# Facharbeit

aus dem Leistungskurs Chemie

# Grundlagen der elementanalytischen Sternspektroskopie

Verfasser: Jan-David Förster

Kursleiter: StR Thomas Bittel

Zunächst erschienen unter dem Titel:

Elementanalytische Sternspektroskopie und ihre quantenmechanischen Grundlagen

\_\_\_\_

Augsburg 2008 neu bearbeitete Fassung

# **Inhaltsverzeichnis**

1.	Vor	wort		5	
2.	Grundlegendes zur Sternspektroskopie7				
	2.1	2.1 Definition des Begriffs Spektroskopie		7	
	2.2	Aufbau eines Sterns	8		
	2.3	Histo	13		
3.	Die Natur der Spektren				
	3.1	Der s	chwarze Strahler	14	
	3.2	Allge	emeines zu Emission und Absorption	20	
4.	Spe	ktrallin	ien und ihre Entstehung	23	
	4.1	Öffnu	ng der Black Box - Einblicke in die Quantenmechanik	23	
		4.1.1	Die Energie von Elektronen	23	
		4.1.2	"Sie ist Schrödingers Kopf entsprungen"	32	
		4.1.3	Exkurs zu den Quantenzahlen	48	
		4.1.4	Russell-Saunders Kopplung	52	
			4.1.4.1 Feinstruktur im H-Atom	52	
			4.1.4.2 Spektroskopische Notation	54	
			4.1.4.3 Weitere Aufspaltung von Spektrallinien	56	
		4.1.5	Das Natriumspektrum als Beispiel für höhere Atome	58	
		4.1.6	Das Nebulium und die "verbotenen" Linien	60	
	4.2	Die B	62		
		4.2.1	Kontinua	62	
		4.2.2	Linienbreite	63	
		4.2.3	Linienintensität	65	
5.	Spel	ktralkla	assifikation	66	
	5.1	Secch	i-Klassen	66	
	5.2	Harva	67		
	5.3	MK-Leuchtkraftklassen und das HRD			

6.	Elementanalytische Sternspektroskopie - praktische Anwendung71			
	6.1	Aufbau der Messapparatur		
	6.2	Ablauf einer Messung	72	
	6.3 Auswertung der Spektren			
		6.3.1 Vorbereitung der Aufnahmen	73	
		6.3.2 Das Programm Visual Spec	74	
		6.3.3 Einordnung der gewonnenen Sternspektren in Spektralklassen	76	
7.	Abs	chließende Bemerkungen	.78	
8.	Mat	hematischer Anhang	<b>79</b>	
9.	Beil	age CD-ROM	83	
10.	Ver	wendete Software	85	
11.	Abb	ildungsverzeichnis	86	
12.	Lite	raturverzeichnis	87	

#### 1. Vorwort

"Der Weltraum - unendliche Weiten. Wir schreiben das Jahr 2200. Dies sind die Abenteuer des Raumschiffs Enterprise, das mit seiner 400 Mann starken Besatzung fünf Jahre lang unterwegs ist, um neue Welten zu erforschen, neues Leben und neue Zivilisationen. Viele Lichtjahre von der Erde entfernt, dringt die Enterprise in Galaxien vor, die nie ein Mensch zuvor gesehen hat."

Über 40 Jahre nach der ersten Folge sind diese bekannten Worte aus der TV-Serie "Star Trek - Raumschiff Enterprise" vielmehr Science als Fiction. Zwar dringen wir nicht mit Hilfe von Raumschiffen in fremde Galaxien vor, doch erlauben uns heute andere technische Errungenschaften so tief in den Weltraum zu blicken wie nie zuvor. Die Informationen, die wir über weit entfernte Objekte sammeln können, beziehen wir ausschließlich aus deren Strahlung und damit durch spektroskopische Analysen. Seit 1861 gewann die Spektroskopie mit der Deutung der Fraunhoferlinien als Absorptionslinien von Elementen, durch G. Kirchhoff (1824-1887) und R. W. Bunsen (1811-1899) in der Astronomie zunehmend an Bedeutung.

Innerhalb des letzten Jahrhunderts dehnten sich die Beobachtungen der Astrospektroskopie auf einen immer größeren Wellenlängenbereich aus, die Technik und die Analysemethoden wurden verfeinert und verhalfen uns letztendlich zu neuen Erkenntnissen über das Universum, erweiterten unser Verständnis von Sternen und deren Entwicklung in entscheidendem Maße und gestatten uns heute sogar, Atmosphären von Planeten, die um fremde Sonnen kreisen zu untersuchen.

Sowohl im Schulunterricht als auch in der Amateurastronomie findet man die Spektroskopie trotz ihrer immensen Bedeutung für die aktuelle Forschung kaum, oder nur in Randbereichen wieder. Das in der Schule vermittelte Wissen über Quantenphysik endet ebenfalls sehr bald nach dem Bohrschen Atommodell und einigen Andeutungen zu neueren Orbitalmodellen, die mit "mysteriösen Wellenfunktionen" in Verbindung stehen. Wir befinden uns somit auf dem Wissensstand von 1926. Dies war der Anlass für mich als Amateurastronom und Schüler des Gymnasiums bei St. Anna in Augsburg, das eine eigene Sternwarte besitzt, den interessanten Forschungsgebieten der Spektroskopie und der damit eng verbundenen Quantenmechanik mehr Beachtung zu schenken und zu zeigen, dass mit begrenztem Aufwand wissenschaftliche spektroskopische Analysen auch im Rahmen des Schulunterrichts realisierbar sind.

In dieser Facharbeit geht es um die spektroskopische Analyse von Sternen aus elementanalytischer Sicht.

Die Elementanalytik beschäftigt sich mit der Bestimmung einzelner Elemente in Stoffen, in meinem Fall der Photosphäre (vgl. 2.2) von Sternen. Mit Hilfe eigener spektroskopischer Messungen im sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums, die größtenteils mit der Ausrüstung der Schulsternwarte durchgeführt wurden und somit jederzeit reproduzierbar sind, möchte ich einigen Spektrallinien auf den Zahn fühlen und sie Elementen zuordnen sowie eine Einordnung der Sterne in Spektralklassen vornehmen. Außerdem werde ich auf die historische Entwicklung der Spektroskopie eingehen, die zur Messung verwendete Apparatur hinsichtlich Aufbau und Funktionsweise erläutern, ihre Nachteile aufdecken und die gewonnenen Ergebnisse in den Kontext einer Anwendbarkeit für den naturwissenschaftlichen Schulunterricht stellen.

"Energie"

# 2. Grundlegendes zur Sternspektroskopie

## 2.1 Definition des Begriffs Spektroskopie

Die Spektroskopie beschäftigt sich mit der Beobachtung und Analyse der von Materie emittierten sowie absorbierten Strahlung, die sich in einem Spektrum äußert. Die charakteristische Beschaffenheit eines Spektrums lässt Rückschlüsse auf die Wechselwirkung von Strahlung und Materie, sowie die Zusammensetzung und Struktur von Materie auf molekularer, atomarer und nuklearer Ebene zu.

Die Spektroskopie gliedert sich daher in drei Bereiche:

- Molekülspektroskopie
- Atomspektroskopie
- Kernspektroskopie

Ich beschränke mich hier auf die Atomspektroskopie, der bei der spektroskopischen Analyse von Sternen die größte Bedeutung zukommt. Molekülspektren spielen in Sternen zwar ebenfalls eine große Rolle, doch würde eine genauere Erläuterung der verantwortlichen Mechanismen den Rahmen einer Facharbeit bei Weitem sprengen. Wie wir noch feststellen werden ist das Verstehen der Atomspektren mit all ihren Facetten an sich schon eine sehr anspruchsvolle Aufgabe.

#### 2.2 Der Aufbau eines Sterns

Anfang des 20. Jahrhunderts berechnete der britische Astrophysiker Sir Arthur Stanley Eddington (1882-1944) den inneren Aufbau eines Gaskörpers wie unserer Sonne und gelangte zu der Erkenntnis, dass im Sonnenkern eine ungeheure Energiequelle vorhanden sein muss, um durch Druck von innen das Zusammenstürzen des Gasballs unter der eigenen Schwerkraft zu verhindern. Eddington sprach damals von subatomaren Energien. Heute wissen wir, dass diese Energien durch Kernfusionsprozesse erzeugt werden. Sterne bestehen aus Wasserstoff, Helium und Spuren schwererer Elemente. Fast die gesamte Energie, die ein Stern produziert, ist auf die Fusion von Wasserstoffkernen zu Helium zurückzuführen. Diese Verschmelzung ist in drei Fusionsreaktionen, die sog. Proton-Proton-Reaktionen aufgeteilt, wird aber durch zwei Startreaktionen eingeleitet, die wohl namensgebend waren.

Startreaktionen: 
$${}^{1}_{1}p^{+} + {}^{1}_{1}p^{+}$$
  $\rightarrow {}^{2}_{1}D^{+} + {}^{0}_{1}e^{+} + {}^{0}_{0}v$   
 ${}^{2}_{1}D^{+} + {}^{1}_{1}p^{+}$   $\rightarrow {}^{2}_{2}He^{2+} + {}^{0}_{0}y$   
p/p-Reaktion 1:  ${}^{3}_{2}He^{2+} + {}^{3}_{2}He^{2+}$   $\rightarrow {}^{4}_{2}He^{2+} + {}^{1}_{1}p^{+} + {}^{1}_{1}p^{+}$   
p/p-Reaktion 2:  ${}^{3}_{2}He^{2+} + {}^{4}_{2}He^{2+}$   $\rightarrow {}^{7}_{4}Be^{4+} + {}^{0}_{0}y$   
 ${}^{7}_{4}Be^{4+} + {}^{0}_{-1}e^{-}$   $\rightarrow {}^{3}_{2}Li^{3+} + {}^{0}_{0}v$   
 ${}^{7}_{3}Li^{3+} + {}^{1}_{1}p^{+}$   $\rightarrow {}^{4}_{2}He^{2+} + {}^{4}_{2}He^{2+}$   
p/p-Reaktion 3:  ${}^{3}_{2}He^{2+} + {}^{4}_{2}He^{2+}$   $\rightarrow {}^{7}_{4}Be^{4+} + {}^{0}_{0}y$   
 ${}^{7}_{4}Be^{4+} + {}^{1}_{1}p^{+}$   $\rightarrow {}^{8}_{5}B^{5+} + {}^{0}_{0}y$   
 ${}^{8}_{5}B^{5+}$   $\rightarrow {}^{8}_{4}Be^{4+} + {}^{1}_{0}e^{+} + {}^{0}_{0}v$   
 ${}^{8}_{5}B^{6+}$   $\rightarrow {}^{4}_{4}Be^{4+} + {}^{1}_{1}e^{+} + {}^{0}_{0}v$   
 ${}^{8}_{4}Be^{4+}$   $\rightarrow {}^{4}_{2}He^{2+} + {}^{4}_{2}He^{2+}$ 

Formel 2.2.1: Die drei p/p-Reaktionen; Energieabstrahlung durch Neutrinos, γ-Quanten und kinetische Energie entstehender Teilchen

Bereits ab 5 Mio. Kelvin ist die p/p-Reaktion 1 möglich, läuft dann aber auch nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ab, denn Wasserstoffkerne benötigen aufgrund ihrer Ladung entweder sehr hohe kinetische Energien um die Coulomb-Abstoßungskräfte zu überwinden, was äußerst unwahrscheinlich ist, oder behelfen sich eines quantenmechanischen Phänomens, des sog. Tunneleffekts.

Dieser lässt sich relativ anschaulich und ohne höheres Mathematikverständnis erläutern. Eine der Haupterrungenschaften der Quantenmechanik stellt die Möglichkeit dar, ein Teilchen auch als Welle zu beschreiben. Durch die Wellenfunktion  $\Psi(x)$  lässt sich also der quantenmechanische Zustand eines Teilchens und seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem bestimmten Raum zu einer bestimmten Zeit berechnen. Die Wellenfunktion erhält man durch Lösen der Schrödingergleichung, auf die wir später noch stoßen werden. Betrachten wir nun ganz anschaulich eine Welle im Meer. Die Welle bricht sich an der Küste und sollte, sofern sie nicht zu hoch ist, die Deichkrone nicht passieren können. Sie wird an den Deichflanken zurückgeworfen. So verhält es sich auch mit unserem Proton. Es prallt auf den Coulombwall der Höhe  $\Delta E$  und kann ihn nicht überwinden, da seine kinetische Energie  $E_0$  nicht ausreicht, oder quantenmechanisch gesagt: Die Wellenfunktion wird an den Wänden des Coulombwalls reflektiert. Dies passiert zwar, jedoch wird nur ein gewisser Teil reflektiert. Die Amplitude der Wellenfunktion sinkt an den Potentialwänden nicht schlagartig auf Null.

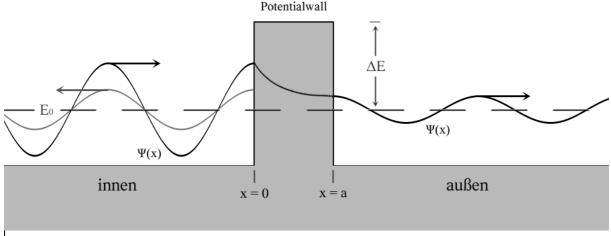


Abbildung 2.2.1: Der Tunneleffekt aus quantenmechanischer Sicht

Vielmehr läuft die Welle unter exponentieller Abnahme der Amplitude in den Potentialwall hinein und kann, sofern der Wall nicht unendlich breit ist, ihn auch wieder verlassen, wie in Abbildung 2.1.1 dargestellt. Demnach besteht die Möglichkeit, dass ein Teilchen den Potentialwall durchtunnelt. Anders ausgedrückt: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens innerhalb des Potentialwalls ist nicht Null. In der klassischen Physik ist dies verboten, die Quantenmechanik kann es. Die Wahrscheinlichkeit, dass Protonen den Coulombwall durchtunneln ist abhängig von ihrer Geschwindigkeit und ihrem Abstand zueinander. Für zwei einzelne Protonen ist die Wahrscheinlichkeit der Fusion trotz der extremen Bedingungen in Sternen sehr gering. Da dort aber eine sehr große Anzahl von Protonen vorhanden ist, kommt es doch häufig zu diesem Phänomen. Bei den p/p-Reaktionen werden ungeheure Mengen an Energie frei. Die häufigste der p/p-Reaktionen stellt mit 91%

Wahrscheinlichkeit die p/p-Reaktion 1 dar. Folglich ist dies der Hauptmechanismus zur Energiegewinnung in Sternen wie unsere Sonne, die ungefähr dem Großteil aller Sterne entspricht. In Formel 2.2.1 ist der Mechanismus in Form von Gleichungen ausgedrückt. Es fusionieren zunächst zwei Protonen miteinander, das Ergebnis ist Deuterium. Ein Up-Quark wandelt sich unter Aussendung eines Positrons und eines Neutrinos in ein Down-Quark um. Aus einem Proton ist somit ein Neutron entstanden. Deuterium fusioniert dann unter Aussendung von harter Gammastrahlung mit einem weiteren Proton zu He-3. Zwei He-3-Kerne vereinigen sich bei der p/p-Reaktion 1, die hier exemplarisch angeführt wird, zu Helium-4. Zwei Protonen werden frei, die wieder am Fusionsanfang eingesetzt werden können. Wenn man diese Gleichung bilanziert, ergibt sich eine komprimierte Fassung mit der man leicht den Massendefekt und somit die freigewordene Energie nach E = mc² berechnen kann. Die entstehende Energie tritt dabei in Form von kinetischer Energie der entstehenden Teilchen, oder in Form von Strahlung auf.

$${}^{1}_{1}p^{+} + {}^{1}_{1}p^{+} + {}^{1}_{1}p^{+} + {}^{1}_{1}p^{+} \rightarrow {}^{4}He^{2+} + 2 {}^{0}_{+1}e^{+} + 2 {}^{0}_{0}\gamma + 2 {}^{0}_{0}\gamma$$

Massendefekt:  $4 \cdot 1,007276 u - (4,001504 u + 2 \cdot 0,000549 u) = 0,026502 u$ 

Freiwerdende Energie:  $0.026502 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot 9.10^{16} kg \cdot m^2 \cdot s^{-2} = 3.96 \cdot 10^{-12} J$ 

Formel 2.2.2: Bilanzierte Gleichung & Berechnung der erzeugten Energie einer p/p- Reaktion 1

Unter Betrachtung aller Fusionsprozesse und Verluste durch Neutrinoemission misst man heutzutage einen Energieverlust der Sonne von 3,85·10<sup>26</sup> Js<sup>-1</sup>, das entspricht einem Masseverlust von 4,4 Mio. ts<sup>-1</sup>. Als Folge der ständig ablaufenden Kernfusion vermindert sich der Anteil des Wasserstoffs im Kerngebiet und der des Heliums steigt. Dies ist ein normaler Entwicklungsprozess wie ihn jeder Stern durchläuft. Abbildung 2.2.2 zeigt die Energieerzeugung und den Wasserstoffgehalt im Innern der Sonne, sowie den Aufbau des Sonnenkörpers und steht illustrierend für den Inhalt des übrigen Kapitels.

Die im Kernbereich bei ca. 16 Mio. Kelvin entstandene Strahlung wird nach Verlassen des Kerns in der sog. Strahlungszone, siehe Abbildung 2.2.2 u. 2.2.3, durch eine Folge von Absorptions- und Emissionsvorgängen immer wieder umgewandelt. Die ionisierten Atome geben dabei die Strahlungsenergie durch Emission an benachbarte Atome weiter, sodass das solare Plasma als Strahlungsleiter fungiert. Bis ein γ-Quant die Strahlungszone verlässt und an die Oberfläche gelangt, kann es mehrere Mio. Jahre dauern. Das Sonnenlicht, welches wir sehen, ist also schon mehrere Mio. Jahre alt. Die Strahlungszone ist die größte Zone in Sternen und wird durch die Strahlung des Kerns aufgebläht, ist also maßgeblich für die Größe

des Sterns. Diese ist relativ stabil, so lange genug Wasserstoff für die Fusion vorhanden ist. Auf die Strahlungszone folgt die Konvektionszone, in der Atome erstmals nicht mehr nur als Ionen vorliegen, sondern Strahlungsenergie durch Absorption aufnehmen, dadurch kinetische Energie gewinnen und den Energietransport zur Oberfläche durch Konvektion vollziehen.

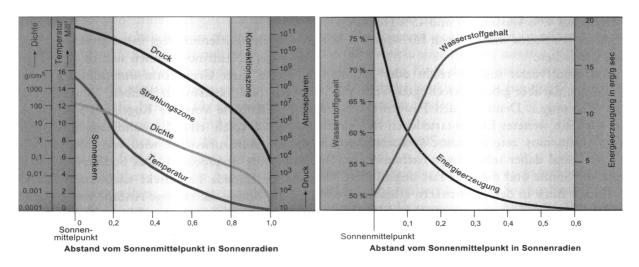


Abbildung 2.2.2: (links) Aufbau des Sonnenkörpers; Druck-, Temperatur- und Dichteverlauf (rechts) Energieerzeugung und Wasserstoffgehalt im Sonneninnern. Nur bis 1/10 Sonnenradius ist die Energieerzeugung effektiv; im Sonnenkern ist der Wasserstoffgehalt schon abgesunken.

Die äußerste Schicht der Konvektionszone wird Photosphäre genannt. Diese Schicht ist der scharf begrenzte Sonnenrand, den man mit bloßem Auge beobachten kann, denn die Photonen werden dort nicht mehr vollkommen von den Atomen absorbiert, sondern zu einem Großteil in den Weltraum abgestrahlt. In der kühlen Photosphäre geben angeregte Atome ihre absorbierte Energie ab und sinken durch ihre Abkühlung wieder in tiefere Bereiche der Konvektionszone um neue Energie aufzunehmen. Durch diese Konvektionsströme kommt es an der Sternoberfläche zur sog. Granulation<sup>1</sup>. Wenn der gesamte Wasserstoff im Kern verbraucht ist, kontrahiert der Stern aufgrund des nicht mehr vorhandenen Strahlungsdrucks ein wenig und der Heliumkern verdichtet sich. Aufgrund des Temperaturanstiegs durch Druckerhöhung im Innern, beginnt nun das Helium durch den  $3\alpha$ -Prozess<sup>2</sup> zu fusionieren. Durch die wesentlich energiereichere Strahlung und den größeren Strahlungsdruck, der dabei entsteht, kann nun auch der Wasserstoff in den äußeren Schichten fusionieren. Der Stern nimmt an Leuchtkraft zu, bläht sich zu einem Roten Riesen auf und kühlt sich dabei aufgrund von Druckverminderung wieder ab.

<sup>1</sup> Körnige Struktur von Sternoberflächen. Einzelne Körner werden als Granulen bezeichnet und haben eine Ausdehnungen von bis zu 1000 km im Durchmesser. Sie existieren nur für wenige Minuten.

<sup>2</sup> Drei Heliumkerne fusionieren unter Abstrahlung von zwei γ-Quanten zu Kohlenstoff. = Heliumbrennen

Schematisch sind in folgender Abbildung die weiteren Phasen der Kernfusion dargestellt, doch man findet nie alle Phasen gemeinsam im Kern von Sternen vor.

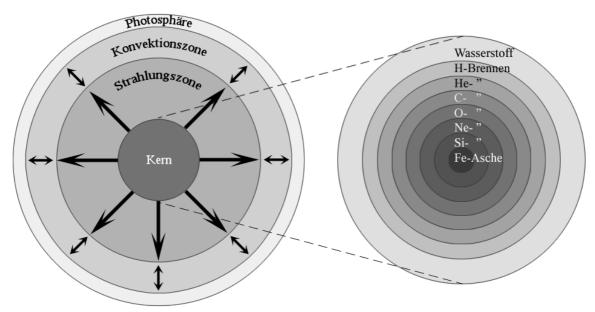


Abbildung 2.2.3: Schematischer Aufbau eines Sterns. Kernbereich herausfokussiert und alle Phasen der stellaren Kernfusion dargestellt. Bei der Sonne finden wir zur Zeit nur das Wasserstoffbrennen wieder.

Mit der Entwicklung eines Sterns verändert sich ebenfalls sein abgestrahltes Licht und damit sein Spektrum. Dieses kann über Entfernung, Zusammensetzung, Masse, Größe, Temperatur und Alter eines Sterns Aufschluss geben. Jeder Stern besitzt somit eine Art Fingerabdruck, der die Spektroskopie zu einem mächtigen Instrument für die Klassifizierung von Sternen macht.

## 2.3 Historische Entwicklung

1666 zerlegte Isaac Newton (1642-1727) mit Hilfe eines Prismas Licht in seine Spektralfarben und nannte die entstandene Farbenreihe "Spektrum" (lat. spectrum: Bild in der Seele). Ende des 19. Jahrhunderts setzte sich dann der Begriff Spektroskopie (griech. skopein: schauen) für die Betrachtung von Spektren durch. Im Jahr 1802 bemerkte der britische Chemiker William Hyde Wollaston (1766-1828) erstmals dunkle Linien im Sonnenspektrum, hielt sie jedoch für natürliche Grenzen zwischen den Farben. Zehn Jahre später untersuchte Joseph von Fraunhofer (1787-1826) diese Linien genauer, katalogisierte sie und bezeichnete sie mit den Buchstaben A bis H. Seine D-Linie fand er auch im Licht einer Kerzenflamme wieder, konnte sich jedoch nicht erklären warum diese im Sonnenspektrum dunkel und im Kerzenspektrum hell erschien. Die Deutung der Linien gelang Fraunhofer noch nicht, er erkannte jedoch bei weiteren Beobachtungen, dass Sonne und Sterne unterschiedliche Spektren zeigten. G. Kirchhoff (1824-1887) und R. W. Bunsen (1811-1899) führten schließlich die Linien im Sonnenspektrum auf chemische Elemente zurück. Mit einem Prismenspektroskop und Flammenemissionsspektroskopie gelang ihnen die Identifizierung einiger Elemente, wie z.B. Na, Ca, Mg, Cr und Fe. 1885 wurde dann die Verbindung von Theorie und Realität durch Johann Jakob Balmer (1825-1898) vollzogen, der empirisch eine Formel fand, mit der sich die Linien des Wasserstoffs zwischen 377 und 656nm berechnen ließen. Drei Jahre später war es durch die Rydberg-Formel (vgl. 4.1.1) möglich, sämtliche Linien des Wasserstoffspektrums zu errechnen. Einige davon wurden später durch Lyman, Paschen und Pfund mit Hilfe dieser Formel nachgewiesen. Zum endgültigen Verständnis dieser Formel bedurfte es Anfang des 20. Jahrhunderts der Physiker Bohr (1885-1962) und vor allem Schrödinger (1887-1961), die durch neue quantisierte Atommodelle die Basis schufen, auf der die moderne Physik und somit auch die Spektroskopie heute aufbauen.

## 3. Die Natur der Spektren

#### 3.1 Der schwarze Strahler

Wir wissen bereits, dass Sterne Strahlung emittieren. Diese Strahlung ist jedoch nicht gleichmäßig über alle Wellenlängen verteilt und wird nicht mit der gleichen Intensität abgegeben, sondern folgt bestimmten Gesetzmäßigkeiten. Um diese zu verstehen, müssen wir den Schwarzen Strahler einführen. Ein Schwarzer Strahler ist in der Physik ein Körper, welcher sämtliche auf ihn auftreffende Strahlung absorbiert. Seine Temperatur steigt dabei nicht unbegrenzt an, da der Strahler entsprechend seiner Temperatur auch Energie abstrahlt, sodass sich ein thermodynamisches Gleichgewicht ausbildet. Im Gleichgewicht nimmt der Schwarze Strahler ebenso viel Energie auf wie er emittiert. Diesen Körper gibt es in der Natur nicht, jedoch verhalten sich Sterne in guter Näherung so. Die Verteilung der Intensität (I=PA<sup>-1</sup>) bzgl. der Wellenlänge (Spektralverteilung), der durch den Körper emittierten Strahlung, ließ sich in Versuchen beobachten, war jedoch nicht zu berechnen. J. Stefan und L. Boltzmann beschrieben erstmals ein Gesetz, welches erlaubte, die abgestrahlte Leistung über alle Wellenlängen hinweg, in Abhängigkeit von Fläche und Temperatur des Schwarzen Körpers zu bestimmen, da sie den Zusammenhang P ~ AT4 erkannten. Der benötigte Faktor heißt Stefan-Boltzmann-Konstante und ist nicht mit der Boltzmann-Konstante zu verwechseln, der wir gleich begegnen werden.

$$P(A,T) = \sigma \cdot A \cdot T^4$$

Formel 3.1.1: Das Stefan-Boltzmannsche Gesetz

σ Stefan-Boltzmann-Konst. ~5,6671 · 10 <sup>-8</sup> [W·m<sup>-2</sup>·K<sup>4</sup>]

A strahlende Oberfläche des Körpers [m²]

T Temperatur des Strahlers [K]

Die abgestrahlte Leistung eines Sterns wird auch als Leuchtkraft L bezeichnet und hängt natürlich auch von seiner Oberfläche ab. A ersetzt man in diesem Fall durch  $4\pi R^2$ , wobei R der Radius des Sterns ist.

$$L(R,T) = \sigma \cdot 4\pi R^2 \cdot T^4$$

Formel 3.1.2: Leuchtkraft eines Sterns

Die auf die gesamte strahlende Fläche bezogene Leistung (Energie pro Zeit und Fläche) bezeichnet man auch als Spezifische Ausstrahlung M, oder auch Intensität.

$$M(T) = \sigma \cdot T^4$$

Formel 3.1.3: Das Stefan- Boltzmannsche Gesetz

Wir haben nun ein Mittel um die Strahlungsleistung durch die Temperatur auszudrücken. Weiterhin besagt das Stefan-Boltzmann-Gesetz, dass jeder Köper über 0 Kelvin Strahlung aussendet. Man bezeichnet diese Strahlung daher als Wärmestrahlung. Für die genaue Verteilung der Strahlungsleistung pro Wellenlänge gab es allerdings nur zwei unzufriedenstellende Ansätze, die in Näherungen für sehr lange bzw. sehr kurze Wellenlängen richtige Werte lieferten. Nach dem Rayleigh-Jeans-Gesetz lassen sich Teilchen (Der aufmerksame Leser ahnt spätestens jetzt, dass es sich um Elektronen handeln dürfte.) durch Energiebeträge zum Schwingen anregen. Diese Schwingungen erzeugen laut Rayleigh und Jeans Strahlung gleicher Frequenz. In der Thermodynamik wird die durchschnittliche kinetische Energie von Molekülen in einem Gas als proportional zu seiner Temperatur angesehen.

$$E_{kin} = \frac{3}{2} kT$$

Formel 3.1.4: Mittlere kinetische Energie der Moleküle eines idealen Gases, 3 Freiheitsgrade (3 Raumachsen) k Boltzmann-Konstante ~ 1,3807 · 10 · 23 [J·K<sup>-1</sup>]

Der Faktor 3/2 ergibt sich pro Raumrichtung zu je 1/2. Bei Elektronen nahm man an, dass sie sich ähnlich wie die Teilchen eines Gases verhalten. Durch den Wellencharakter der Strahlung, die durch die Elektronen erzeugt wird, schwingen sie aber nur in einer Ebene (2 Raumachsen). Daraus ergibt sich für die Schwingungsenergie von Elektronen:

$$E_{Schwing} = kT$$

Formel 3.1.5: Mittlere Schwingungsenergie der Elektronen eines Schwarzen Strahlers, 2 Freiheitsgrade

Außerdem wusste man, dass ein Zusammenhang zwischen Schwingungsenergie und spektraler spezifischer Ausstrahlung<sup>1</sup> besteht. Das Rayleigh-Jeans-Gesetz lautet demnach,

$$M_{v}(v;T) = \frac{2\pi v^{2}}{c^{2}} \cdot kT$$

Formel 3.1.6: Das Rayleigh-Jeans-Gesetz

oder umgeformt in Abhängigkeit der Wellenlänge (s. Mathematischer Anhang, Kapitel 9):

$$M_{\lambda}(\lambda;T) = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \cdot kT$$

Formel 3.1.7: Das Rayleigh-Jeans-Gesetz

Anhand der unteren Darstellung (Abbildung 3.1.1) lässt sich der Verlauf des Graphen gut nachvollziehen. Im IR-Bereich, in dem die Formel experimentell überprüft wurde, ergeben sich annehmbare Werte. Für  $\lambda \to 0$  geht die abgestrahlte Leistung pro Fläche (1m²) jedoch gegen Unendlich. Das stellt einen Widerspruch zur experimentellen Spektralverteilung dar, wonach im Bereich  $\lambda \to 0$  die Leistung ebenfalls gegen Null geht. Weiterhin hieße das, dass ein Körper mit einer Temperatur über 0 Kelvin unendlich viel Energie in Form von UV-Strahlung emittieren müsste. Das Rayleigh-Jeans-Gesetz mündet folglich aufgrund falscher theoretischer Vorhersagen in der sog. Ultraviolettkatastrophe.

Der zweite Ansatz lieferte da schon wesentlich bessere Werte. Er stammte vom deutschen Physiker Wilhelm Wien und wird Wiensches Strahlungsgesetz genannt. Sein Gedanke war, da sich die Energie des Elektrons offenbar nicht wie die eines Gasteilchens ausdrücken ließ, einen neuen Ansatz zu entwickeln, der die bisherige klassische Physik nicht berücksichtigt. Schließlich stieß er auf eine vermeintliche Lösung, die jedoch nur für sehr kurze Wellenlängen richtige Werte lieferte.

Spektrale spezifische Ausstrahlung M (pro Wellenlänge) =  $\frac{P}{A} = \frac{E}{t \cdot A} = I$ 

$$M_{\nu}(\nu;T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \cdot \frac{W \cdot \nu}{e^{\frac{W \cdot \nu}{kT}}}$$
 oder  $M_{\lambda}(\lambda;T) = \frac{2\pi c}{\lambda^5} \cdot \frac{W \cdot c}{e^{\frac{c \cdot W}{\lambda \cdot k \cdot T}}}$ 

Formel 3.1.8: Das Wiensche Strahlungsgesetz W neue Konstante

Wien befand sich jedoch auf dem richtigen Weg, den ein anderer deutscher Physiker zu Ende ging, Max Planck.

Dieser versuchte die beiden Gesetze durch eine Art Interpolationsformel zu vereinigen, indem er die Bereiche, die für den experimentell ermittelten Kurvenverlauf gute Übereinstimmungen ergaben übernahm und für den abweichenden Abschnitt eine neue Formel entwickelte. Vergleichen wir jedoch zunächst die Funktionen der drei unterschiedlichen Ansätze miteinander, bevor wir uns dem Aufbau von Plancks Formel zuwenden. Das Wiensche Strahlungsgesetz geht für hohe Frequenzen ins Plancksche Strahlungsgesetz über. Dagegen nähert sich das Rayleigh-Jeans-Gesetz erst im langwelligen Bereich an die Planck-Kurve an und liefert falsche Werte für höhere Frequenzen, da es von der Beziehung aus Formel 3.1.4 ausgeht.

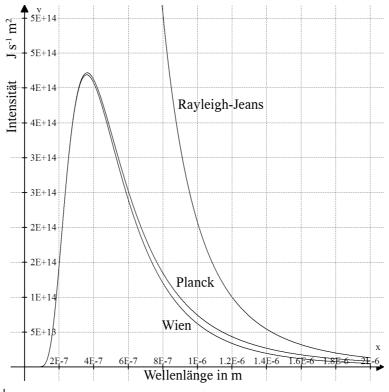


Abbildung 3.1.1: Kurvenverläufe im Vergleich

Laut dieser können Elektronen wie Gasteilchen mit jedem beliebigen Energiebetrag zur Schwingung angeregt werden. Das würde weiter bedeuten, dass Elektronen zur Emission von

Strahlung befähigt sein müssten, auch die mit hohen Frequenzen. Plancks Ansatz war nun, zu postulieren, dass eine Anregung von Elektronen nur dann möglich ist, wenn sie ein bestimmtes Energiepaket oder ganzzahlige Vielfache davon erhalten.

$$E = n \cdot h \nu$$

#### Formel 3.1.9: Planck Distribution

Diese kleinen Energiepakete nannte Planck Quanten<sup>1</sup>. Die Energie eines Quants hängt von seiner Frequenz und einer Konstanten h ab. Diese Konstante bezeichnet man als Plancksches Wirkungsquantum, da seine Einheit [Js] als Wirkung bezeichnet wird. Es besitzt ungefähr den Wert  $6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ .

Nach Planck kann ein Quantenobjekt mit der Frequenz v also Energie in Form von Quanten der Energie hv aufnehmen. Oszillatoren, deren Schwingungsenergien energetisch höher liegen als die vom Schwarzen Strahler zur Verfügung gestellte Energie kT, können nicht, oder nur mit gewisser Wahrscheinlichkeit zur Emission angeregt werden. Dies ist im Planckschen Strahlungsgesetz ausgedrückt.

$$M_{\nu}(\nu;T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$
 oder  $M_{\lambda}(\lambda;T) = \frac{2\pi c}{\lambda^5} \cdot \frac{hc}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$ 

Formel 3.1.10: Das Plancksche Strahlungsgesetz Zu beachten ist, dass sich Plancks Formel nur um "-1" von Wiens unterscheidet.

Anhand des Kurvenverlaufs lässt sich der Sachverhalt anschaulicher darstellen. Je höher die Temperatur wird, desto mehr kurze Wellenlängen (= hohe Frequenzen) können angeregt/emittiert werden und desto höher ist die abgestrahlte Leistung.

Die hier gezeigten Graphen wurden mit dem Funktionenplotter Mathplot erstellt. Zur Verbesserung der Anschaulichkeit befindet sich auf der CD (s. Kapitel 10) die Definitionsdatei mit teilweise animierten Funktionen im Ordner 3.1.

<sup>1</sup> Ein Quant (lat. quantum = wie groß, wie viel) bezeichnet eine nicht teilbare Energieportion.

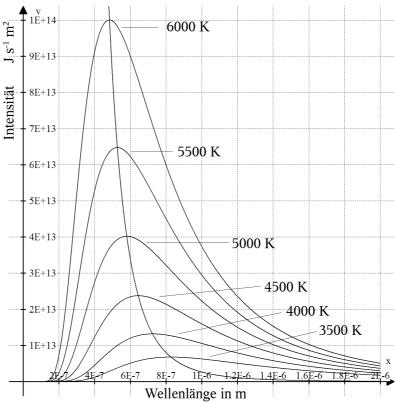


Abbildung 3.1.2: Spektralverteilungsfunktionen für verschiedene Temperaturen nach dem Planckschen Strahlungsgesetz

Diesen letzten Zusammenhang beschreibt das Wiensche Verschiebungsgesetz, das in Abhängigkeit der Temperatur die Wellenlänge angibt, bei der die Intensität am größten ist.

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T}$$

Formel 3.1.11: Das Wiensche Verschiebungsgesetz b Wien-Konstante ~ 2,898 · 10 -3 [m·K]

Ersetzt man T im Planckschen Strahlungsgesetz (Formel 3.1.10) durch b $\lambda^{-1}$  erhält man die Ortskurve aller Maxima der Planck-Funktion, die das Wiensche Verschiebungsgesetz als Funktion wiedergibt. Sie ist in Abbildung 3.1.2 bereits eingezeichnet.

$$M_{\lambda}(\lambda) = \frac{2\pi c}{\lambda^5} \cdot \frac{hc}{e^{\frac{hc}{kb}} - 1}$$

Formel 3.1.12: Ortskurve der Maxima der Planck-Funktion

Da sich Sterne, wie oben erwähnt, in Näherung wie Schwarze Strahler verhalten, lässt sich über ihr Intensitätsmaximum ihre tatsächliche Oberflächentemperatur (Photosphäre) bestimmen. Abbildung 3.1.3 zeigt die Planck-Kurven der Temperatur 3000, 5000 und 7000 mit ihren dazugehörigen Spektren.

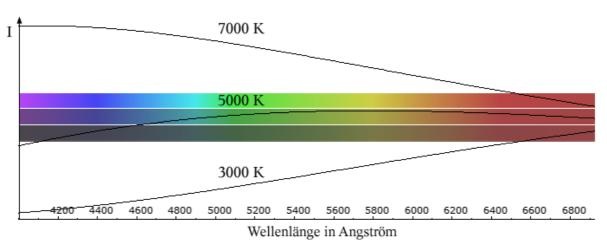


Abbildung 3.1.3: Planck-Kurven im "sichtbaren" Wellenlängenbereich von 400-775nm und die dazugehörigen Spektren

Gut zu sehen ist die temperaturabhängige Verschiebung des Intensitätsmaximums, welches für die unterschiedlichen Sternfarben verantwortlich ist. Sterne, die am Himmel blau erscheinen, sind folglich wesentlich heißer als solche, die rötlich strahlen. Diese Temperaturunterschiede reichen von blauen Überriesen mit bis zu 30000K zu den kühlen roten Riesen mit nur noch 2600K.

# 3.2 Allgemeines zu Emission und Absorption

Sternspektren sind nicht gleichförmig, sondern weisen eine große Anzahl von dunklen und hellen Linien auf, die durch die Anregung von Elektronen in Atomen verursacht werden. Zugunsten der Anschaulichkeit werden wir uns auf das Wasserstoffatom und die Anregung seines Valenzelektrons beschränken.

Ein Schwarzer Strahler emittiert Licht aller Wellenlängen, einschließlich derer, die man aus der Schule vom Spektrum des Wasserstoffs kennt. Wenn nun ein Elektron des Wasserstoffs im Grundzustand von einem  $\gamma$ -Quant der Energie  $hc\lambda^{-1}$  getroffen wird und die Wellenlänge des  $\gamma$ -Quants mit der einer Emissionslinie des Wasserstoffs übereinstimmt, wird das Elektron die Energie aufnehmen und in eine höhere Schale angehoben. Nach ca. 10 <sup>-8</sup> sec fällt das Elektron wieder in eine niedrigere Schale zurück, sofern es nicht erneut angeregt wird und gibt dabei seine absorbierte Energie in Form der selben Strahlung wieder ab.

Betrachten wir nun eine Wolke aus elementarem Wasserstoff geringer Dichte im Vakuum des Weltalls. Wir stellen dieser Wolke eine Strahlungsquelle zur Verfügung, die ein kontinuierliches¹ Spektrum aussendet (z.B. einen Schwarzen Strahler). Wie sieht nun das Spektrum nach der Gaswolke aus? Da das Gas keine so hohe Dichte hat wie das im Kernbereich von Sternen der Fall ist, kann es kein Schwarzkörperspektrum aussenden, denn es ist für fast alle Wellenlängen einfach durchsichtig und lässt sie ungehindert passieren. Dem Spektrum nach Passage der Gaswolke fehlen jedoch die Linien des Wasserstoffspektrums. Sie erscheinen dunkel, da die Elektronen des Wasserstoffgases nach der Anregung die Strahlung wieder diffus in alle Raumrichtungen und nicht in die entgegengesetzte Richtung, aus der die Strahlung unserer Strahlungsquelle stammte, abgeben. Wenn wir die Gaswolke seitlich, also ohne unsere Strahlungsquelle im Hintergrund, betrachten, dann entdecken wir diese diffuse Strahlung, die uns als Emissionslinien erscheint, jedoch sehr viel schwächer als unsere Strahlungsquelle sie emittiert.

Jetzt verdichten wir unsere Gaswolke. Die einzelnen Wasserstoffatome behindern sich nun gegenseitig viel stärker, reabsorbieren und -emittieren die auftreffende Strahlung vielfach, bevor sie das Gas wieder verlassen kann. Zur Veranschaulichung: Der Wasserstoff im Kern der Sonne hat ungefähr die Konsistenz von Glycerin. Im Innern unserer Gaswolke bildet sich ein thermodynamisches Gleichgewicht, wie es bei einem Schwarzen Strahler der Fall ist. Entsprechend ihrer Temperatur gibt die Gaswolke ein Schwarzkörperspektrum ab, welches wieder einen kontinuierlichen Verlauf hat.

Nehmen wir an, dass das Gas so sehr verdichtet ist, sodass die Kernfusion, wie in Kapitel 2.2 beschrieben, stattfindet und somit die Strahlungserzeugung autonom verläuft. Wir können unsere Strahlungsquelle entfernen, denn es ist ein Stern entstanden.

1 = gleichförmiges (ein Spektrum, welches bei jeder Wellenlänge Strahlung aussendet)

Die Regeln, nach denen ein Spektrum entsteht hat G. Kirchhoff 1859 aufgestellt.

- 1. Ein glühender fester oder flüssiger Körper, oder ein Gas mit hinreichendem Absorptionsvermögen emittiert ein kontinuierliches Spektrum, das alle Wellenlängen enthält.
- 2. Ein glühendes Gas unter niedrigem Druck emittiert ein nichtkontinuierliches Spektrum, das heißt Licht in einer begrenzten Anzahl unterschiedlicher Wellenlängen, die für das Gas charakteristisch sind.
- 3. Wenn weißes Licht (kontinuierliches Spektrum) ein kühles Gas durchsetzt, absorbiert das Gas diejenigen Wellenlängen aus dem kontinuierlichen Spektrum heraus, die es selbst emittieren würde, wenn es genügend heiß wäre. Diese Wellenlängen fehlen also im kontinuierlichen Spektrum, oder sind zumindest geschwächt, sodass der Eindruck dunkler Linien entsteht.

Bei Sternen finden wir alle drei Arten von Spektren (siehe Abbildung 3.2.1: Emissions-, Absorptions- und kontinuierliches Spektrum) gemeinsam vor.

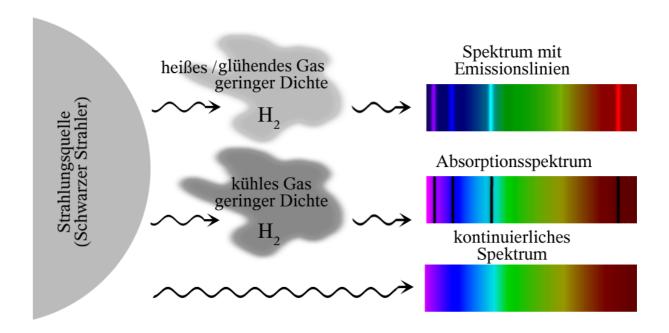


Abbildung 3.2.1: Die Spektrenarten bei Sternen am Beispiel des Wasserstoffgases

- 4. Spektrallinien und ihre Entstehung
- 4.1 Öffnung der Black Box Einblicke in die Quantenmechanik

#### 4.1.1 Die Energie von Elektronen

Als Niels Bohr 1913 sein Bohrsches Atommodell vorstellte, bezog er bereits die Quantisierung der Energiezustände in seine drei Postulate mit ein. Abweichend zu Rutherfords Planetenmodell ging er von folgenden Sachverhalten aus:

- 1. Ein Elektron, welches den positiv geladenen Kern eines Atoms umkreist, kann nur ganz bestimmte Kreisbahnen der Energie E<sub>n</sub> (n=1, 2, 3,...) beschreiben. Diese Bahnen werden stationäre Zustände genannt.
- 2. Auf den stationären Zuständen bewegen sich Elektronen strahlungsfrei (stabil). Bei einem Übergang des Elektrons in ein niedrigeres Energieniveau wird Energie in Form eines Photons frei (Emission). Damit ein Elektron in ein höheres Energieniveau angehoben werden kann, bedarf es der Aufnahme eines Photons (Absorption).
- 3. Der Drehimpuls eines Elektrons, das um den Kern kreist, ist definiert als:

$$L = m \mathbf{v} \cdot r = n \hbar$$

Formel 4.1.1.1: Drehimpuls eines Elektrons mv = Impuls des Elektrons r = Radius der Kreisbahn  $\hbar = h/2\pi$ , wird als Drehimpulsquantum bezeichnet

Er ist quantisiert, denn er kann nur ganzzahlige Vielfache von ħ annehmen.

Um die Herkunft der Konstante h zu begreifen, müssen wir in einem kleinen Exkurs den Begriff der Materiewelle einführen. Dieser Ausdruck ist eng verknüpft mit dem des Welle-Teilchen-Dualismus, auf den ich nicht näher eingehen möchte. Louis-Victor de Broglie (1892-1987) schrieb jeder bewegten Materie eine Wellenlänge zu. Diese Wellenlänge wird De-Broglie-Wellenlänge genannt und ist proportional zum Impuls der Materie ( $\lambda = h/p$ ). Betrachten wir jetzt ein Elektron, das, getreu dem Bohrschen Atommodell, auf seinem Energieniveau um den Atomkern kreist. Der Umfang der Kreisbahn, den es beschreibt, dürfte

als  $U=2\pi r$  bekannt sein. Auf dieser Kreisbahn breitet sich nun ebenfalls die Welle des Elektrons aus. Wenn die Welle mit sich selbst konstruktiv interferieren soll, muss der Kreisumfang ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge des Elektrons sein. Daraus folgt:

$$2\pi r = n\lambda$$

Formel 4.1.1.2: Beziehung zwischen Kreisumfang und Wellenlänge der Elektronenwelle

Zugegebenermaßen wirkt diese Formel wenig anschaulich und die Bedeutung der konstruktiven Interferenz der Elektronenwelle ist unklar. Laut klassischer Physik müssen beschleunigte Ladungen Energie in Form von Strahlung aussenden. Wenn ein Elektron ständig Strahlung aussendet, würde es kinetische Energie verlieren und in letzter Konsequenz in den Kern stürzen. Im 2. Bohrschen Postulat wird das jedoch ausgeschlossen. Warum bleiben Atome also stabil, obwohl es im Widerspruch zur klassischen Physik steht? De Broglie erklärte dies mit der Annahme von Elektronenwellen. Sofern die Welle scheinbar im Raum steht, wird keine Strahlung emittiert und der Zustand ist stabil, da die Ladungsverteilung auf dem Energieniveau an jeder Stelle gleich ist. Der Zustand der stehenden Elektronenwelle wird durch deren konstruktive Interferenz erzeugt, wie bei einer schwingenden Saite, und zwar nach der Bedingung aus Formel 4.1.2, die hier grafisch dargestellt ist. Die Enden der schwingenden Saite werden miteinander verbunden. Erfüllt die Saite die Bedingung, steht die Welle, falls nicht, löscht sie sich durch Interferenz aus.

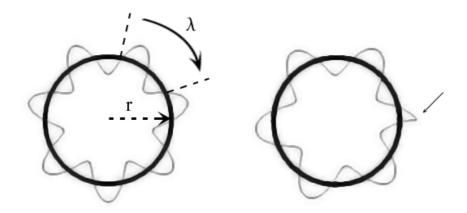


Abbildung 4.1.1.1: links: konstruktive Interferenz der Elektronenwelle (stabil) rechts: destruktive Interferenz, Strahlung wird frei (instabil)

Die Welle passt (mit n=7) hier in der linken Grafik auf den Umfang des Kreises.

Wenden wir nun die De-Broglie-Wellenlänge auf unsere Formel an. Wir ersetzen  $\lambda$  durch h/p und erhalten eine Formel, die sich so umformen lässt, dass wir das 3. Bohrsche Postulat herleiten können. Es ist damit äquivalent zur Forderung De Broglies, dass ganzzahlige Vielfache der De-Broglie-Wellenlängen in den Umfang des zugehörigen Bohrschen Energieniveaus passen.

$$2\pi r = n \cdot \frac{h}{p} \qquad \rightarrow \qquad pr = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar \quad ; \quad p = mv \quad \rightarrow mv \cdot r = n \hbar$$

Formel 4.1.1.3: Herleitung des 3. Bohrschen Postulats mittels De-Broglie-Materiewelle

Die Konstante h ist demnach laut Bohr der kleinstmögliche Drehimpuls eines Elektrons. Bohr entwickelte seine Postulate in Kenntnis der empirisch gefundenen Balmer Formel (vgl. 2.3), daher zog er zur Anwendung seiner Postulate das Wasserstoffatom heran. Wie bekannt sein dürfte, besteht das Wasserstoffatom aus einem Proton und einem Elektron. Beide Teilchen tragen jeweils die Elementarladung, das Proton jedoch mit positivem Vorzeichen, entgegengesetzt zum Elektron.

$$e = 1,6022 \cdot 10^{-19} \,\mathrm{C}$$

Formel 4.1.1.4: Elementarladung

Dieses muss außerdem durch seine beschleunigte Bewegung exakt die Anziehungskraft des Atomkerns aufheben um auf einer Kreisbahn zu bleiben:

$$\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = -\frac{m_e v^2}{r}$$

Formel 4.1.1.5: Gleichgewichtsbedingung

 $Q_1 u. Q_2$  hier: +e und -e $\varepsilon_0$  elektr. Feldkonstante links: Coulombkraft rechts: neg. Zentripetalkraft

Die Anziehungskraft des Atomkerns wird als Coulombkraft bezeichnet. Die darin vorhandene elektrische Feldkonstante hat den Wert  $8,854 \cdot 10^{-12}~\text{C}\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ . Die Masse  $m_e$  ist die Masse des Elektrons mit  $m_e$ =  $9,109 \cdot 10^{-31}~\text{kg}$ . In der Gleichung werden zunächst die Ladungen zusammengefasst. Durch Multiplikation mit  $r^2$  erhalten wir dann:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = m_e v^2 r$$

Formel 4.1.1.6: Produkt aus Drehimpuls und Bahngeschwindigkeit des Elektrons

Wenn wir jetzt mit Formel 4.1.1.1 vergleichen, dann sehen wir, dass sie dem Produkt aus Bahngeschwindigkeit und Drehimpuls (L·v) entspricht. Wir setzen nun das 3. Bohrsche Postulat in die Gleichung ein und lösen nach der Bahngeschwindigkeit auf

$$L v = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = n\hbar v$$

$$v = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}$$

$$= \frac{e^2}{2\epsilon_0 n\hbar}$$

Formel 4.1.1.7: Bahngeschwindigkeit des Elektrons

Die Bahngeschwindigkeit wird in Formel 4.1.1.6 eingesetzt und man erhält nach geschicktem Kürzen eine Formel für den Bahnradius, die nur noch von einer quantisierten Variablen abhängig ist, nämlich von n.

$$r(n) = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{m_e e^2 \pi}$$

Formel 4.1.1.8: Bahnradius eines Elektrons im Wasserstoffatom nach Bohr

Setzt man in unserer Gleichung n=1, so erhalten wir den kleinstmöglichen Abstand eines Elektrons vom Atomkern im Wasserstoffatom, den man auch Grundzustand nennt. Er beträgt  $5,292 \cdot 10^{-11}$  m. Dieser Abstand wird als Bohrscher Radius bezeichnet. Für n haben wir schon in den Bohrschen Postulaten den Begriff Energieniveau eingeführt. Wir können nun den Radius der Kreisbahnen im Wasserstoffatom berechnen, wissen aber nicht welche Energie das Elektron auf den jeweiligen Kreisbahnen inne hat.

Die Gesamtenergie des Elektrons auf seiner Kreisbahn setzt sich aus seiner kinetischen  $(E_{kin} = \frac{1}{2}m_e v^2)$  und potentiellen Energie  $(E_{pot} = F \cdot r)$  zusammen. Das F in der Gleichung entspricht der Coulombkraft aus Formel 4.1.1.5. Folgender Zusammenhang ist daher ersichtlich:

$$E_{gesamt} = E_{pot} + E_{kin}$$

$$= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{1}{2}m_e v^2$$

Formel 4.1.1.9: Energie des Wasserstoffelektrons

Wir substituieren r aus Formel 4.1.1.8 und v aus 4.1.1.7,

$$E_{gesamt} = -\frac{m_e e^4}{4 \epsilon_0^2 n^2 h^2} + \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 n^2 h^2}$$
$$= -\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

Formel 4.1.1.10: Energieniveaus im Wasserstoff

und können nun jedes Energieniveau im Wasserstoffatom nach dieser Formel berechnen:

$$E_{gesamt}(n) = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

Formel 4.1.1.11: Energieniveaus im Wasserstoff

Sehr interessant ist die Tatsache, dass für die Gesamtenergie ein negativer Wert errechnet wird. Rechnerisch ist dadurch belegt, dass das Elektron in gebundenem Zustand energieärmer ist als wenn es vom Atomkern gelöst existieren würde. Der Grundzustand ist dabei der energieärmste Zustand, denn wenn n gegen 1 geht, nimmt die Energie immer kleinere Werte an. Außerdem lässt sich der Gleichung entnehmen, dass die Energieniveaus umso geringere Differenzen aufweisen, je größer n wird. Der tatsächliche Abstand vom Atomkern nimmt bei größer werdendem n nach Formel 4.1.1.8 jedoch im Quadrat zu.

In Kapitel 3.2 haben wir uns kurz mit Emission und Absorption beschäftigt. Nachdem wir die Energieniveaus für den Wasserstoff nun berechnen können, lassen sich genaue Aussagen über die Spektrallinien beim Wasserstoff treffen. Die Energie eines emittierten Photons (Quants) kann nur den Energiedifferenzen zwischen den Energieniveaus entsprechen. Es gilt:

$$E_{Photon} = E_{n_1} - E_{n_2}$$

Formel 4.1.1.12: Energie eines emittierten Photons  $n_1 > n_2$ 

Mit dieser allgemeinen Formel lässt sich die Energie eines abgestrahlten Quants ausdrücken:

$$E_{Photon} = -\frac{1}{n_1^2} \cdot \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} - \left( -\frac{1}{n_2^2} \cdot \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \right)$$

$$h \cdot v = h \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot (\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2})$$

Formel 4.1.1.13: Energieniveaus im Wasserstoff

Damit lassen sich nun alle Übergange zwischen den Energieniveaus im Wasserstoffatom berechnen. Wenn wir diese Formel noch etwas umstellen, erhalten wir eine kompaktere Gleichung, da wir alle Naturkonstanten zu einem Faktor zusammenfassen können, der Rydbergkonstante genannt wird.

$$\frac{1}{\lambda} = \underbrace{\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c}}_{\text{Rvdberg Konstante}} \cdot (\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2})$$

Formel 4.1.1.14: Die Rydberg Formel  $\lambda^{-1}$  bezeichnet man auch als Wellenzahl Rydberg-Konst.:  $R_H$ =1,0968 · 10<sup>7</sup> m<sup>-1</sup> für das H-Atom

Diese Gleichung ist nach ihrem Entdecker Johannes Robert Rydberg (1854-1919) benannt, der die Formel 1888 erstmals vorstellte. Sie wurde empirisch gefunden. Rydberg kannte weder die Zusammensetzung seiner Rydberg-Konstante, noch wusste er etwas von Quanten. Warum es 25 Jahre dauerte bis die Korrektheit der Rydberg-Formel nachgewiesen wurde, sehen wir anhand der mathematischen Eskapaden und der neuen Denkansätze Bohrs auf den letzten sechs Seiten. Die Erkenntnis, dass der Drehimpuls von Elektronen, ihr Abstand zum Kern und die Energieniveaus im Wasserstoffatom nur in quantisierten Werten vorkommen, haben wir Nils Bohr und seinem Atommodell zu verdanken.

Obwohl die Energie aus Formel 4.1.1.13 in Joule hervorgeht, verwendet man in der Kernchemie gerne die Einheit Elektronenvolt¹. Der Grundzustand im Wasserstoffatom besitzt die Energie -13,6 eV. Regt man das Elektron im Grundzustand mit diesem Energiebetrag an, entspricht das einer Wellenlänge von ca. 91,15nm, die bei der Emission frei wird. Füge ich mehr Energie zu, wird das Atom ionisiert. Man bezeichnet diese Barriere auch als Ionisationsgrenze. Rechnerisch lässt sich der Sachverhalt mit oben stehender Formel nachvollziehen, wenn man die Gleichung ein wenig umformt.

$$\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{\lambda R_H} = \frac{1}{n_1^2}$$

Formel 4.1.1.15: Seriengrenzen des Wasserstoffs

Wir nehmen den Grundzustand  $n_2 = 1$  an. Wenn  $\lambda R_H$  ebenfalls gegen 1 geht, dann muss  $n_1$  gegen Unendlich gehen um die Gleichung zu erfüllen.

<sup>1</sup> Elektronenvolt:  $1 \text{ eV} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ 

Da  $\lambda R = (n_2)^2$ , erhalten wir für  $\lambda$  91,15nm. Gehen wir hier nicht vom Grundzustand aus, sondern setzen für  $n_2$  andere ganzzahlige Werte ein, müssen wir nicht so viel Energie aufwenden, damit das Atom ionisiert vorliegt, denn man geht ja bereits von einem energiereicheren Niveau aus. Die Wellenlängen, die bei Anregung von Elektronen emittiert werden und die vom selben Energieniveau  $n_2$  ausgehen, bezeichnet man als Serie.

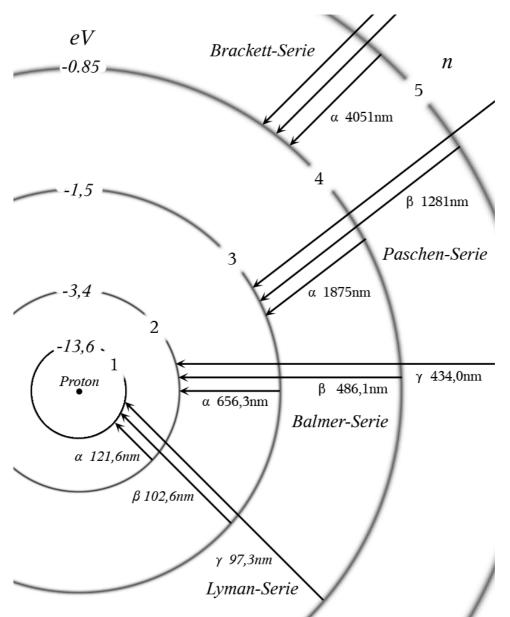


Abbildung 4.1.1.2: Schematischer Aufbau des Wasserstoffs mit einigen Übergängen der Serien.

Im Wasserstoffatom sind einige Serien nach ihren Entdeckern benannt. Die Balmer Serie geht auf Johann Jakob Balmer (1825-1898) zurück. Sie liegt teilweise im sichtbaren Spektralbereich und geht vom zweiten Energieniveau aus, wie wir in Abbildung 4.1.1.2. sehen. In der Grafik sind keinesfalls alle Übergänge gezeigt, sondern nur jeweils drei pro Serie. In Wirklichkeit gibt es jedoch unendlich viele, deren Dichte innerhalb einer Serie pro

nm zunimmt, je näher sie der Ionisationsgrenze kommen. Man bezeichnet diese Grenze, an der die Wellenlänge des Übergangs scheinbar nicht mehr größer wird, als Seriengrenze. Mit Formel 4.1.1.15 lassen sich die Seriengrenzen beliebiger Serien berechnen, wie oben beispielhaft für die der Lyman-Serie durchgeführt. Abbildung 4.1.1.3 zeigt die prominentesten Serien nochmals didaktisch reduziert mit ihren dazugehörigen Grenzen. Aus Balmers Überlegungen zur Berechnung der Spektrallinien im sichtbaren Bereich aus dem Jahr 1885, entwickelte Rydberg drei Jahre später seine allgemeingültige Formel. Die Existenz der restlichen Serien wurde unter Kenntnis der Rydberg-Formel überprüft. Die Herausforderung dabei lag nicht in ihrer Vorhersage, sondern in ihrer Messung, da sie teilweise weit im IRund UV-Bereich liegen und nicht mehr mit visueller Spektroskopie gearbeitet werden konnte. Ausgehend vom Übergang der größten Wellenlänge in der jeweiligen Serie, werden die Spektrallinien mit griechischen Buchstaben benannt. In der Spektroskopie sind mit den Bezeichnungen Hα, Hβ, Hγ, Hδ,... jedoch im Zweifelsfall immer die Balmer Linien gemeint.

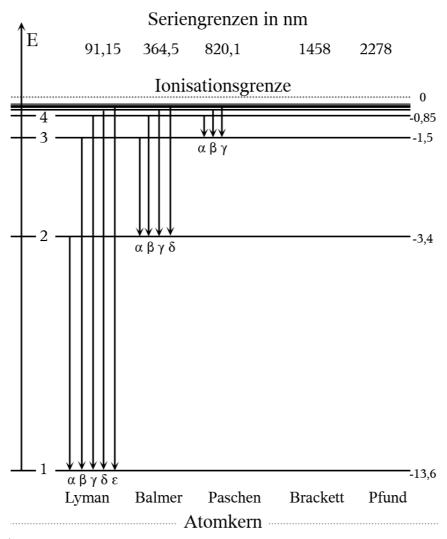


Abbildung 4.1.1.3: Energieniveaus im Wasserstoffatom und Seriengrenzen der Lyman-, Balmer, Paschen-, Brackett- und Pfund-Serie

## 4.1.2 "Sie ist Schrödingers Kopf entsprungen"

Das Bohrsche Atommodell ist trotz der Quantisierung im Atom nicht als richtig anzusehen. Es funktioniert streng genommen sogar ausschließlich für das Wasserstoffatom zufriedenstellend. Durch die Sommerfeld-Erweiterung gelang es einige Unzulänglichkeiten zu beseitigen, indem die Energieniveaus ihrerseits nochmals unterteilt und neben den kreisförmigen nun auch elliptische Elektronenbahnen mit unterschiedlicher Neigung im Raum postuliert wurden. Das Bohr-Sommerfeld-Modell konnte daher schon einige komplexere Elemente beschreiben, ließ sich aber nicht mit der Heisenbergschen Unschärferelation, nach der sich Elektronen nicht auf diskreten Bahnen aufhalten dürfen, vereinbaren. Aufgrund der Anschaulichkeit von Elektronenbahnen ist das Bohr-Sommerfeld-Modell jedoch das bevorzugte didaktische Mittel um Atome und die Zustände ihrer Elektronen strukturiert darzustellen. Die Energieniveaus, nach denen man gliedert und für die wir auch synonym die Begriffe Schalen oder Quantenzahlen verwenden können, finden sich heute im Periodensystem der Elemente wieder.

Die Widersprüche, die bei der Annahme von diskreten Elektronenbahnen entstehen, lassen sich relativ einfach nachvollziehen. Wenn man annimmt, dass sich das Elektron im Wasserstoffatom im Grundzustand befindet und sich entlang einer Kreisbahn bewegt, ist sein Ort sehr genau festgesetzt. Da wir äußerst kulant sind, gewähren wir dem Elektron eine Abweichung ( $\Delta x$ ) von der berechneten Bahn, die 10% des Atom-/Bahndurchmessers (vgl. Formel 4.1.1.8) betragen darf. Dieser liegt bei ca. 1,0 ·10 <sup>-10</sup> m. Nach Heisenberg ist die Impulsunschärfe definiert als:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$$

Formel 4.1.2.1: Heisenbergsche Unschärferelation

Wir wollen nun die kinetische Energie unseres Elektrons berechnen, welches wir auf seinen kleinen Aufenthaltsbereich präpariert haben und drücken daher die kinetische Energie durch den Impuls bzw. die Impulsabweichung aus. Dann substituieren wir  $\Delta p$  aus der obenstehenden Formel und erhalten den Mittelwert der kinetischen Energie des Elektrons in unserem Ortsbereich.

$$E_{kin} \ = \ \frac{1}{2} \ m_e \, \text{v}^2 \ = \ \frac{p^2}{2 \text{m}_e} \ = \ \frac{(\Delta \, p)^2}{2 \text{m}_e}$$
 aus Formel 4.1.2.1  $\ \rightarrow \ E_{kin} \ \ge \ \frac{\hbar^2}{8 \, m_e (\Delta \, x)^2}$  für  $\Delta \, x = 10^{-11} \, m \ \rightarrow \ E_{kin} \ \ge \ \frac{(1,055 \cdot 10^{-34} \, Js)^2}{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \, kg \cdot (10^{-11} \, m)^2} \ \approx \ 1,53 \cdot 10^{-17} \, J \ = \ 95 \ eV$ 

Formel 4.1.2.2: Mittelwert der kinetischen Energie des Elektrons für  $\Delta x = 10^{-11}$  m

Was bedeutet dieses Ergebnis für uns? Wenn das Elektron durch uns auf ein Zehntel des Bahndurchmessers genau "eingesperrt" wird, müsste es eine mittlere kinetische Energie von mindestens 95 eV haben. Wie wir wissen, beträgt die zur Ionisation nötige Energie für das Wasserstoffelektron im Grundzustand 13,6 eV. Zwingen wir dem Elektron also einen relativ engen Aufenthaltsraum auf, wäre dieser Zustand von so hoher Energie, dass das Elektron gar nicht mehr an den Atomkern gebunden wäre. Diskrete Bahnen anzunehmen auf denen sich Elektronen bewegen könnten ist daher unsinnig. Außerdem basiert die Quantisierung im Atom bei den bisherigen Modellvorstellungen auf bloßen Postulaten und kann daher keine stichhaltige Argumentation sein. Erwin Schrödinger (1887-1961) versuchte quantenmechanische Vorgänge mit der sog. Wellenmechanik zu erklären, die wieder an die Materiewelle De Broglies aus Kapitel 4.1.1 anknüpft. Ein mathematischer Ausdruck, der den Zustand eines Quantenobjekts, wie z.B. den eines Elektrons, beschreibt, ist die Wellenfunktion. Sie ist ein Synonym für den Begriff der Wahrscheinlichkeitsamplitude, deren Bedeutung es im Folgenden zu begreifen gilt. Dafür müssen wir zum Doppelspaltexperiment mit Elektronen zurückdenken, bei dem ihr Wellencharakter entdeckt wurde.

In der Kurzfassung lässt sich das beobachtbare Ergebnis dieses Experiments so zusammenfassen: Elektronen treffen nach dem Passieren des Doppelspalts auf einen Detektorschirm und hinterlassen dort Punkte. Nach einiger Zeit erkennt man ein Muster auf dem Schirm, welches nicht mit der erwarteten Verteilung für Teilchen  $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$  übereinstimmt, sondern der Intensitätsverteilung zweier interferierender Wellen entspricht. Man nennt diese Verteilung auch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, denn sie gibt die Wahrscheinlichkeit  $\Delta P$  an, mit der ein Teilchen in einem Intervall  $\Delta x$  um den Ort x herum gefunden wird. Obwohl man für Teilchen am Einzelspalt, eine Gaußverteilung der

Auftreffwahrscheinlichkeit beobachtet, die mit der Funktion P<sub>1</sub>(x) bzw. P<sub>2</sub>(x) beschrieben wird (Abbildung 4.1.2.1), erhält man für Quantenobjekte am Doppelspalt nicht die Summe der Funktionen als Verteilungsfunktion, sondern das Quadrat der Summen zweier Funktionen, die den Zustand des jeweiligen Quantenobjekts genau beschreiben. Für eine klassische Welle entsprechen diese Funktionen der Elongation der Welle in Abhängigkeit von Ort und Zeit. Eine solche Funktion nennt man Wellenfunktion. Bei einer mechanischen Welle hat sie die Form:

$$A(x;t) = A_0 \cdot \sin(kx - \omega t)$$

Formel 4.1.2.3: Wellenfunktion / Elongation einer Welle

Amplitude der Welle

Kreiswellenzahl Kreisfreauenz / L Kreisfrequenz / Winkelgeschwindigkeit

Die hier dargestellte sinusförmige Wellenfunktion gibt uns Auskunft über die Auslenkung aus der Nullage an jedem beliebigen Ort und zu jeder Zeit. Da Quantenobjekten nicht gleichzeitig ein bestimmter Ort und Impuls zugeordnet werden kann, spricht man in der Quantenmechanik von Zuständen, die ein Quantenobjekt mit gewisser Wahrscheinlichkeit inne hat. Die beiden Zustände, die ein Elektron im Doppelspaltexperiment einnehmen kann, heißen "Weg durch Spalt 1" und "Weg durch Spalt 2" und werden durch je eine Wellenfunktion beschrieben.

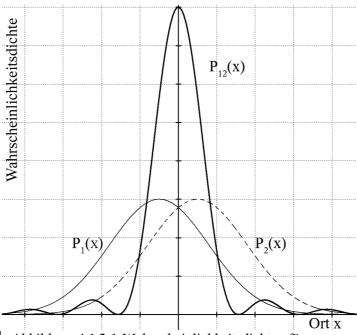


Abbildung 4.1.2.1: Wahrscheinlichkeitsdichten für Teilchen bei nur einem geöffneten Spalt  $P_1(x)$  bzw.  $P_2(x)$ und für Quantenobjekte am Doppelspalt  $P_{12}(x)$ 

Ein anderer Begriff für die Wellenfunktion innerhalb der Quantenmechanik, ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude. Dieser Begriff beinhaltet die Tatsache, dass über Ereignisse nur Wahrscheinlichkeitsaussagen gemacht werden können. Die Quantenmechanik ist also ein rein statistisches Werkzeug. Anders als in der klassischen Physik, ist der Begriff Amplitude in der Quantenmechanik etwas weiter gefasst. Sie ist nicht nur die maximale Auslenkung (maximale Elongation) einer Schwingung, sondern entspricht dem Wert der Wellenfunktion  $\Psi(x,t)$  an einem Ort zu einer bestimmten Zeit. Doch was berechnet man eigentlich mit der Wellenfunktion? Der Wellenfunktion selbst kommt keine physikalische Bedeutung zu, allerdings entspricht ihr Betragsquadrat der Wahrscheinlichkeitsdichte, womit wir wieder beim Doppelspaltexperiment wären. Quantenmechanische Wellen können sich, anschaulich dargestellt, wie Wasserwellen überlagern, daher entspricht der Überlagerungszustand zweier Wellen, der Addition der Wellenfunktionen. Für das Doppelspaltexperiment (Abbildung 4.1.2.1) gilt folglich:

$$P_1(x) = |\Psi_1(x)|^2$$
 ;  $P_2(x) = |\Psi_2(x)|^2$   
 $\rightarrow P_{12}(x) = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2$ 

Formel 4.1.2.4: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Überlagerungszustandes aus  $\Psi_1$  (Weg Spalt 1)und  $\Psi_2$  (Weg Spalt 2)

Das bedeutet, wenn man die Wellenfunktion eines Teilchens kennt, lässt sich seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit an einem Ort, oder in einem Raum bestimmen. Leider haben wir die Wellenfunktion aber nicht, was uns vor das Problem stellt: Woher bekommen wir sie?

An der Schrödinger-Gleichung führt jetzt kein Weg mehr vorbei. Diese Differentialgleichung enthält nämlich die Wellenfunktion als Lösung. Gehen wir wie immer aus energetischer Sicht an die Sache heran. Betrachten wir ein Teilchen ohne äußere Einflüsse.  $E_{kin}$  ist dann  $E_{gesamt}$ .

$$E_{kin}=rac{p^2}{2\mathrm{m}}$$
 ;  $p=rac{h}{\lambda}$  ;  $k=rac{2\pi}{\lambda}$  ;  $\omega=2\pi\nu$ 
 $\rightarrow$   $E_{ges}=E_{kin}=rac{k^2\hbar^2}{2\mathrm{m}}=\hbar\omega$ 

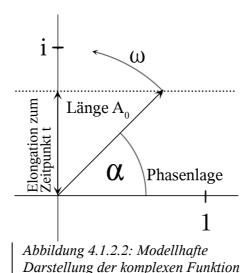
Formel 4.1.2.5: Gesamtenergie für ein unbeeinflusstes Teilchen

Desweiteren ist eine Wellenfunktion der Form

$$\Psi(x;t) = A_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$$

Formel 4.1.2.6: Darstellung einer ebenen Welle Eben bedeutet, dass sich die Welle geradlinig ausbreitet.  $i^2 = -1$  imaginäre Einheit

gegeben. Gegenüber der klassischen Wellenfunktion, die nur die Elongation der Welle angibt, sind in dieser komplexen Funktion Amplitude und Phasenlage enthalten. Anschaulicher dargestellt, beschreibt diese Funktion eine komplexe Zahl¹. Diese Zahl wird, wenn wir sie in ein Koordinatensystem eintragen (Abbildung 4.1.2.2), durch einen Punkt im Abstand  $A_0$  veranschaulicht, der mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  um den Ursprung rotiert. Man verwendet zur Darstellung einen rotierenden Zeiger, der vom Ursprung aus zur komplexen Zahl zeigt. Die Zeigerstellung heißt Phasenlage.



Zur Vereinfachung setzen wir  $A_0$  gleich 1. Sich eine komplexe Zahl vorzustellen gestaltet sich schwierig, daher versuchen wir gar nicht erst uns damit auseinanderzusetzen, sondern sehen i einfach als reellen Faktor an, der uns nicht weiter stören soll. Wir leiten die Wellenfunktion 4.1.2.6 nun einmal nach t ab

$$\frac{d\Psi(x;t)}{dt} = -i\omega \cdot e^{i(kx-\omega t)}$$

Formel 4.1.2.7: Partielle Ableitung nach t der Wellenfunktion

 $<sup>1\</sup>quad Komplexe\ Zahlen\ erweitern\ die\ reellen\ Zahlen.\ Quadrate\ kompl.\ Z.\ k\"{o}nnen\ z.B.\ negative\ Werte\ annehmen.$ 

und Formel 4.1.2.6 zweimal nach x.

$$\frac{d^2 \Psi(x;t)}{d x^2} = i^2 k^2 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$$

Formel 4.1.2.8: Zweifache Partielle Ableitung nach x

Diese Ableitungen werden wir gleich noch benötigen. Jetzt multiplizieren wir die Gleichung für die Gesamtenergie (Formel 4.1.2.5) auf beiden Seiten mit -i<sup>2</sup> e  $^{i (k \ x - \omega \ t)}$ , was zunächst sinnlos erscheint.

$$-i^{2} \cdot \frac{k^{2} \hbar^{2}}{2m} \cdot e^{i(kx-\omega t)} = -i^{2} \cdot \hbar \omega \cdot e^{i(kx-\omega t)}$$

$$E_{kin} \cdot \Psi(x;t) = E_{ges} \cdot \Psi(x;t)$$

Formel 4.1.2.9: Gesamtenergie eines unbeeinflussten Teilchens  $-i^2 = 1$ 

Wir formen im Folgenden um und erkennen, dass sich die Ableitungen aus den Formeln 4.1.2.8 und 4.1.2.7 wiederfinden lassen.

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m} \cdot \underbrace{i^{2}k^{2} \cdot e^{i(kx-\omega t)}}_{\frac{d^{2}\Psi(x;t)}{dx^{2}}} = i\hbar \cdot \underbrace{(-i)\omega \cdot e^{i(kx-\omega t)}}_{\frac{d\Psi(x;t)}{dt}}$$

Formel 4.1.2.8 4.1.2.7

Formel 4.1.2.10: Schrödinger Gleichung für den Fall ohne äußeres Kraftfeld

Dies ist die Schrödingergleichung für ein Teilchen, das sich frei und ohne äußere Einflüsse bewegen kann. Da sich (für unseren Fall) Elektronen aber meist innerhalb eines Potentials befinden, muss die Schrödingergleichung noch in eine allgemeine Form gebracht werden, bei der die potentielle Energie berücksichtigt wird. Die kinetische Energie ist die Gesamtenergie ohne die potentielle Energie. Daraus folgt:

$$\begin{split} E_{kin} &= \underbrace{E_{ges} - E_{pot}}_{} \\ -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \cdot \frac{d^2 \Psi(x;t)}{d \, x^2} &= \underbrace{(E_{ges} - E_{pot}) \cdot \Psi(x;t)}_{} \\ -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \cdot \frac{d^2 \Psi(x;t)}{d \, x^2} + E_{pot} \cdot \Psi(x;t) &= i \, \hbar \cdot \frac{d \, \Psi(x;t)}{d \, t} \end{split}$$

Formel 4.1.2.11: zeitabhängige Schrödingergleichung in einem beliebigen Potential

Die Wellenfunktion Ψ ist hier nicht mehr der Ausdruck aus Formel 4.1.2.6, sondern die allgemeine Wellenfunktion, die gesucht ist und als Lösung der Schrödingergleichung hervorgeht. Wie diese allgemeine Form aussieht, ist für uns uninteressant. Wie sich diese in speziellen Fällen vereinfacht, werden wir jedoch noch sehen. Wir haben jetzt eine Gleichung vor uns, die sowohl von x, als auch von t abhängt. Um von stationären Zuständen (Kapitel 4.1.1) sprechen zu können ist es jedoch wichtig, dass sich die Welle zeitlich nicht verändert, somit im Raum steht und keine Energie an die Umgebung abgibt. Es muss also nach der zeitunabhängigen Eigenschaft "bestimmte Gesamtenergie" gesucht werden. Wir benutzen daher ein mathematisches Hilfsmittel, den sog. Separationsansatz. Mit dessen Hilfe lässt sich die Wellenfunktion in zwei Funktionen, die nur noch von einer Variablen abhängig sind, zerlegen. Diese Funktionen sind ebenfalls Wellenfunktionen.

Separationsansatz: 
$$\Psi(x;t) = a(x) \cdot b(t)$$
  
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 a(x)}{dx^2} \cdot b(t) + E_{pot} \cdot a(x) \cdot b(t) = i\hbar \cdot \frac{d b(t)}{dt} \cdot a(x)$ 

Formel 4.1.2.12: Separierte Schrödingergleichung

Zugunsten der Übersichtlichkeit schreiben wir für die zweite Ableitung der Funktion a(x), a''(x) und für die erste Ableitung von b(t), b'(t). Diese Gleichung teilen wir schließlich durch a(x) und b(t). Siehe Formel 4.1.2.13 auf der nächsten Seite.

$$\begin{split} -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \cdot a^{\prime\prime}(x) \cdot b(t) \; + \; E_{pot} \cdot a(x) \cdot b(t) \; = \; i \, \hbar \cdot b^{\prime}(t) \cdot a(x) \qquad | \; : a(x) \; , \; : b(t) \\ \\ -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \cdot \frac{a^{\prime\prime}(x)}{a(x)} \; + \; E_{pot} \; = \; i \, \hbar \cdot \frac{b^{\prime}(t)}{b(t)} \end{split}$$

Formel 4.1.2.13: Separierte Schrödingergleichung

Auf der linken Seite steht nun eine reine Funktion des Ortes, auf der rechten Seite eine Funktion der Zeit. Linke und rechte Seite müssen gleich einer Konstanten sein, damit die Gleichung erfüllt ist. Diese Separationskonstante nennen wir Gesamtenergie und setzen sie mit dem ortsabhängigen Teil gleich, denn wir suchen einen Ausdruck für die Gesamtenergie der zeitunabhängig ist.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{a''(x)}{a(x)} + E_{pot} = E_{ges} \qquad | \cdot a(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot a''(x) + E_{pot} \cdot a(x) = E_{ges} \cdot a(x)$$

Formel 4.1.2.14: Separierte Schrödingergleichung

Wie wir wissen, ist a(x) der ortsabhängige Teil der Wellenfunktion. Daher ergibt sich letztendlich für die zeitunabhängige Schrödingergleichung bei  $a(x) = \Psi(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Psi''(x) + E_{pot} \cdot \Psi(x) = E_{ges} \cdot \Psi(x)$$

Formel 4.1.2.15: Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Diese Gleichung beschreibt stationäre Zustände eines Teilchens in einem beliebigen Potential. Daher bezeichnet man diese Gleichung auch als stationäre Schrödingergleichung. Wir wollen nun versuchen diese Gleichung anzuwenden, nämlich auf ein Elektron in einem Potentialtopf,

der jedoch zunächst eindimensional sein soll und aus dem das Elektron nicht entweichen kann. Der Potentialtopf hat eine bestimmte Breite x, die von 0 bis a reicht. Das Elektron kann sich nur auf dieser Strecke bewegen. Für Wellen gilt in der klassischen Wellenmechanik: Stehende Wellen bilden sich dann aus, wenn die Strecke x = a ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge ist. Dies ist beinahe analog zu den stehenden Wellen aus Kapitel 4.1.1 zu sehen, nur dass wir uns jetzt nicht auf einer Kreisbahn befinden, auf der die Welle mit sich selbst interferiert, sondern auf einer geraden Strecke bei der Knotenpunkte<sup>1</sup> immer bei 0 und a liegen. Das Potential können wir uns so vorstellen:

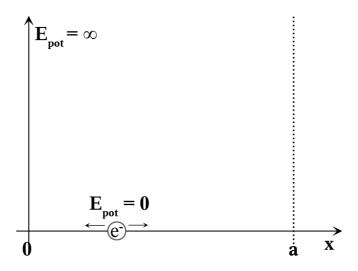


Abbildung 4.1.2.3: eindimensionaler Potentialtopf

Das Elektron besitzt, da es am Boden des Potentialtopfes liegt,  $E_{pot}$ = 0. Seine kinetische Energie berechnet sich in Anlehnung an De Broglie über:

Bedingung der stehenden Welle: 
$$\frac{n \cdot \lambda}{2} = a$$

De-Broglie-Wellenlänge:  $p = \frac{h}{\lambda} = n \cdot \frac{h}{2a}$ 
 $E_{ges} = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e} = n^2 \cdot \frac{h^2}{8m_e a^2}$ 

Formel 4.1.2.16: E<sub>ges</sub> im Potentialtopf der Breite a

Die Energie ist wieder quantisiert. Versuchen wir nun die zeitunabhängige Schrödingergleichung auf das Elektron anzuwenden. Da keine potentielle Energie vorliegt fällt dieser Teil der Gleichung raus. Weiterhin fassen wir Energie und den Vorfaktor auf der

<sup>1</sup> Ein Knotenpunkt ist ein Ort an dem die Amplitude der Welle immer Null ist.

linken Seite zu einer Konstanten mit dem Wert  $B^2 = 2mE_{ges}~\hbar^{-2}$  zusammen. Die Gleichung lautet dann:

$$\Psi''(x) = -B^2 \cdot \Psi(x)$$

Formel 4.1.2.17: zeitunabhängige Schrödingergleichung ohne Potential

Die zweite Ableitung der Wellenfunktion stimmt bis auf den Faktor -B<sup>2</sup> mit der Wellenfunktion überein. Diese Eigenschaft besitzen sowohl die Sinus- als auch die Cosinusfunktion (vgl.:  $\sin''(x) = -\sin(x)$ ). Da  $\Psi(0) = 0$  jedoch ein Knotenpunkt ist, kommt nur die Sinusfunktion in Frage. Diese Bedingung nennt man auch Randbedingung. Eine zweite Randbedingung lautet  $\Psi(a) = 0$ , da dort ebenfalls ein Knotenpunkt liegt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons muss außerhalb des Potentials Null sein, daher sind diese Randbedingungen notwendig. Unsere Wellenfunktion hat die Form:

$$\Psi(x) = A \cdot \sin(Bx)$$

Formel 4.1.2.18: Ansatz zur Lösung der Schrödingergleichung

Die zweite Randbedingung  $\Psi(a) = A \cdot \sin(B \cdot a) = 0$  ist dann gegeben, wenn  $B \cdot a = n \cdot \pi$ , denn der Sinus hat bei  $n \cdot \pi$  eine Nullstelle. Über B können wir dann die Gesamtenergie ausdrücken.

$$B = n \cdot \frac{\pi}{a} = \sqrt{\frac{2mE_{ges}}{\hbar^2}}$$

$$E_{ges} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 \text{ma}^2} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2}{8 \text{ma}^2}$$

Formel 4.1.2.19: Gesamtenergie im Potentialtopf

Wir haben hier ausschließlich mit Randbedingungen und der zeitunabhängigen Schrödingergleichung die Formel für die Gesamtenergie aus Formel 4.1.2.16 und deren Quantisierung hergeleitet. Das war bei Bohr nicht der Fall. Die Schrödingergleichung muss

keine Quantisierung postulieren, sondern sie ergibt sich bei ihrer Lösung automatisch. Unser Ziel ist aber die Wellenfunktion des Elektrons, die wir jetzt herleiten können. In Formel 4.1.2.18 ist nur noch A unbekannt. Um A zu errechnen, müssen wir die Schrödingergleichung normieren. Das heißt, wir stellen der Gleichung eine Bedingung, die sie erfüllen muss. Für unseren Fall wäre das die Tatsache, dass sich das Elektron innerhalb des Potentials, also zwischen 0 und a, aufhält und somit die Wahrscheinlichkeit das Elektron innerhalb des Potentials anzutreffen 1 ist. Mathematisch ausgedrückt müssen wir daher das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichte von 0 bis a errechnen. Wir erinnern uns, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte das Betragsquadrat der Wellenfunktion ist und können daher A rechnerisch bestimmen.

$$\int_{0}^{a} |\Psi(x)|^{2} dx = 1 \quad \rightarrow \quad \int_{0}^{a} |A|^{2} \cdot \sin^{2}(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x) dx = |A|^{2} \cdot \left[ \frac{1}{2}x - \frac{a}{4n\pi} \cdot \sin(\frac{2n\pi}{a} \cdot x) \right]_{0}^{a}$$
$$= |A|^{2} \cdot \frac{1}{2} a = 1 \quad \rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Formel 4.1.2.20: Bestimmung von A mit der Normierungsbedingung (s. Mathematischer Anhang)

Wir haben nun die Wellenfunktion und die Energiewerte eines Elektrons in einem eindimensionalen Potentialtopf mit Hilfe von Randbedingungen, Normierung und der stationären Schrödingergleichung vollständig beschrieben.

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin(\frac{n\pi}{a} \cdot x)$$
 und  $E_{ges} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\text{ma}^2}$ 

Formel 4.1.2.21: Wellenfunktion und Energie eines Elektrons im eindimensionalen Potentialtopf

Auf der nächsten Seite sehen wir in Abbildung 4.1.2.4 die Wellenfunktionen für verschiedene Energiewerte des Elektrons und die dazugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten. Da die Welt drei Raumrichtungen hat, ist die Schrödingergleichung nicht so einfach zu lösen wie gerade dargestellt. Für ein Elektron in einem dreidimensionalen Potentialkasten lautet sie:

$$\Psi_n(x;y;z) = A \cdot \sin(\frac{n_x \pi}{a} \cdot x) \cdot \sin(\frac{n_y \pi}{a} \cdot y) \cdot \sin(\frac{n_z \pi}{a} \cdot z) \quad \text{und} \quad E_{ges} = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 \text{ma}^2}$$

Formel 4.1.2.22: Lösungsansatz und Energie des Elektrons für einen dreidimens. Potentialkasten

Man sieht die Ähnlichkeit zum eindimensionalen Fall, jedoch lässt sich die Amplitude hier bedeutend schwerer bestimmen, was wir auch nicht tun wollen. Zunächst betrachten wir die Wellenfunktionen und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für den eindimensionalen Fall.

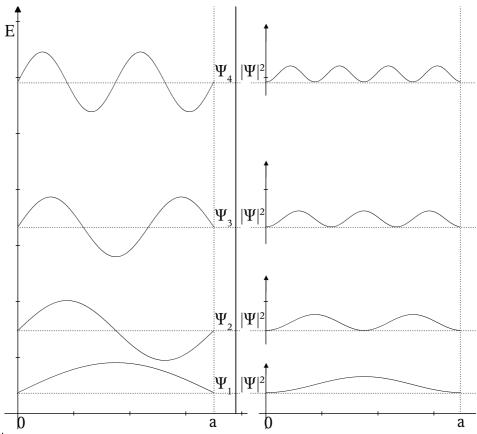


Abbildung 4.1.2.4: Wellen- und damit verknüpfte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für ein Elektron im eindimensionalen Potential

Im räumlichen Potential finden wir für die ersten beiden Niveaus folgende Verteilung:

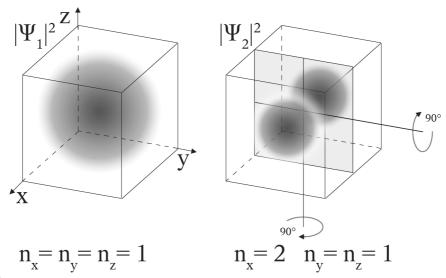


Abbildung 4.1.2.5: Wahrscheinlichkeitsdichten im dreidim. Potentialraum

Die Ähnlichkeit zum eindimensionalen Potential lässt sich noch erkennen, wenn wir die Wahrscheinlichkeitsdichten des dazugehörenden Niveaus auf die jeweilige Achse projezieren. Für den Grundzustand ist das noch kein Problem, für den ersten Anregungszustand erhalten wir drei unterschiedliche Orientierungen der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Raum, jeweils um 90°, wie eingezeichnet, gedreht. Jedes n kann zwar unabhängig voneinander beliebige Werte annehmen, für den Fall des ersten Anregungszustandes kann jedoch nur ein n den Wert Zwei besitzen, während die beiden anderen jeweils Eins haben müssen. Je nachdem welches n diese Werte annimmt, ergeben sich unterschiedliche Ausrichtungen im Raum, die jedoch alle die gleiche Energie haben. Hier erkennt man erstmals die Verwandtschaft mit Atomorbitalen bei denen trotz unterschiedlicher Ausrichtung auch die selben Energieniveaus resultieren. Auffällig in der Abbildung ist die Knotenfläche, auf der die Wahrscheinlichkeit ein Elektron zu finden Null ist. Dies ist analog zu den Knotenpunkten im eindimensionalen Fall zu sehen.

Wir haben nun eine Ahnung davon, wie die Schrödingergleichung funktioniert. Für die Anwendung auf ein Atom bedarf es jedoch sehr viel mehr Mathematik, mit der wir uns nicht aufhalten wollen. Einen kleinen Einblick gewähren wir uns aber dennoch, wenn auch wieder nur für das simpelste Element, den Wasserstoff.

Wir befinden uns jetzt im Atom und müssen natürlich die potentielle Energie des Elektrons berücksichtigen. Diese kennen wir bereits aus Formel 4.1.1.9. Die potentielle Energie des Elektrons ist abhängig von seinem Abstand vom Kern, der der Radius einer Kugel ist. Statt in kartesischen Koordinaten muss daher in Polarkoordinaten gerechnet werden, denn das Potential ist kugelsymmetrisch und kein Quader. Die Schrödingergleichung lautet zunächst analog zu Formel 4.1.2.15 und wird für den dreidimensionalen Fall erweitert:

Eindimensional: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \Psi}{d x^2} + E_{pot} \cdot \Psi = E_{ges} \cdot \Psi$$

Dreidimensional: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (\frac{d^2 \Psi}{d x^2} + \frac{d^2 \Psi}{d y^2} + \frac{d^2 \Psi}{d z^2}) + E_{pot} \cdot \Psi = E_{ges} \cdot \Psi$$

Formel 4.1.2.23: Ein- und dreidim. Schrödingergl., oben:  $\Psi$  ist  $\Psi$  (x), unten:  $\Psi$  ist  $\Psi$  (x;y;z)

Den Ausdruck in Klammern kann man auch durch einen Operator ausdrücken, den sog. Laplace-Operator. Dieser soll nun auf Kugelkoordinaten umgeformt werden.

Der Laplace-Operator (auch Deltaoperator) wird durch das Zeichen Delta ausgedrückt und ist nichts anderes als die in den Klammern (Formel unten) stehende Rechenvorschrift.

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right) \cdot \Psi = \Delta \cdot \Psi$$

Formel 4.1.2.24.: Laplace Operator multipliziert mit der Wellenfunktion

Der Zusammenhang zwischen Kugelkoordinaten und kartesischem Koordinatensystem wird in dieser Grafik dargestellt:

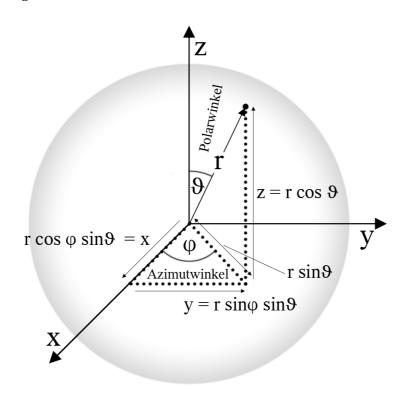


Abbildung 4.1.2.6.: Kugelkoordinate als Darstellung der Vektoren x, y und z Länge  $r = \sqrt{(x^2+y^2+z^2)}$ 

Nach Einsetzen, Ableiten und Umrechnen ergibt sich für den Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \cdot (r^2 \frac{d}{dr}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \cdot (\sin \theta \frac{d}{d\theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{d^2}{d\phi^2}$$

Formel 4.1.2.25: Laplace-Operator in Polarform

und somit für die stationäre Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\cdot \big[\frac{1}{r^2}\cdot\frac{d}{dr}\cdot \big(r^2\frac{d}{dr}\big) + \frac{1}{r^2\mathrm{sin}\,\vartheta}\cdot\frac{d}{d\,\vartheta}\cdot \big(\mathrm{sin}\,\vartheta\frac{d}{d\,\vartheta}\big) + \frac{1}{r^2\mathrm{sin}^2\,\vartheta}\cdot\frac{d^2}{d\,\varphi^2}\big]\cdot \Psi \ + \ E_{pot}\cdot\Psi \ = \ E_{ges}\cdot\Psi$$

Formel 4.1.2.26: stationäre Schrödingergleichung,  $\Psi$  ist  $\Psi(r; \vartheta; \varphi)$ 

Wie schon beim eindimensionalen Potential wird für die Schrödingergleichung hier ebenfalls ein Separationsansatz gemacht. Vorhin diente er dazu die Wellenfunktion in einen orts- bzw. zeitabhängien Teil zu zerlegen, jetzt zerlegen wir in einen Radial- und einen Winkelanteil, wobei wir die Winkel nochmal gesondert separieren können.

$$\Psi(r;\vartheta;\varphi) = R(r) \cdot \underbrace{Y(\vartheta;\varphi)}_{= R(r) \cdot \underbrace{\Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)}}$$

Formel 4.1.2.27: Separationsansatz

Die Wellenfunktion zerfällt daraufhin in drei Differentialfunktionen, die Radial-, Polar- und Azimutalgleichung (vgl. Abbildung 4.1.2.6). Die Separationskonstanten dieser Funktionen werden n, m und l genannt. Die Lösung von  $\Theta(\vartheta)$  ergibt sogenannte Legendresche Polynome. Werden diese in Polarkoordinaten dargestellt, erhält man folgende Funktionen für einige der Polynome in Abhängigkeit von m und l.

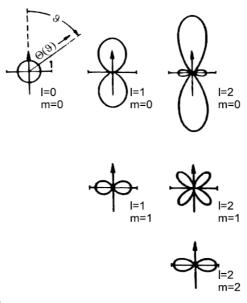


Abbildung 4.1.2.7:Legendre-Polynome

Multipliziert man  $\Theta(\vartheta)$  mit  $\Phi(\phi)$ , dem Azimutanteil, erhält man die Kugelflächenfunktion, eine winkelabhängige stehende Welle. Man kann das Quadrat dieser Funktionen auch als im Raum befindliche Oberflächen interpretieren, auf denen ein Teilchen entlanglaufen würde, wenn es nicht noch den Radialanteil gäbe.  $Y(\vartheta;\phi)$  gibt also die Form eines Orbitals an. Diese ist ebenfalls wieder abhängig von m und l.

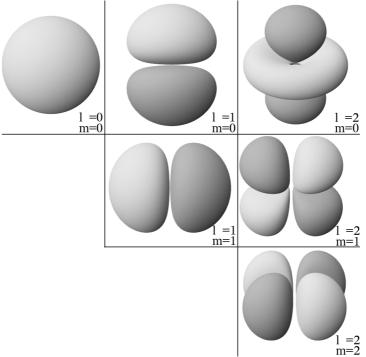


Abbildung 4.1.2.8: Kugelflächenfunktionen

Das Quadrat von R(r) multipliziert mit der Oberfläche der Kugelschale ergibt die Wahrscheinlichkeitsdichte in Abhängigkeit vom Radius. Sie beschreibt sozusagen das Innere der Kugelflächenfunktion und wird von n und l bestimmt.

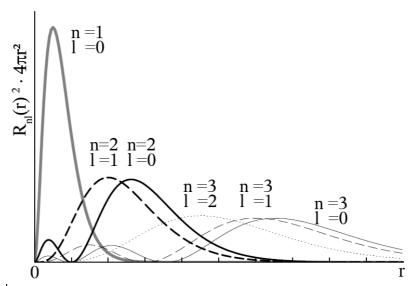


Abbildung 4.1.2.9: Radiale Wahrscheinlichkeitsdichten

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb eines Orbitals ist wie wir sehen (Abbildung 4.1.2.9) nicht überall gleich. Für den Grundzustand liegt die größte Wahrscheinlichkeitsdichte beim Bohrschen Radius, für höhere Zustände liegen die Maxima der radialen Dichten der Zustände so wie im Bohr-Sommerfeld-Modell beschrieben, jedoch existieren auch noch Nebenmaxima. Die Lösung der Schrödingergleichung ergibt bei Vernachlässigung der Masse des Protons und der damit zugrundeliegenden Schwerpunktsdiskussion des Systems Elektron-Kern, für den Wasserstoff genau das Bohrsche Atommodell. Für höhere Elemente mit mehr Elektronen wird die Schrödingergleichung sehr viel komplexer und die Wellenfunktion ebenso. Sie ist jedoch das beliebteste Mittel zur näherungsweisen Beschreibung von Zuständen und Energien der Quantenobjekte. Es gibt übrigens keine wirkliche Herleitung der Schrödingergleichung, denn sie basiert auf keiner wirklichen klassischen Theorie, bis auf der Annahme von Materiewellen durch De Broglie. Umso erstaunlicher erscheint da die Denkleistung Schrödingers, weshalb Richard Feynman (1918-1988), der Schöpfer des Doppelspaltexperiments auch folgende treffenden Worte für die Schrödingergleichung fand: "Woher haben wir diese Gleichung. Nirgendwoher. Es ist unmöglich, sie aus irgendetwas Bekanntem herzuleiten. Sie ist Schrödingers Kopf entsprungen." Spektroskopische Messungen bestätigen die Richtigkeit der Überlegungen Schrödingers, da sich die Energiedifferenzen der berechneten Zustände als Spektrallinien zeigen. Mittels der drei Separationskonstanten kann eindeutig die Form des Aufenthaltsraums, die Energie und Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung eines Elektrons in der Atomhülle bestimmt werden. Für jede Kombination von Quantenzahlen gibt es demnach unterschiedliche Lösungen der Schrödingergleichung. Das Schema zur Lösung aus dem eindimensionalen Fall, den wir berechnet haben, bleibt jedoch immer gleich. Da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Atom an den Rändern des Potentials asymptotisch gegen Null geht (Siehe Abbildung 4.1.2.9) ist der Aufenthaltsraum prinzipiell nicht begrenzt. Als eigentliches Orbital bezeichnet man daher nur den Raum in dem die Wahrscheinlichkeit das Elektron anzutreffen mindestens 90% ist, bzw.  $|\Psi(x)|^2 \ge 0.9$ .

## 4.1.3 Exkurs zu den Quantenzahlen

Wie bereits erwähnt, entsprechen die Separationskonstanten aus der Schrödingergleichung den Quantenzahlen n, 1 und m und sind mathematisch miteinander verknüpft. Die Hauptquantenzahl n gibt, allgemein gesagt, die Größe des Orbitals an und entspricht beim Wasserstoff den Energieniveaus, da die Energie im Wasserstoff nur von n abhängt. Warum das so ist werden wir gleich sehen. Die Quantenzahl 1 bezeichnet die Form des Orbitals und kann die Werte 0...(l-1) annehmen. Beispiele sehen wir in Abbildung 4.1.2.8. Sie wird auch

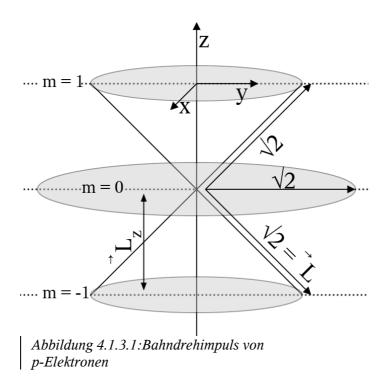
Drehimpulsquantenzahl genannt. In Formel 4.1.1.1 hatten wir den Bahndrehimpuls eines Elektrons als Vielfaches von  $\hbar$  angesehen. In der Quantenmechanik definiert sich der Wert des Gesamtbahndrehimpulses als vektorielle Größe nach Formel 4.1.3.1, wobei der Betrag des Vektors L der Wert des Gesamtbahndrehimpulses ist und L die Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl darstellt. Diese setzt sich ihrerseits aus den einzelnen Drehimpulsquantenzahlen 1 der Elektronen zusammen ( $L = l_0 + l_1 + l_2 + ... + l_1$ ). Beim Wasserstoff ist L mit 1 gleichzusetzen.

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)} \cdot \hbar$$

Formel 4.1.3.1: Länge des Gesamtbahndrehimpulsvektors

Die Quantenzahl 1 ist also wichtig für den Wert des Gesamtbahndrehimpulses. Auch wenn ein Elektron de facto keinen fixen Bahndrehimpuls haben darf, so lässt sich doch damit rechnen, wenn man von Vektorbetrachtungen ausgeht. Die Quantenzahl m kennzeichnet die Richtung des Bahndrehimpulses, bzw. Bahndrehimpulsvektors. Sie kann die Werte -l, -(1-1),...0,...(1-1), 1 annehmen. Dass damit nicht nur die Ausrichtung des Orbitals im Raum gemeint sein kann, sehen wir im Vergleich der Orbitale ab 1 = 3. Die magnetische Quantenzahl hat also durchaus auch mit der Form der Elektronenwolke zu tun. Da bei l=3 und m=0 eine Komponente des Bahndrehimpulsvektors Null ist, ändert sich auch die Form der Elektronenwolke. Die Quantenzahl m ist nur messbar wenn ein äußeres Magnetfeld am Elektron anliegt, abgesehen davon sind die Orbitale mit gleichen Nebenquantenzahl, aber unterschiedlicher Magnetquantenzahl energetisch gleichwertig. Das Magnetfeld wird meist in Richtung der Z-Koordinate angelegt. Die Länge des Bahndrehimpulsvektors berechnet sich dann nach den Regeln der Vektorrechnung aus der Summe der Quadrate der drei Richtungsvektoren  $L = \sqrt{(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)}$ . Siehe Abbildung 4.1.3.1. Sie zeigt veranschaulichend den Bahndrehimpuls von p-Elektronen, d.h. (1 = 1), im dreidimensionalen Raum. Eingesetzt in Formel 4.1.3.1 ergibt sich für die Länge des Bahndrehimpulsvektors √2ħ. Meist notiert man aus Bequemlichkeit nur  $\sqrt{2}$ .

Die Quantenzahl m beschreibt die Länge des Vektors  $L_z$ , der Projektion des Bahndrehimpulsvektors auf die z-Achse.  $L_z$  ist definiert als  $m \cdot h$ , wonach sich für die Quantenzahl  $m = L_z \cdot h^{-1}$  ergibt.



Die Nomenklatur s,p,d,f... für l=0,1,2,3... hat sich aus der Spektroskopie eingebürgert, wonach man Spektrallinien den Nebenschalen zuordnete und nach dem Aussehen (sharp, principle, diffuse, fundamental) gliederte.

Am Anfang des Kapitels hielten wir fest, dass die Energieniveaus im Wasserstoffatom nur von der Hauptquantenzahl abhängig sind. Dies beruht zunächst einmal auf der Lösung der Schrödingergleichung. Anschaulich kann man es jedoch wie folgt darstellen: Das Elektron im Wasserstoffatom ist vollkommen allein in der Atomhülle. Es kann prinzipiell in jedes Orbital aufsteigen ohne von störenden Einflüssen befallen zu sein. Für das Wasserstoffatom gilt: E(1s) < E(2s) = E(2p) < E(3s) = E(3p) = E(3d) < E(4s)... Zu jedem 1 gibt es 2l+1 entartete, d.h. energetisch gleiche Zustände. Bei komplexeren Elementen befinden sich mehrere Elektronen in der Atomhülle. Diese stören sich aufgrund ihrer Abstoßung und aufgrund der Abschirmung<sup>1</sup>. Quantenmechanisch lassen sich die Auswirkungen bei Mehrelektronensystemen mit der Überlappung von Orbitalen erklären. Durch unterschiedliche radiale Wahrscheinlichkeitsdichten (Abbildung 4.1.2.9) ergeben sich für Elektronen aus höheren Hauptschalen, aber geringen Werten von 1, erhöhte Wahrscheinlichkeitsdichten (Nebenmaxima) innerhalb der tiefer liegenden Orbitale kleinerer Hauptquantenzahlen. In den Überlappungsbereichen wirkt die Abschirmung vermindert auf das Orbital, das mit dem zweiten Maximum in das eigentlich energieärmere Orbital hineinragt. Daraus resultiert eine stärkere Wirkung der Coulombkraft auf das Elektron des Orbitals mit dem größerem Wert

<sup>1</sup> Elektronen schirmen die positive Ladung des Atomkerns teilweise gegenüber anderen Elektronen ab.

von n. Es kommt zu einer Verringerung der Energie dieses Zustandes und gleichzeitig zu einer Energieerhöhung des eigentlich Energieärmeren. Beim Wasserstoff kann dieser Effekt nicht auftreten, da nur ein Elektron vorliegt. In anderen Atomen spalten sich die Unterschalen in unterschiedliche Energien auf, wie es von Sommerfeld postuliert wurde und mit Schrödinger berechenbar ist. Es ist sogar so, dass sich die Energieniveaus der Unterschalen nicht nur aufspalten, sondern Zustände existieren, die sich in der Hauptquantenzahl unterscheiden, aber energetisch gleichwertig sind. So einen Fall trifft man erstmals beim 4s und 3d Orbital an. Bei komplexen Atomen gilt daher: E(1s) < E(2s) < E(2p) < E(3s) < E(3p)< E(3d) ≈ E(4s)... Das 4s Orbital wird aber häufig, abhängig von der Elektronenkonfiguration, bevorzugt besetzt, da seine Wahrscheinlichkeitsdichte in Kernnähe höher ist als die des 3d Orbitals und somit das Elektron einen energieärmeren Zustand einnehmen kann, sofern die Hundschen Regeln, auf die ich hier nicht weiter eingehen möchte, nichts anderes vorgibt. Eine Quantenzahl fehlt noch zur vollständigen Beschreibung des Atoms, die Spinquantenzahl s. Diese geht nicht aus der Schrödingergleichung hervor, wurde aber durch die Erweiterung der Schrödingergleichung durch die Pauli-Gleichung eingeführt. Sie beschreibt die Ausrichtung des magnetischen Spinmoments eines Teilchens. Die magnetische Spinquantenzahl kann bei Fermionen wie z.B. Elektronen die Werte  $s = \frac{1}{2}$ Ausrichtung parallel zu einem angelegten Magnetfeld und  $s = -\frac{1}{2}$  für die gegenläufige Ausrichtung einnehmen. Dies entspricht wieder der Projektion des tatsächlichen Elektronenspins auf die z-Achse und beschreibt die relative Länge dieses Projektionsvektors und nicht seinen Absolutwert sich in Analogie zur magnetischen Quantenzahl, bis auf die Tatsache, dass nur die Einstellungen  $\pm \frac{1}{2}$  erlaubt sind. Die Existenz des Spins wurde 1922 durch den Stern-Gerlach-Versuch gezeigt. Dabei wurde ein Strahl von Silberatomen durch ein Magnetfeld, welches lotrecht zum Teilchenstrahl stand, geschossen. Auf dem Schirm, dem die Atome anschließend begegneten, bildeten sich zwei Verteilungsmaxima. Im Silberatom heben sich alle Drehimpulse nach der Hundschen Regel auf. Nur das 5s<sup>1</sup> Elektron trägt zum Drehimpuls bei, der jedoch Null ist, da es im s-Orbital sitzt. Durch die Aufspaltung der Silberatomverteilung im Magnetfeld schloss man auf die Existenz einer weiteren Quantenzahl. Wie beim Bahndrehimpuls lässt sich der Spin eines Teilchens als Vektor schreiben.

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$$

Formel 4.1.3.2: Elektronenspinvektor

- 52 -

Für Übergänge der Elektronen in andere Energieniveaus gelten gewisse Regeln, die erfüllt sein müssen, damit ein Übergang stattfinden kann. Die Quantenzahlen sollten sich dabei auf folgende Weise ändern:

 $\Delta n = beliebig$ 

 $\Delta 1 = \pm 1$ 

 $\Delta m = 0, \pm 1$ 

 $\Delta s = 0$ 

Bei Emission oder Absorption eines Photons ändert sich der Bahndrehimpuls 1 des Elektrons um  $\pm 1$ . Die Erklärung ist so simpel wie einleuchtend: Photonen besitzen den Drehimpuls  $\hbar$ . Zur Erläuterung der übrigen Auswahlregeln bedarf es wieder eines übermäßigen Gebrauchs der Formelsprache, weshalb ich den Aspekt an dieser Stelle nicht vertiefen möchte. Die Auswahlregeln  $\Delta l = \pm 1$  und  $\Delta s = 0$  müssen nicht zwangsläufig erfüllt sein. Man spricht dann von "verbotenen" Übergängen, die mit geringer Wahrscheinlichkeit ablaufen. Neben den hier genannten gibt es noch andere Auswahlregeln, die z.B. für Kombinationen der Quantenzahlen gelten. Zum Beispiel koppeln sich Elektronenspin und Bahndrehimpuls zum Gesamtdrehimpuls des Elektrons. Das ist wichtig zur Erklärung der Feinstrukturaufspaltung.

## 4.1.4 Russell-Saunders Kopplung

#### 4.1.4.1 Feinstruktur im H-Atom

Betrachtet man Spektrallinien mit einem hochauflösenden Spektroskop, so wird man feststellen, dass sie oft keinen gleichmäßigen Peak zeigen, sondern zwei oder mehr Maxima haben. Eine Möglichkeit wie die Entartung von Zuständen aufgehoben werden kann, stellt die Feinstrukturaufspaltung dar. Diese resultiert aus der Kopplung (Addition) von Spin- und Bahndrehimpulsvektor des Elektrons zum Gesamtdrehimpulsvektor. Für seinen Wert gilt:

$$|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$$

Die Quantenzahl j darf die Werte l±s annehmen. Je nachdem in welche Anzahl von Spektrallinien ein Energieniveau aufgespalten wird, nennt man die entstandenen Zustände Singulett, Dublett oder Triplett. Die Energiezustände berechnen sich nach folgender Formel:

$$E_{nj} = E_n + \Delta E_{ls} + \Delta E_{rel}$$
  
=  $E_n \cdot (1 + \frac{\alpha^2}{n} \cdot (\frac{1}{j+0.5} - \frac{3}{4n}))$ 

Formel 4.1.4.2: Feinstruktur des Wasserstoff  $\alpha = 1/137$  Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante

 $E_n$  bezeichnet die Energie des jeweiligen Niveaus nach der Bohr Formel 4.1.1.11.  $\Delta E_{rel}$  ist ein Korrekturterm, die relativistische Massenzunahme einrechnet. Was darf man sich darunter vorstellen? Laut der Keplerschen Gesetze für Planeten werden Elektronen in Kernnähe beschleunigt. Sie sind deshalb nach der Relativitätstheorie in Kernnähe schwerer. Nach Bohr bedeutet eine größere Masse einen kleineren Radius und somit verliert das Elektron Energie. Man kann es allerdings auch quantenmechanisch erklären, nämlich mit exakt dem gleichen Ansatz, den wir gerade bei der Erläuterung der Sortierung der Energieniveaus gemacht haben. Bei Orbitalen mit kleinen Werten von n liegen die Wahrscheinlichkeitsdichten in der Nähe des Kerns höher. Dadurch kommt es, analog zu vorhin, zu einer Energieminderung. Im Wasserstoffatom liegt für jeden Zustand ein Dublett vor, bis auf die s-Nebenschalen. Die Quantenzahl j kann zwar die Werte  $1 + \frac{1}{2}$  oder  $1 - \frac{1}{2}$  annehmen und es ergibt sich mit 1 = 0folglich  $\pm \frac{1}{2}$ , jedoch muss man die Länge der Vektoren bestimmen und eine Vektorlänge ist immer positiv, weshalb man den Betrag der Quantenzahl j (für das Wasserstoffatom) nehmen muss. Es resultiert nur ein möglicher Wert für diesen Zustand. Daher findet für einfach besetzte s-Orbitale keine Feinstrukturaufspaltung statt, im Gegensatz zu einfach besetzten p-Orbitalen. Bei ihnen kommt es, da j = 1/2 bzw. 3/2, zur Feinstrukturaufspaltung in ein Dublett. ΔE<sub>ls</sub>, entspricht dann den Aufspaltungsenergien, relativ zur Ausgangslage, in Abhängigkeit von j.

$$\Delta E_{ls}(j) \ \, => \ \, \Delta E_{ls}(l+\frac{1}{2}) = lx \qquad \qquad bzw. \qquad \qquad \Delta E_{ls}(l-\frac{1}{2}) = -(l+1)x$$

Der Multiplikator x ist die Kopplungskonstante, die Auskunft über die Größe der Aufspaltung gibt. Sie verhält sich proportional zur vierten Potenz der Kernladungszahl.

$$E_{nl} \qquad \int dE_{ls} (l+\frac{1}{2})$$

$$-(l+1) \times \Delta E_{ls} (l-\frac{1}{2})$$

Abbildung 4.1.4.1: allgemeine Feinstrukturaufspaltung  $E_{nl} = E_n$ 

Warum beobachtet man, außer beim Übergang auf das 1s Niveau, bei allen Zuständen im Wasserstoffatom Dubletts, obwohl doch die Feinstrukturregel für alle s-Orbitale gilt? Der aufmerksame Leser wird schnell die Fangfrage erkannt haben. Da alle Unterschalen im Wasserstoffatom energetisch gleichwertig sind, fallen die Unterschalen mit den Hauptschalen zusammen. Das Fehlen von Dubletts in den s-Orbitalen tritt übrigens auch bei den Alkalimetallen auf, die wie der Wasserstoff nur ein Valenzelektron haben.

Bei Berechnung der zu erwartenden Spektrallinien geht man erwartungsgemäß so vor:

$$E_{Photon} = E_{n_1} - E_{n_2}$$

Formel 4.1.4.3: Energie eines emittierten Photons

Für  $E_{n1}$  oder  $E_{n2}$  sind jetzt  $E_{nl} + \Delta E_{ls}$  (l+1/2) bzw.  $E_{nl} + \Delta E_{ls}$  (l-1/2) einzusetzen, je nachdem welchen Übergang man berechnen will. Es drängt sich die Frage förmlich auf, ob unter Beachtung der Auswahlregeln die Übergänge zwischen unterschiedlichen Feinstrukturniveaus beliebig sind. Nein, sind sie nicht, denn die wichtige Auswahlregel  $\Delta j = 0, \pm 1$  hatte ich vorhin nur angedeutet, da wir die Spin-Bahn-Kopplung noch nicht kannten. Eine weitere zu klärende Frage wäre, in welchen Größenordnungen sich die Feinstrukturaufspaltung abspielt. Das ist sehr unterschiedlich. Beim Wasserstoff liegt sie für die Balmer Linien bei ca. 0,01nm , für die Natrium D-Linie, die noch gesondert behandelt wird, jedoch schon bei 0,6nm.

### 4.1.4.2 Spektroskopische Notation

In der Spektroskopie hat sich eine andere Schreibweise für die Konfiguration von Elektronen etabliert. In ihr ist die Art der Feinstrukturaufspaltung bereits enthalten. Allgemein setzt sich diese Notation folgendermaßen zusammen:

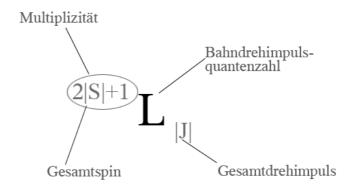


Abbildung 4.1.4.2: Spektroskopische Notation. L, S und J sind als Kopplung aller Drehimpulse l s und j zu verstehen.

Die Multiplizität gibt an, in wie viele Spektrallinien sich ein Zustand aufspaltet. Quantenmechanisch ausgedrückt bezeichnet die Multiplizität die Anzahl der möglichen Richtung des Spinvektors. Addieren sich die Spinquantenzahlen der Elektronen zu Null (2.0)+1 = 1 ergibt sich ein Singulett-Zustand. Die Spektrallinie wird nicht aufgespalten. Für die Multiplizität 2 ergibt sich ein Dublett (2 Linien pro Zustand), bei 3 ein Triplett und ein Quartett liegt bei 4 vor (eher selten). Betrachten wir als Beispiel neutrales Helium (HeI) im Grundzustand mit der Konfiguration  $1s^2$ . Für den Bahndrehimpuls 1 = 0 beider Elektronen ergibt sich auch für die Summe der Bahndrehimpulse L = 0, da nur ein Orbital mit anregbaren Elektronen vorliegt. S addiert sich jedoch zu Null, da nach dem Pauliprinzip die Elektronen in einem Orbital entgegengesetzten Spin haben müssen. Demnach ergibt sich für die Multiplizität der Wert 1. Da sowohl S als auch L Null sind, folgt für J ebenfalls Null. Die Notation für das Heliumatom im Grundzustand lautet daher <sup>1</sup>S<sub>0</sub>. Nun wollen wir die Schwierigkeit erhöhen und ionisieren das Helium zu He<sup>+</sup> (HeII). Es kann ein Übergang erfolgen, sodass die Konfiguration 1s1 2s1 vorliegt. Diesmal müssen wir die Summe der Bahndrehimpulse berechnen, da jedoch beide Null sind ergibt auch der Gesamtdrehimpuls Null. Beim Spin wird es nun bereits interessanter. Der Gesamtspin S errechnet sich mit S = s<sub>1</sub>+s<sub>2</sub>. Nun könnten die Elektronen entgegengesetzen Spin aufweisen, dann wäre S gleich Null und der Singulettzustand würde lauten <sup>1</sup>S<sub>0</sub>. Die Elektronen könnten jedoch auch gleichen Spin besitzen, dann wäre  $S = \pm 1$  und wir erhielten den Triplettzustand  ${}^{3}S_{1}$ . Beide Annahmen sind richtig. Man beobachtet beim Helium Übergänge für den Gesamtspin Null und Eins. Da man früher keine Erklärung für die Feinstruktur hatte, schrieb man die Singulettzustände einem Ortho-Helium und die Triplettzustände einem Para-Helium zu. Heute sind solche Verlegenheitsdefinitionen nicht mehr notwendig. Tiefer möchte ich an dieser Stelle nicht in die Finessen der Nomenklatur einsteigen. Wenn jedoch Interesse am Verständnis der Drehimpulskopplung bei komplexeren Konfigurationen besteht, ist Begleitmaterial auf der beigefügten CD im Ordner 4.1.4 vorhanden.

## 4.1.4.3 Weitere Aufspaltung von Spektrallinien

Neben der Feinstrukturaufspaltung gibt es noch andere Effekte, die eine Entartung der Spektrallinien verursachen. Beispielsweise beschreibt die Quantenelektrodynamik die sogenannte Lamb-Verschiebung, durch die eine Aufspaltung der Energieniveaus aufgrund von Zitterbewegungen des Elektrons in Erscheinung tritt. Je näher das Elektron dem Kern ist, umso größer ist diese Zitterbewegung und desto größer fällt die Aufspaltung aus. Die Hyperfeinstrukturaufspaltung hingegen basiert auf der Kopplung von Kernspin und Gesamtdrehimpuls zum atomaren Gesamtdrehimpuls f. Für Wasserstoff entspricht der Kernspin dem Protonenspin  $s_p = +1/2$ . Durch quantenmechanische Effekte kann sich der Protonenspin jedoch umkehren. Daraus folgt:

$$f = j \pm s_p$$

Formel 4.1.4.4: Atomarer Gesamtdrehimpuls des Wasserstoffatoms

Im Grundzustand  ${}^{2}S_{\frac{1}{2}}$  ist  $j = \frac{1}{2}$ . Das heißt, der Zustand wird in zwei Linien mit f = 0 und 1 aufgespalten. Die Energiedifferenz der beiden Niveaus beträgt nur 6  $\cdot$  10  $^{\text{-5}}$  eV. Der Übergang zwischen den beiden Niveaus liegt im Radiobereich, bei 1420,4 Mhz und entspricht einer Wellenlänge von 21cm. Diese Spektrallinie ist von spezieller Bedeutung für die Astronomen zur Messung der Verteilung des Wasserstoffs (Stärke der Linie) speziell in Gasnebeln und anderen Bereichen der Milchstraße. Wasserstoff findet man überall in Galaxien, wenn auch in lokal unterschiedlicher Konzentration. Über die Dopplerverschiebung der 21cm Linie (Rot-/Blauverschiebung) bestimmen Radioastronomen die Geschwindigkeit mit der sich eine Galaxie, oder Gaswolke relativ zu uns bewegt. Bewegt sich die Galaxie auf uns zu, so wird die Wellenlänge der 21cm Linie etwas verkürzt, verschiebt sich also in Richtung 20cm (wird blauer) und umgekehrt. Sogar die Temperatur des Wasserstoffs ist indirekt über die Linienbreite der 21cm Linie messbar. Dazu später aber mehr. Beobachtet man die 21cm Linie als Absorptions-, oder Emissionslinie? Natürlich muss sie als Emissionslinie auftreten, denn das Wasserstoffgas in den sog. Emissionsnebeln, die aufgrund der hohen Wasserstoffkonzentration ebenfalls Sternentstehungsgebiete sind, ist von geringer Dichte, wird durch die energiereiche Strahlung der umgebenden jungen Sterne aufgeheizt und so zur Emission von Linienspektren angeregt. Weitere Aufspaltung der Spektrallinien wird durch den Zeeman- und den Stark Effekt erzeugt, nur um sie der Vollständigkeit halber zu nennen.

Wir kennen jetzt alle Effekte, die für das Vorkommen von Spektrallinien verantwortlich sind und wissen warum manche Linien beobachtet werden und manche nicht, oder zumindest seltener. Betrachten wir nun das vollständige Schema der Energiezustände im Wasserstoffatom:

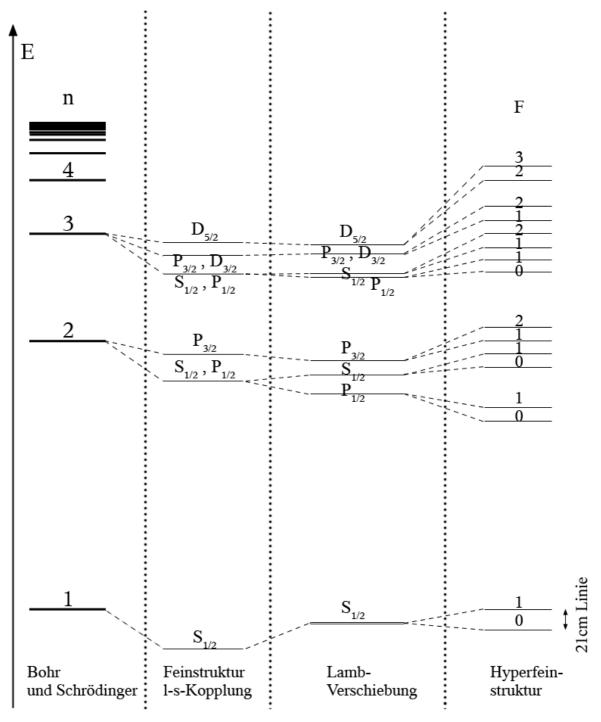


Abbildung 4.1.4.3: Vollständiges Spektrum des Wasserstoffs bis n = 3Die Energien und die Größen der Aufspaltungen sind nicht maßstabsgetreu dargestellt.

## 4.1.5 Das Natriumspektrum als Beispiel für höhere Atome

Natrium mit der Kernladungszahl Z=11, besitzt im Grundzustand die Konfiguration  $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$ . Falls die zehn inneren Elektronen die effektive Kernladung, die auf das Valenzelektron wirkt, um Zehn reduzieren würden, sodass nur noch eine effektive Kernladung von Eins wirkt  $Z_{\rm eff}=11\text{-}10=1$ , wären die Energieniveaus des Natriums wie die des Wasserstoff durch die Bohrsche Formel gegeben. Wie wir bereits wissen, kommt es aber zu Überlagerungen der Wellenfunktionen, oder wie wir es vorhin nannten, zur Überlappung von Orbitalen in gewissen radialen Abständen vom Kern, was zu einer Energieverringerung führt. Man kann die Formel jedoch so korrigieren, dass sie für Natrium zutrifft. Hier ist sie im Vergleich mit Wasserstoff aufgeführt:

Wasserstoff Natrium 
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot R_H \cdot hc \qquad \qquad E_{nl} = -\frac{Z_{\it eff}^2}{\left(n - \mu_{nl}\right)^2} \cdot R_{\infty} \cdot hc$$

Formel 4.1.5.1: Formel für die Energieniveaus bei Wasserstoff und Natrium

 $R_H$ = 1,0968 ·10<sup>7</sup> m<sup>-1</sup> für das H-Atom, da Schwerpunkt Proton – Elektron berücksichtigt.

 $R_{\infty} = 1,0974 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  allgemeine Rydberg-Konstante

h·c Produkt aus Lichtgeschwindigkeit und Planck-Konstante

 $u_{nl}$  Quantendefekt, abhängig von n und l

Der Quantendefekt  $\mu_{nl}$  ist notwendig um die Orbitalüberlappung in der Rechnung zu berücksichtigen. Er ist keine Konstante, sondern hat für jedes Element und jeden Zustand einen eigenen Wert. Für Natrium kann man diese Werte aus folgender Grafik entnehmen:

1	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	$n = \infty$
0	1,373 0,883 0,012	1,357	1,353	1,351	1,348
1	0,883	0,867	0,862	0,857	0,855
2	0,012	0,013	0,014	0,014	0,015
3	-	0,000	0,000	0,000	0,000

Abbildung 4.1.5.1: Quantendefekt für Natriumniveaus

Man sieht deutlich, dass der Quantendefekt hauptsächlich von 1 abhängt. Niedrige Drehimpulsquantenzahlen überlappen stärker, wie wir vorhin bereits gesehen haben. Um die möglichen Übergänge zwischen den resultierenden Energieniveaus darzustellen, nutzt man

meist sog. Grotrian-Diagramme. Diese sind grafisch aufbereitete Termschemen (Zusammenstellungen der Energieniveaus), bei denen die Energien ins Verhältnis zu den Nebenschalen, manchmal auch mit zusätzlicher Feinstrukturaufspaltung, gesetzt sind. Für Natrium ist hier ein Ausschnitt gezeigt:

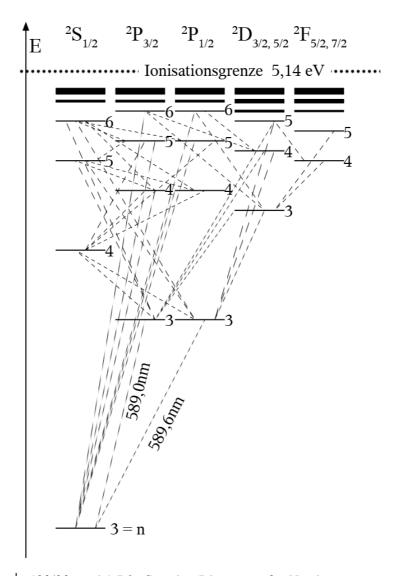


Abbildung 4.1.5.2: Grotrian Diagramm des Natriums

Die Übergänge im Natrium sind sehr ähnlich wie die des Wasserstoffs. Der Übergang vom 3s ins 3p Niveau entspricht dabei der  $\alpha$ -Linie der Lyman-Serie. Ebenfalls wie beim Wasserstoff verhalten sich die Spinmultiplizitäten. Überall herrschen Dubletts vor, mit Ausnahme, der s-Orbitale. Im Natriumspektrum beobachtet man im sichtbaren Bereich des Lichts bei ungefähr 589nm eine Spektrallinie. Im Sonnenspektrum sowie in einer Kerzenflamme hatte Fraunhofer sie bereits 1814 entdeckt, katalogisiert und mit D bezeichnet. Der Name hat sich bis heute gehalten, man nennt sie Natrium-D-Linie. Als hätte Fraunhofer eine Vorsehung gehabt, ist ausgerechnet diese Linie auch noch ein Dublett-Zustand, der zudem, wie wir im

Grotrian Diagramm sehen, recht weit auseinander liegt. Mit gehobenen Amateurspektrographen lässt sich diese Linie bereits optisch trennen. Bei meinen durchgeführten Messungen stand jedoch die Spektralklassifikation im Vordergrund und nicht die Trennung so feiner Übergänge. Wie man im Grotrian Diagramm sieht, erzeugt der Übergang von  $S_{1/2}$  -  $P_{3/2}$  eine leicht kürzere Wellenlänge. Wenn der Elektronenspin aber antiparallel ist, sodass der Übergang  $S_{1/2}$  -  $P_{1/2}$  stattfindet, ist die Energie etwas niedriger. Das sieht man auch wenn man j in Formel 4.1.4.2 einsetzt. Man erhält zwar falsche Werte, da die Formel so nur für Wasserstoff anwendbar ist, jedoch funktioniert das Prinzip. Antiparalleler Spin wirkt also energiemindernd bei der Feinstrukturaufspaltung.

## 4.1.6 Das Nebulium und die "verbotenen" Linien

Bei der 21cm Linie hatten wir bereits kurz Emissionsnebel angesprochen. Dies sind Wolken aus Wasserstoff und Spuren anderer Elemente, in denen Sterne entstehen. Junge heiße Sterne strahlen, das wissen wir, energiereiche UV-Strahlung ab. Mit Hilfe dieser UV-Strahlung kann nun zum Beispiel der sie umgebende Wasserstoff ionisiert werden. Bei der Rekombination, dem Einfangen von Elektronen, kehren die Teilchen nicht wieder sofort in den Grundzustand zurück, sondern durchlaufen eine Kaskade von Emissionsprozessen, während sie sich dem Grundzustand nähern. Durch die Rekombination wird Licht im sichtbaren Spektrum frei. Daher leuchten Emissionsnebel. Besonders markant ist dabei die H $\alpha$  Emissionslinie, die den Gaswolken aus ionisiertem Wasserstoff ihre charakteristische rötliche Färbung gibt. Der bekannteste Emissionnebel dürfte wohl der Große Orionnebel (Messier 42) sein.



Abbildung 4.1.6.1: Großer und kleiner Orionnebel, M42, 43

Im Jahre 1918 führten Studien der Emissionsspektren von kosmischen Nebeln zu der Entdeckung bisher unbekannter Spektrallinien. Diese konnten nicht in Laborversuchen reproduziert werden, weshalb man annahm, dass die fragwürdigen Linien von einem bisher nicht entdeckten Element stammen könnten. Das Element taufte man auf den Namen Nebulium. Besonders zwei der Linien waren aufgrund ihrer ausgeprägten Stärke auffallend. Zehn Jahre später fand Ira Bowen (1898-1973) die wahre Erklärung für ihr Auftreten. Sie erkannte, dass die Gasdichte in Emissionsnebeln so gering ist, dass sich Atome und Ionen dort zwischen 10 und 10000s ungestört im Raum bewegen können, bevor ein Zusammenstoß mit einem anderen Teilchen erfolgt. Das verschafft Elektronen in Atomen und Ionen genug Zeit, um von metastabilen Energiezuständen durch sog. verbotene Übergänge in den Grundzustand zurückzufallen. Wie gelangt ein Elektron in einen metastabilen Zustand? Die Elektronen, die bei der Ionisation von Wasserstoff frei werden, können durch Stöße Elektronen in anderen Atomen in höhere Energieniveaus anheben. Das geschieht zum Beispiel bei Elektronen des zweifach ionisierten Sauerstoffs OIII. Seine Elektronenkonfiguration lautet im Grundzustand 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>. Der Grundzustand ist bereits ein Triplettzustand. Trifft nun ein freies Elektron auf ein Elektron im Grundzustand des OIII findet eine Impulsübertragung statt. Das freie Elektron verliert Energie, während das Elektron im Grundzustand in ein anderes Niveau angehoben wird. Das ist kein Absorptionsprozess bei dem Photonen zur Anregung genutzt werden. Bei dieser Anregung spielen die Auswahlregeln zunächst eine untergeordnete Rolle, da sie ausschließlich durch Stoß erfolgte. Das Elektron im Grundzustand wurde nun z.B. auf das 3d-Orbital angehoben. Dies ist ein metastabiler Zustand, denn das Elektron kann ohne Verletzung der Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$  den Zustand nicht mehr verlassen. Außer durch Stoß mit einem anderen Teilchen können Elektronen auch durch die Rekombinationskaskade in metastabile Zustände geraten. In diesen verweilt das Elektron 10-100s, bevor es in einen tieferen Zustand fällt. Bei einem normalen Übergang liegt die Verweildauer im angeregten Zustand bei 10<sup>-8</sup>s. Im Fall von OIII kann das Elektron im metastabilen Zustand in die zwei energiehöchsten Niveaus des Grundzustandes zurückfallen und emittiert dabei zwei Linien im grünen Licht bei 500,7 und 495,9nm. Im Labor kann man verbotene Linien nicht nachweisen, denn wir können technisch die geringe Teilchendichte, die notwendig wäre, nicht erzeugen. In dichterem Gas würden die Elektronen in den metastabilen Zuständen durch Stöße abgeregt und nicht über die wesentlich unwahrscheinlicheren verbotenen Übergänge. Die Tatsache, dass solche Übergänge möglich sind und beobachtet werden, schließt ein Verbot direkt aus, iedoch ergibt sich aus der Schrödingergleichung eine milliardenfach Wahrscheinlichkeit für erlaubte Übergänge. Verbotene erkennt man in spektroskopischen Schriften an eckigen Klammern. Korrekterweise muss man für die beiden Übergänge vom d-Orbital folgende Notationen anwenden:

500,7nm [OIII] 
$$1s^22s^22p^2$$
  $^1D_2$  -  $^3P_2$ 

495,9nm [OIII] 
$$1s^22s^22p^2$$
  $^1D_2$  -  $^3P_1$ 

Die [OIII] Übergänge sind nur ein Beispiel von vielen verbotenen Linien, die man in Emissionsnebeln findet. Die Übergänge für [OII], [NIII], [NIII], [HeII], [SII], [CIII] sind nur einige Beispiele von Spektrallinien, die sich kosmischen Gasnebeln finden lassen. Keine dieser Spektrallinien ist jedoch so intensiv wie die [OIII]-Linien. Es gibt sogar Nebel bei denen die Intensität der [OIII]-Linien größer ist als die der H $\alpha$ -Linie. Indirekt lässt sich darüber in Abhängigkeit von der Temperatur, die Konzentration der O $^{2+}$ - und H $^+$ -Ionen sowie die der H-Atome in den Nebeln bestimmen. Der H $\alpha$ -Linie und insbesonders den [OIII]-Linien kommen bei der Beobachtung und Fotografie von Emissionsnebeln eine gesteigerte Bedeutung zu. Mittels Interferenzfilter können alle übrigen Wellenlängen ausgeblendet werden und nur die schmalen Spektralbereiche in denen der Nebel den Großteil seines Lichts emittiert, werden durch den Filter nicht geblockt und gelangen ins Auge, oder auf den CCD-Chip. Man erreicht dadurch eine Kontrasterhöhung, gegenüber des meist durch künstliche Lichtquellen aufgehellten Himmelshintergrundes und bei der Fotografie eine Verlängerung der maximal möglichen Belichtungszeit.

## 4.2 Die Beschaffenheit von Spektrallinien

#### 4.2.1 Kontinua

Wir wissen nun im Detail welche Spektrallinien einige Elemente erzeugen und haben uns lange durch die Quantenmechanik gearbeitet. Ein Sternspektrum können wir aber noch nicht erklären. Ein Effekt, der das Aussehen eines Sternspektrums beeinflusst, sind sog. Kontinua. Dies sind gleichmäßige Einsenkungen der Strahlungsintensitäten an den Ionisationsgrenzen, ganz im Gegensatz zu den scharfen Spektrallinien. Beim Wasserstoffatom kann jedes Photon mit einer höheren Energie als 13,6eV, was 91,2nm entspricht, das Wasserstoffatom aus dem Grundzustand heraus ionisieren. Wir wollen nun aber, da wir im sichtbaren Spektrum, oder zumindest in der näheren Umgebung des sichtbaren Spektrums spektroskopische Beobachtungen durchführen, von der Ionisationsgrenze der Balmerniveaus ausgehen. Diese nötige Ionisationenergie liegt bei 3,4 eV, was 364,5nm entspricht. Wenn das Elektron ungebunden ist, muss es keiner Quantisierung mehr gehorchen. Jedes Photon mit einer größeren Energie als 3,4eV kann daher ionisieren. Dies ist jedoch mit einer Einschränkung verbunden: Je näher die Photonenergie dem Energiewert der Seriengrenze ist, umso größer ist

die Wahrscheinlichkeit einer Ionisation. Umso höher die Energie des Photons ist, desto weniger wird es zur Ionisation genutzt. Zu kurzen Wellenlängen hin flacht sich die Einsenkung der Intensität des Spektrums wieder ab und verschwindet schließlich ganz. Dies ist in der Grafik nicht mehr zu sehen, jedoch können wir den sogenannten Balmersprung beobachten, eben diese Einsenkung, die wir gerade beschrieben haben. Den Effekt, dass das Spektrum nicht überall dem Verlauf der Planck Kurve folgt, sondern durch Kontinua unterbrochen ist, kann man an allen Seriengrenzen beobachten, jedoch ist der Balmersprung in mittelheißen Sternen besonders deutlich ausgeprägt, da sich bei ca. 10000 Kelvin das Maximum der Wasserstoffatome in angeregtem Zustand befindet. Ein Stern mit solcher Oberflächentemperatur ist bspw. der Stern Sirus im Sternbild Großer Hund, der uns vor allem in den Wintermonaten als hellster Stern am Himmel im Süden auffällt. Sein Spektrum zeigt den Balmersprung besonders deutlich.

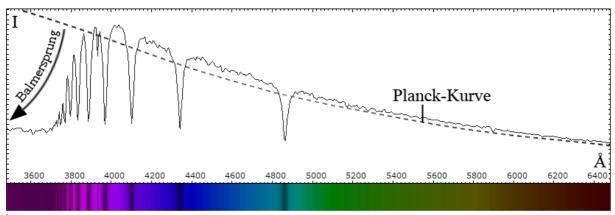


Abbildung 4.2.1.1: Spektrum von Sirius mit den starken Balmerlinien 1 Å = 10 nmEinheit  $[\mathring{A}]$  – Angström, nach Anders Jonas Ångström, einem schwedischen Astronom benannt.

#### 4.2.2 Linienbreite

Die Breite von Spektrallinien lässt sich auf mehrere Ursachen zurückführen. Zunächst einmal sind Übergänge aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation einer gewissen Grundunschärfe unterworfen. Abgesehen davon kann durch Stöße zwischen den Gasteilchen der Energiezustand verschmiert werden, da Impulsübertragung stattfindet. Dies hängt direkt mit dem Druck zusammen, denn je dichter das Gas ist, desto mehr Stöße können erfolgen. Die nächsthäufigste Ursache breiter Spektrallinien stellt neben der Druckverbreiterung der Dopplereffekt dar. Die Teilchen in der Sternatmosphäre sind ständig in Bewegung. Je nachdem wie sich ein Teilchen relativ zu uns bewegt, tritt eine Rot-, bzw. Blauverschiebung auf. Die Verbreiterung der Linie errechnet sich aufgrund ihrer Abhängigkeit von der Teilchengeschwindigkeit nach folgender Formel:

$$\Delta \lambda = \frac{\mathbf{v}}{c} \cdot \lambda = \sqrt{\frac{2\mathbf{k}\mathbf{T}}{m}} \cdot \frac{\lambda}{c}$$

Formel 4.2.2.1: Dopplerverbreiterung k Boltzmann-Konstante m Masse des Teilchens

Für die Verbreiterung der H $\alpha$ -Linie bei einer bestimmten Temperatur setzt man für  $\lambda$  656,3nm ein und als Masse die des Protons. Bei z.B. 10000 Kelvin erhält man eine Linienverbreiterung von 0,028nm, bei 6000 nur 0,21nm. Zum Dopplereffekt der Teilchenbewegung muss sich der Dopplereffekt der Rotation des Sterns addieren, sofern seine Drehachse nicht in unsere Richtung zeigt. In der Astrospektroskopie nutzt man den Dopplereffekt aus, um z.B. spektroskopische Doppelsterne, das sind zwei Sterne, die so weit weg sind, oder so dicht beisammen stehen, dass sie mit Teleskopen nicht in zwei Komponenten getrennt werden können, zu untersuchen. Diese Sterne rotieren um ihren gemeinsamen Schwerpunkt. Liegt nun die Ebene auf der sie sich umkreisen parallel zu unserer Blickrichtung, tritt selbstverständlich ein Dopplereffekt auf, der sich durch verschobene Absorptionslinien äußert. Das Spektrum, welches man bei Beobachtung eines spektroskopischen Doppelsterns sieht, ist die Überlagerung der Spektren beider Sterne. Je nachdem welcher Stern sich auf uns zu, bzw. von uns weg bewegt, verschieben sich die Absorptionslinien der Sterne in den Rot-, oder Blaubereich. Im Zusammenspiel der Dopplerverschiebung der Spektrallinien erscheinen die Linien im Spektrum doppelt. Während des Umlaufs der Sterne um ihren Schwerpunkt, ändert sich der Abstand zwischen den zwei "aufgespaltenen" Spektrallinien periodisch. Darüber lässt sich die Radialgeschwindigkeit<sup>1</sup> berechnen und somit die Umlaufdauer, die Art der gegenseitigen Umkreisung (elliptisch, kreisförmig) und das Verhältnis der Massen der beiden Doppelsternkomponenten bestimmen. Auf der Suche nach extrasolaren Planeten erzielte man mit der Ausnutzung des Dopplereffekts ebenfalls Erfolge. Planeten und Sterne rotieren auch um ihren gemeinsamen Schwerpunkt. Dadurch bewegt sich der Stern während des periodischen Umlaufs des Planeten relativ zu uns und sein Spektrum verschiebt sich leicht. Durch diese geringen Änderungen lassen sich unter Kenntnis der Größe des Sterns, Masse und Bahnradius eines extrasolaren Planeten bestimmen. Für Sternsysteme mit mehreren Planeten stellen diese Berechnung eine große Herausforderung dar, da die radiale Geschwindigkeitsänderung des Sterns sehr komplexe Formen annimmt.

Die Radialgeschwindigkeit ist in der Astronomie die Geschwindigkeit, die ein Himmelsobjekt, das einen Fixpunkt umkreist, relativ zur Blickrichtung hat.

## 4.2.3 Linienintensität

Von der Intensität einer Spektrallinie kann auf die Zahl der Atome geschlossen werden, die zu ihrer Emission beitragen und damit auf das Vorkommen der Elemente in einer Sternatmosphäre. Die Berechnung der Elementhäufigkeiten möchte ich jedoch verschweigen, da uns das wieder zurück zu Wellenfunktionen und Quantenmechanik bringen würde. Im Sonnenspektrum bspw. sind die Linien des CaII (ionisiertes Kalzium) wesentlich stärker als die des Wasserstoffs ausgeprägt.

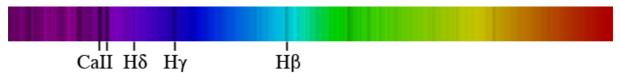


Abbildung 4.2.3.1: Sonnenspektrum mit den markanten CaII Linien bei 393,4 und 396,8nm

Heißt das nun in der Sonne ist mehr Kalzium als Wasserstoff vorhanden? Anfang des 20. Jhdts war das die gängige These. Heute wissen wir, dass die Intensität von Spektrallinien zusätzlich von der Temperatur und damit von der Anzahl der Atome in Anregungszuständen abhängt. Bei 5770K, der Oberflächentemperatur unserer Sonne, ist etwa jedes 200 Millionste Wasserstoffatom befähigt Balmerlinien zu produzieren. Demgegenüber sind 400mal mehr Ca<sup>+</sup>-Ionen im richtigen Zustand zur Absorption der beiden CaII-Linien. Die Variation der Linienstärke in Abhängigkeit von der Temperatur ist in der folgenden Abbildung gezeigt.

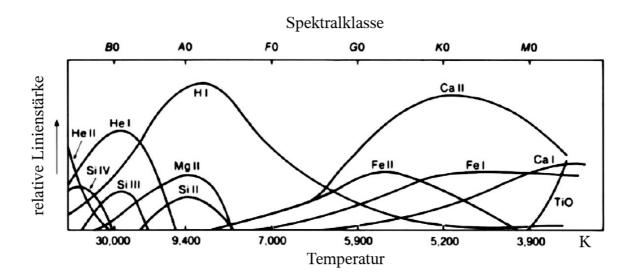


Abbildung 4.2.3.2: Linienstärken für einige Elemente und ihre Ionisationsstufen

In dieser Grafik fällt der Begriff Spektralklasse ins Auge, der synonym für die Oberflächentemperatur eines Sterns gebraucht wird.

# 5. Spektralklassifikation

## 5.1 Secchi-Klassen

Auf den ersten Blick erscheint die Vielfalt der unterschiedlichen Sternspektren aufgrund der enormen Anzahl an Absorptionslinien unübersichtlich. Bei näherem Hinsehen kann man die meisten Spektren jedoch in Gruppen einteilen. Pater Angelo Secchi unternahm diesen Versuch relativ früh, in den 1860ern. Sein System hatte bereits einige Ähnlichkeit mit der heutigen Art der Klassifikation von Spektren. Secchi gliederte seine Sternspektren in fünf Grundtypen, die er wie folgt beschrieb:

Typ I: Starke Wasserstofflinien; blau-weisse Sterne (Sirius, Wega).

Typ II: Zahlreiche Metalllinien (Natrium, Kalzium, Eisen), schwächere Wasserstofflinien; gelbe oder orangefarbene Sterne (Sonne, Capella, Arkturus).

Typ III: Auffällige Banden<sup>1</sup>, die aus vielen, jeweils zur blauen Seite stärker werdenden Linien bestehen, dazu die Metalllinien des Typs II; orangefarbene Sterne (Beteigeuze, Antares).

Typ IV: Banden, die zur roten Seite stärker werden; tiefrote Sterne; nur wenige mit blossem Auge beobachtbar.

Typ V: Emissionslinien im Spektrum, entweder zusätzlich oder anstelle von Absorptionslinien.

Typ V wurde später von E.C. Pickering vom Harvard Observatory so umdefiniert, dass er nur noch heiße Sterne mit breiten Emissionslinien von Helium, Kohlenstoff und Stickstoff, sowie Planetarische Nebel<sup>2</sup> umfasste. Im Jahre 1904 entdeckte man u.a., dass die Banden vom Typ III durch Titanoxid erzeugt werden.

<sup>1</sup> Banden sind Gruppen dicht nebeneinander stehender Spektrallinien des selben Stoffes.

<sup>2</sup> Ein Planetarischer Nebel ist die Gas- und Plasmahülle, die ein Stern am Ende seiner Entwicklung abstößt.

## 5.2 Harvard-Klassifikation

Mit der Weiterentwicklung der Spektroskopie und der technischen Möglichkeiten wurde klar, dass die Einteilung in fünf Klassen zu grob war. 1890 verfeinerten vier Mitarbeiter des Harvard Observatory Secchi's Einteilung, indem sie weitere Klassen einführten und mit den Buchstaben A bis Q benannten. Bis zum heutigen Stand wurden dezimale Untergruppen hinzugefügt, einige Klassen gestrichen, einige hinzugefügt, oder ihre Reihenfolge angepasst. Die heute verwendeten Spektralklassen lauten nach der Harvard-Klassifikation:

Тур	Kennzeichen		Hauptreihentemperatur
O B A F G K	He II, häufig Emissionsl He I H Metalle, H Ca II, Metalle Ca II, Ca I, Moleküle	inien $\left. R\left( CN,C_{_{2}}\right) \right _{C}$	28 000-50 000 K 9 900-28 000 K 7 400- 9 900 K 6 000- 7 400 K 4 900- 6 000 K 3 500- 4 900 K
M Zunehr	(TiO) S(ZrO) mender Kohlenstoffgehalt –	$N(C_2)$	2 000- 3 500 K

Die Harvard-Spektraltypen und ihre spätere Weiterentwicklung.

Abbildung 5.2.1: Harvard-Klassifikation ohne weiterentwickelte Unterklassen für O und M

Die Temperatur der Sternoberflächen nimmt entlang der Spektralklassen ab. Um sich die Reihenfolge der Spektraltypen einzuprägen, kann man sich dieses Merkspruches behelfen: "Oh, Be A Fine Girl Kiss Me!" Diese Klassen werden untereinander noch in das Stadium ihrer Entwicklung mit den Zahlen 0-9 eingeteilt. Unsere Sonne bspw. hat die Spektralklasse G2, was einem normalen Durchschnittsstern entspricht.

Es gibt noch diverse Unterklassen und Nebenklassen, die ich jedoch an dieser Stelle nicht näher nennen möchte, da ich sie bei meinen selbst aufgenommenen Spektren ebenfalls nicht differenzieren konnte.

1943 entwickelte man ein System, ähnlich zur Spektralsequenz, in der man die Leuchtkraft von Sternen charakterisierte. Eine Einteilung der Sterne anhand ihrer Spektren reichte nämlich nicht aus um alle verschiedenen Typen von Sternen zu beschreiben.

## 5.3 MK-Leuchtkraftklassen und das HRD

Die Helligkeiten von Sternen gleichen Spektraltyps können sich um mehrere Zehnerpotenzen unterscheiden. Das hängt mit der Größe eines Sterns zusammen. Man unterscheidet z.B. Riesen- und Zwergsterne. Alle Sterne erscheinen im Teleskop aber punktförmig, egal ob wir es z.B. mit einem Riesen oder Zwerg zu tun haben. Daher stellt sich die Frage, wie man anhand des Spektrums solche Sterne unterscheiden kann. Riesensterne sind um ein vielfaches größer als Hauptreihensterne gleichen Spektraltyps, haben aber fast die gleiche Masse wie diese. Daher unterscheiden sie sich u.a. durch die Dichte des Gases an der Oberfläche. Ein zunehmender Gasdruck führt, wie wir wissen, zu einer Verbreiterung der Spektrallinien. Darum sind z.B. die Wasserstofflinen bei Riesensternen schärfer als bei Hauptreihensternen. Die Leuchtkraftklassen in die die Sterne unterteilt wurden nennt man auch MKK-, oder kürzer MK-Klassen, nach ihren geistigen Vätern Morgan, Keenan und Kellman. Sie lauten wie folgt:

	Spektraltyp	absolute visuelle He	elligkeit
0 (null)	die extrem hellen, allerhellsten Überri den Magellanschen Wolken und der		-9
la	helle Überriesen		-8,2
lb	weniger helle Überriesen	_	-4,7
II	helle Riesen	_	-2,3
III	normale Riesen		1,2
IV	Unterriesen		2,0
V	Hauptreihe		2,6
sd (VI*)	Unterzwerge		
D, wd (VII*)	Weiße Zwerge		12,9

<sup>\*</sup> seltener

Abbildung 5.3.1: MK-Leuchtkraftklassen

Ein Beispiel für die Notwendigkeit der Leuchtkraftklassifikation ist hier gegeben. Trotz gleichen Harvard-Typs ist die Breite der Spektrallinien unterschiedlich:

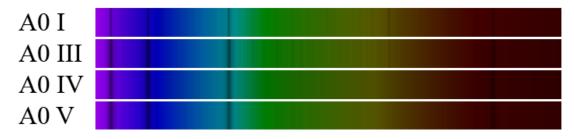


Abbildung 5.3.2: Spektren gleicher Harvard-, aber unterschiedlicher MK-Klassen

Wie misst man die absolute Helligkeit eines Sterns? Kurz gesagt: Man kennt die scheinbare Helligkeit des Sterns und durch Parallaxenmessung die Entfernung des Sterns. Jetzt berechnet man wie hell der Stern in 10 Parsec, das entspricht 32,6 Lichtjahren, erscheinen müsste. Diesen Wert nennt man absolute Helligkeit. Sie wird übrigens bzgl. des visuellen Spektralbereiches angegeben, weshalb sie auch absolute visuelle Helligkeit genannt wird. Außerdem ist sie äquivalent zum Integral (über den sichtbaren Teil des Spektrums) der spektralen spezifischen Ausstrahlung.

Trägt man nun absolute Helligkeit bzw. die spektrale spezifische Ausstrahlung und den Spektraltyp von vielen Sternen in ein Koordinatensystem mit gleichnamigen Achsen ein, so erhält man ein Diagramm, welches schon 1913 von Ejnar Hertzsprung und Henry Norris Russell entwickelt wurde. Im Hertzsprung-Russell-Diagramm (HRD) (Abbildung 5.3.3) kann man Entwicklungswege von Sternen verfolgen. Die Sterne laufen dabei im Zuge ihrer Entwicklung entlang von Ästen nach rechts, die mit ihrer MK-Klasse zusammenhängen. Wo sie ihre Entwicklung jedoch starten, hängt vorwiegend von ihrer Anfangsmasse ab. Die Phasen der Sternentwicklung sind weiterhin eng verknüpft mit der stellaren Nukleosynthese, die ich im Referat "Der Ursprung der Elemente" im Kurshalbjahr 12/1 in aller Ausführlichkeit dargestellt habe. Das Vortragsskript befindet sich auf der CD im Ordner 5.

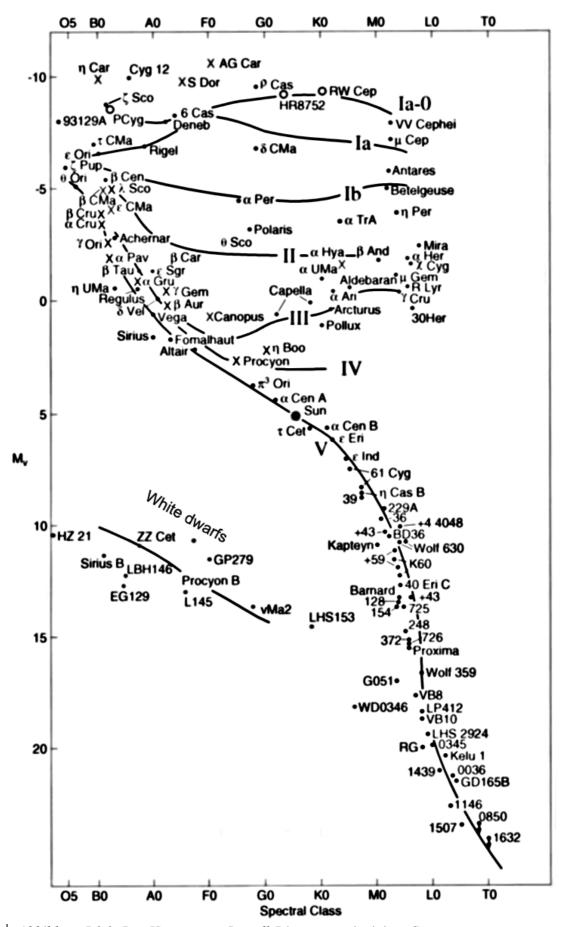


Abbildung 5.3.3: Das Hertzsprung-Russell-Diagramm mit einigen Sternen

# 6. Elementanalytische Sternspektroskopie - praktische Anwendung

## 6.1 Aufbau der Messapparatur

Ziel meiner Facharbeit war es, neben dem Verstehen der theoretischen Grundlagen auch selbst Sternspektren aufzunehmen und an ihnen die theoretischen Ergebnisse nachzuprüfen. Zur Aufnahme der Spektren stand mir aufgrund meiner Tätigkeit als Amateurastronom das nötige Equipment zur Verfügung, bis auf ein Beugungsgitter, das zur Erzeugung der Spektren notwendig war. Die Funktion des Beugungsgitters ist leicht erklärt. Ebenso wie beim Doppelspaltexperiment wird Licht an Gitterfurchen gebeugt. Je mehr Furchen/Spalte ein Gitter hat, desto schärfer werden die Maxima der Wahrscheinlichkeitsverteilung und desto kleiner werden die Nebenmaxima. Das bedeutet, je mehr Furchen das Gitter hat, desto höher ist das Auflösungsvermögen. Da jede Wellenlänge von dem Gitter unter einem anderen Winkel gebeugt wird, spaltet sich das Licht in ein Spektrum auf. Der Vorteil zu einem Prisma ist wohl die gleichmäßige Skalierung der Wellenlängen, im Gegensatz zum Prisma. Das verschafft Vorteile bei der Kalibrierung der Spektren. Wenn man zwei Spektrallinien im Spektrum kennt, kann man sozusagen eichen und alle weiteren Spektrallinien stimmen automatisch. Beim Prisma ist das nicht der Fall, der Beugungswinkel hängt nicht linear von der Wellenlänge ab. Der Nachteil zum Prisma ist allerdings, dass das Licht beim Gitter in verschiedene Ordnungen gebeugt wird und so Licht verloren geht, was mit einer höheren Belichtungszeit bei der Aufnahme von Spektren kompensiert werden muss. In der 0. Ordnung wird das Licht nicht diffraktiert, dieses ist einfach verloren. Das benutzte Beugungsgitter (Transmissionsgitter), welches zum Inventar der Schulsternwarte gehört, ist von der Firma Baader Planetarium und besitzt 207 Furchen/mm. Dies ergibt ein theoretisches Auflösungsvermögen von 0,1nm. Das Beugungsgitter lässt sich leicht über ein Filtergewinde in Okulare, oder Aufnahmeoptiken einsetzen und wird somit in den konvergenten Strahlengang des Teleskops eingebracht. Daraus ergibt sich ein weiteres Problem: Beugungsgitter funktionieren nur dann optimal, wenn parallele Strahlen auftreffen. Andernfalls kommt es zu einer Verschmierung der Spektrallinien, da in jeder Ordnung jeder Lichtstrahl, der auf das Beugungsgitter schräg auftrifft, zu einer Phasenverschiebung der Beugungsmaxima jeder Wellenlänge beiträgt. Das reduziert in unserem Fall das Auflösungsvermögen um den nicht unerheblichen Fakor 3,5. Für Spektralklassifizierung ist dies aber auf jeden Fall ausreichend. Ein weiterer Nachteil ist, dass aufgrund der spaltlosen Anordung Seeingeffekte<sup>1</sup> zum Tragen kommen.

<sup>1</sup> Als Seeing bezeichnet man die allgemeine Luftunruhe durch Strömungen warmer und kalter Luftschichten.

Hier, eine schematische Zeichnung wie das Lichtbündel, welches von der Teleskopoptik kommt, durch das Gitter gebeugt wird. In diesem Fall für zwei monochromatische Lichtstrahlen gleicher Wellenlänge. Die Phasenverschiebungen sind nicht berücksichtigt, da diese in zu kleinem Maßstab stattfinden.

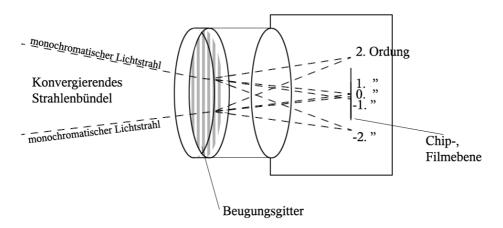


Abbildung 6.1.1: Messanordnung

Als Aufnahmeoptik diente mir die Philips ToUCam, eine Webcam, die eine verhältnismäßig hohe Lichtempfindlichkeit aufweist. Inzwischen befindet sich die Schule ebenfalls im Besitz einer solchen, kann folglich diese Messanordnung reproduzieren, wenn auch nicht mit meinem Spiegelteleskop mit 20cm Öffnung, das während der Messungen an den Coudé-Refraktor der Schulsternwarte angebracht war. Dadurch wurde bei Aufnahmen die chromatische Aberration (Farbfehler von Linsen), sowie der Astigmatismus (nicht exakte Bündelung des einfallenden Lichtes auf einen Brennpunkt) des Coudé-Refraktors umgangen.

# 6.2 Ablauf einer Messung

Bei der Aufnahme eines Sternspektrums verfährt man wie folgt:

- Die Auswahl geeigneter Sterne geschieht im Vorfeld (nicht über 3mag).
- Der Stern wird in das Gesichtsfeld eines ~6mm Okulars gebracht und fokussiert. Die Webcam wird statt des Okulars eingesteckt und die Aufnahmesoftware in Betrieb genommen (z.B.: VRecord, Giotto, VirtualDub, K3CCD). Man wählt daraufhin geeignete Einstellungen (üblich: 5fps, 640x480, Verstärkung/Gain wird zunächst hoch eingestellt und vor der Aufnahme jedoch auf einen möglichst niedrigen Wert angepasst). Im Anschluss wird das Beugungsscheibchen des Sterns fokussiert. Meist muss man den Okularauszug weiter herausfahren.

- Das Diffraktionsgitter wird nun in das Filtergewinde der Webcam eingeschraubt und ein Spektrum durch Betätigung der Steuerungstasten gesucht. Dieses liegt relativ weit außerhalb des Bereichs, den man auf dem Monitor sieht. Die Richtung in der es sich befindet, ist abhängig von der Drehung des Gitters. Das Spektrum wird daraufhin durch Drehung des Gitters und der Kamera so angepasst, dass es parallel zur 640pxund der Rektaszensionsachse verläuft.
- Nun werden die Ordungen miteinander verglichen. Das Licht ist in eine Ordnung geblazed, das bedeutet eine Ordnung erscheint heller. Diese wird für die Aufnahme ausgewählt. Man fokussiert das Spektrum nun, sodass es im Mittel möglichst dünn ist.
- Dann erfolgt der Start der Videoaufnahme als AVI. Wenn genügend scharfe Bilder aufgenommen wurden (~500 Frames) stoppt man die Aufnahme.

#### 6.3 Auswertung der Spektren

Jeder der folgenden Schritte kann mit Hilfe der Daten im Ordner 6.3 bzw. im Ordner Software auf der beigefügten CD nachvollzogen werden.

#### 6.3.1 Vorbereitung der Aufnahmen

In Heimarbeit wird das zuvor aufgenommene Video mit Hilfe des Programms VirtualDub in einzelne Bitmaps zerlegt. Das beste Bitmap wird ausgewählt und im Programm Iris geöffnet. Über *Digital Photo – 48bit to 16bit* werden dem Spektrum die Farbwerte (falls vorhanden) genommen. Eine Anpassung des Tonwerts gelingt bei Bedarf über *Threshold*. Das Spektrum sollte nicht ausgebrannt sein. Man spiegelt das Spektrum, falls notwendig, über *Geometry – Flip - Vertical*, entlang der y-Achse (von links nach rechts muss die Wellenlänge zunehmen). Das Bild wird abschließend als *.fit* abgespeichert.

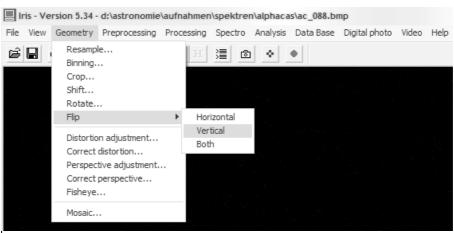


Abbildung 6.3.1.1: Benutzeroberfläche von Iris

#### 6.3.2 Das Programm Visual Spec

Sehr nützlich bei der Auswertung von Sternspektren erwies sich das Programm Visual Spec/Vspec (Version 3.3.3). Wir werden nun die Auswertung eines Spektrums am Beispiel des Sterns Sirius nachvollziehen. Öffnen wir dazu unser sirius. *fit* in Visual Spec. Wir markieren das Spektrum über den Knopf *Display reference binning zone*, ziehen den Auswahlkasten über das Spektrum und machen ihn möglichst schmal.



Abbildung 6.3.2.1: Benutzeroberfläche von Visual Spec

Der Knopf links daneben erzeugt aus der Auswahl ein Intensitätskurve. Diese schaut nur leider nicht nach einem üblichen Spektrum aus. Das liegt daran, dass die Empfindlichkeit der Webcam bzgl. der Wellenlängen unterschiedlich ist. Dennoch lässt sich über *Tools – Synthesis* ein Spektrum synthetisieren über welches man schon Aussagen treffen kann.

#### Abbildung 6.3.2.2: Synthetisiertes Spektrum von Sirius

Man sieht zum Beispiel, dass die Spektrallinien nach links dichter werden. Weiterhin sind sehr wenige markante Spektrallinien vorhanden, dafür jedoch ein paar sehr breite und starke. Es liegt die Vermutung nahe, dass es sich um H-Linien handeln könnte. Die Stärke der H-Linien spricht für den Spektraltyp A und die große Breite für einen Hauptreihenstern. Dennoch wollen wir es genau wissen. Über *Spectrometry - Calibration 2 Lines* müssen wir nun zwei Linien raten. Die Meldung, die zwischenzeitlich auftaucht, bestätigen wir einfach. Die H-Linien bieten sich sehr oft zur Kalibrierung an, daher werden die Wellenlängen der beiden gewünschten Wasserstofflinien, hier z.B. H $\beta$  und H $\gamma$  in Angström eingetippt und dann um die entspechenden Peaks herum eine Auswahl im Graphen gezogen. Hat man das geschafft, kann man im Fenster des Graphen den dritten Knopf von unten betätigen um die Achsenbeschriftung anzuschalten. Diese sollte so wie in Abbildung 6.3.2.3 erscheinen. Über *Format – Graphic* lässt sich dann nachträglich das Aussehen der Skalierung ändern.

Wenn wir das kalibrierte Spektrum synthetisieren, kann es auch per Rechtsklick entsprechend eingefärbt werden. Fügen wir jetzt über Tools – Library und Drag&Drop die Spektralklasse A2V (Spektralklasse von Sirius) ein, so sehen wir den in der Theorie erwarteten Spektralverlauf im Vergleich unserer Aufnahme. Woher die beiden Einsenkungen bei 510 und 575nm stammen, ist mir unbekannt. Die Absorptionslinien stimmen jedoch hervorragend überein. Im nahen IR und UV ist die Webcam unempfindlicher, im Grünbereich dafür umso mehr. Daher ist es unmöglich, Intensitäten korrekt wiederzugeben, sofern man nicht die gleichen Belichtungseinstellungen hat und somit auf Vergleichswerte zurückgreifen kann.

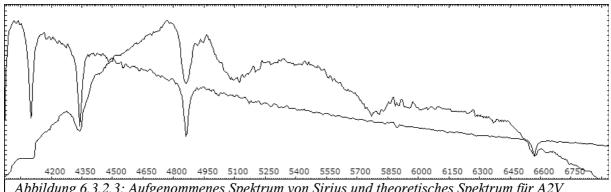


Abbildung 6.3.2.3: Aufgenommenes Spektrum von Sirius und theoretisches Spektrum für A2V

Um die spektrale Empfindlichkeit der Webcam herauszurechnen, verfahre ich nach dem Tutorial auf http://www.astrosurf.com/vdesnoux/tutorial5.html, verwende aber bei der Kontinuumskorrektur direkt *Execute* und den Schieberegler, um das Kontinuum zu erhalten. Die Verwendung des gleichen Kontinuums für mehrere Spektren hat bei mir nicht zum Erfolg geführt, da man immer leicht andere Einstellungen in der Webcamsoftware macht, die das Ergebnis dann verfälschen. Man erhält nach dieser Prozedur den unteren der beiden Graphen:

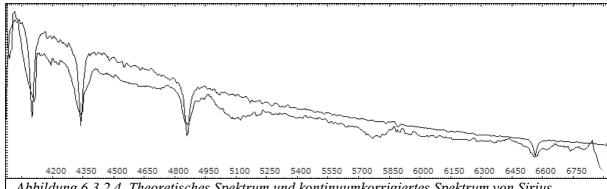


Abbildung 6.3.2.4. Theoretisches Spektrum und kontinuumkorrigiertes Spektrum von Sirius

Durch die Korrektur der Empfindlichkeit sieht das Spektrum so aus wie gewünscht und die Tatsache, dass es sich bei Sirius um einen A-V-Stern handelt, dürfte wohl niemand mehr abstreiten. Das Einzeichnen der Planck-Kurve über Radiometry – Planck ist ebenfalls eine nette Funktion, die das Programm Visual Spec bietet.

#### 6.3.3 Einordnung der gewonnenen Sternspektren in Spektralklassen

Alle neun Spektren, die ich bei meinen Messungen im Rahmen der Facharbeit gewinnen konnte, möchte ich hier nicht darstellen. Dafür aber die drei Aussagekräftigsten, weil Unterschiedlichsten. Die Farben der Graphen haben im Folgenden diese Bedeutung:

Blau: Ursprüngliches Spektrum (so wie es von mir aufgenommen wurde)

Orange: Empfindlichkeitskorrigierter Graph (auf diese Kurve bezieht sich das

synthetisierte Spektrum)

Grün: Theoretischer Graph der jeweiligen Spektralklasse

In Reihenfolge der Spektralklassen beginnen wir mit Sirius.

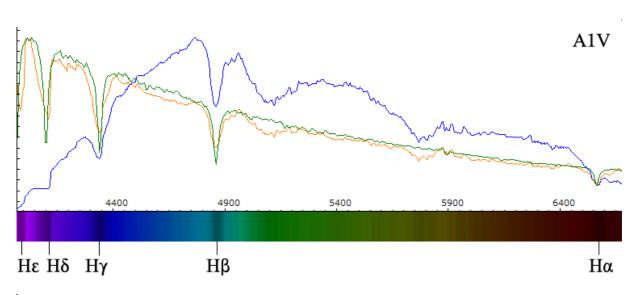


Abbildung 6.3.3.1: Sirius

Sirius hat eine Temperatur von 9400°K. Die ausgeprägten Wasserstofflinien (vgl. Abbildung 4.2.3.2) sind auf Druckverbreiterung zurückzuführen, da wir hier einen Hauptreihenstern vor uns haben. Sirius ist das Paradebeispiel für die Balmerlinien.

Ganz im Gegensatz dazu steht Aldebaran, der Hauptstern des Stiers, ein normaler Riese. Die Wasserstofflinien sind hier nicht mehr zu erkennen. Jedoch treten Metalllinien stärker hervor. Die berühmte Na-D Linie ist hier besonders stark, sowie das sog. Magnesium-Triplett bei 516,7, 516,9 und 517,3nm, das ich aber natürlich nicht spektroskopisch trennen konnte.

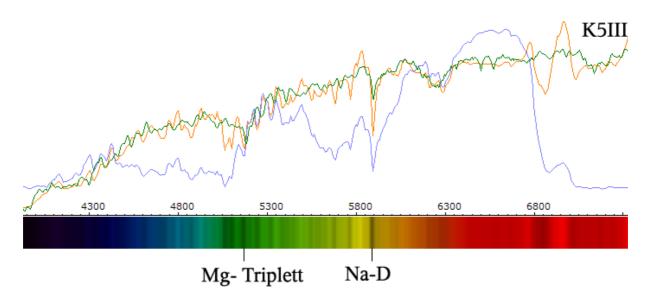


Abbildung 6.3.3.2: Aldebaran

Schlussendlich möchte ich Beteigeuze anführen. Er ist der linke obere Schulterstern im Orion und ein Roter Riese. Er gehört der Spektralklasse M an, in der viele Riesen beheimatet sind. Beteigeuzes Kern besteht aus Helium, um ihn herum brennt jedoch noch eine Schale aus Wasserstoff. Durch die große Entfernung der Photosphäre zum Kern, beläuft sich die Oberflächentemperatur Roter Riesen auf unter 3500° K. Das Strahlungsmaximum liegt dort bereits weit im infraroten Spektralbereich, weshalb sie uns in rot-oranger Farbe erscheinen. Charakteristisch für Sterne dieser Spektralklasse sind die Titanoxid-Banden.

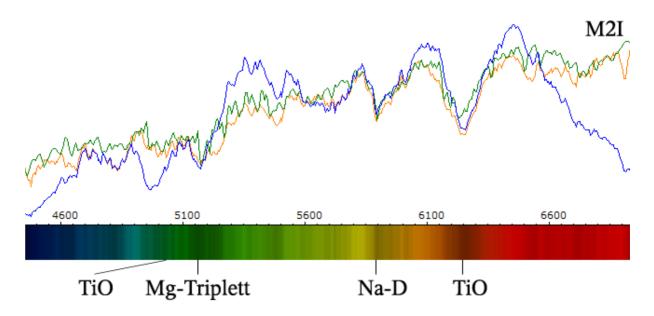


Abbildung 6.3.3.3: Beteigeuze

## 7. Abschließende Bemerkungen

Wie wir gesehen haben, lassen sich mit einfachen Mitteln bemerkenswert detailreiche Spektren von Sternen aufnehmen. Inwieweit kann man jedoch im Schulunterricht davon Gebrauch machen? In Zeiten des G8 wohl kaum, jedoch würde ich es als angenehm empfinden, wenn Spektroskopie nicht mit den Worten "Flammenfärbung", "Absorption" und "Emission" abgehandelt wird. Gerade auf dem Gebiet der Quantenmechanik besteht in den Lehrplänen Nachholbedarf. Speziell im Chemie Leistungskurs könnte der Abschirmungseffekt als Erklärung der Reihenfolge der Energieniveaus dienen, die zumindest von der Mehrheit der Lehrkräfte nicht weiter erläutert, sondern als Tatsache festgesetzt wird. Oft fehlt es an verständlichen Begründungen warum etwas so ist wie es ist. In den Naturwissenschaften wird dies ganz besonders schnell deutlich. Mit einem größeren physikalischen und mathematischen Grundwissen im Chemie Leistungskurs, wäre die Universalantwort auf viele Fragen "Black Box" weitestgehend abstellbar. Die bisherige Black Box stellte für mich die Quantenmechanik dar. Ich hoffe, dass in dieser Facharbeit dem naturwissenschaftlich interessierten Schüler und Lehrer ein Einblick in die Welt der Ouanten auf der Basis der Schulmathematik eröffnet werden konnte. Die Verständlichkeit und Nachvollziehbarkeit der einzelnen Rechenschritte ist dabei von großer Bedeutung. Daher bestand meine Hauptaufgabe bei der Anfertigung dieser Facharbeit darin, die höhere Mathematik auf ein für Schüler und Lehrer naturwissenschaftlicher Fächer verständliches Niveau zu bringen, sowie komplexe Sachverhalte so zu verbalisieren, dass sie mit einem Minimum an neuem Fachwortschatz begreifbar sind.

Für die Zukunft wünsche ich mir einen verstärkten Einsatz der Schulsternwarte im naturwissenschaftlichen Unterricht. Ich hoffe diese Facharbeit kann dafür einen Anreiz bieten. Nach den theoretischen Grundlagen, die durch diese Facharbeit gesetzt sind, gilt es nun die Erkenntnisse praktisch mit Schülern zu erarbeiten. Das kann auf einfachem Niveau, wie z.B. bei der Erklärung von Sternfarben in der Mittelstufe und im Astronomie Wahlfach geschehen, oder auch unter Einsatz des Diffraktionsgitters bei spektroskopischen Messungen und ihrer anschließenden Analyse, bspw. im Physik- und Chemie Leistungskurs. Um so einen anschaulichen und praxisnahen Unterricht zu ermöglichen, bedarf es engagierter Schüler und Lehrkräfte. Ich bin davon überzeugt, dass sich an einer Schule mit eigener Sternwarte und langer Tradition auf dem Gebiet der Astronomie ein solches Publikum findet und die Astronomie am "Anna" wieder einen Stellenwert erlangen kann, wie einst zu Zeiten Tycho Brahes bzw. der Folgejahre, insbesonders nach 1614.

## 8. Mathematischer Anhang

Die zur Gewährleistung des Textflusses nicht erläuterten komplexen mathematischen Umformungen sind im Folgenden aufgeführt.

Zu Kapitel 3.1 Seite 16 Formel 3.1.6-7:

Umformung des Rayleigh-Jeans-Gesetzes:

$$M(v) = \frac{2\pi v^2}{c^2} \cdot kT$$

Die Kenntnis über  $v = \frac{c}{\lambda}$  ist hier nicht ausreichend, da vom Integral

$$\int_{v}^{v+\Delta v} M(v) \, dv = \int_{v}^{v+\Delta v} \frac{2\pi v^2 kT}{c^2} \, dv$$

ausgegangen werden muss. Zur Umrechnung in Wellenlängendarstellung wird nun dv nach  $d\lambda$  abgeleitet.

$$\frac{dv}{d\lambda} = \frac{d(\frac{c}{\lambda})}{d\lambda}$$

In Analogie zu  $f(x) = \frac{1}{x} \rightarrow f'(x) = -\frac{1}{x^2}$  folgt daraus:

$$dv = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$$

Wir erhalten: 
$$-\int_{\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} M(\lambda) \, d\lambda = -\int_{\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \frac{2\pi \frac{c^2}{\lambda^2} kT}{c^2} \cdot \frac{c}{\lambda^2} \, d\lambda = -\int_{\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \frac{2\pi c kT}{\lambda^4} \, d\lambda$$

Zur Entfernung des Minuszeichens werden die Grenzen umgedreht, was auch völlig logisch erscheint, da die Frequenz bei steigender Wellenlänge abnimmt und somit das Integral wieder richtig orientiert ist.

$$\int_{\lambda+\Delta\lambda}^{\lambda} M(\lambda) \, d\lambda = \int_{\lambda+\Delta\lambda}^{\lambda} \frac{2\pi \, c \, kT}{\lambda^4} \, d\lambda$$

*Zu Kapitel 4.1.2 Seite 42 Formel 4.1.2.20:* 

Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im eindimensionalen Potentialtopf:

$$\int_{0}^{a} |\Psi(x)|^{2} dx = 1 \rightarrow \int_{0}^{a} |A|^{2} \cdot \sin^{2}(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x) dx = |A|^{2} \cdot \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{4n\pi} \cdot \sin(\frac{2n\pi}{a} \cdot x) \right]_{0}^{a}$$
$$= |A|^{2} \cdot \frac{1}{2} a = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Vor allem soll es hier um die nicht sofort ersichtliche Gleichwertigkeit von

$$\int |A|^2 \cdot \sin^2(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x) dx \quad \text{und} \quad |A|^2 \cdot \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{4n\pi} \cdot \sin(\frac{2n\pi}{a} \cdot x) \right] + C$$

gehen. Der Beweis gelingt entweder über partielle Integration, oder über die Ableitung der Integralfunktion. Die bevorzugte Methode ist vom persönlichen Gusto abhängig. Ich bevorzuge die zuletzt genannte.

Durch die Beziehung  $\sin(2x) = 2 \cdot \sin(x)$  lässt sich

$$|A|^2 \cdot \left[\frac{1}{2}x - \frac{a}{4n\pi} \cdot \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right] + C$$
 umformen zu:

$$|A|^2 \cdot \left[\frac{1}{2}x - \frac{a}{2n\pi} \cdot \sin(\frac{n\pi}{a}x) \cdot \cos(\frac{n\pi}{a}x)\right] + C$$

Die Integralfunktion F(x) wird nun abgeleitet und umgeformt. Man achte auf sicheren Umgang mit Produkt- und Kettenregel.

$$F(x) = |A|^2 \cdot \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{2n\pi} \cdot \sin(\frac{n\pi}{a}x) \cdot \cos(\frac{n\pi}{a}x) \right] + C$$

$$F'(x) = |A|^2 \cdot \left[ \frac{1}{2} - \frac{a}{2n\pi} \cdot \cos^2(\frac{n\pi}{a}x) \cdot \frac{n\pi}{a} - \frac{a}{2n\pi} \cdot \sin(\frac{n\pi}{a}x) \cdot (-\sin(\frac{n\pi}{a}x)) \cdot \frac{n\pi}{a} \right]$$

$$= |A|^2 \cdot \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cdot \cos^2(\frac{n\pi}{a}x) + \frac{1}{2} \cdot \sin^2(\frac{n\pi}{a}x) \right]$$

Weiterhin gilt  $\cos^2(x) = 1 - \sin^2(x)$  woraufhin sich die Integrandenfunktion f(x) wiederfinden lässt.

$$F'(x) = |A|^{2} \cdot \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cdot \cos^{2}(\frac{n\pi}{a}x) + \frac{1}{2} \cdot \sin^{2}(\frac{n\pi}{a}x) \right]$$

$$= |A|^{2} \cdot \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \sin^{2}(\frac{n\pi}{a}x) + \frac{1}{2} \cdot \sin^{2}(\frac{n\pi}{a}x) \right]$$

$$= |A|^{2} \cdot \sin^{2}(\frac{n\pi}{a}x) = f(x)$$
q.e.d

Das bestimmte Integral aus der Ursprungsformel löst sich wie folgt auf:

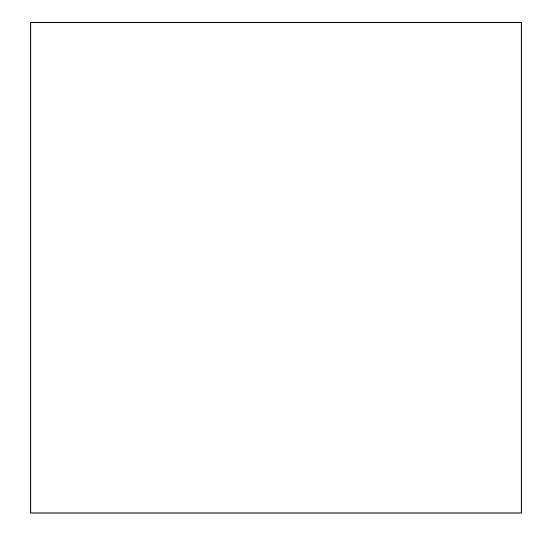
$$|A|^2 \cdot \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{4n\pi} \cdot \sin(\frac{2n\pi}{a} \cdot x) \right]_0^a = |A|^2 \cdot \frac{1}{2} a - \frac{a}{4n\pi} \cdot \sin(2n\pi) - 0$$

Man beachte:  $\sin(2n \pi) = 0$ 

9.	Beilage	<b>CD-ROM</b>
<b>J.</b>	Demage	CD ROM

Auf der hier	befindlichen	CD-ROM	ist	Beilagematerial	gespeichert	sowie	die	Facharbei	t im
PDF-Format	zugänglich.								

Ich bitte um sorgfältiges Lesen der *Readme.txt* im jeweiligen Ordner, sie enthält wichtige Informationen zu den Dateien und ihrer Anwendung.



## 10. Verwendete Software

Star Office 8 Sun Microsystems, Inc.

Adobe Photoshop CS2 Adobe

Mathplot http://mathplot.de/

Orbital Viewer http://orbitals.com/orb

Iris http://www.astrosurf.com/buil/us/iris/iris.htm

VirtualDub http://www.virtualdub.org/

Visual Spec 3.3.3 http://astrosurf.com/vdesnoux/

Die hier genannten Programme befinden sich teilweise auch auf der Beilage-CD.

# 11. Abbildungsverzeichnis

Die hier nicht angeführten Grafiken wurden selbst, z.T. mit den oben genannten Programmen, erstellt.

Abbildung	2.2.2	J.V. Feitzinger - Die Milchstraße – 2002 Spektrum Verlag				
Abbildung	4.1.2.7	PDF, Einführung in die Struktur und Materie – Atomphysik von Prof. Dr. Schmidt-Böcking und Christof Kelbach				
Abbildung	4.2.3.2	J.B. Kaler - Sterne und ihre Spektren - 1994 Spektrum Verlag				
Abbildung	5.2.1	"				
Abbildung	5.3.1	"				
Abbildung	5.3.3	"				

## 12. Literaturverzeichnis

Silvia A. Camejo	Skurrile Quantenwelt	2006	Springer Verlag		
J.V. Feitzinger	Die Milchstraße	2002	Spektrum Verlag		
James B. Kaler	Sterne und ihre Spektren	1994	Spektrum Verlag		
Kuchling	Taschenbuch der Physik	1988	Verlag Harri Deutsch Thun		
Rainer Müller und Hartmut Wiesner	Das Münchener Unterrichtskonzept zur Quantenmechanik				
G.D. Roth	Handbuch für Sternfreunde Band 1 1989 Springer Verlag				
Jonathan Tennyson	Astronomical Spectroscopy	2005	Imperial College Press		
Gerd Wedler	Lehrbuch der Physikalischen Chemie 2. Auflage 1985 VCH Verlag				

http://home.germany.net/101-92989/atom/arbeiten/gruppe4/

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/HPhc.html

 $http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/methoden\_I\_2.xhtml$ 

http://vqm.uni-graz.at/qms/

http://www.astro.uni-bonn.de/~deboer/sterne/hrdtxt.html

http://www.astronomie.de/fachbereiche/spektroskopie/einfuehrung/

http://www.avgoe.de/astro/Teil04/Radius.html

http://www.chemgapedia.de/

http://www.cip.physik.uni-muenchen.de/~milq/milq basiskursp01.html

http://www.epsilon-lyrae.de/

http://www.greier-greiner.at/hc/planck.htm

http://www.iap.unibonn.de/P2K/

http://www.itp.uni-hannover.de/

http://www.joergresag.privat.t-online.de/

http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC3/Kap\_IV/Drehimpuls.htm

http://www.pctheory.uni-ulm.de/didactics/quantenchemie/

http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/hydrogenlab/

http://www.roro-seiten.de/physik/

http://www.solstice.de/grundl d tph/

http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw2 ge/