

Probeklausur zur Einführung in die Festkörperphysik

Prof. Christian Pfeiderer

Wintersemester 2017/2018

25. Januar 2018

Hinweise:

- Notieren Sie auf jedem beschriebenen Blatt Name und Matrikelnummer!
- Fertigen Sie Ihre Lösung ausschließlich auf den ausgeteilten DIN A4 Bögen an! Notizen auf dieser Angabe 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	$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$
red. 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	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N m}^{-2}$

1 Zweidimensionale Struktur

Abbildung 1.1 zeigt eine zweidimensionale Verbindung aus drei Elementen mit den Atomradien r_A (Atom A: Schachbrettmuster), r_B (Atom B: gefüllt) und r_C (Atom C: vertikal gestreift).

- (a) Wie viele Atome jedes Typs sind in der primitiven Einheitszelle?
- (b) Geben Sie die chemische Formeleinheit des Kristalls an.
- (c) Geben Sie die Einheitsvektoren einer primitiven Einheitszelle an.
- (d) Geben Sie die Vektoren für die B-Atome dieser Einheitszelle an.
- (e) Welche geometrische Form hat die Wigner-Seitz-Zelle?
- (f) Wie viele akustische und wie viele optische Phononenzweige gibt es?

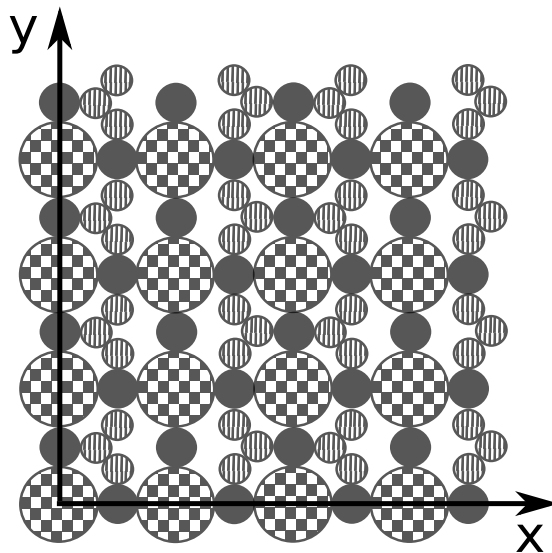


Figure 1.1: Zweidimensionale Struktur

Lösung:

- (a) 2 x A-Atome, 4 x B-Atome und 6 x C-Atome
- (b) AB_2C_3
- (c) $(4 \cdot r_A + 4 \cdot r_B, 0)$
 $(0, 2 \cdot r_A + 2 \cdot r_B)$

- (d) $(r_A + r_B, 0)$
 $(3 \cdot r_A + 3 \cdot r_B, 0)$
 $(0, r_A + r_B)$
 $(2 \cdot r_A + 2 \cdot r_B, r_A + r_B)$

(e) Rechteck

(f) $2N - 2$ optische Phononen und 2 akustische Phononen, bei 12 Atome in de Basis ergibt das 22 optische Phononen.

2 Zinkblende-Struktur

Die meisten Halbleiter in optoelektronischen Anwendungen besitzen die Zinkblende-Struktur (ZnS). Diese besteht aus einer zweiatomigen Basis, angeordnet in einem fcc Gitter mit einem Atom am Ursprung und dem Zweiten bei $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Bei GaAs, dem wichtigsten Vertreter der III-V Halbleiter, beträgt die Gitterkonstante $a = 5.56 \text{ \AA}$.

- (a) Was ist der kleinste Abstand zweier Ga Atome und zwischen einem Ga und As Atom?
- (b) Die Ebenen, die senkrecht auf der dreizähligen Rotationsachse stehen, bestehen entweder aus Ga oder As. Wie groß ist der Abstand benachbarter Ebenen?
- (c) Berechnen Sie die Dichte von GaAs (in SI Einheiten). Benutzen dazu die Atommassen aus dem Periodensystem ($m_{\text{Ga}} = 69.72 u$, $m_{\text{As}} = 74.92 u$).
- (d) Bestimmen Sie den Strukturfaktor für GaAs.

Lösung:

- (a) Da wir ein Ga Atom am Ursprung gelegt haben, sind alle weiteren Ga Atome in der konventionellen Einheitszelle am Gitterpunkte. Der kleinste Abstand ist dann gegeben durch die Länge des Vektors, der zwei benachbarte Gitterpunkte verbindet.

$$d_{\min} = |(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)a - (0, 0, 0)a| \quad (1)$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2}}a \quad (2)$$

$$= 3.93 \text{ \AA} \quad (3)$$

Der Abstand zwischen ein Ga Atom und ein As Atom ist dementsprechend gegeben durch:

$$d_{\text{GaAs}} = |(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})a - (0, 0, 0)a| \quad (4)$$

$$= \sqrt{\frac{3}{16}}a \quad (5)$$

$$= 2.41 \text{ \AA} \quad (6)$$

- (b) Die dreizähligen Rotationsachsen verlaufen entlang der $\langle 111 \rangle$ Achsen. Das ist die selbe Richtung der Verschiebung von As bezüglich Ga, daraus folgt, dass der Abstand dieser Ebenen ist der selbe wie den kleinsten Abstand zwischen Ga und As Atome.
- (c) Zuerst bestimmen wir das Volumen von der Einheitszelle:

$$V = a^3 \quad (7)$$

$$= 171.88 \text{ \AA}^3 \quad (8)$$

Die Einheitszelle beinhaltet 4 Gitterpunkte. Daraus folgt:

$$\rho = \frac{4 \cdot (m_{\text{Ga}} + m_{\text{As}})}{V} \quad (9)$$

$$= \frac{578.56 \text{ u}}{171.88 \text{ \AA}^3} \quad (10)$$

$$= 3.37 \text{ u\AA}^{-3} = 5.59 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3} \quad (11)$$

- (d) Der Strukturfaktor S_{hkl} der konventionellen Einheitszelle bestimmt welche Reflexe erlaubt sind. Stellt man die Positionen der Atome innerhalb der Einheitszelle \vec{r}_α über die Einheitsvektoren \vec{a}_i dar

$$\vec{r}_\alpha = u_\alpha \vec{a}_1 + v_\alpha \vec{a}_2 + w_\alpha \vec{a}_3, \quad (12)$$

so erhält man für S_{hkl} :

$$S_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \left(\vec{G} \right) \exp \{ -2\pi i (hu_{\alpha} + kv_{\alpha} + lw_{\alpha}) \}. \quad (13)$$

Beim GaAs befinden sich 8 Atome in der sc-Elementarzelle:

Ga: $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

As: $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$

Einsetzen in den Strukturfaktor liefert in diesem Fall:

$$S_{hkl} = f_{\text{Ga}} \left[1 + e^{\{-i\pi(h+k)\}} + e^{\{-i\pi(h+l)\}} + e^{\{-i\pi(k+l)\}} \right] \\ + f_{\text{As}} e^{\{\frac{-i\pi}{2}(h+k+l)\}} \left[1 + e^{\{-i\pi(h+k)\}} + e^{\{-i\pi(h+l)\}} + e^{\{-i\pi(k+l)\}} \right] \quad (14)$$

$$= \left[f_{\text{Ga}} + f_{\text{As}} e^{\{\frac{-i\pi}{2}(h+k+l)\}} \right] \left[1 + e^{\{-i\pi(h+k)\}} + e^{\{-i\pi(h+l)\}} + e^{\{-i\pi(k+l)\}} \right] \quad (15)$$

Bei der zweiten Zeile nutzen wir die Tatsache, dass alle As Atome beschrieben werden, durch eine konstante Verschiebung von den Positionen der Ga Atome. Wir können zwischen folgenden Fällen unterscheiden.

$$S_{hkl} = \begin{cases} 4(f_{\text{Ga}} + f_{\text{As}}) & h, k, l \text{ gerade} \quad \& \quad h + k + l = 4n \\ 4(f_{\text{Ga}} - f_{\text{As}}) & h, k, l \text{ gerade} \\ 4(f_{\text{Ga}} \pm i f_{\text{As}}) & h, k, l \text{ ungerade} \end{cases} \quad (16)$$

3 Fermi-Energie von Lithium und Kupfer

- (a) Bestimmen Sie unter der Annahme wechselwirkungsfreier Elektronen die Fermi-Energie E_F in eV, die Fermi-Temperatur T_F und den Fermi-Wellenvektor k_F für:
- Lithium (bcc-Struktur; $a = 3.2 \text{ \AA}$; ein Leitungselektron pro Atom)
 - Kupfer (fcc-Struktur; $a = 3.6 \text{ \AA}$; vier Leitungselektronen pro Atom).
- (b) Erklären Sie kurz, warum die gemessene Fermi-Energie von Lithium mit dem berechneten Wert gut übereinstimmt während die gemessene Fermi-Energie von Kupfer vom berechneten Wert stark abweicht.

Lösung:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad \text{mit} \quad n = \frac{N}{V} = \frac{w \cdot p}{a^3} \quad (17)$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (18)$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \quad (19)$$

Die Elektronendichte n kann aus der Anzahl der Elektronen N pro Volumen V bestimmt werden. Die Anzahl der Elektronen pro Einheitszellenvolumen a^3 ergibt sich gerade als Produkt der Anzahl der Leitungselektronen pro Atom w und der Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitszelle p , so dass $n = (w \cdot p)/a^3$ gilt.

Lithium

Lithium kristallisiert in der bcc-Struktur mit folgenden Eigenschaften:

$$a = 3.2 \text{ \AA}, \quad w = 1, \quad p = 2 \quad (20)$$

$$n = 6.1 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \quad (21)$$

Daraus ergeben sich folgende Werte:

$$E_F = 5.7 \text{ eV} \quad (22)$$

$$k_F = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \quad (23)$$

$$T_F = 65.7 \times 10^3 \text{ K} \quad (24)$$

Kupfer

Kupfer kristallisiert in der fcc-Struktur mit folgenden Eigenschaften:

$$a = 3.6 \text{ \AA}, \quad w = 4, \quad p = 4 \quad (25)$$

$$n = 3.4 \times 10^{29} \text{ m}^{-3} \quad (26)$$

Daraus ergeben sich folgende Werte:

$$E_F = 17.9 \text{ eV} \quad (27)$$

$$k_F = 2.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \quad (28)$$

$$T_F = 207.6 \times 10^3 \text{ K} \quad (29)$$

Lithium ist ein Alkalimetall mit einem Leitungselektron mit s-Charakter an der Fermikante. Dieses verhält sich in guter Näherung wie ein freies Elektron. Daraus resultiert eine gute Übereinstimmung des Messwert der Fermi-Energie von Lithium mit dem berechneten Wert.

Im Gegensatz zu Lithium besitzt Kupfer d-artige Elektronen an der Fermikante, für die die Näherung freier Elektronen nicht mehr zutrifft. Für Kupfer liefert die einfache Abschätzung der Fermi-Energie mittels freier Elektronen daher nur eine schlechte Übereinstimmung mit der Messung.

4 Bindungsenergie im Neon-Kristall

- (a) Nennen Sie vier Bindungstypen in Festkörpern und geben Sie jeweils ein Beispiel an, in dem dieser Bindungstyp dominant ist.
- (b) Skizzieren Sie die fcc-Struktur.
- (c) Wieviele nächste Nachbarn besitzt in der fcc-Struktur jedes Atom?
- (d) Das Edelgas Neon kristallisiert in der fcc-Struktur. Die Bindungsenergie des Kristalls wurde zu $U_B = -1.88 \text{ kJ mol}^{-1}$ gemessen und die Gitterkonstante beträgt $a = 4.466 \text{ \AA}$. Die Wechselwirkung der Atome untereinander kann über das Lennard-Jones-Potential beschrieben werden:

$$U_{\text{Pot}}(r) = -4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right] \quad (30)$$

Berechnen Sie die Parameter σ und ϵ . Gehen Sie von der Annahme aus, dass die Wechselwirkung nur zwischen nächsten Nachbarn auftritt.

Lösung:

- (a) Weitere Bindungstypen (je Typ und Beispiel):

Bindungstyp	Bespiel
Ionenbindung	NaCl
Kovalente Bindung	Diamant
Metallische Bindung	Natrium
Wasserstoffbrückenbindung	Wasser

Table 1: Bindungstypen.

- (b) Siehe Abbildung ??.
- (c) In der fcc Struktur gibt es 12 nächste Nachbarn.
- (d) Zunächst bestimmt man den Gleichgewichtsabstand aus dem Lennard-Jones-Potential. Im Gleichgewicht gilt:

$$\frac{dU_{\text{Pot}}}{dr} = -4\epsilon \left[-6 \frac{\sigma^6}{r^7} + 12 \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} \right] = 0 \quad (31)$$

Die lässt sich umstellen zu:

$$\sigma = \frac{r_0}{\sqrt[6]{2}} = \frac{a}{\sqrt{2}\sqrt[6]{2}} = 2^{-\frac{2}{3}}a = \underline{\underline{2.813 \text{ \AA}}} \quad (32)$$

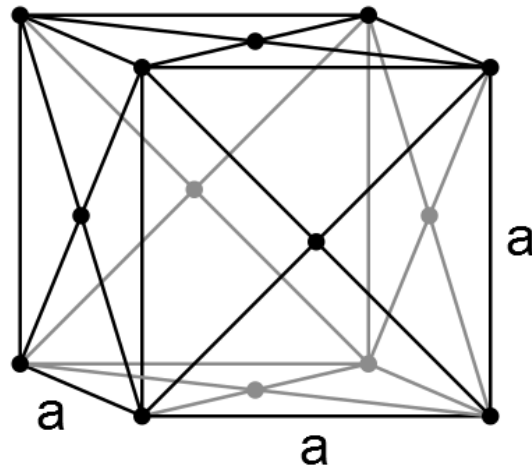


Figure 4.1: fcc-Struktur

wobei r_0 der Gleichgewichtsabstand nächster Nachbarn in der fcc Struktur ist. Für die Berechnung der Bindungsenergie des Kristalls muss man die potentielle Energie aller Atome im Kristall summieren. Dabei ist zu beachten, dass ein Atom mit 12 nächsten Nachbarn in Wechselwirkung tritt.

$$U = -12 \cdot \frac{1}{2} \cdot N_A \left\{ 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^{12} \right] \right\} \quad (33)$$

Der Faktor $1/2$ vermeidet doppelte Summation über die selbe Bindung. Durch Einsetzen von σ erhält man:

$$U = -6N_A \left\{ 4\epsilon \left[\left(\frac{1}{2} \right) - \left(\frac{1}{4} \right) \right] \right\} = -6N_A\epsilon \quad (34)$$

und damit das Endergebnis:

$$\epsilon = -\frac{U}{6N_A} = \frac{0.31 \text{ kJ mol}^{-1}}{N_A} = \underline{\underline{3 \text{ meV}}} \quad (35)$$

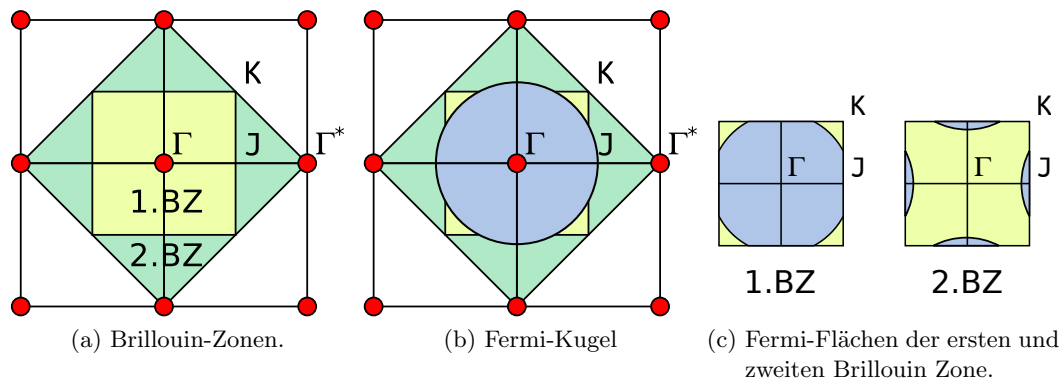


Figure 5.1: Brillouin Zonen und Fermiflächen.

5 Brillouin-Zone

Betrachten sie ein zweidimensionales quadratisches Gitter mit Gitterkonstante $a = 2 \text{ \AA}$ und einatomiger Basis.

- Skizzieren Sie die erste und zweite Brillouin-Zone, indem Sie die entsprechenden Flächen im reziproken Gitter schraffieren.
- Nehmen Sie an, jedes Atom trage zwei Leitungselektronen zum Elektronengas bei. Berechnen Sie den Fermi-Wellenvektor k_F in Einheiten π/a und die Fermi-Energie in Einheiten von $E_0 = \hbar^2/(8m_0a^2)$ des zweidimensionalen Gases.
- Tragen Sie die Fermi-Fläche in die Brillouin-Zonen aus Teilaufgabe (a) ein.
- Zeichnen Sie die Fermi-Fläche in der ersten und zweiten Brillouin-Zone im reduzierten Zonenschema.
- Handelt es sich bei diesem Elektronengas um ein Metall oder einen Isolator?

Lösung:

(a) Brillouin Zonen

Die Brillouin Zone ist die Wigner-Seitz Zelle des reziproken Gitters. Sie ist in Abbildung ?? gezeigt.

(b) Fermi-Wellenvektor

Der Fermiwellenvektor lässt sich wie folgt berechnen

$$k_F = \sqrt{2\pi n} = \sqrt{2\pi \cdot 2/a^2} = \frac{2}{a} \sqrt{\pi} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\pi}{a} \simeq \frac{1.13\pi}{a} \quad (36)$$

mit $n = 2/a^2$. Für die Fermi-Energie folgt

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{4}{\pi} E_0 \simeq 1.27 E_0 \quad (37)$$

(c) Fermi-Fläche und Fermi-Energie

Die Fermikugel ist in Abb. ?? gezeigt.

(d) Fermi-Oberfläche der 1. und 2. Brillouin-Zone

Die Fermi-Flächen sind in Abb. ?? gezeigt. Der Teil der Fermi Kugel, der über die 1. Brillouin-Zone hinausragt, wird mittels eines reziproken Gittervektor in die erste Brillouin-Zone zurück geschoben.

(e) Elektrische Eigenschaften

Es handelt sich um ein Metall. Zum einen gibt es ohne Wechselwirkung keine Bandlücken was einen isolierenden Zustand unmöglich macht. Zum anderen schneidet die Fermi-Fläche die Energiebänder.

6 Drei-Achsen-Spektrometer (8 Punkte)

- Zeichnen Sie schematisch den Aufbau eines Drei-Achsen-Spektrometers und beschriften Sie die wichtigsten Komponenten. Kennzeichnen Sie in Ihrer Skizze den Streuwinkel 2θ . (3 Punkte)
- Welcher Winkel muss variiert werden, um eine Messung bei konstantem Energieübertrag durchzuführen? Begründen Sie kurz Ihre Antwort. (1 Punkt)
- Neutronen der Wellenlänge $\lambda_0 = 1.15 \text{ \AA}$ 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 $\lambda = 1.8 \text{ \AA}$. Skizzieren Sie den Streuvorgang im reziproken Raum unter der Annahme $G = (\bar{1}10)$. (3 Punkte)
- Werden Phononen erzeugt oder vernichtet? (1 Punkt)

Lösung:

- Siehe Abbildung ??

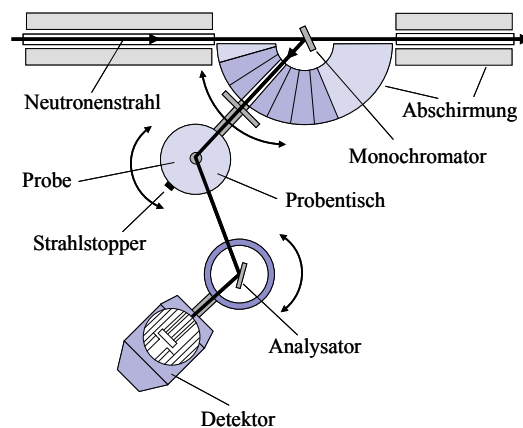


Figure 6.1: Aufbau eines Drei-Achsen-Spektrometers

- Um eine Messung bei konstantem Energieübertrag durchzuführen wird der Winkel 2θ geändert während die Winkeln am Analysator und Monochromator konstant gehalten werden.
- Siehe Abbildung ??
- Es werden Phononen erzeugt.

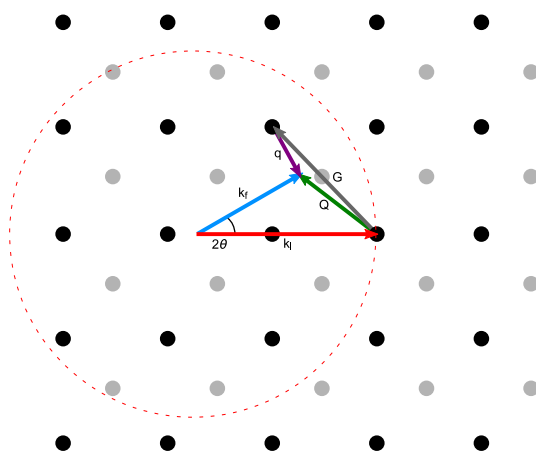


Figure 6.2: Streuvorgang im reziproken Raum