

## Modern Fizika Labor

Fizika BSc

A mérés dátuma: <b>2011. okt. 04.</b>	A mérés száma és címe:  <b>12. Infravörös spektroszkópia</b>	Értékelés:
A beadás dátuma: <b>2011. dec. 21.</b>	A mérést végezte:  <b>Domokos Zoltán</b>  <b>Szőke Kálmán Benjamin</b>	

# 1. Bevezetés

## 1.1. A mérés célja

Az infravörös spektroszkópiával egy anyag kémiai összetételét és a benne lévő kötések vizsgálhatjuk. A mérés során a mintákat infravörös fénnel világítottuk meg. A mérőműszer kalibrálása után az anyagok elnyelési spektrumát mértük, amiből a vizsgált minták tulajdonságait megtudtuk határozni. A mérés feladata az volt hogy a kapott eredményeket hasonlítsuk össze az elméleti értékekkel, és a HCl mintán mért adatokból számoljuk ki a molekula rugóállandóját és az egyensúlyi magtávolságát.

## 1.2. A mérés leírása

A molekulákat felépítő atomok a molekulán belül egymáshoz képest rugalmas módon elmozdulhatnak, kötések mentén rezeghetnek, hosszabb molekulák hajladozhatnak, kötések körül elfordulhatnak. Az ilyen anyagoknál infravörös 2-25  $\mu m$ -es hullámhosszú fénnel besugározva elnyelést tapasztalunk. Az infravörös elnyelés akkor jöhet létre, ha a molekulának van olyan rezgési modusa, amelyben való rezgés során a dipolmomentum nem állandó. Persze vannak kivételek, amik a szimmetrikus molekulák, ezek a szimmetrikus rezgés miatt nem nyelnek el az infravörös tartományon.

A mért spektrumon a csúcsok mutatják ezeket, az itt lévő hullámhossztartományban az anyag nem enged át sugárzást. Az itt elnyelt energia a rezgési és forgási átmenetek gerjesztésére fordítódik. Ezek a mozgások kvantáltak. Ezek a kvantált energiák a különböző infravörös sugárzás fotonjainak energiájával egyenlők. A periodikus mozgások frekvenciája és energiája a részecskéket összekötő erőtlől, kémiai kötés típusától és az atomtömegtől függ. Ezért a kötéstípusokhoz néhány jellemző energia tartozik, ezeket az infravörös spektroszkópiával mérhetjük meg.

## 1.3. A mérési összeállítás

A mérést egy infravörös spektrométer segítségével végeztük, amiben a vizsgált mintát, és a referencia mintát egyszerre sugároztuk be. A két sugár egyesítése után egy monokromátoron át a fényt egy detektor mérte. A detektor az adott frekvencián

való elnyelésnél a hő változását érzékeli, és ezt a változást egy váltakozó feszültség formájában érzékelteti. Tehát a detektor amit a mérőműszerben használtunk egy hőhatáson alapuló detektor volt. Az ilyen detektorok hőmérsékletfüggő ellenállások vagy nagy érzékenyséű gázhőmérők.

A mérést kalibrációval kezdtük, amit a 0.01-es program lefuttatásával tudtunk elvégezni. A méréseknél mindig paramétereket kellett megadni először, amik a mérés tartományát, a résvastagságát, az iterációs időt szabták meg, és hogy a papírra mekkora maximális százaléku áteresztés rajzolódjon ki. A kalibráció után méréseket végeztünk a C60 fullerénnel, egy Polipropilennel és egy HCl mintával. A vízszintes tengelyen a hullámszám [ $cm^{-1}$ ] szerepelt, a függőleges tengelyen az átjutott fényt kaptuk meg százalékosan. A mérőműszer a kapott eredményeket egy papírlapon ábrázolta.

## 2. Eredmények

### 2.1. Alapvonal felvétele

A levegő spektrumát a mérőlapon zöldel rajzoltattuk ki. Itt az oxigéntől és nitrogéntől nem kapunk elnyelést, de vannak mégis tartományok amiken még is látunk nem teljes áteresztést. Ezek oka levegőben lévő szén-dioxid, és a páratartalom. A szén-dioxid, és a vízmolekula tartalmaz poláros kötések, és vannak rezgési módusaik, amelyek infravörös fénnel gerjeszthetők. A víz nyel el a 3000-4000-es és az 1500-1700-as tartományokban, a szén-dioxid pedig a 2150-2200-as, és az 500-700-as tartományokban.

- A mérési paraméterek:

4000	400	
12	0.5	
105	100	1

### 2.2. Polipropilen spektruma

Az alábbi táblázatban az elméleti csúcsokat és a mért értékeket hasonlítottuk össze. A mérési feladatlapon található elméleti értékeknél többet is találtunk a mérés

során. Ezekre az interneten utána kerestünk, és arra az eredményre jutottunk hogy 800 és 1300 között még vannak a PP-re jellemző csúcsok.

- A mérési paraméterek:

4000 400  
12 0.5  
105 100 1

Mért érték [ $cm^{-1}$ ]	Elméleti érték [ $cm^{-1}$ ]
2980	2962
.	2952
.	2920
.	2868
2840	2850
1460	1458
1370	1377
1170	1167
990	997
970	972
840	-
-	719

- Metilén és metil csúcsok: 2962, 2952, 2868, 1377
- Metil deformációk: 1458

### 2.3. C60 Fullerén spektruma

A mérőlapon kék színnel rajzoltattuk ki a spektrumot, és négy elnyelési csúcsot mértünk. Ezek igen jó egyezést adnak az elméleti értékekkel. A beállított paraméterek mellett a relatív hiba  $\pm 2 cm^{-1}$ -nek adódott.

- A mérési paraméterek:

1500 500  
12 3  
105 100 5

Mért érték [ $cm^{-1}$ ]	Elméleti érték [ $cm^{-1}$ ]
1428	1428
1180	1182
576	577
524	527

## 2.4. HCl spektruma

A HCl-al végzett mérést fekete színnel rajzoltattuk ki. 2620 és 3100  $cm^{-1}$  között vizsgáltuk az elnyelést. A mérőpapíron azt láthatjuk, hogy a csúcsok egyre növekednek, majd a 2897 és 2856 közötti elnyeléseknél nem találunk csúcsot, majd a közepétől tovább haladva a kisebb értékek felé tükörszimmetrikusan ismétlődnek a csúcsok. A táblázatban az  $x$  értékek a jegyzetből a következő képpen vannak definiálva az R ágban  $x = J_0 + 1$ , a P ágban  $x = -J_0$ . Így a hullámszámok és az  $x$  közötti összefüggés a következő egyenlettel írható le.

$$k(x) = k_0 + (B_1 + B_0)x - (B_0 - B_1)x^2$$

A mért adatokat ábrázolva  $x$  függvényében, majd parabolát illesztve ezekre, az illesztésből meghatározható  $B_1$  és  $B_0$ .

- A mérési paraméterek:

3100    2620  
0.8      3  
200    200    20

Ág	$J_0$	x	Csúcshely [ $cm^{-1}$ ]
R	10	11	3092
R	9	10	3060
R	8	9	3044
R	7	8	3030
R	6	7	3014
R	5	6	2998
R	4	5	2980
R	3	4	2964
R	2	3	2944
R	1	2	2926
R	0	1	2906
P	1	-1	2864
P	2	-2	2844
P	3	-3	2822
P	4	-4	2798
P	5	-5	2774
P	6	-6	2752
P	7	-7	2726
P	8	-8	2702
P	9	-9	2676
P	10	-10	2650

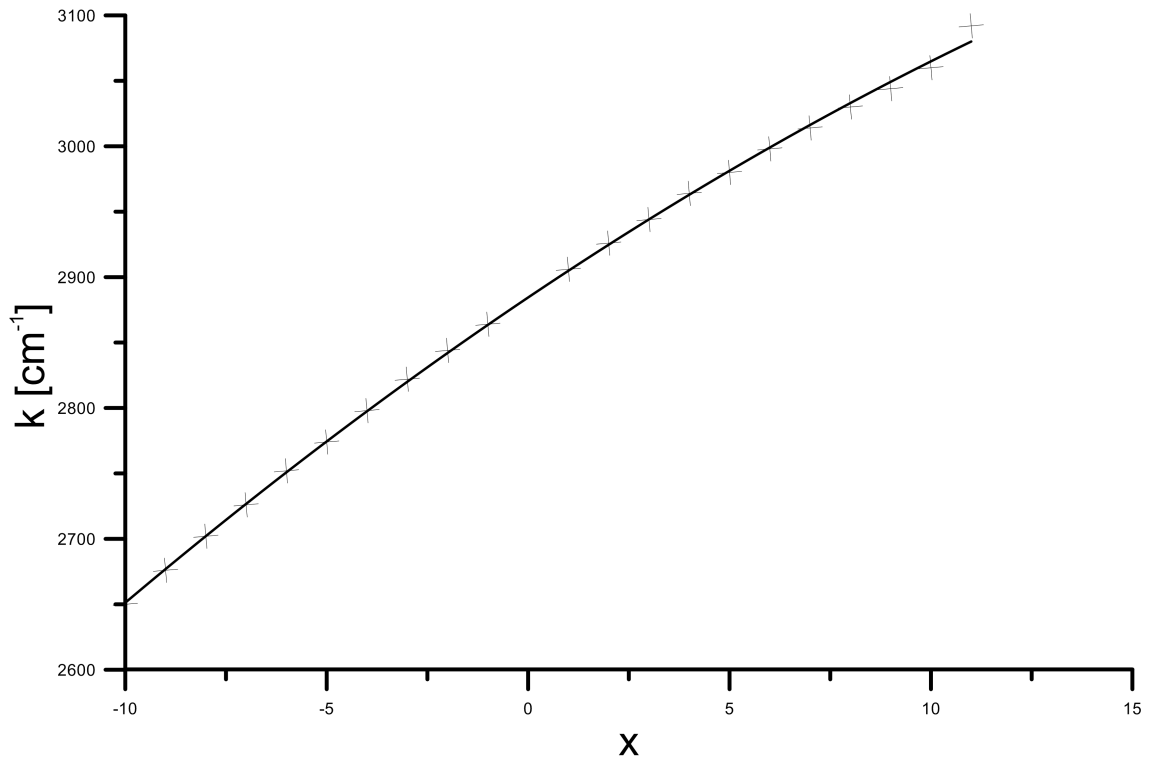
Az illesztett parabola egyenlete, és a  $B_0$   $B_1$  paraméterek eredménye:

$$k(x) = (2884 \pm 1.2) + (20.68 \pm 0.12) x - (0.263 \pm 0.021) x^2$$

$$B_0 = 10.44 \pm 0.15$$

$$B_1 = 10.17 \pm 0.15$$

Ezekből az értékekből az alábbi összefüggésekkel számolható  $B_e$  és  $\alpha$ . Valamint a  $B_e$  értéket felhasználva az egyensúlyi atomtávolság ( $r_e$ ), és a molekula rudóállandója ( $D$ ) megadható. ( $\mu = \frac{M_H \cdot M_{Cl}}{M_H + M_{Cl}} \approx 1.63 \cdot 10^{-27} [kg]$ )



1. ábra. Illesztett parabola

$$B_0 \cong B_e - \frac{1}{2}\alpha$$

$$B_1 \cong B_e - \frac{3}{2}\alpha$$

$$\alpha = 0.263 \pm 0.007 \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

$$B_e = 10.57 \pm 0.04 \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

$$B_i = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2\mu \langle r_i^2 \rangle}$$

Foton energiája ( $\Delta E = \hbar\omega$ )

$$k_{(x=0)} = 2884 \pm 1.2 \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

$$\Delta E = k_0 \cdot hc = (3.5757 \pm 0.0014) \cdot 10^{-1} \text{ [eV]}$$

Egyensúlyi magtávolság

$$r_e = (1,27 \pm 0.02) \cdot 10^{-7} [m]$$

Molekula rugóállandója

$$D = 4\pi^2 c^2 k_0^2 \mu = 481 \pm 2 \left[ \frac{N}{m} \right]$$

Molekularezgés kiterjedése

$$\langle x_0^2 \rangle = \langle r_0^2 \rangle - \langle r_e^2 \rangle = (6.29 \pm 0.04) \cdot 10^{-16} [m]$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \langle r_1^2 \rangle - \langle r_e^2 \rangle = (2.04 \pm 0.04) \cdot 10^{-16} [m]$$

Molekularezgés energiái ( $E_n = \hbar\omega [n + \frac{1}{2}]$ )

$$E_0 = (1.7878 \pm 0.0007) \cdot 10^{-1} [eV]$$

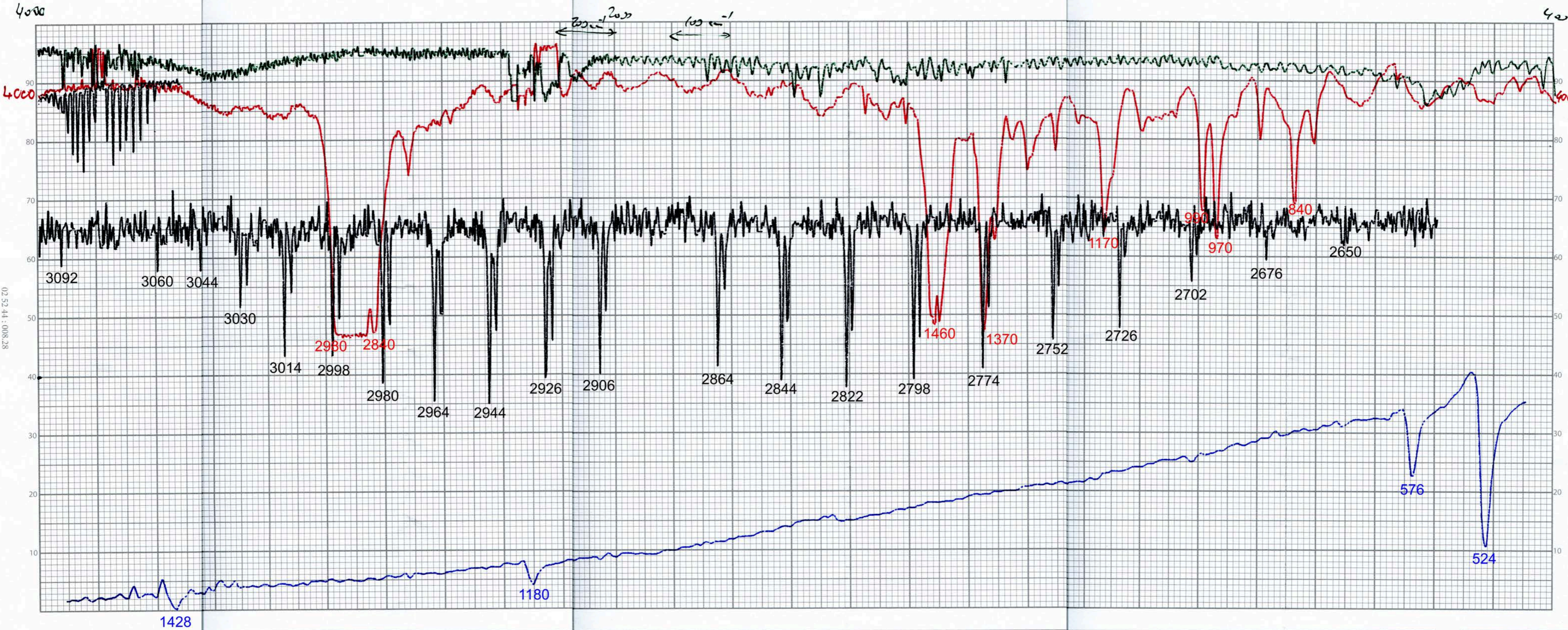
$$E_1 = (5.3635 \pm 0.0021) \cdot 10^{-1} [eV]$$

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>1</b>
1.1. A mérés célja . . . . .	1
1.2. A mérés leírása . . . . .	1
1.3. A mérési összeállítás . . . . .	1
<b>2. Eredmények</b>	<b>2</b>
2.1. Alapvonal felvétele . . . . .	2
2.2. Polipropilen spektruma . . . . .	2
2.3. C60 Fullerén spektruma . . . . .	3
2.4. HCl spektruma . . . . .	4

# Hivatkozások

- [1] Modern fizikai laboratórium, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 1995
- [2] Jegyzet: <http://wigner.elte.hu/koltai/labor/parts/F2jegyzet.pdf>
- [3] Jegyzet: <http://wigner.elte.hu/koltai/labor/parts/12infra.pdf>
- [4] [http://lww.kt.dtu.dk/~vigild/2005\\_04\\_melitek/IR.htm](http://lww.kt.dtu.dk/~vigild/2005_04_melitek/IR.htm)



Minta	
Koncentráció	
Küvetta szélesség	cm
Hőmérséklet	
Referens oldat	
Koncentráció	
Küvetta szélesség	cm
Hőmérséklet	
Paraméter	cm <sup>-1</sup>
Intenzitás	s
Energia	
Sebesség	
Megjelenítés	ABS, % T, derivált
Nullapont	
ExpX	
ExpY	

Megjegyzések:

Dátum: Név: Sorszám: