

Molekül- und Festkörperphysik





Vorlesung: Di. und Do. 9:15 – 11:00, INF 308 H1

Christian Enss

Kirchhoff-Institut für Physik (KIP)

Raum: 1.106, Telefon: 06221/549861

email: enss@kip.uni-heidelberg.de

Sprechstunde: montags 14:00 – 15:00, Bitte vorher anmelden, zusätzliche Sprechstundentermine nach Vereinbarung

Übungen: Do. und Fr., verschiedene Zeiten, **10 Gruppen**

Koordinator: Andreas Reiser

Kirchhoff-Institut für Physik (KIP)

Raum: 0.305, Telefon: 06221/549170

email: andreas.reiser@kip.uni-heidelberg.de



Web: <https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/vorlesung/20252/pep5>



Für das Bestehen des Moduls ist die **aktive Teilnahme an den Übungen** und das **Bestehen der Klausur** erforderlich.

Die **aktive** Teilnahme an den Übungen wird durch das **Präsentieren von Lösungswegen** zu den wöchentlich gestellten Übungsaufgaben **nachgewiesen**. Die Bereitschaft zur Präsentation einer Aufgabenlösung kann zu Beginn jedes Übungstermins angezeigt werden. Entsprechende Namenlisten werden jeweils ausgelegt. Von den voraussichtlich 36 Teilaufgaben (ca. 12 Übungsblätter mit je 3 Aufgaben) müssen **mindestens 60%** gekennzeichnet sein. Im Falle einer Präsentation muss erkenntlich sein, dass ein Lösungsweg bereits erarbeitet wurde.

Schriftlich ausgearbeitete Lösungen können **zusätzlich** in der Vorlesung am Dienstag vor der jeweiligen Übung abgegeben werden. Sie werden **korrigiert** und zu dem folgenden Übungstermin wieder zurückgegeben, sie gehen jedoch in der Regel **nicht in eine Bewertung** ein. Die freiwillige Abgabe von Lösungen kann auch dazu genutzt werden, den Wunsch nach Klärung besonderer Sachverhalte im Zusammenhang mit den Übungsaufgaben zu äußern.

Klausurtermin: steht noch nicht fest

Anmeldung zu den Übungen über die Webseite:

<https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/vorlesung/20252/pep5>

Übungsblätter werden **immer dienstags** ins Web gestellt.

In der ersten Woche **keine** Übungen!



1. Molekülbindung

H_2^+ , H_2 -Molekül
Kovalente Bindung
Hybridisierung

2. Molekülanregungen

Elektronische Zustände
Rotation und Schwingungen
Infrarot- und Raman-Spektroskopie

3. Bindungskräfte

Van der Waals-Bindung
Ionenbindung
Kovalente Bindung
Metallische Bindung
Wasserstoffbrückenbindung

4. Struktur und Strukturbestimmung

Ordnung und Unordnung
Kristalle
Nichtkristalline Festkörper
Reziprokes Gitter
Einfache Theorie der Streuung
Experimentelle Methoden

5. Gitterdynamik und thermische Eigenschaften

Akustische und optische Gitterschwingungen
Experimentelle Bestimmung von Dispersionskurven
Zustandsdichte
Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen
Spezifische Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit

6. Leitungselektronen

Einfache Metalle: Freies Elektronengas
Sommerfeld-Pauli-Modell
Spezifische Wärme
Pauli-Suszeptibilität
Elektrische und thermische Leitfähigkeit
Bändermodell

7. Halbleiter

Intrinsische kristalline Halbleiter
Dotierte kristalline Halbleiter
Amorphe Halbleiter
Inhomogene Halbleiter
Halbleiterheterostrukturen und Übergitter

8. Supraleitung

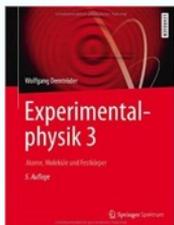
Phänomenologische Beschreibung
Supraleiter 1. und 2. Art
Mikroskopische Beschreibung
Makroskopische Wellenfunktion

9. Magnetische Eigenschaften

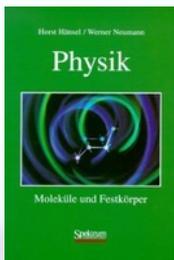
Dia- und Paramagnetismus
Ferromagnetismus
Ferri- und Antiferromagnetismus

10. Dielektrische und optische Eigenschaften

Dielektrische Suszeptibilität
Lokales elektrisches Feld
Elektrische Polarisierung
Optische Eigenschaften freier Ladungsträger



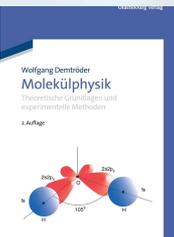
W. Demtröder
Experimentalphysik: Bd.3
Atome, Moleküle und Festkörper
Springer



H. Hähnel, W. Neumann
Moleküle und Festkörper
Spektrum



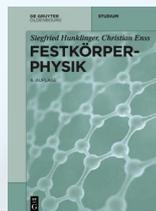
H. Haken, H.-C. Wolf
Molekülphysik und Quantenchemie
Springer-Verlag



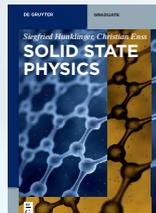
W. Demtröder
Molekülphysik
de Gruyter



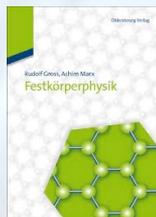
H. Ibach, H. Lüth
Festkörperphysik
Springer



S. Hunklinger, C. Enss
Festkörperphysik,
de Gruyter



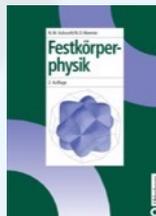
S. Hunklinger, C. Enss
Solid State Physics
de Gruyter



R. Gross, A. Marx
Festkörperphysik,
de Gruyter



Ch. Kittel
Einführung in die Festkörperphysik
de Gruyter



N.W. Ashcroft, N.D. Mermin
Festkörperphysik
de Gruyter



Ziel der Vorlesung

Grundlegendes Verständnis der Eigenschaften aller Materialien

wichtig dabei:

- ▶ Quantenmechanik von Vielteilchensystemen mit Wechselwirkung
- ▶ atomare Eigenschaften, räumliche Anordnung, Bindungsmechanismus
- ▶ übergreifende Konzepte (nicht materialspezifisch)
- ▶ mikroskopische und phänomenologische Modelle
- ▶ kollektive Anregungen
- ▶ makroskopischen Quantenzustände



Warum binden sich neutrale Atome zu Molekülen?

➔ die Gesamtenergie der Moleküle ist geringer als die der Atome

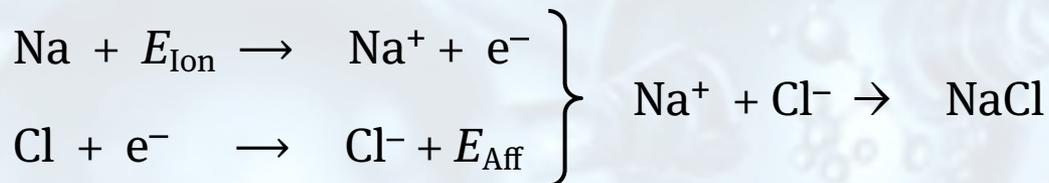
Vorüberlegung:

Betrachte: Na, Cl Atome

Elektronenkonfiguration: Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

wenn ein Elektron von Na auf Cl übergeht: ➤ zwei Ionen mit abgeschlossener Schale
➤ Coulomb Wechselwirkung

Energiebilanz:



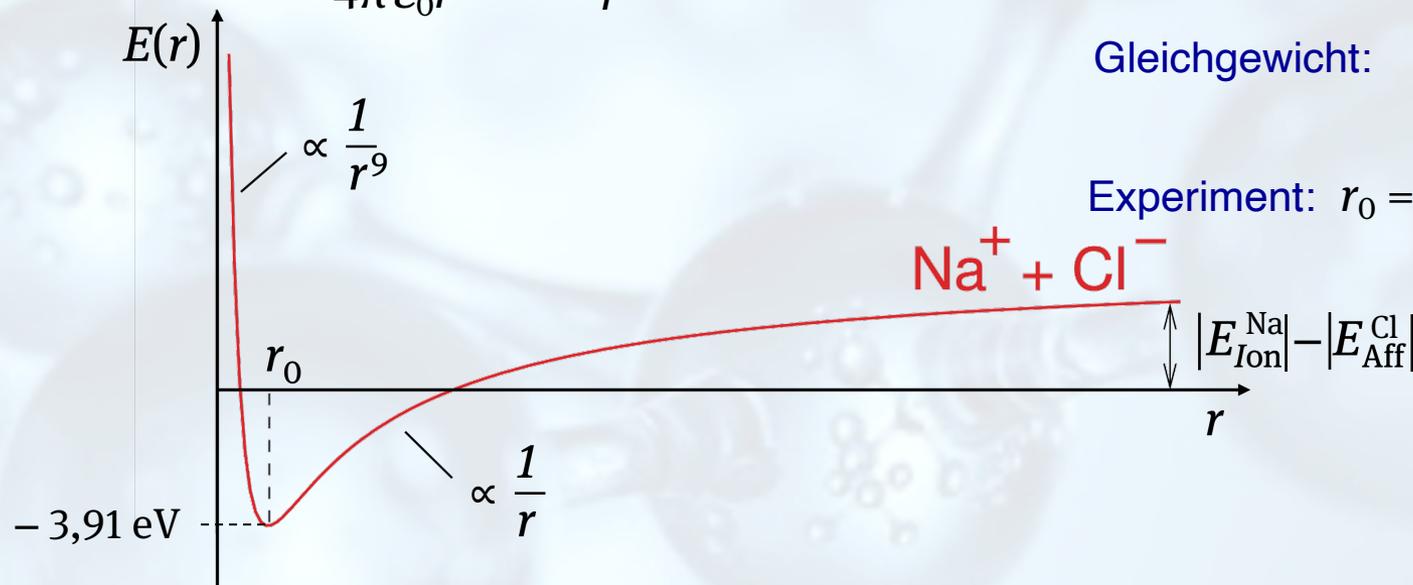
Bindungsenergie: $E_B = -|E_{\text{Coul}}| + \underbrace{|E_{\text{Ion}}^{\text{Na}}| - |E_{\text{Aff}}^{\text{Cl}}|}_{= 1,53 \text{ eV}}$



Coulomb-Energie: $E_{\text{coul}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Pauli-Abstoßung: $E(r) \propto \frac{1}{r^9}$ (empirischer Ansatz)

$E(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{a}{r^9} + |E_{\text{Ion}}^{\text{Na}}| - |E_{\text{Aff}}^{\text{Cl}}|$



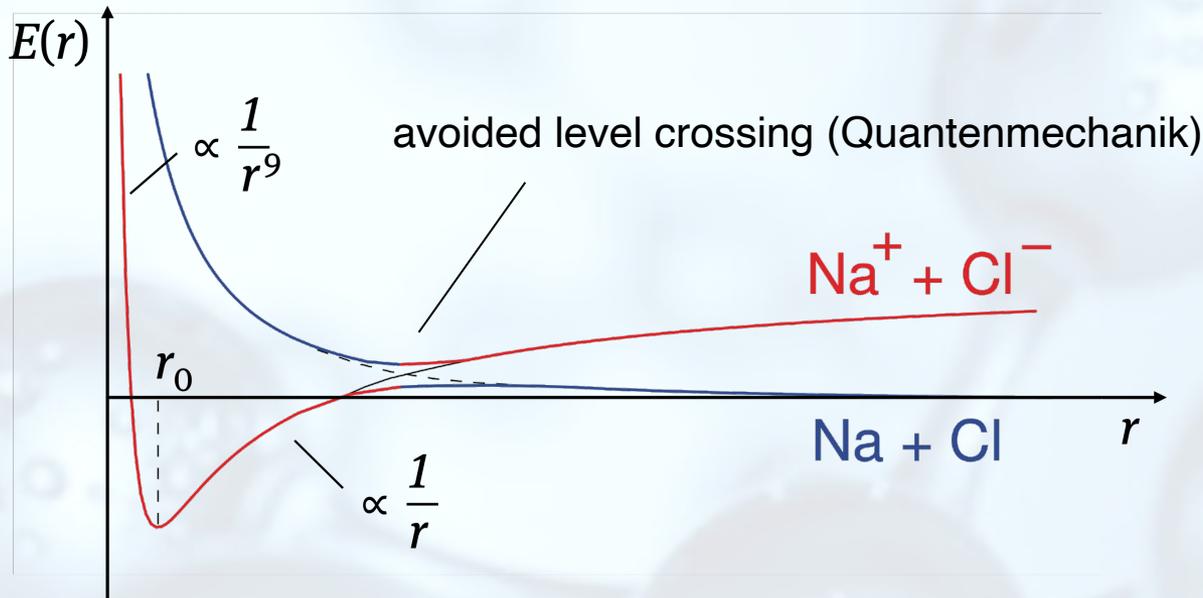
Gleichgewicht: $\left. \frac{dE(r)}{dr} \right|_{r_0} = 0$

Experiment: $r_0 = 2,6 \text{ \AA} \rightarrow a$

$E(r_0) = -5,44 \text{ eV} + 1,53 \text{ eV} = -3,91 \text{ eV}$



Potentielle Energie des Na-Cl Systems als Funktion des Abstands



➔ man spricht von einer **polaren Bindung** oder **Ionenbindung**

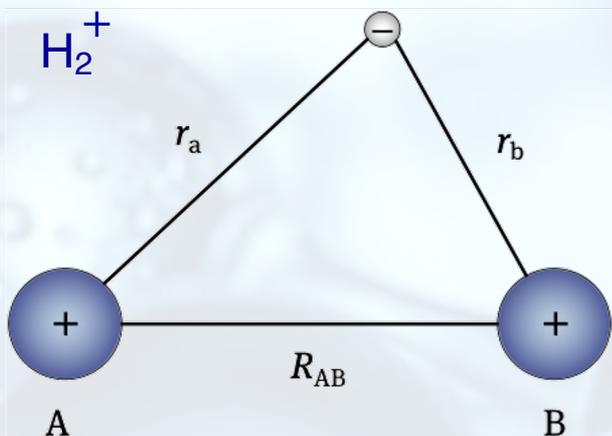
Was passiert bei zwei gleichen Atomen z.B. Wasserstoff?



Typisch für Bindungen von Atomen in Molekülen H_2 , Cl_2 , O_2 , N_2 , ...

Elektronenpaare „gehören“ den Bindungspartnern gemeinsam

Bsp: H_2 Molekül ... zu kompliziert $\rightarrow H_2^+$



- ▶ Kerne bewegen sich langsam
- ▶ Elektronen passen sich augenblicklich an
- ▶ **Kernabstand konstant**
- ▶ Beitrag der Kerne zur kinetischen Energie wird vernachlässigt (Born-Oppenheimer bzw. adiabatische Näherung)

Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

zunächst weglassen, da nur konstanter Offset



Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right] \psi = E \psi$$

Ansatz $\psi = c_1 \varphi_a + c_2 \varphi_b$

Linear Combination of Atomic Orbitals
LCAO Methode

Grundzustandswellenfunktion vom H-Atom

Eigenzustände

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} = \frac{c_1^2 H_{aa} + c_2^2 H_{bb} + 2c_1 c_2 H_{ab}}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S}$$

mit $H_{aa} = \int \varphi_a^* H \varphi_a dV$, $H_{ab} = \int \varphi_a^* H \varphi_b dV = \int \varphi_b^* H \varphi_a dV$, $H_{bb} = \int \varphi_b^* H \varphi_b dV$ und $S = \int \varphi_b^* \varphi_a dV$

Austauschintegral ist negativ, d.h. die Anziehung beruht darauf dass sich das Elektron teils im Zustand φ_a bzw. φ_b befindet