
Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen	1
1.1 Fachgebiete, Geschichte, Größenordnungen	2
1.1.1 Quantennatur der Materie	4
1.1.2 Größenordnungen	7
1.2 Relativität – kurz und bündig	11
1.2.1 Masse, Impuls, Energie und Beschleunigung	11
1.2.2 Energieerhaltung relativistisch, Vierervektoren	14
1.2.3 Zeitdilatation und LORENTZ-Kontraktion	15
1.3 Etwas elementare Statistik und Anwendungen	17
1.3.1 Exponentialverteilungen	18
1.3.2 Kinetische Gastheorie	22
1.3.3 Klassische und Quantenstatistik, Fermionen und Bosonen	24
1.4 Photonen	31
1.4.1 Photoeffekt und Energiequantisierung	31
1.4.2 COMPTON-Effekt und der Impuls des Photons	33
1.4.3 Paarerzeugung	34
1.4.4 Drehimpuls und Masse des Photons	35
1.4.5 Das elektromagnetische Spektrum	36
1.4.6 PLANCK'sches Strahlungsgesetz	36
1.4.7 Sonneneinstrahlung auf die Erde	39
1.4.8 Photometrie – Lichtausbeute und Effizienz	43
1.4.9 RÖNTGEN-Beugung und Strukturanalyse	47
1.5 Die vier fundamentalen Wechselwirkungen	51
1.5.1 COULOMB- und Gravitationswechselwirkung	52
1.5.2 Das Standardmodell der fundamentalen Wechselwirkungen	53
1.5.3 Hadronen	55
1.5.4 Das Elektron	57
1.6 Teilchen in elektrischen und magnetischen Feldern	59
1.6.1 Ladungen im elektrischen Feld	60
1.6.2 Ladung im Magnetfeld	60

1.6.3	Zyklotronfrequenz und ICR-Spektrometer	61
1.6.4	Andere Massenspektrometer	62
1.6.5	Plasmafrequenz	63
1.7	BOHR'sches Atommodell	65
1.7.1	Grundannahmen	66
1.7.2	Radien und Energien	68
1.7.3	Atomare Einheiten (a.u.)	69
1.7.4	Korrekturfaktoren für endliche Kernmasse	69
1.7.5	Energien und Spektren wasserstoffähnlicher Ionen	70
1.7.6	Grenzen des BOHR'schen Modells	71
1.8	Teilchen und Wellen	72
1.8.1	DE BROGLIE-Wellenlänge	72
1.8.2	Experimentelle Evidenz	72
1.8.3	Unschärferelation und Beobachtung	76
1.8.4	Stabilität des atomaren Grundzustands	77
1.9	STERN-GERLACH-Experiment und Richtungsquantisierung	79
1.9.1	Magnetisches Moment und Drehimpuls	79
1.9.2	Das magnetische Moment im magnetischen Feld	80
1.9.3	Das Experiment	81
1.9.4	Interpretation des STERN-GERLACH-Experiments	84
1.9.5	Konsequenzen des STERN-GERLACH-Experiments	85
1.10	Elektronenspin	87
1.10.1	Magnetisches Moment des Elektrons	88
1.10.2	EINSTEIN-DE HAAS-Effekt	89
	Akronyme und Terminologie	90
	Literatur	93
2	Elemente der Quantenmechanik und das H-Atom	97
2.1	Materiewellen	98
2.1.1	Grenzen der klassischen Theorie	98
2.1.2	Wahrscheinlichkeitsamplitude in der Optik	98
2.1.3	Wahrscheinlichkeitsamplitude bei Materiewellen	100
2.2	SCHRÖDINGER-Gleichung	101
2.2.1	Eine Wellengleichung	101
2.2.2	HAMILTON- und Impulsoperator	101
2.2.3	Zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung	102
2.2.4	Frei bewegtes Teilchen – das einfachste Beispiel	104
2.3	Axiome und Begriffe der Quantenmechanik	105
2.3.1	Grundbegriffe	105
2.3.2	Repräsentationen	110
2.3.3	Gleichzeitige Messung von zwei Observablen	110
2.3.4	Operatoren für Ort, Impuls und Energie	111
2.3.5	Eigenfunktionen des Impulses \hat{p}	112
2.4	Teilchen im Kasten – freies Elektronengas	113
2.4.1	Teilchen im eindimensionalen Potenzialkasten	113

2.4.2	Dreidimensionales Kastenpotenzial	114
2.4.3	Das freie Elektronengas	115
2.5	Bahndrehimpuls	118
2.5.1	Polarkoordinaten	118
2.5.2	Definition des Bahndrehimpulses	119
2.5.3	Eigenwerte und Eigenfunktionen	120
2.5.4	Elektronenspin	124
2.6	Einelektronensysteme und das H-Atom	127
2.6.1	Quantenmechanik des Einteilchenproblems	127
2.6.2	Atomare Einheiten	129
2.6.3	Schwerpunktbewegung und reduzierte Masse	129
2.6.4	Qualitative Überlegungen	130
2.6.5	Exakte Lösung für das H-Atom	131
2.6.6	Energieniveaus im H-Atom	132
2.6.7	Radialfunktionen explizit	134
2.6.8	Dichtedarstellungen	136
2.6.9	Die Spektren des H-Atoms	137
2.6.10	Erwartungswerte von r^k	138
2.6.11	Vergleich mit dem Bohr'schen Modell	138
2.7	Normaler ZEEMAN-Effekt	140
2.7.1	Bahndrehimpuls im externen Magnetfeld	141
2.7.2	Aufhebung der m -Entartung	142
2.8	Dispersionsrelationen	144
	Akronyme und Terminologie	147
	Literatur	148
3	Periodensystem und Aufhebung der ℓ-Entartung	149
3.1	Schalenaufbau der Atome, Periodensystem der Elemente	150
3.1.1	Elektronenkonfiguration	150
3.1.2	PAULI-Prinzip	150
3.1.3	Wie die Schalen gefüllt werden	151
3.1.4	Das Periodensystem der Elemente	152
3.1.5	Einige experimentelle Fakten	155
3.2	Quasi-Einelektronensystem	157
3.2.1	Spektroskopische Befunde für die Alkaliatome	158
3.2.2	Quantendefekt	159
3.2.3	Abgeschirmtes COULOMB-Potenzial	161
3.2.4	Radialfunktionen	162
3.2.5	Präzise Berechnung für Na als Beispiel	163
3.2.6	Quantendefekttheorie	165
3.2.7	MOSLEY-Diagramm für Na-ähnliche Ionen	172
3.3	Störungstheorie für stationäre Probleme	174
3.3.1	Störungsansatz für den nicht entarteten Fall	174
3.3.2	Störungstheorie 1. Ordnung	175
3.3.3	Störungstheorie 2. Ordnung	177
3.3.4	Störungstheorie mit Entartung	178

3.3.5	Anwendung der Störungsrechnung auf Alkaliatome	179
	Akronyme und Terminologie	181
	Literatur.	182
4	Nichtstationäre Probleme: Dipolanregung mit einem Photon	183
4.1	Elektromagnetische Wellen: Grundbegriffe	184
4.1.1	Elektrisches Feld und Intensität	184
4.1.2	Basisvektoren der Polarisierung	185
4.1.3	Koordinatensystem	189
4.1.4	Drehimpuls des Photons	189
4.2	Absorption und Emission – Einführung	191
4.2.1	Stationäre Zustände	191
4.2.2	Optische Spektroskopie – Allgemeine Konzepte	192
4.2.3	Induzierte Prozesse	193
4.2.4	Spontane Emission, klassische Interpretation	197
4.2.5	Die EINSTEIN'schen <i>A</i> - und <i>B</i> -Koeffizienten	199
4.3	Zeitabhängige Störungsrechnung	202
4.3.1	Grundsätzliches	202
4.3.2	Näherungsansatz für Übergangsamplituden	204
4.3.3	Übergänge in einer monochromatischen ebenen Welle	204
4.3.4	Dipolnäherung	205
4.3.5	Absorptionswahrscheinlichkeiten	207
4.3.6	Absorption und Emission: Eine erste Zusammenfassung	209
4.4	Auswahlregeln für Dipolübergänge (E1-Übergänge)	213
4.4.1	Drehimpuls und Auswahlregeln	213
4.4.2	Übergangsamplituden in der Helizitätsbasis	215
4.4.3	Übergangsmatrixelemente und Auswahlregeln quantitativ	217
4.4.4	E1-Übergänge im H-Atom als konkretes Beispiel	219
4.5	Winkelabhängigkeit der Dipolstrahlung	221
4.5.1	Semiklassische Veranschaulichung	221
4.5.2	Quantenmechanische Berechnung der Winkelverteilungen	224
4.6	Stärke von elektrischen Dipolübergängen	230
4.6.1	Linienstärke	230
4.6.2	Spontane Übergangswahrscheinlichkeit	231
4.6.3	Induzierte Übergänge	233
4.7	Überlagerung von Zuständen, Quantenbeats und Quantensprünge	235
4.7.1	Kohärente Besetzung durch optische Übergänge	235
4.7.2	Zeitabhängigkeit und Quantenbeats	239
4.7.3	Quantensprünge	243
	Akronyme und Terminologie	244
	Literatur.	245

5	Linienbreiten, Multiphotonenprozesse und mehr	247
5.1	Linienverbreiterung	248
5.1.1	Natürliche Linienbreite	248
5.1.2	Dispersion	253
5.1.3	Stoßverbreiterung	254
5.1.4	DOPPLER-Verbreiterung	255
5.1.5	VOIGT-Profil	257
5.2	Oszillatorenstärke und Wirkungsquerschnitt	259
5.2.1	Verallgemeinerung der Übergangsraten	259
5.2.2	Oszillatorenstärke	260
5.2.3	Absorptionsquerschnitt	261
5.2.4	Verschiedene Schreibweisen – Strahlungstransfer in Gasen	264
5.3	Multiphotonenprozesse	265
5.3.1	Zweiphotonenanregung	267
5.3.2	Zweiphotonenemission	270
5.4	Magnetische Dipol- und elektrische Quadrupolübergänge	272
5.5	Photoionisation	277
5.5.1	Prozess und Wirkungsquerschnitt	278
5.5.2	BORN'sche Näherung für die Photoionisation	280
5.5.3	Winkelverteilung der Photoelektronen	284
5.5.4	Photoionisationsquerschnitt in Theorie und Experiment	285
5.5.5	Multiphotonenionisation (MPI)	289
	Akronyme und Terminologie	294
	Literatur	295
6	Feinstruktur und LAMB-Shift	299
6.1	Methoden der hochauflösenden Spektroskopie	300
6.1.1	Gitterspektrometer	300
6.1.2	Interferometer	304
6.1.3	DOPPLER-freie Spektroskopie in Atomstrahlen	308
6.1.4	Kollineare Laserspektroskopie in Ionenstrahlen	310
6.1.5	Lochbrennen	311
6.1.6	DOPPLER-freie Sättigungsspektroskopie	313
6.1.7	RAMSEY-Streifen	315
6.1.8	DOPPLER-freie Zweiphotonenspektroskopie	317
6.2	Wechselwirkung zwischen Spin und Bahn	321
6.2.1	Experimentelle Befunde	321
6.2.2	Magnetische Momente von Spin und Bahn im Magnetfeld	322
6.2.3	Allgemeine Überlegungen zur <i>LS</i> -Wechselwirkung	323
6.2.4	Größenordnung der Spin-Bahn-Wechselwirkung	325
6.2.5	Drehimpulskopplung, Gesamtdrehimpuls	325
6.2.6	Terminologie für die Atomstruktur	329

6.3	Quantitative Bestimmung der Feinstrukturaufspaltung	332
6.3.1	Die FS-Terme aus der DIRAC-Theorie	332
6.3.2	Feinstruktur im H-Atom	335
6.3.3	Feinstruktur der Alkaliatome und anderer Atome	336
6.4	Auswahlregeln und Intensitäten für Übergänge	339
6.4.1	Einführung	339
6.4.2	Linienstärke und Übergänge zwischen Unterniveaus	340
6.4.3	Einige nützliche Beziehungen für die praktische Spektroskopie	343
6.5	LAMB-Shift	346
6.5.1	Feinstruktur und LAMB-Shift bei der BALMER- H_{α} -Linie	346
6.5.2	Mikrowellen- und RF-Übergänge – DOPPLER-frei	347
6.5.3	Das Experiment von LAMB und RETHERFORD	347
6.5.4	Präzisionsspektroskopie des H-Atoms	349
6.5.5	LAMB-Shift bei hochgeladenen Ionen	353
6.5.6	QED und FEYNMAN-Diagramme	355
6.5.7	Zur Theorie der LAMB-Shift	359
6.6	Anomales magnetisches Moment des Elektrons	363
	Akronyme und Terminologie	368
	Literatur.	370
7	Helium und andere Zweielektronensysteme	375
7.1	Einführung und empirische Befunde	376
7.1.1	Grundlagen	376
7.1.2	Das Termschema des He I	377
7.2	Etwas Quantenmechanik für zwei Elektronen	379
7.2.1	HAMILTON-Operator für das Zweielektronensystem	379
7.2.2	Zweiteilchenwellenfunktionen	380
7.2.3	Nullte Näherung: keine $e^{-}e^{-}$ -Wechselwirkung	381
7.2.4	Störungstheorie für den He-Grundzustand	383
7.2.5	Variationsrechnung und aktueller Status	384
7.3	PAULI-Prinzip und angeregte Zustände in He	386
7.3.1	Austausch von zwei identischen Teilchen	386
7.3.2	Symmetrien der Orts- und Spin-Wellenfunktionen	387
7.3.3	Störungstheorie für einfach angeregte Zustände	390
7.3.4	Ein Nachgedanke: Welche Kraft stellt die Spins parallel oder antiparallel?	393
7.4	Feinstruktur	395
7.5	Elektrische Dipolübergänge	398
7.6	Doppelanregung und Autoionisation	401
7.6.1	Doppelt angeregte Zustände	401
7.6.2	Autoionisation, FANO-Profil	401
7.6.3	Resonanzlinienprofile	405

7.7	Quasi-Zweielektronensysteme	407
7.7.1	Atome der Erdalkalimetalle	407
7.7.2	Quecksilber	409
	Akronyme und Terminologie	411
	Literatur.	411
8	Atome in externen Feldern	413
8.1	Atome in einem statischen magnetischen Feld	414
8.1.1	Der allgemeine Fall	414
8.1.2	ZEEMAN-Effekt in schwachen Feldern	417
8.1.3	PASCHEN-BACK-Effekt	422
8.1.4	Prädizieren Drehimpulse wirklich?	423
8.1.5	Zwischen schwachem und starkem Magnetfeld	426
8.1.6	Vermiedene Kreuzungen	430
8.1.7	Paramagnetismus	432
8.1.8	Diamagnetismus	434
8.2	Atome im elektrischen Feld	436
8.2.1	Einführung	436
8.2.2	Bedeutung	437
8.2.3	Atome im statischen, elektrischen Feld	438
8.2.4	Vorüberlegungen zur Störungstheorie	439
8.2.5	Matrixelemente	440
8.2.6	Störungsreihe	442
8.2.7	Quadratischer STARK-Effekt	443
8.2.8	Linearer STARK-Effekt	445
8.2.9	Ein Beispiel: RYDBERG-Zustände des Li	448
8.2.10	Polarisierbarkeit	450
8.2.11	Elektrische Suszeptibilität	453
8.3	Langreichweitige Potenziale	454
8.4	Atome in einem oszillierenden elektromagnetischen Feld	458
8.4.1	Dynamischer STARK-Effekt	458
8.4.2	Brechungsindex	460
8.4.3	Resonanzen – Dispersion und Absorption	461
8.4.4	Schnelles und langsames Licht	462
8.4.5	Elastische Lichtstreuung	468
8.5	Atome im starken Laserfeld	473
8.5.1	Ponderomotorisches Potenzial	473
8.5.2	KELDISH-Parameter	475
8.5.3	Von der Multiphotonenionisation zur Sättigung	476
8.5.4	Tunnelionisation	478
8.5.5	Rückstreuung	480
8.5.6	Erzeugung höherer Harmonischer (HHG)	481
8.5.7	Ionisation oberhalb der Schwelle (ATI)	483
	Akronyme und Terminologie	486
	Literatur.	487

9	Hyperfeinstruktur	489
9.1	Einführung	490
9.2	Magnetische Dipolwechselwirkung	494
9.2.1	Allgemeine Überlegungen und Beispiele	494
9.2.2	Das magnetische Feld der Elektronenhülle	497
9.2.3	Nichtverschwindender Bahndrehimpuls	500
9.2.4	Der FERMI-Kontaktterm	501
9.2.5	Einige Zahlenwerte	502
9.2.6	Optische Übergänge zwischen HFS-Multipletts	504
9.3	ZEEMAN-Effekt der Hyperfeinstruktur	505
9.3.1	Hyperfein-HAMILTON-Operator mit Magnetfeld	505
9.3.2	Schwache Magnetfelder	506
9.3.3	Starke und sehr starke Magnetfelder	508
9.3.4	Beliebige Felder, BREIT-RABI-Formel	510
9.4	Isotopieverschiebung und elektrostatische Kernwechselwirkungen	515
9.4.1	Potenzialentwicklung	515
9.4.2	Isotopieverschiebung	517
9.4.3	Quadrupol-Wechselwirkungsenergie	521
9.4.4	HFS-Niveaufenspaltung	524
9.5	Magnetische Resonanzspektroskopie	526
9.5.1	Molekularstrahl-Resonanzspektroskopie	527
9.5.2	EPR-Spektroskopie	529
9.5.3	NMR-Spektroskopie	533
	Akronyme und Terminologie	536
	Literatur	537
10	Vielelektronenatome	539
10.1	Zentralfeldnäherung	540
10.1.1	HAMILTON-Operator für ein Vielelektronensystem	540
10.1.2	Zentralsymmetrisches Potenzial	541
10.1.3	HARTREE-Gleichungen und SCF-Methode	542
10.1.4	HARTREE-Verfahren	544
10.1.5	THOMAS-FERMI-Potenzial	544
10.2	HARTREE-FOCK-Methode	548
10.2.1	PAULI-Prinzip und SLATER-Determinante	548
10.2.2	HARTREE-FOCK-Gleichungen	551
10.2.3	Konfigurationswechselwirkung (CI)	553
10.2.4	KOOPMAN'sches Theorem	554
10.3	Dichtefunktionaltheorie	555
10.4	Komplexe Spektren	557
10.4.1	Spin-Bahn-Wechselwirkung und Kopplungsschemata	557
10.4.2	Beispiele für komplexe Spektren	560

10.5	RÖNTGEN-Spektroskopie und Photoionisation	565
10.5.1	Absorption und Emission von inneren Schalen	566
10.5.2	Charakteristische RÖNTGEN -Spektren – MOSLEY'sches Gesetz.	568
10.5.3	Wirkungsquerschnitte für die Photoionisation mit RÖNTGEN-Strahlung.	570
10.5.4	Photoionisation bei mittleren Energien	573
10.6	Quellen für RÖNTGEN-Strahlung	577
10.6.1	RÖNTGEN-Röhren	577
10.6.2	Synchrotronstrahlung, Einführung.	579
10.6.3	Synchrotronstrahlung, Quantitative Beziehungen	583
10.6.4	Undulatoren und Wiggler.	588
10.6.5	Freie-Elektronen-Laser (FEL)	590
10.6.6	Relativistische THOMSON-Streuung.	590
10.6.7	Laserbasierte RÖNTGEN-Quellen	591
	Akronyme und Terminologie.	593
	Literatur	595
	Anhänge	597
A	Naturkonstante und Einheiten	599
A.1	Fundamentale Naturkonstante (Tabelle).	599
A.2	SI und atomare Einheiten	599
A.3	SI- und GAUSS-Einheiten.	603
A.4	Radiant und Steradian	603
A.5	Dimensionsanalyse	605
B	Drehimpulse, $3j$- und $6j$-Symbole	607
B.1	Drehimpulse	607
B.1.1	Allgemeine Definitionen.	607
B.1.2	Bahndrehimpuls – Kugelflächenfunktionen	610
B.2	Kopplung von zwei Drehimpulsen	612
B.2.1	Definitionen	612
B.2.2	Orthogonalität und Symmetrien	613
B.2.3	Allgemeine Formeln	614
B.2.4	Spezialfälle	615
B.3	RACAH-Funktion und $6j$ -Symbole	616
B.3.1	Definition	616
B.3.2	Orthogonalität und Symmetrien	617
B.3.3	Allgemeine Formeln	618
B.3.4	Spezialfälle	618
B.4	Vier Drehimpulse und $9j$ -Symbole	619
C	Koordinatendrehung	621
C.1	EULER-Winkel	621
C.2	Drehmatrizen.	621
C.3	Verschränkte Zustände	625
C.4	Reelle Drehmatrizen	626

D	Tensoroperatoren und Matrixelemente	629
D.1	Tensoroperatoren	629
D.1.1	Definition	629
D.1.2	WIGNER-ECKART-Theorem	630
D.2	Produkte von Tensoroperatoren	632
D.2.1	Produkte von Kugelflächenfunktionen	633
D.2.2	Matrixelemente der Kugelflächenfunktionen	634
D.3	Reduktion von Matrixelementen	636
D.3.1	Matrixelemente der Kugelflächenfunktionen in <i>LS</i> -Kopplung	637
D.3.2	Skalarprodukte von Drehimpulsoperatoren	638
D.3.3	Komponenten der Drehimpulse	640
D.4	Elektromagnetisch induzierte Übergänge	641
D.4.1	Elektrische Dipolübergänge	642
D.4.2	Elektrische Quadrupolübergänge	642
D.4.3	Magnetische Dipolübergänge	643
D.5	Radiale Matrixelemente	644
E	Parität und Reflexionssymmetrie	647
E.1	Parität	647
E.2	Vielelektronensysteme	649
E.3	Reflexionssymmetrie von Orbitalen – reelle und komplexe Basiszustände	649
E.4	Reflexionssymmetrie im allgemeinen Fall	654
F	Multipolentwicklungen und Multipolmomente	659
F.1	Reihenentwicklung	659
F.2	Elektrostatisches Potenzial	660
F.3	Multipol-Tensoroperatoren	662
F.3.1	Der Quadrupoltensor	664
F.3.2	Allgemeine Multipol-Tensoroperatoren	665
G	Faltungen und Korrelationsfunktionen	669
G.1	Definition und Motivation	669
G.2	Korrelationsfunktionen und Kohärenzgrad	671
G.3	GAUSS-Profil	673
G.4	Hyperbolischer Sekans	674
G.5	LORENTZ-Profil	675
G.6	VOIGT-Profil	675
H	Vektorpotenzial, Dipolnäherung, Oszillatorenstärke	677
H.1	Wechselwirkung des Felds einer elektromagnetischen Welle mit einem Elektron	677
H.1.1	Vektorpotenzial	677
H.1.2	Intensität	678
H.1.3	Statisches Magnetfeld	679
H.1.4	Ponderomotorisches Potential	680

H.1.5	Beziehung zwischen den Matrixelementen von p und r	680
H.1.6	Störung durch ein elektromagnetisches Feld; Dipolnäherung.	681
H.2	Linienstärke und Oszillatorenstärke	683
H.2.1	Definitionen	683
H.2.2	THOMAS-REICHE-KUHN-Summenregel	686
I	FOURIER-Transformation und Spektralverteilungen	689
I.1	Einführung und Übersicht.	689
I.2	Elektromagnetische Wellenfelder	692
I.3	Das Intensitätsspektrum	695
I.4	Spezielle Beispiele	696
I.4.1	GAUSS-Verteilung	697
I.4.2	Hyperbolischer Sekans	698
I.4.3	Rechteckiger Wellenzug	699
I.4.4	Rechteckiges Spektrum	700
I.4.5	Exponentialverteilung und LORENTZ-Profil	700
I.5	FOURIER-Transformation in drei Dimensionen	703
J	Kontinuum	705
J.1	Normierung von Kontinuumswellenfunktionen	705
J.2	Dreidimensionale ebene Wellen	707
J.2.1	Partialwellenentwicklung	707
J.2.2	Normierung in der Impuls- und Energieskala.	708
	Akronyme und Quellen	711
	Sachverzeichnis	715

Atome, Moleküle und optische Physik 1

Atome und Grundlagen ihrer Spektroskopie

Hertel, I.V.; Schulz, C.-P.

2017, XXXI, 730 S. 253 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-662-53103-7