

Kabinet výuky obecné fyziky, UK MFF

## Fyzikální praktikum



Úloha č. A20

Název úlohy: Fourierovská infračervená spektroskopie

Jméno: Michal Grňo

Obor: FOF

Datum měření: 4. 11. 2019

Datum odevzdání: 11. 11. 2019

Připomínky opravujícího:

	Možný počet bodů	Udělený počet bodů
Práce při měření	0-3	
Teoretická část	0-2	
Výsledky a zpracování měření	0-9	
Diskuse výsledků	0-4	
Závěr	0-1	
Použitá literatura	0-1	
<b>Celkem</b>	max. 20	

Posuzoval:

dne:

# 1 Pracovní úkoly

1. Proměřte rotačně-vibrační absorpční spektrum oxidu uhelnatého ve spektrální oblasti  $2000 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ . Polohy absorpčních pásů zpracujte graficky a lineární regresí určete parametry vystupující v modelu pružného rotátoru pro základní vibrační stav molekuly a první excitovaný vibrační stav. Z těchto parametrů určete vzdálenosti jader uhlíku a kyslíku v základním a prvním excitovaném vibračním stavu.
2. Spočítejte teplotní a tlakové rozšíření absorpčních pásů, určete rozdíl vibrační frekvence pro isotopomery  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  a  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ . Porovnejte tyto hodnoty s rozlišením použitého spektrálního přístroje.
3. Změřte spektrum bez vzorku, určete oblasti absorpce oxidu uhličitého a vodních par v optické dráze spektrometru. Interpretujte nejvýraznější pásy absorpce  $\text{CO}_2$ .
4. Proměřte spektra propustnosti polyetylénové a polypropylénové folie a interpretujte nejvýraznější pásy.
5. Proměřte spektra propustnosti a odrazivosti skleněné a safírové destičky. Diskutujte rozdíl mezi oběma vzorky.

# 2 Teoretická část

Infračervená spektroskopie je nástroj používaný k identifikaci molekul přítomných v látce podle módů jejich mechanických kmitů. Konkrétně Fourierovská infračervená spektroskopie detekuje změny ve spektru průchozího elektromagnetického záření způsobené interakcí s kmitající molekulou.

U jednoduchých molekul lze v jejich spektru pozorovat tři charakteristické oblasti – nízkofrekvenční<sup>1</sup> pás P odpovídající oblasti, kde se rotační energie a energie fotonu skládají, střední pás Q odpovídající vibračním přechodům beze změny rotačního stavu (a kvantového čísla  $J$ ), vysokofrekvenční<sup>2</sup> oblast R, kde energie fotonů přispívá jak vibračním, tak rotačním stavům. [1]

Z vlnočtu pásů, který naměříme pomocí spektroskopie, lze snadno vypočítat jejich energii:

$$E = hc\tilde{\nu}, \quad (1)$$

kde  $h$  je Planckova konstanta,  $c$  rychlost světla a  $\tilde{\nu} = \lambda^{-1}$  vlnové číslo. U dvouatomové molekuly pro energii odpovídající pásům  $P$  a  $R$  při stavu  $J$  v základním stavu platí vztah:

$$\frac{R_J - P_J}{2J + 1} \frac{1}{h} = (2B_1 - 3D_1) - D_1 (2J + 1)^2, \quad (2)$$

a pro molekuly v excitovaném stavu:

$$\frac{R_{J-1} - P_{J+1}}{2J + 1} \frac{1}{h} = (2B_0 - 3D_0) - D_0 (2J + 1)^2, \quad (3)$$

kde  $B_{0,1}$  a  $D_{0,1}$  jsou konstanty charakteristické pro danou molekulu [1]. Pokud známe závislosti  $R_J(J)$  a  $P_J(J)$ , tyto konstanty lze určit lineární regresí z rovnic (2) a (3).

# 3 Výsledky měření

## 3.1 CO

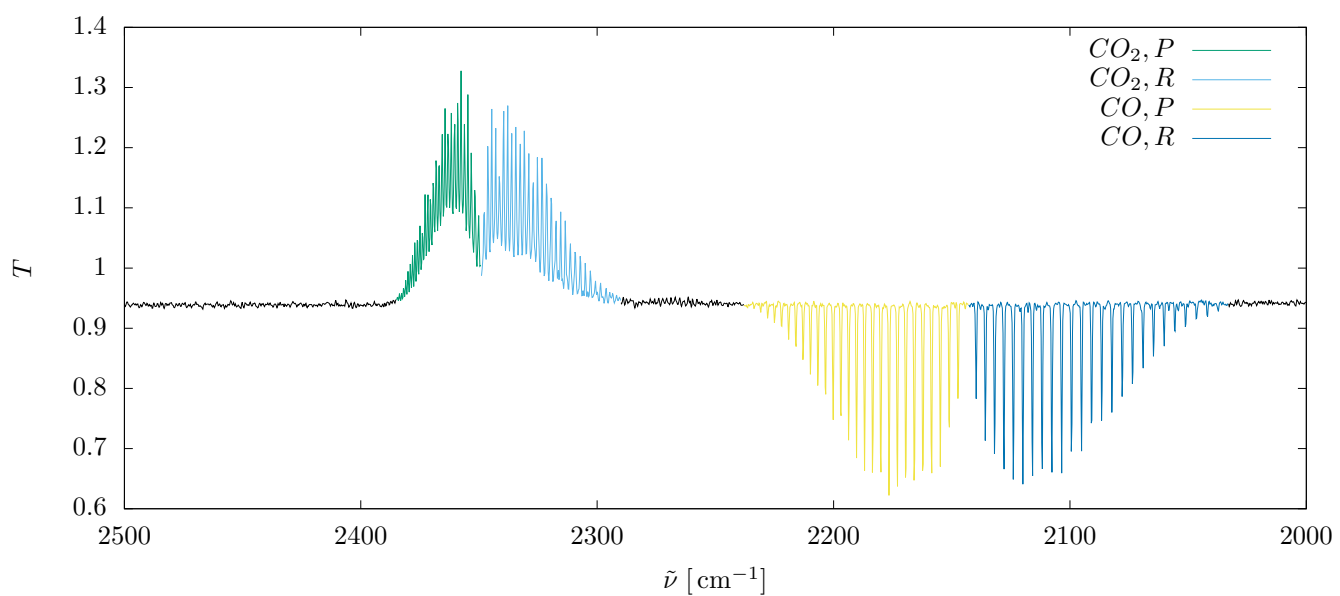
Jako první vzorek jsme měřili transmitanci kyvety se stěnami z  $\text{CaF}_2$  obsahující CO pod tlakem 7 mbar. Měření bylo předem kalibrováno na transmitanci vzduchu a probíhalo na rozsahu  $2000$  až  $2500 \text{ cm}^{-1}$  při rozlišení  $0,35 \text{ cm}^{-1}$ . Protože se mezi kalibrací a měřením změnil podíl  $\text{CO}_2$  v měřeném prostoru, bylo kromě spektra CO viditelné i spektrum  $\text{CO}_2$ . V obou případech byla jasně rozlišitelná pásma P a R, pásmo Q nebylo pozorováno. Zatímco v případě CO jsou jasně rozlišitelná absorpční maxima odpovídající pásům  $P_J$  a  $R_J$  pro celočíselné hodnoty  $J$ , spektrum  $\text{CO}_2$  vykazuje určitou míru překryvu a jeho maxima nejsou jasně oddělená. Naměřené spektrum bylo zaneseno do grafu na obrázku č. 1.

Naměřená absorpční maxima jsme potom od středu očíslovali a jejich vlnočty jsme převedli na energii podle vzorce (1). Pás P začíná od jedničky  $P_1 = 4.288 \cdot 10^{-20} \text{ J}$  a pokračuje k vyšším hodnotám (v grafu doleva), pás R začíná od nuly  $R_0 = 4.280 \cdot 10^{-20} \text{ J}$  a pokračuje k nižším hodnotám (v grafu doprava). Takto vypočtené a očíslované energie  $P_J$  a  $R_J$  jsme v závislosti na jejich kvantovém čísle  $J$  vynesli do grafu na obrázku č. 2 nahoře.

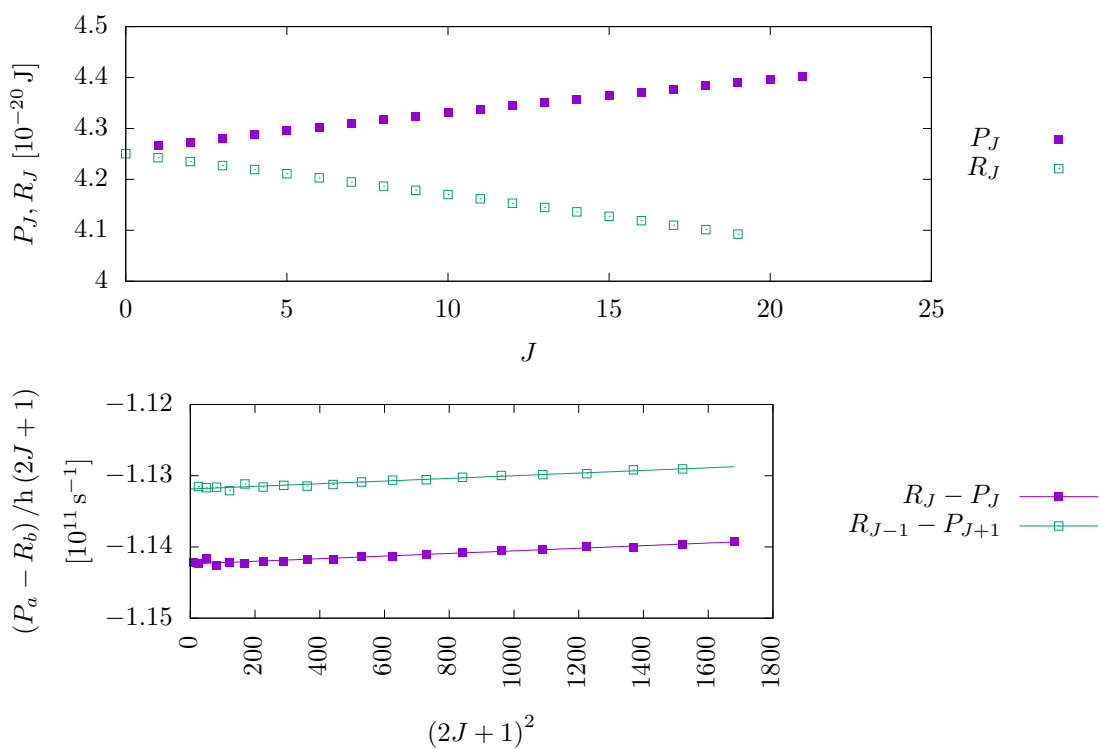
Následně jsme podle vzorců (2) a (3) vynesli závislost  $(P_a - R_b)/h (2J + 1)$  na  $(2J + 1)^2$  do grafu na obrázku č. 2 dole. Pomocí lineární regrese metodou nejmenších čtverců jsme našli konstanty  $B_0, B_1, D_0, D_1$ .

<sup>1</sup>Nízkofrekvenční pás P bude v nižších hodnotách  $f \propto \tilde{\nu}$ , v grafu to ovšem znamená, že bude vpravo...

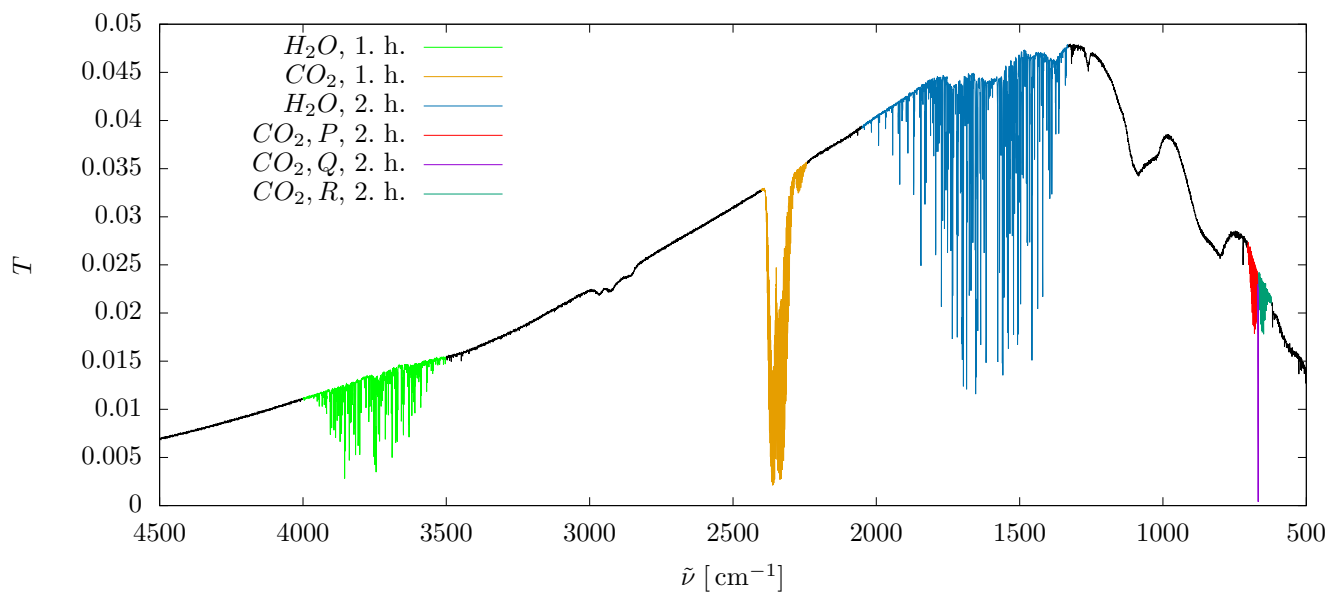
<sup>2</sup>...pás R bude naopak mít vysoké hodnoty  $\tilde{\nu}$  a v grafu bude vlevo.



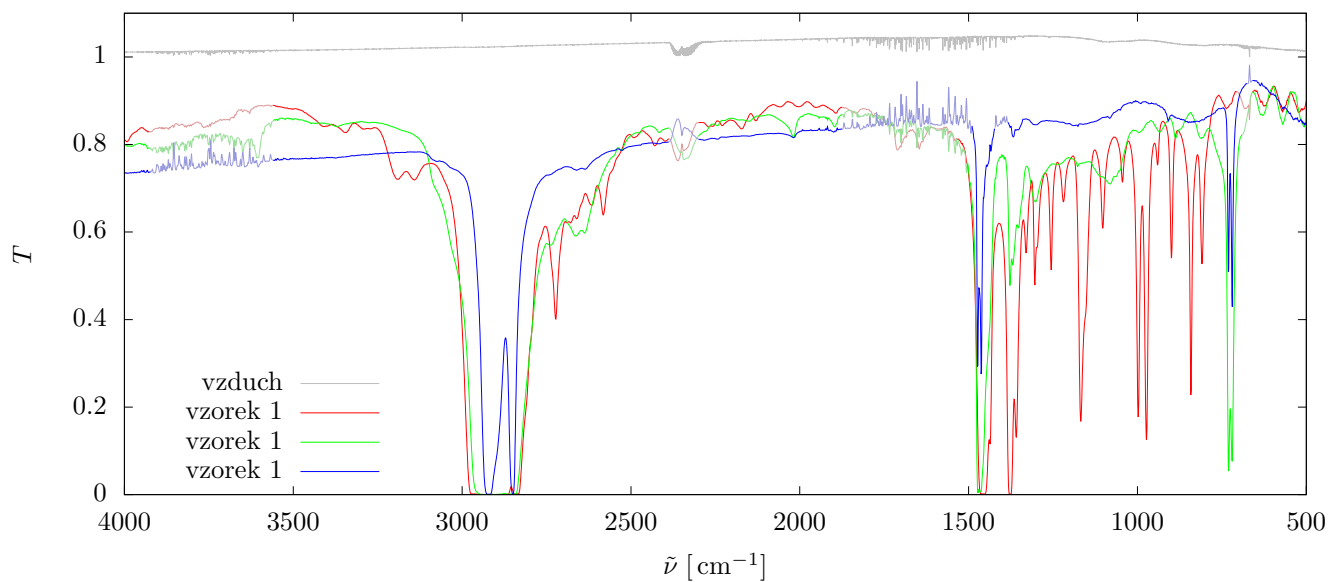
Obrázek 1: Měření transmittance CO.



Obrázek 2: Energie pásů P a R v CO.



Obrázek 3: Měření transmittance vzduchu



Obrázek 4: Měření transmittance polymerových folií. Rysy způsobené fluktuací složení vzduchu jsou vykresleny světlejší a méně sytou barvou.

<b>A</b>	<b>hodnota</b>	<b>směr. odch.</b>
$2B_1 - 3D_1$ [ $10^{11} \text{ s}^{-1}$ ]	-1.1424	0.0001
$2B_1 - 3D_1$ [ $10^{11} \text{ s}^{-1}$ ]	-1.1319	0.0001
$D_1$ [ $10^5 \text{ s}^{-1}$ ]	-1.83	0.10
$D_0$ [ $10^5 \text{ s}^{-1}$ ]	-1.86	0.10
$B_1$	-57119281923	3904107
$B_0$	-56593656850	3865002

Tabulka 1: Konstanty charakteristické pro molekulu CO získané regresí

## 4 Diskuse

Bylo to špatně protože (??)

## 5 Závěr

Bylo to hezké. assadfasd

## 6 Literatura

- [1] P. Hlídaek, *Infračervená spektroskopie*. září 2017. Dostupné z: [https://physics.mff.cuni.cz/vyuka/zfp/\\_media/zadani/texty/txt\\_420.pdf](https://physics.mff.cuni.cz/vyuka/zfp/_media/zadani/texty/txt_420.pdf).