

# 1 Grundlagen der QM

## 1.1 Schwarzkörperstrahlung

Schwarzer Körper

- Ein SK absorbiert elektromagnetische Strahlung vollständig. Somit (wegen Kirchhoffschem Strahlungsgesetz) ist sein Emissionsvermögen im Vergleich zu beliebigen Körper maximal ( $\epsilon = 1$ )
- Ein SK lässt keine Strahlung hindurch und spiegelt oder streut nichts.
- Ein beliebiger Körper kann bei keiner Wellenlänge mehr Strahlung aussenden als ein SK

Wiensches  
schiebungsgesetz

$$\lambda_{max} \cdot T = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ m K}$$

$[\lambda_{max}] = \mu\text{m}$ ; Wellenlänge bei der die grösste Strahlungsintensität auftritt.

$[T] = \text{K}$ ; absolute Temperatur der strahlenden Fläche

$$P = \sigma A \epsilon T^4$$

$[P] = \text{W}$ ; Leistung, die auf eine Seite von der Fläche  $A$  abgestrahlt wird.

$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4}$ , Stefan-Boltzmann-Konstante

$\epsilon \leq 1$ : Emissionsvermögen

$$\rho_E(\nu) d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu$$

$\rho_E(\nu) d\nu$ : Volumendichte der thermischen Strahlung in einem Frequenzintervall  $[\nu, \nu + d\nu]$

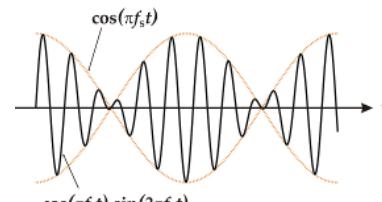
$[\nu] = \text{s}^{-1}$ ; Frequenz

$$\rho_E(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} d\lambda$$

Stefan-Boltzmann-  
Gesetz

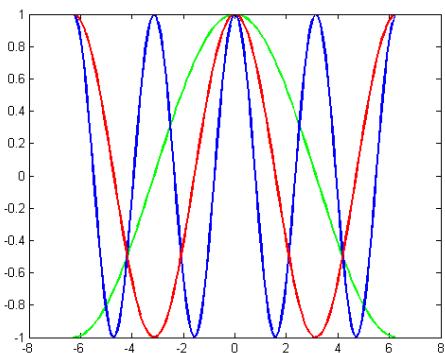
Planck'sches  
Strahlungsgesetz

## 1.2 Ebene Welle

Definition	$\vec{A}(\vec{r}, t) = \operatorname{Re} \left( \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) = \vec{A}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$	
Amplitude	$\vec{A}_0$	Dimension i.A. wählbar
Wellenvektor	$\vec{k}$	
Wellenzahl	$k =  \vec{k}  = \frac{2\pi}{\lambda}$	$\text{m}^{-1}$
Wellenlänge	$\lambda = \frac{2\pi}{k}$	$m$
Kreisfrequenz	$\omega = 2\pi\nu$	$\text{s}^{-1}$
Frequenz	$\nu = \frac{\omega}{2\pi}$	$\text{s}^{-1}$
Periode	$T = \frac{1}{\nu} = \frac{2\pi}{\omega}$	$s$
Phasengeschwindigkeit	$c = \frac{\omega}{k} = \lambda\nu = \frac{\lambda}{T}$	$\text{m s}^{-1}$
Gruppengeschwindigkeit	$v_G = d\omega/dk$	$\text{m s}^{-1}$
Phase	$\phi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$	dimensionslos
Abhängigkeit Medium	von	Beim Übergang in ein Medium mit Brechungszahl $n = \sqrt{\mu_r \epsilon_r}$ ändern sich folgende Größen wie folgt:
	Frequenz:	$\nu \rightarrow \nu$
	Wellenlänge:	$\lambda \rightarrow \frac{\lambda}{n}$
	Lichtgeschwindigkeit:	$c \rightarrow \frac{c}{n}$
	Wellenzahl:	$k \rightarrow k \cdot n$
Schwebung	$E_0 \cdot e^{i(\omega_1 t)} + E_0 \cdot e^{i(\omega_2 t)} = 2E_0 \cos\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right) e^{i\bar{\omega}t}$	
	$\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$	
	$\bar{\omega} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}$	
Beugung	$d =$ Breite des Spalts	
	$d \gg \lambda$	Keine Beugung
	$d \leq \lambda$	Welle wird um Spalt gebeugt
Interferenz	Maxima	$d \sin \theta_m = m\lambda, \quad m = 0, 1, 2, \dots$
	Minima	$d \sin \theta_m = (m - \frac{1}{2})\lambda, \quad m = 1, 2, 3, \dots$
	Intensität	$I = \frac{\sin^2 p z}{\sin^2 z} \quad z = \frac{\pi d}{\lambda} \sin \alpha \quad p = \# \text{ Spalten}$

## 1.3 Wellenpakete

Ein Wellenpaket ist eine Überlagerung von ebenen Wellen mit unterschiedlicher Frequenz aber gleicher Phase. Phasengleich bedeutet, dass verschiedene Wellen an einem Punkt  $(x, t)$  den gleichen Wert haben.



Phasengleiche (um  $x=0$ ) Cosinusfkt. mit Wellenlängen  $4\pi$ ,  $2\pi$  und  $\pi$

allgemeinste Lsg. der SG  $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$   $\psi_n$  sind Lösungen der SG.

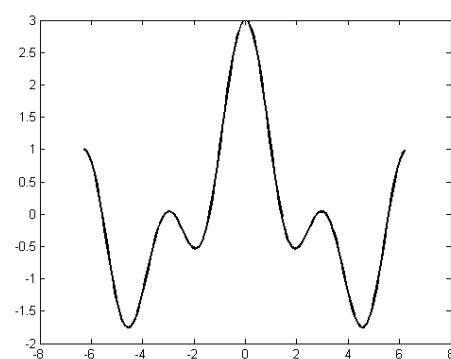
Alternative Darstellung  $\Psi(x, t) = \int g(k) \psi_k(x, t) dk$   $g(k)$  ist eine Gewichtungsfunktion.

Der Zusammenhang zwischen einer einzelnen Welle mit bekannter Frequenz und einem Wellenpaket kann auch mittels Fouriertransformation ausgedrückt werden:

$$\text{Welle} \quad E(z, t) = F^{-1} \left\{ \tilde{E}(z, \omega) \right\} = \frac{1}{2\pi} \int \tilde{E}(z, \omega) e^{i\omega t} d\omega$$

$$\text{Frequenzspektrum} \quad \tilde{E}(z, \omega) = F \{ E(z, t) \} = \int E(z, t) e^{-i\omega t} dt$$

FWHM (Full width @ half maximum) Sei  $f(x_1) = f(x_2) = \frac{1}{2}f(x_{\max})$  Dann ist  $\text{FWHM} = |x_1 - x_2|$



Überlagerung:  $\cos \frac{1}{2}x + \cos x + \cos 2x$

### 1.3.1 Unterschied Wellenpaket - Welle in Bezug auf Unbestimmtheitsrelation

1. Die Eigenzustände (Wellenfkt.) sind Lösungen für eine genau definierte Energie  $\Rightarrow$  Ort ist unbestimmt (Unschärferelation)
2. Durch Superposition mehrerer benachbarter Eigenzustände erhält man einen Puls, (der mit der Eigenfrequenz hin und her schwingt) und dessen Ort immer genauer bestimmbar wird.

## 1.4 Photoelektrischer Effekt

$$E_{kin,max} = \left( \frac{1}{2}mv^2 \right) = h\nu - \Phi_0$$

$E_{kin,max}$ : maximale kinetische Energie der austretenden Elektronen

$\Phi_0$ : Austrittsarbeit: Mindestenergie um ein Elektron herauszulösen.

$$\text{Grenzfrequenz} \quad E_{kin,max} > 0 \Leftrightarrow h\nu_0 > \Phi_0 \Leftrightarrow \nu_0 > \frac{\Phi_0}{h}$$

## 1.5 Compton Effekt und Photonen

Nichtrelativistische Energie  $E = \frac{p^2}{2m}$

Relativistische Energie  $E = m(v)c^2 = c\sqrt{m_0^2c^2 + p^2}$

Geschw. abhängigkeit  $m(v) = m_0 \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{c^2}{v^2}}}$

Photonen im Vakuum Ruhemasse  $m_0 = 0$

Energie  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = cp \quad (\text{nur für Teilchen mit } m_0 = 0!!)$

Impuls  $p = \frac{h}{\lambda}$

Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c$

Compton Effekt  $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\varphi)$

$$\frac{h}{m_e c} =: \lambda_{\text{Compton}} = 2.426 \cdot 10^{-12} \text{m}$$

$\lambda_1$ : Wellenlänge des Photons vor dem Stoss mit einem freien Elektron.

$\lambda_2$ : Wellenlänge nach dem Stoss.

$\varphi$ : Winkel zwischen einfallendem Photon (Welle) und gestreutem Photon

Der Compton-Effekt hat nur dann einen merklichen Einfluss, falls  $\Delta\lambda/\lambda_1$  gross ist, d.h.  $\lambda_1$  muss im pm-Bereich liegen (Röntgenstrahlen).

## 1.6 Welle-Teilchen Dualismus

Elektromagnetische Strahlung breitet sich wie eine Welle aus, und wechselwirkt mit Materie wie ein Teilchen.

Wellencharakteristiken: Transmission, Beugung, Reflexion, Interferenz

Teilchencharakteristiken: Absorption, Emission

## 1.7 De Broglie-Hypothese

Laut de Broglie haben auch Teilchen mit Ruhemasse  $> 0$  eine Wellenlänge.

Materiewellen Wellenlänge  $\lambda = \frac{h}{p}$

nicht relativistischer Impuls  $p = mv$

relativistischer Impuls  $p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$

Materiewelle  $\Psi(z, t) = \Psi_0 e^{i(\omega t - kz)} \quad \omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$

## 2 Schrödinger-Gleichung

### 2.1 Allgemeines

“Herleitung” der SG

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \Psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right) \quad (\text{de Broglie}) \\ \Rightarrow p_x \Psi(x, t) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \\ \Rightarrow E\Psi(x, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Via Korrespondenzprinzip gilt: } E &= \frac{\hat{p}^2}{2m} \\ \Rightarrow E\Psi(x, t) &= i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}}_E \Psi(x, t) = \underbrace{\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_H \Psi(x, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi(x, t)\end{aligned}$$

Lösungsansatz (Separation der Variablen):  $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \chi(t)$

$$\begin{aligned}\Leftrightarrow \psi(x) i\hbar \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} &= \chi(t) \cdot \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \\ \Leftrightarrow \frac{i\hbar \dot{\chi}(t)}{\chi(t)} &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = E \\ \Rightarrow \text{ODE 1: } i\hbar \dot{\chi}(t) &= E\chi(t) \Rightarrow \chi(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} Et\right) \\ \Rightarrow \text{ODE 2: } \frac{-\hbar^2}{2m} \psi''(x) &= E\psi(x)\end{aligned}$$

allgemeine SG

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi$$

allg. zeitabhängige

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$$

Lösung

Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

Aufenthalts

$$P(x) = |\Psi(x)|^2$$

wahrscheinlichkeits-  
dichte

Delokalisation

vollständige Delokalisation eines Teilchens, falls  $P(x) = \text{konst.}$

Heisenberg'sche

$$\text{Unschärferelation} \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A} \quad \text{Falls } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow A \text{ und } B \text{ gleichzeitig messbar}$$

Operatoren

$$\hat{r} \quad \text{Orts-Operator} \quad \hat{r} = (x, y, z)^T$$

$$\hat{p} \quad \text{Impuls-Operator} \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla = -i\hbar (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)^T$$

$$\hat{H} \quad \text{Hamilton-Operator*} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + E_p(\hat{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E_p(\hat{r})$$

\* für ein freies Teilchen im Potentialfeld

## 2.2 allgemeine Lösung für SG mit Potential

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (1-dim)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_{pot}(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Lösung der zeitunabhängigen SG

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{=: -C} \psi(x) = (E - E_{pot})\psi(x)$$

Ansatz:  $\psi(x) = e^{ikx}$

$$\Rightarrow Ck^2 \cdot e^{ikx} = (E - E_{pot}) \cdot e^{ikx}$$

$$\Leftrightarrow k = \pm \sqrt{\frac{E - E_{pot}}{C}} = \pm \sqrt{\frac{(E - E_{pot}) \cdot 2m}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \psi_k(x) = A_k e^{ikx} + B_k e^{-ikx}$$

Lösung für  $E_{pot} = 0$

$$\psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Lösung für  $E < E_{pot}$

$$\psi_2(x) = C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x} \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_{pot} - E)$$

Lösung für  $E > E_{pot}$

$$\psi_3(x) = E e^{i\alpha' x} + F e^{-i\alpha' x} \quad \alpha'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_{pot})$$

Stetigkeitsbedingungen  $\psi_i = \psi_j$  und  $\frac{\partial \psi_i}{\partial x} = \frac{\partial \psi_j}{\partial x}$  für  $x = 0$

Teilchenstromdichte  $v|A|^2 \quad v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$

Transmissionskoeffizient  $\frac{k_C |C|^2}{k_A |A|^2}$

Reflexionskoeffizient  $\frac{k_B |B|^2}{k_A |A|^2}$  Bedeutung von A,B,C wie unten Bsp. Potentialstufe

$R + T = 1$

## 2.3 Spezifische Probleme

### 2.3.1 Potentialstufe

$$E_{pot} \quad E_{pot} = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ (Bereich I)} \\ E_0 & x \geq 0 \text{ (Bereich II)} \end{cases}$$


---

allg. Lösung ( $E < E_{pot}$ )	$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
	$\psi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x} \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E_{pot} - E)$
Stetigkeitsbedingungen	$\psi_I _{x=0} = \psi_{II} _{x=0} \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial \psi_I}{\partial x} \right _{x=0} = \left. \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \right _{x=0}$
Randbedingungen	$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_{II} < \infty$ (vgl. Normierungsbedingung)
spez. Lösung	$D = 0$ (aus RB)
	$B = \frac{(ik + \alpha)A}{ik - \alpha} \quad C = \frac{2ikA}{ik - \alpha}$

---

allg. Lösung ( $E > E_{pot}$ )	$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
	$\psi_{II}(x) = Ee^{i\alpha' x} + Fe^{-i\alpha' x} \quad \alpha'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_{pot})$
spez. Lösung	$F = 0$ (aus RB)
	$B = \frac{(k - \alpha')A}{k + \alpha'} \quad E = \frac{2kA}{k + \alpha'}$
Transmissionskoeffizient	$\frac{v_{II} E ^2}{v_I A ^2} = \frac{\alpha'}{k} \left( \frac{2k}{k + \alpha'} \right)^2$
Reflexionskoeffizient	$\frac{v_I B ^2}{v_I A ^2} = \left( \frac{k - \alpha'}{k + \alpha'} \right)^2$

### 2.3.2 Potentialtopf (1D)

$E_{pot}$	$E_{pot} = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \text{ Bereich I} \\ \infty & \text{sonst (Bereich II)} \end{cases}$
allg. Lösung	$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
	$\psi_{II}(x) = 0$
Randbedingungen	$\psi_I(x = 0) = \psi_I(x = a) = 0$
spez. Lösung	$\psi_I(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(kx) \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k}$
Energieeigenwert	$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

### 2.3.3 Potentialtopf (3D)

SG in 3 Dimensionen	$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \quad \psi_{1,2,3} \text{ sind Wellenfkt. im 1-dim. Kasten}$
Particle in a cube	$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin(\frac{n_1\pi}{a}x) \sin(\frac{n_2\pi}{a}y) \sin(\frac{n_3\pi}{a}z)$
	$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$

### 2.3.4 Der Tunneleffekt

Potentialstufe

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ Bereich A} \\ V & 0 \leq x \leq D \text{ Bereich B} \\ 0 & D < x \text{ Bereich C} \end{cases}$$

SG

$$\hat{H}\Psi_A(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_A(x) = E\Psi_A(x)$$

$$\hat{H}\Psi_B(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_B(x) + V\Psi_B(x) = E\Psi_B(x)$$

$$\hat{H}\Psi_C(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_C(x) = E\Psi_C(x)$$

Lösungen

$$\Psi_A(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_B(x) = A'e^{ik'x} + B'e^{-ik'x} \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} = i\kappa$$

$$\Psi_C(x) = A''e^{ikx} + B''e^{-ikx}$$

Randbedingungen

$$\Psi_A(0) = \Psi_B(0)$$

$$\frac{d}{dx}\Psi_A(0) = \frac{d}{dx}\Psi_B(0)$$

$$\Psi_B(D) = \Psi_C(D)$$

$$\frac{d}{dx}\Psi_B(D) = \frac{d}{dx}\Psi_C(D)$$

$$B'' = 0 \text{ (keine reflektierte Komponente rechts der Barriere erlaubt)}$$

Letztlich hat man nur 5 Randbedingungen für 6 Unbekannte. Man kann also lediglich die Tunnelwahrscheinlichkeit  $P_T = \frac{|A''|^2}{|A|^2}$  angeben, indem man  $A''$  durch  $A$  ausdrückt.  $P_T = \frac{4E(V-E)}{4E(V-E) + V^2 \sinh^2(\kappa D)}$  Grundsätzlich wird die Tunnelwahrscheinlichkeit klein für breite Barrieren ( $D \rightarrow \infty$ ), hohe Barrieren ( $V \rightarrow \infty$ ) und grosse Massen  $m$

### 2.3.5 QM harmonischer Oszillatör

Der QM harmonische Oszillatör wird verwendet, um bspw. molekulare Vibrationsbewegungen zu modellieren.

SG

$$\hat{H}\Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right) \Psi = E\Psi$$

Eigenwerte

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Eigenfunktionen

$$\Psi_n = N_n H_n(\sqrt{\alpha}x) e^{-\alpha x^2/2} \quad \alpha = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \quad H_n : \text{Hermite-Polynome}$$

### 2.3.6 3D QM harm. Osz.

Eigenwerte

$$E_n = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

Eigenfunktionen

$$\Psi_n = \Psi_{n_x} \cdot \Psi_{n_y} \cdot \Psi_{n_z}$$

## 2.4 Weiteres

Postulat # 2 der QM	Einzig mögliches Messresult einer physik. Grösse $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ ist ein Eigenwert $a_n$ von Operator $\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \Rightarrow \hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$
Postulat # 3 der QM	WSK dass $a_n$ Messresultat ist, ist $ c_n ^2$ , falls Zustand des Systems: $\Phi = \sum_n c_n \psi_n$
Erwartungswert	$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dx dy dz$
Beispiel	(1-dim) Energieerwartungswert: $\langle E_{kin} \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx$

## 3 Bohr'sches Atommodell

Quantisierung des Bahndrehimpuls	$L_n = m_e v r_n = n\hbar$
diskrete Energiezustände	$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu$
Übergangsfrequenz	$\nu = \frac{\Delta E}{h}$
Absorption	$A + h\nu \rightarrow A^*$
spontane Emission	$A^* \rightarrow A + h\nu$ (inkohärente Strahlung, zufällig in alle Rtg.)
stimulierte Emission	$A^* + h\nu \rightarrow A + 2h\nu$ (kohärente Strahlung)
Atomradien nach Bohr	$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0, \quad a_0 = 0.529 \text{ Å}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad Z = \text{Kernladungszahl}$
zugehörige Energien	$E_n = -13.606 eV \frac{Z^2}{n^2}$
Wasserstoffspektrum beim Energieniveaübergang	$\nu = Rc Z^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) Hz, \quad n_2 > n_1, Z = \text{Kernladungszahl}$
Rydberg-Konstante	$R = 1.0973731534 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad Rc = 3.2899 \cdot 10^{15}$

## 4 QM Drehimpuls

Drehimpulsoperator  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi}$$

Kommutativität  $\langle L_z, \hat{\mathbf{L}}^2 \rangle = 0 \quad \langle L_z, L_x \rangle \neq 0 \neq \langle L_z, L_y \rangle$

⇒ In der QM sind nur eine Komponente und Betrag des Drehimpuls unabhängig.

Drehimpulsgleichungen

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = m_l \hbar Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) \quad m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

Kugelfunktionen  $Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = CP_l^{[m_l]}(\cos \theta) e^{im_l \varphi}$

$P_n^m(z) \equiv$  Legendre-Polynome

Lösungen zu  $Y_{l,m_l}$ : Alonso-Finn S.134

Quantenzahlen

Principal quantum number  $n$  1,2,3,... unlimitiert

K,L,M,...

Orbital quantum number  $l$  0,1,2,... n-1 n mögliche Werte

s,p,d,f,..

Orbital magntic quantum number  $m_l$  -l, l+1,..., l-1, l 2l+1 mögliche Werte

Spin quantum number  $m_s$   $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  2 mögliche Werte

## 5 QM Coulomb-Potential (Wasserstoffatom)

Schrödinger-Gleichung	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_K}\nabla_K^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \text{andere Terme}$
vereinfachte SG	$\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi = E\Psi$ (QM Coulomb-Potential)
	$\mu = \frac{m_e \cdot m_K}{m_e + m_K} \approx m_e$
	$Z = \text{Kernladungszahl}$
Ansatz für Eigenfkt.	$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi)$
Lösungen	$R_{n,l}(r) = N_{n,l} \exp\left\{-\frac{Zr}{na}\right\} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na}\right) \quad n = 1, 2, \dots$
	$a = \frac{m_e}{\mu}a_0; \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.0529 \text{ nm}; \quad L : \text{Laguerre-Polynome}$
	$Y_{lm} = \text{Eigenfkt. des Drehimpulsoperators} \quad l = 1, \dots, (n-1)$
	$m = -l, -l+1, \dots$
	Superpositionen sind natürlich auch wieder Lösungen!
Energieeigenwerte	$E_{n,l,m} = E_n = -\frac{hcRZ^2}{n^2} = -13.606eV \frac{Z^2}{n^2}$
	$c = \text{Lichtgeschwindigkeit}; \quad R = \text{Rydberg-Konstante}$
Entartung	$g = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ (Pro $l$ gibt es $2l+1$ $m$ mit gleichem Energieeigenwert)
radiale WSKDichte	WSKDichte $p_{n,l}(r)dr =  R_{n,l}(r) ^2 r^2 dr$
	Radius des Maximums $\arg \max_r p_{n,l}(r) = r_{pmax} = \frac{n^2}{Z}a$ (Bohr'scher Atomradius)
	Mittlerer Radius $\frac{a}{2Z} (3n^2 - l(l+1))$

## 6 Zeeman-Effekt

Unter Einfluss eines Magnetfelds offenbaren sich ungeahnte Zusatzenergien, die für die Aufspaltung von entarteten Energiezuständen sorgen.

magnetisches Dipolmoment	Bahn- Dipolmoment	$\mu_L = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}$
z-Komponente		$\mu_{L,z} = -\frac{e\hbar}{2m_e}m_l$
Bohr'sches Magneton		$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.2732 \cdot 10^{-24} = 5.6564 \cdot 10^{-5} eVT^{-1}$
Zusatz-Energie durch Magnetfeld		$E_B = -\mu_L \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2m_e}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$
z-Achse parallel Rtg. Magnetfeld		$E_B = \mu_B B m_l$
Drehmoment Elektron		$\tau = \mu_L \times \mathbf{B} = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L} \times \mathbf{B}$

## 7 Elektronenspin

Motiviert z.B. durch Stern-Gerlach-Versuch oder auch Doublets bei Wellenlängen, z.B. D-Linien von Natrium. Der Elektronenspin ist ein Zusatzspin, der sich zum Drehimpuls addiert.

Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$

Gesamtdrehmoment  $\mu = \mu_L + \mu_S = -\frac{e}{2m_e}(\mathbf{L} + g_S \mathbf{S})$

Drehimpulsgleichungen

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{s,m_s} &= s(s+1)\hbar^2 \quad \chi_{s,m_s} \quad s = \frac{1}{2} \\ \hat{S}_z \chi_{s,m_s} &= m_s \hbar \quad \chi_{s,m_s} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Die genaue Gestalt von  $\chi$  ist Wurst.

vollständige WFkt.  $\Psi_{nlm_lm_s} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)\chi_{m_s}$

Addition von Bahndrehimpuls und Elektronenspin  $j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|$

## 8 Addition von Drehimpulsen

Sei  $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{j}}_1 + \hat{\vec{j}}_2$  der resultierende Drehimpuls.

Zugehörige Quantenzahlen  $\begin{aligned}\hat{\vec{j}}_1 : |j_1, m_1\rangle \\ \hat{\vec{j}}_2 : |j_2, m_2\rangle \\ \hat{\vec{J}} : |J, M\rangle\end{aligned}$

Zur Erinnerung:  $m = \pm j, \pm(j-1), \dots$

gekoppelte Darstellung  $|j_1, m_1, J, M\rangle$ : In der gekoppelten Darstellung setzt man die Quantenzahlen  $J$  und  $M$  fest.

Betrag und z-

Komponente  $|J| = \hbar\sqrt{J(J+1)} \Rightarrow |\vec{J}| = |\vec{j}_1 + \vec{j}_2| = ??$

$J_z = \hbar M \Rightarrow J_z = j_{1,z} + j_{2,z} = \hbar(m_1 + m_2)$

$M$  ist immer gleich  $m_1 + m_2$ . Weil  $|M| \leq |J|$  sein muss, können wir die möglichen Werte für  $J$  aus  $M$  ableiten.

Resultierende Quantenzahlen

$$\begin{aligned}J &= j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2| \\ M &= m_1 + m_2\end{aligned}$$

Bra-Ket Notation

$$|j_1, j_2, J, M\rangle$$

Anzahl Basisfunktionen

$$(j_1 + j_2) \cdot (2(j_1 + j_2) + 1)$$

# J-Werte # M-Werte pro J-Wert

Addition von Elektronenspin und Bahndrehimpuls

Sei  $\vec{j}_1 = \vec{L}$  und  $\vec{j}_2 = \vec{S}$ . Wir wissen, dass  $m_s = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow j_2 = \frac{1}{2}$ , wogegen  $m_l = \pm l, \pm(l+1), \dots \Rightarrow j_1 = l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ). Somit sind die möglichen Werte für  $J$ :  $l + \frac{1}{2}$  und  $l - \frac{1}{2}$ . Dies entspricht den Fällen parallel und antiparallel.

Der Elektronenspin kann relativ zum Bahndrehimpuls also nur zwei mögliche Orientierungen haben. Ausnahme: Für  $j_1 = l = 0$  ist  $j_1 + j_2 = |j_1 - j_2|$ , somit kann  $J$  nur einen Wert haben.

## 9 Atome mit vielen Elektronen

Ein Protonen, zwei Elektronen System

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

*Elektron-Elektron-Abstossung*

Modell abgeschirmtes Zentralfeld  $E = 2(Z - \delta)^2 E_H$   $E_H = -13.6 \text{ eV}$ ,  $\delta$  = Abschirmungskonstante

Bahnwellenfunktion Atom  $\Psi_{Atom}(2, 1) = \Psi_a(2)\Psi_b(1) \pm \Psi_a(1)\Psi_b(2) = \pm \Psi_{Atom}(1, 2)$  a,b: Zustände; 1,2: Elektronen

symmetrische Bahnwellenfunktion  $\Psi_S(1, 2) = \Psi_S(2, 1) \quad \lim_{a \rightarrow b} \Psi_S > 0$

$\Rightarrow$  Elektronen können einander nahe kommen  $\Rightarrow$  Hohe mittlere Abstossungsenergie

antisymmetrische Bahnwellenfkt.  $\Psi_A(1, 2) = -\Psi_A(2, 1) \quad \lim_{a \rightarrow b} \Psi_A = 0$

$\Rightarrow$  Elektronen sind einander nie nahe  $\Rightarrow$  Niedrige mittlere Abstossungsenergie

gleiche Zustände Die Zustände  $a, b$  entsprechen Quantenzuständen  $n, l, m_l$ . Sind zwei Elektronen im gleichen Zustand, so ist die antisymmetrische Bahnwellenfkt.  $\Psi_A(1, 2) = \Psi_a(2)\Psi_a(1) - \Psi_a(1)\Psi_a(2) = 0$  und somit nicht erlaubt.

Spins Die Spins der beiden Elektronen betragen jeweils  $\frac{1}{2}$ . Je nach Orientierung (parallel, antiparallel) können sie sich zu 0 oder 1 addieren

Spinwellenfkt Zur Erinnerung:  $\chi_+$  bezeichnet die Spinwellenfkt bzgl.  $m_s = \frac{1}{2}$ ,  $\chi_-$  diejenige bzgl.  $m_s = -\frac{1}{2}$

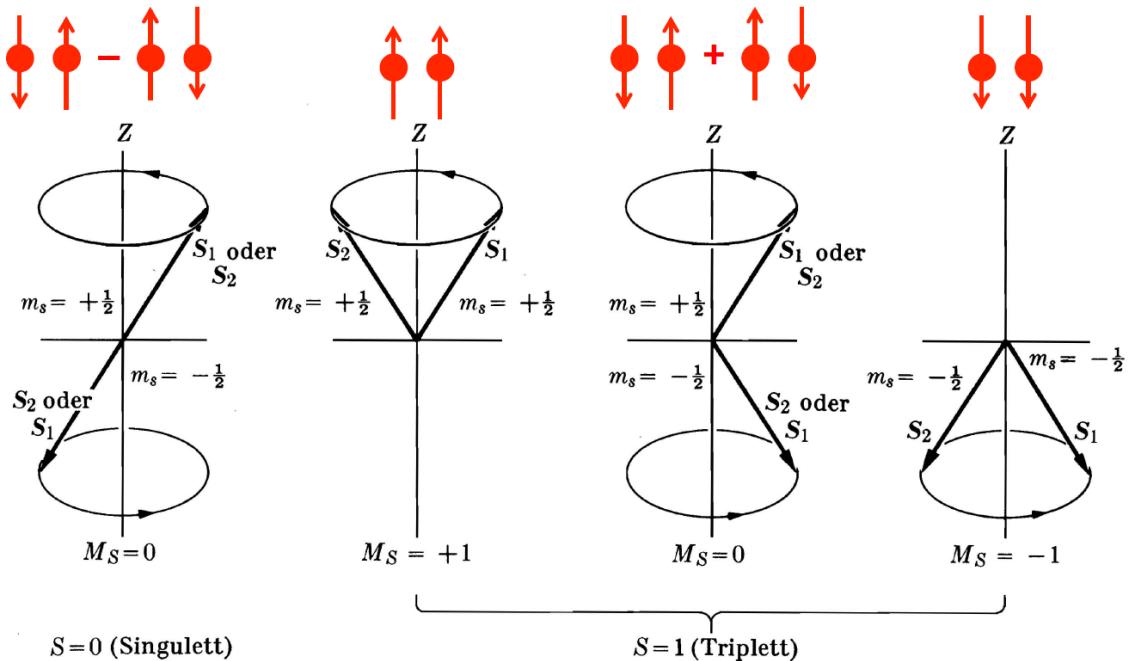
Gesamtspin  $S = 0$   $\chi_A = \chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)$   $M_S = 0$  antisymmetrische Spin-Wellenfkt (Singulett)

Gesamtspin  $S = 1$  (Triplet)  $\chi_S = \chi_+(1)\chi_+(2) \quad M_S = 1$  symmetrische Spin-Wellenfkt.  
 $\chi_S = \chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(2)\chi_+(1) \quad M_S = 0$   
 $\chi_S = \chi_-(1)\chi_-(2) \quad M_S = -1$

Gesamtwellenfunktion  $\Psi_{Gesamt} = \text{Bahnwellenfkt} \cdot \text{Spinwellenfkt} =$  für Fermionen immer ANTIsymmetrisch, für Bosonen immer symmetrisch. Weil Elektronen Fermionen sind, müssen Gesamtwellenfkt. von Atomen immer antisymmetrisch sein.

Singuletts: symmetrische Bahnwfkt  $\cdot$  antisymmetrische Spinwfkt.

Tripletts: antisymmetrische Bahnwfkt  $\cdot$  symmetrische Spinwfkt.



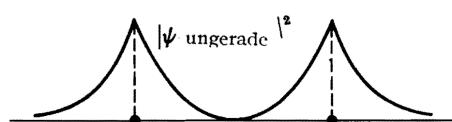
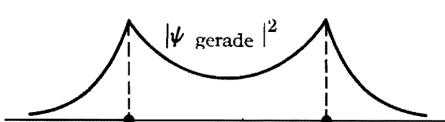
Anzahl Wellenfkt.	versch.	Ein Zwei-Teilchen System mit je $n$ verschiedenen Zuständen hat $\frac{1}{2}n(n+1)$ symmetrische und $\frac{1}{2}n(n-1)$ antisymmetrische Zustände. Dies gilt selbstverständlich für Bahn- und Spinwellenfkt. Merke: Ein Teilchen mit Spin $S$ hat $n = 2S + 1$ versch. Zustände
Ausschliessungsprinzip	Jeder Quantenzustand $(n, l, m_l, m_s)$ kann höchstens von einem Elektron (allg. Fermionen) eingenommen werden. Die Anzahl Zustände ist somit beschränkt durch die Abhängigkeiten der Quantenzahlen.	
Regel von Hund	Im Grundzustand von Atomen hat der resultierende Spin den grösstmöglichen Wert, der mit dem Ausschliessungsprinzip vereinbar ist	
Elektronenkonfiguration (Hauptquantenzahl)(Bahndrehimpuls) <sup>Anz.Elektronen</sup>	Bsp: $1s^2 2s^2 2p \ 5e^- \Rightarrow \text{Bor}$	
Besetzungszahl (max. $2(2l+1) \# e^-$ )		
Auswahlregeln (Atomübergänge)	Emission und Absorption von Photonen: $\Delta l = l_f - l_i = \pm 1$ $\Delta j = j_f - j_i = 0, \pm 1 \quad j_i = 0 \Rightarrow j_f \neq 0$	

## 10 Moleküle

LCAO-Approximation: Linear Combination of Atomic Orbitals.

### 10.1 $H_2^+$ Molekül (ein Elektron, zwei Protonen)

Hamilton-Operator	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(-\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r}\right)$ $r$ : Abstand Proton-Proton, $r_{1,2}$ : Abstand Elektron-Proton
LCAO-Approximation	Spalte $H_2^+$ gedanklich auf in $H$ und $H^+$ , dann gibt es eine Wellenfunktion $\Psi_1$ , bei der das $H$ links ist und eine Wellenfunktion $\Psi_2$ , bei der das $H$ rechts ist. Diese aufgespaltenen Zustände bringt man durch Linearkombination wieder zusammen.
Gesamtwellenfkt.	$\Psi_{gerade} = \Psi_1 + \Psi_2$ $\Psi_{ungerade} = \Psi_1 - \Psi_2$ $\Rightarrow$ Durch die Überlappung (LCAO) entstehen zwei Molekülorbitale
Mittlere Energie des Elektrons	$E = \frac{\int \Psi^* H \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} = E_a + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{A \pm B}{1 \pm S} \quad + : \Psi_{gerade}, - : \Psi_{ungerade}$
Überlappintegral (Proton-Proton)	$S = S(r) = \int \Psi(r_1)\Psi_2(r_1)dV_1 \quad \lim_{r \rightarrow 0} S = S_{max}$
Anziehungsenergie (Elektron-Proton 2)	$A = A(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\Psi_1^2(r_1)}{r_2} dV_1$
Überlappungsterm (Elektron-Proton 1)	$B = B(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)}{r_1} dV_1$
Kovalente Bindung	$\Psi_1 + \Psi_2$ ist bindend und macht die kovalente Bindung. $\Psi_1 - \Psi_2$ ist dagegen nicht-bindend.



## 10.2 $H_2$ Molekül (zwei Elektronen, zwei Protonen)

Das Ganze funktioniert im Prinzip analog, nur dass man jetzt Atomorbitale linear kombiniert.

Pauli-Prinzip

Da wir mehr als ein Elektron haben, muss die Gesamtwellenfkt. antisymmetrisch sein.

Drehimpuls

Drehimpuls  $L$  eines  $e^-$  nicht konstant, da kein Zentralfeld (lineares Molekül)

$L_z = m_l \hbar$  konstant, da Kraft auf Elektronen immer durch Protonenachse

Drehimpulszustände  
im Molekül

$m_l$       0     $\pm 1$      $\pm 2$      $\pm 3$

Symbol     $\sigma$      $\pi$      $\delta$      $\Phi$

# $e^-$       2    4    4    4

# $e^-$  wegen Spin up, down

LCAO

Nun werden Atomorbitale analog zu oben linear kombiniert. Das resultierende MO hängt von den  $m_l$  der Elektronen in den Atomorbitalen ab.

Beispiele

2 ns Atomorbitale ergeben ein  $\sigma$  Molekülorbital, weil  $m_l = 0$  für ns Atomorbitale

2 np Atomorbitale ergeben entweder ein  $\sigma$  MO ( $np_z$ ) oder ein  $\pi$  MO ( $np_x, np_y$ ), da  $m_l$  für die p-AO -1,0,1 ist.

gerade, ungerade

Subscript g: gerade Wellenfunktion (= MO), Subscript u: ungerade, Bsp:  $\sigma_u$

bindend,      nicht-  
bindend

Superscript \*: nichtbindende Wellenfunktion (= MO), Bsp:  $\sigma_u^*$

Molekül	Konfiguration								Dissoziationsenergie	Bindungslänge
	$\sigma_g 1s$	$\sigma_g^* 1s$	$\sigma_g 2s$	$\sigma_g^* 2s$	$\pi_u 2p$	$\sigma_g 2p$	$\pi_g^* 2p$	$\sigma_u^* 2p$	eV	$10^{-10} \text{ m} = \text{\AA}$
$H_2^+$	[↑]								2.65	1.06
$H_2$	[↑↓]								4.48	0.74
$He_2^+$	[↑↓]	[↑]							3.1	1.08
$He_2$	[↑↓]	[↑↓]								Nicht stabil
	Getrennte Atome								Molekül	
$Li_2$	[↑↓]									2.67
$Be_2$	[↑↓]	2p								
									$\sigma_u^*$	
									$\pi_g^*$	
									$\sigma_g$	
									$\pi_u$	
$B_2$	[↑↓]									1.59
$C_2$	[↑↓]	2s								1.31
$N_2$	[↑↓]									1.09
$O_2$	[↑↓]									1.21
$F_2$	[↑↓]	1s								1.44
$Ne_2$	[↑↓]	[↑↓]	[↑↓]	[↑↓]	[↑↓↓]	[↑↓]	[↑↓↓]	[↑↓]		Nicht stabil

Elektronenkonfiguration

## 10.3 Hybrid-Wellenfunktionen

sp

$sp^2$

planar-trigonal

$sp^3$

tetraedrisch ( $CH_4$ )

$$\Psi_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z) \quad \Psi_2 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z) \quad \Psi_4 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z)$$

## 10.4 Molekulare Rotation

Rotationsenergie eines 2-atomigen Moleküls  $E_r = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) \quad I = \text{Trägheitsmoment}$

Auswahlregel (elektr. Dipolstrahlung)  $\Delta l = \pm 1 \Rightarrow \Delta E_{l,l-1} = 2lE_1 \quad E_1 = \frac{\hbar^2}{2I}$

## 10.5 Molekulare Vibration

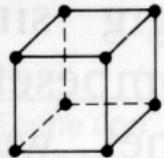
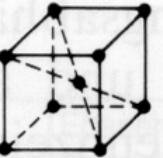
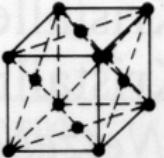
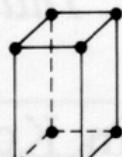
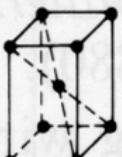
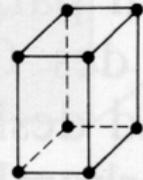
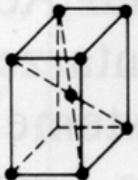
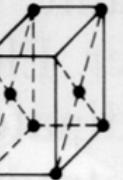
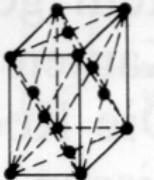
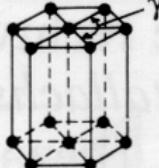
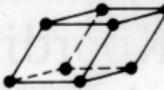
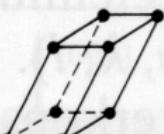
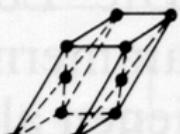
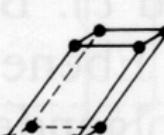
Modelliert durch harmonischen Oszillator.

Vibrationsenergie  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$

Pro Vibrationsenergieniveau gibt es also mehrere ( $n - 1$  viele) Rotationsenergieniveaus.

# 11 Festkörper

kristalline Festkörper sind in Kristallgitter angeordnet. Davon gibt es einige Formen:

	primitiv	raum-zentriert	basis-zentriert	flächen-zentriert
kubisch $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
tetragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
orthorhombisch $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$				
rhomboedrisch $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
monoklin $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$				
triklin $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ $\neq 90^\circ; \neq 120^\circ$				

## 11.1 Arten von Festkörper

### Kovalente Festkörper

- kovalente Bindung: lokalisierte, gerichtete Bindung
- starke Bindung: Kristallschwingungen haben eine hohe Frequenz
- schlechte Leitfähigkeit: keine freien Elektronen
- Beispiele: GaAs, Diamant (beide  $sp^3$ -Hybridwellenfkt., beide (durchschnittlich) 4 Valenzelektronen.)

### Ionenkristalle

- regelmässige Anordnung von positiven und negativen Ionen
- Ionen sind so angeordnet, so dass die gegenseitige elektrische WW eine stabile Konfiguration ergibt.
- Ionengrundkraft < kovalente Bindungskraft
- Ionen im Kristall angeordnet wie dichtgepackte Kugel.
- Beispiele: NaCl

### Molekulare Festkörper

- van der Waals-Kräfte: entsprechen Kräften zwischen zwei elektr. Dipolen
- Kräfte aufgrund von instantanen elektrischen Dipolen

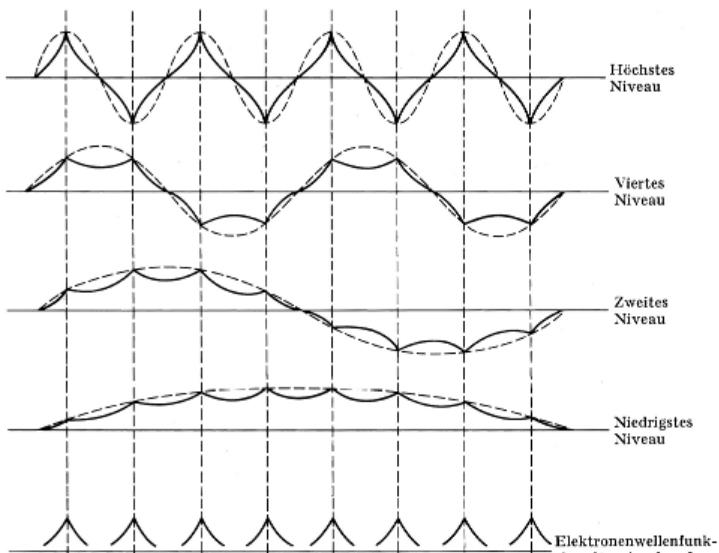
### Metalle

- Elemente mit relativ geringer Ionisationsenergie
- Bindung der positiven Ionen durch Elektronengas
- Elektronengas: Elektronen bewegen sich frei durch das Kristallgitter und sind nicht lokalisiert.
- sehr gute thermische und elektrische Leitfähigkeit

## 11.2 N-atomiges Molekül

LCAO-Ansatz

$\Psi(x) = \sum_{n=1}^N \psi(x - na)e^{ikna}$  Für  $N = 2$  haben wir die LCAO eines zweiatomigen Moleküls, z.B.  $H_2^+$



$$\lambda = 2a, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$$

$$\lambda = 4a, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{2a}$$

$$\lambda = 8a, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{4a}$$

$$\lambda = 16a, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{8a}$$

resultierende Wfkt.

Wellenzahl

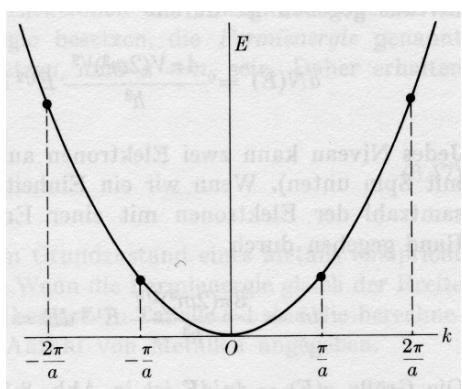
$$k = \frac{n\pi}{Na} \quad n = 1, 2, \dots, N$$

Energiebänder

Je grösser  $n$ , desto kleiner werden die Unterschiede zwischen den einzelnen Energiekurven, wodurch sich ein kontinuierliches Energieband ergibt. In einem Kristallgitter kann es mehrere Energiebänder geben, die jeweils einem der Energieniveaus der Atome entsprechen, die das Gitter bilden.

$$\begin{aligned} \text{Energie im Band} &= E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \\ \text{Breite des Bands} & \end{aligned}$$

## 11.3 Modell freier Elektronen



Wellenfunktion

$$\Psi(x) = e^{ikx}$$

Impuls

$$p = \hbar k$$

Energie

$$E = \frac{\hbar k^2}{2m_e} \propto k^2$$

Wellenzahl

$$k_{max} = \frac{\pi}{a}$$

Energie im Band

$$E_{max} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}$$

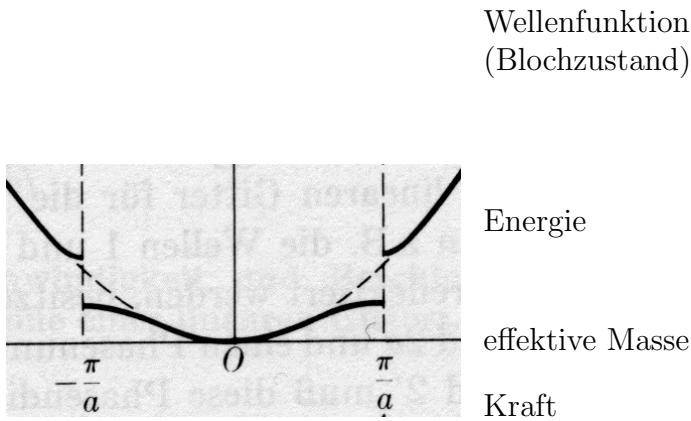
Gruppengeschw.  
Elektronen

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}, \quad E = \hbar\omega$$

Kraft

$$F = ma = m \frac{dv_g}{dt}$$

## 11.4 Elektronen in periodischer Struktur



$$\Psi(x) = e^{ikx} u(x), \quad \underbrace{u(x+a)}_{\text{Blochzustand}} = \underbrace{u(x)}_{\text{Blochzustand}}$$

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^N \psi(x-na)e^{ikna}$$

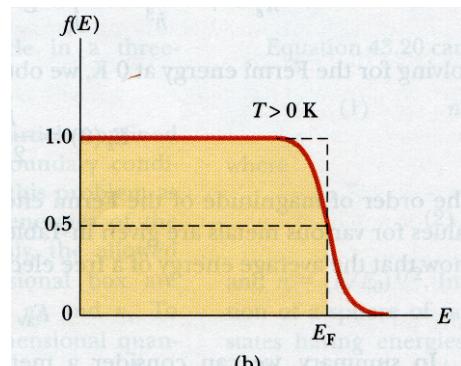
ist ein Blochzustand.

Mit der Näherung des tight binding models ergibt sich:  $E(k) = E_0 - 2A \cos(k_i a)$ ,  $k_i = \frac{2\pi}{aN} i$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

$$F = m^* a = m^* \frac{dv_g}{dt}$$

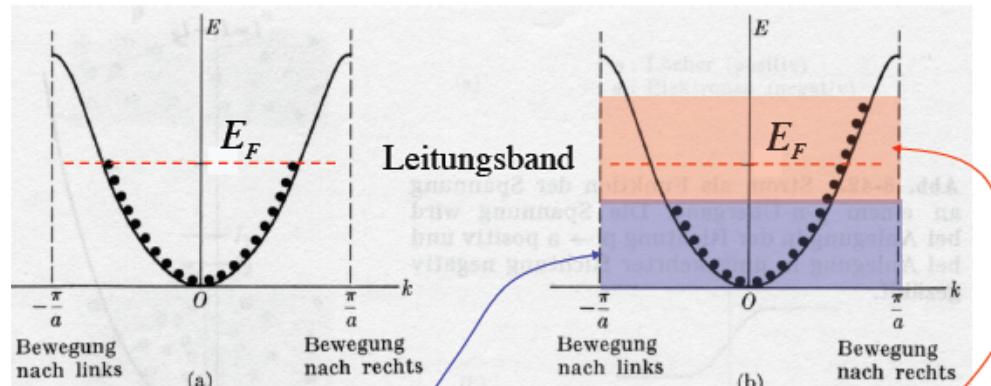
## 11.5 Elektronenleitung



Fermienergie  $E_F$

$$\epsilon = 0$$

$$\epsilon \neq 0$$



Theorie zur Elektronenleitung

blau: gleich viele Elektronen mit Impuls  $+p(\propto k)$  wie mit  $-p \Rightarrow$  im Mittel Impuls  $= 0 \Rightarrow$  kein Strom. Nur Elektronen im roten Bereich tragen zum Strom bei. In vollständig gefüllten Bändern kann die Verschiebung (Bild links zu Bild rechts) jedoch nicht geschehen. Deshalb keine Leitung

Isolator

Das oberste Band ist vollständig besetzt (Valenzband). Die Energielücke zum Leitungsband ist zu hoch. Laut Fermi-Dirac Statistik ist dann die WSK 0, im Leitungsband ein Teilchen zu finden.

Metalle

Das oberste Band ist nicht voll. Die Fermienergie liegt im Leitungsband.

Halbleiter

Es gibt zwar ein Valenzband, doch die Energielücke zum nächsthöheren Band (Leitungsband) ist klein genug, sodass es eine WSK gibt, ein Teilchen im Leitungsband zu finden.

## 11.6 Zustandsdichte

Die Zustandsdichte gibt an, wie viele Zustände pro  $k$  oder  $E$  existieren. Man macht dazu zwei Annahmen:

1. Kristallwürfel der Kantenlänge  $L$  mit unendlich hohen Potentialbarrieren am Rand des Würfels.  $\Psi(\text{Rand des Würfels}) = 0$
2. Periodische Randbedingungen  $\Psi(x, y, z) = \Psi(x + L, y + L, z + L)$

### 11.6.1 Zustandsdichte im $\vec{k}$ -Raum

Da wir in 3D sind, brauchen wir den Vektor  $\vec{k}$  und nicht nur den Skalar  $|\vec{k}|$

Wellenfkt. 1D-  
Potentialtopf  $\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \quad k_n = \pm \frac{n\pi}{L}$  (pro  $n$  **zwei**  $k_n$  !)

Volumen eines Zustands	1D	$(\Delta k) \cdot 2 \cdot 1$	$= \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$	$\Delta k = \frac{\pi}{L}$
	2D	$(\Delta k)^2 \cdot 2 \cdot 2$	$= \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$	
	3D	$(\Delta k)^3 \cdot 2 \cdot 3$	$= \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$	

Zustandsdichte

Pro (räumlichen) Zustand gibt es 2 Elektronen (Spin up, Spin down). Das Volumen eines solchen Zustands ist oben angegeben. Für die Zustandsdichte gilt also allgemein  $D = \frac{2}{\text{Zustandsvolumen}}$

1D	2D	3D
$D_1(k) = \frac{2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$	$D_2(k) = \frac{2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$	$D_3(k) = \frac{2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$

### 11.6.2 Zustandsdichte im $E$ -Raum

Die Zustandsdichten aus dem  $\vec{k}$ -Raum möchten wir nun in den  $E$ -Raum übersetzen. Dafür müssen wir aber von  $\vec{k}$  nach  $|\vec{k}|$  kommen.

Zustandsdichten im  $|\vec{k}|$ -Raum Für die Zustandsdichte gilt allgemein  $D = \frac{\text{Volumen mit konstantem } \vec{k}}{\text{Zustandsvolumen}} \cdot 2$

1D	2D	3D
$D_1(k) = \frac{dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)} \cdot 2$	$D_2(k) = \frac{2\pi k dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \cdot 2$	$D_3(k) = \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \cdot 2$

Beziehung  
(Modell freier Elektronen)

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Leftrightarrow k = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}}$$

$$\frac{dk}{dE} = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}} \frac{1}{2\sqrt{E}}$$

Zustandsdichten im  $E$ -Raum

$D_1(E) = \frac{L}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m_e}{E}} dE$	$D_2(E) = \frac{L^2 m_e}{\pi\hbar^2} dE$	$D_3(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE$
--	--	---

Zusammenhänge

$$g(E) = \frac{D(E)}{V}$$

$$D(E) = \frac{dN}{dE} \quad \text{N: Total Anzahl Elektronen in V}$$

$$g(E) = \frac{dn}{dE} \quad n: \text{Elektronendichte}$$

$$n = \int_0^{E_F} g(E) dE$$

### 11.6.3 Alternative Herleitung für $D_3$

Anzahl Energiezustände in einem 3D Kasten

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{8}\pi k^3 = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m^3)^{\frac{1}{2}} E^{\frac{3}{2}} \quad V : \text{Volumen des Kastens}$$

$$\tilde{D}_3(E) := \frac{d\tilde{N}}{dE} = \frac{4\pi V (2m^3)^{\frac{1}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE$$

Gesamtzahl der Elektronen innerhalb  $E + dE$

$$D_3(E) := \frac{d\tilde{N}}{dE} = \frac{8\pi V (2m^3)^{\frac{1}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}}$$

Jeder Energiezustand kann zwei Elektronen aufnehmen (Spin up, down). Also  $d\tilde{N}$  mit 2 multiplizieren.

## 11.7 Löcher

Als Löcher bezeichnet man fehlende Elektronen im Valenzband. Löcher sind also nur Gedankenkonstrukte, die das Rechnen vereinfachen. Sie haben folgende Eigenschaften:

Ladung: +e Impuls:  $k_h = -k_e$

Energie:  $E_h(k_h) = -E_e(k_e)$  effektive Masse:  $m_h^* = -m_e^*$

Fermi-Dirac WSK-Verteilung  $f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}$

Elektronendichte im Leitungsband  $n = \int_{E_L}^{\infty} f(E) g(E) dE \quad g(E) = \frac{8\pi\sqrt{2(m_e^*)^3}}{h^3} \sqrt{E - E_L}$

Resultat:  $n = N_C \exp\left(-\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right), \quad N_C \equiv 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$

Löcherdichte im Valenzband  $p = \int_0^{E_V} (1 - f(E)) g(E) dE \quad g(E) = \frac{8\pi\sqrt{2(m_{hole}^*)^3}}{h^3} \sqrt{E_V - E}$

Resultat:  $p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right), \quad N_V \equiv 2 \left(\frac{2\pi m_{hole}^* k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$

Fermienergie eines intrinsischen Halbleiters (ohne Fremdatome,  $\Rightarrow n = p$ )

$$E_F \equiv E_i = \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right)$$

Ladungsträgerdichte eines intr. Halbleiters  $n_i = \sqrt{n \cdot p} = \sqrt{N_L N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad E_g \equiv E_L - E_V$  Bandgap energy (Bsp: GaAs 1.43eV)

Stromdichte  $j = nqv$

n: Zahl der Teilchen (z.B. Elektronen) pro Volumeneinheit

q: Ladung der Teilchen.  $q = -e = -1.602 \cdot 10^{-19} A \cdot s$  Elementarladung der Elektronen

v: Driftgeschwindigkeit der Ladungsträger (z.B. Elektronen)

Stromrichtung Per Definition: von plus nach minus

Kraft des elektrischen Felds  $F = qE$

Driftgeschwindigkeit im Halbleiter  $v_d = \mu E \quad [\mu] = cm^2 V^{-1} s^{-1}$  : Mobilität

Stromdichte im Halbleiter  $j = \sigma E \quad \sigma = e\mu_n n + e\mu_p p \quad \mu_p \ll \mu_n$

## 11.8 Absorption und Emission von Photonen

Absorption	Absorption eines Photons mit $E = h\nu$ entspricht einem Übergang eines Elektrons vom Valenzband ins Leitungsband. Die Bandlückenenergie $E_g$ entspricht $h\nu$
Emission	Emission eines Photons entspricht einem Übergang eines Elektrons vom Leitungsband ins Valenzband.

## 11.9 Dotierungen

“Störstellen” eines intrinsischen Halbleiters. Dadurch verändert sich die Fermienergie und weitere Parameter gegenüber einem intrinsischen Halbleiter.

Donatoren	Fremdatome, die mehr Elektronen beitragen können. Bsp: P (5 Aussene $^-$ ) in Si(4 Aussene $^-$ ) $\Rightarrow$ Das überzählige Elektron liegt auf einem Energilevel knapp unter $E_L$ . Es kann also leicht ins Leitungsband angeregt werden, wo es leiten kann.
Akzeptor	Fremdatome, die weniger Elektronen (= mehr Löcher) haben. Bsp: Al (3 Aussene $^-$ ) in Si $\Rightarrow$ . Das überzählige Loch ist auf einem Energilevel, das knapp über $E_V$ liegt. Ein Elektron aus dem Valenzband kann nun das Loch besetzen und somit ein Loch im Valenzband freigeben, das zur Leitung genutzt werden kann.
Elektronendichte im Leitungsband	$n = \frac{N_D^+ - N_A^-}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D^+ - N_A^-}{2}\right)^2 + n_i^2}, \quad N_D^+ > N_A^- \quad N_D^+ : \text{Dichte von Donor-Atomen}$
Löcherdichte im Valenzband	$p = \frac{N_A^- - N_D^+}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A^- - N_D^+}{2}\right)^2 + n_i^2}, \quad N_A^- > N_D^+ \quad N_A^- : \text{Dichte von Akzeptor-Atomen}$
Fermienergie im n-dotierten Halbl.	$E_{F_n} = E_i + k_B T \ln \left( \frac{n}{n_i} \right)$
Fermienergie im p-dotierten Halbl.	$E_{F_p} = E_i - k_B T \ln \left( \frac{p}{n_i} \right)$

# 12 Klassische statistische Mechanik

## 12.1 mikroskopische Bedeutung von Druck und Temperatur

$$k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} J/K$$

Geschwindigkeit  $\langle v_x^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_{xi}^2$

Bewegung isotrop:  $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle$

$$\langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle$$

Druck  $p = \frac{F}{A}$

$$p = \frac{1}{3} \rho \langle v^2 \rangle$$

$$p = \frac{2}{3} \frac{N}{V} \left( \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle \right) = \frac{2}{3} \frac{N}{V} \langle E_{kin} \rangle \Leftrightarrow pV = \frac{2}{3} N \langle E_{kin} \rangle (*)$$

Dichte  $\rho = \frac{mN}{V}$

Zustandsgleichung  
ideales Gas  $pV = Nk_B T$

Temperatur:  
Äquipartitionsgesetz

Mit der Zustandsgleichung ergibt sich aus  $(*) \langle E_{kin} \rangle = \frac{3}{2} k_B T$ . Isotropie vorausgesetzt, ist die innere Energie also pro Freiheitsgrad  $\langle E_{kin,j} \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad j = x, y, z$ .

$$\langle E_{kin} = U \rangle = \frac{f}{2} k_B T \quad f = \# \text{ Freiheitsgrade} \cdot \# \text{ Moleküle} \quad U : \text{Innere Energie}$$

Das Äquipartitionsgesetz ist bei tiefen Temperaturen nicht mehr gültig, wegen der Quantisierung der Energiezustände.

Freiheitsgrade

Für zweiatomige Moleküle gelten bspw. folgende Freiheitsgrade

Translation des Schwerpunkts  $f = 3$

Rotation  $f = 2$

Vibration  $f = 2$

## 12.2 Ensembles

$n_i$  Anz. Teilchen

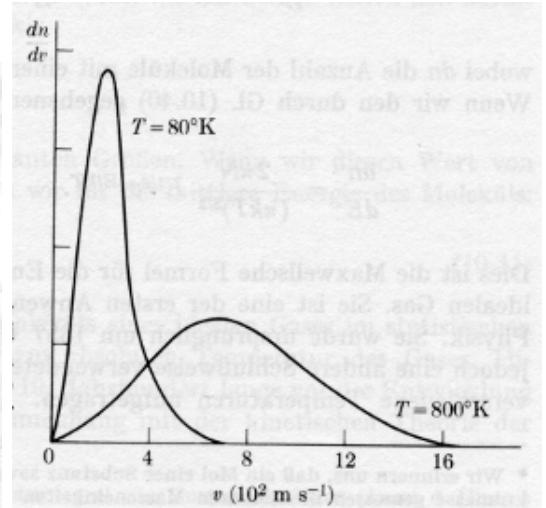
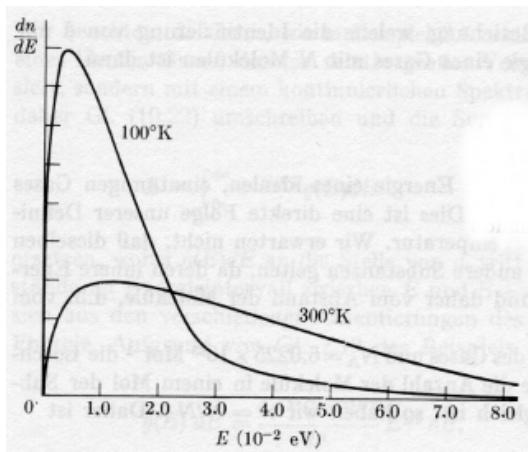
$P$  WSK, dass ein System in einer bestimmten Zustandskonfiguration ist.

$g_i$  WSK, ein Teilchen in einem bestimmtem Zustand zu finden.

Thermodyn. Glgw.  $dP = 0$   
(TG)

### 12.2.1 Kanonisches Ensemble

Konstanten	$N, V, T$
Fluktuationen	$E$
	$N = \sum_i n_i$
$g_i$ (unter TG)	$g_i = \frac{1}{Z(N, V, T)} e^{-\beta E_i}$
Kanonische Zustandssumme	$Z(N, V, T) = \sum_i g_i e^{-\beta E_i} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$
Energie	$\langle E \rangle = \sum_i g_i E_i = - \left( \frac{\partial \ln Z(N, V, T)}{\partial \beta} \right)_{N, V}$
Druck	$\langle p \rangle = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln Z(N, V, T)}{\partial V} \right)_{N, \beta} \quad \Delta E_i = -p_i \Delta V$
Entropie	$S = -k_B \sum_i g_i \ln g_i$
Zustandssumme ideales Gas	$Z_{id} = \sum_i g_i e^{-E_i/k_B T} = \int_0^{\infty} D_3(E) e^{-E/k_B T} dE$ $D_3(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE$ $Z_{id} = \frac{V(2\pi m k_B T)^{3/2}}{h^3} = V \left( \frac{m}{2\beta \pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$
Anzahl Moleküle w.r.t. Energie	$dn = \frac{N}{Z} e^{-E/k_B T} D(E) dE$



## 12.2.2 Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Zustandssumme  $Z(N, V, T) = \frac{1}{N!} [z(V, T)]^N$

Ideal Gas

Avg. size of velocity  $\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{m\pi}}$

Root mean square  $\langle v^2 \rangle^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$

most probable speed  $v_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$

Avg. kinetic energy  $\langle E \rangle = N \frac{3}{2} k_B T$

Heat capacity  $\frac{dE}{dT} = \frac{3}{2} N k_B$

Free energy  $F = -Nk_B T \left( \frac{3}{2} \ln \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right) - \ln \left( \frac{N}{V} \right) + 1 \right)$

Entropy  $S = Nk_B \left( \frac{3}{2} \ln \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right) - \ln \left( \frac{N}{V} \right) + \frac{5}{2} \right)$

## 12.3 Fermi-Dirac, Bose-Einstein partition functions

Volume:  $V$

Number of particles:  $N$

System

Energy levels:  $E_j$

1-particle energy levels:  $\epsilon_k$

Number of particles in a quantum state  $\Psi_k$ :  $m_k$

$$E_j = \sum_k m_k \epsilon_k; N = \sum_k m_k$$

Grand-canonical partition function  $Z(\mu, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_j e^{-\beta(E_j - \mu N)} = \dots = \prod_k \sum_{m_k} (e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})^{m_k}$

Fermi-Dirac partition function  $m_k = 0 \vee 1 \Rightarrow Z_{FD}(\mu, V, T) = \prod_k [1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}]$

Bose-Einstein partition function  $m_k = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow Z_{BE}(\mu, V, T) = \prod_k [1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}]^{-1}$

Combined partition function  $Z_{FD/BE}(\mu, V, T) = \prod_k [1 \pm e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}]^{\pm 1}$

## 12.4 Fermi-Dirac Statistics

Avg. Number of particles  $\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln Z_{FD}(\mu, V, T)}{\partial \mu} \right)_{V,T} = \dots = \sum_k (e^{+\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1)^{-1} = \sum_k \langle m_k \rangle$

$\langle m_k \rangle$   $\langle m_k \rangle = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$   $\langle m_k \rangle \ll 1$  (Boltzmann Limit)

Avg. Energy  $\langle E \rangle = \sum_k \langle m_k \rangle \epsilon_k = \sum_k \frac{\epsilon_k}{e^{+\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$

Pressure  $pV = k_B T \ln Z_{FD}(\mu, V, T) = k_B T \sum_k \ln (1 + e^{-(\epsilon_k - \mu)/k_B T})$

## 12.5 Bose-Einstein Statistics

Avg. Number of particles	$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln Z_{BE}(\mu, V, T)}{\partial \mu} \right)_{V,T} = \dots = \sum_k (e^{+\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1)^{-1} = \sum_k \langle m_k \rangle$
$\langle m_k \rangle$	$\langle m_k \rangle = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$
Avg. Energy	$\langle E \rangle = \sum_k \langle m_k \rangle \epsilon_k = \sum_k \frac{\epsilon_k}{e^{+\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$
Pressure	$pV = k_B T \ln Z_{BE}(\mu, V, T) = -k_B T \sum_k \ln (1 - e^{-(\epsilon_k - \mu)/k_B T})$

## 13 Thermodynamik

Spezifische Größen	$x = \frac{X}{m}$	x: spezifische Zustandsgrösse X: Zustandsgrösse m: Masse [kg]
Molare Größen	$X_m = \frac{X}{m} M$	$X_m$ : molare Zustandsgrösse X: Zustandsgrösse M: Molmasse [kg/mol]

Massen vs. molare Masse  $m = n \cdot M$

Konstanten	universelle Gaskonstante	$R = 8.314 \frac{J}{molK}$
	Avogadro-Konstante	$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \frac{1}{mol}$
	Boltzmann-Konstante	$k_B = \frac{R}{N_A} = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
		$k_B T _{T=300K} = 25.8 meV$

Molmasse etc.	Molmasse einer Substanz A	$M = N_A m_A$
	Atom- oder Molekülmasse einer Substanz A	$m_A$
	Total Anzahl Moleküle	$N$
	Anzahl Mole einer Substanz	$n$

Kelvin-Celsius  $T[K] = \vartheta[^{\circ}C] + 273.15$

Zustandsgleichung ideales Gas  $pV = nRT = \frac{N}{N_A} RT = Nk_B T$

Thermische Ausdehnung	Festkörper	1D: $\frac{\Delta l}{l} = \alpha \Delta T$
		3D: $\frac{\Delta V}{V} = \gamma \Delta T$ Isotrop $\Rightarrow \gamma = 3\alpha$ $\gamma \approx 10^{-5} K^{-1}$
	Flüssigkeiten	$\frac{\Delta V}{V} = \gamma \Delta T$ $\gamma \approx 10^{-3} K^{-1}$ $\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{V_0(1 + \gamma \Delta T)} \approx \rho_0(1 - \gamma \Delta T)$

## 13.1 1.Hauptsatz (Energieerhaltung)

**1.Hauptsatz**

$$dU = \partial Q + \partial W \quad [Q] = J, [T] = K$$

$U$ : innere Energie,  $W$ : Arbeit,  $Q$ : Wärme.  $U$  ist eine Zustandsgrösse, während  $W$  und  $Q$  vom Weg abhängen (deshalb das  $\partial$ -Zeichen).

Äquipartitionsgesetz  
ideales Gas

$$U = N \cdot \frac{f}{2} k_B T$$

**Wärme  $Q$**

$$\partial Q = C dT \quad C: \text{Wärmekapazität des Systems} \quad [C] = \frac{J}{K}$$

Wärme ist eine Energie aufgrund von Temperaturunterschieden. Die Energieübertragung ist dabei irreversibel.

spezifische  
Wärmekapazität

$$c = \frac{C}{m} \quad [c] = \frac{J}{kg \cdot K}$$

molare  
Wärmekapazität

$$C_m = M \cdot c \quad [C_m] = \frac{J}{mol \cdot K}$$

elektr.  
Wärmeäquivalent

$$cm\Delta T = Q = W_{el} = VI\Delta t \quad V: \text{Spannung}, I: \text{Stromstärke}$$

isobare  
Wärmekapazität

$$C_p = \left( \frac{\partial Q}{dT} \right)_p$$

isochore  
Wärmekapazität

$$C_V = \left( \frac{\partial Q}{dT} \right)_V$$

Für ideales Gas

$$C_{mp} = C_{mV} + R \quad C_{mX}: \text{molare Wärmekapazität bei konstantem X}$$

$$C_{mp} = \left( \frac{f}{2} + 1 \right) R, \quad C_{mv} = \frac{f}{2} R, \quad R = \text{Gaskonstante}$$

$$\kappa = \frac{C_{mp}}{C_{mV}} = 1 + \frac{2}{f}$$

Erwartungswert  
der Energie eines  
harm.Osz.

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} W_n E_n = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}, \quad W_n = \frac{e^{-E_n / k_B T}}{\sum_n e^{-E_n / k_B T}}$$

Für kristalline  
Festkörper

$$U_{osz} = 3N \langle E \rangle = 3N \left( \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right)$$

$$C_V = \left( \frac{\partial Q}{dT} \right)_V \xrightarrow{dU = \partial Q - pdV} \frac{dU_{osz}}{dT} = 3N \frac{d}{dT} \langle E \rangle$$

$$C_V = 3N k_B \left[ \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} \right] \quad \text{Einsteinmodell}$$

**Arbeit  $W$**

$$\partial W = -pdV$$

$$W_{12} = \int_{V1}^{V2} pAds = \int_{V1}^{V2} pdV$$

### 13.1.1 Zustandsänderungen (Spezialfälle der Zustandsgleichung)

Zustandsgleichung ideales Gas:  $pV = nRT = Nk_B T$

Bedingung thermische Zus- erster Hauptsatz Wärme  
tandsgrößen

Volumenänderungsarbeit

isotherm	$dT = 0$ $T = \text{konst.}$	$pV = \text{konst.}$	$\partial Q + \partial W = 0$ $Q_{12} + W_{12} = 0$	$\partial Q = -\partial W$ $Q_{12} = nRT \ln \frac{V_2}{V_1}$	$\partial W = -pdV$ $W_{12} = nRT \ln \frac{V_1}{V_2}$
isochor	$dV = 0$ $V = \text{konst.}$	$\frac{p}{T} = \text{konst.}$	$dU = \partial Q$ $U_2 - U_1 = Q_{12}$	$\partial Q = nC_{mV}dT$ $Q_{12} = nC_{mV}(T_2 - T_1)$	$\partial W = 0$ $W_{12} = 0$
isobar	$dp = 0$ $p = \text{konst.}$	$\frac{V}{T} = \text{konst.}$	$dU = \partial Q + \partial W$ $U_2 - U_1 =$ $Q_{12} + W_{12}$	$\partial Q = nC_{mp}dT$ $Q_{12} = nC_{mp}(T_2 - T_1)$	$\partial W = pdV$ $W_{12} = p(V_1 - V_2)$
isenstrop (Adiabate)	$dS = 0$ $\partial Q = 0$ $S = \text{konst.}$	$pV^\kappa = \text{konst.}$ $TV^{\kappa-1} = \text{konst.}$ $p^{1-\kappa}T^\kappa = \text{konst.}$	$dU = \partial W$ $U_2 - U_1 = W_{12}$	$\partial Q = 0$ $Q_{12} = 0$	$\partial W = nC_{mV}dT$ $W_{12} = nC_{mV}(T_2 - T_1)$ $= \frac{p_2V_2 - p_1V_1}{\kappa - 1}$

Merke:  $nC_{mV} = mC_V$        $1\text{l} = 1\text{dm}^3 = 10^{-3}\text{m}^3$

## 13.2 2.Hauptsatz

Entropie  $S$

$$S = k_B \ln P$$

Prozesse

$$dS > 0 \quad \text{irreversibel}$$

$$dS = 0 \quad \text{reversibel}$$

reversibel

System zu jedem Zeitpunkt im statistischen Gleichgewicht, also  $dP = 0$  (most probable distribution)

Für reversible Prozesse gilt:  $dS = \frac{\partial Q}{T} \Leftrightarrow \boxed{Q = \oint T dS}$

### 13.2.1 Entropie für Maxwell-Boltzmann-Statistik

$$\ln P$$

$$\ln P \propto \sum_i n_i \ln g_i - \sum_i \ln(n_i!)$$

$$\ln P \approx N - \sum_i n_i \ln \frac{n_i}{g_i} , \text{ wobei } \ln(x!) = x \ln x - x$$

Entropie für Maxwell-Boltzmann-Statistik

$$S = k_B \ln P = k_B N - k_B \sum_i n_i \ln \frac{n_i}{g_i}$$

$$\text{Aus M-B-Stat bekannt: } \frac{n_i}{g_i} = \frac{N}{Z} e^{-E_i/k_B T}$$

$$\Rightarrow S = k_B N + \sum_i n_i \left( \frac{E_i}{T} + k_B \ln \frac{Z}{N} \right)$$

$$N = \sum_i n_i, U = \sum_i n_i E_i$$

$$\boxed{S = k_B N + \frac{U}{T} + k_B N \ln \frac{Z}{N}}$$

innere Energie

$$dU = \sum_i \underbrace{E_i dn_i}_{\partial Q} + \sum_i \underbrace{n_i dE_i}_{\partial W}$$

Beispiel ideales Gas

$$Z = \frac{V(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

$$U = \frac{3}{2} k_B N T$$

$$\Rightarrow S = k_B N + k_B N \ln \left( \frac{V(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3 N} \right)$$

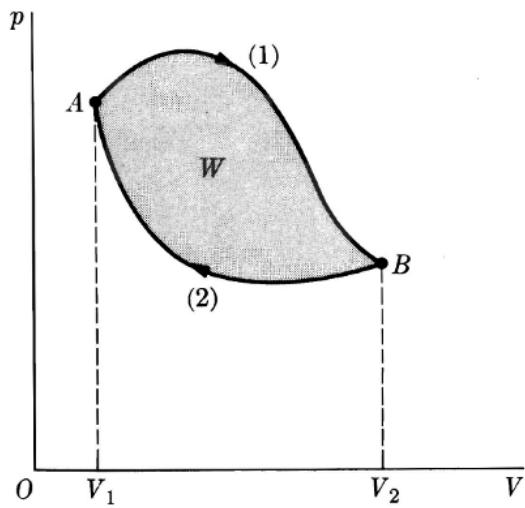
Beispiel irreversibler Prozess

Isotherme ( $T = \text{konst.}$ ) Expansion eines idealen Gases ( $N = \text{konst.}$ )

$$\Delta S = S_2 - S_1 = k_B N \ln \frac{V_2}{V_1} > 0$$

### 13.2.2 Kreisprozesse

Kreisprozess



Arbeit

$$W_{Kreis} = \oint pdV \quad \text{Fläche unter (1) - Fläche unter (2)}$$

Wirkungsgrad

$$\eta = \frac{\text{Nutzen (abgegebene Wärme)}}{\text{Aufwand (zugeführte Wärme)}} = \frac{|W|}{Q_{zu}}$$

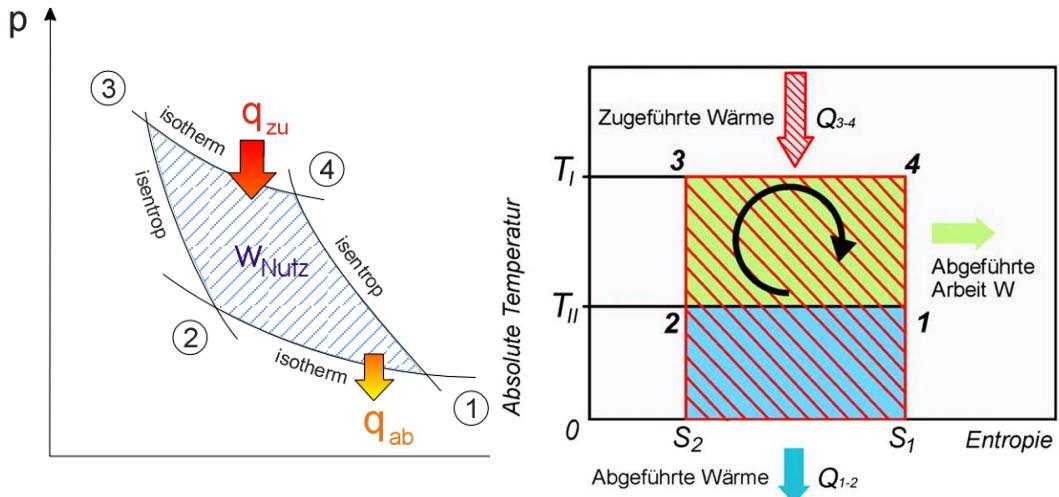
Leistung

$$P = \frac{\text{Arbeit}}{\text{Zeit}}$$

### 13.2.3 Carnot-Prozess

Prinzip

theoretischer, reversibler und optimaler (bzgl. Wirkungsgrad) Kreisprozess mit 2 Isotherme und 2 Isentrope



$1 \rightarrow 2$ : isotherme Kompression (Gas mit Wärmebad der Temperatur  $T_1$  verbunden)

$$W_{12} = nRT_1 \ln \frac{V_1}{V_2} > 0$$

$$Q_{12} = \int_{S_1}^{S_2} T dS = T_1(S_2 - S_1) < 0 = -W_{12}$$

$2 \rightarrow 3$ : isentrope Kompression (Gas wird vom Wärmebad getrennt)

$$W_{23} = nC_{mV}(T_3 - T_1) < 0$$

$$Q_{23} = 0$$

$3 \rightarrow 4$ : isotherme Expansion (Gas mit Wärmebad der Temperatur  $T_3$  verbunden)

$$W_{34} = nRT_3 \ln \frac{V_3}{V_4}$$

$$Q_{34} = \int_{S_1}^{S_2} T dS = T_3(S_1 - S_2) > 0 = -W_{34}$$

$4 \rightarrow 1$ : isentrope Expansion (Gas wird vom Wärmebad getrennt)

$$W_{41} = nC_{mV}(T_1 - T_3) < 0$$

$$Q_{41} = 0$$

$$W_{Carnot} = \oint dW = W_{12} + W_{23} + W_{34} + W_{41} = -nR \ln \left( \frac{V_4}{V_3} \right) (T_3 - T_1)$$

weil:  $W_{23} = -W_{41}$ , für die isentropen ZÄ gilt zudem  $V_2 = V_3$  und  $V_4 = V_1$ ,

$$\text{also gilt auch } \frac{V_4}{V_3} = \frac{V_1}{V_2}$$

$$Q_{zu} = Q_{34} = nRT_3 \ln \frac{V_4}{V_3}$$

$$\eta = \frac{W_{Carnot}}{Q_{zu}} = \frac{T_3 - T_1}{T_3} = 1 - \frac{T_1}{T_3}, \quad T_3 > T_1$$

$$dU = \partial Q + \partial W$$

$$W = Q_{zu} - Q_{ab}$$

$Q_{12} = Q_{ab}$  : abgeführte ("verlorene") Wärme ans Wärmebad  $T_1$

Arbeit (Nutzen)

zugeführte Wärme

Wirkungsgrad

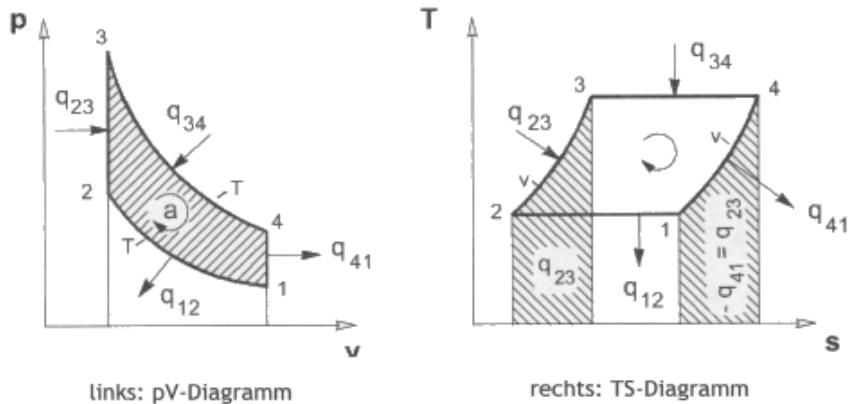
Energiebilanz

### 13.2.4 Stirling-Prozess

Prinzip

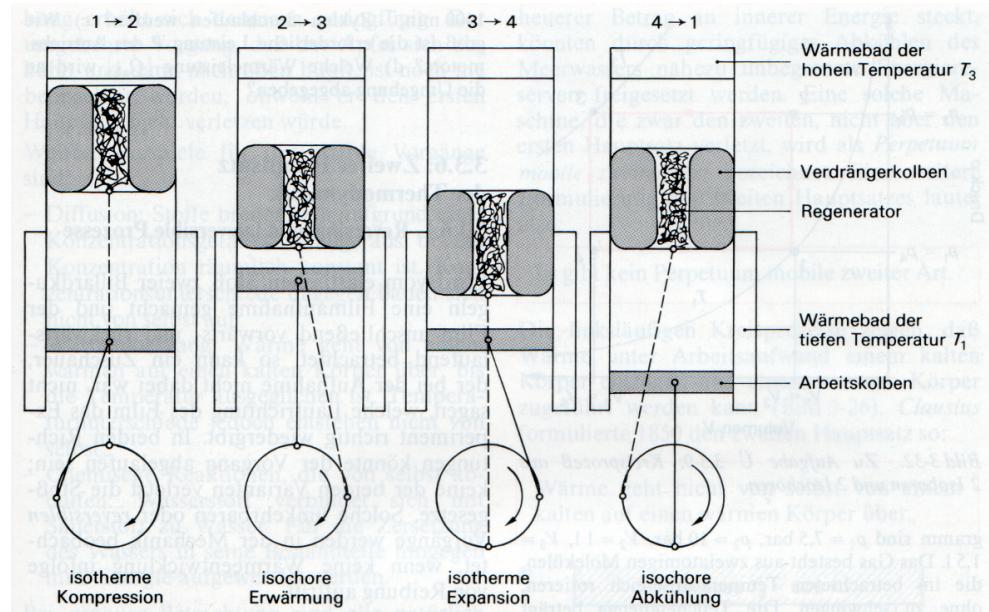
Zwei Isochore, zwei Isotherme

Stirling Kreisprozess



links: pV-Diagramm

rechts: TS-Diagramm



Wirkungsgrad

$$\eta = 1 - \frac{T_1}{T_3}$$

### 13.2.5 Weitere Prozesse

Bezeichnung	$p, V$ -Diagramm	Einzelprozesse	thermischer Wirkungsgrad
Seiliger-Prozeß		2 Isentropen, 2 Isochoren, 1 Isobare	$\eta_{th} = 1 - \frac{T_5 - T_1}{T_3 - T_2 + \kappa(T_4 - T_3)}$
Otto-Prozeß		2 Isentropen, 2 Isochoren	$\eta_{th} = 1 - \frac{1}{\left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\kappa-1}}$
Diesel-Prozeß		2 Isentropen, 1 Isochore, 1 Isobare	$\begin{aligned}\eta_{th} &= \left(\frac{V_3}{V_2}\right)^{\kappa} - 1 \\ &= 1 - \frac{\kappa\left(\frac{V_3}{V_2}-1\right)\left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\kappa-1}}{\left(\frac{V_3}{V_2}\right)^{\kappa}-1}\end{aligned}$

### 13.2.6 Umgekehrter Kreisprozess

Aus mechanischer Arbeit wird Wärme oder Kälte gewonnen.

$$\text{Leistungszahl} \quad \epsilon = \frac{\text{Nutzen}}{\text{Aufwand}}$$

$$\text{Kältemaschine} \quad \epsilon_K = \frac{|Q_{zu}|}{W} = \frac{T_1}{T_3 - T_1}$$

$$\text{Wärmepumpe} \quad \epsilon_W = \frac{|Q_{ab}|}{W} = \frac{T_3}{T_3 - T_1}$$

### 13.3 3. Hauptsatz

$S = 0$  oder  $T = 0$  lässt sich nicht erreichen.

# 14 Transportphänomene

mikroskopischer Stossquerschnitt	$\sigma = 4\pi r^2$
mittlere freie Weglänge	$\Lambda = \frac{1}{n\sigma}$ $n$ : Teilchendichte
“Teilchenintensität”	$W(L) = ae^{-L/\Lambda}$
Absorptionslänge	$l_a \equiv \Lambda_a = \frac{1}{n\sigma_a}$
Absorptionskoeffizient	$\alpha = n\sigma_a$ Anzahl absorbierte Photonen pro Längeneinheit
Intensität des Lichts	$I(z) = I_0 e^{-\alpha z}$

## 14.1 Diffusion und Wärmeleitung

### Diffusion

Fick'sches Gesetz (Diffusionsstromdichte)

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -D \operatorname{grad} n(\mathbf{r})$$

$$\text{Diffusionskonstante } [D] = \frac{m^2}{s}$$

für Gase und Flüssigkeiten

$$D = \frac{1}{3} \langle v \rangle \Lambda$$

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$$

stationärer Zustand:  $j(x) = \text{konst.}$

$$n(x) = -\frac{j}{D}x + n_0$$

Kontinuitätsgleichung: Teilchenerhaltung

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$$

### Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} - D \nabla^2 n(x, t) = 0$$

Driftstromdichte:  $j = n \cdot v_d \cdot f$   $f$  : “generische” Teilcheneigenschaft, z.B.  $f = q$  für Ladung

Teilchenstromdichte:  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$

$$\text{Teilchenstrom: } I = \int_A \mathbf{j}(\mathbf{r}) dA$$

Teilchendichte:  $n(r, t)$

### Wärmeleitung

Fourier'sches Gesetz (Wärmestromdichte)

$$\mathbf{j}_Q(\mathbf{r}) = -K \operatorname{grad} T(\mathbf{r})$$

$$\text{Wärmeleitfähigkeit } [K] = \frac{J}{m \cdot s \cdot K} = \frac{W}{m \cdot K}$$

für Gase und Flüssigkeiten

$$K = D \left( \frac{3}{2} n k_B \right) = \frac{1}{2} n k_B \langle v \rangle \Lambda$$

stationärer Zustand:  $j_Q(x) = \text{konst.}$

$$T(x) = -\frac{j_Q}{K} x + T_0$$

Kontinuitätsgleichung: Energieerhaltung

$$\frac{\partial \rho_Q}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_Q = 0$$

### Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} - D_W \nabla^2 T(x, t) = 0$$

$$D_W \equiv \frac{K}{\rho c}, \rho \quad : \quad \text{Massendichte, } c \quad \text{spez. Wärmekapazität}$$

Wärmestromdichte:  $\mathbf{j}_Q(\mathbf{r})$   $[j_Q(\mathbf{r})] = \frac{J}{m^2 \cdot s}$

$$\text{Wärmestrom: } I_Q = \int_A \mathbf{j}_Q(\mathbf{r}) dA$$

Wärmedichte:  $\rho_Q$

# Beispiel stationärer Zustand

Wärmestromdichte in 1D:  $j_Q = -K \frac{\partial T(x)}{\partial x}$

$$dT = -\frac{j_Q}{K} dx \Rightarrow \int_{T_1}^{T(x)} dT = -\frac{j_Q}{K} \int_{x_1}^x dx, \text{ falls } j_Q(r) \text{ konst.}$$

Randbedingungen:  $T(x_1) = T_1, T(x_2) = T_2$

Wärmestromdichte:  $j_Q = -K \frac{T_2 - T_1}{x_2 - x_1}$

Temperaturprofil:  $T(x) = T_1 - \frac{j_Q}{K}(x - x_1)$

## 15 Anhang

### 15.1 Grundkonstanten

Konstante	Symbol	Wert
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$c$	$2.9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Elementarladung	$e$	$1.6021 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Ruhemasse des Elektrons	$m_e$	$9.1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ruhemasse des Protons	$m_p$	$1.6726 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Ruhemasse des Neutrons	$m_n$	$1.6749 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Planck'sche Konstante	$h$	$6.621 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $= 4.135 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$
	$\hbar = \frac{h}{2\pi}$	$1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Bohr'scher Radius	$a_0$	$5.2918 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Comptonwellenlänge		
d. Elektrons	$\lambda_{c,e}$	$2.4263 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
d. Protons	$\lambda_{c,p}$	$1.3214 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
Rydberg-Konstante	$R$	$1.0974 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$
Bohr'sches Magneton	$\mu_B$	$9.2740 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$
Avogadro-Konstante	$N_A$	$6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Boltzmann-Konstante	$k_B$	$1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ $= 8.6173 \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$
universelle Gaskonstante	$R$	$8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Stefan-Boltzmann-Konstante	$\sigma$	$5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
Schwerebeschleunigung in Meereshöhe am Äquator	$g$	$9.7805 \text{ m s}^{-2}$
Atommasse	$u$	$1.660 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

## 15.2 Einheiten und Zeichen

Grösse	Symbol	Bezeichnung der Einheit	SI-Grösse
Länge	$l$	Meter	m
Masse	$m$	Kilogramm	kg
Zeit	$t$	Sekunde	s
Geschwindigkeit	$v$		$\text{ms}^{-1}$
Beschleunigung	$a$		$\text{ms}^{-2}$
Winkelgeschwindigkeit	$\omega$		$\text{s}^{-1}$
Kreisfrequenz	$\omega$		$\text{s}^{-1}$
Frequenz	$\nu$	Hertz (Hz)	$\text{s}^{-1}$
Impuls	$p$		$\text{m kg s}^{-1}$
Kraft	$F$	Newton (N)	$\text{m kg s}^{-2}$
Druck	$p$	Pascal (Pa)	$\text{m}^{-1} \text{ kg s}^{-2}$
Drehimpuls	$L$		$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-1}$
Drehmoment	$\tau$		$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-2}$
Arbeit	$W$	Joule (J)	$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-2}$
Leistung	$P$	Watt (W)	$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-3}$
Energie	$U, E$	Joule (J)	$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-2}$
Temperatur	$T$	Kelvin (K)	$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-2} / \text{ Teilchen}$
Diffusionskoeffizient	$D$		$\text{m s}^{-2}$
Wärmeleitfähigkeit	$K$		$\text{m kg s}^{-3} \text{ K}^{-1}$
Elektrischer Strom	$I$	Ampère (A)	A
Ladung	$q, Q$		A s
Elektrisches Feld	$\epsilon$		$\text{m kg s}^{-3} \text{ A}^{-1}$
Elektrisches Potential	$V$	Volt (V)	$\text{m}^2 \text{ kg s}^{-3} \text{ A}^{-1}$
Stromdichte	$j$		$\text{m}^{-2} \text{ A}$
Magnetfeld	$B$	Tesla (T)	$\text{kg s}^{-2} \text{ A}^{-2}$

## 15.3 Nützliche Beziehungen

Elektronenvolt	$1\text{eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
	$1\text{J} = 6.242 \cdot 10^{18} \text{ eV}$
Planck'sches Wirkungsquantum	$hc = 1240\text{eV}\cdot nm$
Boltzmann-Konstante	$k_B T = 25.8 \text{ meV} (\text{at } T = 300K) = 4.133 \cdot 10^{-21} J$
Temperatur	$K = 273.15 + {}^\circ C$
Bar - Pascal	$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$
Coulomb - Ampere	$C = A \cdot s$
Energie $E = \hbar\omega$	$\Leftrightarrow$ Wellenlänge $\lambda$
Frequenz $\nu$	$\Leftrightarrow$ reduzierte Wellenzahl $\frac{1}{\lambda}$
Kreisfrequenz $\omega$	$\Leftrightarrow$ Wellenzahl $k$
	$\left  \begin{array}{l} E[eV] = \frac{1.24}{\lambda[\mu m]} \\ \nu[GHz] = \frac{30}{\lambda} [cm^{-1}] \\ \omega[GHz] = 30 \cdot k [cm^{-1}] \end{array} \right.$

## 15.4 Koordinatensysteme

### 15.4.1 Polarkoordinaten

Definition	$x = r \cdot \sin \varphi$
	$y = r \cdot \cos \varphi$
Gradient	$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi$
Laplace	$\Delta f(r, \varphi) = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$
oder	$\Delta f(r, \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$
Volumenelement	$dx dy = r d\varphi dr$

### 15.4.2 Zylinderkoordinaten

Definition	$x = r \cdot \sin \varphi$
	$y = r \cdot \cos \varphi$
	$z = z$
Gradient	$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z$
Laplace	$\Delta f(r, \varphi, z) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$
Volumenelement	$dx dy dz = r dz d\varphi dr$

### 15.4.3 Kugelkoordinaten

Definition

$$x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi$$

$$y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi$$

$$z = r \cdot \cos \theta$$

Gradient

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Laplace

$$\Delta f(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

Volumenelement

$$dx dy dz = r^2 \sin \theta d\varphi d\theta dr$$

## 15.5 Trigonometrische Identitäten und Integrale

### 15.5.1 Identitäten

$$\begin{aligned} \sin(a \pm b) &= \sin a \cos b \pm \cos a \sin b & \sin a \sin b &= \frac{1}{2} (\cos(a - b) - \cos(a + b)) \\ \cos(a \pm b) &= \cos a \cos b \mp \sin a \sin b & \cos a \cos b &= \frac{1}{2} (\cos(a - b) + \cos(a + b)) \\ \sin^2(x) &= -\frac{\cos(2x)}{2} + \frac{1}{2} & \sin a \cos b &= \frac{1}{2} (\sin(a - b) + \sin(a + b)) \\ \cos^2(x) &= \frac{\cos(2x)}{2} + \frac{1}{2} & \sin(2x) &= 2 \sin(x) \cos(x) \\ && \cos(2x) &= \cos^2(x) - \sin^2(x) \end{aligned}$$

### 15.5.2 Integrale

$$\int \sin^2(ax) dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4a} \sin(2ax)$$

$$\int x \cdot \sin(ax) dx = \frac{1}{a^2} \sin(ax) - \frac{x}{a} \cos(ax)$$

$$\int \cos^2(ax) dx = \frac{x}{2} + \frac{1}{4a} \sin(2ax)$$

$$\int x \cdot \cos(ax) dx = \frac{1}{a^2} \cos(ax) + \frac{x}{a} \sin(ax)$$

$$\int x \cdot \sin^2(ax) dx = -\frac{2ax(\sin(2ax) - ax) + \cos(2ax)}{8a^2}$$

$$\int \sin^3(ax) dx = -\frac{1}{a} \cos(ax) + \frac{1}{3a} \cos^3(ax)$$

$$\int x^2 \sin(ax) dx = \frac{2x}{a^2} \sin(ax) - \frac{x^2}{a} \cos(ax) + \frac{2}{a^3} \cos(ax)$$

$$\int \cos^3(ax) dx = -\frac{1}{a} \cos(ax) - \frac{1}{3a} \sin^3(ax)$$

$$\int x^2 \cos(ax) dx = \frac{2x}{a^2} \cos(ax) + \frac{x^2}{a} \sin(ax) - \frac{2}{a^3} \sin(ax)$$

## 15.6 Eigenschaften gerader und ungerader Funktionen

- $f(g(x))$  ist gerade, falls  $g(x)$  gerade ist.  $f(x)$  beliebig. Z.B.  $\sin(x^2)$
- $f(g(x))$  ist gerade, falls  $g(x)$  ungerade und  $f(x)$  gerade. Z.B.  $\sin^2(x)$
- $f(g(x))$  ist ungerade, falls  $g(x)$  ungerade und  $f(x)$  ungerade. Z.B.  $\sin^3(x)$
- Cosinus ist gerade, Sinus ist ungerade.
- Die Ableitung einer geraden Funktion ist ungerade, die Ableitung einer ungeraden Funktion ist gerade.
- Die Fourierreihe einer geraden (ungeraden) Funktion enthält nur Cosinus - (Sinus-) Terme.

## 15.7 Genaue Funktionswerte

$\alpha$	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{3\pi}{4}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\pi$
$\sin \alpha$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$\cos \alpha$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	-1
$\tan \alpha$	0	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	1	$\sqrt{3}$	-	$-\sqrt{3}$	-1	$-\frac{\sqrt{3}}{3}$	0

## 15.8 Fourierreihen

### 15.8.1 Definition

Lipstetige T-periodische Funktionen ( $f(t) = f(t + T)$ ) lassen sich als trigonometrische Reihe darstellen

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos \left( \frac{2\pi}{T} nt \right) + b_n \sin \left( \frac{2\pi}{T} nt \right) \right)$$

mit reellen Koeffizienten  $a_n, b_n$  oder wie folgt:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\frac{2\pi i}{T} nt}, \quad c_n \in \mathbb{C}$$

mit komplexen Koeffizienten  $c_n$

### 15.8.2 Bestimmung der Koeffizienten

$$c_n = \frac{1}{2}(a_n - ib_n)$$

$$c_{-n} = \frac{1}{2}(a_n + ib_n) = \overline{c_n}$$

$$c_0 = \frac{1}{2}a_0$$

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \cdot e^{\frac{-2\pi i}{T} nt} dt$$

$$a_n = (c_n + c_{-n}) = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \cos \left( \frac{2\pi}{T} nt \right) dt$$

$$b_n = \left( \frac{c_n - c_{-n}}{i} \right) = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \sin \left( \frac{2\pi}{T} nt \right) dt$$

Falls  $f$  gerade  $\Leftrightarrow f(t) = f(-t)$ , dann  $b_n = 0 \forall n$

Falls  $f$  ungerade  $\Leftrightarrow f(-t) = -f(t)$ , dann  $a_n = 0 \forall n$

## 15.9 Fouriertransformation (FT)

$$\text{FT} := \hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad \omega \in \mathbb{R}$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

Linearität:  $h(t) = af(t) + bg(t) \Rightarrow \hat{h}(t) = a\hat{f}(t) + b\hat{g}(t)$

Verschiebung:  $g(t) = f(t-a) \Rightarrow \hat{g}(\omega) = e^{-ia\omega} \hat{f}(\omega)$

$$g(t) = e^{iat} f(t) \Rightarrow \hat{g}(\omega) = \hat{f}(\omega - a)$$

Skalierung:  $g(t) = f\left(\frac{t}{a}\right) (a > 0) \Rightarrow \hat{g}(\omega) = a\hat{f}(a\omega)$

Ableitung:  $g(t) = f'(t) \Rightarrow \hat{g}(\omega) = i\omega \hat{f}(\omega)$

Faltungsprodukt: Definition im "Fourierraum":  $(f * g)(t) := \int_{-\infty}^{\infty} f(t-s)g(s)ds$   
 $(f * g)(t) \Rightarrow \widehat{f * g}(\omega) = \hat{f}(\omega) \cdot \hat{g}(\omega)$

Standard-FT:  $f(t) = e^{-\frac{at^2}{2}} \quad a > 0 \quad \Rightarrow \hat{f}(\omega) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{-\omega^2}{2a}}$