

**Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik**  
Blatt 3

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040)  
Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704)

(Theorie, Do 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)  
(Experiment, Fr 12h - 14h c.t., Phy 2.1.29)

**Part I: Theory**

**3.1 Phase space of a harmonic oscillator**

The Hamiltonian of the one dimensional harmonic oscillator is

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2.$$

Which is the form of the curve  $H(q, p) = E$  in phase space? Calculate the volume of phase space  $V_{PR}(E) = \int dq \int dp$ , which is enclosed by this curve. The well known formula for the energy eigenvalues  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  gives the number of states with energy  $E_n \leq E$ . Find the relation between this number  $N_E$  and the phasespace volume  $V_{PR}(E)$ . **(2 points)**

**3.2 Partition function for a mixture of gases**

In a box of volume  $V$  there are  $N_1$  atoms of gas 1 and  $N_2$  atoms of gas 2. Treat the system as a mixture of ideal gases and calculate its partition function  $\Omega$ . **(2 Points)**

**3.3 The mixing entropy (Oral)**

Two ideal monoatomic gases have both the temperature  $T$ , particle number  $N$  and occupy volumes both of size  $V$ . The two volumes share a separating wall. The partition function  $\Omega(E, V, N)$  is given by:

$$\ln \Omega(E, V, N) = \frac{3N}{2} \ln \left( \frac{E}{N} \right) + N \ln \left( \frac{V}{N} \right) + N \ln c.$$

The wall separating the gases is then extracted from the side, and the two gases mix. How large is the change in entropy ( $S = k_B \ln \Omega$ ) associated to this process if i) the two gases are of the same type, or ii) of two different type (for example Helium and Argon?). Why are the results different? (Hint: Think about the Gibbs paradox)

**3.4 Pressure contributions in a gas mixture**

Let us consider a mixture of ideal gases contained in a volume  $V$  ( $N_i$  atoms of the  $i$ th type). Write down the partition function  $\Omega(E, V, N_1, \dots, N_m)$  and, from it, calculate the pressure of the gas mixture. How does the pressure divide among the different components? The pressure, as a generalized force associated to the volume, should be evaluated using the formula:

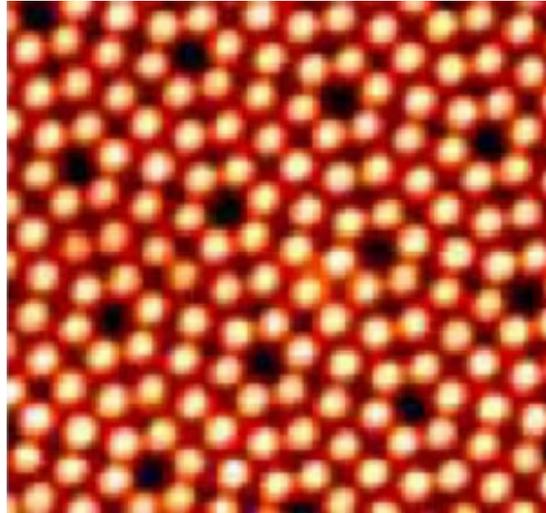
$$p = K_B T \frac{\partial \ln \Omega(E, V, \{N_i\})}{\partial V}$$

**(2 Points)**

## Part II: Experiment

### 3.5 Symmetrielemente und Millersche Indizes

Die Abbildung zeigt eine Oberfläche eines Silizium-Einkristalls, abgebildet mit einem Rastertunnelmikroskop. Überlegen Sie sich Symmetrioperationen, die die abgebildete Oberfläche in sich selbst überführen würde. Um welche Kristallebene handelt es sich bei der abgebildeten Struktur (Angabe der Millerschen Indizes)? **(2 Punkte)**



### 3.6 Gitterbedingung für Bravais-Gitter

Drei nicht-koplanare Vektoren  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$ ,  $\vec{a}_3$  spannen im dreidimensionalen Raum ein Parallelepiped (eine *primitive Elementarzelle*) auf. Durch fortlaufende Aneinanderfügung dieser Translationsvektoren bzw. Parallelepipede entsteht ein Gitter, dessen Gitterpunkte die Eckpunkte der Parallelepipede sind. Ein solches Gitter nennt man Translations- oder Bravais-Gitter. Für jedes dieser Gitter gilt die folgende Gitterbedingung: Alle Gitterpunkte haben eine identische (also insbesondere auch gleich orientierte) Umgebung.

Zeigen Sie, dass diese Gitterbedingung beim kubisch flächenzentrierten, wie auch beim kubisch raumzentrierten Gitter erfüllt ist, nicht aber bei einem kubischen Gitter mit gleichzeitiger Flächen- und Raumzentrierung. Dieses letztere ist also kein Bravais-Gitter. **(2 Punkte)**

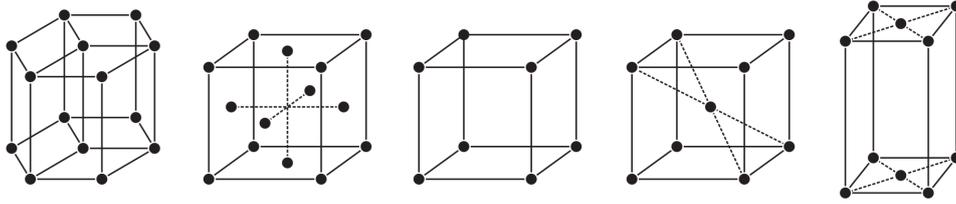
### 3.7 Kubische Bravais-Gitter

Bestimmen Sie für die drei kubischen Bravais-Gitter (primitiv, raumzentriert, flächenzentriert) mit Gitterkonstante  $a$  folgende charakteristische Größen:

- (a) Zahl der Gitterpunkte pro kubischer Elementarzelle **(1 Punkt)**
- (b) Abstand der nächsten Nachbarn **(1 Punkt)**
- (c) Zahl der nächsten Nachbarn (Koordinationszahl) **(1 Punkt)**
- (d) Abstand und Zahl der zweitnächsten Nachbarn **(1 Punkt)**
- (e) Volumenverhältnis der kubischen zur primitiven Elementarzelle **(1 Punkt)**

### 3.8 Bravais-Gitter

Bestimmen Sie die primitiven Translationsvektoren der abgebildeten Bravais-Gitter. (1 Punkt)



### 3.9 Die Struktur von Eisen

Unterhalb von  $910^\circ\text{C}$  liegt Eisen in der bcc-Struktur vor ( $\alpha\text{-Fe}$ ), zwischen  $910^\circ\text{C}$  und  $1390^\circ\text{C}$  in der fcc-Struktur ( $\gamma\text{-Fe}$ ).

- Bestimmen Sie unter der Annahme kugelförmiger, auf Kontakt gepackter Atome die Form und Größe der oktaedrischen Zwischengitterplätze in  $\gamma\text{-Fe}$  (Gitterkonstante  $a = 3.64\text{ \AA}$ ) und  $\alpha\text{-Fe}$  ( $a = 2.87\text{ \AA}$ ). (1 Punkt)
- Fertigen Sie eine Skizze der Gitter und der Zwischengitterplätze an. (1 Punkt)
- Von welcher Phase würden Sie eine höhere Löslichkeit für Kohlenstoff erwarten? Hinweis: Der kovalente Radius von Kohlenstoff beträgt  $0.77\text{ \AA}$ . (1 Punkt)
- (Erst in der Übung zu bearbeiten) Was passiert beim Abkühlen einer Eisenschmelze, die etwas Kohlenstoff ( $\leq 1\%$ ) enthält?