

Physik IV - Formelsammlung

von Julian Merkert, Sommersemester 2006, Prof. Dormann

Grundlagen und frühe Atommodelle

Atome, Kern- und Elektronenradius

Bezeichnung: ${}^A_Z X$

- Z : Anzahl Protonen
- $A = N + Z$: Massenzahl
- Kernladung: $q_K = Z \cdot e$
- Kovolumen: $b = 4 \cdot N_A \cdot \frac{4\pi}{3} r^3$

Elektronenradius: $r_e = \frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot m_{e0} \cdot c^2} = 2,817 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ aus $W_{Coulomb} = m_{e0} c^2$

Kernradius:

- Tröpfchenmodell: $r_k = r_0 \cdot A^{\frac{1}{3}}$
 - $r_0 = (1,2\dots1,5) \cdot 10^{-15} \text{ m}$
 - A : Massenzahl
- Aus Rutherford-Streuung: $r_{min} = \frac{Z \cdot e^2}{2 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot W_{kin}}$

Rutherford-Streufornel

Rutherford-Streuung b-abhängig: $\cot \frac{\vartheta}{2} = \frac{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0}{Z \cdot e^2} \cdot W_{kin} \cdot b$

- ϑ : Streuwinkel
- b : Streuparameter (Abstand des eingeschossenen Teilchens vom Kern)
- Z : Kernladungszahl

Rutherford-Streufornel mit Zählrate: $\frac{n_{\geq \vartheta_0}}{n_0} = \frac{N}{V} \cdot d \cdot \pi \left(\frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot W_{kin}} \right)^2 \cot^2 \frac{\vartheta_0}{2}$

- $n_{\geq \vartheta_0}$: Zahl derer, die mehr als ϑ_0 gestreut werden
- d : Dicke des Metalls, an dem gestreut wird
- $\frac{N}{V}$: Kerne pro Volumeneinheit

Rutherford-Streufornel: $\dot{z}(\vartheta) = \frac{\dot{n}_0 \cdot \frac{N}{V} \cdot d \cdot (Z \cdot e^2)^2}{(8\pi \epsilon_0)^2 \cdot W_{kin}^2 \cdot r_D^2 \cdot \sin^4(\frac{\vartheta}{2})} \Delta A_D$

- $\dot{z}(\vartheta)$: Zählrate (Teilchen pro Sekunde, die unter dem Winkel ϑ detektiert werden)
- ΔA_D : Detektorfläche
- $\frac{N}{V}$, d wie oben
- r_D : Detektor-Radius, also Abstand der durchstrahlten Goldfolie zum Detektor
- \dot{n}_0 : Intensität des ursprünglichen Strahls in Teilchen pro Sekunde
- W_{kin} : Kinetische Energie der α -Teilchen

Bohr'sches Atommodell

Serienspektren des H-Atoms: $\bar{\nu} = R_H \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$

- $R_H = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{m_p}}$ mit $R_\infty = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1}$ Rydberg-Konstante
- $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$: Wellenzahl
- $m = 5$: Pfund-Serie, $m = 4$: Brackett-Serie, $m = 3$: Paschen-Serie, $m = 2$: Balmer-Serie, $m = 1$: Lyman-Serie

Radius der n-ten Bahn im Bohr'schen Atommodell: $r_n = n^2 \cdot \frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m_e \cdot e^2} = n^2 \cdot a_0$

- n heißt Hauptquantenzahl
- $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$ m: Bohr'scher Radius

Energie auf der n-ten Bahn im Bohr'schen Atommodell: $W_n = -\frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -h \cdot c \cdot R_\infty \cdot \frac{1}{n^2}$

- $h \cdot c \cdot R_\infty = 1 \text{ Ry} \approx 13,6 \text{ eV}$: 1 Rydberg

De Broglie-Wellenlänge: $\lambda = \frac{h}{p}$

Wasserstoffähnliche Zentren: $\bar{\nu} = \frac{R_\infty \cdot m_e}{1 + \frac{m_e}{m_k}} Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$

Schrödinger-Gleichung und Wasserstoffatom

Heisenberg'sche Unschärfe-Relation: $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$

Schrödinger'sche Wellenmechanik (allgemein)

- Atom = System stehender Materiewellen
- Wellengleichung: $\sim \Delta \Psi = \frac{1}{c_p^2} \ddot{\Psi}$
- Wellenfunktion: $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$
 - i.d.R. komplex \Rightarrow komplex konjugierte Ψ^*
- Stationäre Zustände: $\Psi = \Psi(x, y, z) \cdot e^{-i\omega t} = \Psi(x, y, z) \cdot e^{-i/\hbar E_n t}$
- Statistische Deutung:

$ \Psi ^2 = \Psi^* \Psi$	Wahrscheinlichkeitsdichte
$\Psi^* \Psi \cdot d\tau$	Aufenthaltswahrscheinlichkeit in $d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$ (in Kugelkoordinaten: $d\tau = dV = r^2 \sin \vartheta \, dr \, d\varphi \, d\vartheta$)
$\int \int \int \Psi^* \Psi \, d\tau = \int \int \int \Psi^* \Psi \, dx \, dy \, dz = 1$	Normierung
$\int \int \int \Psi_n^* \Psi_m \, d\tau = \delta_{nm}$	Orthonormiertheit
$\langle F(\vec{r}) \rangle = \int \int \int \Psi^* F(\vec{r}) \Psi \, d\tau$	Erwartungswert von $\overline{F(\vec{r})}$
z.B. $\langle \vec{r} \rangle = \int \int \int \Psi^* \vec{r} \Psi \, d\tau$	

- Übersetzungsschema:

Physikalische Größe	Differential-Operatoren
\vec{p}	$\frac{\hbar}{i} \cdot \text{grad} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$
p_x, p_z	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
$\frac{p^2}{2m} + V(r)$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \cdot \text{grad}$
L_z	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$
W_{ges}, H	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$

Schrödinger-Gleichung

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung: $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (V(\vec{r}) - E) \Psi = 0$

Lösen der Wellengleichung in Kugelkoordinaten:

- Magnetische Quantenzahl m folgt aus Eindeutigkeitsforderung
- Drehimpuls-Quantenzahl l folgt aus Stetigkeitsforderung
- Wir erhalten folgende Lösung:

Wellenfunktion: $\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$

- $R_{n,l}(r)$: radiale Wellenfunktion, $\int_0^\infty R_{n,l}^2(r) r^2 dr = 1$, $n - (l + 1)$ nichttriviale Nullstellen
- $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$: Kugelflächenfunktion, $\int_{\vartheta=0}^\pi \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1$
- $\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi_{n,l,m}^* \Psi_{n',l',m'} r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$
- Allgemeine und konkrete Formeln von R und Y siehe Vorlesungs-Skript
- Bestimmung von l, m, n aus der Wellenfunktion durch Vergleich: $e^{i \cdot m \cdot \varphi}, e^{\frac{Z \cdot r}{n \cdot a_0}}$

Quantenzahlen

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

- „Schale“: Gesamtheit alle Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl, bez. K, L, M, \dots
- Orbital: 1. Stelle wie Hauptquantenzahl, also 1?, 2?, 3?, ...

Drehimpulsquantenzahl $l: 0, 1, \dots, n - 1$

- Orbital: 2. Stelle entsprechend Drehimpulsquantenzahl, bez. mit folgenden Buchstaben: $?s, ?p, ?d, ?f, \dots$

Magnetische Quantenzahl / Richtungsquantenzahl $m_l: 0, \pm 1, \dots, \pm l$

Parität: $Y_{l,m}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l \cdot Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$

- $l = 0, 2, 4, \dots$: gerade Parität
- $l = 1, 3, 5, \dots$: ungerade Parität

Magnetisches Moment, Drehimpulse und Term aufspaltungen beim Eielektronenatom

	Bahndrehimpuls \vec{L}	Eigendrehimpuls / Spin \vec{S}	Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
Quantenzahl	$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$	$s = \frac{1}{2}$	$j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2}$
Richtungsquantenzahl	$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$	$m_s = \pm \frac{1}{2}$	$m_j = j, j - 1, \dots, -j$
EW des Betrags	$\langle \vec{L} \rangle = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$	$\langle \vec{S} \rangle = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$	$\langle \vec{J} \rangle = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$
EW in z-Richtung	$\langle L_z \rangle = m_l \cdot \hbar$	$\langle S_z \rangle = m_s \cdot \hbar$	$\langle J_z \rangle = m_j \cdot \hbar$
EW magn. Moment	$\langle \vec{\mu}_L \rangle = \sqrt{l(l+1)} \cdot \mu_B$	$\langle \vec{\mu}_S \rangle = 2 \cdot \sqrt{s(s+1)} \cdot \mu_B$	$\langle \vec{\mu}_J \rangle = g_J \cdot \sqrt{j(j+1)} \cdot \mu_B$
EW in z-Richtung	$\langle \mu_{L_z} \rangle = -m_l \cdot \mu_B$	$\langle \mu_{S_z} \rangle = -2 \cdot m_s \cdot \mu_B$	$\langle \mu_{J_z} \rangle = -g_J \cdot m_j \cdot \mu_B$
Magnetisches Moment	$\vec{\mu}_L = -1 \cdot \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{L}$	$\vec{\mu}_S = -2 \cdot \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{S}$	$\vec{\mu}_J = -g_J \cdot \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{J}$

EW = Erwartungswert

Bohr'sches Magneton: $\mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T} = 5,788 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{T}$

- μ_B ist das Verhältnis Magnetisches Moment $\vec{\mu}$ zu Drehimpuls
- Magnetische Moment und Drehimpuls sind antiparallel ausgerichtet
- $\langle |\vec{\mu}_L| \rangle = \sqrt{l(l+1)} \cdot \mu_B$
- $\langle \mu_{L_z} \rangle = -\frac{e}{2 \cdot m_e} \langle L_z \rangle = -m \cdot \mu_B$

Zeeman-Effekt (bei äußerem Magnetfeld):

- $\omega_L = \frac{e}{2m_e} \cdot B$: Larmor-Frequenz, Präzessions-Frequenz eines Kreisels (Normaler Zeeman-Effekt)
- $\langle W_{magn} \rangle = E_{Zeeman} = -\langle \mu_z \rangle \cdot B_z = +g_J \cdot m_j \cdot \mu_B \cdot B$
- Anomaler Zeeman-Effekt: Auswahlregeln: $\Delta m_j = 0, \pm 1$, Elektronen-Spin-Resonanz für $\Delta W = g \cdot \mu_B \cdot B_0 = h \cdot \nu_L$

Emittierte Frequenz: $\nu = \frac{\Delta W}{h}$

Landé- oder g-Faktor: $g_J = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2 \cdot j(j+1)}$

- Zusätzlicher Faktor, um magnetisches Moment $\vec{\mu}$ und Drehimpuls \vec{J} zu verknüpfen
- g-Faktor = Verhältnis von magnetischem Moment (in Bohr'schen Magnetonen) zum Drehimpuls

Spin-Bahn-Kopplung

- Wechselwirkung von Drehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S}
- Kopplungsenergie: $W_{LS} = \lambda(\vec{L}\vec{S})$
- λ : Spin-Bahn-Kopplungskonstante
- $\vec{L}\vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$

Spin-Bahn-Aufspaltung: $E_{LS} = \frac{\lambda \cdot \hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})$

Paschen-Back-Effekt: $\langle \mu_z \rangle = -(m_l + 2m_s) \cdot \mu_B$

- Auswahlregeln:
 - $\Delta m_l = 0, \pm 1$
 - $\Delta m_s = 0$
- Paschen-Back-Effekt: Starkes Magnetfeld \Rightarrow (Spin-Bahn-)Kopplung zwischen \vec{L} und \vec{S} aufgebrochen

Hyperfeinstruktur

	Kernspin \vec{I}	Gesamt-Drehimpuls $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$
Quantenzahl	I (tabelliert)	$F = I + J, I + J - 1, \dots, I - J $
Richtungsquantenzahl	$M_I = I, I - 1, \dots, -I$	$M_F = F, F - 1, \dots, -F$
EW des Betrags	$\langle \vec{I} \rangle = \sqrt{I(I+1)} \cdot \hbar$	$\langle \vec{F} \rangle = \sqrt{F(F+1)} \cdot \hbar$
EW in z-Richtung	$\langle I_z \rangle = M_I \cdot \hbar$	$\langle F_z \rangle = M_F \cdot \hbar$
EW magn. Moment in z-Richtung	$\langle \mu_{Iz} \rangle = +g_I \cdot M_I \cdot \mu_K$	

Kernmagnetisches Moment / Kern-Magneton: $\mu_K = \frac{m_e}{m_p} \cdot \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2 \cdot m_p}$

- g_I (Tabelle): Kern-g-Faktor

Hyperfein-Wechselwirkung: $W_{IJ} = W_{HF} = A (\vec{I} \vec{J})$

Mehrelektronenprobleme und Systematik des Atombaus

Pauli-Prinzip:

In einem Atom dürfen keine zwei Elektronen im selben Quantenzustand existieren

\Rightarrow zu jeder Hauptquantenzahl n existieren $2 \cdot n^2$ mögliche Energiezustände

\Rightarrow mindestens 1 Quantenzahl unterschiedlich

Nomenklatur:

Klassische Größen:		\vec{L}	\vec{S}	\vec{J}
Einzel-Elektronen: Drehimpulse		\vec{l}_i	\vec{s}_i	\vec{j}_i
Quantenzahlen		l_i	$s_i = \frac{1}{2}$	j_i
Richtungs-Quantenzahlen		m_{l_i}	m_{s_i}	m_{j_i}
Gesamt-Atom: Quantenzahlen		L	S	J
Richtungs-Quantenzahlen		M_L	M_S	M_J

L-S-Kopplung / Russel-Sounders-Kopplung

Für das Gesamt-Atom gilt bei L-S-Kopplung:

	Bahndrehimpuls $\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$	Spin $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$	Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
Quantenzahl	$L = \sum_{i=1}^N l_i, \sum_{i=1}^N l_i - 1, \dots,$ $ l_1 - l_2 - \dots - l_N \geq 0$ bei $l_1 \geq l_2 \geq l_3 \dots$	$S = \sum_{i=1}^N s_i, \sum s_i - 1, \dots, \geq 0$	$J = L + S, L + S - 1, \dots,$ $ L - S \geq 0$
Richtungsquantenzahl	$L_{max} = \sum m_{l_i}$	$S_{max} = \sum m_{s_i}$	
	$M_L = L, L - 1, \dots, -L$	$M_S = S, S - 1, \dots, -S$	$M_J = J, J - 1, \dots, -J$
EW des Betrags	-	-	$\langle \vec{J} \rangle = \sqrt{J(J+1)} \cdot \hbar$
EW in z-Richtung	-	-	$\langle J_z \rangle = M_J \cdot \hbar$
EW magn. Moment	-	-	$\langle \vec{\mu}_J \rangle = g_J \cdot \sqrt{J(J+1)} \cdot \mu_B$
EW in z-Richtung	-	-	$\langle \mu_{J_z} \rangle = -g_J \cdot M_J \cdot \mu_B$

- L-S-Kopplung $\Rightarrow \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
- Termsymbole: $^{2S+1}L^{\circ}_J$
 - $2S + 1$: Multiplizität = Anzahl der J-Werte eines Multipletts
 $2S + 1 = 1$ Singulett, $2S + 1 = 2$ Duplett, $2S + 1 = 3$ Triplett, ...
 - $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots \Rightarrow \text{„}L^{\circ} = S, P, D, F, G, H, I, K, \dots$

Landé-Faktor: $g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

Hund'sche Regeln

- (0) Voll aufgefüllte s,p,d,f-Unterschalen liefern stets $L = 0$ und $S = 0$ ($\rightarrow J = 0$)
 - (1) In einer abgeschlossenen s,p,d,f-Unterschale liegen die Terme mit maximalem S (d.h. höchste Multiplizität) am tiefsten ($\rightarrow S_{gr} = S_{max}$)
 - (2) Von den Termen mit maximalem S liegen die Terme mit maximalem (damit verträglichem) L am tiefsten ($\rightarrow L_{gr} = L_{max}(S_{max})$)
 - (3) Ist die s,p,d,f-Unterschale weniger als halb gefüllt, bildet der Term $J = |L - S|$ den Grundzustand, ist sie mehr als halb gefüllt, der Term $J = L + S$
- Grundzustand: $^{2S+1}L^{\circ}_J$
 - entscheidend für alle Anregungsprozesse
 - bestimmt magnetisches Verhalten, auch für Ionen im Festkörper

Larmorpräzession: $\omega_L = \frac{g_J \cdot \mu_B}{\hbar} \cdot B$

Strahlungsprozesse

Elektrische / Magnetische Dipolstrahlung

Typ	Parität	Auswahlregel ΔJ	Auswahlregel ΔM_J
Elektrische Dipolstrahlung (E1)	u / -1	0, ± 1 , <i>nicht</i> $0 \rightarrow 0$	0, ± 1 , <i>El. Dip.</i> , $\perp B$
Magnetische Dipolstrahlung (M1)	g / +1	0, ± 1 , <i>nicht</i> $0 \rightarrow 0$	0, ± 1 , <i>Magn. Dip.</i> , $\perp B$
Elektrische Quadropolstrahlung (E2)	g / +1	0, ± 1 , ± 2 , <i>nicht</i> $0 \rightarrow 0$	0, ± 1 , ± 2

Einelektronenatome:

- $\Delta j = \pm 1, 0$
- $\Delta l = \pm 1$
- $\Delta s = 0$

Mehrelektronenatome:

- $\Delta J = \pm 1, 0$, nicht $J = 0 \rightarrow J = 0$
- $\Delta L = \pm 1, 0$
- $\Delta S = 0$ Interkombinationsverbot

j-j-Kopplung:

- $\Delta J = \pm 1, 0$, nicht $J = 0 \rightarrow J = 0$
- $\Delta j = \pm 1, 0$

Hyperfeinstruktur:

- $\Delta F = \pm 1, 0$ außer $0 \leftrightarrow 0$
- $\Delta J = \pm 1, 0$ außer $0 \leftrightarrow 0$
- $\Delta I = 0$

Atome im äußeren Magnetfeld:

- Zeeman-Effekt: $\Delta M_J = \begin{Bmatrix} 0 & \pi \\ \pm 1 & \sigma \end{Bmatrix} - \text{Komponente}$
- Paschen-Back-Effekt: $\Delta M_L = \begin{Bmatrix} 0 & \pi \\ \pm 1 & \sigma \end{Bmatrix} - \text{Komponente}$
 $\Delta M_S = 0$ „strahlungslos“
- π : parallel zum Magnetfeld (linear) polarisiert
- σ : senkrecht zum Magnetfeld polarisiert \Rightarrow zirkular polarisiert

Atome im elektrischen Feld

- linearer Stark-Effekt: $W_{el} = -\vec{p}_{el} \cdot \vec{E}$
 - \vec{p}_{el} : elektrisches Dipolmoment
 - nur H-Atom verhält sich so
- nichtlinearer Stark-Effekt: $\vec{p}_{ind,z} = \varepsilon_0 \cdot \alpha \cdot \vec{E}$
 - α : Polarisierbarkeit
 - Alle anderen Atome: $\vec{p}_{el} = \int \int \int \vec{r} |\Psi|^2 d\tau$
- Quadratischer Stark-Effekt
 - Auswahlregeln: $\Delta M_J = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & \pi \\ \pm 1 & \sigma \end{array} \right\}$ – *Komponente*

Absorption, Emission und thermisches Gleichgewicht

Mittlere Lebensdauer / Abklingzeit τ : $\frac{1}{\tau} = A_n = \sum_{m=1}^{n-1} A_{nm}$

- $A_{nm} = -\frac{1}{N_n} \frac{dN_n^{(m)}}{dt}$: Übergangswahrscheinlichkeit von n zu m

Natürliche Linienbreite: $\Delta W_{\frac{1}{2}} = 2\pi \Delta\nu_{\frac{1}{2}} = \Gamma = \frac{1}{\tau}$

Unschärfe-Relation: $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$

Boltzmann-Statistik für Besetzungszahlen des atomaren Niveaus: $\frac{N_n}{N_m} = \frac{f_n}{f_m} \cdot e^{-\frac{h \cdot \nu_{nm}}{k_B \cdot T}}$

Planck'sches Strahlungsgesetz: $u(\nu_{nm}) = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu_{nm}^2}{c^3} \cdot \frac{h \cdot \nu_{nm}}{e^{\frac{h \cdot \nu_{nm}}{k_B \cdot T}} - 1}$

- c : Anzahl
- $\frac{h \cdot \nu_{nm}}{k_B \cdot T}$: Besetzungszahl der Eigenschwingung
- $h \cdot \nu_{nm}$ (Zähler): Energie der Eigenschwingung

Doppler-Verbreiterung / Gauß-Profil: $I(\nu) = I_0 \cdot \exp \left\{ -\frac{m \cdot c^2}{2 \cdot k_B \cdot T} \left(\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} \right)^2 \right\}$

Röntgenstrahlung

Bremsstrahlspektrum: $\lambda_{min} \cdot U_0 = \frac{h \cdot c}{e} = const$

Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz: $\nu_0 = \frac{e}{h} \cdot U_0$

Absorption und Emission:

- Kontinuum: $h \cdot \nu_{Abs} = h \cdot \nu_{Kante} + W_{kin}$
- Linien, Feinstruktur: $h \cdot \nu_{K\alpha} = |E_K| - |E_L|$
- Auswahlregeln: $\Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1$

Abschirmung / Moseleysches Gesetz: $E_n^{(1)} = (-)h \cdot c \cdot R_\infty \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2}$

- σ : Abschirmkonstante, $\sigma_K = 1, \sigma_L = 9$ (K- und L-Kante)

Anger-Elektronen-Emission: $W_{Kin} = (E'_K - 2E'_L)$

Compton-Effekt

- $\Delta\nu = \nu - \nu' = \frac{h}{m_{e,0} \cdot c^2} \nu \cdot \nu' (1 - \cos \vartheta)$
- $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c \cdot (1 - \cos \vartheta)$
- $\lambda_c = \frac{h}{m_{e,0} \cdot c^2} = 2,426 \cdot 10^{-12}$ m: Compton-Wellenlänge

Moleküle

Bindungstyp	ionisch	kovalent	van der Waals
Name	Ionen-Moleküle	Atom-Moleküle	van der Waals-Moleküle
Beispiele	NaCl, CsBr	CO, NO, H_2 , N_2	Hg_2 , HgAr
Allgemein	$A^{W^+}B^{W^-}$, $A \neq B$	homonuklear AA heteronuklear AB	AA AB
Dielektrisches Verhalten	stark polar, $p_{A^+B^-} \neq 0$	$p_{AB} \neq 0$ polar $p_{AA} = 0$ unpolar	unpolar
Dissoziation aus Grundzustand	Ionen	neutrale Atome	neutrale Atome
Charakteristik	fest, flüssig, wässrige Lösung: weitgehend in Ionen dissoziiert	gasförmig und flüssig gleiche Struktur	sehr schwach gebunden
Bindungsmechanismus	elektrostatische Anziehung zwischen Ionen	Platzwechsel (Austausch) von Elektronenpaaren	Multipolkräfte (el. Dipol- Dipol-, el. Dipol-Quadrup.)

Potentialkurven: $W_{ges}^{Molekl} = W_{kin}^{Kerne} + W_{kin}^{Elektronen} + W_{pot}^{Molekuele}$

- ionisch: erweitertes Born-Mayer-Potential $W_{ges}^{el}(r) = -\frac{(W)^2 \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} + \beta \cdot e^{-\frac{r}{\rho}} - \frac{d}{r^6}$
- kovalent: Morse-Potential $W_{ges}^{el}(r) = D \left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)^2$
- van-der-Waals-Bindung: $W_{ges}^{el}(r) = -\frac{C_{DD}}{r^6} + \beta \cdot e^{-\frac{r}{\rho}}$

Federkonstante: $k_e = \left(\frac{d^2W}{dr^2}\right) |_{r=r_e}$

Gleichgewichtsabstand = Potenzialminimum r_e : $\left(\frac{dW}{dr}\right) |_{r=r_e} = 0$

Dissoziationsenergie: $D_e = W(r \rightarrow \infty) - W(r_e)$

Schwingungsfrequenz: $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_e}{m}}$