

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

Кафедра физики

Изучение молекулярного спектра поглощения паров йода

Методические указания
к лабораторной работе №3.9
по курсу «Физика»

Минск БГУИР 2009

УДК 539.194(076)
ББК 22.36я7
ИЗ9

Рецензент:
д-р физ.-мат. наук, проф. Н. Т. Квасов

Составитель
М. А. Иванов

Изучение молекулярного спектра поглощения паров йода : метод. указ. ИЗ9 к лаб. работе №3.9 по курсу «Физика» / сост. М. А. Иванов. – Минск : БГУИР, 2009. – 20 с. : ил.

Описание лабораторной работы по квантовой физике «Изучение молекулярного спектра поглощения паров йода» предназначено для организации самостоятельной работы студентов. Сформулирована цель работы, приведены методическое обоснование, описание экспериментальной установки, задание и контрольные вопросы.

Указания разработаны на основе методических работ кафедры атомной физики и физической информатики физического факультета Белорусского государственного университета.

Предназначены для студентов всех специальностей и форм обучения БГУИР.

УДК 539.194(076)
ББК 22.36я7

© Иванов М. А., составление, 2009
© УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», 2009

Лабораторная работа №3.9

Изучение молекулярного спектра поглощения паров йода

Цель работы:

- ознакомиться с понятиями спектров испускания и поглощения;
- изучить структуру молекулярного спектра поглощения;
- измерить положение полос поглощения молекул йода и рассчитать параметры молекулы.

1. Спектры испускания и поглощения света веществом

Свет представляет собой электромагнитное излучение разных длин волн (от 400 нм до 760 нм – видимый диапазон). Интенсивность света I , испускаемого поверхностью или падающего на нее, – это мощность, переносимая волнами через единичную площадь на этой поверхности, измеряется в ($\text{Вт}/\text{м}^2$). Чтобы описать долю мощности dI , переносимую волнами с длинами волн от λ до $\lambda + d\lambda$, вводят спектральную плотность интенсивности света $j(\lambda)$:

$$dI = j(\lambda) d\lambda, \quad (1)$$

$j(\lambda)$ измеряется в $\text{Вт}/\text{м}^3$ (но это не объемная плотность мощности!). Интенсивность света с длинами волн от λ_1 до λ_2 равна

$$I(\lambda_1, \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} j(\lambda) d\lambda. \quad (2)$$

Эта формула связывает I и $j(\lambda)$ по форме так же, как связаны между собой масса и плотность тела, заряд и плотность заряда, – отсюда и название $j(\lambda)$ – спектральная плотность.

Функцию $j(\lambda)$ называют коротко «спектром света». Если хотят сравнить формы спектров разных источников света, эту функцию нормируют:

$$j_n(\lambda) \equiv \frac{j(\lambda)}{\int_0^{\infty} j(\lambda) d\lambda}, \quad (3)$$

где $j_n(\lambda)$ – нормированный спектр.

В квантовой оптике функцию $j(\lambda)$, описывающую спектр света, испускаемого поверхностью нагретого тела, называют испускательной способностью. Она описывается в этом случае формулой Планка. При удалении от нагретого тела спектральная плотность убывает, т.к. энергия излучения распределяется по все большей площади, и название «испускательная способность» уже не подходит.

Чтобы измерить спектр света, нужно иметь *монохроматор* (содержащий призму или дифракционную решетку), выделяющий волны в малом интервале ($\lambda, \lambda + \Delta\lambda$), и *фотометр*, позволяющий измерить интенсивность излучения. Прибор, включающий в себя монохроматор и фотометр, называют **спектрофотометром**.

Проходя через вещество, излучение частично поглощается, причем степень поглощения зависит от длины волны, типа вещества и толщины слоя вещества.

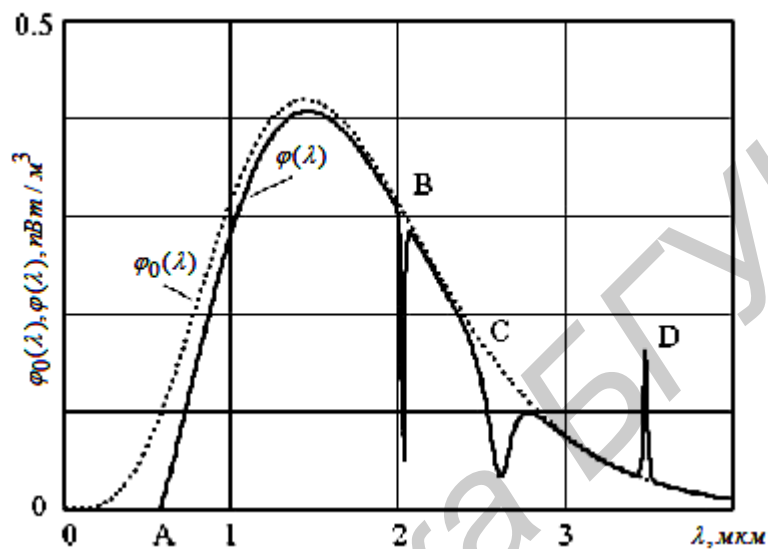


Рис. 1. Спектр испускания источника света (спектр нити накаливания при температуре 2000 К) $j_0(l)$ и спектр этого излучения после слоя поглощающего вещества $j(l)$

На рис. 1 показан спектр света $j_0(l)$, падающего на слой вещества, и спектр света $j(l)$, прошедшего через слой вещества. Спектр $j(l)$ синтезирован на компьютере; в нем отображены основные особенности поглощения, характерные для разных веществ: от 0 до A свет полностью поглощается; от A до B степень поглощения плавно меняется в зависимости от λ ; в окрестности точки B расположена узкая линия поглощения (набор таких узких линий поглощения характерен для разреженных одноатомных газов); C – полоса поглощения (десятки таких полос наблюдаются при поглощении света двухатомными и более сложными молекулами); D – пик фотолюминесценции (часть энергии излучения, поглощенной веществом, переизлучается на больших длинах волн).

При отсутствии фотолюминесценции можно ввести коэффициент поглощения слоя вещества $a(l)$:

$$a(l) \equiv \frac{j_0(l) - j(l)}{j_0(l)}, \quad (4)$$

$a(l) \leq 1$. Зависимость $\alpha(\lambda)$ называют еще «спектром поглощения» (слоя); толщину слоя необходимо указывать.

Из опыта следует, что поглощение зависит от толщины слоя l (закон Бугера) как

$$j(l) = j_0(l)e^{-k(l)l}, \quad (5)$$

где k (читается «каппа») также называют коэффициентом поглощения (от l не зависит); $[k] = m^{-1}$. Тогда

$$k(l) = -\frac{1}{l} \ln \frac{j(l)}{j_0(l)}. \quad (6)$$

Функцию $k(l)$ также называют «спектром поглощения». Чтобы измерить спектр поглощения, нужно измерить спектры света до и после поглощающего слоя и применить формулу (6).

В данной установке используется монохроматор, спектр наблюдается визуально. Измерить интенсивность излучения наш глаз не может, но легко замечает перепады интенсивности, например положение *темных вертикальных полос поглощения* на цветном фоне. Расположение полос характерно для молекул данного типа; совокупность их положений при визуальном наблюдении тоже называют «спектром поглощения» – за неимением лучшего.

Указанные три разных определения «спектра поглощения» используют в разных приложениях; из контекста обычно видно, о чем идет речь.

2. Внутримолекулярные виды движения и полная энергия двухатомной молекулы

В отличие от атома в молекуле кроме *движения электронов* существуют движения, в которых участвуют ядра: *колебательное движение ядер* относительно положения равновесия и *вращение молекулы* как целого относительно центра масс. Энергии всех этих движений квантуются, что приводит к усложнению схемы энергетических уровней по сравнению с атомом.

Совокупность значений полной энергии молекулы может быть определена при решении полного волнового уравнения Шредингера, описывающего все виды движений в молекуле. Однако точное решение такого уравнения даже в простейшем случае двухатомной молекулы невозможно. Но исследования показали, что приближенно полное уравнение Шредингера можно разделить на три решаемых уравнения, соответствующих электронному, колебательному и вращательному движениям. При этом волновая функция молекулы может быть представлена в виде произведения $U = U_{эл} \cdot U_{кол} \cdot U_{вр}$, а полная энергия молекулы представляет собой сумму энергий, соответствующих трём видам движения:

$$E = E_{эл} + E_{кол} + E_{вр}. \quad (7)$$

Такое разделение является физически обоснованным. Вследствие огромной разницы между массами электронов и ядер, электроны движутся намного быстрее. Поэтому при рассмотрении движения электронов мы можем считать

ядра покоящимися. С другой стороны, исследуя движение ядер, можно получить хорошее приближение, если пользоваться средними значениями физических величин, относящихся к движению электронов, т. к. за время, необходимое для заметного перемещения ядер, электроны совершают огромное количество обращений вокруг них.

2.1. Электронная энергия молекулы

Для определения электронной части полной энергии молекулы рассматривается молекула с закреплёнными в пространстве ядрами. Валентные электроны движутся в электростатическом поле ядер, поэтому в уравнении Шредингера, описывающем движение электронов, должна быть задана потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядрами. Поскольку эта энергия зависит от расстояния между ядрами, то межъядерное расстояние r войдёт в уравнение Шредингера в виде параметра, а полученные при решении квантованные значения электронной энергии будут являться функцией этого расстояния $E_{эл m}(r)$, где m – квантовое число, определяющее электронную энергию. Таким образом, в отличие от атомов, разным электронным состояниям которых соответствуют уровни энергии, возможным электронным состояниям двухатомной молекулы может быть поставлена в соответствие система кривых (рис. 2), называемых *конфигурационными кривыми*.

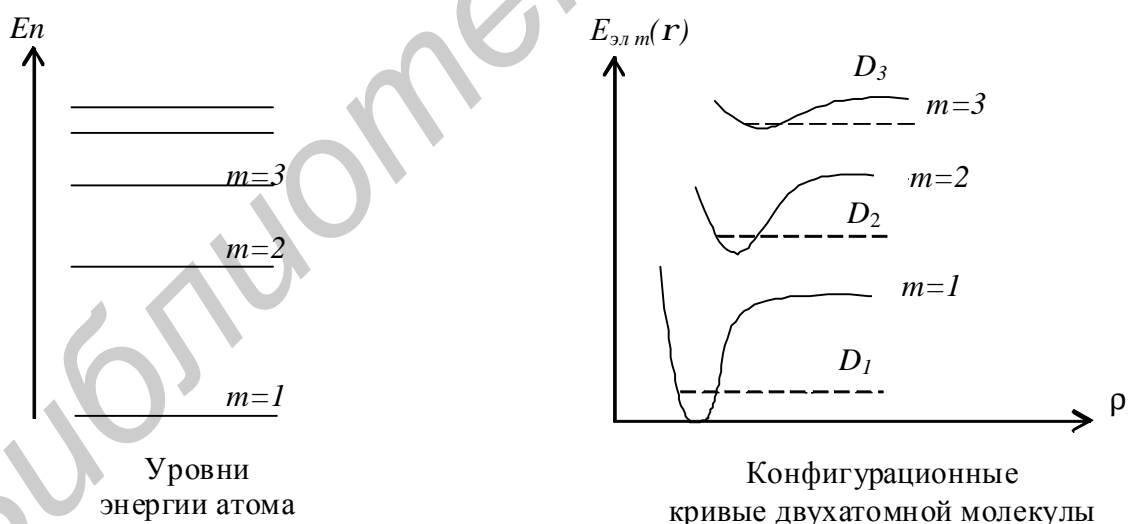


Рис. 2. Уровни энергии атома и конфигурационные кривые двухатомной молекулы

Для относительного движения ядер $E_{эл m}(r)$ играет роль потенциальной энергии, поэтому конфигурационные кривые совпадают с кривыми потенциальной энергии $U(r)$.

С увеличением квантового числа m изменяется вид конфигурационной кривой: уменьшается ее глубина в минимуме и положение минимума смещается в сторону больших ρ , т.е. равновесное межъядерное расстояние в возбуждённом состоянии увеличивается. В связи с этим часто уже второе возбуждённое состояние ($m = 3$) в молекуле не реализуется, так как молекула становится неустойчивой. Различные электронные состояния обычно характеризуют значениями электронной энергии $E_{элm}(r)$ в равновесном состоянии (т.е. в точке минимума конфигурационной кривой). Энергетическое расстояние между последовательными электронными состояниями составляет, как и для атомов, 1 – 10 эВ и уменьшается с увеличением m .

Прочность химической связи тем больше, чем глубже минимум на конфигурационной кривой. Разность энергий $E_{элm}(\infty) - E_{элm}(r) \approx D_m$ представляет собой (с точностью до небольшой поправки) *энергию диссоциации* молекулы D_m . Наибольшее значение энергия диссоциации имеет для основного электронного состояния молекулы ($m = 1$).

2.2. Колебательная энергия молекулы

При решении задачи о колебаниях ядер необходимо в уравнение Шредингера, описывающее движение ядер, подставить значение потенциальной энергии $E_{элm}(r)$. Так как различным электронным состояниям молекулы соответствуют различные конфигурационные кривые, то решение этой задачи следует проводить для каждого электронного состояния молекулы отдельно. Обычно точный вид зависимости $E_{элm}(r)$ от r неизвестен. Поэтому при решении колебательной задачи приходится подбирать функцию потенциальной энергии, удовлетворяющую опыту.

Модель гармонического осциллятора. Если вблизи положения равновесия $r = r_0$ можно принять для потенциальной энергии

$$U(r) = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2, \quad (8)$$

где k – коэффициент жёсткости связи, то в физике такую модель принято называть *гармоническим осциллятором*. Потенциальной энергии (8) соответствуют колебания гармонического осциллятора с частотой $\nu_{кол} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k/m}$, где m – приведённая масса осциллятора.

Задача о гармоническом осцилляторе в квантовой механике решается точно. Возможные значения энергии гармонического осциллятора определяются выражением

$$E_n = h\nu_{кол} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (9)$$

Здесь h – постоянная Планка, $n = 0, 1, 2, \dots$ – колебательное квантовое число. Нижнему колебательному состоянию соответствует энергия $\frac{1}{2} h\nu_{\text{кол}}$, т.е. колебания в молекуле никогда не могут прекратиться (нулевые колебания). На рис. 3 представлены потенциальная энергия и уровни энергии гармонического осциллятора.

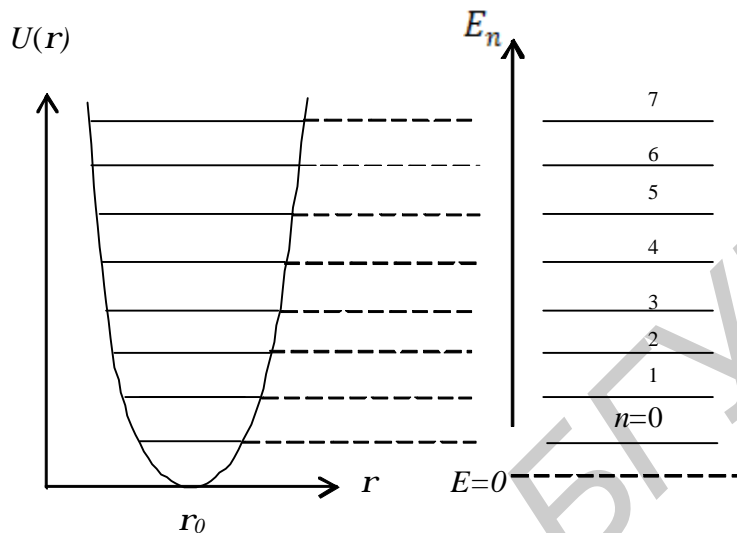


Рис. 3. Потенциальная энергия и уровни энергии гармонического осциллятора

Модель ангармонического осциллятора. В реальной молекуле возможны колебания с большими амплитудами, которые уже нельзя описать параболической потенциальной функцией (8), приемлемой для малых колебаний. В этом случае потенциальную функцию подбирают таким образом, чтобы она соответствовала опыту и допускала точное решение уравнения Шредингера. Решение уравнения Шредингера с учетом отклонения потенциальной энергии от характерной для модели гармонического осциллятора функции (8) даёт следующие собственные значения энергии (рис. 4):

$$E_n = h\nu_{\text{кол}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - c h\nu_{\text{кол}} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (10)$$

Постоянная c (читается «хи») называется *постоянной ангармоничности*. Как и в случае гармонического осциллятора, $n = 0, 1, 2, \dots, n_{\text{зр}}$ – колебательное квантовое число, $n_{\text{зр}}$ – его граничное значение.

Колебательная энергия молекулы в состоянии $cn = 0$ минимальна и равна

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu_{\text{кол}} - \frac{1}{4} c h\nu_{\text{кол}}. \quad (11)$$

Если молекулу вывести из этого состояния, сообщив ей колебательную энергию, превышающую энергию диссоциации D (см. рис. 4), то она распадается на составляющие её атомы с произвольными (неквантованными) значениями кинетической энергии. Это приведёт к тому, что выше границы диссоциации спектр станет сплошным.

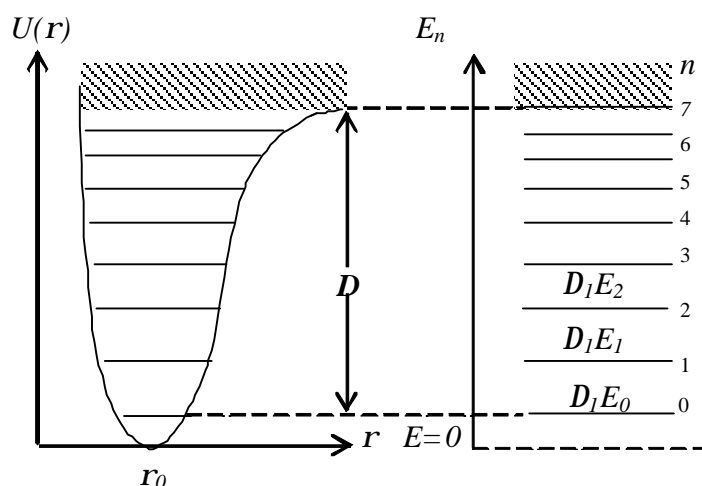


Рис. 4. Потенциальная энергия и уровни энергии ангармонического осциллятора

Энергия диссоциации зависит не только от глубины потенциальной ямы, но и от энергии нулевых колебаний (см. рис. 4).

Расстояния между соседними колебательными уровнями, обычно называемые *первыми разностями энергии*, $\Delta_1 E = E_{n+1} - E_n$ легко найти из формулы (10):

$$\Delta_1 E = E_{n+1} - E_n = h\nu_{\text{кол}} - 2h\nu_{\text{кол}} c(n+1). \quad (12)$$

Таким образом, по мере приближения к границе диссоциации первые разности энергии убывают по линейному закону, а общее количество колебательных уровней молекулы оказывается конечным. Наибольшее значение колебательного числа $n_{\text{гр}}$ определяется постоянной ангармоничности c :

$$n_{\text{гр}} \approx \frac{1}{2c}. \quad (13)$$

Из формулы (10) следует, что с хорошей точностью

$$D = \frac{1}{2} h\nu_{\text{кол}} n_{\text{гр}}. \quad (14)$$

Поскольку вид потенциальной кривой изменяется при электронном возбуждении, то для каждого электронного состояния имеется своя система колебательных уровней.

Расстояние между колебательными уровнями значительно меньше интервала между электронными уровнями и по порядку величины составляет $10^{-2} - 10^{-1}$ эВ.

2.3. Вращательная энергия молекулы

Эта часть полной энергии молекулы определяется из уравнения Шредингера, описывающего вращательное движение молекулы. В первом приближении расстояние между ядрами считается неизменным (модель жёсткого ротатора). Момент импульса L молекулы принимает только квантованные значения:

$$L = \hbar \sqrt{J(J+1)}, \quad (15)$$

где $J = 0, 1, 2, \dots$ – вращательное квантовое число.

Так как рассматривается жёсткая система, то её потенциальная энергия является чисто кинетической и по известной формуле механики равна

$$E_{\text{вр}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = BJ(J+1), \quad (16)$$

где I – момент инерции молекулы относительно ее оси вращения, $B = \frac{\hbar^2}{2I}$ – постоянная вращения.

Из идеализированной формулы (16) следует, что вращательные уровни образуют бесконечную расходящуюся систему. Практически же существует граница по энергии, которая определяется максимальной центробежной силой,рывающей молекулу.

Энергетическое расстояние между нижними вращательными уровнями на 2 порядка величины меньше, чем между колебательными, и составляет $10^{-4} - 10^{-3}$ эВ.

3. Оптические спектры двухатомных молекул

Полная энергия молекулы без учёта взаимодействия между различными видами движений является суммой электронной, колебательной и вращательной энергий. В результате определённому энергетическому состоянию электронной оболочки молекулы соответствует целый набор возможных колебательных и вращательных состояний. Типичная полная схема энергетических уровней двухатомной молекулы, имеющей одно возбуждённое электронное состояние, изображена на рис. 5.

Существует три типа молекулярных спектров, обусловленных переходами между различными энергетическими состояниями.

Вращательные спектры возникают в результате изменения одного только вращательного состояния молекулы. Принимая во внимание правило отбора для вращательного квантового числа

$$\Delta J \equiv J' - J = \pm 1, \quad (17)$$

в соответствии с которым возможны переходы лишь между соседними уровнями, получаем

$$n_{\text{вр}} = 2 \frac{B}{h} (J+1). \quad (18)$$

Отсюда следует, что вращательный спектр двухатомной молекулы представляет собой серию равноотстоящих линий (идеализация, смотрите оговорку после формулы (16)).

Учитывая, что $\Delta E_{вр} = h\nu_{вр} = 10^{-4} \dots 10^{-3} \text{ эВ}$, можно найти область частот вращательного спектра:

$$\nu_{вр} = 10^{10} \dots 10^{11} \text{ Гц}; \quad l_{вр} = 1 \text{ см} \dots 1 \text{ мм}.$$

Эти длины волн лежат в микроволновой (СВЧ) области и поэтому вращательные спектры изучаются методами радиоспектроскопии.

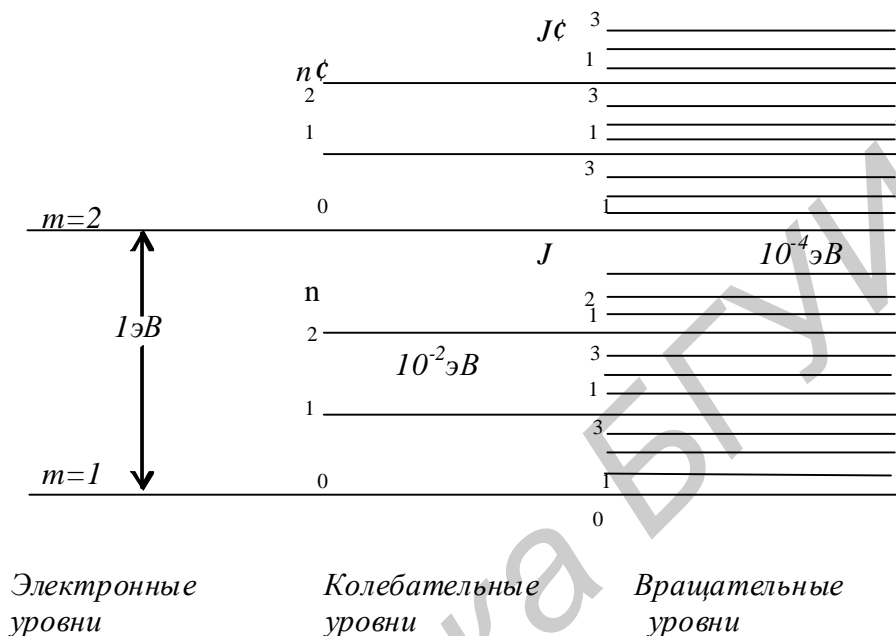


Рис. 5. Схема энергетических уровней двухатомной молекулы

Вращательные спектры появляются не у всех молекул, а лишь у тех, которые имеют постоянный электрический дипольный момент. При отсутствии постоянного дипольного момента молекулы неактивны в микроволновой области, и *вращательный спектр у них не появляется* (H_2 , Cl_2 , J_2 и т.д.).

Колебательные спектры (колебательно-вращательные). Чтобы вызвать изменения колебательного состояния молекулы, необходимо сообщить ей энергию порядка $10^{-2} - 10^{-1} \text{ эВ}$. Так как $\Delta E_{вр}$ примерно в 100 раз меньше $\Delta E_{кол}$, то одновременно будет изменяться и вращательное состояние молекулы. Поэтому, если вращательные спектры могут наблюдаться в чистом виде, то при изменениях колебательного состояния наблюдается колебательно-вращательный спектр. В случае колебательно-вращательного спектра электронная энергия молекулы не изменяется и для частот линий этого спектра получается выражение

$$\nu_{кол} = \frac{1}{h} [(E'_{кол} + E'_{вр}) - (E_{кол} + E_{вр})]. \quad (19)$$

Добавление колебательного кванта энергии к вращательному смещает весь спектр в ближнюю инфракрасную область:

$$\nu_{вр} = 10^{12} \dots 10^{13} \text{ Гц}; \quad l_{кол} = 10^{-2} \dots 10^{-3} \text{ см}.$$

Вид спектра легко представить, если отвлечься от вращательного движения. Правила отбора для ангармонического осциллятора разрешают переходы между любыми колебательными состояниями. А так как расстояния между колебательными уровнями последовательно уменьшаются, то чисто колебательный спектр представлял бы собой группу линий, сбегающих в коротковолновой стороне спектра к некоторому пределу. В результате наложения малых вращательных квантов энергии на колебательные каждая линия чисто колебательного спектра превращается в полосу с вращательной структурой, которая чаще всего спектральным прибором не разрешается. В результате колебательно-вращательный спектр приобретает вид полос, сбегающих к коротковолновому пределу.

Необходимым условием появления колебательного спектра является изменение электрического дипольного момента молекулы при её колебаниях. Это накладывает определённые ограничения на применимость инфракрасной спектроскопии. В частности, *колебательные спектры отсутствуют у двухатомных молекул с одинаковыми ядрами, к которым относится и молекула йода.*

Электронные спектры (электронно-колебательно-вращательные).

Этот вид спектра связан с одновременным изменением энергий вращательного и колебательного движений, сопровождающих изменение электронного состояния молекулы. Соответствующие частоты определяются выражением

$$n_{эл} = \frac{1}{h} [(E'_{эл} + E'_{кол} + E'_{вр}) - (E_{эл} + E_{кол} + E_{вр})]. \quad (20)$$

Так как энергия поглощаемого излучения должна превышать теперь энергию электронного перехода $\Delta E_{эл} = h n_{эл}$, это приводит к смещению спектральных полос в видимую или ультрафиолетовую область:

$$n_{эл} = 10^{14} \dots 10^{15} \text{ Гц}; \quad l_{эл} = 10^{-4} \dots 10^{-5} \text{ см}.$$

Поскольку у начального и конечного электронных состояний существует много колебательных и вращательных подуровней, то электронные спектры имеют очень сложную структуру. Одному и тому же электронному переходу соответствует сложная последовательность электронно-колебательно-вращательных полос. *Электронные спектры могут быть возбуждены у всех без исключения молекул.*

4. Электронный спектр поглощения молекул йода

В данной работе исследуется электронный спектр поглощения молекул йода в парообразном состоянии. Для его получения пучок света со сплошным спектром пропускают через парообразный йод, который состоит из двухатомных молекул J_2 . При поглощении кванта видимого света молекула йода переходит из основного электронного состояния в первое возбуждённое (рис. 6). Энергия $\Delta E_{эл}$, необходимая для перехода молекулы с наиболее глубокого колебательного уровня ($n = 0$) основного электронного состояния на наиболее глубо-

кий колебательный уровень ($n' = 0$) первого возбуждённого электронного состояния, называется энергией электронного перехода. Кроме перехода ($n=0 \rightarrow n'=0$) будут совершаться и другие переходы ($n \rightarrow n'$). Колебательные квантовые числа нижнего и верхнего электронных состояний n и n' могут иметь любые значения.

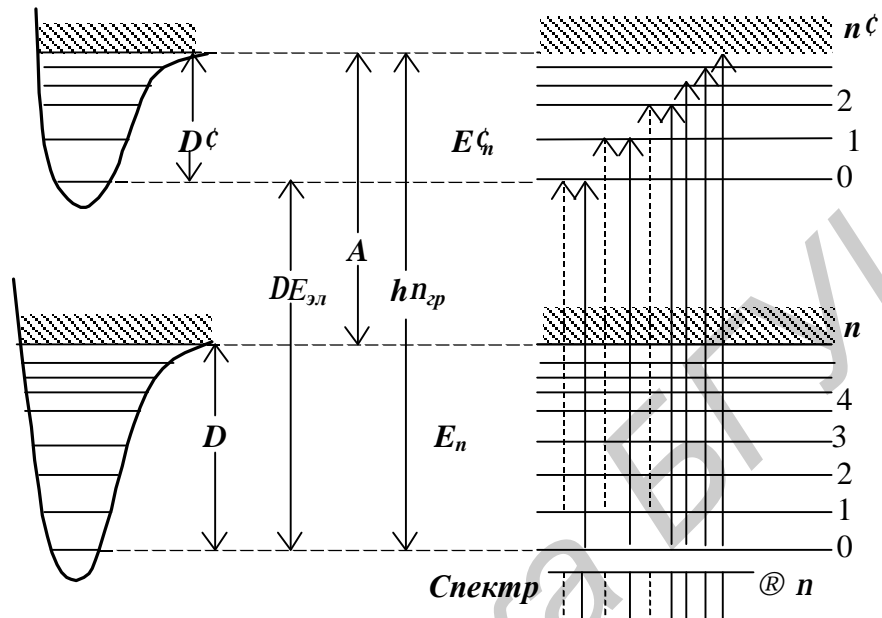


Рис. 6. Переходы на разные колебательные уровни при поглощении света молекулой

При достаточно низких температурах подавляющая часть молекул находится на нижнем колебательном уровне основного электронного состояния с $n=0$. Поэтому в электронном спектре поглощения в первую очередь проявляют себя переходы с этого уровня на различные колебательные уровни первого возбуждённого электронного состояния (сплошные линии на рис. 6).

Простые преобразования приводят к формуле

$$h\nu_{n'} = h\nu_{эл} + h\nu'_{кол}(1 - c)n' - h\nu'_{кол} c' n'^2, \quad (21)$$

где $h\nu'_{кол}$ и c' – энергия колебаний и постоянная ангармоничности молекулы в первом возбуждённом электронном состоянии.

При частотах $\nu < \nu_{эл}$ молекула не поглощает свет, вследствие чего в этой области спектр поглощения полностью совпадает со спектром используемого источника света. В диапазоне частот $\nu > \nu_{эл}$ поглощение света связано с диссоциацией молекулы, в результате чего спектр поглощения молекулы утрачивает полосатую структуру и становится сплошным. Следовательно, по протяжённости полосатого электронного спектра молекулы можно найти её энергию диссоциации в возбуждённом электронном состоянии:

$$D' = h\nu_{эл} - h\nu_{эл}. \quad (22)$$

Если известна энергия возбуждения A атома йода, то энергию диссоциации молекулы йода в основном электронном состоянии D можно найти из исследуемого электронного спектра поглощения. Как следует из рис. 6,

$$hn_{\text{сп}} = hn_{\text{эл}} + D' = D + A. \quad (23)$$

Для молекулы йода $A = 0,95 \text{ эВ}$.

5. Экспериментальная установка

5.1. Порядок выполнения работы

Для получения спектра поглощения молекул йода сквозь пары йода пропускают пучок света от лампы накаливания и исследуют прошедший свет с помощью спектрального прибора (монохроматора). Пары йода, состоящие из молекул J_2 , возникают при нагревании кристаллического йода в специальной кювете с прозрачными торцевыми стенками (йод переходит в газообразное состояние, минуя жидкую фазу).

Экспериментальная установка собрана на базе монохроматора МУМ. Основным элементом этого монохроматора является дифракционная решётка с переменным шагом нарезки и криволинейными штрихами, что обеспечивает абсолютную калибровку (т.е. пропускаемая монохроматором длина волны равна показанию механического счетчика) и даёт возможность скомпенсировать расфокусировку по мере изменения длины волны и другие aberrации. Оптическая схема установки изображена на рис. 7.

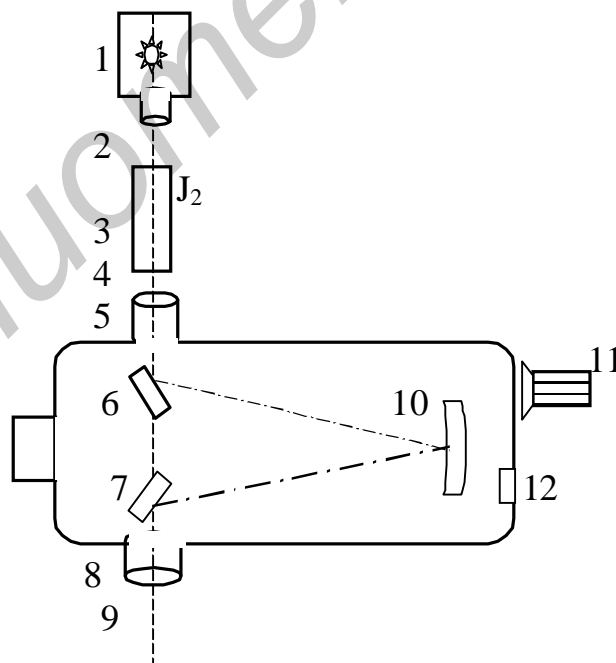


Рис. 7. Схема установки

Перед входной щелью монохроматора 5 устанавливается источник света с лампой накаливания 1 и кювета с йодом 3. Кювета помещается внутри трубчатой

электropечи, которая питается переменным током с напряжением 10 В от понижающего трансформатора. Температура внутри печи устанавливается в пределах 60 – 70 °С. Излучение, проходя через конденсор 2 и пары йода 3, попадает на входную щель 5 и зеркалом 6 направляется на дифракционную решетку 10. Разложенное на монохроматические компоненты излучение, отразившись от зеркала 7, поступает в окуляр 9. Сканирование спектра осуществляется поворотом решётки с помощью рукоятки 11. Длина волны излучения, попадающего в центр поля зрения окуляра и на визир (указатель) 8, определяется в нанометрах непосредственно по цифровому механическому счётчику 12 с точностью до 0,1 нм (десятые доли отсчитываются по цилиндрической шкале, цена деления 0,2 нм).

Перед началом измерений включают электropечь нагрева кюветы с йодом (время нагрева составляет 15 – 30 мин) и лампу накаливания. Осуществляют фокусировку окуляра, добиваясь чёткой видимости указателя и полос поглощения йода. Вращая рукоятку 11, просматривают весь спектр. Колебательные числа n' полос поглощения нарастают к голубой области спектра, т.е. слева направо в поле зрения окуляра.

Затем производят измерения длин волн центров полос поглощения, начиная с $n' = 25$ (для этой полосы $\lambda = 548,3$ нм). Для этого устанавливают на монохроматоре $\lambda = 548,3$ нм и для ближайшей к центру поля зрения окуляра полосы поглощения (находящейся ближе других к визирю) принимают $n' = 25$. Колебательные числа других полос теперь легко установить, они изменяются как ..., 23, 24, 25, 26, 27,

Параметры молекулы йода можно оценить, измерив длины волн трех полос поглощения с $n' = 10, 25, 40$; для проверки используемой модели дополнительно нужны длины волн полос поглощения с $n' = 11, 26, 41$ и с $n' = 17, 18; 32, 33$ – т. е. всего нужно измерить положение десяти полос поглощения:

$$с n' = 10, 11; 17, 18; 25, 26; 32, 33; 40, 41.$$

Далее приступают к обработке результатов измерений.

Если переписать уравнение (21) как

$$E_{n'} = h\nu_{эл} + a \cdot n' - b \cdot n'^2,$$

где

$$E_{n'} \equiv h\nu_{n'} = hc / I_{n'}, \quad (24)$$

$I_{n'}$ – измеренная длина волны полосы поглощения,

$$a \equiv h\nu'_{кол} (1 - c), \quad b \equiv h\nu'_{кол} c', \quad (25)$$

и (a, b измеряются в электрон-вольтах (эВ), как и все другие энергии в (21)) то для оценки трех неизвестных параметров ($h\nu_{эл}, a, b$) нужно составить систему трех таких уравнений для трех полос поглощения, например:

$$\begin{aligned} E_{10} &= h\nu_{эл} + a \cdot 10 - b \cdot 10^2, \\ E_{25} &= h\nu_{эл} + a \cdot 25 - b \cdot 25^2, \\ E_{40} &= h\nu_{эл} + a \cdot 40 - b \cdot 40^2, \end{aligned} \quad (26)$$

где $E_{n'} = hc / I_{n'}$, с $n' = 10, 25, 40$ ($hc \approx 400\pi$ эВ·нм ≈ 1256 эВ·нм).

По измеренным длинам волн полос поглощения вычисляем левые части этих уравнений. Из системы (26) находим значение b :

$$b = (2E_{25} - E_{10} - E_{40}) / 450, \quad (27)$$

тогда для a получим

$$a = (E_{25} - E_{10} + 525b) / 15 \quad (28)$$

и для третьего параметра имеем формулу

$$h\nu_{эл} = E_{10} - 10a + 100b. \quad (29)$$

Зная $h\nu_{эл}$, a , b , можно найти параметры молекулы йода. Из (21), следует, что

$$h\nu'_{кол} = a + b, \quad (30)$$

$$c' = \frac{b}{a + b}, \quad (31)$$

а по найденному c' с использованием (13) найдем $n'_{зр}$:

$$n'_{зр} \approx \frac{1}{2c'}. \quad (32)$$

Теперь можно вычислить граничное значение энергии поглощаемых фотонов (для полосы с номером $n'_{зр}$):

$$h\nu_{зр} \equiv h\nu_{n'_{зр}} = h\nu_{эл} + a \cdot n'_{зр} - b \cdot n'^2_{зр}, \quad (33)$$

и энергии диссоциации молекулы D' и D :

$$D' = h\nu_{зр} - h\nu_{эл}, \quad (34)$$

$$D = h\nu_{зр} - A, \quad (35)$$

где $A = 0,95 \text{ эВ}$. Все энергии удобно вычислять в электрон-вольтах (эВ).

Чтобы проверить самосогласованность модели (10), использованной при вычислениях параметров молекулы йода, можно проверить справедливость соотношения (12) для первых разностей энергий полос поглощения. Если измерены пары энергий $E_{n'}$ и $E_{n'+1}$, то их разности $E_{n'+1} - E_{n'}$ должны ложиться на прямую

$$E_{n'+1} - E_{n'} = a - 2b \cdot n' \quad (36)$$

в координатах $(n', E_{n'+1} - E_{n'})$. Постройте эту прямую и проверьте, попадают ли разности энергий, найденных по формуле (24), для полос с $n' = 10, 11; 17, 18; 25, 26; 32, 33; 40, 41$, на нее (пара $(n', E_{n'+1} - E_{n'})$ задает экспериментально измеренную точку на графике, независимую от модельной функции (36)).

5.2. Задание

1. Изучить экспериментальную установку.
2. Измерить длины волн $I_{n'}$ центров полос поглощения с колебательными числами $n' = 10, 11; 17, 18; 25, 26; 32, 33; 40, 41$.
3. По результатам измерений в соответствии с указаниями предыдущего параграфа (см. формулы (24) – (36)) вычислить параметры молекулы йода $h\nu_{эл}$, $h\nu_{зр}$, $h\nu'_{кол}$, $n'_{зр}$, c' , D' , D .

4. Проверить самосогласованность модели (10) графически, сравнив ожидаемую линейную зависимость (36) с экспериментом.

5. Результаты измерений и расчетов занести в таблицу.

n'	$I_{n'}$, нм	$E_{n'}$, эВ	$hn_{эл}$, эВ	$hn_{сп}$, эВ	$hn'_{кол}$, эВ	$n'_{сп}$	c'	D' , эВ	D , эВ

Возможные трудности при работе с установкой

1. При наблюдении спектра в поле зрения видна **яркая поперечная полоса**. Это размытое изображение спирали лампы. Чтобы устранить эту полосу, придвиньте кювету вплотную к монохроматору, а источник света – к кювете.

2. После 15 – 30 мин прогрева кюветы и работающей лампы **полосы поглощения не наблюдаются**. Возможны три причины:

- не установлен окуляр;

- нет йода в кювете или она разгерметизирована. В этом случае на стенку монохроматора около входного окна попадает пятно **желтого** цвета, как у самого источника света;

- на торцевых стеклах кюветы выросли большие кристаллы йода, мешающие наблюдению полос. В этом случае на стенку монохроматора около входного окна попадает пятно **красноватого** цвета. Эта окраска вызывается поглощением фиолетовой части спектра парами йода и свидетельствует о нормальном поглощении в кювете.

6. Контрольные вопросы

1. Опишите структуру схемы уровней энергии молекулы.

2. Каков порядок величины электронной, колебательной и вращательной энергий молекулы?

3. Как зависит вид потенциальной энергии колебаний молекулы от квантового числа электронного состояния?

4. Что такое первые разности энергии и каковы закономерности их изменения?

5. Дайте определение энергии диссоциации молекулы.

6. Каковы типы оптических спектров молекулы, их характерные частоты и длины волн?

7. Объясните происхождение полос поглощения молекулы йода.

8. Какова закономерность расположения полос в спектре поглощения молекулы йода?

9. Как из спектра поглощения определить энергию диссоциации и постоянную ангармоничности молекулы?

10. Как можно найти точное положение границ полосатого спектра?

Константы

$$c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$$

$$h = 2\pi \cdot 0,659 \cdot 10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{с}$$

$$hc \approx 400\pi \text{ эВ} \cdot \text{нм} \approx 1256 \text{ эВ} \cdot \text{нм}$$

$$1 \text{ эВ} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

Литература

1. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. – М. : Наука, 1962.
2. Савельев, И. В. Курс общей физики. Т. 3 / И. В. Савельев. – М. : Наука, 1987.
3. Граков, В. Е. Практикум по атомной физике / В. Е. Граков, А. А. Сокольский. – БГУ, 2002.

Краткая инструкция по выполнению лабораторной работы №3.9

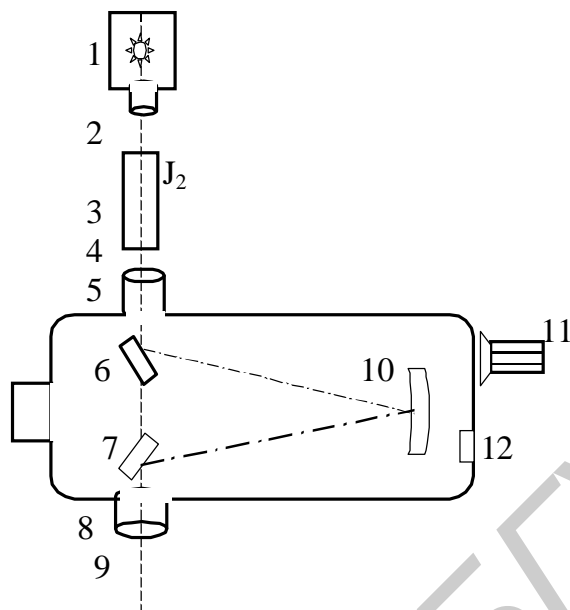


Рис. П.1. Схема установки:

1 – лампа накаливания, 2 – конденсор, 3 – кювета с йодом, 4 – трубчатая электропечь, 5 – входная щель, 6, 7 – зеркала, 8 – визир (указатель), 9 – окуляр, 10 – дифракционная решетка, 11 – рукоятка настройки, 12 – цифровой механический счётчик

Порядок выполнения работы

1. Подключить источник питания к сети (розетки подключены к щитку в комнате 503а). Включить электропечь (время нагрева 15 – 30 мин) и лампу накаливания.

2. Установить **окуляр**.

3. Найти полосу поглощения с $n' = 25$ (для этой полосы $\lambda = 548,3$ нм). Колебательные числа полос изменяются как ..., 23, 24, 25, 26, 27, ...

4. **Измерить положение десяти полос поглощения:** с $n' = 10, 11; 17, 18; 25, 26; 32, 33; 40, 41$.

5. Вычислить для них $E_{n'} \equiv h\nu_{n'} = hc / \lambda_{n'}$, $\lambda_{n'}$ – измеренная длина волны полосы поглощения, ($hc \approx 400\pi$ эВ·нм ≈ 1256 эВ·нм).

6. Вычислить $b = (2E_{25} - E_{10} - E_{40}) / 450$, затем $a = (E_{25} - E_{10} + 525b) / 15$, затем $h\nu_{эл} = E_{10} - 10a + 100b$.

7. Вычислить по ним $h\nu'_{кол} = a + b$, $c' = \frac{b}{a + b}$, $n'_{эп} \approx \frac{1}{2c'}$,

$h\nu_{эп} \equiv h\nu'_{эп} = h\nu_{эл} + a \cdot n'_{эп} - b \cdot n'^2_{эп}$, $D' = h\nu_{эп} - h\nu_{эл}$, $D = h\nu_{эп} - A$,

где $A = 0,95$ эВ. Все энергии вычислять в электрон-вольтах (эВ).

8. В координатах $(n', E_{n'+1} - E_{n'})$ построить прямую $E_{n'+1} - E_{n'} = a - 2b \cdot n'$ и нанести экспериментальные точки $(n', E_{n'+1} - E_{n'})$, чтобы проверить самосогласованность принятой модели.

Учебное издание

Изучение молекулярного спектра поглощения паров йода

Методические указания
к лабораторной работе №3.9
по курсу «Физика»

Составитель
Иванов Михаил Анисимович

Редактор Н. В. Гриневич
Корректор Е. Н. Батурчик
Компьютерная верстка Е. Г. Бабичева

Подписано в печать
Гарнитура «Таймс».
Уч.-изд. л. 1,0.

Формат 60x84 1/16.
Печать ризографическая.
Тираж 200 экз.

Бумага офсетная.
Усл. печ. л.
Заказ 2.

Издатель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»
ЛИ №02330/0494371 от 16.03.2009. ЛП №02330/0494175 от 03.04.2009.
220013, Минск, П. Бровки, 6