

# Nachholklausur zur Einführung in die Festkörperphysik

Prof. Peter Böni

Wintersemester 2015/2016

05. April 2016

## Hinweise:

- Notieren Sie auf jedem beschriebenen Blatt Name und Matrikelnummer!
- Fertigen Sie Ihre Lösung ausschließlich auf den ausgeteilten DIN A4 Bögen an!  
Notizen auf diesem Aufgabenblatt werden bei der Korrektur nicht berücksichtigt!
- Diese Klausurangabe umfasst 6 Aufgaben.
- Bearbeitungszeit: 90 min
- Zugelassene Hilfsmittel:
  - Nicht programmierbarer, netzunabhängiger Taschenrechner.
  - Wörterbuch
  - Ein DIN A4 Formelblatt, beidseitig ausschließlich handschriftlich beschrieben.

## Konstanten:

Wirkungsquantum	$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Wirkungsquantum	$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Elementarladung	$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$
Elektronenmasse	$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Atomare Masseneinheit	$u = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Boltzmann-Konstante	$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Avogadro-Konstante	$N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Elektrische Feldkonstante	$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ As/(Vm)}$
Magnetische Feldkonstante	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N m}^{-2}$
Neutronenmasse	$m_n = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$



## 1 Struktur und Bindungen (9 Punkte)

- (a) Ordnen Sie den folgenden Materialien ihren dominanten Bindungstyp im Festkörper zu: Diamant, Natrium, Kaliumchlorid, Argon, Methanol, Silizium.
- (b) Bestimmen Sie Kristallsystem und Bravais-Gitter der in Abb. 1.1 gezeigten drei Strukturen. Begründen Sie dabei Ihre Wahl des Kristallsystems anhand der Länge der Kristallachsen ( $a, b, c$ ) und der Achsenwinkel ( $\alpha, \beta, \gamma$ ). Geben Sie an, wieviele Gitterpunkte sich jeweils in einer Einheitszelle der Struktur befinden.
- (c) Erklären Sie kurz die Begriffe
- (i) Wigner-Seitz-Zelle
  - (ii) Erste Brillouin-Zone
- (d) Wieviele Gitterpunkte sind in den beiden Zellen in Aufgabenteil (c) jeweils enthalten?

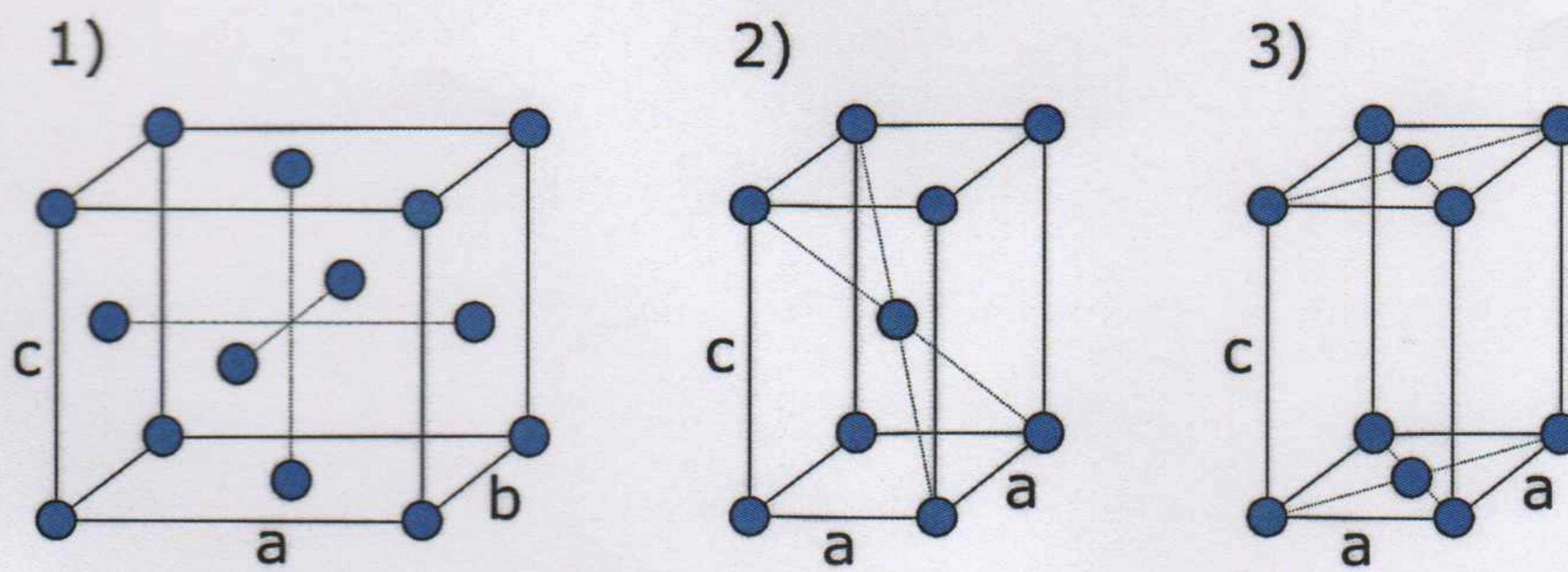


Abbildung 1.1: Drei verschiedene Kristallstrukturen.



## 2 Strukturfaktor (7 Punkte)

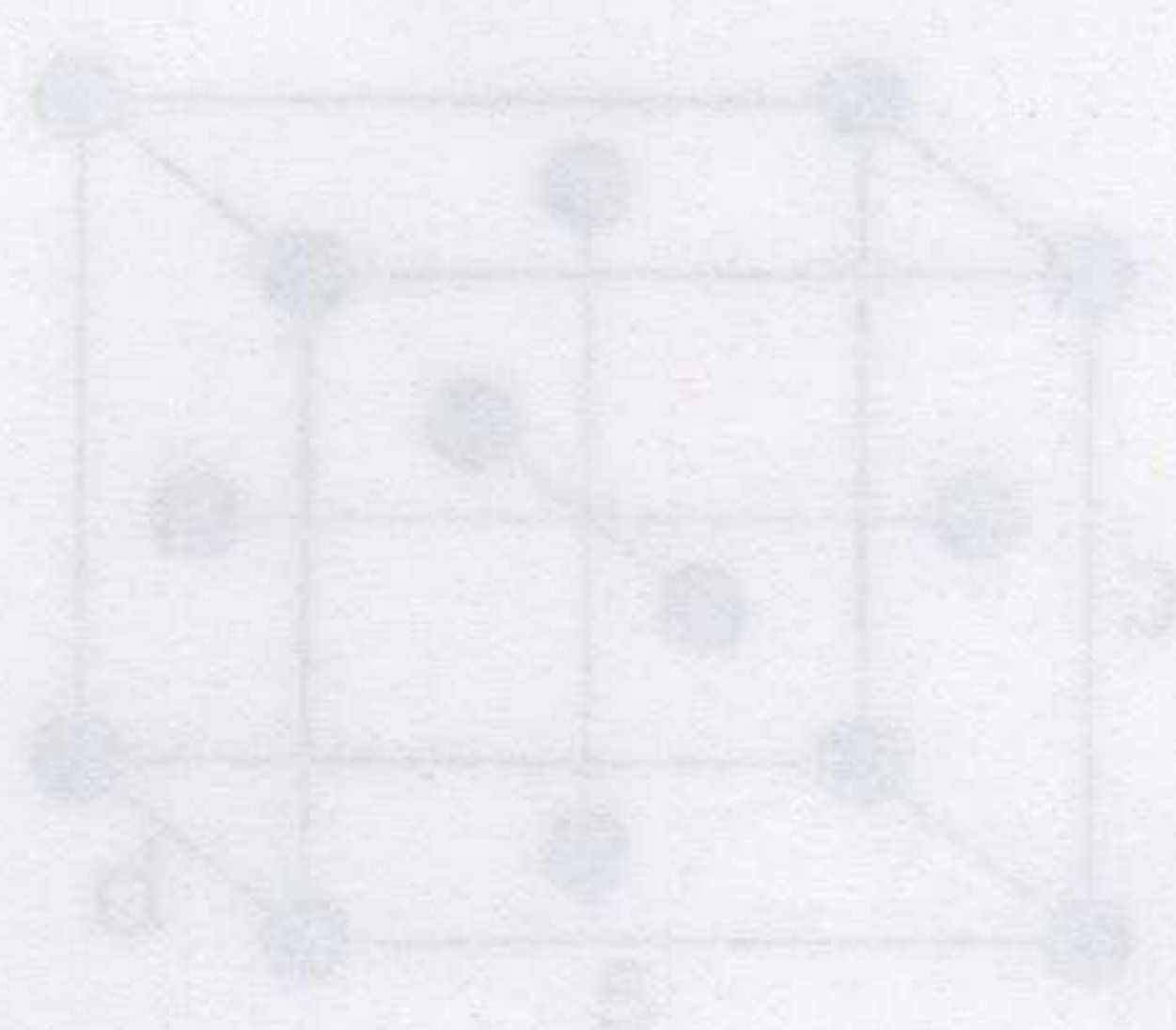
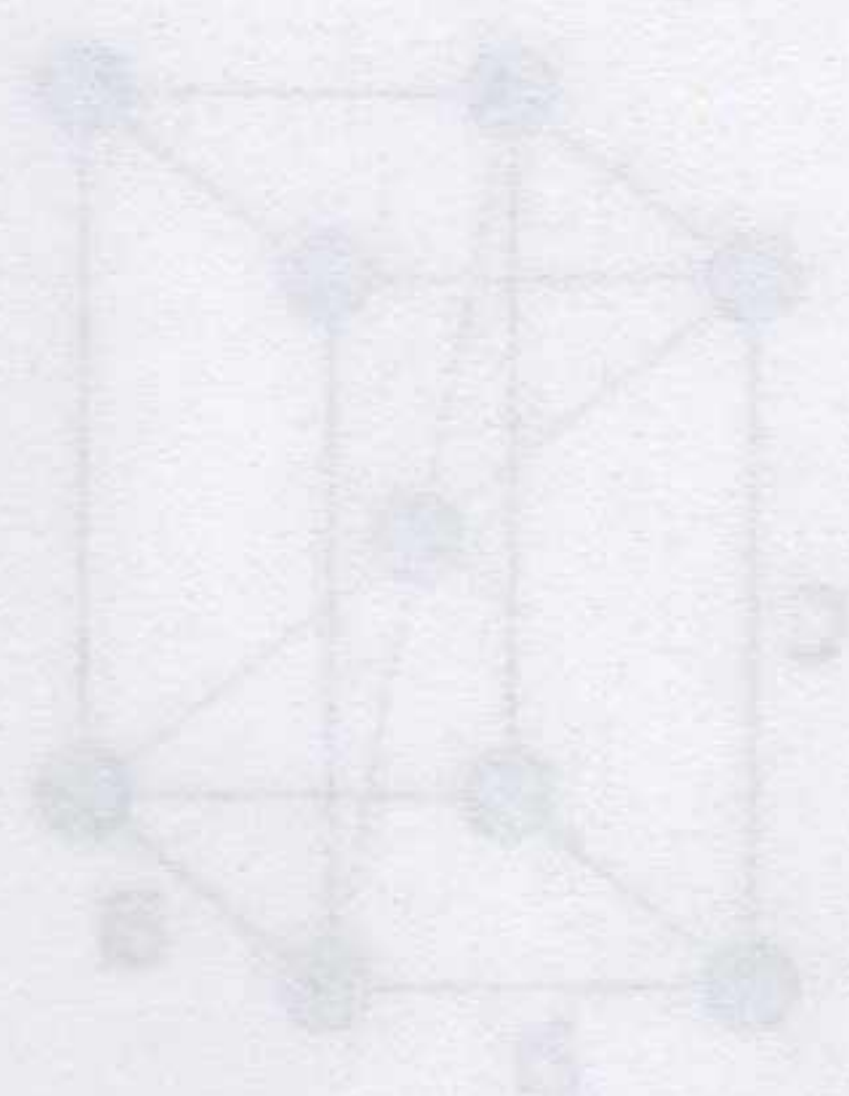
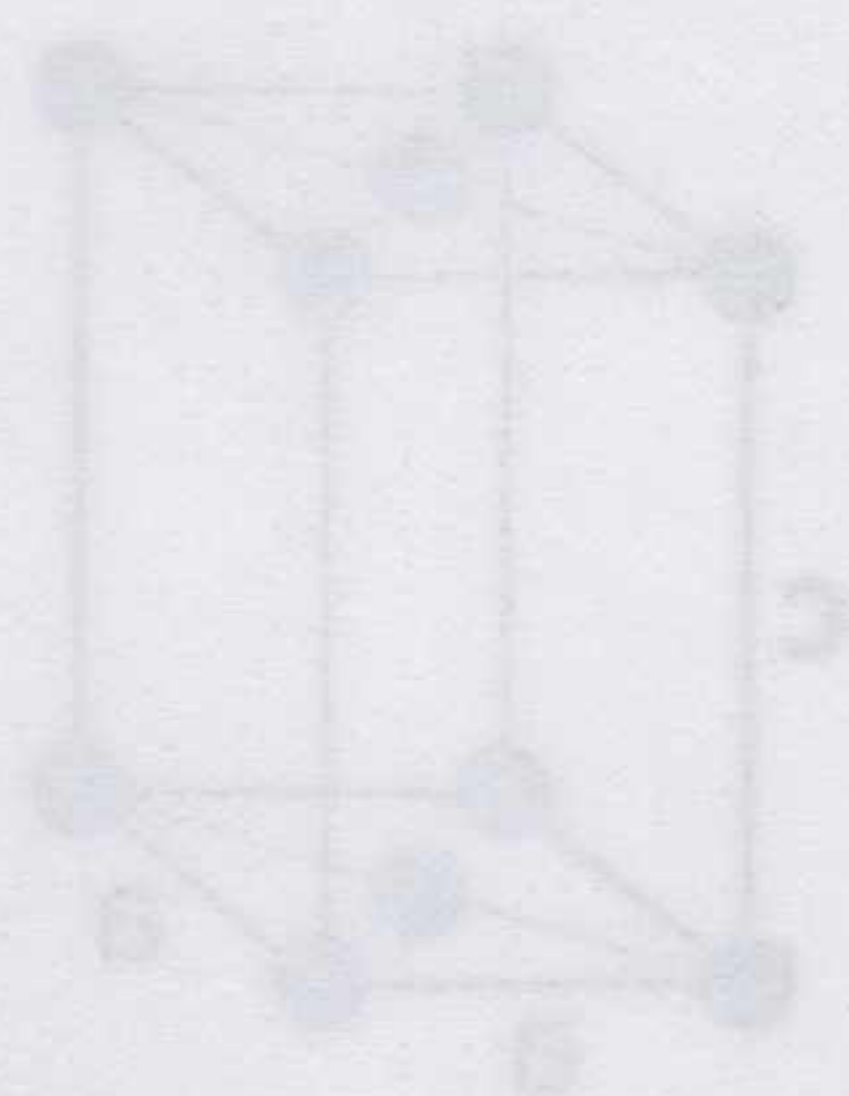
NaCl kristallisiert in einem fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis.

- (a) Geben Sie die Koordinaten der acht Atome der konventionellen Einheitszelle an.
- (b) Berechnen Sie den Strukturfaktor  $S_{hkl}$  für die NaCl-Struktur. Unterscheiden Sie die Fälle (i)  $h, k, l$  gerade, (ii)  $h, k, l$  ungerade, (iii) sonst.

Hinweis:

$$S_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{G}) \exp \{ -2\pi i (hu_{\alpha} + kv_{\alpha} + lw_{\alpha}) \}. \quad (1)$$

- (c) Zeigen Sie durch Rechnung, dass die Intensität des Braggreflexes (210) verschwindet. ?
- (d) Betrachten Sie den Strukturfaktor  $S_{hkl}^{sc}$  eines kubisch-primitiven Kristallgitters. Gibt es Bedingungen unter denen es zur Auslöschung von Streureflexen kommen kann? Begründen Sie ihre Antwort. ?





### 3 Reziprokes Gitter und Strukturbestimmung (9 Punkte)

- (a) Eine hexagonal-primitive Kristallstruktur liege mit ihrer hexagonalen Ebene in der x-y Ebene eines kartesischen Koordinatensystems (Abbildung 3.1). Die primitiven Einheitsvektoren sind  $(a, 0, 0)$ ,  $(a/2, \sqrt{3}a/2, 0)$  und  $(0, 0, c)$ . Berechnen Sie die Einheitsvektoren des reziproken Gitters.
- (b) Welche Struktur hat dieses reziproke Gitter?

Die Achsenlängen  $a$  und  $c$  lassen sich zum Beispiel mittels Röntgendiffraktion bestimmen:

- (c) Beschreiben Sie kurz die Pulvermethode (Debye-Scherrer-Verfahren) zur Strukturbestimmung.
- (d) Der Streuwinkel  $2\vartheta$  ist definiert als der Winkel zwischen direktem und gestreutem Strahl. Bestimmen Sie den kleinstmöglichen Streuwinkel  $2\vartheta$ , unter dem für die oben genannte hexagonal-primitive Kristallstruktur ein Intensitätsmaxima auftritt? Nehmen Sie dabei an:  $c > a$ .

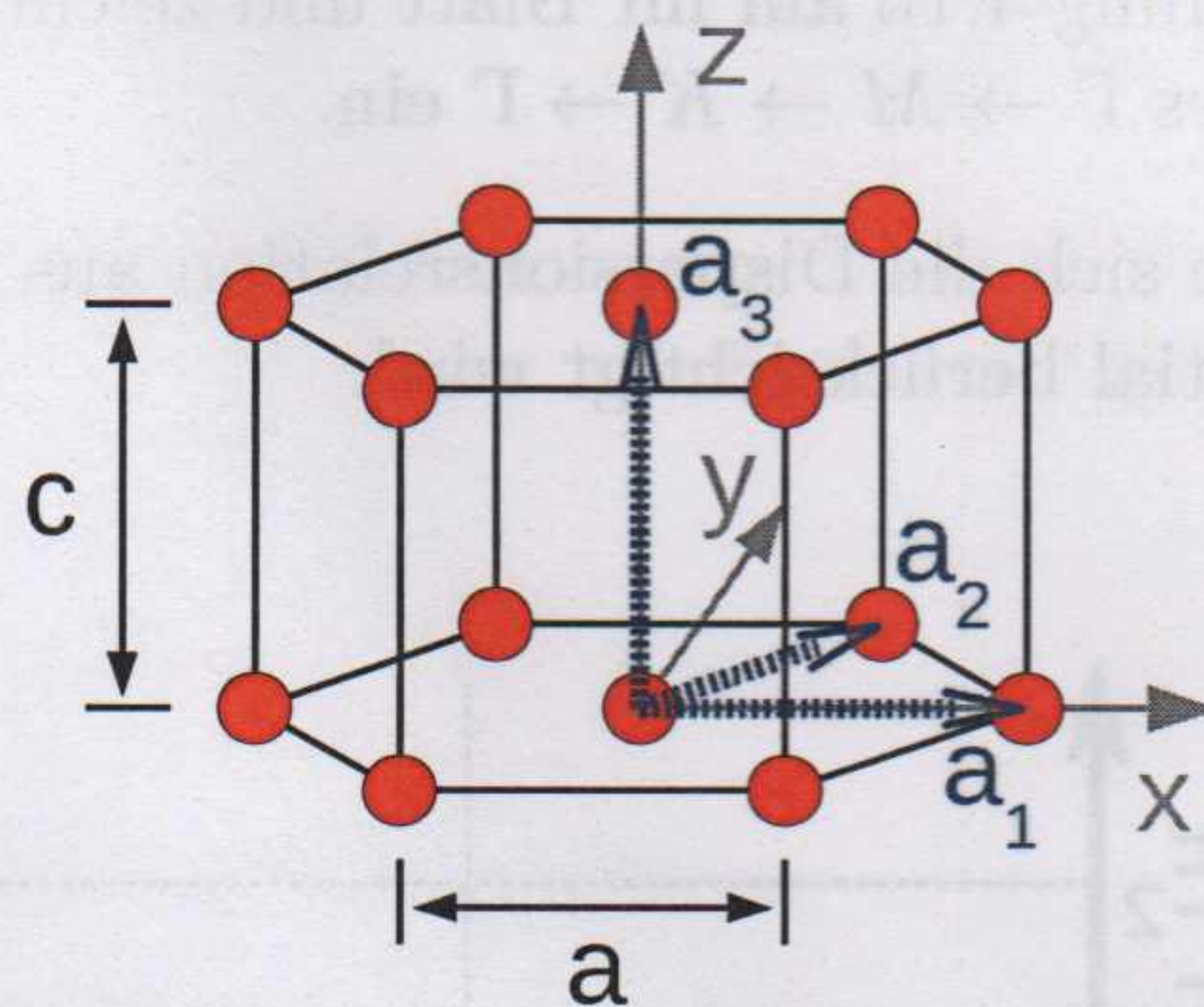


Abbildung 3.1: Hexagonale Einheitszelle



#### 4 Energie freier Elektronen im hexagonalen Gitter (7 Punkte)

Abbildung 4.1a zeigt ein zweidimensionales hexagonales Gitter mit Gitterkonstante  $a = 2 \text{ \AA}$  im reziproken Raum mit den primitiven Gittervektoren

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \hat{e}_x \quad (2)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{1}{2} \hat{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{e}_y \right) \quad (3)$$

- Zeichnen Sie für dieses Gitter die erste Brillouinzone.
- Die mit den Miller'schen Indizes bezeichneten Punkte  $\Gamma = (0, 0)$ ,  $M = (0, 1/2)$  und  $K = (1/3, 1/3)$  bezeichnen Punkte hoher Symmetrie. Zeichnen Sie diese Punkte in ihre Skizze aus (a) ein.
- Berechnen Sie die Energie eines Elektrons in der Näherung freier Elektronen an den Punkten  $\Gamma$ ,  $M$  und  $K$  in Einheiten von eV.
- Übertragen Sie Abbildung 4.1b auf ihr Blatt und zeichnen Sie die Dispersionsrelation entlang des Pfades  $\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma$  ein.
- Erklären Sie kurz, wie sich die Dispersionsrelation aus Teilaufgabe (d) verändert, wenn das Gitterpotential berücksichtigt wird.

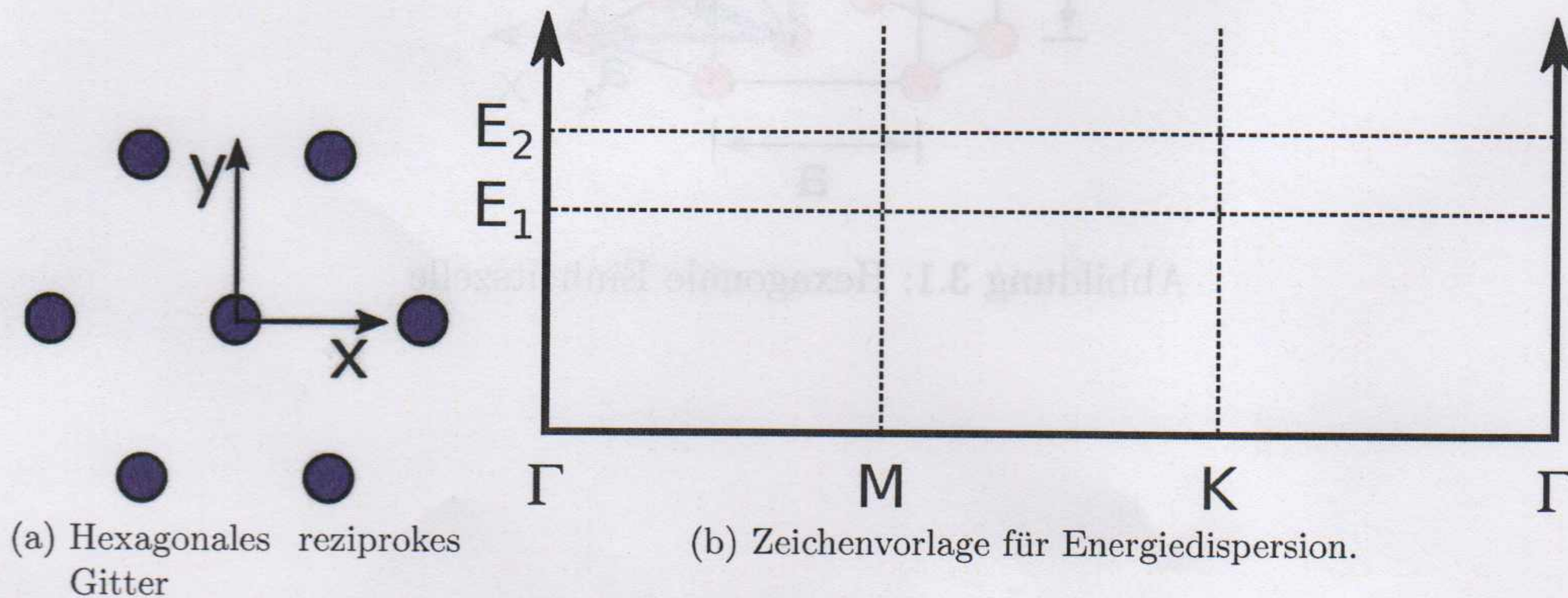


Abbildung 4.1



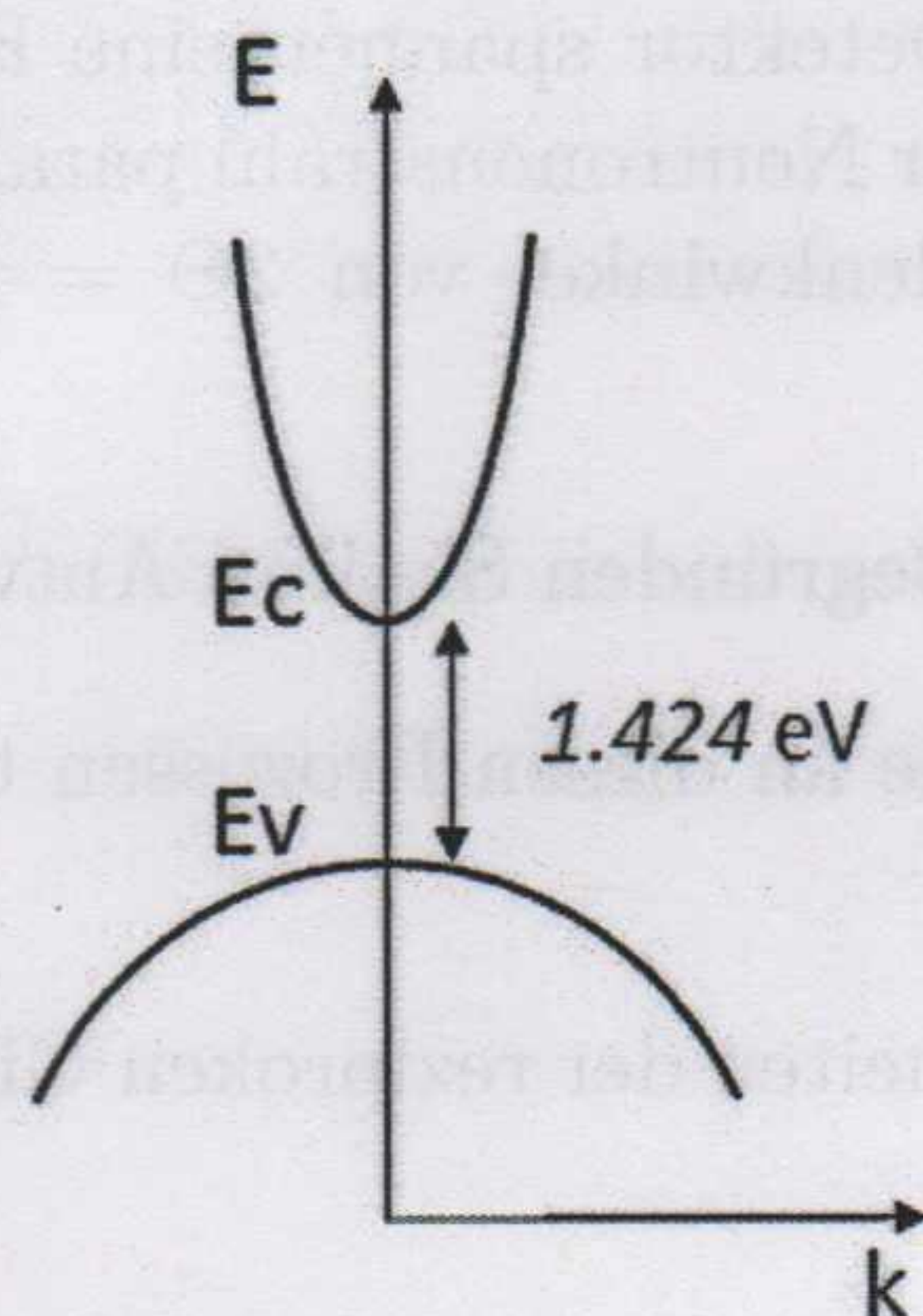
## 5 Inelastische Neutronenstreuung (9 Punkte)

Neutronen der Wellenlänge  $\lambda_0 = 1.80 \text{ \AA}$  werden an einem LiF-Kristall gestreut (fcc Gitter,  $a = 4.02 \text{ \AA}$ ). Neutronenquelle, Probe und Detektor spannen eine Ebene parallel zu den (001)-Netzebenen des Kristalls auf. Fällt der Neutronenstrahl parallel zur [100]-Richtung ein, so beobachtet man unter einem Ablenkwinkel von  $2\Theta = 30^\circ$  gestreute Neutronen der Wellenlänge  $\lambda = 1.15 \text{ \AA}$ .

- (a) Werden Phononen erzeugt oder vernichtet? Begründen Sie ihre Antwort.
- (b) Berechnen Sie die Frequenz der Phononen, die an diesen Prozessen teilnehmen.
- (c) Berechnen Sie den Streuvektor.  
(Hinweis: Drücken Sie den Streuvektor in Einheiten der reziproken Gitterkonstante aus.)
- (d) Skizzieren Sie den Streuprozess im reziproken Raum.
- (e) Geben Sie den Wellenvektor des Phonons an, welches an diesem Streuvorgang teilnimmt (in SI Einheiten).



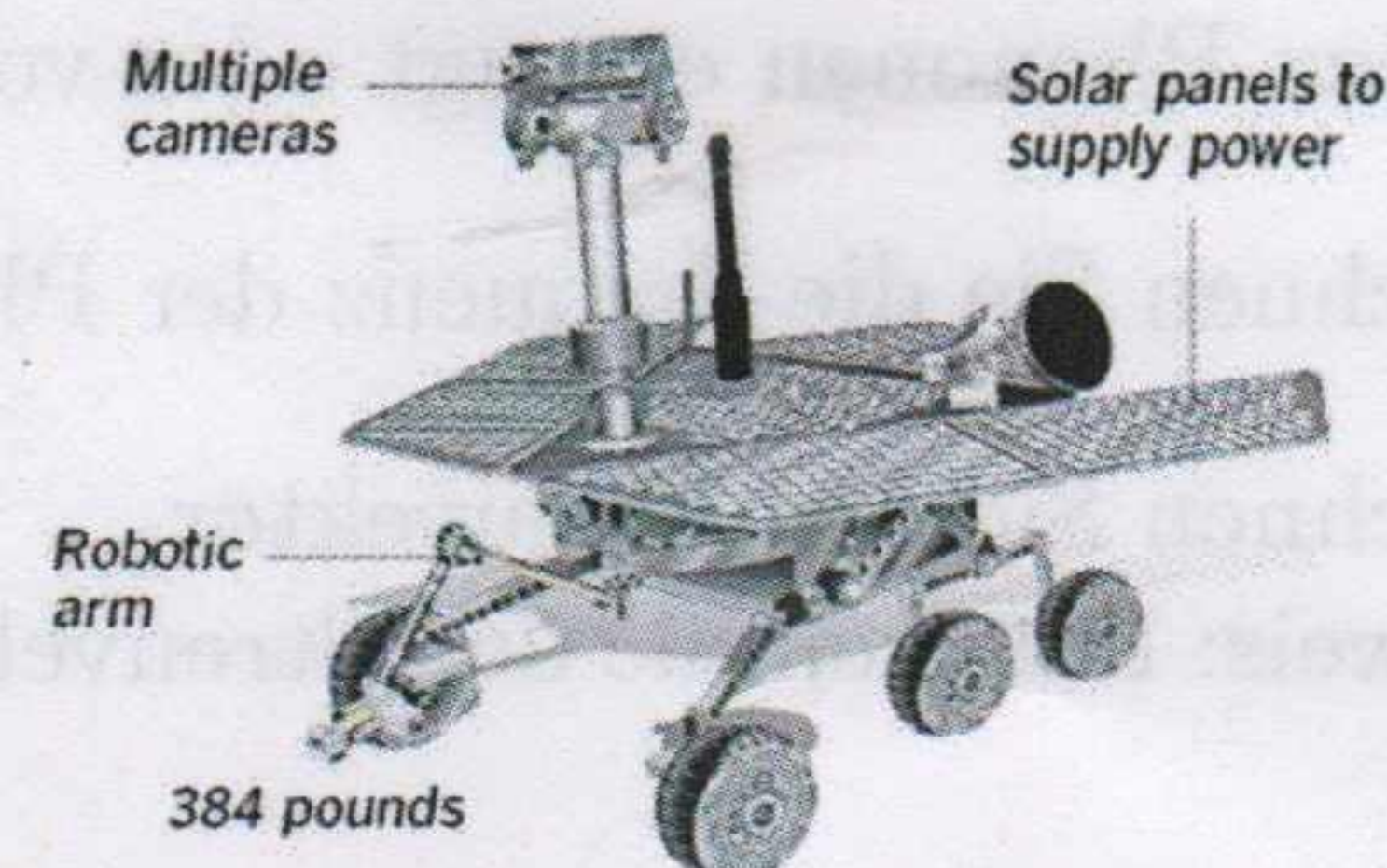
## 6 Galliumarsenid, ein Halbleiter mit direkter Bandlücke (7 Punkte)



(a) Schematische Bandstruktur von GaAs.

### Opportunity

Designed for a 90-day mission to look for evidence that water once existed on Mars. Has explored for eight years.



(b) NASA's Mars Exploration Rover.

Abbildung 6.1

Galliumarsenid (GaAs) ist ein Halbleiter mit einer Bandlücke  $E_g = 1.42 \text{ eV}$ . Die effektive Zustandsdichte des Leitungs- und Valenzbandes beträgt bei Raumtemperatur ( $T = 300 \text{ K}$ )  $N_L = 4.37 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  bzw.  $N_V = 8.68 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Die Mobilität der Ladungsträger bei Raumtemperatur beträgt  $\mu_e = 8500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  für Elektronen und  $\mu_h = 400 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  für Löcher.

- Nehmen Sie ein intrinsischen Verhalten an und berechnen Sie die Elektronendichte,  $n_i$ , und die Lochdichte,  $p_i$ . Bestimmen Sie anschließend die Leitfähigkeit  $\sigma_i$  von GaAs. (Hinweis:  $n_i = \sqrt{N_L N_V} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$ )
- Bestimmen Sie die Fermi-Energie  $E_F$  bei  $T=0$ , bezogen auf andere relevante Energien dieser Aufgabe, für den intrinsischen Fall (Teilaufgabe (a)). Wie ändert sich das chemische Potential  $\mu(T)$  (Fermi Energie für  $T \neq 0$ ) wenn die Temperatur erhöht wird?
- Nun werde der Halbleiter mit einer Dichte von  $N_D = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  Donatoren dotiert (z.B. Phosphor). Die Energie der Donatorniveaus  $E_D$  befinde sich knapp unterhalb des Leitungsbandes ( $E_d = E_L - E_D$ ). Nehmen Sie an, dass bei Raumtemperatur alle Donatoren ionisiert sind ( $E_d \ll k_B T$ ) und berechnen Sie die resultierenden Ladungsträgerkonzentrationen  $n$  und  $p$ . Gehen Sie davon aus, dass die Mobilität der Ladungsträger unverändert bleibt und bestimmen Sie die Leitfähigkeit  $\sigma$  des dotierten GaAs.
- Der Rover *Opportunity* (siehe Abb. 6.1b) erkundet seit 2004 den Mars. Warum benutzt die Nasa Solarzellen auf GaAs Basis anstelle von billigeren Silizium Solarzellen mit indirekter Bandlücke um den Rover mit Strom zu versorgen.