

2.1.5 Merkmale zu Kapitel 2.1 "Bindungspotentiale und erste Eigenschaften"

Zwischen zwei Ionen gibt es **anziehende** und **abstoßende Kräfte**; im **Gleichgewichtsabstand** r_0 = Bindungsabstand ist die Summe der Kräfte = 0

- Für Ionen ist die anziehende Kraft=Coulombkraft; sie nimmt als Funktion des Abstands r mit r^{-2} ab.
- Über die abstoßende Kraft wissen wir nur, dass sie bei zu großer Nähe sehr schnell sehr groß wird, d. h. mit einer Funktion wie r^{-m} , $m \gg 2$) anwächst.

Statt Kräften betrachten wir aber besser das zugehörige **Potential** $U(r)$, gleich dreidimensional als Funktion des Ortsvektors \underline{r}

- Das Potential der Coulombkraft hat also die Funktionalität $U_{\text{Coulomb}} \propto r^{-1}$

Aus abstoßendem Potential und anziehendem Potential kann man, falls überhaupt eine Bindung vorliegt, durch (vorzeichenrichtige) Addition immer einen **Potentialtopf** $U(r)$ konstruieren

- Das abstoßende Potential wird mit B / r^m beschrieben
- Das anziehende Coulombpotential wird mit $-A_{\text{Cou}} / r$ beschrieben; mit $A_{\text{Cou}} = (q_1 \cdot q_2) / 4\pi\epsilon_0$
- Falls wir nicht nur die Coulomb Wechselwirkung zwischen zwei isolierten Ionen betrachten, sondern die zwischen einem Ion in einem Kristall und allen (∞ vielen) anderen, muss A_{Cou} mit der **Madelung-Konstanten** $\alpha \approx 1,5 \dots 4,5$ multipliziert werden
- Als eine allgemeine Näherungsformel mit $A = \alpha \cdot A_{\text{Cou}}$ dient dann die Gleichung

$$U_{\text{Ion}}(r) = \frac{B}{r^m} - \frac{A}{r}$$

Um die Bindungsenergie zu erhalten, muss zur Tiefe des Potentialtopfes U_0 noch die Energiebilanz aus **Ionisierungsenergie** I und **Elektronenaffinität** A addiert werden, da wir ja zuerst aus Atomen Ionen machen müssen.

- Kleine Ionisierungsenergien liegen im Bereich von **5 eV** (Alkali-Metalle), große Elektronenaffinitäten im Bereich **3 eV** (Halogene).

Von der Ionenbindung kommt man leicht zu jeder Bindung: sie braucht einen Potentialtopf und kann immer in folgender Form geschrieben werden:

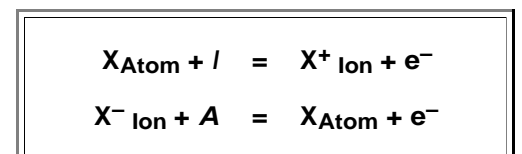
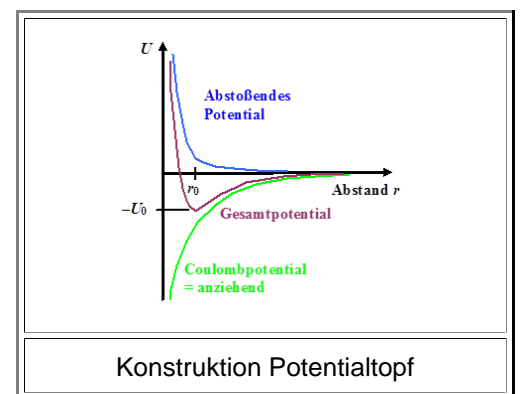
$$U_{\text{Bdg}}(r) = \frac{B}{r^m} - \frac{A}{r^n}$$

- Von den vier Unbekannten A , B , m , n können zwei durch die leicht zu messenden Größen U_0 und r_0 substituiert werden; n ist manchmal bekannt (s. o.).
- Im Bindungspotential stecken viele wichtige Eigenschaften des zugehörigen Kristalls.

$$U(r) = - \int_{r_0}^r F(r') \cdot dr'$$

$$\underline{F} = - \text{grad}[U(r)] = - \nabla U(r)$$

$$F_x = - \frac{\partial U}{\partial x}, \quad F_y = - \frac{\partial U}{\partial y}, \quad F_z = - \frac{\partial U}{\partial z}$$

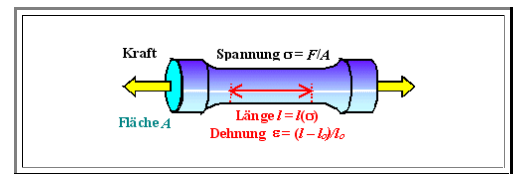


- Im Bindungspotential steckt:
- Struktur des Festkörpers (Kristall, welcher Typ, ...).
 - Elastizitätsmodul E .
 - Thermischer Ausdehnungskoeffizient α .
 - Schwingungsfrequenz der Atome im Kristall.
 - Maximale Bruchfestigkeit.
 - Ungefäher Schmelzpunkt.

Der **Elastizitätsmodul E** misst die durch eine **mechanische Spannung σ** verursachte **Dehnung ϵ** eines Materials.

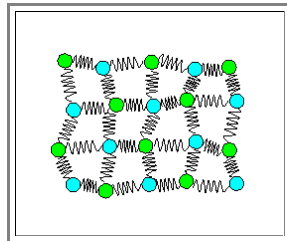
Er ist gegeben durch

$$E = \frac{1}{r_0} \cdot \frac{d^2U}{dr^2}$$



Die mit der (absoluten) **Temperatur T** verbundene thermische Energie **E_{therm}** folgt der extrem wichtigen Formel des **Gleichverteilungssatzes** \Rightarrow

Die Energie kann **nur** in **Schwingungen der Atome** um die Gleichgewichtslage stecken:



Bei der (absoluten) Temperatur T hat **ein** Teilchen in einem Teilchensystem (Kristall, Gas, ...) **im Mittel** die thermische Energie (innere Energie)

$$U_{\text{Teilchen}} = \frac{1}{2} f k_B T$$

(bei f Freiheitsgraden).

In jedem Augenblick hat ein Atom drei linear unabhängige Geschwindigkeitsvektoren (\rightarrow kin. Energie; nicht eingezeichnet) und drei linear unabhängige Ortsvektoren relativ zur Ruhelage (\rightarrow pot. Energie); das ergibt sechs Freiheitsgrade für die Energie.

Die **Gesamtenergie** einer Schwingung ist aber konstant (= **$E_{\text{pot(max)}}$** oder **$E_{\text{kin(max)}}$**) und kann deshalb als **Energieniveau** in den Potentialtopf eingezeichnet werden.

Der **thermische Ausdehnungskoeffizient** folgt damit aus der Asymmetrie des Potentialtopfes und kann somit berechnet werden.

Die **Schwingungsfrequenz ν** ergibt sich aus Massen und "Federkonstante" zu

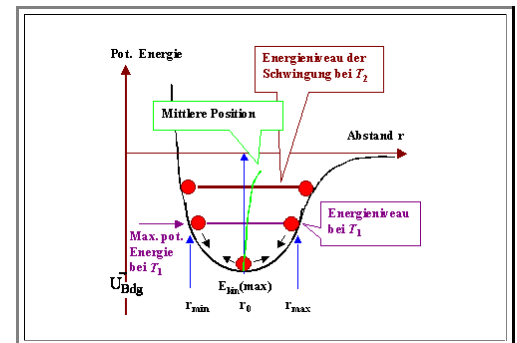
$$\nu \approx 10^{13} \text{ Hz.}$$

Die max.theoretische **Bruchfestigkeit** ist bei ca. **30 %** Dehnung ($\epsilon \approx 0,3$) erreicht

In der Praxis brechen Materialien aber früher, da der Bruch durch Defekte bestimmt wird.

Der **Schmelzpunkt T_m** ist ungefähr durch die Tiefe **U_{Bdg}** des Potentialtopfes gegeben:

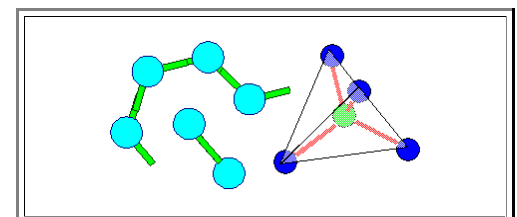
$$k_B T_m \approx U_{\text{Bdg}}$$



Die Art der Bindung bestimmt die atomare Struktur des Festkörpers:

- **Ungerichtete** Bindung: **Dichteste Packungen** (bei elektr. Neutralität)
- **Gerichtete** Bindung: Zahl und Anordnung entscheidend

Für uns besonders wichtig: **4 gerichtete** Bindungsarme im **Tetraederwinkel** (= größtmöglicher gleichgroßer Winkel = Schnittwinkel der Raumdiagonalen eines Würfels)



Aufgaben:

Fragebogen
Einfache Fragen zu 2.1

✓ Hier noch ein "Multiple Choice"-Test, der etwas über den Stoff hinausgeht – man kann es ja mal probieren!

Fragebogen
"Multiple Choice"-Fragen zu 2.1