

Vorlesung: Elektronenstruktur: vom Atom zum Material

Zyklus von 12 Vorlesungen mit insgesamt 9 Themenblöcken.

Grundkenntnisse in der Elektronentheorie werden vorausgesetzt.

Schwerpunkte der Vorlesung sollen in Absprache mit den Doktoranden erfolgen.

Beginn 22. Oktober 2008

Einführung: Was ist chemische Bindung

Thema 1: Wasserstoffatom, Heliumatom, Orbitalbild, Farbzentren

Thema 2: freie Atome und Ionen: Elektronenkonfiguration, Ionisierungspotential, Elektronenaffinität, Elektronegativität, Polarisierbarkeit.

Thema 3: Moleküle: Abfolge der Elektronenzustände, vom kleinen Molekül zum Polymer, Kristallisation

Thema 4: Ionenkristalle: Abfolge der Elektronenzustände, Madelung-Potential und Stabilität, dielektrische Eigenschaften, Stabilität von Oberflächen

Thema 5. sp-Metalle, Elektronengas, periodisches Potential, elektrische Leitfähigkeit, mechanische Eigenschaften

Thema 6: kovalente Bindung, Abfolge der Elektronenzustände in Oxiden, Halbleiter, Schichtstrukturen

Thema 7: Nicht stöchiometrische Verbindungen, Punktdefekte, chemisches Potential

Thema 8: Grenzflächen und Korngrenzen

Thema 9: Rechenprogramme