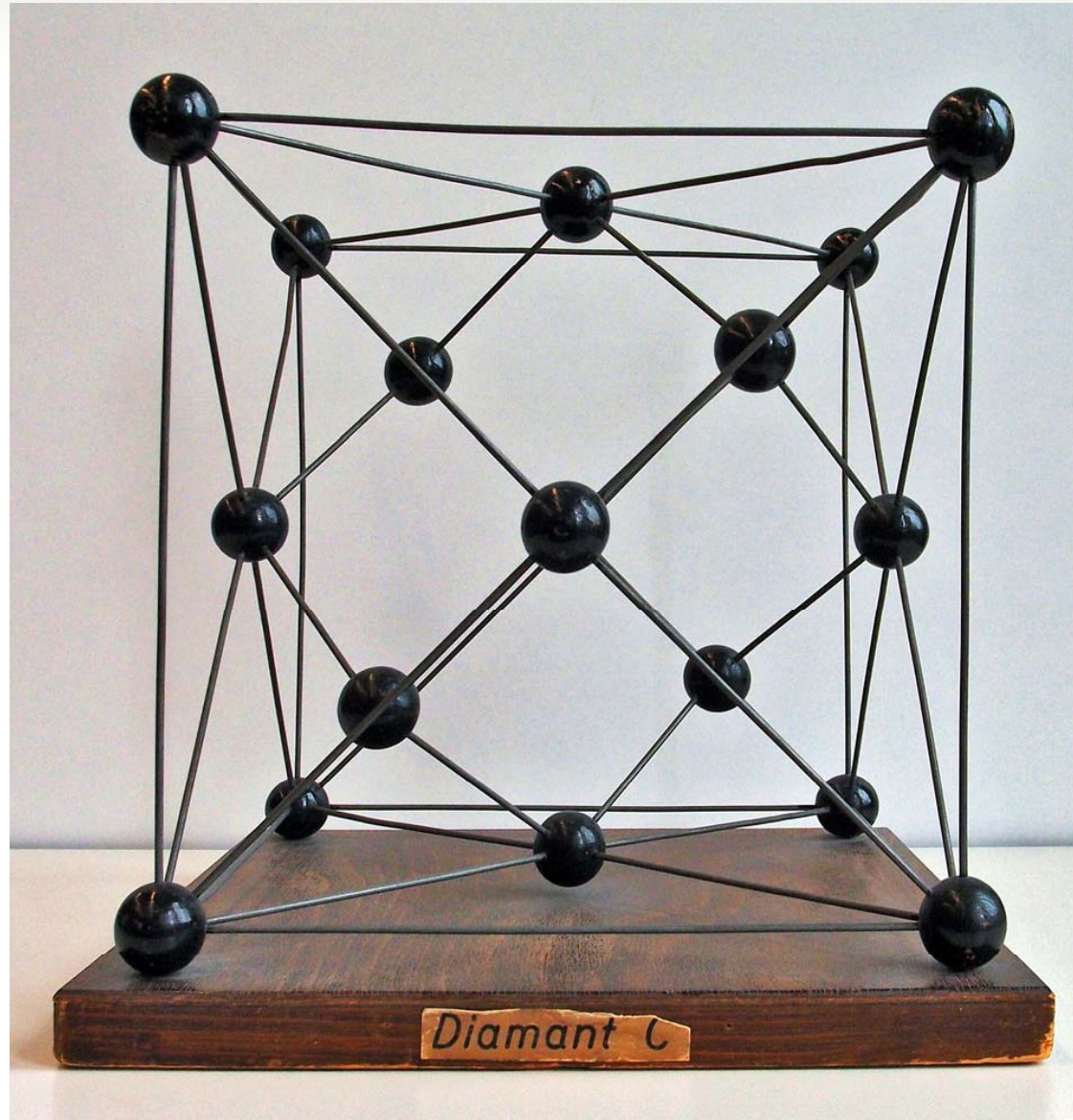


Festkörper 1

Kristallstruktur
Röntgenbeugung
Bandstruktur
Chemische Bindung

Thema Festkörper Kristallstruktur



Feldionenmikroskop



Festkörper 2




Kristalline Anordnung

The diagram illustrates three types of cubic crystal structures, each shown within a 3D wireframe cube with orange spheres representing atoms:

- simple cubic:** Atoms are located only at the eight corners of the cube.
- body-centered cubic:** Atoms are located at the eight corners and one in the center of the cube.
- face-centered cubic (cubic close-packing):** Atoms are located at the eight corners and the center of each of the six faces of the cube.

Example labels for each structure:

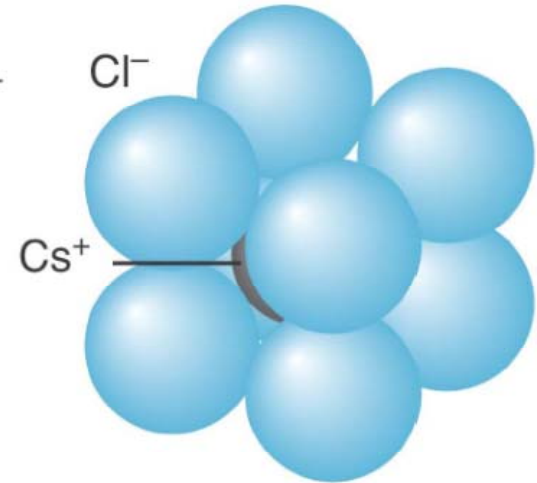
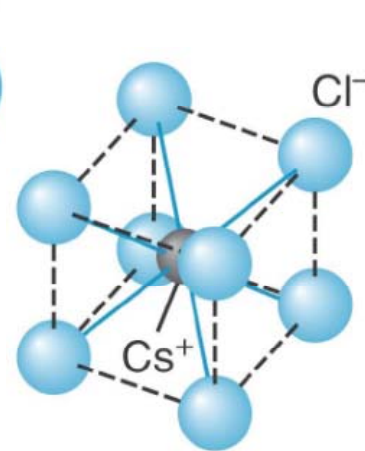
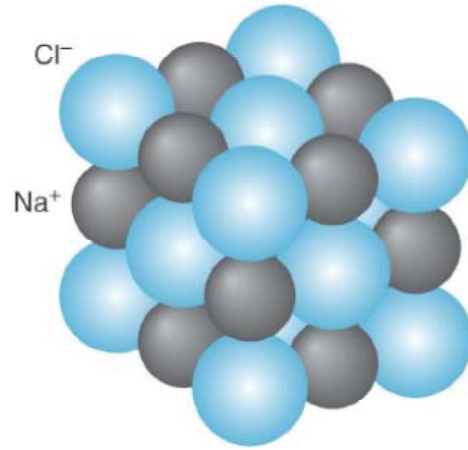
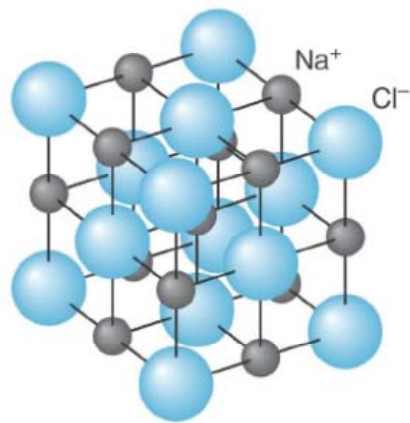
- simple cubic: Beispiel α - Po
- body-centered cubic: Beispiele CsCl, α - Fe
- face-centered cubic (cubic close-packing): Beispiel Metall Cu

DAS EXPERIMENT
 Modelle von Kristallstrukturen

Diagnose
Die Struktur von Kristallen lässt sich häufig auf einfache Geometrien reduzieren

Kristallstrukturen Tafelsalz and andere

FCC
face-centered-cubic



BCC
body-centered-cubic

Diagnose
Ionenbindung führt zu periodischer Struktur

Beispiel Kohlenstoff

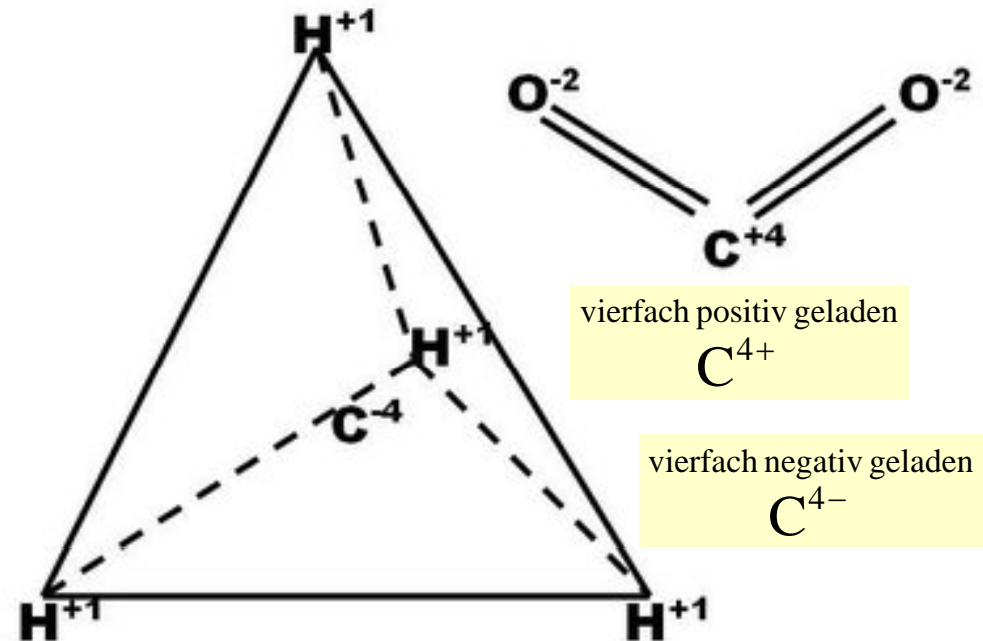
Wertigkeit von Stoffen



Symptome

- Stoffe verhalten sich allgemein so, dass sie bei Bindung Edelgaskonfiguration erzielen wollen
- Pauliprinzip erlaubt auf erster Schale ZWEI (s^2) und auf jeder weiteren ACHT (s^2p^6) Elektronen
- Atom gibt entweder Anzahl von Elektronen ab oder nimmt Elektronen auf
- wahrscheinlich ist, dass ein Stoff eher EIN Elektron abgibt, statt SIEBEN aufzunehmen
- Kohlenstoff steht in 4. Hauptgruppe und hat 4 Elektronen auf äußerer Schale
- Kohlenstoff kann VIER Elektronen abgeben oder VIER aufnehmen (win-win Situation)

1 H Wasserstoff 1,008	2 He Helium 4,003																						
3 Li Lithium 6,941	4 Be Beryllium 9,012	5 B Bor 10,81	6 C Kohlenstoff 12,01	7 N Stickstoff 14,01	8 O Sauerstoff 16,00	9 F Fluor 19,00	10 Ne Neon 20,18																
11 Na Natrium 22,99	12 Mg Magnesium 24,31	13 Al Aluminium 26,98	14 Si Silicium 28,09	15 P Phosphor 30,97	16 S Schwefel 32,06	17 Cl Chlor 35,45	18 Ar Argon 39,95																
19 K Kalium 39,10	20 Ca Calcium 40,08	31 Ga Gallium 69,72	32 Ge Germanium 72,59	33 As Arsen 74,92	34 Se Selen 78,96	35 Br Brom 79,90	36 Kr Krypton 83,80																
37 Rb Rubidium 85,47	38 Sr Strontium 87,62	49 In Indium 114,8	50 Sn Zinn 118,7	51 Sb Antimon 121,8	52 Te Tellur 127,6	53 I Iod 126,9	54 Xe Xenon 131,3																

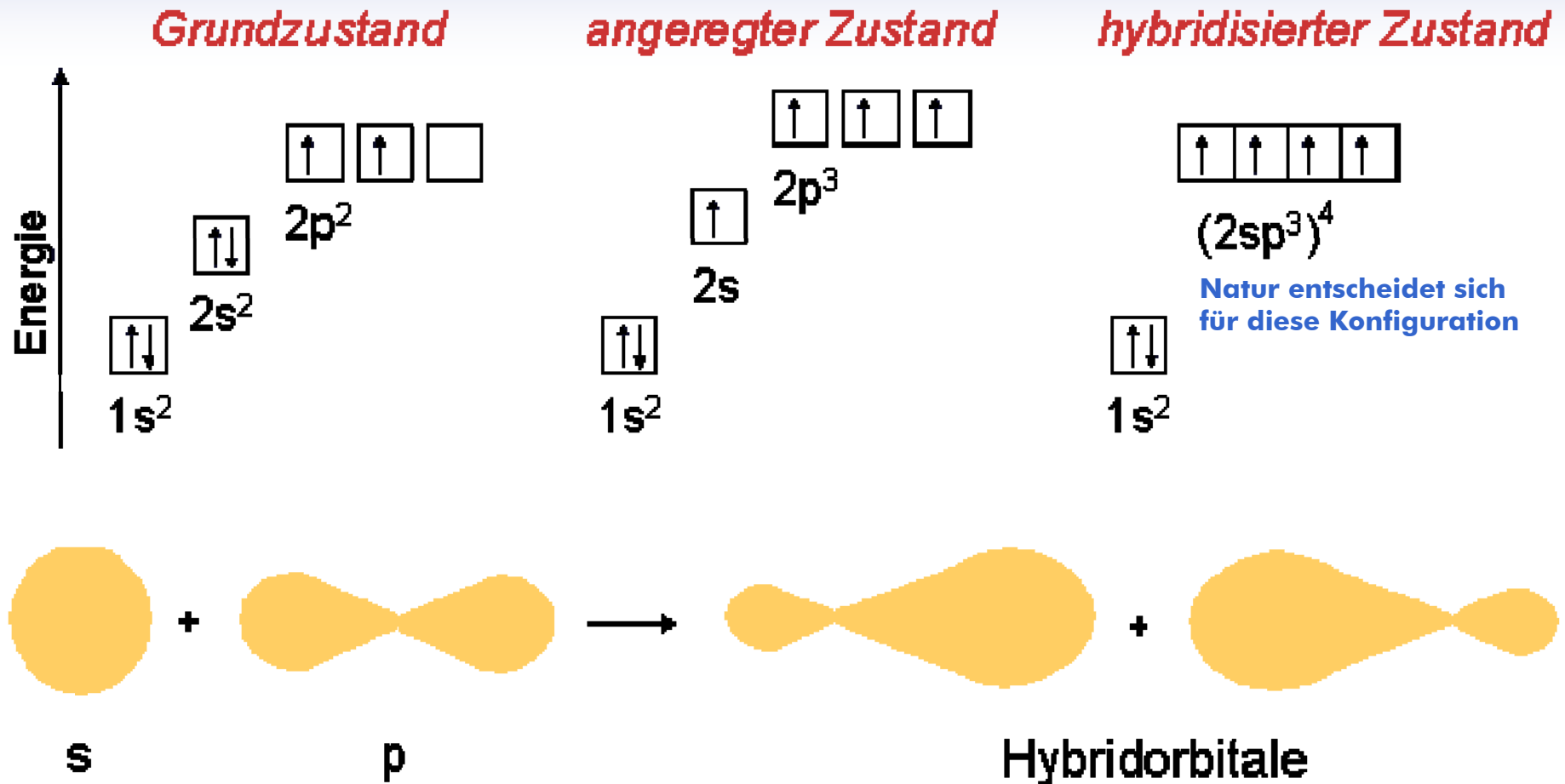


Diagnose

- dies ist eine Besonderheit des Kohlenstoffs
- nur so ist es möglich, dass es Methan UND Kohlendioxid gibt
- chemisch gesehen ist Kohlenstoff VIERWERTIG



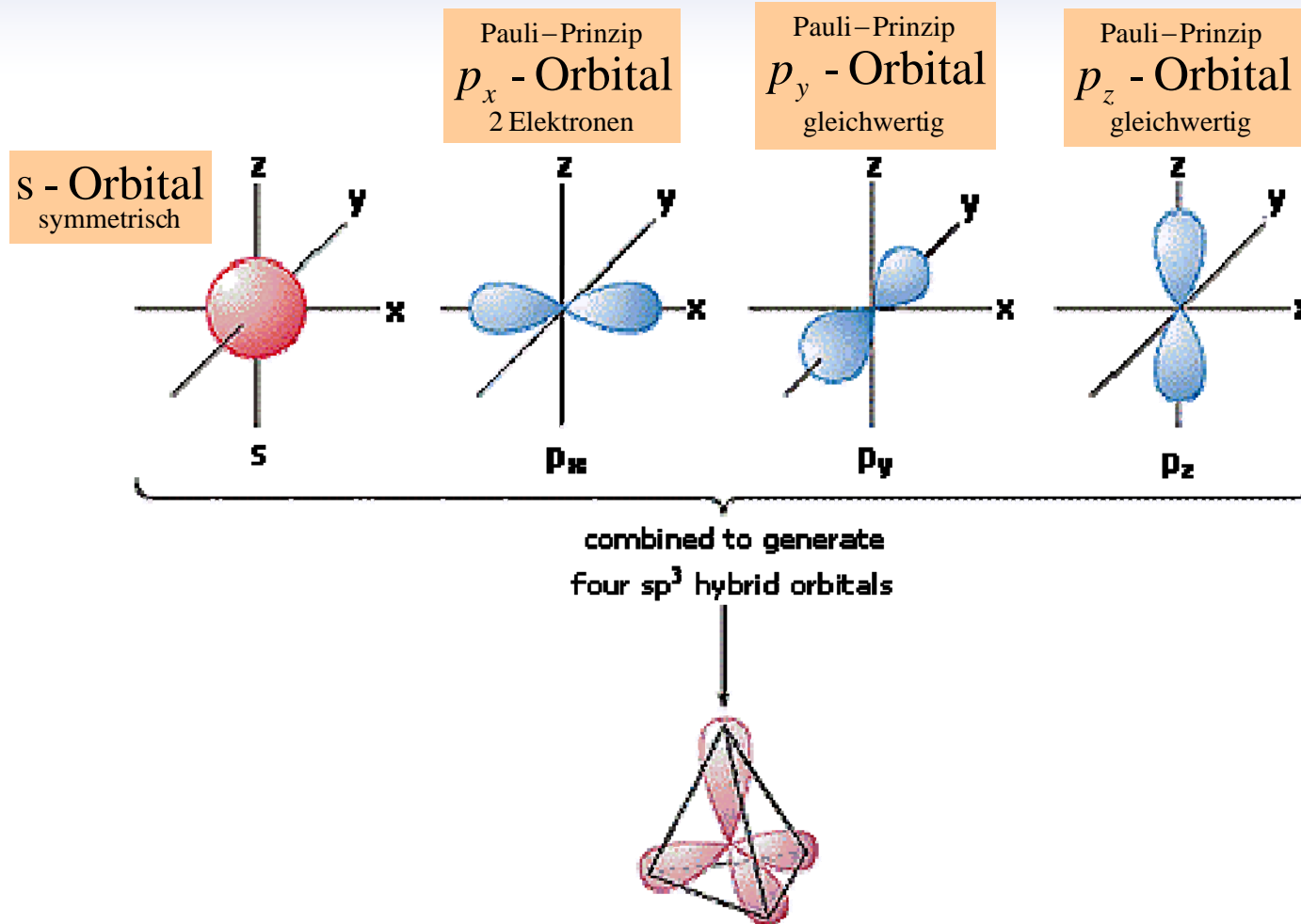
Kohlenstoff sp^3 -Hybridisierung



Diagnose

- nach Pauliprinzip wäre Kohlenstoff **NUR** zweiwertig
- angeregter Zustand ($2s^1 2p^3$) wäre 4-wertig, aber energetisch ungünstig
- in sp^3 -Hybridorbitalen sind **EIN** s- und **DREI** p-Orbitale beteiligt

Atomare Orbitale



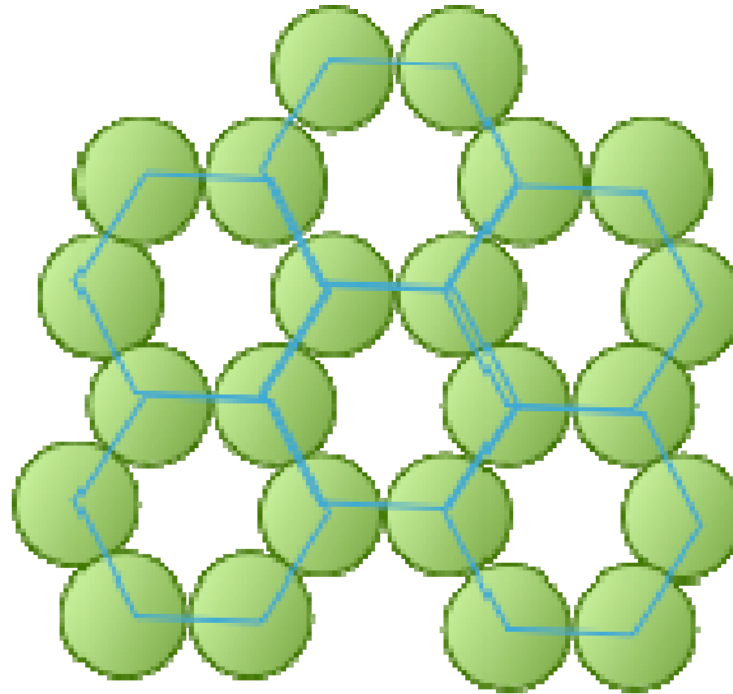
Diagnose

- ein 2s- und drei 2p-Orbitale formen vier energetisch gleichwertige sp^3 -Hybridorbitale
- **VIER** Elektronen stehen für Bindungen zur Verfügung

irgendwie anders Kohlenstoff

Symptome

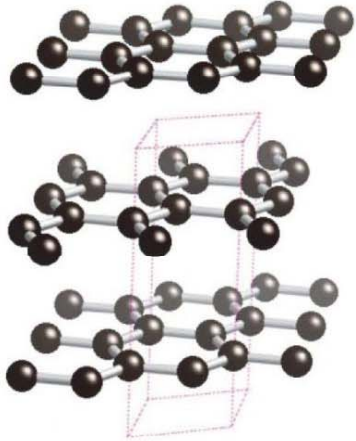
Gerichtete chemische Bindungen zwischen Atomen bestimmen Packungsverhalten



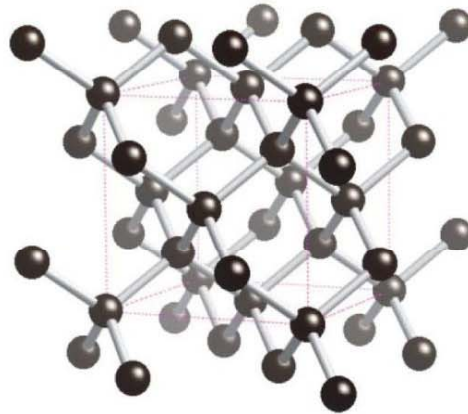
Diagnose

- hexagonale Anordnung von Kohlenstoff führt zur Bildung von zweidimensionalen HOPG (highly ordered pyrolytic graphite)
- jedes Kohlenstoffatom bindet zu DREI anderen C-Atomen
- Koordinationszahl DREI gibt sp^3 -Hybridisierung von Kohlenstoff wieder
- Bildung einer hexagonalen Basisstruktur mit Lücken
- Bindung zwischen Schichten schwach ausgeprägt

irgendwie anders
Andere Kohlenstoff-Strukturen

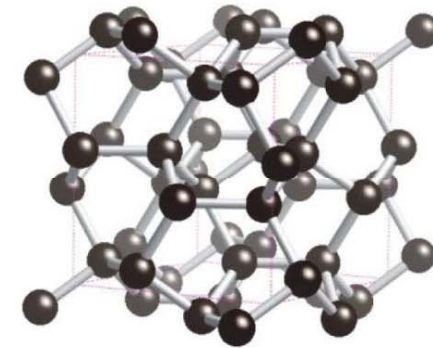


graphite

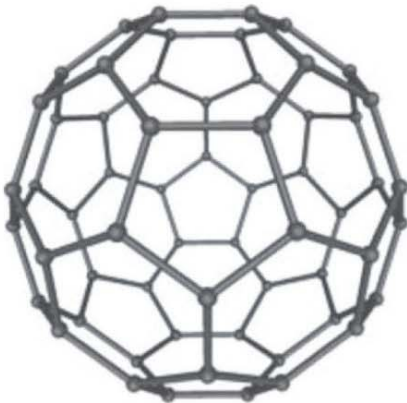


diamond

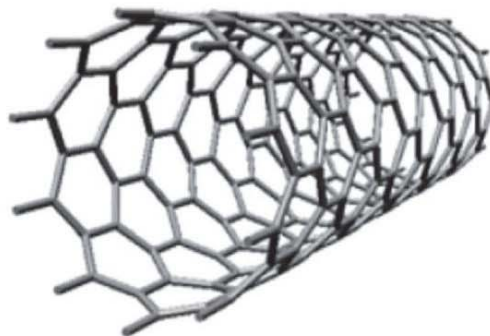
**Modifikation von Diamant
bei hohem Druck (>1000 GPa)**



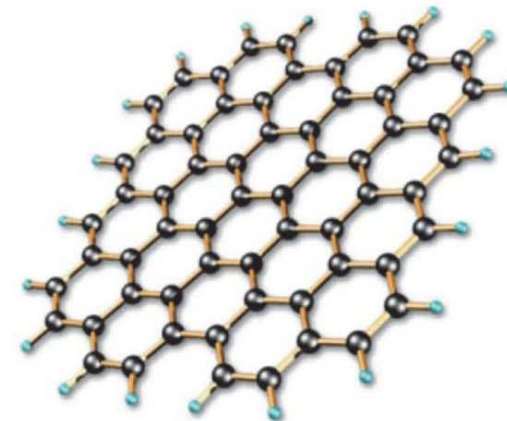
BC8



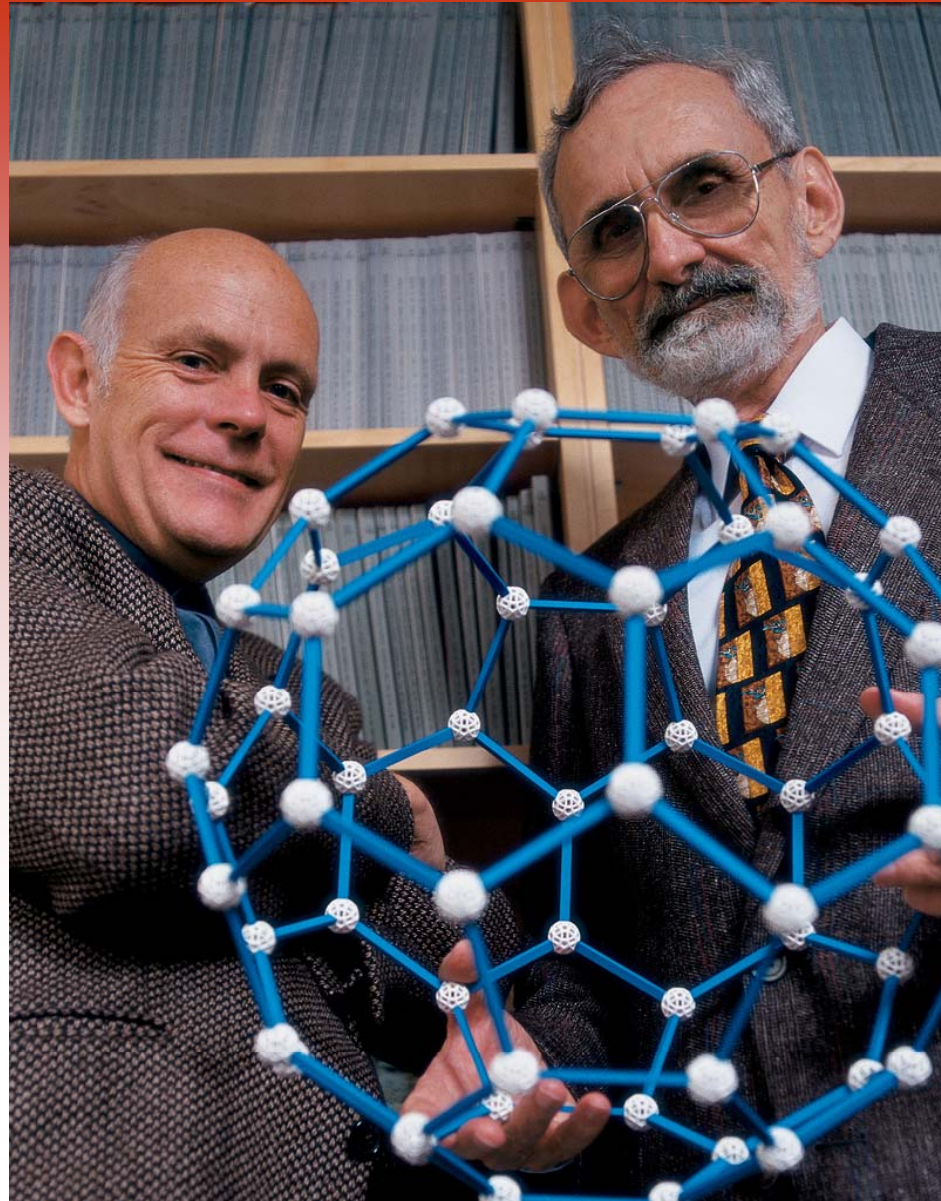
fullerene



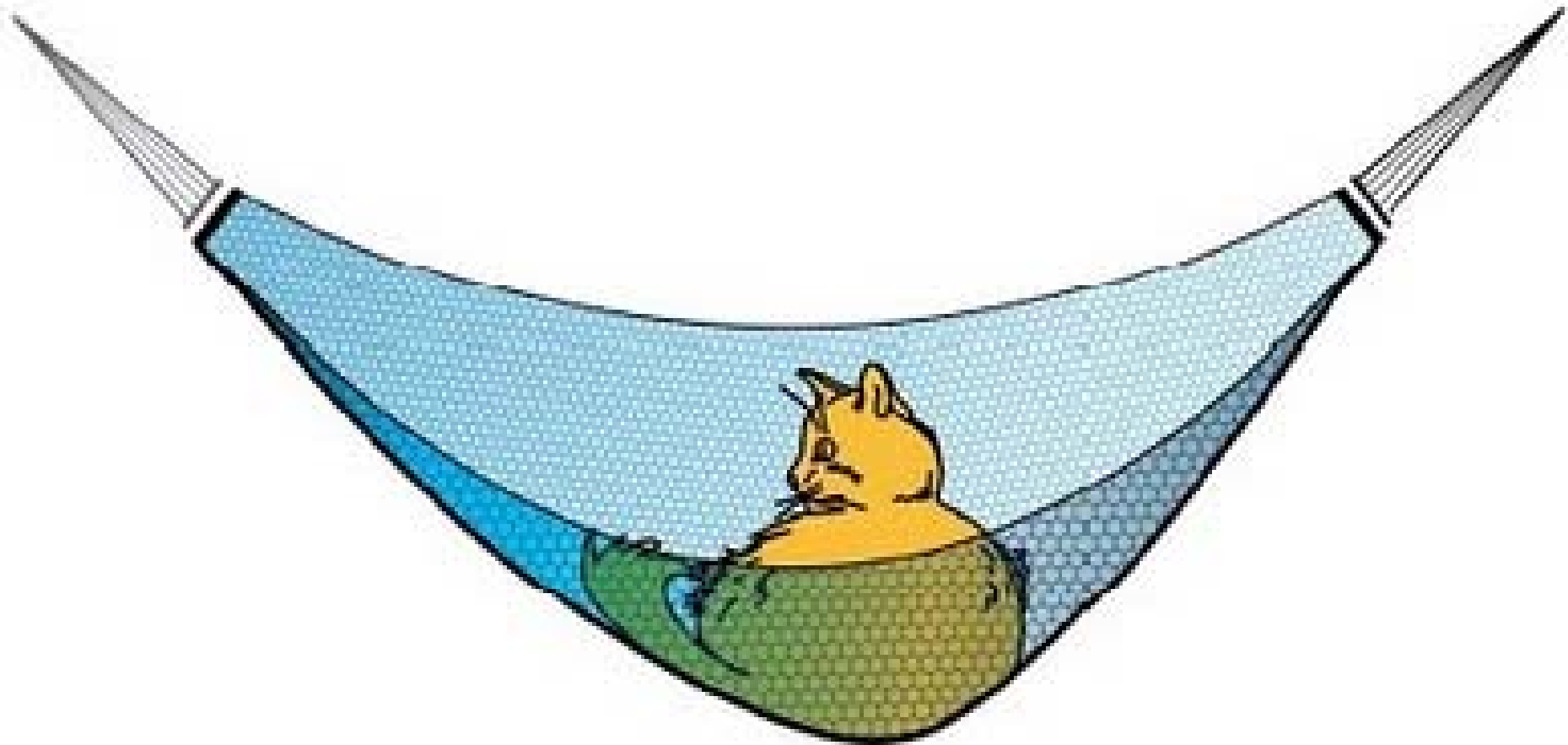
nanotube



graphene



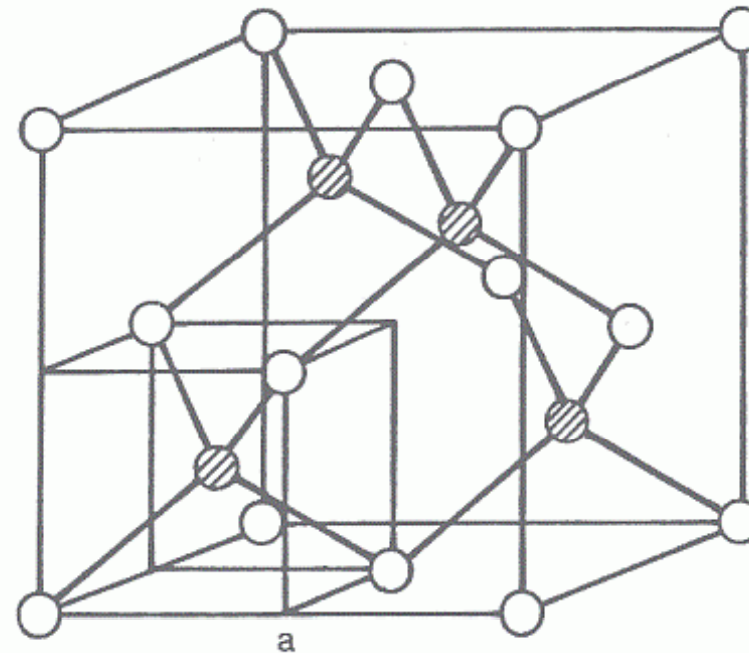
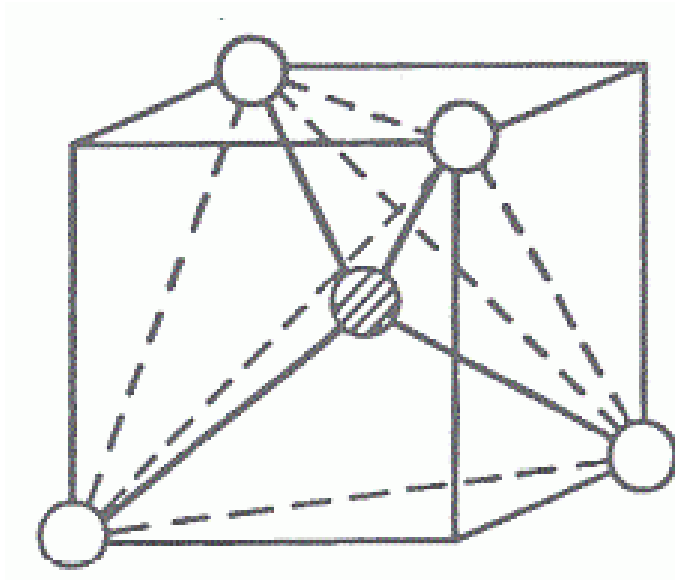
The Nobel Prize in Chemistry 1996 was awarded jointly to Robert F. Curl Jr., Sir Harold W. Kroto and Richard E. Smalley for their discovery of fullerenes



**The Nobel Prize in Physics 2010 was awarded jointly to
Andre Geim and Konstantin Novoselov
for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene**

Kristalline Anordnung Diamand

Elementarzelle

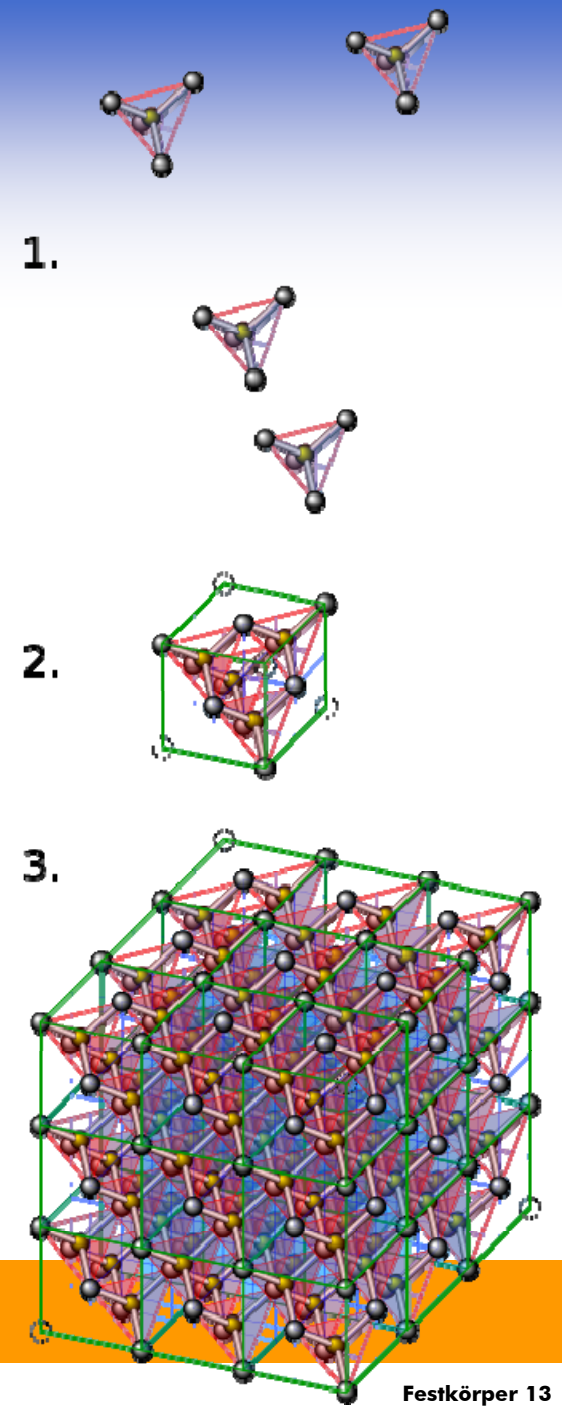


Gitterstruktur des Diamantkristalls

Diagnose

- Kristall kann aus elementaren Bauteile zusammengesetzt werden
- kristalline Festkörper zeichnen sich durch diese Periodizität aus
- elektronische Eigenschaften sollten sich in ähnlicher Weise ausdrücken

Kristallstrukturen Diamant und andere

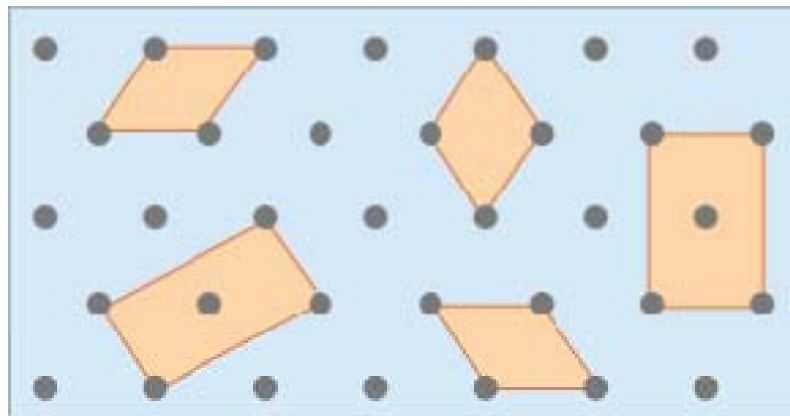
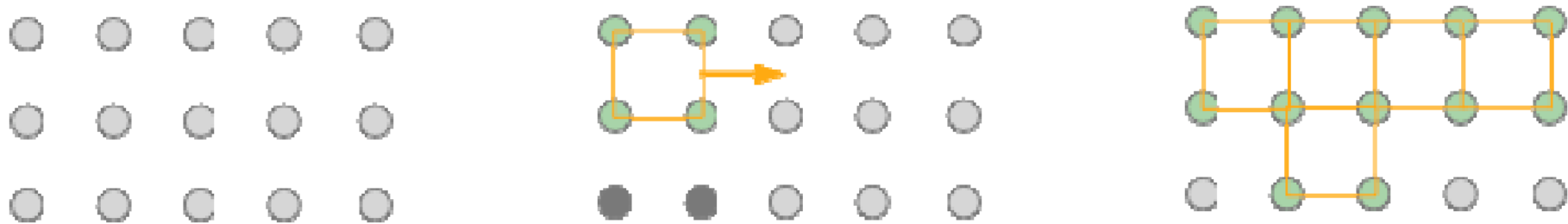


Diagnose
Kohlenstoff und andere Halbleiter kristallisieren in Diamantstruktur

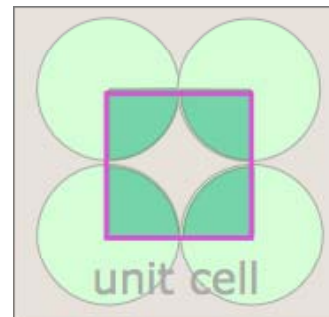
Kristalline Anordnung

Symptome

- Festkörper setzen sich aus Basisbausteinen zusammen, die aneinander gesetzt werden
- Klassifizierung von Festkörpern anhand weniger Basisstrukturen

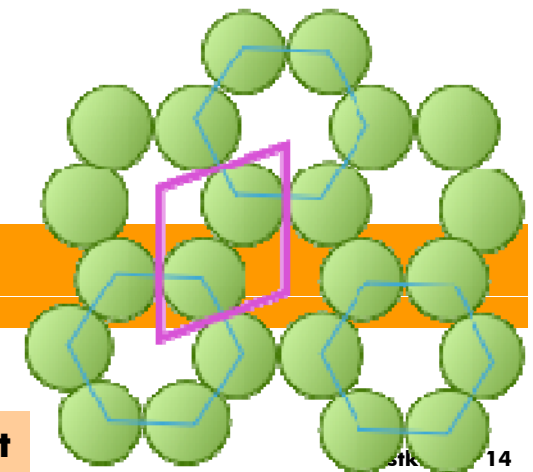


- Möglichkeiten Basisstruktur in Gitter zu definieren
- an Eckpunkten sitzen Gitteratome



Diagnose

Festkörper kann aus elementaren Einheitszellen aufgebaut werden



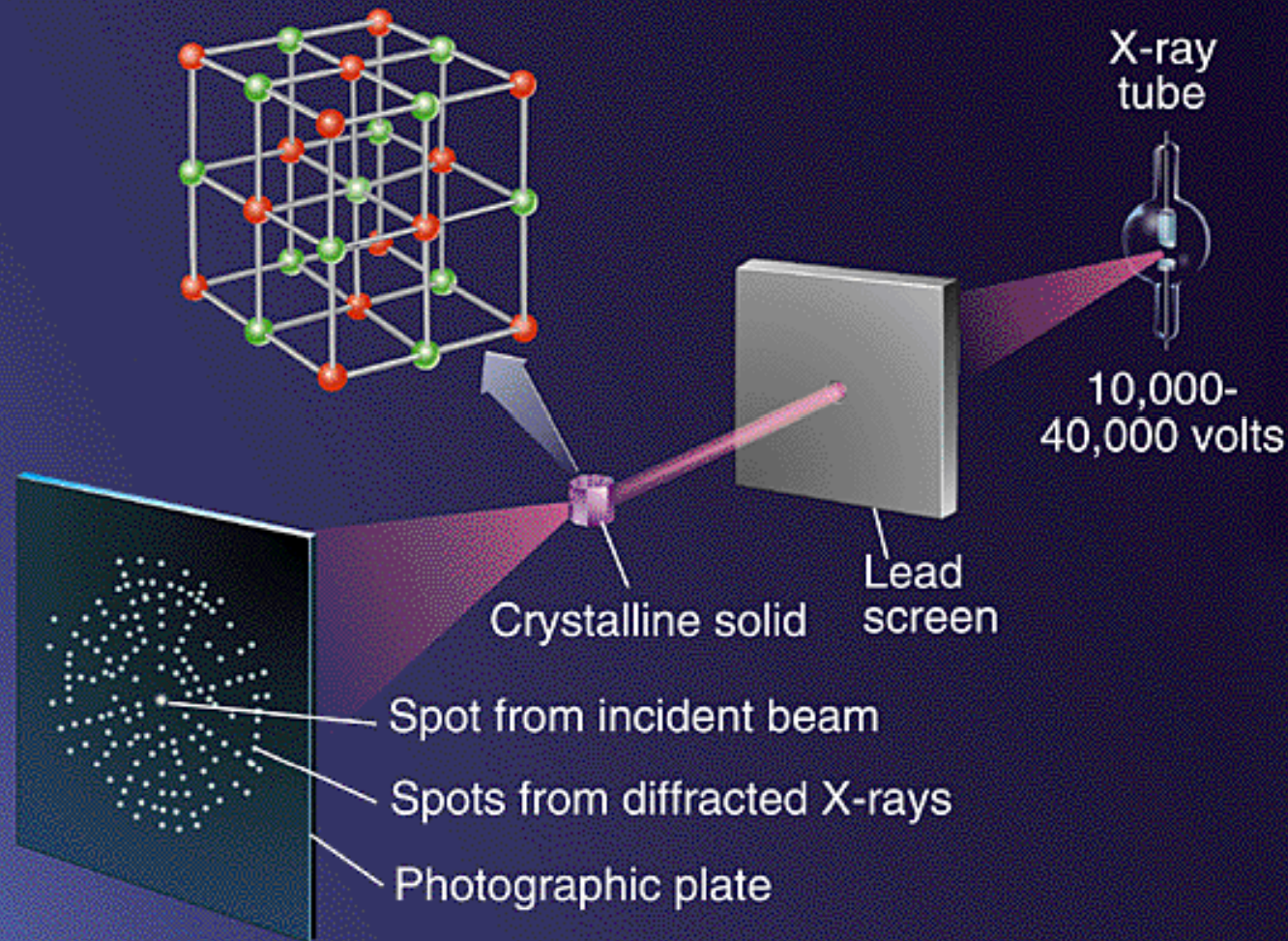
Einheitszelle für Graphit

Thema Festkörper Röntgenbeugung

2014

international year of crystallography





Diagnose

Beugung weißen Röntgenlichtes (kontinuierliches Spektrum) an Einkristallgitter liefert Strukturinformation über Festkörper (Experiment Friedrich, Knipping 1912)

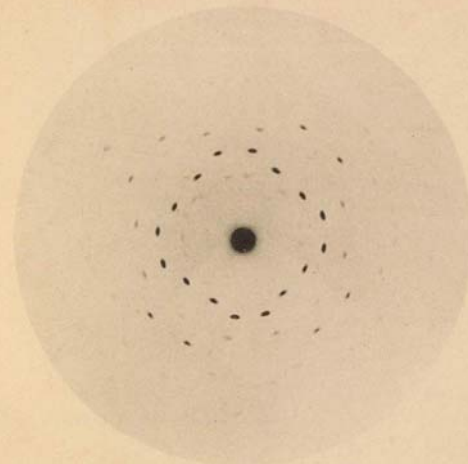


Fig. 5

Max von Laue

Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen

Sitzungsberichte der Königlich Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Mathematische-Physische Klasse 42, 303 (1912)

- $\lambda_{\alpha} = 0,0377$
- ⊙ $\lambda_{\alpha} = 0,0563$
- × $\lambda_{\alpha} = 0,0663$
- $\lambda_{\alpha} = 0,1051$
- + $\lambda_{\alpha} = 0,1493$

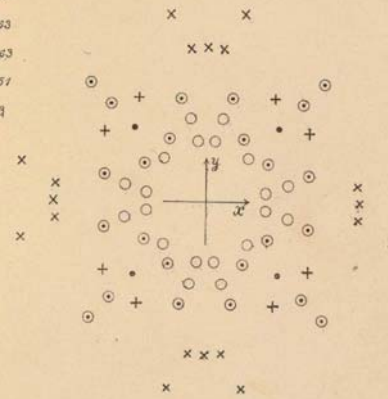


Fig. 6

The Nobel Prize in Physics 1914 was awarded to Max von Laue for his discovery of the diffraction of X-rays by crystals

2014

Bragg-Bedingung

international year of crystallography

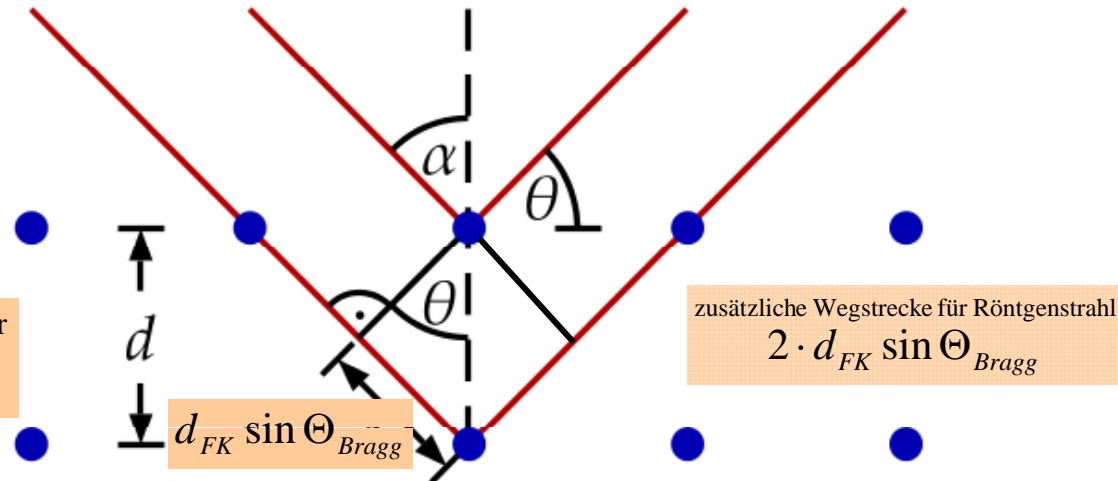
Symptome

- von jedem Gitteratom geht Streuwelle aus (Huygensches Prinzip)
- Streulicht von unterschiedlichen Kristallebenen hat einen definiert längeren Weg
- Elementarwellen überlagern sich am Detektor und interferieren **KONSTRUKTIV** oder destruktiv

$$\lambda_{xray}^{typisch} = 10^{-11} \text{ m}$$

Gitterabstände im Festkörper

$$d_{FK} \approx 10^{-10} \text{ m}$$



geometrischer Wegunterschied im Strahlengang

$$n_{Ordnung} \lambda_{xray} = 2d_{FK} \sin \Theta_{Bragg}$$

Bragg - Bedingung für konstruktive Interferenz

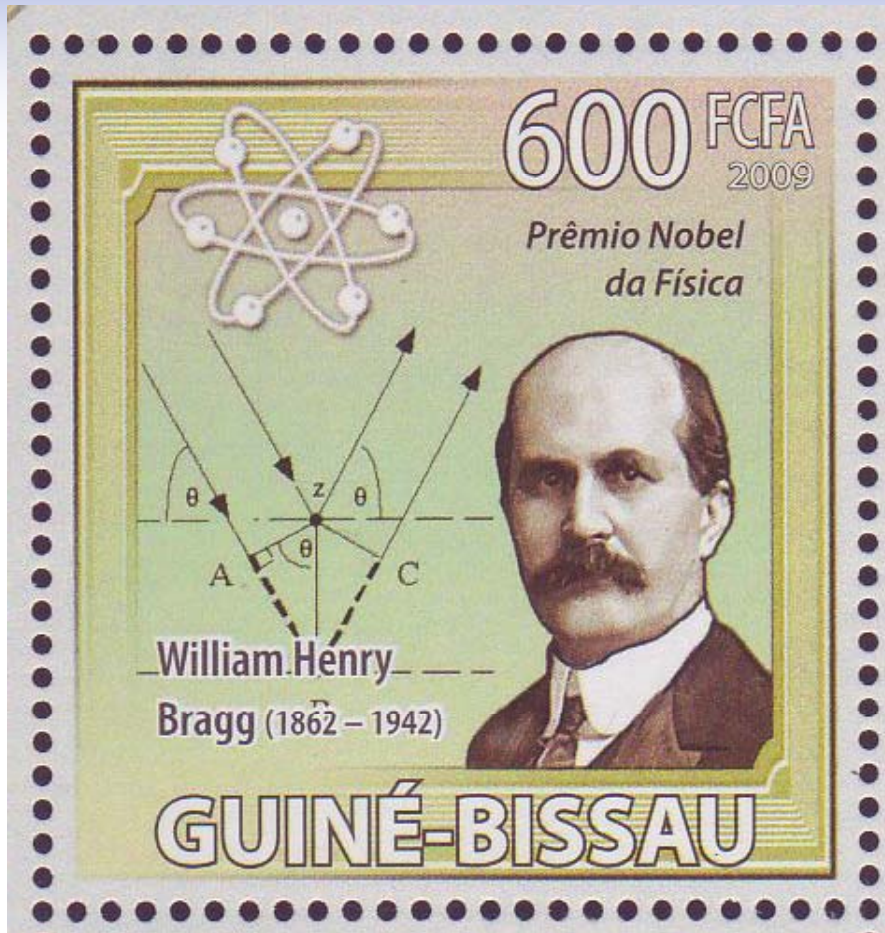
Röntgenbeugung
Elektronenbeugung

DAS EXPERIMENT



Diagnose

- typische Atomabstände im Festkörper vergleichbar mit Wellenlänge von Röntgenstrahlung
- Röntgenbeugungs-Experiment erlaubt Beobachtung von Interferenz
- Beugung an Einkristall erlaubt Erzeugung monochromatischen Röntgenlichts



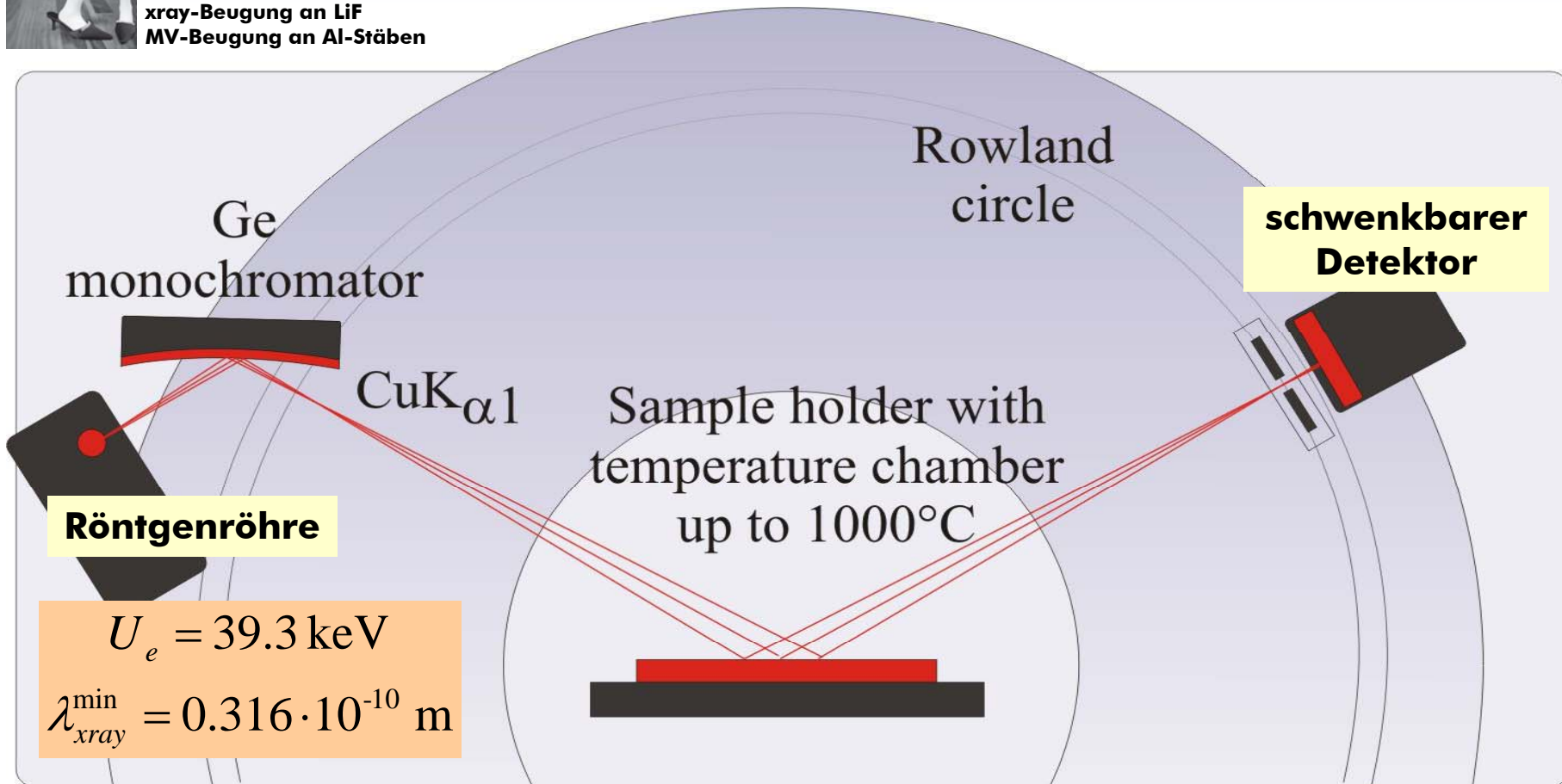
The Nobel Prize in Physics 1915 was awarded jointly to Sir William Henry Bragg and William Lawrence Bragg for their services in the analysis of crystal structure by means of X-rays

Röntgenlicht Monochromator

DAS EXPERIMENT

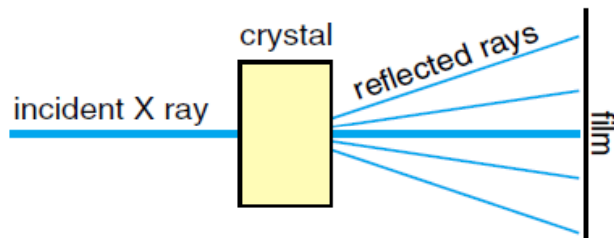


xray-Beugung an LiF
MV-Beugung an Al-Stäben



Diagnose

Durchstimmbare Röntgenstrahlung durch Baggstreuung an Kristall



Röntgenstreuungsspektrum der FCC-Kristallstruktur von Silberbromid



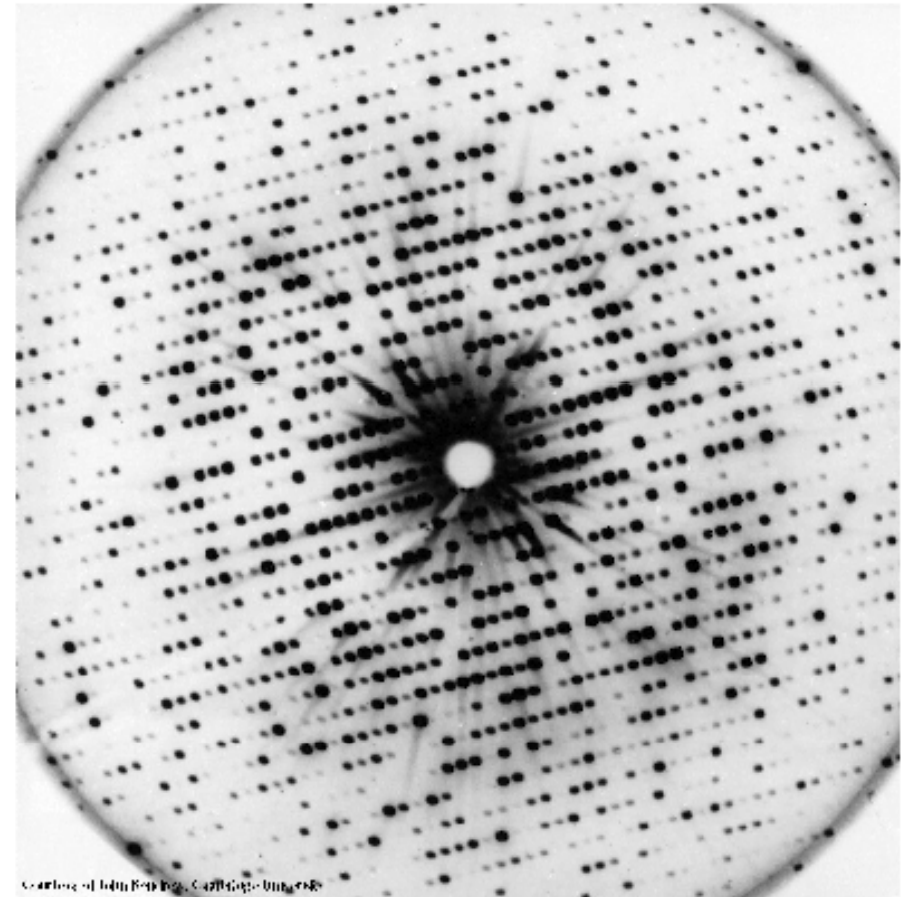
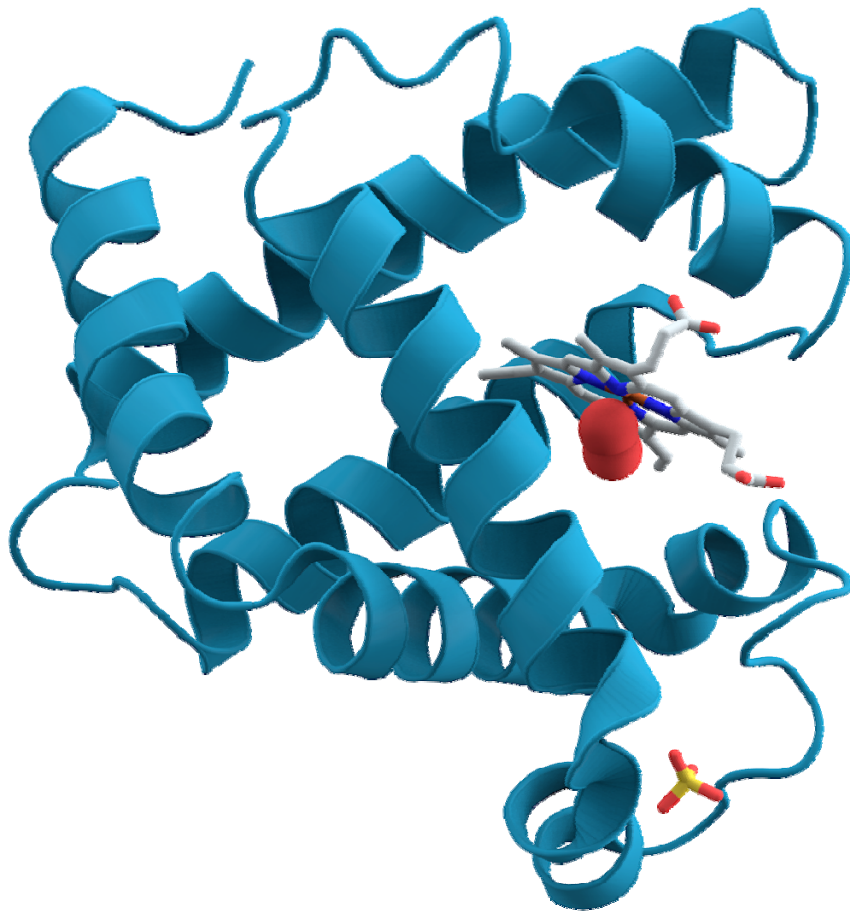
Diagnose

Kristallstruktur führt zu charakteristischer Beugungsstruktur (helle Flecke im Bild)

2014

Myoglobin

international year of crystallography

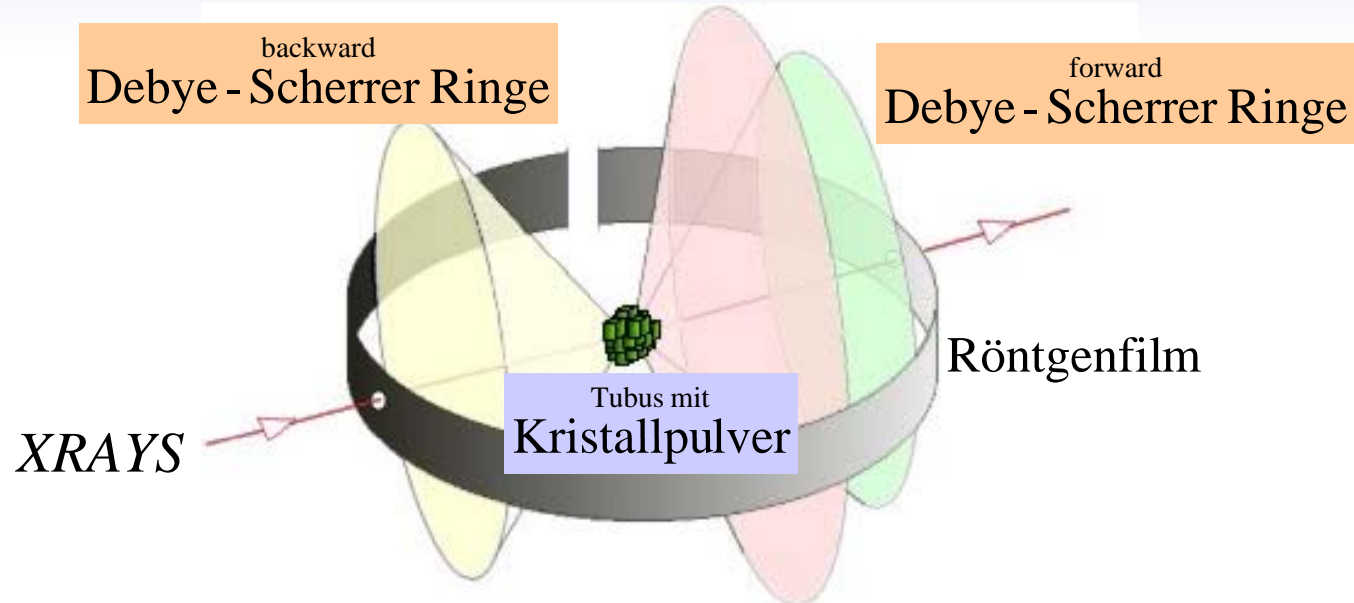


X-Ray diffraction photograph of a single crystal sperm whale myoglobin .

2014

Debye-Scherrer Verfahren

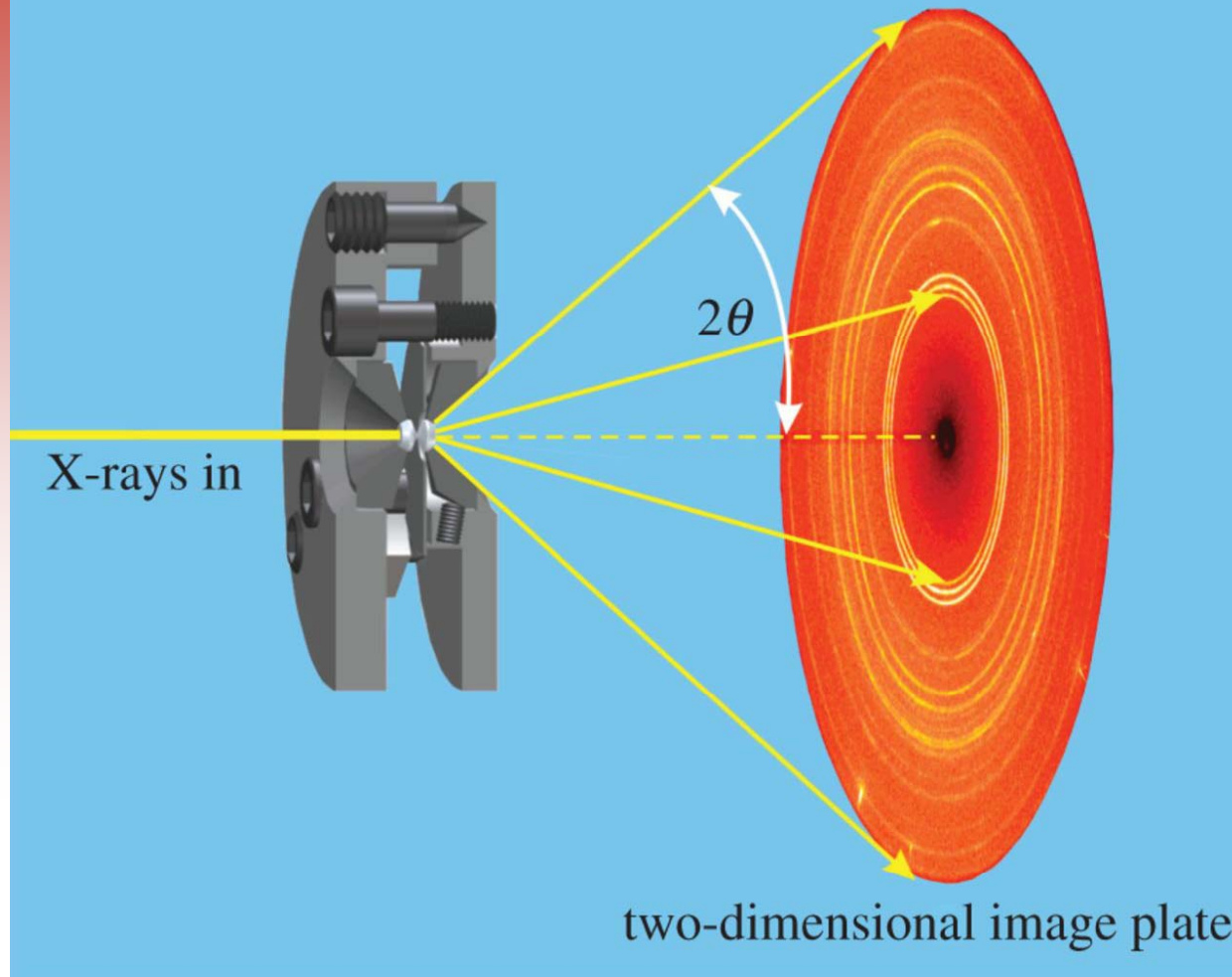
international year of crystallography



Diagnose

- Beugung monochromatischen Röntgenlichts an Kristallpulver
- Bragg-Bedingung für viele Orientierungen erfüllt und liefert Interferenzkegel

Debye-Scherrer Methode zur Untersuchung pulverförmiger kristalliner Substanzen durch Röntgenbeugung



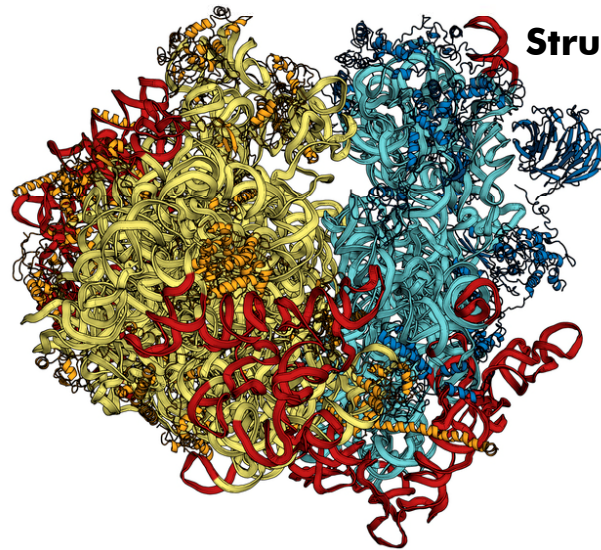
The Nobel Prize in Chemistry 1936 was awarded to Peter Debye for his contributions to our knowledge of molecular structure through his investigations on dipole moments and on the diffraction of X-rays and electrons in gases

Synchrotronstrahlung Anwendung in der Medizin

Strukturforschung

Alzheimerdemenz

- neurodegenerative Erkrankung
- fehlgeleitete Strukturbildung



Struktur des Hefe-Ribosoms



weiße und graue Hirnmasse



Tumor

Tumortherapie

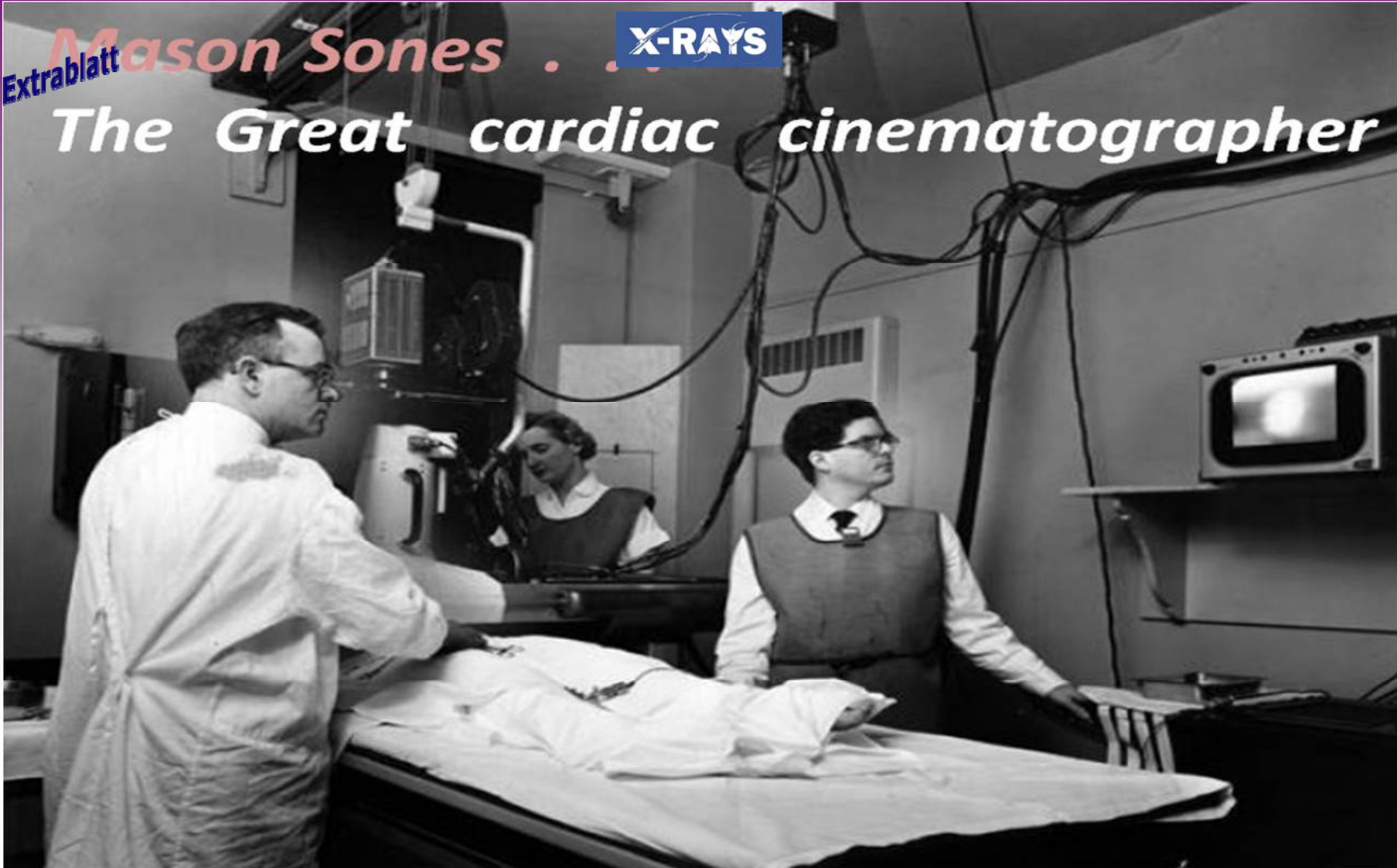
optimale Photonenenergie als Kompromiss
zwischen Wirkung am Tumor und Bestrahlung des umgebenden Gewebes

Extrablatt

Mason Sones . . .

X-RAYS

The Great cardiac cinematographer



The Nobel Prize in Physiology or Medicine 1956 was awarded jointly to André Frédéric Cournand, Werner Forssmann and Dickinson W. Richards for their discoveries concerning heart catheterization and pathological changes in the circulatory system

Max Perutz (1949) *Recent developments in the x-ray study of haemoglobin*

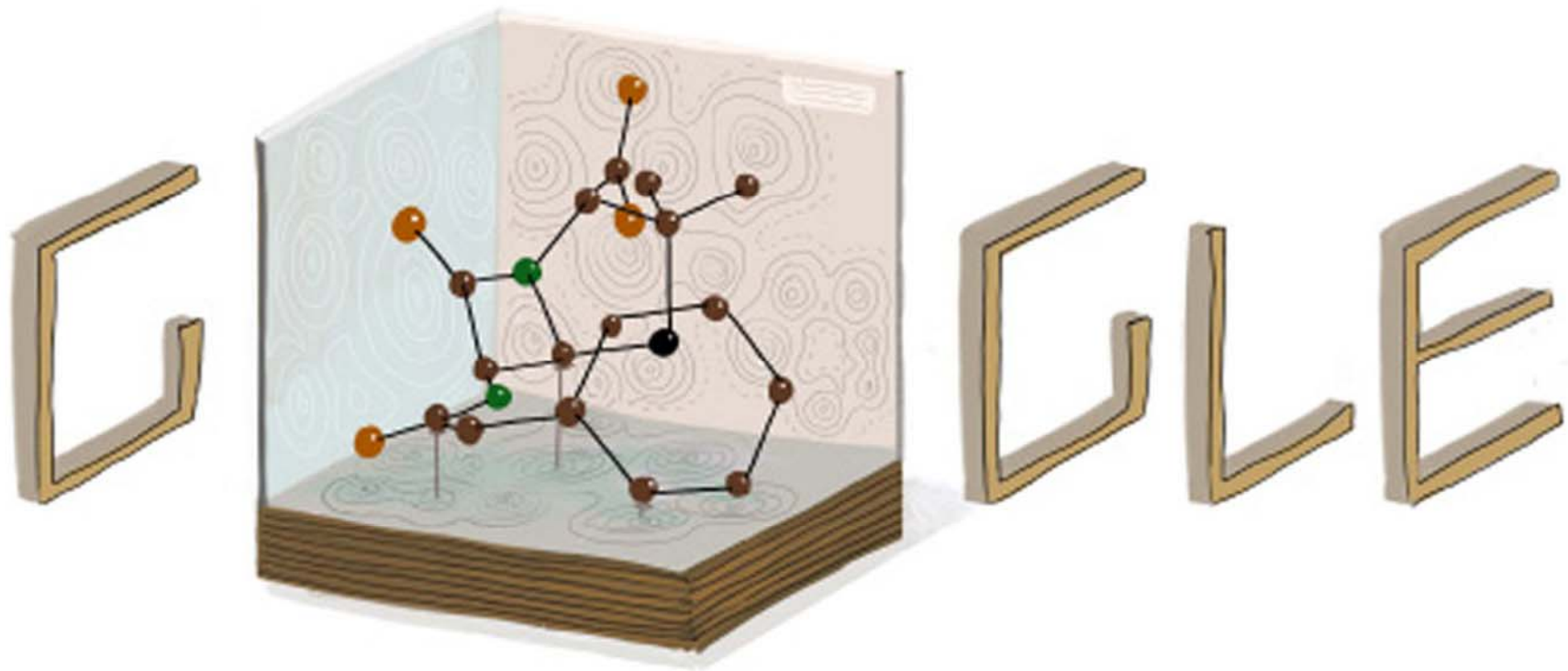
the absence of any direct method for obtaining the atomic positions from the observed intensities of the diffracted rays, a detailed analysis of an organic compound of comparatively moderate size, such as sucrose or cholesterol, takes two or more man-years to complete.

On the face of it, therefore, an attempt to analyze the crystal structure of haemoglobin, or of any crystalline protein for that matter, looks about as promising as a journey to the moon. Indeed, had it not been for an improbably large share of good luck, which confuted all the more sober assessments of my chances, I should not know more about the structure of haemoglobin now than when I started. Fortunately, the first crystalline protein which came my way was methaemoglobin of horse which has since proved to have the simplest crystal structure of any protein of comparable molecular weight, with features

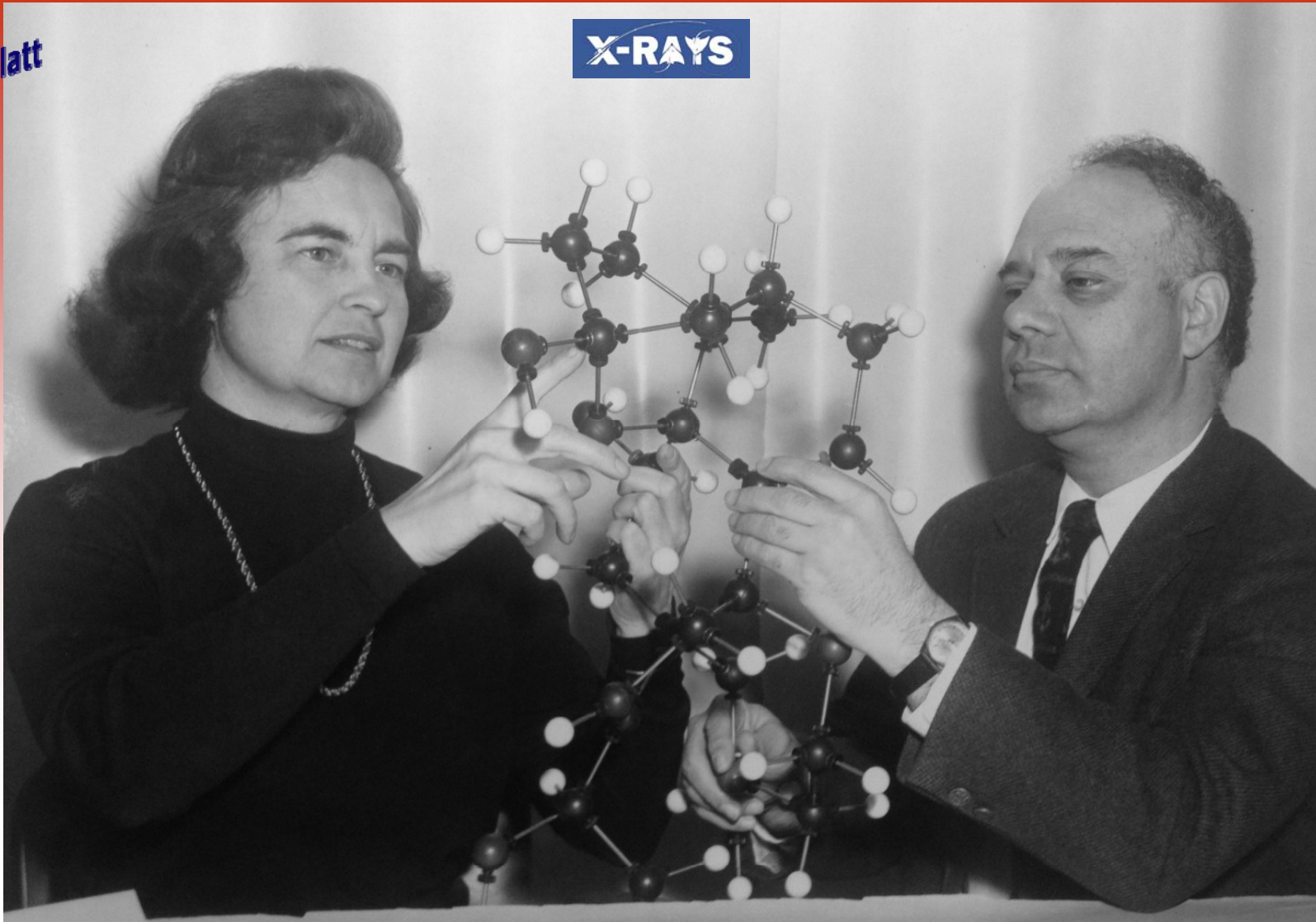
Funnily enough, the structure of haemoglobin was eventually solved in 1968
– a year before the Apollo 11 moon landing

**The Nobel Prize in Chemistry 1962 was awarded jointly to
Max Ferdinand Perutz and John Cowdery Kendrew
for their studies of the structures of globular proteins**

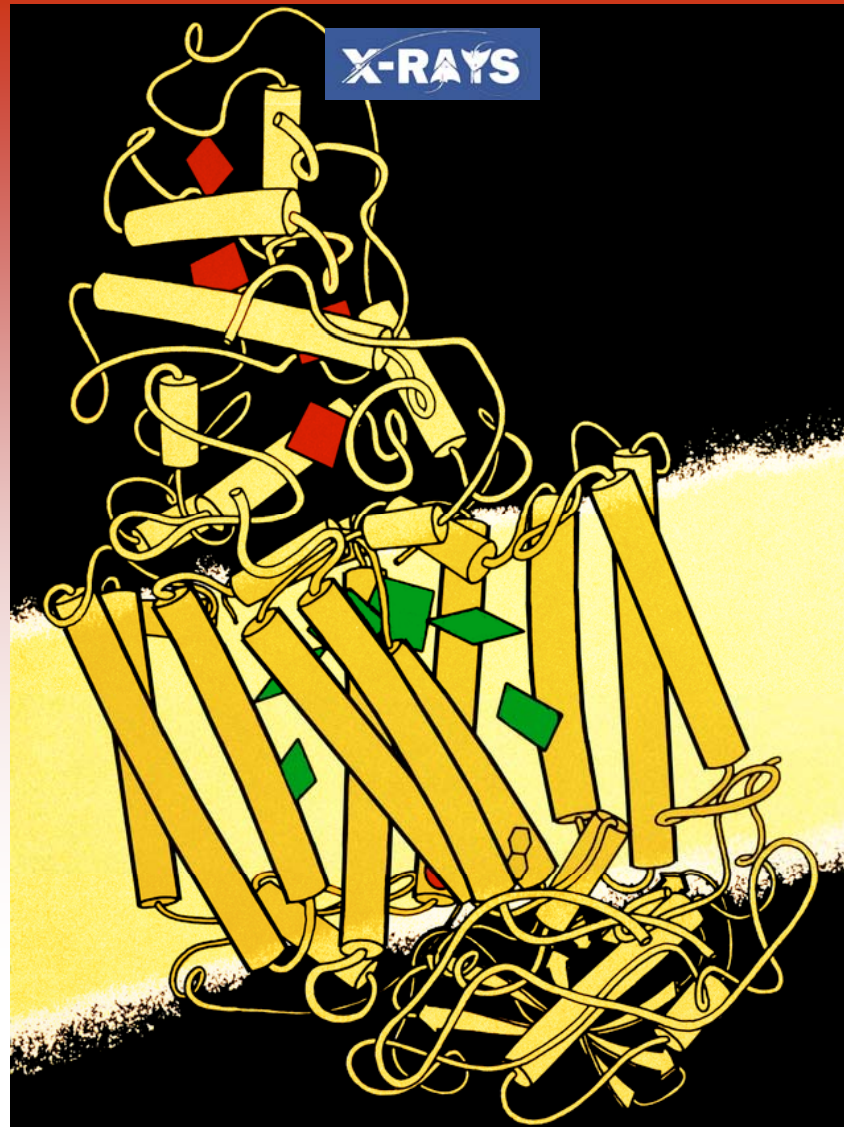
Klärung der Struktur des Penizillins 1946



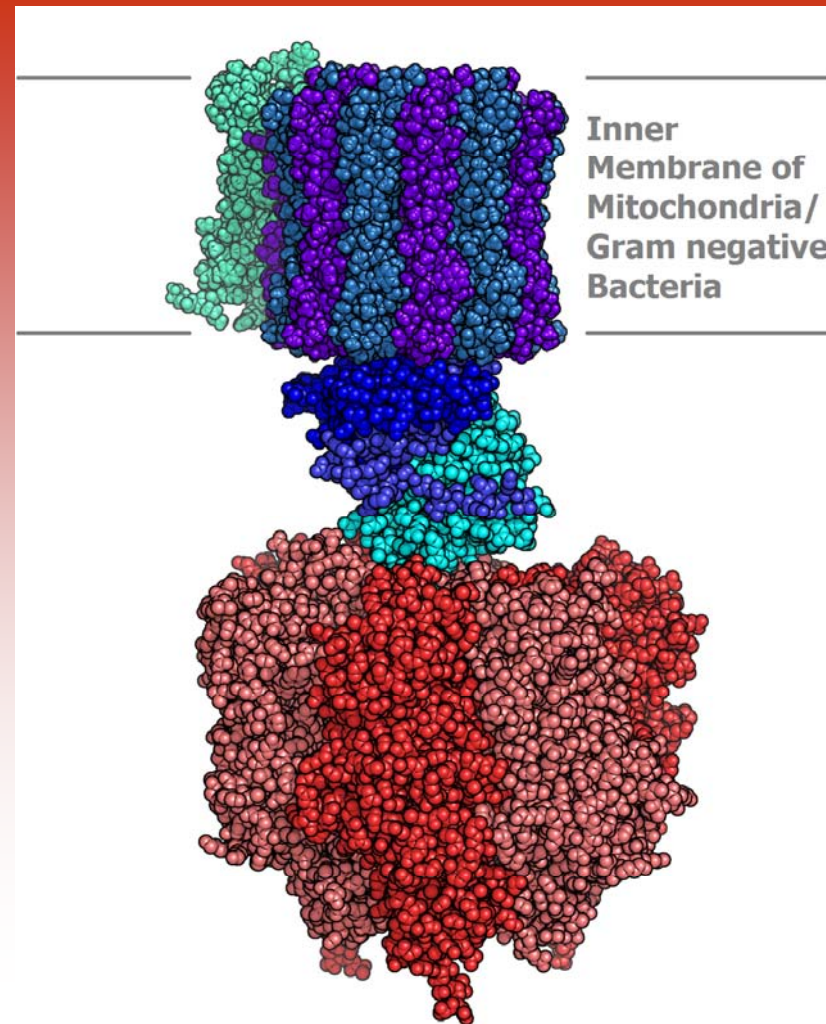
**The Nobel Prize in Chemistry 1964
was awarded to Dorothy Crowfoot Hodgkin
for her determinations by X-ray techniques
of the structures of important biochemical substance´s**



**The Nobel Prize in Chemistry 1985 was awarded jointly to
Herbert A. Hauptman and Jerome Karle
for their outstanding achievements in the development of
direct methods for the determination of crystal structures**



The Nobel Prize in Chemistry 1988 was awarded jointly to Johann Deisenhofer, Robert Huber and Hartmut Michel for the determination of the three-dimensional structure of a photosynthetic reaction centre



The Nobel Prize in Chemistry 1997 was divided, one half jointly to Paul D. Boyer and John E. Walker for their elucidation of the enzymatic mechanism underlying the synthesis of adenosine triphosphate (ATP) and the other half to Jens C. Skou for the first discovery of an ion-transporting enzyme, Na^+ , K^+ -ATPase

Extrablatt

X-RAYS

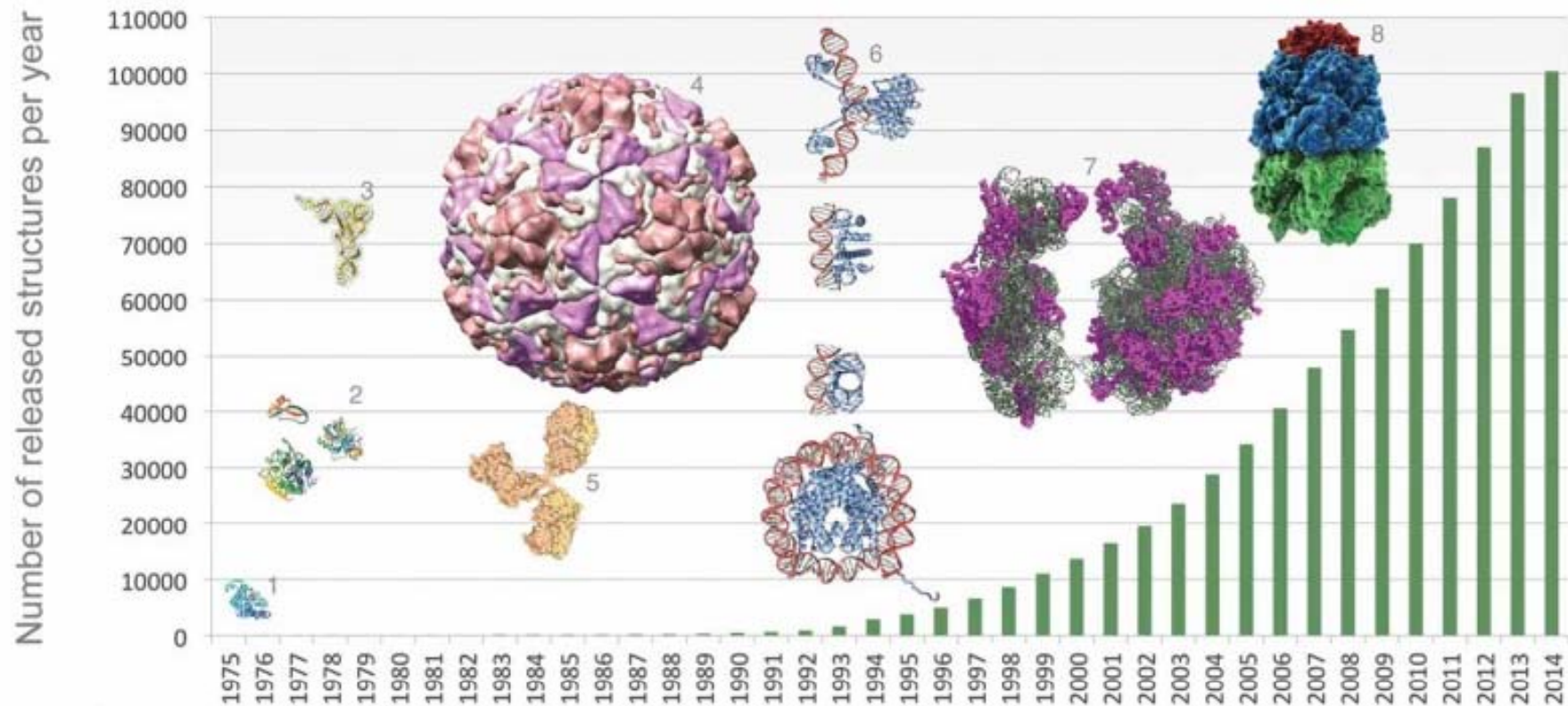


The Nobel Prize in Chemistry 2003 was awarded for discoveries concerning channels in cell membranes jointly with one half to Peter Agre for the discovery of water channels and with one half to Roderick MacKinnon for structural and mechanistic studies of ion channels

2014

Protein database

international year of crystallography



Strukturanalyse von Makromolekülen wird in meisten Fällen durch Röntgenbeugung ermittelt

Fox Hunting (Charles Bentley 1828)



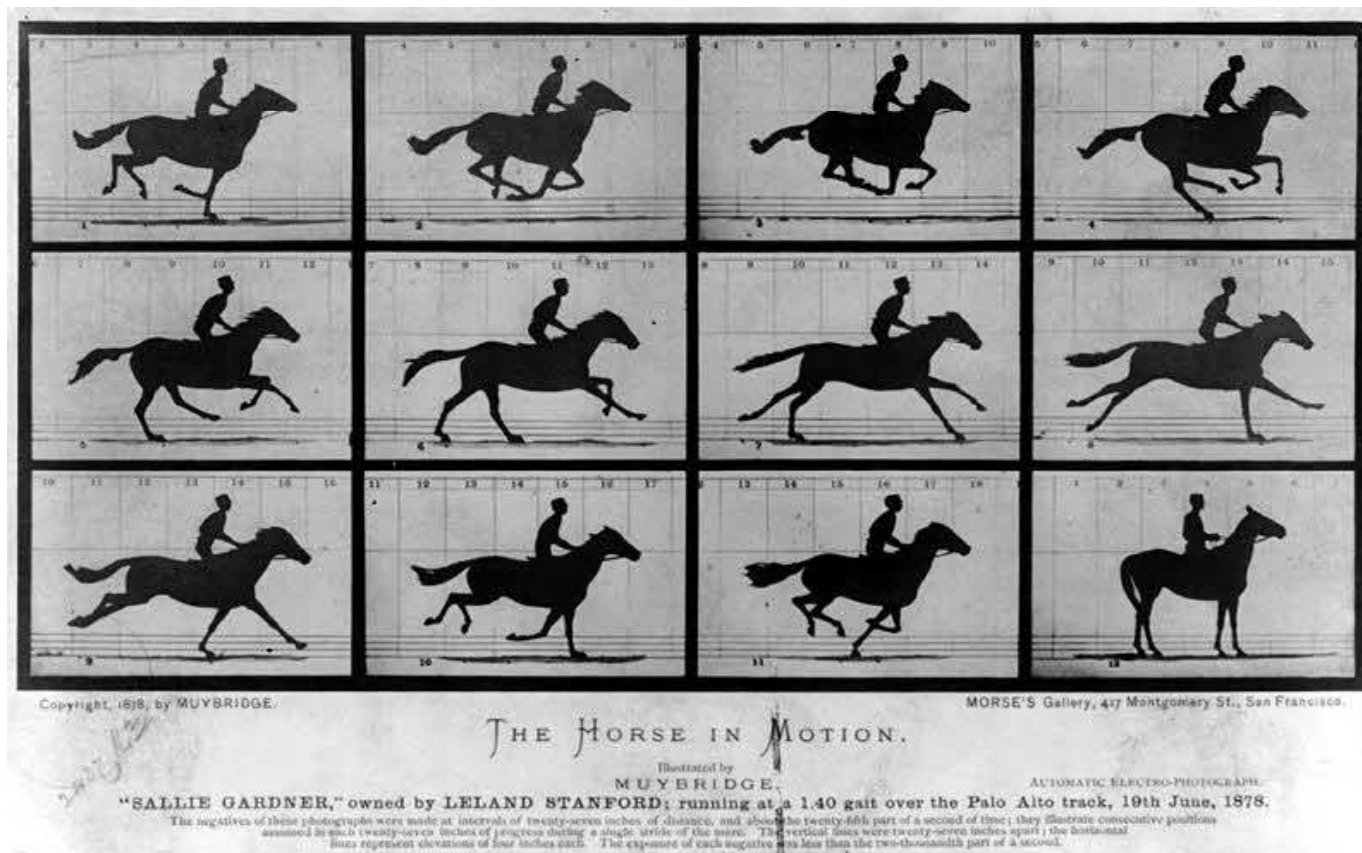
Once upon a time people genuinely didn't know how horses ran.. This might seem a little silly, but it's actually quite difficult to tell what all the legs are doing when an animal is moving very fast. Painters depicting horses in motion tended to show the most dramatic and obvious part of the gait, and so running horses were generally painted with all four legs extended.

2014

Snapshots 1872

international year of crystallography

Eadweard Muybridge
Pionier der Phototechnik
The attitudes of animals in motion



Diagnose

Erster sichtbarer Beweis, dass galoppierendes Pferd zeitweise alle vier Beine in der Luft hat

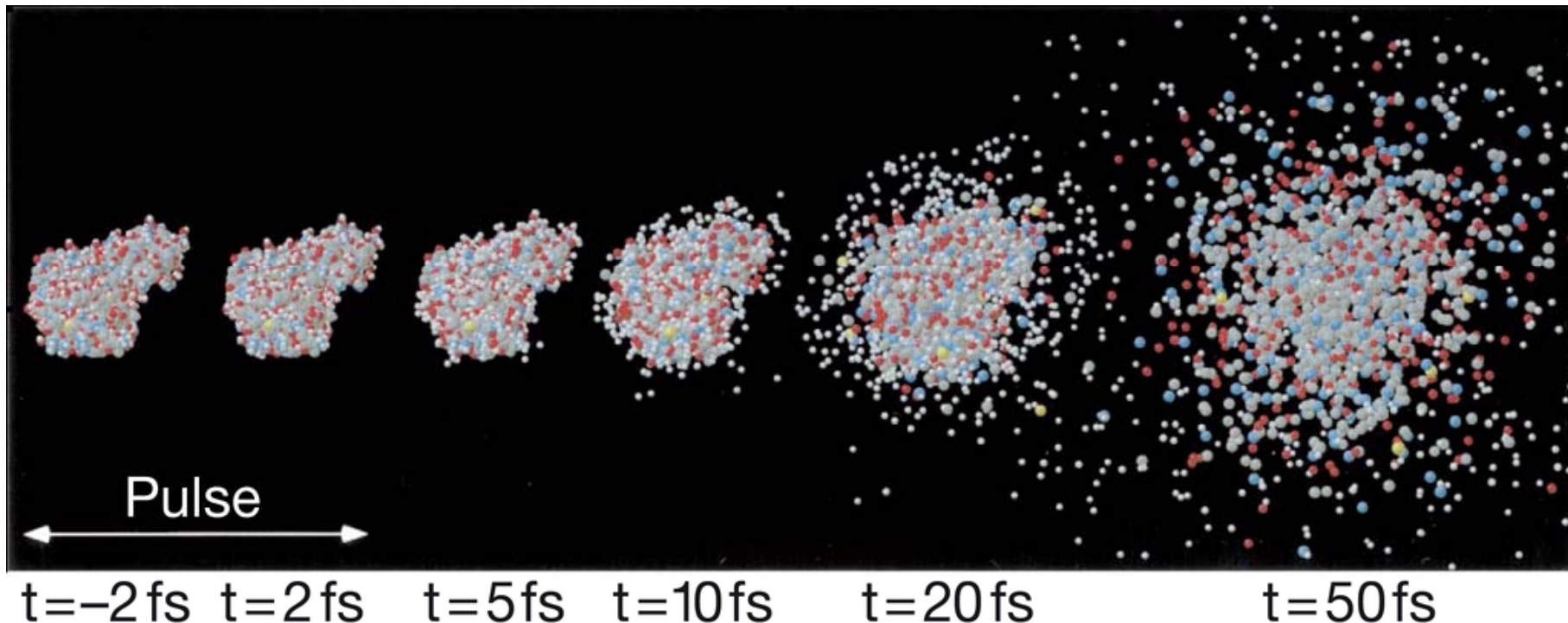
2014

Snapshots im Computer 2000

international year of crystallography

Symptome

Kann man die **Struktur einzelner Biomoleküle mit Röntgenbeugung bestimmen?**



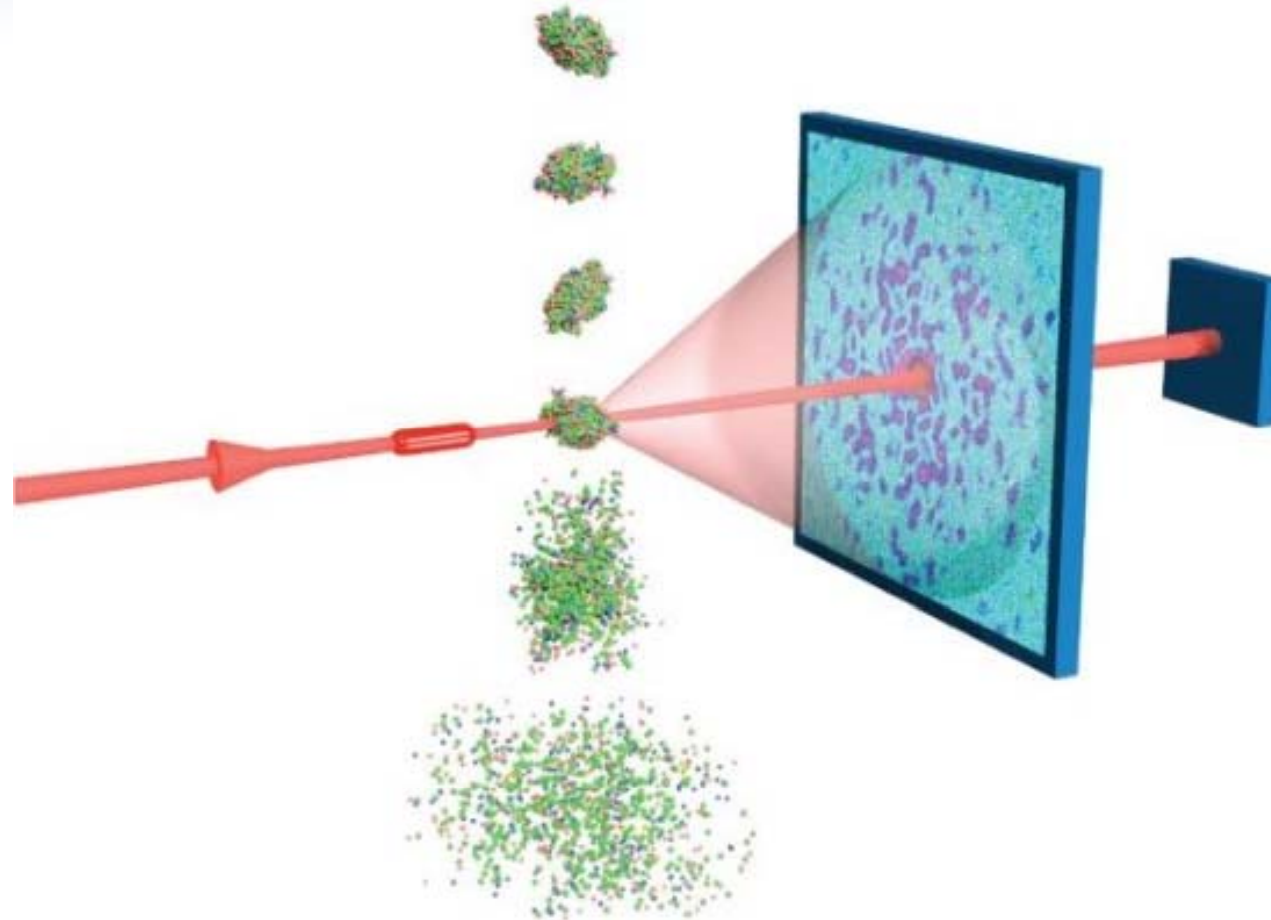
Diagnose

- im Prinzip **JA**, aber durch harte Röntgenstrahlung wird fragile Struktur Biomoleküls zerstört
- innerhalb von Femtosekunden (10^{-15}s) verändert Molekül sein Aussehen
- für Strukturbestimmung darf Biomolekül deshalb nur kurzzeitig beleuchtet werden

2014

Snapshots im Experiment

international year of crystallography



Diagnose

- Biomolekül wird in die Gasphase gebracht und in die Wechselwirkungszone transportiert
- ultrakurzer (0.000 000 000 000 010 s) Röntgenblitz beleuchtet Probe und erzeugt Streubild

2014

Eigene Snapshots

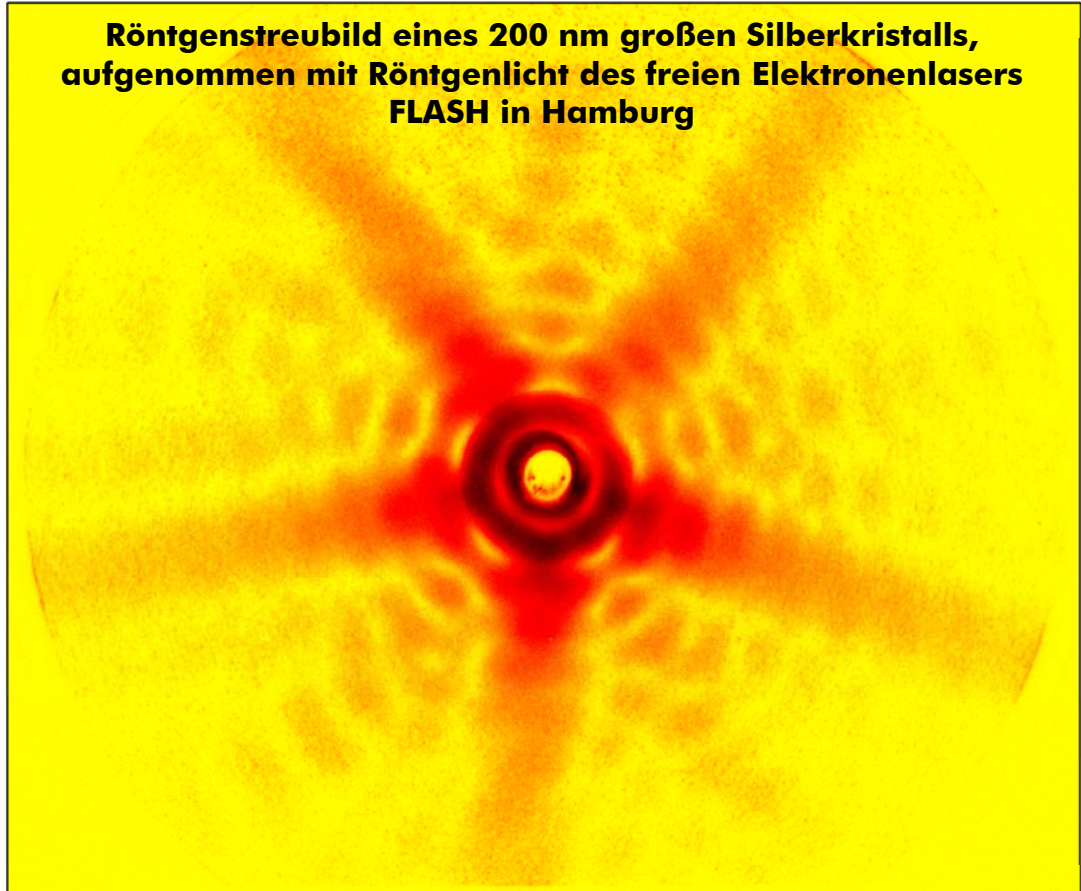
international year of crystallography

FLASH.

Free-Electron Laser FLASH



Röntgenstreubild eines 200 nm großen Silberkristalls,
aufgenommen mit Röntgenlicht des freien Elektronenlasers
FLASH in Hamburg

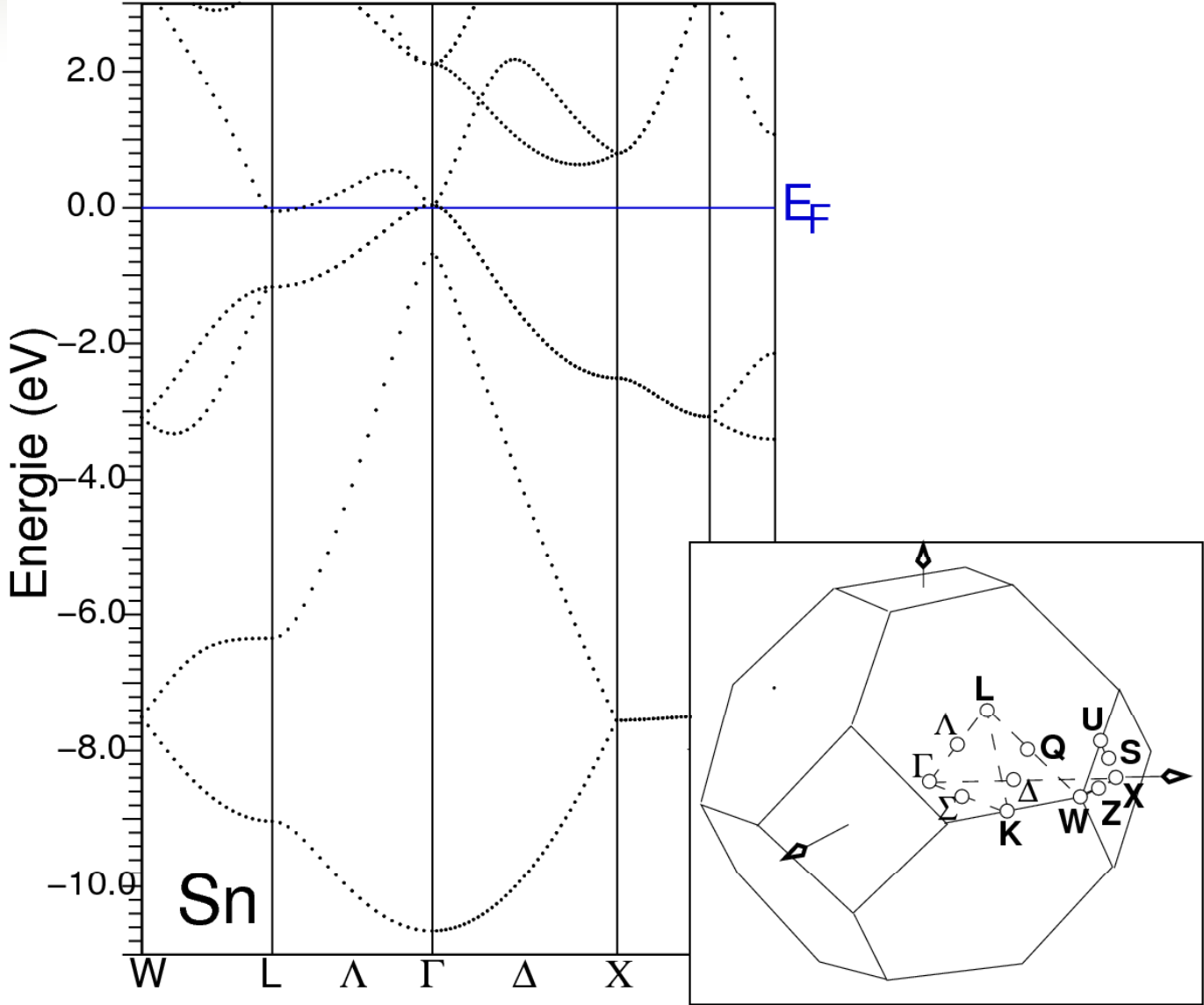


Diagnose

Mit Licht eines Röntgen-Freie-Elektronenlasers gelingt 3D-Abbildung komplexer Biomoleküle

Bostedt et al. *Ultrafast x-ray scattering of xenon nanoparticles: Imaging transient states of matter*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 093401 (2012)
Barke et al. *The 3D-architecture of individual free silver nanoparticles captured by X-ray scattering*, *Nature Communications*, **6**, 1 (2015)

Thema Festkörper Bandstruktur





Energiezustände in Kristallen

Nochmal der Potenzialtopf

Symptome

Energiezustände in eindimensionalen Potenzialtopf der Breite $L_{QW}=2x_0$

Energieabstände in EINEM Potenzialtopf

$$E_n \sim \frac{h^2}{8m_e} \frac{n_{QM}^2}{L_{QW}^2}$$

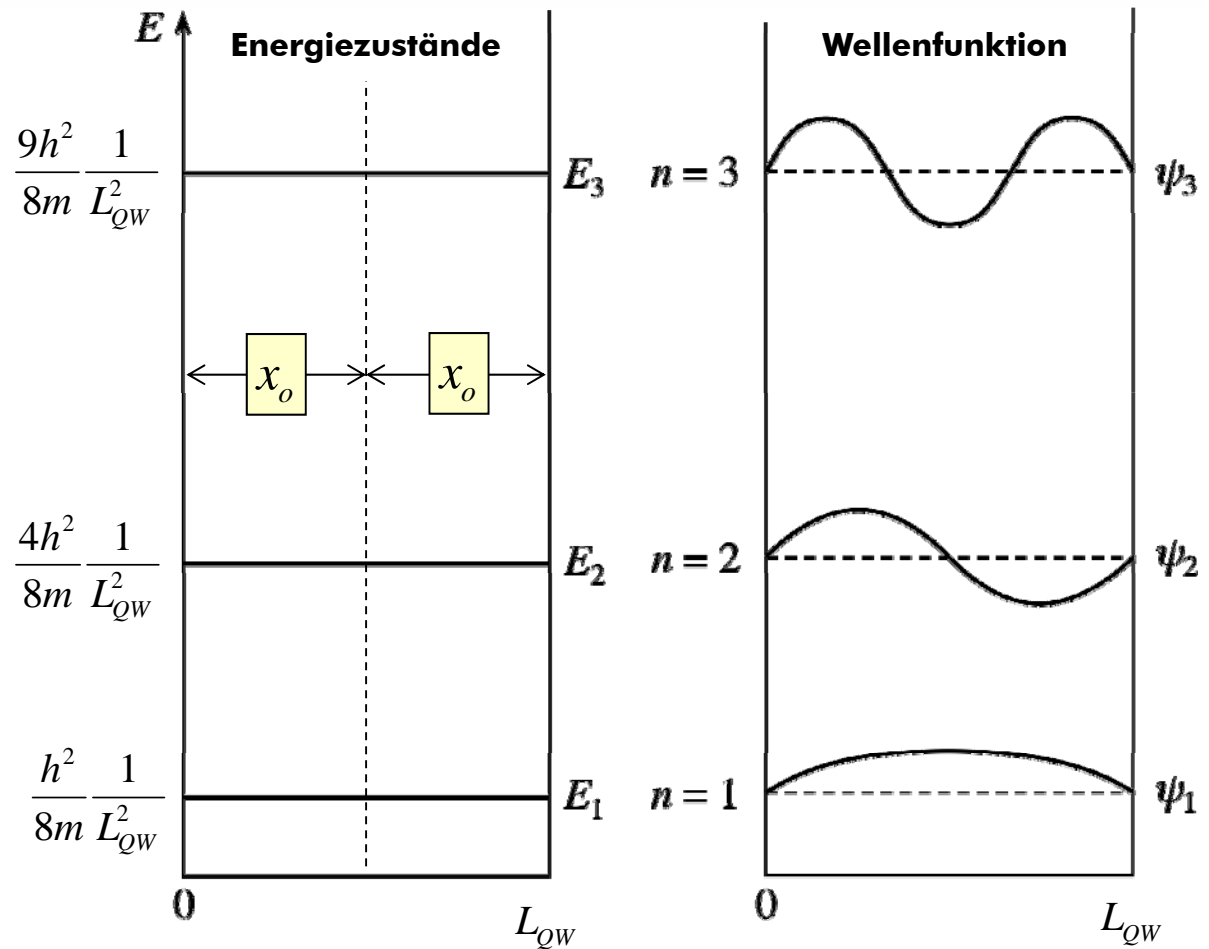
Erster angeregter Zustand $n_{QM}=2$

$$E_2 \sim \frac{h^2}{8m_e} \frac{2^2}{(2 \cdot x_0)^2} = \frac{h^2}{8m_e} \frac{1}{x_0^2}$$

$$E_2 \sim 4 \cdot E_1$$

Grundzustand $n_{QM}=1$

$$E_1 \sim \frac{h^2}{8m_e} \frac{1^2}{(2 \cdot x_0)^2} = \frac{1}{4} \frac{h^2}{8m_e} \frac{1}{x_0^2}$$



Diagnose

Abstände der Energiezustände im Quantentopf skalieren mit Quadrat der Energie-Quantenzahl



Energiezustände in Kristallen

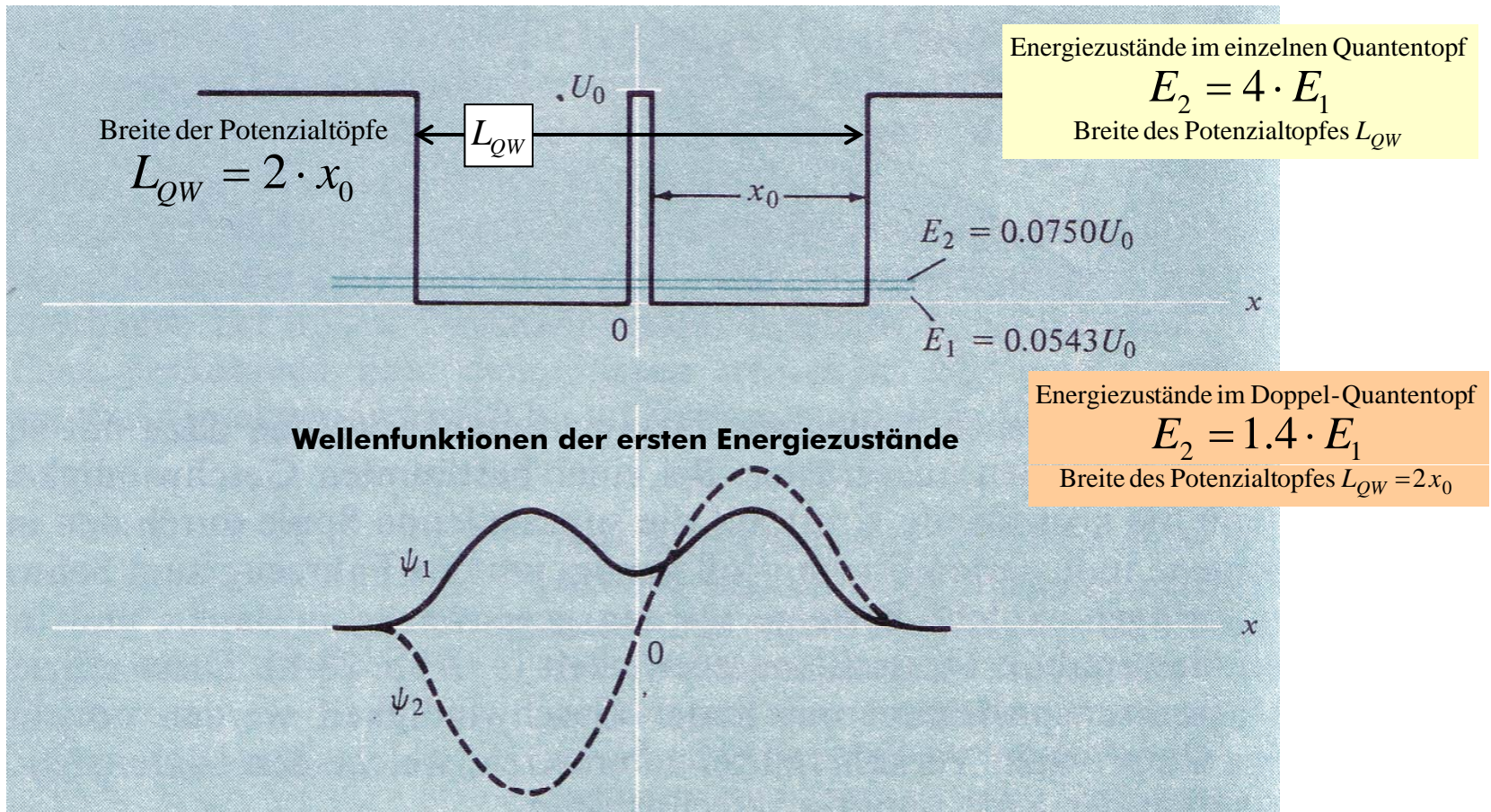
Geringer Abstand

Energieabstände im Potenzialtopf
für $L_{QW} = 2x_0$

$$E_n \sim \frac{1}{2^2} \frac{h^2}{8m_e} \frac{n_{QM}^2}{x_0^2}$$

Symptome

Ersetze Potenzialtopf Breite L durch zwei eng beieinander liegenden Potenzialtöpfe mit Breite x_0



Diagnose

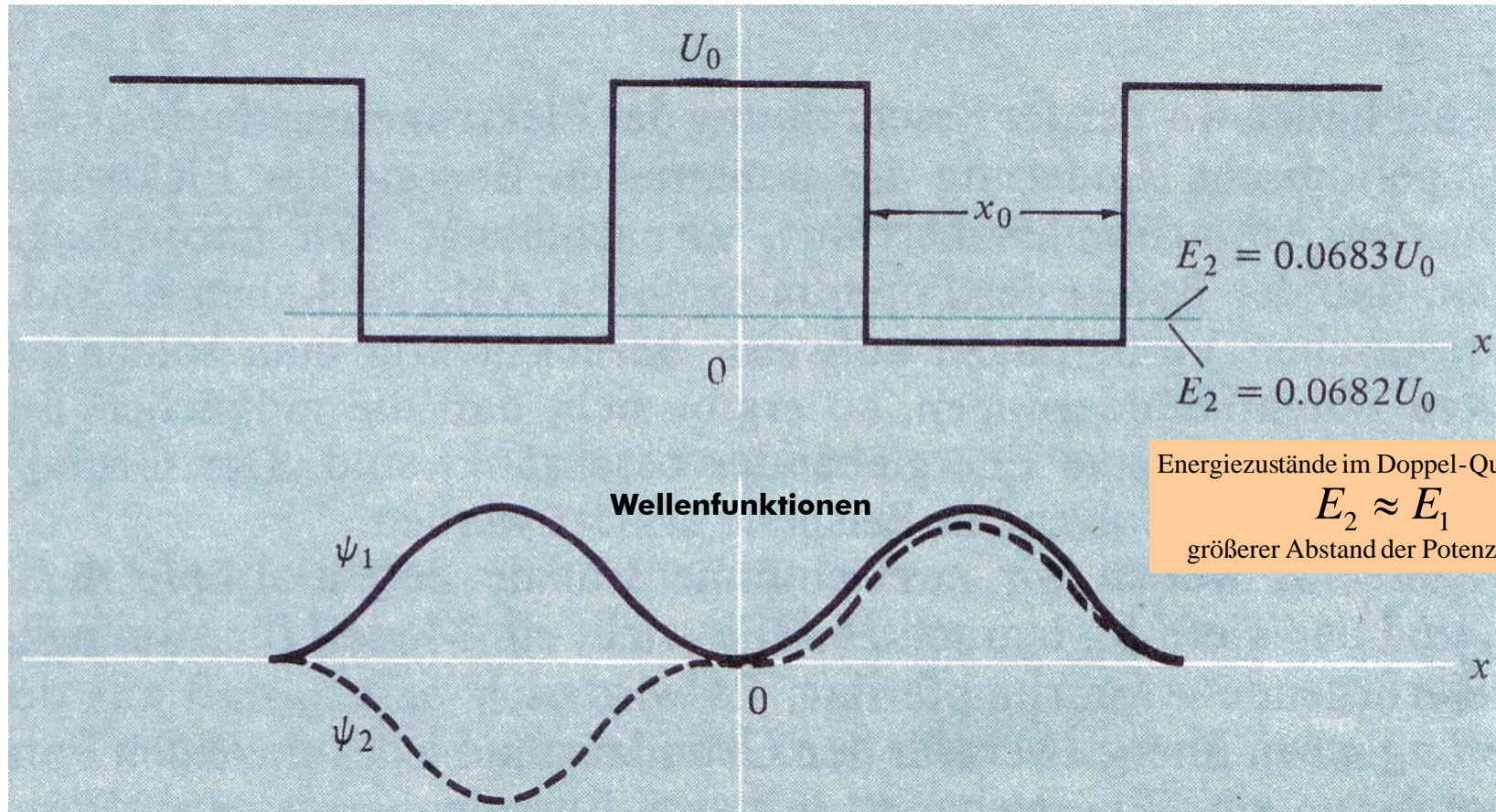
- Elektronen haben Aufenthaltswahrscheinlichkeit in beiden Quantentöpfen (Tunneleffekt)
- in den NAHE beieinander liegenden Potenzialtöpfen nähern sich Energiewerte an

Energiezustände in Kristallen

Bändermodell

Symptome

Abstand der Potenzialtöpfe bei konstant gehaltener Breite wird vergrößert



Diagnose

- Elektronen sind immer noch in beiden Quantentöpfen zu finden (Tunneleffekt)
- Energiewerte nähern sich bei Vergrößerung Abstand noch mehr an
- Wellenfunktion Ψ_1 sieht annähernd so aus wie Ψ_1 im Einzeltopf
- aus niedrigstem Energietopf EINES Potenzialtopfes werden ZWEI Energiezustände

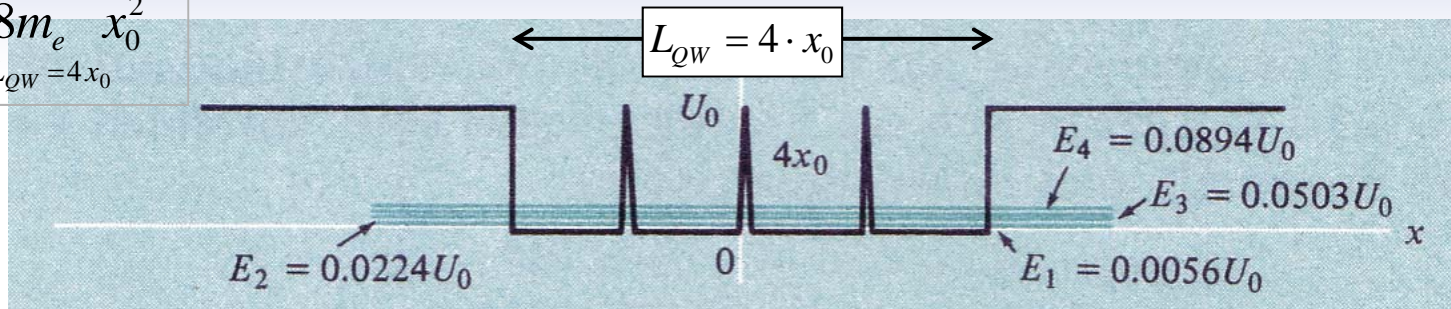
Bändermodell

Vier statt zwei statt eins

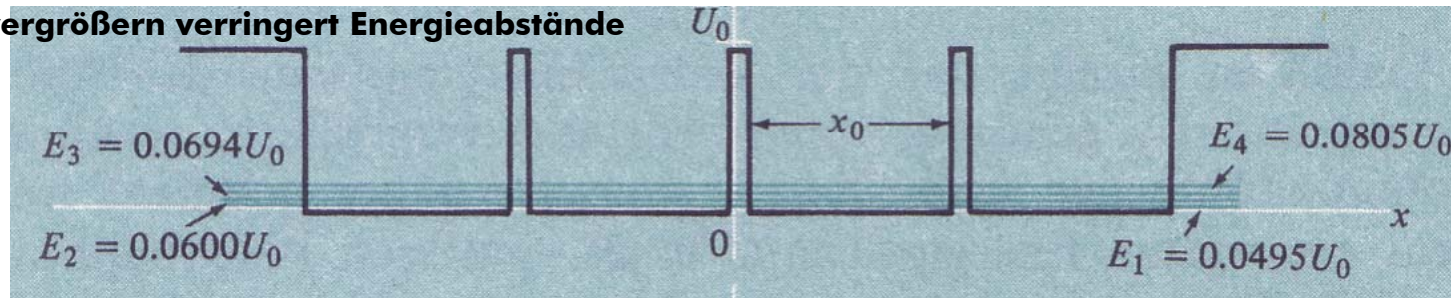
Energieabstände Potenzialtopf

$$E_n \approx \frac{1}{4^2} \frac{h^2}{8m_e} \frac{n_{QM}^2}{x_0^2}$$

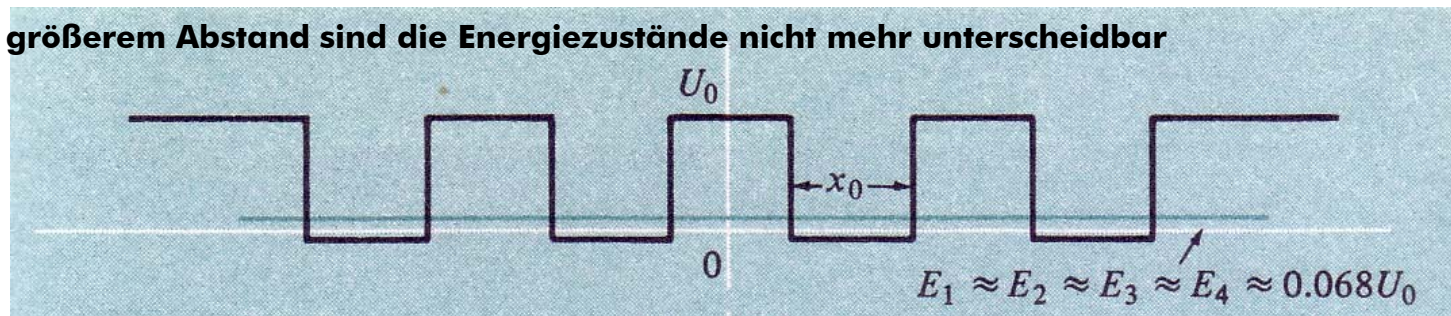
für Breite $L_{QW} = 4x_0$



Abstand vergrößern verringert Energieabstände



Bei noch größerem Abstand sind die Energiezustände nicht mehr unterscheidbar



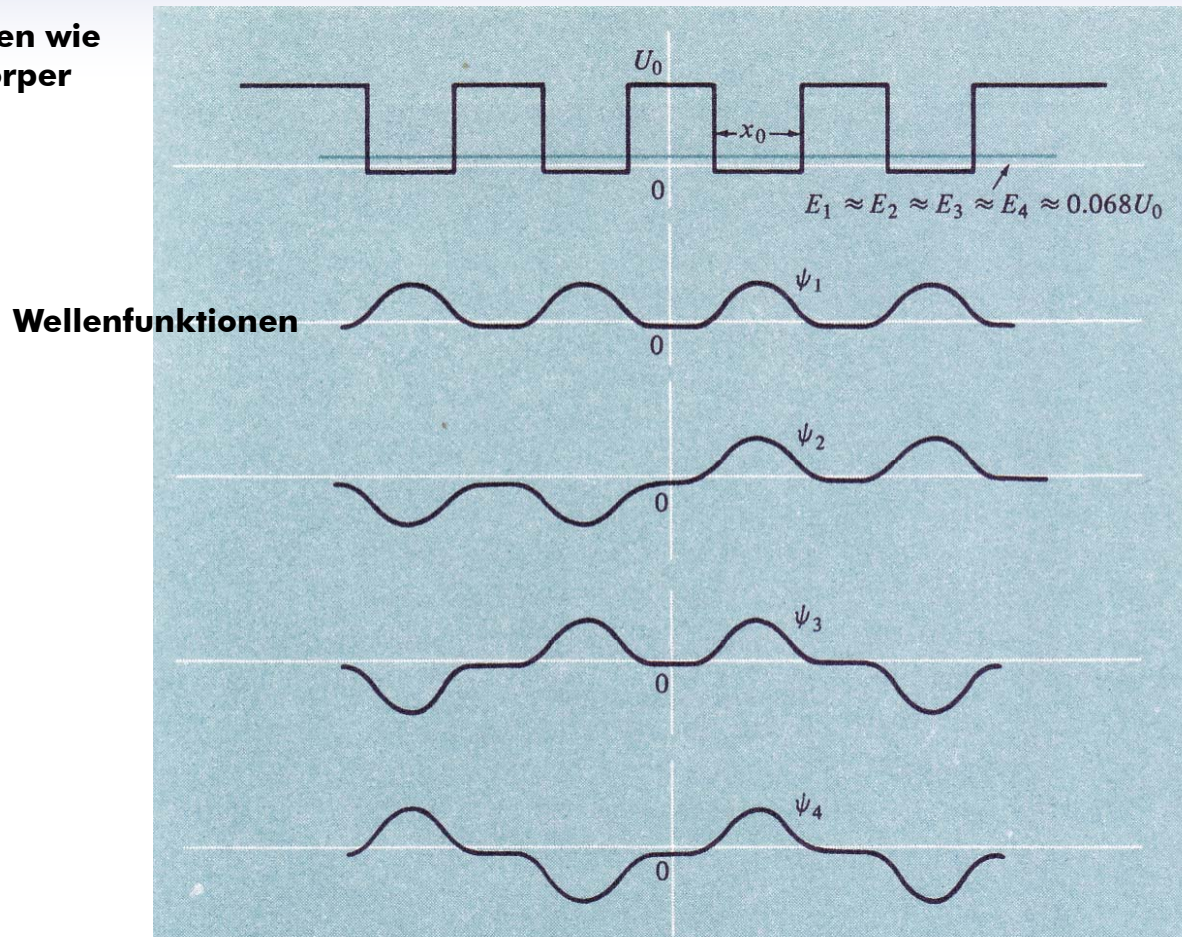
Diagnose

- Energiezustände rücken immer dichter zusammen, je mehr Potenzialtöpfe hinzukommen
- im Festkörper mit 10^{23} Potenzialtöpfen entsteht daraus ein quasi-kontinuierliches Energieband

Bändermodell

Vier Potenzialtöpfe weiter auseinander

Bedingungen wie
im Festkörper



Diagnose

- Potenzialtöpfe weiter voneinander entfernt, haben nahezu gleiche Energiewerte
- Energie der Zustände entspricht in etwa Energie im einzelnen Potenzialtopf
- Wellenfunktion sieht so aus, als wären einzelne Potenzialtöpfe vorhanden



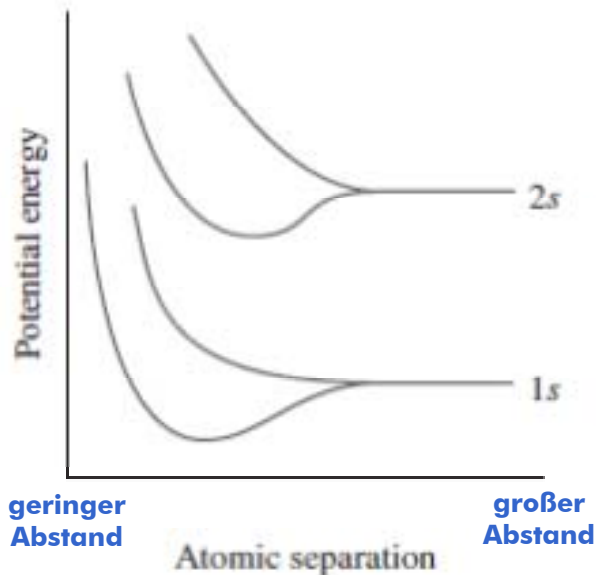
elektronische Zustände in Festkörpern

Bandstruktur

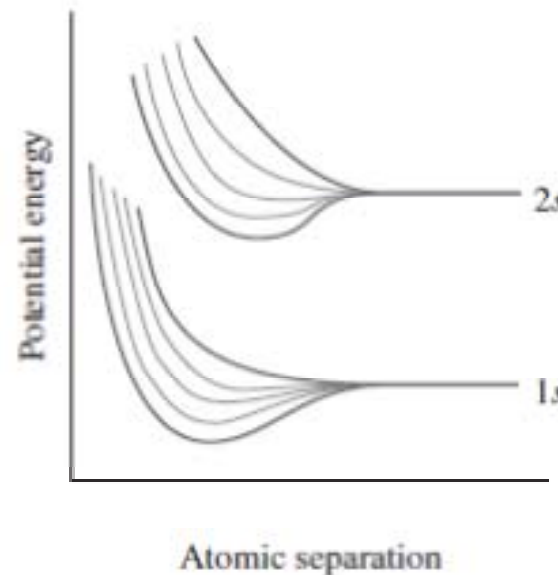
Symptome

Periodische Anordnung der Atome im Festkörper erlaubt Beschreibung durch Wellenfunktion

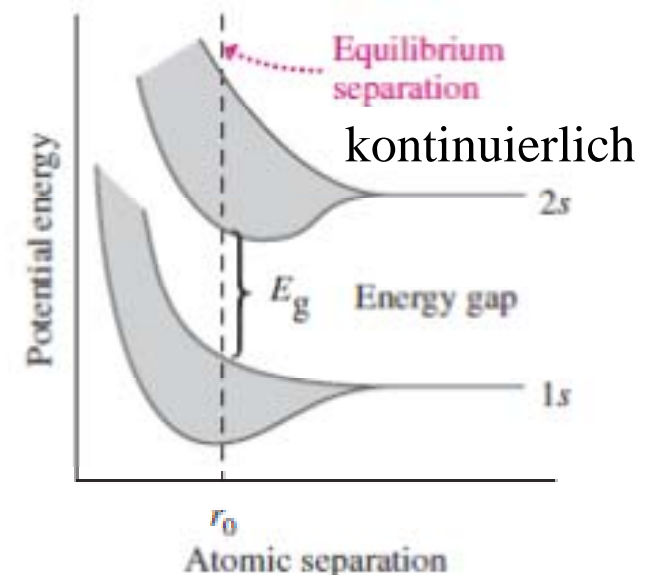
zwei Atome



mehrere Atome



viele Atome n_{AvO}



Diagnose

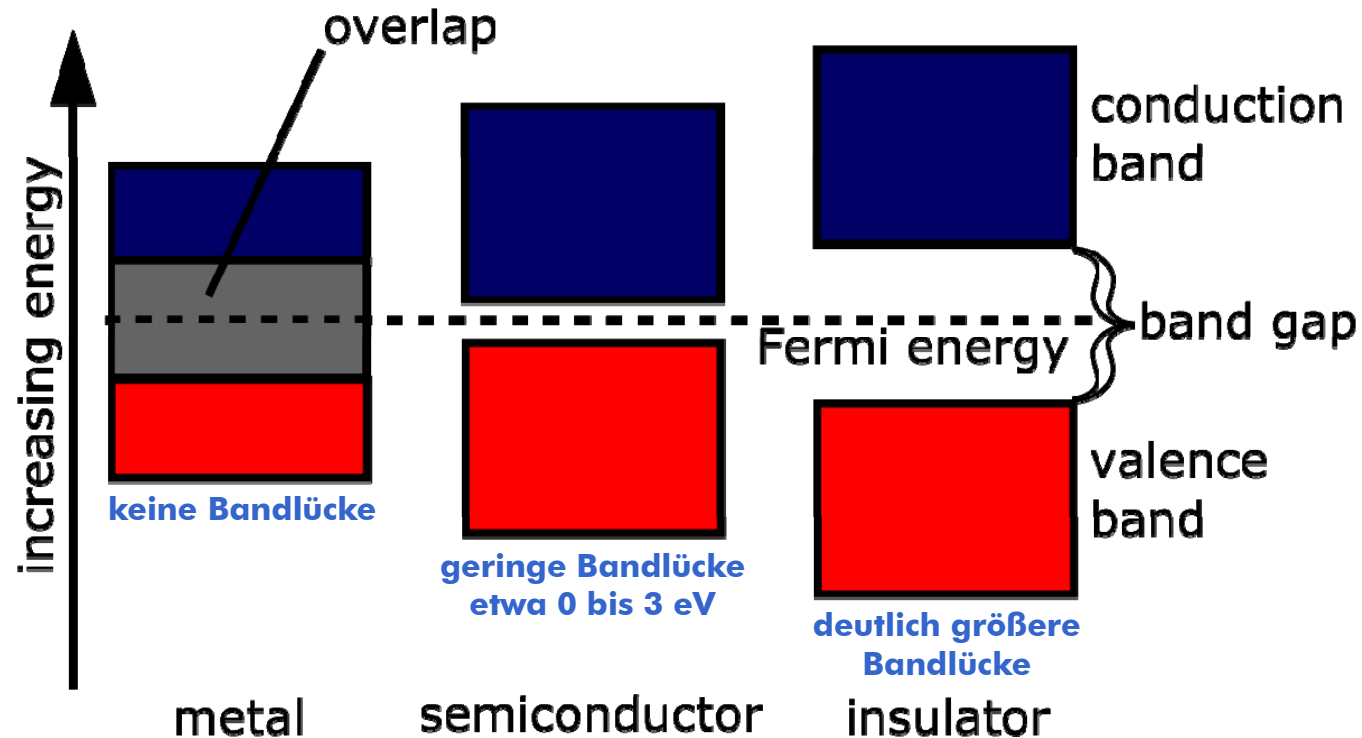
- bringt man Atome näher zusammen, spalten Zustände aufgrund der Pauliabstoßung auf
- Anzahl elektronischer Zustände steigt mit Atomanzahl
- bei 10^{23} Teilchen bilden die Zustände ein kontinuierliches Band erlaubter Zustände
- Abstand der Zustände geringer als thermische Energie ($k_B T$)
- optisches Spektrum eines heißen Festkörpers wird dadurch ebenfalls kontinuierlich
- zwischen erlaubten Energiebereichen existieren sogenannte **BANDLÜCKEN**
- kinetische Energie nicht erlaubt oder Bandlücke kann nicht mit Elektronen besetzt werden



Lücken im System Bandlücke

Symptome

- gebundene elektronische Zustände nur in bestimmten Intervallen der Energieskala
- zwischen den Bändern können (müssen nicht) energetisch verbotene Bereiche liegen



Diagnose

- für physikalischen Eigenschaften Festkörpers ist nur oberste (eventuelle) Lücke entscheidend
- höchstes noch vollständig mit Elektronen besetztes Band wird VALENZBAND genannt
- nächsthöheres nicht mit Elektronen besetztes Band nennt man LEITUNGSBAND
- mit der Bandlücke ist also immer diejenige zwischen Valenz- und Leitungsband gemeint

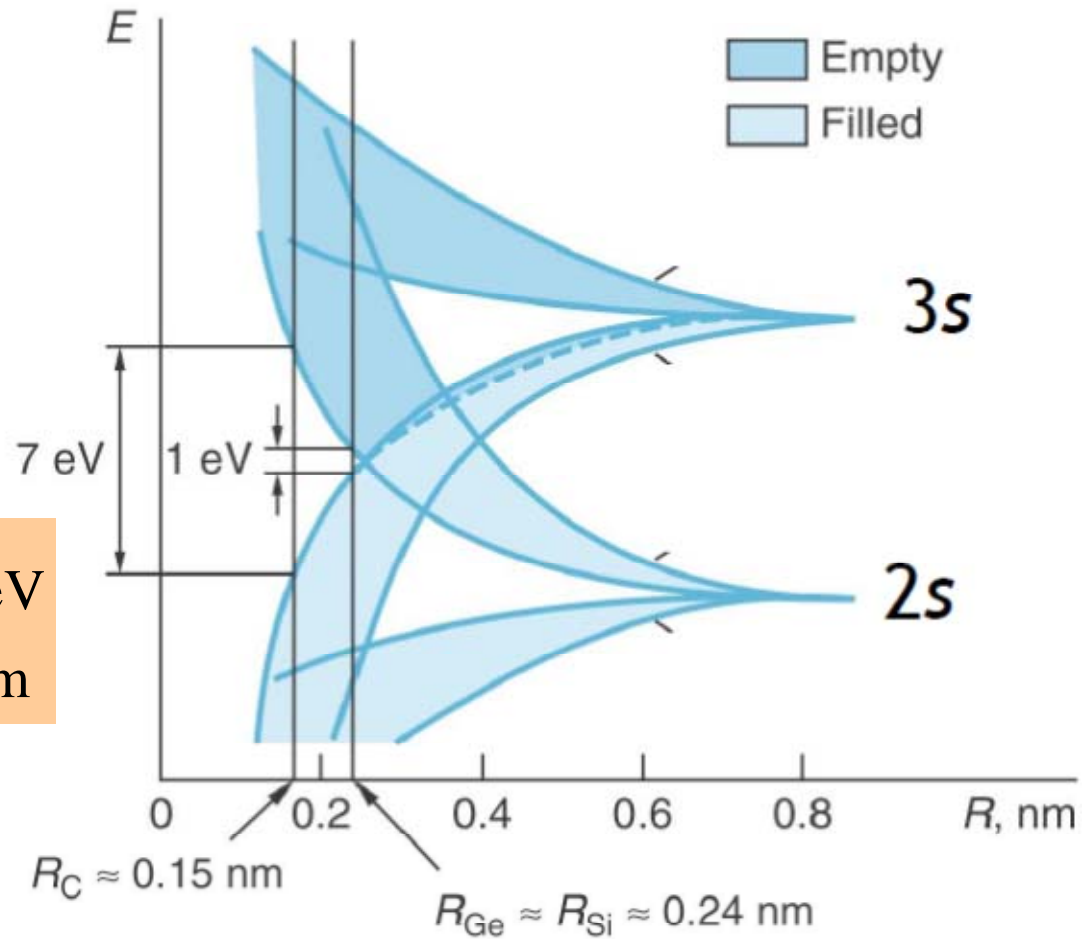
Bandlücke vs Gleichgewichtsabstand

Bandstruktur

Symptome

Elementabhängiger Abstand der Atome im Kristall beeinflusst Energielücke in Halbleitern

Bandlücke
 $E_{\text{Ge}} \approx E_{\text{Si}} \approx 1 \text{ eV}$
 $1 \text{ eV} \sim 1240 \text{ nm}$



Diagnose

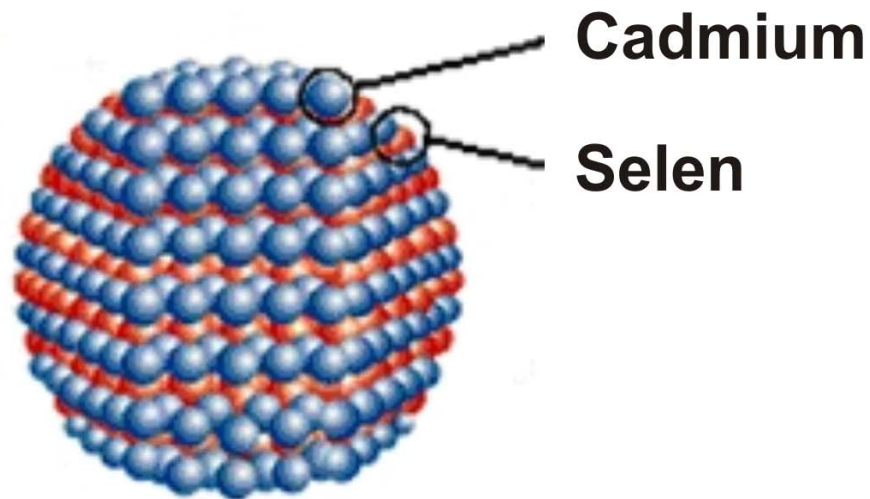
Silizium hat geringe Bandlücke und ist damit wichtiges Element in Halbleitertechnologie

Nanokristalle

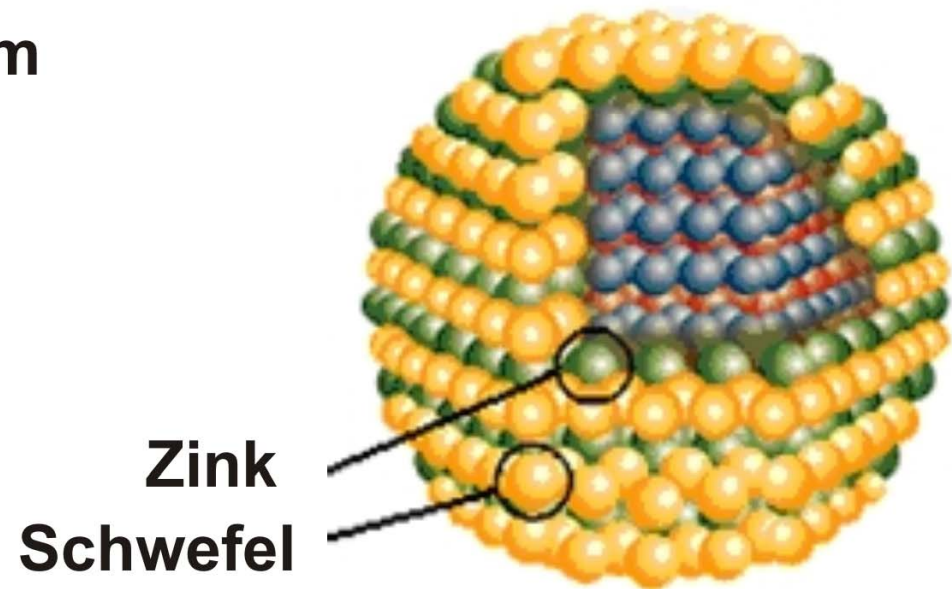
Symptome

Nanokristall ist ein kristalliner Stoff, dessen Größe im Bereich von Nanometern liegt

Nanokristalle sind technisch interessant



$\varnothing = 1,9 - 6,7 \text{ nm}$



$\varnothing = 2,9 - 6,1 \text{ nm}$

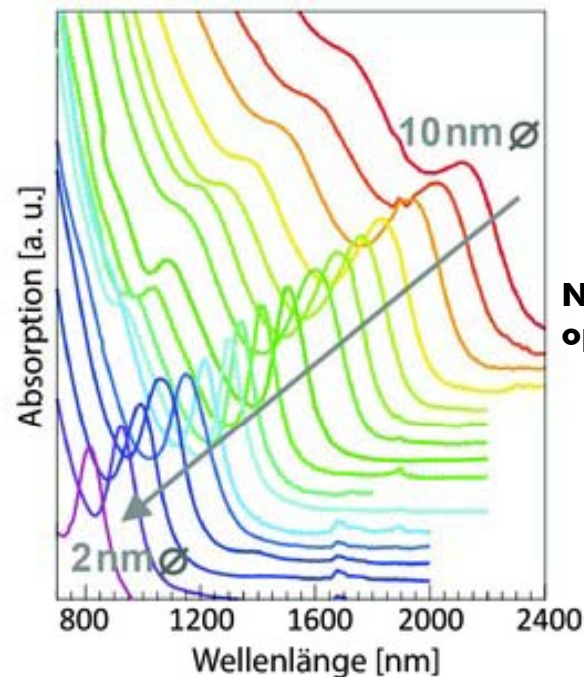
Diagnose

- elektrische und thermodynamische Eigenschaften in der Größe abhängen
- Ausprägung dieser Eigenschaften damit kontrolliert werden

Innerer Photoeffekt Photoleitung

Symptome

- **Bandlücke bestimmt elektronische und optische Eigenschaften eines Festkörpers**
- **Festkörpers kann Licht absorbieren, wenn Photonenenergie zu Anregung von Elektronen führt**
- **Elektronen können nicht in verbotenen Bereich zwischen VB und LB angeregt werden**
- **Energie eines Photons muss Energiedifferenz der Bandlücke übertreffen**



Nanokristalle weisen größenabhängige optische Eigenschaften auf

innerer Photoeffekt

$$E_{ph} > E_{LB} - E_{VB}$$



innerer
Photoeffekt

Diagnose

- **Isolatoren und Halbleiter sind in bestimmten Spektralbereichen transparent**
- **Metalle können nicht transparent sein, da keine Energielücke vorhanden**
- **Absorption von Licht beeinflusst elektrische Leitfähigkeit**
- **bei Halbleitern sinkt elektrischer Widerstand mit steigender Lichtintensität (Photoleitung)**

Thema Festkörper
Chemische Bindung

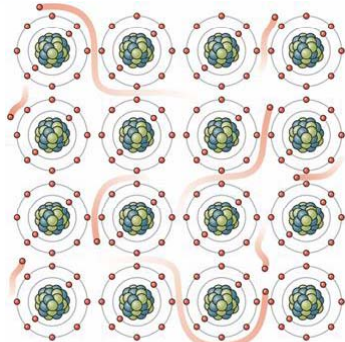


CHEMICAL BONDS

METALLIC, IONIC, AND COVALENT BONDS

Coulomb vs Quantum Bindungstypen

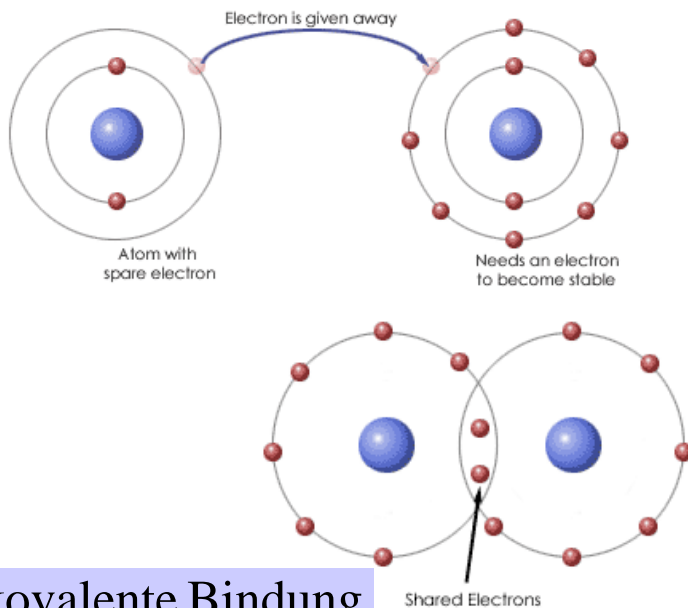
metallisch



Copyright © 2006 Pearson Prentice Hall, Inc.

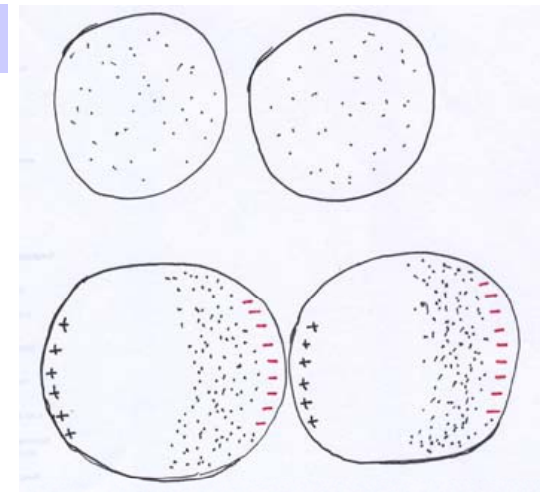
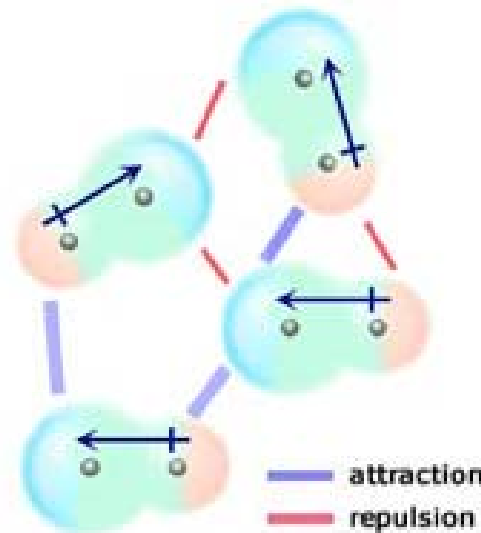
Typ	Mechanismus	typische Bindungsenergie pro Atom oder pro Molekül
ionisch	Transfer von Elektronen	5 eV
kovalent	Elektronen - Sharing	10 eV
metallisch	delokalisierte Elektronen	3 eV
polar (Dipol)	Anziehung von molekularen Dipolen	0.4 eV
van der Waals	Korrelationen in der Elektronenverteilung	0.1 eV

ionische Bindung



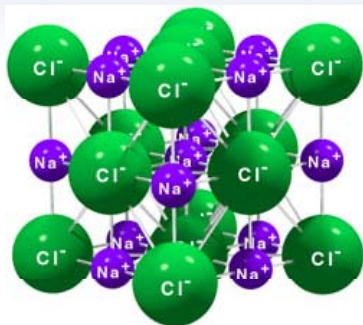
kovalente Bindung

Dipol - Dipol Wechselwirkung



induzierte Dipol - Dipol Wechselwirkung van der Waals

Coulombwechselwirkung Natriumchlorid



Symptome

- im NaCl-Kristall sind die Atomabstände etwas größer als im Molekül
- JEDES Natriumatom spürt
 - Coulomb-Anziehung von sechs Cl-Anionen
 - Coulomb-Abstoßung zwölf Na-Ionen
 - Coulomb-Anziehung von acht Cl-Anionen

Bindungsabstand
 $R_{\text{NaCl}}^{\text{FK}} = 0.28 \text{ nm}$

(a)... und so weiter

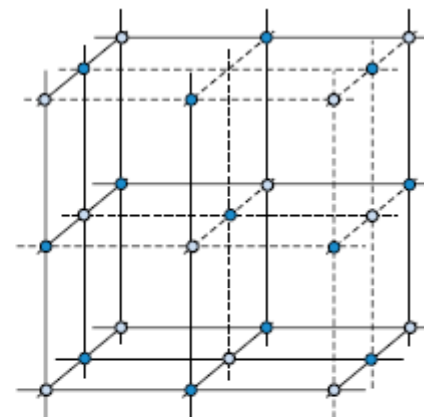
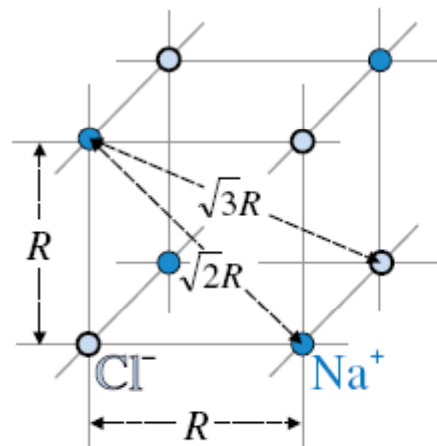
(b)

Abstand zum nächsten Na-Atom

$$\sqrt{R^2 + R^2} = \sqrt{2}R$$

Abstand zum übernächsten Cl-Atom

$$\sqrt{R^2 + R^2 + R^2} = \sqrt{3}R$$



Superposition aller Coulombbeiträge

$$E_{\text{total}} = -6 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} + 12 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{2}R} - 8 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{3}R} + \dots \approx - \underset{\substack{\text{Madelung Konstante} \\ \text{genannt}}}{1.7476} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R}$$

anziehend
abstoßend
anziehend

Diagnose

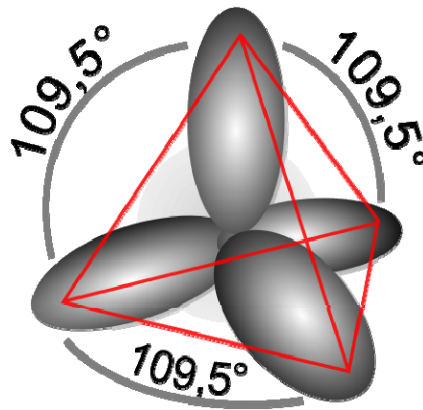
- für NaCl ($R=0.28 \text{ nm}$) ergibt sich Wert von 4.5 eV ($E_{\text{total}} = -9 \text{ eV}$) deutlich höher als kT (20 meV)
- hoher Schmelzpunkt (NaCl 528K) und guter elektrischer Isolator

Festkörper Kovalente Bindung

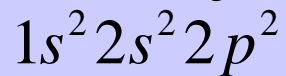
Symptome

- kovalente Bindung beinhaltet Paarung von Elektronen mit entgegengesetztem Spin
- Elektronen stammen aus nur teilweise besetzten Schalen
- jedes Atom trägt über ein Elektron zu Bindung bei
- für Bindungszustand müssen Elektronendichteverteilungen überlappen
- p-Orbitale sind stark ausgerichtet und führen zu charakteristischen Kristallstrukturen

Bindungstyp in Kohlenstoffverbund
 sp^3 – Hybridisierung

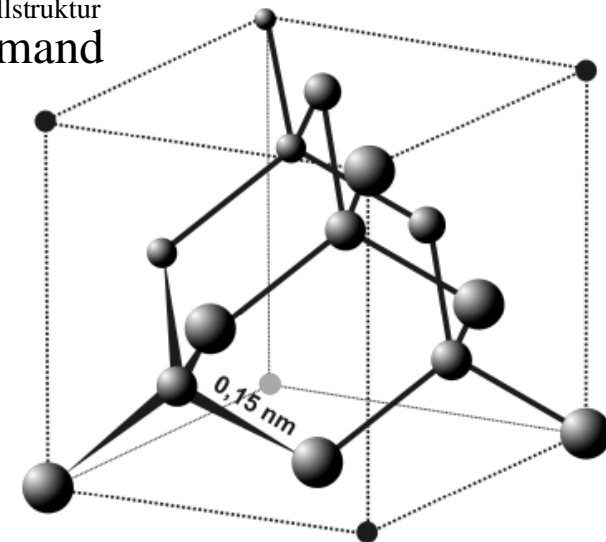


Elektronenkonfiguration



in atomarem Kohlenstoff

Kristallstruktur
Diamant



Diagnose

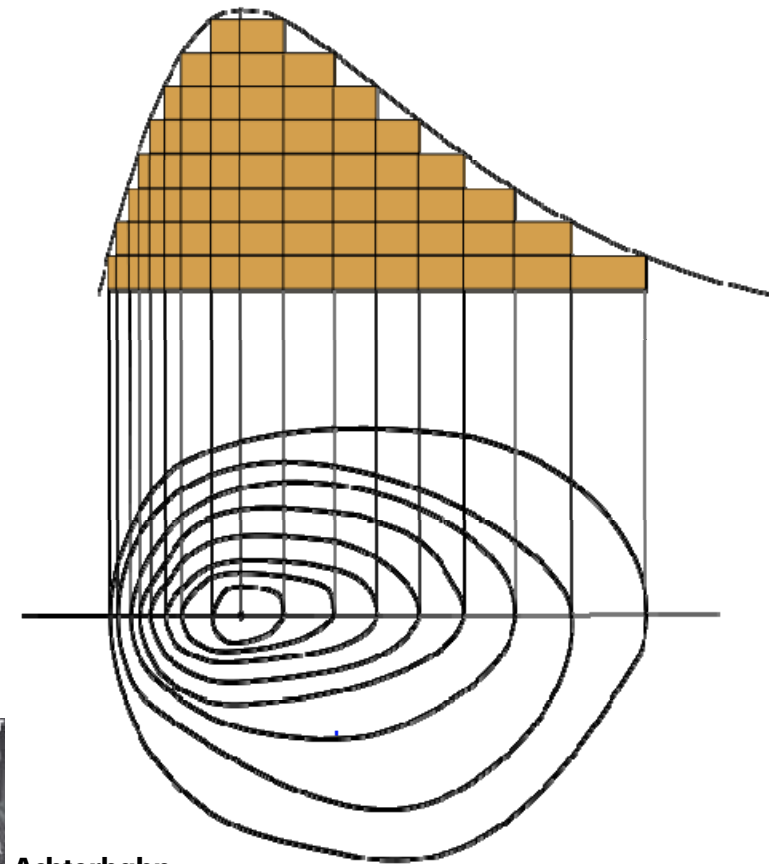
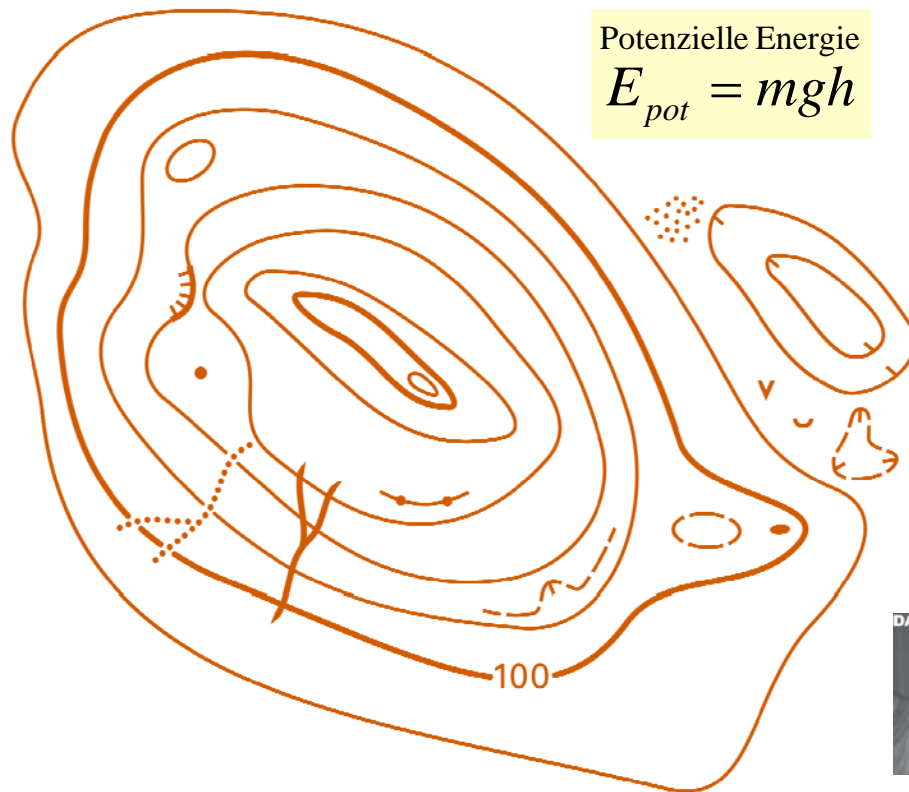
- interessant sind die Elemente der 4. Hauptgruppe
- Kohlenstoff, Silizium, Germanium haben Wertigkeit VIER in äußerer p-Schale
- aufgrund ähnlicher Bindungsenergien tragen alle s- und p-Elektronen zur Bindung bei
- Elektronendichteverteilung in Kohlenstoff führt zu Diamantstruktur im Festkörper



Isolinien Landkarte

Symptome

- Höhenlinien oder Niveaulinien bezeichnen auf Landkarten benachbarte Punkte gleicher Höhe
- jeder Höhenlinie kann EIN bestimmter Wert der potenziellen Energie zugeordnet werden



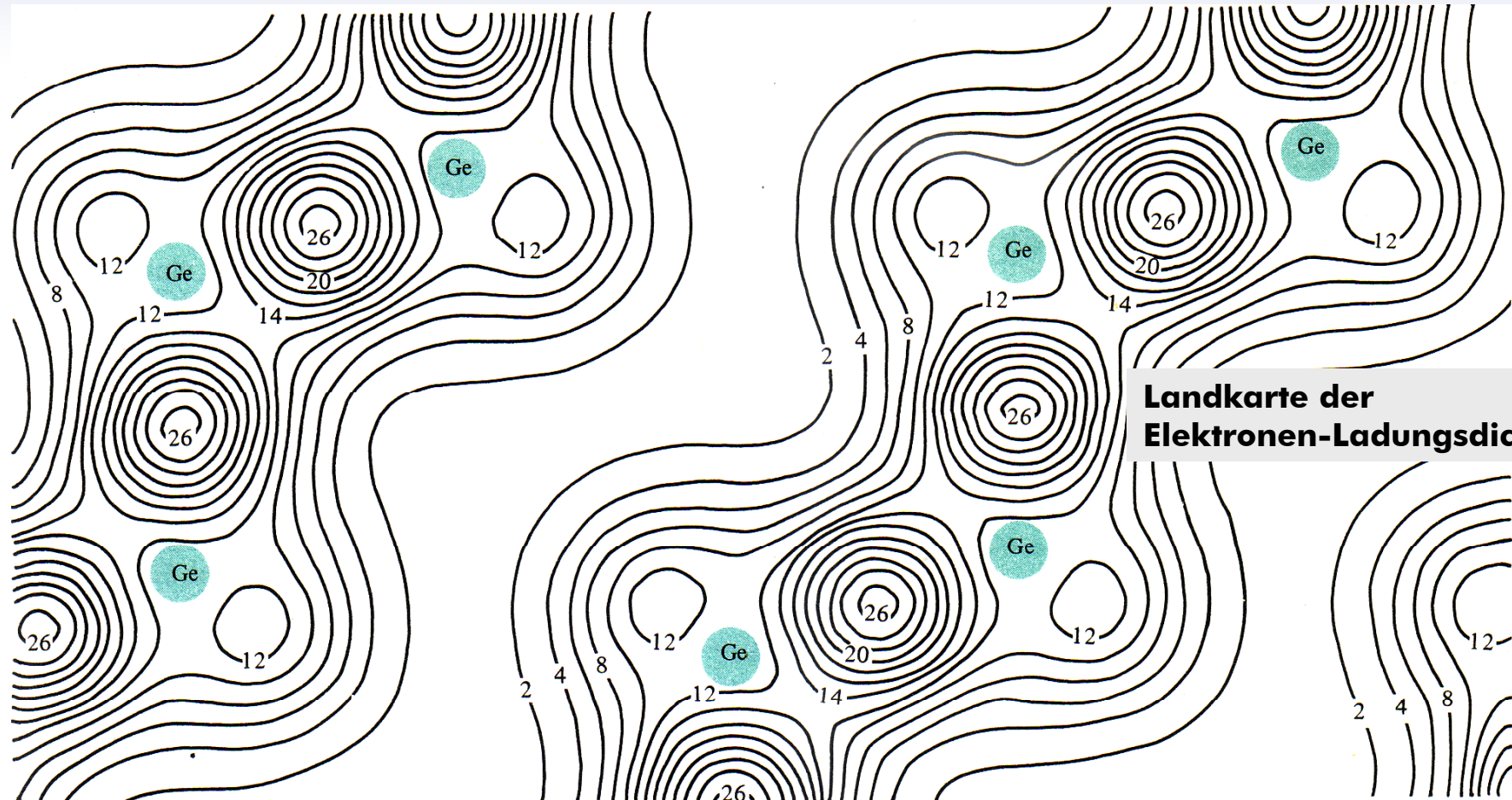
Achterbahn

Diagnose

Auf einer Isolinie ändert sich der Wert physikalischen Größe nicht

kovalente Bindung

Germanium im Grundzustand



Landkarte der
Elektronen-Ladungsdichte

Diagnose

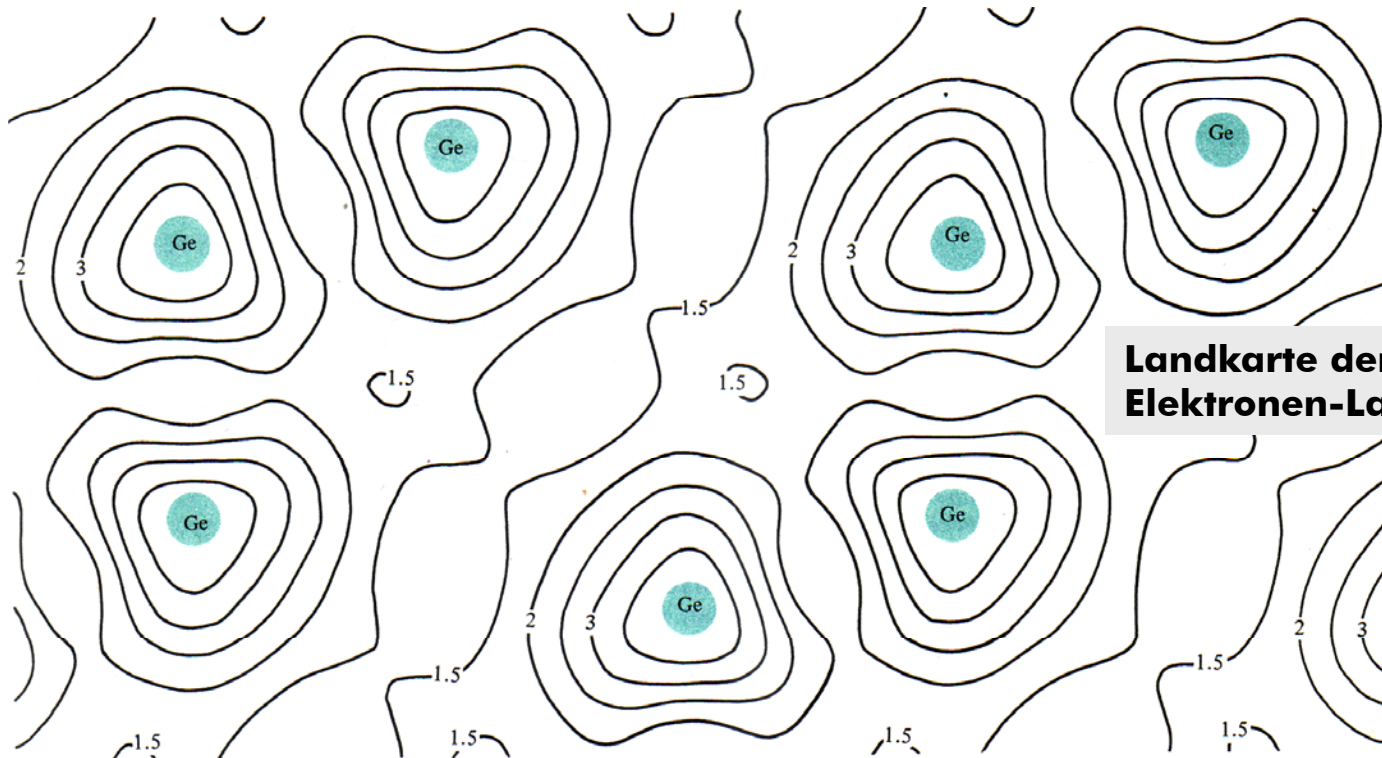
- Elektronen-Ladungsdichte variiert im Grundzustand um etwa Faktor **DREISSIG**
- Minima der Ladungsdichte im Bereich der Atomrümpfe
- Elektronen-Ladungsdichte variiert stark (2 – 26 in willkürlichen Einheiten)
- typische Verhältnisse für kovalente Bindung

Metallische Bindung

Germanium im angeregten Zustand

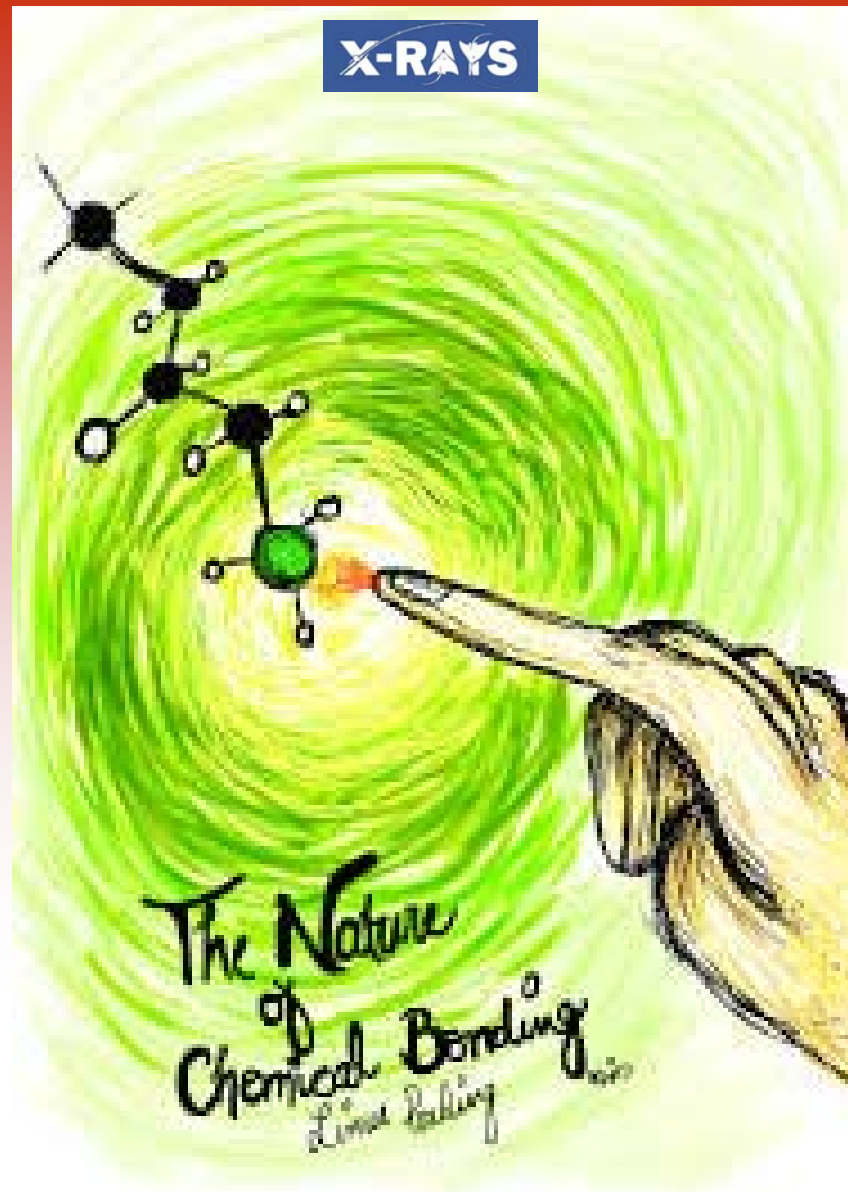
Symptome

- Anregung von Elektronen in höheres Energieniveau dehnt Wellenfunktion aus
- Anziehung von Elektron durch Nachbaratom delokalisiert Wellenfunktion
- Phänomen setzt sich über ganzen Kristall fort
- erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit delocalisierter Elektronen in Kernnähe

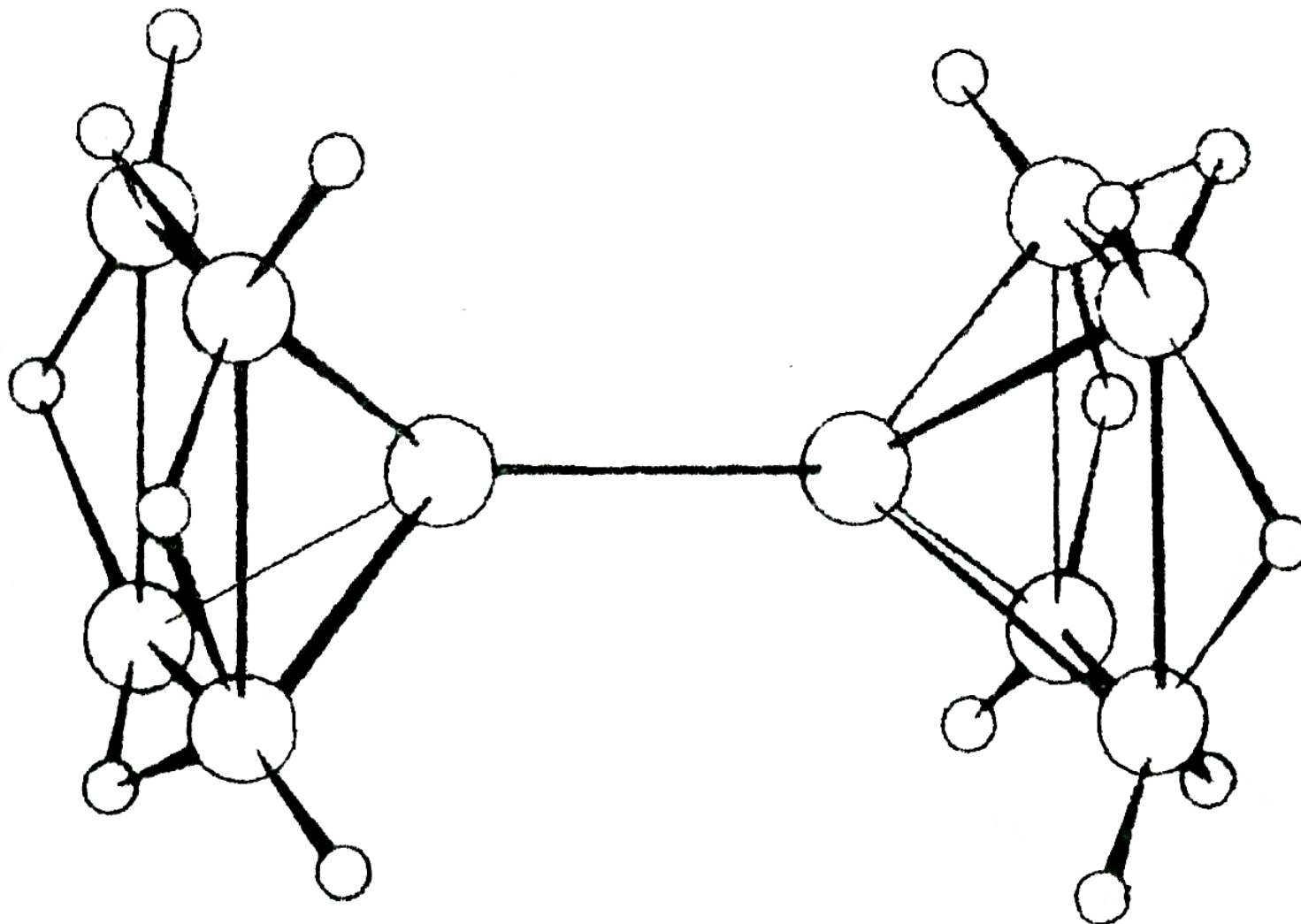


Diagnose

- Minima der Elektronen-Ladungsdichte jetzt **ZWISCHEN** den Atomrümpfen
- Elektronen-Ladungsdichte variiert im angeregten Zustand nur wenig um Faktor **DREI**
- Elektronendichte verschmiert über Kristall
- Elektronen sind dadurch aber jetzt nahezu frei beweglich (metallisch leitend)



The Nobel Prize in Chemistry 1954 was awarded to Linus Pauling for his research into the nature of the chemical bond and its application to the elucidation of the structure of complex substances



The Nobel Prize in Chemistry 1976 was awarded to William Lipscomb for his studies on the structure of boranes illuminating problems of chemical bonding