

UNIVERSITÄT ZU KÖLN

MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT



PRAKTIKUM B

B1.1

Infrarotabsorption in CO₂

CATHERINE TRAN
CARLO KLEEFISCH
OLIVER FILLA

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Theoretische Grundlagen	4
2.1	elektromagnetisches Spektrum	4
2.1.1	Photonen	4
2.2	Planck–Strahlung	5
2.2.1	Strahlungsdichte	5
2.2.2	Wien’sches Verschiebungsgesetz	6
2.3	elektrisches Dipolmoment	6
2.3.1	Dipolübergang	6
2.3.2	Übergangsdipolmoment	6
2.4	Freiheitsgrade	7
2.5	Infrarotaktivität	7
2.6	Mathematische Grundlagen	7
2.6.1	Gaußverteilung	7
2.7	Das Lambert–Beer’sche Gesetz	8
2.8	Treibhauseffekt	8
3	Durchführung	9
4	Auswertung	10
5	Fazit	11
6	Literatur	12

1 Einleitung

Mithilfe von Spektroskopie ist es möglich, Absorptions- und Emissionsspektren von elektromagnetischen Wellen an einer Probe zu beobachten. Hierzu misst man spezifische Größen in Abhängigkeit von der Frequenz. Dadurch ist es möglich, Aussagen über die mikroskopischen Eigenschaften der Probe zu treffen.

Alternativ zur Frequenz werden auch äquivalente Größen wie der Wellenlänge oder Energie verwendet, um Größen wie die Intensität, die Strahlungsleistung und die Zählrate der Strahlung zu messen.

Dieser Versuch dient als Einführung in die Infrarotspektroskopie. Mithilfe eines niedrig auflösenden Absorptionsspektrometers wird die Infrarot-Absorption von Kohlenstoffdioxid (CO_2) untersucht. Dieses Gas gehört zu den sogenannten “Treibhausgasen”.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 elektromagnetisches Spektrum

Es gibt verschiedene Frequenzbereiche elektromagnetischer Strahlung. Diese werden unter verschiedenen Namen zusammengefasst.

Frequenzbereich	Wellenlänge in m
Niederfrequenz	10^4 bis 10^8
Radiowellen	10^1 bis 10^3
Mikrowellen	10^{-3} bis 10^0
Infrarotstrahlung	10^{-6} bis 10^{-3}
sichtbares Licht	10^{-7}
Ultraviolette Strahlung	10^{-9} bis 10^{-7}
Röntgenstrahlung	10^{-11} bis 10^{-9}
Gammastrahlung	$< 10^{-11}$

Tabelle 1: Elektromagnetisches Spektrum

2.1.1 Photonen

Photonen sind die Austauschteilchen von elektromagnetischer Wechselwirkung. Sie haben keine Ruheenergie, ihre Energie E ist über die Frequenz ν bzw. die Kreisfrequenz ω beschrieben. [8]

$$E = h \cdot \nu \quad (2.1)$$

$$= \hbar \cdot \omega \quad (2.2)$$

$$h \approx 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.3)$$

Dabei findet die Planck-Konstante h bzw. ihre reduzierte Form \hbar Verwendung. Die Wellenlänge λ bzw. die Wellenzahl k können über die Lichtgeschwindigkeit c aus der (Kreis-)Frequenz bestimmt werden.

$$c = \lambda \nu \quad (2.4)$$

$$c = k \omega \quad (2.5)$$

Die Kreisfrequenz ω und die Wellenzahl k sind proportional zu der Frequenz ν respektive der Wellenlänge λ .

$$\omega = 2\pi \nu \quad (2.6)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.7)$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.8)$$

2.2 Planck–Strahlung

Das Planck'sche Strahlungsgesetz beschreibt die Energiedichte ω_P , die ein schwarzer Körper mit einer Frequenz ν bei einer Temperatur T als Wärmestrahlung aussendet. Dabei finden das Planck'sche Wirkungsquantum h , die Lichtgeschwindigkeit c und die Boltzmann–Konstante k_B Verwendung. [3]

$$\omega_P(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left[\frac{h\nu}{k_B T}\right] - 1} d\nu \quad (2.9)$$

Der Faktor $\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ ist dabei die Dichte der Schwingungsmoden in einem Frequenzintervall, also die Anzahl erlaubter Schwingungszustände. Der Faktor $h\nu \cdot \exp[\dots]^{-1}$ beschreibt die mittlere kinetische Energie dieser Zustände. Dies ist in Abbildung 1 dargestellt.

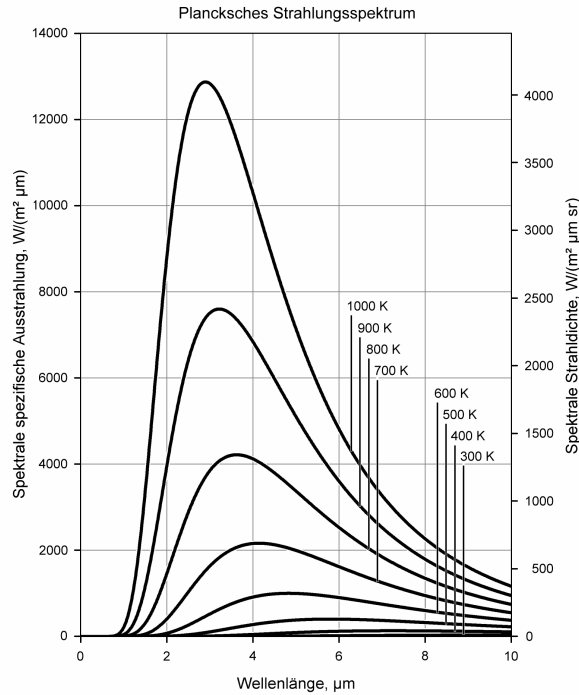


Abbildung 1: Schwarzkörperstrahlung für verschiedene Temperaturen [5]

2.2.1 Strahlungsdichte

Die Strahldichte oder Strahlungsdichte S beschreibt die Strahlung, die ein Flächenelement dA eines Strahlers in einen Raumwinkel $d\Omega$ abstrahlt. Sie ist allgemein das Differential der Strahlungsleistung Φ . [3, 4]

$$S = \frac{d^2\Phi}{dA \cdot d\Omega} \quad (2.10)$$

2.2.2 Wien'sches Verschiebungsgesetz

Das Wien'sche Verschiebungsgesetz beschreibt abhängig von der Temperatur T , bei welcher Wellenlänge $\hat{\lambda}$ bzw. Frequenz $\hat{\nu}$ die größte Wärmeleistung abgestrahlt wird. Dadurch beschreibt es die Temperaturabhängigkeit des Maximums des Planck'schen Strahlungsgesetzes (2.9).

$$\hat{\lambda} \cdot T = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (2.11)$$

$$\hat{\nu} \cdot T = 5.879 \cdot 10^{10} \text{ m} \cdot \text{Hz} \quad (2.12)$$

2.3 elektrisches Dipolmoment

Das elektrische Dipolmoment $\vec{\mu}$ ist das erste Moment aus der Multipolentwicklung einer Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$. [6] Es ist parallel zum elektrischen Feld \vec{E} und beschreibt die Ungleichverteilung von Ladungen.

$$\vec{\mu} = \int \vec{r} \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2.13)$$

Atome im Grundzustand haben kein permanentes Dipolmoment, Moleküle können dagegen ein permanentes Dipolmoment haben. Ein Beispiel dafür ist Wasser (H_2O).

2.3.1 Dipolübergang

Um ein Molekül durch die Absorption eines Photons anzuregen, muss ein Dipolübergang stattfinden. Dabei wird der quantenmechanische Zustand des Moleküls gestört, was durch zeitabhängige Störungstheorie beschrieben wird. [7]

2.3.2 Übergangsdipolmoment

Die Störung wird als Übergangsdipolmoment $\vec{\mu}_{01}$ bezeichnet. Es wird durch den Operator des Dipolmoments $\hat{\mu}_e$ sowie den Anfangszustand $|\Psi_0\rangle$ und den Endzustand $|\Psi_1\rangle$ berechnet. So lange das Übergangsdipolmoment $\vec{\mu}_{01} \neq 0$ nicht verschwindet, ist der Übergang erlaubt.

$$\vec{\mu}_{01} = \langle \Psi_0 | \hat{\mu}_e | \Psi_1 \rangle \quad (2.14)$$

Je größer das Übergangsdipolmoment ist, desto größer ist auch das Absorptionsvermögen.

2.4 Freiheitsgrade

Die Zahl der Freiheitsgrade f gibt an, auf wie viele Arten beispielsweise ein Gasmolekül Energie speichern kann, z.B. in Translation entlang einer Koordinatenachse, Rotation oder Schwingungen.

Einatomige Moleküle haben üblicherweise 3 Freiheitsgrade durch Translation. Zweiatomige Moleküle haben zusätzlich noch zwei Freiheitsgrade durch Rotation, also insgesamt 5.

2.5 Infrarotaktivität

2.6 Mathematische Grundlagen

2.6.1 Gaußverteilung

Die Gaußverteilung entspricht der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\phi_{\mu,\sigma^2}(\chi)$ mit dem Erwartungswert μ und der Standardabweichung σ . Manchmal wird die Gaußverteilung auch als Normalverteilung bezeichnet, manchmal bezeichnet die Normalverteilung dagegen einen Spezialfall mit $\mu = \sigma = 1$. In Abbildung 2 sind verschiedene Gaußverteilungen dargestellt.

$$\phi_{\mu,\sigma^2}(\chi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(\chi - \mu)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (2.15)$$

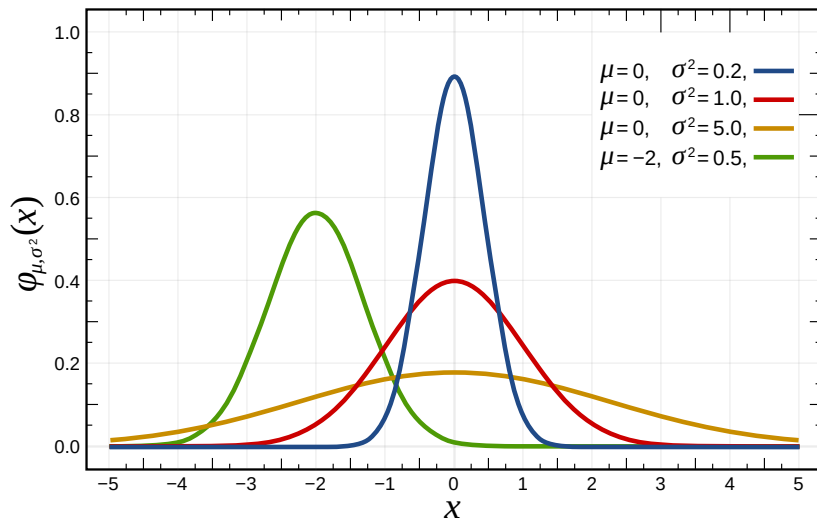


Abbildung 2: Gaußverteilungen mit verschiedenen Parametern [9]

Werden Zufallsvariablen gemessen, so haben sie immer eine gewisse Streuung. Nach dem Grenzwertsatz ist diese Streuung gaußverteilt. Bei genügend Messungen kann man annehmen, dass 68.3% der Zufallsvariablen im Intervall $\mu \pm \sigma$ liegen.

Im 2σ -Intervall werden 95.4% der Zufallsvariablen erwartet, im 3σ -Intervall sogar 99.7%.

2.7 Das Lambert–Beer’sche Gesetz

2.8 Treibhauseffekt

3 Durchführung

4 Auswertung

5 Fazit

6 Literatur

- [1] Universität zu Köln, “B1.1: Infrarotabsorption in CO₂”, April 2024
- [2] S. Bakan & E. Raschke, “Der natürliche Treibhauseffekt”, Promet 28, Deutscher Wetterdienst, 2002, Online verfügbar unter https://www.dwd.de/DE/leistungen/pbfb_verlag_promet/pdf_promethefte/28_3_4_pdf.pdf
- [3] W. Demtröder, “Experimentalphysik 3: Atome, Moleküle und Festkörper”, Springer–Spektrum–Verlag, 5. Auflage 2016, DOI: 10.1007/978-3-662-49094-5
- [4] Wikipedia, “Strahldichte”, <https://de.wikipedia.org/wiki/Strahldichte>, Abruf am 02.05.2024
- [5] Wikipedia, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:BlackbodySpectrum_lin_150dpi_de.png, Abruf am 02.05.2024
- [6] Lexikon der Physik, “Dipolmoment”, <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/elektrisches-dipolmoment/3960>, Abruf am 02.05.2024
- [7] F. Hinderer, “UV/Vis–Absorptions- und Fluoreszenz–Spektroskopie”, 2020, DOI 10.1007/978-3-658-25441-4
- [8] T. Fließbach, “Statistische Physik”, 2018, DOI 10.1007/978-3-662-58033-2
- [9] Wikimedia, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Normal_Distribution_PDF.svg, 2023-02-23