

Formelsammlung

Matthias Quintern

17. Februar 2025

Inhaltsverzeichnis

I	Mathematik	1
1	Lineare Algebra	1
1.1	Matrizen Basics	1
1.1.1	Transponierte Matrix	1
1.2	Determinante	1
1.3	Misc	2
1.4	Eigenwerte	2
2	Geometrie	3
2.1	Trigonometrie	3
2.2	Verschiedene Theoreme	3
2.2.1	Wertetabelle	4
3	Analysis	4
3.1	Fourieranalyse	4
3.1.1	Fourierreihe	4
3.1.2	Fouriertransformation	5
3.1.3	Faltung / Konvolution	5
3.2	Verschiedenes	5
3.3	Logarithmus	6
3.4	Vektor Analysis	6
3.4.1	Kugelsymmetrie	6
3.5	Integralrechnung	7
3.5.1	Liste nützlicher Integrale	7
4	Wahrscheinlichkeitstheorie	8
4.1	Verteilungen	9
4.1.1	Kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilungen	9
4.1.2	Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen	12
4.2	Zentraler Grenzwertsatz	12
4.3	Fehlerfortpflanzung	13
4.4	Maximum likelihood Methode	13
4.5	Bayessche Wahrscheinlichkeitstheorie	13
II	Mechanik	15
5	Newton	15
6	Verschiedenes	15

7 Lagrange Formalismus	15
III Statistische Mechanik	16
8 Entropie	16
IV Thermodynamik	17
9 Prozesse	17
9.1 Irreversible Gasexpansion (Gay-Lussac-Versuch)	17
10 Phasenübergänge	17
10.0.1 Osmose	18
10.1 Materialeigenschaften	18
11 Hauptsätze der Thermodynamik	19
11.1 Nullter Hauptsatz	19
11.2 Erster Hauptsatz	19
11.3 Zweiter Hauptsatz	19
11.4 Dritter Hauptsatz	19
12 Ensembles	20
12.1 Potentiale	21
13 Ideales Gas	22
13.0.1 Molekülgas	22
14 Reales Gas	23
14.1 Virialentwicklung	23
14.2 Van der Waals Gleichung	24
15 Ideales Quantengas	24
15.1 Bosonen	26
15.2 Fermionen	26
15.2.1 Starke Entartung	27
V Elektrodynamik	28
16 Elektrisches Feld	28
17 Magnetfeld	29
17.1 Magnetische Materialien	30
18 Elektromagnetismus	31
18.1 Maxwell-Gleichungen	32
18.1.1 Eichungen	32
18.2 Induktion	32
19 Optik	32
20 Hall-Effekt	34
20.1 Klassischer Hall-Effekt	34
20.2 Ganzzahliger Quantenhalleffekt	34

21 Dipol-zeug	35
22 misc	35
VI Quantenmechanik	36
23 Basics	36
23.1 Operatoren	36
23.1.1 Messung	36
23.1.2 Pauli-Matrizen	36
23.2 Wahrscheinlichkeitstheorie	37
23.3 Kommutator	37
24 Schrödingergleichung	37
24.1 Zeitentwicklung	38
24.1.1 Schrödinger- und Heisenberg-Bild	38
24.1.2 Ehrenfest-Theorem	39
25 Störungstheorie	39
26 Harmonischer Oszillator	40
26.1 Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren / Leiteroperatoren	40
26.1.1 Harmonic Oscillator	41
27 Drehmoment	41
27.1 Aharanov-Bohm Effekt	41
28 Periodische Potentiale	41
29 Symmetrien	41
29.1 Zeitumkehrungssymmetrie	42
30 Zwei-Niveau System (TLS)	42
31 Sonstiges	42
32 Wasserstoffatom	42
32.1 Korrekturen	44
32.1.1 Darwin-Term	44
32.1.2 Spin-Bahn-Kopplung (LS-Kopplung)	44
32.1.3 Feinstruktur	44
32.1.4 Lamb-Shift	44
32.1.5 Hyperfeinstruktur	45
32.2 Effekte im Magnetfeld	45
32.3 Sonstiges	45
VII Festkörperphysik	46
33 Gitterschwingungen	46
33.1 Debye-Modell	47

34 Kristalle	47
34.1 Bravais-Gitter	48
34.2 Reziprokes Gitter	50
34.3 Streuprozesse	50
34.4 Gitter	51
35 Freies Elektronengase	51
35.1 2D Elektronengas	52
35.2 1D Elektronengas / Quantendraht	52
35.3 0D Elektronengase / Quantenpunkt	52
36 Ladungstransport	52
36.1 Drude-Modell	52
36.2 Sommerfeld-Modell	53
36.3 Boltzmann-Transport	53
36.4 misc	53
37 Supraleitung	54
37.1 London-Gleichungen	54
37.2 Ginzburg-Landau Theorie (GLAG)	54
37.3 Mikroskopische Theorie	55
37.3.1 BCS-Theorie	55
38 Halbleiter	56
38.1 Bauelemente und Kontakte	56
38.2 Exzitons	58
39 Bändermodell	58
39.1 Hybridorbitale	58
40 Diffusion	58
41 misc	59
42 Messtechniken	59
42.1 Raman Spektroskopie	60
42.2 ARPES	60
42.3 Rastersondenmikroskopie (SPM)	60
43 Herstellungsmethoden	61
43.1 Epitaxie	61
44 Topologische Materialien	62
44.1 Berry-Phase / Geometrische Phase	62
45 Materialphysik	63
VIII Teilchenphysik	64
IX Quantencomputing	65
46 Qubits	65
47 Gates	65

48 Supraleitende qubits	65
48.1 Bauelemente	65
48.1.1 Josephson-Kontakt	65
48.1.2 SQUID	66
48.2 TODO	66
48.3 Cooper Paar Box (QPB) Qubit	67
48.4 Transmon Qubit	67
48.4.1 Tunable Transmon Qubit	68
48.5 Phase Qubit	68
48.6 Flux Qubit	68
48.7 Fluxonium Qubit	69
49 Zwei-Niveau System	69
49.1 Ramsey Interferometrie	70
50 Noise und Dekohärenz	70
X Computergestützte Physik	71
51 Quanten-Vielteilchenphysik	71
51.1 Quanten-Vielteilchenmodelle	71
51.2 Methoden	71
51.2.1 Quantum Monte-Carlo	71
51.3 Importance sampling / Stichprobenentnahme nach Wichtigkeit	71
51.4 Matrix Produktzustände	71
52 Electronic structure theory	71
52.1 Modell der stark gebundenen Elektronen / Tight-binding	71
52.2 Dichtefunktionaltheorie (DFT)	72
52.2.1 Hartree-Fock	72
52.2.2 Hohenberg-Kohn Theoreme	72
52.2.3 Kohn-Sham DFT	73
52.2.4 Exchange-Correlation Funktionale	73
52.2.5 Basis-Sets	74
52.2.6 Pseudopotentialmethode	75
53 Atomic dynamics	75
53.1 Born-Oppenheimer Näherung	75
53.2 Strukturoptimierung	76
53.3 Gitterschwingungen	77
53.3.1 Finite difference method	77
53.3.2 Anharmonische Ansätze	77
53.4 Molekulardynamik	78
53.4.1 Ab-initio molecular dynamics	78
53.4.2 Force-field MD	78
53.4.3 Integration schemes	79
53.4.4 Thermostate und Barostate	79
53.4.5 Berechnung von Observablen	80
54 Maschinelles Lernen	80
54.1 Metriken zur Leistungsmessung	80
54.2 Regression	80
54.2.1 Lineare Regression	80
54.2.2 Ridge Regression	81

54.3 Gradientenverfahren	81
XI Chemie	82
55 Periodensystem	82
56 Elektrochemie	82
56.1 Elektrochemische Zelle	83
56.2 Ionische Leitung in Elektrolyten	84
56.3 Kinetik	86
56.3.1 Massentransport	87
56.4 Techniken	89
56.4.1 Referenzelektroden	89
56.4.2 Zyklische Voltammetrie	90
56.4.3 Rotating disk electrodes	90
57 Thermoelektrizität	91
58 misc	91
XII Anhang	93
59 Physikalische Größen	93
59.1 SI-Basisgrößen	93
59.2 Mechanik	93
59.3 Thermodynamik	94
59.4 Elektrodynamik	94
59.5 Sonstige	94
60 Konstanten	95
61 Liste der Elemente	95

Teil I

Mathematik

1 Lineare Algebra

1.1 Matrizen Basics

Matrix-Matrix Produkt als
Summe

$$C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \quad (1)$$

Matrix-Vektor Produkt als
Summe

$$\vec{c}_i = \sum_j A_{ij} \vec{b}_j \quad (2)$$

Symmetrische matrix

$$A^T = A \quad (3)$$

A $n \times n$ matrix

Unitäre Matrix

$$U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (4)$$

1.1.1 Transponierte Matrix

Summe

$$(A + B)^T = A^T + B^T \quad (5)$$

Produkt

$$(AB)^T = B^T A^T \quad (6)$$

Inverse

$$(A^{-1})^T = (A^T)^{-1} \quad (7)$$

Exponential

$$\exp(A^T) = (\exp A)^T \quad (8)$$

$$\ln(A^T) = (\ln A)^T \quad (9)$$

1.2 Determinante

2x2 Matrix

$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = ad - cb \quad (10)$$

3x3 Matrix (Regel von
Sarrus)

$$\det \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = aei + bfg + cdh - gec - hfa - idb \quad (11)$$

Leibniz-Formel

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \left(\text{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{i,\sigma(i)} \right) \quad (12)$$

Produkt

$$\det(AB) = \det(A) \det(B) \quad (13)$$

Inverse	$\det(A^{-1}) = \det(A)^{-1} \quad (14)$
---------	--

Transponiert	$\det(A^T) = \det(A) \quad (15)$
--------------	----------------------------------

1.3 Misc

Normal equation Solves a linear regression problem	$\underline{\theta} = (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \underline{X}^T \underline{\bar{y}} \quad (16)$ $\underline{\theta}$ hypothesis / weight matrix, \underline{X} design matrix, $\underline{\bar{y}}$ output vector
---	---

Inverse 2×2 Matrix	$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \quad (17)$
-----------------------------	---

Singulärwertzerlegung Faktorisierung einer reellen oder komplexen Matrix durch Rotation \rightarrow Skalierung \rightarrow Rotation.	$A = U \Lambda V \quad (18)$ A : $m \times n$ matrix, U : $m \times m$ unitary matrix, Λ : $m \times n$ rectangular diagonal matrix with non-negative numbers on the diagonal, V : $n \times n$ unitary matrix
---	---

2D Rotationsmatrix	$R = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (19)$
--------------------	--

3D Rotationsmatrizen	$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (20)$
----------------------	---

$$R_y = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$R_z = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Eigenschaften von Rotationsmatrizen	$R^T = R^{-1} \quad (23)$
	$\det R = 1 \quad (24)$
	$R \in \text{SO}(n) \quad (25)$
n Dimension, $\text{SO}(n)$ spezielle orthogonale Gruppe	

1.4 Eigenwerte

Eigenwert-Gleichung	$Av = \lambda v \quad (26)$ λ Eigenwert, v Eigenvektor
---------------------	---

Charakteristisches Polynom Nullstellen sind die Eigenwerte von A	$\chi_A = \det(A - \lambda \mathbb{1}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (27)$
Kramers-Theorem Wenn H invariant unter T ist und $ \psi\rangle$ ein Eigenzustand von H ist, dann ist $T \psi\rangle$ auch ein Eigenzustand von H	$THT^\dagger = H \quad \wedge \quad H \psi\rangle = E \psi\rangle \quad \Rightarrow \quad HT \psi\rangle = ET \psi\rangle \quad (28)$
Eigenwertzerlegung	$A = V\Lambda V^{-1} \quad (29)$ A diagonalisierbar, Spalten von V sind die Eigenvektoren v_i , Λ Diagonalmatrix mit Eigenwerten λ_i auf der Diagonalen
TODO: Jordan stuff, blockdiagonal matrices, permutations, skalar product lapacescher entwick- lungssatz maybe, cramers rule	
<h2>2 Geometrie</h2>	
<h3>2.1 Trigonometrie</h3>	
Exponentialfunktion	$\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad (30)$
Sinus	$\sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{(2n+1)}}{(2n+1)!} \quad (31)$
	$= \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (32)$
Kosinus	$\cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{(2n)}}{(2n)!} \quad (33)$
	$= \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad (34)$
Sinus hyperbolicus	$\sinh(x) = -i \sin ix \quad (35)$
	$= \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (36)$
Kosinus hyperbolicus	$\cosh(x) = \cos ix \quad (37)$
	$= \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad (38)$
<h3>2.2 Verschiedene Theoreme</h3>	
Hypothenuse im Einheitskreis	$1 = \sin^2 x + \cos^2 x \quad (39)$

Additionstheoreme	$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y \quad (40)$
	$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y \quad (41)$
	$\tan(x \pm y) = \frac{\sin(x \pm y)}{\cos(x \pm y)} = \frac{\tan x \pm \tan y}{1 \mp \tan x \tan y} \quad (42)$
Doppelwinkelfunktionen	$\sin 2x = 2 \sin x \cos x \quad (43)$
	$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x = 1 - 2 \sin^2 x \quad (44)$
	$\tan 2x = \frac{2 \tan x}{1 - \tan^2 x} \quad (45)$
Sonstige	$\cos x + b \sin x = \sqrt{1 + b^2} \cos(x - \theta) \quad (46)$
	$\tan \theta = b$

2.2.1 Wertetabelle

Grad	0°	30°	45°	60°	90°	120°	180°	270°
Rad	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\sqrt{\pi}}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π	$\frac{3\pi}{2}$
$\sin(x)$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	-1
$\cos(x)$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	-1	0
$\tan(x)$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2}$	∞	$-\sqrt{3}$	0	∞

3 Analysis

3.1 Fourieranalyse

3.1.1 Fourierreihe

Fourierreihe Komplexe Darstellung	$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \exp\left(\frac{2\pi i k t}{T}\right) \quad (47)$ $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ T -periodic
Fourierkoeffizienten Komplexe Darstellung	$c_k = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \exp\left(-\frac{2\pi i}{T} k t\right) dt \quad \text{für } k \geq 0 \quad (48)$ $c_{-k} = \overline{c_k} \quad \text{if } f \text{ reellwertig} \quad (49)$
Fourierreihe Sinus und Kosinus Darstellung	$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos\left(\frac{2\pi}{T} k t\right) + b_k \sin\left(\frac{2\pi}{T} k t\right) \right) \quad (50)$ $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ T -periodic

Fourierkoeffizienten
 Sinus und Kosinus
 Darstellung
 Wenn f punktsymmetrisch:
 $a_{k>0} = 0$, wenn f
 achsensymmetrisch: $b_k = 0$

$$a_k = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \cos\left(-\frac{2\pi}{T}kt\right) dt \quad \text{für } k \geq 0 \quad (51)$$

$$b_k = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \sin\left(-\frac{2\pi}{T}kt\right) dt \quad \text{für } k \geq 1 \quad (52)$$

$$a_k = c_k + c_{-k} \quad \text{für } k \geq 0 \quad (53)$$

$$b_k = i(c_k - c_{-k}) \quad \text{für } k \geq 1 \quad (54)$$

TODO:cleanup

3.1.2 Fouriertransformation

Fouriertransformierte

$$\hat{f}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi^n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ikx} f(x) dx \quad (55)$$

$$\hat{f}: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{C}, \forall f \in L^1(\mathbb{R}^n)$$

für $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$:

- i) $f \mapsto \hat{f}$ linear in f
- ii) $g(x) = f(x - h) \Rightarrow \hat{g}(k) = e^{-ikh} \hat{f}(k)$
- iii) $g(x) = e^{ih \cdot x} f(x) \Rightarrow \hat{g}(k) = \hat{f}(k - h)$
- iv) $g(\lambda) = f\left(\frac{x}{\lambda}\right) \Rightarrow \hat{g}(k) \lambda^n \hat{f}(\lambda k)$

3.1.3 Faltung / Konvolution

Die Faltung ist **kommutativ**, **assoziativ** und **distributiv**

Definition

$$(f * g)(t) = f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau) d\tau \quad (56)$$

Notation

$$f(t) * g(t - t_0) = (f * g)(t - t_0) \quad (57)$$

$$f(t - t_0) * g(t - t_0) = (f * g)(t - 2t_0) \quad (58)$$

Kommutativität

$$f * g = g * f \quad (59)$$

Assoziativität]

$$(f * g) * h = f * (g * h) \quad (60)$$

Distributivität

$$f * (g + h) = f * g + f * h \quad (61)$$

Komplexe konjugation

$$(f * g)^* = f^* * g^* \quad (62)$$

3.2 Verschiedenes

Stirlingformel

$$\ln(N!) \approx N \ln(N) - N + \mathcal{O}(\ln(N)) \quad (63)$$

Fehlerfunktion
 $\operatorname{erf} : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ und
 komplementäre
 Fehlerfunktion erfc

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (64)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (65)$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt \quad (66)$$

Dirac-Delta einer Funktion

$$\delta(f(x)) = \frac{\delta(x - x_0)}{|g'(x_0)|} \quad (67)$$

$$g(x_0) = 0$$

Geometrische Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1 - q} \quad (68)$$

$$|q| < 1$$

3.3 Logarithmus

Logarithmus Identitäten
 Logarithmus Rechenregeln

$$\log(xy) = \log(x) + \log(y) \quad (69)$$

$$\log\left(\frac{x}{y}\right) = \log(x) - \log(y) \quad (70)$$

$$\log(x^d) = d \log(x) \quad (71)$$

$$\log(\sqrt[y]{x}) = \frac{\log(x)}{y} \quad (72)$$

$$x^{\log(y)} = y^{\log(x)} \quad (73)$$

Integral des natürlichen
 Logarithmus

$$\int \ln(x) dx = x(\ln(x) - 1) \quad (74)$$

$$\int \ln(ax + b) dx = \frac{ax + b}{a} (\ln(ax + b) - 1) \quad (75)$$

3.4 Vektor Analysis

Laplace-Operator

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (76)$$

3.4.1 Kugelsymmetrie

Kugelkoordinaten

$$x = r \sin \phi \cos \theta \quad (77)$$

$$y = r \cos \phi \cos \theta \quad (78)$$

$$z = r \sin \theta \quad (79)$$

Laplace-Operator

$$\vec{\nabla}^2 = \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (80)$$

3.5 Integralrechnung

Partielle integration	$\int_a^b f'(x) \cdot g(x) dx = [f(x) \cdot g(x)]_a^b - \int_a^b f(x) \cdot g'(x) dx \quad (81)$
Integration durch Substitution	$\int_a^b f(g(x)) g'(x) dx = \int_{g(a)}^{g(b)} f(z) dz \quad (82)$
Satz von Gauss Divergenz in einem Volumen ist gleich dem Fluss durch die Oberfläche	$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV = \oiint_A \vec{F} \cdot d\vec{A} \quad (83)$ $A = \partial V$
Klassischer Satz von Stokes	$\int_A (\vec{\nabla} \times \vec{F}) \cdot d\vec{S} = \oint_S \vec{F} \cdot d\vec{r} \quad (84)$ $S = \partial A$

3.5.1 Liste nützlicher Integrale

cal:log:integral

Arkussinus, Arkuskosinus, Arkustangens	$\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \arcsin x \quad (85)$
	$\int -\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \arccos x \quad (86)$
	$\int \frac{1}{x^2+1} dx = \arctan x \quad (87)$

Arcsinh, arccosh, arctanh	$\int \frac{1}{\sqrt{x^2+1}} dx = \operatorname{arsinh} x \quad (88)$
	$\int \frac{1}{\sqrt{x^2-1}} dx = \operatorname{arcosh} x \quad \text{für } (x > 1) \quad (89)$
	$\int \frac{1}{1-x^2} dx = \operatorname{artanh} x \quad \text{für } (x < 1) \quad (90)$
	$\int \frac{1}{1-x^2} dx = \operatorname{arcoth} x \quad \text{für } (x > 1) \quad (91)$

Integration in Kugelkoordinaten	$\iiint dx dy dz = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi dr d\phi d\theta r^2 \sin \theta \quad (92)$
------------------------------------	--

Riemannsche Zeta-Funktion	$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \frac{1}{(1-2^{1-s})\Gamma(s)} \int_0^\infty d\eta \frac{\eta^{(s-1)}}{e^\eta + 1} \quad (93)$
---------------------------	--

Gamma-Funktion	$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (94)$
	$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \quad (95)$
	$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (96)$

Unvollständige Gamma-Funktion der unteren Grenze	$\Gamma(s, x) = \int_x^\infty t^{s-1} e^{-t} dt \quad (97)$
--	---

Unvollständige Gamma-Funktion der oberen Grenze	$\gamma(s, x) = \int_0^x t^{s-1} e^{-t} dt \quad (98)$
Beta-Funktion Complete beta function	$B(z_1, z_2) = \int_0^1 t^{z_1-1} (1-t)^{z_2-1} dt \quad (99)$
	$B(z_1, z_2) = \frac{\Gamma(z_1)\Gamma(z_2)}{\Gamma(z_1 + z_2)} \quad (100)$
Unvollständige Beta-Funktion Complete beta function	$B(x; z_1, z_2) = \int_0^x t^{z_1-1} (1-t)^{z_2-1} dt \quad (101)$

TODO:differential equation solutions

4 Wahrscheinlichkeitstheorie

Mittelwert Erwartungswert	$\langle x \rangle = \int w(x) x dx \quad (102)$
Varianz Quadrat der Standardabweichung	$\sigma^2 = (\Delta \hat{x})^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \quad (103)$
Kovarianz	$\text{cov}(x, y) = \sigma(x, y) = \sigma_{XY} = \langle (x - \langle x \rangle) (y - \langle y \rangle) \rangle \quad (104)$
Standardabweichung	$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{(\Delta x)^2} \quad (105)$
Median Teilt die untere von der oberen Hälfte	$\text{med}(x) = \begin{cases} x_{(n+1)/2} & n \text{ ungerade} \\ \frac{x_{(n/2)} + x_{((n/2)+1)}}{2} & n \text{ gerade} \end{cases} \quad (106)$ x Reihe mit n Elementen
Wahrscheinlichkeitsdichte- funktion Zufallsvariable hat Dichte f . Das Integral gibt Wahrscheinlichkeit an, dass X einen Wert $x \in [a, b]$ annimmt	$P([a, b]) := \int_a^b f(x) dx \quad (107)$ f normalisiert $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$
Kumulative Verteilungsfunktion	$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt \quad (108)$ f Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
Wahrscheinlichkeitsfunktion / Zählfunktion Wahrscheinlichkeit p dass eine diskrete Zufallsvariable X einen exakten Wert x annimmt	$p_X(x) = P(X = x) \quad (109)$ P probability measure

Autokorrelation
 Korrelation von f zu sich
 selbst zu einem früheren
 Zeitpunkt. C ist auch die
 Kovarianzfunktion

$$C_A(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(t+\tau)f(t) dt \quad (110)$$

$$= \langle f(t+\tau) \cdot f(t) \rangle \quad (111)$$

τ Zeitverschiebung

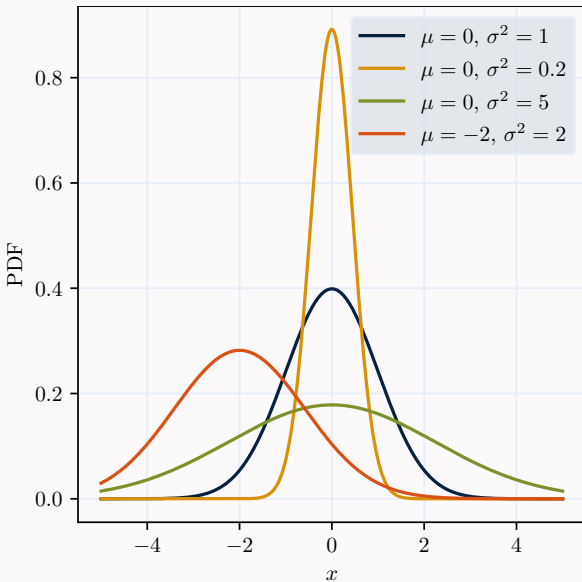
Binomialkoeffizient
 Anzahl der Möglichkeiten, k
 aus n zu wählen
 "n über k"

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (112)$$

4.1 Verteilungen

4.1.1 Kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Gauß/Normal-Verteilung

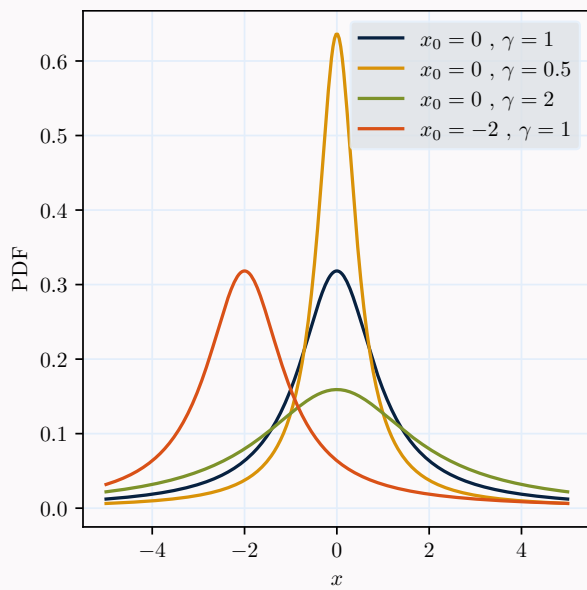


parameters	$\mu \in \mathbb{R}, \quad \sigma^2 \in \mathbb{R}$
support	$x \in \mathbb{R}$
pdf	$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$
cdf	$\frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]$
mean	μ
median	μ
variance	σ^2

Dichtefunktion der
 Standard-Normalverteilung
 $\mu = 0, \sigma = 1$

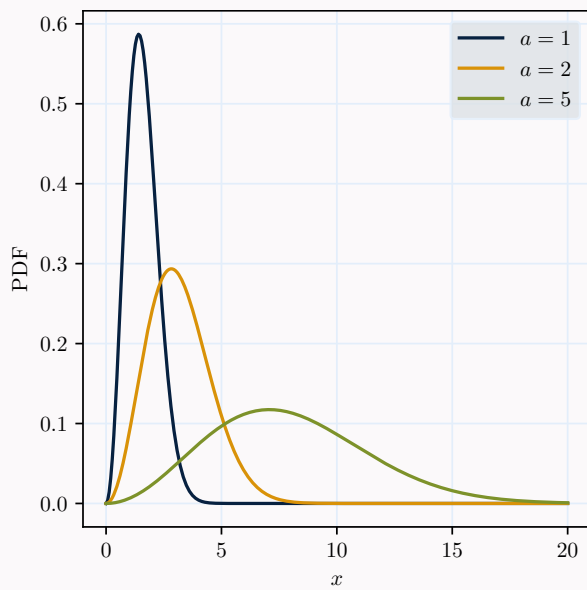
$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (113)$$

Cauchy / Lorentz-Verteilung : Auch bekannt als Cauchy-Lorentz Verteilung, Lorentz Funktion, Breit-Wigner Verteilung.



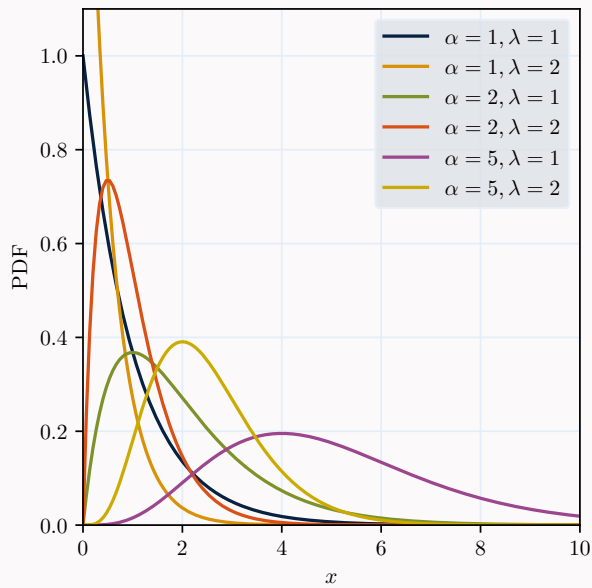
parameters	$x_0 \in \mathbb{R}, \quad \gamma \in \mathbb{R}$
support	$x \in \mathbb{R}$
pdf	$\frac{1}{\pi\gamma \left[1 + \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right)^2 \right]}$
cdf	$\frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{x-x_0}{\gamma} \right) + \frac{1}{2}$
mean	undefined
median	x_0
variance	undefined

Maxwell-Boltzmann Verteilung



parameters	$a > 0$
support	$x \in (0, \infty)$
pdf	$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x^2}{a^3} \exp \left(-\frac{x^2}{2a^2} \right)$
cdf	$\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2}a} \right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x}{a} \exp \left(-\frac{x^2}{2a^2} \right)$
mean	$2a \frac{2}{\pi}$
median	
variance	$\frac{a^2(3\pi - 8)}{\pi}$

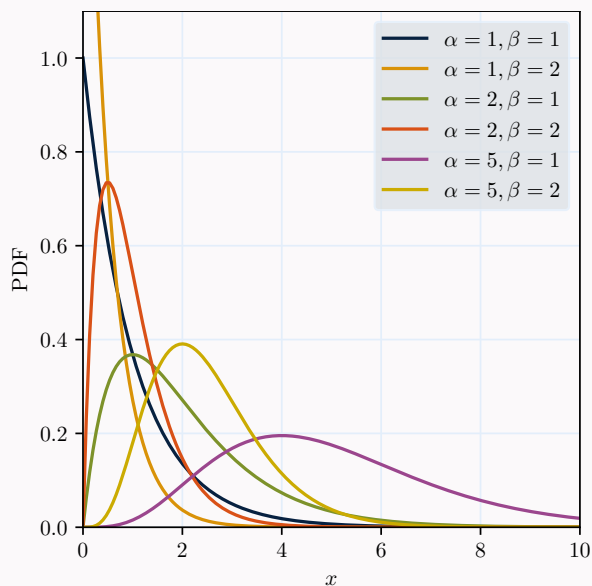
Gamma Verteilung : mit λ Parameter



parameters	$\alpha > 0, \lambda > 0$
support	$x \in (0, 1)$
pdf	$\frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\alpha)x^{\alpha-1}} e^{-\lambda x}$
cdf	$\frac{1}{\Gamma(\alpha)\gamma(\alpha, \lambda x)}$
mean	$\frac{\alpha}{\lambda}$
variance	$\frac{\alpha}{\lambda^2}$

Γ math:cal:integral:list:gamma, γ Unvollständige Gamma-Funktion der oberen Grenze

Beta Verteilung



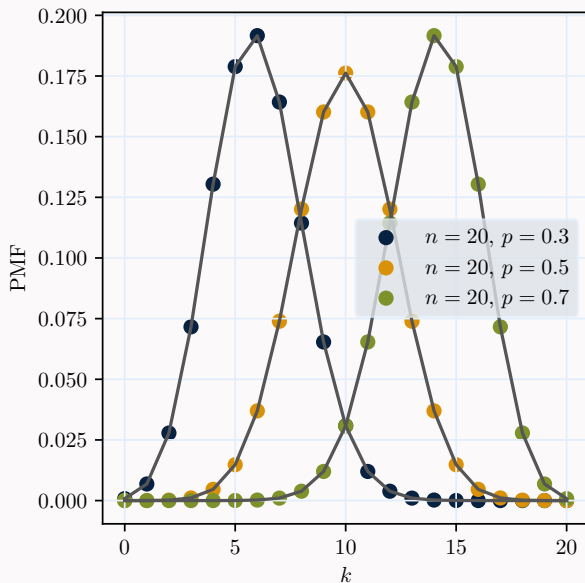
parameters	$\alpha \in \mathbb{R}, \beta \in \mathbb{R}$
support	$x \in [0, 1]$
pdf	$\frac{x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}$
cdf	$\frac{B(x; \alpha, \beta)}{B(\alpha, \beta)}$
mean	$\frac{\alpha}{\alpha + \beta}$
variance	$\frac{\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + 1)}$

B Beta-Funktion / Unvollständige Beta-Funktion

4.1.2 Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen

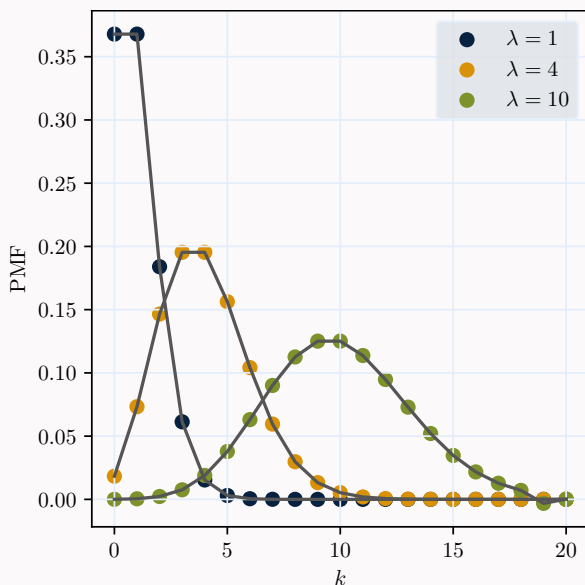
Binomialverteilung

Geht die Zahl der Versuche gegen unendlich ($n \rightarrow \infty$), konvergiert die Binomialverteilung gegen die Poissonverteilung



parameters	$n \in \mathbb{Z}, \quad p \in [0, 1], \quad q = 1 - p$
support	$k \in \{0, 1, \dots, n\}$
pmf	$\binom{n}{k} p^k q^{n-k}$
mean	np
median	$\lfloor np \rfloor$ or $\lceil np \rceil$
variance	$npq = np(1 - p)$

Poissonverteilung



parameters	$\lambda \in (0, \infty)$
support	$k \in \mathbb{N}$
pmf	$\frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$
cdf	$e^{-\lambda} \sum_{j=0}^k \frac{\lambda^j}{j!}$
mean	λ
median	$\approx \lfloor * \rfloor \lambda + \frac{1}{3} - \frac{1}{50\lambda}$
variance	λ

4.2 Zentraler Grenzwertsatz

Sei X_1, X_2, \dots eine Reihe unabhängiger und gleichverteilter Zufallsvariablen mit $\langle X_i \rangle = \mu$ und $(\Delta X_i)^2 = \sigma^2 < \infty$. Für N gegen unendlich konvergieren die Zufallsvariablen $\sqrt{N}(\bar{X}_N - \mu)$ zu einer Normalverteilung $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

Das bedeutet, dass die Schwankung mit $\frac{1}{\sqrt{N}}$ wächst und Aussagen für große N scharf werden.

4.3 Fehlerfortpflanzung

Generalisiertes Fehlerfortpflanzungsgesetz V Kovarianz Matrix, J cal:jacobi-matrix	$V_y = J(x) \cdot V_x \cdot J^T(x) \quad (114)$
Fortpflanzung unabhängiger fehlerbehaftete Größen Lineare Näherung	$u_y = \sqrt{\sum_i \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \cdot u_i \right)^2} \quad (115)$
Gewicht Varianz ist eine mögliche Wahl für ein Gewicht	$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (116)$
Gewichteter Mittelwert	$\bar{x} = \frac{\sum_i (x_i w_i)}{\sum_i w_i} \quad (117)$
Varianz des gewichteten Mittelwertes	$\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{\sum_i w_i} \quad (118)$

4.4 Maximum likelihood Methode

Likelihood Funktion Plausibilität" x zu messen, wenn der Parameter θ ist nicht normalisiert!	$L : \Theta \rightarrow [0, 1], \quad \theta \mapsto \rho(x \theta) \quad (119)$
Likelihood function für unabhängig und identisch verteilte Zufallsvariablen	$L(\theta) = \prod_{i=1}^n f(x_i; \theta) \quad (120)$
Maximum likelihood-Schätzung (MLE) Parameter, für den das Ergebnis am Wahrscheinlichsten ist	$\theta_{ML} = \arg \max_{\theta} L(\theta) \quad (121)$
	$= \arg \max_{\theta} \log(L(\theta)) \quad (122)$

4.5 Bayessche Wahrscheinlichkeitstheorie

Prior Verteilung Expected distribution before conducting the experiment	$p(\theta) \quad (123)$
--	-------------------------

Evidence	$p(\mathcal{D}) = \int d\theta p(\mathcal{D} \theta)p(\theta) \quad (124)$ <p>$p(\mathcal{D} \theta)$ Likelihood Funktion, $p(\theta)$ Prior Verteilung, \mathcal{D} data set</p>
Satz von Bayes	$p(\theta \mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D} \theta)p(\theta)}{p(\mathcal{D})} \quad (125)$ <p>$p(\theta \mathcal{D})$ posterior distribution, $p(\mathcal{D} \theta)$ Likelihood Funktion, $p(\theta)$ Prior Verteilung, $p(\mathcal{D})$ Evidence, \mathcal{D} data set</p>
Maximum a posterior estimation (MAP)	$\theta_{\text{MAP}} = \arg \max_{\theta} p(\theta \mathcal{D}) = \arg \max_{\theta} p(\mathcal{D} \theta)p(\theta) \quad (126)$

Teil II

Mechanik

5 Newton

Newtonsche Gesetze

1. Ein kräftefreier Körper bleibt in Ruhe oder bewegt sich geradlinig mit konstanter Geschwindigkeit

2.

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a}$$

3. Eine Kraft von Körper A auf Körper B geht immer mit einer gleich großen, aber entgegengerichteten Kraft von Körper B auf Körper A einher:

$$\vec{F}_{A \rightarrow B} = -\vec{F}_{B \rightarrow A}$$

6 Verschiedenes

Hookesches Gesetz

$$F = D \Delta l \quad (127)$$

F Kraft, D Federkonstante, Δl Federlänge

7 Lagrange Formalismus

Der Lagrange-Formalismus ist oft der einfachste Weg die Bewegungsgleichungen zu erhalten, da das Aufstellen der Lagrange-Funktion mit geeigneten generalisierten Koordinaten oft relativ einfach ist. Die generalisierten Koordinaten werden so gewählt, dass die Zwangsbedingungen automatisch erfüllt sind. Zum Beispiel findet man für ein 2D Pendel die generalisierte Koordinate $q = \varphi$, mit $\vec{x} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix}$.

Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = T - V \quad (128)$$

T kinetische Energie, V potentielle Energie

Lagrange-Gleichungen
(zweiter Art)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (129)$$

q generalisierte Koordinaten

Kanonischer Impuls

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \quad (130)$$

Hamiltonian

Den Hamiltonian bekommt man aus dem Lagrangian über eine Legendre Transformation

$$H(q, p) = p \dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}(q, p)) \quad (131)$$

TODO:Legendre trafo

Teil III

Statistische Mechanik

Extensive Größen: Additiv für Subsysteme (Systemgrößenabhängig): $S(\lambda E, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(E, V, N)$

Intensive Größen: Unabhängig der Systemgröße, Verhältnis zweier extensiver Größen

Liouville-Gleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \{H, \rho\} \quad (132)$$

$\{\}$ Poisson-Klammer

8 Entropie

Positiv Definit und Additiv

$$S \geq 0 \quad (133)$$

$$S(E_1, E_2) = S_1 + S_2 \quad (134)$$

Von-Neumann

$$S = -k_B \langle \log \rho \rangle = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \quad (135)$$

ρ Dichtematrix

Gibbs

$$S = -k_B \sum_n p_n \log p_n \quad (136)$$

p_n Wahrscheinlichkeit für Mikrozustand n

Boltzmann

$$S = k_B \log \Omega \quad (137)$$

Ω #Mikrozustände

Temperatur

$$\frac{1}{T} := \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V \quad (138)$$

Druck

$$p = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_E \quad (139)$$

Teil IV

Thermodynamik

Thermische Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (140)$$

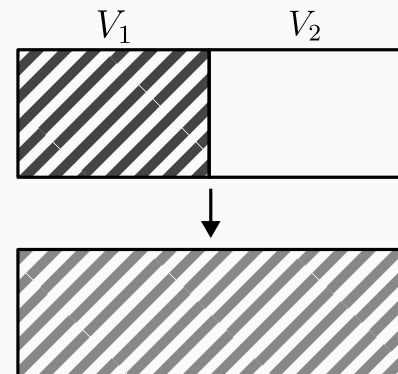
9 Prozesse

- **isobar**: konstanter Druck $p = \text{const}$
- **isochor**: konstantes Volumen $V = \text{const}$
- **isotherm**: konstante Temperatur $T = \text{const}$
- **isentrop**: konstante Entropie $S = \text{const}$
- **isenthalp**: konstante Enthalpie $H = \text{const}$
- **adiabatisch**: kein Wärmeübertrag $\Delta Q = 0$
- **quasistatisch**: läuft so langsam ab, dass das System durchgehend im t.d Equilibrium bleibt
- **reversibel**: reversible Prozesse sind immer quasistatisch und es wird keine Entropie erzeugt
 $\Delta S = 0$

9.1 Irreversible Gasexpansion (Gay-Lussac-Versuch)

Gay-Lussac-Versuch

Ein klassisches Gas in einem System mit Volumen V_1 ist getrennt von einem zweiten System mit Volumen V_2 . Beim Gay-Lussac Versuch wird die Trennwand entfernt und das Gas fließt in das Volumen V_2 .



Entropieänderung

$$\Delta S = N k_B \ln \left(\frac{V_1 + V_2}{V_1} \right) > 0 \quad (141)$$

TODO:Reversible

TODO:Quasistatischer T-Ausgleich

TODO:Joule-Thompson Prozess

10 Phasenübergänge

Ein Phasenübergang ist eine Unstetigkeit in der Freien Energie F oder in der Gibbs-Energie G oder in ihrer Ableitungen. Die Ordnung des Phasenübergangs ist die Ordnung der Ableitung, in welcher die Unstetigkeit auftritt.

Latente Wärme

Für den Phasenübergang von

Phase 1 nach Phase 2

benötigte Wärme

$$Q_L = T \Delta S \quad (142)$$

ΔS Entropieänderung des Phasenübergangs

Clausius-Clapeyron Gleichung Steigung der Phasengrenzlinie	$\frac{dp}{dT} = \frac{Q_L}{T\Delta V} \quad (143)$ ΔV Volumenänderung des Phasenübergangs
Phasenübergang Im Koexistenzbereich	$G_1 = G_2 \quad (144)$ und damit $\mu_1 = \mu_2 \quad (145)$
Gibbsche Phasenregel	$f = c - p + 2 \quad (146)$ c #Komponenten, f #Freiheitsgrade, p #Phasen

10.0.1 Osmose

Osmosis ist die spontane Passage oder Diffusion Lösungsmittelmolekülen durch eine semi-permeable Membran die für das Lösungsmittel, jedoch nicht die darin gelösten Stoffe durchlässig ist. Die Richtung der Diffusion ist vom Gebiet mit hohem chemischen Potential (niedrigere Konzentration des gelösten Stoffes) in das mit niedrigem chemischem Potential (höhere Konzentration des gelösten Stoffes), sodass die Konzentration des gelösten Stoffes ausgeglichen wird.

Osmotischer Druck / Van-t-hoffsches Gesetz	$p_{\text{osm}} = k_B T \frac{N_c}{V} \quad (147)$ N_c #gelöster Teilchen
---	---

10.1 Materialeigenschaften

Wärmekapazität	$c = \frac{Q}{\Delta T} \quad (148)$ Q Wärme
Isochore Wärmekapazität	$c_v = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (149)$ U innere Energie
Isobare Wärmekapazität	$c_p = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (150)$ H Enthalpie
Kompressionsmodul	$K = -V \frac{dp}{dV} \quad (151)$ p Druck, V Anfangsvolumen
Kompressibilität	$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \quad (152)$

Isotherme Kompressibilität	$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{K}$ (153)
----------------------------	--

Adiabatische Kompressibilität	$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S$ (154)
-------------------------------	--

Thermaler Ausdehnungskoeffizient	$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,N}$ (155)
----------------------------------	---

11 Hauptsätze der Thermodynamik

11.1 Nullter Hauptsatz

Wenn sich zwei Systeme jeweils im thermischen Gleichgewicht mit einem dritten befinden, befinden sie sich auch untereinander im thermischen Gleichgewicht.

$$A \overset{th.GGW.}{\leftrightarrow} C \wedge B \overset{th.GGW.}{\leftrightarrow} C \Rightarrow A \overset{th.GGW.}{\leftrightarrow} B \quad (156)$$

11.2 Erster Hauptsatz

In einem abgeschlossenen System ist die Änderung der inneren Energie U gleich der gewonnenen Wärme Q minus der vom System an der Umgebung verrichteten Arbeit W .

Änderung der inneren Energie	$\Delta U = \delta Q - \delta W$ (157)
	$dU = T dS - p dV$ (158)

11.3 Zweiter Hauptsatz

Clausius: Es gibt keine Zustandsänderung, deren einziges Ergebnis die Übertragung von Wärme von einem Körper niedriger Temperatur auf einen Körper höherer Temperatur ist.

Kelvin: Es ist unmöglich, eine periodisch arbeitende Maschine zu konstruieren, die weiter nichts bewirkt als Hebung einer Last und Abkühlung eines Wärmereservoirs.

11.4 Dritter Hauptsatz

Es ist unmöglich, ein System bis zum absoluten Nullpunkt abzukühlen.

Entropiedichte	$\lim_{T \rightarrow 0} s(T) = 0$ (159)
	und damit auch
	$\lim_{T \rightarrow 0} c_V = 0$ (160)
	$s = \frac{S}{N}$

12 Ensembles

Mikrokanonisches Ensemble

Konstante Variablen	E, V, N
partitionsun	$\Omega = \sum_n 1$
probability	$p_n = \frac{1}{\Omega}$
tdpot	$S = k_B \ln \Omega$
pressure	$p = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{E,N}$
entropy	$S = k_B \ln \Omega$

Kanonisches Ensemble

Konstante Variablen	T, V, N
partitionsun	$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$
probability	$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}$
tdpot	$F = -k_B T \ln Z$
pressure	$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N}$
entropy	$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N}$

Grosskanonisches Ensemble

Konstante Variablen	T, V, μ
partitionsun	$Z_g = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}$
probability	$p_n = \frac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z_g}$
tdpot	$\Phi = -k_B T \ln Z$
pressure	$p = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial V} \right)_{T,\mu} = - \frac{\Phi}{V}$
entropy	$S = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T} \right)_{V,\mu}$

Isobaric-isothermal : Gibbs ensemble

Konstante Variablen	N, p, T
partitionsun	
probability	$p_n? \frac{e^{-\beta(E_n+pV_n)}}{Z}$
tdpot	
pressure	
entropy	

Isonthalpic-isobaric ensemble : Enthalpy ensemble

Konstante Variablen	
partitionsun	
probability	
tdpot	
pressure	
entropy	

TODO:complete, link potentials

Ergodenhypothese

Innerhalb einer langen
Zeitspanne sind alle
energetisch erreichbaren
Mikrozustände im
Phasenraum gleich
wahrscheinlich

$\langle A \rangle_{\text{Zeit}} = \langle A \rangle_{\text{Ensemble}}$ (161)
A Messgröße

12.1 Potentiale

Innere Energie	$dU(S, V, N) = T dS - p dV + \mu dN$ (162)
----------------	--

Freie Energie / Helmholtz Energie	$dF(T, V, N) = -S dT - p dV + \mu dN$ (163)
--------------------------------------	---

Enthalpie	$dH(S, p, N) = T dS + V dp + \mu dN$ (164)
-----------	--

Freie Entahlpie / Gibbs-Energie	$dG(T, p, N) = -S dT + V dp + \mu dN$ (165)
------------------------------------	---

Großkanonisches Potential	$d\Phi(T, V, \mu) = -S dT - p dV - N d\mu$ (166)
---------------------------	--

TODO:Maxwell Relationen, TD Quadrat

Thermodynamisches Quadrat
Guggenheim Quadrat

$-S$	U	V
H		F
$-p$	G	T

Die Ecken gegenüber des Potentials

sind die Koeffizienten, das Differential eines Koeffizienten ist in der Ecke gegenüber.

13 Ideales Gas

Das ideale Gas besteht aus nicht-wechselwirkenden, ununterscheidbaren Teilchen.

Phase space volume
3N Kugel

$$\Omega(E) = \int_V d^3q_1 \dots \int_V d^3q_N \int d^3p_1 \dots \int d^3p_N \frac{1}{N! h^{3N}} \Theta\left(E - \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m}\right) \quad (167)$$

$$= \left(\frac{V}{N}\right)^N \left(\frac{4\pi m E}{3h^2 N}\right)^{\frac{3N}{2}} e^{-\frac{5N}{2}} \quad (168)$$

N #Teilchen, h^{3N} Volumen eines Mikrozustandes, $N!$ Teilchen sind ununterscheidbar

Entropie

$$S = \frac{5}{2} N k_B + N k_B \ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m E}{3h^2 N} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (169)$$

Ideale Gasgleichung
Thermische
Zustandsgleichung idealer
Gase

$$pV = nRT \quad (170)$$

$$= N k_B T \quad (171)$$

Kalorische Zustandsgleichung

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \quad (172)$$

Äquipartitionstheorem
Jedem Freiheitsgrad steht die
Energie U_D zur Verfügung

$$U_D = \frac{1}{2} k_B T \quad (173)$$

Maxwellsche
Geschwindigkeitsverteilung
Siehe auch ??

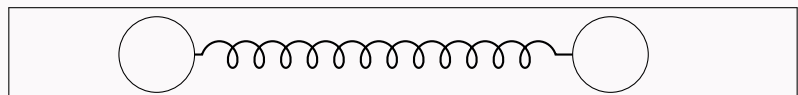
$$w(v) dv = 4\pi \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{\beta m v^2}{2}} dv \quad (174)$$

Mittlere quadratische
Geschwindigkeit
pro Teilchen im 3D-Gas

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty dv v^2 w(v) = \frac{3k_B T}{m} \quad (175)$$

13.0.1 Molekülgas

Molekülgas
2 Teilchen der Masse M sind
verbunden durch eine "Feder"
mit Länge L



Translation	$p_i = \frac{2\pi\hbar}{L} n_i \quad (176)$ $E_{\text{kin}} = \frac{\vec{p}_r^2}{2M} \quad (177)$ $n_i \in \mathbb{N}_0, i = x, y, z$
Schwingungen	$E_{\text{vib}} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (178)$ $n \in \mathbb{N}_0$
Rotation	$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1) \quad (179)$ $j \in \mathbb{N}_0$

TODO:Diagram für verschiedene Temperaturen, Weiler Skript p.83

14 Reales Gas

14.1 Virialentwicklung

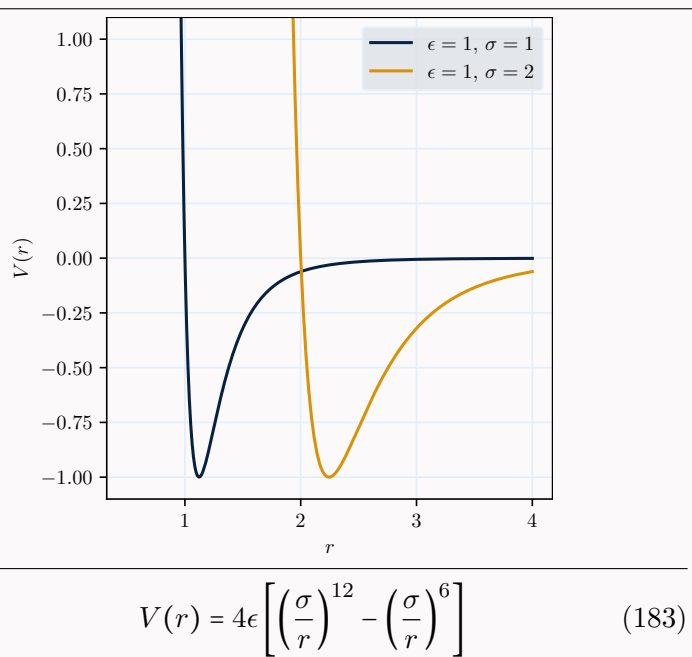
Entwicklung desw Drucks p in eine Potenzreihe der Dichte ρ .

Virialentwicklung Der zweite und dritte Virialkoeffizient ist für viele Substanzen tabelliert	$p = k_B T \rho [1 + B(T)\rho + C(T)\rho^2 + \dots] \quad (180)$ $B \text{ und } C \text{ 2. und 3. Virialkoeffizient, } \rho = \frac{N}{V}$
--	--

Mayer-Funktion	$f(\vec{r}) = e^{-\beta V(i,j)} - 1 \quad (181)$ $V(i,j) \text{ Paarpotential}$
----------------	---

Zweiter Virialkoeffizient Hängt vom Paarpotential zweier Moleküle ab	$B = -\frac{1}{2} \int_V d^3\vec{r} f(\vec{r}) \quad (182)$
--	---

Lennard-Jones-Potential
 Potential zwischen zwei
 Molekülen. Attraktiv für
 $r > \sigma$, repulsiv für $r < \sigma$.
 In Festkörpern: Anziehung
 durch Landau-Dispersion und
 Abstoßung durch
 Pauli-Prinzip.



$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (183)$$

14.2 Van der Waals Gleichung

Annahme eines Harte-Kugeln Potentials mit einer schwachen Anziehung

Zustandssumme

$$Z_N = \frac{(V - V_0)^N}{\lambda^{3N} N!} e^{\frac{\beta N^2 a}{V}} \quad (184)$$

a Kohäsionsdruck

Van der Waals-Gleichung

$$p = \frac{Nk_B T}{V - b} - \frac{N^2 a}{V^2} \quad (185)$$

b Kovolumen

TODO:sometimes N is included in a, b

15 Ideales Quantengas

Fugazität

$$z = e^{\mu\beta} = e^{\frac{\mu}{k_B T}} \quad (186)$$

Besetzungszahl

$$\sum_r n_r = N \quad (187)$$

r Zustände

Ununterscheidbare Teilchen

$$|p_1, p_2, \dots, p_N\rangle = |p_1\rangle |p_2\rangle \dots |p_N\rangle \quad (188)$$

p_i Zustand

Anwenden des Paritätsoperators gibt eine *symmetrische* (Bosonen) und eine *antisymmetrische* (Fermionen) Lösung

$$\hat{P}_{12}\psi(p_i(\vec{r}_1), p_j(\vec{r}_2)) = \pm\psi(p_i(\vec{r}_1), p_j(\vec{r}_2)) \quad (189)$$

\hat{O}_{12} Paritätsoperator tauscht 1 und 2, \pm : $\begin{matrix} \text{bos} \\ \text{fer} \end{matrix}$

Spinartungsfaktor

$$g_s = 2s + 1 \quad (190)$$

s Spin

Zustandsdichte

$$g(\epsilon) = g_s \frac{V}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon} \quad (191)$$

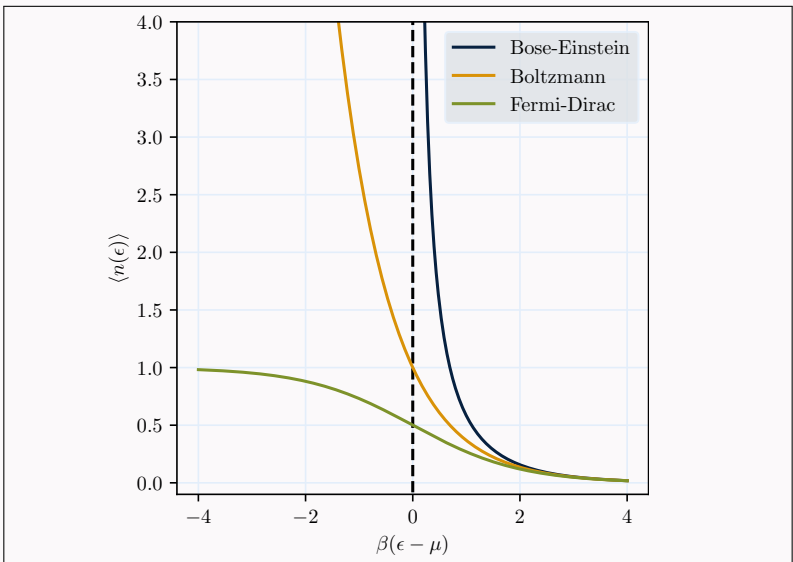
g_s Spinartungsfaktor

Besetzungszahl pro Energie

$$n(\epsilon) d\epsilon = \frac{g(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} \mp 1} d\epsilon \quad (192)$$

Zustandsdichte, \pm : $\begin{matrix} \text{bos} \\ \text{fer} \end{matrix}$

Besetzungszahl



$$\langle n(\epsilon) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} \mp 1} \quad (193)$$

für $\epsilon - \mu \gg k_B T$

$$= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}} \quad (194)$$

\pm : $\begin{matrix} \text{bos} \\ \text{fer} \end{matrix}$

Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty n(\epsilon) d\epsilon \quad (195)$$

Energie Gleich wie beim klassischen idealen Gas

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon n(\epsilon) d\epsilon = \frac{3}{2} pV \quad (196)$$

Zustandsgleichung
 Bosonen: verringerter Druck
 da sie clustern
 Fermionen: erhöhter Druck
 durch das Pauli-Prinzip

$$pV = k_B T \ln Z_g \quad (197)$$

after Virialentwicklung

$$= N k_B T \left[1 \mp \frac{\lambda^3}{2^{5/2} g v} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^2 \right) \right] \quad (198)$$

\pm : bos , $v = \frac{V}{N}$ spezifisches Volumen

Relevanz der qm. Korrekturen

Korrekturen werden relevant,
 wenn der Teilchenabstand in
 der Größenordnung der
 thermischen Wellenlänge ist

$$\left(\frac{V}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \sim \frac{\lambda}{g_s^{\frac{1}{3}}} \quad (199)$$

Verallgemeinerte
 Zeta-Funktion

$$\left. \begin{array}{l} g_\nu(z) \\ f_\nu(z) \end{array} \right\} := \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1} \mp 1} \quad (200)$$

15.1 Bosonen

Zustandssumme

$$Z_g = \prod_p \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}} \quad (201)$$

$p \in \mathbb{N}_0$

Besetzungszahl
 Bose-Einstein Verteilung

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} \quad (202)$$

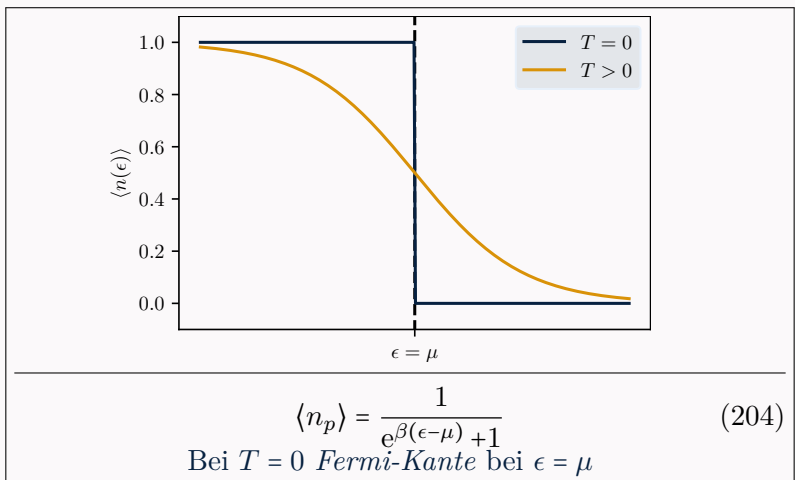
15.2 Fermionen

Zustandssumme

$$Z_g = \prod_p \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)} \right) \quad (203)$$

$p = 0, 1$

Besetzungszahl
 Fermi-Dirac Verteilung



Slater-Determinante

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} p_1(\vec{r}_1) & p_2(\vec{r}_1) & \dots & p_N(\vec{r}_1) \\ p_1(\vec{r}_2) & p_2(\vec{r}_2) & \dots & p_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_1(\vec{r}_N) & p_2(\vec{r}_N) & \dots & p_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (205)$$

Fermienergie

$$\epsilon_F := \mu(T = 0) \quad (206)$$

Fermi Temperatur

$$T_F := \frac{\epsilon_F}{k_B} \quad (207)$$

Fermi-Impuls

Radius der *Fermi-Kugel* im Impulsraum. Zustände mit P_F sind auf der *Fermi-Fläche*

$$p_F = \hbar k_F = (2mE_F)^{\frac{1}{2}} \quad (208)$$

Spezifische Dichte

$$v = \frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad (209)$$

f Verallgemeinerte Zeta-Funktion, g Entartungsfaktor, z Fugazität

15.2.1 Starke Entartung

Sommerfeld-Entwicklung für geringe Temperaturen $T \ll T_F$

$$f_\nu(z) = \frac{(\ln z)^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} \left(1 + \frac{\pi^6}{6} \frac{\nu(\nu - 1)}{(\ln z)^2} + \dots \right) \quad (210)$$

Energiedichte

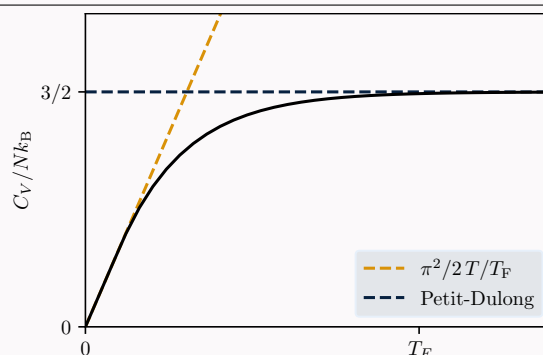
$$\frac{E}{V} = \frac{3}{2} \frac{g}{\lambda^3} k_B T f_{5/2}(z) \quad (211)$$

Sommerfeld-Entwicklung

$$\approx \frac{3}{5} \frac{N}{V} E_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right) \quad (212)$$

Wärmecapacity

für geringe Temperaturen $T \ll T_F$



$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = N k_B \frac{\pi}{2} \left(\frac{T}{T_F} \right) \quad (213)$$

weicht ab vom td:TODO:petitdulong

TODO:Entartung und Sommerfeld TODO:DULONG-PETIT Gesetz

Teil V

Elektrodynamik

16 Elektrisches Feld

Elektrisches Feld Um gibt geladene Teilchen	Symbol: $\vec{\mathcal{E}}$ Unit: $1 \text{ V m}^{-1} = 1 \text{ kgm/s}^3\text{A}$
Elektrisches Potential Benötigte Arbeit um eine Einheitsladung zwischen zwei Punkten zu bewegen	Symbol: ϕ Unit: $1 \text{ V} = 1 \text{ kgm}^2/\text{s}^3\text{A}$ $\phi = - \int \vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} \quad (214)$
Gaußsches Gesetz für elektrische Felder Der magnetische Fluss durch eine geschlossene Fläche ist proportional zur elektrischen Ladung	$\Phi_E = \iint_S \vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{S} = \frac{Q}{\epsilon_0} \quad (215)$ S geschlossene Fläche
Permittivität Dielektrische Konstante / Dielektrische Funktion Elektrische Polarisierbarkeit eines dielektrischen Materials	Symbol: ϵ Unit: $1 \text{ A s V}^{-1} \text{ m} = 1 \text{ F m}^{-1} = 1 \text{ C V}^{-1} \text{ m} = 1 \text{ C}^2/\text{Nm}^2 = 1 \text{ A}^2\text{s}^4/\text{kgm}^3$
Relative Permittivität / Dielectric constant	$\epsilon(\omega)_r = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} \quad (216)$ ϵ Permittivität, ϵ_0 Vakuum Permittivität
Vakuum Permittivität Elektrische Feldkonstante	Symbol: ϵ_0 Experimenteller Wert $8.8541878188(14) \cdot 10^{-12} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}$
Elektrische Suszeptibilität Beschreibt wie stark ein dielektrisches Material polarisiert wird, wenn ein elektrisches Feld angelegt wird	Symbol: χ_e Unit: $\epsilon_r = 1 + \chi_e \quad (217)$ ϵ_r Relative Permittivität / Dielectric constant
Dielektrische Polarisationsdichte	Symbol: \vec{P} Unit: 1 C/m^2 $\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{\mathcal{E}} \quad (218)$ ϵ_0 Vakuum Permittivität, χ_e Elektrische Suszeptibilität, $\vec{\mathcal{E}}$ Elektrisches Feld

Elektrische Flussdichte / dielektrische Verschiebung	Symbol: \vec{D} Unit: $1 \text{ C/m}^2 = 1 \text{ As/m}^2$
	$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{\mathcal{E}} + \vec{P} \quad (219)$
ϵ_0 Vakuum Permittivität, $\vec{\mathcal{E}}$ Elektrisches Feld, \vec{P} Dielektrische Polarisationsdichte	

Elektrischer Fluss durch die Fläche \vec{A}	$\Phi_E = \int_A \vec{D} \cdot d\vec{A} \quad (220)$
\vec{D} Elektrische Flussdichte / dielektrische Verschiebung	

Elektrische Leistung	$P_{\text{el}} = U I \quad (221)$
U Elektrisches Potential, I Elektrischer Strom	

17 Magnetfeld

Magnetischer Fluss	Symbol: Φ_B Unit: $1 \text{ Wb} = 1 \text{ V s}^{-1} = 1 \text{ kgm}^2/\text{s}^2\text{A}$
	$\Phi_B = \iint_A \vec{B} \cdot d\vec{A} \quad (222)$
\vec{A} Fläche	

Magnetische Flussdichte Definiert über Lorentzkraft	Symbol: \vec{B} Unit: $1 \text{ T} = 1 \text{ Vs/m}^2 = 1 \text{ N A}^{-1} \text{ m} = 1 \text{ kg/As}^2$
	$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (223)$
\vec{H} Magnetische Feldstärke, \vec{M} Magnetisierung, μ_0 Magnetische Vakuumpermeabilität	

Magnetisches Vektorpotential	Symbol: \vec{A} Unit: $1 \text{ T m} = 1 \text{ V s m}^{-1} = 1 \text{ kgm/s}^2\text{A}$
	$\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) = \vec{B}(\vec{r}) \quad (224)$

Magnetische Feldstärke	Symbol: \vec{H} Unit: 1 A m^{-1}
	$\vec{H} \equiv \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \quad (225)$

Lorentzkraft Kraft auf geladenes Teilchen	$\vec{F} = q\vec{\mathcal{E}} + q\vec{v} \times \vec{B} \quad (226)$
--	--

Magnetisch Permeabilität	<p>Symbol: μ Unit: $1 \text{ H m}^{-1} = 1 \text{ V s A}^{-1} \text{ m}$</p> $\mu = \frac{B}{H} \quad (227)$ <p>B Magnetische Flussdichte, H Magnetische Feldstärke</p>
Magnetische Vakuumpemeabilität	<p>Symbol: μ_0 Experimenteller Wert $1.25663706127(20) \text{ H/m} = \text{N/A}^2$</p>
Realtive Permeabilität	$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (228)$
Gaußsches Gesetz für Magnetismus Der magnetische Fluss durch eine geschlossene Fläche ist 0 ⇒es gibt keine magnetischen Monopole	$\Phi_B = \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (229)$ <p>S geschlossene Fläche</p>
Magnetisierung Vektorfeld, welches die Dichte von magnetischen Dipolen beschreibt.	<p>Symbol: \vec{M} Unit: 1 A m^{-1}</p> $\vec{M} = \frac{d\vec{m}}{dV} = \chi_m \cdot \vec{H} \quad (230)$
Magnetisches Moment Stärke und Richtung eines magnetischen Dipols	<p>Symbol: \vec{m} Unit: 1 Am^2</p>
Drehmoment	$\vec{\tau} = \vec{m} \times \vec{B} \quad (231)$ <p>m Magnetisches Moment</p>
Suszeptibilität	$\chi_m = \frac{\partial M}{\partial B} = \mu_r - 1 \quad (232)$ <p>μ_r Realtive Permeabilität</p>

17.1 Magnetische Materialien

Paramagnetismus Magnetisches Feld wird im Material verstärkt	$\mu_r > 1 \quad (233)$ $\chi_m > 0 \quad (234)$ <p>μ Magnetisch Permeabilität, χ_m Suszeptibilität</p>
Diamagnetismus Magnetisches Feld wird aus dem Material gedrängt	$0 < \mu_r < 1 \quad (235)$ $-1 < \chi_m < 0 \quad (236)$ <p>μ Magnetisch Permeabilität, χ_m Suszeptibilität</p>

Ferromagnetismus
 Magnetische Momente werden am äußeren Feld ausgerichtet und behalten diese Ausrichtung auch wenn das Feld abgeschaltet wird (Remanenz)

$$\mu_r \gg 1 \quad (237)$$

μ Magnetisch Permeabilität, χ_m Suszeptibilität

18 Elektromagnetismus

Lightgeschwindigkeit in the vacuum

Symbol: c
 Experimenteller Wert
 $299792458 \text{ m s}^{-1}$

Vakuum Permittivität - Permeabilität Beziehung
 TODO:Does this have a name?

$$\epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2} \quad (238)$$

ϵ_0 Vakuum Permittivität, μ_0 Magnetische Vakuumpermeabilität, c Lightgeschwindigkeit

Poisson Gleichung in der Elektrostatik

$$\Delta \Phi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon} \quad (239)$$

TODO:double check Φ
 ρ Ladungsdichte, ϵ Permittivität, Φ Potential

Poynting-Vektor
 Gerichteter Energiefluss oder Leistungsfluss eines elektromagnetischen Feldes
 $[\text{W/m}^2]$

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (240)$$

Elektrisches Feld

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (241)$$

\vec{E} Elektrisches Feld, ϕ Elektrisches Potential, \vec{A} Magnetisches Vektorpotential

Hamiltonian eines Teilchens im elektromagnetischen Feld
 In der ed:em:gauge:coulomb

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right]^2 \quad (242)$$

m Masse, \hat{p} Impulsoperator, q Ladung, \vec{A} Magnetisches Vektorpotential, c Lightgeschwindigkeit

18.1 Maxwell-Gleichungen

Vakuum Mikroskopische Formulierung	$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}} = \frac{\rho_{\text{el}}}{\epsilon_0} \quad (243)$
	$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (244)$
	$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}} = -\frac{d\vec{B}}{dt} \quad (245)$
	$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{d\vec{\mathcal{E}}}{dt} \quad (246)$

Materie Makroskopische Formulierung	$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{\text{el}} \quad (247)$
	$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (248)$
	$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}} = -\frac{d\vec{B}}{dt} \quad (249)$
	$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{d\vec{D}}{dt} \quad (250)$

18.1.1 Eichungen

Coulomb-Eichung	$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (251)$
	\vec{A} Magnetisches Vektorpotential

TODO:Polarization

18.2 Induktion

Faradaysche Induktionsgesetz	$U_{\text{ind}} = -\frac{d}{dt} \Phi_B = -\frac{d}{dt} \iint_A \vec{B} \cdot d\vec{A} \quad (252)$
------------------------------	--

Lenzsche Regel	Die Änderung des magnetischen Flußes durch einen Leiter induziert einen Strom der der Änderung entgegenwirkt.
----------------	---

19 Optik

Ausbreitung von Licht und die Interaktion mit Materie

Brechungsindex	Symbol: \tilde{n} Unit:
	$\tilde{n} = n' + in'' \quad (253)$
	$n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \quad (254)$
	$n = \frac{c_0}{c_M} \quad (255)$
	??? ???:relativepermittivity, ??? ???:relativepermeability, c Lichtgeschwindigkeit, c_M Lichtgeschwindigkeit im Medium

TODO:what does the complex part of the dielectric function represent?

Reller Teil des Brechungsindex	Symbol: n' Unit:
Auslöschungskoeffizient Komplexer Teil des Brechungsindex	Symbol: n'' Unit: manchmal κ
Reflectio	$R = \left \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right \quad (256)$ <p>\tilde{n} Brechungsindex</p>
Snelliussches Brechungsgesetz	$n'_1 \sin \theta_1 = n'_2 \sin \theta_2 \quad (257)$ <p>n_i Brechungsindex, θ_i Einfallswinkel (normal zur Fläche)</p>
Gruppengeschwindigkeit Geschwindigkeit, mit sich die Einhülende einer Welle ausbreitet	$v_g \equiv \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad (258)$ <p>ω Kreisfrequenz, k angularwavenumber</p>
Phasengeschwindigkeit Geschwindigkeit, mit der sich eine Welle im Medium ausbreitet	$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\lambda}{T} \quad (259)$ <p>ω Kreisfrequenz, k angularwavenumber, λ wavelength, T Periodendauer</p>
Absorptionskoeffizient Intensitätsverringierung beim Durchgang eines Mediums, nicht zwingend durch Energieabgabe an Medium	<p>Symbol: α Unit: 1 cm^{-1}</p> <hr/> $\alpha = 2n'' \frac{\omega}{c} \quad (260)$ $\alpha = \frac{\omega}{nc} \epsilon'' \quad (261)$ <p>n'' Auslöschungskoeffizient, c Lightgeschwindigkeit, ω Kreisfrequenz</p>
Elektromagnetische Strahlungsintensität Flächenleistungsdichte	<p>Symbol: I Unit: $1 \text{ W/m}^2 = 1 \text{ J/s}^3$</p> <hr/> $I = \langle S \rangle_t \quad (262)$ <p>S ed:poynting</p>
Lambert-beersches Gesetz Intensität in einem absorbierenden Medium	$I(z) = I_0 e^{-\kappa z} \quad (263)$ <p>I Elektromagnetische Strahlungsintensität, α Absorptionskoeffizient, z Eindringtiefe</p>

20 Hall-Effekt

Zyklotronfrequenz	$\omega_c = \frac{eB}{m_e} \quad (264)$
-------------------	---

TODO:Move

20.1 Klassischer Hall-Effekt

Fließt in einem Leiter ($l \times b \times d$) ein Strom in x Richtung, während der Leiter von einem Magnetfeld B in z -Richtung durchdrungen, wird eine Hallspannung U_H in y -Richtung induziert.

Hallspannung	$U_H = \frac{IB}{ned} \quad (265)$
	n Ladungsträgerdichte

Hall-Koeffizient Manchmal R_H	$A_H := -\frac{E_y}{j_x B_z} \stackrel{\text{metals}}{\downarrow} = \frac{\rho_{xy}}{B_z} \quad (266)$
------------------------------------	--

Spezifischer Widerstand	$\rho_{xx} = \frac{m_e}{ne^2\tau} \quad (267)$
	$\rho_{xy} = \frac{B}{ne} \quad (268)$

20.2 Ganzzahliger Quantenhalleffekt

Leitfähigkeitstensor	$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \quad (269)$
----------------------	---

Spezifischer Widerstands-tensor	$\rho = \sigma^{-1} \quad (270)$
------------------------------------	----------------------------------

Spezifischer Hallwiderstand	$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad (271)$
	$\nu \in \mathbb{Z}$ Füllfaktor

Fraktionaler Quantum-Hall-Effekt	$\nu = \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \frac{2}{3} \dots \quad (272)$
	ν Bruch aus Zahlen ohne gemeinsamen Teiler

- **Integer** (QHE): Füllfaktor ν ist ganzzahlig
- **Fractional** (FQHE): Füllfaktor ν ist ein Bruch
- **Spin** (QSHE): Spin Ströme anstatt Ladungsströme
- **Anomalous** (QAHE): Symmetriebruch durch interne Effekte anstatt durch ein externes Magnetfeld

TODO:sort

21 Dipol-zeug

Dipolsrahlung
Poynting-Vektor

$$\vec{S} = \left(\frac{\mu_0 p_0^2 \omega^4}{32\pi^2 c} \right) \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \vec{r} \quad (273)$$

Zeitlich mittlere Leistung

$$P = \frac{\mu_0 \omega^4 p_0^2}{12\pi c} \quad (274)$$

22 misc

Impedanz eines Ohmschen
Widerstands

$$Z_R = R \quad (275)$$

??? ??:resistance

Impedanz eines Kondensators

$$Z_C = \frac{1}{i\omega C} \quad (276)$$

??? ??:capacity, ??? ??:angularvelocity

Impedanz eines Induktors

$$Z_L = i\omega L \quad (277)$$

??? ??:inductance, ??? ??:angularvelocity

TODO:impedance addition for parallel / linear

Teil VI

Quantenmechanik

23 Basics

23.1 Operatoren

Dirac-Notation	$\langle x $ "Bra" Zeilenvektor	(278)
	$ x\rangle$ "Ket" Spaltenvektor	(279)
	$\hat{A} \beta\rangle = \alpha\rangle \Rightarrow \langle\alpha = \langle\beta \hat{A}^\dagger$	(280)
Dagger	$\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^*)^T$	(281)
	$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger$	(282)
	$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$	(283)
		(284)
Adjungierter operator	$\langle\alpha \hat{A}^\dagger \beta\rangle = \langle\beta \hat{A} \alpha\rangle^*$	(285)
Hermitescher operator	$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$	(286)

23.1.1 Messung

Eine Observable ist ein hermitescher Operator, der auf \hat{H} wirkt. Die Messung ergibt zufällig einen der Eigenwerte von \hat{O} , welche alle reell sind.

Messwahrscheinlichkeit

Wahrscheinlichkeit, ψ im Zustand λ zu messen

$$p(\lambda) = \langle\psi|\hat{P}_\lambda|\psi\rangle \quad (287)$$

Zustand nach der Messung

$$|\psi\rangle_{\text{post}} = \frac{1}{\sqrt{p(\lambda)}} \hat{P}_\lambda |\psi\rangle \quad (288)$$

23.1.2 Pauli-Matrizen

Pauli Matrizen	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 0\rangle\langle 1 + 1\rangle\langle 0 $	(289)
	$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i 0\rangle\langle 1 + i 1\rangle\langle 0 $	(290)
	$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 0\rangle\langle 0 - 1\rangle\langle 1 $	(291)

23.2 Wahrscheinlichkeitstheorie

Kontinuitätsgleichung	$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (292)$ <p>ρ Dichte einer Erhaltungsgröße q, j Fluß von q</p>
Zustandswahrscheinlichkeit	$TODO \quad (293)$
Dispersion	$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad (294)$
Allgemeine Unschärferelation	$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 \quad (295)$
	$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \quad (296)$

23.3 Kommutator

Kommutator	$[A, B] = AB - BA \quad (297)$
Antikommutator	$\{A, B\} = AB + BA \quad (298)$
Kommutatorrelationen	$[A, BC] = [A, B]C - B[A, C] \quad (299)$
TODO:add some more?	
Kommutator mit einer Funktion	$[f(A), B] = [A, B] \frac{\partial f}{\partial A} \quad (300)$ <p>falls $[A, [A, B]] = 0$</p>
Jakobi-Identität	$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (301)$
Lemma von Hadamard	$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (302)$
Kanonische Vertauschungsrelationen	$[x_i, x_j] = 0 \quad (303)$
	$[p_i, p_j] = 0 \quad (304)$
	$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (305)$ <p>x, p kanonische konjugierte</p>

24 Schrödingergleichung

Energieoperator	$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (306)$
-----------------	--

Impulsoperator	$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}_x \quad (307)$
Ortsoperator	$\vec{x} = i\hbar\vec{\nabla}_p \quad (308)$
Stationäre Schrödingergleichung	$\hat{H} \psi\rangle = E \psi\rangle \quad (309)$
Schrödingergleichung	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \vec{V}(x)\right)\psi(x) \quad (310)$
Hellmann-Feynman-Theorem Ableitung der Energie nach einem Parameter	$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \int d^3r \psi_\lambda^* \frac{d\hat{H}_\lambda}{d\lambda} \psi_\lambda = \left\langle \psi(\lambda) \left \frac{d\hat{H}_\lambda}{d\lambda} \right \psi(\lambda) \right\rangle \quad (311)$

24.1 Zeitentwicklung

The time evolution of the Hamiltonian is given by:

Zeitentwicklungsoperator	$ \psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0)\rangle \quad (312)$ U unitär
--------------------------	---

Von-Neumann Gleichung
Zeitentwicklung des
Dichteoperators im
Schrödingerbild. Qm.
Analogon zur
Liouville-Gleichung ??

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (313)$$

Lindblad-Mastergleichung
Verallgemeinerung der
von-Neumann Gleichung für
offene Quantensysteme

$$\dot{\rho} = \underbrace{-\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho]}_{\text{reversible}} + \underbrace{\sum_{n,m} h_{nm} \left(\hat{A}_n \rho \hat{A}_m^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{A}_m^\dagger \hat{A}_n, \rho \} \right)}_{\text{irreversible}} \quad (314)$$

\hbar positiv-semifinite Matrix, \hat{A} beliebiger Operator

TODO:unitary transformation of time dependent H

24.1.1 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

Im Schrödinger-Bild sind die Zustände zeitabhängig, im Heisenberg-Bild sind die Observablen (Operatoren) zeitabhängig

Schrödinger Zeitentwicklung	$ \psi(t)_S\rangle = \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0)\rangle \quad (315)$
-----------------------------	---

Heisenberg Zeitentwicklung	$ \psi_H\rangle = \psi_S(t_0)\rangle$ (316)
	$A_H = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0)$ (317)
	$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \left(\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right)_H$ (318)
mit H und S dem Heisenberg- und Schrödinger-Bild	

24.1.2 Ehrenfest-Theorem

Siehe auch ??

Ehrenfest-Theorem gilt für beide Bilder	$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$ (319)
---	---

Ehrenfest-Theorem Beispiel Beispiel für x	$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = - \langle \nabla V(x) \rangle = \langle F(x) \rangle$ (320)
--	---

Korrespondenzprinzip	Die klassischen Bewegungsgleichungen lassen sich als Grenzfall (große Quantenzahlen) aus der Quantenmechanik ableiten.
----------------------	--

25 Störungstheorie

Die folgenden Gleichungen gelten wenn \hat{H}_1 ausreichend klein ist und die $E_n^{(0)}$ Niveaus nicht entartet sind.

Hamiltonian	$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ (321)
-------------	---

Potenzreihe	$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$ (322)
	$ \psi_n\rangle = \psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \psi_n^{(2)}\rangle + \dots$ (323)

Energieverschiebung 1. Ordnung	$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} \hat{H}_1 \psi_n^{(0)} \rangle$ (324)
--------------------------------	---

Zustände	$ \psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} \hat{H}_1 \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}\rangle$ (325)
----------	---

Energieverschiebung 2. Ordnung	$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left \langle \psi_k^{(0)} \hat{H}_1 \psi_n^{(0)} \rangle \right ^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$ (326)
--------------------------------	--

Fermis goldene Regel Übergangsrate des initial Zustandes $ i\rangle$ unter einer Störung H^1 zum Endzustand $ f\rangle$	$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle f H^1 i \rangle ^2 \rho(E_f)$ (327)
--	---

26 Harmonischer Oszillator

Hamiltonian	$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (328)$ $= \frac{1}{2}\hbar\omega + \omega a^\dagger a \quad (329)$
-------------	---

Energiespektrum	$E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right) \quad (330)$
-----------------	---

Siehe auch 26.1

26.1 Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren / Leiteroperatoren

Teilchenzahloperator/Besetzungszahloperator	$\hat{N} := a^\dagger a \quad (331)$ $\hat{N} n\rangle = n N\rangle \quad (332)$
	$ n\rangle = \text{Fock-Zustände, } \hat{a} = \text{Vernichtungsoperator, } \hat{a}^\dagger = \text{Erzeugungsoperator}$

Kommutator	$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (333)$ $[N, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (334)$ $[N, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (335)$
------------	---

Anwendung auf Zustände	$\hat{a} n\rangle = \sqrt{n} n-1\rangle \quad (336)$ $\hat{a}^\dagger n\rangle = \sqrt{n+1} n+1\rangle \quad (337)$ $ n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n 0\rangle \quad (338)$
------------------------	---

Matrix-Form	$\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N \end{pmatrix} \quad (339)$ $\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (340)$ $\hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{N} & 0 \end{pmatrix} \quad (341)$
-------------	---

26.1.1 Harmonic Oscillator

Harmonischer Oszillator

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (342)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (343)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \quad (344)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} + i\tilde{P}) \quad (345)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} - i\tilde{P}) \quad (346)$$

27 Drehmoment

27.1 Aharonov-Bohm Effekt

Erhaltene Phase

Elektron entlang eines geschlossenen Phase erhält eine Phase die proportional zum eingeschlossenen magnetischem Fluss ist

$$\delta = \frac{2e}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{s} = \frac{2e}{\hbar} \Phi \quad (347)$$

TODO:replace with loop intergral symbol and add more info

28 Periodische Potentiale

Blochwellen

Lösen stat. SG im periodischen Potential mit Periode \vec{R} : $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (348)$$

\vec{k} beliebig, u periodische Funktion

Periodizität

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (349)$$

$$\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (350)$$

\vec{R} Gittervektor, \vec{G} Reziproker Gittervektor

29 Symmetrien

Die meisten Symmetrieoperatoren sind unitär ??, da die Norm eines Zustands invariant unter Raum-, Zeit- und Spin-Transformationen sein muss.

Invarianz

\hat{H} is invariant unter der von \hat{U} beschriebenen Symmetrie wenn gilt:

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{U}, \hat{H}] = 0 \quad (351)$$

29.1 Zeitumkehrungssymmetrie

Zeitumkehrungssymmetrie	$T : t \rightarrow -t$	(352)
-------------------------	------------------------	-------

Antiunitär	$T^2 = -1$	(353)
------------	------------	-------

30 Zwei-Niveau System (TLS)

$$H = \underbrace{\hbar\omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\text{field}} + \underbrace{\hbar\omega_a \frac{\hat{\sigma}_z}{2}}_{\text{atom}} + \underbrace{\frac{\hbar\Omega}{2} \hat{E} \hat{S}}_{\text{int}} \quad (354)$$

James-Cummings
Hamiltonian
TLS interagiert mit
resonantem Lichtfeld

after RWA:

$$= \hbar\omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\omega_a \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} + \frac{\hbar\Omega}{2} (\hat{a} \hat{\sigma}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}) \quad (355)$$

$\hat{E} = E_{\text{ZPF}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ Feldoperator mit bosonischen Leiteroperatoren, $\hat{S} = \hat{\sigma}^\dagger + \hat{\sigma}$ Polarisationsoperator mit Leiteroperatoren des TLS

31 Sonstiges

Rotating Wave
Approximation /
Drehwellennäherung (RWS)
Schnell oscillierende Terme
werden vernachlässigt

$$\Delta\omega := |\omega_0 - \omega_L| \ll |\omega_0 + \omega_L| \approx 2\omega_0 \quad (357)$$

ω_L Frequenz des Lichtes, ω_0 Übergangsfrequenz

Adiabatentheorem

Ein quantenmechanisches System bleibt in im derzeitigen Eigenzustand falls eine Störung langsam genug wirkt und der Eigenwert durch eine Lücke vom Rest des Spektrums getrennt ist.

Slater Determinante
Konstruktion einer
fermionischen
(antisymmetrischen)
Vielteilchen Wellenfunktion
aus ein-Teilchen
Wellenfunktionen

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_a(q_1) & \phi_a(q_2) & \dots & \phi_a(q_N) \\ \phi_b(q_1) & \phi_b(q_2) & \dots & \phi_b(q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_z(q_1) & \phi_z(q_2) & \dots & \phi_z(q_N) \end{vmatrix} \quad (358)$$

32 Wasserstoffatom

Reduzierte Masse

$$\mu = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K} \stackrel{m_e \ll m_K}{\approx} m_e \quad (359)$$

Coulomb potential Für ein Eielektronenatom	$V(\vec{r}) = \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (360)$ <p>Z Ordnungszahl/Kernladungszahl</p>
Hamiltonian	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) \quad (361)$ $= \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r} + V(r) \quad (362)$
Wellenfunktion	$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (363)$ <p>$R_{nl}(r)$ Radialanteil, Y_{lm} qm:sphericalharmonics</p>
Radialanteil	$R_{nl} = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n[(n+l)!]^3}} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l-1}^{2l+1}(2\kappa r) \quad (364)$ <p>with</p> $\kappa = \frac{\sqrt{2\mu E }}{\hbar} = \frac{Z}{na_B} \quad (365)$ <p>$L_r^s(x)$ Laguerre-Polynome</p>
Energieeigenwerte	$E_n = \frac{Z^2 \mu e^4}{n^2 (4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -E_H \frac{Z^2}{n^2} \quad (366)$
Rydberg-Konstante für schwere Atome	<p>Symbol: R_∞ Experimenteller Wert $10973731.568157(12) \text{ m}^{-1}$</p> <hr/> $R_\infty = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \quad (367)$ <p>m_e Elektronenmasse, e elementarycharge, ϵ_0 vacuumpermittivity, h Plancksches Wirkumsquantum, c vacuumspeedoflight</p>
Rydberg Konstante korrigiert für Kernmasse M	$R_M = \frac{\mu}{m_e} R_\infty \quad (368)$ <p>??? ???:rydbergconstantheavy, $\mu = \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{M}\right)^{-1}$ reducedmass, m_e Elektronenmasse</p>
Rydberg-Energy Energie Einheit	$1 \text{ Ry} = hc R_\infty \quad (369)$ <p>R_∞ Rydberg-Konstante, h Plancksches Wirkumsquantum, ??? ???:vacuumspeedoflight</p>

Bohrscher Radius	Symbol: a_0 Experimenteller Wert $5.29177210544(82) \cdot 10^{-11} \text{ m}$
	$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m_e} \quad (370)$ ϵ_0 Vakuum Permittivität, m_e Elektronenmasse

32.1 Korrekturen

32.1.1 Darwin-Term

Relativistische Korrektur: Elektronen führen eine Zitterbewegung aus und sind nicht vollständig lokalisiert.

Energieverschiebung	$\Delta E_{\text{rel}} = -E_n \frac{Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \quad (371)$
---------------------	--

Feinstrukturkonstante Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (372)$
--	--

32.1.2 Spin-Bahn-Kopplung (LS-Kopplung)

Die Wechselwirkung zwischen dem Elektronenspin und dem elektrostatischen Feld des Kerns führt zu Energieverschiebungen.

Energieverschiebung	$\Delta E_{\text{LS}} = \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3} \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle \quad (373)$
---------------------	---

??	$\begin{aligned} \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle &= \frac{1}{2} \langle [J^2 - L^2 - S^2] \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \end{aligned} \quad (374)$
----	---

32.1.3 Feinstruktur

Die Feinstruktur vereint relativistische Korrekturen 32.1.1 und die Spin-Orbit-Kupplung 32.1.2.

Energieverschiebung	$\Delta E_{\text{FS}} = \frac{Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (375)$
---------------------	--

32.1.4 Lamb-Shift

Die Wechselwirkung zwischen dem Elektron und vom Kern absorbierten/emittierten virtuellen Photonen führt zu einer (sehr kleinen) Energieverschiebung.

Potentielle Energy	$\langle E_{\text{pot}} \rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r + \delta r} \right\rangle \quad (376)$ δr Schwankung von r
--------------------	--

32.1.5 Hyperfeinstruktur

Wechselwirkung von Kernspin mit dem vom Elektron erzeugten Magnetfeld spaltet Energieniveaus

Kernspin	$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad (377)$
	$ \vec{I} = \sqrt{i(i+1)}\hbar \quad (378)$
	$I_z = m_i\hbar \quad (379)$
	$m_i = -i, -i+1, \dots, i-1, i \quad (380)$
Gesamtdrehimpuls	$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad (381)$
	$ \vec{F} = \sqrt{f(f+1)}\hbar \quad (382)$
	$F_z = m_f\hbar \quad (383)$
Auswahlregel	$f = j \pm i \quad (384)$
	$m_f = -f, -f+1, \dots, f-1, f \quad (385)$
Hyperfeinstrukturkonstante	$A = \frac{g_i \mu_K B_{\text{HFS}}}{\sqrt{j(j+1)}} \quad (386)$ <p>B_{HFS} Hyperfeinfeld, μ_K Kernmagneton, g_i Kern-g-Faktor ??</p>
Energieverschiebung	$\Delta H_{\text{HFS}} = \frac{A}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \quad (387)$

TODO:landé factor

32.2 Effekte im Magnetfeld

TODO:all

TODO:Hunds rules

32.3 Sonstiges

Auger-Meitner-Effekt

Auger-Effekt

Ein angeregtes Elektron fällt in ein unbesetztes, niedrigeres Energieniveau zurück. Durch die frei werdende Energie verlässt ein Elektron aus einer höheren Schale das Atom (Auger-Elektron).

Teil VII

Festkörperphysik

TODO:Bonds, hybridized orbitals TODO:Lattice vibrations, van hove singularities, debye frequency

Zustandsdichte (DOS)

$$D(E) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \delta(E - E(\vec{k}_i)) \quad (388)$$

V Volumen, N Anzahl der Energieniveaus, ??? ??? :energy

Zustandsdichte für
parabolische Dispersion
Bei Freies Elektronengase

$$D_1(E) = \frac{1}{2\sqrt{c_k(E - E_0)}} \quad (1D) \quad (389)$$

$$D_2(E) = \frac{\pi}{2c_k} \quad (2D) \quad (390)$$

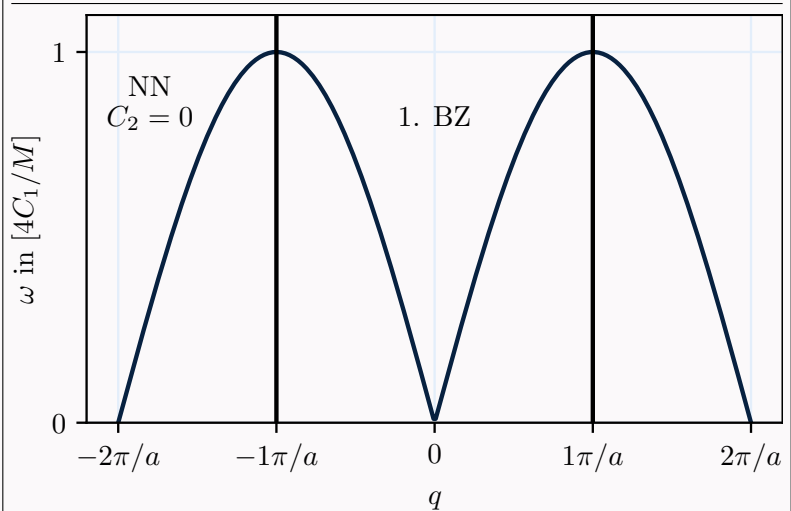
$$D_3(E) = \pi \sqrt{\frac{E - E_0}{c_k^3}} \quad (3D) \quad (391)$$

33 Gitterschwingungen

$$\omega^2 = \frac{4C_1}{M} \left[\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + \frac{C_2}{C_1} \sin^2(qa) \right] \quad (392)$$

with

$$u_{s+n} = U e^{-i[\omega t - q(s+n)a]} \quad (393)$$

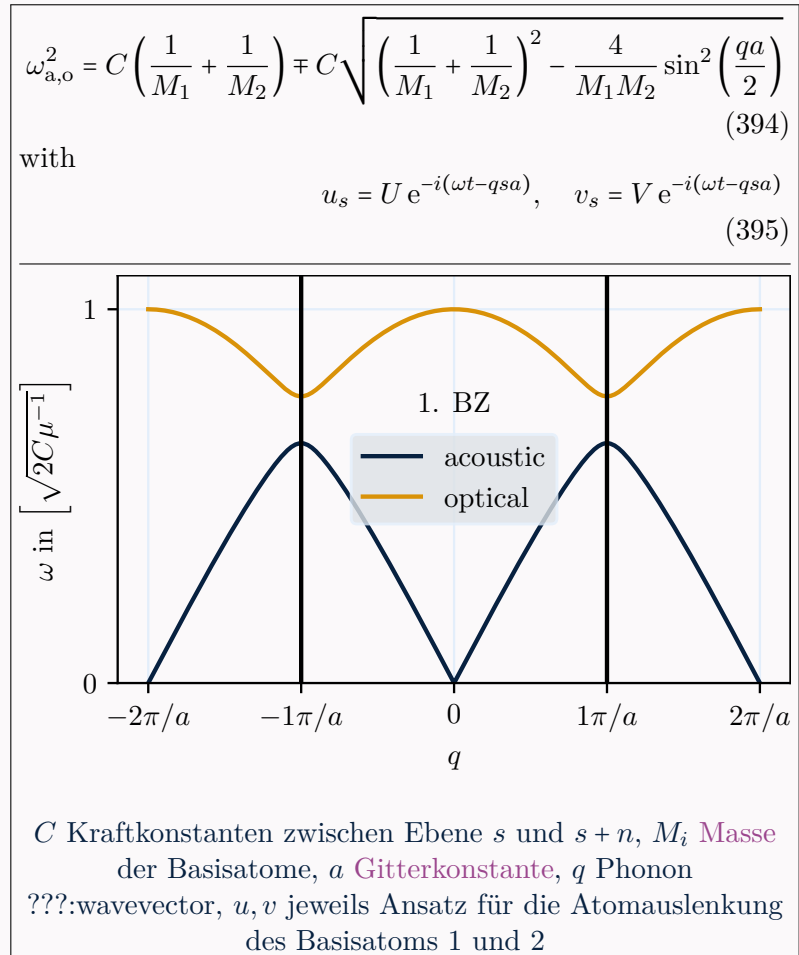


Phonondispersion eines
Gitters mit zweiatomiger
Basis
gleich der Dispersion einer
linearen Kette

C_n Kraftkonstanten zwischen Ebene s und $s + n$, M Masse des Referenzatoms, a Gitterkonstante, q Phonon wavevector, u Ansatz für die Atomauslenkung

TODO:Plots

Phonondispersion eines
Gitters mit einatomiger Basis



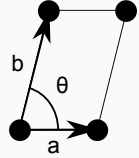
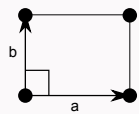
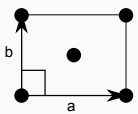
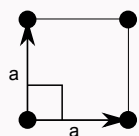
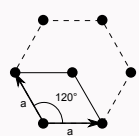
33.1 Debye-Modell

Atome verhalten sich wie gekoppelte quantenmechanische harmonische Oszillatoren. Die endliche Ausdehnung des Körpers führt zu periodischen Randbedingungen.

34 Kristalle

34.1 Bravais-Gitter

2D : In 2D gibt es 5 verschiedene Bravais-Gitter

Gittersystem	Punktgruppe	5 Bravais Gitter	
		primitive (p)	centered (c)
monoclinic (m)	C_2		
orthorhombic (o)	D_2		
tetragonal (t)	D_4		
hexagonal (h)	D_6		

3D : In 3D gibt es 14 verschiedene Bravais-Gitter

Kristall-system	Gittersystem	Punktgruppe	14 Bravais Gitter			
			primitive (P)	basecente-red (S)	bodycente-red (I)	facecente-red (F)
triclinic (a)		C_i				
monoclinic (m)		C_{2h}				
orthorhombic (o)		D_{2h}				
tetragonal (t)		D_{4h}				
hexagonal (h)	rhombohe-dral	D_{3d}				
	hexagonal	D_{6h}				
cubic (c)		O_h				

Gitterkonstante Parameter (Länge oder Winkel) der die Einheitszelle beschreibt	Symbol: a Unit:
---	----------------------

Gittervektor	Symbol: \vec{R} Unit:
	$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ (396)
	$n_i \in \mathbb{Z}$

TODO:primitive unit cell: contains one lattice point

Millersche Indizes	(hkl) plane (397)
	$[hkl]$ direction (398)
	$\{hkl\}$ millerFamily (399)
	Miller family: planes that are equivalent due to crystal symmetry

34.2 Reziprokes Gitter

Das rezioproke Gitter besteht aus dem dem Satz aller Wellenvektoren \vec{k} , die ebene Wellen mit der Periodizität des Bravais-Gitters ergeben.

Reziproke Gittervektoren	$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ (400)
	$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1$ (401)
	$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$ (402)
	a_i Bravais-Gitter Vektoren, V_c Volumen der primitiven Gitterzelle

Reziproker Gittervektor	Symbol: \vec{G} Unit:
	$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ (403)
	$n_i \in \mathbb{Z}$

34.3 Streuprozesse

Matthiessensche Regel
Näherung, nur gültig wenn die einzelnen Streuprozesse von einander unabhängig sind

$\frac{1}{\mu} = \sum_{i=\text{Streuprozesse}} \frac{1}{\mu_i}$ (404)
$\frac{1}{\tau} = \sum_{i=\text{Streuprozesse}} \frac{1}{\tau_i}$ (405)
μ Elektrische Mobilität / Beweglichkeit, τ Streuzzeit

34.4 Gitter

Einfach kubisch (SC)
 Reziprok: Einfach kubisch

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (406)$$

a Gitterkonstante

Kubisch raumzentriert (BCC)
 Reziprok: cm:bravais:fcc

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (407)$$

a Gitterkonstante

Kubisch flächenzentriert (FCC)
 Reziprok: cm:bravais:bcc

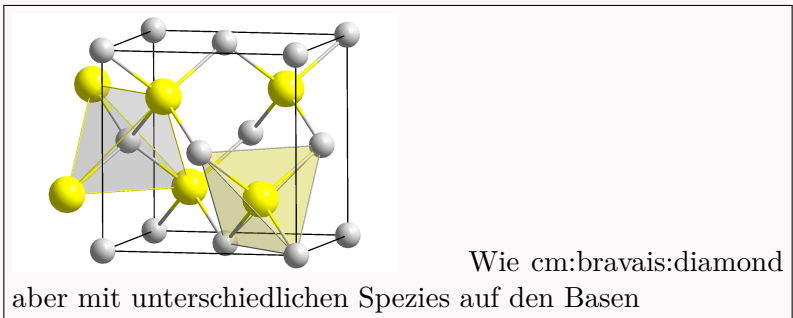
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (408)$$

a Gitterkonstante

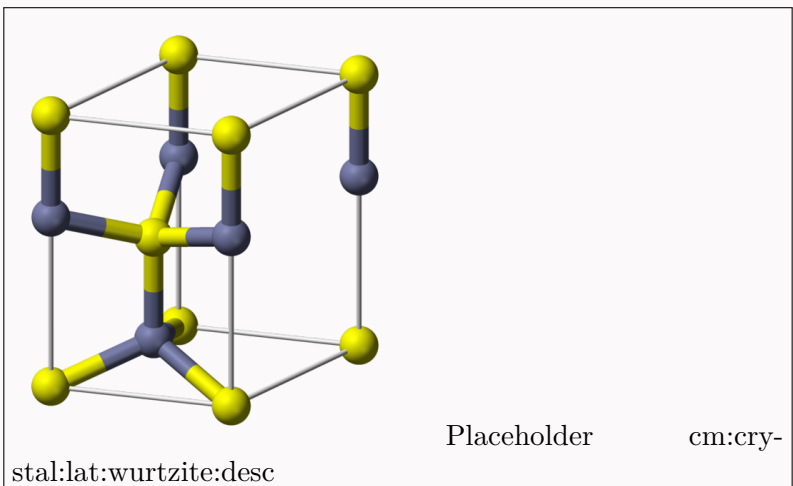
Diamantstruktur

cm:bravais:fcc mit Basis $(0 \ 0 \ 0)$ und $(\frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4})$

Zinkblende-Struktur



Wurtzite-Struktur
 hP4



35 Freies Elektronengase

Annahmen: Elektronen bewegen sich frei und unabhängig voneinander.

Driftgeschwindigkeit Geschwindigkeitskomponente durch eine externe Kraft (z.B. ein elektrisches Feld)	$\vec{v}_D = \vec{v} - \vec{v}_{th}$ (409)
	v_{th} thermische Geschwindigkeit

Mittlere freie Weglänge	$\ell = \langle v \rangle \tau$ (410)
-------------------------	---------------------------------------

Elektrische Mobilität / Beweglichkeit Leichtigkeit mit der sich durch ein Elektrisches Feld beeinflusstes Teilchen im Material bewegt	Symbol: μ Unit: $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
	$\mu = \frac{q\tau}{m}$ (411)
	q Ladung, m Masse, τ Streuzeit

35.1 2D Elektronengas

Niederdimensionale Elektronengase erhält man, wenn ein 3D Gas durch unendlich hohe Potentialwände auf einem schmalen Bereich mit Breite L eingeschränkt wird.

Confinement Energie Erhöht die Grundzustandsenergie	$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2}$ (412)
---	---

Energie	$E_n = \underbrace{\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_e}}_{x-y: \text{ ebene Welle}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} n^2}_z$ (413)
---------	--

35.2 1D Elektronengas / Quantendraht

Energie	$E_n = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_z^2} n_1^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_y^2} n_2^2$ (414)
---------	--

TODO:conductance

35.3 0D Elektronengase / Quantenpunkt

TODO:TODO

36 Ladungstransport

36.1 Drude-Modell

Ein klassisches Model zur Beschreibung der Transporteigenschaften von Elektronen in (v.a.) Metallen: Der Festkörper wird als Ionenkristall mit frei beweglichen Elektronen (Elektronengas). Die Elektronen werden durch ein Elektrisches Feld E beschleunigt und durch Stöße mit den Gitterionen gebremst. Das Modell vernachlässigt die Fermi-Dirac Verteilung der Leitungselektronen.

Bewegungsgleichung	$m_e \frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{m_e}{\tau} \vec{v}_D = -e\vec{E}$ (415)
	v Elektronengeschwindigkeit, \vec{v}_D Driftgeschwindigkeit, τ Stoßzeit

Streuzeit Momentum relaxation time	Symbol: τ Unit: 1 s
	τ the average time between scattering events weighted by the characteristic momentum change cause by the scattering process.

Stromdichte Ohmsches Gesetz	Symbol: \vec{j} Unit: 1 A/m ²
	$\vec{j} = -ne\vec{v}_D = ne\mu\vec{\mathcal{E}} \quad (416)$ n Ladungsträgerdichte

Drude-Leitfähigkeit	$\sigma = \frac{\vec{j}}{\vec{\mathcal{E}}} = \frac{e^2\tau n}{m_e} = ne\mu \quad (417)$
---------------------	--

36.2 Sommerfeld-Modell

Annahme eines freien Fermionengases, welches dem Pauli-Prinzip unterliegt. Nur Elektronen in einem Energiebereich von $k_B T$ um die Fermi Energie E_F nehmen an Streuprozessen teil.

Elektrische Stromdichte	$\vec{j} = -en \langle v \rangle = -en \frac{\hbar}{m_e} \langle \vec{k} \rangle = -e \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar \vec{k}}{m_e} \quad (418)$
-------------------------	---

TODO: The formula for the conductivity is the same as in the drude model?

36.3 Boltzmann-Transport

Semiklassische Beschreibung, benutzt eine Wahrscheinlichkeitsverteilung (stat:todo:fermidirac).

Boltzmann-Transportgleichung für Ladungstransport	$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f - \frac{e}{\hbar} (\vec{\mathcal{E}} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f + \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{scatter}} \quad (419)$ $f ??$
---	---

36.4 misc

Tsu-Esaki Tunnelstrom Beschreibt den Strom $I_{L \leftrightarrow R}$ durch eine Barriere	$I_T = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} (f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)) T(E) dE \quad (420)$ μ_i ??? : chemicalpot links/rechts, U_i Spannung links/rechts. Elektronen besetzen Bereich zwischen U_i und μ_i
---	--

Kontinuitätsgleichung der Ladung Elektrische Ladung kann sich nur durch die Stärke des Stromes ändern	$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j} \quad (421)$ ρ Ladungsdichte, \vec{j} Stromdichte
--	---

37 Supraleitung

Materialien, bei denen der elektrische Widerstand beim unterschreiten einer kritischen Temperatur T_c auf 0 springt. Sie verhalten sich dann wie ideale Leiter und ideale Diamagnete, bis zu einem kritischen Feld B_c .

Ideale Leiter	Im Gegensatz zu einem Supraleiter werden ideale Leiter nur dann diamagnetisch, wenn das externe magnetische Feld nach dem Abkühlen unter die kritische Temperatur eingeschaltet wird. (ed:fields:mag:induction:lenz)
Meißner-Ochsenfeld Effekt Idealer Diamagnetismus	Externes Magnetfeld fällt im Supraleiter exponentiell unterhalb einer kritischen Temperatur und unterhalb einer kritischen Feldstärke ab.

37.1 London-Gleichungen

Quantitative Beschreibung des **Meißner-Ochsenfeld Effekts**.

Erste London-Gleichung	$\frac{\partial \vec{j}_s}{\partial t} = \frac{n_s q_s^2}{m_s} \vec{E} - \mathcal{O}(\vec{j}_s^2) \quad (422)$ <p>\vec{j} Stromdichte, n_s, m_s, q_s Dichte, Masse und Ladung der supraleitenden Teilchen</p>
------------------------	---

Zweite London-Gleichung Beschreibt den Meißner-Ochsenfeld Effekt	$\vec{\nabla} \times \vec{j}_s = -\frac{n_s q_s^2}{m_s} \vec{B} \quad (423)$ <p>\vec{j} Stromdichte, n_s, m_s, q_s Dichte, Masse und Ladung der supraleitenden Teilchen</p>
---	---

London Eindringtiefe	$\lambda_L = \sqrt{\frac{m_s}{\mu_0 n_s q_s^2}} \quad (424)$
----------------------	--

37.2 Ginzburg-Landau Theorie (GLAG)

TODO:TODO

Ginzburg-Landau Kohärenzlänge	$\xi_{GL} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m \alpha }} \quad (425)$
	$\xi_{GL}(T) = \xi_{GL}(0) \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}} \quad (426)$

Ginzburg-Landau Eindringtiefe	$\lambda_{GL} = \sqrt{\frac{m_s \beta}{\mu_0 \alpha q_s^2}} \quad (427)$
	$\lambda_{GL}(T) = \lambda_{GL}(0) \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}} \quad (428)$

Erste Ginzburg-Landau Gleichung

$$\alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi + \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} + 2e\vec{A})^2\Psi = 0 \quad (429)$$

ξ_{GL} Ginzburg-Landau Kohärenzlänge, λ_{GL} Ginzburg-Landau Eindringtiefe

Zweite Ginzburg-Landau Gleichung

$$\vec{j}_s = \frac{ie\hbar}{m}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*) - \frac{4e^2}{m}|\Psi|^2\vec{A} \quad (430)$$

TODO:proximity effect

37.3 Mikroskopische Theorie

Isotopeneffekt
Supraleitung hängt von der Atommasse und daher von den Gittereigenschaften ab
⇒Mikroskopischer Ursprung

$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \quad (431)$$

$$\omega_{\text{ph}} \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \Rightarrow T_c \propto \omega_{\text{ph}} \quad (432)$$

T_c kritische Temperatur, M Isotopen-Masse, ω_{ph}

Cooper-Paars

Conduction electrons reduce their energy through an attractive interaction: One electron passing by atoms attracts the these, which creates a positive charge region behind the electron, which in turn attracts another electron.

37.3.1 BCS-Theorie

Elektronenpaar bilden bosonische Quasipartikel (Cooper Paare) welche in den Grundzustand kondensieren können. Die Wellenfunktion überspannt den gesamten Festkörper, was einen widerstandslosen Ladungstransport garantiert. Die Austauschbosonen zwischen den Elektronen sind Bosonen.

BCS Hamiltonian for N interacting electrons

$$\hat{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \quad (433)$$

$c_{\vec{k}\sigma}$ creation/annihilation operators create/destroy at \vec{k} with spin σ

First term: non-interacting free electron gas

Second term: interaction energy

Bogoliubov-Valatin transformation
Diagonalization of the BCS Hamiltonian to derive excitation energies

$$\hat{H}_{\text{BCS}} - N\mu = \sum_{\vec{k}} [\xi_{\vec{k}} - E_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}} g_{\vec{k}}^*] + \sum_{\vec{k}} [E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + E_{\vec{k}} \beta_{-\vec{k}}^{\dagger} \beta_{-\vec{k}}] \quad (434)$$

BCS-gap equation

$$\Delta_{\vec{k}}^* = - \sum_{\vec{k}'}^+ V_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}'}}{2k_{\text{B}}T}\right) \quad (435)$$

38 Halbleiter

Intrinsisch/Extrinsisch	Intrinsisch: Pur, Elektronendichte gegeben durch thermische Anregung und $n_i^2 = n_0 p_0$ Extrinsisch: gedoped n, p Ladungsträgerdichte im Equilibrium																																				
Ladungsträgerdichte im Equilibrium Gilt wenn $\frac{E_c - E_F}{k_B T} > 3.6$ und $\frac{E_F - E_v}{k_B T} > 3.6$	$n_0 \approx N_c(T) \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) \quad (436)$ $p_0 \approx N_v(T) \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T}\right) \quad (437)$																																				
Intrinsische Ladungsträgerdichte	$n_i \approx \sqrt{n_0 p_0} = \sqrt{N_c(T) N_v(T)} \exp\left(-\frac{E_{\text{gap}}}{2k_B T}\right) \quad (438)$																																				
Massenwirkungsgesetz Ladungsträgerdichten im Equilibrium, unabhängig der Dotierung	$np = n_i^2 \quad (439)$																																				
Bandlücken wichtiger Halbleiter	<table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>$E_{\text{gap}}(0\text{ K})[\text{eV}]$</th> <th>$E_{\text{gap}}(300\text{ K})[\text{eV}]$</th> <th></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Diamant</td> <td>5,48</td> <td>5,47</td> <td>indirect</td> </tr> <tr> <td>Si</td> <td>1,17</td> <td>1,12</td> <td>indirect</td> </tr> <tr> <td>Ge</td> <td>0,75</td> <td>0,66</td> <td>indirect</td> </tr> <tr> <td>GaP</td> <td>2,32</td> <td>2,26</td> <td>indirect</td> </tr> <tr> <td>GaAs</td> <td>1,52</td> <td>1,43</td> <td>direct</td> </tr> <tr> <td>InSb</td> <td>0,24</td> <td>0,18</td> <td>direct</td> </tr> <tr> <td>InP</td> <td>1,42</td> <td>1,35</td> <td>direct</td> </tr> <tr> <td>CdS</td> <td>2.58</td> <td>2.42</td> <td>direct</td> </tr> </tbody> </table>		$E_{\text{gap}}(0\text{ K})[\text{eV}]$	$E_{\text{gap}}(300\text{ K})[\text{eV}]$		Diamant	5,48	5,47	indirect	Si	1,17	1,12	indirect	Ge	0,75	0,66	indirect	GaP	2,32	2,26	indirect	GaAs	1,52	1,43	direct	InSb	0,24	0,18	direct	InP	1,42	1,35	direct	CdS	2.58	2.42	direct
	$E_{\text{gap}}(0\text{ K})[\text{eV}]$	$E_{\text{gap}}(300\text{ K})[\text{eV}]$																																			
Diamant	5,48	5,47	indirect																																		
Si	1,17	1,12	indirect																																		
Ge	0,75	0,66	indirect																																		
GaP	2,32	2,26	indirect																																		
GaAs	1,52	1,43	direct																																		
InSb	0,24	0,18	direct																																		
InP	1,42	1,35	direct																																		
CdS	2.58	2.42	direct																																		
Minoritäts- / Majoritätsladungstraäger	Majoritätsladungstraäger: höhere Teilchenzahl (e^- in n-Typ, h^+ in p-Typ) Minoritätsladungstraäger: niedrigere Teilchenzahl (h^+ in n-Typ, e^- in p-Typ)																																				

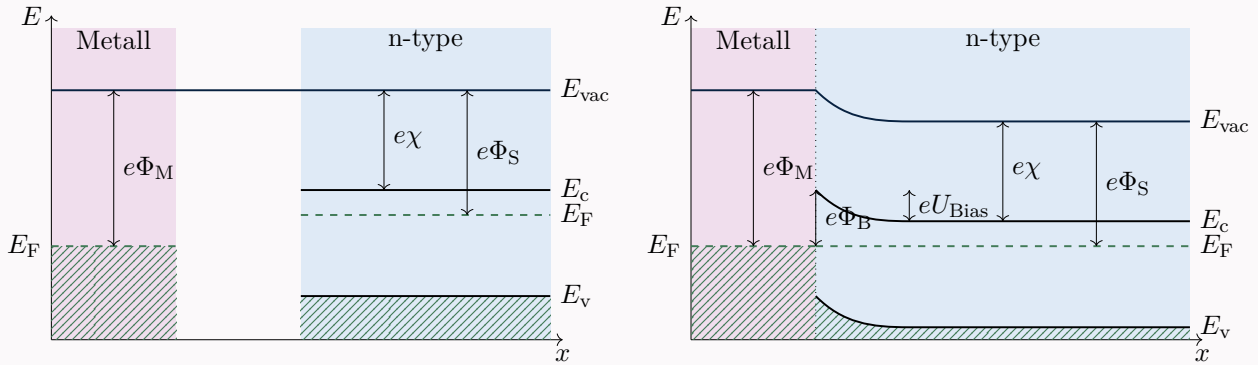
TODO:effective mass approx

38.1 Bauelemente und Kontakte

Metall-Halbleiter Kontakt

□

Schottky barrier : Rectifying cm:sc:junctions:metal-sc



TODO: Work function electron affinity sind doch Energien und keine Potentiale, warum wird also immer q davor geschrieben?

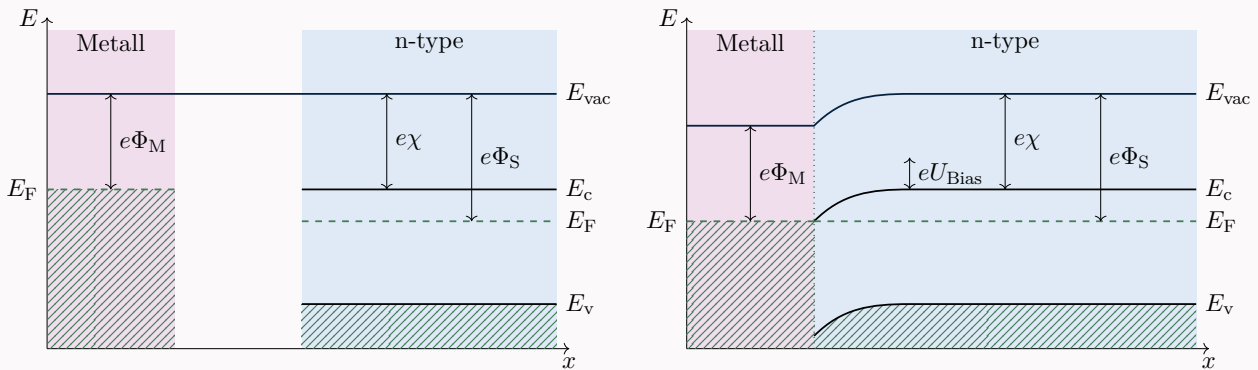
Schottky-Mott rule

$$\Phi_B \approx \Phi_M - \chi_{sc} \quad (440)$$

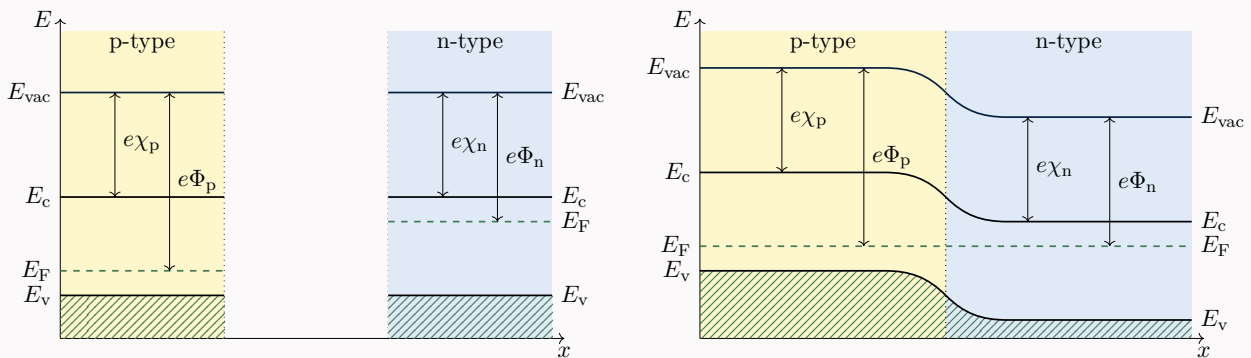
Φ_B barrier potential, Φ_M Metall Austrittsarbeit, χ_{sc} Elektronenaffinität

TODO: work function verhältnisse, wann ist es ohmsch wann depleted?

Ohmscher Kontakt



p-n Übergang



38.2 Exzitons

Exziton	<p>Quasiteilchen, Anregung im Festkörper als gebundenes Elektron-Loch-Paar</p> <p>Freie (Wannier) Exzitons: delokalisiert, über mehrere Einheitszellen</p> <p>Gebundene (Frenkel) Exzitons: lokalisiert in einer Einheitszelle</p>
Exciton Rydberg energy für freie Exzitons	$E(n) = - \left(\frac{\mu}{m_0 \epsilon_r^2} \right) R_H \frac{1}{n^2} \quad (441)$ <p>R_H Rydberg-Energy</p>
Exziton-Bohr Radius für freie Exzitons	$r_n = \left(\frac{m_e \epsilon_r a_B}{m\mu} \right) n^2 \quad (442)$ <p>???:relativepermittivity, a_0 Bohrscher Radius, m_e Elektronenmasse, $m\mu$ reducedmass</p>

39 Bändermodell

39.1 Hybridorbitale

Hybridorbitale werden durch Linearkombinationen von anderen atomorbitalen gebildet.

sp3 Orbital eg CH ₄	$1s + 3p = sp^3 \quad \text{🎈} \quad (443)$
sp2 Orbital	$1s + 2p = sp^2 \quad \text{🎈} \quad (444)$
sp Orbital	$1s + 1p = sp \quad \text{🎈} \quad (445)$

40 Diffusion

Diffusionskoeffizient	<p>Symbol: D</p> <p>Unit: $1 \text{ m}^2/\text{s}$</p>
Teilchenstromdichte Anzahl der Teilchen durch eine Fläche	<p>Symbol: J</p> <p>Unit: $1/\text{s}^2$</p>
Einsteinrelation Klassisch	$D = \frac{\mu k_B T}{q} \quad (446)$ <p>D Diffusionskoeffizient, μ Elektrische Mobilität / Beweglichkeit, T Temperatur, q Ladung</p>

Konzentration Eine Größe pro Volumen	Symbol: c Unit: 1 x/m^3
Erstes Ficksches Gesetz Teilchenbewegung ist proportional zum Konzentrationsgradienten	$J = -D \frac{c}{x} \quad (447)$ <p>J Teilchenstromdichte, D Diffusionskoeffizient, c Konzentration</p>
Zweites Ficksches Gesetz	$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (448)$ <p>J Teilchenstromdichte, D Diffusionskoeffizient, c Konzentration</p>

41 misc

Austrittsarbeit eng. "Work function"; minimale Energie um ein Elektron aus dem Festkörper zu lösen	Symbol: W Unit: 1 eV $W = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}} \quad (449)$
Elektronenaffinität Energie, die benötigt wird um ein Elektron aus einem einfach-negativ geladenen Anion zu entfernen. Entspricht der Energiedifferenz zwischen Vakuum-Niveau und dem Leitungsband	Symbol: χ Unit: 1 eV $\chi = (E_{\text{vac}} - E_{\text{c}}) \quad (450)$
Laser Light amplification by stimulated emission of radiation	<i>Gain medium</i> is energized <i>pumping energy</i> (electric current or light), light of certain wavelength is amplified in the gain medium

42 Messtechniken

42.1 Raman Spektroskopie

Raman-Spektroskopie

Anwendung	Vibrationsmoden, Kristallstruktur, Dotierung, Bandlücke, Schichtdicke im cm:misc:vdwmaterial
how	Monochromatisches Licht (Laser) bestrahlt Probe, inelastische Streuung durch Rotations-, Schwingungs-, Phonon und Spin-Flip-Prozesse, plotte Spektrum als Verschiebung gegen das Laser Licht (in cm^{-1})

Photolumeszenz-Spektroskopie

Anwendung	Kristallstruktur, Dotierung, Bandlücke, Schichtdicke im cm:misc:vdwmaterial
how	Monochromatisches Licht (Laser) bestrahlt Probe, Elektronen werden angeregt und relaxieren in das Leitungsband-Minimum und schließlich über die Bandlücke unter Photonemission

42.2 ARPES

what? in? how? plot

42.3 Rastersondenmikroskopie (SPM)

Bilder der Oberfläche einer Probe werden erstellt, indem die Probe mit einer Sonde abgetastet wird.
Atomare Rasterkraftmikroskopie (AMF)

Anwendung	Oberflächenzeug
how	Mit Nadel

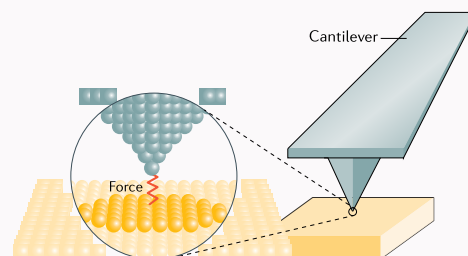


Abbildung 1: [?]

Rastertunnelmikroskop (STM)

Anwendung	Oberflächenzeug
how	Mit Tunnel

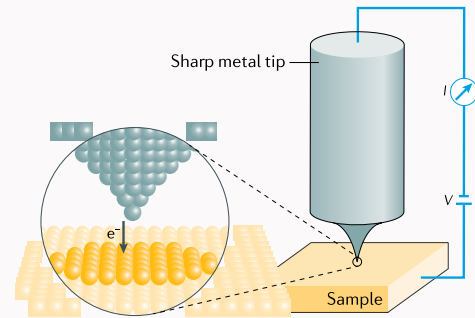
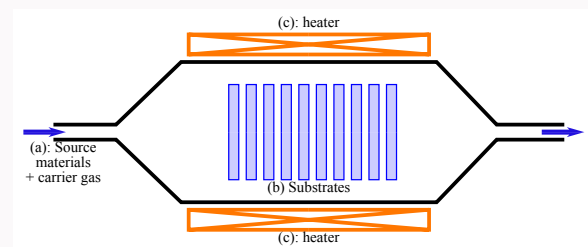


Abbildung 2: [?]

43 Herstellungsmethoden

Chemische Gasphasenabscheidung (CVD)

how	An der erhitzten Oberfläche eines Substrates wird aufgrund einer chemischen Reaktion mit einem Gas eine Feststoffkomponente abgeschieden. Nebenprodukte werden durch den Gasfluss durch die Kammer entfernt.
Anwendung	<ul style="list-style-type: none"> • Poly-silicon Si • Siliziumdioxid SiO_2 • Graphen • Diamant

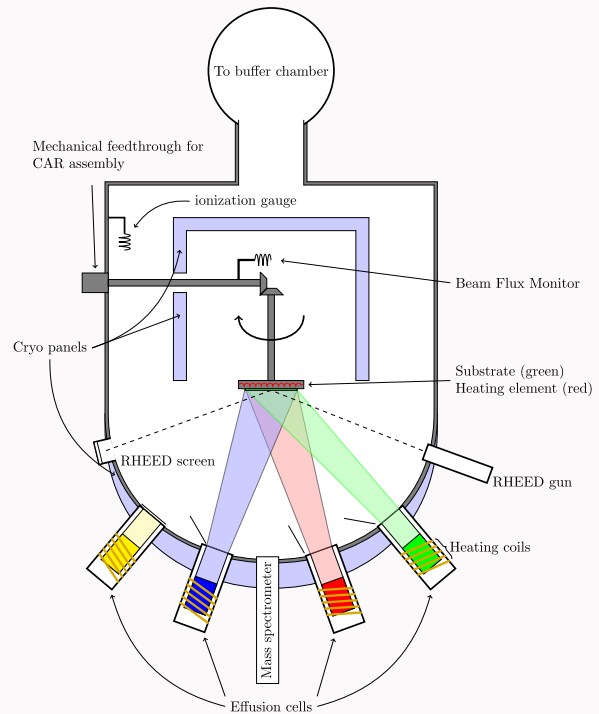


43.1 Epitaxie

Eine Art des Kristallwachstums, bei der mindestens eine kristallographische Ordnung der wachsenden Schicht der des Substrates entspricht.

Molekularstrahlepitaxie (MBE)

how	Die Elemente werden in einem Ultrahochvakuum erhitzt, bis sie langsam sublimieren. Die entstandenen Gase kondensieren dann auf der Oberfläche des Substrats
Anwendung	<ul style="list-style-type: none"> Galliumarsenid GaAs



44 Topologische Materialien

44.1 Berry-Phase / Geometrische Phase

Beim adiabatischem Durchlauf eines geschlossenen Weges durch den Parameterraum $R(t)$ kann die Wellenfunktion eines Systems eine zusätzliche Phase γ erhalten.

Wenn $\vec{R}(t)$ adiabatisch (langsam) variiert und das System anfangs im Eigenzustand $|n\rangle$ ist, bleibt das System während dem Prozess in einem Eigenzustand (Adiabatisches Theorem der Quantenmechanik).

Schrödinger Gleichung

$$H(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle = \epsilon(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle \quad (451)$$

Wellenfunktion

Nach vollem adiabatischem Umlauf in \vec{R}

$$|\psi_n(t)\rangle = \underbrace{e^{i\gamma_n(t)}}_{\text{Berry Phase}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \int^r \epsilon_n(\vec{R}(t')) dt}}_{\text{Dynamische Phase}} |n(\vec{R}(t))\rangle \quad (452)$$

Berry connection

$$A_n(\vec{R}) = i \langle \psi | \nabla_R | \psi \rangle \quad (453)$$

Berry-Krümmung
Eichinvariant

$$\vec{\Omega}_n = \vec{\nabla}_R \times A_n(\vec{R}) \quad (454)$$

Berry-Phase
Eichinvariant bis auf 2π

$$\gamma_n = \oint_C d\vec{R} \cdot A_n(\vec{R}) = \int_S d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_n(\vec{R}) \quad (455)$$

Chernzahl

Z.B. Anzahl der

Berry-Krümmungs-Monopole in der Brillouinzone (dann ist $\vec{R} = \vec{k}$). Ein *Chern-Isolator* ist ein 2D Isolator mit $C_n \neq 0$

Der Berry-Fluß durch eine geschlossene 2D Fläche ist quantisiert durch die **Chernzahl**. Bei erhaltener Zeitumkehrsymmetrie ist die Chernzahl 0.

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \oint d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_n(\vec{R}) \quad (456)$$

\vec{S} geschlossene Fläche im \vec{R} -Raum

Hall-Leitfähigkeit eines 2D
Band-Isolators

$$\bar{\sigma}_{xy} = \sum_n \frac{e^2}{h} \int_{\text{occupied}} d^2k \frac{\Omega_{xy}^n}{2\pi} = \sum_n C_n \frac{e^2}{h} \quad (457)$$

Topologischer Isolator

Ein 2D Isolator mit einer Chernzahl ungleich 0 wird **topologischer Isolator** genannt.

45 Materialphysik

Toruosität
Grad der Gewundenheit eines
Transportweges in einem
porösen Material.
Mehrere Definitionen
existieren

Symbol: τ
Unit:

$$\tau = \left(\frac{l}{L}\right)^2 \quad (458)$$

$$\tau = \frac{l}{L} \quad (459)$$

l Weglänge, L Distanz der Endpunkte

Spannung
(Engl. "stress") Kraft pro
Fläche

Symbol: σ
Unit: 1 N/m^2

$$[\sigma]_{ij} = \frac{F_i}{A_j} \quad (460)$$

\vec{F} Kraft, A Fläche

Dehnung
(Engl. "strain")

Symbol: ϵ
Unit:

$$\epsilon = \frac{\Delta x}{x_0} \quad (461)$$

Δx Auslenkung aus der Referenzposition x_0

Teil VIII

Teilchenphysik

Elektronenmasse	Symbol: m_e Experimenteller Wert $9.1093837139(28) \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
-----------------	---

Spin	Symbol: σ Unit:
------	---------------------------

Standartmodell

		generation			force carriers	
		I standard matter	II unstable matter	III		
Masse	→	2.3 MeV	1.275 GeV	173.2 GeV	0	125.1 GeV
Spin	→	1/2	1/2	1/2	1	0
Ladung	→	2/3	2/3	2/3	0	0
colors	→					
Quarks		u	c	t	g	H
		up	charm	top	gluon	Higgs
Leptonen		d	s	b	γ	
		down	strange	bottom	photon	
Leptonen		e	μ	τ	Z	
		electron	muon	tau		
Leptonen		ν_e	ν_μ	ν_τ	W_\pm	
		e neutrino	μ neutrino	τ neutrino		
		Fermionen			Bosonen	

Teil IX

Quantencomputing

46 Qubits

Bloch-Sphäre

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (462)$$

$$= \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi_\alpha} |0\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi_\beta} |1\rangle \quad (463)$$

$$= e^{i\phi_\alpha} \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |1\rangle \quad (464)$$

47 Gates

Gates

$$\text{Bitflip: } \hat{X} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (465)$$

$$\text{Bit-Phase flip: } \hat{Y} = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (466)$$

$$\text{Phaseflip: } \hat{Z} = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (467)$$

$$\text{Hadamard: } \hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - \hat{Z}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (468)$$

48 Supraleitende qubits

48.1 Bauelemente

48.1.1 Josephson-Kontakt

Wenn zwei Supraleiter durch einen dünnen Isolator getrennt sind, können Cooper-Paare durch den Isolator tunneln. Der Josephson-Kontakt ist ein nicht-linearer Induktor.

Josephson-Hamiltonian

$$\hat{H}_J = -\frac{E_J}{2} \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|] \quad (469)$$

1. Josephson Gleichung
Dissipationsloser Suprastrom
durch die Kreuzung ohne
angelegte Spannung

$$\hat{I} |\delta\rangle = I_C \sin \delta |\delta\rangle \quad (470)$$

$I_C = \frac{2e}{\hbar} E_J$ kritischer Strom, δ Phasendifferenz zwischen den
Supraleitern

2. Josephson Gleichung
Supraleitende Phasendifferenz
is proportional zur angelegten
Spannung

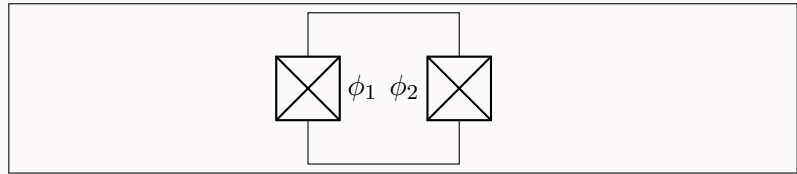
$$\frac{d\hat{\delta}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\delta}] = -\frac{2eU}{i\hbar} [\hat{n}, \hat{\delta}] = \frac{1}{\varphi_0} U \quad (471)$$

$\varphi_0 = \frac{\hbar}{2e}$ reduziertes Flussquantum

48.1.2 SQUID

SQUID

Superconducting quantum interference device, besteht aus parallelen nd kann zur Messung extrem schwacher Magnetfelder genutzt werden

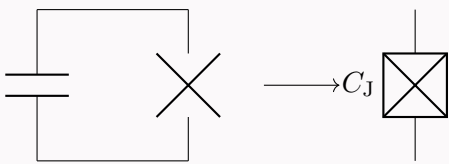


Hamiltonian

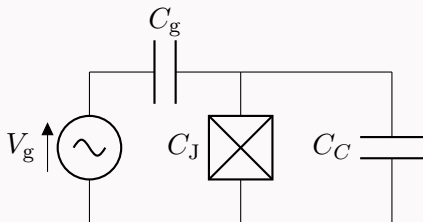
$$\hat{H} = -E_{J1} \cos \hat{\phi}_1 - E_{J2} \cos \hat{\phi}_2 \quad (472)$$

$\hat{\phi}$ Phasendifferenz an einer Junction

48.2 TODO



TODO:Include schaltplan



Ladeenergie?

$$E_C = \frac{(2e)^2}{C} \quad (473)$$

Josephson-Energie?

$$E_J = \frac{I_0 \phi_0}{2\pi} \quad (474)$$

TODO:Was ist I0

Induktive Energie

$$E_L = \frac{\varphi_0^2}{L} \quad (475)$$

Gate Ladung
auch Offset charge

$$n_g = \frac{C_g V_g}{2e} \quad (476)$$

Anharmonizität

$$\alpha := \omega_{1 \leftrightarrow 2} - \omega_{0 \leftrightarrow 1} \quad (477)$$

		$E_L/(E_J - E_L)$			
		0	$\ll 1$	~ 1	$\gg 1$
$\frac{E_J}{E_C}$	$\ll 1$	cooper-pair box			
	~ 1	quantronium	fluxonium		
	$\gg 1$	transmon			flux qubit
	$\gg\gg 1$			phase qubit	

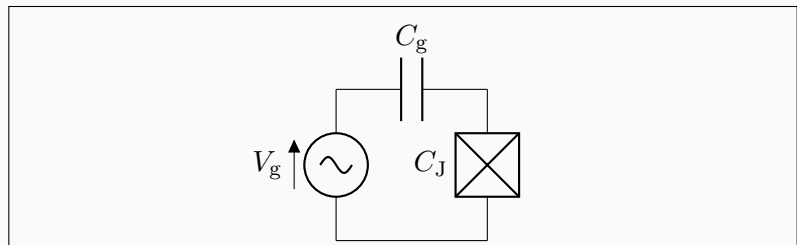
48.3 Cooper Paar Box (QPB) Qubit

= voltage bias junction

= charge qubit?

Cooper Pair Box / Charge Qubit

- Große Anharmonizität
- Sensibel für charge noise



Hamiltonian

$$\hat{H} = 4E_C(\hat{n} - n_g)^2 - E_J \cos \hat{\phi} \quad (478)$$

$$= \sum_n \left[4E_C(n - n_g)^2 |n\rangle \langle n| - \frac{E_J}{2} |n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n| \right] \quad (479)$$

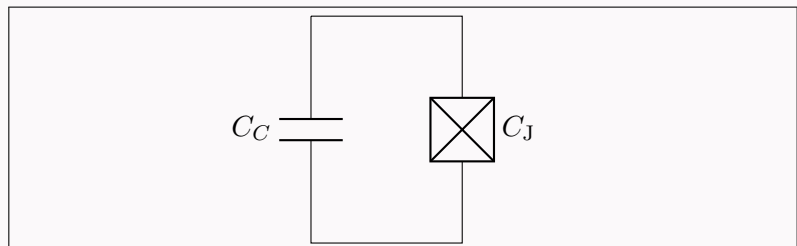
48.4 Transmon Qubit

Transmon Qubit

Josephson-Kontakt mit einem parallelen **kapazitiven**

Element.

- Charge noise resilient
- Geringe Anharmonizität α

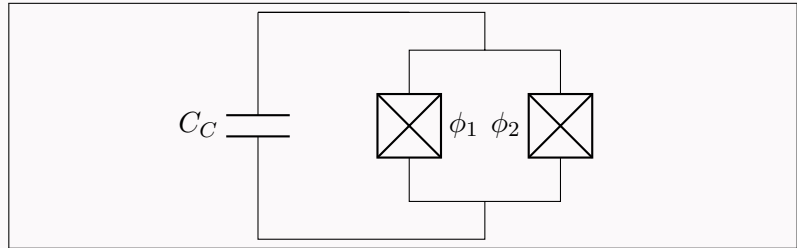


Hamiltonian

$$\hat{H} = 4E_C \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\phi} \quad (480)$$

48.4.1 Tunable Transmon Qubit

Frequency tunable transmon
 Durch Nutzung eines SQUID
 anstatt eines Josephson-Kontakts, ist die
 Frequenz des Qubits durch
 ein externes Magnetfeld
 einstellbar



Josephson Energie

$$E_{J,\text{eff}}(\Phi_{\text{ext}}) = (E_{J1} + E_{J2}) \sqrt{\cos^2\left(\pi \frac{\Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0}\right) + d^2 \sin^2\left(\pi \frac{\Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0}\right)} \quad (481)$$

$d = (E_{J1} - E_{J2}) / (E_{J1} + E_{J2})$ Asymmetrie

Hamiltonian

$$\hat{H} = 4E_C \hat{n}^2 - \frac{1}{2} E_{J,\text{eff}}(\Phi_{\text{ext}}) \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|] \quad (482)$$

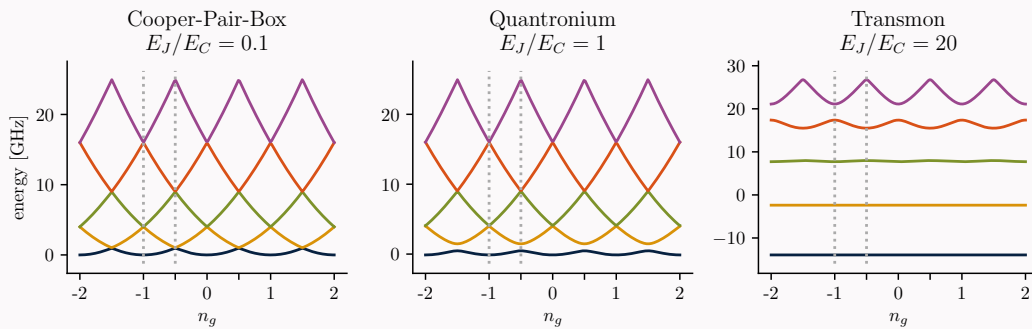
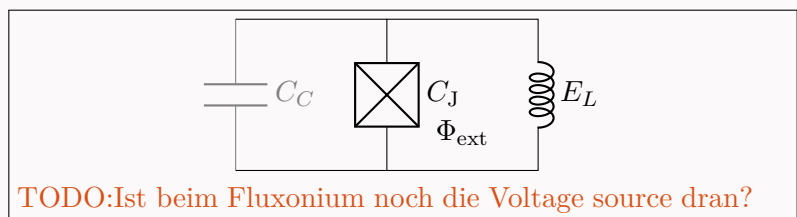


Abbildung 3: Transmon and so TODO

48.5 Phase Qubit

Phase Qubit



Hamiltonian

$$\hat{H} = E_C \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\delta} + E_L (\hat{\delta} - \delta_s)^2 \quad (483)$$

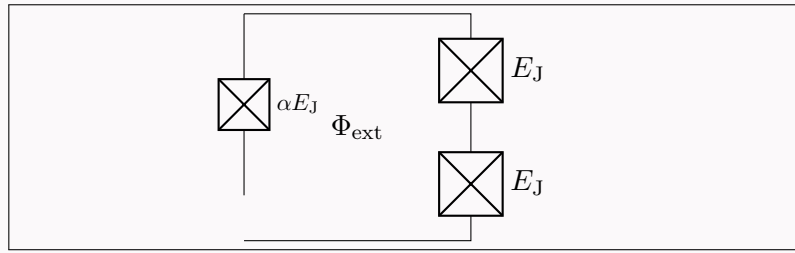
$$\delta = \frac{\phi}{\phi_0}$$

This is only a test

48.6 Flux Qubit

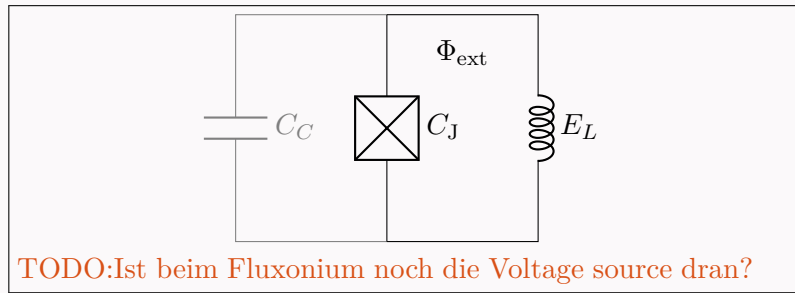
TODO: TODO

Flux Qubit / Persistent current qubit



48.7 Fluxonium Qubit

Fluxonium Qubit
Josephson-Kontakt mit einem parallelen **induktiven Element**. Anstatt zu tunneln, können die Cooper-Paare über das induktive Element auf die Insel gelangen. Das induktive Element besteht aus sehr vielen parallelen Josephson-Kontakten um parasitische Kapazitäten zu vermeiden.



TODO:Ist beim Fluxonium noch die Voltage source dran?

Hamiltonian

$$\hat{H} = 4E_C \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\delta} + E_L (\hat{\delta} - \delta_s)^2 \quad (484)$$

$$E_C = \frac{(2e)^2}{2C}, E_L = \frac{\varphi_0^2}{2L}, \delta_s = \frac{\varphi_s}{\varphi_0}$$

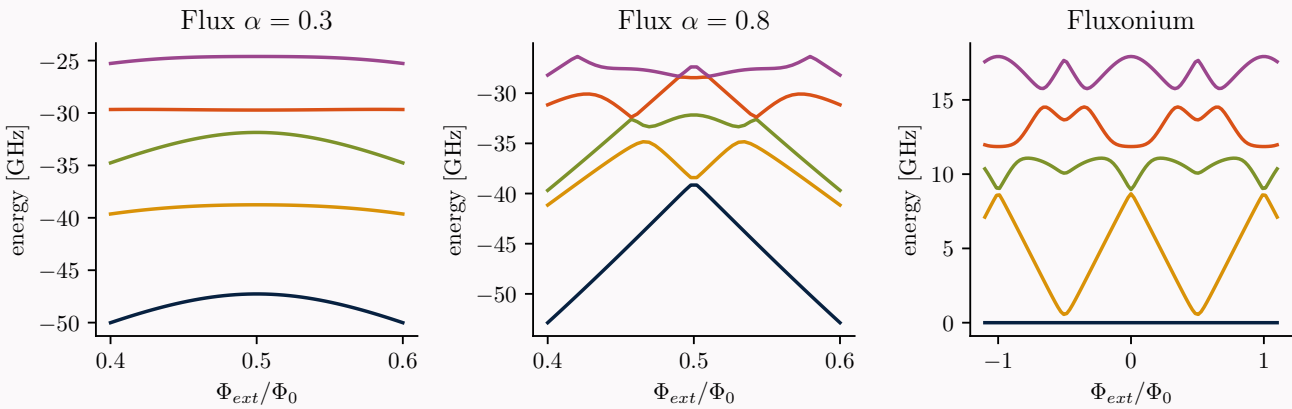


Abbildung 4: img/

49 Zwei-Niveau System

Ressonanzfrequenz

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (485)$$

TODO:sollte das nicht 10 sein?

Rabi-Oszillationen

$$\Omega_{\text{TODO:TODO}} \quad (486)$$

ω_{21} Resonanzfrequenz des Energieübergangs, Ω Rabi-Frequenz

49.1 Ramsey Interferometrie

q

50 Noise und Dekohärenz

Longitudinale Relaxationsrate

$\Gamma_{1\downarrow}$: $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$
 $\Gamma_{1\uparrow}$: $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$

$$\Gamma_1 = \frac{1}{T_1} = \Gamma_{1\uparrow} + \Gamma_{1\downarrow} \quad (487)$$

$\Gamma_{1\uparrow}$ ist bei niedrigen Temperaturen unterdrückt wegen detailed balance

Reine Phasenverschiebung

$$\Gamma_\phi \quad (488)$$

Transversale Relaxationsrate

$$\Gamma_2 = \frac{1}{T_2} = \frac{\Gamma_1}{2} + \Gamma_\phi \quad (489)$$

Bloch-Redfield Dichtematrix
2-Niveau System schwach an
Noise Quellen mit kurzer
Korrelationszeit gekoppelt

$$\rho_{\text{BR}} = \begin{pmatrix} 1 + (|\alpha|^2 - 1) e^{-\Gamma_1 t} & \alpha \beta^* e^{-\Gamma_2 t} \\ \alpha^* \beta e^{-\Gamma_2 t} & |\beta|^2 e^{-\Gamma_1 t} \end{pmatrix} \quad (490)$$

Teil X

Computergestützte Physik

51 Quanten-Vielteilchenphysik

51.1 Quanten-Vielteilchenmodelle

Homogeneous electron gas (HEG)
Also "Jellium"

Both positive (nucleus) and negative (electron) charges are distributed uniformly.

51.2 Methoden

51.2.1 Quantum Monte-Carlo

TODO:TODO

51.3 Importance sampling / Stichprobenentnahme nach Wichtigkeit

TODO:Monte Carlo

51.4 Matrix Produktzustände

52 Electronic structure theory

Kinetische Energie
von Spezies i

$$\hat{T}_i = - \sum_{n=1}^{N_i} \frac{\hbar^2}{2m_i} \vec{\nabla}_n^2 \quad (491)$$

i = Nukleonen/Elektronen, N Teilchenzahl, m Masse

Elektrostatistisches Potential
zwischen Spezies i und j

$$\hat{V}_{i \leftrightarrow j} = - \sum_{k,l} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{r}_k - \vec{r}_l|} \quad (492)$$

i, j = nucleons/electrons, r particle position, Z_i charge of species i , e Elementarladung

Electronic structure
Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + V_{e \leftrightarrow e} + V_{n \leftrightarrow e} + V_{n \leftrightarrow n} \quad (493)$$

\hat{T} Kinetische Energie, \hat{V} Elektrostatistisches Potential, e electrons, n nucleons

Molekularfeldnäherung
Ersetzt 2-Teilchen Operator
durch 1-Teilchen Operator

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \approx \sum_i V_{\text{eff}}(\vec{r}_i) \quad (494)$$

Beispiel für Coulomb Wechselwirkung zwischen Elektronen

52.1 Modell der stark gebundenen Elektronen / Tight-binding

Annahmen

- Atomic wave functions are localized \Rightarrow Small overlap, interaction cutoff

Tight-binding Hamiltonian
in zweiter Quantisierung

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_{i,j} t_{i,j} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) \quad (495)$$

$\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ Erzeugungs / Vernichtungs-Operatoren erzeugen/vernichten ein Elektron auf Platz i , ϵ_i on-site Energie, $t_{i,j}$ hopping Amplitude, meist werden ϵ und t aus experimentellen Daten oder anderen Methoden bestimmt

52.2 Dichtefunktionaltheorie (DFT)

52.2.1 Hartree-Fock

Beschreibung

- Assumes wave functions are **Slater Determinante** \Rightarrow Approximation
- **Molekularfeldnäherung** theory obeying the Pauli principle
- Self-interaction free: Self interaction is cancelled out by the Fock-term

Hartree-Fock Gleichung

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_{\text{en}} + \hat{V}_{\text{HF}}^\xi \right) \varphi_\xi(x) = \epsilon_\xi \varphi_\xi(x) \quad (496)$$

φ_ξ ein-Teilchen Wellenfunktion des ξ -ten Orbitals, \hat{T} kinetische Energie der Elektronen, \hat{V}_{en} Electron-Kern Anziehung, \hat{V}_{HF} comp:dft:hf:potential

Hartree Fock Potential

$$V_{\text{HF}}^\xi(\vec{r}) = \sum_{\vartheta} \int d\vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \left(\underbrace{|\varphi_\xi(x')|^2}_{\text{Hartree-Term}} - \underbrace{\frac{\varphi_\vartheta^*(x') \varphi_\xi(x') \varphi_\vartheta(x)}{\varphi_\xi(x)}}_{\text{Fock-Term}} \right) \quad (497)$$

Self-consistent field cycle

1. Initial guess for ψ
2. Solve SG for each particle
3. Make new guess for ψ

52.2.2 Hohenberg-Kohn Theoreme

Hohenberg-Kohn Theorem
(HK1)

Die Elektronendichte des Grundzustandes $n(\vec{r})$ bestimmt ein einzigartiges \hat{V}_{ext} eines Systems aus interagierenden Elektronen bis auf eine Konstante.

Hohenberg-Kohn Theorem
(HK2)

Für ein Energiefunktional $E[n(\vec{r})]$ kann die Grundzustandsdichte und Energie durch systematische Variation bestimmt werden. Die Dichte, welche die Gesamtenergie minimiert ist die exakte Grundzustandsdichte.

Grundzustandselektronendichte

$$n(\vec{r}) = \left\langle \psi_0 \left| \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right| \psi_0 \right\rangle \quad (498)$$

52.2.3 Kohn-Sham DFT

<p>Kohn-Sham Map</p>	<p>Maps fully interacting system of electrons to a system of non-interacting electrons with the same ground state density $n'(\vec{r}) = n(\vec{r})$</p> <hr/> $n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{r}) ^2 \quad (499)$
<p>Kohn-Sham Funktional</p>	$E_{\text{KS}}[n(\vec{r})] = T_{\text{KS}}[n(\vec{r})] + V_{\text{ext}}[n(\vec{r})] + E_{\text{H}}[n(\vec{r})] + E_{\text{XC}}[n(\vec{r})] \quad (500)$ <p>T_{KS} kinetic energy, V_{ext} external potential, E_{H} Hartree term, E_{XC} Exchange-Correlation Funktional</p>
<p>Kohn-Sham Gleichung Exakte Einteilchen-SE (allerdings ist das exakte E_{XC} oft nicht bekannt) Die Lösung der Gleichung macht einen großen Teil der Supercomputer Ressourcen aus</p>	$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_{\text{ext}}(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{ \vec{r} - \vec{r}' } + \frac{\partial E_{\text{X}}[n(\vec{r})]}{\partial n(\vec{r})} + \frac{\partial E_{\text{C}}[n(\vec{r})]}{\partial n(\vec{r})} \right\} \phi_i^{\text{KS}}(\vec{r}) = \epsilon_i^{\text{KS}} \phi_i^{\text{KS}}(\vec{r}) \quad (501)$ <p>ϕ_i^{KS} KS orbitals, $\int d^3r v_{\text{ext}}(\vec{r})n(\vec{r}) = V_{\text{ext}}[n(\vec{r})]$</p>
<p>Self-consistent field cycle for Kohn-Sham</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Initial guess for $n(\vec{r})$ 2. Calculate effective potential V_{eff} 3. Solve Kohn-Sham Gleichung 4. Calculate density $n(\vec{r})$ 5. Repeat 2-4 until self consistent

52.2.4 Exchange-Correlation Funktionale

<p>Exchange-Correlation Funktional</p>	$E_{\text{XC}}[n(\vec{r})] = \langle \hat{T} \rangle - T_{\text{KS}}[n(\vec{r})] + \langle \hat{V}_{\text{int}} \rangle - E_{\text{H}}[n(\vec{r})] \quad (502)$ <hr/> <p>Accounts for:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Kinetic energy difference between interaction and non-interacting system • Exchange energy due to Pauli principle • Correlation energy due to many-body Coulomb interaction (not accounted for in mean field Hartree term E_{H})
<p>Local density approximation (LDA) Simplest DFT functionals</p>	$E_{\text{XC}}^{\text{LDA}}[n(\vec{r})] = \int d^3r n(r) [\epsilon_{\text{X}}[n(\vec{r})] + \epsilon_{\text{C}}[n(\vec{r})]] \quad (503)$ <p>ϵ_{X} calculated exchange energy from HEG model, ϵ_{C} correlation energy calculated with Quantum Monte-Carlo</p>

Generalized gradient approximation (GGA)

$$E_{XC}^{GGA}[n(\vec{r})] = \int d^3r n(r) \epsilon_X[n(\vec{r})] F_{XC}[n(\vec{r}), \vec{\nabla}n(\vec{r})] \quad (504)$$

ϵ_X calculated exchange energy from HEG model, F_{XC} function containing exchange-correlation energy dependency on n and $\vec{\nabla}n$

TODO:PBE

Hybride Funktionale

$$\alpha E_X^{HF} + (1 - \alpha) E_X^{GGA} + E_C^{GGA} \quad (505)$$

Include Fock term (exact exchange) in other functional, like GGA . Computationally expensive
 α mixing paramter, E_X exchange energy, E_C correlation energy

Range separated hybrid functionals (RSH)
 Here HSE as example

$$\frac{1}{r} = \frac{\text{erf}(\omega r)}{r} + \frac{\text{erfc} \omega r}{r} \quad (506)$$

$$E_{XC}^{HSE} = \alpha E_{X,SR}^{HF}(\omega) + (1 - \alpha) E_{X,SR}^{GGA}(\omega) + E_{X,LR}^{GGA}(\omega) + E_C^{GGA} \quad (507)$$

Use GGA and Fock exchange for short ranges (SR) and only GGA??? for long ranges (LR). GGA??? correlation is always used. Useful when dielectric screening reduces long range interactions, saves computational cost.
 α mixing paramter, E_X exchange energy, E_C correlation energy

Vergleich von DFT Funktionalen

Hartree-Fock	only exchange, no correlation \Rightarrow upper bound of GS energy
LDA	underestimates e repulsion \Rightarrow Overbinding
GGA	underestimate band gap
hybrid	underestimate band gap

52.2.5 Basis-Sets

Ebene Wellen als Basis
 Plane wave ansatz in Kohn-Sham Gleichung
 Good for periodic structures, allows computation parallelization over a sample points in the brillouin_zone???

$$\sum_{\vec{G}'} \left[\frac{\hbar^2 |\vec{G} + \vec{k}|^2}{2m} \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + V_{\text{eff}}(\vec{G} - \vec{G}') \right] c_{i, \vec{k}, \vec{G}'} = \epsilon_{i, \vec{k}} c_{i, \vec{k}, \vec{G}} \quad (508)$$

Plane wave cutoff
 Number of plane waves included in the calculation must be finite

$$E_{\text{cutoff}} = \frac{\hbar^2 |\vec{k} + \vec{G}|^2}{2m} \quad (509)$$

52.2.6 Pseudopotentialmethode

Ansatz	Core electrons are absorbed into the potential since they do not contribute much to interesting properties.
--------	---

53 Atomic dynamics

Hamiltonian der Elektronen	$\hat{H}_e = \hat{T}_e + V_{e \leftrightarrow e} + V_{n \leftrightarrow e} \quad (510)$ <p>\hat{T} Kinetische Energie, \hat{V} Elektrostatisches Potential, e electrons, n nucleons</p>
----------------------------	---

Wellenfunktion Ansatz	$\psi_{\text{en}}^n(\{\vec{r}, \sigma\}, \{\vec{R}\}) = \sum_i c^{ni}(\{\vec{R}\}) \psi_e^i(\{\vec{r}, \sigma\}, \{\vec{R}\}) \quad (511)$ <p>ψ_{en}^n eigenstate n of Electronic structure Hamiltonian, ψ_e^i eigenstate i of comp:ad:bo:hamiltonian, \vec{r}, \vec{R} electron/nucleus positions, σ electron spin, c^{ni} coefficients</p>
-----------------------	---

Equation	$\left[E_e^j(\{\vec{R}\}) + \hat{T}_n + V_{n \leftrightarrow n} - E^n \right] c^{nj} = - \sum_i \Lambda_{ij} c^{ni}(\{\vec{R}\}) \quad (512)$
----------	--

Exact nonadiabtic coupling operator Electron-phonon couplings / electron-vibrational couplings	$\Lambda_{ij} = \int d^3r (\psi_e^j)^* \left(- \sum_I \frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{R}_I}^2}{2M_I} \right) \psi_e^i + \sum_I \frac{1}{M_I} \int d^3r \left[(\psi_e^j)^* (-i\hbar \nabla_{\vec{R}_I}) \psi_e^i \right] (-i\hbar \nabla_{\vec{R}_I}) \quad (513)$ <p>ψ_e^i electronic states, \vec{R} nucleus position, M nucleus Masse</p>
--	--

53.1 Born-Oppenheimer Näherung

Adiabatische Näherung Elektronenkonfiguration bleibt gleich bei Bewegung der Atome gleichl ()	$\Lambda_{ij} = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad (514)$ <p>Λ_{ij} Exact nonadiabtic coupling operator</p>
---	--

Born-Oppenheimer Näherung	$\Lambda_{ij} = 0 \quad (515)$
Elektronen werden nicht durch die Bewegung der Atome beeinflusst	<p>comp:ad:bo:equation \Rightarrow</p> $\left[E_e^i(\{\vec{R}\}) + \hat{T}_n - E^n \right] c^{ni}(\{\vec{R}\}) = 0 \quad (516)$ <p>see Equation, $V_{n \leftrightarrow n} = \text{const}$ absorbed into E_e^j</p>

Born-Oppenheimer Potentialhyperfläche Die Nukleonen Newtons klassischen Bewegungsgleichungen auf der BO Hyperfläche wenn das System im elektronischen Grundzustand ist	$V_{\text{BO}}(\{\vec{R}\}) = E_e^0(\{\vec{R}\}) \quad (517)$ $M_I \ddot{\vec{R}}_I(t) = -\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} V_{\text{BO}}(\{\vec{R}(t)\}) \quad (518)$ <p>E_e^0, ψ_e^0 niedrigster Eigenwert/Eigenzustand vom comp:ad:bo:hamiltonian</p>
---	---

Ansatz für Born-Oppenheimer Näherung

Produkt aus einem einzelnen elektronischen Zustand und einem Nukleus-Zustand

$$\psi_{\text{BO}} = c^{n_0}(\{\vec{R}\}) \psi_e^0(\{\vec{r}, \sigma\}, \{\vec{R}\}) \quad (519)$$

Limitationen

- Nuclei velocities must be small and electron energy state differences large
- Nuclei need spin for effects like spin-orbit coupling
- Nonadiabatic effects in photochemistry, proteins

Valid when Massey parameter $\xi \gg 1$

$$\xi = \frac{\tau_n}{\tau_e} = \frac{L \Delta E}{\hbar |\dot{\vec{R}}|} \quad (520)$$

τ passage of time for electrons/nuclei, L characteristic length scale of atomic dynamics, $\dot{\vec{R}}$ nuclear velocity, ΔE difference between two electronic states

53.2 Strukturoptimierung

Kräfte

$$\vec{F}_I = -\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} E \stackrel{\text{Hellmann-Feynman-Theorem}}{=} - \left\langle \psi(\vec{R}_I) \left| \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} \hat{H}(\vec{R}_I) \right) \right| \psi(\vec{R}) \right\rangle \quad (521)$$

Ionic cycle

Self-consistent field cycle for Kohn-Sham for geometry optimization

1. Initial guess for $n(\vec{r})$
 - (a) Calculate effective potential V_{eff}
 - (b) Solve Kohn-Sham Gleichung
 - (c) Calculate density $n(\vec{r})$
 - (d) Repeat b-d until self consistent
2. Calculate Kräfte
3. If $F \neq 0$, get new geometry by interpolating R and re-start

Transformation der Atompositionen unter Spannung

$$R_\alpha([\epsilon]_{\alpha\beta}) = \sum_\beta (\delta_{\alpha\beta} + [\epsilon]_{\alpha\beta}) R_\beta(0) \quad (522)$$

$\alpha, \beta = 1, 2, 3$ Positionskomponenten, R Position, $R(0)$ Position ohne Dehnung, $[\epsilon]$ Dehnung Tensor

Spannungstensor

$$[\sigma]_{\alpha,\beta} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial [\epsilon]_{\alpha\beta}} \right)_{[\epsilon]=0} \quad (523)$$

Ω unit cell volume, $[\epsilon]$ Dehnung tensor

Pulay-Spannung

$$N_{\text{PW}} \propto E_{\text{cut}}^{\frac{3}{2}} \propto |\vec{G}_{\text{max}}|^3 \quad (524)$$

Number of plane waves N_{PW} depends on E_{cut} . If G changes during optimization, N_{PW} may change, thus the basis set can change. This typically leads to too small volumes.

53.3 Gitterschwingungen

Force constant matrix

$$\Phi_{IJ}^{\mu\nu} = \left(\frac{\partial^2 V(\{\vec{R}\})}{\partial R_I^\mu \partial R_J^\nu} \right)_{\{\vec{R}_I\}=\{\vec{R}_I^0\}} \quad (525)$$

Harmonische Näherung
Hesse matrix, Taylor
Entwicklung der
Born-Oppenheimer
Potentialhyperfläche in
zweiter Ordnung um
Atomposition \vec{R}_I^0

$$V^{\text{BO}}(\{\vec{R}_I\}) \approx V^{\text{BO}}(\{\vec{R}_I^0\}) + \frac{1}{2} \sum_{I,J} \sum_{\mu,\nu} s_I^\mu s_J^\nu \Phi_{IJ}^{\mu\nu} \quad (526)$$

$\Phi_{IJ}^{\mu\nu}$ Force constant matrix, s displacement

53.3.1 Finite difference method

Approximation
Assume forces in equilibrium
structure vanish

$$\Phi_{IJ}^{\mu\nu} \approx \frac{\vec{F}_I^\mu(\vec{R}_1^0, \dots, \vec{R}_J^0 + \Delta s_J^\nu, \dots, \vec{R}_N^0)}{\Delta s_J^\nu} \quad (527)$$

Δs displacement of atom J

Dynamical matrix
Mass reduced fourier
transform of the Force
constant matrix

$$D_{\alpha\beta}^{\mu\nu} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(n-n') e^{i\vec{q}(\vec{L}_n - \vec{L}_{n'})} \quad (528)$$

\vec{L} vector from origin to unit cell n , α/β atom index in th unit cell, \vec{q} wavevector, Φ Force constant matrix, M Masse

Eigenwertgleichung
For a periodic crystal, reduces
number of equations from
 $3N_p \times N$ to $3N_p$. Eigenvalues
represent phonon band
structure.

$$\omega^2 \vec{c}(\vec{q}) = \underline{D}(\vec{q}) \vec{c}(\vec{q}) \quad (529)$$

N_p number of atoms per unit cell, \vec{c} displacement amplitudes,
 \vec{q} wavevector, \underline{D} Dynamical matrix

53.3.2 Anharmonische Ansätze

Quasi-harmonic
approximation

Include thermal expansion by assuming Born-Oppenheimer
Potentialhyperfläche is volume dependant.

Pertubative approaches

Expand Force constant matrix to third order.

53.4 Molekulardynamik

Beschreibung	<ul style="list-style-type: none"> • Exact (within previous approximations) approach to treat anharmonic effects in materials. • Computes time-dependant observables. • Assumes fully classical nuclei. • Macroscropical observables from statistical ensembles • System evolves in time (ehrenfest). Number of points to consider does NOT scale with system size. • Exact because time dependance is studied explicitly, not via harmonic approx. <p>TODO:cleanup</p>
Ablauf von MD Simulationen	<ol style="list-style-type: none"> 1. Initialize with optimized geometry, interaction potential, ensemble, integration scheme, temperature/pressure control 2. Equilibrate to desired temperature/pressure (eg with statistical starting velocities) 3. Production run, run MD long enough to calculate desired observables

53.4.1 Ab-initio molecular dynamics

Born-Oppenheimer MD (BOMD)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Calculate electronic ground state of current nuclei configuration $\{\vec{R}(t)\}$ with KS-DFT 2. Calculate forces from the Born-Oppenheimer Potentialhyperfläche 3. Update positions and velocities <ul style="list-style-type: none"> • äb-initio no empirical information required • Many expensive DFT calculations
Car-Parrinello MD (CPMD)	<p>Evolve electronic wave function φ (adiabatically) along with the nuclei \Rightarrow only one full KS-DFT</p> $M_I \frac{d^2 \vec{R}_I}{dt^2} = -\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} E[\{\varphi_i\}, \{\vec{R}_I\}] \quad (530)$ $\mu \frac{d^2 \varphi_i(\vec{r}, t)}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \varphi_i^*(\vec{r}, t)} E[\{\varphi_i\}, \{\vec{R}_I\}] + \sum_j \lambda_{ij} \varphi_j(\vec{r}, t) \quad (531)$ <p>μ electron orbital mass, φ_i KS-DFT eigenststate, λ_{ij} Lagrange multiplier</p>

53.4.2 Force-field MD

Force field MD (FFMD)	<ul style="list-style-type: none"> • Use empirical interaction potential instead of electronic structure • Force fields need to be fitted for specific material \Rightarrow not transferable • Faster than BOMD • Example:
-----------------------	---

53.4.3 Integration schemes

Procedures for updating positions and velocities to obey the equations of motion.

Euler-Verfahren Prozedur um gewöhnliche DGLs mit Anfangsbedingungen in erster Ordnung zu lösen. Taylor Entwicklung von $\vec{R}/\vec{v}(t + \Delta t)$	$\vec{R}(t + \Delta t) = \vec{R}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (532)$ $\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (533)$
	Cumulative error scales linearly $\mathcal{O}(\Delta t)$. Not time reversible.

Verlet-Algorithmus Zeitumkehr-symmetrisch	$\vec{R}(t + \Delta t) = 2\vec{R}(t) - \vec{R}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (534)$
--	--

Velocity-Verlet integration	$\vec{R}(t + \Delta t) = \vec{R}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (535)$ $\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)}{2}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (536)$
-----------------------------	---

TODO:leapfrog

53.4.4 Thermostate und Barostate

Velocity rescaling Thermostat, keep temperature at T_0 by rescaling velocities. Does not allow temperature fluctuations and thus does not obey the	$\Delta T(t) = T_0 - T(t) \quad (537)$ $= \sum_I \frac{M_I (\lambda \vec{v}_I(t))^2}{f k_B} - \sum_I \frac{M_I \vec{v}_I(t)^2}{f k_B} \quad (538)$ $= (\lambda^2 - 1)T(t) \quad (539)$
	$\lambda = \sqrt{\frac{T_0}{T(t)}} \quad (540)$ <p>T target Temperatur, M Masse of nucleon I, \vec{v} Geschwindigkeit, f number of degrees of freedom, λ velocity scaling parameter, k_B Boltzmann-Konstante</p>

Berendsen thermostat Does not obey but efficiently brings system to target temperature	$\frac{dT}{dt} = \frac{T_0 - T}{\tau} \quad (541)$
---	--

Nosé-Hoover Thermostat Control the temperature with by time stretching with an associated mass. Compliant with	$d\tilde{t} = \tilde{s} dt \quad (542)$ $\mathcal{L} = \sum_{I=1}^N \frac{1}{2} M_I \tilde{s}^2 v_i^2 - V(\tilde{R}_1, \dots, \tilde{R}_I, \dots, \tilde{R}_N) + \frac{1}{2} Q \dot{\tilde{s}}^2 - g k_B T_0 \ln \tilde{s} \quad (543)$ <p>s scaling factor, Q associated mass, \mathcal{L}, g degrees of freedom</p>
--	---

53.4.5 Berechnung von Observablen

Spektraldichte Wiener-Khinchin Theorem of	$S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau C(\tau) e^{-i\omega\tau} \quad (544)$
---	--

Vibrationszustandsdicht (VDOS)	$g(\omega) \sim \sum_{I=1}^N M_I S_{v_I}(\omega) \quad (545)$
	S_{v_i} velocity Spektraldichte of particle I

54 Maschinelles Lernen

54.1 Metriken zur Leistungsmessung

Genauigkeit	$a = \frac{\text{richtige Vorhersagen}}{\text{falsche Vorhersagen} + \text{richtige Vorhersagen}} \quad (546)$
-------------	--

TODO: is n the number of predictions or the number of output features?

Mittlerer absoluter Fehler (MAE)	$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i - \hat{y}_i \quad (547)$
	y Wahrheit, \hat{y} Vorhersage, n ?

Standardfehler der Regression Quadratwurzel des mittleren quadratischen Fehlers (RSME)	$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (548)$
	y Wahrheit, \hat{y} Vorhersage, n ?

54.2 Regression

54.2.1 Lineare Regression

Lineare Regression Fitted Daten unter der Annahme normalverteilter Fehler	$\underline{y} = \underline{b} + \underline{x} \cdot \vec{W} \quad (549)$
	$\underline{x} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ input data, $\underline{y} \in \mathbb{R}^{N \times L}$ output data, \underline{b} bias, \vec{W} weights, N samples, M features, L output variables

Designmatrix Ansatz Stack column of ones to the feature vector Useful when b is scalar	$\underline{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1M} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \dots & x_{NM} \end{pmatrix} \quad (550)$
	x_{ij} feature j of sample i

Lineare Regression mit skalarem Bias Durch die Designmatrix wird der Bias in den Gewichtsvektor absorbiert	$\underline{y} = \underline{X} \cdot \vec{W} \quad (551)$
	\underline{y} output data, \underline{X} comp:ml:reg:designmatrix, \vec{W} weights

Normalgleichung
Löst Lineare Regression mit
skalarem Bias

$$\vec{W} = (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \underline{X}^T \underline{y} \quad (552)$$

\underline{y} output data, \underline{X} Designmatrix Ansatz, \vec{W} weights

54.2.2 Ridge Regression

TODO:ridge reg, Kernel ridge reg, gaussian process reg

54.3 Gradientenverfahren

TODO:in lecture 30 CMP

Teil XI Chemie

55 Periodensystem

	<ul style="list-style-type: none"> ■ metalloid ■ nonmetal ■ alkalimetal ■ transitionmetal ■ lanthanoide <ul style="list-style-type: none"> ■ Metall ■ halogen ■ noblegas ■ alkalineearthmetal 																															
1																	2															
1	H 1.008																	He 4.003														
2	Li 6.946	Be 9.012																	Ne 20.180													
3	Na 22.990	Mg 24.305																	Ar 39.948													
4	K 39.098	Ca 40.078	Sc 44.956	Ti 47.867	V 50.942	Cr 51.996	Mn 54.938	Fe 55.845	Co 58.933	Ni 58.693	Cu 63.546	Zn 65.382	Ga 69.723	Ge 72.631	As 74.922	Se 78.972	Br 79.905	Kr 83.798														
5	Rb 85.468	Sr 87.621	Y 88.906	Zr 91.224	Nb 92.906	Mo 95.951	Tc 98.906	Ru 101.072	Rh 102.906	Pd 106.421	Ag 107.868	Cd 112.414	In 114.818	Sn 118.711	Sb 121.760	Te 127.603	I 126.904	Xe 131.294														
6	Cs 132.905	Ba 137.328	La 138.905	Hf 178.492	Ta 180.948	W 183.841	Re 186.207	Os 190.233	Ir 192.217	Pt 195.085	Au 196.967	Hg 200.592	Tl 204.382	Pb 207.210	Bi 208.980	Po 209.980	At 209.987	Rn 222.000														
7	Fr 223.020	Ra 226.025	Ac 227.028	Rf 261.109	Db 262.114	Sg 263.118	Bh 262.123	Hs 265.269	Mt 268.000	Ds 281.000	Rg 280.000	Cn 277.000	Nh 287.000	Fl 289.000	Mc 288.000	Lv 293.000	Ts 292.000	Og 294.000														
																			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
																			Ce 140.116	Pr 140.908	Nd 144.242	Pm 146.915	Sm 150.362	Eu 151.964	Gd 157.253	Tb 158.925	Dy 162.500	Ho 164.930	Er 167.259	Tm 168.934	Yb 173.045	Lu 174.967
																			90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
																			Th 232.038	Pa 231.036	U 238.029	Np 237.048	Pu 244.064	Am 243.061	Cm 247.070	Bk 247.000	Cf 251.000	Es 252.000	Fm 257.095	Md 258.000	No 259.000	Lr 266.000

56 Elektrochemie

Chemisches Potential
der Spezies i

Involvierte Energie, wenn sich
die Teilchenzahl ändert

Symbol: μ
Unit: 1 J/mol; J

$$\mu_i \equiv \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{n_j \neq n_i, p, T} \quad (553)$$

??? ???: gibbsfreeenergy, n Stoffmenge

Standard chemisches
Potential
In equilibrium

$$\mu_i = \mu_i^\theta + RT \ln(a_i) \quad (554)$$

μ Chemisches Potential, R Universelle Gaskonstante, T Temperatur, a Aktivität

Chemisches Gleichgewicht

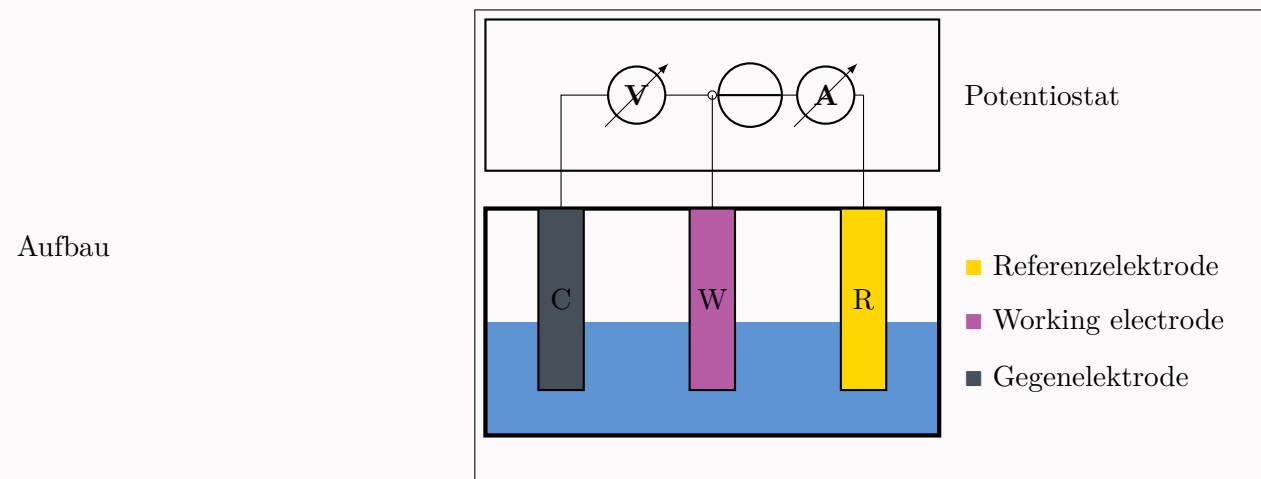
$$\sum_{\text{products}} \nu_i \mu_i = \sum_{\text{educts}} \nu_i \mu_i \quad (555)$$

μ Chemisches Potential, ν Stöchiometrischer Koeffizient

Aktivität Relative Aktivität	Symbol: a Unit:
	$a_i = \exp\left(\frac{\mu_i - \mu_i^\theta}{RT}\right) \quad (556)$
μ Chemisches Potential, μ_i^θ standardchemicalpotential, R Universelle Gaskonstante, T Temperatur	

Elektrochemisches Potential Chemisches Potential mit elektrostatischen Energiebeiträgen	Symbol: $\bar{\mu}$ Unit: 1 J/mol; J
	$\bar{\mu}_i \equiv \mu_i + z_i F \phi \quad (557)$
μ Chemisches Potential, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, ϕ Elektrisches Potential (Galvanisches Potential)	

56.1 Elektrochemische Zelle



Arten der Elektrochemische Zelle	<ul style="list-style-type: none"> • Elektrolytische Zelle: Nutzt elektrische Energie um eine Reaktion zu erzwingen • Galvanische Zelle: Produziert elektrische Energie durch eine chemische Reaktion
----------------------------------	---

Faradäischer Prozess	Ladung wird zwischen Elektrode und dem Elektrolyten transferiert.
----------------------	---

Nicht-Faradäischer (kapazitiver) Prozess	Ladung lagert sich am Elektrode-Elektrolyt Interface an.
--	--

Elektrodenpotential	Symbol: E Unit: 1 V
---------------------	--------------------------

Standard Zellpotential	$E_{\text{rev}}^\theta = \frac{-\Delta_{\text{R}}G^\theta}{nF} \quad (558)$
$\Delta_{\text{R}}G^\theta$ Standard Gibbs free energy der Reaktion, n Anzahl der Elektronen, F Faraday-Konstante	

Nernst-Gleichung
Elektrodenpotential für eine
Halbzellenreaktion

$$E = E^\theta + \frac{RT}{zF} \ln \left(\frac{(\prod_i (a_i)^{\nu_i})_{\text{oxidized}}}{(\prod_i (a_i)^{\nu_i})_{\text{reduced}}} \right) \quad (559)$$

E Elektrodenpotential, E^θ Standard Zellpotential, R Univer-
selle Gaskonstante, T temperature, z Ladungszahl, F
Faraday-Konstante, a Aktivität, ν Stöchiometrischer Koeffi-
zient

Thermodynamische
Zelleffizienz

$$\eta_{\text{cell}} = \frac{P_{\text{obtained}}}{P_{\text{maximum}}} = \frac{E_{\text{cell}}}{E_{\text{cell,rev}}} \quad \text{galvanisch} \quad (560)$$

$$\eta_{\text{cell}} = \frac{P_{\text{minimum}}}{P_{\text{applied}}} = \frac{E_{\text{cell,rev}}}{E_{\text{cell}}} \quad \text{electrolytisch} \quad (561)$$

P Elektrische Leistung

56.2 Ionische Leitung in Elektrolyten

Diffusion
durch
Konzentrationsgradienten

$$i_{\text{diff}} = \sum_i -z_i F D_i \left(\frac{dc_i}{dx} \right) \quad (562)$$

z_i Ladungszahl des Ions i , F Faraday-Konstante, D_i dif-
fusionconstant des Ions i , c Konzentration des Ions i

Migration
durch Potentialgradienten

$$i_{\text{mig}} = \sum_i -z_i^2 F^2 c_i \mu_i \nabla \Phi_s \quad (563)$$

z_i Ladungszahl des Ions i , F Faraday-Konstante, c Konzen-
tration des Ions i , μ Elektrische Mobilität / Beweglichkeit des
Ions i , $\nabla \phi_s$ Potentialgradient in der Lösung

Convection
durch Druckgradienten

$$i_{\text{conv}} = \sum_i -z_i F c_i v_i^{\text{flow}} \quad (564)$$

z_i Ladungszahl des Ions i , F Faraday-Konstante, c Konzen-
tration des Ions i , v_i^{flow} Geschwindigkeit des Ions i im fließenden
Elektrolyt

Ionische Leitfähigkeit

Symbol: κ

Unit: $1 \Omega^{-1} \text{cm} = 1 \text{S cm}^{-1}$

$$\kappa = F^2 (z_+^2 c_+ \mu_+ + z_-^2 c_- \mu_-) \quad (565)$$

F Faraday-Konstante, z_i , c_i , μ_i Ladungszahl, Konzentration
und Elektrische Mobilität / Beweglichkeit der positiv (+) und
negativ geladenen Ionen

Ohmscher Widerstand für
Ionen-Strom

$$R_\Omega = \frac{L}{A \kappa} \quad (566)$$

L Länge, A Fläche, κ Ionische Leitfähigkeit

<p>Ionische Mobilität</p>	<p>Symbol: u_{\pm} Unit: $1 \text{ cm}^2 \text{ mol} / \text{Js}$</p> <hr/> $u_{\pm} = -\frac{v_{\pm}}{\nabla\phi z_{\pm}F} = \frac{e}{6\pi F\eta_{\text{dyn}}r_{\pm}} \quad (567)$ <p>v_{\pm} steady state drift Geschwindigkeit, ϕ Elektrisches Potential, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, e Elementarladung, η, μ Dynamisch Viskosität, r_{\pm} ion radius</p>
<p>Gesetz von Stokes Reibungskraft auf ein sphärisches Objekt in einer Flüssigkeit bei niedriger Reynolds-Zahl</p>	$F_R = 6\pi r\eta v \quad (568)$ <p>r Teilchenradius, η, μ Dynamisch Viskosität, v Teilchengeschwindigkeit</p>
<p>Überföhrungszahl Anteil der positiv / negativ geladenen Ionen am Gesamtstrom</p>	$t_{+/-} = \frac{i_{+/-}}{i_{+} + i_{-}} \quad (569)$ <p>$i_{+/-}$ Strom durch positive / negative Ladungn</p>
<p>Molare Leitfähigkeit</p>	<p>Symbol: Λ_M Unit: $1 \text{ Scm}^2 / \text{mol} = 1 \text{ Acm}^2 / \text{Vmol}$</p> <hr/> $\Lambda_M = \frac{\kappa}{c_{\text{salt}}} \quad (570)$ <p>κ Ionische Leitfähigkeit, c_{salt} ch:el:ioncond:salt</p>
<p>Kohlrausch's law</p>	$\Lambda_M = \Lambda_M^0 - K\sqrt{c_{\text{salt}}} \quad (571)$ <p>Λ_M^0 Molare Leitfähigkeit bei unendlicher Verdünnung, salt Konzentration des Elektrolyts K constant</p>
<p>Molalität</p>	<p>Symbol: b Unit: 1 mol kg^{-1}</p> <hr/> $b = \frac{n}{m} \quad (572)$ <p>n Stoffmenge des gelösten Stoffs, m Masse des Lösungsmittels</p>
<p>Molarität see Konzentration</p>	<p>Symbol: c Unit: 1 mol L^{-1}</p> <hr/> $c = \frac{n}{V} \quad (573)$ <p>n Stoffmenge des gelösten Stoffs, V Volumen des Lösungsmittels</p>

Ionenstärke
Maß einer Lösung für die elektrische Feldstärke durch gelöste Ionen

Symbol: I
Unit: 1 mol/kg; mol/L

$$I_b = \frac{1}{2} \sum_i b_i z_i^2 \quad (574)$$

$$I_c = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2 \quad (575)$$

b Molalität, c Molarität, z Ladungszahl

Debye-Länge / Abschirmlänge

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{2 N_A e^2 I_C}} \quad (576)$$

N_A Avogadro-Konstante, e Elementarladung, I Ionenstärke, ϵ Permittivität, k_B Boltzmann-Konstante, T Temperatur

Mittlerer ionischer Aktivitätskoeffizient
Berücksichtigt dass Ionen sich erst von ihrer Ionenwolke lösen müssen, bevor sie reagieren können

Symbol: γ
Unit:

$$\gamma_{\pm} = (\gamma_+^{\nu_+} \gamma_-^{\nu_-})^{\frac{1}{\nu_+ + \nu_-}} \quad (577)$$

Debye-Hückel Gesetz
Für eine unendlich verdünnte Lösung

$$\ln(\gamma_{\pm}) = -A |z_+ z_-| \sqrt{I_b} \quad (578)$$

γ Mittlerer ionischer Aktivitätskoeffizient, A solvent dependant constant, z Ladungszahl, I Ionenstärke in [mol kg⁻¹]

56.3 Kinetik

Durchtrittsfaktor
Transferkoeffizient
Anteil des Potentials der sich auf die freie Reaktionsenthalpie des anodischen Prozesses auswirkt

$$\alpha_A = \alpha \quad (579)$$

$$\alpha_C = 1 - \alpha \quad (580)$$

Überspannung

Abweichung der Spannung von der Zellspannung im Gleichgewicht

Aktivierungsüberspannung

$$\eta_{act} = E_{electrode} - E_{ref} \quad (581)$$

$E_{electrode}$ Potential bei der die Reaktion beginnt, E_{ref} thermodynamisches Potential der Reaktion

56.3.1 Massentransport

Konzentrationsüberspannung

Durch einen Konzentrationsgradienten an der Elektrode müssen Ionen erst zur Elektrode **diffundieren**, bevor sie reagieren können

$$\eta_{\text{conc,anodic}} = -\frac{RT}{\alpha zF} \ln\left(\frac{c_{\text{red}}^0}{c_{\text{red}}^S}\right) \quad (582)$$

$$\eta_{\text{conc,cathodic}} = -\frac{RT}{(1-\alpha)zF} \ln\left(\frac{c_{\text{ox}}^0}{c_{\text{ox}}^S}\right) \quad (583)$$

R Universelle Gaskonstante, T Temperatur, $0/S$ ion concentration in the electrolyte / at the double layer, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante

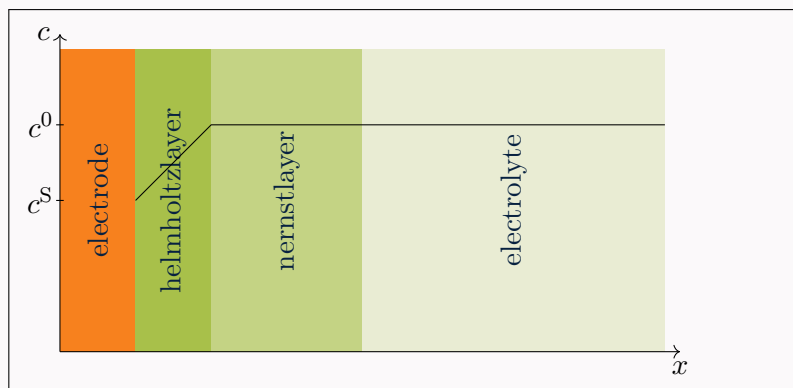
Diffusionsüberspannung

Durch Limit des Massentransports

$$\eta_{\text{diff}} = \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{j_{\infty}}{j_{\infty} - j_{\text{meas}}}\right) \quad (584)$$

j_{∞} (Limiting) current density, j_{meas} measured Stromdichte, R Universelle Gaskonstante, T Temperatur, n Ladungszahl, F Faraday-Konstante

Zellschichten



Dicke der Nernstschen Diffusionsschicht

$$\delta_N = \frac{c^0 - c^S}{\left.\frac{dc}{dx}\right|_{x=0}} \quad (585)$$

c^0 Bulk-Konzentration, c^S Oberflächen-Konzentration

(Limiting) current density

$$|j| = nFD \frac{c^0 - c^S}{\delta_{\text{diff}}} \quad (586)$$

für $c^S \rightarrow 0$

$$|j_{\infty}| = nFD \frac{c^0}{\delta_{\text{diff}}} \quad (587)$$

n Z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, c^0 Bulk-Konzentration, D Diffusionskoeffizient, δ_{diff} Dicke der Nernstschen Diffusionsschicht

Strom - Konzentrationsbeziehung

$$\frac{j}{j_{\infty}} = 1 - \frac{c^S}{c^0} \quad (588)$$

c^0 Bulk-Konzentration, c^S Oberflächen-Konzentration, j (Limiting) current density

Kinetische Stromdichte

$$j_{\text{kin}} = \frac{j_{\text{meas}} j_{\infty}}{j_{\infty} - j_{\text{meas}}} \quad (589)$$

j_{meas} gemessene Stromdichte, j_{∞} (Limiting) current density

Roughness factor
Surface area related to
electrode geometry

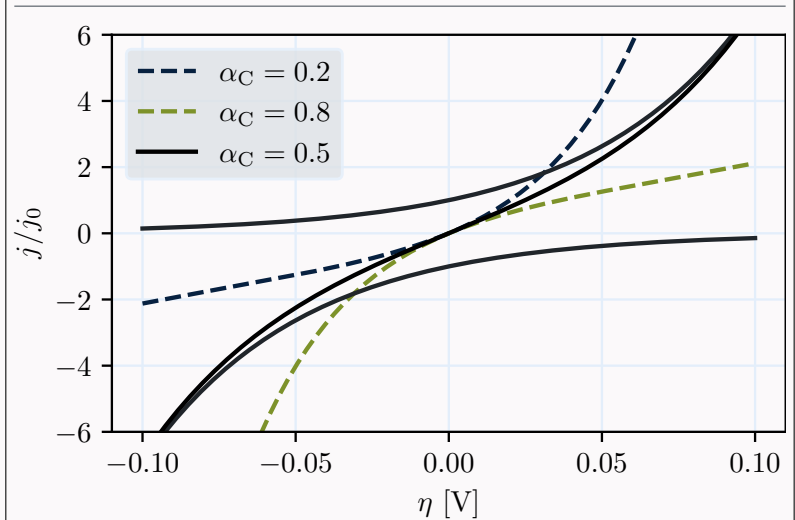
$$\text{rf} \quad (590)$$

$$j = j_0 \text{rf} \left[\exp\left(\frac{(1 - \alpha_C)zF\eta}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_C zF\eta}{RT}\right) \right] \quad (591)$$

with

$$\alpha_A = 1 - \alpha_C \quad (592)$$

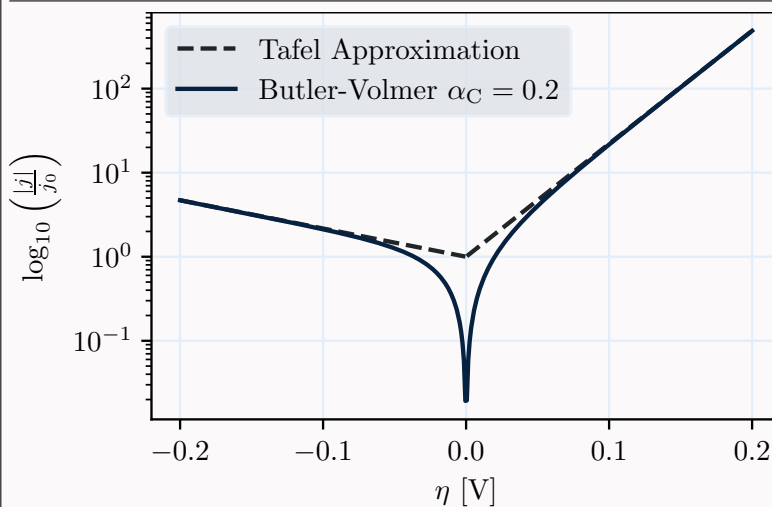
Butler-Volmer-Gleichung
Reaktionskinetik in der Nähe
des Gleichgewichtspotentials



j Stromdichte, j_0 Austauschstromdichte, η Überspannung, T Temperatur, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, R Universelle Gaskonstante, $\alpha_{C/A}$ Ladungstransferkoeffizient an der Kathode/Anode, rf Roughness factor

$$\log(j) \approx \log(j_0) + \frac{\alpha_C z F \eta}{RT \ln(10)} \quad \eta \gg 0,1 \text{ V} \quad (593)$$

$$\log(|j|) \approx \log(j_0) - \frac{(1 - \alpha_C) z F \eta}{RT \ln(10)} \quad \eta \ll -0,1 \text{ V} \quad (594)$$



Tafel Näherung
Für langsame Kinetik:
 $|\eta| > 0,1 \text{ V}$

56.4 Techniken

56.4.1 Referenzelektroden

Definiert als Referenz für Messungen von Potentialen von Halbzellen

Standardwasserstoffelektrode
(SHE)

Potential der Reaktion: $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightleftharpoons \text{H}_2$
 $p = 10^5 \text{ Pa}$, $a_{\text{H}^+} = 1 \text{ mol L}^{-1}$ ($\Rightarrow \text{pH} = 0$)

Reversible
Wasserstoffelektrode (RHE)
Potential ändert sich nicht
mit dem pH-Wert

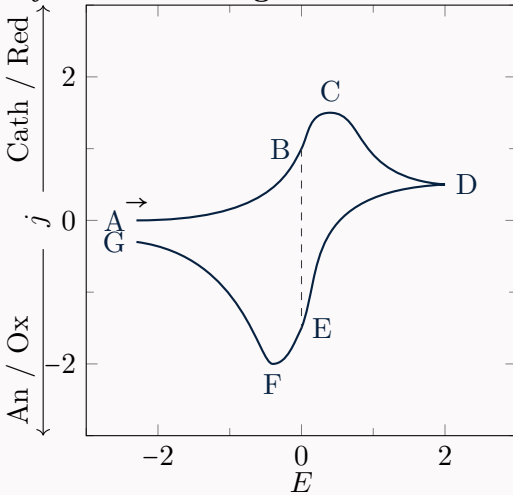
$$E_{\text{RHE}} = E^0 + \frac{RT}{F} \ln\left(\frac{a_{\text{H}^+}}{p_{\text{H}_2}}\right) \quad (595)$$

$$= 0 \text{ V} - 0,059 \text{ V} \quad (596)$$

$E^0 \equiv 0 \text{ V}$, a Aktivität, p Druck, see Nernst-Gleichung

56.4.2 Zyklische Voltammetrie

Cyclic voltammogram



- A-D: Diffusion layer growth → decreased current after peak
- D: Switching potential
- B,E: Equal concentrations of reactants
- C,F: Formal potential of redox pair: $E \approx \frac{E_C - E_F}{2}$
- C,F: Peak separation for reversible processes: $\Delta E_{rev} = E_C - E_F = n \cdot 59 \text{ mV}$
- Information about surface chemistry
- Double-layer capacity (horizontal lines): $I = Cv$

Randles-Sevcik Gleichung
Spitzenstrom

$$i_{\text{peak}} = 0.446 n F A c^0 \sqrt{\frac{n F v D_{\text{ox}}}{RT}} \quad (597)$$

n Ladungszahl, F Faraday-Konstante, A electrode surface area, c^0 bulk Konzentration, v Scanrate, D_{ox} Diffusionskoeffizient of oxidized analyte, R Universelle Gaskonstante, T Temperatur

Underpotential deposition (UPD)

Reversible deposition of metal onto a foreign metal electrode at potentials positive of the Nernst potential **TODO:clarify**
ch:el:tech:cv:upd:desc

56.4.3 Rotating disk electrodes

Dynamisch Viskosität

Symbol: η, μ
Unit: $1 \text{ Pa} \cdot \text{s} = 1 \text{ N} \cdot \text{s} / \text{m}^2 = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}$

Kinematische Viskosität
Dynamisch Viskosität im Verhältnis zur Dichte der Flüssigkeit

Symbol: ν
Unit: $1 \text{ cm}^2 / \text{s}$

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \quad (598)$$

η, μ Dynamisch Viskosität, ??? ??? :density

Diffusionsschichtdicke
TODO:Where does 1.61 come from

$$\delta_{\text{diff}} = 1.61 D^{\frac{1}{3}} \nu^{\frac{1}{6}} \omega^{-\frac{1}{2}} \quad (599)$$

D Diffusionskoeffizient, ν Kinematische Viskosität, ω Kreisfrequenz

Limiting current density
for a RDE

$$j_{\infty} = nFD \frac{c^0}{\delta_{\text{diff}}} = \frac{1}{1.61} nFD^{\frac{2}{3}} \nu^{-\frac{1}{6}} c^0 \sqrt{\omega} \quad (600)$$

n Ladungszahl, F Faraday-Konstante, c^0 Bulk-Konzentration, D Diffusionskoeffizient, δ_{diff} Diffusionsschichtdicke, ν Kinematische Viskosität, ω Kreisfrequenz

57 Thermoelektrizität

Seebeck-Koeffizient

Symbol: S
Unit: $1 \mu\text{V K}^{-1}$

$$S = -\frac{\Delta V}{\Delta T} \quad (601)$$

V voltage, T Temperatur

Seebeck-Effekt
Electromotive force across two
points of a material with a
temperature difference

$$\vec{j} = \sigma(-\vec{\nabla}V - S\vec{\nabla}T) \quad (602)$$

σ Leitfähigkeit, V local voltage, S Seebeck-Koeffizient, T Temperatur

Wärmeleitfähigkeit
Leitung von Wärme, ohne
Stofftransport

Symbol: κ, λ, k
Unit: $1 \text{ W m}^{-1} \text{ K} = 1 \text{ kgm/s}^3\text{K}$

$$\kappa = \frac{\dot{Q}l}{A\Delta T} \quad (603)$$

$$\kappa_{\text{tot}} = \kappa_{\text{lattice}} + \kappa_{\text{electric}} \quad (604)$$

heat, l Länge, A Fläche, T Temperatur

Wiedemann-Franz Gesetz

$$\kappa = L\sigma T \quad (605)$$

Elektrische κ, λ, k Wärmeleitfähigkeit, L in $\text{W } \Omega \text{ K}^{-1}$ Lorentz-zahl, σ Leitfähigkeit

Thermoelektrische Gütezahl
Dimensionsoser Wert zum
Vergleichen von Materialien

$$zT = \frac{S^2\sigma}{\lambda} T \quad (606)$$

S Seebeck-Koeffizient, σ Leitfähigkeit,

58 misc

Stöchiometrischer Koeffizient

Symbol: ν
Unit:

Standardbedingungen	$T = 273,15 \text{ K} = 0 \text{ }^\circ\text{C}$	(607)
	$p = 100\,000 \text{ Pa} = 1,000 \text{ bar}$	(608)

pH-Wert definition	$\text{pH} = -\log_{10}(a_{\text{H}^+})$	(609)
	a_{H^+} Wasserstoffionen-Aktivität	

pH-Wert Bei Raumtemperatur 25 °C	$\text{pH} > 7$ basic	(610)
	$\text{pH} < 7$ acidic	(611)
	$\text{pH} = 7$ neutral	(612)

Kovalente Bindung	Bindungen zwischen Atomen die durch geteilte Elektronen, welche Elektronenpaare bilden, gebildet werden.
-------------------	--

Grotthuß-Mechanismus	The Mobilität von Protonen in wässrigen Lösungen ist wesentlich größer als die anderer Ionen, da sie sich "bewegen" können indem die Wasserstoffbrückenbindungen gelöst und neu gebildet werden.
----------------------	--

Häufige Chemikalien	Name	formula
	Zyanid	CN
	Ammoniak	NH ₃
	Wasserstoffperoxid	H ₂ O ₂
	Schwefelsäure	H ₂ SO ₄
	Ethanol	C ₂ H ₅ OH
	Essigsäure	CH ₃ COOH
	Methan	CH ₄
	Salzsäure	HCl
	Natriumhydroxid	NaOH
	Salpetersäure	HNO ₃
	Calciumcarbonat	CaCO ₃
	Glukose	C ₆ H ₁₂ O ₆
	Benzol	C ₆ H ₆
	Aceton	C ₃ H ₆ O
Ethylen	C ₂ H ₄	
Kaliumpermanganat	KMnO ₄	

Teil XII

Anhang

Weltformel

$$E = mc^2 + AI$$

(613)

59 Physikalische Größen

59.1 SI-Basisgrößen

Zeit

Symbol: t
Unit: 1 s

Länge

Symbol: l
Unit: 1 m

Masse

Symbol: m
Unit: 1 kg

Temperatur

Symbol: T
Unit: 1 K

Elektrischer Strom

Symbol: I
Unit: 1 A

Stoffmenge

Symbol: n
Unit: 1 mol

Lichtstärke

Symbol: I_V
Unit: 1 cd

59.2 Mechanik

Kraft

Symbol: \vec{F}
Unit: 1 N = 1 kgm/s²

Federkonstante

Symbol: k
Unit: 1 N m⁻¹ = 1 kg/s²

Geschwindigkeit

Symbol: \vec{v}
Unit: 1 m s⁻¹

Drehmoment

Symbol: τ
Unit: 1 N m = 1 kgm²/s²

Druck

Symbol: p
Unit: 1 m²

59.3 Thermodynamik

Volumen d dimensionales Volumen	Symbol: V Unit: 1 m^d
--------------------------------------	--------------------------------------

Wärmekapazität	Symbol: C Unit: 1 J K^{-1}
----------------	---

59.4 Elektrodynamik

Ladung	Symbol: q Unit: $1 \text{ C} = 1 \text{ A s}$
--------	--

Ladungszahl Anzahl der Elementarladungen	Symbol: Z Unit:
--	----------------------

Ladungsdichte	Symbol: ρ Unit: 1 C/m^3
---------------	---

Frequenz	Symbol: f Unit: $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$
----------	--

Kreisfrequenz	Symbol: ω Unit: 1 rad s^{-1}
	$\omega = \frac{2\pi/T}{2\pi f} \quad (614)$ T Periodendauer, f Frequenz

Periodendauer	Symbol: T Unit: 1 s
	$T = \frac{1}{f} \quad (615)$ f Frequenz

Leitfähigkeit	Symbol: σ Unit: $1 \Omega^{-1} \text{ m}$
---------------	---

59.5 Sonstige

Fläche	Symbol: A Unit: 1 m^2
--------	--------------------------------------

60 Konstanten

Plancksches Wirkumsquantum	Symbol: h Definiertes Wert $6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $4.135667969 \dots \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$
Universelle Gaskonstante Proportionalitätskonstante für ideale Gase	Symbol: R Definiertes Wert $8.31446261815324 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}$ $N_A \cdot k_B$ N_A Avogadro-Konstante, k_B Boltzmann-Konstante
Avogadro-Konstante Anzahl der Moleküle pro mol	Symbol: N_A Definiertes Wert $6.02214076 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$
Boltzmann-Konstante Temperatur-Energie Umrechnungsfaktor	Symbol: k_B Definiertes Wert $1.380649 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Faraday-Konstante Elektrische Ladung von einem Mol einfach geladener Ionen	Symbol: F Definiertes Wert $9.64853321233100184 \cdot 10^4 \text{ C mol}^{-1}$ $N_A e$ N_A Avogadro-Konstante, k_B Boltzmann-Konstante
Elementarladung	Symbol: e Definiertes Wert $1.602176634 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Abbildungsverzeichnis

1	[?]	60
2	[?]	61
3	Transmon and so TODO	68
4	img/	69

Tabellenverzeichnis

61 Liste der Elemente

Wasserstoff
English: Hydrogen
farbloses Gas (H₂)

Symbol: H
Number: 1
set: nonmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
Elektronenkonfiguration: 1s[1]
atomicmass: 1.0081

<p>Helium English: Helium farbloses Gas</p>	<p>Symbol: He Number: 2 set: noblegas magneticordering: diamagnetic Kristallstruktur: hcp Elektronenkonfiguration: 1s[1] atomicmass: 4.0026022</p>
<p>Lithium English: Lithium silbrig weiß/grau</p>	<p>Symbol: Li Number: 3 set: alkalimetal magneticordering: paramagnetic Kristallstruktur: bcc Elektronenkonfiguration: He 2s[1] atomicmass: 6.946</p>
<p>Beryllium English: Beryllium weiß-grau metallisch</p>	<p>Symbol: Be Number: 4 set: alkalineearthmetal magneticordering: diamagnetic Kristallstruktur: hcp Elektronenkonfiguration: He 2s[2] atomicmass: 9.01218315</p>
<p>Bor English: Boron schwarz</p>	<p>Symbol: B Number: 5 set: metalloid magneticordering: diamagnetic Kristallstruktur: rho Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[1] atomicmass: 10.811</p>
<p>Kohlenstoff English: Carbon schwarz (Graphit); farblos (Diamant)</p>	<p>Symbol: C Number: 6 set: nonmetal magneticordering: diamagnetic Kristallstruktur: hex Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[2] atomicmass: 12.01112</p>
<p>Stickstoff English: Nitrogen farbloses Gas</p>	<p>Symbol: N Number: 7 set: nonmetal magneticordering: diamagnetic Kristallstruktur: hex Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[3] atomicmass: 14.006714</p>

Sauerstoff
English: Oxygen
farbloses Gas

Symbol: O
Number: 8
set: nonmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: sc
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[4]
atomicmass: 15.99915

Fluor
English: Fluorine
blasses, gelbliches Gas

Symbol: F
Number: 9
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[5]
set: halogen
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: sc
refractiveindex: 1.000195
atomicmass: 18.9984031636

Neon
English: Neon
farbloses Gas

Symbol: Ne
Number: 10
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[6]
set: noblegas
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractiveindex: 1.000067
atomicmass: 20.17976

Natrium
English: Sodium
silbrig weiß

Symbol: Na
Number: 11
set: alkalimetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[1]
atomicmass: 22.989769282

Magnesium
English: Magnesium
silbrig weiß

Symbol: Mg
Number: 12
set: alkalineearthmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2]
atomicmass: 24.30524

Aluminium
English: Aluminum
silbrig

Symbol: Al
Number: 13
set: metal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[1]
atomicmass: 26.98153857

Silicium
English: Silicon
dunkelgrau, bläulicher
Farbton

Symbol: Si
Number: 14
set: metalloid
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: dc
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[2]
atomicmass: 28.08528

Phosphor
English: Phosphorus
weiß-beige (W); dunkelrot
(R); schwarz (S)

Symbol: P
Number: 15
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[3]
set: nonmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractiveindex: 1.001212
atomicmass: 30.9737619985

Schwefel
English: Sulfur
gelb

Symbol: S
Number: 16
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[4]
set: nonmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractiveindex: 1.001111
atomicmass: 32.0632

Chlor
English: Chlorine
gelblich-grün

Symbol: Cl
Number: 17
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[5]
set: halogen
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractiveindex: 1.000773
atomicmass: 35.4535

Argon
English: Argon
farbloses Gas

Symbol: Ar
Number: 18
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[6]
set: noblegas
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractiveindex: 1.000281
atomicmass: 39.9481

Kalium
English: Potassium
silbrig weiß

Symbol: K
Number: 19
set: alkalimetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Ar 4s[1]
atomicmass: 39.09831

Calcium
English: Calcium
silbrig weiß

Symbol: Ca
Number: 20
set: alkalineearthmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Ar 4s[2]
atomicmass: 40.0784

Scandium
English: Scandium
silbrig weiß

Symbol: Sc
Number: 21
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[1] 4s[2]
atomicmass: 44.9559085

Titan
English: Titanium
silbrig metallisch

Symbol: Ti
Number: 22
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[2] 4s[2]
atomicmass: 47.8671

Vanadium
English: Vanadium
stahlgrau metallisch, bläulich
schimmernd

Symbol: V
Number: 23
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[3] 4s[2]
atomicmass: 50.94151

Chrom
English: Chromium
silbrig metallisch

Symbol: Cr
Number: 24
set: transitionmetal
magneticordering: antiferromagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[5] 4s[1]
atomicmass: 51.99616

Mangan
English: Manganese
silbrig metallisch (Stahlweiß)

Symbol: Mn
Number: 25
set: transitionmetal
magneticordering: antiferromagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[5] 4s[2]
atomicmass: 54.9380443

Eisen
English: Iron
metallisch glänzend mit einem
gräulichen Farbton

Symbol: Fe
Number: 26
set: transitionmetal
magneticordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[6] 4s[2]
atomicmass: 55.8452

Cobalt
English: Cobalt
stahlgrauer metallisch
glänzender Feststoff

Symbol: Co
Number: 27
set: transitionmetal
magneticordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[7] 4s[2]
atomicmass: 58.9331944

Nickel
English: Nickel
lustrous, metallic, and silver
with a gold tinge

Symbol: Ni
Number: 28
set: transitionmetal
magneticordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[8] 4s[2]
atomicmass: 58.69344

Kupfer
English: Copper
rotbraun, metallisch

Symbol: Cu
Number: 29
set: transitionmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[1]
atomicmass: 63.5463

Zink
English: Zinc
bläulich blassgrau

Symbol: Zn
Number: 30
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2]
set: transitionmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hcp
refractiveindex: 1.00205
atomicmass: 65.382

Gallium
English: Gallium
silbrig weiß

Symbol: Ga
Number: 31
set: metal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[1]
atomicmass: 69.7231

Germanium
English: Germanium
gräulich weiß

Symbol: Ge
Number: 32
set: metalloid
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: dc
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[2]
atomicmass: 72.6308

Arsen
English: Arsenic
metallisch grau, gelb oder
schwarz

Symbol: As
Number: 33
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[3]
set: metalloid
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
refractiveindex: 1.001552
atomicmass: 74.9215956

Selen
English: Selenium
grau, glänzend

Symbol: Se
Number: 34
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[4]
set: metalloid
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
refractiveindex: 1.000895
atomicmass: 78.9718

Brom
English: Bromine
rotbraun (gasförmig);
rotbraun (flüssig); metallisch
glänzend (fest)

Symbol: Br
Number: 35
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[5]
set: halogen
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractiveindex: 1.001132
atomicmass: 79.90479

Krypton
English: Krypton
farbloses Gas

Symbol: Kr
Number: 36
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[6]
set: noblegas
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractiveindex: 1.000427
atomicmass: 83.7982

Rubidium
English: Rubidium
silbrig weiß

Symbol: Rb
Number: 37
set: alkalimetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Kr 5s[1]
atomicmass: 85.46783

Strontium
English: Strontium
silbrig weiß metallisch

Symbol: Sr
Number: 38
set: alkalineearthmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Kr 5s[2]
atomicmass: 87.621

Yttrium
English: Yttrium
silbrig weiß

Symbol: Y
Number: 39
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[1] 5s[2]
atomicmass: 88.905842

Zirconium
English: Zirconium
silbrig weiß

Symbol: Zr
Number: 40
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[2] 5s[2]
atomicmass: 91.2242

Niob
English: Niobium
grau metallisch glänzend

Symbol: Nb
Number: 41
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[4] 5s[1]
atomicmass: 92.906372

Molybdän
English: Molybdenum
grau metallisch

Symbol: Mo
Number: 42
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[5] 5s[1]
atomicmass: 95.951

Technetium
English: Technetium
silbrig grau metallisch

Symbol: Tc
Number: 43
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[5] 5s[2]
atomicmass: 98.9063

Ruthenium
English: Ruthenium
silbrig weiß metallisch

Symbol: Ru
Number: 44
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[7] 5s[1]
atomicmass: 101.072

Rhodium
English: Rhodium
silbrig weiß metallisch

Symbol: Rh
Number: 45
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[8] 5s[1]
atomicmass: 102.905502

Palladium
English: Palladium
silbrig, weiß, metallisch

Symbol: Pd
Number: 46
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10]
atomicmass: 106.421

Silber
English: Silver
weißglänzend, metallisch

Symbol: Ag
Number: 47
set: transitionmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[1]
atomicmass: 107.86822

Cadmium
English: Cadmium
silbrig grau metallisch

Symbol: Cd
Number: 48
set: transitionmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2]
atomicmass: 112.4144

Indium
English: Indium
silbrig glänzend grau

Symbol: In
Number: 49
set: metal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: tetr
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[1]
atomicmass: 114.8181

Zinn
English: Tin
silbrig glänzend (-Zinn), grau
(-Zinn)

Symbol: Sn
Number: 50
set: metal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: tetr
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[2]
atomicmass: 118.7107

Antimon
English: Antimony
silbrig glänzend grau

Symbol: Sb
Number: 51
set: metalloid
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[3]
atomicmass: 121.7601

Tellur
English: Tellurium
silberweiß, metallisch
glänzend

Symbol: Te
Number: 52
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[4]
set: metalloid
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
refractiveindex: 1.000991
atomicmass: 127.603

Iod
English: Iodine
dunkel-violett (gasförmig);
grauschwarz, glänzend (fest)

Symbol: I
Number: 53
set: halogen
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[5]
atomicmass: 126.904473

Xenon
English: Xenon
farbloses Gas

Symbol: Xe
Number: 54
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[6]
set: noblegas
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractiveindex: 1.000702
atomicmass: 131.2936

Caesium
English: Caesium
goldgelb glänzend

Symbol: Cs
Number: 55
set: alkalimetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Xe 6s[1]
atomicmass: 132.905451966

Barium
English: Barium
weiß-grau metallisch

Symbol: Ba
Number: 56
set: alkalineearthmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Xe 6s[2]
atomicmass: 137.3277

Lanthan
English: Lanthanum
silbrig weiß

Symbol: La
Number: 57
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Xe 5d[1] 6s[2]
atomicmass: 138.905477

Cer
English: Cerium
silbrig weiß

Symbol: Ce
Number: 58
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[1] 5d[1] 6s[2]
atomicmass: 140.1161

Praseodym
English: Praseodymium
silbrig weiß, gelblicher
Farbton

Symbol: Pr
Number: 59
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[3] 6s[2]
atomicmass: 140.907662

Neodym
English: Neodymium
silbrigweiß, gelblicher Farbton

Symbol: Nd
Number: 60
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[4] 6s[2]
atomicmass: 144.2423

Promethium
English: Promethium
metallisch

Symbol: Pm
Number: 61
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[5] 6s[2]
atomicmass: 146.9151

Samarium
English: Samarium
silbrig weiß

Symbol: Sm
Number: 62
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: rho
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[6] 6s[2]
atomicmass: 150.362

Europium
English: Europium
silbrig weiß

Symbol: Eu
Number: 63
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[7] 6s[2]
atomicmass: 151.9641

Gadolinium
English: Gadolinium
silbrig weiß

Symbol: Gd
Number: 64
set: lanthanoide
magneticordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[7] 5d[1] 6s[2]
atomicmass: 157.253

Terbium
English: Terbium
silbrig weiß

Symbol: Tb
Number: 65
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[9] 6s[2]
atomicmass: 158.925352

Dysprosium
English: Dysprosium
silvery white

Symbol: Dy
Number: 66
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[10] 6s[2]
atomicmass: 162.5001

Holmium
English: Holmium
silbrig weiß

Symbol: Ho
Number: 67
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[11] 6s[2]
atomicmass: 164.930332

Erbium
English: Erbium
silbrig weiß

Symbol: Er
Number: 68
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[12] 6s[2]
atomicmass: 167.2593

Thulium
English: Thulium
silbrig grau

Symbol: Tm
Number: 69
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[13] 6s[2]
atomicmass: 168.934222

Ytterbium
English: Ytterbium
silbrig weiß

Symbol: Yb
Number: 70
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 6s[2]
atomicmass: 173.0451

Lutetium
English: Lutetium
silbrig weiß

Symbol: Lu
Number: 71
set: lanthanoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[1] 6s[2]
atomicmass: 174.96681

Hafnium
English: Hafnium
stahlgrau

Symbol: Hf
Number: 72
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[2] 6s[2]
atomicmass: 178.492

Tantal
English: Tantalum
grau

Symbol: Ta
Number: 73
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[3] 6s[2]
atomicmass: 180.947882

Wolfram
English: Tungsten
gräulich weiß, glänzend

Symbol: W
Number: 74
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[4] 6s[2]
atomicmass: 183.841

Rhenium
English: Rhenium
gräulich weiß

Symbol: Re
Number: 75
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[5] 6s[2]
atomicmass: 186.2071

Osmium
English: Osmium
bläulich grau

Symbol: Os
Number: 76
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[6] 6s[2]
atomicmass: 190.233

Iridium
English: Iridium
silbrig weiß

Symbol: Ir
Number: 77
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[7] 6s[2]
atomicmass: 192.2173

Platin
English: Platinum
grau-weiß

Symbol: Pt
Number: 78
set: transitionmetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[9] 6s[1]
atomicmass: 195.0849

Gold
English: Gold
metallisch gelb

Symbol: Au
Number: 79
set: transitionmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[1]
atomicmass: 196.9665695

Quecksilber
English: Mercury
silbrig weiß

Symbol: Hg
Number: 80
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2]
set: transitionmetal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
refractiveindex: 1.000933
atomicmass: 200.5923

Thallium
English: Thallium
silbrig weiß

Symbol: Tl
Number: 81
set: metal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hcp
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2] 6p[1]
atomicmass: 204.38204

Blei
English: Lead
bläulich weiß

Symbol: Pb
Number: 82
set: metal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2] 6p[2]
atomicmass: 207.21

Bismut
English: Bismuth
glänzend silberweiß

Symbol: Bi
Number: 83
set: metal
magneticordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2] 6p[3]
atomicmass: 208.980401

Polonium
English: Polonium
silbrig

Symbol: Po
Number: 84
set: metal
magneticordering: nonmagnetic
Kristallstruktur: sc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2] 6p[4]
atomicmass: 209.98

Astat
English: Astatine
metallisch

Symbol: At
Number: 85
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2] 6p[5]
Kristallstruktur: fcc
atomicmass: 209.9871
set: halogen

Radon
English: Radon
farbloses Gas

Symbol: Rn
Number: 86
set: noblegas
magneticordering: nonmagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2] 6p[6]
atomicmass: 222

Francium
English: Francium

Symbol: Fr
Number: 87
set: alkalimetal
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Rn 7s[1]
atomicmass: 223.0197

Radium
English: Radium
silbrig-weiß-metallisch

Symbol: Ra
Number: 88
set: alkalineearthmetal
magneticordering: nonmagnetic
Kristallstruktur: bcc
Elektronenkonfiguration: Rn 7s[2]
atomicmass: 226.0254

Actinium
English: Actinium
silbrig

Symbol: Ac
Number: 89
Elektronenkonfiguration: Rn 6d[1] 7s[2]
Kristallstruktur: fcc
atomicmass: 227.0278
set: actinoide

Thorium
English: Thorium
silbrig weiß

Symbol: Th
Number: 90
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
Elektronenkonfiguration: Rn 6d[2] 7s[2]
atomicmass: 232.03774

Protactinium
English: Protactinium
hell, silbrig, metallisch
glänzend

Symbol: Pa
Number: 91
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: tetr
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[2] 6d[1] 7s[2]
atomicmass: 231.035882

Uran
English: Uranium
silberweiß

Symbol: U
Number: 92
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: orth
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[3] 6d[1] 7s[2]
atomicmass: 238.028913

Neptunium
English: Neptunium
silbrig

Symbol: Np
Number: 93
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: orth
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[4] 6d[1] 7s[2]
atomicmass: 237.0482

Plutonium
English: Plutonium
silbriges Metall

Symbol: Pu
Number: 94
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: mon
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[6] 7s[2]
atomicmass: 244.0642

Americium
English: Americium
silbrig-weißes Metall

Symbol: Am
Number: 95
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[7] 7s[2]
atomicmass: 243.061375

Curium
English: Curium
silbrig-weißes Metall

Symbol: Cm
Number: 96
set: actinoide
magneticordering: antiferromagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[7] 6d[1] 7s[2]
atomicmass: 247.0703

Berkelium
English: Berkelium
silberweiß

Symbol: Bk
Number: 97
set: actinoide
magneticordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[9] 7s[2]
atomicmass: 247

<p>Californium English: Californium silbriges Metall</p>	<p>Symbol: Cf Number: 98 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[10] 7s[2] Kristallstruktur: dhcp atomicmass: 251 set: actinoide</p>
<p>Einsteinium English: Einsteinium</p>	<p>Symbol: Es Number: 99 set: actinoide magneticordering: paramagnetic Kristallstruktur: fcc Elektronenkonfiguration: Rn 5f[11] 7s[2] atomicmass: 252</p>
<p>Fermium English: Fermium</p>	<p>Symbol: Fm Number: 100 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[12] 7s[2] Kristallstruktur: fcc atomicmass: 257.0951 set: actinoide</p>
<p>Mendelevium English: Mendelevium</p>	<p>Symbol: Md Number: 101 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[13] 7s[2] Kristallstruktur: fcc atomicmass: 258 set: actinoide</p>
<p>Nobelium English: Nobelium</p>	<p>Symbol: No Number: 102 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 7s[2] Kristallstruktur: fcc atomicmass: 259 set: actinoide</p>
<p>Lawrencium English: Lawrencium</p>	<p>Symbol: Lr Number: 103 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 7s[2] 7p[1] Kristallstruktur: hcp atomicmass: 266 set: actinoide</p>
<p>Rutherfordium English: Rutherfordium unbekannt, vermutlich silber-weiß oder grau metallisch</p>	<p>Symbol: Rf Number: 104 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[2] 7s[2] Kristallstruktur: hcp atomicmass: 261.1087 set: transitionmetal</p>

Dubnium English: Dubnium	Symbol: Db Number: 105 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[3] 7s[2] Kristallstruktur: bcc atomicmass: 262.1138 set: transitionmetal
Seaborgium English: Seaborgium	Symbol: Sg Number: 106 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[4] 7s[2] Kristallstruktur: bcc atomicmass: 263.1182 set: transitionmetal
Bohrium English: Bohrium	Symbol: Bh Number: 107 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[5] 7s[2] Kristallstruktur: hcp atomicmass: 262.1229 set: transitionmetal
Hassium English: Hassium	Symbol: Hs Number: 108 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[6] 7s[2] Kristallstruktur: hcp atomicmass: 265.269 set: transitionmetal
Meitnerium English: Meitnerium	Symbol: Mt Number: 109 set: unknown magneticordering: paramagnetic Kristallstruktur: fcc Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[7] 7s[2] atomicmass: 268
Darmstadtium English: Darmstadtium	Symbol: Ds Number: 110 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[8] 7s[2] Kristallstruktur: bcc atomicmass: 281 set: unknown
Roentgenium English: Roentgenium	Symbol: Rg Number: 111 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[9] 7s[2] Kristallstruktur: bcc atomicmass: 280 set: unknown

<p>Copernicium English: Copernicium</p>	<p>Symbol: Cn Number: 112 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] Kristallstruktur: bcc atomicmass: 277 set: unknown</p>
<p>Nihonium English: Nihonium</p>	<p>Symbol: Nh Number: 113 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[1] Kristallstruktur: hcp atomicmass: 287 set: unknown</p>
<p>Flerovium English: Flerovium</p>	<p>Symbol: Fl Number: 114 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[2] Kristallstruktur: fcc atomicmass: 289 set: unknown</p>
<p>Moscovium English: Moscovium</p>	<p>Symbol: Mc Number: 115 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[3] atomicmass: 288 set: unknown</p>
<p>Livermorium English: Livermorium</p>	<p>Symbol: Lv Number: 116 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[4] atomicmass: 293 set: unknown</p>
<p>Tennes English: Tennessine</p>	<p>Symbol: Ts Number: 117 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[5] atomicmass: 292 set: unknown</p>
<p>Oganesson English: Oganesson</p>	<p>Symbol: Og Number: 118 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[6] Kristallstruktur: fcc atomicmass: 294 set: unknown</p>