

Modern fizika laboratórium

11. Az I_2 molekula disszociációs energiája

Készítette: Hagymási Imre

A mérés dátuma: 2007. október 3.
A beadás dátuma: 2007. október xx.

1. Bevezetés

Ebben a mérésben egy kétatomos molekulának, a jódnak, a disszociációs energiáját határoztuk meg. A disszociációs energia az a minimális energia amit egy molekulával közölnünk kell ahhoz, hogy a két atom végtelen távolságra jusson egymástól. Ha ennél nagyobb energiát közlünk a molekulával, akkor az energiafelesleg az atomok mozgási energiájaként marad meg. A disszociációs energia felett a molekula tetszőleges energiát fel tud venni, mivel a szabad mozgás nem kvantált. Ezen energia alatt viszont csak diszkrét energiaszintekre lehet gerjeszteni. Tehát a disszociációs energiának megfelelő átmenet elválasztja a spektrum folytonos illetve diszkrét részét.

2. A mérés elmélete

A részletes elméleti leírás megtalálható a jegyzetben¹, itt csak a legfontosabb részekre térünk ki.

A probléma egzakt megoldását a rendszerre felírt Schrödinger-egyenlet szolgáltatná, de ennek pontos megoldását megadni reménytelen feladat. Ehelyett az ún. *Born-Oppenheimer-közelítést* alkalmazzák. Ez abból áll, hogy az elektronállapotok vizsgálatakor a magok helyzetét állandónak tekintjük, mivel tömegük három nagyságrenddel nagyobb az elektronokénál. Ugyanakkor a magok mozgásának vizsgálatakor az elektronok Coulomb-potenciáljának időátlagát vesszük figyelembe. A jegyzet szerint a magok rezgőmozgását jó közelítéssel leírja az ún. *Morse-potenciál*:

$$V(\varrho) = D_e[1 - e^{-\alpha\varrho}]^2, \quad (1)$$

ahol $\varrho = \frac{r-r_e}{r_e}$ az egyensúlyi helyzettől számított relatív kitérés, α és D_e konstansok. A Schrödinger-egyenletet megoldva a Morse-potenciál esetében, a következő kifejezést kapjuk az energiasajátértékekre:

$$E_n = h\nu \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) - x \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right] = -h\nu x n^2 + (h\nu - h\nu x)n + \frac{h\nu}{2} - \frac{h\nu}{4}x, \quad (2)$$

ahol ν és x a Morse-potenciál paramétereivel kifejezhető állandók, pontos alakjuk megtalálható a jegyzetben. A (2) kifejezésből jól látható, hogy a kötött állapotok száma véges. A disszociációhoz tartozó energia ezen energiaértékek maximuma. Az utolsó energiaszint tehát a $\frac{dE_n}{dn} \Big|_{n=n_0} = 0$ feltételből határozható meg.

¹Papp Elemér (szerk.): *Modern fizika laboratórium*, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 1995.

3. A mérés

3.1. A mérőberendezés

A mérőberendezés „lelke” egy monokromátor volt, melynek kilépő részén egy fotodióda helyezkedett el. Ennek a jelét erősítés után a számítógépre csatlakoztatták. A rés szélességét egy mikrométer-csavarral lehetett szabályozni. Ezt úgy választottuk meg, hogy a kiértékelésnél jól kivethetőek legyenek a maximumok illetve minimumok. A monokromátor hullámhosszát a számítógép vezérelte egy léptetőmotor segítségével.

3.2. Kalibrálás

A számítógép nem tudta kiolvasni a monokromátor aktuális értékét, ezért minden mérés előtt be kellett állítani a kijelzőn leolvasott értékre. A kiértékelőprogram azt tartotta nyilván, hogy melyik pixelnél mennyi az intenzitás. Ahhoz, hogy megmondjuk melyik pixelnek melyik hullámhossz felel meg, kalibráció szükséges. Ehhez egy ismert elemnek - jelen esetben a higanynak - az emissziós spektrumát használtuk. A kalibrálást az 540-580 nm-es tartományban végeztük el, ahol a higany spektrumában 3 csúcs van. Ezen értékek között pedig lineárisan interpolálhatunk. A mért értékek az 1. táblázatban láthatók. A mérési adatokra illesztett egyenes az 1. ábrán.

	pixel értékek		
csúcs helye (nm)	x_1	x_2	x_3
546.07	21	26	25
576.96	171	174	175
578.97	181	185	185

1. táblázat. A higany csúcsaihoz tartozó pixelértékek.

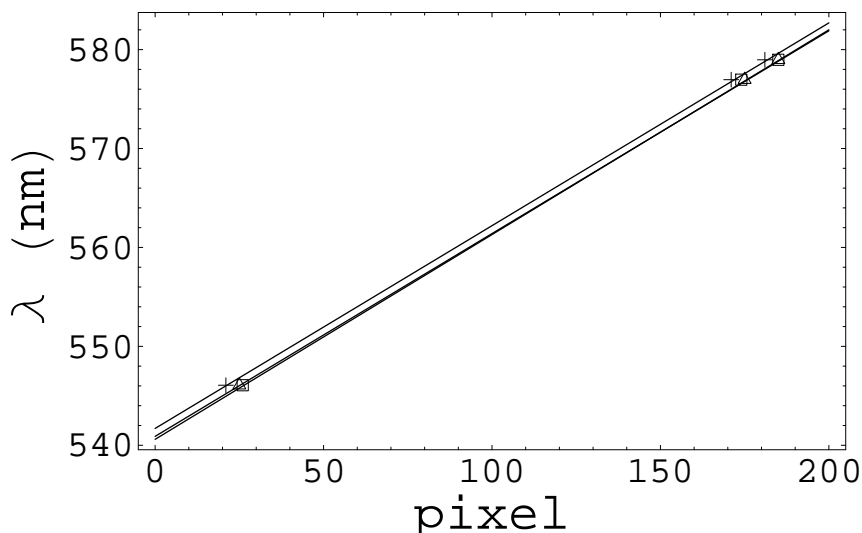
A visszaállási pontatlanság miatt is érdemes volt több kalibrálást elvégezni. Mind a három adatsorra egyenest illesztve, majd a kapott paramétereket átlagolva a következőt kapjuk az a meredekségre illetve b tengelymetszetre:

$$a = (0.206 \pm 0.001)\text{nm}, \quad b = (541.1 \pm 0.5)\text{nm}. \quad (3)$$

A továbbiakban ezekkel számolunk a pixel-nm konverzió során.

	a (nm)	b (nm)
1. mérés	0.2057 ± 0.0002	541.75 ± 0.03
2. mérés	0.207 ± 0.001	540.6 ± 0.2
3. mérés	0.2057 ± 0.0002	540.92 ± 0.03

2. táblázat. A kalibrációs egyenesek meredeksége a , illetve tengelymetszete b .



1. ábra. A kalibrálási egyenesek. + az 1. mérés adatait, \square a 2. mérés adatait, \triangle pedig a 3. mérés adatait jelöli.

3.3. A jódszorbpció s spektrumának mérése

A jódspektrum felvétele előtt maximalizáltuk az üvegcsőből a monokromátorra eső fényintenzitást egy gyűjtőlencse segítségével. Ezután néhány próbamérést végeztünk, amíg meg nem találtuk a közel optimális résszélességet a monokromátoron. Összesen négy spektrumot mértünk az érdekes 540-640 nm-es tartományban. A spektrum minimumhelyeit a 3. táblázat tartalmazza. Mindegyik mérésnél 20 minimumhelyet mértünk. A minimumhelyeket átszámítva energiára és az n kvantumszám függvényében ábrázolva, az elméleti várakozás szerint egy parabolát kapunk. Ezt láthatjuk a 2. ábrán. A hullámhossz hibáját a kalibrációs egyenes paramétereivel számíthatjuk ki:

$$\Delta\lambda = (a \cdot \text{pixel}) \cdot \delta a + \Delta b. \quad (4)$$

A legnagyobb hullámhossz esetén a hiba (ez felülről becsüli a többi hibáját):

$$\Delta\lambda = 0.88\text{nm}. \quad (5)$$

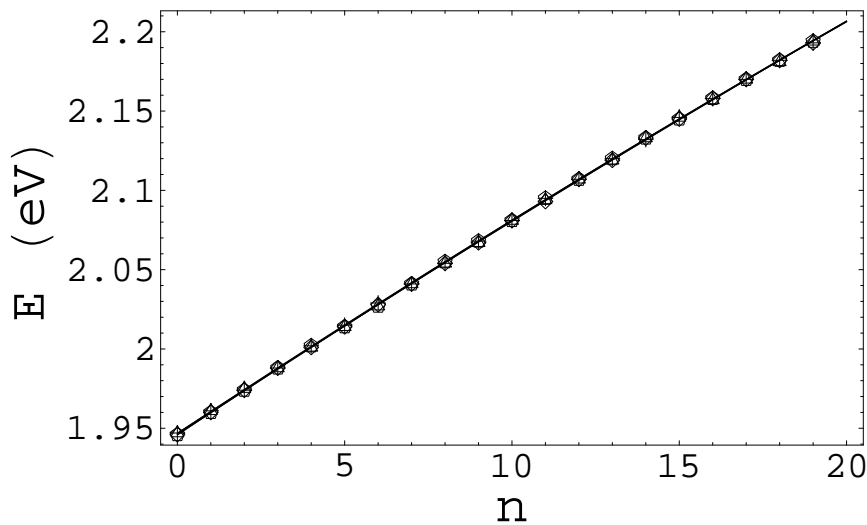
Az energiaértékeket az

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (6)$$

képlettel számoltuk, $h = 6.62 \cdot 10^{-34}\text{Js}$, $c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Az elemi töltés értékét $e = 1.6 \cdot 10^{-19}\text{C}$ -nak vettük. ($1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-19}\text{J}$.) Az energiák hibáját a

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \delta\lambda = 0.002\text{eV} \quad (7)$$

képlettel számolhatjuk. Itt ismét a legnagyobb energiaértéket vettük figyelembe, így felső becslést adva a többire.



2. ábra. Az energiaszintek az n kvantumszám függvényében és a rájuk illesztett másodfokú függvény. A mérések adatait rendre +, háromszög, négyzet, ötszög jelölik.

Az energia- n ($n \in \mathbb{N}$) függvény a bevezetőben megfogalmazottak szerint egy parabola. Az erre illesztett $an^2 + bn + c$ parabola paramétereit mérési sorozatonként a 4. táblázat tartalmazza.

	1. mérés			2. mérés			3. mérés			4. mérés		
n	pixel	nm	eV	pixel	nm	eV	pixel	nm	eV	pixel	nm	eV
0	120	565.82	2.193	119	565.61	2.194	120	565.82	2.193	119	565.61	2.194
1	134	568.70	2.182	135	568.91	2.181	134	568.70	2.182	134	568.70	2.182
2	150	572.00	2.170	150	572.00	2.170	150	572.00	2.170	150	572.00	2.170
3	165	575.09	2.158	166	575.29	2.157	165	575.09	2.158	165	575.09	2.158
4	181	578.38	2.146	181	578.38	2.146	182	578.59	2.145	182	578.59	2.145
5	199	582.09	2.132	198	581.88	2.133	198	581.88	2.133	198	581.88	2.133
6	215	585.39	2.120	216	585.59	2.119	216	585.59	2.119	215	585.39	2.120
7	233	589.09	2.107	233	589.09	2.107	233	589.09	2.107	232	588.89	2.107
8	249	592.39	2.095	250	592.60	2.094	251	592.80	2.093	249	592.39	2.095
9	268	596.30	2.081	268	596.30	2.081	268	596.30	2.081	268	596.30	2.081
1	0 286	600.01	2.068	287	600.22	2.067	287	600.22	2.067	286	600.01	2.068
11	306	604.13	2.054	306	604.13	2.054	306	604.13	2.054	305	603.93	2.055
12	325	608.05	2.041	325	608.05	2.041	325	608.05	2.041	325	608.05	2.041
13	343	611.75	2.029	345	612.17	2.027	344	611.96	2.028	345	612.17	2.027
14	363	615.87	2.015	364	616.08	2.014	364	616.08	2.014	364	616.08	2.014
15	382	619.79	2.002	384	620.20	2.001	384	620.20	2.001	383	619.99	2.002
16	404	624.32	1.988	403	624.11	1.988	404	624.32	1.988	404	624.32	1.988
17	425	628.65	1.974	424	628.44	1.975	425	628.65	1.974	425	628.65	1.974
18	445	632.77	1.961	445	632.77	1.961	446	632.97	1.961	447	633.18	1.960
19	468	637.50	1.947	467	637.30	1.947	469	637.71	1.946	469	637.71	1.946

3. táblázat. A jódszorbpció spektrumának minimumhelyei. A mért pixelértékek, és a számolt hullámhossz- és energiaértékek.

	a (eV)	b (eV)	c (eV)
1. mérés	$(-4.7 \pm 0.4) \cdot 10^{-5}$	0.0139 ± 0.0001	1.9467 ± 0.0004
2. mérés	$(-3.8 \pm 0.5) \cdot 10^{-5}$	0.0137 ± 0.0001	1.9468 ± 0.0004
3. mérés	$(-4.4 \pm 0.4) \cdot 10^{-5}$	0.01391 ± 0.00008	1.9460 ± 0.0004
4. mérés	$(-4.8 \pm 0.4) \cdot 10^{-5}$	0.01400 ± 0.00008	1.9459 ± 0.0003

4. táblázat. A másodfokú görbe illesztett paraméterei.

Ezen adatok birtokában már meghatározható a maximum helye és értéke. Számunkra csak a maximumérték az érdekes. A maximumértékek a parabola paramétereinek ismeretében a

következőképpen számítható:

$$E_{\max} = -\frac{b^2}{4a} + c. \quad (8)$$

A maximumértékek rendre:

$$\left. \begin{array}{l} (E_{\max})_1 = (2.97 \pm 0.09) \text{ eV} \\ (E_{\max})_2 = (3.1 \pm 0.1) \text{ eV} \\ (E_{\max})_3 = (3.0 \pm 0.1) \text{ eV} \\ (E_{\max})_4 = (2.96 \pm 0.09) \text{ eV} \end{array} \right\} \overline{E_{\max}} = (3.0 \pm 0.1) \text{ eV}. \quad (9)$$

A maximumértékek hibáját a

$$\Delta E_{\max} = \left| -\frac{b^2}{4a} \right| \cdot (2\delta b + \delta a) + \Delta c \quad (10)$$

formulával számoltuk.

Ebből az értékből még le kell vonni az egy darab jódatom $E(I \rightarrow I^*) = 0.941 \text{ eV}$ gerjesztési energiáját, hogy megkapjuk a tényleges disszociációs energiát:

$$E_{\text{disszociációs}} = (2.1 \pm 0.1) \text{ eV}. \quad (11)$$