

# Klausur

Name:

Matrikel-Nr.:

Vorname:

abgegeben: Aufgabenblatt +

Blätter

## 1 Phasenübergang Eisen

Für Eisen beobachtet man unter sehr hohem Druck (Größenordnung 130 kbar) einen strukturellen Phasenübergang von der kubisch-raumzentrierten (bcc) zur hexagonal-dichtesten (hcp) Packung.

- Schätzen Sie die relative Volumenänderung ab unter der Annahme, dass die Atome als harte Kugeln beschrieben werden können, deren Radius und Dichte sich am Phasenübergang nicht ändern.
- Warum ist (auch ohne Kenntnis der Hochdruck-Struktur) das Auftreten des kubisch-primitiven (sc) Gitters bei sehr hohem Druck unwahrscheinlich?

Bitte in beiden Aufgabenteilen a) und b) Rechnungen nachvollziehbar ausführen.

## 2 Strukturfaktor von Caesiumchlorid (CsCl)

- Berechnen Sie den Strukturfaktor  $S_{hkl}$  für die Caesiumchloridstruktur (CsCl).  $\text{Cs}^+$  und  $\text{Cl}^-$  haben unterschiedliche Atomformfaktoren  $f_1$  bzw.  $f_2$ .
- Wie kann man – ausgehend vom Ergebnis für die CsCl-Struktur – den Strukturfaktor für die einatomige bcc-Struktur ableiten (bezogen auf die kubische Einheitszelle)? Wie sieht dieser aus?
- Für welche Tripel  $h, k, l$  treten in der bcc-Struktur Beugungsreflexe auf bzw. welche Tripel  $h, k, l$  führen zur Auslöschung von Beugungsreflexen?

Hinweis: CsCl ist einfach kubisch, die Einheitszelle hat 2 Basisatome bei  $(u_\alpha, v_\alpha, w_\alpha) = (0, 0, 0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .

## 3 Punktdefekte

Die Konzentration der Punktdefekte in einem Kristall können wir aus statistischen Überlegungen herleiten. Zur Erzeugung eines Defekts müssen wir die Energie  $E$  aufwenden; die Entropie  $S$  wird dabei wegen der Verringerung der Gitterordnung größer. Wenn  $N$  Defekte bei insgesamt  $N_{\text{ges}}$  Gitterplätzen auftreten, beträgt der Entropiezuwachs gegenüber dem perfekten Kristall:

$$\Delta S = k_B \ln \frac{N_{\text{ges}}!}{(N_{\text{ges}} - N)!N!} \quad (1)$$

und die Änderung der freien Energie für  $N$  Punktdefekte ist

$$\Delta F = \Delta U - T \cdot \Delta S = N \cdot E - k_B T \ln \frac{N_{\text{ges}}!}{(N_{\text{ges}} - N)!N!} \quad (2)$$

- Formen Sie Gleichung (2) mit Hilfe der Stirling-Formel ( $\ln X! \approx X \cdot \ln X - X$  [für große  $X$ ]) so um, dass keine Fakultäten mehr auftauchen! Sowohl  $N_{\text{ges}}$  als auch  $N$  seien absolut gesehen als große Zahlen zu betrachten, so dass die Stirling-Formel in sehr guter Näherung erfüllt ist.
- Der Gleichgewichtszustand ist durch  $\left(\frac{\partial \Delta F}{\partial N}\right)_{T=\text{const.}} \stackrel{!}{=} 0$  charakterisiert. Zeigen Sie, dass daraus folgt:

$$\ln \frac{N}{N_{\text{ges}} - N} = -\frac{E}{k_B T} \quad (3)$$

- Für  $N \ll N_{\text{ges}}$  folgt aus Gleichung (3) durch Vernachlässigen von  $N$  im Nenner:

$$n = \frac{N}{N_{\text{ges}}} \approx \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \quad (4)$$

Hierbei ist  $n$  die Punktdefektkonzentration im Kristall, also wieviele Punktdefekte pro Gitterplatz bei einer bestimmten Temperatur existieren. Wie groß ist  $n$  bei  $20^\circ\text{C}$  und bei einer angenommenen Bildungsenergie für einen Defekt von  $E = 1 \text{ eV}$ ? Benutzen Sie  $k_B = 8,617 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$ .

#### 4 Verschiebung der Fermi-Kugel

Längs eines kristallinen Kupferstabes werde zur Zeit  $t = 0$  ein zeitlich konstantes elektrisches Feld der Stärke  $E = 1000 \text{ V/m}$  angelegt. Infolge der Stöße zwischen Elektronen mit Verunreinigungen, Gitterfehlern oder Phononen kann die Verschiebung  $\Delta k$  der Fermi-Kugel nach endlicher Zeit  $t = \tau$  als stationärer Zustand aufrecht erhalten werden, wobei  $\tau$  ein Maß für die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen sei.

- Wie groß ist die Verschiebung  $\Delta k$  der Fermi-Kugel? Leiten Sie einen Ausdruck als Funktion der elektrischen Feldstärke  $E$  und der elektrischen Leitfähigkeit  $\sigma$  her! Berechnen Sie  $\Delta k$ , inklusive Einheitenbetrachtung! Benutzen Sie dazu die Werte:  $\sigma_{\text{Cu}} = 5,8 \cdot 10^7 \text{ A/(V m)}$ ,  $n_{\text{Cu}} = 8,5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ ,  $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ,  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ A s}$ .
- Bestimmen Sie für ein kubisch flächenzentriertes (fcc) Gitter die maximale Ausdehnung  $k_{\text{max}}$  eines Wellenvektors entlang der Raumdiagonale der 1. Brillouin-Zone (BZ), siehe Abbildung 1!
- Kupfer besitzt ein fcc-Gitter mit der Gitterkonstante  $a \approx 0,36 \text{ nm}$ . Vergleichen Sie  $\Delta k$  mit  $k_{\text{max}}$  aus Aufgabenteil b) größenordnungsmäßig für Kupfer! Ist es wahrscheinlich, dass die Elektronen bei solchen  $E$ -Feldern den Rand der 1. BZ erreichen und Bloch-Oszillationen ausführen können?

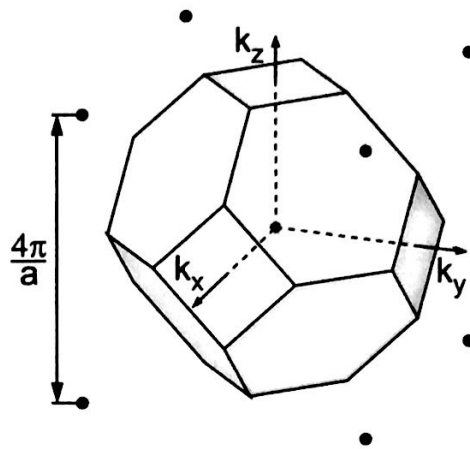


Abbildung 1: Reziprokes Gitter und 1. Brillouin-Zone des fcc-Gitters.

#### 5 Tight-Binding-Modell bcc

Die Bandstruktur des vereinfachten *tight-binding*-Modells hat die Form

$$E(\vec{k}) = E_0 - t \sum_j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \quad (5)$$

wobei die Summe über alle solchen Vektoren  $\vec{r}_j$  des Bravais-Gitters läuft, die das Atom im Ursprung mit den jeweiligen nächsten Nachbarn verbinden. Die Größe  $t$  ist das für alle nächsten Nachbarn als gleich angenommene Überlappungsintegral.

Berechnen Sie  $E(\vec{k})$  für ein bcc-Gitter, ausgedrückt durch  $E_0$ ,  $t$  und  $\cos\left(\frac{k_i a}{2}\right)$ , mit  $i = x, y, z$ .

**Viel Erfolg!!!**

**Bitte beachten:** Zwischenschritte werden bepunktet, daher Lösungswege klar und ausführlich darstellen!