

FYZIKÁLNÍ PRAKTIKUM

Fyzikální praktikum 3

Zpracoval: Artem Gorodilov

Naměřeno: 6. května 2024

Obor: Astrofyzika

Skupina: Po 14:00

Testováno:

Úloha č. F: Optická emisní spektra atomů a molekul

1. Zadání

- Identifikovat spektrální čáry emitované parami materiálu elektrod v obloukovém výboji a určit jejich intenzitu.

Ze sklonu pyrometrické přímky určit teplotu oblouku.

- Uřít z naměřeného molekulového spektra radikálu OH rotační teplotu.

2. Teorie

2.1. Spektrální čáry

Spektrální čáry jsou způsobeny přechody elektronů mezi energetickými hladinami atomu nebo molekuly. Energie přechodu je rovna rozdílu energií hladin a odpovídá energii fotonu emitovaného nebo absorbovaného při přechodu. Spektrální čáry jsou charakteristické pro každý prvek a slouží k identifikaci prvků ve vzorcích.

Relativní intenzita spektrálních čar je dána vztahem:

$$I_{mn} \sim \frac{A_{mn}g_m}{\lambda_m} \cdot \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) \quad (1)$$

kde A_{mn} je pravděpodobnost přechodu s m-té na n-tou hladinu, g_m je statistická váha horního energetického stavu, λ_m je vlnová délka emitovaného fotonu, E_m je excitační energie m-té hladiny, k je Boltzmannova konstanta a T je teplota.

Po zalogování vztahu (1) dostaneme:

$$\ln\left(\frac{I_{mn}\lambda_{mn}}{A_{mn}g_m}\right) \sim \left(-\frac{E_m}{kT}\right) \quad (2)$$

Závislost intenzity spektrální čáry na teplotě je tedy lineární (tzv. pyrometrická přímka):

$$y = \ln\left(\frac{I_{mn}\lambda_{mn}}{A_{mn}g_m}\right) = f(E_m) \quad (3)$$

2.2. Molekulové spektrum

Molekulové spektrum je dáno kvantovými čísly N , J a S , které popisují rotaci a vibraci molekuly. Intenzita rotační čáry je dána vztahem:

$$\ln\left(\frac{I_{n''v''J''}}{\tilde{\nu}^4 S_{J''J''}}\right) = -\frac{B_{v''}hc}{kT}N'(N'+1) + const \quad (4)$$

kde $I_{n''v''J''}$ je intenzita spektrální čáry, $\tilde{\nu}$ je vlnocet, $S_{J''J''}$ je Hönl-Londonův intenzitní faktor, $B_{v''}$ je rotační konstanta, N' je rotační kvantové číslo, h je Planckova konstanta a c je rychlost světla.

3. Měření

3.1. Spektrá železa

Pomocí programu *Span* [1] jsme určili a zkalibrovali spektrální čáry spektra železa, které jsme dostali, a změřili intenzity těchto čar. Data jsou uvedena v tabulce (1). Spektra jsou znázorněna v grafu (1).

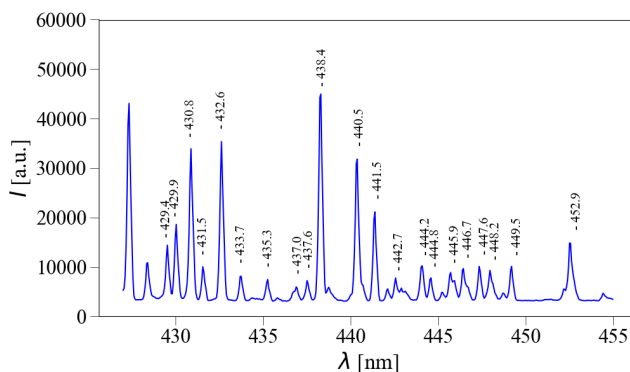


Figure (1) Spektrá železa.

Pomocí tohoto programu jsme také provedli pyrometrickou přímku a určili tak teplotu materiálu:

$$T_{Fe,span} = (6371 \pm 934) \text{ K}$$

Z tabulkových údajů jsme získali hodnoty A a E , poté jsme určili teplotu vynesáním pyrometrické přímky podle vzorce (3). Výsledky jsou znázorněny v grafu (2).

$$T_{Fe} = (5600 \pm 400) \text{ K}$$

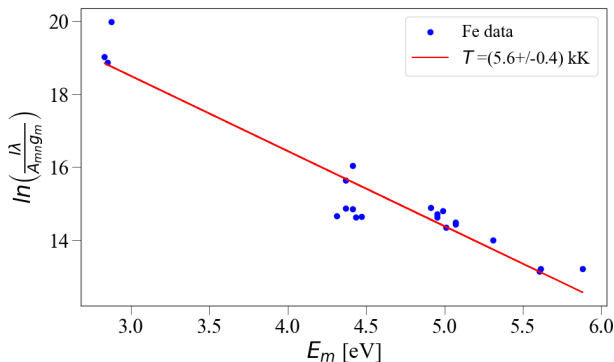


Figure (2) Pyrometrická přímka pro železo.

3.2. Molekulové spektrum radikálu OH

Pomocí programu *Span* jsme určili a zkalibrovali rotační čáry molekulového spektra radikálu OH, které jsme dostali, a změřili intenzity těchto čar. Data jsou uvedena v tabulce (2). Spektra jsou znázorněna v grafu (3).

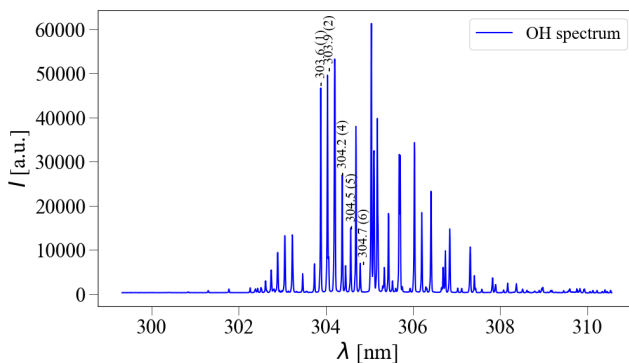


Figure (3) Rotční spektra radikálu OH. Rotční čáry jsou označeny čísly.

Pomocí tohoto programu jsme také provedli pyrometrickou přímku a určili tak teplotu materiálu:

$$T_{OH,span} = (302 \pm 11) \text{ K}$$

Z tabulkových údajů jsme získali hodnoty $S_{J',J''}$ a J' , poté jsme určili teplotu vynesáním

pyrometrické přímky podle vzorce (4). Výsledky jsou znázorněny v grafu (4):

$$T_{OH} = (269 \pm 11) \text{ K}$$

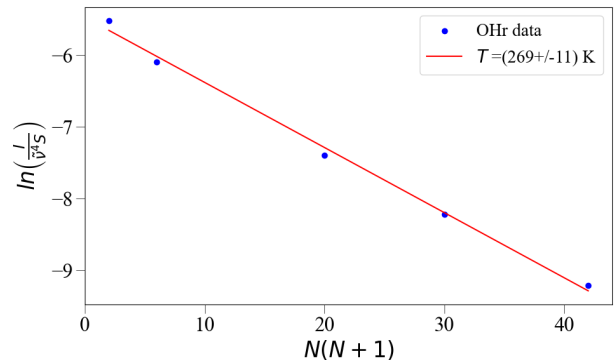


Figure (4) Pyrometrická přímka pro radikál OH.

K výpočtu veličin a jejich nejistot byla použita knihovna *Uncertainties* pro Python [2]. Chyby byly rozšířeny o Studentův koeficient (2-Tail Confidence Level) s ohledem na stupně volnosti pro každou hodnotu, pro interval spolehlivosti 68.27%.

4. Závěr

Byly identifikovány spektrální čáry emitované parami materiálu elektrod v obloukovém výboji a určeny jejich intenzity. Ze sklonu pyrometrické přímky pro spektrum železa byla určena teplota oblouku: $T_{Fe} = (5600 \pm 400) \text{ K}$ a pomocí programu *Span* byla určena teplota: $T_{Fe,span} = (6371 \pm 934) \text{ K}$.

Byla určena rotační teplota radikálu OH: $T_{OH} = (269 \pm 11) \text{ K}$ a pomocí programu *Span* byla určena teplota: $T_{OH,span} = (302 \pm 11) \text{ K}$.

Získané teploty lze interpretovat různě v závislosti na experimentálních podmínkách. Teplota T získaná z pyrometrické čáry z emisního (rotačního) atomového spektra je obecně emisní nebo excitační teplota [3]. Může zastupovat skutečnou kinetickou teplotu [4], pokud je systém v LTE (Lokální Termodynamická Rovnováha), ale za podmínek mimo LTE slouží jako efektivní teplota T_{eff} [5] udávající rozložení energie mezi emitujícími druhy.

Rozdíl mezi T_{Fe} , $T_{Fe,span}$ a T_{OH} , $T_{OH,span}$ v obou případech je způsoben kalibrací spektrálních čar a použitím různých spektrálních konsant.

Odkazy

- [1] Span, Dostupné online: <https://www.physics.muni.cz/~zdenek/span/>
- [2] Uncertainties, Dostupné online: <https://pypi.org/project/uncertainties>
- [3] M. P. Polek, M. C. Phillips, F. N. Beg, S. S. Harilal; Comparison of excitation temperature of a laser-produced plasma by combining emission and absorption spectroscopy. AIP Advances 1 February 2024; 14 (2): 025043. doi: <https://doi.org/10.1063/5.0190522>
- [4] A. Yanguas-Gil, J. Cotrino, A. R. González-Elipe; Measuring the electron temperature by optical emission spectroscopy in two temperature plasmas at atmospheric pressure: A critical approach. J. Appl. Phys. 1 February 2006; 99 (3): 033104. doi: <https://doi.org/10.1063/1.2170416>
- [5] S. L. Siddanathi, L. G. Westerberg, H. O. Åkerstedt, H. Wiinikka, A. Sepman; Computational modeling and temperature measurements using emission spectroscopy on a non-transferred plasma torch. AIP Advances 1 February 2023; 13 (2): 025019. doi: <https://doi.org/10.1063/5.0129653>

5. Appendix

5.1. Tabulka naměřených hodnot pro spektrální čáry železa

| I [a.u.] | λ [nm] | E_m [eV] | $A_{mn}g_m$ [10^8] | $\ln\left(\frac{I_{mn}\lambda_{mn}}{A_{mn}g_m}\right)$ |
|------------|----------------|------------|------------------------|--|
| 10138.69 | 429.41 | 4.37 | 0.71 | 15.63 |
| 14427.92 | 429.92 | 5.31 | 5.2 | 13.99 |
| 30404.4 | 430.79 | 4.43 | 5.9 | 14.61 |
| 6714.0 | 431.51 | 5.07 | 1.5 | 14.47 |
| 32159.24 | 432.58 | 4.47 | 6.1 | 14.64 |
| 4924.69 | 433.7 | 4.42 | 0.23 | 16.04 |
| 4252.45 | 435.27 | 5.07 | 1.0 | 14.43 |
| 2738.33 | 436.98 | 5.88 | 2.2 | 13.21 |
| 3912.5 | 437.59 | 2.83 | 0.01 | 19.02 |
| 40764.23 | 438.35 | 4.31 | 7.7 | 14.66 |
| 28674.5 | 440.48 | 4.37 | 4.4 | 14.87 |
| 17952.0 | 441.51 | 4.42 | 2.8 | 14.86 |
| 3492.0 | 442.73 | 2.85 | 0.01 | 18.87 |
| 6587.43 | 444.23 | 4.99 | 1.1 | 14.79 |
| 4162.91 | 444.77 | 5.01 | 1.1 | 14.34 |
| 5010.15 | 445.91 | 4.96 | 1.0 | 14.62 |
| 5966.56 | 446.66 | 5.61 | 5.3 | 13.13 |
| 6591.0 | 447.6 | 5.61 | 5.4 | 13.21 |
| 5679.6 | 448.22 | 2.88 | 0.01 | 19.99 |
| 6568.67 | 449.46 | 4.96 | 1.22 | 14.7 |
| 11621.39 | 452.86 | 4.91 | 1.8 | 14.89 |

5.2. Tabulka naměřených hodnot pro rotační čáry radikálu OH

| I [a.u.] | N' | λ [nm] | $S_{J'J''}$ | J' | $\ln\left(\frac{I_{N'v'J'}^{N''v''J''}}{\tilde{\nu}^4 S_{J'J''}}\right)$ |
|------------|------|----------------|-------------|------|--|
| 46224.51 | 1 | 307.84 | 0.56 | 3/2 | -5.52 |
| 49052.06 | 2 | 308.0 | 1.06 | 5/2 | -6.09 |
| 26258.67 | 4 | 308.33 | 2.1 | 9/2 | -7.4 |
| 14480.75 | 5 | 308.52 | 2.64 | 11/2 | -8.22 |
| 6434.58 | 6 | 308.73 | 3.16 | 13/2 | -9.21 |