptibilität  $\chi^{\text{el}} = \epsilon_r - 1 = \frac{P}{\epsilon_0 E} = \frac{P_{\text{in}}}{\epsilon_0 E_{\text{in}}} = \frac{\alpha N}{1 - \frac{\alpha N}{3}}$

Elektronische Polarisation

Elektronenhülle verschiebt sich durch äußeres Feld

$\underline{p} = \epsilon_0 \alpha \underline{E}_{\text{ext}}$  Polarisierbarkeit  $\alpha = 4\pi R^3$

Ionische Polarisation

Ionen werden durch äußeres Feld verschoben

$p = q \Delta r_{\text{Atom}} = \epsilon_0 \alpha E$   $\alpha = \frac{q^2}{2 \epsilon_0}$

Orientierungspolarisation

Permanente Dipole werden durch E-Feld ausgerichtet.  $\nu = \frac{Ep}{k_B T}$  Energie eines Dipols:  $U(\theta) = -\underline{p} \underline{E} = -p E \cdot \cos(\theta)$

Energieverteilung  $w(\theta) = \exp \left( \frac{U(\theta)}{k_B T} \right)$

$\cos(\theta) = \frac{w(\theta) \cos(\theta)}{w(\theta)}$

11. Magnetische Eigenschaften

Magnetische Flussdichte	$\underline{B}$	$[T = \frac{Vs}{m^2}]$
Magnetische Feldstärke	$\underline{H} = \underline{M}$	$[\frac{A}{m}]$
Bahndrehimpuls	$\underline{L}$	$[V A s^2]$
Magnetisches Moment	$\underline{m}$	$[A m^2]$
magn. Quantenzahl	$m$ od. $M$	
Spinquantenzahl	$S$	
gyromagnetisches Verhältnis	$g$	
Gesamtdrehimpuls	$\underline{J}$	$[T = \frac{Vs}{m^2}]$
Magnetische Suszeptibilität	$\chi^m$	

Bohrsches Magneton:  $\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m_e} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ A m}^2$

	Dielektrika	Magnetika
Polarisation	$\underline{P} = \epsilon_0 \chi \underline{E}_{\text{netto}}$	$\underline{J} = \mu_0 \underline{M}$
Flussdichte	$\underline{D} = \epsilon_0 \underline{E}_{\text{netto}} + \underline{P}$	$\underline{B} = \mu_0 \underline{H} + \underline{J}$

Gesamtdrehimpuls  $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$

permanentes mag. Dipolmoment  $M_z = g(-\mu_B) J$

Magnetische Suszeptibilität  $\chi^m = \mu_r - 1 = \frac{1}{\mu_0} \frac{J}{H} = \frac{M}{H}$

Magnetische Flussdichte  $\underline{B} = \mu_r \mu_0 \underline{H} = \mu_0 \underline{H} + \underline{J} = \mu_0 (\underline{H} + \underline{M})$

Elementare Dipole:

Mechanischer Drehimpuls  $\underline{L} = \underline{r} \times m_0 \underline{v} = m_0 r^2 \underline{\omega}$

Magnetisches Moment  $\underline{m} = I \underline{A} = -\frac{1}{2} e r^2 \underline{\omega} = -\frac{e}{2 m_0} \underline{L}$

Gyromagn. Verhältnis:  $g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

Spezial:  $S = 0 \Rightarrow g = 1$  (unreal)  $L = 0 \Rightarrow g = 2$

Diamagnetismus ( $\mu_r < 1$ )

Wirkung der Lorentzkraft. Immer aktiv, wird aber von Para- und Ferromag. überlagert. Temperaturunabhängig.

$\chi_{\text{dia}}^m = \frac{M}{H} = -\frac{N Z^* e^2 r^2 \mu_0}{6 m_e}$

Paramagnetismus ( $\mu_r > 1$ )

Material besitzt magnetische Dipolmomente. (Unvollständige Elektronenschalen)

dominiert oberhalb der Curie-Temperatur

Curiesches Gesetz:  $\chi_{\text{para}}^m = \frac{N \mu_0 g^2 J(J+1) \mu_B^2}{3 k_B T}$

Leitungselektronen ( $\mu_r \gg 1$ )

$\chi_{\text{para,le}}^m = \frac{3}{2} \frac{n \mu_0 \mu_B^2}{k_B T_F}$   $\chi_{\text{dia,le}}^m = -\frac{1}{3} \chi_{\text{para,le}}^m$   $\chi_{\text{le}}^m = \chi_{\text{para,le}}^m + \chi_{\text{dia,le}}^m = \frac{n \mu_0 \mu_B^2}{k_B T_F}$  (mit  $n = \frac{\text{freie } e}{V \text{ ez}}$ )

Ferromagnetismus

( $\mu_r \gg 1$ ) gekoppelte, parallele Ausrichtung der Momente. Wirkung nur bis Curie-Temp.

$E_A = -\mu_0 \int_{V_W} \underline{H}_G \underline{H}_A \, dV$

Curie-Weiss-Gesetz:  $\chi^m = \frac{C}{T - \Theta}$  mit  $\Theta = \frac{E_F}{k_B}$

Hystereseverluste  $w_v = \oint B \, dH$

Antimagnetismus

gekoppelte, antiparallele Ausrichtung.

Ferimagnetismus

In eine Richtung stärkere Magnetisierung.

$\underline{m} = I \underline{A}$  ist antiparallel zu  $\underline{L}$

12. Skizzen und Tabellen

12.1. Skizzen

Name	Seite
molare spezifische Wärme	70
Thermoelement	104
Peltier-Effekt	105
Peltier-Element	105
Leitfähigkeit/Supraleitung	106
Wärmeleitfähigkeit	75
Temp. dot. Halbleiter	122
Berthe-Slater-Kurve	164
Magnetische Sättigung	167
Magnetisierungskurve	171
Legierungssystem ohne Mischlücke	42
Legierungssystem ohne Mischkristallbildung	44
Legierungssystem mit Mischlücke	45
Legierungssystem mit intermetallischen Verbindungen	46
Abstandsabhängigkeit interatomarer Kräfte	59
Spannungs/Dehnungsdiagramm	63
Festigkeit bei wechselnder Belastung	67

12.2. Tabellen / Werte

Name	Seite
Wärmeleitfähigkeit	75
Thermopaare	104
Kritische Feldstärke Supraleiter	107
Orbitalebestetzung	23
Elektronenhülle	24

