

### III. Physikalisches Institut B, RWTH Aachen Prof. Dr. Christopher Wiebusch, Dr. Philipp Soldin

Übungen zur Physik IV - SS 2024 Atome Moleküle Kerne

# Übung 7

Ausgabedatum: 29.05.24 Abgabedatum: 05.06.24 Tag der Besprechung: 10.06.24

## Verständnisfragen

#### Kapitel 5.4-5.6

- 1. Erläutern Sie die Grundprinzipien für den Aufbau von Atom-Hüllen von Vielelektronenatomen?
- 2. Was sind die Schalen der Atomhülle und mit wie vielen Elektronen können sie besetzt werden?
- 3. Was ist das Hartree-Verfahren? Wie funktioniert es und welche Verbesserung fügt das Hartree-Fock-Verfahren hinzu?
- 4. Nach welchen Regeln werden die Schalen der Atomhülle für die Elemente des Periodensystems aufgefüllt?
- 5. Erläutern Sie die Hundsche Regel.
- 6. Erläutern Sie ausgewählte Eigenschaften von Elementen im Periodensystem der Elemente?
- 7. Beschreiben Sie die Spektren der Alkaliatome.
- 8. Was ist LS Kopplung und was ist jj Kopplung?
- 9. Erläutern Sie allgemeine Eigenschaften von Atomsprektren von Vielelektronatomen.
- 10. Was sind exotische Atome? Nennen Sie Beispiele.
- 11. Was ist Anti-Wasserstoff und was sind seine Eigenschaften?

#### Kapitel 6.1

- 12. Wiederholen Sie die Herleitung der Planck'schen Strahlungsformel aus der Physik 3.
- 13. Welche drei Möglichkeiten atomarer Strahlungsübergänge gibt es und wie unterscheiden sie sich?
- 14. Was beschreiben die Einsteinkoeffizienten?
- 15. Wie hängen die Übergangs-Wahrscheinlichkeiten für spontane und induzierte Emission sowie für Absorption und induzierte Emission miteinander zusammen?

#### Kapitel 6.2

- 16. Wie bestimmt man die Auswahlregeln für elektrische Dipolstrahlung und welche sind es?
- 17. Was ist die Paritätstransformation?
- 18. Welche Eigenschaften haben die Kugelflächenfunktionen unter Paritätstransformation?
- 19. Was ist ein Matrixelement?
- 20. Welche andere Formen von elektromagnetischer Strahlung gibt es neben elektrischer Dipolstrahlung und wie unterscheiden sich die Auswahlregeln von elektrischer Dipolstrahlung?
- 21. Was ist ein Rydberg-Atom?

# Übungsaufgaben

## Aufgabe 1 $\star$ $\star$ $\star$ $\Leftrightarrow$ $\Leftrightarrow$ (25 Punkte) Herleitung der Plankschen Strahlungsformel für einen schwarz Körper

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:
  - 1. Was ist spektrale Modendichte?
  - 2. Warum wird bei der Herleitung der Formel nur über eine ½ Kugel im k-Raum integriert und nicht über die Vollkugel?
  - 3. Warum kommt im Ergebnis  $8\pi$  und nicht  $4\pi$  vor?
- b) Zeigen sie, dass die Planksche Strahlungsformel:

$$u_{\nu} = n_{\nu}(\nu) \cdot \langle E(\nu, T) \rangle = \frac{8\pi\nu^{3}h}{c^{3}} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_{B}T}} - 1},$$
(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 Besetzungswahrscheinlichkeiten berechnen. Die mittlere Energie (das mit den Besetzungswahrscheinlichkeiten  $P_n$  gewichteten Mittel der Zustandsenergien  $E_n$ ) lässt sich durch geometrische Reihen ausdrücken:

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \sum_{n} P_n E_n = \frac{\frac{-d}{d\beta} \sum_{n} e^{-\beta E_n}}{\sum_{n} e^{-\beta E_n}}$$
 (2)

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

Aufgabe 2 
$$\star$$
  $\Leftrightarrow$   $\Leftrightarrow$   $\Leftrightarrow$   $\Leftrightarrow$  (20 Punkte)

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

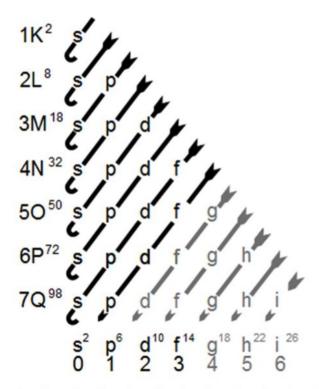
# Aufgabe 3 ★★★☆☆ Belegung der Orbitale

(30 Punkte)

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: nlN mit der Hauptschale n, der Nebenschale l und der Anzahl der Elektronen N in der Unterschale,

Beispiel: Argon, Z = 18, Ausgabe: 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6

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



 $1s_{2}^{2}2s_{4}^{2}2p_{10}^{6}3s_{12}^{2}3p_{18}^{6}4s_{20}^{2}3d_{30}^{10}4p_{36}^{6}5s_{38}^{2}4d_{48}^{10}5p_{54}^{6}6s_{56}^{2}4f_{70}^{14}5d_{80}^{10}6p_{86}^{6}7s_{88}^{2}5f_{102}^{14}6d_{112}^{10}7p_{118}^{6}$ 

Abbildung 1: Madelung Energieschema: Die Orbitale der Atomhülle werden in der Reihenfolge des Pfeils mit Elektronen besetzt. Der Suffix in der Reihe unten gibt die Summe aller Elektronen an, wenn an dieser Stelle alle vorherigen Orbitale besetzt sind.

Überprüfen Sie das Programm mit

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

und geben sie jeweils die Ausgabe an.

Aufgabe 4  $\star \star \stackrel{\star}{\Rightarrow} \stackrel{\star}{\Rightarrow} \stackrel{\star}{\Rightarrow}$  Positronium

(25 Punkte)

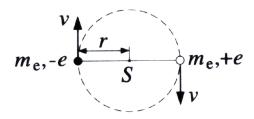


Abbildung 2: Impulskonfiguration im Positronium

Ein Elektron (Masse  $m_e = 9.109\,38 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$ , elektrische Ladung  $-e = -1.602\,177 \times 10^{-10}\,\mathrm{C}$  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" (siehe Abb.).

- a) Berechnen Sie allgemein mit Hilfe der Bohrschen Quantenbedingung für den Gesamtbahndrehimpuls die möglichen Bahnradien und Energiezustände des Positronium!
- b) Wie groß ist die Grundzustandsenergie?
- c) Wie groß ist der kleinste Durchmesser?