

---

# Klausur in Experimentalphysik 4

Prof. Dr. L. Fabbietti

Sommersemester 2020

28.07.2020

---

Zugelassene Hilfsmittel:

- 1 Doppelseitig handbeschriebenes DIN A4 Blatt
- 1 nichtprogrammierbarer Taschenrechner

Die Bearbeitungszeit beträgt 90 Minuten. Es müssen nicht alle Aufgaben vollständig gelöst sein, um die Note 1,0 zu erhalten.

## Aufgabe A (10 Punkte)

- Inwieweit steht das Bohrsche Atommodell im Konflikt mit der klassischen Elektrodynamik?
- Wie ist die Halbwertsbreite definiert?
- Unter welcher Voraussetzung können die Eigenwerte von zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  gleichzeitig scharf gemessen werden?
- Was ist der Unterschied zwischen dem Paschen-Back-Effekt und dem anomalen Zeemann-Effekt?
- Erklären Sie kurz den Auger-Effekt.
- Welche Aussage kann über Edelgase in Bezug auf Spin, Bahndrehimpuls und Gesamtdrehimpuls gemacht werden?
- Warum ist die magnetische Quantenzahl  $m$  bei Mehrelektronen-Atomen auch ohne angelegtes äußeres Feld relevant?
- Wodurch kommt die Van der Waals-Wechselwirkung zustande?
- Welches Orbital (s,p,d,..) hat die höchste radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei  $r = 0$ ?
- Wie viele Freiheitsgrade hat ein dreiatomiges, gewinkeltes Molekül? Geben Sie die Komponenten an.

## Lösung

- Nach Bohr bewegen sich die Elektronen im Atom auf festen Bahnen. Nach der klassischen Elektrodynamik müssten die Elektronen aufgrund der Beschleunigung Strahlung abgeben, was ein Konflikt mit der Realität darstellt.

[1]

- Besitzt eine Funktion ein Maximum, so ist die Halbwertsbreite die Differenz zwischen den beiden Werten auf der x-Achse, für die die Funktion auf die Hälfte des Maximums abgesunken ist.

- [1]
- (c) Die Eigenwerte kann man gleichzeitig scharf messen, wenn die Operatoren vertauschbar sind, also  $[\hat{A}, \hat{E}] = 0$  gilt.
- [1]
- (d) Beim Paschen-Back-Effekt wird die Spin-Bahn-Kopplung aufgehoben, wohingegen beim anomalen Zeemann-Effekt diese erhalten bleibt.
- [1]
- (e) Ein einfallendes Photon schlägt ein Elektron aus einer inneren Schale. Das Photon, das vom nachrückenden Elektron emittiert wird, wird von einem äußeren Elektron verwendet, um sich ebenfalls aus dem Atom zu lösen. Dieses Elektron nennt man Auger-Elektron.
- [1]
- (f)  $L = S = J = 0$
- [1]
- (g) Bei Mehrelektronen-Atomen ist ab dem zweiten Elektronen die Ausrichtung relativ zum Feld des ersten Elektrons relevant und wird durch  $m$  beschrieben.
- [1]
- (h) Die Van der Waals-Wechselwirkung kommt induzierte Dipol-Dipol-Wechselwirkung zustande.
- [1]
- (i) s-Orbitale.
- [1]
- (j) Das Molekül hat: drei Freiheitsgrade in der Translation des gesamten Moleküls ( $v_x, v_y, v_z$ ), drei Freiheitsgrade der Rotation (um die x-, y-, z-Achse) und drei Freiheitsgrade der Schwingung der Einzelatome relativ zu einander (drei Eigenschwingungen)
- [1]

### Aufgabe 1 (10 Punkte)

- (a) Leiten Sie mit Hilfe der Bohrschen Quantisierungsbedingung für den Drehimpuls und Kräftegleichgewicht den Radius  $r_n$  der  $n$ -ten Bohr'schen Bahn in einem wasserstoffartigen Atom mit Kernladungszahl  $Z$  und reduzierter Masse  $\mu$  sowie die zugehörige Bindungsenergie  $E_n$  in Abhängigkeit von  $n$  her.
- (b) Zeigen Sie am Beispiel der L-Schale ( $n = 2$ ) eines Wasserstoffatoms, dass die Überlagerung aller möglichen Elektronendichteverteilungen eine kugelsymmetrische Verteilung ergibt. Hinweis: Die  $n = 2$  Wellenfunktionen können dafür nützlich sein (siehe Tabelle).

$n$	$l$	$m$	Wellenfunktionen $\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_B}\right) e^{-Zr/2a_B}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_B} e^{-Zr/2a_B} \cos \vartheta$
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_B} e^{-Zr/2a_B} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$

## Lösung

- (a) Es gilt ein Kräftegleichgewicht zwischen Zentripetalkraft und Coloumbkraft:

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1)$$

Die Geschwindigkeit  $v$  kann mit Hilfe der Quantisierungsbedingung eliminiert werden:

$$l = \mu v_n r_n = n\hbar \quad \Rightarrow \quad v_n = \frac{n\hbar}{\mu r_n} \quad (2)$$

[2]

Setzt man dies in Gleichung (1) ein, erhält man:

$$\frac{n^2 \hbar^2}{\mu r_n^3} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (3)$$

Durch Auflösen nach  $r_n$  erhält man für den Radius der  $n$ -ten Bohrschen Bahn:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu Ze^2} n^2 \quad (4)$$

[2]

Die Bindungsenergie ist die Summe von kinetischer und potentieller Energie:

$$E_n = \frac{1}{2} \mu v_n^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{n^2 \hbar^2}{2\mu r_n^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} \quad (5)$$

Einsetzen von  $r_n$  aus Gleichung (4) ergibt:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (6)$$

[2]

- (b) Dafür müssen wir zeigen, dass  $\sum_{lm} |\psi_{2lm}|^2$  unabhängig von  $\phi$  und  $\theta$  ist. Deshalb reicht es sich die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}$  der Wellenfunktionen anzuschauen.

[1]

Für 2s-Elektronen gilt:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (7)$$

dieser Ausdruck ist bereits isotrop.

[1]

Für 2p-Elektronen gilt:

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (8)$$

$$Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (9)$$

und die entsprechenden Betragsquadrate lauten

$$|Y_{10}|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta \quad (10)$$

$$|Y_{1\pm 1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \quad (11)$$

In Summe erhält man

$$\frac{3}{8\pi} (2 \cos^2 \theta + 2 \sin^2 \theta) = \frac{3}{4\pi} \quad \left( = \frac{2l+1}{4\pi} \text{ wenn } l = 1 \right), \quad (12)$$

dieser Ausdruck ist ebenfalls isotrop.

[2]

Allgemein kann man schreiben:

$$\sum_m |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (13)$$

Die Summe ist also immer unabhängig von  $\theta$  und  $\phi$ . Abgeschlossene Unterschalen sind damit kugelsymmetrisch.

## Aufgabe 2 (10 Punkte)

- Berechnen Sie die Energieniveaus einschließlich der Feinstruktur-Aufspaltung, die zur Hauptquantenzahl  $n = 3$  des einfach ionisierten He-Atoms gehören.
- Zeichnen Sie qualitativ die relative Lage der Energieniveaus für  $n = 3$  und  $n = 4$ . Zeichnen Sie die erlaubten Übergänge ein. Wie viele verschiedene Spektrallinien erwarten Sie?

## Lösung

- Die Energieeigenwerte sind:

$$E_n = -\alpha^2 m_e c^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad (14)$$

und die Feinstruktur-Korrektur:

$$\Delta E_{FS} = -\alpha^4 m_e c^2 \frac{Z^4}{2n^4} \left( \frac{n}{j+1} - \frac{3}{4} \right) \quad (15)$$

Insgesamt sind unsere Energiewerte also

$$E_{n,j} = E_n \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (16)$$

[2]

Mit

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \quad (17)$$

und  $\alpha^2 = 5,33 \cdot 10^{-5}$  und  $E_n = -(13,6 \text{ eV})Z^2/n^2$  können wir schreiben

$$E_{n,j} = -(13,6 \text{ eV}) \frac{4}{n^2} \left[ 1 + \frac{2,132 \cdot 10^{-4}}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (18)$$

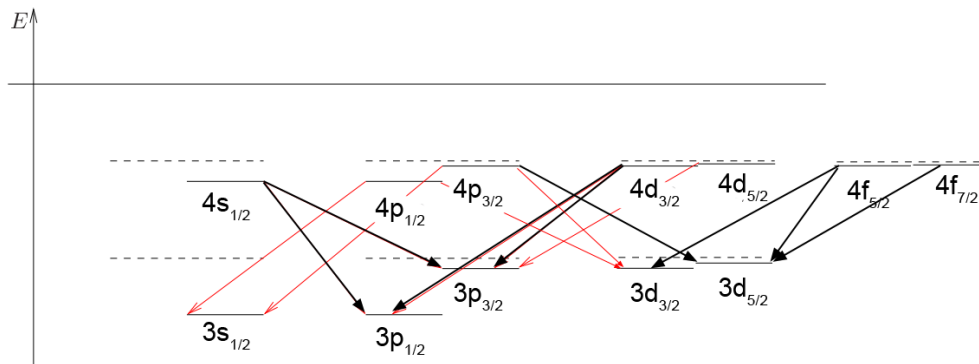
Für  $n = 3$  folgt:

$$E_{3,1/2} = -6,04 \text{ eV} (1 + 5,33 \cdot 10^{-5})$$

$$E_{3,3/2} = -6,04 \text{ eV} (1 + 1,78 \cdot 10^{-5})$$

$$E_{3,5/2} = -6,04 \text{ eV} (1 + 0,59 \cdot 10^{-5})$$

[3]



(b) [4]

Mit den Auswahlregeln  $\Delta l = \pm 1$  und  $\Delta j = 0, \pm 1$  erhält man die in der obigen Skizze eingezeichneten 13 Übergänge. Da die Feinstrukturformel für jedes  $n$  und jedes  $j$  einen anderen Wert liefert, sind die Frequenzen für alle erlaubten Übergänge verschieden, man erhält also auch 8 verschiedene Spektrallinien.

[1]

### Aufgabe 3 (9 Punkte)

- Berechnen Sie die Verschiebung der Übergangsfrequenz ( $\Delta\nu$ ) von  $1s \rightarrow 2p$  für die zwei Isotope  $^2\text{D}$  und  $^3\text{T}$  gegenüber normalem Wasserstoff. Berücksichtigen Sie bei der Berechnung der Verschiebung die unterschiedlichen reduzierten Massen.
- Berechnen Sie die Hyperfeinaufspaltung im Grundzustand mit den drei jeweiligen Kernspins  $\frac{1}{2} (^1\text{H})$ ,  $1 (^2\text{D})$  bzw.  $\frac{1}{2} (^3\text{T})$  sowie den magnetischen Momente  $2,79\mu_K$ ,  $0,85\mu_K$  bzw.  $2,98\mu_K$ .

**Hinweise:**

- Die Rydbergkonstante ist  $R_\infty c = 3,289842 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ .

- Die Hyperfeinaufspaltung beim Wasserstoffatom (Isotop  $^1\text{H}$ ) beträgt 1420 MHz.
- Atomare Massen (in atomaren Masseneinheiten  $m_e/m_u = 5.485799 \cdot 10^{-4}$ ):
  - Wasserstoff:  $m_1/m_u \approx 1.007825$
  - Deuterium:  $m_2/m_u \approx 2.014102$
  - Tritium:  $m_3/m_u \approx 3.016049$

## Lösung

(a) Die  $1s^1\text{S} \rightarrow 2p^2\text{P}$  Übergangsfrequenz erhält man aus der Bohrschen Formel:

$$\nu_0 = R_\infty c \frac{\mu}{m_e} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{4} \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_K}} R_\infty c \quad (19)$$

Die Kernmasse ist  $m_K \approx m_A - m_e$  ( $A = 1, 2, 3$ ), so dass

$$\frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_K}} \approx \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_A - m_e}} = \frac{1}{\frac{m_A}{m_A - m_e}} = 1 - \frac{m_e}{m_A} = 1 - \frac{m_e}{m_u} \frac{m_u}{m_A} \quad (20)$$

Für die drei Isotope mit  $A = 1, 2, 3$  erhält man

$$\nu_1 = 0.75 \cdot 0.999456 \cdot R_\infty c = 2.466039 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \quad (21)$$

$$\nu_2 = 0.75 \cdot 0.999728 \cdot R_\infty c = 2.466710 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \quad (22)$$

$$\nu_3 = 0.75 \cdot 0.999818 \cdot R_\infty c = 2.466932 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \quad (23)$$

Daraus berechnen sich die Isotopieverschiebungen zu

$$\Delta\nu_{21} = \nu_2 - \nu_1 = 6.71 \cdot 10^{11} \text{ Hz} = 671 \text{ GHz} \quad (24)$$

$$\Delta\nu_{31} = \nu_3 - \nu_1 = 8.93 \cdot 10^{11} \text{ Hz} = 893 \text{ GHz} \quad (25)$$

[4]

(b) Die Hyperfeinaufspaltung zwischen benachbarten Energieniveaus beträgt

$$\Delta\nu_{hfs} = \frac{1}{h} [\Delta E_{hfs}(F) - \Delta E_{hfs}(F-1)] = \frac{1}{h} A_{hfs} F \quad (26)$$

Dabei wurde nur die Wechselwirkung mit dem magnetischen Dipolmoment des Kerns berücksichtigt. Für die Quantenzahl  $F$  gilt  $|J - I| \leq F \leq J + I$ . Im  $^1\text{s}$ -Grundzustand ist  $J = 1/2$ . Man erhält also bei den drei Isotopen die folgenden Werte für den Drehimpuls  $F$ :

$$^1\text{H} : \quad I = 1/2, \quad F = 0, 1 \quad (27)$$

$$^2\text{D} : \quad I = 1, \quad F = 1/2, 3/2 \quad (28)$$

$$^3\text{T} : \quad I = 1/2, \quad F = 0, 1 \quad (29)$$

Die Hyperfeinaufspaltung beim Wasserstoffatom (Isotop  $^1\text{H}$ ) beträgt 1420 MHz. Da die Aufspaltung  $\Delta\nu_{hfs}$  proportional zum Produkt aus  $g$ -Faktor  $g_I = \mu_I/(\mu_K I)$  des Kerns und

maximalem  $F$  ist, kann die Hyperfeinaufspaltung für die anderen beiden Isotope über das Verhältnis der entsprechenden Produkte berechnet werden.

$$^1\text{H} : \quad \Delta\nu_{hf} = 1420 \text{ MHz} \quad (30)$$

$$^2\text{D} : \quad \Delta\nu_{hf} = \frac{F_D}{F_H} \cdot \frac{g_{I,D}}{g_{I,H}} \Delta\nu_{hf-H} = \frac{F_D}{F_H} \cdot \frac{\frac{\mu_{K,D}}{I_D}}{\frac{\mu_{K,H}}{I_H}} \Delta\nu_{hf-H} = \frac{3/2}{1} \cdot \frac{0.857}{5.58} \cdot 1420 \text{ MHz} = 327 \text{ MHz} \quad (31)$$

$$^3\text{T} : \quad \Delta\nu_{hf} = \frac{5.96}{5.58} \cdot 1420 \text{ MHz} = 1516 \text{ MHz} \quad (32)$$

[5]

Die Hyperfeinaufspaltungen sind ca. drei Größenordnungen kleiner als die Isotopieverschiebungen.

#### Aufgabe 4 (11 Punkte)

- (a) Warum spaltet der Term  $^3\text{P}_0$  im Magnetfeld nicht auf?
- (b) Warum spaltet der Term  $^4\text{D}_{1/2}$  im Magnetfeld nicht auf?
- (c)  $^{23}\text{Na}$  hat einen Kernspin  $I = 3/2$ . Geben Sie alle möglichen Gesamtdrehimpulse  $F$  für die Natriumkonfigurationen  $1s^2 2s^2 2p^6 3s$  und  $1s^2 2s^2 2p^6 3p$  an.

#### Lösung

- (a) Wegen  $J = 0$  gibt es keine Quantisierungsachse. Das vorhandene magnetische Moment  $\vec{\mu}_J \neq 0$  hat keinen stationären Anteil.

[1]

- (b) Da  $J \neq 0$  existiert eine Quantisierungsachse.  $S = 3/2$ ,  $L = 2$  und  $J = 1/2$  ergeben einen Landé'schen  $g$ -Faktor

$$g_J = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} = 0 \quad (33)$$

Die Projektion auf  $\vec{J}$  verschwindet, weil  $\vec{\mu}_J$  auf  $\vec{J}$  senkrecht steht.

[2]

- (c) Spin  $S$  und Bahndrehimpuls  $L$  addieren sich zum Elektronen-Gesamtdrehimpuls  $J$  gemäß der Auswahlregel

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (34)$$

Elektronen-Gesamtdrehimpuls  $J$  und Kerndrehimpuls  $I$  addieren sich zum Gesamtdrehimpuls  $F$  gemäß der Auswahlregel

$$|J - I| \leq F \leq J + I \quad (35)$$

Da die  $n = 1$ - und  $n = 2$ - Schalen abgeschlossen sind, ist für die Betrachtung der Elektronen-Drehimpulse nur das äußere Elektron relevant.

### 3s-Elektron

Spin:  $S = 1/2$

Bahndrehimpuls  $L = 0$

Elektronen-Gesamtdrehimpuls  $|1/2 - 0| \leq J \leq 0 + 1/2 \Rightarrow J = 1/2$

Gesamtdrehimpuls:  $|1/2 - 3/2| \leq F \leq 1/2 + 3/2 \Rightarrow F = 1, 2$

In der Natriumkonfiguration  $1s^2 2s^2 2p^6 3s$  gibt es die Gesamtdrehimpulse  $F = 1$  und  $F = 2$ .

[4]

### 3p-Elektron

Spin:  $S = 1/2$

Bahndrehimpuls  $L = 1$

Elektronen-Gesamtdrehimpuls  $|1/2 - 1| \leq J \leq 1 + 1/2 \Rightarrow J = 1/2, 3/2$

Gesamtdrehimpuls

$$|1/2 - 3/2| \leq F \leq 1/2 + 3/2 \Rightarrow F = 1, 2, \quad \text{sowie} \quad (36)$$

$$|3/2 - 3/2| \leq F \leq 3/2 + 3/2 \Rightarrow F = 0, 1, 2, 3 \quad (37)$$

In der Natriumkonfiguration  $1s^2 2s^2 2p^6 3p$  gibt es die Gesamtdrehimpulse  $F = 0$ ,  $F = 1$ ,  $F = 2$  und  $F = 3$ .

[4]

## Aufgabe 5 (12 Punkte)

Wir betrachten ein Atom mit zwei p-Elektronen  $(np)^1(n'p)^1$  in nicht abgeschlossenen Schalen (z.B. ein angeregtes He-Atom).

- Welche Konfigurationen sind bei Russel-Saunders-Kopplung möglich?
- Wie hängen die Abstände benachbarter Triplettkomponenten von  $J$  ab?
- Wie groß ist die Richtungsentartung der einzelnen Triplettkomponenten in Abhängigkeit von  $J$ ?
- Welche Konfigurationen sind für zwei gleichartige Elektronen  $(np)^2$  möglich?
- Welche Konfigurationen sind für zwei s-Elektronen  $(ns)^1(n's)^1$  möglich?

## Lösung

- Die beiden p-Elektronen  $l_1 = l_2 = 1$ ,  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$  können zu  $L = 0, 1, 2$  und  $S = 0, 1$  koppeln. Die möglichen  $J$ -Werte gehen jeweils von  $L + S$  bis  $|L - S|$ .
  - Singulets: (wegen  $S = 0$  ist  $J = L$ ):  $^1S_0$ ,  $^1P_1$ ,  $^1D_2$
  - Triplets:  $^3S_1$  (wegen  $L = 0$  ist  $J = S$  und die Multiplizität ist unvollständig entwickelt);  $^3P_0$ ,  $^3P_1$ ,  $^3P_2$ ;  $^3D_1$ ,  $^3D_2$ ,  $^3D_3$ .



[5]

- (b) Die Fragestellung ist nur für vollständige Triplets sinnvoll.

$$E_{LS}(J, L, S) = \frac{a}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (38)$$

wobei  $a > 0$  und unabhängig von  $J$ . also gilt

$$E_{LS}(J) = E_{LS}(J, L, S) - E_{LS}(J-1, L, S) = \frac{a}{2} [J(J+1) - (J-1)J] = aJ \quad (39)$$

Die Intervalle skalieren wie die größere der beteiligten Quantenzahlen  $J$  (Landé-sche Intervallregel).

[2]

- (c) Jeder Zustand  $|J, M_J\rangle$  ist  $2J + 1$ -fach richtungsentartet, d.h. nur Terme mit großem  $J$  haben entsprechend höheres Gewicht.

[1]

- (d) Bei gleichartigen Elektronen schlägt das Pauli-Prinzip zu!

- Singletts (Bahnfunktion muss symmetrisch sein):  $^1P_1$  verboten  $\Rightarrow$  nur  $^1S_0, ^1D_2$
- Triplets: aus Symmetriegründen sind  $^3S_1$  und  $^3D_{1,2,3}$  verboten  $\Rightarrow$  nur  $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$

[2]

- (e) nur  $L = 0$  Terme  $\Rightarrow J = S$ , also  $^1S_0$  und  $^3S_1$

[2]

## Aufgabe 6 (10 Punkte)

In der Radio- und Infrarotastronomie beobachtet man u.a. auch Moleküllinien im interstellaren Medium. Aus diesen Beobachtungen können Rückschlüsse auf die galaktische Verteilung und Häufigkeit der Moleküle sowie auf Sternentstehungsgebiete und -mechanismen gezogen werden.

- (a) Kohlenmonoxid  $^{12}_6C^{16}_8O$  emittiert beim Übergang vom ersten angeregten Rotationsniveau ( $J = 1$ ) zum Grundzustand ( $J = 0$ ) eine Linie der Wellenlänge  $\lambda_0 = 2.6$  mm. Berechnen Sie die dazu gehörige Energie und den Abstand der beiden Atome im Molekül.
- (b) Man kann bei diesen Beobachtungen auch Hinweise auf die Isotopenverhältnisse finden. Berechnen Sie die Energie und Frequenz des gleichen Übergangs im Molekül  $^{13}_6C^{16}_8O$  sowie die relative Frequenzverschiebung.

**Hinweis::** Nehmen Sie den gleichen Abstand  $R$  wie oben an.

## Lösung

- (a) Die reduzierte Masse beträgt:

$$\mu = \frac{12u \cdot 16u}{12u + 16u} \approx 6.86u.$$

$$\begin{aligned}
E_0 &= \frac{hc}{\lambda_0} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{2.6 \cdot 10^6 \text{ nm}} \approx 4.8 \cdot 10^{-4} \text{ eV} \\
E_{rot} &= \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = BJ(J+1) \\
\Delta E_{12} &= \frac{hc}{\lambda} = \Delta E_{Rot} = \frac{\hbar^2}{\mu R^2} \rightarrow \frac{\hbar^2}{\mu R^2} = \frac{hc}{\lambda} \\
\Rightarrow R &= \sqrt{\frac{h\lambda_0}{4\pi^2 c \mu}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2.6 \cdot 10^6 \text{ nm} \cdot 1240 \text{ eV nm}}{6.86 \cdot 931.5 \text{ MeV}}} \approx 1.13 \text{ \AA}
\end{aligned}$$

[6]

(b) Es ändert sich im Vergleich zu oben nur die reduzierte Molekülmasse:

$$\mu_{13} = \frac{13u \cdot 16u}{13u + 16u} \approx 7.17u.$$

Damit ergibt sich für die Energie:

$$\Delta E_{13} = \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \cdot \Delta E_{12} \approx 4.6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$\nu_{13} = \frac{\Delta E_{13}}{h} \approx 111 \text{ GHz}$$

$$\frac{\Delta \nu}{\nu_{12}} = \frac{\Delta E}{E_{12}} = 1 - \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \approx 0.04.$$

[4]

## Aufgabe 7 (13 Punkte)

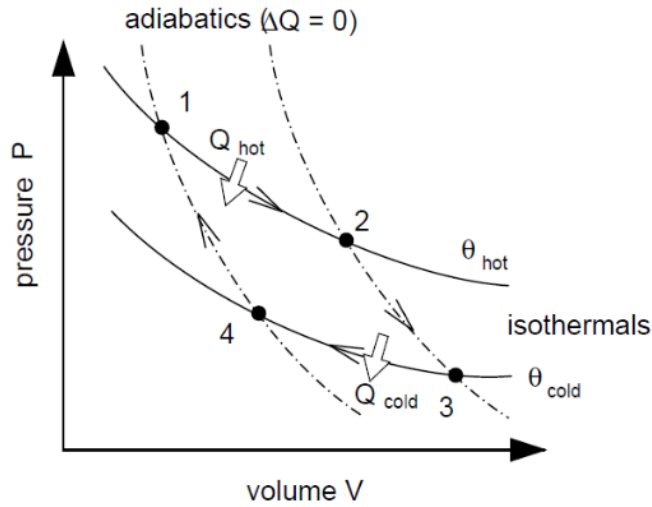
Beweisen Sie die Äquivalenz der Temperaturskala von idealen Gasen  $\Theta$  und der thermodynamischen Skala  $T$  durch Anwendung eines Carnot-Kreisprozesses auf ein ideales Gas. Das ideale Gas erfülle  $PV = Nk_B\Theta$  und seine innere Energie  $E$  hänge nur von  $\Theta$  ab, es gilt jedoch nicht  $E \propto \Theta$ .

- Leiten Sie aus der idealen Gasgleichung den Wärmeaustausch  $Q_H$  und  $Q_C$  in Abhängigkeit von  $\Theta_H$  und  $\Theta_C$  her.
- Berechnen Sie die Volumen-Ausdehnungskoeffizienten  $(\int_V \frac{dV}{V})$  für die adiabatischen Prozesse in Abhängigkeit von  $\Theta$ .
- Zeigen Sie, dass  $\frac{Q_{hot}}{Q_{cold}} = \frac{\Theta_{hot}}{\Theta_{cold}}$  gilt und nutzen Sie dafür ihre Ergebnisse aus a) und b). Damit bestätigen sie die Äquivalenz der Temperaturskalen.

## Lösung

- Die Temperatur von idealen Gasen ist durch die Zustandsgleichung definiert:

$$\Theta = \frac{pV}{Nk_B} \quad (40)$$



Die thermodynamische Temperatur ist für einen reversiblen Carnot-Prozess definiert durch:

$$\frac{T_{hot}}{T_{cold}} = \frac{Q_{hot}}{Q_{cold}} \quad (41)$$

Bei einem idealen Gas hängt die innere Energie nur von der Temperatur ab, d.h.  $E = E(\Theta)$  und

$$dQ = dE - dW = \frac{dE}{d\Theta} \cdot d\Theta + PdV \quad (42)$$

Betrachten Sie nun die Carnot-Zyklus in der Abbildung. Im Abschnitt  $1 \rightarrow 2$  findet eine isotherme Ausdehnung statt:

$$d\Theta = 0 \Rightarrow dQ_{hot} = PdV, \quad \text{und} \quad P = \frac{Nk_B\Theta_{hot}}{V} \quad (43)$$

Zwischen der abgegebenen Wärme im Kreisprozess und dem Ausdehnungsfaktor gilt folgender Zusammenhang:

$$Q_{hot} = \int_{V_1}^{V_2} Nk_B\Theta_{hot} \frac{dV}{V} = Nk_B\Theta_{hot} \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) \quad (44)$$

Eine ähnliche Rechnung entlang der Isothermen der niedrigen Temperatur liefert:

$$Q_{cold} = \int_{V_4}^{V_3} Nk_B\Theta_{cold} \frac{dV}{V} = Nk_B\Theta_{cold} \ln\left(\frac{V_3}{V_4}\right) \quad (45)$$

[6]

- (b) Nun werden die Volumen-Ausdehnungs- sowie Kompressionskoeffizienten für einen adiabatischen Prozess als Funktion von  $\Theta$  berechnet. Entlang eines adiabatischen Abschnitts gilt

$$dQ = 0, \Rightarrow 0 = \frac{dE}{d\Theta} \cdot d\Theta + \frac{Nk_B\Theta}{V} \cdot dV, \Rightarrow \frac{dV}{V} = -\frac{1}{Nk_B\Theta} \frac{dE}{d\Theta} \cdot d\Theta \quad (46)$$

Integration zwischen den beiden Temperaturen liefert

$$\begin{cases} \ln\left(\frac{V_3}{V_2}\right) &= -\frac{1}{Nk_B} \int_{\Theta_{cold}}^{\Theta_{hot}} \frac{1}{\Theta} \frac{dE}{d\Theta} \cdot d\Theta, \quad \text{und} \\ \ln\left(\frac{V_4}{V_1}\right) &= -\frac{1}{Nk_B} \int_{\Theta_{cold}}^{\Theta_{hot}} \frac{1}{\Theta} \frac{dE}{d\Theta} \cdot d\Theta \end{cases} \quad (47)$$

[4]

(c) Verwendet man die beiden Ergebnisse aus (a) ergibt sich

$$\frac{Q_{hot}}{Q_{cold}} = \frac{\Theta_{hot}}{\Theta_{cold}} \frac{\ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)}{\ln\left(\frac{V_3}{V_4}\right)} \quad (48)$$

Mit b) kann ergibt sich:

$$\frac{Q_{hot}}{Q_{cold}} = \frac{\Theta_{hot}}{\Theta_{cold}} \quad (49)$$

Da die thermodynamische Temperaturskala definiert ist als

$$\frac{Q_{hot}}{Q_{cold}} = \frac{T_{hot}}{T_{cold}} \quad (50)$$

müssen  $\Theta$  und  $T$  also proportional sein.

[3]

Zusätzlich: Wenn man darüber hinaus

$$\Theta(\text{Tripelpunkt}_{H_2O}) = T(\text{Tripelpunkt}_{H_2O}) = 273.16 \quad (51)$$

definiert, werden  $\Theta$  und  $T$  identisch.

## Konstanten

$$\begin{array}{ll} \hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js} & m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \\ e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C} & m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\ \epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ As/V/m} & \alpha = 7.3 \cdot 10^{-3} \\ a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \frac{\hbar^2}{m_e} = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} & \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 \\ R_\infty = \frac{m_e e^4}{8c\epsilon_0^2 \hbar^3} = 1,1 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} & A = 5,9 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \\ a = 1,159 \cdot 10^{-22} \text{ J} \cdot \frac{1}{n^6} & g_{\text{proton}} = 5,56 \\ \mu_K = 5,051 \cdot 10^{-27} \text{ Am}^2 & k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \\ R = 8,314 \text{ J(molK)}^{-1} & \end{array}$$