

Molvolumen (22,414 dm³): Volumen von 1 mol = 6,022 136 7 · 10²³ Teilchen eines Gases bei Normalbedingungen (p = 1013 hPa, T = 0 °C). Seine Masse ist dann (in Gramm) gleich dem Molekulargewicht der Gasmoleküle.

Atomdurchmesser ≈ 1 Å = 10⁻¹⁰ m (Ångström),

Zeitskala: 10⁻¹⁵ s = 1 Femtosekunde.

e = 1,6 · 10⁻¹⁹ A s,

m₀ = 9,1 · 10⁻³¹ kg ≐ 511 keV/c².

(E = m₀c²)

Strahlung **schwarzer Körper** (Stefan-Boltzmann-Gesetz):

$$P = \sigma AT^4(\cdot \varepsilon)$$

A - abstrahlende Fläche

T - Temperatur

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15h^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4}$$

ε - Emissivität

(Für diese schwarzen Strahler ergibt sich die Wellenlänge der Maximalen Emission über das)

Wien'sche Verschiebungsgesetz: $\lambda_{\text{max}} = \frac{b}{T}$ mit b = 2,9 · 10⁻³ m K.

Rayleigh-Jeans-Strahlungsgesetz (EM-Wellen mit Annahme mittlere Energie pro Eigenschwingung $\bar{w}_\nu(T) = k_B T$):

$$w_\nu(\nu) d\nu = \underbrace{k_B T}_{\bar{w}_\nu} \underbrace{\frac{8\pi\nu^2}{c^3}}_{n(\nu)} d\nu.$$

k_B - Boltzmann-Konstante

c - Lichtgeschwindigkeit

ν = $\frac{c}{\lambda}$ - Frequenz

(Infrarot recht gut, UV-Katastrophe)

Max Planck: $\Delta E = h\nu$, $h = 6,626\,069\,57 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ (\Rightarrow Photonen - Mindestenergiequanten)
 $= 4,135\,667\,516 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$

Planck'sches Strahlungsgesetz: $w(\nu) d\nu = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \underbrace{\frac{8\pi\nu^2}{c^3}}_{n(\nu)} d\nu$

Photoelektrischer Effekt: $E_{kin,e^-}^{max} = h\nu - \Phi$, Φ - Austrittsarbeit

Compton-Effekt: Elastischer Stoß von Röntgenstrahlung (E = hν) und Elektronen → Streuung mit Energieverlusten.

Compton-Streuformel: $\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos(\varphi))$

de Broglie - Wellenlänge: $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}$.

relativistische Energie eines Teilchens: $E^2 = p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2$

Impuls eines Photons: $p = \frac{E_\gamma}{c} = \frac{h\nu}{c} = \hbar k$ $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

Masse eines Photons: $m_\gamma = \frac{E_\gamma}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2}$

Beschreibung der Materie durch überlagerte Wellen: $\Psi(x, t) = \lim_{j \rightarrow \infty} \sum_j C_j e^{i(\omega_j t - k_j x)} = \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} C(k) e^{i(\omega t - kx)} dk.$

In erster Näherung für kleines Frequenzintervall (\Rightarrow Materie): $\Psi(x, t) = 2C(k_0) e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} \frac{\sin(((\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t - x) \frac{\Delta k}{2})}{(\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t - x}$.

Dabei gilt: $v_{\text{Gruppe}} = v_{\text{Teilchen}} = (\frac{d\omega}{dk})_{k_0}$; und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für das Teilchen ergibt sich zu: $w(x, t) dx = |\Psi(x, t)|^2 dx$; wobei $\int_{-\infty}^{\infty} w(x, t) dx \equiv 1$ für alle t.

Heisenberg'sche **Unschärferelation**: $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ und $\Delta t \Delta E \geq \hbar$!

Rydberg-Ritz-Formel zur Beschreibung der Spektrallinien des Wasserstoffatoms: $\nu = c R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, mit

$$n_2 > n_1 \text{ und } R_H = 109\,678 \text{ cm}^{-1} = \frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c}$$

Bohr'sche Postulate:

1. Es sind nur diskrete Bahnradien mit entsprechenden Energien erlaubt.

$$r = \frac{n^2}{Z} a_0 \text{ mit } a_0 = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2} \approx 0,53 \text{ \AA} \text{ Bohrscher Radius.}$$

2. Die Bewegung auf diesen gequantelten Bahnen erfolgt strahlenlos.

3. Das Elektron kann von einer zur anderen Bahn unter Emission oder Absorption von Energie (Licht) übergehen.
 $E_n - E_{n'} = h\nu$

Z - Kernladungszahl

Damit ergibt sich: $E_{ges} = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} \frac{m_e e^2 Z^2}{4 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} - \frac{m_e e^2 Z^2}{4 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e e^2 Z^2}{8 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$, n - Hauptquantenzahl.

Somit ergibt sich für Energiedifferenzen: $\Delta E = h\nu = Ry \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right)$, mit $Ry = \frac{m_e e^2 Z^2}{8 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV} \cdot Z^2$.

$Ry_{Z=1}$ entspricht genau der Ionisierungsenergie des Wasserstoffs.

Auch der Drehimpuls ist gequantelt: $mvr = n\hbar = l$; mit der Nebenquantenzahl l .

Bohr'sches Korrespondenzprinzip:

Im Grenzfall $n \rightarrow \infty$ müssen die Aussagen der Quantentheorie mit denen der klassischen übereinstimmen.

Schrödinger-Gleichung (1D, zeitabhängig): $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + E_{pot}(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$.

zeitunabhängige Schrödingergleichung: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + E_{pot}(x) \varphi(x) = E_{ges} \varphi(x)$

Mit der Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ ist $|\varphi(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

Tunneleffekt: Transmissionsvermögen durch ein Rechteckpotential der Länge a und Höhe E_0 für ein Teilchen der Energie $E < E_0$: $T = \frac{1 - \frac{E}{E_0}}{(1 - \frac{E}{E_0}) + \frac{E_0}{4\pi} \sinh^2(\alpha a)}$, mit $\alpha = \frac{\sqrt{2m(E_0 - E)}}{\hbar}$.

Unendlich hoher Potentialtopf der Länge a : es ergibt sich über die zeitunabhängige Schrödingergleichung: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2$, wobei $n \in \mathbb{Z}_+ \setminus \{0\} \rightarrow$ Nullpunktenergie $\neq 0$.

Harmonischer Oszillator in Parabelpotential: $E_p = \frac{1}{2} D x^2$, über Schrödingergleichung: $E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$, $n \in \mathbb{Z}_+$.

Schrödinger in mehr als 1 Dimension: $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + E_P \psi = E \Psi$

2D in unendlichem Kastenpotential mit Seitenlängen a, b - 2 Quantenzahlen: $E(n_x, n_y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right)$
 \Rightarrow verschiedene Kombinationen können zum gleichen Energiewert führen (**Entartung!**).

3D - Wasserstoffatom: $\frac{1}{r}$ -Potential, reduzierte Masse $\mu \rightarrow \Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$;

mit den Quantenzahlen Radialteil: $n = 1, 2, 3, \dots$ Hauptquantenzahl
 Polarwinkelanteil: $l = 0, 1, \dots, n - 1$ Bahndrehimpuls
 Azimutteil: $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ magnetische Quantenzahl

(Historische) Benennung des Bahndrehimpulses l :

0	1	2	3	4
s	p	d	f	g

 (scharf, prinzipal, diffus, fundamental, alphabetisch weiter)

Energie: $E_n = \frac{-Z^2 E_0}{n^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ $\vec{B} || z$ -Richtung: $l_z = m_l \hbar$.

relativistische Korrektur: $E_{rel} = E_{nr} - \Delta E$

$$\Delta E_r = \frac{E_{nr} Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right), \text{ mit } \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ („Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante“),}$$

\Rightarrow Bei genauem Hinsehen doch nicht entartet! $E_{nr} = \frac{p^2}{2m_0} + E_P$.

normaler Zeeman-Effekt - Verhalten von in Atomen gebundenen Elektronen in äußerem Magnetfeld:

Halbklassisches Modell: gequantelter Drehimpuls $|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, klassische Bahnradien.

magnetisches Bahnmoment: $\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e}\vec{l} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{l}$,

potentielle Energie in äußerem Magnetfeld: $E_{pot} = \frac{\hbar e}{2m_e} m B$ (m - magn. Quantenzahl).

$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e}$ - Bohrsches Magneton

Für Wasserstoff $\Rightarrow E_{nlm} = E_{Coulomb}(n, l) + \mu_B m B$.

Dann spalten die Energien in $2l + 1$ äquidistante Zustände auf: $\Delta E = \mu_B B$.

Emission / Absorption: Photon trägt immer Drehimpuls $\pm\hbar$.

$\Rightarrow \Delta|\vec{l}| = \pm\hbar \Leftrightarrow$ Auswahlregel: $\Delta l = \pm 1$.

In Richtung des angelegten Magnetfeldes: $\Delta m = \pm 1$, normal dazu: $\Delta m = 0, \pm 1$.

Spin des Elektrons:

Der Spin \vec{s} mit $|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ und $s = \pm\frac{1}{2}$ einer weiteren Quantenzahl ist entweder parallel oder antiparallel zum

angelegten Magnetfeld; magnetisches Spinnmoment: $\vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s}$ mit dem Landé-Faktor g_s (≈ 2 für Elektron).

Spin-Bahn-Kopplung des Elektrons:

Die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt ein Magnetfeld (\leftarrow Strom), in dem sich das magnetische Moment des Spins des Elektrons befindet, Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \Rightarrow$ weitere Aufspaltung der Energien:

$$E_{nls} = E_n - \vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = E_n + \frac{a}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad , \text{ mit } a = \frac{\mu_0 Z e^2 \hbar^2}{8\pi m_e^2 r^3}.$$

Insgesamt liefert die Berücksichtigung der Feinstruktur: $E_{nlm} = E_{nr} \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \right]$.

\Rightarrow **anomaler Zeeman-Effekt** (z.B. bei Natrium).

Nomenklatur: $4D_{\frac{5}{2}}$, $n = 4, l = 2, j = \frac{5}{2}$.

Lamb-Verschiebung: Durch Emission und Reabsorption „virtueller Photonen“ führt das Elektron ein Zitterbewegung auf seiner Ellipsenbahn aus \rightarrow Verschiebung der Energien. (\rightarrow QED)

Hyperfeinstruktur:

Räumliche Ausdehnung des Kerns

\rightarrow Kernspin \vec{I} mit $|\vec{I}| = \sqrt{I(I+1)}\hbar$ und magnetisches Kernmoment $\vec{\mu}_I = g_I \frac{\mu_K}{\hbar} \vec{I}$

mit $\mu_K = \frac{e}{2m_{\text{Proton}}}\hbar \approx \frac{\mu_B}{1836}$ Kernmagneton, g_I Kern-Landé-Faktor.

Mit dem Gesamtdrehimpuls $\vec{F} = \vec{j} + \vec{I}$ ergibt sich:

$$E_{\text{Hyperfein}} = E_{nls} + \frac{A}{2} [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)] \quad , \text{ mit der Hyperfeinkonstante } A = \frac{g_I \mu_K B_{\text{int}}(j)}{\sqrt{j(j+1)}}.$$

Die analytische Berechnung von Atomen mit mehr Protonen und Elektronen ist dann zu kompliziert, da die Schrödingergleichung aufgrund der nicht mehr vorhandenen Kugelsymmetrie nicht entsprechend separiert werden kann.

Aber: Näherung mit Abschirmungswerten pro Elektron in Abhängigkeit von dessen Bahnradius möglich.

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems mit mehreren Elektronen ist immer antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung zweier Elektronen.

$$\Psi_{\text{Gesamt}} = \Psi_{\text{Atom}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{\text{Spin}}(s, m_s)$$

mit $\Psi_{\text{Atom}} = \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) + \Psi_1(\vec{r}_2) \Psi_2(\vec{r}_1)$ symmetrisch, Ψ_{Gesamt} antisymmetrisch, χ_{Spin} antisymmetrisch.

Pauli-Prinzip:

Ein durch die Quantenzahlen n, l, m_l, m_s charakterisierter Zustand kann höchstens von einem Elektron besetzt sein.

Schalenmodell:

Die Verteilung der Elektronen eines Atoms auf die verschiedenen Energiezustände (n, l, m_l, m_s) geschieht so, dass:

1. Das Pauli-Prinzip erfüllt ist.
2. Die Gesamtenergie aller Elektronen für den Zustand jedes Atoms minimal wird.

Pro Hauptquantenzahl n gibt es bis zu $2n^2$ Elektronen. Bezeichnung für Schalen bezüglich n :

1	2	3	4	5
K	L	M	N	O

Hund'sche Regel:

Im Grundzustand eines Atoms hat der Gesamtspin den größtmöglichen mit dem Pauliprinzip vereinbaren Wert.

Emission und Absorption von Licht - **Einsteinkoeffizienten** B_{ik}, B_{ki}, A_{ik} :

Atom im Zustand k befindet sich im Strahlungsfeld mit Energiedichte $w(\nu) = n(\nu) h \nu$ mit $n(\nu)$ der Zahl der Photonen im Frequenzintervall $\Delta\nu$:

- a) Wahrscheinlichkeit für Absorption von Photonen: $W_{k \rightarrow i} = B_{ki} w(\nu)$
- b) Wahrscheinlichkeit für induzierte Emission: $W_{i \rightarrow k} = B_{ik} w(\nu)$
- c) Wahrscheinlichkeit für spontane Emission: $W_{ik}^{\text{spontan}} = A_{ik}$

Im thermischen Gleichgewicht ergibt sich über die Boltzmann-Verteilung $\frac{N_i}{N_k} = \frac{g_i}{g_k} e^{-\frac{E_i - E_k}{k_B T}}$ (g_i, g_k sind die „statistischen Gewichte eines Zustands“ oder auch „der Grad der Entartung“) und mit dem Planck'schen Strahlungsgesetz:

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

Die Wahrscheinlichkeit für die induzierte Emission hängt über die mittlere Besetzungszahl $e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1$ einer Mode des Strahlungsfeldes mit der der spontanen zusammen:

$$W_{ik}^{\text{ind}} = W_{ik}^{\text{spontan}} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}.$$

Der **Erwartungswert** einer physikalischen Messgröße eines Teilchens ist der Mittelwert dieser Größe gebildet mit der Wellenfunktion des Teilchens:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx.$$

Auswahlregeln: 1. $\Delta l = \pm 1$

2. $\Delta s = 0$

3. $\Delta m = 0, \pm 1$

Bei spontaner Emission ergibt sich der Zeitverlauf der Anzahl von Elektronen im Zustand i : $N_i(t) = N_i(0) e^{-A_i t}$ mit $A_i = \sum_j A_{ij}$. Die mittlere Lebensdauer ist dann $\tau_i = \frac{1}{A_i}$ und aufgrund der Zeit-Energie-Unschärfe ergibt sich eine Linienbreite der ausgesandten Strahlung von: $\Delta\nu = \frac{A_i}{2\pi}$.

Röntgen-Strahlung („X-Rays“) besteht aus 2 Charakteristiken:

1. „Bremsstrahlung“ (im Coulombfeld der Atome) und
2. „charakteristische Röntgenstrahlung“ (durch Anheben und anschließendem Rückbesetzen von Elektronen in niedrigen Schalen (K- oder L-)).

Laser: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation .