

## 근적외선분광법에 의한 물계에서 물분자들의 모임상태평가가능성

최창호, 리경수

선행연구[1, 3]에서는 물계에서 클러스터의 형성과정을 확률방정식을 리용하여 설명하였으며 물분자의 모임상태를 핵자기공명방법으로 평가하였다. 또한 선행연구[3]에서는 물 클러스터의 프락탈성과 브라운운동에 기초하여 분광법으로 물계의 모임상태를 평가할수 있는 가능성을 제기하였다. 그러나 리용되는 빛의 파장대역과 스펙트르선평에서 자연폭과의 관계문제는 밝히지 못하였다.

우리는 물계에 있는 물분자나 그 클러스터가 브라운운동할 때 거기에서 2차복사되는 빛의 스펙트르선평에 반영된 확산계수를 통하여 물계의 모임상태평가가 근적외선대역에서도 가능하다는것을 고찰하였다.

물계에서 브라운운동하는 물분자나 그 클러스터들이 2차복사되는 빛의 스펙트르선평 [2]은

$$\Delta\omega = 2\mathcal{D}q^2 \quad (1)$$

이고 확산계수  $\mathcal{D}$ 는

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_0 n^{1/D-1/2} \quad (2)$$

이며

$$\mathcal{D}_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \sqrt{k_B T r_0} m_0^{-1/2} \quad (3)$$

이다. 여기서  $k_B \approx 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ 은 볼츠만상수,  $T \approx 300 \text{ K}$ 은 물계의 온도,  $m_0 \approx 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ 은 물분자의 질량,  $r_0 = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ 는 물분자의 대략적인 선평크기,  $n$ 은 물분자클러스터에 있는 물분자수이다. 그러면 이때

$$\mathcal{D}_0 = 3.3 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}.$$

따라서

$$\mathcal{D} = 3.3 \cdot 10^{-8} n^{1/D-1/2} \text{ m}^2/\text{s}$$

이며

$$\Delta\omega = 6.6 \cdot 10^{-8} q^2 n^{1/D-1/2} \quad (4)$$

이다. 여기서  $D$ 는 물분자클러스터의 프락탈차원수로서 식

$$D = \frac{\ln\left(\frac{M}{m_0}\right)}{\ln\left(\frac{R}{r_0}\right)} \quad (5)$$

에 의하여 정의된다.

이제 스펙트르선평에서 자연폭의 영향이 무시되는 경우를 살펴보자.

자연폭은 불확정성관계식  $\Delta E_0 \cdot \tau \approx \hbar$  에 의하여 주어진다. 여기서  $\Delta E_0 = \hbar \Delta \omega_0$  이고  $\Delta \omega_0$  은 스펙트르선의 자연폭,  $\tau$  는 분자여기준위의 수명으로서  $\approx 10^{-4}$  s 정도이다.

식 (4)에서 클라스터안의 물분자수  $n$ 이 증가할수록 스펙트르선폭은 감소하므로 최대 로 감소되었을 때의  $\Delta \omega_{\text{최소}} > \Delta \omega_0$  이 만족되는가를 따져보면 된다. 여기서  $\frac{1}{D} - \frac{1}{2} < 0$  이다. 왜냐하면  $2 \leq D \leq 3$  이기때문이다. 그러므로  $n^{1/D-1/2}$  의 최소값은  $D=3$  일 때이며 이 경우 클라스터안의 물분자수가 180이라고 하여도  $180^{-1/6} \approx 0.422$  이다. 이 값을 식 (4)에 대입하고  $\Delta \omega_{\text{최소}} > \Delta \omega_0$  을 고려하면

$$\Delta \omega_{\text{최소}} = 0.278 \cdot 4 \cdot 10^{-7} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right) \geq \Delta \omega_0 \approx \frac{1}{\tau} \quad (6)$$

이 얻어진다.

식 (6)으로부터

$$\lambda \leq 10.4 \cdot 10^{-6} \text{ m}$$

이다.

이 파장은 중간적외선, 근적외선과 그 이하 대역을 보여준다.

이것은 물에서 수소결합상태변화연구에 근적외선 흡수띠의 이동을 리용한다는 선행연구[3-6]에서와 같이 근적외선분광기와 그것의 스펙트르를 물분자들의 모임상태연구에 그대로 리용할수 있다는것을 의미한다. 다른것은 스펙트르선의 위치가 아니라 스펙트르선 폭을 대상으로 한다는것이다. 그리고 파장대역도 근적외선대역뿐아니라 중간적외선대역에 이른다는것이다.

다음으로 스펙트르선의 위치에 따르는 선폭의 상대값  $\frac{\Delta \omega}{\omega_0}$  를 평가해보자.

식 (4)로부터

$$\frac{\Delta \omega}{\omega_0} \approx 0.278 \cdot 4 \cdot 10^{-7} \frac{2\pi}{\lambda c} n^{1/D-1/2} \quad (7)$$

이 나온다. 상대값의 최대는  $n=1$  일 때이므로

$$\left( \frac{\Delta \omega}{\omega_0} \right)_{\text{최대}} \approx 0.278 \cdot 4 \cdot 10^{-7} \frac{2\pi}{\lambda c} = \frac{0.582}{\lambda} \cdot 10^{-7}$$

이다. 실례로

$$\lambda = 0.7 \mu\text{m} \text{ 일 때 } \left( \frac{\Delta \omega}{\omega_0} \right)_{\text{최대}} \approx 8.3 \cdot 10^{-8}$$

$$\lambda = 10.5 \mu\text{m} \text{ 일 때 } \left( \frac{\Delta \omega}{\omega_0} \right)_{\text{최대}} \approx 0.56 \cdot 10^{-8}$$

이며 이때

$$(\Delta \omega)_{\text{최대}} = \begin{cases} 19.92 \cdot 10^7 & (\lambda = 0.7 \mu\text{m}) \\ 0.5 \cdot 10^7 & (\lambda = 10.5 \mu\text{m}) \end{cases}$$

이다.

## 맺 는 말

1) 근적외선 및 중간적외선대역에서 동작하는 적외선분광기의 흡수스펙트럼에서 분자의 려기상태수명과 관련되는 자연폭은 이 대역 스펙트럼선폭보다 작다.

2) 물계에서 브라운운동하는 물분자나 그 클라스터에 의하여 2차복사되는 빛스펙트럼선폭에 물분자들의 모임상태가 반영되는데 이것은 근적외선과 중간적외선대역에서도 평가가 가능하다는것을 보여준다.

## 참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 62, 12, 39, 주체105(2016).
- [2] 김일성종합대학학보 물리학, 65, 2, 28, 주체108(2019).
- [3] 황설주 등; 화학과 화학공업, 2, 16, 주체104(2015).
- [4] A. Sedov et al.; Phid Phase Eguilibria, 315, 16, 2012.
- [5] C. Grineru et al.; Phys. Rev. Lett., 107, 11304, 2011.
- [6] M. A. Billenica et al.; Druker Optico, BOPT-4000611-01, 2013.

주체108(2019)년 3월 5일 원고접수

## On the Possibility of Connection State Examination of Water Molecules of Water System by Near Infrared Spectroscopic Method

*Choe Chang Ho, Ri Kyong Su*

We found that in the region of near and mid infrared, the width of spectral line related to the connection state of water molecules is bigger than that related to the lifetime of the molecular excited state. We have found the possibility to examine the connection state of water molecules reflected at the width of spectral line of near and mid infrared region.

Key words: infrared spectroscopic method, width of spectral line, connection state of water molecules, near infrared region