

# Experimentalphysik Va (WS 2023/2024)

## Übung 4

Tutorium: 1

Abgabe: 18.11.2024

### Aufgabe 1: Dimensionsabhängigkeit von Zustandsdichte und Fermi-Energie

[siehe hinten ]

### Aufgabe 2: Plasmaschwingungen in Metallen

Mit  $n(\text{Na}) = 2.53 \cdot 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3}$ :

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m_e}} \approx 8.97 \cdot 10^{15} \frac{1}{s} \quad E = \hbar \omega_p \approx 5.91$$

### Aufgabe 3: Born-Mayer-Potential für NaCl

(a)

$$U^{(C)}(r) = -N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \alpha$$

$$U^{(B)}(r) = NzB \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$$

$$U(r) = -N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \alpha + NzB \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$$

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial U}{\partial r}(r_0) = N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \alpha - \frac{NzB}{\rho} \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right)$$

$$\text{Gl. 1: } 0 = \frac{e^2 \alpha}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{B}{\rho} \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right)$$

(b)

$$\frac{1}{\kappa} = V \frac{d^2 U}{dV^2}$$

$$\frac{d^2 U}{dV^2} = \frac{d}{dV} \frac{dU}{dV}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{d}{dV} \left( \frac{\partial U}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial V} \right) \\
&= \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \left( \frac{\partial r}{\partial V} \right)^2 + \underbrace{\frac{\partial U}{\partial r}}_{0 \text{ für } r_0} \frac{\partial^2 r}{\partial V^2} \\
\Rightarrow \quad &\boxed{\left. \frac{d^2 U}{dV^2} \right|_{r=r_0} = \left. \frac{d^2 U}{dr^2} \left( \frac{dr}{dV} \right)^2 \right|_{r=r_0}}
\end{aligned}$$

Mit dem Zusammenhang  $V = 2r^3 N$  gilt dann:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right|_{r=r_0} &= -N \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r_0^3} \alpha + \frac{NzB}{\rho^2} \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right) \\
\frac{dr}{dV} &= \frac{1}{6r^2 N}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d^2 U}{dV^2} \right|_{r=r_0} &= \left. \frac{d^2 U}{dr^2} \left( \frac{dr}{dV} \right)^2 \right|_{r=r_0} \\
&= \left. \frac{d^2 U}{dr^2} \right|_{r=r_0} \frac{1}{36r_0^4 N^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\kappa} &= \frac{V}{36r_0^4 N^2} \left. \frac{d^2 U}{dr^2} \right|_{r=r_0} \\
&= \frac{2r_0^3 N}{36r_0^4 N^2} \left. \frac{d^2 U}{dr^2} \right|_{r=r_0}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\text{Gl. 2: } \frac{18r_0}{\kappa} = -\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r_0^3} \alpha + \frac{zB}{\rho^2} \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right)}$$

(c)

Python-Code 1:

```

from scipy.optimize import fsolve
import numpy as np
from scipy.constants import e, epsilon_0
alpha, r0, kappa, z = 1.7476, 2.820e-10, 4.17e-11, 6

def scaled_eq1(params):
    B, rho = params
    left = (B / rho) * np.exp(-r0 / rho)
    right = (e**2 * alpha) / (4 * np.pi * epsilon_0 * z * r0**2)
    return (left - right) / right

```

```

def scaled_eq2(params):
    B, rho = params
    term1 = -2 * (e**2 * alpha) / (4 * np.pi * epsilon_0 * r0**3)
    term2 = (z * B / rho**2) * np.exp(-r0 / rho)
    d2U_dr2 = term1 + term2
    kappa_term = 18 * r0 / kappa
    return (d2U_dr2 - kappa_term) / kappa_term

def scaled_equations(params):
    return [scaled_eq1(params), scaled_eq2(params)]

B, rho = fsolve(scaled_equations, [1e-16, 3e-11])

print(f"{B = .3} J\n{rho = .3} m")

# returns:
# >>> B = 1.75e-16 J
# >>> rho = 3.22e-11 m

```

Auf der Wikipedia Seite zum Buckingham-Potential ist für das Beest Kramer van Santen (BKS) Potential, einer Erweiterung des hier betrachteten Potentials, eine Liste an Parametern für häufige Materialien angegeben. Die von uns numerisch ermittelten Parameter sind in der selben Größenordnungen.

#### Aufgabe 4: Lennard-Jones-Potential

(a)

Für den Gleichgewichtsabstand muss gelten  $F \propto \frac{\partial V}{\partial r} = 0$ :

$$\begin{aligned}
 V(r) &= 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \\
 V'(r) &= 4\epsilon \left[ 12 \cdot \frac{-\sigma}{r^2} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{11} - 6 \cdot \frac{-\sigma}{r^2} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^5 \right] \\
 0 &= \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \\
 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 &= \frac{1}{4} \pm \sqrt{\frac{1}{16}} = \frac{1}{2} \\
 \boxed{r_0} &= 2^{\frac{1}{6}} \sigma
 \end{aligned}$$

Die Bindungsenergie (mit positiven Vorzeichen definiert) ist dann  $|V(r_0)|$ :

$$\begin{aligned}
 |V(r_0)| &= \left| V(2^{\frac{1}{6}} \sigma) \right| \\
 &= \left| 4\epsilon \left[ 2^{-2} - 2^{-1} \right] \right| \\
 &= \left| 4\epsilon \left[ \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \right] \right|
 \end{aligned}$$

$$|V(r_0)| = \epsilon$$

(b)

Mit  $m(\text{He}) \approx 4 \cdot \frac{10^{-3}}{N_A}$ :

$$\begin{aligned} V(r) &= 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \\ V'(r) &= -6 \cdot 4\epsilon \left[ \frac{2}{r} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \frac{1}{r} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \\ V''(r) &= 24\epsilon \sigma^6 \frac{r^6 - 2\sigma^6}{r^{13}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(\Delta r \ll 1) &\approx V(r_0) + \frac{1}{2} \partial^2 V|_{r_0} (\Delta r)^2 \\ \text{const.} + \frac{1}{2} k (\Delta r)^2 &= -\epsilon + \frac{1}{2} \partial^2 V|_{r_0} (\Delta r)^2 \end{aligned}$$

$$\implies k = \partial^2 V|_{r_0} = 9 \cdot 2^{\frac{8}{3}} \frac{\epsilon}{\sigma^2} = 0.792 \frac{\text{N}}{\text{m}}$$

$$c_{\text{Ar}} \approx \frac{1}{2} f r_0 = \frac{\omega r_0}{4\pi} = \frac{r_0}{4\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$c_{\text{Ar}} \approx 331 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Der Literaturwert bei Raumtemperatur beträgt  $c_{\text{Ar}} = 319 \frac{\text{m}}{\text{s}}$  und wurde mit einer relativen Abweichung von 3.7% gut getroffen.

## Aufgabe 5: Fibonacci-Multilayer

(a)

In einer Fibonacci-Folge gibt es zwei Zahlen  $F_0, F_1$  (meistens 0 und 1) um die Reihe zu starten, alle weiteren  $F_i$  ergeben sich rekursiv aus  $F_i = F_{i-1} + F_{i-2}$ . Übertragen auf das Schichtsystem eines Kristall ergibt sich:

$i$	$F_i$
0	A
1	B
2	AB
3	BAB
4	ABBAB
5	BABABBAB
6	ABBABBABABBAB

(b)

Es gilt:

$$N_{A/B}(i) = N_{A/B}(i-1) + N_{A/B}(i-2)$$

Mit den Startwerten  $N_A(1) = 0, N_A(2) = 1$  und  $N_B(1) = 1, N_B(2) = 1$ . Es ergeben sich also für  $N_{A/B}$  die gleichen Fibonacci-Folgen, wobei  $N_B$  immer einen Schritt vorraus ist:  $N_A(i) = N_B(i-1)$ . Damit gilt für das Verhältnis  $\eta = \frac{N_B}{N_A}$ :

$$\begin{aligned}\eta &= \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{N_B}{N_A} \\ &= \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{N_B(i)}{N_B(i-1)} \\ &= \phi \approx \frac{1 + \sqrt{5}}{2}\end{aligned}$$

(c)

Die Schichtfolge kann auch durch die Substitution

$$A \rightarrow AB \quad \text{und} \quad B \rightarrow A$$

erzeugt werden.

Für die Anzahl der Bausteine ergibt sich somit in Matrixdarstellung

$$\begin{pmatrix} N'_A \\ N'_B \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} N_A \\ N_B \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$N(i) = M^i N(0), \quad N(i) := \begin{pmatrix} N_A(i) \\ N_B(i) \end{pmatrix}$$

Unter der Annahme, dass sich für  $i \rightarrow \infty$  ein festes Verhältnis einstellt, heißt dies, dass der Zustandsvektor  $N$  bei jeder Anwendung von  $M$  maximal noch eine konstante Streckung erfahren kann. Damit ist muss  $N(i \rightarrow \infty) \in \text{Eig } M$ , wobei der Streckungsfaktor der entsprechende Eigenwert ist.

Die Eigenwerte sind

$$\begin{aligned}0 &\stackrel{!}{=} \det(M - \lambda \mathbb{1}) = \begin{vmatrix} 1 - \lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda(\lambda - 1) - 1 = \lambda^2 - \lambda - 1 \\ \lambda &= \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + 1} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2} \\ &= \phi^{\pm 1}\end{aligned}$$

1.

a)

$$O_d(E) dE = 2 L^d \frac{O_d(h) dh}{(2\pi)^d} = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} h^{d-1} dh$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \Rightarrow k_F = \frac{(2mE_F)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \quad dh = \left(\frac{m}{2E\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} dE$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad \Gamma(1) = 1 \quad \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$$

$$O_d(E) dE = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} h^{d-1} dh$$

$$O_d(E) dE = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{d-1}{2}} \left(\frac{m}{2E\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} dE$$

$$= 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2(\pi m)^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \frac{(2E)^{\frac{d-1}{2}}}{\hbar^d} dE$$

$$\Rightarrow O_d(E) \propto E^{\frac{d}{2}-1}$$

$$O_1(E) dE = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{E}} dE$$

$$O_2(E) dE = \frac{mL^2}{\pi\hbar^2} dE$$

$$O_3(E) dE = \frac{L^3 m \sqrt{2mE}}{\pi^2 \hbar^3} dE$$

b)

$$n = \frac{N}{L^d} \Rightarrow N = nL^d$$

$$O(E) \equiv \frac{dN}{dE}$$

$$dN = O(E) dE = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2(\pi m)^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \frac{(2E)^{\frac{d-1}{2}}}{\hbar^d} dE$$

$$nL^d = N = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2(\pi m)^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \frac{2^{\frac{d-1}{2}}}{\hbar^d} \int E^{\frac{d-1}{2}} dE = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2(\pi m)^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \frac{2^{\frac{d-1}{2}}}{\hbar^d} \frac{2}{d} E^{\frac{d}{2}}$$

$$\Rightarrow E^{\frac{d}{2}} = \frac{1}{4} n \left(\frac{2\pi}{m}\right)^{\frac{d}{2}} \hbar^d \Gamma(\frac{d}{2}) d \quad \Rightarrow E = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(\frac{d\Gamma(\frac{d}{2})n}{4}\right)^{\frac{2}{d}}$$

$$d=1: E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8m}$$

$$d=2: E = \frac{\pi \hbar^2 n}{m}$$

$$d=3: E = \frac{\pi^{\frac{3}{2}} \hbar^2 (3n)^{\frac{2}{3}}}{2m}$$

$$2. \quad n = 2,53 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

a)

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}} = 9,297 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

b)

$$E = \hbar \omega_p = 0,1 \text{ eV}$$