

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik
Blatt 4

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

4.1 Energy scales

Calculate the characteristic energy scale (*i.e.* the difference ΔE between the energy of the first excited state and the groundstate) and the associated temperature $T = \Delta E/k_B$ corresponding to the following systems:

- a) Non interacting electrons in a cube of lateral size $L = 1$ cm and $L = 1$ Å. **(1 point)**

- b) Ideal (*i.e.* non-interacting) electronic spins in a magnetic field of 1 Tesla. **(1 point)**

4.2 Ideal gas in a sphere

An ideal gas closed in a sphere of radius R should be treated quantum mechanically.

- a) Prove that the radial part of the Schrödinger equation is solved by the spherical Bessel functions $j_l(x)$. Hint: The spherical Bessel functions $j_l(x)$ solve the differential equation:

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} + [x^2 - l(l+1)]y = 0$$

(2 Points)

- b) Calculate, for this specific geometry, the pressure $P = -\overline{\partial E_r(V)}/\partial V$ as a function of E and V . Assume as known the constants x_{nl} solving the equation $j_l(x_{nl}) = 0$ (*i.e.* x_{nl} are the zeros of the Bessel function).

(2 Points)

4.3 Ideal spin system (in class)

Consider a crystal lattice with an unpaired electron per atomic site immersed in a uniform magnetic field $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. The microscopic state of the system $r = (s_{z,1}, s_{z,2}, \dots, s_{z,N})$, where $s_{z,\nu} = \pm 1/2$ is the spin of the ν -th electron, has an energy

$$E_r(B) = -2\mu_B B \sum_{\nu=1}^N s_{z,\nu},$$

where $\mu_B = e\hbar/(2m_e)$ is the Bohr magneton. The (microcanonical) partition function $\Omega(E, B)$ has, in the limit $N \gg 1$ and $|E| \ll N\mu_B B$ the form

$$\ln \Omega(E, B) = -\frac{N}{2} \left(1 - \frac{E}{N\mu_B B} \right) \ln \left(\frac{1}{2} - \frac{E}{2N\mu_B B} \right) - \frac{N}{2} \left(1 + \frac{E}{N\mu_B B} \right) \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{E}{2N\mu_B B} \right).$$

- Find the an expression for the temperature as a function of the energy $T(E)$
- Which energy do you obtain for $T \rightarrow \infty$? Which temperature corresponds instead to $E = E_{\max}$?
- Calculate the ratio of the average occupation of the up and down spins as well as the energy as a function of the temperature T . Under the condition $T \geq 0$ what can you conclude about the average occupation of the spin up and spin down states?

4.4 Entropy variation by heat exchange

A kilogram of water in equilibrium at 10°C is brought in thermal contact to a heat reservoir at 90°C . After a while a new equilibrium is reached. Calculate, for this process, the entropy variation of water, of the thermal reservoir and of the entire system.

(2 Points)

Part II: Experiment

4.1 Beugung an Kristallen

Ein Kristall mit Netzebenenabstand $d = 1.8 \times 10^{-10}$ m soll mit Neutronen, Elektronen und Photonen untersucht werden. Die Raumgitterinterferenzen bei der elastischen Streuung sollen in allen drei Fällen einen Glanzwinkel von 60° in erster Beugungsordnung erzeugen.

- (a) Welche kinetische Energie müssen Neutronen für dieses Experiment besitzen? Geben Sie diese in der Einheit eV an. (1 Punkt)
- (b) Wie groß muss die kinetische Energie im Falle der Elektronen sein? Welchen Brechungswinkel bewirken diese Kristallebenen im Falle eines Elektronenmikroskops mit einer Beschleunigungsspannung von 100 kV? (1 Punkt)
- (c) Wie groß ist die Energie (in der Einheit eV) von Röntgenstrahlen, wenn das obige Experiment mit diesen durchgeführt wird? (1 Punkt)

4.2 Millersche Indizes

Wir betrachten die Ebenen mit den Millerschen Indizes (100) und (001) in einem Gitter mit fcc-Struktur. Die Indizes beziehen sich auf die übliche kubische Zelle. Dabei sind die Translationen die Kanten \hat{x} , \hat{y} und \hat{z} des Würfels mit Länge a . Wie lauten die Indizes dieser Ebenen, wenn sie sich auf die primitiven Achsen des fcc-Gitters beziehen? Zur Erinnerung: Die primitiven Achsen des fcc-Gitters lauten $\hat{a} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$, $\hat{b} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$ und $\hat{c} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$. (2 Punkte)

4.3 Die sc-, bcc-, fcc- und hcp-Struktur

- (a) In einer einfach kubischen (sc) Kristallstruktur befinden sich lediglich an den Ecken eines Würfels Atome. Die Berührungspunkte der Atome liegen deshalb entlang der Würfelkanten und die Gitterkonstante a beträgt $2r$, wobei r der Radius der als kugelförmig angenommenen Atome ist. Berechnen Sie den Volumenanteil, den die Atome in der Elementarzelle der einfach kubischen Kristallstruktur einnehmen. (1 Punkt)
- (b) Wie ändert sich der Volumenanteil beim Übergang von einem einfach kubischen zu einem kubisch raumzentrierten (bcc) Gitter? Welche der beiden Kristallstrukturen füllt den Raum besser aus? (1 Punkt)
- (c) Die gemessenen Werte für die Dichte und Gitterkonstante von Eisen betragen $\rho_{\text{Fe}} = 7.86 \text{ gcm}^{-3}$ und $a_{\text{Fe}} = 2.87 \times 10^{-10}$ m. Entscheiden Sie, ob Eisen in der einfach kubischen oder kubisch raumzentrierten Struktur vorliegt. Die Masse eines Eisenatoms beträgt $m_{\text{Fe}} = 9.28 \times 10^{-26}$ kg. (1 Punkt)
- (d) α -Co hat eine hcp-Struktur (hcp) mit den Gitterkonstanten $a = 2.51 \text{ \AA}$ und $c = 4.07 \text{ \AA}$. β -Co hat dagegen eine fcc-Struktur mit der kubischen Gitterkonstante von 3.55 \AA . Wie groß ist der Dichteunterschied der beiden Erscheinungsformen? (1 Punkt)

4.4 Das reziproke Gitter

Gegeben sein ein beliebiges Bravaisgitter mit den primitiven Gittervektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 .

(a) Zeigen Sie, dass die durch

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

definierten Vektoren \vec{b}_1 , \vec{b}_2 und \vec{b}_3 die primitiven Gittervektoren des entsprechenden reziproken Gitters sind. (1 Punkt)

(b) Zeigen Sie damit, dass das reziproke Gitter des reziproken Gitters wieder das ursprüngliche Gitter ist.

(c) Zeigen Sie, dass der reziproke Gittervektor $\vec{G}(hkl) = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ senkrecht auf den Netzebenen mit Millerindizes $\{hkl\}$ steht. (1 Punkt)

(d) Zeigen Sie, dass für den Abstand $d_{(hkl)}$ benachbarter Netzebenen zu den Millerindizes (hkl) gilt:
 $d_{(hkl)} = 2\pi |\vec{G}(hkl)|^{-1}$. (1 Punkt)