



**Aufgabe 1) Atomabstand im Kristallgitter.**

Der Abstand der Atome in einem Kristall ist genauso groß, dass:

1. Anziehende und abstoßende Energien den gleichen Betrag besitzen. ....
2. Die Wellenfunktionen der Elektronen sich nicht mehr überlappen. ....
3. Die potentielle Energie der Bindung ein Minimum hat. ....
4. Keine der vorherigen Antworten trifft zu. ....

**Aufgabe 2) Atomorbitale.**

Erklären Sie den Begriff Hybridisierung. Welche Rolle spielt dabei die Linearität der Schrödingergleichung?

.....  
.....  
.....  
.....  
.....

**Aufgabe 3) Aufspaltung der Energieniveaus.**

Was führt zur Aufspaltung der Energieterme der Elektronen von Si-Atomen, wenn die Atomabstände von unendlich immer weiter auf den Abstand im Festkörper verringert werden?

1. Die Überlagerung der Wellenfunktionen der Elektronen eines Atoms mit den Wellenfunktionen eines anderen Atoms. ....
2. Die Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte jedes einzelnen Elektrons von der Position aller anderen Elektronen. ....
3. Das Pauli-Prinzip. ....
4. Nichts hiervon trifft zu. ....

**Aufgabe 4) Energie eines Elektrons.**

Um wie viel nimmt die Energie eines Elektrons zu, wenn es eine elektrische Potentialdifferenz von 0,5 V durchläuft?

**Aufgabe 5) Energien im Bändermodell.**

Für einen Halbleiter werden, bezogen auf einen bestimmten Nullpunkt, die Energiewerte

$$\begin{aligned} \text{Makropotential} \quad \phi_0 &= 3 \text{ V} \\ \text{Leitungsbandkante} \quad W_C &= -6 \text{ eV} \\ \text{Valenzbandkante} \quad W_V &= -7 \text{ eV} \end{aligned}$$

festgelegt.

- Zeichnen Sie das zugehörige Bänderdiagramm, wobei der Nullpunkt der Energie auf die Valenzbandkante gelegt werden soll.
- Die Austrittsarbeit  $W_H$  im Halbleiter wird als Abstand der Fermi-Energie  $W_F$  vom Makropotential definiert ( $W_H = -e\phi_0 - W_F$ ). Die Elektronenaffinität  $W_\phi$  ist definiert als die Energiedifferenz zwischen Makropotential und Leitungsbandkante ( $W_\phi = -e\phi_0 - W_C$ ). Wie groß sind (im obigen Beispiel) die Energie der Bandlücke  $W_g$ , sowie  $W_\phi$  und  $W_H$ ? (Nehmen Sie an, dass das Fermi-niveau in der Mitte der Bandlücke liegt.)
- Berechnen Sie die Ionisierungsenergie ( $W_I = -e\phi_0 - W_V$ ) und erklären Sie warum diese bei Halbleitern von besonderer Bedeutung ist.

**Aufgabe 6) Zustandsdichte.**

Betrachten Sie einen würfelförmigen Kristall mit Kantenlänge  $L = 1 \text{ mm}$ . Für die potentielle Energie der Elektronen soll gelten:

$$W_{pot} = \begin{cases} 0 & \text{innerhalb des Kristalls} \\ \infty & \text{außerhalb des Kristalls} \end{cases}$$

- Berechnen Sie unter Zuhilfenahme des Ansatzes  $\psi = a \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}$  als Lösung der Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi \right) = W \cdot \psi$$

die Energie  $W$  des Elektrons, das zu dem Wellenvektor  $\vec{k}$  gehört.

- Um die periodische Randbedingung zu erfüllen, wird folgender Ansatz gewählt:

$$k_x = \frac{n_x \cdot 2\pi}{L} \quad k_y = \frac{n_y \cdot 2\pi}{L} \quad k_z = \frac{n_z \cdot 2\pi}{L} \quad \text{mit } n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$$

Welchen Einfluss hat diese Wahl auf die Energie des Elektrons im k-Raum?

- Berechnen Sie die ersten vier Energieniveaus, die das Elektron einnehmen kann!
- Wie viele Zustände  $N_Z$  ergeben sich auf diesen ersten vier Energieniveaus? Durch wie viele Elektronen  $N_{EZ}$  können diese eingenommen werden?

**Besprechung** des Blatts: 06.11.2016.