

Experimentalphysik IV (WS 2023/2024)

Übung 7

Tutorium: 2

Abgabe: 05.06.2024

Aufgabe 1: Herleitung der Planckschen Strahlungsformel für einen Schwarzkörper

Das Strahlungsfeld in einem thermischen Hohlraum kann als Summe stehender Wellen dargestellt werden (Moden). Aufgrund der hohen Anzahl an Moden führt man eine spektrale Modendichte ein: $n_\nu(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$.

(a) *Erläutern Sie kurz zur spektralen Modendichte:*

i. *Was ist spektrale Modendichte?*

Die spektrale Modendichte $dn / d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ ist die Zahl der möglichen Eigenschwingungen pro Volumen eines Hohlraumresonators innerhalb des Frequenzintervalls ν bis $\nu + \Delta\nu$ mit $\Delta\nu = 1$ Hz.

ii. *Warum wird bei der Herleitung der Formel nur über eine $\frac{1}{8}$ Kugel im k -Raum integriert und nicht über eine Vollkugel?*

Weil negative k_i Komponenten nicht zu neuen Lösungen führen würden. Tatsächlich unterscheiden sich die Lösungen der einzelnen E-Feld-Komponenten mit $(\pm k_x, \pm k_y, \pm k_z)$ maximal um ein Vorzeichen von der Lösung mit (k_x, k_y, k_z) . Dieses Vorzeichen kann einfach in den Vorfaktor der Lösung absorbiert werden, sodass alle einzigartigen Lösungen mit positiven k_i abgedeckt sind.

iii. *Warum kommt im Ergebnis 8π und nicht 4π vor?*

Es kommt ein zusätzlicher Faktor von zwei dazu, um zu berücksichtigen, dass jede stehende Welle eine beliebige Polarisationsrichtung haben kann, die man immer als Linearkombination aus zwei zueinander senkrecht polarisierten Wellen darstellen kann.

(b) *Zeigen sie, dass die Plancksche Strahlungsformel:*

$$u_\nu = n_\nu(\nu) \cdot \langle E(\nu, T) \rangle = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1},$$

wobei $\langle E(\nu, T) \rangle$ die mittlere thermische Energie einer Mode als Funktion der Temperatur T ist, gilt.

Tipp: Zusätzlich zu den Angaben im Skript, müssen Sie die mittlere Energie über den Mittelwert der Besetzungswahrscheinlichkeit berechnen. Die mittlere Energie (das mit den Besetzungswahrscheinlichkeiten P_n gewichtete Mittel der Zustandsenergien E_n) lässt sich durch geometrische Reihen ausdrücken:

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \sum_n P_n E_n = \frac{-\frac{d}{d\beta} \sum_n e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}}$$

mit $h = 2\pi\hbar$ und $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

.....

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \sum_n P_n E_n$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-\frac{d}{d\beta} \sum_n e^{-\beta h\nu n}}{\sum_n e^{-\beta h\nu n}} \\
&= \frac{-\frac{d}{d\beta} \sum_n \alpha^n}{\sum_n \alpha^n}, \quad \text{mit } \begin{cases} \alpha = e^{-\beta h\nu} < 1 \\ d\alpha = -h\nu e^{-\beta h\nu} d\beta \end{cases} \\
&= -\frac{d}{d\beta} \left(\frac{1}{1-\alpha} \right) (1-\alpha) \\
&= h\nu e^{-\beta h\nu} \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{1}{1-\alpha} \right) (1-\alpha) \\
&= h\nu e^{-\beta h\nu} \frac{1}{(1-\alpha)^2} (1-\alpha) \\
&= h\nu \frac{e^{-\beta h\nu}}{1-e^{-\beta h\nu}} \\
&= h\nu \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_\nu &= n_\nu(\nu) \cdot \langle E(\nu, T) \rangle \\
&= \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}
\end{aligned}$$

Aufgabe 2: Lithium

Die Energie des tiefsten Zustands $2s$ im Li-Atom ist $E = -5.39 \text{ eV}$, die in $20s$ ist -0.034 eV . Wie groß ist die effektive Kernladung Z_{eff} bzw. die Abschirmungskorrektur (Quantendefekt) δ_{nl} und der mittlere Bahnradius des dritten Elektron in beiden Zuständen?

.....

Durch die Abschirmung des Kerns wird die effektive Kernladung verringert. Die Proportionalität der Energie wechselt von

$$E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad \text{zu} \quad E_{n,l} \propto \frac{1}{n^2 \left(1 - \frac{\delta_{n,l}}{n}\right)^2},$$

mit der Abschirmungskorrektur δ_{nl} . Es ergeben sich für die δ_{nl} :

$$\begin{aligned}
E_{nl} &= \frac{-13.6 \text{ eV}}{(n - \delta_{nl})^2} \\
\Rightarrow \delta_{nl} &= n - \sqrt{\frac{-13.6 \text{ eV}}{E_{nl}}}
\end{aligned}$$

$$\delta_{2s} \approx 0.412$$

$$\delta_{20s} \approx 0.0$$

Korrigiert man statt der Quantenzahl n die Kernladung Z zu einer effektiven Kernladung Z_{eff} ergeben sich die Werte:

$$-\frac{13.6 \text{ eV}}{(n - \delta_{nl})^2} = -\frac{13.6 \text{ eV} Z_{\text{eff}}^2}{n^2}$$

$$\Rightarrow Z_{\text{eff}} = \frac{1}{1 - \frac{\delta_{nl}}{n}}$$

$$Z_{\text{eff}}(2s) = 1.26$$

$$Z_{\text{eff}}(20s) = 1.0$$

Aufgabe 3: Belegung der Orbitale

Schreiben Sie ein Python-Skript oder Jupyter Notebook, das die Orbitalbelegungen von Mehrelektronen nach dem Madelungschema bestimmt. Wählen Sie als Eingabe die Ordnungszahl Z und als Ausgabe die s,p,d,f Nomenklatur für Unterschalen und 1,2,3,... für die Hauptschalen im Format als Dreierblock für jede Unterschale: $n l N$ mit der Hauptschale n , der Nebenschale l und der Anzahl der Elektronen N in der Unterschale,

Beispiel: Argon, $Z = 18$, Ausgabe: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Das Programm sollte von Wasserstoff ($Z = 1$) bis Krypton ($Z = 102$) funktionieren und für elektrisch neutrale Atome gelten.

Überprüfen Sie das Programm mit

- a) Sauerstoff
- b) Kupfer
- c) Krypton
- d) Uran

Python-Code 1:

```
import numpy as np

tests = [["Argon", 18],
         ["Sauerstoff", 8],
         ["Kupfer", 29],
         ["Krypton", 36],
         ["Uran", 92]]

def next_shell():
    n,l = 0,0
    yield n+1,l
    while True:
        if l==0:
            n += 1
            while l+1 <= n-1:
                n, l = n-1, l+1
        else:
            n,l = n+1, l-1
        yield n+1,l

def orbital(Z):
    spd = "spdfghijklmno"
    nl = next_shell()
    max_e = lambda l: 2*(2*l+1)

    while Z>0:
        n,l = next(nl)
```

```

        electrons_used = min(Z, max_e(l))
        Z -= electrons_used
        print(f"{n}{spd[l]}{electrons_used}", end=" ")

for element, Z in tests:
    print(f"\n{element:10}, {Z=:2}: ", end="")
    orbital(Z)

# outputs:
# Argon      (Z=18): 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6
# Sauerstoff (Z= 8): 1s2 2s2 2p4
# Kupfer     (Z=29): 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d9
# Krypton    (Z=36): 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6
# Uran       (Z=92): 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f4

```

Aufgabe 4: Positronium

Ein Elektron kann mit seinem Antiteilchen, dem Positron (Masse m_e , elektrische Ladung $+e$) ein wasserstoffähnliches Atom, das Positronium, bilden, wobei Elektron und Positron unter der Wirkung ihrer gegenseitigen elektrostatischen Anziehung um den gemeinsamen Massenschwerpunkt (S) „kreisen“.

- (a) Berechnen Sie allgemein mit Hilfe der Bohrschen Quantenbedingung für den Gesamtdrehimpuls die möglichen Bahnradien und Energiezustände des Positronium!

Die Bohrsche Quantenbedingung für den Gesamtdrehimpuls ist

$$L_n = n\hbar = \mu v_n r_N$$

Im Bohrschen Atommodell muss außerdem gelten:

$$\begin{aligned}
 0 &= F_C + F_Z \\
 &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + \mu \frac{v^2}{r} \\
 v &= \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 r m_e}}
 \end{aligned}$$

Kombination der beiden Zusammenhänge liefert:

$$\begin{aligned}
 n\hbar &= e\sqrt{\frac{\mu r_n}{4\pi\epsilon_0}} \\
 r_n &= \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} n^2
 \end{aligned}$$

Daraus lässt sich noch die Energie berechnen als:

$$\begin{aligned}
 E_n &= T + V \\
 &= \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \\
 &= \frac{1}{2} m \frac{n^2 \hbar^2}{\mu^2 r_n^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} m \frac{n^2 \hbar^2}{\mu^2} \frac{\mu^2 e^4}{16 \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^4 n^4} - \frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0} \frac{\mu e^2}{4 \pi \varepsilon_0 \hbar^2 n^2} \\
&= \frac{\mu e^4}{32 \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} - \frac{\mu e^4}{16 \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \\
&= - \frac{\mu e^4}{32 \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \\
&= - \frac{m_e^2}{m_e + m_e} \frac{e^4}{32 \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \\
&= - \frac{m_e e^4}{64 \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2}
\end{aligned}$$

(b) *Wie groß ist die Grundzustandsenergie?*

.....

Ein Vergleich mit der Formel für die Energieniveaus des Wasserstoff zeigt, dass der Grundzustand genau die halbe Energie des Wasserstoff hat, also -6.8 eV .

(c) *Wie groß ist der kleinste Durchmesser?*

.....

Genau doppelt wie das Wasserstoffatom, d.h. 1.06 \AA .