

Formelsammlung

Matthias Quintern

23. 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	3
2	Geometrie	3
2.1	Trigonometrie	3
2.2	Verschiedene Theoreme	4
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	23
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	29
16 Elektrisches Feld	29
17 Magnetfeld	30
17.1 Magnetische Materialien	31
18 Elektromagnetismus	32
18.1 Maxwell-Gleichungen	32
18.1.1 Eichungen	33
18.2 Induktion	33
19 Optik	33
20 Hall-Effekt	34
20.1 Klassischer Hall-Effekt	34
20.2 Ganzzahliger Quantenhalleffekt	35

21 Dipol-zeug	35
22 misc	36
VI Quantenmechanik	37
23 Basics	37
23.1 Operatoren	37
23.1.1 Messung	37
23.1.2 Pauli-Matrizen	37
23.2 Wahrscheinlichkeitstheorie	38
23.3 Kommutator	38
24 Schrödingergleichung	38
24.1 Zeitentwicklung	39
24.1.1 Schrödinger- und Heisenberg-Bild	39
24.1.2 Ehrenfest-Theorem	40
25 Störungstheorie	40
26 Harmonischer Oszillator	41
26.1 Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren / Leiteroperatoren	41
26.1.1 Harmonic Oscillator	42
27 Drehmoment	42
27.1 Aharanov-Bohm Effekt	42
28 Periodische Potentiale	42
29 Symmetrien	42
29.1 Zeitumkehrungssymmetrie	43
30 Zwei-Niveau System (TLS)	43
31 Sonstiges	43
32 Wasserstoffatom	43
32.1 Korrekturen	45
32.1.1 Darwin-Term	45
32.1.2 Spin-Bahn-Kopplung (LS-Kopplung)	45
32.1.3 Feinstruktur	45
32.1.4 Lamb-Shift	45
32.1.5 Hyperfeinstruktur	46
32.2 Effekte im Magnetfeld	46
32.3 Sonstiges	46
VII Festkörperphysik	47
33 Gitterschwingungen	47
33.1 Debye-Modell	48

34 Kristalle	48
34.1 Bravais-Gitter	49
34.2 Reziprokes Gitter	51
34.3 Streuprozesse	51
34.4 Gitter	52
35 Freies Elektronengase	52
35.1 2D Elektronengas	53
35.2 1D Elektronengas / Quantendraht	53
35.3 0D Elektronengase / Quantenpunkt	53
36 Ladungstransport	53
36.1 Drude-Modell	53
36.2 Sommerfeld-Modell	54
36.3 Boltzmann-Transport	54
36.4 misc	54
37 Supraleitung	55
37.1 London-Gleichungen	55
37.2 Ginzburg-Landau Theorie (GLAG)	55
37.3 Mikroskopische Theorie	56
37.3.1 BCS-Theorie	56
38 Halbleiter	57
38.1 Bauelemente und Kontakte	57
38.2 Exzitons	59
39 Bändermodell	59
39.1 Hybridorbitale	59
40 Diffusion	59
41 misc	60
42 Messtechniken	60
42.1 Raman Spektroskopie	61
42.2 ARPES	61
42.3 Rastersondenmikroskopie (SPM)	61
43 Herstellungsmethoden	62
43.1 Epitaxie	62
44 Topologische Materialien	63
44.1 Berry-Phase / Geometrische Phase	63
45 Materialphysik	64
VIII Teilchenphysik	65
IX Quantencomputing	66
46 Qubits	66
47 Gates	66

48 Supraleitende qubits	66
48.1 Bauelemente	66
48.1.1 Josephson-Kontakt	66
48.1.2 SQUID	67
48.2 TODO	67
48.3 Cooper Paar Box (QPB) Qubit	68
48.4 Transmon Qubit	68
48.4.1 Tunable Transmon Qubit	69
48.5 Phase Qubit	69
48.6 Flux Qubit	69
48.7 Fluxonium Qubit	70
49 Zwei-Niveau System	70
49.1 Ramsey Interferometrie	71
50 Noise und Dekohärenz	71
X Computergestützte Physik	72
51 Quanten-Vielteilchenphysik	72
51.1 Quanten-Vielteilchenmodelle	72
51.2 Methoden	72
51.2.1 Quantum Monte-Carlo	72
51.3 Importance sampling / Stichprobenentnahme nach Wichtigkeit	72
51.4 Matrix Produktzustände	72
52 Electronic structure theory	72
52.1 Modell der stark gebundenen Elektronen / Tight-binding	72
52.2 Dichtefunktionaltheorie (DFT)	73
52.2.1 Hartree-Fock	73
52.2.2 Hohenberg-Kohn Theoreme	73
52.2.3 Kohn-Sham DFT	74
52.2.4 Exchange-Correlation Funktionale	74
52.2.5 Basis-Sets	75
52.2.6 Pseudopotentialmethode	75
53 Atomic dynamics	76
53.1 Born-Oppenheimer Näherung	76
53.2 Strukturoptimierung	77
53.3 Gitterschwingungen	78
53.3.1 Finite difference method	78
53.3.2 Anharmonische Ansätze	78
53.4 Molekulardynamik	79
53.4.1 Ab-initio molecular dynamics	79
53.4.2 Force-field MD	79
53.4.3 Integration schemes	80
53.4.4 Thermostate und Barostate	80
53.4.5 Berechnung von Observablen	81
54 Maschinelles Lernen	81
54.1 Metriken zur Leistungsmessung	81
54.2 Regression	81
54.2.1 Lineare Regression	82
54.2.2 Kernelmethode	82

54.2.3 Bayes'sche Regression	82
54.3 Gradientenverfahren	83
XI Chemie	84
55 Periodensystem	84
56 Elektrochemie	84
56.1 Elektrochemische Zelle	85
56.2 Ionische Leitung in Elektrolyten	86
56.3 Kinetik	88
56.3.1 Massentransport	88
56.4 Techniken	90
56.4.1 Referenzelektroden	90
56.4.2 Zyklische Voltammetrie	91
56.4.3 Rotating disk electrodes	91
56.4.4 AC-Impedanz	92
57 Thermoelektrizität	93
58 misc	93
XII Anhang	95
59 Physikalische Größen	95
59.1 SI-Basisgrößen	95
59.2 Mechanik	95
59.3 Thermodynamik	95
59.4 Elektrodynamik	96
59.5 Sonstige	96
60 Konstanten	96
61 Liste der Elemente	97

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
---	---

Woodbury-Matrix-Identität Inverse einer Rang- k -Korrektur	$(\underline{A} + \underline{U} + \underline{C} + \underline{V})^{-1} = \underline{A}^{-1} - \underline{A}^{-1} \underline{U} (\underline{C}^{-1} + \underline{V} \underline{A}^{-1} \underline{U})^{-1} \underline{V} \underline{A}^{-1} \quad (17)$ $\underline{A} n \times n, \underline{U} n \times k, \underline{C} k \times k, \underline{V} k \times n$
--	---

Inverse 2×2 Matrix	$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \quad (18)$
-----------------------------	---

Singulärwertzerlegung Faktorisierung einer reellen oder komplexen Matrix durch Rotation \rightarrow Skalierung \rightarrow Rotation.	$A = U \Lambda V \quad (19)$ $A: m \times n$ matrix, $U: m \times m$ unitary matrix, $\Lambda: m \times n$ rectangular diagonal matrix with non-negative numbers on the diagonal, $V: n \times n$ unitary matrix
--	---

2D Rotationsmatrix	$R = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (20)$
--------------------	--

3D Rotationsmatrizen	$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (21)$
	$R_y = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (22)$
	$R_z = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (23)$

Eigenschaften von Rotationsmatrizen	$R^T = R^{-1} \quad (24)$
	$\det R = 1 \quad (25)$
	$R \in \text{SO}(n) \quad (26)$ n Dimension, $\text{SO}(n)$ spezielle orthogonale Gruppe

1.4 Eigenwerte

Eigenwert-Gleichung	$Av = \lambda v \quad (27)$ <p>λ Eigenwert, v Eigenvektor</p>
Charakteristisches Polynom Nullstellen sind die Eigenwerte von A	$\chi_A = \det(A - \lambda \mathbf{1}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (28)$
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	$THT^\dagger = H \quad \wedge \quad H \psi\rangle = E \psi\rangle \quad \Rightarrow \quad HT \psi\rangle = ET \psi\rangle \quad (29)$
Eigenwertzerlegung	$A = V\Lambda V^{-1} \quad (30)$ <p>A diagonalisierbar, Spalten von V sind die Eigenvektoren v_i, Λ Diagonalmatrix mit Eigenwerten λ_i auf der Diagonalen</p>

TODO: Jordan stuff, blockdiagonal matrices, permutations, skalar product lapacescher entwicklungsatz maybe, cramers rule

2 Geometrie

2.1 Trigonometrie

Exponentialfunktion	$\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad (31)$
Sinus	$\sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{(2n+1)}}{(2n+1)!} \quad (32)$
	$= \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (33)$
Kosinus	$\cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{(2n)}}{(2n)!} \quad (34)$
	$= \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad (35)$
Sinus hyperbolicus	$\sinh(x) = -i \sin ix \quad (36)$
	$= \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (37)$
Kosinus hyperbolicus	$\cosh(x) = \cos ix \quad (38)$
	$= \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad (39)$

2.2 Verschiedene Theoreme

Hypothenuse im Einheitskreis	$1 = \sin^2 x + \cos^2 x \quad (40)$
Additionstheoreme	$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y \quad (41)$
	$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y \quad (42)$
	$\tan(x \pm y) = \frac{\sin(x \pm y)}{\cos(x \pm y)} = \frac{\tan x \pm \tan y}{1 \mp \tan x \tan y} \quad (43)$
Doppelwinkelfunktionen	$\sin 2x = 2 \sin x \cos x \quad (44)$
	$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x = 1 - 2 \sin^2 x \quad (45)$
	$\tan 2x = \frac{2 \tan x}{1 - \tan^2 x} \quad (46)$
Sonstige	$\cos x + b \sin x = \sqrt{1 + b^2} \cos(x - \theta) \quad (47)$
	$\tan \theta = b$

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

Fourierreihe
Sinus und Kosinus
Darstellung

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos\left(\frac{2\pi}{T} kt\right) + b_k \sin\left(\frac{2\pi}{T} kt\right) \right) \quad (51)$$

$f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ T -periodic

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

$$a_k = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \cos\left(-\frac{2\pi}{T} kt\right) dt \quad \text{für } k \geq 0 \quad (52)$$

$$b_k = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \sin\left(-\frac{2\pi}{T} kt\right) dt \quad \text{für } k \geq 1 \quad (53)$$

$$a_k = c_k + c_{-k} \quad \text{für } k \geq 0 \quad (54)$$

$$b_k = i(c_k - c_{-k}) \quad \text{für } k \geq 1 \quad (55)$$

TODO:cleanup

3.1.2 Fouriertransformation

Fouriertransformierte

$$\hat{f}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi^n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ikx} f(x) dx \quad (56)$$

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

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

$$(f * g)(t) = f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau \quad (57)$$

Notation

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

$$f(t - t_0) * g(t - t_0) = (f * g)(t - 2t_0) \quad (59)$$

Kommutativität

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

Assoziativität]

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

Distributivität

$$f * (g + h) = f * g + f * h \quad (62)$$

Komplexe konjugation

$$(f * g)^* = f^* * g^* \quad (63)$$

3.2 Verschiedenes

Stirlingformel

$$\ln(N!) \approx N \ln(N) - N + \mathcal{O}(\ln(N)) \quad (64)$$

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

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (65)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (66)$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt \quad (67)$$

Dirac-Delta einer Funktion

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|} \quad (68)$$

$$f(x_i) = 0$$

Geometrische Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1 - q} \quad (69)$$

$$|q| < 1$$

3.3 Logarithmus

Logarithmus Identitäten
 Logarithmus Rechenregeln

$$\log(xy) = \log(x) + \log(y) \quad (70)$$

$$\log\left(\frac{x}{y}\right) = \log(x) - \log(y) \quad (71)$$

$$\log(x^d) = d \log(x) \quad (72)$$

$$\log(\sqrt[y]{x}) = \frac{\log(x)}{y} \quad (73)$$

$$x^{\log(y)} = y^{\log(x)} \quad (74)$$

Integral des natürlichen
 Logarithmus

$$\int \ln(x) dx = x(\ln(x) - 1) \quad (75)$$

$$\int \ln(ax + b) dx = \frac{ax + b}{a} (\ln(ax + b) - 1) \quad (76)$$

3.4 Vektor Analysis

Laplace-Operator

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (77)$$

3.4.1 Kugelsymmetrie

Kugelkoordinaten

$$x = r \sin \phi \cos \theta \quad (78)$$

$$y = r \cos \phi \cos \theta \quad (79)$$

$$z = r \sin \theta \quad (80)$$

Laplace-Operator

$$\vec{\nabla}^2 = \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (81)$$

p -Norm

$$\|\vec{x}\|_p \equiv \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (82)$$

3.5 Integralrechnung

Partielle integration

$$\int_a^b f'(x) \cdot g(x) dx = [f(x) \cdot g(x)]_a^b - \int_a^b f(x) \cdot g'(x) dx \quad (83)$$

Integration durch
Substitution

$$\int_a^b f(g(x)) g'(x) dx = \int_{g(a)}^{g(b)} f(z) dz \quad (84)$$

Satz von Gauss
Divergenz in einem Volumen
ist gleich dem Fluss durch die
Oberfläche

$$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV = \iint_A \vec{F} \cdot d\vec{A} \quad (85)$$

$A = \partial V$

Klassischer Satz von Stokes

$$\int_A (\vec{\nabla} \times \vec{F}) \cdot d\vec{S} = \oint_S \vec{F} \cdot d\vec{r} \quad (86)$$

$S = \partial A$

3.5.1 Liste nützlicher Integrale

cal:log:integral

Arkussinus, Arkuskosinus,
Arkustangens

$$\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \arcsin x \quad (87)$$

$$\int -\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \arccos x \quad (88)$$

$$\int \frac{1}{x^2+1} dx = \arctan x \quad (89)$$

Arcsinh, arccosh, arctanh

$$\int \frac{1}{\sqrt{x^2+1}} dx = \operatorname{arsinh} x \quad (90)$$

$$\int \frac{1}{\sqrt{x^2-1}} dx = \operatorname{arcosh} x \quad \text{für } (x > 1) \quad (91)$$

$$\int \frac{1}{1-x^2} dx = \operatorname{artanh} x \quad \text{für } (|x| < 1) \quad (92)$$

$$\int \frac{1}{1-x^2} dx = \operatorname{arcoth} x \quad \text{für } (|x| > 1) \quad (93)$$

Integration in
Kugelkoordinaten

$$\iiint dx dy dz = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi dr d\phi d\theta r^2 \sin \theta \quad (94)$$

Riemannsche Zeta-Funktion

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \frac{1}{(1-2^{1-s})\Gamma(s)} \int_0^\infty d\eta \frac{\eta^{s-1}}{e^\eta + 1} \quad (95)$$

Gamma-Funktion	$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (96)$ $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \quad (97)$ $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (98)$
Unvollständige Gamma-Funktion der unteren Grenze	$\Gamma(s, x) = \int_x^\infty t^{s-1} e^{-t} dt \quad (99)$
Unvollständige Gamma-Funktion der oberen Grenze	$\gamma(s, x) = \int_0^x t^{s-1} e^{-t} dt \quad (100)$
Beta-Funktion Complete beta function	$B(z_1, z_2) = \int_0^1 t^{z_1-1} (1-t)^{z_2-1} dt \quad (101)$ $B(z_1, z_2) = \frac{\Gamma(z_1)\Gamma(z_2)}{\Gamma(z_1+z_2)} \quad (102)$
Unvollständige Beta-Funktion Complete beta function	$B(x; z_1, z_2) = \int_0^x t^{z_1-1} (1-t)^{z_2-1} dt \quad (103)$

TODO:differential equation solutions

4 Wahrscheinlichkeitstheorie

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

Kumulative
Verteilungsfunktion

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt \quad (110)$$

f Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Wahrscheinlichkeitsfunktion /
Zählfunktion
Wahrscheinlichkeit p dass eine
diskrete Zufallsvariable X
einen exakten Wert x
annimmt

$$p_X(x) = P(X = x) \quad (111)$$

P probability measure

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

$$C_A(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(t+\tau)f(t) dt \quad (112)$$

$$= \langle f(t+\tau) \cdot f(t) \rangle \quad (113)$$

τ Zeitverschiebung

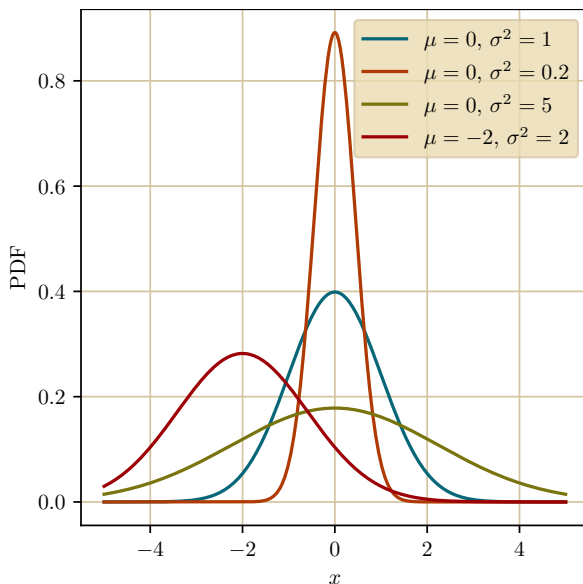
Binomialkoeffizient
Anzahl der Möglichkeiten, k
aus n zu wählen
"n über k"

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (114)$$

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
 $\mu = 0, \sigma = 1$

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (115)$$

Mehrdimensionale Normalverteilung : Multivariate Normalverteilung

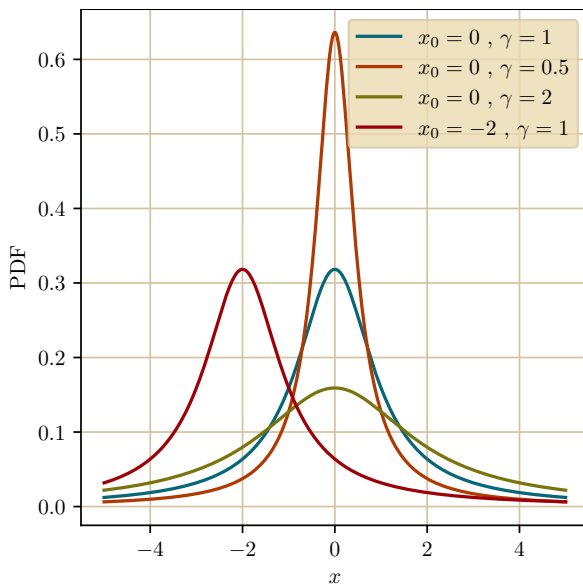
parameters	$\vec{\mu} \in \mathbb{R}^k, + \quad \underline{\Sigma} \in \mathbb{R}^{k \times k}$
support	$\vec{x} \in \vec{\mu} + \text{span}(\underline{\Sigma})$
pdf	$\mathcal{N}(\vec{\mu}, \underline{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{k/2}} \frac{1}{\sqrt{\det \underline{\Sigma}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\vec{x} - \vec{\mu})^T \underline{\Sigma}^{-1}(\vec{x} - \vec{\mu})\right)$ (TODO: (x - mu)T Sigma^-1 (x - mu))
mean	$\vec{\mu}$
variance	$\underline{\Sigma}$

$\vec{\mu}$ Mittelwert , $\underline{\Sigma}$ Kovarianz

Laplace-Verteilung

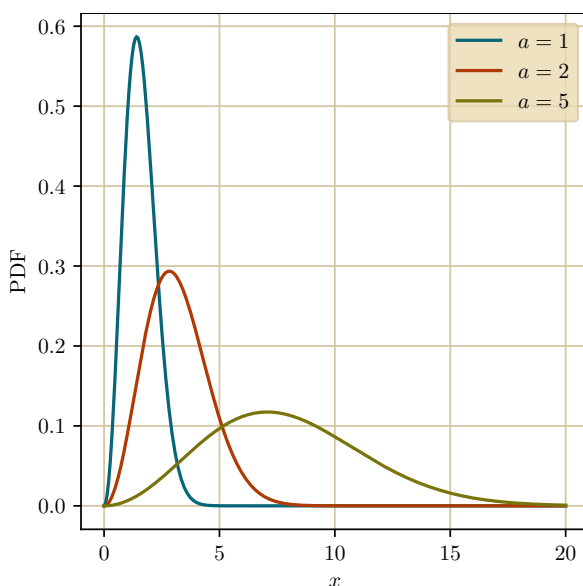
TODO:TODO

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



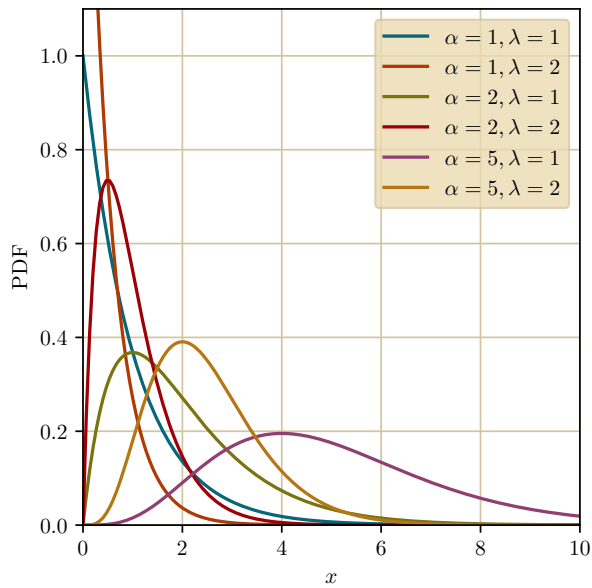
parameters	$x_0 \in \mathbb{R}, \quad \gamma \in \mathbb{R}$
support	$x \in \mathbb{R}$
pdf	$\frac{1}{\pi\gamma \left[1 + \left(\frac{x-x_0}{\gamma}\right)^2\right]}$
cdf	$\frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{x-x_0}{\gamma}\right) + \frac{1}{2}$
mean	undefined
median	x_0
variance	undefined

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	$\text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}a}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x}{a} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$
mean	$2a \frac{2}{\pi}$
median	
variance	$\frac{a^2(3\pi - 8)}{\pi}$

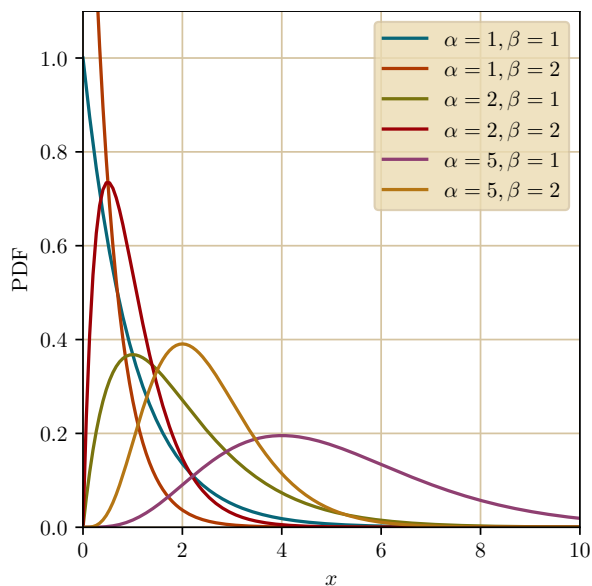
Gamma Verteilung : mit λ Parameter



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



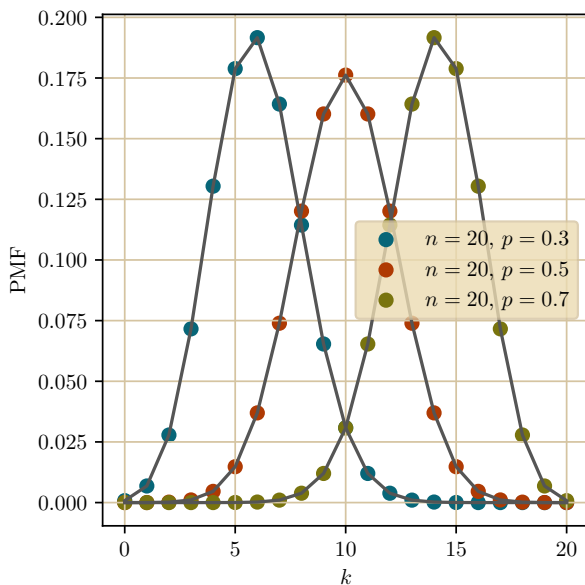
parameters	$\alpha \in \mathbb{R}, \beta \in \mathbb{R}$
support	$x \in [0, 1]$
pdf	$\frac{x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}$
cdf	$\frac{B(x; \alpha, \beta)}{B(\alpha, \beta)}$
mean	$\frac{\alpha}{\alpha + \beta}$
variance	$\frac{\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + 1)}$

B Beta-Funktion / Unvollständige Beta-Funktion

4.1.2 Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen

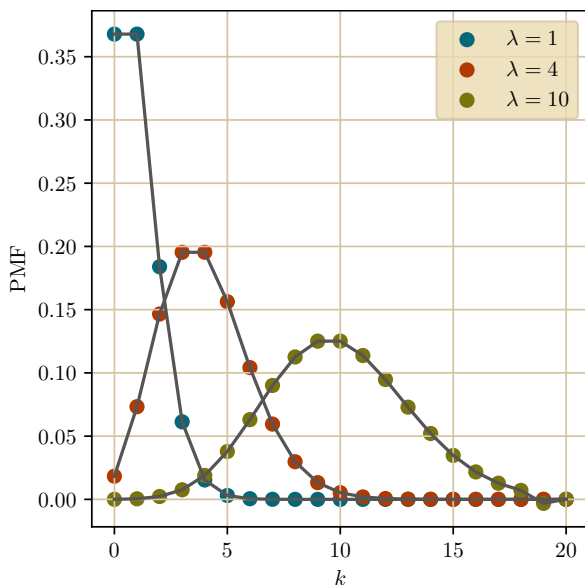
Binomialverteilung

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	$e^{-\lambda} \sum_{j=0}^{\lfloor k \rfloor} \frac{\lambda^j}{j!}$
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	$V_y = J(x) \cdot V_x \cdot J^T(x) \quad (116)$
Fortpflanzung unabhängiger fehlerbehaftete Größen Lineare Näherung	$u_y = \sqrt{\sum_i \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \cdot u_i \right)^2} \quad (117)$
Gewicht Varianz ist eine mögliche Wahl für ein Gewicht	$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (118)$
Gewichteter Mittelwert	$\bar{x} = \frac{\sum_i (x_i w_i)}{\sum_i w_i} \quad (119)$
Varianz des gewichteten Mittelwertes	$\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{\sum_i w_i} \quad (120)$

4.4 Maximum likelihood Methode

Likelihood Funktion Plausibilität" x zu messen, wenn der Parameter θ ist nicht normalisiert!	$L : \Theta \rightarrow [0, 1], \quad \theta \mapsto \rho(x \theta) \quad (121)$
Likelihood function für unabhängig und identisch verteilte Zufallsvariablen	$L(\theta) = \prod_{i=1}^n f(x_i; \theta) \quad (122)$
Maximum likelihood-Schätzung (MLE) Parameter, für den das Ergebnis am Wahrscheinlichsten ist	$\theta_{ML} = \arg \max_{\theta} L(\theta) \quad (123)$ $= \arg \max_{\theta} \log(L(\theta)) \quad (124)$

4.5 Bayessche Wahrscheinlichkeitstheorie

Prior Verteilung Expected distribution before conducting the experiment	$p(\theta) \quad (125)$
--	-------------------------

Evidence	$p(\mathcal{D}) = \int d\theta p(\mathcal{D} \theta)p(\theta) \quad (126)$ <p>$p(\mathcal{D} \theta)$ Likelihood Funktion, $p(\theta)$ Prior Verteilung, \mathcal{D} data set</p>
Satz von Bayes	$p(\theta \mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D} \theta)p(\theta)}{p(\mathcal{D})} \quad (127)$ <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)	$\theta_{\text{MAP}} = \arg \max_{\theta} p(\theta \mathcal{D}) = \arg \max_{\theta} p(\mathcal{D} \theta)p(\theta) \quad (128)$

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

$$F = D \Delta l \quad (129)$$

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

$$\mathcal{L} = T - V \quad (130)$$

T kinetische Energie, V potentielle Energie

Lagrange-Gleichungen
(zweiter Art)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (131)$$

q generalisierte Koordinaten

Kanonischer Impuls

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \quad (132)$$

Hamiltonian

Den Hamiltonian bekommt man aus dem Lagrangian über eine Legendre Transformation

$$H(q, p) = p \dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}(q, p)) \quad (133)$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \{H, \rho\} \quad (134)$$

$\{\}$ Poisson-Klammer

8 Entropie

Positiv Definit und Additiv

$$S \geq 0 \quad (135)$$

$$S(E_1, E_2) = S_1 + S_2 \quad (136)$$

Von-Neumann

$$S = -k_B \langle \log \rho \rangle = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \quad (137)$$

ρ Dichtematrix

Gibbs

$$S = -k_B \sum_n p_n \log p_n \quad (138)$$

p_n Wahrscheinlichkeit für Mikrozustand n

Boltzmann

$$S = k_B \log \Omega \quad (139)$$

Ω #Mikrozustände

Temperatur

$$\frac{1}{T} := \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V \quad (140)$$

Druck

$$p = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_E \quad (141)$$

Teil IV

Thermodynamik

Thermische Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (142)$$

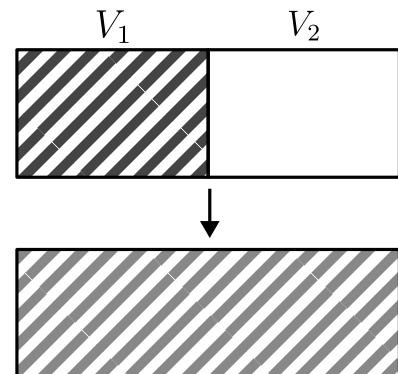
9 Prozesse

- **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

$$\Delta S = Nk_B \ln \left(\frac{V_1 + V_2}{V_1} \right) > 0 \quad (143)$$

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

$$Q_L = T\Delta S \quad (144)$$

ΔS Entropieänderung des Phasenübergangs

Clausius-Clapeyron Gleichung Steigung der Phasengrenzlinie	$\frac{dp}{dT} = \frac{Q_L}{T\Delta V} \quad (145)$ ΔV Volumenänderung des Phasenübergangs
Phasenübergang Im Koexistenzbereich	$G_1 = G_2 \quad (146)$ und damit $\mu_1 = \mu_2 \quad (147)$
Gibbsche Phasenregel	$f = c - p + 2 \quad (148)$ 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-hoff'sches Gesetz	$p_{\text{osm}} = k_B T \frac{N_c}{V} \quad (149)$ N_c #gelöster Teilchen
--	---

10.1 Materialeigenschaften

Wärmekapazität	$c = \frac{Q}{\Delta T} \quad (150)$ Q Wärme
Isochore Wärmekapazität	$c_v = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (151)$ U innere Energie
Isobare Wärmekapazität	$c_p = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (152)$ H Enthalpie
Kompressionsmodul	$K = -V \frac{dp}{dV} \quad (153)$ p Druck, V Anfangsvolumen
Kompressibilität	$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \quad (154)$

Isotherme Kompressibilität

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{K} \quad (155)$$

Adiabatische Kompressibilität

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S \quad (156)$$

Thermaler
Ausdehnungskoeffizient

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,N} \quad (157)$$

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.

$$A \overset{th.GGW.}{\leftrightarrow} C \wedge B \overset{th.GGW.}{\leftrightarrow} C \Rightarrow A \overset{th.GGW.}{\leftrightarrow} B \quad (158)$$

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

$$\Delta U = \delta Q - \delta W \quad (159)$$

$$dU = T dS - p dV \quad (160)$$

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

$$\lim_{T \rightarrow 0} s(T) = 0 \quad (161)$$

und damit auch

$$\lim_{T \rightarrow 0} c_V = 0 \quad (162)$$

$$s = \frac{S}{N}$$

12 Ensembles

Mikrokanonisches Ensemble

Konstante Variablen	E, V, N
partition sum	$\Omega = \sum_n 1$
probability	$p_n = \frac{1}{\Omega}$
td pot	$S = k_B \ln \Omega$
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
partition sum	$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$
probability	$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}$
td pot	$F = -k_B T \ln Z$
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
partition sum	$Z_g = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}$
probability	$p_n = \frac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z_g}$
td pot	$\Phi = -k_B T \ln Z$
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
partition sum	
probability	$p_n? \frac{e^{-\beta(E_n+pV_n)}}{Z}$
td pot	
pressure	
entropy	

Isonthalpic-isobaric ensemble : Enthalpy ensemble

Konstante Variablen	
partition sum	
probability	
td pot	
pressure	
entropy	

TODO:complete, link potentials

Ergodenhypothese

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

$\langle A \rangle_{\text{Zeit}} = \langle A \rangle_{\text{Ensemble}}$ (163)
A Messgröße

12.1 Potentiale

Innere Energie

$dU(S, V, N) = T dS - p dV + \mu dN$ (164)
--

Freie Energie / Helmholtz
Energie

$dF(T, V, N) = -S dT - p dV + \mu dN$ (165)

Enthalpie

$dH(S, p, N) = T dS + V dp + \mu dN$ (166)
--

Freie Entahlpie /
Gibbs-Energie

$dG(T, p, N) = -S dT + V dp + \mu dN$ (167)

Großkanonisches Potential

$d\Phi(T, V, \mu) = -S dT - p dV - N d\mu$ (168)
--

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

$$\Omega(E) = \int_V d^3q_1 \dots \int_V d^3q_N \int d^3p_1 \dots \int d^3p_N \frac{1}{N! h^{3N}} \Theta\left(E - \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m}\right) \quad (169)$$

$$= \left(\frac{V}{N}\right)^N \left(\frac{4\pi m E}{3h^2 N}\right)^{\frac{3N}{2}} e^{-\frac{5N}{2}} \quad (170)$$

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

Entropie

$$S = \frac{5}{2} N k_B + N k_B \ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m E}{3h^2 N} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (171)$$

Ideale Gasgleichung

Thermische
Zustandsgleichung idealer
Gase

$$pV = nRT \quad (172)$$

$$= N k_B T \quad (173)$$

Kalorische Zustandsgleichung

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \quad (174)$$

Äquipartitionstheorem

Jedem Freiheitsgrad steht die
Energie U_D zur Verfügung

$$U_D = \frac{1}{2} k_B T \quad (175)$$

Maxwellsche

Geschwindigkeitsverteilung

Siehe auch
Maxwell-Boltzmann
Verteilung

$$w(v) dv = 4\pi \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{\beta m v^2}{2}} dv \quad (176)$$

Mittlere quadratische

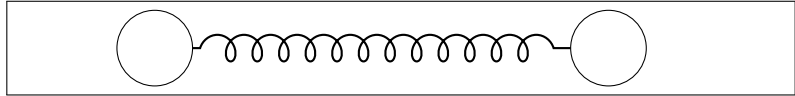
Geschwindigkeit
pro Teilchen im 3D-Gas

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty dv v^2 w(v) = \frac{3k_B T}{m} \quad (177)$$

13.0.1 Molekülgas

Molekülgas

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



Translation

$$p_i = \frac{2\pi\hbar}{L} n_i \quad (178)$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{\vec{p}_r^2}{2M} \quad (179)$$

$$n_i \in \mathbb{N}_0, \quad i = x, y, z$$

Schwingungen

$$E_{\text{vib}} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (180)$$

$$n \in \mathbb{N}_0$$

Rotation

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1) \quad (181)$$

$$j \in \mathbb{N}_0$$

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

$$p = k_B T \rho [1 + B(T)\rho + C(T)\rho^2 + \dots] \quad (182)$$

$$B \text{ und } C \text{ 2. und 3. Virialkoeffizient, } \rho = \frac{N}{V}$$

Mayer-Funktion

$$f(\vec{r}) = e^{-\beta V(i,j)} - 1 \quad (183)$$

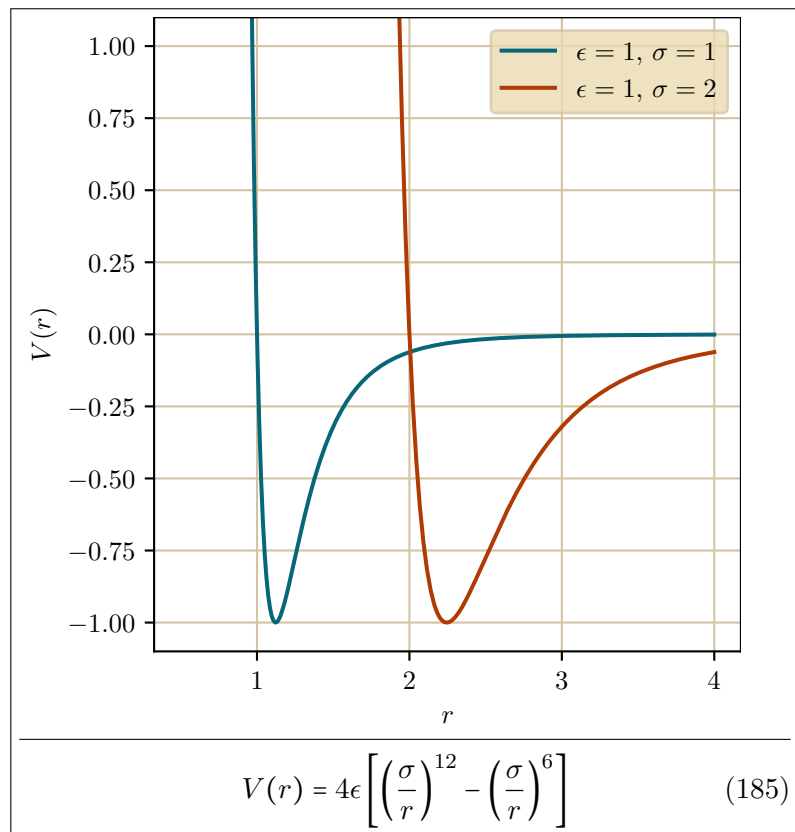
$V(i, j)$ Paarpotential

Zweiter Virialkoeffizient

Hängt vom Paarpotential zweier Moleküle ab

$$B = -\frac{1}{2} \int_V d^3\vec{r} f(\vec{r}) \quad (184)$$

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.



14.2 Van der Waals Gleichung

Annahme eines Harte-Kugeln Potentials mit einer schwachen Anziehung

Zustandssumme

$$Z_N = \frac{(V - V_0)^N}{\lambda^{3N} N!} e^{\frac{\beta N^2 a}{V}} \quad (186)$$

a Kohäsionsdruck

Van der Waals-Gleichung

$$p = \frac{Nk_B T}{V - b} - \frac{N^2 a}{V^2} \quad (187)$$

b Kovolumen

TODO:sometimes N is included in a, b

15 Ideales Quantengas

Fugazität

$$z = e^{\mu\beta} = e^{\frac{\mu}{k_B T}} \quad (188)$$

Besetzungszahl

$$\sum_r n_r = N \quad (189)$$

r Zustände

Ununterscheidbare Teilchen

$$|p_1, p_2, \dots, p_N\rangle = |p_1\rangle |p_2\rangle \dots |p_N\rangle \quad (190)$$

p_i Zustand

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

$$\hat{P}_{12}\psi(p_i(\vec{r}_1), p_j(\vec{r}_2)) = \pm\psi(p_i(\vec{r}_1), p_j(\vec{r}_2)) \quad (191)$$

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

Spinartungsfaktor

$$g_s = 2s + 1 \quad (192)$$

s Spin

Zustandsdichte

$$g(\epsilon) = g_s \frac{V}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon} \quad (193)$$

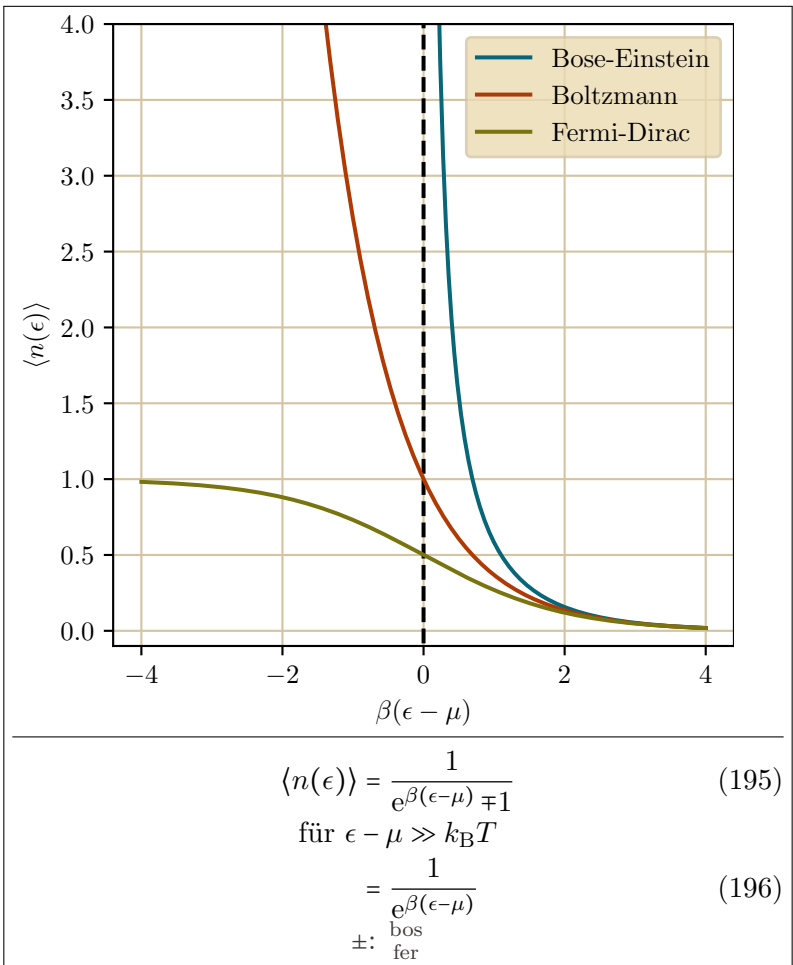
g_s Spinartungsfaktor

Besetzungszahl pro Energie

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

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

Besetzungszahl



Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty n(\epsilon) d\epsilon \quad (197)$$

Energie

Gleich wie beim klassischen idealen Gas

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon n(\epsilon) d\epsilon = \frac{3}{2} pV \quad (198)$$

Zustandsgleichung

Bosonen: verringerter Druck da sie clustern

Fermionen: erhöhter Druck durch das Pauli-Prinzip

$$pV = k_B T \ln Z_g \quad (199)$$

after Virialentwicklung

$$= N k_B T \left[1 \mp \frac{\lambda^3}{2^{5/2} g v} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^2 \right) \right] \quad (200)$$

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

Relevanz der qm. Korrekturen

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

$$\left(\frac{V}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \sim \frac{\lambda}{g_s^{\frac{1}{3}}} \quad (201)$$

Verallgemeinerte Zeta-Funktion

$$\left. \begin{array}{l} g_\nu(z) \\ f_\nu(z) \end{array} \right\} := \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1} \mp 1} \quad (202)$$

15.1 Bosonen

Zustandssumme

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

$p \in \mathbb{N}_0$

Besetzungszahl

Bose-Einstein Verteilung

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1} \quad (204)$$

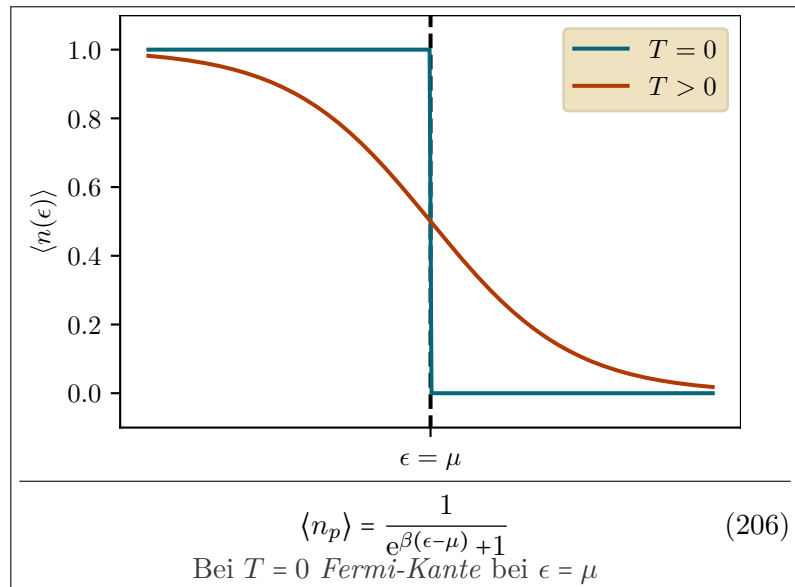
15.2 Fermionen

Zustandssumme

$$Z_g = \prod_p \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)} \right) \quad (205)$$

$p = 0, 1$

Besetzungszahl
Fermi-Dirac Verteilung



Slater-Determinante

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} p_1(\vec{r}_1) & p_2(\vec{r}_1) & \dots & p_N(\vec{r}_1) \\ p_1(\vec{r}_2) & p_2(\vec{r}_2) & \dots & p_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_1(\vec{r}_N) & p_2(\vec{r}_N) & \dots & p_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (207)$$

Fermienergie

$$\epsilon_F := \mu(T = 0) \quad (208)$$

Fermi Temperatur

$$T_F := \frac{\epsilon_F}{k_B} \quad (209)$$

Fermi-Impuls

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

$$p_F = \hbar k_F = (2mE_F)^{\frac{1}{2}} \quad (210)$$

Spezifische Dichte

$$v = \frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad (211)$$

f Verallgemeinerte Zeta-Funktion, g Entartungsfaktor, z Fugazität

15.2.1 Starke Entartung

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

$$f_\nu(z) = \frac{(\ln z)^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} \left(1 + \frac{\pi^6 \nu(\nu - 1)}{6 (\ln z)^2} + \dots \right) \quad (212)$$

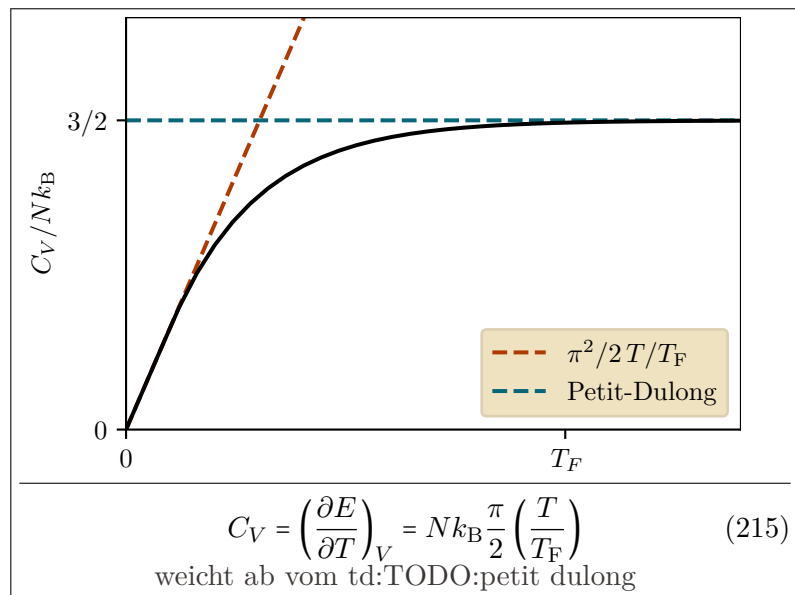
Energiedichte

$$\frac{E}{V} = \frac{3}{2} \frac{g}{\lambda^3} k_B T f_{5/2}(z) \quad (213)$$

Sommerfeld-Entwicklung

$$\approx \frac{3}{5} \frac{N}{V} E_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right) \quad (214)$$

Wärmecapacity
für geringe Temperaturen
 $T \ll T_F$



TODO:Entartung und Sommerfeld TODO:DULONG-PETIT Gesetz

Teil V

Elektrodynamik

16 Elektrisches Feld

Elektrisches Feld Umgibt 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: $1 \text{ V} = 1 \text{ kgm}^2/\text{s}^3\text{A}$ $\phi = - \int \vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} \quad (216)$
Gaußsches Gesetz für elektrische Felder Der magnetische Fluss durch eine geschlossene Fläche ist proportional zur elektrischen Ladung	$\Phi_E = \iint_S \vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{S} = \frac{Q}{\epsilon_0} \quad (217)$ 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	$\epsilon(\omega)_r = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} \quad (218)$ ϵ Permittivität, ϵ_0 Vakuum Permittivität	
Vakuum Permittivität Elektrische Feldkonstante	Symbol: ϵ_0	Experimenteller Wert $8.8541878188(14) \cdot 10^{-1} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}$
Elektrische Suszeptibilität Beschreibt wie stark ein dielektrisches Material polarisiert wird, wenn ein elektrisches Feld angelegt wird	Symbol: χ_e	Unit: $\epsilon_r = 1 + \chi_e \quad (219)$ ϵ_r Relative Permittivität / Dielectric constant
Dielektrische Polarisationsdichte	Symbol: \vec{P}	Unit: 1 C/m^2 $\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{\mathcal{E}} \quad (220)$ ϵ_0 Vakuum Permittivität, χ_e Elektrische Suszeptibilität, $\vec{\mathcal{E}}$ Elektrisches Feld

Elektrische Flussdichte / dielektrische Verschiebung	Symbol: \vec{D} Unit: $1 \text{ C/m}^2 = 1 \text{ As/m}^2$
	$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{\mathcal{E}} + \vec{P} \quad (221)$
	ϵ_0 Vakuum Permittivität, $\vec{\mathcal{E}}$ Elektrisches Feld, \vec{P} Dielektrische Polarisationsdichte

Elektrischer Fluss durch die Fläche \vec{A}	$\Phi_E = \int_A \vec{D} \cdot d\vec{A} \quad (222)$
	\vec{D} Elektrische Flussdichte / dielektrische Verschiebung

Elektrische Leistung	$P_{\text{el}} = U I \quad (223)$
	U Elektrisches Potential, I Elektrischer Strom

17 Magnetfeld

Magnetischer Fluss	Symbol: Φ_B Unit: $1 \text{ Wb} = 1 \text{ V s}^{-1} = 1 \text{ kgm}^2/\text{s}^2 \text{ A}$
	$\Phi_B = \iint_A \vec{B} \cdot d\vec{A} \quad (224)$
	\vec{A} Fläche

Magnetische Flussdichte Definiert über Lorentzkraft	Symbol: \vec{B} Unit: $1 \text{ T} = 1 \text{ Vs/m}^2 = 1 \text{ N A}^{-1} \text{ m} = 1 \text{ kg/As}^2$
	$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (225)$
	\vec{H} Magnetische Feldstärke, \vec{M} Magnetisierung, μ_0 Magnetische Vakuumpermeabilität

Magnetisches Vektorpotential	Symbol: \vec{A} Unit: $1 \text{ T m} = 1 \text{ V s m}^{-1} = 1 \text{ kgm/s}^2 \text{ A}$
	$\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) = \vec{B}(\vec{r}) \quad (226)$

Magnetische Feldstärke	Symbol: \vec{H} Unit: 1 A m^{-1}
	$\vec{H} \equiv \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \quad (227)$

Lorentzkraft Kraft auf geladenes Teilchen	$\vec{F} = q\vec{\mathcal{E}} + q\vec{v} \times \vec{B} \quad (228)$
--	--

Magnetisch Permeabilität	Symbol: μ Unit: $1 \text{ H m}^{-1} = 1 \text{ V s A}^{-1} \text{ m}$
	$\mu = \frac{B}{H} \quad (229)$
	B Magnetische Flussdichte, H Magnetische Feldstärke

Magnetische Vakuumpermeabilität	Symbol: μ_0 Experimenteller Wert $1.25663706127(20) \text{ H/m} = \text{N/A}^2$
Realtive Permeabilität	$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (230)$
Gaußsches Gesetz für Magnetismus Der magnetische Fluss durch eine geschlossene Fläche ist 0 ⇒ es gibt keine magnetischen Monopole	$\Phi_B = \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (231)$ S geschlossene Fläche
Magnetisierung Vektorfeld, welches die Dichte von magnetischen Dipolen beschreibt.	Symbol: \vec{M} Unit: 1 A m^{-1} $\vec{M} = \frac{d\vec{m}}{dV} = \chi_m \cdot \vec{H} \quad (232)$
Magnetisches Moment Stärke und Richtung eines magnetischen Dipols	Symbol: \vec{m} Unit: 1 Am^2
Drehmoment	$\vec{\tau} = \vec{m} \times \vec{B} \quad (233)$ m Magnetisches Moment
Suszeptibilität	$\chi_m = \frac{\partial M}{\partial B} = \mu_r - 1 \quad (234)$ μ_r Realtive Permeabilität

17.1 Magnetische Materialien

Paramagnetismus Magnetisches Feld wird im Material verstärkt	$\mu_r > 1 \quad (235)$ $\chi_m > 0 \quad (236)$ μ Magnetisch Permeabilität, χ_m Suszeptibilität
Diamagnetismus Magnetisches Feld wird aus dem Material gedrängt	$0 < \mu_r < 1 \quad (237)$ $-1 < \chi_m < 0 \quad (238)$ μ Magnetisch Permeabilität, χ_m Suszeptibilität
Ferromagnetismus Magnetische Momente werden am äußeren Feld ausgerichtet und behalten diese Ausrichtung auch wenn das Feld abgeschaltet wird (Remanenz)	$\mu_r \gg 1 \quad (239)$ 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?	$\epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2} \quad (240)$ ϵ_0 Vakuum Permittivität, μ_0 Magnetische Vakuumpermeabilität, c Lightgeschwindigkeit
Poisson Gleichung in der Elektrostatik	$\Delta \Phi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon} \quad (241)$ TODO:double check Φ ρ Ladungsdichte, ϵ Permittivität, Φ Potential
Poynting-Vektor Gerichteter Energiefluss oder Leistungsfluss eines elektromagnetischen Feldes [W/m ²]	$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (242)$
Elektrisches Feld	$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (243)$ \vec{E} Elektrisches Feld, ϕ Elektrisches Potential, \vec{A} Magnetisches Vektorpotential
Hamiltonian eines Teilchens im elektromagnetischen Feld In der ed:em:gauge:coulomb	$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right]^2 \quad (244)$ m Masse, \hat{p} Impulsoperator, q Ladung, \vec{A} Magnetisches Vektorpotential, c Lightgeschwindigkeit

18.1 Maxwell-Gleichungen

Vakuum Mikroskopische Formulierung	$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{el}}{\epsilon_0} \quad (245)$
	$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (246)$
	$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{d\vec{B}}{dt} \quad (247)$
	$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{d\vec{E}}{dt} \quad (248)$

Materie
Makroskopische Formulierung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{\text{el}} \quad (249)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (250)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{d\vec{B}}{dt} \quad (251)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{d\vec{D}}{dt} \quad (252)$$

18.1.1 Eichungen

Coulomb-Eichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (253)$$

\vec{A} Magnetisches Vektorpotential

TODO:Polarization

18.2 Induktion

Faradaysche Induktionsgesetz

$$U_{\text{ind}} = -\frac{d}{dt} \Phi_B = -\frac{d}{dt} \iint_A \vec{B} \cdot d\vec{A} \quad (254)$$

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:

$$\tilde{n} = n' + in'' \quad (255)$$

$$n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \quad (256)$$

$$n = \frac{c_0}{c_M} \quad (257)$$

???:relative permittivity, ???:relative permeability, c Lightgeschwindigkeit, c_M Lichtgeschwindigkeit im Medium

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

Realer Teil des
Brechungsindex

Symbol: n' Unit:

Auslöschungskoeffizient
Komplexer Teil des
Brechungsindex

Symbol: n'' Unit:
manchmal κ

Reflectio	$R = \left \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right \quad (258)$
	\tilde{n} Brechungsindex

Snelliussches Brechungsgesetz	$n'_1 \sin \theta_1 = n'_2 \sin \theta_2 \quad (259)$
	n_i Brechungsindex, θ_i Einfallswinkel (normal zur Fläche)

Gruppengeschwindigkeit Geschwindigkeit, mit sich die Einhülende einer Welle ausbreitet	$v_g \equiv \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad (260)$
	ω Kreisfrequenz, k angular wavenumber

Phasengeschwindigkeit Geschwindigkeit, mit der sich eine Welle im Medium ausbreitet	$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\lambda}{T} \quad (261)$
	ω Kreisfrequenz, k angular wavenumber, λ wavelength, T Periodendauer

Absorptionskoeffizient Intensitätsverringderung beim Durchgang eines Mediums, nicht zwingend durch Energieabgabe an Medium	Symbol: α Unit: 1 cm^{-1}
	$\alpha = 2n'' \frac{\omega}{c} \quad (262)$
	$\alpha = \frac{\omega}{nc} \epsilon'' \quad \text{TODO: For direct band gaps; from adv. sc: sheet 10 2b). Check whi} \quad (263)$
	n'' Auslöschungskoeffizient, c Lightgeschwindigkeit, ω Kreisfrequenz

Elektromagnetische Strahlungsintensität Flächenleistungsdichte	Symbol: I Unit: $1 \text{ W/m}^2 = 1/\text{s}^3$
	$I = \langle \langle S \rangle_t \rangle \quad (264)$
	S ed:poynting

Lambert-beersches Gesetz Intensität in einem absorbierenden Medium	$I(z) = I_0 e^{-\kappa z} \quad (265)$
	I Elektromagnetische Strahlungsintensität, α Absorptionskoeffizient, z Eindringtiefe

20 Hall-Effekt

Zyklotronfrequenz	$\omega_c = \frac{eB}{m_e} \quad (266)$
-------------------	---

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	$U_H = \frac{IB}{ned} \quad (267)$
n Ladungsträgerdichte	

Hall-Koeffizient Manchmal R_H	$A_H := -\frac{E_y \overset{\text{metals}}{\downarrow} 1}{j_x B_z ne} = \frac{\rho_{xy}}{B_z} \quad (268)$
------------------------------------	--

Spezifischer Widerstand	$\rho_{xx} = \frac{m_e}{ne^2\tau} \quad (269)$
	$\rho_{xy} = \frac{B}{ne} \quad (270)$

20.2 Ganzzahliger Quantenhalleffekt

Leitfähigkeitstensor	$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \quad (271)$
----------------------	---

Spezifischer Widerstands-tensor	$\rho = \sigma^{-1} \quad (272)$
------------------------------------	----------------------------------

Spezifischer Hallwiderstand	$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad (273)$
$\nu \in \mathbb{Z}$ Füllfaktor	

Fraktionaler Quantum-Hall-Effekt	$\nu = \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \frac{2}{3} \dots \quad (274)$
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

Dipolstrahlung Poynting-Vektor	$\vec{S} = \left(\frac{\mu_0 p_0^2 \omega^4}{32\pi^2 c} \right) \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \vec{r} \quad (275)$
-----------------------------------	---

Zeitlich mittlere Leistung	$P = \frac{\mu_0 \omega^4 p_0^2}{12\pi c} \quad (276)$
----------------------------	--

22 misc

Impedanz eines Ohmschen
Widerstands

$$Z_R = R \quad (277)$$

??? ??:resistance

Impedanz eines Kondensators

$$Z_C = \frac{1}{i\omega C} \quad (278)$$

??? ??:capacity, ??? ??:angular velocity

Impedanz eines Induktors

$$Z_L = i\omega L \quad (279)$$

??? ??:inductance, ??? ??:angular velocity

TODO:impedance addition for parallel / linear

Teil VI

Quantenmechanik

23 Basics

23.1 Operatoren

Dirac-Notation	$\langle x $ "Bra" Zeilenvektor	(280)
	$ x\rangle$ "Ket" Spaltenvektor	(281)
	$\hat{A} \beta\rangle = \alpha\rangle \Rightarrow \langle\alpha = \langle\beta \hat{A}^\dagger$	(282)
Dagger	$\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^*)^T$	(283)
	$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger$	(284)
	$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$	(285)
		(286)
Adjungierter operator	$\langle\alpha \hat{A}^\dagger \beta\rangle = \langle\beta \hat{A} \alpha\rangle^*$	(287)
Hermitescher operator	$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$	(288)

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

$$p(\lambda) = \langle\psi|\hat{P}_\lambda|\psi\rangle \quad (289)$$

Zustand nach der Messung

$$|\psi\rangle_{\text{post}} = \frac{1}{\sqrt{p(\lambda)}} \hat{P}_\lambda |\psi\rangle \quad (290)$$

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 $	(291)
	$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i 0\rangle\langle 1 + i 1\rangle\langle 0 $	(292)
	$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 0\rangle\langle 0 - 1\rangle\langle 1 $	(293)

23.2 Wahrscheinlichkeitstheorie

Kontinuitätsgleichung	$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (294)$ <p>ρ Dichte einer Erhaltungsgröße q, j Fluß von q</p>
Zustandswahrscheinlichkeit	$TODO \quad (295)$
Dispersion	$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad (296)$
Allgemeine Unschärferelation	$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 \quad (297)$
	$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \quad (298)$

23.3 Kommutator

Kommutator	$[A, B] = AB - BA \quad (299)$
Antikommutator	$\{A, B\} = AB + BA \quad (300)$
Kommutatorrelationen	$[A, BC] = [A, B]C - B[A, C] \quad (301)$
TODO:add some more?	
Kommutator mit einer Funktion	$[f(A), B] = [A, B] \frac{\partial f}{\partial A} \quad (302)$ <p>falls $[A, [A, B]] = 0$</p>
Jakobi-Identität	$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (303)$
Lemma von Hadamard	$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (304)$
Kanonische Vertauschungsrelationen	$[x_i, x_j] = 0 \quad (305)$
	$[p_i, p_j] = 0 \quad (306)$
	$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (307)$ <p>x, p kanonische konjugierte</p>

24 Schrödingergleichung

Energieoperator	$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (308)$
-----------------	--

Impulsoperator	$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}_x \quad (309)$
Ortsoperator	$\vec{x} = i\hbar\vec{\nabla}_p \quad (310)$
Stationäre Schrödingergleichung	$\hat{H} \psi\rangle = E \psi\rangle \quad (311)$
Schrödingergleichung	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \vec{V}(x)\right)\psi(x) \quad (312)$
Hellmann-Feynman-Theorem Ableitung der Energie nach einem Parameter	$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \int d^3r \psi_\lambda^* \frac{d\hat{H}_\lambda}{d\lambda} \psi_\lambda = \left\langle \psi(\lambda) \left \frac{d\hat{H}_\lambda}{d\lambda} \right \psi(\lambda) \right\rangle \quad (313)$
Variationsprinzip	Wenn $\hat{H}\psi = E\psi$, dann ist $E_0 \leq E = \langle \psi \hat{H} \psi \rangle$. Der Grundzustand kann daher gefunden werden, indem ψ variiert wird bis die Energie minimiert ist.

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 (314)$
	U unitär

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

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (315)$$

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

$$\dot{\rho} = \underbrace{-\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho]}_{\text{reversible}} + \underbrace{\sum_{n,m} h_{nm} \left(\hat{A}_n \rho \hat{A}_m^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{A}_m^\dagger \hat{A}_n, \rho \} \right)}_{\text{irreversible}} \quad (316)$$

h 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 (317)$
-----------------------------	---

Heisenberg Zeitentwicklung	$ \psi_H\rangle = \psi_S(t_0)\rangle$ (318)
	$A_H = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0)$ (319)
	$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \left(\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right)_H$ (320)
	mit H und S dem Heisenberg- und Schrödinger-Bild

24.1.2 Ehrenfest-Theorem

Siehe auch ??

Ehrenfest-Theorem gilt für beide Bilder	$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$ (321)
---	---

Ehrenfest-Theorem Beispiel Beispiel für x	$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = - \langle \nabla V(x) \rangle = \langle F(x) \rangle$ (322)
--	---

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	$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ (323)
-------------	---

Potenzreihe	$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$ (324)
	$ \psi_n\rangle = \psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \psi_n^{(2)}\rangle + \dots$ (325)

Energieverschiebung 1. Ordnung	$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} \hat{H}_1 \psi_n^{(0)} \rangle$ (326)
--------------------------------	---

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$ (327)
----------	---

Energieverschiebung 2. Ordnung	$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left \langle \psi_k^{(0)} \hat{H}_1 \psi_n^{(0)} \rangle \right ^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$ (328)
--------------------------------	--

Fermis goldene Regel Übergangsrate des initial Zustandes $ i\rangle$ unter einer Störung H^1 zum Endzustand $ f\rangle$	$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle f H^1 i \rangle ^2 \rho(E_f)$ (329)
--	---

26 Harmonischer Oszillator

Hamiltonian	$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (330)$ $= \frac{1}{2}\hbar\omega + \omega a^\dagger a \quad (331)$
-------------	---

Energiespektrum	$E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right) \quad (332)$
-----------------	---

Siehe auch 26.1

26.1 Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren / Leiteroperatoren

Teilchenzahloperator/Besetzungszahloperator	$\hat{N} := a^\dagger a \quad (333)$ $\hat{N} n\rangle = n n\rangle \quad (334)$
	<p>$n\rangle =$ Fock-Zustände, $\hat{a} =$ Vernichtungsoperator, $\hat{a}^\dagger =$ Erzeugungsoperator</p>

Kommutator	$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (335)$ $[N, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (336)$ $[N, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (337)$
------------	---

Anwendung auf Zustände	$\hat{a} n\rangle = \sqrt{n} n-1\rangle \quad (338)$ $\hat{a}^\dagger n\rangle = \sqrt{n+1} n+1\rangle \quad (339)$ $ n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n 0\rangle \quad (340)$
------------------------	---

Matrix-Form	$\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N \end{pmatrix} \quad (341)$ $\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (342)$ $\hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{N} & 0 \end{pmatrix} \quad (343)$
-------------	---

26.1.1 Harmonic Oscillator

Harmonischer Oszillator

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (344)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (345)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \quad (346)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} + i\tilde{P}) \quad (347)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{X} - i\tilde{P}) \quad (348)$$

27 Drehmoment

27.1 Aharonov-Bohm Effekt

Erhaltene Phase

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

$$\delta = \frac{2e}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{s} = \frac{2e}{\hbar} \Phi \quad (349)$$

TODO:replace with loop intergral symbol and add more info

28 Periodische Potentiale

Blochwellen

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

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (350)$$

\vec{k} beliebig, u periodische Funktion

Periodizität

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (351)$$

$$\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (352)$$

\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:

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{U}, \hat{H}] = 0 \quad (353)$$

29.1 Zeitumkehrungssymmetrie

Zeitumkehrungssymmetrie	$T : t \rightarrow -t$	(354)
-------------------------	------------------------	-------

Antiunitär	$T^2 = -1$	(355)
------------	------------	-------

30 Zwei-Niveau System (TLS)

$$H = \underbrace{\hbar\omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\text{field}} + \underbrace{\hbar\omega_a \frac{\hat{\sigma}_z}{2}}_{\text{atom}} + \underbrace{\frac{\hbar\Omega}{2} \hat{E} \hat{S}}_{\text{int}} \quad (356)$$

James-Cummings
Hamiltonian

TLS interagiert mit
resonantem Lichtfeld

after RWA:

$$(357)$$

$$= \hbar\omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\omega_a \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} + \frac{\hbar\Omega}{2} (\hat{a} \hat{\sigma}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}) \quad (358)$$

$\hat{E} = E_{\text{ZPF}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ 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

$$\Delta\omega := |\omega_0 - \omega_L| \ll |\omega_0 + \omega_L| \approx 2\omega_0 \quad (359)$$

ω_L Frequenz des Lichtes, ω_0 Übergangsfrequenz

Adiabatheorem

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

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_a(q_1) & \phi_a(q_2) & \dots & \phi_a(q_N) \\ \phi_b(q_1) & \phi_b(q_2) & \dots & \phi_b(q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_z(q_1) & \phi_z(q_2) & \dots & \phi_z(q_N) \end{vmatrix} \quad (360)$$

32 Wasserstoffatom

Reduzierte Masse

$$\mu = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K} \stackrel{m_e \ll m_K}{\approx} m_e \quad (361)$$

Coulomb potential Für ein Eielektronenatom	$V(\vec{r}) = \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (362)$ <p>Z Ordnungszahl/Kernladungszahl</p>
Hamiltonian	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) \quad (363)$ $= \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r} + V(r) \quad (364)$
Wellenfunktion	$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (365)$ <p>$R_{nl}(r)$ Radialanteil, Y_{lm} qm:spherical harmonics</p>
Radialanteil	$R_{nl} = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n[(n+l)!]^3}} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r) \quad (366)$ <p>with</p> $\kappa = \frac{\sqrt{2\mu E }}{\hbar} = \frac{Z}{na_B} \quad (367)$ <p>$L_r^s(x)$ Laguerre-Polynome</p>
Energieeigenwerte	$E_n = \frac{Z^2 \mu e^4}{n^2 (4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -E_H \frac{Z^2}{n^2} \quad (368)$
Rydberg-Konstante für schwere Atome	<p>Symbol: R_∞ Experimenteller Wert $10973731.568157(12) \text{ m}^{-1}$</p> <hr/> $R_\infty = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \quad (369)$ <p>m_e Elektronenmasse, e elementary charge, ϵ_0 vacuum permittivity, h Plancksches Wirkumsquantum, c vacuum speed of light</p>
Rydberg Konstante korrigiert für Kernmasse M	$R_M = \frac{\mu}{m_e} R_\infty \quad (370)$ <p>rydberg constant heavy, $\mu = \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{M}\right)^{-1}$ reduced mass, m_e Elektronenmasse</p>
Rydberg-Energy Energie Einheit	$1 \text{ Ry} = hc R_\infty \quad (371)$ <p>R_∞ Rydberg-Konstante, h Plancksches Wirkumsquantum, c vacuum speed of light</p>

Bohrscher Radius	Symbol: a_0 Experimenteller Wert $5.29177210544(82) \cdot 10^{-11} \text{ m}$
	$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m_e} \quad (372)$ 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	$\Delta E_{\text{rel}} = -E_n \frac{Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \quad (373)$
---------------------	--

Feinstrukturkonstante Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (374)$
--	--

32.1.2 Spin-Bahn-Kopplung (LS-Kopplung)

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

Energieverschiebung	$\Delta E_{\text{LS}} = \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3} \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle \quad (375)$
---------------------	---

??	$\begin{aligned} \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle &= \frac{1}{2} \langle [J^2 - L^2 - S^2] \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \end{aligned} \quad (376)$
----	---

32.1.3 Feinstruktur

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

Energieverschiebung	$\Delta E_{\text{FS}} = \frac{Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (377)$
---------------------	--

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	$\langle E_{\text{pot}} \rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r + \delta r} \right\rangle \quad (378)$ δr Schwankung von r
--------------------	--

32.1.5 Hyperfeinstruktur

Wechselwirkung von Kernspin mit dem vom Elektron erzeugten Magnetfeld spaltet Energieniveaus

Kernspin	$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad (379)$
	$ \vec{I} = \sqrt{i(i+1)}\hbar \quad (380)$
	$I_z = m_i\hbar \quad (381)$
	$m_i = -i, -i+1, \dots, i-1, i \quad (382)$
Gesamtdrehimpuls	$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad (383)$
	$ \vec{F} = \sqrt{f(f+1)}\hbar \quad (384)$
	$F_z = m_f\hbar \quad (385)$
Auswahlregel	$f = j \pm i \quad (386)$
	$m_f = -f, -f+1, \dots, f-1, f \quad (387)$
Hyperfeinstrukturkonstante	$A = \frac{g_i \mu_K B_{\text{HFS}}}{\sqrt{j(j+1)}} \quad (388)$ <p>B_{HFS} Hyperfeinfeld, μ_K Kernmagneton, g_i Kern-g-Faktor ??</p>
Energieverschiebung	$\Delta H_{\text{HFS}} = \frac{A}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \quad (389)$

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)

$$D(E) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \delta(E - E(\vec{k}_i)) \quad (390)$$

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

Zustandsdichte für
parabolische Dispersion
Bei Freies Elektronengase

$$D_1(E) = \frac{1}{2\sqrt{c_k(E - E_0)}} \quad (1D) \quad (391)$$

$$D_2(E) = \frac{\pi}{2c_k} \quad (2D) \quad (392)$$

$$D_3(E) = \pi \sqrt{\frac{E - E_0}{c_k^3}} \quad (3D) \quad (393)$$

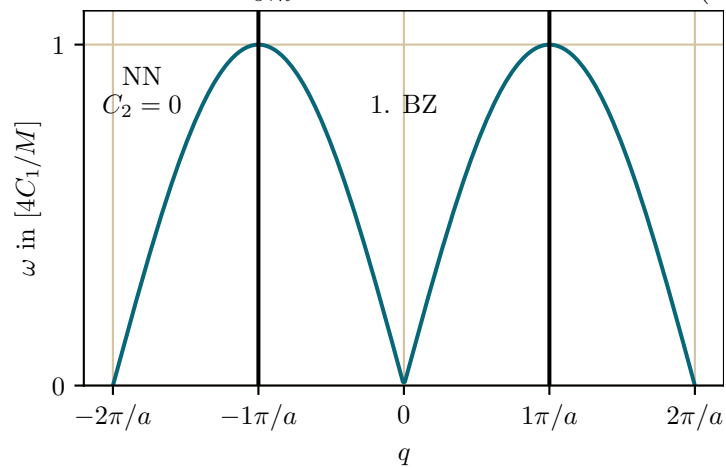
33 Gitterschwingungen

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

$$\omega^2 = \frac{4C_1}{M} \left[\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + \frac{C_2}{C_1} \sin^2(qa) \right] \quad (394)$$

with

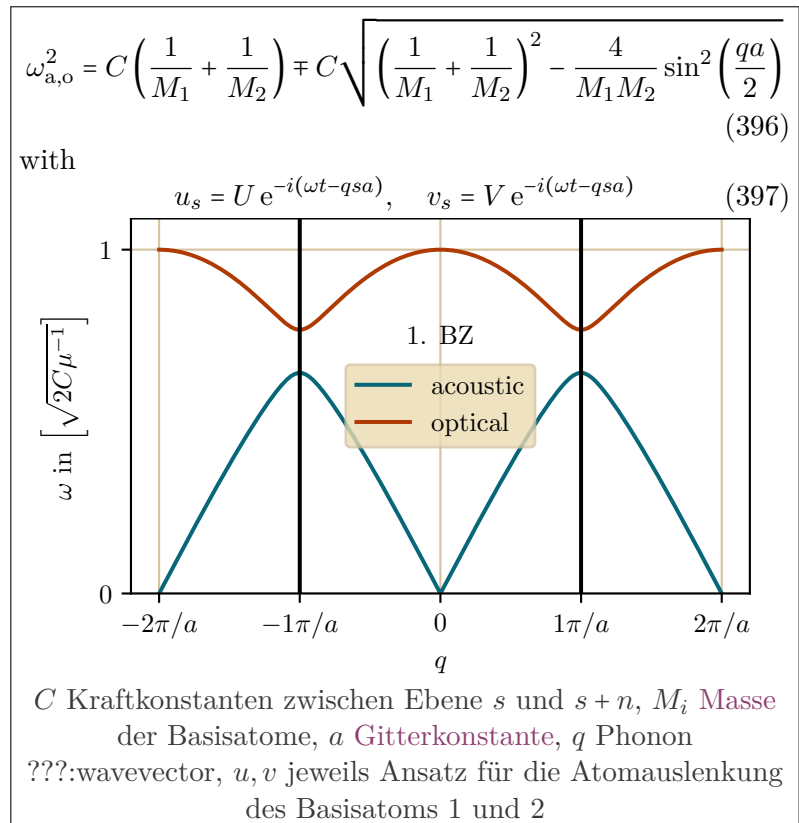
$$u_{s+n} = U e^{-i[\omega t - q(s+n)a]} \quad (395)$$



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



Vibrationsmoden

Akustisch: 3 Moden (1 longitudinal, 2 transversal), die zwei Basisatome schwingen in Phase.
Optisch: 3 Moden, die zwei Basisatome schwingen gegenphasig. Das dadurch entstehende Dipolmoment erlaubt die Wechselwirkung mit Photonen.

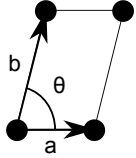
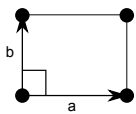
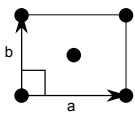
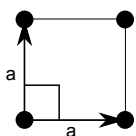
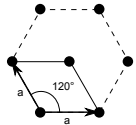
33.1 Debye-Modell

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)	base centered (S)	body centered (I)	face centered (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:
	$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$	(398)
	$n_i \in \mathbb{Z}$	

TODO:primitive unit cell: contains one lattice point

Millersche Indizes	(hkl) plane	(399)
	$[hkl]$ direction	(400)
	$\{hkl\}$ millerFamily	(401)
	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	$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$	(402)
	$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1$	(403)
	$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$	(404)
	a_i Bravais-Gitter Vektoren, V_c Volumen der primitiven Gitterzelle	

Reziproker Gittervektor	Symbol: \vec{G}	Unit:
	$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$	(405)
	$n_i \in \mathbb{Z}$	

34.3 Streuprozesse

Matthiessensche Regel Näherung, nur gültig wenn die einzelnen Streuprozesse von einander unabhängig sind	$\frac{1}{\mu} = \sum_{i=\text{Streuprozesse}} \frac{1}{\mu_i}$	(406)
	$\frac{1}{\tau} = \sum_{i=\text{Streuprozesse}} \frac{1}{\tau_i}$	(407)
	μ Elektrische Mobilität / Beweglichkeit, τ Streuzzeit	

34.4 Gitter

Einfach kubisch (SC)
 Reziprok: Einfach kubisch

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

a Gitterkonstante

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

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (409)$$

a Gitterkonstante

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

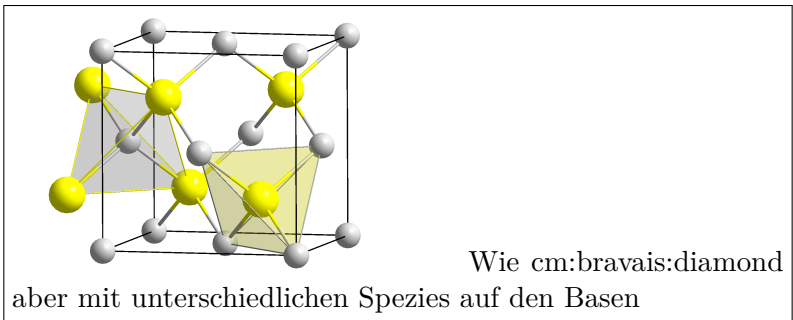
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (410)$$

a Gitterkonstante

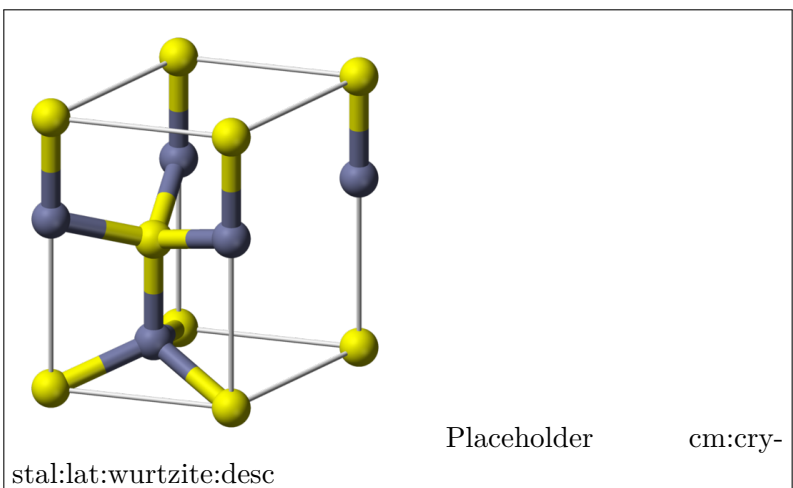
Diamantstruktur

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)

$$\vec{v}_D = \vec{v} - \vec{v}_{th} \quad (411)$$

v_{th} thermische Geschwindigkeit

Mittlere freie Weglänge	$\ell = \langle v \rangle \tau$ (412)						
Elektrische Mobilität / Beweglichkeit Leichtigkeit mit der sich durch ein Elektrisches Feld beeinflusstes Teilchen im Material bewegt	<table border="1" style="width: 100%;"> <tr> <td style="width: 50%;">Symbol: μ</td> <td style="width: 50%;">Unit: $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$</td> </tr> <tr> <td colspan="2" style="text-align: center;">$\mu = \frac{q\tau}{m}$ (413)</td> </tr> <tr> <td colspan="2">q Ladung, m Masse, τ Streuzeit</td> </tr> </table>	Symbol: μ	Unit: $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$	$\mu = \frac{q\tau}{m}$ (413)		q Ladung, m Masse, τ Streuzeit	
Symbol: μ	Unit: $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$						
$\mu = \frac{q\tau}{m}$ (413)							
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	$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2}$ (414)
---	---

Energie	$E_n = \underbrace{\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_e}}_{x-y: \text{ ebene Welle}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} n^2}_z$ (415)
---------	--

35.2 1D Elektronengas / Quantendraht

Energie	$E_n = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_z^2} n_1^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_y^2} n_2^2$ (416)
---------	--

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	$m_e \frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{m_e}{\tau} \vec{v}_D = -e\vec{E}$ (417)
	v Elektronengeschwindigkeit, \vec{v}_D Driftgeschwindigkeit, τ Stoßzeit

Streuzeit Momentum relaxation time	Symbol: τ τ the average time between scattering events weighted by the characteristic momentum change cause by the scattering process.	Unit: 1 s
Stromdichte Ohmsches Gesetz	Symbol: \vec{j} $\vec{j} = -ne\vec{v}_D = ne\mu\vec{\mathcal{E}}$ n Ladungsträgerdichte	Unit: 1 A/m ² (418)
Drude-Leitfähigkeit	$\sigma = \frac{\vec{j}}{\vec{\mathcal{E}}} = \frac{e^2\tau n}{m_e} = ne\mu$	(419)

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	$\vec{j} = -en \langle v \rangle = -en \frac{\hbar}{m_e} \langle \vec{k} \rangle = -e \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar \vec{k}}{m_e}$	(420)
-------------------------	---	-------

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:fermi dirac).

Boltzmann-Transportgleichung für Ladungstransport	$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f - \frac{e}{\hbar} (\vec{\mathcal{E}} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f + \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{scatter}}$	(421)
	$f ??$	

36.4 misc

Tsu-Esaki Tunnelstrom Beschreibt den Strom $I_{L \leftrightarrow R}$ durch eine Barriere	$I_T = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} (f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)) T(E) dE$	(422)
	μ_i ??? : chemical pot 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	$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j}$	(423)
	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

$$\frac{\partial \vec{j}_s}{\partial t} = \frac{n_s q_s^2}{m_s} \vec{E} - \mathcal{O}(\vec{j}_s^2) \quad (424)$$

\vec{j} Stromdichte, n_s , m_s , q_s Dichte, Masse und Ladung der supraleitenden Teilchen

Zweite London-Gleichung
Beschreibt den
Meißner-Ochsenfeld Effekt

$$\vec{\nabla} \times \vec{j}_s = -\frac{n_s q_s^2}{m_s} \vec{B} \quad (425)$$

\vec{j} Stromdichte, n_s , m_s , q_s Dichte, Masse und Ladung der supraleitenden Teilchen

London Eindringtiefe

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m_s}{\mu_0 n_s q_s^2}} \quad (426)$$

37.2 Ginzburg-Landau Theorie (GLAG)

TODO:TODO

Ginzburg-Landau
Kohärenzlänge

$$\xi_{GL} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|\alpha|}} \quad (427)$$

$$\xi_{GL}(T) = \xi_{GL}(0) \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}} \quad (428)$$

Ginzburg-Landau
Eindringtiefe

$$\lambda_{GL} = \sqrt{\frac{m_s \beta}{\mu_0 |\alpha| q_s^2}} \quad (429)$$

$$\lambda_{GL}(T) = \lambda_{GL}(0) \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}} \quad (430)$$

Erste Ginzburg-Landau Gleichung

$$\alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi + \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} + 2e\vec{A})^2\Psi = 0 \quad (431)$$

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

Zweite Ginzburg-Landau Gleichung

$$\vec{j}_s = \frac{ie\hbar}{m}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*) - \frac{4e^2}{m}|\Psi|^2\vec{A} \quad (432)$$

TODO:proximity effect

37.3 Mikroskopische Theorie

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

$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \quad (433)$$

$$\omega_{\text{ph}} \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \Rightarrow T_c \propto \omega_{\text{ph}} \quad (434)$$

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

$$\hat{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \quad (435)$$

$c_{\vec{k}\sigma}$ 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

$$\hat{H}_{\text{BCS}} - N\mu = \sum_{\vec{k}} [\xi_{\vec{k}} - E_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}} g_{\vec{k}}^*] + \sum_{\vec{k}} [E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + E_{\vec{k}} \beta_{-\vec{k}}^{\dagger} \beta_{-\vec{k}}] \quad (436)$$

BCS-gap equation

$$\Delta_{\vec{k}}^* = - \sum_{\vec{k}'}^+ V_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}'}}{2k_{\text{B}}T}\right) \quad (437)$$

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 $\frac{E_F - E_v}{k_B T} > 3.6$	$n_0 \approx N_c(T) \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) \quad (438)$ $p_0 \approx N_v(T) \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T}\right) \quad (439)$																																				
Intrinsische Ladungsträgerdichte	$n_i \approx \sqrt{n_0 p_0} = \sqrt{N_c(T) N_v(T)} \exp\left(-\frac{E_{\text{gap}}}{2k_B T}\right) \quad (440)$																																				
Massenwirkungsgesetz Ladungsträgerdichten im Equilibrium, unabhängig der Dotierung	$np = n_i^2 \quad (441)$																																				
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)																																				

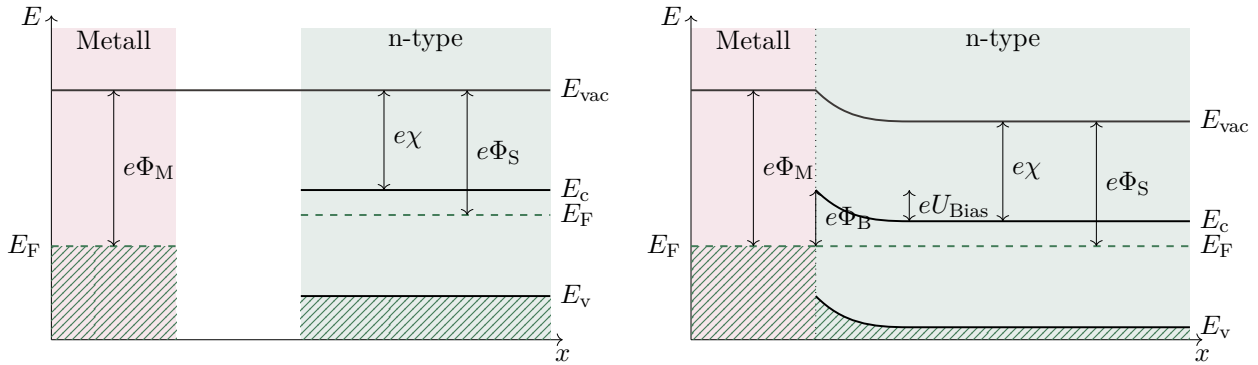
TODO:effective mass approx

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?

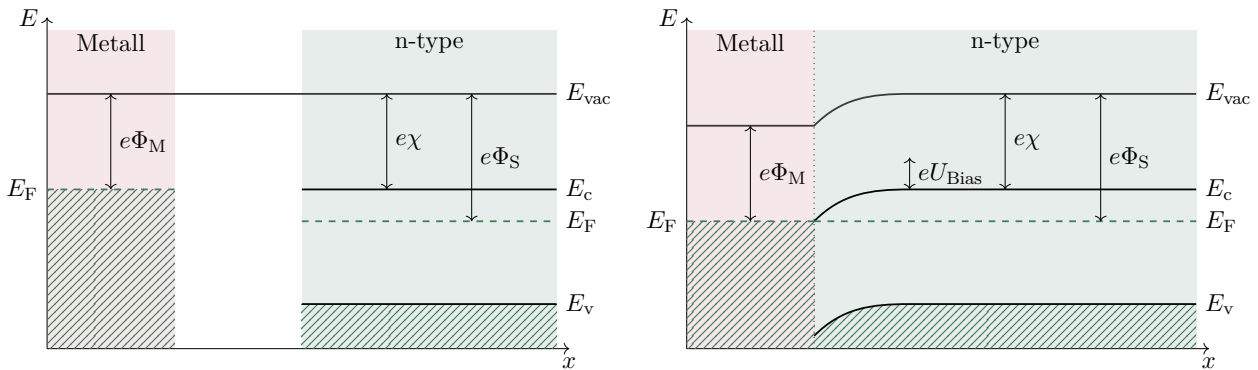
Schottky-Mott rule

$$\Phi_B \approx \Phi_M - \chi_{sc} \quad (442)$$

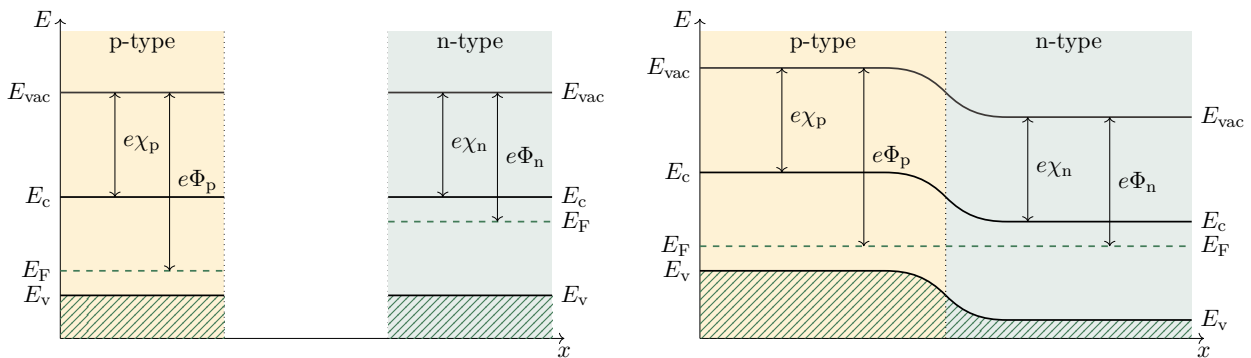
Φ_B barrier potential, Φ_M Metall Austrittsarbeit, χ_{sc} Elektronenaffinität

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	$E(n) = - \left(\frac{\mu}{m_0 \epsilon_r^2} \right) R_H \frac{1}{n^2} \quad (443)$ <p>R_H Rydberg-Energy</p>
Exziton-Bohr Radius für freie Exzitons	$r_n = \left(\frac{m_e \epsilon_r a_B}{m\mu} \right) n^2 \quad (444)$ <p>???:relative permittivity, a_0 Bohrscher Radius, m_e Elektronenmasse, $m\mu$ reduced mass</p>

39 Bändermodell

39.1 Hybridorbitale

Hybridorbitale werden durch Linearkombinationen von anderen atomorbitalen gebildet.

sp ³ Orbital eg CH ₄	$1s + 3p = sp^3$  (445)
sp ² Orbital	$1s + 2p = sp^2$  (446)
sp Orbital	$1s + 1p = sp$  (447)

40 Diffusion

Diffusionskoeffizient	Symbol: D	Unit: $1 \text{ m}^2/\text{s}$
Teilchenstromdichte Anzahl der Teilchen durch eine Fläche	Symbol: J	Unit: $1/\text{s}^2$
Einsteinrelation Klassisch	$D = \frac{\mu k_B T}{q} \quad (448)$ <p>D Diffusionskoeffizient, μ Elektrische Mobilität / Beweglichkeit, T Temperatur, q Ladung</p>	
Konzentration Eine Größe pro Volumen	Symbol: c	Unit: $1 \text{ x}/\text{m}^3$

<p>Erstes Ficksches Gesetz Teilchenbewegung ist proportional zum Konzentrationsgradienten</p>	$J = -D \frac{c}{x} \quad (449)$ <p>J Teilchenstromdichte, D Diffusionskoeffizient, c Konzentration</p>
<p>Zweites Ficksches Gesetz</p>	$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (450)$ <p>J Teilchenstromdichte, D Diffusionskoeffizient, c Konzentration</p>

41 misc

<p>Austrittsarbeit eng. "Work function"; minimale Energie um ein Elektron aus dem Festkörper zu lösen</p>	<table border="1"> <tr> <td data-bbox="619 723 1109 801">Symbol: W</td> <td data-bbox="1109 723 1434 801">Unit: 1 eV</td> </tr> <tr> <td colspan="2" data-bbox="619 801 1434 913"> $W = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}} \quad (451)$ </td> </tr> </table>	Symbol: W	Unit: 1 eV	$W = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}} \quad (451)$	
Symbol: W	Unit: 1 eV				
$W = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}} \quad (451)$					
<p>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</p>	<table border="1"> <tr> <td data-bbox="619 913 1109 1081">Symbol: χ</td> <td data-bbox="1109 913 1434 1081">Unit: 1 eV</td> </tr> <tr> <td colspan="2" data-bbox="619 1081 1434 1265"> $\chi = (E_{\text{vac}} - E_{\text{c}}) \quad (452)$ </td> </tr> </table>	Symbol: χ	Unit: 1 eV	$\chi = (E_{\text{vac}} - E_{\text{c}}) \quad (452)$	
Symbol: χ	Unit: 1 eV				
$\chi = (E_{\text{vac}} - E_{\text{c}}) \quad (452)$					
<p>Laser Light amplification by stimulated emission of radiation</p>	<table border="1"> <tr> <td data-bbox="619 1265 1434 1429"> <p><i>Gain medium</i> is energized <i>pumping energy</i> (electric current or light), light of certain wavelength is amplified in the gain medium</p> </td> </tr> </table>	<p><i>Gain medium</i> is energized <i>pumping energy</i> (electric current or light), light of certain wavelength is amplified in the gain medium</p>			
<p><i>Gain medium</i> is energized <i>pumping energy</i> (electric current or light), light of certain wavelength is amplified in the gain medium</p>					

42 Messtechniken

42.1 Raman Spektroskopie

Raman-Spektroskopie

Anwendung	Vibrationsmoden, Kristallstruktur, Dotierung, Bandlücke, Schichtdicke im cm:misc:vdw material
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:vdw material
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

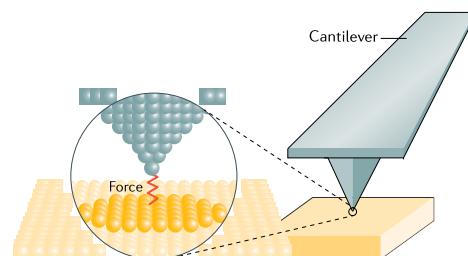


Abbildung 1: [?]

Rastertunnelmikroskop (STM)

Anwendung	Oberflächenzeug
how	Mit Tunnel

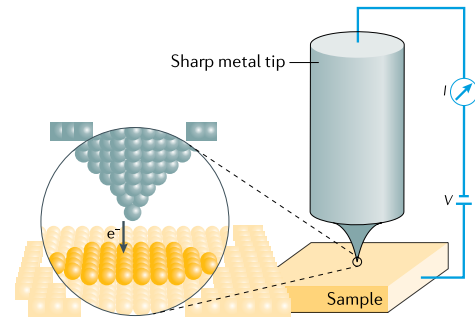
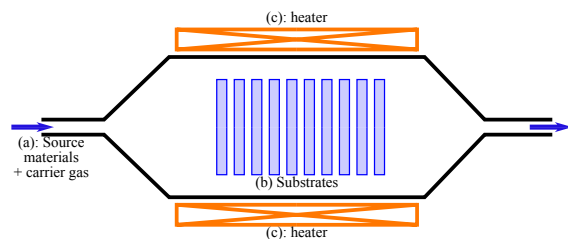


Abbildung 2: [?]

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 SiO₂ • Graphen • Diamant

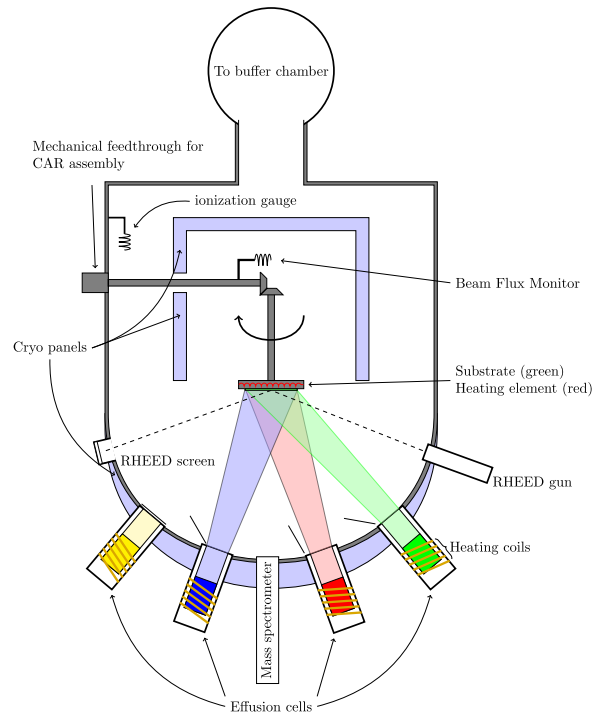


43.1 Epitaxie

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

$$H(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle = \epsilon(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle \quad (453)$$

Wellenfunktion

Nach vollem adiabatischem Umlauf in \vec{R}

$$|\psi_n(t)\rangle = \underbrace{e^{i\gamma_n(t)}}_{\text{Berry Phase}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \int^r \epsilon_n(\vec{R}(t')) dt}}_{\text{Dynamische Phase}} |n(\vec{R}(t))\rangle \quad (454)$$

Berry connection

$$A_n(\vec{R}) = i \langle \psi | \nabla_R | \psi \rangle \quad (455)$$

Berry-Krümmung
Eichinvariant

$$\vec{\Omega}_n = \vec{\nabla}_R \times A_n(\vec{R}) \quad (456)$$

Berry-Phase

Eichinvariant bis auf 2π

$$\gamma_n = \oint_C d\vec{R} \cdot A_n(\vec{R}) = \int_S d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_n(\vec{R}) \quad (457)$$

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.

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \oint d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_n(\vec{R}) \quad (458)$$

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

Hall-Leitfähigkeit eines 2D
Band-Isolators

$$\vec{\sigma}_{xy} = \sum_n \frac{e^2}{h} \int_{\text{occupied}} d^2k \frac{\Omega_{xy}^n}{2\pi} = \sum_n C_n \frac{e^2}{h} \quad (459)$$

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:

$$\tau = \left(\frac{l}{L}\right)^2 \quad (460)$$

$$\tau = \frac{l}{L} \quad (461)$$

l Weglänge, L Distanz der Endpunkte

Spannung
(Engl. β stress") Kraft pro
Fläche

Symbol: σ

Unit: 1 N/m²

$$[\sigma]_{ij} = \frac{F_i}{A_j} \quad (462)$$

\vec{F} Kraft, A Fläche

Dehnung
(Engl. β strain")

Symbol: ϵ

Unit:

$$\epsilon = \frac{\Delta x}{x_0} \quad (463)$$

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	→				g	H
Quarks		u	c	t	gluon	Higgs
		up	charm	top		
		4.8 MeV	95 MeV	4.18 GeV	0	
		1/2	1/2	1/2	1	
		-1/3	-1/3	-1/3	0	
		d	s	b	γ	
		down	strange	bottom	photon	
		511 keV	105.7 MeV	1.777 GeV	91.2 GeV	
		1/2	1/2	1/2	1	
		-1	-1	-1	0	
		e	μ	τ	Z	
		electron	muon	tau		
		< 2.2 eV	< 170 keV	< 15.5 MeV	80.4 GeV	
		1/2	1/2	1/2	1	
		0	0	0	± 1	
		ν_e	ν_μ	ν_τ	W_\pm	
		e neutrino	μ neutrino	τ neutrino		
		Fermionen			Bosonen	

Teil IX

Quantencomputing

46 Qubits

Bloch-Sphäre

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (464)$$

$$= \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi_\alpha} |0\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi_\beta} |1\rangle \quad (465)$$

$$= e^{i\phi_\alpha} \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |1\rangle \quad (466)$$

47 Gates

Gates

$$\text{Bitflip: } \hat{X} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (467)$$

$$\text{Bit-Phase flip: } \hat{Y} = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (468)$$

$$\text{Phaseflip: } \hat{Z} = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (469)$$

$$\text{Hadamard: } \hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - \hat{Z}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (470)$$

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

$$\hat{H}_J = -\frac{E_J}{2} \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|] \quad (471)$$

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

$$\hat{I} |\delta\rangle = I_C \sin \delta |\delta\rangle \quad (472)$$

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

2. Josephson Gleichung
Supraleitende Phasendifferenz
is proportional zur angelegten
Spannung

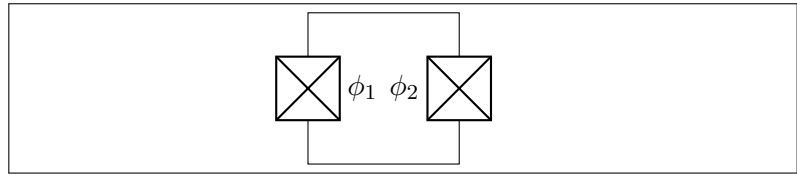
$$\frac{d\hat{\delta}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\delta}] = -\frac{2eU}{i\hbar} [\hat{n}, \hat{\delta}] = \frac{1}{\varphi_0} U \quad (473)$$

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

48.1.2 SQUID

SQUID

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

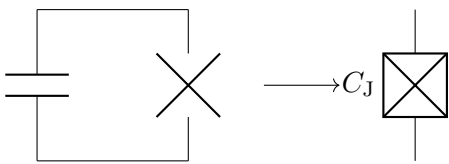


Hamiltonian

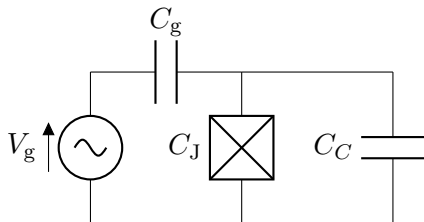
$$\hat{H} = -E_{J1} \cos \hat{\phi}_1 - E_{J2} \cos \hat{\phi}_2 \quad (474)$$

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

48.2 TODO



TODO:Include schaltplan



Ladeenergie?

$$E_C = \frac{(2e)^2}{C} \quad (475)$$

Josephson-Energie?

$$E_J = \frac{I_0 \phi_0}{2\pi} \quad (476)$$

TODO:Was ist I0

Induktive Energie

$$E_L = \frac{\varphi_0^2}{L} \quad (477)$$

Gate Ladung
auch Offset charge

$$n_g = \frac{C_g V_g}{2e} \quad (478)$$

Anharmonizität

$$\alpha := \omega_{1 \leftrightarrow 2} - \omega_{0 \leftrightarrow 1} \quad (479)$$

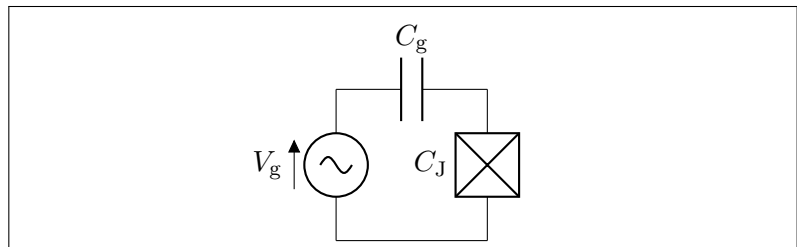
		$E_L/(E_J - E_L)$			
		0	$\ll 1$	~ 1	$\gg 1$
$\frac{E_J}{E_C}$	$\ll 1$	cooper-pair box			
	~ 1	quantronium	fluxonium		
	$\gg 1$	transmon			flux qubit
	$\ggg 1$			phase qubit	

48.3 Cooper Paar Box (QPB) Qubit

= voltage bias junction
 = charge qubit?

Cooper Pair Box / Charge Qubit

- Große Anharmonizität
- Sensibel für charge noise



Hamiltonian

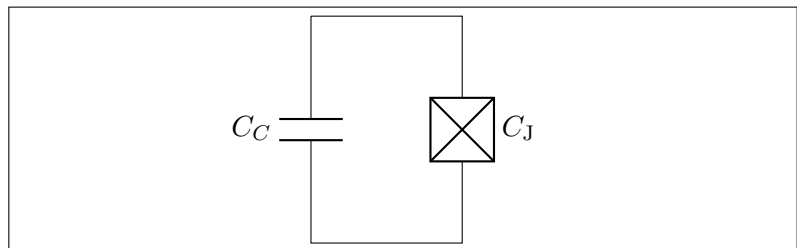
$$\hat{H} = 4E_C(\hat{n} - n_g)^2 - E_J \cos \hat{\phi} \quad (480)$$

$$= \sum_n \left[4E_C(n - n_g)^2 |n\rangle \langle n| - \frac{E_J}{2} |n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n| \right] \quad (481)$$

48.4 Transmon Qubit

Transmon Qubit
 Josephson-Kontakt mit einem parallelen **kapazitiven Element**.

- Charge noise resilient
- Geringe Anharmonizität α

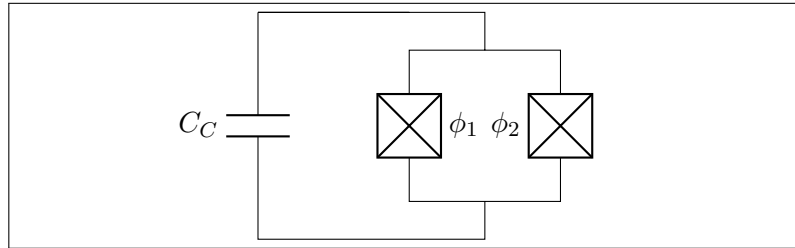


Hamiltonian

$$\hat{H} = 4E_C \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\phi} \quad (482)$$

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

$$E_{J,\text{eff}}(\Phi_{\text{ext}}) = (E_{J1} + E_{J2}) \sqrt{\cos^2\left(\pi \frac{\Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0}\right) + d^2 \sin^2\left(\pi \frac{\Phi_{\text{ext}}}{\Phi_0}\right)} \quad (483)$$

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

Hamiltonian

$$\hat{H} = 4E_C \hat{n}^2 - \frac{1}{2} E_{J,\text{eff}}(\Phi_{\text{ext}}) \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|] \quad (484)$$

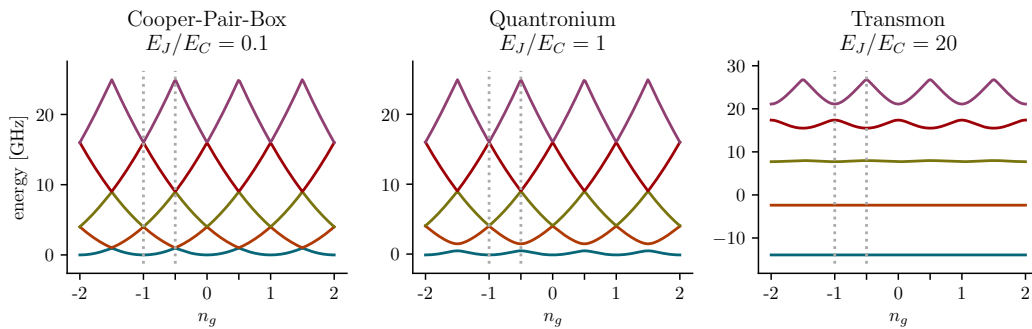
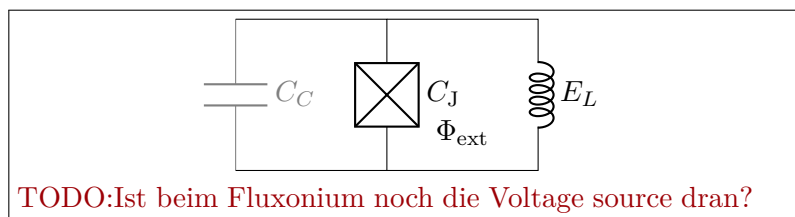


Abbildung 3: Transmon and so TODO

48.5 Phase Qubit

Phase Qubit



Hamiltonian

$$\hat{H} = E_C \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\delta} + E_L (\hat{\delta} - \delta_s)^2 \quad (485)$$

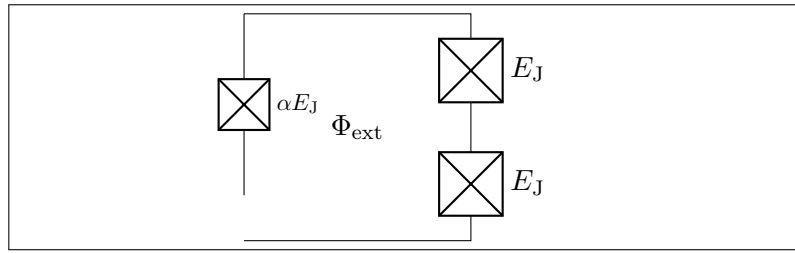
$$\delta = \frac{\phi}{\phi_0}$$

This is only a test

48.6 Flux Qubit

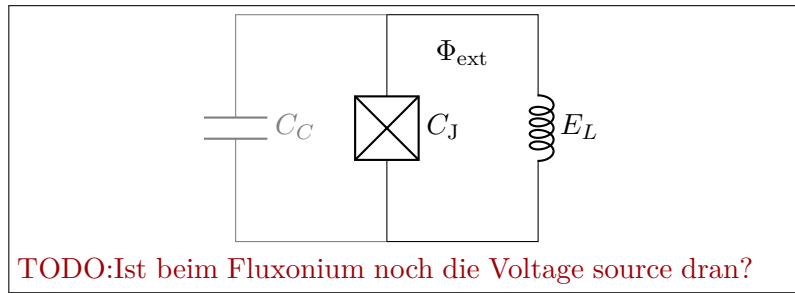
TODO: TODO

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

$$\hat{H} = 4E_C \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\delta} + E_L (\hat{\delta} - \delta_s)^2 \quad (486)$$

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

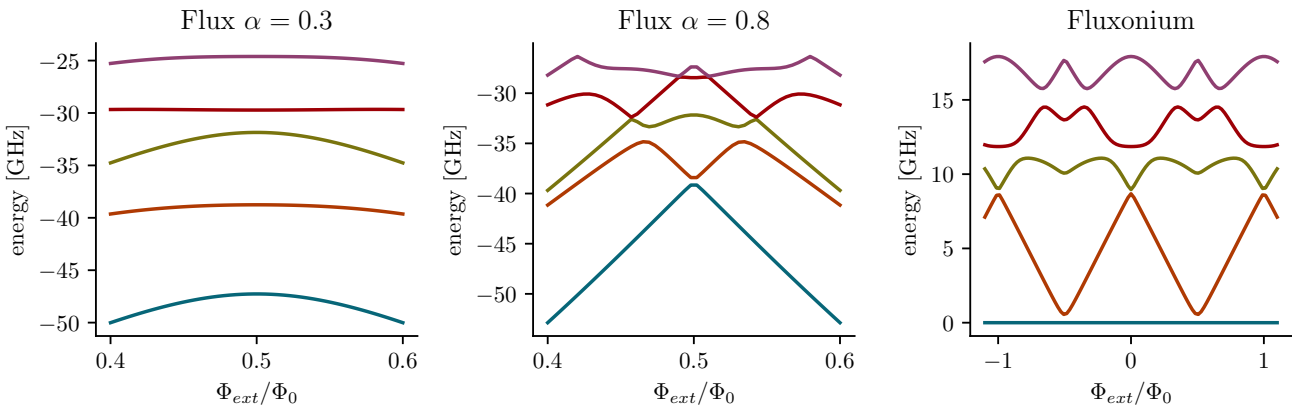


Abbildung 4: img/

49 Zwei-Niveau System

Ressonanzfrequenz

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (487)$$

TODO:sollte das nicht 10 sein?

Rabi-Oszillationen

$$\Omega_{\text{TODO:TODO}} \quad (488)$$

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

49.1 Ramsey Interferometrie

q

50 Noise und Dekohärenz

Longitudinale Relaxationsrate

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

$$\Gamma_1 = \frac{1}{T_1} = \Gamma_{1\uparrow} + \Gamma_{1\downarrow} \quad (489)$$

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

Reine Phasenverschiebung

$$\Gamma_\phi \quad (490)$$

Transversale Relaxationsrate

$$\Gamma_2 = \frac{1}{T_2} = \frac{\Gamma_1}{2} + \Gamma_\phi \quad (491)$$

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

$$\rho_{\text{BR}} = \begin{pmatrix} 1 + (|\alpha|^2 - 1) e^{-\Gamma_1 t} & \alpha \beta^* e^{-\Gamma_2 t} \\ \alpha^* \beta e^{-\Gamma_2 t} & |\beta|^2 e^{-\Gamma_1 t} \end{pmatrix} \quad (492)$$

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

$$\hat{T}_i = - \sum_{n=1}^{N_i} \frac{\hbar^2}{2m_i} \vec{\nabla}_n^2 \quad (493)$$

i = Nukleonen/Elektronen, N Teilchenzahl, m Masse

Elektrostatistisches Potential
zwischen Spezies i und j

$$\hat{V}_{i \leftrightarrow j} = - \sum_{k,l} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{r}_k - \vec{r}_l|} \quad (494)$$

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

Electronic structure
Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + V_{e \leftrightarrow e} + V_{n \leftrightarrow e} + V_{n \leftrightarrow n} \quad (495)$$

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

Molekularfeldnäherung
Ersetzt 2-Teilchen Operator
durch 1-Teilchen Operator

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \approx \sum_i V_{\text{eff}}(\vec{r}_i) \quad (496)$$

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

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_{i,j} t_{i,j} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) \quad (497)$$

$\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ 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

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_{\text{en}} + \hat{V}_{\text{HF}}^\xi \right) \varphi_\xi(x) = \epsilon_\xi \varphi_\xi(x) \quad (498)$$

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, $x = \vec{r}, \sigma$ Position and Spin

Hartree Fock Potential

$$V_{\text{HF}}^\xi(\vec{r}) = \sum_{\vartheta} \int dx' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \left(\underbrace{|\varphi_\xi(x')|^2}_{\text{Hartree-Term}} - \underbrace{\frac{\varphi_\vartheta^*(x') \varphi_\xi(x') \varphi_\vartheta(x)}{\varphi_\xi(x)}}_{\text{Fock-Term}} \right) \quad (499)$$

Self-consistent field cycle

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

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

$$n(\vec{r}) = \left\langle \psi_0 \left| \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right| \psi_0 \right\rangle \quad (500)$$

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> $n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{r}) ^2 \quad (501)$
<p>Kohn-Sham Funktional</p>	$E_{\text{KS}}[n(\vec{r})] = T_{\text{KS}}[n(\vec{r})] + V_{\text{ext}}[n(\vec{r})] + E_{\text{H}}[n(\vec{r})] + E_{\text{XC}}[n(\vec{r})] \quad (502)$ <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>	$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_{\text{ext}}(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{ \vec{r} - \vec{r}' } + \frac{\partial E_{\text{X}}[n(\vec{r})]}{\partial n(\vec{r})} + \frac{\partial E_{\text{C}}[n(\vec{r})]}{\partial n(\vec{r})} \right\} \phi_i^{\text{KS}}(\vec{r}) = \epsilon_i^{\text{KS}} \phi_i^{\text{KS}}(\vec{r}) \quad (503)$ <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>	$E_{\text{XC}}[n(\vec{r})] = \langle \hat{T} \rangle - T_{\text{KS}}[n(\vec{r})] + \langle \hat{V}_{\text{int}} \rangle - E_{\text{H}}[n(\vec{r})] \quad (504)$ <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>	$E_{\text{XC}}^{\text{LDA}}[n(\vec{r})] = \int d^3r n(r) [\epsilon_{\text{X}}[n(\vec{r})] + \epsilon_{\text{C}}[n(\vec{r})]] \quad (505)$ <p>ϵ_{X} calculated exchange energy from HEG model, ϵ_{C} correlation energy calculated with Quantum Monte-Carlo</p>

Generalized gradient approximation (GGA)

$$E_{XC}^{GGA}[n(\vec{r})] = \int d^3r n(r) \epsilon_X[n(\vec{r})] F_{XC}[n(\vec{r}), \vec{\nabla}n(\vec{r})] \quad (506)$$

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

$$\alpha E_X^{HF} + (1 - \alpha) E_X^{GGA} + E_C^{GGA} \quad (507)$$

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

$$\frac{1}{r} = \frac{\text{erf}(\omega r)}{r} + \frac{\text{erfc} \omega r}{r} \quad (508)$$

$$E_{XC}^{HSE} = \alpha E_{X,SR}^{HF}(\omega) + (1 - \alpha) E_{X,SR}^{GGA}(\omega) + E_{X,LR}^{GGA}(\omega) + E_C^{GGA} \quad (509)$$

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

TODO:HFtotal energy: upper boundary for GS density n

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???

$$\sum_{\vec{G}'} \left[\frac{\hbar^2 |\vec{G} + \vec{k}|^2}{2m} \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + V_{\text{eff}}(\vec{G} - \vec{G}') \right] c_{i, \vec{k}, \vec{G}'} = \epsilon_{i, \vec{k}} c_{i, \vec{k}, \vec{G}} \quad (510)$$

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

$$E_{\text{cutoff}} = \frac{\hbar^2 |\vec{k} + \vec{G}|^2}{2m} \quad (511)$$

52.2.6 Pseudopotentialmethode

Ansatz

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

53 Atomic dynamics

<p>Hamiltonian der Elektronen</p>	$\hat{H}_e = \hat{T}_e + V_{e \leftrightarrow e} + V_{n \leftrightarrow e} \quad (512)$ <p>\hat{T} Kinetische Energie, \hat{V} Elektrostatisches Potential, e electrons, n nucleons</p>
<p>Wellenfunktion Ansatz</p>	$\psi_{\text{en}}^n(\{\vec{r}, \sigma\}, \{\vec{R}\}) = \sum_i c^{ni}(\{\vec{R}\}) \psi_e^i(\{\vec{r}, \sigma\}, \{\vec{R}\}) \quad (513)$ <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>
<p>Equation</p>	$[E_e^j(\{\vec{R}\}) + \hat{T}_n + V_{n \leftrightarrow n} - E^n] c^{nj} = - \sum_i \Lambda_{ij} c^{ni}(\{\vec{R}\}) \quad (514)$
<p>Exact nonadiabtic coupling operator Electron-phonon couplings / electron-vibrational couplings</p>	$\Lambda_{ij} = \int d^3r (\psi_e^j)^* \left(- \sum_I \frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{R}_I}^2}{2M_I} \right) \psi_e^i + \sum_I \frac{1}{M_I} \int d^3r [(\psi_e^j)^* (-i\hbar \nabla_{\vec{R}_I}) \psi_e^i] (-i\hbar \nabla_{\vec{R}_I}) \quad (515)$ <p>ψ_e^i electronic states, \vec{R} nucleus position, M nucleus Masse</p>

53.1 Born-Oppenheimer Näherung

<p>Adiabatische Näherung Elektronenkonfiguration bleibt gleich bei Bewegung der Atome gleichl (Adiabatentheorem)</p>	$\Lambda_{ij} = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad (516)$ <p>Λ_{ij} Exact nonadiabtic coupling operator</p>
<p>Born-Oppenheimer Näherung</p> <p>Elektronen werden nicht durch die Bewegung der Atome beeinflusst</p>	$\Lambda_{ij} = 0 \quad (517)$ <p>comp:ad:bo:equation \Rightarrow</p> $[E_e^i(\{\vec{R}\}) + \hat{T}_n - E^n] c^{ni}(\{\vec{R}\}) = 0 \quad (518)$ <p>see Equation, $V_{n \leftrightarrow n} = \text{const}$ absorbed into E_e^j</p>
<p>Born-Oppenheimer Potentialhyperfläche Die Nukleonen Newtons klassischen Bewegungsgleichungen auf der BO Hyperfläche wenn das System im elektronischen Grundzustand ist</p>	$V_{\text{BO}}(\{\vec{R}\}) = E_e^0(\{\vec{R}\}) \quad (519)$ $M_I \ddot{\vec{R}}_I(t) = -\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} V_{\text{BO}}(\{\vec{R}(t)\}) \quad (520)$ <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

$$\psi_{\text{BO}} = c^{n_0}(\{\vec{R}\}) \psi_e^0(\{\vec{r}, \sigma\}, \{\vec{R}\}) \quad (521)$$

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 $\xi \gg 1$

$$\xi = \frac{\tau_n}{\tau_e} = \frac{L\Delta E}{\hbar |\dot{\vec{R}}|} \quad (522)$$

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

$$\vec{F}_I = -\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} E \stackrel{\text{Hellmann-Feynman-Theorem}}{=} - \left\langle \psi(\vec{R}_I) \left| \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} \hat{H}(\vec{R}_I) \right) \right| \psi(\vec{R}) \right\rangle \quad (523)$$

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

$$R_\alpha([\epsilon]_{\alpha\beta}) = \sum_\beta (\delta_{\alpha\beta} + [\epsilon]_{\alpha\beta}) R_\beta(0) \quad (524)$$

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

Spannungstensor

$$[\sigma]_{\alpha,\beta} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial [\epsilon]_{\alpha\beta}} \right)_{[\epsilon]=0} \quad (525)$$

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

Pulay-Spannung

$$N_{\text{PW}} \propto E_{\text{cut}}^{\frac{3}{2}} \propto |\vec{G}_{\text{max}}|^3 \quad (526)$$

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	$\Phi_{IJ}^{\mu\nu} = \left(\frac{\partial^2 V(\{\vec{R}\})}{\partial R_I^\mu \partial R_J^\nu} \right)_{\{\vec{R}_I\}=\{\vec{R}_I^0\}} \quad (527)$
<p>Harmonische Näherung Hesse matrix, Taylor Entwicklung der Born-Oppenheimer Potentialhyperfläche in zweiter Ordnung um Atomposition \vec{R}_I^0</p>	$V^{\text{BO}}(\{\vec{R}_I\}) \approx V^{\text{BO}}(\{\vec{R}_I^0\}) + \frac{1}{2} \sum_{I,J} \sum_{\mu,\nu} s_I^\mu s_J^\nu \Phi_{IJ}^{\mu\nu} \quad (528)$ <p>$\Phi_{IJ}^{\mu\nu}$ Force constant matrix, s displacement</p>
<h4>53.3.1 Finite difference method</h4>	
<p>Approximation Assume forces in equilibrium structure vanish</p>	$\Phi_{IJ}^{\mu\nu} \approx \frac{\vec{F}_I^\mu(\vec{R}_1^0, \dots, \vec{R}_J^0 + \Delta s_J^\nu, \dots, \vec{R}_N^0)}{\Delta s_J^\nu} \quad (529)$ <p>Δs displacement of atom J</p>
<p>Dynamical matrix Mass reduced fourier transform of the Force constant matrix</p>	$D_{\alpha\beta}^{\mu\nu} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\beta}^{\mu\nu} (n - n') e^{i\vec{q}(\vec{L}_n - \vec{L}_{n'})} \quad (530)$ <p>\vec{L} vector from origin to unit cell n, α/β atom index in th unit cell, \vec{q} ???:wave vector, Φ Force constant matrix, M Masse</p>
<p>Eigenwertgleichung For a periodic crystal, reduces number of equations from $3N_p \times N$ to $3N_p$. Eigenvalues represent phonon band structure.</p>	$\omega^2 \vec{c}(\vec{q}) = \underline{D}(\vec{q}) \vec{c}(\vec{q}) \quad (531)$ <p>N_p number of atoms per unit cell, \vec{c} displacement amplitudes, \vec{q} ???:wave vector, \underline{D} Dynamical matrix</p>
<h4>53.3.2 Anharmonische Ansätze</h4>	
<p>Quasi-harmonic approximation</p>	<p>Include thermal expansion by assuming Born-Oppenheimer Potentialhyperfläche is volume dependant.</p>
<p>Pertubative approaches</p>	<p>Expand Force constant matrix to third order.</p>

53.4 Molekuldynamik

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> $M_I \frac{d^2 \vec{R}_I}{dt^2} = -\vec{\nabla}_{\vec{R}_I} E[\{\varphi_i\}, \{\vec{R}_I\}] \quad (532)$ $\mu \frac{d^2 \varphi_i(\vec{r}, t)}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \varphi_i^*(\vec{r}, t)} E[\{\varphi_i\}, \{\vec{R}_I\}] + \sum_j \lambda_{ij} \varphi_j(\vec{r}, t) \quad (533)$ <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: Lennard-Jones
-----------------------	---

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 $\vec{R}/\vec{v}(t + \Delta t)$	$\vec{R}(t + \Delta t) = \vec{R}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (534)$ $\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (535)$
	Cumulative error scales linearly $\mathcal{O}(\Delta t)$. Not time reversible.

Verlet-Algorithmus Zeitumkehr-symmetrisch. Iteration in zweiter Ordnung	$\vec{R}(t + \Delta t) = 2\vec{R}(t) - \vec{R}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (536)$
---	--

Velocity-Verlet integration	$\vec{R}(t + \Delta t) = \vec{R}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (537)$
	$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)}{2}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (538)$

Leapfrog Integration in zweiter Ordnung	$x_{i+1} = x_i + v_{i+1/2}\Delta t_i \quad (539)$
	$v_{i+1/2} = v_{i-1/2} + a_i\Delta t_i \quad (540)$

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 Kanonisches Ensemble	$\Delta T(t) = T_0 - T(t) \quad (541)$
	$= \sum_I \frac{M_I (\lambda \vec{v}_I(t))^2}{f k_B} - \sum_I \frac{M_I \vec{v}_I(t)^2}{f k_B} \quad (542)$
	$= (\lambda^2 - 1)T(t) \quad (543)$
	$\lambda = \sqrt{\frac{T_0}{T(t)}} \quad (544)$
	<i>T</i> target Temperatur, <i>M</i> Masse of nucleon <i>I</i> , \vec{v} Geschwindigkeit, <i>f</i> number of degrees of freedom, λ velocity scaling parameter, k_B Boltzmann-Konstante

Berendsen thermostat Does not obey Kanonisches Ensemble but efficiently brings system to target temperature	$\frac{dT}{dt} = \frac{T_0 - T}{\tau} \quad (545)$
---	--

Nosé-Hoover Thermostat
 Control the temperature with
 by time stretching with an
 associated mass.
 Compliant with **Kanonisches
 Ensemble**

$$d\tilde{t} = \tilde{s} dt \quad (546)$$

$$\mathcal{L} = \sum_{I=1}^N \frac{1}{2} M_I \tilde{s}^2 v_i^2 - V(\tilde{R}_1, \dots, \tilde{R}_I, \dots, \tilde{R}_N) + \frac{1}{2} Q \dot{\tilde{s}}^2 - g k_B T_0 \ln \tilde{s} \quad (547)$$

\tilde{s} scaling factor, Q associated mass", \mathcal{L} Lagrange-Funktion ,
 g degrees of freedom

53.4.5 Berechnung von Observablen

Spektraldichte
 Wiener-Khinchin Theorem
 Fouriertransformierte of
 Autokorrelation

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau C(\tau) e^{-i\omega\tau} \quad (548)$$

C Autokorrelation

Vibrationszustandsdicht
 (VDOS)

$$g(\omega) \sim \sum_{I=1}^N M_I S_{v_I}(\omega) \quad (549)$$

S_{v_i} velocity Spektraldichte of particle I

54 Maschinelles Lernen

54.1 Metriken zur Leistungsmessung

Genauigkeit

$$a = \frac{\text{richtige Vorhersagen}}{\text{falsche Vorhersagen} + \text{richtige Vorhersagen}} \quad (550)$$

Number of data points Anzahl der Datenpunkte

Mittlerer absoluter Fehler
 (MAE)

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (551)$$

y Wahrheit, \hat{y} Vorhersage, n comp:ml:performance:n desc

Methode der kleinsten
 Quadrate (MSE)
 Quadratwurzel des mittleren
 quadratischen Fehlers (SME)

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (552)$$

y Wahrheit, \hat{y} Vorhersage, n comp:ml:performance:n desc

Standardfehler der Regression

Quadratwurzel des mittleren
 quadratischen Fehlers
 (RSME)

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (553)$$

y Wahrheit, \hat{y} Vorhersage, n comp:ml:performance:n desc

54.2 Regression

54.2.1 Linear Regression

Lineare Regression
Fitted Daten unter der
Annahme **normalverteilter**
Fehler

$$\underline{y} = \underline{\epsilon} + \underline{x} \cdot \vec{\beta} \quad (554)$$

$\underline{x} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ input data, $\underline{y} \in \mathbb{R}^{N \times L}$ output data, \underline{b} bias, $\vec{\beta}$ weights,
 N samples, M features, L output variables

Designmatrix Ansatz
Stack column of ones to the
feature vector
Useful when ϵ is scalar

$$\underline{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1M} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \dots & x_{NM} \end{pmatrix} \quad (555)$$

x_{ij} feature j of sample i

Lineare Regression mit
skalarem Bias
Durch die Designmatrix wird
der Bias in den
Gewichtsvektor absorbiert

$$\underline{y} = \underline{X} \cdot \vec{\beta} \quad (556)$$

\underline{y} output data, \underline{X} comp:ml:reg:design matrix, $\vec{\beta}$ weights

Normalengleichung
Löst **Lineare Regression mit**
skalarem Bias mit
comp:ml:performance:mse

$$\vec{\beta} = (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \underline{X}^T \underline{y} \quad (557)$$

\underline{y} output data, \underline{X} **Designmatrix Ansatz**, $\vec{\beta}$ weights

54.2.2 Kernelmethode

Kernel trick

Useful when transforming the input data x into a much higher dimensional space ($M_2 \gg M_1$) $\Phi : \mathbb{R}^{M_1} \mapsto \mathbb{R}^{M_2}$, $\vec{x} \rightarrow \Phi(\vec{x})$ and only the dot product of this transformed data $\Phi(x)^T \Phi(x)$ is required. Then the dot product can be replaced by a suitable kernel function κ .

$$k(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \equiv \Phi(\vec{x}_i)^T \Phi(\vec{x}_j) \quad (558)$$

$\vec{x}_i \in \mathbb{R}^{M_1}$ input vectors, M_1 dimension of data vector space,
 M_2 dimension of feature space

Common kernels

Linear, Polynomial, Sigmoid, Laplacian, radial basis function (RBF)

Radiale Basisfunktion-Kernel
(RBF)
RBF = Reelle Funktion,
deren Wert nur vom Abstand
zum Ursprung abhängt

$$k(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|_2^2}{\sigma}\right) \quad (559)$$

54.2.3 Bayes'sche Regression

Bayes'sche lineare Regression

Assume a **Prior Verteilung** distribution over the weights. Offers uncertainties in addition to the predictions.

<p>Ridge Regression Regularization method</p>	<p>Reduziert Gewichte mit der L2-Norm. Dadurch werden unwichtige Features nicht berücksichtigt (kleines Gewicht) und enkodieren nicht Noise. Entspricht der Annahme einer Normalverteilung mit $\bar{\mu} = 0$ und unabhangigen Komponenten (<i>Sigma</i> diagonaal) der die Gewichte als Prior Verteilung.</p>
<p>Optimale Gewichte fur Ridge Regression</p>	$\vec{\beta} = (\underline{X}^T \underline{X} + \lambda)^{-1} \underline{X}^T \vec{y} \quad (560)$ <p>TODO:Does this only work for gaussian data? $\lambda = \frac{\sigma^2}{\xi^2}$ shrinkage parameter, ξ Varianz of the gaussian Prior Verteilung, σ Varianz of the gaussian likelihood of the data</p>
<p>Lasso Regression Least absolute shrinkage and selection operator Regularization method</p>	<p>Reduziert Gewichte mit der L1-Norm. Unwichtige Features werden reduziert und konnen auch ganz vernachlassigt werden und enkodieren nicht Noise. Entspricht der Annahme einer Laplace-Verteilung der die Gewichte als Prior Verteilung.</p>
<p>Gaussian process regression (GPR)</p>	<p>Gaussian process: A distribtuion over functions that produce jointly gaussian distribution. Multivariate normal distribution like comp:ml:reg:bayes:bayesian, except that $\bar{\mu}$ and $\underline{\Sigma}$ are functions. GPR: non-parametric Bayesian regressor, does not assume fixed functional form for the underlying data, instead, the data determines the functional shape, with predictions governed by the covariance structure defined by the kernel (often RBF). Offers uncertainties in addition to the predictions. TODO:cleanup</p>

TODO:soap

54.3 Gradientenverfahren

TODO:in lecture 30 CMP

Teil XI Chemie

55 Periodensystem

		<ul style="list-style-type: none"> ■ lanthanoide ■ Metall ■ nonmetal ■ transitionmetal ■ metalloid ■ noblegas ■ halogen ■ alkalimetal ■ alkalineearthmetal 																
1	1											2						
1	H											He						
	1.008											4.003						
2	3	Li	4	Be											10			
	6.946	9.012											20.180					
3	11	Na	12	Mg											18			
	22.990	24.305											39.948					
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
	39.098	40.078	44.956	47.867	50.942	51.996	54.938	55.845	58.933	58.693	63.546	65.382	69.723	72.631	74.922	78.972	79.905	83.798
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
	85.468	87.621	88.906	91.224	92.906	95.951	98.906	101.072	102.906	106.421	107.868	112.414	114.818	118.711	121.760	127.603	126.904	131.294
6	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
	132.905	137.328	138.905	178.492	180.948	183.841	186.207	190.233	192.217	195.085	196.967	200.592	204.382	207.210	208.980	209.987	222.000	
7	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
	223.020	226.025	227.028	261.109	262.114	263.118	262.123	265.269	268.000	281.000	280.000	277.000	287.000	289.000	288.000	293.000	292.000	294.000
		58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
		140.116	140.908	144.242	146.915	150.362	151.964	157.253	158.925	162.500	164.930	167.259	168.934	173.045	174.967			
		90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			
		232.038	231.036	238.029	237.048	244.064	243.061	247.070	247.000	251.000	252.000	257.095	258.000	259.000	266.000			

56 Elektrochemie

Chemisches Potential
der Spezies i
Involvierte Energie, wenn sich
die Teilchenzahl ändert

Symbol: μ	Unit: 1 J/mol; J
$\mu_i \equiv \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{n_j \neq n_i, p, T} \quad (561)$	
??? ???: gibbs free energy, n Stoffmenge	

Standard chemisches
Potential
In equilibrium

	$\mu_i = \mu_i^\theta + RT \ln(a_i) \quad (562)$
μ Chemisches Potential, R Universelle Gaskonstante, T Temperatur, a Aktivität	

Chemisches Gleichgewicht

	$\sum_{\text{products}} \nu_i \mu_i = \sum_{\text{educts}} \nu_i \mu_i \quad (563)$
μ Chemisches Potential, ν Stöchiometrischer Koeffizient	

Aktivität
Relative Aktivität

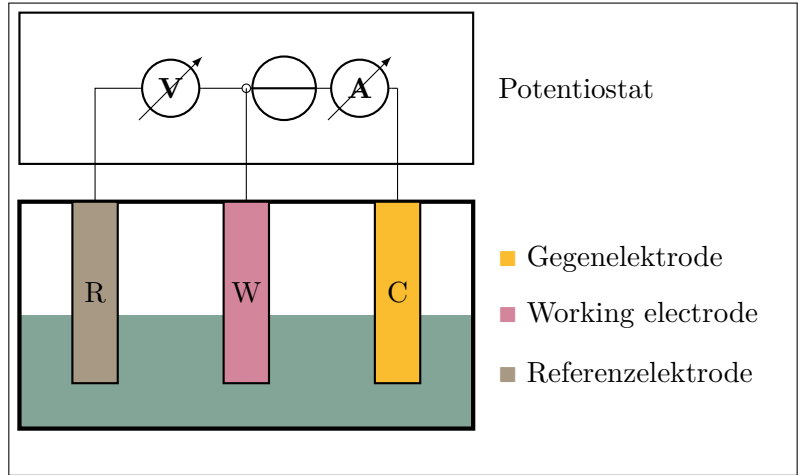
Symbol: a	Unit:
$a_i = \exp\left(\frac{\mu_i - \mu_i^\theta}{RT}\right) \quad (564)$	
μ Chemisches Potential, ??? ???: standard chemical potential, R Universelle Gaskonstante, T Temperatur	

Elektrochemisches Potential
 Chemisches Potential mit
 elektrostatischen
 Energiebeiträgen

Symbol: $\bar{\mu}$	Unit: 1 J/mol; J
$\bar{\mu}_i \equiv \mu_i + z_i F \phi$ (565)	
μ Chemisches Potential, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, ϕ Elektrisches Potential (Galvanisches Potential)	

56.1 Elektrochemische Zelle

Aufbau



Arten der Elektrochemische Zelle

- 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

$$E_{\text{rev}}^{\theta} = \frac{-\Delta_{\text{R}}G^{\theta}}{nF} \quad (566)$$

$\Delta_{\text{R}}G^{\theta}$ Standard Gibbs free energy der Reaktion, n Anzahl der Elektronen, F Faraday-Konstante

Nernst-Gleichung
 Elektrodenpotential für eine
 Halbzellenreaktion

$$E = E^{\theta} + \frac{RT}{zF} \ln \left(\frac{(\prod_i (a_i)^{\nu_i})_{\text{oxidized}}}{(\prod_i (a_i)^{\nu_i})_{\text{reduced}}} \right) \quad (567)$$

E Elektrodenpotential, E^{θ} Standard Zellpotential, R Universelle Gaskonstante, T temperature, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, a Aktivität, ν Stöchiometrischer Koeffizient

Thermodynamische
Zelleffizienz

$$\eta_{\text{cell}} = \frac{P_{\text{obtained}}}{P_{\text{maximum}}} = \frac{E_{\text{cell}}}{E_{\text{cell,rev}}} \quad \text{galvanisch} \quad (568)$$

$$\eta_{\text{cell}} = \frac{P_{\text{minimum}}}{P_{\text{applied}}} = \frac{E_{\text{cell,rev}}}{E_{\text{cell}}} \quad \text{electrolytisch} \quad (569)$$

P Elektrische Leistung

56.2 Ionische Leitung in Elektrolyten

Diffusion
durch
Konzentrationsgradienten

$$i_{\text{diff}} = \sum_i -z_i F D_i \left(\frac{dc_i}{dx} \right) \quad (570)$$

z_i Ladungszahl des Ions i , F Faraday-Konstante, D_i Diffusionskonstante des Ions i , c_i Konzentration des Ions i

Migration
durch Potentialgradienten

$$i_{\text{mig}} = \sum_i -z_i^2 F^2 c_i \mu_i \nabla \Phi_s \quad (571)$$

z_i Ladungszahl des Ions i , F Faraday-Konstante, c_i Konzentration des Ions i , μ_i Elektrische Mobilität / Beweglichkeit des Ions i , $\nabla \Phi_s$ Potentialgradient in der Lösung

Convection
durch Druckgradienten

$$i_{\text{conv}} = \sum_i -z_i F c_i v_i^{\text{flow}} \quad (572)$$

z_i Ladungszahl des Ions i , F Faraday-Konstante, c_i Konzentration des Ions i , v_i^{flow} Geschwindigkeit des Ions i im fließenden Elektrolyt

Ionische Mobilität

Symbol: u_{\pm} Unit: $1 \text{ cm}^2 \text{ mol} / \text{Js}$

$$u_{\pm} = -\frac{v_{\pm}}{\nabla \phi z_{\pm} F} = \frac{e}{6\pi F \eta_{\text{dyn}} r_{\pm}} \quad (573)$$

v_{\pm} steady state drift Geschwindigkeit, ϕ Elektrisches Potential, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante, e Elementarladung, η, μ Dynamisch Viskosität, r_{\pm} ion radius

Gesetz von Stokes
Reibungskraft auf ein
sphärisches Objekt in einer
Flüssigkeit bei niedriger
Reynolds-Zahl

$$F_R = 6\pi r \eta v \quad (574)$$

r Teilchenradius, η, μ Dynamisch Viskosität, v Teilchengeschwindigkeit

Ionische Leitfähigkeit

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

$$\kappa = F^2 (z_+^2 c_+ u_+ + z_-^2 c_- u_-) \quad (575)$$

F Faraday-Konstante, z_i, c_i, u_i Ladungszahl, Konzentration und Ionische Mobilität der positiv (+) und negativ geladenen Ionen

Ohmscher Widerstand für Ionen-Strom

$$R_{\Omega} = \frac{L}{A \kappa} \quad (576)$$

L Länge, A Fläche, κ Ionische Leitfähigkeit

Überföhrungszahl
Anteil der positiv / negativ geladenen Ionen am Gesamtstrom

$$t_{+/-} = \frac{i_{+/-}}{i_{+} + i_{-}} \quad (577)$$

$i_{+/-}$ Strom durch positive / negative Ladungen

Molare Leitfähigkeit

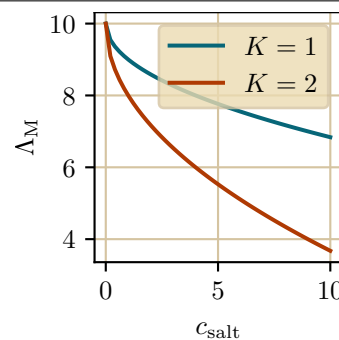
Symbol: Λ_M Unit: $1 \text{ Scm}^2/\text{mol} = 1 \text{ Acm}^2/\text{Vmol}$

$$\Lambda_M = \frac{\kappa}{c_{\text{salt}}} \quad (578)$$

κ Ionische Leitfähigkeit, c_{salt} ch:el:ion cond:salt

Kohlrausch's law
For strong electrolytes

$$\Lambda_M = \Lambda_M^0 - K \sqrt{c_{\text{salt}}} \quad (579)$$



Λ_M^0 Molare Leitfähigkeit bei unendlicher Verdünnung, salt Konzentration des Elektrolyts, K constant

Molalität
Stoffmenge pro Masse

Symbol: b Unit: 1 mol kg^{-1}

$$b = \frac{n}{m} \quad (580)$$

n Stoffmenge des gelösten Stoffs, m Masse des Lösungsmittels

Molarität
Stoffmenge pro Volumen
Konzentration

Symbol: c Unit: 1 mol L^{-1}

$$c = \frac{n}{V} \quad (581)$$

n Stoffmenge des gelösten Stoffs, V Volumen des Lösungsmittels

Ionenstärke
Maß einer Lösung für die elektrische Feldstärke durch gelöste Ionen

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

$$I_b = \frac{1}{2} \sum_i b_i z_i^2 \quad (582)$$

$$I_c = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2 \quad (583)$$

b Molalität, c Molarität, z Ladungszahl

Debye-Länge / Abschirmlänge

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{2 N_A e^2 I_C}} \quad (584)$$

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:

$$\gamma_{\pm} = (\gamma_+^{\nu_+} \gamma_-^{\nu_-})^{\frac{1}{\nu_+ + \nu_-}} \quad (585)$$

$$a_i \equiv \gamma_i \frac{m_i}{m_0} \quad (586)$$

a Aktivität, m_i Molalität, $m_0 = 1 \text{ mol kg}^{-1}$

Debye-Hückel Gesetz
Für eine unendlich verdünnte Lösung

$$\ln(\gamma_{\pm}) = -A |z_+ z_-| \sqrt{I_b} \quad (587)$$

γ Mittlerer ionischer Aktivitätskoeffizient, A solvent dependant constant, z Ladungszahl, I Ionenstärke in $[\text{mol kg}^{-1}]$

56.3 Kinetik

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

$$\alpha_A = \alpha \quad (588)$$

$$\alpha_C = 1 - \alpha \quad (589)$$

Überspannung

Abweichung der Spannung von der Zellspannung im Gleichgewicht

Aktivierungsüberspannung

$$\eta_{act} = E_{electrode} - E_{ref} \quad (590)$$

$E_{electrode}$ 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

$$\eta_{conc,anodic} = -\frac{RT}{\alpha z F} \ln \left(\frac{c_{red}^0}{c_{red}^S} \right) \quad (591)$$

$$\eta_{conc,cathodic} = -\frac{RT}{(1-\alpha)zF} \ln \left(\frac{c_{ox}^0}{c_{ox}^S} \right) \quad (592)$$

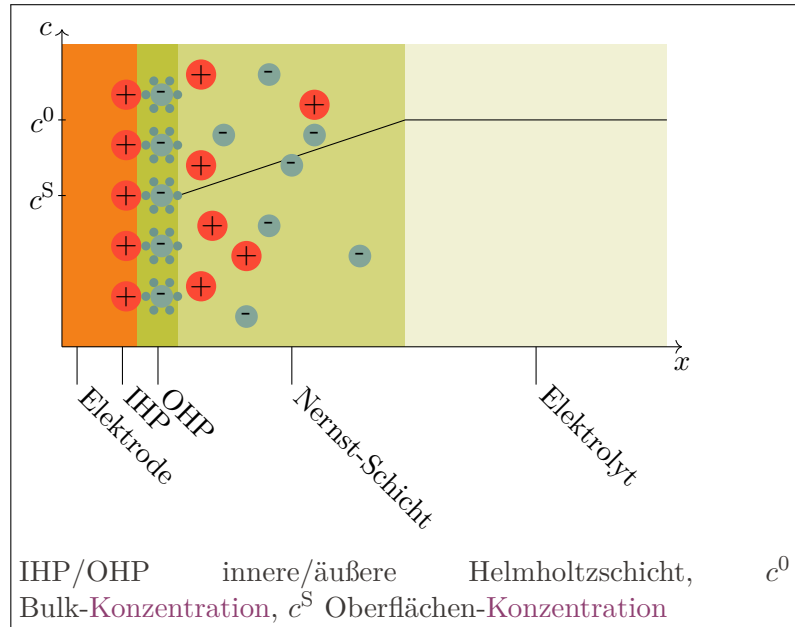
R Universelle Gaskonstante, T Temperatur, $0/S$ ion concentration in the electrolyte / at the double layer, z Ladungszahl, F Faraday-Konstante

Diffusionsüberspannung
Durch Limit des
Massentransports

$$\eta_{\text{diff}} = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{j_{\infty}}{j_{\infty} - j_{\text{meas}}} \right) \quad (593)$$

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

Zellschichten



Dicke der Nernstschen
Diffusionsschicht

$$\delta_N = \frac{c^0 - c^S}{\left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=0}} \quad (594)$$

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

(Limiting) current density

$$|j| = nFD \frac{c^0 - c^S}{\delta_{\text{diff}}} \quad (595)$$

für $c^S \rightarrow 0$

$$|j_{\infty}| = nFD \frac{c^0}{\delta_{\text{diff}}} \quad (596)$$

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

Strom -
Konzentrationsbeziehung

$$\frac{j}{j_{\infty}} = 1 - \frac{c^S}{c^0} \quad (597)$$

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

Kinetische Stromdichte

$$j_{\text{kin}} = \frac{j_{\text{meas}} j_{\infty}}{j_{\infty} - j_{\text{meas}}} \quad (598)$$

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

Roughness factor
Surface area related to
electrode geometry

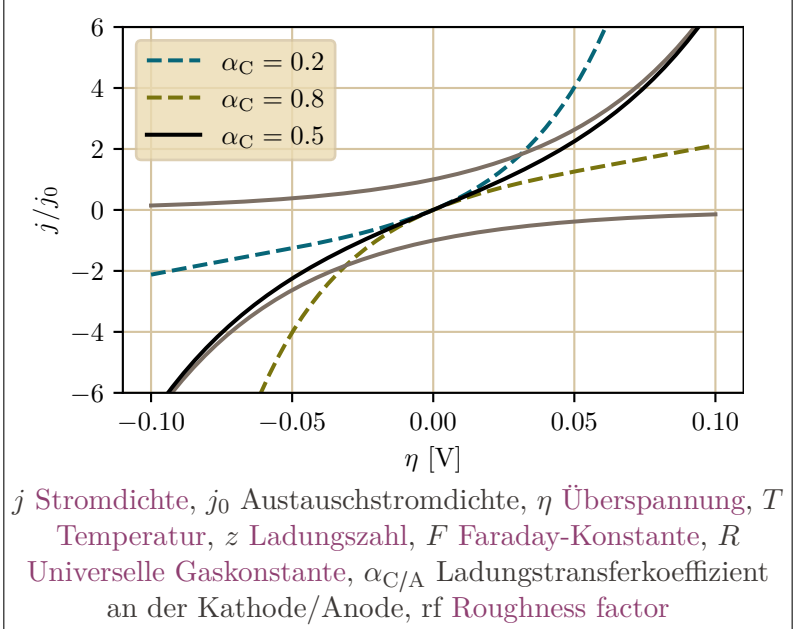
$$\text{rf} \quad (599)$$

Butler-Volmer-Gleichung
 Reaktionskinetik in der Nähe
 des Gleichgewichtspotentials

$$j = j_0 \operatorname{rf} \left[\exp \left(\frac{(1 - \alpha_C) z F \eta}{RT} \right) - \exp \left(- \frac{\alpha_C z F \eta}{RT} \right) \right] \quad (600)$$

with

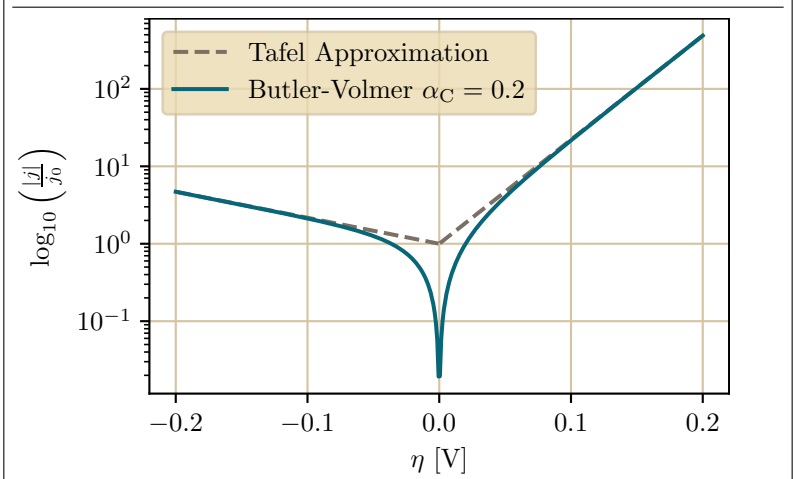
$$\alpha_A = 1 - \alpha_C \quad (601)$$



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

$$\log(j) \approx \log(j_0) + \frac{\alpha_C z F \eta}{RT \ln(10)} \quad \eta \gg 0,1 \text{ V} \quad (602)$$

$$\log(|j|) \approx \log(j_0) - \frac{(1 - \alpha_C) z F \eta}{RT \ln(10)} \quad \eta \ll -0,1 \text{ V} \quad (603)$$

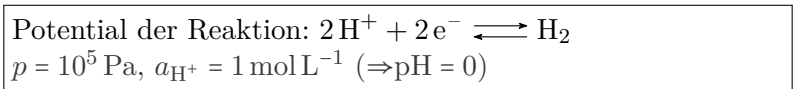


56.4 Techniken

56.4.1 Referenzelektroden

Definiert als Referenz für Messungen von Potentialen von Halbzellen

Standardwasserstoffelektrode
 (SHE)



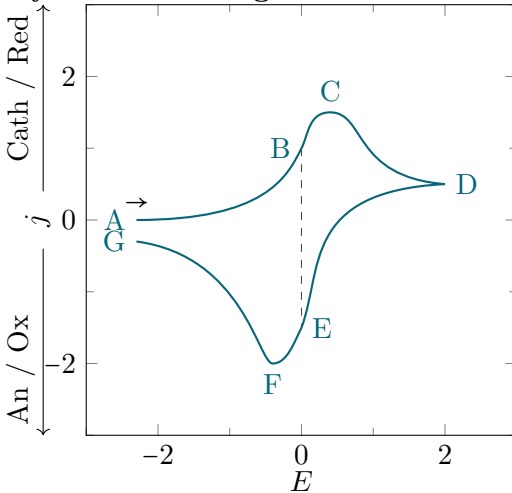
Reversible
Wasserstoffelektrode (RHE)
Potential ändert sich nicht
mit dem pH-Wert

$$E_{\text{RHE}} = E^0 + \frac{RT}{F} \ln \left(\frac{a_{\text{H}^+}}{p_{\text{H}_2}} \right) \quad (604)$$

$E^0 \equiv 0 \text{ V}$, 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: $\Delta E_{\text{rev}} = E_C - E_F = n \cdot 59 \text{ mV}$
- Information about surface chemistry
- Double-layer capacity (horizontal lines): $I = C \cdot v$

Ladung
Fläche unter der Kurve

$$q = \frac{1}{v} \int_{E_1}^{E_2} j \, dE \quad (605)$$

v Scanrate

Randles-Sevcik Gleichung
Für eine reversible,
faradäische Reaktion
Spitzenstrom hängt von der
Wurzel der Scanrate ab

$$i_{\text{peak}} = 0.446 n F A c^0 \sqrt{\frac{n F v D_{\text{ox}}}{RT}} \quad (606)$$

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: $1 \text{ Pa s} = 1 \text{ N s/m}^2 = 1 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}$

Kinematische Viskosität
Dynamisch Viskosität im
Verhältnis zur Dichte der
Flüssigkeit

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

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \quad (607)$$

η, μ Dynamisch Viskosität, ρ density

Diffusionsschichtdicke
 TODO:Where does 1.61 come from

$$\delta_{\text{diff}} = 1.61 D^{\frac{1}{3}} \nu^{\frac{1}{6}} \omega^{-\frac{1}{2}} \quad (608)$$

D Diffusionskoeffizient, ν Kinematische Viskosität, ω Kreisfrequenz

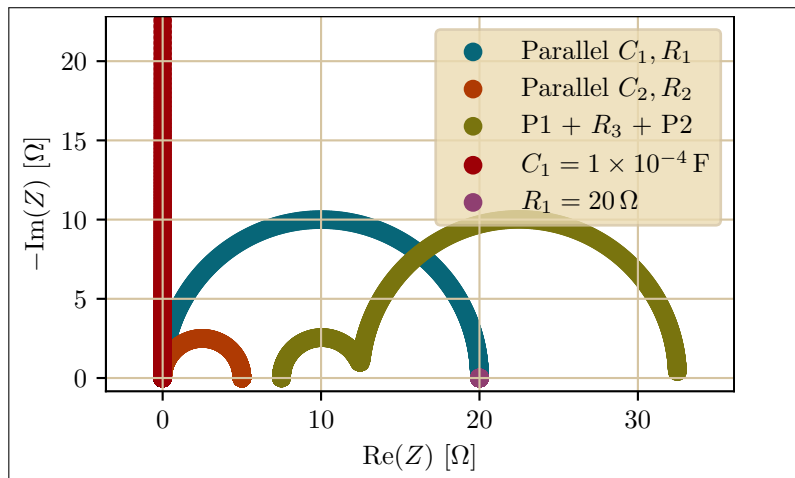
Limiting current density for a RDE

$$j_{\infty} = n F D \frac{c^0}{\delta_{\text{diff}}} = \frac{1}{1.61} n F D^{\frac{2}{3}} \nu^{-\frac{1}{6}} c^0 \sqrt{\omega} \quad (609)$$

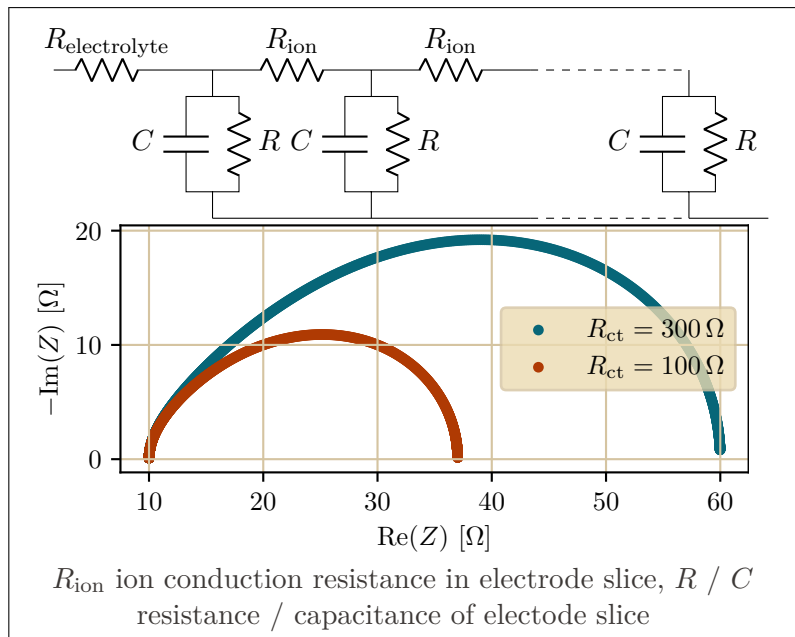
n Ladungszahl, F Faraday-Konstante, c^0 Bulk-Konzentration, D Diffusionskoeffizient, δ_{diff} Diffusionsschichtdicke, ν Kinematische Viskosität, ω Kreisfrequenz

56.4.4 AC-Impedanz

Nyquist-Diagramm
 Real und Imaginärteil der impedance während die Frequenz variiert wird



Transmission line model
 Model of porous electrodes as many slices



57 Thermoelektrizität

<p>Seebeck-Koeffizient Thermopower</p>	<p>Symbol: S Unit: $1 \mu\text{V K}^{-1}$</p> <hr/> $S = -\frac{\Delta V}{\Delta T} \quad (610)$ <p>V voltage, T Temperatur</p>
<p>Seebeck-Effekt Elecromotive force across two points of a material with a temperature difference</p>	$\vec{j} = \sigma(-\vec{\nabla}V - S\vec{\nabla}T) \quad (611)$ <p>σ Leitfähigkeit, V local voltage, S Seebeck-Koeffizient, T Temperatur</p>
<p>Wärmeleitfähigkeit Leitung von Wärme, ohne Stofftransport</p>	<p>Symbol: κ, λ, k Unit: $1 \text{ W m}^{-1} \text{ K} = 1 \text{ kgm/s}^3\text{K}$</p> <hr/> $\kappa = \frac{\dot{Q}l}{A\Delta T} \quad (612)$ <hr/> $\kappa_{\text{tot}} = \kappa_{\text{lattice}} + \kappa_{\text{electric}} \quad (613)$ <p>???:heat, l Länge, A Fläche, T Temperatur</p>
<p>Wiedemann-Franz Gesetz</p>	$\kappa = L\sigma T \quad (614)$ <p>κ Elektrische Wärmeleitfähigkeit, L in $\text{W } \Omega \text{ K}^{-1}$ Lorentzzahl, σ Leitfähigkeit</p>
<p>Thermoelektrische Gütezahl Dimensionsoser Wert zum Vergleichen von Materialien</p>	$zT = \frac{S^2\sigma}{\kappa}T \quad (615)$ <p>S Seebeck-Koeffizient, σ Leitfähigkeit, κ Wärmeleitfähigkeit, T Temperatur</p>

58 misc

<p>Stöchiometrischer Koeffizient</p>	<p>Symbol: ν Unit:</p>
<p>Standardbedingungen</p>	$T = 273,15 \text{ K} = 0^\circ\text{C} \quad (616)$ $p = 100\,000 \text{ Pa} = 1,000 \text{ bar} \quad (617)$
<p>pH-Wert definition</p>	$\text{pH} = -\log_{10}(a_{\text{H}^+}) \quad (618)$ <p>a_{H^+} Wasserstoffionen-Aktivität</p>
<p>pH-Wert Bei Raumtemperatur 25°C</p>	$\text{pH} > 7 \quad \text{basic} \quad (619)$ $\text{pH} < 7 \quad \text{acidic} \quad (620)$ $\text{pH} = 7 \quad \text{neutral} \quad (621)$

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

$$E = mc^2 + AI$$

(622)

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/s ²
Federkonstante	Symbol: k	Unit: 1 N m ⁻¹ = 1 kg/s ²
Geschwindigkeit	Symbol: \vec{v}	Unit: 1 m s ⁻¹
Drehmoment	Symbol: τ	Unit: 1 N m = 1 kgm ² /s ²
Druck	Symbol: p	Unit: 1 N/m ²

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}
	$\omega = \frac{2\pi/T}{2\pi f}$ (623)	
	T Periodendauer, f Frequenz	
Periodendauer	Symbol: T	Unit: 1 s
	$T = \frac{1}{f}$ (624)	
	f Frequenz	
Leitfähigkeit	Symbol: σ	Unit: $1\text{ }\Omega^{-1}\text{ m}$

59.5 Sonstige

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

60 Konstanten

Plancksches Wirkumsquantum	Symbol: h Definierter 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 Definierter 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 Definierter Wert $6.02214076 \cdot 10^{23}\text{ 1/mol}$

Boltzmann-Konstante Temperatur-Energie Umrechnungsfaktor	Symbol: k_B Definierter Wert $1.380649 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Faraday-Konstante Elektrische Ladung von einem Mol einfach geladener Ionen	Symbol: F Definierter Wert $9.64853321233100184 \cdot 10^4 \text{ C mol}^{-1}$ $N_A e$ N_A Avogadro-Konstante, k_B Boltzmann-Konstante
Elementarladung	Symbol: e Definierter Wert $1.602176634 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Atomare Masseneinheit	Symbol: u Experimenteller Wert $1.66053906892(52) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Abbildungsverzeichnis

1	[?]	61
2	[?]	62
3	Transmon and so TODO	69
4	img/	70

Tabellenverzeichnis

61 Liste der Elemente

Wasserstoff English: Hydrogen farbloses Gas (H2)	Symbol: H Number: 1 Elektronenkonfiguration: 1s[1] set: nonmetal magnetic ordering: diamagnetic Kristallstruktur: hex atomic mass: 1.0081
Helium English: Helium farbloses Gas	Symbol: He Number: 2 Elektronenkonfiguration: 1s[1] set: noble gas magnetic ordering: diamagnetic Kristallstruktur: hcp atomic mass: 4.0026022

Lithium
English: Lithium
silbrig weiß/grau

Symbol: Li
Number: 3
Elektronenkonfiguration: He 2s[1]
set: alkalimetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 6.946

Beryllium
English: Beryllium
weiß-grau metallisch

Symbol: Be
Number: 4
Elektronenkonfiguration: He 2s[2]
set: alkalineearthmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 9.01218315

Bor
English: Boron
schwarz

Symbol: B
Number: 5
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[1]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
atomic mass: 10.811

Kohlenstoff
English: Carbon
schwarz (Graphit); farblos
(Diamant)

Symbol: C
Number: 6
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[2]
set: nonmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
atomic mass: 12.01112

Stickstoff
English: Nitrogen
farbloses Gas

Symbol: N
Number: 7
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[3]
set: nonmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
atomic mass: 14.006714

Sauerstoff
English: Oxygen
farbloses Gas

Symbol: O
Number: 8
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[4]
set: nonmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: sc
atomic mass: 15.99915

Fluor
English: Fluorine
blasses, gelbliches Gas

Symbol: F
Number: 9
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[5]
set: halogen
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: sc
refractive index: 1.000195
atomic mass: 18.9984031636

Neon
English: Neon
farbloses Gas

Symbol: Ne
Number: 10
Elektronenkonfiguration: He 2s[2] 2p[6]
set: noblegas
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractive index: 1.000067
atomic mass: 20.17976

Natrium
English: Sodium
silbrig weiß

Symbol: Na
Number: 11
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[1]
set: alkalimetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 22.989769282

Magnesium
English: Magnesium
silbrig weiß

Symbol: Mg
Number: 12
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2]
set: alkalineearthmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 24.30524

Aluminium
English: Aluminum
silbrig

Symbol: Al
Number: 13
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[1]
set: metal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 26.98153857

Silicium
English: Silicon
dunkelgrau, bläulicher
Farbton

Symbol: Si
Number: 14
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[2]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: dc
atomic mass: 28.08528

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

Symbol: P
Number: 15
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[3]
set: nonmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractive index: 1.001212
atomic mass: 30.9737619985

Schwefel
English: Sulfur
gelb

Symbol: S
Number: 16
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[4]
set: nonmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractive index: 1.001111
atomic mass: 32.0632

Chlor
English: Chlorine
gelblich-grün

Symbol: Cl
Number: 17
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[5]
set: halogen
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractive index: 1.000773
atomic mass: 35.4535

Argon
English: Argon
farbloses Gas

Symbol: Ar
Number: 18
Elektronenkonfiguration: Ne 3s[2] 3p[6]
set: noblegas
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractive index: 1.000281
atomic mass: 39.9481

Kalium
English: Potassium
silbrig weiß

Symbol: K
Number: 19
Elektronenkonfiguration: Ar 4s[1]
set: alkalimetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 39.09831

Calcium
English: Calcium
silbrig weiß

Symbol: Ca
Number: 20
Elektronenkonfiguration: Ar 4s[2]
set: alkalineearthmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 40.0784

Scandium
English: Scandium
silbrig weiß

Symbol: Sc
Number: 21
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[1] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 44.9559085

Titan
English: Titanium
silbrig metallisch

Symbol: Ti
Number: 22
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[2] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 47.8671

Vanadium
English: Vanadium
stahlgrau metallisch, bläulich
schimmernd

Symbol: V
Number: 23
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[3] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 50.94151

Chrom
English: Chromium
silbrig metallisch

Symbol: Cr
Number: 24
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[5] 4s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: antiferromagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 51.99616

Mangan
English: Manganese
silbrig metallisch (Stahlweiß)

Symbol: Mn
Number: 25
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[5] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: antiferromagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 54.9380443

Eisen
English: Iron
metallisch glänzend mit einem
gräulichen Farbton

Symbol: Fe
Number: 26
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[6] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 55.8452

Cobalt
English: Cobalt
stahlgrauer metallisch
glänzender Feststoff

Symbol: Co
Number: 27
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[7] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 58.9331944

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

Symbol: Ni
Number: 28
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[8] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: ferromagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 58.69344

Kupfer
English: Copper
rotbraun, metallisch

Symbol: Cu
Number: 29
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 63.5463

Zink
English: Zinc
bläulich blassgrau

Symbol: Zn
Number: 30
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hcp
refractive index: 1.00205
atomic mass: 65.382

Gallium
English: Gallium
silbrig weiß

Symbol: Ga
Number: 31
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[1]
set: metal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
atomic mass: 69.7231

Germanium
English: Germanium
gräulich weiß

Symbol: Ge
Number: 32
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[2]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: dc
atomic mass: 72.6308

Arsen
English: Arsenic
metallisch grau, gelb oder
schwarz

Symbol: As
Number: 33
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[3]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
refractive index: 1.001552
atomic mass: 74.9215956

Selen
English: Selenium
grau, glänzend

Symbol: Se
Number: 34
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[4]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
refractive index: 1.000895
atomic mass: 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
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
refractive index: 1.001132
atomic mass: 79.90479

Krypton
English: Krypton
farbloses Gas

Symbol: Kr
Number: 36
Elektronenkonfiguration: Ar 3d[10] 4s[2] 4p[6]
set: noblegas
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractive index: 1.000427
atomic mass: 83.7982

Rubidium
English: Rubidium
silbrig weiß

Symbol: Rb
Number: 37
Elektronenkonfiguration: Kr 5s[1]
set: alkalimetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 85.46783

Strontium
English: Strontium
silbrig weiß metallisch

Symbol: Sr
Number: 38
Elektronenkonfiguration: Kr 5s[2]
set: alkalineearthmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 87.621

Yttrium
English: Yttrium
silbrig weiß

Symbol: Y
Number: 39
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[1] 5s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 88.905842

Zirconium
English: Zirconium
silbrig weiß

Symbol: Zr
Number: 40
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[2] 5s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 91.2242

Niob
English: Niobium
grau metallisch glänzend

Symbol: Nb
Number: 41
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[4] 5s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 92.906372

Molybdän
English: Molybdenum
grau metallisch

Symbol: Mo
Number: 42
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[5] 5s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 95.951

Technetium
English: Technetium
silbrig grau metallisch

Symbol: Tc
Number: 43
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[5] 5s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 98.9063

Ruthenium
English: Ruthenium
silbrig weiß metallisch

Symbol: Ru
Number: 44
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[7] 5s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 101.072

Rhodium
English: Rhodium
silbrig weiß metallisch

Symbol: Rh
Number: 45
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[8] 5s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 102.905502

Palladium
English: Palladium
silbrig, weiß, metallisch

Symbol: Pd
Number: 46
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 106.421

Silber
English: Silver
weißglänzend, metallisch

Symbol: Ag
Number: 47
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[1]
set: transitionmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 107.86822

Cadmium
English: Cadmium
silbrig grau metallisch

Symbol: Cd
Number: 48
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 112.4144

Indium
English: Indium
silbrig glänzend grau

Symbol: In
Number: 49
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[1]
set: metal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: tetr
atomic mass: 114.8181

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

Symbol: Sn
Number: 50
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[2]
set: metal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: tetr
atomic mass: 118.7107

Antimon
English: Antimony
silbrig glänzend grau

Symbol: Sb
Number: 51
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[3]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
atomic mass: 121.7601

Tellur
English: Tellurium
silberweiß, metallisch
glänzend

Symbol: Te
Number: 52
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[4]
set: metalloid
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: hex
refractive index: 1.000991
atomic mass: 127.603

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

Symbol: I
Number: 53
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[5]
set: halogen
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: orth
atomic mass: 126.904473

Xenon
English: Xenon
farbloses Gas

Symbol: Xe
Number: 54
Elektronenkonfiguration: Kr 4d[10] 5s[2] 5p[6]
set: noblegas
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: fcc
refractive index: 1.000702
atomic mass: 131.2936

Caesium
English: Caesium
goldgelb glänzend

Symbol: Cs
Number: 55
Elektronenkonfiguration: Xe 6s[1]
set: alkalimetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 132.905451966

Barium
English: Barium
weiß-grau metallisch

Symbol: Ba
Number: 56
Elektronenkonfiguration: Xe 6s[2]
set: alkalineearthmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 137.3277

Lanthan
English: Lanthanum
silbrig weiß

Symbol: La
Number: 57
Elektronenkonfiguration: Xe 5d[1] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 138.905477

Cer
English: Cerium
silbrig weiß

Symbol: Ce
Number: 58
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[1] 5d[1] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 140.1161

Praseodym
English: Praseodymium
silbrig weiß, gelblicher
Farbton

Symbol: Pr
Number: 59
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[3] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 140.907662

Neodym
English: Neodymium
silbrigweiß, gelblicher Farbton

Symbol: Nd
Number: 60
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[4] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 144.2423

Promethium
English: Promethium
metallisch

Symbol: Pm
Number: 61
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[5] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 146.9151

Samarium
English: Samarium
silbrig weiß

Symbol: Sm
Number: 62
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[6] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: rho
atomic mass: 150.362

Europium
English: Europium
silbrig weiß

Symbol: Eu
Number: 63
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[7] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 151.9641

Gadolinium
English: Gadolinium
silbrig weiß

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

Terbium
English: Terbium
silbrig weiß

Symbol: Tb
Number: 65
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[9] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 158.925352

Dysprosium
English: Dysprosium
silvery white

Symbol: Dy
Number: 66
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[10] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 162.5001

Holmium
English: Holmium
silbrig weiß

Symbol: Ho
Number: 67
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[11] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 164.930332

Erbium
English: Erbium
silbrig weiß

Symbol: Er
Number: 68
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[12] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 167.2593

Thulium
English: Thulium
silbrig grau

Symbol: Tm
Number: 69
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[13] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 168.934222

Ytterbium
English: Ytterbium
silbrig weiß

Symbol: Yb
Number: 70
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 6s[2]
set: lanthanoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 173.0451

Lutetium
English: Lutetium
silbrig weiß

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

Hafnium
English: Hafnium
stahlgrau

Symbol: Hf
Number: 72
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[2] 6s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 178.492

Tantal
English: Tantalum
grau

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

Wolfram
English: Tungsten
gräulich weiß, glänzend

Symbol: W
Number: 74
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[4] 6s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 183.841

Rhenium
English: Rhenium
gräulich weiß

Symbol: Re
Number: 75
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[5] 6s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 186.2071

Osmium
English: Osmium
bläulich grau

Symbol: Os
Number: 76
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[6] 6s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 190.233

Iridium
English: Iridium
silbrig weiß

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

Platin
English: Platinum
grau-weiß

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

Gold
English: Gold
metallisch gelb

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

Quecksilber
English: Mercury
silbrig weiß

Symbol: Hg
Number: 80
Elektronenkonfiguration: Xe 4f[14] 5d[10] 6s[2]
set: transitionmetal
magnetic ordering: diamagnetic
Kristallstruktur: rho
refractive index: 1.000933
atomic mass: 200.5923

Thallium
English: Thallium
silbrig weiß

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

Blei
English: Lead
bläulich weiß

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

Bismut
English: Bismuth
glänzend silberweiß

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

Polonium
English: Polonium
silbrig

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

Astat
English: Astatine
metallisch

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

Radon
English: Radon
farbloses Gas

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

Francium
English: Francium

Symbol: Fr
Number: 87
Elektronenkonfiguration: Rn 7s[1]
set: alkalimetal
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 223.0197

Radium
English: Radium
silbrig-weiß-metallisch

Symbol: Ra
Number: 88
Elektronenkonfiguration: Rn 7s[2]
set: alkalineearthmetal
magnetic ordering: nonmagnetic
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 226.0254

Actinium
English: Actinium
silbrig

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

Thorium
English: Thorium
silbrig weiß

Symbol: Th
Number: 90
Elektronenkonfiguration: Rn 6d[2] 7s[2]
set: actinoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 232.03774

Protactinium
English: Protactinium
hell, silbrig, metallisch
glänzend

Symbol: Pa
Number: 91
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[2] 6d[1] 7s[2]
set: actinoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: tetr
atomic mass: 231.035882

Uran
English: Uranium
silberweiß

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

Neptunium
English: Neptunium
silbrig

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

Plutonium
English: Plutonium
silbriges Metall

Symbol: Pu
Number: 94
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[6] 7s[2]
set: actinoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: mon
atomic mass: 244.0642

Americium
English: Americium
silbrig-weißes Metall

Symbol: Am
Number: 95
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[7] 7s[2]
set: actinoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 243.061375

Curium
English: Curium
silbrig-weißes Metall

Symbol: Cm
Number: 96
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[7] 6d[1] 7s[2]
set: actinoide
magnetic ordering: antiferromagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 247.0703

Berkelium
English: Berkelium
silberweiß

Symbol: Bk
Number: 97
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[9] 7s[2]
set: actinoide
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 247

Californium
English: Californium
silbriges Metall

Symbol: Cf
Number: 98
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[10] 7s[2]
Kristallstruktur: dhcp
atomic mass: 251
set: actinoide

Einsteinium English: Einsteinium	Symbol: Es Number: 99 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[11] 7s[2] set: actinoide magnetic ordering: paramagnetic Kristallstruktur: fcc atomic mass: 252
Fermium English: Fermium	Symbol: Fm Number: 100 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[12] 7s[2] Kristallstruktur: fcc atomic mass: 257.0951 set: actinoide
Mendelevium English: Mendelevium	Symbol: Md Number: 101 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[13] 7s[2] Kristallstruktur: fcc atomic mass: 258 set: actinoide
Nobelium English: Nobelium	Symbol: No Number: 102 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 7s[2] Kristallstruktur: fcc atomic mass: 259 set: actinoide
Lawrencium English: Lawrencium	Symbol: Lr Number: 103 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 7s[2] 7p[1] Kristallstruktur: hcp atomic mass: 266 set: actinoide
Rutherfordium English: Rutherfordium unbekannt, vermutlich silber-weiß oder grau metallisch	Symbol: Rf Number: 104 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[2] 7s[2] Kristallstruktur: hcp atomic mass: 261.1087 set: transitionmetal
Dubnium English: Dubnium	Symbol: Db Number: 105 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[3] 7s[2] Kristallstruktur: bcc atomic mass: 262.1138 set: transitionmetal

Seaborgium
English: Seaborgium

Symbol: Sg
Number: 106
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[4] 7s[2]
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 263.1182
set: transitionmetal

Bohrium
English: Bohrium

Symbol: Bh
Number: 107
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[5] 7s[2]
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 262.1229
set: transitionmetal

Hassium
English: Hassium

Symbol: Hs
Number: 108
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[6] 7s[2]
Kristallstruktur: hcp
atomic mass: 265.269
set: transitionmetal

Meitnerium
English: Meitnerium

Symbol: Mt
Number: 109
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[7] 7s[2]
set: unknown
magnetic ordering: paramagnetic
Kristallstruktur: fcc
atomic mass: 268

Darmstadtium
English: Darmstadtium

Symbol: Ds
Number: 110
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[8] 7s[2]
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 281
set: unknown

Roentgenium
English: Roentgenium

Symbol: Rg
Number: 111
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[9] 7s[2]
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 280
set: unknown

Copernicium
English: Copernicium

Symbol: Cn
Number: 112
Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2]
Kristallstruktur: bcc
atomic mass: 277
set: unknown

<p>Nihonium English: Nihonium</p>	<p>Symbol: Nh Number: 113 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[1] Kristallstruktur: hcp atomic mass: 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 atomic mass: 289 set: unknown</p>
<p>Moscovium English: Moscovium</p>	<p>Symbol: Mc Number: 115 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[3] set: unknown atomic mass: 288</p>
<p>Livermorium English: Livermorium</p>	<p>Symbol: Lv Number: 116 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[4] set: unknown atomic mass: 293</p>
<p>Tenness English: Tennessine</p>	<p>Symbol: Ts Number: 117 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[5] set: unknown atomic mass: 292</p>
<p>Oganesson English: Oganesson</p>	<p>Symbol: Og Number: 118 Elektronenkonfiguration: Rn 5f[14] 6d[10] 7s[2] 7p[6] Kristallstruktur: fcc atomic mass: 294 set: unknown</p>