V605

Alkali-Spektren

Timo Gräßer Jasper Karl Lammering timo.graesser@udo.edu jasper.lammering@udo.edu

Durchführung: 26.4. Abgabe: 3.5.

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1.	The	orie	3
	1.1.	Fehlerrechnung	3
	1.2.	Einleitung und Zielsetzung	3
	1.3.	Einführung der Quantenzahlen und relativistische Effekte	4
			5
		Abschirmungskonstanten	6
		Das Beugungsgitter	6
		Ausmessung von Dublettlinien	7
2.	Dure	chführung	9
	2.1.	Aufbau	9
		Messprogramm	
		2.2.1. Spektrallinien des He-Spektrums	
		2.2.2. Dublettlinien verschiedener Elemente	
		2.2.3. Distanzen der Dubletts	
3.	Ausv	wertung	11
	3.1.	Bestimmung der Gitterkonstante	11
		Bestimmung der Eichgröße	
		Abschirmkonstante	
4.	Disk	cussion	14
Lit	eratu	ır	14
Α.	Kopi	ie der Originaldaten	14

1. Theorie

1.1. Fehlerrechnung

Für die Fehlerfortpflanzung bei Gleichungen mit N fehlerbehafteten Größen wird jeweils die Formel zur Gaußschen Fehlerfortpflanzung

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial f(x_i)}{\partial x_i} \sigma_i\right)^2} \tag{1}$$

mit der jeweiligen Funktion $f(x_i)$, den Messgrößen x_i und den zugehörigen Fehlern σ_i verwendet. Zur Berechnung des arithmetischen Mittels von N Messwerten wird jeweils die Formel

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{2}$$

mit den Messwerten x_i benutzt. die Standardabweichung des Mittelwerts wird jeweils mit der Gleichung

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2}$$
 (3)

mit den N Messwerten x_i berechnet.

1.2. Einleitung und Zielsetzung

Im folgenden Versuch sollen die Spektren der Alkali-Metalle im sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums untersucht werden. Aus den Energien der angeregten Zustände eines Atoms kann die Stärke des Coulombfelds an dem jeweiligen Ort des betrachteten Elektrons im Atom bestimmt werden. Dabei ist zu beachten, dass die Elektronen auf inneren Schalen das Coulombfeld abschwächen. Man führt die Abschirmkonstante σ ein und für die effektive Kernladung gilt

$$z_{\text{eff}} = z - \sigma. \tag{4}$$

Die Alkali-Metalle haben alle die Eigenschaft, dass sie jeweils ein Leuchtelektron besitzen. Das bedeutet, dass die Atome jeweils aus einem Atomrumpf, das ist der Atomkern mit allen abgeschlossenen Schalen, und einem äußeren Elektron bestehen. Diese Eigenschaft wird bei einigen der folgenden Rechnungen mit Hilfe der sogenannten Ein-Elektonen-Näherung ausgenutzt. An dieser Stelle lässt sich bereits vermuten, dass eine Ähnlichkeit zwischen den Alkali-Spektren und dem Wasserstoff-Spektrum besteht, da Wasserstoff ebenfalls in der Hauptgruppe der Elemente mit nur einem Valenz-Elektron ist.

1.3. Einführung der Quantenzahlen und relativistische Effekte

Zunächst wird die stationäre Schrödingergleichung für die Teilchen im Atom aufgestellt

$$H\psi = E\psi. (5)$$

Dabei ist

$$H = \frac{P^2}{2m_0} - U(r) \tag{6}$$

der Hamitonoperator, wobei

$$U(r) = -\frac{(z-\sigma)e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{7} \label{eq:7}$$

das genäherte Potential des Kernfelds und

$$P = \frac{\hbar}{i} \nabla \tag{8}$$

der Impuls ist. Da es sich um ein radialsymmetrisches Problem handelt, werden Kugelkoordinaten und damit die sogenannte Bahndrehimpulsquantenzahl l eingeführt. Für diese Quantenzahl gilt stets die Beziehung

$$l_{\text{max}} = n - 1 \tag{9}$$

mit der Hauptquantenzahl n. Werden relativistische Effekte beachtet, so muss der Hamiltonoperator zu

$$H_{\rm rel} = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 P^2} - m_0 c^2 + U \tag{10}$$

umgeformt werden. In einer Näherung werden diese Effekte als Störungen behandelt und nach einer aufwendigen Rechnung ergibt sich die für die Schrödingergleichung (5) gesuchte Energie in Abhängigkeit von den Quantenzahlen n und l

$$E_{n,l} = -R_{\infty} \left(\frac{(z-\sigma)^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{(z-\sigma)^4}{n^3} \left(\frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n} \right) \right).$$
 (11)

Dabei ist

$$\alpha = \frac{e_0^2}{2hc\epsilon_0} \tag{12}$$

die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante und

$$R_{\infty} = 13.6 \,\text{eV} \tag{13}$$

die Rydberg-energie. Wird die Tatsache berücksichtigt, dass die Elektronen frei sind und somit einen Spin haben, so muss zusätzlich die Spinquantenzahl s eingeführt werden. Da

Bahndrehimpuls und Spin nur parallel oder antiparallel zueinander sein können, folgen sofort die Beziehungen

$$j = l \pm \frac{1}{2}.\tag{14}$$

Zwischen den verschiedenen, aus den Drehimpulsen entstehenden, magnetischen Momenten der Elektronen entstehen nicht vernachlässigbare Wechselwirkungen, die auch als Spin-Bahn-Kopplung bezeichnet werden. Diese Effekte können genähert werden, sodass sich für die Energieeigenwerte in Abhängigkeit von n und j

$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left(\frac{(z-\sigma)^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{(z-\sigma)^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \tag{15}$$

ergibt, wobei l bereits mit der Beziehung (14) durch j ausgedrückt wird. Diese Gleichung (15) entspricht in erster Näherung der Sommerfeldschen Feinstrukturformel. Zur Kurzschreibweise der Energieniveaus werden die Quantenzahlen durch zwei Zahlen und einen Buchstaben geschrieben. Für die Bahndrehimpulsquantenzahl l wird ein Großbuchstabe wie folgt geschrieben:

$$l = 0 "S" (16)$$

$$l = 1 "P" (17)$$

$$l = 2 "D" (18)$$

$$l = 3 "F". (19)$$

Die Hauptquantenzahl n wird vor den Buchstaben geschrieben und die Spinquantenzahl j als Index dahinter.

1.4. Energieniveauübergänge und Auswahlregeln

Die Elektronen um einen Atomkern können durch äußere Anregung ihr eigenes Energieniveau ändern und beispielsweise auf eine niedrigere Schale springen. Bei solchen Energieübergängen ändern sich die Quantenzahlen und es wird Energie in Form von Strahlung abgegeben. Allerdings sind nicht alle möglichen Energieübergänge im Atom erlaubt. Solche mit

$$\Delta j = 0 \tag{20}$$

sind sehr unwahrscheinlich und für l sind nur Übergänge mit

$$\Delta l = \pm 1 \tag{21}$$

erlaubt. Bei der Hauptquantenzahl werden die Sprünge mit steigendem Δn unwahrscheinlicher. Die Energieniveaus mit gleichem l und unterschiedlichem j liegen deutlich näher aneinander als diejenigen mit unterschiedlichem l, weshalb im Spektrum Dubletts erkennbar sind. In Abbildung 1 wird dieses Phänomen dargestellt.

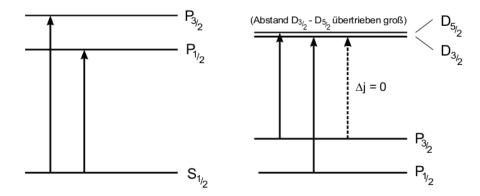


Abbildung 1: Skizze zur Lage der Spektrallinien in einer Dublettstruktur. [1]

1.5. Abschirmungskonstanten

Bei den Abschirmungszahlen, die zur Berechnung der Eigenenergien bestimmt werden müssen, unterscheidet man zwischen der vollständigen Abschirmung σ_1 und der inneren Abschirmung σ_2 . Die vollständige Abschirmung beinhaltet den Kraftfeldeinfluss aller Teilchen im Atom und die innere Abschirmung die bereits erwähnte Spin-Bahn-Kopplung, bezogen auf die Schale unter der Betrachteten. Da die Alkali-Metalle nur ein Leuchtelektron besitzen, ist der Unterschied zwischen beiden Abschirmungszahlen gering. Die Eigenenergiegleichung (15) wird nun zu

$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left(\frac{(z - \sigma_1)^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{(z - \sigma_2)^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right)$$
 (22)

umgeformt und es folgt die genäherte Beziehung

$$\Delta E_{\text{Dublett}} = hc \frac{\Delta \lambda}{\lambda^2}.$$
 (23)

Dabei ist λ die gemessene Wellenlänge und $\Delta\lambda$ die Wellenlängendifferenz der beiden Linien eines Dupletts.

1.6. Das Beugungsgitter

Fällt Licht durch einen ausreichend dünnen Spalt, so wird ein Teil der Intensität hinter dem Spalt je nach Wellenlänge mit einem bestimmten Winkel gebeugt. Dieses Phänomen wird in der Spektroskopie ausgenutzt, da es die Möglichkeit bietet, gemischtes Licht mit unterschiedlichen Wellenlängen in seine Bestandteile zu zerlegen. In Abbildung 3 ist die Beugung einer Welle an regelmäßig angeordneten Spaltöffnungen skizziert. Im Versuch soll kein einzelner Spalt, sondern ein Gitter benutzt werden, sodass Interferenzerscheinungen beachtet werden müssen. Nach einer langen Rechnung, die hier nicht aufgeführt wird, folgt die Intensität eines gebeugten Strahls in Abhängigkeit vom Winkel φ

$$I_g(\varphi) = E_0^2 b^2 \left(\frac{\lambda}{\pi b \sin(\varphi)}\right)^2 \sin^2 \left(\frac{\pi b \sin(\varphi)}{\lambda}\right) \frac{\sin^2(p\pi g \sin(\varphi)/\lambda)}{\sin^2(\pi g \sin(\varphi)/\lambda)}.$$
 (24)

Bei der Gleichung (24) wird zwischen dem Spaltfaktor

$$s(x) = \frac{\sin^2 x}{x^2} \qquad \qquad x = \frac{\pi b \sin(\varphi)}{\lambda} \tag{25}$$

(26)

und dem Gitterfaktor

$$g(y) = \frac{\sin^2 py}{\sin^2 y^2} \qquad \qquad y = \frac{\pi g \sin(\varphi)}{\lambda} \tag{27}$$

(28)

unterschieden. Diese Funktionen besitzen bei x,y=0 ein Maximum Nullter Ordnung und bei

$$x = n\pi \tag{29}$$

$$y = \frac{n\pi}{p} \tag{30}$$

(31)

die lokalen Minima. Die Hauptmaxima, die bei genügend vielen Gitteröffnungen deutlich von den Nebenmaxima zu unterscheiden sind, befinden sich bei

$$y = \pi k \tag{32}$$

$$\sin(\varphi) = k\frac{\lambda}{g} \tag{33}$$

(34)

In Abbildung 2 ist der grobe Verlauf der Intensitätsverteilung abgebildet.

1.7. Ausmessung von Dublettlinien

Für den messbaren Abstand zwischen zwei Dublettlinien gilt gemäß Abbildung 4

$$\Delta s = r \Delta \varphi. \tag{35}$$

Mit Hilfe einer Eichmessung wird die Beziehung zwischen dem am Okularmikrometer gemessenen Abstand und der Wellelänge aufgestellt

$$\Delta t = r(\varphi_1 - \varphi_2). \tag{36}$$

Mit einer Kleinwinkelnäherung ergibt sich für die Differenz der Wellenlängen zwischen zwei Dublettlinien

$$\Delta \lambda = g \cos(\bar{\varphi}) \Delta \varphi, \tag{37}$$

wobei $\bar{\varphi}$ der gemittelte Wert zwischen beiden Dublettlinien ist. Über die Beziehung (36) folgt dann

$$\Delta \lambda = \frac{\cos \bar{\varphi}}{\cos \bar{\varphi}_{1,2}} \frac{\Delta s}{\Delta t} (\lambda_1 - \lambda_2). \tag{38}$$

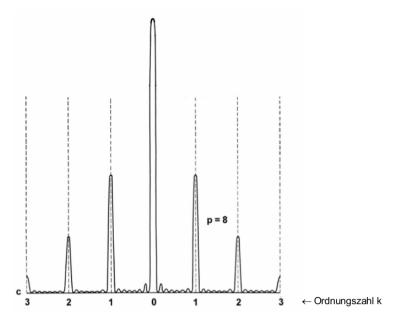


Abbildung 2: Intensitätsverteilung bei der Beugung an acht Spalten. [1]

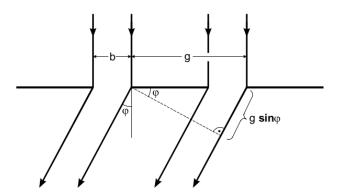


Abbildung 3: Lichtbeugung an regelmäßig angeordneten Spaltöffnungen. b ist die Spaltbreite und g der Gangunterschied.[1]

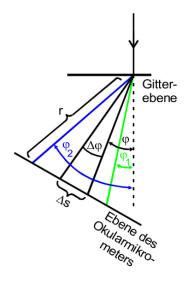


Abbildung 4: Ausmessung der Dublettlinien mit Hilfe des Okularmikrometers. [1]

2. Durchführung

2.1. Aufbau

Für die Spektralmessungen wird ein Gitterspektralapparat 5 verwendet. An das eine Ende wird jeweils die Lampe gestellt, sodass das Licht in die Spaltblende 1.1 fällt. Diese kann mit der Dort angebrachten Schraube verstellt werden, sodass die Spaltbilder schärfer werden. Das Licht bewegt sich durch ein Gitter 2 und wird dann gebeugt. Der zweite Teil des Apparats ist ein schwenkbares Fernrohr 3, mit welchem das Spektrum beobachtet werden kann. Dort sind eine Objektiv- und Okularlinse mit Fadenkreuz eingebaut, sodass mit einem Okularmikrometer bei 3.2 feinverstellt werden kann. Dafür sollte das Fernrohr allerdings zuerst mit der Rändelschraube 3.1 arretiert werden. An der Teilkreisplatte 4 in der Mitte kann der Winkel abgelesen werden.

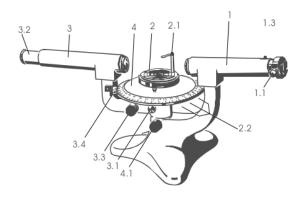


Abbildung 5: Aufbau der Apparatur. Die Lampe wird vor das rechte Ende gestellt. [1]

2.2. Messprogramm

2.2.1. Spektrallinien des He-Spektrums

- 1. Nachdem die Helium-Lampe vor die Apparatur gestellt wird, wird der Winkel am Nullten Maximum ausgemessen.
- 2. Als nächstes werden die wichtigsten sichtbaren Spektrallinien von Helium aus Tabelle 1 ausgemessen. Es werden insgesamt neun Messwerte notiert.

λ/nm	Farbe	Intensität
706.5	dunkelrot	schwach
667.8	rot	stark
587.6	gelb	stark
504.8	grün	schwach
501.6	grün	stark
492.2	blaugrün	$_{ m mittel}$
471.3	blau	stark
447.1	violett	stark
438.8	violett	schwach

Tabelle 1: Die wichtigsten sichtbaren Spektrallinien von Helium.[1]

2.2.2. Dublettlinien verschiedener Elemente

- 1. Vor jeder der folgenden Messungen wird erneut der Nullwinkel bestimmt.
- 2. Es sollen die Beugungswinkel der in Tabelle 2 aufgezählten Dublettlinien gemessen werden. Liegen die beiden Linien eines Dubletts nah genug aneinander, darf der Wert gemittelt werden. Ansonsten sollten pro Dublett zwei Messwerte aufgenommen werden. Es sollten also mindestens acht Werte notiert werden.

Bei Tabelle 2 ist zu beachten, dass das gesuchte Dublett bei Rubidium aus der dritten und vierten roten Linie besteht. Die Lage der Dublettlinien bei Kalium sind in Abbildung 6 skizziert.

2.2.3. Distanzen der Dubletts

- 1. Vor den folgenden Messungen sollte das Gerät jeweils mit der Rändelschraube arretiert werden.
- 2. Zunächst wird der in Kapitel 1.7 erwähnte Abstand Δt zwischen zwei bekannten Linien eines Dubletts mit Hilfe des Okularmikrometers bestimmt.
- 3. Nun sollen die Dublettlinien aus Tabelle 2 ausgemessen werden. Es werden also insgesamt 16 Messwerte und damit 8 Differenzen notiert

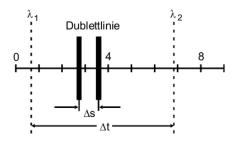


Abbildung 6: Lage der vier grünen sowie der vier gelben Linien. [1]

Element und Farbe	Anzahl Dubletts
Na, rot	1
Na, gelb	1
Na, grüngelb	1
Ka, gelb	2
Ka, grün	2
Rb, rot	1

Tabelle 2: Dublettlinien, die in diesem Versuch gemessen werden sollen.

3. Auswertung

Die genutzten Naturkonstanten [2] sind:

$$\begin{split} h &= (6.626\,070\,040 \pm 0.000\,000\,081) \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\,s} \\ c &= 299\,792\,458\,\mathrm{m\,s^{-1}} \\ e &= (1.602\,176\,620\,8 \pm 0.000\,000\,009\,8) \cdot 10^{-19}\,\mathrm{C} \\ R_\infty &= (13.605\,693\,009 \pm 0.000\,000\,084)\,\mathrm{eV} \\ \alpha &= 7.2973525664(17)e - 3 \end{split}$$

3.1. Bestimmung der Gitterkonstante

In Tabelle 3 sind die gemessenen Ablenkwinkel ausgehend von der 0. Ordnung sowie die zugehörigen Wellenlängen der Spektrallinien eingetragen. Die Beziehung der beiden Größen ist in Formel (34) gezeigt.

In Abbildung 7 ist $\sin(\phi)$ gegen die Wellenlänge aufgetragen. Außerdem wird eine lineare Ausgleichsrechnung gemacht und die Ausgleichsgerade eingezeichnet.

Die ausgegebene Steigung der Geraden ist

$$m = (9.78 \pm 0.03) \cdot 10^5 \,\mathrm{m}^{-1}.$$

daraus ergibt sich die Gitterkonstante:

$$g = (1.022 \pm 0.003)\,\mathrm{\mu m}$$

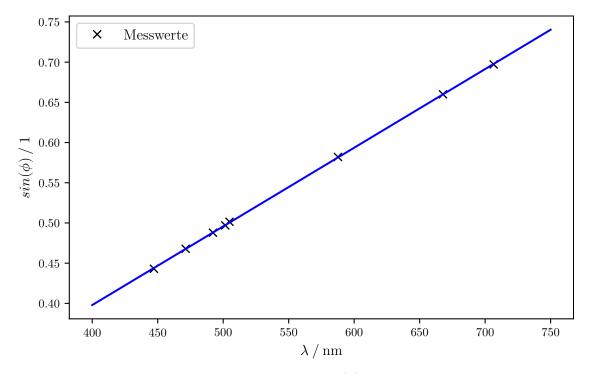


Abbildung 7: Plot von $\sin(\phi)$ gegen λ .

λ / nm	ϕ / $^{\circ}$
447.1	26.3
471.3	27.9
492.2	29.2
501.6	29.8
504.8	30.1
587.6	35.6
667.8	41.3
706.5	44.2

Tabelle 3: Die gegebenen Werte für λ und der gemessene Ablenkwinkel $\phi.$

3.2. Bestimmung der Eichgröße

Die Eichgröße ψ wird zwei Mal anhand unterschiedlicher Spektrallinien bestimmt.

Die Formel lautet:

$$\psi = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\Delta t \cos(\bar{\phi}_{12})} \tag{39}$$

Die berechneten Eichgrößen und die zugehörigen Messdaten sind in Tabelle 4 zu finden.

λ_1 / nm	λ_2 / nm	$\lambda_1 - \lambda_2 / \mathrm{nm}$	$\bar{\phi}_{12} / \mathrm{rad}$	Δt / Skt	$\psi / 10^{-11} \text{mSkt}^{-1}$
501.6	492.2	9.4	0.515 ± 0.005	373	2.045 ± 0.006
504.8	501.6	3.2	0.523 ± 0.003	125	2.218 ± 0.003

Tabelle 4: Die Eichgöße ψ mit den zugehörigen Messdaten.

Die gemittelte Eichgröße beträgt:

$$\psi = (2.131 \pm 0.003) \cdot 10^{-11} \,\mathrm{mSkt^{-1}}$$

3.3. Abschirmkonstante

Nun wird im letzten Teil die Abschirmkonstante bestimmt. Aus Formel (34) lässt sich mit der Gitterkonstante aus Kapitel 3.1 und den gemittelten Winkeln der Dublettlinien die Wellenlänge λ herausfinden. $\Delta\lambda$ wird mit Formel (38) berechnet, wobei die Eichgröße aus Kapitel 3.2 eingesetzt wird. Dann kann mit λ , $\Delta\lambda$ und Formel (23) die Energie $\Delta E_{\rm D}$ berechnet werden. Eingesetzt in Formel (40) ergibt sich dann zusammen mit der passenden Ordnungszahl z und der Hauptquantenzahl n die Abschirmkonstante σ_2 . Mit l=1 gilt:

$$\sigma_2 = z - \sqrt[4]{2\Delta E_D \frac{n^3}{R_\infty \alpha^2}}.$$
 (40)

In den Tabellen 5, 6 und 7 sind die Zwischen- und Endergebnisse zur Berechnung der Abschirmzahlen $\sigma(n, l) = \sigma(n, 1)$ gegeben.

ϕ / rad	λ / nm	$\Delta\lambda$ / nm	$\Delta \rm E_{\rm D}/meV$	σ_2
0.656	624 ± 2	0.4559 ± 0.0006	1.454 ± 0.009	7.774 ± 0.004
0.623	596 ± 2	0.5192 ± 0.0007	1.81 ± 0.01	7.592 ± 0.005
0.599	576 ± 2	0.4225 ± 0.0006	1.58 ± 0.01	7.706 ± 0.004

Tabelle 5: Die Abschirmkonstanten bei Natrium mit z = 11 und n = 3.

Die gemittelten Abschirmkonstanten betragen für Natrium und Kalium:

$$\begin{split} &\sigma_{2,\mathrm{na,gem.}} = 7.691 \pm 0.005 \\ &\sigma_{2,\mathrm{ka,gem.}} = 13.891 \pm 0.008. \end{split}$$

ϕ / rad	λ / nm	$\Delta\lambda$ / nm	$\varDelta E_{\rm D}/{\rm meV}$	σ_2
0.6082 ± 0.0009	584 ± 2	1.486 ± 0.002	5.40 ± 0.04	13.441 ± 0.001
0.6100 ± 0.0009	585 ± 2	0.2620 ± 0.0004	0.948 ± 0.006	15.403 ± 0.006
0.5524 ± 0.0009	536 ± 2	1.469 ± 0.002	6.33 ± 0.04	13.216 ± 0.001
0.5559 ± 0.0009	539 ± 2	1.213 ± 0.002	5.17 ± 0.04	13.503 ± 0.001

Tabelle 6: Die Abschirmkonstanten bei Kalium mit z = 19 und n = 4.

ϕ / rad	λ / nm	$\Delta\lambda$ / nm	$\Delta E_{\mathrm{D}} / \mathrm{eV}$	σ_2
0.668 ± 0.006	633 ± 5	6.83 ± 0.03	21.1 ± 0.4	27.76 ± 0.05

Tabelle 7: Die Abschirmkonstanten bei Rubidium mit z = 37 und n = 5.

4. Diskussion

Die lineare Ausgleichsrechnung zur Berechnung der Gitterkonstante liegt nah an den Messwerten. Zu Erkennen ist dies auch am geringen Fehler der Gitterkonstante. Der Wert liegt in einer Größenordnung, die bei einem optischen Gitter erwartet wird.

Bemerkenswert ist aber, dass die Winkel nur auf eine Nachkommastelle genau gemessen werden konnten. Dies wirkt sich besonders auf die Ausmessung der Dublettlinien aus. Bei der Bestimmung der Eichgröße wurden nur anhand zweier Messungen Werte aufgenommen. Zur genaueren Bestimmung sind mehrere Durchläufe zu empfehlen. Die Abschirmkonstanten wurden mit geringem Fehler bestimmt. Zu Bemerken ist, dass die zweite Zeile bei der Messung von Kalium offensichtliche Messfehler aufweist. Bei Betrachtung der Messdaten fällt auf, dass der Abstand der Dublettlinien an der Stelle so nicht stimmen kann. Eine mögliche Fehlerquelle ist hier die teils geringe Intensität der Spektrallinien. Da die Abschirmung immer noch eine Anziehung des Kerns auf die äußeren Elektronen zulassen muss, sind die Werte sehr vernünftig.

Literatur

- [1] TU Dortmund. Die Spektren der Alkali-Atome. 2016. URL: http://129.217.224.2/ HOMEPAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V605.pdf.
- [2] National Institute of Standards und Technology. Fundamental Physical Constants. 2016. URL: http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html.

A. Kopie der Originaldaten