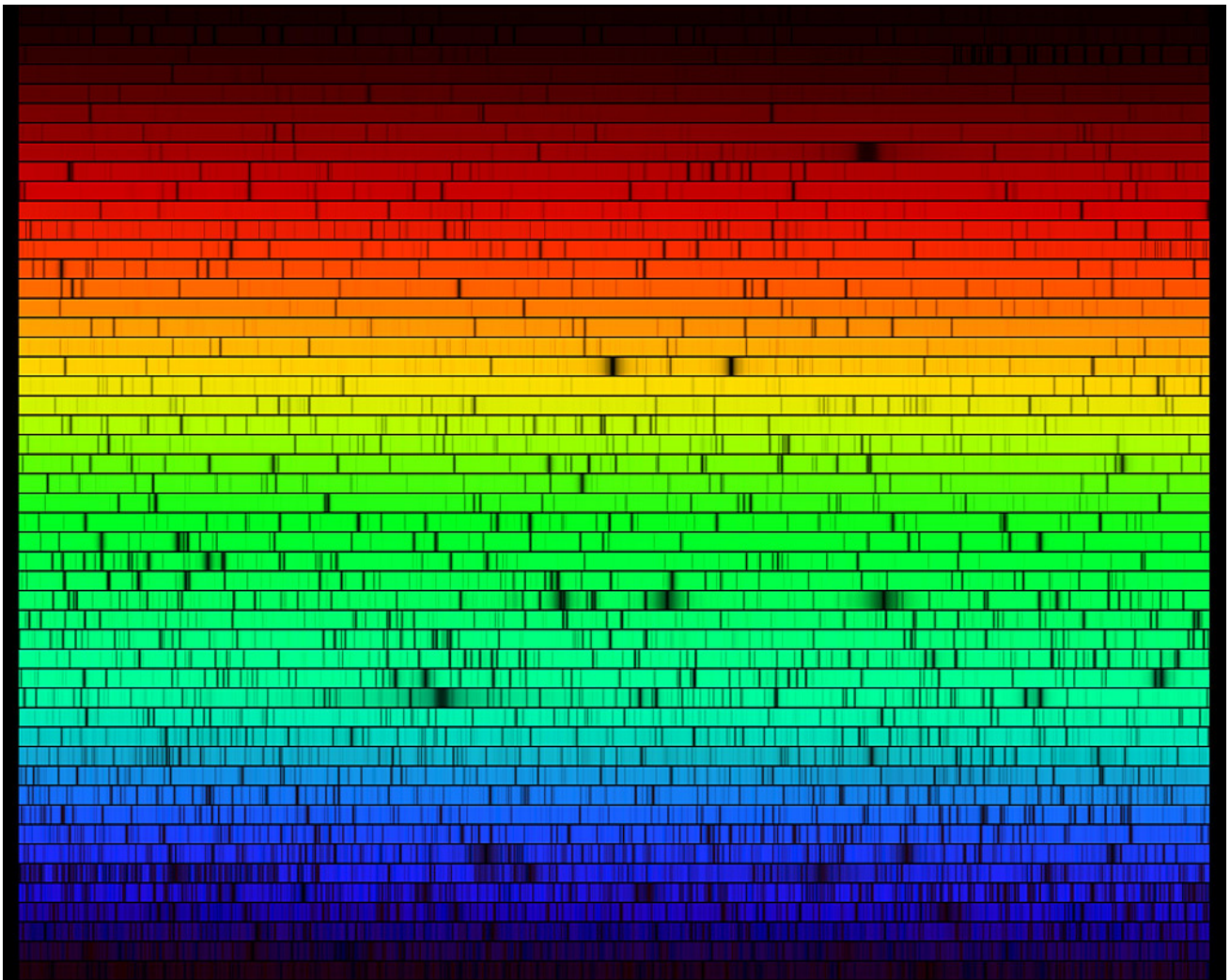


Kleines Lehrbuch der Astronomie und Astrophysik

M. Scholz

Band 15: Grundlagen der Sternspektroskopie



Atomspektren, Molekülspektren, Linienprofile, Strahlungstransport, Spektralanalyse

M.Scholz

Kleines Lehrbuch der Astronomie und Astrophysik

Band 15: Grundlagen der Sternspektroskopie

Atomspektren, Molekülspektren, Linienprofile, Strahlungstransport, Spektralanalyse

E-Book-Ausgabe 2009

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Autors unzulässig.

Bildnachweis: Wikipedia Commons, NASA, ESA, Autor

M.Scholz

Kleines Lehrbuch der Astronomie und Astrophysik

Band 15

Grundlagen der Sternspektroskopie

Atomspektren, Molekülspektren, Linienprofile, Strahlungstransport, Spektralanalyse

Ausgabe 2009

mathias.scholz@t-online.de

INHALTSVERZEICHNIS

PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN DER STERNSPEKTROSKOPIE	2
Absorption und Emission von elektromagnetischer Strahlung	3
Übergänge im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell.....	4
Das Wasserstoffatom.....	7
Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms.....	7
Das Wasserstoffspektrum	10
Die Spektren der Alkalimetalle	13
Atome mit mehreren Elektronen.....	15
Elektronenkonfigurationen von Ionen	17
Russel-Saunders-Kopplung.....	18
Das j-j -Kopplungsschema	20
Nomenklatur der Spektraltermen von Mehrelektronensystemen	21
Auswahlregeln.....	22
Interkombinationslinien.....	23
Verbotene Linien.....	24
Das Heliumspektrum und die Spektren heliumartiger Ionen	25
Spektren der Wasserstoffionen	29
Spektren molekularer Systeme (Molekülspektren)	31
Struktur und Beschreibung zweiatomiger Moleküle	32
Die Born-Oppenheimer-Näherung, Molekülorbitale	33
Vibrationsübergänge.....	37
Rotationsübergänge.....	40
Vibrations- Rotationspektren	41
Beispiele astronomisch relevanter Moleküle.....	43
Identifikation von Spektrallinien in stellaren Spektren.....	44
Profil und Verbreiterung von Spektrallinien	46
Die Struktur einer Spektrallinie.....	48
Der Doppler-Effekt und die Dopplerverbreiterung	49
Thermische Dopplerverbreiterung.....	50
Rotation von Sternen	51
Doppler Imaging.....	52
Druckverbreiterung von Spektrallinien.....	55
Die Inglis-Teller-Beziehung.....	59
Faltung doppler- und druckverbreiteter Profile - das Voigt-Profil.....	60
Strahlungstransport in Absorptionslinien (gg-Übergänge).....	61
Lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE) und der Kirchhoffsche Satz	65
Linienabsorptionskoeffizienten	66
Kontinuierliche Absorption	71

Gebunden-frei und frei-frei-Übergänge, Streuprozesse	71
Absorptionskoeffizienten für gf-Übergänge	72
Absorptionskoeffizienten für ff-Übergänge	73
Streuprozesse.....	74
Der Rosseland'sche mittlere Opazitätskoeffizient.....	75
Die Boltzmann-Gleichung	78
Die Saha-Gleichung	80
Quantitative Spektralanalyse	86
Wachstumskurven	87
Theoretische und empirische Wachstumskurven.....	91
Ableitung der Säulendichten verschiedener Elemente aus einem Absorptionslinienspektrum.....	93
Synthetische Spektren	95

Literatur

Index

Die Numerierung der Formeln im Text setzt sich von Band 14 fort

Vorwort

Das Ziel dieser mehrbändigen Lehrbuchreihe ist es, grundlegende Erkenntnisse über die Welt außerhalb unserer Erde in systematischer Weise auf einem Niveau, den man im amerikanischen als „undergraduate“ bezeichnen würde, dem Leser „äher zu bringen. Dabei wurde sowohl eine gewisse Ausführlichkeit als auch Aktualität (hier etwa 2007) – soweit das bei den einzelnen Themenkomplexen überhaupt möglich ist – angestrebt. Gerade in der Astronomie und Astrophysik beobachtet man gegenwärtig innerhalb kürzester Zeiträume einen enormen Wissenszuwachs, wie man es bei anderen Wissenschaften in diesem Umfang her nur begrenzt kennt. Allein während der Arbeit an dieser Buchreihe erforschte die Raumsonde „Galilei“ das Jupitersystem, erreichte „Cassini“ den Saturn mit seinem komplexen Ringsystem und „Huygens“ die Oberfläche des Saturnmondes Titan; eine ganze Anzahl von „Transplutos“ mit „Eris“ an der Spitze wurden entdeckt, was u.a. dazu führte, daß der neue Begriff „Zwergplanet“ in die astronomische Terminologie eingeführt wurde und die bekannten Merksätze für die Planeten unseres Sonnensystems nur noch bedingt gültig waren und umformuliert werden mußten ...

Während es vor 30 Jahren nicht sonderlich schwierig war, die Anzahl und die Namen der Satelliten der Planeten unseres Sonnensystems aufzusagen, ist das heute längst nicht mehr möglich. Man hat sogar den Eindruck, daß es zunehmend schwieriger wird, für die neuentdeckten Objekte überhaupt Namen zu finden, wie die vielen noch vorläufigen Bezeichnungen der neuentdeckten Jupiter- und Saturnmonde zeigen. Und schließlich soll in diesem Zusammenhang nur noch auf den inflationären Zuwachs an Entdeckungen von Exoplaneten allein im letzten Jahrzehnt hingewiesen werden, die uns viele neue Einsichten in die Struktur und Entstehung von Planeten und Planetensystemen gewährt haben. Gerade an Planeten um weit entfernte Sterne entzündet sich unsere Phantasie, wie die vielen künstlerischen Darstellungen beweisen, die man bei der Recherche im Internet leicht auffinden kann.

Ziel dieser „Einführung“ in die Astronomie und Astrophysik ist es Leser anzusprechen, die einen nicht zu kompakten Einstieg in diese Wissenschaft in deutscher Sprache wünschen und auch daran interessiert sind, an die im Internet oder über Zeitschriften zugängliche Fachliteratur herangeführt zu werden. Angesprochen sind in erster Linie Schüler der Abiturstufe unserer Gymnasien, ihre Lehrer, Studenten der ersten Studienjahre sowie selbstverständlich auch die wachsende Zahl an Liebhaberastronomen (so wie der Autor), die mehr wissen wollen über die Objekte, die sie in ihren „Backyard“- Observatorien oder an Volks- und Schulsternwarten beobachten.

Auf Zitierungen wurde im Text – dem Charakter eines Lehrbuches entsprechend – weitgehend verzichtet. Fachaufsätze lassen sich mittlerweile leicht über Google Scholar oder über das Astrophysics Data System (ADS) recherchieren.

Zum Schluß möchte ich mich noch bei meinem Freunden, Bekannten und Kollegen bedanken, dich mich mittelbar und unmittelbar während der Zeit der Erarbeitung dieser Buchreihe unterstützt haben.

M.Scholz

Herbst 2007

Physikalische Grundlagen der Sternspektroskopie

Die Sternspektroskopie mußte bis in die zwanziger Jahre des vorigen Jahrhunderts im Wesentlichen ohne einer tiefgreifenden theoretischen Begründung auskommen. Das änderte sich mit der Entwicklung der ersten einfachen Atommodelle („Planetenmodell“) die es zumindest erlaubten (zuerst noch in halbmechanischer Weise), das Wasserstoffspektrum in seinen Grundzügen zu verstehen. Mit der Entwicklung der Quantenmechanik – insbesondere durch WERNER HEISENBERG (1901-1976) und ERWIN SCHRÖDINGER (1887-1961) sowie durch der Erklärung der elementaren Absorptions- und Emissionsvorgänge durch ALBERT EINSTEIN (1879-1955) – wurde die Atomspektroskopie nach und nach auf ein festes Fundament gehoben und damit zu einem praktikablen Werkzeug sowohl für den beobachtenden als auch für den theoretisch arbeitenden Astronomen mit weitreichenden Konsequenzen auf die Interpretation von Sternspektren. Richtungsweisend in diesem Zusammenhang war das mehrfach überarbeitete Buch von ARNOLD SOMMERFELD (1868-1951) „Atombau und Spektrallinien“ (erste Auflage 1919) und - im deutschsprachigen Raum - das Buch von ALBRECHT UNSÖLD (1905-1995) „Physik der Sternatmosphären“ (erste Auflage 1937). Dazwischen lag die Entwicklung der quantitativen Spektralanalyse auf Grundlage der Ionisationstheorie von MEGHNAD SAHA (1893-1956), eine erste detaillierte Theorie des inneren Aufbaus der Sterne von ARTHUR STANLEY EDDINGTON (1882-1944) und die Entdeckung, daß die Energieabstrahlung der Sterne auf thermonuklearen Reaktionen tief in ihrem Inneren beruht.

Absorption und Emission von elektromagnetischer Strahlung

Die Beobachtung, daß glühende Gase ein Emissionslinienspektrum, glühende Festkörper ein kontinuierliches Spektrum und kühle Gase, durch die kontinuierliches Licht dringt, ein Absorptionslinienspektrum besitzen, geht auf GUSTAV ROBERT KIRCHHOFF (1824-1887) und ROBERT WILHELM BUNSEN (1812-1899) zurück (um 1859). Desweiteren stellten sie fest, daß für einen gegebenen Stoff die Emissionslinien und die Absorptionslinien immer die gleiche Position im Spektrum einnehmen, sie aber ansonsten für den jeweiligen Stoff charakteristisch sind. Durch die Identifikation solcher Spektrallinien in dem Spektrum eines Sterns konnte man also auf die Existenz des betreffenden Stoffs in dem Stern schließen. Eine begründete Erklärung auf die Frage, warum es überhaupt Linienspektren gibt, gelang ihnen jedoch nicht. Dafür untersuchten sie im Detail das Emissions- und Absorptionsverhalten verschiedener Festkörper und Gase und stellten die Hypothese auf, daß die spektrale Energieverteilung der Strahlung $B_\lambda(T)$, die ein „Schwarzer Körper“ emittiert, nur von dessen Temperatur T und von keinen weiteren Parametern abhängt. Experimentell ließ sich ein solcher „Schwarzer Körper“ mit hoher Genauigkeit durch einen Hohlraum, der mit seiner Umgebung im thermodynamischen Gleichgewicht steht, darstellen. Deshalb spricht man auch heute noch oft von „Hohlraumstrahlung“ wenn man „Schwarzkörperstrahlung“ meint. Bereits um 1894 war die Energieverteilungsfunktion dieser Strahlung für verschiedene Temperaturen experimentell sehr genau bekannt, aber der Versuch einer theoretische Begründung (z.B. im Rahmen der Maxwellschen Elektrodynamik) führte zu nicht auflösbaren Paradoxien („Ultraviolett katastrophe“).

Erst im Jahre 1900 gelang es MAX PLANCK (1858-1947) eine Formel herzuleiten (siehe (1.37)), welche die Energieverteilung der Schwarzkörperstrahlung in Einklang mit den experimentellen Ergebnissen darzustellen vermochte und außerdem die zuvor von JOHN WILLIAM STRUTT (1842-1919, Lord Rayleigh) und JAMES HOPWOOD JEANS (1877-1946) einerseits und WILHELM WIEN (1864-1928) andererseits erstellten Näherungsformeln (siehe (1.89) und (1.90)) als Grenzfälle erhielt. Der Preis, der dafür zu zahlen war, war beträchtlich. Man mußte sich von der Annahme verabschieden, daß alle Vorgänge in der Natur kontinuierlich verlaufen und man mußte zur Kenntnis nehmen, daß die Erklärungskraft der klassischen Mechanik und der Maxwellschen Elektrodynamik offensichtlich an ihre Grenzen gestoßen ist. Eine neue Naturkonstante (das Planck'sche Wirkungsquantum h) erblickte das Licht der Welt und sollte bereits wenige Jahre später zum Schlüssel für die Erklärung der Atome und der Atomspektren werden. Die Quantentheorie war geboren.

1913 gelang es NIELS BOHR (1885-1962) mit ein paar wenigen Postulaten ein einfaches Atommodell zu entwickeln welches in der Lage war, die 1885 von JOHANN JAKOB BALMER (1825-1898) ad hoc erstellte Formel für die im optischen Bereich des Spektrums liegende Linienserie des Wasserstoffs abzuleiten. Dieses Modell wurde später von ARNOLD SOMMERFELD (1868-1951) zum Bohr-Sommerfeldschen Atommodell erweitert und spielte eine wichtige Rolle bei der Entwicklung der quantitativen astronomischen Spektroskopie im ersten Drittel des vorigen Jahrhunderts. Wegen seiner Anschaulichkeit werden die mit diesem Atommodell eingeführten Begriffe noch heute gern benutzt. Zu nennen sind z.B. Begriffe wie Term und Termschema, stationäre Elektronenbahn, Strahlungsübergang (*transition*) und Quantenzahl. Für alle diese Begriffe gibt es auch im modernen quantenmechanischen Atommodell mathematische (aber weniger anschauliche) Entsprechungen.

Übergänge im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell

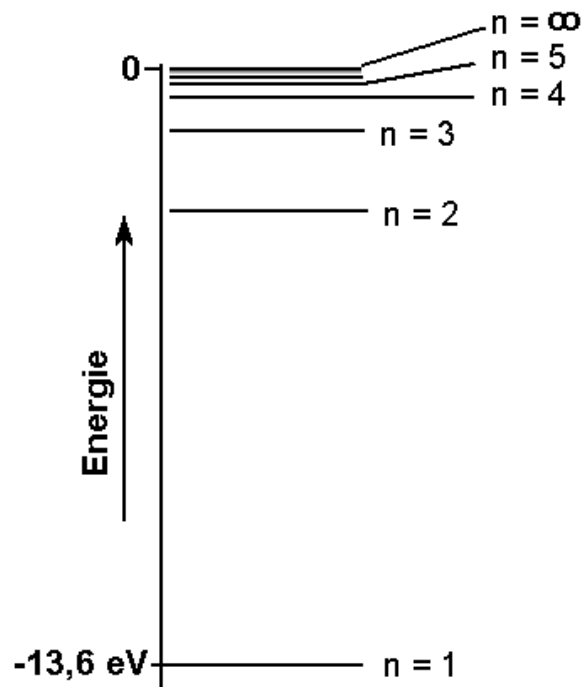
Das Bohrsche Atommodell beruht auf folgenden Postulaten, die erst in der Wellenmechanik (Schrödingergleichung) näher begründet werden:

1. Atome existieren in stationären Zuständen mit diskreten Energien, die durch ganze Zahlen n (die man als Hauptquantenzahl bezeichnet) charakterisiert sind.
2. Der Übergang von einem stationären Zustand n zu einem anderen stationären Zustand m erfolgt durch Emission oder Absorption eines Lichtquants (Photon) mit der Energie

$$\hbar\omega = E_n - E_m \quad [1.91]$$

$$(\hbar = h/2\pi)$$

Für jedes Atom gibt es unendlich viele derartige Zustände, deren energetischer Abstand mit steigendem n jedoch immer geringer wird:



Stationäre Zustände im Wasserstoffatom

Alle diese diskreten Zustände haben negative Energien, da es sich um Bindungszustände handelt, d.h. man muß Energie aufwenden, um z.B. ein Elektron, welches sich in einem derartigen Zustand befindet, aus dem Atom zu entfernen. Befindet sich das Elektron im Grundzustand ($n=1$), dann beträgt beim Wasserstoffatom der energetische Abstand bis zur Seriengrenze $n \rightarrow \infty$ 13.6 eV. Dieser Energiebetrag wird als Ionisationspotential (oder als 1. Ionisationsenergie) bezeichnet:

$$E_p = E_\infty - E_1 \quad [1.92]$$

Mit größer werdenden n benötigt man offensichtlich immer weniger Energie, um ein Elektron aus der Elektronenhülle zu entfernen:

$$E_i = E_\infty - E_n \quad [1.93]$$

Der Verlauf der Ionisationsenergie für $n=1$ zeigt einige interessante Gesetzmäßigkeiten. Ihr Wert ist sehr gering für Alkalimetalle (ca. 5 eV, Na, K, Rb, Cs) und sehr hoch (zwischen 10 eV und ca. 25 eV) für Edelgase (He, Ne, Ar, Kr, Xe). Aus diesem Grund sind in fast allen Spektren mittlerer und später Spektraltypen Absorptionslinien von Alkalimetallen – z.T. in sehr starker Ausprägung – enthalten (z.B. die H und K-Linie des einfach ionisierten Kalziums CaII). Linien von Edelgasen – insbesondere He, treten dagegen nur in sehr heißen Sternen (Spektraltyp O und B) bzw. in den Spektren heißer Chromosphären (wie z.B. im Flashspektrum der Sonne) auf.

„Freie“ Elektronen, wie man sie in Plasmen oder als Leitungselektronen in Metallen antrifft, können jeden Energiewert annehmen. Im Unterschied zu den Bindungszuständen in Atomen spricht man hier von Kontinuumszuständen.

Mit diesem sehr einfachen Modell lassen sich bereits ein paar wichtige Begriffe qualitativ erklären:

Anregung

Ein „angeregtes“ Atom ist ein Atom, bei der durch Energiezufuhr (z.B. durch Absorption eines Photons) ein Elektron aus dem Energieniveau E_n auf ein Energieniveau E_m mit $m > n$ angehoben wurde. Dort verweilt es für kurze Zeit (im Mittel ca. 10^{-8} s) und „springt“ danach unter Aussendung eines Lichtquants

$$h\nu = E_m - E_n \quad [1.94]$$

wieder auf das Ausgangsniveau zurück.

Ionisation

Ist die dem Elektron zugeführte Energie größer als die zum entsprechenden Energieniveau gehörende Ionisationsenergie, dann kann das Elektron den Atomverbund verlassen und energetisch einen Kontinuumszustand einnehmen. Es entsteht ein ionisiertes Atom, welches eine positive Ladung aufweist wobei der Ladungsüberschuß identisch ist mit der Anzahl der fehlenden Hüllenelektronen. In der Astrophysik ist es üblich, Ionisationszustände durch eine angehängte römische Ziffer an das Elementesymbol zu kennzeichnen wobei die Ziffer I für den nichtionisierten Zustand reserviert ist (deshalb neutraler Wasserstoff HI, ionisierter Wasserstoff HII).

Rekombination

Ein ionisiertes Atom existiert normalerweise nur eine begrenzte Zeit und zwar solange, bis es aus seiner Umgebung wieder ein freies Elektron „eingefangen“ hat. Dieser Vorgang, der die effektive Ladung des Atoms wieder um eine Einheit verringert, bezeichnet man als Rekombination.

Es zeigte sich schnell, daß das ursprüngliche Bohrsche Atommodell nur das Wasserstoffatom einigermaßen befriedigend zu beschreiben vermag. Es versagt z.B. völlig bei Mehrelektronen-

Physikalische Grundlagen der Sternspektroskopie

systemen. Deshalb wurden von ARNOLD SOMMERFELD auf eine semiklassischen Art und Weise weitere Quantenzahlen eingeführt, um gewisse spektrale Besonderheiten (z.B. Linienaufspaltungen) zu erklären. Im Einzelnen handelt es sich dabei (inklusive der Hauptquantenzahl n) um folgende Quantenzahlen:

n	Hauptquantenzahl	$n=\{1,2,3,\dots,\infty\}$	Energieniveaus
l	Nebenquantenzahl	$l=\{0,1,2,\dots,n-1\}$	Bahndrehimpuls der e^-
m	Magnetische Quantenzahl	$m=\{-1,\dots,1\}$	(räumliche Ausrichtung des Gesamtdrehimpulsvektors bei Vorhandensein eines äußeren Magnetfeldes, Richtungsquantelung)
s	Spinquantenzahl	$e^- \rightarrow s=\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$	Orientierung des Elektronen-Spins
J	Rotationsquantenzahl		Molekülspektroskopie
v	Schwingungsquantenzahl		Molekülspektroskopie

Eine bestimmte Kombination dieser Quantenzahlen für ein Atom mit der Kernladungszahl Z charakterisiert jeweils ein bestimmtes Energieniveau in diesem Atom. Es wird in diesem Zusammenhang oft auch als Term bezeichnet. Die graphische Darstellung aller Terme eines neutralen Atoms, eines Ions oder eines Moleküls, nennt man deshalb Termschema oder – nach dem deutschen Astronomen WALTER GROTRIAN (1890-1954) – ein Grotrian-Diagramm. In diesem Diagramm werden die Wellenzahlen der Terme gewöhnlich über die diskreten Bahndrehimpulse aufgetragen. Die Wellenzahl $\bar{\nu}$ gibt dabei die Anzahl der Lichtwellen pro Längeneinheit (m) im Vakuum an ($\bar{\nu} = \nu/c_0$) und ist ein Maß für die Energie. Manchmal verwendet man aber auch direkt das Elektronenvolt (eV) als Einheit für die Ordinate.

Für Mehrelektronensysteme können Grotrian-Diagramme eine sehr komplizierte Struktur annehmen.

Der Übergang zwischen zwei Termen unterschiedlicher Energie führt zur Emission oder Absorption jeweils eines Lichtquants, dessen Energie $E = h\nu$ genau der Energiedifferenz dieser Terme entspricht. Im Diagramm werden die möglichen (d.h. durch Auswahlregeln erlaubten) Übergänge durch Linien zwischen den Termen dargestellt und oftmals durch die Wellenlänge λ der beim Übergang emittierten Strahlung bezeichnet.

Ein Grotrian-Diagramm stellt demnach die Verbindung zwischen dem Linienspektrum und den atomphysikalischen Parametern her und ist deshalb ein gern verwendetes Hilfsmittel in der Astrophysik.

Das Wasserstoffatom

Wasserstoff ist mit nur einem Proton und einem Elektron das leichteste der chemischen Elemente. Ungefähr 75% der gesamten Masse im Kosmos wird durch Wasserstoffatome gebildet was bedeutet, daß rund 90% aller Atome Wasserstoffatome sind. Es tritt als neutraler atomarer Wasserstoff (HI), als molekularer Wasserstoff H_2 , als ionisierter Wasserstoff (p, HII) und in Form von molekularen Ionen (z.B. H_2^+) auf. Die elektromagnetische Strahlung, die Wasserstoffatome emittieren und absorbieren, ist eine der wichtigsten Informationsquellen der astronomischen Forschung. Deshalb sollen in diesem Abschnitt einige damit im Zusammenhang stehenden Fragen im Detail behandelt werden.

Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Ausgangspunkt für die quantenmechanische Behandlung des Wasserstoffatoms ist die Schrödingergleichung, die unter Verwendung des Hamilton-Operators $\hat{H}$ wie folgt geschrieben werden kann:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad [1.95]$$

wobei E die Energie und ψ die Wellenfunktion darstellt.

Ein Wasserstoffatom besteht aus einem Atomkern der Masse m_p und der Kernladungszahl Z und die Wechselwirkung zwischen dem positiv geladenen Atomkern Ze (e =Elementarladung) und dem Elektron erfolgt gemäß dem Coulombschen Gesetz

$$\mathbf{F} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \mathbf{r}_n \quad [1.96]$$

wobei n die Nummer der stationären Bahn kennzeichnet. Da es sich bei einem elektrischen Feld um ein konservatives Kraftfeld mit einem ortsabhängigen Potential handelt, folgt daraus für das Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad [1.97]$$

und damit entsprechend der Hamilton –Funktion $H = T + V(\mathbf{r})$ für den Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad [1.98]$$

(T = kinetische Energie $= \frac{p^2}{2m^*}$, Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$, $\Delta \equiv$ Laplace-Operator)

Da es sich bei dem Wasserstoffatom um ein Zweiteilchensystem handelt, wurde für m in (1.98) die reduzierte Masse m^* gewählt:

$$m^* = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{1}{1836}\right) \quad [1.99]$$

m_e ist die Ruhemasse des Elektrons und m_p die Protonenmasse ($\sim 1836 m_e$).

Obwohl die Elektronenmasse nur einen Bruchteil der Protonenmasse ausmacht, ist die Einführung von (1.99) wichtig. Sie erlaubt die Erfassung der Unterschiede in den Spektren von Wasserstoff und Deuterium, die sich bereits bei mittlerer spektraler Auflösung klar erkennen lassen.

Damit kann entsprechend (1.95) die Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom wie folgt aufgeschrieben werden:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 r} - E \right] \psi(r) = 0 \quad [1.100]$$

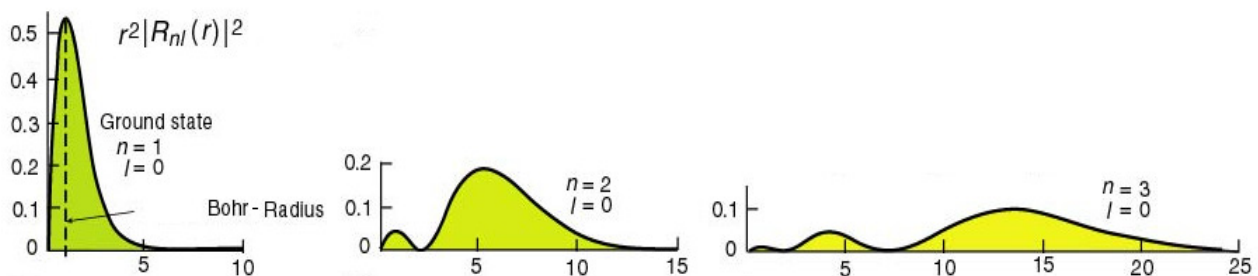
Diese Gleichung läßt sich bei Einführung von Kugelkoordinaten analytisch lösen, wobei die Lösungen aus einem radialen Anteil und einem winkelabhängigen Anteil bestehen:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad [1.101]$$

Y_{lm} stellen dabei Kugelflächenfunktionen dar; n , l und m sind die bereits aus dem Bohr-Sommerfeldschen Atommodell bekannten Quantenzahlen.

Das (normierte) Quadrat dieser Funktion beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron in dem durch die Quantenzahlen n , l und m angegebenen Zustand an der Position r, ϑ, φ aufzufinden. Dabei wird das Raumgebiet, in dem sich das Elektron mit einer Wahrscheinlichkeit von $2/3$ aufhält, gewöhnlich (insbesondere in der Chemie) als Orbital bezeichnet.

Die Radialwellenfunktion hängt nur von der Hauptquantenzahl n und der Nebenquantenzahl l (die mit dem Bahndrehimpuls verknüpft ist) ab und ihr Quadrat gibt das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in radialer Richtung vom Atomkern an.

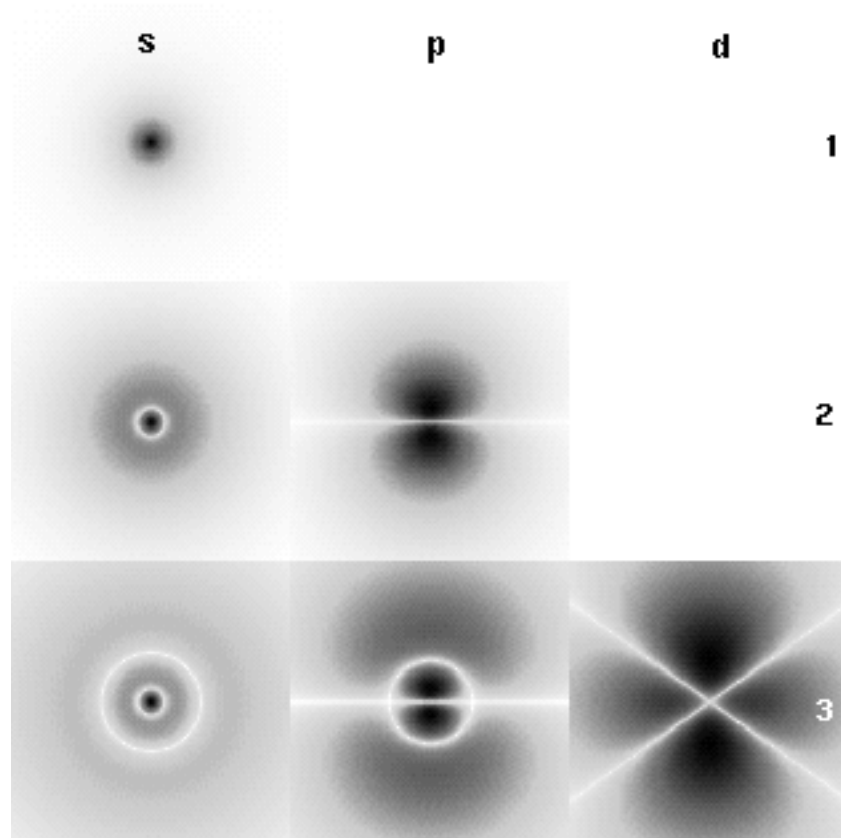


Radiale Elektronendichteverteilung für verschiedene Zustände des Wasserstoffatoms

Im Grundzustand $n=0$, $l=0$ entspricht ihr Maximum genau dem Radius der 1. Elektronenbahn im klassischen Bohrschen Atommodell („Bohr-Radius“):

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m^*e^2} \approx 0.0529 \text{ nm} \quad [1.102]$$

Der räumliche Anteil der Wellenfunktion (er hängt von der Nebenquantenzahl l und der magnetischen Quantenzahl m ab) ist komplizierter und führt zusammen mit dem radialen Anteil zu folgenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen:



Die Graustufen geben die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron in dem dargestellten Raumbereich anzutreffen. Je dunkler die Farbe, desto höher die Wahrscheinlichkeit.

Die Nebenquantenzahlen l werden historisch durch Kleinbuchstaben bezeichnet, die folgende Bedeutung haben:

s	$l=0$	“sharp”
p	$l=1$	“principal”
d	$l=2$	“diffuse”
f	$l=3$	“fundamental”

Die Begriffe “sharp” usw. stammen ursprünglich aus der Spektroskopie und haben dort das Aussehen bestimmter Spektrallinien beschrieben.

Untersucht man das Spektrum der Energieeigenwerte der Lösungsfunktionen (1.101) der Schrödingergleichung, dann erhält man für gebundene Zustände ($E < 0$) folgende diskrete Werte:

$$E_n = -\frac{m^* Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad [1.103]$$

Der Vorfaktor stellt die von dem schwedischen Physiker JOHANNES ROBERT RYDBERG (1854-1919) empirisch eingeführte Konstante mit dem Wert

$$R_H = \frac{m^*}{m_e} R_\infty = 1.09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad [1.104]$$

dar, die man in der Spektroskopie als Rydberg-Konstante bezeichnet.

Wie man an (1.103) sieht, hängt die Energie eines Zustandes nur von der Hauptquantenzahl n ab. Es läßt sich weiterhin zeigen, daß es im Wasserstoffatom zu jedem Energieeigenwert $E_n \rightarrow n^2$ Eigenzustände mit der gleichen Energie, aber mit einer jeweils unterschiedlichen Kombinationen der Quantenzahlen l und m gibt. Man spricht in diesem Fall von einer Entartung der Energiezustände.

Das Wasserstoffspektrum

Kombiniert man (1.103) mit der Bohr'schen Frequenzbedingung (1.91), dann läßt sich unter Verwendung der Rydbergkonstante eine geschlossene Formel für das Wasserstoffspektrum aufschreiben:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \text{mit } n < m \quad [1.105]$$

Mit $n=2$ kann sofort das Ergebnis von JOHANN JAKOB BALMER (1825-1898) aus dem Jahre 1885 reproduziert werden:

$$\lambda = C \left(\frac{m^2}{m^2 - 4} \right)$$

Läßt man den Laufterm m alle ganzen Werte $m > 2$ durchlaufen, dann erhält man die Wellenlängen aller Linien der sogenannten Balmer-Serie, deren Absorptionen das Spektrum von A-Sternen dominieren.

Termschema von Wasserstoff

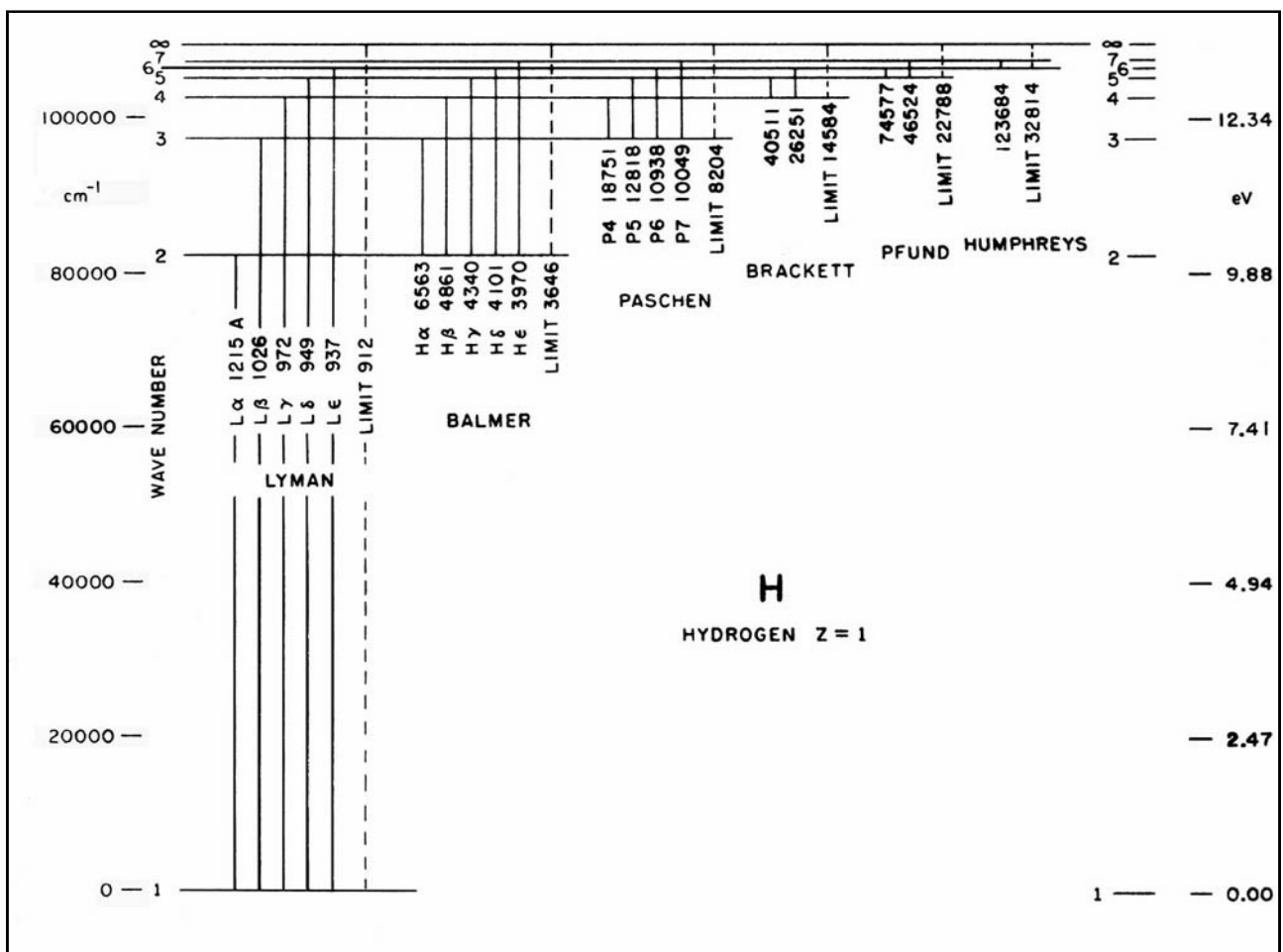
Aus (1.105) kann jetzt recht einfach das Termschema des Wasserstoffatoms konstruiert werden. Man erkennt – wie es (1.103) auch impliziert –, daß die energetischen Abstände für anwachsendes n immer geringer werden bis bei $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n = 0$ der Übergang zu positiven Kontinuumszuständen erreicht ist.

Die Übergänge zu den untersten Niveaus bilden Linienserien, die jeweils mit einem eigenen Namen versehen sind. Für die Astrophysik sind besonders die Lyman-Serie im ultravioletten und die Balmer-Serie im sichtbaren Spektralbereich von Bedeutung. Serien mit größeren n als Zwei findet man

in Absorption bei einigen weichen Röntgenquellen und in Infrarotspektren von Supernovaausbrüchen wie z.B. 1987A.

n	Name	Bezeichner	Spektralbereich	Bereich in nm
1	Lyman-Serie	Ly	UV	121.5 – 91.2
2	Balmer-Serie	H	sichtbar	656.3 – 364.6
3	Paschen-Serie	P	IR	1875.1 – 820.4
4	Brackett-Serie	Br	IR	4051.1 – 1458.4
5	Pfund-Serie	Pf	IR	7457.7 – 2278.8
6	Humphreys-Serie	Hu	IR	12368.4 – 3281.4

Es ist üblich, die wichtigsten individuellen Übergänge zusätzlich noch durch griechische Buchstaben zu bezeichnen. Die Linie H_α ist demnach der Übergang mit $\Delta n=1$ der Balmerserie. Die analoge Linie im UV-Spektrum des Wasserstoffs wird demnach mit Ly_α und die zweite Linie ($\Delta n=2$) mit Ly_β bezeichnet usw.



Grotrian-Diagramm von atomarem Wasserstoff

Feinstruktur der Spektrallinien

Beobachtet man z.B. die H_α -Linie bei sehr hoher spektraler Auflösung (z.B. mit einem Fabry-Perot-Interferometer), dann erkennt man, daß diese Linie in Wirklichkeit aus zwei eng benachbarten Linien (einem Dublett) besteht: man sagt, die Spektrallinie weist eine Feinstruktur auf.

Diese Feinstrukturaufspaltung findet man bei fast allen Spektrallinien und stellt einen relativistischen Effekt dar, an dem der Elektronenspin maßgeblich beteiligt ist. Sie läßt sich deshalb aus der speziell-relativistischen Dirac-Gleichung deduzieren.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten der Wechselwirkung des Elektronenspins mit anderen Quellen von Drehimpuls in einem Atom. Die wichtigste davon ist die Wechselwirkung des Elektronenspins (dargestellt durch den Vektor $\mathbf{s}$) mit dem Bahndrehimpuls $\mathbf{l}$ (Spin-Bahn-Kopplung). Der Gesamtdrehimpuls ergibt sich in diesem Fall aus der vektoriellen Addition dieser beiden Größen und wird mit $\mathbf{j}$ bezeichnet:

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s} \quad [1.106]$$

Berücksichtigt man jetzt noch den Kernspin $\mathbf{i}$, dann ergibt sich für den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{f}$ des Atoms

$$\mathbf{f} = \mathbf{j} + \mathbf{i}$$

Quantenmechanische Drehimpulse können nicht beliebige Werte annehmen. Bei einem Einelektronensystem sind z.B. für den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j}$ nur die Werte $|\mathbf{j}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$ mit $j = l \pm s$ erlaubt. Das führt im Fall des Wasserstoffatoms zu folgender Aufspaltung der nl-Orbitale:

Elektronen-Konfiguration	l	s	j	
ns	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$ns_{\frac{1}{2}}$
np	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$np_{\frac{1}{2}}, np_{\frac{3}{2}}$
nd	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$	$nd_{\frac{3}{2}}, nd_{\frac{5}{2}}$
nf	3	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}, \frac{7}{2}$	$nf_{\frac{5}{2}}, nf_{\frac{7}{2}}$

Danach besitzen alle Terme des Wasserstoffatoms mit Ausnahme der s-Orbitale Dublettcharakter.

Während im nichtrelativistischen Fall die Energie eines Zustandes nur von der Hauptquantenzahl n abhängt, gilt dieser Satz bei der Berücksichtigung relativistischer Effekte, wie es der Spin darstellt, offensichtlich nicht mehr.

Bei astronomischen Anwendungen wird der Effekt der Feinstrukturaufspaltung i.d.R. durch andere Effekte wie Druckverbreiterung der Spektrallinien überdeckt und hat damit zumindest bei

Untersuchungen im optischen und infraroten Spektralbereich nur eine geringe Bedeutung (Ausnahme sind Sterne mit starken Magnetfeldern). Bei der Untersuchung der Verteilung von neutralen Wasserstoff im kosmischen Raum hat dagegen ein weiterer Effekt, die sogenannte Hyperfeinstrukturaufspaltung des $1s_{\frac{1}{2}}$ -Zustandes im Wasserstoffatom, eine überragende Bedeutung, da sie zur Emission der 21 cm-Radiowellenstrahlung führt, die radioastronomisch leicht zu beobachten ist.

Nicht alle denkbaren Übergänge zwischen Feinstrukturniveaus unterschiedlichen n sind möglich. Sie werden vielmehr durch Auswahlregeln eingeschränkt, die sich vollständig aus dem quantenmechanischen Formalismus ergeben. Für die astronomisch bedeutsamen Dipol-Übergänge im Wasserstoffatom sind das im Einzelnen:

Δn zwischen verschiedenen n sind alle Übergänge erlaubt

$$\Delta l = \pm 1$$

$\Delta s = 0$ (diese Bedingung ist im Wasserstoffatom wegen $s = 1/2$ immer erfüllt)

$$\Delta j = \{0, +1, -1\}$$

$\Delta m_j = \{0, +1, -1\}$ wichtig bei Vorhandensein eines Magnetfeldes (bedeutsam für den Zeeman-Effekt)

Bei sogenannten Multipolübergängen kommen weitere Auswahlregeln ins Spiel bei denen u.a. eine zusätzliche Quantenzahl - die Parität P - eine wichtige Rolle spielt.

Die Spektren der Alkalimetalle

Die Alkalimetalle oder die Elemente der ersten Hauptgruppe im Periodensystem (${}^3\text{Li}$, ${}^{11}\text{Na}$, ${}^{19}\text{K}$, ${}^{37}\text{Rb}$, ${}^{55}\text{Cs}$, ${}^{87}\text{Fr}$) zeichnen sich dadurch aus, daß sich in ihrer äußersten Hülle nur ein Elektron aufhält, welches man oft - da es im Wesentlichen für das Zustandekommen der Spektrallinien verantwortlich ist - als „Leuchtelektron“ bezeichnet. Es verhält sich bei Anregung ähnlich wie das Elektron im Wasserstoffatom so daß es zwischen dem Wasserstoffspektrum und den Alkalispektren starke Ähnlichkeiten gibt. Insbesondere lassen sich für die Linienserien geschlossene Ausdrücke ähnlich (1.105) aufschreiben. Im Gegensatz zum Wasserstoffatom können die Termdifferenzen jedoch nicht mehr in der Form

$$\frac{R_H}{n^2} - \frac{R_H}{m^2}$$

dargestellt werden, wo m und n ganze Zahlen sind. Das gelingt erst wieder, wenn man Korrekturgrößen (die für jedes Element spezifisch sind) einführt, welche durch die Überlappung des Valenzorbitals mit den anderen Orbitalen entstehen und im Wesentlichen von der Bahndrehimpulsquantenzahl l abhängen:

$$\frac{R_H}{1 + \sigma^2} - \frac{R_H}{1 + \xi^2}$$

σ und ξ bezeichnen diese Korrekturgrößen. Die wichtigsten Serien werden durch folgende Gleichungen dargestellt:

a) Hauptserie

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{(1 + s^*)^2} - \frac{1}{(n + p^*)^2} \right) \quad n = \{2, 3, 4, \dots\} \quad [1.107]$$

b) 1. und 2. Nebenserie

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{(2 + p^*)^2} - \frac{1}{(n + d^*)^2} \right) \quad n = \{3, 4, 5, \dots\} \quad [1.108]$$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{(1 + p^*)^2} - \frac{1}{(n + s^*)^2} \right) \quad n = \{2, 3, 4, \dots\} \quad [1.109]$$

c) Bergmann-Serie

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{(3 + d^*)^2} - \frac{1}{(n + f^*)^2} \right) \quad n = \{4, 5, 6, \dots\} \quad [1.110]$$

Die 1. und 2. Nebenserie bilden eine Folge von Spektrallinien, deren Linien meist paarweise zusammenliegen. Dabei erscheint die „s“-Linie scharf und die „d“-Linie diffus. Die Linien der Hauptgruppe wurde ursprünglich von den Spektroskopikern als „Prinzipalserie“ bezeichnet, was das Kürzel „p“ erklärt. Obwohl sich die Erklärung der Bergmann-Serie als „fundamentale“ Serie als Irrtum herausstellte, ist die Bezeichnung „f“ geblieben.

In den Gleichungen (1.107 - 8.110) werden diese Kürzel mit einem „*“ bezeichnet, was darauf hinweisen soll, daß es sich um keine echten Quantenzahlen handelt, sondern um reelle

Konstanten, die für jedes Alkalimetall charakteristisch sind. Ihr Wert nimmt mit wachsender Ordnungszahl zu (Li: $s^* \approx 0.4$, $p^* \approx 0$; Cs: $s^* \approx 0.87$, $p^* \approx 0.3$) wobei jedoch die d^* und f^* -Werte erst ab dem Element Rubidium merklich von 0 abweichen.

Setzt man diese Konstanten gleich Null, dann gehen die Serienspektren der Alkalimetalle in die Serien des Wasserstoffspektrums über. Die Hauptserie entspricht dann der Lyman-Serie, die 1. und 2. Nebenserie der Balmer-Serie und die Bergmann-Serie der Paschen-Serie.

Für die Bezeichnung der Terme in (1.107 - 8.110) hat sich folgende Nomenklatur durchgesetzt: {Laufzahl}{Großbuchstabe der „effektiven“ Quantenzahl}

(1.107)	1S - nP
(1.108)	2P - nD
(1.109)	1P - nS
(1.110)	3D - nF

Diese Bezeichnungsweise stammt ursprünglich von HENRY NORRIS RUSSELL (1877-1957) und FREDERICK A. SAUNDERS und wird jetzt - mit einigen Ergänzungen, s.u. - zur quanten-mechanischen Beschreibung von Elektronenzuständen allgemein verwendet.

Atome mit mehreren Elektronen

Die quantenmechanische Beschreibung von Atomen mit mehreren Elektronen ist komplizierter, da man beispielsweise die Wechselwirkung der Elektronen untereinander in der Elektronenhülle des Atoms berücksichtigen muß. Das führt zu einigen neuen Effekten und zu im Vergleich zum Wasserstoffatom sehr komplexen Termdiagrammen. Unter Berücksichtigung des Pauliprinzips (nachdem in einem Atom keine zwei Elektronen in ihren Quantenzahlen übereinstimmen dürfen) ergibt sich darüber hinaus aus einer eingehenden Analyse der Elektronenhülle von neutralen Atomen unterschiedlicher Kernladungszahl Z eine natürliche Erklärung des Periodensystems der Elemente und wie sich darin bestimmte chemische Eigenschaften von Element zu Element verändern. Die Quantentheorie der Atomhülle bildet deshalb die theoretische Grundlage der Chemie als Wissenschaft.

Genauso wie im Wasserstoffatom kann der Zustand eines Elektrons in einem Atom mit mehreren Elektronen durch die Quantenzahlen n , l , s und m eindeutig festgelegt werden. Da jetzt aber aufgrund der erweiterten Kombinationsmöglichkeiten der Bahn- und Eigendrehimpulse der Elektronen der Drehimpulszustand des Gesamtatoms komplexer wird (siehe Folgekapitel), werden auch dessen Energieeigenwerte subtiler von der Kombination dieser Größen abhängen. Insbesondere lassen sich keine allgemeine Seriengesetze mehr angeben, wenn das Atom mehr als ein Valenzelektron besitzt. Dabei versteht man unter Valenzelektronen die Elektronen, die sich in den äußersten Orbitalen aufhalten. Sie haben gewöhnlich als sogenannte „Bindungselektronen“ eine große Bedeutung bei der Ausbildung von Bindungen zwischen den Atomen.

Je nachdem wie viele Valenzelektronen ein Atom besitzt, spricht man von Zwei -, Drei - oder Vierelektronensystemen (usw.). Die Anzahl der Valenzelektronen korrespondiert dabei mit der Gruppennummer des entsprechenden (neutralen) Atoms im Periodensystem der Elemente.

Alle in einer waagerechten Reihe angeordneten Elemente gehören zu jeweils einer Periode, da sich die Veränderung der chemischen Eigenschaften in jeder dieser Reihen in gleicher oder ähnlicher Weise wiederholt. Diese Gesetzmäßigkeit wurde z.B. von DIMITRI IWANOWITSCH MENDELEJEV (1834-1907) (der unabhängig von JULIUS LOTHAR VON MEYER (1830-1895) das Periodensystem entwickelt hat) ausgenutzt, um damals noch unbekannte Elemente und deren Eigenschaften vorherzusagen.

Das Periodensystem der Elemente beruht im Wesentlichen auf drei quantenmechanischen Prinzipien, welche für die Anordnung der Elektronen in einem Atom der Kernladungszahl=Ordnungszahl Z verantwortlich sind. Neben dem bereits behandelten Beziehungen zwischen den Quantenzahlen n , l und s gehören dazu das Pauli-Prinzip und die vier Hundschen Regeln.

Im niedrigsten Zustand mit der Hauptquantenzahl $n=1$ können sich nur $2n^2$ Elektronen befinden. Das erklärt, daß die erste Periode durch genau zwei Elemente - Wasserstoff und Helium - repräsentiert wird, die wegen $l = n - 1 = 0$ nur s-Orbitale ausbilden. Bei $n=2$ sind bereits 8 Elektronenzustände möglich, welche den Elementen Lithium ($Z=3$) bis Neon ($Z=10$) entsprechen. Die möglichen

Physikalische Grundlagen der Sternspektroskopie

Nebenquantenzahlen sind $l=0$ und $l=1$, d.h. bei diesen Elementen findet man sowohl s- als auch p-Orbitale. Wie sehen nun die Elektronenkonfigurationen im Einzelnen aus? Ein Lithiumatom ist quasi ein Helium-Atom, dem im Kern ein Proton und in der Hülle ein Elektron hinzugefügt wurde. Dieses Elektron besetzt das 2s-Orbital so daß man als Elektronenkonfiguration $1s^2 2s$ erhält (die Hochzahl gibt die Anzahl der Elektronen >1 in dem jeweiligen Zustand an). Fügt man diesem Atom ein weiteres Proton und ein Elektron hinzu, dann erhält man Beryllium, dessen zusätzliches Elektron auch vom 2s - Orbital aufgenommen wird: $1s^2 2s^2$. Bei Bor mit der Ordnungszahl 5 wird das erste p-Orbital belegt und die Elektronenkonfiguration ist $1s^2 2s^2 2p$. Bei den nächsten Elementen der 2. Periode kommt die Hundsche Regel ins Spiel und zwar in der Form, daß jedes der $m=\{-1, \dots, 1\}$ p-Orbitale ($m=\{0, \pm 1\}$) zuerst halb besetzt wird. Daraus ergibt sich z.B. für Stickstoff ($Z=7$) die Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^3$ und für Sauerstoff ($Z=8$) $1s^2 2s^2 2p^4$. Die volle Besetzung der p-Orbitale wird schließlich bei Neon ($Z=10$) erreicht: $1s^2 2s^2 2p^6$. Es ist mit 8 Außenelektronen ein Edelgas.

Gruppe		Ordnungszahl																VIIIa			
Ia																		VIIa			
1	1,008																	2	4,003		
H	Wasserstoff																	He	Helium		
IIa																					
3	6,941	4	9,012															9	18,998		
Li	Lithium	Be	Beryllium															F	Fluor		
11	22,990	12	24,312															17	35,453		
Na	Natrium	Mg	Magnesium															Cl	Chlor		
19	39,10	20	40,08	21	44,96	22	47,90	23	50,94	24	52,00	25	54,94	26	55,84	27	58,93	28	58,71		
K	Kalium	Ca	Kalzium	Sc	Scandium	Ti	Titan	V	Vanadium	Cr	Chrom	Mn	Mangan	Fe	Eisen	Co	Kobalt	Ni	Nickel		
37	85,47	38	87,62	39	88,91	40	91,22	41	92,91	42	95,94	43	(98)	44	101,07	45	102,91	46	106,4		
Rb	Rubidium	Sr	Strontium	Y	Yttrium	Zr	Zirkon	Nb	Niob	Mo	Molybdän	Tc	Technetium	Ru	Ruthenium	Rh	Rhodium	Pd	Palladium		
55	132,91	56	137,34	57	138,91	72	178,48	73	180,95	74	183,85	75	186,2	76	190,2	77	192,2	78	195,1		
Cs	Cäsium	Ba	Barium	La	Lanthan	Hf	Hafnium	Ta	Tantal	W	Wolfram	Re	Rhenium	Os	Osmium	Ir	Iridium	Pt	Platin		
87	(223)	88	(226)	89	(227)	104	(261)	105	(262)												
Fr	Francium	Ra	Radium	Ac	Actinium	Rf	Rutherfordium	Ha	Hahnium												
58	140,12	59	140,91	60	144,24	61	(145)	62	150,36	63	151,96	64	157,25	65	158,93	66	162,50	67	164,93		
Ce	Cer	Pr	Praseodym	Nd	Neodym	Pm	Promethium	Sm	Samarium	Eu	Europium	Gd	Gadolinium	Tb	Terbium	Dy	Dysprosium	Ho	Holmium		
90	(237)	91	(231)	92	(238)	93	(237)	94	(244)	95	(243)	96	(247)	97	(247)	98	(249)	99	(254)		
Th	Thorium	Pa	Protactinium	U	Uran	Np	Neptunium	Pu	Plutonium	Am	Amerikium	Cm	Curium	Bk	Berkelium	Cf	Californium	Es	Einsteinium		
102	(258)	103	(260)	104	(261)	105	(262)	106	(263)	107	(264)	108	(265)	109	(266)	110	(267)	111	(268)		
Uu	Ununseptium	Uub	Unbibium	Uut	Untriseptium	Uuq	Unquadrupium	Uup	Unpentium	Uuh	Unhexium	Uus	Unseptium	Uuo	Unoktium	Uu11	Unundecium	Uu12	Unbium		

Der Aufbau der dritten Periode erfolgt analog dem der zweiten Periode wobei es jedoch einen wesentlichen Unterschied gibt. Theoretisch könnte man annehmen, daß der Zustand $n=3$ insgesamt 18 Elektronen aufnehmen kann. Tatsächlich sind es aber wiederum nur 8. Der Grund dafür ist, daß die Nebenquantenzahl l den Wert 2 annimmt was bedeutet, daß die entsprechenden Atome d-Orbitale besitzen. Sie werden zwar nicht aufgefüllt, haben aber chemisch eine große Bedeutung bei der Ausbildung von Verbindungen.

Ab der 4. Periode werden nach und nach auch die d-Orbitale mit Elektronen gefüllt. Solange sie noch unvollständig besetzt sind oder sie Kationen mit unvollständiger d-Besetzung bilden können, spricht man von d- oder Übergangselementen. Es handelt sich dabei um die Elemente mit $Z=21$ (Sc) bis $Z=27$

(Co) und $Z=39$ (Y) bis 46 (Pa). In dieser Zusammenstellung findet sich auch das astronomisch wichtige Eisen ($Z=26$) mit seiner komplizierten Elektronen-Struktur und dem damit verbundenen spektralen Eigenschaften.

Nun noch ein paar Worte zu den Gruppen im Periodensystem. Als Hauptgruppen bezeichnet man die ersten beiden und die letzten sechs Spalten, die anderen als Nebengruppen. Die erste Hauptgruppe bilden (mit Ausnahme des Wasserstoffs, der aber unter extremen Druckbedingungen metallische Eigenschaften annehmen kann) die Alkalimetalle. Als zweite Hauptgruppe folgen die Erdalkalimetalle mit den für die astronomische Spektroskopie so wichtigen Element Kalzium. Sie besitzen außerhalb der abgeschlossenen Elektronenschalen (Edelgaskonfiguration) zwei s-Elektronen. Man findet sie deshalb oft als zweiwertige Ionen wie z.B. Mg^{++} , Ca^{++} . Die dritte Hauptgruppe ist durch eine abgeschlossene s-Schale und ein zusätzliches d-Elektron charakterisiert. Die dazugehörigen Elemente werden als Bor-Gruppe bezeichnet. Ihr folgt die Kohlenstoffgruppe mit den wichtigen Elementen Kohlenstoff und Silizium. Die fünfte Hauptgruppe bezeichnet man als Stickstoffgruppe und die Sechste als Sauerstoffgruppe. Danach folgen die Halogene und die - aufgrund ihrer abgeschlossenen Elektronenkonfiguration - reaktionsträgen Edelgase.

Elektronenkonfigurationen von Ionen

Wenn ein Atom in seiner Gesamtheit nicht mehr elektrisch neutral ist, dann bezeichnet man es als ein Ion. Im Gegensatz zur Chemie spielen in der Astrophysik Ionen mit negativer Überschußladung - sogenannte Anionen - nur eine untergeordnete Rolle. Eine Ausnahme ist das Wasserstoff-Anion H^- , welches einen äußerst wichtigen Beitrag zur Opazität der Sternmaterie kühler Sterne bis hin zur Sonne leistet.

Kationen sind dagegen Atome, welche Elektronen abgegeben haben und die damit eine positive Überschußladung besitzen.

Atome (und Moleküle) können durch verschiedene Prozesse ionisiert werden. Von sehr großer Bedeutung ist dabei die Stoßionisation, wo Elektronen bei inelastischen Stößen mit anderen Atomen oder Ionen (aber auch einzelnen Elementarteilchen) aus dem Atomverbund herausgetrennt werden. Ist dabei der Stoßpartner ein entsprechend energiereiches Photon, dann spricht man auch von Photoionisation. Die Energie, die bei solch einem Ionisationsvorgang vom Stoßpartner aufzubringen ist, muß größer oder gleich der Ionisations-energie des herauszulösenden Elektrons sein.

Wenn zwei Atome bzw. Ionen unterschiedlicher Kernladungszahl Z die gleiche Elektronenkonfiguration aufweisen (was ja durch einen Ionisationsvorgang erreicht werden kann), dann spricht man von isoelektronischen Elektronenkonfigurationen. Beispielsweise besitzen das zweifach ionisierte Beryllium Be^{++} und das neutrale Helium He die gleiche Elektronenkonfiguration $1s^2$, was auch ihre Spektren ähnlich macht. Ganz allgemein gilt, daß (zumindest für Atome mit kleinen Z) isoelektronische Atome und Ionen sehr ähnliche Spektren besitzen, da sie sich nicht in ihrer Elektronenkonfiguration, sondern hauptsächlich in ihrer effektiven Kernladung unterscheiden. So besitzen die wasserstoffartigen Ionen He^+ , Li^{++} und Be^{3+} auch wasserstoffähnliche Spektren. Genauso findet man Ähnlichkeiten zwischen dem neutralen Helium und den Ionen Li^+ , Be^{++} und B^{3+} ,

die deshalb auch als heliumartige Ionen bezeichnet werden. Diese Reihe lässt sich natürlich fortsetzen. Allen ist gemeinsam, daß sich die äußeren Elektronen jeweils in einem elektrischen Feld der effektiven Ladung $Z_{\text{eff}} = Z - N + 1$ bewegen, wobei $N < Z$ die Anzahl der Elektronen im Ion sind. Die Energieniveaus und damit auch die Übergangsfrequenzen verschieben sich proportional der Größe Z_{eff}^2 . Deshalb machen sich Unterschiede besonders in den Spektren komplexerer Ionen bemerkbar.

Die allermeisten Absorptionslinien in den Spektren der Sterne entstehen bei Übergängen teilionisierter Atome. Welcher Anteil sich davon bei einer gegebenen Temperatur in einem bestimmten Ionisationszustand befindet, wird durch die Saha-Gleichung beschrieben.

Russel-Saunders-Kopplung

Die Frage, wie man die Bahn- und Eigendrehimpulse der Elektronen in einem Atom kombinieren muß, um den Gesamtdrehimpuls zu erhalten, wurde auf eine halbklassische Art und Weise im sogenannten Vektormodell der Atomhülle erklärt. Dabei spielen nur die Außenelektronen eines Atoms eine Rolle, bei denen eine Kopplung zwischen den Drehimpulsen über eine Vektoraddition erreicht wird (entsprechend dem Pauliprinzip gilt für abgeschlossene Elektronenschalen jeweils $L=0$ und $S=0$). Bezeichnet $\mathbf{L}$ den Bahndrehimpuls und $\mathbf{S}$ den Eigendrehimpuls des Systems der i Außenelektronen gemäß

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i \quad \text{und} \quad \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i \quad [1.111]$$

dann gilt bei L/S-Kopplung

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad [1.112]$$

Damit läßt sich das Ergebnis (1.106) auch auf Atome mit mehreren Valenzelektronen verallgemeinern. Ein bestimmtes Wertepaar von L (stets ganzzahlig) und S (halb- oder ganz-zahlig je nach Elektronenzahl) bildet dabei jeweils einen Term, der eine analoge Bezeichnung erhält wie bei Einelektronensystemen nur daß die Bahndrehimpulsquantenzahl L mit Großbuchstaben bezeichnet wird:

L	0	1	2	3	4	5
S	P	D	F	G	H	

Jeder dieser Terme zerfällt unter der Voraussetzung $L \geq S$ in $r = 2S + 1$ Feinstruktur-niveaus mit jeweils verschiedenen J . In der Spektroskopie nennt man r die „Multiplizität“ des entsprechenden Terms:

$r=1$	$S=0$	Singulett
$r=2$	$S=1/2$	Dublett
$r=3$	$S=1$	Triplet
$r=4$	$S=3/2$	Quartett
...		

Beim Wasserstoffatom (einem Eielektronensystem) gilt die Auswahlregel $\Delta l = \pm 1$. Bei Mehrelektronensystemen muß sie auf $\Delta L = \{0, \pm 1\}$ erweitert werden wobei die Einschränkung $\Delta L = 0$ jedoch erst bei Elementen mit größeren Ordnungszahlen eine signifikante Rolle spielt.

Der Betrag des resultierende Bahndrehimpulses (1.111) kann selbst nur gequantelte Werte annehmen

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{L(L+1)} \hbar \quad [1.113]$$

wobei für die z-Komponente

$$\mathbf{L}_z = M_L \hbar \mathbf{k} \quad (\mathbf{k} \text{ Einheitsvektor in } z\text{-Richtung}) \quad [1.114]$$

mit $M_L = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L\}$ gilt (magnetische Quantenzahl des Mehrelektronensystems). Analoge Überlegungen gelten übrigens auch für den Gesamtspin $\mathbf{S}$ eines Mehrelektronensystems, wobei in diesem Fall für den Betrag des magnetische Spinnmoment $\mathbf{M}_S$

$$|\mathbf{M}_S| = 2\sqrt{S(S+1)} |\mu_B| \quad \mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_e} \quad \text{Bohrsches Magneton} \quad [1.115]$$

gilt.

Kombiniert man $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ entsprechend (1.112), dann ergibt sich für den resultierenden Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$ eines Systems aus i Valenzelektronen:

$$|\mathbf{J}| = \sqrt{J(J+1)} \hbar \quad \text{mit } J = L + M_S \geq 0 \quad [1.116]$$

und für dessen z-Komponente

$$\mathbf{J}_z = M_J \hbar \mathbf{k} \quad (M_J = -J, -J+1, -J+2, \dots, J-2, J-1, J) \quad [1.117]$$

Der Vektor $\mathbf{J}$ kann in bezug auf die z-Richtung nur die Lagen einnehmen, die den $2J+1$ -möglichen J_z -Werten entsprechen. Das wird deutlich, wenn man das Verhalten eines Atoms in einem äußeren Feld - z.B. einem Magnetfeld $\mathbf{B}$ - betrachtet. In diesem Fall spaltet sich das J -Niveaus in $(2J+1)$ -Niveaus unterschiedlicher Energie auf (bei fehlendem äußeren Feld haben sie alle die gleiche Energie). Man sagt, daß das Niveau mit der Quantenzahl J genau $(2J+1)$ -fach entartet ist.

In der Quantenphysik spricht man übrigens ganz allgemein von der Entartung eines Zustandes, wenn z.B. zu einem Energieeigenwert E_n mehrere Eigenfunktionen ψ_{nk} (mit $k = 1 \dots r$) gleicher Energie existieren, wobei r den Grad der Entartung angibt. Da unter Einwirkung eines äußeren Feldes die zu einem J -Wert gehörenden $2J+1$ Niveaus energetisch aufgespalten werden, kann man in einem derartigen Fall auch eine entsprechende Aufspaltung der davon betroffenen Spektrallinien beobachten. Führt die Einwirkung eines Magnetfeldes zu der Aufhebung der Entartung, dann spricht man vom Zeeman-Effekt während man analog dazu im Falle eines elektrischen Feldes vom Stark-Effekt spricht.

Letzterer ist ganz wesentlich für die Druckverbreiterung der Spektrallinien, die in Sternatmosphären entstehen, verantwortlich.

Dazu ein Beispiel. Die elektronische Zustand des Alkalimetalls Natrium ($Z=11$) ist ein s-Zustand und besitzt demnach keinen Bahndrehimpuls. Nach (1.112) ist $J=L+S=1/2$. Der angeregte Zustand $3p$ besitzt dagegen einen L-Wert von 1 und je nach relativer Orientierung der Vektoren $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ ergibt sich für den Betrag des Gesamtdrehimpulses entweder $J=3/2$ oder $J=1/2$. Das bedeutet, die beiden Zustände sind energetisch aufgespalten was im Spektrum zur NaD_1 und zur NaD_2 Linie bei $\lambda_1 = 589.5932 \text{ nm}$ bzw. $\lambda_2 = 588.9965 \text{ nm}$ führt.

Ein weiteres Merkmal eines Terms ist dessen Parität P . Es beschreibt das Verhalten einer Wellenfunktion gegenüber einer Inversion (Reflektion der Wellenfunktion am Ursprung, d.h. am Atomkern). Es gilt dabei (bei Vernachlässigung des Spins)

$$\psi(\mathbf{r}) = \pm \psi(-\mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \text{ Ortsvektor}) \quad [1.118]$$

Je nach dem, ob auf der rechten Seite das positive oder negative Vorzeichen gilt, spricht man von Zuständen gerader bzw. ungerader Parität. Sie läßt sich bei einer gegebenen Elektronenkonfiguration leicht berechnen, in dem man entsprechend (1.111) die Bahndrehimpulse l aufsummiert und das Vorzeichen der Beziehung

$$(-1)^{\sum_i l_i} \quad [1.119]$$

bestimmt. Auf die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Elektronen in einem Atom hat die Parität keinen Einfluß, jedoch auf die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Spektraltermen.

Das j-j -Kopplungsschema

Bei Atomen höherer Ordnungszahl (beginnend ungefähr bei Germanium, $Z=32$) müssen bei der Spin-Bahnkopplung verstärkt relativistische Effekte berücksichtigt werden. Das führt zu einem etwas anderen Kopplungsschema. Dazu betrachten wir den gesamten Drehimpuls des i -ten Elektrons $\mathbf{j}_i$, welcher sich aus der vektoriellen Addition seines Bahndrehimpulses $\mathbf{l}_i$ mit dem Eigendrehimpuls $\mathbf{s}_i$ ergibt:

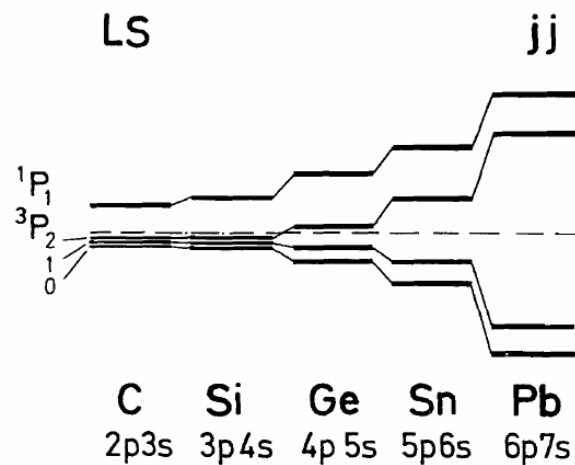
$$\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i \quad [1.120]$$

Den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$ des Atoms erhält man dann als Summe aller Drehimpulse der einzelnen Elektronen:

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i \quad [1.121]$$

Während man bei leichten Atomen $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ mit hoher Genauigkeit als Erhaltungsgrößen betrachten kann, ist das bei Atomen mit hoher Kernladungszahl nicht mehr der Fall, weil die Bahn-Spin-Wechselwirkung immer stärker wird und die Abweichungen zum nichtrelativistischen Grenzfall immer

deutlicher hervortreten. Die Auflösung der Entartung der Energieniveaus verstärkt sich mit wachsendem Z mehr und mehr, wie folgendes Termdiagramm zeigt:



Das erklärt auch, weshalb man in der Spektroskopie zwei verschiedene Kopplungsschemata benötigt.

Nomenklatur der Spektraltermen von Mehrelektronensystemen

Jeder Term in einem Grotrian-Diagramm lässt sich durch eine Kombination von Quantenzahlen eindeutig beschreiben. Im Fall der in der astronomischen Spektroskopie wichtigen L-S-Kopplung hat sich die folgende Notation zur Beschreibung eines Spektralterms (bzw. eines Energieniveaus) eingebürgert:

$$\text{Term} = {}^{2S+1}L^{\text{Parität}} \quad \text{Niveau} = {}^{2S+1}L_J^{\text{Parität}} \quad [1.122]$$

Der führende Index gibt offensichtlich den Entartungsgrad des Spin-Zustandes an, d.h. dessen Multiplizität. L wird durch große lateinische Buchstaben gekennzeichnet: ein S-Zustand ist ein Zustand mit L=0, ein P-Zustand ein Zustand mit L=1 usw. Die Parität wird gewöhnlich nur dann als rechter oberer Index - und zwar mit dem kleinen Buchstaben „o“ (für „odd“) - angegeben, wenn die Parität ungerade ist. Andernfalls lässt man ihn weg. Der Index J, welcher ein Maß für den Gesamtdrehimpuls ist, verwendet man nur zur Kennzeichnung eines Niveaus um dessen Entartung explizit aufzuschlüsseln. Das ist z.B. wichtig, wenn sich die strahlenden oder absorbierenden Atome in einem Magnetfeld befinden und es dabei zu der bekannten Zeeman-Aufspaltung der Spektrallinien kommt.

Das einfachste Mehrelektronensystem stellt das Heliumatom dar. Sein Grundzustand ist offensichtlich $1s^2$ und ist damit (wegen Z=2) abgeschlossen (Edelgas) woraus S=0 und L=0 folgt. Damit ergibt sich ein einzelner Term 1S mit dem Niveau gerader (positiver) Parität 1S_0 .

Der erste angeregte Zustand ist $1s2s$, für den sich entsprechend dem L-S-Schema L=0 sowie S=0 und S=1 ergibt. Der Singulett-Zustand hat demnach die Bezeichnung 1S und der Triplet-Zustand die Bezeichnung 3S . Die dazugehörigen Niveaus sind 1S_0 und 3S_1 , die einen energetischen Abstand von ca. 0.8 eV haben. An dieser Stelle greift eine der Hund'schen Regeln. Sie besagt, daß der Zustand mit

Folgende Regeln resultieren aus dem LS-Schema:

- $\Delta S = 0$ [1.124a-e]
- $\Delta L = \{0, -1, +1\}$
- $L = 0 \leftrightarrow 0$ ist verboten
- $\Delta l = \{-1, +1\}$ und $\Delta n = \text{beliebig}$ für Dipol-Übergänge
- $\Delta l = \{0, -2, +2\}$ und $\Delta n = \text{beliebig}$ für Quadrupol-Übergänge

Betrachten wir dazu die Auswirkung der Drehimpulserhaltung bei der Absorption eines Photons durch ein Atom. Befindet es sich im Grundzustand (Drehimpuls verschwindet) und absorbiert es in diesem Zustand ein Photon, dessen Drehimpuls parallel zur Quantisierungsachse orientiert ist, dann muß es auch dessen Drehimpuls genauso wie dessen Energie vollständig übernehmen (Drehimpuls- und Energieerhaltung). Das bedeutet, daß sich dieses Atom nach dem Absorptionsvorgang im gleichen Drehimpulszustand befindet wie das Photon vor dessen Absorption: $L=1$, $M_L=1$. Der Photonen spin kann bekanntermaßen die Werte $S=1$ mit $m=\{0, \pm 1\}$ annehmen (welche die orthogonalen Polarisationszustände eines klassischen elektromagnetischen Strahlungsfeldes bestimmen). Wählt man die Quantisierungsachse parallel zum Pointingvektor des Strahlungsfeldes, dann muß der Zustand $m=0$ verschwinden und das Strahlungsfeld ist transversal. Die zirkulären Polarisationszustände ergeben sich in diesem Bild durch eine Kombination der verbleibenden Spinzustände mit $m = \pm 1$. Die Konsequenz für das betrachtete Atom besteht darin, daß der Grundzustand nicht entartet ist während der angeregte Zustand aus drei Drehimpulszuständen besteht, die den Spinzuständen des Photons entsprechen. Bei der Wechselwirkung mit zirkular polarisierten Licht werden deshalb bei einem Absorptionsvorgang jeweils die Drehimpulszustände bevorzugt mit Elektronen bevölkert, dessen Drehimpuls gerade dem gesamten Drehimpuls (d.h. Grundzustand plus Photon) entspricht. Aus diesen Überlegungen folgen sofort die Auswahlregeln (1.124b und c) sowie (1.123b).

Für jj-Kopplung muß für eines der Elektronen

- $\Delta j = \{0, -1, +1\}$ [3.124f]

gelten.

Interkombinationslinien

Das Versagen der Russell-Saunders-Kopplung bei Elementen mit größerem Z äußert sich im Auftreten von sogenannten Interkombinationslinien in deren Spektren. Dabei handelt es sich um Übergänge zwischen Singulett- und Triplettzuständen mit $\Delta S = 0$ (z.B. Hg: $6^1S_0 \leftrightarrow 6^3P_1$ bei $\lambda = 253.7 \text{ nm}$), die gemäß der LS-Kopplung eigentlich verboten sind. Dieses ursprünglich aus Experimenten abgeleitete Verhalten wird als Interkombinationsverbot bezeichnet. Es verbietet optische Übergänge zwischen Energieniveaus unterschiedlicher Multiplizität. Das bedeutet natürlich nicht, daß es entsprechende Übergänge nicht gibt. Sie sind vielmehr metastabil, d.h. sie können gewöhnlich nicht über Strahlungsanregung besetzt werden da Photonen den Spinzustand nicht ändern können. Technisch haben sie in der Laserphysik eine große Bedeutung, wo sie für den Aufbau von Besetzungsinversionen verwendet werden.

In der Astronomie werden Interkombinationslinien durch das Ionensymbol des entsprechenden Elements gefolgt von einer (!) schließenden eckigen Klammer und der Wellenlänge der emittierten Strahlung gekennzeichnet:

Hg] (253.7 nm)

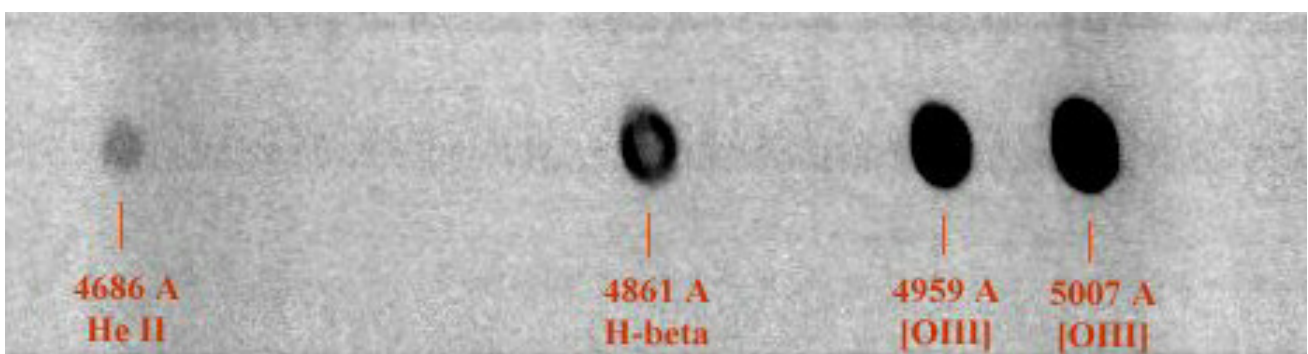
CIII] (190.87 nm)

Gewöhnlich werden in einem Grottrandiagramm derartige Übergänge durch eine gestrichelte Linie dargestellt.

Verbotene Linien

Die Verletzung der Regeln (1.124b-e) kann die Anzahl der möglichen Spektrallinien in Mehrelektronenspektren beträchtlich erhöhen. Da die Übergänge, die zu derartigen Linien führen, unter „normalen“ Laborbedingungen nicht auftreten, spricht man von „verbotenen Linien“. Unter kosmischen Bedingungen (hohe Temperaturen, äußerst geringe Gasdichten) können sie jedoch schnell in Spektren - z.B. von Planetarischen Nebeln oder von manchen kataklysmischen Veränderlichen - dominieren und damit eine große astrophysikalische Bedeutung erlangen (Energiebilanz, Kühlungsmechanismen interstellarer Gas- und Staubwolken).

Die An- und Abregung erfolgt in diesem Fall weniger unter der Einwirkung eines elektromagnetischen Feldes sondern in erster Linie durch Stoßprozesse (z.B. druckbedingte Stöße, Elektronenstreuung). Da die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den betroffenen Termen um etwa 10 Größenordnungen geringer sind als bei erlaubten Übergängen, können sich bei geringer Gasdichte und entsprechend geringer Stoßwahrscheinlichkeit die Elektronen auf diesen metastabilen Energieniveaus ansammeln. Aufgrund ihrer absoluten Häufigkeit entstehen so in einem großen Volumen bei der Abregung z.T. sehr intensive Emissionen. Aus ihrer Intensität lassen sich wertvolle Erkenntnisse über die Druck- und Temperatur-verhältnisse im jeweiligen Emissionsgebiet gewinnen.



Im grünen Teil des Spektrums erfolgt die maximale Emission des Planetarischen Nebels M57 (Ringnebel) durch verbotene Linien des zweifach ionisierten Sauerstoffatoms bei 495.9 und 500.7 nm

Verbotene Emissionen werden durch eckige Klammern, die den Namen des entsprechenden Ions umschließen, gekennzeichnet. z.B.

[OIII] (495.9 nm)

[CIII] (190.7 nm)

Verbotene Übergänge führen im Allgemeinen zu schwächeren Emissionslinien als Interkombinationsübergänge. In der Praxis werden aber beide Arten selten sauber getrennt.

Die in den Spektren planetarischer Nebel auftretenden Emissionen bei 495.9 nm und 500.7 nm wurden 1864 durch WILLIAM HUGGINS (1824-1910) entdeckt und von ihm einen neuen hypothetischen Stoff - dem Nebulium - zugeschrieben. Erst 1927 konnte der amerikanische Astrophysiker IRA SPRAGUE BOWEN (1898-1973) zeigen, daß es sich bei diesen intensiven Emissionen um verbotene Übergänge des O^{2+} -Ions handelt. Ähnliches ist auch über das „Coronium“ zu berichten, einem „Stoff“, den man lange Zeit in der Sonnenkorona vermutet hat bis Ende der dreißiger Jahre des vorigen Jahrhunderts BENGT EDLÉN (1906-1993) und WALTER GROTRIAN (1890-1954) auch diese Emissionen als „verbotene Linien“ identifizieren konnten.

Das Heliumspektrum und die Spektren heliumartiger Ionen

Helium ist das zweithäufigste Element im Kosmos. Trotzdem wurde dieses Edelgas erst relativ spät (1895) von WILLIAM RAMSAY (1852-1916) entdeckt, der es als Gas aus einem Uranmineral extrahierte (Helium-Atome entstehen beim α -Zerfall radioaktiver Elemente und Isotope). Das liegt u.a. daran, daß es auf der Erde recht selten ist. Es wird technisch i.d.R. aus Erdgas extrahiert. Interessant ist, daß eine Spektrallinie im gelben Bereich des optischen Sonnenspektrums bereits einige Jahre vor RAMSAY (1868) von PIERRE JANSEN und kurz danach von NORMAN LOCKYER (1836-1920) im Flashspektrum entdeckt und einem noch unbekannten Stoff - eben dem Helium - (Sonnenstoff) zugeordnet wurde.

Die Elektronenstruktur von Helium ist im Grundzustand $1s^2$ und stellt die stabilste Edelgaskonfiguration der Elemente im Periodensystem dar. In bezug auf ein Elektron im Grundzustand kann das andere Elektron, das sich in einem höheren energetischen Zustand befindet, seinen Spin entweder parallel ($S=1$) oder antiparallel ($S=0$) zum Grundzustandselektron ausrichten. Für diese beiden Konfigurationen hat sich die Bezeichnung Parahelium (für $S=0$) und Orthohelium (für $S=1$) eingebürgert. Aufgrund des Pauli-Verbots können sich nur im Parahelium beide Elektronen gleichzeitig im $1s$ -Zustand aufhalten.

Die Spektren von Ortho- und Parahelium unterscheiden sich relativ stark voneinander so daß man anfänglich sogar von zwei verschiedenen Stoffen ausgegangen ist. So sind die Linien des Orthoheliums wegen $S=1$ und der Spin-Bahn-Wechselwirkung immer Triplets während Übergänge im Parahelium zu keiner Feinaufspaltung der entsprechenden Linien führen. Außerdem liegen die Terme des Triplett-Systems energetisch tiefer als beim Parahelium so daß sich schon hieraus gravierende Unterschiede in den Spektren ergeben. Die Ursache dafür liegt in den Symmetrieeigenschaften der Gesamtwellenfunktionen der entsprechenden Atome. Deshalb entstehen aufgrund der Spinerhaltung

(Interkombinationsverbot) auch zwei unabhängige Spektralserien, die im Wesentlichen im UV und im IR angesiedelt sind.

Beim Helium beobachtet man zum ersten Mal auch metastabile Zustände. Es handelt sich dabei um Zustände, aus denen heraus die Möglichkeit eines Übergangs in den energetisch bevorzugten Grundzustand quasi nicht existiert. Es handelt sich dabei z.B. um den Term 2^1S_0 im Parazustand und um den 2^3S_1 -Term im Orthozustand. Entsprechende Elektronenzustände können aufgrund der Auswahlregel für L (1.124) und aufgrund des Interkombinationsverbots nicht auf herkömmliche Art und Weise in den Zustand 1^1S_0 überführt werden. (verbotener Übergang). Es gibt aber trotzdem Möglichkeiten, die sehr hohe Lebensdauer derartiger metastabiler Zustände abzukürzen und zwar durch Stöße mit anderen Atomen oder freien Elektronen. Für derartige Wechselwirkungen gelten die Auswahlregeln für elektronische Übergänge nicht mehr.

Helium tritt im Kosmos häufig in ionisierter Form in Erscheinung und zwar als einfach ionisiertes HeII oder als vollständig ionisiertes HeIII. Letzteres wird auf der Erde als Ergebnis eines α -Zerfalls eines radioaktiven Atoms beobachtet. Wie zu erwarten, besitzt HeII ein weitgehend wasserstoffähnliches Linienspektrum mit dem Unterschied, daß aufgrund von $Z=2$ die Bindung des Elektrons an den Kern um ca. Z^2 stärker ist als beim neutralen Wasserstoffatom. Der Übergang, der beim Wasserstoff zur $Ly\alpha$ -Linie führt und damit zur Emission eines Photons der Wellenlänge 121.6 nm (UV), führt beim einfach ionisierten Helium zu einem Lichtquant der Wellenlänge 30.4 nm (EUV). In Absorption findet man die korrespondierende Linie z.B. im UV-Spektrum der interstellaren Materie wo sie ein wichtiger Indikator zur Bestimmung der Heliumhäufigkeit im Kosmos außerhalb der Sterne ist.

Analog zu (1.105) läßt sich für HeII auch eine Serienformel für die Übergänge im optischen Bereich des elektromagnetischen Spektrums angeben, aus der sich näherungsweise die Wellenlängen der Spektrallinien berechnen lassen:

$$\frac{1}{\lambda} = 4R_{He} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad [1.125]$$

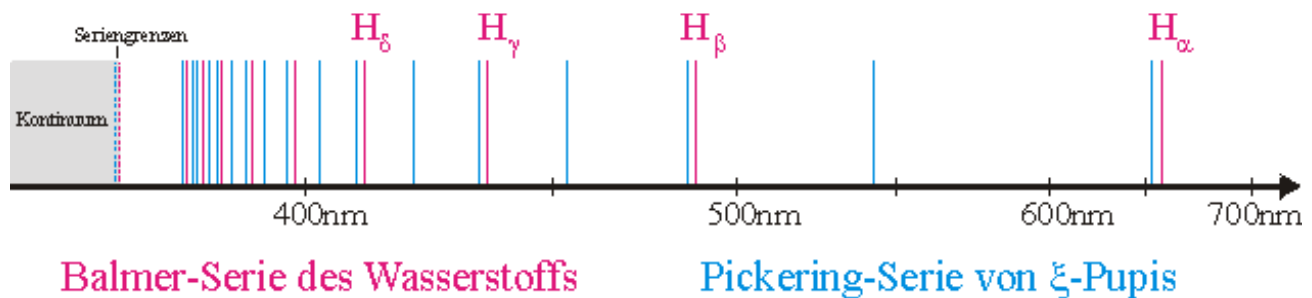
Die Rydberg-Konstante R_{He} für Helium läßt sich entsprechend (1.104) aus

$$R_{He} = \left(\frac{M_{He}}{M_{He} + m_e} \right) R_{\infty} = 1097.224 m^{-1} \quad [1.126]$$

bestimmen, wobei man näherungsweise $M_{He} = 4m_p$ setzen kann.

Man beachte, daß die Linien, die sich aus Übergängen zwischen den Hauptquantenzahlen $n_1 = 4$ und $n_2 = \{6, 8, 10, \dots\}$ ergeben, fast die gleiche Wellenlänge besitzen wie die Wasserstofflinien der Balmerserie. Deshalb lassen sich bei geringer spektraler Auflösung die Heliumabsorptionen von den Wasserstoffabsorptionen in den Spektren früher Spektraltypen nur schwer trennen.

Die optische Linienserie des einfach ionisierten Heliums wurde erstmalig von dem amerikanischen Astronomen EDWARD CHARLES PICKERING (1846-1919) im Spektrum des Sterns ξ Puppis entdeckt und wird seitdem als Pickering-Serie bezeichnet.



Sie hatte zuerst zu einigen Irritierungen geführt, da die Laufvariable in (1.125) auch halbzahlige Werte annehmen muß, um die zusätzliche intermediäre Linie zwischen jeweils zwei Linien der Balmerserie erklären zu können.

HeII-Absorptionen findet man aufgrund der hohen Ionisationsenergie von ca. 24 eV nur bei Spektraltypen früher als O5. Die Feinklassifizierung dieser sehr heißen Sterne erfolgt häufig anhand des Intensitätsverhältnisses der HeII-Linie bei 454.1 nm Wellenlänge zur HeI-Linie bei 447.1 nm wobei man ausnutzt, daß die HeII-Absorption bei steigender Temperatur immer effektiver wird während die Linienstärke der Linien des neutralen Heliums entsprechend abnehmen.

Während HeII ein wasserstoffartiges Ion ist (ähnlich wie die Alkali-Atome), bezeichnet man Ionen mit nur zwei Elektronen als heliumartige Ionen. Sie haben in der astronomischen Spektroskopie eine große Bedeutung, da sich aus ihrer Präsenz und aus der Verteilung ihrer Elektronenzustände wertvolle Informationen über die physikalischen Verhältnisse ihrer Aufenthaltsorte gewinnen lassen. Sie treten innerhalb eines großen Temperatur- und Dichtebereichs auf und sind unter gewissen Bedingungen in der Lage, sehr intensive Spektrallinien zu erzeugen. Beispiele für derartige Ionen sind LiII, NVI, MgXI, SiXIII, FeXXV oder OVII. Je schwerer die Ionen sind, desto weiter verschieben sich die Übergänge in den Grundzustand in den Röntgenbereich. Einige der intensivsten Emissionslinien im Röntgenspektrum der Sonnenkorona werden durch heliumartige Ionen hervorgerufen. Bei ihrer Entstehung spielt nicht nur die Strahlungsanregung, sondern insbesondere Anregungsprozesse durch Stoßprozesse (Elektronenstöße) eine wichtige Rolle. Einige Übergänge können überhaupt nur durch Stöße angeregt werden, weil für Strahlungsabsorption das Verbot (1.124a) besteht.

Betrachten wir dazu als Beispiel ein angeregtes heliumartiges Ion, dessen Elektron sich im Niveau $n=2$ aufhält. Zu dieser Hauptquantenzahl gehören die Terme 2^1P^o , 2^3P^o und 2^3S . Der Strahlungsübergang in das 1^1S -Niveau kann auf folgende Art und Weise erfolgen:

($\rightarrow$) Stoßanregung ($\Rightarrow$) Strahlungsanregung

1. Resonanzübergang:

$$1s2p^1P_{1,2,3} \leftrightarrow 1s^2^1S_0$$

2. Interkombinationsübergang:

$$1s^2^1S_0 \rightarrow 1s2p^3P_{1,2,3}$$

$$1s^2^1S_0 \rightarrow 1s2s^3S_1 \Rightarrow 1s2p^3P_{1,2,3}$$

$$1s^2^1S_0 \rightarrow 1s2s^3S_1 \rightarrow 1s2p^3P_{1,2,3}$$

$$1s2p^3P_{1,2,3} \rightarrow 1s^2^1S_0 \quad \text{Strahlungsübergang}$$

$$1s2p^3P_{1,2,3} \rightarrow 1s2s^3S_1 \quad \text{Strahlungsübergang}$$

3. Verbotener Übergang:

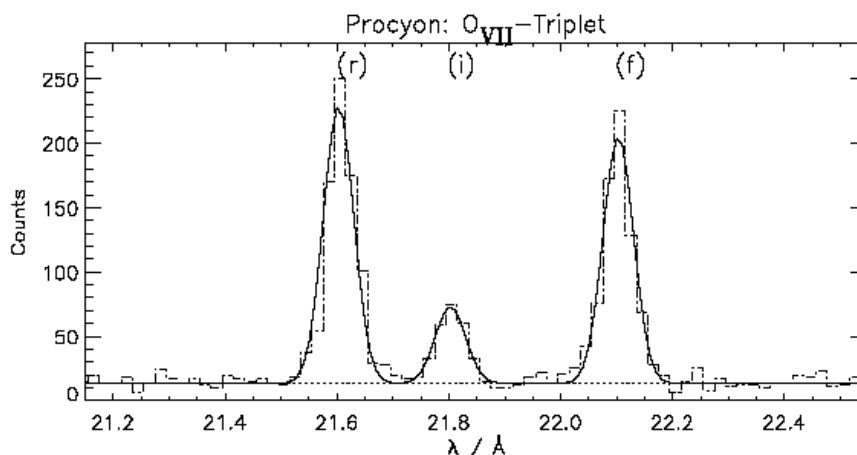
$$1s^2^1S_0 \rightarrow 1s2s^3S_1$$

$$1s2s^3S_1 \rightarrow 1s^2^1S_0 \quad \text{Strahlungsübergang}$$

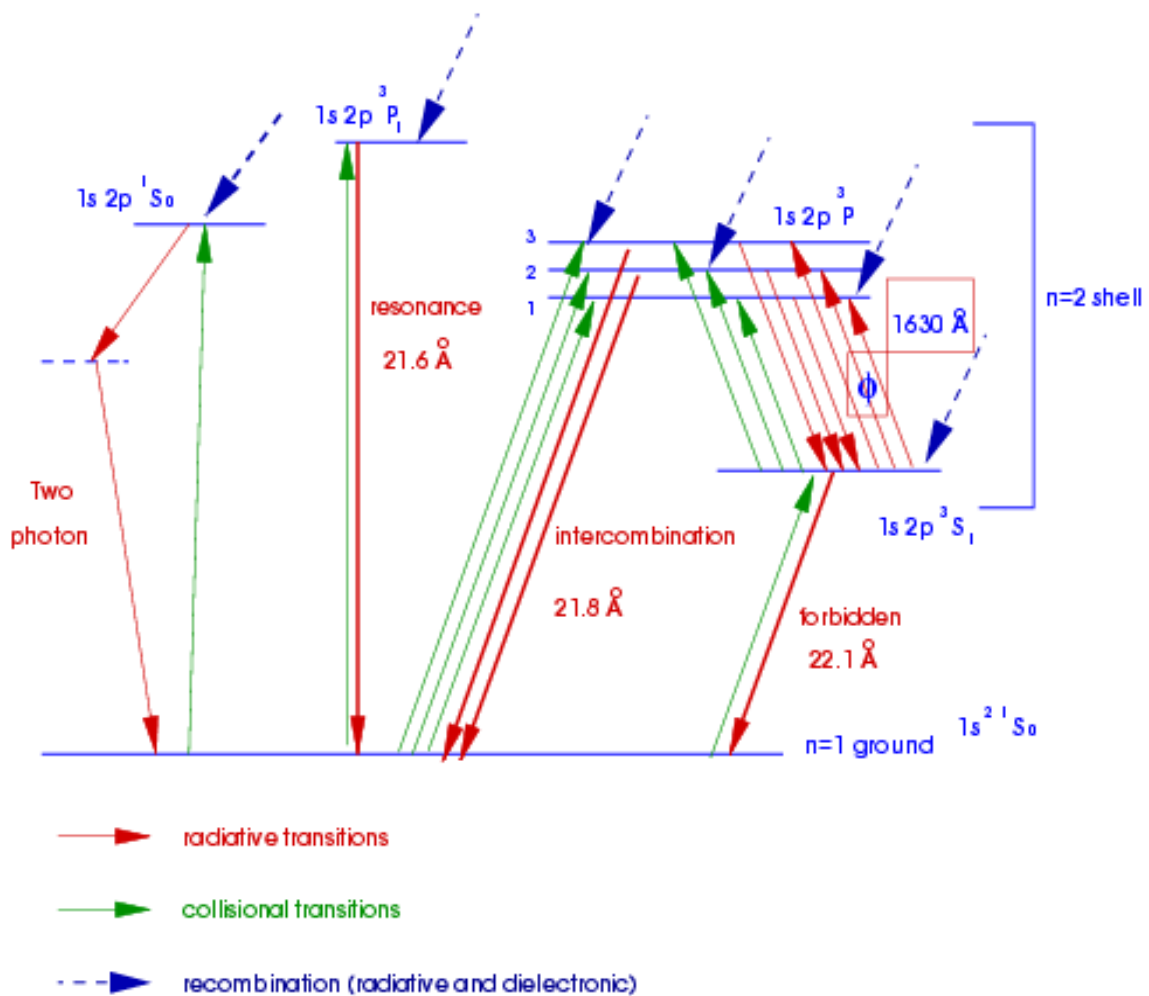
Im Fall des astrophysikalisch sehr wichtigen OVII-Triplets (Plasmadiagnostik) führen diese Übergänge zu folgenden Emissionen im Röntgenbereich:

Resonanzlinie	$\lambda = 2.16 \text{ nm}$	W
Interkombinationslinie	$\lambda = 2.18 \text{ nm}$	X,Y
Verbotene Linie	$\lambda = 2.21 \text{ nm}$	Z

Die Großbuchstaben W-Z werden gern in der Röntgenspektroskopie verwendet, um die entsprechenden Linien zu kennzeichnen. Aus dem Verhältnis der Linienstärke zwischen der Resonanzlinie und der verbotenen Linie lassen sich sehr genau Informationen über die Elektronendichte im Emissionsgebiet gewinnen.



Röntgenspektrum des F5 IV-Sterns Prokyon im Bereich des OVII-Triplets. Von links nach rechts sind deutlich die W, X und Y (nicht aufgelöst) und Z-Linie zu erkennen. © J.-U.Ness et. al 2000



Ausschnitt aus dem Grotrian diagramm des OVII-Ions mit den dazugehörigen Röntgenübergängen.

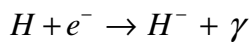
Spektren der Wasserstoffionen

Der Wasserstoff kommt in ionisierter Form in zwei verschiedenen Arten vor. Einmal als positiv geladenes Proton (H^+) und einmal als Wasserstoff-Anion H^- (Hydrid-Ion). Letzteres hat in der Physik der Sternatmosphären eine große Bedeutung, da es im Wesentlichen für das Zustandekommen der optischen Kontinuumsstrahlung der sonnenähnlichen Sterne verantwortlich ist.

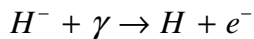
Um aus einem neutralen Wasserstoffatom ein Elektron zu entfernen, ist eine Energie von mindestens 13.6 eV notwendig. Das bedeutet, daß nur Photonen mit einer Wellenlänge $\leq 91.2\ \text{nm}$ (UV) in der Lage sind, Wasserstoffatome vollständig zu ionisieren. Wolken ionisierten Wasserstoffs treten deshalb nur in der Nähe sehr heißer Sterne auf, deren hochenergetische UV-Strahlung in diesen Wolken thermalisiert wird. Das führt dazu, daß die mittlere Temperatur in H^+ -Wolken ungefähr $10^4\ \text{K}$ erreicht. Die Rekombination erfolgt kaskadenartig und die dabei entstehende Strahlung kann im UV-Bereich (Lyman-Serie) und im optischen Bereich (Balmer-Serie) des elektromagnetischen Spektrums beobachtet werden.

Die Absorption von Strahlung mit einer Wellenlänge kleiner als der Wellenlänge der Lyman-Grenze bei 91.2 nm führt dazu, daß der kosmische Raum überall dort, wo Wasserstoffgas in nennenswerter Dichte vorkommt, für UV-Strahlung praktisch undurchsichtig wird. Die Sonne befindet sich z.Z. in einem Raumbereich, der relativ frei von Wasserstoffgas ist. Deshalb können Sterne, die sich z.Z. innerhalb dieses „lokalen Bubbles“ aufhalten, mit Hilfe von Satelliten auch im EUV erfolgreich beobachtet werden.

Ein auf dem ersten Blick ungewöhnliches Ion stellt das Hydrid-Ion H^- dar. Hier wird der bei astronomischen Objekten selten beobachtete Fall realisiert, daß ein Ion einen Überschuß an negativer Ladung aufweist, während alle sonst astronomisch relevanten Ionen ausschließlich Kationen sind:



Die Bindungsenergie ist mit $E_b = 0.754$ eV sehr gering. Alle Photonen, deren Wellenlänge unter $\lambda = 1653$ nm liegt, sind in der Lage, dieses Ion wieder in den neutralen Zustand zu überführen.:



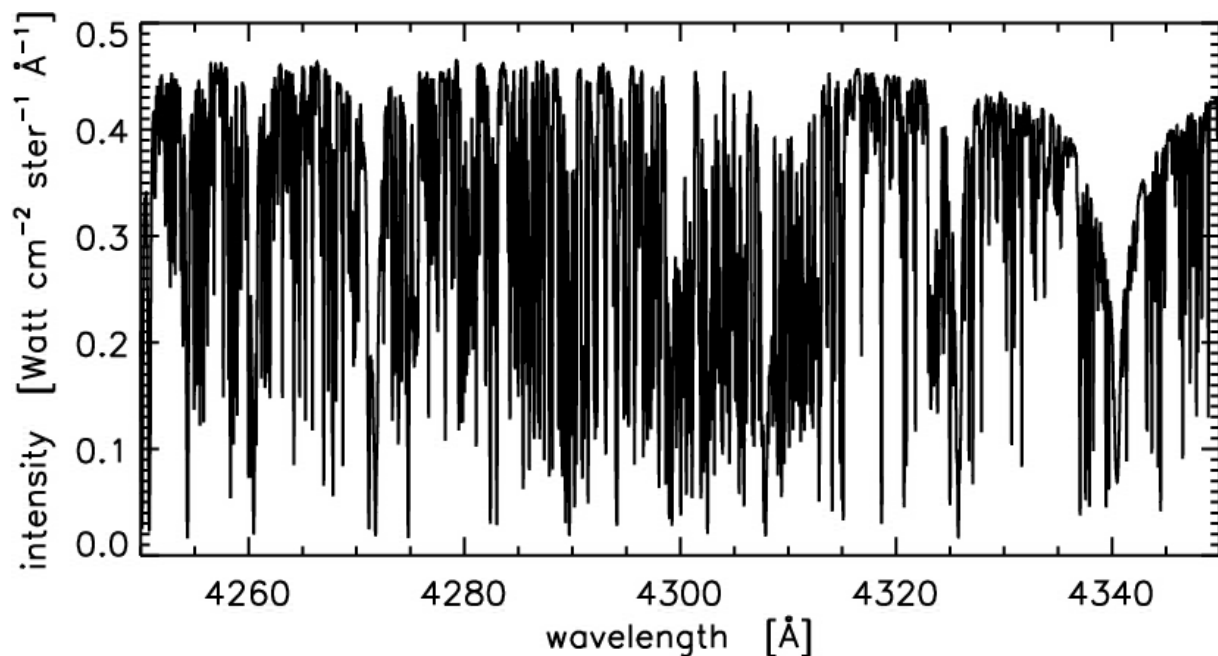
Dabei geht die überschüssige Energie des Lichtquants in die kinetische Energie des freigesetzten Elektrons über.

Das ein Wasserstoffatom überhaupt in der Lage ist, ein weiteres Elektron zu binden, hängt damit zusammen, daß das reguläre Elektron ($E_b = 13.6$ eV) die positive Kernladung nicht vollständig abschirmen kann. Das erlaubt eine schwache elektromagnetische Bindung eines weiteren Elektrons - natürlich nur, soweit in der Umgebung dafür Geeignete vorhanden sind. Insbesondere in den Sternatmosphären mittlerer Spektraltypen (G, F) existieren solche freien Elektronen in großer Zahl, die von leicht zu ionisierenden Metallen wie Ca, Na, Mg und Fe stammen. Wie 1938 der deutsch-amerikanische Astronom RUPERT WILDT (1905-1976) entdeckte, stellen für sonnenähnliche Sterne die H^- -Ionen die dominierende Opazitätsquelle im optischen Wellenlängenbereich dar. Bei sehr heißen Sternen gibt es dagegen zu wenige neutrale Wasserstoffatome, als daß sich H^- -Ionen bilden können. Bei Sternen später Spektraltypen reichen dagegen die Temperaturen nicht mehr aus, um genügend viele Metallatome zu ionisieren. Die Elektronendichte ist in diesem Fall einfach zu gering, um genügend Wasserstoff-Anionen bilden zu können. Das bedeutet, daß bei einer effektiven Temperatur unterhalb von ca. 3000 K so gut wie keine H^- -Ionen mehr produziert werden. Das Plasma der Sternatmosphäre kann keine optische Strahlung mehr absorbieren und emittieren. Das führt dazu, daß das Gas in der Sternatmosphäre im optischen Bereich nicht mehr länger strahlen kann und immer durchsichtiger wird (d.h. die Opazität nimmt ab). Hat ein Stern erst einmal diese Temperatur erreicht, dann kann er seine Leuchtkraft nur noch dadurch erhöhen, in dem er bei gleichbleibender effektiver Temperatur seine Oberfläche vergrößert. Er wandert im HRD in den Riesenast ab.

Spektren molekularer Systeme (Molekülspektren)

Beginnend beim Spektraltyp F3 und besonders ausgeprägt ab dem Spektraltyp G erscheinen mit fallender effektiver Temperatur immer mehr Gruppen von Absorptionslinien in den Sternspektren, die von einfachen zweiatomigen Molekülen wie CH, CN, CO, TiO, ZrO und VO stammen wobei insbesondere die Oxide ungefähr ab dem Spektraltyp K5 verstärkt in Erscheinung treten.

Bei den Moleküllinien handelt es sich oft um eine Aneinanderreihung einer Vielzahl von einzelnen Linien, die man gewöhnlich als „Band“ bezeichnet. Das CH-Molekül entsteht z.B. in nennenswerter Menge bereits in den Atmosphären von F3-Sternen und bildet (besonders gut sichtbar im Spektrum sonnenähnlicher Sterne und bei Sternen vom Spektraltyp K) bei einer Wellenlänge von ca. 430 nm eine Absorptionsbande, die bei geringer spektraler Auflösung wie eine einzelne Absorptionslinie aussieht. Diese „Linie“ erhielt 1814 von JOSEPH VON FRAUNHOFER (1787-1826) zur Kennzeichnung den Großbuchstaben „G“ zugeordnet. Heute spricht man allgemein von der G-Bande des CH-Moleküls.



Hochauflöstes Teilstück des Sonnenspektrums im Bereich des G-Bandes. Ein Großteil der hier aufgelösten Absorptionslinien ergeben sich aus Übergängen zwischen den quantisierten Rotations- und Vibrationsübergängen des CH-Moleküls.

Es gibt nur relativ wenige Moleküle, die unter den Temperatur- und Druckbedingungen einer Sternatmosphäre über längere Zeit stabil sind. Häufiger findet man sie in kühlen Regionen des Kosmos wie z.B. in interstellaren Gas- und Staubwolken. Dort können sie sich bei niedrigen Temperaturen und abgeschirmt von der kurzwelligen Strahlung heißer Sterne ansammeln und sogenannte Molekülwolken bilden. Da bei den darin herrschenden Temperaturen um die 20 K nur niederenergetische Übergänge möglich sind (z.B. zwischen verschiedenen Rotationsfreiheitsgraden), strahlen die Moleküle hauptsächlich im Mikro- und im Radiowellenbereich. Aus diesem Grund ist die Beobachtung und Identifizierung interstellarer Moleküle ein Hauptarbeitsgebiet der Millimeter- und Submillimeter-astronomie geworden.

In Sternspektren findet man naturgemäß fast ausschließlich die Signaturen sehr einfacher Moleküle. Nur sie können bei Temperaturen oberhalb von 3000 K überleben wobei die Bedingungen für chemische Verbindungen mit steigender Temperatur sehr schnell schlechter werden. Die folgenden Ausführungen beschränken sich deshalb auf zweiatomige Moleküle, da sie einfach strukturiert sind und weil sie sich mittels quantenmechanischer Näherungsmethoden für spektroskopische Zwecke genügend genau beschreiben lassen. Außerdem findet man nur ihre Linienbanden im optischen Bereich von Sternspektren.

Struktur und Beschreibung zweiatomiger Moleküle

Wenn sich zwei Atome gleicher Ordnungszahl (z.B. H_2 , O_2 , homonuklear) oder zwei Atome unterschiedlicher Ordnungszahl (z.B. CO , TiO , heteronuklear) miteinander verbinden, dann bilden sie zweiatomige Moleküle. Sie gelten per Definition als elektrisch neutral. Werden Ionen in die Betrachtung mit einbezogen (was bei astronomischen Fragestellungen häufig der Fall ist), dann spricht man besser von molekularen Systemen (z.B. H_2^+), um sie von den „echten“ Molekülen abzugrenzen.

Die Verbindung einzelner Atome zu Molekülen und molekularen Systemen kann auf verschiedene Art und Weise geschehen. Im Zusammenhang mit den hier diskutierten Fragestellungen sind jedoch nur Verbindungen, bei denen sich die Einzelatome gemeinsame Elektronen in ihrer Hülle teilen, von Bedeutung. Man spricht in solchen Fällen von homöopolaren oder kovalenten Bindungen. Heteropolare oder Ionenbindungen, die z.B. für die überwiegende Mehrzahl der Mineralaggregationen verantwortlich sind, spielen unter stellaren Bedingungen keine Rolle.

Grundsätzlich gelten die Beschreibungsmethoden, wie man sie für Einzelatome entwickelt hat, auch für Moleküle. Auch hier ist der Ausgangspunkt die Schrödingergleichung (1.95). Da jetzt aber mehrere Atome beteiligt sind, muß der Hamilton-Operator entsprechend erweitert werden. Ziel ist es, die Entstehung von Bindungen zwischen neutralen Atomen (z.B. zwei Wasserstoffatomen oder zwei Sauerstoffatomen) zu verstehen und die möglichen molekularen Anregungszustände vorherzusagen. Erschwerend wirkt, daß Moleküle aufgrund ihrer räumlichen Struktur neben der „elektronischen“ Anregung noch weitere Freiheitsgrade besitzen, die bei Einzelatomen nicht auftreten können. Es handelt sich dabei um Schwingungen entlang der Molekülachsen (Vibrationen) sowie um Rotationen, die jeweils einen eigenen Beitrag zur Gesamtenergie und damit zum Hamilton-Operator liefern:

$$E_{ges} = E_{el} + E_{vib} + E_{rot} \quad [1.127]$$

Eine exakte Lösung der Schrödingergleichung ist deshalb (selbst für das sehr einfache H_2^+ -Ion) nicht mehr möglich. Es wurden aber im Laufe der Zeit eine Anzahl von Näherungsmethoden entwickelt, die trotzdem eine durchaus befriedigende theoretische Behandlung von Molekülen und molekularen Systemen ermöglichen. Für zweiatomige Moleküle ist in diesem Zusammenhang insbesondere die Born-Oppenheimer Approximation zu nennen.

Die Born-Oppenheimer-Näherung, Molekülorbitale

Die Atomkerne von zweiatomigen Molekülen können im Molekülverbund eigene Bewegungen relativ zueinander ausführen. Diese Bewegungen erfolgen aber aufgrund der großen Trägheit der Kerne jedoch wesentlich langsamer als die Bewegung der Elektronen, die für die Bindung verantwortlich sind. Aus diesem Grund läßt sich die „Bewegung“ der Elektronen von der „Bewegung“ der Kerne quasi trennen in dem man für jeweils einen bestimmten festen Kernabstand d die Schrödingergleichung für das dazugehörige Coulombpotential löst. Technisch bedeutet das, daß man den Hamilton-Operator in zwei Terme aufspalten kann, deren erster Term die kinetische Energie der Kernbewegung und der zweite Term die Energieanteile der Elektronen beinhaltet:

$$\hat{H} = \hat{T}_n + \hat{H}_{el} \quad [1.128]$$

Der elektronische Anteil berücksichtigt dabei sowohl die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen als auch die Wechselwirkung zwischen den Kernen und den Elektronen sowie die kinetische Energie der Elektronen..

In solch einem Fall ist es legitim, auch die Gesamtwellenfunktion ψ als Produkt aus einer „Kernwellenfunktion“ ψ_n und einer „Elektronenwellenfunktion“ ψ_e zu betrachten:

$$\psi = \psi_n \psi_{el} \quad [1.129]$$

Einsetzen in (1.95) ergibt

$$\hat{H}\psi = (\hat{T}_n + \hat{H}_{el})\psi_n\psi_{el} = \hat{T}_n\psi_n\psi_{el} + \hat{H}_{el}\psi_n\psi_{el} = E\psi \quad [1.130]$$

Jetzt kann man für jeden Kernabstand d die Elektronenwellenfunktion einzeln ausrechnen:

$$\hat{H}_{el}\psi_{el} = E_{el}\psi_{el} \quad [1.131]$$

Führt man diese Rechnungen durch, dann erhält man E_{el} als Funktion der Kernseparation d (manchmal auch als Bindungslänge bezeichnet)..

Unter Berücksichtigung von (1.131) ergibt sich schließlich aus (1.130) die Schrödingergleichung der Kernwellenfunktion

$$(\hat{T}_n + E_{el})\psi_n = E\psi_n \quad [1.132]$$

E_{el} läßt sich als die potenzielle Energie einer Schwingung der Atomkerne eines diatomigen Moleküls interpretieren.

Mit einer weiteren Approximation (Molekül als starrer Rotator) lassen sich zusätzlich noch Rotationszustände erfassen, deren Energien gewöhnlich bedeutend geringer sind als die der Vibrationszustände.

Betrachten wir im Folgenden zwei Atome A und B mit den Kernmassen M_A und M_B sowie den Kernladungen Z_A und Z_B , die durch einen Abstand d voneinander getrennt sind (Kern-Kern-Abstand). Der gemeinsame Schwerpunkt des Moleküls sei S. Die Vektoren $\mathbf{r}_A$ und $\mathbf{r}_B$ sollen dann jeweils von S aus die Positionen der Atomkerne A und B angeben. Die Vektoren, welche die Position der jeweiligen Elektronen in Bezug auf S festlegen, werden im Folgenden zusätzlich durch einen Zahlenindex gekennzeichnet, wobei i die Elektronen durchnummeriert: $\mathbf{r}_i$. Die Abstände zwischen den Elektronen i und den Kernen A und B sind dann entsprechend r_{Ai} und r_{Bi} .

Ausgeschrieben hat die Schrödingergleichung (1.95) für ein zweiatomiges Molekül folgende Form, wobei N die Gesamtzahl der Elektronen angibt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M_A} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2M_B} \nabla_B^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \right) \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_i) = (E - V_e) \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_i) \quad [1.133]$$

Der linke Teil stellt den Operator für die kinetische Energie des Gesamtmoleküls dar. Er besteht aus einem Anteil, der die kinetische Energie der Kernbewegung beschreibt und einem Anteil, der sich aus der kinetischen Energie der Elektronen ergibt. Die Indizierung des Laplace-Operators gibt an, auf welche Koordinaten er anzuwenden ist.

Die Bewegung der Elektronen erfolgt innerhalb eines Coulomb-Potentials V_e . Dieses Potential muß die verschiedenen Formen der elektromagnetischen Wechselwirkungen zwischen den einzelnen geladenen Bestandteilen des Moleküls beschreiben. Das betrifft Kern-Kern-Wechselwirkungen genauso wie Elektronen-Kern und Elektronen-Elektronen-Wechselwirkungen. Allgemein gilt:

$$V_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^N \frac{r_i}{r_j} - \sum_{i=1}^N \frac{Z_A}{r_{Ai}} - \sum_{i=1}^N \frac{Z_B}{r_{Bi}} + \frac{Z_A Z_B}{d} \right) \quad [1.134]$$

Berechnet man jetzt entsprechend (1.131) den Anteil zur Bestimmung der Elektronen-wellenfunktion, dann ergibt sich:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + V_e \right) \psi_e(r_i) = E_e \psi_e(r_i) \quad [1.135]$$

Um die Energieeigenwerte als Funktion von d zu erhalten, muß diese Gleichung für jeden Abstand d zwischen den Kernen A und B gelöst werden.

Schauen wir uns zuerst die elektronischen Zustände an, wie sie sich aus der Lösung der Schrödingergleichung ergeben. Dazu betrachten wir zwei ungebundene Atome A und B, die sich immer näher kommen (d wird immer kleiner), bis sich aus den separaten Atomorbitalen bei Erreichen des Gleichgewichtsabstands $d = r_0$ Molekülorbitale ausgebildet haben. Dabei gilt folgende Einschränkung. Besitzen die beiden sich annähernden Atome je ein einfach besetztes Orbital, tritt eine Aufspaltung der Energieterme in jeweils ein „bindendes“ Orbital mit geringer Energie und in ein „antibindendes“ Orbital höherer Energie auf. Bei der Ausbildung der kovalenten Bindung besetzen

beide Elektronen das bindende Orbital, wobei Energie frei wird. Die gleiche Energie muß wieder aufgewendet werden, um die beiden Atome wieder aus dem Molekülverbund zu lösen. Man nennt diesen Energiebetrag Dissoziationsenergie. Wenn sich - wie bei Helium - die beiden Orbitale nicht energetisch unterscheiden, kommt es zu keiner kovalenten Bindung zwischen den Atomen.

Im Fall eines zweiatomigen Moleküls ist das Coulombpotential, unter dessen Einfluß sich die Elektronen bewegen müssen, offensichtlich nicht mehr zentralsymmetrisch. Insbesondere wirkt in Richtung z der Verbindungslinie der beiden Atome eine zusätzliche Feldkomponente, die - analog zum Starkeffekt - zu einer Aufhebung der Entartung von Energieniveaus führt. Die Nebenquantenzahl l (die für den Bahndrehimpuls steht) ist deshalb keine „gute“ Quantenzahl mehr. Etwas anders sieht es für die magnetische Quantenzahl m_l aus. Für sie ergibt sich (soweit sie sich auf die Kernverbindungsline als Vorzugsrichtung bezieht) ein Wertevorrat gemäß

$$l_z = m_l \hbar \quad \text{mit } m_l = \{l, l-1, l-2, \dots, -l\} \quad [1.137]$$

Im Rahmen des Bohr-Sommerfeldschen Atommodell kann man sich vorstellen, daß der Bahndrehimpulsvektor $\mathbf{l}$ der Elektronen um die Kernverbindungsline (= z-Achse) mit der gequantelten Komponente (1.137) präzediert. Um diesen Sachverhalt auch adequat in die Beschreibung von Molekülen einfließen zu lassen, führt man in der Molekülphysik eine neue Quantenzahl λ ein, welche quasi die Nebenquantenzahl l der Atomphysik (zumindest für die Bindungselektronen) ersetzt:

$$\lambda = |m_l| \quad [1.138]$$

λ kann nach (1.137) offensichtlich die Werte 0 bis l annehmen. Diese Werte werden in Analogie zu den Bezeichnern s, p, d, f, ... der Nebenquantenzahl l mit den griechischen Buchstaben $\sigma, \pi, \delta, \phi, \dots$ bezeichnet. Ein σ -Orbital entspricht demnach einer Wellenfunktion mit $\lambda = 0$ und $m_l = 0$. Es weist als einziges Molekülorbital keine Entartung auf, während alle Molekülorbitale mit $\lambda > 0$ gemäß (1.138) zweifach entartet sind. Aus dem Pauliprinzip folgt deshalb, daß ein σ -Orbital maximal 2 Elektronen und alle anderen Zustände 4 Elektronen aufnehmen können.

Um den Quantenzustand eines zweiatomigen Moleküls mit genau einem Valenzelektron anzugeben, sind demnach die Quantenzahlen n , λ und m_l im Prinzip ausreichend. In der Bezeichnung der Terme wird oftmals noch ein Index eingeführt, welcher angibt, aus welchem Einzelatom sich der jeweilige Term ergeben hat. Beim Wasserstoffmolekül erhält man z.B. folgende Molekülorbitale, die sich in ihrer Parität unterscheiden:

$$\sigma \ 1s \rightarrow \sigma \ 1s_A + \sigma \ 1s_B \quad \text{bindender Zustand}$$

$$\sigma^o \ 1s \rightarrow \sigma \ 1s_A - \sigma \ 1s_B \quad \text{nichtbindender Zustand}$$

Sind an der Bindung mehrere Valenzelektronen beteiligt, dann kombinieren sich entsprechend des LS- bzw. jj-Schemas die Einzeldrehimpulse der Elektronen zu einem Gesamtdrehimpuls. In der Molekülphysik werden mehrere Kopplungsfälle unterschieden, von denen an dieser Stelle nur der Fall erwähnt werden soll, wo die Größen s (Spin) und $\mathbf{l}$ (Bahndrehimpuls) an die Molekülachse (= z-Achse)

gekoppelt sind. Die Projektionen der Drehimpulse addieren sich unter dieser Bedingung algebraisch zur Projektion des Gesamtdrehimpulses:

$$L_z = \pm \Lambda \hbar \quad \text{mit} \quad \Lambda = \left| \sum_i (\pm \lambda_i) \right| \quad [1.139]$$

Analog zur Russel-Saunders-Kopplung werden die jeweils zu Λ gehörenden Terme mit (griechischen) Großbuchstaben bezeichnet, wobei folgende Zuordnung gilt:

$$\Lambda: \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3$$

$$\quad \Sigma \quad \Pi \quad \Lambda \quad \Delta$$

Auch hier sind alle Zustände ab $\Lambda = 1$ zweifach entartet.

Wie bei den Atomen werden Großbuchstaben zur Kennzeichnung der Elektronenzustände und Kleinbuchstaben zur Kennzeichnung der Orbitale verwendet. So bedeutet z.B. $^3\Pi$ ein Zustand mit $S=1$ und $\Lambda = 1$. Der hochgestellte Index 3 (Multiplizität) kennzeichnet dabei den resultierenden Spin S :

$$S = S^* \hbar \quad \text{mit} \quad S^* = \{S, S-1, \dots, -S\} \quad [1.140]$$

wobei S^* die Projektion auf z darstellt. Je nach Elektronenzahl nimmt S^* ganz- oder halbzahlige Werte an. Die Multiplizität, die zu jedem durch Λ gegebenen Zustand gehört, ist durch

$$\text{Multiplizität} = 2S+1 \quad [1.141]$$

gegeben. Das bedeutet, daß es infolge der Kopplung zwischen $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ zu einer Aufspaltung des zu einem bestimmten Λ -Wert gehörenden Terms in ein Multiplett von (1.141)-Termen kommen muß. Diese Terme unterscheiden sich durch die Quanztenzahl des resultierenden elektronischen Drehimpulses (in z -Richtung gemessen):

$$\Omega = |\Lambda + S^*| \quad [1.142]$$

Diese Größe beschreibt nicht (wie bei einem Atom) den Gesamtdrehimpuls, da der Anteil, der sich aus der Rotation ergibt („Hantel-Drehimpuls“ $\mathbf{N}$ bei einem zweiatomigen Molekül) nicht berücksichtigt wird. Der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$ kann vielmehr aus der vektoriellen Addition des Hanteldrehimpulses $\mathbf{N}$ mit dem der Elektronen $\mathbf{\Omega}$ berechnet werden:

$$\mathbf{J} = \mathbf{N} + \mathbf{\Omega} \quad [1.143]$$

Bei der Bezeichnung der Energiet Terme in einem Molekül hat man sich an der Bezeichnungsweise der Terme in Atomen orientiert (siehe 8.122):

$$\text{Term} = {}^{2S+1} \Lambda_{\Omega}^{(\text{parität})} \quad [1.144]$$

Die Multiplizität wird als linker oberer Index an das Λ -Termsymbol geschrieben. Der rechte unteren Index stellt den resultierenden Drehimpuls um die Kernverbindungsline dar und wird oft weggelassen.

Nicht alle denkbaren elektronischen Übergänge zwischen den einzelnen Molekültermen sind möglich. Sie werden - wie auch bei Einzelatomen - durch Auswahlregeln eingeschränkt. Insbesondere gilt:

$$\Delta\Lambda = \{0, +1, -1\}$$

$$\Delta S = \{0\}$$

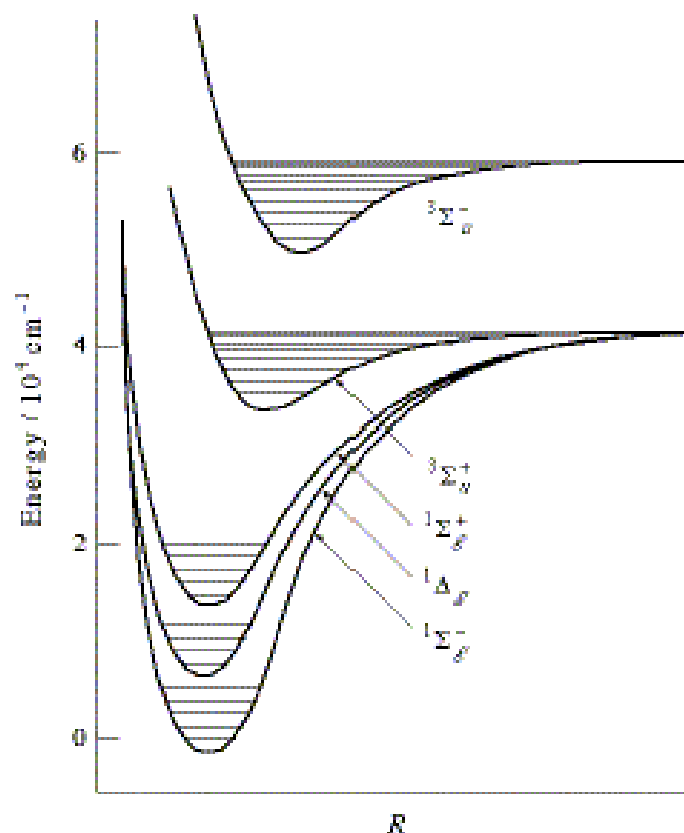
[1.145]

Bei (zumindest leichten) Molekülen gilt demnach auch das Interkombinationsverbot.

Zum Abschluß dieses Kapitels soll nur noch kurz auf den in der Molekülphysik wichtigen Begriff der Hybridisierung eingegangen werden. Sie spielt eine besonders wichtige Rolle in der organischen Chemie, da sie maßgeblich die räumliche Struktur mehratomiger organischer Moleküle bestimmt. Man versteht darunter sogenannte „gerichtete“ Atomorbitale, die sich rein mathematisch z.B. durch Mischung von s- und p-Orbitalen am gleichen Atom ergeben. So lassen sich aus den vier Wellenfunktionen 2s sowie 2px, 2py und 2pz insgesamt vier äquivalente sp³-Hybridorbitale konstruieren, die nach den Ecken eines Tetraeders ausgerichtet sind.

Vibrationsübergänge

Zweiatomige Moleküle können entlang ihrer Bindungsachse Schwingungen (Vibrationen) ausführen. Das ist leicht verständlich, wenn man sich die Potentialkurven V(r), d.h. die Energie in Abhängigkeit des Abstandes r der beiden das Molekül bildenden Atome, anschaut.



Potentialkurven für einige elektronische Zustände eines zweiatomigen Moleküls

Offensichtlich ähneln die Potentialkurven im Bereich ihres Minimums dem Potential eines harmonischen Oszillators. Wählt man ein Koordinatensystem, in dem das Atom A ruht, dann kann die Positionsänderung des Atoms B als Schwingung um die Gleichgewichtslage, die dem Minimum der Funktion $V(r)$ entspricht, beschrieben werden. Diese Gleichgewichtslage ist durch den „Molekülabstand“ r_0 gegeben, der wiederum von dem jeweiligen elektronischen Zustand abhängt (siehe Abbildung). Jetzt verschieben wir die Ordinate des Koordinatensystems derart, daß sie genau durch r_0 geht und die Bewegung relativ zu diesen Punkt durch die neue Variable

$$x = \frac{r - r_0}{r_0} \quad [1.146]$$

gemessen wird. In diesem Fall kann man das Potential $V(x)$ wie folgt schreiben:

$$V(x) = E + \frac{k}{2} r_0^2 x^2 \quad [1.147]$$

(k „Bindungskraftkonstante“ = Rückstellkraft)

Die Lösung der zu diesem Potential gehörenden Schrödingergleichung liefert - wie zu erwarten - einen diskreten Satz von Energieeigenwerten E_n , die das Potential mit einem äquidistanten Abstand auffüllen:

$$E_n = h\nu_0 \left(\frac{1}{2} + n \right) \quad [1.148]$$

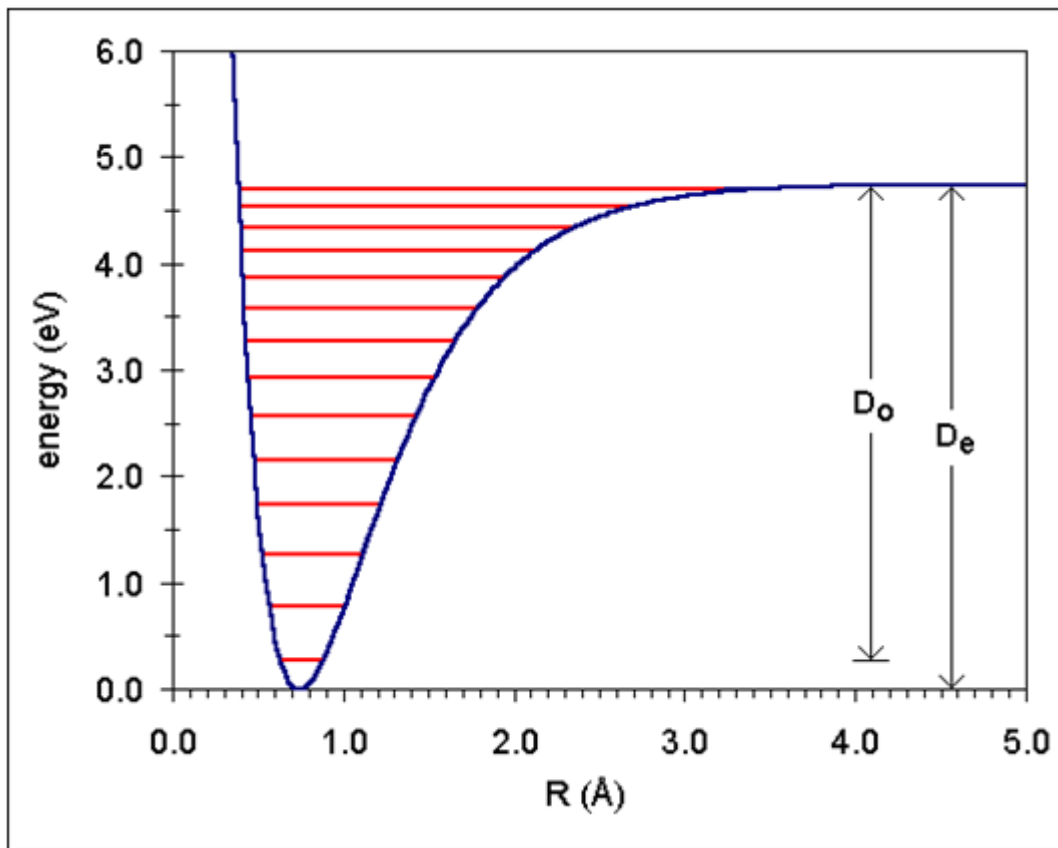
wobei ν_0 die Eigenfrequenz des Grundzustandes und n die diskrete Schwingungsquantenzahl $n=\{0,1,2,\dots\}$ darstellt (bitte im Folgenden nicht mit der Hauptquantenzahl n atomarer Zustände verwechseln). Deshalb ergibt sich aufgrund der Auswahlregel $\Delta n = \pm 1$ auch nur eine Strahlungsfrequenz beim Übergang benachbarter Vibrationsniveaus.

Bei einem realen Molekül sind die Verhältnisse natürlich weitaus komplizierter. So kann z.B. bei einem realen Molekül der Kernabstand niemals den Wert $r=0$ erreichen. Dehnt man dagegen das Molekül, dann darf der linke Ast der Potentialkurve selbstverständlich nicht ins Unendliche gehen, sondern muß sich asymptotisch der Dissoziationsenergie E_{diss} annähern.

Ein Potential, welches ungefähr diesen Bedingungen genügt, ist das sogenannte Morse-Potential (nach PHILIP MCCORD MORSE, 1903-1985):

$$V(r) = E + E_{diss} \left(1 - \exp(-a(r - r_0)) \right)^2 \quad [1.149]$$

(a Parameter, der u.a. von der reduzierten Masse des Moleküls abhängt. Er wird manchmal als Steife-Parameter bezeichnet und in m^{-1} gemessen.)



Morse-Potential zur Modellierung des Potentialverlaufs eines diatomigen Moleküls © B.M. Tissue

Die Bedeutung des Morse-Potential besteht darin, daß sich mit diesem Potentialansatz die Schrödingergleichung (3.136) exakt lösen läßt. In diesem Fall erhält man für die Energieeigenwerte:

$$E_n = h\nu_0 \left(\frac{1}{2} + n \right) - \frac{h^2 \nu_0^2}{4E_{diss}} \left(\frac{1}{2} + n \right)^2 \quad [1.150]$$

Wie man leicht erkennt, füllen die Energieniveaus das Potential nicht mehr mit äquidistanten Abstand aus, d.h., daß die Abstände zwischen den Vibrationsniveaus mit wachsendem n abnehmen. Im Gegensatz zum harmonischen Oszillator ergeben sich für Vibrationsübergänge folgende Auswahlregeln:

$$\Delta n = \{\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\} \quad [1.151]$$

Man beachte außerdem, daß aufgrund dessen, daß für das Potenteial (1.149) ein rechtsseitiger Grenzwert existiert (die Dissziationsenergie E_{diss}), die Anzahl der Energieniveaus im Potential endlich ist. Weiter folgt daraus, daß im Fall eines Morsepotentials die maximale Vibrationsenergie offensichtlich der Dissoziationsenergie entsprechen muß.

Rotationsübergänge

Rotation und Vibration sind bei der Analyse von Molekülspektren immer als Einheit zu betrachten. Da sich bei der Anregung eines Vibrationsniveaus der mittlere Abstand zwischen den Atomen A und B ändert, ändert sich dementsprechend auch das Trägheitsmoment des Moleküls auf diskrete Art und Weise. Das hat wiederum Auswirkungen auf das Rotationsverhalten, dessen wichtigste Kenngröße in diesem Zusammenhang die Rotationsenergie E_{rot} ist:

$$E_{rot} = \frac{I}{2} \omega^2 \quad [1.152]$$

I ist das Trägheitsmoment des Moleküls und ω die Winkelgeschwindigkeit. Diese aus der klassischen Mechanik bekannte Formel muß natürlich modifiziert werden, damit sie sich auf ein quantenmechanisches Objekt anwenden läßt. Da man ein zweiatomiges Molekül aufgrund seiner Hantelform als starren Rotator mit zwei Rotationsfreiheitsgraden ansehen kann (da das Trägheitsmoment um die Kernverbindungsline nahezu 0 ist, spielt dieser (dritte) Freiheitsgrad für die weiteren Betrachtungen keine Rolle), gilt für das jeweils zu diesen zwei Freiheitsgraden gehörende Trägheitsmoment

$$I = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} d^2 \quad [1.153]$$

wobei der Faktor vor dem Kernabstand d die reduzierte Masse μ des Moleküls aus den Atomen A und B darstellt. Aus der Schrödingergleichung folgt in diesem Fall für den Drehimpuls p des Moleküls:

$$p = \hbar \sqrt{J(J+1)} = I \omega = |\mathbf{L}| \quad [1.154]$$

J ist dabei die Quantenzahl des gesamten molekularen Drehimpulses (Rotationsquantenzahl), deren Wertevorrat durch

$$J = \{0, 1, 2, 3, \dots\} \quad [1.155]$$

gegeben ist. Analog zur Drehimpulsquantisierung beim Atom kann man auch hier eine Art von magnetischer Quantenzahl m_J einführen, welche die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{L}$ bestimmt:

$$m_J = \{+J, J-1, \dots, -J\}, \quad L_z = \hbar m_J \quad [1.156]$$

Setzt man (1.154) in (1.152) ein, dann erhält man für die Rotationsenergie in bezug auf die zwei Rotationsachsen mit nichtverschwindenden Trägheitsmoment I

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad [1.157]$$

Das bedeutet, daß (ähnlich wie bei einem Atom) ein Energieniveau in bezug auf die dazugehörigen Rotationsniveaus $(2J+1)$ -fach entartet ist und damit die Übergänge zwischen diesen Niveaus zu einem

Spektrum führen müssen, bei denen bei Präsenz von elektrischen oder magnetischen Feldern eine entsprechende Aufspaltung in Einzellinien zu beobachten ist. Die Energiedifferenzen, die sich zwischen den einzelnen Rotationszuständen ergeben, liegen dabei in der Größenordnung von einigen Tausendstel bis Hunderttausendstel eV. Das erklärt, warum Rotationsübergänge fast ausschließlich im Mikrowellenbereich des elektromagnetischen Spektrums auftreten. Zum Abschluß soll noch darauf hingewiesen werden, daß wenn $J=0$ ist nach (1.157) auch $E_{rot} = 0$ ist. Für die Rotation gibt es demnach keine Nullpunktsenergie.

Aus der Quantisierung der Rotationsenergie folgt weiter die Auswahlregel

$$\Delta J = \pm 1 \quad [1.158]$$

und damit für das Spektrum

$$\lambda(J) = \left(\frac{\hbar^2}{2I} (J(J+1) - (J-1)J) \right)^{-1} \quad [1.159]$$

Es besteht aus äquidistanten Linien mit einem jeweiligen Abstand von

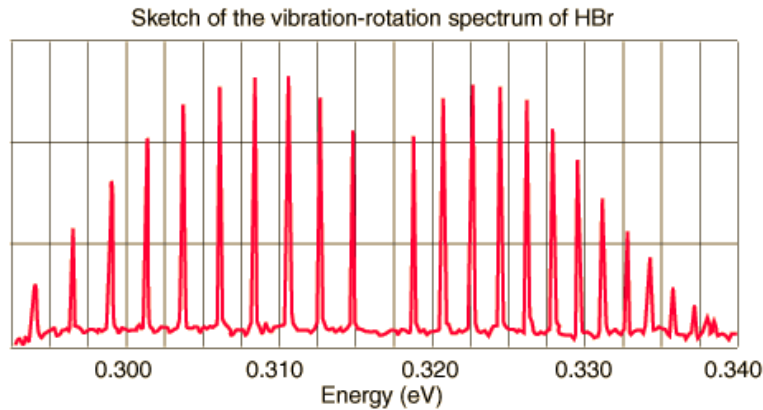
$$\Delta\lambda = \frac{2\pi c}{\hbar} I \quad [1.160]$$

Lediglich für sehr große J macht sich schwach ein durch Zentrifugalkräfte verursachter Effekt bemerkbar, der dazu führt, daß die Linienabstände ganz langsam abnehmen. In der astronomischen Spektroskopie hat dieser Effekt keine Bedeutung und ist nicht einmal nachweisbar.

Vibrations- Rotationsspektren

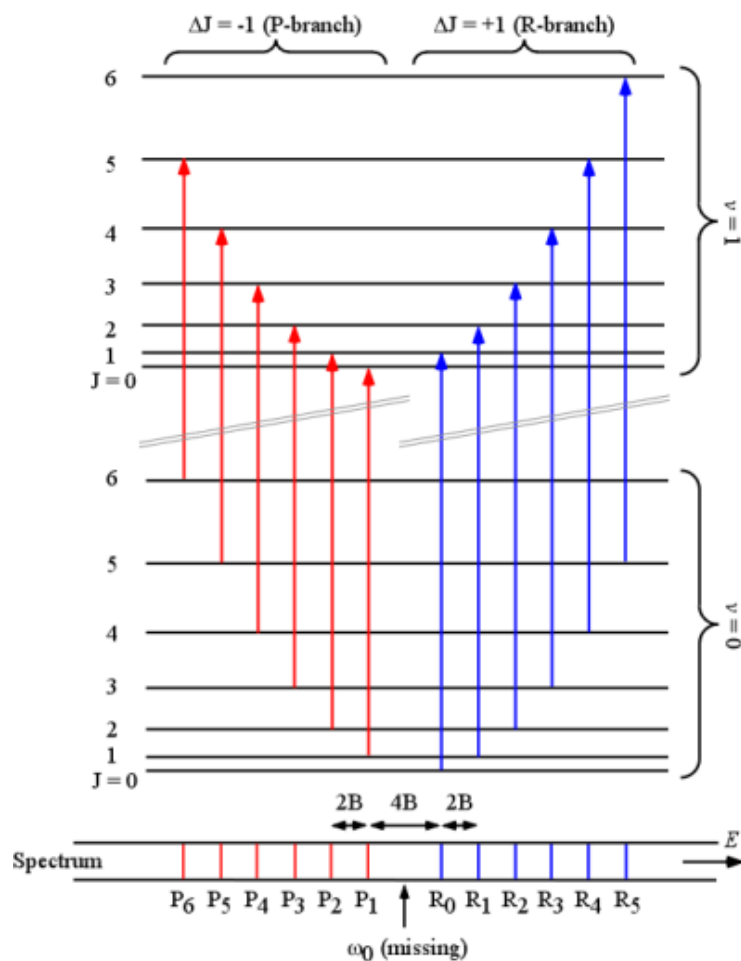
Schon eine einfache Rekapitulation der in den beiden vorangegangenen Kapiteln beschriebenen Zusammenhänge zeigt, daß die Vibrations- und Rotationsenergiezustände nicht unabhängig voneinander betrachtet werden können. Eine Anregung eines Schwingungsfreiheitsgrades führt zu einer Vergrößerung des mittleren Abstandes der Atome in dem Molekül und ändert damit dessen Massenträgheitsmoment. Das wiederum hat nach (1.157) einen direkten Einfluß auf die Rotationsenergieniveaus. Die Auswahlregel $\Delta J = \pm 1$ erzwingt darüber hinaus, daß mit jeder Vibration auch eine Rotation angeregt wird was streng für alle heteronuklearen zweiatomigen Moleküle (wie z.B. CO, TiO) gilt.

Von Bedeutung ist, daß die Anregungsenergien für Rotationszustände relativ klein sind. Eine Absorption erfolgt genau dann, wenn die Frequenz des zu absorbierenden Lichtquants mit der sogenannten Rotationszahl ν_R (die sich aus der Energie des Rotationsniveaus ergibt) übereinstimmt. Bei den astronomisch interessanten Molekülen liegen diese Frequenzen im fernen Infrarot sowie (bei Molekülen mit größeren I) im Mikrowellenbereich. Sie eignen sich deshalb besonders gut zur Untersuchung der thermischen Verhältnisse in Stern-entstehungsgebieten sowie in kühlen Hüllenbereichen ausgedehnter Riesensterne.



Vibration-Rotationsspektrum von HBr-Molekülen

Das Vibrationsspektrum von heteronuklearen zweiatomigen Molekülen weist eine typische Rotationsstruktur auf, die sich in zwei Bereiche, die symmetrisch zueinander liegen, aufteilt. Betrachten wir dazu zwei übereinanderliegende Vibrationsniveaus, denen jeweils einige Rotationsquantenzahlen J' (oberer Term) und J'' (unterer Term) zugeordnet sind. Der Bereich mit $\Delta J = -1$ ist der sogenannte P-Zweig (hier gilt $J' = J'' - 1$) während man den Bereich mit $\Delta J = +1$ als R-Zweig ($J' = J'' + 1$) bezeichnet. Die als Symmetrieachse dienende Null-Linie ($\Delta J = 0$, „Q-Zweig“) fehlt meist (es gibt Ausnahmen).



Für die Energiedifferenzen ΔE_R bei Übergängen zwischen zwei unterschiedlichen Rotationsniveaus ergibt sich:

$$\Delta E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} \left(J' (J' + 1) - J'' (J'' + 1) \right) \quad [1.161]$$

Dieses Ergebnis widerspiegelt sofort die Äquidistanz der Rotationslinien was z.B. leicht zu erkennen ist, wenn man die Auswahlregel $J' = J'' + 1$ in die Gleichung einsetzt.

Beispiele astronomisch relevanter Moleküle

Im optischen Bereich von Sternspektren findet man gewöhnlich nur wenige Spektrallinien bzw. Banden, die auf Moleküle in Sternatmosphären hinweisen. Störend machen sich aber manchmal die Absorptionsbanden des atmosphärischen Sauerstoffs (A-Bande, $\lambda = 760$ bis 780 nm) und des Wasserdampfes (z.B. $\lambda = 1.34 - 1.45 \mu\text{m}$) bei spektroskopischen Untersuchungen bemerkbar, welche die Sternspektren überlagern. Sie sind z.B. deutlich im roten Bereich des Sonnenspektrums auszumachen - vorausgesetzt, es wurde von der Erdoberfläche aus aufgenommen.

Die Präsenz von Molekülen erwartet man bei kühlen Sternen bzw. bei Sternen, die mit einer kühleren Gas- und Staubwolke umgeben sind, wie es z.B. bei jungen Protosternen der Fall ist. Besonders günstig für die Entstehung von teilweise sehr komplexen Molekülen sind kalte ($T \sim 20$ K) interstellare Gas- und Staubwolken, die man deshalb auch als „Molekülwolken“ bezeichnet. Aufgrund der geringen Anregungsenergien lassen sie sich besonders gut mit den Methoden der Mikrometer- und Millimeterastronomie beobachten, da die meisten Rotationsübergänge der darin vorkommenden Moleküle in diesem Wellenlängenbereich stattfinden. Außerdem sind kühlen Molekülwolken kosmogonisch außerordentlich interessant, da in ihnen neue Sterne und Planeten entstehen.

Obwohl H_2 -Moleküle die weitaus meisten Teilchen in interstellaren Molekülwolken stellen (auf ca. 10000 Wasserstoffmoleküle kommt ein Kohlenmonoxidmolekül), sind entsprechende elektronische Absorptionsbanden nur sehr schwer und dann auch nur außerhalb der Erdatmosphäre zu beobachten, da sie sich im UV-Bereich ($\lambda = 100$ nm bis 110 nm) befinden. Vibrationsbanden (in Emission) findet man dagegen im sichtbaren Rot bis zum mittleren Infrarot ($\lambda \sim 2.82 \mu\text{m}$). Aber auch ihre Beobachtung erweist sich in der Praxis als technisch anspruchsvoll.

Aufgrund seiner Symmetrie gehört das Wasserstoffmolekül H_2 bekanntlich zu den homöopolaren Molekülen. Es besitzt also kein permanentes Dipolmoment wie z.B. das CH-Molekül. Deshalb sind elektronische Übergänge, bei denen sich J um ± 1 ändert, verboten. Erlaubt sind dagegen Übergänge mit $J=0$ und $J=\pm 2$. Für Vibrationsübergänge gelten derartige Einschränkungen jedoch nicht, da sie unabhängig von der Drehimpulsquantenzahl J sind.

Ein sehr wichtiger Übergang in diesem Zusammenhang ist z.B. der von $J=3$ nach $J=1$ unter Änderung der Vibrationsquantenzahl von $n=1$ nach $n=0$. Dabei wird eine IR-Linie bei $\lambda = 2.12 \mu\text{m}$ emittiert. Da sie in einem IR-Spektrum meist sehr gut auflösbar ist, gehört sie zu den am besten untersuchten

Moleküllinien des interstellaren molekularen Wasserstoffs. Über ihre Intensität läßt sich z.B. die Verteilung von Wasserstoffmolekülen in einem Gasnebel erforschen.

Aber auch in bestimmten Sternatmosphären können sich u.U. Wasserstoffmoleküle bilden, die aber nicht stabil sind und deshalb besser als Quasimoleküle bezeichnet werden. Ihre Entstehung kann man sich in etwa wie folgt vorstellen: Unter gewissen Temperatur- und Druckverhältnissen kommt es in einer Sternatmosphäre öfters vor, daß zwei Wasserstoffatome sehr nahe beieinander vorbeifliegen ohne sich binden zu können. Genau zu diesem Zeitpunkt kann das System jedoch ein eventuell vorhandenes Strahlungsquant passender Energie absorbieren und eines der beiden Elektronen anregen. Da es dafür verschiedene Möglichkeiten über einen größeren Energiebereich gibt (Streuung der Kerndistanzen während der Absorptionsvorgänge), wird man entsprechend stark gestreckte Einsenkungen im UV-Bereich des Spektrums erwarten können. Beobachtungen mit dem *International Ultraviolet Explorer* (IUE) haben z.B. solche Einsenkungen im Bereich um $\lambda = 160$ nm bei bestimmten Weißen Zwergsternen nachgewiesen. Begegnen sich dagegen ein neutrales und ein ionisiertes Wasserstoffatom, dann entsteht kurzzeitig ein H_2^+ -Quasimolekül mit einer etwas anderen spektroskopischen Signatur um 106 und 140 nm. Auch diese Absorptionen ließen sich in den Atmosphären einiger heißer Weißer Zwergsterne zweifelsfrei nachweisen.

Ein gerade für die Untersuchung von Sternentstehungsprozessen außergewöhnlich wichtiges Molekül ist das des Kohlenmonoxids CO. Da seine Rotationsfreiheitsgrade durch Stöße mit anderen Molekülen (insbesondere H_2) leicht angeregt werden können, stellt es ein mit den Methoden der Millimeterwellenastronomie ($\lambda = 2.6$ mm, Übergang zwischen $J=1$ und $J=0$) leicht zu beobachtendes „Tracermolekül“ für Wasserstoffmolekülwolken dar. Das gilt auch für die ähnliche Verbindung CS, die bei einer Frequenz von 48 GHz emittiert. Durch genaue Untersuchungen der CO- und CS-Emissionen von galaktischen Molekülwolken erhält man z.B. wertvolle Informationen über die Dichte der (ansonsten weitgehend unsichtbaren) Wasserstoffmoleküle sowie deren Temperaturverteilung im Emissionsgebiet.

Identifikation von Spektrallinien in stellaren Spektren

Am Anfang jeder Untersuchung von Sternspektren steht die Identifikation der darin vorkommenden Spektrallinien, d.h. der Bestimmung, zu welchen chemischen Elementen und zu welchen atomaren Übergängen sie jeweils gehören. Praktisch läuft das auf eine möglichst genaue Messung der Wellenlänge λ im Spektrum hinaus, bei der die entsprechende Spektrallinie auftritt. Für wichtige und häufig vorkommende Übergänge sind die Wellenlängen bzw. Frequenzen aufgrund von Laboruntersuchungen sehr gut bekannt, so daß deren Identifikation - insbesondere, wenn man noch plausible Annahmen über deren Anregungsbedingungen in Sternatmosphären machen kann - meist keine Probleme macht. Entsprechende Tabellenwerke sind seit langen Bestandteil der astronomischen und chemischen Fachliteratur. Schwieriger ist es, die teilweise dicht beieinanderliegenden Absorptionslinien hochionisierter Metalle (z.B. Fe), wie sie zu Tausenden in den Spektren mittlerer und später Spektraltypen vorkommen, bestimmten Elementen oder Ionen verschiedener Ionisationsgrade zuzuordnen. Hier helfen - wie bei der Identifikation verbotener Linien - oftmals nur theoretische Untersuchungen in Form der Berechnung der jeweils physikalisch möglichen Übergänge

und der dazugehörigen Übergangsfrequenzen aus atomphysikalischen Parametern weiter. Das gilt insbesondere für die reichhaltigen spektralen Merkmale von UV-Spektren heißer Sterne, die heute satellitengestützten Beobachtungen zugänglich, die aber im Labor kaum zu reproduzieren sind. Für die Ableitung der physikalischen Bedingungen, wie sie innerhalb einer Sternatmosphäre herrschen, ist es aber meist gar nicht notwendig, jede im Spektrum auftretende Linie genau einem Atom oder Ion eines bestimmten Elementes zuordnen zu müssen. Für eine quantitative Spektralanalyse reichen meistens eine Anzahl repräsentativer Spektrallinien aus, wobei es mehr darauf ankommt weniger die Positionen (Bewegungszustand) als vielmehr die Linienprofile möglichst genau zu bestimmen. Deshalb gibt es auch nur recht wenige Sterne, bei denen man eine lückenlose Identifikation der Spektrallinien im sichtbaren Bereich überhaupt versucht hat. Ein solcher Stern ist z.B. die Sonne, deren Linien mit sehr hoher Genauigkeit z.B. von MOORE, MINNAERT und HOUTGAST (1966) im Bereich zwischen 293.5 nm und 877 nm erfaßt und identifiziert worden sind. Die qualitative Spektralanalyse, zu deren Hauptarbeitsgebiet die Linienidentifikation gehört, gewinnt aber zunehmend an Bedeutung bei der Untersuchung von sogenannten peculiaren Sterne, also Sternen, die irgendwie stark von der Norm abweichen in dem sie z.B. Spektrallinien von Elementen enthalten, die man ansonsten nur selten in Sternspektren findet.

Im Zeitalter des Internet existieren mehrere webgestützte Datenbanken zur Identifikation stellarer Spektrallinien. Als Beispiel soll hier nur die „*Vienna Atomic Line Database*“ (VALD) des Astronomischen Instituts der Universität Wien erwähnt werden, die prinzipiell für jeden interessierten Astronomen online verfügbar ist.

Wie bereits beschrieben, bilden alle erlaubten spektralen Übergänge zwischen zwei Termen ein Multiplett. Die dabei auftretenden Linien haben oft eine unterschiedliche Stärke (Intensität) wobei sich die jeweiligen Intensitätsverhältnisse zwischen den Linien des Multipletts theoretisch vorhersagen lassen (Intensitätsverhältnisse zwischen Linien eines gleichen Multipletts variieren nur gering bei sich ändernden Anregungsbedingungen). Identifiziert man z.B. eine Linie eines Multipletts in einem Sternspektrum, dann kann man anhand der Intensitätsunterschiede oftmals entscheiden, ob die Linie an der Position einer weiteren Linie des Multipletts zu demselben Multiplett oder zu einem völlig anderen Übergang gehört. Oder ein anderer Fall: Ordnet man beispielsweise einer schwachen Absorptionslinie einen bestimmten Übergang zu, findet aber an der Position einer stärkeren Linie des gleichen Multipletts keine Anzeichen für eine derartige Linie, dann muß die Identifikation offensichtlich falsch sein.

In der modernen beobachtenden Astronomie werden immer mehr automatische Verfahren zur Untersuchung von Sternspektren eingesetzt. Dazu werden die Spektren digitalisiert (wenn noch Photoplatten verwendet werden, erfolgt die Digitalisierung mittels Mikrodensitometer, welche die Plattenschwärzung als Funktion der Wellenlänge messen) und danach mit Hilfe von leistungsfähigen Computerprogrammen die spektralen Merkmale identifiziert und kategorisiert. Diese mittlerweile vollautomatisch ablaufenden Verfahren sind besonders bei Aufgabenstellungen erfolgreich (z.B. Surveys), wo es gerade auf die Gewinnung von umfangreichen und statistisch auswertbaren Material ankommt.

Ein weiteres, neuerdings besonders bei UV-Spektren gern benutztes Verfahren ist die von CHARLES R. COWLEY mitentwickelte Methode der „*wavelength coincidence statistics*“ (WCS). Wie der Name

schon sagt, handelt es sich um ein statistisches Verfahren bei dem untersucht wird, ob bereits aus Laboruntersuchungen bekannte Spektrallinien im Spektrum eines Sterns nachweisbar sind oder nicht. Aus diesen Untersuchungen werden statistische Kennziffern gewonnen, die eine Beurteilung eines entsprechenden Sternspektrums unter verschiedenen, vorher festgelegten Gesichtspunkten erlauben. So gesehen handelt es sich bei diesem Verfahren nicht unbedingt um eine Methode zur Identifizierung von Einzellinien sondern eher zur Bestimmung globaler spektraler Parameter, wie man sie z.B. für Klassifikationszwecke oder zur Suche nach Objekten mit besonderen Spektralmerkmalen benötigt. Da es relativ leicht algorithmierbar ist, bildet es die Grundlage von einigen recht leistungsfähigen Analyseprogrammen.

Zum Abschluß sollen noch einige Punkte kurz angesprochen werden, welche die Identifikation von Spektrallinien in Sternspektren zumindest erschweren:

- zu geringe spektrale Auflösung (oder der Prozeß der Linienverbreiterung) führt zur Überlagerung (blending) von eng beeinanderliegenden Linien, was deren Identifikation teilweise aussichtslos macht
- Störungen durch atmosphärische Absorptionen und Emissionen (z.B. im roten und ultraroten Bereich des sichtbaren Spektrums) überdecken stellare Spektralmerkmale
- Spektroskopie in Wellenlängenbereichen, für die es nicht genügend, durch theoretische und Laboruntersuchungen gestütztes Identifikationsmaterial gibt (z.B. UV)
- schnell rotierende Sterne ($v \sin i > 10 \text{ km/s}$) bzw. Sterne mit hoher Schwerebeschleunigung an deren „Oberfläche“ (z.B. Weiße Zwergsterne), bei denen die Spektrallinien stark verbreitert werden (Dopplerverbreiterung, Druckverbreiterung)

Profil und Verbreiterung von Spektrallinien

Betrachtet man eine Fotografie von einem linienreichen Spektrum - z.B. das eines G-Sterns - dann fällt auf, daß sich die Absorptionslinien in ihrer Linienstärke und ihrer Schwärzungsverteilung stark unterscheiden. Noch deutlicher wird es, wenn man sich die Registrierkurve, die mit Hilfe eines Mikrodensitometers gewonnen wurde, anschaut: Spektrallinien besitzen eine mehr oder weniger starke Verbreiterung innerhalb eines Frequenzintervalls $\Delta\nu$ um die Wellenlänge λ_0 , die sich aus dem jeweiligen quantenmechanischen Übergang ergibt. Auch die Intensität der „Schwärzung“ $S(\lambda)$ zeigt eine für die entsprechende Linie charakteristische Verteilung als Funktion der Frequenz, die man als Linienprofil bezeichnet.

Daß eine Spektrallinie nicht „unendlich“ dünn (scharf) sein kann, läßt sich ohne große Schwierigkeiten aus der Quantenmechanik herleiten. Ursache dafür ist, daß angeregte Zustände in einem atomaren oder molekularen System immer nur eine endliche Lebensdauer Δt besitzen, was entsprechend der Heisenbergschen Unschärferelation zwischen Energie E und Zeit t

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

sowie der Planckschen Beziehung

$$\Delta E = h \Delta \nu$$

zu einer natürlichen Linienunschärfe $\Delta\nu$ führt.

Mit einer Photonenenergie $E = hc/\lambda$ läßt sich diese „Unschärfe“ für einen elektronischen Übergang zwischen den Zuständen m und n wie folgt abschätzen:

$$\Delta\lambda \approx \frac{\lambda^2}{2\pi c} \left(\frac{1}{\Delta t_m} + \frac{1}{\Delta t_n} \right) \quad [1.162]$$

Da die typische Lebensdauer von angeregten Zuständen in der Größenordnung von 10^{-8} s liegt, kann es im Bereich des sichtbaren Spektrums keine schärferen Linien als ca. $5 \cdot 10^{-5}$ nm Breite geben. Nur bei speziellen, sogenannten metastabilen Zuständen, erwartet man weitaus geringere natürliche Linienbreiten. Bei derartigen Zuständen langer Lebensdauer, die z.B. für die Entstehung „verbotener Linien“ verantwortlich sind, ist die natürliche Linienbreite noch um einige Größenordnungen geringer als bei den normalen atomaren Strahlungsübergängen.

Bei astronomischen Spektren läßt sich bereits apparativ bedingt nie die spektrale Auflösung erreichen die notwendig ist, um bis in den Bereich der „natürliche Linienbreiten“ vorzustößen ($\sim 0.1 \text{ m}\overset{\circ}{\text{Å}}$). Trotzdem zeigen Spektrallinien eine Struktur die darauf hinweist, daß es eine Anzahl von physikalischen Prozesse geben muß, die eine Spektrallinie über einen mehr oder weniger großen Frequenzbereich zu verschmieren vermögen. Diese Prozesse werden gewöhnlich unter dem Begriff der „Linienverbreiterung“ zusammengefaßt und sollen im Folgenden diskutiert werden. Im Einzelnen handelt es sich dabei um:

- Natürliche Linienbreite oder Strahlungsdämpfung (siehe (1.162)), Begrenzung der Linienbreite durch die begrenzte Lebensdauer eines angeregten Zustandes
- Dopplerverbreiterung, verursacht durch die thermische Bewegung der angeregten Atome in einem Gas
- Dopplerverbreiterung durch nichtthermische Effekte wie z.B. Rotation eines Sterns oder durch Vorgänge der Mikro- und Makroturbulenz in einer Sternatmosphäre (z.B. Konvektion)
- Druckverbreiterung, verursacht durch Störungen, die durch Stöße mit anderen Partikeln hervorgerufen werden und die Lebensdauer eines angeregten Zustandes verkürzen (Stoßdämpfung)

Durch die Untersuchung von Verbreiterungsmechanismen und deren Auswirkungen auf das Linienprofil lassen sich viele Informationen über die physikalischen Bedingungen am Ursprungsort der Linienabsorption bzw. Linienemission (z.B. Sternatmosphäre, interstellare Gaswolke) ableiten. Linienprofile beinhalten bedeutend mehr Informationen über das Ursprungsgebiet einer Spektrallinie als deren bloße Identifikation. Wenn man diese Informationen lesen kann, lassen sich z.B. im Zusammenspiel zwischen Beobachtung und Theorie erstaunlich genaue Modelle von Sternatmosphären entwickeln.

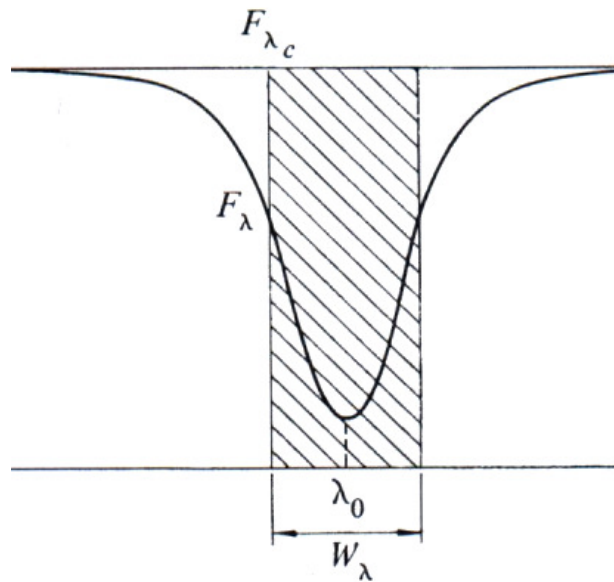
Die Struktur einer Spektrallinie

Eine Absorptionslinie ist im Wesentlichen ein Intensitätseinbruch im Kontinuum einer Strahlungsquelle. Ihre „tiefste“ Position erreicht sie bei der Wellenlänge λ_0 (das ist die Position des Linienkerns) während man den Bereich rechts und links davon als „Linienflügel“ bezeichnet. Ist $I_{c,\lambda}$ die Intensität des Kontinuums und I_λ die Linienintensität, dann bestimmt das Verhältnis $I_\lambda / I_{c,\lambda}$ als Funktion von λ das Linienprofil. Ist diese Funktion bekannt (z.B. durch die Messung der Schwärzungsverteilung $S(\lambda)$, die im Wesentlichen der Verteilung $I(\lambda)$ proportional ist), dann läßt sich daraus die besser handhabbare Äquivalentbreite W_λ der Spektrallinie bestimmen:

$$W_\lambda = \int \frac{I_{c,\lambda} - I_\lambda}{I_{c,\lambda}} d\lambda \quad [1.163]$$

Physikalisch stellt sie ein Maß für die in der Linie absorbierte Energie dar.

Während die natürliche Äquivalentbreite von Linien nur wenige Millionstel nm beträgt, liegt die Linienbreite von scharfen Linien im sichtbaren Spektralbereich meist bei einigen Hundertstel nm. Eine genaue Bestimmung der Äquivalentbreite setzt demnach eine genügend hohe Auflösung eines Spektrographen voraus. Häufig verwendet man auch den Terminus „Linienstärke“ als Synonym für W_λ .



Linienprofil einer Absorptionslinie

Als relative Linieneinsenkung r_λ bezeichnet man die Größe

$$r_\lambda = \frac{I_{c,\lambda} - I_\lambda}{I_{c,\lambda}} \quad [1.164]$$

und als Halbwertsbreite (FWHM = *Full Width at Half-Maximum*) die Größe $(\Delta\lambda)_{1/2}$, bei der

$$\frac{I_{c,\lambda} - I_{\lambda}}{I_{c,\lambda} - I_{\lambda_0}} = \frac{1}{2} \quad [1.165]$$

gilt.

Gewöhnlich benutzt man zur Darstellung eines Linienprofils eine genormte Darstellung, bei der die Intensität des Kontinuums auf 1 gesetzt wird.

Der Doppler-Effekt und die Dopplerverbreiterung

Unter dem Doppler-Effekt (CHRISTIAN DOPPLER, 1803 - 1853) versteht man die Frequenz-änderung $\Delta\nu$ die auftritt, wenn sich eine Strahlungsquelle entweder auf einen Beobachter zu oder von ihm wegbewegt. Dieser Effekt tritt bei jeder Art von Wellenausbreitung auf, d.h. nicht nur bei elektromagnetischen Wellen sondern z.B. auch bei Schallwellen. Im Fall von Schallwellen kann man ihn leicht „hören“, in dem man z.B. auf den Sirenton eines vorbeifahrenden Krankenwagens achtet. Nähert sich das Fahrzeug, hört man einen hellen Ton (=höhere Frequenz), entfernt es sich, erscheint der Ton tiefer (=geringere Frequenz). Dieser Effekt ist leicht zu verstehen, wenn man sich die Ausbreitung einer Kugelwelle einmal vom Standpunkt eines bewegten Beobachters und einmal vom Standpunkt einer bewegten Strahlungsquelle vergegenwärtigt. Da in der Astronomie Relativgeschwindigkeiten u.U. sehr groß sein können, soll hier gleich der relativistische Fall für Lichtwellen behandelt werden.

Unter Anwendung der speziell-relativistischen Lorentz-Transformationen erhält man für die in einen der beiden Bezugssysteme wahrgenommenen Frequenz ν' (bei optischen Phänomenen kann man zwischen den Fällen „bewegter Beobachter“ und „bewegte Lichtquelle“ nicht unterscheiden, da es nur auf die Relativgeschwindigkeit ankommt. Bei astronomischen Anwendungen wird i.d.R. die „Erde“ als ruhendes System betrachtet.)

$$\nu' = \nu \frac{1 - \beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{v}{c} \quad [1.166]$$

c Lichtgeschwindigkeit

Durch Reihenentwicklung von (1.166) und unter Vernachlässigung aller Glieder ab 2. Ordnung erhält man den klassischen Ausdruck

$$\nu' = \nu \left(1 \pm \frac{v}{v_s} \right) \quad [1.167]$$

wobei v_s die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle (z.B. der einer Schallwelle) ist.

Man beachte, daß es sich bei der Geschwindigkeit v immer um die radiale Geschwindigkeitskomponente in Bezug auf den Beobachter handelt. Um die „wahre“ Geschwindigkeit zu bestimmen, muß zusätzlich noch die Richtung des Geschwindigkeitsvektors der Strahlungsquelle bekannt sein.

Der Wurzelausdruck in (1.166) führt noch zu einem weiteren Effekt, der beim klassischen Dopplereffekt nicht auftritt. Bewegt sich die Strahlungsquelle parallel zum Beobachter, dann ist klassisch wegen $v_r = v_s \cos \vartheta = 0$ kein Dopplereffekt zu erwarten. Im relativistischen Fall muß man jedoch die Zeitdilatation beachten die dazu führt, daß die Frequenz ν auf

$$\nu' = \nu \sqrt{1 - \beta^2} \quad [1.168]$$

verringert erscheint. Dieser Effekt wird als transversaler Dopplereffekt bezeichnet und ist ein rein relativistischer Effekt. Er spielt auch erst bei sehr hohen Relativgeschwindigkeiten eine Rolle und kann bei den meisten astronomischen Anwendungen vernachlässigt werden.

Der Dopplereffekt ist ein äußerst wichtiges Hilfsmittel um die Bewegung von Himmelskörpern zu erforschen. Angenommen, bei einem Stern beobachtet man auf der Registrierkurve seines Spektrums bei der H_α -Linie des Wasserstoffs ($\lambda_0 = 656.28 \text{ nm}$) eine Verschiebung der Linienachse um 0.022 nm zu längeren Wellenlängen hin. Das bedeutet wegen

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda_0} = \frac{v_r}{c_0} \quad [1.169]$$

daß sich dieser Stern mit einer radialen Geschwindigkeit v_r von 10 km/s von uns entfernen muß. Eine positive Wellenlängenverschiebung bezeichnet man gewöhnlich als Rotverschiebung (Strahlungsquelle entfernt sich) und eine negative als Violettverschiebung (Strahlungsquelle nähert sich). Bei spektroskopischen Doppelsternsystemen kann man leicht beide Effekte beobachten, wenn man die Frequenzverschiebung des Gesamtsystems aufgrund dessen gemeinsamer Bewegung im Raum heraus rechnet.

Thermische Dopplerverbreiterung

Was für einen Stern gilt, gilt natürlich auch für jedes strahlende Atom. Dessen Bewegung in einem Gas ist bekanntlich thermischer Natur. Je nach dem, ob sich das Atom bei einem Emissions- oder Absorptionsvorgang auf den Beobachter zubewegt oder nicht, erfolgt eine radialgeschwindigkeitsabhängige Wellenlängenverschiebung zu längeren oder kürzeren Wellenlängen hin. Bei der Entstehung von Spektrallinien muß man selbstverständlich alle Atome der Strahlungsquelle betrachten. Ihre Geschwindigkeitsverteilung wird bekannter-maßen bei einer gegebenen Temperatur T durch eine Maxwell-Verteilung beschrieben:

$$N(v) dv \approx v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad [1.170]$$

Sie gibt die Anzahl N der Teilchen mit der Geschwindigkeit v im Geschwindigkeitsbereich $v+dv$ an. Da die radiale Geschwindigkeitskomponente jedes strahlenden Atoms einen Beitrag zum

Dopplereffekt liefert, kommt es nicht nur zu einer „Unschärfe“ einer Spektrallinie, sondern die Maxwell-Verteilung schlägt direkt auf das Linienprofil, d.h, auf die Intensitätsverteilung $I(\lambda)$ entlang der Linie, durch:

$$I(\lambda) = I(\lambda_0) \exp\left(\frac{-mc^2(\lambda_0 - \lambda)^2}{2kT\lambda^2}\right) \quad [1.171]$$

λ_0 ist die vom Dopplereffekt unbeeinflusste Wellenlänge. Da es sich bei diesem Profil um eine Gaußkurve handelt, ergibt sich daraus (soweit die Linie noch nicht abgesättigt ist) für deren Halbwertsbreite (FWHM):

$$(\Delta\lambda)_{1/2} = \lambda_0 \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{mc^2}} \quad [1.172]$$

Die rein thermische Bewegung der Teilchen im Plasma einer Sternatmosphäre ist nicht die einzige Ursache für das Auftreten einer Dopplerverbreiterung. Auch makroskopische Bewegungen in Form von Strömungen (Konvektion), chaotischen Verwirbelungen und explosiven Prozessen (bei der Sonne z.B. der Aufstieg und Zerfall von Protuberanzen) können sich im Dopplerprofil einer Spektrallinie niederschlagen. Sie sind bei Detailuntersuchungen nicht zu vernachlässigen. Ihre Berücksichtigung erweist sich jedoch ohne genaue Kenntnis der makroskopischen Geschwindigkeitsfelder $\mathbf{v}(x, y, z)$ in den Sternatmosphären als nicht einfach. Es existieren jedoch mittlerweile verschiedene Ansätze zur Berücksichtigung von Effekten der Mikro- und Makroturbulenz in Form von Korrekturen an (1.171), die derartige Einflüsse auf das Dopplerprofil approximativ erfassen lassen.

Rotation von Sternen

Ein weiterer wichtiger Anwendungsfall des Dopplereffekts in der Astronomie liegt in der Bestimmung der Rotationsparameter von Einzelsternen. Man kann sich leicht vorstellen, daß man bei einem rotierenden Stern (natürlich nur wenn nicht gerade auf einen der Rotationspole eines Sterns geschaut wird) an Stelle einer festen Frequenz quasi ein Strahlungsgemisch mit unterschiedlichen Dopplerverschiebungen erhält, da sich aufgrund der Rotation ein Teil der Sternmaterie mit jeweils unterschiedlichen Geschwindigkeiten auf den Beobachter zu und der andere Teil von ihm weg bewegt. Bezeichnet man mit v_R die Radialgeschwindigkeit eines Oberflächenelements am Rand des Sterns, dann folgt aus (1.169) eine „Verschmierung“ einer Spektrallinie über den Bereich

$$\Delta\lambda = \frac{2v_R}{c_0} \lambda_0 \quad [1.173]$$

Durch diesen Vorgang bildet eine Spektrallinie ein charakteristisches Rotationsprofil (im Idealfall ein Ellipsenbogen) aus, welches um so flacher wird, je größer $|v_R|$ ist. Auf diese Weise unterscheidet es sich deutlich von den Profilen, die durch andere Verbreiterungsmechanismen hervorgerufen werden. Solange die Rotationsgeschwindigkeit hoch ist (z.B. über 100 km/s), kann diese Art der Linienverbreiterung in einem Spektrum dominieren. Bei kleineren Rotationsgeschwindigkeiten (z.B.

bei späten Hauptreihensternen mit $v_R < 25$ km/s) wird jedoch die Trennung von thermischen und turbulenten Effekten zunehmend schwieriger.

Ein Problem, was bleibt, ist in (1.173) noch nicht berücksichtigt. In dieser Beziehung wurde stillschweigend angenommen, daß die Rotationsachse des Sterns genau senkrecht auf der Sichtlinie steht. Das wird selbstverständlich nur selten der Fall sein. Was man auf einem Spektrogramm ausmessen kann ist vielmehr eine maximale Linienbreite $\Delta\lambda$, die sich aus der projizierten Geschwindigkeit $v_R \sin i$ ergibt, wobei i der Winkel zwischen (unbekannter) Rotationsachse und Sichtlinie ist. Das Problem ist aber statistisch lösbar. Beobachtet man sehr viele Sterne und nimmt man weiterhin an, daß die Richtungen ihrer Rotationsachsen im Raum gleichverteilt sind, dann sollte sich der Mittelwert $\bar{v}_R$ der Größe

$$\bar{v}_R = \frac{4}{\pi} \overline{v_R \sin i} = 0.784 \cdot \overline{v_R \sin i} \quad [1.174]$$

annähern. Es ist sinnvoll, diese Größe für physikalisch ähnliche Gruppen von Sternen (also z.B. für Sterne gleichen Spektraltyps und Leuchtkraftklasse) zu ermitteln, wobei als Ergebnis herausgekommen ist, daß die Rotationsgeschwindigkeit von frühen Spektraltypen zu späten Spektraltypen in der Tendenz abnimmt. Es handelt sich dabei offensichtlich um einen Entwicklungseffekt.

Bei Sternen mit hohen Rotationsgeschwindigkeiten (z.B. $v_R > 100$ km/s) bestimmt in vielen Fällen die Rotationsverbreiterung fast ausschließlich das Linienprofil. Da es zumindest bei Sternen ohne wesentlicher Randverdunklung scharf begrenzt ist, ist $\Delta\lambda$ entsprechend gut meßbar. Das betrifft insbesondere Sterne vom Spektraltyp A und B, bei denen man Rotationsgeschwindigkeiten zwischen 50 und 250 km/s festgestellt hat. Noch höhere Geschwindigkeiten (bis zu 350 km/s) wurden bei Emissionsliniensternen früher Spektraltypen beobachtet (z.B. Oe, Be). Die Ausbildung der für diese Sterntypen charakteristischen Emissionslinien wird wahrscheinlich durch Gasverlust an ihrem Äquator (Zentrifugalkräfte) begünstigt, wobei kontinuierlich Material zum Aufbau und zur Aufrechterhaltung einer ausgedehnten Hülle nachgeliefert wird. In dieser dünnen Gashülle entstehen dann die in den Spektren beobachteten Emissionslinien.

Aus der bei manchen Sternen beobachteten periodischen Änderungen des Rotationsprofils konnte eine raffinierte Methode zur bildmäßigen Rekonstruktion der „Sternoberfläche“ entwickelt werden die auch funktioniert, wenn sich der Stern selbst nicht im Teleskop auflösen läßt. Diese Methode wird als „Doppler Imaging“ bezeichnet und wurde 1958 von ARMIN DEUTSCH vorgeschlagen.

Doppler Imaging

Solange sich ein Stern in einem Teleskop nicht räumlich auflösen läßt, erscheint es auf dem ersten Blick fast aussichtslos, Informationen über die flächenhafte Verteilung von Strukturen in dessen Photosphäre durch Beobachtungen zu erhalten. Solche Informationen können aber durchaus in den Sternspektren vorhanden sein, wie bereits 1958 ARMIN DEUTSCH zeigen konnte.

Angenommen, ein größerer „Sternfleck“ (ähnlich einem Sonnenfleck) wandert aufgrund der Eigenrotation des Sterns über die Sternoberfläche. Seine Radialgeschwindigkeit ist am Größten, wenn

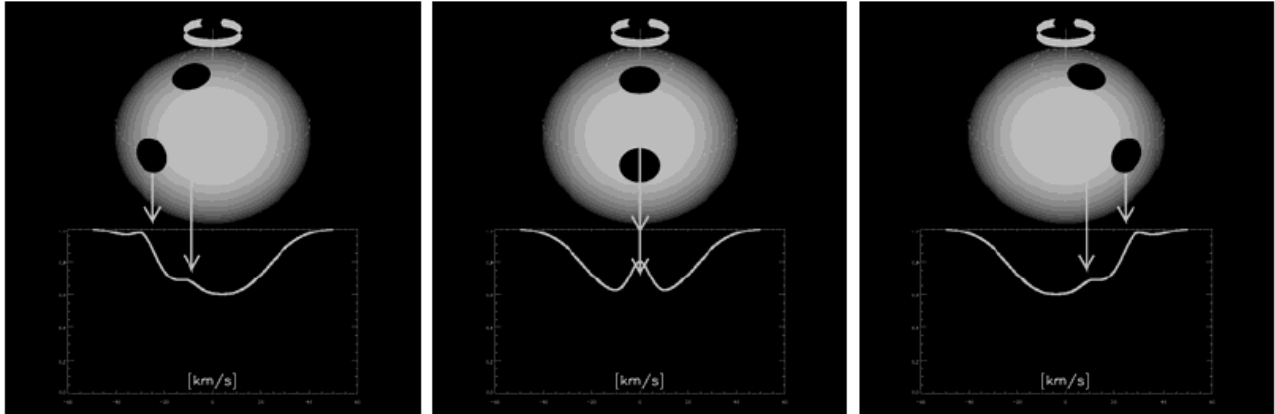
er entweder gerade an einem Rand des Sterns auftaucht oder am anderen Rand des Sterns wieder verschwindet. Das Licht, welches von diesem Fleck emittiert wird, weist deshalb über den Zeitraum einer halben Rotationsperiode eine wechselnde Rotverschiebung auf. Da sich seine Intensität von der Umgebung unterscheidet, macht er sich im Linienprofil durch eine Einsenkung (er ist dunkler als seine Umgebung) oder durch eine Intensitätserhöhung (er ist heller als seine Umgebung) bemerkbar (also in Form von sogenannten „bumps“), wobei diese Abweichung von der Linienkontur innerhalb einer halben Rotationsperiode über das gesamte Linienprofil wandert. Eine genaue Analyse von Zeitreihen hochauflösender Spektren eines genügend schnell rotierenden Sterns sollte deshalb Informationen über das Vorhandensein und die Verteilung von Strukturen in der Photosphäre des jeweiligen Sterns liefern können. Von S.S.VOGT und G.D.PENROD ist 1983 an dem Stern HR 1099 (einem Veränderlichen vom Typ RS Canis Venaticorum) exemplarisch gezeigt worden, dass die hier vorgestellten Ideen auch wirklich funktionieren. Von Ihnen stammt übrigens die Bezeichnung „Doppler Imaging“, welches sich seitdem neben dem Begriff der „Doppler Tomographie“ für dieses spezielle bildgebende Verfahren durchgesetzt hat.

Die für die Analyse benutzten Spektrallinien müssen bestimmte Voraussetzungen erfüllen, um brauchbare Ergebnisse zu liefern. Ihr Profil sollte beispielsweise fast ausschließlich durch die Rotation festgelegt sein, was bei Rotationsgeschwindigkeiten von mehr als 20 km/s meistens der Fall ist. Außerdem dürfen sie noch keine Sättigung im Bereich ihres Minimums aufweisen (optisch dünne Linien). Durch moderne elektronische Aufnahmeverfahren konnte das Signal- zu-Rausch-Verhältnis bei der Spektrengewinnung gegenüber fotografischen Verfahren um Einiges gesteigert werden, so dass sich geringe Veränderungen in der Linienkontur erfolgreich vermessen lassen. Unter bestimmten Umständen können aus einer Anzahl von solchen (eindimensionalen) Linienprofilen zweidimensionale (monochromatische) Intensitätsverteilungen auf der Sternscheibe berechnet werden. Der zur Lösung dieses „inversen“ Problems notwendige Rechenaufwand ist zwar sehr hoch, aber die einzelnen Schritte von der Photometrie der Spektrallinie bis zum Zeichnen einer Intensitätskarte lassen sich sehr gut algorithmisieren.

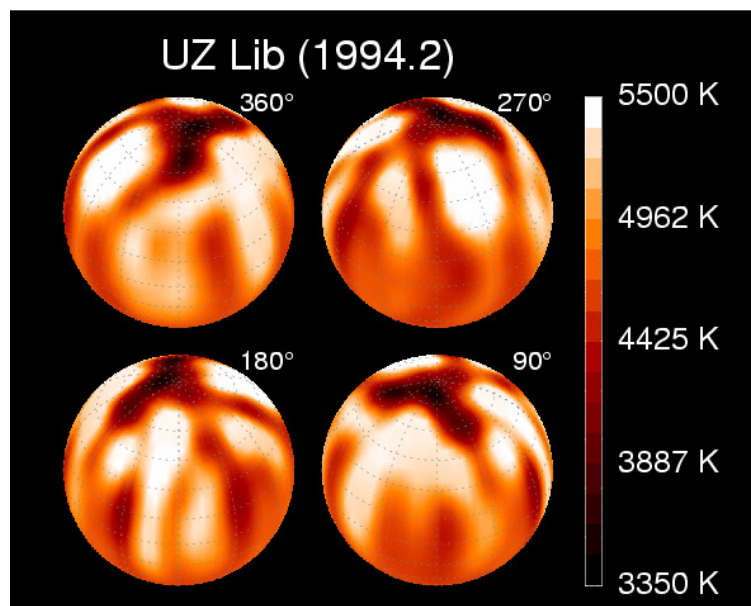
Bleibt noch die Frage zu beantworten, inwieweit man den berechneten Intensitätsverteilungen glauben schenken darf. Diese Frage ist keineswegs trivial, da verschiedene Helligkeitsverteilungen auf der Sternscheibe durchaus zu einer Abfolge ähnlicher Linienprofile (die aufgrund des Rauschens nicht unterscheidbar sind) führen können. Doppler Imaging gehört mathematisch gesprochen zu den schlecht konditionierten Problemen und man muß viel Aufwand betreiben, um aus der Klasse der möglichen Intensitätsverteilungen die jeweils Wahrscheinlichste zu finden. Ein Verfahren zur Lösung dieses Problems soll hier nur als Begriff erwähnt werden, die Maximum-Entropie-Methode. Neuerdings gelangen auch mit steigendem Erfolg evolutionäre Algorithmen zum Einsatz, um auf indirekte Art und Weise Oberflächenkarten von Sternen aus Linienprofilen abzuleiten.

Von der Sonne weiß man, dass ihre Aktivitätszyklen physikalisch mit dem internen Dynamo zu tun haben, der für die Entstehung und Aufrechterhaltung des solaren Magnetfeldes verantwortlich ist. Bei anderen Sternen ist das natürlich ähnlich. Indem man Sternflecken untersucht, lassen sich wertvolle Informationen (oftmals im Zusammenspiel mit anderen Beobachtungsverfahren) über eventuell vorhandene Magnetfelder, ihre Stärke und zeitliche Entwicklung gewinnen. Insbesondere die Einbeziehung von Spektrallinien, die durch lokale Magnetfelder aufgrund des Zeeman-Effektes in mehrere, unterschiedlich polarisierte Komponenten aufgespalten werden, führten zu wichtigen neuen

Erkenntnissen über die physikalischen Bedingungen bei magnetischen Sternen. Das indirekte Bildgebungsverfahren, welches auf der Ausnutzung beider Effekte (also Doppler-Effekt und Zeeman-Effekt) beruht, liefert im Prinzip ähnliche Informationen wie die Magnetogramme der solaren Astronomie und wird deshalb auch als *Zeeman-Doppler-Imaging* bezeichnet.



Entstehung eines “bumps“ im Dopplerprofil einer Spektrallinie durch eine kühlere und damit weniger intensiv strahlende Struktur in der Photosphäre eines Sterns © J.B.Rice, 2002



Temperaturverteilung in der Photosphäre des Sterns ZU Lib, einem sehr aktiven RS CVn-Stern, abgeleitet aus Dopplerprofilen © K.G.Strassmeier et.al.

Druckverbreiterung von Spektrallinien

Die sogenannten Stoßdämpfung entsteht aufgrund der Wechselwirkung der angeregten Atome mit geeigneten Stoßpartnern immer dann, wenn die Dichte und damit der Druck eines Gases einen Wert erreicht, bei dem die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen in der gleichen Größenordnung liegt wie der Lebensdauer der angeregten Zustände selbst. Oder anders ausgedrückt (H.A.LORENTZ), die „atomare Schwingung“ der Frequenz $\omega_0 = 2\pi\nu_0$ wird bei einem Stoß derart gestört, daß sie quasi „außer Phase“ gerät was einer Dämpfung mit einer Dämpfungskonstanten γ gleichkommt. Klassisch läßt sich dieser Sachverhalt durch das Verhalten eines gedämpften harmonischen Oszillators beschreiben:

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad [1.175]$$

Bei schwacher Dämpfung (was man bei optischen Strahlungsübergängen voraussetzen kann) ergibt sich als Lösungsfunktion:

$$x(t) = x_0 \exp\left(-\frac{\gamma t}{2}\right) \cos\left(\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}} t\right) \quad [1.176]$$

Um daraus das Linienprofil zu erhalten, führt man eine Fouriertransformation durch und berechnet daraus die frequenzabhängige Intensitätsverteilung $I(\omega)$:

$$I(\omega) = \frac{\gamma/2\pi}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2/4} \equiv L(\omega_0 - \omega) \quad [1.177]$$

wobei die Dämpfungskonstante γ mit der Lebensdauer des angeregten Zustandes folgender-maßen verknüpft ist:

$$\gamma = \frac{1}{2\pi \Delta t^*} \quad [1.178]$$

Nach (1.162) führt eine Verringerung der Lebensdauer aufgrund der Heisenberg'schen Unschärferelation zu einer erhöhten Energieunschärfe und damit automatisch zu einer Verbreiterung der Spektrallinien. Bei den Stößen zwischen den Atomen bzw. Molekülen kann es sich entweder um elastische oder um inelastische Stöße (also mit Energieübertragung) handeln. Bei inelastischen Stößen wird z.B. ein Teil der Anregungsenergie in kinetische oder innere Energie des Stoßpartner überführt, was i.d.R. zu einer sofortigen Abregung, d.h. zu einer Verkürzung der Lebensdauer Δt_n^* des angeregten Zustandes führt:

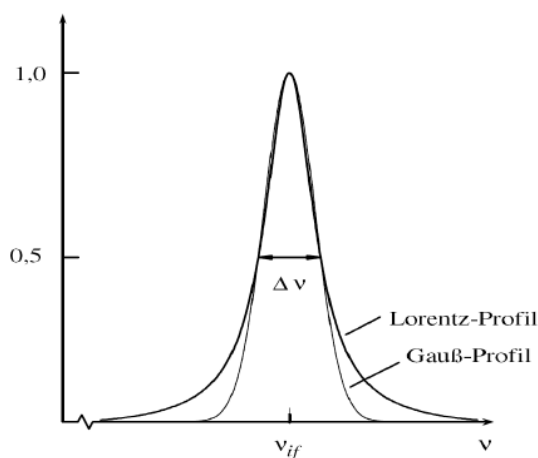
$$\Delta\lambda \approx \frac{\lambda^2}{2\pi c} \left(\frac{1}{\Delta t_m} + \frac{1}{\Delta t_n^*} \right) \quad [1.179]$$

Da viele Teilchen in einem Plasma elektrisch geladen sind (Elektronen, Ionen), wird es bei einer Annäherung an einen Stoßpartner zur Überlagerung der einzelnen individuellen elektrischen Felder

kommen, was zu einer zeitabhängigen Störung der Energieniveaus der in einem Atom oder Ion gebundenen Elektronen führt. Dieser bereits 1913 von ANTONIO LO SURDO und JOHANNES STARK (1874-1957) unabhängig voneinander entdeckte Effekt (er wird seitdem Stark-Effekt genannt), liefert die grundlegenden Mechanismen, die für das Profil einer druckverbreiterten Spektrallinie im wesentlichen verantwortlich sind. Der Stark-Effekt führt unter der Präsenz eines starken elektrischen Feldes E zu einer Aufspaltung der Energieniveaus der Atome. Der Betrag der Aufspaltung ist dabei entweder der Feldstärke direkt proportional (linearer Stark-Effekt) oder hängt quadratisch von ihr ab (quadratischer Stark-Effekt). Der lineare Effekt wird nur bei Atomen beobachtet, die in der Nebenquantenzahl l entartet sind. Diese Entartung wird durch den Einfluß eines externen elektrischen Feldes aufgehoben was zu einer Aufspaltung des Niveaus E_n in $(2n-1)$ Komponenten führt. Jedem Wert von l sind bekanntlich aufgrund des Elektronenspins s genau zwei Werte von j (Gesamtdrehimpuls) zugeordnet und da es zu jeder Haupt-quantenzahl n genau $2(n-1)$ Werte von j gibt, ist das entsprechende Niveau auch $(2(n-1))$ -fach entartet.

Der quadratische Effekt tritt dagegen bei jedem Atom auf, da er zu einer dem Quadrat des äußeren Feldes E proportionalen Verschiebung der Energieniveaus entlang der Energieachse (S-Niveaus) bzw. zu deren Aufspaltung (z.B. D- und F-Niveaus) führt. Erreicht die Feldstärke schließlich einen Wert, bei der es zu einer Aufhebung der Entartung der Multiplettzustände kommt, dann geht der quadratische Effekt in den linearen über.

In Sternspektren ist der Stark-Effekt (im Unterschied zum Zeeman-Effekt) selbstverständlich niemals in seiner reinen Form zu beobachten. Dazu wären homogene makroskopische elektrische Felder notwendig, die in Sternatmosphären nicht vorkommen. Bei Stoßprozessen bzw. bei nahen Vorübergängen von Ionen und Elektronen kommt es jedoch zu schnell wechselnden Mikrofeldern, die zu einer jeweils individuellen und zeitlich veränderlichen Verschiebung der atomaren Energieniveaus im Sinne des Stark-Effektes führen. In der Summe bedingt dieser Vorgang eine Verbreiterung der Spektrallinien die um so ausgeprägter ist, je häufiger derartige Wechselwirkungen stattfinden. Da die Stoßwahrscheinlichkeit mit zunehmender Dichte (also zunehmenden Druck P) zunimmt, ist die Druckverbreiterung der Spektrallinien ein guter Indikator, um die Elektronen- und Ionendichte im Emissions- bzw. Absorptionsgebiet einer bestimmten Spektrallinie zu ermitteln.



Lorentz- und Gaußprofil einer Spektrallinie im Vergleich

Nicht unerwähnt soll bleiben, daß auch Stöße zwischen neutralen Atomen einen Beitrag zur Druckverbreiterung einer Spektrallinie liefern können. Bei einem nahen Vorübergang zwischen zwei neutralen Atomen wird u.U. für kurze Zeit ein Dipolmoment induziert (van der Waals-Kräfte), das wiederum zu einer Abregung eines angeregten Zustandes führen kann. Bei kühleren Hauptreihensternen vom Typ „Sonne“ überwiegt genau diese Art von Stoßdämpfung, die hauptsächlich von neutralen Wasserstoffatomen in der Photosphäre hervorgerufen wird. In solch einem Fall ist die Dämpfungskonstante γ (1.178) dem (reziproken) Abstand r^{-n} mit $n=6$ der beteiligten Atome proportional. Allgemeiner läßt sich die Dämpfungskonstante (oder allgemeiner, die „Verstimmung“ eines Emissions- bzw. Absorptionsvorgang) durch eine Beziehung der Form

$$\gamma \sim \frac{C_n}{r^n} \quad [1.180]$$

darstellen. Der Exponent n hängt dabei von der Art der Wechselwirkung ab während C_n als Wechselwirkungskonstante (die u.a. atomare Kenngrößen zusammenfaßt) bezeichnet wird.

n	Art der Wechselwirkung	Niveaus	Anwendung / Vorkommen
2	Linearer Stark-Effekt	entartet	Balmer-Linien, bestimmte Heliumlinien (He^+); Ableitung der Elektronendichte
3	Eigendruckverbreiterung	entartet	Störung durch (neutrale) gleichartige Atome; tritt besonders bei Sternen späterer Spektraltypen auf; Ableitung der Gasdichte
4	Quadratischer Stark-Effekt	nicht entartet	Heliumlinien bei frühen Spektraltypen; ausgeprägter bei Elementen größerer Ordnungszahl; Ableitung der Elektronendichte
6	van der Waals -Wechselwirkung	nicht entartet	Wechselwirkung bei Stöße mit neutralen Wasserstoff- oder anderen neutralen Atomen (Fremdgasverbreiterung); Hauptreihensterne, bei denen nur ein Bruchteil des Wasserstoffs in deren Atmosphären ionisiert vorliegt, z.B. Sonne; Ableitung der Gasdichte

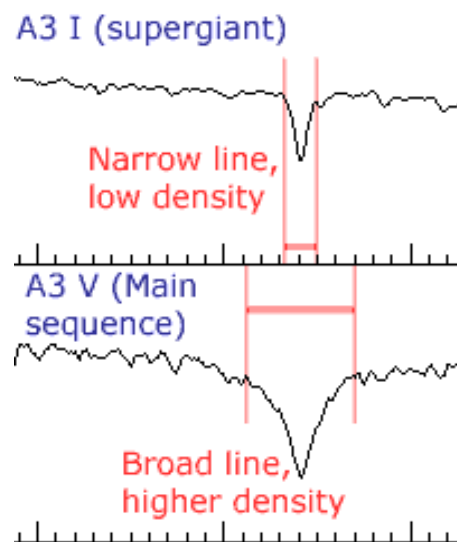
Das Linienprofil $L(\omega_0 - \omega)$, welches sich aufgrund von Kollisionen der strahlenden Atome mit anderen Teilchen ausbildet, bezeichnet man als Dispersions- bzw. Lorentz-Profil. Es unterscheidet sich vom Gauß-Profil $G(\omega_0 - \omega)$ des thermisch bedingten Dopplereffekts dadurch, das es im Zentralbereich spitzer als eine Gaußkurve erscheint während es in der unteren Hälfte langsamer abfällt und auf diese Weise die auffälligen Linienflügel entstehen. Wenn jeweils einer von beiden Effekten überwiegt, sind beide Linienprofile gut voneinander zu unterscheiden. Andererseits ergibt sich durch Überlagerung (genauer Faltung, s.u.) ein neues Profil, welches unter dem Namen Voigt-Profil bekannt ist.

Bei den Wechselwirkungen, die zum Stark-Effekt führen, spielen neben Ionen auch freie Elektronen eine Rolle, deren elektrische Felder insbesondere Wasserstoff- und einige Heliumterme stören können (linearer Effekt). Eine detailliertere Analyse der Wechselwirkungsvorgänge (die ja statistischer Natur sind) führt zu einem Linienprofil, welches nicht genau mit dem reinen Dispersionsprofil, welches sich aus der klassischen Theorie ergibt, übereinstimmt. Es wird als Holtsmark-Profil (J.HOLTSMARK, 1919) bezeichnet und berücksichtigt die gleichzeitige Störung eines angeregten Zustandes durch mehrere geladene Teilchen in dessen unmittelbarer Umgebung. Dadurch ist es in der Lage, insbesondere die Linienflügel von druckverbreiterten Spektrallinien genauer zu erfassen. Man verwendet es z.B. um aus Balmerlinienprofilen Elektronendichten in Sternatmosphären abzuleiten.

Da die Atmosphären von Riesen- und Überriesensternen relativ dünn sind, spielt bei ihnen die Druckverbreiterung keine oder nur eine untergeordnete Rolle. Anders sieht es schon bei den weitaus kompakteren Hauptreihensternen aus. Die mittlere Zeit zwischen den Stößen der Gasteilchen in ihren Atmosphären läßt sich leicht aus der kinetischen Gastheorie ableiten und beträgt

$$\bar{t} = \frac{1}{n d^2} \sqrt{\frac{m}{16\pi kT}} \quad [1.181]$$

wobei n die Teilchenzahldichte, m die Teilchenmasse, d der „Atomdurchmesser“ und T die kinetische Temperatur ist. Setzt man $\bar{t} \approx \Delta t^*$ (1.178) dann erkennt man, daß sich (vorausgesetzt, die Temperatur T ist anderweitig bekannt) aus der Halbwertsbreite einer geeigneten Spektrallinie die Teilchenzahldichte n (und darüber der Gasdruck P) bestimmen läßt.



Auswirkung unterschiedlichen Gasdrucks bei A-Überriesen und A-Zwergsternen auf eine Balmerabsorptionslinie

Wie bereits erwähnt, sind die Linien der Balmerreihe besonders leicht durch den linearen Stark-Effekt zu beeinflussen. Ihre Linienstärke ist deshalb ein wichtiges Kriterium, um Sterne gleichen Spektraltyps in unterschiedliche Leuchtkraftklassen einzuordnen. Aufgrund der Anregungsbedingungen betrifft das im Wesentlichen nur späte B-Typen und den Spektraltyp A, bei dem die Balmerabsorptionen am deutlichsten ausgeprägt sind. Die Balmerlinien sind bei Überriesen vom Typ A bedeutend schwächer

als bei Hauptreihensternen gleichen Spektraltyps. Die Ursache dafür liegt in der Zunahme der Teilchenzahldichte (und damit des Gasdrucks) in deren Atmosphären bei gleichzeitiger Abnahme der Sternradien.

Die Druckverbreiterung kann u.U. solche Ausmaße annehmen, daß z.B. bei manchen Weißen Zwergsternen die Balmerabsorptionslinien über einen großen Bereich des Kontinuums regelrecht verschmiert werden.

Die Inglis-Teller-Beziehung

Entsprechend (1.105) mit $n=2$ nehmen die Linienabstände $\Delta\lambda$ mit wachsendem m immer mehr ab bis die Linienserie im Grenzfall $m \rightarrow \infty$ bei $\lambda = 364.6 \text{ nm}$ in das Balmer-Grenzkontinuum übergeht. Unter der Wirkung des linearen Stark-Effektes wächst jedoch mit steigenden n (Hauptquantenzahl) auch die der Aufspaltung der Terme $(2n-1)$ an, was unter der Einwirkung von Mikrofeldern, die durch die Teilchen eines Elektronengases der Dichte N_e erzeugt werden, zu einer Linienverbreiterung führt. Damit verschiebt sich die Grenze, ab der die Linien der Serie nicht mehr aufgelöst werden können (aufgrund der Überlappung der druckverbreiterten Spektrallinien), in Richtung höherer Wellenlängen. D.A.INGLIS und EDWARD TELLER (1908-2003) haben 1939 eine Beziehung abgeleitet, welche die Elektronendichte N_e zu der Quantenzahl n_m in Beziehung setzt, die zu der Linie im Bereich der Seriengrenze gehört, die gerade noch aufgelöst werden kann:

$$\log N_e = 23.26 - 7.5 \log n_m \quad \text{unter der Bedingung } T \ll 10^5 / n_m \quad [1.182]$$

Indem man auf einem hochaufgelösten Spektrum die Nummer der letzten einzeln sichtbaren Balmerlinie bestimmt, erhält man mit (1.182) einen Wert für die Anzahl der Elektronen pro Volumeneinheit in der jeweiligen Sternatmosphäre. Einige typische Werte sind in folgender Tabelle angegeben:

Stern	Spektraltyp	$n_{\max}$	$\log N_e$
$\alpha \text{ Cyg}$	A2I	29	12.3
$\alpha \text{ CMa}$	A2V	18	13.8
$\tau \text{ Sco}$	B0V	14	14.7
Weißer Zwerg	DA	8	16.5

Berechnete Elektronendichten gemäß der Inglis-Teller-Beziehung für verschiedene Sterne (Mihalas, 1970)

Die oben neben (1.182) angegebene Bedingung stellt sicher, daß Elektronenstöße (und nicht Stöße von Ionen) maßgeblich für die Druckverbreiterung verantwortlich sind.

Faltung doppler- und druckverbreiteter Profile - das Voigt-Profil

Die Spektrallinien realer Sterne stellen Überlagerungen zwischen dopplerverbreiterten und durch Druckeffekte verbreiterte Linien dar. Mathematisch wird das durch eine Faltung des Gaußprofils $G(\omega_0 - \omega)$ mit dem Dispersions- oder Lorentzprofil $L(\omega_0 - \omega)$ erreicht, wodurch das Voigt-Profil $H(\omega_0 - \omega)$ entsteht:

$$H = L * G \equiv H(\omega_0 - \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} L(\omega) G(\omega_0 - \omega) d\omega \quad [1.183]$$

(WOLDEMAR VOIGT, 1850-1919)

Leider gibt es keine analytische Lösung des Faltungsintegrals (1.183), so daß es im praktischen Einsatz etwas schwierig anzuwenden ist. Im allgemeinen Fall läßt sich das aus der Faltung resultierende Voigt-Profil

$$H(\omega) = 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{V(x, \beta)}{(\Delta\omega)_{1/2}} \quad [1.184]$$

durch die Voigt-Funktion (auf $\sqrt{\pi}$ normiert)

$$V(x, \beta) = \frac{\beta}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-y^2)}{\beta^2 + (x - y)^2} dy \quad [1.185]$$

darstellen, wobei sich die Parameter x und β folgendermaßen berechnen lassen:

$$\beta = \sqrt{\ln 2} \frac{(\Delta\omega)^{Lorentz}}{(\Delta\omega)^{Gau\beta}} \quad \text{und} \quad x = 2\sqrt{\ln 2} \frac{(\omega - \omega_0)}{(\Delta\omega)^{Gau\beta}} \quad [1.186]$$

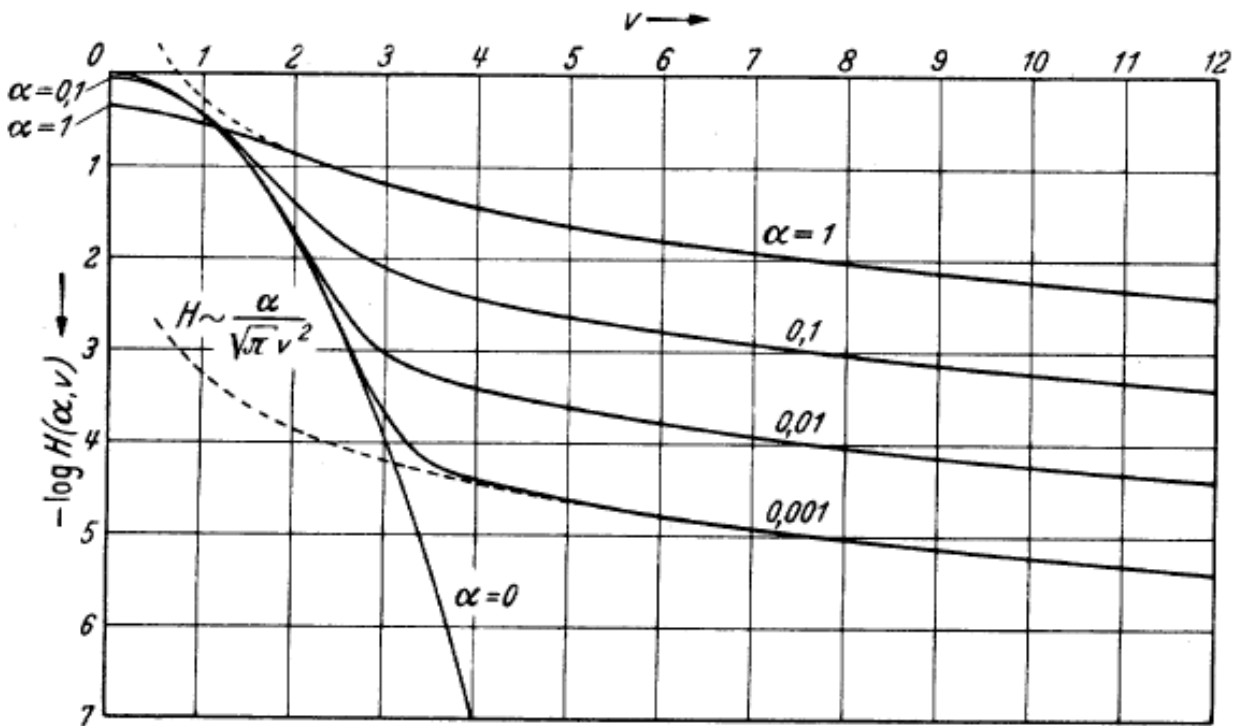
Die Delta-Werte sind dabei die jeweils vollen Halbwertsbreiten in Kreisfrequenzeinheiten und ω_0 die Mittenfrequenz der Linie.

Früher verwendete man zur Linienanalyse umfangreiche Tabellen der Voigt-Funktion in Abhängigkeit ihrer Parameter. Heute existieren eine ganze Anzahl effizienter numerischer Algorithmen zur Berechnung dieser Funktion, die in entsprechenden Computerprogrammen zur automatischen Analyse von Spektrallinien verwendet werden.

Schaut man sich das Voigt-Profil etwas genauer an, dann kann man zwei verschiedene Strukturmerkmale unterscheiden. Der Linienkern ist fast ausschließlich durch die thermische Dopplerverbreiterung bedingt, weshalb man auch von einem Doppler-Kern spricht. Druckeffekte führen dagegen zu ausladenden Linienflügeln, die deshalb oft auch als Dämpfungsflügel bezeichnet werden. Die Linienform wird dabei in erster Linie durch das Verhältnis der „Dämpfungsbreite“ zur „Dopplerbreite“ entsprechend (1.186a, Parameter β) bestimmt. Das ist leicht einzusehen, da der

Doppleranteil mit wachsenden x exponentiell abfällt, die Dämpfung dagegen nur mit $1/\Delta\lambda^2$. Das führt bei größer werdender Dämpfungskonstante zwangsläufig zu einer immer ausgeprägteren Flügelbildung. Annähernd gilt dabei für den Abstand $\Delta\lambda$ von der Linienmitte, wo sich die Dämpfungsflügel vom Dopplerkern lösen

$$\Delta\lambda \approx -\log\left(\frac{\Delta\omega^{\text{Lorentz}}}{\Delta\omega^{\text{Doppler}}}\right)\Delta\lambda_{\text{Doppler}} \quad [1.187]$$



Voigt-Funktion für verschiedene Werte des Dämpfungsparameters β © Unsöld, 1955

Strahlungstransport in Absorptionslinien (gg-Übergänge)

Eine Absorptionslinie in einem Sternspektrum kann man in einem gewissen Sinn als ein Abbild der Absorptionseigenschaften der Sternatmosphäre in dem Wellenlängenbereich $\Delta\lambda$ betrachten, den die entsprechende Spektrallinie abdeckt. Ein Grund dafür ist in der Temperaturschichtung zu suchen und zwar in dem Sinn, daß sich über den heißen tieferen Schichten des Sterns eine kühlere Gasschicht befindet, in der das Gas quasi durchsichtig wird und an deren Oberfläche die elektromagnetische Strahlung in den interstellaren Raum entweichen kann. Das entspricht in etwa dem Kirchhoff'schen Grundversuch, bei dem eine kontinuierliche Strahlungsquelle durch ein durchsichtiges Behältnis mit einem kühleren Gas beobachtet wird und man genau an den Positionen im Spektroskop dunkle Linien erkennen kann., wo das gleiche Gas bei hohen Temperaturen (wenn es quasi selbst strahlt) Emissionslinien zeigt. Um die Entstehung und das Profil einer Spektrallinie zu verstehen, muß man demnach im Detail untersuchen was genau physikalisch mit einem kontinuierlichen Strahlungsfeld passiert (dargestellt durch eine Planck'sche Funktion B_λ gemäß (1.37)), wenn es aus dem Sterninneren

kommend die Sternatmosphäre durchquert. Diese Aufgabenstellung begründet die Theorie des Energietransports durch Strahlung (Strahlungstransport, *radiative transfer*), welche gleichermaßen auch eine Theorie des physikalischen Aufbaus von Sternatmosphären (soweit man konvektiven Energietransport vernachlässigen kann) ist. Sobald nämlich die grundlegenden Prozesse der Wechselwirkung eines gegebenen Strahlungsfeldes mit der Materie bekannt sind, läßt sich im Umkehrschluß aus der Auswertung von Sternspektren auf den Aufbau der dazugehörigen Sternatmosphären schließen (quantitative Spektralanalyse).

Die erste Frage, die beantwortet werden soll, ist die Frage, wie sich die Intensität I der Strahlung beim Durchgang durch eine rein absorbierende Schicht verändert. Zuvor soll präzisiert werden, was im Folgenden unter Intensität I bzw. „spezifischer Intensität“ I_ν bei der Frequenz ν zu verstehen ist. dA soll ein Flächenelement sein, welches sich irgendwo im Strahlungsfeld befindet. Die Ausbreitungsrichtung des Strahlungsfeldes und die Richtung des Normalenvektors $\mathbf{n}$ des Flächenelements bilden den Winkel ϑ , so daß $dA \cos \vartheta$ die in Einstrahlungsrichtung projizierte Fläche ist. Die Strahlung selbst stammt aus dem Raumwinkelbereich $d\omega$ und dem Frequenzbereich $\nu + d\nu$. Pro Zeiteinheit dt strömt dann genau die Energie

$$dE = I_\nu \cos \vartheta dA d\omega dt d\nu \quad [1.188]$$

durch das Flächenelement dA . Hieraus läßt sich sofort die SI-Einheit für die spezifische Intensität ablesen: Watt pro Quadratmeter, Steradian und Hertz ($W m^{-2} ster^{-1} Hz^{-1}$). Physikalisch stellt die spezifische Intensität bei kosmischen Objekten eine Flächenhelligkeit dar, die wegen

$$\frac{dI_\nu}{ds} = 0 \quad [1.189]$$

(wenn sich zwischen Beobachter und beobachtetes Objekt Vakuum befindet) entfernungsunabhängig ist.

Die Gesamtintensität I erhält man durch Integration über den gesamten Frequenzbereich:

$$I = \int_0^\infty I_\nu d\nu \quad [1.190]$$

Unter der Strahlungsflußdichte F_ν versteht man die Leistung pro Flächeneinheit und Frequenzintervall, die sich aus (1.188) durch Integration über den Raumwinkel ω , welche die Quelle am Himmel einnimmt, ergibt:

$$F_\nu = \frac{1}{dA dt d\nu} \int dE = \int I_\nu \cos \vartheta d\omega \quad [1.191]$$

Diese Größe hängt von der Entfernung von der Strahlungsquelle ab. Ein typisches Beispiel für diese Größe ist die Solarkonstante S .

Integriert man über alle Frequenzen, dann erhält man mit (1.190):

$$F = \int I \cos \vartheta d\omega \approx \int I d\omega \quad \text{wenn die Winkelausdehnung der Strahlungsquelle sehr klein ist} \quad [1.192]$$

Integriert man (1.193) dagegen nur über einen Halbraum (Kugelschale), dann folgt für ein isotropes Strahlungsfeld:

$$F = I \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \pi I \quad [1.194]$$

Das ist die Strahlungsenergie, die pro Zeiteinheit die Einheitsfläche verläßt.

Wie ändert sich nun die Strahlungsintensität, wenn sie eine absorbierende Schicht durchläuft? Angenommen, an einer bestimmten Stelle R (vom Zentrum des Sterns gemessen) sei die Intensität I . Ein kleines Stück weiter (also an der Position $R+ds$) hat sich die Intensität aufgrund von Absorptionsprozessen um $I+dI$ verändert. Da es sich dabei um eine Abschwächung handelt, ist dI ein negativer Wert. Bezeichnet man mit κ den Absorptionskoeffizienten (welcher eine Materialeigenschaft darstellt und in diesem Beispiel die Absorptionsfähigkeit des Sternplasmas beschreibt), dann gilt für die Verringerung der Intensität I über die Strecke ds

$$-\frac{dI}{I} = \kappa ds \quad [1.195]$$

Wie ein Blick auf ein Sternspektrum eindrucksvoll beweist, muß die Größe κ (und damit auch die Intensität I) eine (meist komplizierte) Funktion der Frequenz ν sein:

$$-\frac{dI_\nu}{I_\nu} = \kappa(\nu) ds \quad [1.196]$$

Da κ_ν nichts anderes ist als ein Wirkungsquerschnitt pro Volumeneinheit, wird er in einer reziproken Längeneinheit gemessen (in SI in m^{-1}). Er gibt den Bruchteil der Intensitätsänderung an, den die Strahlung pro Meter Weg erfährt. Da die Absorptionsvorgänge durch Teilchen entlang des Lichtwegs hervorgerufen werden, hängt κ_ν offensichtlich von der Anzahl dieser (absorbierenden) Teilchen pro Volumeneinheit, also von deren Dichte ρ ab:

$$\tilde{\kappa}_\nu = \frac{\kappa_\nu}{\rho} \quad (\text{Massenabsorptionskoeffizient}) \quad [1.197]$$

Diese Größe wird oft verwendet, wenn man die Intensitätsänderung, die beim Durchgang von Strahlung durch eine Gassäule mit dem Wirkungsquerschnitt 1 m^2 und einem Masseinhalt von 1 kg absorbierender Materie auftritt, benötigt.

Bezieht man κ_ν auf jeweils ein absorbierendes Teilchen, dann spricht man von einem atomaren Absorptionskoeffizienten und die Größe entspricht einem klassischen Streuquerschnitt, deren SI-Einheit bekanntlich m^2 ist.

Den Absorptionskoeffizienten κ_ν kann man zur Definition einer weiteren, recht anschaulichen Größe - der optischen Tiefe τ_ν - verwenden. Diese neue Größe stellt ein Maß für die „Durchsichtigkeit“ einer Sternatmosphäre bei einer gegebenen Frequenz ν dar und wird über das Wegintegral über den Absorptionskoeffizienten in radialer Richtung berechnet:

$$\tau_\nu = \int_0^r \kappa_\nu dr \quad [1.198]$$

dr bezeichnet in dieser Beziehung ein Wegelement längs des Sternradius und wird von Außen nach Innen positiv gezählt während ds ein Wegelement längs eines Lichtstrahls ist. Betrachtet man die Intensität I_ν der Strahlung, die radial aus dem Stern austritt ($dr=ds$), dann folgt aus (1.196) durch Integration

$$I_\nu = I_{\nu,0} \exp(-\tau_\nu) \quad [1.199]$$

d.h. die Intensität $I_{\nu,0}$ der Strahlung, die aus einer optischen Tiefe von $\tau_\nu = 1$ stammt, ist an der Sternoberfläche auf $I_{\nu,0} / e$, d.h. auf rund 37 % ihres ursprünglichen Wertes gefallen.

Medien, die bei einer bestimmten Frequenz ν eine optische Tiefe $\tau_\nu \gg 1$ besitzen, bezeichnet man bei dieser Frequenz als „optisch dick“; andernfalls spricht man von „optisch dünnen“ Medien. Die Erdatmosphäre ist z.B. im Bereich des sichtbaren Lichtes „optisch dünn“, während sie im fernen UV und im Röntgenbereich „optisch dick“ ist.

In der Sternmaterie finden natürlich nicht nur Absorptionsvorgänge statt. Analog zum Absorptionskoeffizienten κ_ν kann deshalb auch ein Emissionskoeffizient ϵ_ν eingeführt werden welcher angibt, wieviel Energie pro Sekunde und Kubikmeter bei der Frequenz ν in den Raumwinkel $d\omega = 1$ emittiert wird:

$$dI_\nu = \epsilon_\nu ds \quad [1.200]$$

Oder anders ausgedrückt, diese Beziehung erfaßt die längs des Weges zusätzlich emittierte Energie so daß sich unter der Voraussetzung, daß die Strahlung eine planparallele Schicht unter dem Winkel ϑ durchdringt, folgende Bilanzgleichung aufstellen läßt:

$$\cos \vartheta \frac{dI_\nu}{ds} = -\kappa_\nu I_\nu(\vartheta) + \epsilon_\nu \quad [1.201]$$

Man beachte dabei, daß der erste Summand richtungsabhängig und der zweite richtungsunabhängig ist. Auch der Emissionskoeffizient ist gewöhnlich eine komplizierte Funktion der Frequenz und hängt von den physikalischen Bedingungen am Ort der Emissionsvorgänge ab.

Lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE) und der Kirchhoffsche Satz

Da Sternatmosphären einen radialen Temperaturgradienten aufweisen, können sie sich nicht im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Thermodynamisches Gleichgewicht setzt voraus, daß überall die gleiche Temperatur T herrscht und das Strahlungsfeld isotrop ist - Bedingungen, die nach Definition genaugenommen nur für Schwarzen Strahler gelten. Im kosmischen Raum erfüllt lediglich das 3K Hintergrundstrahlungsfeld weitgehend diese einschränkenden Forderungen.

Es ist aber realistisch, die Bedingung des thermodynamischen Gleichgewichts für ein Volumenelement dV innerhalb einer (nicht zu dünnen) Sternatmosphäre anzunehmen. In solch einem Fall spricht man von einem lokalen thermodynamischen Gleichgewicht, welches gewöhnlich mit LTE (*local thermodynamical equilibrium*) abgekürzt wird. Es erlaubt die uneingeschränkte Anwendung des Kirchhoffschen Satzes, nach der das Absorptionsvermögen eines Mediums gleich seinem Emissionsvermögen ist, also mit der Planck-Funktion $B_\nu(T)$:

$$\varepsilon_\nu = \kappa_\nu B_\nu(T) \quad [1.202]$$

Das Verhältnis zwischen Emissionskoeffizient und Absorptionskoeffizient, welches für eine gegebene Temperatur T die Gleichung (1.202) erfüllt, wird gewöhnlich als „Ergiebigkeit“ oder im englischsprachigen Raum als „*source function*“ bezeichnet:

$$S_\nu = \frac{\varepsilon_\nu}{\kappa_\nu} \quad [1.203]$$

Mit $d\tau_\nu = -\kappa_\nu ds$ kann dann (1.201) wie folgt geschrieben werden:

$$\cos \vartheta \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu(\vartheta) - S_\nu \quad [1.204]$$

Diese lineare Differentialgleichung 1. Ordnung in der Form einer Strömungsgleichung nennt man in der Astrophysik Strahlungstransportgleichung. Sie gilt für jeweils eine bestimmte Frequenz und kann zur Behandlung von Strahlungstransportprozessen in Sternen verwendet werden, bei denen die Bedingung $\Delta R / R \ll 1$ erfüllt ist, wobei ΔR die Mächtigkeit der Sternatmosphäre angibt. Kommen dagegen die Außmaße der Sternatmosphären in die gleiche Größenordnung wie ihre Radien (wie es z.B. bei kühleren Riesensternen der Fall ist), dann muß man ihre Kugelsymmetrie bei der Ableitung der Strahlungstransportgleichung auf jeden Fall berücksichtigen.

Durch Integration unter Verwendung des integrierenden Faktors $e^{-\tau_\nu}$ erhält man als allgemeine Lösung von (1.204) die Intensität $I_\nu(\vartheta)$, welche unter einem Winkel ϑ die Stern-oberfläche ($\tau_\nu = 0$) verläßt (eventuell von außen einfallende Strahlung wird vernachlässigt):

$$I_\nu(\vartheta) = \int_0^\infty \frac{S_\nu(\tau_\nu)}{\cos \vartheta} \exp\left(-\frac{\tau_\nu}{\cos \vartheta}\right) d\tau_\nu \quad [1.206]$$

(da in der Sternatmosphäre ein von innen nach außen verlaufende Temperaturgradient herrscht, ist entgegen der Annahmen von LTE die Ergiebigkeit eine Funktion der optischen Tiefe was die Auswertung des Integrals sehr erschwert).

Im Allgemeinen läßt sich das Integral (1.206) bis auf einige Spezialfälle nur numerisch auswerten. Eine einfache analytische Lösung existiert jedoch für den Fall, daß die Ergiebigkeitsfunktion ein gewichtetes Mittel aller ihrer Werte in Blickrichtung ist und man senkrecht auf die Sternatmosphäre schaut ($\vartheta = 0$):

$$I_\nu = I_{\nu_0} \exp(-\tau_\nu) + S_\nu (1 - \exp(-\tau_\nu)) \quad [1.207]$$

Angenommen, die Frequenz ν_0 entspricht genau der Frequenz der Linienmitte einer Absorptionslinie. Dann lassen sich in Abhängigkeit der optischen Tiefe τ_ν zwei Fälle unterscheiden:

τ_ν	Grenzwert	Intensität I_ν
$\tau_{\nu_0} \gg 1$ optisch dick	$\exp(-\tau_\nu) \rightarrow 0$	$I_{\nu_0} = S_{\nu_0}$
$\tau_{\nu_0} \ll 1$ optisch dünn	$\exp(-\tau_\nu) \rightarrow 1 - \tau_\nu$	$I_{\nu_0} = \tau_{\nu_0} S_{\nu_0}$

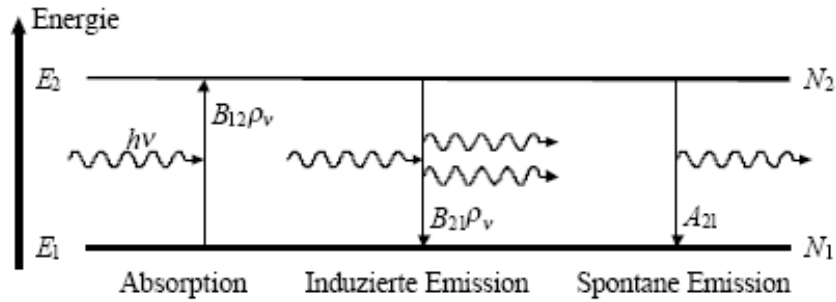
Während optisch dünne Linien immer oberhalb der Sättigungsgrenze bleiben, absorbieren optisch dicke Linien die gesamte bei der Frequenz ν_0 aus dem Sterninnern kommende Strahlung. Es gilt dabei die Faustregel, daß man als Beobachter bis ungefähr in eine optische Tiefe von $\tau_\nu \approx 1$ „sehen“ kann. Optisch dicke Linien entstehen demnach bereits in sehr geringen (geometrischen) Tiefen (die Intensität der Linienmitte entspricht im LTE der Temperatur der Oberkante der absorbierenden Sternatmosphäre) während das Absorptionsgebiet von optisch dünnen Linien in tieferen Schichten der Sternatmosphäre zu suchen ist. Es wurde im Band.12 gezeigt, wie man z.B. aus der Randverdunklung der Sonne auf die vertikale Temperaturschichtung der Photosphäre schließen kann.

Linienabsorptionskoeffizienten

Die in (1.196) und in (1.197) eingeführten Absorptionskoeffizienten haben offensichtlich mikroskopische Ursachen, die im Wesentlichen mit atomaren Wechselwirkungen zwischen einem Strahlungsfeld und freien sowie an Atomen / Molekülen gebundenen Elektronen zu tun haben. Bevor jedoch näher darauf eingegangen wird, soll ein etwas detaillierterer Blick auf die Elementarvorgänge geworfen werden, welche die Absorption und Emission von elektromagnetischer Strahlung betreffen.

Bei einem Übergang zwischen zwei stationären Elektronenzuständen 1 und 2 wird bekanntlich aus dem elektromagnetischen Strahlungsfeld entweder ein Photon der Energie $\Delta E_{12} = h\nu$ entnommen (Absorption) oder abgegeben (Emission). Während ein Absorptionsvorgang immer durch ein äußeres Strahlungsfeld induziert ist, erfolgt eine Emission in der Regel spontan. Es gibt aber auch die Möglichkeit der induzierten Emission, wie sie z.B. bei Laser und bei Maser technisch ausgenutzt wird.

Zwischen diesen drei Strahlungsmechanismen existieren Zusammenhänge, die mittels der Einsteinschen Übergangswahrscheinlichkeiten (Einstein-Koeffizienten) beschrieben werden können.



Mögliche Strahlungsübergänge zwischen zwei Elektronenzuständen der Energie E_1 und E_2

Mit N_1 und N_2 (Besetzungszahl) soll jeweils die Anzahl der Atome in einen der Zustände mit der Energie E_1 und E_2 bezeichnet werden, wobei $E_1 < E_2$ gilt. Weiterhin sei $u_\nu = n(\nu)h\nu$ die spektrale Energiedichte des Strahlungsfeldes bei der Frequenz ν . Dann gilt für die Zahl der Atome, die durch Absorption eines Lichtquants vom Zustand 1 in den Zustand 2 übergehen:

$$-dN_1 = u_\nu N_1 B_{12} dt \quad [1.208]$$

Das Produkt $u_\nu B_{12}$ gibt dabei die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Photon $h\nu$ aus dem umgebenden Strahlungsfeld absorbiert wird. Die gesamte absorbierte Energie ist dann

$$dE_{abs} = h\nu dN_1 \quad [1.209]$$

Aufgrund der Wechselwirkung des Atoms mit dem Nullpunktsstrahlungsfeld wird diese Energie durch spontane Emission wieder abgegeben:

$$dE_{em} = h\nu dN_2 \quad [1.210]$$

Deshalb muß zusätzlich zur induzierten Übergangswahrscheinlichkeit $u_\nu B_{21}$ noch eine Übergangswahrscheinlichkeit A_{21} eingeführt werden, welche die spontane Emission berücksichtigt. Für die Änderung der Besetzungszahl des Zustandes E_2 gilt demnach:

$$-dN_2 = (u_\nu B_{21} + A_{21}) N_2 dt \quad [1.211]$$

Im stationären Fall müssen die sich aus (1.208) und (1.211) ergebenden Zustandsbesetzungen gleich sein, was zu der Beziehung

$$u_\nu N_1 B_{12} = A_{21} N_2 + u_\nu N_2 B_{21} \quad [1.212]$$

führt.

Die Größen A_{21} , B_{12} und B_{21} sind die sogenannten Einstein-Koeffizienten. Physikalisch stellen sie Übergangswahrscheinlichkeiten dar:

A_{21} Übergangswahrscheinlichkeit für spontane Emission

Spontane Emission findet immer dann statt, wenn sich das Elektron in einem oberen Niveau (hier 2) befindet und spontan (unter Aussendung eines Photons) in ein unteres Niveau übergeht. Die Anzahl der spontanen Übergänge hängt dabei von der Anzahl N_2 der Atome ab, die sich gerade im angeregten Zustand 2 befinden sowie von der mittleren Lebensdauer dieses Zustandes. Daraus folgt, daß der Einstein-Koeffizient A_{21} den Kehrwert der Lebensdauer des Zustandes 2 angibt: $A_{21} = \tau_2^{-1}$. Die Zeitkonstante τ hängt dabei von der natürlichen Lebensdauer bzw. von der durch thermische und Stoßprozesse verkürzte Lebensdauer des entsprechenden quantenmechanischen Zustandes ab.

B_{12} Übergangswahrscheinlichkeit für Absorption

Wahrscheinlichkeit dafür, daß aus dem umgebenden Strahlungsfeld ein Photon der Energie $\Delta E = h\nu$ entnommen wird und das Atom aus dem Zustand 1 in den Zustand 2 übergeht. Es handelt sich dabei um den inversen Prozeß der stimulierten Emission. Dieser Vorgang wird manchmal auch als Strahlungsanregung bezeichnet.

B_{21} Übergangswahrscheinlichkeit für stimulierte Emission

Die Anzahl der durch stimulierte Emission erzeugten Photonen hängt neben der Besetzungsdichte des Niveaus 2 von der Richtung und Intensität des Strahlungsfeldes mit den Strahlungsmoden $\Delta E = h\nu$ ab. Stimulierte Emission wird z.B. bei Laser zur Lichtverstärkung ausgenutzt, nachdem durch „pumpen“ eine Besetzungsinversion zwischen den Niveaus 1 und 2 erzeugt wurde (das entspricht nach (1.213) einem Zustand „negativer“ Temperatur).

Geht man davon aus, daß im thermischen Gleichgewicht für das Verhältnis der Besetzungszahlen eine Boltzmann-Verteilung vorliegt, dann erhält man mit

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \quad [1.213]$$

die spektrale Energiedichte

$$u_\nu = \frac{A_{21}}{B_{21}} \frac{1}{\left(\frac{g_1}{g_2}\right) \left(\frac{B_{21}}{B_{12}}\right) \left(\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right)} \quad [1.214]$$

Dabei bezeichnen die Größen g jeweils die statistischen Gewichte der Zustände 1 und 2. Sie geben an, wie oft ein Niveau mit dem Gesamtdrehimpuls J entartet ist (also $g=2J+1$).

Vergleicht man diese Formel mit dem Planckschen Strahlungsgesetz in der Form

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad [1.215]$$

dann ergibt sich

$$A_{21} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{12} \quad [1.216]$$

$$B_{12} = \frac{g_2}{g_1} B_{21} \quad [1.217]$$

Im Fall, daß die beiden Niveaus nicht entartet sind (d.h. $g=1$), stimmen die Einsteinkoeffizienten für Absorption und stimulierte Emission überein.

Anstelle des Koeffizienten B_{12} verwendet man oftmals eine Größe, die noch aus der klassischen Behandlung der Linienemission stammt und als Oszillatorstärke f_{12} für den Absorptionsübergang $E_1 \rightarrow E_2$ bezeichnet wird:

$$f_{12} = \frac{m_e}{\pi e^2} h\nu B_{12} \quad [1.218]$$

Diese Größe wird gewöhnlich experimentell bestimmt. Sie kann aber auch (zumindest für Wasserstoff) mit quantenmechanischen Methoden berechnet werden. Im Fall der Balmer -Alpha und der Balmer-Beta -Linie gilt z.B. $f_{23} = 0.637$ und $f_{24} = 0.119$ (hier sind die Indizes die Hauptquantenzahlen der betreffenden Niveaus im Wasserstoffatom).

Für den Emissionsvorgang $E_2 \rightarrow E_1$ gilt eine zu (1.218) analoge Beziehung, wobei man die Oszillatorstärke (wegen Emission) mit einem Minuszeichen versieht. Mit (1.217) folgt dann die wichtige Beziehung:

$$g_1 f_{12} = -g_2 f_{21} \quad [1.219]$$

Sie sagt aus, daß sich bei Übergängen zwischen jeweils zwei Energieniveaus die Oszillatorstärken für Absorption und Emission wie die statistischen Gewichte der Endzustände verhalten.

Mit diesen Vorarbeiten sollte es nun gelingen, einen Zusammenhang zwischen dem Linienabsorptionskoeffizienten $\kappa(\nu)$ und den atomaren Absorptionsprozessen herzustellen. Die Strahlungsenergie E_ν , die bei der Frequenz ν in einem Strahlungsfeld pro Zeiteinheit in einem Einheitsvolumen enthalten ist, entspricht der spektralen Energiedichte (gemessen in $J m^{-3} Hz^{-1}$)

$$u_\nu = \frac{1}{c} \int I_\nu d\omega \quad [1.220]$$

c Lichtgeschwindigkeit

$$\text{d.h. } I_\nu = \frac{c u_\nu}{4\pi}$$

Die Energie, die dabei pro Sekunde und Flächeneinheit aus dem Strahlungsfeld mit der Intensität I_ν und dem Öffnungswinkel $d\omega$ entnommen wird, ist dann wegen (1.188) und (1.196) $\kappa_\nu I_\nu \cos \vartheta d\nu d\omega$. Geht man davon aus, daß die Fläche senkrecht im Strahlungsfeld steht ($\vartheta=0$) und man über die gesamte Spektrallinie um die Mittenfrequenz ν integriert, dann ergibt sich mit (1.220) für die gesamte pro Zeiteinheit und Einheitsfläche in der Linie absorbierte Energie

$$c u_\nu \int \kappa_\nu d\nu \quad (\text{gemessen in } J m^{-2} Hz) \quad [1.221]$$

Diese Energie muß durch elementare Absorptionsvorgänge von N_2 Atomen, die sich im Zustand E_1 befinden und die jeweils innerhalb einer Sekunde die Energie $h\nu = E_2 - E_1$ dem Strahlungsfeld entnehmen, vom absorbierenden Gas aufgenommen werden. Außerdem ist noch die stimulierte Emission zu berücksichtigen, die zu einer Abgabe eines Extraquants an das Strahlungsfeld führt und in die Rechnung in Form einer „negativen Absorption“ eingeht. Daraus folgt mit (1.212), (1.213) und (1.217)

$$\frac{c}{h\nu} \int \kappa_\nu d\nu = B_{12} N_1 \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right) \quad [1.222]$$

oder nach Einführung der Oszillatorstärke (1.218)

$$\int \kappa_\nu d\nu = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{12} N_1 \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right) \quad [1.223]$$

Der Klammerausdruck berücksichtigt dabei explizit die durch das Strahlungsfeld stimulierte Emission. Für den Linienabsorptionskoeffizienten $\kappa_{gg}(\nu)$ gilt dann unter Einführung einer auf 1 normierten Linienverbreiterungsfunktion $\Phi(\nu)$:

$$\hat{\kappa}_{gg}(\nu) = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{12} N_1 \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right) \Phi(\nu) \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\nu') d\nu' = 1 \quad [1.224]$$

Der Index gg weist auf gebunden-gebunden-Übergänge hin.

Diese Funktion bestimmt das Profil einer Spektrallinie in Abhängigkeit von der Anzahl der an der Absorption beteiligten Atome, deren Eigenschaften (Oszillatorstärke, absorbierte Frequenz) und etwaigen Linienverbreiterungsmechanismen (thermische Verbreiterung, Druckverbreiterung). Was die Linienverbreiterungsfunktion betrifft, hat die größte Bedeutung das bereits vorgestellte Voigt-Profil. Es deckt sowohl Strahlungsdämpfung, thermische Effekte als auch verschiedene Druckverbreiterungsmechanismen ab.

Kontinuierliche Absorption

Neben den im vorigen Abschnitt behandelten gebunden-gebunden-Übergängen zwischen einzelnen diskreten Energieniveaus eines Atoms (oder Moleküls), die zu den individuellen Linien in den Sternspektren führen, existieren darüber hinaus noch sogenannte „gebunden-frei“-Übergänge, bei denen Elektronen aus dem Atomverbund gelöst werden (Photoionisation) sowie frei-frei-Übergänge, die sich auf die Wechselwirkung von freien Elektronen mit dem Coulomb-Feld von Ionen zurückführen lassen. Auch Streuprozesse zwischen Photonen und freien Elektronen sind in diesem Zusammenhang noch zu erwähnen. Alle diese Vorgänge führen zu signifikanten Abweichungen der Kontinuumsstrahlung eines Sternspektrums in Bezug auf die Planck-Funktion $B_\nu(T)$ und damit auf dessen spektrale Energieverteilung. Zur Beschreibung dieser Abweichungen wird der kontinuierliche Absorptionskoeffizient $\hat{\kappa}_\nu$ herangezogen, der von der Art der betrachteten Atome (z.B. Wasserstoff, Helium) oder Ionen (z.B. H^-) sowie von den physikalischen Bedingungen in den Sternatmosphären abhängt (z.B. Temperatur, Gas- und Elektronendruck). Aus diesem Grund spielt er in der Theorie des Sterninneren und der Sternatmosphären eine sehr wichtige Rolle, da diese Größe (in Form der Opazität) im wesentlichen den Energietransport im Sterninneren festlegt.

Gebunden-frei und frei-frei-Übergänge, Streuprozesse

Unter einem gebunden-frei-Übergang versteht man einen Übergang, bei dem ein im Atom gebundenes Elektron im Zustand mit der Hauptquantenzahl n durch Absorption eines genügend energiereichen Photons $E_\gamma = h\nu$ in einen Kontinuumszustand (wo das Elektron einen beliebigen Wert von kinetischer Energie annehmen kann) überführt wird. Die Energiebilanz entspricht dem des äußeren photoelektrischen Effekts:

$$h\nu = (E_{\text{Ion}} - E_n) + E_{\text{kin}} \quad [1.225]$$

E_{Ion} ist dabei die Ionisationsenergie des Atoms und E_{kin} die kinetische Energie des Elektrons in Bezug auf das Atom nach dem Absorptionsvorgang.

Gleichung (1.225) lehrt, daß es für jeden Energiezustand E_n genau eine Schwellenergie $E_{\text{Ion}} - E_n$ geben muß, welches in der Lage ist, das Atom zu ionisieren. Diese (diskrete) Energie hängt von n ab und wird immer geringer, je größer n ist.

Den umgekehrten Vorgang, bei dem ein Elektron von einem Atom (meist einem positiv geladenen Ion) eingefangen wird, bezeichnet man als Rekombination. Dabei wird ein Photon der entsprechenden Energiedifferenz emittiert (frei-gebunden-Übergang). Diese Art von kontinuierlicher Strahlung tritt unter gewissen Umständen auch beim Einfang von freien Elektronen durch neutrale Teilchen (z.B. Wasserstoffatomen) auf, wobei negativ geladene Ionen entstehen. Bei Hauptreihensternen wie der Sonne sind z.B. auf diese Weise entstandene H^- -Ionen eine wichtige Quelle für die von der Photosphäre im Bereich zwischen dem mittleren Infrarot und allen kürzeren Wellenlängen emittierten

Kontinuumsstrahlung. Die Ursache dafür ist die sehr geringe Ionisationsenergie von $E_{\text{Ion}} = 0.754 \text{ eV}$ des H^- -Ions.

Betrachtet man nochmals die Beziehung (1.225) im Hinblick auf Rekombinationsprozesse, dann erkennt man, daß sich an die Seriengrenze $n \rightarrow \infty$ ein kontinuierliches Spektrum anschließen muß, welches man als Seriengrenzkontinuum bezeichnet. Während der erste Term der rechten Seite immer einen diskreten Energiewert darstellt, kann die kinetische Energie des Elektrons im Prinzip jeden beliebigen Wert besitzen. Das hat zur Folge, daß die Frequenz ν des bei der Rekombination emittierten Photons auch jeden Wert oberhalb der Frequenz $\nu = E_{\text{Ion}}/h$ annehmen kann (selbstverständlich unter Einhaltung der Energiebilanz).

Frei-frei-Übergänge sind dagegen „Übergänge“, bei denen sich lediglich die kinetische Energie eines freien Elektrons ändert. Die Energiedifferenz $E_{\text{kin}}^* - E_{\text{kin}}$ mit $E_{\text{kin}}^* > E_{\text{kin}}$ wird dabei als Photon in das Strahlungsfeld abgegeben. Das passiert z.B. immer dann, wenn ein Elektron im Feld eines positiven Ions abgebremst wird, ohne daß es rekombiniert. Die Strahlung, die dabei entsteht, bezeichnet man als Bremsstrahlung und daß durch diesen Prozeß entstehende kontinuierliche Spektrum als Elektronenbremskontinuum. Auch der umgekehrte Prozeß, bei dem ein Elektron, welches sich im Coulombfeld eines Ions bewegt, ein Photon absorbiert und dabei an kinetischer Energie gewinnt, ist möglich. Er liefert insbesondere bei hohen Elektronendichten (wie sie z.B. in heißen Koronen auftreten) einen Beitrag zum kontinuierlichen Absorptionskoeffizienten.

Für Absorptionsprozesse in Sternatmosphären spielt auch die Streuung von Licht eine Rolle. In heißen Sternen, wo Metalle in hohen Ionisationsstufen vorkommen, ist besonders die Thomson-Streuung an freien Elektronen von Bedeutung. Dabei wird die Energie von Photonen im Zuge eines elastischen Stoßes absorbiert und kurze Zeit später wieder reemittiert. Wird dagegen ein Teil der Photonenenergie zur Erhöhung der kinetischen Energie des Elektrons aufgewendet (inelastische Streuung), dann verringert sich die Frequenz des reemittierten Photons und man spricht von Compton-Streuung.

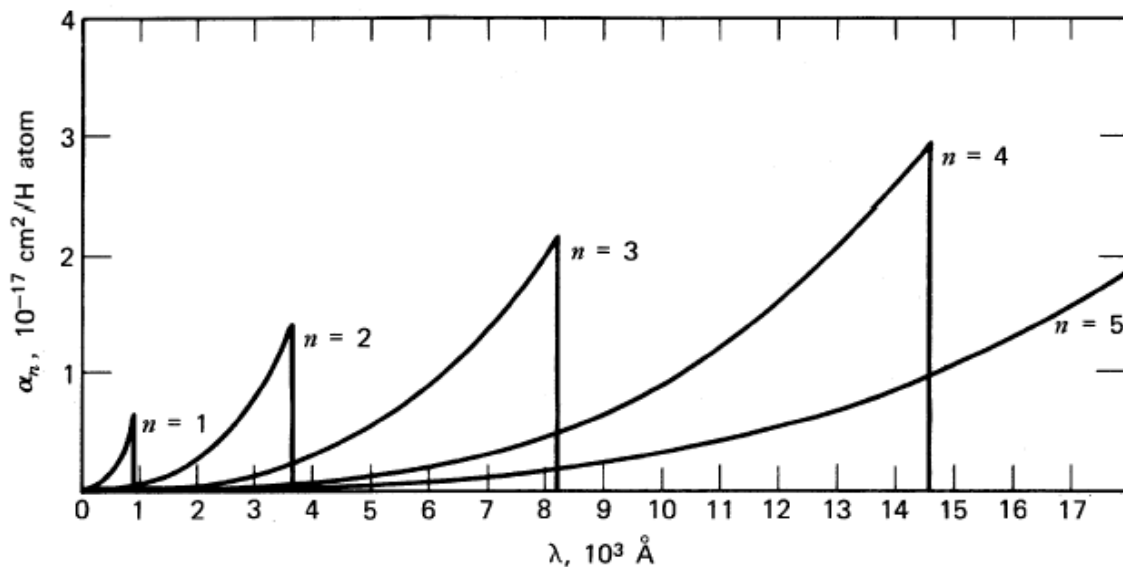
In kühleren Sternatmosphären ist dagegen die Rayleigh-Streuung an neutralen Wasserstoffatomen bei der Berechnung der kontinuierlichen Absorptionskoeffizienten zu berücksichtigen.

Absorptionskoeffizienten für gf-Übergänge

In der Physik der Sternatmosphären spielen die Absorptionskoeffizienten für Wasserstoff, Helium sowie für einige Metalle eine wichtige Rolle, da sie hauptsächlich für die Opazität des stellaren Plasmas verantwortlich sind. Dabei wird der Absorptionskoeffizient in Form eines Streuquerschnitts i.d.R. auf ein einzelnes Atom oder Ion bezogen und deshalb als atomarer Absorptions-Streuquerschnitt $\hat{\sigma}$ bezeichnet. Er läßt sich zumindest in einfacheren Fällen (z.B. für Wasserstoff und wasserstoffähnliche Ionen) mit quantenmechanischen Methoden berechnen. Für ein Wasserstoffatom im Anregungszustand n ergibt sich z.B.

$$\hat{\sigma}_{\text{gf}}^H(\nu) = \frac{64\pi^4}{3\sqrt{3}} \frac{Z^4 m_e e^{10}}{c h^6 n^5} \frac{1}{\nu^3} G_{\text{gf}}^* \quad \text{für } \nu \geq \nu_0 \text{ [cgs; cm}^2\text{]} \quad [1.226]$$

Die dimensionslose Korrekturgröße G_{gf}^* , deren Wert nahe 1 liegt, bezeichnet man als Gauntfaktor. ν_0 stellt die Frequenz dar, bei welcher der Absorptionsprozeß plötzlich einsetzt („Absorptionskante“ oder Seriengrenze).



Atomare Absorptionskoeffizienten des neutralen Wasserstoffs für gebunden-frei-Übergänge für verschiedene Hauptquantenzahlen n . Für $n=1, 2$ und 3 ergeben sich die Grenzkontinua für die Lyman-, Balmer- und Paschenserie mit den $\lambda_0 = c/\nu_0$ -Werten von 91.2 nm, 364.7 nm und 820.6 nm.

Bei Atomen höherer Ordnungszahl ist der bei Wasserstoff zu $1/\nu^3$ proportionale Verlauf komplizierter und weist Abweichungen in Form von „Peaks“ auf, die auf Resonanzprozesse mit Elektronen im gleichen Niveau zurückzuführen sind.

Da der Absorptionskoeffizient der Wirkungsquerschnitt eines Absorptionsvorgangs multipliziert mit der Anzahldichte der absorbierenden Atome ist, folgt aus (1.226) für Photoionisation aus dem Niveau n mit $N_{0,n}$ = der Anzahl der neutralen Wasserstoffatome in diesem Zustand:

$$\hat{\kappa}_{gf}^H(\nu) = \frac{64\pi^4}{3\sqrt{3}} \frac{Z^4 m_e e^{10}}{c h^6 n^5} \frac{1}{\nu^3} N_{0,n} G_{gf}^* \quad [1.227]$$

Um den integralen $g \rightarrow f$ Absorptionskoeffizienten für eine Atomart (z.B. Wasserstoff) zu erhalten, müssen lediglich alle atomaren Absorptionskoeffizienten für alle möglichen Zustände aufsummiert werden. Die Besetzungszahlen der einzelnen Zustände ergeben sich bei thermischer Anregung für eine gegebene Temperatur aus der Boltzmann-Gleichung.

Absorptionskoeffizienten für ff-Übergänge

Bei hohen Elektronendichten ist die Wahrscheinlichkeit groß, daß ein Elektron bei einem nahen Vorübergang an einem positiv geladenen Ion mit ihm für kurze Zeit zusammen einen Zustand ausbildet, bei dem es in der Lage ist, entweder Strahlung zu absorbieren (Elektron gewinnt an kinetischer Energie, „inverse Bremsstrahlung“) oder zu emittieren (Elektron verliert kinetische

Energie, thermische Bremsstrahlung). Die Präsenz des Ions ist bei diesem Prozeß notwendig, damit die Energie- und Impulsbilanz entsprechend der Erhaltungssätze am Ende ausgeglichen ist. Für den Streuquerschnitt gilt dabei

$$\hat{\sigma}_{ff}(\nu) = \frac{8}{3\sqrt{2\pi}} \frac{Z^2 e^6}{c (m_e k_b T)^{3/2}} \frac{1}{\nu^2} G_{ff}^* \quad [1.228]$$

wobei davon ausgegangen wird, daß die Geschwindigkeitsverteilung der freien Elektronen durch eine Maxwell-Verteilung der Temperatur T gegeben ist.

Der Absorptionskoeffizient ergibt sich in diesem Fall zu

$$\hat{\kappa}_{ff}(\nu) = \frac{8}{3\sqrt{2\pi}} \frac{Z^2 e^6}{c (m_e k_b T)^{3/2}} \frac{1}{\nu^2} N_i N_e G_{ff}^* \quad [1.229]$$

N_i ist die Ionendichte und N_e die Elektronendichte. Sie hängt neben der Temperatur von der stofflichen Zusammensetzung und vom Ionisationsgrad der stellaren Materie ab.

Die Ausbildung einer nennenswerten ff-Absorption erfordert große Elektronen- und Ionendichten bei hohen Temperaturen. und macht sich besonders im fernen IR sowie im Radiobereich bemerkbar. Bei heißen Sternen liefert der integrale ff-Absorptionskoeffizient einen wichtigen Beitrag zur Opazität der Sternmaterie. Bei dessen Berechnung müssen alle ff-Absorptionskoeffizienten für alle möglichen Atomarten und deren Ionisationszustände aufsummiert werden. Letztere erhält man durch Lösung der Saha-Gleichung.

Streuprozesse

In heißen Sternen liefert die Thomson-Streuung an freien Elektronen und bei kühleren Sternen die stark wellenlängenabhängige Rayleigh-Streuung Beiträge zum integralen kontinuierlichen Absorptionskoeffizienten. Streuung bedeutet, daß ein Teil des aus dem Sterninneren kommenden Strahlungsstroms aus der Blickrichtung heraus gelenkt wird, was effektiv einem Absorptionsvorgang entspricht obwohl dabei kein Photon absorbiert wird oder anderweitig einen Energieverlust erleidet.

Beginnen wir mit der elastischen Streuung von Photonen an freien Elektronen. Da kein Energieübertrag stattfindet, ändert sich die kinetische Energie des Elektrons und die Frequenz des Photons nicht. Deshalb ist der Streuquerschnitt für Photonen aller Frequenzen gleich:

$$\hat{\sigma}_T = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{m_e c^2} \right)^2 = 6.65 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2 \quad [\text{cgs}] \quad [1.230]$$

$$\hat{\kappa}_T = \hat{\sigma}_T N_e \quad [\text{cgs, cm}^{-1}] \quad [1.231]$$

Der Wert in der Klammer wird als klassischer Elektronenradius bezeichnet. ρ ist die Massendichte.

Bildet man das Verhältnis mit einem typischen Wert eines Streuquerschnitt für gebunden-frei-Übergänge, dann erkennt man, daß der Wert für die Thomson-Streuung um ca. 9 Größenordnungen

kleiner ist als $\hat{\sigma}_{gf}$. Thomson-Streuung kann also nur bei sehr hohen Temperaturen (wo die meisten Atome im Gas komplett ionisiert sind und damit als Opazitätsquellen ausfallen) und entsprechenden Elektronenzahldichten eine wesentliche Rolle spielen. Das trifft immer auf das tiefe Innere der Sterne und auf die Atmosphären der heißesten Sterne zu.

Unter bestimmten Bedingungen kann ein Photon auch von einem locker gebundenen Elektron gestreut werden, wobei das Elektron an Energie gewinnt und in einen Kontinuumszustand übergeht (Ionisation) während das Photon an Energie verliert, d.h. „röter“ wird. Den Vorgang der inelastischen Photonenstreuung bezeichnet man gewöhnlich als Compton-Effekt. Er spielt bei Temperaturen über 10^8 K eine Rolle, wo er die fast ausschließlich durch Thompson-Streuung bedingte Opazität um rund 20% reduzieren kann.

Erfolgt die Streuung an ganzen Atomen (oder Molekülen), dann beobachtet man eine auffällige Wellenlängenabhängigkeit des Streuquerschnitts (1.230):

$$\hat{\sigma}_R = \hat{\sigma}_T \left(\frac{\lambda_0}{\lambda} \right)^4 \quad [1.232]$$

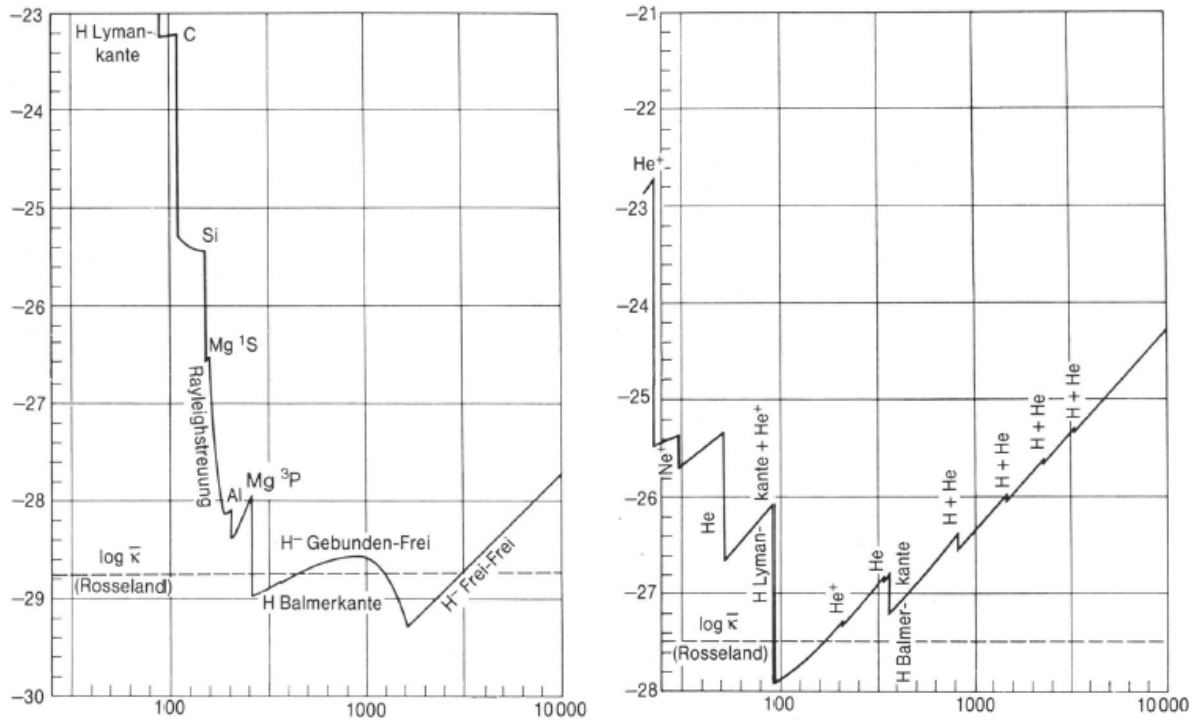
Diese Form der Streuung, die als Rayleigh-Streuung bezeichnet wird, ist z.B. für die blaue Farbe des Taghimmels verantwortlich. In kühlen Sternatmosphären bzw. in den ausgedehnten Hüllen von Riesensternen liefert sie einen nicht zu vernachlässigenden Beitrag zum kontinuierlichen Absorptionskoeffizienten.

Der Rosseland'sche mittlere Opazitätskoeffizient

Die frequenzabhängige Gesamtopazität der Sternmaterie ergibt sich aus der Summe der einzelnen, die Abweichungen von der Planck'schen Funktion beschreibenden Absorptionskoeffizienten aller Atom- und Molekülsorten (der Boltzmann-Faktor berücksichtigt die stimulierte Emission, siehe Abschnitt 8.2.4.2):

$$\kappa_\nu(\text{Zusammensetzung}, \rho, T) = \left[\hat{\kappa}_{gg}(\nu) + \hat{\kappa}_{gf}(\nu) + \hat{\kappa}_{ff}(\nu) \right] \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right) + \hat{\kappa}_T + \hat{\kappa}_R(\nu) \quad [1.233]$$

Die Gesamtabsorption hängt also nicht nur von der Frequenz des Lichts, welches absorbiert wird, ab, sondern auch von der chemischen Zusammensetzung, der Dichte (auch Elektronendichte) und der Temperatur des stellaren Plasmas. Deshalb ist die Funktion κ_ν für eine konkrete Sternatmosphäre nur sehr schwer zu berechnen.



Verlauf des (gesamten) kontinuierlichen Absorptionskoeffizienten für eine kühle (Sonne, 5000 K) und (rechts) für eine heiße Sternatmosphäre (τ_{Sco} , 28000 K). Die Abszisse gibt die Wellenlänge in Å (10^{-10} m) an, die Ordinate den integralen Absorptionskoeffizienten in m^2 pro Atom.

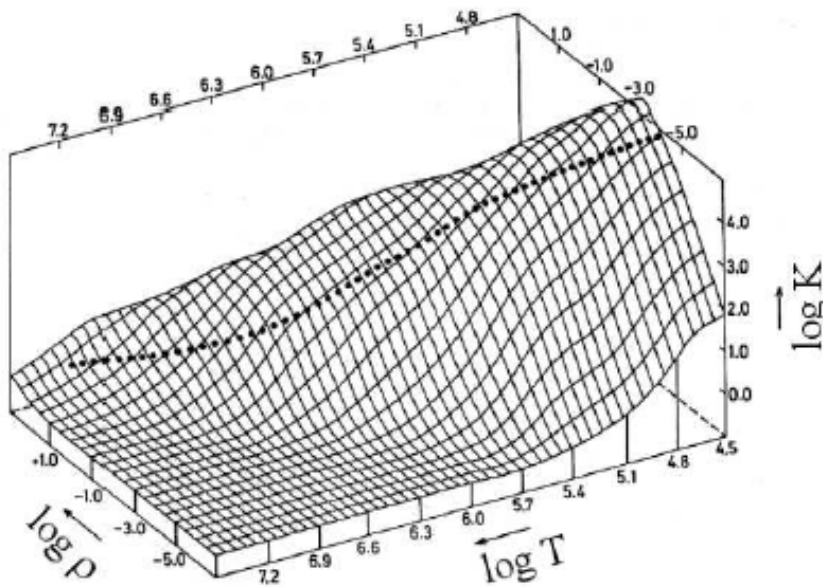
Andererseits spielen in der Theorie des Strahlungstransports über alle Frequenzen integrierte Größen wie die Intensität I und den Strahlungsstrom F eine wichtige Rolle, so daß es vernünftig ist, nach einem für deren Berechnung geeigneten mittleren Absorptionskoeffizienten zu suchen. Um das zu erreichen, hat man den Begriff der „grauen“ Atmosphäre eingeführt. Es handelt sich dabei um eine spezielle (wenn auch nicht sonderlich gute) Approximation, um die Strahlungstransportgleichung (1.204) für eine integrale spezifische Intensität $I = \int_0^\infty I_\nu d\nu$ und eine integrale Ergiebigkeit $S = \int_0^\infty S_\nu d\nu$ zu lösen.

Der Absorptionskoeffizient ist hier nur noch eine Funktion der Dichte und der Temperatur und stellt ein harmonisches Mittel über alle Frequenzen dar. Er wird nach SVEN ROSSELAND (1894-1985) als Rosseland'scher Mittelwert oder Rosseland'scher mittlerer Opazitätskoeffizient $\bar{\kappa}$ bezeichnet. Er läßt sich mit (1.233) wie folgt definieren:

$$\frac{1}{\bar{\kappa}} = \frac{\int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{dB_\nu(T)}{dT} d\nu}{\int_0^\infty \frac{dB_\nu(T)}{dT} d\nu} = \frac{\pi}{acT^3} \int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{dB_\nu(T)}{dT} d\nu \quad [1.234]$$

$a = 7.56 \cdot 10^{-16} \text{ W s m}^{-3} \text{ K}^{-4}$ Strahlungskonstante

Dieser Opazitätsmittelwert wird mit großem Erfolg in „optisch dicken“ Fällen angewendet, d.h. besonders bei der Berechnung des Strahlungstransports im tiefen Inneren der Sterne. Er ist jedoch in der Praxis - wie bereits erwähnt - nicht einfach zu berechnen. Da der Rosseland'sche Mittelwert aber in vielen Anwendungsfällen der stellaren Astrophysik benötigt wird, wurde er als Funktion der chemischen Zusammensetzung der Sternmaterie, sowie deren Dichte und Temperatur tabelliert oder anderweitig (z.B. über Datenbanken im Internet, siehe „*The Opacity Project*“, [//vizier.u-strasbg.fr/topbase/op.html](http://vizier.u-strasbg.fr/topbase/op.html)) zugänglich gemacht. Trägt man den Logarithmus dieser Größe für verschiedene Elementzusammensetzungen über den Logarithmus der Massedichte ρ und der Temperatur T auf, dann erhält man das sogenannte „Kappa-Gebirge“.



Rosseland-Opazität als Funktion der Dichte und der Temperatur für verschiedene Elementzusammensetzungen. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Opazität solarer Materie vom heißen Zentrum nach Außen dar.

Ein von der Größenordnung her guter Mittelwert für den Rosseland-Absorptionskoeffizienten für die Photosphäre der Sonne ist $\bar{\kappa} \approx 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ bei einer optischen Tiefe von $\tau = 1$. Die mittlere freie Weglänge l_γ eines Photons von $\sim 10 \text{ km}$ (entspricht dem Kehrwert von $\bar{\kappa}$) erklärt somit, warum der Sonnenrand außergewöhnlich scharf erscheint.

Für optisch dicke Schichten in Sternen kann man das universellen Fick'schen Diffusionsgesetz, welches die Form

$$j = -\frac{1}{3} v l_\gamma \frac{dn}{dr} \quad [1.235]$$

hat, anwenden, wenn man die darin enthaltenen Größen auf Strahlung bezieht. Dabei ist die „mittlere“ Geschwindigkeit der Partikel v , also die der Photonen, gleich der Lichtgeschwindigkeit c ist ($v \rightarrow c$); die Teilchendichte n entspricht der Photonendichte, also nach (1.41)

$$n = \frac{I(T)}{c h \nu} = \frac{\sigma T^4(r)}{c h \nu}$$

und der Diffusionsfluß j dem Photonenfluß j_γ , d.h. gemäß (1.42):

$$j_\gamma(\nu) = \frac{L(r)}{4\pi r^2 h \nu}$$

Eingesetzt in (1.235) ergibt

$$\frac{L(r)}{4\pi r^2} = -\frac{1}{3\bar{\kappa}} \sigma \frac{dT^4(r)}{dr} \quad [1.236]$$

und damit

$$\frac{dT}{dr} = -\frac{3}{16\pi} \frac{\bar{\kappa}}{\sigma T^3} \frac{L(r)}{r^2} \quad [1.237]$$

was bedeutet, daß der Strahlungstransport immer in Richtung des Temperaturgradienten (d.h. radial vom heißen Sterninneren zur kühlen Sternoberfläche) erfolgt.

Die Boltzmann-Gleichung

Aussagen darüber, wie die Elektronen bei einer bestimmten Temperatur T auf die einzelnen Energieniveaus von neutralen bzw. teilweise ionisierter Atome verteilt sind, liefert unter der Bedingung des thermodynamischen Gleichgewichts die Boltzmann-Verteilung. Bei einer sehr geringen Temperatur erwartet man, daß sich alle Atome im niedrigsten energetischen Zustand, dem Grundzustand, befinden. Mit zunehmender Temperatur werden überwiegend durch Stoßprozesse immer mehr Atome angeregt, so daß die Besetzungszahlen N_i der angeregten Zustände ansteigen. Es bildet sich jeweils ein Gleichgewichtszustand zwischen Stoßanregung und anschließender „Abregung“ durch Abstrahlung aus, die für jede Atomsorte und für jede Temperatur T charakteristisch ist. Bezeichnet man mit $\Delta E_n = |E_n - E_0|$ die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und einem angeregten Zustand mit der Hauptquantenzahl n , dann entwickeln sich die Besetzungszahlen mit der Temperatur T gemäß

$$\frac{N_n}{N_0} = \frac{g_n}{g_0} \exp\left(-\frac{\Delta E_n}{kT}\right) \quad [1.238]$$

zumindest solange die überwiegende Zahl der Atome weiterhin im Grundzustand verbleibt ($N_n \ll N_0$). Exakt gilt jedoch die Beziehung zwischen den Besetzungszahlen jeweils zweier benachbarter Energieniveaus m und n:

$$\frac{N_m}{N_n} = \frac{g_m}{g_n} \exp\left(-\frac{|E_m - E_n|}{kT}\right) \quad [1.239]$$

Die g-Faktoren (statistische Gewichte) zählen dabei die Zustände, welche bei gegebenen n jeweils die gleiche Energie besitzen, was bekanntlich mit der Entartung der Energieniveaus gemeint ist. Bei atomaren Wasserstoff beträgt z.B. diese Entartung für jedes Niveau $g_n = (2J + 1) = 2n^2$ (und zwar ohne Berücksichtigung des Kernspins, dessen Anteil sich im Verhältnis der statistischen Gewichte sowieso herauskürzen würde).

Möchte man die Besetzungszahlen für einen bestimmten Anregungszustand N_s im Verhältnis zur Gesamtzahl N der der Atome in einem Einheitsvolumen ausrechnen, dann gilt die aus der statistischen Mechanik bekannte Formel

$$\frac{N_s}{N} = \frac{g_s \exp\left(-\frac{\Delta E_s}{kT}\right)}{g_1 + g_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) + g_3 \exp\left(-\frac{\Delta E_3}{kT}\right) + \dots} = \frac{g_s \exp\left(-\frac{\Delta E_s}{kT}\right)}{\sum_i g_i \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}\right)} \quad [1.240]$$

mit der Zustandssumme $Z(T)$ im Nenner. ΔE_i ist jeweils die Anregungsenergie des i-ten Zustandes in Bezug auf den Grundzustand.

Liegt die Temperatur in einem Gas aus neutralen Wasserstoff weit unterhalb von 10^4 K, dann befinden sich die allermeisten Atome im Grundzustand mit $n=1$ und das Verhältnis der Besetzungszahlen des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes ($n=2$, $\Delta E = 10.2$ eV für Balmer α) ist nahezu Null. Erst bei Temperaturen in der Größenordnung von 10^4 K (was ungefähr dem Spektraltyp A entspricht) gehen immer mehr Wasserstoffatome in den ersten angeregten Zustand über und können Licht, dessen Frequenzen der Balmerlinien entsprechen, absorbieren. Deshalb dominieren beispielsweise in den Spektren von A0 und A1-Sterne (wie Wega im Sternbild Lyra oder Sirius in Canis majoris) Absorptionslinien der Balmerserie. Bei noch höheren Temperaturen (wie sie bei O und B-Sternen auftreten) werden die Wasserstoffatome zunehmend ionisiert und die Balmerabsorptionen verschwinden wieder und zwar einfach deshalb, weil es nicht mehr genügend viele Wasserstoffatome im ersten angeregten Zustand gibt. In diesem Fall muß die Ionisierung in der Rechnung mit berücksichtigt werden, was die Boltzmann-Gleichung in der Form (1.239) nicht mehr leisten kann. Die Frage, welchen Anteil die einzelnen Ionisationsstufen eines Elements in einem Plasma bei einer bestimmten Temperatur haben, führt direkt zur Saha-Gleichung, die im folgenden Abschnitt vorgestellt werden soll.

Die Saha-Gleichung

In Sternspektren findet man oft Spektrallinien, die dem gleichen Element, aber unterschiedlichen Ionisationsstufen angehören. Ein Beispiel ist die bekannte H und K-Linie des einfach ionisierten Kalziums bei 396.9 nm und 393.4 nm, die oft zusammen mit der Linie des neutralen Kalziums bei 422.6 nm zu beobachten sind. Da man davon ausgehen kann, daß die Äquivalentbreite einer Spektrallinie (siehe (1.163)) der Anzahl der Atome bzw. Ionen proportional ist, welche diese Linien hervorrufen, kann man - wie MEGHNAD SAHA (1893-1956) zuerst gezeigt hat - aus dem Verhältnis der Äquivalentbreiten der Linien benachbarter Ionisationsstufen die Sterntemperatur bestimmen. Dazu müssen im Prinzip nur die für das jeweilige Element in den entsprechenden Ionisationsstufen geltenden Ionisationspotentiale $E_{ion,n}$ sowie die aus der Boltzmann-Gleichung folgenden Besetzungszahlen bekannt sein.

Bei steigender Temperatur nimmt entsprechend der Maxwell-Verteilung (1.170) der Anteil der Atome mit kinetischen Energien, die größer sind als die Ionisationsenergien, immer mehr zu so daß es bei Zusammenstößen zum Herauslösen von Elektronen aus den Elektronenschalen der Stoßpartner kommt. Dieser Vorgang wird als Stoßionisation bezeichnet und als Ionisationsbedingung kann man grob schreiben:

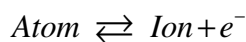
$$kT \sim E_{ion,n} = |E_{\infty} - E_n| \quad [1.241]$$

bzw. für die Ionisation aus dem Grundzustand

$$kT \sim E_{ion,1} = |E_{\infty} - E_1| \quad [1.242]$$

Die Beziehung (1.241) drückt dabei nur den trivialen Fakt aus, daß sich bereits angeregte Atome leichter ionisieren lassen als Atome, die sich im Grundzustand befinden. Um zu bestimmen, wie stark die einzelnen Ionisationsstufen in einem Gas vertreten sind, muß die Boltzmann-Gleichung insofern modifiziert werden, daß die bei der Ionisation frei werdenden Elektronen in der Berechnung der Zustandssumme Berücksichtigung finden.

Im thermodynamischen Gleichgewicht (daß man bei nicht zu geringen Gasdichten voraussetzen kann) stellt sich gemäß der Reaktionsgleichung



bei einer gegebenen Temperatur immer ein Gleichgewicht zwischen Ionisation und Rekombination ein. Diesen Gleichgewichtszustand bezeichnet man als Ionisationsgleichgewicht und das dieses Gleichgewicht ausmachende Gemisch aus neutralen Atomen, Ionen und freien Elektronen Plasma. Bei einem Gas aus nur einer Atomsorte stellt dieses Plasma eine Mischung aus neutralen Atomen sowie aus Ionen unterschiedlicher Ionisationsstufen dar, in welches zusätzlich noch ein freies „Elektronengas“ eingebettet ist. Ein reales Plasma (wie es z.B. in den Sternen vorkommt) ist dann wiederum eine Mischung aus den „Plasmen“ unterschiedlicher Elemente in unterschiedlichen Konzentrationen.

Im einfachsten Fall reicht es aus, zwei verschiedene Zustände - z.B. den Grundzustand und die erste Ionisationsstufe - zu betrachten. Erinnert werden soll in diesem Zusammenhang daran, daß die Ionisationsstufen in der Astronomie mit römischen Ziffern bezeichnet werden, welche dem Elementsymbol nachgestellt sind. Römisch eins kennzeichnet immer neutrale Atome und römisch zwei einfach ionisierte Atome - im Fall von Wasserstoff z.B. HI und HII. Die Energie, die zur Ablösung eines Elektrons aus dem Atomverbund führt, setzt sich aus zwei Teilen zusammen und zwar aus der Ionisationsenergie des Elektrons im Zustand n und der kinetischen Energie des beim Ionisationsvorgangs freigesetzten Elektrons

$$E = E_{\text{Ion}} + \frac{p^2}{2m_e}$$

wobei p der Impuls und m_e die Masse des Elektrons ist. Eingesetzt in die Boltzmann-Gleichung ergibt sich

$$\frac{N_{r+1,m}}{N_{r,n}} = \frac{g_{r+1,m} g_e}{g_{r,n}} \exp \left(- \frac{E_{\text{Ion},r} + E_{r+1,m} - E_{r,n} + p^2/2m_e}{kT} \right) \quad [1.243]$$

wobei die Größe r die Ionisationsstufe indiziert. Das zusätzlich eingeführte statistische Gewicht g_e gibt die Anzahl der quantenmechanischen Zustände an, die für das freigesetzte Elektron möglich sind, um genau in den Kontinuumszustand mit der kinetischen Energie $p^2/2m_e$ zu gelangen. Nach der Quantenmechanik muß man, um dieses statistische Gewicht zu bestimmen, von einem endlichen Phasenraumvolumen ausgehen. Aus der Heisenberg'schen Unschärferelation folgt, daß man zwei Teilchen mit gleichem Spin immer dann in Bezug auf ihre Position und ihren Impuls als identisch ansehen kann, wenn die Beziehung $dp_i dx_i = h$ erfüllt ist, wobei der Index i über die jeweils 3 Impuls- und Ortskoordinaten des Phasenraumes läuft. Demnach sind Teilchen, die sich im Phasenraum innerhalb einer Zelle der Größe $\prod_{i=1}^3 dx_i dp_i = h^3$ befinden, physikalisch nicht zu unterscheiden. Da die Anzahl der vom Maximalimpuls p_{max} der Elektronen abhängigen Phasenraumzellen in einem Volumen V gleich $4\pi p_{\text{max}}^3 V/3$ ist, ergibt sich (da Elektronen Fermionen mit dem Spin $\pm 1/2$ sind und deshalb zwei Elektronen unterschiedlicher Spinquantenzahl genau eine Phasenraumzelle belegen können) für die „Besetzungszahl“ dieses Volumens $8\pi p_{\text{max}}^3 V/(3h^3)$. Daraus folgt für die Zustandssumme der Elektronen im Impulsbereich von p bis $p+dp$

$$Z(p) dp = \frac{8\pi p^2 V}{h^3} dp \quad [1.244]$$

und aufgrund

$$g_e = \frac{Z(p)}{N_e V} dp = \frac{8\pi p^2}{N_e h^3} dp = \frac{8\pi m_e^3 v^2}{N_e h^3} dv \quad [1.245]$$

N_e = Elektronendichte, v Elektronengeschwindigkeit

geht (1.243) in

$$\frac{N_{r+1,m}}{N_{r,n}} N_e = \frac{g_{r+1,m}}{g_{r,n}} \frac{8\pi m_e^3}{h^3} \exp\left(-\frac{E_{lon,r} + E_{r+1,m} - E_{r,n} + \frac{1}{2}m_e v^2}{kT}\right) v^2 dv \quad [1.246]$$

über.

Daraus folgt wegen $\int_0^\infty v^2 \exp(-v^2) dv = \frac{\sqrt{\pi}}{4}$ nach Integration über alle Geschwindigkeiten

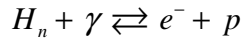
die Saha-Gleichung in der Form

$$\frac{N_{r+1,m}}{N_{r,n}} N_e = \frac{g_{r+1,m}}{g_{r,n}} \frac{2\sqrt{(2\pi m_e kT)^3}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_{lon,r} + E_{r+1,m} - E_{r,n}}{kT}\right) \quad [1.247]$$

Die in (1.247) enthaltene Größe

$$n_{Q_e} = \left[\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right]^{3/2} \approx 2.41 \times 10^{21} T^{3/2} m^{-3} \quad [1.248]$$

wird manchmal als Quantenkonzentration der Elektronen bei der Temperatur T bezeichnet. Damit läßt sich im Fall des Ionisationsgleichgewichts von Wasserstoff (Photoionisation)



die Saha-Gleichung folgendermaßen

$$\frac{N(H_n)}{N_e N_p} = \frac{g_n}{n_{Q_e}} \exp\left[-\frac{\mathcal{E}_n}{kT}\right] \quad [1.249]$$

mit $g_n = 2n^2$ und $-\mathcal{E}_n = E_{lon} + (E_1 - E_n)$ aufschreiben. Man beachte, Wasserstoff kann nur einmal durch Entfernen eines Elektrons ionisiert werden, weshalb der r-Index im Folgenden weggelassen wird.

Der Anteil der neutralen Wasserstoffatome bei der Temperatur T ergibt sich dagegen unter Berücksichtigung aller Anregungszustände zu

$$\frac{N(H_I)}{N_e N_p} = \frac{1}{n_{Q_e}} \sum_{n=1}^{\infty} g_n \exp\left[-\frac{\mathcal{E}_n}{kT}\right] \quad [1.250]$$

und unter Einführung der Zustandssumme Z

$$\frac{N(H_I)}{N_e N_p} = \frac{Z}{n_{Q_e}} \exp\left[\frac{E_{Ion}}{kT}\right] \quad [1.251]$$

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \exp\left(-\frac{E_n - E_1}{kT}\right) \quad [1.252]$$

Eine genauere Untersuchung von (1.252) zeigt jedoch, daß die Summe $\lim_{n \rightarrow \infty} Z \Rightarrow \infty$ divergiert. Dieses physikalisch unsinnige Ergebnis kann jedoch pragmatisch auf einen Wert der Größenordnung 1 reduziert werden, wenn man den größten n -Wert so wählt, daß der von n abhängige Bohrsche Radius $r_n = a_0 n^2$, ($a_0 = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$) des angeregten Wasserstoffatoms die gleiche Größenordnung erreicht wie der mittlere Abstand der einzelnen Atome im Wasserstoffgas. Das Verhältnis zwischen ionisierten Atomen zu neutralen Atomen läßt sich dann in sehr guter Näherung durch folgende Beziehung ausdrücken:

$$\frac{N_p}{N(H_I)} \approx \frac{n_{Q_e}}{N_e} \exp\left[-\frac{E_{Ion}}{kT}\right] \quad [1.253]$$

Im Unterschied zur Boltzmann-Gleichung erscheint in der Saha-Gleichung explizit die Elektronendichte N_e als Ausdruck für die Druckabhängigkeit des statistischen Gewichts der freien Elektronen. Das bedeutet, daß das Ionisationsverhalten eines Gases im thermo-dynamischen Gleichgewicht nicht nur von der Temperatur T , sondern auch vom Umgebungsdruck P bzw. der Dichte ρ abhängt. Oder anders ausgedrückt: Erhöhung der Temperatur fördert Ionisation, Erhöhung des (Elektronen-) Drucks begünstigt Rekombination. Mit diesen Erkenntnissen läßt sich die im Band 14 vorgestellte Spektralsequenz in ihren Grundzügen leicht verstehen, denn sie ist nichts anderes als das optisch sichtbare Resultat aus den Besetzungszahlen der angeregter Zustände sowie der Ionisationsgrade der verschiedenen, in den Sternatmosphären vorkommenden Elemente als Funktion der Temperatur. Der Unterschied zwischen den Spektren von Riesensternen und Hauptreihensternen gleicher effektiver Temperatur ergibt sich dagegen aus der höheren Ionisationsrate in den Atmosphären der Riesensterne aufgrund des im Vergleich zu den kompakteren Hauptreihensternen geringeren Drucks.

Element	Z	II [eV]	III [eV]	VII [eV]	XIX [eV]
H	1	13.6	-	-	
He	2	24.6	54.4	-	
C	6	11.3	24.4	-	
N	7	14.5	29.6	667.0	
O	8	13.6	35.1	739.3	
Na	11	5.1	47.3	208.5	

Element	Z	II [eV]	III [eV]	VII [eV]	XIX [eV]
K	19	4.3	31.8	117.6	4934
Ca	20	6.1	11.9	127.2	5129
Fe	26	7.9	16.2	125.0	1456

Ionisationsenergien für einfache (II) und doppelte Ionisation (III) sowie für die Ionisationsstufen VII und XIX für einige in Sternatmosphären häufig beobachtete Elemente

Anstelle des Verhältnisses von ionisierten Atomen zu neutralen Atomen ist es oftmals anschaulicher, den jeweiligen Anteil in Bezug auf alle Atome des Elements in einem Gas anzugeben. Betrachten wir dazu wieder die Ionisation von reinem Wasserstoff. Im Ionisationsgleichgewicht gilt offensichtlich

$$N_H = N_I + N_{II} \quad \text{und} \quad N_{II} = N_e \quad [1.254]$$

wobei die Indizes die Ionisationszustände I (neutral) und II (ionisiert) an den Anzahldichten kennzeichnen. Der Ionisationsgrad soll im Folgenden mit X gekennzeichnet werden, d.h.

$$X = \frac{N_{II}}{N_H} \quad [1.255]$$

Dieser Wert ist gleich 1, wenn der Wasserstoff vollständig ionisiert ist und gleich 0, wenn das Wasserstoffgas nur aus neutralen Atomen besteht. Aus (1.254) folgt dann

$$N_I = (1 - X) N_H \quad \text{und} \quad N_{II} = X N_H \quad [1.256]$$

Damit kann man die Saha-Gleichung (1.253) auf folgende Form bringen:

$$\frac{N_{II} N_e}{N_H} = \frac{X^2}{1 - X} N_H \approx n_{Q_e} \exp\left[-\frac{E_{Ion}}{kT}\right] \quad [1.257]$$

Betrachtet man das Wasserstoffgas als ideales Gas, dann gilt für dessen Druck bekanntlich $P = NkT$, wobei sich die Teilchenanzahldichte aus der Summe aller Teilchensorten im Gas, also der neutralen und ionisierten Wasserstoffatome sowie der freien Elektronen, zusammensetzt. Daraus folgt $P = (1 + X) N_H kT$ und eingesetzt in (1.257)

$$\frac{X^2}{1 - X^2} = \frac{kT}{P} n_{Q_e} \exp\left[-\frac{E_{Ion}}{kT}\right] \quad [1.258]$$

Im Zentrum der Sonne erwartet man einen Druck in der Größenordnung von $2.3 \cdot 10^{16}$ Pa und eine Temperatur von ca. $1.5 \cdot 10^7$ K. Die Gleichung (1.258) liefert für diese Werte überraschenderweise nur einen Anteil von rund 75 % ionisierten Wasserstoffs, obwohl man erwarten kann, daß unter den im Sonnenkern herrschenden Temperatur- und Druckverhältnissen der gesamte Wasserstoff im ionisierten Zustand vorliegt. Der Grund dafür ist, daß die Anwendung von (1.258) auf das Sonneninnere in

mehrfacher Hinsicht problematisch ist und dabei zugleich auch die Grenzen der Saha-Gleichung aufgezeigt werden. Zuerst einmal ist die Annahme falsch, daß die solare Materie nur aus Wasserstoff besteht. Das freie Elektronengas und damit die Größe N_e wird nicht nur von den Elektronen der Wasserstoffatome, sondern auch aller anderen ionisiert im Sonneninneren vorkommenden Elemente gespeist. Insbesondere „Metalle“ mit relativ geringen Ionisationspotentialen sind bei Hauptreihensternen wichtige Lieferanten für freie Elektronen. Ein weiterer wichtiger Punkt ist, daß die Dichte im Sonnenzentrum so groß ist, daß man die einzelnen Wasserstoffatome nicht mehr als isolierte Einzelteilchen, sondern nur noch als miteinander wechselwirkende Ensembles von Teilchen betrachten darf. Das bedeutet konkret, daß der mittlere Abstand der Wasserstoffatome bei dem im Sonnenzentrum herrschenden Druck in die Größenordnung des Bohrschen Atomradius gelangt. Wie man im Rahmen der Quantenmechanik zeigen kann, führt in solch einem Fall die Wechselwirkungen der Atome untereinander zu einer Reduzierung der Besetzungswahrscheinlichkeit der gebundenen Zustände mit der Folge, daß mehr Atome ionisiert werden als die Saha-Gleichung vorhersagt. Das entspricht genau genommen einer effektiven Absenkung des Ionisationspotentials des Grundzustandes. Man kann sich daß mit einer einfachen Überschlagsrechnung leicht plausibel machen. Vergewegenwärtigen wir uns dazu die Bedingungen im Zentrum der Sonne. Die Dichte liegt dort in der Größenordnung von $1.7 \cdot 10^5 \text{ kg m}^{-3}$. Das bedeutet, daß die Teilchenzahldichte der Wasserstoffatome ungefähr bei

$$N_H \approx \rho_{\odot z} / m_p \sim 10^{32} \text{ m}^{-3}$$

liegt. Der mittlere Abstand zwischen den Atomen läßt sich dann mit

$$l \approx \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi N_H}} \sim 1.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

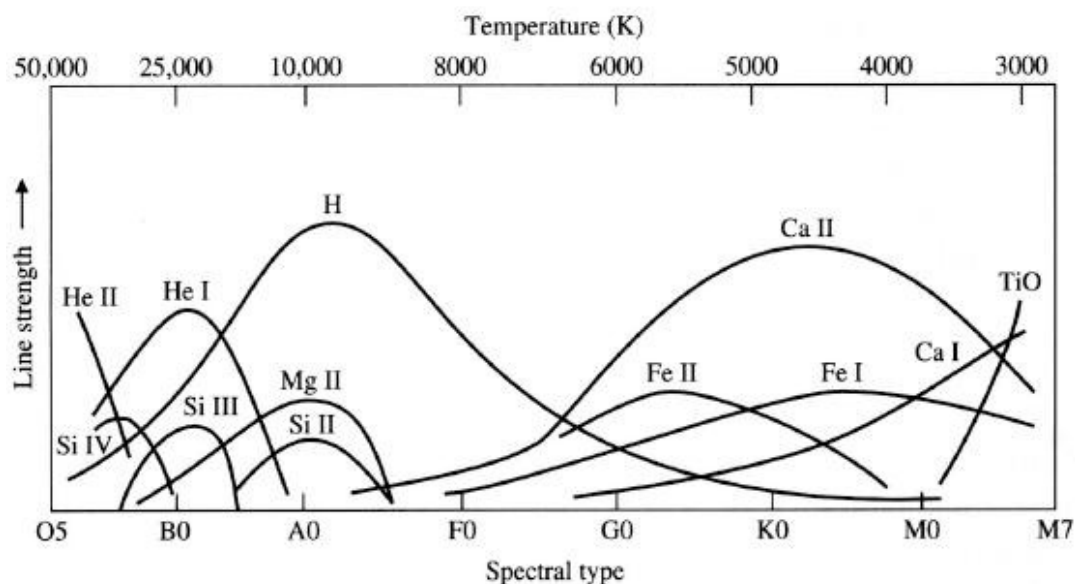
leicht abschätzen. Diese Größe muß man mit dem Atomradius, der über die Beziehung

$$r = a_0 n^2$$

mit dem Bohrschen Atomradius a_0 und der Hauptquantenzahl n verbunden ist, verglichen werden. Da $a_0 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ beträgt und damit $l < a_0$ ist, kann es im Sonnenzentrum Wasserstoff weder im Grundzustand noch in irgendeinem angeregten Zustand geben. Unter den dort herrschenden Bedingungen läßt sich (1.257) offensichtlich nicht mehr vernünftig anwenden, was selbstverständlich auch für die Kernregionen anderer Sterne gilt. Die Saha-Gleichung liefert jedoch sehr genaue Resultate, wenn man sie auf die Atmosphären der Sterne anwendet.

Quantitative Spektralanalyse

Die Saha- und die Boltzmann-Gleichung lehrt, daß man allein aus der Betrachtung der Stärke einzelner ausgewählter Spektrallinien verschiedener Elemente niemals ohne weiteres auf die relativen Anteile dieser chemischen Elemente in der betreffenden Sternatmosphäre schließen kann. Eine besonders starke Absorptionslinie in einem Sternspektrum bedeutet noch lange nicht, daß das zu dieser Linie gehörende Element in der Sternatmosphäre auch besonders häufig vorkommt. Das Gegenteil ist oftmals der Fall, wie die starken Kalziumlinien im kurzwelligen Bereich des Sonnenspektrums beweisen. Eine Abschätzung mittels der Saha-Gleichung zeigt, daß in der Sonnenatmosphäre auf ein Kalzium-Atom ungefähr 2 Millionen Wasserstoffatome kommen, die wiederum (nach der Boltzmann-Gleichung) überwiegend den ersten angeregten Zustand besetzen. Das erklärt zugleich die geringe Präsenz der Balmerlinien im Sonnenspektrum. Im Gegensatz dazu sind die Kalziumatome unter solaren Bedingungen ($T \sim 6000$ K) aufgrund ihres geringen Ionisationspotentials von 6.1 eV (Wasserstoff 13.6 eV) fast alle einfach ionisiert. Die Ionen selbst befinden sich wiederum überwiegend im Grundzustand. Damit sind sie sehr effektiv in der Lage, Photonen, deren Frequenz der H- und K-Linie entsprechen, zu absorbieren.



Funktion der Linienstärke einiger ausgewählter Absorptionslinien als Funktion der Temperatur respektive Spektraltyp

Hieraus erkennt man, daß es nicht einfach ist, aus einem gegebenen optischen Spektrum eines Sterns globale Informationen über die physikalischen Bedingungen in dessen Atmosphäre (Temperatur- und Druckschichtung, Energietransport, chemische Zusammensetzung etc.) abzuleiten. Der Weg, um diese Schwierigkeit zu überwinden, besteht darin, das Problem von zwei Seiten her anzugehen. Die eine Seite besteht in der Entwicklung einer Theorie der Sternatmosphären, aus der sich sogenannte „synthetische Spektren“ berechnen lassen. Die andere Seite setzt an den Spektren selbst an, aus deren Parametern (Energieverteilung, Linienidentifikationen, Linienstärken bzw. Profile etc.) man versucht, die Größen abzuleiten, die wiederum als Eingabeparameter für die theoretischen Modellatmosphären fungieren. Die beide Seiten zusammenführende Hypothese ist dabei, daß ein synthetisches Spektrum,

welches aus einem theoretischen Atmosphärenmodell abgeleitet wurde und das im Wesentlichen mit einem beobachteten Spektrum übereinstimmt, die Annahme rechtfertigt, daß auch das dem synthetischen Spektrum zugrundeliegende Atmosphärenmodell die physikalischen Parameter der realen Sternatmosphäre innerhalb des angestrebten Genauigkeitsintervalls richtig widerspiegelt. In der Praxis handelt es sich dabei um einen iterativen Prozeß, bei dem versucht wird, über eine Folge von verschieden komplexen Analyseschritten die Parameter einer Modellatmosphäre solange zu variieren, bis die Abweichungen zwischen dem synthetischen Spektrum und dem beobachteten Spektrum möglichst verschwinden. Dem liegt weiterhin die Annahme zugrunde, daß sich ein bestimmtes synthetisches Spektrum auch nur aus einem ganz bestimmten Atmosphärenmodell ergibt (Eindeutigkeitsprinzip). Der sehr hohe Rechenaufwand, der mit dieser Methodik verbunden ist, wird mittels der heute verfügbaren Computertechnik klaglos bewältigt. Der Aufwand drumherum (Vermessung der Spektren, experimentelle Bestimmung atomphysikalischer Größen wie z.B. Oszillationsstärken für die einzelnen Elemente etc.) ist aber geblieben.

Mit der nicht leichten Aufgabe der Datengewinnung durch Analyse von Sternspektren, um daraus z.B. die chemische Zusammensetzung einer Sternatmosphäre abzuleiten, beschäftigt sich die quantitative Spektralanalyse. Im Folgenden sollen einige Methoden, die dabei zur Anwendung gelangen, in ihren Grundzügen erläutert werden.

Wachstumskurven

Schon rein intuitiv ist es klar, daß die Stärke von Spektrallinien - oder genauer, die in ihnen absorbierte Energie - irgend etwas mit der Anzahl der am Absorptionsvorgang beteiligten Atome / Ionen zu tun haben muß. Um diese innerhalb der Linienkontur absorbierten Energie zu quantifizieren, wurde die Äquivalentbreite W_λ (1.163) eingeführt. Der Integrant in dieser Beziehung ist die Linieneinsenkung

$$R_\lambda = \frac{I_{c,\lambda} - I_\lambda}{I_{c,\lambda}} \quad [1.259]$$

die sich unter Einführung der Ergiebigkeit S_λ (1.207) auch folgendermaßen schreiben läßt:

$$R_\lambda = 1 - \frac{S_\lambda}{I_{c,\lambda}} (1 - \exp(-\tau_\lambda)) \quad [1.260]$$

Wir wählen hier wie im Folgenden die Wellenlänge λ als Funktionsargument, da die häufig zur Analyse verwendeten Spektren Gitterspektren sind, die eine in λ lineare Dispersion aufweisen. Der Index c kennzeichnet den Kontinuumswert in der unmittelbaren Nähe von λ . λ_0 ist die Wellenlänge der Linienmitte (also dort, wo bei einer optisch dünnen Linie die Linieneinsenkung am größten ist).

Die Grundidee besteht nun darin, daß in einer Gasschicht der Dicke ds gemäß (1.196) die Absorption von dem (frequenzabhängigen) Absorptionskoeffizienten κ_ν abhängt. Dieser wiederum ist eine Funktion der Anzahl N_i der Atome (siehe (1.224)), die sich jeweils in dem für den Absorptionsvorgang verantwortlichen Besetzungszustand befinden sowie der Oszillatorenstärke für

den Übergang $i \rightarrow k$, also f_{ik} . Eine Frage, die sich in diesem Zusammenhang stellt, ist die Frage, wie sich eine Absorptionslinie (ausgedrückt durch W_λ) mit wachsenden N_i (bezogen auf eine Gassäule mit dem Volumen V) verändert. Die Funktion, welche diese Änderung beschreibt, bezeichnet man als Wachstumskurve (*curve of growth*). Betrachten wir dazu eine isotherme Gasschicht über einer Schicht, die kontinuierlich strahlt und auf die wir senkrecht drauf schauen (was in erster Näherung den Verhältnissen einer Sternatmosphäre entspricht). Die Anzahl der Atome im Zustand i , die in der Projektion auf eine Einheitsfläche entfallen, sei n_i . Alle diese Atome sind in der Lage, im thermodynamischen Gleichgewicht einen Teil der um λ_0 emittierten kontinuierlichen Strahlung zu absorbieren, was zu einer Abnahme des Strahlungsflusses und damit zu einem bestimmten W_λ -Wert führt. Verdoppelt man gedanklich die Schichtdicke (oder, was dem äquivalent ist, man verdoppelt die Teilchendichte bei Beibehaltung der Schichtdicke), dann vergrößert sich auch die Äquivalentbreite um den Faktor 2 unter der Voraussetzung, daß die absorbierende Gasschicht optisch dünn ist. Allgemeiner gesagt, bei optisch dünnen Linien (bei denen man quasi bis zum „Boden“ der Schicht schauen kann) besteht eine direkte Proportionalität zwischen der Äquivalentbreite und der Anzahl der am Absorptionsvorgang beteiligten Atome in Sichtlinie. Um das zu verifizieren, lösen wir die Strahlungstransportgleichung für diesen einfachen Fall (siehe 8.199) und berechnen die optische Tiefe τ_λ über das Linienprofil:

$$\tau_\lambda = \int n_x \hat{\kappa}_{ik} ds \approx n_x \hat{\kappa}_{ik} s = \mathcal{N}_x \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{ik} N_i \left(1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT\lambda}\right) \right) \Phi(\lambda) \quad [1.261]$$

n_x ist die Teilchenzahldichte des Elements X in der Schicht, $\mathcal{N}_x = n_x s$ die Säulendichte und $\Phi(\lambda)$ die auf 1 normierte Linienverbreiterungsfunktion. Die Zahlen i und k indizieren den quantenmechanischen Übergang, der zur Absorption führt.

Mit (1.163) und (1.199) ergibt sich folgender Ausdruck für die Äquivalentbreite W_λ der Absorptionslinie:

$$W_\lambda = \int_0^\infty (1 - \exp(-\tau_\lambda)) d\lambda \quad [1.262]$$

woraus unter Beachtung von (1.261) für optisch dünne Linien ($\tau_\lambda \ll 1$)

$$W_\lambda \approx \int_0^\infty \mathcal{N}_x \hat{\kappa}_{ik} d\lambda = \mathcal{N}_x \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{ik} N_i \left(1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT\lambda}\right) \right) \quad [1.263]$$

und damit wie erwartet $W_\lambda \sim \mathcal{N}_x$ folgt. Man beachte, daß die normierte Linienverbreiterungsfunktion

aufgrund $\int_0^\infty \Phi(\lambda') d\lambda' = 1$ keinen Einfluß auf das Ergebnis hat.

Wie sieht es aber aus, wenn das Gas optisch dick ist oder - anders ausgedrückt - wenn von der Linienmitte ausgehend die gesamte aus dem Kontinuum im Bereich der Spektrallinie stammende Energie absorbiert wird. In diesem Fall hat die Linienensenkung ihren größten möglichen Wert erreicht und die Linienflügel können sich nur noch verbreitern. Im Prinzip lassen sich dabei drei verschiedene „Linientypen“ ausmachen, die sich durch ihr konkretes Linienprofil unterscheiden. Moderat starke Linien werden z.B. lediglich im Bereich ihres Dopplerkerns optisch dick während sehr starke Linien auch im Bereich der Linienflügel das Licht vollständig absorbieren. Ist die optische Tiefe nur im Bereich der Linienmitte >1 , dann spricht man von starken Linien. Schwache Linien absorbieren dagegen Licht nur teilweise. Sie stellen den optisch dünnen Typ dar.

Betrachten wir als Erstes eine sogenannte starke Absorptionslinie. Obwohl (1.262) über den gesamten Wellenlängenbereich integriert wird, sind selbstverständlich nur wenige nm rechts und links vom Linienkern wirklich optisch dick. Der Wellenlängenbereich $\lambda_0 \pm \Delta\lambda$, in dem $\tau_\lambda \gg 1$ gilt, ist offensichtlich sehr eng. Das ist auch zu erwarten, wenn man sich einmal den asymptotischen Verlauf der Linienverbreiterungsfunktion vergegenwärtigt. Es ist also vernünftig, das Integral (1.262) über die Linie in drei Teile aufzuteilen, bei denen nur der Bereich um den Linienkern optisch dick ist:

$$W_\lambda \approx \int_0^{\lambda_0 - \Delta\lambda} (1 - \exp(-\tau_\lambda)) d\lambda + \int_{\lambda_0 - \Delta\lambda}^{\lambda_0 + \Delta\lambda} (1 - \exp(-\tau_\lambda)) d\lambda + \int_{\lambda_0 + \Delta\lambda}^{\infty} (1 - \exp(-\tau_\lambda)) d\lambda \quad [1.264]$$

mit $\tau_\lambda = \mathcal{N}_x \hat{\kappa}_{ik} \Phi(\lambda)$. Da der erste und der letzte Summand in (1.264) bei gesättigten Linien keine große Rolle spielen, bleibt wegen $\exp(-\tau_\lambda) \ll 1$ für die Äquivalentbreite

$$W_\lambda \approx 2\Delta\lambda$$

übrig. Wie sieht das Verhalten nun bei moderat starken Linien aus? Wie bereits behandelt, führt der thermische Dopplereffekt zu einem sogenannten „Gauß-Profil“. Daraus ergibt sich näherungsweise

$$W_\lambda \approx 2\Delta\lambda \sqrt{\ln\left(\frac{\mathcal{N}_x \hat{\kappa}_{ik}}{\sqrt{\pi} \Delta\lambda}\right)} \quad [1.265]$$

was bedeutet, daß sich die Äquivalentbreite logarithmisch mit der Säulendichte vergrößert. Dieser Fall tritt ein, wenn $\tau > 5$ wird und Kollisionsprozesse (Gasdruck) zwischen den Atomen noch keine so große Rolle spielen.

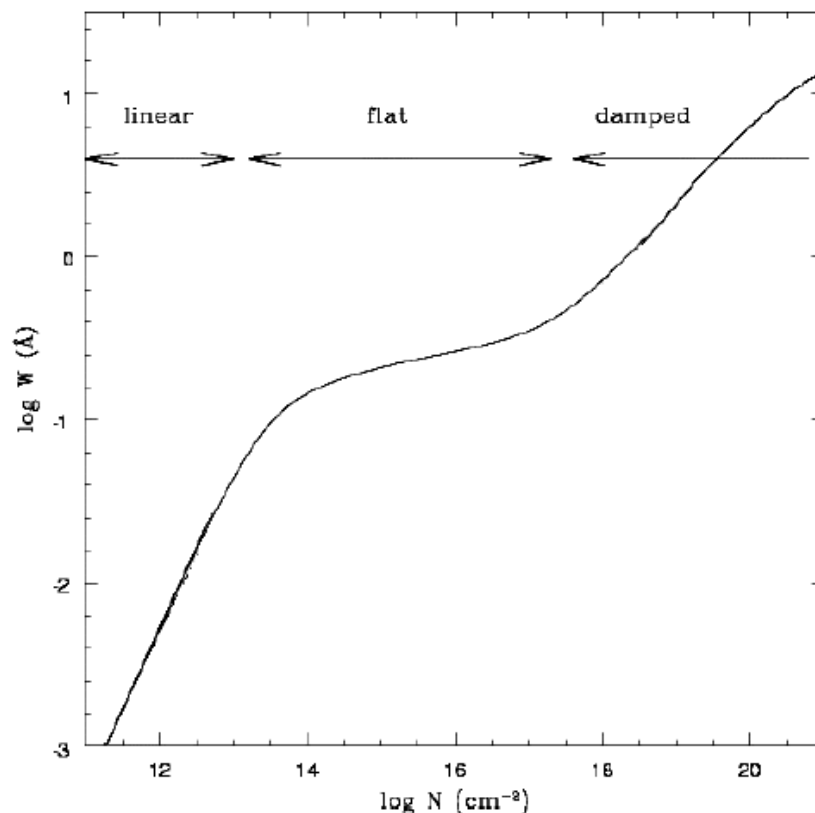
Bei sehr starken Linien überwiegt dagegen die Stoßdämpfung, was mit der Dämpfungskonstanten γ zu einer Äquivalentbreite von

$$W_\lambda \approx \frac{\sqrt{\mathcal{N}_x \hat{\kappa}_{ik} \gamma}}{\pi} \quad [1.266]$$

führt. Die Linienflügel wachsen überproportional an während das Linienzentrum durch die Dämpfung nur schwach berührt wird. Hier beobachtet man ein Anwachsen der Äquivalentbreite, die proportional der Quadratwurzel der Säulendichte der absorbierenden Teilchen ist.

optisch dünne Linien	$W_\lambda \sim \mathcal{N}_x$
gesättigte moderat starke Linien (Gauß-Profil)	$W_\lambda \sim \sqrt{\ln \mathcal{N}_x}$
gesättigte druckverbreiterte Linien (Lorentz-Profil)	$W_\lambda \sim \sqrt{\mathcal{N}_x}$

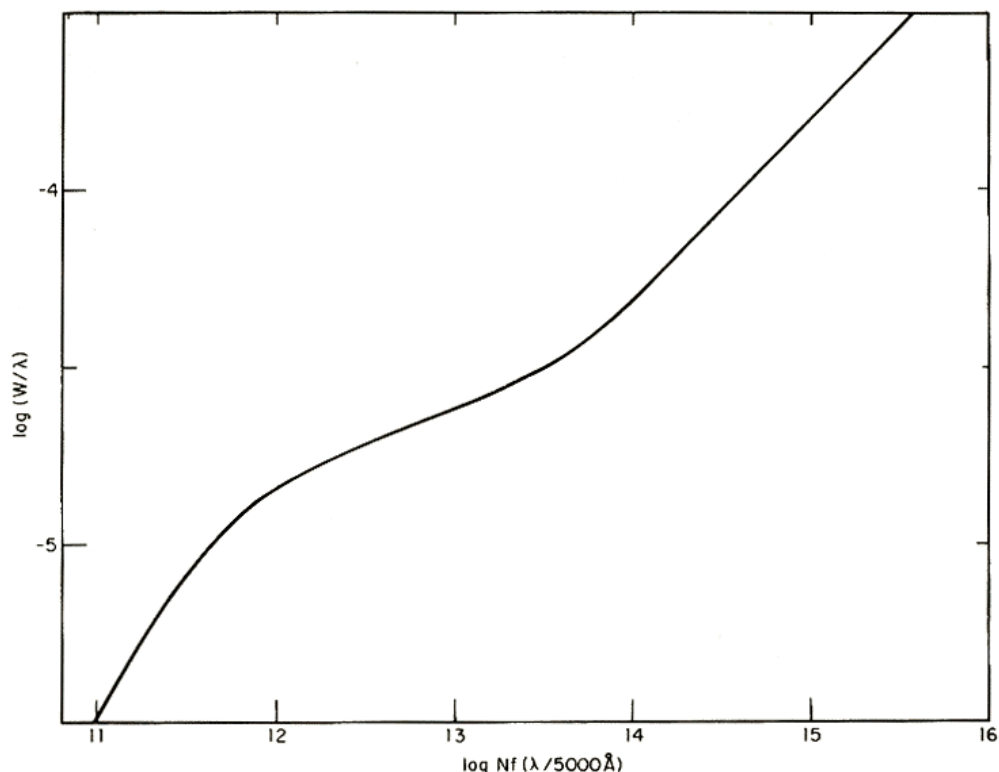
In dem man den Logarithmus der Äquivalentbreiten über den Logarithmus der Größe $\mathcal{N}_x$ aufträgt, erhält man die graphische Darstellung der Wachstumskurve für einen bestimmten Übergang des Elements x.



Theoretische Wachstumskurve, die aus einem linearen Anstieg, einem relativ flachen Plateau und dem der Quadratwurzel der Säulendichte proportionalen Anstieg besteht.

In der Praxis wählt man jedoch oft einen etwas anderen Weg, der es erlaubt, alle interessierenden Übergänge in einem Diagramm zu erfassen. Dazu trägt man als Ordinate den Logarithmus aus Äquivalentbreite dividiert durch die Zentralwellenlänge auf. Dadurch wird diese Achse unabhängig von einem konkreten quantenmechanischen Übergang. Als Abszisse wählt man dagegen den Logarithmus aus Säulendichte $\mathcal{N}$ und Oszillatorenstärke f . Letztere ist ja ein Maß dafür, wie wahrscheinlich ein bestimmter Übergang stattfindet. Je größer f ist, desto häufiger wird der entsprechende Übergang in der Gassäule realisiert. Wie bereits erwähnt, gibt es ganze Tabellenwerke (bzw. Datenbanken, die im Internet abrufbar sind), aus denen man für verschiedene Elemente und

Übergänge die (meist experimentell bestimmten) f -Werte entnehmen kann. Einen ersten Überblick bietet z.B. „Allen’s Astrophysical Quantities“ (Ed. N.Cox, Springer 1999, S. 69 ff.).



Allgemeine Wachstumskurve für die Sonnenphotosphäre © (Aller, 1971)

Theoretische und empirische Wachstumskurven

Die Wachstumskurve war bis vor ein, zwei Jahrzehnten ein wichtiges Hilfsmittel zur Ableitung der Elementhäufigkeiten sowie anderer physikalischer Parameter von realen Sternatmosphären aus geeigneten optischen Spektren im Rahmen einer Grobanalyse. Seitdem ist ihre Bedeutung in der stellaren Astrophysik etwas zurückgegangen. Durch die Verfügbarkeit leistungsfähiger Rechentechnik können heute bessere und genauere Methoden eingesetzt werden, die sich komplett algorithmisieren lassen. Diese Methoden beruhen (vereinfacht gesagt) darauf, daß man Sternatmosphären im Computer modelliert und für diese Modelle numerisch Spektren ableitet, die sich wiederum mit realen Spektren vergleichen lassen. Derartige berechnete Sternspektren werden gewöhnlich als synthetische Spektren bezeichnet. Aus den Abweichungen zwischen realem und synthetischem Spektrum gewinnt man wiederum Daten, mit denen man das Atmosphärenmodell weiter verbessern kann so daß ein iterativer Ablauf entsteht an, dessen Ziel es ist, eine größtmögliche Übereinstimmung zwischen den beiden Spektren (synthetisch und empirisch) zu erreichen. Der große Vorteil bei diesem Verfahren liegt darin begründet, daß sich im Gegensatz zur Methode der Wachstumskurve physikalische Größen schichtenabhängig berechnen lassen, während die Wachstumskurve genaugenommen nur über die Atmosphärenschicht gemittelte Größen liefert.

Die theoretische Berechnung von Wachstumskurven für verschiedene Elemente erfordert die genaue Kenntnis atomphysikalischer Größen (z.B. f -Werte) sowie die Berücksichtigung einer Vielzahl weiterer, voneinander abhängiger Größen wie Dämpfungskonstanten (γ), Turbulenzgeschwindigkeiten und Dopplerprofile, die wiederum von der Temperatur T und vom Gasdruck P abhängen. Um einen Zusammenhang zwischen den theoretischen Kurven und einem konkreten Sternspektrum herstellen zu können, konstruiert man für eine Anzahl von Linien eines geeigneten Elements (z.B. Fe) aus deren auf dem Spektrum gemessenen Äquivalentbreiten W_g eine empirische Wachstumskurve. Wie man das macht, soll ohne allzu sehr ins Detail zu gehen, an dieser Stelle kurz erläutert werden. Als Ordinate wählt man die Größe $\lg(W_g/\lambda)$ und als Abszisse hat sich der Logarithmus aus dem Produkt aus statistischem Gewicht g_k , der Oszillatorenstärke f_{ik} sowie der Wellenlänge der Linienmitte λ_0 als geeignet erwiesen. In dieses Diagramm werden die Meßdaten von möglichst vielen Linien mit jeweils gleichem Ausgangsniveau k und gleichen Ionisationszustand r eingezeichnet (charakterisiert durch die Energie E_{rk}). Damit ergibt sich immer jeweils genau ein Teilstück der Wachstumskurve. Dasselbe führt man für Linien, die andere Werte von E_{rk} repräsentieren, durch. Diese Teilstücke sind um einen gewissen Betrag Δx in der Abszisse gegeneinander verschoben. Nach (1.261) kann man für den Absorptionskoeffizienten $\hat{\kappa}_{ik}(\lambda_0)$ für die Linienmitte (unter Zusammenfassung aller konstanten Werte und mit der Halbwertsbreite $\Delta\omega$ in Frequenzeinheiten)

$$\hat{\kappa}_{ik} s = \text{const} \cdot \frac{N_{rk} f_{ik}}{\Delta\omega} s \quad \text{mit} \quad N_{rk} = \frac{N_{rk}}{N_r} \frac{N_r}{\sum N_r} \sum N_r = \frac{g_k}{Z_r(T)} \exp\left(-\frac{E_{rk}}{kT}\right) \cdot \frac{N_r}{\sum N_r} \sum N_r \quad [1.267]$$

schreiben. Die Zustandssumme Z_r läßt sich für eine gegebene Sternatmosphäre (Annahme gleichmäßige Temperatur T) und für eine Atomsorte als konstant ansehen. Für die Absorption über die Schichtdicke s bei der Wellenlänge λ_0 ergibt sich dann:

$$\hat{\kappa}_{ik} s = \text{const} \cdot (g_k f_{ik} \lambda_0) \exp\left(-\frac{E_{rk}}{kT}\right)$$

Diese Gleichung wird handlicher, wenn man sie logarithmiert:

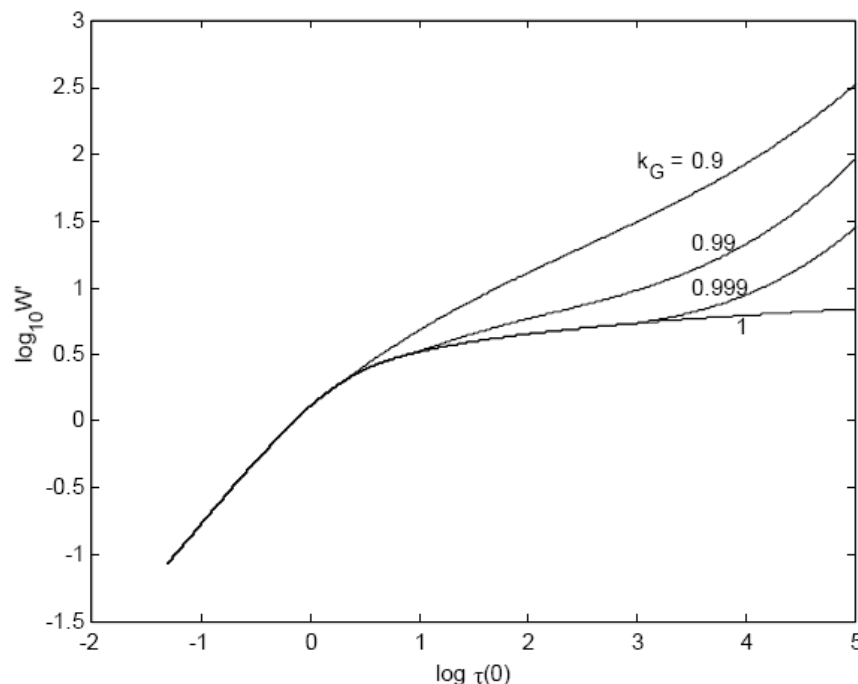
$$\lg(\hat{\kappa}_{ik} s) = C + \lg(g_k f_{ik} \lambda_0) - \frac{E_{rk}}{kT} \lg(e) \quad [1.268]$$

Hieraus läßt sich erkennen, daß die Größe, um die sich jeweils ein Teilstück der Wachstumskurve für einen bestimmten k -Wert verschiebt (Δx), linear abhängig von der Anregungsenergie E_{rk} dieses Zustandes ist. Trägt man Δx für verschiedene Kurvenstücke über E_{rk} auf, dann läßt sich aus dem Anstieg der Geraden die Anregungstemperatur T bestimmen, welche in der Boltzmann-Gleichung (1.238) das Verhältnis der jeweiligen Besetzungszahlen festlegt.

Um die komplette Wachstumskurve zu erhalten, müssen die einzelnen Kurvenstücke unter Beibehaltung der Ordinatenwerte aufeinander „aufgeschoben“ werden. Die auf diese Weise

konstruierte Kurve muß anschließend mit einer passenden theoretischen Wachstumskurve (durch Verschieben der Letzteren inkl. der Abszissenteilung) zur Deckung gebracht werden, was auch durch den ausgeprägten linearen Teil meist recht gut gelingt.

Aus dem Verlauf der empirischen Kurve im Bereich sehr starker Linien (Dämpfungsteil der Kurve, abhängig von γ) kann schließlich durch einen Vergleich mit unterschiedlich parametrisierten theoretischen Kurven der Gasdruck P in der Sternatmosphäre bestimmt werden.



Theoretische Wachstumskurven mit unterschiedlicher Dämpfung. k_g ist der Dämpfungskonstante γ proportional, die im wesentlichen das Lorentz-Profil einer druckverbreiterten Spektrallinie bestimmt.

Weitere wichtige Parameter, die Einfluß auf Wachstumskurven haben und sich deshalb daraus auch deduzieren lassen, sind die (gauß'schen) Geschwindigkeitsfelder mikroturbulenter Strömungen sowie Effekte, die mit der Größe der Schwerebeschleunigung in der Atmosphärenschicht im Zusammenhang stehen.

Ableitung der Säulendichten verschiedener Elemente aus einem Absorptionslinienspektrum

Wachstumskurven verschiedener Elemente sind untereinander meist ähnlich und können, in dem man sie in einem Diagramm zur Deckung bringt, zu einer für den jeweiligen Stern charakteristischen Wachstumskurve zusammengefaßt werden. Aus solch einer allgemeinen Wachstumskurve lassen sich die Säulendichten der einzelnen in der Sternatmosphäre vorhandenen Elemente bestimmen. Dazu wählt man eine Anzahl von Absorptionslinien, die unterschiedlichen quantenmechanischen Übergängen entsprechen und für die sowohl die statistischen Gewichte als auch die Oszillatorstärken mit ausreichender Genauigkeit bekannt sind. Mit einer geeigneten Methode (z.B. Dreieckinterpolation bei schwachen Linien) bestimmt man für diese Linien auf einem Photometerschrieb (oder mit einem

Computerprogramm) die Äquivalentbreiten W_g . Mit diesen Meßwerten geht man in die Wachstumskurve und liest auf der horizontalen Achse den Abszissenwert ab. Daraus läßt sich bei gegebenen g_k und f_{ik} die Säulendichte der Atome, die in der Lage sind, Strahlung bei der Wellenlänge λ_0 zu absorbieren, ausrechnen. In dem man das für verschiedene Linien eines Elements macht, kann man anschließend mit Hilfe der Boltzmann - bzw. der Saha-Gleichung die Zahl der Atome, die sich in den einzelnen möglichen Anregungs- bzw. Ionisationszuständen befinden, berechnen und daraus wiederum die Gesamtzahl der in der Einheitssäule befindlichen Teilchen des entsprechenden Elements bestimmen.

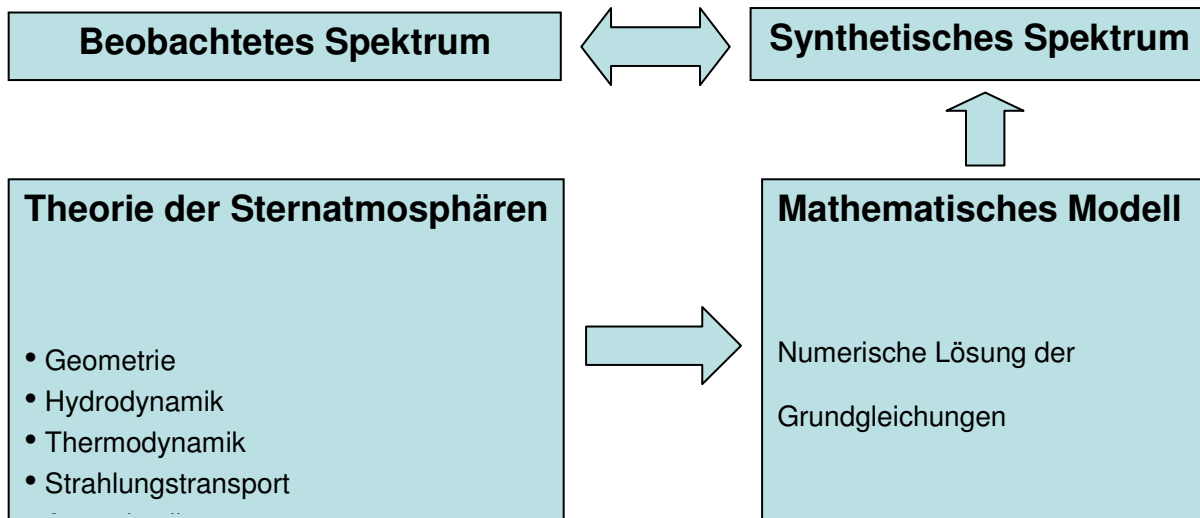
Die Ableitung stellarer Parameter aus der alleinigen Analyse von Wachstumskurven wird gewöhnlich als Grobanalyse bezeichnet. Sie erlaubt zwar einen ersten Überblick über den physikalischen Zustand der Sternatmosphäre. Für detailliertere Untersuchungen ist sie jedoch weniger gut oder höchstens als Einstieg geeignet. Deshalb folgt gewöhnlich auf die Grobanalyse noch eine Feinanalyse. Bei ihr kommt es insbesondere auf ein gutes Zusammenspiel zwischen theoretischer Modellierung der Sternatmosphäre (Eingabewerte sind die aus der Grobanalyse gewonnenen Werte für T, P, chemische Zusammensetzung, Turbulenzanteile etc.) und dem Vergleich der Ergebnisse mit den aus den Spektren abgeleiteten Parametern an. Das Prinzip besteht darin, daß man über einen iterativen Vorgang, bei denen immer bessere Modellatmosphären berechnet werden, man theoretisch Äquivalentbreiten bestimmt, die sich mit den Linienbreiten im originalen Sternspektrum vergleichen lassen. Aus den Abweichungen „Beobachtung - Rechnung“ zwischen den einzelnen Iterationsstufen ergeben sich Korrekturen, die zur jeweiligen Verbesserung des Atmosphärenmodells genutzt werden. Aus dieser Verfahrensweise wurde die moderne Methode der synthetischen Spektren entwickelt, über die im folgenden Abschnitt noch etwas Genaueres zu berichten sein wird.

Mittels der Grob- und Feinanalyse konnten erstmalig die Häufigkeitsverteilung der Elemente in der Sonne und einiger ausgewählter Sterne (der „Klassiker“ ist hier der B0-Stern τ Sco) bestimmt werden. In diesem Zusammenhang sind insbesondere die bahnbrechenden Arbeiten der Kieler Schule unter ALBRECHT UNSÖLD (1905-1995) in den 30iger und 40iger Jahren des vorigen Jahrhunderts zu erwähnen.

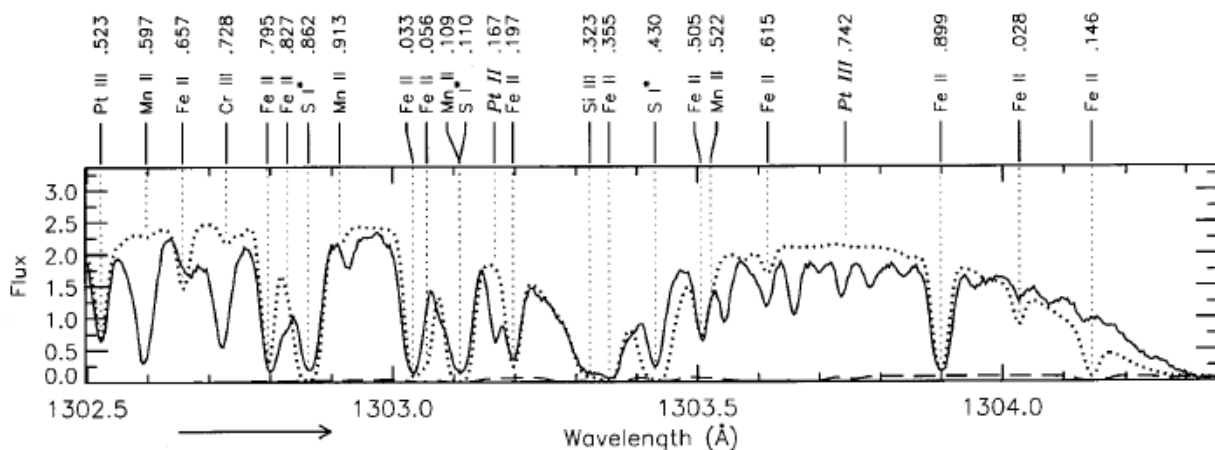
Ein bemerkenswertes Ergebnis der quantitativen Spektralanalyse war auch der Nachweis des Metallarmuts der Population II -Sterne, der sich kosmologisch begründen läßt und ihre Ursache in dem hohen Alter der Sterne hat.

Synthetische Spektren

Ein großes Problem bei der Auswertung linienreicher Sternspektren stellen die sogenannten „Blends“ dar. Sie entstehen, wenn nahe beieinander liegende Linien von dem verwendeten Spektrographen nicht mehr aufgelöst werden können und damit im Spektrum als eine (meist deformierte) Linie erscheinen oder wenn die Linienflügel einer Linie durch andere Linien beeinflusst werden. In beiden Fällen ist die genaue Messung der Äquivalentbreiten mit Schwierigkeiten verbunden oder ganz unmöglich. Um dieses Problem abzuschwächen bzw. ganz zu umgehen, wurde in den 60ziger Jahren des vorigen Jahrhunderts die Methode der Spektralsynthese entwickelt. Das zugrunde liegende Prinzip läßt sich in etwa folgendermaßen beschreiben: Aus einem Atmosphärenmodell werden für einen gegebenen Spektralbereich für alle interessierenden Elemente und deren Übergänge die Linienabsorptionskoeffizienten berechnet. Wenn man sie zusammenaddiert und daraus den zu erwartenden spektralen Strahlungsfluß bestimmt, dann erhält man ein sogenanntes synthetisches Spektrum. Dieses läßt sich dann mit dem Apparateprofil eines Spektrographen gegebener Auflösung „falten“ (was einer „Verschmierung“ der Details des künstlichen Spektrums entspricht) und es ergibt sich ein Spektrum, daß sich nun direkt mit einem realen Sternspektrum vergleichen läßt. Dreh- und Angelpunkt an diesem Verfahren ist offensichtlich eine möglichst genaue und detaillierte Modellierung der Sternatmosphäre. Zu diesem Zweck wurden eine ganze Reihe von Softwarepaketen entwickelt, die den Verlauf der wesentlichsten physikalischer Größen wie T , P und ρ für eine bestimmte Ausgangsmasse, effektive Temperatur und chemische Zusammensetzung (Metallizität) in einer Sternatmosphäre über einen großen Parameterbereich (meist unter Annahme von LTE, aber immer öfters werden auch die Gleichungen für das NLTE numerisch integriert) zu berechnen erlauben. Mittlerweile gibt es ganze Bibliotheken von Atmosphärenmodellen, die über das Internet abrufbar sind. Auch die zu ihrer Berechnung verwendeten Programme (die meist unter Unix / Linux laufen) können meist frei aus dem Netz heruntergeladen werden. Sehr häufig wird z.B. das 4-parametrische Atmosphärenmodell von ROBERT KURUCZ eingesetzt, welches als Eingabeparameter T_{eff} , $\log g$ (Schwerebeschleunigung an der Oberfläche), v_{mt} (Mikroturbulenzgeschwindigkeit) und $[X/H]$ (Metallizität) verwendet. Derartige Modelle dienen wiederum als „Eingabeparameter“ für Programmpakete, die in der Lage sind, für eine Vielzahl von atomaren Übergängen und unter den Modellbedingungen die Strahlungstransportgleichung zu lösen. Eine moderne Softwarelösung zur Berechnung synthetischer Spektren berücksichtigt z.B. 26 chemische Elemente, über 150 Ionisationszustände, bis zu 100000 Energieniveaus und vermag die Absorptionskoeffizienten von einigen Millionen bb-Übergängen zu berechnen. Dabei ist natürlich zu bemerken, daß diese Programme stetig weiterentwickelt werden und sich ihr Einsatz nicht nur auf klassische Sterne beschränkt. Weitere Anwendungsgebiete überdecken beispielsweise die Modellierung von Akkretionsscheiben (z.B. bei bestimmten Typen von veränderlichen Sternen), von protoplanetaren Scheiben bis hin zur Berechnung von Spektren ganzer Galaxien unterschiedlicher Populationszusammensetzung. Die Genauigkeit derartiger Modelle hängt dabei mit entscheidend von der Qualität der in sie eingehenden atomphysikalischen Parameter ab. Sie werden deshalb in der VALD (*Vienna Atomic Line Database*) akribisch gesammelt und gepflegt und sind über das Internet abrufbar (z.B. ams.astro.univie.ac.at/vald/).

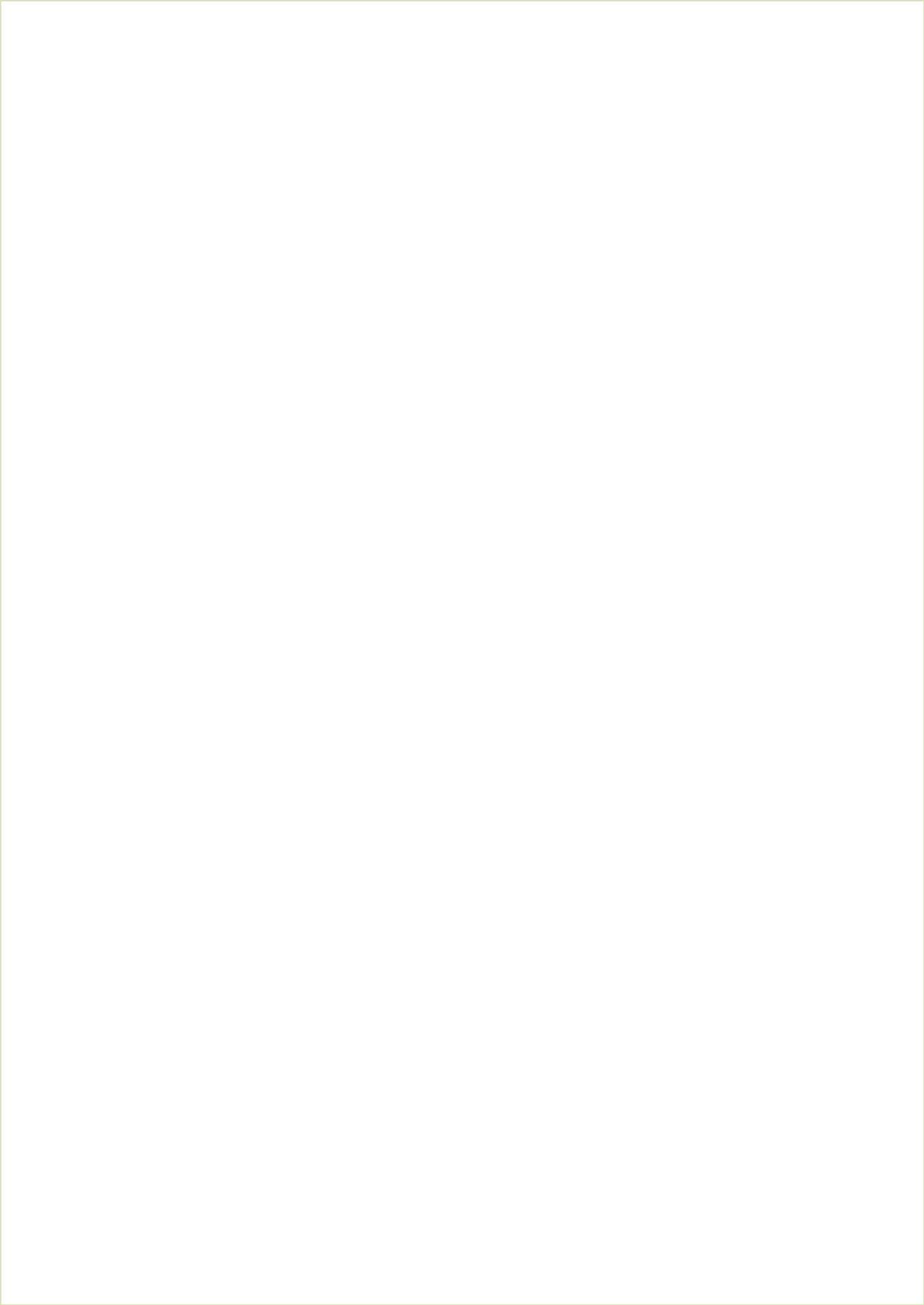


Prinzipieller Ablaufplan der Berechnung eines synthetischen Spektrums aus einem Sternmodell



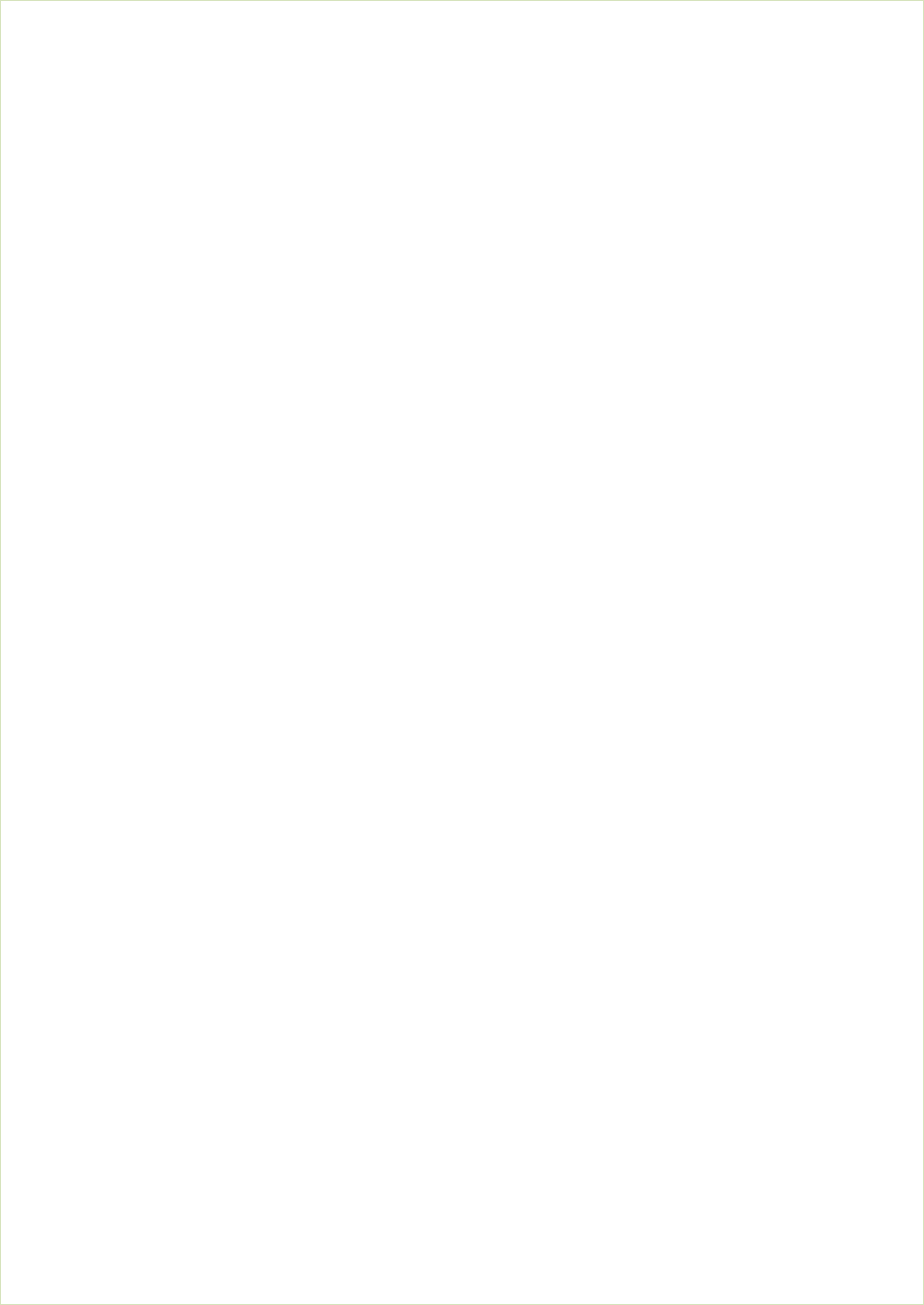
Vergleich zwischen einem Echelle-Spektrum des pekuliaren Sterns Chi Lup (ausgezogene Linie) mit einem synthetischen Spektrum (punktierter Linie, berechnet mit SYNTHE) für einen kleinen Wellenlängenausschnitt im UV-Bereich © J.C.Brandt et.al 1998

Wie obige Abbildung zeigt, können synthetische Spektren reale Sterne nicht perfekt reproduzieren obwohl die Genauigkeit der Annäherung doch bemerkenswert ist. Das ist einmal den unausweichlichen Vereinfachungen geschuldet, die genaugenommen erst eine Modellierung der komplexen Vorgänge in einer Sternatmosphäre ermöglichen (z.B. LTE statt NLTE, unvollständige oder ungenaue Liniendaten, Vernachlässigung bestimmter Ionisations-mechanismen). Deshalb ist der Vergleich mit realen (Referenz-) Sternen unumgänglich, um systematisch die Modellparameter und die Algorithmen zu verbessern. Ziel ist es immer, ein Atmosphärenmodell zu berechnen, welches das beobachtete Spektrum möglichst optimal reproduziert. Erst daraus ergeben sich dann tiefere Einsichten in die Physik der einzigen für uns sichtbaren Bereiche eines Sterns.



Literatur zum Thema

- K. Lindner: **Taschenbuch der Astronomie**, Fachbuchverlag Leipzig, 1997
- H. Bernhard, K.Lindner, M.Schukowski: **Wissensspeicher Astronomie**, Volk und Wissen 1995
- A.Unsöld, B.Baschek: **Der neue Kosmos**, Springer-Verlag 2004
- A.Weigert, H.J. Wendker: **Astronomie und Astrophysik**. Ein Grundkurs, Wiley-VCH 2004
- H. Karttunen et.al.: **Fundamental Astronomy**, Springer-Verlag 2000
- B.W. Jones: **Discovering the Solar System**, Wiley 2000
- McBride, Gilmour: **Introduction to the Solar System**, Cambridge University Press 2004
- C.R.Cowley: **The Theory of Stellar Spectra**, Gordon and Breach 1970
- J.B.Kahler: **Sterne und ihre Spektren**, Spektrum-Verlag 1994
- J.Tennyson: **Astronomical Spectroscopy**, Imperial College 2005
- D.C.Clayton: **Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis**, University Chicago Press
- S.A.Kaplan: **Physik der Sterne**, BSB B.G.Teubner Verlagsgesellschaft 1980
- M.Salaris, S.Cassisi: **Evolution of Stars and Stellar Population**, Wiley 2005



Index

A

Absorption, kontinuierliche 71
Absorptionskante 73
Absorptionskoeffizient 63, 64, 66, 72-77, 87, 92, 95
Absorptionslinienspektrum 3, 93
Alkalimetalle 5, 13, 14, 17
Anregung 5, 13, 32, 40, 41, 73
Äquivalentbreite 48, 80, 87-90
Aufenthaltswahrscheinlichkeit 8
Auswahlregeln 6, 13, 22, 23, 26, 37, 39

B

Balmer, Johann Jakob 3, 10
Balmer-Serie 11, 14
Bergmann-Serie 14
Besetzungszahl 67, 81
Bindungszustände 4
Bohr, Niels 3
Bohr-Radius 9
Bohr-Sommerfeldsches Atommodell 3, 4, 5, 8, 35
Boltzmann-Gleichung 73, 78-81, 83, 86, 92
Boltzmann-Verteilung 68, 78
Born-Oppenheimer-Näherung 32, 33
Bowen, Ira Sprague 25
Bremsstrahlung 72, 73

C

Chromosphäre 5
Compton-Streuung 72
Cowley, Charles R. 45
Cox, N. 91

D

Deutsch, Armin 52
Dirac-Gleichung 12
Dissziationsenergie 39
Doppler Imaging 52, 53
Doppler, Christian 49
Dopplereffekt 50, 51, 89
Dopplerverbreiterung 46, 47, 49, 50, 51, 60
Druckverbreiterung 12, 20, 46, 47, 55-59, 70

E

Eddington, Arthur Stanley 2
Edelgaskonfiguration 17

Edle'n, Bengt 25
Eigenzustände 10
Einstein, Albert 2
Einstein-Koeffizienten 67, 68
Elektronenbremskontinuum 72
Elektronengas 80, 85
Elektronenspin 12, 56
Emissionslinienspektrum 3
Energieeigenwerte 38
Energietransport 62, 71, 86
Entartung 10, 19, 21, 35, 56, 79

F

Fabry-Perot-Interferometer 12
Feinstrukturaufspaltung 12
Ficksche Diffusionsgesetz 77
Flashspektrum 5, 25
Fraunhofer, Joseph von 31
Frei-frei-Übergänge 71

G

Gauntfaktor 73
Gauß-Profil 57, 89
Gebunden-frei-Übergänge 71
Grotrian, Walter 6, 25
Grotrian-Diagramm 6, 11, 22
Grundzustand 4, 9, 21, 23, 25-27, 78-81, 85, 86

H

Halbwertsbreite 49, 51, 58, 92
Hamilton –Funktion 7
Hamilton-Operator 7, 32, 33
Heisenberg, Werner 2
Heisenbergsche Unschärferelation 55, 81
Heliumatom 21
Heliumspektrum 25
Holtsmark, J. 58
Holtsmark-Profil 58
Huggins, William 25
Hundsche Regeln 15, 21
Hydrid-Ion 29, 30
Hyperfeinstrukturaufspaltung 13

I

Inglis, D.A. 59
Inglis-Teller-Beziehung 59
Interkombinationslinien 23, 24, 28
Interkombinationsübergang 28
Interkombinationsverbot 23, 26, 37
Ionen 7, 17, 27, 30, 32, 44, 55, 56, 58, 59, 71, 72, 80, 86, 87
Ionen, heliumartige 18, 25, 27
Ionisation 5, 75, 80, 83, 84
Ionisationspotential 4

J

Jansen, Pierre Jules 25
Jeans, James Hopwood 3
j-j -Kopplungsschema 20

K

Kirchhoff, Gustav Robert 3
Kontinuumsstrahlung 29, 71, 72
Kontinuumszustände 5, 10
Kurucz, Robert 95

L

Leuchtelektron 13, 22
Leuchtkraftklasse 52, 58
Linienabsorptionskoeffizient 66, 69, 70, 95
Linienbreite, natürliche 47
Linieneneinsenkung 48, 87, 89
Linienflügel 48, 57, 58, 89, 95
Linienprofil 46, 47, 48, 51-53, 55, 57, 58, 88, 89
Lo Surdo, Antonio 56
Lockyer, Norman 25
Lorentz, H.A. 55
Lorentzprofil 60
Lorentz-Transformation 49
Lyman-Serie 10

M

Massenabsorptionskoeffizient 63
Maxwell-Verteilung 50, 51, 74, 80
Mehrelektronensysteme 19, 21, 22
Mendelejew, Dimitri Iwanowitsch 15
Metallizität 95
Meyer, Julius Lothar von 15
Moleküle, zweiatomige 32
Molekülorbitale 33, 34, 35
Molekülspektren 1, 2, 31, 40

Morse, Philip McCord 38
Morse-Potential 38, 39
Multipllettzustände 56
Multiplizität 18, 21, 22, 23, 36

N

Nullpunktsstrahlungsfeld 67

O

Opazität 17, 30, 71, 72, 74, 75, 77
Orbital 8, 13, 15, 16, 34, 35, 37
Oszillatorenstärke 69, 70, 87, 90, 92

P

Parität 13, 20, 21, 22, 35
Paschen-Serie 14
Pauli-Prinzip 15, 18, 35
Penrod, G.D. 53
Periodensystem 13, 15, 17, 25
Photo-Effekt 71
Photoionisation 17, 71, 73, 82
Pickering, Edward Charles 27
Pickering-Serie 27
Planck, Max 3
Plancksches Strahlungsgesetz 69
Plancksches Wirkungsquantum 3
Planetarische Nebel 24
Pointingvektor 23
Polarisationszustände 23
Protosterne 43

R

Radialwellenfunktion 8
Ramsay, William 25
Rayleigh-Streuung 72, 74, 75
Rekombination 5, 29, 71, 72, 80, 83
Resonanzlinie 28
Resonanzübergang 28
Robert Wilhelm, Bunsen 3
Röntgenspektrum 27, 28
Rosseland, Sven 76
Rosseland'sche mittlere Opazitätskoeffizient 75
Rotationsübergänge 40, 41, 43
Russell, Henry Norris 15
Russell-Saunders-Kopplung 18, 23, 36
Rydberg, Johannes Robert 10
Rydberg-Konstante 10, 26

S

Saha, Meghnad 2, 80
Saha-Gleichung 18, 74, 79, 80, 82-86, 94
Säulendichte 88, 89, 90, 94
Saunders, Frederick A. 15
Schrödinger, Erwin 2
Schrödingergleichung 4, 7, 8, 10, 32-34, 38, 39, 40
Schwarzer Körper 3
Seriengrenze 4, 59, 72, 73
Sommerfeld, Arnold 2, 3, 6
source function, Ergiebigkeit 65
Spektralanalyse, quantitative 86
Spektrallinien, Feinstruktur 12
Spektrum, kontinuierliches 3, 72
Spektrum, synthetisches 86, 87, 95
Spin-Bahn-Kopplung 12
Spinzustände 23
Stark, Johannes 56
Stark-Effekt 19, 56, 58
Stern, Rotation 51
Sternatmosphäre 30, 31, 44, 45, 47, 51, 59, 61, 64-66, 75, 76, 86-88, 92-96
Stoßdämpfung 47, 55, 57, 89
Stoßprozesse 24, 27, 68, 78
Strahlungstransport 1, 2, 61, 62, 78, 95
Strahlungstransportgleichung 65, 76, 88
Strahlungsübergang 3, 27, 28
Streuprozesse 71, 74
Strömungsgleichung 65
Strutt, John William (Lord Rayleigh) 3

T

Teller, Edward 59
Termdiagramm 15
Termschema 3, 6, 10
Thomson-Streuung 72, 74
Tracermolekül 44

U

Übergangswahrscheinlichkeiten 20, 24, 67, 68
Ultraviolettkatastrophe 3
Unsöld, Albrecht 2, 94

V

Valenzelektron 15, 35
Verbotene Linien 24, 28
Verbotener Übergang 28
Vibrations- Rotationsspektren 41
Vibrationsspektrum 42
Vibrationsübergänge 37, 39, 43
Vienna Atomic Line Database 45, 95
Vogt, S. S. 53
Voigt, Woldemar 60
Voigt-Profil 57, 60, 70

W

Wachstumskurven 87, 91-94
Wasserstoffatom 4, 5, 7, 8, 10, 13, 15, 19, 26, 29, 30, 44, 69, 72
Wasserstoffionen, Spektren 29
Wasserstoffspektrum 2, 10, 13
Weiße Zwergstern 44
Wien, Wilhelm 3
Wildt, Rupert 30
Wirkungsquerschnitt 63, 73

Z

Zeeman-Doppler-Imaging 54
Zeeman-Effekt 19, 54, 56