

FP-Versuch

Wasserstoffisotopie

Roland Gersch, Fatma Kul, Tanja Striepling, Christian Stromenger
email: r@roland-gersch.de
Betreuer: Dr. Urs Graf

29.11.2002

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbereitung	5
1.1	Klassisches Modell des Wasserstoffatoms	5
1.2	Bohrsche Postulate	5
1.3	Schrödinger-Gleichung	6
1.4	Hamiltonfunktion des Wasserstoffatoms	7
1.5	Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffpotential	7
1.6	Winkelabhängigkeit der Wasserstoffwellenfunktion	8
1.7	Rydberg-Formel	10
1.8	Wasserstoffwellenfunktion graphisch	11
1.9	Korrekturen	11
1.9.1	Relativistische Korrektur	13
1.9.2	Feinstruktur	13
1.9.3	Die Lamb-Shift	16
1.9.4	Hyperfineinstruktur	17
1.9.5	Isotopieverschiebung	18
1.10	Strahlungsgesetze	19
1.10.1	Schwarzer Körper	19
1.10.2	Das Plancksche Strahlungsgesetz	20
1.10.3	Das Rayleigh-Jeans-Strahlungsgesetz	21
1.11	Linienemission /Linienabsorption	21
1.12	Linienbreiten	22
1.13	Verbreiterungsmechanismen	23
1.13.1	Natürliche Linienbreite	23
1.13.2	Stoßverbreiterung von Spektrallinien	26
1.14	Fragen aus der Praktikumsanleitung	27
2	Auswertung	33
2.1	Eingangsspaltbreite	33
2.2	Eichung	33

2.3	Gemessene Wasserstoff- und Deuteriumlinien	38
2.4	Bestimmung der Rydbergkonstanten	44
2.5	Bestimmung von m_e/m_H	44
2.6	Bestimmung der Deuteronenmasse	46
2.7	Bestimmung von $\frac{e}{m_e}$	46
2.8	Diskussion	46
3	Korrekturen zur Auswertung	49

1 Vorbereitung

1.1 Klassisches Modell des Wasserstoffatoms

Das Modell des Wasserstoffatoms hat sich im Verlauf der Geschichte der Physik radikal verändert. Zunächst beschrieb man es als hochelastisches, winziges Klümpchen (Durchmesser 10^{-10}m). Zur Erklärung der Elektrolyse dachte sich J.J. Thomson das Klümpchen als positiv geladen. In diesem sollten sich punktförmige negativ geladene Elektronen reibungsfrei bewegen.

Rutherfords Streuversuche zerstörten dieses Modell. Sie wiesen nach, daß der Großteil der Masse des Atoms im Zentrum auf 10^{-14}m konzentriert und positiv geladen ist. Da das Atom sich aber mechanisch und thermisch als Teilchen mit 10^{-10}m verhält, muß die zusätzliche Ausdehnung durch in einer Umlaufbahn um den Kern befindliche Elektronen bewirkt werden.

Das Wasserstoffproblem war so auf das von Kepler gelöste Zweikörperproblem zurückgeführt worden. Die Elektronen befanden sich also auf Ellipsenbahnen um den Atomkern.

Probleme.

1. Experimente zeigten, daß sich alle Wasserstoffatome gleich verhalten. Da aber nach Kepler viele verschiedene Umlaufbahnen möglich sind, müßte es auch viele verschiedene Verhaltensweisen der Wasserstoffatome geben.
2. Das Elektron auf der Ellipsenbahn um den Atomkern ist eine beschleunigte Ladung, strahlt also beständig Energie ab. Das würde dazu führen, daß das Elektron recht bald in den Kern stürzt, was offenbar nicht geschieht.
3. Beim Sturz in den Kern vergrößert sich die Umlauffrequenz des Elektrons beständig, also auch die Frequenz der ausgesendeten Strahlung. Das Energiespektrum des Wasserstoffatoms wäre also nicht diskret.

1.2 Bohrsche Postulate

Zur Rettung des Rutherfordschen Atommodells formulierte Niels Bohr 1913 zwei Postulate:

1. Ein Atom kann nur diskrete Energiezustände annehmen. Befindet es sich in einem erlaubten Energiezustand, so strahlt es nicht. Strahlung wird nur beim Übergang zwischen zwei erlaubten Energiezuständen freigesetzt. Die Frequenz der ausgesandten Strahlung entspricht der Energiedifferenz der Zustände:

$$\hbar\omega = E_i - E_f$$

Denkt man sich Energiezustände als verschiedene Umlaufbahnen des Elektrons um den Kern, so widerspricht dieses Postulat der Elektrodynamik, da ein beschleunigtes Elektron beständig strahlt.

2. Unter den nach Kepler möglichen Bahnen sind nur die zulässig, auf denen für den Drehimpuls L des Elektrons gilt:

$$L = n\hbar, n \in \mathbb{N}$$

Die Zahl n heißt Hauptquantenzahl.

Die Bohrschen Postulate sagen nichts über die Mechanismen, die dem Elektron die strahlungsfreie Kreisbahn gestatten und die diskreten Übergänge ermöglichen. Sie rechtfertigen sich durch die erfolgreiche Erklärung des Wasserstoffspektrums.

1.3 Schrödinger-Gleichung

Die Schrödingergleichung ist die Bewegungsgleichung für die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ eines Teilchens. Sie lautet

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (1)$$

Dabei ist \hat{H} der Hamiltonoperator des Problems.

Gültigkeitsbereich. Die Schrödingergleichung ist eine nicht-relativistische Gleichung. Außerdem erlaubt sie den beschriebenen Teilchen keine innere Struktur mehr. Beide Näherungen sind bei genauer Betrachtung unzulässig. Elementarteilchen wie Elektronen besitzen eine innere Struktur, den Spin. Dieser wird korrekt durch die Dirac-Gleichung beschrieben.

Das direkte relativistische Analogon zur Schrödingergleichung ist die Klein-Gordon-Gleichung.

Stationäre Schrödingergleichung. \hat{H} sei zeitunabhängig. Dann setze an: $|\Psi\rangle = f(t)|\psi\rangle$, mit $|\psi\rangle$ nicht abhängig von t . Offenbar ist (1) erfüllt, wenn gilt:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E_\psi|\psi\rangle \quad (2)$$

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_\psi t} \quad (3)$$

Hat man eine Lösung der Eigenwertgleichung (2), die stationäre Schrödingergleichung heißt, so hat man das zeitunabhängige Problem gelöst. Da der Hamiltonoperator recht beliebige Form annehmen kann, ist eine solche Lösung nicht allgemein möglich.

Ortsdarstellung. In der Ortsdarstellung ist der Ortsoperator \hat{x}_i festgelegt als Multiplikation mit dem Skalar x_i . Dann ist der Impulsoperator $\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i}\nabla_{x_i}$. Es gilt das Korrespondenzprinzip, und man kann jede symmetrische klassische Hamiltonfunktion $H(\vec{x}, \vec{p})$ in einen Hamiltonoperator \hat{H} umschreiben durch rein symbolische Ersetzung der x_i und p_i .

1.4 Hamiltonfunktion des Wasserstoffatoms

Das Wasserstoffatom besteht aus einem Proton und einem Elektron. Das Massenverhältnis ist $\frac{m_{\text{Proton}}}{m_{\text{Elektron}}} \approx 1836$. Deshalb wird im folgenden das Proton als stationär im Zentrum des Atoms angenommen. Außerdem vernachlässigt werden sollen der Spin des Elektrons und magnetische Effekte, siehe dazu Abschnitt 1.9.

Da der Spin ohnehin vernachlässigt wird, kann man ihn als konstant ansehen. Damit gilt Drehimpulserhaltung.

Die potentielle Energie des Elektrons im Feld des Protons ist klassisch bekannt: $V_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{r}$ (cgs-System). In Ortsdarstellung läßt sich mit Hilfe des Korrespondenzprinzips nun der Hamiltonoperator aufschreiben:

$$\hat{H}_{\text{Wasserstoff}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad (4)$$

1.5 Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffpotential

Um die stationäre Schrödingergleichung (2) für den Hamiltonoperator (4) zu lösen, schreibt man sie zunächst in Kugelkoordinaten um:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right\} = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi \quad (5)$$

Diese Gleichung soll zunächst für solche ψ gelöst werden, die nicht winkelabhängig sind.

Winkelunabhängige Zustände. Für winkelunabhängige ψ vereinfacht sich (5) zu

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\psi) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi \quad (6)$$

Diese Gleichung soll zunächst in ein passenderes Maßsystem überführt werden. Setze dazu $\rho := \frac{me^2}{\hbar^2} r$ und $\epsilon := \frac{2\hbar^2}{me^4} E$. Für ρ und ϵ gilt dann:

$$\frac{d^2(\rho\psi)}{d\rho^2} = -\left(\epsilon + \frac{2}{\rho} \right) \rho\psi \quad (7)$$

Definiere nun eine Funktion $g(\rho)$ durch $\rho\psi = e^{-\alpha\rho} g$ für $\alpha^2 = -\epsilon$. Einsetzen in (7) und Kürzen der anfallenden $e^{-\alpha\rho}$ -Terme liefert:

$$\frac{d^2 g}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{dg}{d\rho} + \frac{2}{\rho} g = 0 \quad (8)$$

Diese Differentialgleichung ist durch einen Potenzreihenansatz zu lösen. Sei $g(\rho) \stackrel{def}{=} \sum_{k=1}^{\infty} a_k \rho^k$. Dann gilt

$$\begin{aligned} g'(\rho) &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k k \rho^{k-1} \\ g''(\rho) &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k k(k-1) \rho^{k-2} \end{aligned}$$

Einsetzen in (8) ergibt:

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_k k(k-1) \rho^{k-2} - \sum_{k=1}^{\infty} 2\alpha a_k k \rho^{k-1} + \sum_{k=1}^{\infty} 2a_k \rho^{k-1} = 0$$

Umbenennung des Index k in $k+1$ in der ersten Summe erlaubt Zusammenfassung der Reihen, da das erste Glied der ersten Reihe sowieso Null war. Es ergibt sich:

$$\sum_{k=1}^{\infty} [(k+1)ka_{k+1} - 2\alpha ka_k + 2a_k] \rho^{k-1} = 0$$

Koeffizientenvergleich liefert eine Rekursionsformel für die a_k :

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{(k+1)k} a_k \quad (9)$$

Für große k läßt sich per Induktion zeigen, daß $a_{k+1} \approx \frac{(2\alpha)^k}{k!}$, es wäre also $g(\rho) \approx e^{2\alpha\rho}$. Dann würde die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons für große Entfernungen aber nicht verschwinden. Die Reihenentwicklung muß also ab einem bestimmten Glied abbrechen, um eine gebundene Lösung zu ergeben. Aus (9) folgt: Ist ein Koeffizient Null, so sind auch alle folgenden Null. Ein erster Koeffizient a_n ist Null, wenn $\frac{1}{n} = \alpha = \sqrt{-\epsilon}$ gilt.

Damit sind physikalisch sinnvolle Lösungen von (8) gefunden. Bezeichne sie als g_n . Sie ergeben Lösungen für (7):

$$\psi_n = \frac{e^{-\rho/n}}{\rho} g_n \quad (10)$$

1.6 Winkelabhängigkeit der Wasserstoffwellenfunktion

Zu bestimmen ist noch die Winkelabhängigkeit der Wasserstoffwellenfunktion. Diese wird bestimmt durch den Drehimpuls. Aus der allgemeinen Lösung der Eigenwertgleichungen für den Drehimpulsoperator \hat{L}^2 und dessen Projektion \hat{L}_z auf eine beliebige, mit z bezeichnete Achse, ist bekannt: Zu gegebenem Eigenwert $\hbar l(l+1)$ von \hat{L}^2 gibt es $2l+1$ Eigenwerte m von \hat{L}_z : $-l, -l+1, \dots, l+1, l$.

Gilt nun $m \neq 0$, so kann sich das Elektron nicht auf der z -Achse aufhalten. Den Zustand des Atoms bezeichne symbolisch mit $|l, m\rangle$. Dieser Zustand ändert sich während der

folgenden Betrachtung nicht. Für $m = 0$ sei $F_l(r)$ die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Elektron auf der z-Achse im Abstand r vom Ursprung befindet.

Gesucht ist $\psi_{l,m}(r, \theta, \phi)$. Festlegung der z-Achse und Angabe der Winkel θ und ϕ legen eine neue Achse z' fest. Sei m' Eigenwert von $\hat{L}_{z'}$. Ist $m' \neq 0$, dann verschwindet die Wahrscheinlichkeit, das Elektron bei (r, θ, ϕ) anzutreffen. Sonst ist die Wahrscheinlichkeit $F_l(r)$. Die Gesamtwahrscheinlichkeit, das Elektron bei (r, θ, ϕ) anzutreffen, ist also die Wahrscheinlichkeit, daß $m' = 0$ ist multipliziert mit $F_l(r)$. In Formeln:

$$P_{\text{Elektron bei } r, \theta, \phi}^{l,m} = F_l(r) \cdot P_{m'=0}^{l,m}$$

Sei $R_\gamma(\gamma)$ die Drehung um die Achse z' mit Drehwinkel γ . Dann erhalten wir $|l, m'\rangle$ durch bilden von $R_y(\theta)R_z(\phi)|l, m\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit, $m' = 0$ anzutreffen, ist dann

$$P_{m'=0}^{l,m} = \langle l, 0 | R_y(\theta) R_z(\phi) | l, m \rangle \quad (11)$$

Gebäuchlicher Konvention folgend schreibt man

$$P_{m'=0}^{l,m} = \sqrt{\frac{4}{2l+1}} \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (12)$$

und nennt die $Y_{l,m}$ Kugelfunktionen. Jetzt läßt sich die Wasserstoffwellenfunktion schreiben als:

$$\psi_{l,m} = F_l(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Dies setzt man nun in (5) ein. Man erhält nach Umordnung:

$$\frac{1}{Y_{l,m}} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial \phi^2} \right] = -\frac{r^2}{F_l} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r F_l) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) F_l \right]$$

Die linke Seite ist nur von ϕ und θ abhängig, die rechte nur von r . Außerdem ist die rechte Seite nicht von m abhängig. Aufgrund der Gleichheit gelten diese Eigenschaften für beide Seiten. Die betreffende Konstante bezüglich r, θ, ϕ und m , die aber noch von l abhängen kann, heiße K_l . Man erhält so zwei Eigenwertgleichungen:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial \phi^2} = K_l Y_{l,m} \quad (13)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r F_l) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) F_l = -K_l \frac{F_l}{r^2} \quad (14)$$

Mit Hilfe von (13) läßt sich die Konstante ermitteln. (14) erlaubt dann die Bestimmung von F_l . Zur Bestimmung von K_l ermittle

$$R_z(\phi)|l, l\rangle = e^{il\phi}|l, l\rangle \quad (15)$$

$$\langle l, 0 | R_y(\theta) | l, l \rangle = b(\sin \theta)^l \quad (16)$$

(15) wird in der Theorie der Eigenzustände des Drehimpulsoperators begründet.

Einschub. (16) ist so zu motivieren: Den Zustand $|l, l\rangle$ entspricht vom Drehimpuls her dem eines Systems von $2l$ Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, die alle im Zustand $|\uparrow\rangle$ sind. Der Zustand $|l, 0\rangle$ ergibt sich dann aus $2l$ Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, von denen l im Zustand $|\downarrow\rangle$ und l im Zustand $|\uparrow\rangle$ sind.

Die Wahrscheinlichkeit, daß unter Drehung um θ um die y-Achse (also gerade $R_y(\theta)$) ein Teilchen von $|\downarrow\rangle$ nach $|\uparrow\rangle$ übergeht, beträgt $\sin^2 \frac{\theta}{2}$ (Bei Drehung um π klappen alle um, bei Drehung um 0 keiner, und von $\pi \leftrightarrow 2\pi$ symmetrisch). Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen seinen Spinzustand beibehält, ist also $\cos^2 \frac{\theta}{2}$.

Das Betragsquadrat des linken Teils von (16) ist nun genau die Wahrscheinlichkeit, daß unter Drehung l Teilchen ihren Spinzustand wechseln und die anderen l ihren Spinzustand halten. Nach obiger Argumentation ist diese Wahrscheinlichkeit

$$\left(\cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}\right)^{2l} \stackrel{\text{Additionstheorem}}{=} \left(\frac{1}{2}\right)^{2l} \sin^{2l} \theta.$$

Somit ist (16) begründet.

Einschub Ende. Aus (15) und (16) folgt mit (12) und (11): $Y_{l,l} \sim e^{il\phi} \sin^l \theta$. Das setzt man in (13) ein und es ergibt sich $K_l = l(l+1)$. Man kann dies in (14) einsetzen und erhält eine Eigenwertgleichung analog (6), mit einem additiven Zusatzterm $\frac{l(l+1)F_l}{r^2}$ auf der rechten Seite.

(6) war bereits gelöst worden. Der selbe Lösungsweg führt wieder auf eine Potenzreihe für F_l . Es ergibt sich die zusätzliche Bedingung, daß $a_1 = 0$ sein muß, die anderen Koeffizienten sind dann festgelegt durch

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k$$

Die Bedingung, daß die Reihe abbrechen muß, wenn das Elektron in einem gebundenen Zustand sein soll, führt wieder auf $\alpha = \frac{1}{n}$. Da $a_1 = 0$ sind alle Koeffizienten null, bis $k = l$ eintritt. Zur Vermeidung des Problems $\frac{0}{0}$ läßt man die Reihe erst bei $l+1$ beginnen. Das Glied a_{l+1} kann dann genauso frei gewählt werden wie a_1 bei der früheren Lösung. Man erhält also

$$F_{n,l}(\rho) = e^{-\alpha\rho} \sum_{k=l+1}^{\infty} n a_k \rho^k$$

und

$$\psi_{n,l,m} = Y_{l,m} F_{n,l}$$

1.7 Rydberg-Formel

In Abschnitt 1.5 war bereits aus (9) gefolgert worden, daß $\alpha = \frac{1}{n}$ mit $n \in \mathbb{N}$ gelten muß.

Nun war aber α wegen (7) definiert worden als $\sqrt{-\epsilon}$. ϵ war aber wegen 6 definiert worden als $\frac{2\hbar^2}{me^4} E$. Wir sehen also: E ist abhängig von n , und es gilt:

$$E_n = \frac{me^4}{2\hbar^2} \epsilon = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \alpha^2 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Das ist die Rydbergformel im Gaußschen Maßsystem.

1.8 Wasserstoffwellenfunktion graphisch

Verschiedene graphische Darstellungen der Wasserstoffwellenfunktion sind in Abbildungen 1 und 2 zu finden.

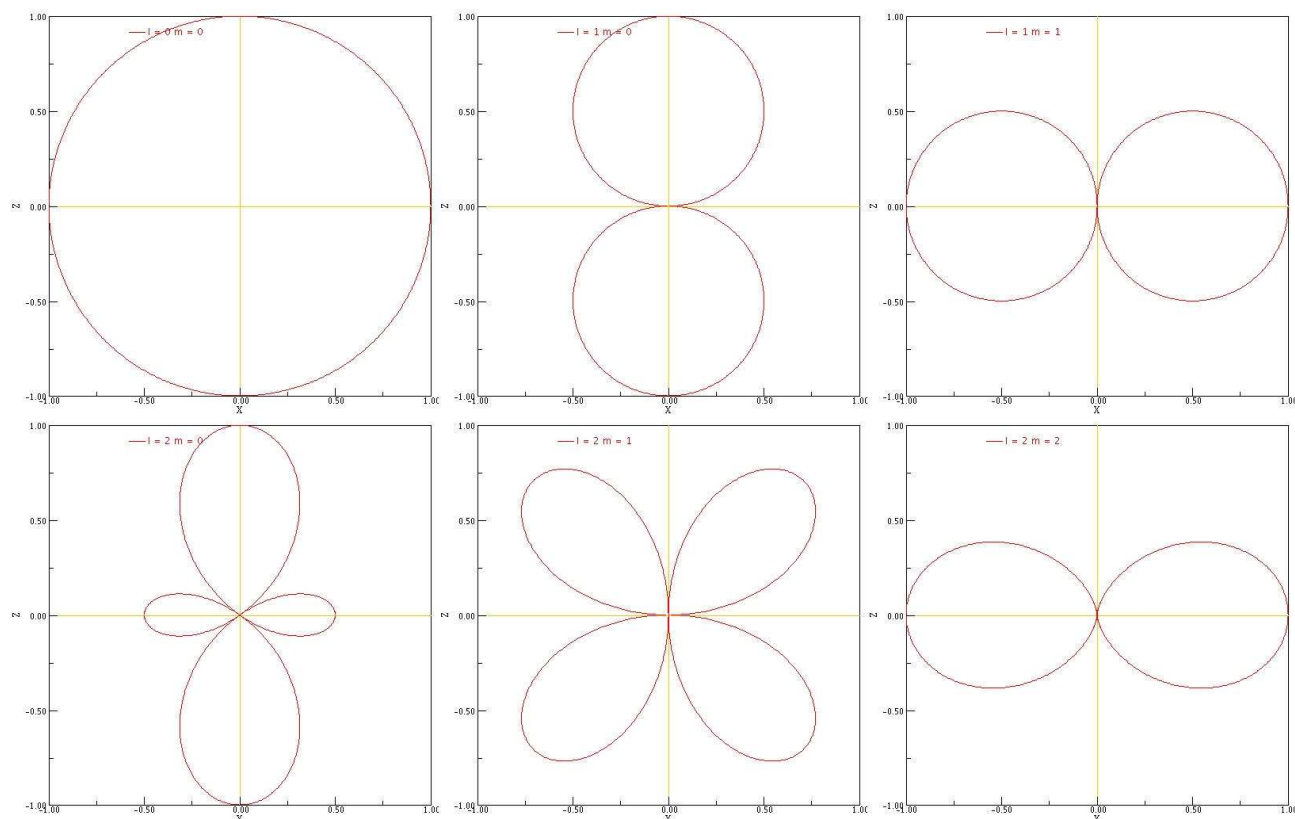


Abbildung 1: Winkelanteil der Wasserstoffwellenfunktion bei Quantenzahlen $nkl = 300, 310, 311, 320, 321, 322$ in der x - z -Ebene. Quelle: [1]

1.9 Korrekturen

Solang man bei der Berechnung der Energieniveaus im Wasserstoffatom nur die kugelsymmetrische Coulomb-Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron beachtet, kommt man zu dem Schluß, daß die Energieniveaus des Wasserstoff nur von der Quantenzahl n abhängen. Man kann dann das Linienspektrum des Wasserstoff mit Hilfe der Rydberg-Formel ausrechnen.

Bei entsprechend hoher Auflösung von Spektren findet man aber weitere Strukturen im Spektrum. Mit dem einfachen Modell des Wasserstoffatoms als Elektron im Coulomb-Potential des Kerns ist diese Unterstruktur im Spektrum nicht zu erklären, sondern man muß noch andere Effekte beachten und entsprechende Korrekturen ausrechnen.

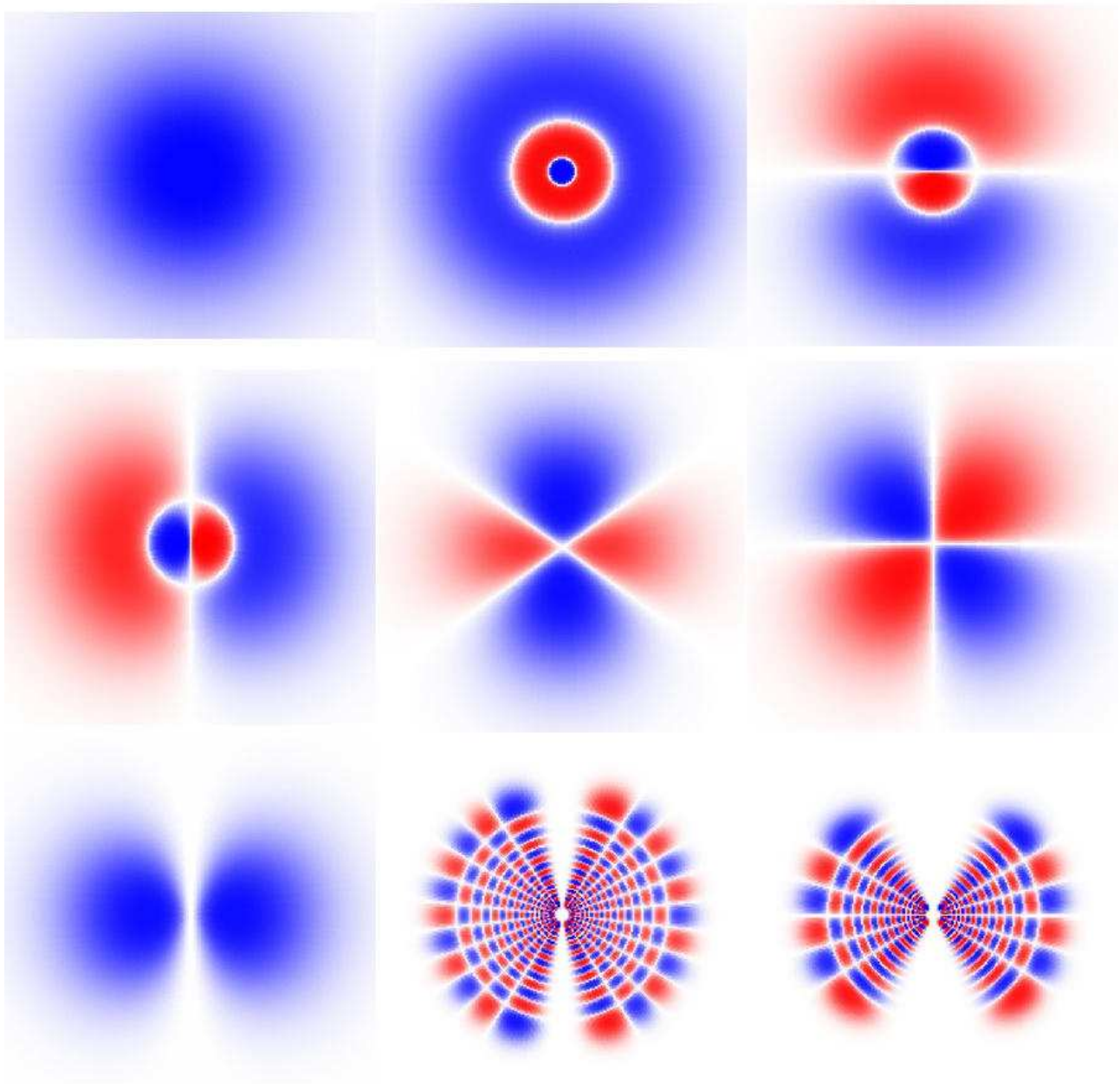


Abbildung 2: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Wasserstoffelektrons bei Quantenzahlen $nkl = 100, 300, 310, 311, 320, 321, 322, 30|15|5, 30|15|10$ in der x-z-Ebene. Quelle:[1]

- Relativistische Korrektur
- Feinstruktur - Folge der Spin-Bahn-Kopplung
- Lamb-Shift - Strahlungskorrektur
- Hyperfeinstruktur - Folge der magnetischen Kopplung zwischen dem Kern und der Atomhülle

1.9.1 Relativistische Korrektur

Experimentell ergibt sich, daß die Energie der verschiedenen Übergänge im Spektrum des Wasserstoffs von den theoretisch erwarteten abweicht und außerdem nicht nur von der Hauptquantenzahl n , sondern auch von der Drehimpulsquantenzahl l abhängt. Diese Abweichungen lassen sich durch die relativistische Massenzunahme des Elektrons bei seiner Bewegung um den Kern erklären. Die relativistische Energie eines Elektrons abzüglich Ruheenergie ist gegeben durch:

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} - m_0 c^2 + E_{pot} \quad (17)$$

Reihenentwicklung liefert:

$$E_{kin} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} = m_0 c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_0^4 c^4} + \dots \right) \quad (18)$$

und somit

$$E = \left(\frac{p^2}{2m_0} + E_{pot} \right) - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_0^3 c^2} + \dots \quad (19)$$

Aus dieser Überlegung ergibt sich als relativistische Korrektur in erster Näherung:

$$E_r = \frac{\hbar^4}{8m_0^3 c^2} \int \Psi^* \nabla^4 \Psi = \frac{E_n Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \quad (20)$$

Diese Korrektur wird auch *Darwin-Term* genannt.

1.9.2 Feinstruktur

Durch die relativistische Korrektur wurde also die Entartung von Zuständen gleicher Haupt- aber verschiedener Bahndrehimpulsquantenzahl aufgehoben. Außerdem gibt es noch eine zweite Korrektur gleicher Größenordnung, die auf den Spin des Elektrons zurückzuführen ist. Elektronen haben aufgrund sowohl ihres Spins als auch ihres Bahndrehimpuls ein magnetisches Moment. Je nachdem, ob diese beiden Momente nun parallel oder antiparallel zueinander stehen, haben sie eine etwas andere Energie, die dann zu Feinstrukturaufspaltung führt. Man nennt diesen Effekt die *Spin-Bahn-Kopplung*.

Die exakte Behandlung der Spin-Bahn-Kopplung ist relativ aufwändig. Da aber die zusätzlichen Energierme klein gegenüber den klassischen Energieniveaus sind, kann

man die Feinstrukturaufspaltung mit halbklassischen Methoden und stationärer Störungsrechnung berechnen.

Dazu führt man zuerst eine Koordinatentransformation auf ein "ruhendes" Elektron durch. In diesem System bewegt sich dann der Atomkern um das Elektron.

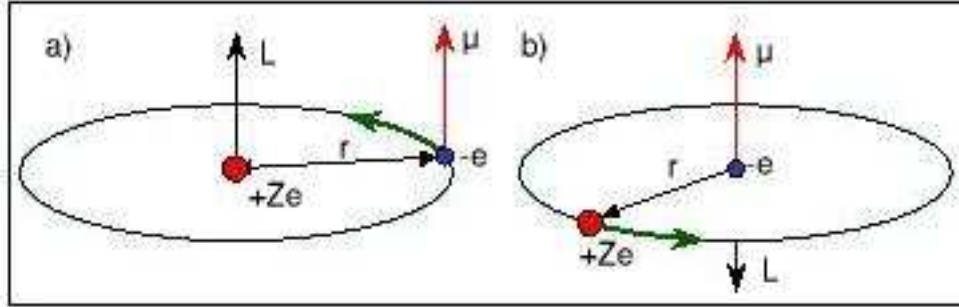


Abbildung 3: Halbklassisches Modell der Spin-Bahn-Kopplung: (a) Im Ruhesystem des Kerns kreist das Elektron um den Kern. (b) Im Ruhesystem des Elektrons kreist der Kern um das Elektron. Quelle: [2]

Man kann dann mit Hilfe des Gesetzes von Biot-Savart das Magnetfeld berechnen, das durch den kreisenden Atomkern am Ort des Elektrons entsteht:

$$B_l = \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3}(v \times (-r)) = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3}(v \times r) \quad (21)$$

wobei $-r$ den Vektor des umlaufenden Kerns im Bezugssystem des Elektrons bezeichnet, μ_0 ist die Induktionskonstante des Vakuums. Da $L = mr \times v$, folgt

$$B_l = \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3 m} L \quad (22)$$

Bei der Rücktransformation wird dieser Ausdruck mit dem sogenannten *Thomas-Faktor* $1/2$ multipliziert, der nur durch die exakte relativistische Rechnung begründet werden kann.

In diesem Magnetfeld B ergibt sich also durch den Spin eine Zusatzenergie:

$$E_{l,s} = -\mu_s B_l = \frac{Ze^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} (S \cdot L) \quad (23)$$

Durch die Spin-Bahn-Kopplung spalten somit die Energiewerte E_n , die ohne Berücksichtigung des Spins erhalten wurden, in die Werte

$$E_{nls} = E_n + E_{l,s} = E_n + \frac{Ze^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} (S \cdot L) \quad (24)$$

auf. Hierbei gilt, daß $E_n \gg E_{l,s}$. Man kann daher $E_{l,s}$ als Störungsterm im Hamiltonoperator betrachten und die Korrekturen in erster Ordnung mit Hilfe der stationären Störungsrechnung ausrechnen. In erster Näherung ergibt sich nun die Energie des gestörten Systems, indem man zur ungestörten Energie den Erwartungswert des Störterms

hinzuaddiert. Dieser Erwartungswert wird dabei mit den Eigenfunktionen des ungestörten Problems berechnet.

Die energetische Aufspaltung der Spektralterme unter dem Einfluß der Spin-Bahn-Kopplung ist also:

$$\langle E_{L,S} \rangle = \left\langle \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m^2 r^3} (S \cdot L) \right\rangle = \left\langle \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m^2 r^3} \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) \right\rangle \quad (25)$$

wobei J der Operator des gesamten Drehimpuls ist. Da nun die Eigenfunktionen Ψ des ungestörten Problems in einen Radialteil R_n und einen Winkelanteil Φ faktorisieren, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle E_{L,S} \rangle &= \int \Psi^* \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m^2 r^3} \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) \Psi \\ &= \frac{Ze^2\mu_0}{16\pi m^2} \int \Phi^* (J^2 - L^2 - S^2) \Phi \int R_n^* \frac{1}{r^3} R_n \\ &= \frac{Ze^2\mu_0 \hbar^2}{16\pi m^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \frac{1}{r^3} \\ &= \frac{a}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \\ a &= \frac{Ze^2\mu_0 \hbar^2}{8\pi m^2} \frac{1}{r^3} \end{aligned} \quad (26)$$

Da für ein Elektron immer $s = \pm \frac{1}{2}$ gilt, kann der Gesamtdrehimpuls J nur die Werte $l + 1/2$ und $l - 1/2$ annehmen. Die Energiewerte spalten damit je nach Spinrichtung in die beiden Komponenten mit $j = l + 1/2$ und $j = l - 1/2$ auf. Für die Energiedifferenz zwischen diesen beiden Zuständen erhält man:

$$\Delta E_{l,s} = a \left(l + \frac{1}{2} \right) \quad (27)$$

Zur Berechnung wurde der klassische Bahnradius eines Elektrons verwendet. Eigentlich hätte man aber mit dem quantenmechanischen Erwartungswert rechnen müssen:

$$\begin{aligned} \langle r^{-3} \rangle &= \int R_n^* \frac{1}{r^3} R_n \\ \Rightarrow a &= E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{nl(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \end{aligned} \quad (28)$$

wobei $\alpha = \frac{e^2\mu_0 c}{4\pi\hbar} \approx \frac{1}{137}$ die sogenannte *Feinstrukturkonstante* ist.

Die Aufspaltung ist damit:

$$\Delta E_{l,s} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{nl(l + 1)} \quad (29)$$

und mit $E_n \propto \frac{Z^2}{n^2}$ ergibt sich:

$$\Delta E_{l,s} \propto \frac{Z^4}{n^3 l(l + 1)} \quad (30)$$

Berücksichtigt man die relativistische Korrektur und die Spin-Bahn-Kopplung, so ergibt sich:

$$E_{n,j} = E_n \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (31)$$

Damit folgt:

Bei Einelektronenatomen mit kugelsymmetrischem Coloumb-Potential hängt die Energie eines Elektronenzustands nicht von der Drehimpulsquantenzahl l ab.

Das heißt zum Beispiel, daß s- und p-Elektronen mit der selben Hauptquantenzahl die gleiche Energie haben. Bei Atomen mit mehr Elektronen gilt diese Entartung nicht mehr.

1.9.3 Die Lamb-Shift

Bei noch genauerer Messung stellt sich heraus, daß auch bei Berücksichtigung der relativistischen Korrektur und der Spin-Bahn-Kopplung das Spektrum von Wasserstoff nicht richtig vorhergesagt wird. Zustände mit gleicher Drehimpulsquantenzahl fallen nämlich doch nicht exakt zusammen. Der Grund für diese Abweichung der Theorie vom Experiment liegt darin, daß man die Wechselwirkung des Elektrons mit dem elektromagnetischen Feld, wie sie in der QED beschrieben wird, berücksichtigen muß.

Die Wechselwirkung eines Atoms mit dem Strahlungsfeld tritt nicht nur bei Absorption oder Emission eines Photons auf, sondern auch bei so genannten virtuellen Wechselwirkungsprozessen. Bei diesen Prozessen kann das Elektron im Coulomb-Feld des Kerns auf einer Zeitskala $\Delta t < \frac{\hbar}{\delta E} = \frac{1}{\omega}$ ein Photon der Energie $\hbar\omega$ absorbieren und wieder emittieren, ohne daß dabei der Energiesatz verletzt würde. Diese Wechselwirkung führt zu einer kleinen Verschiebung der Energierterme, deren Größe von der räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Coulomb-Feld des Kerns und damit von den Quantenzahlen n und l abhängt.

Zu genauen Beschreibung dieses Effekts müßte man QED betreiben, aber man kann versuchen, sich mit einem einfachen Modell vorzustellen, was passiert. Durch die virtuelle Absorption und Emission von Photonen macht das Elektron aufgrund der Photonenrückstöße eine Zitterbewegung im Coulomb-Potential des Kerns. Seine mittlere potentielle Energie kann dann aufgrund der Schwankungen δr des Bahnradius durch

$$\langle E_{pot} \rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r + \delta r} \right\rangle \quad (32)$$

ausgedrückt werden. Bei einer statistischen Verteilung ist zwar $\langle \delta r \rangle = 0$, aber $\langle (r + \delta r)^{-1} \rangle \neq \langle r^{-1} \rangle$, so daß man eine Verschiebung der Energieniveaus erhält.

Die Lamb-Shift ist ein winziger Effekt, der erst bei sehr genauer Messung zu beobachten ist.

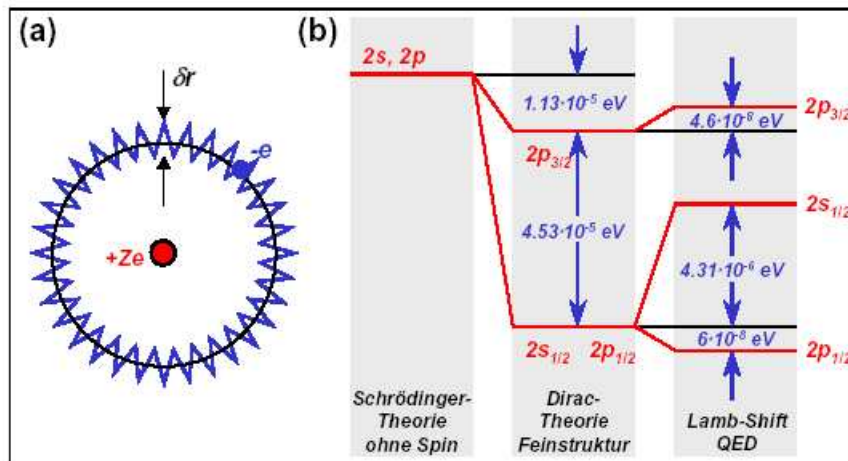


Abbildung 4: a) Veranschaulichung der ‘Zitterbewegung’ des Elektrons; b) Feinstruktur und Lamb-Shift beim Wasserstoffniveau mit $n=2$. Quelle: [2]

1.9.4 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinstrukturaufspaltung ist eine Folge der Wechselwirkung des magnetischen Moments des Atomkerns mit dem magnetischen Moment der Elektronenhülle. Diese Wechselwirkung bewirkt eine gegenseitige Ausrichtung der Drehimpulse \vec{I} des Kerns und \vec{J} der Hülle. Beim Wasserstoff beträgt $|\vec{I}| = \frac{1}{2}$, da der Kern nur aus einem Proton besteht.

Die Wechselwirkungsenergie ist klein gegen die Kopplungsenergie der Elektronen innerhalb der Hülle und der Nukleonen innerhalb des Kerns. Daher greift die relativ schwache Hyperfeinstrukturwechselwirkung zwischen \vec{I} und \vec{J} nicht in die innere Kopplungen von Hülle und Kern ein, sondern führt lediglich zu einer Kopplung der beiden Drehimpulse zum Gesamtdrehimpuls \vec{F} des Atoms: $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$. Speziell beim Grundzustand des Wasserstoffs gibt es nur zwei mögliche Werte für F , da Proton und Elektron beide den Spin $\frac{1}{2}$ haben und sich die beiden Spins nur entweder parallel oder antiparallel stellen können.

Zur quantitativen Berechnung der sich ergebenden Korrekturen zu den Energieniveaus betrachtet man den Kern als praktisch punktförmig und das von der Elektronenhülle erzeugte Magnetfeld als konstant im Bereich des Kernvolumens. Die magnetische Energie ist dann $V_{HFS} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{B}_0$, wobei $\vec{\mu}_I$ das magnetische Moment des Kerns und \vec{B}_0 das magnetische Feld der Hülle am Kernort ist. Man kann diese dann als Störungsterm im Hamiltonoperator betrachten und die Korrekturen in erster Ordnung wieder mit Hilfe der stationären Störungsrechnung ausrechnen.

Es gilt $\vec{B}_0 = B_0 \frac{\vec{J}}{J\hbar}$ und $\vec{\mu}_I = g_I \mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar} = \frac{\mu_I \mu_K}{\hbar} \frac{\vec{I}}{I}$ mit $g_I = \frac{\mu_I}{I}$. Hierbei ist $\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 3,152 \cdot 10^{-8} \text{ eV/T}$ das Kernmagneton und g_I der sogenannte *g-Faktor*, der das Verhältnis von magnetischem Moment (in *Magnetonen*) zum Drehimpuls (in Einheiten von \hbar) angibt.

Einsetzen von \vec{B}_0 und $\vec{\mu}$ ergibt

$$V_{HFS} = -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{\hbar^2 I J} (\vec{I} \cdot \vec{J}) = -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{\hbar^2 I J} \cdot \frac{1}{2} (F^2 - I^2 - J^2). \quad (33)$$

In erster Näherung ergibt sich nun die Energie des gestörten Systems, indem man zur ungestörten Energie den Erwartungswert des Störterms hinzuaddiert. Dabei wird dieser Erwartungswert mit den Eigenfunktionen des ungestörten Problems berechnet.

$$\Delta E_{HFS} = \langle V_{HFS} \rangle = \frac{A}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (34)$$

mit $\frac{A}{2} = -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{2 I J}$.

Speziell für den Wasserstoffgrundzustand erhalten wir aus (34):

$$\begin{aligned} \Delta E_{HFS}^{(1)} &= +\frac{A}{4} && \text{für } J = \frac{1}{2}, I = \frac{1}{2}, F = 1 \\ \Delta E_{HFS}^{(0)} &= -3\frac{A}{4} && \text{für } J = \frac{1}{2}, I = \frac{1}{2}, F = 0 \end{aligned}$$

1.9.5 Isotopieverschiebung

Außerdem gibt es noch zwei weitere Effekte, die eine Linienaufspaltung in der Größenordnung der Hyperfeinstruktur bewirken. Da sie auftreten, wenn gleichzeitig mehrere Isotope vorliegen, nennt man sie Isotopieverschiebung. Dabei handelt es sich bei leichten Kernen um den Effekt unterschiedlicher Kernmassen. In dieser Form ist die Isotopieaufspaltung für Wasserstoff und Deuterium am größten und verliert bei zunehmender Atommasse schnell an Bedeutung. Bei schweren Kernen tritt eine Isotopieverschiebung auf Grund eines Volumeneffekts auf. Kerne mit unterschiedlicher Neutronen-, aber gleicher Protonenzahl haben einen etwas anderen Radius, und somit unterschiedliche Ladungsverteilungen.

Hat man ein Isotopengemisch aus Wasserstoff und Deuterium, beobachtet man zu jeder Linie des Wasserstoff eine "Satelliten-Linie", die vom Deuterium stammt. Diese Isotopieverschiebung ist wie oben schon erwähnt auf die unterschiedlichen Kernmassen der beiden Isotope zurückzuführen. Das Coloumb-Potential ändert sich dabei nicht, man muß also das "Zweikörper-Problem" für die veränderte Masse lösen, was darauf hinausläuft, daß man das ganze Problem mit einer veränderten reduzierten Masse durchrechnet:

$$\mu = \frac{m_e + m_k}{m_e m_k} \quad (35)$$

Die Energie der Elektronenzustände läßt sich dann schreiben als:

$$E_n = -E_H \frac{Z^2}{n^2} \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_k}} \approx -E_H \frac{Z^2}{n^2} \left(1 - \frac{m_e}{m_k}\right) \quad (36)$$

da $m_e \ll m_k$.

Dabei ist E_H die Energie eines ruhenden Kerns mit kreisendem Elektron. Für unterschiedliche Kernmassen gibt es also eine unterschiedliche Verschiebung der Energieniveaus gegenüber diesem Modell. Für Wasserstoff und Deuterium:

$$E_n^H = -0.99945 E_H (n^{-2})$$

und

$$E_n^D = -0.99973 E_H (n^{-2})$$

1.10 Strahlungsgesetze

1.10.1 Schwarzer Körper

Alle Körper senden eine Strahlung aus, die im allgemeinen ziemlich kompliziert ist je nach Temperatur, Zusammensetzung und Beschaffenheit des Körpers. Eine besonders einfach zu beschreibende Strahlung würde von einem Körper im exakten *thermischen Gleichgewicht* ausgesandt werden. Dies ist aber eine stark idealisierte Situation. Näherungsweise erhält man diese Strahlung aus einer kleinen Öffnung in einem Hohlraum, dessen Wände sehr genau auf konstanter Temperatur gehalten und von innen geschwärzt sind, damit möglichst keine Reflexionen auftreten. Man spricht daher auch von "Hohlraumstrahlung" oder Strahlung eines "schwarzen Körpers".

Hohlraumstrahlung hat ein rein kontinuierliches Spektrum, also keine Absorptions- oder Emissionslinien, und sie ist isotrop, d.h. ihre Intensität ist unabhängig von der Strahlungsrichtung. Ihre Eigenschaften sind allein durch die Temperatur bestimmt. Im stationären Zustand müssen Emission und Absorption der Hohlraumwände im Gleichgewicht sein.

$$\frac{dW_A(\nu)}{dt} = \frac{dW_E(\nu)}{dt}$$

$dW_A(\nu)$ und $dW_E(\nu)$ sind absorbierte und emittierte Leistungen von einem beliebigen Flächenelement.

$$\frac{dW_A}{dt} = A_\nu \cdot S_\nu^* \cdot dF \cdot d\Omega \cdot d\nu \quad (37)$$

$$\frac{dW_E}{dt} = E_\nu \cdot dF \cdot d\Omega \cdot d\nu \quad (38)$$

A_ν und E_ν heissen spektrales Absorptions- bzw. Emissionsvermögen.

Die Leistung muß im thermischen Gleichgewicht gleich absorbiert und emittiert werden. Das gilt für jede Richtung θ und ϑ , da Hohlraumstrahlung isotrop ist. Dann kommt *das Kirchhoffsche Gesetz* heraus.

$$\frac{E_\nu^*}{A_\nu} = S_\nu^*(T)$$

Das spektrale Emissionsvermögen E_ν eines Schwarzen Körpers ist identisch mit der spektralen Strahlungsdichte S_ν der Hohlraumstrahlung. Das liegt daran, daß $A \equiv 1$ für einen Schwarzen Körper ist.

1.10.2 Das Plancksche Strahlungsgesetz

Um die experimentell gefundene Intensitätsverteilung $I(\nu)$ der Strahlung eines Hohlraumes zu erklären, forderte Planck, daß jede Eigenschwingung des elektromagnetischen Feldes Energie nur in ganzzahligen Vielfachen von $h\nu$ aufnehmen oder abgeben kann. Im thermischen Gleichgewicht folgt die Verteilung der Gesamtenergie auf die einzelnen Eigenschwingungen einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung. Die Zahl $p(q)$ der Eigenschwingungen pro Volumeneinheit mit der Energie $qh\nu$ ist

$$p(q) = \frac{n}{Z} e^{-qh\nu/kT}$$

n ist Gesamtdichte aller Eigenschwingungen, k ist die Boltzmann-Konstante

$$Z = \sum_{q=0}^{\infty} e^{-qh\nu/kT}$$

Z ist die Zustandssumme über alle Eigenschwingungen. Die mittlere Energiedichte pro Eigenschwingung mit der Frequenz ν ist

$$\overline{W} = \frac{1}{n} \sum_{q=0}^{\infty} p(q) qh\nu \quad (39)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{q=0}^{\infty} qh\nu e^{-qh\nu/kT} \quad (40)$$

$$\overline{W} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (41)$$

Die spektrale Modendichte ist $n(\nu)$. Wir kennen die mittlere Energiedichte. Damit kann man die spektrale Energieverteilung $\rho(\nu)$ der Hohlraumstrahlung finden, d.h.

$$n(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu \quad (42)$$

$$\rho(\nu) = n(\nu)\overline{W} \quad (43)$$

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \quad (44)$$

$\rho(\nu)$ hat die Einheit Jm^{-3}s . Diese Formel heißt *Plancksche Strahlungsformel*.

1.10.3 Das Rayleigh-Jeans-Strahlungsgesetz

Die Strahlungsdichte der vom Flächenelement dF eines Schwarzen Körpers in den Raumwinkel $d\Omega$ emittierten Strahlung ist

$$S_\nu^* d\nu d\Omega = \frac{c}{4\pi} w_\nu d\nu d\Omega \quad (45)$$

$$= \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{d\nu d\Omega}{e^{(h\nu/kT)} - 1} \quad (46)$$

Wenn $h\nu \ll kT$ ist, dann ist $e^{+x} = 1 + x$.

$$S_\nu^*(\nu) \approx \frac{2\nu^2}{c^2} kT \Rightarrow w_\nu(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (47)$$

Was wir gefunden haben, heißt Rayleigh-Jeans-Gesetz. Dieses Gesetz ist ein Grenzfall der allgemeinen Planckschen Strahlungsformel.

1.11 Linienemission /Linienabsorption

Linienabsorption und Linienemission entsteht beim Gebunden-Gebunden-Übergang von Atomen einer bestimmten Sorte zwischen zwei ihrer diskreten Energieniveaus mit den Energien E_i und E_k

Im Bohrschen Atommodell wird gesagt, daß ein Atomzustand E_i durch Emission oder Absorption eines Photons $h\nu$ in einen anderen Zustand E_k übergehen kann, wenn die Energie erhaltung

$$E_i - E_k = h\nu$$

erfüllt ist. Aber das ist im Experiment nicht ganz genau so. Die Spektrallinien haben unterschiedliche Intensitäten. Das bedeutet, daß die verschiedenen Übergänge im Atom unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten haben. Dann haben wir keine monochromatische Strahlung. Die Spektrallinien bestehen vielmehr aus einer Intensitätsverteilung um eine Mittenfrequenz

$$\nu_{ik} = (E_i - E_k)/h.$$

Bei Übergängen zwischen zwei Zuständen eines äußeren, schwach gebundenen Elektrons liegt die Energiedifferenz ΔE im Bereich weniger eV. Die emittierte Strahlung liegt daher zwischen dem infraroten und ultravioletten Spektralbereich, oft im sichtbaren Gebiet. Bei Anregung eines inneren, stark gebundenen Elektrons reichen die absorbierten bzw. emittierten Wellenlängen bis ins Röntgengebiet.

Die Übergangswahrscheinlichkeit für induzierte Emission ist

$$W_{ik} = B_{ik} \cdot w_\nu \nu$$

proportional zur spektralen Energiedichte. B_{ik} heißt Einstein-Koeffizient der induzierten Emission. w_ν ist die Energiedichte

$$w_\nu(\nu) = n(\nu)h\nu,$$

wobei $n(\nu)$ die Zahl der Photonen im Einheitsintervall $\Delta\nu=1\text{s}^{-1}$ ist. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für spontane Emission ist $W_{ik}^{spont}=A_{ik}$. Sie ist unabhängig von einem äußeren Strahlungsfeld und heißt Einstein-Koeffizient der spontanen Emission. Und die letzte Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ist für den Absorptionsübergang

$$W_{ki} = B_{ki}w_\nu(\nu)$$

Im stationären Gleichgewicht sind Zustandsbesetzungen zeitlich konstant. Das bedeutet, daß die Emissionsrate gleich der Absorptionsrate sein muß.

$$A_{ik}N_i + B_{ik}\cdot w_\nu(\nu)\cdot N_i = B_{ki}\cdot w_\nu(\nu)\cdot N_k$$

N_i und N_k sind die Zahlen in den Zuständen E_i und E_k . Im thermischen Gleichgewicht gilt für die Besetzungszahlen N_i, N_k die Boltzmann-Verteilung

$$\frac{N_i}{N_k} = \frac{g_i}{g_k} e^{-(E_i-E_k)/kT} = \frac{g_i}{g_k} e^{-h\nu/kT},$$

wobei die Zahl $g=(2J+1)$ das statistische Gewicht eines Zustandes mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl J ist. Im thermischen Strahlungsfeld ist $w_\nu(\nu)$ bekannt. Davon kann man die Relationen zwischen den Einstein-Koeffizienten herausfinden. Die Relationen sind

$$B_{ik} = \frac{g_i}{g_k} B_{ki}, \tag{48}$$

$$A_{ik} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{ik}. \tag{49}$$

Bei gleichen statistischen Gewichten $g_k=g_i$ sind die Einstein-Koeffizienten für induzierte Emission und Absorption gleich groß.

1.12 Linienbreiten

Bei der Absorption oder Emission elektromagnetischer Strahlung, die zu einem Übergang $\Delta E = E_i - E_k = h\nu_{ik}$ zwischen zwei Energieniveaus des Atoms führt, wird eine Frequenz ν_{ik} gestrahlt, die nicht streng monochromatisch ist. Der verwendete Spektralapparat hat eine bestimmte Spektralaufösung. Deshalb gibt es eine Verteilung $P_\nu(\nu - \nu_{ik})$ der emittierten bzw. absorbierten spektralen Strahlungsleistung um eine Mittenfrequenz

$\nu_0 = \nu_{ik}$. $P_\nu(\nu)$ ist die spektrale Leistungsdichte, die von der Lichtquelle im Frequenzintervall $\Delta\nu = 1\text{s}^{-1}$ um die Frequenz ν abgestrahlt wird. $P_\nu(\nu - \nu_0)$ ist das Lineienprofil einer Spektrallinie. Das Frequenzintervall $\delta\nu = |\nu_1 - \nu_2|$ heißt *Halbwertsbreite*, bei der die emittierte spektrale Leistungsdichte $P_\nu(\nu)$ auf $1/2P_\nu(\nu_0)$ abgesunken ist.

$$\delta\lambda = (\lambda_1 - \lambda_2) = (c/\nu_1 - c/\nu_2)$$

aus $\lambda = c/\nu$

$$\delta\lambda = -\frac{c}{\nu^2}\delta\nu = -\frac{\lambda}{\nu}\delta\nu.$$

$$\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| = \left|\frac{\delta\nu}{\nu}\right| = \left|\frac{\delta w}{w}\right|.$$

1.13 Verbreiterungsmechanismen

Für die endliche Linienbreite gibt es viele Gründe, von denen natürliche Linienbreite, Doppler-Verbreiterung und Druckverbreiterung wichtig sind.

1.13.1 Natürliche Linienbreite

Durch die Unschärfe der Energieniveaus in Atomen ergibt sich die sogenannte natürliche Linienbreite, die normalerweise sehr klein ist. Diese Linienverbreiterung wird Strahlungs-dämpfung genannt, weil sie mit der endlichen Länge der Wellenzüge, deren Dämpfung, zusammenhängt. Unter dem klassischen gedämpften harmonischen Oszillator wird die Eigenfrequenz $w_0 = \sqrt{D/m}$ mit m ; Masse D ; Rückstellkonstante w ; Eigenfrequenz beschrieben.

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + w_0^2x = 0,$$

γ ist die Dämpfungskonstante.

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-(\gamma/2)t} [\cos wt + (\gamma/2w) \sin wt] \quad (50)$$

wobei die Frequenz

$$w = \sqrt{w_0^2 - (\gamma/2)^2}$$

ist. Wegen der Dämpfung ist w kleiner als w_0 . Allgemein kann man

$$\gamma \ll w_0$$

annehmen. Deshalb kann

$$w \approx w_0$$

gesetzt werden. Dann haben wir als Lösung

$$x(t) \approx x_0 \cdot e^{-(\gamma/2)t} \cdot \cos w_0 t.$$

Die Amplitude ist hier abhängig von der Frequenz w , und kann durch eine Fourier-Transformation beschrieben werden.

$$A(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \cdot e^{-iwt} dt \quad (51)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} x_0 \cdot e^{-(\gamma/2)t} \cos w_0 t \cdot e^{-iwt} dt \quad (52)$$

$$A(w) = \frac{x_0}{\sqrt{8\pi}} \left[\frac{1}{i(w_0 - w) + \gamma/2} + \frac{1}{i(w_0 + w) + \gamma/2} \right] \quad (53)$$

Die abgestrahlte spektrale Leistung

$$P_w(w) \propto A(w) \cdot A^*(w),$$

ist in der Umgebung der Frequenz w_0 das Linienprofil

$$P_w(w) = \frac{C}{(w - w_0)^2 + (\gamma/2)^2},$$

das Lorentzprofil heißt.

$$C = P_0 \cdot \frac{\gamma}{2\pi}$$

Die natürliche Linienbreite ist die Halbwertsbreite des Lorentzprofil. Sie unterliegt keinen äußeren Einflüssen und entsteht nur durch die endliche Abstrahldauer des Atoms. Die Halbwertsbreite δw_n ist gleich

$$\delta w_n = \gamma \Rightarrow \delta \nu_n = \gamma/2\pi.$$

Die mittlere Lebensdauer τ erfüllt die Gleichung $\tau = 1/\gamma$. Auch wissen wir: die mittlere Lebensdauer eines Atomzustandes $\tau_i = 1/A_i$ wird durch den Einstein-Koeffizienten A_i der spontanen Emission bestimmt. Dann

$$\delta w_n = A_i = \frac{1}{\tau_i} \quad (54)$$

$$\Rightarrow \delta \nu_n = \frac{A_i}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\tau_i} \quad (55)$$

Was wir gefunden haben, können wir aus der Heisenbergschen Unschärferelation herleiten. $\Delta E_i = \hbar/\tau_i$: aus dieser Gleichung erhalten wir die Energie, die bei einem Übergang $E_i \rightarrow E_k$ herauskommt. Dazu kann man die entsprechende Frequenz finden:

$$\Delta \nu = \Delta E/h = \frac{1}{2\pi\tau_i} \Rightarrow \Delta \nu = \delta \nu_n.$$

Beide Energieniveaus haben verschiedene Lebensdauern τ_i, τ_k . Die entsprechenden Energieunschärfen beider Niveaus addieren sich.

$$\Delta E = \Delta E_i + \Delta E_k \quad (56)$$

$$\Rightarrow \delta \nu_n = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_k} \right) \quad (57)$$

Doppler-Verbreiterung

Wenn sich ein angeregtes Atom mit der Geschwindigkeit $\vec{v} = \{v_x, v_y, v_z\}$ bewegt, wird die Mittenfrequenz w_0 des vom Atom in Richtung des Wellenvektors \vec{k} emittierten Lichtes für einen ruhenden Beobachter infolge des Dopplereffektes verschoben zu

$$w_e = w_0 + \vec{k} \cdot \vec{v}$$

mit

$$|\vec{k}| = k = 2\pi/\lambda.$$

Für die Absorptionsfrequenz gibt es die Gleichung

$$w = w_a = w_0 + \vec{k} \cdot \vec{v}.$$

Wenn $\vec{k} = \{0, 0, k_z\}$ und $\vec{k} \cdot \vec{v} = k_z \cdot v_z$ sind, ist die Absorptionsfrequenz

$$w_a = w_0 + k_z \cdot v_z = w_0(1 + v_z/c).$$

Im thermischen Gleichgewicht haben die Atome eines Gases eine Maxwell'sche Verteilung. Die Zahl der Atome pro Volumeneinheit im absorbierenden Zustand E_i mit Geschwindigkeitskomponenten v_z zwischen v_z und $v_z + dv_z$ ist

$$n_i(v_z)dv_z = \frac{N_i}{v_w \cdot \sqrt{\pi}} e^{-(v_z/v_w)^2} dv_z,$$

wobei $v_w = (2k_B T/m)^{1/2}$ die wahrscheinlichste Geschwindigkeit ist.

$$N_i = \int_{-\infty}^{+\infty} n_i(v_z) dv_z$$

ist die Gesamtzahl aller Atome im E_i Zustand pro Volumeneinheit. Wir können die Zahl der Atome in w ausdrücken:

$$n_i(w)dw = \frac{c \cdot N_i}{w_0 \cdot v_w \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{-[c(w-w_0)/(w_0 v_w)]^2} dw.$$

Die emittierte bzw. absorbierte Strahlungsleistung $P(w)$ ist proportional zu n_i , dann

$$P(w) = P(w_0) e^{[c(w-w_0)/(w_0 v_w)]^2}$$

Ihre volle Halbwertsbreite $\delta w_D = |w_1 - w_2|$ mit $P(w_1) = P(w_2) = 1/2P(w_0)$ heißt *Dopplerbreite*.

$$\delta w_D = 2\sqrt{\ln 2} \cdot w_0 v_w / c$$

wenn man $v_w = (2k_B T/m)^{1/2}$ einsetzt, dann ist die Dopplerbreite

$$\delta w_D = (w_0/c) \sqrt{(8k_B T \cdot \ln 2)/m} \quad (58)$$

$$\delta \nu_D = \frac{2\nu_0}{c} \sqrt{(2RT/M) \cdot \ln 2} \quad (59)$$

$$= 7,16 \cdot 10^{-7} \nu_0 \cdot \sqrt{T/M} \cdot s^{-1}, \quad (60)$$

wenn $M = N_A \cdot m$ (N_A ist die Avogadrozahl) $R = N_A \cdot k_B$ und $\nu = w/2\pi$ sind. T ist in K und M ist in g/mol.

1.13.2 Stoßverbreiterung von Spektrallinien

Wenn sich einem Atom A mit den Energieniveaus E_i und E_k ein anderes Atom bzw. Molekül B nähert, dann werden wegen der Wechselwirkung zwischen A und B die Energieniveaus von A verschoben. Diese Energieverschiebung hängt ab von

1. der Struktur der Elektronenhüllen von A und B
2. dem gegenseitigen Abstand $R(A,B)$

Die Energieverschiebung hat unterschiedliche Werte für die einzelnen Energieniveaus E_i und kann sowohl negativ (beim anziehender WW) als auch positiv sein (bei abstoßendem Potential zwischen $A_i(B)$ und B).

Bei einem Übergang zwischen Niveaus E_i und E_k während des Stoßes hängt die Frequenz ν_{ik} des emittierten bzw. absorbierten Lichtes

$$h\nu_{ik} = |E_k(R) - E_i(R)|$$

von der Differenz der Potentialkurven beim Abstand R zwischen A und B während der Lichtemission ab. Wenn es ein Gas Gemisch gibt, dann sind R Abstände um einen Mittelwert \bar{R} , der von Druck und Temperatur abhängt, und ν_{ik} auch um $\bar{\nu}$ statistisch verteilt. Es gibt zwei verschiedene Stoßarten, die

1. **elastischen Stöße:** Die Stöße verursachen Linienverbreiterung $\delta\nu$ und Linienverschiebung $\Delta\nu$. Die Energiedifferenz $h \cdot \Delta\nu = E_i - E_k$ wird bei positivem $\Delta\nu$ durch die kinetische Energie der Stoßpartner, nicht durch die innere Energie eines Stoßpartners geliefert. Bei negativem $\Delta\nu$ wird die Übergangenergie in kinetische Energie umgewandelt. Sie ändert nur die Phase der Oszillatorschwingung. Deswegen werden solche Stöße auch **Phasenstörungsstöße** genannt.
2. **inelastischen Stöße:** Bei denen die Anregungsenergie $E_i - E_k$ ganz oder teilweise in innere Energie des Stoßpartners B umgewandelt wird oder in Translationsenergie beider Stoßpartner. Sie vermindern die Besetzungszahl von E_i und damit die Fluoreszenz von E_i . Sie führen zu einer Verbreiterung der Spektrallinien. Sie ändern die Amplitude der Oszillatorschwingung. Man kann das durch eine zusätzliche Dämpfungskonstante $\gamma_{Stoß}$ beschreiben.

$$\delta\omega = \gamma_n + \gamma_{Stoß}$$

ist die Linienbreite eines Lorentz-Profiles. γ_n ist die durch die Strahlung bewirkte Dämpfung.

Wenn ein angeregtes Atomniveau E_i mit der Wahrscheinlichkeit R_{ik} durch Stoß mit B ohne Lichtemission in den Zustand E_k übergeht (das wird **Stoßinduzierte Relaxation** genannt), ist die gesamte Übergangswahrscheinlichkeit vom Niveau E_i in andere Zustände E_k des Atoms

$$A_i = \sum_k A_{ik}(\text{spontan}) + \sum_k R_{ik}$$

mit der stoßinduzierten Übergangswahrscheinlichkeit

$$R_{ik} = N_B \sigma_{ik} \sqrt{8k_B T} / \pi \mu.$$

Die effektive Lebensdauer $\tau_{eff} = \frac{1}{A_i}$ des Niveaus E_i wird durch die Stöße verkürzt. Deswegen wird die Linienbreite der Strahlung größer. Wegen $\delta\nu_{ik} = A_{ik}/2\pi$ steigt $\delta\nu$ linear mit der Dichte N (mit dem Druck der Komponente B) an. Das Linienprofil für elastische und inelastische Stöße ist

$$P_w(w) = P_0 \frac{(\frac{\gamma_n + \gamma_{in}}{2} + N\bar{v}\sigma_b)^2}{(w - w_0 - N\bar{v}\sigma_s)^2 + (\frac{\gamma_n + \gamma_{in}}{2} + N\bar{v}\sigma_b)^2},$$

wobei N die Dichte der stoßenden Moleküle B , \bar{v} die mittlere Relativgeschwindigkeit und $P_0 = P_w(w'_0)$ die spektrale Strahlungsleistung im Linienmaximum bei der verschobenen Frequenz $w'_0 = w_0 + N\bar{v}\sigma_s$ ist.

Spektrometertypen Bei Spektrometern handelt es sich um eine spezielle Art von Interferometern. Das Licht einer Lichtquelle wird durch eine optische Apparatur geleitet, in der die verschiedenen Wellenlängen des Spektrums räumlich getrennt werden und dann beobachtet werden können. Zur räumlichen Trennung nutzt man entweder ein Prisma oder ein Beugungsgitter. Zunächst durchquert das Licht einen Spalt, wonach es dann auf eine Linse (Prisma) bzw. auf einen Hohlspiegel (Gitter) trifft, um paralleles Licht zu erhalten. Dieses trifft dann auf das Prisma bzw. Gitter und wird danach durch eine weitere Linse bzw. einen weiteren Hohlspiegel wieder gebündelt und trifft schließlich auf einen Detektor. Beim Spektrographen wird das gesamte Spektrum gleichzeitig aufgenommen, daher besteht der Detektor aus einer Photoplatte oder einem Bildverstärker. Verwendet man einen Monochromator, so will man die einzelnen Spektrallinien nacheinander aufnehmen. Deswegen befindet sich vor dem Detektor ein weiterer Spalt, der den unerwünschten Teil des Spektrums ausblendet.

1.14 Fragen aus der Praktikumsanleitung

1. Wie lauten die Bohrschen Postulate?

Antwort: Siehe Abschnitt 1.2.

2. Wie groß ist der sogenannte Bohrsche Radius a_0 des Wasserstoffatoms?

Antwort: $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} m = 0,529 \text{ \AA}$

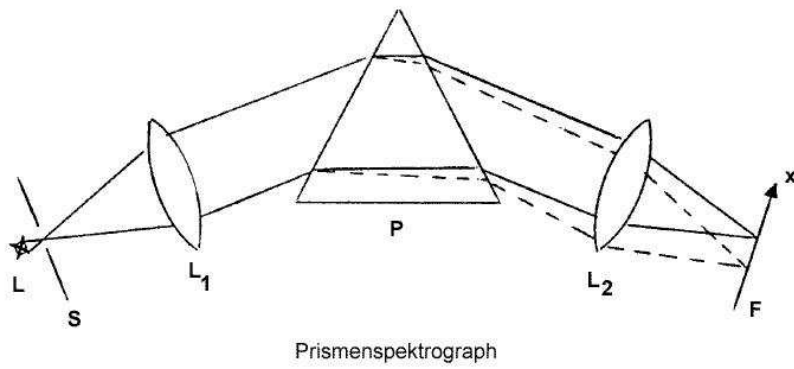


Abbildung 5: Prismenspektrograph. Quelle: [4]

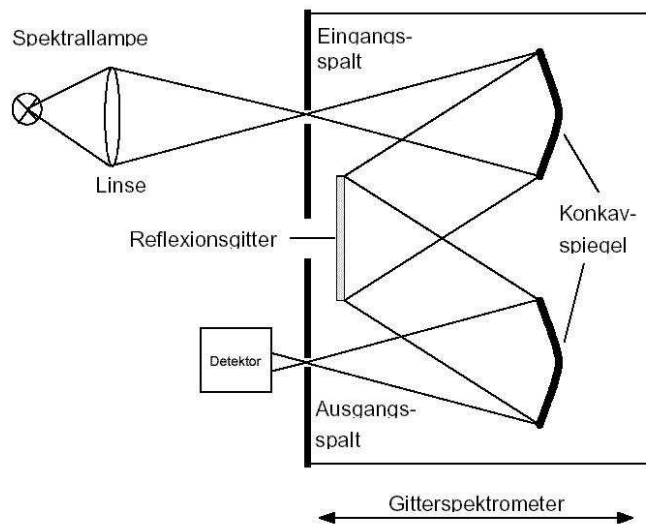


Abbildung 6: Gittermonochromator. Quelle: [4]

3. Wie groß ist der Radius der 1. Bahn von myonischem Wasserstoff?

Antwort: Das Myon ist 206.8 mal schwerer als das Elektron, folglich ist $a_\mu = a_0/206.8$.

4. In welchem Energiebereich liegen Photonen des sichtbaren Lichts?

Antwort: Sichtbares Licht hat eine Wellenlänge von $400 - 800 \text{ nm} \hat{=} 750 - 475 \text{ THz} \hat{=} 5 \cdot 10^{-19} - 2,5 \cdot 10^{-19} \text{ J} \hat{=} 3,1 - 1,6 \text{ eV}$.

5. Wie lautet der Zusammenhang zwischen Energie und Wellenlänge der Photonen?

Antwort: $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$.

6. Können Sie die Gleichung für die reduzierte Masse herleiten?

Antwort: Ja.

Es ist zu vermuten, daß die auf diese Frage erwartete Reaktion eine Herleitung der Formel für die träge Masse ist. Betrachte also zwei wechselwirkende Teilchen mit Massen m_1, m_2 . Die Teilchen sollen sich an den Koordinaten \vec{x}_1 und \vec{x}_2 befinden. Für die zwischen den Teilchen wirkende Kraft gilt also:

$$m_1 \frac{d^2 \vec{x}_1}{dt^2} = F = -m_2 \frac{d^2 \vec{x}_2}{dt^2}.$$

Fordere nun, daß die Kraftgleichung für die Relativkoordinate $\vec{x} := \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ die gleiche Form annehmen soll

$$\Rightarrow \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = F \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Rightarrow \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = F.$$

Die in der Formel auftretende Masse heißt dann *reduzierte Masse* μ .

7. Wie groß ist die Isotopieverschiebung der $n = 3 \rightarrow n = 2$ Linie (Wasserstoff gegen Deuterium) nach dem Bohrschen Atommodell?

Antwort: Im Bohrschen Atommodell ist die Frequenz ν eines durch einen Übergang von $n = 3$ nach $n = 2$ erzeugten Photons gegeben durch:

$$\nu = R_{H/D} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right).$$

Also ist die Frequenzisotopieverschiebung gegeben durch

$$\Delta\nu = \frac{5}{36} (R_H - R_D),$$

und die Wellenlängenisotopieverschiebung durch

$$\Delta\lambda = \frac{36}{5} \left(\frac{c}{R_H} - \frac{c}{R_D} \right).$$

Für die Rydbergkonstante gilt:

$$R_X = \frac{\mu_X e^4}{8\epsilon_0^2 h^3}.$$

Es ist $\mu_H = 9,104432 \cdot 10^{-31} \text{kg}$ und $\mu_D = 9,106912 \cdot 10^{-31} \text{kg}$. Es folgt (mit Werten aus [3]): $R_H = 3,288041 \cdot 10^{15} \text{Hz}$, $R_D = 3,288937 \cdot 10^{15} \text{Hz}$. Damit wird

$$\Delta\nu \approx 1,24 \cdot 10^{11} \text{Hz}, \quad \Delta\lambda \approx 1,80 \text{\AA}.$$

8. Wie funktionieren Interferenzfilter?

Antwort: Interferenzfilter spalten einen Wellenzug in n -mal auf. Jedes der n Wellenpakete durchläuft einen Weg, der sich in der optischen Länge von den Wegen der anderen Pakete unterscheidet. Am Ort der Zusammenführung löschen sich Wellenlängen, deren Pakete nicht konstruktiv interferieren selbst aus.

9. Was ist ein Fabry-Perot-Interferometer? Kann man damit allein spektroskopieren?

Antwort: Siehe hierzu Abbildung 7. Das Fabry-Perot-Interferometer besteht

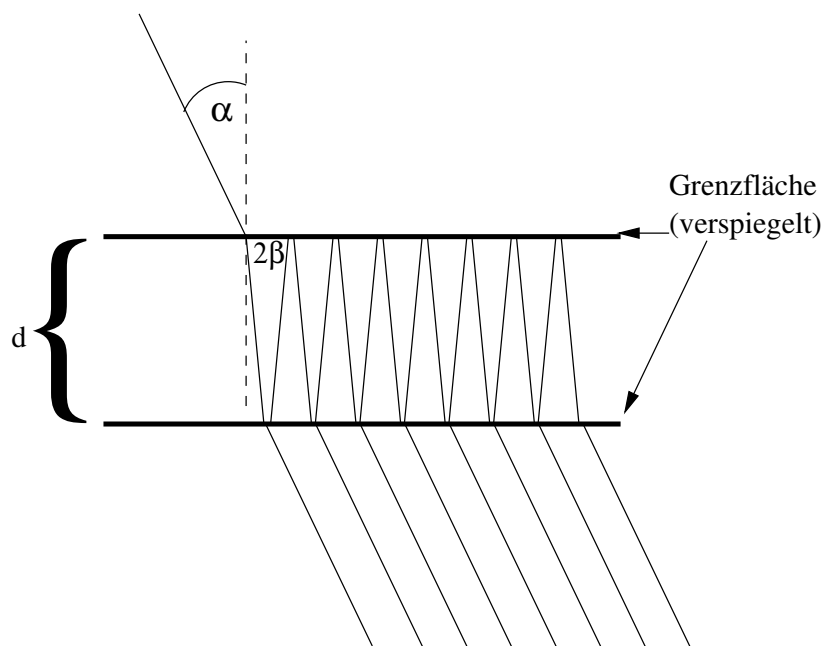


Abbildung 7: Fabry-Perot-Interferometer

aus einer planparallelen Platte, deren Außenflächen mit einem Metall bedampft sind, also sehr gut spiegeln. Ein einfallender Lichtstrahl wird nun innerhalb der Platte reflektiert. Bei jeder Reflexion verläßt ein - je nach Güte der Metallisierung - kleiner Teil des Lichts die Platte. So erreicht man die Aufteilung des einfallenden Strahls.

Der Gangunterschied zwischen zwei benachbart austretenden Strahlen ist nun leicht aus der Zeichnung abzulesen: $\Delta l = 2d / \cos \beta$. (β läßt sich bei Kenntnis des Brechungsindex n mit dem Snellius'schen Brechungsgesetz $n = \sin \beta / \sin \alpha$ berechnen). Es ergibt sich eine Phasenverschiebung zwischen zwei benachbarten Strahlen von $\Delta\phi = \frac{4\pi d}{\lambda \cos \beta}$.

Interessant ist nun die Interferenz bei der Zusammenführung der einzelnen Strahlen. Addiere dafür Phasen und Amplituden in der komplexen Ebene:

$$A_f = \sum_{n=0}^N A_i G^n e^{in\Delta\phi} = A_i \frac{(Ge^{i\Delta\phi})^{N+1} - 1}{Ge^{i\Delta\phi} - 1},$$

mit A_i : Anfangsamplitude, A_f : Endamplitude, G : Reflexionsgrad der Grenzfläche. Durch Einsetzen und Multiplikation mit dem komplex konjugierten erhält man dann eine Intensitätsverteilung in Abhängigkeit von α und d .

Es ist nicht möglich, nur mit dem Fabry-Perot-Interferometer zu spektroskopieren. Mit der Geometrie des Strahlenganges versuchen wir, eine Wellenlänge vorzugeben, die an unserem Detektor konstruktiv interferiert. Allerdings interferieren auch Strahlen solcher Wellenlängen konstruktiv, die ein kleiner ganzzahliger Bruchteil der gewünschten Wellenlänge sind. Es ist also eine weitere Filterung nötig.

10. Wie groß ist die Auflösung eines Prismenspektrographen?

Antwort: Ist n der Brechungsindex des Materials, aus dem das Prisma besteht und d die Basisbreite des Prismas, dann gilt:

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{d}{3} \frac{\partial n}{\partial \lambda}.$$

11. Wie groß ist die Auflösung bei einem Gittermonochromator?

Antwort: Parallel eintreffende Lichtstrahlen haben nach Auftreffen auf das Gitter

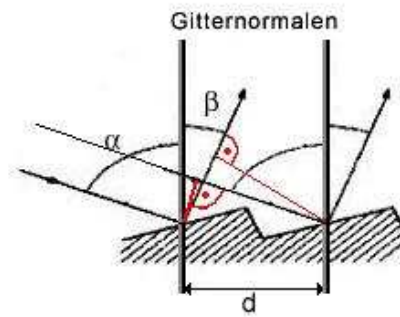


Abbildung 8: Beugungsgitter. Quelle: [4]

einen Gangunterschied von $d(\sin(\alpha) + \sin(\beta))$. Damit es zu konstruktiver Interferenz kommt, muss dieser Gangunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge sein. Somit erhält man die so genannte Gittergleichung

$$d(\sin(\alpha) + \sin(\beta)) = m\lambda.$$

Differenziert man dies nach λ bei festgehaltenem α , so erhält man die Winkeldispersion

$$\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{m}{d\cos(\beta)} = \frac{1}{\lambda} \frac{\sin(\alpha) + \sin(\beta)}{\cos(\beta)}$$

Setzt man nun noch die halbe Fusspunktbreite $\Delta\beta = \frac{\lambda}{Nd}$ ($N =$ Zahl der beleuchteten Furchen), die sich aus der Berechnung der Intensitätsverteilung ergibt, ein, so erhält man unter nochmaliger Verwendung der Gittergleichung

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = mN.$$

Hieran erkennt man insbesondere, dass es sinnvoll ist, dass Gitter bestmöglich auszuleuchten, da das Auflösungsvermögen proportional zu Zahl der beleuchteten Gitterfurchen ist.

12. Was ist ein Phasengitter?

Antwort: Während das normale Beugungsgitter aus einer periodischen Folge von lichtdurch- und -undurchlässigen Öffnungen besteht, ändert sich in einem Phasengitter periodisch entweder der Brechungsindex oder die Dicke des durchstrahlten Mediums. Infolgedessen erfährt nicht die Amplitude, sondern die Phase des Lichtes in der Gitterebene eine periodische Änderung.

13. Weshalb wird die Lichtquelle mittels eines Kondensors auf den Eintrittsspalt abgebildet? Wie muß der Kondensor beschaffen sein? Kann man auch ohne Kondensor arbeiten?

Antwort: Ein Kondensor besteht aus zwei Konvexlinsen. Diese sorgen dafür, dass möglichst viel Licht aus der Lampe durch den Eintrittsspalt geht, da dann natürlich die Intensität des auf den Detektor fallenden Lichtes höher ist als ohne Kondensor. Arbeitet man ohne Kondensor, so muss die verwendete Lichtquelle deutlich heller sein.

14. Diese Frage sollte nicht beantwortet werden.

15. Welche Breite b des Eintrittspalts wählt man bei vorgegebener Auflösung a) bei photographischer Registrierung des Spektrums, b) bei Aufnahme des Spektrums mit einem Photomultiplier?

Antwort: Bei der Breite des Austrittspaltes ist es nötig, einen Kompromiss aus breitem und schmalen Spalt zu finden. Zum einen sollen möglichst alle bis auf die eine relevante Wellenlänge ausgeblendet werden. Dies erfordert einen schmalen Spalt. An diesem Spalt tritt allerdings Beugung auf, das einfallende Licht wird gebeugt und erzeugt ein zusätzliches Interferenzbild, welches das beobachtete Spektrum verschmiert. Also ist hier ein möglichst großer Spalt gefragt.

2 Auswertung

2.1 Eingangsspaltbreite

Das Beugungsbild des Eingangsspalts ist für die Auflösung der Apparatur mitbestimmend. Je schmaler der Spalt, desto breiter das Hauptmaximums des Beugungsbilds. Je breiter das Hauptmaximum ist, desto mehr Gitterfurchen werden kohärent ausgeleuchtet, und desto besser ist die Auflösung.

Die Breite des Eingangsspalts reguliert aber auch die einfallende Lichtmenge. Zur Optimierung der beiden gegeneinander wirkenden Prinzipien wurde die Breite der 5769,6Å-Linie der Eichlampe für verschiedene Öffnungsbreiten bestimmt. Die Linien sind in Abbildungen 10-13 gezeichnet. In Abbildung 9 findet sich der Graph der Linienbreite gegen die Spaltbreite. Die Werte stehen in Tabelle 1. Da wir leider Anfangs- beziehungsweise

Öffnung [Micron]	Linienbreite [Mess-Schritte]
2	9.54
6	8.49
10	8.32
14	8.42
18	8.50
22	9.25
26	10.02
30	10.40

Tabelle 1: Halbwertsbreite der 5769,6Å-Linie gegen die Öffnungsbreite des Eintrittsspalts.

Endwert der Messdurchgänge falsch abgelesen haben, können wir die Breite der Linien nicht in Angstrom angeben. Die Angabe in Mess-Schritten ermöglicht aber auch eine funktionstüchtige Wahl der Spaltbreite. Nach Absprache wurde diese für den weiteren Versuch auf 10μ festgelegt.

2.2 Eichung

Mit Hilfe einer Quelle mit bekanntem Spektrum ermitteln wir die Abweichung der Anzeige des Monochromators von der tatsächlichen Wellenlänge. Als Quelle stand eine Cadmium-Quecksilber-Lampe zur Verfügung, aus deren Spektrum die Linien in Tabelle 2 angegeben waren. $\lambda_{\text{gemessen}}$ ist dabei die Position des gemessenen Peaks und $\Delta\lambda_{\text{gemessen}}$ die halbe Halbwertsbreite des Peaks. Die Peaks sind in Abbildungen 14-19 graphisch dargestellt.

In den Plots sind deutlich zwei von uns gemachte Fehler zu erkennen, und zwar in den Linien 4 und 7. Der Literaturwert ist in allen Plots zentriert, die gemessene Linie befindet sich rechts vom Literaturwert. Nur die Linien 4 und 7 befinden sich links von ihrem jeweiligem Literaturwert.

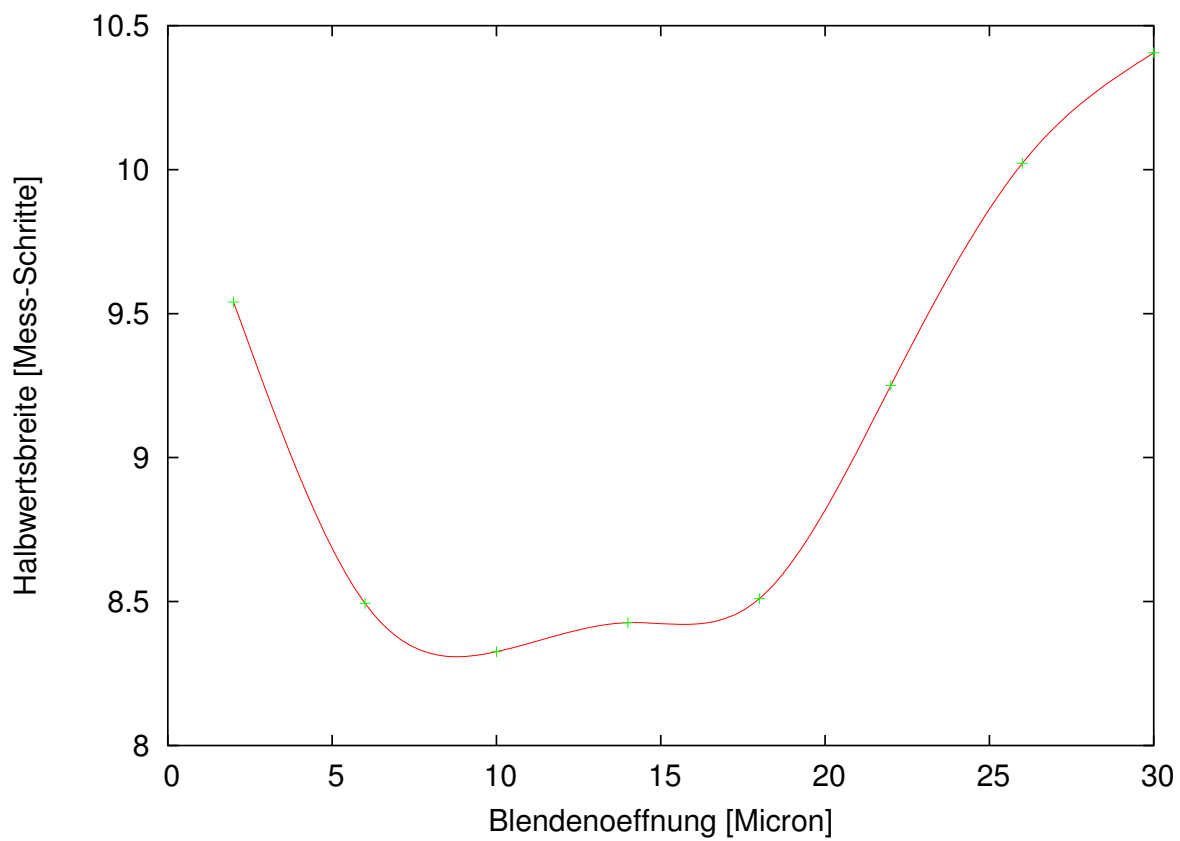


Abbildung 9: Halbwertsbreite der 5769,6Å-Linie gegen die Öffnungsbreite des Eintrittspalts.

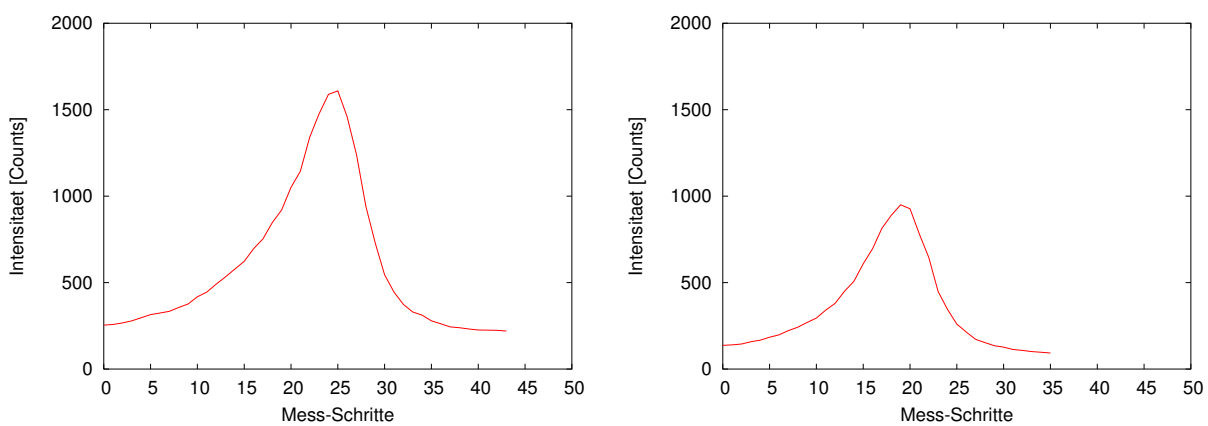


Abbildung 10: 5769,6Å-Linie bei 2 und 6 μ Spaltbreite

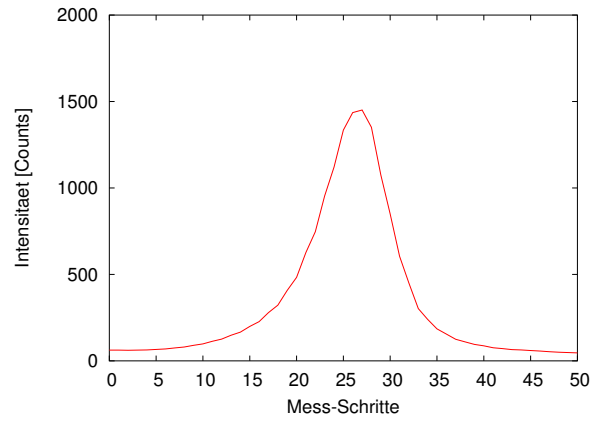
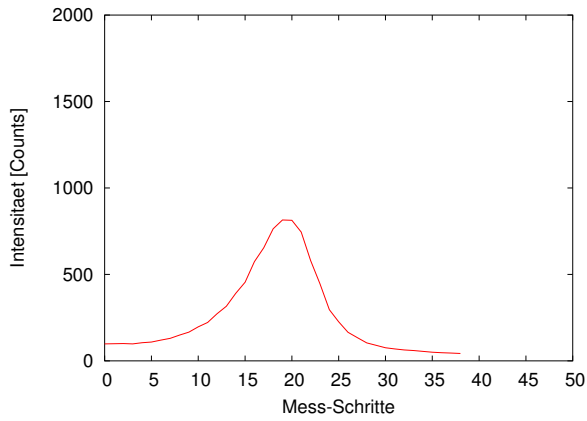


Abbildung 11: 5769,6Å-Linie bei 10 und 14 μ Spaltbreite

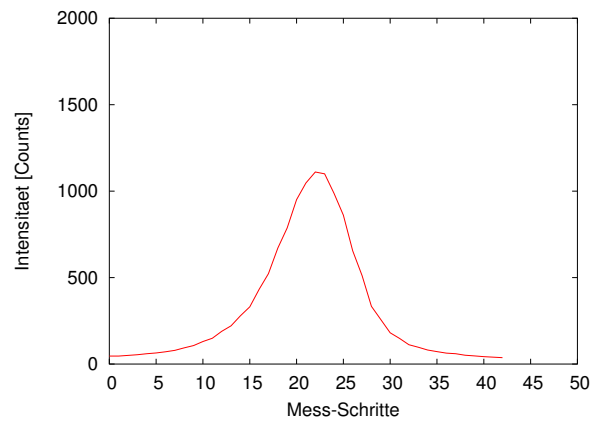
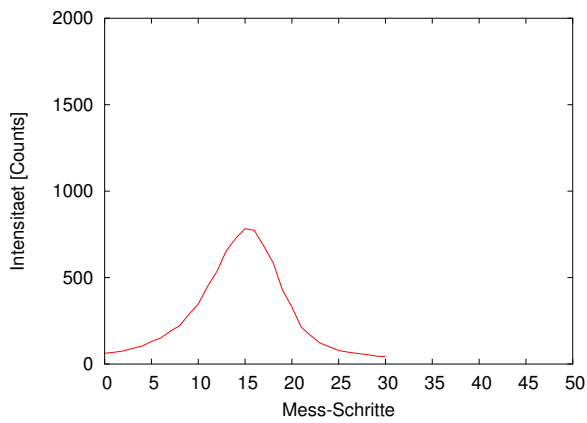


Abbildung 12: 5769,6Å-Linie bei 18 und 22 μ Spaltbreite

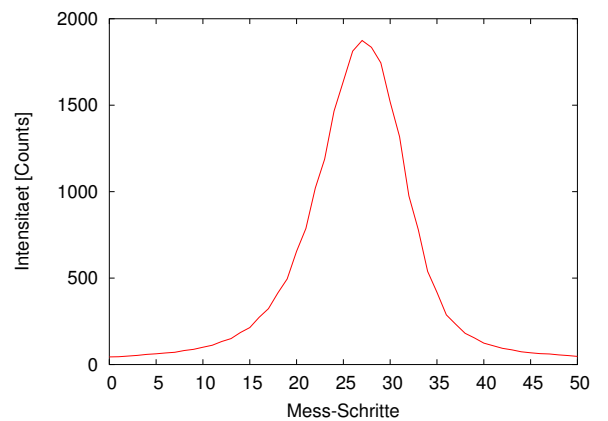
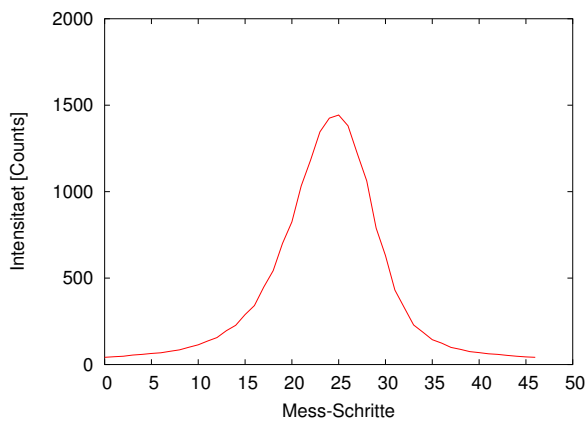


Abbildung 13: 5769,6Å-Linie bei 26 und 30 μ Spaltbreite

#	λ_{Lit} [Å]	$\lambda_{\text{gemessen}}$ [Å]	Halbwertsbreite [Å]	Differenz [Å]
1	4046.6	4047.14	0.29	0.5
2	4077.8	4078.2	0.2	0.4
3	4358.4	4358.77	0.27	0.4
4	4414.6	4413.38	0.68	-1.2
5	4678.2	4678.8	0.28	0.6
6	4799.9	4800.83	0.28	0.9
7	4916	4917.25	0.42	1.25
8	5085.5	5086.82	0.35	1.3
9	5460.7	5461.6	0.29	0.9
10	5769.6	5770.7	0.3	1.1
11	5790.7	5791.7	0.43	1
12	6438.5	6440.05	0.31	1.6

Tabelle 2: Ausgewählte Linien aus dem Spektrum der Eichlichtquelle.

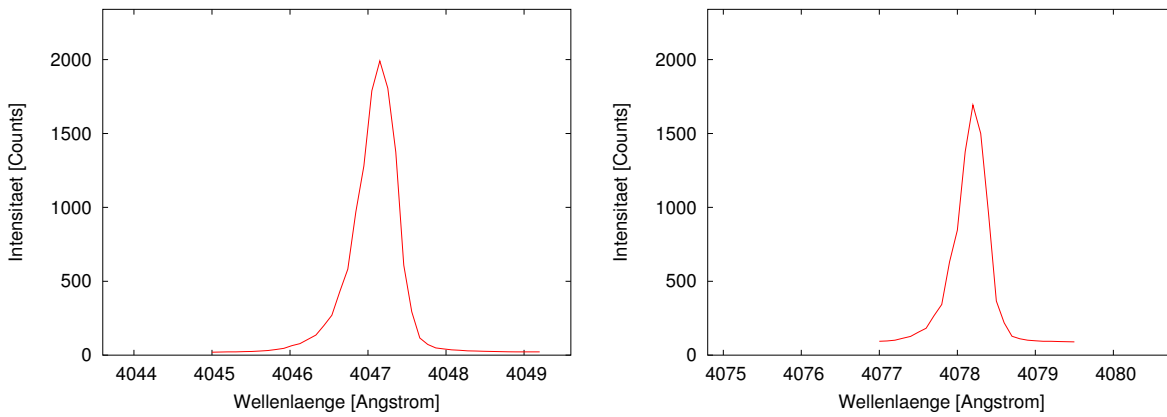


Abbildung 14: Eichpeaks 1 und 2

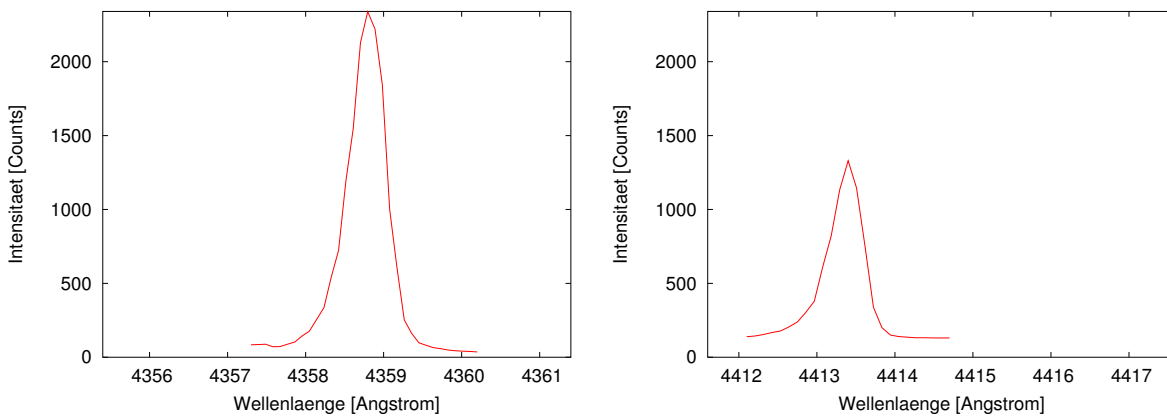


Abbildung 15: Eichpeaks 3 und 4

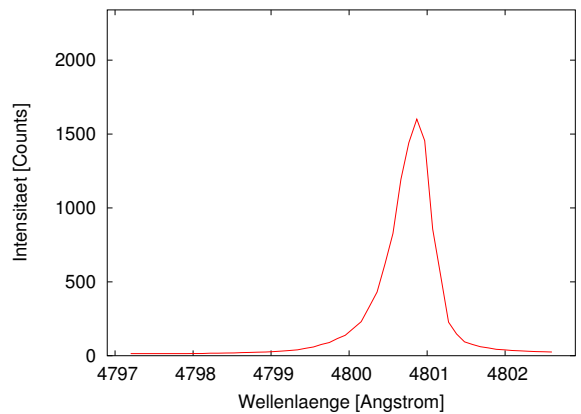
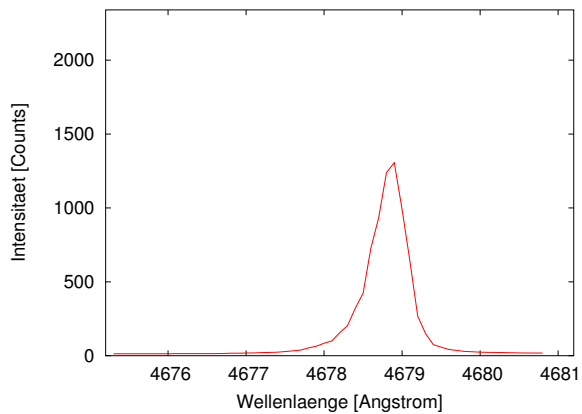


Abbildung 16: Eichpeaks 5 und 6

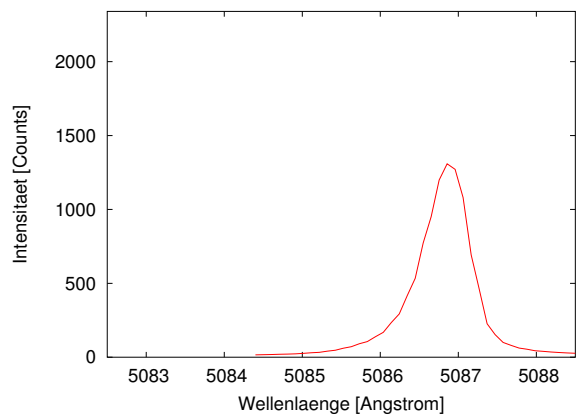
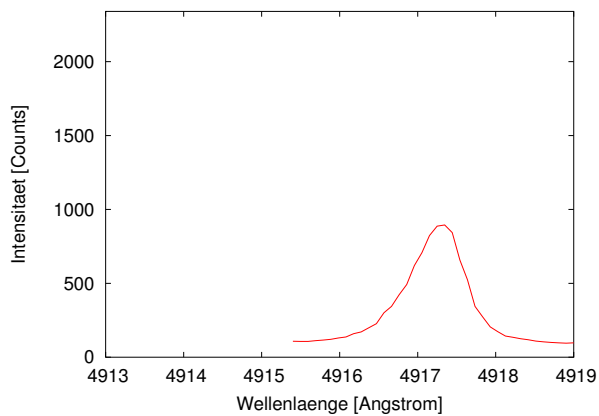


Abbildung 17: Eichpeaks 7 und 8

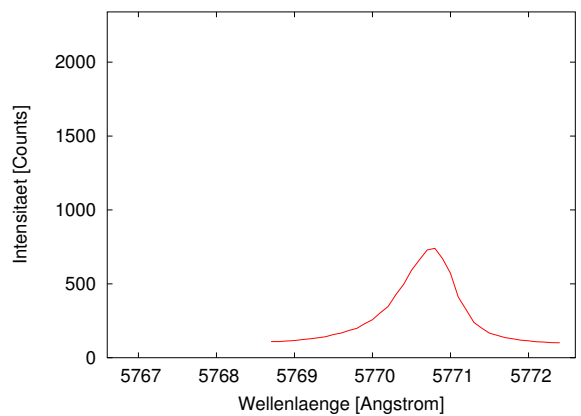
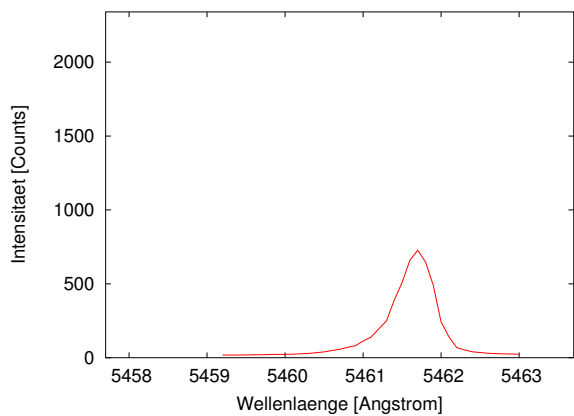


Abbildung 18: Eichpeaks 9 und 10

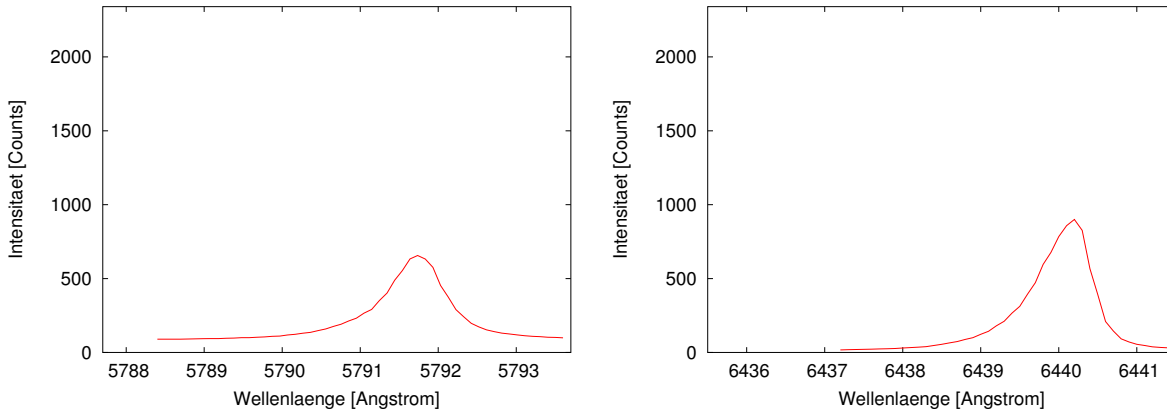


Abbildung 19: Eichpeaks 11 und 12

Konsultiert man außerdem noch unser handschriftliches Meßprotokoll, so stellt man fest, daß die Empfindlichkeit des Milliampereometers für die Linien 4 und 7 tausendmal höher eingestellt war als für die anderen Linien. Offenbar haben wir versehentlich nicht die angegebenen Linien gemessen, sondern schwächere bei etwas kleineren Wellenlängen.

Diese beiden Linien dürfen für die Eichung also nicht berücksichtigt werden. Spart man die beiden aus, so kann man Gnuplot eine rechnerische Geradenanpassung für die Gerade Differenz zum Literaturwert gegen Wellenlänge durchführen lassen und erhält eine Steigung von $m = 0,0006$ sowie einen Achsenabschnitt von $n = -2,2\text{Å}$.

Nun muß man einen Fehler für diese Gerade finden. Dazu berechnet man die Standardabweichung Δn der Meßwerte von der Geradenformel $mx + n$. Man verwendet

$$\Delta n = \sqrt{\frac{\sum_{i \neq 4} (\lambda_{\text{gemessen}} - \lambda_{\text{Lit}} - m\lambda_{\text{Lit}} - n)^2}{N - 2}}$$

Da wir zwei freie Parameter haben, müssen wir im Nenner 2 abziehen. Wir erhalten so $\Delta n = 0,3\text{Å}$ und zeichnen Abbildung 20.

Bei einer angezeigten Wellenlänge von $\lambda_{\text{gemessen}}$ lag also tatsächlich eine Wellenlänge von $\lambda = (1 - m)\lambda_{\text{gemessen}} - n$ vor. Der Fehler beträgt immer Δn .

2.3 Gemessene Wasserstoff- und Deuteriumlinien

Mit Hilfe der Eichung aus Abschnitt 2.2 lassen sich nun die gemessenen Spektren in tatsächliche umrechnen und in Abbildungen 21-24 darstellen. Die Abweichung der Linien von den Literaturwerten (in den Graphen zentriert) ist uniform schwach zu höheren Wellenlängen. Nur die zweite Messung der α -Linie weicht stark in diese Richtung ab. Dieser Wert ist bei der folgenden Auswertung also auszulassen, da wahrscheinlich wieder eine Fehlbedienung der Geräte vorgekommen ist.

Zur Bestimmung der Linienpositionen und Halbwertsbreiten. Die rechte Flanke der Deuteriumlinie wird in allen Graphen von der Wasserstofflinie überlagert und

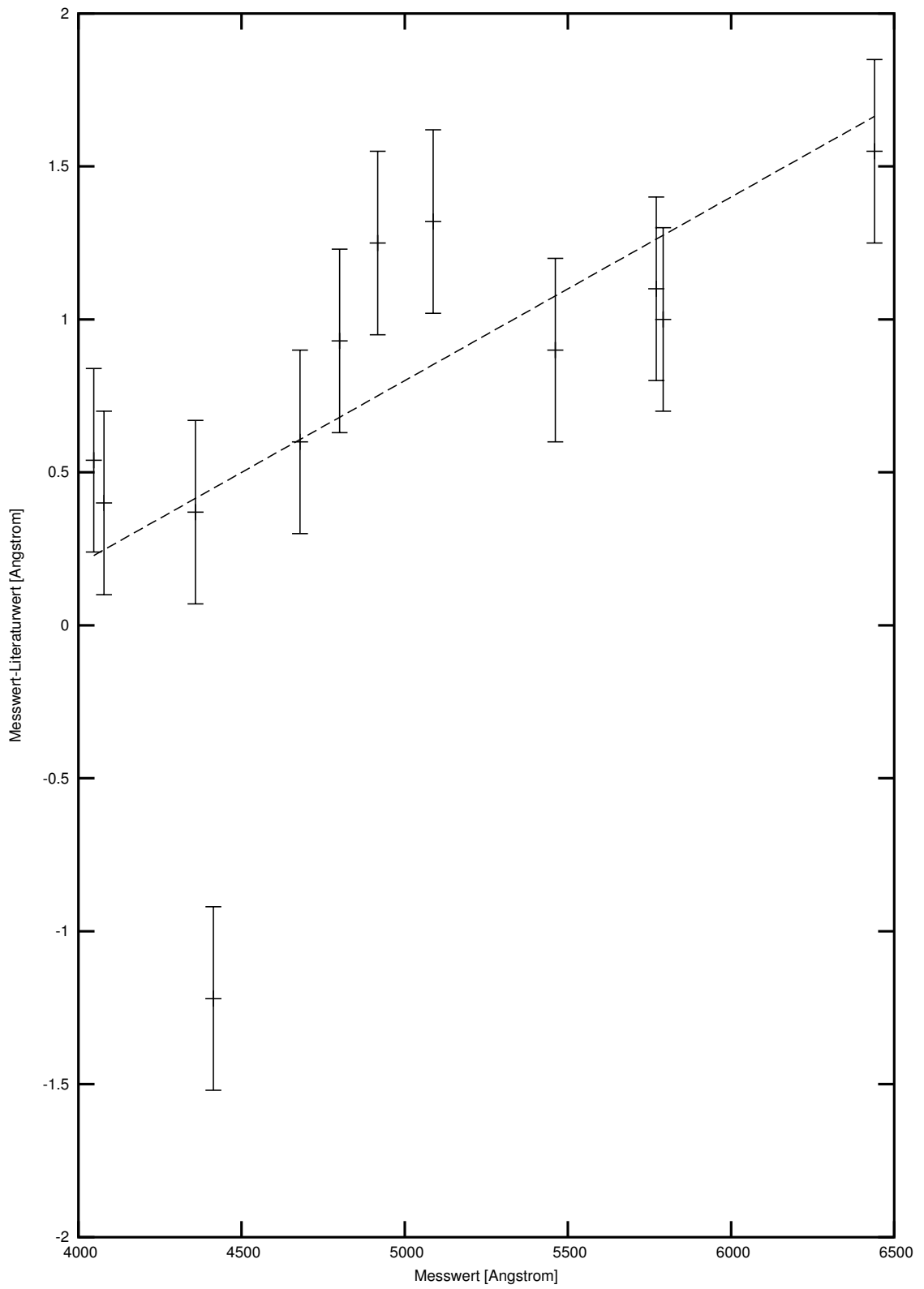


Abbildung 20: Eichgerade

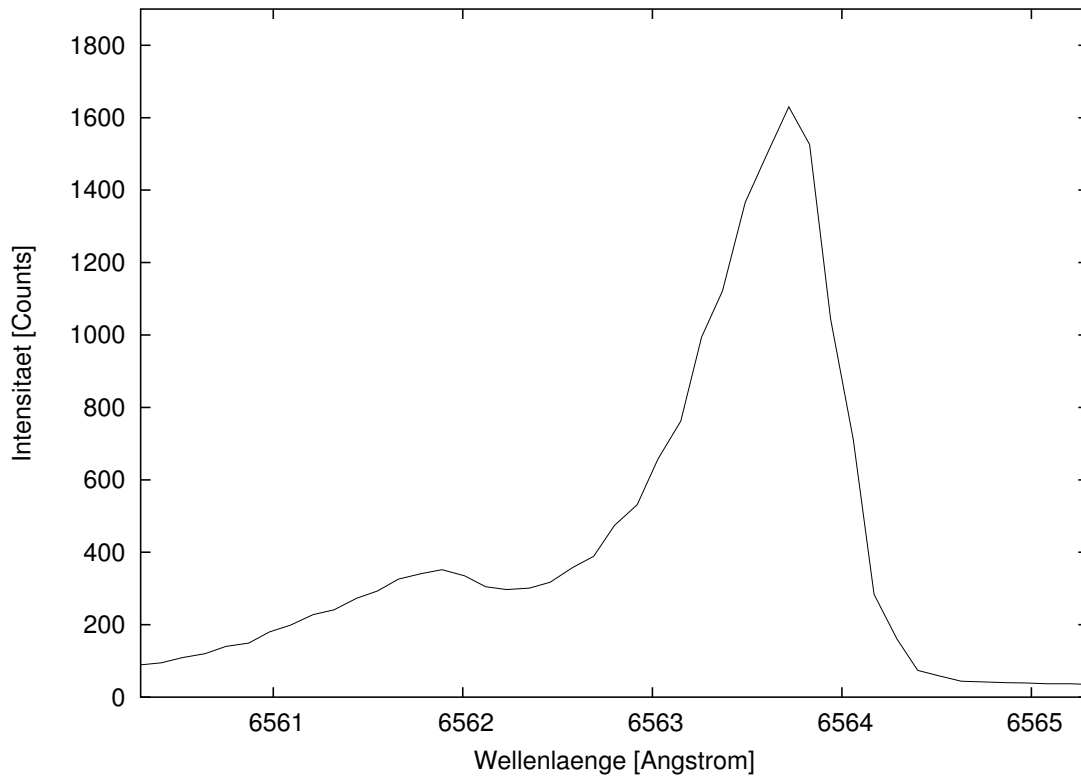
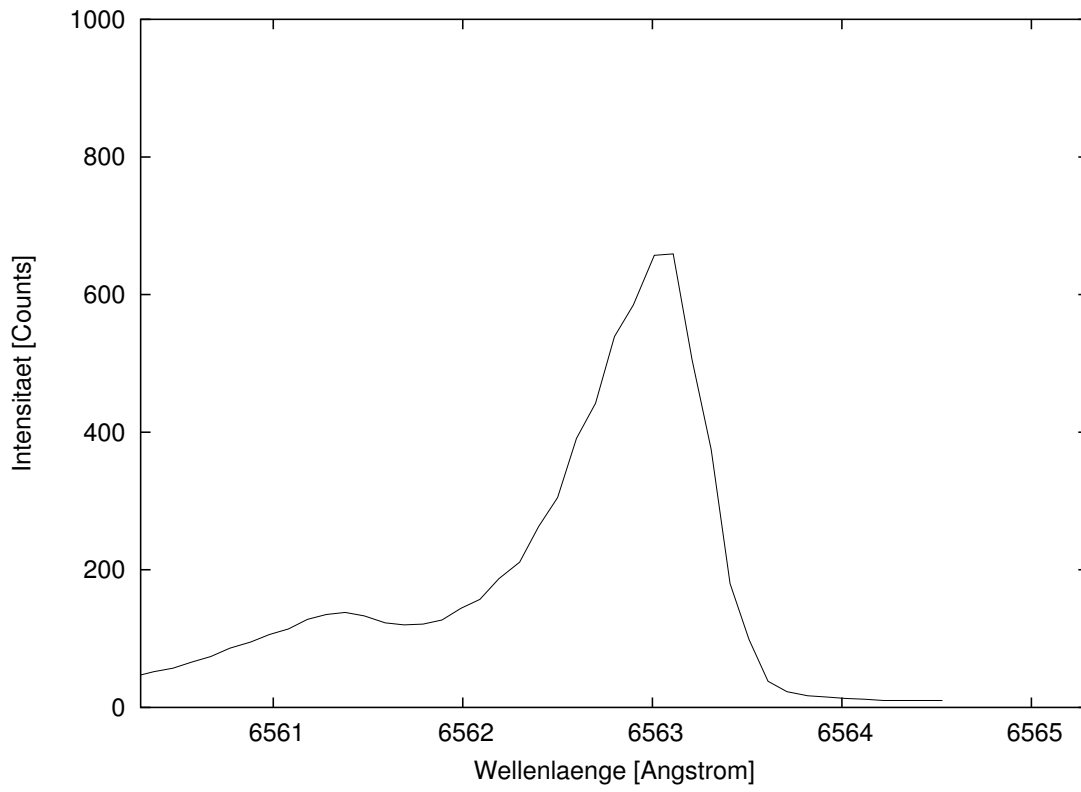


Abbildung 21: α -Linie von Wasserstoff/Deuterium

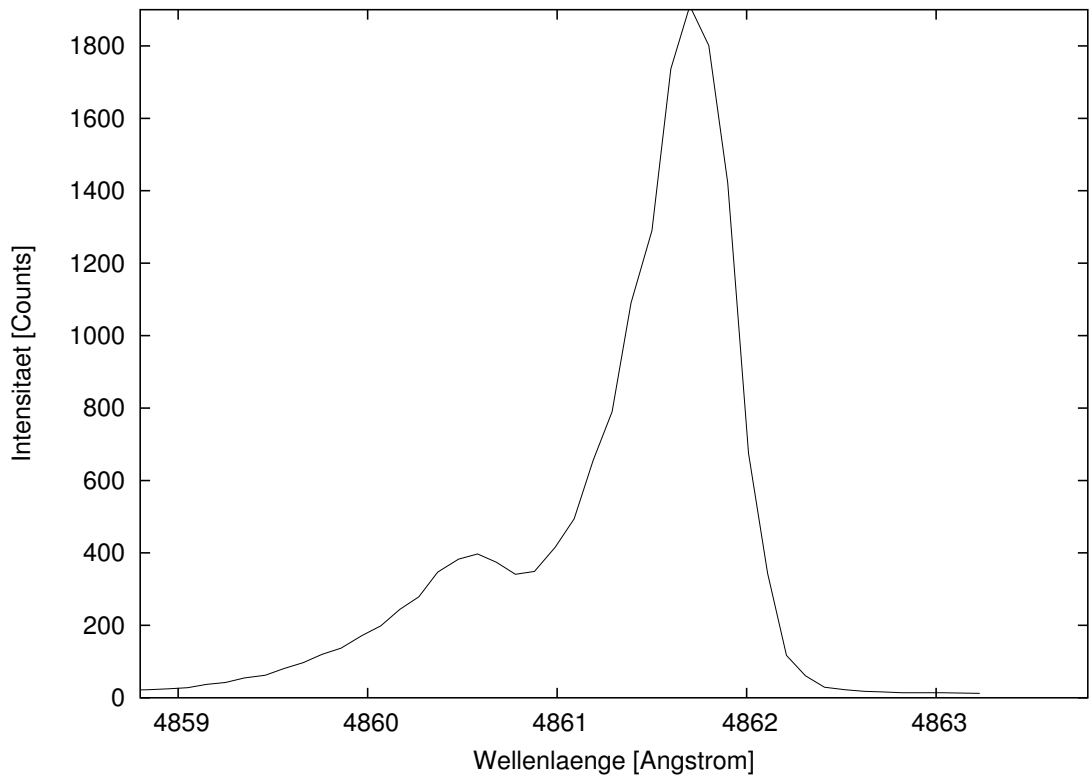
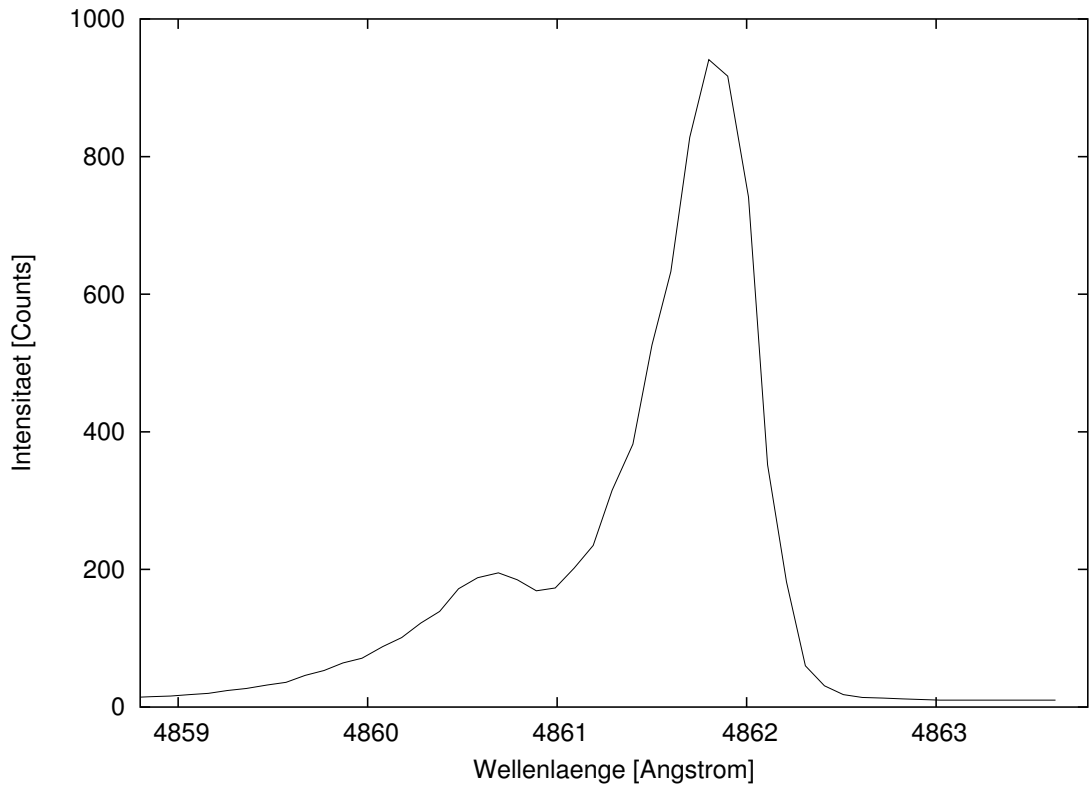


Abbildung 22: β -Linie von Wasserstoff/Deuterium

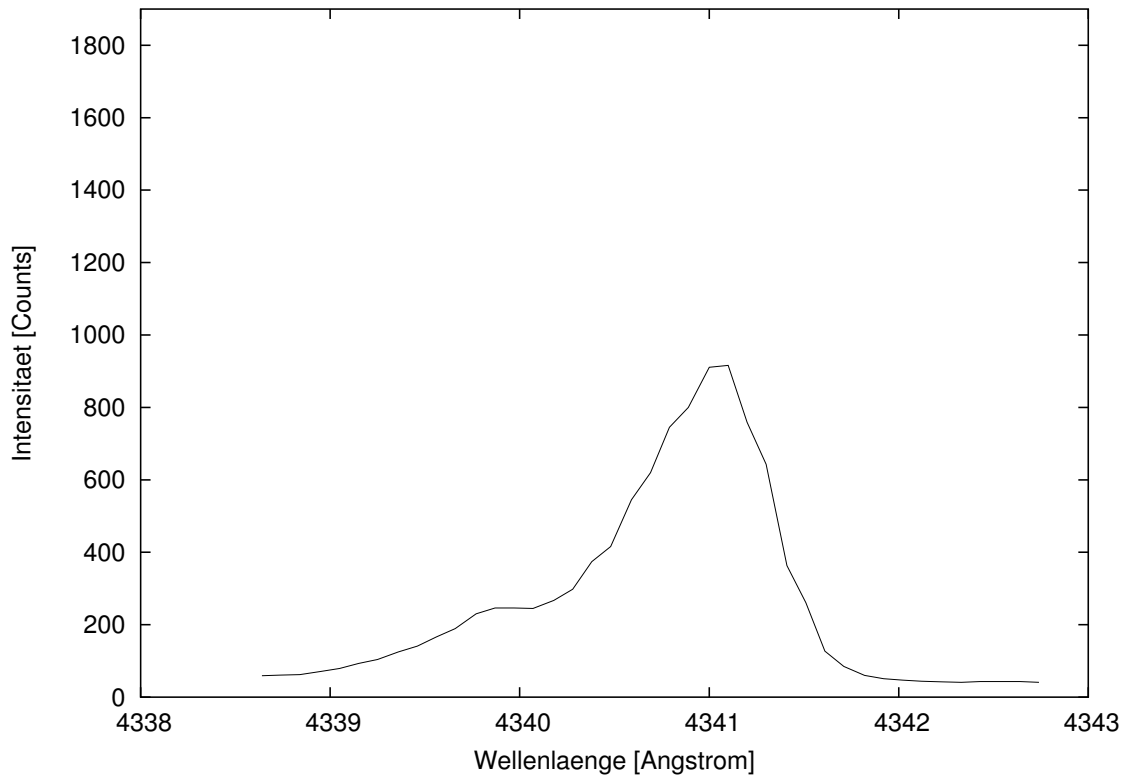
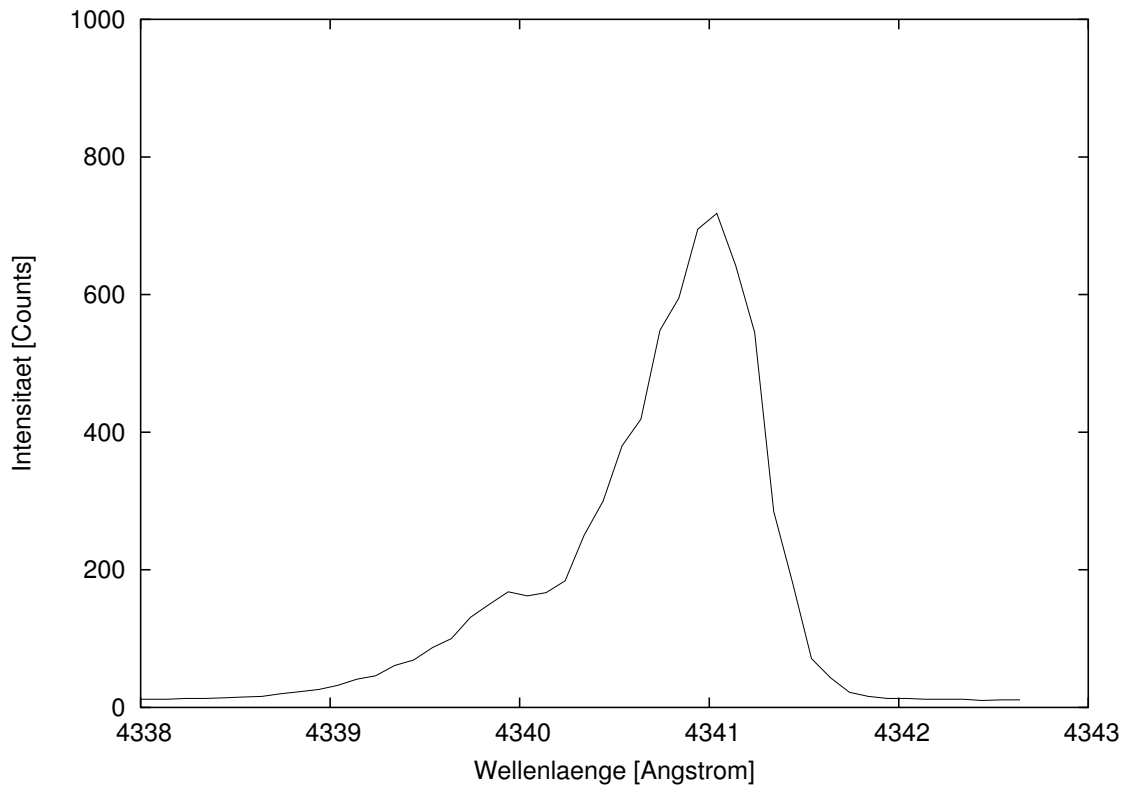


Abbildung 23: γ -Linie von Wasserstoff/Deuterium

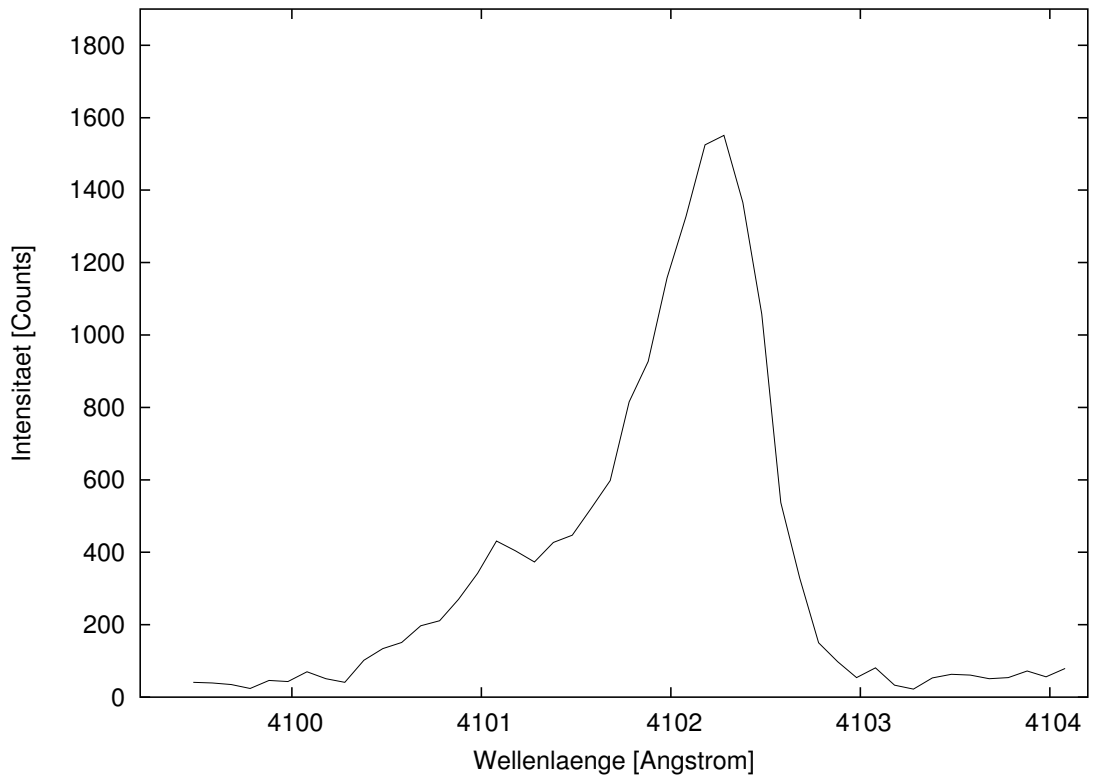
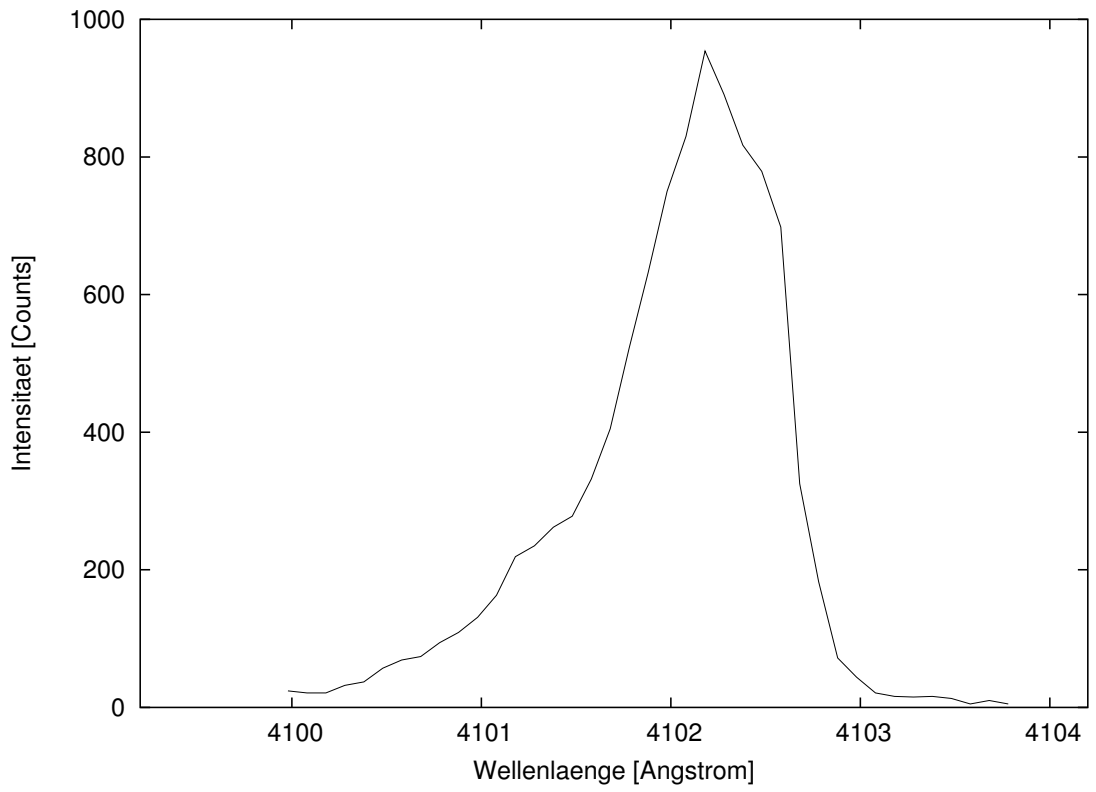


Abbildung 24: δ -Linie von Wasserstoff/Deuterium

somit unsichtbar. Also wurde wie besprochen auf separatem Papier die linke Flanke mit Hilfe eines Kurvenlineals nach rechts gespiegelt. Es war dann möglich, die in Tabellen 3 und 4 erfaßten Positionen und Halbwertsbreiten auszumessen.

2.4 Bestimmung der Rydbergkonstanten

Die Rydbergkonstante R_X (X ist Wasserstoff H oder Deuterium D) ist festgelegt durch die Relation

$$\nu = R_X \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Es gilt bekanntlich $\nu = c/\lambda$. Wir sind im Antestat vorgewarnt worden und verwenden $c = c_0/n$ (n sei der Brechungsindex von Luft, nach [3] gilt $n = 1,0003$ bei 1013 mbar Druck).

Es ergibt sich insgesamt

$$R_X = \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)^{-1} \frac{c_0}{n\lambda}.$$

Aus dem Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetz ergibt sich $\Delta R_X = R_X \Delta\lambda/\lambda$. $\Delta\lambda$ ergibt sich aus der halben Halbwertsbreite der Linie plus der Eichunsicherheit von $0,21\text{\AA}$. Die Ergebnisse für unsere Messungen sind in Tabellen 3 und 4 zusammengefaßt. Um einen

Linie	#	Position [\AA]	R_H [10^{15}s^{-1}]	$\frac{R_H \times}{(1 + \frac{1}{1836})}$ [\AA]	ΔR_H [10^{15}s^{-1}]
α	1	6562.9	3.2880	3.2897	0.0002
α	2	6563.6	3.2876	3.2894	0.0002
β	1	4861.8	3.2877	3.2895	0.0002
β	2	4861.7	3.2878	3.2895	0.0002
γ	1	4340.9	3.2877	3.2895	0.0002
γ	2	4340.9	3.2877	3.2895	0.0002
δ	1	4102.1	3.2877	3.2895	0.0002
δ	2	4102.1	3.2877	3.2895	0.0002

Tabelle 3: Rydbergkonstante für Wasserstoff

Vergleich mit Literaturwerten zu ermöglichen, wurde die Rydbergkonstante noch mit einem Faktor gewichtet, der den Fehler beim Übergang von der reduzierten Masse zur Elektronenmasse reproduziert. Nach [3] gilt $R_H = 3,2898 \cdot 10^{15}\text{s}^{-1}$, das liegt innerhalb des Meßfehlerbereichs.

2.5 Bestimmung von m_e/m_H

Wir kennen nun die Rydbergkonstanten von Wasserstoff und Deuterium in Luft, R_H und R_D . Mit Hilfe von R_D/R_H wollen wir m_e/m_H berechnen.

Linie	#	Position [Å]	R_D [10^{15}s^{-1}]	$R_D \times$ $(1 + \frac{1}{2 \cdot 1836})$ [Å]	ΔR_D [10^{15}s^{-1}]
α	1	6561.4	3.2887	3.2896	0.0002
α	2	6561.8	3.2885	3.2894	0.0002
β	1	4860.7	3.2884	3.2893	0.0002
β	2	4860.6	3.2885	3.2894	0.0002
γ	1	4339.9	3.2884	3.2893	0.0002
γ	2	4339.9	3.2884	3.2893	0.0002
δ	1	4101.4	3.2883	3.2892	0.0002
δ	2	4101.2	3.2885	3.2893	0.0002

Tabelle 4: Rydbergkonstante für Deuterium

Es gilt

$$\begin{aligned}
\alpha &:= \frac{R_H}{R_D} &= \frac{\mu_H}{\mu_D} \stackrel{1}{=} \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \cdot \frac{m_e + 2m_p}{2m_e m_p} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{m_p}{m_e + m_p} \right) \\
\Rightarrow (2\alpha - 1)(m_e + m_p) &= m_p \\
\Rightarrow (2\alpha - 1)m_e &= 2(1 - \alpha)m_p \\
\Rightarrow \frac{m_p}{m_e} &= \frac{2\alpha - 1}{2(1 - \alpha)} \\
\Rightarrow 1 + \frac{m_p}{m_e} = \frac{m_e + m_p}{m_e} &= \frac{2 - 2\alpha + 2\alpha - 1}{2(1 - \alpha)} = \frac{1}{2(1 - \alpha)} \\
\Rightarrow \frac{m_e}{m_H} &= 2\left(1 - \frac{R_H}{R_D}\right) \tag{61}
\end{aligned}$$

Das Gaußsche Fehlerfortpflanzungsgesetz liefert

$$\Delta \left(\frac{m_e}{m_H} \right) = \sqrt{\left(\frac{\Delta R_H}{R_D} \right)^2 + \left(\Delta R_D \frac{R_H}{R_D^2} \right)^2} \tag{62}$$

Wir müssen also den Mittelwert und dessen Fehler von R_H und R_D bilden. Wir ignorieren dabei die Messung α 2, da hier – wie in Abschnitt 2.3 argumentiert – ein Ablesefehler begangen wurde.

Es ergibt sich $\bar{R}_H = (3,2878 \pm 0,0002) \cdot 10^{15}\text{s}^{-1}$ und $\bar{R}_D = (3,2885 \pm 0,0002) \cdot 10^{15}\text{s}^{-1}$.

Wir setzen in (61) und (62) ein und erhalten $\boxed{\frac{m_e}{m_H} = (4,3 \pm 0,9) \cdot 10^{-4}}$.

Nach Literatur gilt $m_e/m_H \approx 5,4 \cdot 10^{-4}$. Das liegt wie zu erwarten nur im zweifachen Fehlerbereich unseres Wertes.

¹Hier vernachlässigen wir relativistische Effekte und setzen $m_p = m_n$.

2.6 Bestimmung der Deuteronenmasse

Wir setzen hier voraus, daß wir die Masse des Elektrons m_e kennen. Nur aus den Ergebnissen des Experiments ist es nicht möglich, die Deuteronenmasse zu bestimmen.

Wir rechnen also

$$m_{DK}^2 \approx 2m_p = 2m_e \frac{m_p}{m_e} = 2m_e \left(\frac{1}{m_e/m_H} - 1 \right) \approx \frac{2m_e}{m_e/m_H}$$

und setzen in die Gaußsche Fehlerformel ein:

$$\Delta m_{DK} = 2m_e \frac{\Delta(m_e/m_H)}{(m_e/m_H)^2}.$$

$m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg schreiben wir aus [3] ab und erhalten:

$$\boxed{(m_{DK} = 4,2 \pm 0,9) \cdot 10^{-27} \text{ kg}}.$$

Der Literaturwert von $3,3 \cdot 10^{-27}$ kg liegt wieder im doppelten Fehlerbereich unseres Werts.

2.7 Bestimmung von $\frac{e}{m_e}$

In diesem Abschnitt ignorieren wir unser Wissen über die Elektronenmasse aus der Literatur, um unsere Meßergebnisse einfließen lassen zu können. Die Faraday-Konstante F ist die Ladung von $6,02 \cdot 10^{23}$ Elektronen. Aus dem Periodensystem der Elemente aus [3] lesen wir ab, daß $6,02 \cdot 10^{23}$ Wasserstoffatome 1,008 Gramm wiegen. Es gilt also

$$\frac{e}{m_e} = \frac{N_A e}{N_A m_e} = \frac{F}{1,008 \text{ g} \cdot m_e/m_H} \approx \frac{F}{0,001 \text{ kg} \cdot m_e/m_H}.$$

Gaußsche Fehlerfortpflanzung liefert

$$\Delta \left(\frac{e}{m_e} \right) = \frac{F}{0,001 \text{ kg}} \frac{\Delta(m_e/m_H)}{(m_e/m_H)^2}$$

Es ergibt sich $\boxed{e/m_e = (2,2 \pm 0,5) \cdot 10^{11} \text{ C/kg}}$

Diesmal liegt der Literaturwert von $1,8 \cdot 10^{11}$ C/kg im Fehlerbereich unseres Wertes. Dies läßt sich durch das Aufrunden des Fehlers in den vorangegangenen Rechenschritten erklären.

2.8 Diskussion

Der bereits in den Meßwerten für die Wellenlängen zu erkennende Offset zieht sich durch die gesamte Auswertung. Eine Erklärung wäre eine Erschütterung des Meßgeräts

²Wir nähern erneut $m_p = m_n$. Der Fehler beträgt 0,1%, ist also klein im Vergleich zur Standardabweichung von m_e/m_H , die 20% beträgt.

zwischen Eichung und Messung, aber es gab am Tage der Messung keine spürbaren Erdbeben. Es ist auch niemand gegen den Monochromator gestoßen.

Physikalische Ursachen können wir nur ausschließen. Relativistische Massenkorekturen sind zu klein und würden außerdem in die falsche Richtung korrigieren. Der Lambshift ist ebenfalls zu klein, um den beobachteten systematischen Fehler zu erklären.

Die δ -Linie von Deuterium ist schwer zu erkennen, insbesondere in der ersten Messung. Dies begründet sich zum einen durch die geringe Intensität der beiden δ -Linien, zum anderen durch das Flackern der Lampe während der ersten Meßreihe. Bei allen anderen Linien ist die Isotopieverschiebung besser zu erkennen.

Literatur

- [1] Wolfgang Christian. Wellenfunktion des Wasserstoffatoms. Internet, 11 2002. <http://www.schulphysik.de/java/physlet/applets/quant1.html>.
- [2] Rudolf Gross. *Physik III : Optik, Quantenphänomene, Aufbau der Atome*. Internet-Angebot der TU München, 2001/2002.
- [3] H. Vogel, editor. *Gerthsen Physik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 20 edition, 1999.
- [4] W. Demtröder. *Laserspektroskopie*. Springer Verlag, unbekannter Jahrgang.

3 Korrekturen zur Auswertung

Zur Formel (31) und Abbildung 4: (31) gibt die Energieniveaus des Eielektronenatoms nach Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung und einer relativistischen Korrektur wieder. Die relativistische Korrektur entsteht durch Entwicklung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung nach Potenzen von $p^2/m_0^2c^2$. Bei Berücksichtigung nur der ersten Ordnung der Entwicklung ergibt sich aus dem Korrespondenzprinzip ein additiver Korrekturterm für den Hamiltonoperator. Dessen Beitrag zur Gesamtenergie wird - genau wie der der Spin-Bahn-Kopplung - mit Hilfe der Formeln der Theorie kleiner Störungen in erster Ordnung ermittelt:

$$\text{Erste Korrektur der Energie} = \langle \text{ungestoerter Zustand} | \text{Stoeroperator} | \text{ungestoerter Zustand} \rangle$$

Man erkennt an Formel (31) nun eine Form der Entartung, die dem Wasserstoffproblem ohne Spin und relativistische Korrektur fremd ist. Es ist nämlich die Energie nicht mehr abhängig von der Orientierung des Spins zum Bahndrehimpuls des Elektrons, sondern nur noch vom Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$.

Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl haben also gleiche Energie, wenn ihre Gesamtdrehimpulsquantenzahl j übereinstimmt. Die Behauptung von Seite 16 ist also falsch. s- und p-Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl können gleiche Energie haben, müssen aber nicht.

Größenordnungen: Die Größenordnungen der Korrekturen durch Feinstruktur und Lambshift läßt sich Abbildung 4 entnehmen. (Hoffentlich) Alle relevanten Größenordnungen sind in Tabelle 5 zusammengefaßt.

Effekt	Größenordnung
Feinstruktur plus relativistische Effekte	10^{-5} - 10^{-4} eV
Lambshift	10^{-6} eV
Isotopieverschiebung	10^{-4} - 10^{-3} eV
Hyperfeinstruktur	10^{-6} eV

Tabelle 5: Größenordnungen

Linienbreiten: Auf Seite 22 steht der kritisierte Satz “Der verwendete Spektralapparat hat eine bestimmte Spektralaufösung”. Im folgenden entsteht der Eindruck, die endliche Breite der Spektrallinien sei auf den verwendeten Spektralapparat zurückzuführen. Richtig ist: Der Spektralapparat zerlegt das Spektrum in Kanäle von endlicher Breite. Er integriert nun in einem bestimmten Zeitintervall die gesamte pro Kanal Kanal einfallende Energie. Ist nun die Einteilung in Kanäle feiner als die in Abschnitt 1.13 diskutierte Breite der Linien, so erkennt man im aufgenommenen Spektrum statt diskreter Linien ausgeschmierte Glockenkurven in Lorentzform.

Frage 3: Wie groß ist der Radius der ersten Bahn von myonischem Wasserstoff?

Der Bohrsche Radius für Wasserstoff ist $a_0 = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c}$. Hier ist die Näherung $\mu \approx m_e$ gemacht worden (μ ist die reduzierte Masse des Wasserstoffatoms). Der Radius der ersten Bahn des myonischen Wasserstoffs ist also $a_\mu = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{\mu_\mu c}$. Nun ist das Myon 206,8 mal schwerer als das Elektron, es gilt also $\mu_\mu = \frac{206,8 \cdot m_e m_p}{206,8 \cdot m_e + m_p}$. Es gilt also

$$a_\mu = \frac{206,8 \cdot m_e + m_p}{206,8 \cdot m_p} a_0 = \left(\frac{m_e}{m_p} + \frac{1}{206,8} \right) a_0 = a_0 / 185,9.$$

Frage 10: Die Aussage über die Auflösung eines Prismenspektrographen wird korrigiert in

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = d \frac{\partial n}{\partial \lambda}$$

mit dem Brechungsindex des Prismenmaterials n und der Basisbreite d des Prismas.

Frage 15: Welche Breite b des Austrittsspalts wählt man bei vorgegebener Auflösung a) bei photographischer Registrierung des Spektrums, b) bei Aufnahme des Spektrums mit einem Photomultiplier?

a) Bei photographischer Registrierung des Spektrums läßt man den Austrittsspalt weg. Auf der Photoplatte sieht man dann das gesamte Spektrum. Die Position auf der Photoplatte gibt Auskunft über die Wellenlänge der Strahlung, der Grad der Schwärzung über die Intensität.

b) Bei Aufnahme mit einem Photomultiplier paßt man die Spaltbreite der Breite eines Beugungsmaximums des Gitters an. Man will nämlich sowohl unerwünschte Wellenlängen ausblenden als auch möglichst viel Licht der gewünschten Wellenlänge durchlassen. Zur Wahl der Wellenlänge verdreht man dann das Gitter. Genauer: Ein Gitter hat bekanntlich die Auflösung

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = N \Leftrightarrow \Delta\lambda = \frac{\lambda}{N}.$$

Die zu beantwortende Frage ist also: Wie weit ist der Peak zu $\lambda + \Delta\lambda$ in der Ebene des Spalts vom Peak zu λ entfernt?

Ist α der Winkel zwischen Peak-Lichtstrahl und Gittersenkrechte, so gilt $\lambda = d \sin \alpha$, wenn d der Abstand zwischen zwei Gitterlinien ist. Das kann man nähern zu $\lambda \approx d\alpha$ oder $\alpha \approx \lambda/d$. Es gilt also für die Winkeldifferenz $\Delta\alpha$ zwischen den λ - und $\lambda + \Delta\lambda$ -Peaks:

$$\Delta\alpha \approx \frac{\lambda}{dN}.$$

Ist l der Abstand zwischen Gitter und Austrittsspalt, so wählt man

$$b = \frac{\lambda l}{dN}.$$

λ wählt man zweckmäßig als kleinste aufzulösende Wellenlänge.

Zur Linie 7: Wir ändern nach Absprache den Endwert in den Daten zur Linie 7 von 4910 in 4919 Å. Wir hoffen, damit einen bei der Messung gemachten Fehler zu beheben. Diese Hoffnung entspricht den Indizien; so umfaßt die Datei zur Linie bei 5769 Å mit 37 Meßwerten einen Bereich von 3,7 Å. Die Datei zur Linie bei 4916 Å umfaßt ebenfalls 37 Meßwerte und einen Bereich von 3,6 Å. Die Restabweichung läßt sich mit einem Ablesefehler am Monochromator erklären, den wir jetzt aber nicht mehr korrigieren können.

Es ergibt sich eine veränderte Abbildung 17 auf Seite 37. Wir lesen aus der Abbildung eine Peakposition von 4917,25 Å und eine Halbwertsbreite von 0,84 Å ab. Wir erhalten eine veränderte Tabelle 2 auf Seite 36. Damit ändert sich auch der Graph 20 zur Eichgeraden (Seite 39. Hier werden noch die Fehlerbalken der Werte ersetzt durch den Fehler bei der Bestimmung des Eichfehlers des Monochromators, $\Delta n = 0,3\text{Å}$.

Die neue Eichung ergibt Abweichungen von der alten Eichung. Deswegen sind alle Wasserstoff- und Deuteriumlinien neu geplottet. Die entsprechenden Tabellen sind auf den neuen Stand gebracht. Zur Ermittlung der Positionen wurde die im nächsten Abschnitt beschriebene Methode verwandt.

“Massenmethode” zur Ermittlung der Linienpositionen: Die Positionen der Linien sollten folgendermaßen ermittelt werden: Nach Augenmaß wird die Glocke so durch einen senkrechten Strich geteilt, daß auf beiden Seiten gleiche Flächen zwischen Kurve und Rauschuntergrund entstehen.

In Tabelle 6 sind die so gewonnenen Ergebnisse mit Literaturwerten verglichen (Die Zahlen in den Tabellen 4 und 3 sind mit dieser Methode ermittelt, da die neue Eichung ohnehin eine neue Bearbeitung nötig machte).

Linie/Messung	Wellenlänge	Wellenlänge (Literatur) (siehe [3])	Fehler des Eichfehlers
$\alpha/1$	6562,9	6562,79	0,3
$\alpha/2$	6563,6	6562,79	0,3
$\beta/1$	4861,8	4861,33	0,3
$\beta/2$	4861,7	4861,33	0,3
$\gamma/1$	4340,9	4340,47	0,3
$\gamma/2$	4340,9	4340,47	0,3
$\delta/1$	4102,1	4101,74	0,3
$\delta/2$	4102,1	4101,74	0,3

Tabelle 6: Neu ermittelte und computerermittelte Linienpositionen für Wasserstoff. Ebenso Literaturwerte. Alles in Å

Vergleich mit Literaturwerten: Alle unsere Werte (bis auf den Ausreißer $\alpha/2$) sind um ungefähr 0,4-0,5 Å größer als die Literaturwerte. Die Literaturwerte liegen also nur noch innerhalb des doppelten Fehlerbereichs von $\Delta n = 0,3\text{Å}$. Der Fehler des Eichfehlers dominiert hier, denn der Ablesefehler ist deutlich kleiner.

Für Deuterium ist noch Tabelle 7 angefertigt worden.

Linie/Messung	Meßwert	Wellenlänge (Literatur) (siehe [3])	Fehler des Eichfehlers
$\alpha/1$	6561,4	6560,95	0,3
$\alpha/2$	6561,8	6560,95	0,3
$\beta/1$	4860,7	4859,97	0,3
$\beta/2$	4860,6	4859,97	0,3
$\gamma/1$	4339,9	4339,25	0,3
$\gamma/2$	4339,9	4339,25	0,3
$\delta/1$	4101,4	4100,59	0,3
$\delta/2$	4101,2	4100,59	0,3

Tabelle 7: Meß- und Literaturwerte aus dem Deuteriumspektrum. Alles in Å.

Alle Meßwerte für Deuterium sind um 0,6 bis 0,8 Å zu groß. Die Abweichung ist hier größer und streut stärker als bei den Wasserstofflinien, da die Peaks deutlich schwerer zu erkennen und von der linken Flanke der Wasserstofflinien teilweise verschluckt werden. Die Willkür bei der Wahl der Fortsetzung der Glockenkurve nach rechts (in die Wasserstofflinienflanke hinein) ist groß.

Die Ursache des sowohl für die Wasserstofflinien als auch für die Deuteriumlinien beobachtbaren Offsets ist für uns leider nicht erkennbar. Vermutlich hat der Monochromator nach der Eichung einen Stoß erlitten.

Aufgaben b-d, Diskussion: Die entsprechenden Seiten wurden neu geschrieben und beigelegt.