Modern Fizika Labor

Fizika BSC

<table>
<tr><td>A mérés dátuma:

2008. 09.30.</td><td>A mérés száma és címe:

12. Infravörös spektroszkópia</td><td rowspan="2">Értékelés:</td></tr>
<tr><td>A beadás dátuma:

2008.10.14.</td><td>A mérést végezte:

Juhász Krisztina
Szilvási Ádám</td></tr>
</table>

1. A mérés célja

A mérés célja az infravörös spektroszkópiával való megismerkedés a polisztirol, HCl és a fullerén molekulák vizsgálatán keresztül.

2. A mérési összeállítás

A mérést egy folytonos üzemű infravörös spektrométerrel végeztük, melynek hibája ±1 hullámszám volt, valamint, mivel a spektrumok leolvasását papírról végeztük, itt ±0,5 kocka (1 kocka=2 mm, elnézést a nem konvencionális mértékegységekért, de a számolásokhoz sokszor volt funkcionálisabb) hibával számoltam.

A jegyzőkönyv során nem említem, de minden összefüggést a Modern fizikai laboratóriumi jegyzetből idézek.

3. A spektroszkóp kalibrálása

a. A polisztirol képe

A kalibrációt egy előre felvett mágneskártya segítségével végeztük, majd lemértük a levegő-levegő alapvonalat. Itt azt tapasztaltuk, hogy a várható véletlen zajon kívül megjelentek a levegőben előforduló szén-dioxid, vízpára, illetve metán molekulák sűrűségingadozásai is, egy-egy erősebb elnyelési spektrumvonallal.

A hitelesítést egy polisztirol fólia abszorpciós spektrumának segítségével számoltam. A fólia spektrumát először a 4000-400 cm^{-1} tartományban vettük fel, majd ennek segítségével kiválasztottunk három tartományt, amelyekben az abszorpció legnagyobb maximumai találhatóak. Ezekben meghatároztuk a minimumok helyeit, majd ezeket összehasonlítva az irodalmi értékekkel, egy hitelesítési egyenest illesztettünk. Megjegyezném, hogy az esetünkben a mért hullámszámok gyakorlatilag csak a 3200-2800-ig terjedő tartományban tértek el természetes módon, de ott is csak minimálisan. A 1700-1450-ig terjedő tartományon lévő két csúcs tökéletesen illeszkedett az elméleti értékekhez, feltéve, hogy kiterjesztettük 1700-ról 1702-re, mivel a szélessége az ábrának 252 kocka volt. Mivel ez hivatalosan nem megengedett manipuláció, ezt a transzformációt nem hajtottam végre. Az 1050-550-ig terjedő tartományt sajnos nem pontosan a segédvonalak valamelyikétől indítottuk el, így el kellett tolni minden értéket a számoláskor. Itt is igaz, hogyha kicseréljük az 1050-t 1054-re, akkor egy eltolással pontosan kijönnek a minimumhelyek elméleti értékei. Mivel itt sem végeztem ilyen módosításokat, ezért az eltérések lineárisan növekvők maradtak. Ezen három tartományban megmért hullámszámokra az elméleti értékek függvényében illesztettem a kalibrációs egyenest. Az egyenes így is nagyon közel maradt a 45°-oshoz, minimális eltéréssel.

Az adatok cm^{-1}-ben vannak megadva. A mért értékek leolvasási hibája ±1mm (ált. =±1 cm^{-1}, de 1700-1450-ig ±0,5 cm^{-1}):

Elméleti	Mért	Elméleti	Mért
3106	3104	2851	2850
3084	3084	1603	1601,8
3062	3062	1495	1494,6
3028	3028	1028	1026,2
3004	3002	906	905,2
2925	2924	700	700,8

Az erre illesztett egyenes meredeksége: m=1,0003±0,0001

b. A fullerén képe

A fullerénmolekulát sajnálatos módon nem sikerült lemérni, így egy régebbi mérési papírról olvastam le a minimumhelyeket. Valószínűleg emiatt nem is volt jó a hitelesítési egyenes, csak minimálisan korrigálta az értékeket.

Az adatok cm^{-1}-ben vannak megadva. A mért értékek leolvasási hibája $\pm 2cm^{-1}$:

Elméleti	Mért	Korrigált
1428	1424	1424,5
1182	1180	1180,4
577	576	576,2
527	528	528,2

c. A HCl molekula spektruma

Mivel a mérés egy szűk tartományra korlátozódott, ahol a transzmisszió alacsony és hosszú integrálási idővel kellett lemérni a mintát, ezért a mérés sokáig tartott, így ezt a laborvezetők előre elvégezték helyettünk. A spektrum két részben van felvéve, a magasabb frekvenciákhoz a ΔJ=+1-hez tartozó R-ág, az alacsonyabb frekvenciákhoz pedig a ΔJ=-1-hez tartozó P-ág rendelhető. A megfigyelhető csúcsok párba rendeződnek, amelyek mindig ugyanolyan távolságra vannak egymástól. Ez arra utal, hogy a gázban a klór 35-ös tömegszámú izotópja mellett a 37-es izotóp is jelentős mértékben jelen van, ahogy ezt látni fogjuk.

Az adatok cm^{-1}-ben vannak megadva, és korrigáltak. A mért értékek hibája $\pm 0{,}8\ cm^{-1}$:

$x=J_0+1$	Nagy	Kis	$x=-J_0$	Nagy	Kis
9	3046,0	3043,5	-1	2866,4	2864,4
8	3031,0	3029,0	-2	2844,9	2842,4
7	3015,5	3013,0	-3	2822,9	2820,9
6	2999,0	2996,5	-4	2799,9	2797,9
5	2982,0	2980,0	-5	2776,9	2774,9
4	2964,4	2961,9	-6	2752,9	2750,9
3	2945,9	2943,9	-7	2728,9	2726,9
2	2926,9	2924,9	-8	2703,9	2702,4
1	2907,4	2904,9			

Ezek között az adatok között felírhatunk egy összefüggést a hullámszámra:

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

Ezt illesztve a fenti táblázatban szereplő csúcsokra, megkapjuk a két egyenlet három paraméterét, melyekből kifejezhetőek a forgási állandóik:

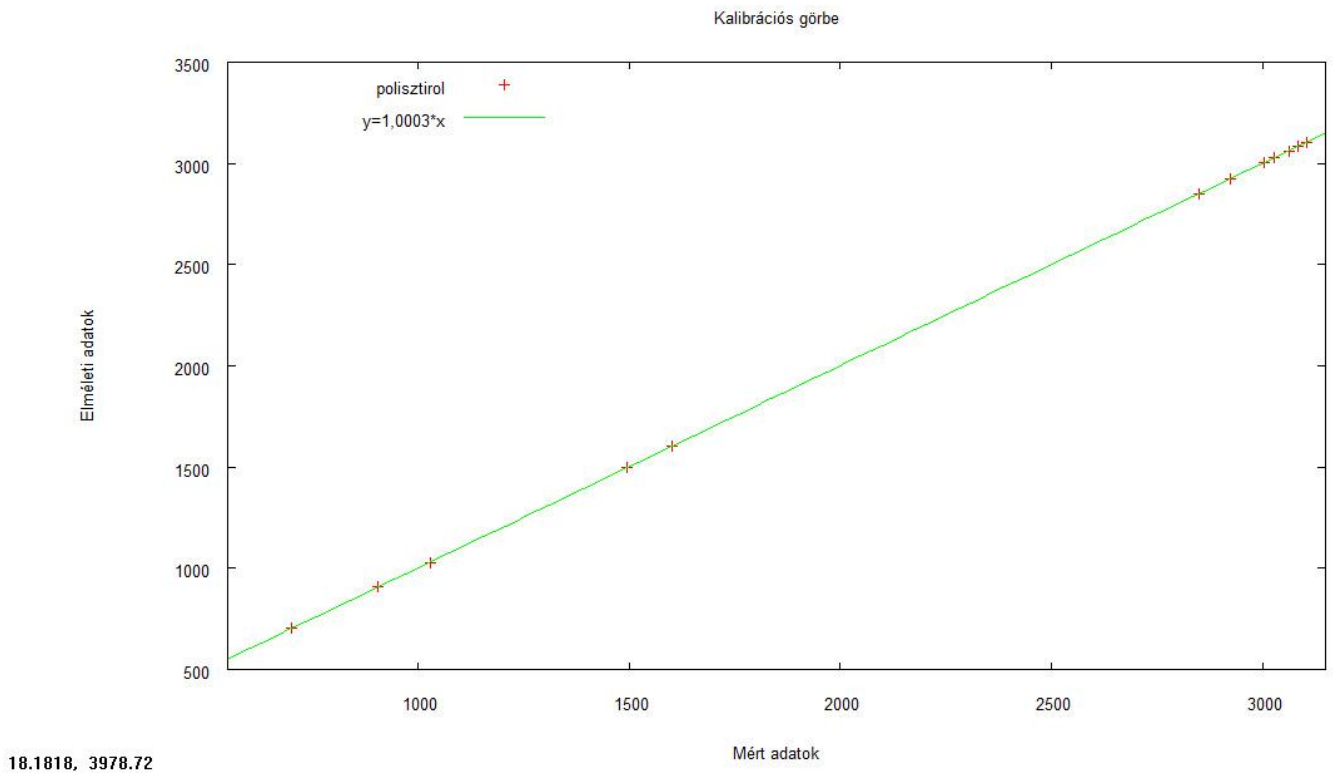
k_{035}	2886,5 cm^{-1}	±0,4 cm^{-1}
k_{037}	2884,1 cm^{-1}	±0,4 cm^{-1}
B_{035}	10,42 cm^{-1}	±0,01 cm^{-1}
B_{037}	10,37 cm^{-1}	±0,01 cm^{-1}
B_{135}	10,11 cm^{-1}	±0,01 cm^{-1}
B_{137}	10,07 cm^{-1}	±0,01 cm^{-1}

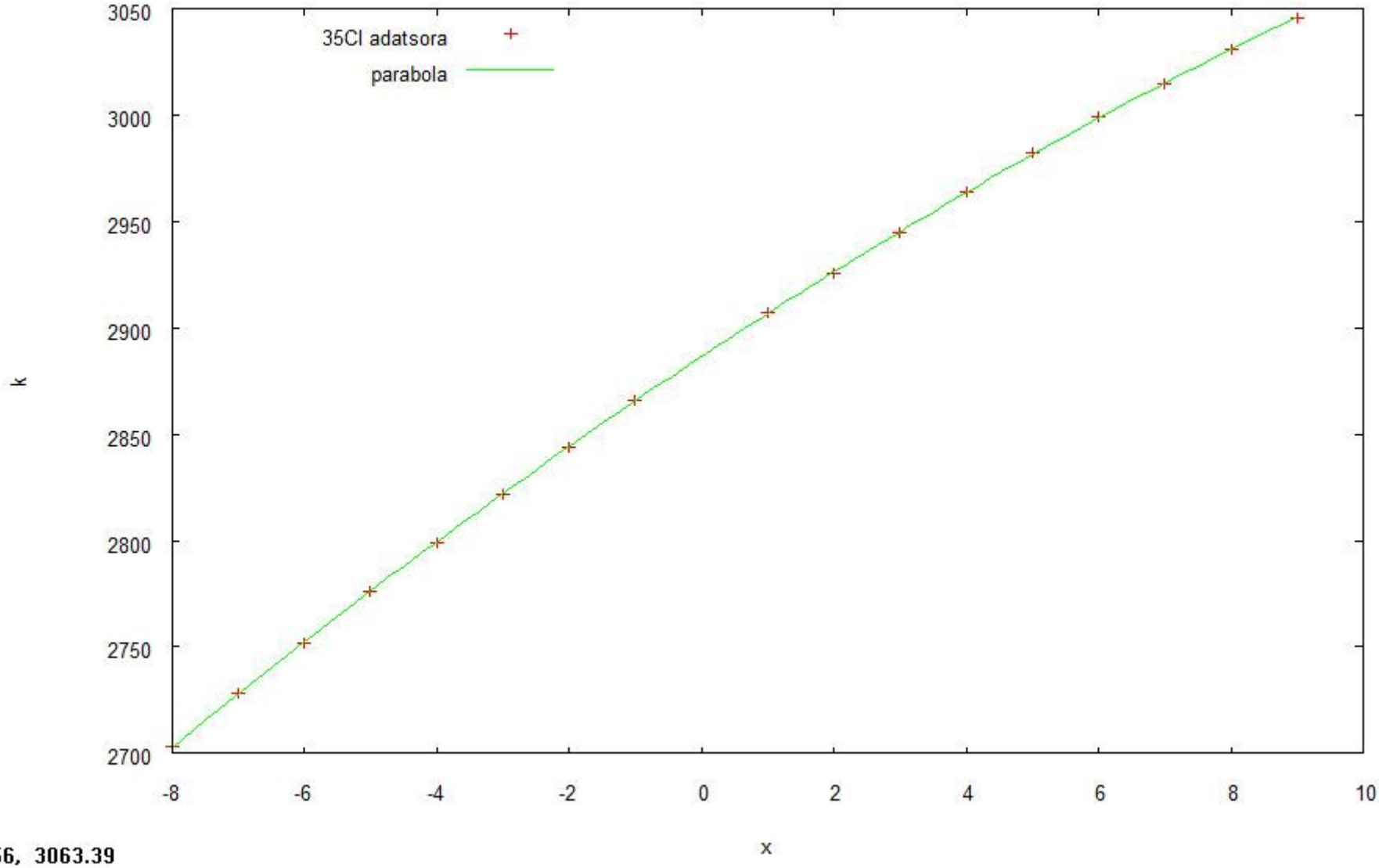
Meghatározva előbb a HCl molekulák redukált tömegeit, ezekből kiszámítható az egyensúlyi forgási állandó, az α paraméter, a kötési rugóállandó, illetve az egyensúlyi magtávolság is:

B_{e35}	1057 m^{-1}	±1 m^{-1}
B_{e37}	1053 m^{-1}	±1 m^{-1}
α_{35}	30,7 m^{-1}	0,4 m^{-1}
α_{37}	30,8 m^{-1}	0,4 m^{-1}
μ_{35}	1,6145 x 10^{-27} kg	-
μ_{37}	1,6169 x 10^{-27} kg	-
r_{e35}	1,281 x 10^{-10} m	±3 x 10^{-13} m
r_{e37}	1,282 x 10^{-10} m	±3 x 10^{-13} m
D_{35}	477,3 N/m	±0,1 N/m
D_{37}	477,2 N/m	±0,1 N/m

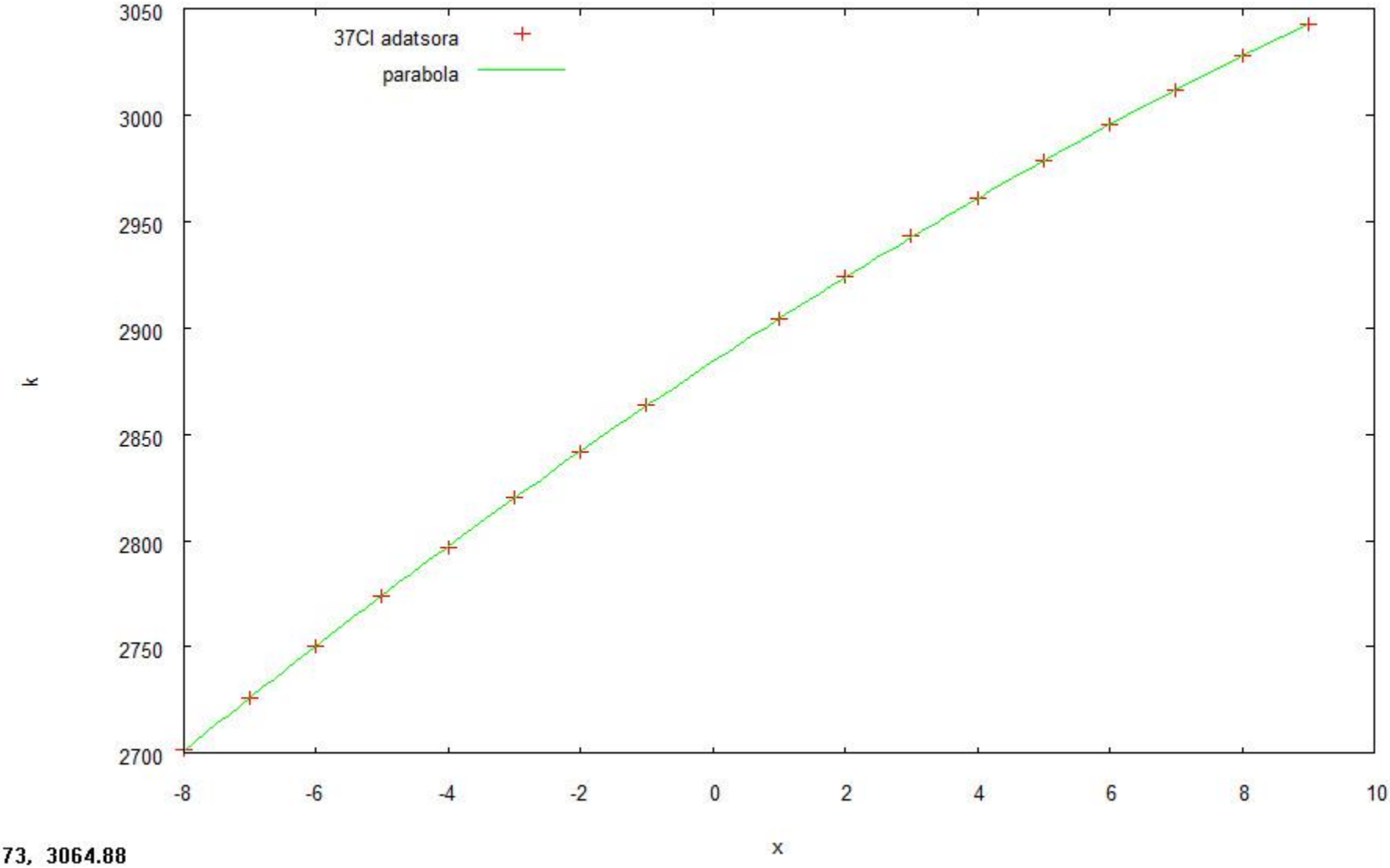
Itt az indexek a különböző izotópokra vonatkoznak. Ahogy látjuk, ez tényleg ugyanannak az atomnak egy más izotópja, mivel az α paraméter, az egyensúlyi magtávolság és a kötési rugóállandók is megegyeznek hibahatáron belül, csak a tömegkülönbség miatt a forgási és rezgési sajátmódusok tolódtak el picivel.

A mellékletben megtalálhatóak az illesztett görbék.





-10.6656, 3063.39



-11.5173, 3064.88