

Co nám světlo prozradí o dvouatomové molekule?

V. Vařáková

OPEN GATE – gymnázium a základní škola, s.r.o., Na Návsi 5,
Babice, 251 01

varakovaveronika@gmail.com

Abstrakt

Absorpce je fyzikální jev, kdy je energie fotonu pohlcena atomem a jeho valenční elektrony přecházejí do vyšší úrovně energie. Na základě toho, které vlnové délky jsou pohlceny, je možné zjistit informace o materiálu včetně disociační energie, anharmonicity a vibrační konstanty. Cílem úlohy bylo zjistit tato data u molekuly jodu.

1. Úvod

Výsledkem pozorování absorpce je absorpční spektrum, což je grafické vyjádření vztahu vlnové délky elektromagnetického spektra a jejího absorbovaného procenta (absorbance). Tato úloha je zaměřena na pouze na viditelné spektrum, tudíž vlnové délky 390-700 nm. Absorpční spektrum je charakteristické pro každou látku, což samozřejmě také platí pro jód.

Kvůli přijímání energie se zvyšuje potenciál systému dvou atomů. Ze Schrödingerovy rovnice víme, že každý vázaný systém může mít pouze omezený počet úrovní energie. Přechody mezi těmito stavy korespondují k vlnovým délkám, které potom absorpční spektrum tvoří. Rozdíly mezi konkrétními vlnovými délkami potom korespondují k jednotlivým vibračním úrovním. Energie mezi vibračními úrovněmi potom prozrazuje vlastnosti tohoto neharmonického oscilátoru.

2. Experiment

K experimentu byl použit spektrometr. Využívá bílé světlo, které je následně rozptýleno difrakční mřížkou. Vzniklé spektrum poté prochází skleněnou kyvetou se vzorkem plynného jodu. Za kyvetou se nachází detektor zjišťující množství záření, které prošlo, a jeho vlnovou délku.

3. Princip

Molekula jodu je oscilátor o dvou hmotnostech, který není harmonický. Výpočet potenciální energie tohoto oscilátoru je možné pomocí Taylorovy řady. V rámci praktičnosti je možné počítat pouze s kvadratickým členem pro nulovou potenciální energii:

$$V(0) = \frac{\delta^2 v}{\delta r^2} (r - r_0)^2$$

Hookův zákon říká, že:

$$F = kr$$

$$\therefore V = \frac{1}{2}kr^2$$

Po dosazení:

$$V(0) = k(r - r_0)^2$$

což znamená, že existuje pouze jedna konstanta, pro každou vazbu pro molekulu o dvou atomech.

Molekula jodu vibruje na různých úrovních, podle množství energie, které získala od fotonů. Rozdíl energií odpovídá:

$$\Delta E = E_0 - E_1 = \omega(v + \frac{3}{2}) - \omega x(v + \frac{1}{2})^2$$

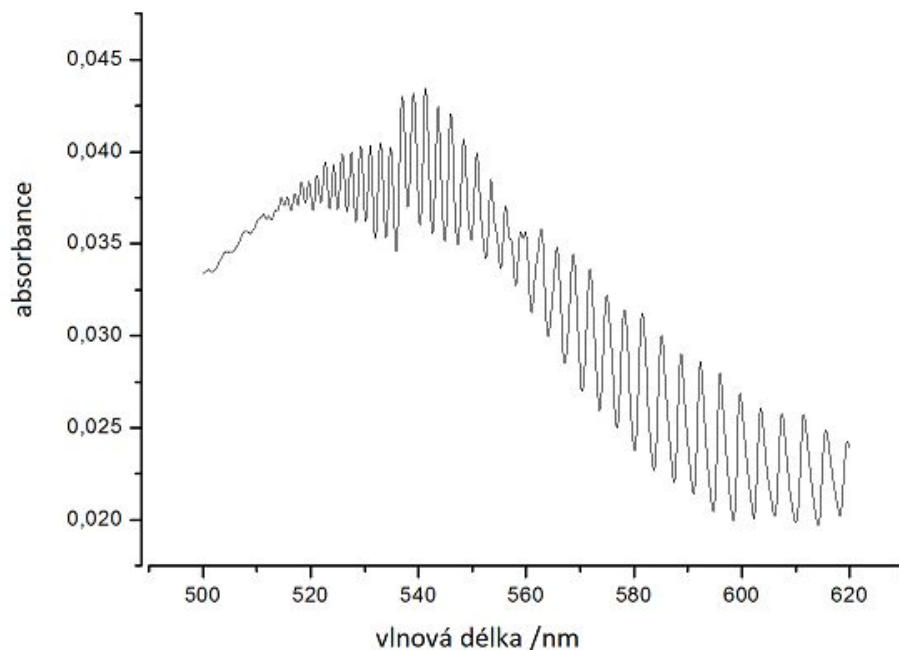
Je možné zjednodušit na:

$$\Delta E = \omega(1 - 2x(v + 1))$$

kde ω reprezentuje vibrační konstantu, x anharmonii a v vibrační úroveň.

4. Metoda

Lokální maxima absorpční křivky (*Graf 1.*) jsou nejvíce absorbované vlnové délky a ukazují, že vibrační úrovně korespondují právě jim. U jodu vlnová délka 542 nm patří k vibrační úrovni 27. K ostatním vrcholům křivky pak koresponduje číslo podle vzdálenosti právě od $v = 27$. Převrácením hodnot vlnových délek získáme jednotlivé vlnočty.

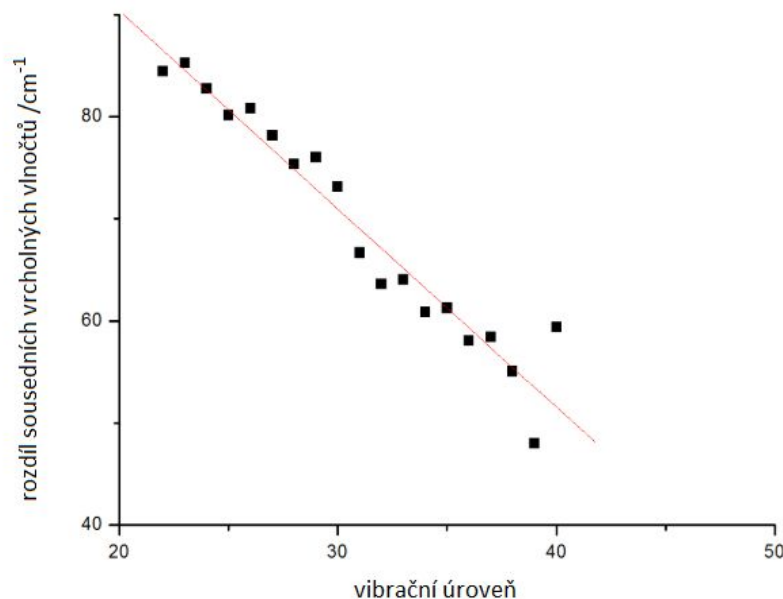


Graf 1.: Absorpční křivka jodu

Rozdíl vedlejších vlnočtů se postupně mění (*Graf 2.*). Jak můžeme vidět na *Grafu 1.*, rozdíl se postupně zvětšuje se zvětšující vlnovou délkou, tedy se zmenšující se vibrační úrovní. Míra tohoto zmenšování je násobek anharmonicity molekuly podle:

$$-2x\omega = A$$

Kde x odpovídá anharmonicitě, ω vibrační konstantě a A spádu funkce *Grafu 2.*, tedy míře změny rozdílů mezi sousedními vlnočty podle vibračních úrovní.



Graf 2.: Vztah rozdílu sousedních vlnočtů a vibračních úrovní

Přestože skutečná molekula nemá nikdy nulovou vibrační hodnotu, protože všechny částice se neustále pohybují, je možné získat teoretický rozdíl mezi $v = 0$ a $v = 1$. Tato hodnota je průsečíkem osy y v *Grafu 2.* Získané číslo lze poté dosadit za ΔE v :

$$\Delta E = \omega(1 - 2x(v + 1))$$

Z *Grafu 2.* je tedy možné vypočítat jak anharmonicitu, tak vibrační konstantu.

Disociační energie je minimální potenciální energie, kterou jádra při vzdalování se nabydou, potřebná k odtržení jader diatomové molekuly od sebe. Je integrálem funkce, která vzniká prodloužením úsečky v *Grafu 2.*

5. Výsledky

Všechna měření probíhala třikrát, během druhého měření však muselo dojít k chybě, neboť výsledky druhého měření se příliš liší od zbylých dvou, které jsou si blízko. V konečných výsledcích proto není druhé měření zohledněno.

Závěrem byly cíle úlohy splněny, protože je v *Tabulce 1.* možné najít všechny konstanty, které bylo úkolem vypočítat.

Měření	Anharmonicitá	Vibrační konstanta /cm ⁻¹	Disociační energie /cm ⁻¹
1.	$7,61 \times 10^{-3}$	127,36	4308,89
3.	$8,10 \times 10^{-3}$	135,14	4308,34
Průměr	$7,86 \times 10^{-3}$	127,31	4308,62

Tabulka 1.: Výsledky

6. Poděkování

Zde bych chtěla poděkovat mému supervisorovi RNDr. Martinovi Michlovi, Ph.D. za úvod do problematiky, pomoc a trpělivost. Za materiály, přístroje a za vůbec možnost uskutečnění děkuji FJFI ČVUT v Praze, UK v Praze a celému týmu Týdne vědy na Jaderce.

7. Zdroje

- [1.] *Iodine Spectroscopy* [online]. Trent University, 1997 [cit. 2018-06-19]. Dostupné z: https://www.trentu.ca/academic/physics/rshiell/PHYS461Hdir/lab_iodine_spectroscopy.pdf
- [2.] KARLÍČEK, Rolf a kol. *Analytická chemie pro farmaceuty*. 1. vydání. Praha: Nakladatelství Karolinum, 2001 ISBN 80-246-0348-9
- [3.] LESSINGER, Leslie. *Morse Oscillators, Birge-Sponer Extrapolation, and the Electronic Absorption Spectrum of I* [online]. 1994 [cit. 2018-06-19]. Dostupné z: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed071p388>
- [4.] SMART, Oliver. *Justification of harmonic form for bond potential* [online]. 1995 [cit. 2018-06-19]. Dostupné z: http://www.cryst.bbk.ac.uk/PPS2/course/section7/os_harju.html
- [5.] SNADDEN, R. B. The iodine spectrum revisited. *Journal of Chemical Education*, 1987 [cit. 2018-06-19]. Dostupné z: https://www.uni-ulm.de/physchem-praktikum/media/literatur/1987_The_Iodine_Spectrum_Revisited.pdf