

Kondensierte Materie

- grundlegendes Verständnis der Eigenschaften aller Materialien
 - Quantenmechanik von Vielteilchensystemen mit Wechselwirkung
 - Atomare Eigenschaften
 - räumliche Anordnungen
 - Bindungsmechanismen
- } Eigenschaften der kondensierten Materie
- übergreifende Konzepte
 - mikroskopische und phänomenologische Modelle
 - kollektive Anregungen

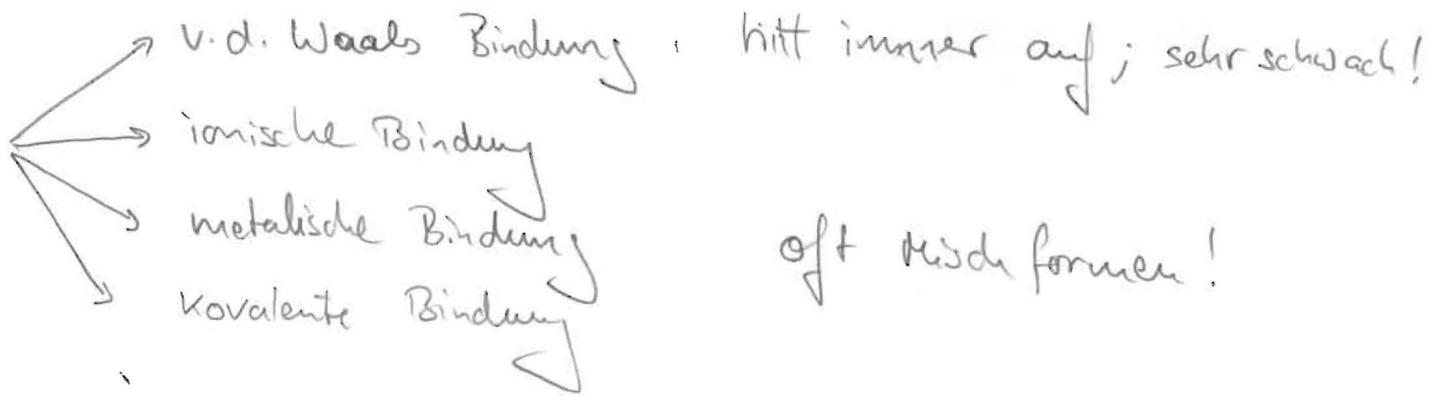
1) Bindungskräfte

basieren alle auf der Coulomb-WW zwischen Kernen und Elektronen

trotzdem: verschiedene Bindungstypen

entscheidend: Valenzelektronen Konfiguration!

→ Bild



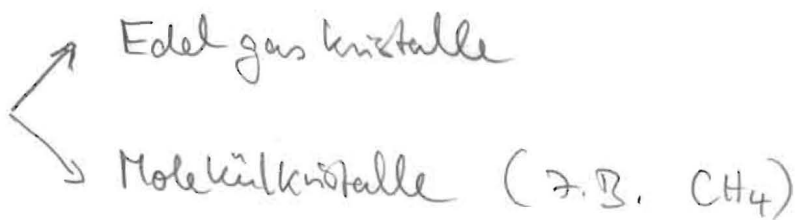
Besonderheit : Wasserstoffbrückenbindung
 - weitgehend ionischer Charakter
 - wichtig vor allem bei organischen Substanzen

Bindungsenergie (Gitterenergie)

Def: $\Delta E_B(T=0) = E_{FK} - E_{A, \text{Moleküle}}$
 ↑
 Nullpunktenergie enthalten!

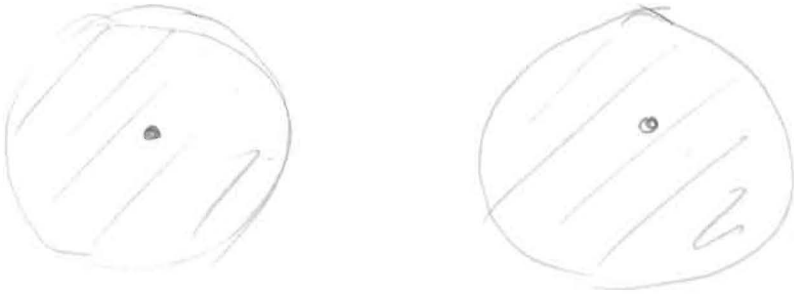
→ Tabelle

1.1 Van der Waals-Bindung



Johannes Diderik
 van der Waals
 geb. 1837 Leiden
 gest. 1923 Amsterdam
 NP 1910

Betrachte zwei (neutrale) Atome mit
kugelsymmetrischer Ladungsverteilung



→ kein permanentes Dipolmoment, aber Ladungsfuktuationen → momentanes Dipolmoment

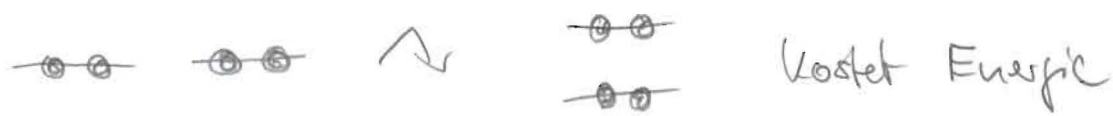
$$p_1 \rightarrow E \propto \frac{p_1}{r^3} \leadsto p_2 \propto E \propto \frac{p_1}{r^3}$$

$$\leadsto \underset{\text{Potential}}{g(r)} \propto \frac{p_1 p_2}{r^3} \propto \frac{p_1^2}{r^6} \quad \vec{p}_1 \parallel \vec{p}_2 \text{ vereinfachte Annahme}$$

$$\leadsto g(r) = -\frac{B}{r^6} \quad \text{positiv, Polarisierbarkeit der Atome geht ein}$$

QM Störungsrechnung liefert Energieabsenkung →
ausreichende WW (Theorie von London)

Abstoßung, entscheidet: das Pauli-Prinzip
(Coulomb-WW ist unwichtig)



→ Atome verhalten sich fast wie harte Kugeln

empirische Näherungen für die Abstandsabhängigkeit:

→ Lennard-Jones $\mathcal{J}(r) = \frac{A}{r^{12}}$ (abstoßendes Teil)

→ Born-Mayer $\mathcal{J}(r) = A' e^{-r/r_0}$
| charakteristische Reichweite des abstoßenden Potentials

Gute Beschreibung für Edelgas Kristalle

⇒ Lennard-Jones Potential

$$\mathcal{J}(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

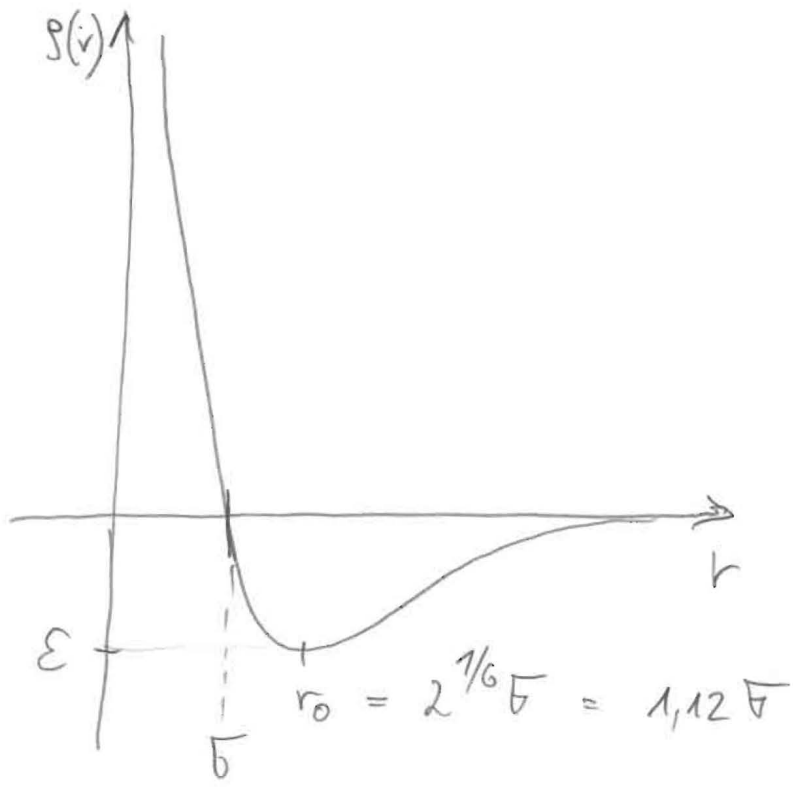
ϵ, σ neue Parameter:

Bestimmung: - Steinproteine mit Atomstrahlen

- v.d. W. Gleichung

- Edelgas Kristalle

! Sublimationswärme Kompressibilität



Gitterenergie (zunächst nur potentielle Energie ohne Nullpunktsenergie)

$$U_B = \frac{1}{2} \sum_m \varphi_m = \frac{N}{2} \varphi_m = \frac{1}{2} N \sum_{n \neq m} 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^6 \right]$$

paarweise
WW

$$\varphi_m = \sum_{n \neq m} \varphi_{mn}$$

WW zwischen m, n

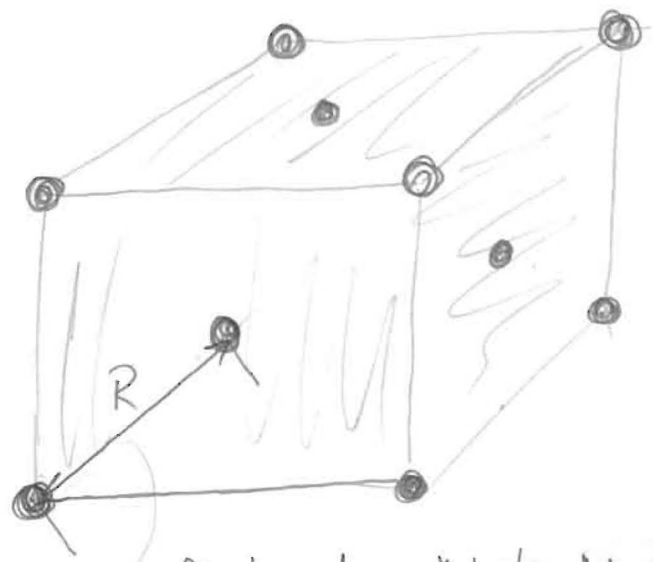
↑
potentielle Energie mit der das Atom m gebunden ist

$$r_{nm} = p_{mn} \cdot R \quad \text{Abstand nächster Nachbarn}$$

Summation ist abhängig von der Struktur

Bsp Edelgas kristalle mit kubisch-flächenzentrierte Struktur

vorgriff → später genauer



Abstand nächster Nachbarn

für diese Struktur: $\rho_{nn} = (1, \sqrt{2}, 2, \sqrt{3}, \dots)$

$$U_B = 2N\epsilon \left[\left(\frac{5}{R}\right)^{12} \underbrace{\left(\frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{(\sqrt{2})^{12}} + \dots\right)}_{12,13188} - \left(\frac{5}{R}\right)^6 \underbrace{\left(\frac{12}{1^6} + \frac{6}{\sqrt{2}^6} + \dots\right)}_{14,45392} \right]$$

$$\leadsto U_B = 2N\epsilon \left[12,13 \left(\frac{5}{R}\right)^{12} - 14,45 \left(\frac{5}{R}\right)^6 \right]$$

mit Hilfe der Stabilitätsbedingung.

$$\frac{dU_B}{dR} \Big|_{R_0} = 0 \quad \leadsto \quad \underline{R_0 = 1,095}$$

- sollte für alle Edelgas kristalle mit fcc gelten
- kleiner als bei "Molekul" ($r = 1,125$)

$R_0 = 1,09 \text{ \AA}$ in (*) einsetzen

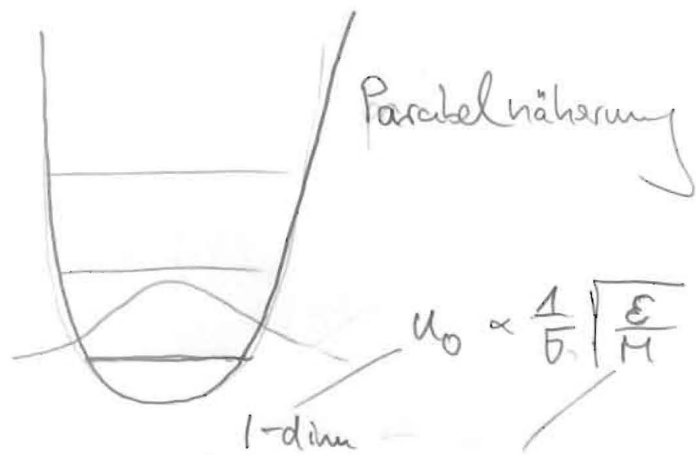
$$\Rightarrow U_B(R_0) = -8,6 \text{ NE}$$

(merkliche)

Abweichungen findet man bei leichten Edelgasen

Grund: Nullpunktsbewegung

vereinfachtes Modell.



$$U_{B, \text{ges}} = -8,6 \text{ E} + u_0$$

He wird unter
Normaldruck nicht
fest

→ Tabelle

→ Bild Gecko (400N)

1.2 Ionenbindung (heteropolare Bindung)

betrachte Ionen als geladene Kugeln

entgegengesetzt geladene Kugeln im Abstand R_0

$$U_B = - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 R_0}$$

Coulomb Energie