

# Moleküle und Wärmestatistik

Vorlesung

22.08.2008

## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Moleküle</b>	<b>2</b>
1.1 Born-Oppenheimer Näherung (adiabatische Näherung) . . . . .	3
1.2 LCAO Näherung . . . . .	4
1.3 Molekülorbitalnäherung . . . . .	6
<b>2 Verteilungsfunktionen</b>	<b>7</b>
2.1 Fermi-Dirac-Verteilung . . . . .	7
2.2 Bose-Einstein-Verteilung . . . . .	8
2.3 Freies Elektronengas . . . . .	9
2.4 Photonengas, Schwarzkörperstrahlung . . . . .	11
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>14</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>14</b>

# 1 Moleküle

Nach den Mehrelektronensystemen wollen wir uns nun den Molekülen widmen. Anfangs betrachten wir, wie bei den Atomen, ein möglichst einfaches Molekül und verallgemeinern dann die Lösung auf komplexere Moleküle.

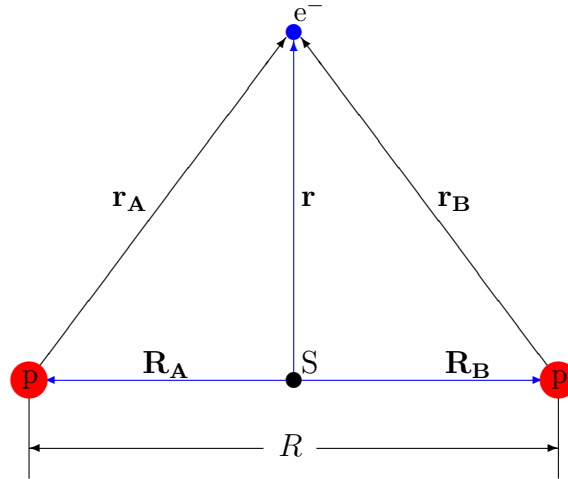


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines  $H_2^+$ -Ions, das aus zwei Protonen und einem Elektron besteht. Der Schwerpunkt  $S$  dieses Systems ist praktisch identisch mit dem Schwerpunkt der beiden Protonen, da die Elektronenmasse zu vernachlässigen ist.

Das einfachste Molekül ist ein  $H_2^+$ -Ion. Es besteht aus 2 Protonen und einem Elektron (siehe Abb. 1). Die potentielle Energie dieses Systems lautet

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} - \frac{1}{R} \right) \quad (1)$$

oder bezüglich des Schwerpunkts  $S$

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{2r}{r^2 - \frac{1}{4}R^2} - \frac{1}{R} \right) \quad (2)$$

Der Hamiltonoperator für dieses System lautet damit

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_A^2(\mathbf{R}_A) + \nabla_B^2(\mathbf{R}_B)) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_e^2(\mathbf{r}) + E_{pot}(\mathbf{r}, R) \quad (3)$$

wobei mit  $M$  die Protonenmasse und mit  $m$  die Elektronenmasse bezeichnet wird. Die  $\nabla$ -Operatoren beziehen sich jeweils auf die Vektoren, die in den Klammern stehen.

Die resultierende Schrödingergleichung  $\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i) = E\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i)$  ist analytisch nicht lösbar. Deshalb führen wir im Folgenden zwei Näherungen ein, um diese Schrödingergleichung zu lösen.

## 1.1 Born-Oppenheimer Näherung (adiabatische Näherung)

Die Elektronenmasse ( $0.511 \frac{\text{MeV}}{c^2}$ ) ist etwa um den Faktor 2000 kleiner als die Protonenmasse ( $938 \frac{\text{MeV}}{c^2}$ ), wodurch auch die Massenträgheit der Elektronen viel kleiner ist als die der Protonen. Die Elektronen können der Bewegung der Protonen (bzw. Atomkernen) praktisch instantan folgen. Die Elektronenbewegung kann also unabhängig von der Protonenbewegung betrachtet werden, wodurch sich die Schrödingergleichung vereinfacht.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_e^2(\mathbf{r}) + E_{\text{pot}}(\mathbf{r}, R) \right] \Psi^{el}(\mathbf{r}, R) = E \Psi^{el}(\mathbf{r}, R) \quad (4)$$

Diese Gleichung lässt sich nun für jeden festen Abstand  $R$  der beiden Protonen lösen. Die Energieniveaus, die sich bei der Lösung ergeben hängen von  $R$  ab. In Abbildung 2 sind drei dieser Niveaus in Abhängigkeit von  $R$

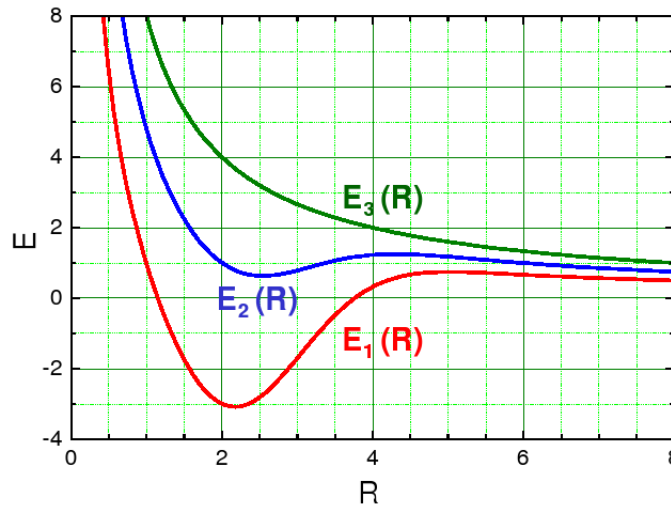


Abbildung 2: *Energieniveaus der Elektronenwellenfunktion eines  $H_2^+$  - Ions in Abhängigkeit vom Abstand  $R$  der beiden Protonen[1]. Einige der Energieniveaus haben ein Minimum. Für diese Niveaus existiert ein Abstand  $R$  bei dem das Molekül zumindest ein metastabiler Zustand ist.*

abgebildet. Einige der Energieniveaueurven haben ein Minimum. Bei diesen

Niveaus handelt es sich um einen zumindest metastabilen, molekularen Zustand. Bei den monoton abfallenden Niveaus dissoziiert das Molekül, da die Energie am kleinsten ist, wenn der Abstand  $R$  zwischen den beiden Protonen unendlich groß ist.

## 1.2 LCAO Näherung

Für komplexere Moleküle reicht die Born-Oppenheimer Näherung alleine nicht aus um die Schrödingergleichung analytisch zu lösen. Hier kommt dann zum Beispiel die sogenannte LCAO Näherung (**L**inear **C**ombination of **A**tomic **O**rbitals) zum Einsatz.

Zur Motivation dieser Näherung betrachten wir zunächst den Grenzfall unendlicher Abstände der Atome. Die Wellenfunktionen der Elektronen sind in diesem Grenzfall die selben, wie für einzelne Atome, also die Atomorbitale. Wenn nun der Abstand der Atome verkürzt wird, ist es nicht möglich die Elektronen einem bestimmten Atomkern zuzuordnen. Als Ansatz für die Wellenfunktionen der Elektronen eines Moleküls wählen wir eine Linearkombination aus Atomorbitalen. Für das  $\text{H}_2^+$ -Ion würde sich somit folgender Ansatz ergeben

$$\Psi^{el}(\mathbf{r}, R) = c_a \Phi_a(\mathbf{r}_a) + c_b \Phi_b(\mathbf{r}_b) \quad (5)$$

wobei  $\Phi_a$  und  $\Phi_b$  jeweils die Atomorbitale für die beiden Protonen sind. Da die Wellenfunktion normiert sein muß, ergibt sich folgende Bedingung für die Koeffizienten  $c_a$  und  $c_b$

$$\int \Psi dV \equiv 1 \quad (6)$$

$$c_a^2 + c_b^2 + 2c_a c_b S_{ab} = 1 \quad (7)$$

wobei  $S_{ab}$  vom räumlichen Überlapp der beiden Wellenfunktionen abhängt

$$S_{ab} = \Re \int \Phi_a^* \Phi_b d^3r \quad (8)$$

Aus Symmetriegründen muß gelten

$$|c_a|^2 = |c_b|^2 = |c|^2 \quad (9)$$

Da die Wellenfunktion beim Vertauschen der Atomorbitale entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein muß, gilt außerdem

$$c_a = \pm c_b \quad (10)$$

Damit ergeben sich die beiden folgenden normierten Molekülorbitale

$$\Psi^s = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S_{ab}}} (\Phi_a + \Phi_b) \quad (11)$$

$$\Psi^a = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S_{ab}}} (\Phi_a - \Phi_b) \quad (12)$$

$$(13)$$

Diese beiden Wellenfunktionen werden nun in die Schrödingergleichung eingesetzt um die Potentialkurven zu bestimmen. Diese Potentialkurven sind

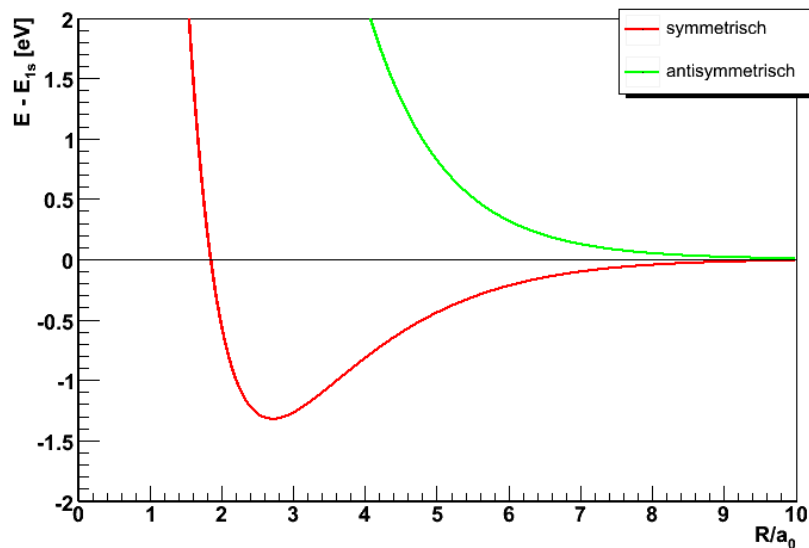


Abbildung 3: *Potentialkurven eines  $H_2^+$ -Ions. Die Potentialkurven sind die Energieeigenwerte der symmetrischen bzw. antisymmetrischen Molekülorbitale eines  $H_2^+$ -Ions in der LCAO-Näherung. Da die Potentialkurve der symmetrischen Lösung ein Minimum besitzt, stellt diese Lösung einen stabilen molekularen Zustand dar.*

in Abbildung 3 dargestellt. Die Potentialkurven zeigen die Energieeigenwerte der beiden Wellenfunktionen in Abhängigkeit vom Abstand  $R$  der beiden Protonen. Die symmetrische Wellenfunktion führt zu einem stabilen molekularen Zustand, da die Potentialkurve ein Minimum aufweist. Die antisymmetrische Wellenfunktion führt zu einem dissoziierenden Zustand, da das Potential für einen unendlichen Abstand der beiden Protonen am kleinsten ist.

Aufgrund dieses Verhaltens wird die symmetrische Lösung auch oft als bindend und die antisymmetrische als antibindend bezeichnet.

### 1.3 Molekülorbitalnäherung

Wenn wir nun ein zweites Elektron zum  $\text{H}_2^+$  MolekÜlion hinzufügen, müssten wir für die Gesamtwellenfunktion der beiden Elektronen die Wechselwirkung der beiden Elektronen untereinander berücksichtigen. In der sogenannten Molekülorbitalnäherung wird diese Wechselwirkung vernachlässigt. Da die beiden Elektronen jetzt völlig unabhängig von einander sind ergibt sich als Ansatz für die Gesamtwellenfunktion das Produkt aus den Molekülorbitalen in denen sich die Elektronen jeweils befinden. Wenn sich zum Beispiel beide Elektronen im Grundzustand  $\Psi^s$  befinden, ergibt sich folgende Gesamtwellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi^s(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi^s(\mathbf{r}_2) \quad (14)$$

Diese räumliche Wellenfunktion wird dann noch mit der Spinnwellenfunktion multipliziert, so dass die Gesamtwellenfunktion der Elektronen antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung von zwei Elektronen ist, was durch das Pauliprinzip gefordert wird.

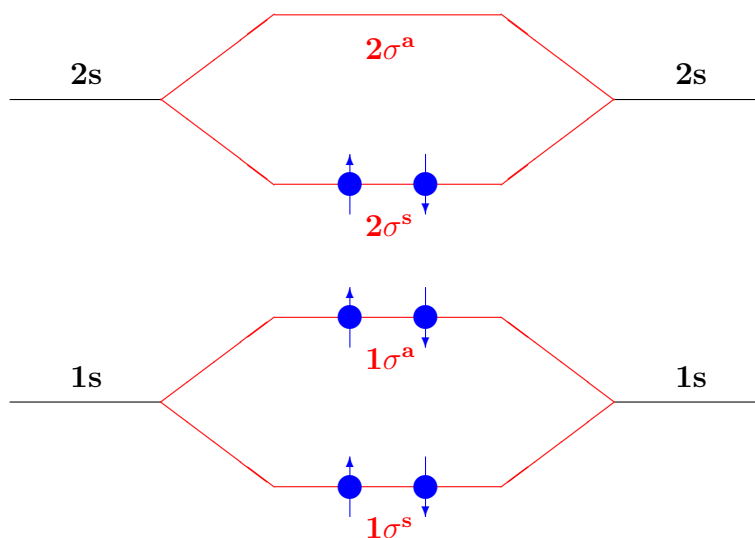


Abbildung 4: Elektronenkonfiguration des Grundzustands eines  $\text{Li}_2$  Moleküls

In Abbildung 4 ist die Elektronenkonfiguration des Grundzustands eines  $\text{Li}_2$  Moleküls dargestellt. Die Nomenklatur der Molekülorbitale ist ähnlich zur Nomenklatur der Atomorbitale. Die Zahl gibt die Hauptquantenzahl  $n$  an, also das Energieniveau  $E_n(R)$ . Der griechische Buchstabe korrespondiert mit dem Bahndrehimpuls. Im Gegensatz zu den Atomorbitalen ist bei Molekülen

nicht der Betrag des Bahndrehimpulses eine gute Quantenzahl sondern die Projektion auf die z-Achse ( $l_z = \lambda \hbar$ ). Die Quantenzahl  $\lambda$  wird nun mit griechischen Buchstaben nummeriert ( $\lambda = 0, 1, 2, \dots \rightarrow \sigma, \pi, \delta, \varphi, \dots$ ).

## 2 Verteilungsfunktionen

Wir wollen nun Systeme betrachten mit einer sehr großen Anzahl von Teilchen, wie zum Beispiel Gase oder Festkörper. Analog zur klassischen Mechanik interessieren wir uns bei solchen Vielteilchensystemen nur für die messbaren Zustandsgrößen, wie Druck, Temperatur, Wärmekapazität oder Energie.

Um diese Zustandsgrößen ausrechnen zu können, wird neben der Zustandsdichte, also der Anzahl der Zustände in einem Energieintervall  $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$ , auch eine Verteilungsfunktion benötigt. Die Verteilungsfunktion gibt die mittlere Besetzungszahl eines Zustandes mit Energie  $\epsilon$  an. Für unterschiedliche Sorten von Teilchen gibt es unterschiedliche Verteilungsfunktionen. Für Fermionen, also Teilchen mit halbzahligem Spin, wird die Fermi-Dirac-Verteilung verwendet und für Bosonen, Teilchen mit ganzzahligem Spin, wird die Bose-Einstein-Verteilung verwendet.

### 2.1 Fermi-Dirac-Verteilung

Die Fermi-Dirac-Verteilung wird für Fermionen verwendet. Nach dem Pauliprinzip müssen sich Fermionen in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden. Damit kann ein Zustand nur mit einem Fermion besetzt werden<sup>1</sup>. Außerdem müssen wir noch berücksichtigen, dass alle quantenmechanischen Teilchen ununterscheidbar sind. Diese beiden Bedingungen führen zu folgendem Verhalten der Vielteilchenwellenfunktion für Fermionen bei Teilchenvertauschung

$$\Psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots) = -\Psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots) \quad (15)$$

Mit diesen Bedingungen lässt sich dann die Fermi-Dirac-Verteilung herleiten

$$f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \epsilon_F)/(kT)} + 1} \quad (16)$$

Diese Verteilung ist in Abbildung 5 für unterschiedliche Temperaturen dargestellt. Wie sich an der grünen Kurve erahnen lässt, nähert sich die Fermi-Dirac-Verteilung bei niedrigen Temperaturen einer Stufenfunktion an. Alle

---

<sup>1</sup>Falls die Zustände, wie zum Beispiel die Atomorbitale, keine Spinquantenzahl enthalten, kann jeder Zustand mit zwei Fermionen besetzt werden. Eins mit Spin up und eins mit Spin down

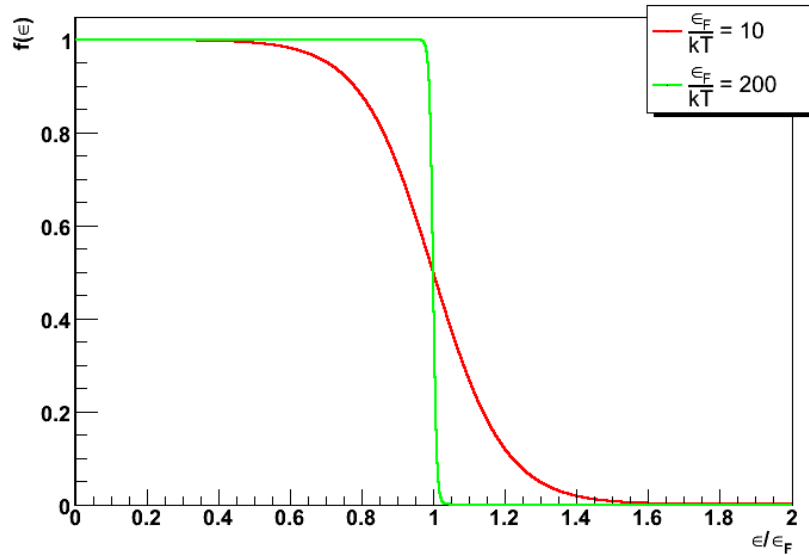


Abbildung 5: *Fermi-Dirac-Verteilung bei unterschiedlichen Temperaturen. Die Fermi-Dirac-Verteilung gibt die mittlere Besetzungszahl eines Zustandes mit Energie  $\epsilon$  an. Bei niedrigen Temperaturen (grüne Kurve) nähert sich die Fermi-Dirac-Verteilung einer Stufenfunktion ab. Bei tiefen Temperaturen sind alle Zustände unterhalb der Fermienergie  $\epsilon_F$  besetzt, während alle Zustände mit höherer Energie unbesetzt sind.*

Zustände mit einer kleineren Energie als die sogenannte Fermienergie  $\epsilon_F$  sind dann einfach besetzt während alle Zustände mit höherer Energie unbesetzt sind. Die Fermienergie ist damit die Energie des besetzten Zustandes mit der höchsten Energie.

## 2.2 Bose-Einstein-Verteilung

Im Gegensatz zu Fermionen, können sich beliebig viele Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) in einem Zustand mit den selben Quantenzahlen befinden. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Boson im selben Zustand befindet wie ein anderes Boson, ist größer als die Wahrscheinlichkeit, dass sich zwei klassische Teilchen im selben Zustand befinden. Diese Eigenschaft von Bosonen wird zum Beispiel bei der stimulierten Emission von Photonen im Laser angewendet.

Die Vielteilchenwellenfunktion von Bosonen bleibt beim Austausch von Teilchen unverändert

$$\Psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots) = \Psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots) \quad (17)$$



Die Bose-Einstein-Verteilung lautet dann

$$f_{BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/(kT)} - 1} \quad (18)$$

wobei mit  $\mu$  das chemische Potential bezeichnet wird. Das chemische Potential  $\mu$  ist die Energie die aufgebracht werden muß um einem Vielteilchensystem ein weiteres Teilchen hinzuzufügen. Bei Fermionen ist das chemische Potential die Fermienergie.

### 2.3 Freies Elektronengas

Wir wollen in diesem Abschnitt ein freies Elektronengas betrachten. Also ein System aus nichtwechselwirkenden Fermionen. Das freie Elektronengas ist eine einfache Näherung für das Elektronensystem eines Metalls. Wir nehmen an, dass sich die Valenzelektronen der Metallatome völlig frei durch den Festkörper bewegen können. Nur an den Oberflächen des Metalls tritt eine unendlich hohe Potentialbarriere auf, damit die Elektronen das Metall nicht verlassen können.

Die Lösungen für Elektronen in einem eindimensionalen unendlich hohem Potentialtopf lauten

$$\varphi_n(x) \propto \sin(k_n x) \quad (19)$$

wobei wegen den Randbedingungen gilt

$$k_n = n \frac{\pi}{L} \quad (20)$$

Wir nehmen ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass das Metall ein Würfel mit Kantenlänge  $L$  ist. Da die drei Dimensionen unabhängig voneinander sind, erhalten wir im dreidimensionalen Fall folgende Bedingungen

$$k_x = n_x \frac{\pi}{L} \quad (21)$$

$$k_y = n_y \frac{\pi}{L} \quad (22)$$

$$k_z = n_z \frac{\pi}{L} \quad (23)$$

$$(24)$$

Für die Energieniveaus gilt

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (25)$$

wobei  $n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$  verwendet wurde.

Um die Zustandsgrößen dieses Systems auszurechnen zu können benötigen wir die Zustandsdichte  $g(\epsilon)d\epsilon$ , die angibt wieviele Zustände im Energieintervall  $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$  existieren. Die Zustandsdichte wird also von der Zahl der möglichen Trippel  $(n_x, n_y, n_z)$ , die im Intervall  $[n, n + dn]$  liegen, bestimmt. Im dreidimensionalen Raum der  $n_i$  suchen wir also das  $\frac{1}{8}$  Volumen<sup>2</sup> einer Kugelschale mit Innenradius  $n$  und Dicke  $dn$ . Die Zahl der möglichen Trippel ist identisch mit diesem Volumen, da durchschnittlich ein Zustand in jedem Volumenelement  $dV$  liegt.

$$g(n)dn = \frac{1}{8}4\pi n^2 dn \quad (26)$$

Jetzt muß noch berücksichtigt werden, dass in jedem Zustand zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin sein können.

$$g(n)dn = \pi n^2 dn \quad (27)$$

Aus der Energie  $\epsilon$  eines Zustands  $n$  kann man einen Zusammenhang zwischen  $n$  und  $\epsilon$  finden

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (28)$$

$$\Rightarrow n^2 = \frac{2mL^2}{\hbar^2 \pi^2} \epsilon \quad (29)$$

$$dn = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{L}{\pi} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon}} \quad (30)$$

Damit ergibt sich für die Zustandsdichte

$$g(\epsilon)d\epsilon = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{L^3}{2\pi^2} \sqrt{\epsilon} d\epsilon \quad (31)$$

Um die Fermienergie  $\epsilon_F$  zu berechnen verwenden wir folgende Bedingung

$$N \stackrel{!}{=} \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) f_{FD}(\epsilon) \quad (32)$$

Außerdem ersetzen wir  $L^3$  durch  $V$ . Für  $T = 0$  ist die Fermi-Dirac-Verteilung  $f_{FD}(\epsilon)$  eine Stufenfunktion. Alle Zustände mit einer kleineren Energie sind einfach besetzt, alle anderen bleiben unbesetzt. Wir können daher die obere Integrationsgrenze  $\infty$  durch  $\epsilon_F$  ersetzen.

$$N \stackrel{!}{=} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon g(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \sqrt{\epsilon} \quad (33)$$

---

<sup>2</sup>Nur  $\frac{1}{8}$  der Kugel ist relevant, da die  $n_i$  positive ganze Zahlen sind.

Damit ergibt sich für die Fermienergie

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (34)$$

Die Fermienergie ist also diejenige Energie, bis zu der alle Zustände besetzt sind. In Festkörpern liegen diese Zustände liegen die Energieniveaus so dicht zusammen, dass sich kontinuierliche Bänder mit erlaubten Energien und verbotenen Bereichen dazwischen bilden. die verbotenen Bereich werden Bandlücken genannt. Die Lage der Fermienergie in diesen Energiebändern bestimmt die elektrischen Eigenschaften des Festkörpers. In Abbildung 6 ist die

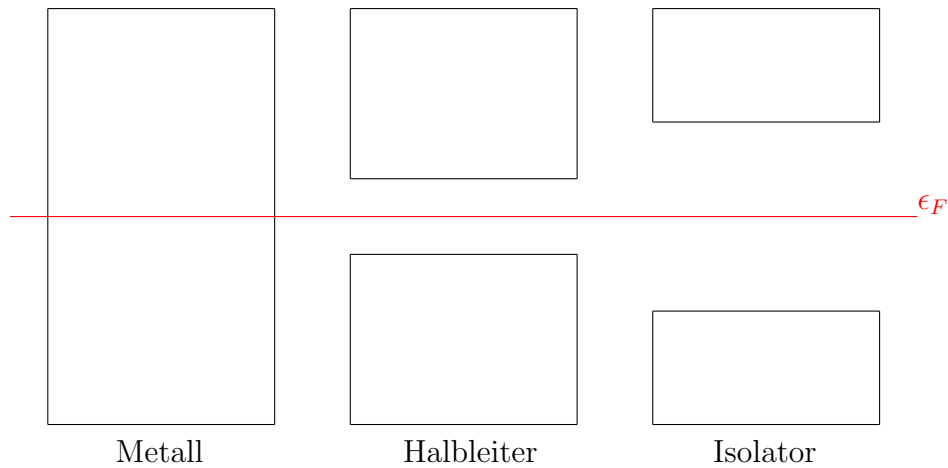


Abbildung 6: Bei Metallen liegt die Fermienergie mitten in einem Energieband, sodass im Energieband noch freie Zustände existieren. Bei Halbleitern und Isolatoren ist die Fermienergie in der Mitte der Bandlücke. Der einzige Unterschied von Halbleitern und Isolatoren ist die Größe der Bandlücke.

Lage der Fermienergie bei Metallen, Halbleitern und Isolatoren abgebildet. Bei Metallen sind überhalb der Bandkante noch freie Zustände vorhanden, während bei Halbleitern und Isolatoren die Bandlücke überwunden werden muß.

## 2.4 Photonengas, Schwarzkörperstrahlung

In diesem Abschnitt wollen wir ein Photonengas betrachten. Die Photonen sollen sich in einem Hohlraum mit reflektierenden Oberflächen befinden. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir auch hier annehmen, dass der Hohlraum ein Würfel mit Kantenlänge  $L$  ist.

In so einem Hohlraum können nur solche elektromagnetische Wellen, also Photonen, existieren, die eine stehende Welle ausbilden. Damit können nur Photonen im Hohlraum existieren für die gilt

$$k_x = l \cdot \frac{\pi}{L} \quad (35)$$

$$k_y = m \cdot \frac{\pi}{L} \quad (36)$$

$$k_z = n \cdot \frac{\pi}{L} \quad (37)$$

$$(38)$$

wobei  $l$ ,  $m$  und  $n$  positive ganze Zahlen sind. Die Dispersionsrelation einer elektromagnetischen Welle im Vakuum lautet

$$\omega^2 = \mathbf{k}^2 c^2 \quad (39)$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{\pi^2 c^2}{L^2} (l^2 + m^2 + n^2) \quad (40)$$

Um die Zustandsdichte, also die Anzahl der Zustände im Frequenzbereich  $[\omega, \omega + d\omega]$ , auszurechnen, nehmen wir an, dass in jedem Volumenelement  $dV$  durchschnittlich ein Zustand  $(l, m, n)$  liegt. Die Zustandsdichte  $g(\omega)d\omega$  ist dann das ist  $\frac{1}{8}$  Volumen<sup>3</sup> einer Kugelschale im  $(l, m, n)$  - Raum, wobei die Kugel den Radius  $\frac{\omega L}{\pi c}$  und die Kugelschale die Dicke  $\frac{d\omega L}{\pi c}$  hat. Die Zustandsdichte ist also

$$g(\omega)d\omega = \frac{1}{8} 4\pi \left( \frac{\omega^2 L^2}{\pi^2 c^2} \right) \frac{d\omega L}{\pi c} \quad (41)$$

Jetzt muß noch berücksichtigt werden, dass jede Mode, also jeder Zustand, zwei unterschiedliche Polarisationsrichtungen hat. Damit ergibt sich für die Zustandsdichte eines Phononengases in einem Hohlraum mit Volumen  $L^3$

$$\boxed{g(\omega)d\omega = \frac{\omega^2 L^3}{\pi^2 c^3} d\omega} \quad (42)$$

Die mittlere Besetzungszahl eines Zustandes mit Frequenz  $\omega$  und Energie  $\hbar\omega$  wird durch die Bose-Einstein-Verteilung gegeben, da Photonen Bosonen sind. Das chemische Potential, also die Energie die aufgebracht werden muß, um ein weiteres Teilchen dem System hinzuzufügen, ist für ein Photonengas Null. Damit ergibt sich für die mittlere Besetzungszahl eines Zustandes mit Frequenz  $\omega$

$$\langle n_\omega \rangle = \frac{1}{e^{(\hbar\omega)/(kT)} - 1} \quad (43)$$

---

<sup>3</sup>nur positive Werte für  $(l, m, n)$

Die Gesamtenergie wird dann aus dem Produkt der Zustandsdichte, der Energie eines Zustands und der mittleren Besetzungszahl berechnet

$$E_{ges}(T) = \int_0^\infty d\omega g(\omega) \cdot \hbar\omega \cdot \langle n_\omega \rangle = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2 L^3}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{(\hbar\omega)/(kT)} - 1} \quad (44)$$

Aus dem Integranden dieser Gleichung lässt sich dann die spektrale Energiedichte berechnen, indem man den Integranden durch das Volumen  $L^3$  teilt. Damit ergibt sich das Plancksche Strahlungsgesetz

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{(\hbar\omega)/(kT)} - 1} \quad (45)$$

In Abbildung 7 ist die spektrale Energiedichte für unterschiedliche Temperaturen aufgetragen.

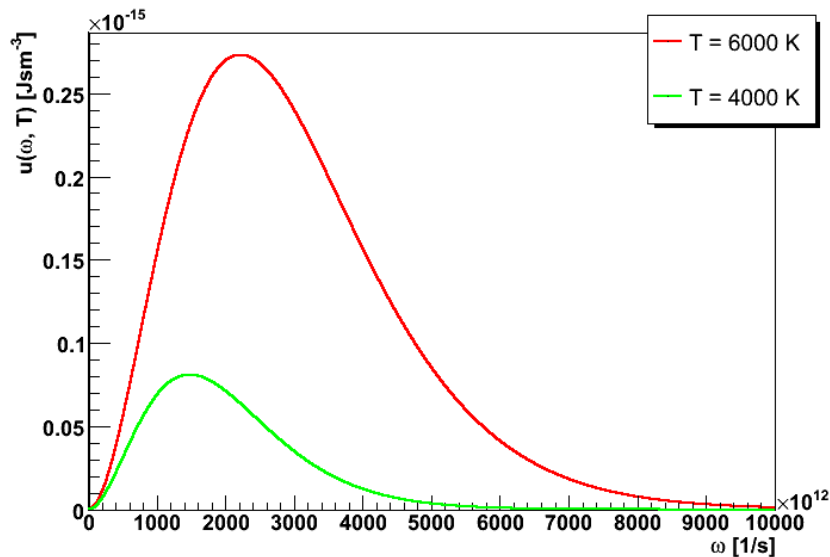


Abbildung 7: Hier ist die spektrale Energiedichte nach dem Planckschem Strahlungsgesetz bei unterschiedlichen Temperaturen dargestellt

## Abbildungsverzeichnis

1	$H_2^+$ -Ion . . . . .	2
2	Energieniveaus der Elektronenwellenfunktion eines $H_2^+$ - Ions[1]	3
3	Potentialkurven eines $H_2^+$ -Ions . . . . .	5
4	Elektronenkonfiguration eines $Li_2$ Moleküls . . . . .	6
5	Fermi-Dirac-Verteilung bei unterschiedlichen Temperaturen . .	8
6	Energiebänder von Metallen, Halbleitern und Isolatoren . . . .	11
7	Spektrale Energiedichte bei unterschiedlichen Temperaturen .	13

## Literatur

- [1] R.GROSS, Vorlesungsskript zu Experimentalphysik 4 (SS 2003)