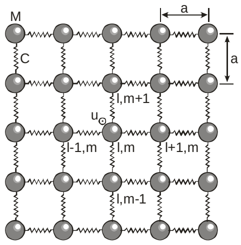
1. **Kristallographie:** Ein kristalliner Festkörper kann als **periodische Anordnung von Atomen** beschrieben werden. Alle Atompositionen lassen sich durch **Translation der sogenannten Elementarzelle** in die drei Raumrichtungen um einen Satz von **Basisvektoren** konstruieren.

a) Interpretieren Sie die Termini **Elementarzelle**, **primitive Elementarzelle**, **Basisvektor**, **primitiver Basisvektor** und **reziprokes Gitter**.

b) Skizzieren Sie eine **Elementarzelle** eines **kubisch raumzentrierten** und eines **kubisch flächenzentrierten** Gitters. Ermitteln Sie **die primitiven Basisvektoren**.

c) Zeigen Sie, dass das **reziproke Gitter des kubisch flächenzentrierten Gitters kubisch raumzentriert** ist.

2. **Schwingungen im quadratischen Gitter – Dispersionsrelation, Brillouin-Zone und Schallgeschwindigkeit:** Gegeben sei ein quadratisches Gitter der **Gitterkonstante** a. $u_{l,m}$ sei die Auslenkung des Atomes in der **Spalte** l und der **Reihe** m. Die Auslenkungen u seien alle **normal** zur eingezeichneten Ebene (siehe Skizze). Die **Masse der Atome sei** M, die **Federkonstante** zwischen den nächsten Nachbaratomen sei C.



a) Zeigen Sie, dass für **kleine Auslenkungen** u die Bewegungsgleichung des Atomes an der Position l, m folgendermaßen lautet: $M \cdot \frac{d^2 u_{l,m}}{dt^2} = C \cdot \left[\left(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2 \cdot u_{l,m} \right) + \left(u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2 \cdot u_{l,m} \right) \right]$

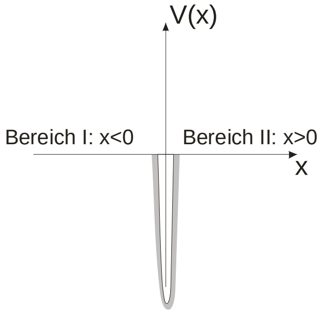
b) Zeigen Sie, dass mit $u_{l,m} = u(0) \cdot exp\left[i \cdot \left(l \cdot k_x \cdot a + m \cdot k_y \cdot a - \omega \cdot t \right) \right]$ die Bewegungsgleichung erfüllt ist, wenn die Dispersionsrelation $\omega^2 \cdot M = 2 \cdot C \cdot \left[2 - cos(k_x \cdot a) - cos(k_y \cdot a) \right]$ gilt.

c) Bestimmen Sie jenen Bereich des k-Raumes, für den **unabhängige Lösungen** der Dispersionsrelation existieren.

d) Zeigen Sie, dass für $k_x \cdot a << 1$ und $k_y \cdot a << 1$ gilt: $\omega = \sqrt{\frac{C \cdot a^2}{M}} \cdot \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \sqrt{\frac{C \cdot a^2}{M}} \cdot K$. Wie hängt dieses Ergebnis mit der **Schallgeschwindigkeit** in Festkörpern zusammen?

Bitte Seite wenden!

3. **Delta-Potential:** Ein Teilchen der **Masse *m*** befinde sich in einem **anziehenden δ-förmigen** Potential der Form $V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \cdot D \cdot \delta(x), \quad D > 0$ (siehe Skizze).



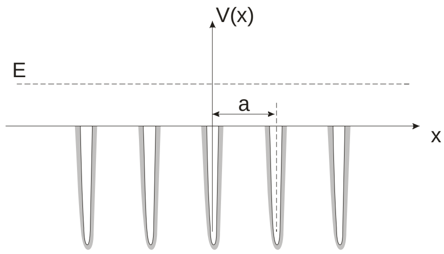
a) Zeigen Sie mit Hilfe der **einmaligen Integration der zeitunabhängigen Schrödingergleichung** über das **Intervall [*x* = -ε, *x* = ε]**, dass für $\varepsilon \to 0$ die Anschlussbedingung für die Ableitung der Wellenfunktion von Bereich *I* zu Bereich *II* (siehe Skizze) lautet: $\frac{d\psi_I(x)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} + 2 \cdot D \cdot \psi(0)$.

Beachten Sie dabei: $\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E \cdot \psi(x) \cdot dx = 0$ und $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \cdot \psi(x) = \psi(0)$.

b) Zeigen Sie, dass es **nur einen gebundenen Zustand** der Energie $E = -\frac{\hbar^2 \cdot D^2}{2 \cdot m}$ gibt.

c) Bestimmen Sie die **normierte Wellenfunktion** zu diesem Eigenwert.

4. **Periodisches δ-Potential und Bändermodell:** Ein Teilchen der **Masse *m*** und der **Energie *E*, *E* > 0**, befinde sich in Wechselwirkung mit einem **anziehenden periodischen δ-förmigen Potential** der Form $V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \cdot D \cdot \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta(x + l \cdot a), \quad D > 0$, mit der **Gitterkonstante *a* > 0** (siehe Skizze).



Das **Blochtheorem**, welches für **periodische Potentiale** gilt, besagt, dass die Energieeigenfunktionen eines Teilchens durch einen **kontinuierlichen Parameter *K***, $K \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$, die sogenannte **Quasiwellenzahl**, gekennzeichnet werden können. Für die zu einem gegebenen K gehörige Energieeigenfunktion gilt $\psi_K(x + l \cdot a) = e^{i \cdot K \cdot l \cdot a} \cdot \psi_K(x), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.
Leiten Sie mit Hilfe der **Anschlussbedingung für die Ableitung** der Wellenfunktionen von links nach rechts eines δ-Potentiales **an der Stelle *a***, $\left.\frac{d\psi_{links}(x)}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{rechts}(x)}{dx}\right|_{x=a} + 2 \cdot D \cdot \psi(a)$ sowie mit Hilfe des Blochtheorems die **Eigenwertbedingung für die möglichen Energiewerte *E* des Teilchens her** und erläutern Sie, warum es zum Auftreten von "erlaubten" und "verbotenen" Energiebereichen, den sogenannten **Energiebändern**, kommt.

(Lösung: $\cos(K \cdot a) = \cos\left(\sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}} \cdot a\right) - \frac{D}{\sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}}} \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}} \cdot a\right)$*)*