

2.5 Zusammenfassung / Merkpunkte zu Kapitel 2: Vom Atom zum Festkörper

Die wesentlichen Punkte, die wir zum Thema "**Quantentheorie der Atome**" behalten wollen sind:

- Die primäre Größe, die den Zustand des Quantensystems beschreibt, ist die **Wellenfunktion** ψ . Sie enthält **alles**, was man über das System wissen kann. Die Wellenfunktion ist prinzipiell eine **komplexe** Funktion.
- Das Absolutquadrat der Wellenfunktion, $\psi \cdot \psi^* dV$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das (oder die) Teilchen in dem betrachteten (differenziellen) Volumen dV zu finden. Integriert über den ganzen Raum ergibt sich die **Normierungsbedingung**

$$\iiint \psi \cdot \psi^* = 1$$

Die Wellenfunktion ψ eines Systems errechnet sich aus der (für unsere Zwecke ausreichenden zeitunabhängigen) **Schrödingergleichung**.

- Dabei ist (für unsere Zwecke), die **potentielle Energie** $U(x,y,z)$ des Systems als Funktion der Teilchenpositionen die einzige "Input"größe.
- Die (nebenstehende) Schrödingergleichung müssen wir **nicht** auswendig können; sie ist i.d.R. nicht leicht zu lösen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial z^2} \right) + \left(U(x,y,z) - E \right) \cdot \psi(x,y,z) = 0$$

Exakte Lösungen zum Wasserstoffatom sind möglich, sie definieren die **Quantenzahlen** n, l, m und die zu einem dadurch gegebenen Zustand gehörende (konstante) **Gesamtenergie** E .

- Darüberhinaus muß der **Spin** s der Teilchen berücksichtigt werden. Das **Pauli Prinzip** postuliert, daß Teilchen mit halbzahligem Spin ($s = \pm 1/2; \pm 3/2, \dots$) **nicht** in allen Quantenzahlen übereinstimmen dürfen.

Lösungen: $\psi = \psi_{n, l, m, s}(x, y, z)$

Zugehörige Energien: $E = E_{n, l, m, s}$

Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$

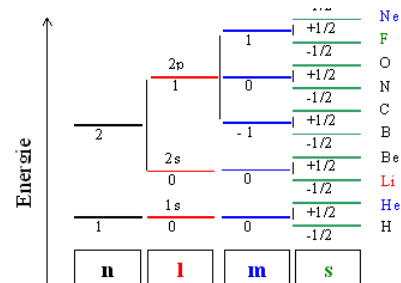
Nebenquantenzahl $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$

Magnetische Quantenzahl $m = l, l - 1, \dots, 0, \dots, -l$

Spinquantenzahl $s = +1/2$ oder $-1/2$

Die Übertragung auf beliebige Atome führt zu einem **Termschema** mit Besetzungssystematik. Dabei zeigt sich, daß gefüllte Schalen besonders stabil sind, es liegen Edelgase vor.

- Das Bestreben nach gefüllten Schalen regelt die "**Chemie**". Es kann quantifiziert werden durch die Materialparameter "**Ionisationsenergie**" und "**Elektronenaffinität**".



Man kann **vier** Bindungstypen unterscheiden: Ionische, kovalente, Metall- und Sekundärbindungen.

Die anziehenden Kräfte der **Ionbindung** sind rein elektrostatisch. Das zugehörige Potential ist das Coulomb Potential; wir haben

$$U_{\text{anz}}(\text{Molekül}) = - \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$$

In einem **Kristall** muß aber die Wechselwirkung mit allen anderen Ionen berücksichtigt werden, die abwechselnd anziehend oder abstoßend ist. Dies äußert sich in einer um die **Madelung Konstante** modifizierten potentiellen Energie der elektrostatischen Interaktion.

$$U_{\text{anz}}(\text{Kristall}) = - \alpha \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$$

Die abstoßenden Kräfte sind quantenmechanisch und nur näherungsweise durch das nebenstehende Potential $U_{\text{anziehend}} = B/r^m$ beschreibbar. Ionische Bindungen sind damit **ungerichtet**.

$$U_{\text{abs}}(\text{Molekül/Kristall}) = \frac{B}{r^m}$$

Damit ergibt sich ein Gesamtpotential für die ionische Bindung im Kristall mit der Form

$$U_{\text{gesamt}}(\text{Kristall}) = \frac{B}{r^m} - \alpha \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$$

Kovalente Bindungen entstehen durch Überlapp teilbesetzter Orbitale. Sie sind damit im Falle von **p, l, ...** Orbitalen **gerichtet**.

Das Bindungspotential (in Bindungsrichtung) ist durch Lösungen der S.-Gleichung gegeben und wird i.a. mit 4 freien Parametern dargestellt:

$$U_{\text{kovalent}} = \frac{B}{r^m} - \frac{A}{r^n}$$

Wichtig sind ggf. **Hybridorbitale**, insbesondere bei den Gruppe **IV** Elementen (**C, Si, Ge, ...**) das **sp³** Hybridorbital mit **Tetraedersymmetrie**.

Die **Metallbindung** besteht aus einem "Elektronensee" freier Elektronen, die die positiv geladenen Atomrümpfe zusammenhalten.

Das Bindungspotential hat 4 freie Parameter wie bei der kovalenten Bindung. Die Bindung ist natürlich **ungerichtet**.

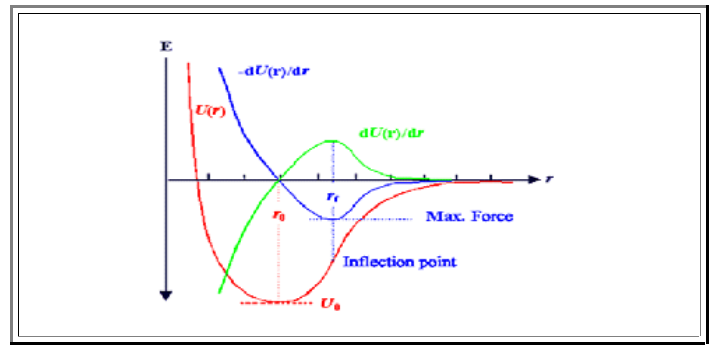
Zwei der 4 freien Parameter können durch **Bindungsabstand und **Bindungsenergie** substituiert werden**

Sekundäre Bindungen sind relativ schwach (und ermöglichen damit "das Leben" bei Raumtemperatur). Wichtig sind Dipol-Dipol Bindungen (van der Waals Bindungen) und die Wasserstoffbrückenbindung.

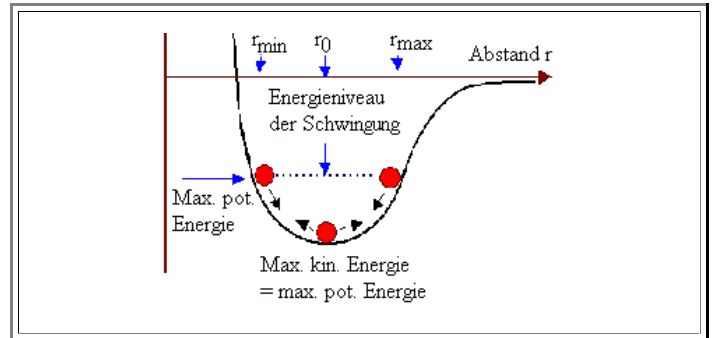
Die **allgemeine Bindung** ist möglicherweise eine Mischung aus verschiedenen Bindungstypen - und damit möglicherweise **ein bißchen** richtungsabhängig, etc.

Ein Potential - Koordinate - Bild jeder Bindung hat ein Minimum genannt "Topf". Mit solchen "**Potentialtöpfen**" kann man sich viele wichtige Größen sehr leicht veranschaulichen. Sie zeigen unmittelbar oder ein bißchen "versteckt":

- Die **Bindungsenergie** U_0 .
- Den **Bindungsabstand** oder Gleichgewichtsabstand r_0 .
- Die auf einen Bindungspartner wirkende Kraft F im Abstand r über $F = -dU/dr$ (d.h. durch die Steigung).
- Die maximal notwendige Kraft zum Lösen der Bindung durch $dF/dr = 0$; d.h die Steigung am Wendepunkt.

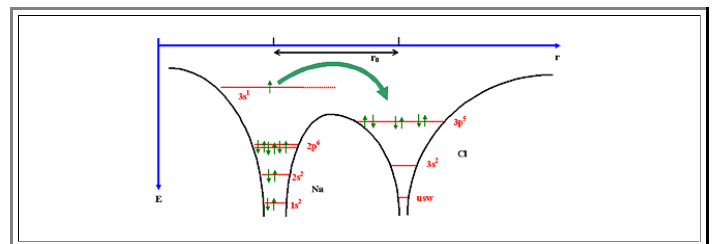


Außerdem kann man die Schwingungen der Teilchen anschaulich darstellen sowie die damit verbundene Gesamtenergie.



Das Konzept ist auch auf die Elektronen im Atom übertragbar.

- Damit lassen sich sofort die Bindungstypen darstellen; für Festkörper wird die Aufspaltung von Einzelniveaus in Bänder zwingend.



Aus den Bindungspotentialen folgen direkt die defekt- oder strukturunempfindlichen Eigenschaften der Materialien:

- Der **Elastizitätsmodul** $E = \sigma/\epsilon$ als eine Art "Federkonstante" der Bindung (σ = mech. Spannung = Kraft / Fläche; ϵ = Dehnung = relative Längenänderung). Ω ist das Atomvolumen.
- Der thermische Ausdehnungskoeffizient α als "Maß" für die Assymetrie des Potentialtopfes.
- Maximale Bruchspannung σ_f oder anschaulicher max. Bruchdehnung ϵ_f . Allerdings sind die errechenbare Werte hier nicht so sinnvoll, das sie nur die absolute Obergrenze angeben.
- Schwingungsfrequenz ω der Atome um ihre Gleichgewichtslage.

$$E = \frac{n \cdot m}{r_0^3 \cdot U_0} \approx \frac{80 \cdot kT}{\Omega}$$

$$\alpha = \frac{(n + m + 3)k}{2 \cdot n \cdot m \cdot U_0} \approx \frac{\text{const.}}{T_m}$$

$$\epsilon_f = \left(\frac{n + 1}{m + 1} \right)^{1/(n - m)} - 1 \approx (15 - 30)\%$$

$$\omega = \left(\frac{E \cdot r_0}{m_a} \right)^{1/2} \approx 10^{13} \text{ Hz}$$

Insbesondere der **E-Modul** und die Schwingungsfrequenz sind von großer Bedeutung.

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu Kapitel 2