

Molekül- und Festkörperphysik (Bachelor)
Fortgeschr. Exp.-Physik LA Teil II (Lehramt)

Übersicht über die behandelten Themen

Molekülphysik

1. Quantenmechanische Grundlagen

- Schrödinger-Gleichung und Lösungsmethoden
- Variationsverfahren für Wellenfunktionen
- Atomare Einheiten
- Überlappintegrale
- Helium Atom und Symmetrie, Spinfunktionen, Singlet/Triplet
- Zweizentrenintegrale
- Kopplung an das Elektromagnetische Feld (quantenmechanisch)

2. Chemische Bindung in Molekülen

- H_2^+ : Molekülorbitalmethode
- H_2^+ : Numerische Berechnung des Grundzustandes
- H_2 -Molekül
- Heitler-London-Methode
- Hund-Mulliken-Methode

3. Molekülrotationen

- Born-Oppenheimer-Näherung
- Starre Rotation, quantenmechanische Behandlung
- Nichtstarre Rotation, Zentrifugalaufweitung, Effektives Potential
- Auswahlregeln quantitativ
- Quantitative Rotationsspektren ausgewählter Moleküle

4. Schwingungen, Schwingungsspektroskopie

- Quantenmechanische Behandlung der Schwingungen
- numerische Berechnung der Schwingungswellenfunktionen
- Model Potentiale: Morsepotential
- Reale Potentiale, numerische Lösung der Schwingungsschrödingergleichung
- Schwingungs-Rotationsspektren
- Infrarot-Spektren, Auswahlregeln, Fortrat-Diagramme
- Kernspin und Kernspineinflüsse auf die Rotation
- CO_2 -Laser, Arbeitsweise, Fermi-Resonanz

5. Raman-Spektroskopie

- Raman-Effekt, quantenmechanische Behandlung
- Raman Spektroskopie
- Analyse des O_2 -Raman Spektrums

6. Elektronische Anregung und elektronische Spektren

Elektronisch angeregte Zustände
Elektronische Übergänge bei Molekülen
Franck-Condon Prinzip und Franck-Condon-Faktoren
Photoemission an Molekülen

7. Kernmagnetische Resonanz in der Molekülphysik
Einführung in die NMR Methoden
Einführung in die Puls-NMR (FFT-Methoden)

Festkörperphysik

8. Kristallstrukturen und Strukturanalyse
Einführung in die wichtigsten Kristallstrukturen
Graphene als Beispiel eines 2-D Kristalls
Gitter und Basis
Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Beugungssonden
(Röntgen, Elektronen, Neutronen, Atome)
Einführung in Beugungsmethoden
Bragg'sche Formulierung der Beugung
Laue'sche Formulierung der Beugung
Elektronendichte auf einer Linie, 1-D "Kristall"
Zweidimensionale Beugung
LEED auf einer [111]-Fläche
9. Elektronische Struktur von Festkörpern
Bloch-Theorem, Bloch-Funktionen
k-p Modell, effektive Massen
QM-Störungstheorie am Beispiel der k-p Methode
Numerische Lösung des SE für 1-dim Probleme
Periodisches Potential 1, Entwicklung von Bandlücken
Periodisches Potential 2, Entwicklung von weiteren Bandlücken
Bandstruktur Aluminium, Kupfer und Germanium
NFE-Modell, Elektrochemisches Potential, Fermi-Dirac Verteilung
Zustanddichten von Metallen
Drude Modell der elektrischen Leitfähigkeit, Temperaturverhalten
Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit, Restwiderstand
Transport: Boltzmann-Gleichung
Wärmekapazität der Leitungselektronen, Sommerfeldmodell
10. Halbleiter
Bandstrukturen realer Halbleiter, GaAs, Si, Ge
Effektive Massen in Halbleitern, Zustanddichten
Zyklotron-Resonanz
Hall-Effekt, Magnetotransport
Intrinsische Halbleiter: Lage des elektrochemischen Potentials
11. Bandstrukturen und Messmethoden
Visualisierung von Bloch-Wellen im 1D
Photoemission, winkelaufgelöste Photoemission
Modell der starken Bindungen (Tight-Binding-Methode)

Farbkodierung der Phasen von s- und π -Elektronen
Spin-Bahn-Kopplung in Festkörpern

12. Gitterschwingungen und Phononen

Einführung in die Dynamik des Kristallgitters
Klassische Beschreibung der Gitterschwingungen
Einführung in die quantenmechanische Behandlung: Phononenkonzept
Dispersionsrelation für akustische Phononen
Berechnung eindimensionaler akustischer Phononen
Optische Phononen
Experimentelle Methoden zur Messung von Phononen

13. Thermische Eigenschaften von Festkörpern

Spezifische Wärmen
Einstein-Modell und Debye-Modell der spezifischen Wärmen
Zustandsdichten der Phononen, Bose-Einstein Verteilung
Thermische Leitfähigkeit, Phonon-Phono-Wechselwirkung

Die Vorlesung hat verstärkt Wert auf die quantitative Berechnung der quantenmechanischen Lösungen mit Hilfe numerischer Verfahren (MATLAB) gelegt. Dadurch konnten z.B. realistische Lösungen zur Molekülbindung gewonnen werden. Im Bereich der Rotationen und Schwingungen wurden die Lösungen (Eigenwerte und Eigenfunktionen) zu realen Potentialkurven (und nicht nur zu Modellpotentialen) bestimmt.

Als Lehrbücher wurden empfohlen:

Molekülphysik: Peter Atkins, Ronald Friedman, Molecular Quantum Mechanics
Demtröder: Molekülphysik

Festkörperphysik: R. Gross/ A. Marx, Festkörperphysik

Ein umfangreiches Skript des gesamten Vorlesungsstoffes stand den Studierenden on-line zur Verfügung: http://www.pi2.uni-stuttgart.de/official/g.denninger/EXP_V_WS16/ws_16.html

Es wurden 12 Übungsblätter jeweils wöchentlich schriftlich bearbeitet und in Übungsgruppen behandelt.