

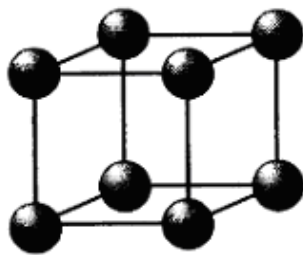
## Übungen Festkörper (WS 2018/2019) (wird im Laufe des Semesters vervollständigt)

---

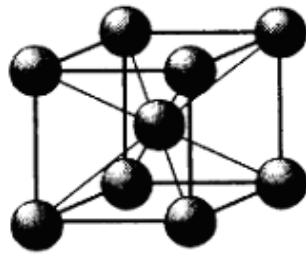
### Aufgabe 0)

(a0)

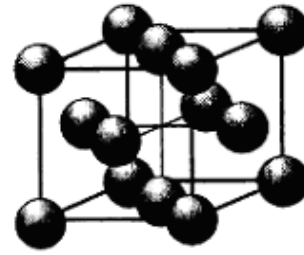
Es sollen aus folgenden Einheitszellen in allen Raumrichtungen unendlich periodisch fortgesetzte Festkörper aufgebaut werden:



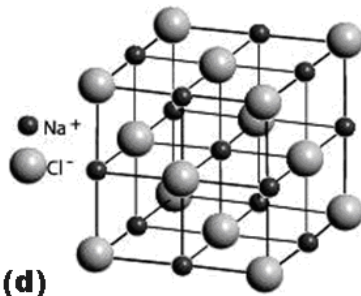
(a)



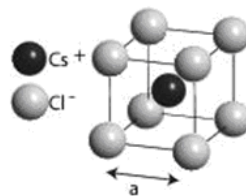
(b)



(c)



(d)



(e)

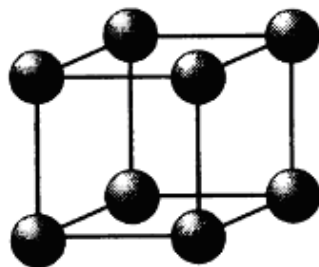
Geben sie an, wie viele Atome sich genau in einer solchen Einheitszelle befinden müssen, damit beim periodischen Fortsetzen, keine Atome doppelt gezählt werden!

---

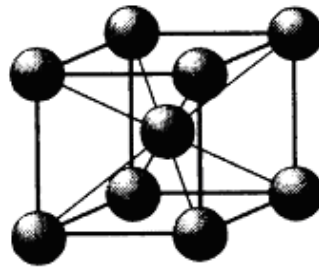
### Aufgabe 1)

(a47)

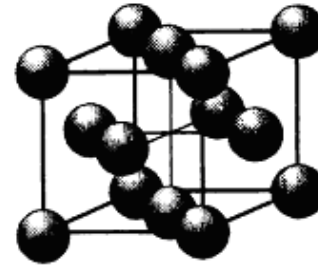
In der Abbildung sind die drei kubischen Bravais-Gitter abgebildet. Berechnen Sie die maximale Raumerfüllung, welche sich nach dem Modell harter Kugeln (die sich gerade so berühren) für diese drei Gitter ergibt.



(a)



(b)



(c)

**Abb. 1.1.** Einheitszellen des (a) primitiv kubischen, des (b) innenzentriert kubischen und des (c) flächenzentriert kubischen Gitters.

---

**Aufgabe 2)****(a75)**

Wie ist der Raumfüllungsfaktor im tetragonal-primitiven Gitter mit  $a=b=c/2$ , wenn sich benachbarte Atome, die durch Kugeln beschrieben werden, gerade berühren?

---

**Aufgabe 3)****(a33)**

Nehmen Sie an, dass identische Kugeln mit dem Radius  $R$  in einer hexagonal dichtesten Kugelpackung angeordnet sind. Welcher Teil des gesamten Volumens der Elementarzelle wird durch die Kugeln eingenommen?

---

**Aufgabe 4)****(a5)**

Geben Sie für einen unendlich ausgedehnten Eisenkristall (kubisch-raumzentriert,  $a = 2.87 \text{ \AA}$ ) die Anzahl und Abstände der nächsten bis viertnächsten Nachbarn an.

---

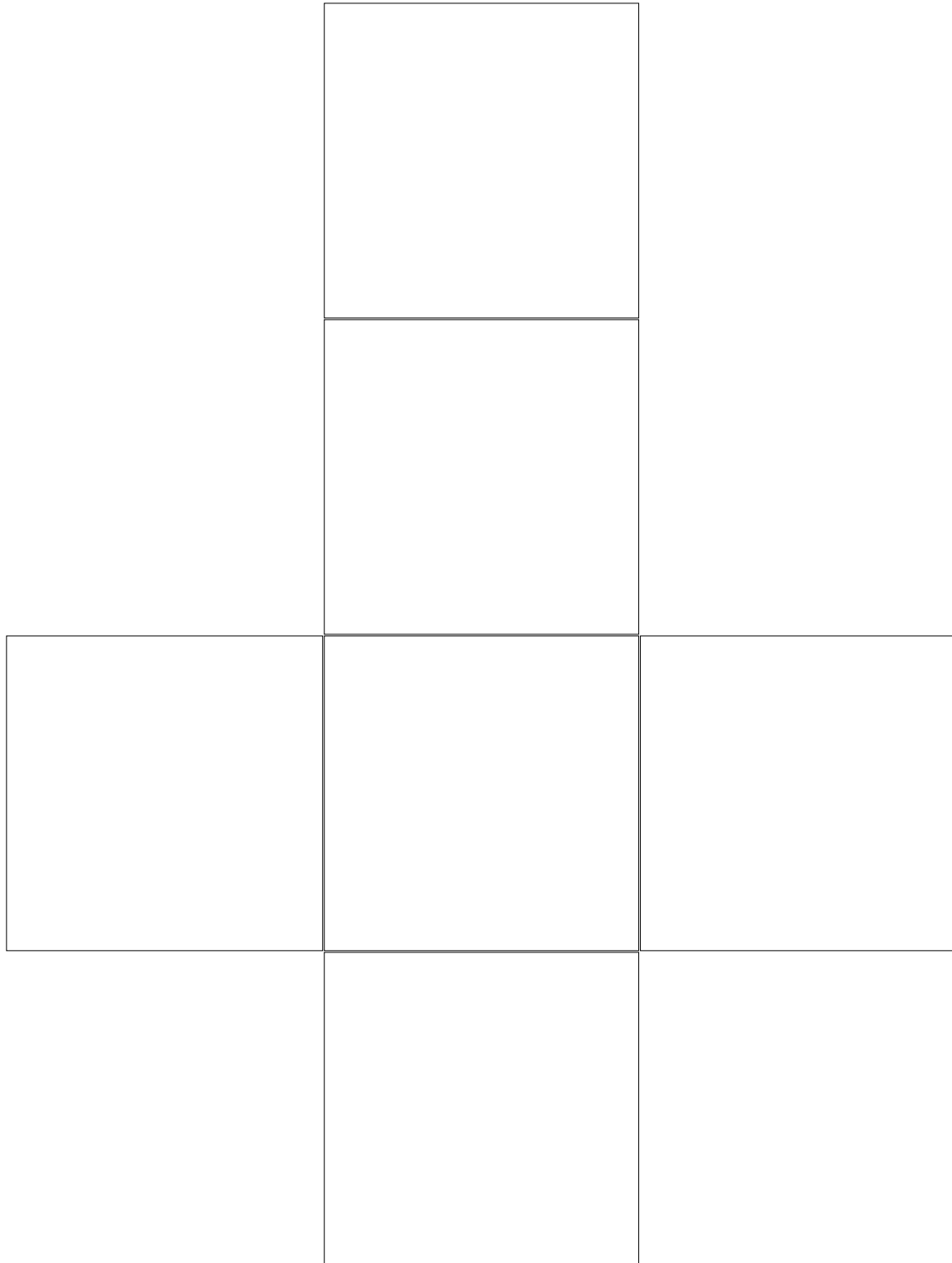
**Aufgabe 5)****(a1)**

Berechnen Sie die Gitterkonstanten der folgenden Metalle:

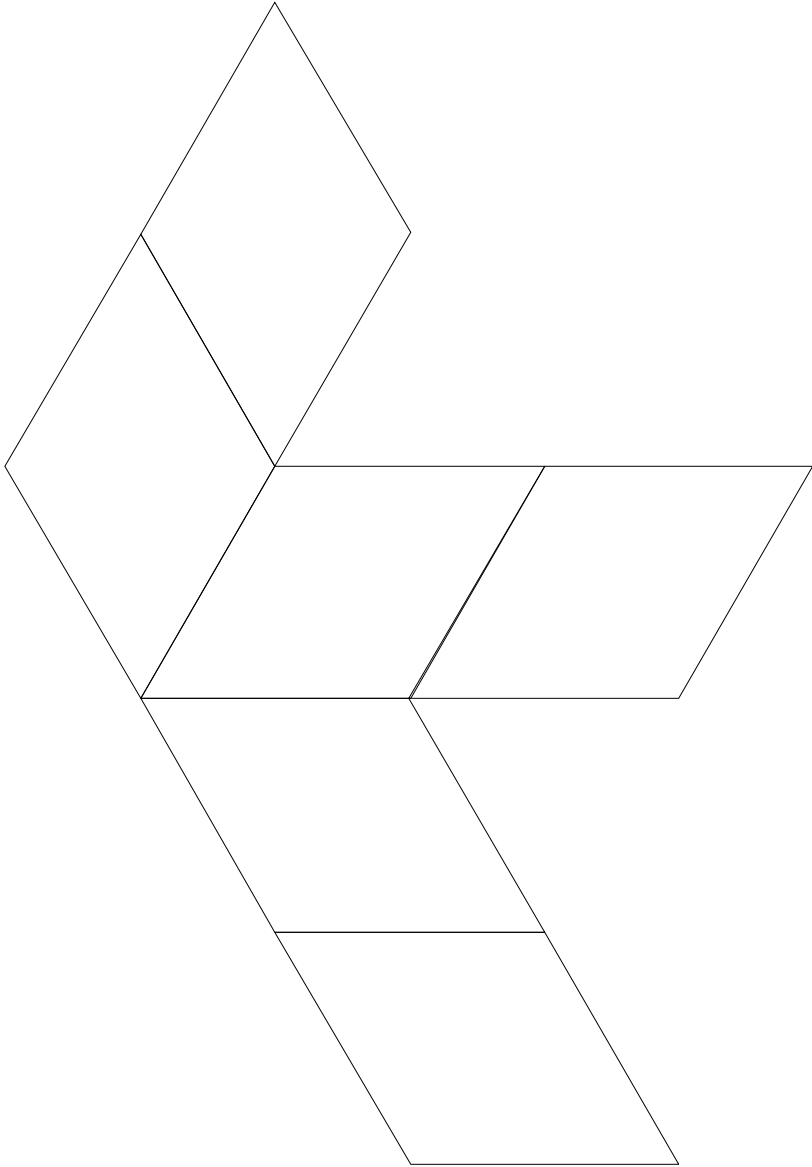
- (a) Eisen (kubisch-raumzentriert;  $7,874 \text{ g/cm}^3$ )
  - (b) Nickel (kubisch-flächenzentriert;  $8,908 \text{ g/cm}^3$ )
- ( Massszahlen: Fe = 55.85, Ni=58,71 )
-

**Hausaufgabe: Basteln sie folgende Körper: Den Würfel am besten aus transparenter Folie, wo eine Seitenfläche offen bleibt als Deckel. Den 2. Körper aus Papier oder Pappe ausschneiden und ganz zusammen kleben.**

**Würfel:**



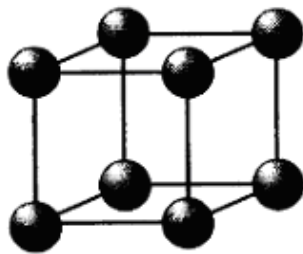
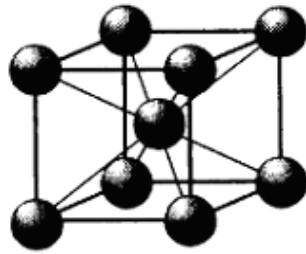
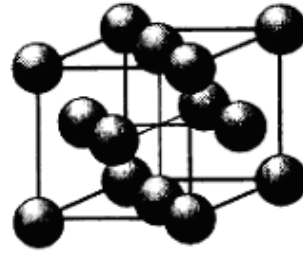
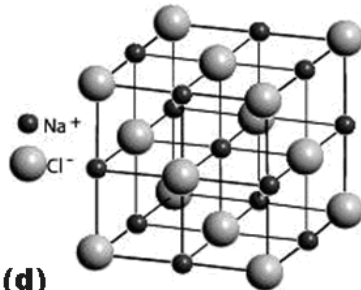
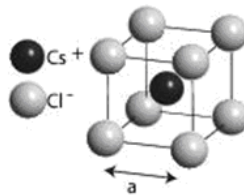
**primitive Elementarzelle des fcc- Gitters:**



---

**Aufgabe 6)****(a0)**

Es sollen aus folgenden Einheitszellen in allen Raumrichtungen unendlich periodisch fortgesetzte Festkörper aufgebaut werden:

**(a)****(b)****(c)****(d)****(e)**

Geben sie an, wie viele Atome sich genau in **primitiven** Einheitszelle befinden müssen, damit beim periodischen Fortsetzen, keine Atome doppelt gezählt werden! Welche Form und welche Gittervektoren hat die primitive Elementarzelle?

---

**Aufgabe 7)****(a42)**

Das Bravais-Gitter von NaCl ist kubisch flächenzentriert (fcc) mit einer Basis bestehend aus einem Natrium-Ion bei 0 und einem Chlorid-Ion im Zentrum der (konventionellen) kubischen Elementarzelle (2-atomige Basis). Die kubische Zelle wird durch die Vektoren  $a = (a,0,0)$ ;  $b = (0,a,0)$ ;  $c = (0,0,a)$  aufgespannt mit  $a = 5.64 \text{ \AA}$ .

a) Wieviele  $\text{Na}^+$  und  $\text{Cl}^-$  Ionen sind in der kubischen Elementarzelle enthalten? Finden Sie die Lage dieser Ionen im System xyz.

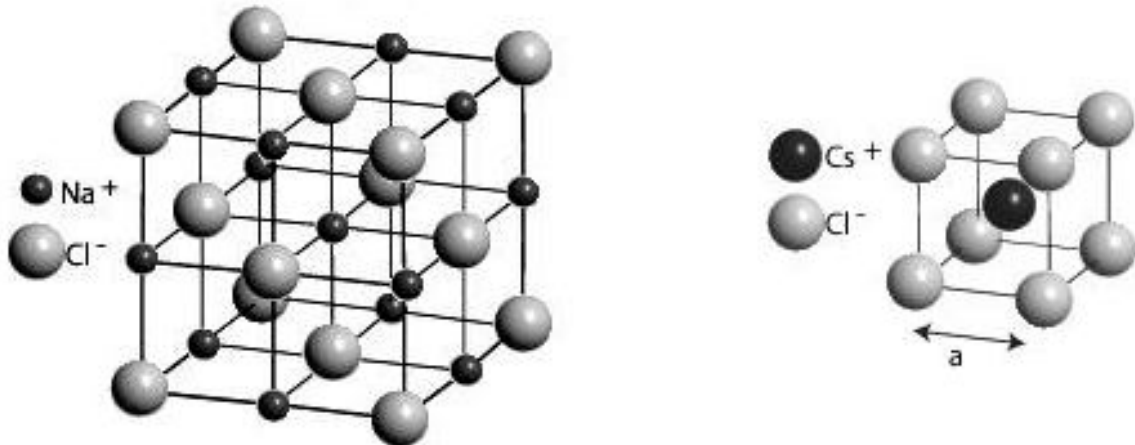
b) Finden Sie die Elementarzelle mit dem kleinsten Volumen (d. h. die primitive Einheitszelle), mit der an durch Translationen entlang der Gittervektoren die NaCl-Struktur konstruieren kann. Bestimmen Sie das Vektortripel, das diese Zelle aufspannt, die Lage aller Ionen in der Zelle und berechnen Sie das Volumen der Einheitszelle. Machen Sie eine Skizze!

---

---

**Aufgabe 8)****(a34)**

Wichtige Ionenkristall-Strukturen sind die NaCl- und die CsCl-Struktur (siehe Abbildung)



a) Beschreiben Sie die Unterschiede der Atomanordnungen in beiden Verbindungen benennen Sie die Gittertypen.

b) Wovon hängt es ab, in welcher Struktur ein ionischer Festkörper kristallisiert; wann tritt die NaCl-, wann die CsCl-Struktur auf?

-----

**Aufgabe 9)****(a35)**

Berechnen Sie, bei welchen Verhältnissen der Radien der beteiligten Atome  $r_1/r_2$  die NaCl bzw. die CsCl Struktur zur dichteren Packung führt.

-----

**Aufgabe 10)****(a12)**

a) Welche Spiegelebenen existieren in einem einfach-kubischen Gitter?

b) In welchen der Richtungen [100],[110] und [111] liegen Drehachsen des einfach-kubischen Gitters? Wie hoch ist jeweils ihre Zähligkeit? Wie hoch ist jeweils die Zahl äquivalenter Achsen?

-----

-----

**Aufgabe 11)****(a11)**

Geben Sie die **primitive** Elementarzelle sowie die Chemische Formel für die folgenden periodisch angeordneten linearen Ketten an:

- a) ...-A-B-C-A-B-C-A-B-C-A...
- b) ...-A-B-C-B-A-B-C-B-A-B-...
- c) ...-A-B-C-C-B-A-B-C-C-B-...
- d) ...-A-B-C-C-B-A-A-B-C-C-...

Fassen Sie A, B und C als dichtgepackte farbige Kugeln mit identischem Durchmesser  $d$  auf. Wie groß sind die Gitterkonstanten für die 4 Strukturen? Welche der Strukturen besitzen Inversionszentren und wo liegen diese?

-----

**Aufgabe 12)****(a2)**

Gegeben ist eine zweidimensionale Kristallstruktur, deren Atome auf den Ecken eines Honigwabengitters liegen.

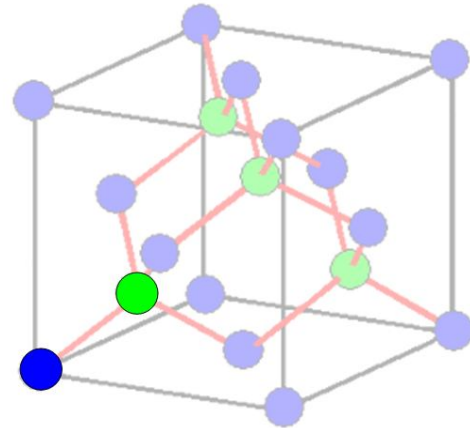
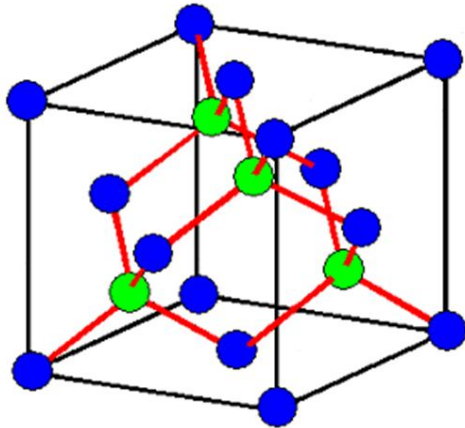
- (a) Warum ist dieses Gitter kein Bravaisgitter?
  - (b) Wählen Sie eine Basis, so dass sich ein Bravaisgitter ergibt. Welches Bravaisgitter erhält man?
  - (c) Skizzieren Sie zwei Möglichkeiten für primitive Elementarzellen.
- 

**Aufgabe 13)****(a4)**

Die Diamantstruktur kann als kubisch-flächenzentriertes Bravaisgitter aufgefasst werden, dessen Basis aus Kohlenstoffatomen bei  $(0,0,0)$  und  $(1/4,1/4,1/4)$  besteht.

- (a) Zeichnen Sie die  $(1\bar{1}0)$  und  $(001)$  Ebene. Die Gitterkonstante der gewöhnlichen Einheitszelle von Diamant ist  $a = 3.57 \text{ \AA}$ . Wie groß ist der minimale Abstand zwischen Kohlenstoffatomen in der  $(001)$  Ebene? Wie groß ist der Abstand nächster Nachbarn in der Diamantstruktur?
- (b) Wie viele Atome gehören zur gewöhnlichen Einheitszelle?
- (c) Wieso kann unter der Annahme einer einatomigen Basis kein Bravaisgitter gefunden werden?

## Diamantstruktur:



- Struktur fcc-abgeleitet durch Besetzung von **Tetraederplätzen**
- lockere Packung basierend auf  **$sp^3$ -Hybridbindung**

---

Aufgabe 14)

(a83)

Warum kommt bei den Bravaisgittern im 3-dimensionalen das raumzentrierte monokline Gitter nicht vor?

---

Aufgabe 15)

(a84)

Warum ist bei den Bravaisgittern im 3-dimensionalen im orthorhombischen System die Zentrierung von nur zwei verschiedenen Rechteckflächen nicht erlaubt? Zu welchem Bravaisgitter würde sie eine solche Kristallstruktur zuordnen?

---

Aufgabe 16)

(a61)

Konstruieren Sie die Wigner-Seitz-Zelle in dem Bild der Gitterpunkte eines Flächengitters!

○ ○ ○

○ ○ ○

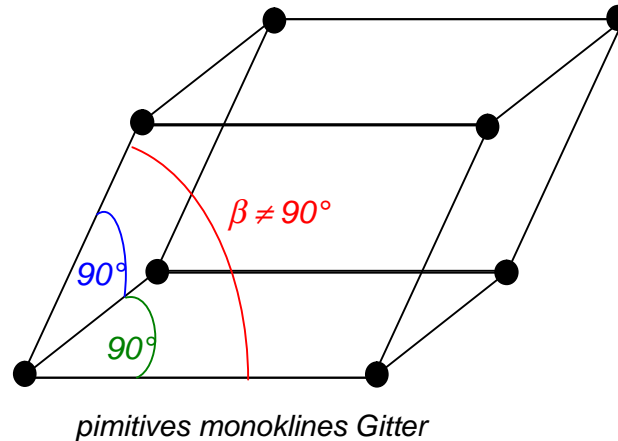
○ ○ ○



---

**Aufgabe 17)****(a85)**

Skizzieren Sie die Wigner-Seitz Zelle des einfach-monoklinen Gitters.  
(Winkel zwischen  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2 \neq \pi/2$  und  $\vec{a}_3 \perp \vec{a}_1, \vec{a}_2$ )



---

**Aufgabe 18)****(a78)**

Interferenzen an Kristallgittern werden nicht nur mit Röntgen-Strahlen beobachtet, sondern auch mit Elektronen- und Neutronenstrahlen, sofern die Wellenlänge klein genug ist.

Zeigen sie für ein einfach kubisches Gitter mit der Gitterkonstante  $a$ , das gelten muss:  $\lambda \leq 2a$

Es soll ein einfach kubisches Gitter mit  $a = 3 \text{ \AA}$  untersucht werden.

Wie groß ist :

- die minimale Spannung zwischen Anode und Kathode einer Röntgen-Röhre ?
- die Beschleunigungsspannung einer Elektronenkanone ?
- die minimale kinetische Energie bzw. die tiefste Temperatur thermischer Neutronen ?

**Tip:** Berechnen sie zuerst das reziproke Gitter des einfach kubischen Gitters und diskutieren sie daran die Ewaldkonstruktion.

---

**Aufgabe 19)****(a72)**

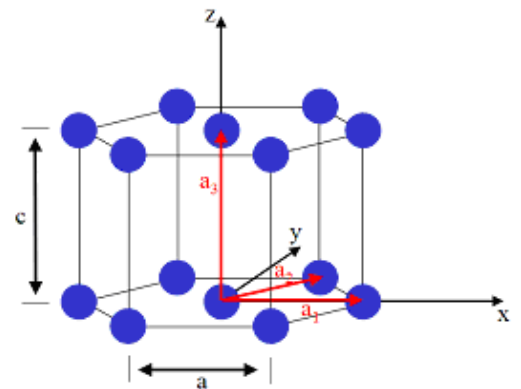
a) Wie sieht das reziproke Gitter des tetragonal raumzentrierten Gitters aus?

---

**Aufgabe 20)**

(a06)

Eine hexagonal-primitive Kristallstruktur liege mit ihrer hexagonalen Ebene in der x-y Ebene eines kartesischen Koordinatensystems. Die primitiven Einheitsvektoren haben die Längen a und c. Berechnen Sie die Einheitsvektoren des reziproken Gitters. Welche Struktur hat das reziproke Gitter?



Hinweis:  $\cos(60^\circ) = \frac{1}{2}$      $\sin(60^\circ) = \frac{\sqrt{3}}{2}$

**Aufgabe 21)**

(a07)

Erklären Sie mit Hilfe einer Ewald-Konstruktion, unter welcher Bedingung in einem Neutronenstreuexperiment an einem großen Einkristall das gestreute Neutron ein weiteres Mal abgelenkt wird, bevor es den Kristall wieder verlässt.

**Aufgabe 22)**

(a67)

Füllen Sie folgende Tabelle zu den am häufigsten für die Strukturanalyse verwendeten experimentellen Verfahren aus, die auf Beugungseffekten beruhen!

Name des Verfahrens	Skizze des Versuchsaufbaus	Strahlungseigenschaften	Probeneigenschaften	Ewald-konstruktion	Ziel des Verfahrens
<b>Laue-Verfahren</b>					
<b>Debye-Scherrer-Verfahren</b>					

<b>Drehkristall-Verfahren</b>					
-------------------------------	--	--	--	--	--

**Aufgabe 23)**

**(a81)**

Das Laue-Verfahren wird oft bei bekannter Kristallstruktur dazu benutzt, um einen Kristall im Raum zu orientieren. Im Gegensatz zum Debye-Scherrer-Verfahren wird hierbei ein Röntgenstrahl mit kontinuierlichem Spektrum auf den Kristall gerichtet.

Schätzen Sie die maximal mögliche Anzahl von Interferenzpunkten ab, wenn die Spannung an der Röntgenröhre 60 kV beträgt und der Kristall ein einfach kubisches Gitter mit einer Gitterkonstante von 2 Å ist!

**Aufgabe 24)**

**(a08)**

Ist es richtig, dass bei der Streuung an einem Pulver eines Bravaisgitters mit monochromatischer Strahlung beliebiger Wellenlänge immer zumindest ein Debye-Scherrer Ring beobachtet wird? (Begründung !)

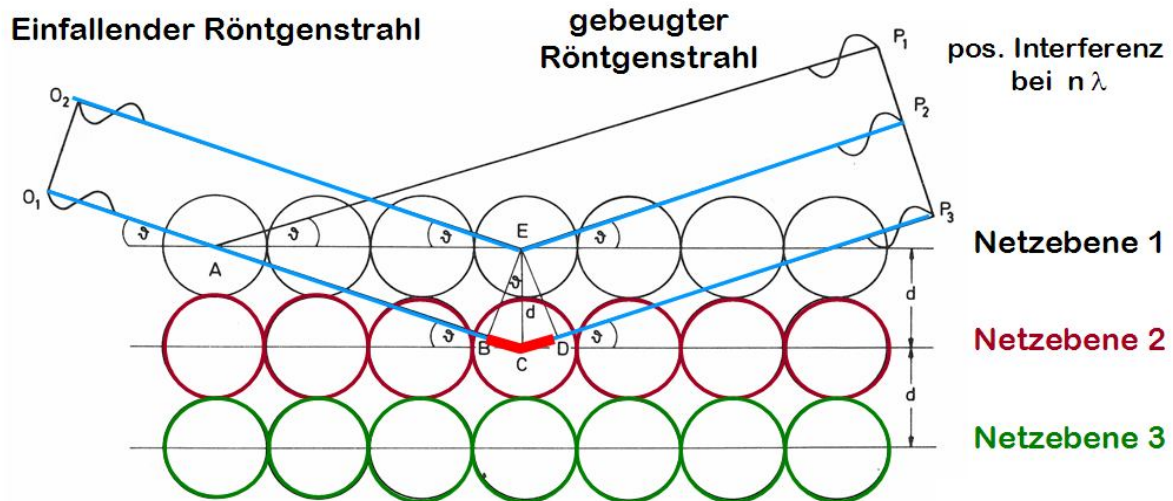
**Aufgabe 25)**

**(a58)**

Sie untersuchen eine Pulverprobe eines kubischen Materials unter Verwendung von Cu-K<sub>α</sub>-Strahlung mit einer Wellenlänge von  $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$ . Sie erhalten Röntgen-Reflexe bei den Winkeln:

$$2\theta_1 = 26.59^\circ, 2\theta_2 = 37.96^\circ \text{ und } 2\theta_3 = 46.95^\circ.$$

- (a) Handelt es sich bei dem untersuchten Material um eine amorphe oder kristalline Substanz?
- (b) Berechnen Sie den Abstand der Netzebenen, von denen die Beugungsreflexe stammen, unter der Annahme, dass es sich um Beugungsreflexe 1. Ordnung handelt.
- (c) Welchen Flächen im Elementarwürfel des kubischen Materials entsprechen diese Netzebenen?



### Aufgabe 26)

(a59)

Obwohl wir zwischen verschiedenen Bindungstypen unterscheiden, treten diese in Festkörpern üblicherweise nicht in reiner Form auf. Diskutieren Sie, welche Bindungstypen in folgenden Festkörpern relevant sind und welcher Bindungstyp dominiert: Krypton, Kochsalz (NaCl), Natrium, Graphit, Diamant, Ar,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ , Polyethylen.

### Aufgabe 27))

**Wiederholen sie folgende Fragen und Antworten aus der der Vorlesung Atome und Moleküle:**

- Was ist die Schrödingergleichung ? Wie wurde sie hergeleitet ?
- Wie wird die Wellenfunktion interpretiert ?
- Was versteht man unter Normierung der Wellenfunktion ?
- Welche Einheit hat die Wellenfunktion?
- Was sind gebundene Zustände und was sind ungebundene Zustände ?
- Wie sieht die Wellenfunktion in einem endlichen und in einem unendlichen 1-dim. Potentialtopf aus ?
- Erklären sie ein Beispiel für die 2-dimensionale Schrödingergleichung !
- Wie sehen die Lösungen im 2-dim. Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden aus ?
- Welche Energiewerte ergeben sich im 2-dim. Potentialtopf ?
- Wie sehen die Lösungen im 3-dim. Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden aus ?
- Welche Energiewerte ergeben sich im 3-dim. Potentialtopf ?
- Was sind Energieentartungen im mehrdimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden?
- Was besagt das Pauli-Prinzip und wo kam es her?

---

**Aufgabe 28)**

Erklären sie den Begriff "Zustandsdichte" mit eigenen Worten ! (am Besten an einem Beispiel ...)

---

**Aufgabe 29)****(a76)**

Wo liegen die erlaubten Energieniveaus, wenn man Elektronen in ein kubisches Volumen mit der Kantenlänge  $a = 2 \text{ nm}$  einsperrt?

Wo liegen die erlaubten Energieniveaus, wenn man Elektronen in ein kubisches Volumen mit der Kantenlänge  $a = 2 \text{ nm}$  einsperrt und man zusätzliche periodische Randbedingungen fordert?

Wie viele Elektronen mit der Energie  $E < 1 \text{ eV}$  können dann in beiden Fällen dort untergebracht werden, wenn jeder Zustand mit 2 Elektronen besetzt werden kann (Spin up und Spin down)? Benutzen sie einmal die Formel aus der Vorlesung und zählen sie einmal wirklich die erlaubten Zustände!

---

**Aufgabe 30)****(a89)**

Berechnen sie analog zur Vorlesung die Zustandsdichte für ein 2-dimensionales Elektronengas !

---

**Aufgabe 31)****(a49)**

Aluminium besitzt die molare Masse  $M = 26.98 \text{ g/mol}$  und eine Dichte von  $\rho = 2.7 \text{ g/cm}^3$ . Berechnen Sie die Ladungsdichte  $n$  von Aluminium unter der Annahme, dass jedes Aluminiumatom drei Außenelektronen zur Verfügung stellt. Welche Fermienergie und Fermitemperatur ergibt sich damit für Aluminium?

---

**Aufgabe 32)****(a22)**

Wie könnte man die "Tiefe" des Fermi-Sees mit dem Photoeffekt bestimmen?

---

---

**Aufgabe 33)****(a16)**

Was besagt die Fermi-Funktion? Wie sieht diese Funktion aus? In welchem Energiebereich fällt die Fermi-Funktion von 0.9 auf 0.1 ab? Wie breit ist dieser Bereich bei  $T=300\text{ K}$ ?

---

**Aufgabe 34)****(a87)**

Wie groß ist die Driftgeschwindigkeit  $v_D$  der Leitungselektronen in Kupfer bei einer Stromdichte von  $5\text{ A/cm}^2$ ? Die Konzentration der Leitungselektronen in Kupfer sei  $n = 10^{23}/\text{cm}^3$ .

Man schätze ferner auf Grund des Modells freier Elektronen die Fermigeschwindigkeit  $v_F$  der Leitungselektronen in Kupfer ab und bilde das Verhältnis  $v_F/v_D$ . Warum ist dieses Verhältnis so groß?

---

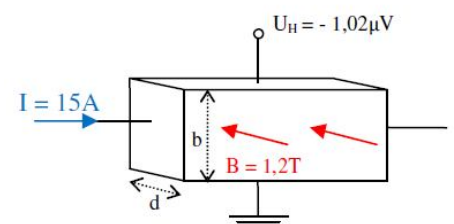
**Aufgabe 35)****(a51)**

Hinsichtlich der Wärmeleitfähigkeit übertrifft Diamant sogar den besten metallischen Leiter Silber deutlich. Andererseits ist reiner Diamant ein elektrischer Isolator. Lassen sich diese gegensätzlichen Eigenschaften mit der Aussage des Wiedemann-Franz-Gesetzes vereinbaren? begründen sie ihre Antwort!

---

**Aufgabe 36)****(a30)**

Ein Kupferplättchen (Breite  $b = 1,8\text{ cm}$ , Dicke  $d = 1,0\text{ mm}$ ) wird wie abgebildet in ein Magnetfeld der magnetischen Flussdichte  $1,2\text{ T}$  gebracht. Fließt durch das Kupferplättchen ein Strom der Stärke  $15\text{ A}$ , so wird eine Hallspannung von  $-1,02\text{ }\mu\text{V}$  gemessen.



a) Bestimmen Sie die Hallkonstante  $R_H$  von Kupfer. Sind die freien Ladungsträger des Kupfers positiv oder negativ geladen? Um welche Teilchen handelt es sich also?

b) Bestimmen Sie die Ladungsträgerdichte  $n$  im Kupfer. Wie viele freie Ladungsträger pro Kupferatom ergibt das?

c) Bestimmen Sie die mittlere Driftgeschwindigkeit der Ladungsträger in Kupfer.

Angaben: Dichte von Kupfer:  $8,92\text{ g/cm}^3$ ; Atommasse  $63,4\text{ u}$ ;  $u = 1,66 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$

---

---

**Aufgabe 37)****(a31)**

Bei einem Plättchen aus dem Halbleiter Germanium ist der Hall-Effekt deutlich stärker ausgeprägt. Das Plättchen hat die Breite  $b = 1,2\text{cm}$  und die Dicke  $d = 1,0\text{mm}$ . Bei einer magnetischen Flussdichte von  $106\text{ mT}$  und einer Stromstärke von  $30\text{mA}$  misst man eine Hallspannung von  $-20,6\text{ mV}$ .

- a) Bestimmen Sie die Hallkonstante  $R_H$  von Germanium und begründen sie, dass Elektronen den Ladungstransport bewerkstelligen.
- b) Zeigen Sie, dass auf ein einziges freies Leitungs-Elektron weit mehr als  $1000\ 000$  Germaniumatome kommen.
- c) Bestimmen Sie die mittlere Driftgeschwindigkeit der Elektronen in Germanium! Vergleichen Sie mit dem entsprechenden Wert für Kupfer.

Angaben: Dichte von Germanium:  $5,3\text{ g/cm}^3$ ; Atommasse  $72,6\text{ u}$ ;  $u = 1,66 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$

---

**Aufgabe 38)****(a45)**

Zeigen Sie für ein einfach quadratisches Gitter in zwei Dimensionen, dass die kinetische Energie eines freien Elektrons an einer Ecke der ersten Brillouin-Zone doppelt so groß ist wie die eines Elektrons im Mittelpunkt einer Seitenfläche der Zone. Wie sieht dieses Verhältnis in einem einfach kubischen Gitter in drei Dimensionen aus?

---

**Aufgabe 39)****(a69)**

Erläutern Sie das Zustandekommen der Bandlücke an der Brillouin- Zonengrenze in den Dispersionsrelationen für Elektronen in schwachen periodischen Potenzialen!

---

## Aufgabe 40)

(a91)

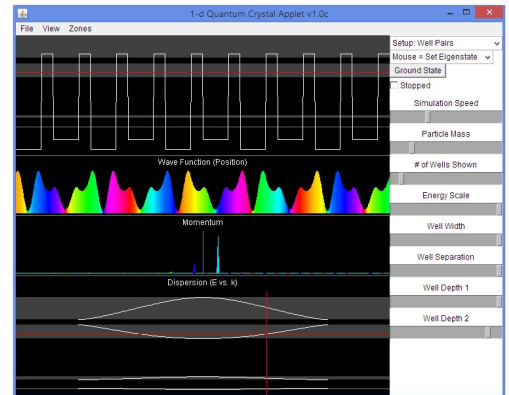
Spielen Sie mit folgendem Java-Applet rum und veranschaulichen Sie sich die Wellenfunktionen, die Phase, den Impuls, ... für verschiedene Fälle des Potentialverlaufes ...

Programm:

<http://www.falstad.com/qm1dcrystal/>

Anleitung unter:

<http://www.falstad.com/qm1dcrystal/directions.html>



Wenn sie das Kapitel "Bandstruktur" jemals ansatzweise verstehen wollen, dann arbeiten sie mindestens folgende Punkte ab:

### 1) "Setup Free Particle" (rechts oben bei den Einstellungen ...)

- Ändern sie die Energie des Elektrons und beobachten sie die Auswirkungen auf die Welle!
- Was bedeuten die Farben? (Tip: "View" → "Wave Function" → ...)
- Schalten sie "View" → "Momentum" an! Was wird dargestellt? Ändern sie die Energie des Elektrons!
- Interpretieren sie die Dispersion (E vs. k)!
- Was passiert, wenn sie an "Particle Mass" herumspielen?
- Aktivieren Sie "Zones" → "Extended Zone Scheme", "Reduced Zone Scheme", "Repeated Zone Scheme", und erklären Sie die Darstellungen. Sind diese Darstellungen alle für das freie Elektron sinnvoll?

### 2) "Setup Finite Wells", "Particle Mass" = klein, "Well Width" = mittel

- Ändern sie die Energie des Elektrons und beobachten sie die Auswirkungen auf die Welle!
- Verkleinern sie "Well Depth" und "Well Width" und beobachten sie die Auswirkungen auf die Dispersion! Wann verschwinden die Bandlücken und warum?
- Untersuchen sie das Aussehen der Wellenfunktion an Punkten des Zonenrandes und beim Ursprung ( $k=0$ )!
- Untersuchen sie das Aussehen der Wellenfunktion an Punkten des Zonenrandes beim Wechsel von einem Band auf das nächste Band!
- Untersuchen sie das Impulsspektrum der Welle an verschiedenen Punkten der Bandstruktur! Was bedeuten mehrere Impulse gleichzeitig im Spektrum? Woran erkennt man mehrere Impulse gleichzeitig in der farbig dargestellten Wellenfunktion? Was bedeutet das Impulsspektrum für den Grundzustand?
- Nutzen sie "Energy Scale", um auch hochenergetisch angeregte Elektronen darzustellen.
- Verwenden Sie "Well Depth" = groß und "Well Width" = mittel und zeigen Sie damit, das



bei einem hoch angeregten Zustand die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Atombereich etwas geringer ist als im Zwischenraum zwischen den Atomen! Warum ist das so?

- Wie sieht die Wellenfunktion aus, wenn sie zum Maximum der Energie gehen, die das Programm hergibt?

### **3) "Setup Finite Wells ", Particle Mass" = groß, aber nicht maximal, "Well Width" = mittel**

- Wie verhalten sich die diskreten Energieniveaus innerhalb der Kästen, wenn sie "Particle Mass" = maximal verwenden?
- Schauen sie sich hoch angeregte Zustände und deren Verteilung der Impulse an, schalten sie regelmäßig mal zu "Setup Free Particle" um und vergleichen sie beide Bilder.
- Woran sieht man bei niedrigen Energien, dass das Teilchen nicht mehr durch die Wand tunneln kann? Was hat das mit lokalisierten Einzelwellen im Kastenpotential und mit diskreten Energieniveaus und steigender Anzahl von Knoten zu tun?
- Woran sieht man bei Zuständen mit niedriger Energie die Heisenbergsche Unschärferelation, wenn sie die Kastenbreite variieren?
- Warum verschwindet die Impulsunschärfe bis auf "einige" Ausnahmen, wenn die Energie weit über dem periodischen Potential liegt?
- Wann treten diese "Ausnahmen" auf und warum?
- Untersuchen sie den Übergang vom parabolischen Band zu diskreten Energieniveaus bei der Variation der Teilchenmasse! Wie kann man das Verhalten erklären?
- Diskutieren sie nun die Anzahl der Teilchen in einem Band, wenn die Teilchenmasse sehr groß ist! Ändert sich die Anzahl der Teilchen in einem Band, wenn die Teilchenmasse wieder verringert wird?
- Was hat die Bandfüllung mit der Leitfähigkeit des Materials zu tun? Bei welcher Anzahl von Elektronen pro Atom sollte das Band voll sein?
- Warum können auch Substanzen mit 2 Außenelektronen metallisch sein? Geht das auch für eindimensionale Festkörper?

### **4) "Setup Harmonic ", Particle Mass" = maximal**

- Erkennen sie die äquidistanten Zustände im harmonischen Potential wieder? Was passiert beim Verringern der Masse? Was sagen einem die Farben der Wellenfunktion dabei?

### **5) "Setup Well Pairs", "Energie Scale" = klein, aber nicht minimal**

- Warum verschwinden einige Bandlücken, wenn "Well Depth 1" = "Well Depth 2" und "Well Separation" = Maximum gewählt werden?
- Warum kommen die fehlenden Bandlücken wieder rein, wenn "Well Separation" nun verkleinert wird?

### **6.) Malen sie ein beliebiges periodisches Potential, indem sie den Modus "Mouse = Edit Funktion" verwenden.**

- Schauen sie sich die Wellenfunktionen und die Banddispersion für den von ihnen gemalten periodischen Potentialverlauf an!

---

**Aufgabe 41)****(a90)**

a) Zeigen Sie, dass für ein parabolisches Band die effektive Masse konstant ist!

b) Geben sei folgendes modellhafte Energieband ( $E_0 = 2 \text{ eV}$ ,  $d = 0.5 \text{ nm}$ ):

$$E(k_x) = \frac{E_0}{2} [1 - \cos(kd)]$$

Zeichnen Sie das  $E(k_x)$  - Diagramm über die 1. Brillouin-Zone! Berechnen Sie die effektive Masse für die gegebene Bandstruktur für  $|k_x| \ll \frac{\pi}{d}$ . Welche Bedeutung hat der Parameter  $d$ ?

---

**Aufgabe 42)****(a46)**

Für Indiumantimonid ist  $E_G = 0.23 \text{ eV}$ , die Dielektrizitätskonstante beträgt  $\epsilon_r = 18$  und die effektive Masse der Elektronen  $m_e = 0.015 m_0$ . Man dotiert Indiumantimonid mit Siliziumatomen.

a) Berechnen Sie die Ionisierungsenergie der Donatoren und den Bahnradius für den Grundzustand.

b) Ab welcher Donatorkonzentration treten deutliche Überlappungseffekte zwischen den Bahnen benachbarter Fremdatome auf?

---

**Aufgabe 43)****(a36)**

Die Energielücke zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband in Silizium beträgt bei Zimmertemperatur  $1,14 \text{ eV}$ . Wie groß ist die Grenzwellenlänge eines Photons, das ein Elektron vom oberen Teil des Valenzbandes in den unteren Teil des Leitungsbandes anregen kann? Was gilt für Germanium mit einer Bandlücke von nur  $0,74 \text{ eV}$ ? Ist für diese Aufgabe die maximale oder minimale Wellenlänge gemeint und warum?

---

**Aufgabe 44)****(a93)**

Was versteht man unter einem direkten bzw. einem indirekten Halbleiter? Wie kann man experimentell nachweisen, ob es sich bei einem Halbleiter um einen direkten oder indirekten Halbleiter handelt?

**Aufgabe 45)**

**(a97)**

- a) Was sind longitudinale und transversale Wellen?
- b) Was besagt die Dispersionsrelation für Gitterschwingungen?
- c) Was bedeuten die Begriffe optischer bzw. akustischer Zweig der Dispersionskurve (üblicherweise dargestellt für die 1. Brillouinzone)? Wann treten beide Zweige auf?
- d) Hat das irgend etwas mit der elektronischen Bandstruktur im Festkörper zu tun?
- e) Was bedeuten die Begriffe longitudinaler und transversaler optischer/akustischer Zweig?
- f) Berechnen sie die erlaubten Schwingungsfrequenzen  $\omega$  der Gitterschwingungen für eine eindimensionale Kette aus zwei verschiedenen Atomen mit den Massen  $M_1$  und  $M_2$  ( $M_1 > M_2$ ) zwischen denen sich jeweils ein Feder mit der Federkonstanten  $D$  befindet für  $k = 0$  und  $k = \pi/a$ . Wie schwingen dort die Atome (machen Sie eine Skizze!) ?
- g) Was passiert, wenn man einen Festkörper mit einer Frequenz anregt, die innerhalb der Lücke oder über der maximalen Frequenz liegt? Schwingen dann noch die Atome?