

Resonatormoden

Der Resonator aus zwei Spiegeln sorgt nicht nur für den mehrfachen Durchlauf des Lichts durch das aktive Medium, sondern konzentriert die Intensität auch auf bestimmte Moden, die von der Geometrie des Oszillators abhängen. In der Regel sind TEM_{00q}-Moden erwünscht (transversal-elektromagnetische Moden mit 0 Knoten des elektrischen Felds in x-Richtung, 0 Knoten in y-Richtung und q Knoten in z-Richtung, d.h. entlang der Strahlachse. Der Spiegelabstand ist ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge:

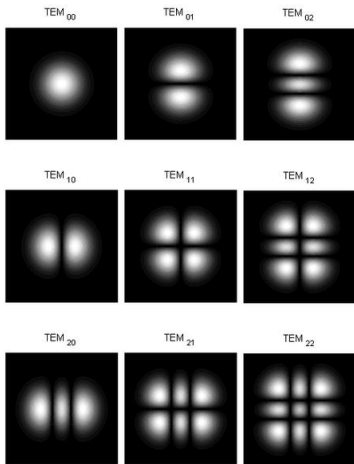
$$L = q \cdot \frac{\lambda}{2} = q \cdot \frac{c}{2\nu} \quad \rightarrow \quad \nu = q \cdot \frac{c}{2L}$$

Die Moden bilden ein dichtes Spektrum (das Verhältnis von L zu λ beträgt typisch 10⁶)

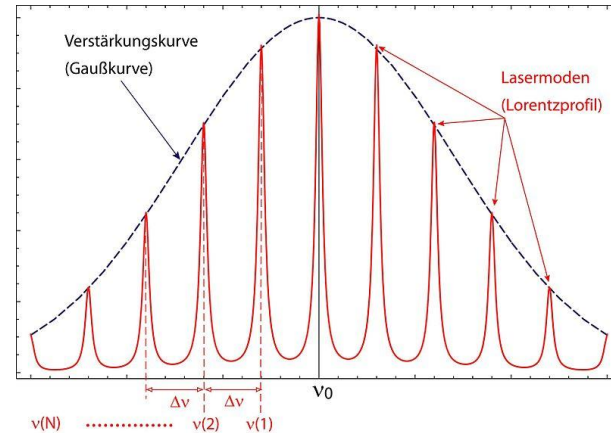
Das transversale Strahlprofil zwischen zwei gekrümmten Spiegel ist Gauß-förmig und bildet eine Strahltaille:

$$w(z) = 2\sigma = w_0 \cdot \sqrt{1 + (z/z_R)^2} \quad \text{mit} \quad z_R = \frac{\pi \cdot w_0^2}{\lambda}$$

Die charakteristische Länge z_R heißt Rayleigh-Länge und hängt von der Größe der Taile w₀ und der Wellenlänge ab.



transversale Moden für rechteckige Spiegel



longitudinale Moden (Wikipedia, Dr. W. Geitner)

Lasertypen

nach Pulsform

- Dauerstrich (cw)
- gepulst, Kurzpulslaser

nach Bauform

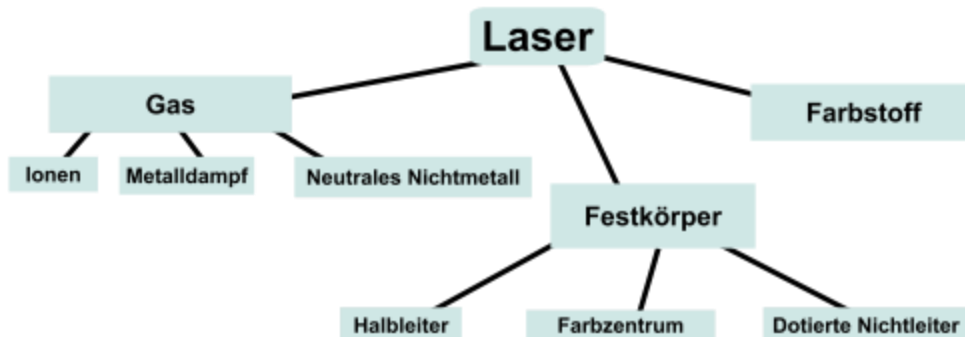
- Gas (geschlossen oder Gasstrom)
- Flüssigkeit (geschlossen oder Gasstrom)
- Kristall
- Laserdioden
- Scheibenlaser
- Faserlaser

nach Wellenlänge

- UV-Laser (Excimer)
- sichtbares Licht (z.B. HeNe)
- IR-Laser (Er:Glas)

nach Lasermedium

- Festkörper (Ti:Saphir, Nd:YAG,...)
- Flüssigkeit (Farbstofflaser)
- Gaslaser (CO₂, HeNe)



Prominente Beispiele

CO₂-Laser $\lambda = 10 \mu\text{m}$
 Gaslaser für hohe Intensitäten

Er:Glas-Laser $\lambda = 1540 \text{ nm}$
 Faserlaser für die Telekommunikation,
 kurze Pulse möglich (100 fs)

Nd:Glas-Laser $\lambda = 1064 \text{ nm}$
 hohe Intensität, Pulse im ns-Bereich,
 oft frequenz-verdoppelt (532 nm)
 z.B. zum Pumpen von Ti:Saphir

Yb:Glas-Laser $\lambda = 1030 \text{ nm}$
 ähnlich wie Nd:Glas

Ti:Saphir-Laser $\lambda \approx 800 \text{ nm}$
 Standard-Kurzpulslaser (20 fs)

AlGaAs-Laser $\lambda = 785 \text{ nm}$
 Laserdiode z.B. für CD/DVD

HeNe-Laser $\lambda = 632 \text{ nm}$
 cw-Gaslaser, typischer Justierlaser

InGaN-Laser $\lambda = 405 \text{ nm}$
 Laserdiode z.B. für BlueRay

Excimer-Laser (Ar/Kr) $\lambda = 193/243 \text{ nm}$
 Gaslaser für UV-Licht

Erzeugung ultrakurzer Lichtpulse

- erfordert sehr "breitbandige" Laser,

Unschärferelation bzw. "Zeit-Bandbreiten-Produkt" $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar / 2$ $\Delta \omega \cdot \Delta t \geq 1/2$

- in der Regel Titan:Saphir-Laser mit 800 nm Wellenlänge (1 Periode = 2,67 fs)
gepumpt mit grünem Licht bei 532 nm (frequenz-verdoppelter Nd:Glas-Laser)

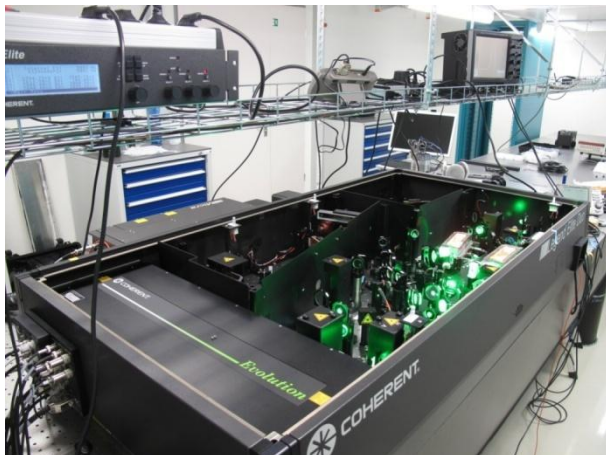
- Pulsdauern < 10 fs möglich ("few-cycle"-Pulse)

- Modenkopplung: durch Addition longitudinaler Moden mit fester Phasenbeziehung

$$A = \sum_q A_q \cdot \cos(2\pi\{v_0 + q \cdot \delta v\} \cdot t) \quad \delta v = \frac{c}{2L}$$

entsteht ein sehr kurzer Puls durch konstruktive Interferenz.

- die Verstärkung kurzer Laserpulse ist aufgrund der hohen Spitzenintensität problematisch,
Lösung: chirped pulse amplification CPA (Mourou, Strickland 1985)



2.22 Zusammenfassung: Grundlagen der Quantenmechanik

2.22.1 Strahlung eines "schwarzen Körpers"

Stefan-Boltzmann-Gesetz (1873)
 von der Fläche A emittierte Leistung

$$P = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4} \cdot A \cdot T^4$$

Wiensches Verschiebungsgesetz (1896)
 Wellenlänge des spektralen Maximums

$$\lambda_{\text{max}} = 2898 \mu\text{m} \cdot \frac{\text{K}}{T}$$

Berechnung des Spektrums - zwei Ansätze

Planck: Moden im Hohlraum, Wahrscheinlichkeiten p durch Boltzmann-Faktoren gegeben

$$\bar{W} = \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot h \cdot \nu \cdot p \quad p \propto \exp(-n \cdot h \cdot \nu / k \cdot T)$$

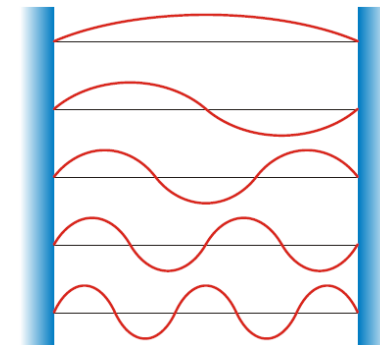
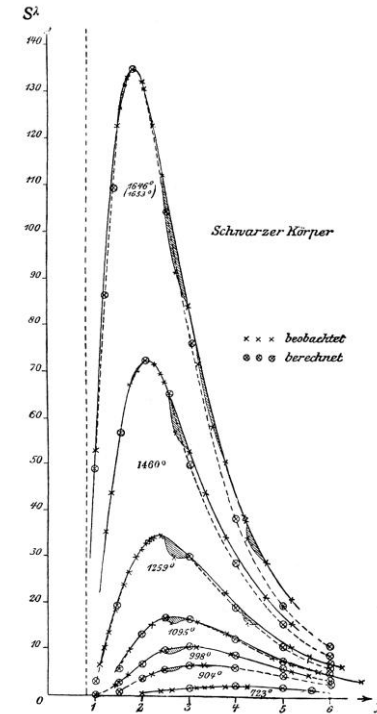
Einstein: Gleichgewicht zwischen Absorption, spontaner und stimulierter Emission

$$\gamma \cdot \rho(\nu, T) \cdot n_0 \cdot d\nu = \beta \cdot n_E + \gamma \cdot \rho(\nu, T) \cdot n_E \cdot d\nu$$

Beide Ansätze kommen zum selben Ergebnis:

$$\rho(\nu, T) \cdot d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \cdot \frac{h\nu^3}{\exp(h\nu/kT) - 1} \cdot d\nu$$

Plancksche Strahlungsformel



2.22.2 Weitere Hinweise auf Lichtquanten (Photonen)

a) Der Photoeffekt

Energie der emittierten Elektronen hängt nicht von der Lichtintensität ab, sondern von der Frequenz/Wellenlänge

$$E_{\max} = -e \cdot U_0 = h \cdot \nu - W_a$$

b) Der Compton-Effekt

Licht streut an (quasi freien) Elektronen wie Teilchen mit einer bestimmten Energie und Impuls

Energiesatz $h \cdot \nu = h \cdot \nu' + E_{kin} = h \cdot \nu' + m_0 \cdot \gamma \cdot c^2 - m_0 \cdot c^2$

Impulssatz $\hbar \cdot \vec{k} = \hbar \cdot \vec{k}' + m_0 \cdot \gamma \cdot \vec{w}$

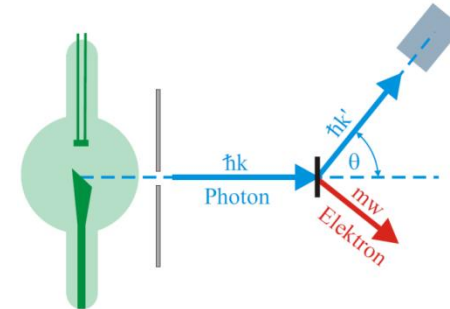
$$\lambda' - \lambda = 2\lambda_c \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \lambda_c \equiv \frac{h}{m_0 \cdot c}$$

Compton-Streuformel

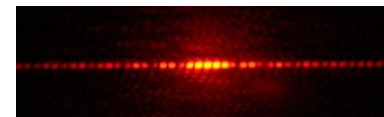
c) Detektion von Licht mit einem Photomultiplier

Abschwächung der Lichtquelle: keine gleichmäßige Reduktion der Signalstärke, sondern einzelne Signale, die schwächer werden.

Andererseits: Beugungserscheinungen sprechen für Wellencharakter des Lichts



Compton-Wellenlänge:
Änderung der Wellenlänge bei Streuung unter 90 Grad



2.22.3 Der Welle-Teilchen-Dualismus

Je nach Experiment zeigt sich der Wellen- oder Teilchencharakter des Lichts

Photonenenergie $E = h \cdot \nu = \hbar \cdot \omega = \frac{h \cdot c}{\lambda}$

Photonenimpuls $p = \frac{h \cdot \nu}{c} = \hbar \cdot k \quad \vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$

Photonen sind masselos, aber eine formale "Masse" zeigt sich beim Einfluss der Gravitation $m = \frac{E}{c^2} = \frac{h \cdot \nu}{c^2}$

Lichtintensität im Wellen- und Teilchenbild $I = \epsilon_0 \cdot c \cdot E^2 \quad I = n \cdot c \cdot h \cdot \nu \quad [I] = \frac{W}{m^2}$

Ebenso kann man einem "Teilchen", das eine Masse hat, (z.B. Elektron) auch Wellencharakter zuschreiben

$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ $\rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{h}{p}$ De-Broglie-Wellenlänge

$\psi(x, t) = C \cdot e^{i(\omega t - k \cdot x)} = C \cdot e^{i(E \cdot t - p \cdot x) / \hbar}$ Materiewellen

Unterschied zu Lichtwellen: Dispersion auch im Vakuum $v_{ph} \neq v_g = v$

$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{v}{2}$ Phasengeschwindigkeit

Teilchen entspricht einem "Wellenpaket"

$v_g = \frac{d\omega}{dk} = v$ Gruppengeschwindigkeit

2.22.4 Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = C_0 \cdot e^{i(\omega t - k \cdot x)} = C_0 \cdot e^{i(E \cdot t - p \cdot x) / \hbar}$$

Kopenhagener Deutung

$$|\psi(x, t)|^2 dx \quad \text{mit} \quad \int_{x=-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Intervall $[x, x+dx]$ zu finden. Der genaue Ort ist nicht vorhersagbar und steht erst dann fest, wenn eine Messung durchgeführt wird, ebenso wie man den Zerfall eines bestimmten radioaktiven Atomkerns nicht vorhersagen kann. Skurriles Beispiel:

Schrödingers Katze: In einem geschlossenen Raum befindet sich eine Katze mit einem Mechanismus, der durch einen quantenmechanischen Prozess entscheidet, ob die Katze stirbt (radioaktiver Zerfall löst die Zerstörung einer Giftampulle aus). Solange niemand nachschaut, ist die Katze demnach in einem tot/lebendig-Überlagerungszustand.

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \cdot e^{i(k \cdot x - \omega t)} \cdot dk \quad \text{Eine Wellenfunktion enthält normalerweise verschiedene Frequenzen}$$

Spektrum und Wellenfunktion sind durch Fourier-Transformation verknüpft, d.h.

schmales Spektrum, kleine Impulsunschärfe \leftrightarrow **breite Verteilung in x , große Ortsunschärfe**

breites Spektrum, große Impulsunschärfe \leftrightarrow **schmale Verteilung in x , kleine Ortsunschärfe**

daraus ergibt sich die **Heisenbergsche Unschärferelation**

Verschiedene Formulierungen je nach Definition der Breite (σ bedeutet Standardabweichung)

$$\sigma_x \cdot \sigma_k \geq \frac{1}{2} \quad \Delta x \cdot \Delta k \geq 1$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \quad \text{oder} \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

ebenso gilt $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$

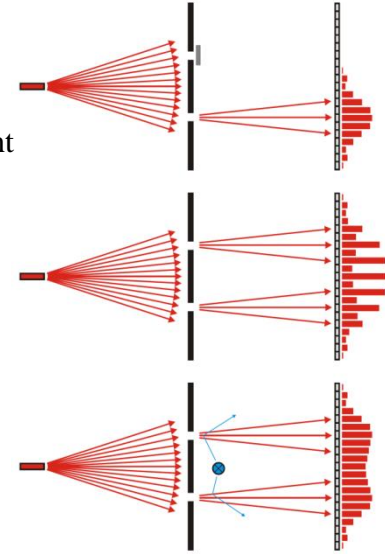
Youngsches Doppelspalt-Experiment mit Teilchen

Interferenzmuster wie bei Licht, wenn nicht gefragt wird, durch welchen Spalt das Teilchen geht

$$I \propto P = |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$$

Wenn sich das Teilchen für einen Spalt "entscheiden" muss, verschwindet die Interferenz

$$I \propto P = P_1 + P_2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$$



2.22.5 Operatoren und Erwartungswerte

Wellenfunktionen entsprechen Vektoren im Hilbert-Raum

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\dots \psi_i^* \dots \right) \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_i \\ \vdots \end{pmatrix} dx = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad \text{normierte Wellenfunktion}$$

Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot \hat{A} \cdot \psi \cdot dx = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Wenn $\hat{A}\psi = A \cdot \psi$, dann ist A ein Eigenwert und ψ eine Eigenfunktion zum Operator \hat{A}

Operatoren "holen eine bestimmte Größe aus der Wellenfunktion heraus", z.B.

$$\hat{p} = -i \cdot \hbar \cdot \vec{\nabla}$$

Impulsoperator

$$\hat{E} = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}$$

Energieoperator

2.22.6 Vertauschungsrelationen

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi = i \cdot \hbar \cdot \psi \quad \boxed{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i \cdot \hbar} \quad \text{Kommutator} \quad \text{ebenso} \quad \boxed{[\hat{t}, \hat{E}] = i \cdot \hbar}$$

Orts- und Impulsoperator "vertauschen nicht", d.h. der Kommutator ist ungleich 0. Solche Größen unterliegen einer Unschärferelation. Ist der Kommutator gleich 0, können die entsprechenden Größen gleichzeitig genau gemessen werden.

2.22.7 Das Bohrsche Atommodell

Experimentelle Befunde:

Existenz des Atomkerns (Rutherford)

Absorptions/Emissionsspektren, **Rydberg-Formel**

Franck-Hertz-Versuch (Elektronen in Hg-Dampf)

$$v = R \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Zentripetalkraft = Coulomb-Kraft (μ : reduzierte Masse)

$$\frac{\mu \cdot v^2}{r} = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{Z \cdot e^2}{r^2} \quad \mu = \frac{m_e \cdot m_{\text{Kern}}}{m_e + m_{\text{Kern}}} \approx m_e$$

entweder: Bahnumfang = ganzzahliges Vielfaches der De-Broglie-Wellenlänge

oder: Bahndrehimpuls = ganzzahliges Vielfaches von \hbar

$$2\pi \cdot r = n \cdot \lambda = n \cdot h / (\mu \cdot v) \quad \text{oder} \quad |\vec{L}| = \mu \cdot r \cdot v = n \cdot \hbar$$

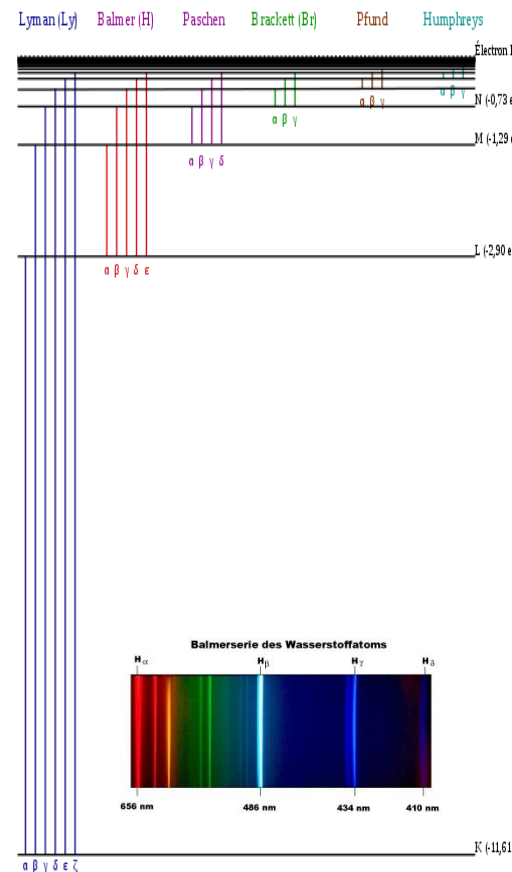
Beides führt zu:

$$\boxed{a_0 = \frac{h^2 \cdot \epsilon_0}{\pi \cdot e^2 \cdot \mu} = 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m}}$$

$$\boxed{E = -\frac{e^4 \cdot \mu}{8\epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = -R \cdot \frac{Z^2}{n^2}}$$

Bohrscher Radius

diskrete Energieniveaus



$$R_\infty = 13,6 \text{ eV} \quad \text{für} \quad \mu \rightarrow m_e$$

2.22.8 Die Schrödinger-Gleichung

Hamilton-Operator

$$i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V(x,t) \cdot \psi \quad i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad \text{mit} \quad \hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,t)$$

(nicht-relativistisch)

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Zeitunabhängiges Potenzial:

$$i \cdot \hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = E \cdot \varphi(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad \hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Lösung:

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) \cdot e^{-i \cdot \omega_n \cdot t}$$

Beispiel: unendlich hoher Potenzialtopf

- unterstes Energieniveau nicht null
- Zustände orthogonal und vollständig

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2$$

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\langle \psi_m(x) | \psi_n(x) \rangle = \delta_{mm} \quad |f(x)\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} x\right) \quad \langle E \rangle = \sum_n |c_n|^2 \cdot E_n$$

Beispiel: endlich hoher Potenzialtopf

- gebundene und ungebundene Zustände
- numerische Lösungen, sin/cos-förmige Wellenfunktion dringt in die Wände ein, klingt dort exponentiell ab

Beispiel: Potenzialstufe, Barriere ...

- Tunneleffekt

Beispiel: Harmonischer Oszillator

- Hermitesche Polynome ($H_0(a) = 1$)

$$\psi_i = H_i(a) \cdot e^{-\frac{1}{2}a^2}$$

$$E_n = (n + 1/2) \cdot \hbar \cdot \omega \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

äquidistante Energieniveaus

2.22.9 Der Tunnel-Effekt

I) $\psi_I(x) = A \cdot e^{i \cdot k \cdot x} + B \cdot e^{-i \cdot k \cdot x}$

II) $\psi_{II}(x) = C \cdot e^{\alpha \cdot x} + D \cdot e^{-\alpha \cdot x}$

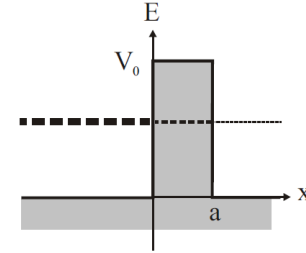
III) $\psi_{III}(x) = E \cdot e^{i \cdot k \cdot x}$

$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$

$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$

$\frac{\partial \psi_I(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}(0)}{\partial x}$

$\frac{\partial \psi_{II}(a)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{III}(a)}{\partial x}$



Anschluss: stetig und differenzierbar

Transmission:

$T \propto e^{-2 \cdot \alpha \cdot a} \quad \alpha \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)}$

WKB-Näherung: wenn Potenzial ortsabhängig, aber ändert sich nur langsam

$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cdot e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) \cdot dx}$

Beispiel: Alpha-Zerfall von Atomkernen

Transmission $T = e^{-2\gamma}$ mit $\gamma = \frac{1}{\hbar} \cdot \int_0^r |p(\hat{r})| \cdot d\hat{r}$

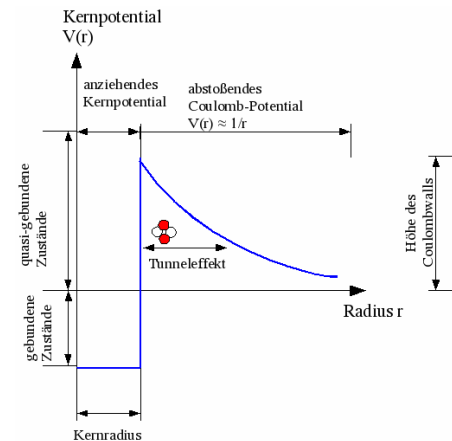
Das Integral geteilt durch \hbar ersetzt $k \cdot x$, wenn V nicht konstant ist.

Gamov-Faktor

$\gamma = K_1 \cdot \frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2 \cdot \sqrt{Z \cdot r_1}$ mit $K_1 = 1,980 \sqrt{\text{MeV}}$ und $K_2 = 1,485 \frac{1}{\sqrt{\text{fm}}}$

Geiger-Nuttall-Regel: Je höher die Energie, desto kürzer die Halbwertszeit

$\ln \tau = -\frac{a_1}{\sqrt{E}} + a_2$



2.22.10 Schrödinger-Gleichung in 3 Dimensionen

Drei-dimensionaler unendlich hoher Kasten

$$V(x, y, z) = 0 \quad \text{für} \quad 0 \leq x \leq a \quad 0 \leq y \leq b \quad 0 \leq z \leq c, \quad \text{sonst} \quad V(x, y, z) \rightarrow \infty$$

$$\psi(x, y, z) = A \cdot \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \cdot B \cdot \sin\left(n_y \frac{\pi}{b} y\right) \cdot C \cdot \sin\left(n_z \frac{\pi}{c} z\right) \quad n_i = 1, 2, 3, \dots \quad A \cdot B \cdot C = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{a \cdot b \cdot c}}$$

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

Energieniveaus können "entartet" sein, d.h. für verschiedene Quantenzahlen ist der Energie-Eigenwert gleich

Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \cos^{-1}(z / \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}) \quad \leftrightarrow$$

$$\varphi = \tan^{-1}(y / x)$$

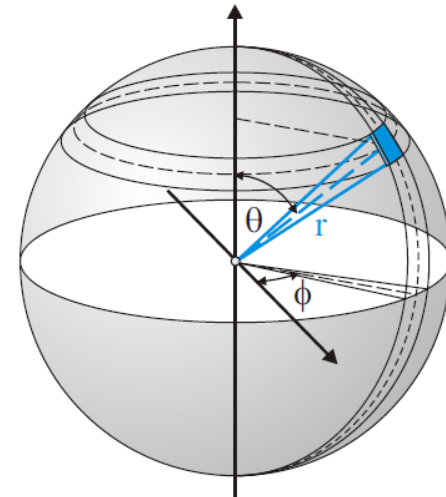
$$x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi$$

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

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

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

(Herleitung sehr umständlich)



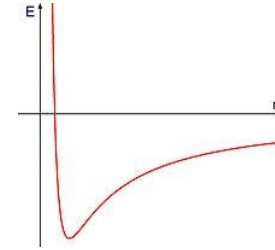
2.22.11 Das Wasserstoff-Atom

Schrödinger-Gleichung $\Delta\psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) = 0$ mit Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

Produktansatz $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i \cdot m \cdot \varphi} \quad \text{mit} \quad m = \dots - 2, -1, 0, 1, 2, \dots$$

magnetische Quantenzahl



$$\Theta_m(\theta) = A \cdot P_l^m(\cos \theta) \quad \text{mit} \quad -l \leq m \leq l$$

Drehimpuls-Quantenzahl

$$P_l(x) = P_l^0(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

Legendre-Polynome

$$R_{nl}(r) \propto r^{l+1} \cdot e^{-\frac{r}{na_0}} \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na_0)$$

Laguerre-Polynome

Hauptquantenzahl n

Energieniveaus

$$E_n = -\frac{\mu \cdot Z^2 \cdot e^4}{8\epsilon_0 \cdot \hbar^2 \cdot n^2} = -R \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

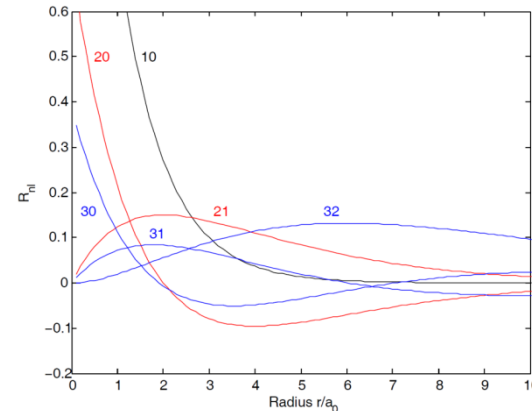
$$l < n$$

$$-l \leq m \leq l$$

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2 \cdot l + 1) = n^2 \quad \text{entartete Zustände}$$

Kugelflächenfunktionen

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \propto P_l^m(\cos \theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$



Gesamtwellenfunktion

$$\psi_{nlm} = \underbrace{\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+1)!\}^3}}}_{\text{Normierung}} \cdot \underbrace{e^{-\frac{r}{na_0}} \cdot \left(\frac{2r}{n \cdot a_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na_0)}_{\text{radiale Abhängigkeit mit Laguerre-Polynomen}} \cdot \underbrace{Y_l^m(\theta, \varphi)}_{\text{Winkelabhängigkeit mit Kugelflächenfunktionen}}$$

Normierung
(abhängig von n, l)

radiale Abhängigkeit
mit Laguerre-Polynomen
(abhängig von n, l)

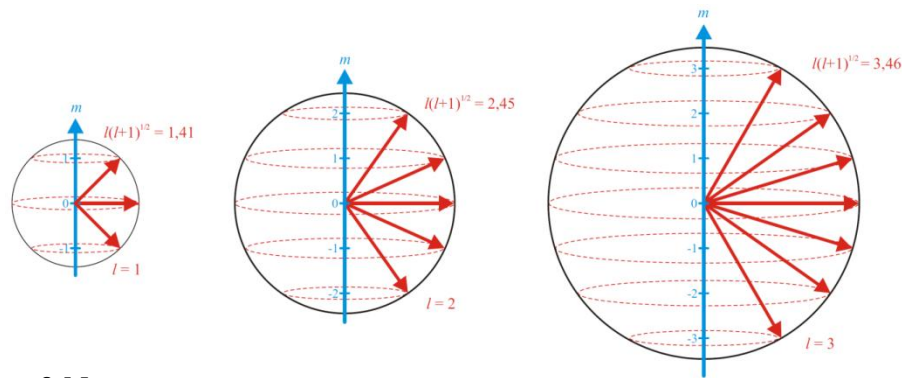
Winkelabhängigkeit mit
Kugelflächenfunktionen
(abhängig von l, m)

2.22.12 Drehimpuls

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

$$m_L = -L \dots L$$

$$L_z = m \cdot \hbar$$

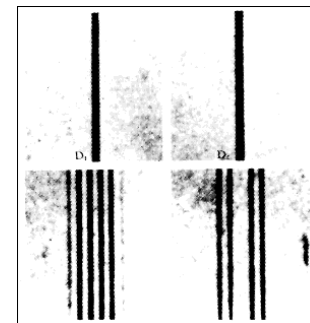


Normaler Zeeman-Effekt: Aufspaltung im Magnetfeld

$$E_{pot} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = m \cdot \mu_B \cdot B$$

$$\mu_B \equiv -\frac{e \cdot \hbar}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T}$$

Bohrsches Magneton



2.22.13 Korrekturen des Wasserstoff-Spektrums

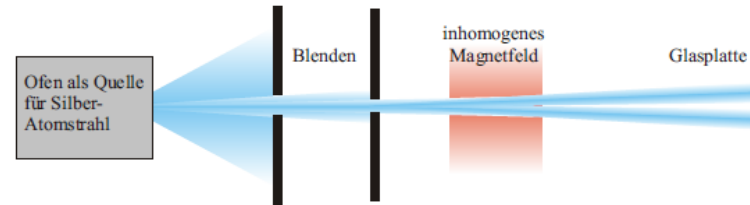
- | | |
|---|--|
| Energieniveaus gemäß dem Bohrschen Atommodell in der Größenordnung von | $\alpha^2 \cdot m \cdot c^2$ |
| a) Feinstruktur (relativistischer Effekt und Spin-Bahn-Kopplung) | $\alpha^4 \cdot m \cdot c^2$ |
| b) Lamb-Verschiebung (Quantenelektrodynamik, Vakuumfluktuationen) | $\alpha^5 \cdot m \cdot c^2$ |
| c) Hyperfeinstruktur (Effekte des Kerns: el./mag. Moment, Masse, Volumen) | $\alpha^4 \cdot m \cdot c^2 \cdot (m_e / m_p)$ |

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar \cdot c} = 0,007297 \dots \approx \frac{1}{137}$$

Feinstruktur-Konstante

Stern-Gerlach-Experiment

Elektronen haben einen inneren Drehimpuls ("Spin")



$$|\vec{s}| = \sqrt{s \cdot (s + 1)} \cdot \hbar \quad m_s = -s \dots s \quad \rightarrow \quad s = \frac{1}{2} \quad |\vec{s}| = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} \cdot \hbar = \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot \hbar$$

$$\vec{\mu}_l = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{l} \quad \text{analog} \quad \vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{s} \quad \text{mit} \quad g_s = 2,0023 \approx 2$$

sog. Landé-Faktor ungefähr (aber nicht genau) 2

Einstein-de-Haas-Experiment

Messung des gyromagnetischen Verhältnisses

$$\gamma_s = \frac{|\vec{\mu}_s|}{|\vec{s}|} = \frac{2 \cdot |\vec{\mu}_s|}{2 \cdot |\vec{s}|} \frac{N}{N} = \frac{\Delta M}{\Delta S}$$

2.22.14 Das Helium-Atom

Betrachte zwei ununterscheidbare Teilchen, z.B. Elektronen im He-Atom, in zwei Zuständen a, b

symmetrische Linearkombination, Teilchen mit ganzzahligem Spin

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1) \cdot \psi_b(\vec{r}_2) + \psi_b(\vec{r}_1) \cdot \psi_a(\vec{r}_2) \quad \text{Bosonen}$$

antisymmetrische Linearkombination, Teilchen mit halbzahligem Spin

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1) \cdot \psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1) \cdot \psi_a(\vec{r}_2) \quad \text{Fermionen}$$

Zwei Fermionen können nicht gleichzeitig im selben Quantenzustand sein

Gesamtwellenfunktion

$$\psi(\vec{r}) \cdot \chi(\vec{s})$$

Ortswellenfkt. · Spinwellenfkt.

$$|1 \ 1\rangle = \uparrow\uparrow$$

$$|1 \ -1\rangle = \downarrow\downarrow$$

$$|1 \ 0\rangle = (\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \cdot 1/\sqrt{2}$$

$$|0 \ 0\rangle = (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \cdot 1/\sqrt{2}$$

Triplet (symmetrisch)

Singulett (antisymmetrisch)

Schrödinger-Gleichung für zwei Elektronen

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_1 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + E_{pot} \cdot \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \cdot \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0} \left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right)$$

Lösung mit Näherungen, z.B. 1-Teilchen-Schrödinger-Gleichung mit reduzierter Kernladung (Abschirmung) oder zwei Elektronen auf gegenüberliegenden Positionen (s. Übungsblatt 7)

2.22.15 Das Periodensystem der Elemente

Elektronen"schalen"

- n = 1: K-Schale
- n = 2: L-Schale
- n = 3: M-Schale
- n = 4: N-Schale usw.

Die Radialwellenfunktion hängt auch von l ab. Mit (n, l) bezeichnete Zustände nennt man **Unterschalen**. Für jede Schale gibt es n Unterschalen, da $l = 0 \dots n-1$, und $2 \cdot (2 \cdot l + 1)$ Zustände pro Unterschale.

Mit zunehmender Ordnungszahl Z (Protonenzahl, Kernladungszahl) werden die Unterschalen in folgender Reihenfolge aufgefüllt:

- 1s (₁H bis ₂He)
- 2s (₃Li bis ₄Be)
- 2p (₅B bis ₁₀Ne)
- 3s (₁₁Na bis ₁₂Mg)
- 3p (₁₃Al bis ₁₈Ar)
- 4s (₁₉K bis ₂₀Ca)
- 3d (₂₁Sc bis ₃₀Zn)
- 4p (₃₁Ga bis ₃₆Kr)
- 5s (₃₇Rb bis ₃₈Sr)
- 4d (₃₉Y bis ₄₈Cd)
- 5p (₄₉In bis ₅₄Xe)

L-S-Kopplung

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

j-j-Kopplung

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

Erste Hundsche Regel: Volle Schalen und Unterschalen haben den Gesamtdrehimpuls null.

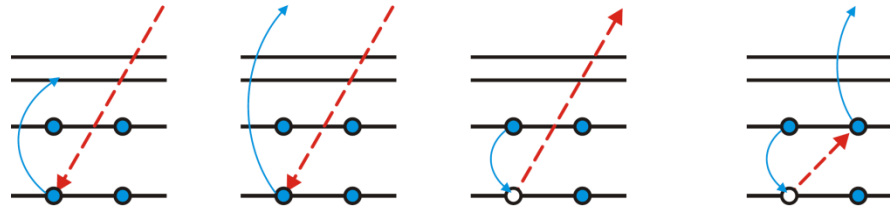
Zweite Hundsche Regel: Im Grundzustand hat der Gesamtspin den größtmöglichen Wert, die Elektronenspins stehen also möglichst parallel.

$$n^{2S+1} L_J$$

B	C	N	O	F	Ne
S=1/2	S=1	S=3/2	S=1	S=1/2	S=0
↑	↑ ↑	↑ ↑ ↑	↑ ↓ ↑ ↑	↑ ↓ ↑ ↓ ↑	↑ ↓ ↑ ↓ ↑ ↓

2.22.16 Angeregte Atome, Emission und Absorption von Strahlung

$$h \cdot \nu = \hbar \cdot \omega = E_i - E_k$$



Gleichgewicht zwischen Absorption, spontaner und stimulierter Emission ergibt zusammen mit der Planckschen Formel:

$$\rightarrow B_{ik} = \frac{g_k}{g_i} B_{ki} \quad A_{ik} = \frac{8\pi \cdot h \cdot \nu^3}{c^3} B_{ik}$$

spontan stimuliert

Für die Betrachtung von Übergängen: zeitabhängiges Potenzial eingeführt

$$H(t)\Psi = i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \Psi = c_a(t) \cdot \psi_a \cdot e^{-i \cdot E_a \cdot t / \hbar} + c_b(t) \cdot \psi_b \cdot e^{-i \cdot E_b \cdot t / \hbar}$$

$$H(t) = H^0 + H'(t)$$

zeitliche Ableitung des Koeffizienten $\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} c_b \cdot \langle \psi_a | H' | \psi_b \rangle \cdot e^{-i \cdot (E_b - E_a) \cdot t / \hbar}$

kosinus-förmige Störung angenommen, integriert und quadriert $P_{a \rightarrow b}(t) = |c_b|^2 = \frac{|V_{ba}|^2}{\hbar^2} \cdot \frac{\sin^2((\omega_0 - \omega) \cdot t / 2)}{(\omega_0 - \omega)^2}$

auf elektrische Dipole angewandt $V_{ab} = V_{ba} = -p_{el} \cdot E_0$

$$\vec{p}_{el} = -e \cdot \vec{r}$$

$$\langle \vec{p}_{el} \rangle = -e \cdot \langle \vec{r} \rangle = -e \cdot \langle \psi_a | \vec{r} | \psi_a \rangle$$

Übergangsdipolmoment

$$M_{ab} = -e \cdot \langle \psi_b | \vec{r} | \psi_a \rangle$$

Endergebnis (Fermis goldene Regel)

$$A_{ab} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \cdot \omega_0^3}{\epsilon_0 \cdot h \cdot c^3} \left| \langle \psi_b | \vec{r} | \psi_a \rangle \right|^2$$

Anwendungen

- Herleitung der Auswahlregeln (welche Integrale werden null, welche nicht?)
- Ausrechnen des Einstein-Koeffizienten, der Lebensdauer des Zustands und der Linienbreite des Übergangs

Besetzung eines Zustands als Funktion der Zeit $N_a(t) = N_a(0) \cdot e^{-A_a \cdot t}$ $\tau_a = \frac{1}{A_a}$ **1/e-Lebensdauer**

$\delta\omega = 1/\tau_a$ $\delta\nu = 1/(2\pi \cdot \tau_a)$ **nat. Linienbreite**

Auswahlregeln für Dipolübergänge

$\Delta m = 0$ für lineare Polarisation
 $\Delta m = \pm 1$ für zirkulare Polarisation
 $\Delta l = \pm 1$ (ein Elektron)
 $\Delta L = \pm 1$ (mehrere Elektronen) gilt streng für für L-S-Kopplung, weil sonst L nicht definiert ist
 $\Delta S = 0$ (mehrere Elektronen) gilt streng für für L-S-Kopplung, weil sonst S nicht definiert ist
 $\Delta J = 0, \pm 1$ außer $J = 0 \rightarrow J = 0$

2.22.17 Röntgenstrahlung

Quellen

- Röntgenröhre
- Synchrotronstrahlungsquellen
- Freie-Elektronen-Laser
- laser-basierte Quellen

Moseleysches Gesetz

$$h \cdot \nu = R \cdot Z_{eff} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Röntgenstrahlung und Materie

- Photoeffekt
- Comptonstreuung
- Paarbildung