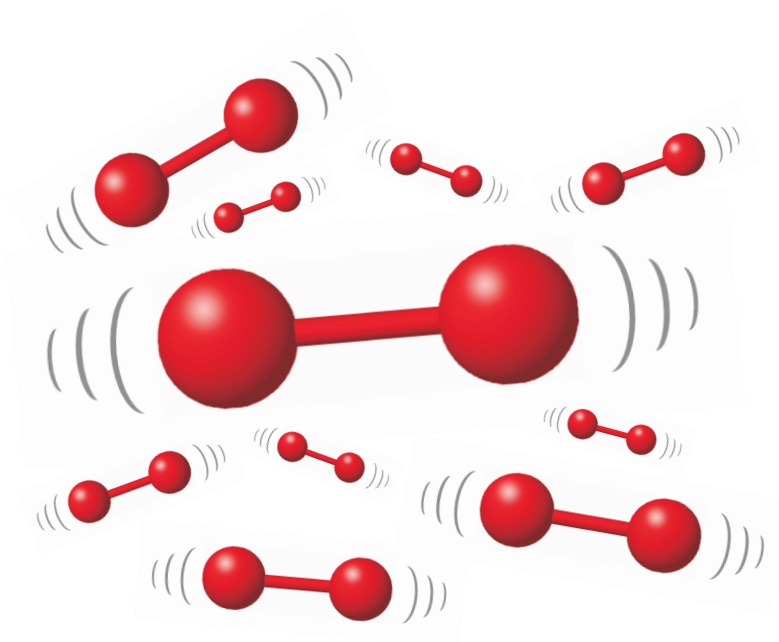


GÖTEBORGS UNIVERSITET
CHALMERS TENKISKA HÖGSKOLA
Avdelningen för Experimentell Fysik
Göteborg april 2004
Martin Sveningsson
Mats Andersson

A12

LASERINDUCERAD FLUORESCENS FRÅN
JODMOLEKYLER



Namn..... Kurs.....
Utförd den.....Handledare.....
Godkänd den.....av.....

Förord

Laborationen A12, Laserinducerad fluorescens, är i stort sett en ny laboration för 2004. Tidigare år har man studerat jodmolekylers fluorescens i kursen experimentell fysik för F3 men då i form av ett tredagars projekt. Detta innebär också att det lab-PM som du nu håller i är en första version. Det vore bra om du efter laborationen kunde ge synpunkter på vad du tyckte var bra eller dåligt med laborationen och handledningen. En liten utvärderingsenkät att besvara finns på sista sidan i detta lab-PM.

Målsättning

Målsättningen med denna laboration är att du skall få en insikt i hur man kan studera övergångar mellan energinivåer i en diatomisk molekyl med laserspektroskopi. Dessutom ska laborationen ge en förklaring till spektrumets utseende med hjälp av teoretiska modeller.

Förberedelse

Du skall ha läst igenom detta lab-PM. Det förväntas också att du innan laborationen läser igenom kap 9.4 i Haken-Wolf "*The Quantum Mechanical Oscillator*" eller motsvarande teori i annan kursbok. Studera Schrödingerekvationen för systemet, fastna dock inte på matematiken utan koncentrera dig på resultaten i form av egenvärden (energi) och egenvektorer (vågfunktioner). Försök också besvara instuderingsfrågorna.

Uppgift

Mät upp ett fluorescensspektrum från jodmolekylen (I_2) och bestäm vibrationsfrekvensen hos molekylen i dess grundtillstånd. Förklara även spektrumets utseende med hjälp av teoretiska modeller.

Genomförande

Använd en orange HeNe-laser ($\lambda = 611.9$ nm) och excitera jodmolekylerna som är inneslutna i en glasbehållare. För att detektera det emitterade ljuset används en monokromator, en fotomultiplikator, en amperemeter och en skrivare. Mät upp ett fluorescensspektrum genom att svepa monokromatorn över ett våglängdsområde och registrera signalen. Utgående från det uppmätta spektrumet kan jodmolekylernas vibrationsfrekvens bestämmas.

1 Inledning

I denna laboration kommer vi att studera jodmolekylen (I_2) som är en diatomisk molekyl. Jod upptäcktes 1811 av fransmannen Bernard Courtois. Det engelska ordet för jod "Iodine" kommer från det grekiska ordet "iodes" vilket betyder violett som också speglar färgen på just jod. När två atomer binds samman till en molekyl erhålls en diatomisk molekyl. Den kemiska bindningen som uppstår är ett resultat av en minskning av den totala energin när valenselektronerna delas mellan de två atomerna. Beroende på avståndet mellan atomerna varierar energin vilket kan beskrivas med en potentialkurva där det finns ett minimum som motsvarar molekylen i jämviktstillstånd d.v.s. jämviktsavståndet mellan de två atomkärnorna.

2 Teori

Atomer och molekyler kan absorbera fotoner av en specifik energi (rätt våglängd) och hamna i ett sk. elektroniskt exciterat tillstånd. Men eftersom molekyler har fler frihetsgrader än atomer förekommer det även andra slags excitationer för molekyler. Dessa är vibrations samt rotationsexcitationer.

En relativt enkel modell för att beskriva molekyler såsom I_2 är att dela upp elektronernas och kärnornas rörelser (Born-Oppenheimer approximationen). Detta är möjligt då elektronernas rörelse är mycket snabbare än de tunga kärnornas och snabbt följer kärnornas rörelse. En diatomisk molekyl kan på detta sätt beskrivas som två kärnor omringade av ett elektronmoln. Elektronmolnet från valenselektronerna kommer att skärma av Coulombrepulsionen mellan kärnorna vilket förklarar den kemiska bindningen. Bindningen kan också illustreras som en fjäder med en viss fjäderkonstant vilket gör att molekylerna i en första ordningens approximation kan beskrivas som en harmonisk oscillator. Då vi gör detta är det lämpligt att beskriva systemet med en reducerad massa som rör sig runt en jämviktspunkt. Systemet "*The Quantum Mechanical Oscillator*" är beskrivet i kap. 9.4 i kursboken "*The Physics of Atom and Quanta*" [1] och skall läsas igenom innan laborationen. Samma system är också beskrivet i kompendiet "kvantfysik" kap. 7. Studera Schrödingerekvationen för systemet, fastna dock inte på matematiken utan koncentrera dig på resultaten i form av egenvärden (energi) och egenvektorer (vågfunktioner). Figurerna 9.8 och 9.9 i kursboken beskriver resultaten på ett mycket bra sätt.

Förutom att molekylerna har möjlighet att vibrera som en harmonisk oscillator med diskreta energinivåer, så kan den också rotera. Rotationsrörelsen beskrivs som en stel rotor, vilken är bekant från mekaniken. Löser man Schrödingerekvationen för den stela rotorn kommer man också att erhålla diskreta energibidrag. Men då energin som behövs för att ändra molekylens rotation är mycket liten i jämförelse med att ändra dess vibration kommer vi inte att kunna observera detta vid denna laboration. I en molekyl kan i allmänhet övergångar även ske mellan vibrationsnivåer inom samma elektrontillstånd. Energiskillnaden mellan vibrationsnivåer är då typiskt sådan att det motsvarar absorption eller emission av infrarött ljus. I symmetriska diatomiska molekyler, såsom I_2 , som inte har något permanent dipolmoment är dock dessa övergångar kvantmekaniskt förbjudna. En illustration över de olika energinivåerna i en diatomisk molekyl kan slutligen ses i figur 1.

Från figur 1 kan vi beskriva hur själva absorptionsprocessen går till. Jodmolekylen befinner sig till en början i sitt elektroniska grundtillstånd. Den kan då absorbera en foton och hamna i ett elektroniskt exciterat tillstånd. Då den elektroniska excitationen går mycket snabbt (mycket snabbare än vad de två kärnorna hinner hänga med på) kommer avståndet mellan kärnorna inte att hinna ändras initialt. För att en excitation skall ske måste fotonenergin överensstämma med skillnaden mellan två olika tillstånd. Sannolikheten för att molekylerna kommer att hamna i ett visst exciterat tillstånd beror på hur vågfunktionerna för de olika vibrationsnivåerna ser ut för det aktuella kärnavståndet. Då dessa inte är lika för alla vibrationsnivåer i det exciterade tillståndet kommer det att ske en fördelning i populationen av olika vibrationsnivåer. Detta är vad som brukar kallas *Frank Condon's princip*.

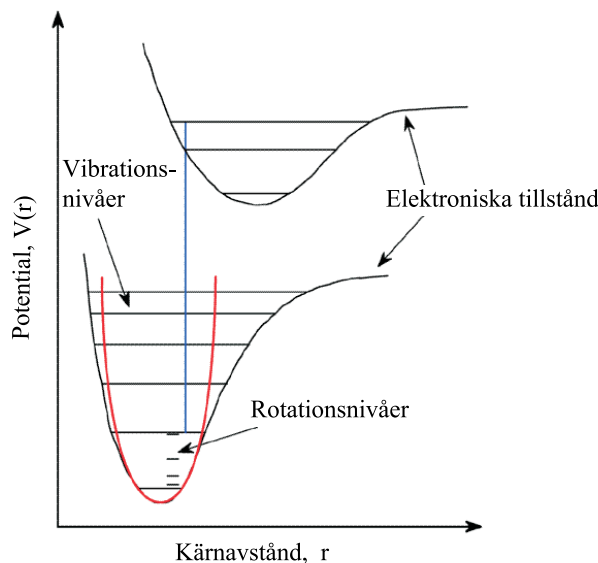


Figure 1: Bilden visar potentiella energin hos en molekyl som funktion av avståndet mellan kärnorna (r) i den diatomiska molekylen. Kurvorna representerar två olika elektroniska tillstånd. Varje elektrontillstånd kan delas upp i olika vibrationsnivåer och varje vibrationsnivå kan i sin tur delas upp i olika rotationsnivåer (ej skalenligt). Vibrationspotentialen för varje elektrontillstånd kan till en första approximation beskrivas med en harmonisk oscillatorpotential [3].

För det lägsta vibrationstillståndet kommer det vara högst sannolikhet att befinna sig i mitten av potentialgropen (se figur 9.8 i kursboken). För högre vibrationsnivåer kommer den största sannolikheten istället bli längre ut på kanterna av potentialkurvan. Effektiviteten i excitationen till de olika vibrationsnivåerna kommer då bero på överlappet mellan vågfunktionerna för begynnelse- och sluttillståndets vibrationsnivåer.

Ett analogt resonemang kan föras för emissionsprocessen, d.v.s. när molekylen emitterar ljus och faller tillbaka till sitt elektroniska grundtillstånd. Sannolikheten bestäms alltså även här av överlappet mellan de två vågfunktionerna i de olika vibrationsnivåerna.

Kursboken nämner tyvärr inte så mycket om Frank Condon's princip. Det finns en hel del information på internet om man vill läsa mer, men detta är något som vi också kommer att gå igenom under laborationens gång.

Referenser

- [1] G. Niklasson, P. Apell, B. Lundkvist, "Kvantfysik" del 1.
- [2] H. Haken, H. C. Wolf, "The Physics of Atom and Quanta", 6th edition.
- [3] J. Enger, S. Bagge, J. Sandström, D. Hanstorp, "Visualization of a quantum system", Conf. Proc. GIREP, Lund (2002)

3 Frågor att besvara vid analysen av mätdata

1. Ser det upptagna spektrumet ut som du hade förväntat dig?
2. Vad representerar de olika topparna?
3. Hur kan vibrationsenergin/frekvensen bestämmas med hjälp av spektrat?
Beräkna vibrationsenergin och gör en feluppskattning.
4. Är alla toppar ekvidistanta, d.v.s. ligger de på exakt samma avstånd?
Förklara dina observationer och hur det överrensstämmer med teorin.
5. Varför har topparna olika intensitet?
6. Vilken vibrationsövergång har högst (bortsett från laservåglängden) resp. lägst sannolikhet i ditt spektra?
7. Hur kommer det sig att man kan se toppar med kortare våglängd (högre energi) än excitationljuset?
8. Ge exempel på någon viktig egenskap hos I_2 molekylen som inte kan bestämmas med hjälp av ert spektrum.
9. Hade ert spektrum sett annorlunda ut om glasbehållaren haft en annan temperatur? Förklara.
10. Hur hade fluorescensspektrumet sett ut om laserljuset hade haft en annan våglängd? (Undersök gärna detta om ni har tid!)
11. Hur skulle ett absorptionsspektrum se ut? Börja med att beskriva hur ett spektrum skulle sett ut om vi exciterade jodmolekylerna med flera olika lasrar (olika våglängder) samtidigt.

4 Instuderingsfrågor att besvara innan laborationstillfället

1. Vilken typ av excitationer kan förekomma i en atom?
2. Vilka typer av excitationer kan förekomma i en molekyl?
3. Rangordna de olika sorters excitationer som kan förekomma i förhållande till den energimängd som krävs för de olika excitationerna.
4. Ställ upp Schrödingerekvationen (S.E.) för den harmoniska oscillatoren.
5. Ange lösningarna till S.E. i form av energiegenvärden och vågfunktioner.
6. En väsentlig del i en monokromator är gittret. Hur fungerar ett gitter?
7. En fotomultiplikator bygger på den fotoelektriska effekten. Beskriv kortfattat denna effekt.
8. Hur ser man till att få en stark signal vid detektionen av fluorescensljuset?
9. Skissa ett emissionsspektrum som du förväntar dig att det kommer se ut när man exciterar jodmolekyler med en laser i det synliga våglängdsområdet. (Rita även in laservåglängden λ i ditt spektra)