Die Spektren der Alkali-Atome

1. Einleitung und Zielsetzung

Das Spektrum der von angeregten Atomen emittierten Strahlung gibt Auskunft über den Schalenaufbau ihrer Elektronenhüllen. Während man aus den Röntgen-Spektren - wie in V 602 dargestellt - bevorzugt Information über das Innere der Elektronenhülle erhält, erlauben die Spektren, die im sichtbaren oder im UV- und IR-Bereich liegen, Aussagen über die Struktur der äußeren Hülle zu machen. In dem hier beschriebenen Experiment soll Spektroskopie im sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums betrieben werden. Man erhält dabei im wesentlichen die Energien angeregter Atomzustände, da wegen des Pauli-Verbots (siehe z.B. V 504, Kap.1) die äußeren Elektronen nur in höhere, normalerweise nicht besetzte Zustände übergehen können. Aus diesen Energien kann man weiterhin die Stärke des Kernfeldes am Ort der äußeren Elektronen bestimmen: Es ist zu erwarten, dass das Coulomb-Feld des Kerns durch die Anwesenheit der inneren Elektronen nach außen hin abgeschirmt wird. Man charakterisiert die Stärke dieses Effektes durch eine sogenannte Abschirmungszahl σ. Damit drückt man aus, dass am Ort des angeregten Elektrons nur noch ein Coulomb-Feld herrscht, das von einem Kern mit der Ladungszahl

$$z_{\text{eff}} = z - \sigma$$

erzeugt wird, wobei z die Zahl der Protonen im Kern ist. Es ist nun Aufgabe dieses Experimentes, aus den Emissionslinien angeregter Atome derartige Abschirmungszahlen, die von mehreren Parametern abhängen, zu bestimmen.

2. Ein-Elektronen-Spektren

Zur Lösung der in Kap. 1 skizzierten Aufgabenstellung ist es notwendig, die Energien der Emissionslinien angeregter Atome zu berechnen, was im allgemeinen Falle eine sehr aufwendige Rechnung erfordert. Bei den Alkali-Atomen kann man sich jedoch mit Erfolg der (relativ einfachen) Ein-Elektronen-Näherung bedienen. Man weiß z.B. aus ihrem chemischen Verhalten, dass sie über einer oder mehreren abgeschlossenen Elektronenschalen je ein äußeres Elektron besitzen, das allein für die Anregungszustände in Frage kommt. Dieses äußerste Elektron, das man auch als Leuchtelektron bezeichnet, befindet sich im Feld des sogenannten Atomrumpfes, welcher aus dem Kern und den abgeschlossenen Elektronenschalen besteht. Es ist daher zu erwarten, dass gewisse Ähnlichkeiten der Alkali-Spektren mit dem einfachsten Ein-Elektronen-Spektrum, dem des atomaren Wasserstoffs, bestehen. Das Experiment bestätigt diese Vermutung bis zu einem gewissen Grade; es offenbart aber auch deutliche Abweichungen. Zunächst einmal stellt man fest, dass bei der Berechnung der Energie von einem stark abgeschwächten Coulomb-Feld des Kerns auszugehen ist. Das ist ein Effekt, der durch die schon in der Einleitung erwähnte Abschirmungswirkung der abgeschlossenen Elektronenschalen entsteht. Weiterhin beobachtet man bei den Alkali-Atomen ein erheblich linienreicheres Spektrum¹. Dieser experimentelle Befund lässt sich nur erklären, wenn man die Existenz weiterer Quantenzahlen (neben der Hauptquantenzahl) annimmt, von denen die Höhe der Energieniveaus ebenfalls abhängt. Weiterhin ergibt sich bei der Auswertung des Beobachtungsmaterials, dass bei der Emission eines Quants Beschränkungen bei den Änderungen der Quantenzahlen auftreten müssen, die man als **Auswahlregeln** bezeichnet. Außerdem müssen bei Atomen, insbesondere bei solchen mit größerem z, relativistische Effekte berücksichtigt werden. Auf all diese Probleme soll im nächsten Kapitel näher eingegangen werden.

3. Berechnung der Strahlungsenergien in Ein-Elektronen-Spektren unter Berücksichtigung der Drehimpulse des Leuchtelektrons und relativistischer Effekte

Wie bereits in V 604, Kap.2 näher beschrieben wurde, bekommt man die Energiewerte E der stationären Atomzustände als Eigenwerte der Schrödinger-Gleichung

$$\left\{\sum_{i} \frac{\mathbf{P}_{i}^{2}}{2m_{i}} + U\right\} \psi = E\psi .$$

Hierin bedeuten $\psi(\vec{r})$ die Wellenfunktion des Atoms, \mathbf{P}_i die Impulsoperatoren sowie m_i die Massen der zum Atom gehörenden Teilchen. U ist die potentielle Energie des Atoms.

(3)
$$\mathbf{H} := \sum_{i} \frac{\mathbf{P}_{i}^{2}}{2m_{i}} + \mathbf{U}$$

nennt man den Hamilton-Operator des Atoms. Im Falle des Wasserstoff-Atoms (siehe V 604, Kap.2) ergab sich mit

$$U = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

auf dieser Stufe der Näherung das Ergebnis

(5)
$$E(n) = R_{\infty} \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, ...$$

 $(R_{\infty}=$ Rydberg-Energie, n = Hauptquantenzahl, $\epsilon_0=$ Influenzkonstante, $e_0=$ Elementarladung). Daraus folgte für die emittierten Strahlungsenergien

(6)
$$h v_{n,n'} = E(n) - E(n') = R_{\infty} \left\{ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right\}$$
 $n = 1, 2, ..., n' > n$

Trägt man die emittierten Quantenenergien in einer Energieskala auf, so bekommt man Gruppen von eng beieinander liegenden Linien, die jeweils zu einer Hauptquantenzahl gehören (siehe Abb.1).

¹ Die Aufspaltung der Energieniveaus ist auch beim Wasserstoff vorhanden. Nur ist sie dort so gering, dass sie nur mit hochauflösenden Spektroskopen beobachtet werden kann.

Der in V604 beschriebene Isotopie-Effekt wird hier vernachlässigt, da er bei Atomen mit großem z keine Rolle mehr spielt. Er wird hier also $m_k/(m_0 + m_k) \approx 1$ gesetzt.

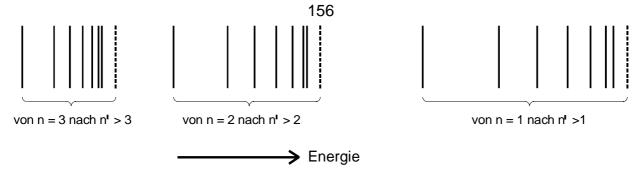


Abb. 1: Darstellung der Energieterme des Wasserstoff-Atoms (unmaßstäblich)

Im folgenden soll nun die Lösung der Schrödinger-Gleichung (2) schrittweise verallgemeinert werden: In der Ein-Elektronen-Näherung berücksichtigt man die Rumpf-Elektronen durch die Abschirmungszahl σ aus (1). Anstelle von (4) gelte also jetzt

$$U \; = \; - \frac{\left(z - \sigma\right)e_0^2}{4\,\pi\,\epsilon_0\,r} \quad . \label{eq:U_def}$$

Im Hamilton-Operator braucht bei dieser Näherung und bei Vernachlässigung des Isotopie-Effektes nur der Impuls-Operator des Leuchtelektrons berücksichtigt zu werden. Es gelte also anstelle von (3)

(7)
$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} - \frac{(z-\sigma)e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Der Impuls-Operator **P** hat in der Quantenmechanik bekanntlich die Gestalt

$${f P}=rac{\hbar}{{\sf i}}
abla$$
 ,

sodass gilt

$$\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \Delta$$

Damit lässt sich die Schrödinger-Gleichung (2) unter Berücksichtigung von (7) in der Form

$$\left\{ -\, \frac{\hbar^2 \, \Delta}{2 \, m_0} \, - \, \frac{ \left(z \, - \, \sigma\right) e_0^2}{4 \, \pi \, \epsilon_0 \, r} \right\} \psi \; = \; E \, \psi \quad . \label{eq:psi_eq}$$

schreiben. Wegen der Zentralsymmetrie des Problems ist es zweckmäßig Polarkoordinaten r, ϑ und φ einzuführen und den Laplace-Operator in einen Radial- und einen Winkelanteil aufzuspalten:

(8)
$$\Delta = \Delta_{r} + \Delta_{\vartheta \varphi} = \nabla \cdot \frac{\vec{r}}{r} \cdot \nabla - \nabla \times \frac{\vec{r}}{r} \cdot \nabla \times \frac{\vec{r}}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} r - \left\{ \nabla \times \frac{\vec{r}}{r} \right\}^{2}$$

Man erkennt an (8), dass man den Winkelanteil des Laplace-Operators auch mit Hilfe des quantenmechanischen Drehimpulsoperators **L** ausdrücken kann. Aufgrund seiner Definition

$$\mathbf{L} := \frac{\hbar}{\mathbf{i}} \, \mathbf{r} \times \nabla$$

lässt sich (8) auch darstellen als

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2$$

Damit nimmt die Schrödinger-Gleichung die Gestalt

(9)
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2 m_0} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 r}{\partial r^2} + \frac{1}{2 m_0} \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 - \frac{(z - \sigma) e_0^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{r} \right\} \psi = E \psi$$

an. Die Quantenmechanik lehrt nun, dass die Operatoren \mathbf{H} und \mathbf{L} vertauschbar sind und deshalb die gleichen Eigenfunktionen besitzen. Man kann daher für y ebenfalls die Gleichung

$$\mathbf{L}^2 \psi = \mathbf{w}^2 \psi$$

ansetzen, in der w^2 die Eigenwerte des Operators L^2 zu den Eigenfunktionen ψ sind. Die Eigenfunktionen der Differentialgleichung (10) nennt man die Kugelflächenfunktionen Y_{ℓ} (9, ϕ). Wie die Mathematik lehrt, besitzen die Y_{ℓ} die Eigenwerte (11) $w^2 = \hbar^2 \ell (\ell + 1)$, $\ell = 0, 1, 2, ...$

(11)
$$w^2 = \hbar^2 \ell (\ell + 1)$$
, $\ell = 0, 1, 2, ...$

Den Laufindex ℓ in (11) nennt man auch wegen seines Zusammenhanges mit dem Drehimpuls-Operator die Bahndrehimpulsquantenzahl. Mit ihr kann man die Schrödinger-Gleichung (9) in die Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial^2}{\partial\,r^2}\,r + \frac{\hbar^2}{2\,m_0}\,\ell\,\big(\ell\,+\,1\big)\frac{1}{r^2} - \frac{\big(z-\sigma\big)\,e_0^2}{4\,\pi\,\epsilon_0}\,\frac{1}{r} \right\}\,R\,\big(r\big) \;=\; ER\,\big(r\big)$$

bringen, dabei wurde ψ ebenfalls in einen Radial- und einen Winkelanteil gemäß

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{\ell}(\theta, \phi)$$

zerlegt. Man kann nun mit einer Rechnung, die der in V604, Kap.2 beschriebenen recht ähnlich ist, zeigen, dass (12) die Lösungen

$$(13) \qquad E \,=\, -\, \frac{e_0^4\,m_0}{8\,h^2\,\epsilon_0^2}\,\frac{\left(z\,-\,\sigma\right)^2}{\left(k\,+\,1\,+\,\ell\right)^2} \,=\, -\,\,R_\infty\,\frac{\left(z\,-\,\sigma\right)^2}{\left(k\,+\,1\,+\,\ell\right)^2} \qquad k\,=\,0,\,1,\,2,\,..$$

besitzt. Durch Vergleich von (13) mit (5) erkennt man, dass der Ausdruck k + 1 + ℓ der Hauptquantenzahl n entspricht, die den Energiewert E(n) festlegt. Daraus folgt wegen $k_{min} = 0$, dass

$$\ell_{\text{max}} = n - 1$$

ist und dass zu jeder Hauptquantenzahl n die Drehimpulsquantenzahlen $\ell = 0, 1, 2, ...,$ n-1 gehören. Man erkennt an (13), dass auf dieser Stufe der Näherung die Energiewerte nur von der Hauptquantenzahl n abhängen. Sobald man jedoch relativistische Effekte berücksichtigt, den Hamilton-Operator also in der Form

(14)
$$\mathbf{H}_{\text{rel}} = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \mathbf{P}^2} - m_0 c^2 + U$$

(c = Lichtgeschwindigkeit im Vakuum)

anstelle von (7) darstellt, ergibt sich auch eine ℓ-Abhängigkeit der Energiewerte, wie im folgenden gezeigt werden soll. Um das Problem mit geringem Rechenaufwand zu lösen, wird der Einfluss der Relativitätstheorie nur als "Störung" behandelt, sodass sich die Eigenwerte E_{rel} mit Hilfe der quantenmechanischen Störungstheorie berechnen lassen: Man formt (14) um in

(15)
$$\mathbf{H}_{rel} = -m_0 c^2 \left\{ \sqrt{1 + \frac{\mathbf{P}^2}{m_0^2 c^2}} - 1 \right\} + U .$$

Der Wurzelausdruck in (15) lässt sich gemäß

$$\sqrt{1 + x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots$$

in eine Reihe entwickeln. Man bekommt damit für

(16)
$$\mathbf{H}_{\text{rel}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2 \, \mathsf{m}_0} - \frac{1}{8} \, \frac{\mathbf{P}^4}{\mathsf{m}_0^3 \, \mathsf{c}^2} + \dots + \, \mathsf{U}$$

Das Glied mit \mathbf{P}^4 in (16) soll gemäß Voraussetzung nur eine Störung darstellen. (Diese Annahme ist bei Atomen mit mittlerem z brauchbar.) Dann bekommt man bekanntlich die Eigenwerte E_{rel} des Hamilton-Operators \mathbf{H}_{rel} in erster Ordnung, wenn man die Erwartungswerte des "Störoperators" $\frac{1}{8}\mathbf{P}^4/m_0^3\,c^2$ mit den ungestörten Eigenfunktionen ψ bildet und diese zu den Eigenwerten (13) des ungestörten Operators \mathbf{H} addiert, also

(17)
$$\mathsf{E}_{\mathsf{rel}} = \mathsf{E} - \frac{1}{8} \frac{1}{\mathsf{m}_0^3 \mathsf{c}^2} \left\langle \psi, \mathbf{P}^4 \psi \right\rangle$$

mit

$$\langle \psi, \mathbf{P}^4 \psi \rangle = \int \int \int \psi \mathbf{P}^4 \psi * d^3 \vec{r}$$

Die aufwendige Berechnung von $\langle \psi, \mathbf{P}^4 \psi \rangle$ soll hier nicht vorgeführt sondern es soll nur das Ergebnis angegeben werden, welches lautet

(18)
$$\frac{1}{8 \, \mathsf{m}_0^3 \, \mathsf{c}^2} \left\langle \psi, \mathbf{P}^4 \, \psi \right\rangle \, = \, \mathsf{R}_\infty \, \alpha^2 \frac{\left(\mathsf{z} \, - \, \sigma\right)^4}{\mathsf{n}^3} \left\{ \frac{2}{2 \, \ell \, + \, 1} \, - \, \frac{3}{4 \, \mathsf{n}} \right\} \quad .$$

Die Konstante α in (18) nennt man die **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante**³. Sie ist definiert als

$$\alpha := \frac{e_0^2}{2hc\epsilon_0} .$$

Für die gesuchten Energieeigenwerte E_{rel} des relativistischen Hamilton-Operators (16) erhält man somit aus (13), (17) und (18)

(19)
$$E_{rel_{n,l}} = -R_{\infty} \left\{ \frac{\left(z - \sigma\right)^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{\left(z - \sigma\right)^4}{n^3} \left(\frac{2}{2\ell + 1} - \frac{3}{4n}\right) \right\} .$$

³ benannt nach dem deutschen Physiker Arnold Sommerfeld (1868 – 1951)

Man erkennt an (19), dass jetzt auch die Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ in die Berechnung der Energieniveaus des Leuchtelektrons eingeht. Das zur Hauptquantenzahl n gehörende Niveau E_{rel} spaltet bedingt durch relativistische Effekte in n Unterniveaus auf.

Bei genauer Auswertung experimentell ermittelter Spektren stellt man jedoch fest, dass auch die Gleichung (19) die Messergebnisse noch nicht korrekt beschreibt. Das hat seine Ursache darin, dass eine Eigenschaft des freien Elektrons bisher noch nicht in die Rechnung einbezogen wurde; und zwar ist dies der Eigendrehimpuls oder **Spin** des Elektrons (Näheres hierzu: Siehe V505). Seine Existenz und sein Wert ergeben sich beispielsweise aus dem berühmten **Stern-Gerlach-Experiment**. Die zugehörige Quantenzahl s hat (im Gegensatz zu ℓ) nur den Wert ½. Die Eigenwertgleichung des Spin-Operators **S** lautet entsprechend zu (10)

$$\mathbf{S}^2 \psi = s^2 \psi$$

mit

(21)
$$s^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \right) .$$

Mit den Drehimpulsen des Elektrons sind magnetische Momente verknüpft. Das hat zur Konsequenz, dass das eine Moment sich im Feld des anderen befindet. Aus diesem Grunde tritt eine Wechselwirkung zwischen beiden auf, die man **als Spin-Bahn-Kopplung** bezeichnet. Sie führt dazu, dass sich die beiden Drehimpulse vektoriell zu einem Gesamtdrehimpuls zusammensetzen, den man üblicherweise mit \vec{J} abkürzt. Die zugehörige Operatorgleichung lautet

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} .$$

Für die Eigenwerte j des Operators ${f J}$ gilt entsprechend

$$\mathbf{J}^2 \psi = \hbar^2 \mathbf{j} (\mathbf{j} + 1) \psi$$

Da sich der Bahndrehimpuls und der Spin des Elektrons nur parallel oder antiparallel zueinander einstellen können, besitzt die Quantenzahl j nur die Werte

$$j = \ell + \frac{1}{2} \qquad \text{und} \qquad j = \ell - \frac{1}{2}$$

Der Einfluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung auf die Energieeigenwerte des Leuchtelektrons lässt sich ebenfalls mit Hilfe der Störungstheorie ermitteln. Der Gang der aufwendigen Rechnung soll hier nur skizziert werden. Wie schon zuvor erwähnt, genügt es, den Hamilton-Operator \mathbf{H}_{SpB} der Spin-Bahn-Wechselwirkung ("Stör-Operator") auf die Eigenfunktionen ψ des ungestörten Problems anzuwenden, um ein Ergebnis in erster Ordnung zu erhalten. \mathbf{H}_{SpB} lässt sich aus der Diracschen Theorie des relativistischen Elektrons ableiten. Man bekommt für ein Coulomb-Feld

(24)
$$\mathbf{H}_{SpB} = \frac{1}{2 \, m_0^2 \, c^2} \, \frac{1}{r} \, \frac{dU}{dr} \, \mathbf{S \cdot L} \, - \, \frac{e_0 \, \hbar^2}{8 \, m_0^2 \, c^2} \, \mathbf{div} \, \frac{(z \, - \, \sigma) e_0}{4 \, \pi \, \epsilon_0} \, \frac{\vec{r}}{r^3} \quad .$$

Für den Operator S·L in (24) folgt zunächst aus (22)

(25)
$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S}^2$$

Da die Operatoren J^2 , L^2 und S^2 alle untereinander vertauschbar sind, ergibt sich aus (25) weiter

$$\mathbf{S.L} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$$

Damit existiert für S·L gemäß (11), (21) und (23) die Eigenwertgleichung

(26)
$$\mathbf{S.L} \ \psi = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right\} \psi .$$

Da für r ≠ 0

$$\operatorname{div} \frac{\vec{r}}{r^3} = 0$$

ist, bekommt man aus (24) und (26) für den gesuchten Erwartungswert

$$\left\langle \psi, \mathbf{H}_{SpB} \psi \right\rangle \ = \ \frac{\hbar^2}{4 \, m_0^2 \, c^2} \left\langle \psi, \frac{1}{r} \, \frac{dU}{dr} \, \psi \right\rangle \left\{ j \left(j \ + \ 1 \right) \ - \ \ell \left(\ell \ + \ 1 \right) \ - \ \frac{3}{4} \right\} \psi$$

 $\left\langle \psi, \frac{1}{r} \frac{dU}{dr}, \psi \right\rangle$ lässt sich mit einigem Aufwand für ein Coulomb-Potential der Gestalt

$$U = -\frac{(z-\sigma)e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

berechnen. Man bekommt für $\ell \neq 0^4$

$$\left\langle \psi, \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \psi \right\rangle \, = \, \frac{\left(z - \sigma\right) e_0^2}{4 \, \pi \, \epsilon_0} \left\langle \psi, \frac{1}{r^3} \, \psi \right\rangle \, = \, \frac{2 \, \pi^2 \, \alpha^2 \, e_0^4 \, c^2 \, m_0^3 \, \left(z - \sigma\right)^4}{\epsilon_0^3 \, h^4} \, \frac{1}{\ell \left(\ell + 1\right) \left(2\ell + 1\right) n^3}$$

und damit

(27)
$$\left\langle \Psi, \mathbf{H}_{SpB} \Psi \right\rangle = \alpha^2 R_{\infty} (z - \sigma)^4 \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}}{n^3 \ell(\ell+1)(2\ell+1)}$$

Eine gesonderte Rechnung liefert für den Fall $\ell = 0^{*)}$

(28)
$$\left\langle \Psi, \mathbf{H}_{SpB} \Psi \right\rangle = \alpha^2 R_{\infty} (z - \sigma)^4 \frac{1}{n^3}$$
.

Mit den Gleichungen (19), (27) und (28) ist man jetzt in der Lage, die Energieeigenwerte von Ein-Elektronen-Atomen in Abhängigkeit von den Quantenzahlen n, ℓ und j in erster Näherung anzugeben. Es gilt

$$(29) \ E_{n \, l \, j} \ = \ - \, R_{\infty} \, \left\{ \frac{(z - \sigma)^2}{n^2} \, + \, \alpha^2 \, \frac{(z - \sigma)^4}{n^3} \left(\frac{2}{2 \, \ell + 1} \, - \, \frac{3}{4 \, n} \, - \, \frac{j \, (j + 1) - \ell \, (\ell + 1) - \frac{3}{4}}{\ell \, (\ell + 1) (2 \, \ell + 1)} \right) \right\}$$

Da j nur die Werte $\ell+\frac{1}{2}$ und $\ell-\frac{1}{2}$ annehmen kann, lässt sich (29) auch in die Form

(30)
$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left\{ \frac{\left(z - \sigma\right)^{2}}{n^{2}} + \alpha^{2} \frac{\left(z - \sigma\right)^{4}}{n^{3}} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right) \right\} .$$

⁴ siehe z.B. Fortgeschrittenen-Praktikum, V22

bringen. Für den Fall $\ell = 0$ ist

(30a)
$$E_{n,\frac{1}{2}} = -R_{\infty} \left\{ \frac{\left(z - \sigma\right)^{2}}{n^{2}} + \alpha^{2} \frac{\left(z - \sigma\right)^{4}}{n^{3}} \left(1 - \frac{3}{4n}\right) \right\} .$$

Die Gleichungen (30) und (30a) stellen die berühmte **Sommerfeldsche Feinstrukturformel** in erster Näherung dar. Mit ihr konnte erstmals die Feinstruktur der Spektrallinien von Ein-Elektronen-Atomen quantitativ erklärt werden. Es zeigt sich, dass die(2n-1)-fache Entartung eines Zustandes mit der Hauptquantenzahl n durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgehoben wird. Zu jedem n gibt es n ℓ -Werte (0, 1,..., n-1), zu jedem $\ell \neq 0$ zwei j-Werte ($\ell \pm 1/2$) und für $\ell = 0$ den Wert j = 1/2.

4. Termbezeichnungen

Für die durch die Quantenzahlen n, ℓ und j festgelegten Energieniveaus hat man (historisch bedingte) Kurzbezeichnungen eingeführt. Den Wert der Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ kennzeichnet man durch einen Großbuchstaben. Es gilt im einzelnen für ℓ = 0 das Symbol "S", für ℓ = 1 "P", für ℓ = 2 "D" und für ℓ =3 "F". Vor die Großbuchstaben setzt man die Hauptquantenzahl n. Den Wert von j fügt man als unteren Index an die Großbuchstaben an. So ist zum Beispiel mit dem Symbol "3D $_{5/2}$ " ein Niveau mit n = 3, ℓ = 2 und j = 5/2 gemeint.

5. Auswahlregeln

Es zeigt sich bei der Auswertung beobachteter Spektren, dass Quantenübergänge zwischen den durch die Quantenzahlen n, ℓ und j gekennzeichneten Energieniveaus eine sehr unterschiedliche Übergangswahrscheinlichkeit besitzen. Einige Übergänge sind regelrecht "verboten", insbesondere solche, bei denen sich der Bahndrehimpuls nicht ändert, also $\Delta \ell = 0$ ist. Ebensowenig beobachtet man Übergänge mit $\Delta \ell \geq 2$. Erlaubte Übergänge gehorchen somit der Auswahlregel

$$\Delta \ell \pm 1$$
 .

Der hiermit verträgliche Übergang $\Delta j = 0$ ist ebenfalls sehr unwahrscheinlich. Er tritt in den Spektren nur als (schwer beobachtbarer) Satellit auf. In Abb.2 sind erlaubte Übergänge, wie sie in Alkali-Spektren auftreten, zusammen mit den üblichen Termsymbolen eingezeichnet.

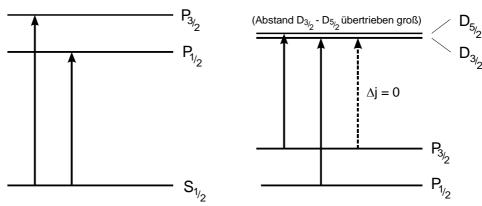


Abb.2: Einige mögliche Übergänge in Einelektronen-Spektren

Hinsichtlich Δn gibt es keine Einschränkungen, wenn auch Übergänge mit großem Δn unwahrscheinlicher werden. Da die Energieniveaus mit gleichem ℓ aber unterschiedlichem j viel dichter beieinander liegen als diejenigen mit unterschiedlichem ℓ^5 , beobachtet man in den Alkali-Spektren immer jeweils zwei dicht nebeneinander liegende Linien. Man spricht daher von der sogenannten **Dublett-Struktur** der Alkalispektren und drückt diese Tatsache in der spektroskopischen Symbolik durch einen Index 2 aus, den man oben vor den die Quantenzahl ℓ kennzeichnenden Buchstaben schreibt.

6. Abschirmungszahlen

Bei der Berechnung der Energieeigenwerte des Leuchtelektrons musste der Einfluss der Rumpfelektronen berücksichtigt werden. Das geschah, indem man die Abschirmungszahl σ einführte. Bei genauerer Betrachtung erweist es sich als notwendig, sogar zwei Abschirmungszahlen einzuführen. Es ist sinnvoll, die Gleichung (30) abzuändern in

(31)
$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left\{ \frac{\left(z - \sigma_{1}\right)^{2}}{n^{2}} + \alpha^{2} \frac{\left(z - \sigma_{2}\right)^{4}}{n^{3}} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right) \right\} .$$

Da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Leuchtelektrons innerhalb des "gesamten Atoms" von null verschieden ist, sind sämtliche Rumpfelektronen an der Abschirmung beteiligt, selbstverständlich die weiter innen liegenden in stärkerem Maße. Man nennt daher die Abschirmungszahl σ_1 im ersten Summanden von (31) die Konstante der vollständigen Abschirmung. Sie nimmt mit n, ℓ , und z zu.

Der zweite Summand in (31) gibt den Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung des Leuchtelektrons auf den Energiewert an; bei diesem Effekt schirmen nur diejenigen Elektronen ab, die innerhalb der Schale des Leuchtelektrons liegen. Daher nennt man σ_2 auch die **Konstante der inneren Abschirmung**. σ_2 ist daher stets kleiner als σ_1 , wächst aber ebenfalls mit n und ℓ an. Bei einem "Leuchtelektron", also einem ganz außen liegenden Elektron ist der Unterschied zwischen σ_1 und σ_2 nur gering. Er spielt erst eine Rolle, wenn man die Anregung innerer Elektronen untersucht, wie sie bei Röntgenstrahlung auftritt.

Aufgabe des hier beschriebenen Experiments ist es nun, die Abschirmungszahl σ_2 zu bestimmen. Das ist möglich, indem man den Abstand ΔE_D der beiden Linien innerhalb eines Dubletts ausmisst. Wie aus Abb.2 hervorgeht, ändert sich bei den beiden Übergängen nur die Quantenzahl j um 1, während alle anderen Größen konstant bleiben. Es ist daher nach (31)

$$(32) \ \Delta \, E_D := E_{n,\,j} - E_{n,\,j+1} = \frac{R_\infty \ \alpha^2}{n^3} \, \big(z - \sigma_2\big)^4 \, \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{j+\frac{3}{2}}\right) = \frac{R_\infty \ \alpha^2}{n^3} \, \big(z - \sigma_2\big)^4 \ \frac{1}{\ell \, \big(\ell+1\big)}.$$

Diese Gleichung lässt sich bei bekanntem ΔE_D , ℓ , n und z nach σ_2 auflösen. Die Größe ΔE_D wird über den Wellenlängenunterschied $\Delta \lambda$ der beiden Spektrallinien λ und λ ' des

 $^{^{5}}$ wegen der stark von ℓ abhängenden Abschirmungszahl σ

 $^{^6}$ Im Falle von Abb.2 kann die Aufspaltung $\{D_{5/2},\,D_{3/2}\}$ gegen die von $\{P_{3/2},\,P_{1/2}\}$ vernachlässigt werden.

Dubletts errechnet. Wegen $E = hc/\lambda$ gilt

$$\Delta \, \mathsf{E}_D \ = \ h \, c \, \left(\frac{1}{\lambda} \ - \ \frac{1}{\lambda^{\bullet}} \right) \ \approx \ h \, c \, \frac{\Delta \, \lambda}{\lambda^2} \quad .$$

Die Größen λ und $\Delta\lambda$ können mit einem Spektralapparat hinreichender Auflösung bestimmt werden. Hier soll ein Gitterspektralapparat verwendet werden, dessen Aufbau und Wirkungsweise im folgenden Kapitel beschrieben wird.

7. Das Beugungsgitter

Das Beugungsgitter besteht aus einer großen Zahl regelmäßig angeordneter paralleler Spalte in einer sonst lichtundurchlässigen Fläche. Trifft ein Lichtbündel auf diese Anordnung, dann wird ein Teil der Intensität aus der Einfallsrichtung abgelenkt. Diesen Effekt bezeichnet man als Beugung (Näheres siehe V406). Die Größe der Richtungsänderung steht in Zusammenhang mit der Wellenlänge λ des einfallenden Lichtes. Beim Gitterspektralapparat wird somit die Messung der Wellenlänge auf eine Winkelmessung zurückgeführt. Im folgenden soll der Zusammenhang zwischen dem Beugungswinkel ϕ und der Wellenlänge λ abgeleitet werden. Man betrachtet hierzu ein Gitter mit p Spalten der Breite b (b << Spaltlänge) und einer Gitterkonstanten g (= Abstand der Spaltmitten, siehe Abb.3); auf dieses möge ein paralleles Lichtbündel der Wellenlänge λ senkrecht auffallen. Die Amplitude der Welle sei gegeben durch

$$E(z,t) = E_0 \exp i \left(\omega t - 2\pi \frac{z}{\lambda}\right)$$
.

Die Teilstrahlen innerhalb eines Bündels der Breite b interferieren miteinander. Das führt dazu, wie in V406 dargelegt wurde, dass die aus **einer** Gitteröffnung in Richtung ϕ abgebeugte Intensität den Betrag

(33)
$$\mathbf{I}_{b}(\varphi) = \mathsf{E}_{0}^{2} \, \mathsf{b}^{2} \left(\frac{\lambda}{\pi \, \mathsf{b} \, \mathsf{sin} \, \varphi} \right) \mathsf{sin}^{2} \left(\frac{\pi \, \mathsf{b} \, \mathsf{sin} \, \varphi}{\lambda} \right)$$

hat. Beim Gitter tritt zusätzlich Interferenz zwischen den von den einzelnen Gitteröffnungen ausgehenden Strahlenbündeln auf. Die Gesamtintensität der in Richtung ϕ abgebeugten Strahlung muss daher dargestellt werden durch

$$\mathbf{I}_{g}(\varphi) = \left| \mathsf{E}_{g}(\varphi) \right|^{2} \, \mathbf{I}_{b}(\varphi) \quad .$$

Hierin bedeutet $E_g(\phi)$ die Feldstärkeamplitude der Welle in Richtung ϕ , die durch Interferenz der aus allen Gitterspalten kommenden Bündel entsteht. Um sie zu berechnen, betrachtet man zunächst den Phasenunterschied δ der Wellen, die von zwei benachbarten Öffnungen ausgehen. Für sämtliche einander entsprechende Punkte innerhalb der beiden Öffnungen ist gemäß Abb.3 - hier sind beispielsweise die rechten Randstrahlen eingezeichnet –

$$\delta = \frac{2\pi g \sin \varphi}{\lambda}$$

Da das Gitter aus insgesamt p Öffnungen besteht, ist E_g eine Amplitude, die durch Überlagerung von p Teilwellen entsteht:

$$(35) \qquad E_g \big(\phi \big) \; = \; \text{exp} \big(i \, \big(\omega \, t \; - \; 2 \, \pi \, z / \lambda \big) \big) \Big(1 \; + \; \text{e}^{-i \delta} \; + \; \text{e}^{-i \delta} \; + \; \dots \; + \; \text{e}^{-\left(p-1\right) i \delta} \Big) \quad .$$

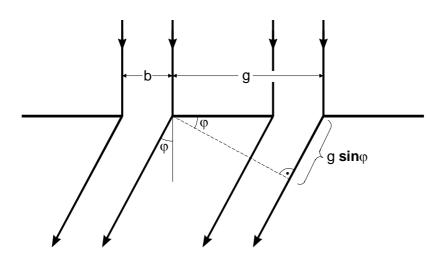


Abb.3: Beugung einer ebenen Welle an regelmäßig angeordneten Spaltöffnungen der Breite b

Der rechte Faktor in (35) stellt eine geometrische Reihe mit dem Quotienten e^{-iδ} dar. Ihre Summation liefert daher den Ausdruck

$$1 + \mathbf{e}^{-i\delta} + \mathbf{e}^{-i\delta} + \dots + \mathbf{e}^{-i(p-1)\delta} = \frac{1 - \mathbf{e}^{-ip\delta}}{1 - \mathbf{e}^{-i\delta}}.$$

Der komplexe Bruch in obiger Gleichung lässt sich mit Hilfe der Eulerschen Formel umformen in

$$\frac{1 \, - \, \boldsymbol{e}^{-i\,p\,\delta}}{1 \, - \, \boldsymbol{e}^{-i\,\delta}} \; = \; \frac{\boldsymbol{e}^{-i\,p\,\delta/2} \, \left(\boldsymbol{e}^{i\,p\,\delta/2} \, - \, \boldsymbol{e}^{-i\,p\,\delta/2} \right)}{\boldsymbol{e}^{-i\,\delta/2} \, \left(\boldsymbol{e}^{i\,\delta/2} \, - \, \boldsymbol{e}^{-i\,\delta/2} \right)} \; = \; \boldsymbol{e}^{-i\left(p-1\right)\,\delta/2} \; \frac{\sin p\,\delta/2}{\sin \delta/2} \quad .$$

Damit wird

$$\mathsf{E}_g\left(\phi\right) \; = \; \boldsymbol{\mathsf{exp}}\left(i\,\omega\,t \; - \; 2\,\pi\,z/\lambda\right) \, \boldsymbol{\mathsf{exp}}\left(-\,i\left(p \; - \; 1\right)\delta/2\right) \frac{\boldsymbol{\mathsf{sin}}\,p\,\delta/2}{\boldsymbol{\mathsf{sin}}\,\delta/2} \quad .$$

Nach Multiplikation mit dem konjugiert komplexen Wert bekommt man

(36)
$$\left| \mathsf{E}_{\mathsf{g}} \left(\varphi \right) \right|^2 = \frac{\sin^2 \rho \, \delta/2}{\sin^2 \delta/2} .$$

Die Intensität der von einem Gitter mit p Spalten in Richtung φ abgebeugten Strahlung beträgt somit nach (33), (34) und (35)

(37)
$$\mathbf{I}_{g}(\varphi) = \mathsf{E}_{0}^{2} \mathsf{b}^{2} \left(\frac{\lambda}{\pi \, \mathsf{b} \, \sin \varphi} \right) \sin^{2} \left(\frac{\pi \, \mathsf{b} \, \sin \varphi}{\lambda} \right) \frac{\sin^{2} \left(\mathsf{p} \, \pi \, \mathsf{g} \, \sin \varphi / \lambda \right)}{\sin^{2} \left(\pi \, \mathsf{g} \, \sin \varphi / \lambda \right)}$$

Zur Diskussion des Verlaufs von $\mathbf{I}_g(\phi)$ beachte man, dass der Ausdruck (37) aus zwei Faktoren besteht, nämlich dem "Spaltfaktor" , der sich durch

$$s(x) := \frac{\sin^2 x}{x^2}$$
 $(x := \pi b \sin \varphi/\lambda)$

darstellen lässt, und dem "Gitterfaktor"

$$g(y) := \frac{\sin^2 py}{\sin^2 y}$$
 $(y := \pi g \sin \varphi/\lambda)$.

Wie man leicht zeigen kann, besitzen beide Faktoren für x=0 bzw. y=0, d.h. $\phi=0$ ein absolutes Maximum, das man als **Maximum nullter Ordnung** bezeichnet. Der größte Teil der auf das Gitter fallenden Intensität geht demnach ohne Richtungsänderung hindurch. Ansonsten besitzt die Funktion (37) eine Fülle lokaler Maxima und Minima. Die Minima liegen dort, wo die Faktoren des nicht negativen \mathbf{I}_g verschwinden, das heißt bei

$$x = n \pi$$
 (n = 1, 2, 3, ...) oder $\sin \varphi = n \lambda / b$

und

(38)
$$y = n\pi/p$$
 $(n = 1, 2, ..., jedoch n \neq kp, k = 1, 2, ...)$ oder $sin \varphi = \frac{n \lambda}{p g}$.

Da p >> 1 und g > b ist, ist der Abstand der Minima von (37) im wesentlichen durch den Gitterfaktor bestimmt. Vergrößert man die Zahl der Gitteröffnungen, so kann man nach Aussage von (38) erreichen, dass die Minima beliebig dicht liegen. Die zwischen den Minima liegenden Maxima befinden sich ungefähr an den Stellen⁷

(39)
$$y = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{p}$$
 $n = 1, 2, ...$ oder $\sin \varphi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\lambda}{p g}$.

Als nächstes sind die in (38) ausgeschlossenen Fälle

(40)
$$y = k \pi, \qquad k = 1, 2, ...$$

zu behandeln. Hier verschwinden Zähler **und** Nenner des Gitterfaktors. Nach der Regel von l'Hopital erhält man für diese Stellen

$$\lim_{y \to k\pi} \frac{\sin^2 py}{\sin^2 y} = p^2$$

Das heißt, an den durch (40) bezeichneten Stellen liegen Maxima. Man bezeichnet sie je nach der Größe von k als **Hauptmaxima k-ter Ordnung**; denn ihr Betrag ist groß gegen die Beträge der durch (39) festgelegten, sogenannten Nebenmaxima, wie im Folgenden gezeigt wird: Für die Größe der Nebenmaxima bekommt man ungefähr

$$g(y_{\text{max}}) \approx \frac{\sin^2\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi}{\sin^2\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{p}\right)} = \frac{1}{\sin^2\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{p}\right)}.$$

Wenn n nicht zu nahe bei p oder bei 1 liegt, das heißt, wenn man sich nicht zu dicht in der Nähe der Hauptmaxima (40) befindet, dann bleibt $\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{p}$ in der Größenordnung von 1, und damit ist (41) klein gegen p^2 .

Es wurde bereits darauf hingewiesen, dass der Abstand der Minima beliebig klein werden kann, wenn man nur p hinreichend groß wählt. Das hat zur Konsequenz, dass auch die Halbwertsbreite der Maxima beliebig klein werden muss. Charakteristisch für die Beugung am Gitter ist also, dass man bei Beobachtung der Beugungsfigur schmale und

⁷ Die exakte Lage der Maxima ist durch die transzendente Gleichung \mathbf{tg} p $y_{\text{max}} = p$ \mathbf{tg} y_{max} gegeben.

helle Maxima auf dunklem Grund sieht; denn bei großem p kann man die Intensität der Nebenmaxima vernachlässigen. Die Hauptmaxima liegen an den Stellen, die durch

(42)
$$\sin \varphi = k \frac{\lambda}{g}$$
, $k = 0, 1, 2, ...$

gegeben sind. Wäre der Spaltfaktor s(x) nicht zu berücksichtigen, besäßen alle Hauptmaxima die Intensität p^2 . Da aber s(x) mit wachsendem x gegen null geht (siehe V 406), besitzt nur das Hauptmaximum nullter Ordnung die angegebene Intensität, während die Intensität höherer Maxima gegen null strebt. Außerdem vergrößert s(x) die Zahl der Nullstellen von \mathbf{I}_g . Durch den Einfluss von s(x) verschwinden aber nur dann Hauptmaxima der Funktion $\mathbf{I}_g(\phi)$, wenn g und b ein rationales Verhältnis zu einander besitzen. In Abb.4 ist zur Veranschaulichung der Verlauf der Intensität für ein Gitter mit 8 Spalten wiedergegeben.

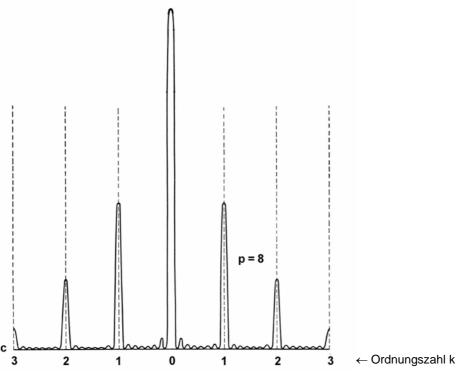


Abb.4⁸: Intensitätsverteilung (qualitativ) bei der Beugung durch 8 Spalte

8. Auflösungsvermögen eines Gitterspektralapparates

Wie man an (42) erkennt, ist der Sinus des Beugungswinkels proportional zur Wellenlänge des einfallenden Lichtes. Man kann daher ein Beugungsgitter zur Wellenlängenmessung benutzen. Wegen der geringen Halbwertsbreite der Beugungsmaxima lassen sich mit dem Gitter auch sehr kleine Wellenlängenänderungen ausmessen. Ein Gitterspektralapparat besitzt somit ein hohes Auflösungsvermögen A. Hierunter versteht man den Quotienten aus der Differenz $\Delta\lambda$ zweier gerade noch vom Gerät zu trennenden Wellenlängen und der aus beiden Komponenten gemittelten Wellenlänge λ ', also

$$A := \frac{\lambda''}{\Delta \lambda} .$$

_

⁸ entnommen aus Bergmann Schäfer, Lehrbuch der Experimentalphysik, Bd. III

Man sagt, dass sich zwei Spektrallinien mit den Wellenlängen λ und λ + $\Delta\lambda$ gerade dann noch trennen lassen, wenn das Hauptmaximum der einen Komponente auf das

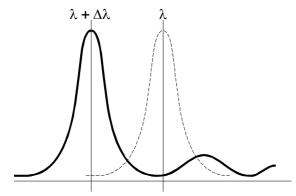


Abb.5: Skizze zur Erläuterung der Trennung zweier dicht beieinanderliegenden Linien in einem Spektralapparat

erste Minimum neben dem Hauptmaximum der anderen Komponente fällt (siehe Abb.5). Mit dieser Definition lässt sich das Auflösungsvermögen berechnen: Das k-te Hauptmaximum der Linie mit der Wellenlänge $\lambda + \Delta \lambda$ liegt nach (42) an der Stelle

$$\sin \varphi_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k} (\lambda + \Delta \lambda)}{\mathbf{g}}$$

Das unmittelbar benachbarte Minimum der Linie mit der Wellenlänge λ erscheint nach (38) unter dem Winkel

$$\sin \varphi = \frac{kp + 1}{p} \frac{\lambda}{a}$$
 $(n = kp)$.

Sollen sich beide Linien noch trennen lassen, dann muss gelten

$$\frac{k}{g}(\lambda + \Delta\lambda) = \frac{kp + 1}{p} \frac{\lambda}{g} .$$

Daraus folgt

$$A = \frac{\lambda}{\Delta \lambda} = kp .$$

Das Auflösungsvermögen ist also proportional zur Ordnungszahl und zur Zahl der beleuchteten Gitteröffnungen. In üblichen Spektralapparaten kann man meistens nicht über k =3 hinausgehen, da die Bedingung k λ < g eingehalten werden muss. Die Zahl der Gitterspalte liegt bei den besten Spektralapparaten jedoch in der Größenordnung von 10^5 , sodass man mit einem solchen Gerät noch Wellenlängenänderungen von $3 \cdot 10^{-6}$ beobachten kann.

9. Aufbau des Gitterspektralapparates

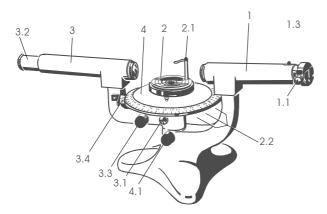


Abb.6: Perspektivische Darstellung des verwendeten Gerätes

Die wesentlichen Bestandteile des in Abb.6 wiedergegebenen Spektrometers sind Kollimatorrohr 1 mit Spaltblende 1.1, Gittertisch 2, schwenkbares Fernrohr 3 und Teilkreisplatte 4. Während der Kollimator fest mit dem Stativ verbunden ist, lässt sich das Fernrohr und auch der Gittertisch um eine vertikale Achse schwenken. Wird das Fernrohr mit der Rändelschraube 3.1. arretiert, dann kann man es mit dem Vorschub 3.3 noch feinverstellen. Der Gittertisch und die Teilkreis-

platte werden mit der Schraube 4.1 arretiert. Unmittelbar vor dem Spalt steht die zu untersuchende Lichtquelle. Die durch den Spalt in das Kollimatorrohr eintretenden divergenten Strahlen werden von einer Objektivlinse in 1. zu einem parallelen Bündel zusammengefasst. Dieses fällt auf das Gitter, wird dort abgebeugt und mit Hilfe des Fernrohres 3 beobachtet. Letzteres besteht aus einer Objektiv- und einer Okularlinse mit Fadenkreuz. Die Objektivlinse sammelt die vom Gitter ausgehenden Strahlen, die unter demselben Winkel ϕ abgebeugt wurden, an einem Ort in ihrer Brennebene. Dort entstehen reelle Bilder des Spaltes. Da sie für eine unmittelbare Beobachtung zu klein sind, betrachtet man sie mit Hilfe der Okularlinse, die die Funktion einer Lupe hat. Zur Messung des gesuchten Beugungswinkels ϕ schwenkt man das Fernrohr solange um eine vertikale Achse, die durch die Gitterfläche geht, bis das Spaltbild mit dem in das Okular eingebrachten Fadenkreuz zur Deckung kommt und liest den Schwenkwinkel an

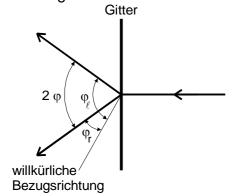


Abb.7: Skizze zur Bestimmung des Beugungswinkels φ

dem an der Apparatur angebrachten Teilkreis 4 ab. Da das auf das Gitter fallende Licht sowohl nach links als auch nach rechts abgebeugt wird, ist es sinnvoll, gemäß Abb.7 die Richtungen ϕ_ℓ und ϕ_r beider abgebeugter Strahlen auszumessen und aus der Gleichung

$$\varphi = \frac{1}{2} (\varphi_{\ell} - \varphi_{r})$$

den Beugungswinkel zu berechnen.

10. Justierung des Spektrometers

Für genaue Messungen mit dem Spektrometer ist es erforderlich, dass sich 1. der Spalt und das Fadenkreuz des Okulars in den Brennebenen der zugehörigen Objektive befinden, 2. die Gitteröffnungen parallel zur Drehachse des Fernrohres liegen und 3. die Gitterebene senkrecht zum einfallenden Strahl steht.

zu 1: Man schwenkt das Fernrohr in die Achse des Kollimators und verschiebt nach Lösen der Rändelschraube 1.3 den Tubus der beleuchteten Spaltblende solange, bis das Spaltbild scharf erscheint. Gleichzeitig richtet man den Spalt vertikal aus. Danach wird die Lage des Blendentubus mit 1.3 fixiert.

zu 2: Ist die unter 2. genannte Forderung nicht erfüllt, dann beobachtet man beim Durchschwenken des Fernrohrs auch eine vertikale Bewegung der Spaltbilder. Durch geeignetes Drehen an den 3 Stellschrauben 2.2 unterhalb der Teilkreisplatte kann dieser Justierfehler beseitigt werden.

zu 3: Nur dann, wenn die Gitterebene senkrecht zum einfallenden Strahl steht, liegen die Beugungsbilder einer Spektrallinie symmetrisch zum ungebeugten Strahl. Durch vorsichtiges Drehen der Gitterebene (Nur beim Transmissiongitter!!) um die vertikale

Es gibt auch Gitter, wo das Licht praktisch nur in **eine** Richtung abgebeugt wird. Hier wird φ als Differenz zwischen der Richtung des ungebeugten und des gebeugten Strahls bestimmt.

Achse und nachfolgendes Messen von ϕ kann man diese allmählich in die gewünschte Lage bringen.

11. Ausmessung von Dublett-Linien

Zur Bestimmung von $\Delta\lambda$ bei einem Alkali-Dublett reicht die Winkelauflösung (0,1°) des Goniometers nicht mehr aus. Hier muss der Abstand der beiden Spektrallinien mit Hilfe eines Okularmikrometers ausgemessen werden. Man arretiert hierzu den Fernrohrarm 3 mit der Rändelschraube 3.1 an einer geeigneten Stelle und misst den Abstand Δs (siehe Abb.8) der beiden Linien durch Verschiebung des Fadenkreuzes im Okularmikrometer aus. Zu diesem Zwecke ist an dem rechteckigen Okulargehäuse seitlich ein Drehknopf mit einer Skalentrommel angebracht, auf welcher genau 100 Teilstriche eingraviert sind. Man erhält also den gesuchten Wellenlängenunterschied $\Delta\lambda$ der Dublettlinien zunächst in Einheiten der Teilung des Okularmikrometers. Um aus

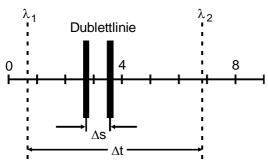


Abb.8: Skizze zur Eichung des Okularmikrometers

dem gemessenen Δs das gesuchte $\Delta \lambda$ in nm errechnen zu können, ist noch eine weitere Eichmessung notwendig. Hierzu verwendet man zwei benachbarte Spektallinien mit den Wellenlängen λ_1 und λ_2 (Abb.8) aus einem Spektrum, dessen Wellenlängen bekannt sind. Sie dür-fen nur soweit auseinanderliegen, dass sie beide noch von der Skala des Okularmikro-meters überdeckt werden. (siehe Abb.8). Man misst nun ihren

Abstand Δt aus. Gemäß Abb.8 und Abb.9 gelten dann die Beziehungen

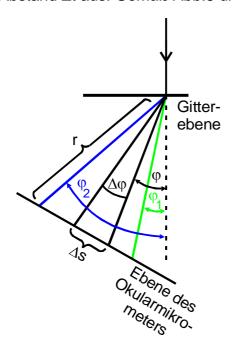


Abb.9: Ausmessung kleiner Winkelunterschiede $\Delta \phi$ mit dem Okularmikrometer

$$\Delta s = r \Delta \varphi$$

und

$$\Delta t = r (\varphi_1 - \varphi_2)$$

Es folgt dann aus Gleichung (42): (k = 1)

$$(\lambda + \Delta \lambda) = g \sin (\varphi + \Delta \varphi) \approx g (\sin \varphi + \Delta \varphi \cos \varphi),$$

falls $\Delta \varphi \ll \varphi$, und weiter für das gesuchte $\Delta \lambda$:

$$(46) \Delta \lambda \approx g \cos \phi \Delta \phi$$

In (46) ersetzt man nun die unbekannte Hilfsgröße $\Delta \varphi$ mit Hilfe von (44) durch die Messgröße Δs :

(47)
$$\Delta \lambda = g \cos \overline{\phi} \frac{\Delta s}{r}$$

worin $\overline{\phi}$ den gemittelten Winkel zwischen den beiden Dublettlinien bedeuten soll. Eine entsprechende Gleichung kann man auch für die beiden benach-

¹⁰ Dieses ist in Abb.6 nicht eingezeichnet.

barten Spektrallinien λ_1 und λ_2 aufstellen; es folgt aus (45) und (46)

(48)
$$\lambda_1 - \lambda_2 = g \cos \overline{\varphi}_{1,2} \frac{\Delta s}{r}$$

mit

$$\overline{\phi}_{1,2} \ = \ \frac{1}{2} \left(\phi_1 \ + \ \phi_2 \right) \qquad .$$

wobei ϕ_1 und ϕ_2 die zu λ_1 und λ_2 gehörenden Beugungswinkel bedeuten sollen. Man kann nun noch den unbekannten Radius r durch Zusammenfassung von (47) und (48) eliminieren und erhält schließlich

$$\Delta \lambda = \frac{\cos \overline{\varphi}}{\cos \overline{\varphi}_{1,2}} \frac{\Delta s}{\Delta t} (\lambda_1 - \lambda_2) .$$

12. Messprogramm

a) Man messe die Beugungswinkel φ_i der wichtigsten Spektrallinien des He-Spektrums, die in der nachstehenden Tabelle angegeben sind. (Die Messung ist nur in 1. Ordnung möglich.)

λ [nm]	Farbe	Intensität	λ [nm]	Farbe	Intensität
706,5	dunkelrot	schwach	492,2	blaugrün	mittel
667,8	rot	stark	471,3	blau	stark
587,6	gelb	stark	447,1	violett	stark
504,8	grün	schwach	438,8	violett	schwach
501,6	grün	stark			

Tabelle 1: Die wichtigsten sichtbaren Spektrallinien des Helium-Spektrums

- b) Man eiche das Okularmikrometer nach der in Kap.11 beschriebenen Methode. (Grüne und violette Spektrallinien sind hierzu geeignet.)
- c) Man messe die Beugungswinkel folgender Linien (Mittelwert) Natrium-Spektrum: rot, gelb, grüngelb; Kalium-Spektrum: 2xgelb, 2xgrün (siehe Abb.10); Rubidium-Spektrum: rot (3. und 4. Linie)

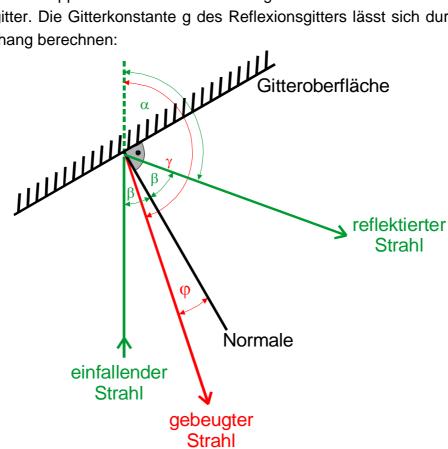
Dub.1 Dub.2

Abb.10: Lage der beiden gelben sowie der beiden grünen Dubletts im Kalium-Spektrum

- d) Man bestimme mit Hilfe des Okularmikrometers die Distanzen der Dublettkomponenten der unter c) genannten Spektrallinien.
- e) Man untersuche das Auflösungsvermögen des benutzten Gitterspektralapparates am gelben Natrium-Dublett. Man verkleinere dazu den unmittelbar vor dem Beugungsgitter stehenden Spalt solange, bis die beiden Linien ineinander übergehen. Die so ermittelte Spaltbreite lese man an der Skalentrommel ab.

13. Auswertung

zu a: Man trage in einem Diagramm $\sin \phi$ gegen λ auf. Man bestimme mittels einer Ausgleichsrechnung die Gitterkonstante g des verwendeten Beugungsgitters. Hierbei besitzt die eine Apparatur ein Transmissionsgitter und die andere Apparatur ein Reflexionsgitter. Die Gitterkonstante g des Reflexionsgitters lässt sich durch folgenden Zusammenhang berechnen:



 α = Winkel zwischen einfallendem und reflektiertem Strahl

 β = Reflexionswinkel

 φ = Beugungswinkel

 γ = Winkel zwischen einfallendem und gebeugten Strahl

Der Reflexionswinkel β errechnet sich aus dem messbaren Winkel α zu

$$\beta = 90^{\circ} - \alpha/2$$

 α erhält man aus dem an der Winkelskala abgelesenen Wert δ zu

$$\alpha = 400^{\circ} - \delta \qquad .$$

Den Beugungswinkel φ erhält man aus dem messbaren Winkel γ zu

$$\phi = \gamma + \beta - 180^{\circ} = \gamma - \frac{\alpha}{2} - 90^{\circ}$$
, (Hinweis: ϕ ist < 0°)

wobei sich der Winkel γ ebenfalls nach (49) aus dem an der Winkelskala abgelesenen Wert δ ' errechnet.

Die gesuchte Gitterkonstante ergibt sich dann zu

$$g = \frac{\lambda}{\sin\beta + \sin\varphi}$$

zu b: Man errechne für verschiedene geeignete Spektrallinien die Eichgröße $(\lambda_1 - \lambda_2)/\Delta t \cos \overline{\phi}_{12}$ und bilde einen Mittelwert.

zu c: Man errechne erstens aus den gemessenen Beugungswinkeln und der Gitterkonstanten g die mittlere Wellenlänge, zweitens den Wellenlängenunterschied $\Delta\lambda$ der Dublett-Komponenten und drittens aus λ und $\Delta\lambda$ die Differenz ΔE_D der beiden Energieniveaus, die die Dublettaufspaltung hervorrufen. Man setze ΔE_D in (32) ein und errechne daraus die Abschirmungszahlen $\sigma_2(n, \ell)$. Man beachte dabei, dass die angegebenen Na-Dubletts sämtlich durch die Aufspaltung des 3P-Niveaus in $3P_{1/2}$ und $3P_{3/2}$ entstehen, während bei den K-Dubletts die $4P_{1/2}$ - und $4P_{3/2}$ - und beim Rb die $5P_{1/2}$ - und $5P_{3/2}$ - Niveaus beteiligt sind.

zu e: Man errechne aus der gemessenen Spaltbreite und g die Anzahl der beteiligten Gitteröffnungen und das daraus resultierende Auflösungsvermögen. Man vergleiche den erhaltenen Wert mit $\lambda/\Delta\lambda$ für das Na-Dublett.

14. Literatur:

zu: Berechnung von Ein-Elektronen-Spektren
Bergmann Schäfer, Lehrbuch d. Experimentalphysik, Bd.IV, Teil 1
Becker Sauter, Theorie der Elektrizität, Bd.2
A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien
B. Heckmann Trabert, Einführung in die Spektroskopie d. Atomhülle

zu: Beugungsgitter Bergmann Schäfer, Lehrbuch d. Experimentalphysik, Bd.III