# Ferienkurs Experimentalphysik 2013

Lösung - 4. Tag

5. September 2013

## Aufgabe 1 Moleküle im interstellaren Medium

In der Radio- und Infrarotastronomie beobachtet man u.a. auch Moleküllinien im interstellaren Medium. Aus diesen Beobachtungen können Rückschlüsse auf die galaktische Verteilung und Häufigkeit der Moleküle sowie auf Sternentstehungsgebiete und -mechanismen gezogen werden.

- a) Kohlenmonoxid  $^{12}C^{16}O$  emittiert beim Übergang vom ersten angeregten Rotationsniveau (J=1) zum Grundzustand (J=0) eine Linie der Wellenlänge  $\lambda_0 = 2.6$ mm. Berechnen Sie die dazu gehörige Energie und den Abstand der beiden Atome im Molekül.
- b) Berechnen Sie die Energie und Frequenz des gleichen Übergangs auch für das Molekül  $^{13}C^{16}O$  sowie die relative Frequenzverschiebung. (*Hinweis:* Nehmen Sie den gleichen Abstand R wie beim  $^{12}C^{16}O$ .)

#### Lösung

a) Die reduzierte Masse beträgt:

$$\mu = \frac{12u \cdot 16u}{12u + 16u} \approx 6.68u \tag{1}$$

$$E_0 = \frac{hc}{\lambda_0} \approx 4.8 \cdot 10^{-4} \text{eV} \tag{2}$$

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) = BJ(J+1)$$
 (3)

mit dem Trägheitsmoment  $I=\mu R^2$  und der Rotationskonstanten  $B=\frac{\hbar^2}{4\pi^2 I}$  bei Übergangen von (J=1) nach (J=0) gilt:

$$\Delta E_{1\to 0} = 2B = \frac{hc}{\lambda_0} \tag{4}$$

$$\Rightarrow B = \frac{hc}{2\lambda_0} \tag{5}$$

$$\Rightarrow R = \sqrt{\frac{h\lambda_0}{4\pi^2 c\mu}} \approx 1.13 \cdot 10^{-10} m \tag{6}$$

b) Bei  $^{13}C^{16}O$  ändert sich im Vergleich zu  $^{12}C^{16}O$  nur die reduzierte Masse.

$$\mu = \frac{13u \cdot 16u}{13u + 16u} \approx 7.17u \tag{7}$$

Damit ergibt sich für die Energie:

$$\Delta E_{13} = \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \cdot \Delta E_{12} \approx 4.6 \cdot 10^{-4} \text{eV}$$
 (8)

$$\nu_{13} = \frac{\Delta E_{13}}{h} \approx 111 \text{GHz} \tag{9}$$

$$\frac{\Delta\nu}{\nu_{12}} = \frac{\Delta E}{E_{12}} = 1 - \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \approx 0.04 \tag{10}$$

## Aufgabe 2 Lithiummoleküle

Lithium kommt in zwei Isotopen vor,  $^6$ Li und  $^7$ Li, mit jeweils 3 Protonen und 3 bzw. 4 Neutronen. Der Gleichgewichtsabstand  $r_0$  in den Molekülen  $H^6$ Li und  $H^7$ Li sei gleich groß. Die Frequenz  $\nu$  entspreche dem Übergang zwischen den Rotationszuständen j=1 und j=0. Experimentell wird zwischen den beiden Molekülsorten ein Frequenzunterschied von  $\Delta\nu=\nu(H^6Li)-\nu(H^7Li)=1\cdot 10^{10}$  Hz beobachtet. Die Moleküle sollen als starre Rotatoren betrachtet werden.

- a) Berechnen Sie den Gleichgewichtsabstand  $r_0$ .
- b) Berechnen Sie für beide Molekülsorten die Energie des Übergangs von j=1 nach j=0.

#### Lösung

a) Die Energie  $E_j$  eines Rotationsniveaus mit der Drehimpulsquantenzahl j berechnet sich über

$$E_j = \frac{\hbar}{2I} \cdot j(j+1) \tag{11}$$

mit  $j=0,1,2,\ldots$  und dem Trägheitsmoment des Moleküls

$$I = \mu \cdot r_0^2 = \frac{m_h \cdot m_{Li}}{m_h + m_{Li}} \cdot r_0^2 \tag{12}$$

Die Frequenz des Übergangs zwischen den Niveaus mit den Quantenzahlen j=0 und j=1 beträgt somit

$$h\nu_{0,1} = \Delta E_{0,1} = \frac{\hbar^2}{I} \tag{13}$$

$$\nu_{0,1} = \frac{\hbar^2}{hI} = \frac{\hbar}{2\pi I} \tag{14}$$

Aus dem Frequenzunterschied zwischen den Molekülen  $\mathrm{H}^6\mathrm{Li}$  und  $\mathrm{H}^7\mathrm{Li}$  kann Gleichgewichtsabstand  $r_0$  gerechnet werden

$$\Delta \nu = \nu_6 - \nu_7 = \frac{\hbar}{2\pi r_0^2} \left( \frac{1}{\mu_6} - \frac{1}{\mu_7} \right) \tag{15}$$

$$r_0^2 = \frac{\hbar}{2\pi\Delta\nu} \left( \frac{1}{\mu_6} - \frac{1}{\mu_7} \right) \tag{16}$$

mit  $\mu_6 = \frac{6}{7}$ amu,  $\mu_7 = \frac{7}{8}$ amu folgt

$$r_0 = 1.55 \cdot 10^{-10} \text{m} \tag{17}$$

b) Die Trägheitsmomente der Moleküle ergeben sich zu

$$I_6 = \frac{6}{7} \cdot r_0^2 = 3.429 \cdot 10^{-47} \text{kgm}^2$$

$$I_7 = \frac{7}{8} \cdot r_0^2 = 3.500 \cdot 10^{-47} \text{kgm}^2$$

und damit die Übergangsenergien

$$E_6 = \frac{\hbar^2}{I_6} = 3.24 \cdot 10^{-22} J = 2.02 \cdot 10^{-3} \text{eV}$$

$$E_7 = \frac{\hbar^2}{I_7} = 3.181 \cdot 10^{-22} J = 1.98 \cdot 10^{-3} \text{eV}$$

## Aufgabe 3 Molekülvibration, Molekülspektroskopie

Wir betrachten nun ein Molekül das nicht rotiert (J=0), aber dafür ist der Abstand R der beiden Atomkerne nicht mehr konstant. Die Kerne können also gegeneinander schwingen. Die Schrödingergleichung für die Radialbewegung lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[ \frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{dS}{dR} \right) - E_{pot}(R) \right] S(R) = E \cdot S(R)$$
 (18)

Für die potentielle Energie zwischen den beiden Kernen ist das Morse-Potential eine sehr gute Näherung:

$$E(R) = E_D(1 - e^{-a(R - R_0)})^2$$
(19)

Da die Lösung der Schrödingergleichung mit Morse-Potential kompliziert ist, wollen wir uns hier auf die harmonische Näherung beschränken.

- a) Geben Sie die Entwicklung des Morse-Potentials bis zur 2. Ordnung an, und bringen Sie es auf die Form  $E_{pot}(R) \approx \frac{1}{2}k(R-R_0)^2$
- b) Geben Sie die Energieeigenwerte für dieses Potential an.

- c) Berechnen Sie die Anregungsenergien für die harmonischen Energieniveaus fürs H<sub>2</sub>-Moleül (Dissoziationsenergie  $E_{diss} = 4.75$  eV,  $aR_0 = 1.44$ ).
- d) Zwischen welche Vibrationsniveaus unterschiedlicher elektronischer Niveaus sind elektromagnetische Übergänge besonders wahrscheinlich?
- e) Erklären Sie die Funktionsweise eines Wellenlängenschiebers, wie er bei Weißmachern zum Einsatz kommt.

### Lösung

a) Zunächst wird das Morse-Potential um  $R_0$  entwickelt:

$$E_{pot}(R) \approx E_{pot}(R_0) + E'_{pot}(R_0)(R - R_0) + \frac{1}{2}E''_{pot}(R_0)(R - R_0)^2$$
 (20)

$$= \frac{1}{2}2a^2E_D(R - R_0)^2 = \frac{1}{2}k(R - R_0)^2$$
 (21)

wobei  $k = 2a^2 E_D$ .

b) Das Potential  $E_{pot}(R) \approx \frac{1}{2} k (R - R_0)^2$  ist das Potential eines eindimensionalen harmonischen Oszillators. Die zugehörigen Energieeigenwerte lauten:

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\tag{22}$$

wobei  $\omega$ ) $\sqrt{\frac{k}{M}}$  und M die reduzierte Masse ist.

c) Die Anregungsenergie entspricht dem Unterschied zwischen zwei Energieniveaus:

$$\Delta = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \tag{23}$$

Fürs  $H_2$ -Molekül ergibt sich damit:

$$\Delta E = \hbar \sqrt{\frac{2a^2 E_D}{0.5 M_H}} = 771 \text{meV}$$
 (24)

Die Vibrationsanregungen sind immer noch um eine Größenordnung kleiner als die elektronischen Anregungen, aber deutlich größer als die Rotationsanregungen.

d) Die Übergangswahrscheinlichkeit hängt unter anderem vom Überlapp der Wellenfunktion im angeregtem Zustand und der Wellenfunktion im Endzustand ab. Damit sind Übergänge besonders wahrscheinlich, wenn beide Wellenfunktionen an der selben Stelle ein Maximum haben. Die Maxima der Wellenfunktionen müssen beim selben Abstand R der beiden Atomkerne liegen, da bei Molekülen nur senkrechte Übergänge möglich sind, also nur Übergänge bei denen sich der Abstand der Atomkerne nicht ändert. Der Abstand kann sich bei einem Übergang nicht ändern, da die Elektronenbewegung viel schneller ist als die Kernbewegung (→ Born-Oppenheimer-Näherung).

e) Wellenlängenschieber sind organische Moleküle. Ein UV-Photon regt das Molekül aus dem Grundzustand in den ersten elektronischen Zustand an. Außerdem wird das Molekül in einen hohen Vibrationszustand versetzt. Zunächst geht das Molekül durch strahlungslose Übergänge in einen niedrigen Vibrationszustand über. Da erfolgt der elektromagnetische Übergang in den Grundzustand. Das dabei freiwerdende Photon hat eine Wellenlänge im sichtbarem Bereich (meistens blau). Bei Weißmachern im Waschmittel werden Wellenlängenschieber eingesetzt, um einen größeren Bereich des Spektrums sichtbar zu machen. Dadurch erscheint die Wäsche weißer.

# Aufgabe 4 Übergänge im Wasserstoffatom

Ein Wasserstoffatom befindet sich im angeregten Zustand 2p und geht durch spontane Emission eines Photons in den Grundzustand 1s über.

a) Berechnen Sie den Einsteinkoeffizienten für diesen Übergang für den Fall eines linear polarisierten Photons.

$$\begin{split} \textit{Hinweise:} \ \Psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi), \\ R_{10}(r) &= \frac{2}{a_0^{3/2}} \mathrm{e}^{-r/a_0}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}} r \mathrm{e}^{-r/(2a_0)}, \\ Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \\ \int\limits_0^\infty \mathrm{d} r \, r^n \mathrm{e}^{-\alpha r} &= \frac{n!}{\alpha^{n+1}}. \end{split}$$

- b) Die mittlere Lebensdauer des 2p-Zustands beträgt  $\tau=1.6$  ns. Berechnen Sie die natürliche Breite für die Lyman- $\alpha$ -Linie  $(2p \to 1s)$  und vergleichen Sie diese mit der Doppler-Breite bei Zimmertemperatur.
- c) Vergleichen Sie die sich aus b) ergebenden Breiten der Lyman- $\alpha$ -Linie  $(2p \to 1s)$  mit der Hyperfeinstrukturaufspaltung (HFS) des Wasserstoffgrundzustandes, die durch die Wellenlänge  $\lambda = 21.1$  cm zwischen den beiden F-Zuständen charakterisiert ist. Welche Temperatur muss erreicht werden, damit die HFS von einem idealen Spektrometer aufgelöst werden kann?

Hinweis: Vernachlässigen[c)] Sie hierbei die Hyperfeinstruktur der 2p Energieniveaus

d) Wie groß sind Übergangswahrscheinlichkeit und natürliche Linienbreite des Übergangs  $3s \to 2p$  im Wasserstoffatom, wenn die Lebensdauer der Zustände  $\tau(3s) = 23$  ns und  $\tau(2p) = 2.1~\mu s$  betragen?

### Lösung

a) Die Übergangswahrscheinlichkeit ist gemäß der Vorlesung gegeben durch

$$A_{ik} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{ik}^3}{\varepsilon_0 c^3 h} \left| \mathbf{\mathcal{M}}_{ik} \right|^2.$$

Der 2p-Zustand besitzt drei entartete m-Komponenten ( $m=0,\pm 1$ ), da es sich jedoch laut Aufgabenstellung hier um ein linear polarisiertes Photon handelt, können wir uns auf m=0 beschränken.

Zunächst berechnen wir die einzelnen Komponenten des Matrixelements

$$|\mathcal{M}_{ik}|^2 = (\mathcal{M}_{ik})_x^2 + (\mathcal{M}_{ik})_y^2 + (\mathcal{M}_{ik})_z^2$$

mit Hilfe von Kugelkoordinaten. Man erhält

$$(\mathcal{M}_{ik})_{x} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_{0}^{2\pi} d\varphi \sin \varphi}_{=0} \int_{0}^{\pi} d\vartheta \sin^{2} \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = 0$$

$$(\mathcal{M}_{ik})_{y} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_{0}^{2\pi} d\varphi \cos \varphi}_{=0} \int_{0}^{\pi} d\vartheta \sin^{2} \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = 0$$

$$(\mathcal{M}_{ik})_{z} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta \cos \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = 0$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2\sqrt{2}a_{0}^{4}}}_{0} \underbrace{\int_{0}^{\infty} dr \, r^{4} e^{-\frac{3}{2}\frac{r}{a_{0}}}}_{0} \underbrace{\int_{0}^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta \cos^{2} \vartheta}_{0} = \underbrace{\frac{2^{15/2}}{3^{5}}}_{20} a_{0}$$

Wir benötigen nun nur noch die Kreisfrequenz  $\omega_{ik}$  des emittierten Photons, welche sich mit Hilfe der Balmerformel für n=1 und m=2

$$E = \hbar\omega = \text{Ry}^* \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) = \frac{3}{4}\text{Ry}^* \implies \omega = 2\pi \cdot 2.47 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

berechnen lässt (Feinstruktur etc. kann hier vernachlässigt werden). Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir letztendlich

$$A_{ik} = \frac{2^9}{3^8} \frac{e^2 a_0^2}{\pi \varepsilon_0 \hbar^4 c^3} \text{Ry}^{*3} = 6.25 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}.$$

b) Der Zusammenhang zwischen der natürlichen Breite der Lyman- $\alpha$ -Linie und der Lebensdauer  $\tau$  des 2p-Zustandes ist gegeben durch

$$\Delta \nu_{\rm nat} = \frac{1}{2\pi\tau} = 100 \text{ MHz}.$$

Für die Doppler-Verbreiterung ergibt sich gemäß der Formel aus der Vorlesung bei  $T=293~\mathrm{K}$  und der Frequenz  $\nu_0$  die in a) berechnet wurde

$$\Delta\nu_{\rm D} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8 \ln 2k_{\rm B}T}{m_{\rm H}}} = 30.1 \ {\rm GHz} \approx 300 \cdot \Delta\nu_{\rm nat}.$$

c) Beim Übergang  $2p \to 1s$ , können wir bei hinreichend guter Auflösung zwei Linien erkennen, jeweils für F=0 und F=1 der HFS des 1s Energieniveaus. Damit die HFS aufgelöst werden kann, muss die Doppler-Verbreiterung kleiner sein als der Abstand zwischen den beiden Linien.

$$\frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8 \ln 2k_{\rm B}T}{m_{\rm H}}} \le \Delta \nu \quad \Rightarrow \quad T \le \frac{m_{\rm H}c^2}{8 \ln 2k_{\rm B}} \left(\frac{\Delta \nu}{\nu_0}\right)^2 = 0.66 \text{ K}.$$

d) Der 3s-Zustand kann nur in den 2p-Zustand zerfallen. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$A_{ik} = \frac{1}{\tau(3s)} = 4.3 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}.$$

Die natürliche Linienbreite ist

$$\Delta \nu_{\rm nat} = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{1}{\tau(3s)} + \frac{1}{\tau(2p)} \right) = 7 \text{ MHz}.$$

# Aufgabe 5 Atomare Übergänge

- a) Zeigen Sie, dass  $\frac{\Delta\omega}{\omega_{ik}} = \frac{A_{ik}}{\omega_{ik}}$  gilt. (Hier ist  $A_{ik}$  der sogenannte Einsteinkoeffizient, der die Übergangswahrscheinlichkeit pro Sekunde eines spontanen Übergangs vom Zustand i in den Zustand k beschreibt.  $\omega_{ik}$  ist die Frequenz des Übergangs und  $\Delta\omega$  die Frequenzbreite des FWHM.)
- b) Zeigen Sie am Beispiel des  $2p \to 1s$  Übergangs des Wasserstoffatoms, dass die relative Linienbreite  $\frac{\Delta\omega}{\omega}$  für Ein-Elektronen Systeme von der Größenordnung  $\alpha^3$  ( $\alpha$ : Feinstrukturkonstante) ist. Berechnen Sie dazu zunächst den Einsteinkoeffizient  $A_{ik}$ , drücken Sie diesen dann geschickt durch  $\alpha^3$  aus und verwenden Sie den Zusammenhang aus a).

durch  $\alpha^3$  aus und verwenden Sie den Zusammenhang aus a). Hinweise:  $R_{10}(r) = 2 \cdot a_B^{-3/2} \cdot e^{-r/a_B}$  und  $R_{21}(r) = \frac{r}{\sqrt{24}} \cdot a_B^{-5/2} \cdot e^{-r/2a_B}$ 

Das zu lösende Integral ist vom Typ:

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}} \text{ mit } (n = 0, 1, 2, \dots, a > 0)$$

c) Das Wasserstoffgas befinde sich nun in einem mit Flüssigstickstoff gekühlten Kryostaten ( $T=77\mathrm{K}$ ). Berechnen Sie die Intensität  $I(\omega)$  und die Halbwertsbreite  $\Delta\omega$  bei der die Intensität auf  $\frac{1}{2}$  abgefallen ist. Berechnen Sie auch  $\frac{\Delta\omega}{\omega_{kj}}$ . Diese Verbreiterung des Frequenzspektrums, das durch die Bewegung der Atome zustande kommt wird Dopplerverbreiterung genannt. Hat diese Dopplerverbreiterung Einfluss auf die Zerfallswahrscheinlichkeit?

### Lösung

a) Es gilt (siehe oben)  $\Gamma \leq \Delta E$  und  $\Gamma/\hbar = 1/\tau = A_{ik}$ . Daraus folgt

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_{ik}} = \frac{\hbar\Delta\omega}{\hbar\omega_{ik}} = \frac{\Delta E}{\hbar\omega_{ik}} = \frac{\Gamma}{\hbar\omega_{ik}} = \frac{A_{ik}}{\omega_{ik}}$$
(25)

b) Für elektrische Dipolübergänge benötigen wir  $\Delta l = \pm 1$  und  $\Delta m = 0, \pm 1$ :

$$1s \rightarrow n = 1, l = 0, m = 0$$
  
 $2p \rightarrow n = 2, l = 1, m = 0, \pm 1$ 

Der Übergang  $2p \to 1s$  erfüllt somit immer die Auswahlregeln. Wir verwenden nun wieder die Dipolnäherung um die Wahrscheinlichkeiten für Übergänge zu beschreiben. Die Wahrscheinlichkeit eines spontanen Übergangs von einem Zustand k mit Energie  $E_k$  in einen Zustand j mit Energie  $E_j$  wird durch den Einsteinkoeffizienten  $A_{kj}$  beschrieben.

$$A_{kj} = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c^3} \omega_{kj}^3 \left| \langle j|\vec{r}|k\rangle \right|^2 \tag{26}$$

mit  $\omega_{kj} = (E_k - E_j)/\hbar$  und  $\langle j|\vec{r}|k\rangle$  dem Matrixelement des Ortsoperators  $\vec{r}$ . Zunächst berechnen wir das Matrixelement:

$$\langle j | \vec{r} | k \rangle = \int_0^\infty R_{21}(r) r R_{10} r^2 dr \int Y_{1m}^{\star}(\vartheta, \varphi) \hat{r} Y_{00}(\vartheta, \varphi) d\Omega$$

$$\approx \int_0^\infty R_{21}(r) R_{10} r^3 dr = \frac{2}{\sqrt{24}} a_B^{-4} \int_0^\infty r^4 e^{-r3/2a_B} dr$$

$$\approx \frac{2}{\sqrt{24}} a_B^{-4} \frac{4!}{(3/2)^5} a_B^5 = 1.29 a_B$$

$$\approx a_B$$

Das Matrixelement für zwei Zustände im Wasserstoffatom ist allgemein von der Größenordnung des Bohrschen Atomradius  $a_B$ .

Nun berechnen wir die Frequenz des Übergangs und drücken das Ergebnis durch  $\alpha$  aus. Die Frequenz des Übergangs ist gegeben durch

$$\omega_{kj} = (E_k - E_j)/\hbar$$

wobei für die Energie gilt

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n}$$

Damit ergibt sich:

$$\omega_{kj} = (E_{2p} - E_{1s})/\hbar = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \left(\frac{1}{4} - 1\right)$$
$$= \frac{3}{8} \frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} = \frac{3}{8} \frac{\alpha_C}{a_B} \approx \frac{\alpha_C}{a_B}$$

Mit  $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar}{me^2}$  und  $\alpha_C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$  kann das dann oben eingesetzt werden und man erhält

$$A_{kj} \approx \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c^3} \left(\frac{\alpha_C}{a_B}\right)^2 \omega_{kj}^3 a_B^2$$
$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \alpha^2 \omega_{kj} = \alpha^3 \omega_{kj}$$

c) Die Wellenlänge des von einem bewegten Atom emittierten Licht ist durch den Doppler-Effekt verschoben. Da sich auch die Atome eines heißen Gases noch nicht relativistisch schnell bewegen, kann die Verschiebung als

$$\lambda = \lambda_0 \left( 1 + \frac{v_x}{c} \right) \tag{27}$$

geschrieben werden, wobei  $v_x$  die longitudinale Komponente der Bewegung ist. Da  $v_x << c$  ergibt sich die Frequenzverschiebung zu

$$\nu = \nu \left( 1 - \frac{v_x}{c} \right) \tag{28}$$

Die Maxwellverteilung der Geschwindigkeiten der Gas-Atome ist

$$dN(v_x) = N_0 \exp\left(-\frac{Mv_x^2}{2k_BT}\right) dv_x \tag{29}$$

wobei M die Atomasse ist. Durch Einsetzen der obigen Gleichungen erhält man die Intensität pro Frequenzintervall:

$$I(\omega) = C \exp\left[-\frac{Mc^2}{2k_BT} \left(\frac{\omega - \omega_{kj}}{\omega_{kj}}\right)\right]$$
(30)

Die Halbwertsbreite beträgt

$$\Delta\omega = \frac{2\omega_{kj}}{c}\sqrt{\frac{2kTln2}{M}} \approx \frac{2\alpha}{a_B}\sqrt{\frac{2kTln2}{M}}$$
 (31)

Einsetzen der Konstanten liefert folgende Ergebnisse:

$$\Delta\omega = 2.59 \cdot 10^{11} \text{Hz} \text{ und } \frac{\Delta\omega}{\omega_{kj}} = 6.26 \cdot 10^{-6}$$