

Einführung in die Plasmaspektroskopie

Kurt Behringer

Universität Augsburg, WS 2000/2001

Einführung in die Plasmaspektroskopie

K. Behringer, WS 1998/1999

Literatur:

- W. Lochte-Holtgreven: Plasma Diagnostics, North-Holland, 1968 (Neuaufgabe)
- A. Unsöld: Physik der Sternatmosphären, Springer, 1955 (vergriffen)
- Hans R. Griem: Plasma Spectroscopy, McGraw-Hill, 1964 (Neuaufgabe)
- Hans R. Griem: Spectral Line Broadening by Plasmas, Academic Press
- W. Finkelnburg: Einführung in die Atomphysik, Springer, 1976 (Neuaufgabe)
- G. Herzberg: Molecular Spectra and Molecular Structure, 1989
 - I. Spectra of Diatomic Molecules, Robert E. Krieger (Malabar, Florida)
- A.P.Thorne: Spectrophysics, 1988 (Chapman and Hall)

1. Einleitung.....	2
2. Grundlagen.....	4
2.1 Wellenlängenskala.....	4
2.2 "Intensität".....	7
2.3 Volumengrößen, Strahlungstransportgleichung	13
2.4 Arten von Strahlung, Informationsgehalt der Spektren.....	15
3. Experimentelle Untersuchung von Spektren.....	16
3.1 Prismenspektrograph	16
3.2 Gitterspektrograph	19
3.3 Apparateprofil	24
3.4 Weitere Spektralapparate	27
3.5 Detektoren	30
3.6 Wellenlängennormale	37
3.7 Strahldichtenormale	37
3.8 Strahlung ausgedehnter Lichtquellen.....	38
4. Berechnung von Spektren	39
4.1 Atome und Ionen.....	39
4.2 Berechnung der Spektren zweiatomiger Moleküle	42
5. Gleichgewichtsbeziehungen.....	47
5.1 Definition des thermodynamischen Gleichgewichts TE, LTE, PLTE	47
5.2 Gleichgewichtsrelationen	48
5.3 Berechnung der Plasmazusammensetzung und Auswertung der Linienstrahlung...51	
5.4 Kontinuumsstrahlung	53
5.5 Linienverbreiterung.....	56

1. Einleitung

Die Plasmaspektroskopie spielt in vielen Bereichen der Physik eine wichtige Rolle, z.B.:

- in der Astrophysik:

alle Informationen über die Sonne und die Sterne stammen aus ihrer Strahlung
besonders gut untersucht sind die Sonne und das Sonnenspektrum
die Sterne werden nach ihren Spektren klassifiziert

wichtig: ein großer Teil der Strahlung wird in der Erdatmosphäre absorbiert
→ Messungen im Weltraum von Satelliten aus

- in der Plasmadiagnostik; Beispiele von Plasmen und spektraler Information:

Kohlebogen (thermisches Plasma), Farben von Fremdelementen
Wasserstoffbogen (thermisches Plasma), rote Farbe von H_α
ASDEX-Upgrade (Fusionsplasma), rote Farbe von H_α
violetttes CH-Spektrum aus technischen Beschichtungsplasmen mit Methan,

- in der Atomphysik und Quantenmechanik: siehe Finkelburg,
speziell: H_α -Feinstruktur, QED-Effekte (Dopplerfreie Spektroskopie).

Warum strahlt ein Plasma?

Eine beschleunigte Ladung sendet immer elektromagnetische Strahlung aus mit der Leistung:

$$P = \frac{e^2 (dV/dt)^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \sim \omega^4 \quad (\text{wenn } x \sim \sin\omega t, \text{ dann ist } dV/dt = d^2x/dt^2 \sim \omega^2). \quad (1.1)$$

Die geladenen Teilchen im Plasma werden ständig beschleunigt (stoßen miteinander)
→ Strahlung (sog. Bremsstrahlung = kontinuierliche Strahlung).

Außerdem emittieren Plasmen in der Regel auch Rekombinationskontinua, Linienstrahlung und evtl. Molekülbanden.

Die Spektroskopie ist eine nicht-störende (nicht-invasive) Diagnostik, da die Plasmen immer strahlen; aber:

die Strahlung ist ein Teil der Energiebilanz und muß für Berechnungen des Plasmas berücksichtigt werden.

Ein Spektrum hat 2 Koordinatenachsen:

die Wellenlängen-(x -)achse - genau meßbar, einfach interpretierbar
hängt mit den Energieniveaus zusammen → Information für die Atomphysik,

die y -Achse, die "Intensität", (spektrale) Strahldichte - relativ ungenau meßbar, schwierig bis unmöglich zu interpretieren.

Deshalb steht in vorgezeigten Spektren an den Strahldichteachsen sehr häufig:
willk. Einheiten, relative Einheiten!

Prinzipielle Meßmöglichkeiten der Plasmaspektroskopie:

- Untersuchung der Eigenstrahlung (Emissionsspektroskopie, Besetzung der angeregten Atomniveaus durch Plasmaprozesse),
- Externe Anregung (Laserfluoreszenz, Elektronenstrahlen),
- Untersuchung der Absorption von Strahlung (Besetzung der unteren Atomniveaus),
- Messung des Brechungsindex' (Interferometrie, meistens bestimmt durch die Elektronendichte),
- Messung der Streuung von Licht (Thomson-Streuung → Elektronendichte, -temperatur).

Inhalt der Vorlesung:

Im Kapitel 2 der Vorlesung werden zunächst die gebräuchlichen Wellenlängen- und Frequenzeinheiten sowie ihr Zusammenhang mit den atomaren Energieniveaus besprochen. Anschließend folgt ein größerer Abschnitt über den Begriff "Strahldichte", der die Intensität charakterisiert. Dazu gehören die Definition der Strahldichte und ihr Verhalten bei Abbildung. Es folgt ein Einschub über die Größen der Lichttechnik mit der Definition der Lichtausbeute der verschiedenen Lampentypen. In der Spektroskopie braucht man wellenlängenabhängige Größen, was zu dem Begriff "spektrale Strahldichte" führt. Für die Plasmaspektroskopie müssen dann noch Volumengrößen eingeführt und die Strahlungstransportgleichung besprochen werden.

Das Kapitel 3 befaßt sich mit den experimentellen Grundlagen der spektralen Strahlungsmessungen. Es werden Gitter- und Prismenspektrographen besprochen und ihre Dispersion und Auflösung berechnet. Einige Arten von spektralen Filtern werden ebenfalls diskutiert. Zu den Meßapparaturen gehören auch die verschiedenen Arten von Strahlungsdetektoren einschließlich der modernen Vielkanalkameras, die das anschließende Thema bilden. Das Kapitel wird abgerundet durch die Beschreibung von Normalen für die Wellenlängen- und Strahldichtekalibrierung sowie der Abelschen Integralgleichung für ausgedehnte Strahlungsquellen.

Das Kapitel 4 befaßt sich kurz mit den atomphysikalischen Grundlagen der Spektren von Atomen, Ionen und Molekülen. Dazu sind die Nomenklatur der Terme und die Auswahlregeln erforderlich.

Das Kapitel 5 behandelt Gleichgewichtsrelationen für die kinetische Geschwindigkeit der Teilchen, für die die Besetzung angeregter Niveaus sowie für die Ionisation und Dissoziation der Plasmen. Die Gleichgewichtszusammensetzung thermischer Plasmen und ihre verschiedenen Strahlungsanteile werden berechnet. Das Kapitel schließt mit einer Diskussion der Linienverbreiterung durch die Plasmaeffekte und daraus resultierende Möglichkeiten zur Plasmadiagnostik. Nichtgleichgewichtsplasmen, wie z.B. Fusionsplasmen, werden in der Vorlesung im SS behandelt.

Einschränkungen der Vorlesung:

Die Vorlesung befaßt sich hauptsächlich mit der Spektroskopie im optischen Spektralbereich sowie im VUV, nahen Infrarot und nahen Röntgengebiet. Es wird nur passive Emissionsspektroskopie behandelt, nicht aber Laserverfahren, Ramanstreuung, CARS, etc. . Die Plasmamodelle sind von den Beziehungen des thermodynamischen Gleichgewichts abgeleitet.

2. Grundlagen

2.1 Wellenlängenskala

Elektromagnetische Strahlung wird emittiert bei einem spontanen oder stimulierten Übergang in einem Atom / Molekül von einer höheren zu einer niedrigeren Energie mit $\Delta W = W_k - W_i$.

$$\begin{aligned} \text{Nach Einstein: } \Delta W = h\nu = \hbar\omega \quad (\omega = 2\pi\nu) & \quad (2.1-1) \\ \text{mit } h = 6.6262 \cdot 10^{-34} \text{ Ws}^2 & \\ & = 6.6262 \cdot 10^{-34} / 1.6022 \cdot 10^{-19} = 4.1357 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}, \end{aligned}$$

d.h. 1 eV (gebräuchliche Energieeinheit in der Plasmaphysik, $1 \text{ eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Ws}$)
 $\leftrightarrow 2.418 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$.

Die Frequenz ist die primäre Eigenschaft.

In der Praxis verwendet man häufiger die Wellenlängenskala. Umrechnung über die Vakuumlichtgeschwindigkeit $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ und den Brechungsindex.

800 nm	$n = 1.000275$	$\lambda = \frac{c}{n\nu}$ Geschwindigkeit $< c$ (2.1-2) $n =$ Brechungsindex; Tabelle links: n für Luft 1 eV \leftrightarrow 1.2399 μm
600 nm	$n = 1.000277$	
400 nm	$n = 1.000283$	
300 nm	$n = 1.000291$	

Der sichtbare Spektralbereich reicht etwa von 380 bis 780 nm, d.h. $\Delta W = 3.2 - 1.6$ eV (Definitionen: DIN 5031).

optische Strahlung	100 nm - 1 mm
Ultraviolettstrahlung	100 nm - 380 nm
UV - C	100 nm - 280 nm
UV - B	280 nm - 315 nm
UV - A	315 nm - 380 nm
sichtbare Strahlung, Licht	380 nm - 780 nm
Infrarotstrahlung	780 nm - 1 mm
IR - A	780 nm - 1.4 μm
IR - B	1.4 μm - 3.0 μm
IR - C	3.0 μm - 1 mm

Früher wurden Wellenlängen in Angström (\AA) angegeben: $1 \text{\AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm}$.

$$\text{Wellenzahl } \bar{\nu} = \frac{\Delta W}{hc} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{n\lambda} \text{ cm}^{-1} \quad (\text{cm}^{-1} = \text{Kayser}) \quad (2.1-3)$$

Im sichtbaren Spektralbereich reichen die Wellenzahlen von etwa 25000 - 14000 cm^{-1} .

Wellenzahlen: vor allem gebräuchlich im infraroten Spektralbereich und in der Molekülphysik

$$1000 \text{ cm}^{-1} = 10 \mu\text{m}.$$

Achtung: Wellenzahlen sind Energien! Umrechnung: $\lambda = \frac{1}{n\bar{\nu}}$. (2.1-4)

In den Tabellen der Atomphysik werden häufig die Energieniveaus in cm^{-1} angegeben; z.B. Ionisierungsenergie von Wasserstoff (Rydberg-Konstante für die Kernmasse ∞):

$$R_\infty = 13.605 \text{ eV} = 1.0974 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1} = 109.74 \text{ kK} \rightarrow \lambda = 91.12 \text{ nm},$$

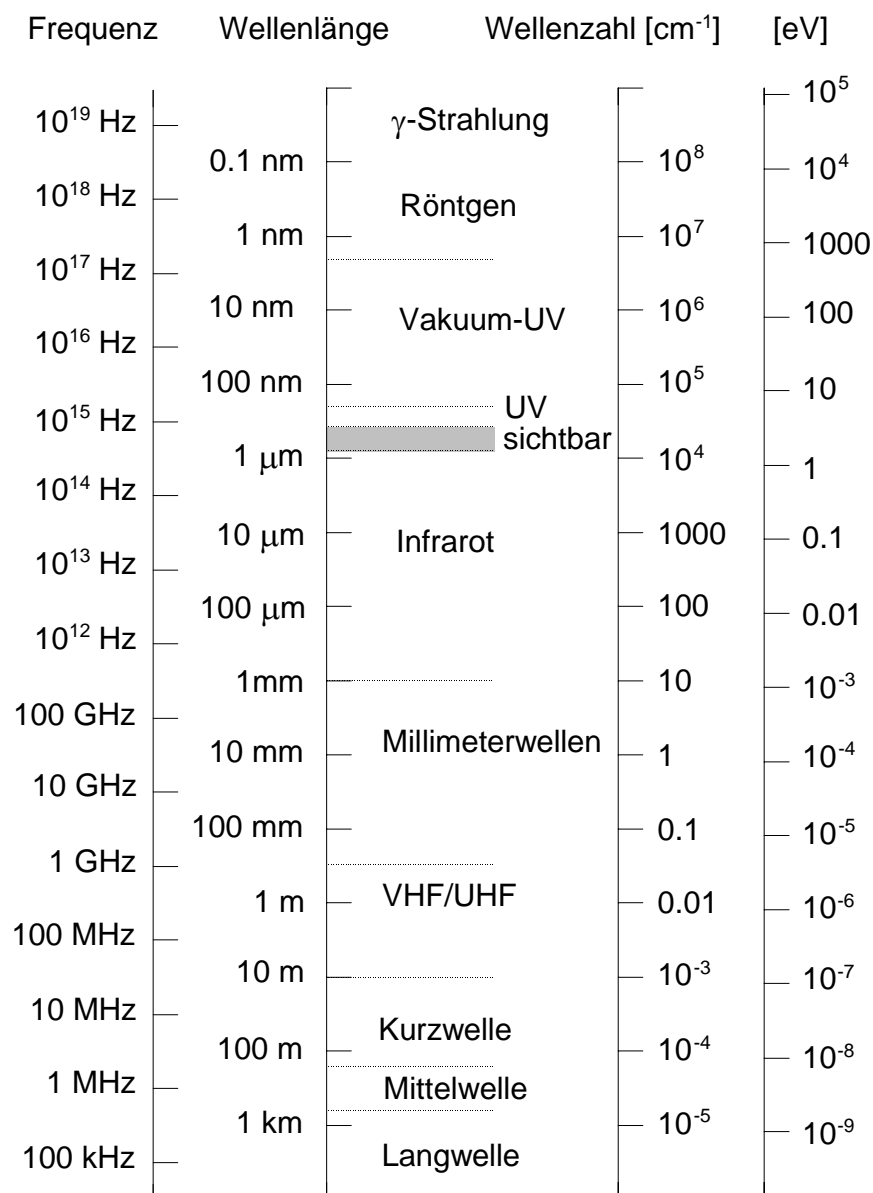
$$1 \text{ eV} \leftrightarrow 8065.5 \text{ cm}^{-1} .$$

Beispiel: Spektrallinie des atomaren Wasserstoffs, H_{α} , $W_i = 82259\text{cm}^{-1}$, $W_k = 97492\text{cm}^{-1}$,
 $\lambda = 656.280\text{ nm}$ (Wiese et al., Tabellenwerk NBS 4, 1966).

Wir berechnen
$$\lambda = \frac{10^7 \frac{\text{nm}}{\text{cm}}}{n(97492 - 82259)\text{cm}^{-1}} = \frac{656.4695}{1.000276} \text{ nm} \quad \underline{\lambda = 656.288 \text{ nm} .}$$

Zur genaueren Angabe der Niveaus und der Wellenlänge muß die Feinstruktur berücksichtigt werden! Die NBS-Angaben sind Multipllett-Mittelwerte.

Wellenlängen und Frequenzskalen



2.2 "Intensität"

Strahlungsmessungen (Photometrie) können subjektiv (mit dem Auge) oder objektiv durchgeführt werden. Die objektive Photometrie wurde durch die Entwicklung geeigneter Detektoren möglich. Einige Detektoren sind:

Photoplatte	vor allem früher in der Spektroskopie verwendet
Bolometer	geschwärzte Flächen, Messung des Widerstands aufgebracht, temperaturabhängiger Widerstände $R(T)$
Thermosäule	Thermoelemente, Reihenschaltung von vielen Elementen

Die Erwärmung ist zunächst zeitproportional (Wärmekapazität) bis die Wärmeableitung berücksichtigt werden muß.

innerer +
äußerer Photoeffekt (Halbleiter-Detektoren, Photomultiplier, siehe später).

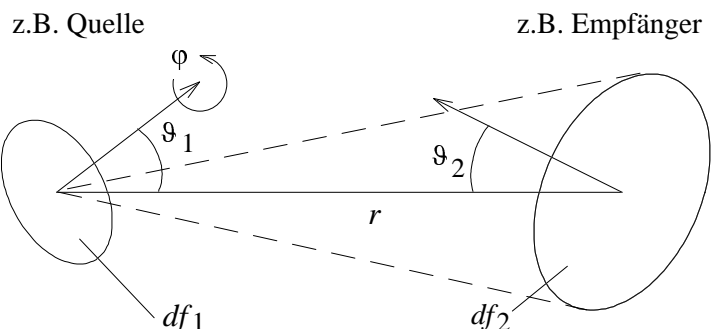
Detektoren messen immer Strahlungsleistung, bzw. Strahlungsleistung mal Zeit.

Photometrische Grundbegriffe:

objektive Photometrie			subjektive Photometrie		
Bezeichnung	Zeichen	Einheit	Bezeichnung	Zeichen	Einheit
Strahlungsleistung (Energiestrom/Zeit) (radiant flux)	Φ	W	Lichtstrom (luminous flux)	Φ	Lumen (lm)
Strahlstärke (intensity)	$I = \Phi/\Omega$	W/sr	Lichtstärke (luminous intensity)	$I = \Phi/\Omega$	Candela (cd)
Bestrahlungsstärke (irradiance)	$E = \Phi/F$	W/m ²	Beleuchtungsstärke (illuminance)	$E = \Phi/F$	Lux (lx)
Strahldichte (Flächenstrahldichte), (radiance)	$L = \Phi/F\Omega$	W/m ² sr	Leuchtdichte (Flächenhelligkeit) (luminance)	$L = \Phi/F\Omega$	Stilb (sb = cd/cm ²)

Definition der Strahldichte L :

photometrisches Grundgesetz für die Strahlungsleistung von Fläche 1 auf Fläche 2:



$$d\Phi_{1,2} = L \frac{df_1 \cos \vartheta_1 df_2 \cos \vartheta_2}{r^2} \quad (2.2-1)$$

(2.2-1) enthält 2 bekannte Gesetze:

- a) das Lambertsche Kosinusetz $d\Phi \sim \cos \vartheta_1$ und $d\Phi \sim \cos \vartheta_2$,
- b) die Abnahme der auftreffenden Energie mit dem Quadrat des Abstandes (Energieerhaltung, Möglichkeit der definierten Abschwächung).

$$\frac{df_2 \cos \vartheta_2}{r^2} = d\Omega_2, \quad (2.2-2)$$

somit:

$$d\Phi_{1,2}(\vartheta, \varphi) = L(\vartheta, \varphi) df_1 \cos \vartheta_1 d\Omega_2; \quad L = \frac{d\Phi}{df \cos \vartheta d\Omega} \quad \text{in } \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{sr}}. \quad (2.2-3)$$

Beachte: Fläche 1 und Raumwinkel 2 oder Fläche 2 und Raumwinkel 1!

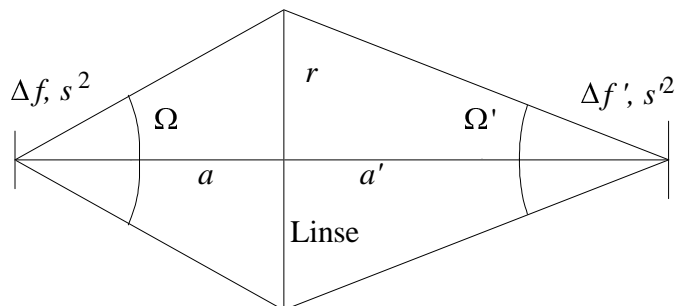
Die Strahldichte ist unabhängig vom Abstand, da die r^2 -Abhängigkeit (und ein $\cos \vartheta$) in $d\Omega$ steckt, und bleibt auch bei Abbildungen erhalten. Bei isotroper Strahlung $\int L d\Omega = 4\pi L$.

Verhalten der Strahldichte bei Abbildung: (Abbildung durch eine Linse ohne Verluste)

Einfacher Fall:

$$\Delta \Phi = L \Delta f \Omega = L' \Delta f' \Omega'; \quad \Delta f = s^2$$

$$\frac{\Omega'}{\Omega} = \frac{r^2 \pi a^2}{a'^2 r^2 \pi} = \frac{a^2}{a'^2}$$



$$\text{Abbildungsmaßstab: } \frac{s'}{s} = \frac{a'}{a} \quad \frac{\Delta f'}{\Delta f} = \frac{a'^2}{a^2} \Rightarrow \boxed{\frac{L}{L'} = \frac{\Delta f' \Omega'}{\Delta f \Omega} = 1}$$

Komplizierterer Fall:

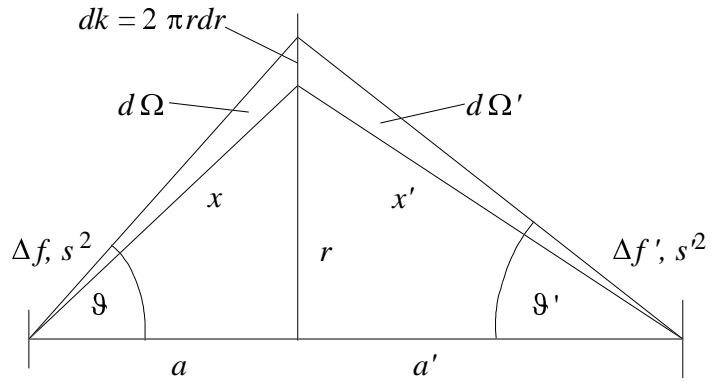
Es wird die Strahlung betrachtet, die von einem Kreisring der Linse mit der Fläche $dk = 2\pi r dr$ abgebildet wird. Die Strahlungsleistung ist dann (siehe oben):

$$d\Phi = L \Delta f \cos \vartheta d\Omega \quad (2.2-4)$$

$$\Delta f = s^2$$

$$d\Omega = 2\pi r \frac{x d\vartheta}{x^2} = \frac{2\pi r d\vartheta}{x}$$

$$x = \frac{a}{\cos \vartheta}; \quad d\Omega = \frac{2\pi r \cos \vartheta d\vartheta}{a}$$



in (2.2-4):

$$d\Phi = L \frac{s^2}{a} 2\pi r \cos^2 \vartheta d\vartheta \quad (2.2-5)$$

Berechnung der Strahldichte bei $\Delta f'$ analog mit $\Phi' = \Phi$ (die Strahlungsleistung soll perfekt fokussiert werden).

$$L' = \frac{d\Phi}{\Delta f' \cos \vartheta' d\Omega'} = L \frac{s^2 2\pi r \cos^2 \vartheta d\vartheta}{a} \frac{a'}{s'^2 2\pi r \cos^2 \vartheta' d\vartheta'} \quad \frac{L'}{L} = \frac{s^2}{s'^2} \frac{a'}{a} \frac{\cos^2 \vartheta d\vartheta}{\cos^2 \vartheta' d\vartheta'} \quad (2.2-6)$$

Wir brauchen nun die Vergrößerung s'/s als Funktion von a'/a . Es gilt die Abbésche Sinusbedingung für ein fehlerfreies (aberrationsfreies, aplanatisches) System:

$$s'/s = \sin \vartheta / \sin \vartheta'; \quad (\text{Abbildungsmaßstab: } s/s' = x/x')$$

$$s \sin \vartheta = s' \sin \vartheta' \quad (2.2-7)$$

$$r = a' \tan \vartheta' = a \tan \vartheta; \quad a' \frac{\sin \vartheta'}{\cos \vartheta'} = a \frac{\sin \vartheta}{\cos \vartheta} \quad \text{mit (2.2-7):} \quad a' \frac{\sin \vartheta'}{\cos \vartheta'} = a \frac{s' \sin \vartheta'}{s \cos \vartheta}$$

$$\text{also: } \frac{\cos \vartheta}{\cos \vartheta'} = \frac{s' a}{s a'}$$

$$(2.2-7) \text{ differenzieren: } s \cos \vartheta d\vartheta = s' \cos \vartheta' d\vartheta' \quad \rightarrow \quad \frac{\cos \vartheta}{\cos \vartheta'} \frac{\cos \vartheta d\vartheta}{\cos \vartheta' d\vartheta'} = \frac{s' a}{s a' s}$$

Eingesetzt ergibt sich:

$$\boxed{L' = L}$$

Die Strahldichte kann durch ein optisches System nicht vergrößert werden. Bei verlustfreier Optik wird die Strahldichte nicht verändert. Die Strahldichte bleibt bei einer Abbildung bestenfalls erhalten.

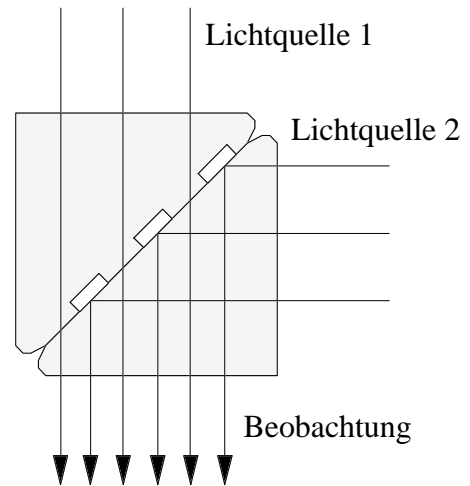
aber: die Bestrahlungsstärke kann sehr wohl verändert werden: Brennglas
- Verkleinerung der Fläche.

Beispiel für subjektive Photometrie:

Bunsensches Fettfleckphotometer

besser: Lummer-Brodhunscher Würfel (Abb.)

→ Vergleich zweier Lichtquellen (gleicher Farbe).



Strahldichtemessungen im Labor:

Absolutmessung z.B. über Erwärmung,
"Kalibrierung" durch Vergleich mit einem Strahlungsnormal.

Spektrale Größen:

Alle Größen können auch auf ein Frequenz- oder Wellenlängenintervall bezogen werden, dann spricht man von der spektralen Strahldichte $L_\nu(\nu)$, $L_\lambda(\lambda)$ (der Index bedeutet: dies ist eine differentielle Größe bezüglich des ν - oder λ -Intervalls):

$$d\Phi(\vartheta, \varphi) = L_\nu(\vartheta, \varphi) d\nu \cos\vartheta df d\Omega; \quad L_\nu \text{ in } \text{W}/(\text{m}^2 \text{ Hz sr}), \quad L_\lambda \text{ in } \text{W}/(\text{m}^2 \text{ nm sr}). \quad (2.2-8)$$

Die gesamte Strahldichte L ergibt sich: $L = \left| \int L_\nu d\nu \right| = \left| \int L_\lambda d\lambda \right|$.

Zur Umrechnung ist erforderlichlich:

$$L_\nu d\nu = -L_\lambda d\lambda; \quad \text{d.h.} \quad L_\lambda = -L_\nu \frac{d\nu}{d\lambda} = \frac{c}{\lambda^2} L_\nu. \quad (2.2-9)$$

Manchmal wird auch der Begriff der Strahlungsdichte (Energie/Volumen) benutzt:

$$u_\nu = \frac{4\pi}{c} L_\nu; \quad \left(\frac{\text{s}}{\text{m}} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ Hz}} = \frac{\text{Ws}}{\text{m}^3 \text{ Hz}} \right). \quad (2.2-10)$$

Die spektrale Strahldichte in thermischen Gleichgewicht ist die Hohlraumstrahlung - schwarze Strahlung $B_\lambda(\lambda, T)$, Plancksches Strahlungsgesetz (1900, Abb. nächste Seite, Ableitung später):

$$B_\lambda = \frac{2hc^2}{\lambda^5 \left[\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1 \right]} \quad B_\lambda = \frac{1.191 \cdot 10^{20}}{\lambda^5 \left[\exp\left(\frac{1.43879 \cdot 10^7}{T\lambda}\right) - 1 \right]} \quad (2.2-11)$$

in $\text{W}/(\text{m}^2 \text{ nm sr})$,
 T in K, λ in nm

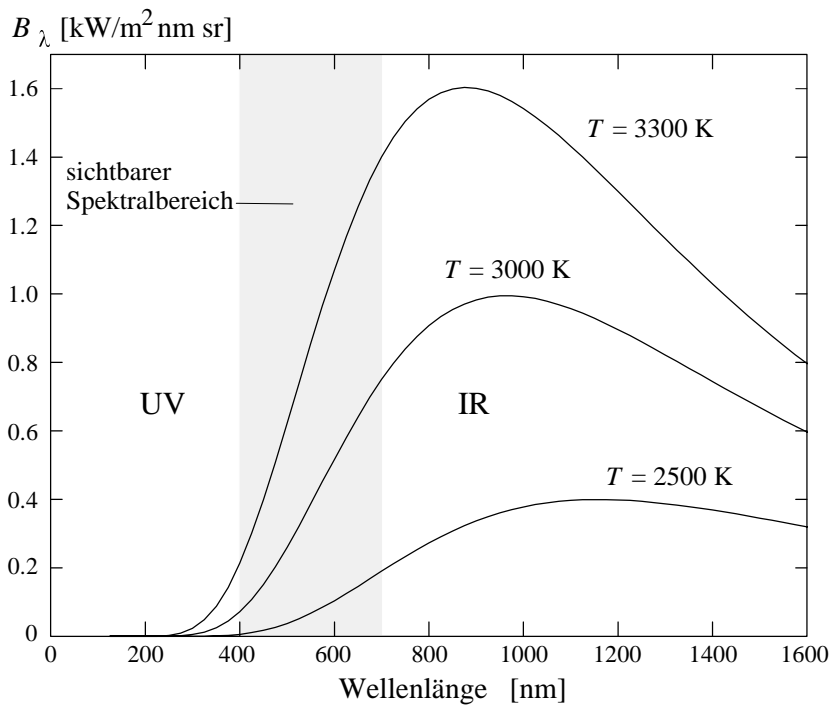


Abbildung links:
Planckfunktion für einige
Temperaturen.

Weitere Gesetze:

Rayleigh-Jeanssches Gesetz - Näherung im langwelligen Bereich,
Wiensches Strahlungsgesetz - Näherung im kurzwelligen Bereich.

Gesamtstrahlung, Stefan-Boltzmannsches Gesetz: $E = \sigma T^4$ (2.2-12)

$$\sigma = \frac{2 \pi^5 k^4}{15 c^2 h^3} = 5.670 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \quad (E = \pi \int B_\lambda d\lambda) . \quad (2.2-13)$$

Wiensches Verschiebungsgesetz (numerische Auswertung):

$$\lambda_m T = c h / (4.9651 k) = 2.898 \cdot 10^6 \text{ nm K}. \quad \text{Sonne: } 5800 \text{ K} \rightarrow \lambda_m \approx 500 \text{ nm}. \quad (2.2-14)$$

Kirchhoffscher Satz: Im Gleichgewicht müssen Emission und Absorption (= Absorptionsgrad mal Strahldichte) gleich groß sein, d.h.

$$E_\lambda(\lambda) = A(\lambda) \cdot B_\lambda(\lambda); \quad \frac{E_\lambda(\lambda)}{A(\lambda)} = B_\lambda(\lambda) = f(\lambda, T) . \quad (2.2-15)$$

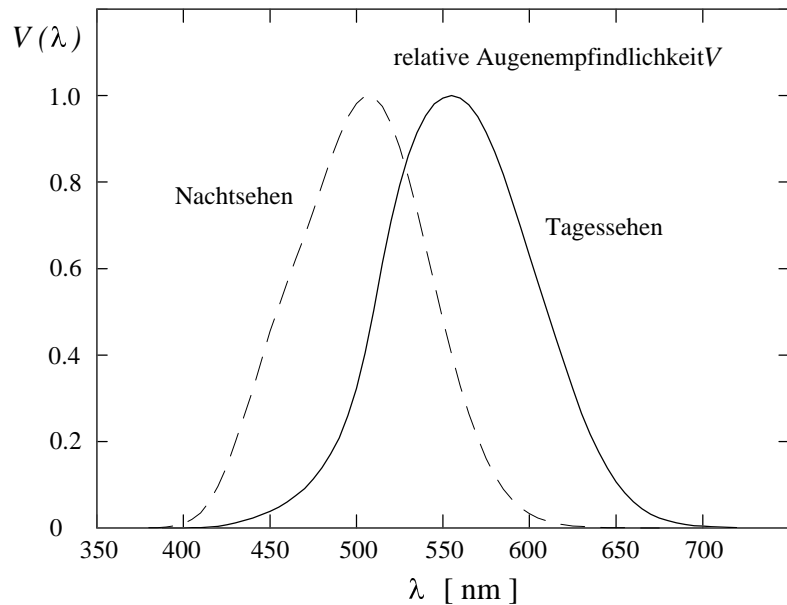
Lichttechnische Größen:

Definition über die normierte Augenempfindlichkeit $V(\lambda)$ (Bild)

Maximalwerte K_m :

Tagessehen 673 lm/W
bei $L = 10^2 \text{ cd/m}^2$

Nachtsehen 1759 lm/W
bei $L = 10^{-5} \text{ cd/m}^2$.



Die Lichtstärke Candela (cd) ist definiert über die Abstrahlung eines Flächenelements f von $1/600000 \text{ m}^2$ eines schwarzen Strahlers bei Platintemperatur (2042 K) senkrecht zur Oberfläche (entspricht 3.14 lm ; das Platin strahlt dann insgesamt 1.64 W ab, $\Phi = \sigma T^4 f$).

Leuchtdichte cd/m^2 (\leftrightarrow Strahldichte).

Lichtstrom Lumen $1 \text{ lm} = 1 \text{ cd sr}$, Beleuchtungsstärke Lux = Lumen/ m^2 (siehe Tabelle).

Auch Belichtung: Luxsekunde

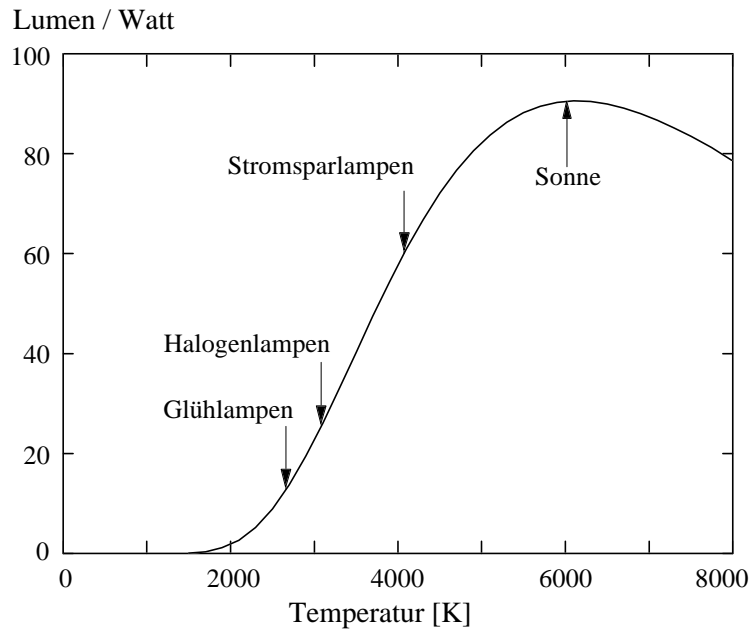
Berechnung lichttechnischer Größen, z.B.: $\Phi (\text{lumen}) = K_m \int \Phi (\text{Watt}) V(\lambda) d\lambda$ usw. (2.2-16)

Rechenbeispiel: Wir bauen eine 100 W Glühbirne. Maximaltemperatur des W-Glühfadens sei 2800 K. Wärmeleitung wird vernachlässigt. Zu beachten ist, daß Wolfram nicht schwarze, sondern (näherungsweise) graue Strahlung aussendet, d.h. $L_\lambda \approx 0.4 B_\lambda$. Ergebnisse der numerischen Rechnung:

1. um 100 W bei 2800 K abzustrahlen, braucht man eine Fläche von 0.72 cm^2 (Emissionsgrad von Wolfram ≈ 0.4),
2. von den 100 W werden ca. 11 W im sichtbaren Spektralbereich abgestrahlt,
3. multipliziert mit der Augenempfindlichkeit für Tagsehen ($K_m = 673 \text{ lm/W}$) ergibt sich $\Phi \approx 1650 \text{ lm}$, d.h. die Lampe macht 16.5 lm/W (Halogenlampen machen 25 lm/W). Für andere Temperaturen (beachte das Maximum bei 6000 K):

T / K	2000	3000	4000	5000	6000	7000	10000
lm/W	1.83	22.7	57.7	82.3	90.5	87.4	57.5

4. können wir diese Strahlung auf 1 m² bringen, dann ergibt sich eine Beleuchtungsstärke von ≈1600 lux (gutes Arbeitslicht, empfohlen: 500 - 2000 lux).



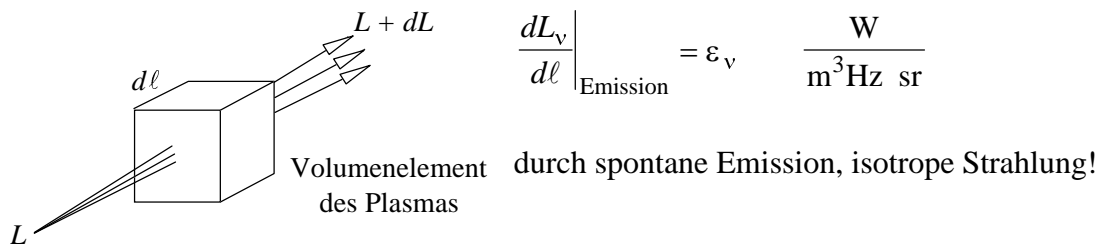
Zur Abb. links:

Bei denjenigen Temperaturen, die mit Metallen erreichbar sind, ist der Wirkungsgrad von Lampen immer relativ klein. Gasentladungslampen sind besser.

Die Sonne hat den höchsten Wirkungsgrad eines schwarzen Körpers, da das Maximum der Emission bei ca. 6000 K genau im sichtbaren Spektralbereich liegt.

2.3 Volumengrößen, Strahlungstransportgleichung

Die Plasmastrahlung ist Volumenstrahlung, daher braucht man die Definition einer Größe pro Volumeneinheit. Sie wird spektraler Emissionskoeffizient ϵ_v genannt und beschreibt die Änderung der Strahldichte beim Durchgang durch ein Volumenelement.



weitere Prozesse: Absorption $\alpha(v) \cdot L_v(v)$ und induzierte Emission $\beta(v) \cdot L_v(v)$ (nicht isotrop).

α und β haben keinen Index; sie sind nicht differentiell, sondern nur Funktionen von v .

$$\frac{dL_v}{dl} = \epsilon_v(v) - [\alpha(v) - \beta(v)] \cdot L_v(v) = \epsilon_v(v) - \alpha'(v) \cdot L_v(v). \quad (2.3-1)$$

$\alpha'(v)$ = effektiver Absorptionskoeffizient; die induzierte Emission wird vernünftigerweise zur Absorption geschlagen, da sie die gleiche Abhängigkeit von $L_v(v)$ hat.

Im Gleichgewicht ($dL_\nu/d\ell = 0, L_\nu = B_\nu$) lautet der Kirchhoffsche Satz:

$$\varepsilon_\nu(\nu) = \alpha'(\nu) \cdot B_\nu \quad \text{Achtung! Gilt nur für thermisches Gleichgewicht!} \quad (2.3-2)$$

(genauer: bei einer Boltzmannverteilung der beteiligten Niveaus).

Damit wird die Strahlungstransportgleichung (2.3-1):

$$\frac{dL_\nu}{d\ell} = \alpha'(B_\nu - L_\nu) . \quad (2.3-3)$$

Definition der optische Tiefe $\tau \quad d\tau = \alpha' d\ell \quad (2.3-4)$

somit $\frac{dL_\nu}{d\tau} = (B_\nu - L_\nu) \quad (2.3-5)$

(2.3-5) kann man für eine homogene Schicht integrieren, und es ergibt sich für $L_\nu(0) = 0$:

$$\boxed{L_\nu = B_\nu[1 - \exp(-\tau)]} . \quad (2.3-6)$$

Im allgemeinen Fall muß B_ν durch die sog. Quellfunktion (source function S_ν) ersetzt werden, die von den detaillierten Eigenschaften des Plasmas abhängt (Besetzung oben - unten).

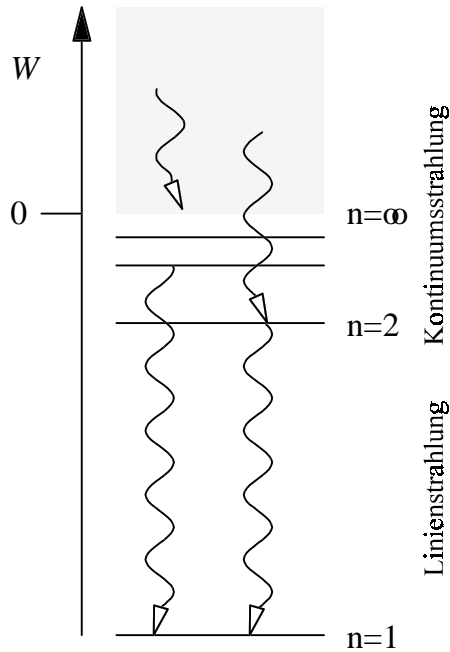
Spezialfälle:

optisch dünn: $\tau \ll 1 \quad L_\nu = L_\nu(0) + \int \varepsilon_\nu d\ell , \quad (2.3-7)$

optisch dick: $\tau \gg 1 \quad L_\nu = B_\nu \quad (\text{oder } S_\nu) . \quad (2.3-8)$

Die optische Dicke kann bei jeder Wellenlänge anders sein! Prinzip der Strahldichtekalibrierung mit optisch dicken Linien.

2.4 Arten von Strahlung, Informationsgehalt der Spektren

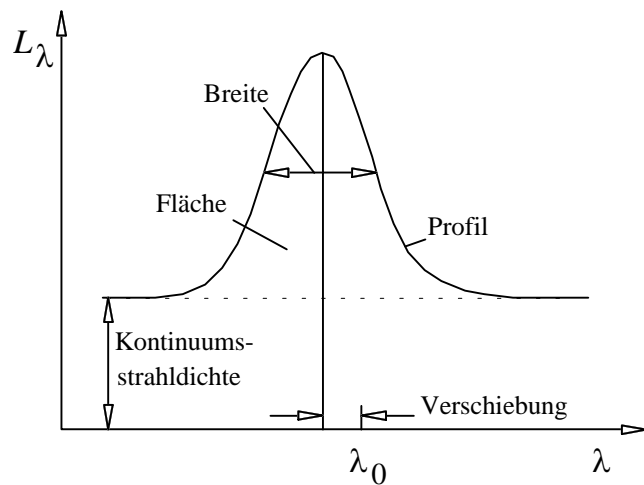


Energiediagramm (eindimensional, W -Achse)
Energienullpunkt hier an der Seriengrenze

Elektronische Übergänge können zu

- Linienstrahlung (Bandenstrahlung), oder
- kontinuierlicher Strahlung

führen.



Informationsgehalt eines Spektrums:

Kontinuum, Integral über Linien,
Linienprofile, Linienverschiebung.

Die gesamte Strahlung unter dem Linienprofil, d.h. der Linienemissionskoeffizient ϵ_L ist das primäre Ergebnis einer Atomphysik-Rechnung.

(spontane Emission: $\epsilon_L = n_{\text{oben}} A \frac{h\nu}{4\pi}$ A = Übergangswahrscheinlichkeit, siehe später)

$$\epsilon_L = \int_{\text{Linie}} \epsilon_\nu d\nu \quad \text{oder} \quad \epsilon_\nu = \epsilon_L P_\nu \quad (2.4-1); \quad \text{Linienprofil} \int_{\text{Linie}} P_\nu d\nu = 1 \quad (2.4-2).$$

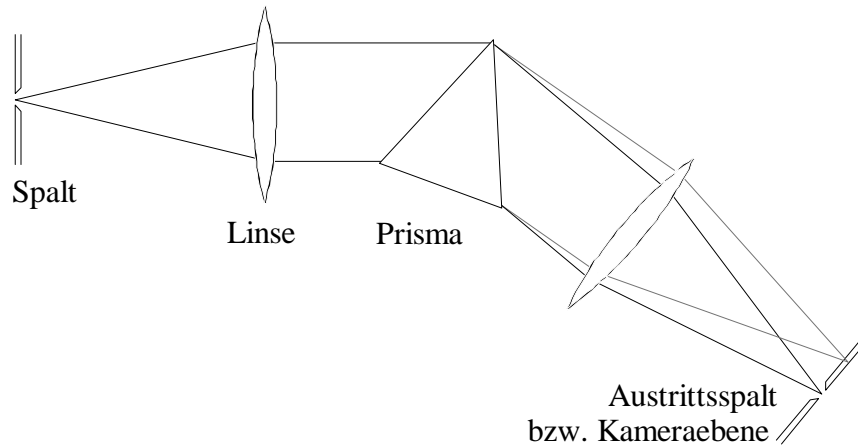
Spektrallinien sind niemals unendlich schmal; sie haben mindestens die natürliche Linienbreite, aber auch Plasmaeffekte spielen eine Rolle, in der Praxis: Apparateprofil!

3. Experimentelle Untersuchung von Spektren

Klassische Spektralapparate bestehen aus dem Eintrittsspalt, einer Linse (bzw. einem fokussierenden Spiegel), dem dispersiven Element Prisma oder Gitter im parallelen Strahlen-gang, wieder einer Linse sowie der Photoplatte oder dem Austrittsspalt. Im vakuum-ultravioletten Spektralbereich sind fokussierende Gitter üblich.

3.1 Prismenspektrograph

Prinzip: Abhängigkeit des Brechungsindex' von der Wellenlänge, $n = f(\lambda)$
 (normalerweise nimmt n mit abnehmendem λ zu; blau wird stärker abgelenkt als rot)



Berechnung der Winkeldispersion:

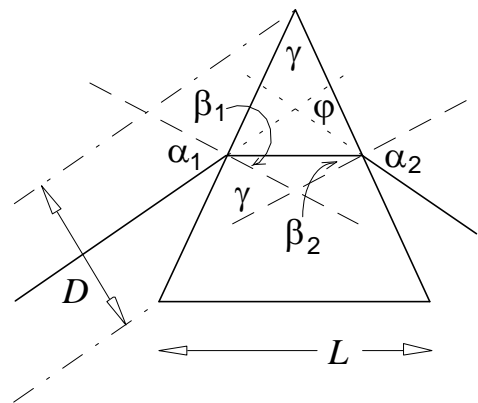
(Beziehungen in Klammern: symmetrischer Durchgang, nur hier ist eine einfache Rechnung möglich)

$$\gamma = \beta_1 + \beta_2 (= 2 \beta; \beta = \gamma/2) \quad (3.1-1)$$

$$\varphi = \alpha_1 - \beta_1 + \alpha_2 - \beta_2 (= 2\alpha - \gamma) \quad (3.1-2)$$

$$\frac{\sin \alpha_1}{\sin \beta_1} = n \quad (3.1-3)$$

n ist eine Funktion von λ ; gesucht: $\frac{d\varphi}{dn}$; $\frac{d\varphi}{d\lambda}$.



Symmetrischer Durchgang:

aus (3.1-3): $\alpha = \arcsin (n \sin \beta)$

mit (3.1-1): $\alpha = \arcsin (n \sin \gamma/2)$.

In (3.1-2) und differenziert:
$$\frac{d\varphi}{dn} = \frac{2d\alpha}{dn} = \frac{2 \sin(\gamma / 2)}{\sqrt{1 - [n \sin(\gamma / 2)]^2}} \quad (3.1-4)$$

(3.1-4) beschreibt die Dispersion als Funktion des Prismenwinkels γ ; sie wächst mit γ (d.h. $\gamma/2$), in der Praxis muß aber sein $\gamma \leq 60^\circ$.

Um die Dispersion als Funktion von α zu erhalten gehen wir zurück auf den Ausdruck in Klammern von (3.1-2) und erhalten mit $\sin\alpha = n \sin\beta$ (3.1-3) und $\cos\alpha \, d\alpha = dn \sin\beta$:

$$\frac{d\varphi}{dn} = \frac{2}{n} \tan\alpha; \quad \frac{d\varphi}{d\lambda} = \frac{d\varphi}{dn} \frac{dn}{d\lambda} = \frac{2}{n} \tan\alpha \frac{dn}{d\lambda}. \quad (3.1-5)$$

Die Lineardispersion ist proportional zum Winkel und der Brennweite f .

Reziproke Lineardispersion:
$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{1}{f} \frac{d\lambda}{d\varphi} = \frac{1}{f \frac{2}{n} \tan\alpha \frac{dn}{d\lambda}}. \quad (3.1-6)$$

$dn/d\lambda$ für Glas oder Quarz ist bei 500 nm in der Größenordnung 600 bzw. 2000 cm^{-1} (Änderung des Brechungsindex' $\Delta n = 0.006$ bzw. 0.02 pro $\Delta\lambda = 100$ nm).

Rechenbeispiel: Quarz 60° , 500 nm, $f = 100$ cm, $n \approx 1.5$, $\tan\alpha = 1.13$, $dn/d\lambda = 600$ cm^{-1}

$d\lambda/dx \approx 11 \cdot 10^{-6} = 11$ nm/mm - ganzes sichtbares Spektrum 28 mm (nichtlinear!)
früher Geräte mit 3 m Brennweite!

Auflösungsvermögen:

Allgemeine Faktoren, welche die Auflösung begrenzen:

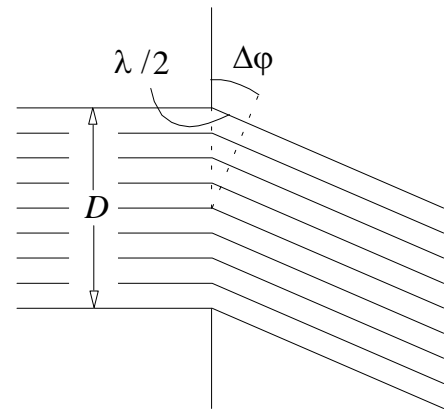
1. Spektrallinien sind nicht wirklich monochromatisch - natürliche Linienbreite, Dopplerbreite, Druckverbreiterung, optische Tiefe.
2. Linien sind Bilder des Eintrittsspalts, Breite > 0 (Kompromiß: Intensität - Auflösung). Außerdem: Abbildungsfehler.
3. Ortsauflösung des Detektors ungenügend (zu kleine Lineardispersion).
4. Begrenzung der Auflösung durch Beugung an der effektiven Öffnung mit der Breite D (d.h. der Größe des Prismas, wenn die andere Optik groß genug ist).

Zu Punkt 4: Fraunhofer-Beugung an einem Spalt

Winkeldifferenz für 1. Auslöschung:

$$(D/2) \Delta\varphi = \lambda/2, \quad \Delta\varphi = \lambda/D \quad (3.1-7)$$

(Rand löscht Mitte usw. herunter).



Berechnung von D für ein Prisma aus L , γ und α :

$$\text{Seitenlänge des Prismas} = \frac{L}{2 \sin(\gamma/2)} = \frac{L}{2 \sin\beta} \quad \text{nach (3.1-1);} \quad \frac{L}{2 \sin\beta} = \frac{D}{\cos\alpha}$$

$$\text{mit (3.1-3):} \quad \frac{L}{D} = \frac{2 \sin\beta}{\cos\alpha} = \frac{2 \tan\alpha}{n}; \quad \text{mit (3.1-7):} \quad \Delta\varphi = \lambda \frac{2 \tan\alpha}{Ln} \quad (3.1-8)$$

Welches $\Delta\lambda$ gehört nun zu diesem $\Delta\varphi$ (aus der Dispersionsbeziehung)?

$$\Delta\lambda = \Delta\varphi \frac{d\lambda}{d\varphi}; \quad \text{mit (3.1-5 und 3.1-8):} \quad \Delta\lambda = \lambda \frac{2 \tan\alpha}{nL} \frac{n}{2 \tan\alpha} \frac{dn}{d\lambda}$$

Somit ergibt sich das theoretische Auflösungsvermögen eines Prismas zu:

$$\boxed{\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = L \frac{dn}{d\lambda}} \quad (3.1-9)$$

Wieder das Beispiel Quarz, 8 cm, $dn/d\lambda = 600 \text{ cm}^{-1}$: $\lambda / \Delta\lambda = 4800 \rightarrow 0.1 \text{ nm}$ bei 500 nm
 $\rightarrow \odot$ schlecht!

Man hat früher auch Spektrometer mit mehreren Prismen gebaut. Je nach Anordnung gibt es z.B. addierende und subtrahierende Doppelmonochromatoren (d.h. die Zerlegung wird wieder rückgängig gemacht), die größere Dispersion haben, bzw. weniger Streulicht.

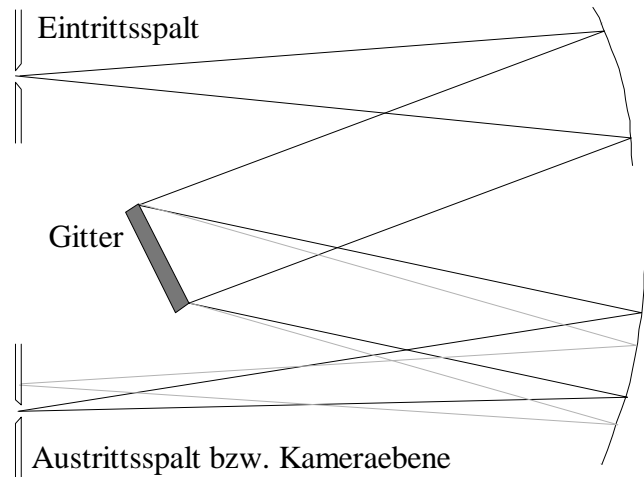
Um eine Änderung der Polarisierung zu vermeiden, sind Quarz-Prismen üblicherweise aus links- und rechtsdrehenden Kristallen zusammengesetzt.

☺ Vorteile: etwa konstante Transmission über einen großen Wellenlängenbereich
keine höheren Ordnungen (s.u.) \rightarrow Vorzerleger für Gitterspektrographen.

☹ Nachteile: Dispersion stark nichtlinear; Wellenlängenbereich eingeschränkt durch
Transmission des Materials; schlechte Auflösung; gekrümmte Spaltbilder.

3.2 Gitterspektrograph

Prinzip: Beugung an vielen Spalten
 → Auslöschung von Lichtbündeln
 von jedem zweiten, jedem dritten
 Spalt usw. außer bei wenigen
 ausgezeichneten Richtungen.



Rechts: Czerny-Turner-Anordnung.

Berechnung der Dispersion:

Bedingung für eine Verstärkung aller Bündel
 (Phasenunterschied $\lambda, 2\lambda, \dots$):

$$a \pm b = z \lambda \quad (3.2-1)$$

(in der Skizze: -)

$$g(\sin\alpha + \sin\beta) = z \lambda \quad (3.2-2)$$

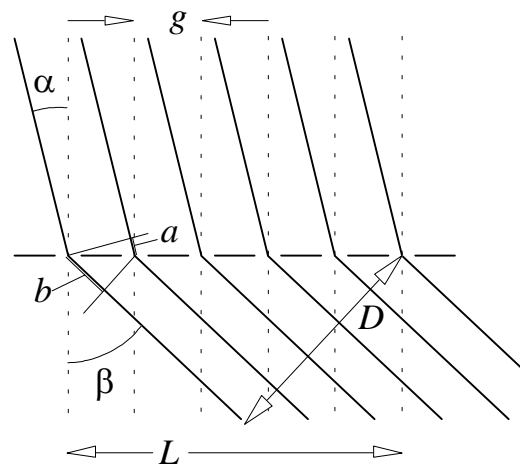
(Winkel positiv/negativ zählen)

z = Ordnung der Beugung, g = Gitterkonstante.

Speziell für senkrechten Einfall, $\alpha = 0^\circ$
 (ansonsten $\alpha = \text{const.}$, $d\alpha/d\lambda = 0$):

$$g \sin\beta = z \lambda;$$

differenzieren:
$$\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{z}{g \cos\beta}. \quad (3.2-3)$$



Je kleiner die Gitterkonstante (je mehr Striche /mm), desto höher ist die Winkeldispersion.
 Die Lineardispersion erhält man wieder durch Multiplizieren mit der Brennweite f . Die
 angegebenen Formeln gelten auch für Reflexionsgitter.

Beispiel für die reziproke Lineardispersion; $f = 1\text{m}$, $g = 1 / 1200\text{ mm}$, $z = 1$, $\cos\beta \approx 1$

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{1}{f} \frac{d\lambda}{d\beta} = \frac{1}{1000 \cdot 1200} = 8.3 \cdot 10^{-7} = 0.83 \frac{\text{nm}}{\text{mm}}.$$

Gitterspektrometer haben bei kleinen Ablenkwinkeln fast konstante Dispersion ($\cos\beta \approx 1$).

Bei Monochromatoren (z.B. mit Photomultiplier) erfolgt die Veränderung der Wellenlänge
 durch Gitterdrehung (siehe Sinustrieb).

Gitterspektrographen sind in der Regel nicht mit Linsen, sondern mit fokussierenden Spiegeln ausgestattet (Wellenlängenbereich vom IR bis zum nahen VUV).

Begrenzung der Auflösung, wieder aufgrund der Beugung an der Öffnung D nach (3.1-7):
(der Austrittswinkel ist nun β)

$$\Delta\beta = \frac{\lambda}{D} = \frac{\lambda}{L \cos\beta} \quad \text{und} \quad \frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{z}{g \cos\beta} \quad (3.2-3) \quad \Rightarrow \quad \Delta\lambda = \frac{\lambda g \cos\beta}{z L \cos\beta}. \quad (3.2-4)$$

L/g ist die Gesamtzahl N der Gitterstriche:

$$\boxed{\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = z N} \quad (3.2-5)$$

Beispiel wie oben, Gitterbreite 5 cm: $\lambda/\Delta\lambda = 50 \cdot 1200 = 6 \cdot 10^4$ (5 pm bei 300 nm);

erforderliche Spaltbreite: $\Delta x = f \Delta\beta = 1000 \text{ mm} \cdot 5 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot 1200 \text{ mm}^{-1} = 6 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 6 \text{ }\mu\text{m}$.

Veränderung der Wellenlänge durch Gitterdrehung: Sinustrieb
(zuerst von Fastie angegeben)

Beim Betrieb als Monochromator möchte man gerne eine lineare Abhängigkeit der Wellenlänge vom Drehwinkel der Spindel, die z.B. durch einen Synchronmotor oder Schrittmotor angetrieben wird: dann hängt λ linear von der Zeit ab.

Gitterformel: $\sin\alpha + \sin\beta = z\lambda / g$

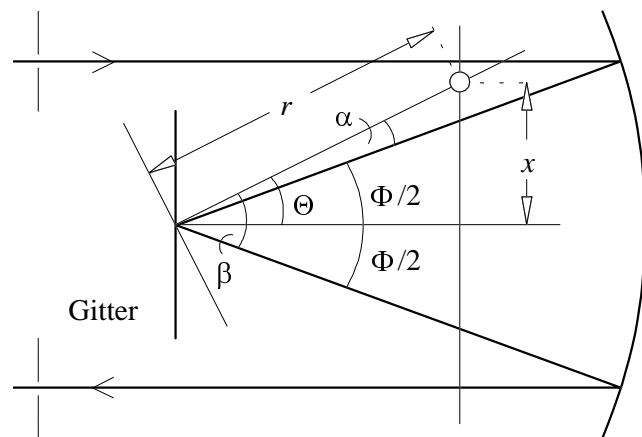
Schleifender Arm auf einer Spindel:

In der Mittenstellung findet man die sog. 0. Ordnung (direkte Reflexion), wobei $\alpha = \beta = \Phi/2$. Der Arm wird nun um Θ gedreht. Bei der richtigen Wellenlänge λ ist der Strahlengang wie vorher.

$$\alpha = \Theta - \Phi/2$$

$$\beta = \Theta + \Phi/2$$

$$\lambda = [\sin(\Theta - \Phi/2) + \sin(\Theta + \Phi/2)] (g/z)$$



Winkel-Additionstheorem: $\sin(\alpha - \beta) + \sin(\alpha + \beta) = 2 \sin\alpha \cos\beta$

$$\rightarrow \lambda = \sin\Theta \cos(\Phi/2) (2g/z).$$

\rightarrow

Somit ist die durchgelassene Wellenlänge proportional zu $\sin\Theta$.

Andererseits, wenn der Schnittpunkt auf einer Kreisbahn fährt:

$$x = r \sin\theta,$$

Dispersion: Radius des Kreises $r = R/2$

Gitterformel (3.2-2): $g(\sin\alpha + \sin\beta) = z\lambda$

Winkeldispersion (3.2-3): $\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{z}{g \cos\beta}$

Lineardispersion: $\frac{dx}{d\lambda} = \frac{dx}{d\beta} \frac{d\beta}{d\lambda}$ ($dx = \overline{BB'}$ entlang des Rowlandkreises)

wegen der Eigenschaft des Zentriwinkels $dx = r \cdot 2 d\beta = (R/2) \cdot 2 d\beta$

reziproke Dispersion beim Rowlandkreis: $\frac{d\lambda}{dx} = \frac{g \cos\beta}{z R}$. (3.2-6)

Grazing Incidence:

Im Vakuum-UV wird der Reflexionskoeffizient von Metalloberflächen für senkrechten Einfall immer kleiner (es sind auch keine Schutzschichten für Aluminium mehr brauchbar).

Die Reflexion hängt mit den freien Elektronen des Metalls zusammen und der kritische Reflexionswinkel ist gegeben durch die Plasmfrequenz der Elektronen:

$$\sin\Theta_c = \lambda \frac{e}{2\pi c} \sqrt{\frac{n_e}{\epsilon_0 m_e}} \quad (3.2-7)$$

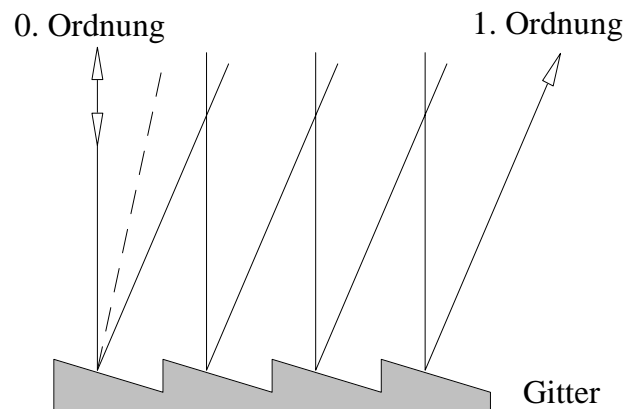
θ ist hier der Winkel zur Oberfläche, unterhalb θ_c erfolgt Totalreflexion.

Bei kurzen Wellenlängen ($\lambda < 10$ nm) muß man also zu immer kleineren Winkeln zur Oberfläche übergehen (1 - 2° für Röntgenbereich). Die Gleichungen des Rowlandkreises gelten weiter.

Gitterspektralapparate historisch:

Rowland (konkav)	1883
Ebert (plan)	1889
Eagle (konkav)	1910
Grazing-Incidence (k)	1927
Czerny-Turner (p)	1930
Fastie (p)	1952
Seya-Namioka (k)	1952

Rechts: Blaze.



Spezialität geritzter Gitter:

"Blaze" - spezielle, sägezahnförmige Formung der Gitterfurchen, die zu besonders großer Effektivität in einem bestimmten Winkelbereich (Wellenlängenbereich) führt. Die negativen und die positiven Ordnungen sind dann nicht mehr gleichberechtigt.

Gitterherstellung und Gitterfehler:

Zunächst wird auf der Gitterritzmaschine ein "Master" hergestellt (Steigung der Spindel z.B. 1 mm, Teilung auf dem Umfang 1800 Striche \rightarrow 1800 l/mm). Das Ritzen mit einem Diamantstichel dauert viele Tage! Konkavgitter werden gleichermaßen hergestellt, mit gleichem Abstand entlang der Sehne. Dabei ist das Mastergitter ein Negativ, d.h. es ist konvex. Die Mechanik hat aber immer kleine Fehler, die zu den sog. Gittergeistern führen.

Gittergeister (wesentlich unterdrückt durch interferometrisch kontrollierte Teilungsmaschinen):

Rowland-Geister: periodische Fehler der Teilung der Gitterspindel, symmetrisch um die Linie.

Lyman-Geister: periodische Fehler im Zusammenhang mit anderen drehenden Teilen.

Wood-Geister: unperiodische Fehler, ganz nahe an der Linie.

Sehr wichtig ist außerdem, wieviel Streulicht von der Oberfläche kommt.

Von dem Master werden durch eine Trennschicht, Bedampfen mit Aluminium und Aufbringen einer Harzschicht Replika-Gitter hergestellt. Man macht 30-50 Kopien von einem Master, allerdings normalerweise ca. 10 Ersatz-Masterkopien.

Holographische Gitter: (interferometrische Gitter)

Eine lichtempfindliche Schicht wird belichtet durch ein Interferenzstreifenmuster, das durch die Überlagerung zweier Laserstrahlen (Argon-Ionen-Laser) entsteht. Anschließend erfolgt die Metallisierung. Etwa sinusförmige Gitterriefen - kein Blaze, keine 2. Ordnung, die optische Fehler sind zum Teil korrigiert.

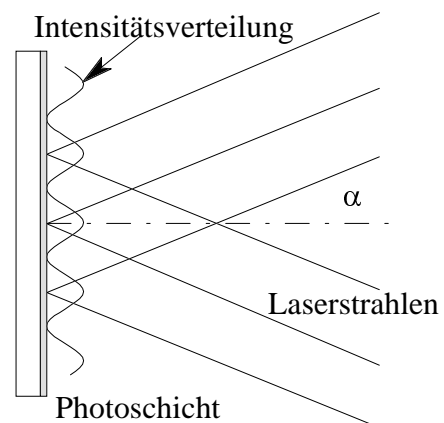
Für das Interferenzmuster der Laser gilt die Gitterformel (3.2-2): $\sin\alpha + \sin\beta = \lambda/g$

hier: $\alpha = \beta$; $2 \sin\alpha = \lambda/g$; $g = \lambda / 2\sin\alpha$

Ar-Ionenlinie 488 nm $\rightarrow g_{\min} = 244 \cdot 10^{-9} \text{ m} \rightarrow \approx 4000 \text{ l / mm}$,

Ar-Ionenlinie 320 nm $\rightarrow g_{\min} = 160 \cdot 10^{-9} \text{ m} \rightarrow \approx 6300 \text{ l / mm}$.

(geritzte Gitter: $\approx 1200 \text{ l / mm}$).



☺ Vorteile der Gitterspektrographen:

(fast) lineare Dispersion

hohe Auflösung

sie funktionieren in vielen Wellenlängenbereichen (IR - VUV).

⊗ Nachteile der Gitterspektrographen:

verschiedene Ordnungen

"Gittergeister" - periodische Fehler durch die Gitterritzmaschine.

Trennung von Ordnungen: Kantenfilter - das Abschneiden ist nur einfach zum Blauen hin

Rotunterdrückung: Detektorkathode (s.u.)

Prismenvorzerleger.

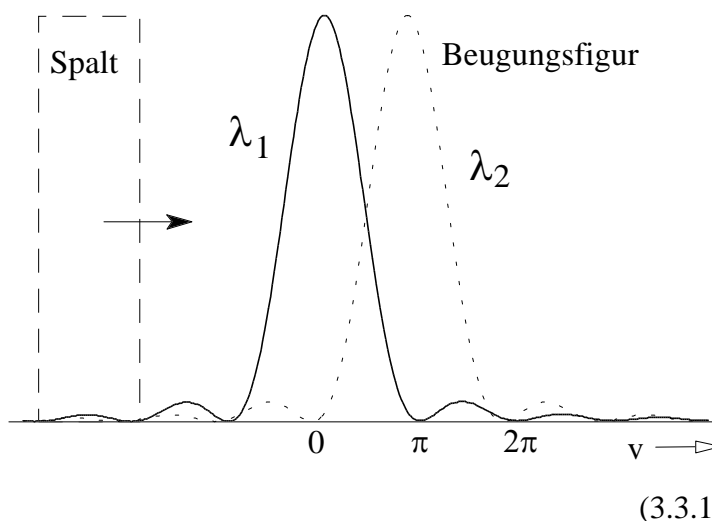
Messung in hoher Ordnung ($z = 20-30$): Echelle-Gitter.

3.3 Apparateprofil

Jeder Spektralapparat hat eine endliche Auflösung und ein "Apparateprofil" einer unendlich schmalen Linie.

Allgemein: Faltung z.B. mit dem "Apparateprofil"

$$f(x) = \int_0^{\infty} f_1(x-y) f_2(y) dy$$



Wahl der Spaltbreite:

(Kompromiß zwischen Auflösung und Intensität, gilt für Prisma und Gitter)

Apparateprofil: bestimmt durch die Beugungsfigur $\Phi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\sin v}{v} \right)^2$ (3.3-2)

Minimum bei $v_0 = \pi$, entspricht $x_0 = f \Delta\varphi = \lambda f / D$ (siehe 3.1-7)

Umrechnung (Dreisatz): $v = v_0 \frac{x}{x_0} = \pi \frac{x D}{\lambda f}$ (3.3-3)

D : kleinste Bündelbegrenzung, x : Abstand in der Fokalebene, f : Brennweite der Kameralinse.

Nach (3.3-2) haben Gitter- oder Prismenapparate näherungsweise ein sog. Dispersionsprofil, d.h.:

$$\Phi(\Delta\lambda) / \Phi(0) \sim v^2 \sim \Delta\lambda^{-2}$$

Der Eintrittsspalt wird 1:1 auf die Fokalebene abgebildet → rechteckige Intensitätsverteilung. Man muß jetzt die Faltung von Beugungsprofil und Rechteck berechnen.

Breite des Spalts s in gleichen Einheiten wie die Beugungsfigur: $\sigma = \pi \frac{D}{\lambda} \frac{s}{f}$

$$\Phi(w) = \int_{v=w-\sigma/2}^{v=w+\sigma/2} \frac{\sin^2 v}{v^2} dv \quad \text{führt auf den Integralsinus} \rightarrow \text{numerische Auswertung.}$$

Es zeigt sich, daß der beste Kompromiß bei $\sigma \approx \pi$ liegt: $s_0 = f \frac{\lambda}{D}$. (3.3-4)

Justierhilfe:

Die Beugung am Eintrittsspalt mit der Breite s ergibt Minima im Abstand der Brennweite f (am Ort der Linse / des Spiegels), die den Abstand a haben: $\lambda/s = a/f$. Nach (3.3-4) soll $a = D$ sein. Damit erhält man die Einstellvorschrift für die "förderliche Spaltbreite": Eintrittsspalt (und Austrittsspalt bei Monochromatoren) sollen so breit sein, daß das erste Beugungsmaximum gerade voll die Kollimatorlinse füllt.

$$s_0 = f \lambda / D.$$

Bei größeren Spaltbreiten:

Rechteckprofil bei Spektrographen

dreieckiges Profil bei Monochromatoren (Rechteck fährt über Rechteck).

Bei Gittermonochromatoren gilt heute meist: $s \gg s_0 \rightarrow$ dreieckiges Apparateprofil.

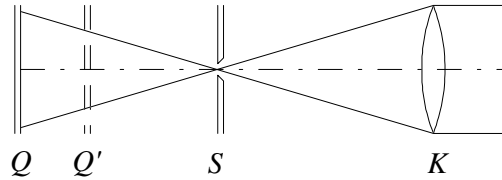
Da die theoretische Auflösung von Gitterspektrographen und -monochromatoren heute immer sehr hoch ist, wird das Apparateprofil in der Nähe der Linienmitte durch die Spaltbreite und Bildfehler bestimmt, bei Vielkanaldetektoren auch durch Übersprechen, bei Kanalplatten durch ungenügende Fokussierung der Elektronen.

In einfachen Fällen darf man ein dreieckförmiges oder näherungsweise Gaußförmiges Profil annehmen. Die Messung erfolgt mit schmalen Linien einer Spektrallampe oder Gasentladung.

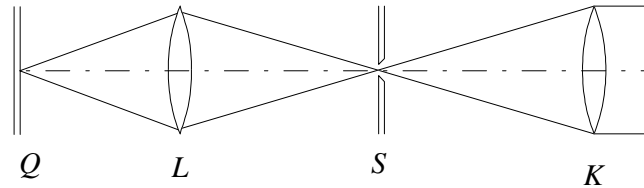
Ausleuchtung der Spektralapparate:

Q : Lichtquelle; S : Spalt; L : Linse; K : Kollimatorlinse

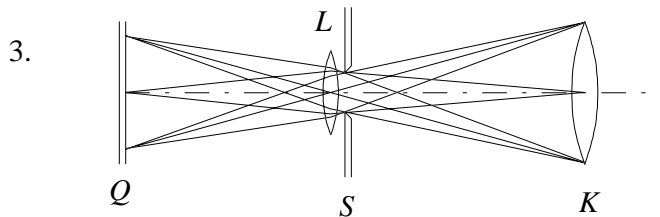
1. Große Lichtquellen ohne Abbildung. Der Strahlungsfluß ist unabhängig vom Spaltabstand Q - S , solange der Öffnungswinkel des Spektrographen gefüllt wird (im VUV).



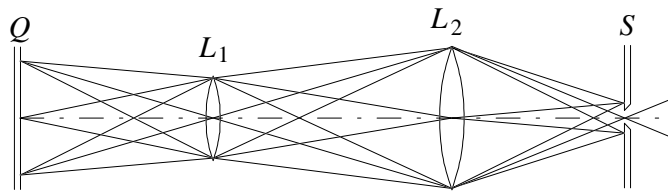
2. Abbildung auf den Spalt \rightarrow Ortsauflösung in der Quelle. Struktur über die Spalthöhe kann untersucht werden (am gebräuchlichsten im Sichtbaren).



3. Abbildung auf die Kollimatorlinse. Möglicherweise mehr Licht.



4. "Hand-in-Hand"-Abbildung mit einer Feldlinse. Die zweite Linse bildet die erste als leuchtende Fläche (Ersatzlichtquelle) ab.



3.4 Weitere Spektralapparate

3.4.1 Filter

Absorptionsfilter

- Farbglasfilter (Schott, charakterisiert durch Buchstaben NG, OG, GG,, siehe unten)
- Gelatinefilter
- Flüssigkeitsfilter
- Metallfilme für den Röntgenbereich.

Die Wirkung beruht auf der Absorption von Ionen oder mikroskopischen Kristallen in der Glasschicht, organischen Substanzen in Gelatine eingelegt oder in Flüssigkeiten gelöst.

Anwendung:

- Abschwächen (Neutralglasfilter NG, ca. 400-800 nm)
- Unterdrücken von störenden Ordnungen
- grobe Wellenlängenselektion.

Kantenfilter (WG, GG, OG, RG) 200-1000 nm:

gefaltet mit der Empfindlichkeitskurve eines Detektors (z.B. des Auges) ergeben sich Bandpaßfilter

Selektive Filter (BG, VG, UG, ...) - mäßige Selektion; Wärmeschutzgläser.

Interferenzfilter:

Prinzip: Schwächung des Lichts durch Mehrfachinterferenz, außer für einige ausgezeichnete Wellenlängen (siehe Interferometer).

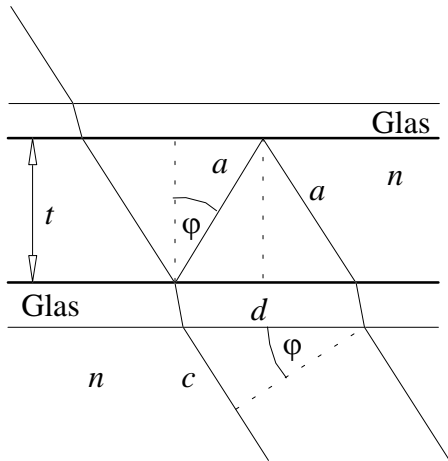
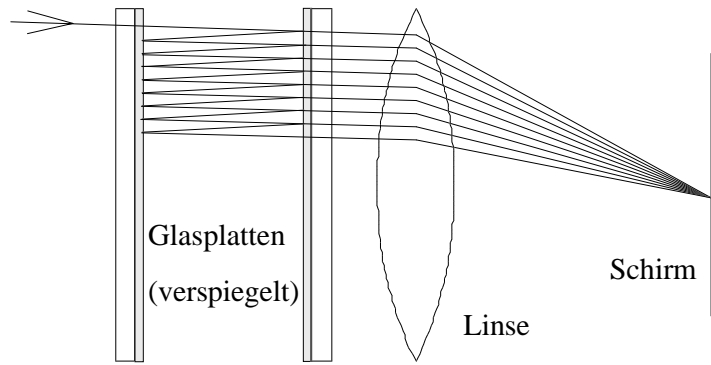
Abwechselnd Metallschichten und dielektrische Schichten;

$\Delta\lambda \approx 1 \text{ nm}$;

die Mittenwellenlänge kann durch Verdrehen des Filters in kleinem Umfang verändert werden.

3.4.2 Fabry-Perot-Interferometer

Prinzipieller Strahlengang
(Interferenzen gleicher Neigung):



Berechnung des Gangunterschieds D :

$$D = 2a n - c n \quad n: \text{Brechungsindex der Luft} \quad (3.4-1)$$

$$a = \frac{t}{\cos \varphi} \quad \frac{d}{2} = t \tan \varphi$$

$$c = d \sin \varphi = 2t \tan \varphi \sin \varphi = 2t \frac{\sin^2 \varphi}{\cos \varphi}$$

$$D = 2t \frac{n}{\cos \varphi} (1 - \sin^2 \varphi) = 2t n \cos \varphi \quad (3.4-2)$$

Maximale Durchlässigkeit für: $2 t n \cos \varphi = z \lambda \quad (3.4-3)$

Instrumentenprofil (Airy-Funktion):

$$A(\delta) = \frac{1}{1 + F \sin^2(\delta/2)} \quad \delta: \text{Phasendifferenz} = D \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\delta = \frac{2\pi D}{\lambda} = \frac{4\pi}{\lambda} n t \cos \varphi$$

$F = 4 R / (1 - R)^2$ R ist das Reflexionsvermögen der Platten ($F \rightarrow \infty$ für $R \rightarrow 1$)

Finesse $\mathcal{F} = (\pi/2) F^{1/2}$ $1/\mathcal{F}$ = Halbwertsbreite eines Ringes in Bruchteilen einer Ordnung

freier Spektralbereich: Wellenlängenabstand zweier benachbarter Ringe
Vorselektion erforderlich!

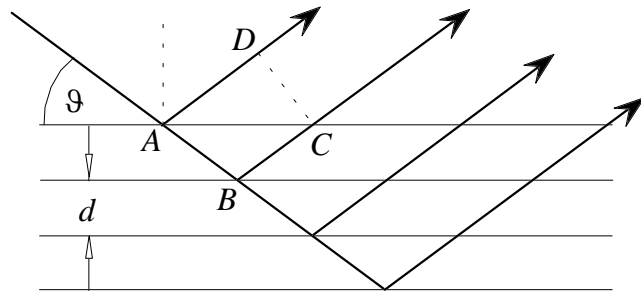
Selten: Lyot-Filter

Interferenz von polarisiertem Licht nach dem Durchgang durch einen doppelbrechenden Kristall. Polarisator - Analysator.

Hintereinanderschalten von mehreren Elementen (Kristallen), deren Dicken in einem geradzahligen Verhältnis stehen.

3.4.3 Kristall-Spektrometer für den Röntgenbereich

Gangunterschied D (die Berechnung ist ganz ähnlich wie oben beim Interferometer, aber der Winkel wird hier zur Netzebenenfläche gezählt):



$$D = AB + BC - AD$$

$$AB = BC = \frac{d}{\sin \vartheta}$$

$$AC = \frac{2d}{\tan \vartheta} \quad AD = AC \cos \vartheta = 2d \frac{\cos^2 \vartheta}{\sin \vartheta}$$

$$D = \frac{2d}{\sin \vartheta} (1 - \cos^2 \vartheta) = 2d \sin \vartheta$$

Bragg-Bedingung:

$$2d \sin \vartheta = z \lambda$$

(3.4-4)

d : Netzebenenabstand, ϑ : Einfallswinkel zur Netzebenenfläche.

Der Einfallswinkel legt den Ausfallswinkel fest (beide sind gleich bezüglich der Netzebene des Kristalls)! Das ist ein bedeutender Unterschied zu Dispersionsgittern. Man braucht verschiedene geeignete Kristalle für die verschiedenen Wellenlängen.

Außerdem: Zählrohre - Halbleiterdetektoren → Pulshöhenanalyse

(Erzeugung von Ladungsträgerpaaren, entsprechend der Energie der Photonen).

3.5 Detektoren

In der Fokalebene der besprochenen Spektralapparate braucht man zur Registrierung der Spektren Detektoren, die entweder selbst eine Ortsauflösung haben (in Wellenlängenrichtung oder auch senkrecht dazu) oder hinter einem Austrittsspalt angebracht sind.

Wellenlängenbereiche für verschiedene Detektoren:

- Photoplatte ≈ 0 - 1000 nm
- Photomultiplier ≈ 50 - 1200 nm
- Channeltrons ≈ 1 - 150 nm
- Halbleiterdetektoren ≈ 10 - 3000 nm
- thermische Detektoren wellenlängenunabhängig, aber Problem der Schwärzung und der absorbierenden Schichtdicke (dickere Schicht \rightarrow träger).

3.5.1 Photographische Detektoren

Filme und Photoplaten wurden früher viel verwendet, sind heute aber meist durch photoelektrische Detektoren abgelöst worden. Sie sind für quantitative Spektroskopie weniger geeignet, es gibt aber noch Anwendungen für Übersichtsspektren (speziell Polaroid-Film), in der Astrophysik und bei Kurzzeitmessungen (Schmierkamera).

☺ Vorteile der photographischen Schichten:

- \rightarrow große Informationsdichte
Korngröße $\approx 10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m} \approx 10^{-6} \text{cm}^2$, Dynamik ≈ 5 Bit
Platte mit $10 \text{cm} \times 10 \text{cm} \approx 5 \cdot 10^8$ Bit - vergleichbar mit gut ausgebauten Computern
- \rightarrow Registrierung über zwei Ortskoordinaten
- \rightarrow man kann in gewissen Grenzen damit integrieren.

☹ Nachteile:

- \rightarrow zeitraubende Entwicklung (aber: Polaroid)
- \rightarrow die Empfindlichkeit ist nicht linear
- \rightarrow sie haben keine Zeitauflösung (außer bei Schmierkamera).

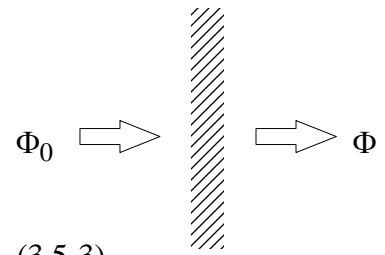
Grundbegriffe:

Transparenz (bei späterer Durchleuchtung z.B. auf einem Photometer):

$$T = \Phi / \Phi_0 \quad (3.5-1)$$

Dichte: $D = -\log T = -\log (\Phi/\Phi_0) = \log (\Phi_0/\Phi)$ (3.5-2)

(auch Schwärzung S genannt)



Bestrahlung (Exposition):

$$E = \int_0^t \frac{\Phi_0(t)}{F} dt \quad \frac{\Phi_0}{F} = \text{Bestrahlungsstärke} \quad (3.5-3)$$

Die Dichte ist eine Funktion von ξ : $D = f(\xi)$,

wobei Strahlungsleistung, Belichtungsdauer, Art der Entwicklung, Konzentration des Entwicklers usw. eingehen.

Die Eichkurve (Schwärzungskurve) muß gleichzeitig auf die gleiche Photoplatte (den gleichen Film) aufgenommen werden.

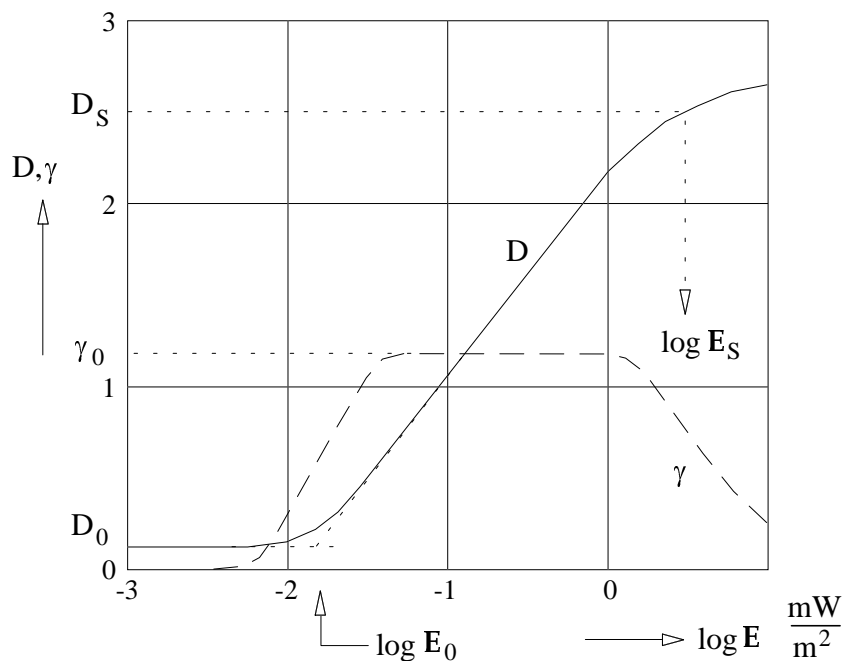
Gradient γ der Schwärzungskurve:

$$\gamma = \frac{dD}{d \log E} \quad (3.5-4)$$

γ_0 ist der Gradient des linearen Teils der Schwärzungskurve.

Die Schwärzungskurve ändert sich während des Entwicklungsprozesses ($\gamma_0 = 1-1.5$).

Linearer Bereich ca. 1.5 im Logarithmus \rightarrow Faktor $32 = 2^5$.



Plattenschleier D_0 ist die Dichte des unbelichteten Teils der Platte (ändert sich mit der Entwicklungsdauer).

$\log \xi_0$ ist der Schnittpunkt zwischen $D = D_0$ und der Extrapolation des linearen Bereichs. Definition der Empfindlichkeit.

Außerdem gibt es eine Reihe von Effekten, die mit langen, kurzen oder intermittierenden Belichtungen zusammenhängen.

Elementarprozeß (AgBr-Keim):

Es entstehen instabile Zwischenstufen mit einer gewissen Lebensdauer, die durch weitere Photonen stabilisiert werden. 3-4 absorbierte Photonen sind erforderlich, um einen entwickelbaren Keim zu erzeugen. Etwa 10% der ankommenden Photonen werden absorbiert, aber nicht jedes führt zu einem stabilen Keim.

100 - 1000 Photonen sind nötig, um einen Keim zu erzeugen .

(Inverse) Quantenausbeute, d.h. Photonen pro Keim, bzw. Elektron:

Photoplatte 100 - 1000
Multiplier 10 - 100 (siehe später)
Halbleiter 2 - 5.

Schwarzschild-Effekt

Für $D = \text{const}$ ist bei kurzen und langen Zeiten ein höherer $\log \xi$ erforderlich, als im optimalen Fall ξ_0

$$D = D(\Phi_0 t^q) \quad \text{statt } D = D(\Phi_0 t); \quad q = \text{Schwarzschildexponent}$$

für Zeiten $t > 100 \text{ s}$, $q \approx 0.8-0.9$.

Intermittenz-Effekt

Wenn man die gleiche Strahlungsleistung "in Portionen" auffallen läßt, benötigt man wieder mehr, um die gleiche Dichte zu erreichen:

$$\int \Phi dt = \text{const, aber verschiedene Schwärzung.}$$

Das ist wichtig für die definierte Abschwächung mit einem rotierenden Sektor, d.h. einer entlang des Radius' verschieden stark ausgeschnittene, rotierende Scheibe, die man zur Messung der Schwärzungskurve verwendet. Alternative: Graukeil aus verschiedenen dicken Neutralglasfiltern.

Anschauliche Erklärung: bei langer Belichtung (kleiner Photonenfluß) können die instabilen Keime relaxieren, bevor ein zweites Photon dazu absorbiert wird, d.h. sie gehen verloren.

Bei sehr kurzen Zeiten (hoher Photonenfluß) werden sehr viele positive Löcher gebildet, so daß die Wahrscheinlichkeit groß wird, daß ein Elektron in ein Loch rekombiniert, bevor es sich an einen AgBr-Komplex angelagert hat.

Alle bisher behandelten Effekte verschwinden bei hohen Photonenenergien (UV), wenn ein Keim durch die Absorption eines Photons gebildet werden kann.

Weiteres Thema: Sensibilisieren (nicht behandelt).

Auswertung der photographischen Aufnahmen:

Durchstrahlung und Messen der Schwärzung in einem Photometer. Die Photoplatte wird von einer Spindel angetrieben. Die Aufzeichnung erfolgt:

- a) linear oder logarithmisch (T oder D),
- b) mit Quellenkompensation (gegen Intensitätsschwankungen der Lichtquelle),
- c) im Graukeilphotometer - Nullabgleich über phasenempfindlichen Verstärker,
- d) mit Analog- oder Digitalrechner.

Zusammenfassend: Photoplatte → viel Information, ungenau
 z.B. Photomultiplier → wenig Information, hohe Genauigkeit.

3.5.2 Sekundärelektronenvervielfacher (Photomultiplier)

Photomultiplier: Vakuum-Photodiode mit Verstärker (äußerer Photoeffekt).

Entstehung freier Elektronen an Metalloberflächen:

- lichtelektrischer Effekt $h\nu = e U_A + e \varphi + \text{kin. Energie, Austrittsarbeit}$
- Sekundärelektronenemission durch Elektronen.

(Außerdem gibt es noch Thermoemission und Feldemission → siehe Gasentladungen).

Die Abhängigkeit der Kathodenausbeute von der Wellenlänge (Photonenenergie) ist eine Funktion der Austrittsarbeit.

Bereich	Kathodenmaterialien		Bezeichnung
UV sichtbar		CsTe, CsJ	"solar blind"
		Sb-Cs	S4, S5, S11
Infrarot	Bialkali	Cs-K-Sb, Cs-Rb,Sb	
	Multialkali	Cs-Na-K-Sb	S20
		Ag-O-Cs	S1

Rotempfindlichkeit bereitet Probleme (thermische Auslösung von Elektronen, → Kühlung).

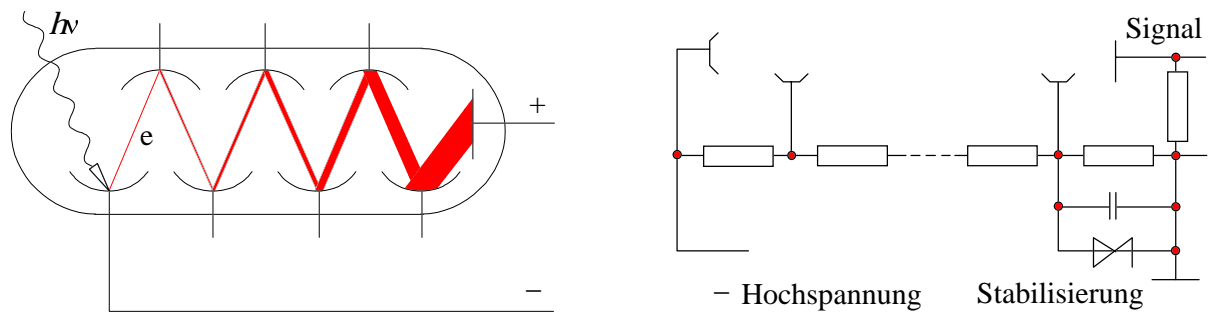
Szintillationsschichten lösen das Problem der Transmission der Fenstermaterialien im UV und VUV.

Verstärkung durch Sekundärelektronenemission; diese ist

- eine Funktion der Energie (Spannung), Maximum bei einigen 100 V,
- materialabhängig, meistens 1-2 (Spezialmaterialien: Ausbeute $\approx 3-4$).

Es gibt Anordnungen bis etwa 12 Dynoden, damit erreicht man eine Verstärkung bis 10^8 .

Die Dynoden könnte man aus dem gleichen Material machen, wie die Kathode, aber man benutzt lieber stabile Materialien, da genügend Beschleunigungsspannung zur Verfügung steht.



Die Dynoden werden üblicherweise durch einen Spannungsteiler versorgt; der Querstrom sollte aber mindestens zehnmals höher als der maximale Photostrom sein (positiver Pol geerdet).

Detektion des Signals:

- Strommessung (Problem der Sättigung, Nichtlinearität),
- Zählen der Elektronen (Begrenzung der Zählfrequenz, obere Grenzfrequenz).

Dunkelstrom

Ursachen: thermische Emission (Kühlen, besonders günstig bei "end-on"-Fenstern, da die Kathode direkt auf den Glaskolben gedampft ist - Fenster können beschlagen! Vakuum.)

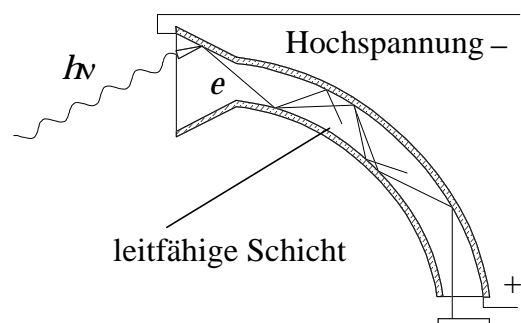
- Feldemission - Einfluß gering
- Leckströme
- Ionisation im Gasraum (gutes Vakuum erforderlich). Dieser Effekt begrenzt die anlegbare Spannung - Zünden einer Entladung - Strombegrenzung ist ratsam.

Mit den Photomultipliern verwandt sind die:

Channeltrons

Anwendung im Vakuum-UV und Röntgengebiet (fensterlos).

Kleiner Querstrom, d.h. niedriger Nutzstrom; sie werden schnell nichtlinear.



Übliche Auswertung: Zählung der Photoelektronen. Die Photonen lösen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ein primäres Elektron aus, das einen Ladungspuls mit 10 ns Dauer zur Folge hat. Die maximale Zählfrequenz ist aber relativ niedrig (Erholzeit): 100 Khz - 1 MHz.

Channeltrons werden auch für Teilchenmessungen verwendet.

Wichtige Anwendung dieses Prinzips: Kanalplatten (siehe unten).

3.5.3 Andere Detektoren

Photowiderstände, Photoelemente (Halbleiter, innerer Photoeffekt).

Allgemein: In Isolatoren führt die Grundgitterabsorption eines Photons zu freien Elektronen, die Elektronen gelangen in das Leitungsband;
 → elektrische Leitfähigkeit (Photoleitfähigkeit). Wegen Gitterfehlstellen gibt es einen langwelligen Ausläufer der Grundgitterabsorption.

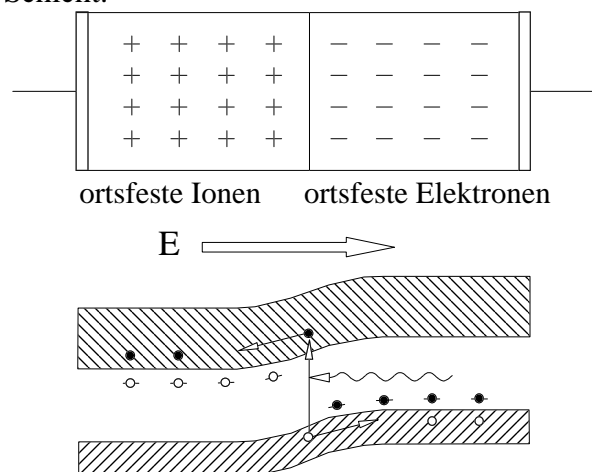
Halbleiter: Eigenhalbleiter ("intrinsic conductivity")
 Störstellenhalbleiter - Donatoren: 5-wertig, z.B. P, As, Sb
 (in Si oder Ge) - Akzeptoren: 3-wertig, z.B. B, Al, Ga, In

Die Störstellen liegen in der Bandlücke der Halbleiter, der Abstand zum Leitungsband ist sehr gering;
 → es ist nur eine geringe Photonenenergie zur Anregung eines Elektrons erforderlich, die Zustände können aber auch durch thermische Energie besetzt werden;
 → Kühlen (Peltier, N_2 , He).

Photodioden:

eine n -dotierte Schicht grenzt an eine p -dotierte Schicht:

→ durch Diffusion entsteht eine Raumladung, Potentialdifferenz, Spannung V_D
 (die Summe der Spannungen im gesamten Kreis = 0 bei gleicher Temperatur).



Beim Bestrahlen werden Elektronen und Löcher gebildet → vermindert V_D um ΔV .

Schließt man das gesamte System kurz, so fließen die Ladungsträger durch den Verbraucher.

Photodioden: Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren in der Sperrschicht → Erhöhung des Sperrstroms (in Sperrichtung vorgespannt).

Photovoltaische Dioden (Sperschichtphotoeffekt): Photostrom.

Typische Materialien: CdS, Si, GaAs; Bandabstand W_0

Detektor	W_0 (eV)	Temperatur (K)	λ_{\max} (μm)
InSb	0.22	77	5.5
PbSb	0.42	193	3
Ge	0.67	103	1.9
Si	1.12	300	1.1
CdSe	1.8	300	0.69
CdS	2.4	300	0.52

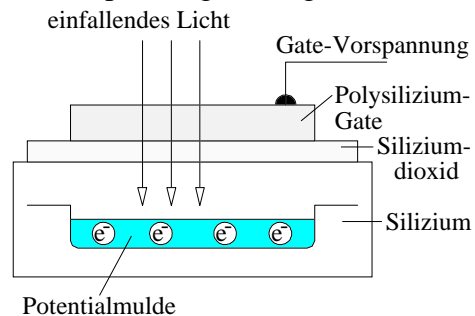
Avalanche-Dioden: Halbleiter mit internem Lawinen-Effekt (Stoßionisation), Verstärkung ca. 100 (bis einige 1000).

Diodenzeilen, CCD-Detektoren (charge-coupled device)

Detektion in vorgespannten MOS-Kondensatoren (Metal-Oxide-Silicon, meist Al - SiO₂ - Si);

Einfachste Form MIS: Metall - Isolator - Halbleiter (Metal-Insulator-Semiconductor).

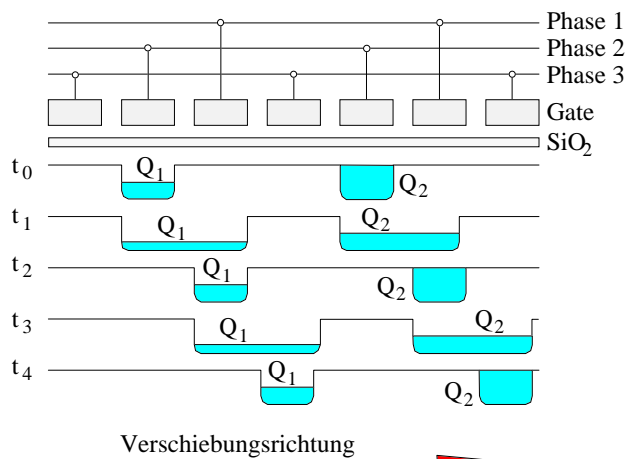
Durch Belichtung werden die einzelnen Pixels unterschiedlich geladen. Am Ende der Aufnahme wird die Information durch Anlegen anderer Spannungen ausgelesen (durchgeschoben) und einem Rechner zugeführt (siehe Skizze).



Optische Vielkanaldetektoren (Optical Multichannel Analyser OMAs)

- eindimensional - zweidimensional.

Vorverstärkung: großflächige Kathode + Kanalplatten + Szintillationsschicht (Multi-Channel-Plate MCP).



Thermische Detektoren Bolometer
Thermosäulen.

Im Röntgenbereich: Zählrohre

3.6 Wellenlängennormale

Spektrallampen, z.B. Hg-Cd-Lampe (siehe Tabelle),

Anschluß über Vorwiderstand oder Drossel an 230 V~, I < 1A.

Hg-Cd, Auswahl von Wellenlängen in nm (* = stärkste Linien):

<u>Cd</u> 214.4328*	<u>Hg</u> 248.2721	280.4462	313.1883	433.9235
228.8018*	248.3829	289.3595	334.1478	434.7496
361.0510	253.6519*	302.1499	365.0146*	435.8343
361.2875	265.2042	302.3467	365.4833*	546.0740*
467.8156	265.3681	302.5617	366.2878	576.9596
479.9914	265.5121	302.7496	366.3276*	579.0654
508.5824	275.2775	312.5663	404.6561	
632.519	280.3442	313.1546	407.7811	

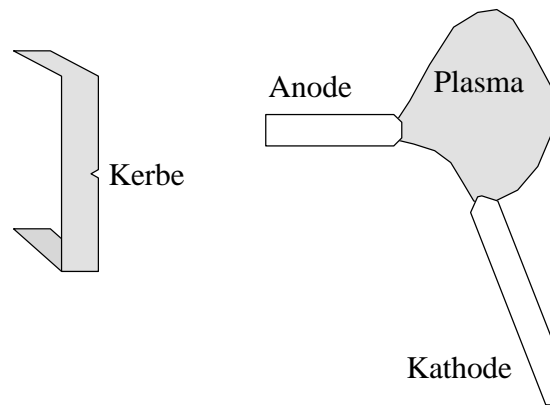
Außerdem: Verwendung bekannter Linien im Plasma, z.B. Wasserstofflinien, Moleküllinien.

3.7 Strahldichtenormale

- Primärnormale: die Strahlung ist aus grundlegenden physikalischen Größen berechenbar,
- Sekundärnormale: für den Einsatz im Labor möglichst leicht zu handhaben, müssen aber an Primärnormalen kalibriert werden (von Eichanstalten PTB, NBS)
Forderung: konstant und reproduzierbar,
- Primärnormale: schwarzer Strahler, Synchrotronstrahlung, Wasserstoffbogen bei der sog. Normtemperatur T_{norm} (später behandelt),
- Sekundärnormale: Kohlebogen, Wolframbandlampe, Deuteriumlampe, verschiedene Plasmaquellen, Kurzzeitentladungen, Laserplasmen.

Normale basierend auf schwarzer oder grauer Strahlung:

Fixpunkte der Temperaturskala (Auswahl)	
Primäre Fixpunkte:	
Tripelpunkt des Wasserstoffs	13.81 K
Tripelpunkt des Neons	27.102 K
Tripelpunkt des Argons	83.798 K
Tripelpunkt des Wassers	273.16 K
Schmelzpunkt des Zinns	505.118 K
Schmelzpunkt des Silbers	1235.08 K
Schmelzpunkt des Goldes	1337.58 K
Sekundäre Fixpunkte:	
Schmelzpunkt des Nickels	1726 K
Schmelzpunkt des Kobalts	1765 K
Schmelzpunkt des Palladiums	1825 K
Schmelzpunkt des Platins	2042 K
Schmelzpunkt des Thoriums	2233 K
Schmelzpunkt des Iridiums	2716 K
Schmelzpunkt des Wolframs	3653 K



Wolframbandlampe, Kohlebogen

$$L_{\lambda}(\lambda, T) = B_{\lambda}(\lambda, T) a(\lambda, T) \quad (3.7-1)$$

a = Emissionsgrad, Graufaktor; für

Wolfram $a \approx 0.4$: deVos, Physica 20, 690 (1964).

$L_{\lambda}(\lambda, T)$ für Kohlebogen: z.B. Magdeburg und Schley, Z. angew. Phys. 20, 465 (1966)
Strom ca. 8A, Spannung ca. 50 V. Beachte: Plasmastrahlung muß berücksichtigt werden!

Wolframbandlampe

In der Bandmitte befindet sich eine kleine Kerbe, die auf den Eintrittsspalt abgebildet wird; Strom ca. 8 - 14 A, Spannung ca. 10V, extreme Genauigkeit und Konstanz der Stromversorgung erforderlich (Präzisionsshunt, Digitalvoltmeter).

Berechnung der Strahlung einer Wolframbandlampe (wenn nicht schon eine Eich-tabelle vorliegt) aus der pyrometrisch gemessenen, schwarzen Temperatur bei 650 nm und der Fenstertransmission b (für Quarz $b \approx 0.94$):

$$\begin{aligned} \text{Eichwert bei 650 nm: } L_{\lambda}(650\text{nm, außen}) / b &= L_{\lambda}(650\text{nm, innen}) \\ L_{\lambda}(650\text{nm, innen}) / a(650\text{ nm, } T) &= B_{\lambda} \rightarrow T_{\text{wahr}} \\ L_{\lambda}(\lambda, \text{außen}) &= B_{\lambda}(\lambda, T_{\text{wahr}}) a(\lambda, T_{\text{wahr}}) \cdot b. \end{aligned}$$

Erreichbare Genauigkeit ca 1% in der Strahldichte. Wegen Alterung der Lampe bei Benutzung hat man üblicherweise eine Eichlampe und eine Arbeitslampe.

Plasmaentladungen: Deuteriumlampe, kann kalibriert gekauft werden.
Wasserstoffbogen, Argonbogen, Heliumbogen,
Methode der optisch dicken Plasmalinien (im VUV)
- nur in speziellen Labors, aufwendig.

im VUV: Synchrotronstrahlung, Bessy in Berlin,

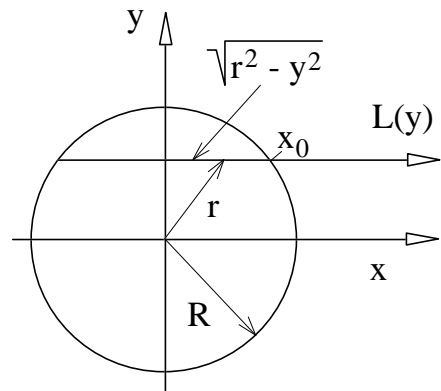
(im Röntgenbereich: berechenbare Zählrohre; auch geeichte Detektoren).

3.8 Strahlung ausgedehnter Lichtquellen

Strahlungstransportgleichung;

Optisch dünne Strahlung: $L_\lambda = L_\lambda(0) + \int \varepsilon_\lambda d\ell$ (2.3-7)

Zylindersymmetrische Quelle (häufige Annahme für Plasmasäulen und "side-on"-Beobachtung in Richtung x),



dann gilt die Abelsche Integralgleichung:

$$\int \varepsilon_\lambda d\ell = 2 \int_0^{x_0} \varepsilon_\lambda dx \quad x = \sqrt{r^2 - y^2} \quad dx = \frac{r dr}{\sqrt{r^2 - y^2}}$$

$$L_\lambda(y) = 2 \int_y^R \varepsilon_\lambda(r) \frac{r dr}{\sqrt{r^2 - y^2}} \quad \text{Umkehrung} \Rightarrow \quad \varepsilon_\lambda(r) = \frac{1}{\pi} \int_r^R \frac{dL_\lambda(y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2 - r^2}} \quad (3.8-1, 3.8-2)$$

Die Lösung erfolgt meistens numerisch, z.B. durch Verfahren mit einer Koeffizientenmatrix.

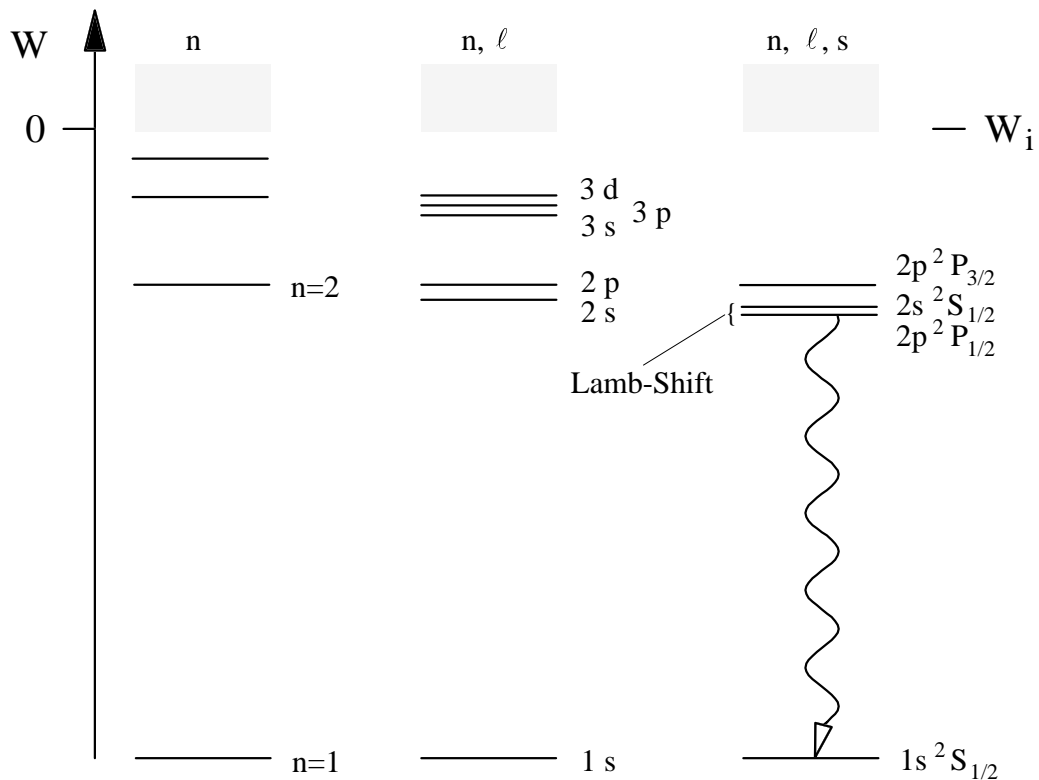
In komplizierten Fällen: Tomographie (Messung aus mehreren Richtungen).

4. Berechnung von Spektren

4.1 Atome und Ionen

wasserstoffähnliche Ionen: Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$ (genügt oft für H-Atom)

genauer aber auch: Bahndrehimpulsquantenzahl $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$ und Spins s



Berechnung der Energie W der angeregten Zustände

$$W_n^* = -\frac{R' Z^2}{n^2} \quad W_{n,\ell}^* = -\frac{R' Z^2}{[n + a(\ell)]^2} \quad Z: \text{Kernladungszahl.}$$

mit der Rydbergkonstante K

$$R' = \frac{\mu e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \quad \mu = \frac{m M}{m + M} \quad m: \text{Elektronenmasse, } M: \text{Kernmasse.}$$

In diesen Gleichungen ist W_i die Ionisierungsenergie, W^* sind die Anregungsenergien von oben gerechnet, d.h. negativ, R' ist die Rydbergkonstante in Energieeinheiten (R ist normalerweise in Wellenzahlen). Die Energie in Plasmagleichungen wird aber meistens vom Grundzustand gezählt, d.h. $W_n = W_i - W_n^*$.

Näherung für nicht wasserstoffähnliche Atome und Ionen:

"Quantendefekt" $a(\ell)$, verschwindet für große ℓ .

Rydberg-Serien: $h\nu_n = W_n - W_1$ usw.; beachte Brechungsindex bei der Umrechnung auf λ !

Auswahlregel: $\Delta\ell = \pm 1$.

Elektronenspin: jedes Elektron hat $|\vec{s}| = \hbar/2$; Quantenzahl $s = 1/2$.

Gesamtdrehimpuls bei Eielektronensystemen: $\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s} = \vec{\ell} - \vec{s}, \vec{\ell} + \vec{s}$

Auswahlregel: $\Delta j = 0, \pm 1$, nicht $0 \rightarrow 0$.

Orientierungsquantenzahl m : $-\ell \leq m \leq +\ell$.

Pauliprinzip, Aufbau der Elektronenschalen:

n	Schale	mögliche Elektronen	Zahl der m -Werte	Zahl der Spin- einstellungen	Zahl nicht übereinstim- mender Elektronen	
					für ℓ	für n
1	<i>K</i>	1s	1	2	2	2
2	<i>L</i>	2s	1	2	2	8
		2p	3	2	6	
3	<i>M</i>	3s	1	2	2	18
		3p	3	2	6	
		3d	5	2	10	
4	<i>N</i>	4s	1	2	2	32 $= 2 n^2$
		4p	3	2	6	
		4d	5	2	10	
		4f	7	2	14	

mehrere Elektronen, LS-Kopplung: alle ℓ verbinden sich zu L ,
alle s verbinden sich zu S ,
 L und S ergeben den Gesamtdrehimpuls J .

Multiplizität $(2S+1)$, bei einem Elektron ergeben sich Dubletts,
bei zwei Elektronen Singulett/Triplett,
bei drei Elektronen Dublett, Quartett usw.,
(S -Zustände, d.h. $\ell = 0$ oder $L = 0$, sind immer einfach).

Auswahlregeln: $\Delta L = 0, \pm 1$, $\Delta J = 0, \pm 1$, nicht $0 \rightarrow 0$;
 $\Delta S = 0$, nicht miteinander kombinierende Termsysteme (Singulett,
Triplett ..).

In den Spinsystemen, die nicht zum Grundzustand gehören, gibt es metastabile Niveaus!

Schreibweise der Terme:

einzelne Elektronen mit kleinen Buchstaben, Anzahl als Hochzahl.

Gesamtconfiguration links oben \rightarrow Multiplizität (Gesamtspin S) $= 2S+1$,
großer Buchstabe \rightarrow Gesamtbahndrehimpuls
 L (S : $L = 0$; P : $L = 1$; ...),
Index unten \rightarrow Gesamtdrehimpuls J ,
Index oben \rightarrow Parität gerade (odd = o) oder ungerade (kein Index).

Beispiel: Grundzustand des Stickstoffatoms (oder des Sauerstoffions OII), 2 1s-Elektronen, 2 2s-Elektronen, 3 2p-Elektronen:

$$1s^2 2s^2 2p^3 \quad {}^4S_{3/2}^o$$

einzelne Elektronen Termkonfiguration: Quartet S drei Halbe odd

Die zwei Paare von s-Elektronen haben $L = 0$ und bilden $S = 0$.

Die drei 2p-Elektronen setzen sich zusammen zu $L = 0$ (S-Term) und $S = 3/2$, somit $J = 3/2$. Die Parität des Systems ist ungerade (odd) = $\sum \ell_i = 3$.

Weiteres Beispiel: Ein Elektron des Stickstoffs wird angeregt in den $n=3$, $\ell=2$ -Zustand, die beiden übrigen 2p-Elektronen sind zum Triplet mit L_p ($p = \text{parent, Rumpf}$) = 1 verbunden :

mögliche Konfigurationen: $({}^3P) 3d {}^4P_{5/2,3/2,1/2}$, $3d {}^4D_{7/2,5/2,3/2,1/2}$, $3d {}^4F_{9/2,7/2,5/2,3/2}$, ...

(die Niveaus im Bild sind in Wirklichkeit entsprechend aufgespalten).

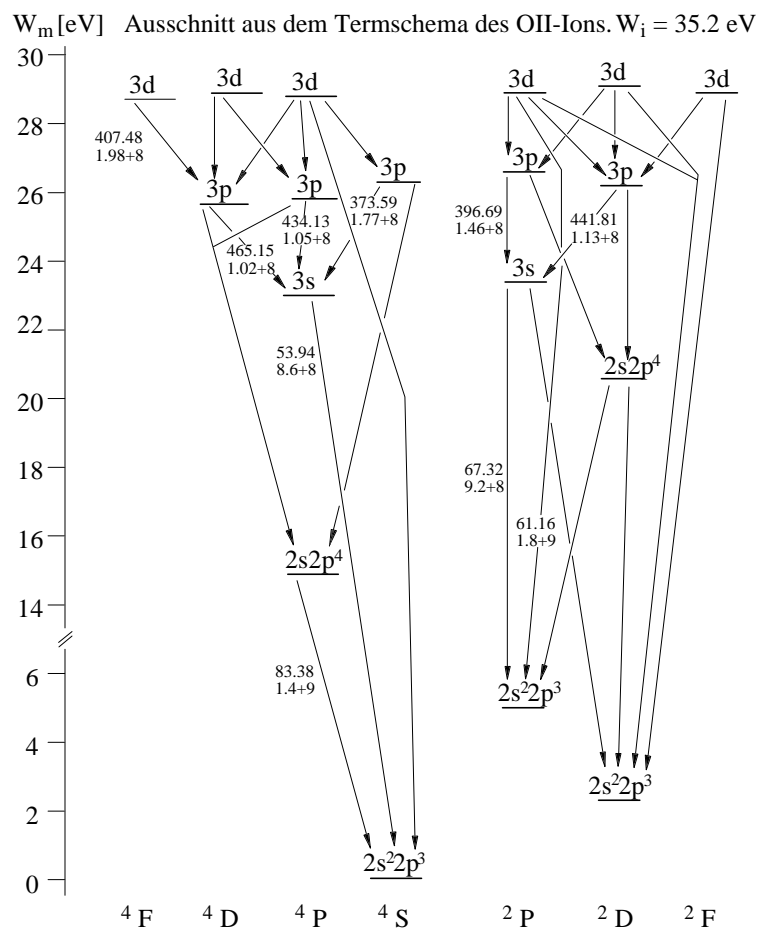
Außerdem: Dublett-Terme, andere Rumpfkongfigurationen (gestrichen 3d', doppelt gestrichen 3d'', ...).

→ **Spektraltabellen**

(siehe z.B. **Grotrian**-diagramme, Energieniveaus nach Moore, isoelektronische Sequenz).

J-J-Kopplung: jedes ℓ verbindet sich mit seinem s zu j , alle j 's zu J .

Auswahlregel: $\Delta J = 0, \pm 1$.



Wichtig für Berechnung der Niveaubesetzung:

statistisches Gewicht

$$g = (2J + 1) \quad (\text{einzelnes Niveau})$$

$$\sum_J (2J + 1) = (2L + 1)(2S + 1) \quad (\text{Summe der Subniveaus})$$

Einfluß des Kernspins: in Plasmen in der Regel ohne Bedeutung, da sich die Multiplizität

herauskürzt.

Hyperfeinstruktur: Kernspin, Isotopeneffekte (bei Wasserstoff - Deuterium groß!).

4.2 Berechnung der Spektren zweiatomiger Moleküle

Zunächst betrachten wir nur die zwei Atomkerne, Gleichgewichtsabstand r_e :

Theorie: harmonischer Oszillator - $W_{\text{pot}} = 2m\omega^2 (r - r_e)^2$ Schwingungs-
anharmonischer Oszillator - $W_{\text{pot}} = f(r - r_e)^2 - g(r - r_e)^3$ quantenzahl ν
(auch Morsepotential)

Kopplung von Vibration und Rotation Quantenzahl N
Symmetric Top (Rotationsellipsoid)

Aufbau der Rotationsniveaus auf den Vibrationsniveaus - auch durch höhere ν 's hindurch.

Bahndrehimpuls $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots \rightarrow s, p, d, \dots$ -Elektronen.

Orientierungsquantenzahl (entspricht m , aber in Richtung der Kernverbindungsachse, ist hier viel wichtiger als bei den Atomen):

$\lambda = 0, 1, 2, \dots \rightarrow \sigma, \pi, \delta, \dots$ -Elektronen

mehrere Elektronen: die ℓ 's verbinden sich zu L , Projektion Λ ,
die s 's verbinden sich zu S , Projektion Σ ,
 Λ und Σ verbinden sich zu Ω .

Sehr wichtig: gequantelte Rotation der Kerne mit Quantenzahl N .

Nomenklatur der elektronischen Zustände:

große Buchstaben \rightarrow elektronische Zustände im Spinsystem des Grundzustands
Grundzustand: X

kleine Buchstaben \rightarrow elektronische Zustände in metastabilen Systemen.

Termcharakterisierung: große griechische Buchstaben geben die Projektion des gesamten Bahndrehimpulses auf die Kernverbindungsachse an (Σ : $\Lambda = 0$; Π : $\Lambda = 1$, usw.)

Hochzahl links: Multiplizität (wie bei den Atomen).

Drehimpuls-Kopplungsfälle (Hundsche Fälle a, b, c, d) \rightarrow Gesamtdrehimpuls J (siehe Herzberg).

Es gibt bindende und abstoßende Elektronenkonfigurationen ($^1\Sigma$ oder $^3\Sigma$ bei Wasserstoff).

Darstellung der Termwerte (Energien) - zunächst nur elektronische Anregung W_e , Rotation W_r und Schwingung W_v ; die anderen Quantenzahlen der Elektronen (λ, s) sind Korrekturen:

Energien (z.B. eV):	Terme (cm^{-1}):
$W = W_e + W_v + W_r$;	$T = T_e + G + F$

Näherung durch Polynome:

$$G = \omega_e(v + 1/2) - \omega_e x_e(v + 1/2)^2 + \omega_e y_e(v + 1/2)^3 + \dots$$

$$F = B_v J(J + 1) - D_v J^2(J + 1)^2 + \dots \quad \text{für Nicht-Singulets kompliziertere Formeln.}$$

Berechnung der Rotationskonstanten B_v und D_v aus B_e und D_e :

(Dissoziationsenergie D_e vom Minimum der Potentialkurve, D_0 von $v = 0$).

$$B_v = B_e - \alpha_e(v + 1/2) + \gamma_e(v + 1/2)^2 - \dots \quad \text{Kopplung von Schwingung und Rotation}$$

$$D_v = D_e + \beta_e(v + 1/2) + \dots$$

J -Auswahlregeln: $\Delta J = 0, \pm 1$, aber nicht $0 \rightarrow 0$.

Linien (Termdifferenzen):

R -Zweig:	$= T'(J' = J'' + 1) - T''(J'')$	J'' oder einfach J : J im unteren Zustand
Q -Zweig:	$= T'(J' = J'') - T''(J'')$	
P -Zweig:	$= T'(J' = J'' - 1) - T''(J'')$	

Achtung: Termwerte sind Energien! bei der Umrechnung auf Wellenlängen in Luft muß der Brechungsindex der Luft berücksichtigt werden!

$$\lambda = \frac{c}{n\nu} \quad \lambda = \frac{1}{n\bar{\nu}}$$

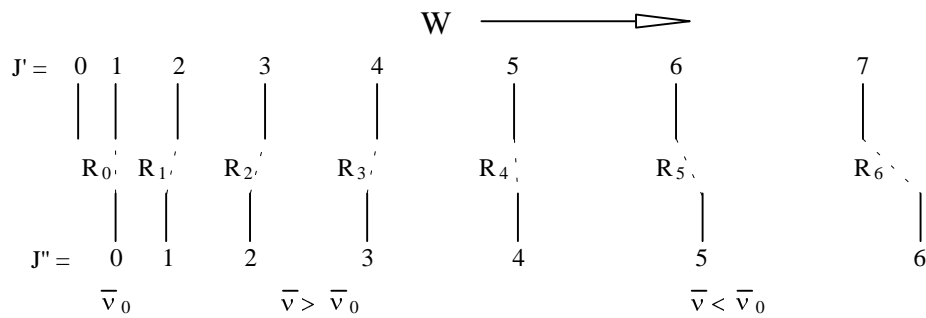
Fortrat-Diagramm: durch Einsetzen und Vernachlässigung von D_v ergibt sich:

$$R: \quad \bar{\nu} = \bar{\nu}_0 + 2B_v' + (3B_v' - B_v'')J + (B_v' - B_v'')J^2$$

$$Q: \quad \bar{\nu} = \bar{\nu}_0 + (B_v' - B_v'')J + (B_v' - B_v'')J^2$$

$$P: \quad \bar{\nu} = \bar{\nu}_0 - (B_v' + B_v'')J + (B_v' - B_v'')J^2$$

\Rightarrow verschobene Parabeln, Bandenköpfe, rot/violett abgeschattiert, abhängig vom Vorzeichen $(B_v' - B_v'')$. Beispiel: Bandenkopf im R -Zweig, $B_v' < B_v''$:



Wichtig: Symmetrieeigenschaften

die Kernrotation ist symmetrisch für gerade und antisymmetrisch für ungerade J 's
 (für $\Lambda > 0$ hat jeder Zustand beide Symmetrien),
 bei Spiegelung der Elektronen-Wellenfunktion am Ursprung:
 hochgestelltes $+$ = symmetrisch (s), $-$ = antisymmetrisch (a),
 bei homonuklearen Molekülen auch Vertauschung der Kerne: g = gerade,
 u = ungerade.

Auswahlregeln: $+$ \leftrightarrow $-$ (J 's), $s \leftrightarrow s$, $a \leftrightarrow a$, $u \leftrightarrow g$ (z.B. $\Sigma_u^+ \leftrightarrow \Sigma_g^+$, $J=1 \leftrightarrow 2$)

Fulcherbande des Wasserstoffs, Übergang $3p \ ^3\Pi_u \rightarrow 2s \ ^3\Sigma_g^+$ (Π hat $+$ und $-$).

Symmetrieeigenschaften und Einfluß des Kernspins bei homonuklearen Molekülen:

Die Spins I der beiden Kerne setzen sich zum Gesamtkernspin T zusammen. Bei Bose-Statistik ist die Spinfunktion symmetrisch für geradzahliges und antisymmetrisch für ungeradzahliges T , umgekehrt bei Fermi-Statistik. Je nach Statistik des Einzelkerns (Bose oder Fermi, I = ganz- oder halbzahlig) muß die Gesamtsymmetrie gerade oder ungerade sein, sonst kann der Zustand nicht existieren:

Koordinaten-symmetrie	Kernspin	statistisches Gewicht	Gesamt-kernspin	Gesamt-symmetrie	Bose-statistik	Fermi-statistik
symmetrisch	symmetr.	$(2I+1)(I+1)$	$2I, 2I-2, \dots$	symmetr.	✓	fehlt
	antisymmetr.	$(2I+1)I$	$2I-1, 2I-3, \dots$	Antisymmetr.	fehlt	✓
antisymmetr.	symmetr.	$(2I+1)(I+1)$	$2I, 2I-2, \dots$	antisymmetr.	fehlt	✓
	antisymmetr.	$(2I+1)I$	$2I-1, 2I-3, \dots$	symmetr.	✓	fehlt

Sind die Terme einfach (Σ -Terme):

Intensitätswechsel durch Einfluß des Kernspins I (statistische Verteilung der Kerne mit Gewicht $2T+1$), da für die verschiedenen Einstellmöglichkeiten nur bestimmte J 's erlaubt sind.

Intensitätsverhältnis $R = \frac{I+1}{I}$ Kohlenstoff, Sauerstoff: $I = 0 \rightarrow R = \infty$,

Wasserstoff: $I = 0.5 \rightarrow R = 3$,

Deuterium, Stickstoff: $I = 1 \rightarrow R = 2$,

Wasserstoff, Zustand Σ_g^+ : Kernspin 1/2 (Fermi), das größere statistische Gewicht haben die ungeraden Rotationsterme.

Deuterium, Zustand Σ_g^+ : Kernspin 1 (Bose), das größere statistische Gewicht haben die geraden Rotationsterme.

Dublett-, Triplet- usw. Spektren: Spinaufspaltungskonstanten: $Y = A/B_v$.

Nicht- Σ -Zustände: Λ - Verdopplung, möglicherweise additiv berücksichtigt,

v-Auswahlregeln: keine, aber Überlappintegrale Franck-Condon-Faktoren $q_{v'v''}$

$$\varepsilon_{v'v''} = \text{const.} \cdot n_{v'} \cdot v_{v'v''}^4 \cdot R_e^2(r_{v'v''}) \frac{q_{v'v''}}{g_o} \quad \text{statistisches Gewicht oben } g_o = (2 - \delta_{0\Lambda})(2S + 1),$$

$$\delta_{0\Lambda} = 1 \text{ für } \Lambda=0, 0 \text{ für } \Lambda > 0.$$

"band strength" $S_{v'v''} = R_e^2(r_{v'v''}) q_{v'v''}$.

Linienstärken $S_{J,J'}$: Hönl-London-Faktoren (für Singulett-Zustände, sonst komplizierter)

$$\Delta\Lambda = 0 \quad S_J^R = \frac{(J''+1 + \Lambda'')(J''+1 - \Lambda'')}{J''+1}$$

$$S_J^Q = \frac{(2J''+1)\Lambda''^2}{J''(J''+1)}$$

$$S_J^P = \frac{(J''+\Lambda'')(J''-\Lambda'')}{J''}$$

usw. für $\Delta\Lambda = \pm 1$.

Die Beschreibung der Molekülspektren ist kompliziert und in der Regel müssen Bücher und Tabellen zu Rate gezogen werden!

PLTE: Gleichgewicht unter den angeregten Zuständen mit $n > n_{\text{Stoß}}$ (n_{coll} , collision limit), gilt aber nicht für den Grundzustand - größte Energielücke.

Außerdem sind die kinetischen Temperaturen der Elektronen und der schweren Teilchen T_e und T_g möglicherweise verschieden (siehe unten).

5.2 Gleichgewichtsrelationen

Boltzmann-Statistik - Einführung der Temperatur über die Wahrscheinlichkeit eines Prozesses:

$$\frac{d}{dW} \ln(\text{Wahrscheinlichkeit}) = \frac{1}{kT} \quad W = \text{Energie}$$

Integration \rightarrow Boltzmann-Faktor.

Maxwellverteilung

Die Verteilung des Betrags der Geschwindigkeiten (und zugehörigen kinetischen Energien W_{kin}) als Funktion der Temperatur wird durch die Maxwellverteilung beschrieben (Anwendung der Boltzmannstatistik). Möglicherweise gibt es (zwei) verschiedene Temperaturen (bei sehr verschiedenen Massen, weil die Energieübertragung innerhalb einer Sorte viel effektiver ist als zwischen den Sorten $\rightarrow T_i \approx T_g$ und T_e).

$$f(v) dv = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv = \text{Geschwindigkeitsbetrag der Teilchen} \quad (5.2-1)$$

mit der Masse m .

Gasgesetz

$$p = \sum n_n k T_n \quad (5.2-2)$$

n : Atome, Ionen, Elektronen, ..., T_n : kin. Temperaturen, p : Druck

Quasineutralität: $n_e = \sum Z_i n_i$ mit der Ladungszahl der Ionen Z_i .

Boltzmann-Verteilung angeregter Niveaus

Die Anregungsenergien werden nun positiv vom Grundzustand aus gezählt. Angeregter Zustand m , Summe aller Teilchen n_0 , statistisches Gewicht g . Bezieht man die Zahl n_m auf alle Teilchen der entsprechenden Sorte, so führt eine Summation zu der Zustandssumme Q .

$$\frac{n_m}{n_0} = \frac{g_m}{Q(T)} \exp\left(-\frac{W_m}{kT}\right) \quad g_m = 2J_m + 1 \quad Q(T) = \sum_k g_k \exp\left(-\frac{W_k}{kT}\right). \quad (5.2-3)$$

im PLTE: Unterbesetzungsfaktoren b_m : $\frac{n_m}{n_1} = \frac{b_m g_m}{g_1} \exp\left(-\frac{W_m}{k T}\right)$ b_m (meistens) ≤ 1

In der Zustandssumme müssen alle gebundenen Niveaus bis zur Ionisierungsenergie W_i mitgenommen werden, das sind unendlich viele. Für $k = \infty$ divergiert aber die Zustandssumme, da der e-Faktor konstant wird und die Gewichte mit k^2 anwachsen. Erklärung: durch die Anwesenheit der Felder anderer Teilchen wird die Ionisierungsenergie W_i erniedrigt und die Zustandssumme muß bei dem entsprechenden k abgebrochen werden.

$$W_i = W_{i0} - \Delta W_i \quad \text{nach Griem: } \Delta W_i = \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 \rho_D} \quad \text{mit dem Debyeradius } \rho_D .$$

Sahagleichung, Massenwirkungsgesetze:

Aus einem detaillierten Gleichgewicht der Ionisationsprozesse folgt immer: $n_e \frac{n_{Z+1}}{n_Z} = f(T)$

z.B. Elektronenstoßionisation $\sim n_a n_e \cdot \text{Koeff.}(T)$; Dreierstoßrekombination $\sim n_i n_e^2 \cdot \text{Koeff.}(T)$

somit $n_i n_e / n_a = f(T)$ genauso bei Dissoziationsprozessen!

$$n_e \frac{n_{Z+1}}{n_Z} = \frac{Q_{Z+1}}{Q_Z} 2 \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{W_{i0} - \Delta W_i}{k T}\right) \quad m_e = \text{Elektronenmasse} \quad (5.2-5)$$

Zustandssumme der Elektronen

Im PLTE kann man wieder einen Unterbesetzungsfaktor, das sog. Saha-Dekrement (< 1) einführen.

Die Sahagleichung kann genauso gut für einen bestimmten angeregten Zustand k des Atoms und z.B. den Grundzustand des Ions $k = 1$ angeschrieben werden (PLTE!):

$$n_e \frac{n_{Z+1,k}}{n_{Z,k}} = \frac{g_{Z+1,k}}{g_{Z,k}} 2 \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{W_{i0} - \Delta W_i - W_k}{k T}\right) \quad (5.2-6)$$

Die Massenwirkungsgesetze für Dissoziation ergeben sich analog mit drei Zustandssummen.

Strahlung

Vorbemerkung: für ν in den folgenden Gleichungen kann immer hc/λ geschrieben werden; Größen mit dem Index ν müssen aber über c/λ^2 umgerechnet werden.

Übergang $k \rightarrow \ell$:

$$\text{Beziehungen für die Einsteinkoeffizienten: } A_{k\ell} = \frac{g_\ell}{g_k} B_{\ell k} \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad g_\ell B_{\ell k} = g_k B_{k\ell}$$

spontane Emission Absorption induzierte Emission

Bei Spektrallinien ist nur der integrale Linienemissionskoeffizient einfach zu berechnen:

$$\varepsilon_L = n_k A_{kl} \frac{h\nu}{4\pi} = \int_{Linie} \varepsilon_\nu d\nu = \varepsilon_L \int_{Linie} P_\nu d\nu \quad \frac{W}{m^3 sr}$$

Nützliche Beziehungen für Ionen der Kernladungszahl Z : $A_Z = Z^4 A_H$
 innerhalb eines Ions: $A \sim \nu^3$

Wenn man den spektralen Emissionskoeffizienten ε_ν bzw. ε_λ wissen will, braucht man das normierte Linienprofil $P_{\nu,\lambda}$:

$$\varepsilon_\nu = \varepsilon_L P_\nu; \quad \int_{Linie} P_\nu d\nu = 1 \quad \text{bzw.} \quad \varepsilon_\lambda = \varepsilon_L P_\lambda; \quad \int_{Linie} P_\lambda d\lambda = 1.$$

Absorptionskoeffizient einer Spektrallinie:

$$\int_{Linie} \alpha_L(\nu) d\nu = \frac{h\nu}{c} n_\ell B_{lk} \quad (5.2-7) \quad \alpha_L(\nu) = \frac{h\nu}{c} n_\ell B_{lk} P_\nu \quad (5.2-8)$$

(Ladenburgsche Beziehung)

Bemerkung: bei Benutzung der Wellenlängenskala gilt

$$\alpha_L(\lambda) = \frac{h\lambda}{c} n_\ell B_{lk} P_\lambda, \quad \text{da } P_\lambda = \frac{c}{\lambda^2} P_\nu$$

Zur Beschreibung der Absorption wird oft auch die (Absorptions-) Oszillatorenstärke verwendet, die folgendermaßen definiert ist:

$$f = f_{lk} = \frac{4\varepsilon_0 m_e h\nu}{e^2} B_{lk} \quad (5.2-9)$$

Strahlungstransportgleichung: $\frac{dL_\nu(\nu)}{d\ell} = \varepsilon_\nu(\nu) - [\alpha(\nu) - \beta(\nu)] \cdot L_\nu(\nu) \quad (= \varepsilon_\nu - \alpha' \cdot L_\nu)$

Im Gleichgewicht (die Strahlung ändert sich nicht mehr mit dem Ort, optisch dicke Lösung) bedeutet das:

$$\varepsilon_\nu(\nu) = [\alpha(\nu) - \beta(\nu)] \cdot L_\nu(\nu)$$

Genau genommen, muß nun zwischen den Linienprofilen für Absorption, Emission und induzierte Emission unterschieden werden. Im thermischen Gleichgewicht sind diese Profile gleich.

P_ν weggelassen: $n_k A_{kl} \frac{h\nu}{4\pi} = \frac{h\nu}{c} n_\ell B_{lk} \left(1 - \frac{g_\ell n_k}{g_k n_\ell}\right) L_\nu \quad (5.2-10)$

$$n_k \frac{g_\ell}{g_k} B_{lk} \frac{8\pi h\nu^3}{4\pi c^3} = \frac{1}{c} n_\ell B_{lk} \left(1 - \frac{g_\ell n_k}{g_k n_\ell}\right) L_\nu$$

Boltzmannverteilung:

$$\frac{g_\ell n_k}{g_k n_\ell} = \exp\left(-\frac{W_k - W_\ell}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right); \quad \text{damit} \quad L_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} = B_\nu,$$

d.h. die Planckfunktion. Im Strahlungsgleichgewicht ist die Strahldichte gleich der Hohlraumstrahlung.

Andererseits gilt das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts: Wenn es nur die Prozesse Absorption, Emission und induzierte Emission gäbe, müßten sie zwangsläufig in das thermische Gleichgewicht führen. Damit ergibt sich wieder (5.2-10) aber nun sofort mit $L_\nu = B_\nu$. Das ist der Kirchhoffsche Satz, der offenbar nur eine Boltzmannverteilung der beteiligten Niveaus voraussetzt. Der Kirchhoffsche Satz gilt auch ohne das Vorhandensein der Hohlraumstrahlung. Er gilt für jeden Punkt des Linienprofils und natürlich auch für das Kontinuum.

Beachte: die Berücksichtigung der induzierten Emission in (5.2-10) resultiert in einem Faktor $1 - \exp(-\frac{h\nu}{kT})$ bzw. $1 - \exp(-\frac{hc}{kT\lambda})$ (gilt generell im thermischen Gleichgewicht, brauchen wir später bei der Umrechnung von Absorption in Emission).

	Parameter	Maxwell- verteilung	Hohlraum- strahlung	Saha- gleichung	Boltzmann- verteilung	partielle Sahagl.
TE	p, T	ja	ja	ja	ja	ja
LTE	p, T	ja	nein	ja	ja	ja
PLTE	p, T_e, T_g, b	ja	nein	nein	partiell	ja

Im Einzelfall muß die Gültigkeit des LTE aus verschiedenen Kriterien abgeschätzt oder experimentell verifiziert werden. Richtwert: für stationäre Laborplasmen $n_e \approx 10^{22} - 10^{23} \text{ m}^{-3}$.

5.3 Berechnung der Plasmazusammensetzung und Auswertung der Linienstrahlung

Im LTE läßt sich die Zusammensetzung eines Plasmas aus der Temperatur T , dem Druck p und der Gesamtkonzentration der Elemente c_n über das Gasgesetz, die Quasineutralität und die Massenwirkungsgesetze berechnen.

Speziell bei Wasserstoff, oder falls es nur eine Sorte Atome und Ionen gibt, folgt

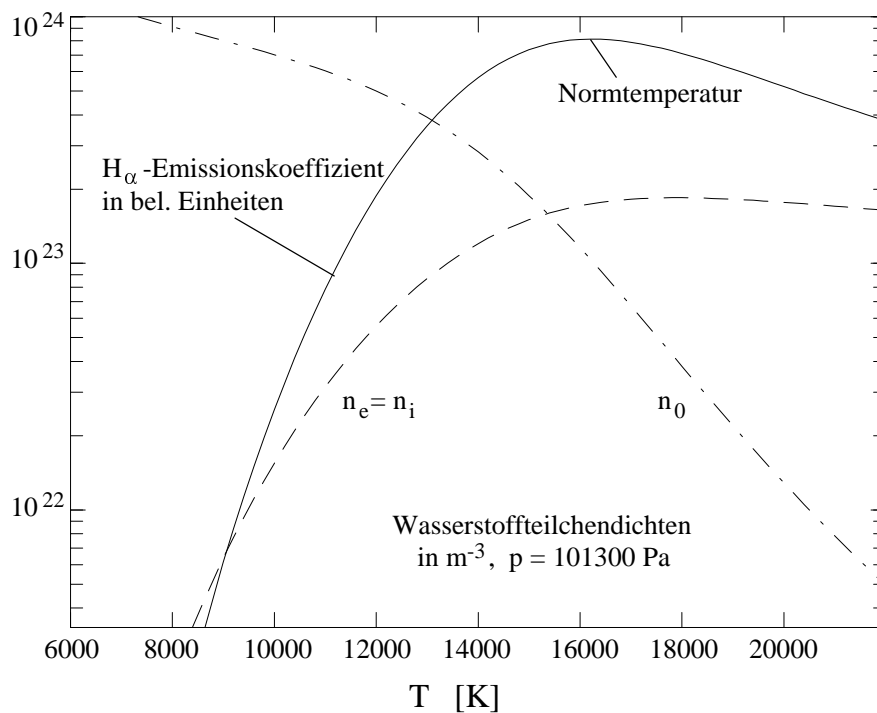
$$n_e + n_i + n_0 = 2n_e + n_0 = \frac{p}{kT}$$

$$\text{Sahagleichung: } \frac{n_e^2}{n_0} = \frac{n_e^2}{p/kT - 2n_e} = S(T) \text{ (Sahafunktion)}$$

Dies ist eine quadratische Gleichung für n_e .

Lösung:
$$n_e = \sqrt{S(T)^2 + S(T) \cdot p/kT} - S(T) \quad (5.3-1)$$

$$n_0 = \frac{p}{kT} + 2S(T) - 2\sqrt{S(T)^2 + S(T) \cdot p/kT} \quad (5.3-2)$$



In anderen Fällen kann man die Elektronendichte abschätzen, alle Teilchensorten berechnen, über den Druck bilanzieren und dann mit einem neuen n_e iterieren. Oder es werden alle Gleichungen aufgestellt und mit einer gängigen Lösungsmethode am Rechner numerisch ausgewertet.

Aus der Strahldichte, bzw. dem Emissionskoeffizienten einer Spektrallinie, erhält man bei bekannter Übergangswahrscheinlichkeit die Besetzung des Niveaus k . Liegt die Berechnung der Plasmazusammensetzung als Funktion der Temperatur vor, so kann die Plasmatemperatur sofort angegeben werden, da auch die angeregten Niveaus aus der Boltzmannverteilung bekannt sind. Allerdings ist eine Absolutmessung des Emissionskoeffizienten erforderlich.

Normtemperatur

Bei einer Temperaturerhöhung des Plasmas werden angeregte Niveaus infolge des Boltzmannfaktors immer stärker besetzt und der Linienemissionskoeffizient steigt, bis der Exponent sehr klein wird. Gleichzeitig nimmt aber die Gesamtdichte einer Teilchensorte durch Ionisation und bei konstantem Druck auch über das Gasgesetz ab. Es ergibt sich ein Maximum des Emissionskoeffizienten berechenbarer Größe bei einer ganz bestimmten Temperatur, der sog. Normtemperatur. Gut für die Diagnostik geeignet, kann aber auch zur Bestimmung von Übergangswahrscheinlichkeiten genutzt werden. Wurde in der Astrophysik von Fowler und Milne 1923 eingeführt, für Lichtbögen von W. Larenz 1951.

Relativmessungen

Darf eine Boltzmannverteilung angenommen werden, so kann die Temperatur aus zwei Spektrallinien bestimmt werden, die von Niveaus mit verschiedener Anregungsenergie stammen:

$$\varepsilon_{L,k} = n_k A_{k,m} \frac{h\nu_{k,m}}{4\pi}; \quad \varepsilon_{L,\ell} = A_{\ell,n} n_\ell \frac{h\nu_{\ell,n}}{4\pi}; \quad \log \frac{g_\ell n_k}{g_k n_\ell} = -\frac{W_k - W_\ell}{kT},$$

meistens aber sehr unempfindlich, da die Energiedifferenz im Exponenten kein ist, und ungenau, wenn die Übergangswahrscheinlichkeiten nicht sehr gut bekannt sind.

Besser: Boltzmann-Plot

Man mißt eine ganze Reihe von Linien und trägt die so erhaltenen reduzierten Dichten n_m/g_m logarithmisch über der Energie W_m auf. Die Punkte müssen auf einer Geraden mit der Steigung $-W_m/kT$ liegen.

Funktioniert auch im PLTE und ergibt dann die Elektronentemperatur.

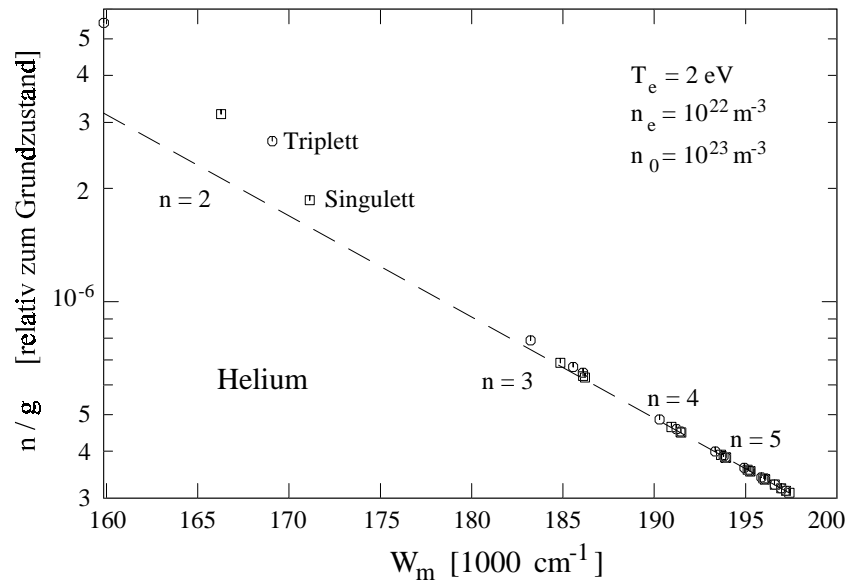


Bild: Rechnung für Helium (optisch dünn) mit PLTE-Geraden, Collision-Limit $n_{\text{coll}} \approx 4$.

Mit dem Boltzmann-Plot verwandt:

Bestimmung der Rotationstemperatur von Molekülbanden, indem man die Strahldichte der verschiedenen Rotationslinien durch ihre Linienstärke teilt und über der Rotationsenergie aufträgt (Besonderheiten, z.B. Intensitätswechsel: siehe Herzberg). Das Ergebnis entspricht am ehesten der Gastemperatur.

Bestimmung der Vibrationstemperatur von Molekülzuständen durch Auftragen der Intensität von Banden verschiedener Vibrationsquantenzahl über der Schwingungsenergie.

5.4 Kontinuumsstrahlung

Bei der frei-gebunden-Strahlung ist die Energie der freien Elektronen und eine Bindungsenergie beteiligt:

$$h\nu = \frac{1}{2} m_e v_e^2 + W_i (-\Delta W_i) - W_m = \frac{1}{2} m_e v_e^2 - h\nu_g, \quad (5.4-1)$$

wobei ν_g die Wellenlänge der Absorptionskante ist. (Voraussetzung ist, daß das Ion aus seinem Grundzustand rekombiniert, ansonsten müßte noch eine Ionenanregungsenergie addiert werden. Die meisten Ionen sind aber im Grundzustand - siehe auch später bei σ .)

Klassischer Querschnitt für die Photoionisation eines wasserstoffähnlichen Atoms mit der Hauptquantenzahl n :

$$\sigma_n^{kl}(\nu) = \frac{m_e e^{10}}{48\pi\epsilon_0^5 c \sqrt{3} h^6} \frac{Z^4}{\nu^3 n^5}$$

(5.4-2)

$$= 2.815 \cdot 10^{25} \text{ m}^2 \text{ Hz}^3 \frac{Z^4}{\nu^3 n^5}$$

Diese Formel muß mit einer quantenmechanischen

Korrektur, dem sog. Gauntfaktor G multipliziert werden, der von n und ν abhängt.

$$\sigma_{Z-1,n}(\nu) = \sigma_n^{cl}(\nu) G_n(\nu) \quad (5.4-3)$$

Bei anderen Atomen als Wasserstoff sind die zu einer Hauptquantenzahl gehörigen Sub-Niveaus nicht mehr energetisch entartet und σ muß gemäß den statistischen Gewichten aufgeteilt werden. Im Folgenden soll der Index m für beliebige gebundene Niveaus stehen.

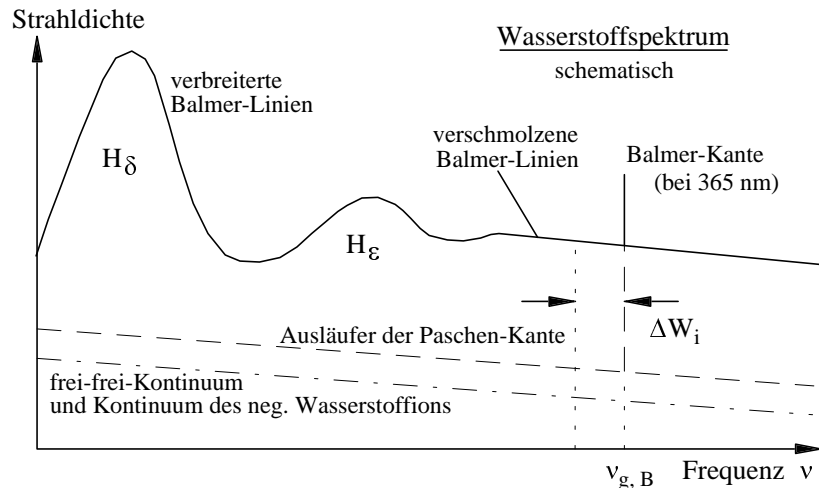
Der effektive Absorptionskoeffizient ergibt sich aus einer Multiplikation des Absorptionsquerschnitts mit der Teilchenzahldichte im unteren Zustand und unter Berücksichtigung der induzierten Emission (Faktor: $1 - \exp[-h\nu/kT]$).

Vom Absorptions- zum Emissionsquerschnitt $\sigma_{Z,1}(\nu)$ (Rekombination mit einem Ion im Grundzustand) kommt man über die Beziehung von Milne (entspricht etwa dem Kirchhoffschen Satz, siehe unten):

$$\sigma_{Z,1}(\nu) = \frac{g_{Z-1,m}}{g_{Z,1}} \frac{h^2 \nu^2}{m_e^2 c^2 \nu^2} \sigma_{Z-1,m}(\nu). \quad (5.4-4)$$

Zur Berechnung des Emissionskoeffizienten für Rekombinationsstrahlung betrachten wir zunächst die Rekombinationsrate $dN_{Z,1 \rightarrow Z-1,m}$ (Rekombinationsprozesse pro Zeit- und Volumeneinheit) zwischen ν und $\nu + d\nu$. Sie ist proportional zur Ionendichte und zu der Anzahl der Elektronen in dem Geschwindigkeitsintervall, das zu dem betrachteten Wellenlängenintervall gehört. Die Verteilung über die Geschwindigkeitsintervalle ist im Gleichgewicht durch die Maxwellverteilung $f(\nu = \text{Geschwindigkeitsbetrag})$ gegeben.

$$dN_{Z,1 \rightarrow Z-1,m} = n_e n_{Z,1} f(\nu) \sigma_{Z,1}(\nu) \nu d\nu \quad (\text{Raten enthalten immer: Querschnitt} \cdot \nu d\nu).$$



Die Anzahl $f(v)$ pro Geschwindigkeitsintervall muß über $dv = h \cdot dn / m_e v$ auf die Frequenz umgerechnet werden, und man erhält den Emissionskoeffizienten nach einer Multiplikation mit $h\nu/4\pi$:

$$\varepsilon_{\nu, Z, 1 \rightarrow Z-1, m} = n_e n_{Z, 1} f(v) \frac{h^2 \nu}{4\pi m_e} \sigma_{Z, 1}(v) \left[= n_e n_{Z, 1} f(v) \frac{g_{Z-1, m}}{g_{Z, 1}} \frac{h^4 \nu^3}{4\pi m_e^3 c^2 v^2} \sigma_{Z-1, m}(v) \right]. \quad (5.4-5)$$

Beachte: Das dv steckt im $\varepsilon = \text{Leistung} / \text{Frequenzintervall}$! Benutzt man den Kirchhoffschen Satz, d.h. setzt man den Emissionskoeffizienten gleich dem effektiven Absorptionskoeffizienten (unter Berücksichtigung der induzierten Emission) multipliziert mit der Planckfunktion, und benutzt man die Sahagleichung für die Teilchendichten, so erhält man die Milnesche Beziehung. Mit dieser Beziehung (Ausdruck oben in Klammern) und der Maxwellverteilung

$$f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_e}{k T_e} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{h\nu - W_i + W_m}{k T_e}\right), \text{ ergibt sich schließlich der Emissionskoeffizient}$$

$$\varepsilon_{\nu} = \frac{2h^4 \nu^3}{c^2 (2\pi m_e)^{3/2}} \frac{n_e n_{Z, 1}}{(k T_e)^{3/2}} \exp\left(-\frac{W_{i, Z-1} - h\nu}{k T_e}\right) \sum_m \frac{g_{Z-1, m}}{2g_{Z, 1}} \sigma_{Z-1, m}(v) \exp\left(-\frac{W_m}{k T_e}\right), \quad (5.4-6)$$

wobei über die einzelnen gebundenen Zustände summiert werden muß.

Im Falle des Wasserstoffs ist $g_{Z-1, n} = 2n^2 g_{Z, 1}$. Da der klassische Querschnitt $\sim v^{-3} n^{-5}$ und Z^4 ist, wird der Emissionskoeffizient insgesamt:

$$\varepsilon_{\nu} = 1.719 \cdot 10^{-46} \frac{n_e n_{Z, 1} Z^4}{T_e^{3/2}} \exp\left(-\frac{W_{i, Z-1} - h\nu}{k T_e}\right) \sum_n \frac{G_n(v)}{n^3} \exp\left(-\frac{W_n}{k T_e}\right) \frac{W}{m^3 \text{Hz sr}}, \quad T_e \text{ in K.} \quad (5.4-7)$$

Wenn die Energieniveaus dicht genug liegen, d.h. ab einer bestimmten Hauptquantenzahl n' , und unter der Annahme $G_n = 1$ kann man die Summe durch ein Integral ersetzen.

$$\text{Man benutzt dazu die Wasserstoff-Beziehung: } W_{i, Z-1} - W_n = \Delta W = \frac{Z^2 W_H}{n^2} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2}.$$

$$\sum_{n'} \frac{1}{n^3} \exp\left(\frac{Z^2 W_H}{n^2 k T_e}\right) \Rightarrow \int_{n'} \frac{1}{n^3} \exp\left(\frac{Z^2 W_H}{n^2 k T_e}\right) dn = -\frac{1}{2Z^2 W_H} \int_{\Delta W} \exp\left(\frac{\Delta W}{k T_e}\right) d(\Delta W)$$

Infolge der Integration hängt der Kontinuumsemissionskoeffizient nur noch von Z^2 und (nach der Auswertung des Integrals) von $T^{-1/2}$ ab! Durch Ausdehnung des Integrals auf den Energiebereich der freien Elektronen (obere Grenze $-\infty$) kann auch die frei-frei-Strahlung (Bremsstrahlung) mit erfaßt werden, für die sich folgende Relation ergibt (die Gleichung muß eigentlich noch mit einem gemittelten Gauntfaktor multipliziert werden):

$$\varepsilon_{\nu}^{\text{ff}} = 5.443 \cdot 10^{-52} Z^2 \frac{n_e n_Z}{T_e^{1/2}} \exp\left(-\frac{h\nu}{k T_e}\right) \frac{W}{m^3 \text{Hz sr}}, \quad T_e \text{ in K.} \quad (5.4-8)$$

Quasineutralität: $n_e = Z n_Z$; $Z^2 n_e n_Z = Z n_e^2$; damit ist $\varepsilon^{\text{ff}} \sim Z n_e^2$.

Vorwandern der Seriengrenze: wegen der Erniedrigung der Ionisierungsenergie und des Verschmelzens der Spektrallinien liegt die scheinbare Seriengrenze bei niedrigeren Wellenlängen als die theoretische Grenze. Wird zur Bestimmung der Elektronendichte verwendet ("Inglis-Teller"-Beziehung 1939, Vidal 1966, Linienverbreiterungsmechanismen müssen

berücksichtigt werden). Eigentlich erfolgt auch eine "Aufweichung" der Kontinuums-kante, ähnlich der Linienverbreiterung.

Andere Darstellung der Kontinuumsstrahlung bei Edelgasen: ξ-Faktormethode von Biberman. Die Summe in der Kontinuumsformel wird immer durch das entsprechende Integral ersetzt, die Gaunfaktoren werden eins gesetzt und die Details der Kantenstruktur durch einen Vorfaktor, den ξ-Faktor beschrieben (funktioniert nur gut bei dicht liegenden Kanten).

Kontinua negativer Ionen (Absorptionskoeffizient σ^- , möglicherweise temperaturabhängig):

$$\varepsilon_{\nu}^- = n^- \sigma(\nu)^- \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT_e}\right); \quad H^-: \text{wichtiger Strahlungsbeitrag im Sonnenspektrum!}$$

Bestimmung der Dichte der negativen Ionen aus der entsprechenden Sahagleichung.

Diagnostikmöglichkeiten

Häufig ist der Exponentialfaktor in der Kontinuumsformel nahe eins. Dann mißt man im wesentlichen die Elektronen und Ionendichte (Quasineutralität, eine Ionisationsstufe: n_e^2). In der Fusionsforschung versucht man mit bekannter Elektronendichte die effektive Ladungszahl Z_{eff} zu bestimmen.

Wegen der verschiedenen Exponentialfaktoren kann man aus einer Messung Linie-zu-Kontinuum die Elektronentemperatur bestimmen. Voraussetzung ist entweder die Gültigkeit der Sahagleichung (LTE) oder eine unabhängige Messung der Elektronendichte. Die Empfindlichkeit ist u.U. wieder nicht sehr groß, da die effektive Energiedifferenz nur $W_i - W_m$ beträgt (und $h\nu/kT$ im Exponenten, was je nach Wellenlänge und Kontinuumsart empfindlicher machen kann, Röntgenbereich!).

Die Bremsstrahlung und die Rekombinationskontinua zwischen den Kanten hängen von der Wellenlänge ab über $\exp(-h\nu/kT)$. Möglichkeit der Temperaturdiagnostik aus dem Abfall über der Frequenz ν .

5.5 Linienverbreiterung

Vorbemerkung: Berechnungen der Linienverbreiterung werden normalerweise über der Frequenz, genauer über der Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$ ausgeführt. Die Linienmitte sei bei ω_0 , bzw. ν_0 bzw. λ_0 . Im Argument des Linienprofils P steht die Differenz $\Delta\omega$, $\Delta\nu$ oder $\Delta\lambda$ zur Linienmitte. Falls der Abstand $\Delta\lambda$ immer sehr viel kleiner als λ_0 ist, kann man umrechnen:

$$P_{\lambda} = \frac{c}{\lambda_0^2} P_{\nu} = \frac{2\pi c}{\lambda_0^2} P_{\omega}.$$

Für die Halbwertsbreiten w_{ω} , w_{ν} und w_{λ} gilt die inverse Beziehung, z.B. $w_{\nu} = w_{\omega}/2\pi$.

Natürliche Lebensdauer und Stoßverbreiterung:

Infolge der endlichen Lebensdauer eines angeregten Zustands ist die ausgesandte Welle nicht streng monochromatisch. Betrachtungsweisen sind

- Fourier-Analyse eines endlichen Wellenzugs
- gedämpfter Oszillator
- Unschärfe-Relation.

Es ergibt sich immer ein sog. Dispersionsprofil mit einer Dämpfungskonstanten γ , bzw. einer (vollen) Halbwertsbreite w :

$$P_\nu(\Delta\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{w_\nu / 2}{(\Delta\nu)^2 + (w_\nu / 2)^2} \quad (5.5-1) \quad w_\nu = \frac{\gamma}{2\pi} \quad (w_\lambda = \frac{\lambda_0^2}{c} \frac{\gamma}{2\pi})$$

Die Dämpfungskonstante hängt quantenmechanisch mit der Lebensdauer des Zustands zusammen, d.h. $\gamma = 1/\tau$. Die Lebensdauer wiederum ist durch die Prozesse der spontanen und induzierten Emission sowie durch Absorptionsprozesse in höhere Zustände hinauf bestimmt. Die Absorptionsprozesse lassen sich nur im Falle der Hohlraumstrahlung leicht ausrechnen und es ergibt sich folgender Zusammenhang mit den Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$\gamma_m = \sum_k \frac{A_{mk}}{1 - \exp(-\frac{h\nu}{kT})} + \sum_\ell \frac{A_{\ell m}}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1} \quad (5.5-2)$$

spontane und induzierte Emission Absorption bei Hohlraumstrahlung

Für die Linienverbreiterung sind die Breiten des oberen und des unteren Niveaus zu addieren. Die natürliche Linienbreite ist sehr klein und liegt in der Größenordnung 10^{-5} nm.

Auch Stöße des angeregten Zustands mit anderen Teilchen im Plasma, hauptsächlich den schnellen Elektronen, die zu einer Beendigung der Strahlung oder aber zu einem Phasensprung führen, verbreitern die Spektrallinien und führen wieder zu einem (meistens viel breiteren) Dispersionsprofil, wobei die Linie auch noch zusätzlich um eine Verschiebung d ($\sim w$) versetzt sein kann. Über der Wellenlänge heißt das:

$$P_\lambda(\Delta\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{w_\lambda / 2}{(\Delta\lambda - d_\lambda)^2 + (w_\lambda / 2)^2} \quad (5.5-3)$$

Breite und Verschiebung müssen individuell für jede Spektrallinie berechnet werden (siehe z.B. Griem). Die Halbwertsbreite der Linien und die Verschiebung sind proportional zu n_e . Häufig erhält man aus der Elektronenstoßbreite direkt die Elektronendichte.

Starkverbreiterung:

Die Ionen verbreitern durch ihre Mikrofelder die atomaren Niveaus (Starkeffekt). Mit Ausnahme des linearen Starkeffekts ergibt sich nur eine Korrektur an die Stoßverbreiterung der Elektronen, die aber zu einer Asymmetrie des Linienprofils führt und durch den sog. Ionenparameter beschrieben wird.

Für die Diagnostik besonders wichtig ist der lineare Starkeffekt bei Wasserstoff. Die Theorie der statischen Ionenfelder liefert die sog. Holtsmark'sche Wahrscheinlichkeitsverteilung der reduzierten Feldstärken $\beta = F/F_0$. Die Holtsmarkfeldstärke wird normalerweise in cgs-Einheiten angegeben

$$F_0 = 2.6031 \cdot e n_e^{2/3} \quad (\text{cgs}) = 4.1793 \cdot 10^{-10} n_e^{2/3} \quad (\text{SI, d.h. } m^{-3} \text{ und } V/m).$$

Für jede Starkkomponente ist die Wellenlängenverschiebung proportional zu einer charakteristischen Konstanten und der Feldstärkeverteilung. Durch eine Summation ergibt sich das normierte Linienprofil $S(\alpha)$, wobei $\alpha = \Delta\lambda/F_0$. Die asymptotischen Linienflügel sind proportional zu n_e und fallen über der Wellenlänge mit $\Delta\lambda^{-5/2}$ (Holtzmarkprofil).

Die Linienprofile der Wasserstofflinien wurden unter Einbeziehung der statischen Ionenverbreiterung und der Elektronenstoßverbreiterung von vielen Autoren berechnet und von einigen auch tabellarisch dargestellt (in der Form $S[\alpha]$). Für den eigentlichen Liniengipfel müssen aber auch die Ionendynamik und einige andere Effekte mitgenommen werden. Die feineren Details der Wasserstofflinien sind immer noch Gegenstand von Untersuchungen.

Für Elektronendichtemessungen wird häufig nur die Halbwertsbreite der Wasserstofflinien ausgewertet

$$w_\lambda = C_L(n_e, T_e) n_e^{2/3},$$

wobei die für eine Linie L zuständige Konstante nur wenig von der Temperatur und Elektronendichte abhängt. Man benutzt häufig experimentelle Werte.

Doppler-Verbreiterung:

Zusätzlich zu den oben erwähnten Druckverbreiterungsmechanismen emittieren Teilchen mit der Masse m , die eine Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung der Temperatur T haben, ein Dopplerprofil:

$$P_\lambda = \frac{1}{\sqrt{\pi} w_D} \exp\left[-\left(\frac{\Delta\lambda}{w_D}\right)^2\right] \quad (5.5-4)$$

mit der sog. Dopplerbreite

$$w_D = \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}}, \quad (5.5-5)$$

bzw. der vollen Halbwertsbreite

$$w_\lambda = \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{8\pi \ln 2 kT}{m}}. \quad (5.5-6)$$

→ Messung der kinetischen Temperatur der schweren Teilchen (der Gastemperatur).
(auch störend: Dopplerfreie Laser-Sättigungsspektroskopie).

Sind mehrere Verbreiterungsmechanismen zugleich wichtig, so muß das resultierende Linienprofil P_λ aus den einzelnen Profilen durch eine Faltung ermittelt werden. Die Messung einzelner Plasmaparameter (Gastemperatur, Elektronendichte) ist meist nur dann möglich, wenn bei bestimmten Linien ein Verbreiterungsmechanismus deutlich überwiegt.

Einfache Fälle:

Faltung zweier Doppler-Profile mit den Breiten w_1 und w_2 ergibt:

$$w = \sqrt{w_1^2 + w_2^2}.$$

Faltung zweier Lorentz-Profile ergibt:

$$w = w_1 + w_2.$$

Die Faltung eines Doppler-Profiles mit einem Lorentz-Profil resultiert in den sog. Voigt-Profilen. Numerische Auswertung und Tabellen, bzw. graphische Darstellungen.