FÉNY A KÉMIÁBAN

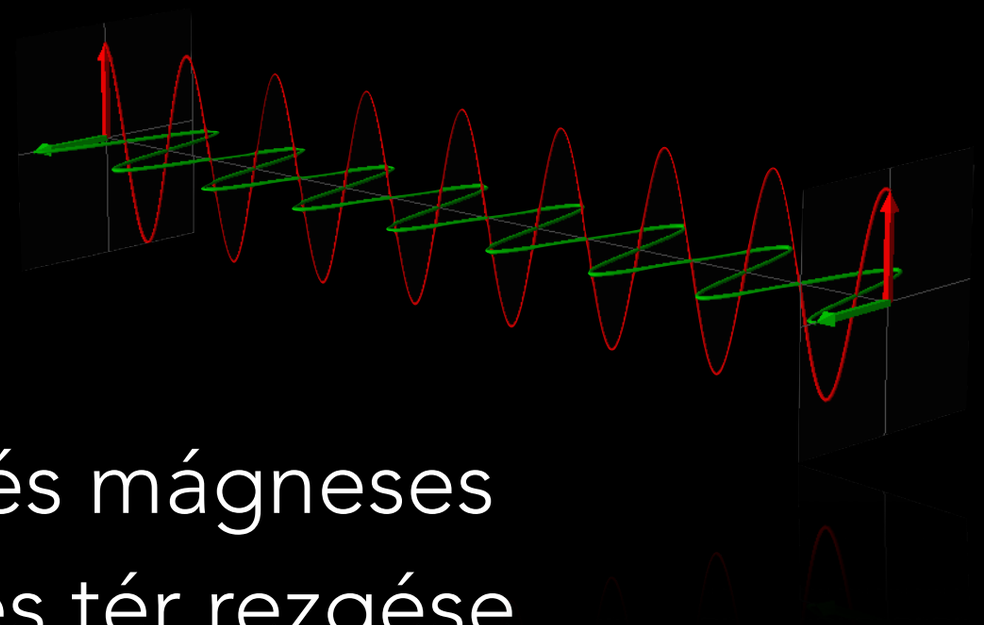
FÉNY-ANYAG KÖLCSÖNHATÁSOK TÖRTÉNETE A KÉMIAI SZEMLÉLET TÜKRÉBEN



KONCZ BENEDEK - X5FMRC

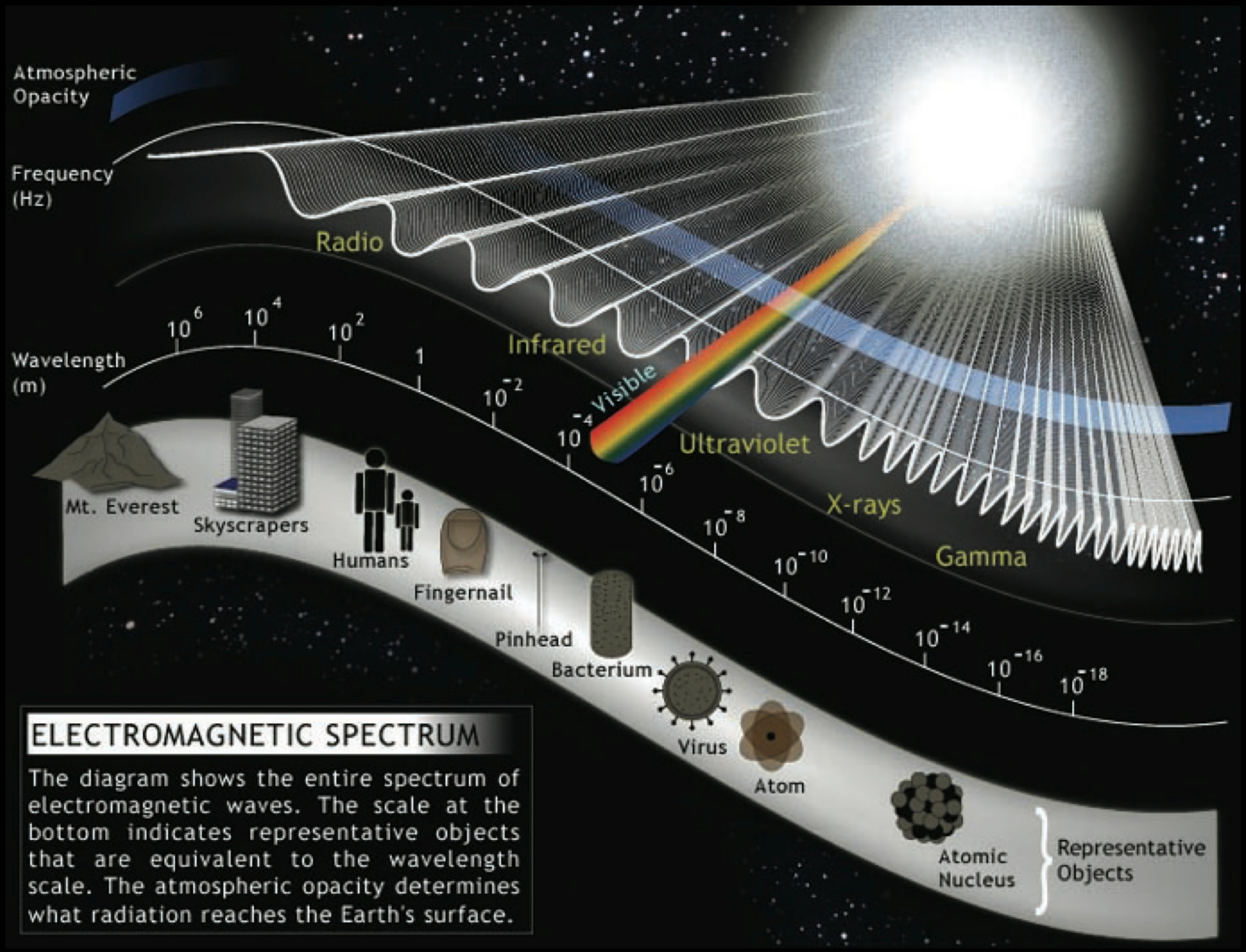
2014.04.24.

A FÉNY TERMÉSZETE



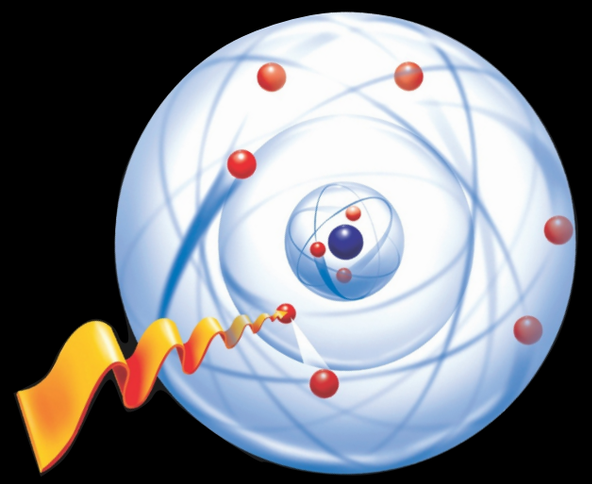
- EMR - elektromágneses sugárzás
- egymásra merőleges elektromos és mágneses hullámok, elektromos és mágneses tér rezgése
- szűkebb értelemben csak a látható tartomány, tágabb értelemben a magyarban szokás mindennemű sugárzásra használni foton-anyag kölcsönhatás esetén
- kvantáltan hordoz energiát, a fénykvantumot Einstein nevezte el a fényelektromos hatás magyarázata írt munkájában fotonnak

A FÉNY TERMÉSZETE



A FÉNY SZEREPE A KÉMIÁBAN

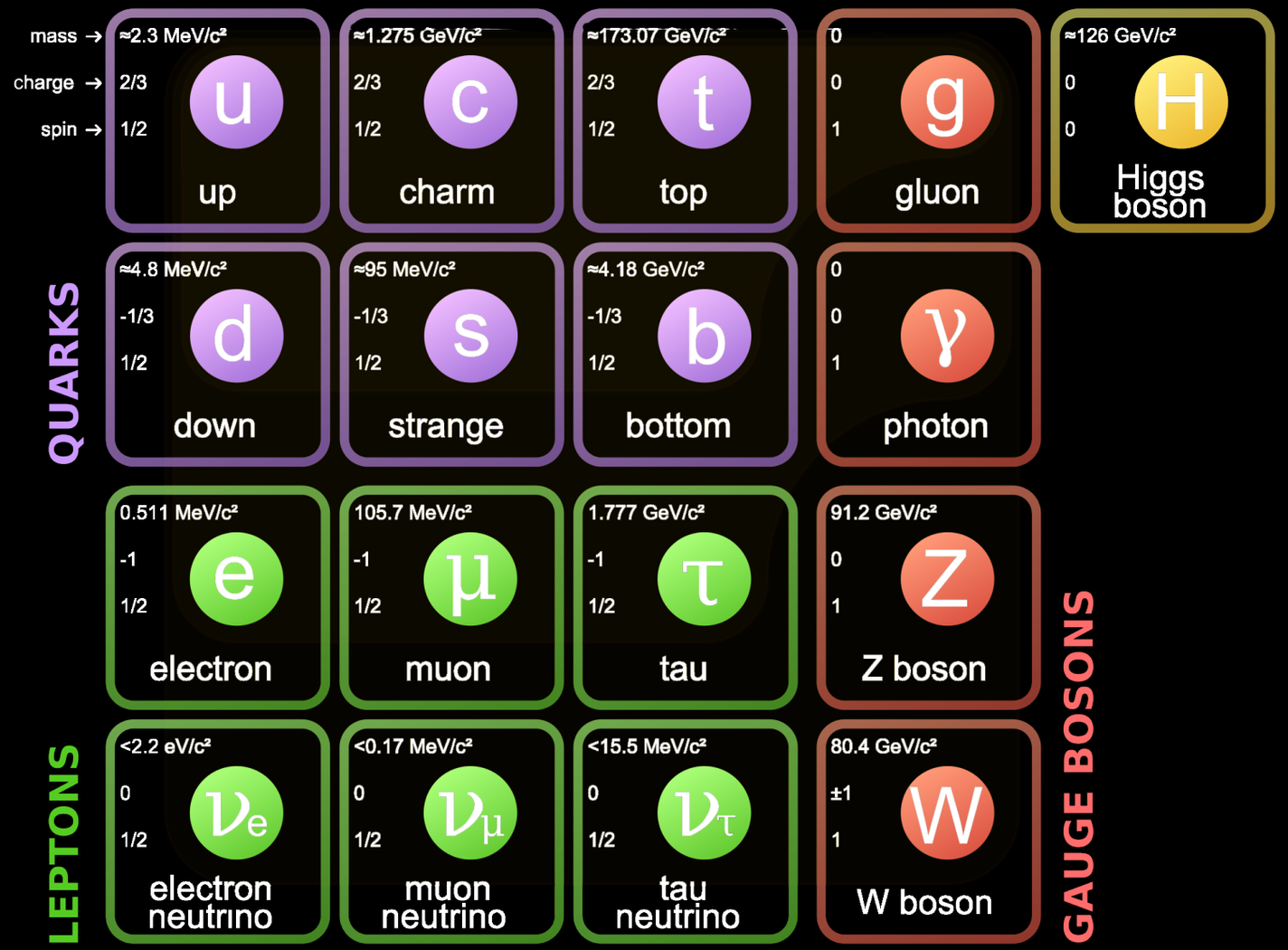
- fizikusok szeretik emlegetni:
  a kémia a vegyértékelektronok fizikája



- érdemes az elektronokat érintő kölcsönhatásokat vizsgálni
- a legfontosabbak a kémiában az *elektromos kölcsönhatások*
- ezek befolyásolják az atomoktól kezdve a molekulák felépülését, a PES-en keresztül valamennyi reakció lezajlását, fehérjék téralkatát, kolloidális méretű részecskehalmok stabilitását

- modern részecskefizikában a kölcsönhatások:
  - gyenge
  - erős
  - elektromágneses
  - gravitációs

- Standard Modell
  - anyagot felépítő részecskék = fermionok
  - kölcsönhatásokat közvetítő részecskék = bozonok

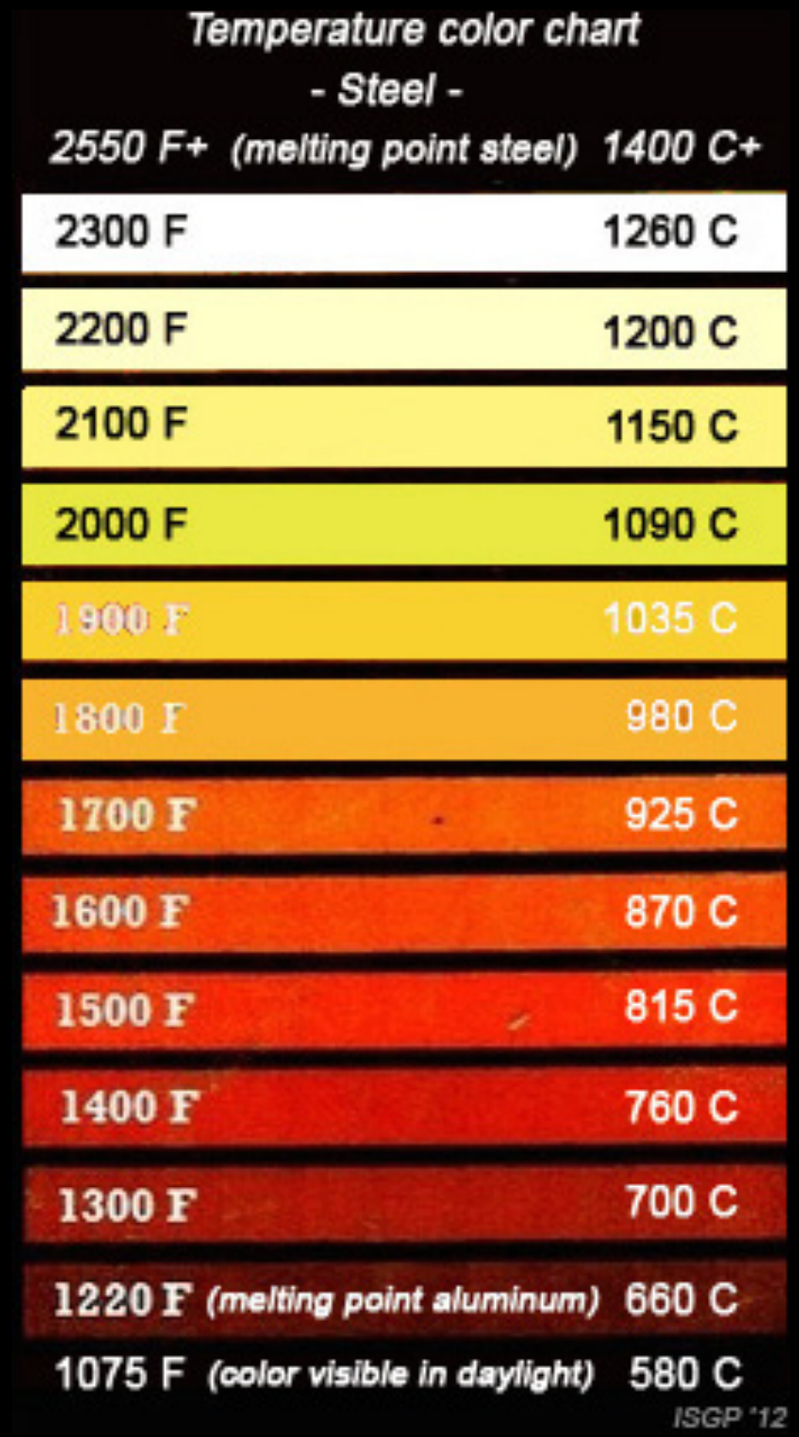


Az SM alapvető részecskéi

- az elektromágneses kölcsönhatást a fotonok közvetítik, így a kémiában legfontosabb kölcsönhatásról a fotonok, azaz a fény által szerezhetünk információt, ráadásul egyszerűen!

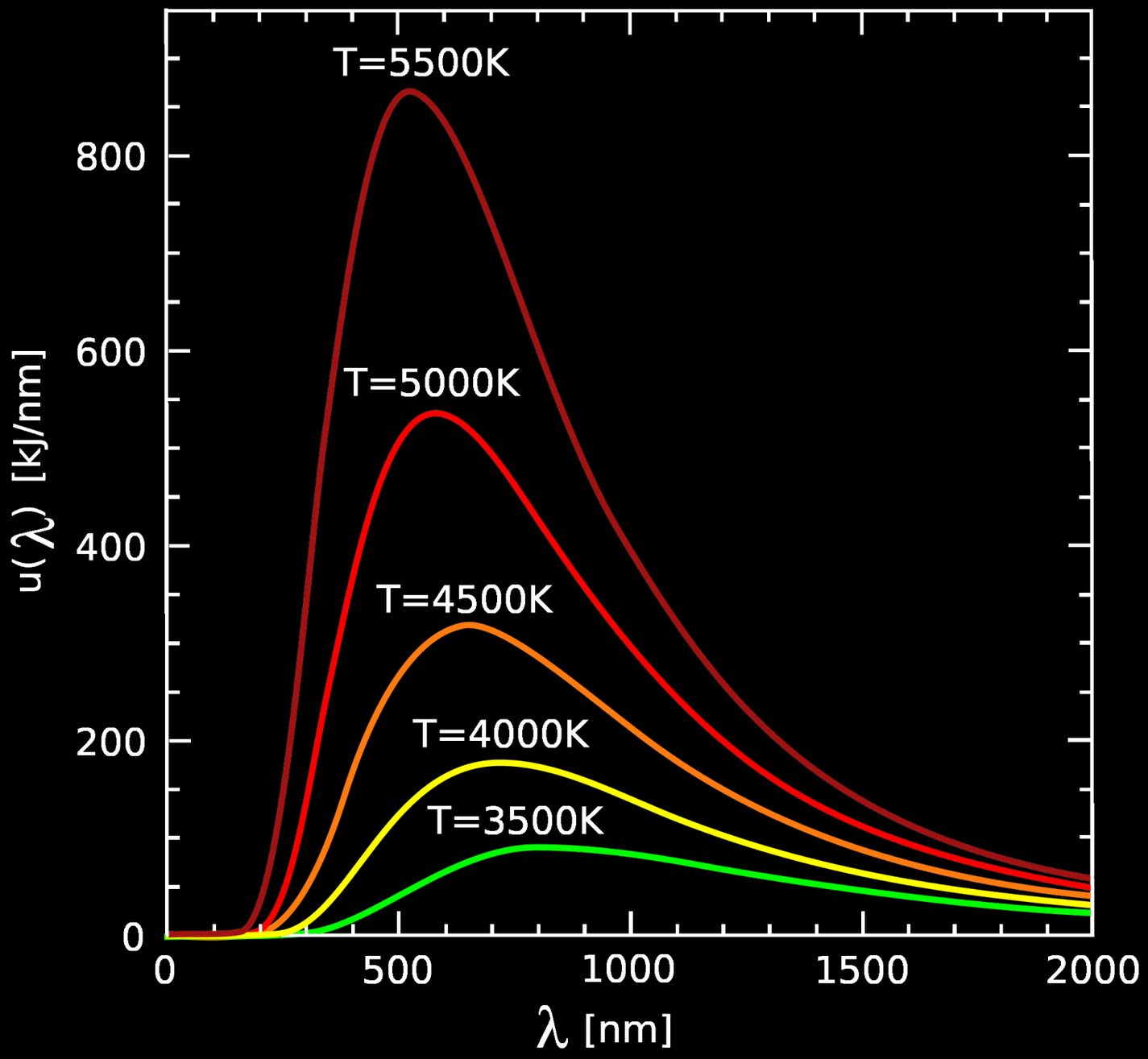
IZZÁS HŐMÉRSÉKLETE

- hőmérsékleti sugárzás
  - az anyag részecskéinek mozgása miatt jön létre
  - fekete testekre jellemzően: a teljes spektrumban, és az intenzitás eloszlás jellemző a hőmérsékletre
  - Wien-tv: $\lambda_{max}=b/T$
  - színesnek látjuk az izzó fémet



Az acél színe adott T-n.

IZZÁS HŐMÉRSÉKLETE



Hőmérsékleti sugárzók intenzitás eloszlása

Temperature color chart - Steel -	
2550 F+ (melting point steel)	*1400 C+*
2300 F	1260 C
2200 F	1200 C
2100 F	1150 C
2000 F	1090 C
1900 F	1035 C
1800 F	980 C
1700 F	925 C
1600 F	870 C
1500 F	815 C
1400 F	760 C
1300 F	700 C
1220 F *(melting point aluminum)*	660 C
1075 F *(color visible in daylight)*	580 C

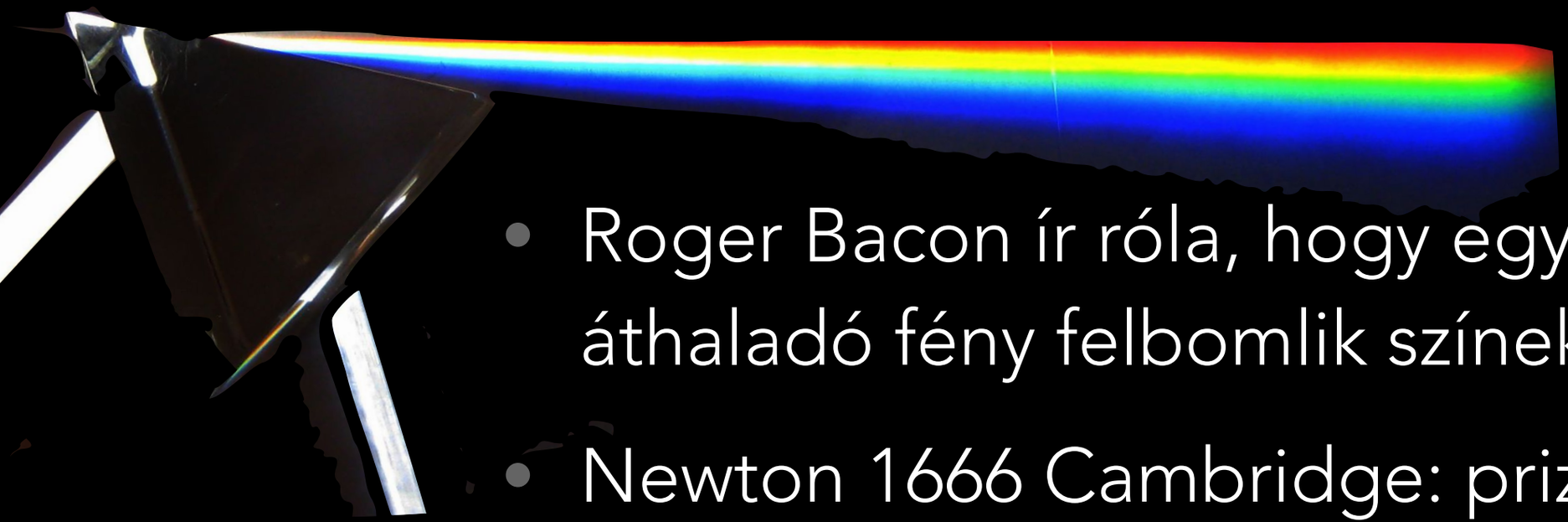
ISGP '12

Az acél színe adott T-n.

ELSŐ EMLÍTÉSEK

- Az első fényre (konkrétan napfényre) vonatkozó megfigyelést Titus Carus Lucretiustól származtatjuk:
  - K. e. 60-ban feltételezte egy sugárzás létezést, amely hőt közvetít a Napból
  - „Forsitan et rosea sol alte lampade lucens possideat multum caecis fervoribus ignem circum se, nullo qui sit fulgore notatus, aestifer ut tantum radiorum exaugeat ictum” - Lukrez: Von der Natur der Dinge, 5. Buch, Vers 602-604. Reclams Universalbibliothek, Leipzig, kiadás éve ismeretlen (a forráslista első eleme alapján)
  - Lehetséges, hogy magasan a Napot körös-körülölelő rózsás fáklya láthatatlan komorló hővel eltöltött tüze, ami a Nap sugarait kíséri, teszi olyan erősen sugárzóvá azokat. (szabad fordítás)
- Edmé Mariotte bizonyította a feltevést (1686) - egy gyertya képe egy fém tükrön lehűlt, ha a fényútba egy üvegtömböt helyezett

A LÁTHATÓ FÉNY SPEKTRUMA



- Roger Bacon ír róla, hogy egy pohár vízen áthaladó fény felbomlik színekre
- Newton 1666 Cambridge: prizmával felbontotta a fehér fényt
- a felfogott képet, amin a színátmenetet tapasztalta spektrumnak (latin ‘kép a lélekben’) nevezte el
- Newton magyarázata: fény eltérő méretű tömör testekből áll



Newton laborjában

INFRAVÖRÖS ÉS UV TARTOMÁNY

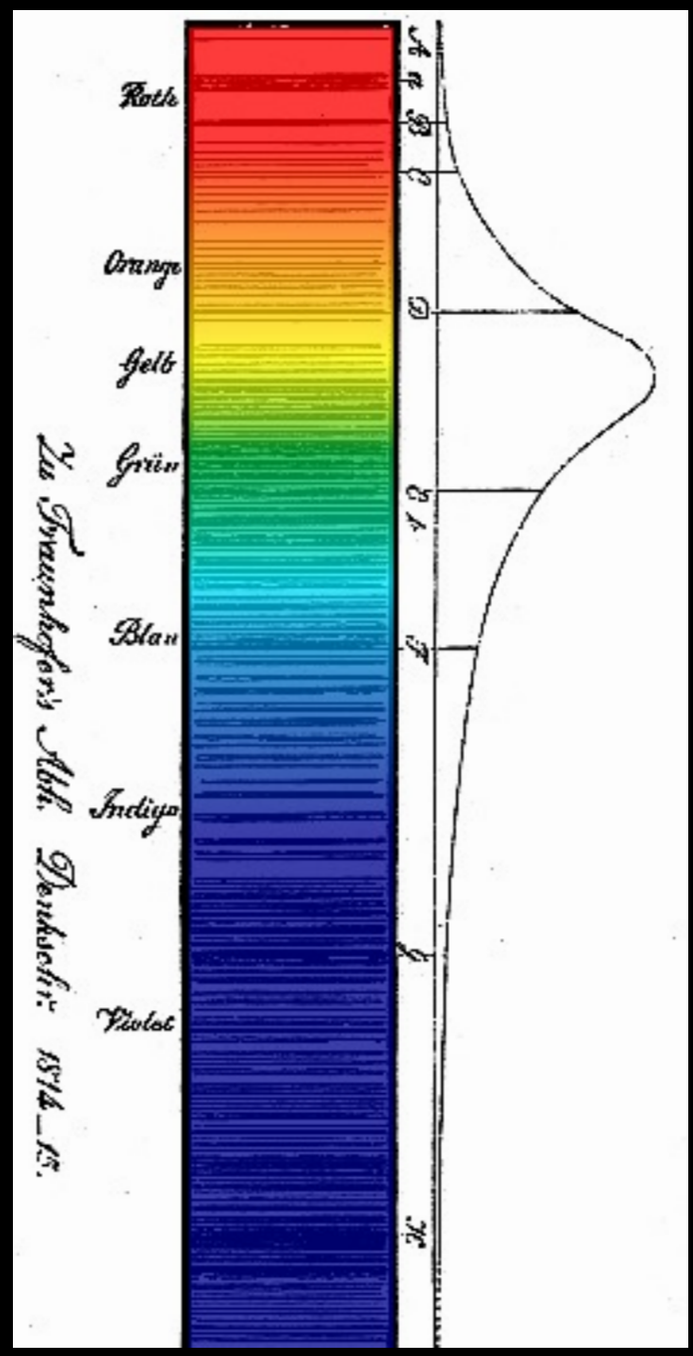


Herschel az infravörös sugárzás felfedezése közben

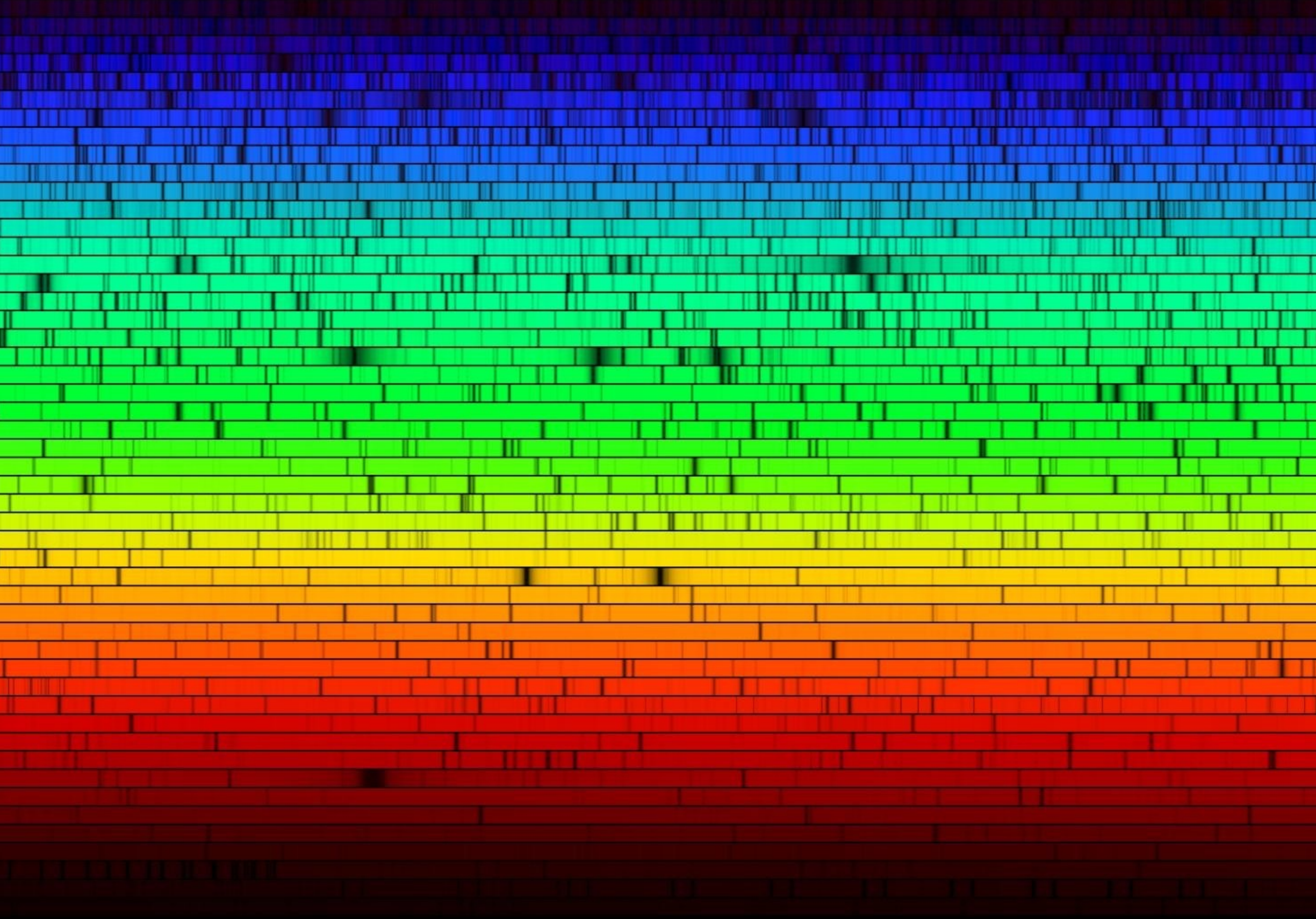
- Frederick William Herschel 1800
  - a felbontott fehér fény hőközlő hatását vizsgálta befeketített hőmérőkkel
  - azt tapasztalta a látható vörös szín után a melegedés folytatódik -» felfedezte az IR tartományt
- Wilhelm Ritter 1801
  - AgCl bomlását vizsgálta különböző színek esetén
  - ibolyán túl is folytatódik, sőt hatékonyabb -» UV

VONALAS SPEKTRUMOK A NAPBÓL

- William Hyde Wollaston 1802
- Joseph von Fruanhofer 1814
  - a Nap színképében fekete vonalak
  - optikai rácsok építése - interferencia alapú színképek
  - összesen 574 vonal azonosítása
  - NEM adott magyarázatot!
- ma: abszorpciós spektrum



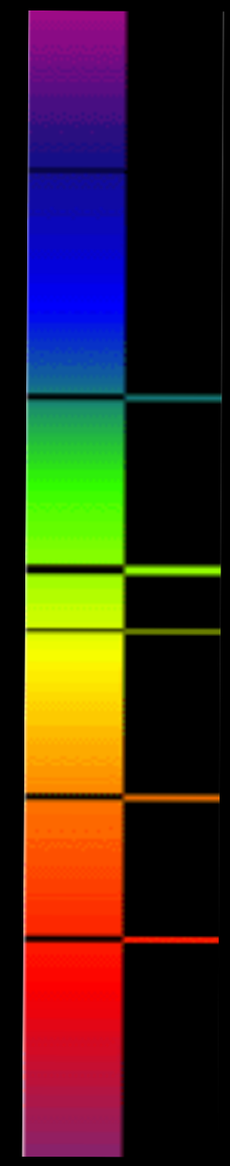
Fraunhofer vonalak,
saját publikációjából (utólag színezve)



High Resolution Solar Spectrum - Nigel Sharp, National Optical Astronomical Observatories/National Solar Observatory at Kitt Peak/Association of Universities for Research in Astronomy, and the National Science Foundation

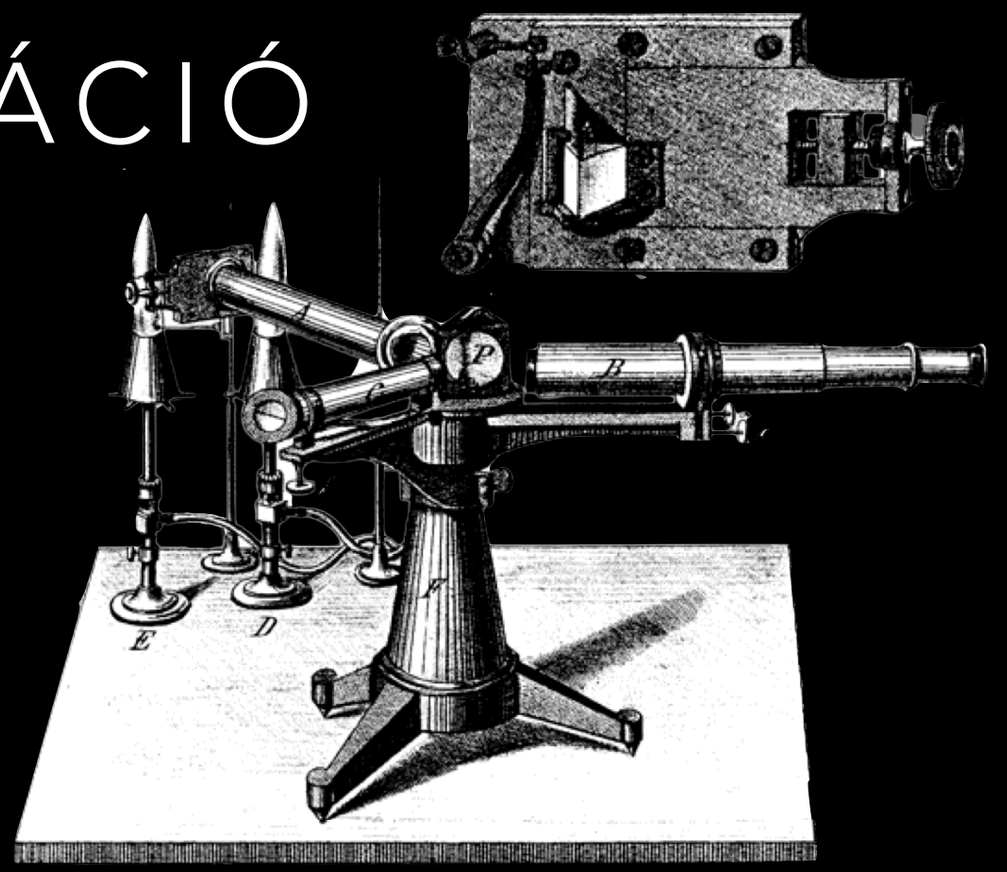
SPEKTRÁLIS VONALAK OKA

- Fox Talbot és John Herschel 1826
  - lángok “világító” vonalas (emissziós) színképe
- William Miller 1833
  - gázokon keresztülvezetve a fényt, újabb sötét vonalak
- Kirchhoff 1859
  - egyazon anyag emissziójának és abszorpciójának intenzitása adott hullámhosszon, azonos hőm. megegyezik
  - Nap színképében a vonalak a Nap hidegebb atmoszférájában lévő anyagok elnyeléséből származik

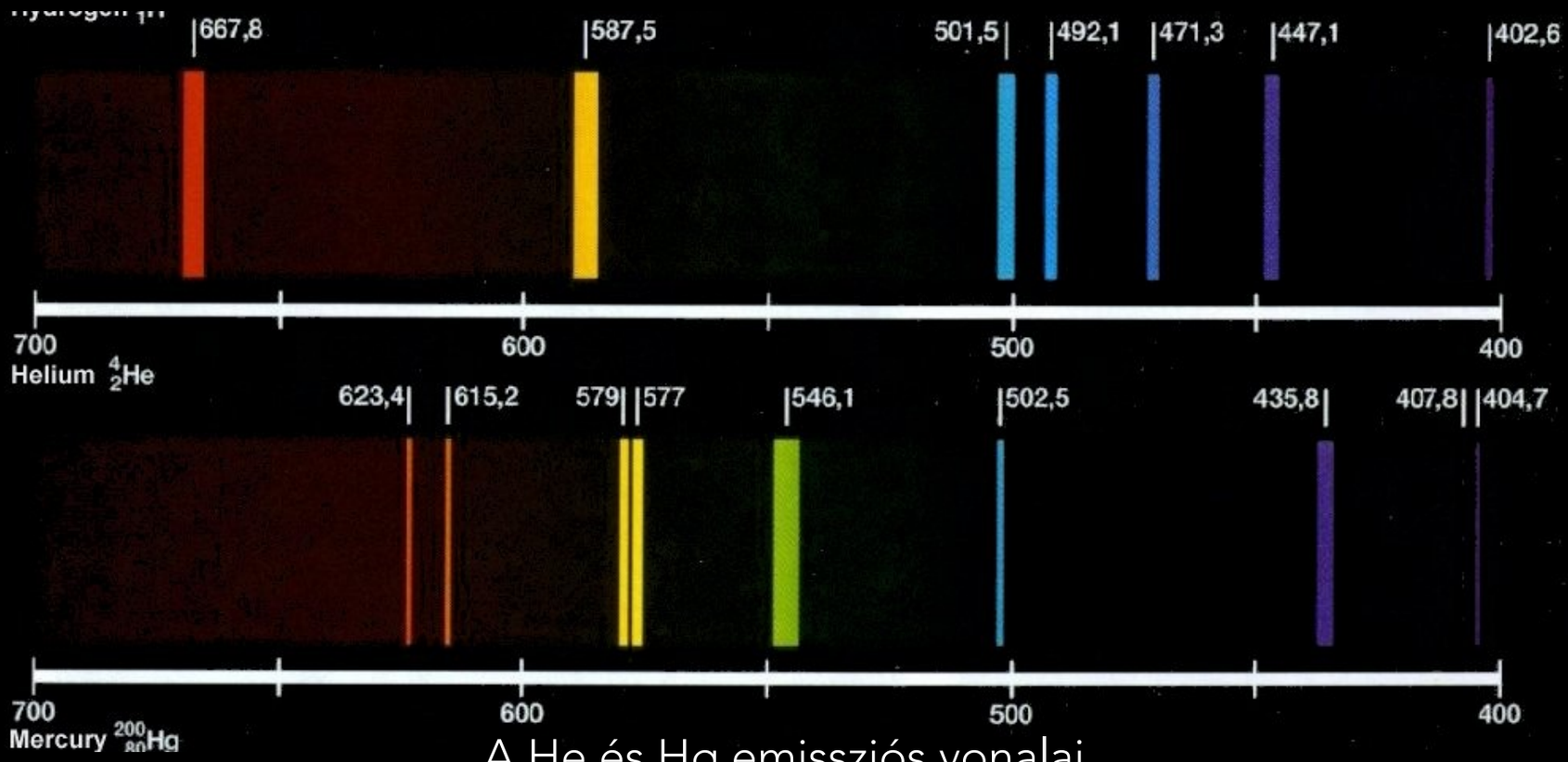


ANALITIKAI INFORMÁCIÓ

- Bunsen és Kirchhoff 1860-as évek
  - fém vegyületek spektruma független az aniontól
  - minden elem jellemző színképet ad!

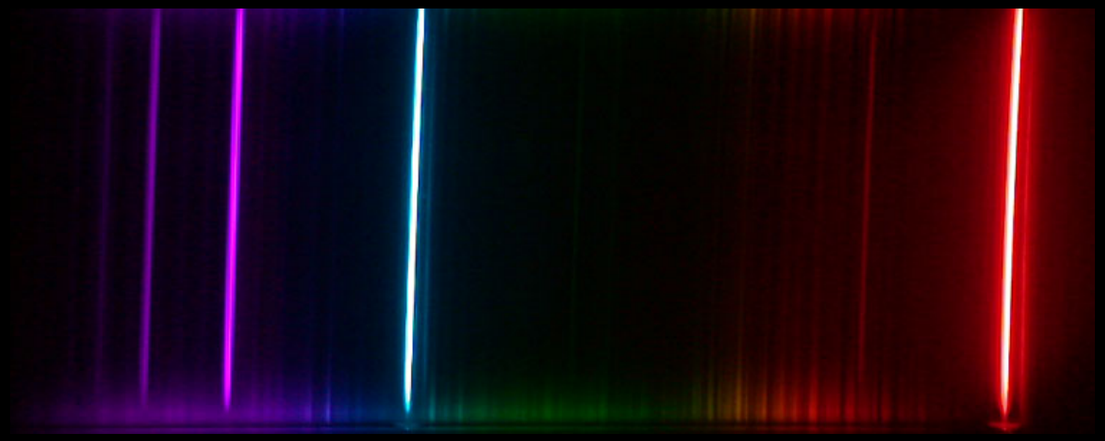


Kirchoff és Bunsen spektroszkópja



A He és Hg emissziós vonalai

H-VONALAS SZÍNKÉPE

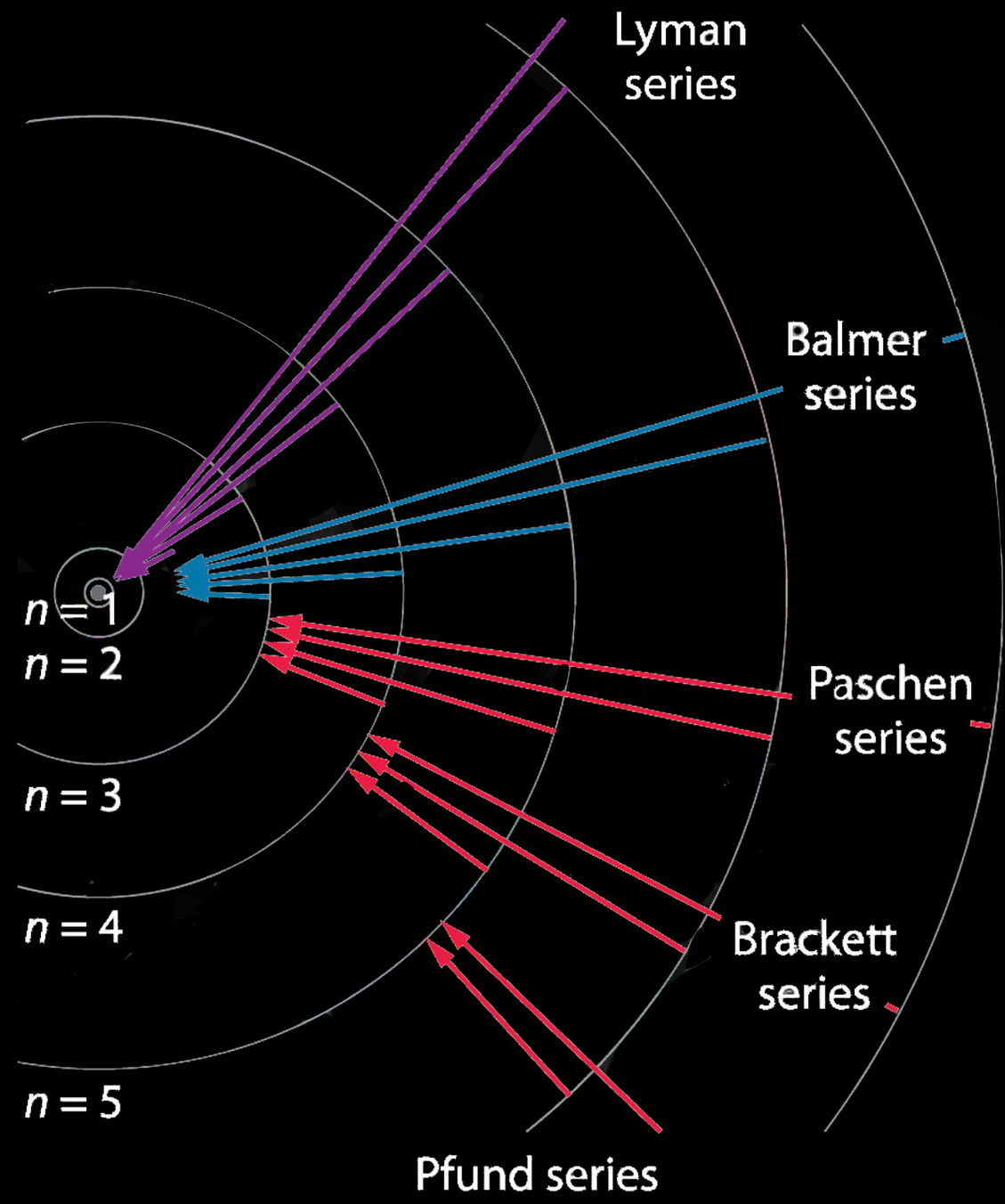


$$\lambda = H\frac{m^2}{m^2-4}$$

$$H{=}364{,}56\ \text{nm}$$

$$\widetilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n''^2} - \frac{1}{n'^2}\right)$$

$$R_H{=}109677{,}58\ \text{cm}^{-1}$$



A felfedezhető sorozatok grafikusan

KVANTUMMECHANIKAI MODELLEK

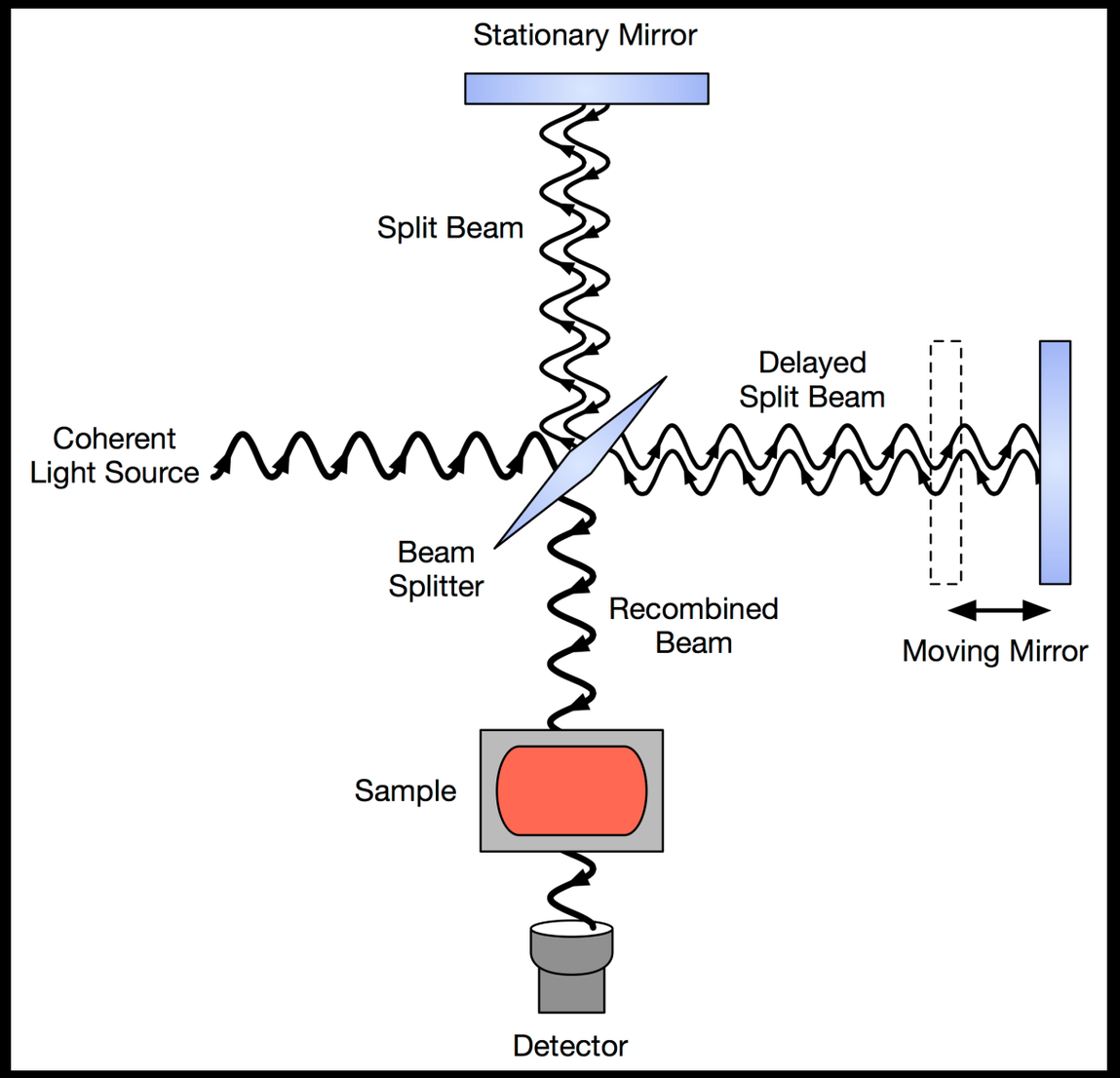
- kvantumos fény - Planck, fotoelektromos hatás - Einstein
- Bohr-modell 1913
  - r sugarú kör alakú pályán keringenek
  - stacionárius állapotok, nem sugároznak
  - csak a H-atomra jó -» Sommerfeld modell
- Zeemann effektus és Stark effektus - felhasadás
- Schrödinger-Heisenberg modell 1926

MODERN SPEKTROSZKÓPIA

- megszámlálhatatlan sok technika:
  - 2D NMR, 3D NMR ESR, MW, IR, Raman-IR, UV, UPS, XPS, CD, VCD, LD-IR, Mössbauer, XTRF, LIF, LEI, MALDI, XRC, CARS, CVASF, CRD, LIBS, IETS…
- meghatározható: egyensúlyi és dinamikus geometria, kötéserősség, elektrongerjesztés, ionizáció, törzselektronok, összetétel, globális struktúra

MODERN SPEKTROSZKÓPIA

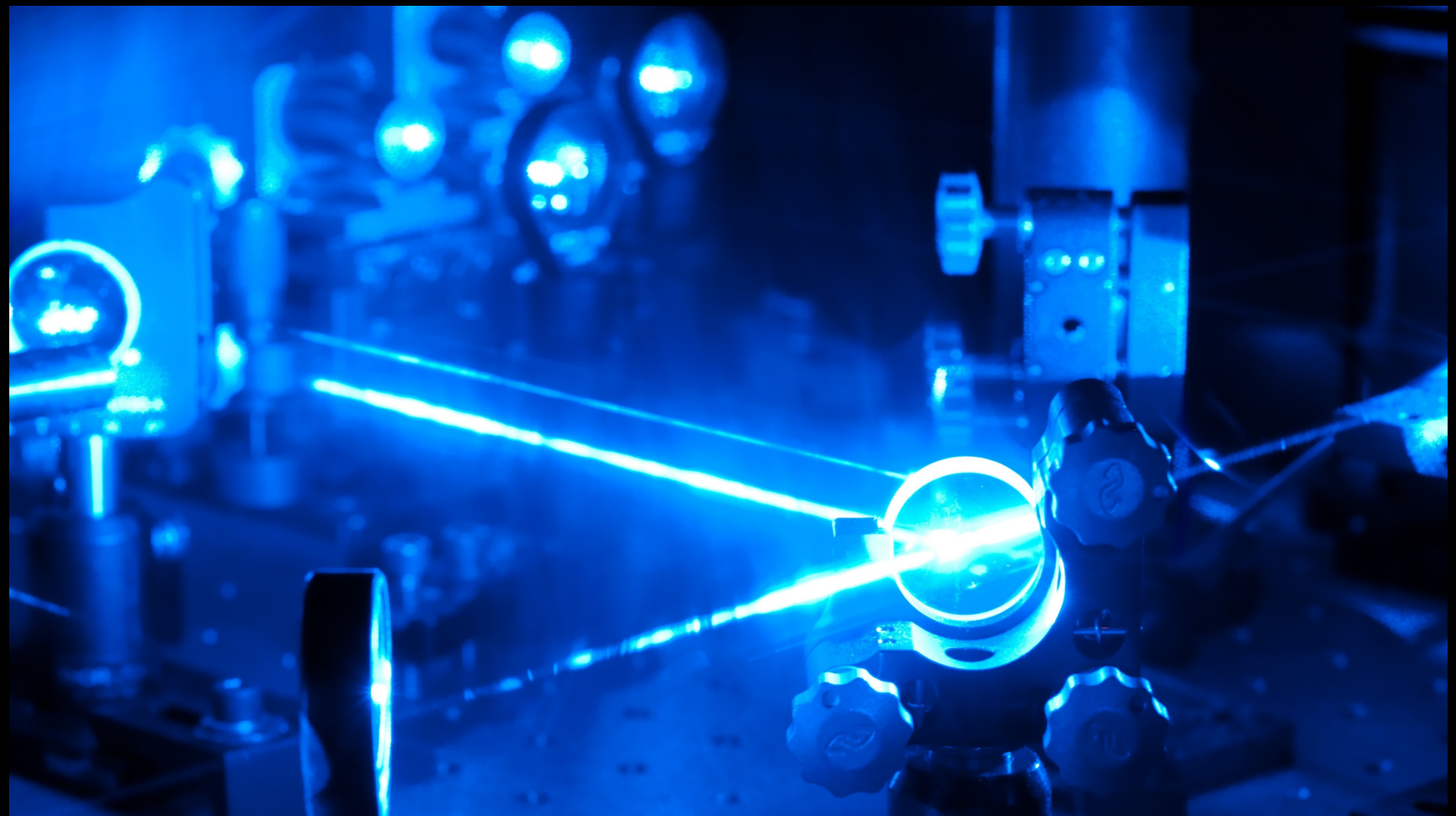
- interferométer
  - hullámhossz pontos megmérésére szolgálnak
  - egy sugárosztó, egy fix és egy mozgatható tükör alkotja az alapját
  - az önmagával interferáló hullámból erősítési mintázatából és a retardációból lehet a hullámhosszt kiszámolni



FT-IR készülék sémája

MODERN SPEKTROSZKÓPIA

- LASER
  - nagy fényerejű, monokromatikus (esetleg hangolható), időben és térben koherens, polarizáció kontrollálható, irányított, femtoszekundumos skálán üzemeltethető



Köszönöm a figyelmet!

KONCZ BENEDEK

FORRÁSOK

D. Freude “Spectroscopy, Introductuion" Universität Leipzig 2006 (http://uni-leipzig.de/~energy/pdf/freuse1.pdf)

The era of classical spectroscopy (http://web.mit.edu/spectroscopy/history/history-classical.html) (2014. 04. 18.)

A Brief (Incomplete) History of Light and Spectra (http://www.chemteam.info/Electrons/Spectrum-History.html) (2014. 04. 18.)

Spectroscopy History Compiled and Edited By Barlow Bob (http://www.neafsolar.com/bb/spectroscopy.html) (2014. 04. 18.)

http://ds9.ssl.berkeley.edu/LWS_gems/pdfs/em-spectrum.pdf (2014. 04. 18.) - 2. dia - Elektromágneses sp.

http://www.howitworksdaily.com/whats-inside/inside-an-atom/ (2014. 04. 18.) - 3. dia - Az atom képe

http://en.wikipedia.org/wiki/Light#Electromagnetic_spectrum_and_visible_light (2014. 04. 18.)

http://hu.wikipedia.org/wiki/Standard_modell (2014. 04. 18.) - 4. dia - Részecsketábla

http://hu.wikipedia.org/wiki/Alapvet%C5%91_k%C3%B6lcs%C3%B6nhat%C3%A1sok (2014. 04. 18.)

http://hu.wikipedia.org/wiki/Kvantum-sz%C3%ADndinamika (2014. 04. 18.)

http://en.wikipedia.org/wiki/Fundamental_interaction (2014. 04. 18.)

http://hu.wikipedia.org/wiki/H%C5%91m%C3%A9rs%C3%A9kleti_sug%C3%A1rz%C3%A1s (2014. 04. 18.)

http://en.wikipedia.org/wiki/Thermal_radiation (2014. 04. 18.) - 5. dia - Feketetest színképek

http://911review.com/articles/reijden/911_my_own_review_files/Thermite_all_in_one_chart.jpg (2014. 04. 18.) - 5. dia - Hőm. skála

http://meganandtimmy.com/wp-content/uploads/2011/10/3480024771_80bb55faea.jpg (2014. 04. 18.) - 5. dia - Izzó vasrúd

http://southerncrossreview.org/74/tao-colors-2_html_4bc2efbe.jpg (2014. 04. 19.)- 7. dia - Prizma

http://www.biographyonline.net/scientists/isaac-newton.html (2014. 04. 19.)- 7. dia - Festmény Newtonról

http://www.univie.ac.at/space/HERSCHEL/herschel_ir_b.jpg (2014. 04. 19.) - 8. dia - Herschel

http://chinook.kpc.alaska.edu/~ifafv/lecture/fraunhofer.htm (2014. 04. 19.) - 9. dia - Fraunhofer vonalak

High Resolution Solar Spectrum Nigel Sharp, National Optical Astronomical Observatories/National Solar Observatory at Kitt Peak/Association of Universities for Research in Astronomy, and the National Science Foundation -10. dia - A nap spektruma

http://www.bbc.co.uk/bitesize/higher/physics/images/spectra4.gif (2014. 04. 19.) - 11. dia - Emisszió, abszorpció

http://2.bp.blogspot.com/-V2ESDXZJuOY/T2ea7n2JzcI/AAAAAAAAACY/ReoTA1l3Y7M/s1600/emission-spectra-1.jpg (2014. 04. 19.)- 12. dia - Elemek emissziós spektruma

http://astro.psu.edu/public-outreach/fireworks-masks-1/sample-spectra-of-gases (2014. 04. 19.)- 13. dia - H vonalas spektruma

http://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0/s10-03-atomic-spectra-and-models-of-t.html (2014. 04. 19.) - 13. dia - H spektrumának vonalsorozatai

http://www.news.wisc.edu/newsphotos/images/Schwartz_David_lab09_1887.jpg (2014. 04. 19.) - 15. dia- Schwartz David Laboratory

http://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_transform_infrared_spectroscopy (2014. 04. 19.) - 15. dia - Michelson interferométer

http://en.wikipedia.org/wiki/Spectroscopy (2014. 04. 19.)