

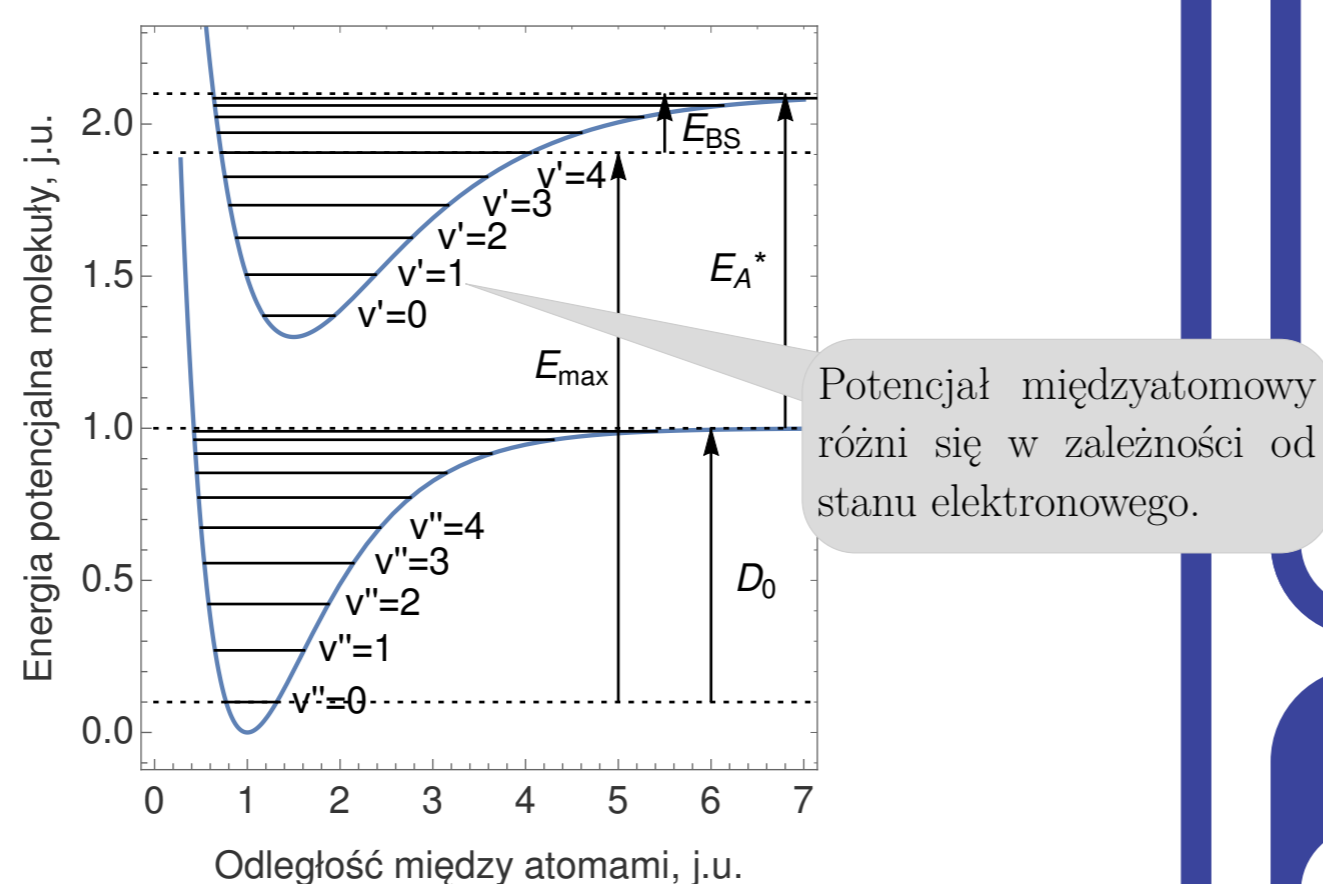


## Abstrakt

Celem doświadczenia jest wyznaczenie energii dysocjacji molekuly jodu. Przy użyciu metody spektroskopii absorbcyjnej zmierzona została część struktury poziomów oscylacyjnych molekuly w pierwszym elektronowym stanie wzbudzonym. Metodą ekstrapolacji Birge-Sponer oszacowana została maksymalna energia związanych stanów oscylacyjnych dla tej struktury. Na tej podstawie oraz z wykorzystaniem znanych energii poziomów elektronowych[1] otrzymana została energia dysocjacji  $D_0 = 1.52705(54)$  eV.

## Struktura energetyczna

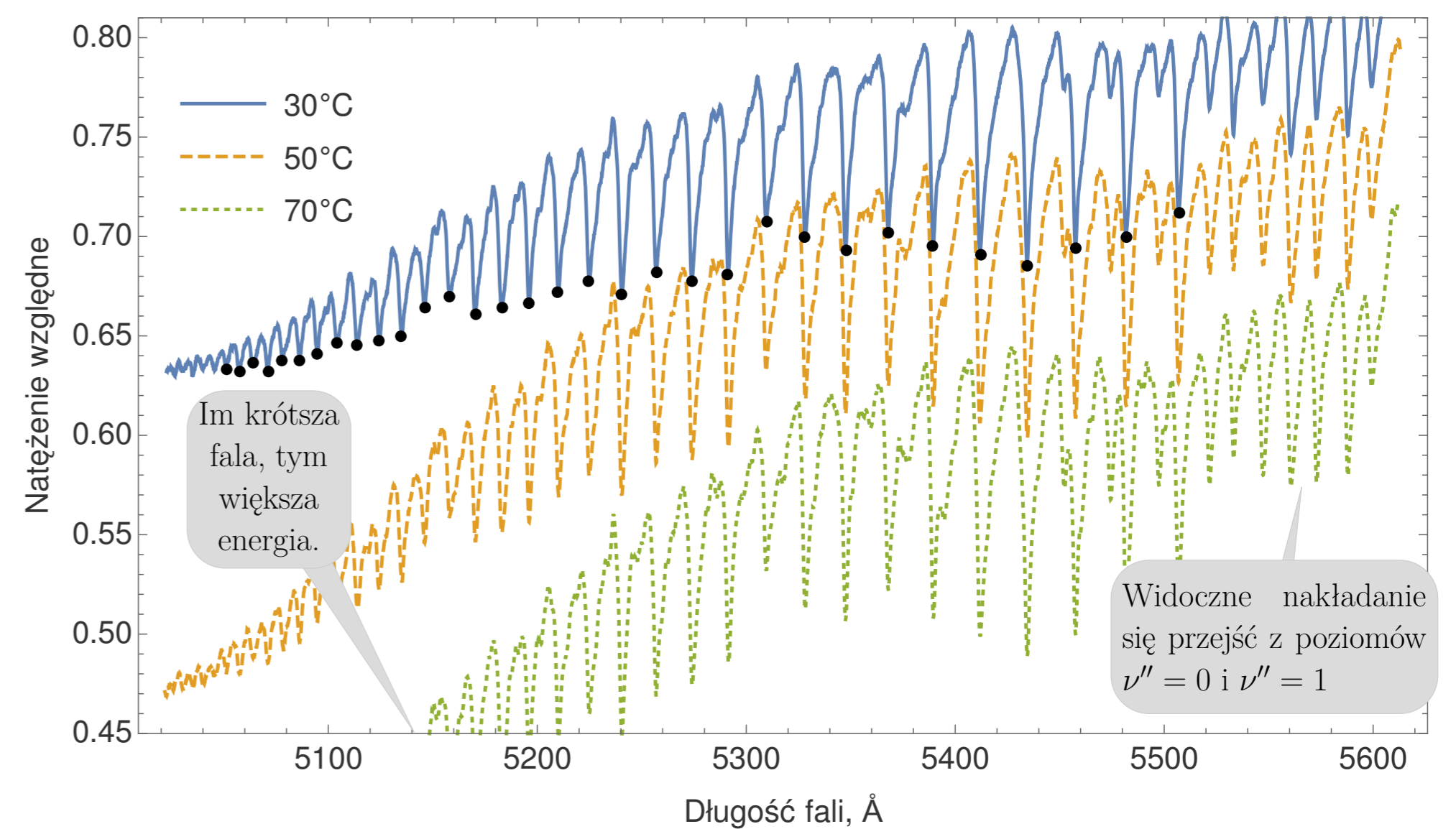
Energia molekuly jest związana z energiami elektronów oraz wzajemnym ruchem jąder. Ponieważ jądra są znacznie cięższe od elektronów, możemy rozpatrywać te dwa zjawiska osobno. W przypadku molekuly dwuatomowej, jaką jest molekula jodu  $I_2$ , możemy dodatkowo rozseparować wzajemny ruch jąder na oscylacyjny i rotacyjny, przy czym wkład rotacji do energii jest zanedbywalny. Całkowitą energię układu opisujemy więc jako **sumę energii stanów elektronowych i oscylacyjnych**. Schemat rozkładu poziomów energetycznych molekuly dwuatomowej przedstawiony jest na rysunku 1. Energią dysocjacji nazywamy energię potrzebną do rozseparowania molekuly ze stanu o najniższej energii na dwa swobodne atomy w stanie podstawowym.



Rys. 1: Rysunek poglądowy energii molekuly dwuatomowej. Wykresy przedstawiają potencjały międzyatomowe molekuly w zależności od odległości między atomami: wykres dolny – w elektronowym stanie podstawowym, wykres górny – w pierwszym elektronowym stanie wzbudzonym. Poziomymi liniami przedstawione są poziomy energetyczne. Oznaczone są najważniejsze różnice energii:  $D_0$  – energia dysocjacji,  $E_{BS}$  – energia z ekstrapolacji Birge-Sponer,  $E_{max}$  – energia najwyższego zmierzonego poziomu,  $E_A^*$  – energia przejścia ze stanu podstawowego do wzbudzonego w atomie.

## Wyniki pomiarów

Wykonane zostały pomiary absorpcji dla temperatur 30, 50 oraz 70 °C. Otrzymane wyniki zostały znormalizowane przez spektrum lampy, aby otrzymać absorpcję względną. Ponieważ interesują nas przejścia z poziomu podstawowego  $\nu'' = 0$ , skupimy się na przejściach o najkrótszej długości fali. Wyniki pomiarów przedstawione są na rysunku 3.



Rys. 3: Wyniki spektroskopii absorbcyjnej jodu dla trzech temperatur. Kropkami oznaczone przejścia z poziomu  $\nu'' = 0$ . Dla fali dłuższej niż 5520 Å widoczne nakładanie się przejść z poziomów  $\nu'' = 0$  i  $\nu'' = 1$ .

## Ekstrapolacja Birge-Sponer

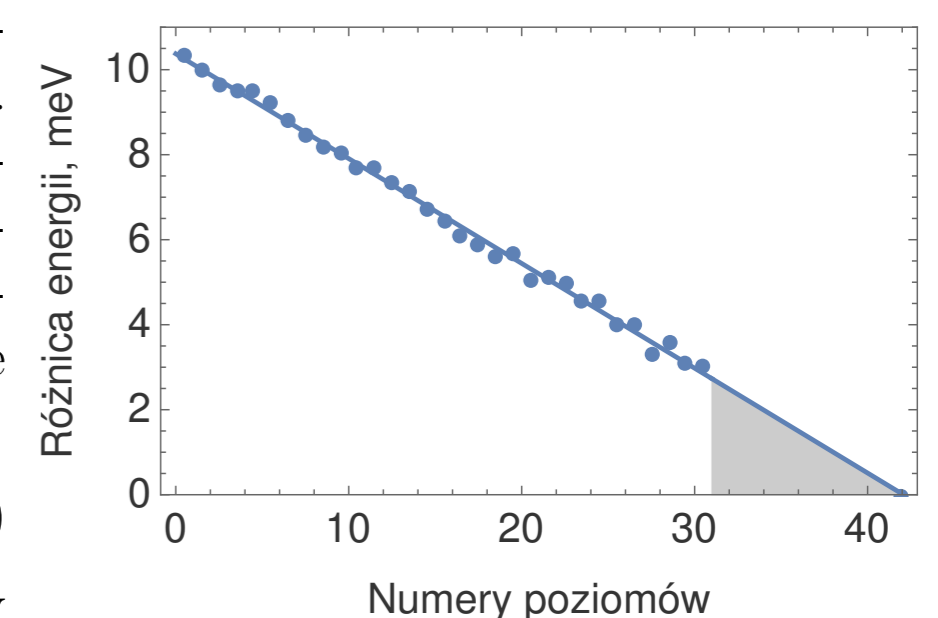
Potencjał oddziaływania międzyatomowego przybliżony jest **potencjałem Morse'a**. Rozwiązując równanie Schrödingera dla tego potencjału z dokładnością do wyrazów kwadratowych otrzymujemy, że różnica energii pomiędzy kolejnymi poziomami maleje liniowo wraz ze wzrostem energii:

$$E_{\nu} \sim -\nu + \text{const} \quad (1)$$

Dopasowując prostą do różnic energii pomiędzy kolejnymi poziomami możemy oszacować „brakującą” energię potrzebną do rozseparowania molekuly. Metodę tę nazywamy **ekstrapolacją Birge-Sponer**. W praktyce w pobliżu energii dysocjacji różnice pomiędzy energiami nie zachowują się już liniowo, co generuje nieznamy nam błąd systematyczny.

Wyznaczone różnice energii oraz ekstrapolacja Birge-Sponer przedstawione zostały na rysunku 4. Energia najwyższego zmierzonego poziomu i energia otrzymana z ekstrapolacji wyniosły odpowiednio:

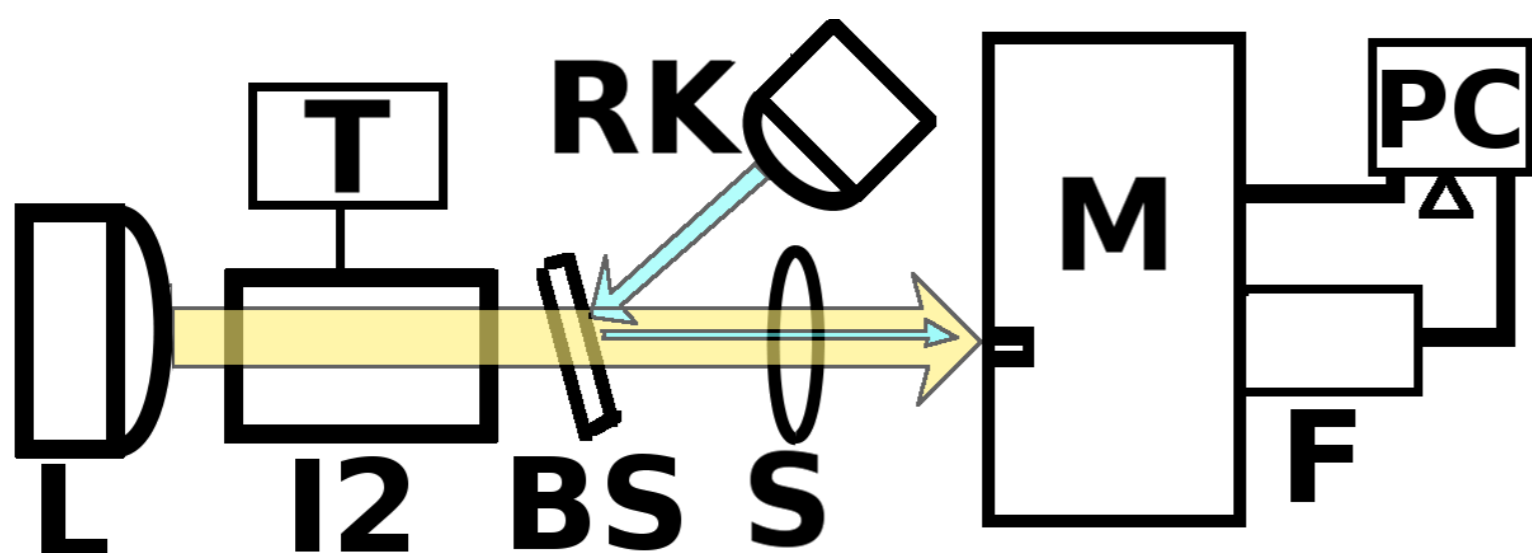
$$E_{max} = 2.4546(6) \text{ eV} \quad E_{BS} = 15.12(52) \text{ meV}. \quad (2)$$



Rys. 4: Różnice energii kolejnych poziomów energetycznych  $\nu'$ . Kolorem szarym oznaczony został obszar ekstrapolacji Birge-Sponer. Pole tego obszaru szacujemy jako energię pomiędzy najwyższym zmierzonym stanem a energią, w której atomy się separują (jeden z nich jest wtedy w stanie wzbudzonym).

## Układ spektroskopii absorbcyjnej

Do wykonania spektroskopii absorbcyjnej wykorzystano lampę o ciągłym spektrum oraz monochromator siatkowy z fotopowielaczem i silnikiem krokowym, pozwalający na zarejestrowanie spektrum promieniowania. Do kalibracji wykorzystano lampę rtęciowo-kadmową. Schemat układu przedstawiony jest na rysunku 2.



Rys. 2: Schemat układu pomiarowego. L – lampa o widmie ciągłym; I2 – podgrzewana komórka z jodem; T – regulator temperatury; BS – beam splitter; RK – lampa rtęciowo-kadmowa; S – soczewka; M – monochromator; F – fotopowielacz; PC – akwizycja danych i kontrola monochromatora

W pierwszym kroku wyznaczona została **krzywa dyspersji** monochromatora. Dzięki zastosowaniu w nim jako elementu rozszczepiającego światło siatki dyfrakcyjnej długość wyselekcjonowanej fali jest liniowa do jego nastawy. Krzywa dyspersji jest więc linią prostą. Badając spektrum lampy rtęciowo-kadmowej, możemy zidentyfikować jej linie charakterystyczne i wyznaczyć krzywą dyspersji. W każdym właściwym pomiarze została zawarta jedna z linii charakterystycznych, aby można było odnieść się do krzywej dyspersji.

Dla kilku różnych temperatur komórki z jodem zmierzone zostało natężenie transmitowanego przez komórkę światła w zależności od długości fali. Ponieważ światło o częstotliwości dopasowanej do różnicy energii pomiędzy poziomami energetycznymi jest **silniej absorbowane**, znajdując lokalne minima w spektrum możemy te różnice wyznaczyć.

## Energia dysocjacji

Sumując otrzymane energie dostajemy energię separacji do stanu wzbudzonego. Odejmując energię pierwszego atomowego stanu wzbudzonego  $E_A^* = 0.94267$  eV [1] otrzymujemy energię dysocjacji (rysunek 1):

$$D_0 = E_{max} + E_{BS} - E_A^* = 1.52705(54) \text{ eV}. \quad (3)$$

Tablicowa wartość energii dysocjacji wynosi 1.5676 eV[2]. Otrzymany przeze mnie wynik jest zaniżony względem tablicowego o około 2.4%. Rozbieżność ta wynika z błędów systematycznych. W celu dokładniejszego zmierzenia energii dysocjacji należałoby z większą czułością zmierzyć strukturę energetyczną molekuly blisko energii dysocjacji i/lub rozwiązać równanie Schrödingera z dokładnością do wyższych rzędów.

## Bibliografia

- [1] *Energy Levels of Neutral Iodine*, NIST, <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/Tables/iodinetable5.htm>.
- [2] Yu-Ran Luo, „Bond Dissociation Energies” (2010).