
Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen	1
1.1	Gesamtübersicht und Geschichte	3
1.2	Quantennatur der Materie	3
1.3	Größenordnungen	4
1.3.1	Längenskalen von Atomphysik bis Astrophysik	4
1.3.2	Zeitskalen von Atomphysik bis Astrophysik	5
1.3.3	Energieskalen der Physik	6
1.4	Photonen	7
1.4.1	Photoeffekt und Energiequantisierung	7
1.4.2	Compton-Effekt und der Impuls des Photons	8
1.4.3	Der Drehimpuls des Photons	9
1.4.4	Das elektromagnetische Spektrum	10
1.4.5	Planck'sches Strahlungsgesetz	11
1.4.6	Röntgenbeugung und Strukturanalyse	12
1.5	Das Elektron	14
1.6	Relativistik in einer Nusschale	15
1.6.1	Masse, Energie und Beschleunigung	15
1.6.2	Zeitdilatation und Lorentz-Kontraktion	17
1.7	Teilchen in elektrischen und magnetischen Feldern	18
1.7.1	Ladungen im elektrischen Feld	18
1.7.2	Ladung im Magnetfeld	18
1.7.3	Zyklotronfrequenz	19
1.7.4	Kombiniertes elektrisches und magnetisches Feld	20
1.7.5	Plasmafrequenz	21
1.8	Kinetische Gastheorie und Statistik	22
1.8.1	Druck und Äquipartitionsgesetz	22
1.8.2	Fermionen, Bosonen und ihre Statistik	23
1.9	Teilchen und Wellen	25
1.9.1	De-Broglie-Wellenlänge	25
1.9.2	Experimentelle Evidenz	26
1.9.3	Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED)	27

1.9.4	Beugung von Neutronen, Atomen und Molekülen	27
1.9.5	Unschärferelation und Beobachtung	29
1.10	Stabilität des atomaren Grundzustands	30
1.11	Bohr'sches Atommodell	31
1.11.1	Grundannahmen	32
1.11.2	Radien und Energien	33
1.11.3	Atomare Einheiten	34
1.11.4	Energien der Wasserstoffähnlichen Ionen	34
1.11.5	Korrektur für endliche Kernmasse	35
1.11.6	Spektren wasserstoffähnlicher Ionen	35
1.11.7	Grenzen des Bohr'schen Modells	36
1.12	Magnetische Momente im Magnetfeld	36
1.12.1	Magnetisches Moment und Drehimpuls	36
1.12.2	Das magnetische Moment im magnetischen Feld	37
1.13	Das Stern-Gerlach-Experiment	38
1.14	Richtungs- (oder Orts-) Quantisierung	41
1.14.1	Interpretation des Stern-Gerlach-Experiments	41
1.14.2	Konsequenzen des Stern-Gerlach-Experiments	42
1.15	Elektronenspin	43
1.15.1	Magnetisches Moment des Elektrons	44
1.15.2	Einstein-de-Haas-Effekt	44
2	Elemente der Quantenmechanik und das H-Atom	47
2.1	Materiewellen	47
2.1.1	Grenzen der klassischen Theorie	47
2.1.2	Wahrscheinlichkeitsamplitude in der Optik	48
2.1.3	Wahrscheinlichkeitsamplitude bei Materiewellen	49
2.2	Stationäre Schrödinger-Gleichung	50
2.2.1	Eine Wellengleichung	50
2.2.2	Hamilton- und Impulsoperator	51
2.3	Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	51
2.3.1	Frei bewegtes Teilchen – das einfachste Beispiel	53
2.4	Grundlagen und Definitionen der Quantenmechanik	53
2.4.1	Axiome der Quantenmechanik	53
2.4.2	Repräsentationen	55
2.4.3	Gleichzeitige Messung von zwei Observablen	56
2.4.4	Operatoren für den Ort, Impuls und Energie	56
2.4.5	Eigenfunktionen des Impulses \hat{p}	57
2.4.6	Teilchen im eindimensionalen Potenzialkasten	58
2.5	Freies Elektronengas im Kastenpotenzial	58
2.6	Bahndrehimpuls	60
2.6.1	Polarkoordinaten	61
2.6.2	Drehimpuls Definition	62
2.6.3	Eigenwerte und Eigenfunktionen	62
2.7	Spin	67

2.8	Das Wasserstoffatom	69
2.8.1	Quantenmechanik des Einteilchenproblems	69
2.8.2	Atomare Einheiten	71
2.8.3	Schwerpunktbewegung und reduzierte Masse	72
2.8.4	Qualitative Überlegungen zu den Lösungen	72
2.8.5	Exakte Lösung	74
2.8.6	Energieniveaus	74
2.8.7	Radialfunktionen explizit	76
2.8.8	Dichteplots	78
2.8.9	Die Spektren des H-Atoms	79
2.8.10	Erwartungswerte von r^k	79
2.8.11	Vergleich mit dem Bohr'schen Modell	80
2.9	Normaler Zeeman-Effekt	81
2.9.1	Wechselwirkung Bahndrehimpuls – externes B-Feld	81
2.9.2	Aufhebung der m -Entartung	82
3	Periodensystem und Aufhebung der L-Entartung	85
3.1	Schalenaufbau der Atome, Periodisches System	85
3.1.1	Elektronenkonfiguration	85
3.1.2	Pauli-Prinzip	86
3.1.3	Wie die Schalen gefüllt werden	87
3.1.4	Das Periodensystem der Elemente	88
3.1.5	Einige experimentelle Fakten	88
3.2	Quasi-Einelektronensystem	91
3.2.1	Spektroskopische Befunde für die Alkaliatome	92
3.2.2	Quantendefekt	93
3.2.3	Abgeschirmtes Coulomb-Potenzial	94
3.2.4	Radialfunktionen semiquantitativ	96
3.2.5	Ergebnisse genauerer theoretischer Rechnungen für das Beispiel Na	99
3.2.6	Mosley-Diagramm für Na ähnliche Ionen	100
3.3	Störungsrechnung für stationäre Probleme	101
3.3.1	Störungsansatz für den nicht entarteten Fall	101
3.3.2	Störungsrechnung 1. Ordnung	102
3.3.3	Störungsrechnung 2. Ordnung	103
3.3.4	Störungsrechnung mit Entartung	104
3.3.5	Anwendung der Störungsrechnung auf Alkaliatome	105
4	Nicht stationäre Probleme: Dipolanregung	107
4.1	Einführung	107
4.1.1	Stationäre Zustände	107
4.1.2	Spektroskopische Beobachtung	108
4.1.3	Induzierte Prozesse	110
4.1.4	Spontane Emission	113
4.1.5	Einstein'sche A und B Koeffizienten	115

VIII Inhaltsverzeichnis

4.2	Zeitabhängige Störungsrechnung	117
4.2.1	Vorbemerkungen	117
4.2.2	Dipolnäherung	117
4.2.3	Lösungsansatz	119
4.2.4	Störungsansatz für die Übergangsamplitude	120
4.2.5	Absorptionswahrscheinlichkeit	122
4.2.6	Emission und Absorption: Ergebnisse	124
4.3	Auswahlregeln für Dipolübergänge	127
4.3.1	Drehimpuls des Photons	127
4.3.2	Basisvektoren der Polarisation	129
4.3.3	Übergangsamplituden in der sphärischen Basis	131
4.4	Winkelabhängigkeiten für Dipolstrahlung	132
4.4.1	Übergangsamplituden	132
4.4.2	Semiklassische Veranschaulichung	133
4.4.3	Winkelverteilungen quantenmechanisch	136
4.5	Matrixelemente und A, B Koeffizienten	142
4.5.1	Matrixelemente	142
4.5.2	Spontane Übergangswahrscheinlichkeit	143
4.5.3	Induzierte Übergänge	145
4.5.4	Zusammenfassung der Auswahlregeln	147
4.5.5	Dipol-erlaubte Übergänge im H-Atom	148
4.6	Linearkombinationen von Zuständen	148
4.6.1	Kohärente Besetzung durch optische Übergänge	148
4.6.2	Quantenbeats	151
4.7	Quantensprünge	155
5	Linienbreiten, Multiphotonenprozesse und mehr	157
5.1	Linienverbreiterung	157
5.1.1	Natürliche Linienbreite	157
5.1.2	Dispersion	160
5.1.3	Doppler-Verbreiterung	161
5.1.4	Stoßverbreiterung	163
5.1.5	Verallgemeinerung der Übergangsrate	163
5.2	Oszillatorenstärke und Wirkungsquerschnitt	164
5.2.1	Oszillatorenstärke	164
5.2.2	Absorptionsquerschnitt	165
5.3	Multiphotonenprozesse	167
5.3.1	Zweiphotonenanregung	168
5.3.2	Zweiphotonenemission	171
5.4	Magnetische Dipol- und elektrische Quadrupolübergänge	172
5.5	Photoionisation	177
5.5.1	Prozess und Wirkungsquerschnitt	178
5.5.2	Photoionisation: Born'sche Näherung	179
5.5.3	Winkelverteilung der Photoelektronen	183

5.5.4	Photoionisation allgemein	185
5.5.5	Multiphotonenionisation (MPI)	189
6	Feinstruktur und Lamb-Shift	195
6.1	Methoden der hochauflösenden Spektroskopie	195
6.1.1	Gitterspektrometer und Fabry-Perot-Interferometer	195
6.1.2	Doppler-freie Spektroskopie an Molekularstrahlen	199
6.1.3	Kollineare Laserspektroskopie	201
6.1.4	Lochbrennen	202
6.1.5	Doppler-freie Sättigungsspektroskopie	203
6.1.6	Ramsey-Streifen	205
6.1.7	Doppler-freie Zweiphotonenspektroskopie	207
6.2	Wechselwirkung zwischen Spin und Bahn	210
6.2.1	Experimentelle Befunde	210
6.2.2	Magnetische Momente im Magnetfeld	211
6.2.3	Allgemeine Überlegungen	212
6.2.4	Spin-Bahn-Kopplung beim H-Atom	213
6.2.5	Drehimpulskopplung, Gesamtdrehimpuls	214
6.2.6	Drehimpulsoperatoren und ihr Skalarprodukt	215
6.2.7	Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses	216
6.2.8	Ein einfaches Beispiel	217
6.2.9	Terminologie der Atomstruktur	218
6.3	Quantitative Bestimmung der Feinstrukturaufspaltung	219
6.3.1	Die FS-Terme aus der Dirac-Theorie	219
6.3.2	Feinstruktur im H-Atom (in Dirac-Näherung)	222
6.3.3	Feinstruktur der Alkaliatome	223
6.4	Auswahlregeln und Intensitäten für Übergänge	224
6.4.1	Beispiel H-Atom	224
6.4.2	Allgemeine Regeln	225
6.5	Lamb-Shift	229
6.5.1	Feinstruktur und Lamb-Shift bei Balmer $H\alpha$	229
6.5.2	Mikrowellen-Übergänge	230
6.5.3	Experiment von Lamb und Rutherford (1947)	231
6.5.4	Lamb-Shift für höhere Kernladungszahlen	234
6.5.5	Präzisionsmessungen am H-Atom	235
6.5.6	QED und Feynman-Diagramme	237
6.5.7	Zur Theorie der Lamb-Shift	239
6.6	Anomales magnetisches Moment des Elektrons	243
6.7	Kopplungskonstanten allgemein	247
7	Helium und He-artige Ionen	251
7.1	Einführung	251
7.2	Empirische Befunde: das He I Termschema	253
7.3	Der Hamilton-Operator	254
7.3.1	Mehrelektronensysteme	254

7.3.2	Vertauschungsoperator	256
7.3.3	Nullte Näherung: keine $e\text{-}e$ Wechselwirkung	257
7.3.4	Der Grundzustand – Störungsrechnung	258
7.3.5	Variationsrechnung und aktueller Status	259
7.4	Die Energiezustände des He	260
7.4.1	Austausch identischer Teilchen	260
7.4.2	Störungsrechnung für (einfach) angeregte Zustände	263
7.4.3	Welche Kraft stellt die Spins parallel	265
7.5	Feinstruktur	267
7.6	Elektrische Dipolübergänge	269
7.7	Doppelanregung und Autoionisation	271
7.7.1	Doppelt angeregte Zustände	271
7.7.2	Autoionisation, Fano-Profil	272
7.7.3	Resonanzenlinienprofile	275
7.8	Quasi-Zweielektronensysteme	277
7.8.1	Erdalkalien	277
7.8.2	Quecksilber	278
8	Atome in externen Feldern	281
8.1	Atome im magnetischen Feld	281
8.1.1	Der allgemeine Fall	281
8.1.2	Zeeman-Effekt bei schwachen Feldern	284
8.1.3	Paschen-Back-Effekt	289
8.1.4	Präzidieren Drehimpulse wirklich?	290
8.1.5	Zwischen schwachem und starkem Magnetfeld	292
8.2	Vermiedene Kreuzungen	297
8.3	Paramagnetismus	299
8.4	Diamagnetismus	301
8.5	Atome im elektrischen Feld	303
8.5.1	Vorbemerkungen	303
8.5.2	Bedeutung	303
8.5.3	Atome im statischen, elektrischen Feld	305
8.5.4	Grundüberlegung zur Störungsrechnung	305
8.5.5	Matrixelemente	306
8.5.6	Störungsreihe	309
8.5.7	Quadratischer Stark-Effekt	309
8.5.8	Linearer Stark-Effekt	311
8.5.9	Ein experimentelles Beispiel: Rydbergzustände des Li .	314
8.6	Polarisierbarkeit	316
8.7	Langreichweitige Wechselwirkungspotenziale	317
8.8	Atome im elektromagnetischen Wechselfeld	321
8.8.1	Dynamischer Stark-Effekt	321
8.8.2	Suszeptibilität, Brechungsindex	323
8.8.3	Polarisation mit Dämpfung, Dispersion	324

8.8.4	Schnelles und langsames Licht	325
8.8.5	Elastische Streuung von Licht	331
8.9	Atome im starken Laserfeld	334
8.9.1	Ponderomotorisches Potenzial	334
8.9.2	Keldysh Parameter	336
8.9.3	Von MPI zu Sättigung	337
8.9.4	Tunnelionisation	339
8.9.5	Rückstreuung	340
8.9.6	Erzeugung höherer Harmonischer	342
8.9.7	„Above Threshold“ Ionisation in starken Laserfeldern	344
9	Hyperfeinstruktur	347
9.1	Einführung	347
9.2	Magnetische Dipol Wechselwirkung	351
9.2.1	Allgemeiner Fall	351
9.2.2	Berechnung des Hüllenfeldes	354
9.2.3	Nicht verschwindender Bahndrehimpuls	356
9.2.4	Fermi-Kontaktterm	358
9.2.5	Zahlenwerte	359
9.2.6	Optische Übergänge zwischen HFS Multipletts	360
9.3	Zeeman-Effekt der Hyperfeinstruktur	361
9.3.1	Hyperfein-Hamilton-Operator mit Magnetfeld	361
9.3.2	Schwache Magnetfelder	362
9.3.3	Starke und sehr starke Magnetfelder	365
9.3.4	Beliebige Felder, Breit-Rabi Formel	367
9.4	Elektrostatische Kernwechselwirkungen	371
9.4.1	Potenzialentwicklung	371
9.4.2	Der Volumenterm	373
9.4.3	Quadrupolterme und Matrixelemente	373
9.5	Isotopenverschiebung	376
9.5.1	Masseneffekt	377
9.5.2	Volumeneffekt	378
9.6	Magnetische Resonanzspektroskopie	380
9.6.1	Molekülstrahl-Resonanzspektroskopie	381
9.6.2	EPR-Spektroskopie	383
9.6.3	NMR-Spektroskopie	386
10	Vielelektronenatome	391
10.1	Zentralfeldnäherung	391
10.1.1	Hamilton-Operator für ein Vielelektronensystem	392
10.1.2	Hartree-Verfahren	394
10.2	Thomas-Fermi-Potenzial	395
10.3	Hartree-Fock-Verfahren	397
10.3.1	Spinorbitale, Pauli-Prinzip, Slater-Determinante	397
10.3.2	Hartree-Fock Gleichungen	398

XII Inhaltsverzeichnis

10.3.3 Konfigurationswechselwirkung (CI)	400
10.3.4 Koopman's-Theorem	400
10.4 Dichtefunktionaltheorie	401
10.5 Komplexe Spektren	403
10.5.1 Spin-Bahn-Wechselwirkung und Kopplungsschemata	403
10.5.2 Beispiele für komplexe Spektren	405
10.6 Röntgenspektroskopie	409
10.6.1 Absorption und Emission der inneren Atomschalen	411
10.6.2 Charakteristische Röntgenspektren – Moseley's Formel	414
10.7 Photoionisation bei Vielelektronenatomen	415
10.7.1 Absorptionskoeffizient für Röntgenstrahlung	415
10.7.2 Photoionisation bei mittleren Energien	418
10.8 Quellen für Röntgenstrahlung	421
10.8.1 Röntgenröhren	421
10.8.2 Synchrotronstrahlung	422
10.8.3 Undulatoren und Wiggler	430
10.8.4 Freie-Elektronen-Laser (FEL)	432
10.8.5 Relativistische Thomson-Streuung	433
10.8.6 Laserbasierte Röntgenquellen	433
ANHANG	435
Fundamentale physikalische Konstanten und Einheiten	437
Drehimpulse, $3j$- und $6j$-Symbole	439
B.1 Drehimpulse	439
B.2 Clebsch-Gordon-Koeffizienten und $3j$ -Symbole	441
B.2.1 Definition	441
B.2.2 Orthogonalität und Symmetrien	442
B.2.3 Allgemeine Formel	443
B.2.4 Spezielle Fälle	443
B.3 Racah Funktion und $6j$ -Symbole	444
B.3.1 Definition	444
B.3.2 Orthogonalität und Symmetrien	446
B.3.3 Allgemeine Formel	446
B.3.4 Spezielle Fälle	447
Koordinatendrehung	449
Matrixelemente	451
D.1 Tensoroperatoren	451
D.1.1 Definition	451
D.1.2 Wigner-Eckart Theorem	452
D.2 Produkte von Tensoroperatoren	454
D.2.1 Produkte von Kugelflächenfunktionen	454
D.2.2 Matrixelemente der Kugelflächenfunktionen	455

D.2.3	Quadrupolmoment	457
D.3	Reduktion von Matrixelementen	460
D.3.1	Skalarprodukte von Drehimpulsoperatoren	461
D.3.2	Matrixelemente der Kugelflächenfunktionen in LS-Kopplung	462
D.3.3	Drehimpulskomponenten	463
D.4	Elektromagnetisch induzierte Übergänge	465
D.4.1	Elektrische Dipolübergänge	465
D.4.2	Elektrische Quadrupolübergänge	466
D.4.3	Magnetische Dipolübergänge	466
D.5	Radialmatrixelemente	467
Parität und Reflexionssymmetrie		471
E.1	Parität	471
E.2	Reelle und komplexe Basiszustände, Reflexionssymmetrie	472
E.3	Vielelektronensysteme	475
Vektorpotenzial, Dipolnäherung, Oszillatorenstärke		477
F.1	Elektron im elektromagnetischen Wellenfeld	477
F.1.1	Vektorpotenzial	477
F.1.2	Statisches magnetisches Feld	479
F.1.3	Vertauschungsregeln	479
F.1.4	Ponderomotorisches Potenzial	480
F.1.5	Reihenentwicklung der Störung und Dipolnäherung	481
F.2	Oszillatorenstärke	482
F.2.1	Definition	482
F.2.2	Die Thomas-Reiche-Kuhn Summenregel	484
Kontinuum		487
G.1	Normierung von Kontinuumsfunktionen	487
G.2	Ebene Welle	489
Literaturverzeichnis		491
Sachverzeichnis		499