

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 |
| 2.2 | Planck–Strahlung | 4 |
| 2.2.1 | Strahlungsdichte | 4 |
| 2.2.2 | Wien’sches Verschiebungsgesetz | 5 |
| 2.3 | elektrisches Dipolmoment | 5 |
| 2.3.1 | Dipolübergang | 5 |
| 2.3.2 | Übergangsdipolmoment | 5 |
| 2.4 | Freiheitsgrade | 6 |
| 2.5 | Infrarotaktivität | 6 |
| 2.6 | Photonen | 6 |
| 2.7 | Mathematische Grundlagen | 6 |
| 2.8 | Das Lambert–Beer’sche Gesetz | 6 |
| 2.9 | Treibhauseffekt | 6 |
| 3 | Durchführung | 7 |
| 4 | Auswertung | 8 |
| 5 | Fazit | 9 |
| 6 | Literatur | 10 |

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

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]

$$\omega_P(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left[\frac{h\nu}{k_B T}\right] - 1} d\nu \quad (2.1)$$

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.

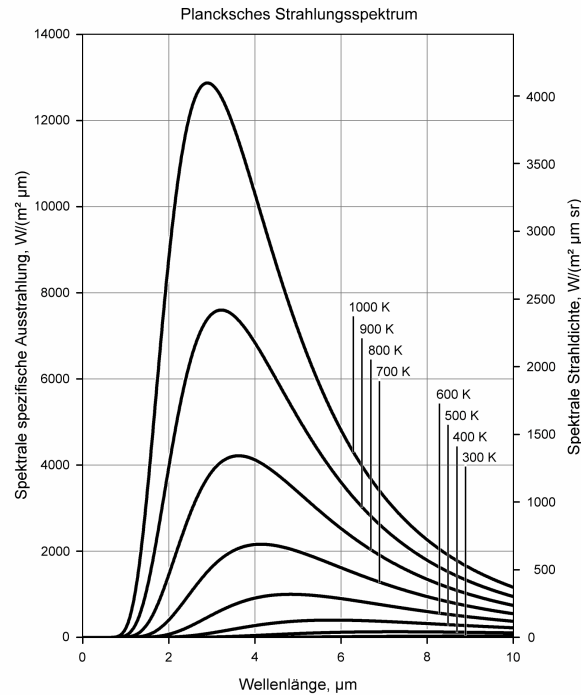


Abbildung 1: Schwarzkörperstrahlung für verschiedene Temperaturen [5]

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]

$$S = \frac{d^2\Phi}{dA \cdot d\Omega} \quad (2.2)$$

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 (2.1).

$$\hat{\lambda} \cdot T = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (2.3)$$

$$\hat{\nu} \cdot T = 5.879 \cdot 10^{10} \text{ m} \cdot \text{Hz} \quad (2.4)$$

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.

$$\vec{\mu} = \int \vec{r} \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2.5)$$

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 $\hat{\vec{\mu}}_e$ 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.

$$\vec{\mu}_{01} = \langle \Psi_0 | \hat{\vec{\mu}}_e | \Psi_1 \rangle \quad (2.6)$$

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

- 2.4 Freiheitsgrade
- 2.5 Infrarotaktivität
- 2.6 Photonen
- 2.7 Mathematische Grundlagen
- 2.8 Das Lambert–Beer’sche Gesetz
- 2.9 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