

Jegyzőkönyv

12.

Infravörös spektroszkópia

Készítette:

Hága Péter és Bozsoki Péter,
harmadéves fizikushallgatók

1999. október 6., szerda
délelőtti csoport

1. A mérés célja

Ezen mérés célja az infravörös spektroszkópia gyakorlati alkalmazása volt a *HCl* molekula spektrumának felvételén keresztül.

2. A mérés elve

A mérés elméleti hátterét ezen jegyzőkönyvben nem ismertetjük, mert bár az szerves része mind a mérésnek, mind a jegyzőkönyvnek, jelen esetben csak a "Modern Fizikai Laboratórium" c. egyetemi jegyzet idevágó (jelen esetben 12. fejezetének) ismételése lenne. Ezt pedig jelen körülmények között feleslegesnek tartjuk. Ahol szükséges, ott hivatkozunk a megfelelő részre.

3. A mérés kivitelezése

A mérést egy folytonos üzemű infravörös spektrométeren végeztük, melynek hibája ± 1 hullámszám (hullámszám alatt a hullámhossz reciprokát értjük itt is, és a jegyzőkönyv további részeiben is), ami figyelembe véve a adatrögzítő papír leolvasási hibáját is, akár ± 1 mm nagyságra is megnőhet. Ez utóbbinak a konkrét értéke (hullámszámban kifejezve) a spektroszkóp adott esetbeli felbontási beállításától függ, mely -természetesen- minden esetben rögzítve van a jegyzőkönyvben.

3.1. A spektroszkóp beállítása és hitelesítése

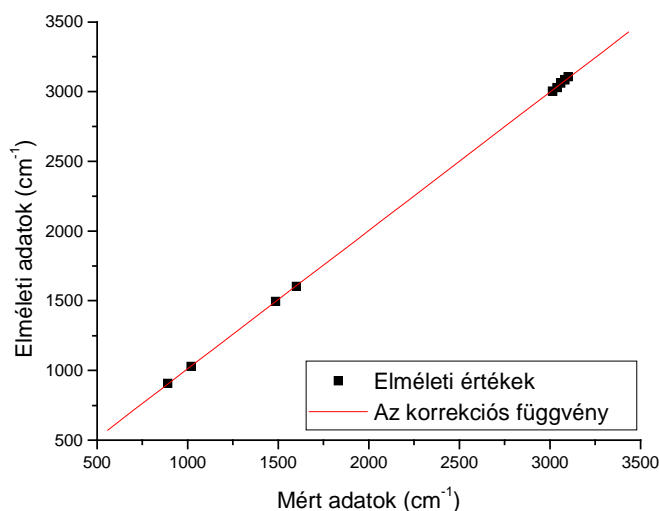
A mérés elején lefutattuk az megfelelő kalibrációs programokat, ezzel beállítva a berendezést, majd felvettük egy polisztirol fólia elnyelési görbét, amit összevetettünk a méréshez kapott hiteles görbével. A felvett görbe az 1. mellékleten látható (a kék görbe az; a zöld görbéről ld. később; a két piros színű görbe a kezdeti, készülékkel történő "ismerkedésünk" eredménye, a mérés szempontjából releváns információt nem hordoznak). Az 1. mellékleten az is látható, hogy a kalibrációs programok ellenére a spektroszkóp a (2310 cm^{-1} , 2355 cm^{-1}) intervallumban ($\pm 10\text{ cm}^{-1}$) 100%-os áteresztést mutatott, ezért később ebben az intervallumban nem mértünk.

Az ábrán a kiértékelés során megszámoztuk a polisztirol fólia elnyelési görbéjének minimumait, úgy, hogy az a kapott hitelesítési görbén látható számozással azonos legyen. Leolvasva a számozott (lokális) minimumokhoz tartozó hullámszámértékeket, a következő adatsort kaptuk:

Táblázat 1

	Minimum helye (cm), a lap bal szélétől	Minimum mért helye (cm ⁻¹)	Elméleti érték (cm ⁻¹)
15	8,8	3102	3106
14	9	3084	3084
13	9,2	3060	3062
12	9,4	3040	3028
11	9,6	3016	3004
6	27,8	1600	1603
5	30	1486	1495
3	39,2	1020	1028
2	41,6	890	906

Ábra 1



A táblázat melletti ábrán láthatóak az elméleti értékek a mért adatok függvényében ábrázolva. Mivel az így kapott korrekciós függvény láthatóan lineáris, ezért egyenest illesztettem rá. Az így kapott egyenes egyenlete lett a korrekciós görbe: $F_{\text{kor}}(x) = (17,9 \pm 0,7) + (0,993 \pm 0,002)x$.

A görbét 4000 és 400 cm⁻¹ között vettük fel, a spektroszkóp felbontása pedig a készülék alapértelmezett felbontása volt: 4000 és 2000 cm⁻¹ között 100 cm⁻¹/ 1 cm, 2000 és 400 cm⁻¹ között 100 cm⁻¹/ 1 cm.

Megjegyzés: a táblázat 3 oszlopában szereplő adatok kiszámolásánál figyelembe vettem, hogy a papírt 2 mm-el balra eltolva helyeztük be (ld. 1. Melléklet). Ez a korrekciós függvény "jóságát" nem befolyásolja, mert a *HCl* spektrumát másik, újonnan behelyezett papírra vettük fel.

3.2. A HCl gáz spektrumának felvétele

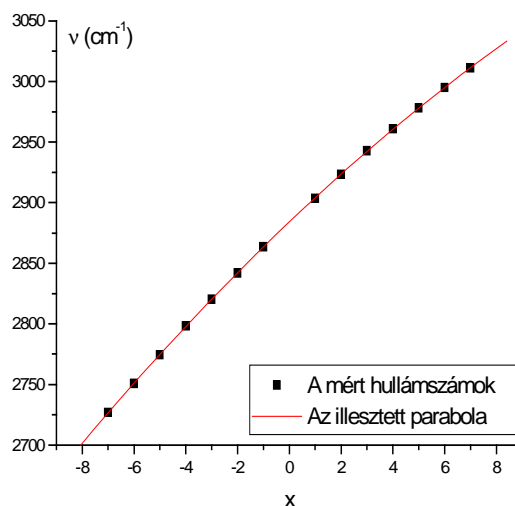
A tényleges mérés elkezdése előtt felvettük a teljes spektrumban a *HCl* gáz spektrumát, így keresve meg a leginkább informatív részeket. Ez a görbe látható az 1. Mellékleten, zöld színnel rajzolva. Mivel itt csak a hozzávetőleges értékeket kerestünk, ezért 1-es x léptékkel, 100-as y léptékkel és 0,25 s-os integrálási idővel dolgoztunk. A görbe alapján úgy döntöttünk, hogy a *HCl* spektrumát a $3100\text{--}2700\text{ cm}^{-1}$ intervallumban érdemes keresnünk. A nagyobb pontosság érdekében 1 s-ra állítottuk az integrálási időt és hogy növeljük a felbontást, a rés méretét SLIT=1,6-ra csökkentettük. A vízszintes felbontásunk ezúttal $10\text{ cm}^{-1} / 1\text{ cm}$ volt. Az ezekkel a beállításokkal kapott elnyelési görbe látható a 2. Mellékleten.

Leolvasva a minimumhelyeket, a kapott értékeket a Táblázat 2 3. és 4. oszlopában tüntettük fel. A táblázat utolsó oszlopában a 3.1. pontban kapott $F_{\text{kor}}(x)$ korrekciós függvénnyel korrigált adatok vannak. A jegyzet $F2$ függelékének 241. oldala alapján a táblázat első oszlopaiban feltüntettem, hogy a $\Delta J = +1$ (R ág) és $\Delta J = -1$ (P ág) esetén a mekkora az x értéke. (x alatt a $v(x) = v_0 + (B_1 + B_0)x - (B_1 - B_0)x^2$ kifejezésbeli x -et értem.) Az így kapott adatsort ábrázolva és parabolát illesztve a pontokra, adódott az Ábra 2-ön látható eredmény. Az ábrán látható parabola adatai: $v_0 = 2884,06 \pm 0,12\text{ cm}^{-1}$, $(B_1 + B_0) = 20,338 \pm 0,018\text{ cm}^{-1}$ és $(B_1 - B_0) = 0,307 \pm 0,005\text{ cm}^{-1}$.

Táblázat 2

Ág	J_0	x	Minimum helye (cm) a lap bal szélétől	Minimum mért helye (cm^{-1})	Korrigált értékek (cm^{-1})
R	6	7	8,56	3014,4	3011,1992
R	5	6	10,2	2998	2994,914
R	4	5	11,9	2981	2978,033
R	3	4	13,62	2963,8	2960,9534
R	2	3	15,46	2945,4	2942,6822
R	1	2	17,4	2926	2923,418
R	0	1	19,4	2906	2903,558
P	1	-1	23,42	2865,8	2863,6394
P	2	-2	25,6	2844	2841,992
P	3	-3	27,8	2822	2820,146
P	4	-4	30,02	2799,8	2798,1014
P	5	-5	32,4	2776	2774,468
P	6	-6	34,78	2752,2	2750,8346
P	7	-7	37,2	2728	2726,804

Ábra 2



Látszik, hogy a parabola rendkívül jól illeszkedik, a relatív hiba nagyságrendileg $\approx 1\%$ körül van. Erre azonban ráakodik az, hogy a korrekciós függvény mérésénél is és számolásánál is voltak hibák. Azonban ott csak az $F_{\text{kor}}(x)$ additív részének hibája a számottevő, mert a leolvasás relatív hibája $\delta_{\text{leolvasás}} \approx 10/2300 \approx 0,004$, az illesztett egyenes meredekségének illesztési hibája pedig $\delta_{\text{meredekség}} \approx 0,002/0,993 \approx 0,002$. Ez utóbbi tagok hibája még együttesen is egy nagyságrenddel kisebb a $\delta_{\text{additív}} \approx 0,7/17,9 \approx 0,04$ relatív hibája mellett. Ezért $\delta F_{\text{kor}}(x) \approx \delta_{\text{additív}} \approx 0,04$. A tízszer nagyobb felbontás miatt a HCl spektrumát tízszer pontosabban tudtam leolvasni, így az abból eredő hiba is eltörpül a korrekciós függvény hibája mellett. Hasonló megfontolással látható, hogy az illesztett parabola illesztési hibáinál a másodfokú tag együtthatójának a hibája a domináns, s lényegében csak annak van a $\delta F_{\text{kor}}(x)$ -el összemérhető hibája. Így végül a relatív hiba $\delta F_{\text{kor}}(x) + \delta_{\text{parabola}} \approx 0,04 + 0,016 \approx 0,06$ -nak adódik, ami százalékban kifejezve 6% -ot jelent. Ez még bőven 10% alatt van, így szerintünk ez egy közepes hiba. Látható az is, hogy számottevő javulás lenne elérhető a korrekciós függvény pontosabb meghatározásával, hisz a hiba túlnyomó része abból ered.

Ezek után meghatározva a B_0 , B_1 , B_e és α értékét, hibával együtt:

$$B_0 = 10,0 \pm 0,6 \text{ cm}^{-1}, B_1 = 10,3 \pm 0,6 \text{ cm}^{-1}, B_e = 10,6 \pm 0,6 \text{ cm}^{-1}, \alpha = 0,307 \pm 0,005 \text{ cm}^{-1}.$$

B_e -t felhasználva, az egyensúlyi atomtávolság $r_e = (127 \pm 3) \cdot 10^{-12} \text{ m}$ adódik, felhasználva, hogy $\mu = 35/(36 \cdot N_A) \text{ g}$ a redukált tömeg. Innen könnyen adódik a molekula erőállandója: $D = 4 \pi^2 \mu c^2 v^2 = 477,8 \pm 0,7 \text{ N/m}$.

3.3. A ^{37}Cl izotóp vizsgálata

A 2. Mellékleten látható, hogy minden minimumot követ egy kisebb minimum. Valószínűsítjük, hogy ezt a ^{37}Cl jelenléte okozza. Feltéve, hogy a spektrum csak konstanssal eltolódott (azaz az izotóphoz is ugyanazon D , B_e és α tartozik -már ha valóban izotópról van szó) a $\nu_{0\text{izotóp}} = \nu_0 - 2 \text{ cm}^{-1} = 2882,06 \pm 0,12 \text{ cm}^{-1}$ -nak adódik, felhasználva a 2. Mellékleten látható görbéről leolvasható eltolódást. Ezen a feltételezés helyességét alátámasztja a mérési eredmény (a két csúcs közötti távolság nem változik észrevehetően a hullámhosszal). Mivel

$$\mu = \frac{D}{4\pi^2 c^2 \nu_{0\text{izotóp}}^2} = (1,62 \pm 0,1) \cdot 10^{-25} \text{ kg}, \text{ ahonnan a moláris redukált tömeg } \mu_M = \mu \cdot 10^3 \cdot N_A \approx 0,971 \pm 0,06 \approx 37/38 = 0,973, \text{ ami hibahatáron belül egyezik az } ^{37}\text{Cl} \text{ -hez tartozó "irodalmi" értékkel, ezért helyesnek bizonyult az előfeltevésünk, miszerint a kisebb minimumokat a } ^{37}\text{Cl} \text{ izotóp okozza.}$$