

Einführung

Dipl.-Ing. Michael Schönleber

- Büro: Forschungszentrum Umwelt, Geb. 50.40, Raum 351
- Telefon: 0721/608-46484
- E-Mail: michael.schoenleber@kit.edu



- Studium Elektro- und Informationstechnik am KIT, Abschluss 2011
- Forschungsgebiet am IWE: Li-Ionen Batterien
 - Identifikation und Quantifizierung von Verlustmechanismen
 - Entwicklung von Mess- und Diagnoseverfahren
 - Entwicklung von Validitätstests für Impedanzspektren
- Privat: Lesen, Tauchen, Kraftraum, Laufen

Sprechstunden

Nach Vereinbarung – einfach anrufen oder E-Mail schreiben.

Zugang zu Vorlesungsmaterialien:

Benutzername: pb Passwort: Perowskit14 (bitte Groß- und Kleinschreibung beachten)

Dipl.-Phys. Julian Szász

- Büro: Forschungszentrum Umwelt, Geb. 50.40, Raum 351
- Telefon: 0721/608-48796
- E-Mail: julian.szasz@kit.edu



- Studium Physik am KIT, Abschluss 2012
- Forschungsgebiet am IWE: Brennstoffzellen (SOFC)
 - Identifizierung von Alterungsmechanismen mit Impedanzspektroskopie
 - Entwicklung eines Modells zur Beschreibung der Alterungsvorgänge
- Privat: Kitesurfen, Downhill-MTB, Segeln und Wintersport

Sprechstunden

Nach Vereinbarung – einfach anrufen oder E-Mail schreiben.

Zugang zu Vorlesungsmaterialien:

Benutzername: pb Passwort: Perowskit14 (bitte Groß- und Kleinschreibung beachten)

Passive Bauelemente Wintersemester 2014/2015

Um was geht es in PB?

Verständnis von physikalischen und chemischen Phänomenen, die in Bauteilen und Materialien der Elektrotechnik Anwendung finden.

Was ist ein Heißleiter, was ist ein Kaltleiter?
Aus welchen Materialien bestehen diese und woher kommt ihre spezielle Eigenschaft?

Welche Prinzipien gibt es um Temperaturen zu messen?

Wie funktionieren Sauerstoffsensoren?

Welche magnetischen Eigenschaften sollte ein Transformator Kern haben?

Was ist ein Varistor und wie funktioniert er?

Wodurch kommt elektrische Leitfähigkeit zustande?

Welche Materialien kommen zum Einsatz wenn Kondensatoren mit extrem großer Kapazität benötigt werden? Warum vergrößern bestimmte Materialien überhaupt die Kapazität eines Kondensators?

Klausur

Klausurtermin: 19.02.2015, 15:00-18:00 Uhr

Modus:

- 50% (Antwort-Wahl-Fragen + Kurzaufgaben) / 50% Rechenaufgaben

Zugelassene Hilfsmittel:

- Taschenrechner
 - Offizielle PB-Formelsammlung (downloadbar auf der PB Homepage)
 - Persönliche Formelsammlung: Ein Blatt beidseitig oder zwei Blätter einseitig handschriftlich beschrieben
 - Schreibzeug, Geodreieck etc.
- Bücher, Vorlesungsskript und sonstige Hilfsmittel sind nicht erlaubt!

Alte Klausuren zum Üben finden Sie auf der PB Homepage oder bei der Fachschaft.
Für Fragen stehen die Übungsleiter gerne zur Verfügung!

Klausurtermin: 19.02.2015, 15:00-18:00 Uhr

Bitte Anmeldefristen beachten und ggf. rechtzeitig abmelden!!!

→ Eine Abmeldung kann bis einen Tag vor der Klausur fernmündlich oder per Email erfolgen. Am Tag der Klausur nur noch persönlich bzw. nach der Klausur nur noch mit Attest. Sie gelten erst als abgemeldet, nachdem sie eine Bestätigung von uns erhalten haben.

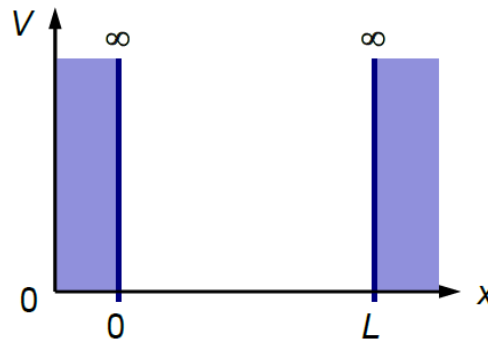
Bitte melden Sie sich ordnungsgemäß ab! Laut Prüfungsordnung sind Sie sonst durchgefallen! Auszug §9 (2) Bachelorprüfungsordnung:

„Eine Modul- bzw. Modulteilprüfung gilt als „nicht ausreichend“ bewertet, wenn die Studentin (sic!) den Prüfungstermin ohne triftigen Grund versäumt oder wenn sie nach Beginn der Prüfung ohne triftigen Grund von der Prüfung zurücktritt.“

Übung 1

A1: Bedeutung von Quantenzahlen: Die Schrödinger-Gleichung

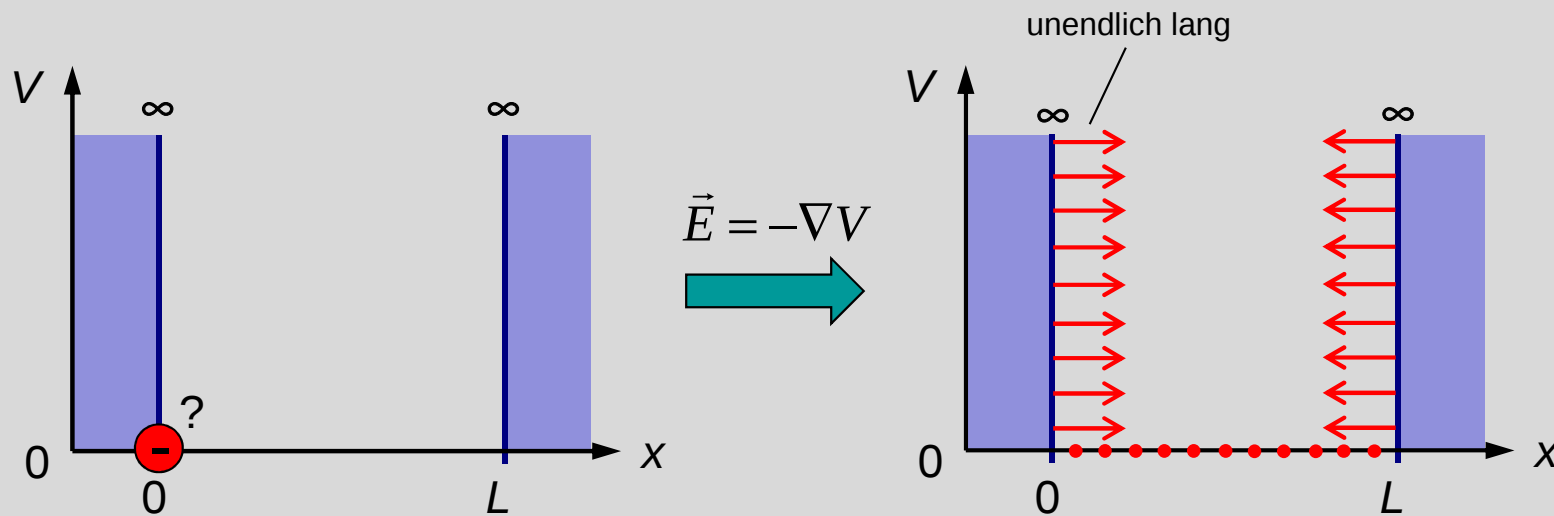
Eine beliebte theoretische Anordnung um zu zeigen wie Quantelung von erlaubten Energiezuständen, sowie Gebiete unterschiedlicher Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen zwanglos durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, ist der sogenannte „Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden“.



a) Machen Sie sich anschaulich klar, wie ein solcher Potentialverlauf im klassischen Sinne auf ein Elektron wirken würde. Welche Kräfte würde ein -klassisch punktförmig- gedachtes Elektron an den Positionen

- i. $x = 0$
- ii. $0 < x < L$
- iii. $x = L$

erfahren?



- i. $x = 0$  Elektron erfährt Kraft nach rechts
- ii. $0 < x < L$  Elektron erfährt keinerlei Kraft
- iii. $x = L$  Elektron erfährt Kraft nach links

**Elektron bleibt
im Topf
gefangen!**

b) Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist im Inneren des Potentialtopfes gegeben durch

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$

Bestimmen sie die Lösung dieser Differentialgleichung und zeigen Sie, dass die Energie E nur diskrete Werte annehmen kann. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

1) Finden Sie einen geeigneten Ansatz.

Hinweis: Welche Funktion ergibt nach zweifacher Ableitung ein skaliertes negatives ihrer selbst?

2) Prüfen Sie für welche Werte der Energie E Ihr Ansatz die Schrödinger-Gleichung löst.

Ansatz: Eine allgemeine Sinusfunktion!

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}=E\cdot\Psi(x) \quad (1)$$

Ansatz: $\Psi(x) = A \cdot \sin(B \cdot x + C)$

In (1) einsetzen

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2\left[A \cdot \sin(B \cdot x + C)\right]}{\partial x^2}=E \cdot A \cdot \sin(B \cdot x + C)$$

Ableiten

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)A \cdot B^2 \cdot \sin(B \cdot x + C)=E \cdot A \cdot \sin(B \cdot x + C)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = E \cdot \Psi(x) \quad (1)$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) A \cdot B^2 \cdot \sin(B \cdot x + C) = E \cdot A \cdot \sin(B \cdot x + C)$$

Fall $\sin(Bx+C)=0$

$$0 = 0 \quad \checkmark$$

Fall $\sin(Bx+C) \neq 0 \rightarrow$ Division durch $A \sin(Bx+C)$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) B^2 = E \quad (2)$$

Für Energien des Elektrons wie in (2) löst unser Ansatz die Schrödinger-Gleichung!

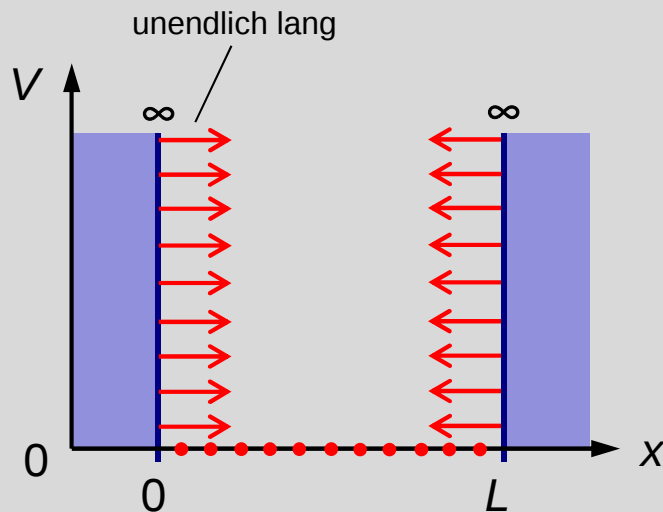
3) Bestimmen Sie die freien Konstanten Ihrer Ansatzfunktion mit Hilfe der Randbedingungen

i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Warum müssen diese Randbedingungen gelten?



i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Im stationären Zustand kann dort nie ein Elektron sein, da es sofort weggerissen werden würde.

Diese Bedingung ist notwendig damit $|\Psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann

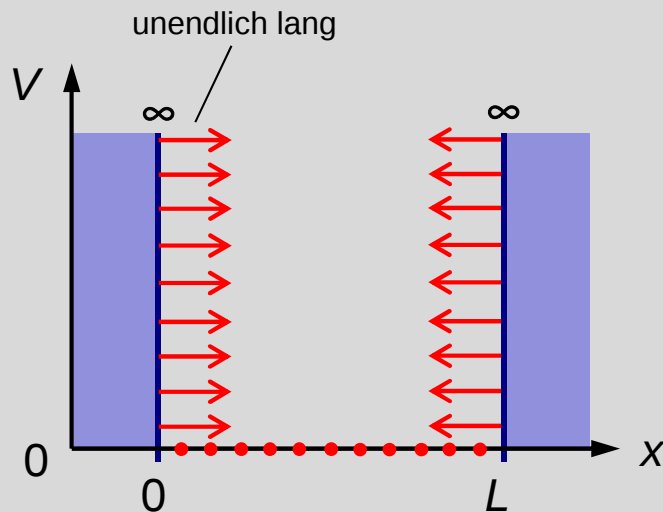
3) Bestimmen Sie die freien Konstanten Ihrer Ansatzfunktion mit Hilfe der Randbedingungen

i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Warum müssen diese Randbedingungen gelten?



i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Im stationären Zustand kann dort nie ein Elektron sein, da es sofort weggerissen werden würde.

Diese Bedingung ist notwendig damit $|\Psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann

$$|\Psi(x=0)|^2 = 0$$

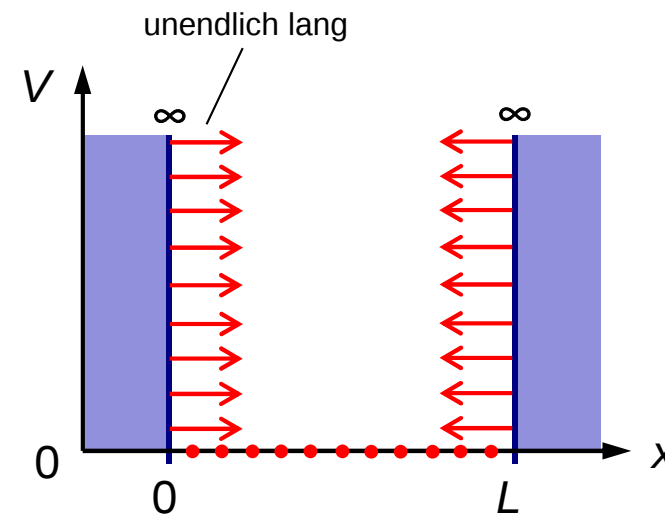
Ansatz: $\Psi(x) = A \cdot \sin(B \cdot x + C)$

Randbedingung einsetzen:

$$|A \cdot \sin(B \cdot 0 + C)|^2 = 0$$

Dies ist wahr für

$$C = 0 \quad \checkmark$$



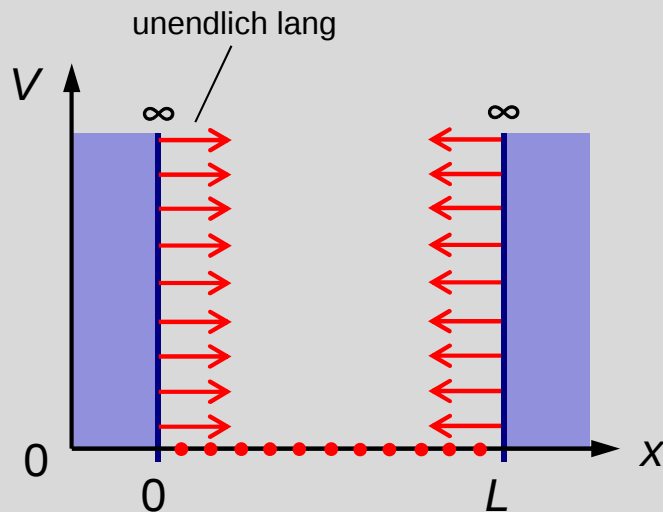
3) Bestimmen Sie die freien Konstanten Ihrer Ansatzfunktion mit Hilfe der Randbedingungen

i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Warum müssen diese Randbedingungen gelten?



i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Im stationären Zustand kann dort nie ein Elektron sein, da es sofort weggerissen werden würde.

Diese Bedingung ist notwendig damit $|\Psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann

$$|\Psi(x=L)|^2 = 0 \quad C = 0$$

Ansatz: $\Psi(x) = A \cdot \sin(B \cdot x + C)$

Randbedingung einsetzen:

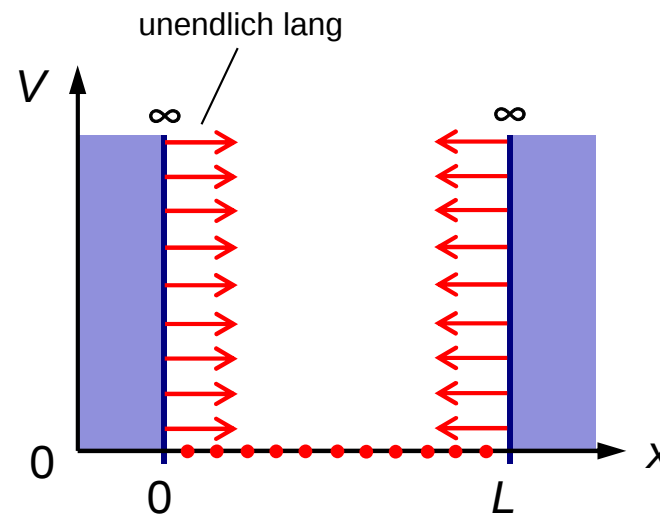
$$|A \cdot \sin(B \cdot L + 0)|^2 = 0$$

Dies ist wahr für

$$B \cdot L = n \cdot \pi, \quad n \in \mathbb{N}$$

Umstellen:

$$B = \frac{n \cdot \pi}{L} \quad \checkmark$$



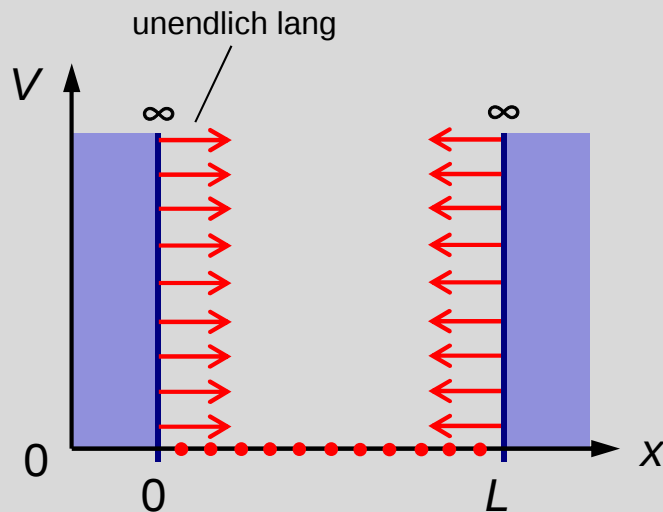
3) Bestimmen Sie die freien Konstanten Ihrer Ansatzfunktion mit Hilfe der Randbedingungen

i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Warum müssen diese Randbedingungen gelten?



i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$

ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$

iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

Im stationären Zustand kann dort nie ein Elektron sein, da es sofort weggerissen werden würde.

Diese Bedingung ist notwendig damit $|\Psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad C = 0 \quad B = \frac{n \cdot \pi}{L}$$

Ansatz: $\Psi(x) = A \cdot \sin(B \cdot x + C)$

Randbedingung einsetzen:

$$\int_0^L \left| A \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x + 0\right) \right|^2 dx = |A|^2 \int_0^L \left| \sin\left(\underbrace{\frac{n \cdot \pi}{L}}_B \cdot x\right) \right|^2 dx = 1$$

Betrag wegen Quadrierung überflüssig:

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2(B \cdot x) dx = 1$$

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad C = 0 \quad B = \frac{n \cdot \pi}{L}$$

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2(B \cdot x) dx = 1$$

Integral durch partielle Integration oder Formelsammlung auflösen:

$$|A|^2 \frac{1}{2B} \left[(B \cdot x - \sin(B \cdot x) \cdot \cos(B \cdot x)) \right]_0^L = 1$$

Klammer auflösen

$$|A|^2 \frac{1}{2B} \left[\left(B \cdot L - \underbrace{\sin(B \cdot L) \cdot \cos(B \cdot L)}_0 \right) - \left(\underbrace{B \cdot 0}_0 - \underbrace{\sin(B \cdot 0) \cdot \cos(B \cdot 0)}_0 \right) \right] = 1$$

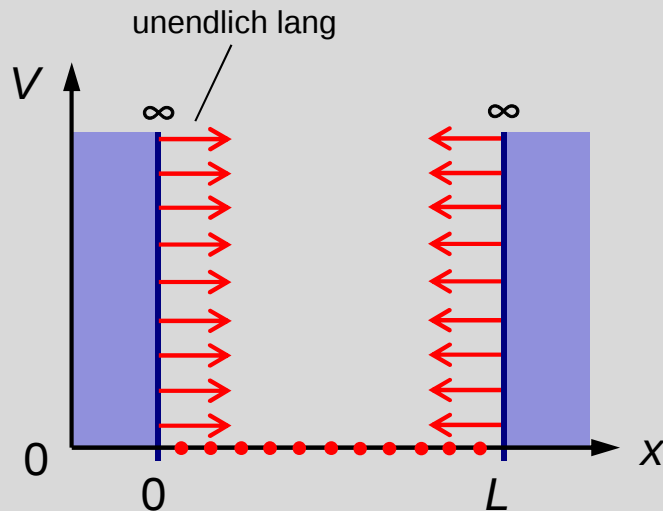
Nullen entfernen

$$|A|^2 \frac{1}{2B} [B \cdot L] = 1 \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow A = \pm \sqrt{\frac{2}{L}} \xrightarrow{\text{Willkür}} A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \checkmark$$

3) Bestimmen Sie die freien Konstanten Ihrer Ansatzfunktion mit Hilfe der Randbedingungen

$$\begin{array}{ll} \text{i.} & |\Psi(x=0)|^2 = 0 \\ \text{ii.} & |\Psi(x=L)|^2 = 0 \\ \text{iii.} & \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \end{array} \quad \begin{array}{l} A \\ B \\ C \end{array}$$

Warum müssen diese Randbedingungen gelten?



- i. $|\Psi(x=0)|^2 = 0$
ii. $|\Psi(x=L)|^2 = 0$
- Im stationären Zustand kann dort nie ein Elektron sein, da es sofort weggerissen werden würde.
- iii. $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$
- Diese Bedingung ist notwendig damit $|\Psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann

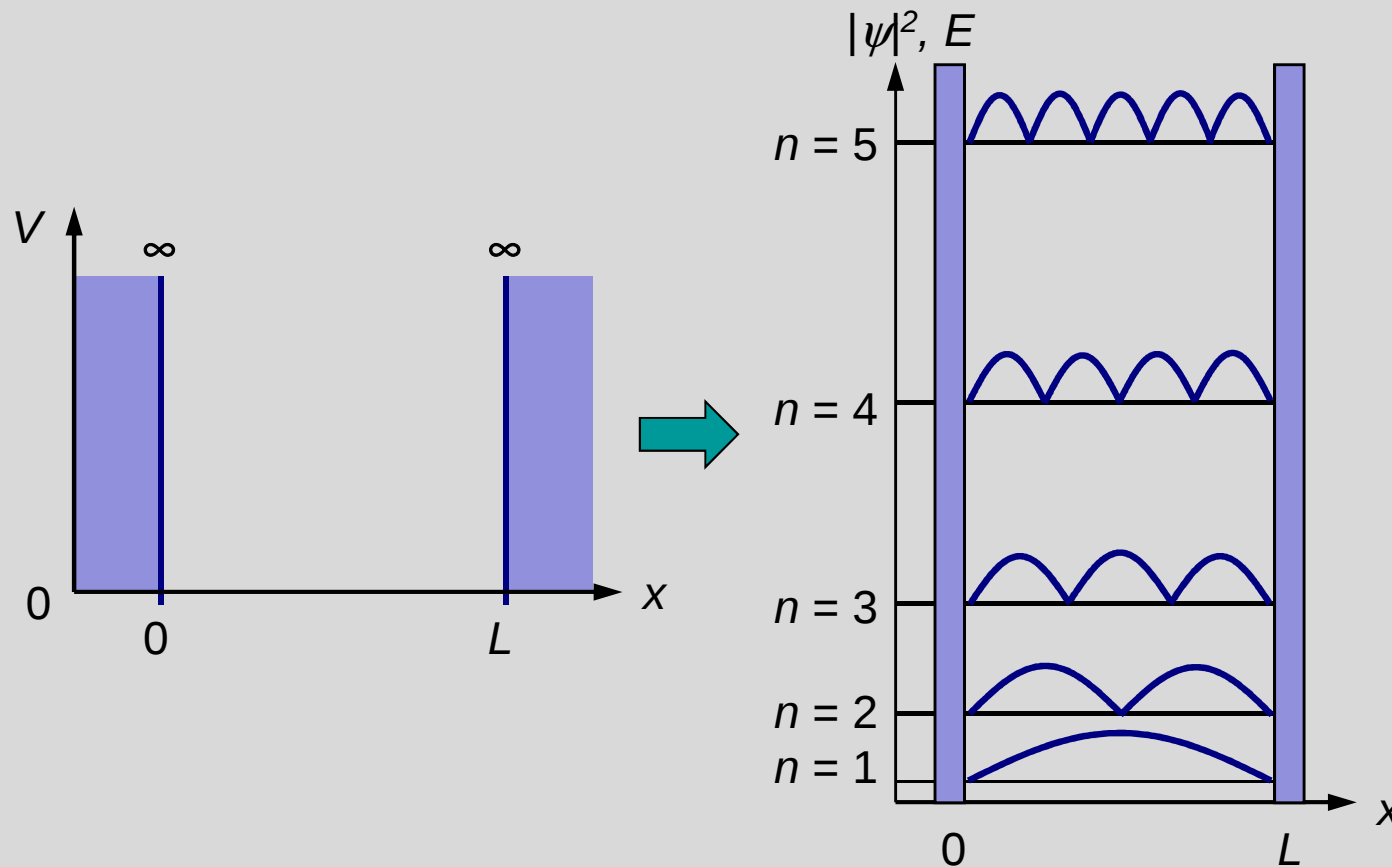
$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad B = \frac{n \cdot \pi}{L} \quad C = 0$$

Ansatz: $\Psi(x) = A \cdot \sin(B \cdot x + C)$, gültig für $E = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) B^2$

Bestimmte Konstanten einsetzen:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x\right) \quad , \quad \text{gültig für} \quad E = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{n^2 \cdot \pi^2}{L^2}$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x\right) \quad , \text{ gültig für } E = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{n^2 \cdot \pi^2}{L^2}$$

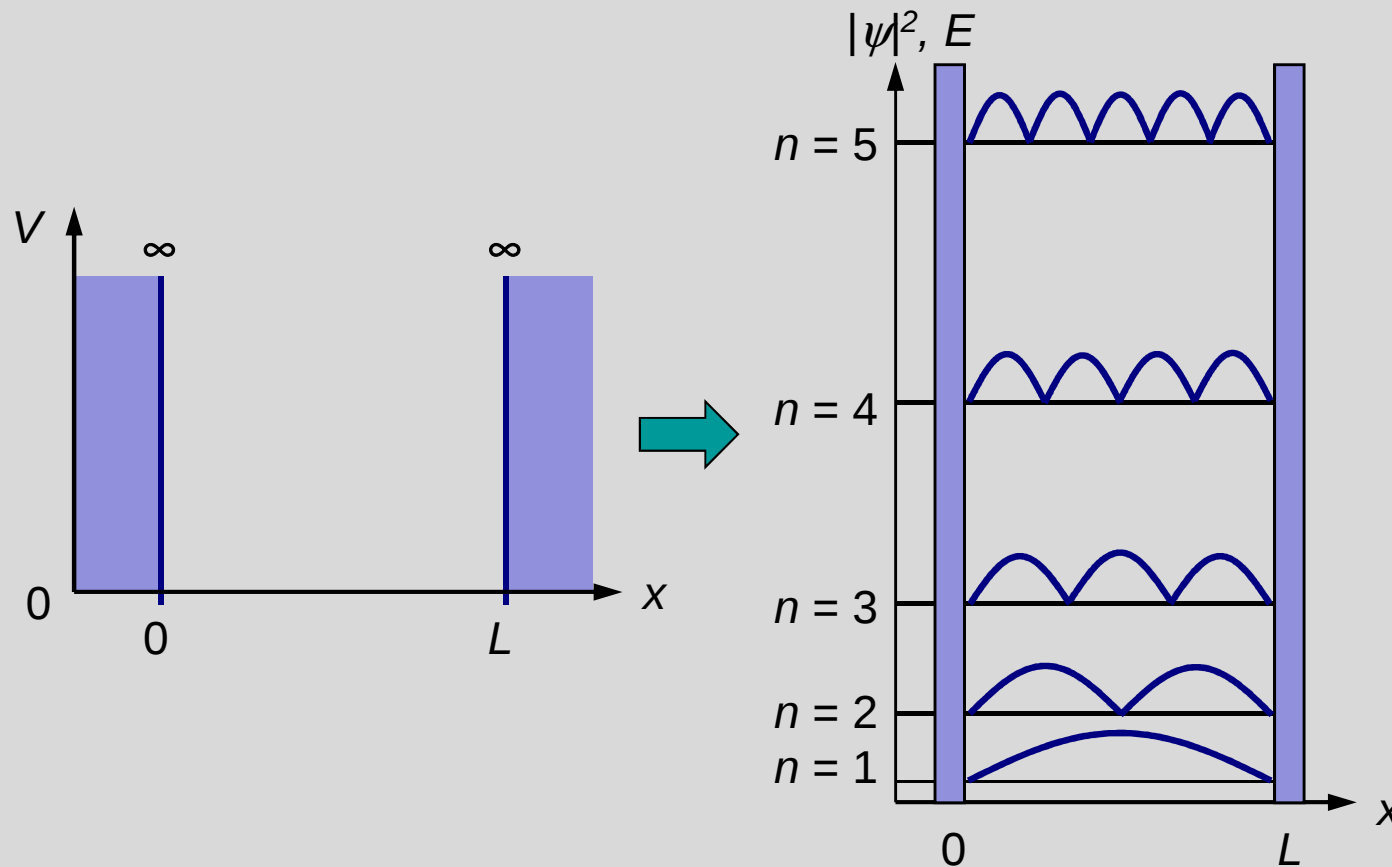


c) Die korrekte Lösung der Schrödinger-Gleichung lautet

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

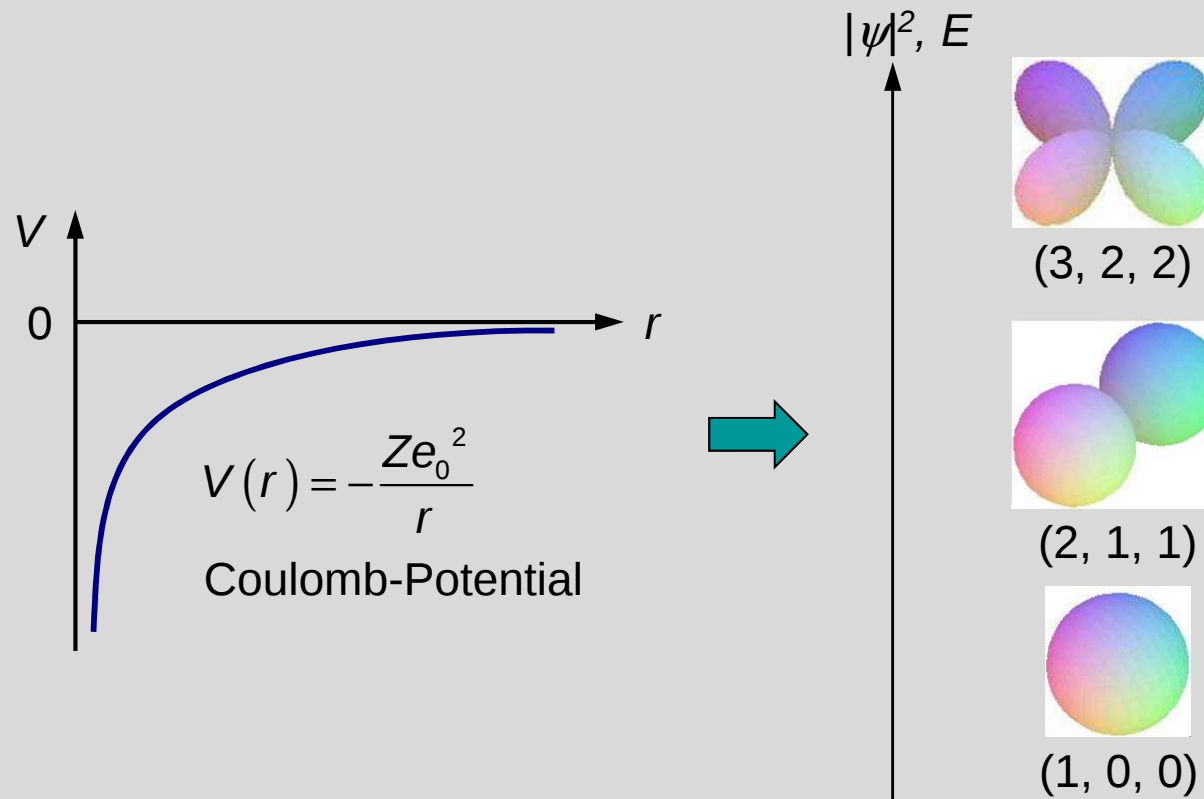
Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons sowie seine Energie ändert sich hier also lediglich mit der „Hauptquantenzahl“ n . Was ändert sich, wenn die Schrödinger-Gleichung statt für einen eindimensionalen Potentialtopf für ein dreidimensionales Coulomb-Potential gelöst werden muss?

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x\right) \quad , \text{ gültig für } E = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{n^2 \cdot \pi^2}{L^2}$$



Für einen eindimensional ausgedehnten unendlich hohen Potentialtopf genügt eine „Quantenzahl“ n um erlaubte Aufenthaltsbereiche sowie Energieniveaus zu charakterisieren.

$$\Psi(r, \Theta, \varphi) = f(n, l, m) \quad , \quad \text{gültig für} \quad E = g(n, l)$$



Für ein dreidimensionales Coulomb-Potential (Potentialfeld einer Punktladung) werden drei „Quantenzahlen“ (n, l, m) benötigt um erlaubte Aufenthaltsbereiche sowie Energieniveaus zu charakterisieren.

Zusammenfassung:

Schrödinger-Gleichung im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden kann durch einen Sinusansatz gelöst werden.



Lösung beschreibt die lokale Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Potentialtopf. Zur Beschreibung von Energie und Aufenthaltswahrscheinlichkeit genügt eine Quantenzahl n .



Schrödinger-Gleichung im Coulomb Potential kann analog (nur mathematisch komplexer) gelöst werden.

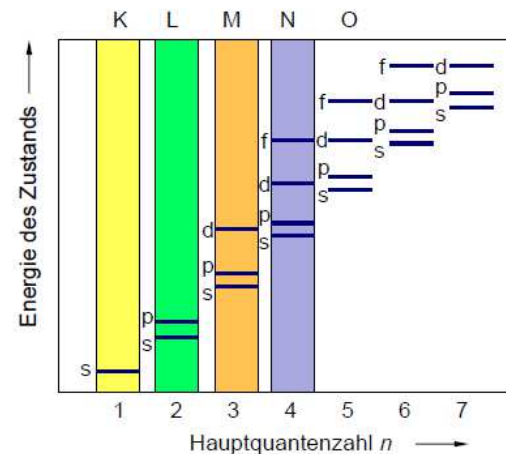


Lösung beschreibt nun die lokale Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Coulomb Potential (bildliche Darstellung: Orbitale). Zur Beschreibung benötigt man nun 3 Quantenzahlen n , l , m .

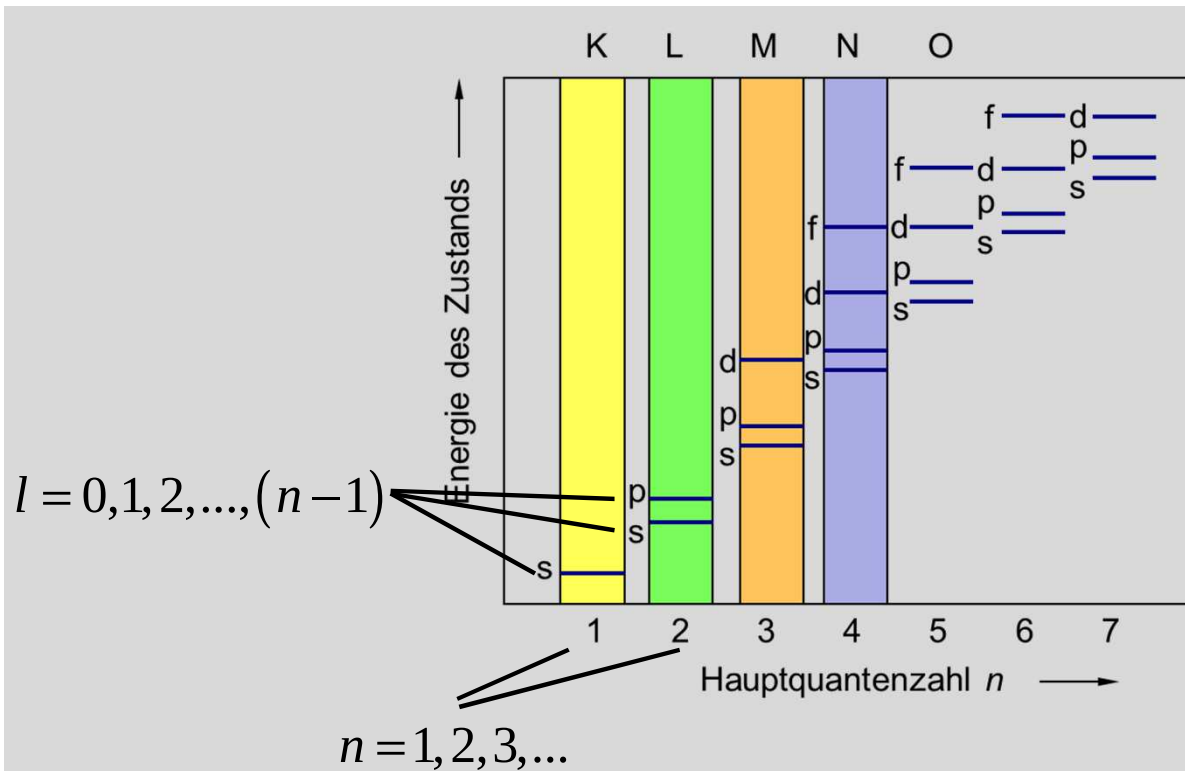


A2: Besetzungsregeln für Atomorbitale: Pauli-Prinzip und Hund'sche Regel

Gegeben sind die durch Hauptquantenzahl n sowie Drehimpulsquantenzahl l vollständig bestimmten möglichen Energiezustände eines Elektrons in einem Atom.



Zeichnen Sie die besetzten Zustände für Kalium in Pauling-Schreibweise. Beachten Sie bei der Besetzung sowohl das Pauli-Prinzip als auch die Hund'sche Regel.



$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

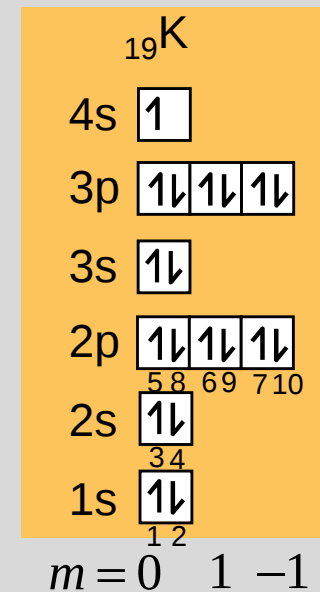
Haben keinen Einfluss auf die Energie, müssen aber auch besetzt werden!

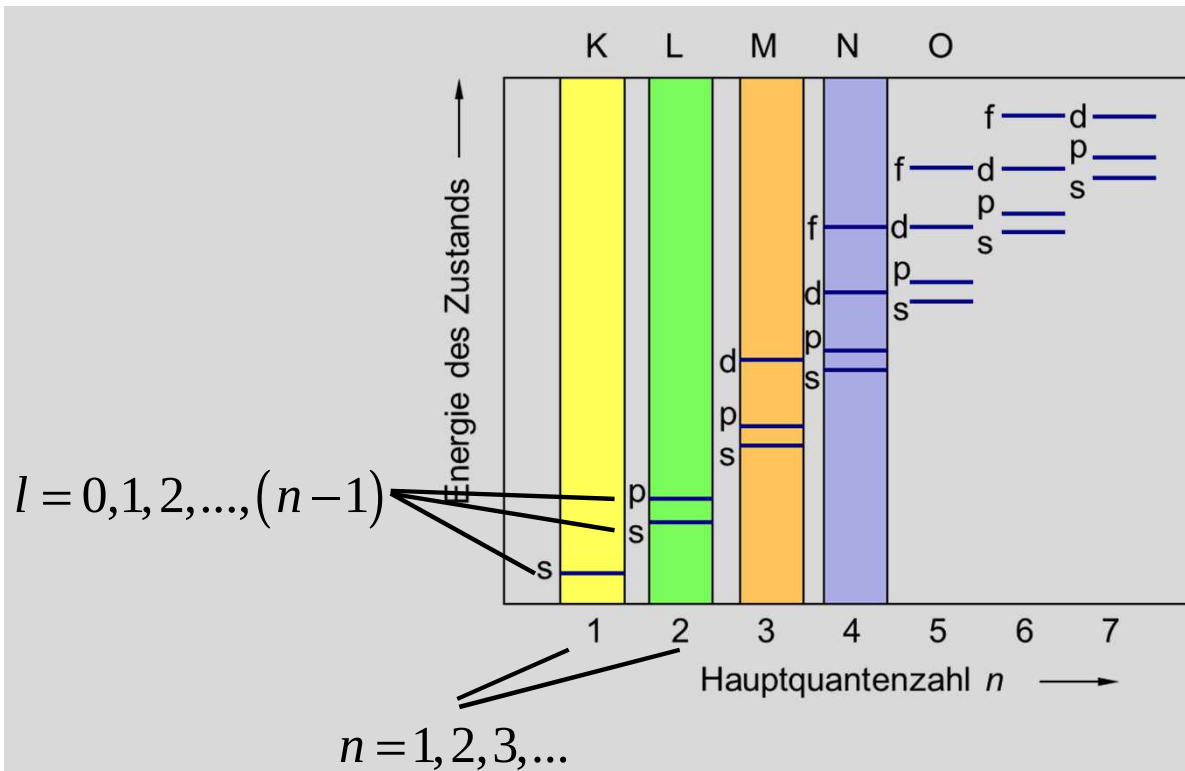
Pauli-Prinzip:

In einem Atom dürfen die Elektronenzustände nicht in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen.

Hund'sche Regel:

Die Atomorbitale werden zuerst von einzelnen Elektronen besetzt.





$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

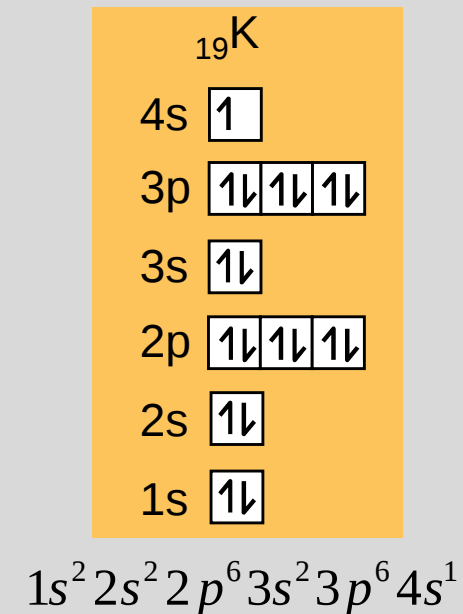
Haben keinen Einfluss auf die Energie, müssen aber auch besetzt werden!

Pauli-Prinzip:

In einem Atom dürfen die Elektronenzustände nicht in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen.

Hund'sche Regel:

Die Atomorbitale werden zuerst von einzelnen Elektronen besetzt.



Zusammenfassung:

Besetzung der Orbitale erfolgt in Reihenfolge der Energieniveaus (nicht der Hauptquantenzahlen!), beginnend beim niedrigsten Energieniveau.



Pauli Prinzip und Hund'sche Regel sind zu beachten:



Pauli-Prinzip:

In einem Atom dürfen die Elektronenzustände nicht in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen.

Hund'sche Regel:

Die Atomorbitale werden zuerst von einzelnen Elektronen besetzt.

A3: Bindungstypen

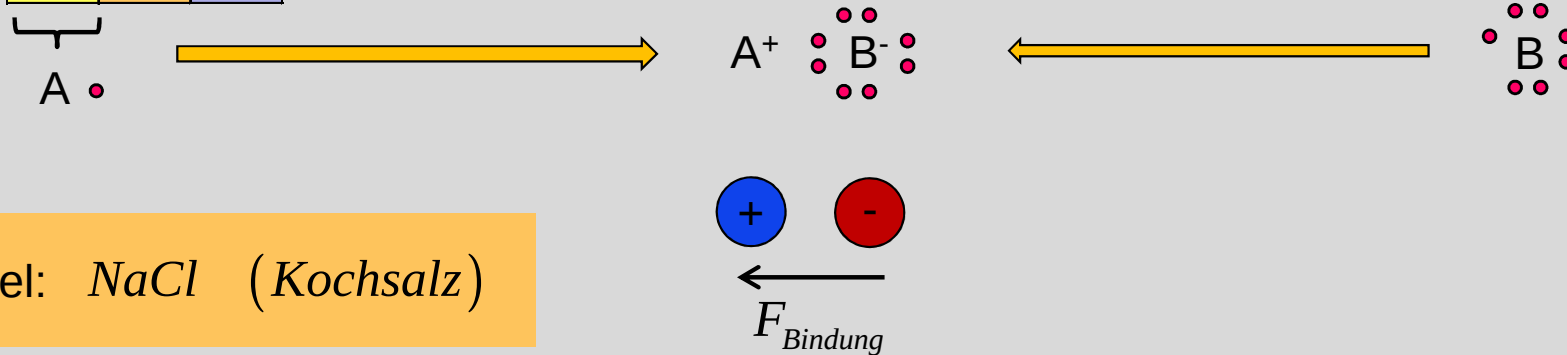
Atome gehen untereinander verschiedene Arten von Bindungen ein. Die Art der eingegangenen Bindung entscheidet beispielsweise über elektronische Leitfähigkeit sowie mechanische Stabilität eines Materials.

a) Nennen sie die drei Hauptbindungstypen, erläutern Sie diese und nennen Sie jeweils einen typischen Vertreter.

Ionische Bindung

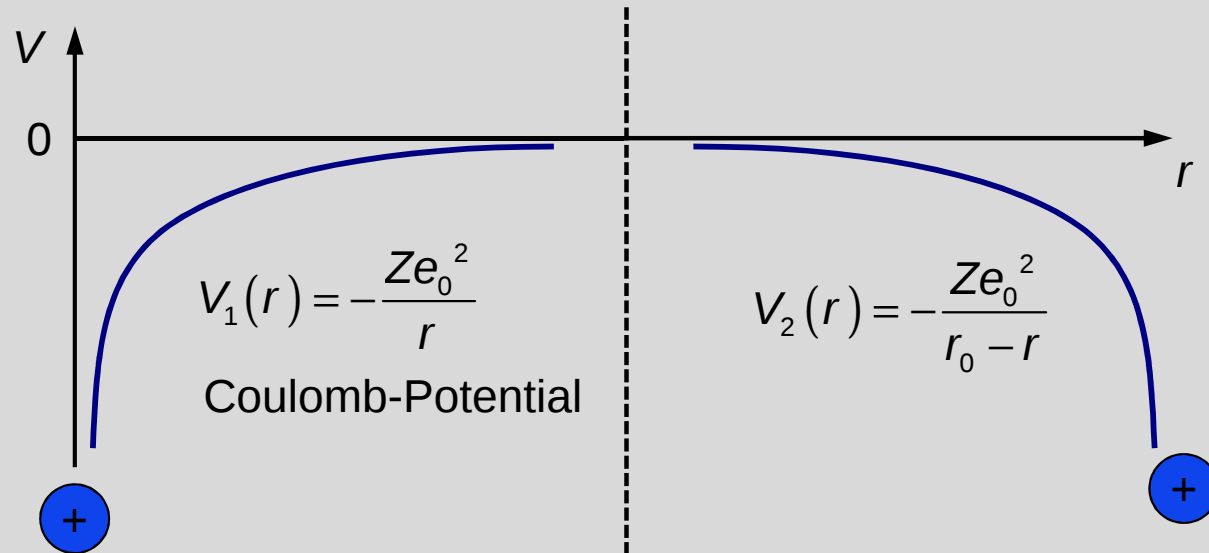
Gruppen

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Perioden	1 1 1,008 H Wasserstoff																	2 4,003 He Helium
2	3 6,941 Li Lithium	4 9,012 Be Beryllium											5 10,81 B Bor	6 12,01 C Kohlenstoff	7 14,01 N Stickstoff	8 16,00 O Sauerstoff	9 19,00 F Fluor	10 20,18 Ne Neon
3	11 22,99 Na Natrium	12 24,31 Mg Magnesium											13 26,98 Al Aluminium	14 28,09 Si Silicium	15 30,97 P Phosphor	16 32,06 S Schwefel	17 35,45 Cl Chlor	18 39,95 Ar Argon
4	19 39,10 K Kalium	20 40,08 Ca Calcium	21 44,96 Sc Scandium	22 47,87 Ti Titan	23 50,94 V Vanadium	24 52,00 Cr Chrom	25 54,94 Mn Mangan	26 55,85 Fe Eisen	27 58,93 Co Cobalt	28 58,69 Ni Nickel	29 63,55 Cu Kupfer	30 65,41 Zn Zink	31 69,72 Ga Gallium	32 72,64 Ge Germanium	33 74,92 As Arsen	34 78,96 Se Selen	35 79,90 Br Brom	36 83,80 Kr Krypton
5	37 85,47 Rb Rubidium	38 87,62 Sr Strontium	39 88,91 Y Yttrium	40 91,22 Zr Zirkonium	41 92,91 Nb Niob	42 95,94 Mo Molybdän	43 (98) Tc Technetium	44 101,1 Ru Ruthenium	45 102,9 Rh Rhodium	46 106,4 Pd Palladium	47 107,9 Ag Silber	48 112,4 Cd Cadmium	49 114,8 In Indium	50 118,7 Sn Zinn	51 121,8 Sb Antimon	52 127,6 Te Tellur	53 126,9 I Iod	54 131,3 Xe Xenon
6	55 132,9 Cs Cäsium	56 137,3 Ba Barium	57 - 71 La-Lu	72 178,5 Hf Hafnium	73 180,9 Ta Tantal	74 183,8 W Wolfram	75 186,2 Re Rhenium	76 190,2 Os Osmium	77 192,2 Ir Iridium	78 195,1 Pt Platin	79 197,0 Au Gold	80 200,6 Hg Quecksilber	81 204,4 Tl Thallium	82 207,2 Pb Blei	83 209,0 Bi Bismut	84 (209) Po Polonium	85 (210) At Astat	86 (222) Rn Radon
7	87 (223) Fr Francium	88 (226) Ra Radium	89 - 103 Ac-Lr															



Beispiel: $NaCl$ (Kochsalz)

Kovalente Bindung



$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_1(r)\right)\psi(r, \Theta, \Phi) = E\psi(r, \Theta, \Phi)$$

Lösung:

$$\{\psi_1, E_1\}$$

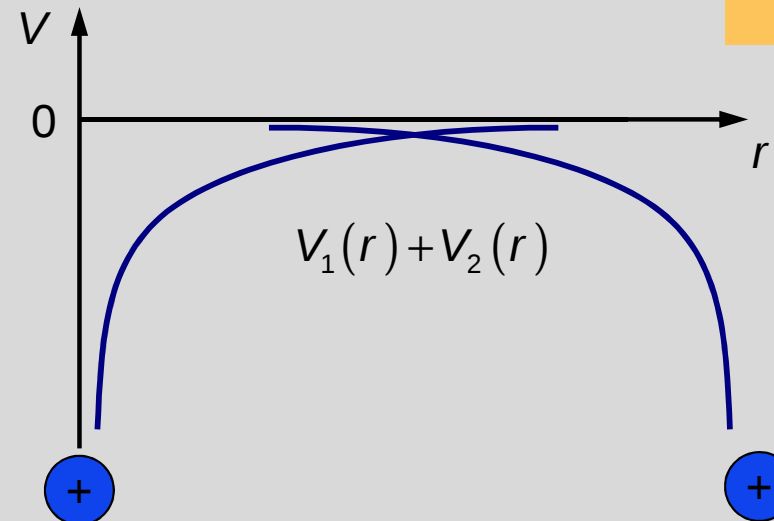
$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_2(r)\right)\psi(r, \Theta, \Phi) = E\psi(r, \Theta, \Phi)$$

Lösung:

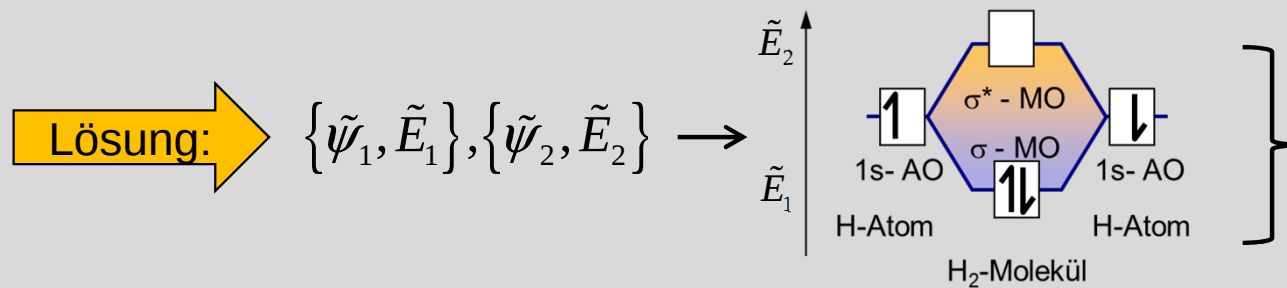
$$\{\psi_2, E_2\}$$

Kovalente Bindung

Beispiel: *Si* (*Silizium*)



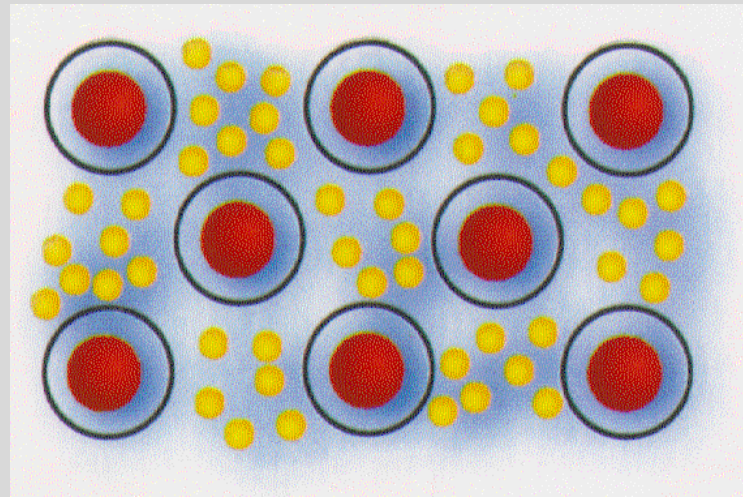
$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_1(r) + V_2(r)\right)\psi(r, \Theta, \Phi) = E\psi(r, \Theta, \Phi)$$



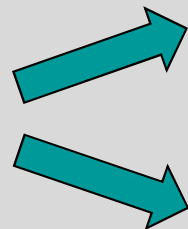
Die Energieniveaus der entstehenden Molekülorbitale liegen über bzw. unter den Energieniveaus der Atomorbitale

Metallische Bindung

Beispiel: *Cu* (*Kupfer*)



Metallatome geben äußere
Elektronen ab

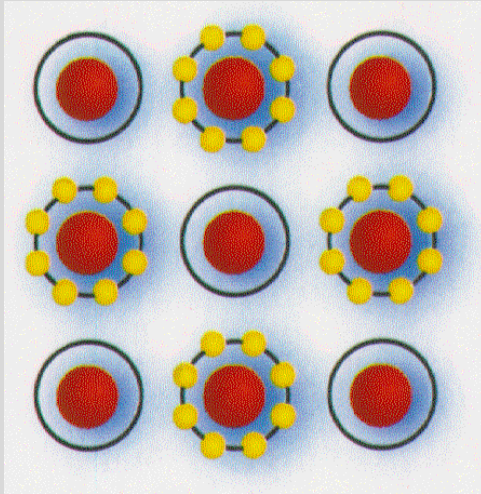


Elektronengas von frei
beweglichen Elektronen

Positiv geladene
Metall-Ionen

(Schwache) Bindung durch
Wechselwirkungskräfte
zwischen Metall-Ionen und
Elektronen

Ionische Bindung

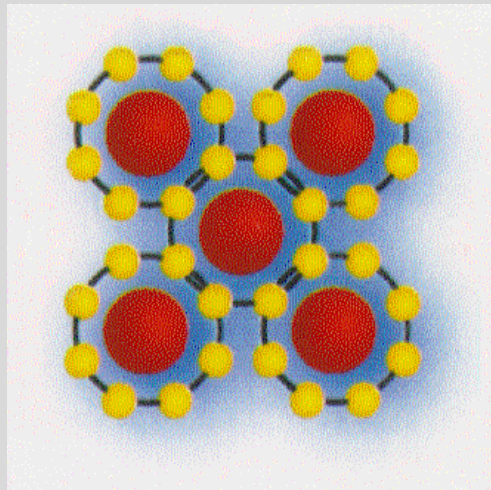


Atome geben Elektronen ab
bzw. nehmen auf
(Edelgaskonfiguration)

Entstehende Ionen ziehen
sich elektrostatisch an

Typisch: Verbindungen aus
1. und 17. Gruppe,
z.B. NaCl

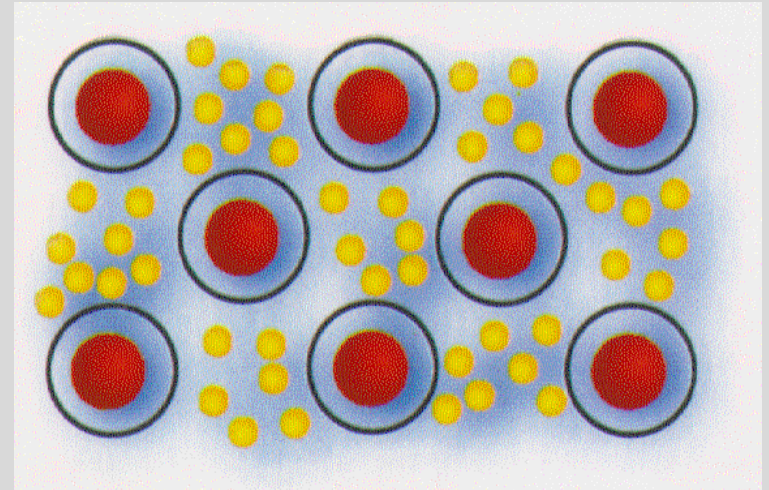
Kovalente Bindung



Atomorbitale überlappen
und bilden Molekülorbitale.
Liegen diese energetisch
günstiger kommt es zu
einer stabilen Bindung.

Typisch:
Elementverbindungen wie
Silizium.

Metallische Bindung

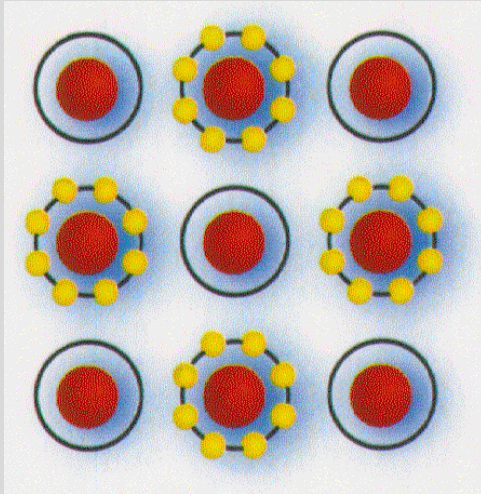


Metallatome geben äußere
Elektronen ab. Diese bilden
ein „Elektronengas“ frei
beweglicher Elektronen.
Wechselwirkung zwischen
Elektronengas und positiv
geladenen Atomrümpfen
sorgt für Bindungskräfte.

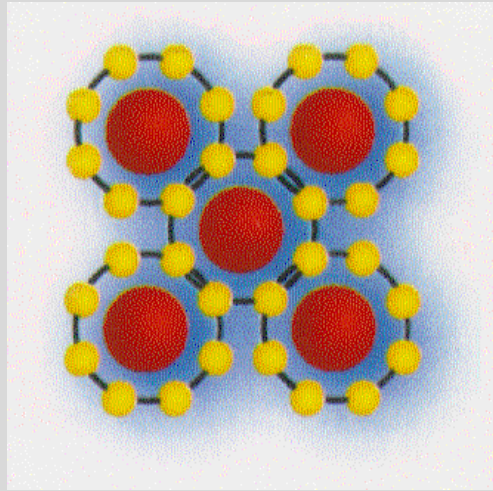
Typisch: Metalle wie Kupfer

b) Materialien welches Bindungstyps weisen in der Regel die höchste elektronische Leitfähigkeit auf und warum?

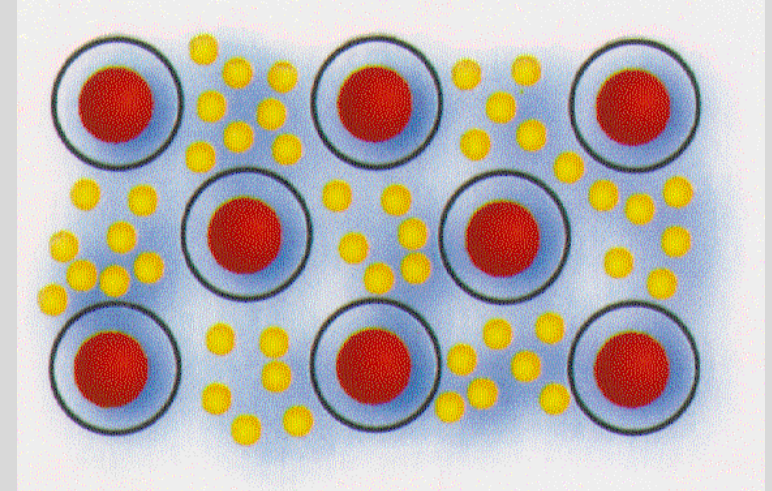
Ionische Bindung



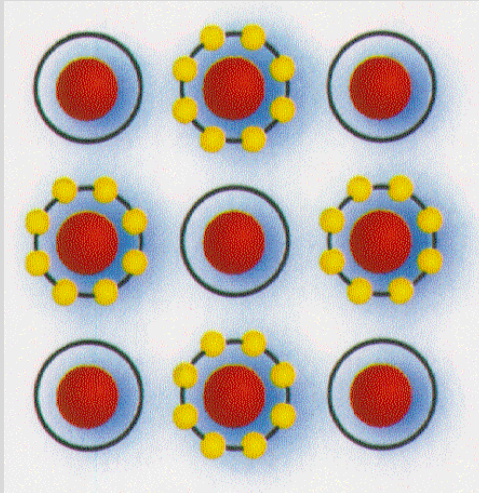
Kovalente Bindung



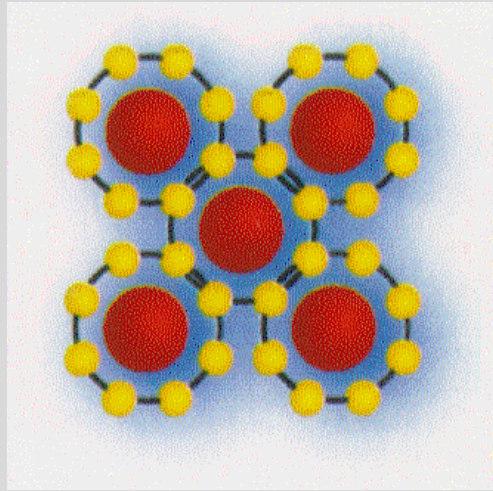
Metallische Bindung



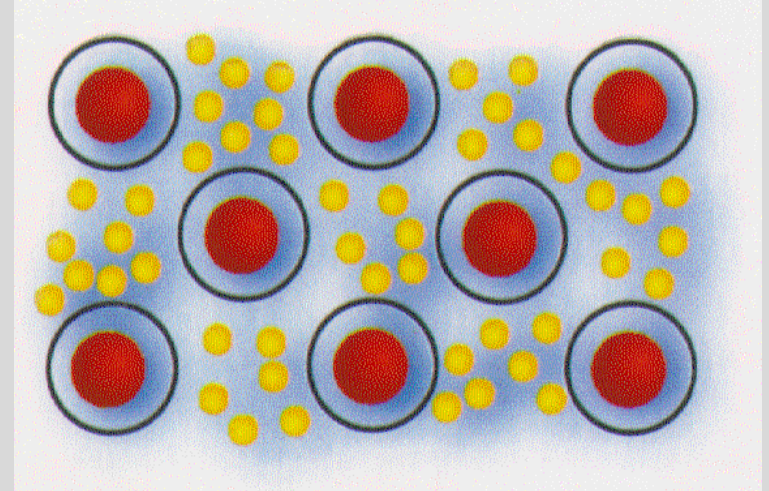
Ionische Bindung



Kovalente Bindung



Metallische Bindung



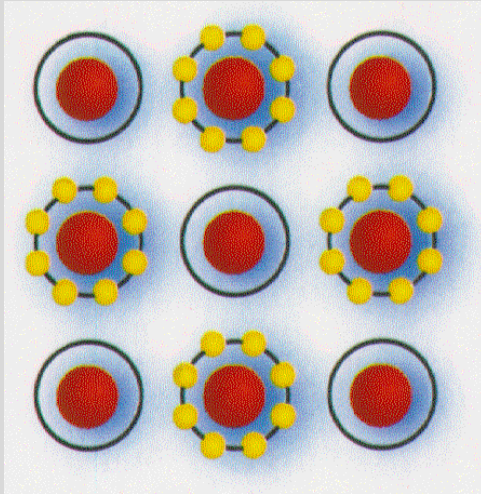
Metalle weisen aufgrund der freien Beweglichkeit aller Elektronen im Elektronengas die höchste Leitfähigkeit auf.

c) Welcher Bindungstyp tritt im Kaliumbromid-Kristall (KBr) auf und warum?

c) Welcher Bindungstyp tritt im Kaliumbromid-Kristall (KBr) auf und warum?

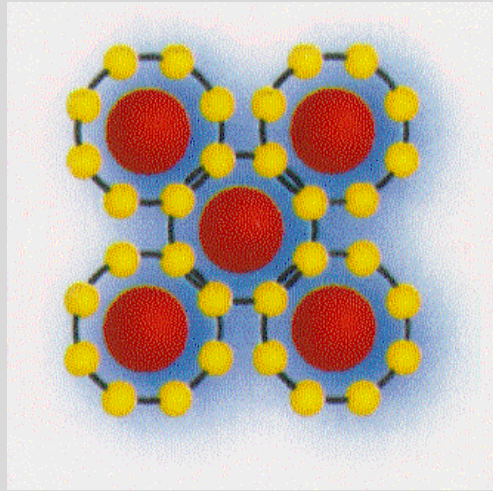
		Gruppen																																			
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																		
Perioden	1	1 1,008 H Wasserstoff																		2 4,003 He Helium																	
	2	3 6,941 Li Lithium		4 9,012 Be Beryllium												5 10,81 B Bor		6 12,01 C Kohlenstoff		7 14,01 N Stickstoff		8 16,00 O Sauerstoff		9 19,00 F Fluor		10 20,18 Ne Neon											
	3	11 22,99 Na Natrium		12 24,31 Mg Magnesium												13 26,98 Al Aluminium		14 28,09 Si Silicium		15 30,97 P Phosphor		16 32,06 S Schwefel		17 35,45 Cl Chlor		18 39,95 Ar Argon											
	4	19 39,10 K Kalium		20 40,08 Ca Calcium		21 44,96 Sc Scandium		22 47,87 Ti Titan		23 50,94 V Vanadium		24 52,00 Cr Chrom		25 54,94 Mn Mangan		26 55,85 Fe Eisen		27 58,93 Co Cobalt		28 58,69 Ni Nickel		29 63,55 Cu Kupfer		30 65,41 Zn Zink		31 69,72 Ga Gallium		32 72,64 Ge Germanium		33 74,92 As Arsen		34 78,96 Se Selen		35 79,90 Br Brom		36 83,80 Kr Krypton	
	5	37 85,47 Rb Rubidium		38 87,62 Sr Strontium		39 88,91 Y Yttrium		40 91,22 Zr Zirkonium		41 92,91 Nb Niob		42 95,94 Mo Molybdän		43 (98) Tc Technetium		44 101,1 Ru Ruthenium		45 102,9 Rh Rhodium		46 106,4 Pd Palladium		47 107,9 Ag Silber		48 112,4 Cd Cadmium		49 114,8 In Indium		50 118,7 Sn Zinn		51 121,8 Sb Antimon		52 127,6 Te Tellur		53 126,9 I Iod		54 131,3 Xe Xenon	
	6	55 132,9 Cs Cäsium		56 137,3 Ba Barium		57 - 71 La-Lu		72 178,5 Hf Hafnium		73 180,9 Ta Tantal		74 183,8 W Wolfram		75 186,2 Re Rhenium		76 190,2 Os Osmium		77 192,2 Ir Iridium		78 195,1 Pt Platin		79 197,0 Au Gold		80 200,6 Hg Quecksilber		81 204,4 Tl Thallium		82 207,2 Pb Blei		83 209,0 Bi Bismut		84 (209) Po Polonium		85 (210) At Astat		86 (222) Rn Radon	
	7	87 (223) Fr Francium		88 (226) Ra Radium		89 - 103 Ac-Lr																															

Ionische Bindung

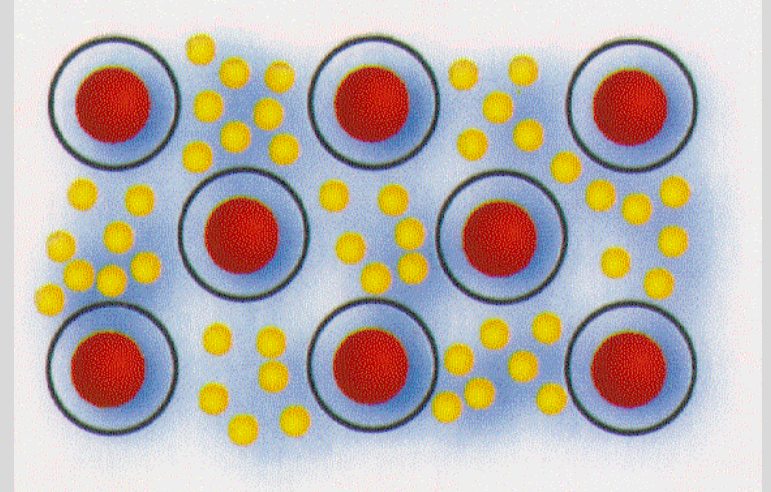


Kalium sowie Brom entstammen der 1. bzw. 17. Gruppe und können daher bei einer Bindung beide Edelgaskonfiguration erreichen.

Kovalente Bindung

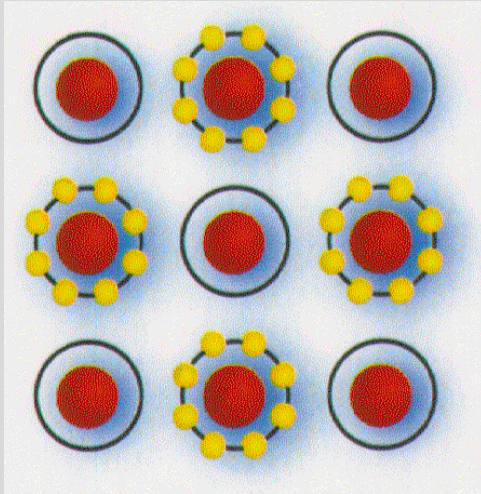


Metallische Bindung



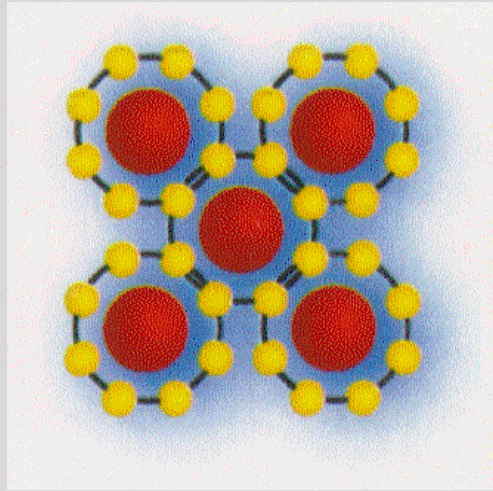
d) Erwarten Sie bei kristallinem Kaliumbromid eine gute oder schlechte elektronische Leitfähigkeit? Begründen Sie!

Ionische Bindung

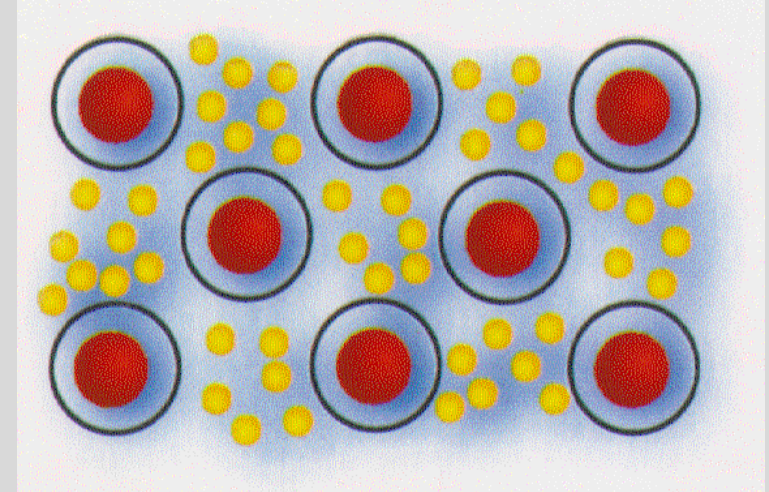


Da KBr ionisch gebunden ist, stehen keine freien Elektronen zur Leitung zur Verfügung. Es wird daher eine schlechte elektronische Leitfähigkeit erwartet.

Kovalente Bindung

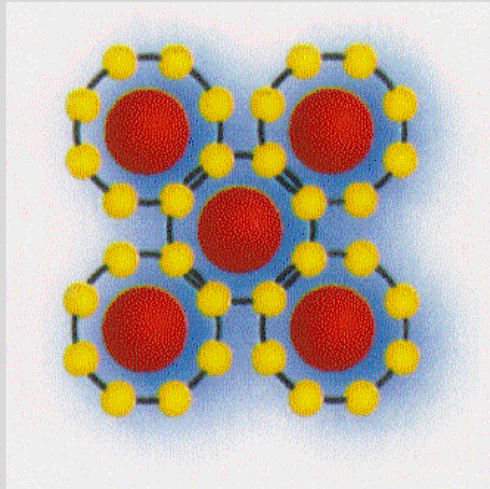


Metallische Bindung

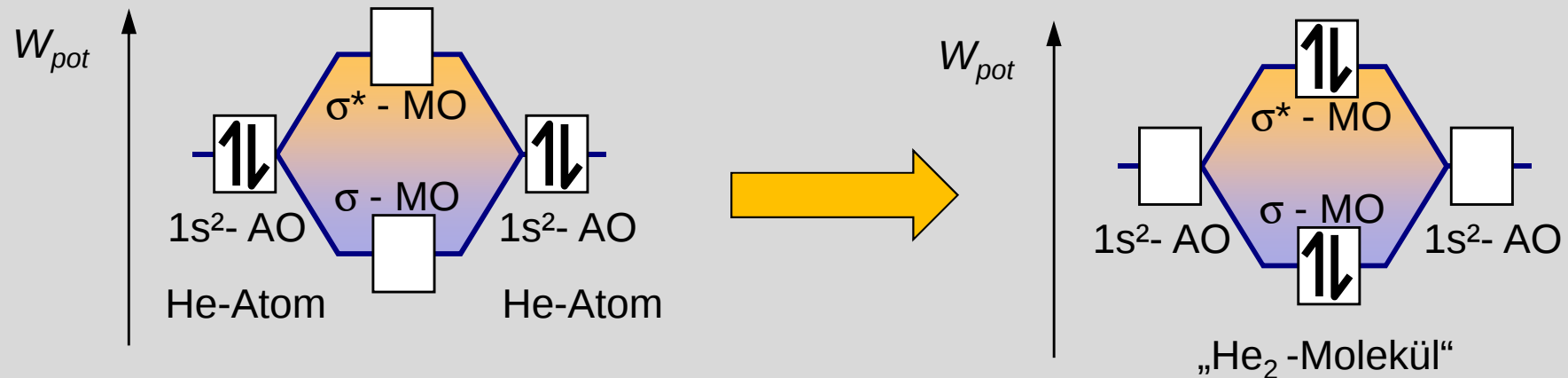


e) Warum bildet Helium keine He_2 - Moleküle aus?

Kovalente Bindung



Helium bildet keine Heliummoleküle, da bei Bindung zweier Heliumatome sowohl bindendes als auch antibindendes Molekülorbital besetzt werden müssen. Die Gesamtenergie wird dabei nicht verringert.

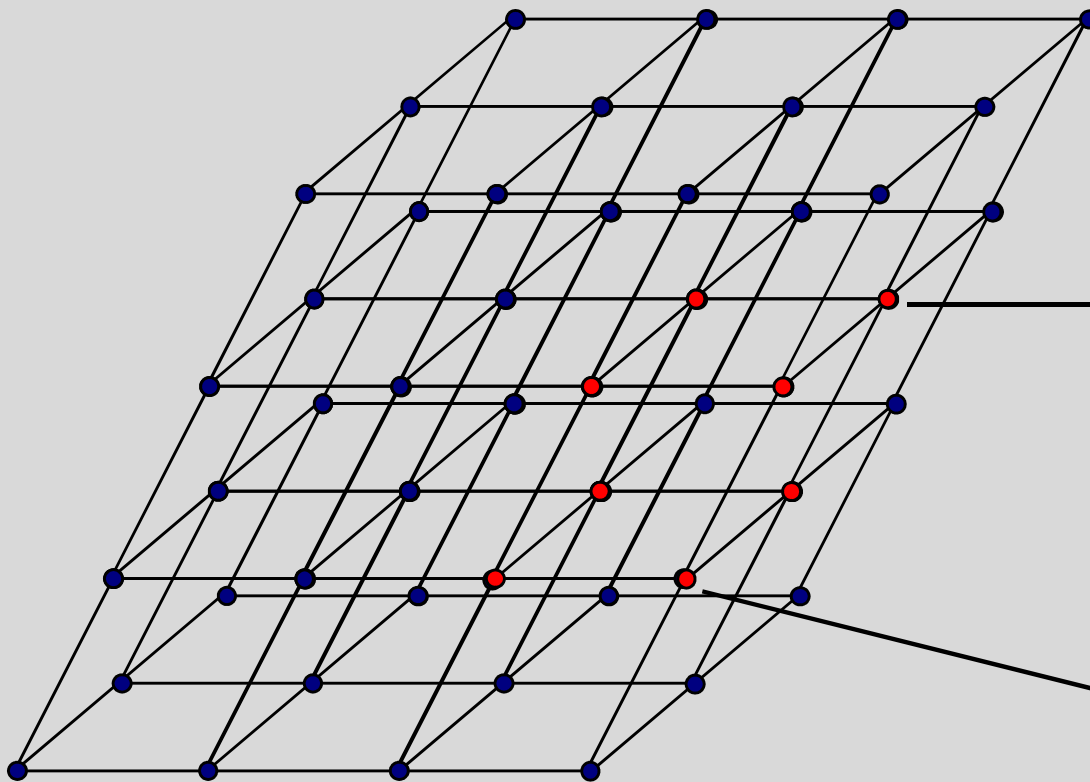


A4: Kristallgitter und Defekte

Der vorherrschende Bindungsmechanismus entscheidet unter anderem darüber, welche Gitterstruktur eine große Ansammlung gebundener Atome -sprich ein Festkörper- annimmt. Die angenommene Struktur wiederum ist entscheidend für das Auftreten spezieller Eigenschaften, die in elektronischen Bauteilen ausgenutzt werden können.

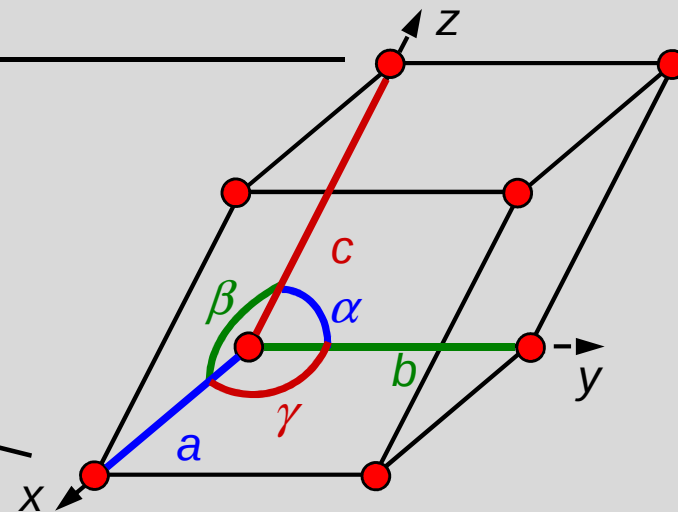
a) Aus 7 Grundgittern kann durch Verschiebung und periodische Wiederholung der Grundgitter jede in der Natur vorkommende Gitterstruktur beschrieben werden. Mit Hilfe welches Grundgitters kann das kubisch-raumzentrierte Gitter erzeugt werden?

Punktgitter

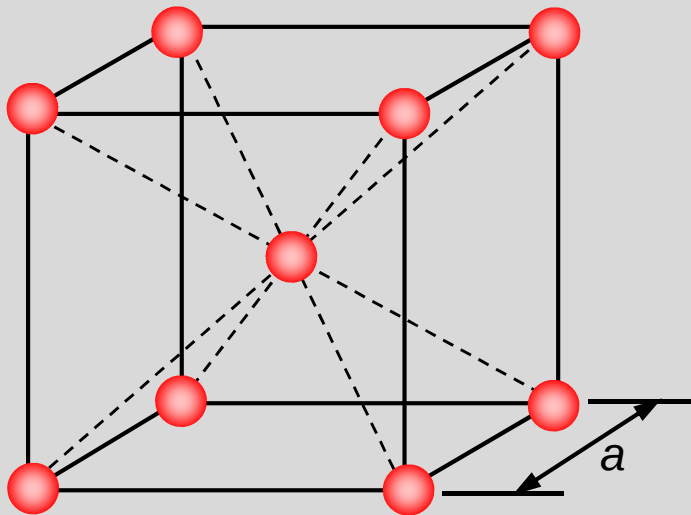


Die Gitterstruktur eines Festkörpers ist durch die Beschreibung einer Elementarzelle vollständig bekannt.

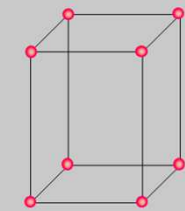
Elementarzelle



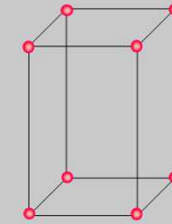
Elementarzelle Kubisch Raumzentriertes Gitter



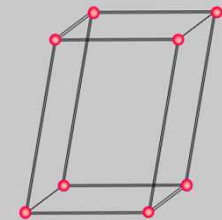
Beispiel:
Eisen bei Raumtemperatur



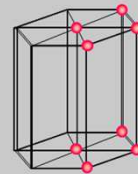
tetragonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



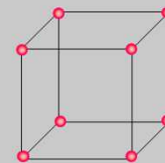
orthorhombisch
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



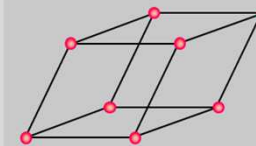
triklin
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \gamma \neq 90^\circ \neq \beta$



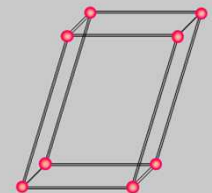
hexagonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$



kubisch
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

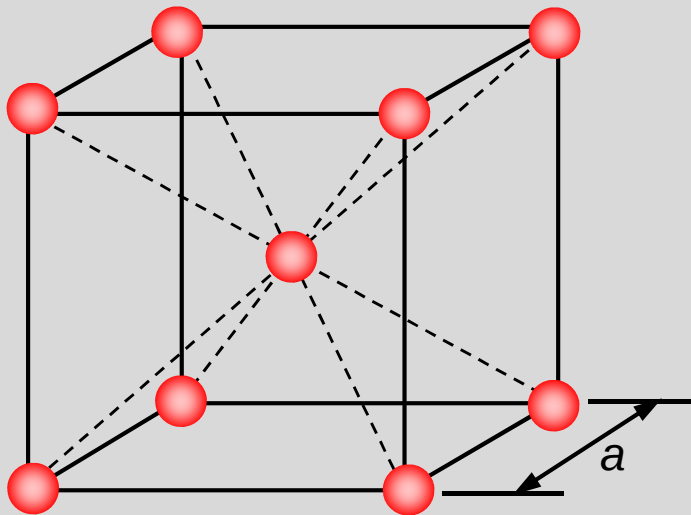


rhomboedrisch
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

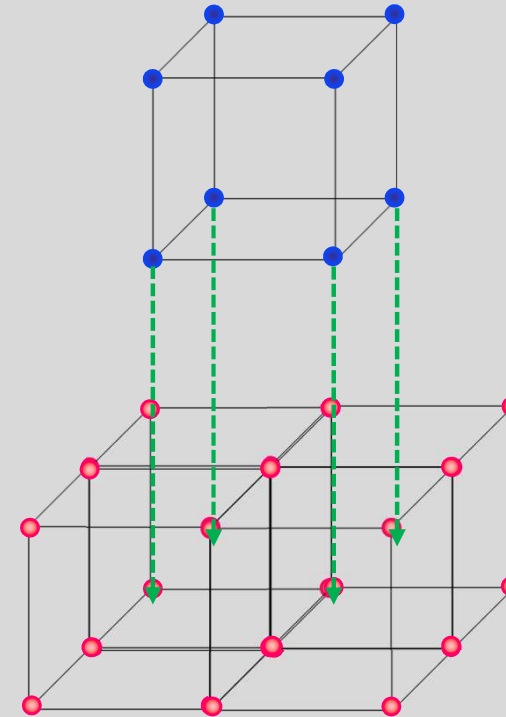


monoklin
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

Elementarzelle Kubisch Raumzentriertes Gitter



Beispiel:
Eisen bei Raumtemperatur



Ein kubisch raumzentriertes Gitter kann
durch gegeneinander verschobene
kubische Kristallgitter erzeugt werden.

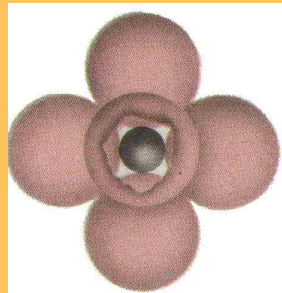
b) Was entscheidet bei ionischer Bindung, was bei kovalenter Bindung über die gebildete Gitterstruktur?

Ionische Bindung

Das Radienverhältnis von Kation zu Anion bestimmt die Geometrie!

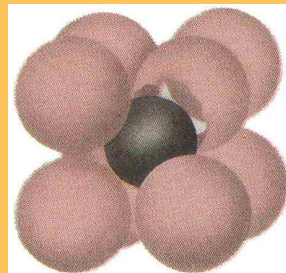
Bsp:

Radienverhältnis:
 $0,414 < r_K/r_A < 0,732$



Kubisch

Radienverhältnis:
 $0,732 < r_K/r_A < 1,000$

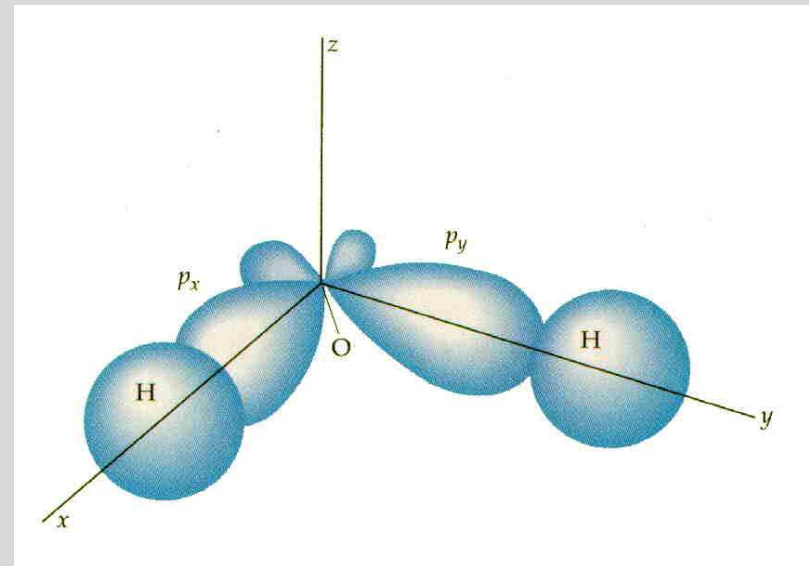


Kubisch Raumzentriert

Kovalente Bindung

Die räumliche Form der entstehenden Hybridorbitale bestimmt die Geometrie!

Bsp:



Bindungswinkel: 104,5°

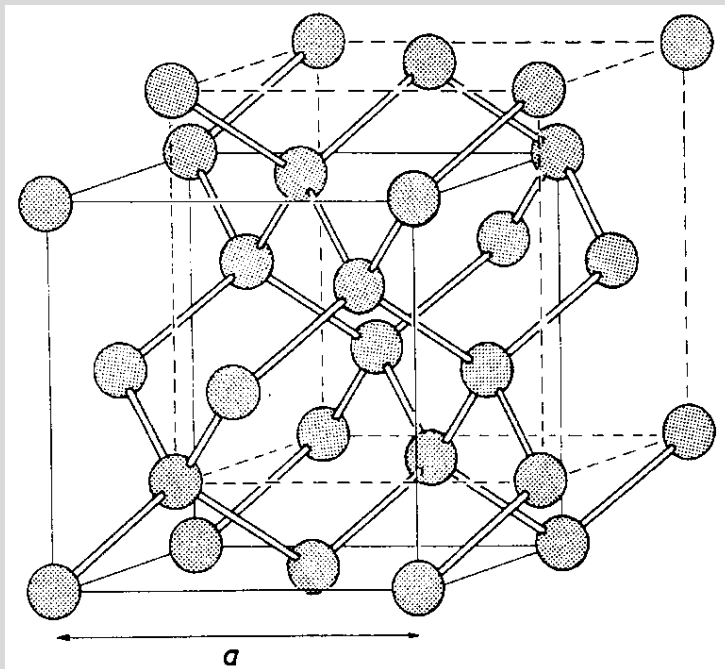
Passive Bauelemente Wintersemester 2014/2015

Übung 1

c) Kann die gebildete Gitterstruktur durch äußere Faktoren beeinflusst werden? Falls ja, nennen Sie ein Beispiel.

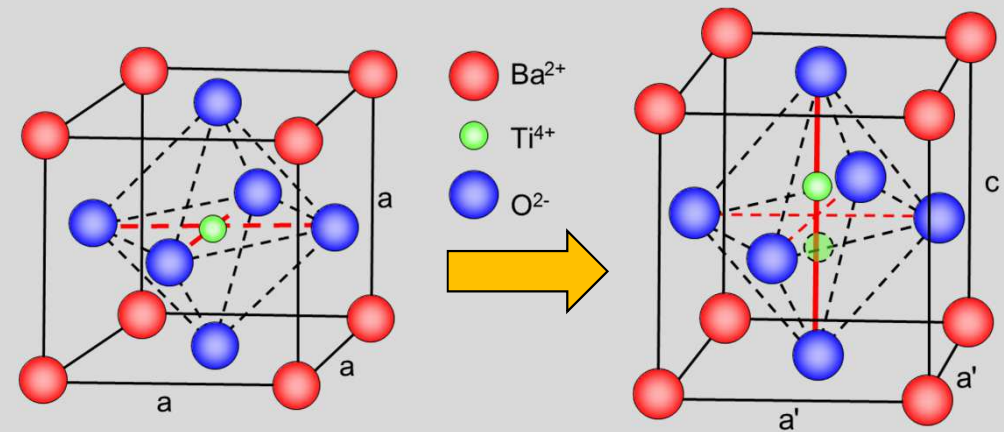
Druck

Kohlenstoff nimmt unter extremen Drücken die Diamantgitterstruktur an.

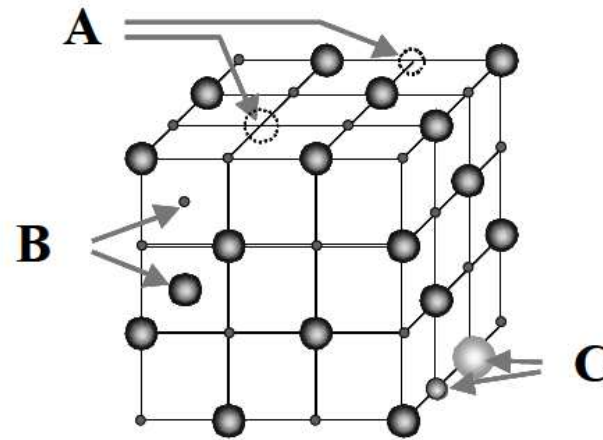


Temperatur

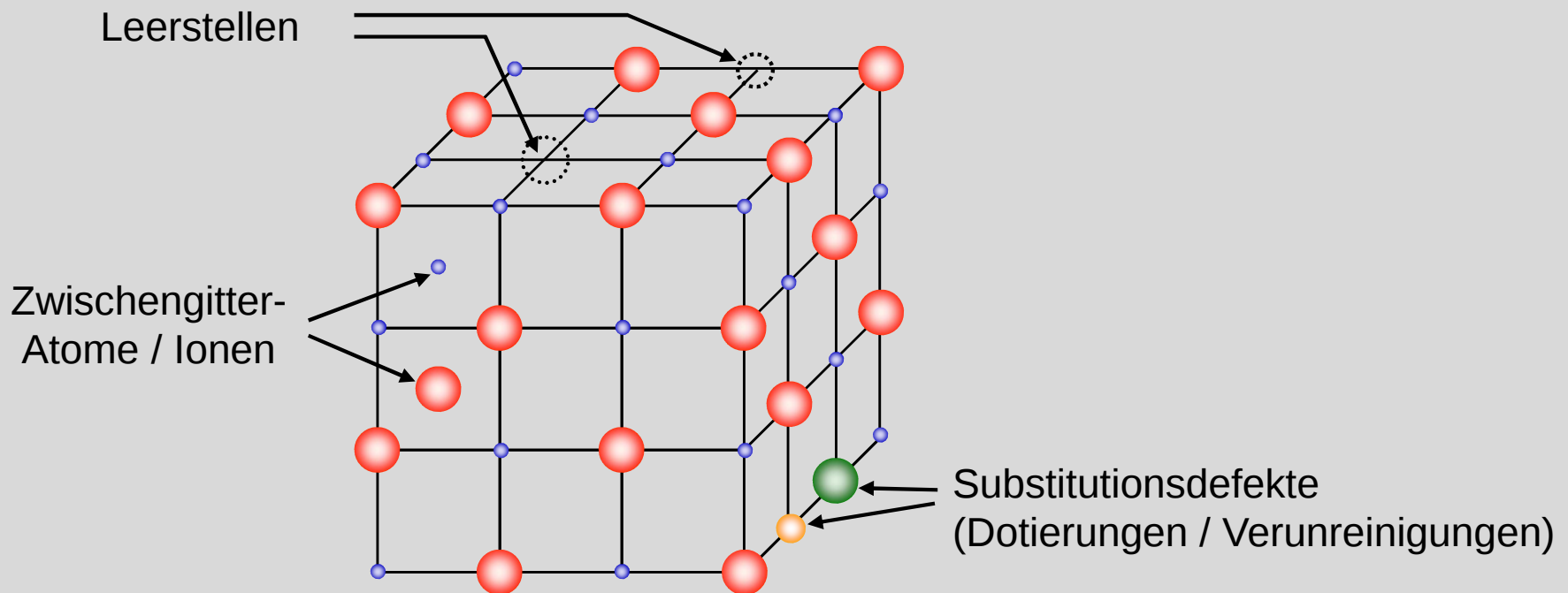
Perowskite wie Bariumtitanat ändern oberhalb einer Sprungtemperatur ihre Gitterstruktur spontan von kubisch nach tetragonal. Diese Eigenschaft ist sehr wichtig für eine Vielzahl von Bauelementen!



d) Benennen Sie die Punktdefekte A, B und C im dargestellten Kristallgitter.



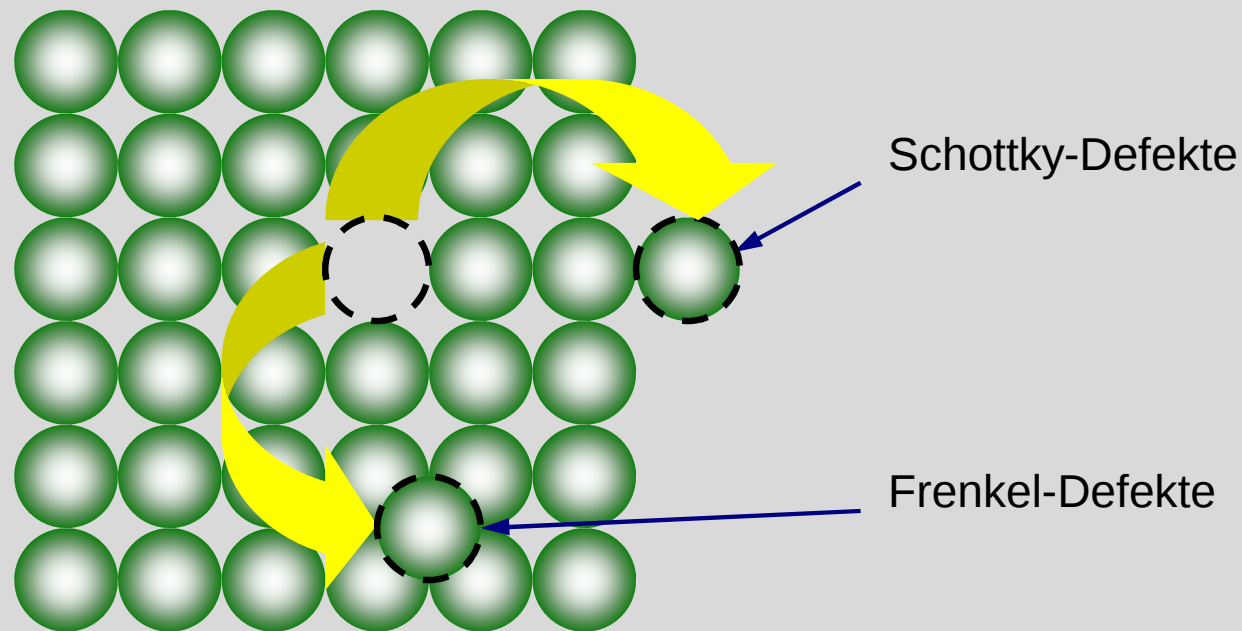
Defekte im Atom/Ionen-Gitter



Durch gezielte Erzeugung von Defekten können Leitfähigkeitseigenschaften verändert werden.
Anwendung: Halbleiterei, Sauerstoffsensoren, Brennstoffzellen etc.

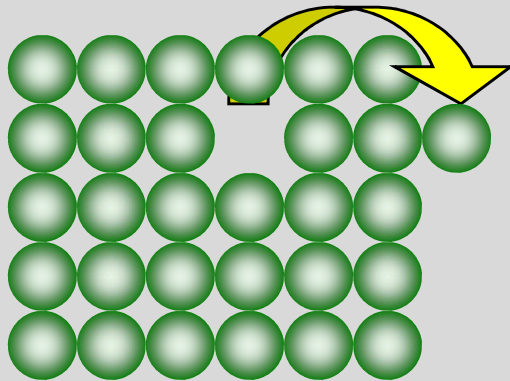
e) Ist die Bildung von Schottky-Defekten mit einer Volumenänderung des Kristalls verbunden? Geben Sie eine kurze Begründung.

Defekte im Atom/Ionen-Gitter



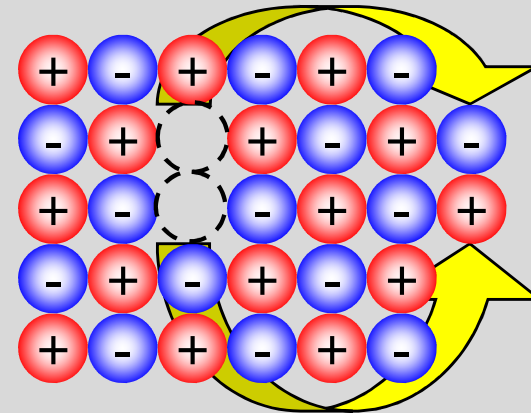
Defekte im Atom/Ionen-Gitter

Gitter A

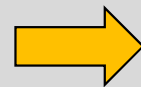


Kovalenter Kristall
⇒ Leerstelle

Gitter A⁺B⁻



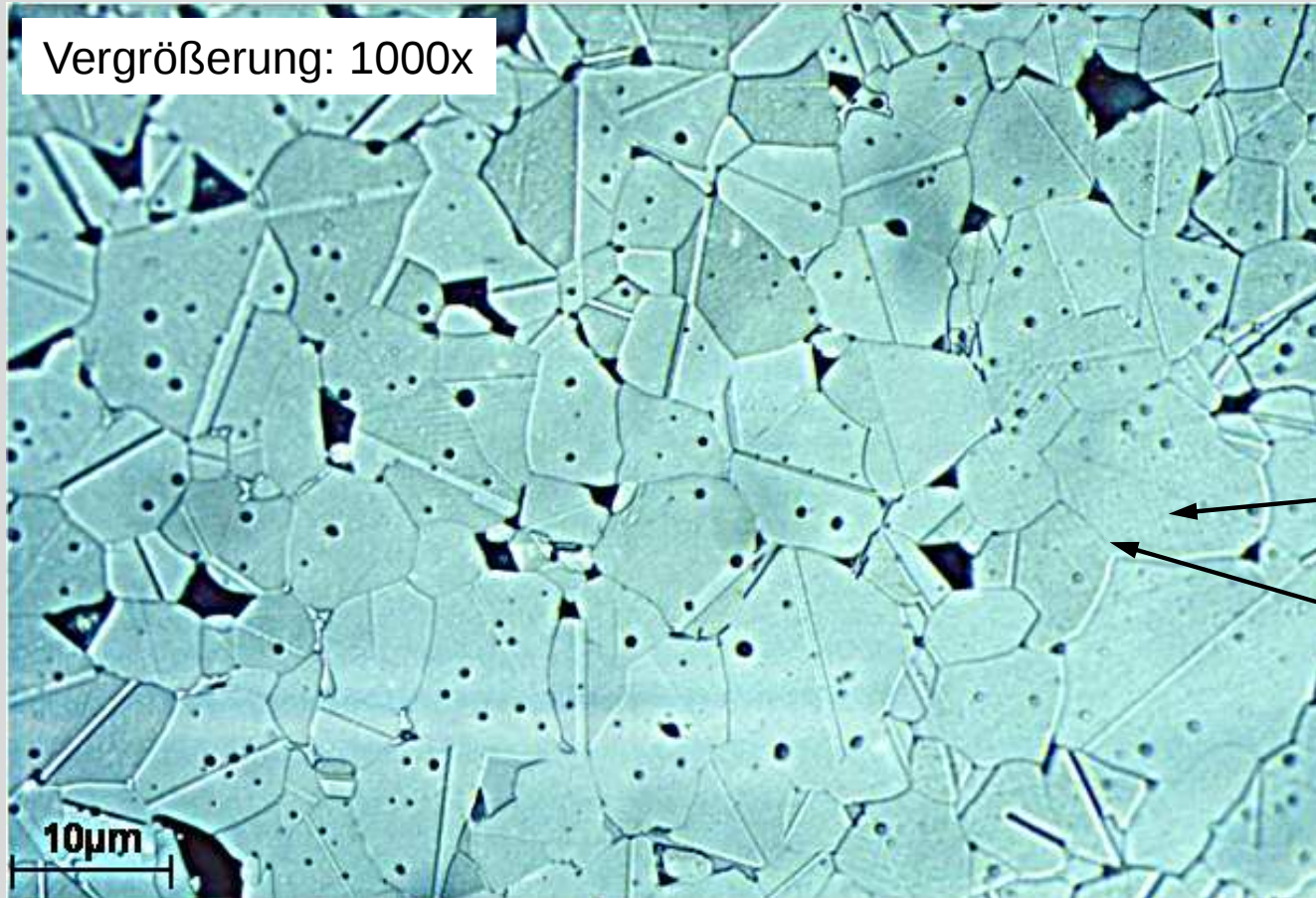
Ionenkristall
⇒ Leerstellenpaare



Volumenänderung des Kristalls

Perfekte Ordnung ist extrem unwahrscheinlich!
Defekte sind daher, trotz ungünstiger Energiebilanz, natürlich und nehmen mit höherer Temperatur zu.
- Siehe auch nächste Vorlesung: Thermodynamik -

f) Was beschreiben die Begriffe „Korn“ und „Korngrenze“?



Bariumtitanat

Korn

Korngrenze

Anwendung:
Kaltleiter und Varistoren

**In Festkörpern werden Bereich gleicher Kristallstruktur und -orientierung als Korn bezeichnet.
Die Grenzflächen zwischen verschiedenen Körnern heißen folglich Korngrenzen.**

Vielen Dank!