

KM-INTRO, WS2016/17, Papadakis/Alligretto

1. Van der Waals Wechselwirkung und Lennard-Jones-Potential (7 Punkte)

Intermolekulare Wechselwirkungen, in denen Van der Waals-Kräfte dominieren, können durch das Lennard-Jones-Potential beschrieben werden.

$$\phi(r) = \frac{A}{r^m} - \frac{B}{r^n}$$

wobei r der Abstand zwischen zwei neutralen Molekülen ist, und A und B zwei positive Konstanten sind.

- Skizzieren Sie den qualitativen Verlauf dieses Wechselwirkungspotentials für den üblichen Fall $m > n$. Diskutieren Sie, welcher der beiden Terme abstoßend wirkt und welcher anziehend.
- Begründen Sie kurz, warum der anziehend wirkende Anteil des Potentials proportional zu $\frac{1}{r^6}$ ist.
- Zeigen Sie, dass ein stabiler Zustand nur für $m > n$ möglich ist.
- Nennen Sie die Ihnen bekannten Bindungstypen in Festkörpern

2. Strukturfaktor von Zinkblende (8 Punkte)

Die Zinkblende-Struktur kann beschrieben werden als Superposition zweier kubisch flächenzentrierter Gitter (fcc), welche um $\frac{1}{4}$ Raumdiagonale der kubischen Elementarzelle gegeneinander verschoben sind. Dabei besteht die Basis aus einem negativ geladenem Ion B (z.B. Schwefel) bei $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$

- Geben Sie die Koordinaten der acht Atome der konventionellen Elementarzelle an.
- Berechnen Sie den Strukturfaktor δ_{hkl} für die Zinkblende-Struktur.
- Betrachten Sie die (100) und (200) Bragg-Reflexe. Nehmen Sie an, dass für die atomaren Formfaktoren $f_A \neq f_B$ ist, und bestimmen Sie, ob die obengenannten Reflexe „erlaubt“ oder „verboten“ sind. Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit den jeweiligen Reflexen des einfachen fcc-Gitters und der Diamantstruktur.
- Wie ändert sich qualitativ die Intensität der „erlaubten“ Bragg-Reflexe mit steigender Temperatur?

3. Debyesche Theorie der Wärmekapazität (10 Punkte)

Betrachten Sie ein zweidimensionales Gitter mit einatomiger Basis und Kantenlänge L

- Berechnen Sie die Phononenzustandsdichte des Gitters für kleine Kreisfrequenzen ω . Nehmen Sie zunächst der Einfachheit halber an, dass die longitudinale und

transversale Schwingungsmethode die gleiche Schallgeschwindigkeit besitzen und berechnen Sie das 2D-Gitter als isotrop.

- b) Gibt es in diesem Fall optische Phononenzweige? (Erläutern Sie)
- c) Bestimmen Sie die innere Energie und die spezifische Wärme des 2D-Gitters im Rahmen des Debye-Modells für den Grenzfall niedriger Temperaturen $T \ll \theta_D = \frac{\hbar\omega}{k_B}$.
Leiten Sie den Ausdruck für die Debye-Frequenz ω_D her.
- d) Vergleichen Sie die Temperatur-Abhängigkeit der phononischen spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen in c mit dem jeweiligen Ergebnis in der Debye-Theorie eines 3D-Festkörpers

Bestimmen Sie Integral in (c)

$$\int_0^\infty \frac{x^2}{e^x - 1} dx \simeq 2,404$$

4. Mittlere Energie im freien Elektronen Gas (9 Punkte)

Berechnen Sie die mittlere Energie \vec{E} pro Elektronengas bei $T = 0$ im

- a) Eindimensionalen Fall
- b) Zweidimensionalen Fall
- c) Dreidimensionalen Fall

Hinweis: Benutzen Sie den bekannten Zusammenhang zwischen der Zustandsdichte $D_{x_0}(E)$ und E für $x = 1, 2, 3$, ohne die Proportionalitätskonstante A_x ausdrücklich anzugeben.

5. Energiebänder für stark gebundene Elektronen (12 Punkte)

Die Bandstruktur des vereinfachten tight-binding-Modells für stark gebundene Elektronen hat die Form

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0 - \gamma \sum_j e^{i\vec{k}\vec{R}_j}$$

wobei die Summe über solche Vektoren des Gitters läuft, die den Ursprung mit seinen nächsten Nachbarn verbinden. Die Größe γ ist das für alle nächsten Nachbarn als gleich angenommene Überlappungsintegral. Betrachten Sie nun ein zweidimensionales hexagonales Gitter mit Gitterkonstante a .

- a) Berechnen Sie $\varepsilon(\vec{k})$ im tight-binding Modell für den Fall $\gamma < 0$ und $\varepsilon(\vec{k} = 0) = 0$
- b) Bestimmen Sie näherungsweise die effektive Masse m_e^* vom Überlappungsintegral γ und der Gitterkonstante a ab? Wie groß muss γ für $a = 2,70\text{\AA}$ sein, damit die effektive Masse gleich der Masse der freien Elektronen ist?
- c) Abb.1 zeigt das rez. Gitter des obenstehenden hexagonalen Bravais-Gitters. Die primitiven Basisvektoren sind

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{e}_x - \frac{1}{2} \hat{e}_y \right)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \hat{e}_y$$

Zeichnen Sie die erste Brillouin-Zone (BZ)¹. Innerhalb dieser existieren folgende Hochsymmetriepunkte

- (1) Der Γ -Punkt in der Mitte;
 - (2) Die sechs K-Punkte, die sich an den Ecken der BZ befinden
 - (3) Die sechs M-Punkte, welche auf der Mitte der Verbindungsgeraden zwischen zwei benachbarten K-Punkten liegen. Zeichnen Sie diese Punkte in ihre Skizze ein und berechnen Sie die Größe von $|\vec{k}_M|$ und $|\vec{k}_K|$
- d) Geben Sie den funktionalen Verlauf der Dispersionsrelation $\varepsilon(\vec{k})$ entlang des Pfades $\Gamma \rightarrow M$ an und skizzieren Sie ihn in einem Diagramm.

Hinweis: Berücksichtigen Sie folgende Gleichungen:

$$\cos(2\theta) = 2\cos^2(\theta) - 1$$

$$\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1 - \cos(\theta)}{2}$$

6. Ladungsträgerdichte und Leitfähigkeit eines dotierten Halbleiters (10 Punkte)

Ein Si-Kristall ist mit $2 \cdot 10^{22}$ Bor-Atomen pro m^3 und 10^{21} Phosphor-Atomen dotiert. Berechnen Sie bei Zimmertemperatur (300K) Folgendes:

- a) Die Elektronen & Löcherkonzentration mit und ohne Dotierung
- b) Die el. Leitfähigkeit des dotierten Halbleiters
- c) Die Verschiebung des Fermi-Niveaus im dotierten Si-Kristall, E_F , bezüglich des Fermi-Niveaus des intrinsischen Halbleiters E_F^i

Die Bandlücke für Silizium ist $E_g = 1,12 eV$. Die effektiven Massen der Elektronen und Löcher sind $m_n^* = 1,08 m_e$ und $m_p^* = 0,81 m_e$ (m_e : Masse der freien Elektronen). Darüber hinaus betragen die Beweglichkeiten der Ladungsträger bei Zimmertemperatur $\mu_n = 0,1 m^2 V^{-1} s^{-1}$ (Elektronen) und $\mu_p = 0,04 m^2 V^{-1} s^{-1}$ (Löcher). Gehen Sie davon aus, dass diese Werte nach der Dotierung unverändert bleiben und dass bei Zimmertemperatur alle Dotieratome ionisiert sind

- d) Betrachten Sie einen Halbleiter pn-Übergang, an dem eine Spannung U angelegt wird. Welche Polung des p-dotierten Halbleiters entspricht der sogenannten Sperrrichtung? Begründen Sie Ihre Antwort

Hinweis: Benutzen Sie die bekannten Gleichungen:

$$n_i = 2 \left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{E_i - E'_F}{k_B T}}$$

$$p_i = 2 \left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{E_F - E_V}{k_B T}}$$

für den intrinsischen Halbleiter und die ähnlichen Ausdrücke für den dotierten Kristall.