

## 2.5.2 Was man wissen muss

### Allgemein

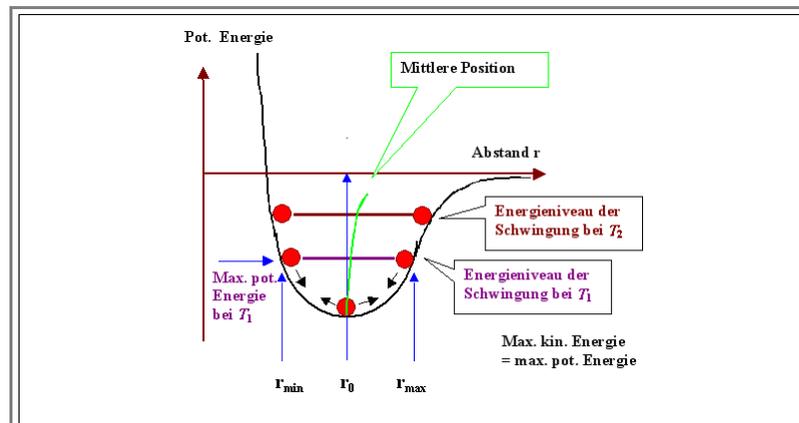
#### Minimalkenntnisse über *Atome* und *Photonen*:

- Sortiert nach Ordnungszahl  $z \Rightarrow$  Periodensystem. Größe  $\approx 1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$ , Atomgewicht  $\approx$  Gewicht Atomkern.
- Minimalkenntnisse "Chemie": Halogene, Alkali, Edelgase, ...; Ionenbildung; Begriff von Ionisierungsenergie und Elektronenaffinität. Bestreben nach Edelgaskonfigurationen. Mol und Avogadrokonstante ( $6,0 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ). Elektronenvolt als Energieeinheit.
- Elektronenkenngößen: Masse  $\approx 1/2000$  der Protonenmasse, Größe  $\ll$  Atomgröße, Träger von  $-e$ , Spin  $s = \pm 1/2$ , magnetisches Moment  $m_B$ . *Elektronen sind Fermionen*.
- Photonen = "Lichtteilchen". Energie der Photonen des sichtbaren Lichtes  $\approx 1 \text{ eV}$  (besser  $\approx 2,5 \text{ eV}$ ). *Photonen sind Bosonen*.

#### Bindungspotentiale für Moleküle und Kristalle:

- Potentialtopf  $U(r)$  aus anziehendem und abstoßendem Teil. Kenngrößen  $U_0$  und  $r_0$ .
- Bedeutung der Madelungkonstante.
- Kristalleigenschaften aus Bindungspotential (Formeln hilfreich, aber nicht nötig):
  - Schmelzpunkt ( $k_B T_M = U_0$ )
  - E-Modul  $E = (1/r_0) \cdot d^2 U/dr^2$
  - Vibrationsfrequenz  $\omega_0$  (aus "Federkonstante" =  $E \cdot r_0$  und Masse  $m$ ;  $\omega_0 = (E \cdot r_0/m)^{1/2}$ )
  - Thermischer Ausdehnungskoeffizient  $\alpha = \epsilon_{\text{therm}} / T$  aus Asymmetrie des Potentials.
  - Max. Bruchparameter ( $\epsilon_{\text{max}} \approx 30 \%$ )
- Federanalogie; Spannung  $\sigma$  und Dehnung  $\epsilon$ , E-Modul und Federkonstante. Darstellung div. Eigenschaften im Potentialbild.

#### Dieses Bild *muß man draufhaben!*



#### Rolle der *Temperatur*. Generell gilt: $k_B T =$ thermische Energie.

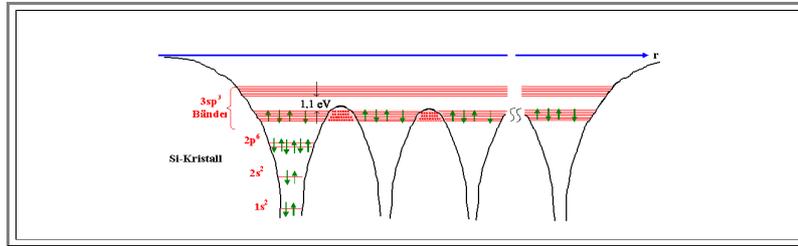
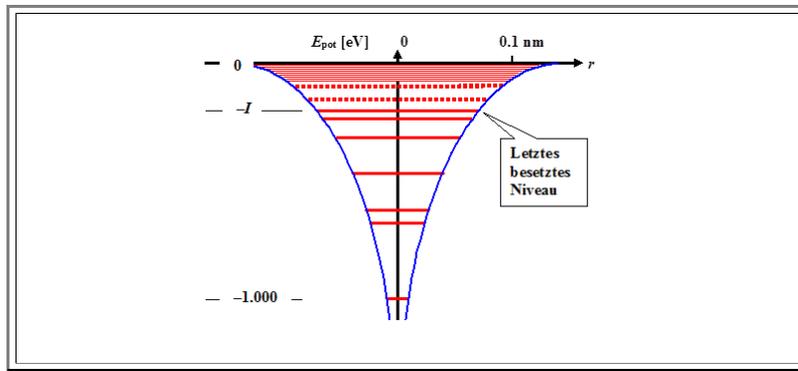
- Essentiell: Gleichverteilungssatz: mittlere thermische Energie pro klass. Teilchen mit  $f$  Freiheitsgraden:  $U_{\text{Teilchen}} = \frac{1}{2} f k_B T$ .
- Energieniveaus im Potentialtopfbild, Bedeutung für Eigenschaften.

#### Bindungsarten:

- Die vier Grundtypen; "Bindungsarme" bei kovalenten Bindungen; aus allem div. Schlussfolgerungen für Kristallbildung. Dichteste Kugelpackung bei Metallen zu erwarten; spez. Strukturen bei kovalent etc.

#### Essenz der Quantentheorie

- Absolutes Minimum: Zustandekommen der Potentialtopfmodelle *für Elektronen* im Einzelatom und im Kristall. Verständnis der Begriffe "Zustand", "Energieniveau", "Entartung", "Besetzung".
- Diese Bilder muß man verinnerlicht haben:



### Zahlen und Formeln

▲ Auf jeden Fall muss man wissen:

● **Anmerkung:** In der Regel reichen "Zehner"-Zahlen. Genauere Werte sind in Klammern gegeben

Zahlen			
Größe		Zehnerwert	Besserer Wert
Größe eines Atoms (Durchmesser)	≈	1 Å = 0,1 nm	1 Å ... 3 Å
Photonenenergie (sichtbares) Licht	≈	1 eV	(1,6 ... 3,3) eV
Schwingungsfrequenz Atome im Kristall	≈	$10^{13}$ Hz	

Formeln	
(Vektoren sind mit einem Unterstrich notiert.)	
Coulombpotential	$U_{\text{Cou}} = \frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$
Beziehung Kraft $\underline{F}(r)$ — Potential $U(r)$	$\underline{F}(r) = -\nabla U(r)$

Mech. Spannung  $\sigma$ , Dehnung  $\epsilon$ , E-Modul  $E$

$$\sigma = \frac{F}{A}$$
$$\epsilon = \frac{l(\sigma) - l_0}{l_0}$$
$$E = \frac{d\sigma}{d\epsilon}$$

Mittlere thermische Energie  
eines klassischen Teilchens  
(innere Energie; Def. der Temperatur)

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

(f: Anzahl der Freiheitsgrade)

Thermische Energie  
(Größenordnung von  $U_{\text{Teilchen}}$ )

$$E_{\text{therm}} = k_B T$$

( $U_{\text{Teilchen}} \approx k_B T$ )