

Lernhilfe zur Diplomprüfung Experimentalphysik

Diese Zusammenfassung wurde für die Vorbereitung auf meine Diplomprüfung erstellt. Bei Fehlern bitte ich um Korrekturhinweise.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|----------|
| 1 | Physikalische Grundgrößen | 7 |
| 2 | Dynamik | 7 |
| 2.1 | Newtonsche Axiome | 8 |
| 2.2 | Lagrange-Formalismus | 8 |
| 2.2.1 | d'Alembertsche Prinzip | 8 |
| 2.2.2 | Lagrange-Gleichungen 1. Art | 8 |
| 2.2.3 | Lagrange-Gleichungen 2. Art | 9 |
| 2.2.4 | Hamilton-Prinzip | 9 |
| 2.3 | Astronomie | 9 |
| 2.4 | Stöße | 9 |
| 2.4.1 | Elastische Stöße | 9 |
| 2.4.2 | Unelastische Stöße | 9 |
| 2.4.3 | Inelastischer Stoß | 10 |
| 2.5 | Mechanik des starren Körpers | 10 |
| 2.5.1 | Linienflüchtigkeit der Kräfte | 10 |
| 2.5.2 | Drehmoment | 10 |
| 2.5.3 | Massenmittelpunkt und Schwerpunkt | 10 |
| 2.5.4 | Gleichgewicht | 10 |
| 2.6 | Dynamik des starren Körpers | 10 |
| 2.6.1 | Schwerpunktsbewegung | 10 |
| 2.6.2 | Drehbewegung | 10 |
| 2.6.3 | Rotationsenergie | 11 |
| 2.6.4 | Drehimpuls und Drehimpulserhaltung | 11 |
| 2.6.5 | Trägheitstensor / Trägheitsellipsoid | 11 |
| 2.6.6 | Kreisel XXX | 11 |
| 2.7 | Bewegte Bezugssysteme | 11 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.7.1 | Galilei-Transformation | 11 |
| 2.7.2 | Beschleunigte Bewegung | 11 |
| 2.7.3 | Lorentz-Transformation | 12 |
| 2.7.4 | Kreisbewegung | 12 |
| 2.7.5 | kosmische Geschwindigkeiten | 12 |
| 2.8 | deformierbare Festkörper | 13 |
| 2.8.1 | Dehnung und Kompression | 13 |
| 2.8.2 | Scherung | 13 |
| 2.8.3 | Biegung | 14 |
| 2.8.4 | Drillung / Torsion | 14 |
| 2.8.5 | Inelastische Effekte | 14 |
| 2.9 | Reibung | 14 |
| 2.10 | Hydrostatik | 14 |
| 2.10.1 | Brownsche Molekularbewegung | 15 |
| 2.10.2 | Druck, Schweredruck und Auftrieb | 15 |
| 2.10.3 | Druckmessung | 15 |
| 2.10.4 | Grenzflächeneffekte | 15 |
| 2.11 | Aerostatik | 16 |
| 2.12 | Hydro- und Aerodynamik | 16 |
| 2.12.1 | Ideale Flüssigkeiten | 16 |
| 2.12.2 | Kontinuitätsgleichung | 16 |
| 2.12.3 | Bernoulli-Gleichung | 16 |
| 2.12.4 | Kavitation | 16 |
| 2.12.5 | Strömungsimpuls | 16 |
| 2.12.6 | Laminare Strömungen | 17 |
| 2.12.7 | Wirbel | 17 |
| 2.12.8 | Turbulente Strömungen | 17 |
| 3 | Schwingungen | 17 |
| 3.1 | harmonischer Oszillator | 17 |
| 3.1.1 | freie ungedämpfte Schwingung | 17 |
| 3.1.2 | freie gedämpfte Schwingung | 17 |
| 3.1.3 | erzwungene Schwingung | 18 |
| 3.1.4 | Beispiele | 18 |
| 3.1.5 | gekoppelte Schwingungen | 18 |
| 3.1.6 | nichtlineare Schwingungen | 18 |
| 3.2 | harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik | 19 |
| 3.3 | Wellen | 19 |
| 3.3.1 | Wellengleichung | 19 |
| 3.3.2 | Wellenausbreitung | 20 |
| 3.3.3 | Interferenz | 20 |
| 3.3.4 | Reflexion, Brechung | 20 |
| 3.3.5 | Beugung | 20 |
| 3.3.6 | Doppler-Effekt | 20 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.3.7 | Stehende Wellen | 21 |
| 4 | Elektrizität und Magnetismus | 21 |
| 4.1 | Elektrostatik | 21 |
| 4.1.1 | Ladung, Coulomb-Gesetz | 21 |
| 4.1.2 | Elektrostatik im Vakuum | 21 |
| 4.1.3 | Leiter im elektrischen Feld | 22 |
| 4.1.4 | Dielektrika / Isolatoren | 22 |
| 4.1.5 | Energie des elektrischen Feldes | 22 |
| 4.2 | Stationäre Ströme | 22 |
| 4.3 | Magnetisches Feld | 23 |
| 4.4 | Elektromagnetische Induktion | 23 |
| 4.5 | Materie im Magnetfeld | 23 |
| 4.6 | Maxwellsche Gleichungen | 23 |
| 4.7 | Wechselstrom | 24 |
| 4.8 | Elektromagnetische Wellen XXX | 24 |
| 4.9 | Ladungstransportprozesse | 24 |
| 5 | Optik | 24 |
| 5.1 | optisches Strahlungsfeld | 24 |
| 5.2 | Geometrische Optik | 24 |
| 5.2.1 | Reflexion, Brechung | 24 |
| 5.3 | Wellenoptik | 24 |
| 5.3.1 | Kohärenz | 24 |
| 5.3.2 | Interferenz | 25 |
| 5.3.3 | Beugung XXX | 25 |
| 5.3.4 | Polarisation | 25 |
| 5.3.5 | Holographie | 25 |
| 5.3.6 | Dispersion | 25 |
| 6 | Thermodynamik | 25 |
| 6.1 | Thermodynamische Systeme | 25 |
| 6.2 | Kinetische Gastheorie | 26 |
| 6.3 | Thermodynamische Hauptsätze | 26 |
| 6.4 | Zustandsänderung idealer Gase | 26 |
| 7 | Atome und Moleküle | 27 |
| 7.1 | Elementare Quantenphysik | 27 |
| 7.1.1 | Photonen | 27 |
| 7.1.2 | Materiewellen | 27 |
| 7.1.3 | Wellenfunktion, Wellenpaket, Unschärferelation | 27 |
| 7.1.4 | Schrödinger-Gleichung | 27 |
| 7.1.5 | Messungen, Messwerte | 27 |
| 7.1.6 | Operatoren | 28 |

| | | |
|--------|--|----|
| 7.1.7 | Harmonischer Oszillator | 28 |
| 7.2 | Das Wasserstoff-Atom | 29 |
| 7.2.1 | QM-Behandlung des Wasserstoff | 29 |
| 7.3 | Alkaliatome | 31 |
| 7.4 | Feinstruktur (Bahn- und Spinmagnetismus) | 31 |
| 7.4.1 | Magnetische Momente, Elektronenspin | 31 |
| 7.4.2 | Stern Gerlach Versuch | 32 |
| 7.4.3 | Spin-Bahn-Aufspaltung im Bohrschen Atommodell | 32 |
| 7.4.4 | Feinstruktur beim Wasserstoffatom | 32 |
| 7.4.5 | Lamb-Verschiebung | 33 |
| 7.4.6 | Schalenmodell XXX | 33 |
| 7.5 | Atome im Magnetfeld | 33 |
| 7.5.1 | Elektronenspin-Resonanz | 33 |
| 7.5.2 | Normaler Zeeman-Effekt | 33 |
| 7.5.3 | Anomaler Zeeman-Effekt | 34 |
| 7.5.4 | Paschen-Back-Effekt | 35 |
| 7.5.5 | Magnetisches Moment bei der Spin-Bahn-Kopplung | 35 |
| 7.5.6 | Quantentheoretische Behandlung des Spins | 35 |
| 7.6 | Atome im elektrischen Feld | 36 |
| 7.6.1 | Stark-Effekt | 36 |
| 7.6.2 | Wechselwirkung eines Zwei-Niveau-Atoms mit einem kohärenten Lichtfeld | 37 |
| 7.6.3 | Spin- und Photonenecho | 37 |
| 7.7 | Emission und Absorption elektromagnetischer Strahlung | 37 |
| 7.7.1 | Übergangswahrscheinlichkeiten | 38 |
| 7.7.2 | Matrixelemente der Übergangswahrscheinlichkeiten | 38 |
| 7.7.3 | Lebensdauer angeregter Zustände | 40 |
| 7.7.4 | Linienbreite der Spektrallinien | 40 |
| 7.7.5 | Laser | 41 |
| 7.8 | Mehrelektronenatome | 42 |
| 7.8.1 | Das Helium-Atom | 42 |
| 7.8.2 | Aufbau der Elektronenhülle größerer Atome | 43 |
| 7.8.3 | Theoretische Modelle von Mehrelektronen-Atomen | 43 |
| 7.8.4 | Kopplungsschemata für die Elektronendrehimpulse | 44 |
| 7.8.5 | Spektren von Mehrelektronen-Atomen | 44 |
| 7.9 | Hyperfeinstruktur (Kernspin) | 45 |
| 7.9.1 | Wechselwirkung mit äußeren Magnetfeldern | 45 |
| 7.9.2 | Einflüsse des Atomkerns auf die Spektren der Atome | 46 |
| 7.10 | Moleküle | 46 |
| 7.10.1 | Das H_2^+ -Molekülion | 46 |
| 7.10.2 | Das H_2 -Molekül | 47 |
| 7.10.3 | Elektronische Zustände zweiatomiger Moleküle | 47 |
| 7.10.4 | Chemische Bindungen | 48 |
| 7.10.5 | Rotation und Schwingung zweiatomiger Moleküle | 48 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 7.10.6 | Spektren zweiatomiger Moleküle XXX | 49 |
| 7.10.7 | Elektronische Zustände mehratomiger Moleküle XXX | 49 |
| 8 | Festkörperphysik | 49 |
| 8.1 | Struktur idealer Kristalle | 49 |
| 8.1.1 | Reziprokes Gitter, Brillouin-Zone | 50 |
| 8.1.2 | Wichtige Kristallstrukturen | 50 |
| 8.1.3 | Netzebene, Millersche Indizes | 51 |
| 8.1.4 | Kristallstrukturanalyse | 51 |
| 8.2 | Gitterschwingungen | 52 |
| 8.2.1 | zweiatomige lineare Kette in Born-Oppenheimer-Näherung | 52 |
| 8.2.2 | Normalkoordinaten, Phononen | 54 |
| 8.2.3 | Innere Energie und Zustandsdichte | 54 |
| 8.2.4 | Verallgemeinerung auf 3D | 56 |
| 8.2.5 | Spezifische Wärmekapazität des Gitters | 56 |
| 8.2.6 | Lichtstreuung | 57 |
| 8.3 | Elektronen in idealen Kristallen | 58 |
| 8.3.1 | Freies Elektronengas | 58 |
| 8.3.2 | Elektrostatische Abschirmung | 59 |
| 8.3.3 | Wirkung äußerer Felder | 59 |
| 8.3.4 | Elektronen im periodischen Potential, Bandstruktur | 61 |
| 8.3.5 | Methoden zur Berechnung von Bandstrukturen | 63 |
| 8.4 | Halbleiter | 64 |
| 8.5 | Optische und dielektrische Eigenschaften | 64 |
| 8.6 | Supraleitung | 64 |
| 8.7 | Magnetismus | 64 |
| 9 | Kernphysik | 64 |
| 9.1 | Werkzeuge der Kernphysik | 64 |
| 9.1.1 | Beschleuniger | 64 |
| 9.1.2 | Wechselwirkung Strahlung und Materie, Detektoren | 64 |
| 9.2 | Stabile Kerne | 64 |
| 9.2.1 | Tröpfchenmodell | 64 |
| 9.2.2 | Fermi-Gas-Modell | 65 |
| 9.2.3 | Hartree-Fock-Methode | 65 |
| 9.3 | Instabile Kerne, Zerfall | 65 |
| 9.3.1 | Zerfallsgesetz | 65 |
| 9.3.2 | α -Zerfall | 65 |
| 9.3.3 | Kernspaltung | 65 |
| 9.3.4 | Elektromagnetische Übergänge (γ -Strahlung) | 66 |
| 9.3.5 | Kernresonanzabsorption (Mößbauer Effekt) | 66 |
| 9.4 | β -Zerfall und schwache Wechselwirkung | 66 |
| 9.4.1 | Experimentelle Befunde und Neutrino | 66 |
| 9.4.2 | Theoretische Beschreibung | 67 |

| | | |
|-------|--|----|
| 9.4.3 | Nichterhaltung der Parität | 67 |
| 9.5 | Kernkräfte und starke Wechselwirkung | 67 |
| 9.5.1 | Eigenschaften des Deuterons | 67 |
| 9.5.2 | Spinabhängigkeit, Ladungsunabhängigkeit der Kernkräfte | 67 |

1 Physikalische Grundgrößen

Meter: Das Meter ist die Länge der Strecke, die Licht im Vakuum während der Dauer von $1/299792458$ s durchläuft. Die Länge wird damit über die Lichtgeschwindigkeit definiert.

Sekunde: Eine Sekunde ist das 9 192 631 770-fache der Periodendauer der dem Übergang zwischen den beiden Hyperfeinstruktur-niveaus des Grundzustandes von Atomen des Nuklids ^{133}Cs entsprechenden Strahlung.

Kilogramm: Seit 1888 bildet das Urkilogramm (der Internationale Kilogrammprototyp) den weltweit einzigartigen Referenzwert für die Maßeinheit Kilogramm.

Ampere: Ein Ampere ist die Stärke eines zeitlich unveränderlichen elektrischen Stromes, der durch zwei im Vakuum parallel im Abstand von 1 Meter voneinander angeordnete, geradlinige, unendlich lange Leiter von vernachlässigbar kleinem, kreisförmigem Querschnitt fließend, zwischen diesen Leitern pro Meter Leiterlänge die Kraft 2×10^{-7} Newton hervorrufen würde.

Kelvin: Das Kelvin, die Einheit der thermodynamischen Temperatur, ist der 273,16te Teil der thermodynamischen Temperatur des Tripelpunktes des Wassers.

Candela: Ein Candela ist die Lichtstärke (Lichtstromdichte) einer Strahlungsquelle, die monochromatische Strahlung einer Wellenlänge λ von ca. 555 nm, mit einer Leistung von $1/683$ Watt pro Steradian (Raumeinheitswinkel) aussendet.

Mol: Das Mol ist die Stoffmenge eines Systems, das aus ebensoviel Einzelteilchen besteht, wie Atome in 0,012 Kilogramm des Nuklids Kohlenstoff-12 (^{12}C) enthalten sind.

2 Dynamik

Kräfte: $F = \frac{dp}{dt} = \frac{d}{dt}(mv)$

Potential: $F = -\text{grad}U$

Massen: Äquivalenzprinzip von träger und schwerer Masse (aus Allgemeiner Relativitätstheorie)

Energieerhaltung: Multipliziert man das erste Newtonsche Axiom mit $\dot{\vec{r}}$ erhält man $m_i \dot{\vec{r}}_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i \dot{\vec{r}}_i$. Man erkennt die kinetische Energie $T = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2$ und teilt die Kräfte in konservative ($\oint \vec{F} d\vec{r} = 0$, $\vec{F} \dot{\vec{r}} = -\frac{d}{dt}U = -\text{grad}U \dot{\vec{r}}$) und dissipative auf, man erhält den Energieerhaltungssatz

$$\frac{d}{dt}(T + U) = \vec{F}_{diss} \dot{\vec{r}}$$

Arbeit: $W = \int \vec{F} d\vec{r}$

Impuls: $p = mv$, Impulserhaltung

Raketengleichung: Man betrachte den Impuls des Systems an zwei infinitesimal benachbarten Zeiten t und $t + dt$, anschließende Näherung in lineare Term

$$\begin{aligned} p(t) &= mv \\ p(t + dt) &= (m + \dot{m}dt) v(t + dt) - \dot{m}dt [a + v(t + dt)] \approx mv + (m\dot{v} - \dot{m}a)dt \end{aligned}$$

Leistung: Arbeit pro Zeit

Wirkung: Arbeit mal Zeit

2.1 Newtonsche Axiome

1. Newtonsches Axiom: Es gibt Koordinatensysteme in denen sich ein kräftefreier ($\vec{F} = 0$) Massenpunkt mit konstanter Geschwindigkeit $\vec{r}'' = \vec{v} = const$ bewegt.

2. Newtonsches Axiom: Kraft $\vec{F} = \frac{d}{dt}(m\vec{v}) = \frac{d}{dt}\vec{p}$ entspricht der zeitlichen Änderung des Impulses \vec{p}

3. Newtonsches Axiom: Actio gleich Reactio

Axiome können nicht auf andere Gesetze zurückgeführt werden und bilden damit das Fundament.

Experimente: Maxwellsche Scheibe

2.2 Lagrange-Formalismus

2.2.1 d'Alembertsche Prinzip

Auf einen in seiner Bewegungsfreiheit eingeschränkten Massenpunkt wirke eine eingeprengte Kraft \vec{F} , die Nebenbedingung verursacht eine Zwangskraft: $m\vec{r}'' = \vec{F} + \vec{Z}$. Das d'Alembertsche Prinzip sagt aus, dass bei virtuellen Verrückungen keine Arbeit der Zwangskraft geleistet wird. Die Zwangskraft hat damit keine Komponente in Richtung denkbarer Verrückungen.

$$\vec{Z}\delta\vec{r} = (m\vec{r}'' - \vec{F})\delta\vec{r} = 0$$

2.2.2 Lagrange-Gleichungen 1. Art

Formuliert man die Nebenbedingungen in folgender Form $g_i(\vec{r}, t) = 0$ muss folgende Gleichung gelöst werden

$$m\vec{r}'' = \vec{F} + \sum \lambda_i \text{grad} g_i$$

2.2.3 Lagrange-Gleichungen 2. Art

Die Lagrange-Funktion $L(q_k, \dot{q}_k, t) = T(q_k, \dot{q}_k, t) - U(q_k, t)$ beschreibt über die Lagrange-Gleichungen 2. Art ein System vollständig.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0$$

2.2.4 Hamilton-Prinzip

Die vom System durchlaufene Bahnkurve zeichnet sich von anderen denkbaren Bahnkurven dadurch aus, dass für sie das Wirkungsintegral

$$\delta W = \delta \int L dt = 0$$

einen Extremwert (meist Minimum) annimmt. Als Vergleichsbahnen bezeichnen wir solche, die gleiche Anfangs- und Endpunkte haben, einer realen Bahn benachbart sind und der Vergleich zu festem Zeitpunkt durchgeführt wird.

2.3 Astronomie

1. **Keplergesetz:** Die Umlaufbahn eines Objekts ist eine Ellipse. Das Schwerezentrum liegt in einem Brennpunkt.
2. **Keplergesetz:** In gleichen Zeiten überstreicht der Fahrstrahl gleiche Flächen.
3. **Keplergesetz:** Die Quadrate der Umlaufzeiten zweier Objekte verhalten sich wie Kuben der großen Halbachsen.

Gravitationsgesetz: $F_g = -G \frac{mM}{r^2}$

2.4 Stöße

2.4.1 Elastische Stöße

Beim idealen elastischen Stoß wird keine Energie in Wärme oder Deformation umgewandelt, es gelten sowohl Impuls- wie auch Energieerhaltungssatz

$$\begin{aligned} m\vec{v}_1 + m\vec{v}_2 &= \vec{p} = m\vec{u}_1 + m\vec{u}_2 \\ \frac{m}{2}v_1^2 + \frac{m}{2}v_2^2 &= E = \frac{m}{2}u_1^2 + \frac{m}{2}u_2^2 \end{aligned}$$

2.4.2 Unelastische Stöße

Beim unelastischen Stoß sind die Stoßpartner nach dem Stoß verbunden. Damit greift die Impulserhaltung, aber Energie wird in innere Energie umgewandelt. Ballistisches Pendel

2.4.3 Inelastischer Stoß

Der inelastische Stoß beschreibt eine weitere Verallgemeinerung, da sich die Partner nach dem Stoß verformt haben können.

2.5 Mechanik des starren Körpers

N Massenpunkten haben $3N$ Freiheitsgrade, ein starrer Körper (nicht deformierbar) besitzt 3 Translations- und 3 Rotationsfreiheitsgrade.

2.5.1 Linienflüchtigkeit der Kräfte

$$\vec{r}_i \vec{F}_i = \text{const}$$

2.5.2 Drehmoment

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F}$$

2.5.3 Massenmittelpunkt und Schwerpunkt

Der Schwerpunkt $r_s = \frac{1}{m} \int \vec{r} dm$ eines Systems von Massenpunkten bewegt sich so, als ob die gesamte Masse in ihm vereinigt ist und alle äußeren Kräfte auf ihn wirken $M \ddot{\vec{r}} = \sum \vec{K}_i$.

2.5.4 Gleichgewicht

stabiles: System befindet sich in einem Minimum und kehrt bei kleinen Störungen in den Gleichgewichtszustand zurück (Kugel im Tal).

labiles: System befindet sich auf einem Maximum und verlässt den Gleichgewichtszustand bei kleinen Störungen (Kugel auf einem Berg).

indifferentes: Der Gleichgewichtszustand ist nicht eindeutig, das System kann beliebig verschoben werden (Kugel auf einer waagerechten Gerade).

2.6 Dynamik des starren Körpers

2.6.1 Schwerpunktsbewegung

$$F = m \ddot{\vec{r}}_s = \frac{d}{dt}(m \dot{\vec{v}}_s)$$

2.6.2 Drehbewegung

$$F = m \dot{\vec{v}} = m \frac{d}{dt}(\vec{\omega} \times \vec{r}) = m \dot{\vec{\omega}} \times \vec{r}$$

2.6.3 Rotationsenergie

$$W_{rot} = \frac{\omega^2}{2} I_A$$

Massenträgheitsmoment $I_A = \int r_{senkr}^2 dm$

2.6.4 Drehimpuls und Drehimpulserhaltung

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

definiert aus $m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}$ multipliziert mit $\vec{r} \times \dots$ erhält man obige Gleichung. Die zeitliche Ableitung $\frac{d\vec{L}}{dt} = m(\dot{\vec{r}} \times \dot{\vec{r}} + \vec{r} \times \ddot{\vec{r}}) = m\vec{r} \times \ddot{\vec{r}} = \vec{M}$ ergibt das Drehmoment, womit sich Drehimpulserhaltung für $\vec{M} = 0$ ergibt (gleichbedeutend mit Zentralkraftfeld).

2.6.5 Trägheitstensor / Trägheitsellipsoid

Ein Trägheitsellipsoid ist eine Veranschaulichung der Trägheitseigenschaft eines starren Körpers. Er ergibt sich aus dem Energieerhaltungssatz.

Ein Spezialfall ist ein sich mit $\vec{\omega} = (0, 0, \omega)$ um die z-Achse drehender starrer Körper. Dann drehen sich Punkte \vec{r}_i des Körpers mit der Geschwindigkeit $\dot{\vec{r}}_i = \vec{\omega} \times \vec{r}_i$ (Betrag $|\dot{\vec{r}}_i| = \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \omega$) und die kinetische Energie ergibt sich zu $T_{rot} = \frac{1}{2} m (x_i^2 + y_i^2) \omega^2$. Man definiert das Trägheitsmoment $\Theta = \sum m_i (x_i^2 + y_i^2)$.

Im allgemeinen Fall ergibt sich der Trägheitstensor Θ_{km} für $T_{rot} = \frac{1}{2} \sum_{k,m} \Theta_{km} \omega_k \omega_m$.

2.6.6 Kreisel XXX

Nutation, Präzession

2.7 Bewegte Bezugssysteme

Inertialsysteme sind Koordinatensysteme, in denen das erste Newtonsche Axiom gilt.

2.7.1 Galilei-Transformation

Ein Inertialsystem S bewegt sich mit *konstanter* Geschwindigkeit ($v \ll c$) in einem zweiten Inertialsystem S' , dann gilt für $t = 0 : S = S'$

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}_s t$$

2.7.2 Beschleunigte Bewegung

$$\ddot{\vec{r}} = \ddot{\vec{r}}' + \vec{a}_s$$

2.7.3 Lorentz-Transformation

Die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit erfordert andere Transformationsvorschriften. Man geht vom 3D-Raum in eine vierdimensionale Raumzeit mit Koordinaten $x^\alpha = (x, y, z, ct)$ oder $x_\alpha = \eta_{\alpha\nu}x^\nu = (x, y, z, -ct)$ über. Da kein Orts- oder Zeitpunkt ausgezeichnet sein soll, muss es sich um lineare Transformationen $x^{\nu'} = L^\nu_\alpha x^\alpha$ zwischen zwei zueinander bewegten Bezugssystemen Σ, Σ' handeln. Es zeigt sich für beliebige Systeme, dass $x^\alpha x_\alpha = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 = 0$ für einen Lichtstrahl gilt. Soll diese Bedingung erfüllt sein, so muss $L^\nu_\alpha L^\beta_\nu = \delta^\beta_\alpha$ gelten. Entsprechende Transformationen heißen Lorentz-Transformationen. Lorentz-Transformationen sind Verallgemeinerungen von 3D-Drehungen ($D_n^a D_i^n = \delta_i^a$), somit ergibt sich in der 2D-Raumzeit

$$\begin{aligned}x' &= x \cosh \varphi - ct \sinh \varphi \\ct' &= -x \sinh \varphi + ct \cosh \varphi\end{aligned}$$

mit $\tanh \varphi = \frac{v}{c}$ erhält man die bekannte Form

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Aus der Energie-Masse-Äquivalenz $E = mc^2$ erhält man zudem die Beziehung zwischen Energie und Impuls

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 p^2$$

2.7.4 Kreisbewegung

S' dreht sich in S, dann entsteht eine Trägheits- / Zentrifugalkraft (Scheinkraft!)

$$\vec{a}_r = \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) = -\omega^2 r \quad \vec{F}_t = m\vec{r}\omega^2$$

Verallgemeinert kann man den Operator $\frac{d}{dt}$ in einem Inertialsystem durch $\frac{d'}{dt} + \vec{\omega} \times$ im bewegten System ersetzen.

Corioliskraft

$$\vec{F}_C = 2m\vec{v} \times \vec{\omega}$$

bei Bewegung tangential zur Drehung, Foucault-Pendel XXX

2.7.5 kosmische Geschwindigkeiten

Als erste kosmische Geschwindigkeit bezeichnet man die Mindestgeschwindigkeit, die ein tangential zur Planetenoberfläche bewegter Satellit benötigt, um nicht mehr auf den Planeten zurück zu fallen. Man erhält durch Gleichsetzen der Anziehungskraft und Zentrifugalbeschleunigung $mg = mv_1^2/r$ die erste kosmische Geschwindigkeit zu $v_1 = \sqrt{GM/r}$. Für die Erdoberfläche ergeben sich 7,9 km/s.

Die zweite kosmische Geschwindigkeit ist nötig, um das Schwerfeld des Planeten zu verlassen: $mv_2^2/2 = GMm/r$ oder $v_2 = \sqrt{2GM/r}$ mit dem Planetenradius r . Sie beträgt rund 11,2 km/s.

2.8 deformierbare Festkörper

elastische Verformung: reversibler Prozess. Das System geht selbstständig in seinen Ausgangszustand zurück

plastische Verformung: irreversibler Prozess. Das System geht nicht in seinen Ausgangszustand zurück

Hooksches Gesetz: Als Hooksches Gesetz bezeichnet man einen linearen Zusammenhang (lineare Näherung) zwischen einwirkender Kraft und Verformung.

2.8.1 Dehnung und Kompression

Eine Kraft kann in orthogonale und vertikale Anteile zerlegt werden, wobei man die orthogonalen als Normalspannung $\sigma = \frac{dF_m}{dA}$ und die vertikalen als Schub- oder Tangentialspannung $\tau = \frac{dF_z}{dA}$ bezeichnet. In linearer Näherung definiert man das Elastizitätsmodul E

$$\sigma = E \frac{\Delta l}{l}$$

mit der relativen Längenänderung $\epsilon = \frac{\Delta l}{l}$. Die Arbeit zur Dehnung eines Festkörpers ergibt sich zu

$$W = \int \vec{F} d\vec{s} = \frac{1}{2} EV \epsilon^2$$

Querkontraktion

Ein Zylinder (Durchmesser d) wird bei Längsbelastung zusammengezogen, die so genannte Querkontraktion. μ bezeichnet man dabei als Poissonzahl.

$$\frac{\Delta d}{d} = -\mu \frac{\Delta l}{l}$$

Kompression

Volumenänderungsarbeit $dW = -pdV$

2.8.2 Scherung

Die Scherung wird ohne Volumensänderung durchgeführt (vgl. Buch), dabei ist der Scherwinkel γ über das Schub- oder Torsionsmodul proportional zur Auslenkung τ .

$$\gamma = \frac{\tau}{G}$$

2.8.3 Biegung

Die Biegung entspricht einer einseitigen Dehnung. Zur Beschreibung definiert man das Flächenträgheitsmoment $\Theta = \int z^2 dA$, das den Widerstand eines Körpers gegenüber Biegung beschreibt.

2.8.4 Drillung / Torsion

$$dM = r dF_z = 2\pi G r^3 \frac{\phi}{l} dr$$

2.8.5 Inelastische Effekte

Hysteresis-Schleife beschreibt eine zurückbleibende Verformung nach Einwirkung einer Kraft. Beispiele finden sich bei der Knickung (Knicklast) oder der Härte eines Stoffes.

2.9 Reibung

Es wird zwischen innerer (durch Bewegung der inneren Teilchen eines Stoffes) und äußerer (zwischen zwei verschiedenen Stoffen) Reibung unterschieden.

Haftreibung

Die Haftreibung steht der Tangentialkomponente einer einwirkenden Kraft entgegen. Sie kann über den Gleitwinkel an einer schiefen Ebene mit Winkel α veranschaulicht werden.

$$\tan \alpha = \frac{F_H}{F_N}$$

Für Materialien wird ein Haftreibungskoeffizient μ_H mit $F_H \leq \mu_H F_N$ definiert.

Gleitreibung

Nach Überwinden der Haftreibung ($\mu_H > \mu_G$) bremst die Gleitreibung eine Bewegung ab.

Rollreibung

Auch beim Rollen von Gegenständen auf einem Untergrund wirkt eine Reibung. Die Rollreibungskraft wird dabei über $M = \mu_R F_N$ zu $F_R = \mu_R \frac{F_N}{r}$ definiert.

2.10 Hydrostatik

festes Volumen, aber Verformung, leichte Verschiebbarkeit, damit schwache Molekülbindung, kaum kompressibel

2.10.1 Brownsche Molekularbewegung

Atome vollziehen einen "random walk", gleichverteilte Bewegung in alle Richtungen, thermisches Rauschen

$$\langle x(t) \rangle = \frac{kT}{2\pi\eta r} t$$

2.10.2 Druck, Schweredruck und Auftrieb

$p = \frac{dF}{dA}$, hydraulische Presse über Druckerhaltung: $\frac{F_1}{A_1} = \frac{F_2}{A_2}$

hydrostatisches Paradoxon: In allen Gefäßen mit dem selben Füllstand wirkt der selben Höhe der selbe Flüssigkeitsdruck, unabhängig von der Grundfläche oder Gefäßform. Als Konsequenz stellt sich in verbunden Gefäßen immer derselbe Flüssigkeitspegel ein, unabhängig von der Form.

2.10.3 Druckmessung

Manometer, Federmanometer, Elektrische Manometer

2.10.4 Grenzflächeneffekte

Kohäsionskräfte: Kräfte zwischen gleichem Stoff, durch Van der Waalsche Kräfte, viel größer als Gravitation, allerdings sehr kurzreichweitig

Adhäsionskräfte: Kräfte zwischen Molekülen verschiedener Stoffe.

Oberflächenspannung

Die Oberflächenspannung ergibt sich aus der fehlenden Wechselwirkung an Flüssigkeitsgrenzen. Während die Kräfte auf ein Teilchen im Inneren der Flüssigkeit aufheben, ist dies an der Grenzfläche nicht mehr der Fall. $\sigma = \frac{dW}{dA}$, beispielsweise für eine Seifenhaut mit einer variablen Seite (Fläche = $2l\Delta s$) $\sigma = \frac{F\Delta s}{2l\Delta s}$

Kapillarität

Die Kapillaraszension tritt bei Flüssigkeiten auf, die das Material des Kapillargefäßes benetzen, wie beispielsweise Wasser auf Glas. Das Wasser steigt in einem Glasröhrchen auf und bildet eine konkave Oberfläche (Meniskus). Die Wasserhöhe steigt mit fallendem Radius der Röhre. Dieses Verhalten ist auf die Adhäsionskraft zurückzuführen.

Die Kapillardepression tritt auf, wenn die Flüssigkeit das Material der Gefäßoberfläche nicht benetzt. Beispiele dafür sind Quecksilber auf Glas oder Wasser auf Glas mit eingefetteter Oberfläche. Solche Flüssigkeiten haben in einem Röhrchen einen niedrigeren Pegel als in der Umgebung und eine konvexe Oberfläche.

2.11 Aerostatik

ideales Gas: Idealisierung eines realen Gases, Annahmen: Teilchen haben kein Eigenvolumen und keine Wechselwirkung untereinander

Boyle-Mariottesches Gesetz: $pV = const$

Grundgleichung der kinetischen Gastheorie: N Teilchen in gegebenem Volumen $p = \frac{1}{3} \frac{N}{V} m \langle v^2 \rangle$

Barometrische Höhenformel: Aus $dp = -\rho g dh$ folgt $p = p_0 \exp\left(-g \frac{\rho_0}{p_0} h\right)$

2.12 Hydro- und Aerodynamik

2.12.1 Ideale Flüssigkeiten

Quellstärke $\Phi = \int_{OF} \vec{j} \cdot d\vec{A}$, wobei $\Phi > 0$ einer Quelle und $\Phi < 0$ einer Senke entspricht, ein Volumen mit $\Phi = 0$ nennt man quellenfrei

2.12.2 Kontinuitätsgleichung

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

2.12.3 Bernoulli-Gleichung

Der gesamte Druck besteht aus statischem Druck, dynamischen Druck und Schweredruck.

$$p + \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho g h = p_{ges}$$

Ein durchflossenes Rohr hat damit bei größerem Querschnitt eine langsamere Strömungsgeschwindigkeit und höheren Druck, an Engstellen erhöht sich die Fließgeschwindigkeit bei gleichzeitig sinkendem Druck.

2.12.4 Kavitation

falls der statische Druck kleiner wird als der dynamische Druck, verdampft die Flüssigkeit plötzlich ab einer kritischen Geschwindigkeit in kleinen Blasen an der Oberfläche. Dies führt zu Korrosion beispielsweise an Schiffsschrauben.

2.12.5 Strömungsimpuls

Die auf eine Fläche auftreffende Masse führt zu einem Impulsübertrag mit der Druckkraft $F_A = \rho v \frac{dV}{dt} = \rho A v^2$

2.12.6 Laminare Strömungen

Im stationären Fall bildet sich in einem Rohr ein Parabelprofil aus (Hagen-Poisoulli-Gesetz)

$$\dot{V} = \frac{\pi \Delta p}{8\eta l} R^4$$

Bei Kugelumströmung ergibt sich eine Reibungskraft (Stokes Reibungsgesetz)

$$F_R = 4\pi\eta r v$$

2.12.7 Wirbel

definiert über die Wirbelstärke

$$\Gamma = \oint \vec{v} d\vec{r} = \iint \text{rot} \vec{v} d\vec{A}$$

2.12.8 Turbulente Strömungen

Ab einer kritischen Strömungsgeschwindigkeit bilden sich Wirbel, bekanntes Beispiel hinter einer Kugel die Karman-Wirbelstraße.

Widerstand in Strömungen: Man definiert den Widerstandsbeiwert c_w als experimentelle Größe mit $F_w = c_w A \frac{\rho}{2} v^2$.

Querkräfte: Magnus-Effekt beschreibt die Auftriebskraft eines rotierenden Zylinders

3 Schwingungen

Periodische Funktion mit $x(t) = x(t + T)$, wobei T Periodendauer.

3.1 harmonischer Oszillator

3.1.1 freie ungedämpfte Schwingung

$$m\ddot{x} + kx = 0 \quad \text{mit Lösung: } x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t + \phi_0) = B_1 e^{i\omega_0 t} + B_2 e^{-i\omega_0 t}$$

x Auslenkung (Elongation), x_0 Amplitude, ϕ_0 Anfangsphase, $\omega_0^2 = k/m$ Eigenkreisfrequenz

3.1.2 freie gedämpfte Schwingung

$$\ddot{x} + \Gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = 0$$

$$x(t) = \exp\left(-\frac{\Gamma}{2}t\right) \left(-c_1 \exp\left(i\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\Gamma^2}{4}}\right) + c_2 \exp\left(-i\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\Gamma^2}{4}}\right) \right) \quad \text{mit } \delta^2 = \Gamma^2/4$$

Γ Dämpfungs konstante oder $\tau = 1/\Gamma$ Zeitkonstante der Dämpfung, Güte einer Schwingung $Q = \frac{\omega_0}{\Gamma} = \omega_0 \tau$

Schwingfall: $\delta \ll \omega_0$ oder $Q > \frac{1}{2}$

Kriechfall: $\delta > \omega_0$ oder $Q < \frac{1}{2}$

Aperiodischer Grenzfall: $\delta = \omega_0$ oder $Q = \frac{1}{2}$

3.1.3 erzwungene Schwingung

$$\ddot{x} + \Gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{F_0}{m} \cos \omega t$$

3.1.4 Beispiele

Federschwinger mit Bewegungsgleichung $m\ddot{x} = F = -kx$ ergibt sich eine harmonische Schwingung.

mathematisches Pendel: Das mathematische Pendel ist nur in linearer Näherung ein harmonischer Schwinger. Für die tangentialen rücktreibenden Kräfte ergibt sich $F_t = m\ddot{s} = -mg \sin \phi$ mit $s = l\phi$ und einer linearen Näherung für kleine Winkel $\sin \phi \approx \phi$ ergibt sich $\ddot{\phi} + \frac{g}{l}\phi = 0$

physikalisches Pendel: Beim physikalischen Pendel handelt es sich um einen starren Körper, der um eine Achse drehbar gelagert ist und schwingen kann. Man betrachtet das Drehmoment $M = -mga \sin \phi = I_A \ddot{\phi}$ und erhält auch hier nur unter Näherung einen harmonischen Oszillator.

Drehschwinger: Ein Drehschwinger wird mit einer tangentialen Kraft zurückgetrieben. Damit ergibt sich für das Drehmoment $M = -k\phi = I_A \ddot{\phi}$ ein harmonischer Schwinger.

3.1.5 gekoppelte Schwingungen

Ein einfaches Beispiel für gekoppelte Schwingungen sind zwei gleiche Pendel, die durch eine Feder gekoppelt werden. Es ergeben sich drei Möglichkeiten der Auslenkung.

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 + \omega_0^2 x_1 &= -k(x_1 - x_2) \\ \ddot{x}_2 + \omega_0^2 x_2 &= -k(x_2 - x_1)\end{aligned}$$

Zur Lösung geht man in Normalkoordinaten $q_1 = x_1 + x_2$ und $q_2 = x_1 - x_2$ über und kann somit die Differentialgleichungen entkoppeln. Man nennt diese Schwingungen auch Normalschwingungen, Fundamentalschwingungen der Eigenmoden.

3.1.6 nichtlineare Schwingungen

keine harmonische Lösungen, daher Fourier-Analyse notwendig

3.2 harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik

als harmonischen Oszillator bezeichnet man ein System in einem Parabelpotential $V = \frac{1}{2}Dx^2$, das somit die stationäre Schrödinger-Gleichung $\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + V\psi = E\psi$ erfüllt. Eine Lösung erhält man über die Hermitschen Polynome

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2})$$

zu den Energieeigenwerten

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

Ein alternativer Weg ergibt sich über die quantenmechanischen Absteige- \hat{a} und Aufsteigeoperatoren \hat{a}^+ mit $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$

$$\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a} = \left(\alpha \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{2\hbar\alpha}\right) \left(\alpha \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{2\hbar\alpha}\right) = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 - \frac{1}{2}$$

womit man nach Vergleich zum obigen Eigenwert des Hamiltonoperators kommt.

3.3 Wellen

Eine Welle beschreibt einen räumlich und zeitlich periodischen Energietransport.

Transversal- / Torsionswellen: Die schwingenden Teilchen werden senkrecht zu ihrer Ausbreitungsrichtung ausgelegt.

Longitudinalwellen: Die schwingenden Teilchen werden in Ausbreitungsrichtung ausgelegt.

3.3.1 Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

mit der allgemeinen Lösung

$$u = f(x - ct) + g(x + ct)$$

Ebene Welle: Orte gleicher Phase liegen auf einer Ebene $\omega t = \vec{k}\vec{r} = \text{const}$

Kugelwelle: Orte gleicher Phase liegen auf Kugelschalen $\omega t = kr = \text{const}$

Energietransport: Die gemittelte kinetische Energie $\overline{W_{kin}}$ und potentielle Energie $\overline{W_{pot}}$ sind (in vielen Fällen) gleich, womit sich eine Gesamtenergie von $\overline{W_{ges}} = \frac{1}{2}m\omega_0^2 u_0^2$ ergibt. Bezogen auf ein Volumen ergibt sich die Energiedichte $\overline{w_{ges}} = \frac{1}{2}\rho\omega_0^2 u_0^2$ und die Energiestromdichte $S = w_{ges}v_{ph}$ oder gemittelt die Intensität $I = \overline{S} = \overline{w_{ges}}v_{ph}$

3.3.2 Wellenausbreitung

Huygensches Prinzip: Jeder Punkt einer Wellenfront ist Ausgangspunkt einer neuen elementaren Kugelwelle. (Ergänzung durch Fresnel:) Die Überlagerung aller Elementarwellen ergibt die neue Wellenfront.

3.3.3 Interferenz

Superpositionsprinzip: Bei linearem Verhalten der ergeben sich lineare Differentialgleichungen, die sich addieren lassen.

Konstruktive Interferenz: Zwei Wellen unterscheiden sich an einem Ort um Phase $\Delta\varphi = 2m\pi$

Destruktive Interferenz: Zwei Wellen unterscheiden sich an einem Ort um Phase $\Delta\varphi = (2m + 1)\pi$

Wellenpaket: unendliche Anzahl harmonischer, ebener Wellen unterschiedlicher Frequenz ergeben ein Wellenpaket

3.3.4 Reflexion, Brechung

$$\frac{\sin \alpha_2}{\sin \alpha_1} = \frac{v_{ph2}}{v_{ph1}} = n_{21}$$

Fermatsches Prinzip: Eine Welle läuft zwischen zwei Punkten immer auf dem Weg extremaler Zeit (minimale oder maximale)

3.3.5 Beugung

Fresnel-Beugung im Nahfeld: XXX

Fraunhofer-Beugung im Fernfeld: Durch Interferenz ergibt sich eine Intensität $I = \frac{\sin^2(x)}{x^2} = \text{sinc}^2(x)$

3.3.6 Doppler-Effekt

Durch die Bewegung von Empfänger oder Sender ändert sich die Wellenlänge (und damit Frequenz) einer Welle.

$$f_{Beob} = f_{Quel} \frac{v_{ph} \pm v_{Beob}}{v_{ph} - v_{Quel}}$$

3.3.7 Stehende Wellen

Reflexion am dünnen Medium (loses Ende): kein Phasensprung, zeitlich unveränderte Wellenfunktion $u = u_0 \cos(\omega t - kx) + u_0 \cos(\omega t + kx) = 2u_0 \cos(\omega t) \cos(kx)$

Reflexion am dichten Medium (festes Ende): Phasensprung um π , stehende Welle $u = u_0 \cos(\omega t - kx) + u_0 \cos(\omega t + kx + \pi) = 2u_0 \sin(\omega t) \sin(kx)$

4 Elektrizität und Magnetismus

4.1 Elektrostatik

4.1.1 Ladung, Coulomb-Gesetz

Die elektrische Ladung ist eine elementare Eigenschaft von Atombausteinen und somit eine Materialeigenschaft. Zwischen zwei Ladungen wirkt die Coulomb-Kraft

$$\mathbf{F}_C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

Milikan zeigte in einem Versuch, dass eine Elementarladung existiert und alle Ladungen aus Vielfache dieser elementaren Ladung bestehen.

4.1.2 Elektrostatik im Vakuum

Elektrische Feldstärke: Von der lokalen Kraft \vec{F} auf eine Ladung q kann zu einer Charakterisierung jedes einzelnen Raumpunktes übergegangen werden, das elektrische Feld $\vec{E} = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\vec{F}}{q}$. Das elektrische Feld wird dabei durch Addition der einzelnen Ladungen aufgebaut:

$$\vec{E} = \sum_i \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \rho(\vec{r}') \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV'$$

Elektrischer Fluss: $\Phi_E = \iint_A \vec{E} \cdot d\vec{A}$ liefert Aussage über die Feldlinien und ihre Quellen ($\Phi_E > 0$) beziehungsweise Senken ($\Phi_E < 0$)

Elektrisches Potential: Aus dem skalaren Potential φ kann das elektrische Feld $\vec{E} = -\text{grad } \varphi(\vec{r})$ bestimmt werden.

Elektrischer Dipol: Eine Ladungsverteilung kann häufig in erster Näherung durch einen Dipol beschrieben werden. Mit dem Dipolmoment $\vec{p} = q\vec{l}$ kann die Wechselwirkung des Dipols beispielsweise im homogenen Feld (resultierendes Drehmoment $\vec{M} = \vec{l} \times \vec{F} = \vec{p} \times \vec{E}$ bis Dipol ausgerichtet) beschrieben werden.

4.1.3 Leiter im elektrischen Feld

Im statischen Fall ist das Innere eines Leiters immer feldfrei, da die resultierende Kraft zu einem Ladungsaustausch führt. Dies gilt auch für Leiter mit einem Hohlraum (Faraday-Käfig). Über die Flächenladung $\sigma = Q/A$ zeigt sich, dass es zu Spitzenentladungen an kleinen Ecken kommt.

Als Influenz bezeichnet man die Ladungsverschiebung in Leitern durch ein elektrisches Feld. Dadurch wird beispielsweise eine Ladungstrennung im Plattenkondensator bei angelegtem externem Feld möglich. Man definiert eine Kapazität $C=Q/U$.

4.1.4 Dielektrika / Isolatoren

Dielektrika im Inneren nicht feldfrei, keine frei beweglichen Ladungsträger. Durch Ladungsverschiebung (induzierte Dipolmomente) oder Orientierungspolarisation (z.B. Wassermolekül) entsteht elektrische Polarisation. XXX

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_r \epsilon_0 \vec{E}$$

E und D an Grenzflächen

An Grenzflächen zwischen ϵ_1 und ϵ_2 sind die tangentiale E- und normale D-Feldkomponente stetig, die normale E- und tangentiale D-Feldkomponente unstetig. Falls keine externen Ladungen vorhanden sind, gilt:

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho_{ext} \Rightarrow \int_{(V)} \mathbf{D} \, d\mathbf{f} = Q_{ext} \doteq 0 \Rightarrow D_{n1} - D_{n2} = 0$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0 \Rightarrow \int_{(F)} \mathbf{E} \, d\mathbf{r} = 0 \Rightarrow E_{t1} - E_{t2} = 0$$

$$\begin{array}{ll} E_{t1} = E_{t2} & \text{und} \quad \epsilon_1 E_{n1} = \epsilon_2 E_{n2} \\ \frac{D_{t1}}{\epsilon_1} = \frac{D_{t2}}{\epsilon_2} & \text{und} \quad D_{n1} = D_{n2} \end{array}$$

4.1.5 Energie des elektrischen Feldes

$$w_{el} = \frac{1}{2} \vec{D} \vec{E}$$

4.2 Stationäre Ströme

Gleichströme bezeichnet man als stationäre Ströme

Stromstärke: $I = \dot{Q} = \iint_A \vec{j} \, d\vec{A}$

Elektrischer Widerstand: $U = RI$, ohmsches Gesetz $U \propto I$

Kirchhoffsche-Gesetze: Knotensatz $\sum I_i = 0$, Maschensatz $\sum U_i = 0$

4.3 Magnetisches Feld

Permanentmagnete: Basieren auf elementaren magnetischen Dipolen, Magnetisierung durch Ausrichtung der elementaren Magnete

Magnetfeld stationärer Ströme: Jeder Strom erzeugt ein Magnetfeld

Magnetische Feldstärke \vec{H} , Durchflutungsgesetz $\oint \vec{H} d\vec{r} = H 2\pi r = I$

Biot-Savartsches Gesetz: $d\vec{H} = \frac{I}{4\pi} \frac{d\vec{s} \times \vec{r}}{r^3}$

Magnetischer Fluß: $\Phi = \iint_A \vec{B} d\vec{A}$

Lorentzkraft: $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

4.4 Elektromagnetische Induktion

$$U_{ind} = -N \frac{d\Phi}{dt} = -N \frac{d}{dt} \iint \vec{B} d\vec{A}$$

Lenzsche Regel: Induzierte Ströme wirken der sie erzeugenden Zustandsänderung entgegen.

Energie des magnetischen Feldes: $w_{mag} = \frac{1}{2} \vec{H} \vec{B}$

4.5 Materie im Magnetfeld

XXX

4.6 Maxwellsche Gleichungen

Grundgleichungen der Elektrodynamik mit den Abkürzungen $\mathbf{D} = (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) \approx \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}$ und $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{B} + \mathbf{M}) \approx \frac{1}{\mu_0 \mu} \mathbf{B}$ bei gegebenen Materialgleichungen $\mathbf{P}(\mathbf{E})$ und $\mathbf{M}(\mathbf{H})$

Integrale Schreibweise:

$$\begin{aligned} \iint \vec{D} d\vec{A} &= Q \\ \iint \vec{B} d\vec{A} &= 0 \\ \oint \vec{E} d\vec{r} &= -\frac{d}{dt} \iint \vec{B} d\vec{A} \\ \oint \vec{H} d\vec{r} &= I + \frac{d}{dt} \iint \vec{D} d\vec{A} \end{aligned}$$

Differentielle Form:

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \vec{D} &= \rho \\ \operatorname{div} \vec{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \operatorname{rot} \vec{H} &= \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}\end{aligned}$$

4.7 Wechselstrom

Generator: Beispielsweise über drehende Leiterschleife im konstanten Magnetfeld $U_{ind} = -\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{d}{dt}(BA \cos \alpha)$

Arbeit und Leistung: Mittelung über Zeitintervall notwendig führt für Sinus-förmigen Wechselstrom auf $I_{eff} = \frac{1}{\sqrt{2}}I_0$

Komplexe Widerstände: XXX

4.8 Elektromagnetische Wellen XXX

4.9 Ladungstransportprozesse

Gasentladung, Glimmentladung, Bogenentladung

5 Optik

5.1 optisches Strahlungsfeld

Thermische Strahler: nach dem Wienschen Verschiebungsgesetz $\lambda_{max} T = 2898 \mu m K$

5.2 Geometrische Optik

5.2.1 Reflexion, Brechung

$$n_1 \sin \alpha_1 = n_2 \sin \alpha_2$$

Fermatsches Prinzip: Ein Lichtstrahl nimmt zwischen 2 Punkten den Weg, für den er kürzere Zeit braucht als auf jedem Nachbarweg. $\int n(s) ds = \text{Extremal}$

XXX

5.3 Wellenoptik

5.3.1 Kohärenz

Die Kohärenz beschreibt die Fähigkeit von Licht zur Interferenz, kohärente Wellen haben eine konstante Phasendifferenz während der Beobachtungszeit.

5.3.2 Interferenz

Zweistrahl-Interferenz: Michelson (Strahlteilung in Arme), Young (Doppelspalt)

Vielstrahl-Interferenz: Planparallele Platte (Fabry-Perot), Keilinterferenz

5.3.3 Beugung XXX

5.3.4 Polarisation

Da elektromagnetische Wellen Transversalwellen sind, können sie räumlich ausgerichtet werden.

Schwingungsebene: nach Definition Ebene mit \vec{k} und \vec{E}

Polarisationsebene: nach Definition Ebene mit \vec{k} und \vec{H}

Brewster-Gesetz: Unter einem Winkel $\tan \alpha_P = \frac{n_2}{n_1}$ ist das reflektierte Licht linear und senkrecht zur Einfallsebene polarisiert, da die parallele Komponente in diese Richtung (senkrecht zum Strahl im Medium) nicht abstrahlen kann.

Doppelbrechung ermöglicht die beiden orthogonalen Komponenten räumlich zu trennen. Dabei wird die Anisotropie eines Kristalls ausgenutzt, die Brechzahl kann nicht mehr als Skalar aufgefasst werden, sondern muss als Tensor verallgemeinert werden. Es entsteht ein ordentlicher Strahl, der dem bekannten Brechungsgesetz folgt und ein außerordentlicher Strahl, der eine andere Brechung erfährt.

5.3.5 Holographie

5.3.6 Dispersion

Die Dispersion beschreibt die Wellenlängen-Abhängigkeit von Materialien und basiert auf der nicht-instantanen Reaktion eines realen Mediums. Im Drude-Modell (gedämpfter harmonischer Oszillator) ergeben sich Resonanzstellen.

6 Thermodynamik

thermische Zustandsgrößen: Druck, Volumen, Temperatur ... direkt messbar

kalorische Zustandsgrößen: Innere Energie ... abgeleitete Größen

6.1 Thermodynamische Systeme

offen: Energie, Arbeit und Masse können ausgetauscht werden

geschlossen: Energie und Wärme können ausgetauscht werden, Masse bleibt konstant

abgeschlossen: keine Wechselwirkung mit der Umgebung

adiabatisch: nur Arbeit kann mit der Umgebung ausgetauscht werden

6.2 Kinetische Gastheorie

Die kinetische Gastheorie basiert auf einer mechanischen Interpretation der phänomenologischen Zustandsgrößen.

Ideales Gas: Im Modell des idealen Gases hat jedes Teilchen kein Eigenvolumen (Massenpunkte) und wechselwirkt nur über elastische Stöße mit anderen Teilchen.
 $pV = nkT$

Geschwindigkeitsverteilung: Die maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung gibt die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Geschwindigkeitsintervall $v, v + dv$ anzutreffen.

$$f(v) dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{mv^2}{2kT} \right) dv$$

6.3 Thermodynamische Hauptsätze

0. Hauptsatz: Im thermodynamischen Gleichgewicht haben alle Komponenten eines Systems die selbe Temperatur.

1. Hauptsatz (Energiesatz): Jedes System besitzt eine innere Energie U (=extensive Zustandsgröße). Diese kann sich nur durch den Transport von Energie in Form von Arbeit W und/oder Wärme Q über die Grenze des Systems ändern. $dU = \delta Q + \delta W$

2. Hauptsatz: Es gibt keine Zustandsänderung, deren einziges Ergebnis die Übertragung von Wärme von einem Körper niedriger auf einen Körper höherer Temperatur ist.
 $dS = \frac{\delta Q}{T} + \frac{\delta W_{diss}}{T}$

3. Hauptsatz: Es ist nicht möglich, ein System bis zum absoluten Nullpunkt ($T = 0K$) abzukühlen.

6.4 Zustandsänderung idealer Gase

Mit $dW = -Fdx = -pAdx = -pdV$ und damit $dU = dQ - pdV$

isotherm: Aus $T = const$ folgt $U = const$ und damit $dQ = pdV$

isochor: Mit $V = const$ folgt $dQ = mc_v dT = dU$

isobar: $p = const$

adiabatisch: Vereinfachung mit $dQ = 0$

polytrop: $pV^\nu = const$

7 Atome und Moleküle

7.1 Elementare Quantenphysik

7.1.1 Photonen

Aus Hohlraumstrahlung, Photoeffekt und Comptoneffekt ergibt sich, dass jedes elektromagnetische Feld der Frequenz ν aus Energiequanten $E_{ph} = h\nu = \hbar\omega$ besteht, die man Photonen nennt. Sie haben eine Masse über die Energie-Masse-Äquivalenz $E = m_{ph}c^2$ (keine Ruhemasse!) und Impuls $p_{ph} = m_{ph}c = \hbar k = E_{ph}/c$. Jedes an einem freien Atom absorbierte Photon ändert den Atomdrehimpuls um \hbar (Photonen-Spin $\vec{s}_{ph} = \pm \hbar \vec{k}/|\vec{k}|$)

7.1.2 Materiewellen

Auch Elektronen zeigen Beugungseffekte. Damit lassen sie sich als Welle betrachten: $\vec{p} = \hbar \vec{k} = \frac{h}{\lambda}$ und $\omega = \frac{E}{\hbar}$

7.1.3 Wellenfunktion, Wellenpaket, Unschärferelation

$$\Psi(x, t) = A \exp(i(kx - \omega t)) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right)$$

Die Phasengeschwindigkeit beschreibt die Bewegung des Maximums von Ψ (oder $(kx - \omega t) = 0$), womit sie sich zu $\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = v_{phase}$ ergibt. Die Dispersion ergibt sich zu $\frac{dv_{phase}}{d\omega} = \frac{1}{k}$. Eine Welle ist nicht geeignet, in Teilchen zu beschreiben, da $v_{phase} = \frac{1}{2}v_{Teilchen}$. Es müssen Wellenpakete mit Wellen unterschiedlicher Frequenz zusammengestellt werden (Fourier-Analyse).

Statistische Deutung der Materiewelle durch Max Born ergibt Unschärfe-Relation: Wahrscheinlichkeit $W(x, t) dx \propto |\Psi(x, t)|^2 dx$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar$$

7.1.4 Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

7.1.5 Messungen, Messwerte

In der Quantenmechanik können Messergebnisse nicht vorhergesagt werden, es können nur Wahrscheinlichkeitsaussagen getroffen werden. Den Mittelwert bezeichnet man als Erwartungswert beispielsweise für den Operator A

$$\bar{A} = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

Wenn sich bei der Anwendung von \hat{A} die Wellenfunktion nur um einen konstanten Faktor unterscheidet $\hat{A}\psi = A\psi$, dann ist ψ eine Eigenfunktion zu \hat{A} mit dem Eigenwert A .

7.1.6 Operatoren

Zu jeder Messgröße gehört in der Quantenmechanik ein Operator.

| Klassische Messgröße | Operator |
|---|--|
| Ort x | $\hat{x} = x$ |
| Impuls p | $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ |
| Energie E | $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}$ |
| Drehimpuls \vec{l} | $\vec{\hat{l}} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$ |
| z -Komponenten des Drehimpulses \vec{l}_z | $\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ |

Es gibt Messungen, die nicht gleichzeitig beliebig exakt durchgeführt werden können. Ein notwendiges Kriterium für die gleichzeitige Messbarkeit zweier Größen ist die Vertauschbarkeit der zugehörigen Operatoren $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_1 \hat{A}_2 - \hat{A}_2 \hat{A}_1 = 0$

| Operator 1 | Operator 2 | Vertauschungsrelation |
|--------------------------------------|------------------------------------|---|
| Impuls \hat{p} | Ort \hat{x} | $\left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, x \right] = \frac{\hbar}{i}$ |
| Impuls \hat{p} | Potential $\hat{V}(x)$ | $\left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \hat{V}(x) \right] = \frac{\hbar}{i} \frac{dV}{dx}$ |
| Impuls \hat{p} | kinetische Energie \hat{E}_{kin} | $\left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} \right] = 0$ |
| Drehimpulskomponente \hat{l}_i | \hat{l}_j | $[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \hat{l}_k$ |
| Quadrat des Drehimpulses \hat{l}^2 | j -te Komponente \hat{l}_j | $[\hat{l}^2, \hat{l}_j] = 0$ |

7.1.7 Harmonischer Oszillator

Als harmonischen Oszillator bezeichnet man ein Teilchen im parabelförmigen Potential $E_{pot} = kx^2/2$. Über die Bewegungsgleichung $m_0 \ddot{x} = -kx$ zeigt sich, dass das Teilchen harmonische Schwingungen mit der Frequenz $\omega^2 = k/m_0$ ausführt. Überführt in die Quantenmechanik ergibt sich die folgende Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0}{2} \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

XXX

Durch Reihenentwicklung der Hermitschen Polynome und Koeffizientenvergleich erhält man folgenden Zusammenhang zwischen den Quantenzahlen n und den Energiewerten $E(n)$

$$E(n) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

7.2 Das Wasserstoff-Atom

Spektroskopie: Emission / Absorption von Licht nur bei speziellen diskreten Wellenlängen, Serienformel $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$

Rutherford Atommodell: Aus Streuexperimenten ergibt sich Atomdurchmesser von $10^{-10}m$, wobei es einen undurchlässigen, positiv geladenen (durch α -Streuung) Kern mit $10^{-14}m$ gibt.

Es herrscht ein dynamisches Gleichgewicht zwischen Coulomb-Kraft und Zentrifugalkraft: $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_0 r \omega^2$

Nicht erklärbar sind die diskreten Energiewerte (Klassisch: beliebiger Radius erlaubt) und der klassisch auftretende Energieverlust einer beschleunigten Ladung (Frequenz $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$)

Bohr-Atommodell: Diese Diskrepanz versuchte Bohr durch drei Postulate zu umgehen: Nur Bahnen mit beobachteten Energiewerten sind zulässig (diskrete Bahnen), auf diesen Bahnen bewegen sich die Elektronen strahlungsfrei (beim Bahnübergang wird Photon mit $\hbar\omega = E_{n_2} - E_{n_1}$ emittiert oder absorbiert), mit wachsendem Bahnradius gehen die Gesetze der quantisierten in die der klassischen Physik über (Rydberg-Konstante kann bestimmt werden $R_\infty = m_0 e^4 / 8\epsilon_0^2 h^3 c$).

Radius und Drehimpuls: Aus den diskreten Bahnradien $r_n \propto n^2$ und den diskreten Kreisfrequenzen $\omega_n \propto 1/n^3$ ergibt sich ein gequantelter Drehimpuls $|\vec{l}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = m_0 r_n^2 \omega_n = n\hbar$

Mitbewegung des Kerns: Die Mitbewegung des Kerns führt zu einem Unterschied zwischen der theoretisch berechneten Größe R_∞ und der gemessenen Rydberg-Konstante R_H . Die Elektronenmasse muss daher gegen die reduzierte Masse $\mu = m_0 M / m_0 + M$ ersetzt werden.

Sommerfelds Erweiterung: Bei hoher spektraler Auslösung zeigt sich, dass die Linien des Wasserstoff aufgespalten sind. Um dies zu erklären führte Sommerfeld Ellipsenbahnen ein. Die große Halbachse wird dabei durch n bestimmt, die kleine durch eine zweite Quantenzahl k . Diese Nebenquantenzahl wird in der Quantentheorie zur Bahndrehimpulszahl l mit $l = k - 1$, so dass sich der Bahndrehimpuls zu $|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ ändert. Die spektrale Aufspaltung erfolgt durch den vernachlässigten Effekt der relativistischen Massenänderung (Beschleunigung in Kernnähe).

Einschränkungen: Die Bohr-Sommerfeld-Theorie beschreibt Energiezustände und Übergangsfrequenzen, aber keine Übergangswahrscheinlichkeiten oder den zeitlichen Verlauf. Es kann nur auf das freie Wasserstoff-Atom und Wasserstoff-ähnliche Systeme (Kern und ein einzelnes Elektron) mit brauchbaren Ergebnissen angewendet werden.

7.2.1 QM-Behandlung des Wasserstoff

Die Gesamtenergie, z-Komponente und Betragsquadrat des Drehimpulses sind gleichzeitig scharf messbar (7.1.6). Besonders interessant sind daher Funktionen $\psi(r)$, die die

Schrödinger-Gleichung lösen und gleichzeitig Eigenfunktionen zu den Operatoren \hat{H} , \hat{l}_z und \hat{l}^2 sind.

Mit einem ruhenden Kern und zentralsymmetrischem Potential $V(r)$ (hier Coulomb-Potential) ergibt sich die Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

und nach Übergang zu Polarkoordinaten ergibt der Operator der kinetischen Energie

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2m_0 r^2} \hat{l}^2$$

mit dem Operator für das Drehimpulsquadrat

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Die Wellenfunktion kann in Polarkoordinaten separiert werden und die Lösungen einzeln bestimmt werden.

$$\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot F(\theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

Winkelanteil: Für $\Phi(\varphi)$ erhält man

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Für die θ -Abhängigkeit ergeben sich die Legendre-Polynome $P_l^m(\cos \theta)$, die zusammengefasst mit $\Phi_m(\varphi)$ zu den Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \varphi)$ führen. Die Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen zu \hat{l}^2 mit den Eigenwerten $l(l+1)\hbar^2$, wobei man l als Drehimpulsquantenzahl bezeichnet.

Radialteil: Mit einem Coulomb-Potential $V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon r$ XXX

Ergebnis: Die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms lässt sich in der Form

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = e^{im\varphi} \cdot P_l^m(\cos \theta) \cdot R_{n,l}(r)$$

mit der Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$, der Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 1, 2, \dots, n-1$ (auch mit $s, p, d, f \dots$ bezeichnet) und der magnetische Quantenzahl $m_l = -l, -l+1 \dots l$ schreiben. Die Wellenfunktionen sind mit n, l, m charakterisiert, die zugehörigen Energien E_n hängen allerdings nur von der Hauptquantenzahl ab. Die Zustände sind entartet, zu jeder Hauptquantenzahl gibt es $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ verschiedene Zustände.

7.3 Alkaliatome

Alkaliatome besitzen ein schwach gebundenes äußeres Elektron (Valenzelektron) und sonst abgeschlossene Schalen (Edelgas-Konfiguration der $Z - 1$ inneren Elektronen). Es ergibt sich eine Wasserstoff-ähnliche Konfiguration. Durch die Einführung eines effektiven Coulomb-Potentials kann die Abschirmung der Kernladung Ze durch die $Z - 1$ inneren Elektronen beschrieben werden.

Da die Abschirmung vom Abstand zum Kern abhängt, muss eine effektive Hauptquantenzahl eingeführt werden $n_{eff} = n - \Delta(n, l)$, wobei die Korrektur als Quantendefekt bezeichnet wird und sehr stark von der Drehimpulsquantenzahl abhängt.

Ein Energieterm wird mit

$$n^{2s+1}l_j$$

bezeichnet, wobei n die Hauptquantenzahl, $2s + 1$ die Multiplizität mit $s = 1/2$, l die Drehimpulsquantenzahl und j die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ bezeichnet. Kleine Buchstaben beschreiben Terme einzelner Elektronen, große wenn mehrere Elektronen des Atoms erfasst sind. XXX

7.4 Feinstruktur (Bahn- und Spinnagnetismus)

Bisher wurden die magnetischen Eigenschaften der Atome vernachlässigt, allerdings führen diese zu beobachtbaren Veränderungen in den Spektren (Doppel-Linien / Doublets). Die so genannte Feinstruktur lässt sich durch diese Erweiterung erklären.

7.4.1 Magnetische Momente, Elektronenspin

Ein Elektron ($q = -e$), das sich auf einer Kreisbahn mit der Geschwindigkeit $v = \omega r$ bewegt, entspricht einem Kreisstrom $I = q/T = -e\omega/2\pi$. Das magnetische Dipolmoment einer Leiterschleife ist $\mu = I \cdot \mathbf{A}$, womit sich für das Elektron $\mu_l = e\omega r^2/2$ bzw. $\mu_l = -\frac{e}{2m}\mathbf{l}$ ergibt. Damit gehört zum Bahndrehimpuls \mathbf{l} des Elektrons ein magnetisches Moment $\mu_l = -\frac{e}{2m}\mathbf{l}$, wobei man $\mu_B = \frac{e}{2m}$ als Bohrsches Magneton bezeichnet. Als Betrag des Magnetischen Momentes erhält man $\mu_l = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$ mit der Bahndrehimpulsquantenzahl l .

Eine analoge Betrachtung für das Elektron liefert für den Elektronenspin $|\mathbf{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ das magnetische Moment $\mu_s = -g_s\mu_B\mathbf{s}$, wobei $g_s \approx 2,0023$. Der Spin des Elektrons folgt zwingend aus einer relativistischen Quantentheorie. Stern und Gerlach konnten zeigen, dass der Spin in einem äußeren Magnetfeld nur zwei Orientierungen einnehmen kann (parallel oder antiparallel zum Feld). In jener Richtung (z) ist die Spinkomponente $s_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$. Mit dem Spin wird auch das magnetische Moment $\mu_{s,z} = -g_s m_s \mu_B$ ausgerichtet und präzediert um die Feldrichtung, wobei die z -Komponente konstant bleibt.

7.4.2 Stern Gerlach Versuch

Ein Strahl von Atomen durchfliegt ein stark inhomogenes Magnetfeld. Auf die magnetischen Momente der Teilchen wirkt daher eine Kraft $F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$ (aus potentieller Energie $V_{mag} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$). Klassisch ist jede Einstellung des magnetischen Moments erlaubt, man findet im Versuch allerdings nur zwei scharfe Strahlen. Folgende Schlussfolgerungen sind möglich:

- Es existiert eine Richtungsquantelung.
- Eine Messung der magnetischen Moment ist über den Abstand der Teilstrahlen möglich. (Bei bekanntem Feldgradienten)
- Die mechanischen und magnetischen Momente innerer Elektronen heben sich auf.
- Das s-Elektron hat $\vec{l} = 0$ und $\vec{\mu}_l = 0$, man misst nur den Spinnmagnetismus.

7.4.3 Spin-Bahn-Aufspaltung im Bohrschen Atommodell

Die Bahnbewegung des Elektrons um den Kern erzeugt am Ort des Elektrons ein Magnetfeld, mit dem das magnetische Moment des Elektrons in Wechselwirkung tritt. Aus dem Biot-Savartschen Gesetz ergibt sich

$$\mathbf{B}_l = \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3 m_0} \mathbf{l} \quad \text{mit} \quad \mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m_0 \mathbf{r} \times \mathbf{v}$$

In diesem Magnetfeld hat der Spin zwei Einstellmöglichkeiten und so erhält man für die Wechselwirkungsenergie zwischen Spin und Magnetfeld

$$V_{l,s} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_l = \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m^2 r^3} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = \frac{a}{\hbar^2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = \frac{a}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

mit der Umformung des Skalarproduktes $2\mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = |\mathbf{j}|^2 - |\mathbf{l}|^2 - |\mathbf{s}|^2 = j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)$. Die Feinstrukturaufspaltung kann als Zeeman-Aufspaltung mit selbst erzeugtem Magnetfeld aufgefasst werden. Jedes Niveau spaltet in zwei Unterniveaus auf, für s-Terme gibt es keine Aufspaltung ($s = 0$ und damit kein Magnetfeld).

7.4.4 Feinstruktur beim Wasserstoffatom

Die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms ist bekannt, daher kann man die Feinstruktur sehr genau berechnen. Zwei Terme führen zur Feinstruktur und haben eine ähnliche Größenordnung

- relativistische Massenzunahme des Elektrons bei seiner Bewegung um den Kern E_{rel}
- Spin-Bahn-Kopplung von Bahndrehimpuls und Elektronenspin

$$E_{n,l,s} = E_n + E_{rel} + E_{l,s}$$

Die Feinstruktur-Korrektur hat eine Größenordnung α^2 , mit der Feinstrukturkonstante $\alpha \approx 1/137$. Die Vollständige Rechnung (durchgeführt von Dirac) ergibt, dass die Feinstruktur-Korrektur nur von j und nicht von l abhängt, alle Terme mit gleichen Quantenzahlen n und j haben damit die gleiche Energie.

7.4.5 Lamb-Verschiebung

Lamb und Rutherford beobachteten eine weitere Aufspaltung bei Termen mit gleichem j beim Wasserstoff. Die nach der Quantentheorie auftretenden Nullpunktsschwankungen des elektromagnetischen Feldes greifen statistisch am Elektron an und bewirken durch Photonenrückstoß bei Emission und Absorption eine Zitterbewegung.

7.4.6 Schalenmodell XXX

7.5 Atome im Magnetfeld

7.5.1 Elektronenspin-Resonanz

Als Elektronenspin-Resonanz bezeichnet man Übergänge zwischen den durch die verschiedenen Werte der magnetischen Quantenzahl m gekennzeichneten Energiezustände der Elektronen im GHz-/Mikrowellenbereich. Das magnetische Moment hat in Vorzugsrichtung $(\mu_s)_z = \pm \frac{1}{2} g_s \mu_B$. Damit unterscheidet sich die potentielle Energie der beiden Orientierungen um $\Delta E = g_s \mu_B B_0$. Mit einem senkrecht dazu eingestrahlt magnetischen Wechselfeld $\vec{B}_1 = \vec{B} \sin \omega t$ können Übergänge zwischen den beiden Energieniveaus induziert werden, wenn $\Delta E = \hbar \omega = g_s \mu_B B_0$ mit Auswahlregel $\Delta m_s = \pm 1$. Man kann die Bedingung auch so verstehen, dass ω gleich der Larmorfrequenz $\omega_L = \gamma B_0$ sein muss. XXX

7.5.2 Normaler Zeeman-Effekt

Beim normalen Zeeman-Effekt handelt es sich um die Aufspaltung von Zuständen mit reinem Bahnmagnetismus ($s = 0$). Bei transversaler Beobachtung findet man die unverschobene Spektrallinie sowie zwei symmetrisch aufgespaltene Linien mit linearer Polarisation. Bei longitudinaler Beobachtung sieht man nur zwei verschobene, zirkular polarisierte Komponenten.

Klassische Erklärung: Ein umlaufendes Elektron wird durch drei Ersatz-Oszillationen ersetzt, wobei eins (1) linear zur Richtung von \vec{B}_0 und (2,3) entgegengesetzt zirkular zueinander und senkrecht zur Richtung von \vec{B}_0 polarisiert sind. Ohne Feld \vec{B}_0 ist die Frequenz alle drei Ersatz-Elektronen gleich, bei eingeschaltetem \vec{B}_0 wirken unterschiedliche Kräfte: (1) erfährt keine zusätzliche Kraft und bleibt unverändert ein Hertzscher Dipol, (2,3) werden je nach Umlaufrichtung beim Einschalten (Induktionsstoß) abgebremst oder beschleunigt und erfahren eine Frequenzänderung $\delta\omega = \frac{eB_0}{2m_0}$. Diese Frequenzänderung erhält man durch hinzufügen der Lorentzkraft

$\vec{F}_L = -e\vec{v} \times \vec{B}$ zum Gleichgewichts zwischen Zentrifugal und Coulombkraft berechnen.

Quantenmechanisch nach dem Vektormodell: Die Zusatzenergie des Atoms im Magnetfeld ergibt sich aus der Präzession des magnetischen Moments $\vec{\mu}_j$ (Achtung: $\vec{s} = 0$ und damit $\vec{j} = \vec{s} + \vec{l} = \vec{l}$) um die Feldrichtung \vec{B}_0 .

$$V_{m_j} = -(\vec{\mu}_j)_z \vec{B}_0 = -m_j g_j \mu_B B_0$$

Die $(2j + 1)$ -fache Richtungsentartung ist aufgehoben, der Term spaltet in $2j + 1$ äquidistante Komponenten auf (bei reinem Bahnmagnetismus $g_j = 1$). Es ergibt sich die selbe Frequenzverschiebung $\delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{eB_0}{2m_0}$.

Quantenmechanisch: Man betrachte das elektromagnetische Vektorpotential \vec{A} und die daraus resultierende Hamilton-Funktion $H = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + V$. Hieraus ergibt sich der quantenmechanische Hamilton-Operator $\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + e\vec{A} \right)^2 + \hat{V}$, so dass man für ein \vec{B} -Feld in z -Richtung und kugelsymmetrisches Potential V einen Ansatz für die Schrödinger-Gleichung erhält $\psi(\vec{r}) = R_{n,l}(r) e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$ und daraus die Energiewerte

$$E = E_n^0 + B_z \frac{e\hbar}{2m_0} m$$

mit $\Delta m = 0, \pm 1$ erhält.

7.5.3 Anomaler Zeeman-Effekt

Beim anomalen Zeeman-Effekt spalten Zustände mit Spin- und Bahnmagnetismus auf. Die Anzahl der Aufspaltungskomponenten ist größer als beim normalen Zeeman-Effekt. Durch die Überlagerung von Spin- und Bahnmagnetismus muss auf die unterschiedlichen Lande-Faktoren (vgl. 7.5.5) geachtet werden.

Quantenmechanisch: Ohne Spin-Bahn-Kopplung sind die Energie der Bahnbewegung (7.5.2) und des Spins im Magnetfeld (7.5.6) additiv, die Wellenfunktion ist damit ein Produkt beider Einzelwellenfunktionen. Die Spin-Bahn-Kopplung führt zu einem Wechselwirkungsterm

$$\hat{W}(\vec{l}, \vec{s}) = \frac{Ze^2 \mu_0}{8\pi m_0^2 r^3} (\vec{l} \cdot \vec{s})$$

Mit der Einführung des Operators des Gesamtspins $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ und Betrachtung der gleichzeitig scharf messbaren Größen erhält man Quantenzahlen (j, s, l, m_j) , wobei die Hauptquantenzahl weiterhin in guter Näherung n die Eigenfunktionen charakterisiert.

$$\hat{W}_{mag}\psi = \frac{eB_z}{2m_0} g_j \hat{j}_z \psi$$

Zwei Energierterme unterscheiden sich also um $\Delta E_{j,l,m_j} = \frac{e\hbar}{2m_0} B_z g_j \Delta m_j$, wobei g_j der Lande-Faktor (vgl. 7.5.5) ist.

7.5.4 Paschen-Back-Effekt

Der Zeeman-Effekt geht bei starken Magnetfeldern in den Paschen-Back-Effekt über. Für leichte Atome sind "starke Felder" bereits deutlich früher erreicht, da die Spin-Bahn-Kopplung mit wachsender Kernladungszahl stark zunimmt. In einem starken Magnetfeld wird die Feinstrukturkopplung gelöst, \vec{l} und \vec{s} präzedieren einzelnen um \vec{B}_0 und der Gesamtdrehimpuls \vec{j} ist nicht definiert.

$$\Delta E = (\Delta m_l + 2\Delta m_s)\mu_B B_0$$

mit den Auswahlregeln $\Delta m_l = 0, \pm 1$ sowie $\Delta m_s = 0$ für optische Übergänge.

7.5.5 Magnetisches Moment bei der Spin-Bahn-Kopplung

Bei reinem Bahnmagnetismus gilt $g_j = 1$, für reinen Spinmagnetismus $g_j = 2,0023$, eine beliebige Überlagerung beider ist allerdings auch möglich. Das magnetische Bahnmoment und magnetische Spinnmoment ergeben das gesamte magnetische Moment $\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$. Experimentell kann man nur die Projektion von $\vec{\mu}_j$ auf \vec{j} beobachten.

$$(\vec{\mu}_j)_j = -g_j \mu_B \frac{j}{\hbar} \quad \text{mit Lande - Faktor} \quad g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

7.5.6 Quantentheoretische Behandlung des Spins

Wie jeder Drehimpuls hat der Spin drei räumliche Komponenten, besitzt aber in eine Vorzugsrichtung (meist z gewählt) nur zwei diskrete Einstellungen $\pm\hbar/2$. Man führt zwei Wellenfunktionen ϕ_\downarrow und ϕ_\uparrow so ein, dass der Messoperator den jeweiligen Messwert $m_s = \pm 1/2$ der Wellenfunktion ergibt $\hat{s}_z \phi_{m_s} = \hbar m_s \phi_{m_s}$. Der Spin-Operator $\hat{\sigma}_i$ kann über die Pauli-Matrizen σ_i geschrieben werden

$$\hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_2, \quad \hat{\sigma}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_3, \quad \hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_1$$

Der Spinoperator zum Quadrat ergibt

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und die Anwendung auf eine Spinfunktion ϕ liefert immer

$$\hat{s}^2 \phi = \frac{3}{4} \hbar^2 \phi = s(s+1) \hbar^2 \phi$$

Schrödinger-Gleichung des Spins im Magnetfeld: Mit dem Elektronenspin \vec{s} ist ein magnetisches Moment $\vec{\mu}_s$ verbunden, das in einem räumlich homogenen Magnetfeld die Energie $V_s = -\vec{\mu}_s \vec{B}$ besitzt. Damit ergibt sich die Schrödinger-Gleichung zu

$$\frac{e}{m} \vec{B} \cdot \vec{s} \phi = E \phi = \pm \mu_B B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \phi = i \hbar \frac{d\phi}{dt}$$

Spinpräzession im konstanten Magnetfeld: Die allgemeine Lösung obiger Schrödinger-Gleichung ist eine Überlagerung von ϕ_{\downarrow} und ϕ_{\uparrow} mit einem Zeitfaktor $\omega_0 = \frac{e}{m_0} B_z$ (Lamorfrequenz). Damit lassen sich die Erwartungswerte der einzelnen Spinkomponenten berechnen und es zeigt sich, dass nur der Erwartungswert in z -Richtung zeitlich konstant ist.

Spin in einem konstanten und einem transversalen zeitabhängigen Magnetfeld: XXX
S. 45

7.6 Atome im elektrischen Feld

7.6.1 Stark-Effekt

Als Stark-Effekt bezeichnet man die Frequenzverschiebung in optischen Spektren durch elektrische Felder.

Linearer Stark-Effekt liegt vor, wenn die l -Entartung erst durch ein äußeres Feld aufgebrochen wird. Zur Beschreibung muss eine entartete Störungstheorie eingesetzt werden, eine Verallgemeinerung des Verfahrens zum quadratischen Stark-Effekt. Man erhält eine zu \mathbf{E} proportionale Aufspaltung beim Wasserstoffatom.

Quadratischer Stark-Effekt: Eine zu \mathbf{E}^2 proportionale Verschiebung / Aufspaltung findet man bei allen Atomen und wird als *quadratischer Stark-Effekt* bezeichnet. Sie entsteht durch induzierte Dipole $V_{el} = \frac{1}{2} \mathbf{p} \mathbf{E} = \frac{1}{2} \alpha \mathbf{E}^2$ und hat halb so viele Aufspaltungen wie der Zeeman-Effekt, da sie nur von $|m_j|$ abhängt. Der quadratische Stark-Effekt kann für kleine Felder über eine Störungsrechnung beschrieben werden

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + H^S = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(r) + e \mathbf{E} \mathbf{r}$$

Dabei nimmt man an, dass die gestörte Lösung φ als Überlagerung der ungestörten Lösungen φ_ν dargestellt werden kann und das äußere Feld die Wellenfunktion verschiebt beziehungsweise deformiert.

$$\varphi(\vec{r}) = \sum c_\nu \varphi_\nu(\vec{r})$$

Durch Ausnutzung der Orthogonalität der Wellenfunktionen kann die \mathbf{r} -Abhängigkeit beseitigt werden und das Matrixelement des Störoperators ergibt sich zu

$$H_{\mu\nu}^S = \int \varphi_\mu^* H^S \varphi_\nu = \delta_{\mu\nu}$$

und damit die Schrödinger-Gleichung zu $(E_\mu - E) c_\mu + \sum_\nu H_{\mu\nu}^S c_\nu = 0$. Ohne Störung muss $c_\nu^0 = \delta_{\nu\kappa}$ gelten. Schreibt man die Störung $H^S = \lambda H^1$, so kann sie für $\lambda \neq 0$ entwickelt werden.

$$c_\nu = \delta_{\nu\kappa} + \lambda c_\nu^{(1)} + \lambda^2 c_\nu^{(2)} + \dots$$

Die gestörte Wellenfunktion in 1. Näherung ergibt sich zu

$$\psi = \phi_{\kappa}(\vec{r}) + \sum_{\mu \neq \kappa} \frac{H_{\mu\kappa}^S}{E_{\kappa}^0 - E_{\mu}^0} \varphi_{\mu}(\vec{r})$$

und die Energieverschiebung der Zustände ist proportional zu \mathbf{E}^2

$$E = E_{\kappa}^0 + \sum_{\nu \neq \kappa} \frac{|H_{\mu\kappa}^S|^2}{E_{\kappa}^0 - E_{\nu}^0}$$

7.6.2 Wechselwirkung eines Zwei-Niveau-Atoms mit einem kohärenten Lichtfeld

Eine einfallende elektromagnetische Welle stellt für ein Atom ein zeitlich verändertes Feld dar, das Übergänge zwischen zwei benachbarten Niveaus hervorrufen kann. Die Feldstärke über das Atom kann dabei meist als konstant angenommen werden ($\ll \lambda$), so dass man für ein elektrisches Feld in z -Richtung $V_S = eE_0 z \cdot \cos \omega t$ erhält. Mit dem Lösungsansatz

$$\psi = c_1(t)\varphi(\vec{r}) + c_2(t)\varphi(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad c_{1/2}(t) = -ie^{-E_{1/2}t/\hbar} \begin{cases} \cos \Omega t \\ \sin \Omega t \end{cases}$$

Die Koeffizienten werden wie beim quadratischen Stark-Effekt bestimmt. $|c_j(t)|^2$ gibt dabei die Wahrscheinlichkeit an, dass das System im Zustand j anzutreffen ist und kann als Besetzungszahl aufgefasst werden.

7.6.3 Spin- und Photonenecho

Es besteht eine enge Analogie zu (7.5.6). Unter Einwirkung eines kohärenten und resonanten Feldes klappt der Spin im Laufe der Zeit um. Beim *Spinecho* legt man einen $\pi/2$ -Puls (also bis der Spin um $\pi/2$ gedreht wurde) an und beobachtet wie die Spins eines Ensembles mit leicht unterschiedlicher Geschwindigkeit präzedieren und damit die Gesamtintensität mit auseinanderlaufender Phase abnimmt. Aus der Frequenzbreite $\Delta\omega^*$ lässt sich eine Zeit $T_2^* = 2\pi/\Delta\omega^*$ definieren, in der die Spins auseinanderlaufen. Durch einen neu eingestrahlten π -Puls werden die spins wieder umgeklappt und nach einer bestimmten Zeit strahlen sie gleichphasig mit nahezu der Anfangsintensität. Ein Echo entsteht., bei wiederholten Pulsen ergibt sich eine Abklingzeit T , die aus den Blochschen Gleichungen bekannt ist.

Dem Spinecho entspricht das *Photonenecho* bei einer Wechselwirkung eines Lichtfeldes mit einem Zwei-Niveau-Atom.

7.7 Emission und Absorption elektromagnetischer Strahlung

Absorption und Emission zwischen möglichen Übergängen mit $\hbar\omega = E_{n_2} - E_{n_1}$

7.7.1 Übergangswahrscheinlichkeiten

Ein Atom im Zustand E_k im elektromagnetischen Strahlungsfeld mit spektraler Energiedichte $\omega_\nu(\nu) = n(\nu)h\nu$ kann ein Photon $h\nu$ absorbieren und in einen höheren Zustand E_i übergehen.

Absorption: $W_{12} = \left(\frac{dN_1}{dt}\right)_{abs} = -B_{12}\omega_\nu N_1$ mit $B_{12} = \sigma_{12}F$ wobei F Strahlenfluss und σ Emissionsquerschnitt

spontane Emission: $\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{spon} = -A_{21}N_2$ mit Rate der spontanen Emission A_{21}

induzierte Emission: $\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{stim} = -B_{21}\omega_\nu N_2$

Im stationären Zustand muss die Absorptionsrate der Emissionsrate entsprechen und somit

$$A_{ik}N_i + B_{ik}\omega_\nu N_i = B_{ki}\omega_\nu N_k$$

gelten. Setzt man im thermischen Gleichgewicht die Besetzungszahlen gleich der Boltzmann-Verteilung $\frac{N_i}{N_k} = \frac{g_i}{g_k} e^{-h\nu/kT}$, erhält man die spektrale Energiedichte, die gleich der Planckschen Strahlungsformel sein muss. Da diese Gleichung für alle Frequenzen und beliebige Temperaturen erfüllt sein soll, folgt für die Einstein-Koeffizienten $B_{ik} = (g_k/g_i)B_{ki}$ und $A_{ik} = (8\pi h\nu^3)/c^3$. Für gleiche Statistische Gewichte g_i, g_k sind die Koeffizienten für induzierte Emission und Absorption gleich.

7.7.2 Matrixelemente der Übergangswahrscheinlichkeiten

spontane Emission: Bei einem Übergang von Zustand ψ_i zu Zustand ψ_k kann das Übergangsdipolmoment oder Matrixelement berechnet werden

$$\bar{\mathbf{p}}_{ik} = M_{ik} = e \int \psi_i^* \mathbf{r} \psi_k d\tau$$

Mit der mittleren, bei einem Übergang emittierten Leistung

$$\langle P_{ik} \rangle = \frac{4}{3} \frac{\omega_{ik}^4}{4\pi\epsilon_0 c^3} |M_{ik}|^2$$

erhält man den Einstein-Koeffizient A_{ik}

$$A_{ik} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{ik}^2}{\epsilon_0 c^3 h} \left| \int \psi_i^* \mathbf{r} \psi_k d\tau \right|^2 \propto \omega_{ik}^3 |M_{ik}|^2$$

Alle Erwartungswerte M_{ik} kann man in einer Matrix anordnen, wobei alle von Null verschiedenen Einträge mögliche Übergänge und ihre Intensität darstellen.

Absorption / induzierte Emission: Induzierte Prozesse können nur stattfinden, wenn eine Energiedichte $w_\nu(\nu) = n(\nu) h\nu$ vorhanden ist. Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang $W_{ki} = B_{ki}w_\nu(\nu)$ ergibt sich aus der Betrachtung eines stationären Gleichgewichts, bei dem die Emissionsrate der Absorptionsrate entsprechen muss.

$$[A_{ik} + B_{ik}w_\nu(\nu)] N_i = [B_{ki}w_\nu(\nu)] N_k$$

Im thermischen Gleichgewicht gilt für die Besetzungszahlen N_i und N_k die Boltzmann-Verteilung $N_i/N_k = g_i/g_k \cdot \exp(-h\nu/kT)$. Durch Gleichsetzen und Koeffizientenvergleich mit der Planckschen Strahlungsformel

$$\omega_n(n) = \frac{A_{ik}}{B_{ik}} \frac{1}{\left(\frac{g_k B_{ki}}{g_i B_{ik}} e^{\frac{h\nu}{kT}}\right) - 1} \stackrel{!}{=} \omega_\nu(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

erhält man die Einstein-Koeffizienten

$$B_{ik} = \frac{g_k}{g_i} B_{ki} \quad \text{und} \quad A_{ik} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu B_{ik}$$

wobei man $\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ als Anzahl der Moden im Strahlungsfeld identifizieren kann.

Auswahlregeln: Nicht jeder nach dem Energiesatz mögliche Übergang wird im Spektrum beobachtet, da auch die Erhaltung des Drehimpulses und Symmetrieprinzipien betrachtet werden müssen. Mit einem Feld $\vec{E} = (0, 0, E_0)$ ergibt sich für das Wasserstoffatom bei genauer Betrachtung beispielsweise die z -Komponente des Übergangsdipolmomentes

$$(M_{ik})_z = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty R_i R_k r^3 dr \cdot \underbrace{\int_0^\pi \Theta_{m_k}^{l_k} \Theta_{m_i}^{l_i} \sin\theta \cos\theta d\theta}_{(2)} \cdot \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{i(m_k - m_i)\varphi} d\varphi}_{(3)}$$

Für eine von Null verschiedene Übergangswahrscheinlichkeit (in z) müssen alle Faktoren ungleich null sein.

- Faktor (3) liefert beispielsweise für in z linear polarisiertes Licht $m_i - m_k = 0$. Die Komponenten x und y liefern bei analoger Betrachtung eine Bedingung für zirkular polarisierte Wellen. Für diese Auswahlregel sorgt die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses für das System aus Atom und Photon.

$$\Delta m = m_i - m_k = \begin{cases} 0 & \text{linear polarisiert in } z \\ \pm 1 & \text{zirkular polarisiert} \end{cases}$$

- aus (2) folgt nach etwas mühsamer Rechnug eine Bedingung für die Drehimpulsquantenzahl (oder durch Symmetriebetrachtung: $M_{ik} = \int \psi_i^* \mathbf{r} \psi_k dV$ wird über den gesamten Raum integriert. Damit das Integral ungleich null wird, muss der Integrand eine gerade Funktion sein. Da aber \vec{r} bereits ungerade Parität hat, müssen

sich die beiden Zustände in ihrer Parität unterscheiden, damit ihr Produkt ebenfalls ungerade wird.)

$$\Delta l = l_i - l_k = \pm 1$$

- Bei Atomen mit nur einem Elektron in einer nicht aufgefüllten Schale muss $\Delta s = s_i - s_k = 0$ gelten, da der Spin $|\mathbf{s}| = \sqrt{3/4}\hbar$ konstant ist. Diese Überlegung greift auch bei Einelektronenübergängen in Mehrelektronensystemen.

Beim Helium-Atom mit zwei Elektronen folgt aus der Forderung, dass das Matrixelement unabhängig von einer Vertauschung der Elektronen sein soll, dass beide Zustände entweder symmetrische oder antisymmetrische Ortsfunktionen haben, d.h. zum Singulett- oder Triplett-System gehören müssen (bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung). Es gilt somit für den Gesamtspin $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$ die Auswahlregel $\Delta S = 0$.

Da sich der Gesamtspin - trotz konstantem Betrag - noch in der Richtung relativ zum Bahndrehimpuls ändern kann, gilt für den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ die erweiterte Auswahlregel

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad \text{für } J \neq 0$$

Multipolübergänge höherer Ordnung: Neben den elektrischen Dipolübergängen werden auch elektrische Quadrupol- oder magnetische Dipolübergänge beobachtet, deren Intensität allerdings um etliche Größenordnungen kleiner ist. So werden auch Übergänge beobachtet, die bei elektrischer Dipolstrahlung verboten sind. Bei Quadrupolübergängen (gerade Parität, da Produkt aus zwei Koordinaten) erhält man beispielsweise $\Delta l = 0, \pm 2$ sowie $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$.

7.7.3 Lebensdauer angeregter Zustände

Aus den Einsteinkoeffizienten ergibt sich die Änderung der Besetzungszahl zu

$$dN_i = -A_{ij}N_i dt \quad \Rightarrow \quad N_i(t) = N_i(0) \cdot e^{-A_i t}$$

Wobei $\tau_i = \frac{1}{A_i}$ als mittlere Lebensdauer des Zustandes i identifiziert werden kann.

7.7.4 Linienbreite der Spektrallinien

Die Linienbreite ist auf verschiedene Effekte zurückzuführen

Natürliche Linienbreite: Die endliche Lebensdauer der Zustände führt zu einer Linienverbreiterung. Das angeregte Elektron verhält sich wie ein gedämpfter harmonischer Oszillator mit $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$, woraus $x(t) = x_0 e^{-\gamma t/2} \cos \omega_0 t$ folgt. Die spektrale Verbreiterung zeigt sich in der Fouriertransformierten $A(\omega)$ zu $x(t)$. Für die abgestrahlte Leistung $P_\omega(\omega) = A(\omega) \cdot A^*(\omega)$ ergibt sich ein *Lorentz-Profil*

$$P_\omega(\omega - \omega_0) = \frac{C}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$

Ersetzt man die Dämpfungskonstante γ durch die spontane Übergangswahrscheinlichkeit A_{ik} erhält man für die Linienbreite

$$\delta\omega_n = A_i = 1/\tau_i$$

Dieser Zusammenhang lässt sich auch aus der Heisenbergschen Unschärferelation herleiten mit $\Delta E \propto \hbar/\tau_i$. Bei Übergängen addieren sich die Energieunschärfen beider Zustände.

Doppler-Verbreiterung: Bewegt sich ein angeregtes Atom, so ergibt sich eine leichte Verschiebung der Frequenz $\omega_e = \omega_0 + \vec{k}\vec{v}$ aufgrund des Doppler-Effekts. Im thermischen Gleichgewicht haben die Atome eine Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung, so dass das Profil durch den Doppler-Effekt eine Gauß-Funktion ist.

$$P_\omega(\omega - \omega_0) = P_\omega(\omega_0) \cdot e^{-\left(\frac{c}{\bar{v}} \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0}\right)^2} \quad \text{mit} \quad \bar{v} = \sqrt{2k_B T/m}$$

Die Doppler-Verbreiterung übertrifft die natürliche Linienbreite im sichtbaren Spektralbereich typischerweise um zwei Größenordnungen, Informationen über die natürliche Linienbreite erhält man meist nur von den Linienflügeln, da das Gauß-Profil schneller abfällt.

$$\delta\omega_D \propto \frac{\omega_0 \sqrt{T}}{\sqrt{m}}$$

Stoß- / Druckverbreiterung: Nähern sich zwei Atome an, so führt die Wechselwirkung zu Verschiebungen der Energieniveaus. Die Verschiebung hängt dabei von der Struktur der Elektronenhüllen und dem Abstand ab. Über das Profil der Verbreiterung können somit Rückschlüsse auf die R-Abhängigkeit der Potentialkurvendifferenz gezogen werden. Elastische Stöße (kurzzeitige WW) führen dabei zu Verschiebungen und Verbreiterung (über die Phase), inelastische zur Verbreiterung (Amplitude) der Linie.

7.7.5 Laser

Läuft eine elektromagnetische Welle durch ein Medium, so ändert sich die Intensität nach dem Beerschen Absorptionsgesetz

$$I(\nu, z) = I(\nu, 0)e^{-\alpha(\nu)z}$$

Unter Berücksichtigung der Verluste $\gamma = \gamma_{RefI} + \gamma_{Streu} + \gamma_{Beug}$ erhält man den Verstärkungsfaktor

$$G(\nu) = \frac{I(\nu, 2L)}{I(\nu, 0)} = e^{-2\alpha(\nu)L + \gamma} > 1$$

Photonenfluss F in z -Richtung, Änderung dF pro dz , Strahlquerschnitt S , damit SdF Änderung der Zahl der Photonen pro Zeit

$$SdF = \sigma_{21}F [N_2 - N_1] (Sdz)$$

Material wie ein Verstärker für $\frac{dF}{dz} > 0$ (entspricht $N_2 > N_1$), Absorber für $\frac{dF}{dz} < 0$, für Besetzungsinversion $N_2 > N_1$ notwendig

Laser-Schwellwertbedingung: Mit dem Absorptionskoeffizienten $\alpha(\nu) = [N_k - (g_k/g_i)N_i] \sigma(\nu)$ und den Reflektivitäten der Spiegel R_i erhält man die Bedingung

$$R_1 R_2 (1 - L_i)^2 \exp(2\sigma_{21}(N_2 - N_1)l) \geq 1$$

Besetzungsinversion: Für den Laserbetrieb muss das obere Niveau stärker bevölkert sein, als das untere. Diese Besetzungsinversion gelingt nur durch selektives Pumpen. Ohne ein drittes (noch höheres) Niveau gelingt eine Besetzungsinversion nicht, da bei direktem Pumpen die Absorption des Pumplichts gegen null strebt, wenn sich die Besetzungszahlen angleichen.

7.8 Mehrelektronenatome

7.8.1 Das Helium-Atom

Das Helium-Atom besteht aus einem Kern und zwei Elektronen, dies führt zu Wechselwirkungstermen in der potentiellen Energie, wodurch das System als ganzes nicht mehr analytisch lösbar ist (keine Kugelsymmetrie).

In erster Näherung könnte man die Wechselwirkung der Elektronen untereinander vernachlässigen, da die Elektronen sich abstoßen und damit meist einen größeren Abstand zueinander als zum Kern haben. Dieser Ansatz führt zu keinen brauchbaren Ergebnissen.

Eine bessere Näherung besteht in der Annahme, dass sich ein Elektron im vom jeweils anderen Elektron abgeschirmten Potential des Kerns (experimentell $Z_{eff} = 1,35$) befindet.

Symmetrie der Wellenfunktion: Durch die Ununterscheidbarkeit der Elektronen sind die symmetrischen / antisymmetrischen Wellenfunktionen Linearkombinationen aus den Produkttermen

$$\psi^{s/a} = \psi_1(a) \cdot \psi_2(b) \pm \psi_1(b) \cdot \psi_2(a)$$

Elektronenspin: Jedes Elektron hat einen Spin \vec{s} , man unterscheidet beim Zwei-Elektronensystem zwischen paralleler und antiparalleler Einstellung. Die gegen Elektronenvertauschung symmetrischen Spinfunktionen (3 räumliche Einstellmöglichkeiten $M_s = 0, \pm 1$ für den Gesamtspin $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$) führen auf den Triplett-Zustand, die antisymmetrische Spinfunktion auf den Singulett-Zustand.

Pauli-Prinzip: Die Gesamtwellenfunktion eines Systems mit mehreren Elektronen ist antisymmetrisch gegen Vertauschung zweier Elektronen. (für alle Teilchen mit halbzahligem Spin / Fermionen, folgt aus Quantenfeldtheorie)

Termschema beim Helium: Beim Helium-Atom kann zwischen dem Singulett- (Parahelium) und dem Triplett-Zustand (Orthohelium) unterschieden werden. Das Parahelium besitzt keine Feinstruktur, da der Gesamtspin $\mathbf{S} = 0$ ist, aufgrund des

Pauli-Prinzip kann der Zustand 1^3S nicht existieren, da beide Elektronen im gleichen Zustand wären. Bei Orthohelium sind die meisten Energiestufen dreifach aufgespalten.

7.8.2 Aufbau der Elektronenhülle größerer Atome

Wegen des Pauli-Prinzips können die Schalen jeweils nur zwei Elektronen besetzt werden. Die Verteilung geschieht so, dass das Pauli-Prinzip erfüllt und die Gesamtenergie aller Elektronen für den Grundzustand jedes Atoms minimal wird.

Schalenmodell der Atomhülle: Zu jeder Hauptquantenzahl n gibt es n^2 Zustände, die von $2n^2$ Elektronen besetzt werden können. Die zeitlich gemittelte Ladungsdichteverteilung aller Elektronen mit gleichem n ist kugelsymmetrisch und hat ein Maximum für bestimmte Abstände. Man nennt sie deshalb Elektronenschale und bezeichnet sie mit K,L,M... (für $n=1,2,3...$)

Hundsche Regeln:

1. Volle Schalen tragen zum gesamten Drehimpuls \vec{J} und Gesamtspin \vec{S} nicht bei.
2. Elektronen mit gleichem l werden im Grundzustand so eingebaut, dass der resultierende Gesamtspin maximal wird. Zustände mit der höchsten Multiplizität liegen also energetisch am tiefsten (z.B. Triplett tiefer als Singulett).
3. Bei Realisierung der größten Quantenzahl S werden die Elektronen so auf die Untere Zustände m_l verteilt (Pauli-Prinzip beachten), dass $|\vec{L}_z| = \sum m_l \hbar = m_L \hbar$ maximal wird. Die resultierenden L sind damit gleich $|m_L|$. Bei gleicher Multiplizität $S(S+1)$ liegen deshalb Zustände energetisch um so tiefer, je größer L ist.
4. Beachtet man Spin-Bahn-Wechselwirkung, so liegen die Terme mit den kleinsten J in normalen Multipletts (Teilschale weniger als zur Hälfte besetzt) energetisch am tiefsten, sonst ist es umgekehrt.

7.8.3 Theoretische Modelle von Mehrelektronen-Atomen

Störungstheoretische Beschreibung des Helium-Atoms: Man geht von der unabhängigen Bewegung zweier Elektronen im Coulomb-Feld aus und behandelt die Wechselwirkung als Störung. Man kommt auf einen Wechselwirkungsterm der Coulomb-Wechselwirkung und einen Zweiten, der als Austauschenergie bezeichnet wird (kein klassisches Analogon, basiert auf Ununterscheidbarkeit der Elektronen). Durch die Störung erhält man eine Energieaufspaltung in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Zustand. Das Pauli-Prinzip fordert eine antisymmetrische Wellenfunktion, weshalb die Zustände mit einer antisymmetrischen (Parahelium, energetisch tiefster Zustand, beide Elektronen gleichzeitig im Grundzustand) beziehungsweise symmetrischen (Orthohelium, metastabiler Zustand) Spinfunktion kombiniert werden müssen.

Hartree-Verfahren: Jedes Elektron wird einzeln betrachtet und bewegt sich dabei in einem effektiven Kugelpotential $\Phi^{(0)} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{r} - ae^{-br}\right)$, das durch die anderen Elektronen und den Kern beschrieben wird. Das Verfahren wird iterativ angewendet, bis die erhaltenen Energieeigenwerte gegen einen minimalen Wert konvergieren. Als Erweiterung wird mit der Hartree-Fock-Methode auch die Austauschenergie und nicht nur das Coulomb-Potential berücksichtigt.

7.8.4 Kopplungsschemata für die Elektronendrehimpulse

Die Kopplung kann nur näherungsweise beschrieben werden, wobei zwei Grenzfälle charakteristisch sind.

$\vec{L}\vec{S}$ -Kopplung für "leichte Atome": Ist die Wechselwirkung zwischen Bahn- und Spinmoment eines Elektrons klein gegen die Wechselwirkung mit allen anderen Elektronen, so koppeln alle Bahnmomente zu einem Gesamtbahndrehimpuls $\vec{L} = \sum \vec{l}_i$ mit $|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$ und die Spinmomente zum Gesamtspin $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$ mit $|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$. Und der Gesamtdrehimpuls zu

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad \text{mit} \quad |\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

Die Zahl der Feinstrukturkomponenten ist gleich der kleineren von $(2S+1)$ und $(2L+1)$. Die Energie ist

$$E_j = E(n, L, S) + C\vec{L}\vec{S} = E(n, L, S) + \frac{1}{2}C [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \hbar^2$$

$\vec{J}\vec{J}$ -Kopplung für "schwere Atome": Ist die Wechselwirkung zwischen Bahn- und Spinmoment eines Elektrons groß gegen die Gesamtwechselwirkung, so ergibt sich für jedes Elektron ein Drehimpuls $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ und diese koppeln zum Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \sum \vec{j}_i$$

Der Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} und Gesamtspin \vec{S} sind nicht mehr definiert. Es ergeben sich sehr unübersichtliche Spektren.

7.8.5 Spektren von Mehrelektronen-Atomen

Bei angeregten Atomen ist die Zahl der Möglichkeiten der Drehimpulskopplung im Allgemeinen viel größer als im Grundzustand, weil sich die Hauptquantenzahlen n unterscheiden und damit das Pauli-Prinzip weniger Beschränkungen gibt. Übergänge zwischen gebundenen Zuständen ergeben ein Linienspektrum. Kontinuierliche Spektren erhält man, wenn mindestens einer der beiden Zustände nicht gebunden ist.

Einfachanregung: Die geringste Energie (1-10eV) ist für äußere Elektronen (Valenzelektronen) nötig. Der angeregte Zustand ist nicht stabil, er geht unter Aussendung eines Photons in tiefere Zustände über (ggf. über Zwischenschritte), nur wenn die Anregungsenergie oberhalb der Ionisierungsenergie liegt, wird das Atom ionisiert (*Photoionisation*, kontinuierliches Spektrum).

Rekombinationsstrahlung: Wird ein freies Elektron mit kinetischer Energie von einem Ion eingefangen, so kann die frei werdende Energie als Strahlung emittiert werden (Zwei-Teilchen-*Rekombination*, kontinuierlich).

Anregung mehrerer Elektronen: Unter geeigneten Bedingungen können mehrere Elektronen gleichzeitig angeregt werden. Sie gehen entweder durch Emission von Photonen in den Grundzustand über oder können über Coulomb-Wechselwirkung die Energie an andere Elektronen übergeben. Durch Energieerhaltung ist dieser Prozess im diskreten Bereich unwahrscheinlich, erst für $E > E_{ion}$ (im kontinuierlichen Bereich) wird er wahrscheinlich (*Autoionisation*).

Innenschalenanregung (Röntgenspektren): Ein durch hochenergetische Photonen oder Elektronenstoß entstandenes Loch in den Inneren Schalen kann durch ein Elektron aus einem höheren Energiezustand besetzt werden. Dieses Elektron kann seine Energie als Photon abgeben. Dieser Prozess ist Quelle für charakteristische Röntgenstrahlung (vorherrschend für $Z > 60$). Die Energie kann allerdings auch strahlungslos an ein weiteres Elektron übergeben werden, das damit eine genügend hohe Energie erhält, um das Atom zu verlassen. Beim diesem so genannten *Auger-Effekt* (überwiegend für $Z < 30$) beobachtet man demnach ein weiteres Elektron.

7.9 Hyperfeinstruktur (Kernspin)

Die Hyperfeinstruktur (Aufspaltung beispielsweise beim H-Atom geringer als Dopplerbreite, Faktor 1000 kleiner als die Feinstruktur) resultiert aus der Wechselwirkung des Kernspins \vec{I} mit dem magnetischen Kernmoment $\vec{\mu}_I = g_I \frac{\mu_K}{\hbar} \vec{I}$ (Kernmagneton $\mu_K = \frac{e}{2m_P} \hbar$). In beiden Fällen kann nur die Komponente längs einer Vorzugsrichtung z beobachtet werden.

$$I_z = m_I \hbar \quad (\vec{\mu}_I)_z = g_I \mu_K m_I$$

Das magnetische Kernmoment μ_I und das von den Elektronen hervorgerufene Magnetfeld \mathbf{B}_j wechselwirken zur Hyperfeinstrukturaufspaltung $V_{HFS} = -\mu_I \mathbf{B}_j$

$$\Delta E_{HFS} = \frac{A}{2} [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)] \quad \text{mit} \quad A = \frac{g_I \mu_K B_j}{\sqrt{j(j+1)}}$$

7.9.1 Wechselwirkung mit äußeren Magnetfeldern

Bei kleinen Magnetfeldern ($\vec{\mu}_F \vec{B} < \Delta E_{HFS}$) koppeln die Drehimpulse der Elektronen und des Kern zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$. Jedes Niveau spaltet in $(2F+1)$ Komponenten auf (Zeeman-Effekt).

Für stärkere Magnetfelder wird die Kopplung aufgebrochen und es gibt keinen Gesamtdrehimpuls mehr.

Bei noch größeren Feldstärken ($\vec{\mu}_F \vec{B} > \Delta E_{FS}$) kann auch die Kopplung zwischen \vec{s} und \vec{l} aufbrechen (Paschen-Back-Effekt).

7.9.2 Einflüsse des Atomkerns auf die Spektren der Atome

Der Atomkern wirkt auch neben der Hyperfeinstruktur noch zu einer Verschiebung der Spektren.

- die Mitbewegung des Kerns führt zu einer Kernmassen-Abhängigkeit der Rydbergkonstanten, so dass Isotope einerleiichte unterschiede zeigen
- Isotope führen durch ihre unterschiedlichen Massen und Volumen bei gleicher Kernladungszahl Z zu einer unterschiedlichen Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron (Volumeneffekt)

7.10 Moleküle

7.10.1 Das H_2^+ -Molekülion

Das einfachste aller Moleküle ist das Wasserstoff-Molekülion H_2^+ , es kann nicht mehr exakt gelöst werden.

Als Näherung bietet sich der "starre Molekül"-Ansatz an. Wegen der großen Masse der Kerne, ist die kinetische Energie dieser sehr klein gegen die der Elektronen. Die Kerne werden im Abstand R festgehalten (starres Kerngerüst). Mit elliptischen Koordinaten kann die Schrödinger-Gleichung gelöst werden.

$$E_n(R) = \bar{E}_{kin}(e^-) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} - \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} \right) \right)$$

An diesen Potentialkurven können stabile (Minimum der Energiewerte) und instabile (monoton abfallende) Molekülzustände erkannt werden. Da das Potential für das Elektron nicht mehr kugelsymmetrisch ist, präzediert sein Drehimpuls um die Kernverbindungsachse. $|\vec{l}|$ hängt vom Kernabstand ab, die z -Komponente hat einen definierten Erwartungswert $l_z = m\hbar$ (analog zum Wasserstoff im externen Magnetfeld). Die Energie hängt hier jedoch nicht von der Richtung der Präzession ab, so dass man für ein nicht rotierendes Molekül die Quantenzahl $\lambda = |m|$ einführt (Bezeichnung $\sigma, \pi, \delta, \dots$ für $\lambda = 1, 2, \dots$).

Die Bewegung des Elektrons um die Kernverbindungsachse führt zu einem Magnetfeld in z -Richtung (falls $\lambda > 0$), in dem sich das magnetische Spinnmoment einstellen kann. Der Elektronenspin präzediert deshalb ebenfalls um z mit $\bar{s}_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$.

LCOA-Methode: Bei der Methode der Linear Combinations of Atomic Orbitals werden geeignete Linearkombinationen atomarer Wellenfunktionen angesetzt und die Koeffizienten optimiert. Das H_2^+ wird dabei durch ein H -Atom mit Wellenfunktion ϕ_A und ein H^+ zusammengesetzt. Das Elektron kann sich sowohl beim einen wie auch beim anderen Proton befinden, weshalb folgender Ansatz für die Gesamtwellenfunktion gewählt wird.

$$\psi = c_1\phi_A(\vec{r}_A) + c_2\phi_B(\vec{r}_B)$$

Die Normierung liefert nun

$$c_1^2 + c_2^2 + 2c_1c_2 \underbrace{\Re \int \phi_A(\vec{r}_A)\phi_B(\vec{r}_B)d\tau}_{S_{AB}} = 1$$

wobei das Integral von der räumlichen Überlappung beider Atomwellenfunktionen abhängt. Aus Symmetriegründen gilt $|c_1|^2 = |c_2|^2$ und durch die Antisymmetrie bei Vertauschung erhält man $c_1 = \pm c_2$. Die Molekülorbitale ergeben sich zu

$$\psi_{s/a} = \frac{1}{\sqrt{2 \pm 2S_{AB}}}(\phi_A \pm \phi_B)$$

Die Energie E_s zeigt ein Minimum und beschreibt damit den stabilen Molekülzustand, während E_a einen abstoßenden Zustand ergibt. Zum stabilen Zustand ψ_s tragen zwei Effekte bei: Die Erniedrigung der potentiellen Energie durch die erhöhte Anwesenheit des Elektrons zwischen den beiden Kernen (Coulomb-Anziehung) und die Verringerung der Impulsunschärfe, da ψ_s mehr Raum gewährt als den Einzelorbitalen.

7.10.2 Das H_2 -Molekül

Das zweite Elektron des Wasserstoff-Moleküls führt dazu, dass obige Näherungen nicht mehr greifen.

Molekülorbitalnäherung: Ähnlich der LCAO-Methode nimmt man als Grundlage eine Linearkombination zweier Wasserstoffatome. Damit wird die Wechselwirkung der beiden Elektronen vernachlässigt. Für die Besetzung des Molekülorbitals mit Elektronen wird ein Produktansatz gewählt.

Valenzbindungsnaheerung: Die auch Heitler-London-Näherung genannte Methode geht von Molekülorbitalen aus, bei der jedoch gleich beide Elektronen berücksichtigt werden. In dieser Näherung fehlen allerdings Beiträge, die den Zustand beschreiben, dass beide Elektronen zu einem Proton gehören.

7.10.3 Elektronische Zustände zweiatomiger Moleküle

Durch Kombination atomarer Wellenfunktionen kann eine Vielzahl von elektronisch angeregten Molekülzuständen erfasst werden. Als gerade Zustände bezeichnet man dabei solche, die bei Spiegelung aller Koordinaten in sich selbst übergehen (ungereade mit Minuszeichen), als positiv solche, die bei Spiegelung an einer Ebene durch die Kernverbindungssachse in sich selbst übergehen (negativ mit Minuszeichen).

Wird ein Elektron angeregt, so entstehen elektrisch angeregte Molekülzustände. Ein Großteil dieser Zustände hat Potentialkurven ohne Minimum, womit es sich um instabile Zustände handelt (Moleküle dissoziieren zu Atomen).

Excimere: Edelgase mit abgeschlossenen Schalen können im Grundzustand keine Moleküle bilden (Anregungsenergie zu hoch), anders sieht dies bei einem angeregten Edelgasatom aus. Zustände, die nur im elektrisch angeregten Zustand stabil sind, bezeichnet man als Excimere.

7.10.4 Chemische Bindungen

Zwei Effekte führen zu stabilen Molekülen: Erhöhte Elektronendichte zwischen Protonen und vergrößerter Aufenthaltsbereich für Elektronen (verringert mittlere kinetische Energie). Klassisch beruht die Bindung auf höheren elektrischen Multipolen, die dadurch entstehen, dass das Potential nicht mehr Kugelsymmetrisch ist.

Ionenbindung (heteropolar) ist eine sehr starke Bindung $\propto 1/R$ durch elektrische Anziehung unterschiedlich geladener Bestandteile

Kovalente Bindung (homöopolar) entsteht durch Austausch identischer Teilchen von zwei oder mehr Atomen (Elektronenaustausch, entscheidend für $R < \vec{r}_A + \vec{r}_B$)

Van-der-Waals-Bindung durch statistische Schwankungen / Unsymmetrien der Elektronenhülle, sehr schwache Bindung $\propto 1/R^6$

Wasserstoff-Brücken-Bindungen treten bei mehratomigen Molekülen auf, bei denen eine Anziehung durch ein H^+ -Ion entsteht (Stärke zwischen Ionen- und Van-der-Waals-Bindung)

Metallbindung durch Elektronengas im Festkörper

7.10.5 Rotation und Schwingung zweiatomiger Moleküle

Born-Oppenheimer-Näherung: Wegen der größeren Masse der Atomkerne ist die kinetische Energie dieser deutlich kleiner, die Elektronen können also in Born-Oppenheimer-Näherung instantan auf die Kernabstände reagieren.

Der starre Rotator: Ein zweiatommiges Molekül kann um eine Achse durch den Schwerpunkt rotieren, durch die Quantelung des Drehimpulses ergibt sich eine Rotationsenergie $E_{rot} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_e^2}$. Bei Absorption oder Emission liegen die Rotationsfrequenzen im Mikrowellenbereich.

Schwingung zweiatomiger Moleküle: In der Nähe des stabilen Zustandes kann das Potential durch eine Parabel angenähert werden. Im anziehenden Bereich kann es gut durch das Morse-Potential $V_m(r) = E_D [1 - e^{-a(r-r_0)}]^2$ angenähert werden. Mit dem Morse-Potential kann die Schrödinger-Gleichung exakt gelöst werden und es ergeben sich folgende Schwingungsniveaus.

$$E_{vib}(\nu) = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{\hbar^2\omega^2}{4E_D} \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$\Delta E(\nu) = E(\nu + 1) - E(\nu) = \hbar\omega \left[1 - \frac{\hbar\omega}{2E_D}(\nu + 1)\right]$$

Wechselwirkung: Die Schwingungsfrequenzen sind meist ein bis zwei Größenordnungen höher als die Rotationsfrequenzen. Während einer Rotation schwingt das Molekül also etliche Male. Da die Gesamtenergie aber konstant ist, findet im schwingenden Rotator ein ständiger Energieaustausch statt.

7.10.6 Spektren zweiatomiger Moleküle XXX

7.10.7 Elektronische Zustände mehratomiger Moleküle XXX

8 Festkörperphysik

Festkörper können neben der Struktur (s.u.) auch über elektrische und optische Eigenschaften unterschieden werden.

Kristalle: periodische Anordnung der Atome, im Idealfall ohne Defekte und Oberflächeneffekte (damit Atomposition $\vec{R}_a = \text{Punktgitter } \vec{R} + \text{atomare Basis } \vec{r}_a$)

Polykristalline Festkörper: räumlich begrenztes periodisches Raunggitter, allerdings nicht für den gesamten Festkörper

Amorphe Festkörper: keine Fernordnung, nur Nahordnung zwischen nahen Nachbarn

Flüssigkristalle: kleine Strukturen, die zueinander ungeordnet sind

8.1 Struktur idealer Kristalle

atomarer Kristall: 1 Atom je Raunggitterpunkt, Basisvektor $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

Translationsvektor: $\vec{T} = m_1\vec{a} + m_2\vec{b} + m_3\vec{c}$

Elementarzelle: enthält im translatorischen Sinne alle physikalisch nichtäquivalenten Punkte, die näher an einem herausgegriffenen Gitterpunkt liegen als an einem anderen. Die Gesamtheit der Gitterpunkte nennt man Bravais-Gitter.

- Volumen $\Omega_0 = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ Spat aus den Basisvektoren, primitiv wenn kleinst mögliches Volumen
- enthält nur einen Gitterpunkt, aber alle Atome der atomaren Basis
- die Gesamtheit aller EZ füllt den gesamten Raum (Kristall) aus

Wigner-Seitz-Zelle: eindeutige Wahl einer EZ, senkrechte Ebenen auf Hälfte der Verbindungslinien zu Nachbarn $\vec{x} \cdot \vec{R} = \frac{1}{2} \vec{R}^2$

Symmetrieachsen: n-zählige Symmetrieachse mit Drehung um $\varphi = \frac{2\pi}{n}$

Gitterebene: Schnittpunkt der Ebene mit Kristallachsen mit $\vec{s}_1 = m_1\vec{a}$ usw. führt auf Millersche Indizes hkl mit $h = \frac{p}{m_1}$ usw.

8.1.1 Reziprokes Gitter, Brillouin-Zone

Räumliche Fourier-Zerlegung: Jede periodische Funktion kann in Fourier-Komponenten zerlegt werden

$$f(\vec{x}) = \sum_{\vec{K}} \hat{f}(\vec{K}) e^{i\vec{K}\vec{x}} \quad \text{mit} \quad \hat{f}(\vec{K}) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} f(\vec{x}) e^{-i\vec{K}\vec{x}} d^3\vec{x}$$

Die \vec{K} -Vektoren müssen die Reziprozitätsbedingung $\vec{K} \cdot \vec{R} = 2\pi n$ erfüllen. Aus dieser Bedingung lassen sich Basisvektoren $\vec{b}_i = \frac{2\pi}{\Omega_0} (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)$ des reziproken Gitters bestimmen.

Brillouin-Zone: Auch das reziproke Gitter lässt sich in Elementarzellen unterteilen. Die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters nennt man dann Brillouin-Zone. Die Konstruktionsvorschrift $\vec{k} \cdot \vec{K} = \frac{1}{2} \vec{K}^2$ bleibt erhalten, das Volumen ergibt sich wiederum aus dem Spatprodukt.

8.1.2 Wichtige Kristallstrukturen

sc-Gitter

simple cubic, Würfel mit Kantenlänge a , Volumen der Elementarzelle $\Omega_0 = a^3$
Basisvektoren

$$\vec{a}_1 = a(1, 0, 0) \quad \vec{a}_2 = a(0, 1, 0) \quad \vec{a}_3 = a(0, 0, 1)$$

6 nächste Nachbarn (NN-Abstand a)

12 übernächste Nachbarn (üNN-Abstand $\sqrt{2}a$)

Raumfüllung mit Kugeln $V_K = \frac{4}{3}\pi r_k^3$ und $r_k = a/2$ ergibt sich zu $p = V_K/\Omega_0 = \pi/6 \approx 0,52$

Reziprokes Gitter: Ebenfalls sc, Kantenlänge $\frac{2\pi}{a}$

fcc-Gitter

face centered cubic, Würfel mit Atomen auf den Seitenflächen, $V = a^3$ enthält vier EZ
Basisvektoren

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(0, 1, 1) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)$$

12 nächste Nachbarn (NN-Abstand $a/\sqrt{2}$)

6 übernächste Nachbarn (üNN-Abstand a)

Raumfüllung ergibt sich zu $p = \frac{V_K}{\Omega_0} = \pi/3\sqrt{2} \approx 0,74$

Reziprokes Gitter: bcc

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1) \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1) \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1)$$

fcc-Gitter

das bcc-Gitter besitzt ein fcc-Gitter als reziprokes Gitter. Damit können die Eigenschaften der Brillouin-Zone des fcc-Gitters auf das bcc-Gitter übertragen werden.

hexagonales Gitter

Stapelung von Schichten 6-zähliger Symmetrie (Atomabstand in der Schicht a , zwischen Schichten c), Volumen der EZ $\Omega_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$

Basisvektoren

$$\vec{a}_1 = (a, 0, 0) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}, 0) \quad \vec{a}_3 = (0, 0, c)$$

6 nächste Nachbarn (NN-Abstand a)

2 übernächste Nachbarn (üNN-Abstand c)

reziprokes Gitter: ebenfalls hexagonal

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}(0, 1, 0) \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c}(0, 0, 1)$$

8.1.3 Netzebene, Millersche Indizes

Netzebene: Drei nicht auf einer Gerade liegende Punkte des Bravais-Gitters spannen eine Netzebene auf. Mit der Normalen $n = K/|K|$ und dem senkrechten Abstand zum Ursprung $D = 2\pi/K_{hkl}$ ergibt sich die Ebenengleichung $\vec{n}\vec{R} = D$.

Millersche Indizes: Die Vorfaktoren hkl der speziellen Darstellung

$$\vec{K} = \vec{K}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

nennt man Millersche Indizes. Sie stimmen mit der kartesischen Bezeichnung für den Normalenvektor überein und können mit folgendem Verfahren bestimmt werden:

- Schnittpunkt zwischen Netzebene und Kristallachsen bestimmen und als Vielfache der Basisvektoren ausdrücken: $(S_1, S_2, S_3) = (3, 2, 2)$
- Kehrwerte der Vorfaktoren bilden und kleinste ganze Zahl bestimmen, die im gleichen Verhältnis stehen: $(hkl) = (233)$

8.1.4 Kristallstrukturanalyse

Die Kristallstruktur kann durch Wechselwirkung mit elektromagnetischen Wellen ermittelt werden. Während Licht im VIS über die charakteristischen Abstände mittelt, können Röntgenstrahlen eine ausreichende Auflösung bieten. Röntgenstrahlung ($E \approx 1keV - 100keV$) entsteht durch Abbremsung energiereicher Elektronen in Materie (kontinuierliche Bremsstrahlung)

$$h\nu = \frac{h\lambda}{c} = eU \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{ce}{h}U$$

oder durch Elektronenübergänge in inneren Schalen (charakteristische Strahlung).

Theorie der elastischen Streuung

An der Gitterstruktur wird Strahlung elastisch gestreut. In Fraunhofer-Näherung (Fernfeld) ist die gestreute Welle $\mathbf{E}'(\mathbf{x}, t) \propto \sum_{\mathbf{R}_a} S_a e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{r}_a}$. XXX

Beugungsbedingungen

Aus den von Laue-Gleichungen

$$\mathbf{a}_1 \Delta \mathbf{k} = 2\pi \hat{h} \quad \mathbf{a}_2 \Delta \mathbf{k} = 2\pi \hat{k} \quad \mathbf{a}_3 \Delta \mathbf{k} = 2\pi \hat{l}$$

folgt mit $\mathbf{R}\mathbf{K} = 2\pi n$ eine triviale Lösung mit

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{K} = \hat{h}\mathbf{b}_1 + \hat{k}\mathbf{b}_2 + \hat{l}\mathbf{b}_3 = n(h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3) = n\mathbf{K}_{hkl}$$

Für einfache, rechtwinklige Gitter mit den Kantenlängen a, b und c findet man

$$\Delta \vec{k} = 2\pi \left(\frac{\hat{h}}{a}, \frac{\hat{k}}{b}, \frac{\hat{l}}{c} \right)$$

oder mit dem senkrechten Abstand D

$$|\Delta \mathbf{k}| = \frac{2\pi n}{D} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{D} = \sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$$

Der Vektor $\Delta \vec{k}$ steht dabei senkrecht auf der reflektierenden Netzebene. Mit der Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$ und dem Winkel 2Θ zwischen ein- und ausfallender Welle ergibt sich die Bragg'sche Reflexionsbedingung

$$2D \sin \Theta = n\lambda$$

8.2 Gitterschwingungen

8.2.1 zweiatomige lineare Kette in Born-Oppenheimer-Näherung

Man betrachte eine zweiatomige (zwei Atomsorten) lineare Kette, die unendlich ausgedehnt ist. In der Born-Oppenheimer-Näherung reagieren die Elektronen instantan (adiabatische Näherung). Ferner beschränke man sich zunächst auf die nächsten-Wechselwirkung (NN-WW).

Als klassische Gesamtenergie des schwingenden Gitters ergibt sich

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n,s} M_s \dot{u}_s^2 + \Phi(\{u_{0ns}\})$$

Da die Auslenkung auf der Gleichgewichtslage klein gegen die Atomabstände sein soll, kann die potentielle Energie Φ in einer Taylor-Reihe bis zur zweiten Ordnung (harmonische Näherung) genähert werden, wobei die erste Ableitung aufgrund der Gleichgewichtsbedingung verschwindet und die zweiten Ableitungen als Kraftkonstantenmatrix

$$D_{nn'}^{ss'} = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{ns} \partial u_{n's'}} \right)$$

aufgefasst werden.

Man kommt zu folgenden Bewegungsgleichungen, wenn man die Auslenkungen in der Form $M_s \ddot{u}_{ns} = F_{ns}$ schreibt.

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u}_{n1} &= -f (2u_{n1} - u_{n2} - u_{(n-1)2}) \\ M_2 \ddot{u}_{n2} &= -f (2u_{n2} - u_{n1} - u_{(n+1)1}) \end{aligned}$$

Mit einem exponentiellen Ansatz $u_{ns}(t) = u_s \exp(iqna - i\omega t)$, wobei der Radius $R_n = na$ und der Wellenvektor q in den Phasenfaktor $\exp(iqR_n)$ einwirken, kann das unendliche Gleichungssystem in ein LGS überführt werden

$$\begin{pmatrix} M_1 \omega^2 - 2f & f(1 + \exp(-iqa)) \\ f(1 + \exp(iqa)) & M_2 \omega^2 - 2f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = 0$$

Die Lösung dieses Eigenwertproblems liefert die Dispersionsrelation

$$\omega_{\pm}^2(q) = \frac{f}{\mu} \left(1 + \sqrt{1 - 4 \frac{\mu}{M} \sin^2 \left(\frac{1}{2} qa \right)} \right)$$

mit den folgenden Eigenschaften:

- ω_{\pm} sind periodisch in q : $\omega_{\pm}(q) = \omega_{\pm}(q + K)$ mit $K = n \frac{2\pi}{a}$
- $\omega_{\pm}(q) = \omega_{\pm}(-q)$, aufgrund der Zeitumkehrsymmetrie
- **akustischer Zweig** ω_0 für lange Wellen ($\lambda \rightarrow \infty$, $q \rightarrow 0$) ergibt sich eine lineare Dispersionsrelation mit der Schallgeschwindigkeit $v_s = \sqrt{\frac{fa^2}{2M}}$

$$\omega_-(q) \approx v_s q$$

Es gibt einen akustischen Zweig je Dimension des betrachteten Kristalls.

- **optischer Zweig** ω_+ für lange Wellen gilt $\omega_+^2(q) \approx \omega_+^2(0)$, also eine verschwindende Geschwindigkeit (=Ableitung), als obere Frequenz $\omega_+(0) = \sqrt{\frac{2f}{M}}$
- am Rande der Brillouin-Zone ($q = \frac{\pi}{a}$) münden die Dispersionsverläufe waagrecht ein (Ableitung gleich null) und ergeben (für $M_1 \neq M_2$) eine Frequenzlücke zwischen

$$\omega_+ \left(\frac{\pi}{a} \right) = \sqrt{\frac{2f}{M_1}} \quad \text{und} \quad \omega_- \left(\frac{\pi}{a} \right) = \sqrt{\frac{2f}{M_2}}$$

Zyklische Randbedingungen

Die unendliche Kette kann man durch zyklische Randbedingungen besser an die Realität anpassen (gleichzeitig vereinfacht sich die mathematische Beschreibung), bei einem Umlauf sollten sich die Eigenschaften nicht ändern, daher lautet die Born-v.Karman-Forderung

$$u_{(n+G)s} = u_{ns}$$

Aufgrund des Lösungsansatzes $u_{ns} \propto \exp(iqna)$ folgt $\exp(iqGa) = 1$ und mit G Wellenvektoren (G geradzahlig), die die BZ dicht und diskret auffüllen.

$$q = \frac{m}{G} \cdot \frac{2\pi}{a}$$

8.2.2 Normalkoordinaten, Phononen

In der harmonischen Näherung kann die Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n,s} M_s (\dot{u}_{ns})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n,n'} \sum_{s,s'} D_{nn'}^{ss'} u_{ns} u_{n's'}$$

auf ihre Hauptachsen transformiert werden. Hierfür entwickelt man nach den möglichen Eigenvektoren des Gitterproblems. Die Entwicklungskoeffizienten nennt man Normalkoordinaten. Nach einer quantenmechanischen Quantisierung spricht man von Phononen. Es zeigt sich, dass Phononen die Eigenschaften von Bosonen besitzen.

8.2.3 Innere Energie und Zustandsdichte

Die diskreten Energiezustände können nun aufsummiert werden und ergeben die Zustandsdichte

$$D(\omega) = \sum_{q,j} \delta(\omega - \omega_j(q))$$

Die Zustandsdichte gibt die Zahl der Zustände $d\epsilon D(\epsilon)$ im Energieintervall $\epsilon, \epsilon + d\epsilon$, wobei die Zustandsdichte auf die Zahl der Gesamtmoden

$$2G = 2 \sum_q = \sum_{q,j} = \int d\epsilon D(\epsilon)$$

normiert ist. Für genügend dichte Zustände $G \rightarrow \infty$ kann die Summation in eine Integration überführt werden. Im folgenden wird die Phononenzustandsdichte für einatomige Kristalle in Debye-Näherung ($\omega \approx v_s q$, BZ Kugel und Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände) bestimmt.

1D Phononenzustandsdichte

$L = Ga$, lineare Dispersionsrelation $\omega = v_s |q|$

$$\begin{aligned} D_{Debye}^{1D}(\omega) &= \sum_q \delta(\omega - v_s |q|) = \frac{L}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dq \cdot \delta(\omega - v_s |q|) \\ &= \frac{L}{2\pi} \cdot 2 \int_0^{+\infty} \frac{d\omega'}{v_s} \cdot \delta(\omega - \omega') \\ &= \frac{L}{\pi v_s} \cdot \Theta(\omega) \Theta(\omega_D - \omega) \end{aligned}$$

wobei die Debye-Frequenz ω_D durch die Anzahl der Moden bestimmt wird

$$\begin{aligned} \frac{L}{a} = G &= \int_0^{\omega_D} d\omega D_{Debye}^{1D}(\omega) = \frac{L}{\pi v_s} \omega_D \\ \Rightarrow \omega_D^{1D} &= \pi \cdot \frac{v_s}{a} \end{aligned}$$

2D Phononenzustandsdichte

$A = G^2 a^2$, da die Phononen sowohl longitudinal als auch transversal auftreten, gibt es je Brillouin-Zone 2 Phononenzustände.

$$\begin{aligned} D_{Debye}^{2D}(\omega) &= 2 \cdot \sum_q \delta(\omega - v_s |\vec{q}|) = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \cdot \int \cdot d^2 \vec{q} \cdot \delta(\omega - v_s |q|) \\ &= \frac{A}{\pi} \cdot \int_0^{+\infty} \cdot \frac{d\omega' \omega'}{v_s v_s} \cdot \delta(\omega - \omega') \\ &= \frac{A}{\pi v_s^2} \cdot \omega \cdot \Theta(\omega) \Theta(\omega_D - \omega) \quad \propto \omega \end{aligned}$$

wobei zu Polarkoordinaten $d^2 \mathbf{q} = 2\pi q dq$ übergegangen wird. Die Debye-Frequenz ω_D wird wiederum durch die Anzahl der Moden bestimmt:

$$\begin{aligned} 2G^2 &= \int_0^{\omega_D} d\omega D_{Debye}^{2D}(\omega) = \frac{A}{\pi v_s^2} \frac{1}{2} \omega_D^2 \\ \Rightarrow \omega_D^{2D} &= 2\sqrt{\pi} \cdot \frac{v_s}{a} \end{aligned}$$

3D Phononenzustandsdichte

$V = G^3 a^3$, wobei 3 Phononenzustände je BZ auftreten (1 longitudinal, 2 transversal)

$$\begin{aligned} D_{Debye}^{3D}(\omega) &= 3 \cdot \sum_q \delta(\omega - v_s |\vec{q}|) = 3 \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \int \cdot d^3 \vec{q} \cdot \delta(\omega - v_s |q|) \\ &= \frac{3V}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{v_s^3} \omega^2 \Theta(\omega) \Theta(\omega_D - \omega) \quad \propto \omega^2 \end{aligned}$$

wobei zu Kugelkoordinaten $d^3 \mathbf{q} = 4\pi q dq$ übergegangen wird. Die Debye-Frequenz ω_D wird wiederum durch die Anzahl der Moden bestimmt.

$$\omega_D^{3D} = (6\pi^2)^{1/3} \cdot \frac{v_s}{a}$$

Innere Energie

Die Innere Energie kann aus der Zustandsdichte mit der Bose-Einstein-Funktion $g(\epsilon) = \frac{1}{\exp(\epsilon/k_B T) - 1}$ berechnet werden

$$U(T) = E_0 + \int d\epsilon \cdot D(\epsilon) \cdot \epsilon \cdot g(\epsilon)$$

Die Integration ist dabei nicht analytisch lösbar, man beschränkt sich meist auf die zwei Grenzfälle:

$$\begin{aligned} T \rightarrow 0K &\Rightarrow g(\epsilon) \approx e^{-\epsilon/k_B T} \\ T \rightarrow \infty &\Rightarrow g(\epsilon) \approx \frac{1}{1 + \frac{\epsilon}{k_B T} - 1} = \frac{k_B T}{\epsilon} \end{aligned}$$

8.2.4 Verallgemeinerung auf 3D

Grundgebiet $V = G^3\Omega_0$, G^3 Elementarzellen und Gitterpunkte, SG^3 schwingende Atome, Eigenvektoren sind jetzt 3D-Vektoren (praktikabel: Komponenten in 1 longitudinale und 2 transversale Wellen zum Ausbreitungsvektor), folgende Konsequenzen

- Eigenwertproblem gibt $3S$ lineare homogene Gleichungen, Lösung Polynom in ω^2 vom Grad $3S$. Folgende Zweige sind möglich (häufig teilweise entartet)

| | |
|----------------|--------------------|
| 3 akustische | 3(S-1) optische |
| 1 longitudinal | (S-1) longitudinal |
| 2 transversal | 2(S-1) transversal |

- Übergang zum Integral: Zu jedem \mathbf{q} gehört ein Volumen im reziproken Raum $\frac{(2\pi)^3}{G^3\Omega_0} = \frac{(2\pi)^3}{V}$, für $G \rightarrow \infty$ kann man von der Summe zum Integral übergehen:

$$\sum_{\vec{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\vec{q} \dots$$

- Zustandsdichte (siehe oben)
- kritische Punkte: Erhebliche Beiträge zur Zustandsdichte sind für

$$\text{grad}_{\vec{q}}\omega_j(\vec{q}) = 0$$

8.2.5 Spezifische Wärmekapazität des Gitters

Im klassischen Fall ergibt sich die spezifische Wärmekapazität zu

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B \quad \text{mit } U(V, T) = 3Nk_B T$$

Quantenmechanische Behandlung

$$U(T) = E_0 + \int d\epsilon \cdot D(\epsilon) \cdot \epsilon \cdot g(\epsilon)$$

Aufgrund der stark unterschiedlichen Dispersion der akustischen und optischen Schwingungszweige ist es sinnvoll die Anteile aufzuspalten, so dass

$$D(\epsilon) = D^a(\epsilon) + D^o(\epsilon) \quad \text{und damit} \quad C_V = C_V^a + C_V^o$$

Einstein-Näherung (optischer Zweig): Ersetzung der Dispersionsrelation durch eine feste Frequenz

$$\omega_j(\mathbf{q}) \approx \omega_j \approx \omega_0$$

Die Zustandsdichte wird auf einen δ -Peak reduziert, sodass die innere Energie mit der Temperatur wie die Bose-Einstein-Funktion variiert.

$$C_V^o(T) = 3(S-1)G^3 k_B$$

Die optischen Gitterschwingungen tragen bei tiefen Temperaturen nicht zur Wärmekapazität bei.

Debye-Modell (akustischer Zweig): Lineare Approximation der Dispersionsrelation mit der Schallgeschwindigkeit bis zur Debye-Frequenz (Stoffabhängigkeit, obere Grenzfrequenz)

$$\omega_j(\mathbf{q}) \approx v_j |\mathbf{q}| \approx vq$$

Für die Zustandsdichte ergibt sich

$$D^a(\epsilon) = 3G^3 \frac{3}{\hbar\omega_D^3} \epsilon^2 \Theta(\hbar\omega_D - \epsilon) \Theta(\epsilon)$$

und schließlich für die spezifische Wärmekapazität

$$C_V^a(T) = 3G^3 k_b \frac{4\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

Dies entspricht dem bekannten Debyeschen T^3 -Gesetz für tiefe Temperaturen ($T < \Theta_D$, bei Metallen bis einige hundert K erfüllt)

| | akustische Phononen | optische Phononen | $a + o$ in 3D |
|-------------|--|--|----------------------|
| Näherung | Debye $\omega_j(\mathbf{q}) \approx v_s q$ | Einstein $\omega_j(\mathbf{q}) \approx \omega_0$ | |
| tiefe Temp. | $C_V^a(T) \sim T^3$ | $C_V^o(T) \approx 0$ | $C_V(T) \sim T^3$ |
| hohe Temp. | $C_V^a(T) = nG^3 k_B$ | $C_V^o(T) = n(S-1)G^3 k_B$ | $C_V(T) = 3SG^3 k_B$ |

8.2.6 Lichtstreuung

Inelastische Streuung durch Absorption oder Emission eines Phonons, dabei sind Impuls- und Energiesatz zu beachten. Betrachtete werden nur Lichtstreuungsprozesse mit Frequenzverschiebung.

Raman-Streuung (optische Phononen): Für Licht (VIS) gilt $|\mathbf{K}| \ll \frac{2\pi}{a}$, so dass nur eine sehr kleine Frequenzverschiebung gemessen werden kann und nur Phononen aus dem Zentrum der BZ ($\mathbf{q} \approx 0$) angeregt werden. Die kleine Frequenzverschiebung $\pm\omega$ erzeugt zwei Nebenmaxima im Spektrum, dabei bezeichnet man die $+\omega$ als Stokes- und $-\omega$ als anti Stokes-Streuung.

$$|\Omega - \Omega'| = \omega_j(\mathbf{q}) \approx 2k \sin(\phi/2)$$

Brillouin-Streuung (akustische Phononen): Die akustischen Phononen führen zu sehr kleinen Frequenzverschiebungen, die nur schwer aufgelöst werden können.

$$|\Omega - \Omega'| = \omega_j(\mathbf{q}) \approx vq \approx 2\Omega \frac{v}{c} \sin(\phi/2)$$

8.3 Elektronen in idealen Kristallen

8.3.1 Freies Elektronengas

Einfachste Näherung: Valenzelektronen als Gas freier Elektronen (keine Streuung an Ionenrümpfen, keine Elektron-Elektron-WW, Jellium-Modell)

QM-Betrachtung: ergibt aus der stationären Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\psi(x) = \epsilon\psi(x)$$

die allgemeine Lösung $\psi(x) \propto e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ (Eigenwerte $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}^2$) auf dem beschränkten Gebiet $V = L_x L_y L_z$ mit Born-v. Karman-Randbedingungen $e^{ik_\alpha L_\alpha} = 1$ und $k_\alpha = \frac{2\pi}{L_\alpha} n_\alpha$

Elektronen-Zustandsdichte: Summe über alle möglichen Zustände auf einer Energiefläche $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\begin{aligned} D^{3D}(\epsilon) &= \sum_{m_s} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \\ &= \underbrace{2}_{\text{Spins}} \cdot \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))}_{\Sigma \rightarrow f} \\ &= 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \underbrace{4\pi \cdot \int_0^\infty dk \cdot k^2}_{\text{Kugelkoordinaten}} \cdot \left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \\ &= \frac{V}{\pi^2} \cdot \int_0^\infty d\epsilon' \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cdot \epsilon'^{-1/2} \cdot \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \cdot \delta(\epsilon - \epsilon') \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon} \cdot \Theta(\epsilon) \sim \sqrt{\epsilon} \end{aligned}$$

Analog für 2D und 1D

$$\begin{aligned} D^{1D}(\epsilon) &= \frac{L}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \cdot \Theta(\epsilon) \sim 1/\sqrt{\epsilon} \\ D^{2D}(\epsilon) &= \frac{A}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \cdot \Theta(\epsilon) \sim const \end{aligned}$$

Fermi-Dirac-Verteilung: Beim Elektronengas handelt es sich um Fermionen. Nach dem Pauli-Prinzip darf jeder Zustand somit nur einmal besetzt werden.

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp((\epsilon - \mu)/k_B T) + 1}$$

geht für $T \rightarrow 0K$ in die Sprungfunktion $\Theta(\epsilon_F - \epsilon)$ über. Für $T > 0K$ zeigt sich eine Auswaschung der Sprungfunktion um die Fermi-Energie in einem Intervall von ungefähr $2k_B T$.

Fermi-Energie: Für das ganze Ensemble ergibt sich eine Gesamtzahl der Elektronen mit der spektralen Verteilung $D(\epsilon)$ (Strukturabhängigkeit) und der thermischen Verteilung (Abhängigkeit der Temperatur)

$$N = \int d\epsilon \cdot D(\epsilon) \cdot f(\epsilon)$$

Für $T \rightarrow 0K$ geht $f(\epsilon) \rightarrow \Theta(\epsilon_F - \epsilon)$, wobei die Fermi-Energie

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_F^2}{2m}$$

die maximale Energie darstellt, die bei voller Besetzung der Zustände gefüllt ist. Ferner lässt sich der Fermi-Wellenvektor $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, die Fermi-Geschwindigkeit $v_F = \frac{\hbar}{m} k_F$ und die Fermi-Temperatur $k_B T_F = \epsilon_F$ definieren.

Spezifische Wärme des Elektronengases: Das Elektronengas führt zu einer kleinen Änderung der inneren Energie durch die Aufweichung der Sprungfunktion für $T = 0K$. Es ergibt sich bei tiefen Temperaturen ein linearer Beitrag zur Wärmekapazität durch das Elektronengas.

$$C_V^{e^-}(T) = k^2 T D(\epsilon_F) \frac{\pi^2}{3} \propto T$$

8.3.2 Elektrostatische Abschirmung

Das Elektronengas reagiert auf Zusatzladungen durch Umverteilung. Bei positiven Zusatzladungen spricht man von einer Abschirmung, ohne Elektronengas ergibt sich ein Störpotential

$$\delta V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

das jedoch durch das Elektronengas zu

$$\delta U(\vec{x}) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{x}} \frac{4\pi}{q^2} \frac{1}{\epsilon(q)}$$

verformt wird. δU wird dabei als Yukawa-Potential bezeichnet und beinhaltet die Thomas-Fermi-Dielektrizitätsfunktion $\epsilon(q) = 1 + \frac{1}{(\lambda q)^2}$.

8.3.3 Wirkung äußerer Felder

statische Leitfähigkeit: Ein angelegtes elektrisches Feld beschleunigt Elektronen in \vec{E} -Richtung. Allerdings führen Stöße dazu, dass das \vec{E} -Feld effektiv nur zwischen zwei Stößen (mit zeitlichem Abstand: Stoßzeit τ) wirkt.

$$m \frac{d}{dt} \vec{v}(t) = -\frac{m}{\tau} \vec{v} - e\vec{E}$$

Für $t \gg \tau$ ergibt sich eine stationäre Lösung $\dot{\vec{v}} = 0$ mit der konstanten Geschwindigkeit $\vec{v} = -\frac{e\tau}{m}\vec{E}$, worüber sich die statische Leitfähigkeit σ_0 oder der spezifische Widerstand ρ ergibt

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n \tau}{m} = \frac{1}{\rho}$$

Ferner kann die mittlere freie Weglänge l mit der Fermigeschwindigkeit (Leitungselektronen sind beweglichsten Elektronen, entsprechend höchste Geschwindigkeit in Näherung v_F) oder die Beweglichkeit der Elektronen μ_0 definiert werden.

$$l = v_F \tau \quad \text{und} \quad \mu_b = \frac{|e|}{m} \tau \quad \text{mit} \quad \vec{v} = \mu_b \vec{E}$$

dynamische Leitfähigkeit: Obiges Ergebnis lässt sich für zeitliche veränderliche Felder $\vec{E}(t) = \vec{E} e^{-i\omega t}$ verallgemeinern, wobei die Elektronen erzwungene Schwingungen vollführen

$$m \frac{d}{dt} \vec{v}(t) = -\frac{m}{\tau} \vec{v} - e \vec{E} e^{-i\omega t}$$

Mit dem Lösungsansatz $\vec{v}(t) = \vec{v} e^{-i\omega t}$ ergibt sich für die Stromdichte \vec{j}

$$\vec{j} = -en\vec{v}(t) = \underbrace{\frac{e^2 n \tau}{m}}_{\sigma_0} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \vec{E} = \sigma(\omega) \vec{E}$$

Für optische Frequenzen und nicht zu hohe Temperaturen ($\omega\tau \gg 1$) dominiert der imaginäre Anteil. Aus den Maxwell-Gleichungen folgt eine Wellengleichung mit der komplexen dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$

$$\Delta_x \vec{E} + \frac{\omega^2}{c^2} \underbrace{\left(1 + \frac{i}{\omega\epsilon_0} \sigma(\omega)\right)}_{\epsilon(\omega)} \vec{E} = 0$$

Mit Einführung der Plasmafrequenz $\omega_p^2 = \frac{\sigma_0}{\epsilon_0 \tau} = \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m}$ erhält man die Drude-Formel

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\frac{\omega}{\tau}}$$

sowie für senkrechten Einfall das Reflexionsvermögen (Fresnel-Formel)

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\epsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\epsilon(\omega)} + 1} \right|^2$$

Magnetfeld: Die verallgemeinerte Lorentz-Kraft $\vec{F} = -e[\vec{E} + \vec{v}(t) \times \vec{B}]$ liefert für ein schwaches Magnetfeld in z -Richtung ($\omega_c \tau < 1$ und $k_B T \gg \hbar \omega_c$ mit Zyklotronfrequenz $\omega_c = eB/m$) einen dynamischen Leitfähigkeitstensor

$$\hat{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c \tau \end{pmatrix}$$

Eine wichtige Konsequenz der Nichtdiagonalelemente ist der **Hall-Effekt**, also eine seitliche Ablenkung von freien Ladungsträgern. Bei einem z -Magnetfeld, werden die Ladungsträger in x -Richtung abgelenkt. Ein Gegenfeld wird zur Messung des Magnetfeldes angelegt, das das ohmsche Gesetz $U_H = R_H I$ mit $R_H = \frac{B}{enL_z}$ erfüllt. Bei näherer Betrachtung zeigt sich kein kontinuierlicher Hall-Widerstand mit steigender Magnetfeldstärke, sondern ein quantisierter Widerstand $R_H = \frac{1}{i} \frac{h}{e^2}$ (**Quanten-Hall-Effekt**)

8.3.4 Elektronen im periodischen Potential, Bandstruktur

Das freie Elektronengas stellte nur eine erste Näherung da, schließlich bewegen sich die Elektronen über Ionenrüpfen. Für einen idealen Kristall ergibt sich ein periodische Potential, aus dem sich wiederum eine periodische Lösung ergibt.

Zur Lösung dieses Problems mit rund 10^{23} Teilchen werden folgende Näherungen gemacht

- adiabatische Näherung: instantane Elektronenverteilung auf Kernkonfiguration
- Beschränkung auf Valenzelektronen: Da die Rumpfelektronen i.A. fest an den Kern gebunden sind, werden die Kristalleigenschaften durch die Valenzelektronen entscheidend beschrieben.
- Einelektronennäherung: In der Hartree-Näherung werden quantenmechanische Effekte (Austausch, Korrelation, e^- -WW) vernachlässigt und die Elektronen-Bewegung im Feld aller anderen Elektronen beschrieben.

$$H_{ges} = \sum_i^N H(\mathbf{x}_i) \quad \text{mit } H(\mathbf{x}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x})$$

Man gelangt auch für das Vielteilchensystem zur Einelektronen-Schrödinger-Gleichung, die nun Bloch-Gleichung genannt wird. Aus der Gitterperiodizität ($V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{R})$, $\mathbf{R} \in \text{Bravais-Gitter}$) ergibt sich für die Eigenfunktionen $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ und als Lösung die Bloch-Funktionen mit dem gitterperiodischen Bloch-Faktor $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$

$$\Psi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x})u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{x})$$

Dabei wurde der Wellenvektor auf eine Brillouin-Zone beschränkt und die Quantenzahl ν als Bandindex eingeführt. Die Menge aller Energieniveaus mit gleichem ν wird Energieband genannt. Das periodische Potential führt zu Lücken zwischen den Energiebändern, da sich für $\mathbf{k} \rightarrow \left(\frac{2\pi}{R_a}\right)$ (Rand der Brillouin-Zone) deutliche Abweichungen vom Parabelpotential ergeben. Im Rahmen der Störungstheorie kann man die periodische Störung für ein Kastenpotential berechnen und erhält an den Rändern $\frac{dE}{dk} = 0$.

Für $k \ll \frac{2\pi}{R_a}$ beziehungsweise $\lambda \gg R_a$ geht die Lösung in das freie Elektronengas über, da über das Potential grob gemittelt wird.

Allgemeines zur Energiebandstruktur

Leiter / Isolator: Hängt von der Besetzung der Energiebänder ab. Ist ein Band vollständig mit Elektronen gefüllt, so können diese Elektronen nicht am Stromtransport teilnehmen, da Leitungselektronen kinetische Energie aufnehmen müssen. In einem voll besetzten Band ist dies aber nicht mehr möglich, da bereits alle möglichen Zustände besetzt sind. Nur Festkörper mit teilweise besetztem und unbesetztem Energieband können Leiter sein. Das oberste vollständig gefüllte Band heißt Valenzband, das darüber liegende Leitungsband.

Symmetrie und Entartung:

- Sternentartung: Punktgruppensymmetrie $\{\alpha, 0\}$ verknüpft physikalisch äquivalente aber räumlich verschiedene Punkte.
- Zeitumkehrsymmetrie: Es gilt immer $\epsilon_\nu(\mathbf{k}) = \epsilon_\nu(-\mathbf{k})$, womit der Γ -Punkt immer ein kritischer Punkt ist. Gilt nur für leichte Elemente, sonst Spin-Bahn-WW.
- Bandüberlappung: Zufällige Überlappung
- Bandentartung: Aus Symmetriegründen gibt es meist an speziellen Punkten $\epsilon_\nu(\mathbf{k}) = \epsilon_{\nu'}(\mathbf{k})$. Meist Rudiment der Entartung bei freien Atomen.
- Spinentartung: Für leichte Elemente relativistische Effekte vernachlässigbar, Potential hängt nicht vom Spin ab.

Zustandsdichte: Analoges Vorgehen wie bei Phononen und freien Elektronen, Spinentartung gibt Faktor 2

$$D(\epsilon) = 2 \sum_{\nu, \mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_\nu(\mathbf{k})) = \frac{V}{4\pi^2} \sum_{\nu} \int_{\epsilon_\nu(\mathbf{k})=\epsilon} \frac{df}{\text{grad}_{\mathbf{k}} \epsilon_\nu(\mathbf{k})}$$

Die größten Beiträge zur Zustandsdichte zeigen sich wieder für $\text{grad}\epsilon = 0$ (kritische Punkte), womit eine Näherung sinnvoll ist.

Effektive Masse: An kritischen Punkten kann die Dispersionrelation entwickelt werden, wobei die zweiten Ableitungen auf einen Tensor der reziproken effektiven Masse für das Band ν . Dieser Tensor ist symmetrisch und kann damit auf Hauptachsenform transformiert werden.

$$\epsilon_\nu(\mathbf{k}) = \epsilon_\nu(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \left\{ \frac{1}{m_\nu(\mathbf{k}_0)} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \right\}$$

$$\left\{ \frac{1}{m_\nu(\mathbf{k}_0)} \right\}_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} \epsilon_\nu(\mathbf{k})_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$$

Die Massen werden nun durch die effektiven Massen in der Nähe der kritischen Punkte ersetzt, da sie positiv wie auch negativ sein können, gibt es vier Arten von kritischen Punkten und damit van-Hove-Singularitäten der Zustandsdichte:

- M_0 : Bandminimum, alle effektiven Massen > 0 , flächen konstanter Energie sind Ellipsoide

- M_1 : Sattelpunkt, ein $m_{i^*} < 0$, einschalige Hyperboloide
- M_1 : Sattelpunkt, zwei $m_{i^*} < 0$, zweischalige Hyperboloide
- M_1 : Bandmaximum, alle $m_{i^*} < 0$, Ellipsoide

Die Dichte der Zustände wird durch die Bandkrümmung (d.h. die Größe der effektiven Massen) bestimmt.

Man findet für das Band ν am kritischen Punkt \mathbf{k}_0 im Hauptachsensystem des effektiven Massentensors für Maxima und Minima folgenden Beitrag für die Zustandsdichte:

$$D_{Extr.}(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{|m_x m_y m_z|} \sqrt{|\epsilon - \epsilon_\nu(\mathbf{k}_0)|} \Theta(\pm[\epsilon - \epsilon_\nu(\mathbf{k}_0)])$$

8.3.5 Methoden zur Berechnung von Bandstrukturen

Methode der starken Bindung

Man nimmt an, dass die Elektronen stark an die Atome gebunden sind. Damit kann das Problem in Eigenfunktionen des freien Atoms ϕ_i entwickelt werden. (LCAO - linear combination of atomic orbitals)

$$\chi_{i\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{G^{3/2}} \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \phi(\mathbf{x} - \mathbf{R})$$

Man findet schließlich die Bänder als modifizierte atomare Niveaus.

$$\epsilon_\nu(\mathbf{k}) = \delta_{\nu j} \{ \epsilon_j + \beta_{jj}(0) + \sum_{\mathbf{R}} \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}) \beta_{jj}(\mathbf{R}) \}$$

Das atomare Niveau wird also durch die intraatomaren WW $\beta_{jj}(0)$ negativ verschoben (core level shift). Das Rumpfpotential wirkt also stärker, da die Valenzelektronen durch die chemische Bindung delokalisiert werden. Die interatomare WW $\beta_{jj}(\mathbf{R})$ hebt die G^3 -fache Entartung der atomaren Niveaus auf, es kommt zur Dispersion des Bandes (Bandcharakter).

Methode fast freier Elektronen

Die Elektronen sind nun nur schwach an die Atomrümpfe gebunden, das Kristallpotential variiert nur leicht um seinen räumlichen Mittelwert. Damit können die Eigenzustände des Kristalls direkt nach den Eigenfunktionen des Elektronen-Problems entwickelt werden. Bei der Lösung kann das Überlappungsintegral durch Kronecker-Symbole ersetzt werden, womit sich der große Vorteil der Entwicklung in ebene Wellen zeigt. (Rechnungen hierzu ab Seite 138 im Festkörper-Skript)

8.4 Halbleiter

8.5 Optische und dielektrische Eigenschaften

8.6 Supraleitung

8.7 Magnetismus

9 Kernphysik

9.1 Werkzeuge der Kernphysik

9.1.1 Beschleuniger

9.1.2 Wechselwirkung Strahlung und Materie, Detektoren

9.2 Stabile Kerne

Aus den Rutherford-Streuexperimenten ergibt sich ein Kernradius $R = r_0 A^{1/3}$ mit der Nukleonenzahl $A = Z + N$. Einfach lässt sich zudem die Kernmasse mit einem Massenspektrograph messen (homogenes Magnetfeld ergibt Kreisbahn mit $r(m)$).

9.2.1 Tröpfchenmodell

Das Tröpfchenmodell liefert Grundlagen zum Verlauf der Bindungsenergien und Kernmassen. Die Bindungsenergie $B = \sum B_i$ setzt sich dabei aus 5 Komponenten zusammen, als Energiebilanz ergibt sich die Bethe-Weizsäcker-Formel

$$m(Z, A) = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - \frac{B}{c^2}$$

- Kondensationsenergie (Volumenbeitrag) wird frei, wenn sich die Nukleonen durch die starke Kernkraft zum Kern vereinigen: $B_1 = a_V A$
- Oberflächenenergie durch die kleinere Bindungsenergie von Nukleonen am Kernrand, besonders bei kleinen Kernen: $B_2 = -a_S A^{2/3}$
- Coulomb-Abstoßung führt zur (langreichweitigen) Abstoßung von Protonen, wird für größere Kerne immer wichtiger: $B_3 = -a_C Z^2 A^{-1/3}$
- Neutronenüberschuss senkt als Asymmetrie-Energie ebenfalls die Bindungsenergie: $B_4 = -a_A \frac{(Z-A/2)^2}{A}$
- Paarungsenergie gleicher Nukleonen (gg bedeutet gerades Z und gerades $N = A - Z$) muss als Korrektur hinzugefügt werden: $B_5 = \begin{cases} +\delta & gg - \text{Kerne} \\ 0 & ug / ug \\ -\delta & uu - \text{Kerne} \end{cases}$ mit $\delta \approx a_P A^{-1/2}$

Bereits diese einfache Betrachtung ergibt wichtige Gesetzmäßigkeiten: Für ungerades A gibt es stets nur ein stabiles Isobar (A fest, Z variiert), für gerade A (Paarungsenergie $\pm\delta$ ergeben sich zwei Parabeln in Z) sind mehrere stabile Isobare möglich.

9.2.2 Fermi-Gas-Modell

Im Fermi-Gas-Modell wird der Kern als Potentialtopf beschrieben. Die Nukleonen können sich dabei im Potentialtopf wechselwirkungsfrei bewegen. Die kurze Reichweite (nur nächste Nachbarn) führt zu einem sprunghaften Potentialanstieg an den Kanten.

9.2.3 Hartree-Fock-Methode

Man betrachtet ein beliebiges Nukleon und fasst die Wirkung aller anderen Nukleonen als ein gemitteltes Potential dar. Dabei bleiben Terme der Paarwechselwirkung außen vor, die nicht in die Mittelung einbezogen werden können. Aus dem Hartree-Fock-Modell ergeben sich die magischen Zahlen. Falls N oder Z die Werte 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 annimmt, ist die Separationsenergie unerwartet hoch. Sie bilden die Grundlage für das Schalenmodell und ergeben sich aus der Wechselwirkungsenergie zwischen Spin und Bahndrehimpuls eines Nukleons.

9.3 Instabile Kerne, Zerfall

9.3.1 Zerfallsgesetz

Die Zerfallswahrscheinlichkeit $\lambda = |\langle\psi_f|O|\psi_i\rangle|^2$ ist eine Konstante, die von Naturkonstanten, nicht aber von makroskopischen Größen wie Temperatur, Druck oder Magnetfeldern abhängt. Für die Aktivität $A = -\frac{dN}{dt} = \lambda N$, also die Zahl der Zerfälle pro Zeiteinheit, wird die Einheit Becquerel (Zerfälle/s) genutzt.

9.3.2 α -Zerfall

Als α -Strahlung bezeichnet man freie Heliumatome. Sie entsteht durch dynamische Instabilitäten. Der Tunneleffekt ermöglicht, dass ein Teil des Kerns den Potentialtopf verlassen kann. Die α -Strahlung ist diskret, daher kann kein weiteres Teilchen beteiligt sein. Es handelt sich um ein Zweiteilchenproblem (Kern und Heliumatom), wobei der Kern durch hohe Masse nur eine ganz geringe kinetische Energie erhält. Meist dominiert der Übergang zum Grundzustand.

$$E_B(A - 4, Z - 2) > E_B(A, Z) - E_\alpha$$

9.3.3 Kernspaltung

Die Kernspaltung ist eine weitere Folge von dynamischer Instabilität, meist wird bei der Spaltung in zwei Bruchstücke Energie frei. Der zunächst sphärische Kern muss verformt werden, wobei gegen die Oberflächenspannung Energie verrichtet wird. Schließlich schnürt sich der Tropfen ein, die elektrostatische Abstoßung überwiegt und am Szissionspunkt

trennen sich die Teile und fliegen im abstoßenden Potential auseinander. Bei einem kleinen Potentialwall reicht teilweise die thermische Energie aus und es kommt zur spontanen Spaltung, bei vielen Atomkernen ist aber eine Energiezufuhr nötig (induzierte Spaltung).

9.3.4 Elektromagnetische Übergänge (γ -Strahlung)

Liegt die Anregungsenergie unter der Schwelle für die Emission von Teilchen, so kann er diese nur in Form von γ -Quanten (elektromagnetische Wellen) abgeben. Dabei gilt Energie- und Impulserhaltung, wobei für die thermische Kernbewegung meist eine klassische nicht-relativistische Beschreibung genügt.

Bei der Emission (-) und Absorption (+) müssen aufgrund der geringen Linienbreite, der Rückstoß und der Dopplereffekt berücksichtigt werden.

$$E_\gamma \approx \Delta E \quad \mp \underbrace{\frac{\Delta E^2}{2m_k c^2}}_{\text{Rueckstoss bei ruhendem Kern}} \quad + \underbrace{\frac{v_{therm}}{c} \Delta E \cdot \cos \theta}_{\text{Doppler-Effekt}}$$

9.3.5 Kernresonanzabsorption (Mößbauer Effekt)

Bei der Emission von Photonen (γ -Strahlung) muss neben der Energie auch der Impuls erhalten bleiben, ein kleiner Teil der Energie wird damit als kinetische Energie an den Kern abgegeben. Entsprechend verringert sich die Energie des γ -Quants. Gleiches gilt für Absorption mit geänderten Vorzeichen. Aufgrund der geringen Linienbreite ist die Wahrscheinlichkeit, dass beide Zustände übereinstimmen, sehr unwahrscheinlich.

Ist das Atom in ein Kristallgitter eingebaut, so kann nicht mehr jede kinetische Energie übertragen werden (diskrete Energiewerte). Es kann Rückstoß-freie Resonanzabsorption auftreten (Mößbauer-Effekt), falls die Rückstoßenergie nicht ausreicht, um das Atom in den nächst höheren Zustand zu bringen. Die Energielücken im Festkörper werden um so größer, je stärker das Atom im Festkörper gebunden ist und je tiefer die Temperatur geht (damit steigt Wahrscheinlichkeit für Mößbauer-Effekt). Die Mößbauer-Linie ist dabei von einem relativ breit strukturierten Phononespektrum begleitet (Linienbreite der Phonon-Linie deutlich größer).

9.4 β -Zerfall und schwache Wechselwirkung

9.4.1 Experimentelle Befunde und Neutrino

Als β -Strahlung bezeichnet man Elektronen, die durch Umwandlung zwischen Protonen und Neutronen entsteht. Die Elektronen haben eine kontinuierliche Energieverteilung, obwohl der Übergang mit fest definierten Energiedifferenzen stattfindet. Die Kernladungszahl ändert sich dabei um 1, der Spin von Mutter- zu Tochterkern um 0 oder 1 (obwohl 1/2 bei Emission eines Elektrons erwartet). Ein theoretischer Ausweg wurde von Pauli aufgezeigt, indem er ein weiteres Teilchen postulierte: Das Neutrino. Die β -Strahlung kann mit den bisherigen Wechselwirkungen nicht erklärt werden, man benötigt eine neue "schwache Wechselwirkung".

9.4.2 Theoretische Beschreibung

Man unterscheidet folgende Arten:

β^- -Strahlung: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ erhält man eine gesamte kinetische Energie

$$\begin{aligned} E(A, Z) &= E(A, Z+1) + m_e c^2 + m_\nu c^2 + E_{kin} \\ Z m_p c^2 + (A-Z) m_n c^2 - E_B(A, Z) &= (Z+1) m_p c^2 + A(-Z-1) m_n c^2 + m_e c^2 + m_\nu c^2 + E_{kin} \\ \Rightarrow E_{kin} &= E_B(A, Z+1) - E_B(A, Z) + (m_n - m_p + m_e - m_\nu) c^2 \end{aligned}$$

Die Energiebilanz ist dabei günstig, da eine Emission selbst für gleiche E_B möglich ist.

β^+ -Strahlung: $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$ mit der sehr ungünstiger Energiebilanz $E_{kin} = E_B(A, Z-1) - E_B(A, Z) - (m_n - m_p + m_e + m_\nu) c^2$

K -Einfang: $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$ Es wird eine Elektron aus der Hülle vom Kern eingefangen und für den Prozess genutzt. $E_{kin} = E_B(A, Z-1) - E_B(A, Z) - (m_n - m_p - m_e + m_\nu) c^2$

Die scharf definierte kinetische Gesamtenergie verteilt sich dabei kontinuierlich auf die Partner.

9.4.3 Nichterhaltung der Parität

Der β -Zerfallsprozess ist nicht invariant gegen Raumspiegelungen. Die zur Beschreibung erforderlichen Wellenfunktionen haben keine definierte Parität.

9.5 Kernkräfte und starke Wechselwirkung

Die starke Wechselwirkung ist sehr kurzreichweitig und tritt nur zwischen Hadronen (z.B. Neutronen, Protonen, Mesonen) auf.

9.5.1 Eigenschaften des Deuterons

Das Deuteron ist der einfachste zusammengesetzte Kern (1 Proton, 1 Neutron).

9.5.2 Spinabhängigkeit, Ladungsunabhängigkeit der Kernkräfte

Die Tatsache, dass kein gebundener Singulettzustand (Spin 0) des Deuterons beobachtet wird, weist auf eine Spinabhängigkeit der starken Wechselwirkung hin. Streuexperimente mit n-n und p-p zeigen (nach Korrekturen der Austausch und Coulomb-Terme) nahezu gleiche Parameter. Hinsichtlich ihrer starken Wechselwirkung sind Neutronen und Protonen gleich. Die starke Wechselwirkung kann theoretisch in der Quantenchromodynamik behandelt werden.