



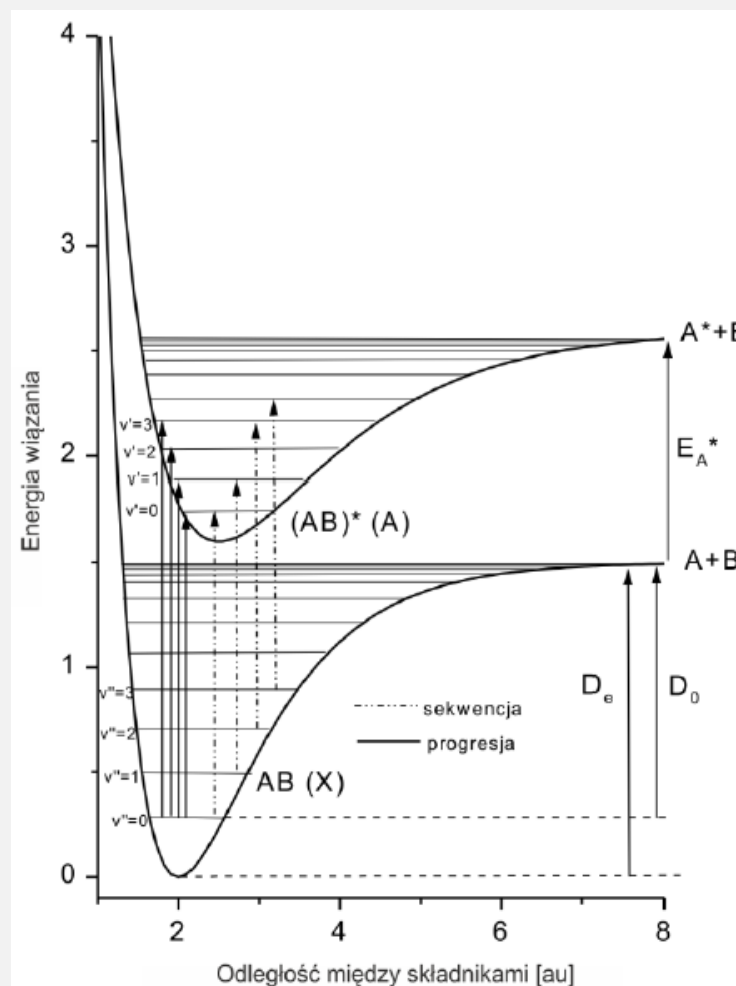
Energia dysocjacji molekuly jodu

Streszczenie

Celem ćwiczenia Z19 było wyznaczenie energii dysocjacji molekuly jodu. Rejestracja widma absorpcyjnego pozwoliła na przeprowadzenie ekstrapolacji Birge-Sponer, zaś korzystając ze znajomości fizyki molekularnej obliczono energię potrzebną do separacji cząsteczki jodu w stanie podstawowym. Uzyskano tym samym wynik $D_0 = (1,559 \pm 0,006)$ eV.

Poziomy energetyczne molekuly

Energia dysocjacji to najmniejsza energia jaką należy dostarczyć cząsteczce w stanie podstawowym by rozseparować jej składniki. Przejścia oscylacyjne możliwe są dla różnych stanów elektronowych molekuly (nazywamy to *przejściami oscylacyjno-elektronowymi*) jak i w obrębie tego samego stanu elektronowego (*przejścia oscylacyjne*). Oscylacyjne liczby kwantowe wyższych poziomów elektronowych oznaczamy v' , zaś niższych v'' . Identyfikacja konkretnych przejść przebiega analogicznie jak na rysunku 1, który ukazuje rozwiązanie równania Schrödingera dla potencjału Morse'a. Wyznaczenie energii dysocjacji jest możliwe dzięki metodzie zwanej *ekstrapolacją Birge-Sponer*.



Rysunek 1: Wykres energii wiązania w funkcji odległości między składnikami molekuly AB. Widać charakterystyczną asymetrię studni potencjału oscylatora anharmonicznego. Obraz zaczerpnięty z [1].

Ekstrapolacja Birge-Sponer

Energia dysocjacji poziomu wzbudzonego D_0^* jest związana z energią dysocjacji D_0 poprzez relację:

$$D_0^* = E^* + D_0,$$

gdzie $E^* = 0,9423$ eV to energia pierwszego stanu wzbudzonego atomu jodu.

Wprowadzając energię oznaczoną jako E_k , dla absorpcji do dowolnie wybranego poziomu v' , otrzymujemy wyrażenie:

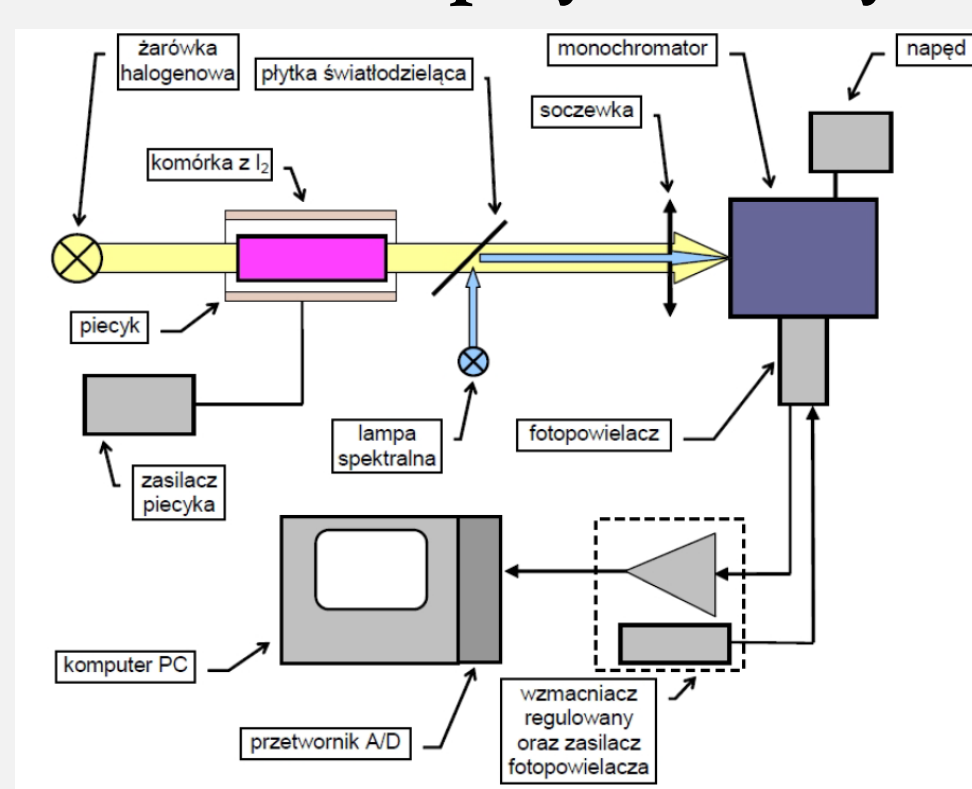
$$D_0^* = E_k + W,$$

gdzie energię W znajdujemy dopasowując do wykresu energii sąsiednich stanów oscylacyjnych od liczby $v + 1/2$

prostą, a następnie odczytując pole pod wykresem. Procedurę tą zwimy ekstrapolacją Birge-Sponer. Finalne wyrażenie na energię dysocjacji molekuly jodu dane jest jako:

$$D_0 = E_k + W - E^*.$$

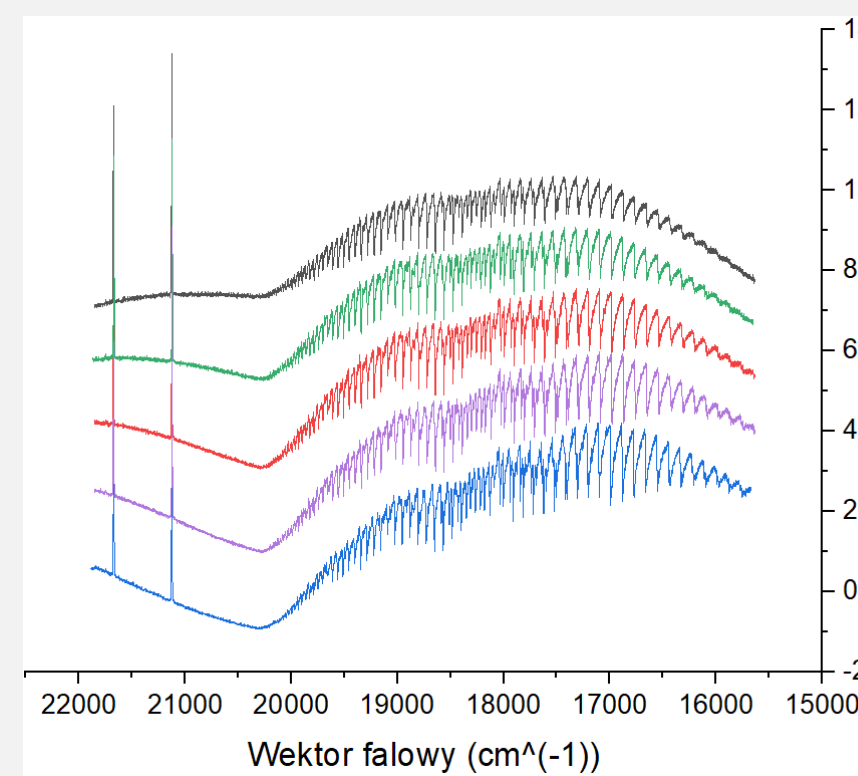
Układ eksperymentalny



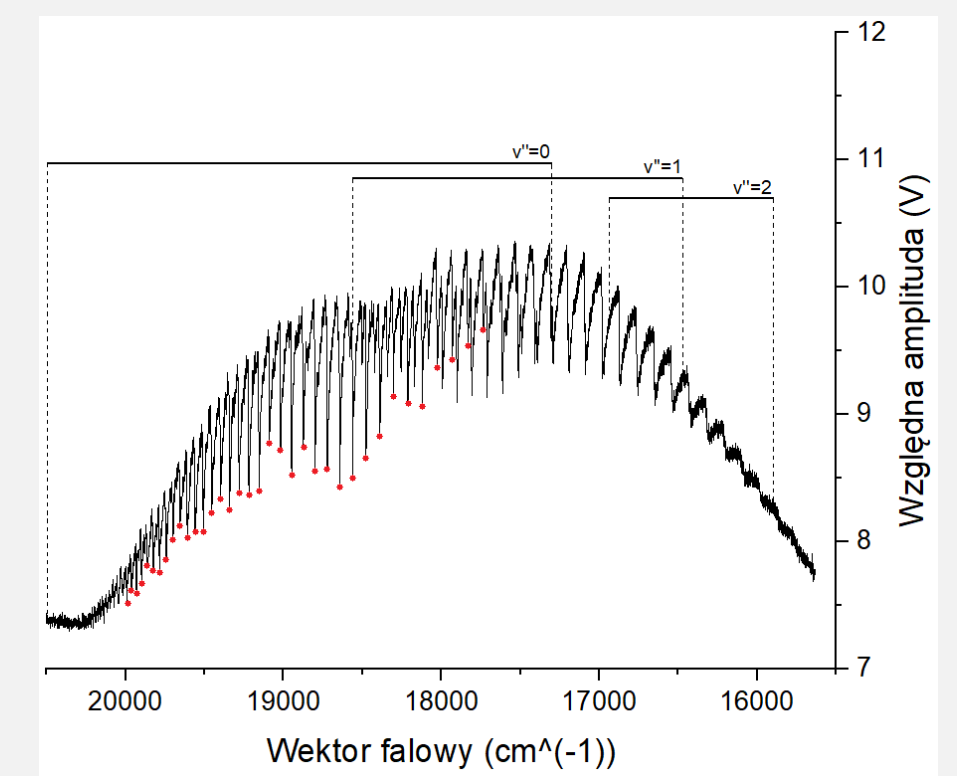
Rysunek 2: Układ eksperymentalny. Wszystkie elementy wchodzące w skład aparatury zostały wypisane na rysunku. Obraz zaczerpnięty z [2].

Wyniki

Otrzymane widma absorpcyjne

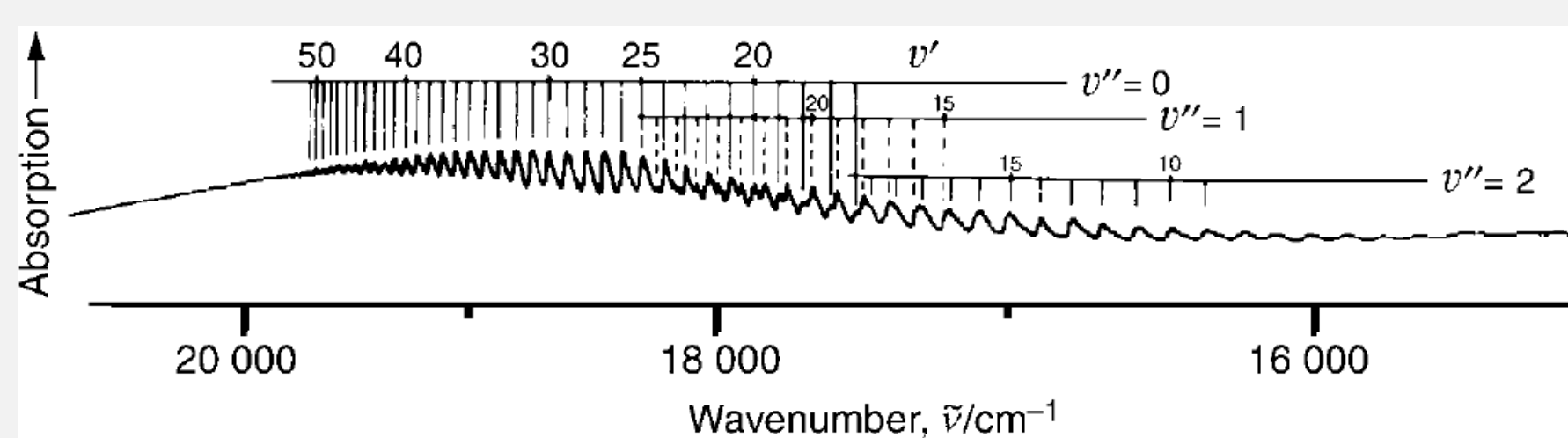


Rysunek 6: Widma absorpcyjne dla 5 temperatur: 30°C (czarny), 40°C (zielony), 50°C (czerwony), 60°C (fioletowy), 70°C (niebieski). Zauważyć można zróżnicowaną strukturę widma w miejscach nakładania się przejść z różnych poziomów oscylacyjnych.



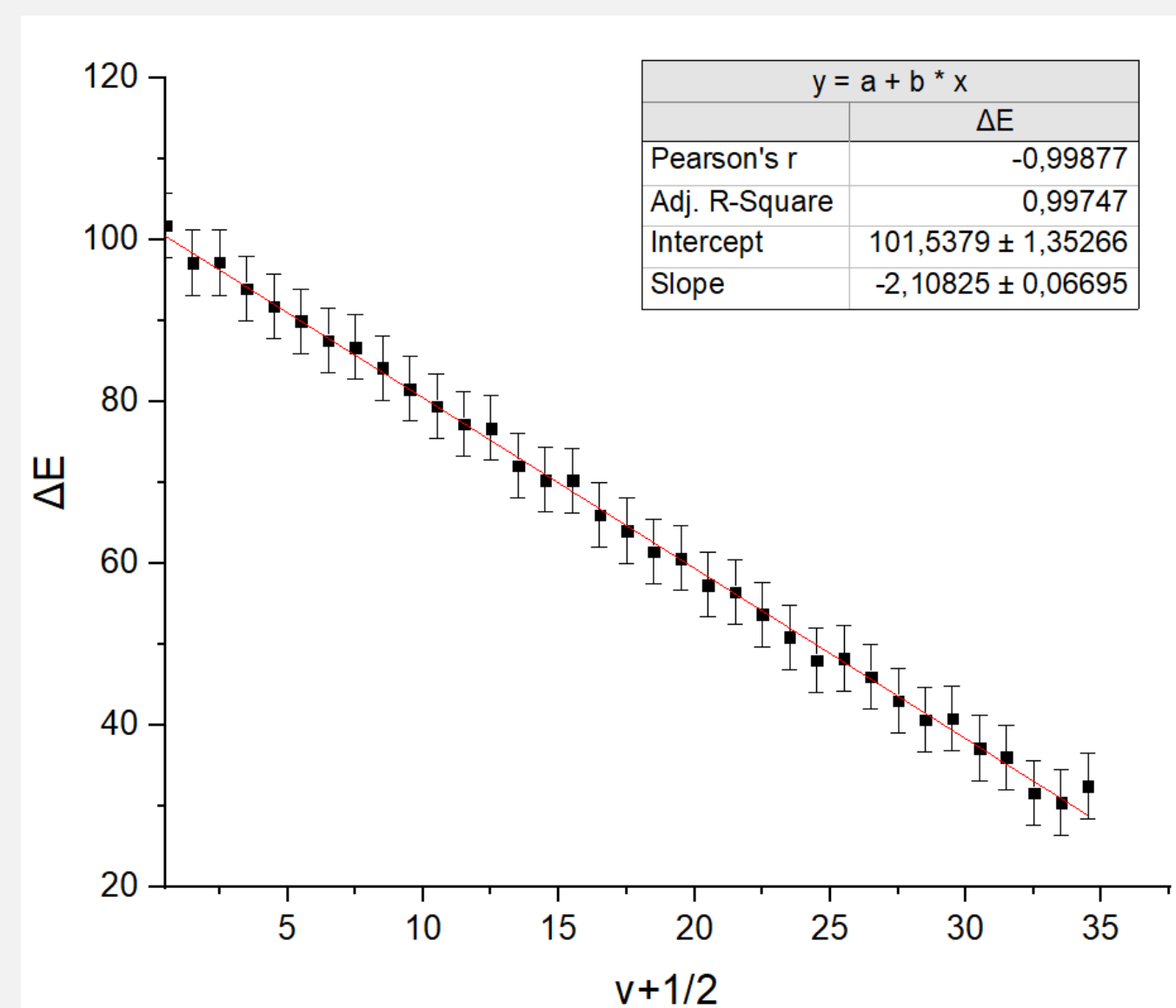
Rysunek 7: Szczegóły widma absorpcyjnego dla temperatury 30°C. Ukazane zostały przedziały występowania progresji $v'' = 0$, $v'' = 1$ i $v'' = 2$. Czerwonymi punktami zaznaczone zostały minima uwzględnione do ekstrapolacji Birge-Sponer.

Widmo absorpcyjne



Rysunek 3: Obraz przykładowego widma absorpcyjnego w funkcji liczby falowej. Widać wyraźnie trudność w ustaleniu oscylacyjnej liczby kwantowej w obszarze nakładania się dwóch przejść oscylacyjnych. Obraz z [3].

Ekstrapolacja



Rysunek 8: Ekstrapolacja Birge-Sponer.

Wyznaczenie pola pod krzywą ekstrapolacyjną pozwoliło na znalezienie energii dysocjacji molekuly jodu:

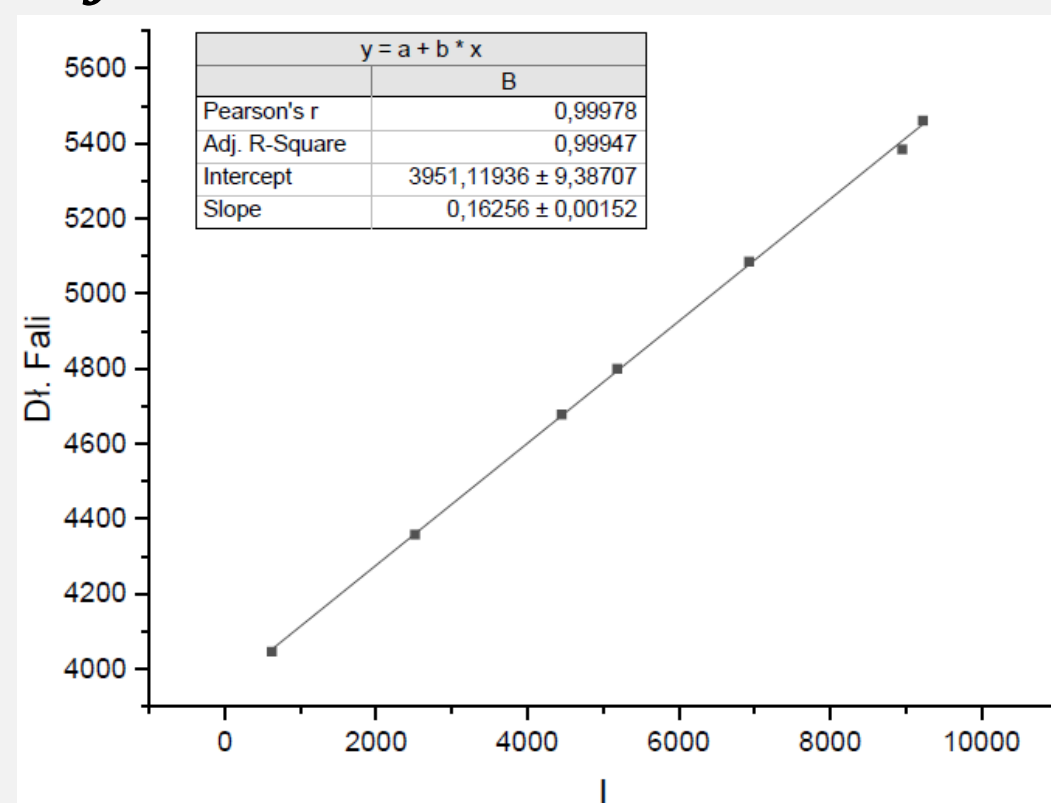
$$D_0 = (12573 \pm 103) \text{ cm}^{-1},$$

$$\text{co w przeliczeniu na eV daje:}$$

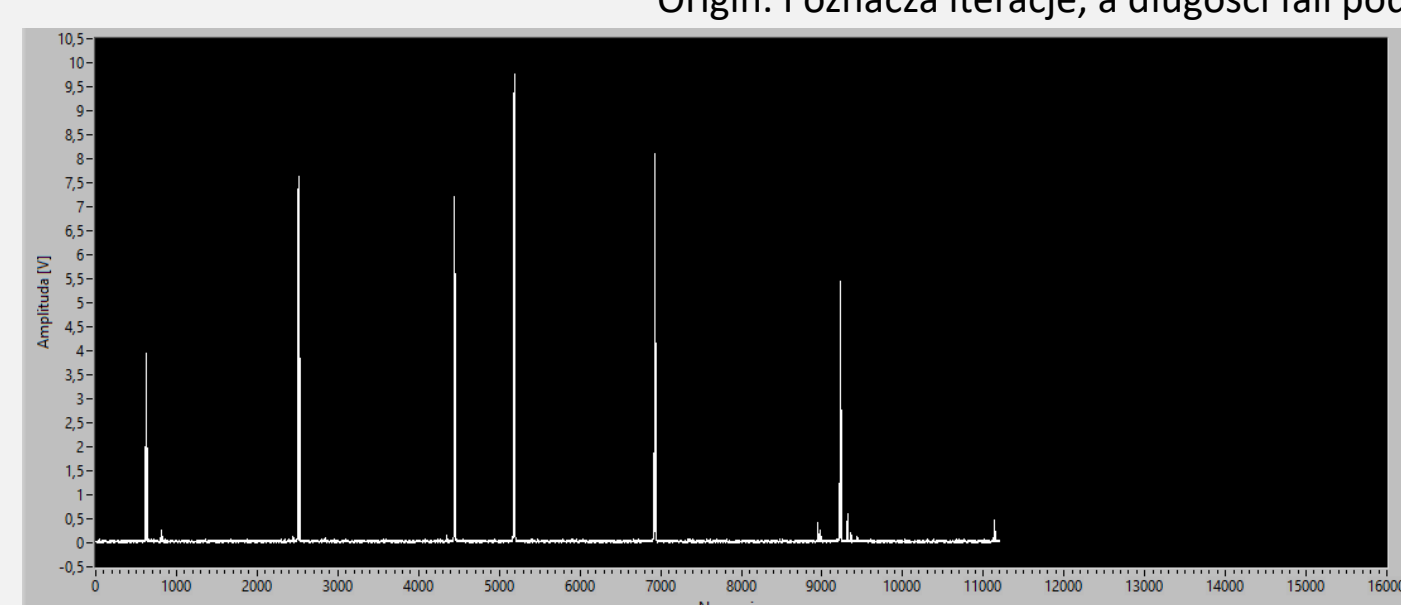
$$D_0 = (1,559 \pm 0,006) \text{ eV}.$$

Krzywa kalibracji monochromatora

Dzięki pomiarowi widma lampy Hg-Cd, otrzymano krzywą kalibracji pokazaną na rysunku 4. Dokonano tego za pomocą przydzielenia długości fali (w angstromach) do odpowiednich pików widma. Przypisujemy interwały między wzrostami natężeń rejestrowanego promieniowania do przerw między silnymi liniami lampy rtęciowo-kadmowej z tablic. Dobierając długości fal tak, by układały się na jednej prostej, a następnie przeprowadzając regresję liniową, otrzymujemy krzywą kalibracyjną.



Rysunek 4: Krzywa kalibracyjna wykonana w programie Origin. I oznacza iterację, a długości fali podane są w Å.



Rysunek 5: Widmo charakterystyczne lampy Hg-Cd.

Podsumowanie i wnioski

Otrzymana wartość energii dysocjacji jest dobrze zgodna z wartością tablicową wynoszącą $D_0 = 1,57$ eV [4]. Przy odczytywaniu różnic energii sąsiednich dipów należy pamiętać, aby piki kalibracyjne (dwa piki od lampy Hg-Cd poprzedzające widmo absorpcyjne) jak najlepiej się przekrywały. Zapewni to, iż wszystkim przejściom jednej energii odpowiadać będzie jedna liczba falowa. Analizując rysunek 6 zauważyć można, iż wraz ze wzrostem temperatury oscylacje charakteryzują się coraz większą amplitudą. Wykresy stają się bardziej przejrzyste i dokładniejsze. Efekt odpowiedzialny za to zjawisko to *termiczne obsadzenie poziomów energetycznych*, który jest opisywany w [1].

Literatura

- [1] II Pracownia Fizyczna, Instrukcja do ćwiczenia Z19 - Dodatek 1 - Teoria.
- [2] II Pracownia Fizyczna, Instrukcja do ćwiczenia Z19.
- [3] J.M. Hollas, Modern Spectroscopy, John Wiley Sons 2004.
- [4] Luo, Y. R., Comprehensive handbook of chemical bond energies, (2007).