

Modern Fizika Labor

Fizika BSC

A mérés dátuma: 2009.03.23.	A mérés száma és címe: 12 Infravörös spektroszkópia	Értékelés:
A beadás dátuma:	A mérést végezte: Mészéna Balázs, Tüzes Dániel	

Bevezető

Az infravörös spektroszkópia segítségével elsősorban molekuláris kötésekre deríthetünk fényt, így a módszer alkalmas egy anyag kémiai összetételének vizsgálatára. A módszer mára széleskörűen alkalmazott és sokkal precízebb mérések kivitelezhetőek vele, mint hajdanán. A laborban található nem éppen mai mérőberendezés pontosságát jellemzi, hogy segítségével meg tudjuk különböztetni két, a klór különböző izotópjait tartalmazó HCl molekula rezgéseit azok frekvenciái alapján. Ugyan ezen spektroszkópia módszerrel meg lehet állapítani az molekulákban létrejövő kötések távolságát, erősségét is.

A módszer elve

A molekulákat felépítő atomok a molekulán belül egymáshoz képest rugalmas módon elmozdulhatnak, kötések mentén rezeghetnek, hosszabb molekulák hajladozhatnak, kötések körül elfordulhatnak. Ezek a mozgások kvantáltak, tehát határozott energiaadagokban történhet csak meg a változásuk. Ezek a kvantumenergiák a különböző infravörös sugárzás fotonjainak energiájával egyenlők. A periodikus mozgások frekvenciája és energiája elsősorban a részecskéket összekötő erőtől, és kémiai kötés típusától és a mozgásban résztvevő részecske tömegétől, vagyis az atomtömegetől függ. Ennek alapján az adott atomok között létrejövő kötéstípusokhoz néhány jellemző energia tartozik, melyeket infravörös technikával megmérhetünk.

Mérési elrendezés

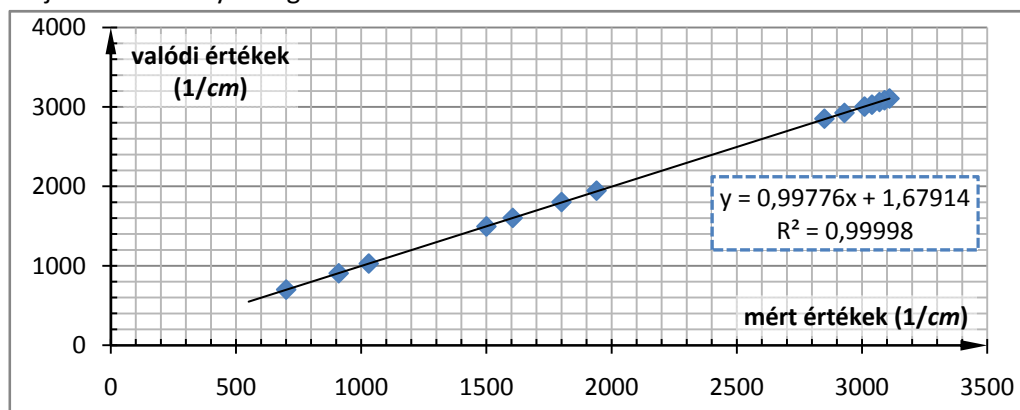
A méréshez egy automata berendezés állt rendelkezésünkre. A berendezésben el kellett helyezni a vizsgálandó mintát, majd a mérési határokat és a mintavételezést beállítani. A gép a kapott eredményeket egy hozzá kalibrált papírlapon ábrázolta, a számításokat erről a lapról lehetett leolvasni.

Mérési feladatok – eredmények

1. Első mérési feladat mérőberendezés ábrázolási léptékének a beállítása. Ennek során a berendezés mintatartóját üresen hagyva kalibráljuk úgy a műszert, hogy a fluktuációkból adódó kitérést túrva az ábrázolt mennyiség még látható legyen. Tapasztalataink szerint így az alapvonalat elég volt a maximálisan ábrázolható érték 95%-ára állítani. A mérés során akaratlanul is rábukkantunk a széndioxid és vízgőz nyomára, ugyanis ezek fluktuációjából következő elnyelés-ingadozás az anyagokra jellemző helyen jelentkeztek. A kalibrálás további része volt a polisztirol vizsgálata. A mérőberendezéssel felvettük a minta spektrumát, majd az elnyelési maximumokat megkerestük. A mérési eredményeket az alábbi táblázatban tartalmazza. A mérési eredmények mellé (ha létezik) feltüntettük a polisztirol valódi spektrumának értékeit.

Mért értékek $1/cm$	valódi értékek $1/cm$	Mért értékek $1/cm$	valódi értékek $1/cm$
3110	3106	1605	1603
3090	3084	1500	1495
3070	3062	1460	-
3040	3028	1160	-
3010	3004	1070	-
2930	2925	1030	1028
2850	2851	910	906
1940	1946	760	-
1870	-	700	700
1800	1802	550	-

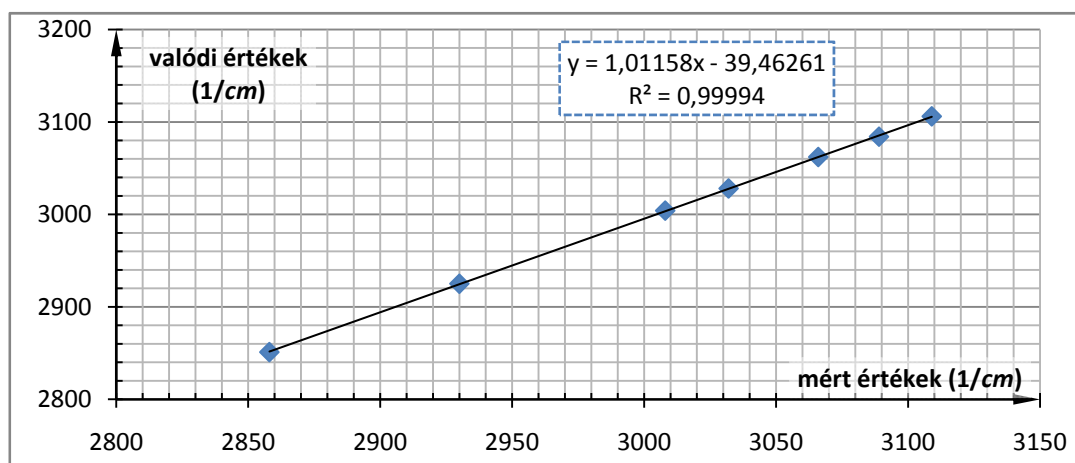
Majd az eredményeket grafikusan is ábrázoltuk:



A kapott egyenes paramétereiből látható, hogy a mérési eredmények igen nagy összhangban állnak a valódi értékekkel, tehát a műszer előre kalibrálása közel tökéletes eredményt hozott. A konstansal való eltolás azonban a berendezés adatrögzítési eljárásából fakadóan azonban nem releváns adat, ez mérésről mérésre változhat és értéke függ a berendezést kezelő tapasztalatától, ügyességétől.

- Ugyanezen minta egy részét részletesebben is megvizsgáltuk a $[3200,2800] / cm$ intervallumot, mely mérési eredmények az előzőhöz hasonló táblázatban látható:

mért eredmények ($1 / cm$)	valódi értékek ($1 / cm$)
3109	3106
3089	3084
3066	3062
3032	3028
3008	3004
2930	2925
2858	2851

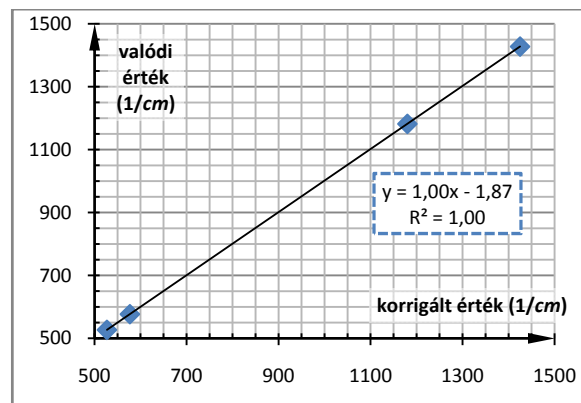


Látható, hogy a második esetben is nagy az egyezés a két érték között. Mivel az első pontban több mérési eredményünk volt, melyek nagyobb intervallumot fedtek le és jobban is illeszkedtek a valódi értékekre a kapott eredmények, ezért a laborvezető ajánlása szerint a korrekciós kalibrálási értéket az első mérés alapján alkalmazzuk.

3. Fulleren spektrumának felvétele során az alábbi értékeket kaptuk:

mért értékek (1/cm)	korrigált értékek (1/cm)	valódi értékek (1/cm)
528	527	527
578	577	577
1182	1180	1182
1428	1425	1428

Látható, hogy a mérési eredmények nagyon közel esnek a valódi értékekhez, oly annyira, hogy a kalibrációs egyenes hibája nagyobb, mint a mérésé. A hibát az eredmények ábrázolásának és leolvasásában pontossága befolyásolja döntően.



4. A HCl spektrumának vizsgálata volt utolsó feladatunk. A mért eredményt kézhez kaptuk, abból leolvastuk az elnyelési maximumok helyeit. Minden elnyelési maximum párosával fordult elő, melynek magyarázata a HCl molekula klórában keresendő, ugyanis a klórnak a természetben mind a 35-ös, mind 37-es izotópja előfordul, 3:1 arányban. A kapott grafikus eredményekből az alábbi elnyelési maximumokat határoztuk meg a J_0 forgási kvantumszám függvényében (ami azt jelenti, milyen értékről történt az átugrás eggyel kisebb vagy nagyobb kvantumszámra). A P -ágban (ahol alacsonyabb állapotba ugrik a molekula) $J_0 = -x$, az R -ágban $J_0 + 1 = x$. Ekkor

$$\nu = \nu_0 + (B_1 + B_0)x - (B_0 - B_1)x^2, \text{ ahol } B_\nu \text{ az egyes rezgési kvantumszám által meghatározott érték}$$

elsőrendben: $B_\nu = B_e - \alpha \left(\nu + \frac{1}{2} \right)$. B_e kifejezhető a molekula tulajdonságaival. A mért értékek a 35-ös és 37-es klór esetén:

^{35}Cl			^{37}Cl		
J_0	x	$\tilde{\nu} (1/cm)$	J_0	x	$\tilde{\nu} (1/cm)$
1	-1	2866	1	-1	2864
2	-2	2844	2	-2	2842
3	-3	2822	3	-3	2820
4	-4	2800	4	-4	2798
5	-5	2777	5	-5	2775
6	-6	2753	6	-6	2751
7	-7	2728	7	-7	2726
8	-8	2703	8	-8	2701
9	-9	2678	9	-9	2676
10	-10	2652	10	-10	2650
0	1	2907	0	1	2905
1	2	2926	1	2	2924
2	3	2946	2	3	2944
3	4	2964	3	4	2962
4	5	2982	4	5	2980
5	6	2999	5	6	2997
6	7	3015	6	7	3013
7	8	3031	7	8	3029
8	9	3046	8	9	3044
9	10	3060	9	10	3058
10	11	3074	10	11	3071

Mint láttuk, a kívánt együtthatókat úgy kapjuk meg, hogy az adatokra egy parabolát illesztünk. Ennek eredményéből a 35-ös esetben:

$$B_1 + B_0 = (20,46 \pm 0,02) \text{cm}^{-1}$$

$$B_0 - B_1 = (0,309 \pm 0,003) \text{cm}^{-1}$$

$$B_0 = (10,39 \pm 0,01) \text{cm}^{-1}$$

$$B_1 = (10,08 \pm 0,01) \text{cm}^{-1}$$

$$\alpha = B_0 - B_1 = (0,31 \pm 0,02) \text{cm}^{-1}$$

$$B_e = \frac{3B_0 - B_1}{2} = (10,54 \pm 0,02) \text{cm}^{-1}$$

A 35-ös HCl molekula redukált tömegét

az alábbi formulából kapjuk: $\mu = \frac{m_H m_{35}}{m_H + m_{35}} = (0,97966 \pm 0,00002) AMU = (1,6268 \pm 0,0003) \cdot 10^{-27} \text{kg}^*$. A

molekula kötészossza $r = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu hc B_e}} = (1,277 \pm 0,001) \cdot 10^{-10} \text{m}$.

Ugyanígy a 37-es klór esetén:

$$B_1 + B_0 = (20,45 \pm 0,02) \text{cm}^{-1}$$

$$B_0 - B_1 = (0,311 \pm 0,003) \text{cm}^{-1}$$

$$B_0 = (10,38 \pm 0,01) \text{cm}^{-1}$$

$$B_1 = (10,07 \pm 0,01) \text{cm}^{-1}$$

$$\alpha = B_0 - B_1 = (0,31 \pm 0,02) \text{cm}^{-1}$$

$$B_e = \frac{3B_0 - B_1}{2} = (10,54 \pm 0,02) \text{cm}^{-1}$$

A redukált tömeg pedig:

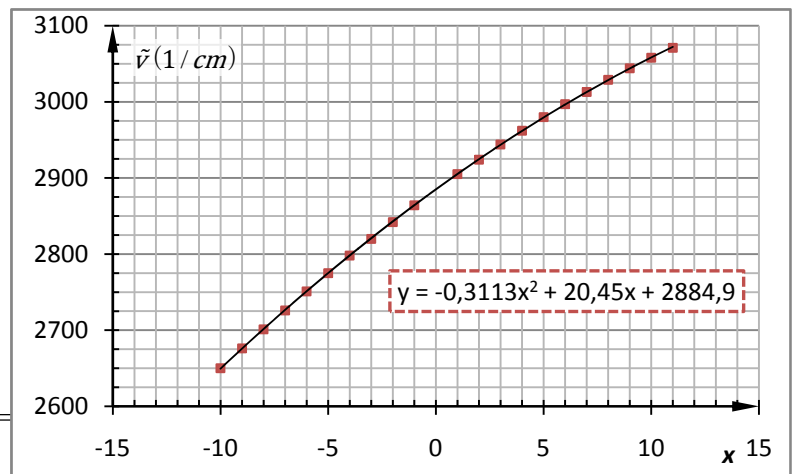
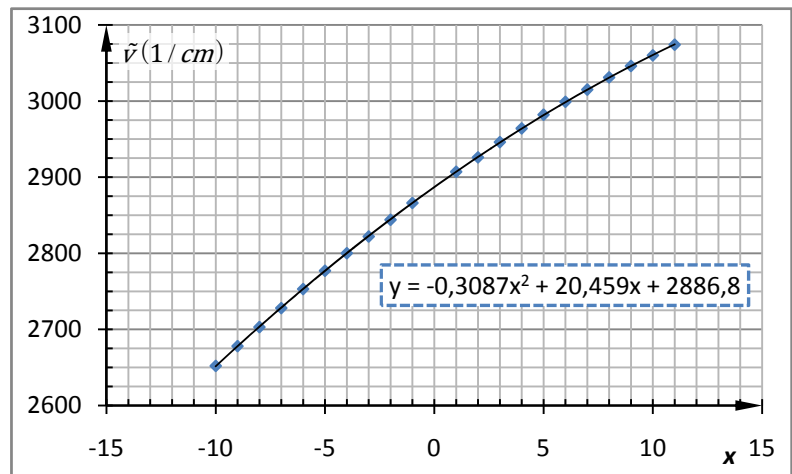
$\mu = \frac{m_H m_{37}}{m_H + m_{37}} = (0,98115 \pm 0,00002) AMU = (1,6292 \pm 0,0003) \cdot 10^{-27} \text{kg}$. Ezekből az

előzőhöz hasonló módon a 37-es Klórt tartalmazó HCl kötészossza $r = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu hc B_e}} = (1,276 \pm 0,001) \cdot 10^{-10} \text{m}$.

Kiszámolhatjuk a két izotópra a kötéseinek erőállandóját is. $k = 4\pi^2 \nu_0^2 \mu$, ahol ν_0 -t az illesztett parabolák konstans tagja adja.

A 35-ös izotópnál $\nu_0 = (2886,8 \pm 0,2) \text{cm}^{-1}$, így $k = 4\pi^2 \nu_0^2 \mu = (5,352 \pm 0,2) \cdot 10^{-15} \frac{N}{m}$.

Ugyanez a 37-esnél $\nu_0 = (2884,9 \pm 0,2) \text{cm}^{-1}$, tehát $k = 4\pi^2 \nu_0^2 \mu = (5,353 \pm 0,2) \cdot 10^{-15} \frac{N}{m}$.



* A hidrogén, illetve klór tömege a <http://www.nndc.bnl.gov/amdc/web/masseval.html> honlapról kerültek felhasználásra.