

Atome, Moleküle & Kerne

Sommersemester 2024

Vorlesung # 16, 20.06.24

Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

8.3 Periodensystem - Schalenmodell

9. Atome & Strahlungsprozesse

9.1 Röntgenstrahlung

9.2 Strahlungslose Prozesse

9.3 Maser und Laser

8.3 Periodensystem - Schalenmodell

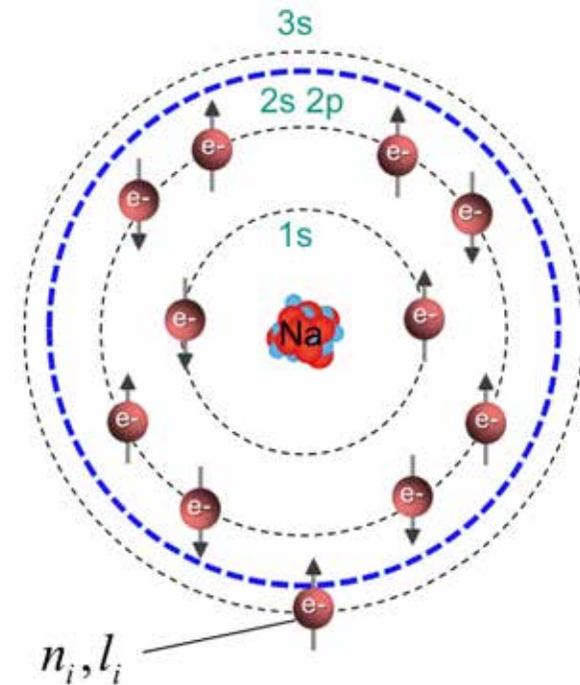
Besetzung atomarer Hüllen - Hund'sche Regeln

- Aus den Hund'schen Regeln lassen sich die Drehimpulsconfiguration des Grundzustands ableiten

1. Hund'sche Regel:

Volle Schalen und Unterschalen haben den Gesamtdrehimpuls Null.

Elektronen in abgeschlossenen Schalen (1s, 2s, 2p, ...) koppeln zu $J = 0$ mit $L = 0, S = 0$



Friedrich Hund



2. Hundsche Regel

Der Gesamtspin S nimmt den maximal möglichen Wert an, die Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen stehen also möglichst parallel.

- die Spins der einzelnen Elektronen stehen möglichst parallel (geringere Abstoßung der e^- , da weiter von einander entfernt (räuml. Wellenfunktion))

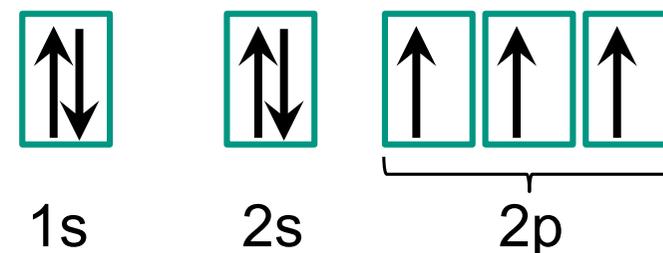
Bs.: Elektron-Wellenfunktion Ψ eines 2p-Orbitals:

$$\Psi = \Psi_S(\text{Spin } \uparrow \uparrow \uparrow) \cdot \Psi_A(\text{Bahndrehimpuls } L)$$

- Pauli-Prinzip limitiert $S_{\max} = \ell + 1/2$

⇒ nachdem Schale halb gefüllt ist, können nur Elektronen mit anti-parallelem Spin zusätzlich eingefügt werden

⇒ volle Schale koppelt zu $S = 0$



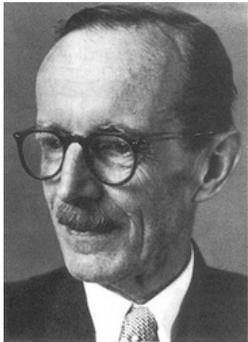
$$(S_{\max} = 3/2)$$

Schalenstruktur – Aufbau nach dem Madelung Schema

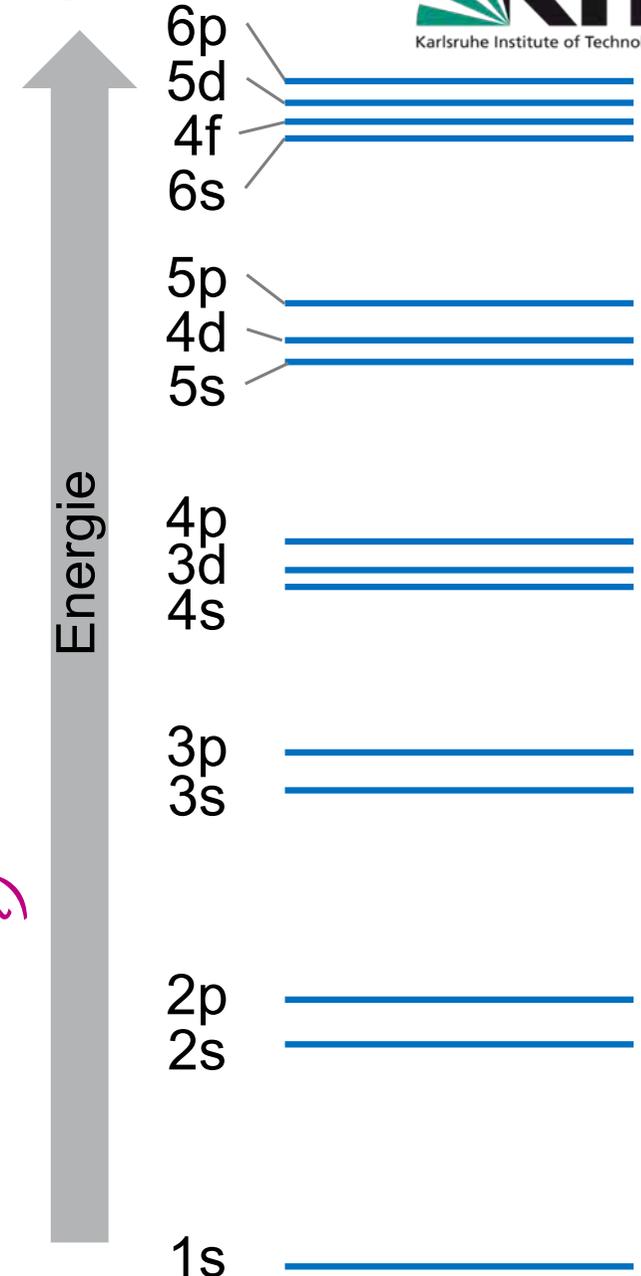
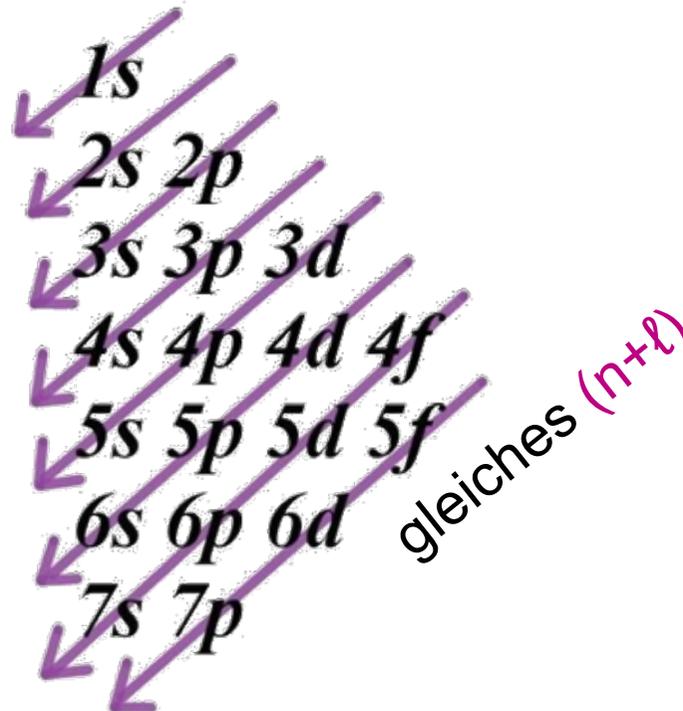
■ Aufbauprinzip: Auffüllung von Schalen und Unterschalen nach dem **Madelung-Energieschema**

- Orbitale mit kleinerem $(n+l)$ Wert werden vor Orbitalen mit größeren Wert gefüllt
- falls $(n+l)$ Wert identisch, zuerst **kleineres n**

$1s \Rightarrow 2s \Rightarrow 2p \Rightarrow 3s \Rightarrow$
 $3p \Rightarrow 4s \Rightarrow 3d \Rightarrow 4p \Rightarrow$
 $5s \Rightarrow 4d \Rightarrow 5p \Rightarrow 6s \Rightarrow$
 $4f \Rightarrow 5d \Rightarrow 6p \Rightarrow 7s \Rightarrow$
 $5f \Rightarrow 6d \Rightarrow 7p$



Erwin Madelung



Schalenstruktur - Elektronenkonfiguration

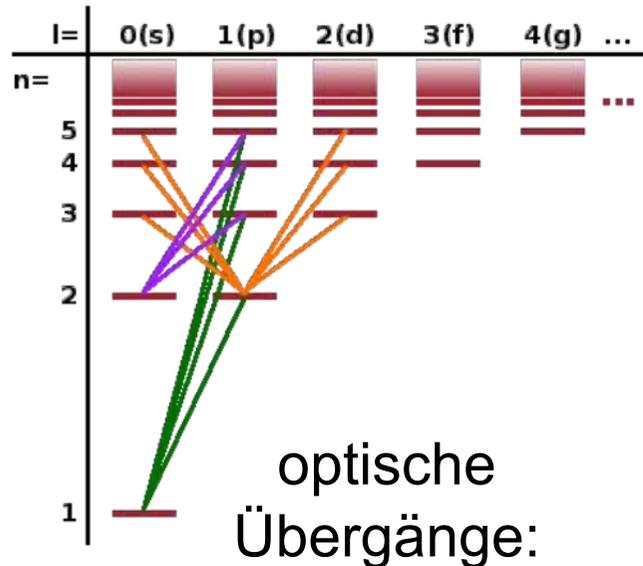
Atom	1s	2s	2p			Elektronenkonfiguration
Li						$1s^2 2s^1$
Be						$1s^2 2s^2$
B						$1s^2 2s^2 2p^1$
C						$1s^2 2s^2 2p^2$
N						$1s^2 2s^2 2p^3$
O						$1s^2 2s^2 2p^4$
F						$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne						$1s^2 2s^2 2p^6$

Periodensystem mit Elektronenkonfiguration

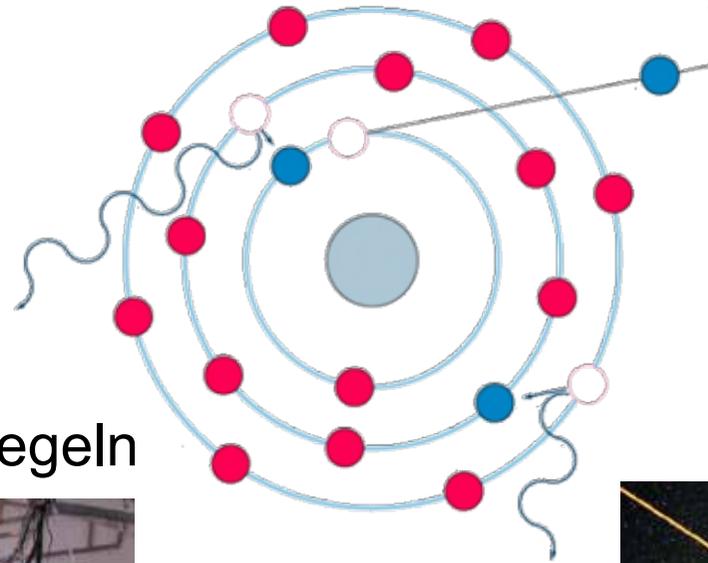
Atom Nr. Z	Element	Schalen	Schalen					L-S Konfiguration des Grundzustandes	Erstes Ionisationspotential [eV]	
			K	L	M	N	O			
			n=1 s	n=2 s p	n=3 s p d	n=4 s p d	n=5 s p			
1	Wasserstoff	H	1					$2S_{1/2}$	13,60	
2	Helium	He	2					$1S_0$	24,58	
3	Lithium	Li	2	1				$2S_{1/2}$	5,39	
4	Beryllium	Be	2	2				$1S_0$	9,32	
5	Bor	B	2	2	1			$2P_{1/2}$	8,30	
6	Kohlenstoff	C	2	2	2			$3P_0$	11,26	
7	Stickstoff	N	2	2	3			$4S_{3/2}$	14,54	
8	Sauerstoff	O	2	2	4			$3P_2$	13,61	
9	Fluor	F	2	2	5			$2P_{3/2}$	17,42	
10	Neon	Ne	2	2	6			$1S_0$	21,56	
11	Natrium	Na	2	2	6	1		$2S_{1/2}$	5,14	
12	Magnesium	Mg	2	2	6	2		$1S_0$	7,64	
13	Aluminium	Al	2	2	6	2	1	$2P_{1/2}$	5,98	
14	Silicium	Si	2	2	6	2	2	$3P_0$	8,15	
15	Phosphor	P	2	2	6	2	3	$4S_{3/2}$	10,55	
16	Schwefel	S	2	2	6	2	4	$3P_2$	10,36	
17	Chlor	Cl	2	2	6	2	5	$2P_{3/2}$	13,01	
18	Argon	Ar	2	2	6	2	6	$1S_0$	15,76	
19	Kalium	K	2	2	6	2	6	$2S_{1/2}$	4,34	
20	Calcium	Ca	2	2	6	2	6	$1S_0$	6,11	
21	Scandium	Sc	2	2	6	2	6	1	$2D_{3/2}$	6,56
22	Titan	Ti	2	2	6	2	6	2	$3F_2$	6,83
23	Vanadium	V	2	2	6	2	6	3	$4F_{3/2}$	6,74
24	Chrom	Cr	2	2	6	2	6	5	$7S_3$	6,76
25	Mangan	Mn	2	2	6	2	6	5	$6S_{5/2}$	7,43
26	Eisen	Fe	2	2	6	2	6	6	$5D_4$	7,90
27	Kobalt	Co	2	2	6	2	6	7	$4F_{9/2}$	7,86
28	Nickel	Ni	2	2	6	2	6	8	$3F_4$	7,63
29	Kupfer	Cu	2	2	6	2	6	10	$2S_{1/2}$	7,72
30	Zink	Zn	2	2	6	2	6	10	$1S_0$	9,39

Aus Haken-Wolf

9. Atome und Strahlungsprozesse



optische Übergänge:
Symmetrien & Auswahlregeln



Röntgenstrahlung



strahlungslose Prozesse

LASER



9.1 Röntgenstrahlung

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

- Erzeugungsmechanismen:

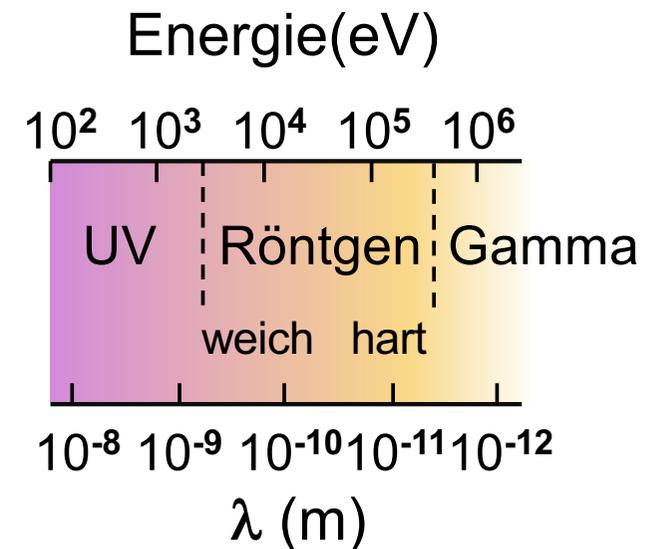
- a) Bremsstrahlung (kontinuierlich)
- b) Röntgenfluoreszenz (diskret)
- c) Thermisch (kontinuierlich, max. bis 1-2 keV)
- d) Synchrotronstrahlung (kontinuierlich)



1. Nobelpreis
1901

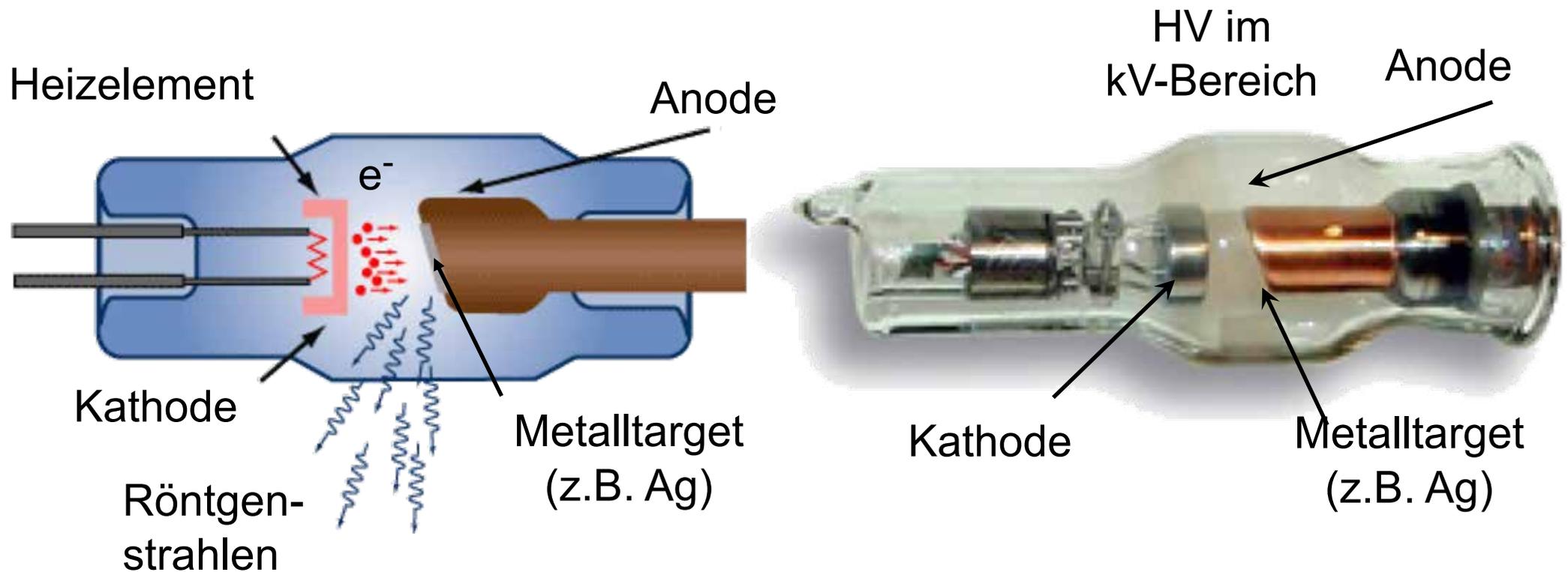


Wilhelm Conrad
Röntgen



Klassische Erzeugung: Röntgenröhre

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



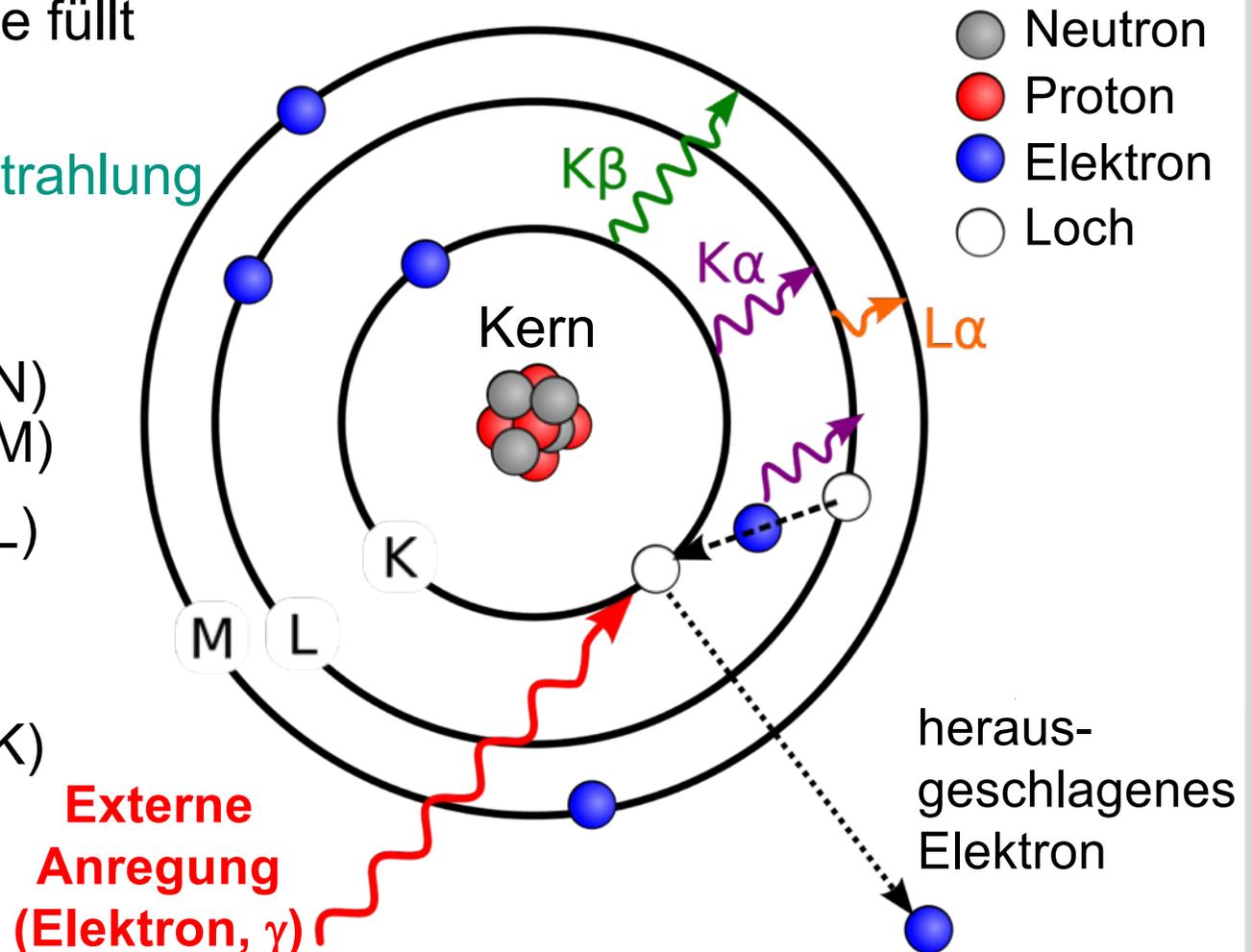
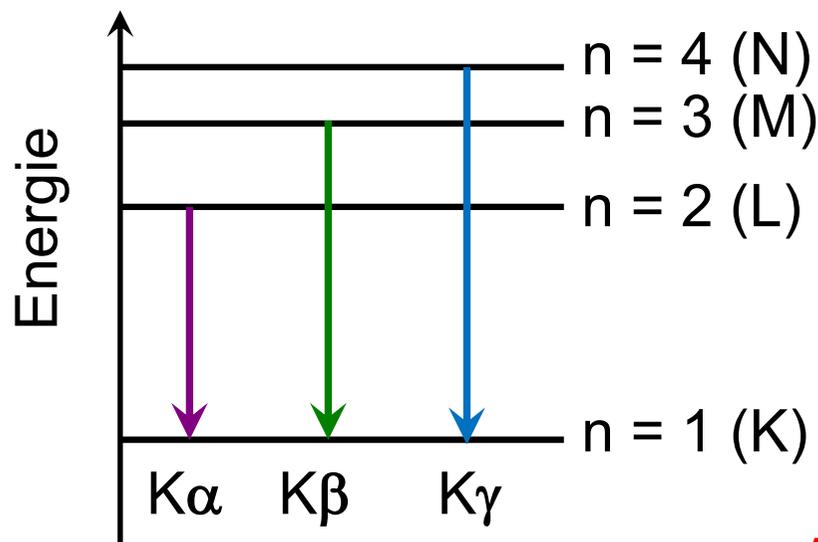
1. Charakteristische Röntgenstrahlung

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

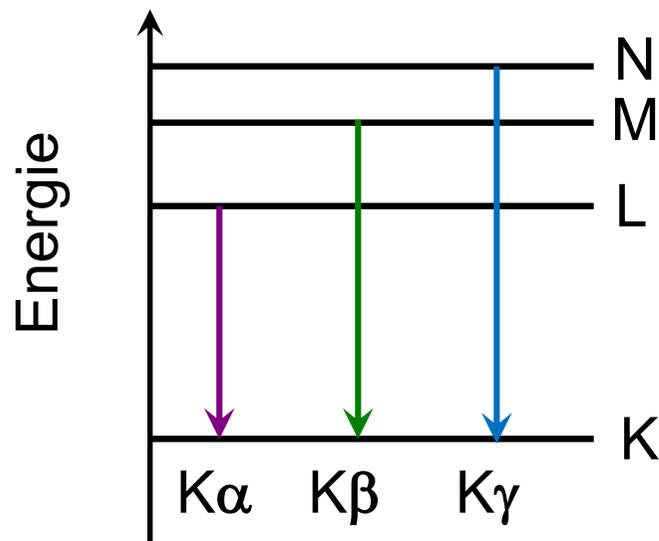
Elektron aus höherer Schale füllt

Vakanz auf, dabei entsteht

charakteristische Röntgenstrahlung

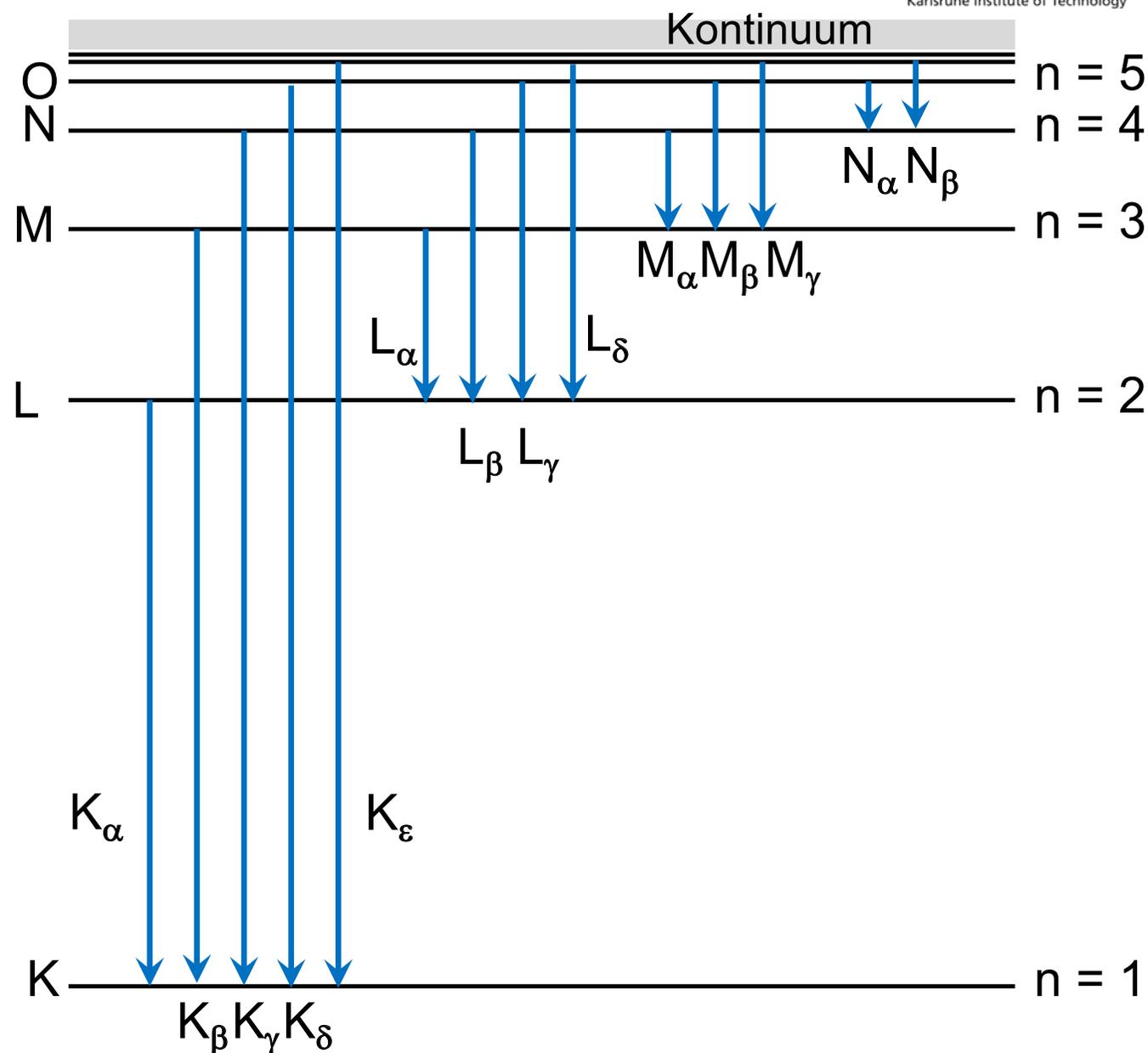


- Energie der charakteristischen Röntgenstrahlung (1-100 keV) entspricht der Energiedifferenz der Schalen (elementspezifisch)
 - Nomenklatur der Schalen: **K, L, M, N, O, P, ...** ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$)
 - Index α : $\Delta n = 1$ (d.h. Übergang $L \rightarrow K, M \rightarrow L, \dots$)
 -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



- **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_{eff}

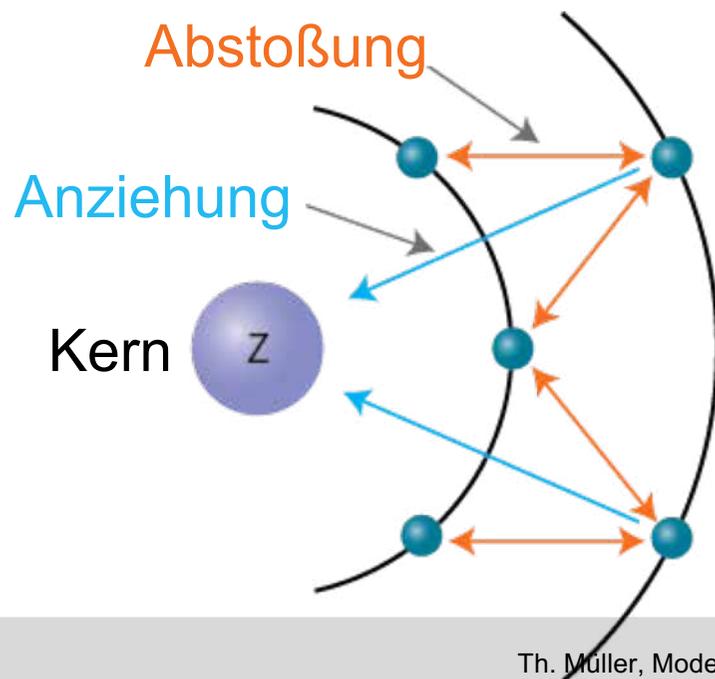


Moseleysches Gesetz: Z_{eff}

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

Röntgenenergie $E \sim Z_{\text{eff}}^2 \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ Z_{eff} = effektive Kernladungszahl (Abschirmung durch innere e^-)

Bs: Blei $Z=82$: $E_K = (82-1)^2 * 13.6 \text{ eV} = 88 \text{ keV}$



äußere
Elektronen

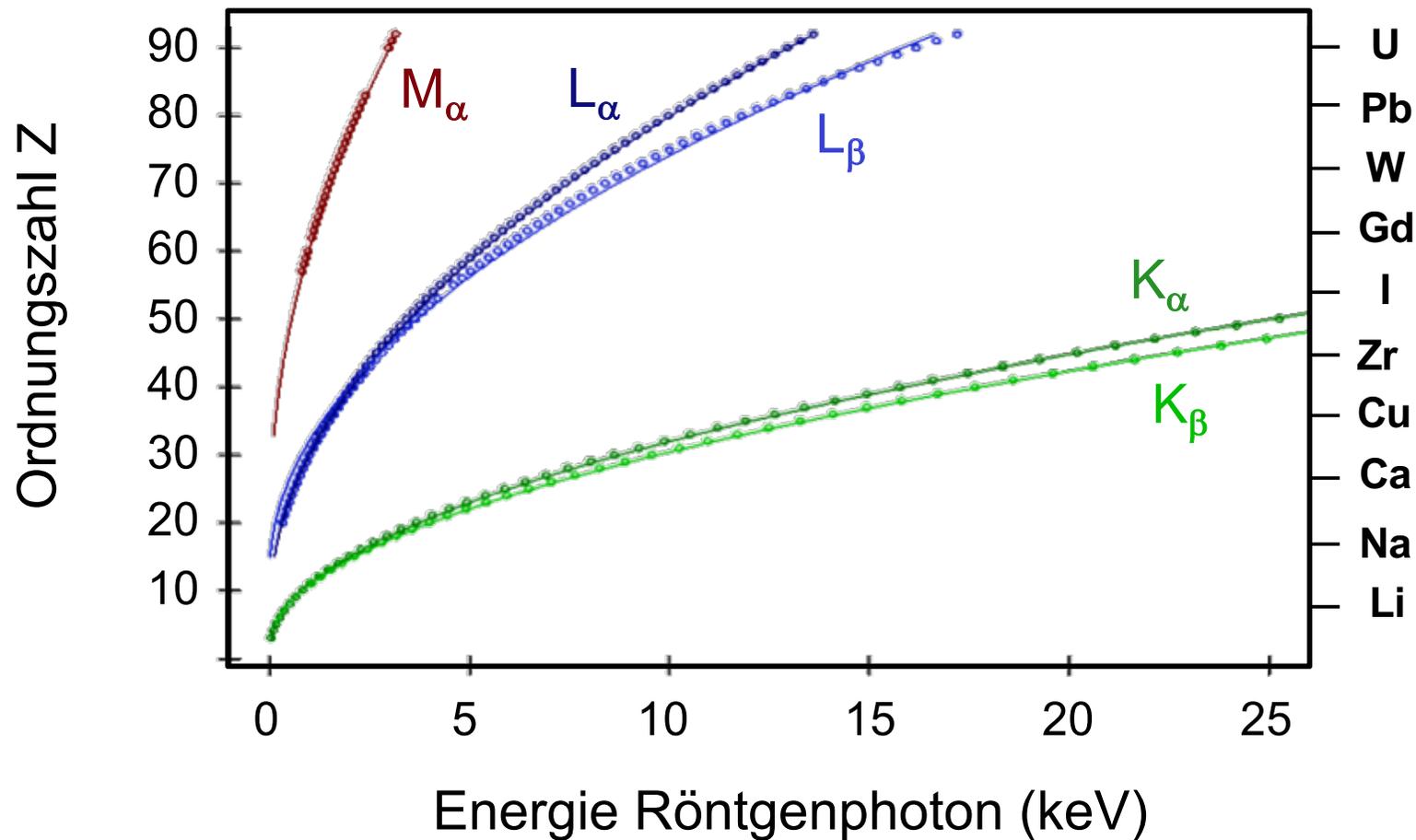
Abschirmung der
Kernladung
durch Elektronenhülle

$$Z \Rightarrow Z_{\text{eff}}$$



Henry
Moseley

- **Empirische Relation** zur Abschätzung der Energien der K_{α} -Linien für verschiedene Elemente mit Ordnungszahl Z

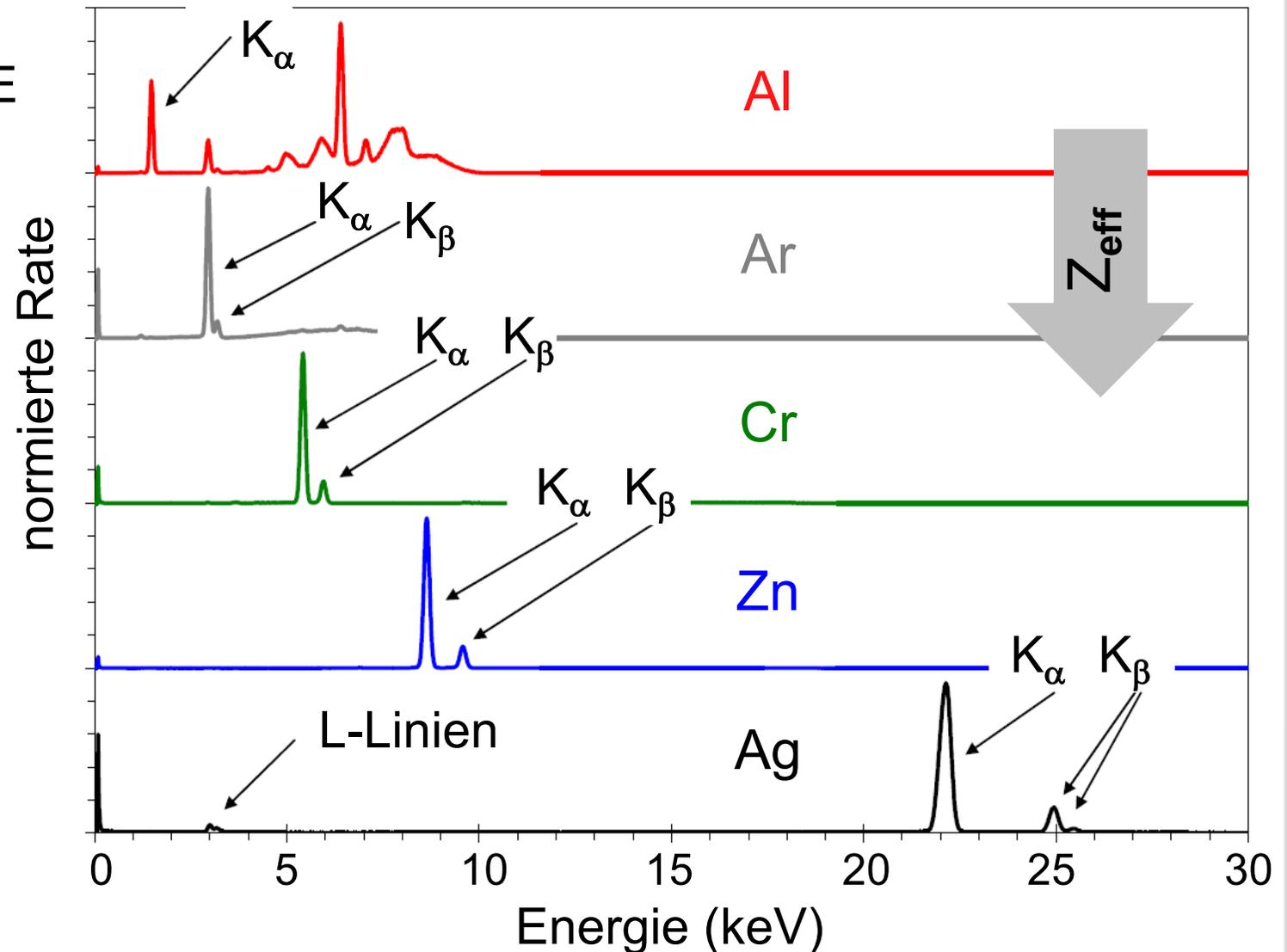


■ Röntgenfluoreszenzlinien wichtig zur Charakterisierung von Detektoren

- Energieauflösung ΔE
- Linearität der Energieskala



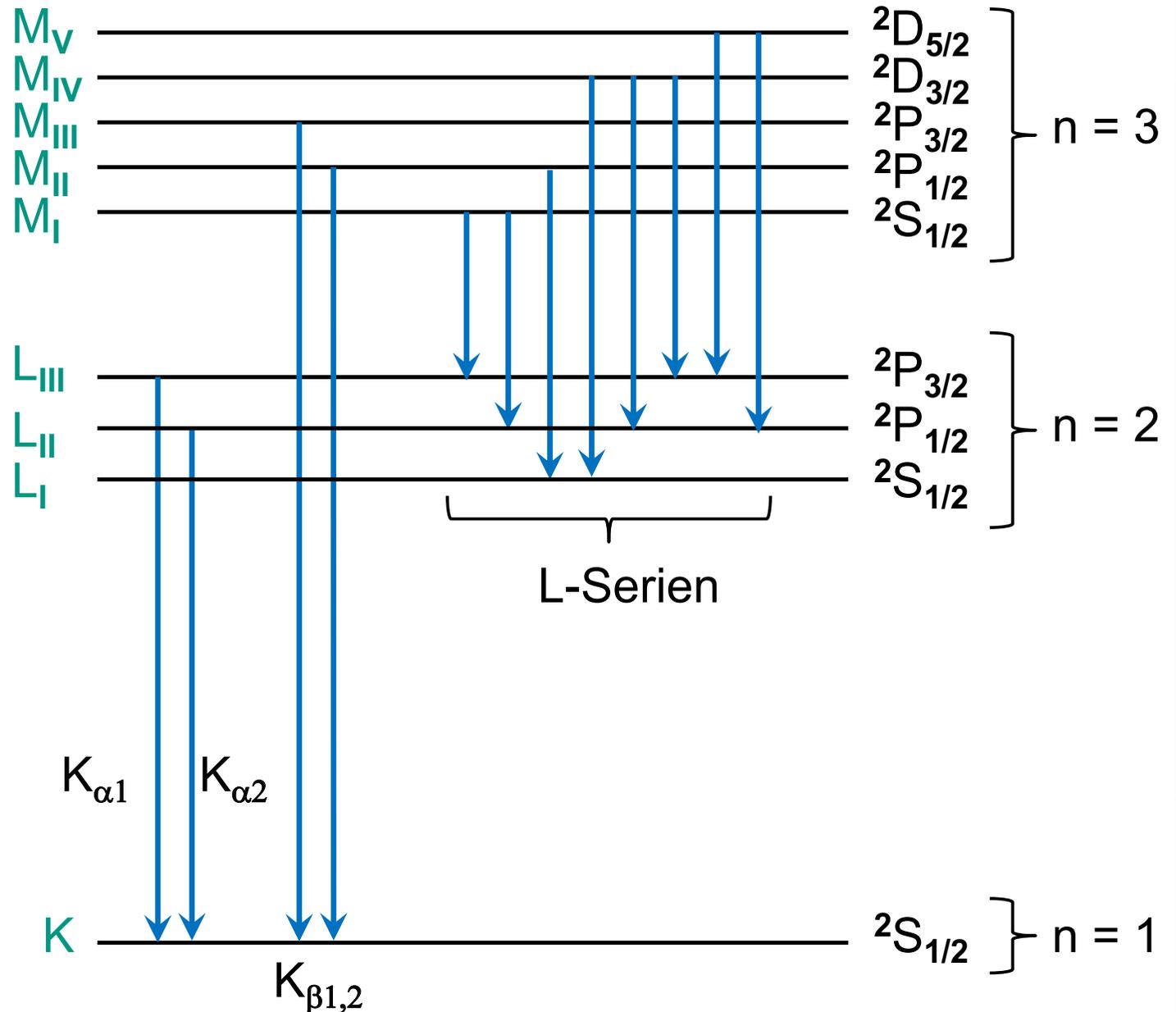
Siliziumdriftdetektoren



Feinstruktur der Röntgenspektren

■ **Termschema** der Feinstruktur von Röntgenspektren:

- gemäß den Auswahlregeln für Strahlungsübergänge



2. Bremsstrahlung

■ Radiative Bremsstrahlungsverluste:

- Energieverlust hochenergetischer Elektrons (MeV) in Materie

⇒ **Kontinuierliches Energiespektrum der abgestrahlten Röntgenphotonen**

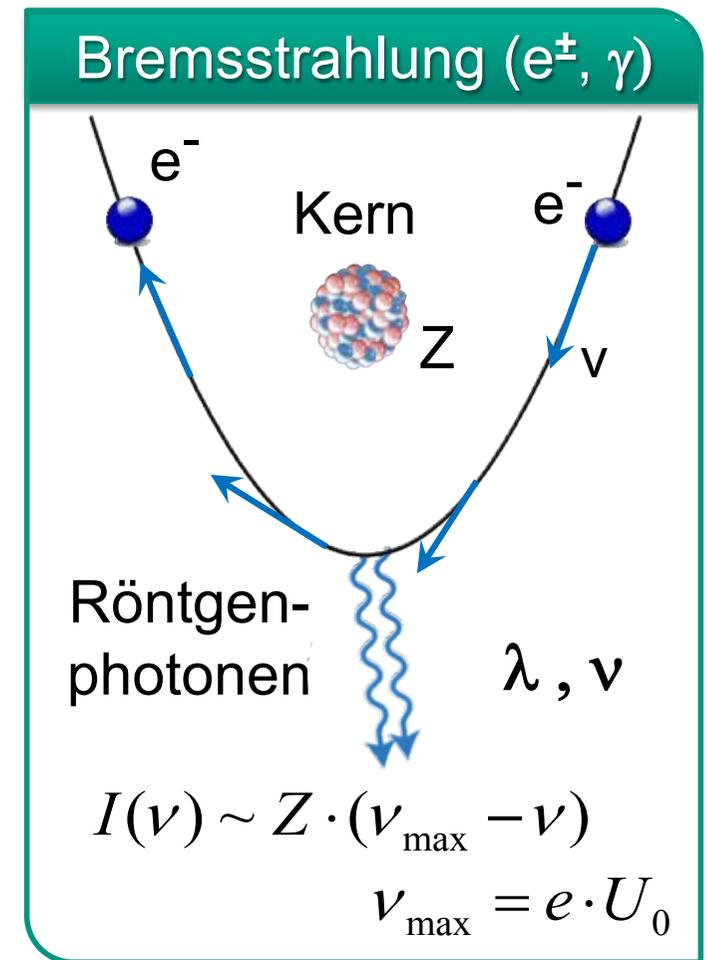
- Energieverluste nehmen linear zu mit der Energie E des Elektrons:

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

- Materialspezifische Größe:

Strahlungslänge X_0 in $[g/cm^2]$

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



Absorption von Röntgen und γ - Strahlung

■ Durchtritt durch Materie:

Röntgenstrahlung wird absorbiert & gestreut

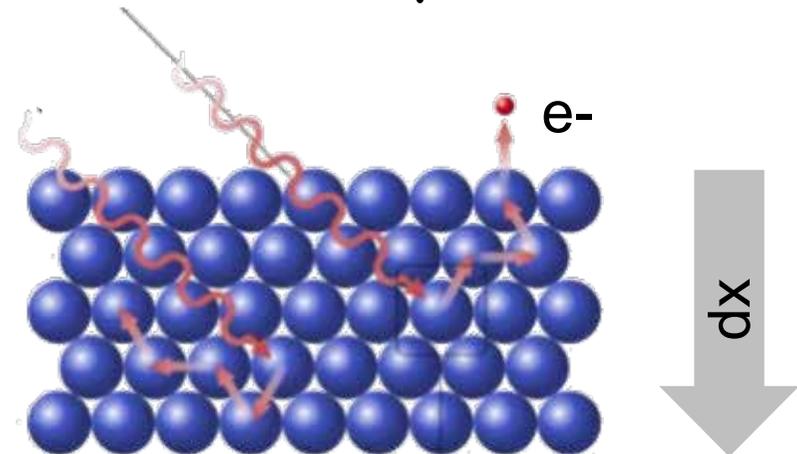
- **Intensität I** der Strahlung schwächt sich entsprechend des **Lambert-Beerschen Gesetzes** **exponentiell** ab

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

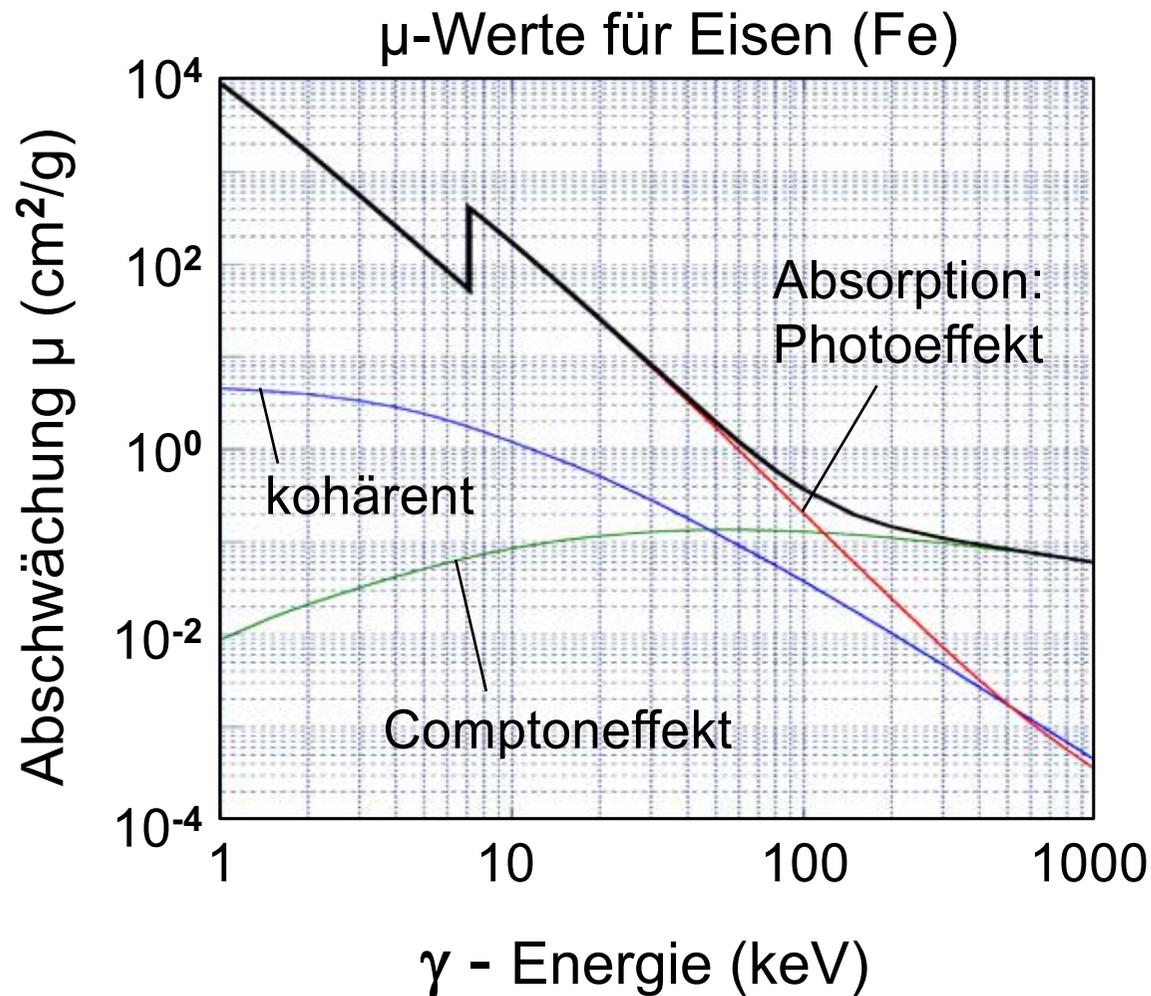
$$I = I_0 \cdot e^{-\int \mu(x) dx}$$

μ : Massen-
Absorptionskoeffizient
Für Röntgenstrahlung

Röntgen-Photonen oder
hochenergetische γ -Strahlung



Absorptionskoeffizient für Röntgenstrahlung



Beispiele:

$$E_\gamma = 10 \text{ keV:}$$

$$d(\text{Al}) = 10^{-2} \text{ cm}$$

$$d(\text{Pb}) = 7,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$$

$$E_\gamma = 100 \text{ keV:}$$

$$d(\text{Al}) = 1,6 \text{ cm}$$

$$d(\text{Pb}) = 10^{-2} \text{ cm}$$

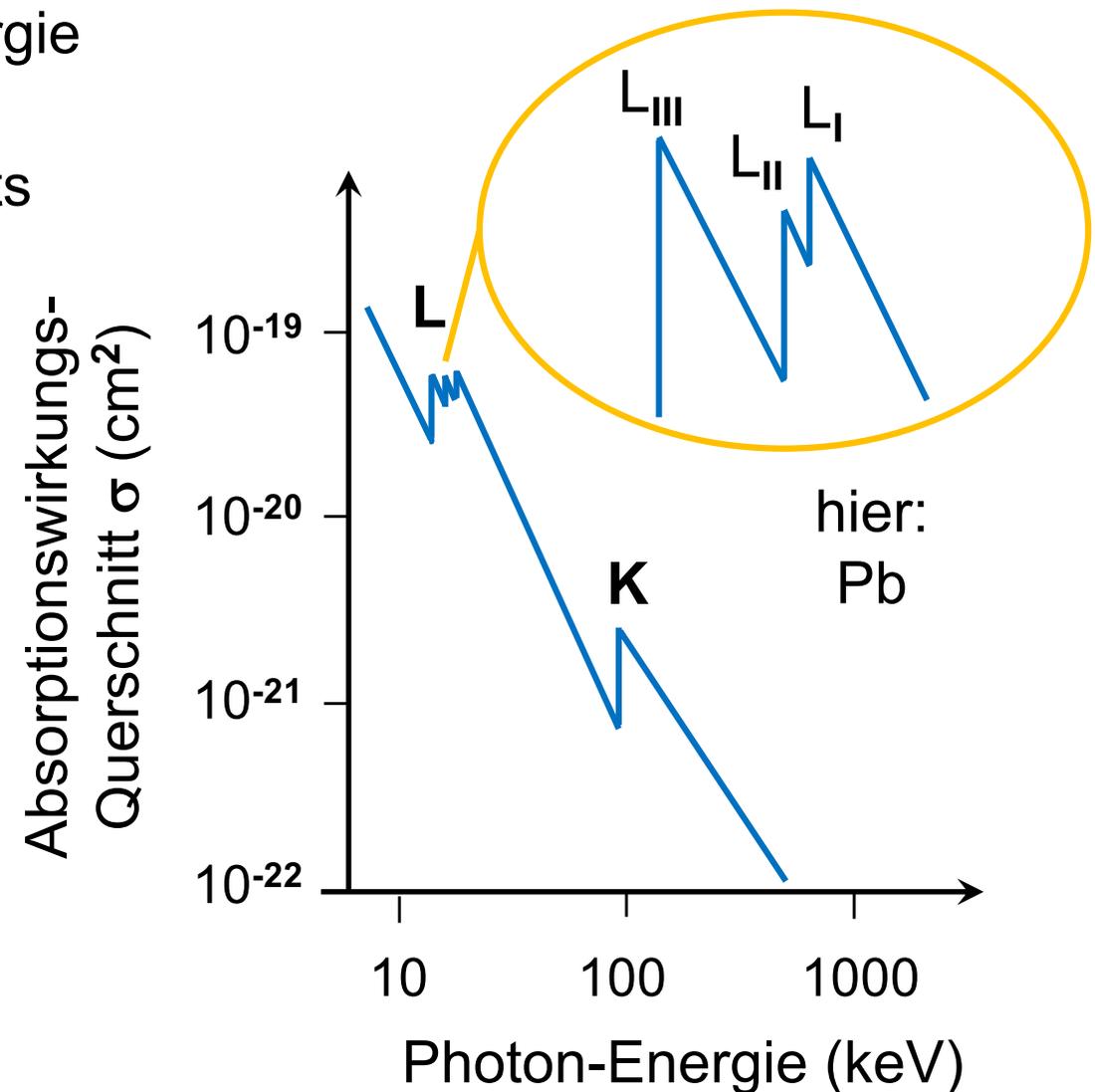
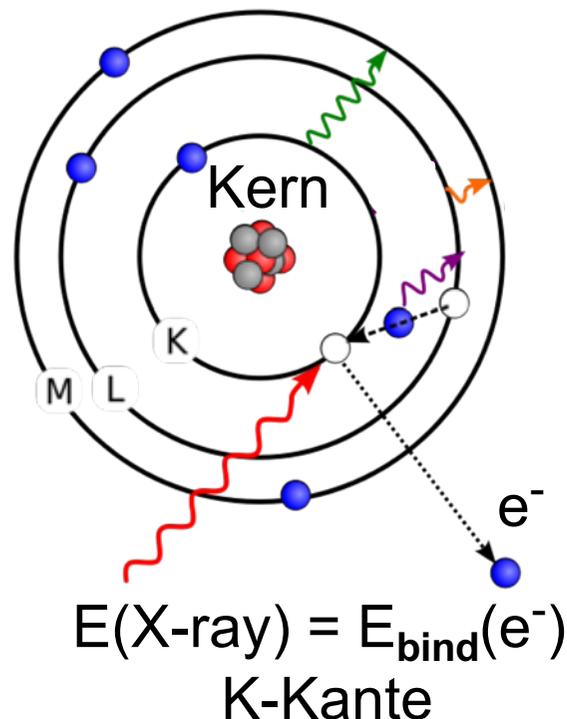
Röntgenabsorption – K, L, ... Kanten

■ σ_{\max} an den Absorptionskanten:

Röntgenenergie \equiv Ionisationsenergie
eines der inneren Elektronen

(K-Schale, L-Schale) des Elements

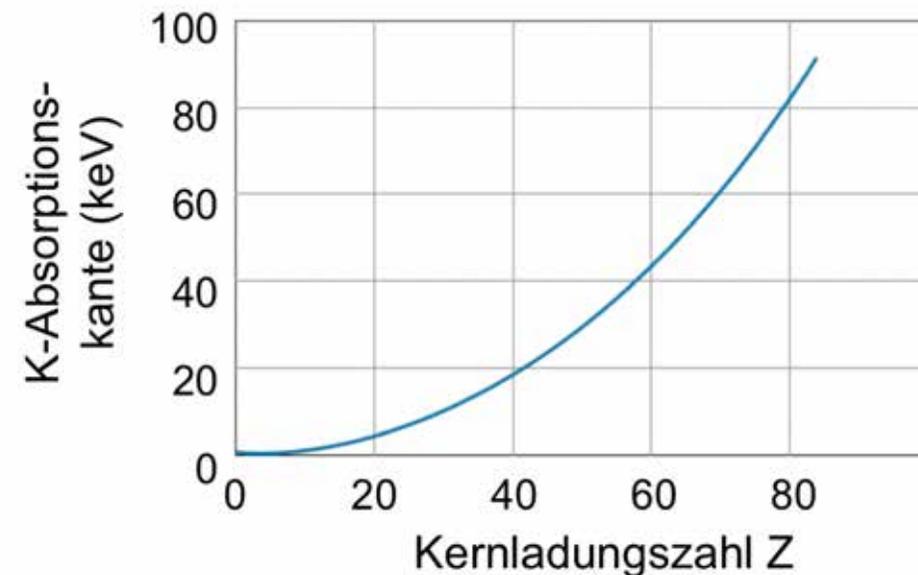
\Rightarrow Elektron wird in das Grenz-
kontinuum mit $E_{\text{kin}} \sim 0$ emittiert



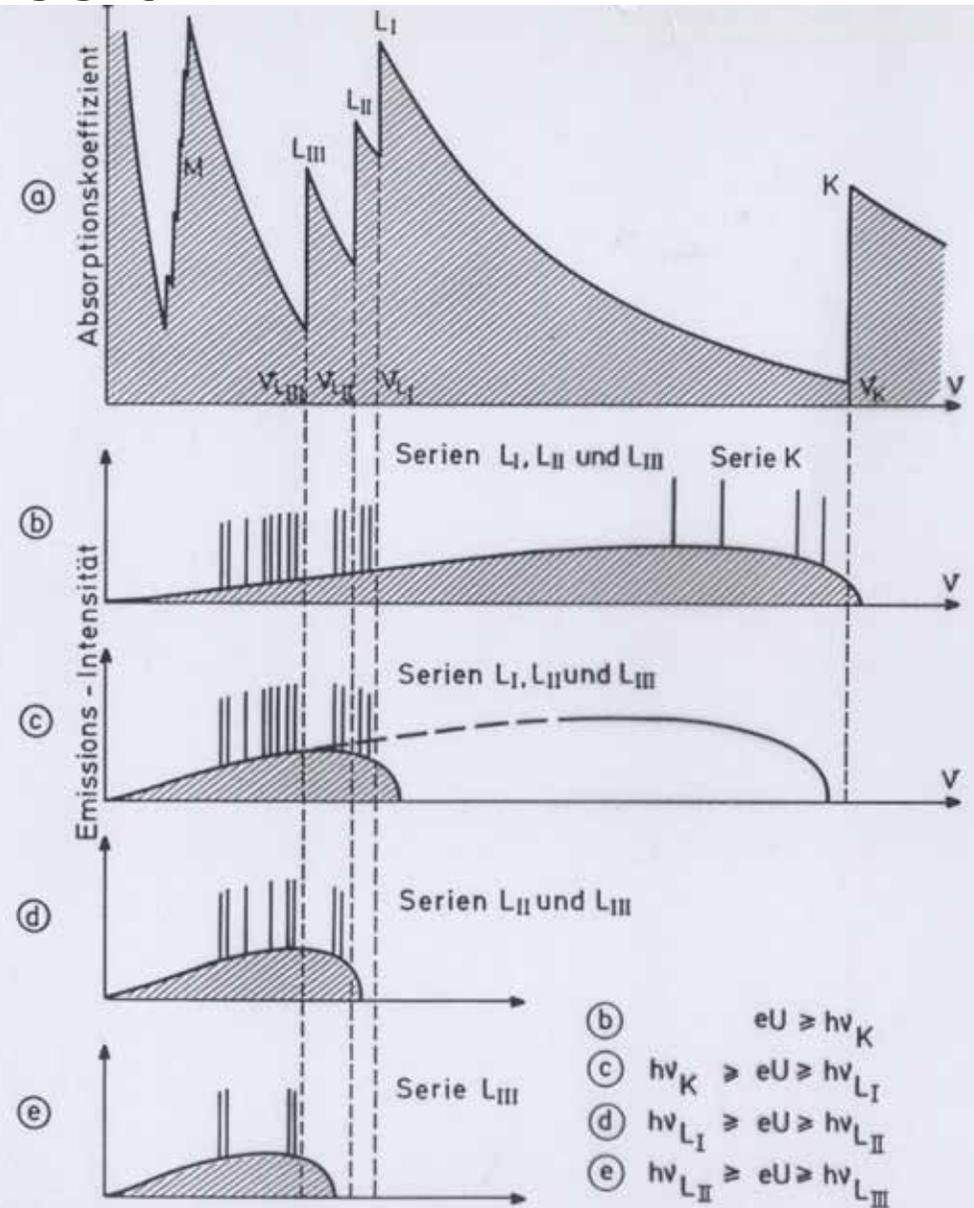
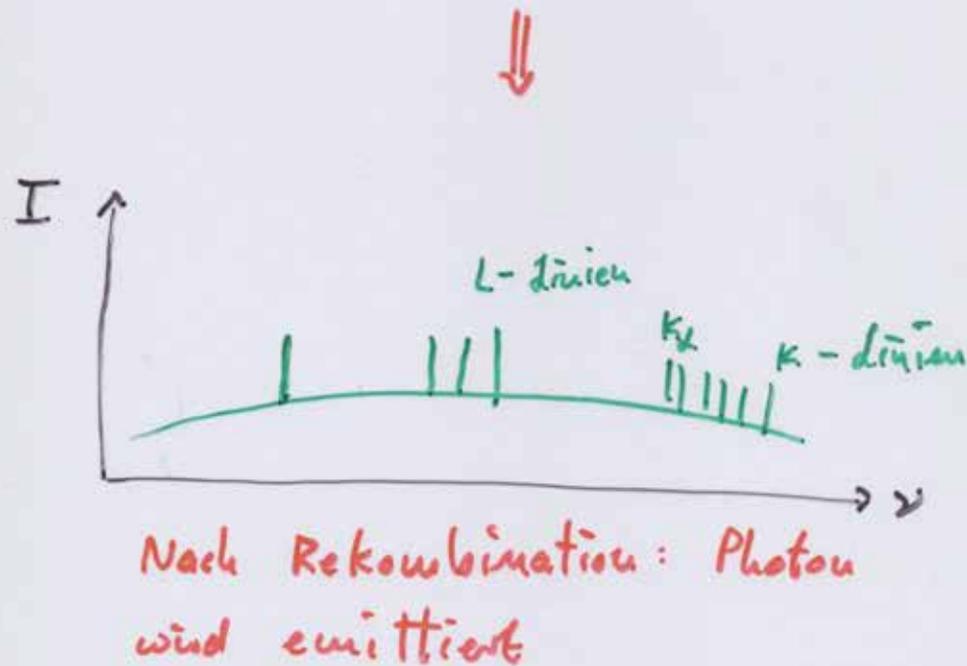
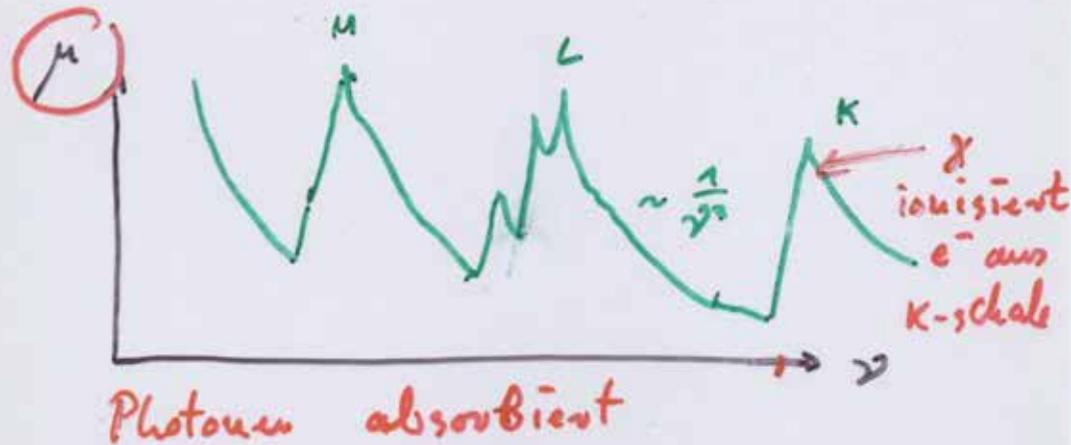
■ **Absorptionskanten** (K-Kante, L-Kante,...) sind element-spezifisch

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

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



Röntgenabsorption und -emission



Anwendung: CT Scans

■ CT-Scans:

Computer-Tomographie

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

- Quelle: Röntgenröhre mit

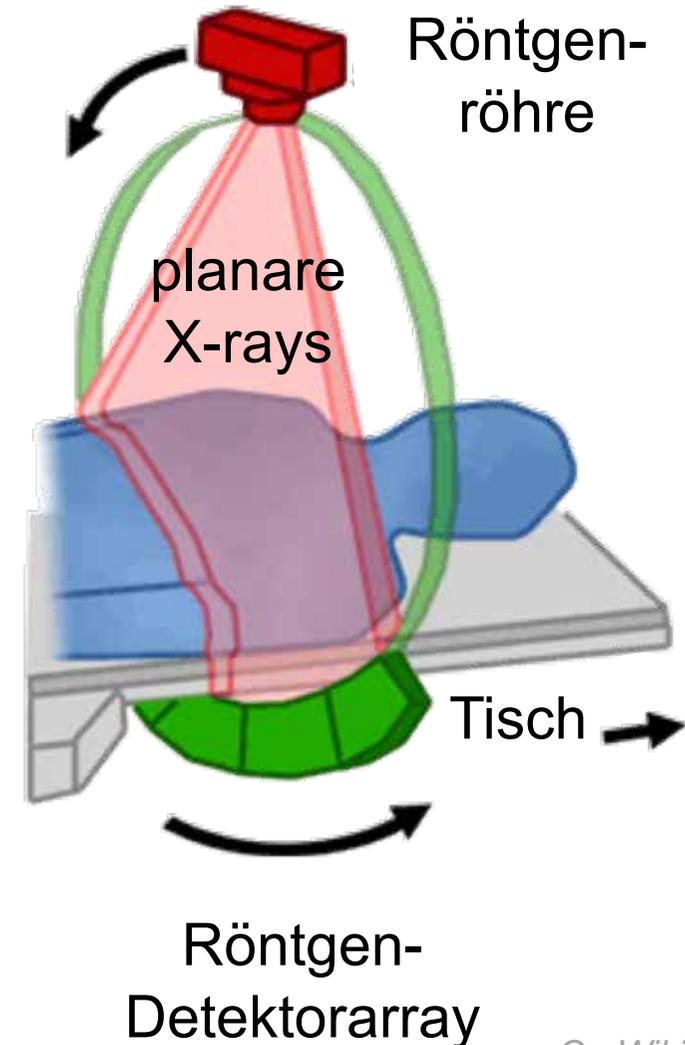
$U = 80-140 \text{ kV}$



- Nachweis: planares Detektorarray

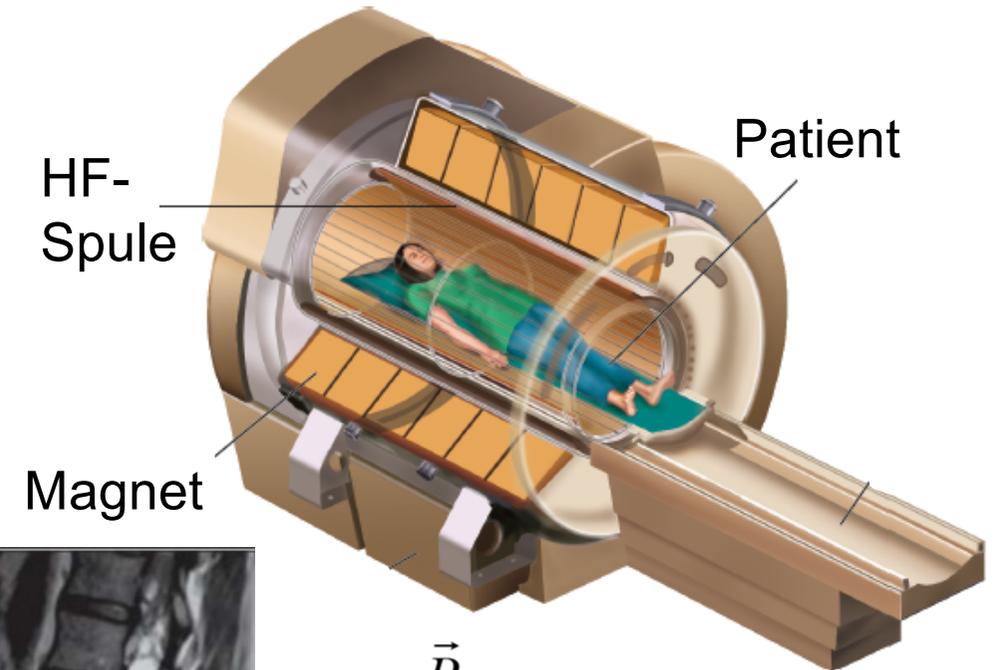
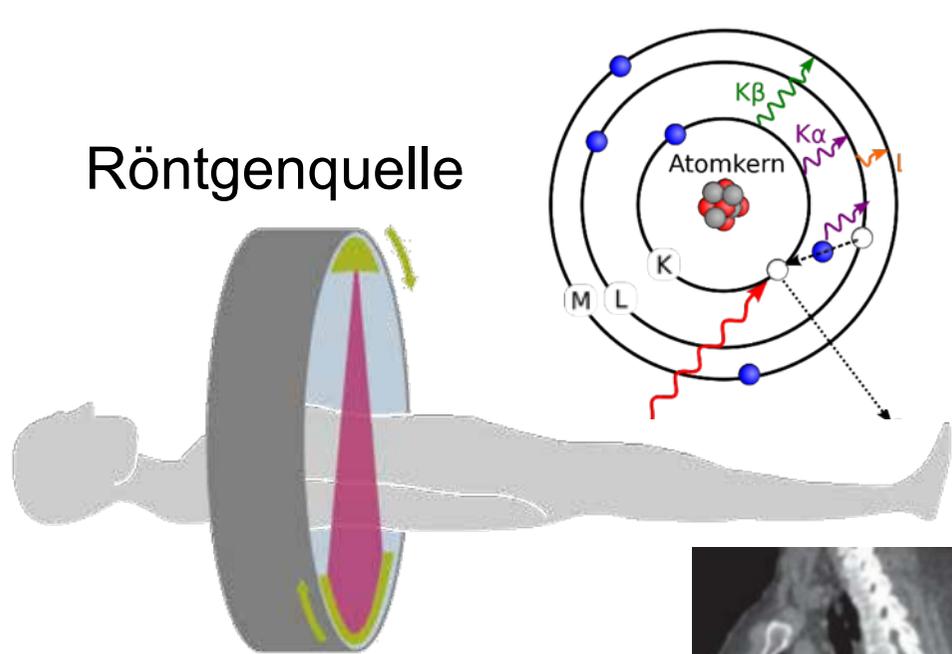
- Erstellung eines 3-dim. Bildes durch
Abschwächung
der X-Rays

CT-Scan
Knie



Q.: Wikipedia

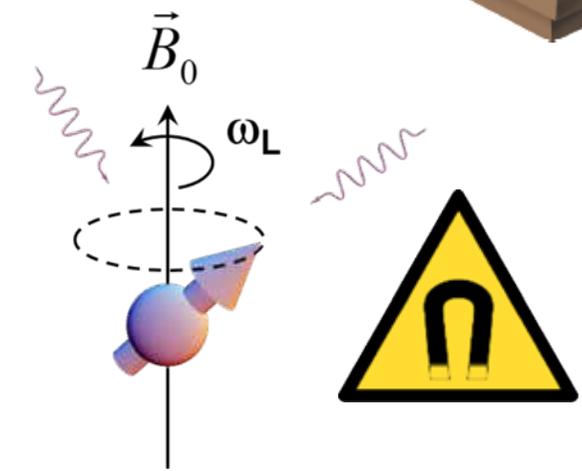
Medizintechnik: CT-Scan und MRI Scan



Röntgendetektoren



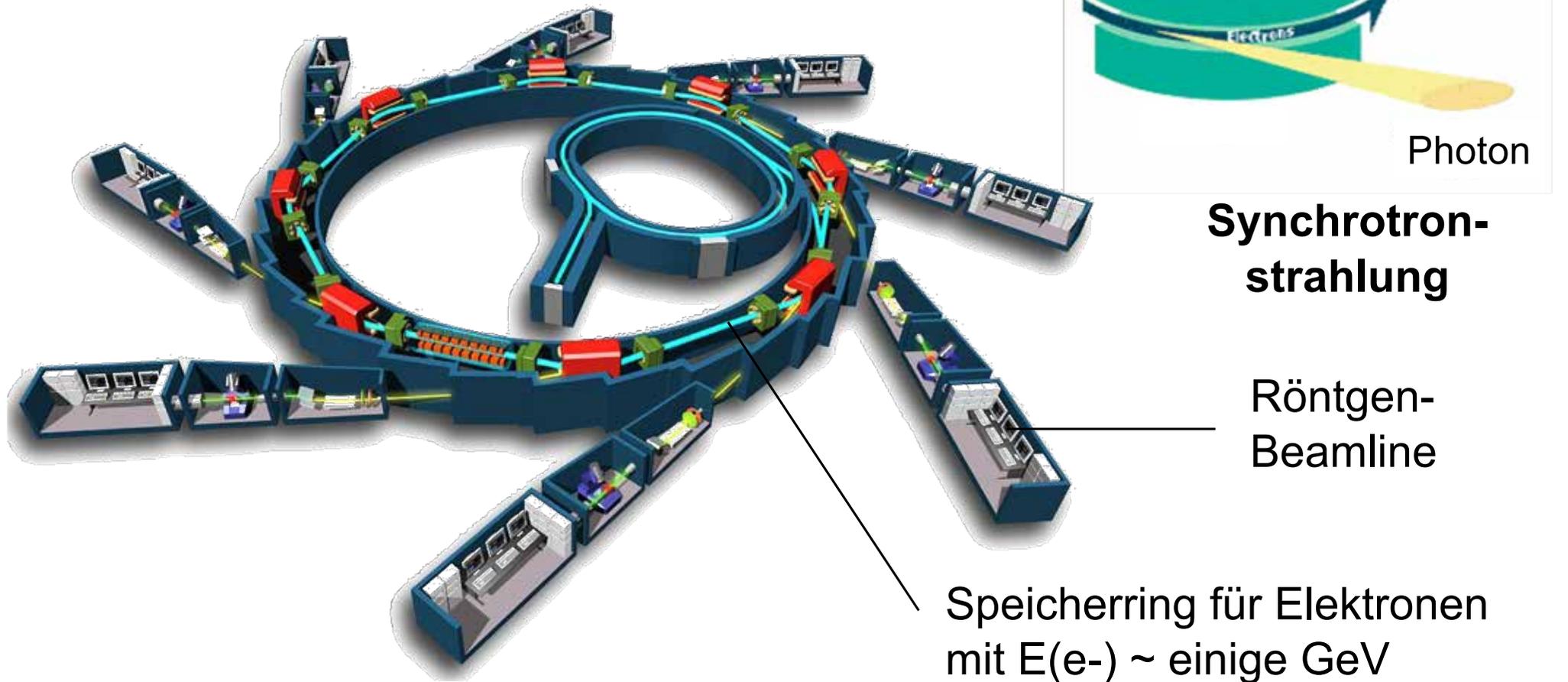
CT Scanner



MRI Scanner

Röntgenstrahlung am Speicherring

- Erzeugung von **Synchrotronstrahlung** an Elektronen-Speicherringen:
 - Beamlines für Röntgen-Mikroskopie,...
 - Anwendung in Festkörperphysik, Biologie,...



9.2 Strahlungslose Prozesse

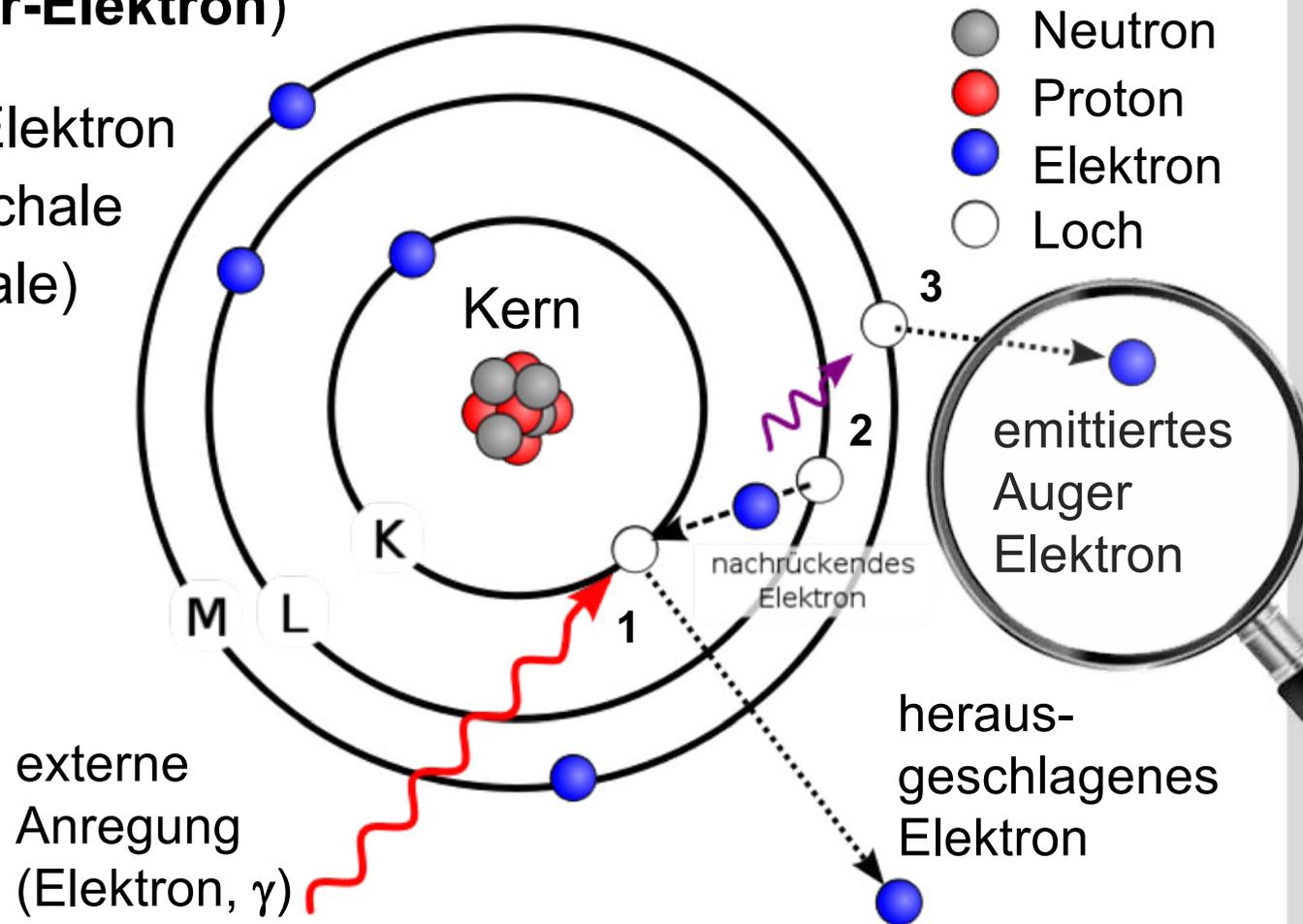
- **Auger-Effekt:** Auffüllen der Vakanz in der inneren Schale erfolgt **strahlungslos** (kein Fluoreszenzphoton!) \Rightarrow Emission eines Elektrons von äußerer Schale (**Auger-Elektron**)

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

erste Nachweise durch:



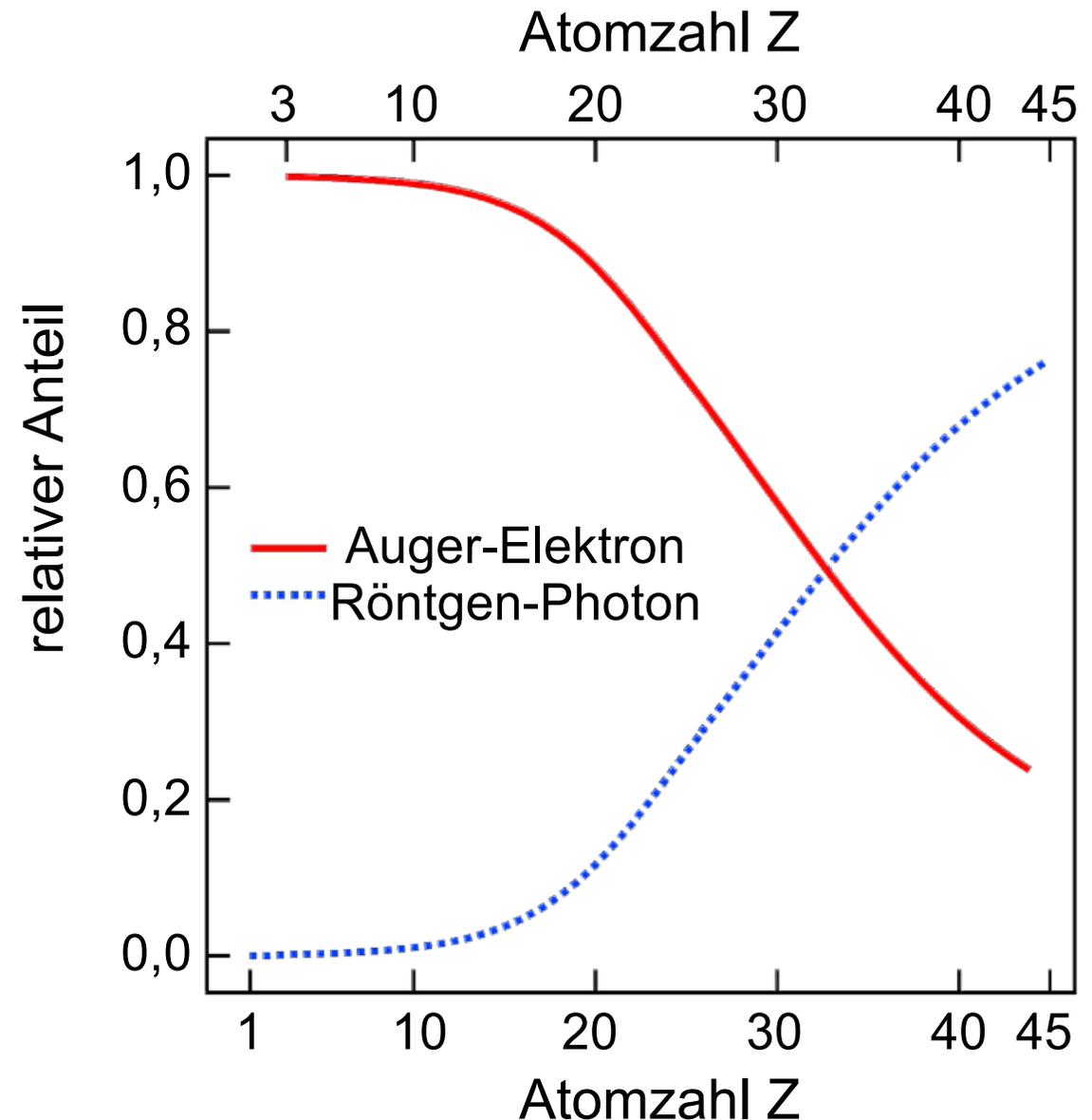
Pierre Auger Lise Meitner



Auger-Effekt vs. Röntgenfluoreszenz

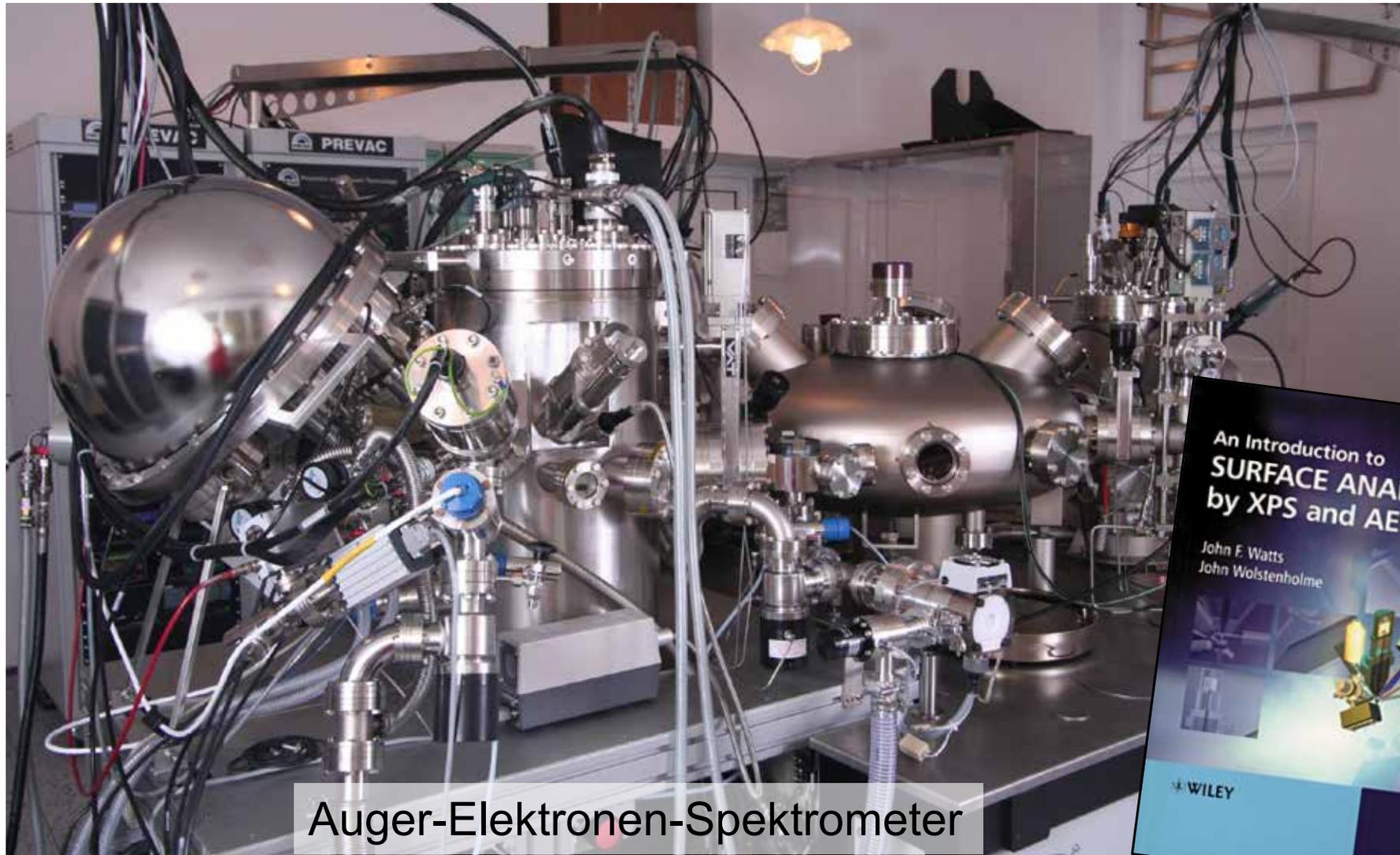
■ Röntgenfluoreszenz und strahlungslose Prozesse stehen bei der Abregung von Atomen nach dem Erzeugen einer Vakanz in **direkter Konkurrenz**

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

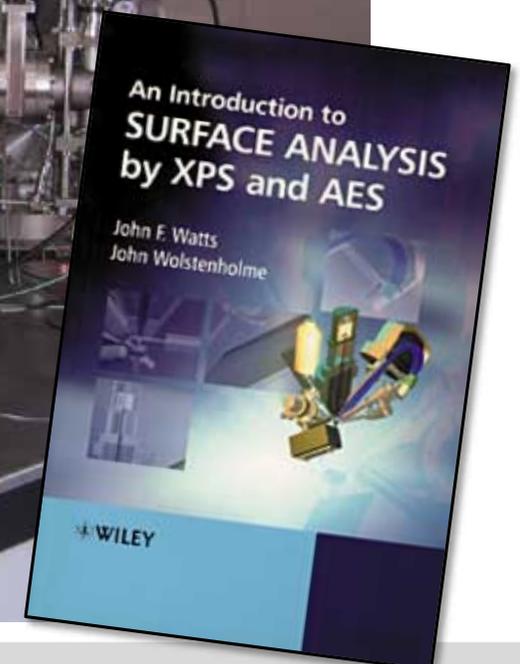


Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES)

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

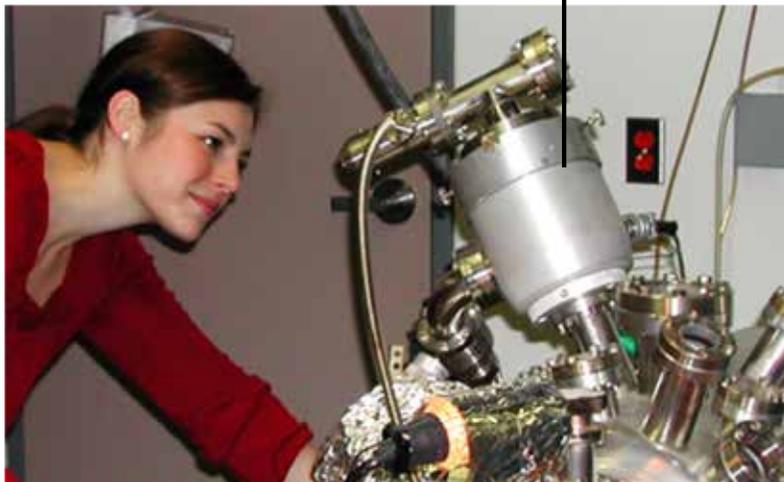


Auger-Elektronen-Spektrometer



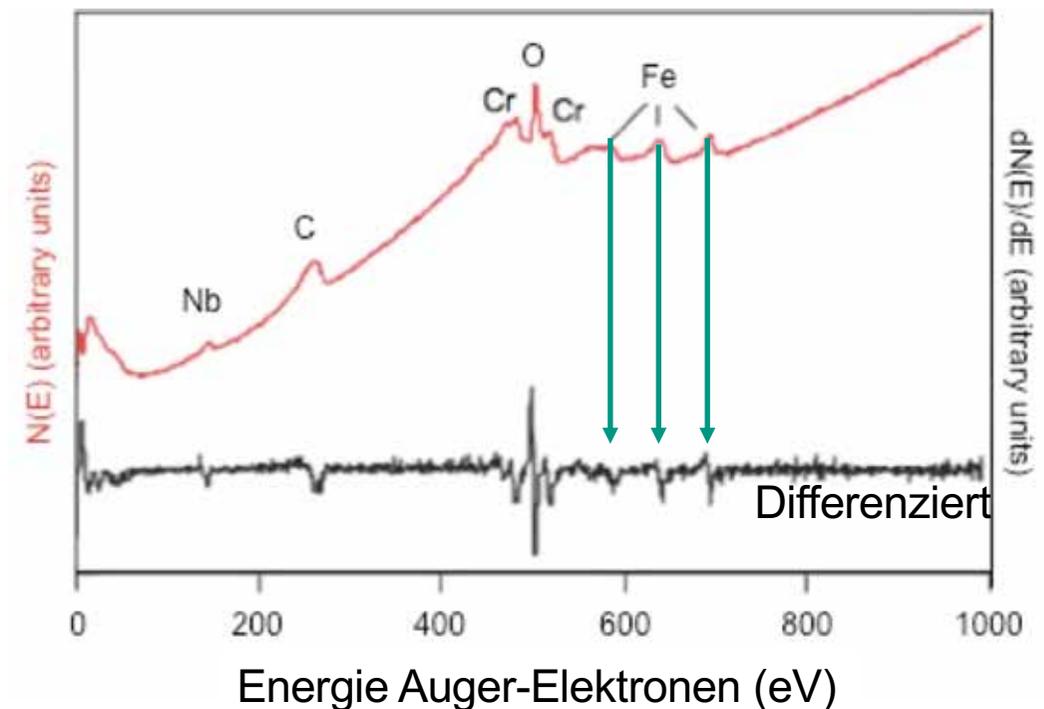
Spektroskopie von Auger-Elektronen

- 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

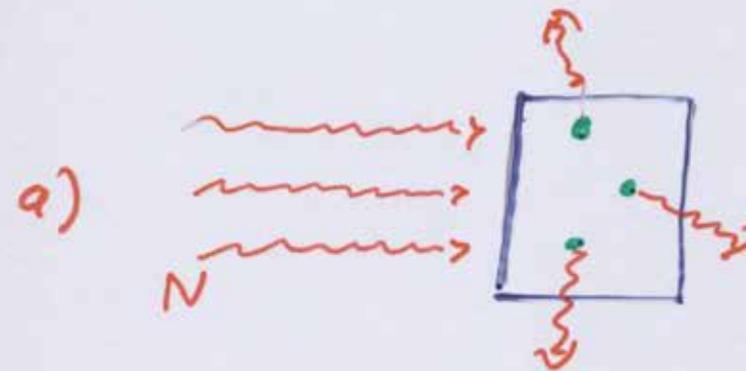


H. J. Mathieu in *Surface Analysis: The Principal Techniques*, 2nd Edition, Ed. J. C. Vickerman, Wiley-VCH, Weinheim (2011)

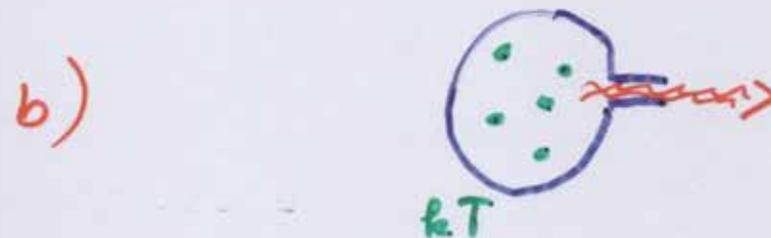
Beispiel: Oberfläche einer Fe-Legierung



• Konventionelle Emission:

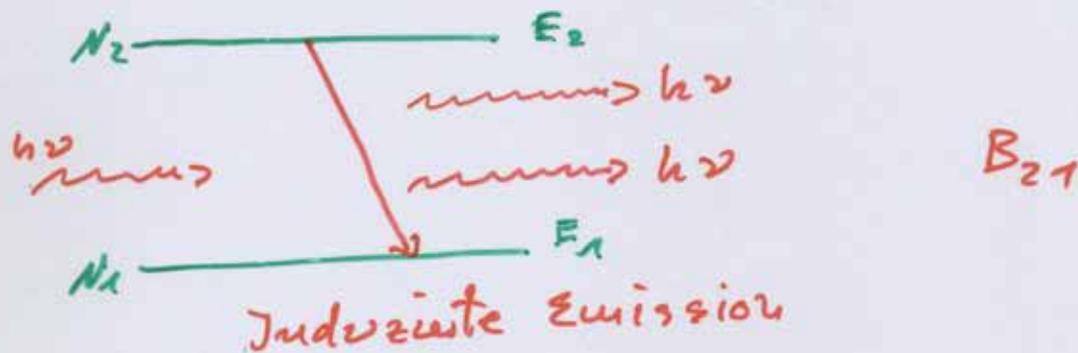
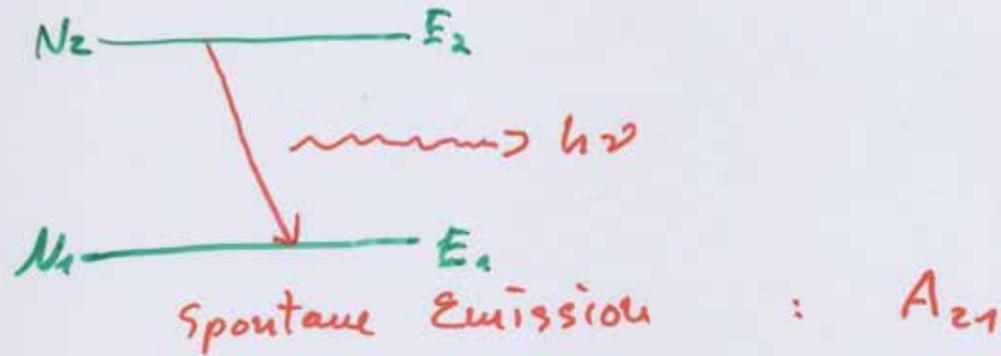
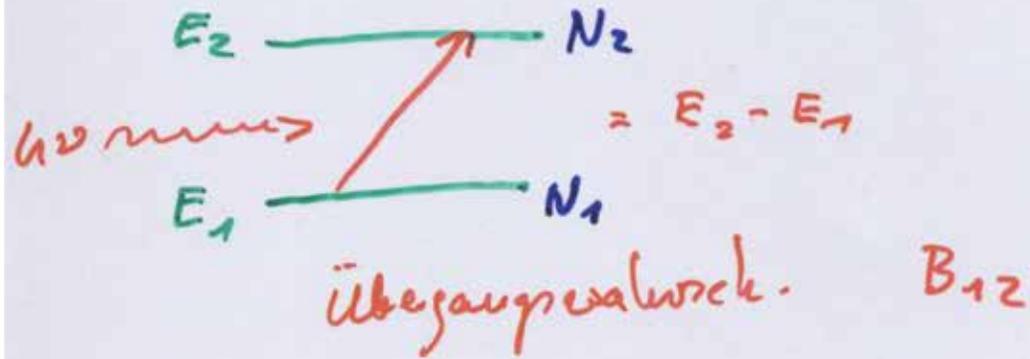


Emission von
 N γ nach
Anregung,
diskontinuierl. Linien



Strahlung eines
Schwarzen Körpers
Anregung durch
therm. Stöße,
kontinuierl. Spektrum

• Im thermischen Gleichgewicht:



$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{k \cdot T}} \quad \text{Boltzmannverteilung}$$

$$= e^{-\frac{h \nu}{k T}}$$

Für $T \rightarrow \infty$: $\frac{N_2}{N_1} \rightarrow 1$

Bsp: Wasserstoff $T = 293 \text{ K}$

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{10,2 \text{ eV} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV}}{293 \text{ K} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}}}$$

$$= e^{-409} \approx 0$$

Für $T = 6000 \text{ K}$ (Sonne):

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-20}$$

dh: von außen induzierte Emission nicht möglich.

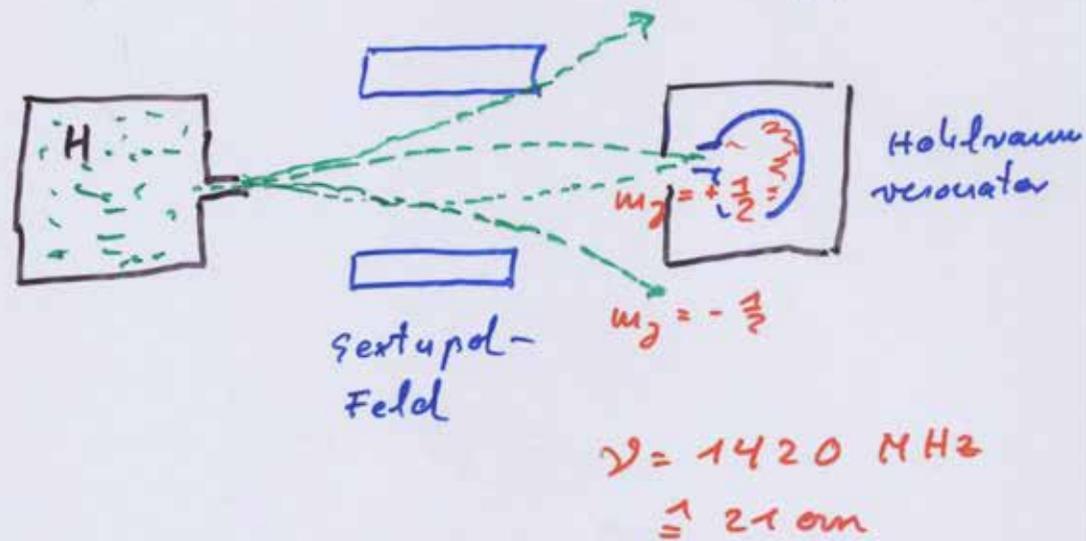
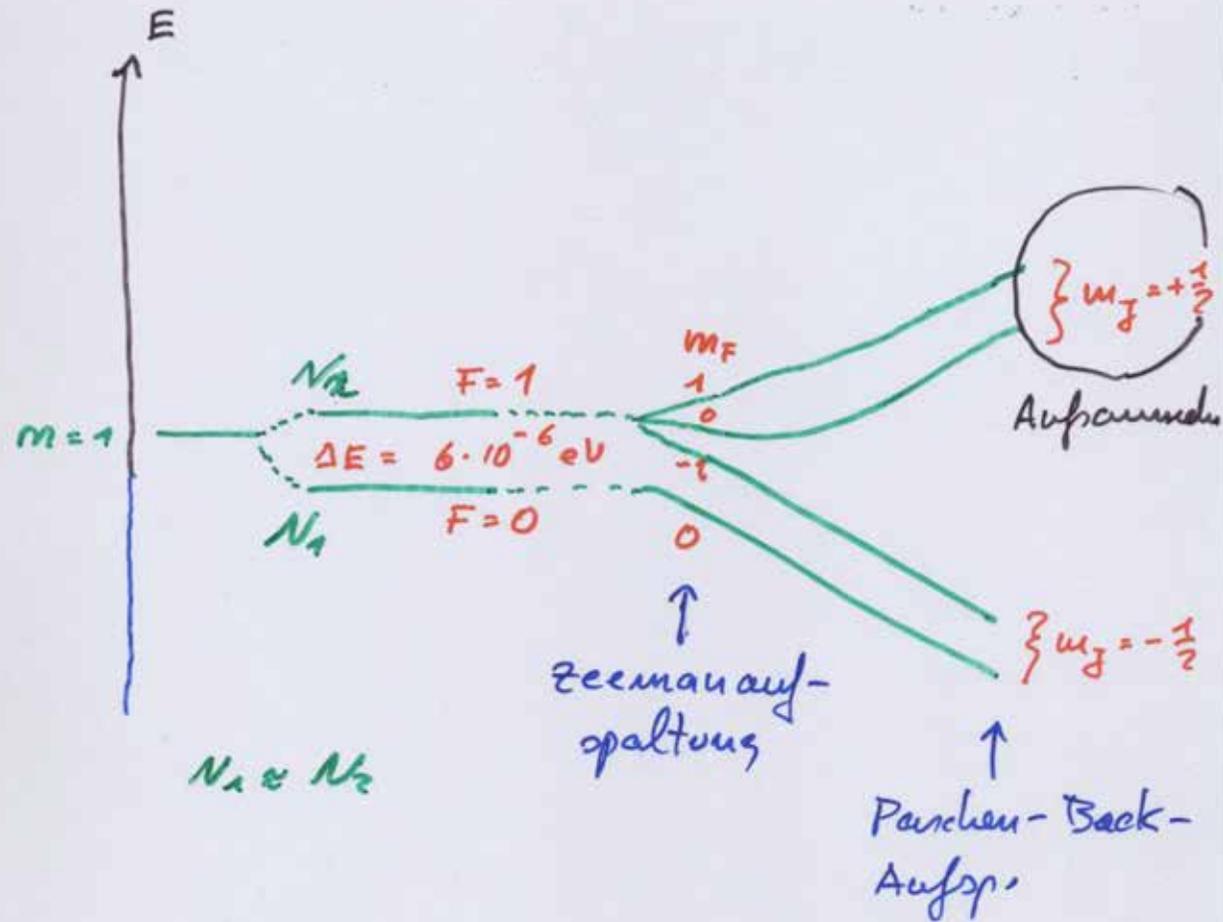
Nötig : $N_2 > N_1$!

Lösung

Methode 1] Separation von Atomen
oder Molekülen im Zustand E_2
von denen im Zustand E_1

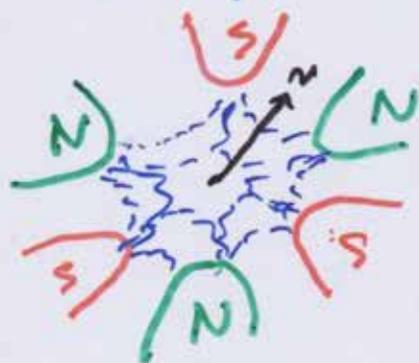
z.B. Wasserstoff-Maser

Separation der HFS Zustände
[je kleiner ΔE , desto mehr N_2 -Zust.]



* Verwendung von Teflon auf Quarz
 im Adulraum: Stöße an der Wand
 führen nicht zur
 Deexcitation

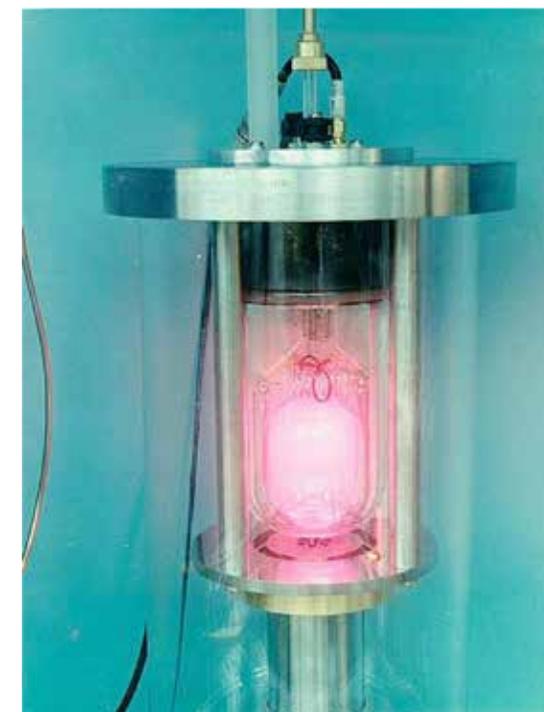
* Sextupol



Kraft auf Magn.
 Momente

$$F = \mu \cdot \frac{dB}{dv} \sim \mu \cdot v$$

effekt: Fokussierung der angeregten
 Atome ($m_z = +\frac{3}{2}$)



Wasserstoffmaser
 Quelle: Wikipedia