

Teilaufgabe 3:**Kristallstruktur und elektronische Eigenschaften im Festkörper****a) Bravaisgitter und reziproker Raum**

Betrachten Sie ein zweidimensionales Rechteckgitter mit den Kantenlängen a und $2a$. Bestimmen Sie die Einheitsvektoren des zugehörigen reziproken Gitters!

b) Röntgenbeugung

(4 Punkte)

Gegeben sei ein Kristall mit einfach kubischem Gitter und der Gitterkonstanten $a = 0,35 \text{ nm}$. Berechnen Sie, welchen Einfallswinkel zur (111)-Ebene Sie für monochromatisches Röntgenlicht der Energie 9000 eV wählen müssen, damit Sie das erste Beugungsmaximum bei Reflexion an der (111)-Ebenenschar des Kristalls erhalten!

(4 Punkte)

c) Zustandekommen von Bändern und Bandlücken im Spektrum der Elektronenzustände

Um das Zustandekommen der elektronischen Struktur eines Festkörpers zu verstehen, kann man sich zweier unterschiedlicher Modellvorstellungen bedienen:

- (i) Tight-Binding-Modell: Die Elektronenzustände des Festkörpers entstehen aus den diskreten Niveaus der einzelnen Atome
 - (ii) Fast-freies-Elektronengas: Die Atomrümpfe streuen Elektronen, die sich ansonsten wie in einem freien Elektronengas bewegen.
- Erklären Sie für jedes dieser Modelle, wie man das Zustandekommen von Bändern und Bandlücken in einem gedachten eindimensionalen Festkörper (= Kette von Atomen) verstehen kann!

(4 Punkte)

d) Elektronensysteme in Isolatoren und Metallen

Die elektronischen Eigenschaften eines Materials werden stark durch die Zahl der Valenzelektronen der Atome und durch das Vorhandensein von Bandlücken bestimmt. Begründen Sie hiermit, weshalb Aluminium ein Metall, Diamant dagegen ein Isolator ist! (Hinweis: Al hat die Ordnungszahl 13, 1 Atom pro primitiver Einheitszelle; C hat die Ordnungszahl 6, Diamant hat 2 Atome in seiner primitiven Einheitszelle)

(5 Punkte)

e) Elektrische Leitfähigkeit

Skizzieren Sie den spezifischen Widerstand eines (normal leitenden) Metalls als Funktion der Temperatur! Markieren Sie auf der Temperaturskala in etwa die Raumtemperatur! Benennen Sie die dominanten Effekte, die die Temperaturabhängigkeit in den einzelnen Temperaturbereichen bestimmen!

(3 Punkte)