

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	
Celkem	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 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 – nízkofrekvenční¹ 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), vysokofrekvenční² 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:

$$E = hc\sigma, \quad (1)$$

kde h je Planckova konstanta, c rychlost světla a $\sigma = \lambda^{-1}$ 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.

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

²...pás R bude naopak mít vysoké hodnoty σ 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 CO₂ 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 FWHM³ platí vztah:

$$\delta\sigma_T = \frac{\sigma_0}{c} \sqrt{\frac{8kT}{m}} \ln 2, \quad (6)$$

kde σ_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 vztah⁴:

$$\delta\sigma_p = 2\gamma p, \quad (7)$$

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

Protože konvolucí dvou Lorentzových funkcí o pološířkách ℓ_1 a ℓ_2 dostaneme Lorentzovu funkci o pološířce $\ell = \ell_1 + \ell_2$ [2], bude pro šířku pásu platit

$$\delta\sigma = \delta\sigma_T + \delta\sigma_p. \quad (8)$$

V experimentu chceme určit, zda je možné odlišit od sebe dva izotopology⁵ ¹²C¹⁶O a ¹³C¹⁶O. Z [1] víme, že pro úhlovou frekvenci platí $\omega = \sqrt{f/\mu}$, tedy $\sigma \propto \mu^{-1/2}$. Známe-li tedy vlnčet nějakého pásu σ_A pro první z izomerů a redukované hmotnosti obou izomerů μ_A, μ_B , můžeme snadno spočítat vlnčet téhož pásu pro druhý z izomerů $\sigma_B = \sigma_A \sqrt{\mu_A/\mu_B}$. Rozdíl mezi vlnčty izomerů tedy bude:

$$\Delta\sigma = |\sigma_A - \sigma_B| = \sigma_A \left| 1 - \sqrt{\frac{\mu_A}{\mu_B}} \right| \quad (9)$$

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

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

2.5 Tabulkové hodnoty

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

izotop	m [u]
¹² C	12.000000
¹³ C	13.003355
¹⁶ O	15.994915
¹⁷ O	16.999132

Tabulka 1: Hmotnosti izotopů C a O

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

izotopolog	μ [u]
¹² C ¹⁶ O	6.856209
¹³ C ¹⁶ O	7.172413

Tabulka 2: Redukované hmotnosti izotopologů CO

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

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

³FWHM = plná šířka v polovině maxima

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

⁵Izotopology 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 CaF_2 obsahující CO pod tlakem 7 mbar. Měření bylo předem kalibrováno na transmitanci vzduchu a probíhalo na rozsahu 2000 až 2500 cm^{-1} při rozlišení 0.35 cm^{-1} . Protože se mezi kalibrací a měřením změnil podíl CO_2 v měřeném prostoru, bylo kromě spektra CO viditelné i spektrum CO_2 . V obou případech byla jasně rozlišitelná pásma P a R, pásmo Q nebylo pozorováno. Zatímco v případě CO jsou jasně rozlišitelná absorpční maxima⁶ odpovídající pásům P_J a R_J pro celočíselné hodnoty J , spektrum 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 ± 0.00008
$2B_0 - 3D_0$ $[10^{11} \text{ s}^{-1}]$	1.15287 ± 0.00012
D_1 $[10^5 \text{ s}^{-1}]$	1.83 ± 0.10
D_0 $[10^5 \text{ s}^{-1}]$	1.82 ± 0.17
B_1 $[10^{10} \text{ s}^{-1}]$	5.7119 ± 0.0004
B_0 $[10^{10} \text{ s}^{-1}]$	5.7644 ± 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}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 ± 0.00006
$r_{12,1}$	1.13599 ± 0.00004
$r_{13,0}$	1.10560 ± 0.00006
$r_{13,1}$	1.11067 ± 0.00004

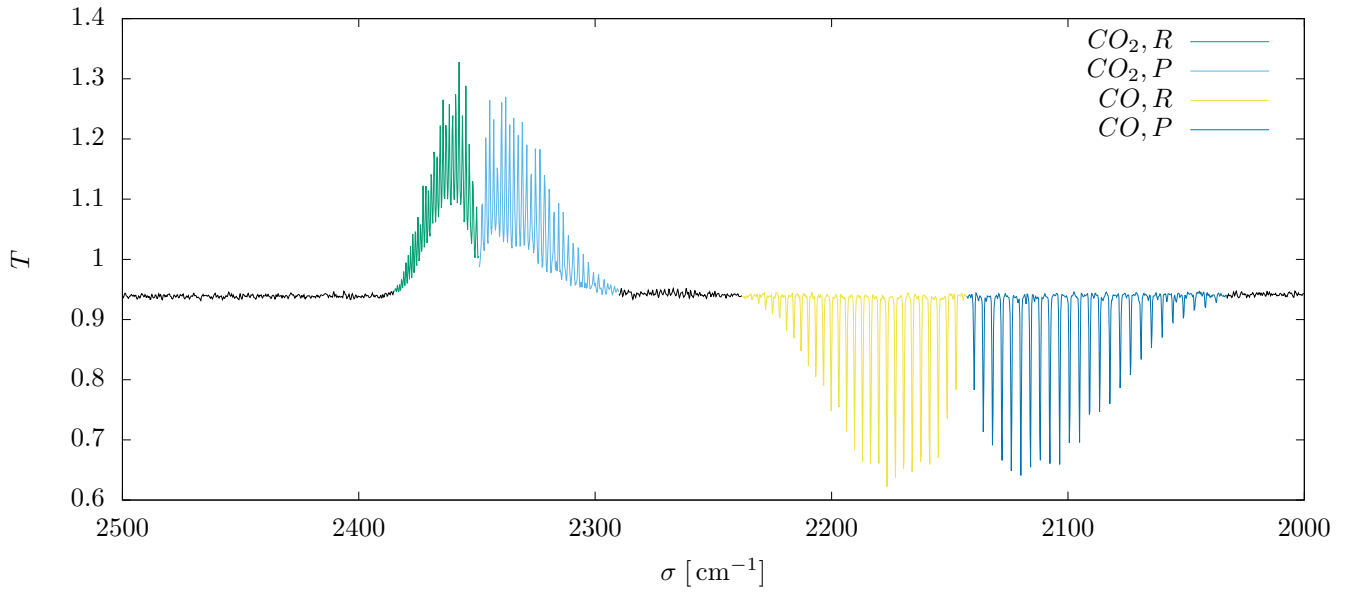
Tabulka 4: Vzdálenosti jader izotopologů CO v základním a excitovaném stavu.

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 $\sigma = 2040$ a 2230 . Podle (9) vypočteme, že maxima izotopologů by od sebe měla být vzdálena:

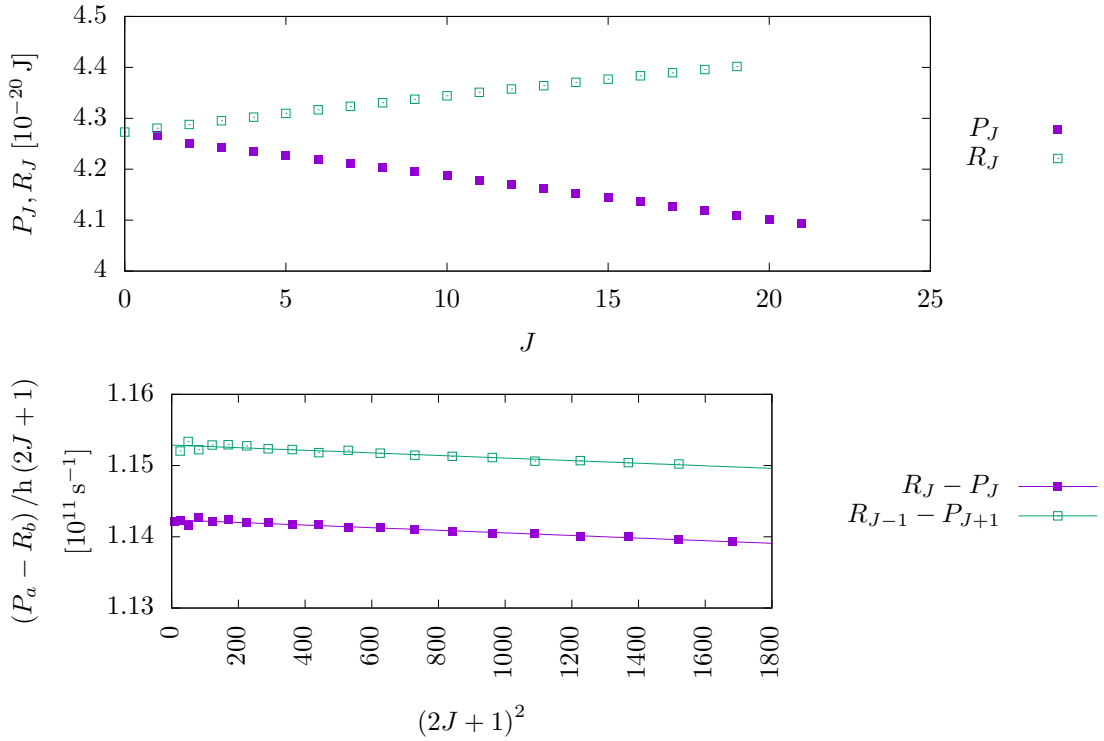
$$\Delta\sigma \approx 2130 \text{ cm}^{-1} \left| 1 - \sqrt{\frac{\mu(^{12}\text{C}^{16}\text{O})}{\mu(^{13}\text{C}^{16}\text{O})}} \right| \approx 2130 \cdot 0.022 \text{ cm}^{-1} \approx 50 \text{ cm}^{-1}. \quad (13)$$

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

⁶Maxima absorpce, tj. minima naměřené intenzity.



Obrázek 1: Měření transmittance kyvety s oxidem uhelnatým (CO). Postupně vidíme (zleva) pásy R a P oxidu uhličitého (CO_2), 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 pásech 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:

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

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

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

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

3.2 Vzduch a polymerové folie

Dále jsme měřili bez vzorku a kalibrace transmitanci vzduchu od $\sigma = 500$ do 4500 cm^{-1} . Naměřené spektrum je v grafu na obrázku č. 3. Zajímavé oblasti byly: P-R pásy CO_2 na 2400 ; P-Q-R pásy 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 H_2O pomocí vodíkových můstků.

Poté jsme již s kalibrací měřili transmitanci tří různých polymerových folií na rozsahu $\sigma = 500$ až 4000 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 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 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 $\sigma = 2920 \text{ cm}^{-1}$ odpovídá antisymetrickým valenčním kmitům „ ν_{as} “ skupiny $-\text{CH}_2-$ a druhé $\sigma = 2850 \text{ cm}^{-1}$ odpovídá jejím symetrickým valenčním kmitům „ ν_{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 cm^{-1} a 2870 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 cm^{-1} . Toto maximum se za pomoci tabulek v [1] nepodařilo vysvětlit.

Následuje oblast 1500 až 700 cm^{-1} , kde je výskyt maxim hojný. Nejprve je zde oblast 1475 až 1430 – vzorky 1 a 2 tu opět mají plateau, vzorek 3 dvojicí peaků 1473 cm^{-1} a 1462 cm^{-1} . Tyto jsou nejbližší tabulkovým maximum 1470 pro nůžkovou deformaci „ δ “ skupiny $-\text{CH}_2-$ a 1465 pro asymetrickou deformaci „ δ_{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 maximum $\sigma = 1375 \text{ cm}^{-1}$ pro symetrické deformace „ δ_{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.

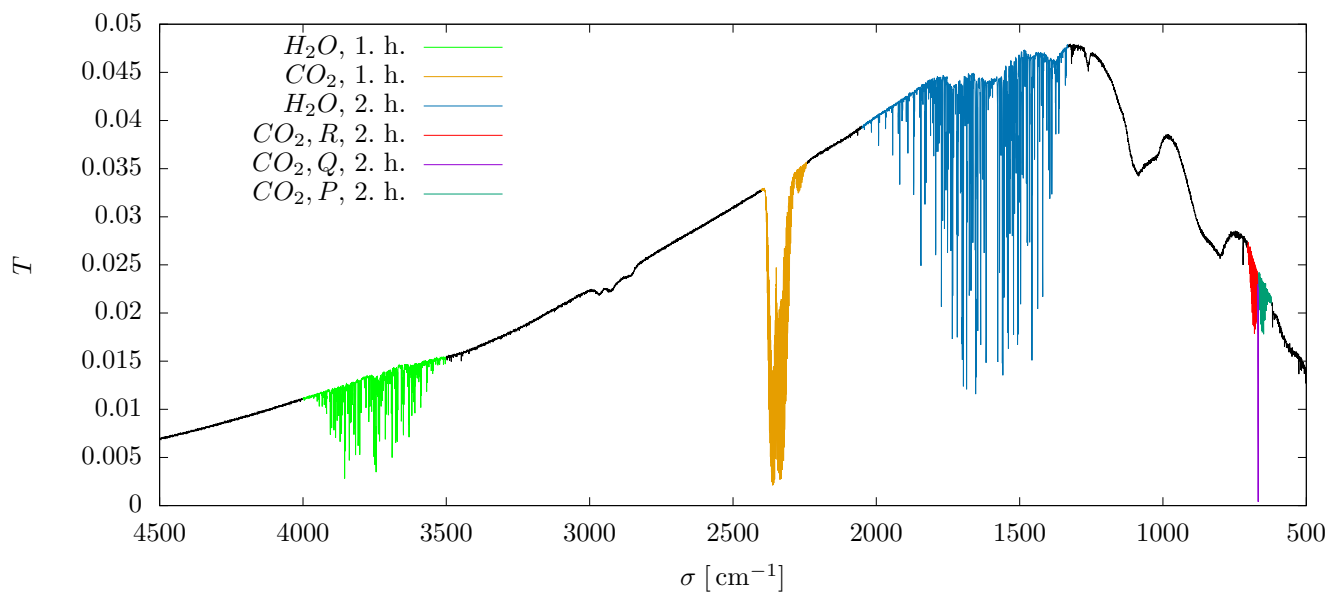
V oblasti 1330 až 800 cm^{-1} má vzorek 1 les maxim, nejvýraznější z nich jsou 1168 , 998 , 973 a 841 . Vzorek 3 zde má naopak téměř ploché spektrum. Vzorek 2 má v této oblasti spektrum „kopcovité“, se vzorkem 1 sdílí pouze jedno maximum $\sigma = 1303 \text{ cm}^{-1}$ (kroutivá deformace „ τ “ skupiny $-\text{CH}_2-$ [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 $\sigma = 730 \text{ cm}^{-1}$, druhý na 720 cm^{-1} . Druhé maximum odpovídá kolébaté deformaci „ ϱ “ skupiny $-\text{CO}_2$. Vzorek 1 má v této oblasti ploché spektrum.

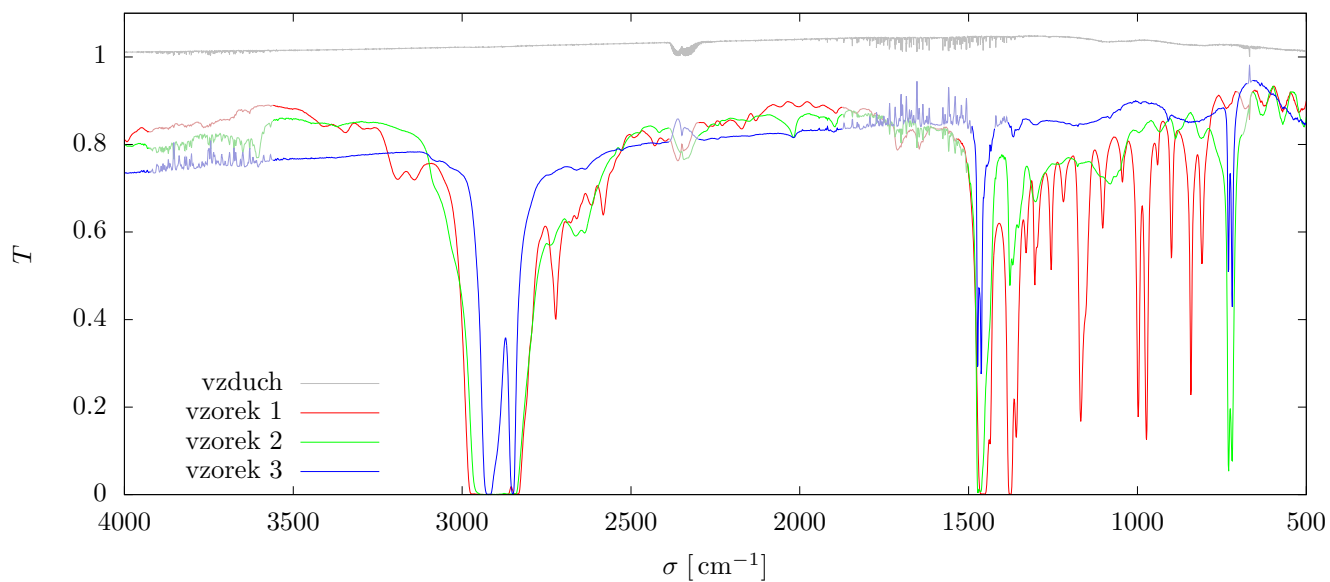
Shrneme-li nyní pozorované rysy, dospějeme k následujícímu závěru: vzorky 1 a 3 jsou si nejméně podobné, vzorek 2 sdílí některé rysy se vzorkem 1 a některé se vzorkem 3. Vzorek 1 splňuje nejvíce kritéria, která by měl splňovat PP (jmenovitě maximum na $\sigma = 1375 \text{ cm}^{-1}$, les maxim mezi 1330 a 800 cm^{-1}) a nesplňuje některá kritéria, která by měl splňovat PE (maximum na $\sigma = 720 \text{ cm}^{-1}$). 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

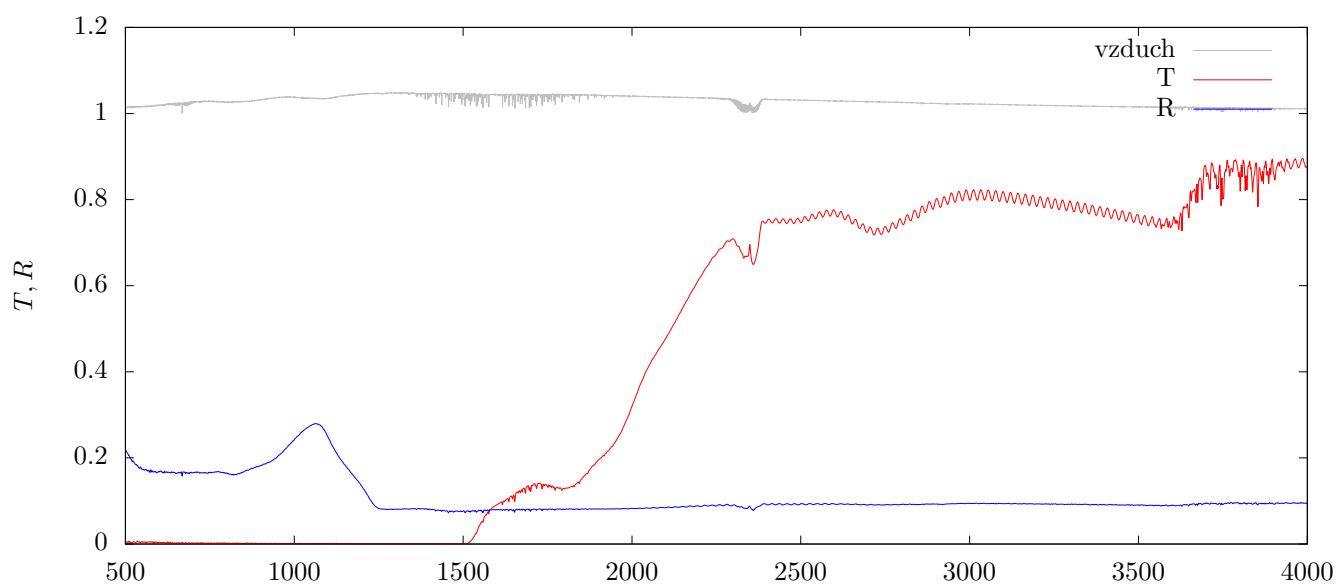
Nakonec jsme měřili transmitanci a reflektanci skla a safíru. Před měřením transmitance byla provedena kalibrace změřením prázdné komory bez vzorku, před měřením reflektance jsme provedli kalibraci pro odraz na



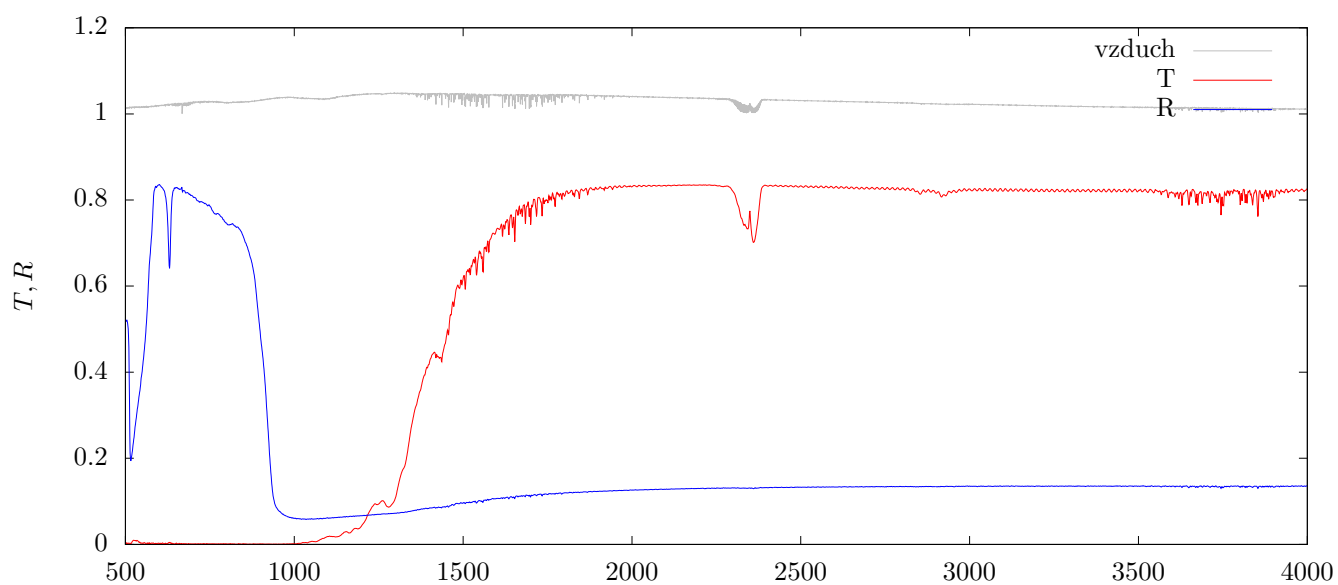
Obrázek 3: Měření transmittance vzduchu



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



Obrázek 5: Měření transmittance a odrazivosti skla



Obrázek 6: Měření transmittance 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 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 cm^{-1} , jednodušší závislost transmitance na σ , 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 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 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

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

a základním stavu:

vel.	$[10^{-10}\text{ m}]$
$r_{12,0}$	1.13081 ± 0.00006
$r_{12,1}$	1.13599 ± 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.
- [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%3A_Stellar_Atmospheres_\(Tatum\)/10%3A_Line_Profiles/Appendix_A%3A_Convolution_of_Gaussian_and_Lorentzian_Functions](https://web.archive.org/web/20191117230715/https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Astronomy_and_Cosmology/TextMaps/Map%3A_Stellar_Atmospheres_(Tatum)/10%3A_Line_Profiles/Appendix_A%3A_Convolution_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.

- [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.