## Die Spektroskopie in Naturwissenschaft und Technik

## ERNST W. SALPETER SJ

Vor rund hundert Jahren erschien in den Poggendorfschen Annalen eine Arbeit von Kirchhoff und Bunsen — zwei Professoren der Heidelberger Universität, der eine Physiker, der andere Chemiker — über "Chemische Analyse durch Spektralbeobachtung". Weder Verfasser noch Leser ahnten damals, welch wundervolles Werkzeug damit der Naturwissenschaft und Technik in die Hand gespielt wurde. Die mächtige Entwicklung der Atomphysik nahm hier ihren Ausgang, und die moderne Technik mit ihren raffinierten Untersuchungen und Prüfungen ist auf ihre Hilfe angewiesen.

Es war ein glücklicher Umstand, daß gerade diese erste fundamentale Arbeit über Spektralanalyse aus dem kollegialen Zusammenwirken eines Physikers und eines Chemikers geboren wurde, das erste Aufleuchten des so notwendigen Zusammengehens der beiden Wissenschaften in der Ergründung der Rätsel der Materie, das undurchdringliche Geheimnis des Zusammenspiels von Kraft und Stoff. Es war aber auch schon die erste Andeutung der zwei großen Gebiete, auf denen sich die Spektroskopie in der Folge betätigte und bewährte: die chemische Spektralanalyse, die vor allem dem analytischen Chemiker und Techniker helfend zur Seite steht bei seinen Untersuchungen und Prüfungen der greifbaren Welt, und die physikalische Spektroskopie, die in den geheimnisvoll unzugänglichen Mikrokosmos der Atome und Moleküle hineintastend, die Natur der Materie, der Energie und des Lichtes zu ergründen sucht. Und schon von Anfang an war es die Spektroskopie, die erlaubte, aus dem feinen Lichtstrahl, der von den Sternen zu uns gelangt, und aus der Lichtflut der Sonne, auf die physikalische und chemische Beschaffenheit der Gestirne zu schließen.

\*

Schon seit Newton wissen wir, daß sich weißes Licht mit Hilfe eines Prismas in ein Band verschiedener Farben, in ein Spektrum zerlegen läßt. Erst ein gutes Jahrhundert später erkannte man klar, daß der physikalische Grund für die Verschiedenheit dieser Farben in ihrer verschiedenen Wellenlänge liegt. Dazu war es aber erst nötig zu erkennen, daß das Licht ein Schwingungsvorgang ist, und man mußte erst lernen, diese Wellenlängen zu messen. Das sichtbare Spektrum, die "Farben", von rot bis violett, für die unser Auge empfänglich ist, bildet aber nur einen ganz kleinen Teil des gesamten Spektrums der elektromagnetischen Wellen, das sich auf der roten Seite ins Infrarot, in die Wärmestrahlen, in die kurzen und langen Radiowellen fortsetzt, während sich hinter dem Violett das Ultraviolett, die Röntgen- und Gammastrahlen anschließen.

Die Spektroskopie erhielt aber eigentlich erst durch Kirchhoff und Bunsen ihren Platz in der Wissenschaft, als sie erkannten, daß jedes einzelne chemische Element ein besonderes charakteristisches Spektrum aussendet, wodurch es auch neben anderen Elementen erkannt und identifiziert werden kann, wie es eben für eine Analyse wichtig ist. 50 Jahre später benützte Bohr ein besonders einfaches Spektrum, das Wasserstoffspektrum, zur Formung seines Atommodells. Der größte Teil unserer Erkenntnisse über den Aufbau der Materie geht auf dieses Modell zurück.

Die chemische Spektralanalyse war zunächst das wichtigste Anwendungsgebiet der Spektroskopie. Ihr erster Triumph war die Entdeckung einer Reihe von bis dahin unbekannten Elementen. Es vergingen aber noch fast 70 Jahre seit den Entdeckungen von Kirchhoff und Bunsen, bis sie Eingang fand und in der Praxis zu Bedeutung kam, und bis wirklich brauchbare Spektrographen hergestellt wurden. Schnelligkeit und Empfindlichkeit zeichnen diese Analysenmethode vor der traditionellen chemischen Analyse aus. Schon geringste Mengen eines Stoffes genügen für solch eine Analyse, so daß schon Bunsen schrieb, daß er mit Leichtigkeit fünf Tausendstel eines Milligramms von Lithium in einem Gemisch nachweisen konnte, und zwar mit einem Blick auf das Spektrum. Die Metallindustrie z. B. kommt heute bei der Herstellung von reinen Metallen und ihren Legierungen ohne diese Methode nicht mehr aus. Man hat Spektralautomaten konstruiert, die in einer Minute eine genaue quantitative Analyse eines Metallstückes mit über 20 Komponenten liefern. Diese Schnelligkeit weiß der zu schätzen, der selbst einmal, mit Hilfe der "normalen" chemischen Methode eine solche Analyse auszuführen hatte.

Um das Spektrum eines Elementes zu erhalten, muß man es zur Lichtaussendung "anregen". Feste Stoffe werden dazu in einem Lichtbogen oder in einem elektrischen Funken verdampft. Flüssigkeiten werden in einer Gasflamme zur Anregung gebracht. Organische Substanzen werden besonders in Absorption untersucht: sie nehmen aus dem weißen Licht, mit dem sie durchstrahlt werden, gewisse charakteristische Wellenlängen heraus, absorbieren sie, und diese Absorption dient in ausgezeichneter Weise der Analyse, so daß heute kaum ein chemischer oder pharmazeutischer Betrieb ohne spektroskopisches Laboratorium bestehen kann. In Verbindung mit einem Mikroskop können biologische Strukturen, ja einzelne Zellen auf ihre Bestandteile untersucht werden, besonders wenn es sich um Mineralsalze handelt, die in unglaublich kleinen Mengen dem Organismus nötig sind und deren Bedeutung man allmählich zu ergründen sucht. In der Biologie gewinnt so die Spektroskopie immer mehr an Bedeutung. Chemische Reaktionen, einschließlich Explosionen und die Verbrennung von Treibstoffen für Raketen werden spektroskopisch untersucht. In letzter Zeit hat man auch die Röntgen-Fluoreszenzanalyse, die mit den Röntgenapparaten der Kliniken wohl nur die Strahlungsquelle, die Röntgenröhre selbst, gemeinsam hat, immer mehr für analytische Zwecke herangezogen.

Dies sind nur ein paar Streiflichter, die eine Ahnung geben sollen von der Bedeutung der Spektroskopie in der Chemie und in den verwandten Wissenschaftszweigen. Dabei ist das Spektrum nur eine Art Werkzeug, das wir für unsere Analysen benützen. Dem Wissenschaftler war dies aber nicht genug. Er wollte wissen, was so ein Spektrum eigentlich in sich ist, wie es aus den Atomen und Molekülen entsteht, und da eröffneten sich ihm ganz neue Aspekte, ein Zugang zur Natur und zum Wesen des Atoms, des Moleküls, tat sich ihm auf. Fast alles, was wir vom Atom wissen, kam uns durch die Spektroskopie, durch die Interpretation des Spektrums selbst.

Es wurde schon erwähnt, daß das relativ so einfache Wasserstoff-Spektrum von Niels Bohr durch seine Theorie des Atoms erklärt wurde. Bohr stellt das Atom durch einen Kern dar, um den die Elektronen in bestimmten. genau festgelegten Bahnen kreisen. Durch Aufnahme von Energie wird ein Elektron in eine höhere Bahn gehoben, und beim Zurückfallen in die tiefere wird die freiwerdende Energie wieder abgestrahlt, in Form einer elektromagnetischen Welle, dem Licht. Die Wellenlänge dieses Lichtblitzes entspricht dem Energiequant, das sich ergibt aus dem Abstand der beiden Bahnen, die eigentlich Energieniveaus sind. Da jedes Element einen verschieden großen Atomkern und dementsprechend verschieden viele Elektronen besitzt, sind die einzelnen Energieniveaus verschieden und für jedes Element charakteristisch. Daher kann man aus den Spektrallinien auf diese Energieniveaus zurückschließen, auf ihre Verteilung, auf die Größe und Form der Elektronenbahnen usf. Das anschauliche Atommodell von Bohr wurde bald durch unanschauliche, aber viel genauere mathematische Formulationen ersetzt, durch die Wellenmechanik und Quantenmechanik von Schrödinger, Heisenberg und Dirac. Damit kann man auch kompliziertere Atome als das Wasserstoffatom mit nur einem Elektron berechnen, und die theoretischen Berechnungen stimmen mit den Erfahrungstatsachen der Spektroskopie vollständig überein. In Verbindung mit dem sogenannten Pauli-Prinzip ließ sich nun das periodische System der Elemente verstehen und erklären, d. h. die periodische Wiederkehr gleicher oder ähnlicher chemischer Eigenschaften in der Reihe der Elemente, die ja nichts anderes sind als Auswirkungen des Energiehaushaltes der Atome. Die Exaktheit all dieser Berechnungen wird durch die Spektroskopie geprüft, und die volle Übereinstimmung erhärtet und berechtigt die Theorie.

Die Spektroskopie brachte ferner Licht in das Wesen der chemischen Verbindungen, der Moleküle. Auch sie ergeben Spektren, wie die Atome, und doch wieder anders. Den Molekülen entsprechen Bandenspektren, Serien von gleichmäßig voneinander entfernten Linien, deren Interpretation allein fast ein eigener Wissenszweig geworden ist. Es mag hier genügen anzudeuten, daß man aus diesen Bandenspektren Abstände der einzelnen Atome, ihre geometrische Anordnung, Bindungsenergien und vieles andere herauslesen und herausrechnen kann, Dinge, die nicht nur für das theoretische Ver-

ständnis der Verbindungen, sondern auch für die Praxis, für die Technik, für die Industrie von ungeheurer Bedeutung sind.

Von den ungezählten Anwendungen der Spektroskopie in den verschiedenen Gebieten der Physik mögen nur einige ganz spezielle Fälle gestreift werden, wie z. B. das Gebiet der Wärme: Die Spektroskopie dient hier nicht nur zur Messung von thermischen Funktionen, wie die Theorie sie braucht, sondern kann mit Erfolg dort eingesetzt werden, wo gewöhnliche und auch außergewöhnliche Thermometer versagen oder überhaupt nicht angewendet werden können, besonders wenn die Temperaturen sehr hoch werden. So hat man aus den Spektren die Temperatur der Sterne und der Sonnenkorona bestimmt, ebenso die Augenblickswerte der Temperatur der Schockwellen bei gewöhnlichen und Kernexplosionen, die hohen Temperaturen des Gasplasmas bei den Experimenten zur Erzielung der Kernfusion.

Eine Spektralwellenlänge des Krypton-Isotopes 84 hat das Ur-Meter aus Platin-Iridium als Längenstandard verdrängt, da sie wesentlich genauer, praktischer und konsequenter ist und jederzeit und überall zur Hand ist. In letzter Zeit hat, sogar in den Zeitungen, der "Maser" von sich reden gemacht, besonders beim Empfang der Sighale von künstlichen Erdsatelliten und in der Radioastronomie. Es ist dies ein ganz neuartiger hochwirksamer Verstärker für Mikrowellen, der sich die aus der Spektroskopie gewonnenen Kenntnisse der Energieniveaus zunutze macht. Man hat auf demselben Prinzip optische Maser konstruiert, die einen so stark gebündelten Lichtstrahl aussenden, wie man es bisher für unmöglich gehalten hatte.

Zum Schluß mögen noch zwei Folgerungen der Relativitätstheorie erwähnt werden, zu deren Beweis die Spektroskopie herangezogen wird. Die erste ist die Frage nach der Bewegung des Lichtäthers, der objektiv unbewegt angenommen wurde, und der deshalb auf der sich bewegenden Erde einen "Ätherwind" hervorrufen sollte. Die Relativitätstheorie verneint einen solchen Ätherwind. Die bisherigen experimentellen Methoden erlaubten aber nur eine geringe Genauigkeit, so daß die Versuchsfehler größer waren als das gesuchte Resultat. Durch die Verwendung des eben genannten Masers konnte man die Versuchsgenauigkeit auf das Tausendfache erhöhen, ohne jedoch einen Ätherwind zu entdecken.

Die andere Forderung der Relativitätstheorie ist die, daß die Spektrallinien in einem Schwerefeld nach Rot abgelenkt werden sollten, z.B. wenn die Lichtstrahlen eines Sternes an der Sonne vorbeigehen, die ja ein starkes Gravitationsfeld hat. Diese Versuche wurden auch bei der letzten Sonnenfinsternis gemacht, ohne aber zu eindeutigen Resultaten zu führen, da zu viele störende Umstände in der Atmosphäre einwirken. Erst in ganz jüngster Zeit hat man (Mößbauer) einen spektroskopischen Effekt gefunden, mit dessen Hilfe man den Einfluß der Schwerkraft auf die Spektrallinien ohne störende Hindernisse, im Laboratorium, und mit unerhörter Präzision zu untersuchen hofft. Die bisherigen Vorversuche stimmen mit der Forderung der Relativitätstheorie überein.

Die Spektroskopie ist in der Chemie nur eine Analysenmethode neben anderen, und ohne sie hätte die Physik vielleicht auch auf irgendeine andere Weise in die Geheimnisse des Atoms eindringen können. Aber es gibt eine Wissenschaft, in deren Forschungsprogramm die Spektroskopie durch nichts anderes ersetzt werden kann: die Astronomie und Astrophysik. Das Licht und die elektromagnetische Strahlung überhaupt sind ja das einzige, was aus den fernen Himmelskörpern zu uns dringt. Und um aus diesen Strahlen mehr herauszulesen als nur die Existenz und Position der Himmelskörper, dazu gibt es kein anderes Mittel als die Spektroskopie. Sie hilft uns, aus dem feinen Lichtstrahl, den die Teleskope faßbar machen, Beschaffenheit, Alter und Bewegung der Gestirne abzuleiten.

Es ist eine eigenartige Tatsache, daß die Anwendung der Spektroskopie in der Astronomie den chemischen Anwendungen um einige Jahre sogar vorausging, denn die Sonne, und bald auch einige hellere Sterne, waren die ersten spektroskopisch betrachteten Lichtquellen. Die dunklen Fraunhoferschen Linien im hellen Sonnenspektrum waren zwar schon lange bekannt, aber erst Kirchhoff und Bunsen erklärten sie als Absorptionslinien, die genau den Emissionslinien des Natriums, des Eisens usf. entsprechen. Daraus entwickelte Kirchhoff die Lehre von der Absorption und bewies, daß die Sonne ein glühender Körper sei, umgeben von einer kühleren Gasatmosphäre. Das ist uns heute eine Selbstverständlichkeit, aber damals glaubte man, die Sonne sei nur "mit einem verdichteten ätherischen Lichtstoff bekleidet", durch den man das dunkle Innere als Sonnenflecken sehen konnte. In der Sonne fand die Spektroskopie das Helium (daher der Name), bevor es auf der Erde nachgewiesen werden konnte. Mit Hilfe der Spektroskopie gelang es auch festzustellen, daß in dem uns zugänglichen Weltraum und in den Sternatmosphären keine anderen Elemente vorhanden sind als wir sie auf Erden finden, und auch in ungefähr gleicher Verteilung. Sogar die Isotopenverteilung der Elemente in den Himmelskörpern kann man unter Umständen feststellen. Sie ist im allgemeinen gleich der auf der Erde, jedoch mit gewissen Ausnahmen, die den Astrophysikern Anhaltspunkte geben für ihre Theorien über die Art und Weise, wie die selbstleuchtenden Himmelskörper die Energie gewinnen, die sie seit Jahrmillionen ausstrahlen.

Von den Planeten, die ja nicht selbst leuchten, sondern nur das Sonnenlicht reflektieren, zeigen viele ein Absorptionsspektrum von Molekülbanden, die zeigen, daß z.B. in der Atmosphäre der Venus große Mengen von
Kohlensäure vorhanden sind, hingegen in der des Mars nur sehr wenig.
Methan findet sich reichlich im Jupiter, Saturn, Neptun; Ammoniak im Jupiter. Andere Gase, wie Wasserstoff, Stickstoff und Argon, sind in den
Spektren der Planetenatmosphären viel schwieriger nachzuweisen. Und doch
müssen sie dort in bedeutenden Mengen vorhanden sein. Die Zusammensetzung der Atmosphäre der Planeten ist für die Frage wichtig, ob dort
irgendeine Art von Leben möglich ist. In letzter Zeit scheint man an gewis-

sen Stellen der Oberfläche des Mars Absorptionsbanden organischer Moleküle bemerkt zu haben — aber ist da nicht der Wunsch Vater des Gedankens?

Sogar von den so schwachen Kometenschweifen gelang es, die Spektren herzustellen, und man fand, daß diese aus gewissen Gasmolekülen bestehen, die durch die Sonnenstrahlung zur Fluoreszenz gebracht werden und so leuchten. Diese Gase entstehen aus den meistens unsichtbaren Kernen der Kometen.

Vieles, was wir von der Erdatmosphäre wissen, stammt aus spektroskopischen Studien. Schon vor 40 Jahren konnte Fabry zeigen, daß eine Schicht von Ozon in der Atmosphäre für die ultravioletten Strahlen der Sonne und der Sterne eine unüberwindliche Schranke bildet. Daher hat man nach dem Krieg Raketen mit einem Spektroskop ausgerüstet und über diese Ozonschicht hinaus in die äußeren Schichten der Atmosphäre steigen lassen, bis 50 und 100 km Höhe. So erhielt man das erste Mal Nachricht über die ultravioletten Strahlungen im Weltraum. Freilich ist dies nicht so einfach: da sich eine solche Rakete nur wenige Minuten in der großen Höhe aufhält, stehen nur ganz kurze Zeiten für die Belichtung des Spektrums auf einem Film zur Verfügung, und außerdem waren noch schwierige technische Probleme zu lösen, um den Spektrographen mit Sicherheit auf sein Ziel, die Sonne oder den Stern, zu richten.

Ist der Weltraum zwischen den Sternen wirklich leer? Auch hier gibt uns die Spektroskopie Antwort: Von einem leeren Raum kann man eigentlich nicht reden; denn es wurden dort schon Atome von Wasserstoff, Natrium, Eisen, Titan und verschiedene Moleküle nachgewiesen. Freilich findet man dort nur ein Wasserstoffatom in einem Raum von der Größe eines halben Fingerhutes, und die übrigen Atome sind noch rarer, während im besten Vakuum, das wir auf Erden erzeugen können, noch immer etwa eine Million Atome und Moleküle im Raum von derselben Größe sind! Weitere Auskünfte werden uns wohl in den nächsten Jahren reichlich die geplanten Weltraum-Beobachtungsstationen liefern.

Die Spektroskopie gibt uns aber nicht nur Aufschluß über die Anwesenheit von Materie im Raum und über die physikalisch-chemische Beschaffenheit der Himmelskörper, sondern sie sagt uns auch viel über ihre Bewegung. Der Schlüssel dazu ist der bekannte Doppler-Effekt, nach dem die Spektrallinien eine Verschiebung erfahren, je nach der relativen Bewegung der Lichtquelle zum Beobachter. Die Wellenlängen erscheinen kürzer, d. h. gegen Violett verschoben, wenn die Lichtquelle sich dem Beobachter nähert, länger, gegen Rot verschoben, wenn sie sich entfernt. Während viele Jahre vergehen müssen, bis man auf fotografischem Weg die sogenannte Eigenbewegung eines Sternes, senkrecht zur Beobachtungsrichtung, erkennen kann, wird die Radialgeschwindigkeit, also die Bewegung in Sichtlinie, die Entfernungsänderung, unmittelbar im Spektrum erkannt und gemessen, eben durch die Verschiebung der Spektrallinien des sich bewegenden Sternes gegenüber entsprechenden Linien aus einer irdischen Vergleichslichtquelle.

Durch das Studium dieser Radialgeschwindigkeiten von tausenden von Sternen konnte man die Bewegung unseres Sonnensystems gegenüber der übrigen Sternenwelt berechnen. Ja man konnte sogar zeigen, daß unser ganzes Milchstraßensystem, von dem unser Sonnensystem nur ein verschwindender Teil ist, sich in einer Rotation befindet, deren Periode 220 Millionen Jahre beträgt.

Weiter hat das Studium der Radialgeschwindigkeiten der außergalaktischen Nebel gezeigt, daß sich diese fernsten Nebel von uns mit um so größerer Geschwindigkeit entfernen, je weiter sie von uns weg sind, mit Geschwindigkeiten bis zu 60000 km in der Stunde. Diese Flucht der Nebel führt uns auf Grund der berühmten Rotverschiebung zur Idee des sich immerfort weiter ausdehnenden Universums.

\*

So haben wir kurz gesehen, daß die Spektroskopie eine ganze Reihe von grundlegenden Bausteinen für die Naturwissenschaft herbeigeschafft hat, für unsere Erkenntnis des Universums, im Mikro- wie im Makrokosmos. Als Analysenmethode ist sie unentbehrlich geworden in Chemie, in Astrophysik, in der Biologie.

Der Aufbau von Atomen und Molekülen ist jetzt in großen Linien bekannt, dank der Bemühungen zahlreicher Spektroskopiker und theoretischer Physiker. Aber es bleibt noch viel Arbeit, sowohl zur Verfeinerung bei einfachen, als zur Lösung von immer komplizierteren Fragen. Es ist schwierig vorauszusehen, welche Rolle der Spektroskopie in der Zukunft vorbehalten ist, gerade wegen einiger wichtiger Entdeckungen auf diesem Gebiet, wie z.B. des Mößbauereffekts, dessen Tragweite und Bedeutung noch nicht abzuschätzen ist. Weitere und größere Überraschungen werden uns vielleicht die spektroskopischen Beobachtungsstationen im Weltraum bringen durch ihre Nachrichten über das Ultraviolett im Weltraum, das uns bisher durch die Atmosphäre verschlossen blieb. Trotzdem aber bleiben noch viele Probleme auch für den Spektroskopiker, der niemals sein irdisches Laboratorium verlassen wird.