

Lösungen der ersten Klausur Mod. Exp. Phys. II (WS 13/14)

Aufgabe 1:

a) Das Volumen der Einheitszelle ist $V_Z = a^3$. Die nächsten Nachbarn liegen entlang $(1, 1, 1)$. Demgemäß ist der maximal mögliche Kugelradius $R = \sqrt{3}a/4$. Das Volumen einer Kugel ist dann

$$V_K = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3 = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi a^3.$$

Mit dem von den Kugeln in der Einheitszelle eingenommenen Volumen V_G folgt

$$V_G = V_K + 8 \cdot \frac{1}{8}V_K = 2V_K \Rightarrow \frac{V_G}{V_Z} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi.$$

b) Die primitiven Translationen des bcc-Gitters sind

$$\vec{a} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{b} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{c} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Dann ist das Spatprodukt

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \left[\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{a^3}{2}$$

und damit die reziproken Gittervektoren

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = 2\pi \frac{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = 2\pi \frac{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = 2\pi \frac{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Das reziproke Gitter des bcc-Gitters ist folglich ein fcc-Gitter.

c) Im Falle einer einatomigen Basis liegen die Atome beim bcc-Gitter in der Einheitszelle bei $(0, 0, 0)$ und $(1/2, 1/2, 1/2)$ (normierte Koordinaten). Die Atomfaktoren f_j sind alle gleich, $f_j = f$, so dass für den Strukturfaktor folgt

$$S_{\vec{G}}(h, k, l) = \sum_{j=1}^s f_j e^{-2\pi i(hx_{1,j} + kx_{2,j} + lx_{3,j})} = f \left(1 + e^{-i\pi(h+k+l)} \right).$$

Der Strukturfaktor wird Null für $h + k + l = 2n + 1$, $n \in \mathbb{Z}$.

Aufgabe 2:

Mit $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k$ (elastische Streuung) sowie $G = |\vec{G}|$ folgt

$$\vec{k} = \vec{k}' - \vec{G} \Rightarrow G^2 = 2\vec{k}' \cdot \vec{G}.$$

Der von \vec{k}' und \vec{G} eingeschlossene Winkel ist $90^\circ - \vartheta/2$, so dass

$$G^2 = 2kG \cos\left(90^\circ - \frac{\vartheta}{2}\right) = 2kG \sin \frac{\vartheta}{2} \Rightarrow \lambda \frac{G}{2\pi} = 2 \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Die Ebene (hkl) enthält nur Gitterpunkte, wenn h , k und l teilerfremd sind. Ihr Abstand zur nächstgelegenen, parallelen Netzebene mit Gitterpunkten beträgt d_{hkl} und mit $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ gilt $G = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$. Mit dem Netzebenenabstand d ist $d = m d_{hkl}$ mit $m \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$, so dass $G = m \cdot 2\pi/d$ und somit

$$m \lambda = 2 d \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Aufgabe 3:

a) Das Volumen des Elektronengases sei $V = L^3$, dann ist die Zustandsdichte im k-Raum $(2\pi/L)^3$. Die insgesamt N_{ges} Elektronen besetzen die Zustände bis zur Fermi-Wellenzahl k_F , so dass mit der zweifachen Besetzung (Spin) jedes Zustands folgt

$$N_{\text{ges}} = 2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 .$$

Mit der Energie freier Elektronen $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ folgt dann mit $n = N_{\text{ges}}/V$ für die Fermienergie

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} .$$

b) Die Gesamtenergie des Elektronengases ist mit der Zustandsdichte $D(E)$ bei $T = 0$ gegeben durch

$$E_{\text{ges}} = \int_0^{E_F} D(E) E dE .$$

Die Zahl der Elektronen $N(E)$ als Funktion der Obergrenze E wird a) entnommen, so dass für $D(E)$ folgt

$$N(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \Rightarrow D(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} .$$

Damit gelten für Gesamtenergie E_{ges} und die mittlere Energie \bar{E} pro Elektron

$$E_{\text{ges}} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{E_F} E^{3/2} dE = \frac{V}{5\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E_F^{5/2} \Rightarrow \bar{E} = \frac{E_{\text{ges}}}{N(E_F)} = \frac{3}{5} E_F .$$

Aufgabe 4:

Aufgrund des unendlich hohen Innenwiderstands des idealen Messgeräts verschwindet im Gleichgewicht die Stromdichte im Stromkreis, $\vec{j} = 0$, so dass $\text{grad}\left(\frac{\mu}{e} - \Phi\right) = \epsilon \text{grad} T$. Integration über den gesamten Leiterweg L zwischen den Kontakten 1 und 4 liefert

$$\int_0^L \text{grad}\left(\frac{\mu}{e} - \Phi\right) d\vec{r} = \int_0^L \epsilon \text{grad} T d\vec{r} \Rightarrow \frac{1}{e} \int_{\mu(0)}^{\mu(L)} d\mu - \int_{\Phi(0)}^{\Phi(L)} d\Phi = \int_{T(0)}^{T(L)} \epsilon dT .$$

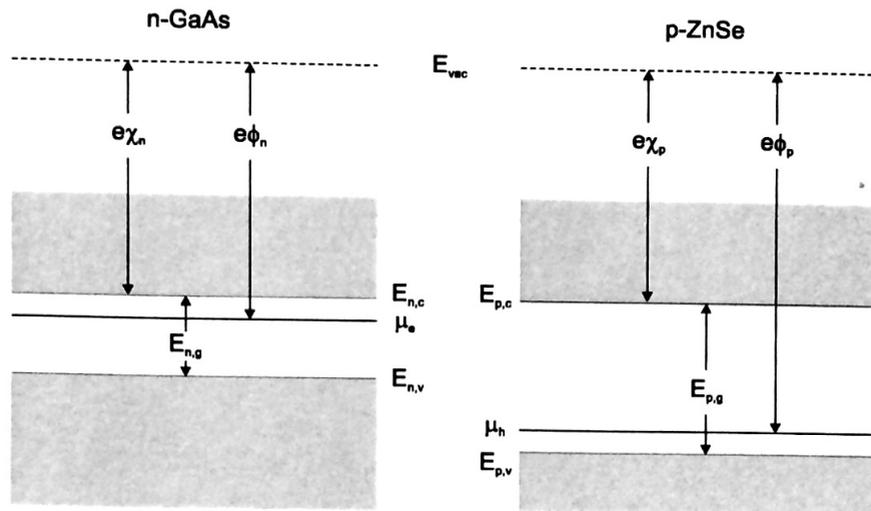
Das Integral über das chemische Potential μ ergibt $\mu(L) - \mu(0) = 0$, da an den Kontakten 1 und 4 sowohl Material als auch Temperatur gleich sind. Von dem Ausdruck der linken Seite verbleibt dann $U_{\text{th}} = \Phi_1 - \Phi_4$. Das rechte Integral berechnet sich zu

$$\int_{T(0)}^{T(L)} \epsilon dT = \epsilon_A (T_0 - T_1) + \epsilon_B (T_1 - T_2) + \epsilon_A (T_2 - T_0) = \epsilon_B (T_1 - T_2) + \epsilon_A (T_2 - T_1) = (\epsilon_A - \epsilon_B) \cdot (T_2 - T_1) .$$

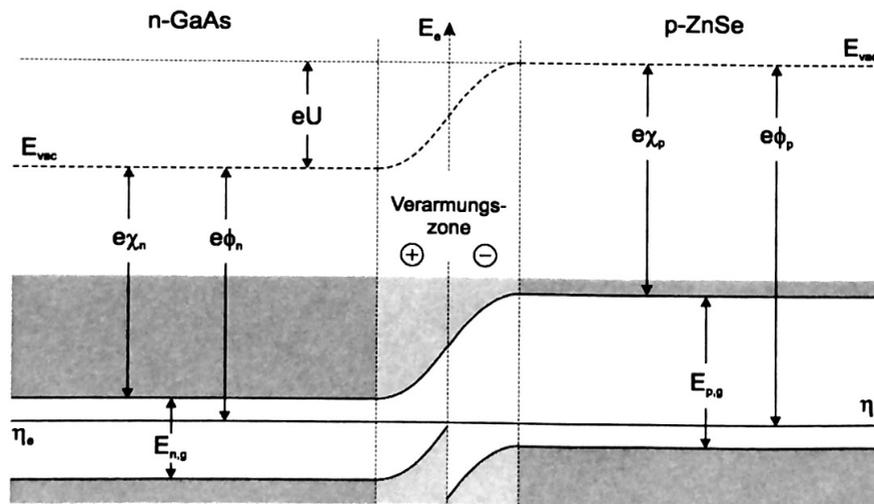
Mit $T_1 = 273 \text{ K}$, $T_2 = 373 \text{ K}$, $\epsilon_A = 19 \mu\text{V/K}$ und $\epsilon_B = -15 \mu\text{V/K}$ erhält man schließlich $U_{\text{th}} = (\epsilon_A - \epsilon_B) \cdot (T_2 - T_1) = 3.4 \text{ mV}$.

Aufgabe 5:

Werden die beiden Halbleiter (HL) ohne Kontakt einander gegenübergestellt, so sind deren Vakuumniveaus auf gleicher Höhe. Die Elektronenaffinität χ stellt jeweils den energetischen Abstand zur Leitungsbandunterkante dar und die Austrittsarbeit Φ entspricht dem energetischen Abstand zum chemischen Potential μ (Fermienergie für $T = 0$) des jeweiligen HL.



Werden die HL in Kontakt gebracht, dann findet so lange ein Austausch von Ladungsträgern statt, bis das thermodynamische Gleichgewicht erreicht ist, also die elektrochemischen Potentiale $\eta = \mu - e\varphi$ mit elektrischem Potential φ beider HL gleich sind. Dabei bildet sich im Bereich der Grenzfläche eine Raumladungszone (Verarmungszone) aus, an der die Diffusionsspannung $U = \Phi_p - \Phi_n$ abfällt. Entsprechend fällt auch das Vakuumniveau ab. Für die Konstruktion des Bandschemas ist es entscheidend, dass das Vakuumniveau $E_{vac}(x)$ im Bereich der Raumladungszone einen stetigen Verlauf haben muss. Wegen der jeweiligen Homogenität der HL verläuft das elektrische Potential streng monoton.



Die Bandverbiegungen verlaufen entsprechend dem Vakuumniveau und an der Kontaktstelle treten jeweils Diskontinuitäten ΔE_c und ΔE_v zwischen Leitungs- und Valenzbändern auf. Im Falle von n-GaAs/p-ZnSe ist ΔE_c ohne Anlegen einer äußeren Spannung vernachlässigbar klein.