

Kap 1. Tidig Atomfysik

Rydbergs formel för väte

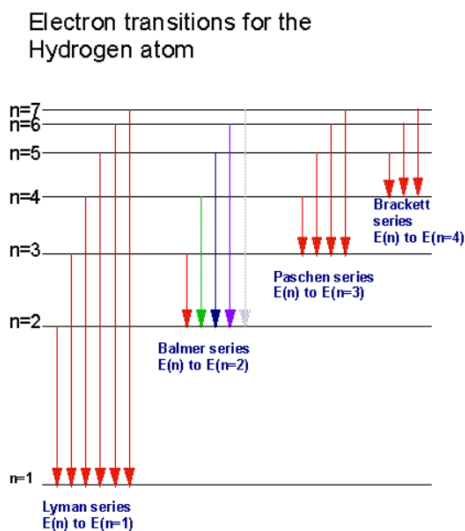
$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

Vågtalet ges som $\nu = \frac{1}{\lambda}$.

För n=1 Lymanserien, n=2 fås

Balmersserien, n=3 Paschenserien.

Balmerserien ligger i det synliga spektrat.



Energi från vågtalet fås som $E = h\nu$, vågtalet ges oftast som inversa centimetrar.

Rydbergskonstanten är massberoende, måste använda reducerade massan

$$m = \frac{m_e M}{m_e + M}$$

R_{∞} är för en oändligt tung kärna, för allmänt R gäller

$$\frac{R_{\infty} M}{m_e + M}$$

Då man substiterar ut elektronmassan mot den reducerade (därför försvinner ett m_e)

Detta leder till isotopskiftet då den reducerade massan är olika för olika isotoper.

Elektronernas banradie i vätelika atomer

$$r = \frac{a_0 n^2}{Z}$$

Bohrs modell är bra för väte och vätelika atomer (om $Z < 20$)

Energivåerna ges av

$$E_n = -\frac{hcRZ^2}{n^2}$$

$$a_0 \approx 0.5 \text{ \AA}$$

Coloumbpotentialen för en vätelik atom

$$V(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze_0^2}{r}$$

Bohrs postulat

- Stationära banor
- Ljusutsändning/-absorption: $hf = |E_n - E'_n|$
- Kvantisering av rörelsemängdsmoment $|L| = r \times p| = n\hbar$

Moseley samband för röntgenstrålning

$$\sqrt{f} \propto Z$$

Kap 1. Vågfunktioner i väte

S.E

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right) \psi = E\psi$$

i sfäriska koordinater blir

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2$$

DVS hela vinkelberoendet ligger i operatorn \mathbf{L} .

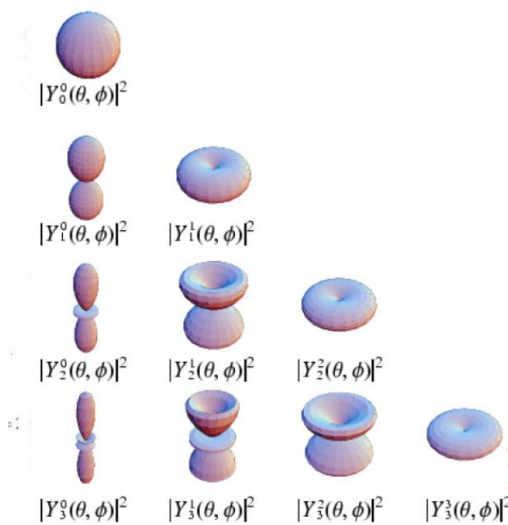
Variabelseparation av S.E i sf. Koord. Ger ekvationen

$$\mathbf{L}^2 Y = bY$$

För vinkeldelen. Lösningen är klotytefunktionerna.

$$\begin{aligned}
 Y_{0,0} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
 Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
 Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\
 Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\
 Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\
 Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}
 \end{aligned}$$

Normalisation: $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{l,m}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$



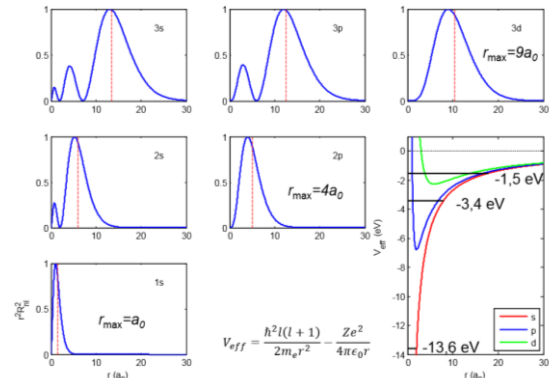
Radiella vågfunktionerna och plottar för sannolikhetstätheten i radiell led.

$\rho = Zr/na_0$

$$\begin{aligned}
 R_{1,0} &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\rho} \\
 R_{2,0} &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} 2(1-\rho)e^{-\rho} \\
 R_{2,1} &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \rho e^{-\rho} \\
 R_{3,0} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} 2\left(1-2\rho+\frac{2}{3}\rho^2\right)e^{-\rho} \\
 R_{3,1} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \rho\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)e^{-\rho} \\
 R_{3,2} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}} \rho^2 e^{-\rho}
 \end{aligned}$$

Normalisation: $\int_0^\infty R_{n,l}^2 r^2 dr = 1$

$$|P(r)|^2 = r^2 |R_{nl}(r)|^2$$



Observera att endast s-elektroner har en sannolikhet att befinna sig i $r=0$. Högre l gör att elektronen befinner sig längre ut och bindningsenergin minskar.

Totala lösningen till S.E i sfäriska koord

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi)$$

En vinkedel och en radiell del, vinkeldelen Y ej beroende av n -kvanttalet och radiella delen R ej beroende av m -kvanttalet.

Observera den effektiva potentialen och dess beroende av l -kvanttalet.

Egenvärden:

$$l^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}$$

$$l_z Y_{lm} = m Y_{lm}$$

l är det orbitala rörelsemängdsmomentet, l_z är dess projektion på z-axeln. l är rörelsemängdsmomentskvanttalet. m är det magnetiska kvanttalet.

Finstruktur

Hela vågfunktionen för en en-elektronsatom måste kompletteras med spinnet.

$\psi = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \cdot |sm_s\rangle$ eller så skriver man även vinkeldelen med ketnotation

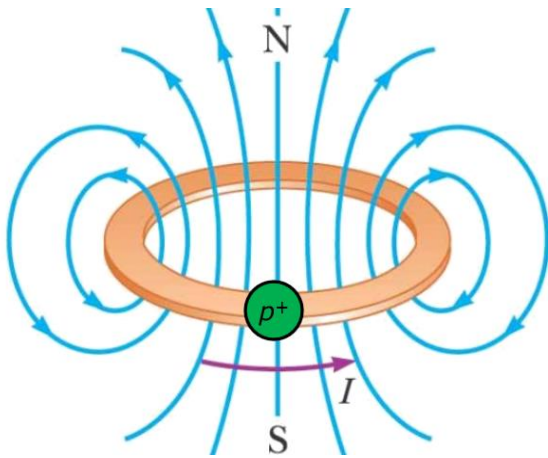
$$\psi = R_{nl}(r) \cdot |lm_l sm_s\rangle$$

För elektroner (fermioner) $s =$

$$\frac{1}{2} \text{ och } m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Inför en vektormodell för spinnet, vektorns längd blir $|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}$ och precesserar okänt kring z-axeln men med en projektion på denna som alltid är 1/2 (eller -1/2)

Klassiskt sett så ser elektronen en positiv kärna rotera kring den som ger upphov till ett magnetfält. Energin beror då på hur elektronens spin är orienterat i förhållande till detta. Detta ger upphov till spin-banväxelverkan.

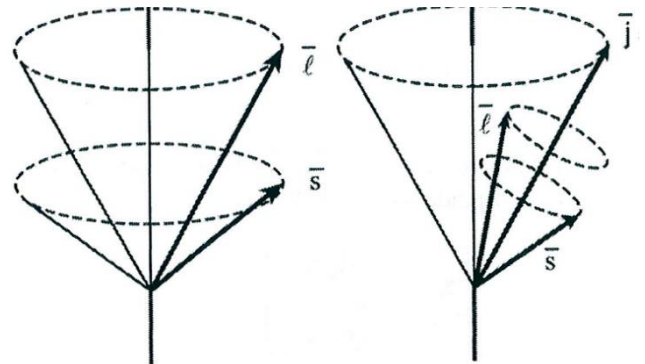


Växelverkan (spin-orbit) ger operatören

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

B-fältet är det fält som elektronen ser från kärnan (som ser ut att cirkulera elektronen) och $\boldsymbol{\mu}$ är elektronens magnetiska moment.

L och S ej rörelsekonstanter längre, däremot är j konstant. Måste byta vågfunktioner.



$$|l m_l s m_s\rangle \Rightarrow |l s j m_j\rangle$$

Spin-banväxelverkan blir

$$E_{s-o} = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \rangle$$

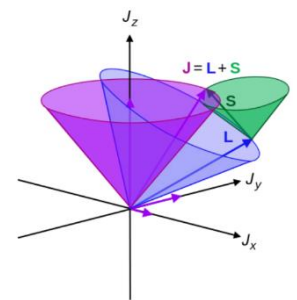
$$= \frac{\beta}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - s(s-1)\}$$

$$\text{Med } \beta = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(na_0)^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

(spin – orbit konstanten)

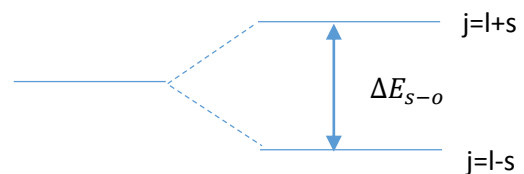
$$\text{Produkten beräknas genom } 2\mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = \mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2$$

Där $j=l+s$ och kan tolkas genom addition av vektorerna i vektormodellen (addition av rörelsemängdsmoment).



Lande's intervallregel

$$\Delta E_{s-o} = E_{s-o}^{l+s} - E_{s-o}^{l-s} = \frac{Z^4}{n^3 l(l+1)} \alpha^2 hc R_\infty$$



Uppsplittringen för **vätelika** system.

$$\text{Detta gör att } \langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \rangle = \frac{1}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}$$

Resten av konstanterna sätts i β och den energin blir tillslut

$$E_{s-o} = \frac{\beta}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}$$

Urvalsregler

Elektrisk dipolövergång	Magnetisk dipolövergång
$\Delta J = 0, \pm 1$ Ej 0 till 0	$\Delta J = 0, \pm 1$ Ej 0 till 0
$\Delta M_J = 0, \pm 1$	$\Delta M_J = 0, \pm 1$
$\Delta l = \pm 1$ (paritetsbyte)	$\Delta l = 0$ (inget paritetsbyte)
Δn Godtyckligt	$\Delta n = 0$
$\Delta L = 0, \pm 1$ (vid perfekt LS-koppling)	$\Delta L = 0$
$\Delta S = 0$ (vid perfekt LS-koppling)	$\Delta S = 0$

s-elektroner har inget banrörelsemängdsmoment och ger därför inte upphov till någon finstruktur.

Flerelektronsystem

S.E för helium

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

Kan skrivas som en summa av två operatörer för två olika elektroner. (bortse från elektronernas växelverkan med varandra, dvs den sista termen)

$$H_0 \psi^0 = (H_1 + H_2) \psi^0 = E^0 \psi^0$$

Och dessa kan lösas var för sig med sin respektive vågfunktion

$$\begin{aligned} H_1 \psi(1) &= E_1 \psi(1) \\ H_2 \psi(2) &= E_2 \psi(2) \end{aligned}$$

Den totala vågfunktionen $\psi^0 = \psi(1)\psi(2)$ och den totala energin blir då

$$E^0 = E_1 + E_2 = -13.6 \text{ ev} \cdot Z^2 \cdot 2 = -109 \text{ ev}$$

Det faktiska värdet är -79 ev.

Väntevärdet av repulsionen

$$\langle \psi^0 | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} | \psi^0 \rangle = \Delta E_{rep} = 34 \text{ ev} \text{ och med denna korrektion fås då}$$

$$E = -109 + 34 = -75 \text{ ev}$$

Fortfarande inte helt rätt då det inte är en liten störning.

Vågfunktionen

Fermioner är antisymmetriska \rightarrow vågfunktionen måste ha samma egenskap.

$$\psi_{tot} = \psi_{rum} \cdot \psi_{spinn}$$

Rumsdelen är symmetrisk så då måste spindelen vara antisymmetrisk, en sådan vågfunktion är

$$\psi_{spinn}^A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Alkaliatomer

Energier från skärmning fås genom

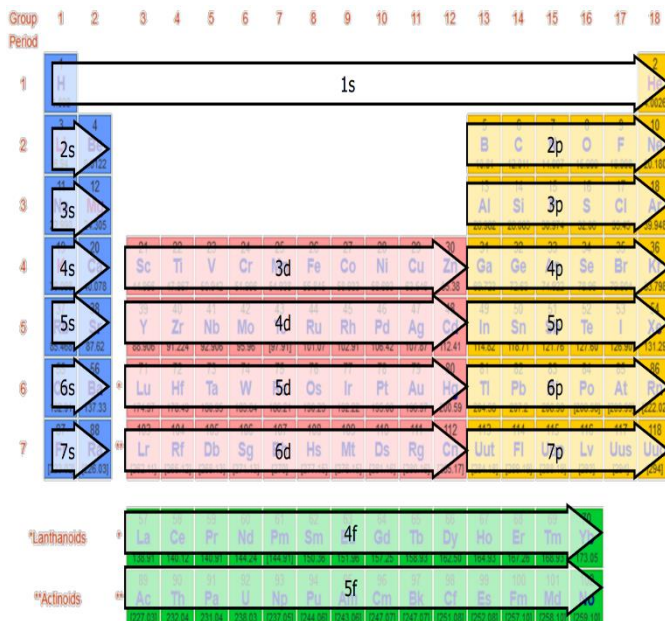
$$E_{nl} = -hcR_\infty \frac{(Z_{eff})^2}{n_i^{*2}}$$

Där $n_i^* = n - \delta_l$, δ_l är kvantdefekten, nästan konstant för olika n men starkt beroende av l -kvanttalet. $\delta_l \approx 0$ för $l > 2$

Spinbanenergin kan skalas på liknande sätt.

$$\Delta E_{s-o} = \frac{Z_i^2 Z_o^2}{n^{*3} l(l+1)} \alpha^2 hcR_\infty$$

Periodiska systemet och hur skaln är fyllda.
Ädelgaser har alltid fyllda s och p orbitaler och
alkalimetaller har alltid en ensam s elektron.



Centralfältsapproximationen

Antar att alla elektroner känner *samma* potential och rör sig självständigt från dom andra.

Totala Hamilton operatoren för ett flerelektronssystem

$$H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right]$$

Den sista termen beskriver elektronernas växelverkan med varandra, denna antas vara av central karaktär och man inför den nya potentialen

$V_{CF} = \frac{-Ze^2/4\pi\epsilon_0}{r} + S(r)$ där $S(r)$ innehåller blandtermerna. Den nya Hamilton operatoren blir då

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{CF}(r_i) \right]$$

Där potentialen är rotationssymmetrisk och alla elektroner känner samma potential.

LS-Koppling

Försummar spinn-ban växelverkan (eller anser den väldigt liten jämfört med repulsionen)

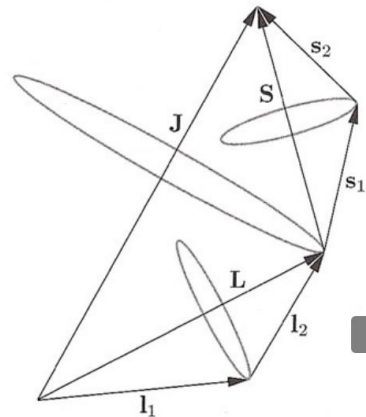
Inför totala moment

$$L = \sum_i l_i$$

$$S = \sum_i s_i$$

$$J = S + L$$

J, S och L är rörelsekonstanter och goda kvanttal i en isolerad atom. Tidigare var l och s bevarade men nu är det fler elektroner och repulsionen gör att rörelsemängdsmomentet inte är bevarat längre. Det *totala* rörelsemängdsmomentet L är däremot bevarat och därmed även J. Vi får då vågfunktioner $|LM_L SM_S\rangle$ istället.



Spinn-ban växelverkan fungerar som en störning på denna vågfunktion och ger upphov till finstruktur med energier $E_{s-o} = \beta_{LS} \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle = \frac{\beta_{LS}}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S-1)\}$ och vågfunktionerna $|LSJM_J\rangle$

JJ-Koppling

Om spinn-ban växelverkan är större än repulsionen, vilket är vanligt för tyngre atomer eftersom spinn-orbit beror på Z, fungerar inte LS-koppling längre eftersom den inte längre är en liten störning. Istället försummas den icke-centralla elektrostatiska växelverkan, istället kopplas varje l och s i **varje atom** ihop sig och man får summera alla j istället.

$$J = \sum_i j_i$$

Alltså:

LS-koppling $E_{re} \gg E_{s-o}$

jj-koppling $E_{re} \ll E_{s-o}$

Hyperfinstruktur

Kärnans magnetiska moment är

$$\mu_I = g_I \mu_N \mathbf{I}$$

Och elektronens är

$$\mu = -g_s \mu_B \mathbf{S}$$

Och den nukleära magnetronen förhåller sig till bohrmagnetonen via

$$\mu_N = \frac{\mu_B}{1836}$$

B-fältet från elektronerna växelverkar med kärnans magnetiska moment och operatorn för hyperfinstruktur blir (JÄMFÖR MED FINSTRUKTUR)

$$H_{HFS} = -\mu_I \cdot \mathbf{B}_e$$

Därmed måste kärnspinn vara nollskilt för att få hyperfinstruktur. S-elektronerna påverkar dessutom kärnans spinn mer då dessa är mycket närmare kärnan och hyperfinstruktursuppsplittringen blir större för dessa.

B-fältet vid kärnan ges av

$$\mathbf{B}_e = \frac{2}{3} \mu_0 \mathbf{M}$$

Där \mathbf{M} är elektronens totala magnetiska moment $\mathbf{M} = -g_s \mu_B \mathbf{S} |\psi(r)|^2$ och med $r=0$ fås

$$\begin{aligned} H_{HFS} &= -\mu_I \cdot \mathbf{B}_e = \mu_I \frac{2}{3} \mu_0 g_s \mu_B |\psi(0)|^2 \\ &= g_I \mu_N \mathbf{I} \frac{2}{3} \mu_B g_s \mu_0 |\psi(0)|^2 \\ &= A \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \end{aligned}$$

Detta är för s-elektroner och allmänt gäller $A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$.

Totala rörelsemängdsmomentet är konstant men I och J preciserar kring F och är ej konstanta $\rightarrow M_J, M_I$ ej goda kvanttal. Istället används F och M_F som är goda kvanttal.

$$F = I + J$$

Väntevärdet blir då

$$E_{HFS} = A \langle \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} \rangle = \frac{A}{2} \{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)\}$$

För $l = s$ är $\Delta E_{HFS} = A$ och för övriga gäller

$$E_F - E_{F-1} = AF$$

Finstruktur – Hyperfinstruktur

	Finstruktur	Hyperfinstruktur
Interaktion	$\beta \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$	$A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$
Totalt rörelsemängdsmoment	$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$	$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$
Egentillstånd	$ LSJM_J\rangle$	$ IJFM_F\rangle$
Energi	$\frac{\beta}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}$	$\frac{A}{2} \{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)\}$
Intervallregel	$E_J - E_{J-1} = \beta J$	$E_F - E_{F-1} = AF$
Alkali skalning	$\Delta E_{s-o} \sim \frac{Z_i^2 Z_o^2}{n^3} \alpha^2 hc R_\infty$	$\Delta E_{s-o} \sim \frac{Z_i Z_o^2}{n^3 l(l+1)} \frac{m_e}{M_p} \alpha^2 hc R_\infty$
Antal nivåer	Min (2s+1, 2L+1)	Min (2J+1, 2I+1)

Zeemaneffekt

Rörelsemängdsmomentet hos en elektron bunden till en atomkärna är kvantiserad till både storlek och riktning. Dessa kvantiseringar ges av:

$$J^2 = \hbar^2 J(J + 1) \tag{1}$$

$$J_z = M_J \hbar \tag{2}$$

För storlek respektive riktning. Då rörelsemängdsmomentets riktning ges av projektionen på en arbiträr z-axel märks denna under normala omständigheter inte av, utan ger endast energierna degenerationen $2J + 1$.

Genom att placera atomen i ett starkt magnetfält definieras en z-riktning, och får därmed en liten energiuppsplitting beroende rörelsemängdsmomentets projektion på magnetfältets riktning. Det emitterade ljuset vid övergångar mellan de uppsplittrade nivåerna får en liten frekvensskillnad.

Energier relativt LS-termen för via Zeemaneffekten uppsplittrade energinivåer ges av:

$$E_{ZE} = g_J \mu_B B M_J$$

där $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{JT}^{-1}$,

B är magnetfältets styrka,

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

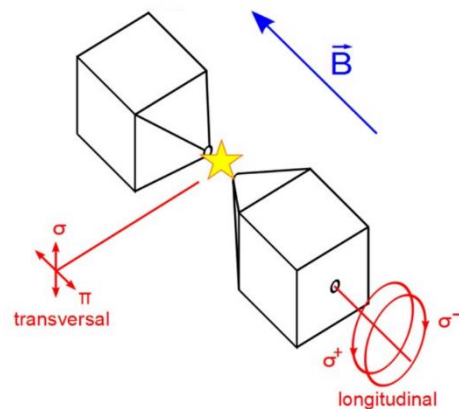
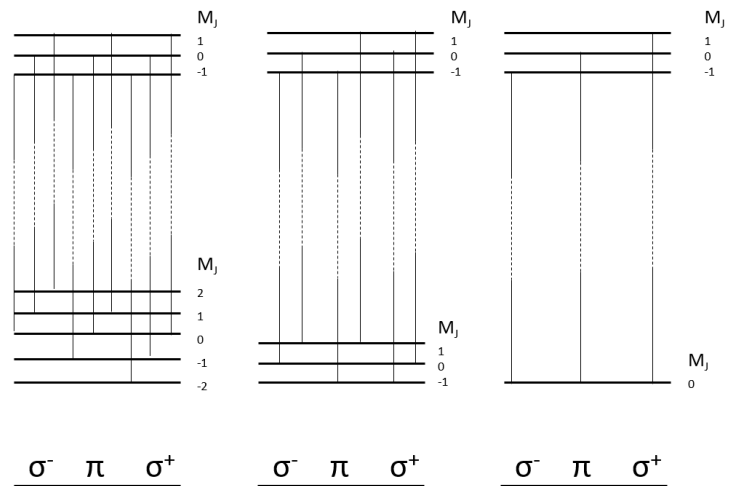
och M_J, S, L samt J

är för tillståndet relevanta kvanttal. OBS ekvidistanta magnetiska subnivåer pga M_J

Om fältet är starkt \rightarrow Paschen-back, energin ges av

$$E_{PA} = \mu_B B (M_L + 2M_S)$$

Övergångar med $\Delta M_J = -1, 0, 1$ är σ -sigma, pi, sigma, se figur.



Det utsända ljuset är polariserat, se figur

Zeeman i HFS

Hamiltonoperatoren för detta ges av

$$H = g_J \mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$$

Om växelverkan med det yttre fältet är **svagare** än den hyperfina växelverkan ($A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$) så kommer I och J precisera kring F men F kommer precisera långsammare kring den magnetiska axeln. Här är F, M_F goda kvanttal medan M_I, M_J inte är det. DVS

$$\mu_B B < A \rightarrow \text{svagt fält}$$

Energien ges av

$$E = g_F \mu_B B M_F$$

Där

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

Om det magnetiska fältet är starkt $\mu_B > A \rightarrow$ starkt fält

$$E = g_J \mu_B B M_J + A M_I M_J$$

Magnetiska moment

$\mu_L = -\frac{e}{2m} \mathbf{L}$ magnetiskt mom. Pga banrörelsen

$\mu_s = -g_s \frac{e}{2m} \mathbf{S}$ ($g_s = 2$) magnetiskt mom. elektronen

$\mu_I = \frac{g_I e}{2m_p} \mathbf{I}$ magnetiskt mom. Kärnan

$$\mu_I \sim \frac{\mu_s}{1836}$$

$\mu_{tot} = -\frac{e}{2m} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$ totala magnetiska mom. (spin ban)

Kärnspinn

$$\frac{A}{Z} X$$

Om A udda $\rightarrow I$ halvtal

Om A jämnt $\rightarrow I$ heltal

Om A och Z jämnt $\rightarrow I = 0$

Övergångar – Einstein koefficienter

Relativ population vid termisk jämvikt

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\Delta E/kT}$$

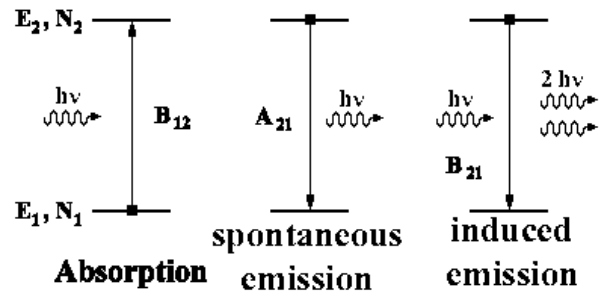
N är populationen, g är statistisk vikt?, boltzmannfördelning.

$$\rho(f) = \frac{\text{energi}}{\text{volym} * \text{frekvensintervall}} = \frac{Js}{m^3}$$

ρB_{12} är sannolikheten **per atom och tidsenhet** för absorption

A_{21} är sannolikheten **per atom och tidsenhet** för **spontan** emission

ρB_{21} är sannolikheten **per atom och tidsenhet** för **stimulerad** emission



Sambanden mellan koefficienterna

Isolerat system i termisk jämvikt \rightarrow

$$A_{21} N_2 + \rho B_{21} N_2 = \rho B_{12} N_1$$

Måste gälla. I ord "antalet spontana emissioner plus antalet stimulerade emissioner måste vara lika med antalet absorberade fotoner i varje tidsintervall. Det är ett isolerat system och energin måste ta vägen någonstans, då måste den alltså absorberas. \rightarrow

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{\rho B_{12}}{A_{21} + \rho B_{21}} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\Delta E/kT}$$

Lös ut $\rho \rightarrow$

$$\rho = \frac{A_{21} g_2}{B_{12} g_1} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\Delta E}{kT}} - \frac{B_{21} g_2}{B_{12} g_1}} = \rho_{planck}$$

Jämför med plancks strålningslag \rightarrow

$$\rho_{planck} = \frac{8\pi f^3 h}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\Delta E}{kT}} - 1}$$

Identifiera

$$\frac{g_2 B_{21}}{g_1 B_{12}} = 1 \Leftrightarrow g_2 B_{21} = g_1 B_{12}$$

$$\frac{g_2 A_{21}}{g_1 B_{12}} = \frac{8\pi f^3 h}{c^3}$$

⇔

$$g_2 A_{21} = \frac{8\pi f^3 h}{c^3} g_1 B_{12}$$

Konsekvenser:

Kan mäta en övergång om man driver/lyser kraftigt → $N_2 = N_1$ (A_{21} försummas)

Laserverkan → Försumma A_{21} →
 $\rho B_{21} N_2 > \rho B_{12} N_1 \rightarrow N_2 > N_1$

Dvs inverterad population.

Spontan emission kraftigt frekvensberoende →

$A_{21} \sim f^3 B_{21}$ (om $g_2 = g_1$) → svårigheter med högfrekventa lasrar.

Linjebredder

Heisenberg → $\Delta E \cdot \Delta t = \hbar \rightarrow h \Delta f_N \cdot \tau = \frac{\hbar}{2\pi} \rightarrow \Delta f_N = \frac{1}{2\pi\tau}$

Kortare livstid → större naturlig breddning

Atomerna står inte stilla vilket leder till dopplerbreddning av spektrallinjerna.

Dopplerbreddningen blir

$$\frac{\Delta\omega_D}{\omega_0} = 2\sqrt{\ln 2} \frac{u}{c}$$

Där $\Delta\omega_D$ är breddningens FWHM, ω_0 är den frekvens atomerna absorberar vid i "vila".

Hastigheten i en atomgas ges av

$$U = 2230 \sqrt{\frac{T}{300M}} \text{ m/s} \quad \text{OBS ! M är i molmassa.}$$

Broadening	Δf / GHz	$\Delta \lambda$ / Å
Natural	0.01	0.0001
Power, $I = 170 \text{ mW/cm}^2$	0.054	0.0006
Pressure, $p = 0.1 \text{ atm}$	0.084	0.0009
Doppler (600 K)	2.25	0.026
Instrument. Fabry Perot: $d = 1 \text{ cm}, R = 0.9$	0.25	0.003
Instrument. Grating 1200 ℓ/mm , 50 μm slit	30	0.35

Storleksordningar, obs att dopplereffekten är bland de största.