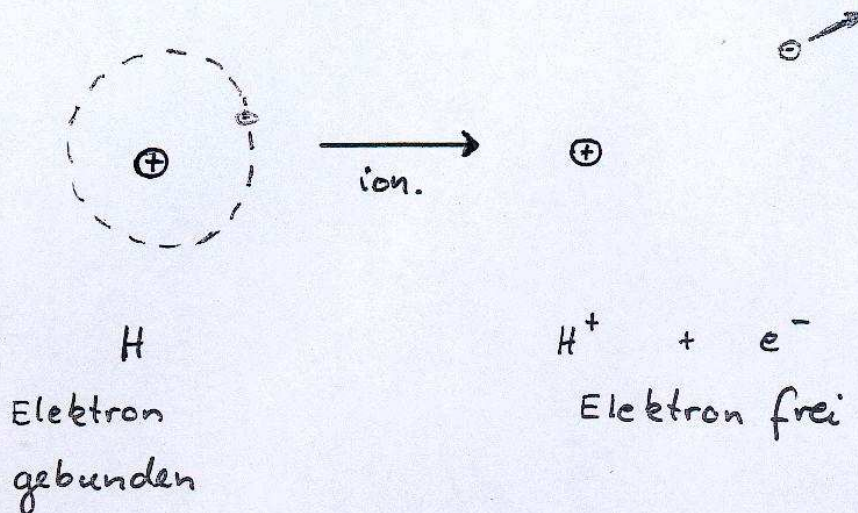


Ionisation (Saha-Gleichung)

z. B. Wasserstoff



Herleitung analog zur Boltzmannformel für gebundene Zustände, aber:

oberer Zustand ist zwei-Teilchenzustand
(Ion + freies Elektron)

• Energie $E = E_{\text{Ion}} + \frac{p^2}{2m_e}$ $p = \text{Impuls des El.}$

$\nwarrow$ Ionisierungsenergie $\nwarrow$ kinetische Energie des freien Elektrons

• statistisches Gewicht

$$g = g_{\text{up}} \cdot G_e(p)$$

$\nwarrow$ statistisches Gewicht des Ions $\nwarrow$ statistisches Gewicht des Elektrons mit Impuls p

$E_{\text{low}} = \text{Energie des niedriger ionisierten Zustands}$
 $E_{\text{up}} = E_{\text{Ion}} = \text{ " " höher " "}$

Einsetzen in Boltzmann-Formel:

$$\frac{n_{up}(p)}{n_{low}} = \frac{g_{up} \cdot G_e(p)}{g_{low}} \cdot \exp\left\{-\frac{E_{up} - E_{low}}{kT}\right\} \underbrace{\exp\left\{-\frac{p^2/2m_e}{kT}\right\}}_{\text{Gleichgewichts-}}$$

verteilung für
die freien Elektronen
(Maxwell-Verteilung)

- Uns interessiert nur das "thermische Mittel" über alle Impulse:

$$\frac{n_{up}}{n_{low}} = \frac{g_{up}}{g_{low}} \cdot \exp\left\{-\frac{E_{up} - E_{low}}{kT}\right\} \cdot \int_0^{\infty} G_e(p) \exp\left\{-\frac{p^2/2m_e}{kT}\right\} dp$$

- statistisches Gewicht des freien Elektrons $G_e(p)$

Elektron hat kontinuierliches Impulsspektrum:

Zahl der verfügbaren Zustände im Intervall $[p, p+dp]$?

Einschränkung: Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h \quad \Delta y \cdot \Delta p_y = h \quad \Delta z \cdot \Delta p_z = h$$

Das Phasenraumvolumen:

$$d\Omega = \underbrace{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}_{\text{Ortsraum}} \cdot \underbrace{\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z}_{\text{Impulsraum}}$$

Es stehen nur $\frac{d\Omega}{h^3}$ Quantenzellen zur Verfügung.

Jede kann mit 2 Elektronen unterschiedlichem Spins belegt werden (Pauli Verbot).

$$\Rightarrow G_e(p) dp = 2 \cdot \frac{d\Omega(p)}{h^3}$$

$$d\Omega = 4\pi p^2 dp \cdot \Delta V \quad (\text{Kugelkoordinaten})$$

Elektronendichte $n_e = \text{Zahl der Elektronen pro Volumen}$

Einem Elektron steht ein Raumvolumen

$$\Delta V = \frac{1}{n_e} \quad \text{zur Verfügung}$$

$$d\Omega = \frac{1}{n_e} 4\pi p^2 dp$$

$$G_e(p) = 2 \frac{1}{n_e} 4\pi p^2 / h^3$$

$$\bullet \text{ thermisches Mittel } \bar{G}_e = \int_0^\infty \frac{8\pi}{n_e h^3} p^2 \exp\left\{-\frac{p^2}{2m_e kT}\right\} dp$$

$$x = p / \sqrt{2m_e kT} \quad dp = \sqrt{2m_e kT} dx$$

$$\bar{G}_e = \frac{8\pi}{n_e h^3} (2m_e kT)^{3/2} \underbrace{\int_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx}_{= \sqrt{\pi}/4}$$

$$= \frac{2}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$$\boxed{\frac{n_{up}}{n_{low}} = \frac{1}{n_e} \cdot 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{g_{up}}{g_{low}} \exp\left\{-\frac{E_{up} - E_{low}}{kT}\right\}}$$

Saha - Gleichung

andere Schreibweise

$$\frac{n_e \cdot n_{up}}{n_{low}} = f(T) = \frac{T^{3/2}}{C} \cdot \frac{g_{up}}{g_{low}} \exp \left\{ -\frac{E_{up} - E_{low}}{kT} \right\}$$
$$C = 2.07 \cdot 10^{-16} [K^{3/2} cm^3] \quad (I)$$

vergleiche "Massenwirkungsgesetz" in der Chemie

• Beispiel: Wasserstoff

"Modellatom": 1 gebundener Zustand von $H\underline{I}$

$$n_{low} = n_I = n(H\underline{I} - \text{Grundzustand}) \quad g_I = 2$$

$$n_{up} = n_{\underline{II}} = n(H\underline{II}) \quad g_{\underline{II}} = 1$$

$$\frac{n_e \cdot n_{\underline{II}}}{n_I} = \frac{T^{3/2}}{C} \cdot \frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{1.58 \cdot 10^5 K}{T} \right\} = f(T)$$

Reines Wasserstoffplasma $n_e = n_{\underline{II}}$

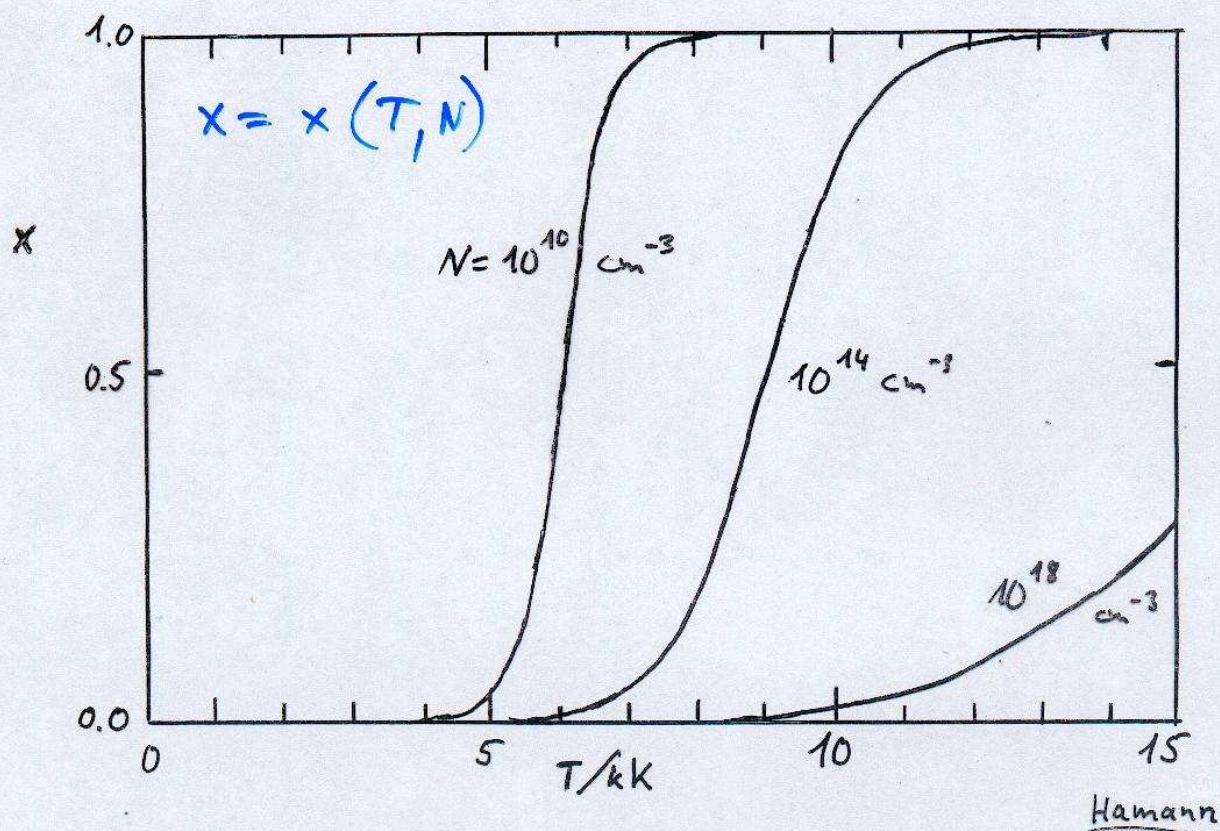
$$N = n_I + n_{\underline{II}}$$

$$\text{Ionisationsgrad: } x = \frac{n_e}{N} = \frac{n_{\underline{II}}}{N}$$

$$\frac{x^2 N}{(1-x)} = f(T) \Rightarrow x^2 + \frac{f(T)}{N} x - \frac{f(T)}{N} = 0$$

$$x = -\frac{f(T)}{2N} + \sqrt{\left(\frac{f(T)}{2N}\right)^2 + \frac{f(T)}{N}}$$

$$x = x(T, N)$$



Allgemein:

Umfangreichere Modelatome:

$j = 1, \dots, J$ Ionisationsstufen

$i = 1, \dots, I(j)$ Niveaus pro Ionisationsstufe j

- Sahagleichung für Grundzustände von Ionisationsstufe j und $j+1$:

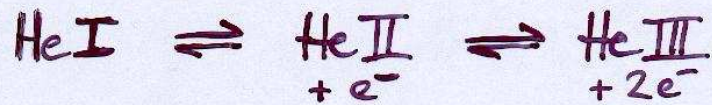
$$n_{1j} = n_{1j+1} \cdot n_e \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} \frac{g_{1j}}{g_{1j+1}} \exp \left\{ \frac{E_{Ion}^j}{kT} \right\}$$

- Boltzmannformel $\rightarrow$ Besetzungsdichte des i -ten Niveaus

$$n_{ij} = \frac{n_{ij}}{n_{1j}} \cdot n_{1j} = \frac{g_{ij}}{g_{1j}} \exp \left(-\frac{E_i^j}{kT} \right) \cdot n_{1j+1} n_e c_1 T^{-3/2} \frac{g_{1j}}{g_{1j+1}} \exp \left\{ \frac{E_{Ion}^j}{kT} \right\}$$

$$n_{ij} = \frac{g_{ij}}{g_{1j+1}} n_{1j+1} \cdot n_e \cdot c_1 T^{-3/2} \exp \left\{ \frac{E_{Ion}^j - E_i^j}{kT} \right\} \quad (I)$$

Ionisationsgrad eines He-Plasmas



Zwei Saha-Gleichungen:

$$N_e \cdot \frac{N_{\text{II}}}{N_{\text{I}}} = c_1(T)$$

$$N_e \cdot \frac{N_{\text{III}}}{N_{\text{II}}} = c_2(T)$$

Ionisationsgrad: $x := \frac{N_e}{N_{\text{He}}}$

$$C_i := \frac{N_{\text{He}}}{c_i} \quad (\text{dimensionslos})$$

$$\Rightarrow C_1 N_{\text{II}} x = N_{\text{I}}$$

$$C_2 N_{\text{III}} x = N_{\text{II}}$$

2 Gleichungen für 4 Unbekannte: $x, N_{\text{I}}, N_{\text{II}}, N_{\text{III}}$

2 Zusatzbedingungen

1. Teilchenerhaltung: $N_{\text{I}} + N_{\text{II}} + N_{\text{III}} = N_{\text{He}}$

2. Ladungserhaltung: $N_e = N_{\text{I}} + 2N_{\text{II}}$

$$\Rightarrow \boxed{C_1 C_2 x^3 + C_2 x^2 + (1 - C_2) x - 2 = 0}$$

AUFGABE: Nachrechnen im Protokoll !!

Berechnung von Polynomen mit Horner-Schema

$$P = \sum_{i=0}^N C_i x^i$$

also $P = C_0 + C_1 \cdot x + C_2 \cdot x^2 + C_3 \cdot x^3 + \dots$

"unökonomische" Programmierung:

$$P = C(0) + C(1) * X ** 1 + C(2) * X ** 2 + C(3) * X ** 3 + \dots$$

besser mit Horner-Schema:

$$P = C(0) + X * (C(1) + X * (C(2) + X * (C(3) + \dots)))$$

Programmvorschlag für viele Koeffizienten:

initiiieren $\left\{ \begin{array}{l} N = \dots \quad (\text{Polynomgrad} + 1 = \text{Zahl d. Koeff.}) \\ C(0) = \dots \\ C(1) = \dots \\ \vdots \end{array} \right.$

$$P = C(N)$$

$$\text{DO } J = N-1, 1, -1$$

$$P = P * X + C(J)$$

END DO