

Atom-, és molekula spektroszkópai gyakorlatok feladatai

ALAPVETŐ MÉRÉSEK AZ ABSZORPCIÓS SPEKTROSKÓPIA TERÜLETÉN

1. Oldott szerves anyagok UV, VIS és NIR abszorpciós színekének meghatározása spektrofotométerrel

Feladatok:

- 1.1. Mérje meg, különböző vastagságú kivetta felhasználásával, adott szerves anyagból készült oldatsorozat tagjainak extinkcióját (26) 200 nm és 1100 nm között!
- 1.2. Számítsa ki a mérési adatokból az oldott anyag abszorpció koefficiensének, $a(\lambda)$ (27), moláris dekadikus extinkció koefficiensének, $\epsilon(\lambda)$ (28) és abszorpciós hatáskeresztmetszetének, $\sigma_a(\lambda)$ (29) hullámhossz függvényeit három nagyságrenden keresztül!
- 1.3. Konvertálja a hullámhossz lineáris skálán felvett színeképeket frekvencia lineáris skálára!
- 1.4. Illessze a színekép hosszú hullámhosszú részére legalább két Gauss görbe összegét! Adja meg a maximum helyek és a sávok szélességének értékét!

2. Oldószerek, oldott szerves anyagok infravörös (NIR, FIR) tartományra eső transzmissziójának és abszorpciós színekének meghatározása spektrofotométerrel

Feladatok:

- 2.1. Mérje meg a víz, az etilalkohol és a víz transzmisszióját és extinkcióját 5000 cm^{-1} és 2000 cm^{-1} hullámszám tartományon!
- 2.2. Azonosítsa kézikönyvek segítségével az egyes tapasztalt sávokat adott molekula csoportok rezgésével!
- 2.3. Számítsa ki az egyes sávok félértékszélességéből a

ALAPVETŐ MÉRÉSEK AZ OLDAT LUMINESZCENCIA SPEKTROSKÓPIA TERÜLETÉN

3. Spektroluminométer gerjesztési és emisszió oldali monokromátorának hullámhossz szerinti ellenőrzése (hitelesítése)

Feladatok:

- 3.1. A mintatéren keresztül higanylámpával (elég távolról) világítsa meg az emissziós monokromátor belépő részét, és vegye fel a lámpából jövő sugárzás intenzitás hullámhossz függvényét! (Kellően keskeny belépő rést alkalmazzon!)
- 3.2. Készítse el a higanylámpa vonalainak hullámhossz adatai ismeretében a hullámhossz–skálarész függvényét!
- 3.3. Ezek után állítson be az emissziós monokromátornál 5–6 helyen ismert hullámhosszat, ellenőrizze, hogy a gerjesztő monokromátor milyen hullámhossz értékeinél tapasztal maximális kimenő jelet!

4. Spektroluminométer emisszió oldali részének vizsgálata spektrális átviteli függvényének, azaz az érzékenységének, $i(\lambda)$ meghatározása

Feladatok:

- 4.1. Vegye fel a hitelesítendő spektrális tartományon a spektroluminométerrel az ismert színhőmérsékletű wolfram lámpa alkalmazásával az $I_L(\lambda)$ függvényt!
- 4.2. Számítsa ki a (34)-es, a Planc-féle eloszlásfüggvényt, $E_L(\lambda)$ -t !
- 4.3. Számítsa ki a (36)-os összefüggés alapján a spektroluminométer érzékenységét leíró függvényt!
- 4.4. Vegye fel a hitelesítendő spektrális tartományon a spektroluminométerrel a megadott koncentrációjú kininszulfát, akriflavin és fluoreszcein fluoreszcencia színképét!
- 4.5. Számítsa ki a (36)-os összefüggés alapján a spektroluminométer érzékenységét leíró függvényt az alapján, hogy meg van adva az előbb mért oldatok valódi emissziós eloszlás függvénye!
- 4.6. Rajzolja ki a mért $I_L(\lambda)$ függvényt, a Planc-féle eloszlásfüggvényt, és a spektroluminométer érzékenységét leíró függvényt!

5. Oldott szerves anyag emissziós színképének meghatározása "folytonos" spektroluminométerrel

Feladatok:

- 5.1. Vegye fel adott gerjesztő hullámhossz mellett történő gerjesztés esetében, alacsony extinkciójú ($\epsilon(\lambda_g) \cdot c \cdot \Delta d < 0,5$), hasábküvetében levő oldatból jövő sugárzás intenzitás-hullámhossz eloszlás függvényét! Alkalmazzon a mérés során merőleges gerjesztési-megfigyelési geometriát és legyen a gerjesztő nyaláb, valamint a megfigyelt térrész is keskeny!
- 5.2. Vegye fel nagy extinkciójú oldat esetében ($\epsilon(\lambda_g) \cdot c \cdot \Delta d > 0,5$) a mintából jövő sugárzás intenzitás-hullámhossz eloszlás függvényét! Alkalmazzon a mérés során merőleges gerjesztési-megfigyelési geometriát, de a gerjesztés és a megfigyelés is essen a minta ugyanazon felületére!
- 5.3. Számolja ki a mért színképből a technikai színképet a 36-os összefüggés felhasználásával! Ábrázolja ezeket a színképeket!
- 5.4. Számolja ki a technikai színképből a valódi színképet a 46-47-es összefüggések felhasználásával! Ábrázolja a kapott színképet!
- 5.5. A valódi energia (vagy fotonszám)–hullámhossz függvényből az 1. táblázat szerint számolja ki az energia–hullámszám, $E(\nu)$ és az energia–frekvencia $E(\nu)$ függvényeket, valamint (30) alapján számolja ki a normált eloszlásfüggvényt!
- 5.6. Felhasználva az oldott anyag moláris dekadikus extinkció koefficiensének frekvencia függvényét, a Strikler–Berg összefüggés (11–12) alapján számolja ki a teljes átmeneti valószínűséget (k_e) és a sugárzásos élettartamot (τ_0)!

6. Oldott szerves anyag gerjesztési színekének meghatározása "folytonos" spektroluminométerrel

Feladatok:

- 6.1. Vegye fel adott megfigyelési hullámhossz mellett, alacsony extinkciójú ($\epsilon(\lambda_g) \cdot c \cdot \Delta d < 0,5$), hasábküvetében levő oldatból jövő sugárzás esetében a gerjesztési színekét! Alkalmazzon a mérés során merőleges gerjesztési-megfigyelési geometriát és legyen a gerjesztő nyaláb, valamint a megfigyelt térrész is keskeny!
- 6.2. Vegye fel adott megfigyelési hullámhossz mellett, nagy extinkciójú oldat esetében ($\epsilon(\lambda_g) \cdot c \cdot \Delta d > 0,5$), hasábküvetében levő oldatból jövő sugárzás esetében a gerjesztési színekét! Alkalmazzon a mérés során merőleges gerjesztési-megfigyelési geometriát és a gerjesztés és a megfigyelés is essen a minta ugyanazon felületére!
- 6.3. Vesse össze a mért gerjesztési színek eloszlását az abszorpcós színek eloszlásával! Ábrázolja ezeket egy rajzon!

7. Oldott szerves anyag polarizációs színekének meghatározása "folytonos" spektroluminométerrel

Feladatok:

- 7.1. Vegye fel adott gerjesztő hullámhossz mellett történő gerjesztés esetében, alacsony extinkciójú ($\epsilon(\lambda_g) \cdot c \cdot \Delta d < 0,5$), hasábküvetében levő (viszkózus) oldatból jövő sugárzás emisszió-polarizációs színekét! Alkalmazzon a mérés során merőleges gerjesztési-megfigyelési geometriát és legyen a gerjesztő nyaláb, valamint a megfigyelt térrész is keskeny!
- 7.2. Vegye fel adott megfigyelési hullámhossz mellett, alacsony extinkciójú ($\epsilon(\lambda_g) \cdot c \cdot \Delta d < 0,5$), hasábküvetében levő (viszkózus) oldatból jövő sugárzás esetében a gerjesztési polarizációs színekét! Alkalmazzon a mérés során merőleges gerjesztési-megfigyelési geometriát és legyen a gerjesztő nyaláb, valamint a megfigyelt térrész is keskeny!
- 7.3 Rajzolja ki a kapott és a számolt színekét!

8. Oldott szerves anyag lecsengési görbéjének meghatározása villanólámpás spektroluminométerrel

Feladatok:

- 8.1. Vegye fel az adott ritkaföldfém komplex oldat emissziós sávjában megfigyelve a villanólámpás spektroluminométerrel a sugárzás időbeli lecsengését!
- 8.2. Értelmezze ki a lecsengési görbét! Először állapítsa meg, hogy a lecsengés egyetlen exponenciális függvénnyel leírható-e! Ehhez képezze a kapott görbe természetes alapú logaritmusát és ezt ábrázolja az idő függvényében! Egyenes esetén számítsa ki a meredekségét (τ)! Ha nem egyenest kapott, próbáljon meg két-exponenciális összegeként felírt függvényt a mérési eredményekre illeszteni!
- 8.3 Rajzolja ki a mért görbét és a számolás során kapott függvényeket!

9. Oldott szerves anyag lecsengési görbéjének meghatározása TEA N₂ lézer gerjesztést alkalmazó spektroluminométerrel

Feladatok:

- 9.1. Vegye fel az adott szerves festék oldat fluoreszcencia sávjában megfigyelve a TEA N₂ lézeres gerjesztést alkalmazó spektrofluoriméterrel a sugárzás időbeli lecsengését! Vegye fel ugyanakkor a 337 nm-es gerjesztésnek megfelelően az oldószer Raman sávjában a készülék fényimpulzust követő válaszfüggvényét!
- 9.2. Értékelje ki a lecsengési görbét! Dekonvolúció útján (egy-exponenciális lecsengést feltételezve) számolja ki a valódi lecsengési görbét és a csillapodási időt!
- 9.3. Vegye fel kétkomponensű oldat esetében, három késleltetési idő mellett az időbontott színeképeket!
- 9.4. Rajzolja ki a mért görbéket és a számolás során kapott függvényeket!

ALAPVETŐ MÉRÉSEK AZ ATOM EMISSZIÓS SPEKTROSKÓPIA TERÜLETÉN

10. Fémanalitikai spektroszkóp hullámhossz szerinti ellenőrzése (hitelesítése) és alkalmazása minőségi elemvizelésre

Feladatok:

- 10.1. Hitelesítse spektrálművekkel (higanygőz, hélium, nitrogén, kadmium,) a spektroszkóp skáláját hullámhosszra! Keresse ki kézikönyvekből az alkalmazott lámpák látott spektrum vonalainak adatait!
- 10.2. Határozza meg (gáz)lángban a konyhasónak, a mosópornak, a homoknak, a kalcium és a magnézium pezsgőtablettáknak, valamint a porrá őrölt vaskloridnak és rézkloridnak a spektrumainál a vonalak hullámhosszát!

11. Időintegrált atomemissziós színekép felvétel lézer-indukált mikroplazmából

Feladatok:

- 11.1. Vegye fel a nátrium és a kálium (konyhasó) legalacsonyabb gerjesztett állapotból az alapállapotba történő átmenete során tapasztalható dublett vonalainak az időintegrált színeképét levegő atmoszférában! Hitelesítse adott tartományon a monokromátort vas emissziós vonalainak felhasználásával!
- 11.2. Vegye fel a cink és a kadmium gerjesztett triplétt állapotából a legalacsonyabb triplétt állapotba történő átmenete során tapasztalható vonalainak az időintegrált színeképét! Hitelesítse adott tartományon a monokromátort vas emissziós vonalainak felhasználásával!
- 11.3. Rajzolja ki a kapott színeképeket

12. Időbontott atomemissziós színekép felvétel lézer-indukált mikroplazmából

- 12.1. Vegye fel az idő függvényében a cink legerősebb triplétt vonalának színeképét!
- 12.2. Illesszen a spektrumvonalakra szimmetrikus és aszimmetrikus Lorentz görbét! Határozza meg a vonal intenzitását, maximum helyét, félértékszélességét, eltolódását, háttérét és az aszimmetriáját jellemző paramétert, mint az idő függvénye!