

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>1</b>
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 Nussschale	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
<b>2</b>	<b>Elemente der Quantenmechanik und das H-Atom</b>	<b>47</b>
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
<b>3</b>	<b>Periodensystem und Aufhebung der <math>L</math>-Entartung .....</b>	<b>85</b>
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
<b>4</b>	<b>Nicht stationäre Probleme: Dipolanregung .....</b>	<b>107</b>
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

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 Polarisierung .....	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
<b>5</b>	<b>Linienbreiten, Multiphotonenprozesse und mehr .....</b>	<b>157</b>
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
<b>6</b>	<b>Feinstruktur und Lamb-Shift .....</b>	<b>195</b>
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 Retherford (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
<b>7</b>	<b>Helium und He-artige Ionen .....</b>	<b>251</b>
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 $e$ - $e$ 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	<b>Atome in externen Feldern</b> .....	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	Präzedieren 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	Matrizelemente .....	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
<b>9</b>	<b>Hyperfeinstruktur .....</b>	<b>347</b>
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
<b>10</b>	<b>Vielelektronenatome .....</b>	<b>391</b>
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

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
<b>ANHANG .....</b>	<b>435</b>
<b>Fundamentale physikalische Konstanten und Einheiten .....</b>	<b>437</b>
<b>Drehimpulse, 3j- und 6j-Symbole .....</b>	<b>439</b>
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
<b>Koordinatendrehung .....</b>	<b>449</b>
<b>Matrizelemente .....</b>	<b>451</b>
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 Matrizelemente 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
<b>Parität und Reflexionssymmetrie .....</b>		<b>471</b>
E.1	Parität .....	471
E.2	Reelle und komplexe Basiszustände, Reflexionssymmetrie ....	472
E.3	Vielelektronensysteme .....	475
<b>Vektorpotenzial, Dipolnäherung, Oszillatorenstärke .....</b>		<b>477</b>
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
<b>Kontinuum .....</b>		<b>487</b>
G.1	Normierung von Kontinuumsfunktionen .....	487
G.2	Ebene Welle .....	489
<b>Literaturverzeichnis .....</b>		<b>491</b>
<b>Sachverzeichnis .....</b>		<b>499</b>