

Experimentalphysik IV - Zusammenfassung

Luca Cordes

3. Juli 2024

Inhaltsverzeichnis

1 Erste Hinweise auf eine Diskretisierung auf der kleinsten Ebene	1	8 Moleküle	12
2 Drehimpuls und magnetisches Moment	3	8.1 LCAO-Methode	12
2.1 Drehimpuls	3	8.2 Van-der-Waals-Wechselwirkung	12
2.2 Spin	3	8.3 Rotation und Vibration	12
2.3 Magnetisches Moment:	4	8.4 Raman-Effekt	12
3 Erwartungswerte im Wasserstoff-Atom	4	8.5 Fluoreszenz	12
4 Wasserstoff	5	8.6 Phosphoreszenz	13
4.1 Herleitung	5	8.7 Kompakt	13
4.2 Kompakt	5	9 Struktur von Atomkernen	13
4.3 Korrekturen	7	9.1 Allgemeines Streuprobem	13
4.3.1 Normaler Zeeman-Effekt:	7	10 Experimente	13
4.3.2 Anormaler Zeeman Effekt	7	10.1 Massenspektrometer nach Thomsons (1912)	13
4.3.3 Paschen-Back Effekt	7	10.2 Einstein de Haas Experiment	13
4.3.4 Stark Effekt	7	10.3 Penning-Falle	14
4.3.5 Feinstruktur:	7	10.4 Elektron-Spin Resonanz (ESR)	14
4.3.6 Lamb-Shift	8	10.5 Dopplerfreie Sättigungsspektroskopie	14
4.3.7 Hyperfeinstruktur:	8	10.6 Rutherford'sche Streuexperiment	15
5 Viel Elektron Atome	8	11 Formelzeichen und ihre Bedeutung	15
5.1 Abschirmung	8	1 Erste Hinweise auf eine Diskretisierung auf der kleinsten Ebene	
5.2 Polarisierung	8	• Gesetz der konstanten Proportionen: In der Chemie wurde im 19. Jahrhundert entdeckt, dass viele chemische Reaktionen in ganzzahligen Verhältnissen ablaufen, z.B. für 100g Wasser: 11.1g Wasserstoff + 88.9g Sauerstoff → Massenverhältnis 1:8	
5.3 Drehimpuls-Kopplungen	8	• Gesetz konstanter Volumina: Bei gleicher Temperatur und Druck reagieren Gase in konstanten ganzzahligen Volumenverhältnissen. Dies kann mit der idealen Gasgleichung so erklärt werden, dass bei gleicher Temperatur und Druck das Volumenverhältnissen gleich dem Verhältnis an Teilchenzahlen ist $\frac{V_1}{V_2} = \frac{N_1}{N_2}$.	
5.4 Besetzungsregel	9	• Periodizität chemischer Eigenschaften von Elementen mit Ordnungszahl Z: Mitte des 19ten Jahrhunderts durch Dmitri Mendelejew und Lothar Meyer entdeckt; Führt zur Entwicklung des Periodensystems.	
6 Atomübergänge und Strahlung	9		
6.1 Kategorisierung	9		
6.2 Berechnung der Einsteinkoeffizienten	9		
6.3 Messung der Einsteinkoeffizienten	9		
6.4 Elektrische Multipolstrahlung	9		
6.5 Breite von Spektrallinien	10		
6.6 Röntgenstrahlung	10		
6.6.1 Bremsstrahlung	10		
7 Laser	10		
7.1 Grundlagen	10		
7.1.1 Besetzungsinversion	10		
7.1.2 Drei Niveau System	11		
7.1.3 Resonator	11		
7.2 Ultra kurze Lichtpulse	11		
7.3 Laserkühlung	12		
7.4 Frequenzkamm	12		

- **Brownsche Molekularbewegung:** Zitterbewegungen kleiner Mikropartikel aufgrund von zufälligen Kollisionen mit Atomen/Molekülen in der Umgebung.

2 Drehimpuls und magnetisches Moment

2.1 Drehimpuls

Beschreibung: Eine klassisch verständliche Eigenschaft.

Operator: $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$. Gehorcht der Vertauschungsrelation von Drehimpulsen $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$. Da die drei Komponenten nicht mit einander vertauschen wählt man als maximal möglicher Satz vertauschbarer Operatoren $|\vec{J}|$ und J_z .

Bahndrehimpuls:		
Größe	Quantenzahl	Wert
\vec{L}		nicht scharf messbar
$ \vec{L} $	$l = 0, \dots, n-1$	$\sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$
L_z	$m_l = 0, \dots, \pm l$	$m_l \hbar$

Drehimpuls-Addition:

Ausgangspunkt: zwei Drehimpulse, mit v.S.k.O. und Eigenzuständen

$$\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2, J_{2z} \rightarrow |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

Die beiden Drehimpulse koppeln zu einem Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. Es gilt $J_z = J_{1z} + J_{2z}$, aber die Basis besteht im allgemeinen nicht aus Eigenvektoren von \vec{J}^2 .

Lösung: Wechsel den v.S.k.O. zu

$$\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2 \rightarrow |j, m, j_1, j_2\rangle$$

Gesamtdrehimpuls:		
Größe	Quantenzahl	Wert
$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$		nicht scharf messbar
$ \vec{J} $	$j = j_1 - j_2 , \dots, j_1 + j_2$	$\sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$
J_z	$m_j = m_{j_1} + m_{j_2} = -(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2$	$m_j \hbar$

2.2 Spin

Beschreibung: Rein quantenmechanische Eigenschaft, welche einem Drehimpuls ähnelt.

Operator: $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$. Gehorcht der Vertauschungsrelation von Drehimpulsen $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$. Da die drei Komponenten nicht mit einander vertauschen wählt man als maximal möglicher Satz vertauschbarer Operatoren $|\vec{S}|$ und S_z .

Größe	Quantenzahl	Wert
\vec{S}		nicht scharf messbar
S_z	m_s	$S_z = m_s \hbar$
S	$s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$	$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$

Verschiedene Teilchen:

Spin	Typ	Teilchen (Beispiele)
0	Boson	Higgs-Boson
$\frac{1}{2}\hbar$	Fermion	Elektron, Proton, Neutrino, Quarks
$1\hbar$	Boson	Photon, Gluon, W-Boson und Z-Boson

Photonen mit $m_s = +1$ sind rechts-zirkular polarisiert, $m_s = -1$ sind links-zirkular polarisiert, linear polarisiertes Licht ist nicht etwa $m_s = 0$, sondern eine Überlagerung von zwei Photonen mit $m_s = +1$ und $m_s = -1$.

2.3 Magnetisches Moment:

Beschreibung: Magnetisches Moment das von einem Teilchen oder einem Verbund dieser ausgeht. Semiklassisch lässt sich das magnetische Moment auf die bewegten Ladungsträger z.B. in der Atomschale zurückführen. Dennoch führt jeder Drehimpuls eines Ladungsträgers zu einem B-Feld, jedoch ist auch die rein quantenmechanische Eigenschaft des Spins Ursache eines magnetischen Moments. Magnetisches Moment und Drehimpulse werden durch die gleichen Quantenzahlen beschrieben.

Operator:

Größe	Quantenzahl	Wert
$\vec{\mu}_J = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$		nicht scharf messbar
$ \vec{\mu}_J $	j	$ \vec{\mu}_J = -g_J \mu_B \sqrt{j(j+1)}$
μ_z	m_j	$\mu_z = -g_J \mu_B m_j$

Lande-Faktoren:

Bezug	Formelzeichen	Wert
Bahndrehimpuls	g_l	1
Spin	g_s	2.00232
Wasserstoffatom (für $\langle \vec{\mu}_J \rangle$)	g_J	$1 + \frac{j(j+1)+m(m+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$
Wasserstoff Atomkern	$g_I = g_p$	5.6

3 Erwartungswerte im Wasserstoff-Atom

Physikalische Größe (n, l, m)-Abhängigkeit

Energie:	$E_n = -\frac{\text{Ry}}{n^2}$
Energiebeitrag durch B-Feld:	$\Delta E_B = \mu_B m_l \vec{B} $
Radius:	$\langle r_{nl} \rangle = \frac{a_0}{2} (3n^2 - l(l+1)) \geq a_0 n^2$
Periodendauer für Umlauf:	$T_n \propto n^3$
Strahlungslebensdauer:	$\propto n^3$
Kritische Feldstärke:	$E_c = \pi \epsilon_0 \text{Ry}^2 e^{-3} n^{-4}$

Physikalische Größe	(n, l, m)-Abhängigkeit
Energie	$E_n = -\frac{\text{Ry}}{n^2}$
Energiebeitrag durch B-Feld	$\Delta E_B = \mu_B m_l \vec{B} $
Radius	$\langle r_{nl} \rangle = \frac{a_0}{2} (3n^2 - l(l+1)) \geq a_0 n^2$
Periodendauer für Umlauf	$T_n \propto n^3$
Kritische Feldstärke	$E_c = \pi \epsilon_0 \text{Ry}^2 e^{-3} n^{-4}$

4 Wasserstoff

4.1 Herleitung

DGL Gesamt

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_e - \frac{\hbar^2}{2Am_p}\Delta_p + V(\vec{r}_e, \vec{r}_p)\right) \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = E \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p)$$

mit

$$V(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_e - \vec{r}_p|}$$

Transformation ins Schwerpunkt und Relativsystem:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi(\vec{r}) \cdot \varphi(\vec{R})$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \frac{m_e \vec{r}_e + A m_p \vec{r}_p}{m_e + A m_p} \quad \text{und} \quad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p \\ \vec{r}_e &= \vec{R} + \frac{A m_p}{m_e + A m_p} \vec{r} \quad \text{und} \quad \vec{r}_p = \vec{R} - \frac{m_e}{m_e + A m_p} \vec{r} \end{aligned}$$

Zerlegung der Gesamt-DGL **DGL Schwer-**
punktbewegung

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R \varphi(\vec{R}) = E_s \varphi(\vec{R}), \quad M = m_e + A \cdot m_p$$

Lösung: Wellenpaket einer Teilchenwelle

$$\varphi(\vec{R}) = \int dk c(k) e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

DGL Relativbewegung

$$\begin{aligned} E_r \psi(\vec{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) \\ \mu &= \frac{Z m_e m_p}{m_e + Z m_p} \end{aligned}$$

Zerlegung der Relativbewegung:

$$\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$$

DGL $\Phi(\phi)$

$$-\frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = m^2 \Phi(\phi)$$

Randbedingungen:

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi), \quad 1 = \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi$$

Lösung:

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\phi}, \quad m \in \mathbb{Z}$$

Anmerkungen:

$$L_z \Phi(\phi) = \hbar m \Phi(\phi)$$

DGL $\Theta(\theta)$

$$\left(-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = l(l+1) \Theta(\theta)$$

Lösung:

$$\Theta(\theta) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta)$$

mit $P_l^{|m|}(\cos \theta)$ als assoziierte Legendrepolynome, und $l \in \mathbb{N}$ und $0 \leq |m| \leq l$.

Anmerkungen: $\Upsilon_l^{(m)} = \Theta(\theta) \Phi(\phi) \equiv$ Kugelflächenfunktionen:

$$\Upsilon_l^{(m)} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \int_{\partial K} d\Omega \left(\Upsilon_{l'}^{(m')} \right)^* \Upsilon_l^{(m)} &= \delta_{l',l} \delta_{m',m} \\ \sum_{m=-l}^l |\Upsilon_l^{(m)}|^2 &= \frac{2l+1}{4\pi} \end{aligned}$$

DGL $R(r)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E_r - V(r)) \right) R(r) = l(l+1) R(r)$$

Nebenbedingung:

$$R(\infty) = 0$$

Lösung (Laguerre Polynome):

$$R_{n,l}(r) = \sum_{j=1}^{n-1} b_j r^j e^{-\kappa r}$$

mit

$$\begin{aligned} b_j &= 2b_{j-1} \frac{\kappa j - a}{j(j+1) - l(l+1)}, \quad j \geq l \\ b_n &= 0 \\ \kappa &= \sqrt{\frac{-2\mu E_r}{\hbar^2}} \\ a &= \frac{\mu Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \equiv \frac{Z}{a_0} \end{aligned}$$

Anmerkungen:

$$E_r = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6 \cdot Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

4.2 Kompakt

Quantenzahlen: Der Zustand eines Wasserstoff ähnlichen Atoms wird durch die fünf Quantenzahlen (n, l, m_l, m_s) charakterisiert:

- **Hauptquantenzahl:** $n \in \mathbb{N}$
- **Drehimpuls-Quantenzahl:** $\ell \in [0, n-1]$ mit der Buchstabenkonvention $(0, 1, 2, 3, 4, \dots) \equiv (s, p, d, f, g, \dots)$.
- **Magnetische Quantenzahl:** $m \in [-\ell, \ell]$, mit der Buchstabenkonvention $(0, 1, 2, 3, 4, \dots) \equiv (\sigma, \pi, \delta, \varphi, \gamma, \dots)$. Diese Quantenzahl ist mit der Projektion des Drehimpuls verknüpft.
- **Spin:** $m_s = \pm \frac{1}{2}$ mit der Notation $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \equiv (\uparrow, \downarrow)$, $s = \frac{1}{2}$ (für ein Elektron).
- **Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl:** $m_j = m_l + m_s$, $j =$

Notationen:

Normal: $(n, l, m_l, m_s) \rightarrow nlm_l m_s$ mit den entsprechenden Buchstaben.

Drehimpuls Notation: $(n, s, l, j) \rightarrow n^{2s+1}l_j$, nur l als Buchstabe sonst Zahlen

Erwartungswerte:

Für ein wasserstoffähnliches Atom welches sich nicht in einem äußerem Feld befindet, ist nur die Quantenzahl n relevant für die Energie. Damit ist die Entartung der Energieniveaus $k = \sum_{\ell, m, m_s} = 2n^2$.

Normaler Zeeman-Effekt: Befindet sich das Wasserstoffatom in einem inhomogenen B-Feld, haben die Quantenzahlen l, m_l einen (kleinen) Beitrag zur Energie. Damit spalten sich die bekannten Energieniveaus weiter auf. Es sind nur Übergänge erlaubt bei denen $\Delta \ell = \pm 1$, entsprechend dem Spin eines Photons. Damit ist $\Delta m = -1, 0, 1$. Anschaulich wird bei $\Delta m = \pm 1$ die z-Komponente des Drehimpuls geändert und ein zirkular polarisiertes Photon erzeugt. Für den Fall $\Delta m = 0$ überlagern sich beide zirkuläre Polarisationsrichtungen zu linear polarisiertem Licht.

Die Auswahlregeln sind: $\Delta s = 0, \Delta m_s = 0, \Delta l = \pm 1, \Delta m_l = 0, \pm 1$

Anormaler Zeeman Effekt Analog zum normalen Zeeman Effekt, jedoch berücksichtigt man nun auch das magnetische Moment, welches durch den Spin verursacht wird. Also $\vec{\mu} \equiv \vec{\mu}_J = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$. Außerdem geht man davon aus, dass das Magnetfeld so schwach ist, dass die Kopplung von \vec{L} und \vec{S} zu \vec{J} nicht gestört wird.

$$\Delta E = -\langle \vec{\mu}_j \rangle_z B = m_j g_j \mu_B B$$

Paschen-Back Effekt Analog zum anormalen Zeeman Effekt, jedoch ist das Magnetfeld so stark, dass die Kopplung von \vec{L} und \vec{S} zu \vec{J} gestört wird.

$$\Delta E = (g_l m_l + g_s m_s) \mu_B B$$

Stark Effekt Auch das Anlegen eines starken elektrischen Feldes $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E} \cdot \vec{e}_z$ führt zu einer Aufspaltung der Energieniveaus. Die Ursache für die Verschiebung der Energieniveaus ist, dass das Coulomb-Potenzial wie folgt modifiziert wird:

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + e \mathcal{E} z$$

Der radiale Abstand r des Elektrons hängt von l ab. Die Orientierung der Orbitale hängt von m_l ab. Dadurch wird das Potential für das Elektron abhängig von l und m_l unterschiedlich modifiziert. Durch diesen Effekt wird die ursprüngliche Entartung von l aufgehoben. Welche Aufspaltung wird nun erwartet?

- Der S-Zustand ($l = 0$): Ist sphärisch symmetrisch. Es ist keine Aufspaltung erwartet.
- $l \neq 0$: Keine sphärische Symmetrie \rightarrow Aufspaltung mit $\Delta E \propto |\vec{\mathcal{E}}|$ (linearer Stark-Effekt)
- $l \neq 0$: Meist quadratischer Stark-Effekt. $\Delta E \propto |\vec{\mathcal{E}}|^2$. Ursache: E-Feld induziert ein permanentes elektrisches Dipol $\vec{p}_{el} = \alpha \vec{\mathcal{E}}$. Dies führt zum zusätzlichen Term $V_{el} = -\vec{p}_{el} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -\alpha |\vec{\mathcal{E}}|^2$

Feinstruktur: Verwendet man statt der Schrödingergleichung die relativistische Diracgleichung und nähert diese durch eine Reihenentwicklung, bekommt man in erster Ordnung drei weitere Terme zum nicht relativistischen Hamiltonoperator H_0 .

$$H = H_0 + V_{ls} + V_{rel} + V_D$$

$$V_{ls} = \frac{g_s \mu_B \mu_0 Z e}{8\pi m_e \hbar} \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

Die Korrekturen sind:

Spin-Bahn-Kopplung V_{ls} : Eine relativistische Betrachtung zeigt, dass sich durch den Bahndrehimpuls ein B-Feld im Elektron befindet, mit dem das magnetische Moment des Spins wechselwirken kann. Die neuen Energieniveaus sind:

$$\begin{aligned} E_{n,l,s} &= E_n - \vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l \\ &= E_n \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2nl(l+\frac{1}{2})(l+1)} \right. \\ &\quad \left. \begin{cases} +l & , \text{ für } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & , \text{ für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \right) \end{aligned}$$

Relativistische Korrektur der kin. Energie V_{rel} :

Relativistisch ist die kinetische Energie gegeben durch

$$E_{\text{kin}} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2 c^2}{m_0^2 c^4}} - 1 \right)$$

$$\frac{p^2 c^2}{m_0^2 c^4} \ll 1 \rightarrow \approx \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2}$$

Damit ist der neue Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2}$$

welcher über eine Störungsrechnung zu den neuen Energieniveaus

$$E_{n,l} = E_n \cdot \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \right)$$

führt.

Darwin-Term V_D : Relativistische Korrektur zur Potenziellen Energie. Die Darwinkorrektur betrifft nur $l = 0$ Zustände und ergibt sich quantitativ korrekt auch aus der Gleichung für die Energiekorrektur der LS-Kopplung, wenn man $l = j - \frac{1}{2} = 0$ einsetzt.

$$E_{n,j,s} = E_n \left(1 - \frac{1}{2} \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \right)$$

Insgesamt: Alle Korrekturen können zusammen addiert werden zu

$$\begin{aligned} E_{n,j} &= E_n + \Delta E_{LS} + \Delta E_{\text{rel}} + \Delta E_{\text{Darwin}} \\ &= E_n \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right) - \frac{3}{4n} \right] \end{aligned}$$

Hyperfeinstruktur:

4.3 Korrekturen

4.3.1 Normaler Zeeman-Effekt:

Befindet sich das Wasserstoffatom in einem inhomogenen B-Feld, haben die Quantenzahlen l, m_l einen (kleinen) Beitrag zur Energie. Damit spalten sich die bekannten Energieniveaus weiter auf. Es sind nur Übergänge erlaubt bei denen $\Delta l = \pm 1$, entsprechend dem Spin eines Photons. Damit ist $\Delta m = -1, 0, 1$. Anschaulich wird bei $\Delta m = \pm 1$ die z-Komponente des Drehimpulses geändert und ein zirkular polarisiertes Photon erzeugt. Für den Fall $\Delta m = 0$ überlagern sich beide zirkuläre Polarisationsrichtungen zu linear polarisiertem Licht.

Die Auswahlregeln sind: $\Delta s = 0, \Delta m_s = 0, \Delta l = \pm 1, \Delta m_l = 0, \pm 1$

4.3.2 Anormaler Zeeman Effekt

Analog zum normalen Zeeman Effekt, jedoch berücksichtigt man nun auch das magnetische Moment, welches durch den Spin verursacht wird. Also $\vec{\mu} \equiv \vec{\mu}_J = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$. Außerdem geht man davon aus, dass das Magnetfeld so schwach ist, dass die Kopplung von \vec{L} und \vec{S} zu \vec{J} nicht gestört wird.

$$\Delta E = - \langle \vec{\mu}_J \rangle_z B = m_j g_j \mu_B B$$

4.3.3 Paschen-Back Effekt

Analog zum anormalen Zeeman Effekt, jedoch ist das Magnetfeld so stark, dass die Kopplung von \vec{L} und \vec{S} zu \vec{J} gestört wird.

$$\Delta E = (g_l m_l + g_s m_s) \mu_B B$$

4.3.4 Stark Effekt

Auch das Anlegen eines starken elektrischen Feldes $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E} \cdot \vec{e}_z$ führt zu einer Aufspaltung der Energieniveaus. Die Ursache für die Verschiebung der Energieniveaus ist, dass das Coulomb-Potenzial wie folgt modifiziert wird:

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + e \mathcal{E} z$$

Der radiale Abstand r des Elektrons hängt von l ab. Die Orientierung der Orbitale hängt von m_l ab. Dadurch wird das Potential für das Elektron abhängig von l und m_l unterschiedlich modifiziert. Durch diesen Effekt wird die ursprüngliche Entartung von l aufgehoben. Welche Aufspaltung wird nun erwartet?

- Der S-Zustand ($l = 0$): Ist sphärisch symmetrisch. Es ist keine Aufspaltung erwartet.
- $l \neq 0$: Keine sphärische Symmetrie \rightarrow Aufspaltung mit $\Delta E \propto |\vec{\mathcal{E}}|$ (linearer Stark-Effekt)
- $l \neq 0$: Meist quadratischer Stark-Effekt. $\Delta E \propto |\vec{\mathcal{E}}|^2$. Ursache: E-Feld induziert ein permanentes elektrisches Dipol $\vec{p}_{el} = \alpha \vec{\mathcal{E}}$. Dies führt zum zusätzlichen Term $V_{el} = -\vec{p}_{el} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -\alpha |\vec{\mathcal{E}}|^2$

4.3.5 Feinstruktur:

Verwendet man statt der Schrödingergleichung die relativistische Diracgleichung und nähert diese durch eine Reihenentwicklung, bekommt man in erster Ordnung drei weitere Terme zum nicht relativistischen Hamiltonoperator H_0 .

$$H = H_0 + V_{ls} + V_{rel} + V_D$$

$$V_{ls} = \frac{g_s \mu_B \mu_0 Z e}{8\pi m_e \hbar} \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

Die Korrekturen sind:

Spin-Bahn-Kopplung V_{ls} : Eine relativistische Betrachtung zeigt, dass sich durch den Bahndrehimpuls ein B-Feld im Elektron befindet, mit dem das magnetische Moment des Spins wechselwirken kann. Die neuen Energieniveaus sind:

$$\begin{aligned} E_{n,l,s} &= E_n - \vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l \\ &= E_n \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2nl \left(l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)} \cdot \begin{cases} +l & , \text{ für } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l + 1) & , \text{ für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \right) \end{aligned}$$

Relativistische Korrektur der kin. Energie V_{rel} :

Relativistisch ist die kinetische Energie gegeben durch

$$E_{kin} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2 c^2}{m_0^2 c^4}} - 1 \right)$$

$$\frac{p^2 c^2}{m_0^2 c^4} \ll 1 \rightarrow \approx \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2}$$

Damit ist der neue Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$$

welcher über eine Störungsrechnung zu den neuen Energieniveaus

$$E_{n,l} = E_n \cdot \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \right)$$

führt.

Darwin-Term V_D : Relativistische Korrektur zur Potenziellen Energie. Die Darwinkorrektur betrifft nur $l = 0$ Zustände und ergibt sich quantitativ korrekt auch aus der Gleichung für die Energiekorrektur der LS-Kopplung, wenn man $l = j - \frac{1}{2} = 0$ einsetzt.

$$E_{n,j,s} = E_n \left(1 - \frac{1}{2} \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \right)$$

Insgesamt: Alle Korrekturen können zusammen addiert werden zu

$$E_{n,j} = E_n + \Delta E_{LS} + \Delta E_{rel} + \Delta E_{Darwin}$$

$$= E_n \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right) - \frac{3}{4n} \right]$$

4.3.6 Lamb-Shift

Der Lamb-Shift Effekt ist eine Konsequenz daraus, dass das Quantenvakuum nicht leer ist, sondern über kurze Zeiträume hinweg virtuelle Partikel entstehen und vernichtet werden. Konkret:

1. Um das Elektron rum entsteht ein $e^+ e^-$ Paar. Dieses schirmt die wahre Elektronenladung ab, wie im Falle der Polarisierung eines Dielektrikums. Damit wird die Coulomb Wechselwirkung leicht verändert.
2. Durch die Emission und Absorption virtueller Teilchen führt das Elektron aus Gründen der Impulserhaltung eine Zitterbewegung auf einer radialen Bahn um die mittlere Bahn durch.

$$\langle E_{pot} \rangle \propto \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \rightarrow \propto \left\langle \frac{1}{r \pm \delta} \right\rangle$$

Die Änderung hängt von der radialen Form des Atomorbitals ab und damit von n und l . Konsequenz ist die Aufhebung der l -Entartung bei gleichem j .

4.3.7 Hyperfeinstruktur:

Die Hyperfeinstruktur ist analog zur Feinstruktur, nur dreht es sich um die Kopplung des Kernspins \vec{I} mit dem Gesamtdrehimpuls der Hülle \vec{J} zu dem Gesamtdrehimpuls $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$. Der Beitrag der Hyperfeinstruktur zu den Energieniveaus ist

$$\Delta E_{HFS} = \frac{A}{2} (F(F+1) - j(j+1) - I(I+1))$$

$$A = \frac{g_i \mu_K B_j}{\sqrt{j(j+1)}}$$

Für zwei aufeinanderfolgende Energieniveaus gilt:

$$\Delta E_f = \Delta E_{HFS, f+1} - \Delta E_{HFS, f} = A \cdot (f+1)$$

5 Viel Elektron Atome**5.1 Abschirmung**

Die Elektronen werden in Mehrelektronenatomen abhängig vom Energiezustand unterschiedlich stark abgeschirmt. Allgemein muss für die Energie gelten:

$$\underbrace{-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{Kernähe}} \leq V(r) \leq \underbrace{-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{außen}}$$

5.2 Polarisation

Nicht nur abhängig von n sondern auch von l wird die äußere Hülle der Rumpfelektronen abhängig von dem Anregungszustand unterschiedlich polarisiert. Somit sind auch die Energieniveaus von n und l abhängig. Dies wird durch einen Korrekturfaktor¹ beschrieben:

$$E_n \propto \frac{1}{n^2} \rightarrow E_{n,l} \propto \frac{1}{n^2 \left(1 - \frac{\delta_{n,l}}{n} \right)^2}$$

5.3 Drehimpuls-Kopplungen

Im allgemeinen sehr kompliziert, daher nur zwei Extremfälle.

LS-Kopplung Wann? Diese Kopplung tritt auf wenn die magnetische Wechselwirkung zwischen den Spins der Elektronen und zwischen den Bahndrehimpulsen der Elektronen stärker ist, als die Wechselwirkung zwischen dem Spin und Bahndrehimpuls für jedes Elektron separat.

Kopplung: Es koppeln sich erst alle Spins sowie Bahndrehimpuls zu einem Gesamtspin und Bahndrehimpuls:

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad \text{und} \quad \vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$$

Quantenzahlen: S, L, m_S, m_L

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$$

Aufspaltung:

$$E = E_{n,L,S} + C \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad C \propto \frac{Z^4}{n^3}$$

jj -Kopplung Wann? Diese Kopplung tritt auf wenn die magnetische Wechselwirkung zwischen jedem Spin und seinem Bahndrehimpuls stärker ist als die Wechselwirkungen zwischen den Spins und zwischen den Bahndrehimpulsen. Diese Kopplung tritt eher bei schweren Atomen auf.

Kopplung: Es koppeln sich erst Bahndrehimpuls und Spin für jedes Elektron.

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i \quad \text{und} \quad \vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$$

Quantenzahlen: S, L, m_S, m_L

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$$

Aufspaltung:

$$E = E_{n,L,S} + C \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad C \propto \frac{Z^4}{n^3}$$

Intermediäre Kopplung Eine Mischung aus LS- und jj -Kopplung. Typischerweise die Realität.

5.4 Besetzungsregel**6 Atomübergänge und Strahlung****6.1 Kategorisierung**

Die möglichen Übergänge von Atomen können in vier Kategorien verteilt werden:

Absorption: Befindet sich ein Atom des Zustandes E_k in einem Strahlungsfeld, können Photonen absorbiert werden, die der Energiedifferenz zu einem angeregten Zustand E_j entsprechen. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Vorgang ist:

$$W_{k \rightarrow j} = B_{kj} \cdot u_\nu(\nu)$$

mit B_{kj} als Einstein-Koeffizient für die Absorption (Reziprokwert der $1/e$ -Zerfallszeit) und $u_\nu(\nu) = h\nu \cdot n_\nu = h\nu \cdot \frac{dn}{d\nu}$ als spektrale Photonendichte des Strahlungsfeldes, d.h. Photonen pro Frequenz und Volumen.

Spontane Emission: Befindet sich ein Atom in einem angeregten Zustandes E_j , kann es spontan unter Aussendung von Licht in einen Zustand niedrigerer Energie übergehen. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Vorgang ist:

$$W_{j \rightarrow k}^{\text{spontan}} = A_{j \rightarrow k}$$

mit $A_{j \rightarrow k}$ als Einstein-Koeffizienten.

Induzierte Emission: Trifft Licht auf ein Atom im angeregten Zustand E_j kann der Übergang in ein tieferes Niveau E_k angeregt werden. Wie Wahrscheinlichkeit ist:

$$W_{j \rightarrow k}^{\text{ind}} = u_\nu(\nu) \cdot B_{j \rightarrow k}$$

Strahlungsloser Übergang: Durch Stöße können auch verbotene Übergänge strahlungslos und damit unsichtbar induziert werden. Die Wahrscheinlichkeit R_i für diesen Vorgang hängt von der Temperatur und der Teilchendichte n ab.

$$R_i \propto n v_{\text{rel}}(T) \propto \frac{p}{\sqrt{T}}$$

6.2 Berechnung der Einsteinkoeffizienten

Durch Betrachtung des Erwartungswertes des Dipoloperators $\langle \vec{p}_{\text{el}} \rangle$ ergibt sich:

$$A_{kj} = \frac{P}{\hbar \omega_{kj}} = \frac{2}{3} \frac{\omega_{kj}^3}{\epsilon_0 c^3 \hbar} |M_{kj}|^2$$

$$B_{kj} = \frac{1}{6 \hbar^2 \epsilon_0} |M_{kj}|^2$$

mit dem Matricelement M_{kj} des Dipoloperators als

$$M_{kj} = \langle \psi_k | q \vec{r} | \psi_j \rangle$$

Zwischen den Einsteinkoeffizienten gilt der folgenden Zusammenhang:

$$B_{kj} = \frac{c^3}{8\pi h \nu^3} A_{kj} = \frac{g_j}{g_k} B_{jk}$$

mit g_j als Entartung der Energiezustände

6.3 Messung der Einsteinkoeffizienten

Die Lebensdauer τ_i eines Zustandes E_i ist gegeben durch

$$\frac{1}{\tau_i} = A_i + R_i = \sum_j (A_{ij} + R_{ij})$$

Misst man zusätzlich die relativen Linienintensitäten I_{ij} , können die einzelnen A_{ij} bestimmt werden als (mit $R_i = 0$)

$$A_{ik} = A_i \cdot \frac{\frac{I_{ik}}{h\nu_{ik}}}{\sum_j \frac{I_{ij}}{h\nu_{ij}}}$$

6.4 Elektrische Multipolstrahlung

Es gibt auch Übergänge die anderen Ordnungen der elektrischen Multipolentwicklung entsprechen. Für den Quadrupol ergibt sich z.B. Auswahlregeln $\Delta l = 0, \pm 2$, d.h. es werden zwei Photonen emittiert.

6.5 Breite von Spektrallinien

Heisenberg'sche Unschärferelation: Die Heisenberg'sche Unschärferelation gibt basierend auf der Lebensdauer τ eines Zustandes eine untere Schranke für die Breite der Linie:

$$\Delta\nu \geq \frac{1}{4\pi\tau}$$

$$\Delta\lambda \geq \frac{\lambda^2}{4\pi c\tau}$$

Form der Spektrallinie: Der Ansatz einer exponentiell abfallenden Strahlungsleistung führt zu einem Frequenzspektrum mit Lorentzprofil, bzw. Cauchyverteilung in der Wahrscheinlichkeitsrechnung.

$$P(\omega) = P_0 \frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$

Die Halbwertsbreite entspricht dem Einsteinkoeffizient des Übergangs.

$$\delta\omega = 2\pi\delta f = A_i = \frac{1}{\tau}$$

Druckverbreiterung: Durch die Wechselwirkung der Atomhüllen treten leichte Änderungen der Energieniveaus auf. Hierdurch werden Spektrallinien um $\Delta\nu$ verschoben. Außerdem verkürzt sich die Lebensdauer der Zustände durch von Kollisionen verursachte Übergänge. Dadurch wird die Linie breiter. (Anwendung: Messung der Größe von Sternen)

Dopplerverbreiterung: Atome in einem heißen Gas bewegen sich relativ zum Beobachter, deshalb kann der Dopplereffekt relevant werden.

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}} \stackrel{v \ll c}{\approx} 1 - \beta$$

Die Geschwindigkeitsverteilung in radialer Richtung folgt einer Maxwellverteilung, sodass die Linienverbreiterung Gaußförmig wird. Die Breite wächst mit \sqrt{T} an:

$$\delta\lambda_{\text{Doppler}} = 2\sqrt{2\ln 2} \cdot \Delta\lambda_{\text{Doppler}}$$

$$\Delta\lambda_{\text{Doppler}} = \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$$

$$\Delta f_{\text{Doppler}} = \sqrt{\frac{k_B T}{mc^2}} f$$

6.6 Röntgenstrahlung

Streuung und Absorption: Jedes Photon hat eine konstante Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit gestreut oder absorbiert zu werden, daher gilt für die Strahlungsleistung P nach der Absorberdicke x das Exponentialgesetz

$$P(x) = P_0 e^{-\mu x}, \mu = \sigma n$$

mit $\mu = \mu_s + \alpha$, μ_s als Streukoeffizient und α als Absorptionskoeffizient.

Streuung: Hier gibt es drei wesentliche Streuprozesse (E_B Bindungsenergie des Elektrons):

Rayleigh Streuung $h\nu \leq E_B$. Es werden in den Atomhüllen elektrische Dipole angeregt.

Thomson-Streuung $E_B \ll h\nu \ll m_e c^2$. Der Rückstoß des Elektrons ist vernachlässigbar, und das Photon wird mit gleicher Frequenz gestreut

Comptonstrahlung $E_B \ll h\nu \approx m_e c^2$. Rückstoß ist nicht vernachlässigbar und es kommt zur Frequenzänderung beim Photon.

Absorption: Für die Absorption bei höheren Energien sind im wesentlichen zwei Effekte relevant:

Photoeffekt $h\nu + A \rightarrow A^+ + e^-$. Maximal Wahrscheinlichkeit für $h\nu \approx E_B$, außerdem $\alpha \propto Z^{4.5}$.

Paarbildung $h\nu + A \rightarrow A + e^+ + e^-$. Minimale Energie $2m_e c^2 \approx 1022 \text{ keV}$, und $\alpha \propto Z^2$

Wirkungsquerschnitt: $R = \sigma \cdot \Phi_\gamma \cdot N_{\text{Target}}$, R Reaktionsrate, σ , $[\sigma] = m^2$ Proportionalitätskonstante, Φ_γ Photonenfluss, N_{Target} Anzahl der Target-Teilchen. Es gilt $\mu = \sigma n = \sigma \cdot \rho \frac{N_A}{A}$, n Menge an Target-Teilchen.

Massenabschwächungskoeffizient: $\kappa = \frac{\mu}{\rho}$

6.6.1 Bremsstrahlung

7 Laser

7.1 Grundlagen

Laser steht für **L**aser **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation.

Grundlage des Laser-Effekts ist die *stimulierte Emission* von Photonen aus einem angeregten Zustand.

Hierbei wird durch ein einlaufendes Photon der richtigen Frequenz ein kohärenter Übergang angeregt und dabei ein Photon mit: 1) *gleicher Frequenz*, 2) *Polarisation*, 3) *Ausbreitungsrichtung* und 4) *fester Phasenbeziehung* erzeugt. Es kommt somit zur Lichtverstärkung. Zusätzlich zur stimulierten Emission existieren zwei weitere konkurrierende Prozesse, die nicht zur Lichtverstärkung führen: Die spontane Emission und die Absorption aus dem Grundzustand.

7.1.1 Besetzungsinversion

Damit es zu einer Lichtverstärkung kommen kann, benötigt man ein aktives Medium, d.h. es liegt eine Besetzungsinversion vor in dem mehr Teilchen im angeregten Niveau sind, als im Grundzustand. Die Inversionsbedingung ist

$$N_2 \gg N_1 \frac{g_2}{g_1}$$

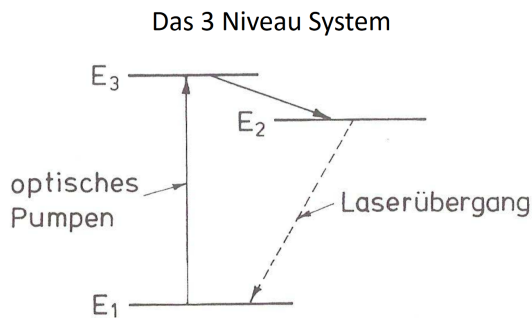
mit $N_{1,2}$ als Teilchenzahl im Energieniveau und $g_{1,2}$ als Entartung der Niveaus.

7.1.2 Drei Niveau System

Grundzustand E_1 : Aus diesem Niveau werden mittels optischen Pumpens Zustände aus dem Energieniveau E_3 angeregt.

Metastabiler Zustand E_3 : Dieser Zustand ist metastabil, d.h. er kann aufgrund der Auswahlregeln nicht direkt in den Grundzustand verfallen. Der Zustand zerfällt schnell in den Zustand E_2 , verglichen mit der Zerfallzeit von $E_2 \rightarrow E_1$. So kann eine Inversion von E_1 bezüglich E_2 erzeugt werden.

Angeregter Zustand E_2 : Dieser zerfällt mit Strahlung in E_1 ist die eigentliche Quelle des Laserlichts.



7.1.3 Resonator

Problem: Der mit der induzierten Emission konkurrierende Prozess der spontanen Emission steigt mit zunehmender Frequenz, da dieser antiproportional ist zur Photonendichte aber proportional zur Modenzahldichte.

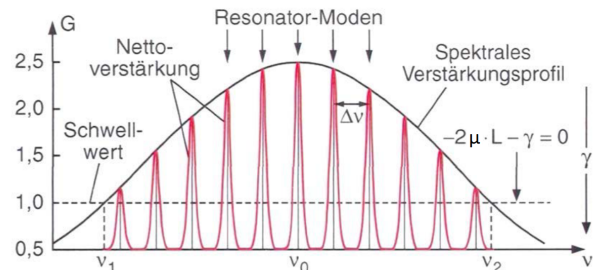
Lösung: Die spontane Emission kann entweder durch eine hohe Photonendichte unterdrückt werden, oder indem man die Modenzahldichte mit einem Resonator einschränkt. Moden, die die Resonanzbedingung $m \cdot \lambda/2 = nL$, $m \in \mathbb{N}$ erfüllen sind dann sehr stark besetzt.

Für eine Verstärkung muss die *Schwellwertbedingung* erfüllt sein

$$-2\mu \cdot L > \gamma$$

mit Resonatorlänge L , Wahrscheinlichkeit eines Photonenverlustes γ und der effektiven Abschwächung $\mu = \mu_{\text{abs}} + \mu_{\text{ind}} = \underbrace{\left(n_k - \frac{g_k}{g_j} n_j\right)}_{\text{Besetzungsinversion}} \cdot \sigma(\nu)$, $I(z) \propto e^{-\mu z}$.

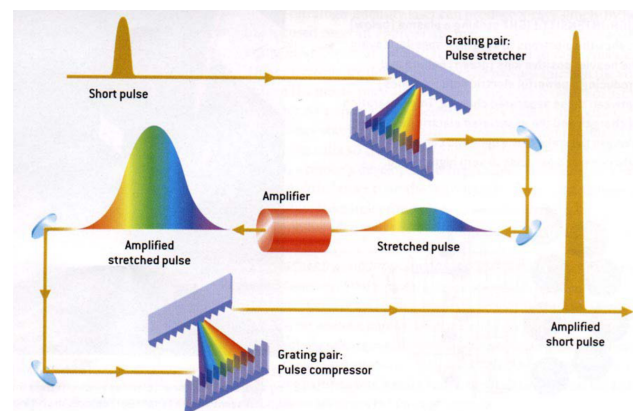
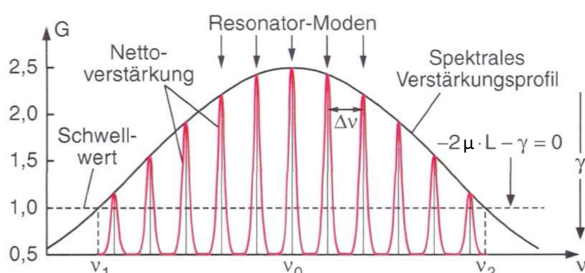
Schwellwertbedingung



7.2 Ultra kurze Lichtpulse

Dies funktioniert über die Nutzung des Zusammenhangs, dass ein sehr kurzes Wellenpaket ein sehr breites Frequenzspektrum hat. Über ein reflektierendes Gitter können die Wellenlängen räumlich getrennt und der Puls damit gestreckt werden. Nach erfolgter Verstärkung wird über ein Gitter im umgekehrten Aufbau die räumliche Trennung wieder rückgängig gemacht.

Schwellwertbedingung



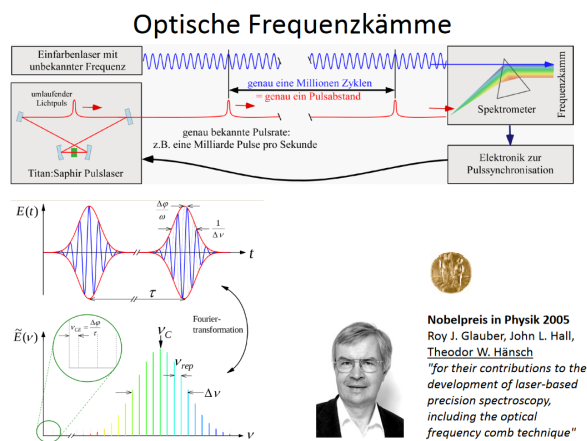
7.3 Laserkühlung

Kühlung mit Laserlicht

- Einstellung Laserfrequenz: **unterhalb der Übergangsfrequenz**
1. Ein ruhendes Atom sieht den Laser weder rot noch blau verschoben und absorbiert kein Photon
 2. Ein sich wegbewegendes Atom sieht den Laser rotverschoben und absorbiert kein Photon
 3. Ein auf den Laser sich zubewegendes Atom sieht den Laser blauverschoben und absorbiert das Photon. Auf Grund der Impulserhaltung wird es um den Betrag des Photonimpulses $h\nu/c$ langsamer.
 4. Das Photon regt das Atom auf einen höheren Zustand an.
 5. Das Atom re-emittiert ein Photon in eine zufällige Richtung. Da die Richtung zufällig ist, erhöht sich im Mittel für viele Atome der Impuls nicht. $T \propto E_{kin} \propto v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$
 6. Mit Laserstrahlen aus unterschiedlichen Richtungen wird eine Kühlung in alle Raumrichtungen erreicht

https://en.wikipedia.org/wiki/Laser_cooling

7.4 Frequenzkamm



8 Moleküle

8.1 LCAO-Methode

Linear Combinations of Atomic Orbitals ist eine Methode um Molekülorbitale anzunähern.

Born-Oppenheimer-Näherung: Der Abstand der Atomkerne wird als konstant angenommen.

Prinzip: Die Wellenfunktion wird als lineare Überlagerung der Lösung für ein separates Atom angenommen. Für zwei Protonen A und B also $\psi_{e-} = c_A\psi_A + c_B\psi_B$. Dann werden per Störungsrechnung die neuen Energieniveaus genähert.

Energieniveaus:

$$E_{\pm} = \frac{\langle \Psi_A | H | \Psi_A \rangle \pm \langle \Psi_A | H | \Psi_B \rangle}{1 \pm \langle \Psi_A | \Psi_A \rangle}$$

8.2 Van-der-Waals-Wechselwirkung

8.3 Rotation und Vibration

	Äquivalent	Energie
Rotation:	Drehimpuls	$\frac{\vec{J}^2}{2\Theta} = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2\mu R^2}$
Vibration:	Harmonischer Oszillator	$\hbar\omega(n + 1/2)$

8.4 Raman-Effekt

Was? Bestrahlt man Moleküle mit monochromatischem Licht der Frequenz ν_0 kommt es zur Rayleigh-Streuung. D.h. die Elektronenhülle wird zu Dipolschwingungen angeregt.

$$\vec{p}_{el} = \vec{p}_{el,0} + \alpha \vec{E}(t), \quad \alpha \equiv \text{Polarisierbarkeit}$$

Das abgestrahlte Licht hat die Frequenz ν_0 , und zusätzlich schwächere Linien kleinerer und größerer Frequenz. Dies ist der Raman-Effekt.

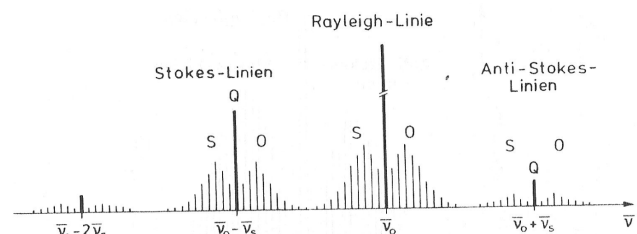
Warum? Die Linie ν_0 wird durch Rayleigh-Streuung verursacht. Linien niedrigerer Frequenz, die so genannten *Stokes Linien*, werden durch die inelastische Anregung von Schwingungen verursacht.

$$\Delta E = h(\nu_0 - \nu_r)$$

$$\nu_r \approx n(\nu_{\text{vib}} + k\nu_{\text{rot}})$$

Die Linien energetischeren Lichts, die sogenannten *Anti-Stokes Linien*, ergeben sich über die Wechselwirkung mit einem angeregten Schwingungszustand und Relaxion in einen niedrigeren Zustand.

$$\Delta E = h(\nu_0 + \nu_r)$$



Nutzen: Eine wichtige Eigenschaft des Raman Effektes ist die Messung und Identifikation von Schwingungszuständen, ohne diese direkt mit der richtigen Frequenz resonant anzuregen. Außerdem die Messung von Spurgasen (CO_2) und Aerosolen in der Atmosphäre (Messung mit Infrarot-Licht nicht möglich, da dieses zu stark von der Luft absorbiert wird).

8.5 Fluoreszenz

Absorption in angeregten Schwingungsniveaus. Durch Stöße (innere Konversion) wird die angeregte Schwingungsenergie abgegeben. Dieser Prozess läuft typischerweise 10 bis 1000 mal schneller ab, so dass der folgende Strahlungsübergang aus dem Grundschwingungszustand erfolgt; das Molekül leuchtet daher bei einer niedrigeren Frequenz.

8.6 Phosphoreszenz

Zusätzlich kann auch durch den sogenannten Interkombinationsprozess die Energie auf Zustände übertragen werden, die einen verbotenen Übergang in den Grundzustand darstellen. Auch hier erfolgt zunächst die Relaxation über innere Konversion in den Grundzustand der Schwingung. Von hier aus kommt es zum stark verzögerten Strahlungsübergang (Nachleuchten) auf typischen Zeitskalen von $10^{-4} - 10^{-2}$ Sekunden.

8.7 Kompakt

Spektralbereich	Frequenzen (Hz)	Energien (eV)	Wellenzahlen (cm^{-1})	Wellenlängen (nm)	Energieformen	gewonnene Moleküleigenschaften
Mikrowellen	$10^9 - 10^{11}$	$4 \cdot 10^{-6} - 4 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-2} - 3$	$3 - 300$	Rotation von schweren Molekülen	Kernabstände, Dipolmomente, Spin-Spin-Wechselwirkung der Kerne
Fernes Infrarot	$10^{11} - 10^{13}$	$4 \cdot 10^{-4} - 0,04$	$3 - 300$	$3 \cdot 10^{-2} - 3$	Rotation von leichten Molekülen, Schwingungen von schweren Molekülen	Kernabstände, Bindungskonstanten
Infrarot (IR)	$10^{13} - 10^{14}$	$0,04 - 0,4$	$300 - 3000$	$3 \cdot 10^{-3} - 3 \cdot 10^{-2}$	Schwingungen von leichten Molekülen, Rotations-Schwingungs-Struktur	Kernabstände, Bindungskonstanten, Ladungsverteilung in Molekülen
Raman	$10^{11} - 10^{14}$	$4 \cdot 10^{-4} - 0,4$	$3 - 3000$	$3 \cdot 10^{-3} - 3$	Rotation und Schwingungen	Wie unter IR, jedoch für mit IR-Methoden nicht meßbare Übergänge
Sichtbarer und UV-Bereich	$10^{14} - 10^{16}$	$0,4 - 40$	$3 \cdot 10^3 - 3 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^{-5} - 3 \cdot 10^{-3}$	Elektronische Übergänge	Alle Eigenschaften wie oben, ferner Dissoziationsenergien, langreichweitige Wechselwirkungen

9 Struktur von Atomkernen

9.1 Allgemeines Streuproblem

Mathematische Beschreibung: Einfallende Teilchen als ebene Welle, mit N_0 als Normierung der Teilchenzahl pro Fläche und Zeit:

$$\phi_0(\vec{r}) = N_0 \exp(ikz)$$

Nach der Streuung an einem sphärisch symmetrischen Potential ist die Welle beschrieben durch

$$\phi_1(\vec{r}) = f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

Der Wirkungsquerschnitt ist (mit $n \equiv$ Zahl der Streuzentren, $\Delta l \equiv$ Dicke des Targets, $F \equiv$ Targetfläche und $R_0 = F\phi_0 \equiv$ Rate der einlaufenden Teilchen, $R_{\text{tot}} \equiv$ Wechselwirkungsrate)

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega$$

$$\sigma_{\text{exp}} = \frac{R_{\text{tot}}}{\phi_0 F \Delta l n} = \frac{R_{\text{tot}}}{R_0 \Delta l n}$$

Die Streuamplitude ist der differentielle Wirkungsquerschnitt (Anteil der effektiven Targetfläche für eine Streuung in den Raumwinkel Ω).

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

Berechnete Formfaktoren

Ladungsverteilung $\rho(r)$	Formfaktor $F(q^2)$	Form
1. punktförmig $\frac{1}{4\pi} \delta(\vec{r})$	1	konstant
2. exponentiell $\frac{q^3}{8\pi} \exp(-ar)$	$\left(\frac{1}{1 + q^2/a^2 \hbar^2} \right)^2$	monoton fallend (Dipol)
3. Yukawa $\frac{q^2}{4\pi r} \exp(-ar)$	$\frac{1}{1 + q^2/a^2 \hbar^2}$	monoton fallend (Monopol)
4. Gauß $\left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{a^2 r^2}{2}\right)$	$\exp\left(-\frac{q^2}{2a^2 \hbar^2}\right)$	Gauß
5. homogene Kugel $\left\{ \begin{array}{l} \rho_0 \text{ für } r \leq R \\ 0 \text{ für } r > R \end{array} \right\}$	$\frac{3}{\epsilon} (\sin \epsilon - \epsilon \cos \epsilon)$ mit $\epsilon = \frac{ q R}{\hbar}$	fallend mit Oszillationen

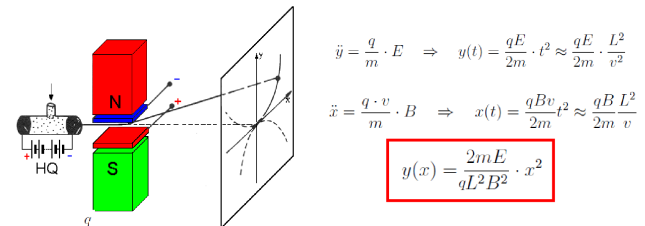
Berechnete Formfaktoren

10 Experimente

10.1 Massenspektrometer nach Thomsons (1912)

Ziel: Messung der atomaren Massen bzw. die relative Häufigkeit bestimmter Massen innerhalb einer Probe.

Aufbau:

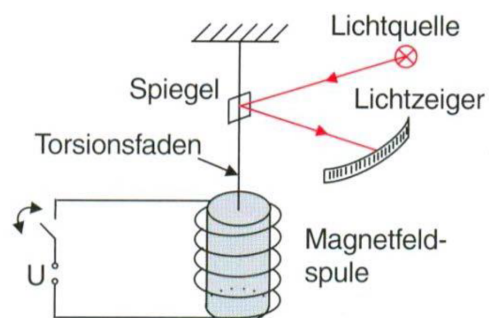


Erklärung: Alle Atome gleicher Masse und Ladung landen auf der gleichen Parabel, die relative natürliche Häufigkeit einzelner Isotope kann aus der Stärke der Schwärzung im Bild eines Massenspektrometers ermittelt werden.

10.2 Einstein de Haas Experiment

Ziel: Messung des Lande Faktors g_s .

Aufbau:



Erklärung: Ein Eisenzylinder ist an einem Torsionspendel befestigt. Er wird in einer Eisenspule so stark magnetisiert, dass Sättigung erreicht wird. Dies bedeutet, dass alle Elektronenspins der N freien Leitungselektronen antiparallel zur B-Feld Richtung ausgerichtet sind. Die Magnetisierung in z -Richtung ist also $M_z = N\mu_{s,z}$. Umpolung des B-Feld entspricht der Umpolung der Magnetisierung

$$|\Delta M_z| = N |\Delta \mu_{s,z}| = 2N |\mu_{s,z}| = N g_s \mu_B$$

Das Umlappen der Spins bedeutet aber auch eine Änderung des Drehimpulses um

$$|\Delta L| = |N \Delta s_z| = N \hbar$$

Die Drehimpulsänderung entspricht einem Drehmoment, das zu einer Schwingung des Torsionspendels führt.

Das Verhältnis von Drehimpuls und Magnetisierung

$$\frac{\Delta M}{\Delta L} = g_s \frac{e}{2m}$$

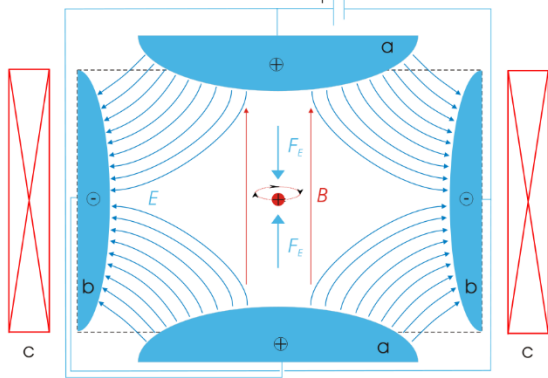
hängt nur vom Landé Faktor und Naturkonstanten ab, d.h. das Verhältnis von Drehimpuls und magnetischem Moment kann bestimmt werden.

10.3 Penning-Falle

Ziel: Messung des Lande Faktors g_s .

Aufbau:

Schema einer Penning-Falle mit positiv geladenem Teilchen (Mitte) auf seiner Kreisbahn. Das elektrische Feld (blau) wird durch einen Quadrupol aus Endkappen (a) und Ringelektrode (b) erzeugt, das magnetische Feld (rot) durch die Zylinderspule C.



Erklärung: Elektronen werden im elektrischen Quadrupolfeld und magnetischen Dipolfeld einer Penning Teilchenfalle eingefangen und gespeichert. Mit eingestrahlten Mikrowellen werden Spinflip Übergänge induziert. Aus dem Verhältnis der Zyklotron und Spinflip Frequenzen können Abweichungen von g_s sehr genau bestimmt werden.

10.4 Elektron-Spin Resonanz (ESR)

Ziel: Messung des Lande Faktors in Festkörpern. Materialuntersuchungen für Proben mit ungepaarten

Elektronen, oder chemische Radikale in der Biophysik und Halbleiterphysik

Aufbau: Probe wird mit starkem inhomogenen Magnetfeld durchsetzt. Anschließend wird die frequenzabhängige Absorption von Mikrowellen vermessen.

Erklärung: Grundlage dieses Effektes ist die Ausrichtung des magnetischen Momentes des Elektronenspins in einem externen B-Feld. Hierbei definiert das B-Feld die z -Achse und die Ausrichtung entspricht einer potentiellen Energie

$$V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g_s \mu_b \frac{s_z}{\hbar} B = g_s \mu_B m_s B$$

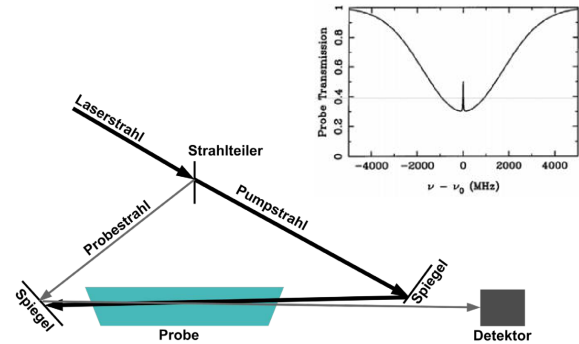
Abhängig von der Spin Einstellung $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ergibt sich ein Energieunterschied zwischen den beiden Einstellungen von

$$\Delta E = g_s \mu_B B$$

Durch die frequenzabhängige Messung der Absorption von Mikrowellen in einer Probe oder alternativ bei einer festen Frequenz in Abhängigkeit des B-Feldes, kann sehr präzise das magnetische Moment bestimmt werden.

10.5 Dopplerfreie Sättigungsspektroskopie

Ziel: Messung der Hyperfeinstruktur, ohne Störung durch Dopplerverbreiterung der Linien.



Aufbau:

Erklärung: Grundlage dieses Effektes ist die Ausrichtung des magnetischen Momentes des Elektronenspins in einem externen B-Feld. Hierbei definiert das B-Feld die z -Achse und die Ausrichtung entspricht einer potentiellen Energie

$$V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g_s \mu_b \frac{s_z}{\hbar} B = g_s \mu_B m_s B$$

Abhängig von der Spin Einstellung $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ergibt sich ein Energieunterschied zwischen den beiden Einstellungen von

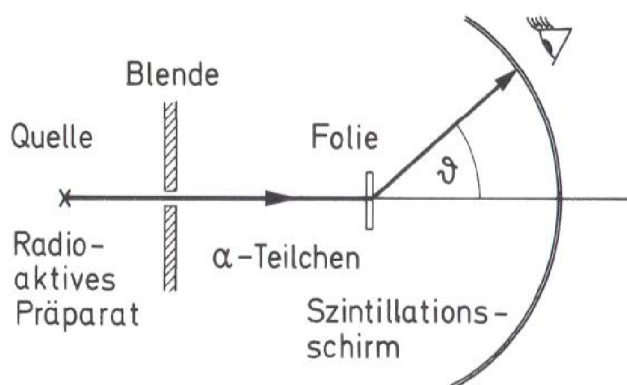
$$\Delta E = g_s \mu_B B$$

Durch die frequenzabhängige Messung der Absorption von Mikrowellen in einer Probe oder alternativ bei einer festen Frequenz in Abhängigkeit des B-Feldes, kann sehr präzise das magnetische Moment bestimmt werden.

10.6 Rutherford'sche Streuexperiment

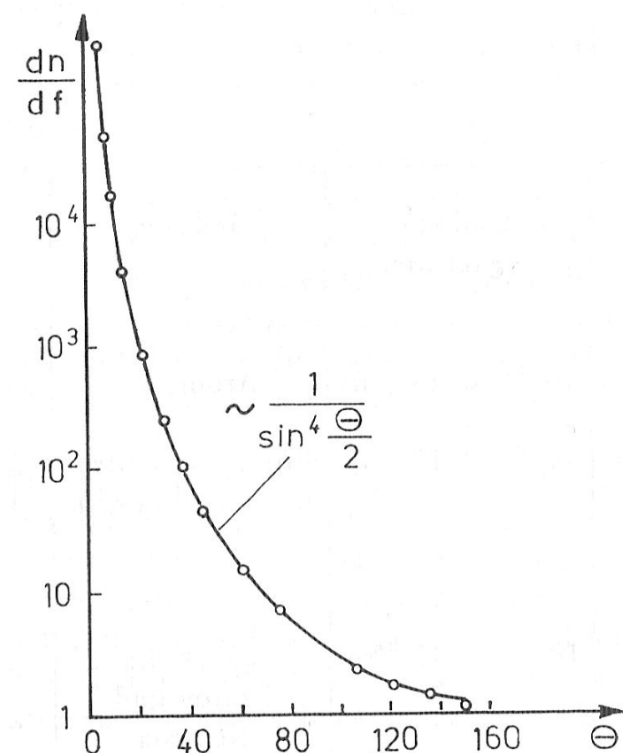
Prinzip: α -Teilchen aus einem radioaktiven Präparat werden an einer dünnen Gold-Folie gestreut. Anschließend misst man die Zählrate N als Funktion des Winkels θ . Der Zerfall verläuft monoenergetisch, d.h. alle Alphateilchen haben die gleiche Geschwindigkeit.

Aufbau:



Ergebnis: Es ergibt sich eine Verteilung

$$N(\theta) \propto \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$



Die starke Streuung widerlegte das damalige Verständnis der Atomkerne als groß und ausgedehnt.

11 Formelzeichen und ihre Bedeutung

r_B : Bohrscher Atomradius, $r_B = \frac{\hbar}{m c \alpha} = 0.529 \text{ \AA}$

μ_B : Bohrsches Magneton, $\mu_B = \frac{e \hbar}{2m} = \begin{cases} 9.27 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}} \\ 5.8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \end{cases}$

g_ℓ : Lande Faktor für ℓ , $g_\ell = 1$

g_s : Lande Faktor für s , $g_s = 2$

γ : gyromagnetisches Verhältnis, $\gamma = \frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{S}|}$

α : Feinstrukturkonstante, $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$

μ_k : Kernmagneton $\mu_k = \frac{\mu_B}{1836} = 3 \cdot 10^{-8} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$

R_y : Rybergenergie, $R_y = \frac{m_e c^2 \alpha^2}{2} = 13.6 \text{ eV}$

R_∞ : Rybergwellenlänge, $R_\infty = \frac{R_y}{\hbar c}$