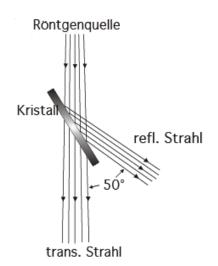
ÜBUNGSBLATT 6

Beispiel 21 (Bragg-Bedingung):

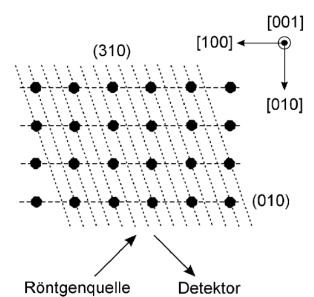
Eine breitbandige Röntgenstrahlung trifft auf einen einfach kubischen Kristall mit einer Gitterkonstante von 4 Å. Der Winkel zwischen dem transmittierten und dem reflektierten Strahl beträgt 50°.

- (a) Leiten Sie die Bragg-Bedingung ab.
- (b) Wie groß ist die Energie der reflektierten Röntgenphotonen für die 3 ersten Peaks?



(c) Gegeben sei ein einfach kubischer Kristall, bestehend aus nur einer Atomsorte und mit einer Gitterkonstanten von a=0.4 nm. Der Kristall wird mit monochromatischem Röntgenlicht der Wellenlänge $\lambda=0.15$ nm senkrecht zur

[001]-Achse bestrahlt. Um diese Achse sei er so orientiert, dass der (010)-Reflex in erster Ordnung erscheint. Berechnen Sie den Winkel um den der Kristall gedreht werden muss, damit der (310)-Reflex erscheint. Die Richtung des einfallenden Röntgenstrahls bleibe dabei unverändert.



Beispiel 22 (Phononen I):

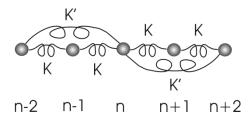
Gegeben sei eine unendlich lange lineare Anordnung von Massenpunkten der Masse M, welche in Ruhelage den gegenseitigen Abstand a aufweisen. Jeder Massenpunkt sei mit seinen beiden nächsten Nachbarn durch eine Kraftkonstante K gekoppelt. Die Massenpunkte sollen sich longitudinal auslenken lassen, wobei die Auslenkung des Massenpunktes n aus seiner Ruhelage durch die Koordinate u_n beschrieben wird.

(a) Stellen Sie für die Koordinate u_n einer longitudinalen Auslenkung des Massenpunktes n die Bewegungsgleichung auf!

- (b) Leiten Sie unter Verwendung des Lösungsansatzes $u_n = A \exp \left(i(nka \omega t)\right)$ die Dispersionsrelation $\omega(k)$ der Phononen her. (Hinweis: $\left[1-\cos(x)\right]/2 = \sin^2(x/2)$)
- (c) Untersuchen Sie die Dispersionsrelation für $k \to 0$ und leiten Sie daraus einen Ausdruck für die Schallgeschwindigkeit ab.
- (d) Diskutieren Sie das Verhalten der Gruppengeschwindigkeit für $k \to \pm \pi/a$.

Beispiel 23 (Phononen II):

Verfahren Sie wie in Aufgabe 15, berücksichtigen Sie diesmal aber auch Kräfte zu übernächsten Nachbarn, welche durch eine Kraftkonstante K' beschrieben werden soll.



- (a) Stellen Sie für obige lineare Kette die Bewegungsgleichung auf!
- (b) Leiten Sie unter Verwendung des Lösungsansatzes $u_n = A \exp(i(nka \omega t))$ die Dispersionsrelation $\omega(k)$ der Phononen her.
- (c) Wie lautet die Dispersionsrelation der Phononen für $k \to 0$ und K' = K/4?

Beispiel 24 (Effektive Masse):

(a) Zeigen Sie, daß man ausgehend von der Definition der Gruppengeschwindigkeit für ein allgemeines Energieband E(k) folgenden Ausdruck für die effektive Masse erhält:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

(b) Zeigen Sie, daß in einem parabolischen Band die effektive Masse konstant ist!

Optional:

(c) Gegeben sei folgendes modellhafte Energieband: $E(k) = \frac{E_0}{2} \left[1 - \cos(kd) \right]$. Zeichnen Sie das E(k)-Diagramm über die erste Brillouin-Zone! Berechnen Sie die parabolische Näherung für die gegebene Bandstruktur (für $|k| << \pi/d$) durch Taylorreihen-Entwicklung! Wie groß ist die effektive Masse in der parabolischen Näherung für $E_0 = 2$ eV und d = 5 Å?