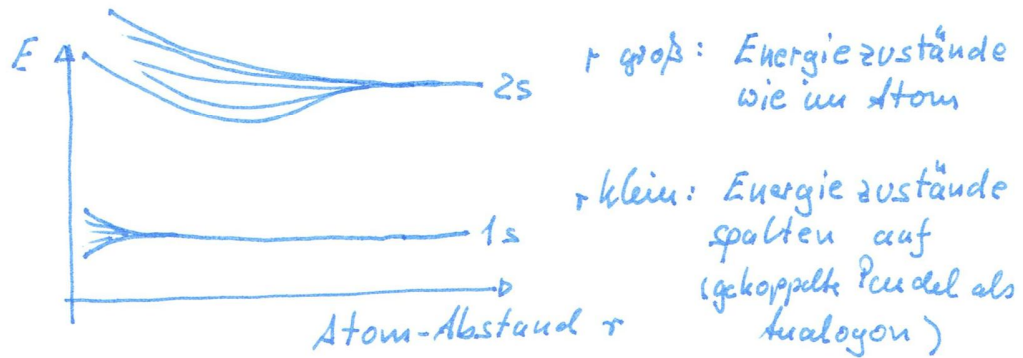


1. Bindungsarten

- Warum ist ein Festkörper fest?



Absenkung der Gesamtenergie

wird verursacht durch Überlapp der Wellenfunktionen

Quantenmechanische korrekte Beschreibung

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta}_{\text{kin. Energie}} - \underbrace{\sum_i \frac{Z_i e^2}{4\pi\epsilon_0 (r - r_i)}}_{\text{Potential d. Atomkerne}} + \underbrace{\sum_{i,j} \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 (r_i - r_j)}}_{\text{Abstoßung}} + \underbrace{\sum_{i,j} \frac{e^2}{(r_i - r_j) 4\pi\epsilon_0}}_{e^- - e^- \text{ WW}}$$

$H\psi = E\psi$; Eigenwerte E bestimmen.

Diese Aufgabe ist für ein Vielteilchensystem unlösbar $\rightarrow$ gute Näherungen sind gefragt.

Einsordnung unterschiedlicher Bindungsarten:

Radius d. Wellenfunktion r_c ; Atomabstand r_{atom}

- $r_c < r_{\text{atom}}$: Überlapp nur zwischen nächsten Nachbarn, gerichtete Bindung, Bindungswinkel wichtig

kovalente Bindung

Beispiel: Diamant, Silizium

- $r_e > r_{atom}$: Überlapp mit vielen anderen Wellenfunktionen in der Nachbarschaft, keine gerichtete Bindung, Bindungswinkel unwichtig, nahezu gleichmäßige Verteilung d. Aufenthaltswahrscheinlichkeit

metallische Bindung

- $r_e < r_{atom}$ und Ladungstransfer:

Bindung durch Coulombanziehung

ionische Bindung

Beispiel: NaCl

- Dynamische Polarisierung des Dipolmoments existiert immer, wird aber von den oben genannten Bindungsarten übertriffen. Wird wichtig, wenn die anderen Bindungen nicht vorhanden sind (z.B. aufgrund abgeschlossener Schalen)

van-der Waals - Bindung

Beispiel: Argon-Kristall, Tesa-Film

- Statisches Dipolmoment

Besonders stark für $-H^{(+)} \cdots OH^{(-)}$

Wasserstoff-Brücken-Bindung

Was bedeutet fest?

3

Atome eines Festkörpers nehmen einen festen Platz im Verhältnis zu ihren Nachbarn ein.

Gegensatz: Fluid (flüssig oder gasförmig)
Atome bewegen sich an jede beliebige Position.

Grenzfälle: • Festkörper mit extrem hoher Diffusion
Li-Ionen Kristalle
• Flüssigkeiten mit extrem niedriger Diff.
Siegel-Lack

Bindung	Beispiel	Schemma	Bindungsenergie E_b (eV/atom)	T_s (K)	$\frac{k_B T_s}{E_b}$
---------	----------	---------	------------------------------------	-----------	-----------------------

Kovalent	Si		3.7	2673	0.06
----------	----	---	-----	------	------

Ionisch	NaCl		6.7	-	-
---------	------	---	-----	---	---

Metallisch	Ag		3.0	2583	0.06
------------	----	---	-----	------	------

v.d. Waals	Ar		0.08	87	0.09
------------	----	---	------	----	------

H-Brücken	H ₂ O		0.5	373	0.06
-----------	------------------	---	-----	-----	------

$$1 \frac{\text{eV}}{\text{atom}} = 23 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}, \quad 1 \frac{\text{eV}}{k_B} = 11600 \text{ K}; \quad 1 \text{ K} \cdot k_B = 86 \mu\text{eV}$$