

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: 17. 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 polyetylenové a polypropylenové folie a interpretujte nejvýraznější pásy.
5. Proměřte spektra propustnosti a odrazivosti skleněné a safírové destičky. Diskutujte rozdíl mezi oběma vzorky.

## 2 Teoretická část

### 2.1 Úvod

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]

### 2.2 Energie pásů

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 excitovaném 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 základním 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  $B_0, B_1, D_0, D_1$  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).

### 2.3 Vzdálenost jader

Z [1] víme, že pro dvouatomové molekuly platí  $I = \mu r^2$  a  $B = h/(8\pi^2 I)$ , kde  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  je redukovaná hmotnost molekuly,  $I$  je moment setrvačnosti molekuly,  $r$  je vzdálenost jader atomů a  $m_1, m_2$  jsou hmotnosti jejich jader. Z těchto rovnic si můžeme vyjádřit  $r$  jako funkci  $m_1, m_2$  a  $B$ :

$$r = \sqrt{\frac{1}{B} \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \frac{h}{8\pi^2}}. \quad (4)$$

Předpokládáme, že hmotnosti atomů je možné z tabulek vyčíst s libovolnou přesností, proto je chyba  $r$  určena pouze chybou  $B$ :

$$\Delta r = \left| \frac{\partial r}{\partial B} \Delta B \right| = r \frac{1}{2} \frac{\Delta B}{B}. \quad (5)$$

Protože  $B$  známe pro základní i excitovaný stav z rovnic (2) a (3), můžeme použít rovnici (4) pro výpočet vzdálenosti jader atomu při základním a excitovaném stavu.

<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.

## 2.4 Rozlišení (teplotní a tlakové)

Je-li elektronový systém molekul v základním stavu (což je typické pro CO a CO<sub>2</sub> za obvyklých podmínek), přirozené šířky pásů jsou velice malé a pozorovaná šířka je téměř výhradně způsobená pohybem molekuly a jejími srážkami s okolními molekulami. [1]

První ze zmíněných jevů – rozšíření pásu vlivem pohybu molekuly – je způsoben Dopplerovým posunem procházejícího paprsku vzhledem k letící molekule a závisí výhradně na teplotě vzorku. Rozšířený pás má Lorentzovský profil a pro jeho FWHM<sup>3</sup> platí vztah:

$$\delta\tilde{\nu}_T = \frac{\tilde{\nu}_0}{c} \sqrt{\frac{8kT}{m}} \ln 2, \quad (6)$$

kde  $\tilde{\nu}_0$  je vlnčet maxima,  $c$  rychlost světla,  $k$  Boltzmannova konstanta,  $m$  hmotnost molekuly a  $T$  je teplota vzorku. [1]

Druhým jevem, který má vliv na rozšíření pásu, jsou srážky s okolními molekulami. Toto rozšíření je pro čistý jednomolekulový plyn závislé výhradně na tlaku, má opět Lorentzovský profil a pro jeho FWHM platí vztah<sup>4</sup>:

$$\delta\tilde{\nu}_p = 2\gamma p, \quad (7)$$

kde  $p$  je tlak plynu a  $\gamma$  je pološířka rozšíření (HWHM) na jednotku tlaku charakteristická pro daný plyn – tu je možné vyčíst v tabulkách.

Protože konvolucí dvou Lorentzových funkcí o pološířkách  $\ell_1$  a  $\ell_2$  dostaneme Lorentzovu funkci o pološířce  $\ell = \ell_1 + \ell_2$  [2], bude pro šířku pásu platit

$$\delta\tilde{\nu} = \delta\tilde{\nu}_T + \delta\tilde{\nu}_p. \quad (8)$$

V experimentu chceme určit, zda je možné odlišit od sebe dva izotopology<sup>5</sup> <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O a <sup>13</sup>C<sup>16</sup>O. Z [1] víme, že pro úhlovou frekvenci platí  $\omega = \sqrt{f/\mu}$ , tedy  $\tilde{\nu} \propto \mu^{-1/2}$ . Známe-li tedy vlnčet nějakého pásu  $\tilde{\nu}_A$  pro první z izomerů a redukované hmotnosti obou izomerů  $\mu_A, \mu_B$ , můžeme snadno spočítat vlnčet téhož pásu pro druhý z izomerů  $\tilde{\nu}_B = \tilde{\nu}_A \sqrt{\mu_A/\mu_B}$ . Rozdíl mezi vlnčty izomerů tedy bude:

$$\Delta\tilde{\nu} = |\tilde{\nu}_A - \tilde{\nu}_B| = \tilde{\nu}_A \left| 1 - \sqrt{\frac{\mu_A}{\mu_B}} \right| \quad (9)$$

Pásky izomerů považujeme za od sebe rozlišitelné, pokud se vlnčty jejich maxim od sebe liší více než o  $\delta\tilde{\nu}$ , tedy  $\Delta\tilde{\nu} > \delta\tilde{\nu}$ . Po dosazení z rovnic (6) a (7) a drobné úpravě dostáváme nerovnost, která je naší podmínkou rozlišitelnosti izotopologů:

$$\left| 1 - \sqrt{\frac{\mu_A}{\mu_B}} \right| > \sqrt{\frac{8kT}{mc^2}} \ln 2 + \frac{2\gamma p}{\tilde{\nu}}. \quad (10)$$

## 2.5 Tabulkové hodnoty

Hmotnosti významných izotopů uhlíku a kyslíku jsme převzali z [3]:

izotop	$m$ [u]
<sup>12</sup> C	12.000000
<sup>13</sup> C	13.003355
<sup>16</sup> O	15.994915
<sup>17</sup> O	16.999132

Tabulka 1: Hmotnosti izotopů C a O

Z těchto je hned možné vypočítat redukované hmotnosti izotopologů oxidu uhelnatého:

izotopolog	$\mu$ [u]
<sup>12</sup> C <sup>16</sup> O	6.856209
<sup>13</sup> C <sup>16</sup> O	7.172413

Tabulka 2: Redukované hmotnosti izotopologů CO

Pro převod z atomových jednotek na jednotky SI platí následující vztah:

$$1 \text{ u} = 1.6605390666050 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (11)$$

<sup>3</sup>FWHM = plná šířka v polovině maxima

<sup>4</sup>Vztah buď vyčíst v tabulkách, nebo vyvodit z obecného vztahu 2.25 v [1] po dosazení odpovídajících hodnot, tedy  $T_{REF} = T$  a  $p_s = p$

<sup>5</sup>Izotopology jsou molekuly, které jsou totožné až na izotopové záměny.

## 2.6 Chyba nepřímého měření

**Pozn.:** Všude, kde není uvedeno jinak, využíváme toho, že jsou chyby malé a pro chybu nepřímého měření tedy platí:

$$f = f(x_1, x_2, \dots) \quad \Delta f = \sqrt{\sum_i \left( \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i \right)^2} \quad (12)$$

## 3 Výsledky měření

### 3.1 Oxid uhelnatý (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<sup>6</sup> 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 odstředou očíslovali a jejich vlnčet 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  $(P_a - R_b)/h$  na  $(2J+1)^2$  do grafu na obrázku č. 2 dole. Pomocí lineární regrese metodou nejmenších čtverců jsme našli konstanty  $B_0, B_1, D_0, D_1$ .

veličina & jednotky	hodnota
$2B_1 - 3D_1$ $[10^{11} \text{ s}^{-1}]$	$1.14238 \pm 0.00008$
$2B_0 - 3D_0$ $[10^{11} \text{ s}^{-1}]$	$1.15287 \pm 0.00012$
$D_1$ $[10^5 \text{ s}^{-1}]$	$1.83 \pm 0.10$
$D_0$ $[10^5 \text{ s}^{-1}]$	$1.82 \pm 0.17$
$B_1$ $[10^{10} \text{ s}^{-1}]$	$5.7119 \pm 0.0004$
$B_0$ $[10^{10} \text{ s}^{-1}]$	$5.7644 \pm 0.0006$

Tabulka 3: Konstanty charakteristické pro molekulu CO získané regresí. První čtyři řádky odpovídají přímo parametrům fitu dle rovnic (2) a (3), poslední dva řádky jsme dostali prostým vyjádřením  $B$ .

Poté jsme použili známé redukované hmotnosti z tabulky č. 2 a pomocí vzorce (4) jsme vypočetli vzdálenost jader v molekule CO. Protože v grafu na obrázku č. 1 nebyl pozorován žádný izotopolog, bez dalších informací nebylo jednoznačné, o který izotop uhlíku se jedná. Výpočet  $r$  jsme tudíž provedli pro  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ , i pro  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ . Protože je ale izotop  $^{12}\text{C}$  mnohem běžnější, velice pravděpodobně jsou správné hodnoty  $r_{12,0}$  a  $r_{12,1}$ .

vel.	$[10^{-10} \text{ m}]$
$r_{12,0}$	$1.13081 \pm 0.00006$
$r_{12,1}$	$1.13599 \pm 0.00004$
$r_{13,0}$	$1.10560 \pm 0.00006$
$r_{13,1}$	$1.11067 \pm 0.00004$

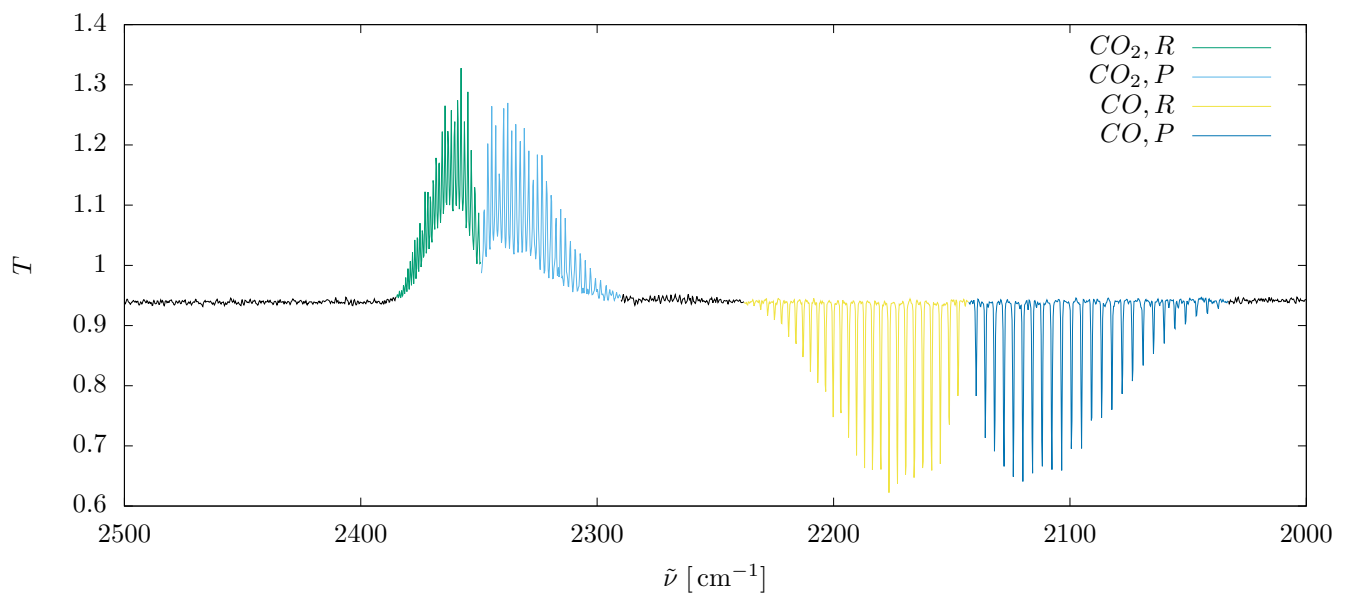
Tabulka 4: Vzdálenosti jader izotopologů CO v základním a excitovaném stavu.

Izotopology  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  a  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  jsme nepozorovali, bylo by tedy vhodné ověřit, zda jsou vůbec za našich podmínek rozlišitelné. Pásky CO jsme pozorovali mezi  $\tilde{\nu} = 2040$  a  $2230$ . Podle (9) vypočteme, že maxima izotopologů by od sebe měla být vzdálena:

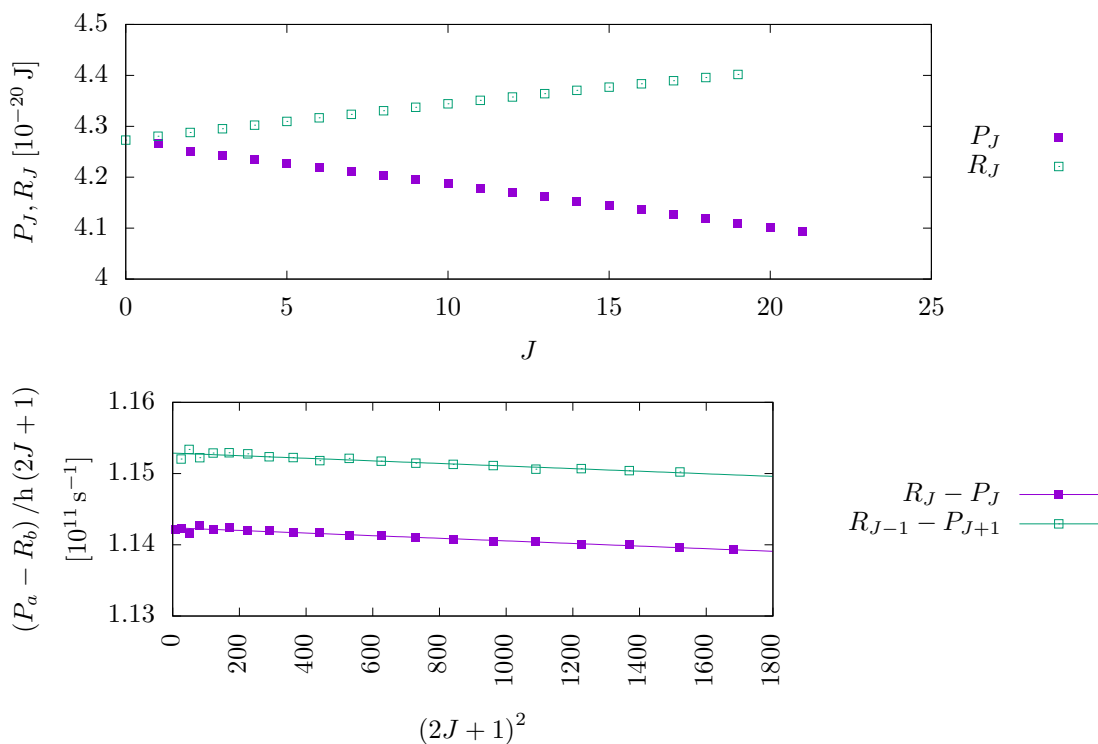
$$\Delta\tilde{\nu} \approx 2130 \text{ cm}^{-1} \left| 1 - \sqrt{\frac{\mu(^{12}\text{C}^{16}\text{O})}{\mu(^{13}\text{C}^{16}\text{O})}} \right| \approx 2130 \cdot 0.022 \text{ cm}^{-1} \approx 50 \text{ cm}^{-1}. \quad (13)$$

To je o několik řádů vyšší než rozlišení přístroje, které je  $0.35 \text{ cm}^{-1}$ . Rozlišení přístroje tedy pozorování izotopologů nebrání.

<sup>6</sup>Maxima absorpce, tj. minima naměřené intenzity.



Obrázek 1: Měření transmittance kyvety s oxidem uhelnatým (CO). Postupně vidíme (zleva) pásy R a P oxidu uhličitého (CO<sub>2</sub>), pásy R a P oxidu uhelnatého (CO). Pás Q pozorovatelný nebyl.



Obrázek 2: Energie pásů P a R v CO. V horním grafu jsou vyznačeny energie spektrálních čar CO (viz graf v obrázku č. 1) v závislosti na jejich kvantovém čísle  $J$ . V obou pásích roste  $J$  směrem od středu pozorovaného obrazce ven, v pásu P má první absorpční maximum  $J = 1$ , v pásu R má první maximum  $J = 0$ . Ve spodním grafu potom vidíme závislost z rovnic (2) a (3) proloženou přímkou.

Vypočteme ještě teplotní a tlakové „rozostření“. Podle vzorce (6) platí:

$$\delta\tilde{\nu}_T \approx (2130 \text{ cm}^{-1}) \sqrt{300 \text{ K}} \sqrt{\frac{8k}{m_{CO} c^2}} \ln 2 \approx 0.005 \text{ cm}^{-1}. \quad (14)$$

Podle vzorce (7), kde  $\gamma \approx 0.05 \text{ cm}^{-1}/\text{bar}$  [1] a  $p = 7 \text{ mbar}$  platí:

$$\delta\tilde{\nu}_p \approx 0.05 \cdot 0.007 \text{ cm}^{-1} \approx 4 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}. \quad (15)$$

Je tedy zřejmé, že  $\delta\tilde{\nu}$  je řádově menší než  $\Delta\tilde{\nu}$  a podmínka rozlišitelnosti izomerů (10) je splněna.

## 3.2 Vzduch a polymerové folie

Dále jsme měřili bez vzorku a kalibrace transmitanci vzduchu od  $\tilde{\nu} = 500$  do  $4500 \text{ cm}^{-1}$ . Naměřené spektrum je v grafu na obrázku č. 3. Zajímavé oblasti byly: P-R pásy  $\text{CO}_2$  na  $2400$ ; P-Q-R pásy  $\text{CO}_2$  na  $600$ ; husté lesy čar mezi  $3500$ – $4000$  a mezi  $1300$ – $2000$  patřící vodním parám. Chaotická povaha čar naznačuje, že molekuly vody vibrují mnohem složitěji – například kvůli častým interakcím s ostatními molekulami  $\text{H}_2\text{O}$  pomocí vodíkových můstků.

Poté jsme již s kalibrací měřili transmitanci tří různých polymerových folií na rozsahu  $\tilde{\nu} = 500$  až  $4000 \text{ cm}^{-1}$ , jejich spektra jsou v grafu na obrázku č. 4. V grafu jsou jasně vidět rysy způsobené proměnlivostí složení vzduchu – obě oblasti odpovídající vodním parám i obě oblasti odpovídající  $\text{CO}_2$  jsou pozorovatelné ve spektru folií. Všechny tři folie byly vyrobeny buďto z polyetylenu (PE), nebo z polypropylenu (PP), naším cílem je interpretovat významné rysy spekter jednotlivých vzorků a určit, který vzorek byl vyroben z jakého materiálu. Klíčová indície k rozlišení materiálů je, že PE je ztvořen dlouhými řetězci  $-\text{CH}_2-$ , zatímco PP má složitější řetězec  $-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-$ .

Prvním výrazným rysem je téměř úplná absorpce světla v oblasti  $2840$  až  $2970 \text{ cm}^{-1}$ , a to u všech tří vzorků. Zatímco vzorky 1 a 2 zablokovaly v této oblasti všechno světlo a lze u nich pozorovat pouze dlouhé plateau s  $T = 0$ , u vzorku 3 vidíme, že se ve skutečnosti jedná o dvě absorpční maxima: první  $\tilde{\nu} = 2920 \text{ cm}^{-1}$  odpovídá antisymetrickým valenčním kmitům „ $\nu_{\text{as}}$ “ skupiny  $-\text{CH}_2-$  a druhé  $\tilde{\nu} = 2850 \text{ cm}^{-1}$  odpovídá jejím symetrickým valenčním kmitům „ $\nu_{\text{s}}$ “ [1]. Skupina  $-\text{CH}_2-$  je společná polyetylenu i polypropylenu. PP má navíc skupinu  $-\text{CH}_3$ , jejíž valenční kmity by odpovídaly maximum na  $2960 \text{ cm}^{-1}$  a  $2870 \text{ cm}^{-1}$ . Vidíme, že vzorek 3 zřejmě taková maxima nemá, což je evidence pro to, že byl vyroben z PE. Druhé dva vzorky mají v této oblasti plateau, nemůžeme o nich tedy zatím říci nic.

Další oblastí, která stojí za zmínku, je maximum vzorku 1 na  $2723 \text{ cm}^{-1}$ . Toto maximum se za pomoci tabulek v [1] nepodařilo vysvětlit.

Následuje oblast  $1500$  až  $700 \text{ cm}^{-1}$ , kde je výskyt maxim hojný. Nejprve je zde oblast  $1475$  až  $1430$  – vzorky 1 a 2 tu opět mají plateau, vzorek 3 dvojici peaků  $1473 \text{ cm}^{-1}$  a  $1462 \text{ cm}^{-1}$ . Tyto jsou nejbližší tabulkovým maximum  $1470$  pro nůžkovou deformaci „ $\delta$ “ skupiny  $-\text{CH}_2-$  a  $1465$  pro asymetrickou deformaci „ $\delta_{\text{as}}$ “ skupiny  $-\text{CH}_3$  [1]. To by napovídalo, že vzorek 3 obsahuje i skupinu  $-\text{CH}_3$ , o vzorcích 1 a 2 stále nic říci nemůžeme.

Dále je zde maximum  $1377$ , které sdílí vzorek 1 a 2. Toto maximum nejlépe odpovídá tabulkovému maximu  $\tilde{\nu} = 1375 \text{ cm}^{-1}$  pro symetrické deformace „ $\delta_{\text{s}}$ “ skupiny  $-\text{CH}_3$ . To je evidence pro přítomnost  $-\text{CH}_3$  skupiny ve vzorcích 1 a 2 a její absenci ve vzorku 3. Maximum vzorku 1 je vysoké  $0.62$ , maximum vzorku 2 je vysoké  $0.30$ . To lze vysvětlit tak, že vzorek 1 obsahuje větší množství  $-\text{CH}_3$  skupin než vzorek 2.

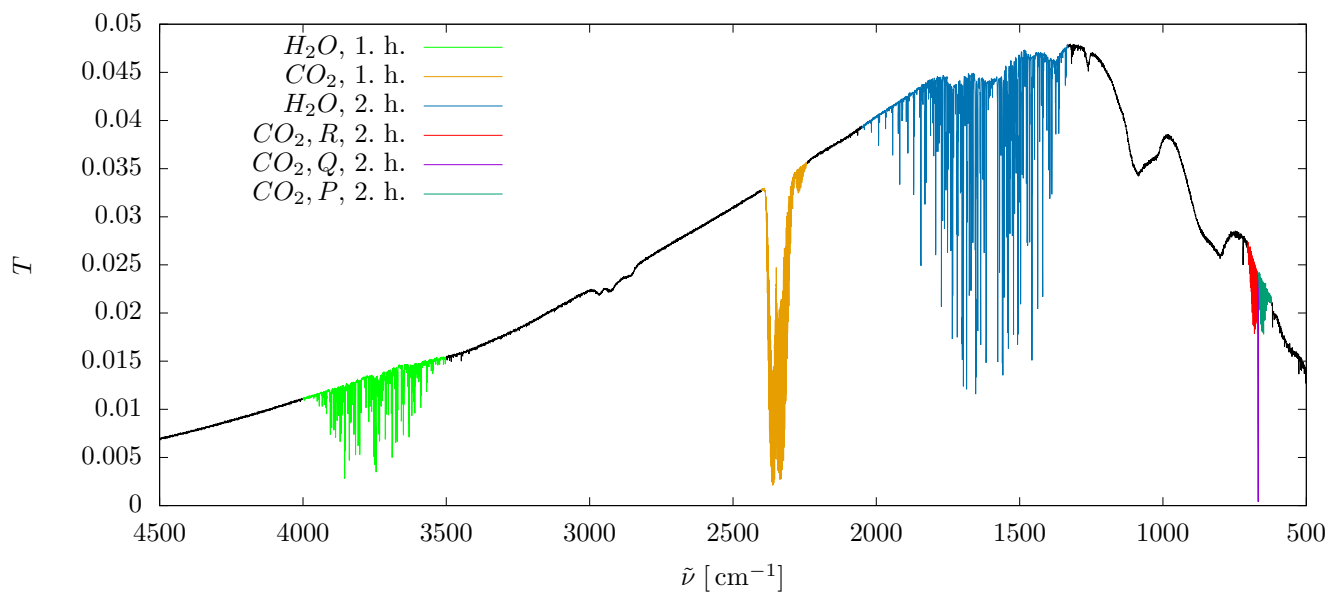
V oblasti  $1330$  až  $800 \text{ cm}^{-1}$  má vzorek 1 les maxim, nejvýraznější z nich jsou  $1168$ ,  $998$ ,  $973$  a  $841$ . Vzorek 3 zde má naopak téměř ploché spektrum. Vzorek 2 má v této oblasti spektrum „kopcovité“, se vzorkem 1 sdílí pouze jedno maximum  $\tilde{\nu} = 1303 \text{ cm}^{-1}$  (kroutivá deformace „ $\tau$ “ skupiny  $-\text{CH}_2-$  [1]), jinak se jeví nahodile. V tabulkách v [1] se nepodařilo najít vysvětlení tohoto hojného výskytu maxim, pravděpodobně je ale výsledkem komplexních interakcí mezi několika různými funkčními skupinami – tj. něco, co bychom čekali u PP a nečekali u PE.

Poslední dvojici maxim sdílí vzorky 2 a 3. Jeden peak se nachází na  $\tilde{\nu} = 730 \text{ cm}^{-1}$ , druhý na  $720 \text{ cm}^{-1}$ . Druhé maximum odpovídá kolébaté deformaci „ $\varrho$ “ skupiny  $-\text{CO}_2$ . Vzorek 1 má v této oblasti ploché spektrum.

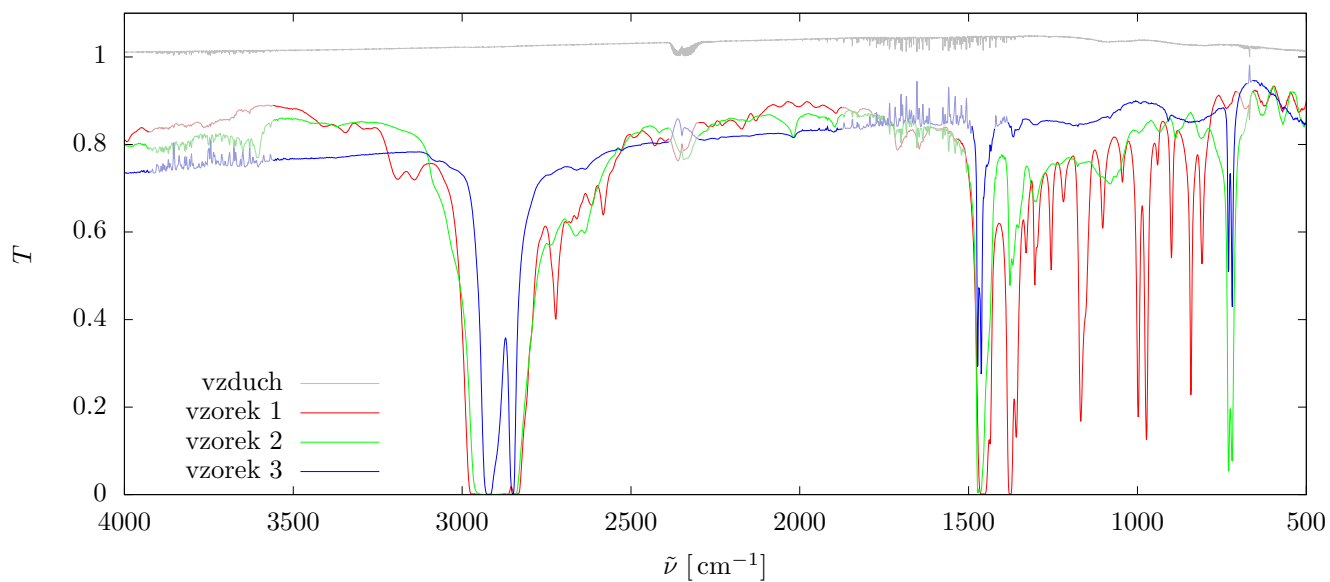
Shrneme-li nyní pozorované rysy, dospějeme k následujícímu závěru: vzorky 1 a 3 jsou si nejméně podobné, vzorek 2 sdílí některé rysy se vzorkem 1 a některé se vzorkem 3. Vzorek 1 splňuje nejvíce kritéria, která by měl splňovat PP (jmenovitě maximum na  $\tilde{\nu} = 1375 \text{ cm}^{-1}$ , les maxim mezi  $1330$  a  $800 \text{ cm}^{-1}$ ) a nesplňuje některá kritéria, která by měl splňovat PE (maximum na  $\tilde{\nu} = 720 \text{ cm}^{-1}$ ). Oproti tomu vzorek 3 nesplňuje zmíněná kritéria pro PP a splňuje kritéria pro PE. S těmito informacemi můžeme učinit závěr, že **vzorek 1 byl z polypropylenu, vzorek 3 byl z polyetylenu a vzorek 2 byl z jejich směsi, anebo jiného podobného plastu.**

## 3.3 Sklo a safír

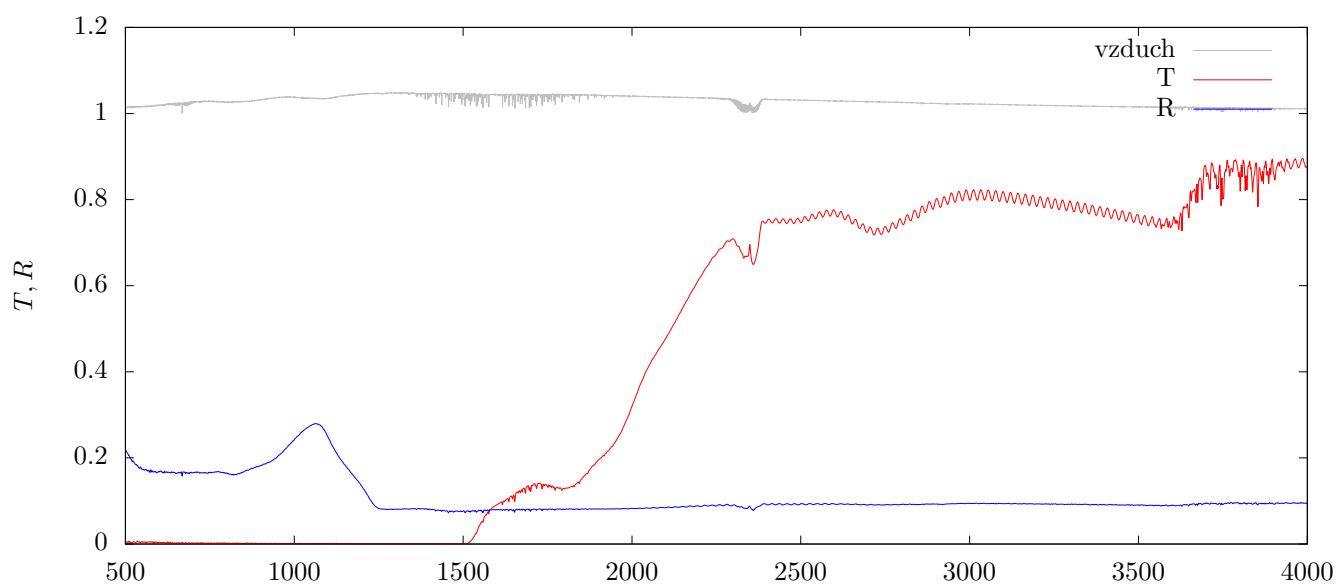
Nakonec jsme měřili transmitanci a reflektanci skla a safíru. Před měřením transmitance byla provedena kalibrace změřením prázdné komory bez vzorku, před měřením reflektance jsme provedli kalibraci pro odraz na



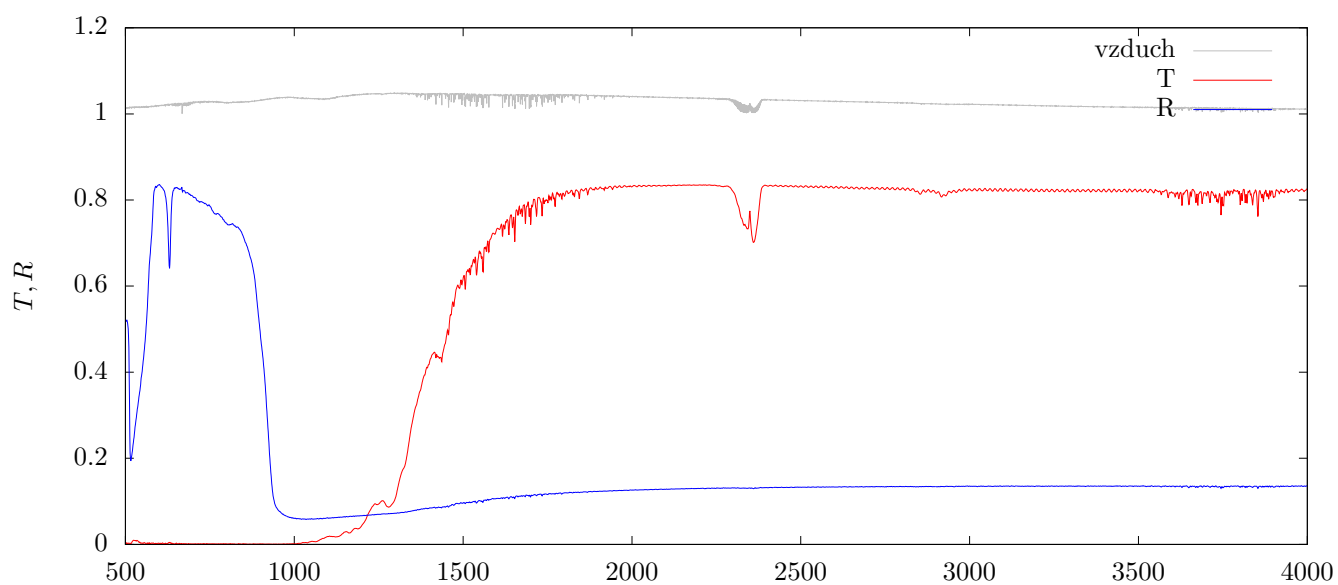
Obrázek 3: Měření transmittance vzduchu



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



Obrázek 5: Měření transmitance a odrazivosti skla



Obrázek 6: Měření transmitance a odrazivosti safíru



zlatém zrcátku. Naměřená spektra jsou v obrázcích č. 5 a 6.

U obou vzorků lze pozorovat změnu atmosférických podmínek od kalibrace – vystupují zde pásy  $\text{CO}_2$  i vodních par, jak jsme je identifikovali v grafu na obrázku č. 3. Z grafů zřejmé, že safír má mnohem lepší optické vlastnosti než sklo: lepší transmitance do  $1500\text{ cm}^{-1}$ , jednodušší závislost transmitance na  $\tilde{\nu}$ , výrazně vyšší reflektance.

Vidíme, že Drudeho model volných nábojů (viz [1]) je vhodný pro modelování transmitance a reflektance krystalického safíru, ale v případě amorfního skla selhává, protože skutečná závislost je mnohem složitější.

U skla můžeme v oblasti  $2300$  až  $3500\text{ cm}^{-1}$  pozorovat ve spektru periodickou "oscilaci". To je způsobeno interferencí na tenké vrstvě.

## 4 Diskuse

Při výpočtu vzdálenosti atomů molekuly CO podle vzorce (4) byla v redukované hmotnosti zanedbána vazebná energie molekuly, ta je řádově  $10\text{ eV}$  [4]. Rychlý výpočet ukazuje, že  $m_{\text{CO}} c^2 \approx (12\text{ u} + 16\text{ u})c^2 \approx 10^{10}\text{ eV}$ , tedy vazbová energie tvoří řádově  $10^{-9}$  hmotnosti molekuly. Protože byla chyba  $B$  řádově  $10^{-4}$ , šlo o oprávněnou aproximaci.

Podařilo se určit konstantu  $B$  s relativní chybou řádově  $10^{-4}$ . Bylo by vhodné ověřit, zda se při takto přesných hodnotách již neprojevuje nějaká systematická aparatury. Je tedy možné, že skutečná chyba bude řádově větší.

Nepodařilo se ve spektru  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  identifikovat izotopolog  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ , ačkoliv byl jejich rozdíl řádově vyšší než rozlišení aparatury. To mohlo být způsobeno buď nedostatečnou přítomností tohoto izotopologu, takže nebyl vidět přes šum, anebo překryvem pásů obou izotopomerů.

## 5 Závěr

Podařilo se naměřit rotačně-vibrační spektrum oxidu uhelnatého, z něj určit rotační konstantu  $B$  pro excitovaný a základní stav molekuly CO: Z ní se podařilo vypočítat vzdálenosti jader atomů molekuly CO v excitovaném

$$\begin{array}{ll} B_1 & [10^{10}\text{ s}^{-1}] = 5.7119 \pm 0.0004 \\ B_0 & [10^{10}\text{ s}^{-1}] = 5.7644 \pm 0.0006 \end{array}$$

a základním stavu:

vel.	$[10^{-10}\text{ m}]$
$r_{12,0}$	$1.13081 \pm 0.00006$
$r_{12,1}$	$1.13599 \pm 0.00004$

Podařilo se spočítat teplotní a tlakové rozšíření absorpčních pásů. Rozšíření pásů i rozlišení přístroje byly řádově větší, než rozdíl vibrační frekvence dvou izotopologů CO, přesto se  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  nepodařilo ve spektru identifikovat.

Podařilo se změřit transmitanci vzduchu a interpretovat v ní nejvýraznější rysy.

Podařilo se na základě spektra určit složení folií – vzorek 1 byl složený z polypropyleny, vzorek 3 z polyetyleny a vzorek 2 jeví rysy obou.

Podařilo se změřit a popsat transmitanci a reflektanci skla a safíru. Safír měl lepší optické vlastnosti a lépe odpovídal Drudeho modelu.

## 6 Literatura

- [1] P. Hlíděk, *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).
- [2] J. Tatum, *Map: Stellar Atmospheres*, vol. Appendix A: Convolution of Gaussian and Lorentzian Functions. LibreTexts, University of California, 2019. [cit. 2019-11-17]. Dostupné z: [https://web.archive.org/web/20191117230715/https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Astronomy\\_and\\_Cosmology/TextMaps/Map%3AStellar\\_Atmospheres\\_\(Tatum\)/10%3ALine\\_Profiles/Appendix\\_A%3AConvolution\\_of\\_Gaussian\\_and\\_Lorentzian\\_Functions](https://web.archive.org/web/20191117230715/https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Astronomy_and_Cosmology/TextMaps/Map%3AStellar_Atmospheres_(Tatum)/10%3ALine_Profiles/Appendix_A%3AConvolution_of_Gaussian_and_Lorentzian_Functions).
- [3] R. Whittal, "Table of isotopic masses and natural abundances," 2003. [cit. 2019-11-17]. Dostupné z: [https://www.chem.ualberta.ca/~massspec/atomic\\_mass\\_abund.pdf](https://www.chem.ualberta.ca/~massspec/atomic_mass_abund.pdf).

- [4] Wikipedia contributors, “Carbon monoxide — Wikipedia, the free encyclopedia,” 2019. [cit. 2019-11-17].  
Dostupné z: [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Carbon\\_monoxide&oldid=926337542](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Carbon_monoxide&oldid=926337542).