Übung 1. Plancksches Strahlungsgesetz (1900): Teil 1

(a) Der Nenner ergibt sofort $1/\beta$. Für den Zähler nutzen wir aus, dass der Integrand geschrieben werden kann als $-\partial_\beta(e^{-\beta E})$. Der Zähler $-\partial_\beta(1/\beta) = 1/\beta^2$ ergibt sich somit durch Ableitung des Nenners und wir finden

$$\langle E \rangle_{\text{klass.}} = 1/\beta = k_B T. \tag{L.1}$$

(b) Die diskrete Summe berechnen wir ebenso. Der Nenner entpuppt sich als eine einfache geometrische Reihe und wir finden $e^{\beta\hbar\omega}/(e^{\beta\hbar\omega}-1)$. Der Zähler ist die Ableitung des Nenners nach $-\beta$. Daraus ergibt sich dann

$$\langle E \rangle_{\text{quant.}} = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \tag{L.2}$$

(c) Entwickeln wir den Ausdruck (L.2) in den Grenzfällen $kT \gg \hbar\omega$ und $kT \ll \hbar\omega$ finden wir

$$\langle E \rangle_{\text{quant.}} = \begin{cases} k_B T & \text{wenn} \quad \hbar\omega \ll k_B T \\ \hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega} & \text{wenn} \quad \hbar\omega \gg k_B T. \end{cases} \tag{L.3}$$

Im Grenzfall kleiner Modenenergien (verglichen mit der Temperatur) konvergiert der Ausdruck (L.2) zum klassischen Ausdruck (L.1). Für hohe Energien $\hbar\omega \gg k_B T$ wird der Erwartungswert hingegen exponentiell gedämpft.

Übung 2. Plancksches Strahlungsgesetz (1900): Teil 2

(a) Um die (Dirichlet-)Randbedingungen zu erfüllen, darf der Wellenvektor nur diskrete Werte $\boldsymbol{k_n} = (\pi/L)\boldsymbol{n}$ mit $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3$ annehmen, sodass jeder Zustand $\boldsymbol{k_n}$ ein Volumen $\Delta V_k = (\pi/L)^3$ im Impulsraum einnimmt. Da zu jedem Zustand zwei Moden mit orthogonaler Polarisation existieren, verdoppelt sich die Modendichte und ist gegeben durch

$$2\left(\frac{L}{\pi}\right)^3 d\boldsymbol{k} \quad \to \quad 2\left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \frac{\pi}{2} k^2 dk = 2\left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \frac{\pi}{2c^3}\omega^2 d\omega. \tag{L.4}$$

Wir haben verwendet, dass der $\boldsymbol{k}$-Raum nur positive Werte k_x, k_y, k_z zulässt. Im letzten Schritt kam die isotrope Dispersionsrelation $\omega = c|\boldsymbol{k}|$ zum Einsatz. Die Modendichte im Frequenzraum ist somit gegeben durch

$$n(\omega) = \frac{L^3}{\pi^2 c^3}\omega^2 \tag{L.5}$$

(b) Die gesamte Energie im Hohlraum ergibt sich als Summe über alle Moden mit ihrer jeweiligen Energie $U = 2\sum_{n_x,n_y,n_z} \langle E_{\boldsymbol{n}} \rangle$. Der Faktor 2 berücksichtigt die beiden Polarisationen und $\langle E_{\boldsymbol{n}} \rangle$ bezeichnet die mittlere Energie der Mode $\boldsymbol{n}$ gemäss Aufgabe 1. Im makroskopischen Limes lässt sich die Summe über alle Moden als Integral über den Impulsraum schreiben als

$$U = 2\int_0^\infty \frac{dk_x dk_y dk_z}{\Delta V_k} \langle E_{\boldsymbol{k}} \rangle = \frac{L^3}{\pi^2} \int_0^\infty dk\, k^2 \langle E_k \rangle, \tag{L.6}$$

wobei wir benutzt haben, dass die Energie $\langle E_{\boldsymbol{k}}\rangle$ nur vom Betrag von $\boldsymbol{k}$ abhängt. Mithilfe von Gl. (L.5) erhält man nun

$$\frac{U}{L^3} = \frac{1}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty d\omega\, \omega^2 \langle E_\omega\rangle. \tag{L.7}$$

Mithilfe von Aufgabe 1 finden wir nun direkt

$$u_{\text{klass}}(\omega,T) = \frac{\omega^2 k_{\mathrm{B}} T}{\pi^2 c^3}, \qquad \text{(Rayleigh-Jeans)} \tag{L.8}$$

$$u_{\text{qm}}(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/k_B T}-1)}. \qquad \text{(Planck)} \tag{L.9}$$

(c) Für die klassische spektrale Energiedichte resultiert

$$\frac{U}{L^3} = \int_0^\infty d\omega\, \frac{\omega^2 k_B T}{\pi^2 c^3} = \infty, \tag{L.10}$$

was als sogenannte *Ultraviolettkatastrophe* bekannt ist, da hoch-energetische Moden (mit grossem ω, also insbesondere UV-Strahlung) das Integral divergieren lassen. Im quantenmechanischen Fall findet man

$$\frac{U}{L^3} = \int_0^\infty d\omega\, \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/k_B T}-1)} = \frac{(k_B T)^4}{\pi^2(\hbar c)^3}\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \tag{L.11}$$

wobei wir die Variablensubstitution $x = \hbar\omega/k_B T$ benutzt haben. Das verbleibende Integral ist dimensionslos und konvergiert, wodurch wir gezeigt haben, dass die Quantenmechanik die Ultraviolettkatastrophe behebt. Physikalisch resultiert die Konvergenz dadurch, dass hochenergetische Moden 'ausgefroren' sind (spektrale Energiedichte ist exponentiell unterdrückt für $\hbar\omega > k_B T$). Da das verbleibende Integral dimensionslos ist, ist die Temperaturabhängigkeit $U \propto T^4$ (Stephan-Boltzmann-Gesetz). Das verbleibende Integral lässt sich folgendermassen berechnen:

$$\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x-1} = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty dx\, x^3 e^{-nx} = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4}\int_0^\infty dy\, y^3 e^{-y} = \sum_{n=1}^\infty \frac{6}{n^4} \tag{L.12}$$

Die obige Summe kann als Zeta-Funktion geschrieben werden $\sum_{n=1}^\infty 1/n^4 = \zeta(4) = \pi^4/90$ (siehe Abramowitz/Stegun, s.807, siehe `http://people.math.sfu.ca/~cbm/aands/`). Dies führt auf

$$\frac{U}{L^3} = \frac{\pi^2}{15}\frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3}. \tag{L.13}$$

Um die Summe selber explizit ausrechnen, kann man die Parsevalsche Identität benutzen: Für eine 2π-Periodische Funktion $f(x)$ mit Fourier-Reihe $f(x) = \sum_{n=-\infty}^\infty c_n e^{-inx}$, gilt

$$\sum_{n=-\infty}^\infty |c_n|^2 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^\pi |f(x)|^2 dx. \tag{L.14}$$

Verwendet man $f(x) = x^2$ für $x \in (-\pi,\pi]$ periodisch fortgesetzt auf $\mathbb{R}$ findet man $c_0 = \pi^2/3$ und $c_n = 2(-1)^n/n^2$ für $n \neq 0$. Mithilfe obiger Identität liefert dies nun

$$\left(\frac{\pi^2}{3}\right)^2 + 8\sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^\pi x^4 dx = \frac{\pi^4}{5}, \tag{L.15}$$

woraus man direkt $\sum_{n=1}^\infty 1/n^4 = \pi^4/90$ findet.

Übung 3. Stern-Gerlach Experiment (1922)

Die Atome mit magnetischem Moment $\boldsymbol{\mu}$ Wechselwirken über eine Distanz d (entlang y) mit einem inhomogenen Magnetfeld $\boldsymbol{B}$ (Gradient entlang z). Somit ist sich Wechselwirkungsenergie $U = -\mu_z B_z$.

(a) Die Atome erfahren eine Kraft

$$F_z = -\partial_z U = \mu_z \partial_z B_z \tag{L.16}$$

und nehmen somit über die Länge d eine kinetische Energie $E_{\text{kin},z} = F_z s_d$ entlang z auf. Hier ist s_d die Strecke welche die Atome im Wechselwirkungsbreich entlang z zurücklegen. Aus der Dispersionsrelation $E_{\text{kin},z} = p_z^2/2m$ ergibt sich ein Impulsübertrag

$$p_z = \sqrt{2m\mu_z \partial_z B_z \, s_d}. \tag{L.17}$$

(b) Die Wechselwirkungszeit

$$\tau_d = d/\sqrt{2E_{\text{kin},y}/m} \tag{L.18}$$

ergibt sich aus der kinetischen Energie $E_{\text{kin},y} \sim k_B T$ und der Masse m der Atome. Wirkt die konstante Kraft (L.16) auf das magnetische Moment μ_z erfährt das Atom eine Ablenkung

$$s_d = \frac{1}{2}\frac{F_z}{m}\tau_z^2 = \frac{d}{2}\frac{\mu_z \partial_z B_z d}{2E_{\text{kin},y}} \tag{L.19}$$

im Wechselwirkungsbereich. Danach fliegen die Atome ballistisch eine Strecke D wobei sich der Impuls entlang z aus den Gleichungen (L.17) und (L.19) ergibt und $p_y = \sqrt{2mE_{\text{kin},y}}$. Wir finden somit

$$s_D = D\frac{p_z}{p_y} = D\frac{\mu_z \partial_z B_z \, d}{2E_{\text{kin},y}} \tag{L.20}$$

für die ballistische Auslenkung. Die gesamte Auslenkung

$$s(d,D) = s_d + s_D = \left(\frac{d}{2} + D\right)\frac{\mu_z \partial_z B_z \, d}{2E_{\text{kin},y}}, \tag{L.21}$$

ergibt sich dann aus Gln. (L.19) und (L.20). Der Grenzwert $d \ll D$ ($d \gg D$) ergibt sich sofort aus Gl. (L.20) [(L.19)]. Im ursprünglichen Experiment von Otto Stern und Walther Gerlach wurde der Grenzwert $d \gg D$ implementiert.

Bemerkung: Da die Vakuumkammer der Länge L ein limitierender Faktor ist, gilt $d \approx L$ für den Grenzfall $d \gg D$ oder $D \approx L$ für $d \ll D$. Maximiert man die Streulänge $s(d, D = L-d)$ bezüglich d erhält man $d = L$ was das die Umsetzung des Experiments erklärt.

(c) Sind die magnetischen Momente der Silber-Atome kontinuierlich verteilt, d.h. $\boldsymbol{\mu}$ ist ein klassischer dreidimensionaler Vektor dessen Ausrichtung isotrop ist, erwarten wir auf dem Schirm eine kontinuierliche Verteilung mit einer Ausdehnung $2s$ entlang z, wobei s gegeben ist durch Gl. (L.21) mit $\mu_z = \mu_{\text{Ag}}$. Die Projektion des Moments $\boldsymbol{\mu}$ entlang z erzeugt eine wolkenförmige Verteilung dessen Dichte bei $z = 0$ am höchsten ist und gegen Aussen abnimmt. Sind nur die diskreten Zustände $\mu_z = \pm\mu_{\text{Ag}}$ erlaubt, werden nur zwei Punkte (oder Flecken) auf dem Schirm zu sehen sein, deren Abstand gegeben ist durch $2s$ [vgl. Gl. (L.21) mit $\mu_z = \mu_{\text{Ag}}$]. Bei $z = 0$ treffen keine Atome auf den Schirm.

(d) Wird einer der beiden oben beschriebenen Strahlen durch ein weiteres Magnetfeld (mit Gradient entlang x) geschickt, spaltet sich der Strahl erneut in zwei Strahlen auf. Klassisch erwartet man deshalb, dass eine Selektion des Moments entlang z und x stattgefunden hat. Somit sollte ein weiteres Experiment entlang z keine Strahlteilung erzeugen. Wie wir später in der Vorlesung sehen werden sind diese sogenannten *Projektionen* entlang x und z nicht kommutativ, wodurch eine Projektion entlang x eine Unschärfe entlang z erzeugt. Dadurch kommt es (beim dritten Magneten mit Grandient entlang z) wieder zu einer Strahlteilung.

Übung 4. Davisson und Germer Experiment (1927)

(a) Gemäss De Broglie lässt sich einem Elektron mit Impuls p eine Welle mit Wellenlänge $\lambda_{\text{el}} = h/p$ zuordnen. Die Dispersion (Energie-Impuls-Beziehung) eines Elektrons lautet $E = p^2/2m_{\text{el}}$, wodurch man direkt folgende Beziehung findet:

$$\lambda_{\text{el}} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_{\text{el}}E}} \tag{L.22}$$

Es ist nun sehr nützlich den Trick $\hbar = \sqrt{\hbar^2}$ zu verwenden, wobei $\hbar^2 = 6.58 \cdot 10^{-16}\text{eV}s \cdot 1.055 \cdot 10^{-34}\text{Js}$. Dadurch kürzen sich einerseits mechanische und andererseits atomistische Einheiten. Mit $m_{\text{el}} = 9.109 \cdot 10^{-31}\text{kg}$ und der Energie der Elektronen in eV, d.h. $E = E[\text{eV}] \cdot \text{eV}$, erhalten wir

$$\lambda_{\text{el}} = \sqrt{\frac{2\pi^2\hbar^2}{m_{\text{el}}E}} = \sqrt{\frac{2\pi^2 \cdot 6.58 \cdot 10^{-16}\text{eV}s \cdot 1.055 \cdot 10^{-34}\text{Js}}{9.109 \cdot 10^{-31}\text{kg} \cdot E[\text{eV}] \cdot \text{eV}}} = \frac{12.2\,\text{Å}}{\sqrt{E[\text{eV}]}}. \tag{L.23}$$

(b) Für Helium lautet die Dispersionsrelation $E = p^2/2m_{\text{He}}$, sodass der einzige Unterschied zu obiger Betrachtung in der verschiedenen Masse der Elektronen und Helium-Atome liegt. Man findet leicht, dass

$$\lambda_{\text{He}} = \sqrt{\frac{2\pi^2\hbar^2}{m_{\text{He}}E}} = \lambda_{\text{el}}\sqrt{\frac{m_{\text{el}}}{m_{\text{He}}}} = \frac{0.14\,\text{Å}}{\sqrt{E[\text{eV}]}}. \tag{L.24}$$

(c) Die Dispersionsrelation von Photonen ist linear, d.h. $E = cp$ mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 3 \cdot 10^8\text{m/s}$. Aus der De Broglie-Beziehung folgt direkt

$$\lambda_{\text{ph}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar c}{E} = \frac{1.24\,\mu\text{m}}{E[\text{eV}]} = \frac{1.24 \cdot 10^4\,\text{Å}}{E[\text{eV}]}. \tag{L.25}$$

Aufgrund der verschiedenen Dispersion von (masselosen) Photonen und Elektronen/Helium-Atome resultiert eine unterschiedliche Energieabhängigkeit.

(d) Damit Beugungsexperimente an einer Kristallstruktur mit Gitterkonstante a überhaupt möglich sind, muss die Bragg-Gleichung erfüllt sein. Dies wiederum verlangt, dass die Wellenlänge λ etwa der Gitterkonstante a entspricht, d.h. $\lambda \sim a$. Daraus resultiert für Elektronen eine Energie $E_{\text{el}} \approx 12\text{eV}$. Diese Energie kann durch eine Beschleunigungsspannung im Voltbereich erzeugt werden (siehe Davissons und Germers Experiment). Für Helium-Atome resultiert eine Energie von $E_{\text{He}} \approx 2\text{meV}$. Für Photonen befindet sich die Wellenlänge im Bereich der Röntgenstrahlen und es resultiert eine Energie von $E_{\text{ph}} \approx 3.5\text{keV}$. Zum Vergleich, bei Raumtemperatur gilt $k_BT \approx 25\text{meV}$.

Die Kristalloberfläche kann also entweder mit thermischen Helium-Atomen ($T \approx 25\text{K}$), beschleunigten Elektronen oder hochenergetischer Röntgenstrahlung untersucht werden. Letztere beschädigen die Kristalloberfläche, während die beiden ersten 'sanft' streuen.