Experimentelle Physik V

Lösungen der Übungsblätter

KIT - Karlsruher Institut für Technologie

Wintersemester 2012/13

Mitschriebe ausgearbeitet von
Philipp Basler, Nils Braun, Larissa Bauer
Überprüft von Dennis Roy

7. Februar 2013

Inhaltsverzeichnis

1. Übung **4**
1. Aufgabe (Bindungsenergie zwischen Gitterbausteinen) 4
2. Aufgabe (Madelung-Konstante α) 7
3. Aufgabe (Bariumoxid) 8

2. Übung **9**
4. Aufgabe (Lennard-Jones-Potential) 9
5. Aufgabe (Kubisch-raumzentrierte Gitterstruktur) 10
6. Aufgabe (ABC-Verbindung) 12
7. Aufgabe (Kubisch-flächenzentrierte Gitterstruktur) 14

3. Übung **16**
8. Aufgabe (Raumfüllung) 16
9. Aufgabe (Hohlräume) 18
10. Aufgabe (Millersche Indizes) 18
11. Aufgabe (Strukturfaktor) 20

4. Übung **20**
12. Aufgabe (Strukturfaktoren) 20
13. Aufgabe (Streubedingungen verschiedener Experimente) 22
14. Aufgabe (Beugung am bcc-Gitter) 23
15. Aufgabe (Debye-Scherrer) 24

5. Übung **25**
16. Aufgabe (Dispersionsrelation für lineare Ketten) 25
17. Aufgabe (Wellengleichung) 28
18. Aufgabe (Transversale Moden im fcc-Gitter) 29

6. Übung **29**
19. Aufgabe (Strahlen zur Untersuchung) 29
20. Aufgabe (LiF-Phononen) 30
21. Aufgabe (Schallgeschwindigkeit in Wasser) 32
22. Aufgabe (Thermischer Ausdehnungkoeffizient) 33

7. Übung **34**
23. Aufgabe (Debye-Temperatur) 34
24. Aufgabe (Innere Energie durch thermische Anregung) 35
25. Aufgabe (Dielektrizitätskonstante) 35

26. Aufgabe (Dispersionsrelationen) 37

8. Übung **38**

27. Aufgabe (Drude-Modell: Widerstand) 38
28. Aufgabe (Hall-Effekt bei Kupfer) 40
29. Aufgabe (Dielektrizitätskonstante beim freien Elektronengas) 41
30. Aufgabe (Fermienergie eines Elektronengases) 43

9. Übung **45**

31. Aufgabe (Fermi-Dirac-Verteilung) 45
32. Aufgabe (Kupfer im Sommerfeld-Modell) 47
33. Aufgabe (Kompressibilität) 49

10. Übung **50**

34. Aufgabe (Brillouin-Zonen) 50
35. Aufgabe (Freie Elektronen in der 1. BZ) 54
36. Aufgabe (BZ und Fermiwellenzahl) 54

11. Übung **55**

37. Aufgabe (LCAO-Formalismus) 55
38. Aufgabe (s-Elektronen im Festkörper) 57
39. Aufgabe (Anisotroper Kristall) 59
40. Aufgabe (Zyklotronfrequenz) 60
41. Aufgabe (Bloch-Elektronen im Magnetfeld) 61

12. Übung **62**

42. Aufgabe (Löcher) 62
43. Aufgabe (De-Haas-van-Alphen-Effekt) 63
44. Aufgabe (Dissipativer Elektronenstrom) 63
45. Aufgabe (Boltzmann-Gleichung) 64
46. Aufgabe (Thomas-Fermi-Näherung) 65

13. Übung **67**

47. Aufgabe (Halleffekt 2) 67
48. Aufgabe (Energie von Donatorniveaus) 67
49. Aufgabe (Elektronenbeweglichkeit im Halbleiter) 67

1. Übung

1. Aufgabe: Bindungsenergie zwischen Gitterbausteinen

Die Wechselwirkungsenergie ist gegeben:

$$\phi_{ij} = -\frac{a}{r_{ij}^m} + \frac{b}{r_{ij}^n}$$

(a) Die möglichen Ursachen für anziehende und abstoßende Wechselwirkungen im Potential zwischen Gitterbausteinen sollen diskutiert werden.
Je nach Gitterbausteinen kann es zu verschiedenen Ursachen kommen:

anziehende Wirkung Ionen (Coulombkraft), Dipol-Dipol-Wechselwirkung, Überlappung der Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeiten , Van-der-Waals-Bindungen

abstoßende Wirkung Abstoßung durch gleichnamig geladene Ionen, besetzung antibindender Orbitale (wegen Pauli-Prinzip), Kern-Wechselwirkung

(b) Es soll gezeigt werden, dass ein stabiler Zustand nur für $n > m$ möglich ist.
Wir unterdrücken die Indizes ij um uns Schreibarbeit zu sparen:

$$\phi = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}$$

Damit ϕ ein Minimum besitzt, muss gelten

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}r} = mar^{-m-1} - nbr^{-n-1} = 0$$

Dies ist für

$$r = \left(\frac{ma}{nb}\right)^{1/(m-n)}$$

erfüllt. Für die zweite Ableitung gilt an dieser Stelle jedoch

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}r^2} = -\frac{m(m+1)a}{r^{m+2}} + \frac{n(n+1)b}{r^{n+2}} = -\frac{1}{r^{2+n}}\left(\frac{m(m+1)a}{\left(\frac{ma}{nb}\right)^{\frac{m-n}{m-n}}} - nb(n+1)\right) = -\frac{1}{r^{2+n}}nb(m-n)$$

Für $m > n$ handelt es sich also um ein Maximum und damit nur um ein labiles Gleichgewicht. In der Aufgabe ist jedoch nach $n > m$ gefragt und für diesen Fall liegt ein Minimum vor. Somit haben wir hier einen stabilen Zustand.

(c) Die statische Gleichgewichtsenergie U_b soll für $T = 0$ berechnet werden.

Wir summieren also über alle möglichen Wechselwirkungspaare:

$$U = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \phi_{ij}$$

Der Faktor $1/2$ verhindert die doppelte Zählung der Atompaare. Bezeichnen wir ein beliebiges Atom weit im Inneren des Kristalles als Referenzatom i, so ist

$$U = \frac{N}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij} = \frac{N}{2} \left(-\frac{a}{r_0^m} \sum_{j \neq i} \frac{1}{p_{ij}^m} + \frac{b}{r_0^n} \sum_{j \neq i} \frac{1}{p_{ij}^n} \right)$$

Die Summen hängen dabei nicht von den jeweiligen Kristalleigenschaften sondern nur von der Gitterform selbst ab (also z.B. kubisch-flächenzentriert usw.) Sie können deshalb als konstant angesehen werden. Wir setzen

$$\sum_{j \neq i} \frac{1}{p_{ij}^m} = P(m) \qquad \sum_{j \neq i} \frac{1}{p_{ij}^n} = P(n)$$

und überlassen die numerische Berechnung im Bedarfsfall dem Computer (siehe dazu auch unten). Es ist also:

$$U = \frac{N}{2} \left(-\frac{a}{r_0^m} P(m) + \frac{b}{r_0^n} P(n) \right)$$

Da die Temperatur $T = 0$ ist, entspricht dies auch schon der freien Energie. Für ein thermodynamisches Gleichgewicht muss diese jetzt minimiert werden. Es ist:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r_0} = \frac{N}{2} \left(mar_0^{-m-1} P(m) - nbr_0^{-n-1} P(n) \right) = 0 \implies r_0 = \left(\frac{maP(m)}{nbP(n)} \right)^{\frac{1}{m-n}}$$

Setzt man diese Lösung jetzt für r_0 in U ein, so erhält man:

$$U_b = \frac{N}{2} bP(n) \left(\frac{nbP(n)}{amP(m)} \right)^{\frac{n}{m-n}} \left(1 - \frac{n}{m} \right)$$

irgendwo Vorzeichenfehler? oder doch nicht?

Angeblich richtiges Ergebnis:

$$U_b = \left(\frac{a^n P(m)^n m^m}{b^m P(n)^m n^n} \right)^{\frac{1}{n-m}} \left(\frac{m}{n} - 1 \right)$$

mit

(d) Der Zusammenhang zwischen n, m und dem isothermen Kompressionsmodul $K =$

$-V_0 \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T$ soll bei $T = 0$ gefunden werden.
Aus der angegebenen Beziehung und etwas Kettenregel folgt:

$$K = V \left.\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}V^2}\right|_{T=0} = V \left.\left(\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}r_0^2}\left(\frac{\mathrm{d}r_0}{\mathrm{d}V}\right)^2 + \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r_0}\frac{\mathrm{d}^2 r_0}{\mathrm{d}V^2}\right)\right|_{T=0}$$

Nach obiger Rechnung ist aber für $T = 0$

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r_0} = 0$$

Außerdem erhält man durch Ableiten:

$$\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}r_0^2} = \frac{N}{2}\left(-m(m+1)ar_0^{-m-2}P(m) + n(n+1)br_0^{-n-2}P(n)\right)$$

und wieder kann das Ergebnis für r_0 bei $T = 0$ von oben eingesetzt werden:

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}r_0^2}\right|_{T=0} = \frac{NnP(n)}{2}\left(\frac{nbP(n)}{maP(m)}\right)^{\frac{n+2}{m-n}}(n-m)$$

Über $r_0^3 = V/N$ erhalten wir:

$$\left(\frac{\mathrm{d}r_0}{\mathrm{d}V}\right)^2 = \frac{1}{9N^2 r_0^4}$$

und damit schließlich:

$$K = \frac{r_0^3 N}{9N^2 r_0^4}\frac{NnP(n)}{2}\left(\frac{1}{r_0}\right)^{n+2}(n-m) = \frac{nP(n)}{18}\left(\frac{nbP(n)}{maP(m)}\right)^{\frac{n+3}{m-n}}(n-m)$$

oder anders mit der selben Rechnung nur andere Dinge ausgeklammert:

$$K = \frac{1}{18}aP(m)r_0^{-m-3}m(n-m)$$

Zusammenh zwischen V_0, a, b, r_0 benutzen, um Gleichung zu vereinfachen

Musterlösung:

$$K = \frac{m}{9}(n-m)\frac{N/2 \cdot A}{V_0^{m/3+1}}$$

(A entspricht $P(M)$)

2. Aufgabe: Madelung-Konstante α

(a) Die Madelung-Konstante eines unendlich ausgedehnten, eindimensionalen Ionenkristalls im Abstand R soll berechnet werden.
Wir setzen $r_{ij} = p_{ij}R$ und erhalten dann

$$\alpha = \sum_{j}^{j\neq i} \frac{\pm 1}{p_{ij}}$$

Als Referenzion nehmen wir ein Ion weit vom Rand entfernt (da die Kette unendlich groß ist, ist das kein Problem). Die Kette ist rechts und links vom Ion symmetrisch. Betrachten wir eine Seite, so steigt p_{ij} mit jedem weiteren Ion um genau eins. Das Vorzeichen wechselt dabei immer. Es ist also

$$\alpha = 2\sum_{n} \frac{(-1)^n}{n}$$

Dies ist gerade die Potenzreihe von $\ln(1-x)$ für $x = -1$, also

$$\alpha = 2\ln(1-(-1)) = 2\ln 2$$

(b) Die Madelungkonstante eines ebenen quadratischen Kristallgitters soll zunächst bis zum nächsten Nachbarn (Abstand R), dann bis zum übernächsten (Abstand $2R$) und schließlich bis zum dritten (Abstand $3R$) berechnet werden.
Wir führen die Berechnung für die ersten drei Schritte aus:

(i) Im ersten Quadrat befinden sich insgesamt: ein negatives Ion im Abstand $\sqrt{2}$ und 2 positive im Abstand 1.

$$\alpha_1 = 2\frac{+1}{1} + \frac{-1}{\sqrt{2}} = 2 - \frac{1}{2}\sqrt{2} \approx 1.29$$

(ii) Im zweiten Quadrat kommen jetzt hinzu: ein negatives Ion im Abstand $2\sqrt{2}$, zwei negative Ionen im Abstand 2, 3 negative Ionen im Abstand $\sqrt{2}$, 2 positive Ionen im Abstand 1, 4 positive Ionen im Abstand $\sqrt{5}$

$$\alpha_2 = \alpha_1 - \frac{1}{2\sqrt{2}} - 2\frac{1}{2} - 3\frac{1}{\sqrt{2}} + 2\frac{1}{1} + 4\frac{1}{\sqrt{5}} \approx 1.607$$

(iii) Analog geht es so weiter:

$$\alpha_3 = \alpha_2 + \frac{4}{\sqrt{5}} - \frac{2}{2} - \frac{3}{2\sqrt{2}} + \frac{4}{\sqrt{13}} + \frac{2}{3} - \frac{4}{\sqrt{10}} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \approx 1.611$$

3. Aufgabe: Bariumoxid

(a) Die Bindungsenergie pro Ionenpaar soll für die hypothetischen Kristalle Ba^+0^- und $Ba^{2+}O^{2-}$ abgeschätzt werden.
Wir benutzen die Formel

$$U_b = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\varepsilon r_0}$$

und erhalten für Ba^+O^-

$$U_b = -1.46 \cdot 10^{-18}\ \text{J} = -9.115\ \text{eV}$$

und für $Ba^{2+}O^{2-}$

$$U_b = -5.841 \cdot 10^{-18}\ \text{J} = -36.46\ \text{eV}$$

jeweils pro Molekül.

(b) Es soll entschieden werden, welches der beiden Gitter das stabilere ist. Dazu sind folgende Informationen gegeben: Das erste Ionisierungspotential von Ba ist 5.19 eV, das zweite 9.96 eV, die Elektronenaffinitäten des ersten und zweiten Elektrons, die zum neutralen bzw. negativ geladenen O hinzugefügt werden, sind -1.5 eV und 9.0 eV.
Es ist für Ba^+O^-:

$$9.115 - 5.19 + 1.5 = 5.425$$

und für $Ba^{2+}O^{2-}$

$$36.46 - 5.19 - 9.96 + 1.5 - 9.0 = 13.81$$

Es wird also beim zweiten Molekül mehr Energie pro Molekül frei. Also bildet sich eher letzteres Molekül.

2. Übung

4. Aufgabe: Lennard-Jones-Potential

Gegeben war das Lennard-Jones-Potential

$$\varphi_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{6} \right]$$

Um auf die Form des letzten Übungsblattes zu kommen, setzen wir

$$a = 4\epsilon\sigma^6 \qquad b = 4\epsilon\sigma^{12} \qquad m = 6 \qquad n = 12$$

(a) Mit dem Ergebnis von Blatt 1 A1 c) soll mit den gemessenen Atomabständen nächster Nachbarn der Parameter σ errechnet werden. Die Ergebnisse sollen mit den experimentell gefundenen Werten verglichen werden. Außerdem war gegeben:

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 12.13 \qquad \sum_j p_{ij}^{-6} = 14.45$$

Auf dem letzten Übungsblatt hatten wir erhalten:

$$r_0 = \left(\frac{maP(m)}{nbP(n)} \right)^{\frac{1}{m-n}} = \sigma \left(2\frac{P(12)}{P(6)} \right)^{1/6}$$

Man erhält damit

	r_0 (nm)	σ_{exp} (nm)	σ_{rech} (nm)
Ne	0.313	0.274	0.287
Ar	0.376	0.340	0.345
Kr	0.401	0.365	0.368
Xe	0.435	0.398	0.399

Die Werte weichen vor allem bei den leichteren Edelgasen etwas ab. Die Begründung liegt in quantenphysikalischen Effekten.

(b) Mit dem Ergebnis von Blatt 1 A1 d) soll der Parameter ϵ berechnet werden. Das Kompressionsmodul für Krypton nahe am absoluten Nullpunkt war mit $K = 2.56 \cdot 10^9 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$ gegeben. Experimentell wurde ein Wert von $\epsilon = 2.25 \cdot 10^{-21}\text{J}$ gefunden.

Mit dem Ergebnis

$$K = \frac{1}{18} a P(m) r_0^{-3-m} m(n-m)$$

erhält man

$$a = \frac{18 K r_0^{3+m}}{P(m) m(n-m)} = 4\epsilon\sigma^m$$

und daraus

$$\epsilon = \frac{18 K r_0^{3+m}}{P(m) m(n-m) 4\sigma^m} \approx 2.51 \cdot 10^{-21} \text{ Nm}$$

(c) Aus den errechneten Werten soll die Bindungsenergie von Krypton für $T = 0$ berechnet werden. Experimentell ist $U_b = 11.2 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$.
Es ist bei diesem Potential

$$U_b = -2N\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^{12} P_{12} + \left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^{6} P_6 \right)$$

und mit den gegebenen Zahlenwerten erhält man:

$$U_b = 11.55 \text{ kJ/mol}$$

Gerechnet mit dem experimentellen ϵ.

5. Aufgabe: Kubisch-raumzentrierte Gitterstruktur

Das kubisch-raumzentrierte Gitter soll sowohl durch eine kubische Elementarzelle als auch durch eine primitive Elementarzelle dargestellt werden. Außerdem soll das Verhältnis der Volumina der beiden Zellen bestimmt werden.

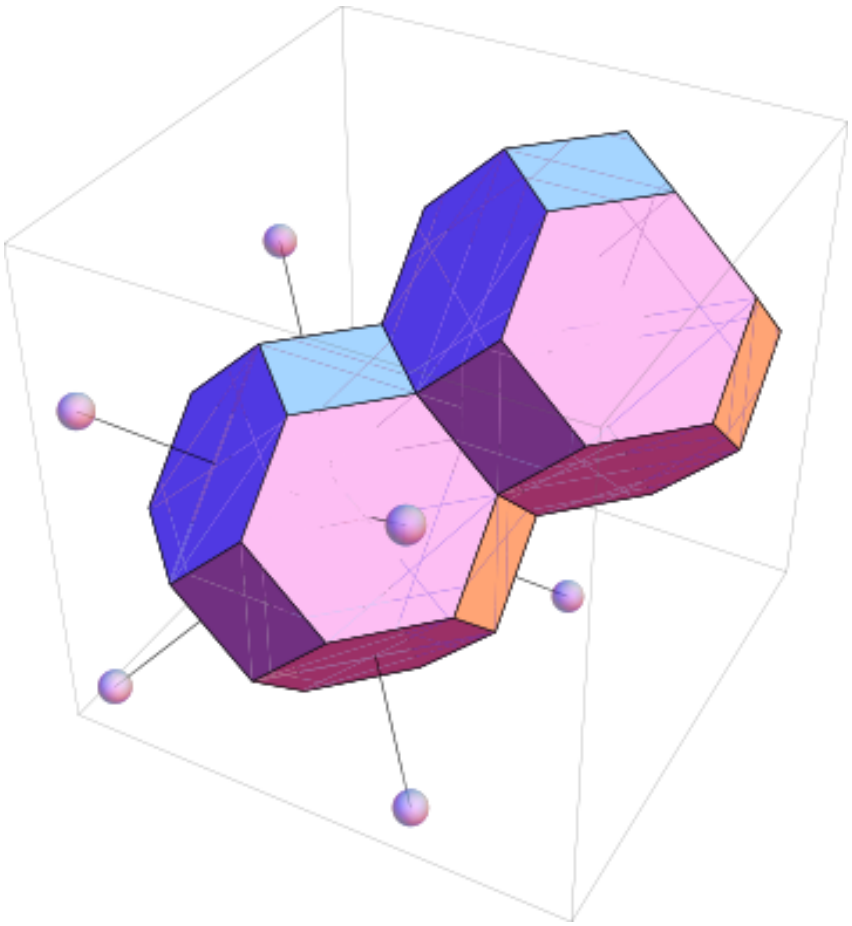


Abbildung 1: WSZ (farbig) und vierfache kubische Einheitszelle (schwarz)

Wigner-Seitz-Zelle (nicht gefragt! Eine Elementarzelle muss immer in der Form eines Parallelepipeds sein!)

Primitive Elementarzelle

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(-1,1,1)^T \qquad \vec{b} = \frac{a}{2}(1,-1,1)^T \qquad \vec{c} = \frac{a}{2}(1,1,-1)^T$$

Berechnet man $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}|$ so erhält man gerade das habe Volumen.

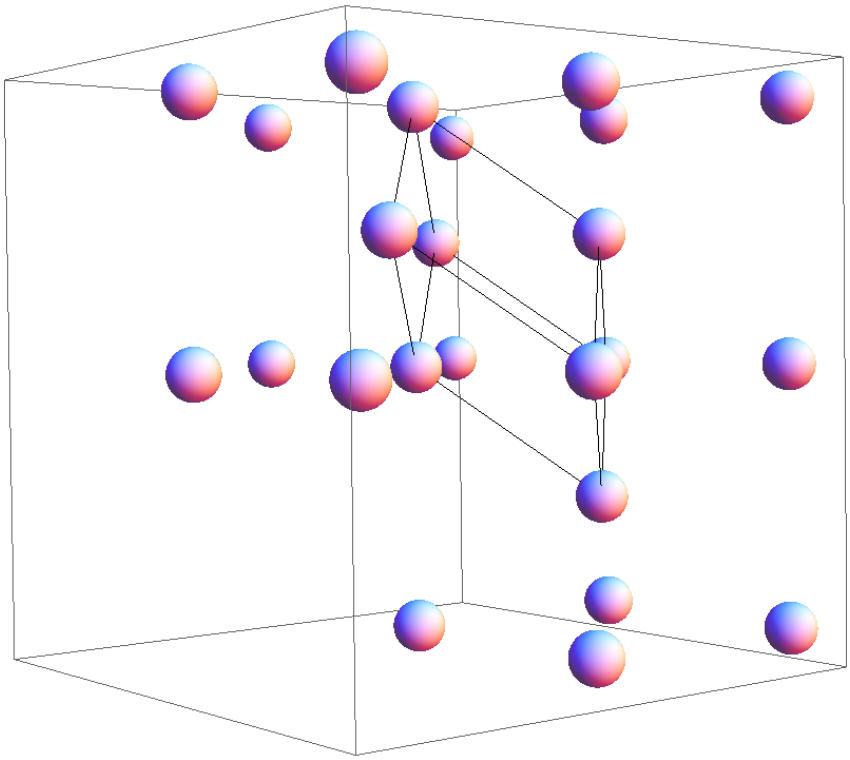


Abbildung 2: Primitive Einheitszelle (farbig) und achtfache kubische Einheitszelle (schwarz)

6. Aufgabe: ABC-Verbindung

Es wird eine zweidimensionale Struktur mit drei Elementen A, B, C betrachtet, die die folgenden Atomradien haben: $r_A = 2\ \mathring{A}, r_B = 1.2\ \mathring{A}, r_C = 0.8\ \mathring{A}$.

(a) Es soll angegeben werden, wie viele Atome jedes Typs in der primitiven Elementarzelle vorhanden sind. Das Ergebnis soll in der chemischen Formeleinheit $A_nB_mC_r$ angegeben werden.

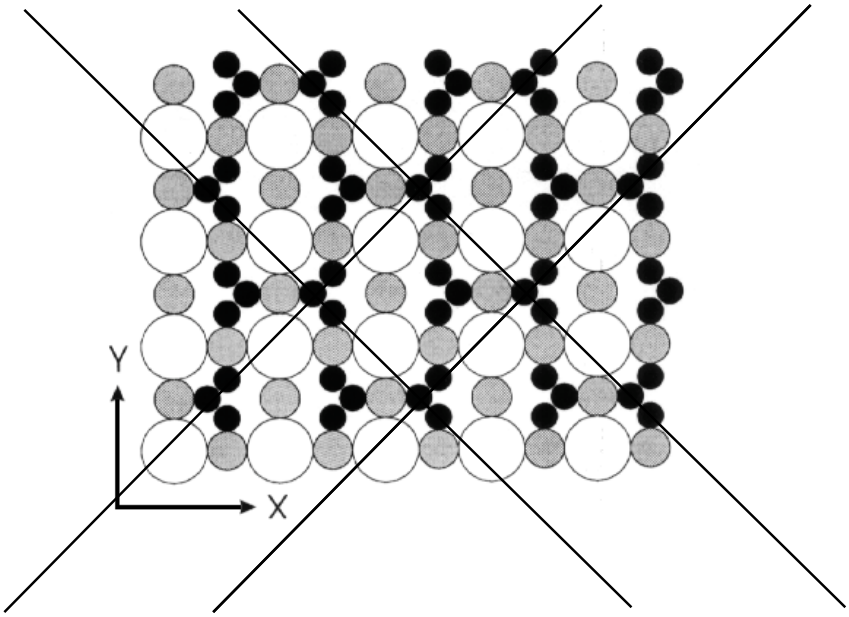


Abbildung 3: Mögliche Wahl der Einheitszelle

Wie man in der Zeichnung erkennt hat eine Zelle die Form $A_2B_4C_6$.

(b) Die Basisvektoren einer primitiven Elementarzelle sollen angegeben und die Wigner-Seitz-Zelle gezeichnet werden.
Die Basisvektoren sind offensichtlich gegeben durch

$$\vec{a} = 1/\sqrt{2}(1,1)^T \qquad \vec{b} = 1/\sqrt{2}(-1,1)^T$$

Die Wigner-Seitz-Zelle hat die selbe Form wie die oben eingezeichnete Elementarzelle, nur um 45 Grad gedreht.

(c) Die Symmetrieelemente sollen eingezeichnet werden. Außerdem wurde gefragt, welches 2D-Bravais-Gitter der Struktur zugrunde liegen könnte.
Als Bravais-Gitter könnte dies ein zweidimensionales rechteckiges Gitter (nur gedreht) sein. Die Symmetrieelemente des Gitters sind:

- Spiegelung an x- und y-Achse
- 4-zählige Drehung
- Inversion

Die Symmetrieelemente der Basis sind:

- Spiegelung an y-Achse
- 1-zählige Drehung

7. Aufgabe: Kubisch-flächenzentrierte Gitterstruktur

Das kubisch-flächenzentrierte Gitter ist eine dichtest gepackte Kristallstruktur.

(a) Die Gitterkonstante a soll durch den Abstand nächster Nachbarn r angegeben werden. Dabei wird angenommen, dass es harte Kugeln sind und direkter Kontakt nächster Nachbarn besteht.
Gehen wir eine Diagonale eines Kantenquadrates ab, so sehen wir (der Reihe nach): $1/2r$ einer Eck-Kugel, $1r$ der Mittelkugel und $1/2r$ der anderen Eckkugel. Das ergibt gerade $2r$. Dies muss der Länge der Diagonalen entsprechen, also

$$2r = \sqrt{a^2 + a^2} = a\sqrt{2} \implies a = r\sqrt{2}$$

Irgendwen auf den Kopf hauen, weil nicht dabei steht, ob es die Symmetrie der Basis oder des Gitters ist!

(b) Die Wigner-Seitz-Zelle soll gezeichnet werden. Ihr Volumen soll in Abhängigkeit von r angegeben werden.

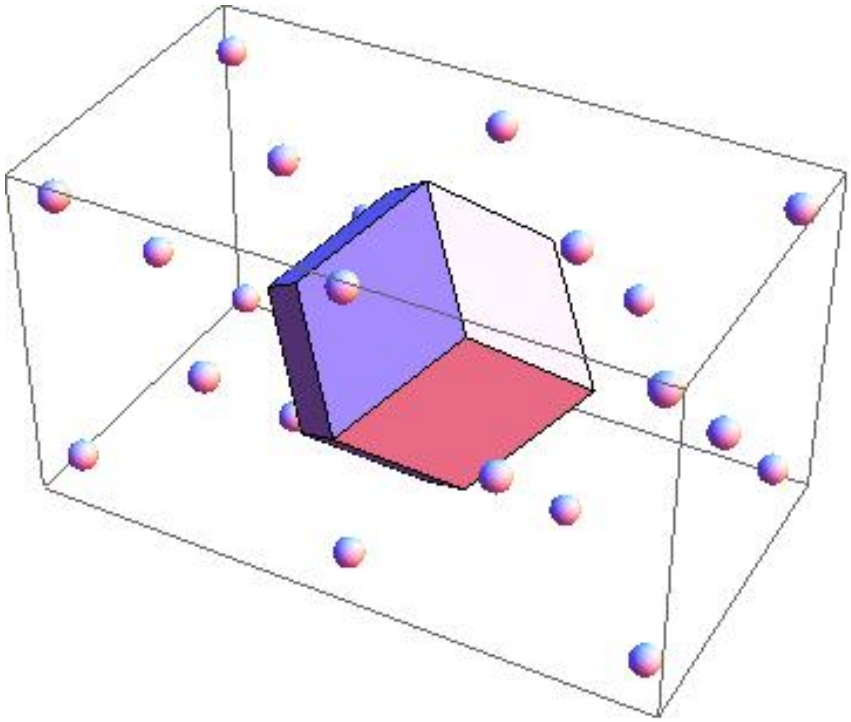


Abbildung 4: Primitive Einheitszelle (farbig) und doppelte kubische Einheitszelle (schwarz)

Trick: In kubische Zelle passen 4 Atome, 8 1/8 Atome an den Kanten + 6 1/2 Atome an den Seitenflächen = 4 Atome auf ein Volumen von a^3 . Da in der WS-Zelle nur

ein Atom vorkommen darf, folgt also $V = \frac{a^3}{4}$.

(c) Eine fcc-Elementarzelle soll gezeichnet werden. Die Atome innerhalb sind in dichtest gepackten hexagonalen Lagen angeordnet. Die Lagen sollen in der Zeichnung markiert werden und ihr Abstand soll in Abhängigkeit von r angegeben werden.

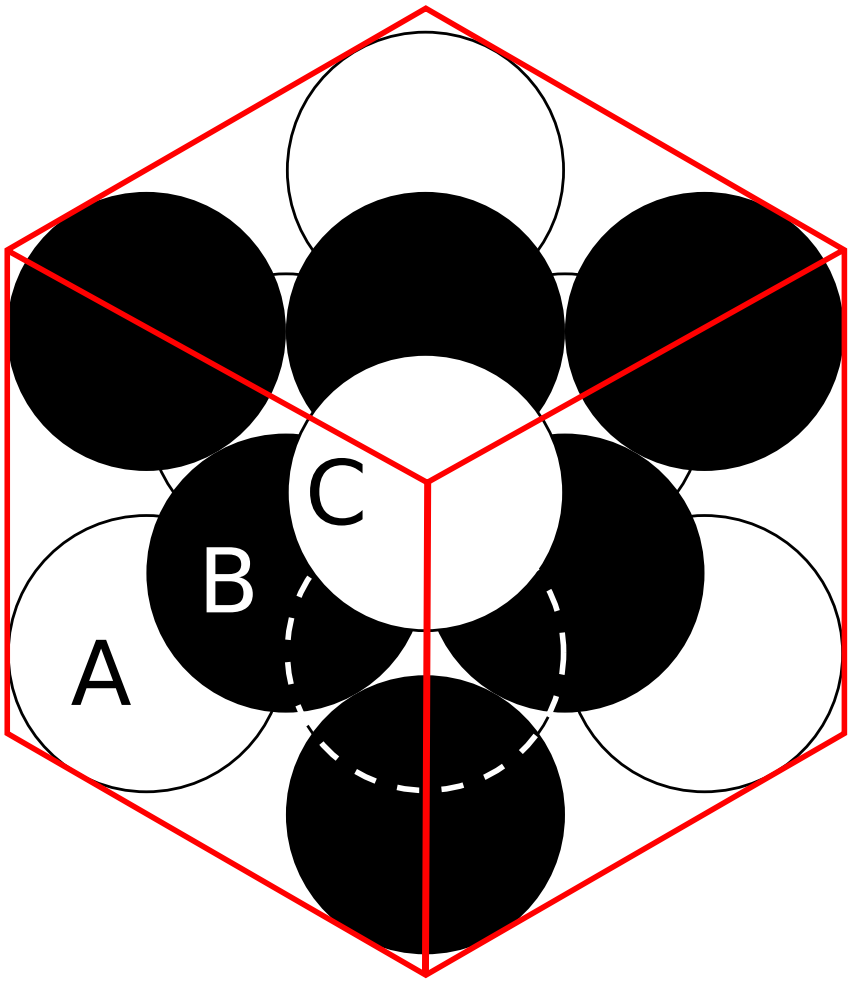


Abbildung 5: Schichtfolge beim fcc-Gitter

Der Gitternetzebenenabstand ergibt sich als Höhe einer dreiseitigen Pyramide mit Kantenlänge von r. Die Höhe beträgt deshalb

$$g = \frac{r}{3}\sqrt{6}$$

(d) Die Lage und der kleinste Abstand der (100)-, (110)-, und (111)-Ebenen des fcc-Gitters sollen bei Zugrundelegung der kubischen Elementarzelle und anschließend der primitiven Elementarzelle angegeben werden.

3. Übung

8. Aufgabe: Raumfüllung

(a) Die Raumfüllung soll für verschiedene Gitterstrukturen (sc, fcc, bcc) berechnet werden. Dabei soll angenommen werden, dass die Kristalle aus harten, sich berührenden Kugeln aufgebaut sind.
Wir betrachten zuerst die maximalen Radien der Kugeln. Sie sind gegeben durch die Hälfte des Abstandes nächster Nachbarn. Danach betrachten wir, wie viele Atome pro Einheitszelle vorhanden sind. Das Volumen einer Einheitszelle ist immer 1. Das Gesamtvolumen der Kugeln kann dann aus dem Radius und ihrer Anzahl über

$$V = \frac{4\pi N}{3} R^3$$

berechnet werden. man erhält

	sc	bcc	fcc
NN-Abstand	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
Radius	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}\sqrt{3}$	$\frac{1}{4}\sqrt{2}$
Anzahl	1	2	4
Volumen der Kugeln	$\frac{1}{6}\pi$	$\frac{1}{8}\sqrt{3}\pi$	$\frac{1}{6}\sqrt{2}\pi$
Packungsdichte	0.524	0.680	0.740

(b) Das Verhältnis $\frac{a}{c}$ und die Raumfüllung sollen für die hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp) berechnet werden.
Im Tut vorgerechnet:

$$a = 2r \quad c = 2h$$
$$V = \frac{\sqrt{2}}{12}a^3 = \frac{1}{3}Gh = \frac{1}{3}\frac{\sqrt{3}}{4}a^2 h$$
$$h = \sqrt{\frac{2}{3}}a$$
$$c = 2\sqrt{\frac{2}{3}}a$$

Von uns ausgerechnet: Wie wir im letzten Übungsblatt erhalten haben, ist $\frac{r}{3}\sqrt{6}$ die Höhe der Pyramide (r ist die Kantenlänge, also in diesem Fall der Kugelradius. Es

ist $r = a$). d ist die doppelte Höhe, also ist

$$\frac{c}{a} = \frac{2}{3}\sqrt{6}$$

Die Raumfüllung ist nach Definition genauso groß wie im fcc. Berechnung: Die Grundfläche eines Prismas ist gerade $m\frac{a}{2} = \frac{\sqrt{3}}{4}$. m ist die Mittelsenkrechte. Die Höhe ist c. Also ist das Volumen des Prismas:

$$V = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

In solch einem Prisma liegt insgesamt genau eine Kugel mit Volumen

$$V_K = \frac{4}{3}\pi\frac{1}{8}$$

Das Verhältnis ist also auch

$$\frac{\pi}{6}\sqrt{2} \approx 0.740$$

(c) Unter den eben errechneten Voraussetzungen soll die Dichte verschiedener Elemente berechnet werden: Barium (bcc) mit $a_{Ba} = 0.502$ nm, $m_{Ba} = 137.34\ \frac{\text{g}}{\text{mol}}$, Blei (fcc) mit $a_{Pb} = 0.495$ nm, $m_{Pb} = 207.19\ \frac{\text{g}}{\text{mol}}$, Magnesium (hcp) mit $a_{Mg} = 0.321$ nm, $m_{Mg} = 24.312\ \frac{\text{g}}{\text{mol}}$.
Es ist

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{N_A m_{\text{Kugel}}}{N_A V_E} = \frac{\frac{M}{N_A}\alpha}{\frac{4}{3}\pi r^3}$$

α ist die Raumdichte. (Eigentlich müsste man mit einrechnen, dass sich mehr als nur eine Kugel in jeder EZ befindet. Diese Zahl taucht aber sowohl im Nenner als auch im Zähler auf). Man erhält

$$\rho_{\text{Mg}} = 1724.99\ \text{kg/m}^3 \qquad \rho_{\text{Ba}} = 3604.57\ \text{kg/m}^3 \qquad \rho_{\text{Pb}} = 11339.1\ \text{kg/m}^3$$

(d) Die Raumfüllung für NaCl und CsCl soll berechnet werden. Außerdem soll beantwortet werden, warum nicht alle Ionenkristalle in einer CsCl-Struktur, obwohl es die höhere Koordinationszahl hat.
In einer NaCl-EZ befinden sich 4 Cl-Atome und 4 Na-Atome. Das ist ein Volumen von 553.72 A^3. Die EZ hat jedoch ein Volumen von $(5.62\ \text{A})^3 = 117.5\ \text{A}^3$. Das macht eine Raumfüllung von 0.64. Im CsCl-Gitter befindet sich s1 Cs-Atom und 1 Cl-Atom. Das macht ein Volumen von 45.06 A^3 wohingegen die EZ ein Volumen von 70.44 A^3 hat. Also ebenfalls eine Raumfüllung von 0.64. Der NaCl-Kristall in einem CsCl-Gitter

hätte eine viel schlechtere Raumfüllung.

9. Aufgabe: Hohlräume

In manchen einfachen Kristallstrukturen entstehen Hohlräume zwischen den Atomen, die unter bestimmten Bedingungen mit anderen Atomen besetzt werden können. Für die sc-, bcc- und fcc-Struktur soll angegeben werden, wo die stabilen Zwischengitterplätze sind und welche Lagersymmetrie sie haben. Außerdem soll der Durchmesser einer harten Kugel berechnet werden, die genau in den Zwischenraum passt.

sc In der Mitte des Würfels ist Platz für ein Atom mit dem Radius

$$r = \frac{1}{2}\left(\sqrt{3} - 1\right)$$

Die Symmetrielemente sind Inversion, Drehung (beliebige Achse durch Punkt, beliebiger Winkel) und Spiegelung (beliebige Achse durch Punkt) -> Oktaedrische Symmetrie

bcc Entweder an den Kanten mit Radius

$$r = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{4}$$

mit Symmetrielementen 4-zählige Drehung (Drehachse parallel zu einer Figurenachse durch Mittelpunkt), Inversion (am Mittelpunkt), Spiegelung (selben Achsen wie Drehung) oder an den Flächen mit dem selben Radius und den selben Symmetrieelementen -> Tetraedische Symmetrie

fcc Entweder in der Mitte des Würfels mit Radius

$$r = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

und den selben Symmetrielementen wie in sc oder jeweils bei 1/4, 1/4, 1/4 (in einem Tetraeder) mit

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

10. Aufgabe: Millersche Indizes

Es soll mit Millerschen Indizes und dem reziproken Gitter gerechnet werden.

(a) Es soll gezeigt werden, dass jeder reziproke Gittervektor $\vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$ senkrecht auf den Ebenen des Ortsraumes (hkl) steht.
Eine der Ebenen aus (hkl) geht durch die Punkte

$$A_1 = \frac{\vec{a}_1}{h} \qquad A_2 = \frac{\vec{a}_2}{k} \qquad A_3 = \frac{\vec{a}_3}{l}$$

Zwei Vektoren auf der Ebene sind also z.B.

$$\vec{v}_1 = \frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h} \qquad \vec{v}_2 = \frac{\vec{a}_3}{l} - \frac{\vec{a}_1}{h}$$

Schreiben wir $\vec{G}_{hkl}$ mit den Definitionen der $\vec{g}_i$ um, so erhalten wir

$$\vec{G}_{hkl} = 2\pi \left(h\frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} + k\frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_3)} + l\frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_3)} \right)$$

Multiplizieren wir jetzt diesen Vektor mit $\vec{v}_1$ oder $\vec{v}_2$, so fallen viele Terme weg, da z.B. $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ senkrecht zu $\vec{a}_2$ ist. Man erhält z.B.

$$\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{v}_1 = 2\pi \left(k\frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_3)}\frac{\vec{a}_2}{k} - h\frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}\frac{\vec{a}_1}{h} \right) = 0$$

und für den anderen analog.

(b) Es soll gezeigt werden, dass der Abstand d_{hkl} zweier benachbarter Netzebenen durch $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$ gegeben ist.

$$d = \frac{\vec{x}\vec{G}}{|\vec{G}|} \quad \vec{x} = \frac{1}{h}\vec{a}_1$$

$$\vec{x}\vec{G} = 2\pi \implies d = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

(c) Die Basisvektoren einer primitiven Elementarzelle sollen für die fcc- und bcc-Struktur in kartesischen Koordinaten angegeben werden. Die Symmetrie der reziproken Gitter soll angegeben werden.
fcc:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1,0,1)^T, \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1,1,0)^T, \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(0,1,1)^T$$

bcc:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-1,1,-1)^T, \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1,1,-1)^T, \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(-1,1,1)^T$$

(d) Für ein sc-Gitter soll der Abstand d_{hkl} der Netzebenen und der Winkel Φ zwischen

den zwei Netzebenen $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ berechnet werden.

$$\cos\Phi = \frac{\vec{G}_1\vec{G}_2}{|\vec{G}_1||\vec{G}_2|}$$

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

$$|\vec{G}_{hkl}| = \sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

$$d = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

11. Aufgabe: Strukturfaktor

Der Strukturfaktor S_{hkl} soll für CsCl (sc) berechnet werden. Außerdem soll beantwortet werden, wie sich der Strukturfaktor ändern würde, wenn Cs und Cl nicht unterscheidbar wären.
Die Basis des CsCl-Kristalles besteht aus einem Cäsium bei (0,0,0) und einem Chlorid bei 1/2(1,1,1). Das reziproke Gitter ist wieder einfach kubisch und die Zahlen bleiben gleich. Es ist also

$$\begin{aligned} S_{hkl} &= \sum_i f_i \exp\left(2\pi i(x_i h + y_i k + z_i l)\right) \\ &= f_{Cs}\exp\left(2\pi i(0h+0k+0l)\right) + f_{Cl}\exp\left(2\pi i(1/2h+1/2k+1/2l)\right) \\ &= f_{Cs} + f_{Cl}\exp\left(\pi i(h+k+l)\right) \\ &= f_{Cs} + f_{Cl}(-1)^{(h+k+l)} \end{aligned}$$

Falls $h+k+l$ gerade ist, entspricht dies $f_{Cs}+f_{Cl}$, ansonsten $f_{Cs}-f_{Cl}$. Könnte man die beiden nicht unterscheiden (wäre also f gleich), so ist det Strukturfaktor 0 wenn $h+k+l$ ungerade ist.

4. Übung

12. Aufgabe: Strukturfaktoren

(a) Der Strukturfaktor für die NaCl-Struktur soll berechnet werden. Außerdem soll der Übergang der NaCl-Struktur zum primitiven sc- bzw. einatomaren fcc-Gitter diskutiert werden.

Wir wählen als unsere Basis:

$$\text{Na bei } (0,0,0),(1/2,1/2,0),(0,1/2,1/2),(1/2,0,1/2)$$

$$\text{Cl bei } (0,0,1/2),(1/2,0,0),(0,1/2,0),(1/2,1/2,1/2)$$

Man erhält dann:

$$S_{hkl} = f_{\text{Na}}\left(1+\exp(\pi i(h+k))+\exp(\pi i(k+l))+\exp(\pi i(h+l))\right)+$$

$$f_{\text{Cl}}\left(\exp(\pi i(h+k+l))+\exp(\pi ih)+\exp(\pi ik)+\exp(\pi il)\right)$$

Betrachten wir jetzt zwei Grenzfälle:

Primitiv kubisch Hier wären die beiden Atome ununterscheidbar. Setzen wir

$$u = \exp(\pi il)+1 \qquad v = \exp(\pi ik)u+u$$

So ist

$$S_{hkl} = \exp(\pi ih)v+v$$

Ist also ein beliebiger Indizee ungerade, dann ist S Null. Es treten also nur die Reflexe aus, bei denen alle Indizes gerade sind). In diesem Fall ist gerade

$$S_{hkl} = 8f$$

fcc-Gitter Dieses erhalten wir, wenn wir z.B. die Cl-Atome weglassen. Man erhält also

$$S_{hkl} = f\left(1+\exp(\pi i(h+k))+\exp(\pi i(k+l))+\exp(\pi i(h+l))\right)$$

Ist einer der Indizes ungerade und alle anderen gerade, dann erhält man Null. Ist einer gerade und alle anderen ungerade, dann erhält man auch Null. Nur im Fall alle gerade oder alle ungerade erhält man

$$S = 4f$$

(b) Bei CsI wird der (100)-Reflex ausgelöscht, bei CsCl ist er klar vorhanden, obwohl beide eine einfach kubische Struktur haben. Dieses Ergebnis soll erklärt werden.
Der (100)-Reflex wird ausgelöscht (Summe ist ungerade), wenn die beiden Atome die selben Atomstreufaktoren besitzen. Da I (53) und Cs (55) im Gitter die selbe

Elektronenkonfiguration besitzen, besitzen sie für Röntgenstrahlung auch fast selbe Atomstreufaktoren. Deshalb wird der Reflex ausgelöscht.

13. Aufgabe: Streubedingungen verschiedener Experimente

Die Streubedingungen sollen für das Laue-, das Drehkristall- und das Debye-Scherrer-Verfahren mit der Ewald-Konstruktion erklärt werden.
Reziproker Gittervektor:

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

Abstand zweier benachbarter Netzebenen:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

$$\sin\theta = \frac{1}{2}\frac{|\vec{K}|}{|\vec{k}_0|} \implies |\vec{K}| = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta = |\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

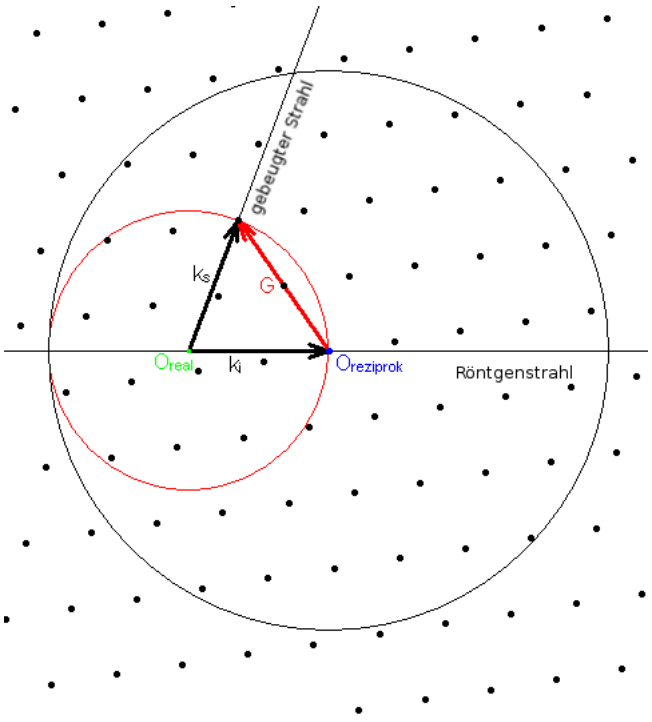
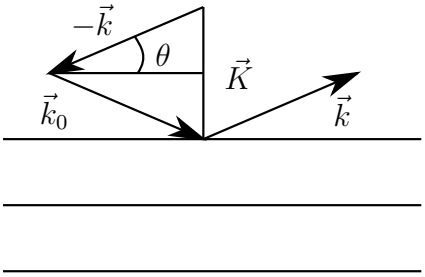


Abbildung 6: Quelle: www.wikipedia.org



Beim Laueverfahren ergeben sich im Bereich der großen Kugel ohne die kleine Kugel Reflexe. Beim Drehkristall dreht sich das Gitter und an allen Punkten, die in der großen Kugel ohne die kleine Kugel landen, ergeben sich Reflexe.

14. Aufgabe: Beugung am bcc-Gitter

(a) Die fundamentalen Gittervektoren des reziproken Gitters beim bcc-Gitter mit Gitterkonstante a sollen bestimmt werden.
Beim bcc-Gitter sind die normalen Gittervektoren:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}$$

Die reziproken Gittervektoren sind dann

$$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix} \quad \vec{b}_2 = 2\pi\frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix} \quad \vec{b}_3 = 2\pi\frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$$

(b) Mit der Ewald-Konstruktion soll gefunden werden, welche Energie Röntgenstrahlen mindestens haben müssen, damit sie beim Einfall parallel zur (100)-Richtung im bcc-Gitter gebeugt werden.

Wir konstruieren die Ewald-Kugel mit Vektoren. Der erste $\vec{k}$-Vektor geht von (000) nach (k00), also

$$\vec{k} = (k, 0, 0)^T$$

Die restlichen Vektoren sind wie oben beschrieben. Von der Spitze des $\vec{k}$ geht jetzt eine Kugel mit Radius k ab. Sie muss jetzt einen der Punkte am ende der drei Vektoren $\vec{b}_i$ treffen. Die beiden nächsten sind $\vec{b}_2$ und $\vec{b}_3$. Der Abstand zu ihnen beiden ist der selbe. Nämlich

$$\Delta l = \sqrt{\left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2}$$

Dieser muss jetzt gerade k entsprechen. Das ist gerade der Fall für

$$k = \frac{2\pi}{a}$$

(c) Es soll beantwortet werden, bei welchen Winkeln Beugung beobachtet wird und an welchen Gitterebenen die Beugung auftritt.
Eine zurückgestreute Welle wird an der (200)-Ebene gestreut und zwar im Winkel $\theta_1 = 90°$. Eine andere wird an (110) gestreut und zwar im Winkel $\theta_2 = 45°$ und eine weitere an $(1\bar{1}0)$ im Winkel $\theta_3 = -45°$.

15. Aufgabe: Debye-Scherrer

Um einen Kristall, der mit Röntgenstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 0.154$ nm bestrahlt wird, ist ein Filmstreifen mit einem Durchmesser von $d = 57.3$ mm aufgebaut. Bei einer Debye-Scherrer-Messung wurden verschiedene Abstände a_i zwischen symmetrischen Linien gemessen. Die Linien sollen indiziert werden. Die Gitterkonstante soll berechnet und die Kristallstruktur bestimmt werden. Daraus soll auf das Element geschlossen werden.
Bragg-Bedingung ($n = 1$)):

$$\lambda = 2\delta \sin\theta$$

$$\varphi_1 = \frac{a_1}{d} = 2\theta_1$$

Der Netzebenenabstand ist dann also

$$\delta_i = \frac{\lambda}{2 \sin \frac{a_i}{2d}}$$

Damit berechnen wir nun für jeden Abstand der symmetrischen Linien den Netzebenenabstand:

a [mm]	43.40	50.60	74.41	90.21	95.21
δ [Å]	2.08	1.80	1.27	1.09	1.04

Wir betrachten ein paar Verhältnisse und sehen:

δ [Å]	2.08	1.80	1.27	1.09	1.04
$\delta \cdot \sqrt{x} = 3.602$ Å	3	4	8	11	12
hkl	111	200	220	311	222

Die Gitterkonstante ist also 3.602 Å. Offensichtlich sind dies nur Reflexe, bei denen alle Indizees gerade oder ungerade sind. Dies deutet auf ein fcc-Gitter hin (ein bcc-Gitter ist

es nicht, da dann z.B. 111 verschwinden müsste, ein sc-Gitter ist es auch nicht, weil ja schließlich ungerade Indizes auftreten). Das nächstgelegene Element wäre Kupfer.

5. Übung

16. Aufgabe: Dispersionsrelation für lineare Ketten

Die Dispersionsrelation soll für verschiedene Teilchenanordnungen hergeleitet werden. Der Abstand zwischen den Teilchen ist d, die Gitterkonstante a. Außerdem sollen die Dispersionskurven gezeichnet werden. Die Lösungen sollen dann in den Grenzfall der einatomigen linearen Kette mit gleicher Federkonstante überführt werden.
Die beschriebene Situation sieht wie folgt aus:

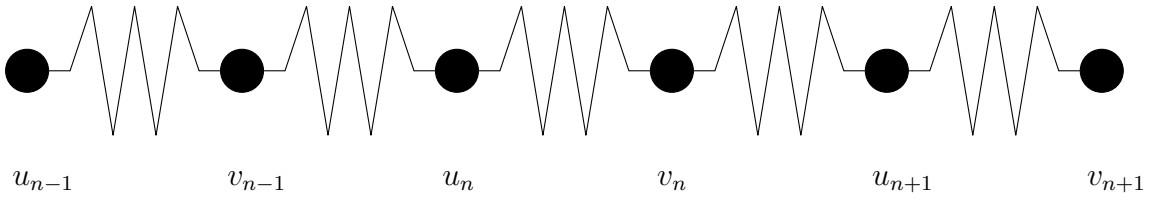


Abbildung 7: Allgemeine lineare Kette mit wechselnden Parametern

(a) Die einzelnen Kugeln haben eine identische Masse m. Die Federn zwischen u und v nach rechts haben jeweils eine Federkonstante von D_1, nach links eine von D_2.

Wir erhalten die beiden Kräftegleichungen

$$m\ddot{u}_n = D_1(v_n - u_n) - D_2(u_n - v_{n-1})$$
$$m\ddot{v}_n = D_2(u_{n+1} - v_n) - D_1(v_n - u_n)$$

Als Ansatz benutzen wir

$$u_n = u_0 e^{i(kna-\omega t)} \qquad v_n = v_0 e^{i(kna-\omega t)}$$

und erhalten damit die Differenzialgleichungen

$$-m\omega^2 u_0 = D_1(v_0 - u_0) - D_2(u_0 - v_0 e^{-ika}) \iff 0 = u_0(m\omega^2 - D_1 - D_2) + v_0(D_1 + D_2 e^{-ika})$$
$$-m\omega^2 v_0 = D_2(u_0 e^{ika} - v_0) - D_1(v_0 - u_0) \iff 0 = u_0(D_1 + D_2 e^{ika}) + v_0(m\omega^2 - D_1 - D_2)$$

Diese besitzen nur dann eine nichtriviale Lösung, wenn die Determinante verschwindet, also muss

$$(m\omega^2 - D_1 - D_2)^2 = (D_1 + D_2 e^{-ika})(D_1 + D_2 e^{ika})$$

gelten. Dies führt auf

$$\omega^4 m^2 - 2m\omega^2(D_1 + D_2) + D_1^2 + D_2^2 + 2D_1 D_2 - D_1^2 - D_2^2 - D_1 D_2 \left(e^{-ika} + e^{ika}\right) = 0$$

Unter Ausnutzung trigonometrischer Umformungen erhält man

$$\omega^4 + \frac{2}{m}(D_1 + D_2)\omega^2 + \frac{4D_1 D_2}{m^2} \sin^2 \frac{ka}{2} = 0$$

und damit die Lösungen

$$\omega_\pm^2 = \frac{D_1 + D_2}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{(D_1 + D_2)^2 - 4D_1 D_2 \sin^2 \frac{ka}{2}}$$

Setzt man jetzt $D_1 = D_2 = D$ so erhält man gerade

$$\omega_\pm^2 = \frac{2D}{m} \pm \frac{2D}{m}\sqrt{1 - \sin^2 \frac{ka}{2}} = \frac{2D}{m}(1 \pm \left|\cos \frac{ka}{2}\right|)$$

was der Lösung einer einatomigen linearen Kette entspricht, da in diesem Beispiel a doppelt so groß gewählt wurde.

(b) Die Federkonstanten auf beiden Seiten sind gleich (D), die Massen von u sind m, die von v sind M.

Es ergeben sich wieder zwei Kräftegleichungen (für u und v):

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_n &= D(v_n - u_n) - D(u_n - v_{n-1}) = -D(2u_n - v_n - v_{n-1}) \\ M\ddot{v}_n &= D(u_{n+1} - v_n) - D(v_n - u_n) = -D(2v_n - u_n - u_{n+1}) \end{aligned}$$

Als Ansatz benutzen wir wieder

$$u_n = u_0 e^{i(kna - \omega t)} \qquad v_n = v_0 e^{i(kna - \omega t)}$$

Setzen wir das ein und vereinfachen, erhalten wir:

$$
\begin{aligned}
-m\omega^2 u_0 &= -D(2u_0 - v_0 - v_0 e^{-ika}) \quad &\Longleftrightarrow 0 &= u_0(m\omega^2 - 2D) + v_0(De^{-ika} + D) \\
-M\omega^2 v_0 &= -D(2v_0 - u_0 - u_0 e^{ika}) \quad &\Longleftrightarrow 0 &= u_0(D + De^{ika}) + v_0(M\omega^2 - 2D)
\end{aligned}
$$

Damit dieses Gleichungssystem eine nichttriviale Lösung hat, muss die Determinante Null sein. Also

$$
(m\omega^2 - 2D)(M\omega^2 - 2D) = D^2(1 + e^{-ika})(1 + e^{ika})
$$

Wir nutzen

$$
e^{ika} + e^{-ika} = 2\cos ka \qquad 1 - \cos ka = 2\sin^2 \frac{ka}{2}
$$

und erhalten die Gleichung

$$
\omega^4 - 2D\omega^2 \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) + \frac{4D^2}{mM} \sin^2 \frac{ka}{2} = 0
$$

und damit die Lösung

$$
\omega_\pm^2 = D\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm D\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM} \sin^2 \frac{ka}{2}}
$$

Setzt man $m = M$, so erhält man aus den beiden Lösungen

$$
\omega_\pm^2 = \frac{2D}{M} \pm \frac{2D}{M}\sqrt{1 - \sin^2 \frac{ka}{2}} = \frac{2D}{M} \pm \frac{2D}{M} \left|\cos \frac{ka}{2}\right|
$$

das schon bekannte Ergebnis, da wir in diesem Beispiel a doppelt so groß gewählt haben.

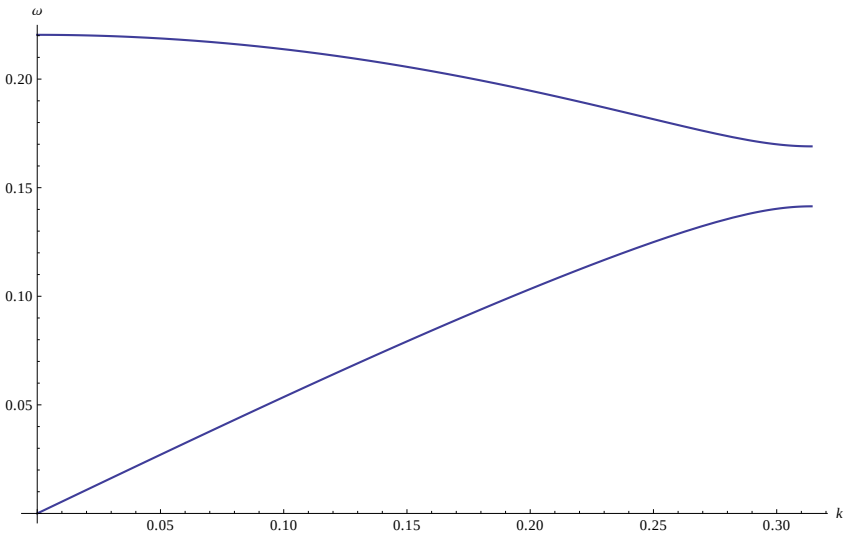


Abbildung 8: Bild für beide (!!) Beispielaufgaben

17. Aufgabe: Wellengleichung

Es soll gezeigt werden, dass für große Wellenlängen ($\lambda >> a$) gezeigt werden, dass die Bewegungsgleichungen der einatomigen linearen Kette $m\ddot{u}_n = -D(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})$ zur Wellengleichung des elastischen Kontinuums vereinfacht werden kann: $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2_{\text{Schall}} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
Wir benutzen die Taylorreihenentwicklung zweier verketteter Funktionen:

$$f(g(x)) \approx f(g(0)) + g'(0)f'(g(0))x + \frac{1}{2}\left(g'(0)^2 f''(g(0)) + f'(g(0))g''(0)\right)x^2 \ldots .$$

Nun ist

$$u_n = u(n(x = na)) \qquad u_{n-1} = u(n(x = na - a)) \qquad u_{n+1} = u(n(x = na + a))$$

Es ist also $f = u$, $g = n$ und

$$x = na \qquad n' = 1/a$$

Wir erhalten also die Näherungen:

$$u_{n-1} = u_n - u'_n + \frac{1}{2}u''_n \qquad u_{n+1} = u_n + u'_n + \frac{1}{2}u''_n$$

und daraus:

$$\ddot{u} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\frac{D}{m}(-u'') = \frac{D}{m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

mit $c = \sqrt{D/m}$ erhalten wir die Behauptung.

Noch ein a^2 suchen

18. Aufgabe: Transversale Moden im fcc-Gitter

Es soll gezeigt werden, dass zwei transversale Moden im fcc-Gitter die gleiche Frequenz haben, wenn $\vec{k}$ parallel zur [100]- oder zur [111]-Richtung ist.
Wenn man die Ebenen einzeichnet, sieht man, dass die Atome auf den Ebenen den gleichen Abstand haben, daraus folgt, dass die zwei transversalen Moden die gleiche Frequenz haben.
Wir vergleichen zwei Moden senkrecht zur (100)-Richtung, welche senkrecht aufeinander stehen. Wir wählen zum Beispiel die beiden Würfelkanten unten und links. Alle Atome auf den beiden Ebenen haben jeweils paarweise den selben Abstand zur Achse. Die Schwingfrequenz ist abhängig von dem Abstand und deshalb breitet sich eine Mode auf beiden Ebenen gleich schnell aus. Jede beliebige Mode lässt sich als Linearkombination dieser beiden Grundmoden schreiben.
Für die andere Richtung analog.

6. Übung

19. Aufgabe: Strahlen zur Untersuchung

Die Energien für Elektronen, Neutronen und Photonen bei einer Wellenlänge von $\lambda = 0.2$ nm sollen berechnet werden. Außerdem soll berechnet werden, bei welcher Temperatur Elektronen und Neutronen diese mittlere kinetische Energie haben.
Benutze

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

und

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

für die Formel

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

. Für die thermische Energie benutze

$$E = \frac{3}{2} k_B T$$

und erhalte

$$T = \frac{2E}{3k_B}$$

Man erhält für das Elektron eine Energie von 37.6 eV = $6.03 \cdot 10^{-18}$ J und eine Temperatur von 291 kK und für das Neutron eine Energie von 0.02 eV = $3.28 \cdot 10^{-21}$ J und eine

Temperatur von 155 K. Für das Photon rechnen wir mit

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

und erhalten eine Energie von 6.2 keV.

20. Aufgabe: LiF-Phononen

Neutronen mit der Wellenlänge $\lambda_0 = 1.80$ Å werden an einem LiF-Einkristall, der ein fcc-Gitter mit einer Gitterkonstanten von $a = 4.02$ Å hat, gestreut. Probe, Detektor und Neutronenquelle spannen eine Ebene parallel zur (001)-Ebene des Kristalls auf. Wenn der Neutronenstrahl parallel zur [100]-Richtung einfällt, beobachtet man unter einem Winkel von 30° gestreute Neutronen mit einer Wellenlänge von $\lambda = 1.15$ Å.

(a) Es soll erklärt werden, ob Phononen erzeugt oder vernichtet werden und warum die Ewald-Konstruktion hier nicht verwendet werden kann.

Die Wellenlänge des ausgestrahlten Lichtes ist kleiner als die des eingestrahlten. Die Frequenz ist also größer geworden und damit die Energie ebenfalls. Die fehlende Energie ist also bei der Vernichtung eines Phonons umgewandelt worden. Wir können deshalb die Ewaldkugel nicht verwenden (da die Energie der Strahlung nicht konstant ist)

(b) Die Frequenz der Phononen soll unter der Annahme der Ein-Phonon-Streuung berechnet werden.

Es gilt die Energieerhaltung

$$E_{n,1} = -E_p + E_{n,2}$$

mit für die Phononen

$$E = h\nu$$

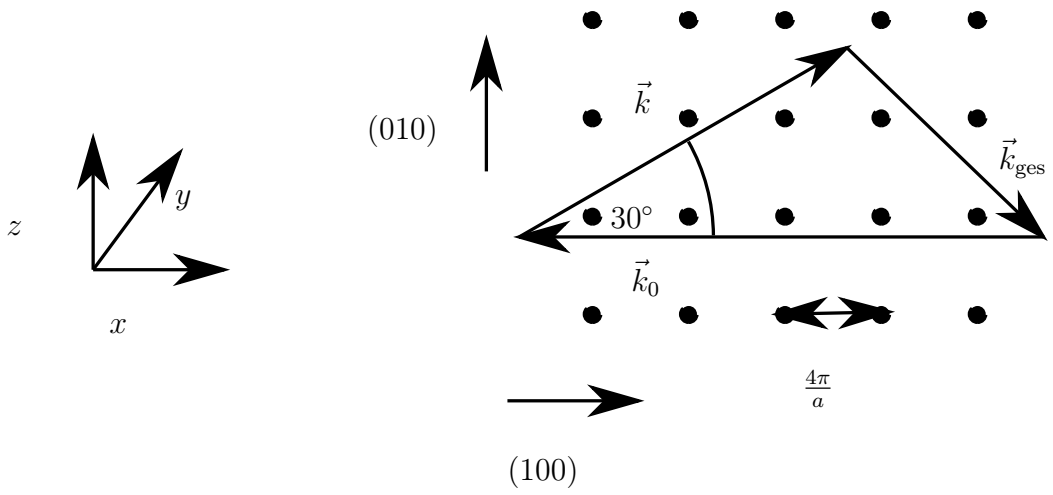
und für die Neutronen wie oben

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

Man erhält also

$$\nu_p = \frac{E_p}{h} = \frac{E_{n,1} - E_{n,2}}{h} = \frac{h}{2m\lambda_0^2} - \frac{h}{2m\lambda^2} \approx 8.85 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$$

(c) Der Streuvektor soll berechnet und der Streuvorgang im reziproken Raum skizziert werden.



$\vec{k}$ sei der Vektor der emmitiierten Strahlung, $\vec{k}_0$ die der einfallenden Strahlung und $\vec{k}_{\text{ges}}$ der Wellenvektor. Die nächste Verbindung zu einem Gitterpunkt ist der Phononenwellenvektor.

$$|\vec{k}_0| = \frac{2\pi}{1.8}\mathring{A}^{-1} = 3.49 \cdot 10^{10}\frac{1}{\text{m}}$$

$$|\vec{k}| = 5.46 \cdot 10^{10}\frac{1}{\text{m}}$$

$$k_x = |k|\cos\alpha = \frac{|k|a}{4\pi}\cos\alpha$$

$$k_y = |k|\sin\alpha = \frac{|k|a}{4\pi}\sin\alpha$$

$$\vec{k}_0 = \frac{4\pi}{a}\begin{pmatrix}1.12\\0\\0\end{pmatrix}$$

$$\vec{k} = \frac{4\pi}{a}\begin{pmatrix}1.52\\0.88\\0\end{pmatrix}$$

$$\vec{k}_{\text{ges}} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \frac{4\pi}{a}\begin{pmatrix}0.4\\0.88\\0\end{pmatrix}$$

$$\vec{G} = \frac{4\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$$

(d) Der Phononenwellenvektor $\vec{q}$ soll in SI-Einheiten angegeben werden. $\vec{k}$ ist die ausfal-

lende, $\vec{k}_0$ die einfallende Strahlung. $\vec{k}_{\text{ges}}$ ist der Wellenvektor.

$$\vec{k}_{\text{ges}} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G} + \vec{q}$$

$$\implies \vec{q} = \vec{k}_{\text{ges}} - \vec{G} = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 0.4 \\ -0.12 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.25 \\ -0.38 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{m}}$$

$$|\vec{q}| = 1.3 \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{m}}$$

21. Aufgabe: Schallgeschwindigkeit in Wasser

Ein monochromatischer Lichtstrahl mit $\lambda = 632.8$ nm wird in Wasser mit Brillouin-Streuung gestreut. Bei einem Winkel von 90° wird ein Brillouin-Seitenband mit einer Verschiebung von $\Delta\nu = 4.3 \cdot 10^9$ Hz zur Zentrallinie erzeugt. Die Schallgeschwindigkeit von Wasser bei Zimmertemperatur soll berechnet werden, wenn der Brechungsindex von Wasser 1.33 beträgt. Außerdem soll beantwortet werden, welche Annahme man machen muss.
Es gilt Impulserhaltung sowie Energieerhaltung. Wir nehmen hierbei an, dass wir keinen weiteren Gittervektor abziehen müssen und dass nur ein Phonon emittiert wird. Dieses muss eine Frequenz von (aufgrund der Energieerhaltung)

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega_1 + \hbar\omega \implies \hbar\omega = h\Delta\nu \implies \omega = 2\pi\Delta\nu = 2.7 \cdot 10^{10}\ 1/\text{s}$$

haben. Außerdem gilt noch die Impulserhaltung in beiden Richtungen, also in x-Richtung:

$$k_{\text{in}} = \frac{2\pi n}{\lambda_0} = \cos\phi K$$

und in y-Richtung:

$$-k_{\text{aus}} = -\frac{2\pi n}{\lambda_1} = \frac{2\pi n}{\lambda_0} - 2\pi n\Delta\nu = \sin\phi\vec{K}$$

Man erhält durch Dividieren der beiden Gleichungen eine Beziehung für den Tangens und daraus dann den Winkel und schließlich durch Einsetzen in eine der beiden Gleichungen (am besten die erste) dann den Wert für K und schließlich die Schallgeschwindigkeit v mit

$$v \approx 1446.67\ \text{m/s}$$

Wir nehmen hier an, dass sich eine Schallwelle wie ein Phonon ausbreitet.

22. Aufgabe: Thermischer Ausdehnungkoeffizient

Der lineare thermische Ausdehnungskoeffizient

$$\alpha = \frac{1}{3V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{3B}\left(\frac{\partial r}{\partial T}\right)_V$$

war gegeben. Es soll gezeigt werden, dass gilt: $\alpha = \gamma \frac{c_v}{3B}$. Außerdem soll der Ausdruck für γ angegeben werden.

$$\alpha = \frac{1}{3V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{3B}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -\frac{\partial}{\partial V}(U - TS)$$

Rechnung einfügen

TS geht gegen 0, da $S = \int \frac{c_v}{T'} \mathrm{d}T'$ bei konstantem Volumen geht dies gegen 0.

$$\alpha = \frac{1}{3B}\frac{\partial}{\partial T}\left[-\frac{\partial}{\partial V}\left[U_B + \sum_{k,S} \hbar\omega_{k,S}\left(\frac{1}{2} + p_{k,S}\right)\right]\right]$$

$$= \frac{1}{3B}\frac{\partial}{\partial T}\left(-\frac{\partial}{\partial V}(U_B + \sum_{k,S}\frac{1}{2}\hbar\omega) - \frac{\partial}{\partial V}\sum_{k,S}\hbar\omega_{k,S}p_{k,S}\right)$$

$$\alpha = \frac{1}{3B}\left(-\sum_{k,S}\hbar\partial\omega_{k,S}\partial V\frac{\partial p_{k,S}}{\partial T}\right)$$

$$c_v = \frac{1}{V}\sum_{k,S}\hbar\omega_{k,S}\frac{\partial p_{k,S}}{\partial T}$$

$$\alpha = \frac{1}{3B}\left(\sum_{k,S}\underbrace{\frac{V}{\omega_{k,S}}\frac{\partial\omega_k}{\partial V}}_{\gamma_{k,S}}\underbrace{\frac{1}{V}\hbar\omega_{k,S}\frac{\partial p}{\partial T}}_{c_{v,k,S}}\right)$$

$$\alpha = \frac{\gamma c_v}{3B}$$

$$\gamma = -\frac{\partial \ln\omega}{\partial \ln V}$$

7. Übung

23. Aufgabe: Debye-Temperatur

Die Debye-Temperatur von Natrium soll abgeschätzt werden. Dabei soll die Annahme gemacht werden, dass Natrium eine isotrope Dispersionsrelation für Phononen hat. Natrium hat bcc-Struktur, es werden die Zahlenwerte verwendet: $K = 8.3 \cdot 10^9 \ \frac{\mathrm{N}}{\mathrm{m}^2}$, $\rho = \cdot 10^3 \ \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m}^3}$, $a = 4.225 \cdot 10^{-10}$ m
Die Formel für die Debye-Temperatur ist

$$\Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$$

mit

$$\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3}\right) = \frac{6pN}{V}\frac{1}{\omega_D^3}$$

wobei

$$c_T = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \quad c_L = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$$

c_{44} und c_{11} sind dabei näherungsweise durch das Kompressionsmodul gegeben (das ist eigentlich nicht ganz korrekt. Es müsste das Elastizitätsmodul für c_{11} und das Schubmodul für c_{44} sein, aber wir wollen mal nicht so rummöpen..). Man erhält dann eine Schallgeschwindigkeit von

$$c_T = c_V = 2880.97 \text{ m/s}$$

In einer bcc-Zelle befinden sich 2 Atome ($p = 2$). Sie hat das Volumen von a^3 ($V = 7.54 \cdot 10^{-29}$ m^3). Wir setzen einfach $N = 1$ (da wir nur eine Elementarzelle betrachten) und erhalten

$$\omega_D^3 = \frac{6\pi^2 p c_L^3}{V} \implies \omega_D = 3.34 \cdot 10^{13} \text{ 1/s}$$

Man erhält dann eine Debye-Temperatur von

$$\Theta_D = 256 \text{ K}$$

Die Debye-Abschneidefrequenz ist gegeben durch

$$3N = \int_0^{\omega_D} Z(\omega) \, \mathrm{d}\omega$$

da sie so gewählt ist. Man erhält dann genau die Formeln wie oben.

24. Aufgabe: Innere Energie durch thermische Anregung

Es soll gezeigt werden, dass man die Innere Energie eines Kristalls aufgrund der thermischen Anregung von Phononen $U = \sum_{k,s} \hbar\omega \left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right)$ näherungsweise als $U = \int Z(\omega)\varepsilon(\omega)\mathrm{d}\omega$ schreiben kann.

$$\sum_x = \frac{1}{\Delta x}\sum_x f(x)\Delta x = \frac{1}{\Delta x}\int_x f(x)\mathrm{d}x$$

$$U = \sum_{k,s} \underbrace{\hbar\omega\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right)}_{\varepsilon(\omega)} = \frac{1}{\Delta k}\sum \varepsilon(\omega)\Delta k = \frac{1}{\Delta k}\int \varepsilon(\omega)\mathrm{d}k$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{n} \quad \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = v_g \implies \mathrm{d}k = \frac{1}{v_g}\mathrm{d}\omega$$

$$U = \int \varepsilon(\omega)\frac{1}{v_g}\left(\frac{n}{2\pi}\right)\mathrm{d}\omega = \int \varepsilon(\omega)Z(\omega)\mathrm{d}\omega$$

da $Z(\omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}}$ gilt.

25. Aufgabe: Dielektrizitätskonstante

Die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(\omega)$ für einen Ionenkristall soll hergeleitet und skizziert werden.
Eine lineare zweiatomige Kette im Limes $k \to 0$ ergibt:

$$M\ddot{\vec{u}} = -2f(\vec{u} - \vec{v}) + e\vec{E}^{\mathrm{loc}}$$
$$m\ddot{\vec{v}} = -2f(\vec{v} - \vec{u}) - e\vec{E}^{\mathrm{loc}}$$

e ist dabei die Ladung der Ionen.
Setzen wir $\vec{w} = \vec{u} - \vec{v}$ und die reduzierte Masse ein, so erhalten wir

$$\ddot{w} = \frac{e}{\mu}E - \frac{2f}{\mu}w$$

Wir setzen sowohl für w wie auch für E eine lokale Wellenbewegung an:

$$w = w_0 e^{-i\omega t} \qquad E = E_0 e^{-i\omega t}$$

und erhalten dann die Gleichung

$$-\omega^2 w_0 = \frac{eE_0}{\mu} - \frac{2f\omega_0}{\mu}$$

Wir setzen zur Abkürzung

$$\bar{\omega}^2 = \frac{2f}{\mu}$$

und erhalten die Beziehung für w_0:

$$w_0 = \frac{eE_0}{\mu}\frac{1}{\bar{\omega}^2 - \omega^2}$$

Es ist dann

$$\alpha_v = \frac{|\vec{P}|}{|\vec{E}|} = \frac{ew_0}{E_0} = \frac{e^2}{\mu}\frac{1}{\bar{\omega}^2 - \omega^2}$$

und somit

$$\alpha = \frac{e^2}{\mu}\frac{1}{\bar{\omega}^2 - \omega^2} + \alpha_\pm$$

Wir betrachten die Clausius-Mossotti-Gleichung

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{1}{V}\sum_j N_j \alpha_j$$

Dabei kommen nur zwei Atomsorten mit jeweiliger Anzahl $N/2$ vor. Für $\omega \gg \bar{\omega}^2$ ist α_v vernachlässigbar klein. Man erhält dann

$$\frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty + 2} = \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{1}{V}\frac{N}{2}(\alpha_+ + \alpha_-)$$

Für $\omega \gg \bar{\omega}^2$ ist wiederum

$$\alpha = \frac{e^2}{\mu\bar{\omega}^2} + \alpha_\pm$$

und damit erhält man

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 2} = \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{1}{V}\sum\frac{N}{2}\left(\alpha_+ + \alpha_- + \frac{2e^2}{\mu\bar{\omega}^2}\right)$$

und mit dem Ergebnis von oben

$$\frac{1}{\varepsilon_0}\frac{N}{V}\frac{e^2}{\mu\bar{\omega}^2} = \frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 2} - \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty + 2}$$

Schließlich können wir dies alles in die CM-Gleichung ohne Grenzfall einsetzen und er-

halten (umgestellt):

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2}=\underbrace{\frac{\varepsilon_\infty-1}{\varepsilon_\infty+2}+\left(\frac{\varepsilon_0-1}{\varepsilon_0+2}-\frac{\varepsilon_\infty-1}{\varepsilon_\infty+2}\right)\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2-\omega^2}}_{=a}\iff\varepsilon=\frac{2a+1}{1-a}$$

ein paar Vorzeichen stimmen nicht, das Endergebnis schon :-)

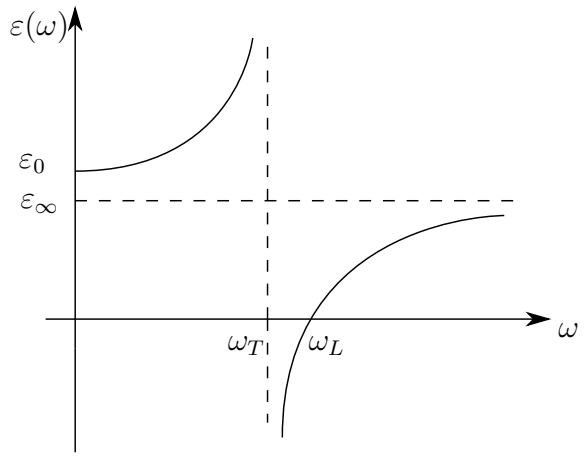
Nach einigem Umformen erhält man

$$a=\frac{(\varepsilon_0-1)(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2-(\varepsilon_\infty-1)(\varepsilon_0+2)\omega^2}{(\bar{\omega}^2-\omega^2)(\varepsilon_\infty+2)(\varepsilon_0+2)}$$

und damit

$$\varepsilon=-\frac{2a+1}{a-1}=\frac{\varepsilon_0(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2-\varepsilon_\infty(\varepsilon_0+2)\omega^2}{(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2-(\varepsilon_0+2)\omega^2}=\varepsilon_\infty+\frac{\varepsilon_0(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2-\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2}{(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2-(\varepsilon_0+2)\omega^2}$$

Kürzen wir den hinteren Bruch durch $(\varepsilon_\infty+2)\bar{\omega}^2$ und drehen das Vorzeichen von oben nach unten, so erhalten wir die Behauptung.



26. Aufgabe: Dispersionsrelationen

Die Dispersionsrelation $\omega(k)$ soll für einen Ionenkristall mit der Dielektriztitätskonstante $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_\infty+\frac{\varepsilon_\infty-\varepsilon_0}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2}-1}$ berechnet werden,.
Mit den Maxwellgleichungen im Medium erhält man eine Gleichung der Form

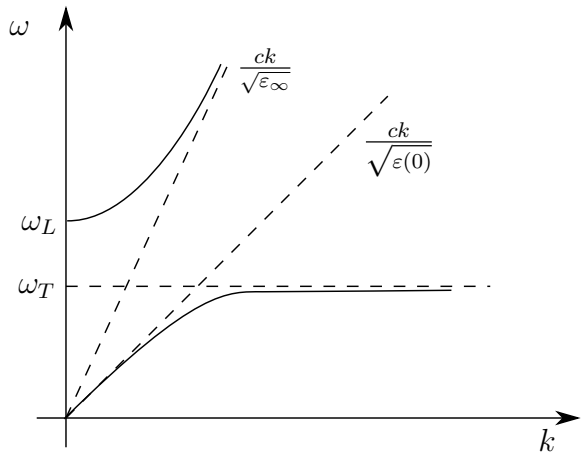
$$k^2-\varepsilon(\omega)\varepsilon_0\mu_0\omega^2=0$$

und damit die Dispersionsrelation

$$\omega=\frac{c}{\sqrt{\varepsilon}}k$$

Mit gegebenem $\varepsilon(\omega)$ eingesetzt und nach ω aufgelöst erhalten wir

$$\omega(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0\epsilon_\infty \left(k^2 + \varepsilon_0\mu_0{\omega_T}^2\epsilon_0 + \sqrt{k^4 + 2\,k^2\varepsilon_0\mu_0{\omega_T}^2\epsilon_0 + (\varepsilon_0)^2\,(\mu_0)^2\,{\omega_T}^4{\epsilon_0}^2 - 4\,\varepsilon_0\mu_0\epsilon_\infty k^2{\omega_T}^2} \right)}}{\varepsilon_0\mu_0\epsilon_\infty}$$



Definiere $\omega_L^2 = \frac{\omega_T^2}{\varepsilon_\infty}\varepsilon_0$ und man erhält

$$\omega_\pm^2 = \frac{1}{2}\left(\omega_L^2 + \frac{c^2k^2}{\varepsilon_\infty}\right) \pm \sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{c^2k^2}{\varepsilon_\infty}\right)^2 + \frac{c^2k^2\omega_L^2}{\varepsilon_\infty}\left(\frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0}\right) + \frac{1}{4}\omega_L^2}$$

8. Übung

27. Aufgabe: Drude-Modell: Widerstand

(a) Durch das Drude-Modell soll gezeigt werden, dass bei einem Strom von Ladungen im elektrischen Feld ein Elektron pro Stoß die Energie $\langle u\rangle = (eE\tau)^2/m$ an das Gitter abgibt.

Es ist $\Delta t/\tau$ die Wahrscheinlichkeit, in der Zeit Δt einen Stoß zu erleiden. $-eE\Delta t$ ist die Impulsänderung während dieser Zeit Δt, welche das Elektron erfährt. Der Impuls der Elektronen nach dem Stoß ist

$$p(t+\Delta t) = \frac{\Delta t}{\tau}\left(-p(t) - eE\Delta t\right)$$

und für die Elektronen ohne Stoß dann

$$p(t+\Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right)(p(t) - eE\Delta t)$$

Da wir Faktoren in $O(\Delta t^2)$ vernachlässigen, gilt für beide Elektronensorten:

$$\dot{p} = \frac{p}{\tau} - eE$$

Nach einiger Zeit stellt sich im Mittel ein Gleichgewicht heraus. Es ist also im Mittel $\dot{p} = 0$. Der gemittelte Impuls beträgt also

$$\langle p \rangle = -eE\tau$$

Bei jedem Stoß übertragen die Elektronen ihre doppelte kinetische Energie an das Gitter (da sie danach mit dem selben Impuls in die andere Richtung weiterfliegen, da wir hier das Gitter als unendlich starr annehmen). Die übertragene Energie ist also

$$\langle u \rangle = 2\frac{(\langle p \rangle)^2}{2m} = (eE\tau)^2/m$$

wie behauptet.

(b) Es soll gezeigt werden, dass die gesamte Energieabgabe pro Zeit- und Volumeneinheit $(ne^2\tau/m)E^2 = \sigma E^2$ beträgt und dass die Joulesche Wärme in einem Draht damit $P = I^2R$ beträgt.

Die gesamte übertragene Energie pro Volumen und Zeiteinheit ist

$$W = \frac{N\langle u \rangle}{V\tau} = ne^2\tau/mE^2 = \sigma E^2$$

Der Strom j entspricht gerade

$$j = \sigma E = ne^2\tau/mE \implies E = \frac{jm}{ne^2\tau}$$

Weiterhin ist die Stromstärke definiert über

$$I = jA = j\frac{V}{d} \implies j = \frac{Id}{V}$$

wenn A die Querschnittsfläche und d die Länge des Drahtes ist. Insgesamt ist also

$$P = \frac{N\langle u\rangle}{\tau} = \frac{nVe^2E^2\tau}{m} = V\underbrace{\left(-\frac{ne^2\tau E}{m}\right)^2}_{=(\sigma E)^2=j^2}\frac{m}{ne^2\tau} = Vj^2\frac{m}{ne^2\tau} = (jA)^2\frac{V}{A^2}\frac{m}{n\tau e^2} = I^2\underbrace{\frac{l}{A\sigma}}_{=R}$$

28. Aufgabe: Hall-Effekt bei Kupfer

Der Hall-Effekt soll berechnet und die Hall-Konstante von Kupfer soll bestimmt werden. Kupfer ist kubisch-flächenzentriert und hat die Gitterkonstante $a = 0.361$ nm.
Der Hall-Effekt beschreibt das Auftreten einer Spannung in einem stromdurchflossenen Leiter, der sich in einem stationären Magnetfeld befindet. Diese so genannte Hallspannung wirkt senkrecht zur Magnetfeldrichtung und zur Stromrichtung. Bei Messungen wird durch eine von außen angelegte Spannung der Strom in diese Richtung (senkrecht zur Magnetfeldrichtung und zur angelegten Stromrichtung) meistens so geregelt, dass er verschwindet. Man erhält für genau diesen Punkt dann eine Beziehung zwischen dem von außen angelegten Feld und dem Magnetfeld:

$$E_y = R_H j_x B$$

Dabei ist E_y das angelegte Feld, j_x der fließende Strom und B das Magnetfeld. R_H ist die so genannte Hall-Konstante. Betrachtet man diesen Effekt genauer (siehe Skript), so kommt man auf

$$R_H = -\frac{1}{ne}$$

wobei n_e die Elektronendichte ist. Da wir es hier mit Kupfer zu tun haben, ist das Volumen einer Elementarzelle gegeben durch

$$V = a^3 = 0.047 \text{ nm}^3$$

Kupfer ist kubisch-flächenzentriert und hat damit 4 Atome pro Elementarzelle. Jedes Atom gibt 1 Elektron ab, also sind es auch 4 abgegebene Elektronen pro Elementarzelle. Die Elektronendichte ist also

$$ne = \frac{4e}{V} = 1.36222 \cdot 10^{10} \text{ C/m}^3$$

und damit die Hall-Konstante

$$R_H = -7.34 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/\text{C}$$

29. Aufgabe: Dielektrizitätskonstante beim freien Elektronengas

(a) Aus den Maxwellgleichungen soll ein Ausdruck für die Frequenzabhängigkeit der Dielektriztitätskonstanten des freien Elektronengases hergeleitet werden.

Die Maxwellgleichungen für mit ohne Ladungsdichte lauten:

$$\nabla \cdot E = 0 \qquad \nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$
$$\nabla \cdot B = 0 \qquad \nabla \times B = \mu_0 j + \mu_0 \frac{\partial D}{\partial t}$$

Da wir hier Wechselstrom betrachten, setzen wir für den Strom eine Abhängigkeit der Form

$$j = j_0 e^{-i\omega t}$$

mit der Frequenz ω voraus. Jeweils für B- und E-Feld setzen wir die selbe Oszillation an:

$$E = E_0 e^{-i\omega t} \qquad B = B_0 e^{-i\omega t}$$

Außerdem betrachten wir ein Material ohne (außer der Frequenzabhängigkeit) weiterer Dielektrizität, also

$$D = \varepsilon_0 E$$

Man erhält dann die Maxwellgleichungen

$$\nabla \cdot E = 0 \qquad \nabla \times E = i\omega B_0$$
$$\nabla \cdot B = 0 \qquad \nabla \times B = \mu_0 j_0 - i\omega\mu_0\varepsilon_0 E_0$$

wenn man jeweils durch den Faktor $e^{-i\omega t}$ teilt. Da wir auf eine Art Wellengleichung kommen müssen, machen wir den Ansatz wie immer:

$$-\nabla^2 E_0 = \nabla \times (\nabla \times E_0) = \nabla \times (i\omega B_0) = i\omega(\mu_0 j_0 - i\omega\mu_0\varepsilon_0 E_0)$$

Außerdem ist $j = \sigma E$ nach Definition und damit

$$= i\omega\mu_0(\sigma E_0 - i\omega\varepsilon_0 E_0) = \omega^2\mu_0\varepsilon_0 \left(\frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} + 1\right) E_0$$

Setzen wir also jetzt $\varepsilon(\omega) = \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} + 1$ so haben wir eine Abhängigkeit wie erwartet:

$$\nabla^2 E = -\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega) E$$

(b) Zu vorgegebenem r_s/a_0 (siehe unten in der Tabelle) soll die Plasmafrequenz für verschiedene Stoffe berechnet werden.

Wir setzen in der Term für $\varepsilon(\omega)$ die Definition von $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m(1-i\omega\tau)}$ ein und nähern für große Frequenzen

$$\varepsilon(\omega) = \frac{ine^2\tau}{m(1-i\omega\tau)\omega\varepsilon_0} + 1 \overset{\omega\gg 1}{\approx} \frac{ine^2\tau}{m\varepsilon i\omega^2\tau} + 1 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m\omega^2} + 1$$

Man setzt die Plasmafrequenz an als

$$\omega_P^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}$$

Um jetzt aus den gegebenen Zahlenwerten diese Zahl zu berechnen, setzen wir zuerst einmal die Definitionen von r_s und a_0 ein. r_s ist der radius einer Kugel, welche genau das Volumen einnimmt, welche dem Elektron rechnerisch zusteht. Die Dichte n ist also

$$\frac{1}{n} = \frac{V}{Ne} = \frac{4\pi r_s^3}{3e} \implies n = \frac{3}{4\pi r_s^3}$$

Der Bohrsche Radius ist definiert über die Coulombkraft eines Elektrons, genauer

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

Setzt man das alles ein, so erhält man

$$\omega_p^2 = \frac{3e^8m^2}{(4\pi)^4\varepsilon_0^4\hbar^6}\left(\frac{a_0}{r_s}\right)^3 \implies \omega_p \approx 7.16054\cdot 10^{16}\left(\frac{r_s}{a_0}\right)^{(-3/2)} \text{ Hz}$$

Man erhält dann

Element	r_s/a_0	ω_p in 10^{16} Hz
Li	3.25	1.22
Na	3.93	0.92
K	4.86	0.67
Rb	5.20	0.60
Ca	6.62	0.42

(c) Das Ergebnis aus a) soll mit der Dielektrizitätskonstanten eines Ionenkristalls verglichen werden.

Teilt man die Dielektrizitätskonstante auf in Real- und Imaginärteil, so erhält man

nach einiger Rechnung für das freie Elektronengas:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\sigma_0 \tau}{\varepsilon_0(1+\omega^2\tau^2)} + i\frac{\sigma_0}{\varepsilon_0\omega(1+\omega^2\tau^2)}$$

Für die Dielektrizitätskonstante eines Ionenkristalls haben wir schon letztes Blatt erhalten:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_\infty - \varepsilon_0}{\omega^2/\omega_T^2 - 1}$$

Diskussion Es gibt in beiden Fällen Frequenzen, unter der die Dielektrizitätskonstante negativ wird (das Material also undurchsichtig). Beim Ionenkristall ist der Bereich jedoch sehr klein. Bei Metallen (freies Elektronengas) ist der Absorptionsteil bei kleinen Frequenzen sehr groß.

Bild malen, auch mit reellen Werten

30. Aufgabe: Fermienergie eines Elektronengases

(a) Die Zustandsdichte $D(E)$, der Wellenvektor k_f und die Fermi-Energie E_F sollen für eine, zwei und drei Dimensionen jeweils als Funktion der Elektronendichte berechnet werden.

In jeder Dimension (egal wie viele es jetzt sind) ist jeder k-Wert quantisiert. Es gibt also immer nur diskrete k-Werte mit

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}$$

Jeder Zustand nimmt also das Volumen $\frac{2\pi}{L}$ in diesem k-Raum ein. Die Zustandsichte im k-Raum mit d Dimensionen ist also

$$Z(k)\ \mathrm{dk} = \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^d}\ \mathrm{dk} = \frac{L^d}{(2\pi)^d}\ \mathrm{dk}$$

Gefragt war jedoch die Energiedichte. Mit

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

kommt man für drei Dimensionen auf

$$D(E)\ \mathrm{dE} = \frac{2}{V} Z(\vec{k})\ \mathrm{d}\vec{k} = \frac{2}{8\pi^2} 4\pi k^2\ \mathrm{dk} = \frac{k^2 m}{\pi^2\hbar^2 k}\ \mathrm{dE} = \frac{m^{(3/2)}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} E^{(1/2)}\ \mathrm{dE}$$

Für zwei Dimensionen gilt

$$D(E)\mathrm{d}E = \frac{2}{4\pi^2} 2k\pi \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}E = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar\pi}\frac{m}{\hbar\sqrt{2mE}}\mathrm{d}E = \frac{m}{\pi\hbar^2}\mathrm{d}E$$

Für eine Dimension gilt

$$D(E)\mathrm{d}E = \frac{2}{2\pi}\mathrm{d}k = \frac{m}{\pi\hbar^2\sqrt{2mE}} = \frac{\sqrt{m}}{\pi\hbar^2}\sqrt{2}E^{-1/2}\mathrm{d}E$$

Die Anzahl aller Elektronen sei N. k_f ist gerade der verallgemeinerte Radius der verallgemeinerten Kugel in d-Dimensionen. Ihr verallgemeinerter Inhalt sei $K(k_f)$. Es ist dann also

$$2K(k_f)\frac{L^d}{(2\pi)^d} = N \implies k_f = K^{-1}\left(\frac{(2\pi)^d}{2}\frac{N}{L^d}\right) = K^{-1}\left(\frac{(2\pi)^d}{2}n\right)$$

Die Fermienergergie ist gerade die Energie an dieser Stelle, also

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$$

Wir können dies noch für die ersten drei Dimensionen ausführen:

Dimensionen	$K(x)$	k_f	E_f
1	$2x$	$\frac{\pi n}{2}$	$\frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8m}$
2	πx^2	$\sqrt{2\pi n}$	$\frac{\hbar^2\pi n}{m}$
3	$\frac{4\pi x^3}{3}$	$(3\pi^2 n)^{(1/3)}$	$\frac{\hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}$

(b) Die Fermi-Energie, die Fermi-Wellenzahl, die Fermi-Temperatur und die Fermi-Geschwindigkeit für Silber sollen berechnet werden. Zum Vergleich soll die Driftgeschwindigkeit bei einer Stromdichte von $j = 4\frac{\mathrm{A}}{\mathrm{mm}^2}$ berechnet werden. Dichte $\rho = 10.5\ \mathrm{g/cm^3}$, Molmasse $M = 107.87\ \mathrm{g/mol}$.

Mit den Zahlenwerten erhalten wir, dass die Elektronendichte gerade

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N_A}{10.273\ \mathrm{cm}^3}$$

beträgt, wobei N_A die Avogadro-Zahl ist. Also

$$k_f = 1.2 \cdot 10^{10}\ 1/\mathrm{m}$$

Es ergeben sich die Zahlenwerte

$$E = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = 5.5 \text{ eV}$$

$$T_f = \frac{E_f}{k} = 63854.3 \text{ K}$$

$$v_f = \frac{\hbar k_f}{m} = 1.39 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

Mit $n = \frac{N_A}{10.273 \text{ cm}^3} = \frac{N_A}{\alpha}$ erhält man

$$N = Vn = \frac{AdN_A}{\alpha}$$

und dann aus $I = jA$ die Formel:

$$I = \frac{Q}{t} = \frac{eN}{t} = \frac{eAdN_A}{\alpha t} = \frac{eAN_a}{\alpha} v$$

Es ist also

$$v = \frac{\alpha j}{N_A e} \approx 0.000425 \text{ m/s}$$

was viel kleiner ist.

9. Übung

31. Aufgabe: Fermi-Dirac-Verteilung

Es sollte für verschieden Fälle gezeigt werden, dass die Fermi-Dirac-Verteilung in die Maxwell-Boltzmann-Verteilung übergeht.

Vorgeplänkel Ist $x \ll 1$ so ist,

$$\frac{1}{\frac{1}{x} + 1} \approx x$$

Könnte man in beiden Fällen also zeigen, dass

$$e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} \approx e^{\frac{E_i}{k_B T}} \gg 1$$

Dann ist mit $x = e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \ll 1$ auch

$$f_i \approx x = e^{-\frac{E_i}{k_B T}} = \frac{N}{N} e^{-\frac{E_i}{k_B T}} = n \frac{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}{\sum f_i} = N \frac{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}$$

und damit die Behauptung.

(a) Fall 1: kleine Teilchendichte n und kleines und festes T.

Sei n sehr klein. μ und $_f$ unterscheiden sich nur in der Ordnung $(T/T_f)^2$ und da T auch klein ist, ist ungefähr

$$\mu \approx E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{(2/3)}$$

Da n sehr klein ist, ist also auch μ sehr klein und damit vernachlässigbar. Da N klein werden soll, muss auch

$$N = \sum_i f_i$$

klein werden. Da die Summanden aber alle positiv sind, muss f_i klein werden und damit die e-Funktion groß. Die Bedingung vom Anfang ist also erfüllt.

(b) Fall 2: Hohe Temperatur T und feste Teilchenzahl N.

Sei jetzt T sehr groß und N fest. Wenn $T \gg T_f$ muss auch $k_B \gg E_f \approx \mu$ sein, da μ und E_f sich nur um $(T/T_f)^2$ unterscheidet. Also ist μ wieder vernachlässigbar.Für große Energien ist die Voraussetzung für die Formel oben wieder erfüllt und man erhält das Ergebnis.

aber nur dann?

(c) Die Halbwertsbreite der Ableitung der Fermi-Dirac-Verteilung nach der Energie soll für $T = 0$ und endliche Temperatur berechnet werden.

Wir berechnen die Ableitung der Funktion. Man erhält:

$$f_i' = -\frac{e^{\frac{E-\mu}{kT}}}{kT\left(e^{\frac{E-\mu}{kT}}+1\right)^2}$$

Für die zweite Ableitung erhält man

$$f_i'' = \frac{e^{\frac{2E+\mu}{kT}} - e^{\frac{E+2\mu}{kT}}}{k^2T^2\left(e^{\frac{E}{kT}}+e^{\frac{\mu}{kT}}\right)^3}$$

Die zweite Ableitung wird Null für $E = \mu$. Für diesen Wert erhält man für die erste Ableitung:

$$f_i'(\mu) = -\frac{1}{4kT}$$

Wir lösen jetzt die Gleichung

$$f_i' = -\frac{1}{8kT}$$

Dazu setzen wir zur Abkürzung

$$\alpha = e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}$$

und erhalten

$$\alpha = \frac{1}{8}(1+\alpha)^2 \iff 6\alpha = 1+\alpha^2 \iff \alpha = 3 \pm 2\sqrt{2}$$

Wir erhalten dann

$$E_{1/2} = \mu + k_B T \ln(3 \pm 2\sqrt{2})$$

Damit ist die Halbwertsbreite

$$\Delta E = k_B T \ln\left(\frac{3+2\sqrt{2}}{3-2\sqrt{2}}\right) \approx 3.52549 k_B T$$

Für $T = 0$ ist die Halbwertsbreite dann auch Null.

32. Aufgabe: Kupfer im Sommerfeld-Modell

(a) Für Kupfer soll die Sommerfeld-Konstante γ im Modell freier Elektronen berechnet und später mit dem experimentellen Wert $\gamma_{\text{exp}} = 1.092 \cdot 10^{-5}$ J/gK^2 verglichen werden. Daraus soll die effektive Masse eines Kupferleitungselektrons bestimmt werden.

Auf dem letzten Blatt wurde angegeben, dass Kupfer eine Gitterkonstante von

$$a = 0.361 \text{ nm}$$

hat. Da Kupfer kubisch-flächenzentriert ist, hat es also eine Elektronendichte von

$$n = \frac{4}{a^3}$$

Wir benutzen

$$U = U_0 + \frac{\pi^2}{6}(K_B T)^2 D(E_F)$$

und leiten nach T ab um c_V zu erhalten. Ferner setzen wir

$$D(E_F) = \frac{m k_f}{\hbar^2 \pi^2} = \frac{m(3\pi^2 n)^{1/3}}{\hbar^2 \pi^2}$$

ein und erhalten

$$c_V = \underbrace{\frac{k_B^2 m \pi^{2/3} n^{1/3}}{3^{2/3}\hbar^2}}_{=\gamma} T$$

Dieses Ergebnis hätte die Einheit $\mathrm{J/m^3/K^2}$. Wir müssen es deshalb noch durch die Dichte

$$\rho = 8920 \cdot 10^3 \ \mathrm{g/m^3}$$

teilen, um es mit dem Ergebnis auf dem Blatt vergleichen zu können. Man erhält dann für γ:

$$\gamma = 8.71327 \cdot 10^{27} m \ \mathrm{m^2/(s^2K^2kg)}$$

und im Vergleich erhält man eine Masse von

$$m = 1.253 \cdot 10^{-30} \ \mathrm{kg}$$

Die haben das anders gerechnet. Die haben das Ef von unten schon benutzt...

(b) Es soll die Temperatur bestimmt werden, für die bei Kupfer der elektronische Beitrag so groß wie der Gitterbeitrag der spezifischen Wärme ist. Die Fermi-Energie beträgt $E_F = 7.0$ eV und die Debye-Temperatur $\theta_D = 343$ K. Die innere Energie de Gitters in Tieftemperaturnäherung ist $U = \frac{3\pi^4 N k_B^4 T^4}{5\hbar^3 \omega_D^3}$

Mit der Formel von oben ist für den elektronischen Beitrag

$$c_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T D(E_F) = \frac{\pi^2 n k_B^2}{2E_F} T$$

und der Beitrag vom Gitter

$$c_V = \frac{12\pi^4 n k_B^4 T^3}{5\hbar^3 \omega_D^3}$$

mit

$$\omega_D = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar}$$

und damit

$$c_V = \frac{12\pi^4 k n T^3}{5\Theta^3}$$

Die beiden Beiträge müssen gleich sein, also nach T aufgelöst:

$$T = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{5k_B}{6E_f}} \Theta_D^{(3/2)} = 3.22902 \ \mathrm{K}$$

(c) Es soll die Temperatur gefunden werden, bei der das folgende Verhältnis aus dem elektronischen Beitrag c_e und dem Gitterbeitrag c_g besteht: $c_e \approx 0.1 c_g$

Für große Temperaturen ist ungefähr für das Gitter

$$c_V = 3nk_B$$

also konstant. Nun soll der elektrische Beitrag ein Zehntel des Gitterbeitrags sein, also

$$\frac{\pi^2 n k_B^2}{2E_F} T = 30 n k_B$$

Nach T aufgelöst erhält man

$$T = \frac{6E_f}{10\pi^2 k} = 4966 \text{ K}$$

Unterschied kommt zwischen exp- und theo. Wert

33. Aufgabe: Kompressibilität

Es soll gezeigt werden, dass sich die Kompressibilität eines Fermigases im Potentialkasten für $T = 0$ als $\kappa_e = \frac{3}{2nE_F}$ darstellen lässt. Dann sollen die Zahlenwerte für Natrium ($E_F = 3.23$ eV) eingesetzt werden und mit dem experimentellen Wert $\kappa_{\text{Na}} = 1.5 \cdot 10^{-10}$ m^2/N verglichen werden.
Wir gehen zuerst vor wie in der Vorlesung beschrieben. Die Energie eines einzelnen Zustandes ist

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Jeder Zustand mit $k < k_f$ ist dabei zweimal besetzt. Die gesamte Energie ist also

$$E = 2 \sum_{k<k_f} E(k) = \frac{2V}{8\pi^3} \sum E(k) \Delta\vec{k} = \frac{V}{4\pi^3} \int E(k) \, \mathrm{d}\vec{k} = \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_f^5}{10m}$$

Und damit die Energie pro Elektron

$$E_e = \frac{E}{N} = \frac{E}{V} \frac{3\pi^2}{k_f^3} = \frac{3\hbar^2 k_f^2}{10m}$$

Setzt man die Definition

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$$

ein, so erhält man für ein Elektron

$$E_e = \frac{3}{5} E_f$$

und damit für das gesamte Gitter wie erwartet

$$U = \frac{3}{5} E_f N$$

Wir setzen außerdem $k_f = (3\pi^2 N/V)^{(1/3)}$ ein:

$$U = \underbrace{\frac{3N\hbar^2}{10m}(3\pi^2 N)^{(2/3)}}_{\alpha} V^{-2/3} = \alpha V^{-2/3}$$

Damit ist

$$\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}V^2} = \frac{10\alpha}{9} V^{-8/3}$$

und insgesamt das Kompressibiliätsmodul:

$$\kappa^{-1} = K = -V\frac{\partial p}{\partial V} = V\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}V^2}$$

nach Formeln aus der Thermodynamik (das Minus fällt weg, da die Bindungsenergie gefragt ist) und Eingesetzt:

$$= \frac{10}{9}\alpha V^{-5/3} = \frac{\hbar^2}{3m}(3\pi^2)^{(2/3)}\left(\frac{N}{V}\right)^{(5/3)} = \frac{\hbar^2}{3m}(3\pi^2)^{(2/3)} n^{(2/3)} n = \frac{2E_f n}{3}$$

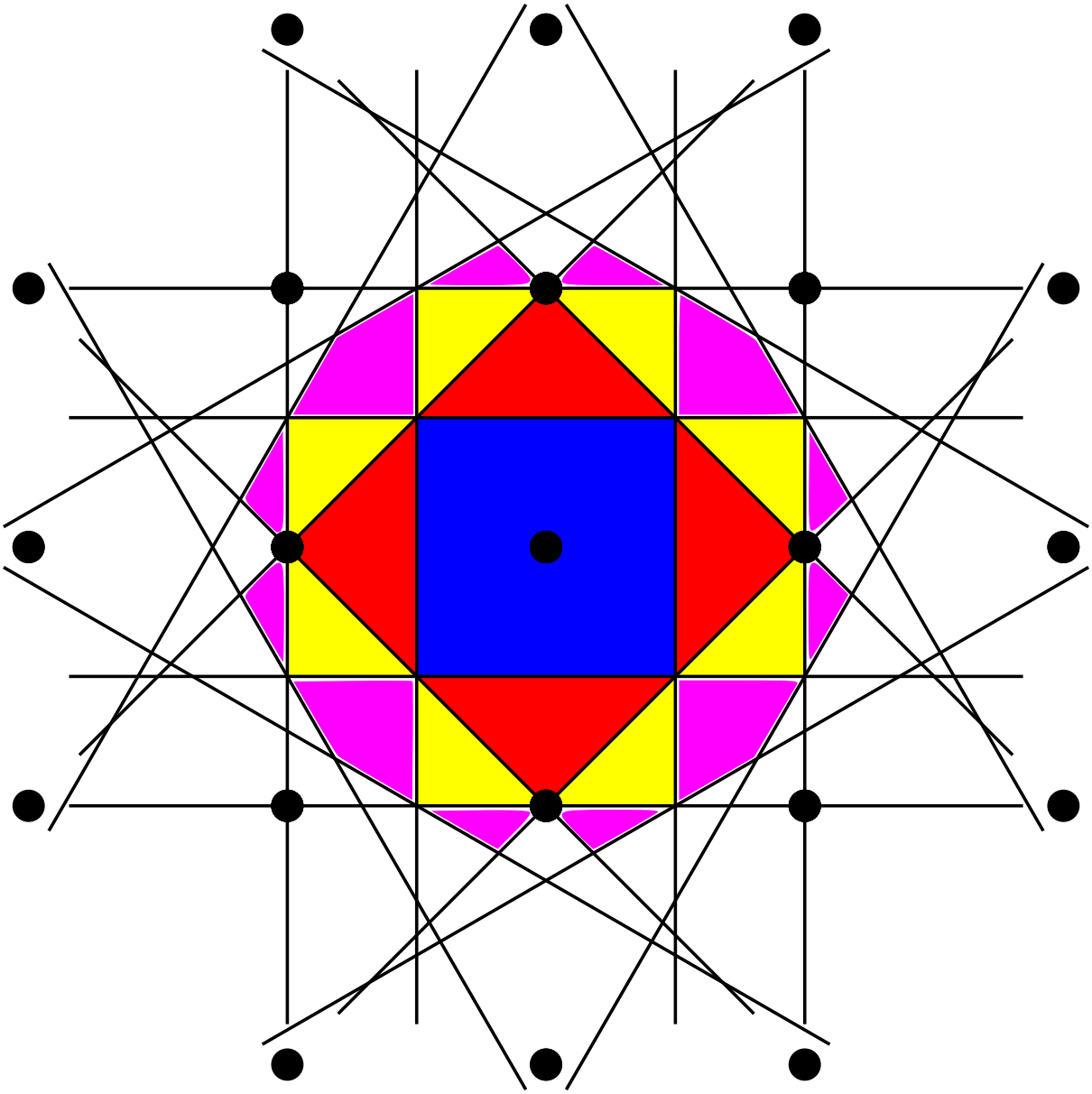
und damit die Behauptung.
Benutzen wir für Natrium, dass es kubisch-raumzentriert mit $a = 0.423$ nm, so erhält man

$$\kappa = 1.1 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}^2/\mathrm{N}$$

10. Übung

34. Aufgabe: Brillouin-Zonen

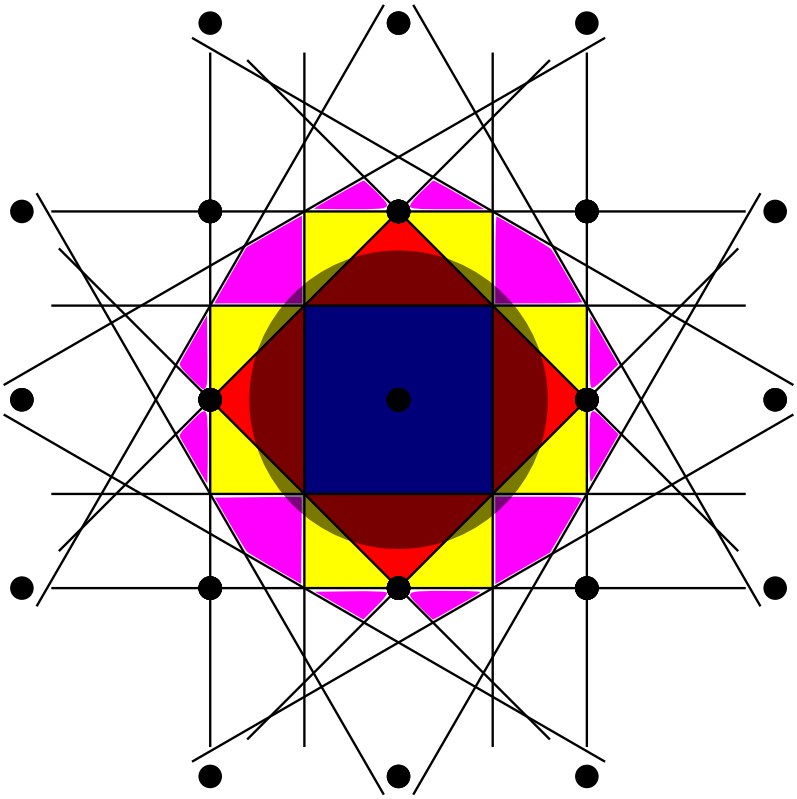
(a) Es sollen die ersten vier Brillouin-Zonen eines primitiven quadratischen Gitters mit Gitterkonstanten a gezeichnet werden. Die Fermi-Fläche eines freien Elektronengases im reduzierten Zonenschema in der ersten bis vierten Zone soll gezeichnet werden. Dabei soll die Elektronenkonzentration so gewählt werden, dass $k_F = 0.85\frac{2\pi}{a}$.

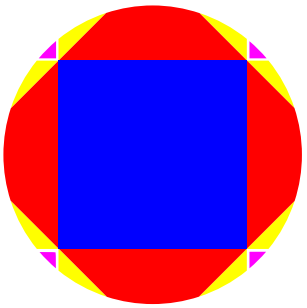


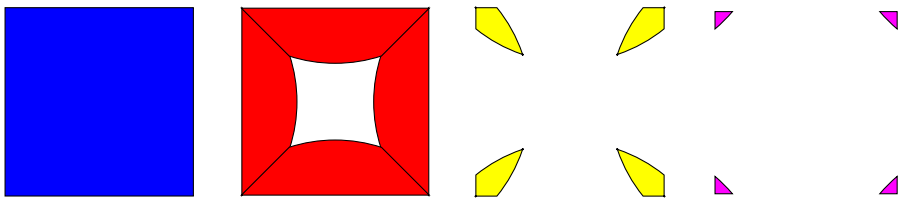
(b) Die Änderung der Fermi-Fläche soll qualitativ angegeben werden, wenn ein schwaches periodisches Potential wirksam ist.

An den Zonengrenzen (also z.B. zwischen 1 und 2 BZ) treten Energielücken auf. Es kommt also zu Sprüngen in der Fermienergie und damit auch in der Fläche. Die Fläche durchtritt die Zonen immer mit konstanter Energie (also senkrechter Tangente - immer senkrecht). Die scharfen Ecken der BZ werden also abgerundet (da die Fermifläche ja immer nur senkrecht eintreten kann). Es kann also vor allem zu verbotenen Zonen kommen (Halbleiter usw.).

(c) Es soll gezeigt werden, dass die Elektronen in einem schwachen periodischen Potential die Flächen konstanter Energie die Bragg-Ebenen senkrecht schneiden.







Wir betrachten zum Beispiel die Energie der positiven Lösung:

$$E = \frac{1}{2}(E_q^0 + E_{q-G}^0) + \sqrt{\frac{1}{4}(E_q^0 - E_{q-G}^0)^2 + |U_G|^2}$$

Die Fermifläche würde genau dann die die Bragg-Ebenen senkrecht schneiden, wenn E_+ an der Zonengrenze ein Minimum hat. Wir zeigen dies nur für die 1. BZ. Der Rest geht dann analog. Sei jetzt also q in der 1. BZ. Nun ist q nie länger als $G/2$ (da sonst q aus der 1. BZ hinausragen würde) und damit $(q-G)^2 - q^2$ positiv. Dann ist aber auch

$$(q-G)^2 + q^2 \geq 2q^2 \implies E_q + E_{q-G} \geq 2E_q$$

Gleichheit tritt nur ein, wenn $q - G = q$ ist, also g gerade auf der 1. BZ. liegt. Dann ist also $E_q + E_{q-G}$ minimal. Außerdem auch die Wurzel, da die E-Klammer dann verschwindet. Für die E_--Lösung zeigt man analog, dass sie dann gerade maximal wird

echt? nö. Deshalb lieber die andere Möglichkeit

Oder: Verwende

$$E_q^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{q}^2$$

und

$$E_{q-G}^0 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{q} - \vec{G})^2$$

und man erhält zum Beispiel für E_+:

$$E_+ = E_q^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{q}^2$$

und

$$E_- = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{q} - \vec{G}\right)^2$$

Wir berechnen den Gradienten, um Aufschluss über die Richtung zu bekommen. U_G fällt weg, da es sich um ein periodisches Potential handelt .

warum?

$$\nabla E_+ = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{q} \qquad \nabla E_- = \frac{\hbar^2}{m}(\vec{q} - \vec{G})$$

Man erhält für die gesamte Energie dann:

$$\nabla E = \frac{2\hbar^2}{m}(\vec{q} - \vec{G}/2)$$

Dies ist jedoch genau die Richtung der Bragg-Ebene (Skizze siehe Ashcroft-Mermin).

35. Aufgabe: Freie Elektronen in der 1. BZ

Es soll für ein einfaches, quadratisches Gitter in zwei Dimensionen gezeigt werden, dass die kinetische Energie eines freien Elektrons an einem Eckpunkt der ersten Brillouin-Zone doppelt so groß ist wie die Energie im Mittelpunkt einer Seitenfläche der Zone. Das Verhältnis soll auch für ein dreidimensionales Gitter berechnet werden.
Für die $\vec{k}$ Vektoren des 1. Elektrons (an der Ecke) und des 2. Elektrons (an der Seitenfläche) gilt aufgrund einfacher geometrischer Überlegungen

$$|\vec{k}_1| = \sqrt{2}|\vec{k}_2|$$

Mit der Relation

$$E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

erhält man dann die Behauptung. In 3 Dimensionen ist der 1. $\vec{k}$-Vektor $\sqrt{3}$-mal so lang, also ist jetzt die Energie 3 Mal so groß.

36. Aufgabe: BZ und Fermiwellenzahl

(a) Für Barium (zweite Hauptgruppe des Periodensystems) soll der kürzeste Abstand vom Ursprung zu einer Begrenzungsfläche der ersten Brillouin-Zone in der ersten Brillouin-Zone und die Fermi-Wellenzahl berechnet werden. Außerdem soll die Fermi-Fläche gezeichnet werden. Barium wird als zweidimensionales, quadratisches Gitter betrachtet.

Aus der Literatur wissen wir, dass die Gitterkonstante von Barium

$$a = 5.02 \ \mathring{A}$$

beträgt. Damit ist der Abstand im reziproken Gitter gegeben durch $g = 2\pi/a$ und damit der Abstand zwischen Ursprung und Rand der Brillouin-Zone

$$d = \frac{g}{2} = 6.25 \cdot 10^9 \ 1/\mathrm{m}$$

Die Wellenzahl in zwei Dimensionen ist gegeben durch

$$k_f = \sqrt{2\pi n} = \sqrt{2\pi \frac{2}{a^2}} = 7.06 \cdot 10^9 \ 1/\mathrm{m} = 3.54 \frac{1}{a}$$

da Barium zwei Elektronen pro Elementarzelle hat. Damit ist die Fermikugel also größer als die erste Brillouin-Zone und das Bild ähnelt dem aus Aufgabe 1.

(b) In der vorigen Aufgabe hat die Fermi-Fläche die Begrenzung der ersten Brillouin-Zone geschnitten. Es soll nun die Elektronendichte berechnet werden, die ein kubisch-flächenzentrierter Silberkristall haben müsste, damit die Fermi-Fläche gerade die erste Brillouin-Zone berührt. Die Gitterkonstante von Silber ist $a = 0.408$ nm.

Die Punkte des Gitters im nicht-reziproken Raum sind gegeben durch

$$E = \frac{a}{2}(0,1,1) \quad F = \frac{a}{2}(1,0,1) \quad G = \frac{a}{2}(1,1,0)$$

und damit die reziproken Gittervektoren:

$$a = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1) \quad b = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1) \quad c = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1)$$

Die Länge (und damit der Abstand) ist gegeben durch

$$|a| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$

Mit der Formel für die Anzahl an Atomen pro Fermikugel

$$N = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3}\pi k_F^3$$

erhält man die schon bekannte Formel für k_F:

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{L^3}\right)^{1/3} \qquad L^3 = V = \frac{N}{V} = n$$

Wir setzen dies ein und erhalten aus

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}}{2}$$

dann das Ergebnis:

$$n = 8.01 \cdot 10^{22} \frac{1}{\mathrm{cm}^3}$$

11. Übung

37. Aufgabe: LCAO-Formalismus

Es soll gezeigt werden, dass die Wellenfunktion eines stark gebundenen Kristallelektrons im LCAO-Formalismus $\Psi_{n,k_x}(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \varphi_n(x - R_j)$ der Blochwelle $\Psi_{n,k_x}(x) =$

$e^{ik_x x}u_{n,k_x}(x)$ mit $u_{n,k_x}(x+pa) = u_{n,k_x}(x)$ wobei $p = \pm 1, \pm 2, \ldots$ entspricht.
Es soll gelten (wenn man die überflüssigen Indizes weglässt):

$$\sum_j \alpha_j \varphi(x - ja) = e^{ikx}u(x)$$

Da aber

$$u(x) = u(x + pa)$$

ist auch

$$e^{ik(x+pa)}u(x+pa) = \sum_j \alpha_j \varphi(x + pa - ja)$$

wobei das vordere:

$$e^{ik(x+pa)}u(x+pa) = e^{ikx}e^{ikpa}u(x)$$

und das hintere nach einem Indexshift:

$$\sum_j \alpha_j \varphi(x + pa - ja) = \sum \alpha_{j+p}\varphi(x - ja)$$

Wir machen also einen Koeffizientenvergleich und erhalten, dass für die α gelten muss:

$$\alpha_j = \alpha_{j+p}e^{-ikpa}$$

Wir wählen deshalb ein α_0 und für alle j:

$$\alpha_j = e^{ikja}\alpha_0$$

Wir wählen also

$$u(x) = \sum_j \alpha_0 e^{-ik(x-ja)}\varphi(x - ja)$$

Denn dann ist

$$\psi = e^{ikx}u(x) = \sum_j \alpha_0 e^{ikja}\varphi(x - ja) = \sum_j \alpha_j \varphi(x - ja)$$

wie es sein sollte und außerdem

$$u(x + pa) = u(x)$$

wie man leicht nachrechnet (man macht den Indexshift einfach rückgängig).

38. Aufgabe: s-Elektronen im Festkörper

Wenn man die Näherung stark gebundener Elektronen verwendet, haben s-Elektronen im Festkörper die Energie

$$E_n(\vec{k}) = E_{n,Atom} - A - B\sum_j e^{i\vec{k}(\vec{a}_i - \vec{a}_j}$$

Es werden A und B verwendet:

$$A = -\int \varphi^*(\vec{r} - \vec{a}_i)V(\vec{r} - \vec{a}_i)\varphi_n(\vec{r} - \vec{a}_i)\mathrm{d}\vec{r}$$

$$B_j = -\int \varphi^*(\vec{r} - \vec{a}_j)V(\vec{r} - \vec{a}_i)\varphi_n(\vec{r} - \vec{a}_i)\mathrm{d}\vec{r}$$

(a) Die Summation für ein einfach-kubisches Gitter soll ausgeführt werden. Es wird nur über die nächsten Nachbarn von a_i summiert. Die Breite des entstandenen Energiebands soll berechnet werden.

$$\vec{a}_i - \vec{a}_j = (\pm a, 0, 0)^T, (0, \pm a, 0)^T, (0, 0, \pm a)^T$$

$E_n(\vec{k}) = E_{n,Atom} - A - B(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + \dots) = E_{n,Atom} - A - 2B(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$

Jeder Cosinus-Term ergibt 2, da $\cos\alpha \in [-1, 1]$.

$$\Delta E = 12B$$

(b) Die eben erhaltene Energie-Funktion soll für kleine k-Werte entwickelt werden. Der Zusammenhang zwischen E und k soll bestimmt werden.

$\cos\alpha \approx 1 - \alpha^2$ für $\alpha << 1$

$$E_n(\vec{k}) = E_{n,Atom} - A - 2B(1 - (k_x a)^2/2 + 1 - (k_y a)^2/2 + 1 - (k_z a)^2/2)$$

$$= E_{n,Atom} - A - 6B + B\vec{k}^2 a^2$$

$$\Longrightarrow\ E \propto k^2$$

(c) Es soll näherungsweise die Energieabhängigkeit der Zustandsdichte der oberen und unteren Bandkante (kritischer Punkt) berechnet werden. Außerdem soll die effektive Masse m^* an den Bandkanten berechnet werden.

$$D^*(E)\mathrm{d}E = \left(\frac{\rho_k}{\hbar}\int\frac{\mathrm{d}S_E}{v_g}\right)\mathrm{d}E$$

$$\rho_k = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \quad v_g = \left|\frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}}E\right| \quad \int \mathrm{d}S_E = 4\pi k^3$$

$$\Longrightarrow\ D^*(E)\mathrm{d}E = \frac{L^3k^2}{2\pi^3|\nabla_{\vec{k}}E|}\mathrm{d}E$$

(1) untere Bandkante: $k_i a << 1$

$$\cos(k_i a) \approx 1 - \frac{a^3k_i^2}{2}$$

$$E(\vec{k}) = E_A - A - 6B + Ba^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_A - A - 6B + Ba^2k^2$$

$$k^2 = \frac{1}{Ba^2}(E - E_A + A + 6B)$$

$$|\nabla_{\vec{k}}E| = 2Ba^2k = \sqrt{4Ba^2(E - E_A + A + 6B}$$

$$D^*(E)\mathrm{d}E = \frac{\frac{L^3}{Ba^2}(E - E_A + A + 6B)}{2\pi^3(4Ba^2(E - E_A + A + 6B))^{1/2}}\mathrm{d}E$$

$$D(E)\mathrm{d}E = \frac{2}{L^3}D^*(E)\mathrm{d}E$$

$$D(E)\mathrm{d}E = \frac{\sqrt{E - E_A + A + 6B}}{2\pi^2a^3B^{3/2}}\mathrm{d}E$$

$$m_{ij}^* = \hbar\left(\frac{\partial^2E}{\partial k_i\partial k_j}\right)^{-1}$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Ba^2}$$

(2) obere Bandkante: $k_i a \approx \pi$

$$\cos(k_i a) \approx -1 + \frac{(ak_i - \pi)^2}{2}$$

$$E(\vec{k}) = E_A - A + 6B - Ba^2((k_x - \frac{\pi}{a})^2 + (k_y - \frac{\pi}{a})^2 + (k_z - \frac{\pi}{a})^2$$

$$\vec{k'} = \vec{k} - \frac{\vec{p}}{a}$$

mit $\vec{p} = (\pi, \pi, \pi)^T \implies \frac{\mathrm{d}k_i'}{\mathrm{d}k_i} = 1$

$$E(\vec{k}) = E_A - A + 6B - Ba^2k'^2$$

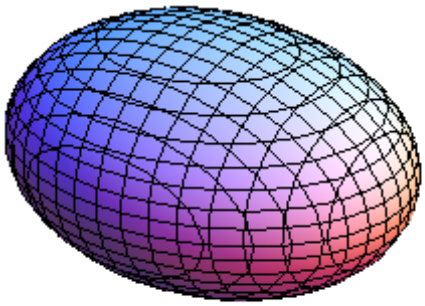
$$D(E)\mathrm{d}E = \frac{\sqrt{E_A - E - A + 6B}}{2\pi a^3 B^{3/2}}\mathrm{d}E$$

und ebenso

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2}$$

39. Aufgabe: Anisotroper Kristall

Energie der Kristallelektronen im Leitungsband war gegeben: $E(\vec{k}) = \alpha_{xx}k_x^2 + \alpha_{yy}k_y^2 + \alpha_{zz}k_z^2$. Die Flächen konstanter Energie sollen diskutiert werden. Die Bewegungsgleichungen eines Elektrons unter einem äußeren Feld $\vec{E}$ sollen aufgestellt werden.
Typischerweise ergeben sich Ellipsoide, wie in folgendem Bild gezeigt.



Nils Ansatz: Es ist nach Definition

$$\hbar\dot{\vec{k}} = -e\vec{E}$$

mit dem elektrischen Feld $\vec{E}$ und für die Geschwindigkeit gilt:

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(\vec{k}) = \frac{2}{\hbar}\begin{pmatrix}\alpha_{xx}k_x\\ \alpha_{yy}k_y\\ \alpha_{zz}k_z\end{pmatrix}$$

Das kann man jetzt noch ineinander einsetzen und erhält:

$$\ddot{x}_i = -\frac{2eE_i}{\hbar^2}\alpha_{ii}$$

40. Aufgabe: Zyklotronfrequenz

Gegeben ist die Energiefläche $E(\vec{k}) = \hbar^2 \left(\frac{k_x^2+k_y^2}{2m_t^*} + \frac{k_z^2}{2m_l^*}\right)$. Es soll durch die Bewegungsgleichungen gezeigt werden, dass die Umlauffrequenz des Elektrons im Magnetfeld der Zyklotronfrequenz $\omega_c = \frac{eB}{(m_t^* m_l^*)^{1/2}}$ entspricht, wenn das B-Feld in x-Richtung zeigt.
Es ist (in die Formeln eingesetzt):

$$\vec{v}(\vec{k}) = \hbar\nabla_k \left(\frac{k_x^2}{2m_t^*} + \frac{k_y^2}{2m_t^*} + \frac{k_z^2}{2m_l^*}\right) = \hbar \begin{pmatrix} k_x/m_t^* \\ k_y/m_t^* \\ k_z/m_l^* \end{pmatrix}$$

und damit

$$\hbar\dot{\vec{k}} = -e\hbar B \begin{pmatrix} k_x/m_t^* \\ k_y/m_t^* \\ k_z/m_l^* \end{pmatrix} \times \hat{e}_x$$

wenn B die Amplitude des Magnetfeldes ist. Das entspricht:

$$\dot{\vec{k}} = -eB \begin{pmatrix} 0 \\ k_z/m_l^* \\ -k_y m_t^* \end{pmatrix}$$

Man erhält also drei DGLs, welche ineinander eingesetzt werden können, wenn man noch einmal nach der Zeit ableitet:

$$\begin{aligned}
\dot{k}_x &= 0 && \Longrightarrow\ k_x = \text{const.} \\
\dot{k}_y &= -\frac{eB}{m_l^*}k_z && \Longrightarrow\ \ddot{k}_y = -\frac{eB}{m_l^*}\dot{k}_z = -\frac{(eB)^2}{m_l^* m_t^*}k_y \\
\dot{k}_z &= \frac{eB}{m_t^*}k_y && \Longrightarrow\ \ddot{k}_z = \frac{eB}{m_l^*}\dot{k}_y = -\frac{(eB)^2}{m_l^* m_t^*}k_z
\end{aligned}$$

Die beiden letzten Gleichungen entsprechen gerade den Schwingungsgleichungen. Ihre

Lösungen entsprechen harmonische Oszillationen mit der Umlauffrequenz von

$$\omega = \sqrt{\frac{(eB)^2}{m_l^* m_t^*}} = \frac{eB}{\sqrt{m_t^* m_l^*}} = \omega_c$$

41. Aufgabe: Bloch-Elektronen im Magnetfeld

Die Bewegung von Bloch-Elektronen im Magnetfeld soll betrachtet werden. Die Bahn $\vec{r}_\perp$ (Projektion der Bahn im Ortsraum auf die Ebene senkrecht zu $\vec{B}$) soll berechnet werden. Außerdem sollen die möglichen Bahnen bei Edelmetallen und deren Umlaufsinn diskutiert werden.
Die Gleichungen wurden oben schon besprochen. Sie lauten:

$$\hbar\dot{\vec{k}} = -e\vec{v} \times \vec{B} \qquad \vec{v} = \frac{1}{\hbar}\nabla E$$

Wir möchten jetzt die Bahn senkrecht zum Magnetfeld berechnen, also

$$\vec{r}_\perp = \vec{r} - \hat{\vec{B}}(\hat{\vec{B}} \cdot \vec{r})$$

wobei $\hat{\vec{B}}$ die Einheitsrichtung des Magnetfeldes angibt. Wir nehmen jetzt an, dass sich diese Richtung nicht ändert und können schreiben:

$$\vec{v}_\perp = \vec{v} - \hat{\vec{B}}(\hat{\vec{B}} \cdot \vec{v})$$

und damit auch

$$\hat{\vec{B}} \times \hbar\dot{\vec{k}} = -e(\hat{\vec{B}} \times \vec{v} \times \vec{B}) = -e(\vec{v}(\hat{\vec{B}} \cdot \vec{B}) - \vec{B}(\hat{\vec{B}} \cdot \vec{v})) = -e|\vec{B}|\vec{v}_\perp$$

Wir integrieren jetzt also nach der Zeit und erhalten die allgemeine Lösung für ein konstantes homogenes Magnetfeld

$$\vec{r}_\perp(t) - \vec{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar}{e|\vec{B}|}\hat{\vec{B}} \times (\vec{k}(t) - \vec{k}(0))$$

irgendwie nicht wirklich vollständig

Ansatz: $k_y = A\cos(\omega t) \quad k_z = A'\sin(\omega t) \quad \omega = \frac{eB}{\sqrt{m_t^* m_l^*}}$ in Bewegungsgleichung einsetzen...

$\dot{k}_z = A'\omega\cos(\omega t)$
Die Bahn wird dabei immer so durchlaufen, dass die hochenergetische Seite rechts liegt. Es können sich geschlossene Elektronenbahnen ergeben (Rechte-Hand), geschlossene Löcherbahnen (linke Hand) oder sogar offene Bahnen ergeben.

12. Übung

42. Aufgabe: Löcher

Mit

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i k_j} = -\frac{6.2510^{-15}\ \text{eVcm}^2}{\hbar^2} 2\delta_{ij}$$

erhält man

$$m^*_{ii} = -5.55 \cdot 10^{-32}\ \text{kg}$$

für die effektive Masse eines Elektrons. Das Loch hat also gerade eine positive Masse. Der Betrag des Wellenvektors ist wie beim Elektron gegeben durch

$$|\vec{k}| = 10^7\ 1/\text{cm}$$

Die Richtung zeigt jetzt jedoch in negative x-Richtung. Die Geschwindigkeit entspricht dem des Elektrons, also

$$\vec{v}(\vec{k})_i = \left(\frac{1}{\hbar}\nabla E\right)_i = \frac{6.2510^{-15}\ \text{eVcm}^2}{\hbar} 2k_i$$

Man erhält nur eine Geschwindigkeit in x-Richtung, die von Null verschieden ist, mit

$$v_x = -1.89908 \cdot 10^6\ \text{m/s}$$

Die Energie ist gegeben durch

$$-E(-\vec{k}) = -E(\vec{k}) = 0.625\ \text{eV}$$

Die Stromdichte ist dementsprechend (da es nur einen unbesetzten Zustand gibt)

$$j = \frac{e}{V}\vec{v} = e\vec{v} = -3.04 \cdot 10^{-13}\ \text{A/m}^2$$

Der Kraftimpuls entspricht

$$\vec{p} = m^*\vec{v} = -1.054 \cdot 10^{-25}\ \text{kg m/s}$$

43. Aufgabe: De-Haas-van-Alphen-Effekt

(a) Für freie Elektronen ist die Fermi-Fläche eine Kugel mit Radius k_f. Die Querschnitts-Fläche ist damit

$$S_{k,f} = \pi k_f^2 = \pi \left(3\pi^2 n\right)^{2/3} \approx 4.55686 \times 10^{20}\ \mathrm{m}^{-2}$$

(b) Man erhält mit der gegebenen Formel für das Feld in [001]-Richtung:

$$S_k = 4.8953 \times 10^{20}\ \mathrm{m}^{-2}$$

und in [111]-Richtung:

$$S_k = 4.65651 \times 10^{20}\ \mathrm{m}^{-2}$$

bzw.

$$S_k = 0.1590973 \times 10^{20}\ \mathrm{m}^{-2}$$

Die verschiedenen Flächen ergeben sich, da es auch verschiedene Elektronenbahnen bei Edelmetallen geben kann (siehe letztes Blatt oder Ashcroft-Mermin Seite 368 f).

(c) Konstantes Magnetfeld führt zu konstanter Energie.

44. Aufgabe: Dissipativer Elektronenstrom

überarbeite

$$\vec{j} = -ne\vec{v} = -\frac{ne}{m^*}\vec{p}$$

$$\vec{v} = -\mu_e \vec{t} \quad \mu = \frac{e\tau}{m^*}$$

$$\frac{\mathrm{d}\vec{p}}{\mathrm{d}t} = -e\left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}\right) - \frac{\vec{p}}{\tau} = 0$$

da stationär.

$$ne\mu_e E_x = \frac{e}{m^*}\tau B_z j_y + j_x$$

$$ne\mu_e E_y = -\frac{e}{m^*}\tau B_z j_z + j_y$$

$$E_y = E_H$$

(1) kurgeschgeschlossen:

$$E_H = 0 \implies j_y = -ne\mu_e v_x B_z = j_x \mu_e B_z$$

Hall-Winkel definieren:

$$\tan\theta_H = \frac{j_y}{j_x} = \mu_e B_z = \underbrace{\frac{e}{m^*} B_z}_{\omega_c} \tau$$

(2) offen:

$$j_y = 0 \implies n\mu_e E_H - \frac{e\tau}{m^*} B_z j_x$$

$$j_x = ne\mu_e E_x$$

$$R_H = \frac{E_H}{j_x B_z} = -\frac{1}{ne}$$

45. Aufgabe: Boltzmann-Gleichung

Die Boltzmann-Gleichung lautet

$$f(\vec{r},\vec{k}) = f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial E}\vec{v} \cdot \left(\vec{E}(\vec{r}) + \frac{1}{3}\nabla\mu(\vec{r}) + \frac{E-\mu}{eT}\nabla T(\vec{r})\right)$$

f_0 ist dabei die Fermi-Dirac-Verteilung mit

$$f_0(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

Wir betrachten die beiden Fälle:

(a) Wenn nur $\vec{E} \neq 0$, dann lautet die BG noch:

$$f(\vec{r},\vec{k}) = f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial E}\vec{v} \cdot \vec{E}(\vec{r})$$

Nun ist

$$\frac{\partial f_0}{\partial k_x} = \frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{\partial f_0}{\partial E}\hbar v_x$$

und damit

$$f(x,k_x) = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar}\frac{\partial f_0}{\partial k_x}E_x(x)$$

was genau der Taylorreihenentwicklung von f_0 auf k um $k_x + \frac{e\tau}{\hbar}E_x(x)$ entspricht. Die Kurve sieht also genauso aus wie die echte f_0-Kurve, nur verschoben.

(b) Wenn nur $\nabla T \neq 0$, dann lautet die BG noch:

$$f(\vec{r},\vec{k}) = f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial E}\vec{v} \cdot \nabla T(\vec{r})\frac{E}{eT}$$

Nun ist wieder

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial f_0}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial E} = \frac{\partial f_0}{\partial T}\frac{-T}{E-\mu}$$

und damit

$$f(x, k_x) = f_0 - \tau v_x \frac{\partial T}{\partial x}\frac{\partial f_0}{\partial T}$$

was genau der Taylorreihenentwicklung von f_0 auf k um $T - \tau v_x \frac{\partial T}{\partial x}$ entspricht. Die Kurve sieht also genauso aus wie die echte f_0-Kurve, nur verschoben.

46. Aufgabe: Thomas-Fermi-Näherung

(a) Es gibt drei Potentiale. Das gesamte Potential ϕ setzt sich zusammen aus dem Potential der Elektronen ϕ^{ind} und dem des Rests ϕ^{ext}. Für alle drei gelten die Poissongleichungen im Ortsraum und deshalb im reziproken Raum deren FT:

$$k^2\phi = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

mit den jeweiligen Ladungsdichten ρ. Wir setzen einen linearen Zusammenhang zwischen externem und gesamten Feld voraus (siehe Aufgabenstellung) und aus der Beziehung für die Felder

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon E$$

folgt dann

$$\phi = \frac{\phi^{\text{ext}}}{\varepsilon}$$

Außerdem soll in TFN gelten:

$$\rho^{\text{ind}} = -e^2 \hat{D} \phi^{\text{ges}}$$

wobei $\hat{D}$ jetzt die Zustandsdichte ist (nicht das Feld!). Also ist

$$\phi^{\text{ind}} = \phi - \phi^{\text{ext}} = \frac{\rho^{\text{ind}}}{k^2\varepsilon_0} = \frac{-e^2\hat{D}}{k^2\varepsilon_0}\phi$$

und damit

$$\phi = \frac{\phi^{\text{ext}}}{1 + \frac{e^2\hat{D}}{k^2\varepsilon_0}}$$

Es soll aber auch gelten

$$\phi = \frac{\phi^{\text{ext}}}{\varepsilon}$$

und damit erhält man die gewünschte Beziehung:

$$\varepsilon = 1 + \frac{e^2 \hat{D}}{\varepsilon_0} \frac{1}{k^2}$$

da laut Skript

$$k_0^2 = \frac{e^2 \hat{D}}{\varepsilon_0}$$

gilt.

(b) Für die gesamten Fälle ist dann

$$\varepsilon_{\text{ges}}(k) = 1 + \frac{P}{E\varepsilon_0} + \frac{k_0^2}{k^2}$$

mit (wie wir von ÜB vorher wissen)

$$\frac{P}{E} = \frac{Ne^2}{\mu(\overline{\omega}^2 - \omega)}$$

Dabei ist μ die reduzierte Masse, ω die Frequenz, N die Anzahl und $\bar{\omega}$ eine Konstante. Damit ist dann

$$\varepsilon_{\text{ges}}(k) = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 \mu(\overline{\omega}^2 - \omega^2)} + \frac{k_0^2}{k^2}$$

Da $\omega_T \to 0$ muss auch (da dies enthalten ist)

$$\bar{\omega} \to 0$$

Die Nullstellen ergeben sich dann bei

$$\frac{Ne^2}{\varepsilon_0 \mu \omega^2} = \frac{k_0^2}{k^2}$$

da weiterhin auch noch $\frac{k_0}{k} \gg 1$ gelten soll. Also

$$\omega^2 = \frac{Ne^2 k^2}{\varepsilon_0 \mu k_0^2} = \frac{Nk^2}{\hat{D}\mu} = \frac{2E_f}{3\mu} k^2$$

Damit ist die Schallgeschwindigkeit dann

$$v_s = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \sqrt{\frac{2E_F}{3\mu}}$$

13. Übung

47. Aufgabe: Halleffekt 2

Ergebnis:

$$A_H = \frac{h\mu_n^2 - n\mu_e^2}{e(h\mu_n + n\mu_e)^2}$$

48. Aufgabe: Energie von Donatorniveaus

$$n_D = N_D\langle n\rangle$$

$$\langle n\rangle = \frac{\sum N_j e^{-(E_j-\mu N_j)/k_BT}}{\sum e^{-(E_j-\mu N_j)/k_BT}}$$

$$= \frac{2e^{-(E_D-\mu)/k_BT} + 2e^{-(E_D+\Delta-2\mu)/k_BT}}{1 + 2e^{-(E_D-\mu)/k_BT} + e^{-(2E_D+\Delta-2\mu)/k_BT}}$$

$$= \frac{1 + e^{-(E_D+\Delta-\mu)/k_BT}}{\frac{1}{2}e^{(E_D\mu)/k_BT} + 1 + \frac{1}{2}e^{-(E_D-\mu+\Delta)/k_BT}}$$

Graph $\mu(T)$ mit Gleichungen in den Grenzfällen $T \to 0$ und $T \to \infty$

49. Aufgabe: Elektronenbeweglichkeit im Halbleiter

$$f(v) = n(\frac{m}{2\pi k_BT})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv}{2k_BT}}$$

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2\tau}{m}$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{phonon}} + \frac{1}{\tau_{Strstellen}}$$

Für hohe Temperaturen (Debye-Modell) ist σ_q konstant und N Temperaturabhängig

$$\langle u\rangle = N\langle E\rangle \propto T$$

$$\frac{m}{2}v^2 = \frac{3}{2}k_BT$$

$$\frac{1}{\tau_{phonon}} \propto T^{\frac{3}{2}}$$

Für tiefe Temperaturen gilt

$$\sigma_s \propto \frac{1}{E^2} \propto \frac{1}{T^2}$$

$$v \propto \sqrt{T}$$

$$\mu = \frac{e}{m}(\frac{1}{\tau_{phonon}} + \frac{1}{\tau_{Strstellen}})^{-1} = \frac{e}{m}(c'T^{\frac{3}{2}} + c''T^{-\frac{3}{2}}$$

Todo list

irgendwo Vorzeichenfehler? oder doch nicht? 5
Zusammenhang zwischen V_0, a, b, r_0 benutzen, um Gleichung zu vereinfachen . . . 6
Irgendwen auf den Kopf hauen, weil nicht dabei steht, ob es die Symmetrie der Basis oder des Gitters ist! 14
Noch ein a^2 suchen 28
Rechnung einfügen 33
ein paar Vorzeichen stimmen nicht, das Endergebnis schon :-) 37
Bild malen, auch mit reellen Werten 43
aber nur dann? 46
Die haben das anders gerechnet. Die haben das Ef von unten schon benutzt... . . 48
Unterschied kommt zwischen exp- und theo. Wert 49
echt? nö. Deshalb lieber die andere Möglichkeit: 53
warum? 53
irgendwie nicht wirklich vollständig 61
überarbeiten 63
Graph $\mu(T)$ mit Gleichungen in den Grenzfällen $T \to 0$ und $T \to \infty$ 67

Dieses Skript wurde heruntergeladen von
ugroup.hostzi.com

Alle Rechte verbleiben beim lesenden Dozenten.
Keine Garantie auf Richtigkeit oder Vollständigkeit.