
Inhaltsverzeichnis

Vorwort	VII
Danksagungen	IX
Abkürzungsverzeichnis	XIX
11 Zweiatomige Moleküle	1
11.1 Charakteristische Energie	2
11.1.1 Hamilton-Operator für zweiatomige Moleküle	2
11.1.2 Elektronische Energien	3
11.1.3 Schwingungsenergie	4
11.1.4 Rotationsenergie	4
11.2 Born-Oppenheimer-Näherung, Molekülpotenziale	5
11.2.1 Ansatz	5
11.2.2 Die Kernwellenfunktion	6
11.2.3 Allgemeine Form der Molekülpotenziale	8
11.2.4 Harmonisches Potenzial und harmonischer Oszillator ...	9
11.2.5 Morse-Potenzial	12
11.2.6 Dispersionswechselwirkung und Van-der-Waals-Moleküle	14
11.3 Kernbewegungen: Rotation und Vibration	17
11.3.1 Schrödinger-Gleichung	17
11.3.2 Der starre Rotator	18
11.3.3 Besetzung der Rotationsniveaus und Kernspinstatistik .	20
11.3.4 Vibration	24
11.3.5 Nicht starrer Rotator	26
11.3.6 Dunham Koeffizienten	29
11.4 Dipolübergänge	29
11.4.1 Rotationsübergänge	30
11.4.2 Stark-Effekt: Polare Moleküle im elektrischen Feld	34
11.4.3 Schwingungsübergänge	35
11.4.4 Rotations-Schwingungs-Spektren	37

11.4.5	Rydberg-Klein-Rees-Verfahren	40
11.5	Molekulare Orbitale	41
11.5.1	Variationsverfahren	41
11.5.2	Spezialisierung auf H_2^+	43
11.5.3	Ladungsaustausch im System H_2^+	47
11.5.4	MOs für homonukleare Moleküle	53
11.6	Aufbau der Gesamt-Molekül-Zustände	59
11.6.1	Gesamtbahndrehimpuls	59
11.6.2	Spin	60
11.6.3	Gesamtdrehimpuls	60
11.6.4	Hund'sche Kopplungsfälle	61
11.6.5	Reflexionssymmetrie	64
11.6.6	Lambda-Verdopplung	67
11.6.7	Beispiel H_2 – MO Ansatz	68
11.6.8	Valence-Bond-Methode	73
11.6.9	Das Stickstoff- und das Sauerstoffmolekül	73
11.7	Heteronukleare Moleküle	76
11.7.1	Energielagen	76
11.7.2	Besetzung der Orbitale	78
11.7.3	Lithiumhydrid	80
11.7.4	Alkali-Halogenide: Ionische Bindung	82
11.7.5	Stickstoffmonoxid, NO	86
12	Mehratomige Moleküle	89
12.1	Rotation mehratomiger Moleküle	89
12.1.1	Allgemeine Zusammenhänge	89
12.1.2	Sphärischer Rotator	92
12.1.3	Symmetrischer, starrer Rotator	92
12.1.4	Asymmetrischer Rotator	94
12.2	Schwingungsmoden mehratomiger Moleküle	96
12.2.1	Normalschwingungen	96
12.2.2	Energien und Übergänge bei Normalschwingungen	98
12.2.3	Lineare, dreiatomige Moleküle AB_2	100
12.2.4	Nicht lineare, dreiatomige Moleküle AB_2	102
12.2.5	Inversionsschwingung im Ammoniak	104
12.3	Symmetrien	109
12.3.1	Symmetrioperationen	109
12.3.2	Punktgruppen	110
12.3.3	Eigenzustände mehratomiger Moleküle	112
12.3.4	Jahn-Teller-Effekt	116
12.4	Elektronische Zustände dreiatomiger Moleküle	119
12.4.1	Ein erstes Beispiel: H_2O	119
12.4.2	Ammoniak, NH_3 und Methan, CH_4	125
12.5	Hybridisierung	125
12.5.1	Bildung der sp^3 -Orbitale	125

12.5.2	σ -Bindung	127
12.5.3	Doppelbindung	128
12.5.4	Dreifachbindung	129
12.6	Konjugierte Moleküle und Hückel-Methode	131
13	Laser, Licht und Kohärenz	137
13.1	Laser – eine Kurzeinführung	137
13.1.1	Grundprinzip	139
13.1.2	Fabry-Perot-Resonator	141
13.1.3	Stabile, transversale Moden und Beugungsverluste	142
13.1.4	Das VerstärkermEDIUM	145
13.1.5	Schwellenbedingung	147
13.1.6	Bilanzgleichungen	148
13.1.7	Besetzungsinversion und Linienprofil, Lochbrennen	149
13.2	Gauß'sche Strahlen	151
13.2.1	Beugungsbegrenztes Profil eines Laserstrahls	152
13.2.2	Fraunhofer-Beugung	157
13.2.3	Strahl-Transfer-Matrizen	160
13.2.4	Fokussierung eines Gauß-Strahles	163
13.2.5	Profilmessung mit der Rasierklinge	168
13.2.6	Der M^2 Faktor	169
13.3	Polarisation	169
13.3.1	Begriffe	169
13.3.2	Polarisationsbedingte Zeitabhängigkeit der Intensität ..	173
13.3.3	Viertel- und Halbwellen-Platten	174
13.3.4	Stokes-Parameter, unvollständig polarisiertes Licht	177
13.4	Wellenpakete	180
13.4.1	Beschreibung von Laserimpulsen	180
13.4.2	Räumliche und zeitliche Intensitätsverteilung	183
13.4.3	Frequenzspektrum	184
13.4.4	Korrelationsfunktion erster Ordnung	185
13.4.5	Frequenzkäme	186
13.5	Vermessung kurzer Laserimpulse	189
13.5.1	Zum Prinzip des Anrege-Abtastverfahrens	189
13.5.2	Faltung und Autokorrelationsfunktion	190
13.5.3	Signal bei interferometrischer Messung	191
13.5.4	Experimentelle Beispiele	196
13.6	Nichtlineare Prozesse in Gauß'schen Laserstrahlen	198
13.6.1	Allgemeine Überlegungen	198
13.6.2	Zylindrische Geometrie (2D-Geometrie)	200
13.6.3	Konische Geometrie (3D-Geometrie)	202
13.6.4	Räumlich aufgelöstes Messverfahren	203

14 Kohärenz und Photonen	205
14.1 Grundlagen der Quantenoptik	205
14.1.1 Vorbemerkungen	205
14.1.2 Quasimonochromatisches Licht	206
14.1.3 Longitudinale Kohärenz	210
14.1.4 Kohärenzgrad 2ter Ordnung	214
14.1.5 Hanbury-Brown-Twiss-Experiment	216
14.1.6 Räumliche Kohärenz	218
14.1.7 Michelson'sches Stellar-Interferometer	221
14.1.8 HBT-Stellar-Interferometer (1954)	222
14.2 Photonen und Photonzustände	223
14.2.1 Einführung und Begriffe	223
14.2.2 Moden des Strahlungsfeldes	225
14.2.3 Zahl der Photonen pro Mode	228
14.2.4 Die Photonenzahl-Zustände	231
14.2.5 Glauber-Zustände	233
14.2.6 Multimode-Zustände	235
14.3 Quantenmechanik elektromagnetischer Übergänge	236
14.3.1 Der Wechselwirkungs-Hamiltonian für einen Dipolübergang	237
14.3.2 Störungstheorie für induzierte und spontane Übergänge	241
15 Molekülspektroskopie	247
15.1 Übersicht	247
15.2 Mikrowellenspektroskopie	250
15.3 Infrarotspektroskopie	254
15.3.1 Allgemeines	254
15.3.2 Fourier-Transformations-IR-Spektroskopie (FTIR)	255
15.3.3 Infrarot-Aktionsspektroskopie	259
15.4 Elektronische Spektren: Allgemeines	262
15.4.1 Franck-Condon-Faktoren	262
15.4.2 Auswahlregeln für elektronische Übergänge	266
15.4.3 Strahlungslose Übergänge	268
15.4.4 Rotationsanregung bei elektronischen Übergängen	270
15.5 Elektronische Spektren	271
15.6 Elektronische Spektren: Laserspektroskopie	274
15.6.1 Laserinduzierte Fluoreszenz (LIF)	275
15.6.2 REMPI an einem „einfachen“ dreiatomigen Molekül	277
15.6.3 Cavity-Ring-Down-Spektroskopie	285
15.6.4 Spektroskopie kleiner, freier Biomoleküle	288
15.6.5 Weitere wichtige Verfahren	292
15.7 Raman-Spektroskopie	292
15.7.1 Einführung	292
15.7.2 Klassische Erklärung	295
15.7.3 Quantenmechanische Theorie	296

15.7.4	Experimentelles	298
15.7.5	Beispiele für Raman-Spektren	300
15.7.6	Kernspinstatistik	302
15.8	Nichtlineare Spektroskopien	305
15.8.1	Einige Grundlagen	305
15.8.2	Ein Beispiel	309
15.9	Photoelektronenspektroskopie	310
15.9.1	Experimentelle Grundlagen und Prinzip der PES	311
15.9.2	Beispiele	314
15.9.3	Weitere Methoden der PES: TPES, PFI, ZEKE, KETOF, MATI	318
15.9.4	PES an negativen Ionen	320
15.9.5	PEPICO, TPEPICO und Variationen	322
16	Grundlagen atomarer Streuphysik: Elastische Prozesse	329
16.1	Einführung	329
16.1.1	Totale Wirkungsquerschnitte	331
16.1.2	Prinzip des detaillierten Gleichgewichts	333
16.1.3	Integrale elastische Streuquerschnitte	335
16.1.4	Eine erste Zusammenfassung	339
16.2	Differenzielle Wirkungsquerschnitte und Kinematik	339
16.2.1	Experimentelle Überlegungen	339
16.2.2	Stoßkinematik	342
16.2.3	Ein spezielles Beispiel: Massenselektion von Clustern ...	346
16.3	Elastische Streuung und klassische Theorie	348
16.3.1	Der differenzielle Wirkungsquerschnitt	349
16.3.2	Der optische Regenbogen	350
16.3.3	Die klassische Ablenkfunktion	352
16.3.4	Regenbögen und andere erstaunliche Oszillationen	356
16.4	Quantentheorie der elastischen Streuung	364
16.4.1	Allgemeiner Formalismus	364
16.4.2	Drehimpuls, Stoßparameter und Streuebene	365
16.4.3	Partialwellenentwicklung	366
16.4.4	Semiklassische Näherung für die elastische Streuung ...	368
16.4.5	Streuphasen bei niedrigen Energien	371
16.4.6	Streumatrizen für Fußgänger	376
16.5	Resonanzen	378
16.5.1	Typen und Phänomene	378
16.5.2	Formalismus	380
16.5.3	Ein Beispiel: e-He Streuung	383
16.6	Die Born'sche Näherung	387

17 Inelastische Stoßprozesse – ein erster Überblick	391
17.1 Einfache Modelle	391
17.1.1 Reaktionen ohne Schwellenenergie	391
17.1.2 Das Modell der absorbierenden Kugel	393
17.1.3 Ein Beispiel: Ladungsaustausch	394
17.1.4 Das Massey-Kriterium für inelastische Stoßprozesse	395
17.2 Anregungsfunktionen	398
17.2.1 Stoßanregung mit Elektronen und Protonen	398
17.2.2 Elektronenstoßanregung von He	399
17.2.3 Feinere Details der Elektronenstoßanregung von He	402
17.2.4 Elektronenstoß – Vergleich verschiedener Edelgase	403
17.2.5 Elektronenstoß am Quecksilber – Franck-Hertz-Versuch	405
17.2.6 Molekülanregung im Elektronenstoß	407
17.3 Schwellengesetze für Anregung und Ionisation	408
17.4 Streutheorie für das Vielkanalproblem	410
17.4.1 Allgemeine Formulierung des Problems	410
17.4.2 Potenzialmatrix und Kopplungselemente	414
17.4.3 Die adiabatische Repräsentation	415
17.4.4 Die diabatische Repräsentation	418
17.5 Semiklassische Näherung	421
17.5.1 Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	421
17.5.2 Kopplungselemente	423
17.5.3 Lösung der gekoppelten Differenzialgleichungen	425
17.5.4 Landau-Zener Formel	426
17.5.5 Ein einfaches Beispiel: $\text{Na}^+ + \text{Na}(3p)$	429
17.5.6 Stückelberg-Oszillationen	433
17.6 Stoßprozesse mit hochgeladenen Ionen (HCIs)	436
17.6.1 Das „über die Barriere“ Modell	438
17.6.2 Elektronenaustausch im Experiment	441
17.6.3 HCI Stöße und ultraschnelle Dynamik	443
17.7 Surface hopping, konische Durchschneidungen und Reaktionen	443
18 Elektronenstoßanregung und -ionisation	447
18.1 Formale Streutheorie und Anwendungen	447
18.1.1 Close-Coupling-Gleichungen	447
18.1.2 Rechenmethoden und experimentell belegte Beispiele	451
18.2 Born'sche Näherung für inelastische Stöße	457
18.2.1 FBA Streuamplitude	457
18.2.2 Wirkungsquerschnitte	458
18.2.3 Zusammenhang mit der Rutherford-Streuung	459
18.2.4 Ein Beispiel	460
18.3 Generalisierte Oszillatorenstärke	461
18.3.1 Definition	461
18.3.2 Entwicklung für kleinen Momentübertrag	462
18.3.3 Ein Beispiel	463

18.3.4	Integrale inelastische Wirkungsquerschnitte	463
18.4	Elektronenstoßionisation	464
18.4.1	Integrale Wirkungsquerschnitte und die Lotz-Formel . . .	466
18.4.2	SDCS: Energieaufteilung auf die beiden Elektronen . . .	468
18.4.3	Verhalten an der Ionisationsschwelle	469
18.4.4	DDCS: Doppelt differenzielle Wirkungsquerschnitte und Born'sche Näherung	473
18.4.5	TDCS: Dreifach differenzielle Wirkungsquerschnitte . .	477
18.5	Elektronenimpuls-Spektroskopie (EMS)	484
18.6	Rekombination	488
19	Die Dichtematrix – eine erste Annäherung	493
19.1	Reine und gemischte Zustände	495
19.2	Dichteoperator und Dichtematrix	501
19.3	Matrix Darstellung	503
19.3.1	Ausgewählte Beispiele	503
19.3.2	Kohärenz und Polarisationsgrad	506
19.4	Theorie der Messung	508
19.4.1	Zustandsselektor und -analysator	508
19.4.2	Zustandsselektives Wechselwirkungsexperiment	510
19.5	Spezielle Beispiele für die Dichtematrix	515
19.5.1	Polarisationsmatrix für quasimonochromatisches Licht .	515
19.5.2	Dichtematrix für ein Atom in einem isolierten ^1P -Zustand	521
20	Die optischen Bloch-Gleichungen	531
20.1	Offene Fragen	531
20.2	Das Zweiniveausystem im quasiresonanten Lichtfeld	534
20.2.1	Das elektrische Feld	535
20.2.2	Bekleidete Zustände (Dressed States)	535
20.2.3	Rabi-Frequenz	536
20.2.4	Drehwellennäherung	537
20.2.5	Das gekoppelte System	538
20.3	Experimente	540
20.4	Autler-Townes-Effekt	542
20.5	Quantensysteme im elektromagnetischen Feld	543
20.5.1	Zeitliche Entwicklung der Dichtematrix	544
20.5.2	Optische Bloch-Gleichungen für ein Zweiniveausystem .	544
20.6	Anregung mit kontinuierlichem (cw) Licht	547
20.6.1	Eingeschwungener, relaxierter Zustand	547
20.6.2	Sättigungsverbreiterung	547
20.6.3	Breitbandige und schmalbandige Anregung	549
20.6.4	Ratengleichungen	550
20.6.5	Kontinuierliche Anregung ohne Relaxation	551
20.6.6	Kontinuierliche Anregung mit Relaxation	553

XVIII Inhaltsverzeichnis

20.7 Bloch-Gleichungen und Kurzzeitspektroskopie	553
20.7.1 Anregung mit kurzen Laserimpulsen	553
20.7.2 Kurzzeitspektroskopie	556
20.7.3 Ratengleichungen und optische Bloch-Gleichungen	557
20.8 STIRAP	561
20.8.1 Dreiniveausystem in zwei Laserfeldern	561
20.8.2 Energieaufspaltung und Zustandsentwicklung	563
20.8.3 Experimentelle Realisierung	565
Anhang	571
Born'sche Näherung für $e + \text{Na}(3s) \rightarrow e + \text{Na}(3p)$	573
H.1 Auswertung der generalisierten Oszillatorenstärke	573
H.2 Integration des differentiellen Wirkungsquerschnitts	576
Optisches Pumpen	577
I.1 Das Standardbeispiel $\text{Na}(3^2\text{S}_{1/2} \leftrightarrow 3^2\text{P}_{3/2})$	577
I.2 Multipolmomente und experimenteller Nachweis	580
I.3 Optisches Pumpen mit zwei Frequenzen	583
Führung, Nachweis und Energieanalyse von Elektronen und Ionen	585
J.1 SEV, Channeltron, Vielkanalplatte	585
J.2 Brechungsindex, Linsen und Richtstrahlwert	591
J.3 Der hemisphärische Energieselektor	593
J.4 Magnetische Flasche und andere Laufzeitmethoden	595
Literaturverzeichnis	599
Sachverzeichnis	619