

3.1. Übersicht

3. Eigenschaften und Anwendungen von Festkörpern

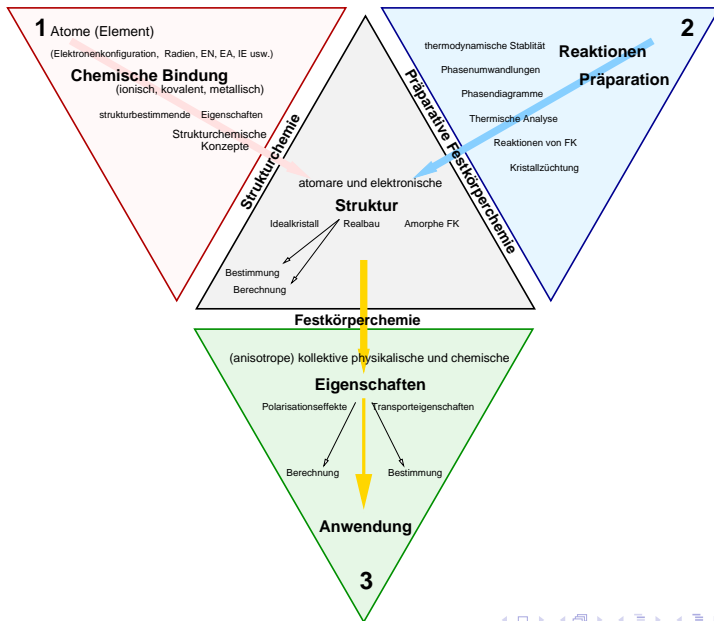


Caroline Röhr

Vorlesung: Festkörper-Chemie, SS 2022

1. **Bau von Festkörpern: Atomare und elektronische Strukturen** ✓
2. **Reaktionen und Synthesen von Festkörpern** ✓
3. **Eigenschaften und Anwendungen von Festkörpern**
 - 3.1. **Übersicht** ▶▶
 - 3.2. **Polarisationseffekte (statischer Response)**
 - 3.2.1. **Dielektrika**
 - 3.2.2. **Magnetmaterialien**
 - 3.3. **Transporteffekte (dynamischer Response)**
 - 3.3.1. **Metalle**
 - 3.3.2. **Halbleiter**
 - 3.3.3. **Supraleiter**
 - 3.3.4. **Ionenleiter**
 - 3.4. **Optische Eigenschaften**

Themen der Festkörperchemie/Materialchemie



- ▶ W. Göpel, C. Ziegler: Einführung in die Materialwissenschaften, Teubner Verlag, 1996. (Kap. 2)
- ▶ W. Kleber, Einführung in die Kristallographie, Verlag Technik GmbH Berlin, 1990. (Kap. 4).
- ▶ R. E. Newnham, Properties of Materials: Anisotropy, Symmetry, Structure; Oxford University Press, 2005.
- ▶ ... verteilt in den Materialchemie-Lehrbüchern wie:
 - A. R. West: Solid state chemistry and it's application, 2. Aufl., Wiley, 2014.
 - R. D. Tilley: Understanding solids: The science of materials, 3. Aufl., Wiley, 2021.
 - D. R. Askeland, W. Wright: Science and engineering of materials, 7. Aufl., Cengage Learning, 2021.
 - W. D. Callister, R. W. Rethwisch, Fundamentals of Materials Science and Engineering. An integrated approach, 5. Ed., 2015.
 - W. Göpel, C. Ziegler: Struktur der Materie: Grundlagen, Mikroskopie und Spektroskopie, Teubner Verlag, 1994.

- ① Einleitung: Physikalische Eigenschaften von Festkörpern
- ② Polarisations Effekte I
- ③ Polarisations Effekte II: Abweichungen von der Linearität
- ④ Transporteffekte
- ⑤ Optische Eigenschaften

① Einleitung: Physikalische Eigenschaften von Festkörpern

② Polarisationseffekte I

③ Polarisationseffekte II: Abweichungen von der Linearität

④ Transporteeffekte

⑤ Optische Eigenschaften

- ▶ vielfältige Anwendung/Funktion von Festkörpern \mapsto Materialwissenschaften
- ▶ Festkörper/Material-**Chemie**
 - Herstellung, Synthesen, Einkristallzüchtung
 - Charakterisierung, Berechnung elektronischer Strukturen
 - Verständnis: Festkörperstruktur \leftrightarrow Eigenschaft
- ▶ **Physik**
 - Festkörperphysik (alle Festkörper)
 - Kristallphysik (Einkristalle)
- ▶ Besonderheiten kristalliner Festkörper
 - Atome/Ionen/Moleküle in wohldefinierter Umgebung (z.B. Lumineszenz/Laser, Halbleiter)
 - (Punkt)-Symmetrie
 - Abstände voneinander
 - Orientierung zueinander
 - Charakterisierung und Berechnung vergleichsweise einfach/genau
 - kooperative Effekte (definierte Wechselwirkungen untereinander) (z.B. Magnete)
 - i.A. nicht isotrop \mapsto richtungsabhängige (Tensor)-Eigenschaften (z.B. Piezoelektrischer Effekt)
- ▶ generelle Klassifizierung physikalischer Eigenschaften \Downarrow

Ursache: Änderung äußerer Parameter/Feldgröße (Zustandsvariable¹)

① Polarisations-Effekte

- ▶ statischer Response, Gleichgewicht
- ▶ ∞ -hoher Transport-Widerstand
- ▶ \mapsto Änderung in einer Mengen/Zustandsgröße² (Wirkung)
- ▶ Beispiele:

direkt: \vec{B} -Feld ? Änderung der Magnetisierung \vec{M} ? \mapsto Magnetismus

indirekt: T -Änderung ? Änderung der Magnetisierung \vec{M} ? \mapsto pyromagnetischer Effekt

② Transport-Effekte

- ▶ dynamischer Response, Abweichung vom Gleichgewicht
- ▶ kein/geringer Transport-Widerstand
- ▶ \mapsto Fluß von Teilchen, Ladungsträgern, ... usw. (Wirkung)
- ▶ Beispiele:

direkt: \vec{E} -Feld ? Ladungstransport ? \mapsto Elektrodynamik

indirekt: \vec{E} -Feld ? Wärmeleitung ? \mapsto PELTIER-Effekt

¹Zustandsvariable: T , p , n , Magnetfeld \vec{H} , elektrische Feld \vec{E} , ...; ²Zustandsgrößen: V , ρ , innere Energie U , Enthalpie H , S , F , dielektrische Polarisation \vec{P} , Magnetisierung \vec{M} , ...

① Einleitung: Physikalische Eigenschaften von Festkörpern

② Polarisationseffekte I

③ Polarisationseffekte II: Abweichungen von der Linearität

④ Transporteeffekte

⑤ Optische Eigenschaften

① Polarisations-Effekte: Prinzip

- ▶ Änderung der Zustandsvariablen (Feldgröße X) \mapsto
- ▶ Änderung der Zustandsgröße/Materialeigenschaft (Mengengröße Y)
(z.B. V , Entropie S , Magnetisierung \vec{M} , ...)

- ▶ allgemein:

$$\chi^{YX} = \frac{\delta Y}{\delta X} \text{ bzw. } \delta Y = \chi^{YX} \delta X$$

- ▶ Proportionalitäts'konstante' $\chi^{X,Y}$ (Suszeptibilität)
 - Material'konstante' für X/Y
bei linearem Zusammenhang (erfüllt bei kleiner, langsamer Änderung)
z.B. Mechanik: Spannung \leftrightarrow Dehnung: HOOK'sches Gesetz
 - je nach X/Y \mapsto unterschiedliche Namen
 - X/Y richtungsabhängig (Vektoren, Tensoren) \mapsto χ höhere Tensoren
- ▶ $\chi^{X,Y}$ häufig nicht 'konstant'
 - abhängig von Vorbehandlung des Materials (Hysterese) \mapsto ferroische Eigenschaften
 - frequenzabhängig (komplexe Größen), \mapsto optische Eigenschaften, Elektronik

Übersicht: Polarisations-Effekte¹

Mengen größe $Y \downarrow$	Feldgröße X			
	Temperatur T [K]	elektrisches Feld E_i [V/m]	Magnetfeld H_i [Vs/m ²]	mechanische Spannung $\sigma_{i,j}$ [N/m ²]
Entropie S [J/m ² s]	Wärmekapazität $\chi^{ST} = c_p = \frac{\delta S}{\delta T} T$	elektrokalo- rischer Effekt $\chi_i^{SE} = \frac{\delta S}{\delta E}$	magnetokalo- rischer Ef- fekt $\chi_i^{SH} = \frac{\delta S}{\delta H}$	$\chi_{i,j}^{S\sigma} = \frac{\delta S}{\delta \sigma}$
elektrische Polarisation P_k [Asm ²]	pyroelektrischer Effekt $\chi_k^{PT} = \frac{\delta P}{\delta T}$	elektrische Suszeptibili- tät $\chi_{i,k}^{PE} = \frac{\delta P}{\delta E}$	magneto- elektrischer Effekt $\chi_{i,k}^{PH} = \frac{\delta P}{\delta H}$	piezo- elektrischer Effekt $\chi_{i,j,k}^{P\sigma} = \frac{\delta P}{\delta \sigma}$ piezo- elektrische Moduln
Magneti- sierung M_k [A/m]	pyromagnetischer Effekt $\chi_k^{MT} = \frac{\delta M}{\delta T}$	elektromagnetischer Ef- fekt $\chi_{i,k}^{ME} = \frac{\delta M}{\delta E}$	magnetische Suszepti- bilität $\chi_{i,k}^{MH} = \frac{\chi}{\mu} = \frac{\delta M}{\delta H}$	piezo- magnetischer Effekt $\chi_{i,j,k}^{M\sigma} = \frac{\delta P}{\delta \sigma}$ piezo- magnetische Mo- duln
mechanische Deformation $\epsilon_{k,l}$	thermische Aus- dehnung $\chi_{k,l}^{\epsilon T} = \alpha_{k,l} = \frac{\delta \epsilon}{\delta T}$	reziproker piezo- elektri- scher Effekt (Elektro- striktion) $\chi_{i,k,l}^{\epsilon E} = \frac{\delta \epsilon}{\delta E}$	reziproker piezo- magne- tischer Effekt $\chi_{i,k,l}^{\epsilon H} = \frac{\chi}{\mu} = \frac{\delta \epsilon}{\delta H}$	Spannungs-Dehnungs- Verhalten $\chi_{i,j,k,l}^{\epsilon \sigma} = \frac{\delta \epsilon}{\delta \sigma}$ Elastizitätsmoduln, YOUNG-Moduln
	thermischer Ver- zerrungstensor	piezo- elektrische Moduln	piezo- magnetische Mo- duln	

¹ thermodynamische Klassifizierung phänomenologischer Materialkonstanten

Feld- und Mengengrößen

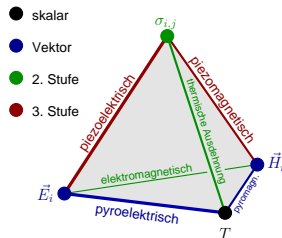
- ▶ Skalar, Vektor oder Tensor 2. Stufe \Rightarrow

Diagonalelemente: (direkte Eigenschaftsänderungen)

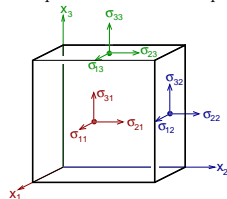
- ▶ einfacher Ursache \leftrightarrow Wirkungs-Bezug
- ▶ Linearität ($\chi_{i,j,k,l} = \text{Konstante}$) \mapsto einfacher 'Normalfall' der Physik

Nebendiagonalen: ('Effekte')

- ▶ zunächst 'unerwartete' Sekundäreffekte
- ▶ für Anwendungen interessant
- ▶ Umwandlung von Energien
 - pyroelektrischer Effekt: Wärme \Rightarrow elektrische Spannung
 - piezoelektrischer Effekt: E -Feld \Rightarrow mechanische Deformation
 - magnetokalorischer Effekt: Wärme \Rightarrow magnetische Felder



Beispiel: mechanische Spannung

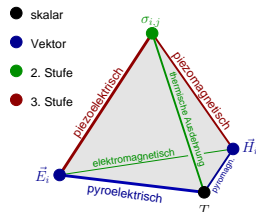


- $\sigma_{i,j}$: 9 Komponenten
- $\sigma_{i,i}$ ($i = j$): Normal-Komp.
- $\sigma_{i,j}$ ($i \neq j$): Scher-Komp.

Richtungsabhängigkeiten von Materialkenngrößen

	Zustandsvariable	① Polarisation		② Transport
Tensor	(Ursache)	Zustandsgrößen (Wirkung) χ		J/λ
skalar	T, p, n	V, ρ , Entropie S , ..	c_p	–
1. Stufe	elektrische Felder magnetische Felder	dielektrische Polarisation magnetische Polarisation	pyroelektr.	Fluss J Gradient ∇X
2. Stufe	mechan. Spannung	mechanische Deformation	magnet. S. dielektr. S.	λ aller Flüsse: z.B. elektrische und Wärmeleitfähigkeit
3. Stufe	–	–	piezoelekt. M.	–
4. Stufe	–	–	YOUNG-Moduln	–

- ▶ 1. Stufe: 3^1 Variable
- ▶ 2. Stufe: $3^2 = 9$ Variable
- ▶ 3. Stufe: $3^3 = 27$ Variable
- ▶ 4. Stufe: $3^4 = 81$ Variable



Vereinfachung polarer symmetrischer Tensoren 2. Stufe¹

Kristallsystem	Tensorfläche Ellipsoid \Downarrow mit ...	Punkt- gruppe	mathematische Form	Zahl unabhängiger Koeffizienten
triklin	... beliebiger Orientierung	mmm	$\begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \chi_{13} \\ \chi_{12} & \chi_{22} & \chi_{23} \\ \chi_{13} & \chi_{23} & \chi_{33} \end{pmatrix}$	6
monoklin	... Hauptachse $\parallel b$	mmm	$\begin{pmatrix} \chi_{11} & 0 & \chi_{13} \\ 0 & \chi_{22} & 0 \\ \chi_{13} & 0 & \chi_{33} \end{pmatrix}$	4
orthorhombisch	... Achsen $\parallel a, b$ und c	mmm	$\begin{pmatrix} \chi_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33} \end{pmatrix}$	3
tetragonal, trigonal, hexagonal	... Rotationssymmetrie um c	$\infty/m\bar{m}$	$\begin{pmatrix} \chi_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33} \end{pmatrix}$	2
kubisch	... 3 gleichen Hauptachsen (Kugel)	$m\bar{3}$	$\begin{pmatrix} \chi_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{11} \end{pmatrix}$	1

¹ auch für Transporteigenschaften wie Wärmeleitfähigkeit gültig, s.u. \blacktriangleright

Darstellung symmetrischer Tensoren 2. Stufe

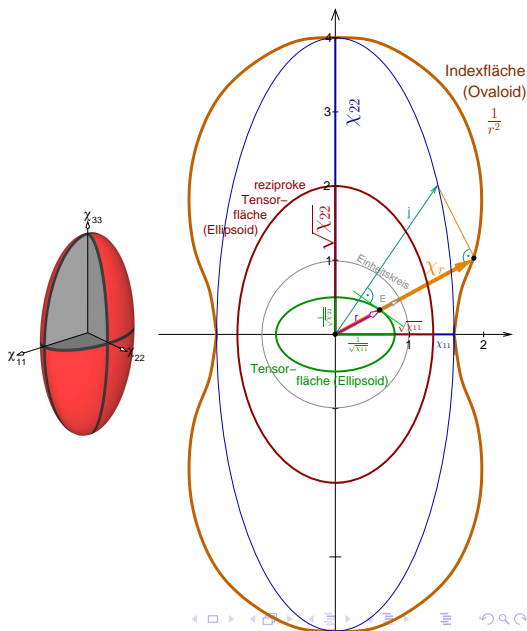
graphische Darstellung

... als **Ellipsoid**

- ▶ ... mit $\frac{1}{\sqrt{\chi_{ii}}}$ als Hauptachsen
- ▶ ... 'reziprok', mit $\sqrt{\chi_{ii}}$ als Hauptachsen
- ▶ ... mit χ_{ii} als Hauptachsen

... als **Indexfläche (Ovaloid)**

- ▶ Konstruktion s. rechts
- ▶ $\chi = \frac{1}{r^2}$
- ▶ direktes Maß für χ_r (λ_r etc.) und damit \vec{P} (\vec{J}) in Richtung \vec{r}
- ▶ Projektion von \vec{P} (\vec{J}) auf $\vec{E} \parallel \vec{r}$

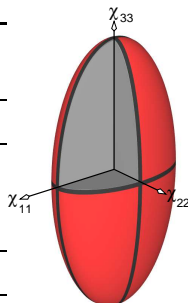


Symmetrie des Ellipsoides und des Ovaloids nach Kristallsystem (s.o.)

Beispiel I: linearer thermischer Ausdehnungskoeffizient (2. Stufe)

- ▶ isotrop: einfache Längenänderung, $l = l_0(1 + \chi\Delta T)$
- ▶ im Kristall: $\chi_{i,j}$ = thermischer Verzerrungstensor (2. Stufe)

Stoff	Raumgruppe	Punktgruppe	thermische Ausdehnung [K^{-1}]	
			χ	
Diamant	$Fd\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	2.5×10^{-6}	
NaCl	$Fm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	40×10^{-6}	
Quarzglas	amorph	–	0.5×10^{-6}	
			$\chi_{\parallel c}$ (χ_{33})	$\chi_{\perp c}$ ($\chi_{11} = \chi_{22}$)
Quarz	$P3_121$	32	9×10^{-6}	14×10^{-6}
Zn	$P6_3/mmc$	6/ mmm	55×10^{-6}	14×10^{-6}
Graphit	$P6_3/mmc$	6/ mmm	26×10^{-6}	-1.2×10^{-6}

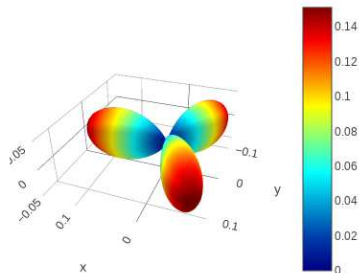


Beispiel II: Piezoelektrische Modulen (3. Stufe)

- ▶ Piezoelektrizität d_{ijk}
- ▶ **Quarz**: wegen hoher Symmetrie (Kristallklasse 32)
- ▶ nur 2 (statt im triklinen 18) unabhängige Elemente
 - $d_{111} = d_{11} = 2.91 \cdot 10^{-12} \text{ As/N}$
 - $d_{123} = d_{14} = -0.727 \cdot 10^{-12} \text{ As/N}$
- ▶ in 6×3 Darstellung

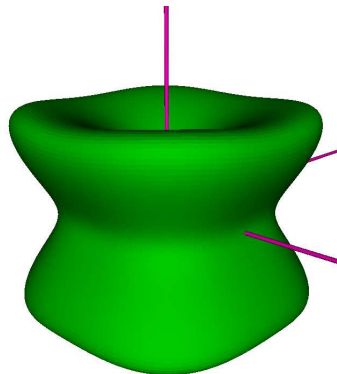
$$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- ▶ **graphisch***, Details s. Kap. 3.2.1.



Beispiel III: Elastizitätsmodulkörper (4. Stufe)

- ▶ VRML-Dateien:
- ▶ für GaAs (Zinkblende, kubisch, $F\bar{4}3m$)
- ▶ für BeSiP₂ (Chalkopyrit, tetragonal)



E-Modulkörper von BeSiP₂

① Einleitung: Physikalische Eigenschaften von Festkörpern

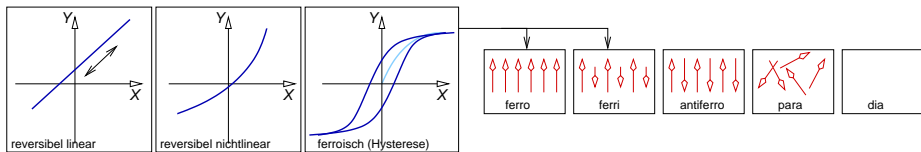
② Polarisations Effekte I

③ Polarisations Effekte II: Abweichungen von der Linearität

④ Transporteffekte

⑤ Optische Eigenschaften

Abweichungen von der Linearität \mapsto Ferroische Eigenschaften



- ▶ praktisch interessant vor allem für Hauptdiagonale (direkte Effekte)
- ▶ nur für Spalten 2 bis 4 (X und Y richtungsabhängig)
- ▶ jeweils für elektrische, magnetische und mechanische Felder
 - **'dia':** keine Polarisation möglich (z.B. NaCl: dia-magnetische/elektrisch)
 - **'para':** Polarisation möglich, aber nicht vorhanden
 - ...-elektrisch: alle Dipole statistisch verteilt
 - ...-magnetisch: alle Spins statistisch verteilt
 - Hochtemperaturform-Formen ($> T_{C,N}$) aller weiteren Ausrichtungen \downarrow
 - **'ferro':** gleichsinnige Polarisation vorhanden, umkehrbar, mit Hysteresis
 - ...-magnetisch: Fe, SmCo_5 (Spins)
 - ...-elektrisch: NaNO_2 bei $T < 164^\circ\text{C}$, KDP (Dipole)
 - ...-elastisch: $\text{NdP}_5\text{O}_{14}$ (Verformung mit Hysteresis)
 - **'antiferro':** gegensinnige Dipol-Ausrichtung, keine Hysteresis
 - keine resultierende Gesamtpolarisation
 - ...-magnetisch: NiO
 - ...-elektrisch: $\text{NH}_4[\text{H}_2\text{PO}_4]$ (ADP)
 - **'ferri':** gegensinnige Ausrichtung, aber unterschiedlich große Dipole
 - makroskopisch analog zu 'ferro'
 - ...-magnetisch: CoFe_2O_4 , Magnetit
 - ...-elektrisch: $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$

T-Abhängigkeit ferroischer Eigenschaften

▶ 'para' (Hochtemperaturzustand)

1. ohne WW zwischen Dipolen:

- mit fallendem T steigt χ (weniger thermisch bedingte Unordnung)

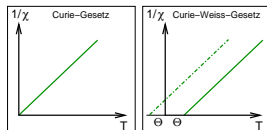
- **CURIE-Gesetz:** $\chi_{\text{para}} = \frac{C}{T}$

2. bei (anti)paralleler WW zwischen Dipole:

- **CURIE-WEISS-Gesetz** $\chi_{\text{para}} = \frac{C}{T-\theta}$

- θ : 'para'...ische CURIE-Temperatur

- \oplus bei paralleler Wechselwirkung ($\uparrow\uparrow$)
- \ominus bei antiparalleler Wechselwirkung ($\uparrow\downarrow$)



▶ 'ferro' und 'ferri'

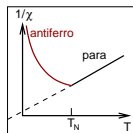
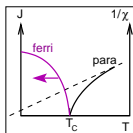
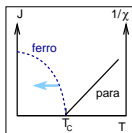
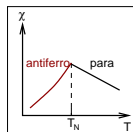
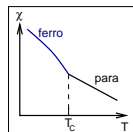
T_C : 'ferro' ...ische CURIE-Temperatur

$< T_C$: χ fällt mit steigender Temperatur \mapsto Unordnung durch thermische Bewegung

▶ 'antiferro'

T_N : NÉEL-Temperatur

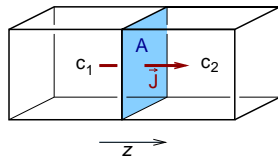
$< T_N$: χ steigt mit steigender Temperatur \mapsto Unordnung führt zu resultierendem Moment



- ① Einleitung: Physikalische Eigenschaften von Festkörpern
- ② Polarisations-effekte I
- ③ Polarisations-effekte II: Abweichungen von der Linearität
- ④ **Transporteffekte**
- ⑤ Optische Eigenschaften

② Transporteffekte: Prinzip

- ▶ kein/geringer Transport-Widerstand
- ▶ Gradient der Zustandsvariablen X , in Richtung z (Ursache)
- ▶ \mapsto Transport im FK
- ▶ dynamischer Response, Abweichung vom Gleichgewicht
- ▶ \mapsto Fluß von Teilchen, Ladungsträgern, ... usw. (Wirkung)



$$\underbrace{\dot{J}_Y}_{\text{Fluß}} = - \underbrace{a^{YX}}_{\text{Transp.-Koeff.}} A \underbrace{\nabla X}_{\text{Gradient}}$$

A: Fläche

$a_{i,j}$: Transportkoeffizient (symmetrischer Tenor 2. Stufe, maximal 6 Elemente, Darstellung: Ellipsoid)

Übersicht wichtiger Transport-Effekte

	Gradient ∇X			
Fluß $\downarrow J_Y$	∇T [K/m]	∇p [kg/m ² s ²]	∇N_v [m ⁻⁴]	$\nabla U, \vec{E}$ [V/m]
Wärme \dot{Q} [J/m ² s]	Wärmeleitung $\frac{dQ}{dt} = -\lambda A \frac{dT}{dz}$	mechanokalorischer Effekt	Diffusionswärme	PELTIER-Effekt bzw. 2. BENEDICKS-Effekt
Masse \dot{m} [kg/m ² s]	thermomechanischer Effekt	Massetransport $\frac{dm}{dt} = \frac{\text{konst.}}{\eta} \frac{dp}{dz}$ (Viskosität) HAGEN-POISEUILLE'sches Gesetz	Diffusionsdruck	
Teilchenzahl \dot{N} [m ⁻² s ⁻¹]	Thermodiffusion	Druckdiffusion	Diffusion $\frac{dN}{dt} = -DA \frac{dN}{dz}$ (Diffusionskoeffizient) 1. FICK'sches Gesetz	Elektrophorese
Ladung \dot{q} [A/m ²]	SEEBECK-Effekt bzw. 1. BENEDICKS-Effekt		Strömungsstrom	Elektrizitätsleitung $\frac{dq}{dt} = \sigma A \frac{dU}{dz}$ (elektrische Leitfähigkeit) OHM'sches Gesetz

obere Reihe:

- ▶ Gradienten der Größe X (in Richtung z)
- 1: T -Gradient
- 2: Druckunterschied
- 3: Konzentrationsgradient
- 4: Potentialgradient (elektrische Spannung)

Diagonalelemente

- ▶ direkt erwartbare Flüsse, einfacher Ursache \leftrightarrow Wirkungs-Bezug
- ▶ Linearität \mapsto einfacher 'Normalfall' der Physik
 - 1:1 Wärmeleitung, λ Wärmeleitfähigkeit (Gitter- und Elektronen-Beiträge)
 - 3:3 Diffusion, D Diffusionskonstante, 1. FICK'sches Gesetz
 - 4:4 Ladungstransport/Stromfluss, σ spezifischer elektrischer Widerstand, OHM'sches Gesetz (Ladungsträger: Elektronen, Ionen, ...)

Nebendiagonalen

- ▶ zunächst 'unerwartete' Sekundäreffekte
- ▶ für Anwendungen interessant (Umwandlung von Energien)
 - 1:4 SEEBECK-Effekt (für 2 Metalle, sonst 1. BENEDICKS-Effekt)
 - 4:1 PELTIER-Effekt (für 2 Metalle, sonst 2. BENEDICKS-Effekt)

Vereinfachung durch Symmetrie: Beispiel Wärmeleitfähigkeit

- ▶ isotrop: λ als skalare Größe
- ▶ im Kristall: $\lambda_{i,j}$ = Tensor 2. Stufe (Beschreibung: Ellipsoid)

Stoff	Raumgruppe	Punktgruppe	Wärmeleitfähigkeit [W/mK]	
			λ	
Diamant	$Fd\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	545.3	
NaCl	$Fm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	6.5	
Quarzglas	amorph	–	1.38	
Cu	$Fm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	386	
α -Messing	$Fm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	109	
			$\lambda_{\perp c}$	$\lambda_{\parallel c}$
Quarz	$P3_121$	32	7.25	13.2
Zn	$P6_3/mmc$	$6/mmm$	120.4	142.2
Graphit	$P6_3/mmc$	$6/mmm$	355	89.4

- ▶ für Metalle: elektronische und Wärmeleitfähigkeit gekoppelt \Downarrow

- ▶ für das Verhältnis von thermischer (λ_e , Gl. (7)) und der elektronischer (σ , Gl. (8)) Leitfähigkeit von Metallen folgt

$$\frac{\lambda_e}{\sigma} = \frac{\frac{\pi^2}{3} \frac{Nk_B^2 T}{m_e} \tau}{\frac{Ne^2 \tau}{m_e}} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} T$$

- ▶ **WIEDEMANN-FRANZ'sches Gesetz**

Das Verhältnis von thermischer zu elektrischer Leitfähigkeit ist direkt proportional zur Temperatur.

Bei konstanter Temperatur sind Wärmeleitfähigkeit und elektrische Leitfähigkeit proportional zueinander.

Elektrische (σ) – Wärme (λ) Leitfähigkeit

	E_g	Ladungsträger- konzentration [e ⁻ /cm ³]	spezifische elektrische Leitfähigkeit σ [$\Omega^{-1}\text{m}^{-1}$]	Wärmeleit- fähigkeit λ [W/mK]
Si	1.17 (i)		$1.56 \cdot 10^{-3}$	
Ge	0.744 (i)		$2.17 \cdot 10^{-4}$	
As	0	$2 \cdot 10^{20}$		
Sb	0	$5.5 \cdot 10^{19}$	2.8	
Bi	0	$2.88 \cdot 10^{17}$	1	
K	0	$1.4 \cdot 10^{22}$	$15.9 \cdot 10^6$	102.4
Na	0	$2.65 \cdot 10^{22}$	$23 \cdot 10^6$	140
Cu	0	$9.3 \cdot 10^{22}$	$5.96 \cdot 10^7$	386
Al	0		$3.5 \cdot 10^7$	247
Zn	0		$1.69 \cdot 10^7$ ^[1]	120.4/142.2 ^[2]
Quarz	≈ 9		$0.3 \cdot 10^{-14}/10^{-12}$	7.25/13.2
Graphit	0		$2\text{-}3 \cdot 10^5/3.3 \cdot 10^2$	355/89.4

¹: Anisotropie $\sigma_{\perp c}:\sigma_{\parallel c}=0.96$; ²: $\perp c/\parallel c$

- ▶ vergleichbare Gesetzmässigkeiten für den zeitlichen Verlauf von Transportvorgängen:
- ▶ Wärmeleitung: T -Gradient: BIOT-FOURIER

$$\frac{dT}{dt} = \kappa \frac{d^2 T}{dx^2}$$

- ▶ Diffusion: c -Gradient: 2. FICK'sches Gesetz

$$\frac{dc_x}{dt} = D \frac{d^2 c_x}{dx^2}$$

- ▶ Quotienten der unterschiedlichen DGLen \mapsto Basis für dimensionslose Kennzahlen

- ① Einleitung: Physikalische Eigenschaften von Festkörpern
- ② Polarisations Effekte I
- ③ Polarisations Effekte II: Abweichungen von der Linearität
- ④ Transporte Effekte
- ⑤ Optische Eigenschaften

- ▶ Lumineszenz- und Lasermaterialien (Einzelionen-Eigenschaften)
- ▶ Kristalloptik (richtungsabhängige Kristalleigenschaften)
 - Lichtbrechung
 - Doppelbrechung und Polarisation
 - Indikatrix
 - optische zweiachsige Kristalle
 - optische Mikroskopie
 - optische Aktivität
 - Reflexion
 - elektrooptischer und elastooptischer Effekt
 - nichtlineare Optik (NLO)
- ▶ Pigmente (verschiedene elektronische Übergänge)

1. **Bau von Festkörpern: Atomare und elektronische Strukturen** ✓
2. **Reaktionen und Synthesen von Festkörpern** ✓
3. **Eigenschaften und Anwendungen von Festkörpern**
 - 3.1. **Übersicht** ✓
 - 3.2. **Polarisationseffekte (statischer Response)**
 - 3.2.1. **Dielektrika** ▶▶
 - 3.2.2. **Magnetmaterialien**
 - 3.3. **Transporteffekte (dynamischer Response)**
 - 3.3.1. **Metalle**
 - 3.3.2. **Halbleiter**
 - 3.3.3. **Supraleiter**
 - 3.3.4. **Ionenleiter**
 - 3.4. **Optische Eigenschaften**