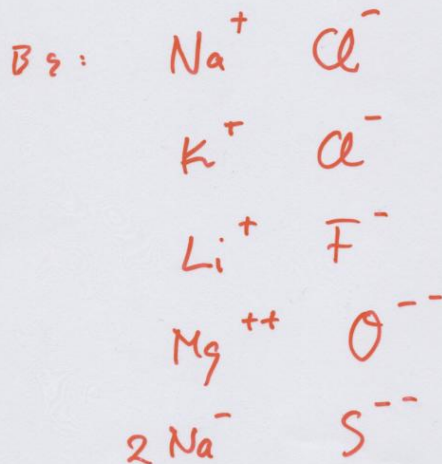


12. 3 Systeme mit vielen
gebundenen Atomen

29

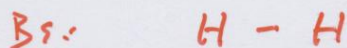
1. Bindungen

a. Heteropolare Bindung : Anziehung von Ionen



Gebunden durch
Elektronenaustausch,
elektrost. Anziehung

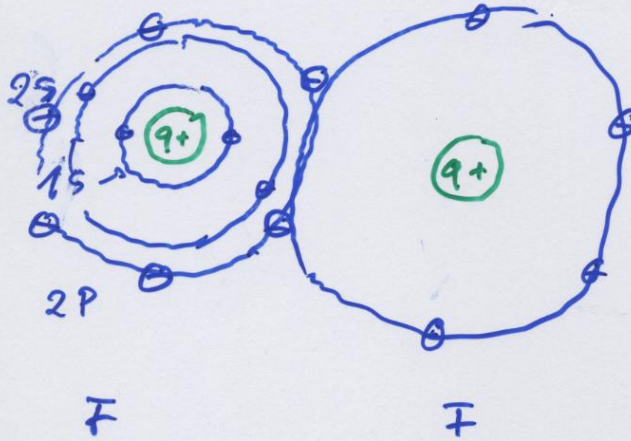
b. Homöopolare Bindung : Austausch von Elektronen der äußeren Hülle



1s Hülle

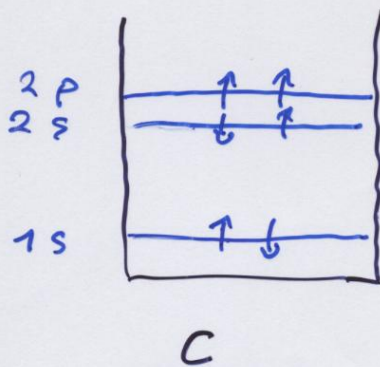
Hüllenabstoßung

Bs: $F - F$ ($z = 9$)

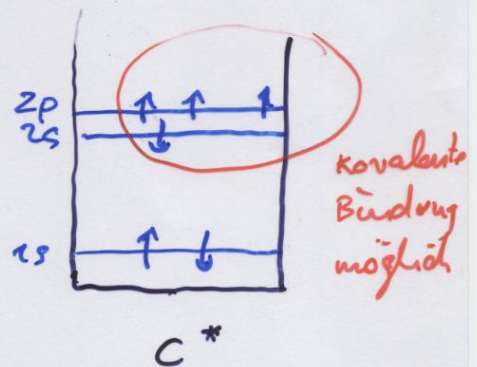


Hüllenabschluss
in 2p
schale

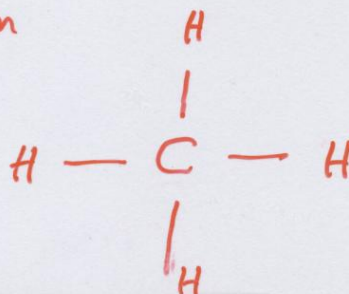
Spezialfall: Kohlenstoffbindung

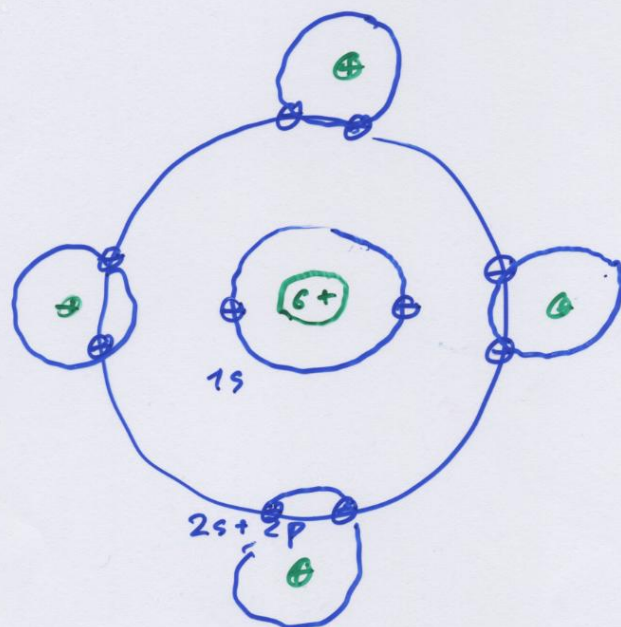


+ 2 eV

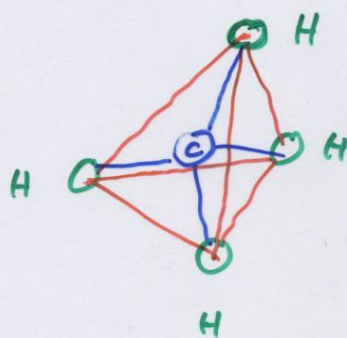


Bs: Methan





Ordnet sich räumlich an:

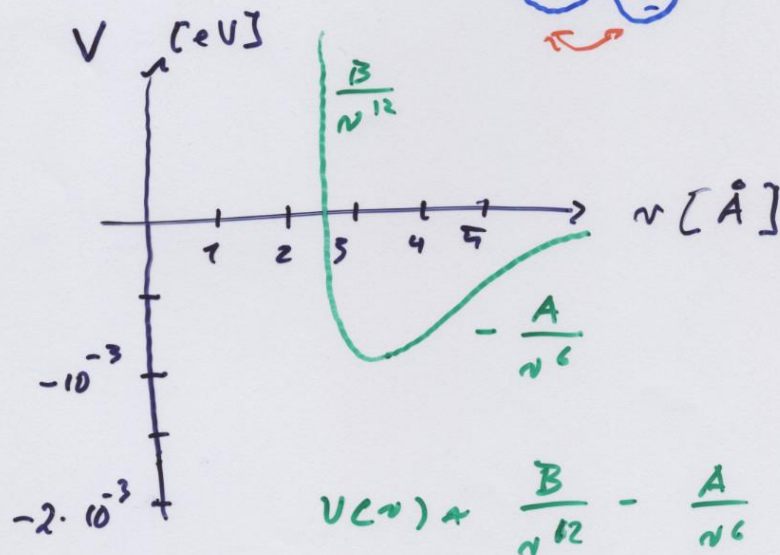
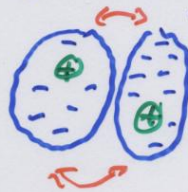


Tetraeder

C. Van der Waals - Bindung

Edelgasatome mit abgeschlossener Hülle

- Van der Waal:
- Deformation der Hüllen
 - Bildung von Dipolen
 - Ausrichtung und Anziehung



Bsp: He - He: $V_{\min} = -0,8 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$

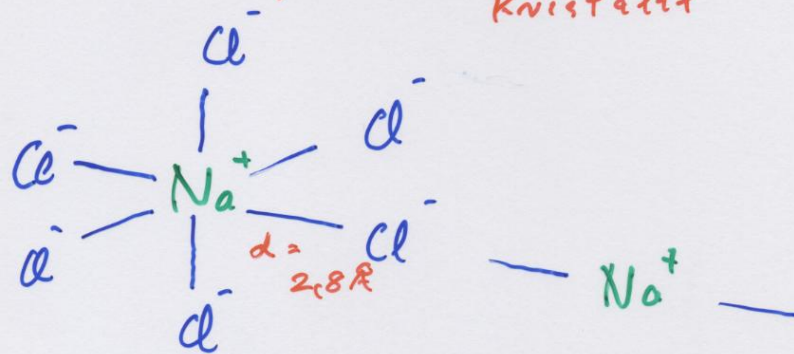
vgl. H - H: $V_{\min} = -4,5 \text{ eV}$

→ Bindung nur bei sehr tiefen Temperaturen

2. Festkörper : Kristalle

a. Ionische Kristalle

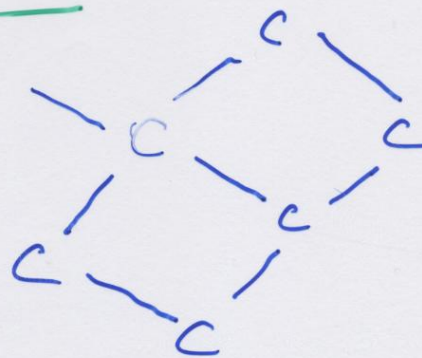
Alkali-, Halogene : kubische ionische Kristalle



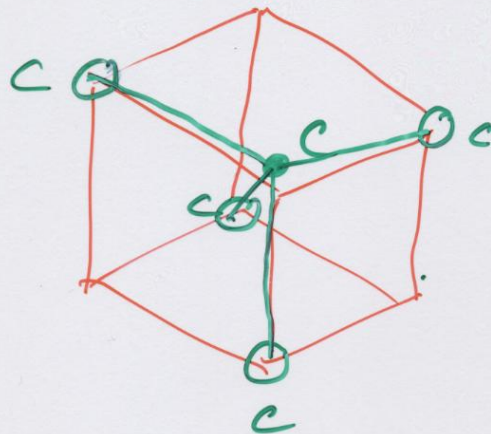
Feste Bindung durch elektrostatische Anziehung
 $V = -16,5 \text{ eV}$ pro Ionenpaar.

b. Kovalente Kristalle

z.B. C



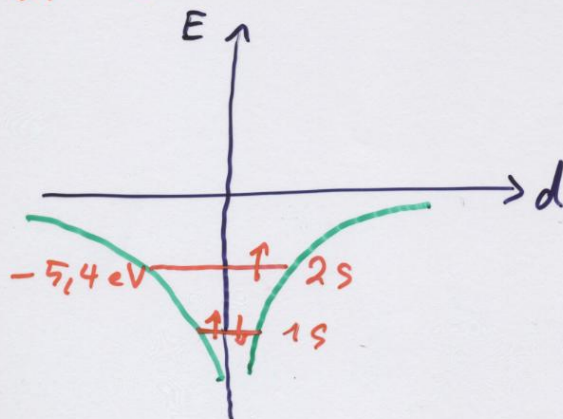
Bs. Diamant



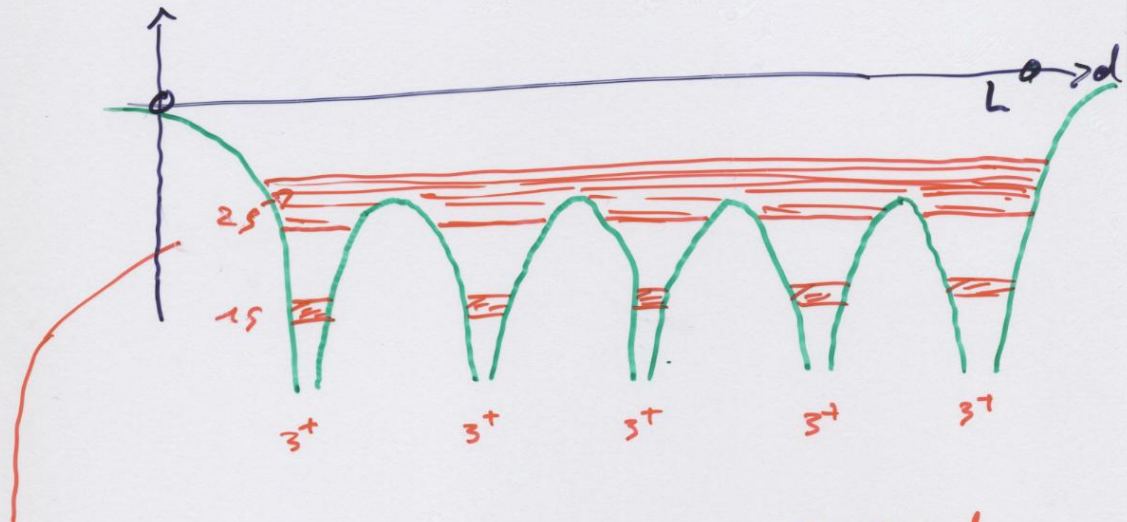
c Metallische Kristalle

Gitter aus pos. Ionen mit freien Valenzelektronen

Bsp Lithium ($z = 3$)

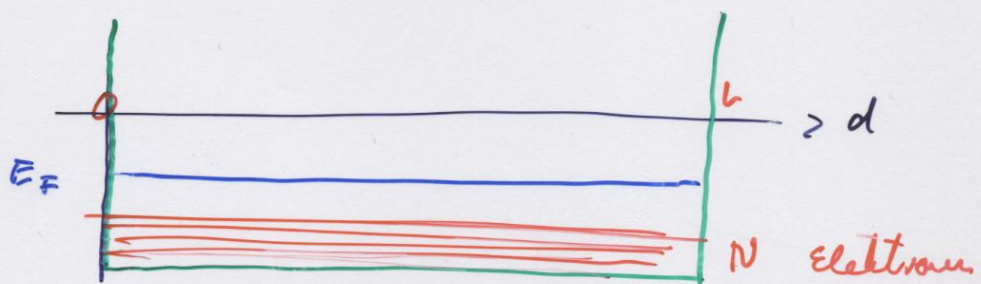


Lithiumkristall (1d)



Valenzelektronen: Gas im Valenzband
frei beweglich

Beschreibung durch Annäherung eines
Kastenpotentials (Fermi Gas Modell)



3-d. Kasten :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi$$

$$\psi = A \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z$$

$$\psi = 0 \text{ für } x, y, z < 0 \\ > L$$

$$\Rightarrow k_x = \frac{n_x \pi}{L}, \quad n_x = 1 \dots n_{\max}$$

$$k_y = \frac{n_y \pi}{L}, \quad n_y = \quad "$$

$$k_z = \frac{n_z \pi}{L}, \quad n_z = \quad "$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

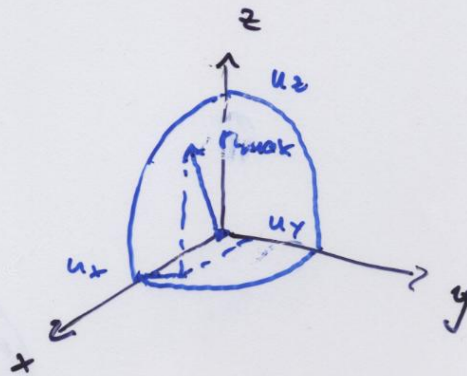
Jedes Elektron hat Zustand (n_x, n_y, n_z)

$$n_{z\max} = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{2mE} \quad (n_x = n_y = 0)$$

$$N(E_i \leq E_F)$$

Zahl aller
Elektronen im Kristall

$$= \underset{\substack{\uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow}}{2} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \frac{1}{8} \text{ Kugel}}}{\left(\frac{1}{2}\right)^3} \cdot \frac{4}{3} \pi \overset{\text{Oberfläche eines Kugel}}{\underset{(n_i \geq 1)}{m_{\max}^3}}$$



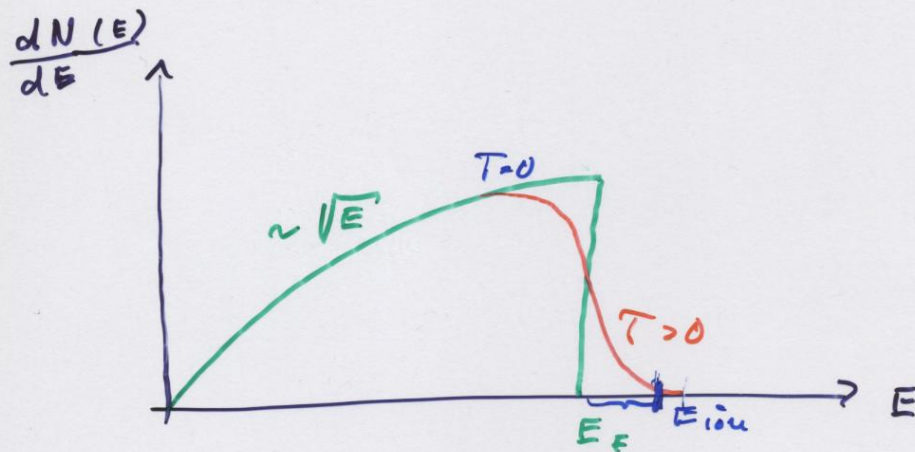
$$\rightarrow N = \frac{L^3}{3\pi^2 \hbar^3} \cdot (2mE)^{3/2}$$

$$E_F = \frac{3^{2/3} \cdot \pi^{4/3} \cdot \hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

Fermienergie = max. Energie (Volumen $V = L^3$)
der Elektronen im Kristallpot.
bei $T = 0 \text{ K}$

$$B_9 : Cu : \frac{N}{V} = \frac{6 \cdot 10^{23} / \text{Mol} \cdot 8,9 \cdot 10^6 \text{ g} / \text{m}^3}{63,5 \text{ g} / \text{Mol}} = 8 \cdot 10^{28} \text{ e}^- / \text{m}^3$$

$$E_F = 7 \text{ eV}$$



$$\frac{dN}{dE} = \frac{(2m)^{3/2} \cdot V \cdot \sqrt{E}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}}$$

$\uparrow$
 Fermi-Dirac-
 statistik.