

Struktur der Materie: Grundlagen, Mikroskopie und Spektroskopie

Von Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang Göpel
und Dr. rer. nat. Christiane Ziegler
Universität Tübingen



B. G. Teubner Verlagsgesellschaft
Stuttgart · Leipzig 1994

Inhalt

	Symbolverzeichnis	12
1	Aufbau der Materie im Überblick	19
1.1	Atomarer Aufbau und Energiequantelung	19
1.2	Teilchen-Welle-Dualismus	25
1.3	Temperatur	26
1.4	Bindungen zwischen Atomen und Molekülen	28
1.5	Aggregatzustände und Grenzflächen	31
1.6	Auswahl und Gliederung des folgenden Stoffs	34
2	Quantenmechanik und Aufbau der Materie	39
2.1	Grenzen der klassischen Physik	41
2.1.1	Teilchen-Welle-Dualismus	42
2.1.2	Atombau	55
2.1.3	Eigenschaften von Elementarteilchen	59
2.2	Einfache Lösungen der Schrödingergleichung	61
2.2.1	Freies Teilchen	61
2.2.2	Teilchen im Kasten	62
2.2.3	Endliche Potentialbarrieren: Tunneleffekt	66
2.2.4	Zweiatomiger harmonischer Oszillator	69
2.2.5	Zweiatomiger starrer Rotator	73
2.2.6	Wasserstoffatome und verwandte Ionen	75
2.2.7	Korrespondenzprinzip	80
2.3	Atome	82
2.3.1	Näherungsmethoden zur Berechnung von Atomzuständen	82
2.3.2	Spins und magnetische Eigenschaften von Atomen	87
2.4	Einfache Moleküle	104
2.4.1	Näherungsmethoden zur Berechnung einfacher Molekülstrukturen	104
2.4.2	Zweiatomige Moleküle	120
2.4.3	Polyatomare Moleküle	128
2.4.4	Dynamische Molekülstrukturen	132

2.5	Klassische und halbklassische Verfahren zur Berechnung von großen Molekülen, intermolekularen Wechselwirkungen und Aggregatzuständen	139
2.5.1	Intermolekulare Wechselwirkungen	139
2.5.2	Kraftfeldrechnungen	147
2.5.3	Ordnung in Raum und Zeit	149
2.6	Festkörper und Oberflächen	153
2.6.1	Geometrische Struktur: reales und reziprokes Gitter	153
2.6.2	Näherungsmethoden zur Berechnung von Festkörperstrukturen	165
2.6.3	Elektronische Struktur von Festkörpern	179
2.6.4	Elektronische Struktur von Oberflächen	193
2.6.5	Dynamische Struktur und Phononen	224
2.6.6	Allgemeine Quasiteilchen in Festkörpern	228
2.7	Quantenzustände und thermische Eigenschaften: das Konzept der statistischen Thermodynamik	238
3	Charakterisierung durch Mikroskopie und Spektroskopie	244
3.1	Wechselwirkungsprozesse im Überblick	244
3.1.1	Streuung	245
3.1.2	Absorption und Emission elektromagnetischer Strahlung (Übersicht)	254
3.2	Versuchsanordnungen im Überblick	278
3.2.1	Prinzipieller Spektrometeraufbau	278
3.2.2	Typische Quellen	280
3.2.3	Typische Monochromatoren und Filter	285
3.2.4	Typische Detektoren	292
3.2.5	Oberflächenempfindliche Untersuchungen	295
3.3	Geometrische Struktur	299
3.3.1	Direkte Abbildung	300
3.3.2	Rastermethoden	304
3.3.3	Beugungsmethoden	320
3.3.4	Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAS) für die Strukturbestimmung: EXAFS	337
3.4	Chemische Zusammensetzung	345
3.4.1	Massenspektrometrische Methoden	347
3.4.2	Streuexperimente mit Ionen (ISS, RBS)	363
3.4.3	Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS)	370
3.4.4	Augerelektronenspektroskopie (AES), Elektronenstrahl-Mikroanalyse (EDX, WDX) und Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) .	383

10 Inhalt

3.5	Elektronische und dynamische Struktur	391
3.5.1	Mikrowellenspektroskopie	392
3.5.2	Infrarotspektroskopie	402
3.5.3	Ramanspektroskopie	418
3.5.4	Spektroskopie im optischen Bereich	430
3.5.5	UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS)	457
3.5.6	Inverse Photoemissionsspektroskopie (IPE)	474
3.5.7	Elektronenenergieverlustspektroskopie (ELS)	476
3.5.8	Spezielle Methoden zur Bestimmung der Austrittsarbeit	480
3.5.9	Mößbauerspektroskopie	482
3.6	Magnetische Struktur	489
3.6.1	Übersicht magnetischer Energien ohne und mit externem Magnetfeld	489
3.6.2	Kernresonanzspektroskopie (NMR)	491
3.6.3	Elektronenspinresonanzspektroskopie (ESR)	527
4	Literatur	533
5	Anhang	544
5.1	Mathematik	544
5.1.1	Skalare	544
5.1.2	Vektoren	545
5.1.3	Matrizen, Tensoren und Eigenwerte	548
5.1.4	Vektoranalysis	550
5.1.5	Komplexe Zahlen und Funktionen	552
5.1.6	Taylorreihen	554
5.1.7	Fourieranalysen	554
5.2	Physik	557
5.2.1	Mechanik	557
5.2.2	Elektrizität und Magnetismus	564
5.3	Schrödingergleichung	579
5.3.1	Formaler Zusammenhang zwischen klassischer Wellenglei- chung und Schrödingergleichung	579
5.3.2	Begriffe und Definitionen der Quantenmechanik	582
5.4	Ausgewählte Probleme aus der Spektroskopie	589
5.4.1	Übergangsmoment	589
5.4.2	Symmetrie	592
5.4.3	Normalkoordinatenanalyse	610
5.4.4	Analyse hochaufgelöster NMR-Spektren	616

5.5	Tabellen	623
5.5.1	Physikalische Größen im SI-System	623
5.5.2	Physikalische Konstanten im SI-System	625
5.5.3	Dezimale Vielfache und Teile von Einheiten	626
5.5.4	Druckdimensionen — Umrechnungsfaktoren	627
5.5.5	Kraftdimensionen — Umrechnungsfaktoren	627
5.5.6	Ladungsdimensionen — Umrechnungsfaktoren	627
5.5.7	Energiedimensionen — Umrechnungsfaktoren	628
5.5.8	Die Funktionen kT und RT in Abhängigkeit von der Temperatur	629
5.5.9	Gebräuchliche Untersuchungsmethoden, Erklärung von Abkürzungen	630
5.5.10	Bindungsenergien und Wirkungsquerschnitte für die Röntgen- photoemission	633
5.5.11	Augerelektronenenergien	636
5.5.12	Charakterentafeln	637
5.5.13	Korrelationstabellen	644
5.5.14	Periodensystem der Elemente	645
	Sachverzeichnis	649