

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Grundlagen</b>	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 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 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
<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 Übergangsrates	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	Resonanzlinienprofile . . . . .	275
7.8	Quasi-Zweielektronensysteme . . . . .	277
7.8.1	Erdalkalien . . . . .	277
7.8.2	Quecksilber . . . . .	278
<b>8</b>	<b>Atome in externen Feldern . . . . .</b>	<b>281</b>
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, <math>3j</math>- und <math>6j</math>-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>Matrixelemente .....</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	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
<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>