

Probeklausur

Physik der Kondensierten Materie I

WS 2016/2017

Aufgabe 1 Klassifizierung von Kristallstrukturen (10 Punkte)

Kristallstrukturen können hinsichtlich der Symmetrieeoperationen, unter denen sie invariant bleiben, in Gruppen eingeteilt werden.

1.1 Die Symmetrieeoperationen werden in die Translationsgruppe und die Punktgruppe unterteilt. Was zeichnet die Symmetrieeoperationen dieser beiden Gruppen aus? Geben sie Symmetrieeoperationen an, die zu diesen beiden Gruppen gehören. (3 Punkte)

1.2 Wir betrachten nur das dreidimensionale Kristallgitter ohne Basis (entspricht einer Kristallstruktur mit kugelsymmetrischer Basis). Wie viele unterschiedliche Gittertypen (Kristallsysteme) können wir hinsichtlich der Symmetrieeoperationen der Punktgruppe unterscheiden? Wie heißen diese Kristallsysteme? (2 Punkte)

1.3 Wir betrachten wiederum nur das dreidimensionale Kristallgitter ohne Basis. Wie viele unterschiedliche Gittertypen (Bravais-Gitter) können wir hinsichtlich aller Symmetrieeoperationen der Punkt- und Translationsgruppe, die zusammen die Raumgruppe bilden, unterscheiden? (1 Punkte)

1.4 Welche Bravais-Gitter gehören zum kubischen Kristallsystem? Wodurch unterscheiden sich die Bravais-Gitter des kubischen Kristallsystems? (2 Punkte)

1.5 Wir betrachten nun dreidimensionale Kristallstrukturen, bei denen auf jedem Gitterpunkt eine Basis mit beliebiger Symmetrie sitzt. Wie viele unterschiedliche Kristallstrukturen (Kristallklassen) können wir hinsichtlich der Symmetrieeoperationen der Punktgruppe unterscheiden? Wie viele unterschiedliche Kristallstrukturen können wir hinsichtlich aller Symmetrieeoperationen der Punkt- und Translationsgruppe, die zusammen die Raumgruppe bilden, unterscheiden? (2 Punkte)

Aufgabe 2 Ebenen und Richtungen in Kristallen (8 Punkte)

2.1 Wie lauten die Vorschriften zur Bestimmung der Millerschen Indizes (hkl) zur Bezeichnung von Richtungen und Ebenen in Kristallen? (2 Punkte)

2.2 Abbildung 1(a)-(f) zeigt Ebenen in einem kubischen Kristall. Geben Sie die Millerschen Indizes (hkl) zu diesen Ebenen an. (3 Punkte)

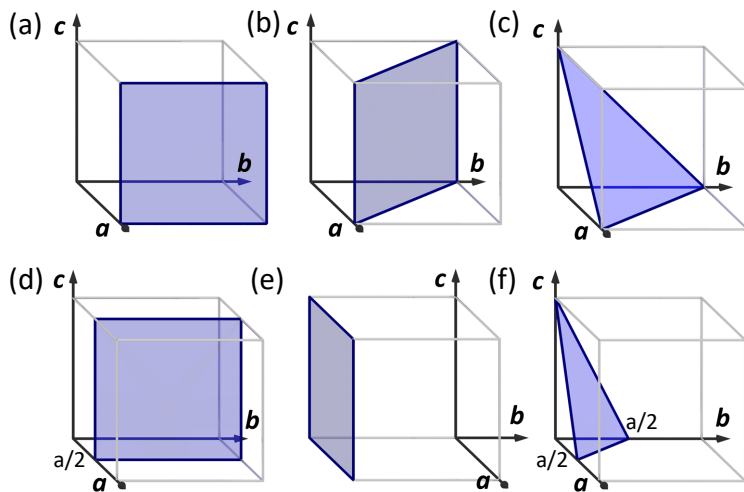


Abbildung 1: Ebenen in einem kubischen Kristall.

2.3 Für Kristalle mit hexagonalem Kristallgitter verwendet man üblicherweise 4 Kristallachsen a_1, a_2, a_3 und c (siehe Abb. 2) und deshalb auch 4 Millersche Indizes ($hkil$) zur Bezeichnung von Ebenen. Geben Sie die 4 Millerschen Indizes ($hkil$) zu den vier in Abb. 2 gezeigten Ebenen (rot, grün, blau, gelb) an. Sind die 4 Indizes unabhängig voneinander. Falls nein, welche Beziehungen bestehen zwischen ihnen? (3 Punkte)

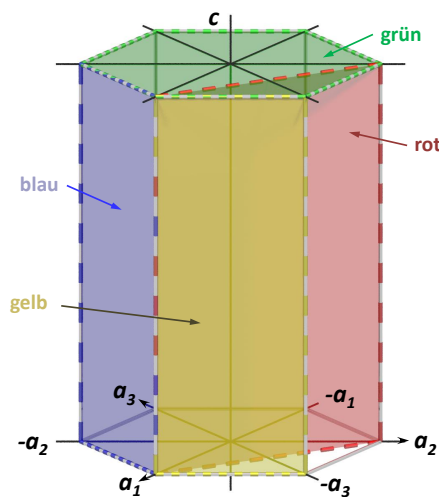


Abbildung 2: Ebenen in einem hexagonalen Kristall.

Aufgabe 3 Zweidimensionales Gitter (12 Punkte)

Abbildung 3 zeigt ein zweidimensionales Gitter eines Kristalls aus zwei verschiedenen Atomsorten A und B.

3.1 Geben sie eine mögliche primitive Gitterzelle mit den zugehörigen Basisatomen und primitiven Gittervektoren an. Berechnen Sie die Fläche dieser primitiven Einheitszelle. (2 Punkte)

3.2 Welches Bravais-Gitter beschreibt die Translationssymmetrie des Punktgitters vollständig? (1 Punkt)

3.3 Beschreiben Sie, wie man die Wigner-Seitz-Zelle erhält, und zeichnen Sie diese für das vorliegende Gitter. (2 Punkte)

3.4 Berechnen Sie die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters für den gegebenen Kristall und skizzieren Sie das reziproke Gitter. Welche Symmetrie besitzt das reziproke Gitter? (3 Punkte)

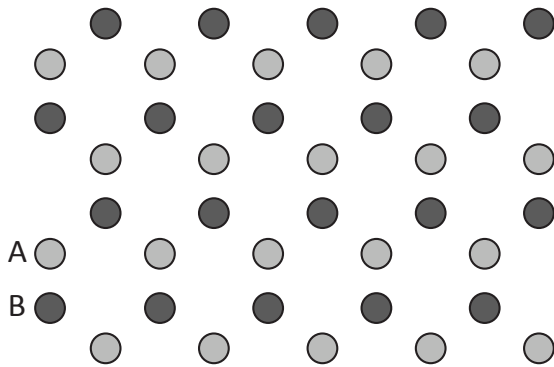


Abbildung 3: Zweidimensionales Gitter eines Kristalls aus zwei verschiedenen Atomen A und B.

3.5 Zeichnen Sie die erste Brillouin-Zone des Gitters und berechnen Sie deren Fläche. (2 Punkte)

3.6 Wie würden sich die vorherigen Eigenschaften ändern, wenn die beiden Atome in Abbildung 3 identisch sind? Welches Bravais-Gitter beschreibt die Translationssymmetrie des Punktgitters nun vollständig? (2 Punkte)

Aufgabe 4 Strukturanalyse – Laue-Experiment (7 Punkte)

Betrachten Sie im folgenden ein Laue-Experiment an einem NaCl-Kristall.

4.1 Geben Sie die Anzahl der Ionen in der konventionellen und der primitiven Einheitszelle, sowie die Anzahl der nächsten Nachbarnionen (Na^+ und Cl^-) jedes Na^+ und Cl^- Ions des NaCl-Kristalls an. (3 Punkte)

4.2 Beschreiben Sie das Laue-Verfahren. (1 Punkt)

4.3 Begründen Sie mit Hilfe des Strukturfaktors, dass nur Reflexe bestimmter Gitterebenen im Interferenzmuster zu sehen sind. Welche Bedingungen erfüllen diese? Gehen Sie dabei vom allgemeinen Ausdruck $S_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j}$ für den Strukturfaktor aus, wobei $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3$ ein reziproker Gittervektor und \mathbf{r}_j die Positionen und f_j die Atomformfaktoren der Basisatome sind. (3 Punkte)

Aufgabe 5 Bindungsenergie (7 Punkte)

Die gesamte Bindungsenergie eines Edelgaskristalls erhält man durch das Aufsummieren der Paarwechselwirkung (Lennard-Jones-Potenzial) über alle $N/2$ Atompaare im Kristall:

$$U_{\text{tot}} = 2N\epsilon \sum_{i \neq j} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Mit $\alpha_{ij} = r_{ij}/R$ ($R =$ Abstand zum nächsten Nachbaratom) sind die Gittersummen für das bcc-Gitter durch $A_{12}^{\text{bcc}} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-12} = 9,114$ und $A_6^{\text{bcc}} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-6} = 12,253$, für das fcc-Gitter durch $A_{12}^{\text{fcc}} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-12} = 12,1319$ und $A_6^{\text{fcc}} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-6} = 14,4539$ und für das hcp-Gitter durch $A_{12}^{\text{hcp}} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-12} = 12,1323$ und $A_6^{\text{hcp}} = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij}^{-6} = 14,4549$ gegeben.

5.1 Berechnen Sie die Gleichgewichtsabstände sowie das Verhältnis der Bindungsenergien der bcc-, fcc- und hcp-Struktur im Gleichgewicht. (3 Punkte)

5.2 Welche Struktur sollte die stabilste sein? Im Experiment misst man für Edelgaskristalle eine fcc-Struktur. Stimmt das mit ihrer Erwartung überein? Falls nein, was könnte die Ursache für Abweichungen zwischen Theorie und Experiment sein? (2 Punkte)

5.3 Kühlt man einen Edelgaskristall auf Temperaturen nahe dem absoluten Temperaturnullpunkt ab, so erwartet man klassisch, dass sich alle Atome am tiefsten Punkt des Wechselwirkungspotenzials $U_{\text{tot}}(R)$ befinden. Die quantenmechanische Grundzustandsenergie liegt allerdings um die Energie $E_0 = \hbar\omega/2$ höher. Wie hängt die Größe der Nullpunktsenergie E_0 mit der Masse M der Edelgasatome und der Form $U_{\text{tot}}(R)$ des Wechselwirkungspotenzials zusammen? (2 Punkte)

Aufgabe 6 Elastische Eigenschaften (9 Punkte)

6.1 Wie ist die Spannung σ definiert, welche Einheit besitzt sie? Wie viele unabhängige Komponenten besitzt der Spannungstensor für einen dreidimensionalen Festkörper? Begründen Sie ihre Antwort. Was verstehen wir unter Normalspannung und Schubspannung, wie viele Normal- und Schubspannungskomponenten gibt es? (3 Punkte)

6.2 Welcher allgemeine Zusammenhang besteht zwischen den Komponenten des Spannungs- und Dehnungstensors in linearer Näherung (Hookescher Bereich)? (1 Punkte)

6.3 Wie viele Komponenten besitzt der Elastizitätstensor im allgemeinen Fall für einen dreidimensionalen Festkörper? Auf wie viele unabhängige Komponenten kann diese Zahl aufgrund von allgemeinen Symmetrieüberlegungen für eine beliebige Kristallsymmetrie reduziert werden? Wie viele unabhängige Komponenten verbleiben schließlich für einen kubischen Kristall? (2 Punkte)

6.4 In der Technik werden häufig polykristalline Materialien verwendet, die man hinsichtlich ihrer elastischen Eigenschaften in guter Näherung als isotrope Festkörper betrachten kann. Was versteht man unter den technischen Größen Young-Modul E , Poisson-Zahl ν , Kompressionsmodul B und Gleitmodul G ? Wie sind diese Größen definiert? Sind diese Größen unabhängig voneinander? (3 Punkte)

Aufgabe 7 Gitterschwingungen (15 Punkte)

Betrachten Sie eine lineare Kette mit alternierenden Atomen der Masse M_1 und M_2 verknüpft über die Kopplungskonstante C . (Angaben: $\cos qa \simeq 1 - \frac{1}{2}q^2a^2 \dots$ bzw. $\sqrt{1+x} \simeq 1 + \frac{1}{2}x \dots$)

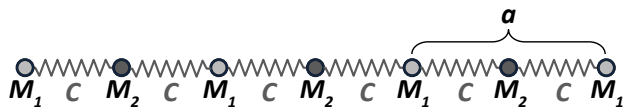


Abbildung 4: Lineare Kette aus zwei alternierenden Atomen der Masse M_1 und M_2 .

7.1 Zeigen Sie, dass die Dispersionsrelation folgende Form besitzt, wenn nur die Wechselwirkung der Atome mit ihren unmittelbaren Nachbarn berücksichtigt wird:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{C}{M_1 M_2} \left(M_1 + M_2 \pm \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1 M_2 \cos qa} \right) .$$

Verwenden Sie hierzu den Lösungsansatz $u_n(t) = u_0 e^{i(qna - \omega t)}$ bzw. $v_n(t) = v_0 e^{i(qna - \omega t)}$. (5 Punkte)

7.2 Skizzieren Sie den Verlauf $\omega(q)$. Diskutieren Sie den Grenzfall $q \rightarrow 0$. Welche Steigung hat die Dispersion dort? (4 Punkte)

7.3 Diskutieren Sie den Grenzfall $q \rightarrow \pi/a$. Welche Steigung hat die Dispersion dort? (2 Punkte)

7.4 Diskutieren Sie die Grenzfälle $M_1 \gg M_2$ und $M_1 = M_2$. (2 Punkte)

7.5 Wie schwingen die Atome unterschiedlicher Masse relativ zueinander bei akustischen und optischen Schwingungen. Skizzieren Sie die Auslenkung der beiden Atomsorten für transversal und longitudinal akustische sowie für transversal und longitudinal optische Gitterschwingungen. (2 Punkte)

Aufgabe 8 Spezifische Wärmekapazität eines zweidimensionalen Kristallgitters (10 Punkte)

Betrachten Sie ein zweidimensionales Kristallgitter aus identischen Atomen, in dem die Bewegung der Atome nur in der Ebene des zweidimensionalen Kristalls stattfindet. Die spezifische Wärmekapazität $c_A = C_A/A$ bei konstanter Fläche A , ist gegeben durch

$$c_A = \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q},r} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar\omega_r(\mathbf{q})}{e^{\frac{\hbar\omega_r(\mathbf{q})}{k_B T}} - 1}.$$

Hierbei ist $\omega_r(\mathbf{q})$ die Dispersionsrelation der r Phononenzweige, T die Temperatur und $k_B = 1,3807 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ die Boltzmann-Konstante.

(Angaben: $e^x \simeq 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3$ bzw. $\frac{1}{a+bx+cx^2+\dots} \simeq \frac{1}{a} \left[1 - \frac{b}{a}x + \left(\frac{b^2}{a^2} - \frac{c}{a} \right) x^2 \right]$)

$\int_0^\infty dx [x^2/(e^x - 1)] \simeq 2,404$ bzw. $\int_0^\infty dx [x/(e^x - 1)] = \pi^2/6$.

8.1 Machen Sie eine klassische Abschätzung der spezifischen Wärmekapazität. (2 Punkte)

8.2 Berechnen Sie den Hochtemperaturgrenzfall ($\hbar\omega_r(\mathbf{q}) \ll k_B T$) der spezifischen Wärmekapazität für den zweidimensionalen Kristall mit einatomiger Basis. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der klassischen Abschätzung. (2 Punkte)

8.3 Zeigen Sie, dass in der Debye-Näherung die spezifische Wärme des zweidimensionalen Kristalls aus identischen Atomen für tiefe Temperaturen ($T \ll \Theta_D$) proportional zu T^2 ist. Hierbei ist $\Theta_D = \hbar\omega_D/k_B$ die Debye-Temperatur. (3 Punkte)

8.4 Wie ändert sich die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität bei tiefen Temperaturen, wenn wir von einem zweidimensionalen zu einem eindimensionalen Kristall übergehen, in dem die Bewegung der Atome nur in einer Dimension stattfindet? (3 Punkte)

Aufgabe 9: Fermi-Dirac-Verteilung (5 Punkte)

Angaben: $\hbar = 1,054 \times 10^{-34} \text{ Js}$, Elektronenmasse $m = 9,109 382 91(40) \times 10^{-31} \text{ kg}$, Elementarladung $e = 1,602 176 565(35) \times 10^{-19} \text{ C}$ und Boltzmann-Konstante $k_B = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$.

9.1 Berechnen Sie die Dichte freier Elektronen in Kupfer. Kupfer besitzt ein kubisch-flächenzentriertes Gitter mit einer Gitterkonstanten von $a = 3,61 \text{ \AA}$ und einem freien Elektron pro Atom. (1P)

9.2 Berechnen Sie die Fermi-Energie für Kupfer und skizzieren Sie die Fermi-Dirac-Verteilung für $T = 0 \text{ K}$. (2P)

9.3 Skizzieren Sie die Fermi-Dirac-Verteilung für $T = 300 \text{ K}$. Schätzen Sie den Anteil der freien Elektronen für Kupfer ab, die sich bei $T = 300 \text{ K}$ in angeregten Zuständen oberhalb der Fermi-Energie befinden. (2P)

Aufgabe 10: Wärmeleitung bei tiefen Temperaturen (7 Punkte)

Für die Wärmeleitung eines Teilchengases wird im Rahmen der kinetischen Gastheorie $\kappa = \frac{1}{3}c_V v \ell = \frac{1}{3}c_V v^2 \tau$ erwartet, wobei c_V die auf ein Teilchen bezogene Wärmekapazität, v ihre Geschwindigkeit, $\ell = v\tau$ die mittlere freie Weglänge und τ die mittlere Streuzzeit der Teilchen ist. Wir nehmen ein Kristallgitter mit einer einatomigen Basis an und diskutieren den Wärmetransport des Phononengases in einem Isolator (Debye-Temperatur $\Theta_D = 250$ K) und des Elektronengases (Fermi-Temperatur $T_F = 100\,000$ K) in einem Metall.

10.1 Was müssen wir für v bei einem Phononen- und einem Elektronengas verwenden? In welcher Größenordnung liegen die jeweiligen Werte (2P)

10.2 Welcher Anteil der Phononen und Elektronen trägt bei Raumtemperatur in etwa zum Wärmetransport bei? (1P)

10.3 Diskutieren Sie qualitativ die erwartete Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit eines Phononen- und eines Elektronengases bei tiefen Temperaturen ($T \ll \Theta_D, T_F$) und bei hohen Temperaturen ($T \gg \Theta_D, T \ll T_F$). (4P)