

# Atome & Kerne

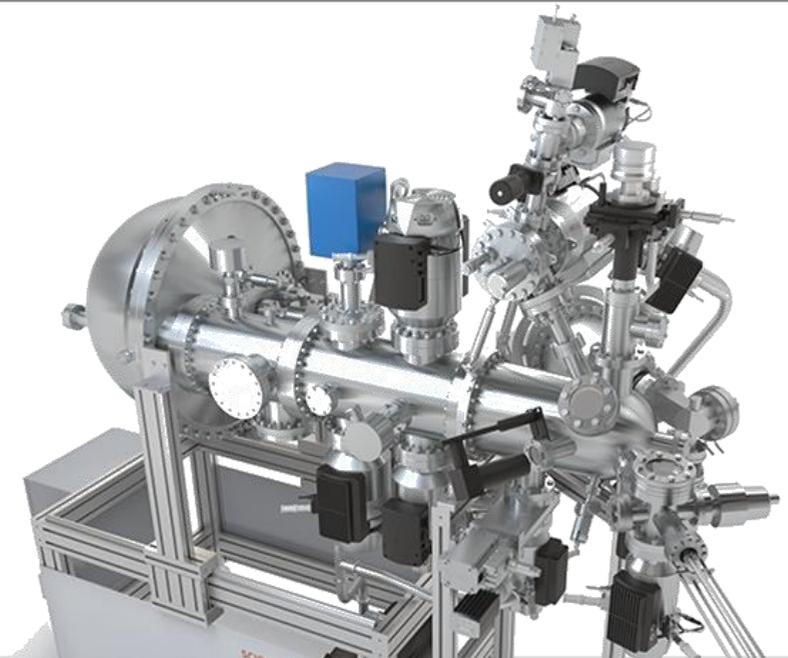
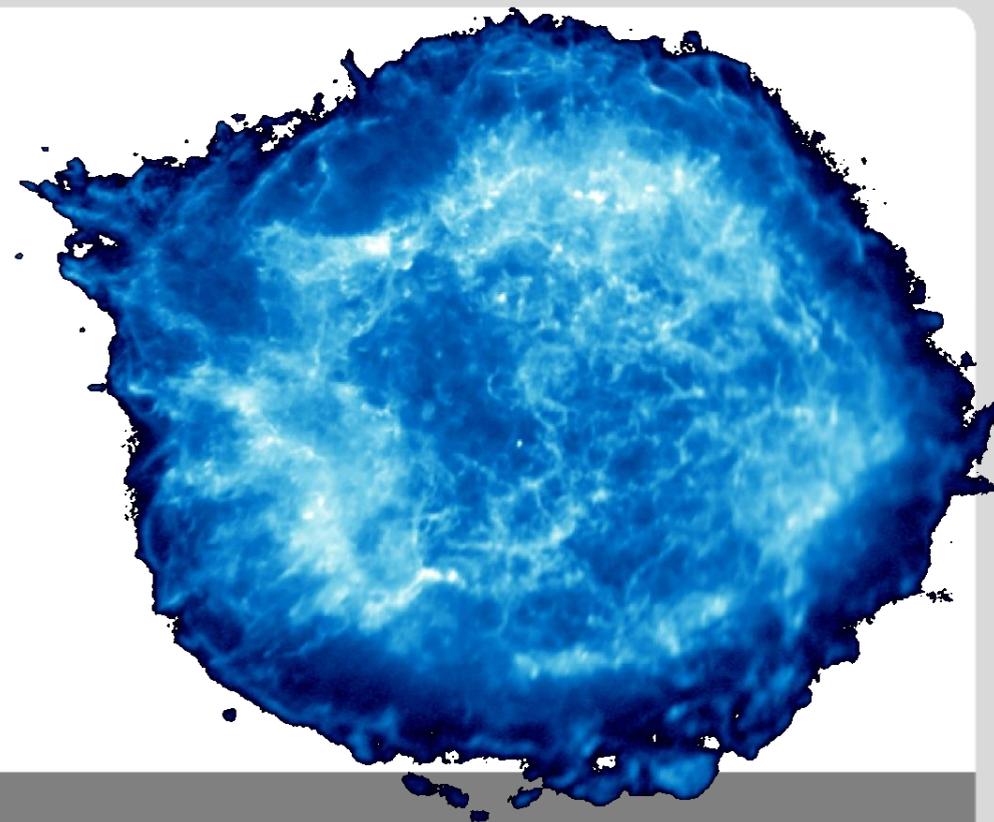
Sommersemester 2019

Vorlesung # 16, 18.06.19

Guido Drexlin, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

## Atome & Strahlungsprozesse

- optische Übergänge
- Röntgenstrahlung:
  - Fluoreszenz & Bremsstrahlung
  - Röntgen-Absorption & CT-Scans
- strahlungslose Prozesse:
  - Auger-Elektron-Prozesse



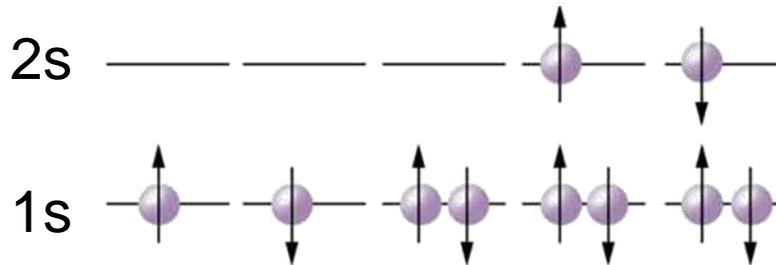
# Mehrelektronensysteme



## ■ He-Atom: abgeleitetes Pauli-Prinzip und Singulett/Triplett-System

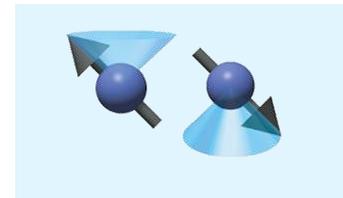
### ■ Pauli-Prinzip für Fermionen:

Wellenfunktion eines Quanten-Systems ist **antisymmetrisch** bei Vertauschung von 2 Fermionen



### ■ He-Atom: Singulett / Triplett

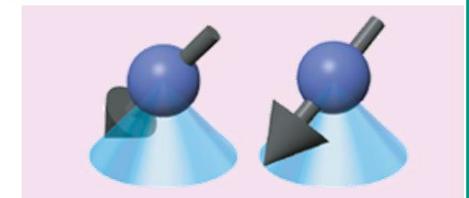
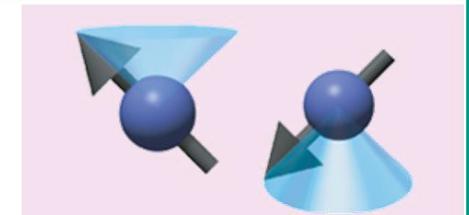
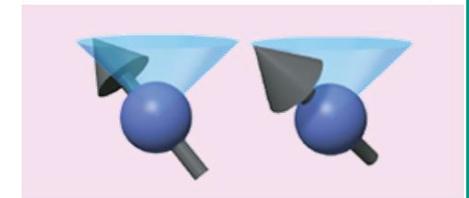
Singulett  $S = 0$



$$\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

anti-symmetrische Spin-Wellenfunktion

Triplett  $S = 1$



symmetrische Spin-Wellenfunktion

$$|\uparrow\uparrow\rangle \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad |\downarrow\downarrow\rangle$$

# Drehimpulskopplung & Aufbauprinzip



## ■ Mehrelektronensysteme: LS und jj-Kopplung sowie Aufbau-Prinzip

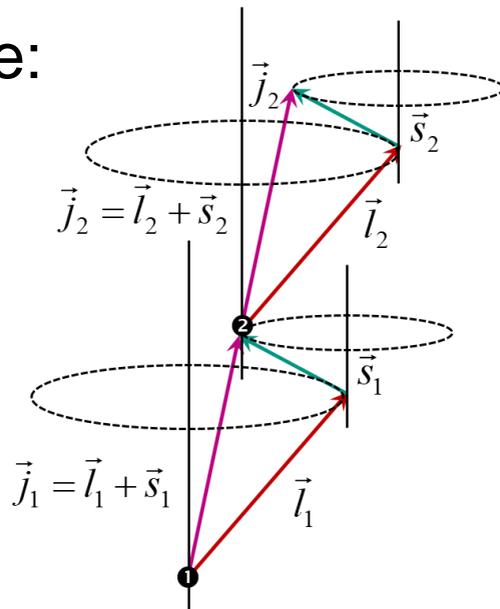
### ■ LS-Kopplung & jj-Kopplung:

- leichte Atome:  
LS Kopplung  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$$

- schwere Atome:  
jj-Kopplung

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{j}_i$$



### ■ Hund'sche Regeln:

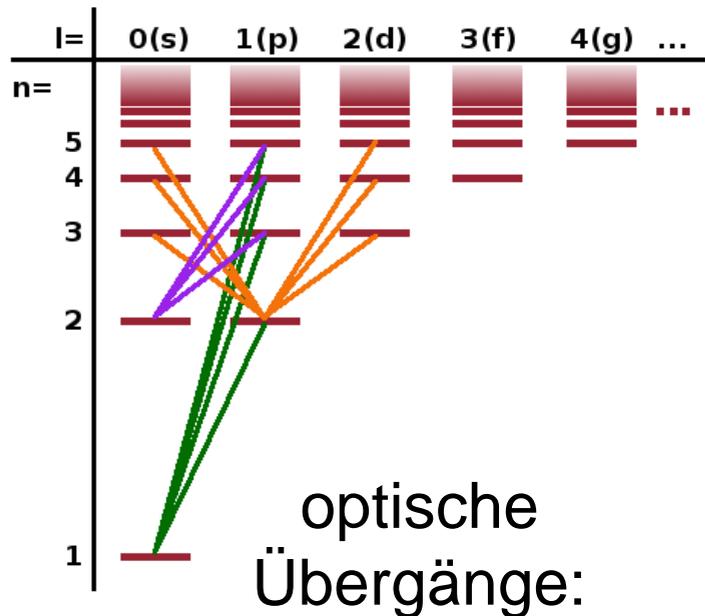
- #1: abgeschlossene Schalen mit  $L = 0$ ,  $S = 0$  (Pauli-Prinzip)
- #2: Maximierung des Spins soweit Pauli-erlaubt

### ■ Aufbau-Prinzip der Hülle:

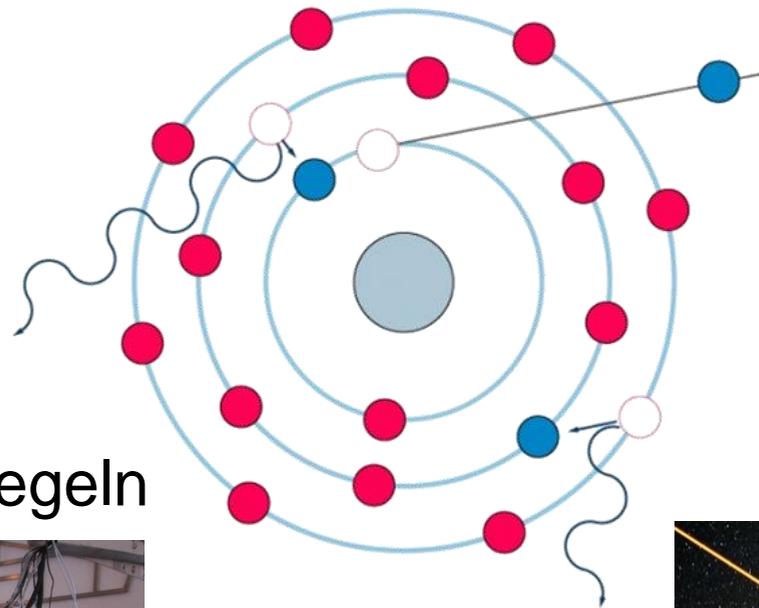
~~1 s~~ ~~2s 2p~~ ~~3s 3p 3d~~ ~~4s 4p 4d 4f~~ ~~5s 5p 5d 5f 5g~~ ~~6s 6p 6d 6f 6g 6h~~

**Madelung:** Orbitale mit kleinerem  $(n+l)$  Wert werden vor Orbitalen mit größerem Wert gefüllt

# 9. Atome und Strahlungsprozesse



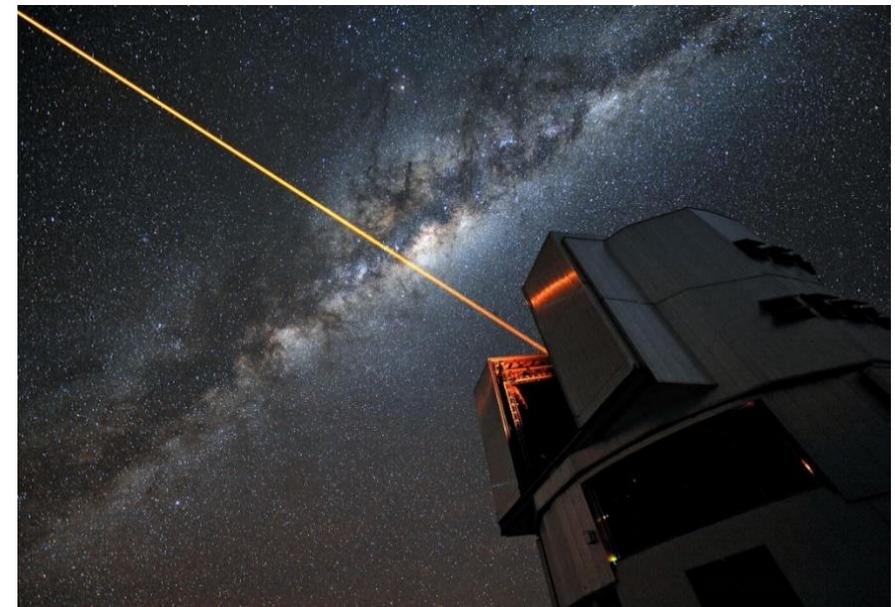
Symmetrien & Auswahlregeln



Röntgenstrahlung



strahlungslose Prozesse



LASER

# 9.1 optische Übergänge: Symmetrien & Auswahlregeln

## Auswahlregeln & Symmetrien:

- Parameter für optische Übergänge mit der Änderung von

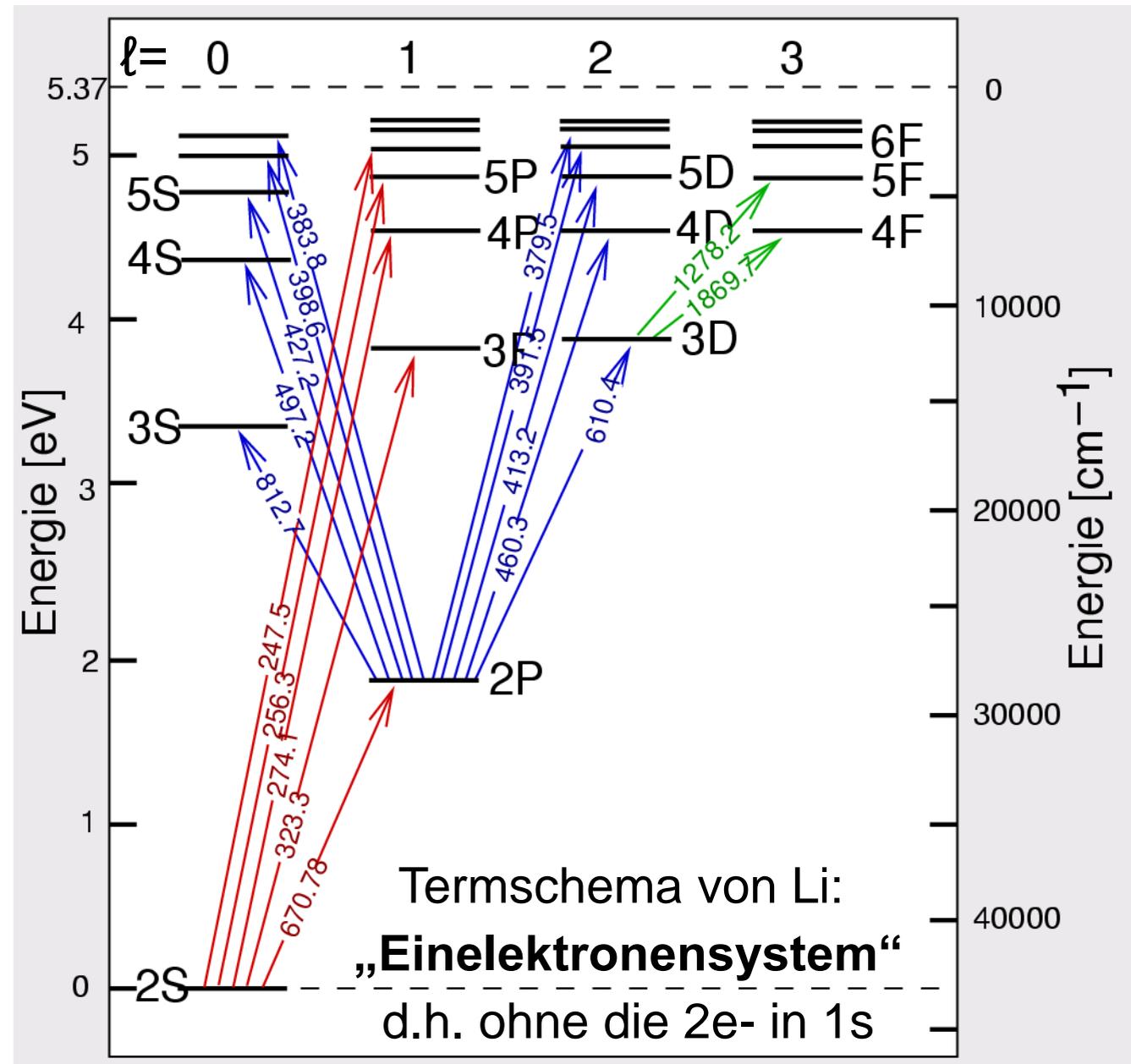
- Bindungsenergie

$$\Delta E = \hbar\omega \text{ (} h\nu \text{)}$$

- Drehimpuls ( $\Delta\ell$ )

- magnetische Quantenzahl ( $\Delta m_\ell$ )

- Parität ( $\Delta P$ )  
multiplikativ



Q: Uni Freiburg

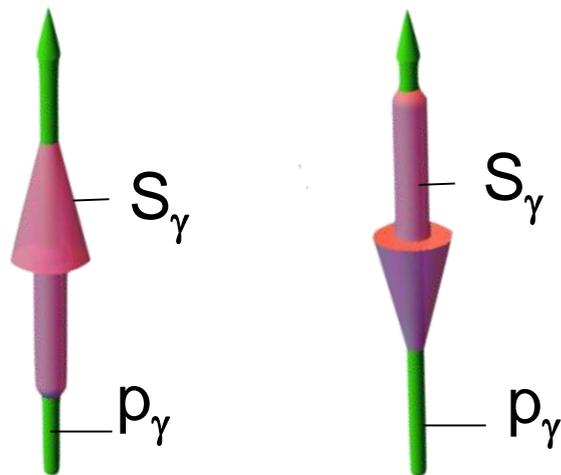
# Elektrischer Dipolübergang

## ■ Übergänge zwischen Orbitalen

- wichtigster Übergang: **elektrische Dipolstrahlung**
- **Auswahlregeln** für Dipolübergänge

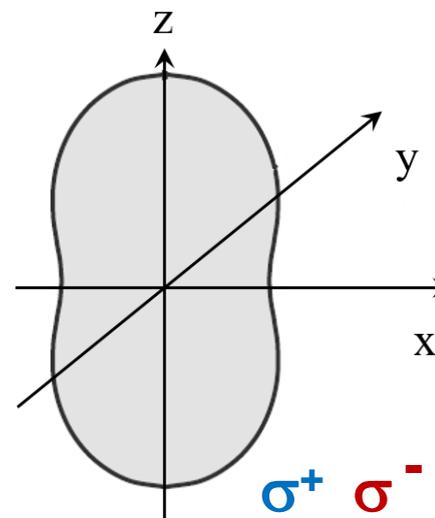
Drehimpuls  $\Delta l = \pm 1$   $\Delta m = 0, \pm 1$  magnet. Zahl

Photon mit  $S = 1$

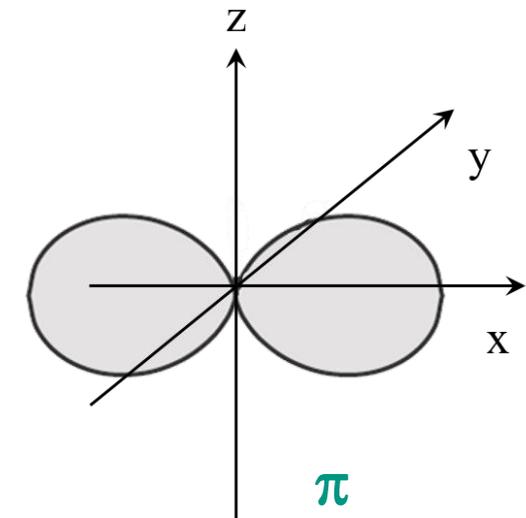


Zirkular- & Linear- Polarisation

$\Delta m_\ell = \pm 1$



$\Delta m_\ell = 0$



# Multipol-Übergänge

## ■ Elektrische & Magnetische Multipol-Übergänge:

- Strahlung des Übergangs wird charakterisiert nach

**E $\lambda$** : **elektrisch** ( $\Rightarrow$  schwingende elektrische **Ladung** erzeugt Photon)

**M $\lambda$** : **magnetisch** ( $\Rightarrow$  elmagnet. Ww. mit **magnetischem Moment** des e-)

**$\lambda$** : **Multipolarität** ( $\Rightarrow$  # der weggetragenen Drehimpulseinheiten  $\hbar$ )

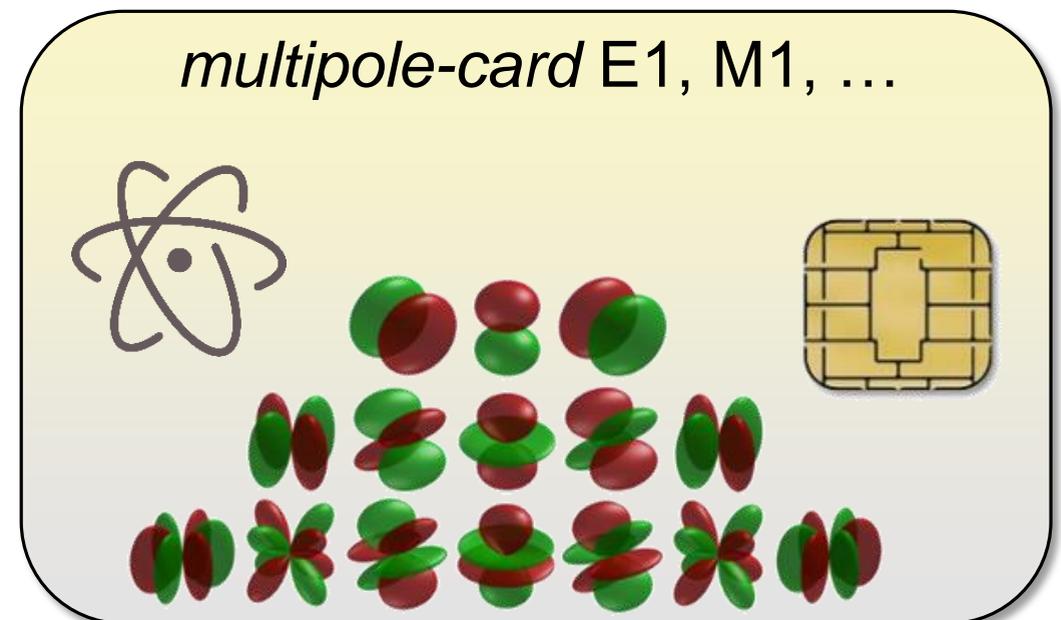
mit  $\lambda = 1, 2, 3, 4, \dots$

(kein Monopol mit  $\lambda = 0$ !)

- **entscheidet über die  
Änderung der Parität beim  
Übergang**

**E1: elektrischer Dipolübergang**

- dominant in opt. Übergängen



# Multipol-Übergänge: Auswahlregeln

## ■ Elektrische & Magnetische Multipolübergänge im Atom:

### Elektrische Multipole E1, E2, ...

#### - Parität

$$P(E\lambda) = P_i \cdot P_f = (-1)^\lambda$$

#### - Dipol E1

$$P_i = -P_f$$

$$\Delta J = \pm 1, 0 \quad (J = 0 \leftrightarrow 0)$$

$$\Delta M_J = \pm 1, 0$$

#### - Quadrupol E2

$$P_i = P_f$$

$$\Delta J = \pm 2, \pm 1, 0 \quad (J = 0 \leftrightarrow 0, 1/2 \leftrightarrow 1/2)$$

$$\Delta M_J = \pm 2, \pm 1, 0$$

### Magnetische Multipole M1, M2, ...

#### - Parität

$$P(M\lambda) = P_i \cdot P_f = (-1)^{\lambda+1}$$

#### - Dipol M1

$$P_i = +P_f$$

$$\Delta J = \pm 1, 0 \quad (J = 0 \leftrightarrow 0)$$

$$\Delta M_J = \pm 1, 0$$

#### - Quadrupol M2

$$P_i = -P_f$$

$$\Delta J = \pm 2, \pm 1, 0 \quad (J = 0 \leftrightarrow 0, 1/2 \leftrightarrow 1/2)$$

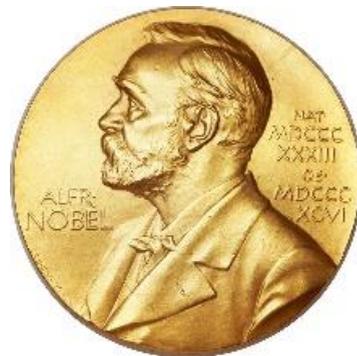
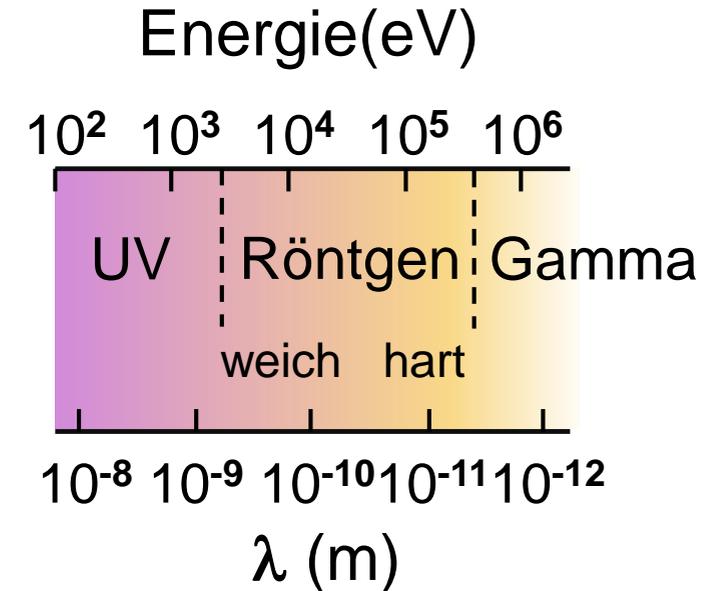
$$\Delta M_J = \pm 2, \pm 1, 0$$

# 9.2 Röntgenstrahlung

- **Röntgenphotonen:**  $E_\gamma = \sim 1 \text{ keV} - \text{einige } 10^2 \text{ keV}$   
 $\lambda = \text{sub-nm} - \text{einige } \mu\text{m}$

### - Erzeugungsmechanismen:

- a) Bremsstrahlung (kontinuierlich)
- b) Röntgenfluoreszenz (diskret)
- c) thermisch (kontinuierlich, max. bis 1-2 keV)
- d) Synchrotronstrahlung (kontinuierlich)



1. Nobelpreis  
1901



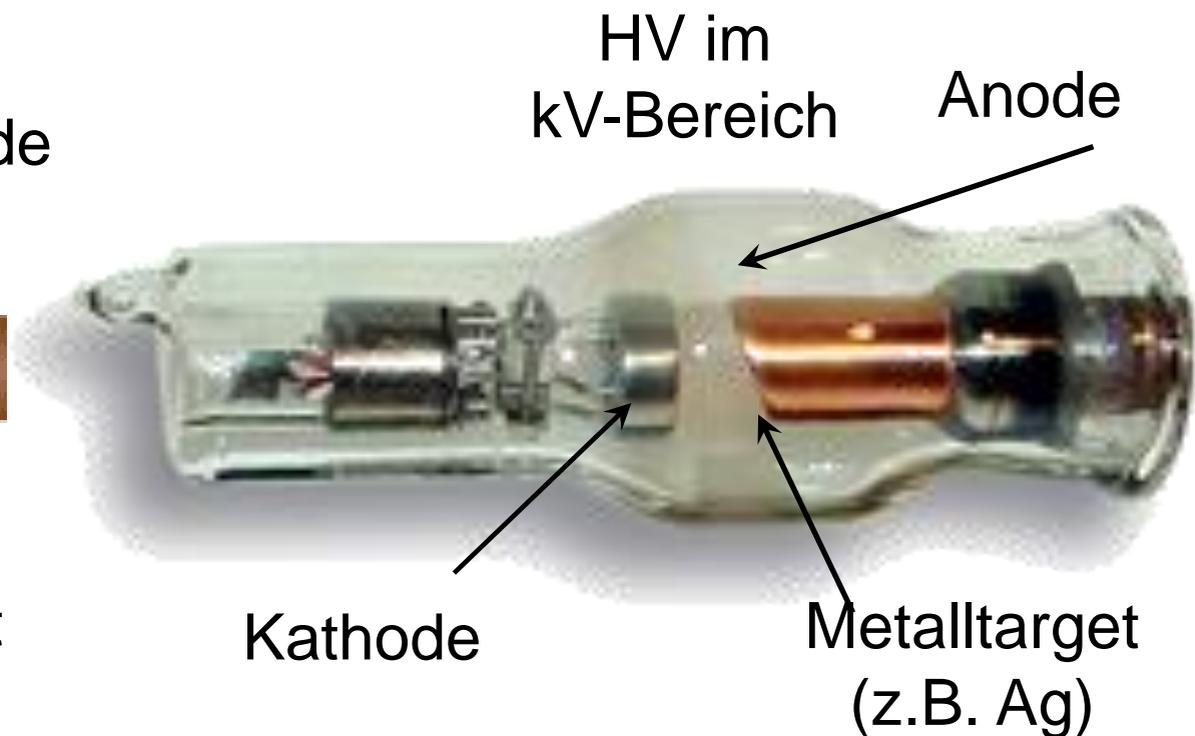
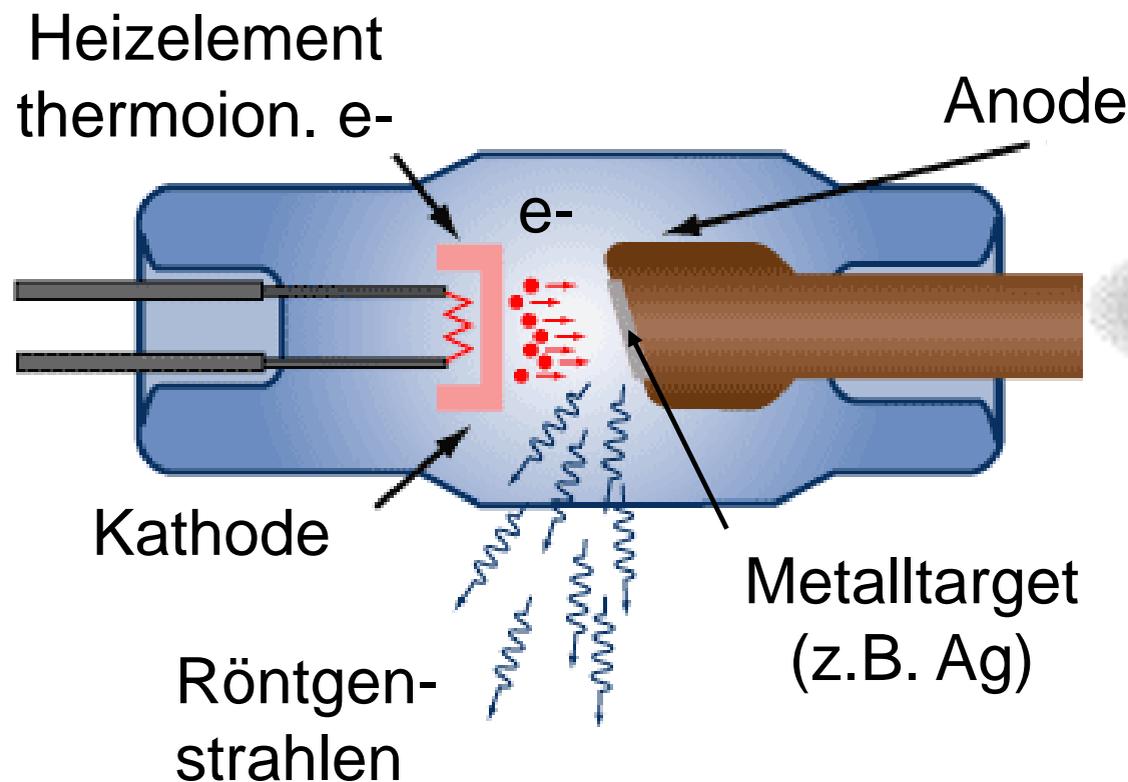
Wilhelm Conrad  
Röntgen



Korona in Röntgenstrahlen

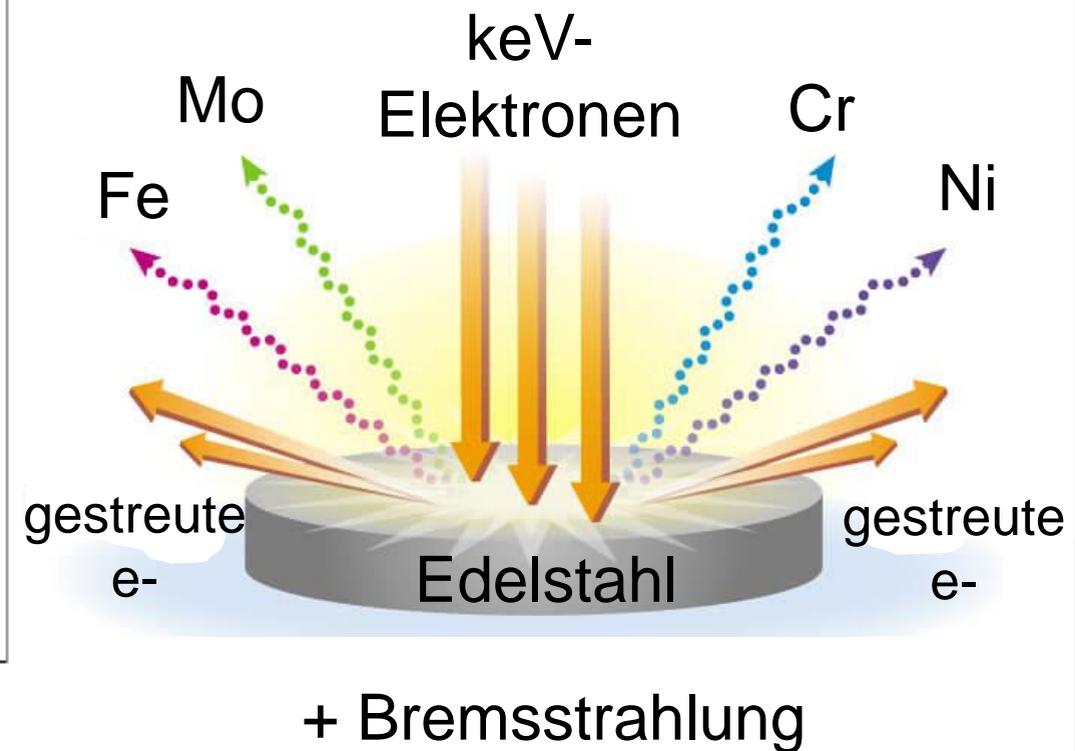
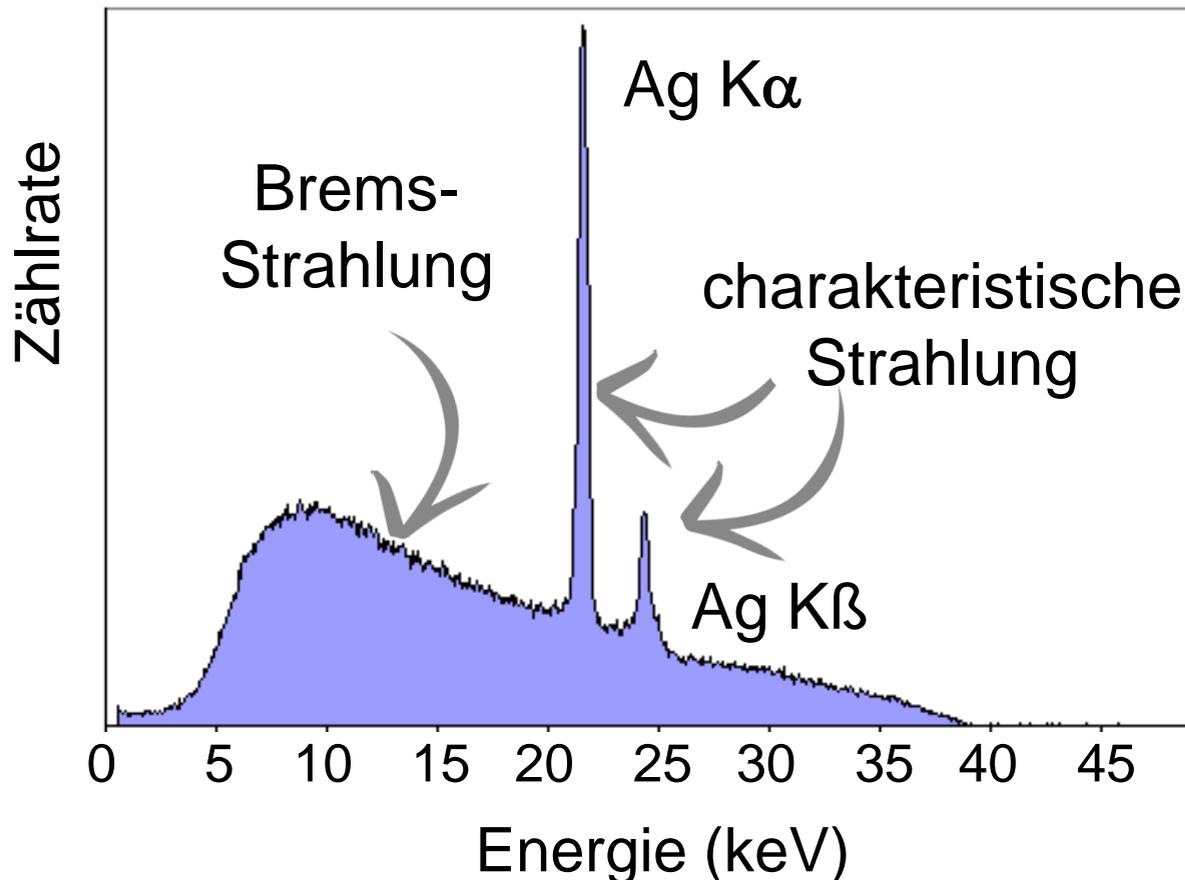
# Klassische Erzeugung: Röntgenröhre

- **Röntgenstrahlung** über beschleunigte Elektronen
  - Beschleunigungsspannungen bis **500 kV**
  - Betrieb von Röntgengeräten unterliegt der Röntgen-Schutzverordnung (RöV), Gerät genehmigungspflichtig



# Klassische Erzeugung: Röntgenröhre

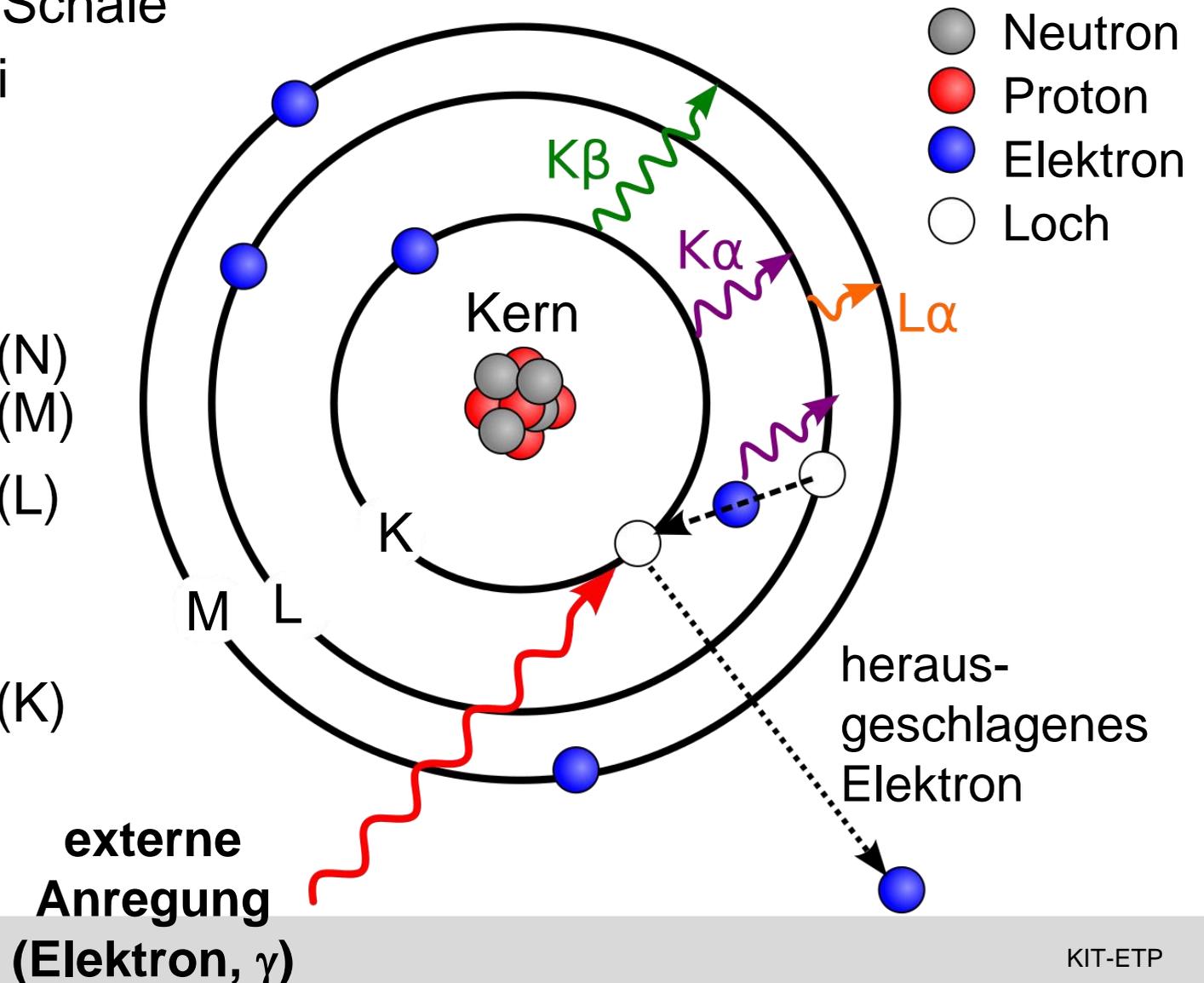
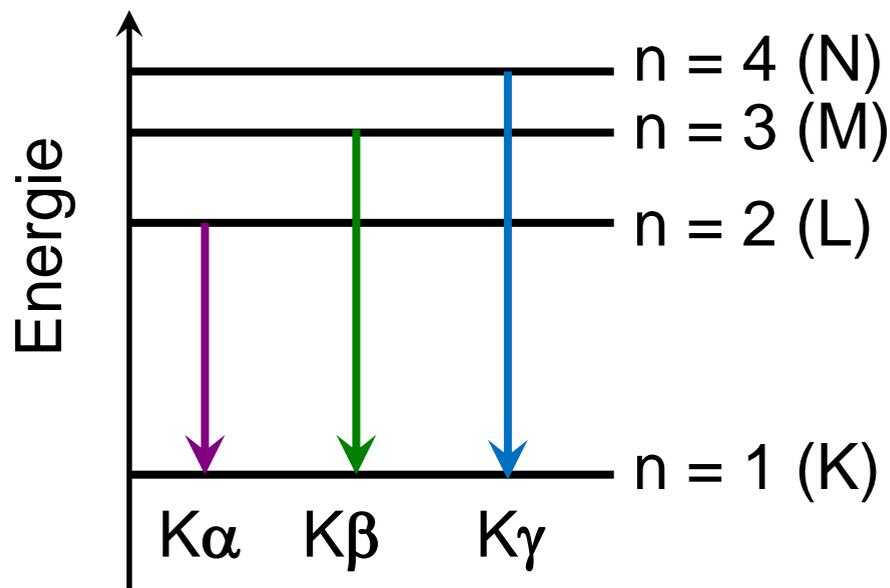
- Röntgenstrahlung durch Elektron-Wechselwirkungen im Target
  - **charakteristische Röntgenstrahlung**  
monoenergetische Linien, elementspezifisch
  - **Bremsstrahlung**: kontinuierliches Energie-Spektrum



# Charakteristische Röntgenstrahlung

- Herausschlagen eines tief gebundenen Elektrons (durch Elektron oder Photon) einer inneren Schale erzeugt eine **Vakanz** (z.B. Loch in K-Schale)

- Elektron aus höherer Schale füllt Vakanz auf, dabei  
⇒ **charakteristische Röntgenstrahlung**



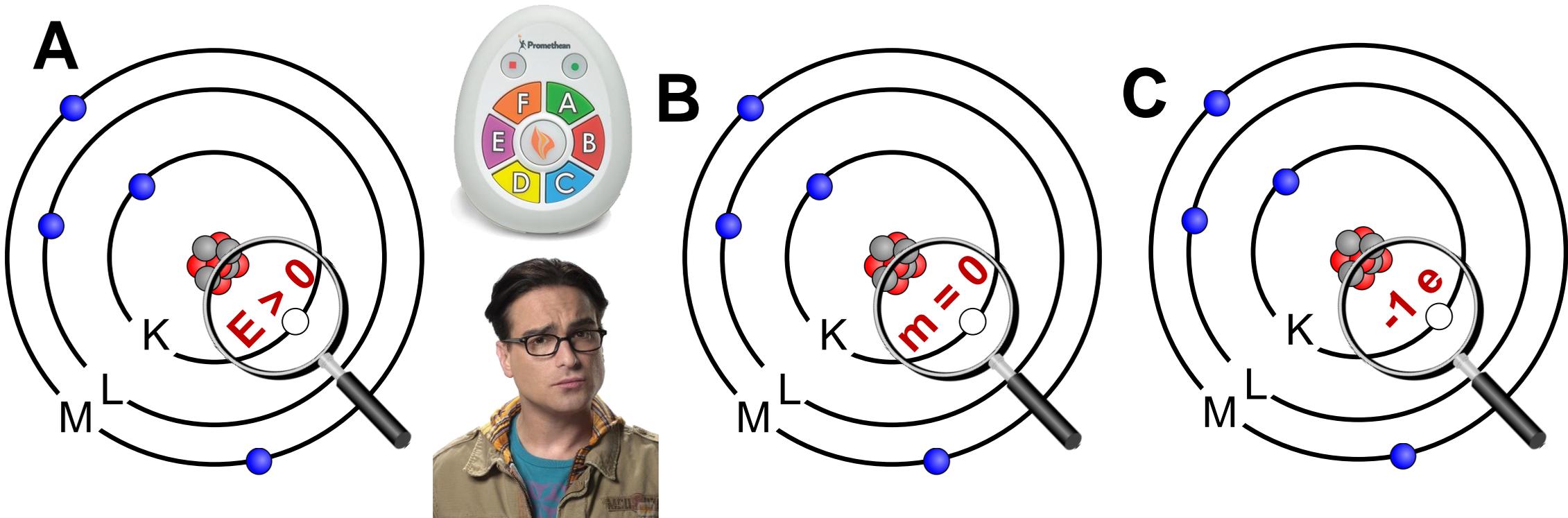
# Fun with Facts: Löcher in der Hülle

## ■ Welche Energie hat ein Atom mit einer Vakanz? Seine Energie...

- A) ...hat **zugenommen** (Atom ist angeregt!)
- B) ...ist **gleich geblieben** (Vakanz = Leerstelle!)
- C) ...hat **abgenommen** (Leerstelle = e- fehlt!)

SHELDON COOPER  
Cyt *presents* CyD  
FUN WITH FLAGS

Facts



**A**  $E > 0$

**B**  $m = 0$

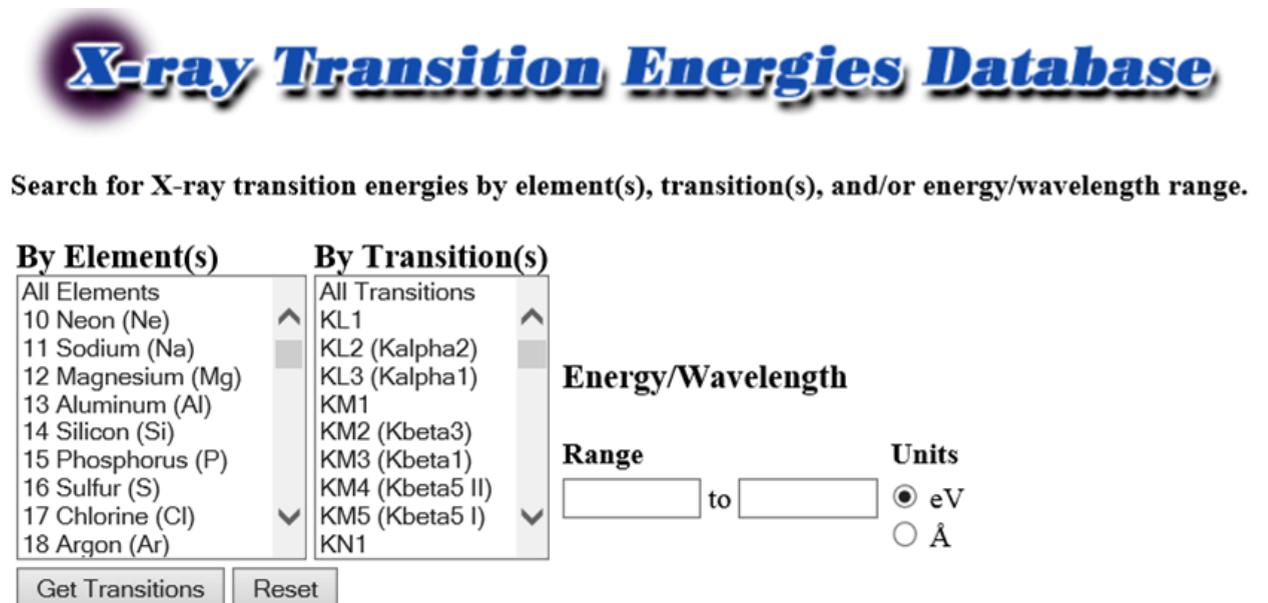
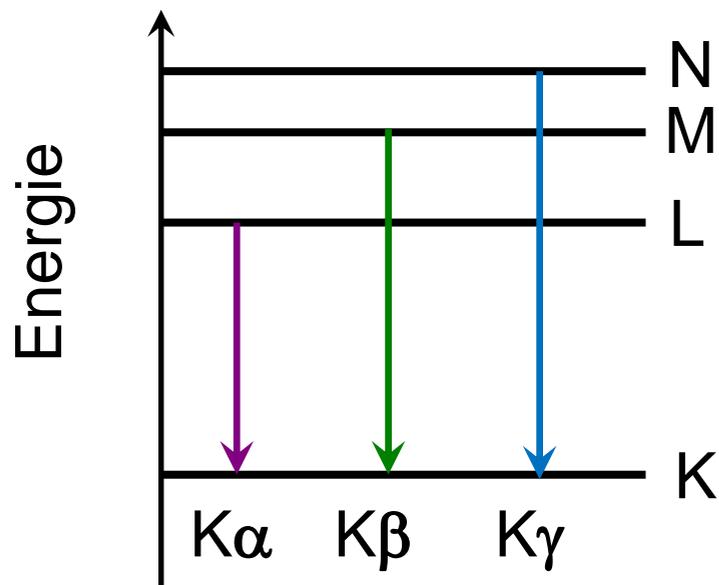
**C**  $-1 e$

Promethium

K L M

# Charakteristische Röntgenstrahlung

- Energie der charakteristischen Röntgenstrahlung (1-100 keV) entspricht der Energiedifferenz der Schalen (elementspezifisch)
  - Nomenklatur der Schalen: **K, L, M, N, O, P, ...** ( $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$ )
  - Index  $\alpha$ :  $\Delta n = 1$  (d.h. Übergang  $L \rightarrow K, M \rightarrow L, \dots$ )
  - $\beta$ :  $\Delta n = 2$  (d.h. Übergang  $M \rightarrow K, N \rightarrow L, \dots$ )
  - $\gamma$ :  $\Delta n = 3$  (d.h. Übergang  $N \rightarrow K, O \rightarrow L, \dots$ )
  - Linie **K- $\alpha$** : Übergang  $2p \rightarrow 1s$  (dabei beobachtet man 2 Linien!)



**X-ray Transition Energies Database**

Search for X-ray transition energies by element(s), transition(s), and/or energy/wavelength range.

By Element(s)	By Transition(s)
All Elements	All Transitions
10 Neon (Ne)	KL1
11 Sodium (Na)	KL2 (Kalpha2)
12 Magnesium (Mg)	KL3 (Kalpha1)
13 Aluminum (Al)	KM1
14 Silicon (Si)	KM2 (Kbeta3)
15 Phosphorus (P)	KM3 (Kbeta1)
16 Sulfur (S)	KM4 (Kbeta5 II)
17 Chlorine (Cl)	KM5 (Kbeta5 I)
18 Argon (Ar)	KN1

Energy/Wavelength

Range  to

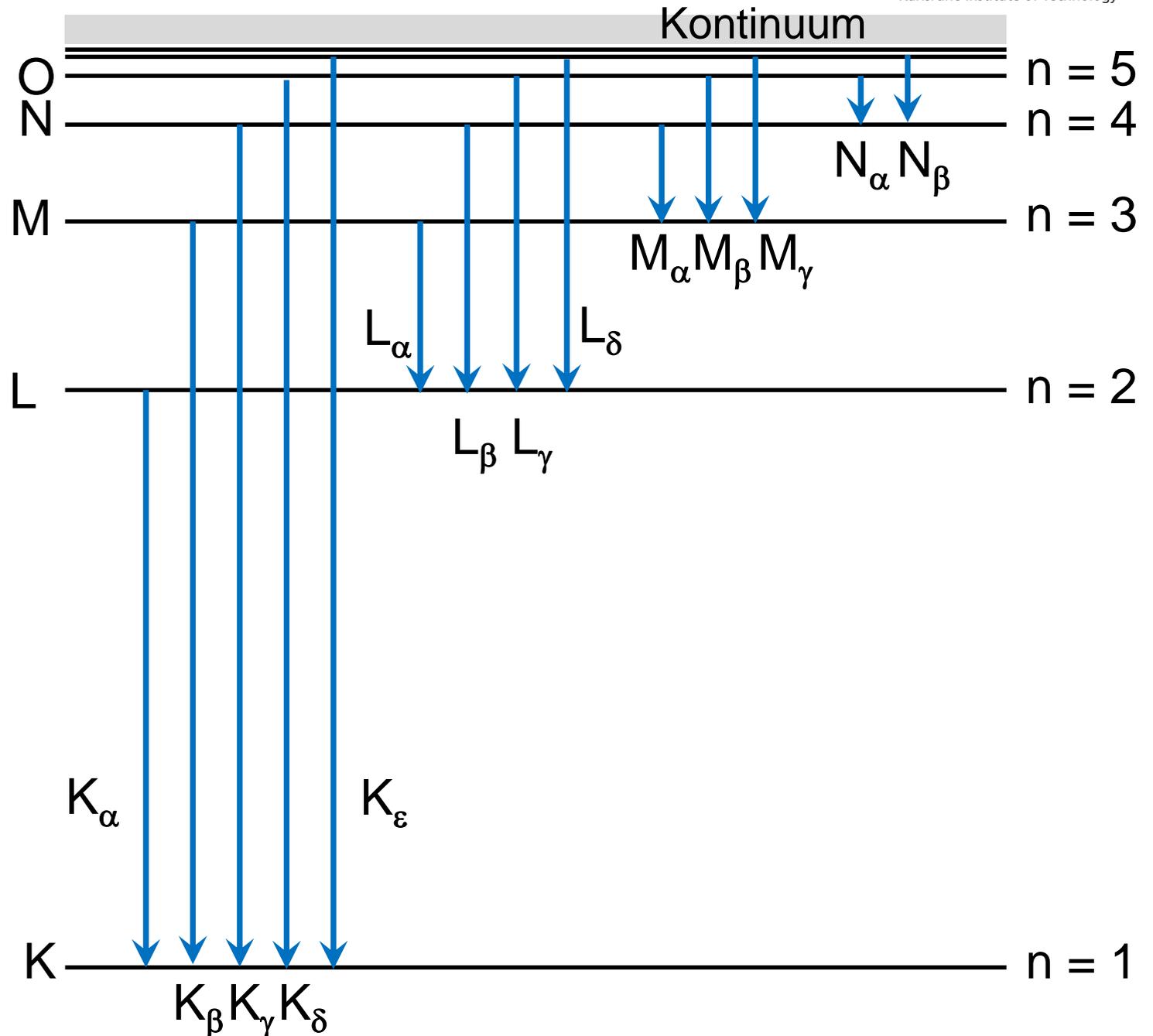
Units  eV  Å

Get Transitions Reset

# Charakteristische Röntgenstrahlung

- **Termschema** der charakteristischen Röntgenstrahlung – Darstellung der beobachteten K, L, M, N, ... Serien

- Analyse der Energien der Röntgen-Linien zeigt die großen Abschirmeffekte für Kern-Ladung  $Z$   
 ⇒ **effektive Ladung**  
 $Z_{\text{eff}}$

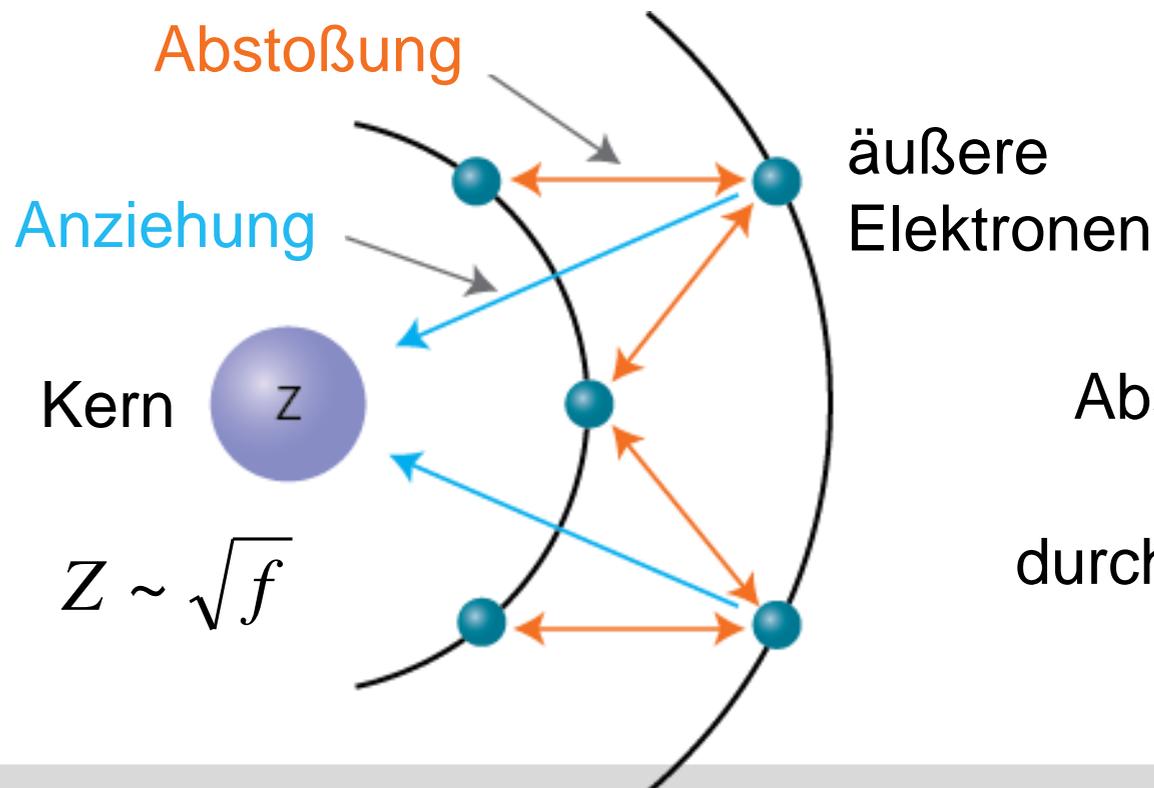


# Moseleysches Gesetz: $Z_{\text{eff}}$

- **Empirische Relation** zur Abschätzung der Energien der  $K_{\alpha}$ -Linien für verschiedene Elemente mit Ordnungszahl  $Z$  (Bohr-Sommerfeld-Modell)

**Frequenz**  $f \sim Z_{\text{eff}}^2 \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

$Z_{\text{eff}}$  = effektive Kernladungszahl  
(Abschirmung via innere e-)



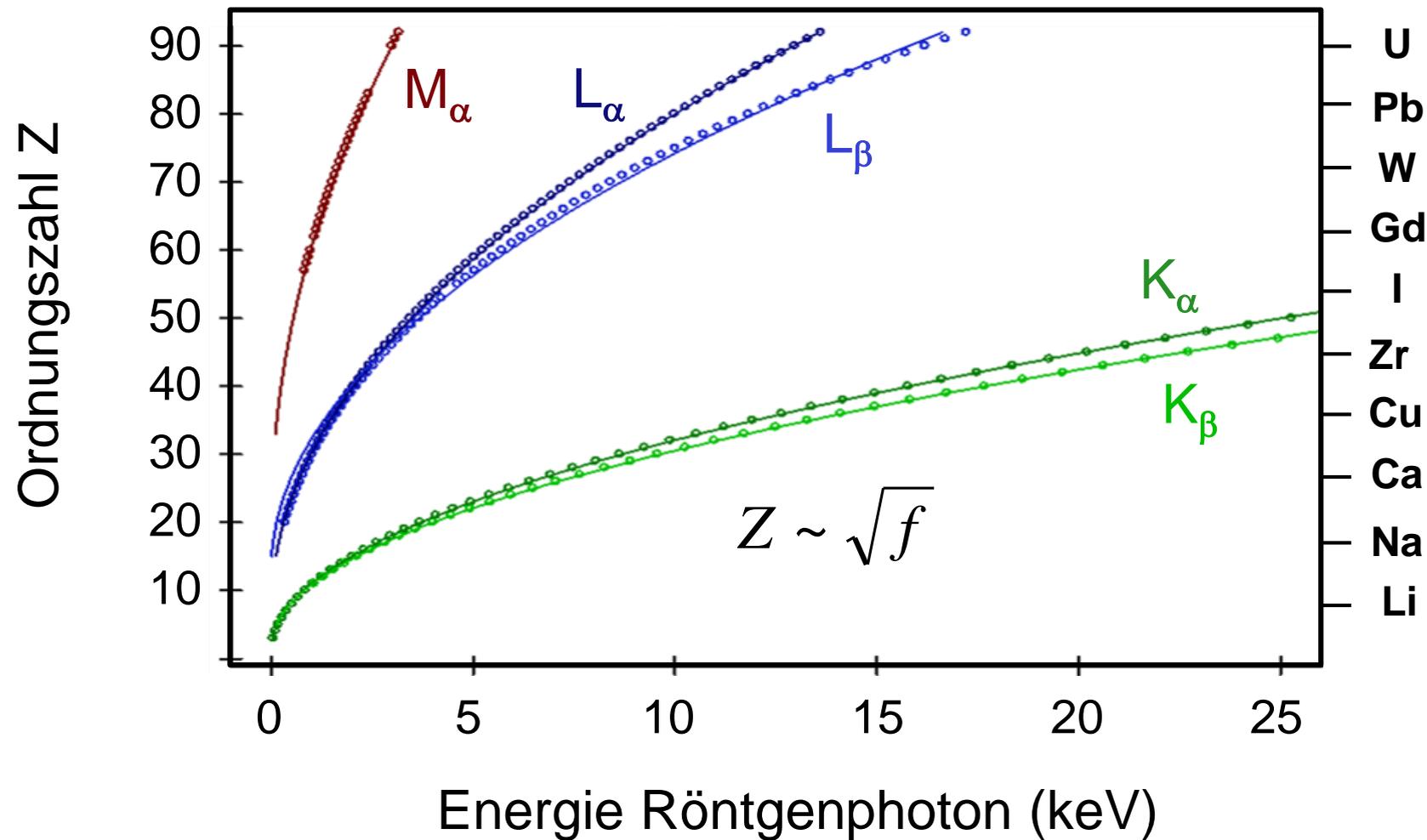
Abschirmung der  
Kernladung  
durch Elektronenhülle  
 $Z \Rightarrow Z_{\text{eff}}$



Henry  
Moseley

# Moseleysches Gesetz: $Z_{\text{eff}}$

- **Empirische Relation** zur Abschätzung der Energien der  $K_{\alpha}$ -Linien für verschiedene Elemente mit Ordnungszahl  $Z$  (Bohr-Sommerfeld-Modell)

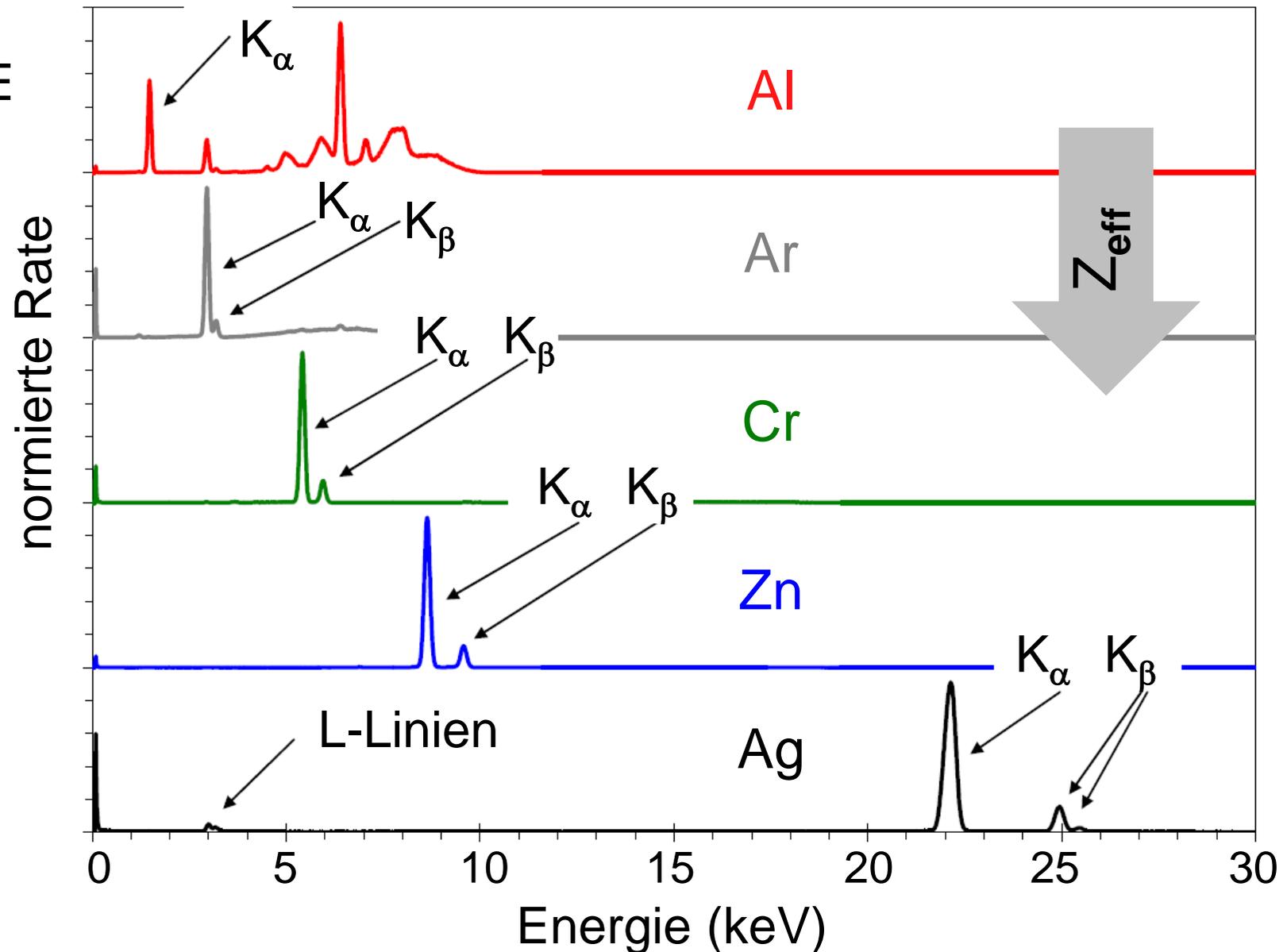


## ■ Röntgenfluoreszenzlinien wichtig zur Charakterisierung von Detektoren

- Energieauflösung  $\Delta E$
- Linearität der keV-Energieskala



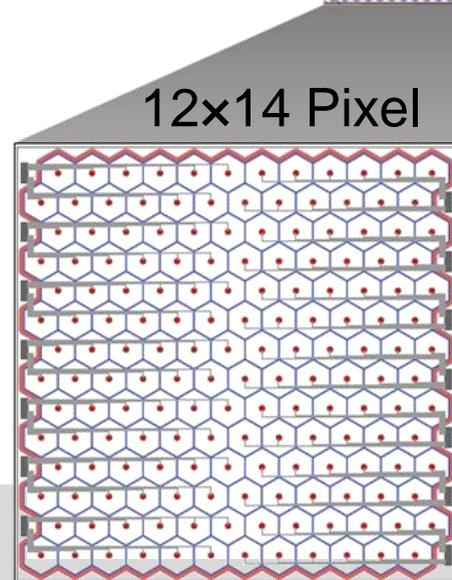
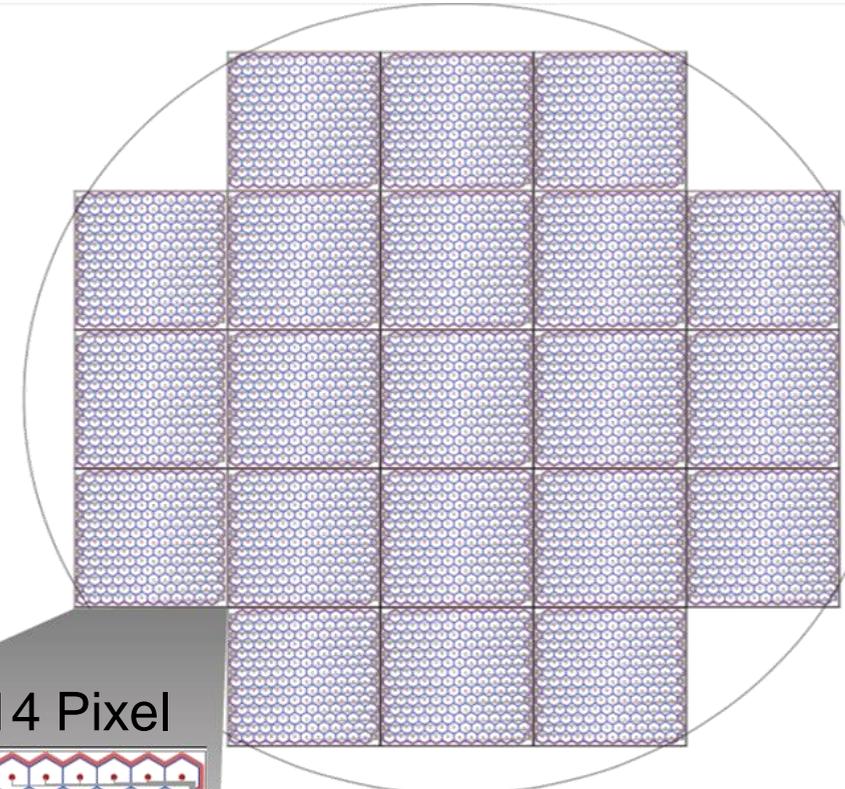
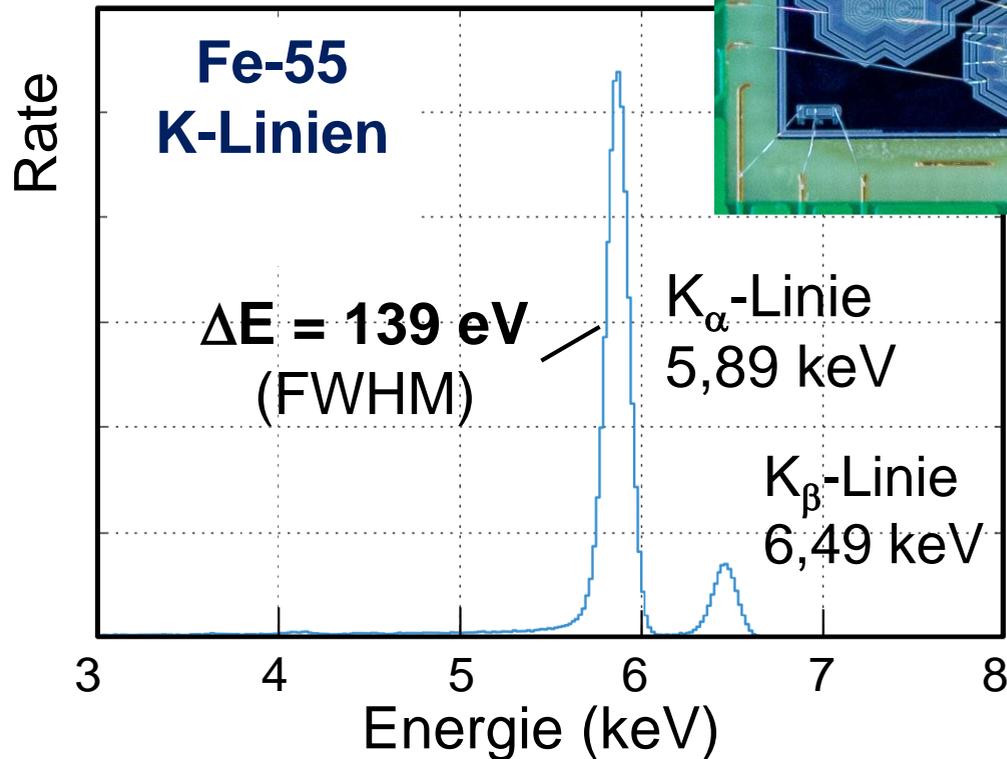
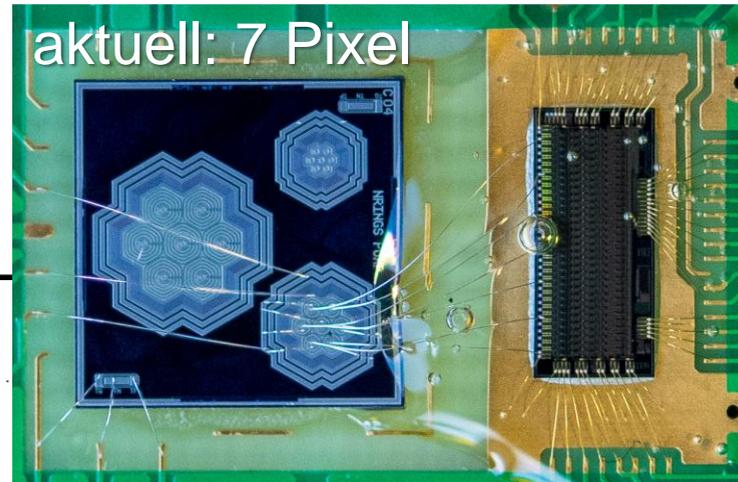
Siliziumdriftdetektoren



# Röntgenfluoreszenz-Kalibration von SDDs

- Bestimmung & Optimierung der Energieauflösung von monolithischen Silizium-Driftdetektorarrays (⇒ Nachweis von keV-Elektronen bei KATRIN)

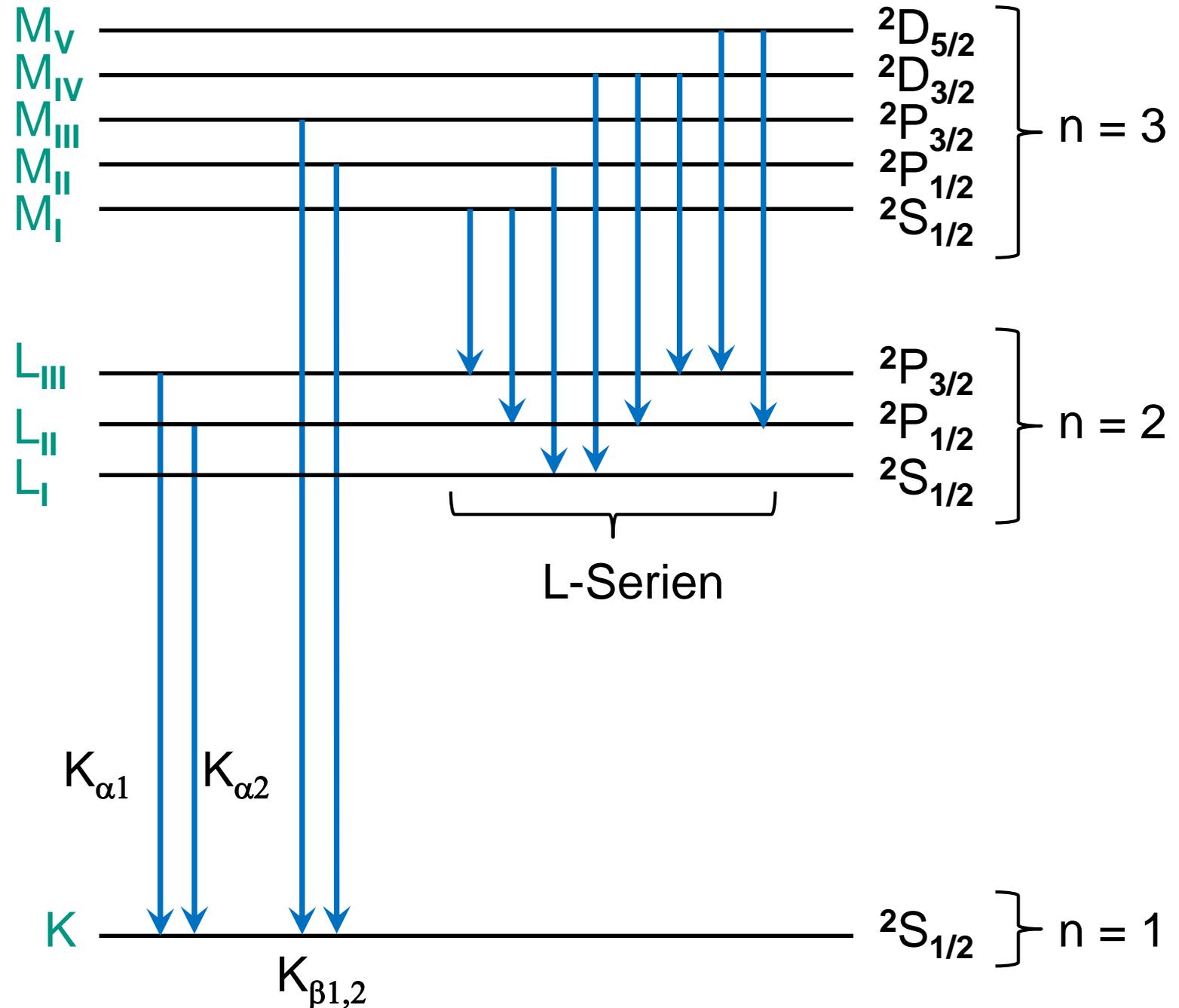
**BACHELORARBEIT : ✓**



# Feinstruktur der Röntgenspektren

■ **Termschema** der Feinstruktur von Röntgenspektren:

- gemäß den Auswahlregeln für Strahlungsübergänge (s. Kap. 9.1)



# Bremsstrahlung

## ■ radiative Bremsstrahlungsverluste:

- Energieverlust hochenergetischer Elektrons (MeV) in Materie

⇒ **kontinuierliches Energiespektrum der abgestrahlten Röntgenphotonen**

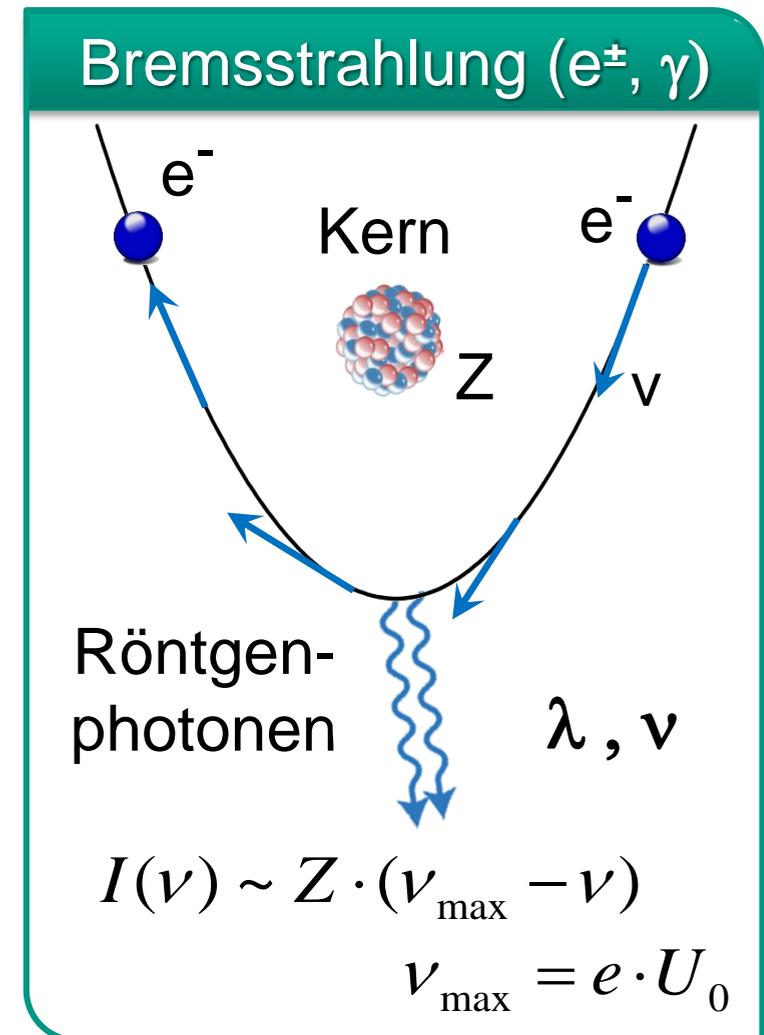
- Energieverluste nehmen linear zu mit der Energie  $E$  des Elektrons:

$$\left( -\frac{dE}{dX} \right)_{\text{brems}} = \frac{1}{X_0} \cdot E$$

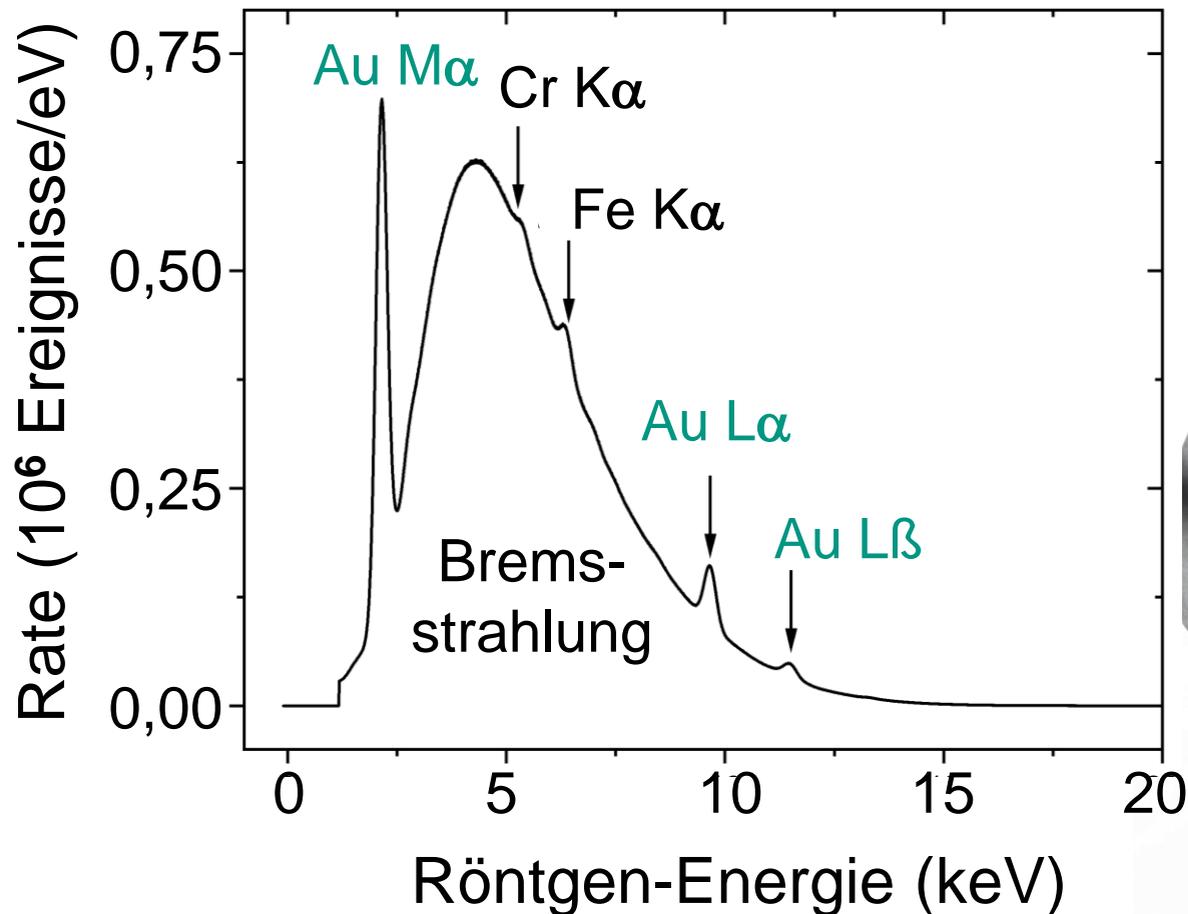
- materialspezifische Größe:

**Strahlungslänge  $X_0$**  in  $[\text{g}/\text{cm}^2]$

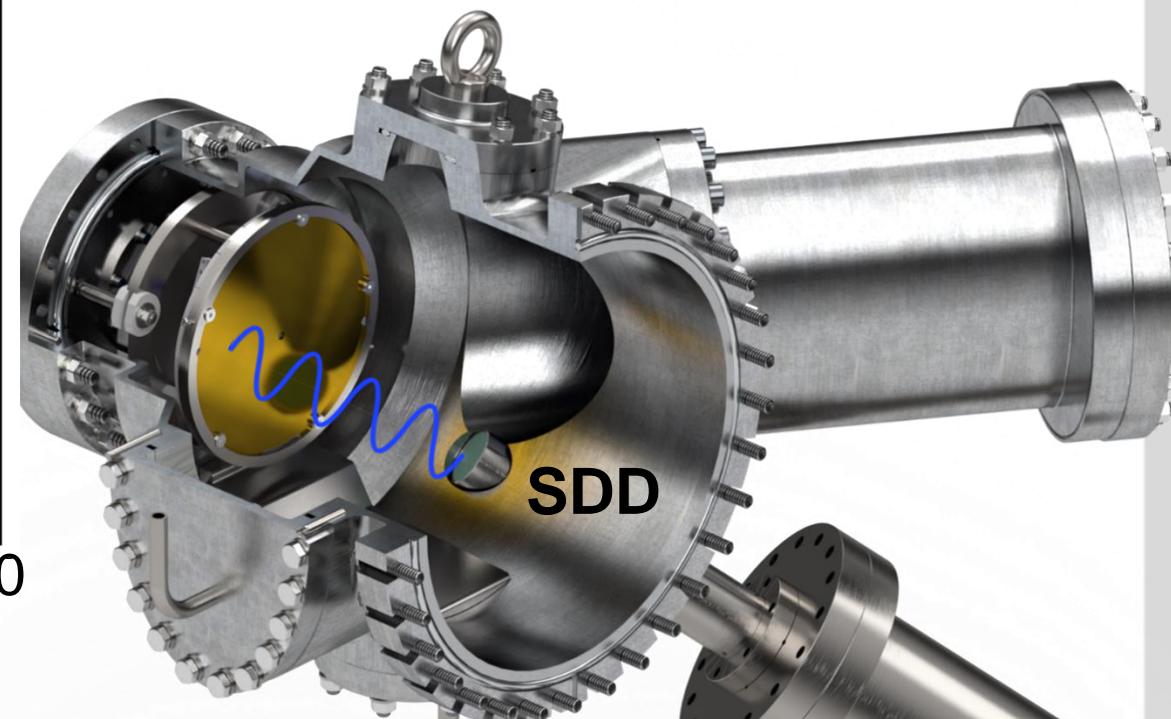
- nur wichtig für leichte geladene Teilchen wie Elektronen ( $\sim m^{-4}$ )



- **Analyse von Röntgenspektren** mit hochauflösenden Siliziumdrift-Detektoren (SDDs) aus Elektron-Wechselwirkungen in einer dünnen **Gold-Edelstahl** Schicht (**KATRIN Rear Wall**)



BACHELORARBEIT: ✓



# Röntgenabsorption – Koeffizient $\mu$

## ■ Durchtritt durch Materie:

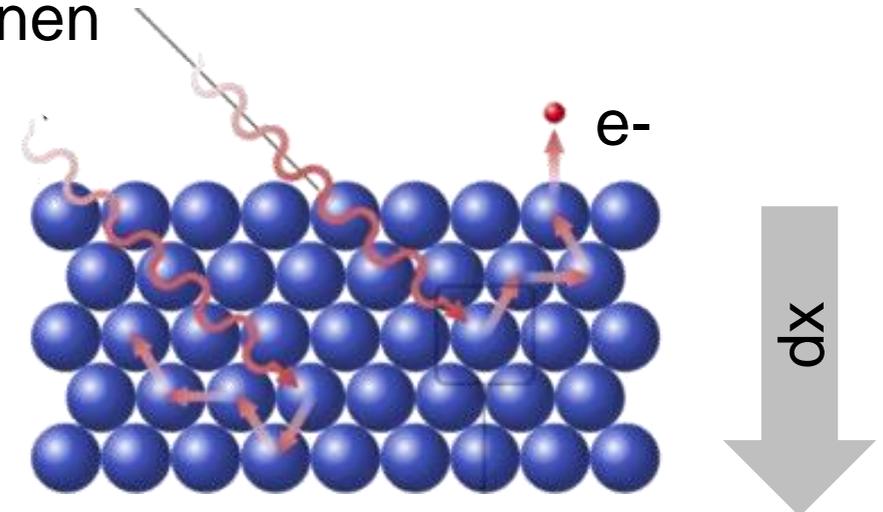
Röntgenstrahlung wird absorbiert & gestreut

- **Intensität  $I$**  der Strahlung schwächt sich entsprechend des **Lambert-Beerschen Gesetzes** **exponentiell** ab

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot d}$$
$$I = I_0 \cdot e^{-\int \mu(x) dx}$$

$\mu$  : Massen-  
Absorptionskoeffizient  
Für Röntgenstrahlung

Röntgen-  
photonen



# Röntgenabsorption – Koeffizient $\mu$

## ■ Durchtritt durch Materie:

Röntgenstrahlung wird absorbiert & gestreut

$\mu(x)$ :  $\mu$  abhängig vom Ort  $x$

Einheit: [  $\text{cm}^2/\text{g}$  ] (d.h. Fläche/Masse)

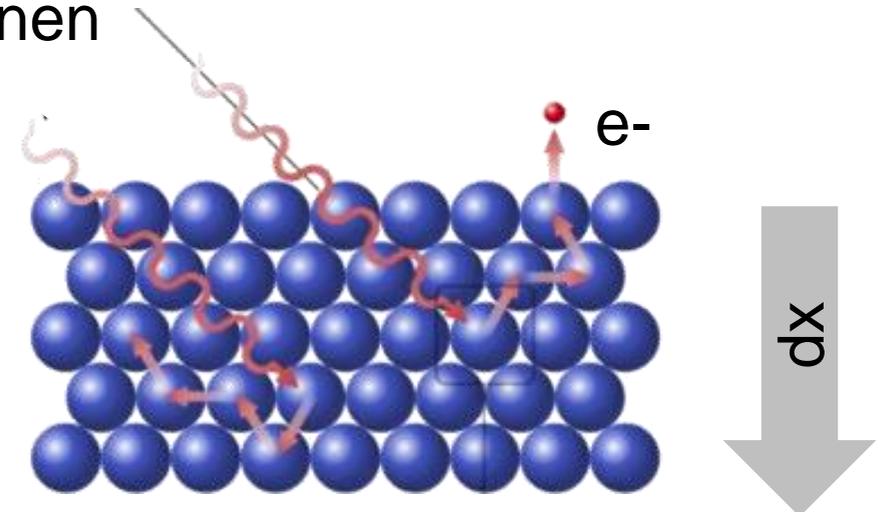
$$I = I_0 \cdot e^{-\frac{\mu}{\rho} \cdot \rho d}$$

- Praxis: normierter Absorptionskoeffizient  $\mu/\rho$  für Massenbelegung  $\rho \cdot d$

Dichte des Materials  $\rho$

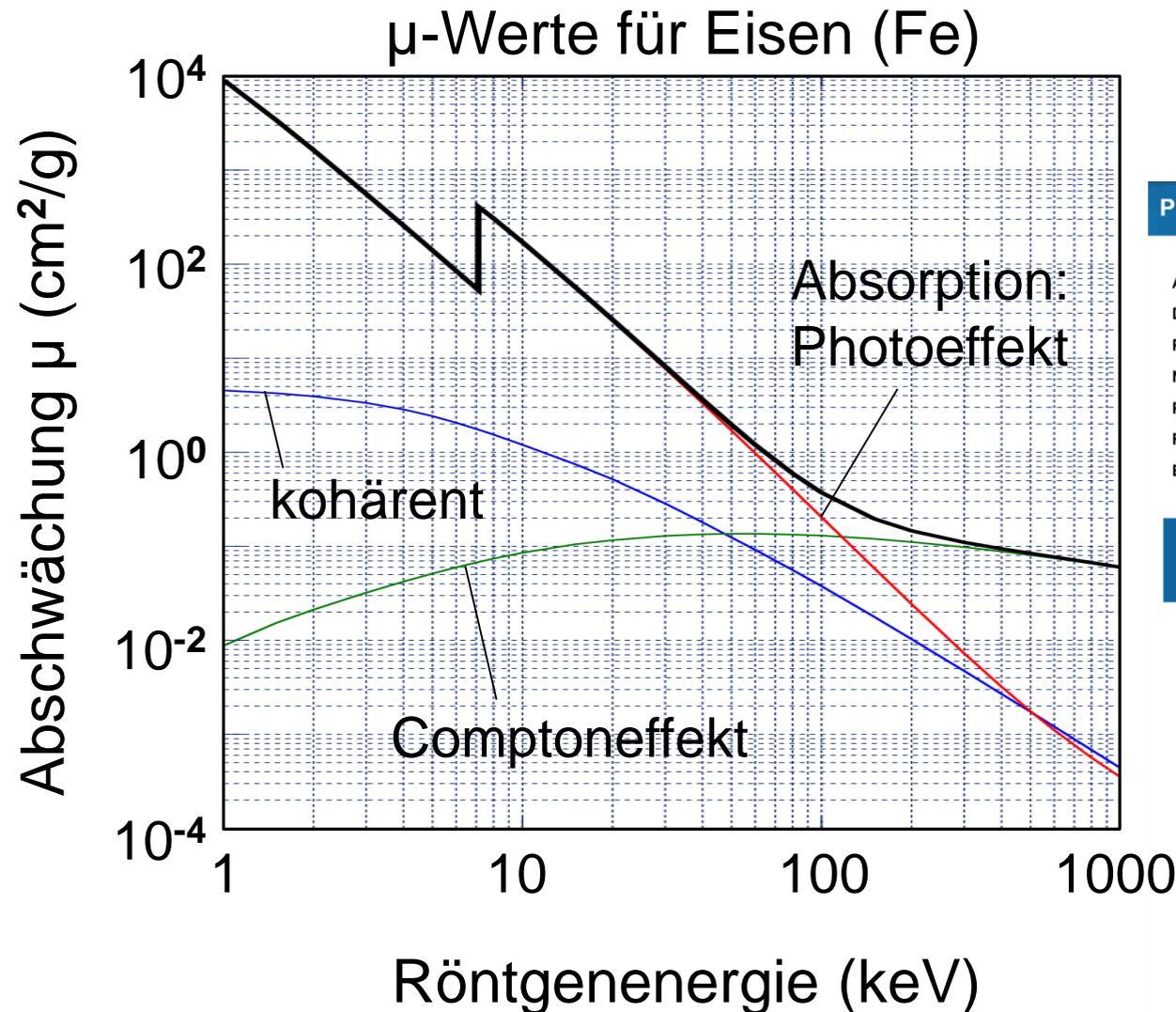
$$\frac{\mu}{\rho} \sim \frac{Z^3}{E^3}$$

Röntgenphotonen



# Röntgenabsorption – Koeffizient $\mu$

- Beim Durchtritt durch Materie wird Röntgenstrahlung absorbiert & gestreut



**NIST**  
National Institute of  
Standards and Technology  
U.S. Department of Commerce

## PHYSICAL MEASUREMENT LABORATORY

- About PML +
- Divisions +
- Products/Services +
- News/Multimedia
- Programs/Projects
- Facilities +
- Email Newsletter

## X-Ray Mass Attenuation Coefficients

NISTIR 5632 | [Version History](#) | [Disclaimer](#)

**Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV for Elements  $Z = 1$  to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest\***

J. H. Hubbell\* and [S. M. Seltzer](#)<sup>†</sup>  
Radiation Physics Division, PML, NIST

© 1989, 1990, 1996 copyright by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America. All rights reserved. NIST reserves the right to charge for these data in the future.

CONNECT WITH US



### Abstract

Tables and graphs of the photon mass attenuation coefficient  $\mu/p$  and the mass energy-absorption coefficient  $\mu_{en}/\rho$  are presented for all of the elements  $Z = 1$  to 92, and for 48 compounds and mixtures of radiological interest. The tables cover energies of the photon (x-ray, gamma ray, bremsstrahlung) from 1 keV to 20 MeV. The  $\mu/p$  values are taken from the current photon interaction database at the National Institute of Standards and Technology, and the  $\mu_{en}/\rho$  values are based on the new calculations by Seltzer described in Radiation Research **136**, 147 (1993). These tables of  $\mu/p$  and  $\mu_{en}/\rho$  replace and extend the tables given by Hubbell in the International Journal of Applied Radiation and Isotopes **33**, 1269 (1982).

[Note on NIST X-ray Attenuation Databases](#)

### Table of Contents

1. [Introduction](#)
2. [X-Ray Mass Attenuation Coefficients](#)
  - [Table 1.](#) Material constants for **elemental media**.
  - [Table 2.](#) Material constants and composition for **compounds and mixtures**.

Values of the mass attenuation coefficient and the mass energy-absorption coefficient as a function of photon energy, for:

  - [Table 3.](#) [\[Data\]](#) **elemental media**.
  - [Table 4.](#) [\[Data\]](#) **compounds and mixtures**.
3. [The Mass Energy-Absorption Coefficient](#)



# Röntgenabsorption – K, L, ... Kanten

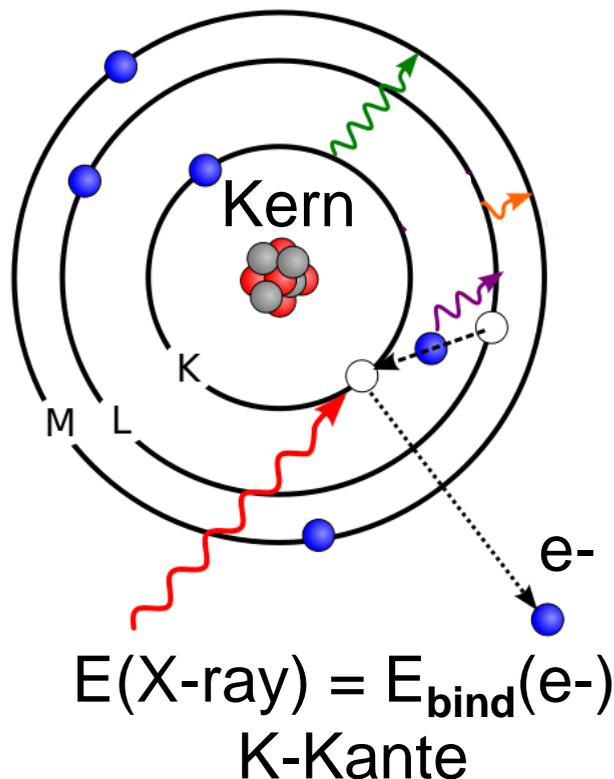
## ■ $\sigma_{\max}$ an den Absorptionskanten:

Röntgenenergie  $\equiv$  Ionisationsenergie

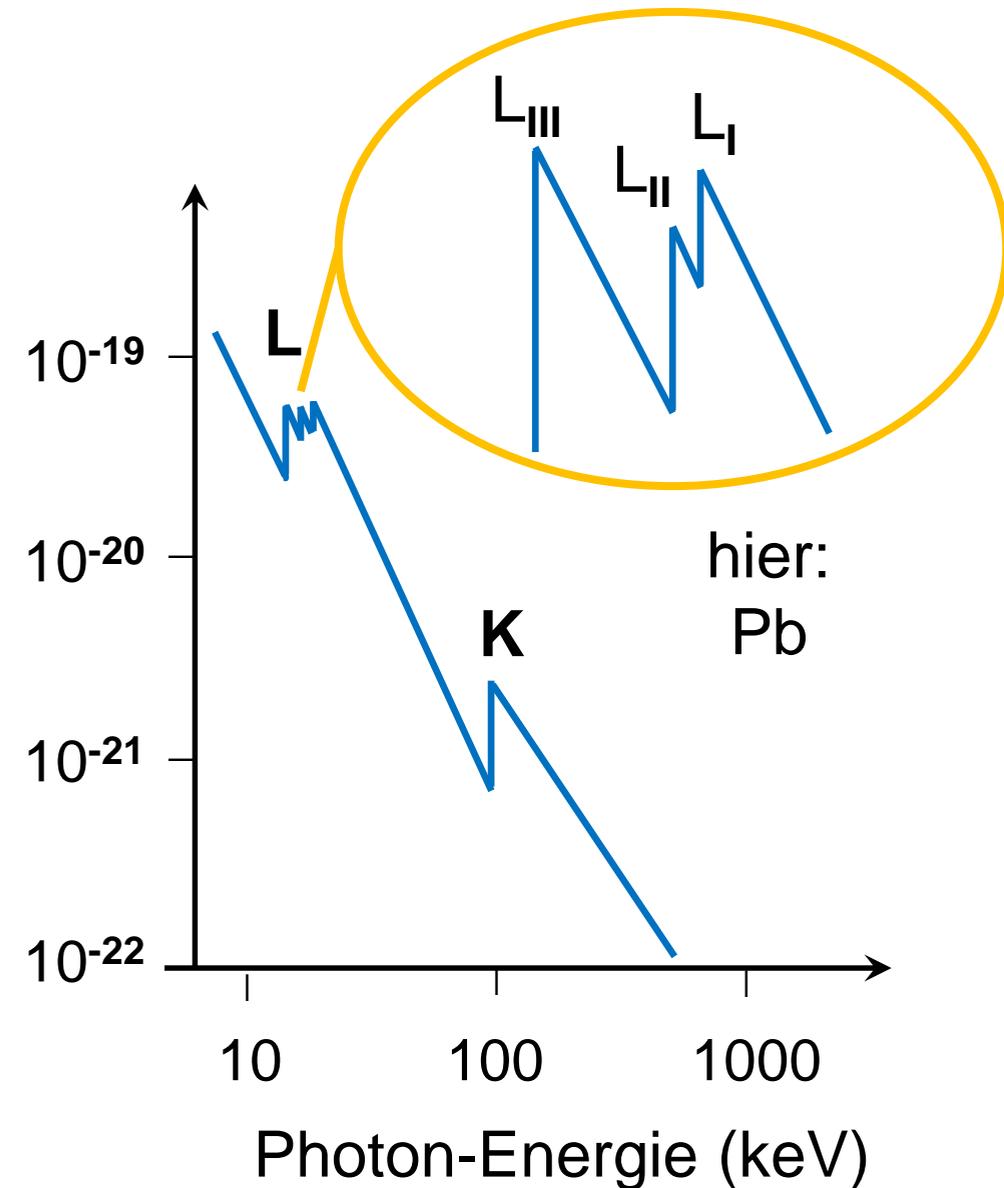
eines der inneren Elektronen

(K-Schale, L-Schale) des Elements

$\Rightarrow$  Elektron wird in das Grenzkontinuum mit  $E_{\text{kin}} \sim 0$  emittiert



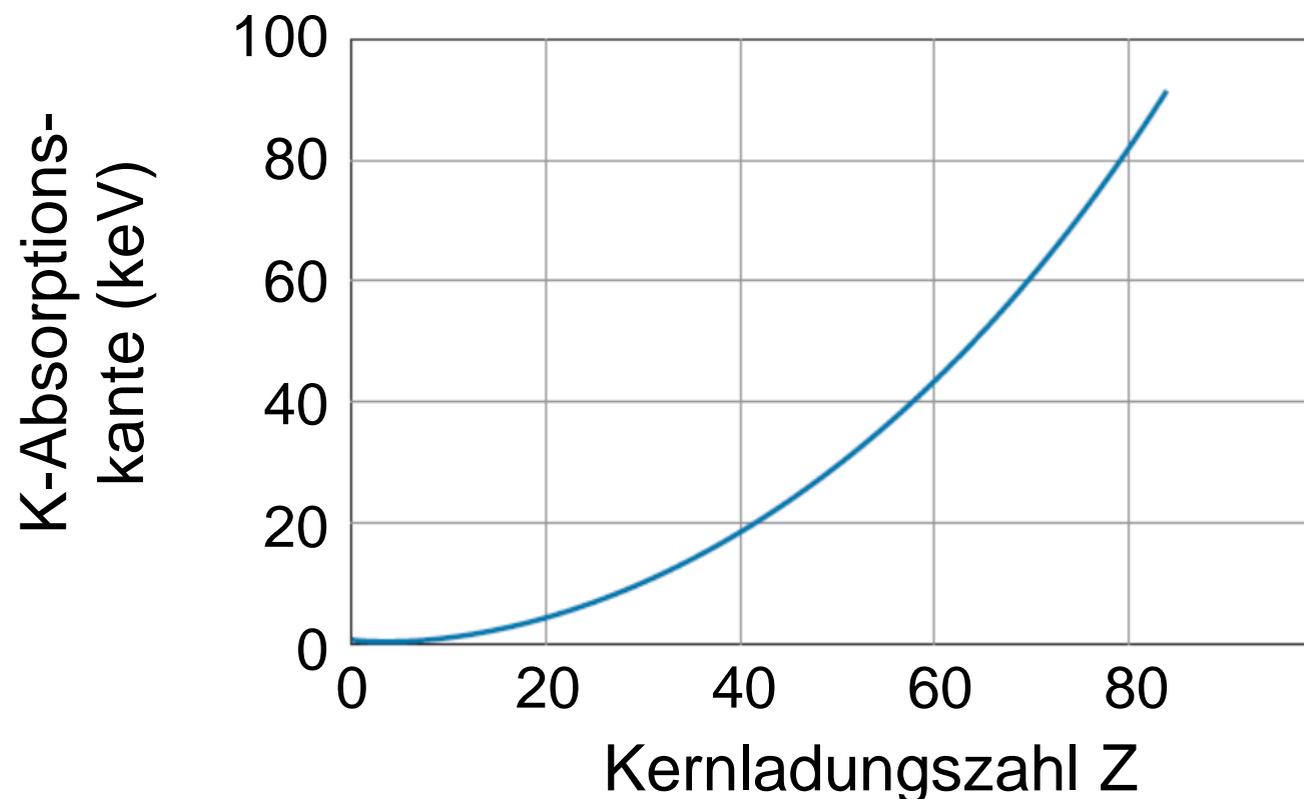
Absorptionswirkungs-  
Querschnitt  $\sigma$  (cm<sup>2</sup>)



■ **Absorptionskanten** (K-Kante, L-Kante,...) sind element-spezifisch

⇒ Energie der K-Kante (= Bindungsenergie der K-Elektronen)  
nimmt für hohes  $Z$  stark zu

$$E_b(K - \text{Schale}) = 13,6 \text{ eV} \cdot Z_{\text{eff}}^2$$



# Anwendung: CT Scans

## ■ CT-Scans:

Computer-Tomographie

= 3-dim. bildgebendes Verfahren  
auf Basis von **Röntgen-Transmission**

- Quelle: Röntgenröhre mit

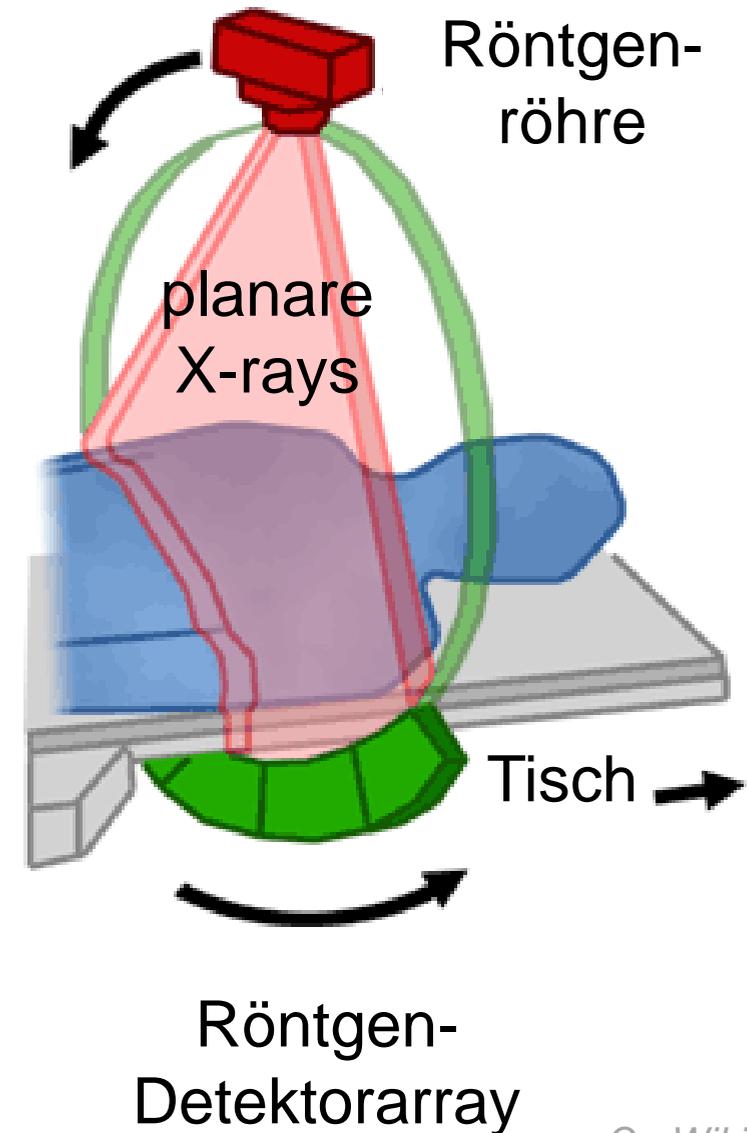
$U = 80-140 \text{ kV}$



- Nachweis: planares Detektorarray

- Erstellung eines 3-dim. Bildes durch  
Abschwächung  
der X-Rays

CT-Scan  
Knie

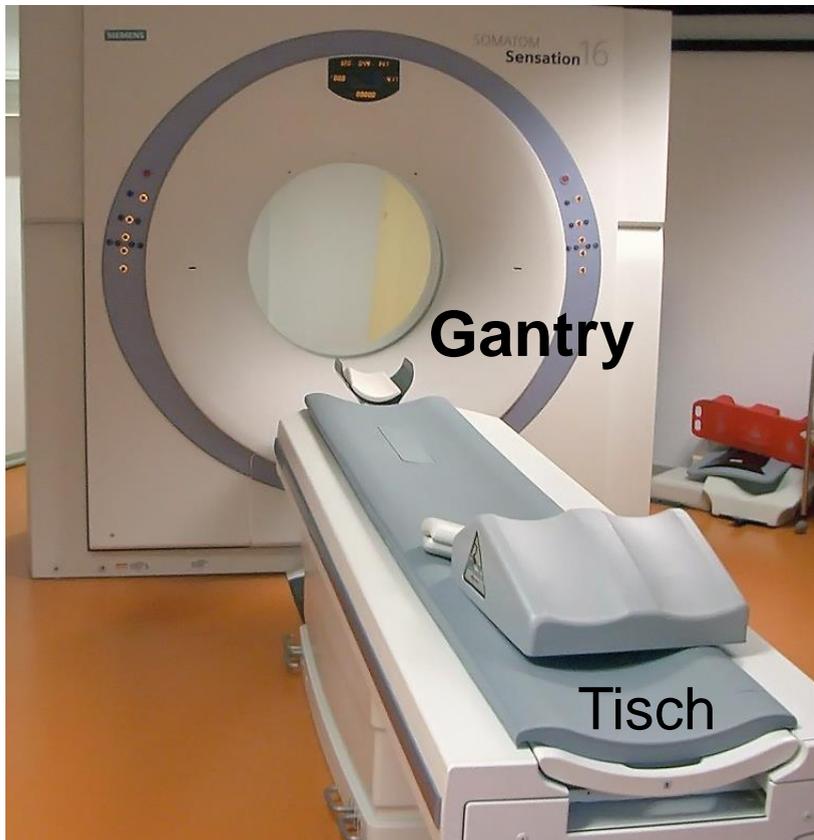


Q.: Wikipedia

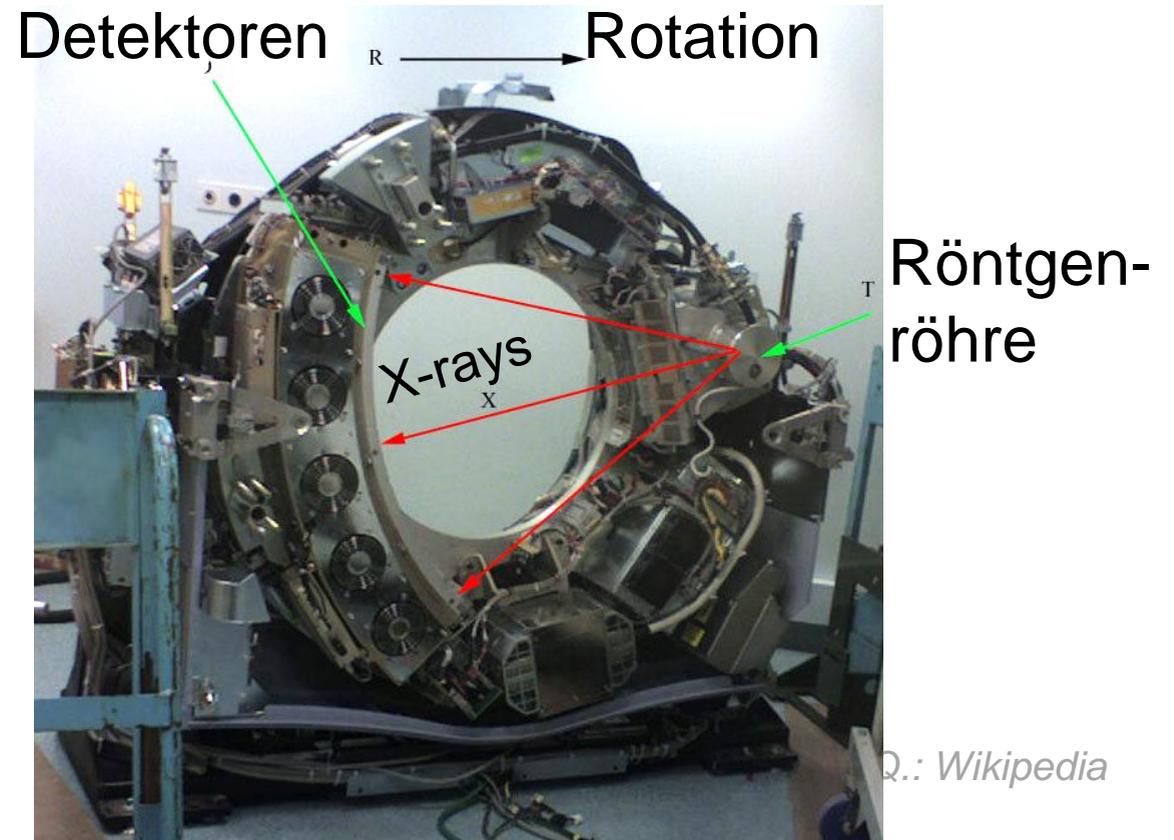
# Röntgenstrahlung – Anwendung CT Scans

## ■ CT-Scans:

- Rotation von Röhre und Detektorarray im Gantry um Patient
- routinemäßige Benutzung eines jod-haltigen CT-Kontrastmittels



geschlossenes Gantry



geöffnetes Gantry

## ■ Weshalb ist die Größe der verwendeten HV patientenspezifisch?

A) ...wird abgestimmt auf das Kontrastmittel im Blut

B) ...wird abgestimmt auf bisherige Strahlenexposition

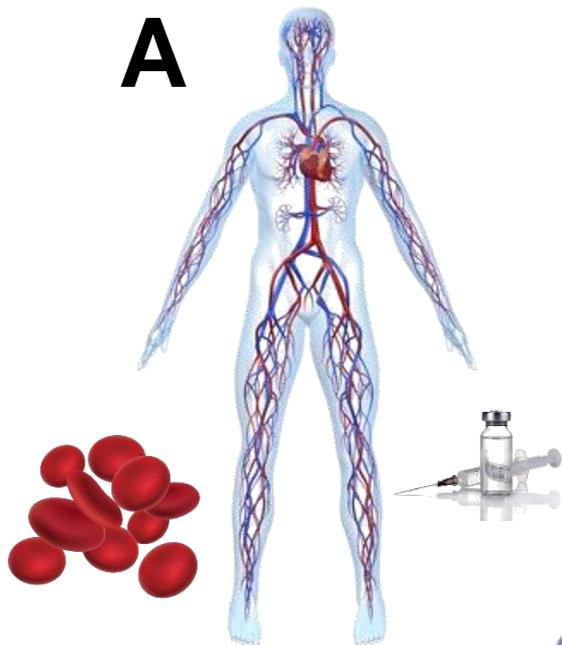
C) ...wird abgestimmt auf Gewicht (Absorptionskoeffizient  $\mu$ )

SHELDON COOPER  
presents  
FUN WITH FACTS

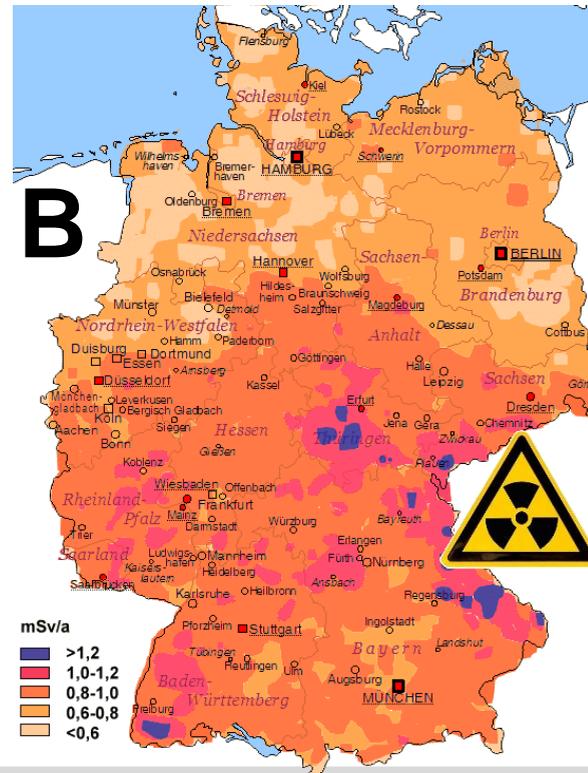
Facts



A



B



C



# CT-Scanner und MRI Scanner

## ■ CT Scanner und MRI Scanner

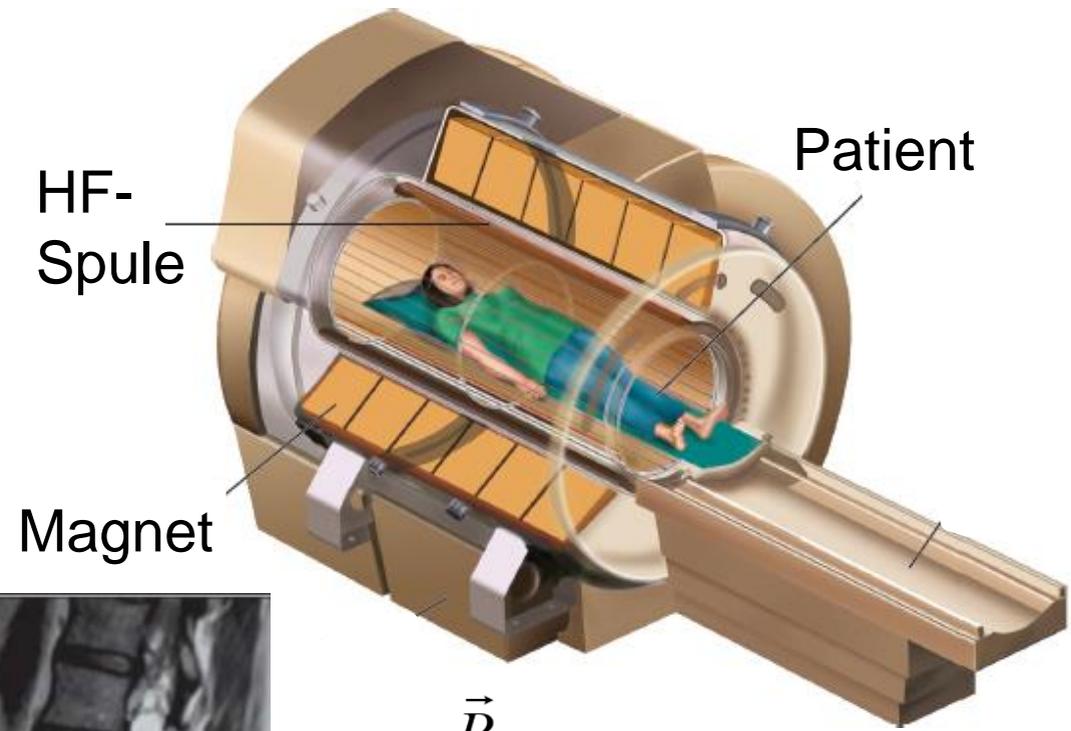
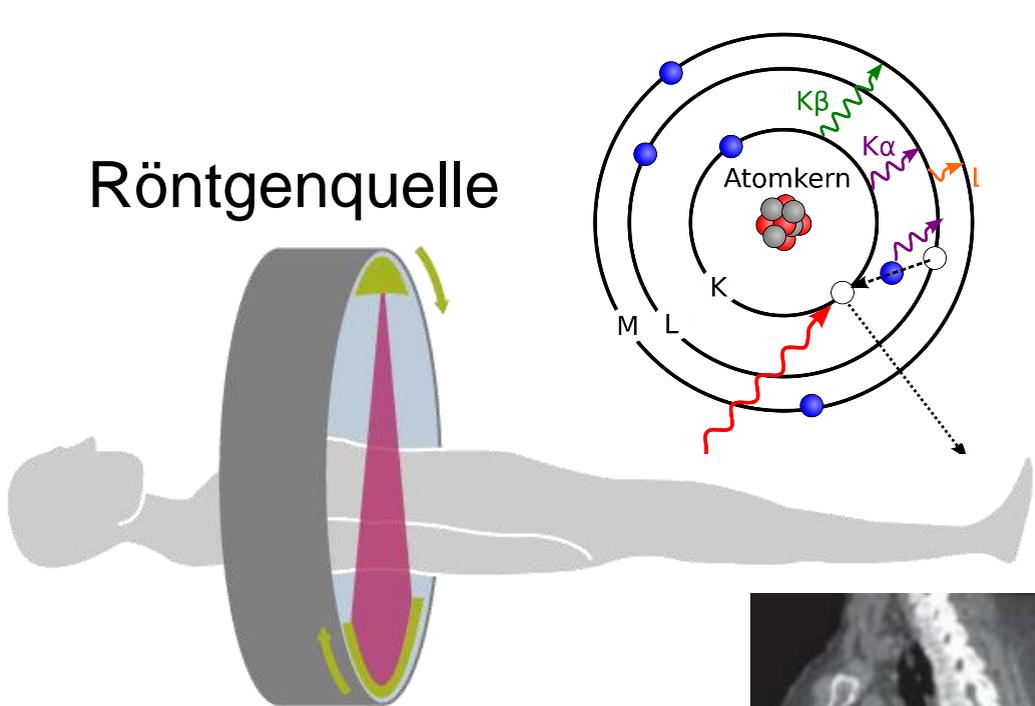


CT Scanner



MRI Scanner

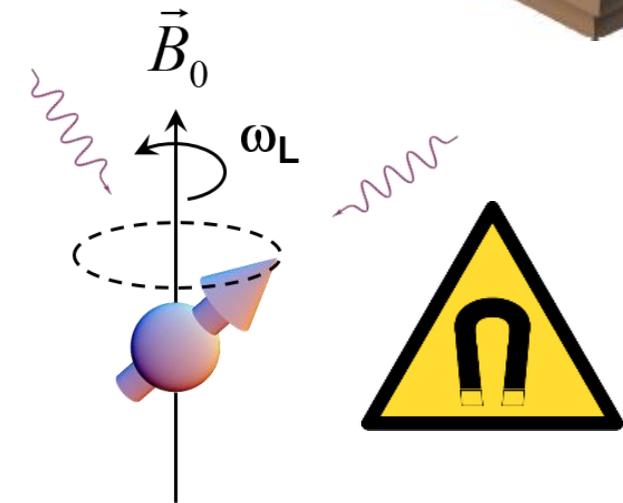
# Medizintechnik: CT-Scan und MRI Scan



Röntgendetektoren



**CT Scanner**

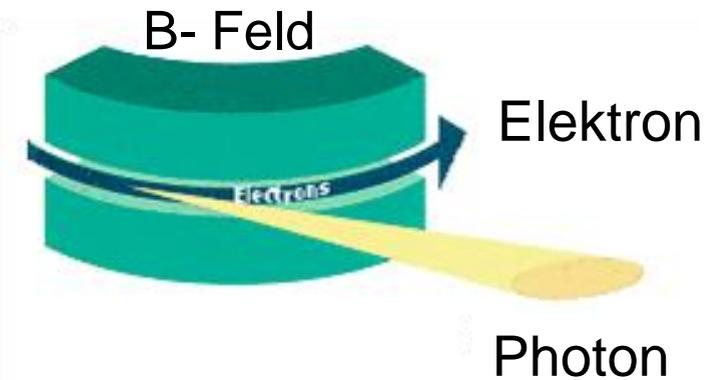
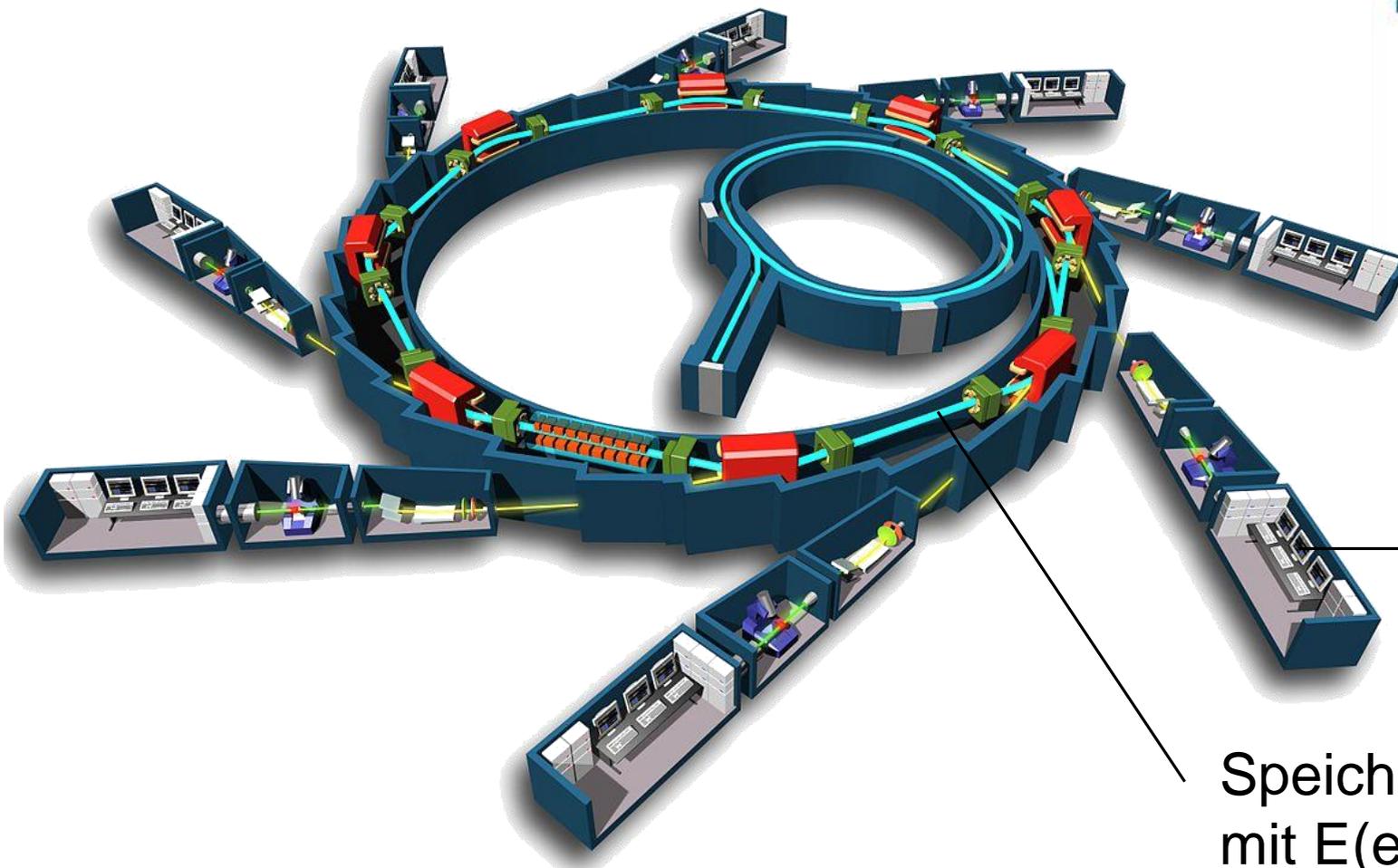


**MRI Scanner**

# Röntgenstrahlung am Speicherring

## ■ Erzeugung von Röntgenstrahlung an Elektronen-Speicherringen:

- Beamlines für Röntgen-Mikroskopie,...
- Anwendung in Festkörperphysik, Biologie,...



**Synchrotronstrahlung**

Röntgen-  
Beamline

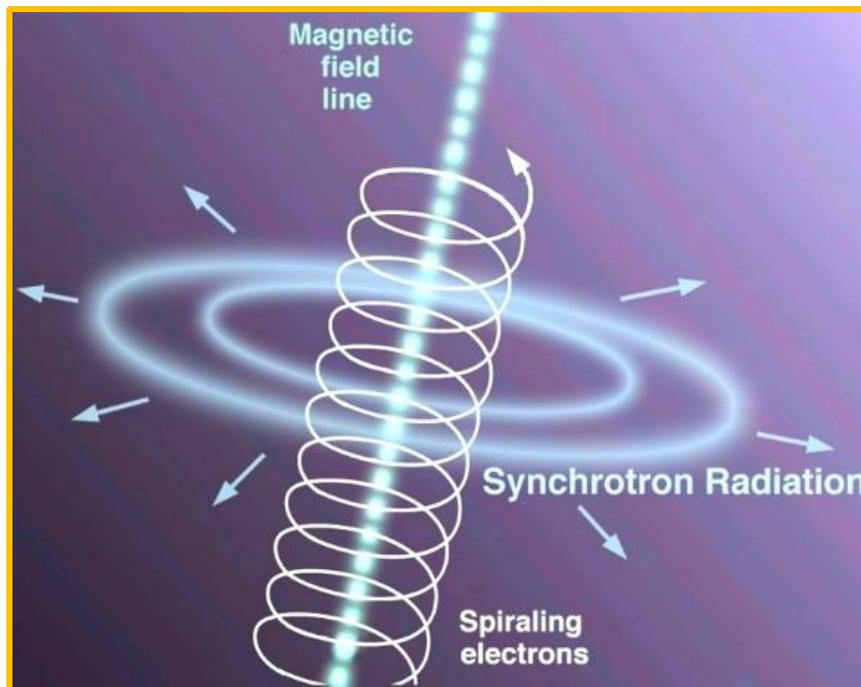
Speicherring für Elektronen  
mit  $E(e^-) \sim$  einige GeV

# Röntgen-Strahlung in Astrophysik

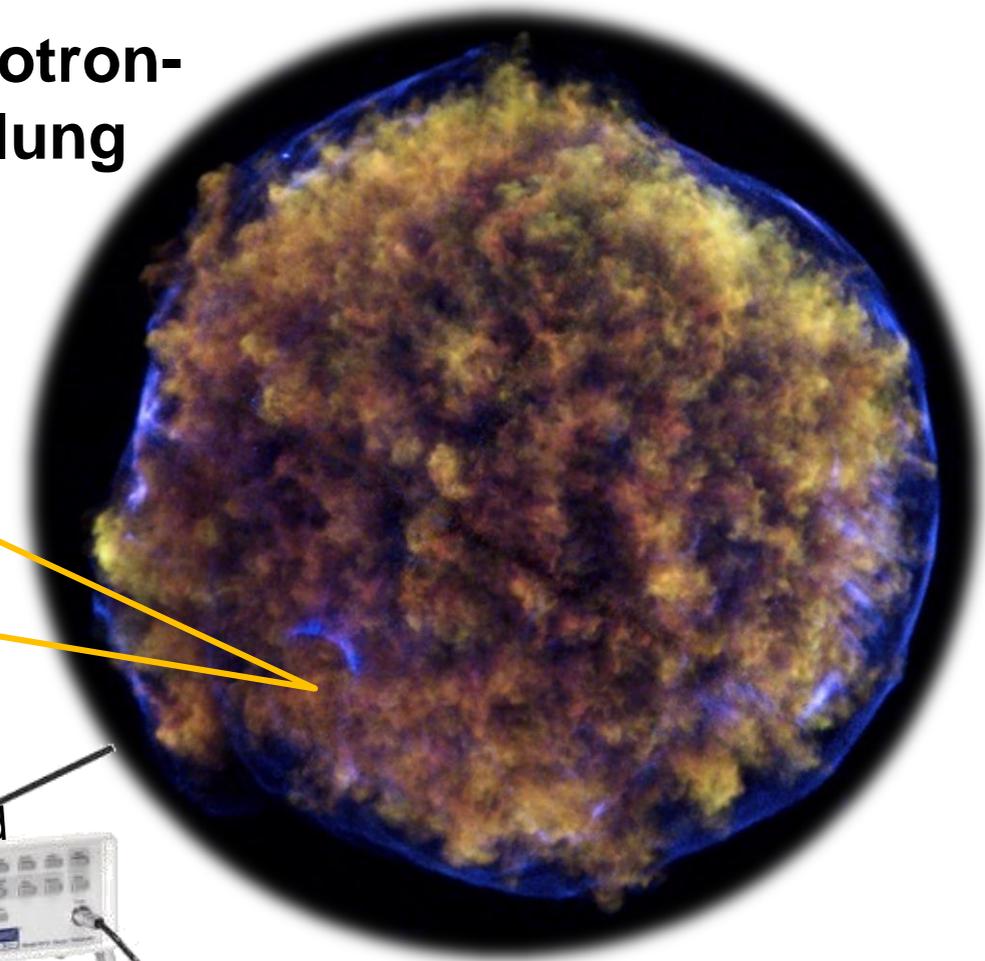
## ■ Erzeugung von Röntgenstrahlung in astrophysikalischen Objekten:

- Supernova-Überreste, Neutronensterne,...
- Galaxiencluster, supermassive *black holes*,...

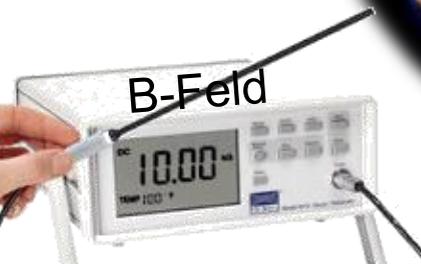
Schockfront  
SN1572



**Synchrotron-  
strahlung**

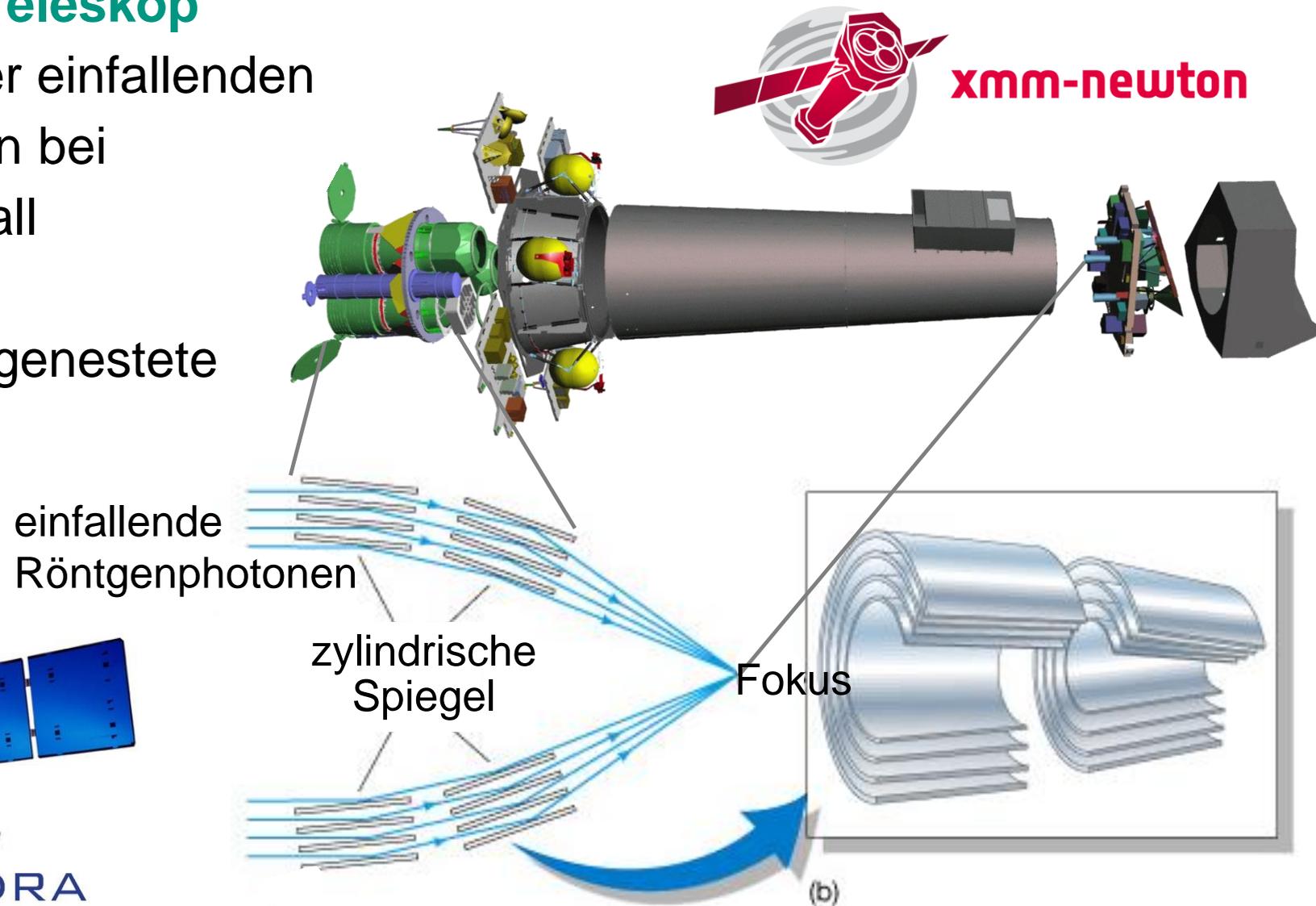


hochenergetische Elektronen auf  
Helix-Bahnen im Magnetfeld



## ■ Abbildung von Röntgenstrahlung aus astrophysikalischen Objekten:

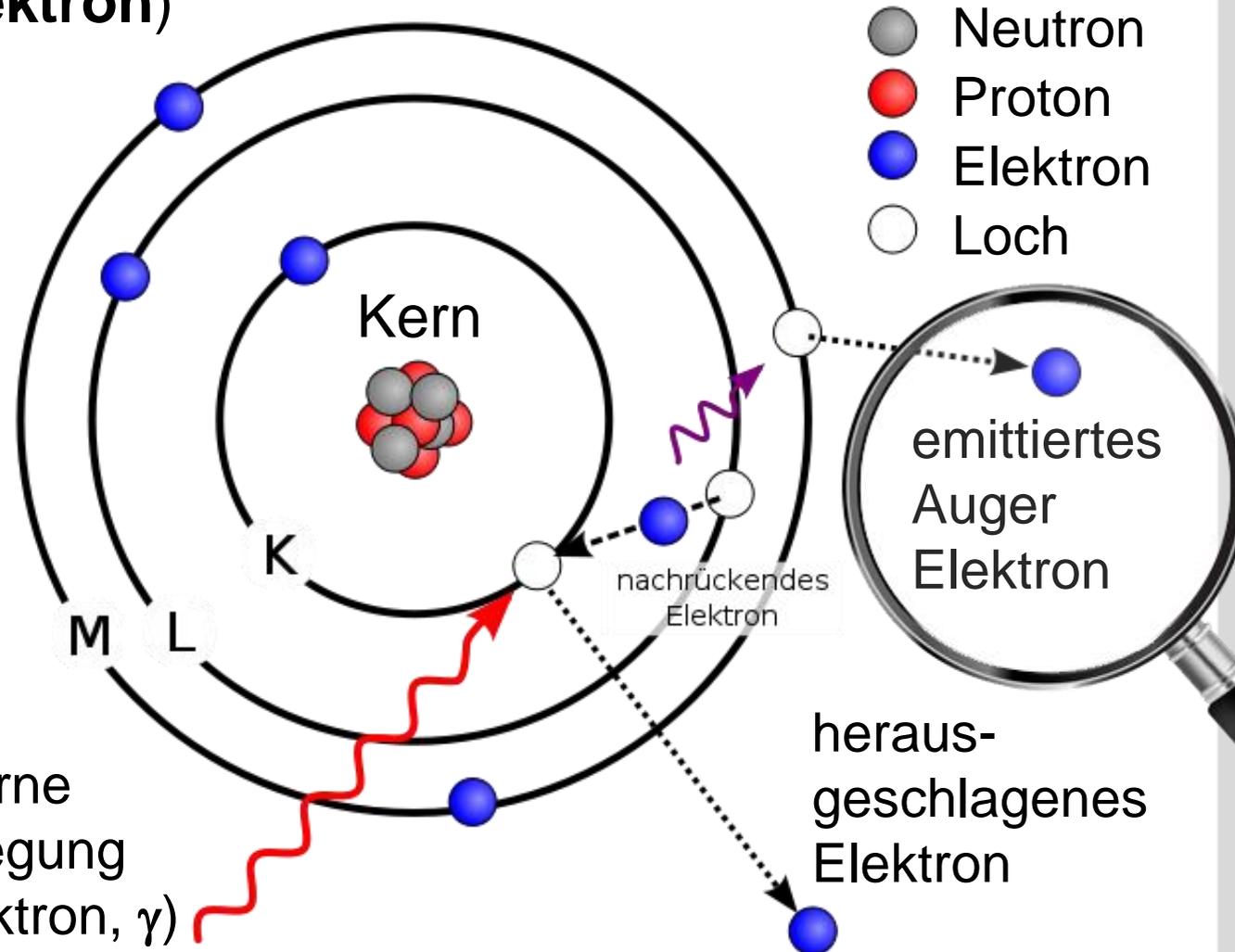
- Prinzip: **Wolter-Teleskop**
- Totalreflektion der einfallenden Röntgenphotonen bei streifendem Einfall ( $\theta < 2-3^\circ$ )
- heute: 3-4 -fach genestete Goldspiegel
- $E_\gamma$  bis 79 keV



# 9.3 strahlungslose Prozesse

■ **Auger-Effekt:** Auffüllen der Vakanz in der inneren Schale erfolgt **strahlungslos** (kein Fluoreszenzphoton!)  $\Rightarrow$  Emission eines Elektrons von äußerer Schale (**Auger-Elektron**)

- Koster-Kronig-Elektron:  
Augerprozess mit Elektron aus höherer Sub-Schale (z.B. LI-LII-LIII Schale)



erste Nachweise durch:



Pierre Auger Lise Meitner

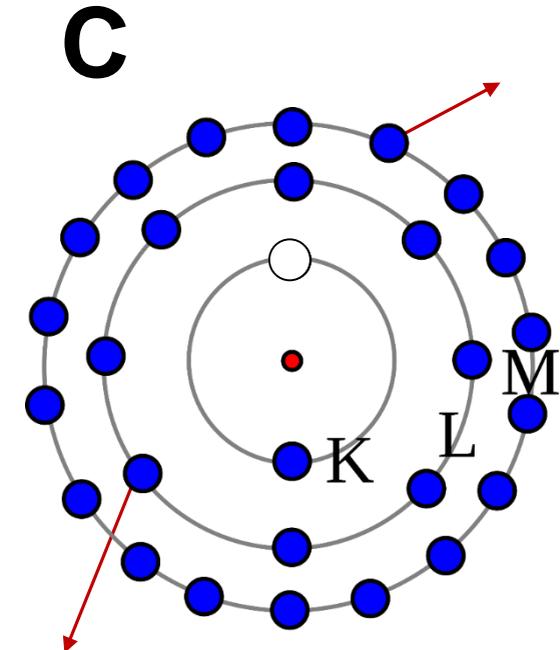
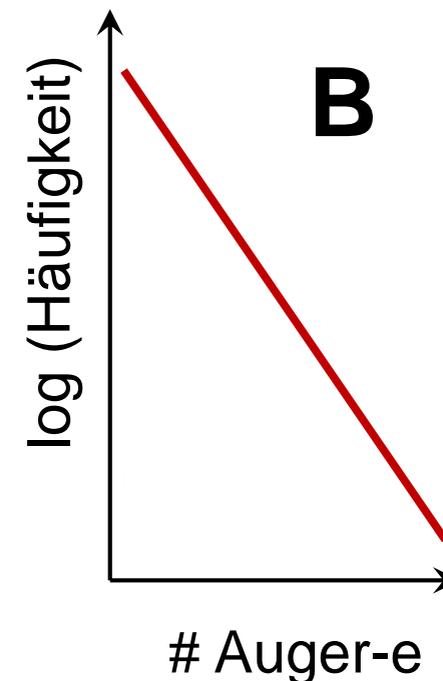
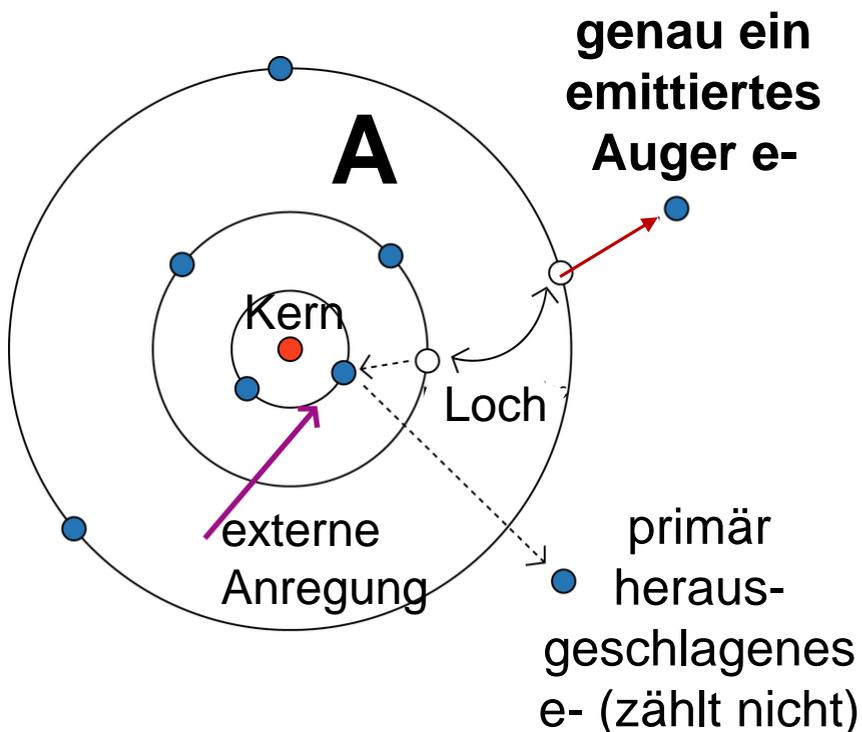
# Fun with Facts: Auger-Effekt

## ■ Wie viele e- beobachtet man nach Erzeugung eines K-Lochs?

- A) 1 Auger e- (Loch wandert nach außen)
- B) große Anzahl Auger e- (stochastisch)
- C) Anzahl Auger e- entspricht # der Schalen

SHELDON COOPER  
CIVIL presents CIVIL  
FUN WITH ~~FLAGS~~

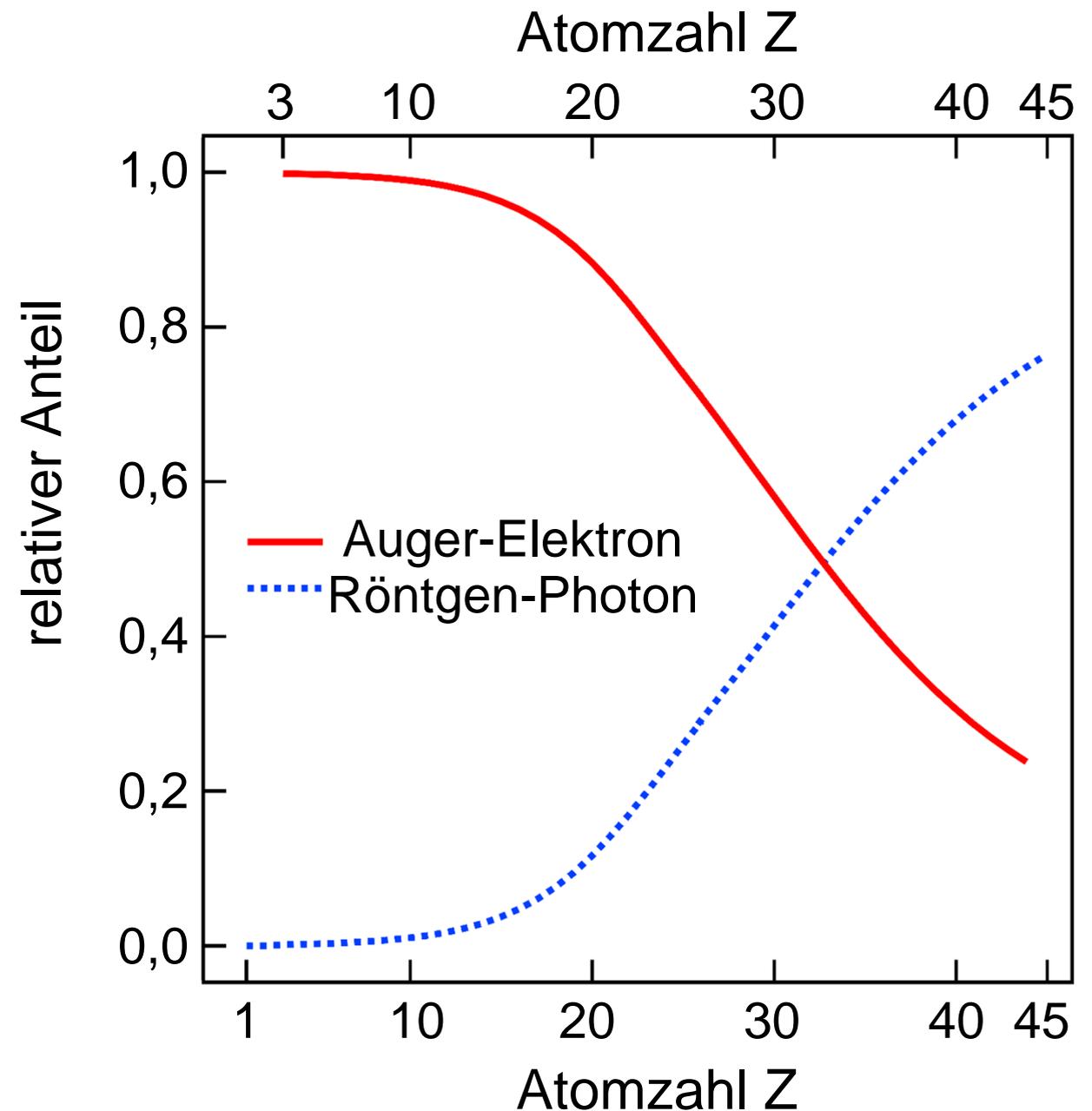
Facts



# Auger-Effekt vs. Röntgenfluoreszenz

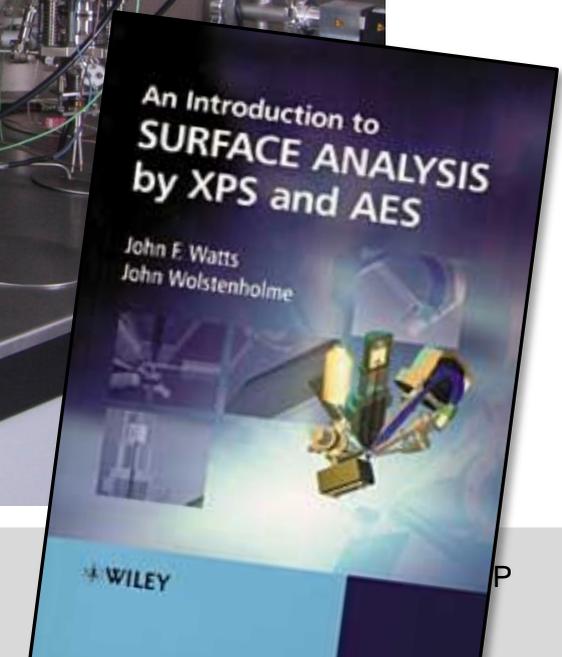
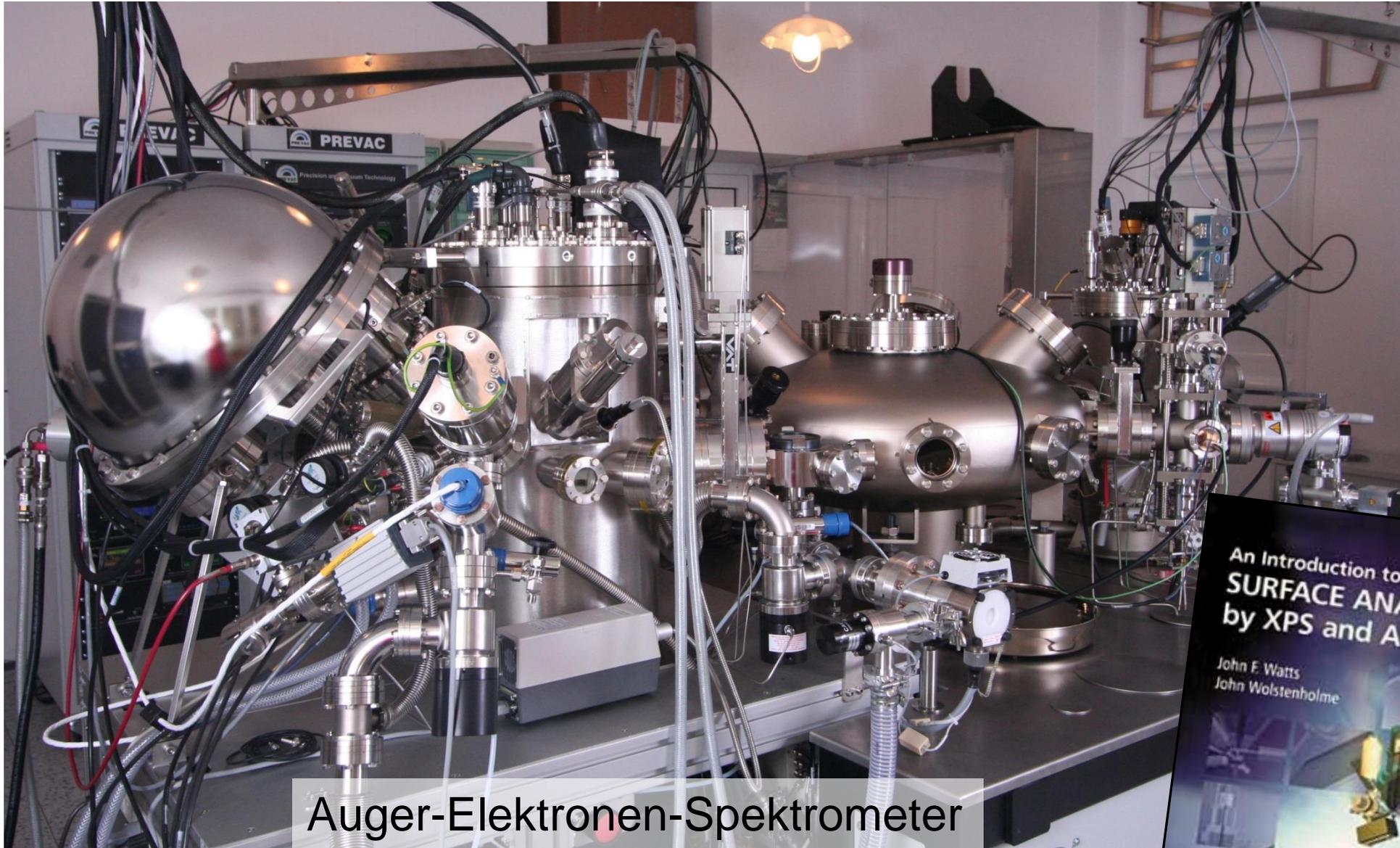
■ Röntgenfluoreszenz und strahlungslose Prozesse stehen bei der Abregung von Atomen nach dem Erzeugen einer Vakanz in **direkter Konkurrenz**

- **Auger-Elektronen:**  
dominant bei leichten Elementen
- **Röntgen-Photonen:**  
dominant bei schweren Elementen



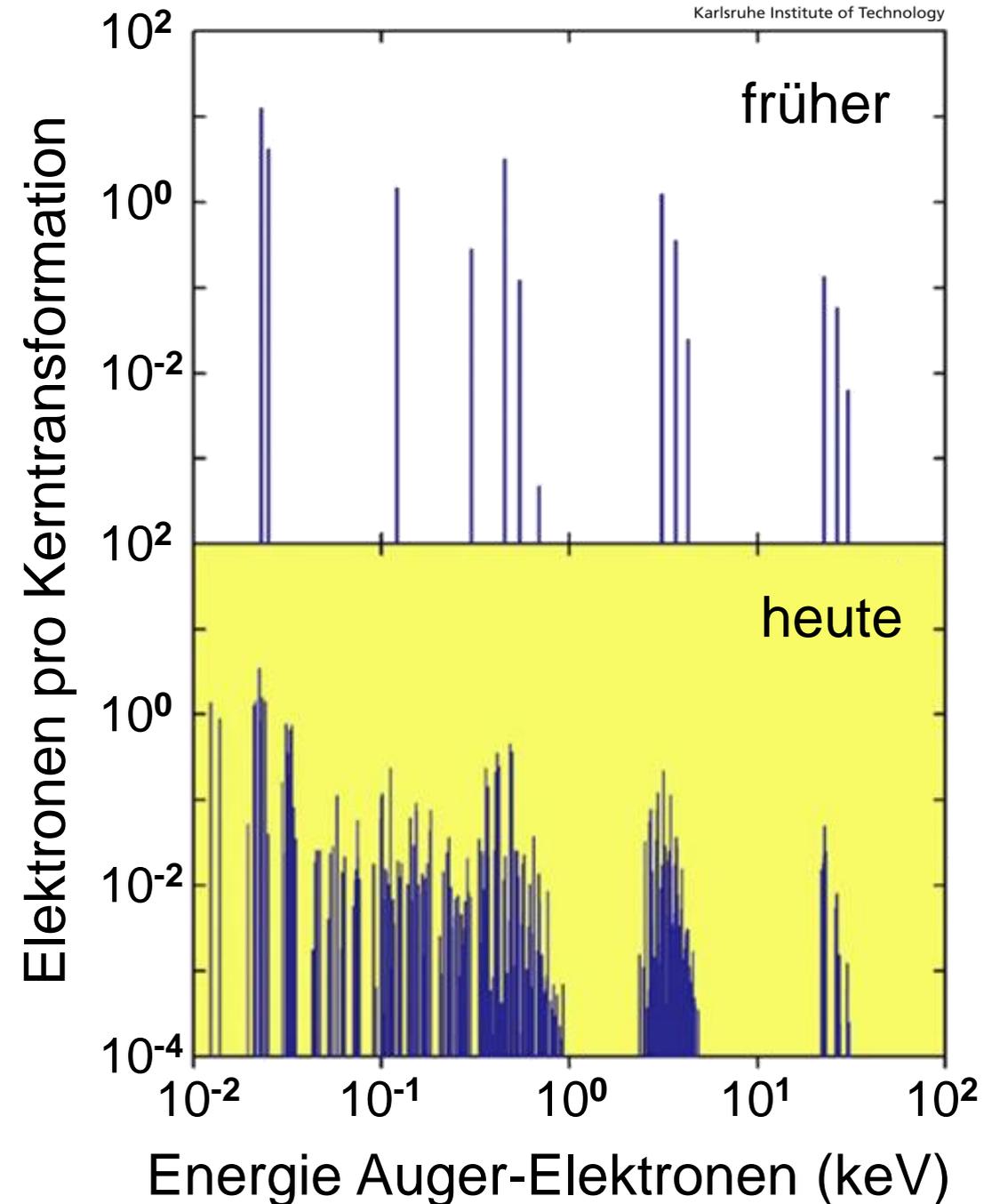
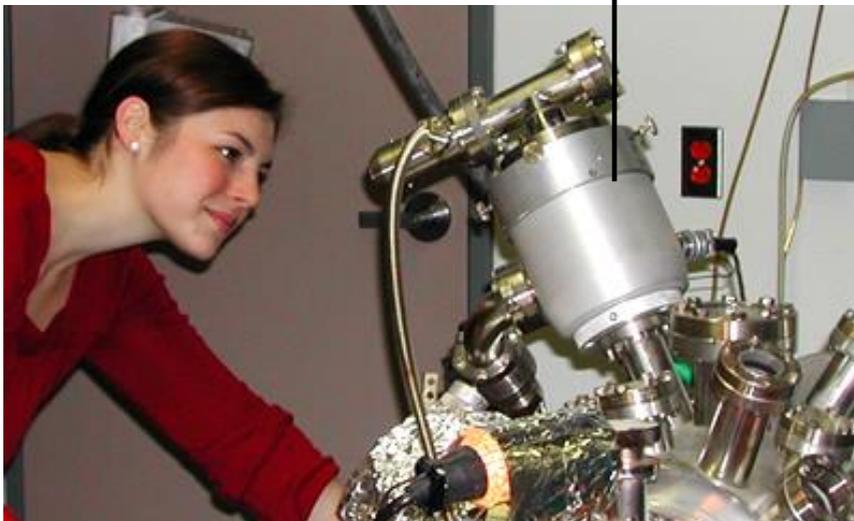
# Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES)

- **Oberflächenspezifische Methode:** chem. Zusammensetzung des Materials



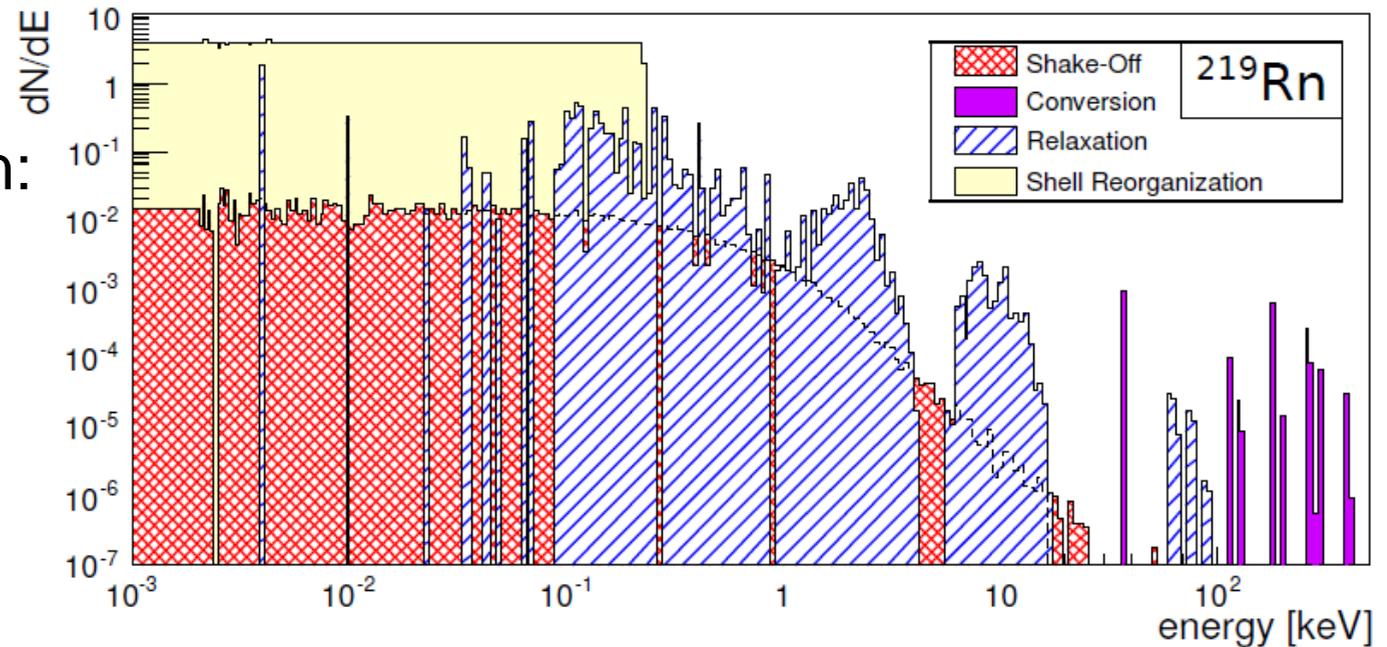
# SSpektroskopie von Auger-Elektronen

- Hochauflösende Spektroskopie von Auger-Elektronen nach dem Zerfall Iod-125 ( $t_{1/2} = 59,5$  Tage)
    - Elektron wird vom Kern eingefangen & erzeugt Vakanz
- Auger-Elektronen-Spektrometer

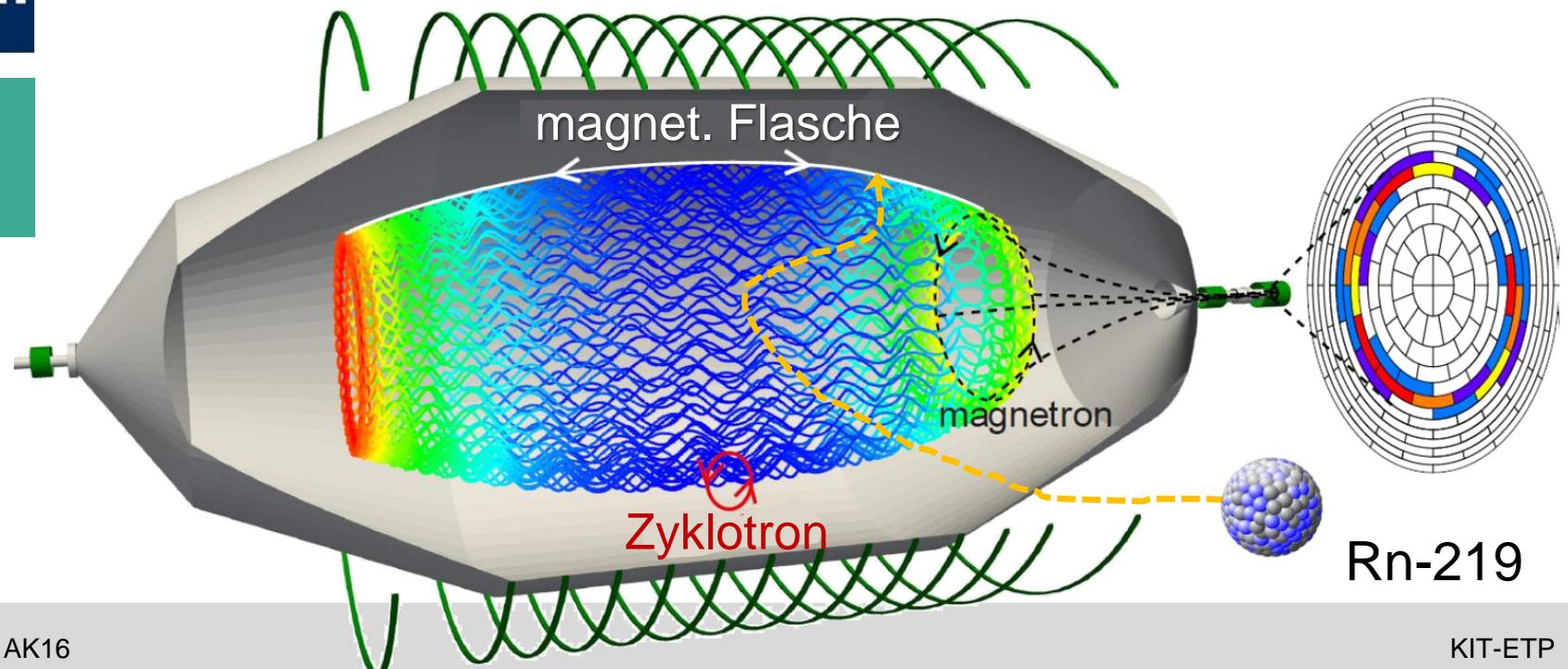


# Auger-Elektronen in KATRIN

- **Auger-Elektronen** nach  $\alpha$ -Zerfall von Radon-Atomen: **zeitliche Stabilität** des Untergrunds im KATRIN Hauptspektrometer



BACHELORARBEIT : ✓



# CT-Scan of Mr. Homer S. (2019)

