Optisches Pumpen und Spektroskopie im optischen Bereich

Andreas Messer und Michael Wießner

Im diesem Praktikumsversuch konnte mit spektroskopischen Methoden elementare Eigenschaften von Wasserstoff und Iod untersucht werden. Zum einen konnte mittels Emissionsspektroskopie die Isotopenaufspaltung von Wasserstoff und Deuterium ermittelt werden, zum anderen mittels Absorptionsspektroskopie die vibronische Struktur von Iod. Im zweiten Teil wurde nun mittels optischem Pumpen und Doppelresonanzspektroskopie die Hyperfeinaufspaltung und der Zeemaneffekt an Rubidium bestimmt. Damit konnte der Kernspin I, das Erdmagnetfeld B_{Erde} und das Bohrsche Magneton ermittelt werden.

Versuchsdurchführung: 18. September 2006
Protokollabgabe: 22. September 2006

I. EINLEITUNG

Mittels spektroskopischen Methoden konnten bereits viele Erkenntnisse über den Aufbau der Materie gewonnen werden. Mit Hilfe der Emissionspektroskopie an Licht einer Gasentladungslampe, die mit Wasserstoff (H) und Deuterium (D) gefüllt war, konnte die Isotopenaufspaltung beobachtet werden, die durch die unterschiedlich schweren Kerne zustande kommt. Aus der Lage der Spektrallinen konnte so die Massendifferenz $\Delta m = (1,70 \pm 0,18) \cdot 10^{-27} kg$ zwischen H und D berechnet werden. Neben reinen Atomen kann man auch Moleküle spektroskopisch untersuchen, so wurde im Licht einer Halogenlampe ein Absorptionsspektrum von Iod I_2 aufgenommen. In diesem Spektrum sind die verschiedenen vibronischen Niveaus, die in Molekülen auftreten, aufgelöst. Daraus lassen sich dann die Vibrationskonstanten und die Dissoziationsenergie berechnen. Im zweiten Teil des Versuchs wurden die Hyperfein- und Zeemanaufspaltung an Rubidium Rb untersucht. Mit einfachen spektroskopischen Methoden lassen sich diese Effekte allerdings nicht auflösen, hier war optisches Pumpen und Doppelresonanzspektroskopie erforderlich, um die nötige experimentelle Auflösung zu erreichen. Dank dieser Messergebnisse waren wir in der Lage, das lokale Erdmagnetfeld $B_{Erde} = (35 \pm 1)\mu T$ zu bestimmen. Außerdem konnten wir die Kernspins und die magnetischen Momente bestimmen, und haben für das Bohrsche Magneton $\mu_B = (5,98 \pm 1,81) \cdot 10^{-5} eV/T$ erhalten.

II. THEORIE

Die Grundgleichung für spektroskopische Untersuchungen ist

$$\Delta E = h\nu. \tag{1}$$

Die Energie eines Photons $h\nu$ entspricht der Energiedifferenz zwischen zwei quantenmechanischen Zuständen. Im ersten Teil des Versuchs sind dies die elektronischen Energieeigenzustände im Wasserstoffatom oder die vibronischen Zustände im Iod-Molekül. Für das H-Atom gilt näherungsweise (ohne Berücksichtigung von Feinstruktur oder kleinerer Korrekturen):

$$\Delta E = E_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ mit } R_\infty = 13,6eV \tag{2}$$

Allerdings wurde bei der Ableitung dieses Ausdrucks die Vereinfachung des unendlich schweren Kerns gemacht, d.h. die Bewegung des Kerns um den gemeinsamen Schwerpunkt wurde vernachlässigt. Die unterschiedlichen Energiewerte von Isotopen lassen sich allerdings erklären, wenn man in der Bohrschen Postulaten den Drehimpuls des Elektrons $L = mvr = n\hbar$ durch den Drehimpuls von Elektron und Kern $L = \mu vr = n\hbar$ mit der reduzierten Masse $\mu = \frac{mM}{M+m}$ ersetzt [2]. Nach einigen Rechenschritten, analog der Herleitung mit festem Kern, kommt man schließlich zum korrigierten Bohrschen Radius $a_\mu = a_0 \frac{m}{\mu}$. Die Rydbergenergie wird zu $R_\infty(M) = \frac{\mu}{m} R_\infty$. Somit kann man bei Kenntnis über die Lage den Abstand der beiden Wellenlängen λ_D und λ_H das Verhältnis zwischen Wasserstoff- und Deuteriummasse bestimmen, bzw. daraus die Masse des Neutrons.

Im Fall des Iod-Moleküls sind neben den elektronischen Zuständen auch noch vibronische und Rotationseigenzustände des Moleküls vorhanden. Die Anregungsenergien für die Rotationen sind im Verhältnis zu Vibrationsanregungen klein, so dass auf Rotationen im weiteren nicht mehr eingegangen wird. Für die Schwingungsbewegung der Kerne im Molekül gilt näherungsweise das Morsepotential [2]:

$$U(r) = D(1 - e^{-\alpha(r-r_e)})^2 \tag{3}$$

mit D Dissoziationsenergie und r_e Kernabstand. Die Näherung durch das Morsepotential geht für kleine Auslenkungen um r_e in ein harmonisches Potential über, für große Abstände verschwindet dieses. Desweiteren lässt sich mit diesem die Schrödingergleichung näherungsweise

lösen, die Energie eines Vibrationsniveaus ist[2]:

$$E_{vib}(\nu) = \hbar\omega_e \left[\left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \beta\left(\nu + \frac{1}{2}\right)\right] \quad (4)$$

bzw. in Wellenzahlen:

$$\nu * (\nu) = \omega_e (\nu + 1/2) - \omega_e \chi_e (\nu + 1/2)^2 \quad (5)$$

mit der Vibrationsquantenzahl ν, sowie dem Vibrationsquant ω_e und der Anharmonizitätskonstanten $\beta\omega_e = \frac{\hbar\omega_e^2}{4D}$ (bzw. in Wellenzahlen ν^*: $\omega_e\chi_e = \frac{\hbar c\omega^2}{4D}$. Durch Absorption von Photonen mit passender Energie können die Elektronen im Molekül in einen angeregten Zustand übergehen. Im Gegensatz zu Übergängen mit gleichen elektronischen Zustand ($\Delta\nu = \pm 1$) existiert keine Auswahlregel für die Vibrationsquantenzahl ν. Die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Übergang stattfindet, gibt der Franck-Condon-Faktor an, der den Überlapp der Wellenfunktionen der beiden involvierten Niveaus - und somit auch die unterschiedlichen Kernabstände - berücksichtigt[5]. Die Wellenzahl der emittierten Photonen ist[1]:

$$\nu^* = T_e + \nu^*(\nu') - \nu^*(\nu'') \quad (6)$$

mit Differenz der elektron. Niveaus T_e, ν'' Grundzustand und ν' angeregter Zustand. Im Versuch tritt vorwiegend Absorption aus den Niveaus $\nu'' = 0$, $\nu'' = 1$ und $\nu'' = 2$ auf.

Die Emissions- /Absorptionslinien sind allerdings nie δ-förmig, sondern sie haben zum einen durch die endliche Lebensdauer der angeregten Zustände eine lorentzartige Linienverbreiterung. Zum anderen werden die Experimente an Gasen druchgeführt, die Bewegung der Atome führt zu einer Dopplerverschiebung der emittierten Strahlung. Der Übergang aller strahlenden/absorbierenden Atome ist daher dopplerverbreitert, die Verbreiterung hat eine gaußartige Form. Die Halbwertsbreite ist[4]:

$$\Delta\nu_{1/2} = \nu_0 \sqrt{\frac{8kTln2}{mc^2}} \quad (7)$$

Der zweite Teil des Versuchs erfolgt mit besser auflösender Spektroskopie, um die Hyperfeinaufspaltung oder den Zeeman-Effekt an Rubidium-Atomen zu messen. Durch die Wechselwirkung des Gesamtdrehimpulses $\vec{J}$ des Elektrons mit dem Kernspin $\vec{I}$, bzw. genauer dem vom Elektron am Kernort erzeugten Magnetfeld $\vec{B_J}$ und dem magnetischen Moment $\vec{\mu_I}$ des Kerns. Mit dem Gesamtdrehimpuls des Atoms $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$ kommt man zur Zusatzenergie durch die Hyperfeinstrukturaufspaltung

$$V_{HFS} = \frac{a_{HFS}}{2}(F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)) \quad (8)$$

mit der Hyperfeinkonstanten $a_{HFS} = \frac{g_I \mu_K B_J}{\sqrt{J(J+1)}}$. Durch den Gesamtdrehimpuls des Atoms F kann man ein magnetisches Moment $\vec{\mu_F} = -g_F \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{F}$ definieren. Der zugehörige Landé-Faktor ist in guter Näherung[4]:

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)} \quad (9)$$

Im Versuch wurden ^{85}Rb und ^{87}Rb untersucht; für die Übergänge der D_1-Linie ($^2P_{1/2}$ nach $^2S_{1/2}$) ist der Gesamtdrehimpuls der Hülle stets $J = 1/2$. Der Kernspin ist allerdings $I = \frac{5}{2}$ bzw. $I = \frac{3}{2}$. Dadurch spaltet die D_1-Linie in je 4 Linien pro Isotop auf (Auswahlregeln: $\Delta L = \pm 1$, $\Delta F = 0, \pm 1$). Die Absorptionswahrscheinlichkeit (und somit die Intensität der einzelnen Peaks im Experiment) ist durch die statistischen Gewichte der beteiligten Zustände bestimmt([1], es gilt:

$$a_i(F' \leftarrow F'') = \omega_i \frac{(2F''+1)}{(2F''_+ + 1) + (2F''_- + 1)} \times \times \frac{(2F'+1)}{(2F'_+ + 1) + (2F'_- + 1)} \quad (10)$$

Befinden sich die Atome in einem äußeren magnetischen Feld, dann können die magnetischen Momente μ_J mit dem Magnetfeld wechselwirken, die zuvor energetisch (2F+1)-fach entarteten Zustände (Quantenzahl m_F; $m_F \in$\{-F...+F\}) spalten nun auf. Die Zeemanaufspaltung ist[4]:

$$V_{Zeeman} = g_F \mu_B m_F B \quad (11)$$

Der Einfluss eines Magnetfeldes lässt sich auch noch in einem weiteren Zusammenhang messen. Befinden sich die Atome in einem äußeren Magnetfeld, so können sich die magnetischen Momente μ_J parallel zu diesem ausrichten. Wird dieses nun plötzlich ausgeschaltet, werden die magnetischen Momente um das verbleibende Erdmagnetfeld mit der Larmorfrequenz ω_L präzedieren. Dabei gilt:

$$\omega_L = g_F \frac{\mu_B}{\hbar} \left|\vec{B}\right| \quad (12)$$

III. EXPERIMENT

Der Versuch setzt sich aus zwei Teilen zusammen. Im ersten Teil wurde ein Czerny-Turner-Spektrometer (Abbildung 1) zur Analyse der elektromagnetischen Strahlung verwendet. Das geblazte Gitter im Spektrographen kann mit einem Schrittmotor um $sin\theta$ bewegt werden, so dass eine gleichmäßige Auflösung von $\Delta\lambda = 0.01nm$ erreicht wird. Der Spektrograph kann dabei in einem Bereich von 200nm - 1000nm arbeiten, wobei der Schrittmotor die Auflösung auf 0,01nm begrenzt. Für 500nm ist das Gitter geblazet, das heißt für diese Wellenlänge wird besonders viel Intensität am Detektor ankommen. Die jeweils durchgelassene Intensität wird von einem Photomultiplier (im Experiment wurde dieser immer mit U = 800V betrieben) registriert und vom Messrechner erfasst. Zur Eichung des Spektrometers wird zunächst das Spektrum einer Quecksilberlampe aufgezeichnet. Durch die grüne (546,07nm) und die gelben (576,96nm und 579,07nm) Linien kann das Spektrum auf Wellenlängenskala geeicht werden. Mit dem geeichten Spektrometer kann dann eine H/D-Lampe untersucht werden, außerdem kann die Absorption einer Halogenlampe beim

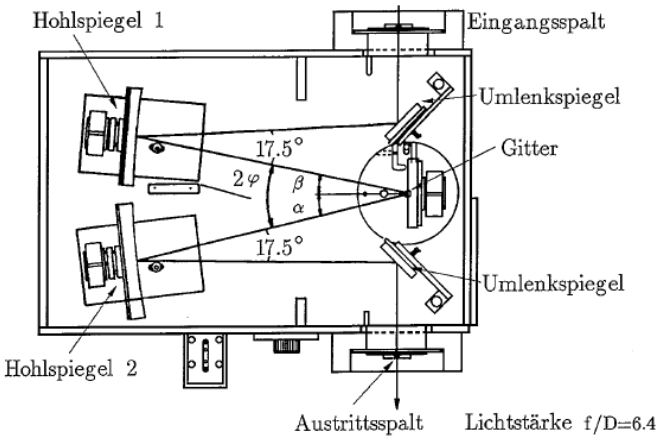

Abb. 1: Gitterspektrograph nach Czerny-Turner aus [1]

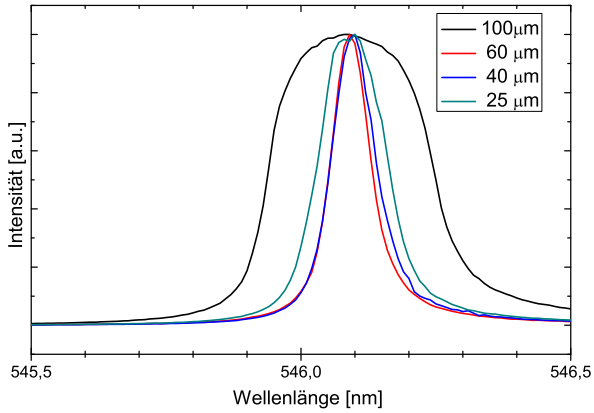

Abb. 2: normierte Spektren der gelbe Hg-Linie bei 546,07nm für verschiedene Spaltbreiten

Durchgang durch eine Iodzelle gemessen werden, woraus sich Aufschlüsse über die vibronische Struktur von I_2 ziehen lassen.

Im zweiten Teil werden Rubidiumatome (^{85}Rb und ^{87}Rb) mittels Resonanzspektroskopie und optischem Pumpen untersucht. Mit einem stückweise durchstimmbaren Diodenlaser (durch Verändern des Injektionsstromes emittiert dieser im Bereich der D_1-Linie von Rb) wird eine beheizbare Rb-Dampfzelle bestrahlt. Die transmittierte Strahlung wird mit einer Photozelle detektiert, das Signal mit zwei Op.-Amp.s verstärkt. An einem Oszilloskop (Injektionsstrom des Lasers auf x-Kanal und Photodiodenstrom auf y-Kanal) kann man die Hyperfeinaufspaltung sichtbar machen. Desweiteren kann durch ein Helmholtzspulenpaar ein Magnetfeld in der Rb-Zelle erzeugt werden, um eine Zeeman-Aufspaltung der Niveaus zu erhalten. Durch die Dopplerverbreiterung lassen sich diese allerdings nicht mit oben beschriebenem Verfahren auflösen, weswegen die Methode der Doppelresonanz eingesetzt wird. Mit einem Linearpolarisator und einem $\lambda/4$-Plättchen wird zirkular polarisiertes Licht erzeugt. Für rechtszirkular polarisiertes Licht gilt die Auswahlregel $\Delta m_F = +1$, so dass in den Zustand mit $m_F = F$ gepumpt wird, wohingegen das unter Niveau entvölkert wird. Da ein $\Delta m_F = +1$ für das gepumpte Niveau nicht mehr möglich ist, nimmt die Absorption des Laser in der Zelle ab. Durch Einstrahlen von Hochfrequenz mit einer Energie, die dem Abstand zweier Zeeman-Niveaus entspricht, kann induziert emittiert werden und das entvölkerte Niveau wird wieder besetzt. Das Laserlicht kann dadurch wieder absorbiert werden. Im Experiment geht man nun so vor, dass man die Frequenz der eingestrahlten HF-Strahlung in einem Bereich von ungefähr 400 kHZ variiert, um die genaue Position der Resonanz zu finden. Dazu wird am Ozsilloskop/Rechner die Absoption des Laser als Funktion der Hochfreqenzstrahlung dargestellt. Abschließend wird noch die Larmor-Frequenz ω_L gemessen, dazu steht ein Stromgenerator zur Verfügung, der mit steiler Flanke einen Stromimpuls an die Helmholtzspulen liefern kann. Dadurch wird es ermöglicht, das im Theorieteil beschriebene schnelle Ausschalten zu realisieren, da die Schwingung in der Absorption auf Grund der Larmor-Präzession innerhalb kurzer Zeit abklingt.

IV. AUSWERTUNG

A. Eichung und Auflösungsvermögen

Zu Beginn des Versuches musste der Spektrometer geeicht werden. Dafür kam eine Hg-Dampflampe zum Einsatz, deren grüne und gelben Linien wohlbekannt waren. Um zu überprüfen, ob die Drehrichtung des Gitters einen Einfluss auf die Genauigkeit des Spektrometers hat, wurden die Linien in positiver und negativer Linie durchgefahren. In Tabelle I ist das Ergebnis der Eichung zu sehen.

λ_{Lit}	$\lambda \uparrow [nm]$	$\lambda \downarrow [nm]$	$\lambda_{Lit} - \lambda \uparrow$
546,07	546,08 ± 0,01	546,06 ± 0,01	0,01
576,96	576,95 ± 0,01	576,94 ± 0,01	0,01
579,07	579,08 ± 0,01	579,05 ± 0,01	0,01

Tabelle I: Eichung des Spektrometers mit der grünen und den gelben Linien der Hg-Dampflampe

Es ist zu sehen, dass in positiver Richtung der Fehler der Messungen geringer ist, so dass im Folgenden nur noch in dieser Richtung gemessen wurde. Eine weitere Eigenschaft des Spektrometers bestimmt das Auflösungsvermögen, nämlich die Spaltbreite, durch die das Licht in den Spektrometer gelangt. Dazu haben wir die gelbe Hg-Linie (546,07nm) bei unterschiedlichen Spaltbreiten aufgezeichnet (Abbildung 2 bzw. Tabelle II).

Wie zu erwarten war, ist die Linie für große Spaltbreiten ebenfalls breiter, für gute Auflösungen sind also kleine Spaltbreiten erforderlich. Eine quantitative Größe für die Auflösung des Spektrometers ist:

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

Spaltbreite [μm]	FWHM [nm]	λ	A
25	0,084 ± 0,01	546,090 ± 0,01	6500 ± 770
40	0,094 ± 0,01	546,100 ± 0,01	5810 ± 620
60	0,14 ± 0,01	546,10 ± 0,01	3900 ± 280
100	0,21 ± 0,01	546,09 ± 0,01	2600 ± 120

Tabelle II: Halbwertsbreiten und Auflösungsvermögen A bei unterschiedlichen Spaltbreiten

Aus der Extrapolation des Auflösungesvermögens A (Abbildung 6) auf eine Spaltbreite von $0\mu m$ erhält man die maximale Auflösung von

$$A = 7700 \pm 500$$

Allerdings kann wegen der verschwindenden Intensität bei unendlich kleiner Spaltbreite diese Auflösung nicht erreicht werden. In den folgenden Versuchen wurde deshalb mit Spaltbreiten von 30-40μm gemessen.

B. Wasserstoff-Deuterium Aufspaltung

Durch die Isotopenaufspaltung von Wasserstoff und Deuterium kann man auf das Verhältnis von Masse Wasserstoffkern zu Masse Deuteriumkern schließen:

$$\frac{m_H}{m_D} = \frac{m_H}{m_0} * \left(R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) (\lambda_D - \lambda_H) \right) + 1$$

In Abbildung 10 ist für den Übergang von 4→2 die Aufspaltung dargestellt, in Tabelle III sind für verschiedene Übergänge im Wasserstoff-/Deuteriumatom die Aufspaltungen und die mit obiger Formel bestimmten Quotienten aus Wasserstoffmasse zu Deuteriummasse zu sehen. Die Fehler wurden dabei mit dem Fehlerfortpflanzungsgesetz bestimmt.

Linie, theo. λ [nm]	λ_D [nm]	λ_H [nm]	$\frac{m_H}{m_D}$
3→2: 656,4	656,13 ± 0,02	656,30 ± 0,02	0,524 ± 0,078
4→2: 486,2	485,97 ± 0,02	486,11 ± 0,02	0,47 ± 0,11
5→2: 434,1	434,04 ± 0,02	433,92 ± 0,02	0,49 ± 0,12

Tabelle III: Bestimmung der Isotopenaufspaltung von H und D, aufgenommen mit 30μm Spaltbreite im Vergleich mit den theoret. Werten aus der Rydbergformel

Bei Kenntnis der Protonenmasse kann man dann die Neutronenmasse im gebundenen Zustand mit einem Proton berechnen:

$$m_N = \Delta m = m_D - m_H = (1,70 \pm 0,18) \cdot 10^{-27} kg$$

Somit hat man eine Abweichung vom Literaturwert ($m_n = 1,674 \cdot 10^{-27} kg$) von 1,5%, für den relativ einfachen Versuchsaufbau ist dies ein erstaunlich gutes Ergebnis. Im Weiteren haben wir noch die Halbwertsbreiten der Wasserstoff-/Deuteriumlinien bestimmt, indem

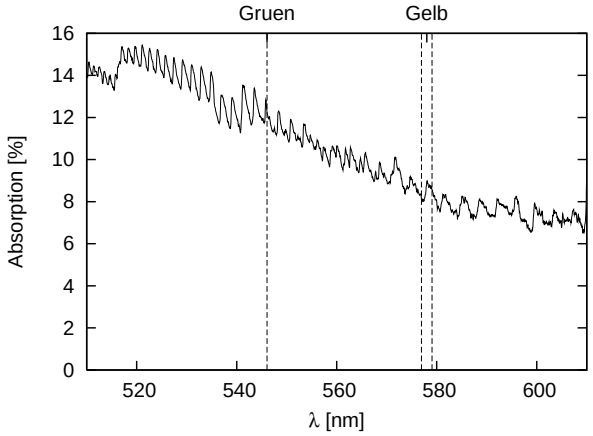

Abb. 3: Absorptionsspektrum von Iod I_2 (mit Tiefpass durch FFT bearbeitet)

zwei Voigt-Profile angefittet wurden, deren Halbwertsbreite dann bekannt ist. In Tabelle IV sind diese für verschiedene Übergänge dargestellt, im Vergleich dazu die Dopplerverbreiterung.

Linie	FWHM [nm]		Dopplerverb.[nm]	
	D	H	D	H
3→2	0,06 ± 0,01	0,06 ± 0,01	0,0070	0,0035
4→2	0,05 ± 0,01	0,06 ± 0,01	0,0038	0,0019
5→2	0,03 ± 0,01	0,04 ± 0,01	0,0031	0,0015

Tabelle IV: Vergleich der Halbwertsbreiten von H und D mit der Dopplerverbreiterung bei 800 K, gemessen mit 30 μm Spaltbreite

Wie man sieht, ist die Dopplerverbreiterung bei 800 K noch eine Größenordnung geringer, als die Halbwertsbreite der Linie. Somit wird die Breite der Linie größtenteils durch die Spaltfunktion bestimmt.

C. Absorptionsspektroskopie an Iod I_2

In diesem Versuchsteil wurde die Absorption einer weißen Lichtquelle beim Durchgang durch eine Iodzelle untersucht, wobei das Iod in der Glaszelle mit einem Fön während des Versuches geheizt wurde, so dass dieses als Gas vorliegt. Um die Eigenschaften der Halogenlampe zu eliminieren, musste zuerst ein Spektrum dieser Lichtquelle aufgenommen werden, mit dem das eigentliche Iod-Spektrum dann normiert wurde. Die Spaltbreite war beide Male 50μm, die Schrittweite 0,02nm. In Abbildung 3 ist die Absorption von Iod im Bereich von 510nm bis 610nm gezeigt. Aus der Lage der Absorptionsmaxima können nun die Übergänge identifiziert werden, dabei wurde benutzt, dass die grüne Eichlinie der Hg-Lampe mit dem Vibrationsübergang $\nu^*(24,0)$ übereinstimmt und der Übergang $\nu^*(16,1)$ durch die beiden

gelben Eichlinien eingeschlossen wird. Im Spektrum können nur die Übergänge aus dem Niveau $\nu'' = 0; 1$ identifiziert werden; hat man alle Übergänge zugeordnet, kann man mit Hilfe von Gleichung (5) und (6) die Vibrationskonstanten bestimmen:

$$\Delta\nu^* = \nu^*(\nu', i) - \nu^*(\nu' - 1, i) = \omega_e - 2\omega\chi_e\nu'$$

mit den Anfangszuständen i=0,1. Aus der graphischen Auftragung gegenüber ν' kann man aus dem Achsenabschnitt und der Steigung der Ausgleichsgeraden die Vibrationskonstanten ablesen. In Abbildung 7 und 8 ist gut der lineare Zusammenhang zu sehen, in Tabelle V sind die Zahlenwerte der einzelnen Vibrationskonstanten zusammengefasst.

ν''	ω'_e $[cm^{-1}]$	$2\omega'_e\chi'_e$ $[cm^{-1}]$
0	$134{,}5 \pm 2{,}2$	$2{,}17 \pm 0{,}14$
1	$136{,}6 \pm 4{,}0$	$2{,}16 \pm 0{,}32$
Mittelwert	$135{,}6 \pm 3{,}1$	$2{,}17 \pm 0{,}23$

Tabelle V: Vibrationskonstanten von Iod

Bei der Auftragung $\nu^*(\nu'\nu'')$ über $-\omega'_e\chi'_e(\nu' - 1/\chi_e)^2$ erhält man aus dem Achsenabschnitt (Abbildung 9): $T_e - \omega''_e(\nu''+1/2) + \omega''_e\chi''_e(\nu''+1/2)^2 + \omega'_e/4\chi'_e$. Bei bekanntem $\omega''_e\chi''_e = 0,61cm^{-1}$ erhält man mit $\nu'' = 0; 1$:

$$\omega''_e = 279,9 \pm 5,6cm^{-1}$$

Damit kann man dann die Energie für den rein elektronischen Übergang berechnen:

$$T_e = (15824,4 \pm 5,7)cm^{-1} \text{ bzw.}$$
$$T_e = (1,96193 \pm 0,00071)eV$$

Die Dissoziationsenergien kann man mit

$$D_e = \frac{\omega_e^2}{4\omega_e\chi_e} \cdot hc$$

berechnen, für den angeregten Zustand ist diese

$$D'_e = (0,517 \pm 0,037)eV$$

bzw. für den Grundzustand

$$D''_e = (3,98 \pm 0,16)eV$$

. Die Literaturwerte [6] sind D'_e=0,6409eV bzw. D'_e=2,3223eV, die Abweichungen vom Literaturwert sind somit 19% bzw. 71%. Mit dem Übergang der stärksten Absorption: $\nu^*(26, 0)$ bei $(541,24 \pm 0,15)nm$ kann man mit Hilfe des Franck-Condon-Prinzips die Differenz der Gleichgewichtsabstände Δr_e abschätzen: Der Übergang von der Mitte des GZ erfolgt senkrecht an den Rand des Potentials des angeregten Zustands. Damit kann man den Abstand abschätzen:

$$\Delta r_e = 0,29$$

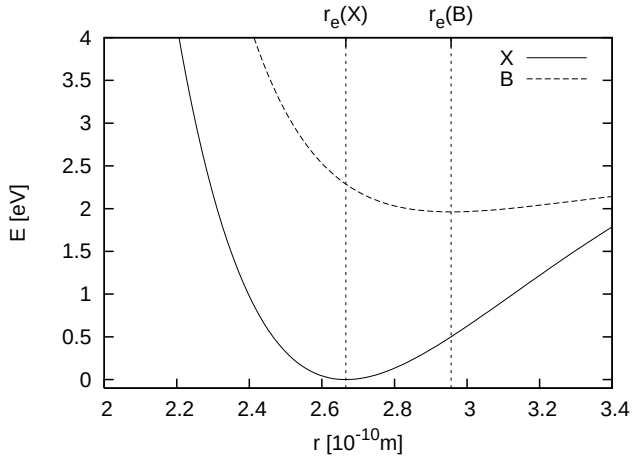

Abb. 4: Morsepotentiale für den Grundzustand X und den ersten angeregten Zustand B

Der Literaturwert ist $r_e = 0,358$ Å, somit liegt man mit der Abschätzung 19% neben dem Literaturwert. Mit dem Literaturwert für den Gleichgewichtsabstand im Grundzustand $r_e = 2,666$ Å[6] kann man dann die beiden Morsepotentiale zeichnen (Abbildung 4).

D. Hyperfeinstruktur von Rubidium

In diesem Versuchsteil wurde mit einem im Bereich der Rubidium D_1-Linie durchstimmbaren Dioden-IR-Laser die Hyperfeinstruktur von Rubidium gemessen. Durch die geringe Linienbreite des Lasers ist es möglich, diese Aufspaltung in der Absorption beim Durchgang durch eine Rb-Dampfzelle (ca. 45^oC) direkt zu messen. Man registriert dabei die unterschiedlich starke Absorption bei unterschiedlich starken Didodenströmen/Wellenlängen mit einer Photodiode. Das dadurch erhaltene Spektrum zeigt allerdings einen linear steigenden Untergrund, da mit steigendem Diodenstrom auch die Laserintensität zunimmt. Das Spektrum in Abbildung 5 wurde deshalb mit einem linearen Untergrund korrigiert. Desweiteren musste das Spektrum geeicht werden.

Wenn man annimmt, dass sich die Frequenz der emittierten Laserstrahlung linear mit dem Diodenstrom ändert, kann man bei Kenntnis von zwei Übergängen die x-Achse eichen. Man kann mit den theoretisch berechneten Werten für den 1→2-Übergang bei 4578,5MHz und 2→1-Übergang bei -3074,4MHz [4]- den beiden äußersten Linien im gesamten Spektrum - die Eichung für die x-Achse bestimmen. In der weiteren Auswertung konnten nun an das Spektrum die acht Voigt-Profile gefittet werden, die die Theorie besagt. Zu beachten ist allerdings, dass die beiden höchsten Peaks aus einer Überlagerung von zwei Peaks entstanden sind, weitere Schwierigkeiten bereiteten die 2 → 1- und 2 → 2-Übergänge, eigentlich sollten diese auf Grund ihrer Dopplerverbreiterung noch trennbar sein, im Spektrum ist allerdings nur noch

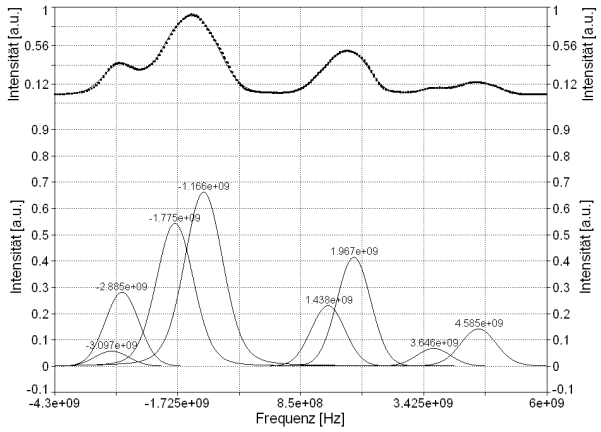

Abb. 5: Hyperfeinstrukturaufspaltung der D_1-Linie bei f=0Hz von ^85Rb und ^87Rb

ein Peak zu sehen. Mit dem Programm PeakFit wurden aber dennoch brauchbare Voigt-Profile angefittet, deren Werte in Tabelle VI aufgelistet sind. Die Fehler für die Peakpositionen wurden dabei abgeschätzt, indem Veränderungen in der Peakposition vorgenommen wurden, die keine sichtbaren Veränderungen in der Form des Gesamtspektrums ergaben.

Isotop	Kernspin	Übergang	$\Delta\nu$ [MHz]	$\Delta\nu_{theo}$ [MHz]
^{87}Rb	3/2	2→1	-3010 $\pm$200	-3074.4
^{87}Rb	3/2	2→2	-2880 $\pm$200	-2256.2
^{85}Rb	5/2	3→2	-1780 $\pm$100	-1476.1
^{85}Rb	5/2	3→3	-1170 $\pm$100	-1114
^{85}Rb	5/2	2→2	1440 $\pm$100	1559.6
^{85}Rb	5/2	2→3	1970 $\pm$100	1921.7
^{87}Rb	3/2	1→1	3650 $\pm$50	3760.2
^{87}Rb	3/2	1→2	4590 $\pm$50	4578.5

Tabelle VI: Zuordnung der einzelnen Linien der hyperfeinaufgespaltenen D_1-Linie von ^{85}Rb und ^{87}Rb mit Hilfe der theoretischen Positionen (aus [4])

Um den Abstand der beiden Doppellinien δ etwas genauer abschätzen zu können, kann man dies mit Hilfe der Beziehung abschätzen:

$$\delta^2 = \Delta^2_{1/2+} - \Delta^2_{1/2}$$

mit der Breite des Doppelpeaks $\Delta^2_{1/2+}$ und der Dopplerverbreiterung $\Delta^2_{1/2}$. Für den Doppelpeak 5/2: 3→2 bzw. 3→3 hat man eine Halbwertsbreite von $\Delta 1^2_{1/2+}$=(1239 $\pm$ 100)MHz, für den Doppelpeak 5/2: 2→2 bzw. 2→3 hat man eine Halbwertsbreite von $\Delta 2^2_{1/2+}$=(1125 $\pm$ 70)MHz. Die Dopplerverbreiterung ist jeweils $\Delta^2_{1/2}$=522,4MHz. Somit bekommt man für den Abstand der Doppellinien:

$$\delta_1 = (995 \pm 92)MHz$$
$$\delta_2 = (530 \pm 62)MHz$$

Der theoretische Abstand der beiden Linien ist 362,1MHz (Tabelle VI), der berechnete Abstand weicht stark von diesem Literaturwert ab. Dies liegt daran, dass sich die Halbwertsbreiten der Peaks nur zu einem Teil aus der Dopplerverbreiterung zusammensetzt, zusätzlich hat man die Linienbreite des Lasers. In Tabelle VII sind die beiden Verbreiterungen miteinander verglichen. Wenn man allerdings die Linienabstände direkt aus dem gefitteten Spektrum abliest, erhält man für

$$\delta_{1fit} = (610 \pm 100)MHz$$
$$\delta_{2fit} = (530 \pm 100)MHz.$$

Wie man leicht sehen kann, ist dieses Ergebnis schon besser, allerdings kann der Abstand von zwei überlagerten Linien nur mit großem Fehler bestimmt werden.

Kernspin	Übergang	FWHM [MHz]	Dopplerverb. [MHz]
3/2	2→1	832 $\pm$70	516,3
3/2	2→2	832 $\pm$70	516,3
5/2	3→2	913 $\pm$70	522,4
5/2	3→3	946 $\pm$70	522,4
5/2	2→2	832 $\pm$70	522,4
5/2	2→3	832 $\pm$70	522,4
3/2	1→1	839 $\pm$70	516,3
3/2	1→2	878 $\pm$70	516,3

Tabelle VII: Vergleich der Halbwertsbreiten der Hyperfeinlinien mit der Dopplerverbreiterung von ^{87}Rb und ^{85}Rb bei 45^oC

Aus den Daten kann nun die Hyperfeinaufspaltung A bestimmt werden, es gilt:

$$A_S(^{85}Rb) = \nu(2 \to 3) - \nu(3 \to 3) = \nu(2 \to 2) - \nu(3 \to 2)$$
$$A_S(^{87}Rb) = \nu(1 \to 2) - \nu(2 \to 2) = \nu(1 \to 1) - \nu(2 \to 1)$$
$$A_P(^{85}Rb) = \nu(2 \to 3) - \nu(2 \to 2) = \nu(3 \to 3) - \nu(3 \to 2)$$
$$A_P(^{87}Rb) = \nu(1 \to 2) - \nu(1 \to 1) = \nu(2 \to 2) - \nu(2 \to 1)$$

Isotop	Niveau	$A_{exp}[MHz]$	$A_{Lit.}$ [MHz]
^{85}Rb	$5^2S_{1/2}$	3180 $\pm$ 71	3035,7
	$5^2P_{1/2}$	570 $\pm$ 71	362,1
^{87}Rb	$5^2S_{1/2}$	7035 $\pm$ 103	6834,6
	$5^2P_{1/2}$	535 $\pm$ 103	818,2

Tabelle VIII: Hyperfeinkonstanten A

Man sieht hier, dass sich die großen Fehler in der Bestimmung der Lage der Peak fortgesetzt haben in die Hyperfeinkonstanten, im Mittel weichen die Werte um 25% von den Literaturwerten ab.

E. Zeemanaufspaltung

In diesem Versuch wurde die Zeemanaufspaltung im Magnetfeld einer Helmholtzspule beobachtet. Das Magnetfeld der Erde, das zusätzlich wirkt, wurde mit einer Förstersonde bestimmt:

$$B_{Erde} = (35 \pm 1]\mu T$$

Die Richtung des Magnetfeldes war dabei ungefähr senkrecht zum B-Feld der Helmholtzspulen, das sich mit

$$B(I) = \mu_0 n I \frac{R^2}{(R^2 + a^2)^{3/2}}$$

berechnen lässt, mit n=124 Windungen, R=14,25cm Spulenradius und 2a=15,0cm Abstand der Spulen. Somit hat man am Ort der Rb-Atome ein effektives B-Feld von $B_{eff} = \sqrt{B_{Erde}^2 + B_I^2)}$. Nun wurde rechtszirkular polarisiertes Laserlicht auf die Rubidiumdampfzelle gestrahlt, indem ein Linearpolarisator und ein $\lambda/4$-Plättchen in den Strahlengang gebracht wurde. Dadurch war nur noch Absorption bei $\Delta m_F = +1$ möglich, die oberen Zustände wurden somit effektiv gepumpt und die Absorption verschwand. Beim Anlegen eines Hochfrequenzfeldes HF mit der Frequenz, die dem Übergang entspricht, setzte die Absorption wieder ein, wobei der Nachweis analog zum Hyperfeinexperiment erfolgte. Die Frequenz des HF-Feldes entspricht somit der Zeemanaufspaltung.

Stromstärke [mA]	B_{eff} [μT]	Resonanzfrequenz [kHz]	g_F
105 ± 10	86,9±7,6	333,6 $\pm$ 2,0	
-105 ± 10	86,9±7,6	334,2 $\pm$ 2,0	
144 ± 10	114,6±7,6	460,9 $\pm$ 2,0	
-144 ± 10	114,6±7,6	462,2 $\pm$ 2,0	
205 ± 10	159,2±7,6	642,9 $\pm$ 2,0	
-205 ± 10	159,2±7,6	644,8 $\pm$ 2,0	
245 ± 10	188,9±7,6	803,7 $\pm$ 2,0	
-245 ± 10	188,9±7,6	802,8 $\pm$ 2,0	
295 ± 10	226,3±7,6	979,8 $\pm$ 2,0	
-295 ± 10	226,3±7,6	978,9 $\pm$ 2,0	

Tabelle IX: Resonanzfrequenzen der Zeemanaufspaltung für verschiedene Magnetfelder

Der Fehler im Strom/Magnetfeld kommt dadurch zustande, dass bei gleichen Einstellungen des Netzteils und umgepolten Anschlüssen eine Differenz zwischen den positivem und negativem Strom von 10 mA auftrat, wahrscheinlich auf Grund eines Fehlers im Messgerät. Der Fehler in der Bestimmung der Resonanzfrequenz kommt zum einen durch den Ablesefehlers des Maximums, zum anderen sind die Resonanzpeaks nicht genau symmetrisch, ein Anzeichen dafür, dass beim Durchfahren der Resonanz effektiv ein Ein-/Ausschaltzyklus des optischen Pumpen stattfindet. Beim Hineinfahren sorgt die HF für ein sofortiges Besetzen der unteren Niveaus, beim Herausfahren muss der Laser erst das untere Niveau leerpumpen, so dass die erhöhte Absorption in Abbildung 11 beim Herausfahren aus der Resonanz zu sehen ist. Verringert man die Geschwindigkeit, mit der die Frequenzen durchfahren werden, sollte dieser Effekt verschwinden.

Mit dem angenäherten Wert von $\mu_B = 5.8 \cdot 10^-5 eV/T$ kann man über

$$g_F = \frac{\nu h}{\mu_B B_{eff}}$$

auf den g-Faktor schliessen. Mit Hilfe der Gleichung (9) und J=1/2, F=I±1/2 kann man daraus den Kernspin I bestimmen:

$$g_F = \pm \frac{2}{2I + 1}$$

B_{eff} [nT]	g_F	I	μ_B [10^-5 eV/T]
86,9 $\pm 7,6$	0,274 $\pm$ 0,024	-3,15 $\pm$ 0,32	4,76 $\pm$ 0,41
86,9 $\pm 7,6$	0,274 $\pm$ 0,024	-3,15 $\pm$ 0,32	4,77 $\pm$ 0,41
114,6 $\pm 7,6$	0,287 $\pm$ 0,019	-2,99 $\pm$ 0,23	4,99 $\pm$ 0,33
114,6 $\pm 7,6$	0,288 $\pm$ 0,019	-2,98 $\pm$ 0,23	5,00 $\pm$ 0,33
159,2 $\pm 7,6$	0,288 $\pm$ 0,014	-2,97 $\pm$ 0,17	5,01 $\pm$ 0,24
159,2 $\pm 7,6$	0,289 $\pm$ 0,014	-2,96 $\pm$ 0,17	5,03 $\pm$ 0,24
188,9 $\pm 7,6$	0,303 $\pm$ 0,012	-2,80 $\pm$ 0,13	5,28 $\pm$ 0,21
188,9 $\pm 7,6$	0,303 $\pm$ 0,012	-2,80 $\pm$ 0,13	5,27 $\pm$ 0,21
226,3 $\pm 7,6$	0,308 $\pm$ 0,010	-2,74 $\pm$ 0,11	5,37 $\pm$ 0,18
226,3 $\pm 7,6$	0,308 $\pm$ 0,010	-2,74 $\pm$ 0,11	5,37 $\pm$ 0,18

Tabelle X: g-Faktoren und μ_B für verschiedene Spulenströme

In Tabelle X sind die verschiedenen g_F, sowie F abgedruckt, der Mittelwert jeweils ergibt:

$$g_F = 0,292 \pm 0,013$$
$$I = 2,92 \pm 0,15$$

Da I bei ungerader Nukleonenzahl nur halbzahlige Werte annehmen kann, ist I=5/2. Nun kann man den genauen Wert für μ_B bestimmen, da $g_f = 1/3$ bekannt ist:

$$\mu_B = \frac{\nu h}{g_f * B_{eff}}$$

In Tabelle X sind ebenfalls die so ermittelten Werte für μ_B aufgelistet, als Ergebnis erhält man

$$\mu_B = (5,08 \pm 0,23) \cdot 10^{-5} eV/T$$

Der Literaturwert ist $\mu_B = 5,799 \cdot 10^5$ev/T, die Abweichung beträgt somit 12%.

Für den Übergang 2→1 des ^{87}Rb kann man die obige Auswertung analog durchführen (siehe Tabelle XI). Man erhält:

$$g_F = 0,436 \pm 0,030$$
$$I = 1,81 \pm 0,18$$

Somit kann dieser Übergang dem Gesamtdrehmoment dem Kernspin I=3/2 zugeordnet werden. Der g-Faktor kann nun ebenfalls berechnet werden: $g_F = 1/2$. Damit kann nun wieder μ_B ermittelt werden (Tabelle XI):

$$\mu_B = (5,05 \pm 0,35) \cdot 10^{-5} eV/T$$

Durch die Messung im Magnetfeld der Helmholtzspulen mit entgegengesetzen Strömen ist es möglich das Erdmagnetfeld zu bestimmen [4]:

$$\nu(I)^2 + \nu(-I)^2 = \frac{2g_F^2\mu_B^2}{h^2}(B_I^2 + B_{Erde}^2)$$

In der Aufragung der Summe der Quadrate der Resonanzfrequenzen gegenüber dem Quadrat des Spulenstroms kann aus dem Wert bei I=0 (also ohne Magnetfeld B_I) das Erdmagnetfeld ermittelt werden. In Abbildung 12 und 13 sind diese Extrapolationen zu sehen, man erhält:

$$B_{Erde_{F=3}} = (38,2 \pm 9,1)\mu T$$
$$B_{Erde_{F=2}} = (26,5 \pm 7,6)\mu T$$
$$Mittelwert : B_{Erde} = (32,4 \pm 5,9)\mu T$$

mit $g_F = 1/3$ bzw. 1/2 und $\mu_{B,exp} = (5,08 \pm 0,23) \cdot 10^{-5} eV/T$ bzw.$(5,05 \pm 0,35) \cdot 10^{-5} eV/T$. Der Fehler in der Messung wurde mit Hilfe der Standardabweichung berechnet; im Rahmen der Fehlergrenzen stimmt dieser Wert mit der Messung der Förstersonde $B = 35\mu T$ überein.

F. Larmorpräzession

Im letzten Teil des Experimentes wurde die Larmorpräzession näher untersucht. Dazu wurden die Rb-Atome wieder mit dem Laser im Feld der Helmholtzspulen optisch gepumpt, somit befinden sich fast alle Elektronen im Zustand $m_F = F$. Desweiteren werden sich alle Spins in Richtung des Magnetfeldes ausrichten. Im Experiment wurde nun das Magnetfeld mit einem Stomimpulsgenerator (steile Flanken) ein- und ausgeschaltet. Bei jedem Ausschaltvorgang präzedieren die Elektronenspins um das verbleibende Erdmagnetfeld mit der typischen Larmorfrequenz ω_L. Dadurch kommt es mit dieser Frequenz ω_L auch wieder zu einer Besetzung von Niveaus mit $m_F < F$ die Absorption des Laserstrahls nimmt periodisch wieder zu. Auf dem Speicherozilloskop kann man die Periodendauer dieser Schwingung bestimmen:

$$T = (5,945 \pm 0,305)\mu s \Rightarrow \omega_L = (1,06 \pm 0,32)MHz$$

Mit $g_F = 1/3$ und dem mit der Förstersonde gemessenen Erdmagnetfeld $B_{Erde} = (35 \pm 1)\mu T$ kann man das Bohrsche Magneton bestimmen:

$$\mu_B = \frac{\omega_L \hbar}{g_F B_{Erde}} = (5,98 \pm 1,81) \cdot 10^{-5} eV/T$$

Der Literaturwert für das Bohrsche Magneton ist $\mu_B = 5,799 \cdot 10^{-5} eV/T$, somit ist die Abweichung des experimentellen Wertes 3,1%, der Wert stimmt also relativ gut mit dem theoretischen Erwartungen überein.

V. ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Versuch war es möglich anhand von relativ einfach zu messenden Spektren die Effekte der Isotopenaufspaltung, der Hyperfeinaufspaltung und des Zeemaneffektes nachzuweisen. Vor allem mit der Doppelresonanzspektroskopie konnten die Spektren so gut aufgelöst werden, um das Bohrsche Magneton, die Kernspins oder das Erdmagnetfeld zu bestimmen. Darüber hinaus konnte die Larmorpräzession gemessen werden. Mit der Molekülspektroskopie konnten wir die vibronischen Anregungen auflösen und die Schwingungskonstanten bestimmen.

[1] Prof. Dr. E. Batke, Prof. Dr. F. Reinert: Versuchsanleitung F-Praktikum Optisches Pumpen und Spektroskopie im optischen Bereich; Physikalisches Institut Würzburg

[2] B.H. Bransden, C.J. Joachain: Physics of Atoms and Molecules; second edition, Pearson Education Limited 2003

[3] M. Schreiter: Versuche zur Spektroskopie im optischen Bereich, Schriftliche Hausarbeit, Physikalisches Institut, 1996

[4] B. Erhard: Resonanzspektroskopie und Optisches Pumpen an Rubidium, Schriftliche Hausarbeit, Physikalisches Institut, 1997

[5] Haken, Hermann; Wolf, Hans Christoph: Molekülphysik und Quantenchemie; 4.Auflage, Springer Berlin, 2003

[6] K. P. Huber and G. Herzberg: Molecular spectra and molecular structure / 4. Constants of diatomic molecules; 1979

VI. ANHANG

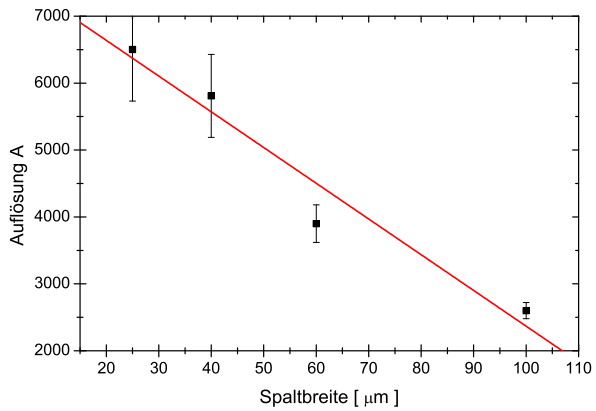

Abb. 6: Extrapolation des Auflösungsvermögen auf verschwindende Spaltbreite: A=7700±500

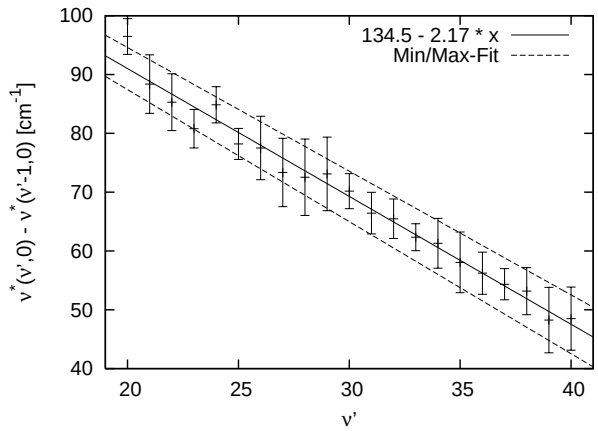

Abb. 7: Bestimmung der Vibrationskonstanten an den Übergängen aus $\nu'' = 0$

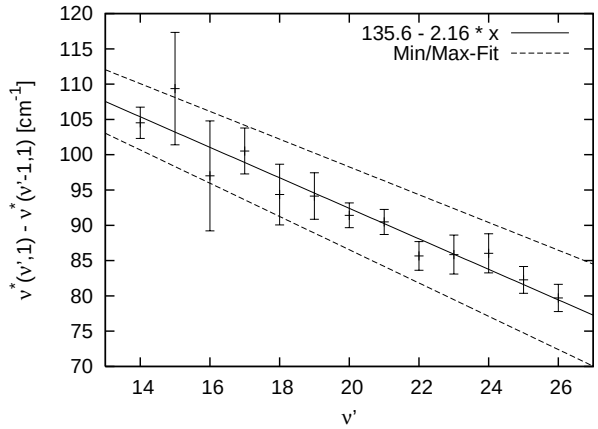

Abb. 8: Bestimmung der Vibrationskonstanten an den Übergängen aus $\nu'' = 1$

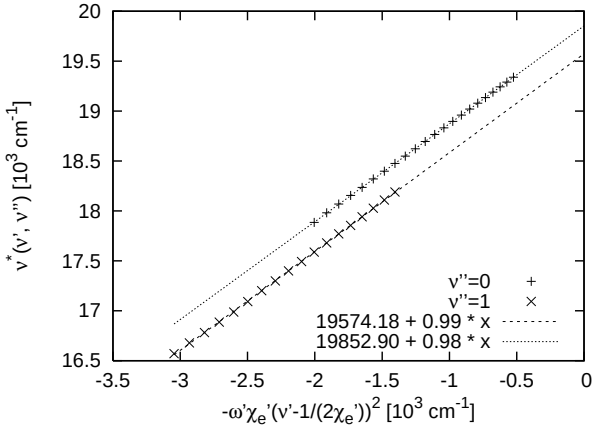

Abb. 9: Bestimmung von ω_e'' sowie T_e

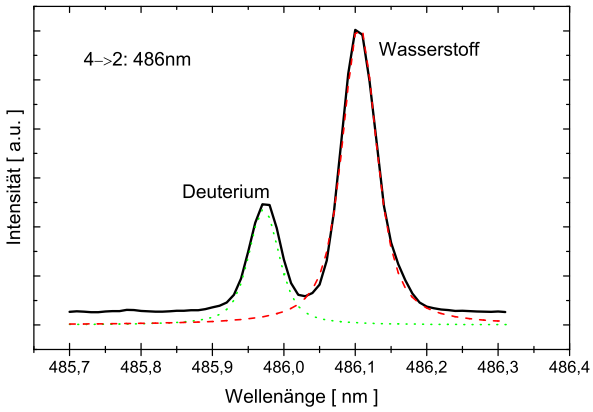

Abb. 10: Isotopenaufspaltung von Wasserstoff und Deuterium

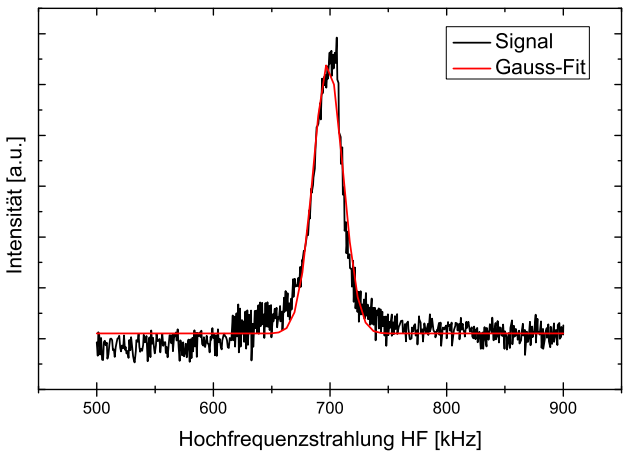

Abb. 11: Bestimmung der Resonanzfrequenz bei I=-144mA

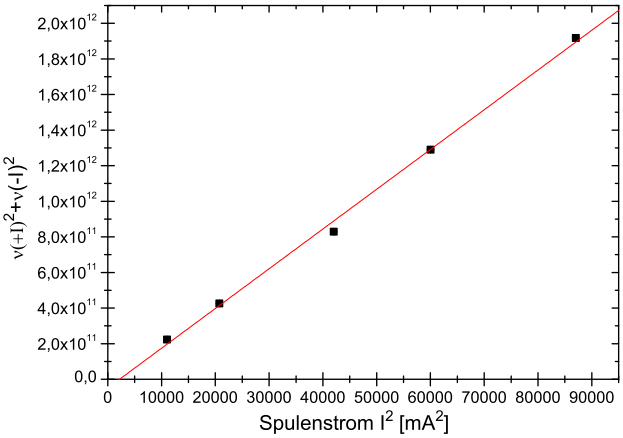

Abb. 12: Bestimmung des Erdmagnetfeldes druch Extrapolation auf verschwindenden Spulenstrom für die Zeemanaufspaltung in ^{85}Rb

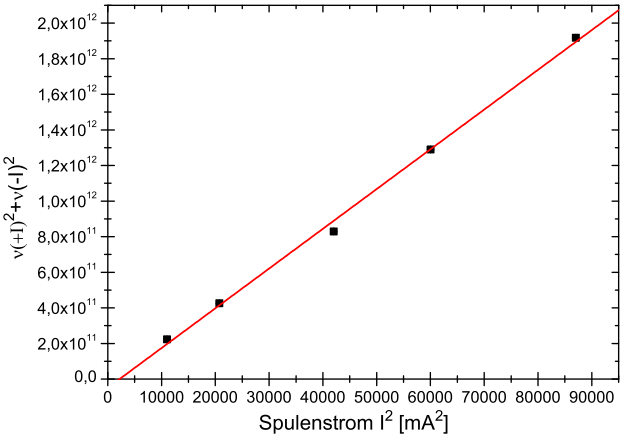

Abb. 13: Bestimmung des Erdmagnetfeldes druch Extrapolation auf verschwindenden Spulenstrom für die Zeemanaufspaltung in ^{87}Rb

Stromstärke [mA]	B_{eff} [μT]	Resonanzfrequenz [kHz]	g_F	Kernspin I	μ_B [$10^{-5} eV/T$]
99	82,8 ±7,6	441,65 ±2,0	0,380 ± 0,035	2,13 ± 0,24	4,41 ± 0,41
-99	82,8 ±7,6	440,5 ±2,0	0,379 ± 0,035	2,14 ± 0,24	4,40 ± 0,40
144	114,6 ±7,6	700,1 ±2,0	0,436 ± 0,029	1,80 ± 0,15	5,05 ± 0,34
-144	114,6 ±7,6	701,17 ±2,0	0,436 ± 0,029	1,79 ± 0,15	5,06 ± 0,34
195	151,8 ±7,6	957,93 ±2,0	0,450 ± 0,023	1,72 ± 0,11	5,22 ± 0,26
-195	151,8 ±7,6	959,4 ±2,0	0,451 ± 0,023	1,72 ± 0,11	5,23 ± 0,26
246	189,7 ±7,6	1210,57 ±2,0	0,455 ± 0,018	1,697 ± 0,088	5,28 ± 0,21
-246	189,7 ±7,6	1212,66 ±2,0	0,456 ± 0,018	1,693 ± 0,088	5,29 ± 0,21
294	225,5 ±7,6	1441,1 ±2,0	0,456 ± 0,015	1,695 ± 0,074	5,29 ± 0,18
-294	225,5 ±7,6	1443,06 ±2,0	0,456 ± 0,015	1,692 ± 0,074	5,29 ± 0,18

Tabelle XI: Zeemanaufspaltung am 2→1-Übergang von ^{87}Rb, für die Berechnung von μ_B wurde der zu I=3/2 gehörige Landé-Faktor g_f=1/2 verwendet