

Oddělení fyzikálních praktik při Kabinetu výuky obecné fyziky MFF UK

PRAKTIKUM IV

Úloha č.: 20

Název: Fourierovská infračervená spektroskopie

Vypracoval: Vít MAREK

stud. sk. F/3

dne 2.1.2001

Odevzdal dne: vráceno:

Odevzdal dne: vráceno:

Odevzdal dne:

Posuzoval: dne výsledek klasifikace

Připomínky:

Pracovní úkol:

1. Z rotačně - vibračního spektra oxidu uhelnatého určete rozměr jeho molekuly.
2. Porovnejte charakter jednotlivých absorpčních pásů oxidu uhelnatého, oxidu uhličitého a vodních par.
3. Určete, která folie je polyetylenová a která polypropylenová.
4. Proměřte propustnost a odrazivost skleněné destičky, případně dalších vzorků, které budou k dispozici.
5. Sledujte vliv následujících parametrů měření a výpočtu na spektra: rozlišení, apodizace, velikost apertury (porovnejte pro nízké a vysoké vlnočty) a fázová korekce. Prověřte souvislost mezi rozlišením a spektrální modulační přenosovou funkcí.

Teorie:

Podle [1] str. 10 si můžeme energii dvouatomové molekuly vyjádřit:

$$E_{vib} = \eta \omega_v \left(n + \frac{1}{2} \right) = \eta \sqrt{\frac{f}{\mu}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1)$$

kde f je síla vazby, μ redukovaná hmotnost molekuly. Rotační energii dvouatomové molekuly pak dostáváme

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega_r^2 = \frac{L^2}{2I} = \frac{\eta^2 J(J+1)}{2\mu r_o^2} = B\eta J(J+1) \quad (2)$$

kde r_o je vzdálenost atomů, L kvantovaný moment hybnosti, J kvantové číslo, B rotační konstanta, r_o vzdálenost atomů v molekule. Celková energie pak je

$$E = \eta \omega_v \left(n + \frac{1}{2} \right) + B\eta J(J+1) \quad (3)$$

Pro vzdálenost atomů platí:

$$r_o = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 B\mu}} \quad (4)$$

Jeli k výpočtu používán vlnčet, pak

$$\nu = \frac{E_{rot}}{hc} = B' J(J+1), \quad r_o = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 B' c \mu}} \quad (5)$$

kde c je rychlost světla. Při pokojové teplotě je většina vibračních stavů v základním stavu. Zato u rotační energie jsou obsazeny i poměrně vysoké energetické hladiny. To se projevuje v bohatosti rotačních a vibračně-rotačních pásů. Spektrální oblast lze rozdělit na 3 pásy: P odpovídá změně rotačního kvant. čísla na úkor vibrační energie, při Q se rot. energie nemění a pás R odpovídá změně kvant. čísla J a zvýšení vibrační energie. Z rovnic pro jednotlivé energie přechodů ([1] str. 15) lze odvodit vztah mezi jednotlivými pásy:

$$\frac{R_{J-1} - P_{J+1}}{2J+1} = (2B_0 - 3D_0) - D_0(2J+1)^2 \quad (5)$$

Výsledky měření:

1, Nejdříve jsem proměřil spektrum CO. Naměřené polohy pásů jsou zaznamenány v *tabulce 1* a v *grafu 1*. Pro měření nebyla zvolena žádná apodizace. Jednotlivým pásům jsem přiřadil jednotlivá kvantová čísla J a výsledky zaznamenal do *tabulky 2*.

Závislost pravé strany *vztahu (5)* na $(2J+1)^2$ je zakreslena do *grafu 2*. Zde byla lineární regresí zjištěna konstanta D_0 a extrapolací $(2J+1)$ k 0 i konstanta B_0 .

$B_0 = (1,92281 \pm 0,00005) [J \text{ s } kg^{-1} \text{ m}^2]$ pro ν v $[cm^{-1}]$ (pro $[m^{-1}]$ je konstanta 100 krát větší).

Dosazením do *vztahu (5)* hmotnost O ($m_o = 2,6557 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$) a hmotnost C ($m_c = 1,9926 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$) získám vzdálenost atomů C a O v molekule CO:

$$r_0 = 1,13 \text{ \AA}$$

Tabulka 2 – Spektrum CO

J	R [cm ⁻¹]	P [cm ⁻¹]	(2J+1) ²	(R _{J-1} -P _{J+1})/(2J+1)
0	2147,2886			
1	2151,0532	2139,6243	9	3,8490
2	2154,7932	2135,7417	25	3,8456
3	2158,4987	2131,8252	49	3,8453
4	2162,1658	2127,8761	81	3,8447
5	2165,8012	2123,8963	121	3,8444
6	2169,3949	2119,8769	169	3,8445
7	2172,9588	2115,8227	225	3,8437
8	2176,4823	2111,7389	289	3,8436
9	2179,9746	2107,6176	361	3,8431
10	2183,4304	2103,4633	441	3,8427
11	2186,8398	2099,2788	529	3,8423
12	2190,2163	2095,0586	625	3,8416
13	2193,5656	2090,8000	729	3,8408
14	2196,8626	2086,5135	841	3,8404
15	2200,1343	2082,1933	961	3,8395
16	2203,3631	2077,8386	1089	3,8385
17	2206,5559	2073,4645	1225	3,8379
18	2209,7119	2069,0372	1369	3,8370
19	2212,8310	2064,5870	1521	3,8360
20	2215,9123	2060,1061	1681	3,8352
21	2218,9472	2055,5881	1849	3,8343
22	2221,9500	2051,0366	2025	

kde J je kvantové číslo, R a P příslušné pásy

2, Stejným způsobem jsem proměřil i spektrum CO₂. Získané výsledky jsou zaznamenány v *grafu 3* a 4. Vlnčet 2350 pak přímo odpovídá tabulkové hodnotě pro CO₂.

3, Proměřením spekter polyetyleny (*graf 5*) a polypropylenu (*graf 6*) jsem na základě tabulky [1] str. 12 přiřadil jednotlivé grafy jednotlivým látkám.

4, Propustnost a odrazivost skleněné destičky je zaznamenána v *grafu 7*.

5, Nakonec jsem sledoval vliv apodizace na výpočet spektra. Spektrum je již vyhlazenější, ale intenzita píků klesla na polovinu.

Diskuse:

Pro přesnější fit konstanty D v *bodě 1* jsem vynechal bod odpovídající $J = 1$. Na změřeném spektru CO₂ lze již pozorovat pás Q. To je způsobeno tvarem molekuly a tedy i možným přechodům.

Závěr:

- 1, Vzdálenost atomů C a O v CO je $r_0 = 1,13 \text{ \AA}$.
- 2, Absorpční pásy Co, CO₂ jsou zaznamenány v *grafech 1, 3 a 4*.
- 3, Spektrum polyetylenové folie je zakresleno v *grafu 5* a propylenové v *grafu 6*.
- 4, Propustnost a odrazivost skleněné destičky je zakreslena v *grafu 7*.
- 5, Vliv apodizace na výpočet spektra je zakreslen v *grafu 8*.

Použitá literatura:

[1] Studijní text k úloze 20, Praktikum IV, www.mff.cuni.cz/iso/study/xbk/zfp/420.htm