

Im Festkörper: höchstes besetztes Band: Valenzband ; niedrigstes unbesetztes Band: Leitungsband .

Tendenziell:

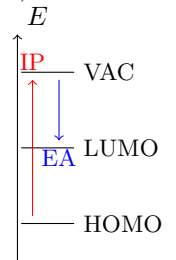


Bindungstypen:

kovalent Ausbildung gemeinsamer e^- -Paare zwischen Atomen; gerichtete Bindung.

ionisch Ionisation beider Partner durch Elektronenübergang (einer mit niedriger Ionisationsenergie (IP), der andere mit hoher Elektronenaffinität (EA)); ungerichtete Bindung;

Paarpotential: $\varphi_{ij} = \pm \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{B}{r_{ij}^n}$, $B = const., n > 1.$



metallisch viele (ähnliche) Atome mit nicht vollständig besetzten HOMOs an Bindung beteiligt; ungerichtete Bindung; delokalisierte Elektronenwellenfunktionen.

Wasserstoffbrücken 1 H-Atom durch Partialladungen $[\delta^+, \delta^-]$ an 2 andere Atome gebunden; Molekül neutral, permanentes elektrisches Dipolmoment.

Van-der-Waals Wechselwirkung zwischen fluktuierenden Dipolen [durch thermische Bewegung und die umher erzeugten elektrischen Felder]; tritt immer auf.

LUMO - **L**owest **u**noccupied **m**olecular **o**rbital
 HOMO - **H**ighest **o**ccupied **m**olecular **o**rbital

Kristallstrukturen:

durch Bindungstyp und Gleichgewichtsabstände bestimmt, Energieminimum im Festkörper.

Einkristall höchste Ordnung (Fernordnung), periodisches Gitter.

polykristalline FK viele kleine Kristalle (nm ... cm) mit wahlloser Orientierung; an Korngrenzen schwer zu beschreiben.

amorphe FK unregelmäßige Verteilung der Atome/Moleküle (Nahordnung [2 ... 3 Gitterabstände], keine Fernordnung).

„Kristallstruktur = Punktgitter + Kristallbasis“

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos(\gamma)$$

Gitter:

2D: 5 Bravais-Gitter;	3D: 14 Bravais-Gitter.	Bezeichnungen:
	allgemein speziell kubisch	
basiszentriert	C	
flächenzentriert	F	face centered cubic
raumzentriert	I	body centered cubic
nicht zentriert	P	simple cubic / primitive cubic

Symmetrien:

Translation, Spiegelung an Ebene [m], Inversion an Ursprung [I], Drehung um Achse [C_n , n-zählige Achse].

Diese Symmetrieeoperationen bilden eine [mathematische] Gruppe:

1. Abgeschlossenheit: $A \otimes B = C$,
2. Assoziativität: $[A \otimes B] \otimes C = A \otimes [B \otimes C]$,
3. Neutrales Element: $A \otimes E = A$,
4. Inverses Element: $A^{-1} \otimes A = E$.

⇒ 32 kristallographische Punktgruppen [Bezeichnung nach Methode von Schönflies], 230 kristallographische Raumgruppen.

Indizierung von Kristallelementen:

- Position in Elementarzelle [Bruchteile von Gittervektoren]: „0 $\frac{1}{2}$ 1“

- Achsen / Richtungen in kristallographisch äquivalenten Richtungen: „ $\langle 0 \frac{1}{2} 1 \rangle$ “
 einer konkreten Richtung : „ $[0 \frac{1}{2} 1]$ “
- Ebenen über Millersche Indizes [kleinste gemeinsame Vielfache der Inversen der Achsenschnittpunkte der Ebene] für alle kristallographisch identischen Ebenen [-scharen]: „ $\{hkl\}$ “
 genau eine Ebene [-nschar]: „ (hkl) “

hexagonale Kristalle: 4 millersche Indizes

„-1“ = „ $\bar{1}$ “

Grundlegende Kristallstrukturen:

- kubische Kristallsysteme [fcc, bcc]
- hexagonal dichteste Kugelpackung [hcp - *hexagonal closed packed*]
- Diamantstruktur [fcc mit 2-atomiger Basis $[0 \ 0 \ 0 \text{ und } \frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4}]$, gleiche Atomsorte]
- Zinkblendestructur [fcc mit 2-atomiger Basis $[0 \ 0 \ 0 \text{ und } \frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4}]$, unterschiedliche Atome]
- Wurtzitstruktur [hcp mit 2-atomiger Basis]
- Natriumchloridstruktur [fcc mit 2-atomiger Basis $[0 \ 0 \ 0 \text{ und } \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]$, unterschiedliche Atome]

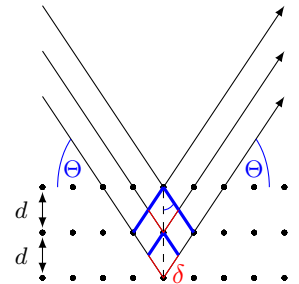
Reale Kristalle:

- Punktdefekte: Leerstelle [V - *vacancy*], Zwischengitteratome [SI - *self interstitials*], falsche Atome auf einem Gitterplatz [S - *substitutional impurities*], falsche Atome auf Zwischengitterplatz [I - *interstitial impurities*], Anti-Sites;
- ausgedehnte Defekte: Stufenversetzung, Schraubenversetzung, Mischformen [\rightarrow Burgers-Vektor];
- Korngrenzen: allgemeine Korngrenzen, gekippte Grenzen, Zwillingsgrenzen.

Beugung von Wellen am Kristall:

Licht- $[\lambda = \frac{hc}{E}]$ / Materiewellen $[p = \frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \lambda = \frac{h}{p}]$ mit Bragg-Bedingung:

$$n\lambda = 2d \sin(\Theta)$$



Unter der Annahme rein elastischer Stöße [Erhaltung der mechanischen Energie], einfallender ebener Wellen $[A(t, \vec{r}) = A_0 e^{i[\vec{k}_0 \vec{r} - \omega_0 t]}]$, kugelförmiger Streuzentren $[A_s(t, \vec{R}) = \frac{\tilde{A}}{R} e^{i[\vec{k} \vec{R} - \omega_0 t]}]$ der Dichte $\rho(\vec{r})$, von allein Einfachstreuung und eines großen Abstands der Probe zum Detektor \vec{R} ergibt sich für die Amplitude am Detektor:

$$A_s(t) = \underbrace{\frac{\tilde{A}}{R} e^{i[\vec{k} \vec{R} - \omega_0 t]}}_{c(t)} \int_{V_{\text{Probe}}} \rho(\vec{r}) e^{-i[\vec{k} - \vec{k}_0] \vec{r}} dV$$

Mit dem Streuvektor $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$ sieht man, dass $A_s = c \int_{V_P} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K} \vec{r}} dV$ [die Streuamplitude proportional der Fouriertransformierten der Streudichteverteilung ist].

Das Inverse liefert die Streudichte:
$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{c} \frac{1}{[2\pi]^3} \int_{\mathbb{R}^3} A_s e^{i\vec{K} \vec{r}} d^3 K$$

Jedoch wird fast nie sowohl Phase als auch Amplitude von A_s gemessen, sondern nur die Intensität \Rightarrow über Angleichen des Beugungsmusters an das einer numerischen Rechnung aufgrund eines zugrundegelegten Modells Struktur annähern [zyklisch optimieren].

Aufgrund der Translationssymmetrie des Kristalls ist auch $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R})$ [periodisch]; daher mit Fouriertransformation:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{h,k,l} \rho_{hkl} e^{i\vec{G}_{hkl} \vec{r}} \quad \rho_{hkl} = \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \int_{V_{\text{EZ}}} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{G}_{hkl} \vec{r}} dV$$

$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$, \vec{b}_i Basisvektoren des reziproken Gitters, $h, k, l \in \mathbb{Z}$.

Aus der Periodizität von $\rho(\vec{r})$ ergibt sich dann: $\vec{G} \vec{R} = n 2\pi$, $n \in \mathbb{Z}$ [Reziprozitätsbedingung]

Wigner-Seitz-Zelle [WSZ]:

Raum, in dem jeder Ort einem ausgewählten Gitterpunkt näher ist, als jedem anderen Gitterpunkt.

Brillouine-Zonen [BZ]:

n -te BZ: Der Bereich im reziproken Raum, der durch Überchreiten von genau $[n - 1]$ Bragg-Flächen [und nicht weniger!] erreicht werden kann.

Zonen aller Ordnungen sind gleich groß und können meist auf 1. BZ [die entspricht der WSZ im reziproken Raum] „zurückgefaltet“ werden.

Atomformfaktor: $f_\alpha(\vec{G}_{hkl})$; Strukturfaktor: S_{hkl} :

Für Atom α mit Ladungsvolumen V_α und \vec{r}_α dem Vektor vom Eckpunkt der EZ zum Atom α gilt:

$$\rho_{hkl} = \frac{1}{V_{EZ}} \sum_{\alpha} \overbrace{e^{-i\vec{G}_{hkl} \vec{r}_\alpha} \int_{V_\alpha} \rho_\alpha(\vec{r}') e^{-i\vec{G}_{hkl} \vec{r}'} dV'}^{S_{hkl}} = \underbrace{f_\alpha(\vec{G}_{hkl})}_{f_\alpha(\vec{G}_{hkl})}$$

Der Strukturfaktor ist ein Maß für das Streuvermögen einer Basis.

Valenzelektronen werden vernachlässigt, kugelförmige Verteilung der streuenden Ladungen angenommen, Streuvektor $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$

$$\Rightarrow f_\alpha(\vec{K}) = 4\pi \int_0^{R_\alpha} \rho_\alpha(r) r^2 \frac{\sin(\vec{K}\vec{r})}{\vec{K}\vec{r}} dr.$$

[Für H -Atom: $\rho_H = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2\frac{r}{a_0}}$ [a_0 bohrscher Radius, $R_\alpha \rightarrow \infty$] ergibt sich: $f_H = \frac{1}{[1+(\frac{1}{2}a_0K)^2]^2} \sim \frac{1}{K^4}$.]

Debye-Waller-Faktor: abhängig von der Temperatur T dämpft die thermische Bewegung der Kristallbausteine die Intensität I der Reflexe des Beugungsmusters:

$$\langle I(T) \rangle = c_1 \underbrace{\langle S_{hkl} \rangle^2}_{I_0} = c_1 \underbrace{S_{hkl}^2}_{DWF} e^{-\frac{1}{3} G_{hkl}^2 c_2 T} \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

Gitterschwingungen $\hat{=}$ „Phononen“ ; diese lassen sich als Quasiteilchen beschreiben, die dann neutral und Bosonen wären.

Zur Beschreibung Reduktion auf 1-dimensionale Kette [Kräfte senkrecht zur Bewegung in Richtung der Hauptsymmetrieachsen des Kristalls kompensieren sich gerade] mit kleinen Auslenkungen [Kraft ca. proportional zur Auslenkung] und einatomiger Basis [Masse M]; physikalisch nur Atomkerne betrachtet, Ansatz $u_{s+n} = u_s e^{i[\omega t - nqa]}$:

$$\omega(p) = \sqrt{\frac{2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} c_n [1 - \cos(qna)]}$$

Phononenwellenvektor: \vec{q}

WW-proportionalitätsfaktor zu n -ten Nachbarn: c_n

Gitterkonstante: a

Für eine zweiatomige Basis und den Ansatz der Wechselwirkung nur mit der nächsten Nachbarbase, gleichen Federkonstanten für alle Verbindungen [c] und $u_n = U e^{-i[\omega t - qna]}$, $v_n = V e^{-i[\omega t - qna]}$ ergibt sich:

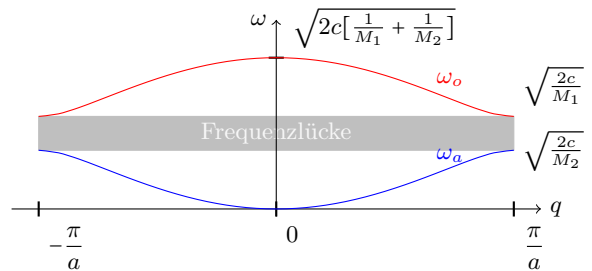
$$\omega_{a,o}^2 = c \left[\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right] \mp c \sqrt{\left[\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right]^2 + \frac{4}{M_1 M_2} \cos^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$$

Ist $M_1 < M_2$, so ergibt sich das rechte Bild und es gilt:

ω_{optisch} ermöglicht [sind die Moleküle zu M_1 und M_2 entgegengesetzt geladen] das Ankoppeln optischer [infraroter] Lichtwellen, da die Nachbarmoleküle für $k \rightarrow 0$ gegenphasig, mit gleicher Auslenkung schwingen; für $k \rightarrow \frac{\pi}{a}$ schwingt nur noch das zu M_1 gehörige Molekül.

$\omega_{\text{akustisch}}$ hat für $k \rightarrow 0$ in Phase schwingende Nachbarmoleküle; für $k \rightarrow \frac{\pi}{a}$ schwingt nur noch das zu M_2 gehörige Molekül.

In der Frequenzlücke ist keine Einkopplung möglich \rightarrow evaneszente Welle & Reflexion.



[Der Graph ist rechts und links periodisch fortsetzbar.]

Bei dreidimensionale Betrachtung ergeben sich für eine 1-atomige, primitive Einheitszelle 1 longitudinaler, akustischer [LA] und 2 transversale, akustische [TA] Zweige. Jedes weitere Atom in der Basis fügt 3 optische Zweige [1 longitudinal [LO], 2 transversal [TO]] hinzu. Zweige können entarten [zusammenfallen].

Quantisierte Gitterschwingungen → Phononen ; Streuung eines einfallenden Teilchens/Welle [Dualismus!] beschreibt sich dann gemäß:

$$A_s(t) = \underbrace{\sum_m e^{-i\vec{K}\vec{R}_m} e^{-i\omega t}}_{\text{elastisch}} - \underbrace{\sum_m \sum_q i\vec{K}\vec{u} e^{i[\vec{K}\pm\vec{q}]\vec{R}_m} e^{-i[\omega_0\mp\omega(q)]t}}_{\text{inelastisch}}$$

A_s Streuamplitude, ω_0, \vec{k}_0 einfallendes Teilchen, $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$ Streuvektor, \vec{R}_m Ortsvektor der Atome, \vec{u}_m Schwingungsamplitude [$\vec{r}_m(t) = \vec{R}_m + \vec{u}_m(t)$], \vec{q} Quasiimpuls der Phononen [$\vec{p}_{QM} = \hbar\vec{q}$].

Elastisch: $\vec{K} = \vec{G}$, inelastisch: $\vec{K} \pm \vec{q} = \vec{G}$; dann gilt im inelastischen Fall:

$$\begin{aligned} \text{Impulserhaltung} & \quad \hbar\vec{K} \pm \hbar\vec{q} = \hbar\vec{G} \\ \text{Energieerhaltung} & \quad \hbar\omega = \hbar\omega_0 \pm \hbar\omega_q. \end{aligned}$$

Nähert man die Schwingungen der Atome gemäß einem harmonischen Oszillators, so ergeben sich die Energien:

$$E_q = [n_q + \frac{1}{2}]\hbar\omega_q \quad , \quad n_q \in \mathbb{N}^0 .$$

Phononenspektroskopie: Infrarot-Absorption, Streuung sichtbaren Lichts [$q \approx 2k_0 \sin(\frac{\theta}{2})$]; Rayleigh [$\hbar\vec{q} = 0$], Brillouin [$\vec{q}_{\text{akustisch}}$], Raman [\vec{q}_{optisch}], inelastische Neutronenstreuung.

Elastische Eigenschaften:

mechanische Spannung [F_i angreifende Kraft, A_j Angriffsfläche]: $\hat{\sigma} : \sigma_{ij} = \frac{F_i}{A_j}$; Dehnung: $\hat{\epsilon} : \vec{u}(\vec{x}) = \vec{\epsilon}\vec{x}$

Hookesches Gesetz: $\sigma_{ij} = \sum_{k,l} c_{ijkl} e_{kl}$.

Dies lässt sich mit der Voigt-Notation [$xx \rightarrow 1, yy \rightarrow 2, zz \rightarrow 3, yz \rightarrow 4, zx \rightarrow 5, xy \rightarrow 6$], da maximal 21 Komponenten von c unabhängig sind, auch kurz schreiben: $\sigma_i = \sum_{j=1}^6 c_{ij} e_j$.

Für polykristalline [, bzw. amorphe] Festkörper gibt es nur 2 unabhängige Konstanten $\lambda = c_{12}, \mu = c_{44}$ [Laue-Konstanten], mit denen: Elastizitätsmodul $E = \frac{\mu[3\lambda+2\mu]}{\lambda+\mu}$, Poissonzahl $\nu = \frac{\lambda}{2[\lambda+\mu]}$, Kompressionsmodul $B = \frac{3\lambda+2\mu}{3}$.

Im homogenen Festkörper der Dichte ρ ergibt sich für die Schallausbreitung [Gitterschwingungen $u_x = U_x e^{-i[\omega t - qx]}$]:

$$\omega_{\text{longitudinal}}(q) = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}} q \quad , \quad \omega_{\text{transversal}}(q) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} q \quad .$$

Thermische Eigenschaften:

Teilchenanzahl N , Phononenfrequenz Ω , innere Energie U , Temperatur T , spezifische Wärmekapazität: $c_V = \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_V$.

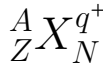
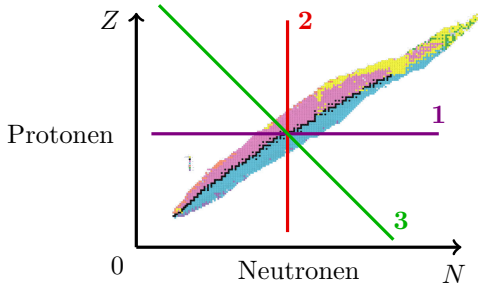
Klassisches Modell: $U = 3Nk_B T$.

Einstein-Modell: $U = 3N \left[\frac{\hbar\Omega}{e^{-\frac{\hbar\Omega}{k_B T}} - 1} + \frac{1}{2}\hbar\Omega \right]$

Debye-Modell: mittlere Schallgeschwindigkeit v_s , Debye-Frequenz: $\Omega_D = \bar{v}_s \sqrt{\frac{6\pi^2 N}{V}}$

$$c_V = \frac{9Nk_B}{\Omega_D^3} \int_0^{\Omega_D} \frac{[\frac{\hbar\Omega}{k_B T}]^2 e^{\frac{\hbar\Omega}{k_B T}}}{[e^{\frac{\hbar\Omega}{k_B T}} - 1]^2} \Omega^2 d\Omega$$

Mit $k_B T_D = \hbar\Omega_D$ gilt für $T < T_D \Rightarrow c_V \sim T^3$, $T \gg T_D \Rightarrow c_V = 3Nk_B$.



X - Elementsymbol
 Z - Protonenzahl
 N - Neutronenzahl
 A = Z + N - Nukleonenzahl
 q⁺ - Ionisationsgrad

- 1. Isotope: Kerne mit gleichem Z
 Isomere: langlebige instabile Kernzustände
- 2. Isotone: Kerne mit gleichem N
 Spiegelkerne: N und Z jeweils vertauscht
- 3. Isobare: Kerne mit gleichem A

1 Fermi = 1 · 10⁻¹⁵ m = 1 fm

1 barn = 1 · 10⁻²⁸ m²

1 u = $\frac{1}{12} m({}^{12}_6\text{C}_6) \approx 1,66 \cdot 10^{-27}$ kg

Kernreaktionen: Teilchen a trifft auf Kern A ⇒ neuer Kern B emittiert Ejektil b A(a, b)B .

Wirkungsquerschnitt σ [barn], Anzahl der Streuzentren n, bestrahlte Fläche A, Reaktionswahrscheinlichkeit $W = \frac{\sigma n}{A}$, Teilchenstromdichte γ, Reaktionen pro Zeit $N = n\sigma\gamma$, Raumwinkelelement dΩ, Winkel für r → ∞ ϑ, differentieller Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}|_{\vartheta} = \frac{\text{unter } \vartheta \text{ in } d\Omega \text{ gestreute Teilchen}}{\gamma}$ [bezogen auf ein Streuzentrum].

Rutherford'sche Streuformel:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}|_{\vartheta} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{16\pi\epsilon_0 E_0} \right]^2 \frac{1}{\sin^4(\frac{\vartheta}{2})}$$

Für stabile Kerne wurde damit gefunden:

Kernradius $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$

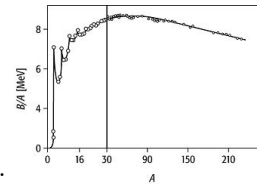
A - Kernladungszahl, r₀ = 1,3(1) fm.

Massendichte $\rho = 2 \cdot 10^{14} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$

Genauere Untersuchungen liefern $\rho(r) = \rho_0 \left[1 + e^{-\frac{r-R_{1/2}}{a}} \right]^{-1}$ Randzonendicke a, Halbdichtenradius R_{1/2}.

Massendefekt $[m_{\text{Atom}} = Zm_{\text{Wasserstoff}} + Nm_{\text{Neutron}} - \frac{B(Z,N)}{c^2}]$:

Energie, die aufgebracht werden muss, um den Kern in seine einzelnen Nukleonen zu zerlegen.

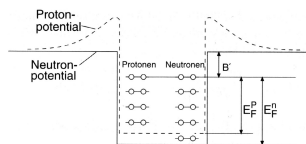


S - Separationsenergie [Abspaltung eines Nukleons, ~ 2 MeV – 20 MeV];

δ - Paarungsenergie [Unterschied der Energie eines Nukleons für Kerne mit ±1N].

Magische Zahlen: 2, 8, 20, 28, 50, 82, ...

[relativ hohe Energien zur Abspaltung eines Nukleons verglichen mit den Nachbarn; für Protonen und Neutronen jeweils gültig.]



Fermi-Gas-Modell:

E_F - Fermienergie ; E_C = E_Fⁿ - E_F^p - Coulombwechselwirkungsenergie.

Neutronen und Protonen sind **Fermionen** [Spin 1/2 und das Pauli-Prinzip gilt].
 {Bosonen - Spin 1, ohne Pauli-Prinzip}

Tröpfchenmodell: Weizsäcker'sche Massenformel

$$m(Z, A) = Zm_H + (A - Z)m_n - a_{\text{volume}} \frac{A}{c^2} + a_{\text{surface}} \frac{A^{\frac{2}{3}}}{c^2} + a_{\text{coulomb}} \frac{Z^2 A^{-\frac{1}{3}}}{c^2} + a_{\text{asymmetry}} \frac{[Z - \frac{A}{2}]^2}{Ac^2} - a_{\text{pair}} \frac{\delta}{c^2} A^{-\frac{1}{2}}$$

mit a_{volume} = 15,85 MeV, a_{surface} = 18,35 MeV, a_{coulomb} = 0,71 MeV, a_{asymmetry} = 92,86 MeV, a_{pair} = 11,46 MeV.

Kernspin: Bahndrehimpuls der Nukleonen Lħ, Spin |S| = 1/2 ħ ⇒ I = L + S mit |I| = √[I(I + 1)] ħ.

Magnetische Kernmomente: $\vec{\mu}_I = g_I \mu_N \vec{I}$; mit dem Kernmagneton $\mu_N = \frac{e}{2m_P} \hbar$.

Für ein einzelnes Nukleon ist: $\vec{\mu} = g_I \vec{l} + g_s \vec{s}$; wobei für ein Proton: g_l = 1, g_s = 5.5858
 Neutron: g_l = 0, g_s = -3,8261 gilt.

Schmidt-Modell:

Annahme: ein ungepaartes Nukleon [Leuchtnukleon] erzeugt das magnetische Moment des Kerns [→ ug- / gu-Kerne]:

Kern-Landé-Formel:
$$g = g_l \frac{j[j+1] + l[l+1] + s[s+1]}{2j[j+1]} + g_s \frac{j[j+1] - l[l+1] + s[s+1]}{2j[j+1]}$$

Parität: $\pi = \pm 1$; Beschreibt die Spiegelsymmetrie der Wellenfunktion $\left[\begin{array}{l} \pi = +1 \text{ - gerade} \\ \pi = -1 \text{ - ungerade} \end{array} \right]$, ist Erhaltungsgröße.

Das Schalenmodell mit Wood-Saxon-Potential $[V(r) = -\frac{V_0}{1+e^{\frac{r-R}{a}}}]$ - Kernradius R , Oberflächendicke $\sim a$, Potentialwalltiefe $\sim V_0$] mit Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung $[V_i = V(r) + V_{ls}(r)\vec{l}\vec{s}]$ - für i -te Nukleon] ergibt dann:

$$\Delta E = \frac{1}{2}[2l+1]V_{ls}\hbar .$$

Außerdem sagt es [nur für nicht-angeregte Kerne] voraus:

- n - und p -Schalen abgeschlossen $\Rightarrow I = 0$.
- Einzig ein Nukleon außerhalb geschlossener Schalen \Rightarrow dieses bestimmt Parität und Gesamtdrehimpuls des Kerns.
- Fehlt einzig ein Nukleon zum Schalenabschluss \Rightarrow das „Loch“ bestimmt Parität und Gesamtdrehimpuls des Kerns.
- magnetische Momente \rightarrow Schmidt-Werte
- „doppelt magische“ Kerne besonders stabil.
- Auftreten von Isomeren: durch die Verschiebung der Energieniveaus entstehen Übergänge mit hoher Multipolarität bzw. großer Spindifferenz \rightarrow unwahrscheinlich \rightarrow langlebig.

Kernzerfall:

<u>Einheiten:</u> Aktivität: 1 Becquerel = $1 \frac{\text{Zerfall}}{\text{s}}$,	Relative Biologische Wirksamkeit-Faktor q :	Strahlung	q
Energiedosis: 1 Gray = 1Gy = $1 \frac{\text{J}}{\text{kg}}$,		α	20
Ionendosis: 1 Röntgen = $2,58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{C}}{\text{kg}}$,		β	1
Äquivalenzdosis: 1 Sievert = 1Sv = $q\text{Gy}$.		γ	1
		Röntgen	1
		n	10
		p	10
		schwere Ionen	20

N instabile Kerne, Übergangsrate λ ; dann Aktivität: $A(t) = \frac{dN}{dt} = -\lambda N \rightarrow N(t) = N(0) e^{-\lambda t}$

In Zerfallskette: $\frac{dN_2}{dt} = -\lambda_2 N_2 + \lambda_1 N_1 \rightarrow N_2(t) = N_1(0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} [e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}] + N_2(0) e^{-\lambda_2 t}$

mittlere Lebensdauer [A auf $\frac{1}{e}$ abgefallen]: $\tau = \frac{1}{\lambda}$; Halbwertszeit [A auf $\frac{1}{2}$ abgefallen]: $t_{1/2} = \frac{1}{\lambda} \ln(2)$

- Arten:
- α -Zerfall: ${}^A_Z X_N \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2} Y_{N-2} + {}^4_2 He_2 + E$
 - β^- -Zerfall: $\beta^-: n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e + E$
 - β^+ : $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e + E$
 - Electron Capture: $p + e^- \rightarrow n + \nu_e + \text{X-Ray/Auger-Elektron} + E$
 - γ -Zerfall: ${}^A_Z X_N^* \rightarrow {}^A_Z X_N + \gamma\text{-Strahlung} + E$
 - Innere Konversion: ${}^A_Z X_N^* \rightarrow {}^A_Z X_N + e^- + \text{X-Ray/Auger-Elektron} + E$
 - Spaltung: ${}^A_Z X_N \rightarrow {}^{A_1}_{Z_1} Y_{N_1} + {}^{A-A_1}_{Z-Z_1} He_{N_2} + \nu n + E$ mit $N_1 + N_2 = N - \nu n$.
 - n -Emission: ${}^A_Z X_N \rightarrow {}^{A-1}_Z Y_{N-1} + n + E$
 - p -Emission: ${}^A_Z X_N \rightarrow {}^{A-1}_{Z-1} Y_N + p + E$

α -Zerfall:

Zweikörper-Zerfall [Impuls-, Drehimpuls- und Energieerhaltung von Kern und α -Teilchen] mit diskreten Energien E_α .

Für alle Elemente einer Zerfallsreihe gelten die gleichen a, b : $\log(E_\alpha) = a + b \log(\lambda)$

[Quantitativ über Tunneleffekt erklärbar]

Kernspaltung:

Ausgelöst durch γ - oder Neutronen-Einstrahlung [bei ungerader Anzahl Neutronen wird bei Neutroneneinstrahlung zusätzlich Paarungsenergie frei \rightarrow diese Kerne günstiger] gilt: $X + n \rightarrow Y_1^* + Y_2^* + \nu n + E_{\text{therm.}}$

Ist die Anzahl der ausgesandten Neutronen ν größer 1, so setzt eine Kettenreaktion ein; sofern die Konzentration anregbarer Kerne groß genug ist.

Reproduktionsfaktor [für ∞ ausgedehntes Volumen]: $k_\infty = \bar{\nu} \frac{\sigma_{\text{Spaltung}}}{\sigma_{\text{Absorption}}}$ L - Avogadro-Zahl,

Oberflächenverluste: $k_{\text{eff}} = k_\infty R \sigma_{\text{Verlust}} \rho \frac{L}{A}$ A - Atomgewicht,

Für Atombomben ergibt sich der kritische Radius so zu: $R_C = \frac{A}{k_\infty \sigma_{\text{Verlust}} \rho}$ R - Kugelradius,
 ρ - Dichte
[^{235}U : $R_C = 8,5 \text{ cm}$, $m_C = 49 \text{ kg}$]

Elektromagnetische Übergänge:

γ -Strahlung gemäß $\hbar\omega = E_{\text{initial}} - E_{\text{final}}$; dabei können Dipol-, Quadrupol-, Oktupol-, ...-Strahlung auftreten, mit geringerer Übergangswahrscheinlichkeit $\lambda = \frac{1}{\tau}$ je höher die Pole sind.

Alternativ *innere Konversion*: Übergangsenergie-Übertrag auf Elektron der K-Schale, da dort der größte Überlapp der Wellenfunktion mit dem Kern existiert.

β -Zerfall:

Massenzahl $\Delta A = 0$, Kernladungszahl $\Delta Z = \pm 1$, Kernspin $\Delta I = 0, \pm 1$, kontinuierliche Energieverteilung ausgesandter Teilchen [Elektronen e^- , Positronen e^+].

Energie-, Impuls-, ...-Erhaltung \Rightarrow es wird noch ein Teilchen emittiert: Neutrino ν [bzw. Antineutrino $\bar{\nu}$], es ist neutral, hat k(1)eine Ruhemasse, Geschwindigkeit $\approx c$, Spin $\frac{\hbar}{2}$.

Zerfallstypen:	β^-	:	$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$	$\frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A}{Z+1}Y + e^- + \bar{\nu}_e$
	β^+	:	$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$	$\frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A}{Z-1}Y + e^+ + \nu_e$
	Electron Capture	:	$p + e^- \rightarrow n + \nu_e$	$\frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A}{Z-1}X^* + \nu_e$

Impuls und Spin parallel \rightarrow Rechtsschraube, $\mathcal{H} = 1$, Impuls und Spin antiparallel \rightarrow Linksschraube, $\mathcal{H} = -1$; \mathcal{H} heißt Helizität und ist eine pseudoskalare Größe.

Untersucht man dies, so findet man für $\mathcal{H} = +1$ und $\mathcal{H} = -1$ unterschiedliche Erwartungswerte [bei tiefen Temperaturen, ...]; aus diesem Symmetriebruch kann man auf die schwache Wechselwirkung schließen: Nicht anziehend/abstoßend, sondern wandelt Teilchen in andere um, Austauscheteilchen W^\pm, Z^0 , sehr kurzreichweitig [$\sim 10^{-18} \text{ m}$].

	I	II	III	
Masse- c^2	2,4 MeV	1,27 GeV	171,2 GeV	0
Ladung/e	2/3	2/3	2/3	0
Spin/ \hbar	1/2	1/2	1/2	1
Name	u up	c charm	t top	γ Photon
				$\sim 126 \text{ GeV}$ 0 0 0 H Higgs Boson
Quarks	4,8 MeV -1/3 1/2 d down	104 MeV -1/3 1/2 s strange	4,2 GeV -1/3 1/2 b bottom	0 0 1 g Gluon
	< 2,2 eV 0 1/2 ν_e Elektron- Neutrino	< 0,17 MeV 0 1/2 ν_μ Myon- Neutrino	< 15,5 MeV 0 1/2 ν_τ Tau- Neutrino	91,2 GeV 0 1 Z^0 schwache Kraft
	0,511 MeV -1 1/2 e Elektron	105,7 MeV -1 1/2 μ Myon	1,777 GeV -1 1/2 τ Tau	80,4 GeV ± 1 1 W^\pm schwache Kraft
				Eichbosonen

Abbildung 1: Standardmodell der Teilchen