



Vorlesung 18:

Roter Faden:

Periodensystem
Röntgenstrahlung

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag



Periodensystem

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Ha													
58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				



LS-Kopplung

Bahndrehimpulse der Elektronen koppeln zu

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i; \quad |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

Spins der Elektronen koppeln zu Gesamtspin

$$\vec{S} = \sum \vec{S}_i; \quad |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

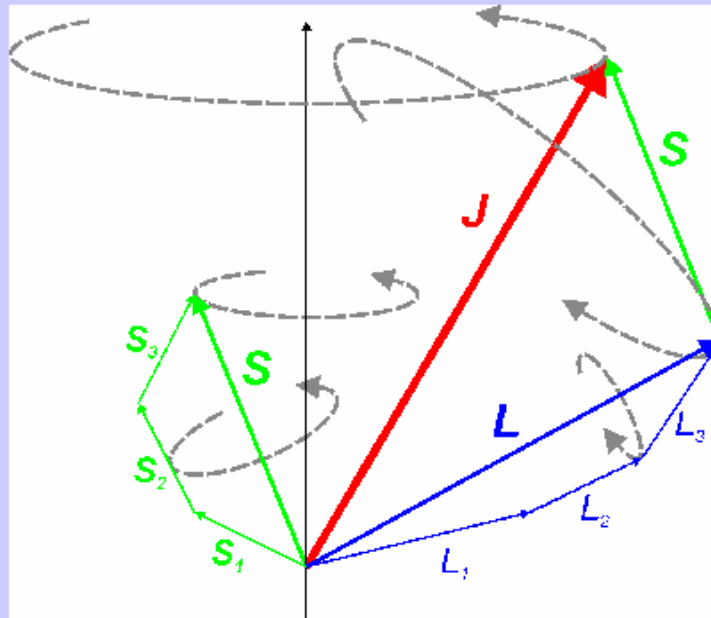
Der **Gesamtdrehimpuls** ist

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

mit

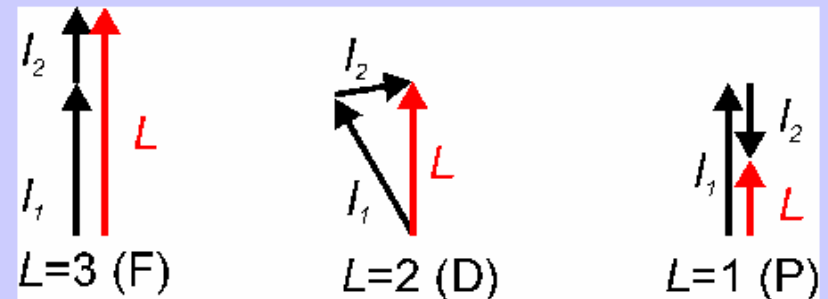
$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

$$J_z = M\hbar; \quad M = J, J-1, \dots, -J$$



Beispiel: 2 Elektronen mit $l_1 > l_2$

Mögliche Werte für L : $l_1+l_2, l_1+l_2-1 \dots l_1-l_2$



Hierbei handelt es sich nicht um die Drehimpulsvektoren, sondern um eine symbolische Addition der Quantenzahlen.

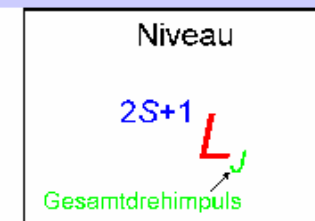
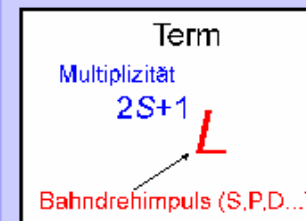
Term: alle Zustände mit gleichem L und S .

Spin-Bahn-Kopplung $\rightarrow (2S+1)$ Kombinationen:

$J = L+S, L+S-1 \dots L-S$ (**Multipletts**)

- ▶ 2 Elektronen: $S=0$ (Singulett) oder $S=1$ (Triplett)
- ▶ 3 Elektronen: $S=1/2$ (Doublett) oder $S=3/2$ (Quartett)
- ▶ 4 Elektronen: $S=0$ oder $S=1$ oder $S=2$ (Quintett)

Notation:





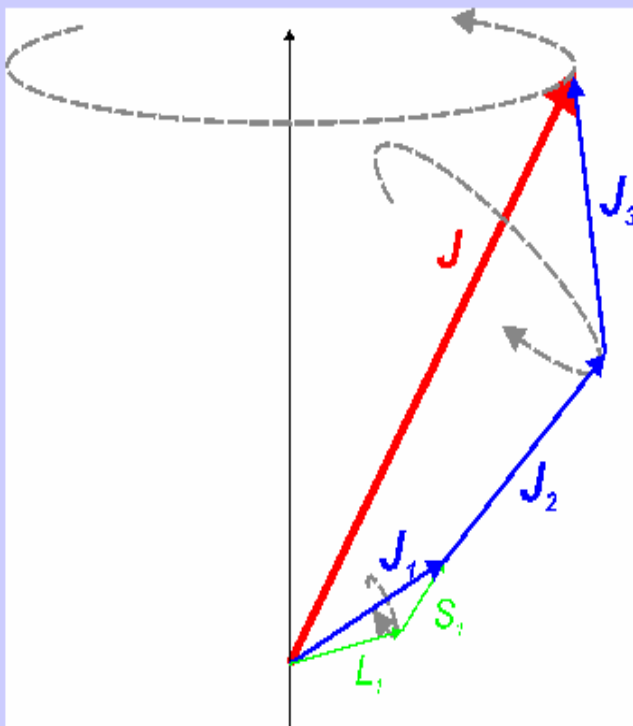
JJ-Kopplung

Mit steigender Kernladungszahl Z wird Spin-Bahn-Kopplung einzelner Elektronen stärker.

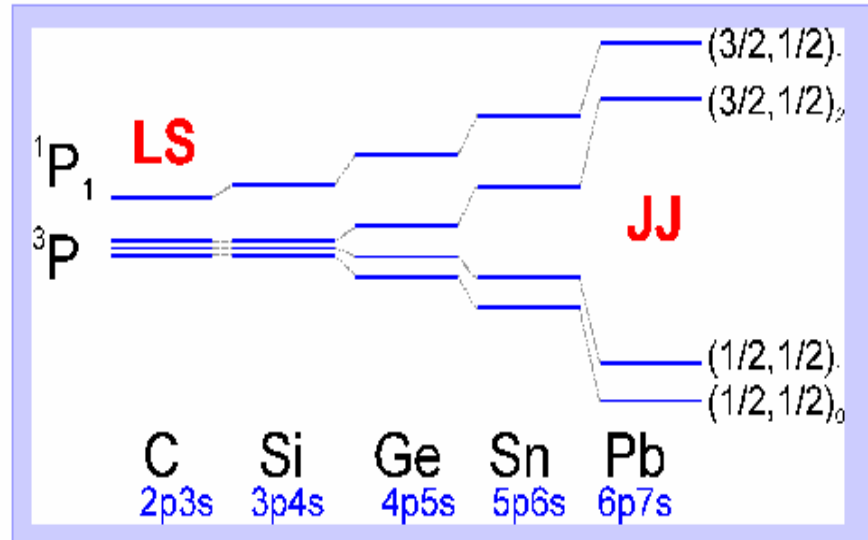
$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i$$

Die J_i koppeln zum Gesamtdrehimpuls des Atoms:

$$\vec{J} = \sum \vec{J}_i; \quad |\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$



LS- und JJ-Kopplung gibt es nur bei leichten bzw. schweren Atomen in Reinform. Die Niveaus im Übergangsbereich lassen sich nicht einfach zuordnen.



Notation: $(J_1, J_2, J_3)_J$



Vergleich LS und JJ Kopplung

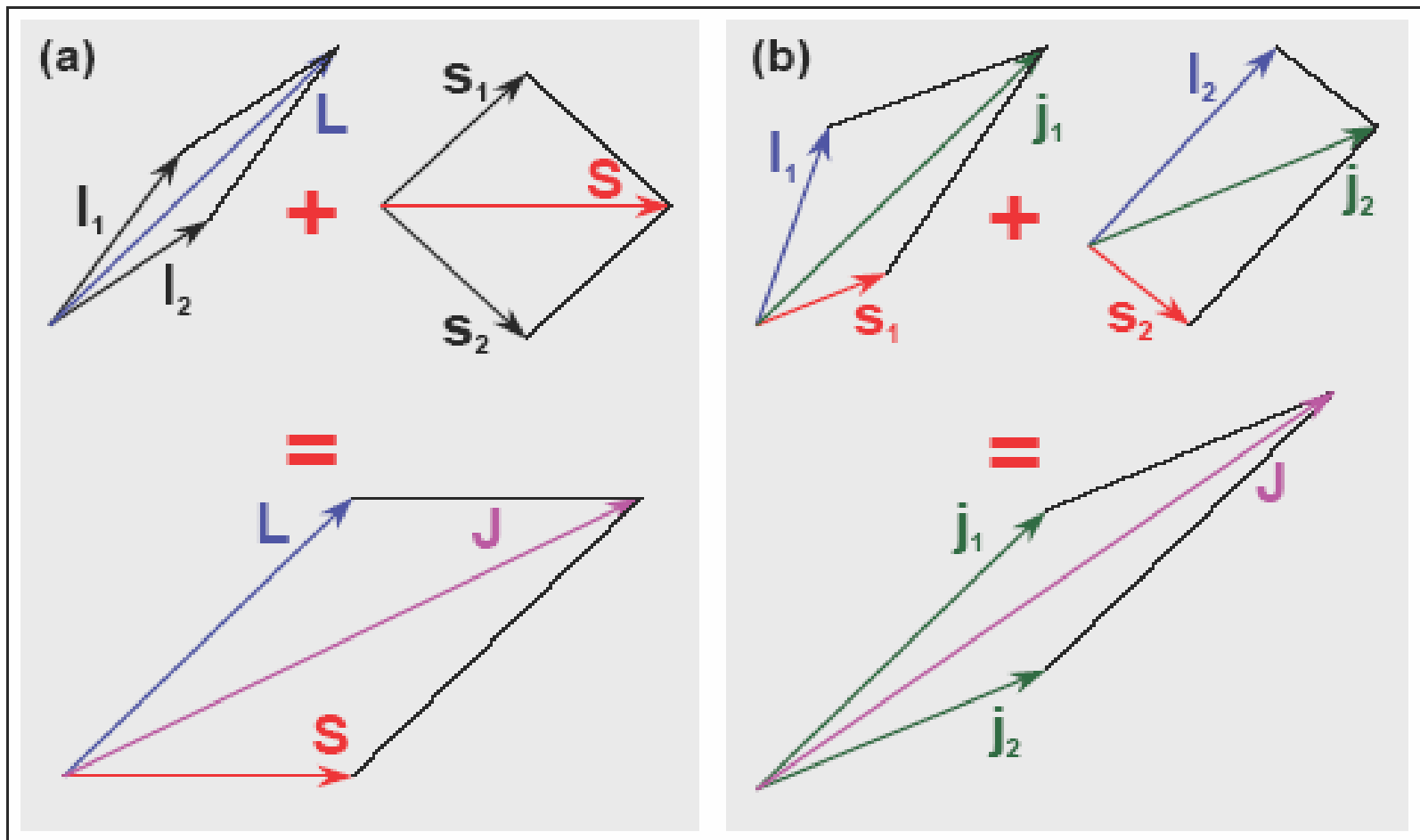


Abbildung 7.5: Vektormodell der L-S-Kopplung (a) und der j-j-Kopplung (b).



QZ bei mehreren Elektronen

Elektronen-konfiguration	Drehimpulsquantenzahlen			Spektroskopische Symbole
	L	S	J	
s	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$^2S_{1/2}$
s²	0	0	0	1S_0
	0	1	1	3S_1
sp	1	0	1	1P_1
	1	1	0,1,2	3P_0 3P_1 3P_2
p²	0	0	0	1S_0
	1	1	0,1,2	3P_0 3P_1 3P_2
	2	0	2	1D_2
	0	1	1	3S_1
	1	0	1	1P_1
	2	1	1,2,3	$^3D_{1,2,3}$

Tabelle 7.1: Mögliche Gesamtdrehimpulse und spektroskopische Symbole für verschiedene Elektronenkonfigurationen. Die rot markierten Terme sind aufgrund des Pauli-Prinzips für $n_1 = n_2$ verboten.



Beispiel der QZ für die np^2 Konfiguration

L	S	m_{l1}	m_{l2}	m_{s1}	m_{s2}	M_S	M_J	Term
0	0	0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	1S_0
1	0	0	-1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	0	3P_0
1	1	+1	-1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+1	3P_1
		+1	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	0	
		+1	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-1	
1	1	+1	0	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+2	3P_2
		+1	-1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+1	
		0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	
		+1	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-1	
		0	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-2	
2	0	+1	+1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	+2	1D_2
		+1	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	+1	
		0	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	
		0	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	-1	
		-1	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	-2	

Tabelle 7.2: Mögliche Zustände der Konfiguration np^2 mit Quantenzahlen $L, S, m_{l1}, m_{l2}, m_{s1}, m_{s2}, M_S = m_{s1} + m_{s2}$ und $M_J = m_{l1} + m_{l2} + m_{s1} + m_{s2}$ für gleiche Hauptquantenzahlen $n_1 = n_2$ der beiden p -Elektronen.



Verbotene QZ

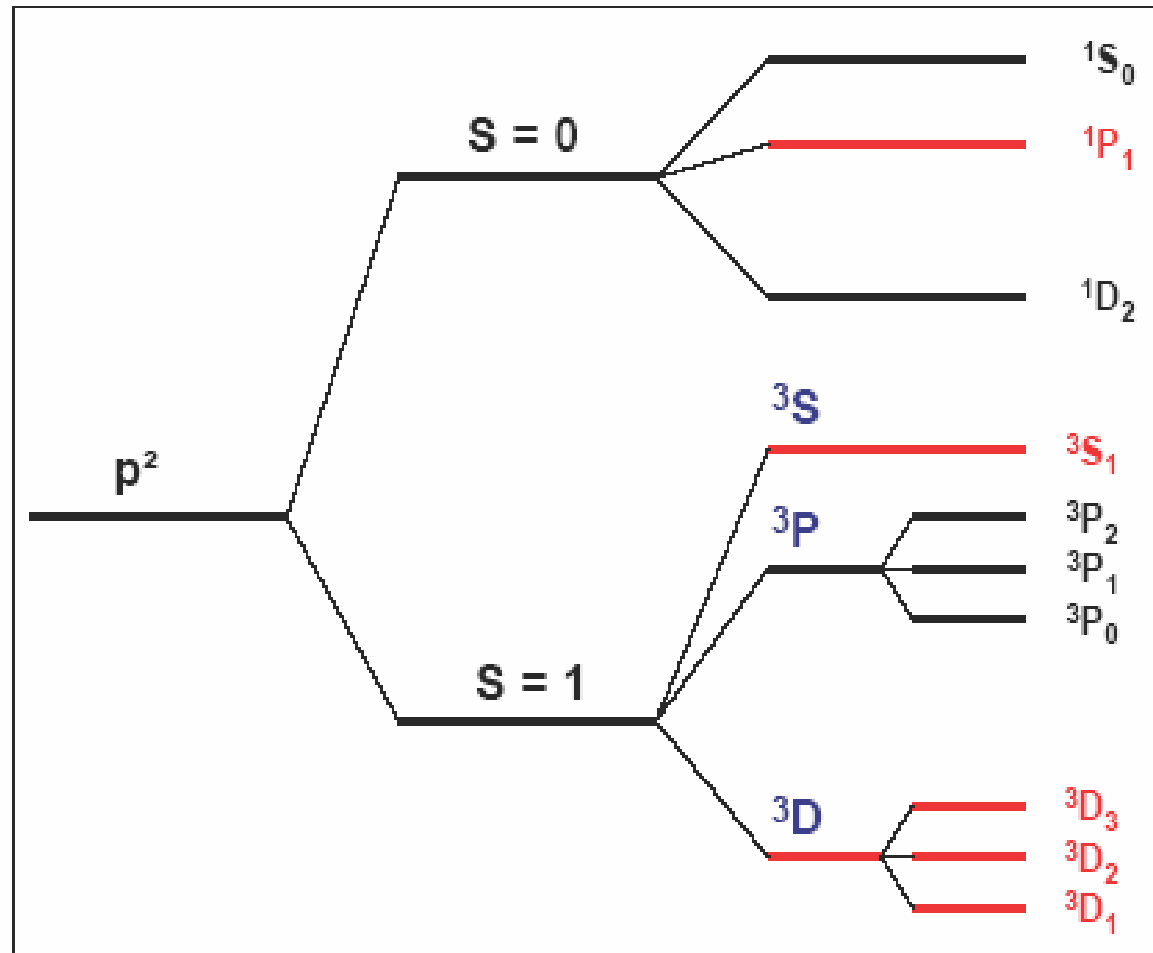


Abbildung 7.7: Mögliche Atomterme der p^2 -Konfiguration. Die rot markierten Terme sind aufgrund des Pauli-Prinzips verboten.

Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale			K	L		M			N
Z		Element	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s
1	H	Wasserstoff	1						
2	He	Helium	2						
3	Li	Lithium	2	1					
4	Be	Beryllium	2	2					
5	B	Bor	2	2	1				
6	C	Kohlenstoff	2	2	2				
7	N	Stickstoff	2	2	3				
8	O	Sauerstoff	2	2	4				
9	F	Fluor	2	2	5				
10	Ne	Neon	2	2	6				
11	Na	Natrium	2	2	6	1			
12	Mg	Magnesium	2	2	6	2			
13	Al	Aluminium	2	2	6	2	1		
14	Si	Silizium	2	2	6	2	2		
15	P	Phosphor	2	2	6	2	3		
16	S	Schwefel	2	2	6	2	4		
17	Cl	Chlor	2	2	6	2	5		
18	Ar	Argon	2	2	6	2	6		
19	K	Kalium	2	2	6	2	6		1
20	Ca	Calcium	2	2	6	2	6		2
21	Sc	Scandium	2	2	6	2	6	1	2
22	Ti	Titan	2	2	6	2	6	2	2
23	V	Vanadium	2	2	6	2	6	3	2
24	Cr	Chrom	2	2	6	2	6	5	1
25	Mn	Mangan	2	2	6	2	6	5	2
26	Fe	Eisen	2	2	6	2	6	6	2
27	Co	Kobalt	2	2	6	2	6	7	2

Schale			K	L		M			N			O	
Z		Element	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	5s	5p
28	Ni	Nickel	2	2	6	2	6	8	2				
29	Cu	Kupfer	2	2	6	2	6	10	1				
30	Zn	Zink	2	2	6	2	6	10	2				
31	Ga	Gallium	2	2	6	2	6	10	2	1			
32	Ge	Germanium	2	2	6	2	6	10	2	2			
33	As	Arsen	2	2	6	2	6	10	2	3			
34	Se	Selen	2	2	6	2	6	10	2	4			
35	Br	Brom	2	2	6	2	6	10	2	5			
36	Kr	Krypton	2	2	6	2	6	10	2	6			
37	Rb	Rubidium	2	2	6	2	6	10	2	6		1	
38	Sr	Strontium	2	2	6	2	6	10	2	6		2	
39	Y	Yttrium	2	2	6	2	6	10	2	6	1	2	
40	Zr	Zirkonium	2	2	6	2	6	10	2	6	2	2	
41	Nb	Niob	2	2	6	2	6	10	2	6	4	1	
42	Mo	Molybdän	2	2	6	2	6	10	2	6	5	1	
43	Tc	Technetium	2	2	6	2	6	10	2	6	6	1	
44	Ru	Ruthenium	2	2	6	2	6	10	2	6	7	1	
45	Rh	Rhodium	2	2	6	2	6	10	2	6	8	1	
46	Pd	Palladium	2	2	6	2	6	10	2	6	10		
47	Ag	Silber	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1	
48	Cd	Cadmium	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	
49	In	Indium	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	1
50	Sn	Zinn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2
51	Sb	Antimon	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	3
52	Te	Tellur	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	4
53	I	Iod	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	5
54	Xe	Xenon	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	6



Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale			N	O					P
Z		Element	4f	5s	5p	5d	5f	6s	
55	Cs	Cäsium		2	6			1	
56	Ba	Barium		2	6			2	
57	La	Lanthan		2	6	1		2	
58	Ce	Cer	2	2	6			2	
59	Pr	Praseodym	3	2	6			2	
60	Nd	Neodym	4	2	6			2	
61	Pm	Promethium	5	2	6			2	
62	Sm	Samarium	6	2	6			2	
63	Eu	Europium	7	2	6			2	
64	Gd	Gadolinium	7	2	6	1		2	
65	Tb	Terbium	9	2	6			2	
66	Dy	Dysprosium	10	2	6			2	
67	Ho	Holmium	11	2	6			2	
68	Er	Erbium	12	2	6			2	
69	Tm	Thulium	13	2	6			2	
70	Yb	Ytterbium	14	2	6			2	
71	Lu	Lutetium	14	2	6	1		2	
72	Hf	Hafnium	14	2	6	2		2	
73	Ta	Tantal	14	2	6	3		2	
74	W	Wolfram	14	2	6	4		2	
75	Re	Rhenium	14	2	6	5		2	
76	Os	Osmium	14	2	6	6		2	
77	Ir	Iridium	14	2	6	7		2	
78	Pt	Platin	14	2	6	9		1	
79	Au	Gold	14	2	6	10		1	

Schale			N	O				P			Q
Z		Element	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
80	Hg	Quecksilber	14	2	6	10		2			
81	Tl	Thallium	14	2	6	10		2	1		
82	Pb	Blei	14	2	6	10		2	2		
83	Bi	Bismut	14	2	6	10		2	3		
84	Po	Polonium	14	2	6	10		2	4		
85	At	Astat	14	2	6	10		2	5		
86	Rn	Radon	14	2	6	10		2	6		
87	Fr	Francium	14	2	6	10		2	6		1
88	Ra	Radium	14	2	6	10		2	6		2
89	Ac	Actinium	14	2	6	10		2	6	1	2
90	Th	Thorium	14	2	6	10		2	6	2	2
91	Pa	Protactinium	14	2	6	10	2	2	6	1	2
92	U	Uran	14	2	6	10	3	2	6	1	2
93	Np	Neptunium	14	2	6	10	5	2	6		2
94	Pu	Plutonium	14	2	6	10	6	2	6		2
95	Am	Americium	14	2	6	10	7	2	6		2
96	Cm	Curium	14	2	6	10	7	2	6	1	2
97	Bk	Berkelium	14	2	6	10	8	2	6	1	2
98	Cf	Californium	14	2	6	10	10	2	6		2
99	Es	Einsteinium	14	2	6	10	11	2	6		2
100	Fm	Fermium	14	2	6	10	12	2	6		2
101	Md	Mendelevium	14	2	6	10	13	2	6		2
102	No	Nobelium	14	2	6	10	14	2	6		2
103	Lr	Lawrencium	14	2	6	10	14	2	6	1	2
104	Rf	Rutherfordium	14	2	6	10	14	2	6	2	2



Periodensystem mit Untergruppen

Periode	Hauptgruppen												Hauptgruppen					
	1 IA	2 IIA											13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	1 <u>H</u> 1.008																	2 <u>He</u> 4.003
2	3 <u>Li</u> 6.941	4 <u>Be</u> 9.012	Nebengruppen										5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18
3	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII B	9	10	11 IB	12 IIB	13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.07	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95
4	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08	21 <u>Sc</u> 44.96	22 <u>Ti</u> 47.88	23 <u>V</u> 50.94	24 <u>Cr</u> 52.00	25 <u>Mn</u> 54.94	26 <u>Fe</u> 55.85	27 <u>Co</u> 58.47	28 <u>Ni</u> 58.69	29 <u>Cu</u> 63.55	30 <u>Zn</u> 65.39	31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.59	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.80
5	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62	39 <u>Y</u> 88.91	40 <u>Zr</u> 91.22	41 <u>Nb</u> 92.91	42 <u>Mo</u> 95.94	43 <u>Tc</u> (98)	44 <u>Ru</u> 101.1	45 <u>Rh</u> 102.9	46 <u>Pd</u> 106.4	47 <u>Ag</u> 107.9	48 <u>Cd</u> 112.4	49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3
6	55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	57 <u>La</u> 138.9	72 <u>Hf</u> 178.5	73 <u>Ta</u> 180.9	74 <u>W</u> 183.9	75 <u>Re</u> 186.2	76 <u>Os</u> 190.2	77 <u>Ir</u> 190.2	78 <u>Pt</u> 195.1	79 <u>Au</u> 197.0	80 <u>Hg</u> 200.5	81 <u>Tl</u> 204.4	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (210)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)
7	87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	89 <u>Ac</u> (227)	104 <u>Rf</u> (257)	105 <u>Db</u> (260)	106 <u>Sg</u> (263)	107 <u>Bh</u> (262)	108 <u>Hs</u> (265)	109 <u>Mt</u> (266)	110 ---	111 ---	112 ---		114 ---		116 ---		118 ---
Lanthaniden *			58 <u>Ce</u> 140.1	59 <u>Pr</u> 140.9	60 <u>Nd</u> 144.2	61 <u>Pm</u> (147)	62 <u>Sm</u> 150.4	63 <u>Eu</u> 152.0	64 <u>Gd</u> 157.3	65 <u>Tb</u> 158.9	66 <u>Dy</u> 162.5	67 <u>Ho</u> 164.9	68 <u>Er</u> 167.3	69 <u>Tm</u> 168.9	70 <u>Yb</u> 173.0	71 <u>Lu</u> 175.0		
Actiniden •			90 <u>Th</u> 232.0	91 <u>Pa</u> (231)	92 <u>U</u> (238)	93 <u>Np</u> (237)	94 <u>Pu</u> (242)	95 <u>Am</u> (243)	96 <u>Cm</u> (247)	97 <u>Bk</u> (247)	98 <u>Cf</u> (249)	99 <u>Es</u> (254)	100 <u>Fm</u> (253)	101 <u>Md</u> (256)	102 <u>No</u> (254)	103 <u>Lr</u> (257)		

 künstlich erzeugt



Reihenfolge der Besetzung im Periodensystem

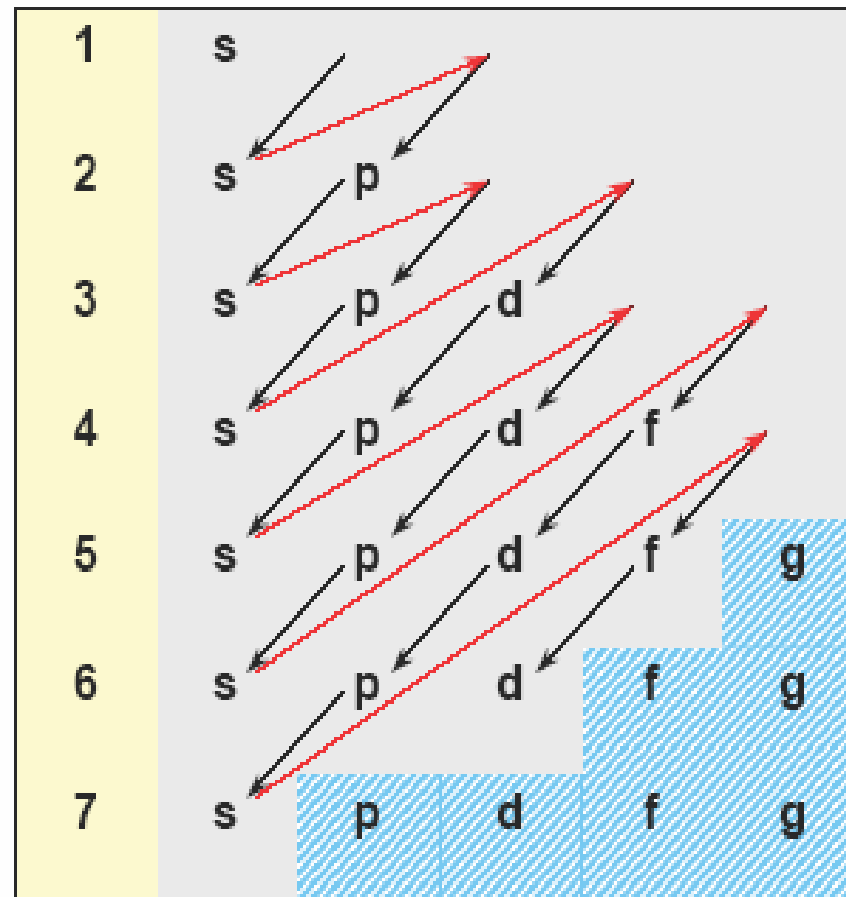


Abbildung 7.9: Graphisches Merkverfahren zur energetischen Abfolge der Einteilchenniveaus. Die Zahlen geben die Schale an, die Buchstaben die zu jeder Schale gehörigen Unterschalen. Die schraffiert hinterlegten Niveaus werden im Grundzustand der stabilen Atome nicht mehr besetzt.



Große Drehimpulse = maximale Abschirmung = geringe Bindung

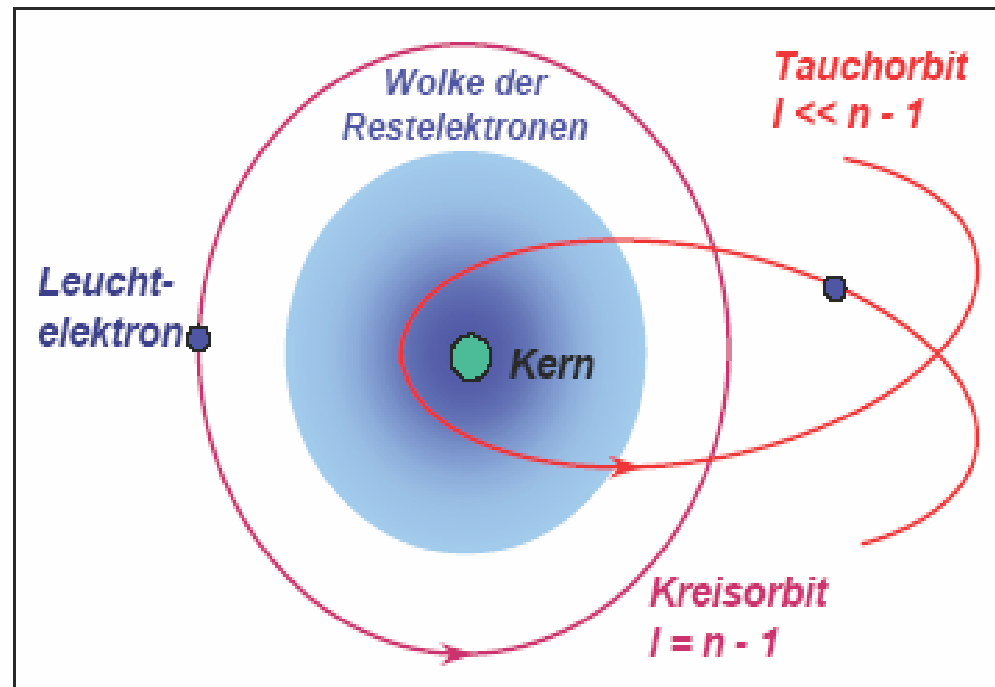
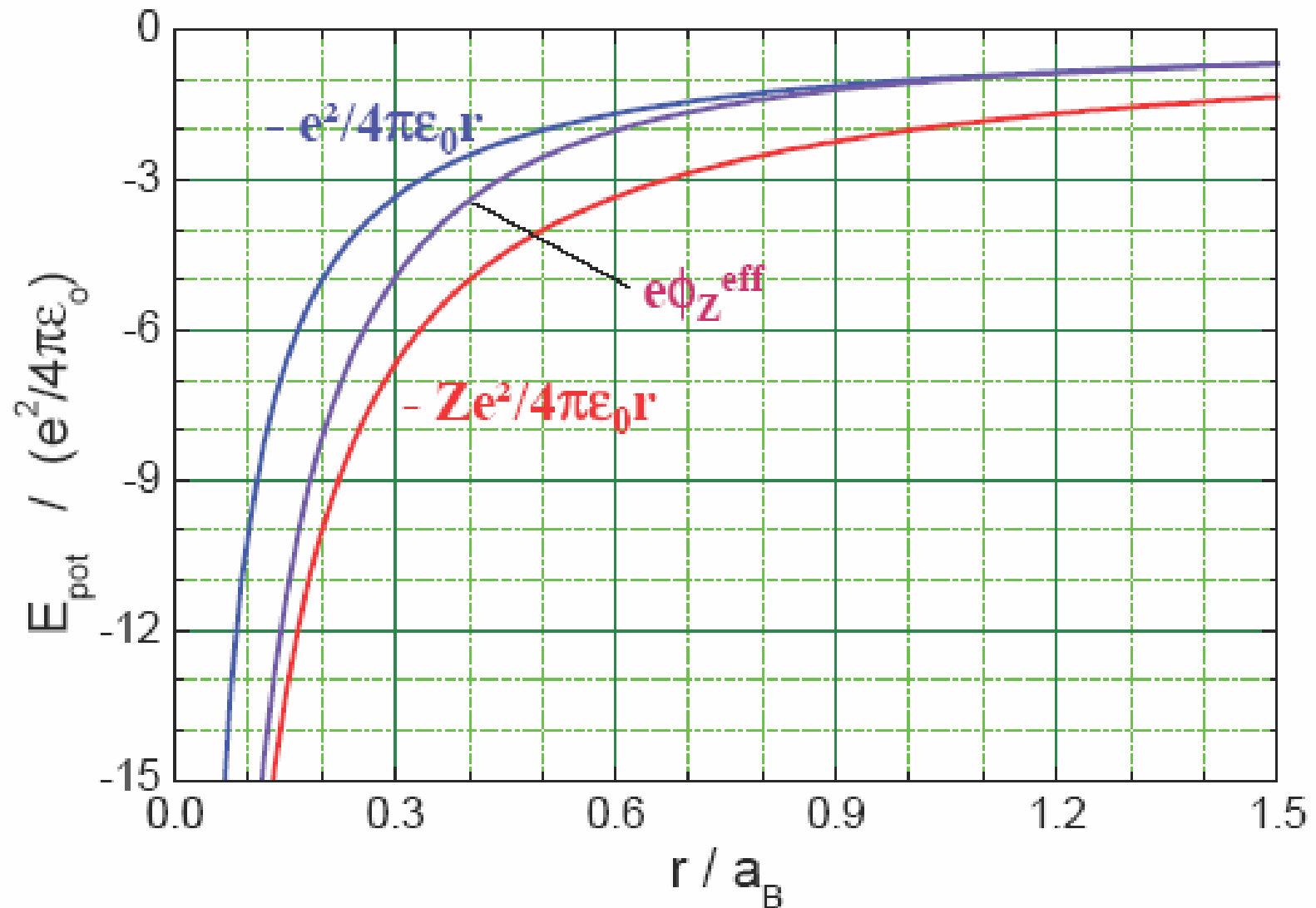


Abbildung 7.3: Zur Veranschaulichung der Aufhebung der l -Entartung mit Hilfe des Sommerfeldschen Modells. Für $l = n - 1$ haben wir es mit einem Orbital zu tun, das einer klassischen Kreisbahn sehr nahe kommt. Für $l \ll n - 1$ hingegen ist das Sommerfeldsche Orbit sehr stark elliptisch. Das Elektron kommt auf seiner "Tauchbahn" dem unabgeschirmten Kern häufiger sehr nahe, was auf Grund der Attraktivität der Wechselwirkung zu einer Absenkung der Energieniveaus führt.



Effektives Potential bei mehreren Elektronen





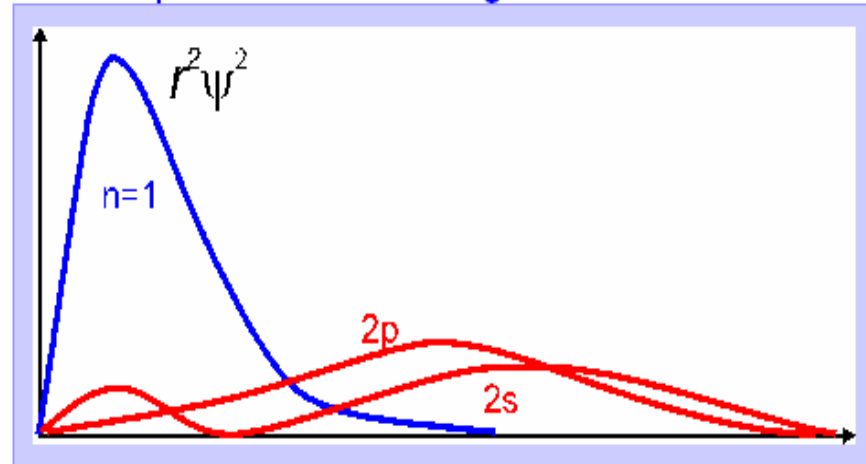
Atome mit 1 oder 2 Valenzelektronen

Abgeschlossene Schalen bilden Rumpf mit $L=0$, $S=0$.

Elektronen außerhalb (**Valenzelektronen**) bestimmen

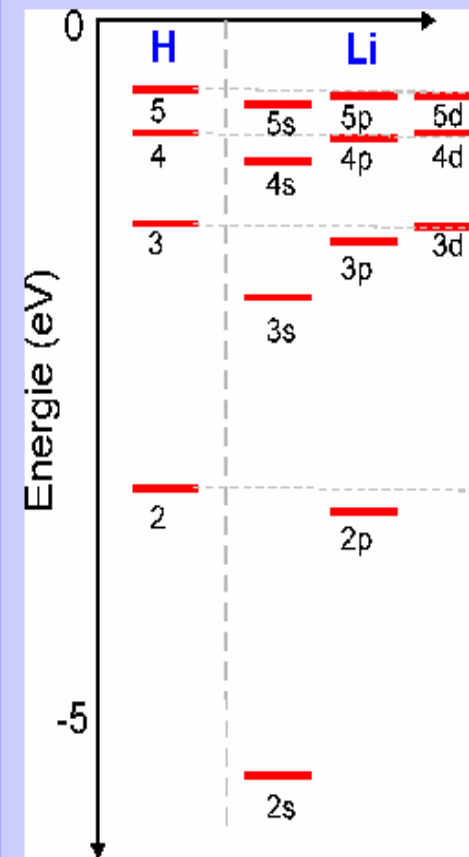
- chemische Eigenschaften
- metallische Eigenschaften
- magnetische Eigenschaften

Der Rumpf schirmt Kernladung teilweise ab.



Atome mit 1 Valenzelektron (Li, Na ...) haben wasserstoffähnliche Spektren. Äquivalente Niveaus sind aber stärker gebunden als im H-Atom.

Termschema des Lithium-Atoms

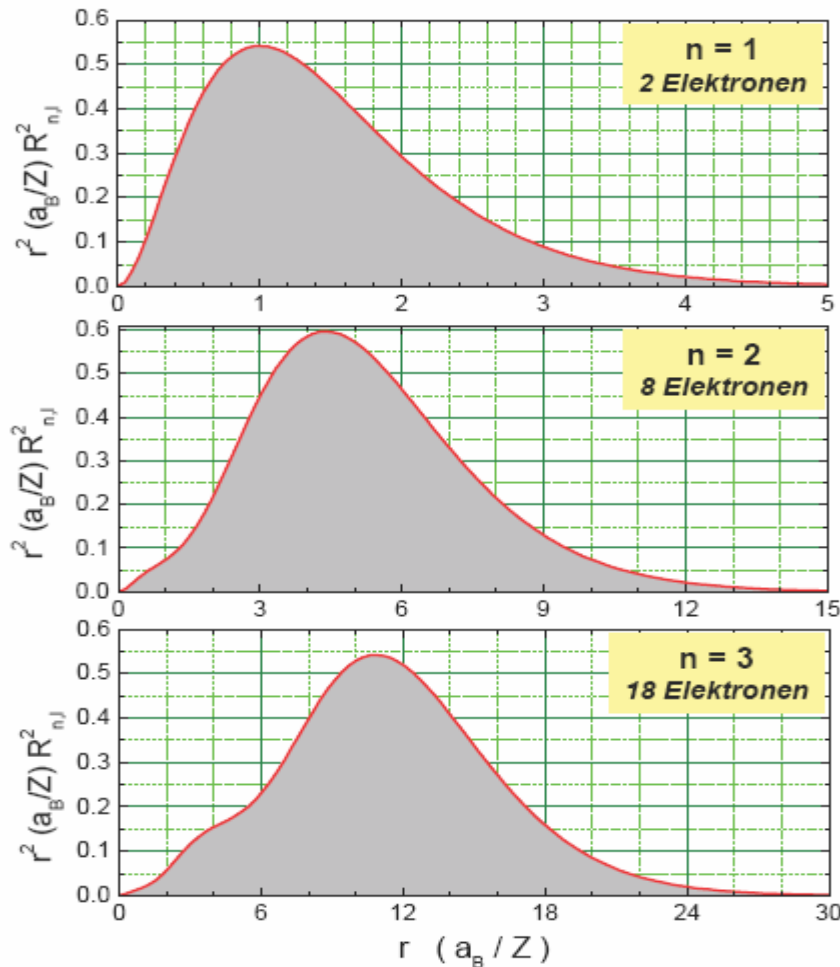


Der Grundzustand des Li liegt höher als bei H. Äquivalente Zustände sind aber stärker gebunden, denn die Abschirmung durch den Rumpf ist nicht vollständig, da die Wellenfunktion des 2S-Zustandes bis in Kernnähe reicht.

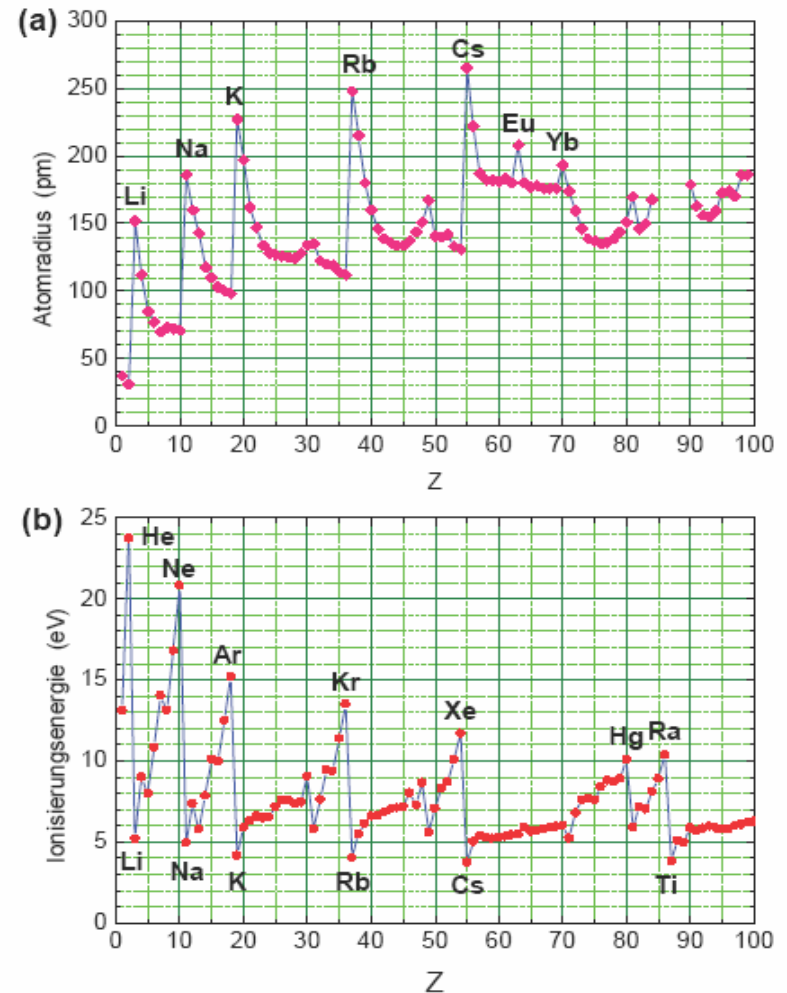
Atome mit 2 Valenzelektronen (Be, Mg ...) treten, wie Helium, in zwei Zuständen (Singulett und Triplett) auf.



Abgeschlossen Schalen



Elektronendichte bei vollen Schalen
($Z=2, 10, 28$ für $n=1, 2, 3$)



Atomradien und Ionisierungsenergie



Zusammenfassung

- Bei Atomen mit mehreren Elektronen führt die elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen dazu, dass das gesamte Potenzial nicht mehr kugelsymmetrisch ist.
- Für die Besetzung der Zustände eines Mehrelektronenatoms gilt das Pauli-Prinzip, für das man folgende äquivalente Formulierungen angeben kann:
 1. Die Gesamtwellenfunktion aller Elektronen muss antisymmetrisch gegenüber Vertauschung zweier Elektronen sein.
 2. Ein atomarer Zustand, der durch die 4 Quantenzahlen n (Hauptquantenzahl), l (Bahndrehimpulsquantenzahl), m (Bahndrehimpulsorientierungsquantenzahl) und m_s (Spinorientierungsquantenzahl) charakterisiert ist, kann nur von einem Elektron besetzt werden.
- Die Besetzung der möglichen Elektronenzustände eines Mehrelektronenatoms erfolgt unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips und der Energieminimierung.
- In der Elektronenhülle von Mehrelektronenatomen fassen wir Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl in Schalen ($n = 1, 2, 3, 4, \dots \Leftrightarrow K, L, M, N, \dots$) zusammen, solche mit gleicher Haupt- und Bahndrehimpulsquantenzahl in Unterschalen ($l = 0, 1, 2, 3, \dots \Leftrightarrow s, p, d, f, \dots$) zusammen.
- Der Schalenaufbau der Atome wird durch die Abhängigkeit der Ionisierungsenergie und der Atomvolumina von der Zahl der Elektronen in der Hülle widerspiegelt. Die Alkalimetalle haben von allen Atomen in der gleichen Periode die kleinsten Ionisierungsenergien und den größten Atomradius, die Edelgase die größten Ionisierungsenergien und den kleinsten Atomradius.



Zusammenfassung

1. Für Atome mit angeschlossenen Schalen gilt $L = S = J = 0$.
 2. In offenen s -, p -, d - oder f -Unterschalen liegen die Zustände mit maximalem S energetisch am tiefsten.
 3. Für die Terme mit maximalem S liegen die Terme mit maximalem L energetisch am tiefsten.
 4. Ist eine s -, p -, d - oder f -Unterschale weniger als halb gefüllt, so bildet der Term mit $J = |L - S|$ den Grundzustand, ist sie mehr als halb gefüllt, der Term mit $J = L + S$.
- Es wird folgende spektroskopische Notation für die Bezeichnung der Energieniveaus von Mehrelektronenatomen verwendet:

$$^M L_J \quad \text{mit der Multiplizität } M = 2S + 1 \quad \text{und} \quad |L - S| \leq J \leq L + S .$$

Für $L > S$ entspricht die Zahl $2S + 1$ der Feinstrukturkomponenten der Multiplizität des Zustandes. Für $L < S$ ist die Zahl $2L + 1$ der möglichen Feinstrukturkomponenten dagegen kleiner als die Multiplizität und wir sprechen von einer nicht vollständig entwickelten Multiplizität.



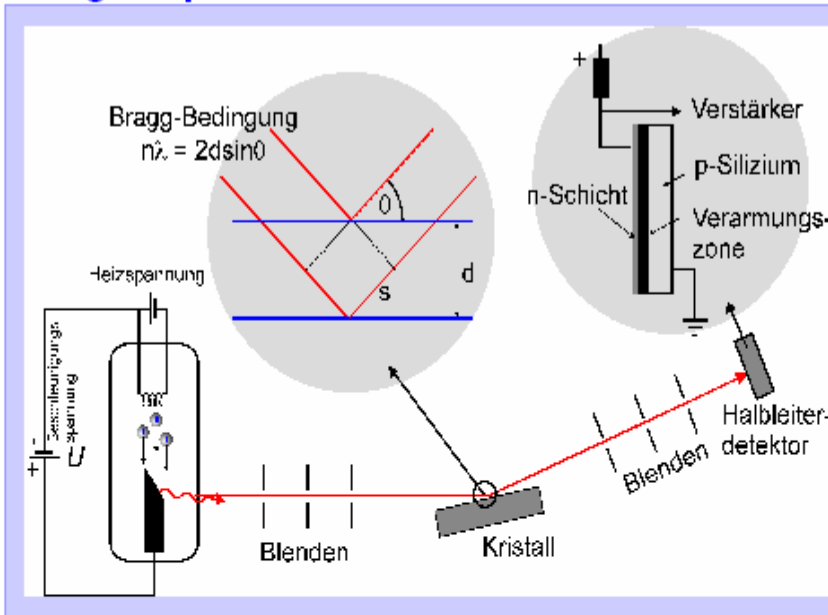
Zusammenfassung

- In einem Modell unabhängiger Elektronen nähert man man die Wechselwirkung eines Elektrons mit der Kernladung $+Ze$ und den verbleibenden $(Z - 1)$ anderen Elektronen durch ein effektives kugelsymmetrisches Potenzial. Dadurch wird das Problem für jedes einzelne Elektron auf ein Einteilchenproblem reduziert. Eine numerische Berechnung kann mit Hilfe des Hartree-Verfahren erfolgen. Die Vielelektronenwellenfunktion wird durch eine antisymmetrische Linearkombination von Produkten von Eielektronenfunktionen angenähert.
- Die Reihenfolge bei der Kopplung der Drehimpulse hängt von der Größe der beteiligten Wechselwirkungen ab:
 1. **L-S-Kopplung:**
Bei leichten Kernen ist die Spin-Bahn-Kopplung schwach, es koppeln zuerst alle Bahndrehimpulse zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$ und alle Spin zum Gesamtspin $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$. Erst anschließend koppeln $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$ des Atoms.
 2. **j-j-Kopplung:**
Bei schweren Kernen ist die Spin-Bahn-Kopplung stark, es koppeln zuerst alle Bahndrehimpulse und Spins der einzelnen Elektronen zu den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i$ der einzelnen Elektronen. Anschließend koppeln dann die verschiedenen $\mathbf{j}_i$ zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_i$ des Atoms.
- Für das Auffinden des Drehimpulszustandes des Grundzustandes eines Atoms können die Hundschen Regeln verwendet werden:



Röntgenstrahlung

Röntgen-Spektrometer



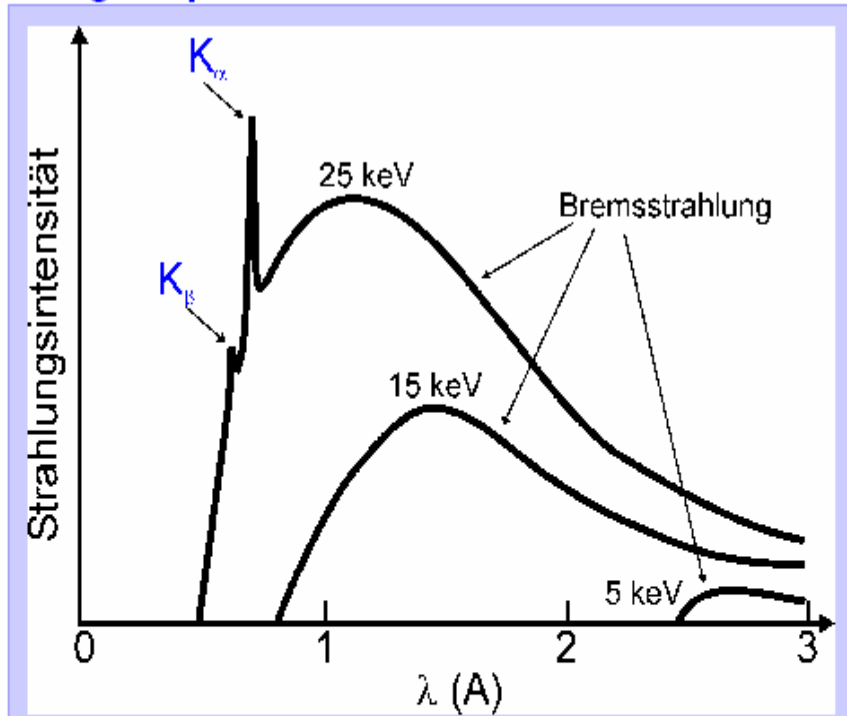
Spektroskopie der inneren Schalen.

- ▶ $E = 1-100 \text{ keV}$
- ▶ $\lambda = 0,1-10 \text{ \AA}$

Röntgen-Bremsspektrum

- ▶ Kontinuierlich
- ▶ Grenzfrequenz $\nu_{\max} = eU/h$
- ▶ $I(\nu) \sim Z(\nu_{\max} - \nu)$

Röntgen-Spektrum



Charakteristisches Spektrum

- ▶ Wenige Linien
- ▶ Zusammengefasst in Serien
- ▶ Kurzwellige Grenzfrequenz (**Serienkante**)
- ▶ Serien verschieben sich mit Z zu höheren Energien



Röntgenlinien

Deutung der Röntgen-Spektren durch Kossel 1916 im Modell unabhängiger Teilchen.

- ▶ Energetisches Elektron stößt Elektron aus inneren Schale
- ▶ Unbesetztes Niveau in sonst voller Schale (genannt **Loch**) hat gleichen Eigenschaften wie ein einzelnes Elektron in der Schale
- ▶ Übergang von Elektronen aus höheren Schalen und Emission eines Photons

Notation

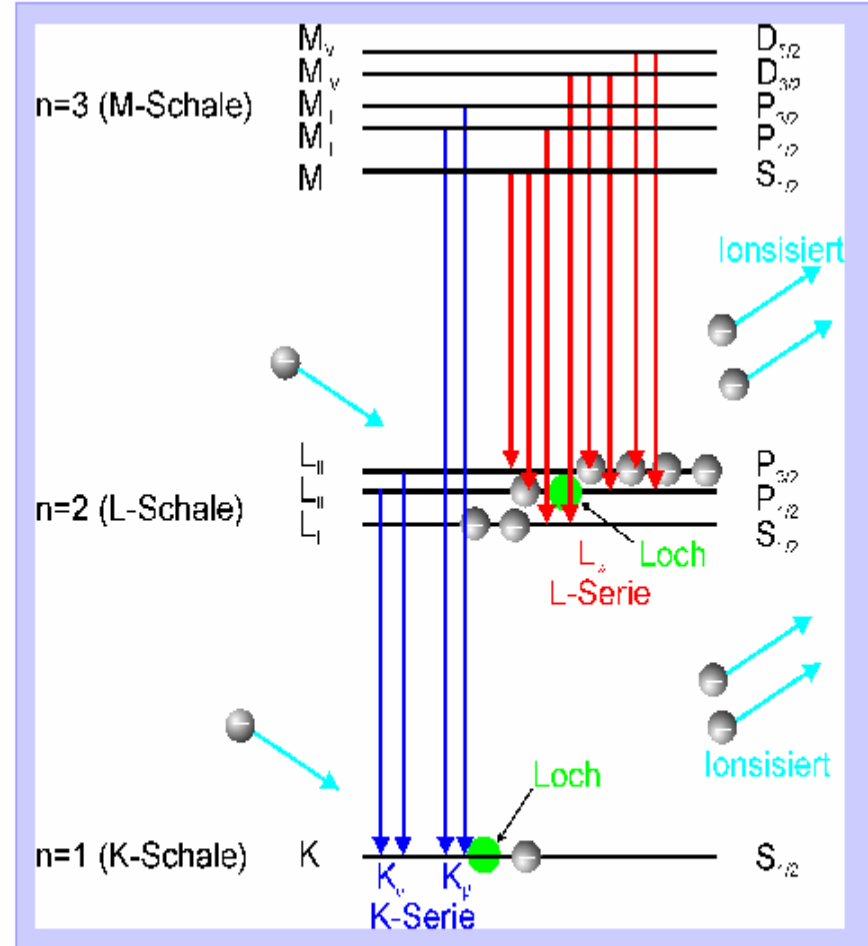
- ▶ Serien: K (n=1), L (n=2), M (n=3), N (n=4) ...
- ▶ Linien: α , β , γ , δ ...
- ▶ Feinaufspaltung: I, II, III, IV ...

Energie der Übergänge

$$\frac{1}{\lambda_{K\alpha}} \approx R_H (Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{L\alpha}} \approx R_H (Z-7,4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

Hier schirmen innere Elektronen die Kernladung um 1e bzw. 7.4e ab.

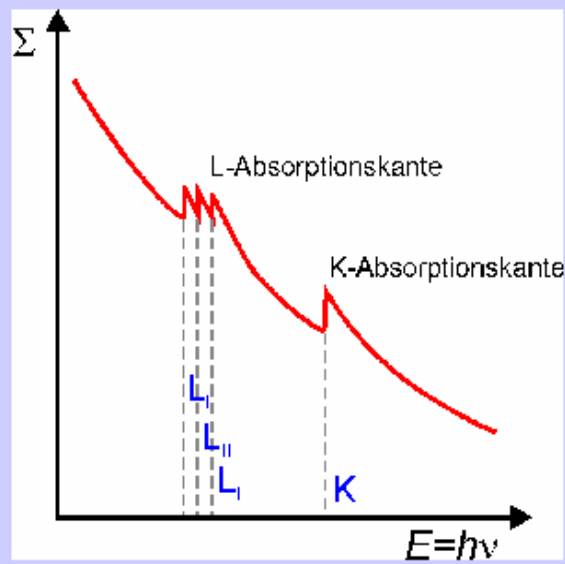


Die Ionisation der inneren Schale kann auch durch Röntgen-Strahlung erfolgen (**Photoionisation** , **Röntgen-Fluoreszenz**).



Röntgenabsorption

Die Abschwächung von Röntgen-Strahlen in Materie wird durch den **makroskopischen Wirkungsquerschnitt** oder **Absorptionskoeffizienten Σ** beschrieben. ➡



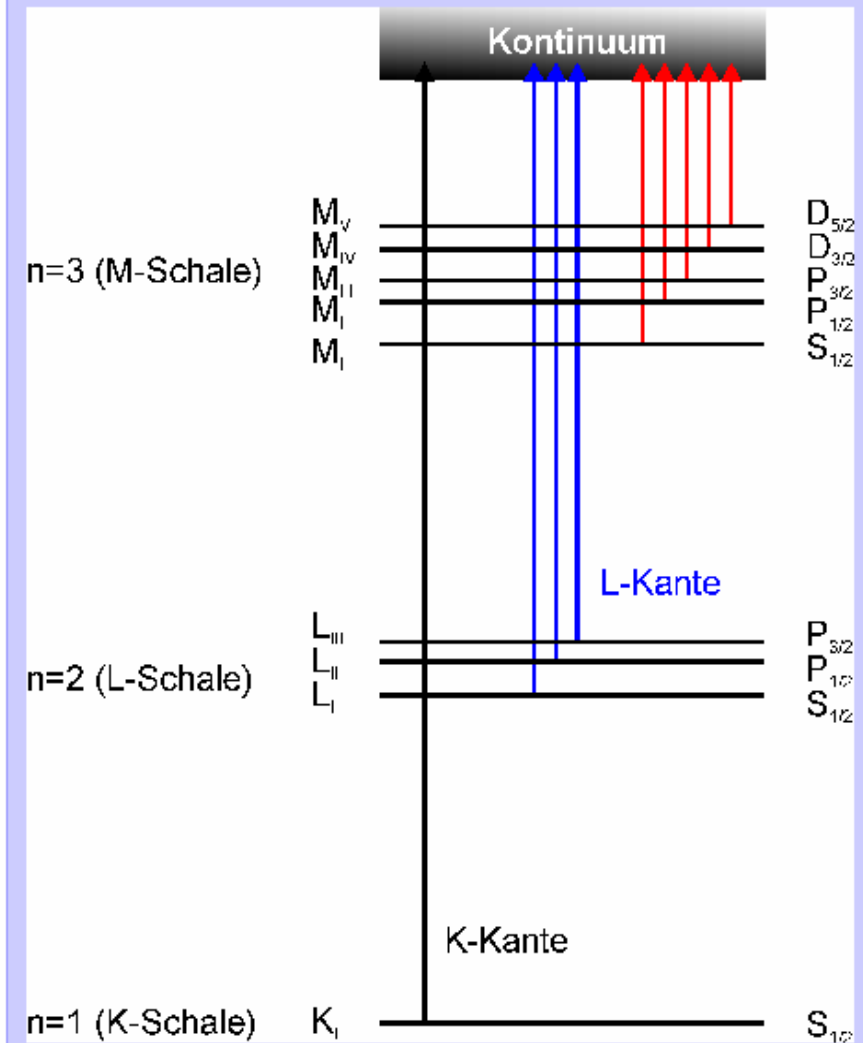
Wenn die Energie der Strahlung ausreicht, Elektronen aus einer tieferen Schale in das Kontinuum anzuregen, nimmt der Absorptionskoeffizient sprunghaft zu (s. rechts).

Man beobachtet:

- Sprunghafte Zunahme von Σ mit der Energie der Strahlung (**Absorptionskanten**)
- Dazwischen Abnahme mit $Z^{3-4}/(h\nu)^3$

Halbwertsdicke d ist der Weg, nach dem die Strahlung auf halbe Intensität gesunken ist. ➡

Anregungen ins Kontinuum

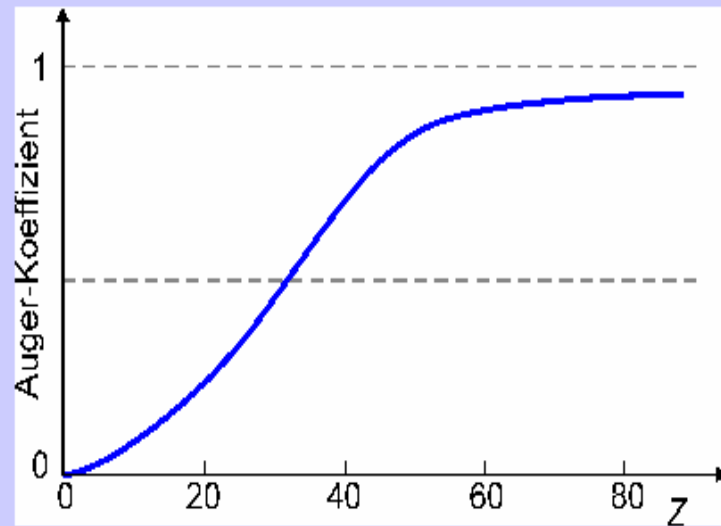




Auger-Elektronen

Nicht alle Atome mit einem fehlenden K- oder L-Elektron emittieren ein Röntgen-Quant beim Übergang in den Grundzustand.

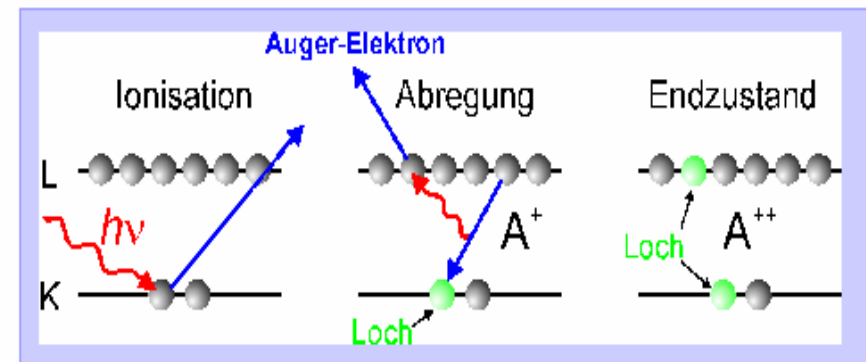
Auger-Koeffizient: Relative Zahl an Atome die mit Röntgen-Quant in Grundzustand übergehen.



Erklärung

Ein Teil der Atome geht über Emission eines Auger-Elektrons in den Grundzustand über:

- ▶ Ionisation innerer Schale durch Röntgen-Quant
- ▶ Übergang eines Elektrons aus höherer Schale unter Emission eines Quants
- ▶ Quant regt weiteres Elektron in einen Kontinuumzustand an (analog zum **atomaren Photoeffekt**)



Energie des Auger-Elektrons

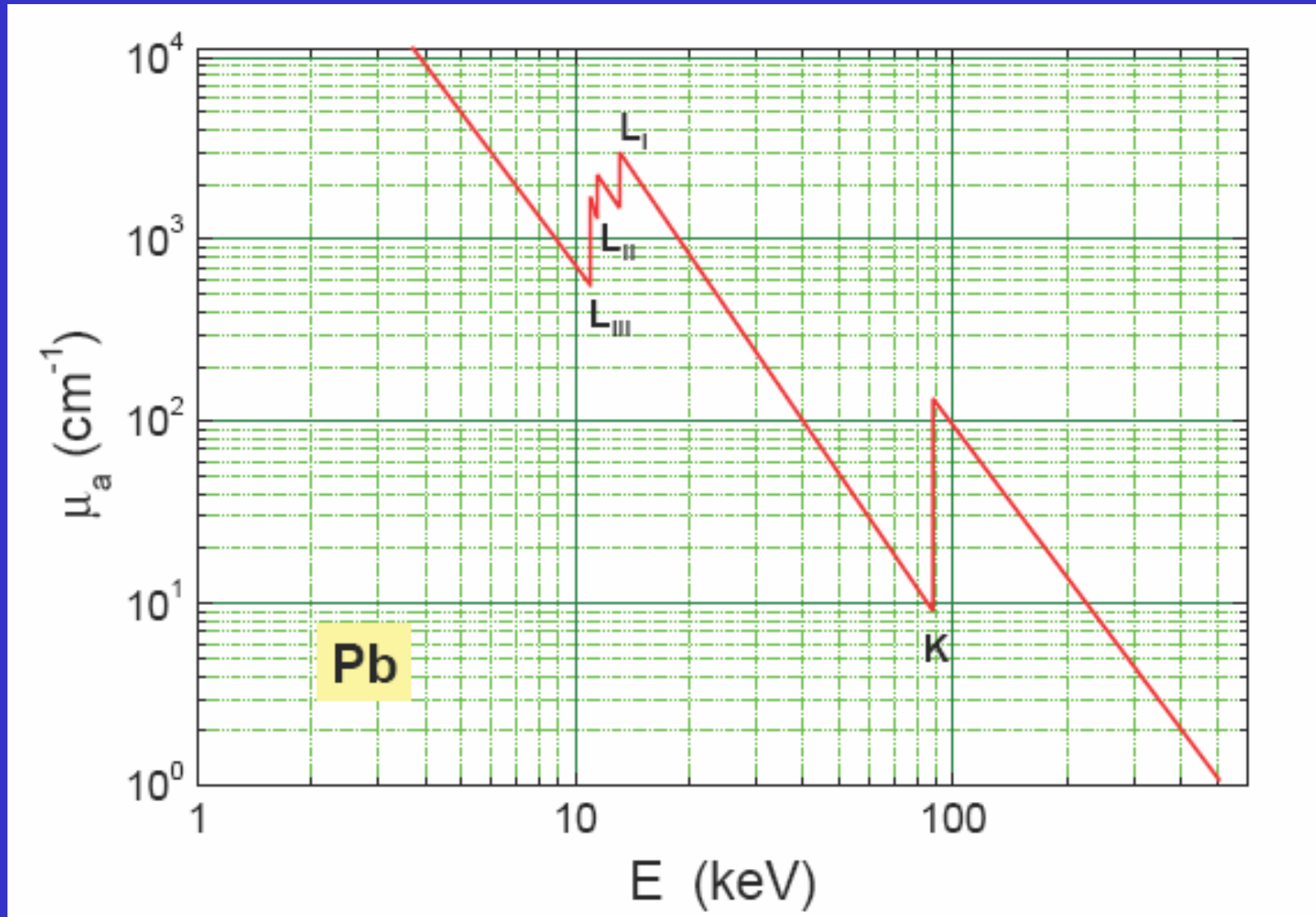
$$E_{\text{Auger}} = E_K - E_L - E_L$$

Inneres Photon Bindungsenergie
Auger-Elektron



Absorptionskoeff. in Blei

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x)$$





Röntgenabsorption

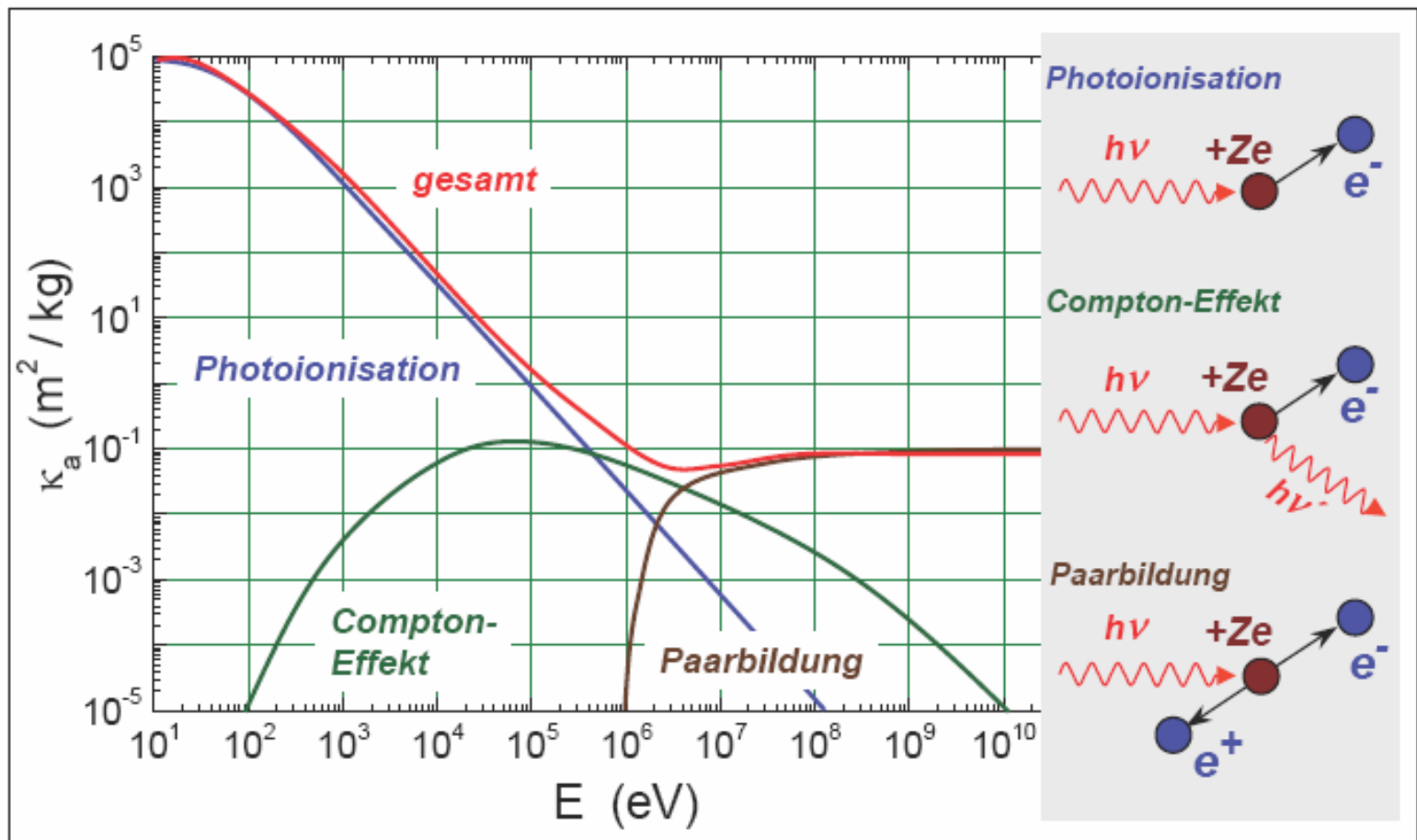


Abbildung 8.14: Qualitative Darstellung der einzelnen Beiträge (Photoionisation, Compton-Effekt, Paarbildung) zum Massenabsorptionskoeffizienten κ_a von Blei.



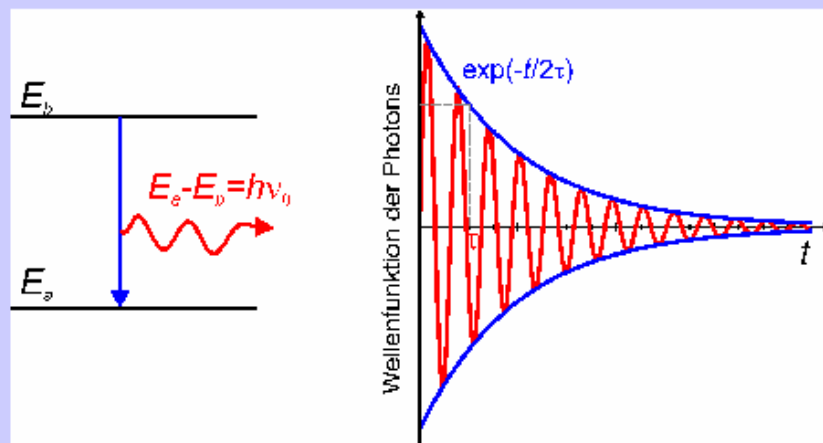
Linienformen

Angeregte Zustände zerfallen exponentiell in der charakteristischen Zeit τ (mittlere Lebensdauer)

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$$

Wellenfunktion des emittierten Quants:

$$\psi(t) = \psi_0 \left(e^{i\omega_0 t} e^{-t/2\tau} + CC \right)$$



Resultierende Spektrum aus Fourier-Transformierten:

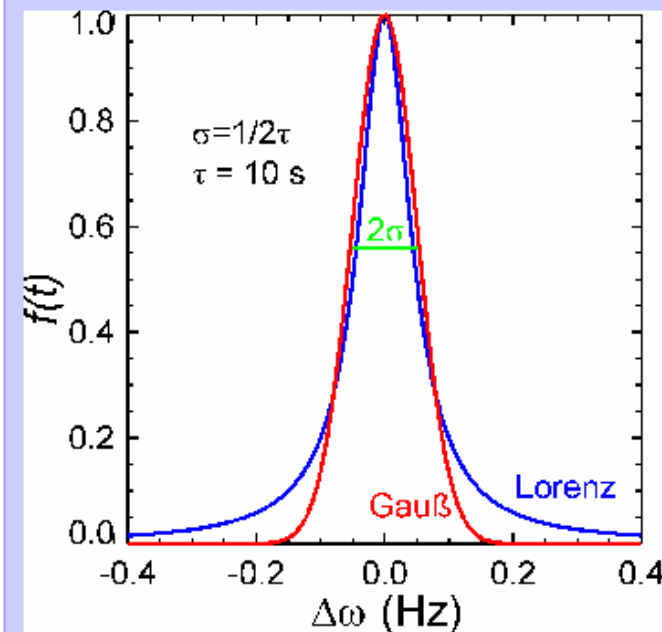
$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) e^{-i\omega t} dt$$

Integration ergibt:

$$C(\omega) = \frac{-\psi_0}{i(\omega_0 - \omega) - 1/2\tau} + \varepsilon$$

Die natürliche Linienform ist ein **Lorenz-Profil**

$$|C(\omega)|^2 = \frac{I}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/2\tau)^2}$$



Beobachtet man Linien die von einem heißen Gas emittiert werden, so bewirkt der Doppler-Effekt ein **Gauß-Profil**

$$|C(\omega)|^2 = I \exp\left(-(\omega_0 - \omega)^2 / 2\sigma^2\right)$$



Zusammenfassung Röntgenstrahlung

- Ein- und Mehrelektronenanregungen in Atomen können durch Absorption elektromagnetischer Strahlung oder durch inelastische Stoßprozesse erhalten werden.
- Werden Elektronen aus den inneren Schalen eines Atoms herausgelöst, spricht man von Innerschalenanregungen.
- Röntgenstrahlung entsteht
 1. beim Abbremsen von Elektronen mit Energien im keV-Bereich. Das resultierende Bremsspektrum ist kontinuierlich.
 2. durch Übergänge von Elektronen auf freie Plätze in inneren Schalen. Das daraus resultierende Spektrum ist ein Linienspektrum, das für jedes Atom charakteristisch ist (charakteristische Röntgenstrahlung).
- Die typische Wellenlänge von Röntgenstrahlung liegt zwischen etwa 100 und $0.1 \text{ \AA}$, was in etwa Frequenzen ν zwischen 10^{16} und 10^{19} Hz und Photonenenergien $h\nu$ zwischen 0.1 und 100 keV entspricht.
- Die Absorption von Röntgenstrahlung erfolgt über (i) die Photoionisation, (ii) die Compton-Streuung und (iii) die Paarbildung für $E_\gamma \geq 2m_0c^2 \simeq 1 \text{ MeV}$.
- Der Absorptionskoeffizient aufgrund der Photoionisation steigt als Funktion der Energie der absorbierten Photonen immer dann sprunghaft an, wenn die Photonenenergie gerade dazu ausreicht, ein Elektron aus einer inneren Schale ins Kontinuum anzuheben. Es entstehen für jedes Atom charakteristische Absorptionskanten.
- Das charakteristische Linienspektrum und die Absorptionskanten zeigen eine Feinstruktur, die durch die Feinstruktur der inneren Schalen L, M, N, ... verursacht wird.
- Röntgenstrahlung kann durch Beugung an einem Kristallgitter oder durch Filterung mit dünnen Metallfolien monochromatisiert werden.



Zum Mitnehmen

Röntgenstrahlung (durch Beschuss einer Elektrode mit Elektronen) zeigt Linien aus der diskreten Energieniveaus und ein kontinuierliches Spektrum durch Bremsstrahlung.