

Opgaveformulering

Gennemgå harmoniske svingninger i klassisk mekanik, herunder mekanisk energi. Gør rede for energiens kvantisering i det kvantemekaniske tilfælde. Lav eksperimenter med harmoniske svingninger med tvangskraft, og relatér dette til absorptionsprocesser i IR-spektroskopi.

Forklar grundprincipperne i IR-spektroskopi og beskriv IR-spektroskopets opbygning. Beskriv vibrationerne, der giver anledning til de vigtigste absorptionsbånd og båndenes beliggenhed i spektret.

Beskriv hvordan man benytter et IR-spektrum til at opklare et molekyles struktur. På bilag 1 er to spektre A og B, som stammer fra to stoffer med molekylformlerne $C_7H_{16}O$ og $C_7H_{14}O$. Om begge molekyler ved man, at C-kæden er uforgrenet og at den funktionelle gruppe sidder for enden af C-kæden. Forklar den del af spektrene, som ligger over 1500 cm^{-1} og forbind spektrene til deres tilhørende molekyle.

Omfanget af opgaven forventes at være 15-20 sider excl. bilag.

Bemærk: sidetal er korrekt anført i opgaven

Abstract

Infrared (IR) spectroscopy is a widely used technique for determining the composition of an unknown molecule. The technique although older is still valid in research along with newer methods for molecule characterization e.g. mass spectrometry.

This project investigates the harmonic oscillator in the classic and wave mechanic understanding. An account of the harmonic oscillator in classic mechanics has been given including an account of harmonic oscillations and Hooke's law because Hooke's law is used to describe the harmonic oscillator and there has been given an account of the energy of harmonic oscillations. There has also been given an account of the energies quantizing in the classic harmonic oscillator, which has been developed further by the wave mechanic understanding and this has been specified in the anharmonic potential.

This paper investigates what IR- spectroscopy is by a comparison of harmonic oscillations and the process of absorption in IR-spectroscopy. To further understand this method, atomic energy levels as well as the vibrations causing absorption bands and location of these in the spectra was studied.

The experiment was used to determine the angular frequency, ω , which was done in two different ways. The deviations of these methods were determined. ω was later converted into frequency, because the forced influenced oscillating system is varied by frequency. The experiment showed that if the oscillating system is set into its natural frequency it generates resonance. It is this resonance that can be compared to the process of absorption in IR-spectroscopy.

Finally two IR-spectra were analyzed and the molecules were identified as the alcohol heptan-1-ol and the aldehyde heptanal. Thereby this project illustrates the easy identification of characteristic groups using IR-spectroscopy as an example of the many uses of this technique.

Indholdsfortegnelse

Abstract	1
Indledning.....	5
Harmoniske svingninger i klassisk mekanik	5
Harmonisk svingning.....	5
Hookes lov.....	6
Energi ved harmoniske svingninger	7
Energiens kvantificering i det kvantemekaniske tilfælde.....	8
Eksperimentel undersøgelse af kraftpåvirkede harmoniske svingninger	13
Eksperimentet	13
Opstilling	13
Fremgangsmåde.....	13
Behandling af grafer	15
Vurdering af resultatet.....	18
Konklusion på eksperimentet	19
Relatér dette til absorptionsprocessorerne i IR- spektroskopi	19
IR- spektroskopi	19
Grundprincipperne bag IR- spektroskopi	19
IR- spektroskopets opbygning	21
Den klassiske opbygning (dispersive- spredende).....	21
Moderne (Fourier Transform – FT).....	22
Vibrationerne og absorptionsbånd.....	22
Benyttelse af IR- spektrum	25
Konklusion	26
Litteraturliste	27
Bøger:	27
Computer program.....	27
Bilag	28

Bilag 1- spektre.....	28
Bilag 2- Eksperimentet	28
Materialeliste	28
Forsøgsdata.....	29
Grafer.....	30

Indledning

IR- spektroskopi er en metode, der benyttes ved kemisk analyse og miljøovervågning, og som har givet en forståelse af universet ved at identificere organiske molekyler. Ved IR- spektroskopi udnytter man at molekyler kan absorbere stråling ved bølgelængder indenfor det infrarøde spektrum. Absorptionen vil ske i de organiske molekyler ved deres karakteristiske atomgrupper. ¹ Under absorptionen i molekylet sker der nogle vibrationer, som kan sammenlignes med harmoniske svingninger.

I opgaven er der lavet et eksperiment som forklarer sammenligningen mellem en harmonisk svingning med tvangskraft og absorptionsprocessen, der sker i molekylet. I opgaven vil IR- spektrummet bliver forklaret med blik på vibrationerne og absorptionsbåndene. På baggrund af IR- spektroskopi vil to spektre blive analyseret for at vise benyttelsen af IR- spektroskopi til at opklare et molekyles struktur. Der vil være en beskrivelse af IR- spektroskopets opbygning i henhold til moderne og den klassiske opbygning med fokus på sidstnævnte.

Harmoniske svingninger i klassisk mekanik

Harmonisk svingning

Et svingende system omkring en ligevægtsstilling kan beskrives ved $y(t)$, som er svingningens udsving til tiden t . En sinusfunktion kan beskrive dette

$$y(t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t) \quad (1)$$

Hvor A = amplituden, som beskriver svingningens maksimale udsving fra ligevægtsstillingen

ω = vinkelfrekvensen, også kaldt omega,

ω kan beskrives ved hjælp af størrelsen T kaldet svingningstiden. Da man ved, at en sinusfunktions periode er 2π , får man således at:

$$\omega \cdot T = 2\pi \Rightarrow \omega = \frac{2\pi}{T}$$

¹ Den store Danske Encyklopædi om IR- spektroskopi

Man kan finde den resulterende kraft på en genstand, som udfører en harmonisk svingning ved Newtons 2. lov:

$$F_{res} = m \cdot a(t)$$

Hvor m = massen af genstanden og $a(t)$ = accelerationen af genstanden til tiden t .

Om bevægelser ved vi, at $a(t) = v'(t)$ og $v(t) = s'(t)$. $v(t)$ beskriver hastigheden til tiden. $s(t)$ beskriver positionen til tiden t , og formel (1) beskriver positionen for vores genstand i det svingende system. Dermed kan man udlede at:

$$F_{res} = -k \cdot y(t)$$

Hvor $k = m \cdot \omega^2$ og $y(t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t)$ ²

Hookes lov

Man kan beskrive kraften af en fjeder hvis masse er i hvile ved, at den resulterende kraft = 0. Det vil sige, at F_{fjeder} er ligeså stor og modsatrettet af F_t , hvilket kan beskrives således:

$$F_{fjeder} = -F_t, \text{ da man ved at } F_t = m \cdot g$$

For en række målte værdier af F_{fjeder} , og fjederens forlængelse y , hvor $F_{fjeder} < 0$ får man dermed at $|F_{fjeder}|$ er proportional med y og man kan beskrive F_{fjeder} ved hjælp af formlen:

$$F_{fjeder} = -k \cdot y \tag{2}$$

Hvor k er en positiv konstant og kaldes fjederkonstanten. Fjederkonstanten beskriver fjederens stivhed. Jo større k er, des stivere er fjederen.

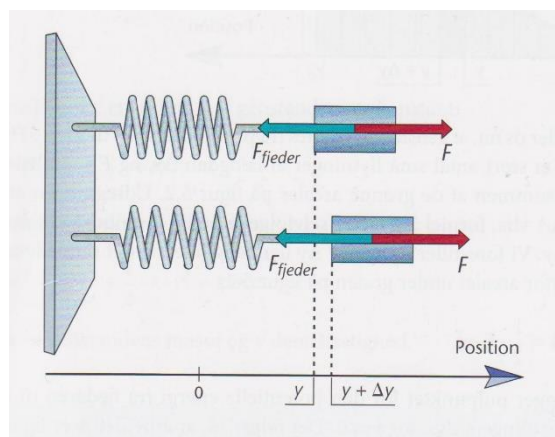
Formel (2) kaldes Hookes lov. Man bruger Hookes lov til at beskrive harmoniske svingninger således, at hvis en svingning passer med Hookes lov vil denne svingning være en harmonisk svingning. ³

² Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn2, side 216- 217

³ Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn2, side 219- 220

Energi ved harmoniske svingninger

Hvis man forestiller sig en genstand, som er påvirket af en kraft F_{fjeder} og en ydre kraft F , hvor F er ligeså stor som F_{fjeder} , men modsatrettet, (illustreret på figur 1), hvor genstanden flyttes en meget lille smule fra y til $y + \Delta y$. Herved vil genstandens energi blive større. Man kan se bort fra den kinetiske energi, da denne er meget lille og kan regnes for uændret. Dermed vil forøgelsen i energi blive set som genstandens potentielle energi i fjederkraften. Dette er fordi energien afhænger af genstandens beliggenhed i forhold til ligevægtsstillingen.



Figur 1. Elvekjær Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbogen 2, side. 221

Man kan udtrykke den ydre kraft F ved, at forestille sig positionen udtrykt på y -aksen. $y = 0$ udtrykker stedet hvor fjederkraften $= 0$. Genstanden flyttes fra y til $y + \Delta y$, og da kraften F er ligeså stor som F_{fjeder} og modsatrettet og F_{fjeder} stemmer overens med Hookes lov, får man at:

$$F = k \cdot y$$

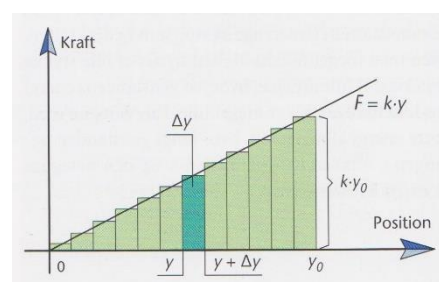
Hvor k = fjederkonstanten og y = positionen

Hvis genstanden hele tiden flyttes Δy vil kraften F udføre et lille arbejde ΔA . Arbejdet kan beskrives som:

$$\Delta A = F \cdot \Delta y \quad (3)$$

Hvis man forestiller sig, at Δy er uendelig lille, vil man kunne udtrykke arbejdet, som arealet under grafen (se figur 2):

$$A = \frac{1}{2} \cdot k \cdot y_0^2$$



Figur 2. Elvekjær Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbogen 2, side. 222

Hvis man skal udtrykke arbejdet som den potentielle energi i positionen y_0 , skal nulpunktet ligge i ligevægtsstillingen dvs. $y = 0$. Dermed udtrykkes den potentielle energi således:

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot k \cdot y_0^2$$

Hvis der ikke er nogle ydre kræfter, der påvirker genstanden, vil den samlede energi af fjederen og genstanden være konstant. Den samlede energi kaldes den mekaniske energi og $E_{mek} = \text{konstant}$:

$$E_{mek} = E_{kin} + E_{pot} \quad (4)$$

Formel (4) kan også udtrykkes således:

$$E_{mek} = \frac{1}{2} m \cdot v^2 + \frac{1}{2} k \cdot y^2$$

Hvor m = massen, v = hastigheden, k = fjederkonstanten og y = udsvinget fra ligevægtskonstanten ⁴

Energis kvantificering i det kvantemekaniske tilfælde

Klassisk harmoniske svingninger

Et toatomigt molekyle kan illustreres som på figur 3, hvor d er afstanden mellem to atomer.

Denne afstand beskriver også ligevægten i det toatomige molekyle, hvilket medfører at ved afstanden, d , er den potentielle energi = 0. Dette ses også på figur 3, hvor energien er beskrevet som en parabel med denne formel:

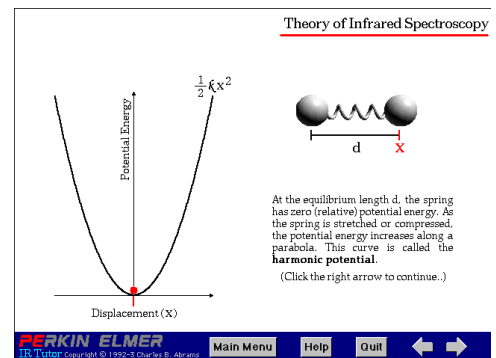
$$E_{pot}(x) = \frac{1}{2} k \cdot x^2 \quad (5)$$

hvor k = fjederkonstanten og x = udsvinget fra ligevægten.

Ændringen i den potentielle energi sker ved, at fjederen strækkes eller presses sammen. ⁵

Man kan sammenligne vibrationen med en svingning, som vil overholde Hookes lov, hvilket kan skrives sådan:

$$f = -k \cdot (r - r_{eq.})$$



Figur 3. Abrams, Charles B., 1993, Ir- Tutor

⁴ Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn2, side 221- 223

⁵ Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

Hvor f = affjedring, r = afstanden inde i molekylet, r_{eq} = den bindingslængde, der kan ses på det sted, hvor der er et minimum af energi. Ved $r = r_{eq}$ svarer det til, at afstanden er lig med bindingslængden.⁶

Dette vil medføre, at man kan beskrive dens svingning, som en parabel, som kan beskrives ved formel (5). Hvis k gøres større vil det give en højere frekvens, og hvis k gøres mindre vil dette give en mindre frekvens. Dog vil ændringer i k også ændre på E_{pot} graf. Hvis man derimod gør massen større ville dette give en mindre frekvens, og hvis man gør massen mindre vil dette give en højere frekvens, men ændringer i massen vil ikke ændre E_{pot} graf.

Svingningsfrekvensen f skrives således:

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (6)$$

hvor f = svingningsfrekvensen og k = fjederkonstanten, som beskriver stivheden af fjederen. Den beskriver styrken af bindingen i et toatomigt molekyle, dvs. bindingen mellem to atomer.⁷ μ beskriver, hvor meget to legemer bidrager til svingning. μ kaldes også den reducerede masse og kan beskrives således:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Hvis der er stor forskel på den reducerede masse, dvs. at der er stor forskel på de to legemer, betyder dette, at den reducerede masse vil ligge tæt på den mindste af masserne, da den tunge masse næsten ikke vil bevæge sig. Dermed vil frekvensen næsten kun afhænge af den lette masse.⁸

Bølgetallet og frekvensen er proportionale, og man kan derfor beskrive bølgetallet ud fra frekvensformlen:

⁶ Banwell, Colin N. og Elaine M. McCash, 1994, Fundamentals of molecular spectroscopy, side. 55-56

⁷ Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

⁸ Kristiansen, Kim Rongsted, 2008, Aurum – kemi for gymnasiet 3, side 86

$$\bar{\omega}_{osc} = \frac{1}{2\pi \cdot c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (\text{cm}^{-1})$$

Hvor $\bar{\omega}_{osc}$ = frekvensen udtrykt i cm^{-1} , k = fjederkonstanten, μ = den reducerede masse, c = lysets hastighed ⁹

Det toatomige molekyle svinger med en total energi lig med E_{pot} til den strakte eller sammenpressede position: $E_{pot}(x) = \frac{1}{2} k \cdot x_{\max}^2$

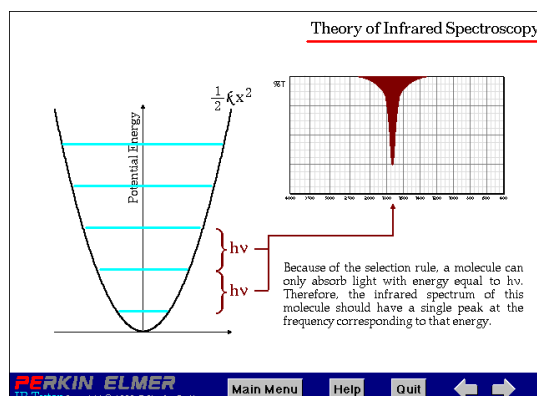
Man vil ud fra denne formel kunne forudse, at det toatomige molekyle kan vibrere for en hvilken som helst energi, men dette er ikke helt sandt. Derfor bliver man nødt til at beskrive det toatomige molekyle med en kvantemekanisk tilgang.

Kvantemekanisk forståelse af vibrationerne

Man kan stadig beskrive vibrationsfrekvensen som formel (6), men ved den kvantemekaniske forståelse kan vibrationerne kun ske ved nogle bestemte energiniveauer:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \cdot \nu \quad (7)$$

hvor E_n = energien i energiniveauerne, h = Plancks konstant som er $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, ν = frekvensen, n = niveauerne ($n=1,2,3, \dots$) Energien er da beskrevet som kvantiseret. ¹⁰



Man kan da udtrykke formel (7) i reciprokke cm , som bruges i IR- spektrummet og derved får man

$$\varepsilon_n = \frac{E_n}{hc} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \bar{\omega}_{osc} \quad (\text{cm}^{-1}) \quad (8)$$

Figur 4. Abrams, Charles B., 1993, Ir- Tutor

hvor ε_n = energien i energiniveauerne udtrykt i cm^{-1} , h = Plancks konstant som er $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $\bar{\omega}_{osc}$ = frekvensen udtrykt i cm^{-1} , n = niveauerne ($n=1,2,3, \dots$)

⁹ Banwell, Colin N. og Elaine M. McCash, 1994, Fundamentals of Molecular spectroscopy, side 57

¹⁰ Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

På figur 4 kan man se, at $n = 0$ er det sted hvor der er den laveste vibrationsenergi.

Ved at sætte $n = 0$ i formel (7) og i formel (8) får man da:

$$E_0 = \left(\frac{1}{2}\right)h \cdot \nu \quad (\text{joule})$$

hvor E_0 = energien i energiniveau 0, h = Plancks konstant som er $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, ν = frekvensen

$$\varepsilon_0 = \left(\frac{1}{2}\right) \cdot \bar{\omega}_{osc.} \quad (\text{cm}^{-1})$$

hvor ε_0 = energien i energiniveau 0 udtrykt i cm^{-1} , h = Plancks konstant som er $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$,

$\bar{\omega}_{osc.}$ = frekvensen udtrykt i cm^{-1} ¹¹

Ved denne forståelse af energiniveauerne kan et molekyle kun absorbere (eller emitte) lys som har den energi der svarer til overgangen mellem de to energiniveauer. Overgangen er beskrevet ved en benyttelse af Schrödingers ligning og det resulterer i *Udvælgelsesreglen*, som siger, at $\Delta n = \pm 1$, dvs. at overgangen kun kan ske til energiniveauet over udgangsniveauet eller nedenunder udgangsniveauet. Dermed kan molekylet kun absorbere lys der svarer til $h \cdot \nu$ (se figur 4).

Man kan derfor se absorptionen på et IR- spektrummet som det sted hvor frekvensen korresponderer med energien. En forhøjet frekvens kan give ændringer i energiniveauerne, som vil forekomme pga. en forhøjet fjederkonstant eller en mindre masse. Dette ville give en større overgang mellem energiniveauerne. En lavere frekvens ville dermed give en mindre overgang mellem energiniveauerne. ¹²

Ved at benytte *udvælgelsesreglen* på formel (8) kan man derved få

$$\text{For emission:} \quad \varepsilon_{n+1 \rightarrow n} = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \cdot \bar{\omega}_{osc.} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \bar{\omega}_{osc.} = \bar{\omega}_{osc.} \quad (\text{cm}^{-1})$$

$$\text{For absorption:} \quad \varepsilon_{n \rightarrow n+1} = \bar{\omega}_{osc.} \quad (\text{cm}^{-1})$$

¹¹ Banwell, Colin N. og Elaine M. McCash, 1994, Fundamentals of Molecular spectroscopy, side 57

¹² Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

Hvor ε_n = energien i energiniveauerne udtrykt i cm^{-1} , n = niveauerne ($n = 1, 2, 3, \dots$) og $\bar{\omega}_{osc.}$ = frekvensen udtrykt i cm^{-1}

Dette gør, at man direkte kan finde bølgetallet ved en absorption eller en emission ved:

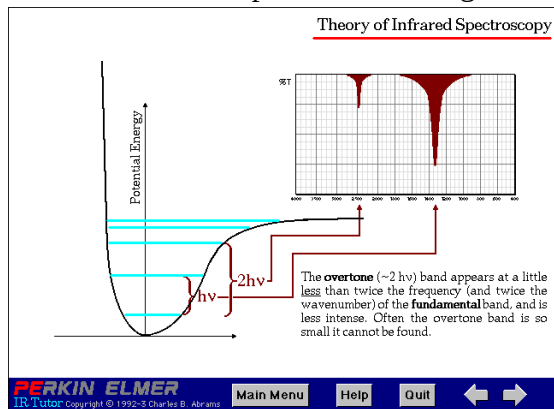
$$\bar{n}_{\text{spectroscopic}} = \varepsilon = \bar{\omega}_{osc.} \quad (\text{cm}^{-1})$$

$\bar{n}_{\text{spectroscopic}}$ = bølgetallet, ε = energien i energiniveauerne udtrykt i cm^{-1} , $\bar{\omega}_{osc.}$ = frekvensen udtrykt i cm^{-1} ¹³

Anharmonisk potentiale

Man kan ikke sætte lighedstegn mellem et molekyle og en harmonisk svingning. Hvis to atomer presses sammen vil protonerne frastøde hinanden, og denne frastødning vil være større end hvis man pressede en fjeder sammen. Hvis man derimod trækker et molekyle fra hinanden vil bindingen brydes, og derfor kan man beskrive det toatomige molekyle som anharmonisk potentiale.

Ved anharmonisk potential er energiniveauerne ikke lige store. Energiniveauerne er lige store så



Figur 5. Abrams, Charles B., 1993, Ir- Tutor

længe grafen er formet ligesom den harmoniske svingning (se figur 4), men når den holder op med det vil overgangen blive mindre, hvilket kan ses på figur 5. Udvalgsreglen vil heller ikke passe, da der godt kan ske overgange som $\Delta n = +2$. Dette kalder man overtoner, og denne kaldes den første overtone. Denne overtone kan tilnærmelsesvis beskrives som $\Delta E \approx 2h \cdot \nu$ dvs. at den er lidt mindre, men tilnærmelsesvis 2. Man

kan se overtoner i spektre for eksempel $\Delta n = +2$ vil det svare tilnærmelsesvist til den halve intensitet af $\Delta n = +1$, hvilket gør at man ikke kan se overtonerne fordi de er så små.

Endnu et krav for, at der kan ske vibrationer er, at molekylets dipol skal ændre sig ved en overgang. Dette betyder, at der skal ske en svingning i dipolen. Derfor er det et krav, at

¹³ Banwell, Colin N. og Elaine M. McCash, 1994, Fundamentals of Molecular spectroscopy, side 58

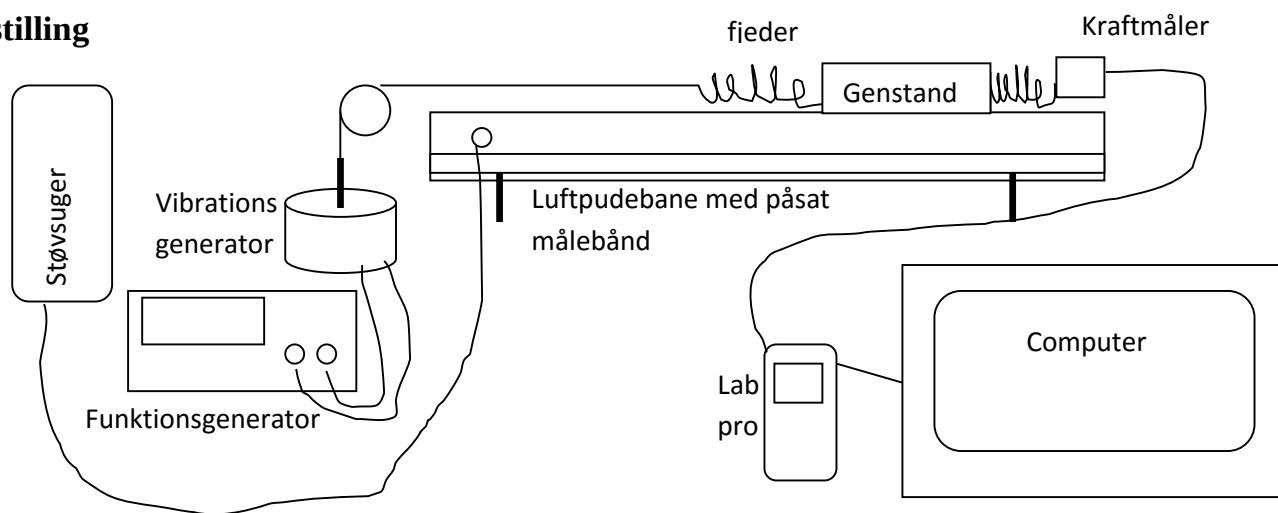
molekylet skal bestå af mere end et slags atomer, ellers vil det ikke have en dipol og vil derfor ikke kunne absorbere IR-strålingen, og der kan dermed ikke frembringes et spektrum.¹⁴

Eksperimentel undersøgelse af kraftpåvirkede harmoniske svingninger

Eksperimentet

I dette illustrationsforsøg ville jeg vise, at man kan lave en sammenligning mellem en kraftpåvirket harmonisk svingning og absorptionsprocessen, der sker i molekylet, når det bliver belyst med IR-stråling også kaldt elektromagnetisk stråling.

Opstilling



Fremgangsmåde

Til at starte med skulle ω bestemmes. Dette blev gjort på to forskellige måder.

Den ene var ved at lave en harmonisk svingning. Man kan dermed aflæse ω ved at fitte svingningen med $Force = A \cdot \sin(B \cdot t + C) + D$, hvor A = amplituden for svingningen, $B = \omega$, $C = \varphi$ som er en konstant og D = konstant.

¹⁴ Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

Jeg lavede denne bestemmelse to gange og fik ω til at være $\omega_1 = 22,18 \text{ s}^{-1}$ og $\omega_2 = 22,16 \text{ s}^{-1}$. Fordi de to fundne værdier af omega er tæt på hinanden har jeg valgt kun at arbejde videre med ω_1 .

Den anden måde at bestemme ω på var ved at udregne fjederkonstanten k. For at finde k, skulle jeg først finde kraften på min genstand mens den var i ligevægt. Derefter trak jeg genstanden 5 mm ud og fandt derefter igen kraften på genstanden. Dette fortsatte jeg med så længe jeg kunne trække i genstanden uden, at genstanden faldt fra hinanden. De målinger, der kom ud af dette, kunne jeg fitte med $Force = mx + b$, hvor m = fjederkonstanten, x = afstanden af hvor meget genstanden bliver trukket væk fra ligevægtsstillingen. ω kunne dermed udregnes ud fra formlen:

$$k = m \cdot \omega^2 \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad 15$$

Udregnet eksempel for ω_3

$$\omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\omega_3 = \sqrt{\frac{\left(0,3399 \frac{N}{mm} \cdot \frac{1000 \text{ mm}}{1m}\right)}{\left(760,9g \frac{1kg}{1000 g}\right)}}$$

$$\omega_3 = 21,1355$$

Jeg fik dermed ω til at være $\omega_3 = 21,1355 \text{ s}^{-1}$ og $\omega_4 = 21,2185 \text{ s}^{-1}$. Da de to udregnede omega er tæt på hinanden har jeg valgt kun at arbejde videre med ω_3 .

Disse udregninger af omega omregnede jeg til frekvens, da jeg i mit system skulle ændre på frekvensen. Omregningen skete ved disse formler

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \quad 16 \quad \text{og} \quad f = \frac{1}{T} \quad 17$$

¹⁵ Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn2, side 218

¹⁶ Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn2, side 216

¹⁷ Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn1, side 206

Dette medfører at:

$$\omega = 2\pi \cdot f \Rightarrow f = \frac{\omega}{2\pi}$$

Udregnet eksempel for ω_3

$$f_3 = \frac{21,1355}{2\pi} = 3,36381 \text{ Hz}$$

Frekvensen for de to forskellige værdier af omega er dermed:

$$f_1 = 3,53006 \text{ Hz} \quad \text{og} \quad f_3 = 3,36381 \text{ Hz}$$

ω_1 og ω_3 er de værdier jeg har fundet til at være egenfrekvensen for det svingende kraftpåvirkede system. Disse værdier er fundet for at vise, at et harmonisk svingende system kan sættes i resonans og, at resonans sker ved $\omega_0 = \omega$ ¹⁸. Dette ville svare til, at $\omega_0 = \omega_1$ eller $\omega_0 = \omega_3$. For at finde ud af ved hvilken frekvens, jeg har egenfrekvensen for det svingende system, og om mine udregninger har været gode nok til at finde egenfrekvensen, påvirkede jeg nu det svingende system med en kraft for at skabe harmoniske svingninger, som svinger med en konstant amplitude. Jeg valgte at lave et udvalg af målinger omkring f_1 og f_3 for ved disse målinger at aflæse amplituden og omega. De aflæste værdier for amplituden og omega har jeg derefter kunnet plotte ind i et datasæt og lave en

$A(\omega)$ graf, som jeg fittede med en $A = \frac{A_0}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2 + \omega^2}$.

Behandling af grafer

Alle grafer kan ses på bilag 2 omkring eksperimentet. De datasæt, som jeg har skrevet ind, kan også ses, men jeg har valgt ikke at tage de LoggerPro- målte datasæt med.

¹⁸ Farnsworth, Jack L. og J. W. Maisel (Red.), 1973, An introduction to mechanics, side. 424

Bestemmelse af omega

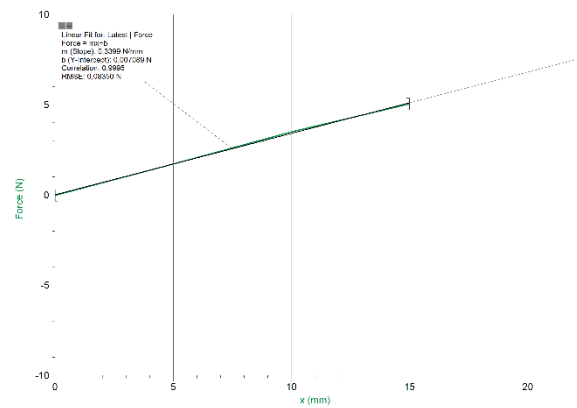
Bestemmelsen sker ved at finde k

Man ser en lineær graf, hvor hældning svarer til fjederkonstanten.

Lineært fit:

$$Force = m \cdot x + b$$

$m = 0,3399\text{N/mm}$, $b = 0,007089\text{N}$, Correlation = 0,9995

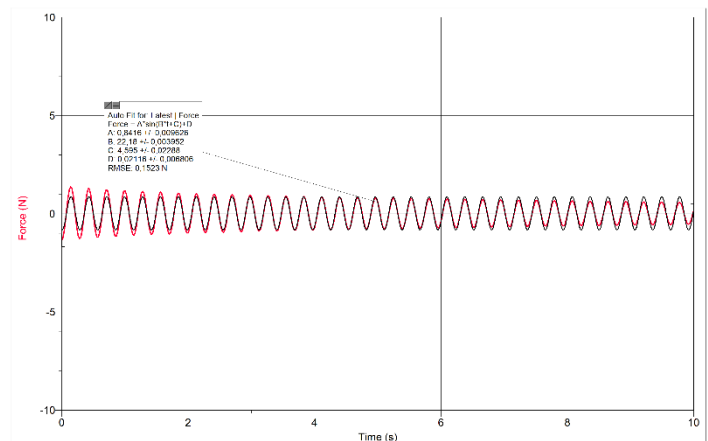


Bestemmelsen sker ved en harmonisk svingning

Dette er en graf, som viser en harmonisk svingning. Grafen er fittet med

$$Force = A \cdot \sin(B \cdot t + C) + D$$

$$A = 0,8416 \pm 0,009626, B = 22,18 \pm 0,003952, C = 4,595 \pm 0,02288, D = 0,02116 \pm 0,006806$$



Kraftpåvirkede harmoniske svinger

Jeg har valgt kun at medtage en af mine 24

grafer. Dette har jeg gjort fordi de alle sammen ligner hinanden med forskellige frekvenser som eneste forskel. Ellers viser alle grafer harmoniske kraftpåvirkede svingninger, som er blevet fittet med $Force = A \cdot \sin(B \cdot t + C) + D$. Jeg har brugt disse grafer til at aflæse amplituden og omega.

Disse aflæste værdier har været baggrund for $A(\omega)$ grafen

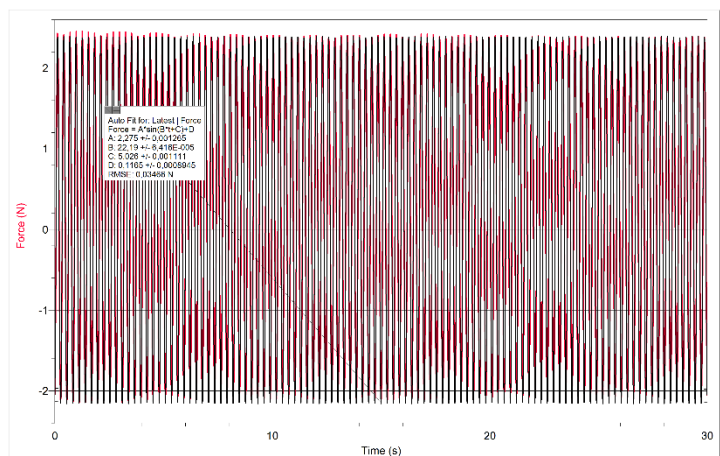
Denne graf viser en harmonisk kraft påvirket svingning. Svingningen er fittet med $Force = A \cdot \sin(B \cdot t + C) + D$

$$A = 2,275 \pm 0,001265, B = 22,19 \pm 6,416E-005, C = 5,026 \pm 0,001111, D = 0,1165 \pm 0,0008945$$

På denne graf kan man se den

kraftpåvirkede harmoniske svingning med

en frekvens på 3,530Hz. Grafen har en amplitude på 2,275mm og en omega på $22,19 \text{ s}^{-1}$



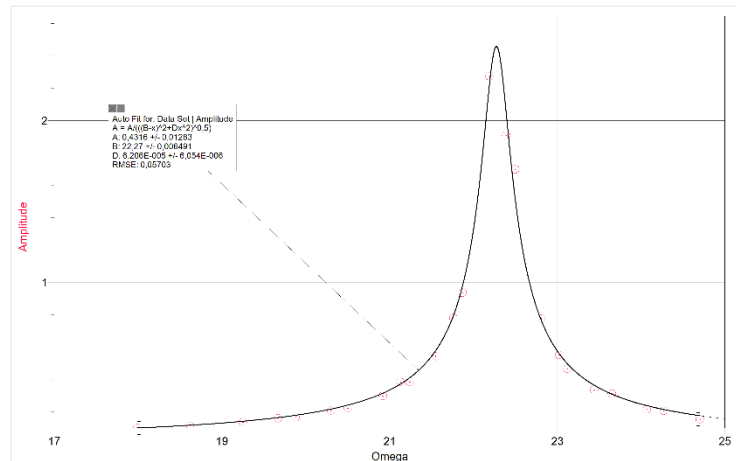
A(ω) graf

Denne graf er lavet på baggrund af alle de aflæste værdier af omega og amplituden, som blev fundet ved de kraft påvirkede harmoniske svingninger.

Grafen er fittet med

$$A = \frac{A_0}{((B - x)^2 + Dx^2)^{0,5}}$$

$A_0 = 0,4316 \pm 0,01283$, $B = 22,27 \pm 0,006491$, $D = 6,206E-005 \pm 6,054E-006$



Vurdering af resultatet

Jeg har valgt at vurdere den sidst graf (A(ω)-graf). Dette har jeg valgt fordi de andre grafer kun er lavet for, at denne kunne laves. Denne graf er endnu en måde at finde $\omega_0 = \omega$, og for at finde ud af om mine to første metoder gav et ordentligt billede om hvor egenfrekvensen er.

Jeg har aflæst på grafen A(ω) via LoggerPro, og har fundet det sted hvor amplituden er størst dvs.

$$\omega_0 = \omega$$

Aflæste værdier: $A = 2,4597$ mm og $\omega = 22,271$ s⁻¹

Dette viser, at metoden hvor jeg aflæste omega ud fra en harmonisk svingning gav et fornuftigt billede, da der er en procentvis afvigelse på:

$$\text{procentvis afvigelse} = \frac{x_{eks} - x_0}{x_0} \cdot 100\% = \frac{22,271s^{-1} - 22,19s^{-1}}{22,19s^{-1}} \cdot 100\% = 0,365\% \quad 19$$

Det vil sige at aflæsningen af omega ved hjælp af en harmonisk svingning afviger med 0,365% fra A(ω)-graf, hvilket igen vil sige, at man godt kan bruge aflæsningen af omega ved en harmonisk svingning, når man skal have en ide om hvor egenfrekvensen vil befinde sig for et harmoniske svingende system.

¹⁹ Formlen - Elvekjær, Finn og Torben Benoni, 2007, FysikABbøgegn1, side 20

Jeg fittede $A(\omega)$ - grafen med $A = \frac{A_0}{((B-x)^2 + Dx^2)^{0,5}}$

A har en dimension som en kraft fordi den er målt ud fra en kraft i forsøget

$A_0 = \frac{F_0}{m}$ dvs. at det er den påtvungne kraft over genstanden.

Dx^2 er den luftmodstand som er ved at lave forsøget på en luftpudebane, og den luftmodstand er proportional med hastigheden.

$A(\omega)$ - grafen har ikke nogle usikkerhed udover luftmodstanden, som der er blevet taget højde for ved fitningen. Hvis der ikke var blevet taget højde for denne, ville dette have medført, at grafen var blevet forskubbet mod en lavere omega.

Konklusion på eksperimentet

Man kan ved et forsøg med kraftpåvirkede harmoniske svingninger, hvor frekvensen varieres, efterwise, at det sted hvor $\omega_0 = \omega$ vil være det sted, hvor der vil blive skabt resonans i en harmonisk kraftpåvirket svingning.

Relatér dette til absorptionsprocessorerne i IR- spektroskopi

Man kan relatere illustrationsforsøg til absorptionsprocessen, fordi den elektromagnetiske stråling kan svare til den ydre kraftpåvirkning, som svingningen udsættes for. Svingningerne, der sker i systemet, vil derfor svare til den vibration, som finder sted ved specifikke frekvenser, og den specifikke frekvens, som vibrationen sker ved, kan man derfor sammenligne med den resonans som der forekommer, når $\omega_0 = \omega$.

IR- spektroskopi

Grundprincipperne bag IR- spektroskopi

I infrarød spektroskopi benytter man sig af, at mange molekyler absorberer den elektromagnetiske stråling, som findes i det infrarøde område. Når molekylerne absorberer den elektromagnetiske stråling vil molekylet vibrere. Den energi hvormed molekylerne vibrerer, passer med den energi som er i det infrarøde område. Når et molekyle absorberer den elektromagnetiske

stråling sker der en ændring i vibrationsniveauet. Denne ændring afhænger af om molekylet indeholder enkelt-, dobbelt- eller tripel-bindinger. Vibrationsenergien vil i organiske molekyler afhænge af hvilke karakteristiske grupper, der er i molekylet. Et IR- spektrometer måler et stofs absorption af IR- stråling som funktion af bølgelængden. I spektrummet udtrykkes bølgelængden som bølgetallet, der udtrykkes i reciprokke cm. Bølgetallet er også proportionalt med frekvensen. Formlen for bølgetallet se da således ud: ²⁰

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda(\text{cm})} = \frac{f(\text{s}^{-1})}{c(\text{cm/s})}$$

Af dette kan vi aflede, at bølgetallet er ligefrem proportionalt med frekvensen, hvor proportionalitetskonstanten er den reciprokke værdi af lysets hastighed dvs. $\left(\frac{1}{c(\text{cm})}\right)$. ²¹

I stedet for at udtrykke hvor meget stråling, der bliver absorberet i stoffet, udtrykker man i spektrummet, hvor meget stråling, der passerer igennem stoffet. Det udtrykkes ved transmittansen, T, og det måles i procent. I spektrummet aftager bølgetallet mod højre dvs. at bølgelængden vokser mod højre. ²²

Formlen for transmittansen ser således ud

$$\%T = \frac{I_2 \cdot 100}{I_1}$$

I₁ = den mængde IR- lys som sendes ind på molekylet, I₂= den mængde IR- lys som passerer igennem molekylet uden at blive absorberet. ²³

IR- spektrummet optagelse ligger i intervallet fra 4000- 500cm⁻¹. ²⁴

²⁰ Kristiansen, Kim Rongsted og Gunnar Cedeberg, 2007, Aurum – kemi for gymnasiet 2, side 270-271

²¹ Pedersen, Uttrup Steen og Bent Rasmussen, 2004, Spektroskopi – molekylernes fingeraftryk, side. 10- 11

²² Kristiansen, Kim Rongsted og Gunnar Cedeberg, 2007, Aurum – kemi for gymnasiet 2, side 271

²³ Pedersen, Steen Uttrup og Bent Rasmussen, 2004, Spektroskopi – molekylernes fingeraftryk, side.11

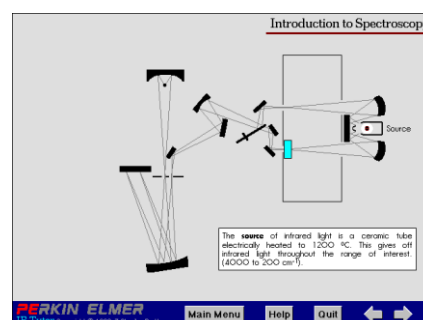
²⁴ Jensen, Hans Birger, 2007, Isis kemi A, side 44

I spektrummet kigger man især på området fra 4000- 1500 cm^{-1} , hvor der vil være nogle karakteristiske absorptioner for bindingerne. Det betyder, at man kan kigge efter karakteristiske grupper, og ud fra disse kan man få en ide om hvilket molekyle spektret viser. Området under 1500 cm^{-1} kaldes fingeraftryksområdet. Der kan man se at absorptioner er komplekse svingninger, hvilket vil sige, at man kan se forskel på molekyler, som er nært beslægtede. Man kan bruge fingeraftryksområdet til at sammenligne forskellige spektre, men man kan ikke tolke de forskellige absorptionsbånd, som man gør i området over 1500 cm^{-1} .²⁵

IR- spektroskopets opbygning

Den klassiske opbygning (dispersive- spredende)

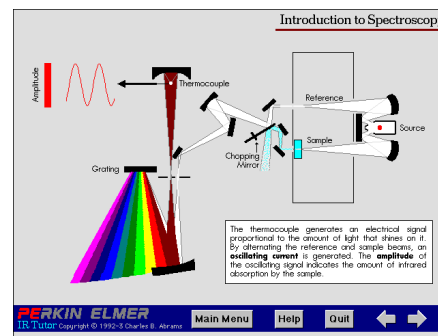
Man kan se på figur 6, som viser den klassiske opbygning af et IR- spektroskop, at man har prøven i blå og kilden er illustreret som den hvide firkant med en rød prik i til højre. Kilden består af et keramisk elektrisk rør som bliver opvarmet til 1200°C, hvorefter kilden vil afgive IR- lys i området fra 4000-2000 cm^{-1} . Det første der sker med lyset fra kilden er, at det bliver reflekteret på et fladt spejl og to toroidformede spejle. Det betyder, at noget af stråling rammer prøven direkte og noget af strålingen ikke kommer i kontakt med prøven hvorved der vil blive skabt en kontrolprøve. Prøven vil absorbere noget af IR- lyset. Kontrolprøven vil derefter ramme et roterende spejl, som vil reflektere kontrolprøven hen imod resten af spektroskopet. Mens dette sker, vil det roterende spejl derimod holde lyset fra prøven tilbage. Spejlet roterer, hvilket gør, at der sker en variation i form af et skift hvor kontrolprøven vil blive holdt tilbage i stedet for, hvorefter spejlet så igen vil rotere og prøven vil blive holdt tilbage igen. Dette er vigtigt da det er med til at give en ordentlig påvisning af absorptionen. Derefter vil prøven blive omdirigeret af et andet toroidformet spejl ned på et diffraktionsgitter, hvilket vil fordele lyset ligesom prisme opdeler lyset. Den spredning, der sker inde i spektroskopet er også grunden til, at den klassiske metode kaldes et spredningsspektroskop. Det spredte lys bliver igen omdirigeret og sendt mod et termoelement, som virker ligesom en detektor, hvor termoelementet vil frembringe et elektrisk signal som er proportionelt med mængden af lys, der skinner på det. Ved at ændre på kontrolprøvens og prøvens lys kan der skabes en svingende bølge, hvor amplituden af den bølge vil svare til mængden af det



Figur 6. Abrams, Charles B., 1993, Ir-Tutor

²⁵ Kristiansen, Kim Rongsted og Gunnar Cedeberg, 2007, Aulum – kemi for gymnasiet 2, side 270-271

absorberede IR- lys i prøven. Amplituden kan også ses på figur 7. Ved at rotere gitteret vil der passere lys med forskellige frekvenser mod detektoren. Ud fra de forskellige frekvenser frembringer termoelementet spektret hvor man har bølgetallet på x-aksen og %T ud af y-aksen. ²⁶

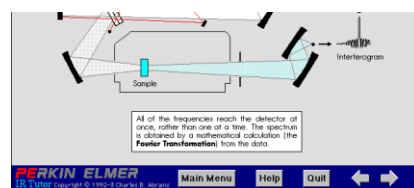


Moderne (Fourier Transform – FT)

Man kan ved den moderne udgave af IR- spektroskopet få den samme information som ved det klassiske IR- spektroskop, men i den moderne udgave bliver Michelsons interferensmåleinstrumenter brugt i stedet for spredningsgitteret. Det betyder, at alle frekvenserne rammer detektoren på samme tid i stedet for en ad gangen. Spektret opnås ved den matematiske Fourier Transformation udregning ud fra dataene.



Figur 7. Abrams, Charles B., 1993, Ir-Tutor



Figur 8. Abrams, Charles B., 1993, Ir-Tutor

Fordele ved FT:

- Spektrene opnås hurtigere, da alle bølgetal bliver målt samtidige.
- Svage signaler kan også måles, fordi der er mere lys, som når frem til detektoren. Man kan også godt bruge dårlige prøver og kontrolprøven.
- Bølgetallets skala er mere præcis, fordi det bliver kalibreret med laser. ²⁷

Vibrationerne og absorptionsbånd

Der findes to forskellige vibrationstyper. Den ene er strækningsvibrationer: Hvis man forestiller sig to kugler med en fjeder imellem kommer strækningsvibrationer til at afhænge af fjederkonstanten dvs. at den afhænger af bindingens styrke og af masserne af de to atomer. Hvis man har et toatomigt molekyle vil dens vibration være en strækningsvibration. Ved strækningsvibrationer sker der en sammenpresning eller en strækning. Dette kan ske på to forskellige måder: Det kan ske ved en symmetrisk strækning. Hvis man forestiller sig et lineært molekyle bestående af tre atomer og to bindinger, vil bindingerne enten blive trukket ligeligt fra hinanden eller ligeligt presset sammen. Det kan også ske ved en asymmetrisk strækning dvs. at den

²⁶ Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

²⁷ Abrams, Charles B., 1993, IR- Tutor

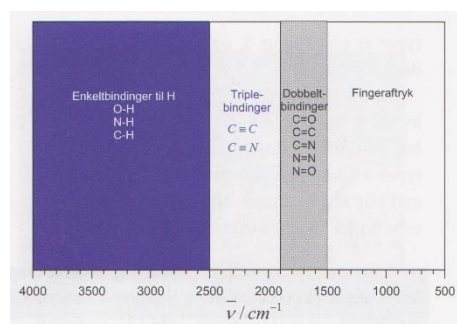
ene af bindingerne enten vil blive presset mere sammen eller trukket mere fra hinanden end den anden binding.

Den anden vibrationstype er bøjningsvibrationer, hvor der sker en ændring i bindingsvinklen.²⁸ Generelt er strækningssvingninger mere energikrævende end bøjningssvingninger, hvilket medfører, at absorptionen for strækningssvingningerne sker ved et højere bølgetal.²⁹

Der er mange organiske molekyler, men disse molekyler består kun af nogle få atomgrupper, hvilket gør, at det er ved de karakteristiske grupper i de organiske molekyler, hvor vibrationerne sker. Dette betyder også, at vibrationsfrekvensen er ens fra molekyle til molekyle, da den er knyttet til den karakteristiske gruppe. Dette kaldes også gruppefrekvenser. Hvis der sker en absorption ved en af de karakteristiske gruppefrekvenser er det ensbetydende med, at molekylet indeholder den karakteristiske atomgruppe. I spektret er det bølgetallet man kigger på, men man omtaler absorptionsbåndene som frekvenser.

I de organiske molekyler er der ofte bindinger til hydrogen atomet, hvilket er det letteste atom. Hvis der er gruppefrekvenser for strækninger i atomgruppen hvori der er et hydrogenatom vil hydrogenatomet gøre, at gruppefrekvensen vil være højere end andre gruppers frekvenser. Man kan se på figur 9, at OH, NH og CH har de største frekvenser og, at OH har en større frekvens end NH som igen har en større frekvens end CH. CH frekvens er afhængig af hybridisering³⁰ hvilket handler om hvordan de forskellige s- og p- orbitaler lægger sig i forhold til hinanden.

³¹ Man kan se, at sp-hybridisering ($\sim 3300\text{cm}^{-1}$) er større end sp²-hybridisering ($\sim 3100\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$), som igen er større end sp³-hybridisering ($3000\text{--}2750\text{ cm}^{-1}$). Man kan opdele gruppefrekvenserne igen ved at se på om der sker symmetriske eller asymmetriske



Figur 9. Pedersen, Steen Uttrup og Bent Rasmussen, 2004, Spektroskopi molekylernes fingeraftryk, side. 14

²⁸ Jensen, Birger Hans, 2007, Isis kemi A, side. 44-45

²⁹ Kristiansen, Kim Rongsted, 2008, Aurum – kemi for gymnasiet, side. 87

³⁰ Pedersen, Steen Uttrup og Bent Rasmussen, 2004, Spektroskopi molekylernes fingeraftryk, side. 19-20

³¹ Bruun, Kim og Hans Birger Jensen, 2002, Isis kemi B side. 174

vibrationer. Gruppefrekvenserne for tripelbindinger og dobbeltbindinger er også karakteristiske, da de vil ske fra et carbonatom til enten et C-, et N- eller et O- atom. Masseforskellen mellem disse tre forskellige atomer er meget lille, hvilket gør at gruppe frekvensen er afhængig af bindingsstyrken. Tripelbinding mellem $C \equiv N$ ($2400-220\text{ cm}^{-1}$) har en højere frekvens end en tripelbinding mellem $C \equiv C$ ($2200-2050\text{ cm}^{-1}$). Efter det har en dobbeltbinding mellem $C=O$ ($1900-1650\text{ cm}^{-1}$) en højere frekvens end en dobbeltbinding mellem $C=C$ ($1675-1625\text{ cm}^{-1}$). Ved enkelt bindinger er grupperefrekvensen afhængig af hvordan resten af molekylet ser ud, dog er C-O- strækningen ($1300-1000\text{ cm}^{-1}$) karakteristisk ved alkoholer, estere eller ethere.

Noget af det første man ser efter i et spektre er C=O- strækningen som findes i carbonylholdige forbindelser. Dette gør man fordi C=O- strækningen er meget tydelig i IR-spektrummet. På figur 10 kan man se en figur, der viser absorptionsbåndets beliggenhed. For nogle carbonyl forbindelser er der et ekstra bånd, hvilket også er medtaget på figur 10.³²

carbonyl-forbindelser	struktur	Bølgeinterval cm^{-1}	ekstra bånd cm^{-1}
syreanhydrid		1850-1800 + 1790-1740	1300-1050 (C-O, stærk, 1-2 bånd)
syrechlorid		1815-1790	
ester		1750-1725	1300-1050 (C-O, stærk, 2 bånd)
aldehyd		1740-1715	
keton		1725-1700	
carboxylsyre		1725-1700	3100-2500 (O-H, stærk), 1300-1050 (C-O, stærk)
amid		1700-1600	

Figur 10. Pedersen, Steen Uttrup og Bent Rasmussen, 2004, Spektroskopi molekylernes fingeraftryk, side. 19

Der er tre specifikke grupperefrekvenser ved bøjningssvingninger: Dette er HCH- sakse-bøjning, HCH- vippe-bøjning og paraply-bøjning. HCH- sakse- bøjning er en symmetrisk bøjning som forekommer i CH_2 - og CH_3 - grupper. HCH-sakse-bøjning vil ligne en saks der klipper ved, at to af hydrogenatomerne, som er bundet til et carbon atom, bevæger sig hen imod hinanden. HCH-vippe- bøjning er en asymmetrisk bøjning i CH_2 - og CH_3 - gruppe. Denne bøjning kan forestilles som værende to hydrogenatomer bundet til et carbonatom, hvor begge hydrogenatomer vil bøje i den samme retning så de begge vipper mod f.eks. højre side. Paraplybøjningen er en symmetrisk bøjning, som forekommer i en methyl gruppe, der er bundet til et carbonatom. I denne bøjning kan man forstille sig tre hydrogen atomer på "linje", hvor den midterste og det venstre hydrogenatom bøjer hen imod hinanden og det højre hydrogen atom vil bøje ind mod midten.³³

³² Pedersen, Steen Uttrup og Bent Rasmussen, 2004, Spektroskopi molekylernes fingeraftryk, side. 19-20

³³ Jensen, Hans Birger, 2007, Isis kemi A, side. 44-45

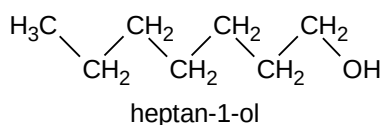
Benyttelse af IR- spektrum

I IR- spektrummet ser man efter de karakteristiske gruppefrekvenser for at finde ud af hvilket molekyle, det er. Man starter ud med at se efter OH- grupper og C=O, da disse gruppefrekvenser vil være tydelige i spektrene. Man skal have for øje, at man i et IR- spektrum ikke kan se molekyler, som ikke er dipoler, da disse molekyler ikke absorberer IR- strålingen, og derfor vil man ikke kunne se molekyler som N₂, O₂. Man vil heller ikke kunne se C-C bindingen i et ethanmolekyle, da denne binding ikke er en dipol, hvorimod man vil kunne se CH- bindingen, da den vil absorbere. Da det kun er dipol molekyler man kan se vil man kun få en ide om hvilke atomgrupper der befinder sig i molekylet.³⁴

Jeg analyserede spektrene A og B. De kan ses i bilag 1.

Spektrum A: Jeg startede ud med at se efter en C=O- strækning, som vil befinde sig i intervallet fra 1900- 1650cm⁻¹. Sådan et bånd var der ikke. Derefter ville jeg se om det var en alkohol. I så fald skulle der være et absorptionsbånd for OH- strækning i intervallet fra 3600-3300cm⁻¹ og et C-O absorptionsbånd i intervallet fra 1300-1000cm⁻¹. Man kan se at disse absorptionsbånd er til stede. Dette betyder, at spektrum A er en alkohol. Hvis man ser på spektret over 1500cm⁻¹ kan man se to absorptionsbånd; det ene er OH- strækningen i intervallet fra 3600-3300cm⁻¹, og det andet er sp³-CH- strækning. Dette har jeg fundet ud af ved at se på et andet spektrum af en alkohol.³⁵ sp³-CH- strækning fortæller, at der er benyttet s- orbitalen og alle tre p- orbitaler. Dette betyder, at molekylet kun består af enkeltbindinger.³⁶ Ud fra det jeg ved om molekylet kan jeg dermed knytte det til sin molekyleformel, som er C₇H₁₆O .

Her er dets molekylestruktur med navn



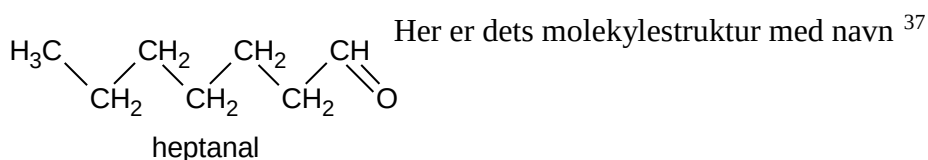
Spektrum B: Jeg analyserede derefter spektrum B, og så igen efter C=O- strækning. En sådan vil befinde sig i intervallet fra 1900- 1650cm⁻¹ og denne strækning var til stede. Jeg ved fra begge

³⁴ Jensen, Hans Birger, 2007, Isis kemi A, side. 52

³⁵ Jensen, Hans Birger, 2007, Isis kemi A, side. 48-49 og 53

³⁶ Bruun Kim og Hans Birger Jensen, 2002, Isis kemi B, side. 174

molekyleformler, at begge molekyler kun indeholder et oxygen atom og, at den karakteristiske gruppe vil være i enden af carbonkæden. Dette betyder, at spektrum B kun kan være en aldehyd, da de andre carbonylholdige forbindelser enten indeholder flere oxygen atom, andre atomgrupper som ikke er tilstede i molekylet eller, at den karakteristiske gruppe ville befinde sig et andet sted end for enden af carbonkæden. Hvis man ser på spektrummet over 1500cm^{-1} kan man se C=O-strækningen som befinder sig i intervallet fra $1740\text{-}1720\text{cm}^{-1}$. Det sidste absorptionsbånd har jeg sammenlignet med et andet spektrum af en aldehyd, og fundet ud af, at den består af en $\text{sp}^3\text{-CH}$ -strækning og en O=CH-strækning. Dette fortæller igen, at carbonkæden består af enkeltbindinger. Ud fra det jeg ved om molekylet, kan jeg dermed knytte det til sin molekyleformel, som er $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$.



Konklusion

I opgaven er der redegjort for den harmoniske svingning i klassisk mekanik herunder harmoniske svingninger og Hookes lov. Der er desuden redegjort for Hookes lov, da man benytter den til at beskrive en harmoniske svingninger, og der er redegjort for energien i den harmoniske svingning. Der er også redegjort for energiens kvantificering i det kvantemekaniske tilfælde, hvilket vil sige, at der er redegjort for harmoniske svingninger i klassisk forstand. Dette bliver uddybet i den kvantemekaniske tilgang, som igen bliver præciseret i den anharmoniske potentielle tilgang. Det er i opgaven forklaret og vist hvordan man kan sammenligne harmoniske svingninger og absorptionen i molekylet. Denne forklaring illustreres især ved hjælp af eksperimentet om harmoniske kraftpåvirkede svingninger hvor frekvensen varieres. Yderligere er det i opgaven beskrevet hvordan vibrationerne sker når IR-strålingen bliver absorberet af molekylet. Analysen af de to spektre skete ud fra en viden om absorptionsbåndene i spektret, hvor spektrene blev analyseret til at være alkoholen heptan-1-ol og aldehyden heptanal. De to spektre indeholder en OH-strækning og den anden en C=O-strækning, disse to absorptionsbånd er dem man ser efter først i analysen af spektre, da disse har nogle karakteristiske og tydelig absorptionsbånd. IR-spektroskopi er en god

³⁷ Jensen, Hans Birger, 2007, Isis kemi A, side. 50-53

metode til bestemmelse absorptionsbånd, vibrationer og karakteristiske gruppefrekvenser i molekyler, men metoden kan ikke stå alene, da der skal være noget ekstra viden om molekylet før man kan lave en sikker analyse af det.

Litteraturliste

Bøger:

- An introduction to mechanics. Side 421-432. Redigeret af: Jack L. Farnsworth og J. W. Maisel. 1. udg. McGraw-Hill book Co., 1973. (Bog)
- Banwell, Colin N. og Elaine M. McCash: Fundamentals of molecular spectroscopy. Side 55-59. 4. udg. McGraw-Hill publishing Company, 1994. (Bog)
- Bruun, Kim og Hans Birger Jensen: Isis kemi B. Side 174-175. 1. udg. Systime, 2002. (Bog)
- Elvekjær, Finn og Torben Benoni: FysikABbogen 1. Side 206. 1. udg. Systime, 2008. (Bog)
- Elvekjær, Finn og Torben Benoni: FysikABbogen 2. Side 216-223. 1. udg. Systime, 2007. (Bog)
- Jensen, Hans Birger: Isis kemi A. Side 44-53. 1. udg. Systime, 2007. (Bog)
- Kristiansen, Kim Rongsted og Gunnar Cederberg: Aurum - kemi for gymnasiet 2. Side 270-280. 1. udg. Malling Beck, 2007. (Bog)
- Kristiansen, Kim Rongsted: Aurum - kemi for gymnasiet 3. Side 85-97. 1. udg. L & R uddannelse, 2008. (Bog)
- Pedersen, Steen Uttrup og Bent Rasmussen: Spektroskopi molekylernes fingeraftryk. Side 10-23. 1. udg. Kemi forlaget, 2004. (Bog)

Computerprogram

- Abrams, Charles B. : IR- Tutor. Perkin Elmer, 1993. (program)

Bilag

Bilag 1- spektre

Spektrene A og B er placeret omme bagved problemformuleringen

Bilag 2- Eksperimentet

Materialeliste

- Støvsuger
- Luftpudebane
- Computer med LoggerPro som er sat til en LabPro
- Kraftmåler sat til Labpro
- 2 fjedre
- Genstand (vogn + 2 fjedre)
- Målebånd
- Snor, vægt, trisse og ledninger
- Funktionsgenerator
- Vibrationsgenerator

Forsøgsdata

Bestemmelse af omega ved fjederkonstanten

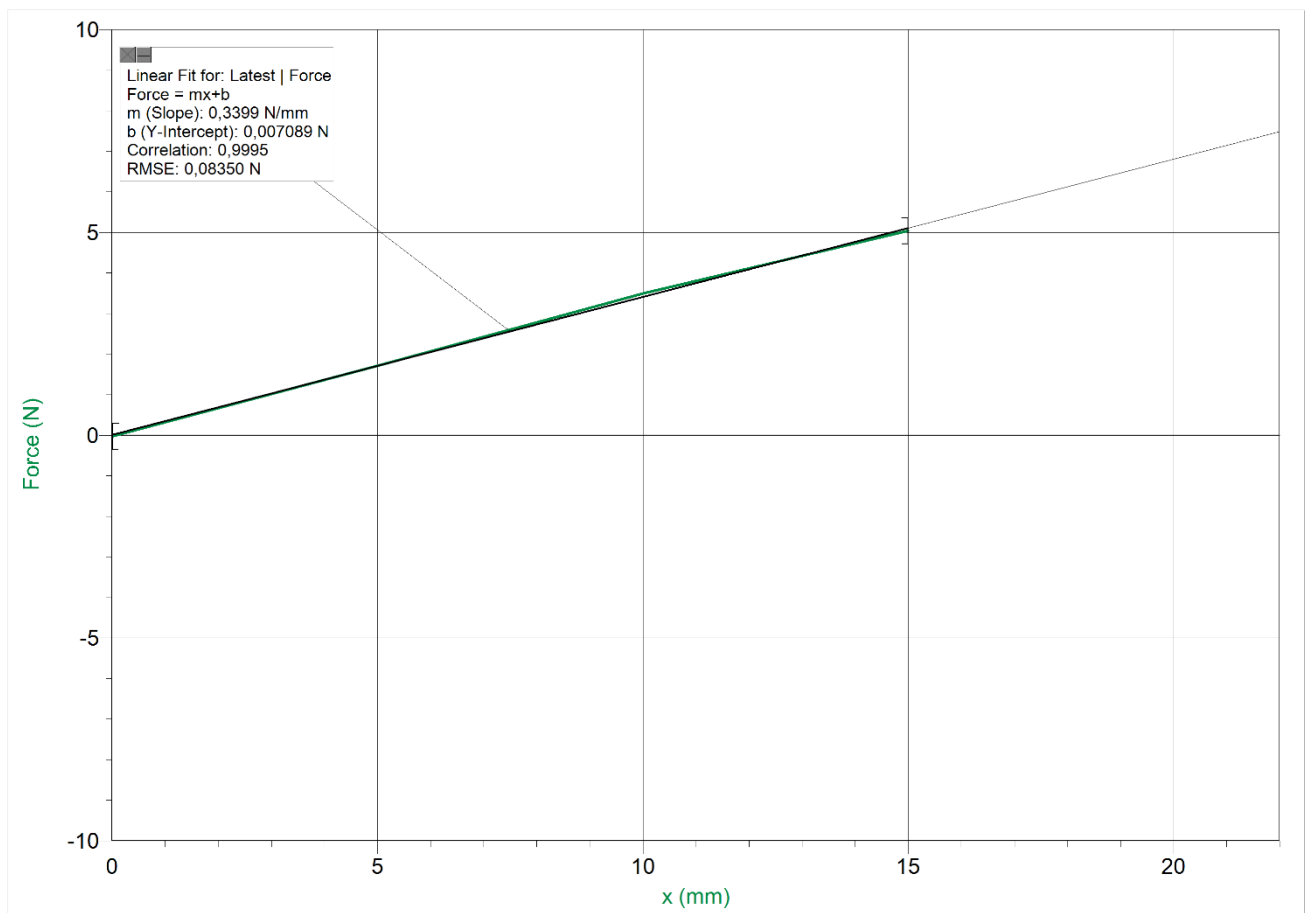
Kraft/ N	Udsvinget/mm
-0,026	0
1,709	5
3,500	10
5,042	15

Amplituden som funktion af omega

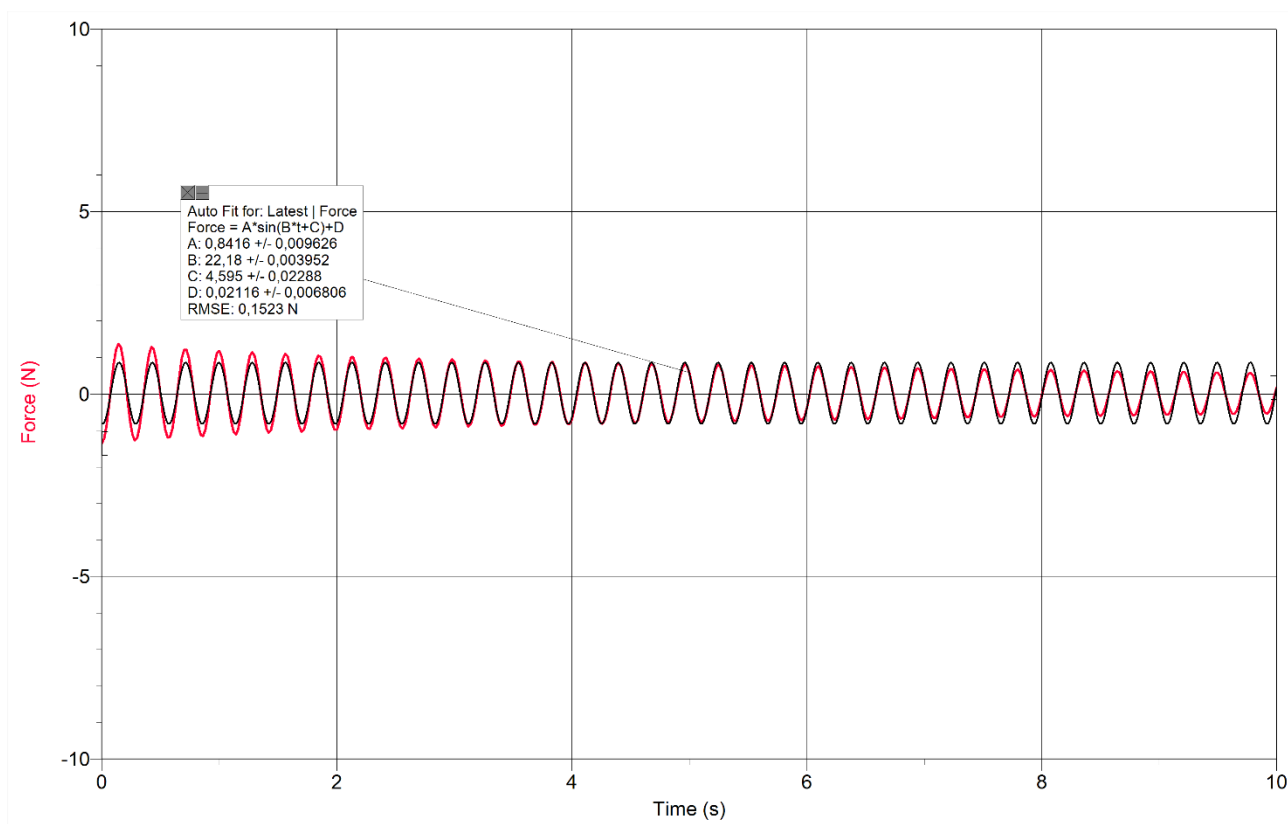
Omega/s ⁻¹	Amplitude/mm	Omega/s ⁻¹	Amplitude/mm
17,99	0,1007	21,87	0,9372
18,62	0,1147	22,19	2,275
19,25	0,1364	22,39	1,909
19,67	0,1614	22,5	1,7
19,88	0,1683	22,81	0,7769
20,3	0,2088	23,02	0,5529
20,5	0,2228	23,12	0,4678
20,92	0,2993	23,44	0,3361
21,13	0,3854	23,65	0,3136
21,24	0,385	24,07	0,2164
21,55	0,5441	24,7	0,1549
21,76	0,783	24,27	0,2071

Grafer

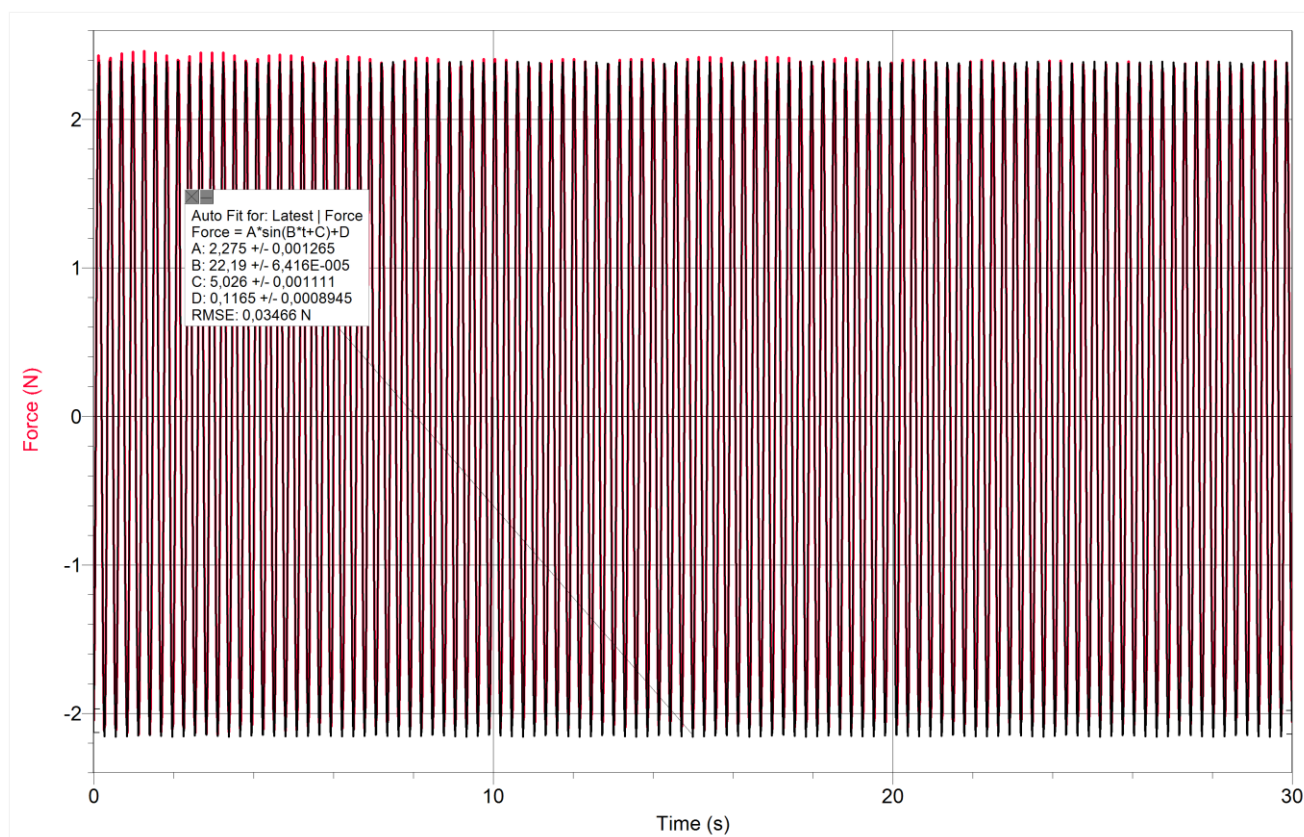
Bestemmelse af omega ved fjederkonstanten



Bestemmelse af omega ved en harmoniske svingning



Kraftpåvirkede harmoniske svingninger



På denne graf kan man se den kraftpåvirkede harmoniske svingning med en frekvens på 3,530Hz.

Grafen har en amplitude på 2,275mm og en omega på $22,19 \text{ s}^{-1}$

Amplituden som funktion af omega

