

**Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik**  
Blatt 5

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**

**5.1 Magnetic cooling**

The (canonical) partition function of an electronic spin in magnetic field reads:

$$z(T, B_{\text{ext}}) = 2 \cosh\left(\frac{\mu_B B_{\text{ext}}}{k_B T}\right).$$

- a) Derive the entropy per particle  $s(T, B_{\text{ext}})$  starting from the definition of the free energy per particle  $f(T, B_{\text{ext}}) = -k_B T \ln z(T, B_{\text{ext}})$ . Plot the result as a function of  $T$  (for different magnetic fields  $B_{\text{ext}}$ ) and of  $B_{\text{ext}}$  (for different temperatures  $T$ ). **(1 Point)**
- b) Why do the above relations allow to use an ideal spin system to cool its environment via an adiabatic demagnetization? **(2 Points)**
- c) Show that the dependance of  $s$  on  $B_{\text{ext}}$  can be approximated, for small  $\frac{\mu_B B_{\text{ext}}}{k_B T}$  by

$$s(T, B_{\text{ext}}) = s_0 - \alpha \left(\frac{B_{\text{ext}}}{T}\right)^2 + \dots \quad (1)$$

and calculate the constant  $\alpha$ . For which temperatures is this a bad approximation? **(1 Point)**

- d) With the help of the appropriate Maxwell-relation show that from (1) one can obtain the Curie law  $\chi_m = A/T$  and calculate the Curie constant  $A = A(\alpha)$ . **(1 Point)**

**5.2 General ideal spin system**

Consider a system of  $N$  independent particles of charge  $q$  and spin  $s$  immersed in a homogeneous magnetic field  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  with  $B > 0$ . The spin  $s > 0$  (here without the factor  $\hbar$ ) can be an integer or a semi-integer. The spin states are labeled by  $s_z = s, s - 1, s - 2, \dots, -s$ . The magnetic moment is  $\mu = g\mu_0\mathbf{s}$  where  $g$  is the gyromagnetic factor and  $\mu_0 = \frac{q\hbar}{2m}$ .

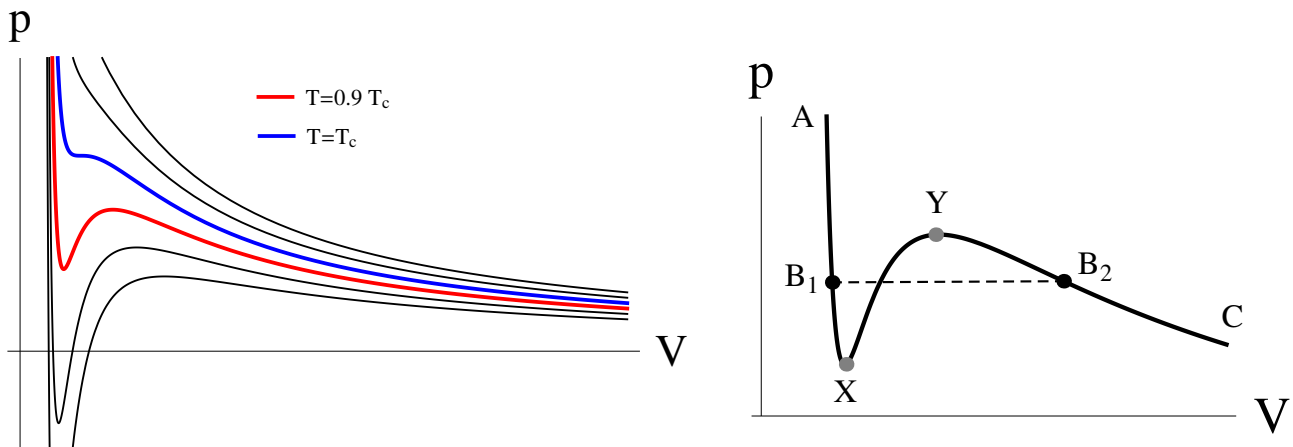
- a) Calculate the canonical partition function, the free energy  $F(T, B)$  and the magnetization  $M(T, B)$ . **(2 Points)**
- b) Calculate the asymptotic behavior of the magnetization for large and small temperatures. **(1 Point)**

### 5.3 Wan der Waals gas and the liquid-gas phase transition (c) to f) in class)

The thermal equation of state for the van der Waals gas is given by

$$\left(p + a \left(\frac{N}{V}\right)^2\right) (V - Nb) = Nk_B T.$$

In the following let us consider a fixed number of gas molecules, say  $N = N_A$ . This equation gives us pressure as a function of temperature and volume,  $p(T, V)$ . Some of the  $p(T, V)$  isotherms for different values of  $T$  are plotted below on the left. There is a range of  $T$  where  $p(T = \text{const}, V)$  develops a local minimum at low  $V$ . Such a situation is shown below on the right. To one pressure correspond three different volumes; this is an indicator of the existence of different phases.



- Find the value of the critical temperature  $T_c$ , i.e. the  $T$  for which the local minimum on the  $p(V)$  curve disappears. The isotherm for  $T = T_c$  is shown in blue in the left plot. At some point on the curve the isothermal compressibility diverges,  $\kappa_T = -(\partial V/\partial p)_T/V \rightarrow \infty$ . This point in the phase space is called the critical point. What are the critical values of  $V_c, p_c$ ? What is the ratio  $p_c V_c / (RT_c)$ ? **(2 Points)**
- Let us consider the van der Waals gas at  $T = 0.9T_c$ , with  $p(V)$  as shown in the right diagram. The curve clearly corresponds to three phases. The branch AC describes the pressure in a liquid, with its very low isothermal compressibility  $\kappa_T$ . The branch YC describes the gas, with its high  $\kappa_T$ , and on the branch XY  $\kappa_T < 0$ . Comment on the stability of this phase. **(1 Point)**
- Find the expressions for the Helmholtz free energy  $F$  and the Gibbs free enthalpy  $G$  for the van der Waals gas. How is the chemical potential  $\mu$  connected to  $G$ ?
- The gas is initially in the state A on the diagram. How does the chemical potential change as we lower the pressure? Plot  $\mu(0.9T_c, p)$  and identify the positions A, C, X and Y on the plot. The points  $B_1, B_2$  are defined by the condition that  $\mu(B_1) = \mu(B_2)$ . What is the value of the integral  $\int_{B_1}^{B_2} p dV$ ?
- What happens physically to the gas as we bring it from A to C by lowering the pressure? Is it possible for the gas to be in a state on the branch  $B_1 X$  or  $Y B_2$ ? If yes, how do we bring it there?
- Find the expression for the entropy of a van der Waals gas. What happens to the entropy when at constant  $p = 0.8p_c$  we raise the temperature of the gas from  $0.8T_c$  to  $1.2T_c$ ? What is the behavior of the heat capacity at constant pressure,  $C_p$ ?

## Part II: Experiment

### 5.4 Reziprokes Gitter eines hexagonalen Raumgitters

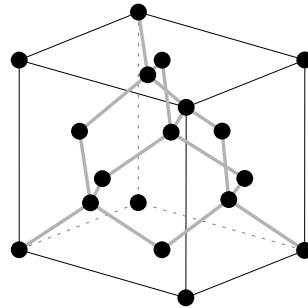
Betrachten Sie ein Raumgitter mit hexagonaler Symmetrie (Achsen und Winkel der gebräuchlichen Einheitszelle mit  $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \neq |\mathbf{c}|$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ . Wählen Sie geeignete primitive Gittervektoren mit diesen Eigenschaften (aber  $\gamma = 60^\circ$ ) und benutzen Sie diese, um die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters zu definieren. Hinweis: Es ist vorteilhaft,  $\mathbf{a} \parallel \hat{\mathbf{x}}$  und  $\mathbf{c} \parallel \hat{\mathbf{z}}$  zu wählen, wobei  $\hat{\mathbf{x}}$  und  $\hat{\mathbf{z}}$  die Einheitsvektoren in x- und z-Richtung sind.

Welche Symmetrie besitzt das reziproke Gitter? Durch welche Symmetrieeoperationen kann man das reziproke Gitter wieder in das Raumgitter überführen? Welche Volumina haben die primitiven Zellen des Raumgitters und des reziproken Gitters? (1 Punkt)

Darüber hinaus existiert eine allgemeine Beziehung bezüglich der Punktsymmetriegruppen von realem und reziprokem Gitter (Erläuterung in der Übung).

### 5.5 Strukturfaktor von Diamant

Diamant kondensiert in der fcc-Struktur mit einer zweiatomigen Basis mit den Ortsvektoren  $(0, 0, 0)$  und  $(1/4, 1/4, 1/4)$ . Als konventionelle Zelle für die Diamantstruktur benutzt man üblicherweise einen Würfel (siehe Abbildung), der dann insgesamt 8 Atome beinhaltet.



- Bestimmen Sie den Strukturfaktor  $S_{hkl}$  der so gewählten Basis. (1 Punkt)
- Berechnen Sie die Millerschen Indizes, für die eine Auslöschung von Reflexen auftritt. (1 Punkt)
- Zeigen Sie weiterhin, dass die erlaubten Beugungsreflexe entweder die Bedingung (i)  $h+k+l = 4n$  mit  $n \in \mathbb{Z}$  und alle Indizes  $h, k, l$  gerade, oder aber die Bedingung (ii), alle Indizes  $h, k, l$  ungerade, erfüllen. (1 Punkt)
- Was ändert sich, wenn Sie von einer Diamant-Struktur zu einer Zinkblende-Struktur übergehen? (1 Punkt)

### 5.6 Debye-Waller Faktor

Die Intensität der Bragg-Reflexe bei der Röntgenbeugung hängt von der Temperatur des Kristalls ab. Diese Abhängigkeit wird durch den Debye-Waller-Faktor  $D = I_{hkl}(T)/I_{hkl,0}$  beschrieben, wobei  $I_{hkl}(T)$  die Intensität in Richtung  $(hkl)$  bei der Temperatur  $T$  ist und  $I_{hkl,0}$  die Beugungsintensität ohne Phononen angibt.  $D$  hat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeit, dass ein Röntgenquant bei der Beugung keine Wechselwirkung mit Phononen erleidet und somit elastisch gestreut wird.

- Gehen Sie vom thermischen Mittelwert des Strukturfaktors

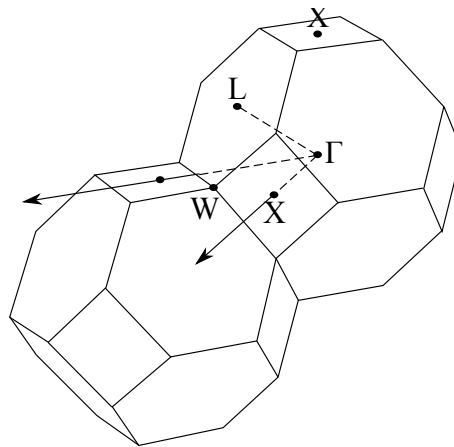
$$\langle S_{hkl} \rangle = \sum_i f_i \langle e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r}_i + \vec{u})} \rangle = \left( \sum_i f_i e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}_i} \right) \langle e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle$$

aus, wobei  $\vec{u}(t)$  die momentane Auslenkung eines Gitteratoms aus seiner Gleichgewichtslage aufgrund thermischer Bewegung ist und  $\langle \cdot \rangle$  eine zeitliche Mittelung bezeichnet. Leiten Sie  $D = e^{-1/3G^2\langle u^2 \rangle}$  her. Die Temperaturabhängigkeit steckt dabei in der mittleren quadratischen Auslenkung  $\langle u^2 \rangle$  der Atome aus ihrer Ruhelage durch thermische Anregung. (2 Punkte)

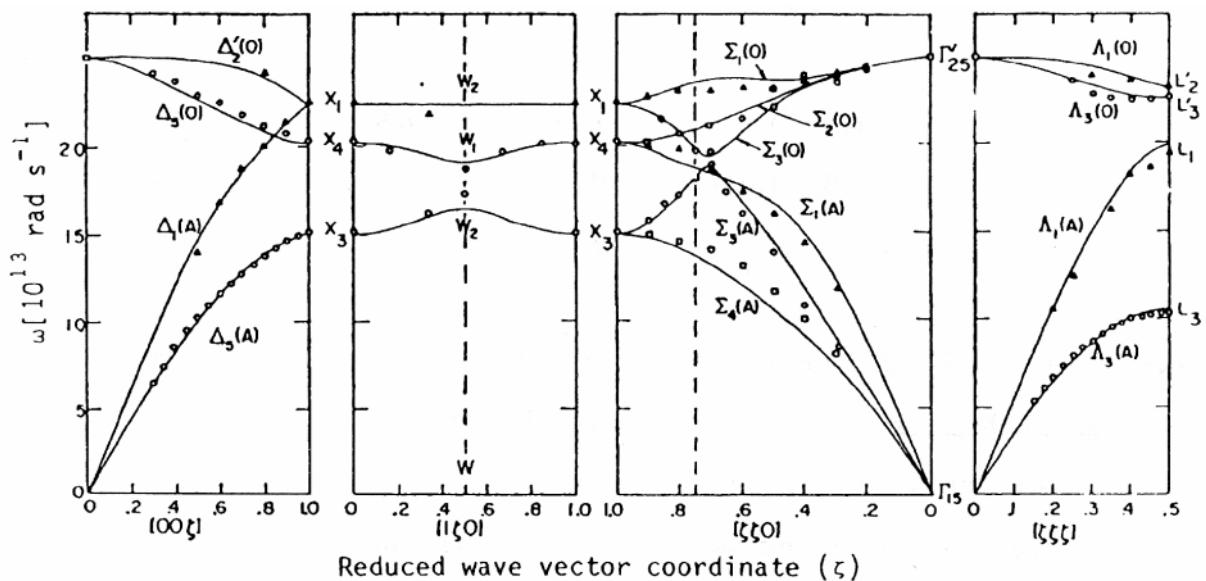
- (b) Betrachten Sie die Atome als *klassische* harmonische Oszillatoren mit der Masse  $M$  und der Schwingungsfrequenz  $\Omega$ . Bestimmen Sie in dieser Näherung einen Ausdruck für  $D$ , so dass die Abhängigkeit von der Temperatur und der Masse explizit auftritt. (1 Punkt)

### 5.7 Schallgeschwindigkeit in Diamant

- (a) Bestimmen Sie die Entfernungen vom  $\Gamma$ -Punkt der Brillouin-Zone des fcc-Gitters zum X- und zum L-Punkt. (1 Punkt)

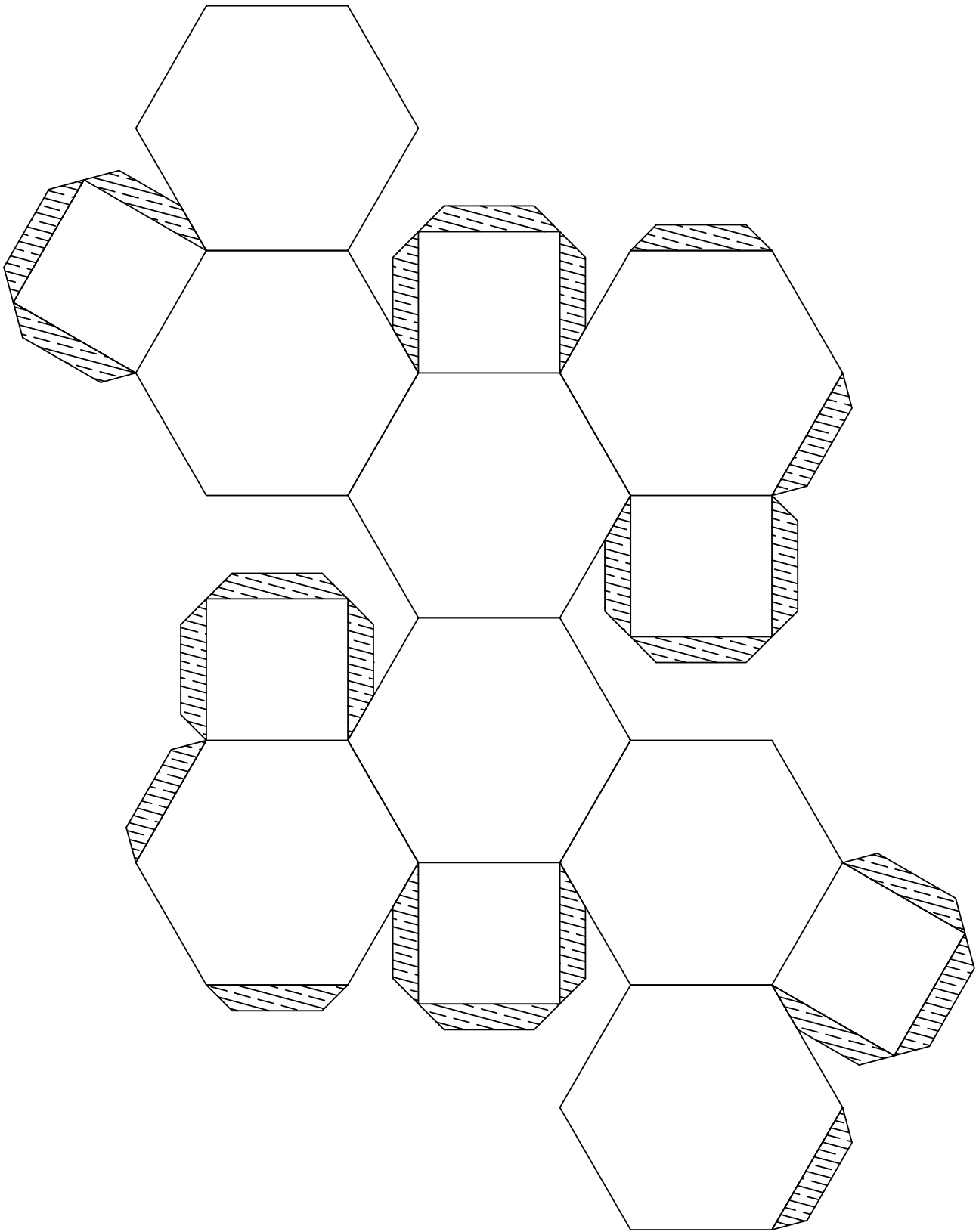


- (b) Ermitteln Sie die Schallgeschwindigkeit in Diamant aus den experimentellen Dispersionsrelationen (siehe Abbildung) für transversale und longitudinale Wellen in die  $[001]$  und  $[111]$  Richtung. Benutzen Sie die bekannte Brillouin-Zone des kubisch flächenzentrierten Gitters (siehe oben) und die kubische Gitterkonstante  $a = 3.56 \text{ \AA}$ . (1 Punkt)



### 5.8 Brillouin-Zone

Basteln Sie die folgende erste Brillouin-Zone zusammen:



Welcher Kristallstruktur entspricht diese Brillouin-Zone?

(1 Punkt)