

Harald Friedrich

Theoretische Atomphysik

Zweite Auflage

Mit 82 Abbildungen und 50 Aufgaben

Springer-Verlag

Berlin Heidelberg New York

London Paris Tokyo

Hong Kong Barcelona

Budapest

Inhaltsverzeichnis

1. Quantenmechanische Voraussetzungen	1
1.1 Wellenfunktionen und Bewegungsgleichungen	1
1.1.1 Zustände und Wellenfunktionen	1
1.1.2 Lineare Operatoren und Observable	3
1.1.3 Hamiltonoperator und Bewegungsgleichungen	7
1.2 Symmetrien	9
1.2.1 Konstanten der Bewegung und Symmetrien	9
1.2.2 Die radiale Schrödingergleichung	12
1.2.3 Beispiel: Der radialsymmetrische harmonische Oszillator	14
1.3 Gebundene und ungebundene Zustände	16
1.3.1 Gebundene Zustände	16
1.3.2 Ungebundene Zustände	19
1.3.3 Beispiele	22
1.3.4 Normierung der ungebundenen Zustände	28
1.4 Resonanzen und Kanäle	29
1.4.1 Kanäle	29
1.4.2 Feshbach-Resonanzen	32
1.4.3 Potentialresonanzen	36
1.5 Näherungsmethoden	38
1.5.1 Zeitunabhängige Störungstheorie	38
1.5.2 Ritzsches Variationsverfahren	41
1.5.3 Halbklassische Näherung	45
1.6 Drehimpuls und Spin	48
1.6.1 Addition von Drehimpulsen	49
1.6.2 Spin	50
1.6.3 Spin-Bahn-Kopplung	52
Aufgaben	54
Referenzen	57
2. Atome und Ionen	59
2.1 Ein-Elektron-Systeme	59
2.1.1 Das Wasserstoffatom	59
2.1.2 Wasserstoff-ähnliche Ionen	61
2.1.3 Die Diracgleichung	62
2.1.4 Relativistische Korrekturen zur Schrödingergleichung	66
2.2 Mehrelektronensysteme	68

2.2.1	Der Hamiltonoperator	68
2.2.2	Pauli-Prinzip und Slaterdeterminanten	70
2.2.3	Schalenaufbau der Atome	74
2.2.4	Klassifizierung atomarer Niveaus	76
2.3	Ansätze zur Lösung des N -Elektronenproblems	80
2.3.1	Das Hartree-Fock-Verfahren	80
2.3.2	Korrelationen und Konfigurationswechselwirkung	85
2.3.3	Das Thomas-Fermi-Modell	88
2.3.4	Dichtefunktionalmethoden	91
2.4	Elektromagnetische Übergänge	93
2.4.1	Übergänge allgemein, „Goldene Regel“	93
2.4.2	Das elektromagnetische Feld	97
2.4.3	Wechselwirkung zwischen Atom und Feld	101
2.4.4	Emission und Absorption von Photonen	102
2.4.5	Auswahlregeln	107
2.4.6	Oszillatorstärken, Summenregeln	110
	Aufgaben	112
	Referenzen	115
3.	Atomare Spektren	117
3.1	Ein Elektron im modifizierten Coulombpotential	117
3.1.1	Rydbergserien, Quantendefekte	117
3.1.2	Theorem von Seaton, Einkanal-Quantendefekttheorie ...	123
3.1.3	Photoabsorption und Photoionisation	125
3.2	Gekoppelte Kanäle	129
3.2.1	Close-Coupling-Gleichungen	129
3.2.2	Autoionisierende Resonanzen	134
3.2.3	Konfigurationswechselwirkung, Interferenz von Resonanzen	138
3.2.4	Gestörte Rydbergserien	143
3.3	Mehrkanal-Quantendefekttheorie (MQDT)	146
3.3.1	Zwei gekoppelte Coulomb-Kanäle	146
3.3.2	Der Lu-Fano-Plot	153
3.3.3	Mehr als zwei Kanäle	155
3.4	Atome in äußeren Feldern	163
3.4.1	Atome in einem statischen, homogenen elektrischen Feld	164
3.4.2	Atome in einem statischen, homogenen Magnetfeld	172
3.4.3	Atome in einem zeitlich oszillierenden elektrischen Feld	182
	Aufgaben	185
	Referenzen	189
4.	Einfache Reaktionen	191
4.1	Elastische Streuung	191
4.1.1	Elastische Streuung an einem kurzreichweitigen Potential	191

4.1.2	Elastische Streuung am reinen Coulombpotential	200
4.1.3	Elastische Streuung am modifizierten Coulombpotential, DWBA	202
4.1.4	Feshbachsche Projektoren. Optisches Potential	204
4.2	Spin und Polarisation	207
4.2.1	Auswirkung der Spin-Bahn-Kopplung	207
4.2.2	Anwendung auf allgemeine reine Spinzustände	210
4.2.3	Anwendung auf gemischte Spinzustände	212
4.3	Inelastische Streuung	215
4.3.1	Allgemeine Formulierung	215
4.3.2	Gekoppelte Radialgleichungen	221
4.3.3	Schwelleneffekte	226
4.3.4	Ein Beispiel	228
4.4	Ausgangskanäle mit zwei ungebundenen Elektronen	231
4.4.1	Allgemeine Formulierung	231
4.4.2	Anwendung auf Elektronen	238
4.4.3	Beispiel	241
	Aufgaben	244
	Referenzen	248
5.	Spezielle Themen	249
5.1	Multiphoton-Absorption	249
5.1.1	Experimentelle Beobachtungen zur Multiphoton-Ionisation	250
5.1.2	Berechnung von Ionisationswahrscheinlichkeiten über Volkov-Zustände	252
5.1.3	Berechnung von Ionisationswahrscheinlichkeiten über Floquet-Zustände	256
5.2	Klassische Mechanik und Quantenmechanik	258
5.2.1	Phasenraumdichten	259
5.2.2	Kohärente Zustände	264
5.2.3	Kohärente Wellenpakete in realen Systemen	270
5.3	Chaos	273
5.3.1	Chaos in der klassischen Mechanik	274
5.3.2	Spuren des Chaos in der Quantenmechanik	278
5.3.3	Ionisation des Wasserstoffatoms in einem Mikrowellenfeld	285
5.3.4	Das Wasserstoffatom in einem homogenen Magnetfeld ..	288
	Aufgaben	294
	Referenzen	298
	Anhang: Spezielle mathematische Funktionen	301
	Sachverzeichnis	309