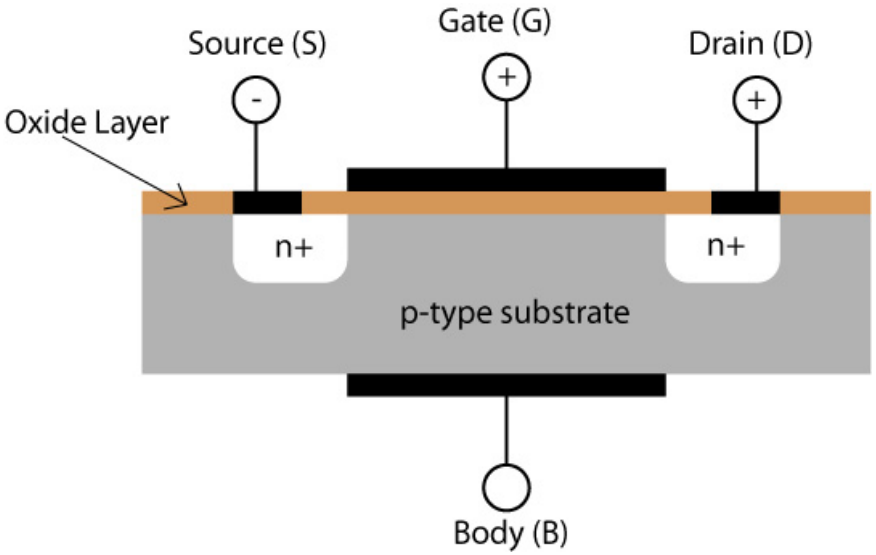
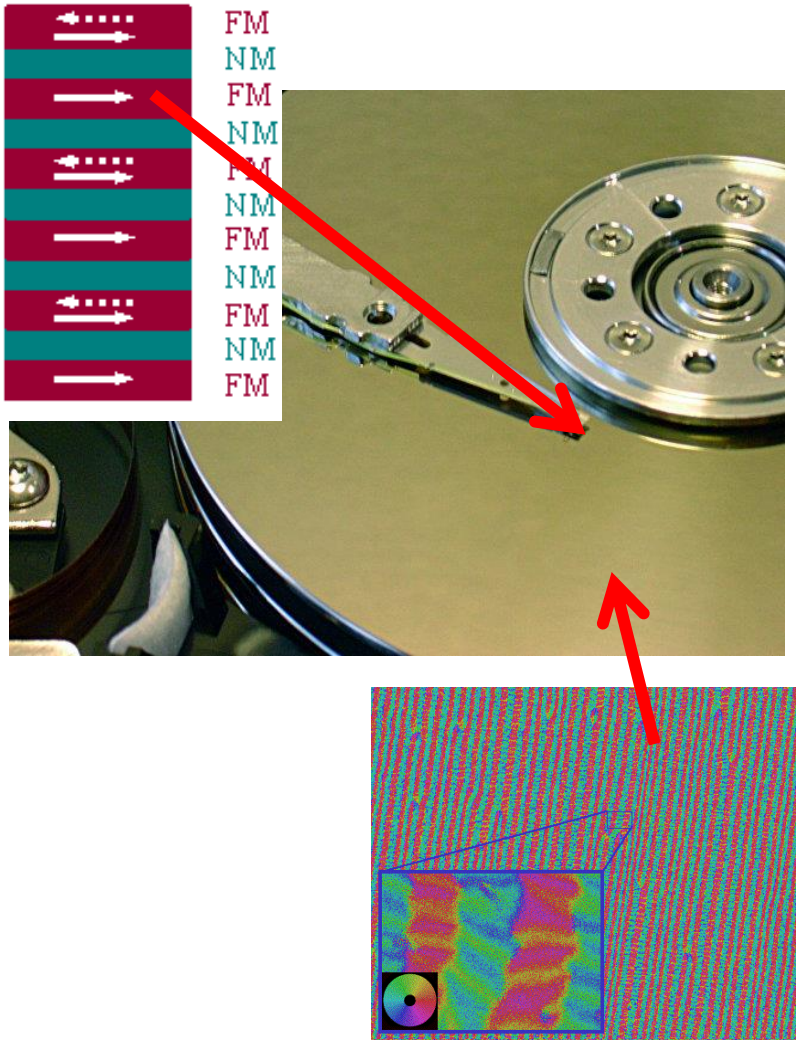
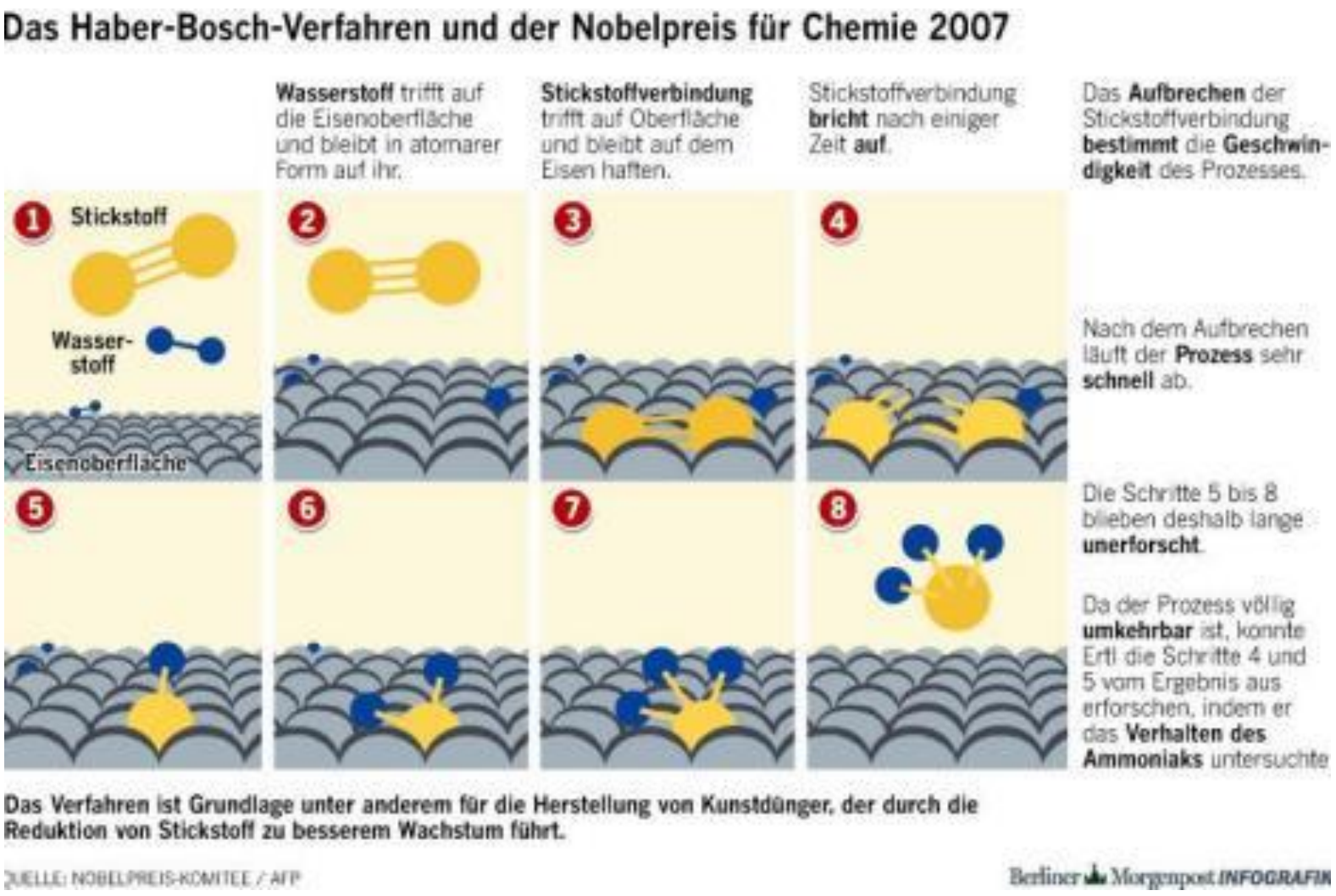
Physik V – Festkörper- (und Oberflächen)physik – MNF-phys-501





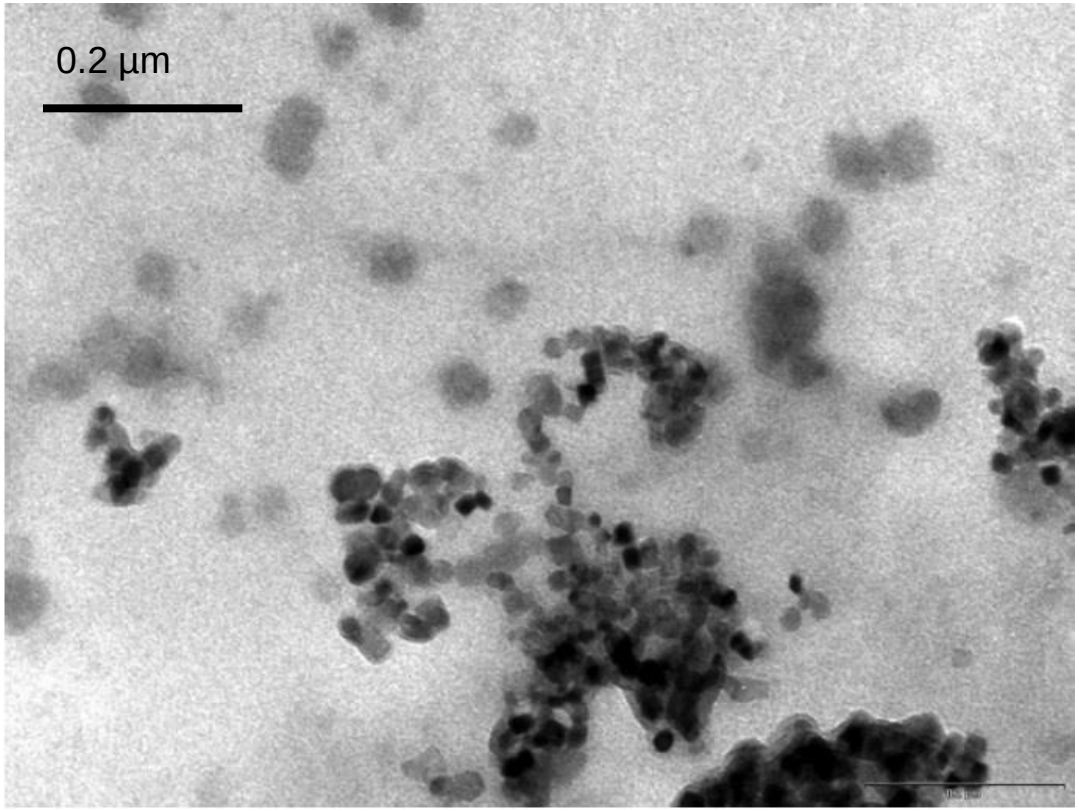
Schema eines MOSFET (links) und magnetische Festplatte mit Lesekopf (rechts)

Physik V – Festkörper- (und Oberflächen)physik – MNF-phys-501



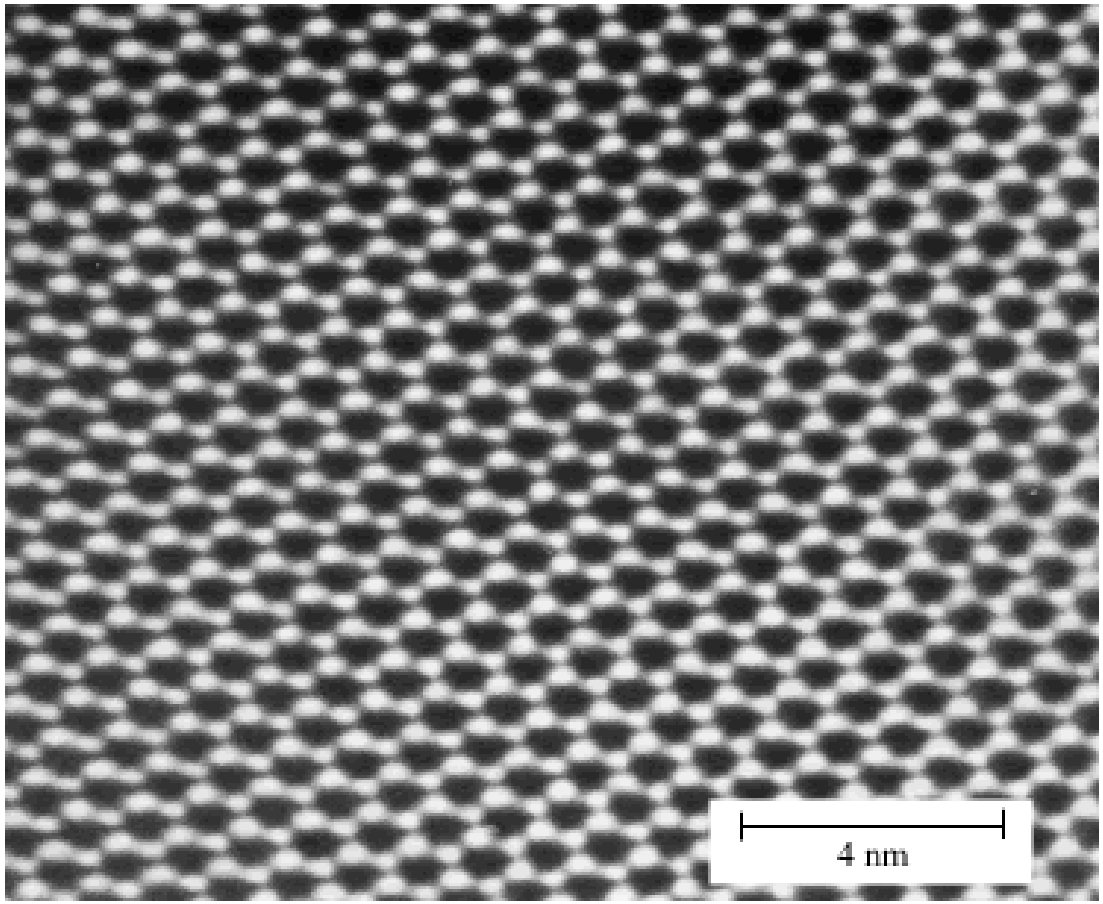
Katalytische Reaktionen an Festkörper-Oberflächen

Physik V – Festkörper- (und Oberflächen)physik – MNF-phys-501

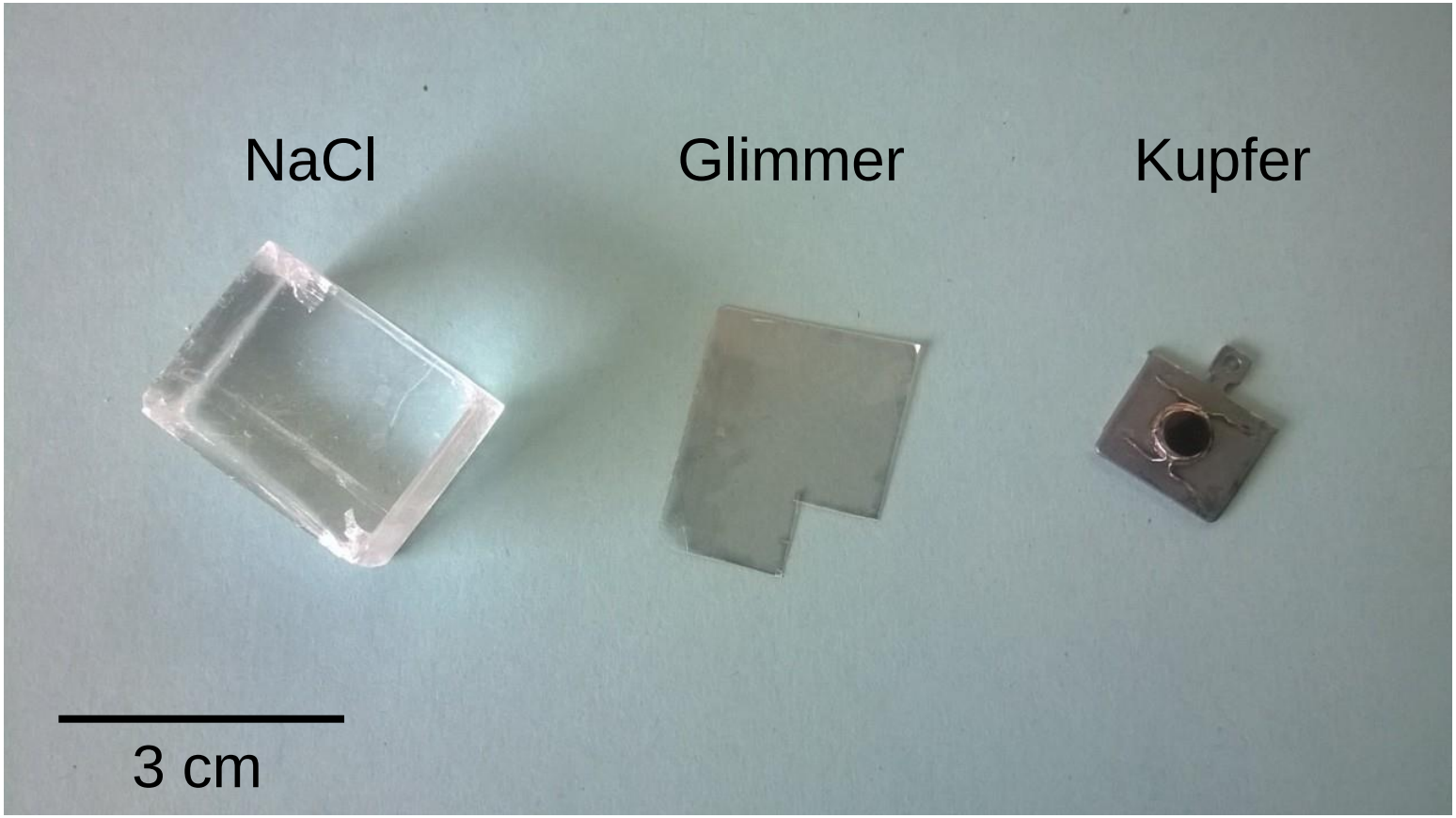


TEM-Aufnahme von 25 nm großen TiO_2 – Nanoteilchen in einer Sonnencreme

Physik V - Festkörperphysik



Beispiel: Transmissions-Elektronenmikroskopie Aufnahme eines Kordierit ($Mg_2Al_4Si_5O_{18}$) - Einkristalls



Beispiele verschiedener Materialien in ‚einkristalliner' Form

Physik V - Festkörperphysik

1. Chemische Bindung in Festkörpern
2. die Struktur von Kristallen
3. Beugung und das reziproke Gitter
4. Phononen: Gitterschwingungen und thermische Eigenschaften
5. das freie Elektronengas
6. Energiebänder und Fermiflächen
7. Halbleiterkristalle
8. Magnetismus
9. Supraleitung

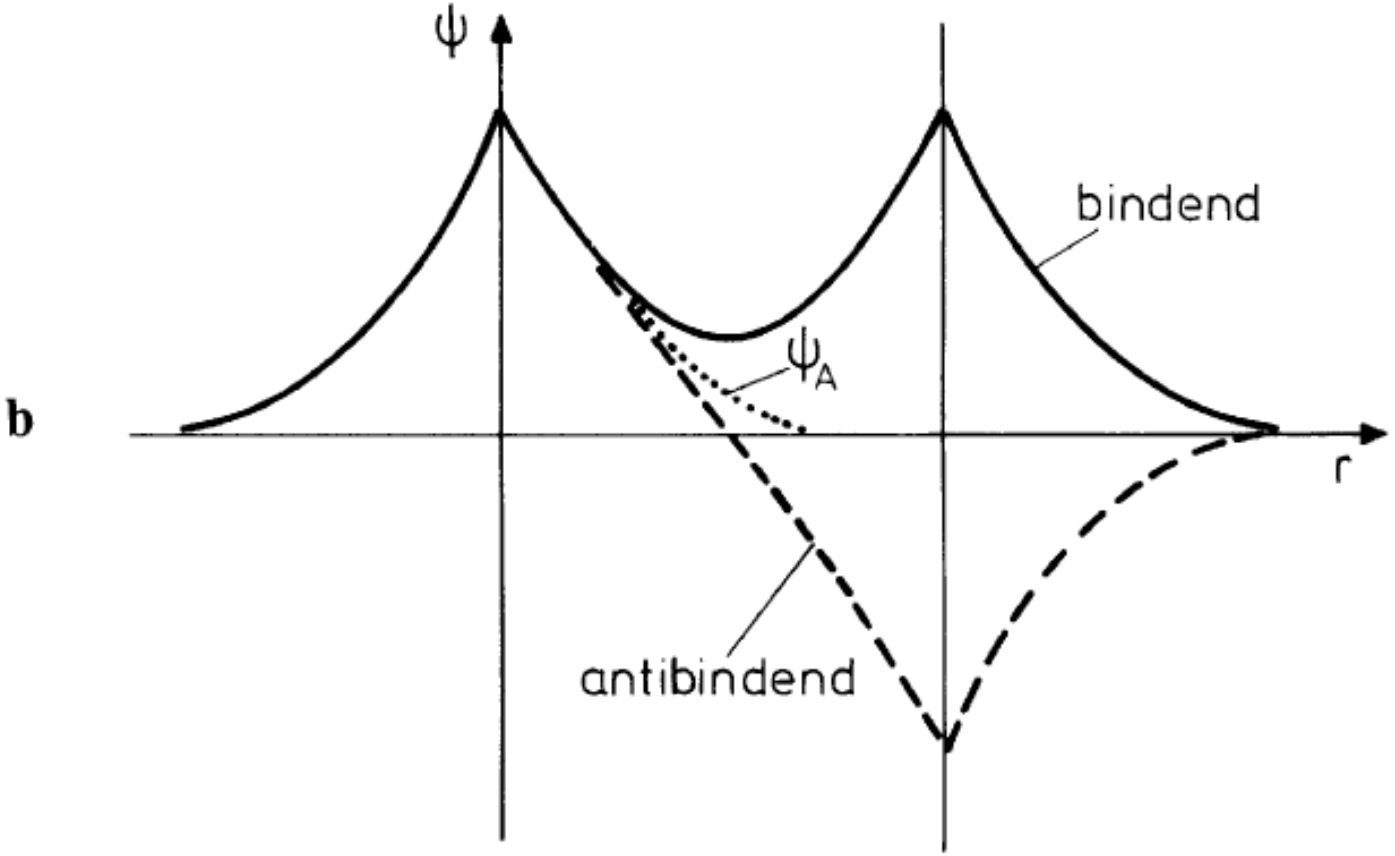
1. Die chemische Bindung

Chemische Bindungen in Festkörpern:

- Kovalente Bindung:	Si
- Ionische Bindungen:	NaCl
- Metallische Bindung:	Na
- Van der Waals Bindung:	Trockeneis (CO_2)
- Wasserstoffbrückenbindungen:	Eis (H_2O)

1. Die chemische Bindung

1.1 die kovalente Bindung



Bindende und antibindende Kombination der 1s Wellenfunktion zur Beschreibung der Bindung im H_2^+ - Molekül (Quelle: Ibach/Lüth)

1. Die chemische Bindung

1.1 die kovalente Bindung

- stark gerichtet

- Im Festkörper: nur **Nächste-Nachbar Wechselwirkung** durch lokalen Wellenfunktionsüberlapp

- starke Bindung mit typischen Bindungsenergien von einigen eV/Bindung

1. Die chemische Bindung

Tabelle 3.1: Bindungsenergien.
Energie, die erforderlich ist, um aus einem Festkörper bei 0 K und 1 atm freie, neutrale Atome in ihrem Grundzustand zu bilden. Die Daten wurden von Prof. Leo Brewer zur Verfügung gestellt.

Li	**Be**												**B**	**C**	**N**	**O**	**F**	**Ne**
158.	320.												561	711.	474.	251.	81.0	1.92
1.63	3.32												5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020
37.7	76.5												134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46
Na	**Mg**												**Al**	**Si**	**P**	**S**	**Cl**	**Ar**
107.	145.	← kJ/mol →											327.	446.	331.	275.	135.	7.74
1.113	1.51	← eV/atom →											3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080
25.67	34.7	← kcal/mol →											78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85
K	**Ca**	**Sc**	**Ti**	**V**	**Cr**	**Mn**	**Fe**	**Co**	**Ni**	**Cu**	**Zn**		**Ga**	**Ge**	**As**	**Se**	**Br**	**Kr**
90.1	178.	376	468.	512.	395.	282.	413.	424.	428.	336.	130		271.	372.	285.3	237	118.	11.2
0.934	1.84	3.90	4.85	5.31	4.10	2.92	4.28	4.39	4.44	3.49	1.35		2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116
21.54	42.5	89.9	111.8	122.4	94.5	67.4	98.7	101.3	102.4	80.4	31.04		64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68
Rb	**Sr**	**Y**	**Zr**	**Nb**	**Mo**	**Tc**	**Ru**	**Rh**	**Pd**	**Ag**	**Cd**		**In**	**Sn**	**Sb**	**Te**	**I**	**Xe**
82.2	166.	422.	603.	730.	658.	661.	650.	554.	376.	284.	112.		243.	303.	265.	211.	107.	15.9
0.852	1.72	4.37	6.25	7.57	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	1.16		2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16
19.64	39.7	100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	26.73		58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80
Cs	**Ba**	**La**	**Hf**	**Ta**	**W**	**Re**	**Os**	**Ir**	**Pt**	**Au**	**Hg**		**Tl**	**Pb**	**Bi**	**Po**	**At**	**Rn**
77.6	183.	431.	621.	782.	859.	775.	788.	670.	564.	368.	65.		182.	196.	210.	144.		19.5
0.804	1.90	4.47	6.44	8.10	8.90	8.03	8.17	6.94	5.84	3.81	0.67		1.88	2.03	2.18	1.50		0.202
18.54	43.7	103.1	148.4	186.9	205.2	185.2	188.4	160.1	134.7	87.96	15.5		43.4	46.78	50.2	34.5		4.66
Fr	**Ra**	**Ac**																
	160.	410.																
	1.66	4.25																
	38.2	98.																

Ce	**Pr**	**Nd**	**Pm**	**Sm**	**Eu**	**Gd**	**Tb**	**Dy**	**Ho**	**Er**	**Tm**	**Yb**	**Lu**
417.	357.	328.		206.	179.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.
4.32	3.70	3.40		2.14	1.86	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43
99.7	85.3	78.5		49.3	42.8	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2
Th	**Pa**	**U**	**Np**	**Pu**	**Am**	**Cm**	**Bk**	**Cf**	**Es**	**Fm**	**Md**	**No**	**Lr**
598.		536.	456	347.	264.	385							
6.20		5.55	4.73	3.60	2.73	3.99							
142.9		128.	109.	83.0	63.	92.1							

(Quelle: Kittel)

Wiederholung vom 23.10.2017

1.1 kovalente Bindung

- *Beispiel:* H_2^+ Molekül
- *Bindungsmechanismen*:
  i) Ladungsdichteerhöhung zwischen Bindungspartner
  (ii) Delokalisierung der Wellenfunktion)
- *Eigenschaften:*
  stark gerichtete Bindung
  Wechselwirkung auf nächste Nachbarn beschränkt
  starke Bindung (einige eV/Atom)

1. Die chemische Bindung

1.2 die ionische Bindung

z.B.: $Na + Cl \rightarrow Na^+Cl^-$

Bindungsstärke der ionischen Bindung

1) $A + B + E_I \rightarrow A^+ + e^- + B$ Ionisierungsenergie E_I

2) $A^+ + e^- + B \rightarrow A^+ + B^- + E_A$ Elektronenaffinität E_A

3) $A^+ + B^- \rightarrow AB + E_C$ Coulombenergie E_C

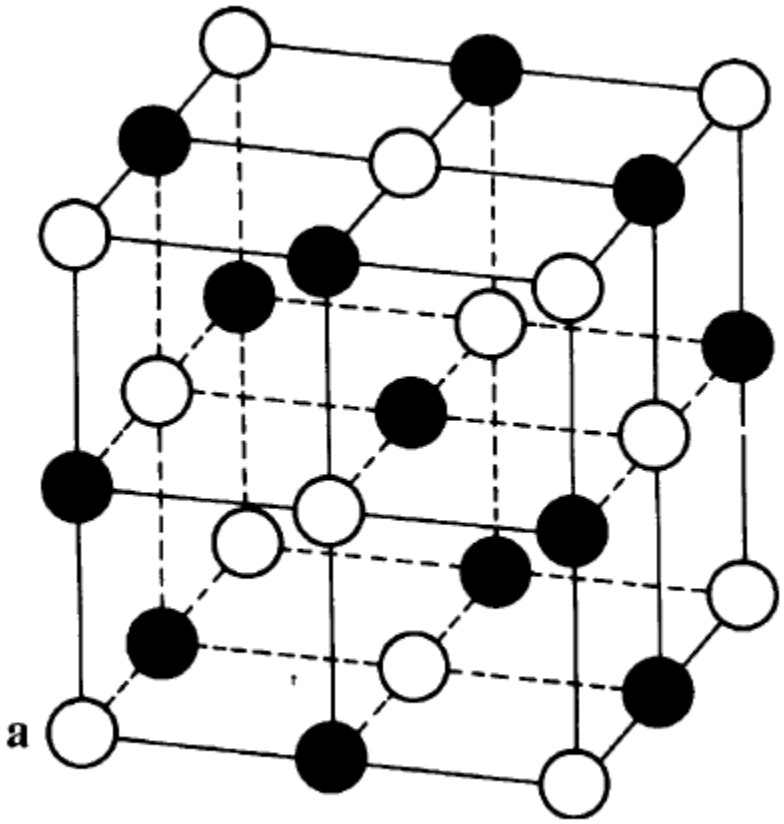
Beispiel: NaCl E_I = -5.14 eV
E_A = +3.71 eV
E_C = +4.51eV

⇨ Bindungsenergie $E_B = E_I + E_A + E_C$ = 3.08 eV

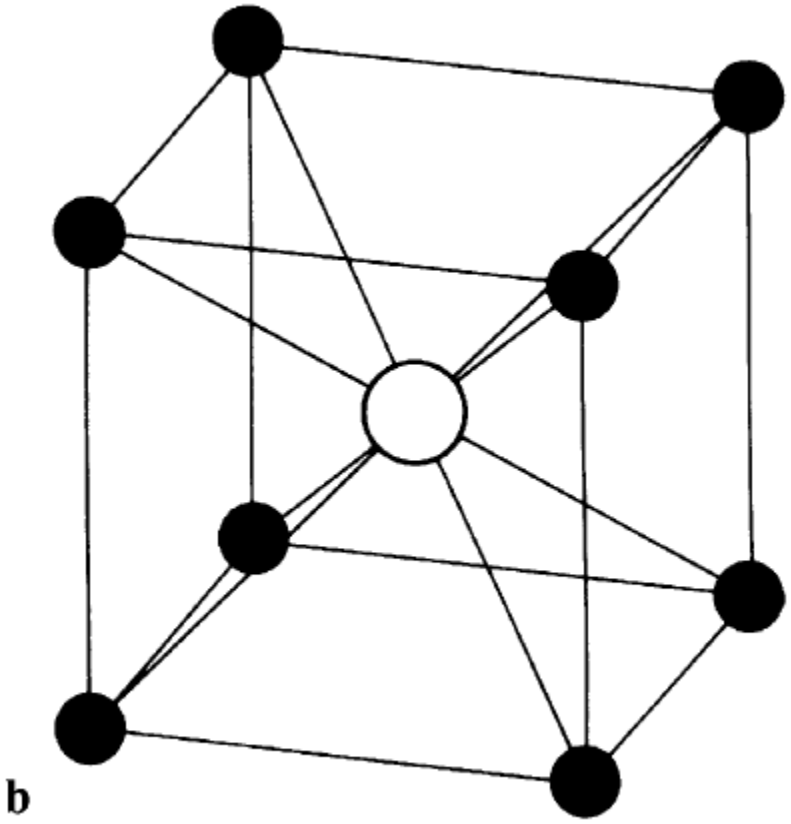
1. Die chemische Bindung

1.2 die ionische Bindung

NaCl-Struktur



CsCl-Struktur



Festkörperstrukturen für ionische Bindungen a) NaCl-Struktur und b) CsCl-Struktur (Quelle: Ibach/Lüth)

1. Die chemische Bindung

1.2 die ionische Bindung

Wechselwirkungsenergie U_{ij} zwischen zwei Ionen i, j in einem ionischen Kristall (empirisch)

$$U_{ij} = \pm \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} + \frac{B}{{r_{ij}}^n}$$

Bindungsstärke U_i des Ions i durch WW mit allen anderen Ionen

$$U_i = \sum_{i \neq j} U_{ij} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{p_{ij}} + \frac{B}{R^n} \sum_{i \neq j} \frac{1}{{p_{ij}}^n} \approx -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{p_{ij}} + \frac{B}{R^n}$$

Madelungkonstante α: $\alpha = \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{p_{ij}}$

Annahme:
nur nächste-Nachbar WW

z.B. NaCl-Struktur $\alpha = 1.748$

CsCl-Struktur $\alpha = 1.763$

1.2 die ionische Bindung

- ungerichtete Bindung (kugelsymmetrische Ladungsverteilung der Bindungspartner)

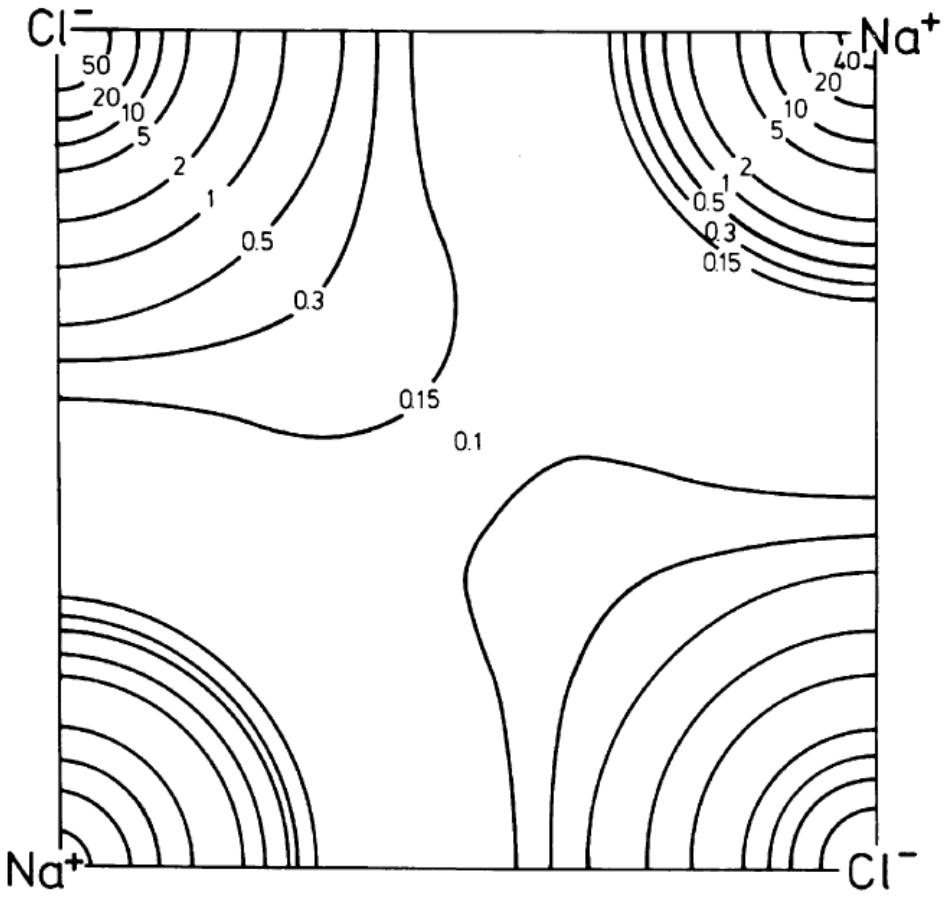
- Wechselwirkung reicht weit über nächsten Nachbarn hinaus (Madelungkonstante!)

- starke Bindung mit typischen Bindungsenergien von einigen eV/Bindung

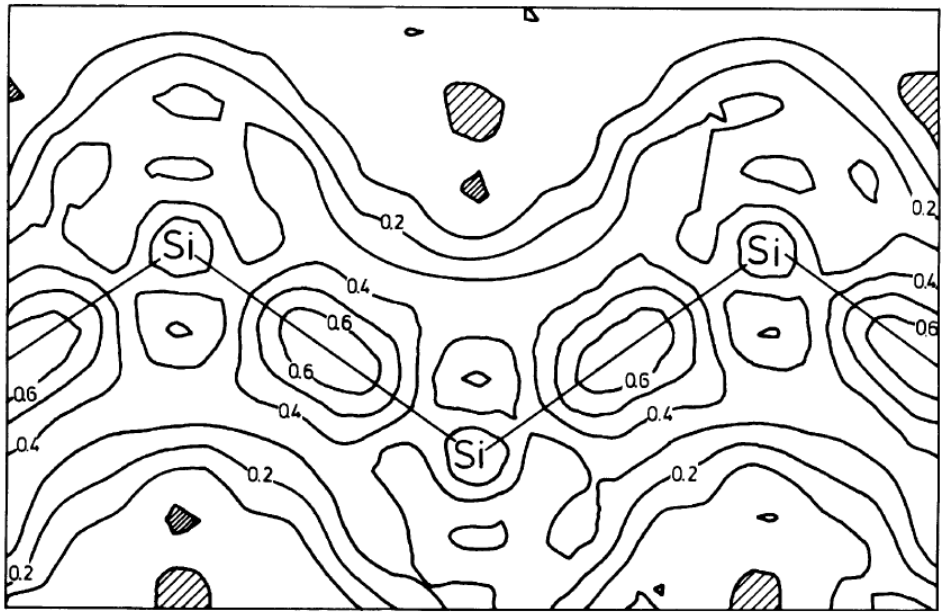
Beispiele:	NaCl	E_B = 7.95 eV
	NaI	E_B = 7.10 eV
	KBr	E_B = 6.92 eV

1. Die chemische Bindung

Ionische Bindung



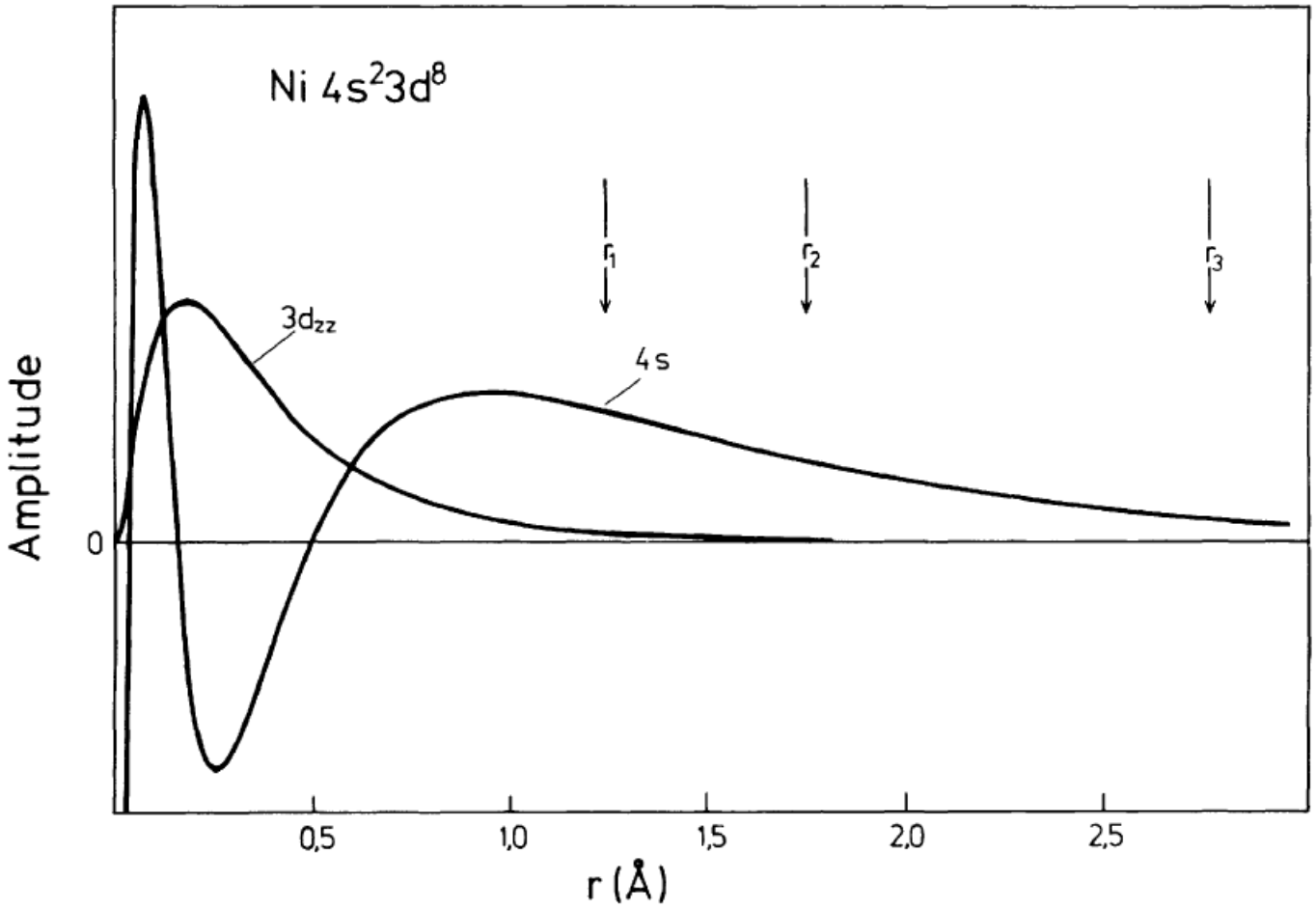
Kovalente Bindung



Elektronendichten im ionischen NaCl-Kristall (links) und im kovalenten Si-Kristall (rechts) (Quelle: Ibach/Lüth)

1. Die chemische Bindung

1.3 metallische Bindungen



Delokalisierung der 4s Wellenfunktion in Nickel; r_1, r_2 und r_3 geben die Positionen der nächsten Nickelatome an (Quelle: Ibach/Lüth)

1. Die chemische Bindung

Tabelle 3.1: Bindungsenergien.
Energie, die erforderlich ist, um aus einem Festkörper bei 0 K und 1 atm freie, neutrale Atome in ihrem Grundzustand zu bilden. Die Daten wurden von Prof. Leo Brewer zur Verfügung gestellt.

Li	**Be**											**B**	**C**	**N**	**O**	**F**	**Ne**
158.	320.											561	711.	474.	251.	81.0	1.92
1.63	3.32											5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020
37.7	76.5											134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46
Na	**Mg**											**Al**	**Si**	**P**	**S**	**Cl**	**Ar**
107.	145.	← kJ/mol →										327.	446.	331.	275.	135.	7.74
1.113	1.51	← eV/atom →										3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080
25.67	34.7	← kcal/mol →										78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85
K	**Ca**	**Sc**	**Ti**	**V**	**Cr**	**Mn**	**Fe**	**Co**	**Ni**	**Cu**	**Zn**	**Ga**	**Ge**	**As**	**Se**	**Br**	**Kr**
90.1	178.	376	468.	512.	395.	282.	413.	424.	428.	336.	130	271.	372.	285.3	237	118.	11.2
0.934	1.84	3.90	4.85	5.31	4.10	2.92	4.28	4.39	4.44	3.49	1.35	2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116
21.54	42.5	89.9	111.8	122.4	94.5	67.4	98.7	101.3	102.4	80.4	31.04	64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68
Rb	**Sr**	**Y**	**Zr**	**Nb**	**Mo**	**Tc**	**Ru**	**Rh**	**Pd**	**Ag**	**Cd**	**In**	**Sn**	**Sb**	**Te**	**I**	**Xe**
82.2	166.	422.	603.	730.	658.	661.	650.	554.	376.	284.	112.	243.	303.	265.	211.	107.	15.9
0.852	1.72	4.37	6.25	7.57	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	1.16	2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16
19.64	39.7	100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	26.73	58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80
Cs	**Ba**	**La**	**Hf**	**Ta**	**W**	**Re**	**Os**	**Ir**	**Pt**	**Au**	**Hg**	**Tl**	**Pb**	**Bi**	**Po**	**At**	**Rn**
77.6	183.	431.	621.	782.	859.	775.	788.	670.	564.	368.	65.	182.	196.	210.	144.		19.5
0.804	1.90	4.47	6.44	8.10	8.90	8.03	8.17	6.94	5.84	3.81	0.67	1.88	2.03	2.18	1.50		0.202
18.54	43.7	103.1	148.4	186.9	205.2	185.2	188.4	160.1	134.7	87.96	15.5	43.4	46.78	50.2	34.5		4.66
Fr	**Ra**	**Ac**															
	160.	410.															
	1.66	4.25															
	38.2	98.															

Ce	**Pr**	**Nd**	**Pm**	**Sm**	**Eu**	**Gd**	**Tb**	**Dy**	**Ho**	**Er**	**Tm**	**Yb**	**Lu**
417.	357.	328.		206.	179.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.
4.32	3.70	3.40		2.14	1.86	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43
99.7	85.3	78.5		49.3	42.8	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2
Th	**Pa**	**U**	**Np**	**Pu**	**Am**	**Cm**	**Bk**	**Cf**	**Es**	**Fm**	**Md**	**No**	**Lr**
598.		536.	456	347.	264.	385							
6.20		5.55	4.73	3.60	2.73	3.99							
142.9		128.	109.	83.0	63.	92.1							

(Quelle: Kittel)

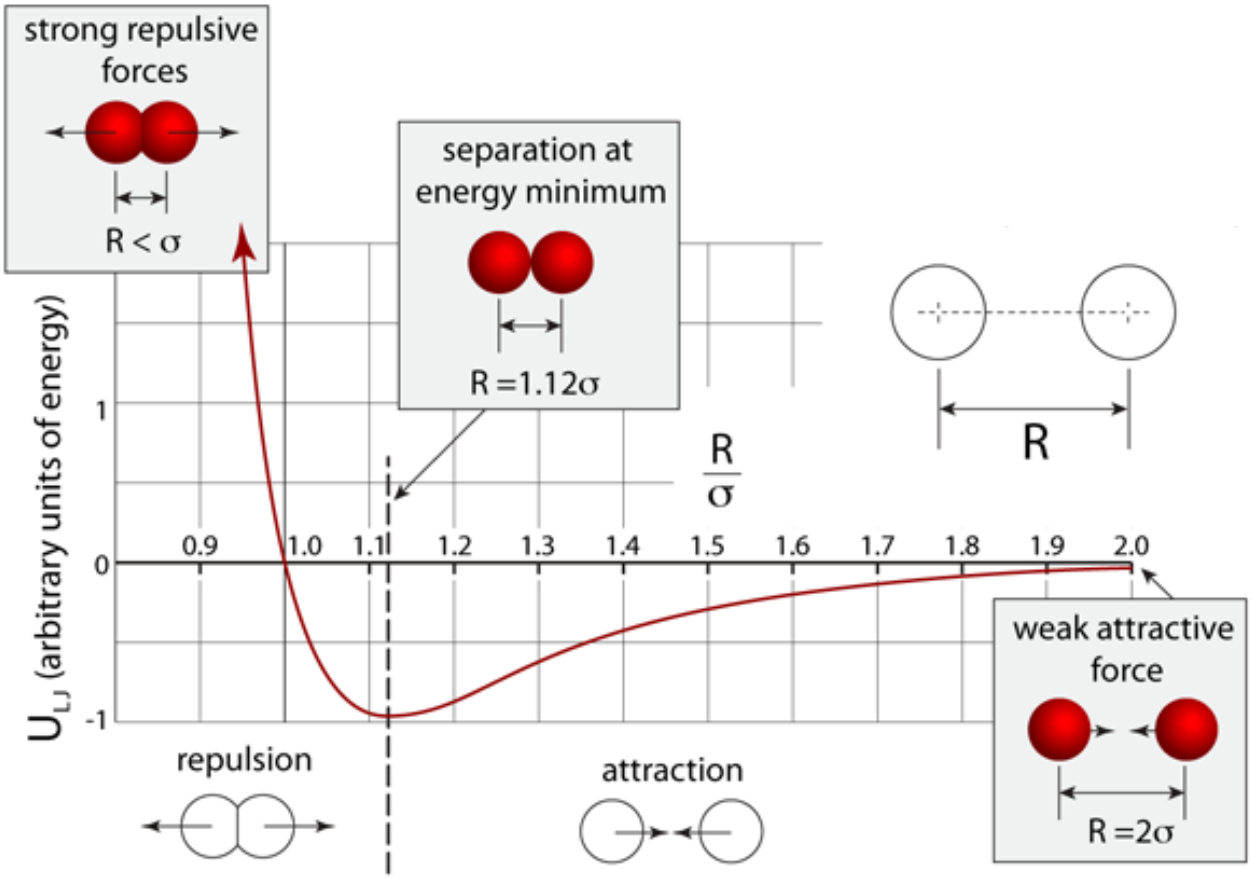
1. Die chemische Bindung

1.3 metallische Bindung

- ungerichtete Bindung
- Starke Delokalisierung → Leitungselektronen
- Bindung mit typischen Bindungsenergien von 1 eV/Atom

1.4 van de Waals Bindung

Lennard-Jones Potential: $U(R) = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right)$



1. Die chemische Bindung

Tabelle 3.1: Bindungsenergien.
Energie, die erforderlich ist, um aus einem Festkörper bei 0 K und 1 atm freie, neutrale Atome in ihrem Grundzustand zu bilden. Die Daten wurden von Prof. Leo Brewer zur Verfügung gestellt.

Li	**Be**												**B**	**C**	**N**	**O**	**F**	**Ne**
158.	320.												561	711.	474.	251.	81.0	1.92
1.63	3.32												5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020
37.7	76.5												134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46
Na	**Mg**												**Al**	**Si**	**P**	**S**	**Cl**	**Ar**
107.	145.	← kJ/mol →											327.	446.	331.	275.	135.	7.74
1.113	1.51	← eV/atom →											3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080
25.67	34.7	← kcal/mol →											78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85
K	**Ca**	**Sc**	**Ti**	**V**	**Cr**	**Mn**	**Fe**	**Co**	**Ni**	**Cu**	**Zn**		**Ga**	**Ge**	**As**	**Se**	**Br**	**Kr**
90.1	178.	376	468.	512.	395.	282.	413.	424.	428.	336.	130		271.	372.	285.3	237	118.	11.2
0.934	1.84	3.90	4.85	5.31	4.10	2.92	4.28	4.39	4.44	3.49	1.35		2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116
21.54	42.5	89.9	111.8	122.4	94.5	67.4	98.7	101.3	102.4	80.4	31.04		64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68
Rb	**Sr**	**Y**	**Zr**	**Nb**	**Mo**	**Tc**	**Ru**	**Rh**	**Pd**	**Ag**	**Cd**		**In**	**Sn**	**Sb**	**Te**	**I**	**Xe**
82.2	166.	422.	603.	730.	658.	661.	650.	554.	376.	284.	112.		243.	303.	265.	211.	107.	15.9
0.852	1.72	4.37	6.25	7.57	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	1.16		2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16
19.64	39.7	100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	26.73		58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80
Cs	**Ba**	**La**	**Hf**	**Ta**	**W**	**Re**	**Os**	**Ir**	**Pt**	**Au**	**Hg**		**Tl**	**Pb**	**Bi**	**Po**	**At**	**Rn**
77.6	183.	431.	621.	782.	859.	775.	788.	670.	564.	368.	65.		182.	196.	210.	144.		19.5
0.804	1.90	4.47	6.44	8.10	8.90	8.03	8.17	6.94	5.84	3.81	0.67		1.88	2.03	2.18	1.50		0.202
18.54	43.7	103.1	148.4	186.9	205.2	185.2	188.4	160.1	134.7	87.96	15.5		43.4	46.78	50.2	34.5		4.66
Fr	**Ra**	**Ac**																
	160.	410.																
	1.66	4.25																
	38.2	98.																

Ce	**Pr**	**Nd**	**Pm**	**Sm**	**Eu**	**Gd**	**Tb**	**Dy**	**Ho**	**Er**	**Tm**	**Yb**	**Lu**
417.	357.	328.		206.	179.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.
4.32	3.70	3.40		2.14	1.86	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43
99.7	85.3	78.5		49.3	42.8	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2
Th	**Pa**	**U**	**Np**	**Pu**	**Am**	**Cm**	**Bk**	**Cf**	**Es**	**Fm**	**Md**	**No**	**Lr**
598.		536.	456	347.	264.	385							
6.20		5.55	4.73	3.60	2.73	3.99							
142.9		128.	109.	83.0	63.	92.1							

(Quelle: Kittel)

1.4 van de Waals Bindung

- Dipol-Dipol Wechselwirkung
- empirische Beschreibung mittels Lennard-Jones Potential
- schwache Bindung mit typischen Bindungsenergien von 0.1 eV/Atom

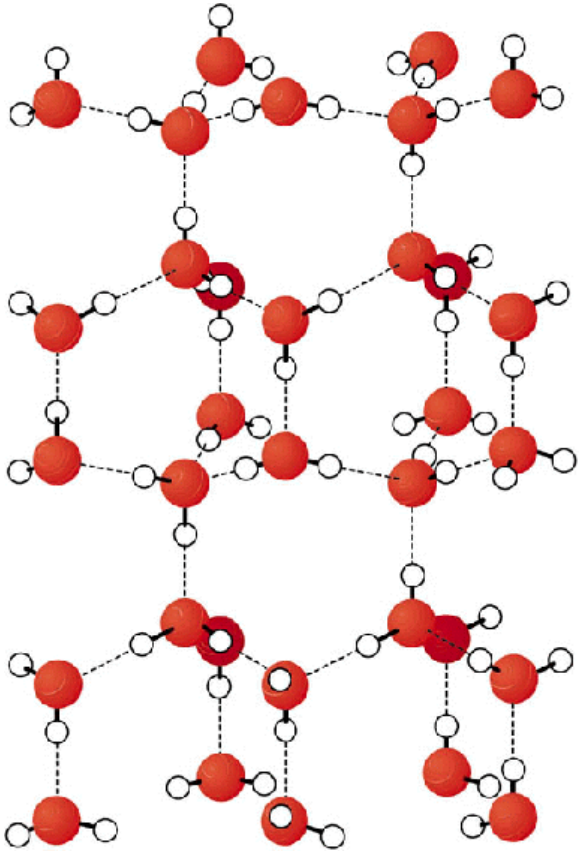
1.4 Wasserstoff-Brückenbindung

- Bindungspartner stark elektronegativ: F, O, N
- Ausschließlich 2 Bindungspartner/H-Atom
- schwache Bindung mit typischen Bindungsenergien von 0.1 eV/Atom

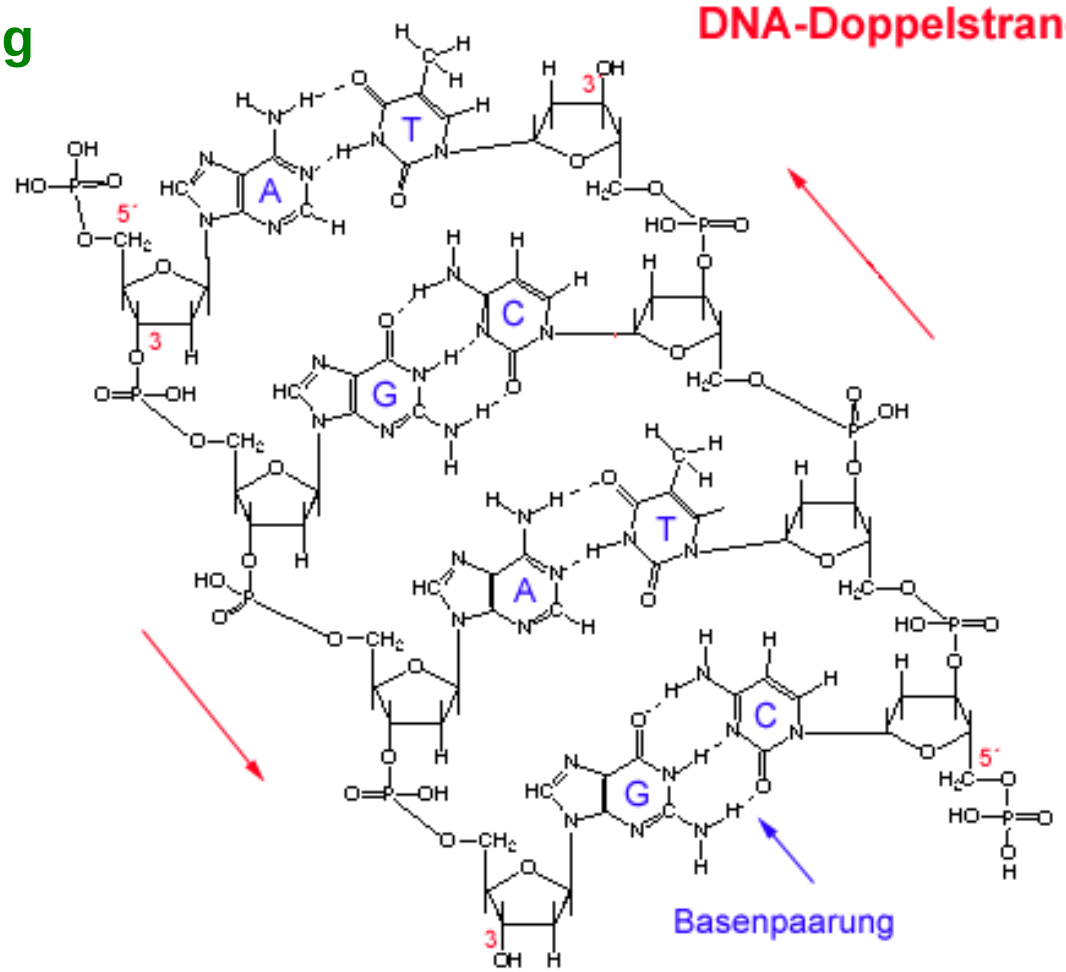
Beispiele:	F-H-F	E_B = 0.29 eV
	O-H-O	E_B = 0.22 eV
	N-H-N	E_B = 0.006 eV

1. die chemische Bindung in Festkörpern

1.5 Wasserstoffbrücken-Bindung



Wasserstoffbrückenbindung in H_2O



Wasserstoffbrückenbindung im DNA-Doppelstrang