

Festkörperphysik, SoSe 2023**Übungsblatt 12**

Prof. Dr. Thomas Michely

Dr. Wouter Jolie (wjolie@ph2.uni-koeln.de)

II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln

Ausgabe: Mittwoch, 05.07.2023**Abgabe: Mittwoch, 12.07.2023, bis 8 Uhr über ILIAS**

Aufgabe Nr.:	1	2	3	Summe
Points:	5	3	7	15
Punkte:				

Bitte Aufgaben zusammen mit Aufgabenblatt als PDF hochladen. Namen, Matrikelnummer und Gruppennummer deutlich lesbar eintragen (sonst Punktabzug). Abgabe in Gruppen zu 2, max. 3 Personen erwünscht. Die Teammitglieder müssen in der gleichen Übungsgruppe sein.

1. [5 Punkte] Kurzfragen

Markieren Sie im folgenden die richtigen Satzenden (Mehrfachauswahl möglich).

- Ein Zonenschema
 - ist eine Darstellung der Dispersionsrelation(en) für Elektronen im periodischen Potential. ☐
 - heißt periodisches Zonenschema, wenn es die Dispersionrelationen unter voller Berücksichtigung ihrer Gitterperiodizität darstellt. ☐
 - heißt reduziertes Zonenschema, wenn es nur die Dispersion in der 1. Brillouinzone unter Verzicht auf die Darstellung der Rückfaltung darstellt. ☐
 - heißt ausgedehntes Zonenschema, wenn es die Dispersion in der 1. Brillouinzone unter Berücksichtigung der Rückfaltung darstellt. ☐
 - wird in der Praxis zur Darstellung der Bandstruktur verwendet. Dabei wird meist das reduzierte Zonenschema benutzt, aber entlang eines Pfades der die Dispersion verschiedener Hochsymmetrierichtungen darstellt. ☐
- Liegt das Fermi-Niveau
 - zwischen Valenz- und Leitungsband, so handelt es sich um ein Metall. ☐
 - so, dass nur sehr wenige Ladungsträger zur Bandfüllung fehlen oder/und nur sehr wenige Zustände im Band besetzt sind, so handelt es sich um einen Isolator. ☐
 - so, dass ein Band etwa halb besetzt ist, so spricht man von einem Halbleiter. ☐

- so, dass es ein oder mehrere Bänder schneidet, dann handelt es sich nicht um einen Isolator. \square
- genau an der Unterkante des Valenzbandes, so handelt es sich um einen Halbleiter oder einen Isolator. \square
- Bandlücken
 - entstehen an Stellen, an denen sich im Falle verschwindender Amplitude des periodischen Potentials Dispersionsrelationen schneiden würden. \square
 - entstehen an Bragg-Ebenen. \square
 - befinden sich an Orten, wo die Gruppengeschwindigkeit verschwindet. \square
 - für ein harmonisches Potential sind in ihrer Größe proportional zur Amplitude des periodischen Potentials. \square
 - sind irrelevant zur Beschreibung optischer Eigenschaften von Halbleitern. \square
- Eine Bandlücke
 - heißt indirekt, wenn diese außerhalb der 1. Brillouinzone liegt. \square
 - heißt direkt, wenn das Valenzbandmaximum und das Leitungsbandminimum beim gleichen \vec{k} -Vektor liegen. \square
 - heißt indirekt, wenn ein Photon mit einer Energie, die exakt der Bandlücke entspricht, kein Elektron-Loch Paar erzeugen kann. \square
 - heißt direkt, wenn zur Erzeugung eines Elektron-Loch Paares ein direktes Phonon benötigt wird. \square
 - muss eine direkte Bandlücke sein, wenn das Material mit dieser Bandlücke in der Optoelektronik (Lichterzeugung) verwendet werden soll. \square
- Die Näherung quasigebundener Elektronen
 - ist ein komplementärer Ansatz zur Näherung quasifreier Elektronen und liefert ebenfalls Bänder und Bandlücken. \square
 - führt zu einer Bandbreite, die direkt proportional zum Hüpfmatrixelement ist. \square
 - führt zu einer mittleren Absenkung der Energie im Vergleich zu den atomaren Niveaus, hervorgerufen durch die Wechselwirkung der Elektronen. \square
 - geht von sich nichtüberlappenden atomaren Wellenfunktionen der Atome auf den Gitterpositionen aus. \square
 - führt bei einer sehr geringen Überlappung der Wellenfunktionen zu einer geringen Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen benachbarten Gitterplätzen und damit zu einer geringen Bandbreite. \square

2. **[3 Punkte] Blochfunktion**

Beweisen Sie, dass die Wellenfunktion im LCAO Ansatz eine Blochfunktion ist.

3. **[7 Punkte] Recherche**

Suchen Sie sich im Internet berechnete oder gemessene Bandstrukturen für CaO, Si und Au heraus. Diskutieren Sie die Bandstrukturen unter folgenden Gesichtspunkten.

- (a) Anhand der Anzahl der Valenzelektronen der Elemente und der Größe der Basis können Sie angeben wieviele Bänder ganz oder teilweise besetzt werden sollten. Ist die richtige Anzahl ganz oder teilweise besetzter Bänder in den Bandstrukturen vorhanden? Falls nein, welche Ideen haben Sie dies zu erklären?
- (b) Woran erkennen Sie an der Bandstruktur ob ein Leiter, Halbleiter oder Isolator vorliegt? Geben Sie für die letzteren beiden Fälle an, ob eine direkte oder indirekte Bandlücke vorliegt und begründen Sie Ihre Wahl.
- (c) Welche dieser Materialien sind im Infrarotbereich unter 1 eV Photonenenergie und welche im optischen Bereich transparent?
- (d) Was sagt die Bandbreite der Bänder über die Stärke der Wechselwirkung der Elektronen in ihren atomaren Niveaus aus, wenn diese aus größerer Entfernung in den Gleichgewichtsabstand gebracht werden.

Erreichbare Gesamtpunktzahl: 15