

# 1 Instrukcja wykonania sprawozdania z ćwiczenia femto

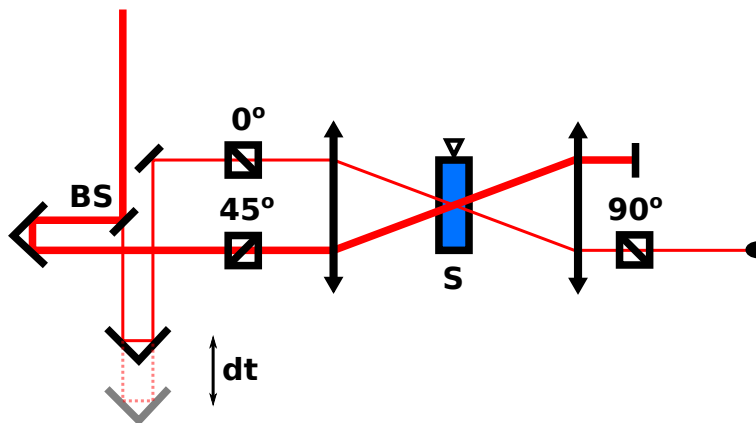
Dane zebrane są w 4 plikach:

- OKE\_CCl<sub>4</sub> – w kolejnych kolumnach zawiera sygnały kerrowskie CCl<sub>4</sub> dla temperatur -5, 15, 35 i 55 °C,
- OKE\_chloroform – w kolejnych kolumnach zawiera sygnały kerrowskie chloroformu dla temperatur -5, 15, 35, 55 i 70 °C,
- Raman\_CCl<sub>4</sub> – w kolejnych kolumnach zawiera widma Ramanowskie CCl<sub>4</sub> dla polaryzacji równoległej i prostopadłej,
- Raman\_chloroform – w kolejnych kolumnach zawiera widma Ramanowskie chloroformu dla polaryzacji równoległej i prostopadłej.

## 1.1 Opis eksperymentu

- Opisać pokrótce co mierzymy w eksperymencie kerrowskim.
- Opisać jak działa układ kerrowski (w najprostszej postaci).

**Uwaga:** Dla ułatwienia zamieszczam poniżej schemat układu:



## 1.2 Identyfikacja składowych sygnału kerrowskiego CCl<sub>4</sub>

**Rys. 1:** Wykreślić sygnał kerrowski CCl<sub>4</sub> dla temperatury 15 °C w zakresie opóźnień od -1000 fs do 5000 fs.

**Pyt. 1:** Skąd pochodzi wysoki pik w okolicy opóźnienia 0 fs i występujące po nim modulacje sygnału?

- Rys. 2:** Wyznaczyć i wykreślić transformatę Fouriera dla wspomnianego wyżej sygnału  $\text{CCl}_4$ . Przed przystąpieniem do tej operacji należy usunąć dane dla opóźnień mniejszych niż 100 fs. W uzyskanym widmie należy przeliczyć jednostki na  $\text{cm}^{-1}$  i wykres zaprezentować w zakresie 0 - 1000  $\text{cm}^{-1}$ .
- Rys. 3:** Wykreślić na wspólnym wykresie widma ramanowskie dla polaryzacji równoległej i prostopadłej dla  $\text{CCl}_4$  w zakresie 0 - 1000  $\text{cm}^{-1}$ .
- Rys. 4:** Wykreślić widmo ramanowskie uzyskane z obliczeń kwantowo-mechanicznych dla  $\text{CCl}_4$  w zakresie 0 - 1000  $\text{cm}^{-1}$ .
- Rys. 5:** Przedstawić grafiki prezentujące ruchy atomów w poszczególnych drganiach normalnych cząsteczki  $\text{CCl}_4$ .
- Pyt. 2:** Zebrać w tabeli drgania normalne cząsteczki  $\text{CCl}_4$ , podając w kolejnych kolumnach ich symetrie, stopień degeneracji oraz częstości (w  $\text{cm}^{-1}$ ), przy jakich są obserwowane w widmie Ramana teoretycznym (z podaniem stopnia depolaryzacji (P)), doświadczalnym (osobno dla polaryzacji równoległej i prostopadłej) oraz dla widma uzyskanego na podstawie sygnału kerrowskiego  $\text{CCl}_4$ .
- Pyt. 3:** Czy względne amplitudy składowych widmowych sygnału Kerrowskiego są zgodne (w przybliżeniu) z widmem Ramana uzyskanym dla polaryzacji równoległej, czy prostopadłej i dlaczego?
- Pyt. 4:** Ile drgań normalnych posiada cząsteczka  $\text{CCl}_4$  i czy są one wszystkie widoczne w widmie uzyskanym z obliczeń kwantowo-mechanicznych?
- Pyt. 5:** Dlaczego jedna ze składowych w widmie Ramana wykazuje znaczące różnice amplitudy dla obu polaryzacji?

**Uwaga:** Dla widma uzyskanego z sygnału kerrowskiego proszę się nie przejmować wkładem poniżej 150  $\text{cm}^{-1}$ . W tym obszarze występują składowe międzymolekularne, które nie są prawidłowo odtwarzane przez zastosowaną tutaj uproszczoną procedurę uzyskania widma. **Uwaga:** Przy odpowiadaniu na powyższe pytania może być przydatna poniższa strona:  
<http://fy.chalmers.se/OLDUSERS/brodin/MolecularMotions/CCl4modes.html>

### 1.3 Porównanie sygnału kerrowskiego $\text{CCl}_4$ i chloroformu

- Rys. 6:** Wykreślić na wspólnym wykresie sygnały  $\text{CCl}_4$  i chloroformu dla temperatury 15 °C, w zakresie opóźnień od -1000 fs do 5000 fs (skala liniowa na obu osiach).
- Rys. 7:** Wykreślić na sąsiednich wykresach sygnały  $\text{CCl}_4$  i chloroformu dla temperatury 15 °C, w pełnym zakresie opóźnień ze skalą logarytmiczną na osi Y (zakres od  $10^{-4}$  do 1).

- Pyt. 6:** Jaka nowa składowa pojawiła się w sygnale chloroformu i dlaczego występuje ona dla chloroformu, a dla  $\text{CCl}_4$  nie?
- Rys. 8:** Wyznaczyć i wykreślić transformatę Fouriera dla sygnałów kerrowskich  $\text{CCl}_4$  i chloroformu. Przed przystąpieniem do tej operacji należy usunąć dane dla opóźnień mniejszych niż 100 fs. W uzyskanych widmach należy przeliczyć jednostki na  $\text{cm}^{-1}$  i wykres zaprezentować w zakresie 100-1000  $\text{cm}^{-1}$ .
- Pyt. 7:** Co jest przyczyną obserwowanych zmian częstości przy przejściu od  $\text{CCl}_4$  do  $\text{CHCl}_3$ ?
- Pyt. 8:** Dlaczego oscylacje w sygnale  $\text{CCl}_4$  wykazują bardziej złożoną strukturę niż w sygnale  $\text{CHCl}_3$ ?
- Rys. 9:** Wykreślić na wspólnym wykresie widma ramanowskie dla polaryzacji równoległej i prostopadłej dla chloroformu w zakresie 0-3500  $\text{cm}^{-1}$ .
- Rys. 10:** Wykreślić widmo ramanowskie uzyskane z obliczeń kwantowo-mechanicznych dla  $\text{CHCl}_3$  w zakresie 0 - 3500  $\text{cm}^{-1}$ .
- Rys. 11:** Przedstawić grafiki prezentujące ruchy atomów w poszczególnych drganiach normalnych cząsteczki  $\text{CHCl}_3$ .
- Pyt. 9:** Zebrać w tabeli drgania normalne cząsteczki  $\text{CHCl}_3$ , podając w kolejnych kolumnach ich symetrie, stopień degeneracji oraz częstości (w  $\text{cm}^{-1}$ ), przy jakich są obserwowane w widmie Ramana teoretycznym (z podaniem stopnia depolaryzacji (P)), doświadczalnym (osobno dla polaryzacji równoległej i prostopadłej) oraz dla widma uzyskanego na podstawie sygnału kerrowskiego  $\text{CHCl}_3$ .
- Pyt. 10:** Czy względne amplitudy składowych widmowych sygnału kerrowskiego są zgodne (w przybliżeniu) z widmem Ramana uzyskanym dla polaryzacji równoległej, czy prostopadłej?
- Pyt. 11:** Ile drgań normalnych posiada cząsteczka  $\text{CCl}_4$  i czy są one wszystkie widoczne w widmie uzyskanym z obliczeń kwantowo-mechanicznych?
- Rys. 12:** Wykreślić na wspólnym wykresie doświadczalne widma ramanowskie dla polaryzacji równoległej dla chloroformu i  $\text{CCl}_4$  w zakresie 0-3500  $\text{cm}^{-1}$ .
- Pyt. 12:** Jakie drganie odpowiada pikowi powyżej 3000  $\text{cm}^{-1}$  widocznemu w widmie Ramana chloroformu i dlaczego nie możemy go zaobserwować w widmie uzyskanym z sygnału Kerrowskiego?
- Uwaga:** W ostatnim punkcie wystarczy się zastanowić nad różnicą w budowie chloroformu i  $\text{CCl}_4$  oraz przyjrzeć się animacjom na poniższej stronie:  
<http://fy.chalmers.se/OLDUSERS/brodin/MolecularMotions/CCl4modes.html>

## 1.4 Analiza wpływu temperatury na sygnały Kerrowskie

- Rys. 13:** Wykreślić na wspólnym wykresie sygnały kerrowskie  $\text{CCl}_4$  dla wszystkich rozważanych temperatur w zakresie opóźnień od -100 fs do 5000 fs (skala liniowa na obu osiach). Skalę na osi Y dopasować tak aby odpowiadała amplitudzie oscylacji (pik w okolicy 0 zostanie przycięty).
- Rys. 14:** Wykreślić na wspólnym wykresie sygnały kerrowskie chloroformu dla wszystkich rozważanych temperatur w pełnym zakresie opóźnień ze skalą logarytmiczną na osi Y (zakres od  $10^{-4}$  do 1).
- Pyt. 13:** Jak zmienia się czas życia koherentnych (zsynchronizowanych w fazie) oscylacji w sygnale  $\text{CCl}_4$  oraz czas reorientacji molekuł dla chloroformu przy zmianie temperatury. Proszę podać przyczyny wspomnianych zmian.
- Rys. 15:** Wyznaczyć i wykreślić na wspólnym wykresie znormalizowane transformaty Fouriera dla wspomnianych wyżej sygnałów  $\text{CCl}_4$ . Przed przystąpieniem do tej operacji należy usunąć dane dla opóźnień mniejszych niż 100 fs. W uzyskanym widmie należy przeliczyć jednostki na  $\text{cm}^{-1}$  i wykres zaprezentować w zakresie 0-1000  $\text{cm}^{-1}$ . Normalizację wykonać przez przeskalowanie widm w taki sposób, żeby amplituda pików w okolicy 315  $\text{cm}^{-1}$  była równa 1.
- Pyt. 14:** Czas życia drgania w sygnale jest odwrotnie proporcjonalny do szerokości pików w widmie. Jak zmieniają się szerokości pików pod wpływem temperatury. Czy uzyskany wynik jest zgodny ze wspomnianą zależnością czasu życia i szerokości pików?