

06.06.2014

Fakultät Physik der Universität Regensburg

SPEKTROSKOPIE

Helene Plank, Stephan Giglberger



Inhaltsverzeichnis

1. Warum Spektroskopie auf dem Mars?.....	1
2. Theoretische Grundlagen der Spektroskopie.....	2
2.1. Das Spektrum	2
2.2. Wechselwirkung mit Materie	3
2.3. Die wichtigsten Einheiten.....	4
3. Versuch: Das Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer	6
1.1.1. Aufbau und Funktionsweise	6
1.1.2. Fourier-Transformation	8
1.1.3. Aufgenommene Transmissionsspektren	8

1. Warum Spektroskopie auf dem Mars?

Die zentralen Fragen:



2. Theoretische Grundlagen der Spektroskopie

Bevor wir im Labor loslegen können, müssen wir uns mit den theoretischen Grundlagen, Einheiten und Ideen des Versuchsaufbaus vertraut machen. Die Spektroskopie ist das Gebiet der spektralen Analyse von Materialien, das heißt, dass Feststoffe, Gase oder Flüssigkeiten mit Strahlung durchleuchtet und charakterisiert werden.

2.1. Das Spektrum

Zuerst gehen wir genauer auf den Begriff des elektromagnetischen **Spektrums** ein (vgl. Abb1). Das Spektrum umfasst die Gesamtheit der **elektromagnetischen (emag) Wellen** und unterteilt diese in verschiedene Bereiche. Eine emag Welle benötigt kein Medium in dem es sich ausbreiten kann und existiert deshalb auch im Vakuum - im Gegensatz zu Schallwellen. Im Vakuum ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit von emag Wellen maximal und wird als Lichtgeschwindigkeit c bezeichnet. Sie ist auf den Wert $c = 299\,792\,458 \frac{m}{s}$ festgelegt.

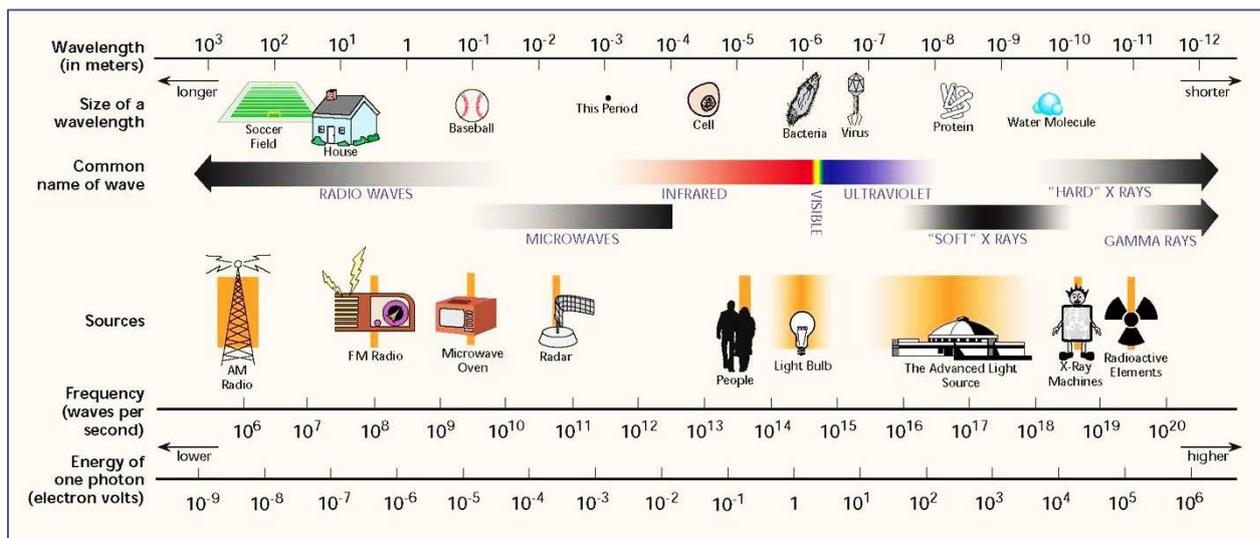


Abbildung 1: Das elektromagnetische Spektrum¹. Es klassifiziert die Strahlung indem einer Welle eine Wellenlänge, bzw. eine Frequenz oder Energie zugeordnet wird. Zusätzlich ist es in Bereiche unterteilt: Radiowellen, Mikrowellen, Infrarot-Bereich (IR), Sichtbares Licht (VIS), Ultraviolett-Strahlung (UV), weiche und harte Röntgenstrahlung (X-Rays) und Gamma-Strahlung

Emag Wellen können sich auch in Medien ausbreiten, werden hier jedoch abgebremst. So ist in bodennaher Luft die Lichtgeschwindigkeit etwa 0,28 ‰ (ca. 299 710 km/s), in Wasser 25 ‰ (ca. 225 000 km/s) geringer als in Vakuum.

Wie wir aus Abb.1 entnehmen können werden die emag Wellen nicht nur einer Wellenlänge (bzw. einer Frequenz oder Energie) zugeordnet, sondern auch in historisch bedingte Bereiche eingeteilt. Der uns am vertrauteste Bereich ist wohl der des **sichtbaren Lichts**, mit VIS (von *visible*, engl. sichtbar) abgekürzt. Er umfasst alle Wellenlängen, die unser menschliches Auge wahrnehmen kann. Gehen wir zu größeren Wellenlängen kommen wir in den Bereich der **Infrarot-Strahlung** (IR), die besser bekannt ist als

¹ http://mdkchemistry.blogspot.de/2013/01/112-electromagnetic-radiation_23.html

Wärmestrahlung. Der Bereich noch größerer Wellenlängen wird in **Mikrowellen** (ca. 300 mm bis ca. 1 cm) und **Radiowellen** (ca. 1cm bis mehrere km) unterteilt.

Im Bereich kürzerer Wellenlängen folgt auf das VIS die **Ultraviolett**-Strahlung (auch UV genannt, 380-10nm), die zum Beispiel die Bräunung der obersten Hautschicht bewirkt (oder auch Sonnenbrand). **Röntgenstrahlen** (genannt X-Rays, 10nm und etwa 1pm), die bei starker Beschleunigung von Elektronen oder bei hochenergetischen Schalenübergängen entstehen, und **Gammastrahlen** (kleiner als 5pm), die beim Zerfall von Atomkernen auftreten, werden ab Wellenlängen kleiner als 200nm als ionisierende Strahlung bezeichnet. Elektronen können durch diese hochenergetische Strahlung aus Atomen oder Molekülen entfernt werden, sodass positiv geladene Ionen oder Molekülreste zurückbleiben.

2.2. Wechselwirkung mit Materie

Wie oben kurz erwähnt kann eine elmag Welle mit Materie wechselwirken, jedoch hängt der Grad der Wechselwirkung von der Wellenlänge und den Material selbst ab.

Ohne genauer auf die interne Wechselwirkung einzugehen betrachten wir ein einfaches Model um zu verstehen, weshalb Dinge für uns Menschen schwarz, weiß oder durchsichtig erscheinen. Es sei vorausgestellt, dass „weißes“ Licht, das wir von der Glühbirne oder der Sonne kennen, eine Überlagerung der gesamten VIS-Strahlung ist (vgl. Versuch mit Prisma).

Trifft nun weißes Licht (das genau genommen eine Überlagerung aller elmag Wellen des VIS sind) auf ein Material, kann es absorbiert, reflektiert oder transmittiert werden.

- **Absorption:** Die eintreffende elmag Welle wechselwirkt mit dem Material und wird von diesem aufgenommen
- **Reflexion:** Die eintreffenden elmag Welle wird an der Oberfläche zurückgeworfen
- **Transmission:** Die eintreffende elmag Welle kann nicht mit dem Material wechselwirken und wird deshalb nicht geschwächt. Sie kann ungehindert fortlaufen

Diese drei grundlegenden Prozesse treten in der Realität nie getrennt voneinander auf, können jedoch unterschiedlich stark ausgeprägt sein. Der Grad der Ausprägung kann sich auch mit der Wellenlänge der elmag Strahlung ändern.

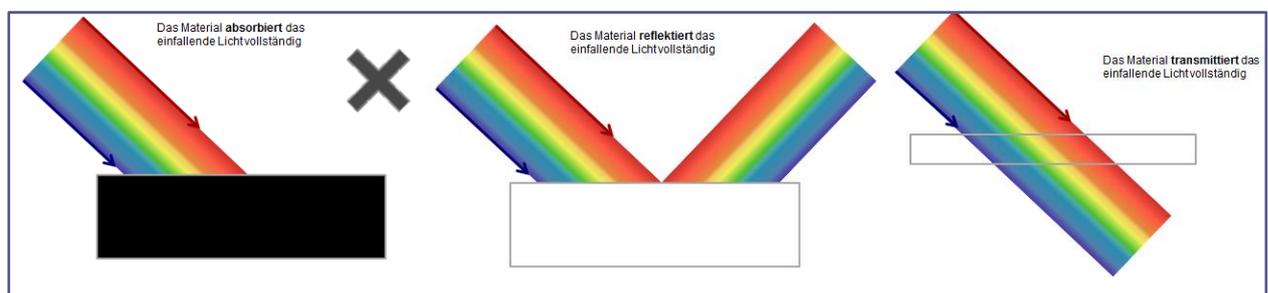


Abbildung 2: Einfaches Model zur Erklärung der Farbwahrnehmung unseres Auges. Bei schwarzen Körpern wird das einfallende sichtbare Licht vollständig absorbiert, bei weißen Körpern fast vollständig reflektiert und bei durchsichtigen Körpern transmittiert.

Um auf das Beispiel mit der Farbe zurück zu kommen (vgl. dazu Abb.2):

- Ein **weißer** Körper reflektiert den Großteil der eintreffenden Strahlung. Unser Auge nimmt den reflektierten Teil wahr. Da das gesamte sichtbare Licht reflektiert wird (und dieses in der Überlagerung weiß aussieht) nehmen wir Menschen den Körper weiß wahr, da wir das Dahinterliegende nicht sehen können.
- Ein **schwarzer** Körper absorbiert den Großteil der eintreffenden Strahlung. Da fast keine Strahlung reflektiert wird, kann unser Auge auch keine Strahlung wahrnehmen.
- Ein **durchsichtiger** Körper transmittiert den Großteil der eintreffenden Strahlung. Befinden sich der Beobachter auf der anderen Seite des Materials als die Lichtquelle, kann er diese sehen.

Analog zu diesen Betrachtungen lässt sich auch die Farbe eines Körpers erklären. Ein uns grün erscheinender Körper reflektiert nur grünes Licht, der Rest wird absorbiert. Ein uns rot erscheinender Körper, reflektiert nur rotes Licht (vgl. Abb.3)

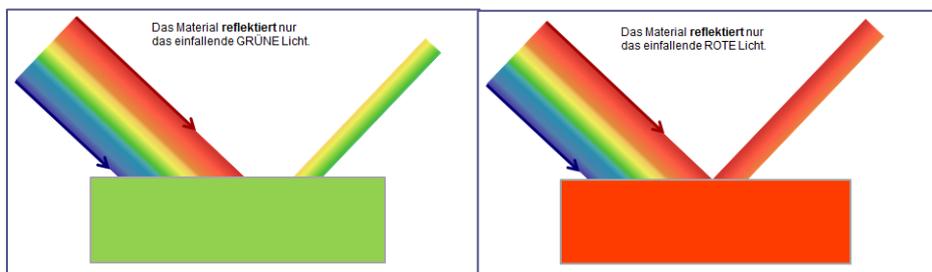


Abbildung 3: Einfaches Modell zur Erklärung der Farbwahrnehmung unseres Auges. Für Menschen grün wirkende Körper reflektiert nur grünes Licht, rote nur rotes.

Verlassen wir nun den Bereich des sichtbaren Lichts und wenden uns dem IR zu. Auch in diesem Bereich können die elmag Wellen mit Materie wechselwirken, auch hier gibt es Absorption, Reflexion und Transmission. Nur ist die Charakterisierung nicht so einfach wie im VIS, da uns ein so guter Detektor wie das Auge fehlt!

2.3. Die wichtigsten Einheiten

Um den theoretischen Teil abschließen zu können, müssen wir uns noch die wichtigsten Einheiten und Gleichungen der Spektroskopie ansehen. Die **Wellenlänge** λ ist eine anschauliche Beschreibung der elmag Welle (vgl. Abb.4). Eine von der Wellenlänge ableitbare Einheit ist die **Frequenz**, welche mit der Wellenlänge im Verhältnis

$$f = c \lambda$$

steht, wobei c die Lichtgeschwindigkeit ist. In der Spektroskopie wird eine eigene Einheit verwendet, die **Wellenzahlen** ν . Sie wird aus dem Kehrwert der Wellenlänge gebildet

$$\nu = \frac{1}{\lambda}$$

und wird in $[cm^{-1}]$ angegeben.

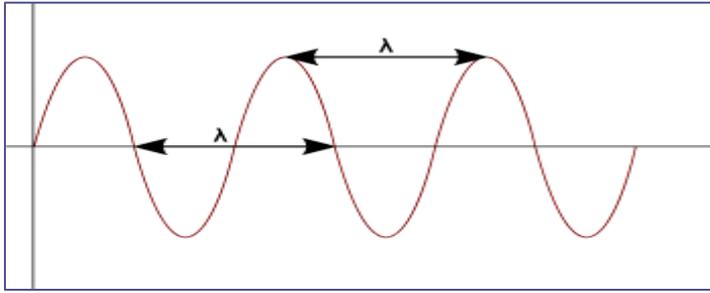


Abbildung 4: Definition der Wellenlänge: Kleinsten Abstand zweier Punkte in Phase (z.B. zweier Maxima)

Betrachten wir erneut Abb.1 stellen wir fest, dass auch die Energie als Einheit angegeben ist.

Kurze Geschichte der Quantenphysik

(Anmerkung: in der Quantenphysik ist die Welt diskret, d.h. es gibt nur ganzzahlige Vielfache einer kleinsten Einheit)

Max Planck mutmaßte 1900 was Albert Einstein 1905 zeigte:

- Licht ist quantisiert
- Das heißt die **elektromagnetische Strahlung** besteht **aus teilchenartigen Objekten**, den Lichtquanten
- Deren Energie ist je nach Frequenz f der Lichtwelle

$$E = h f$$
- Das kleinste Vielfache dieses Energieübertrags ist proportional zum **Planck'schen Wirkungsquantum h**
- Planck: 1918 Nobelpreis für die Entdeckung der Quantisierung
- Einstein: 1921 Nobelpreis für die Entdeckung der Quantisierung des Lichts

Einstein und Planck stellten mit ihrer Hypothese der **Quantisierung** der Energie die Welt der Physik auf den Kopf. Auch Licht besitzt Energie, die nur diskrete Werte annimmt. Dies ist nur möglich, falls Licht einen Teilchencharakter aufweist. Der **Welle-Teilchen-Dualismus** sagt aus, dass Licht gleichzeitig sowohl ein Teilchen (ein Lichtquant oder Photon) als auch eine elmag Welle ist.

Dieser kurze Einblick in die Quantenphysik sollte zeigen, dass jede elmag Welle aus Photonen der Energie

$$E = h f$$

Bestehen. Zudem folgt, dass Wellen / Photonen größerer Frequenz (kleinerer Wellenlänge) energiereicher sind. So ist zum Beispiel blaues Licht energiereicher als rotes da „blaue Photon“ mehr Energie haben als „rote Photonen“.

3. Versuch: Das Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer

Im Folgenden werden beide Versuchsteile kurz beschrieben. Außerdem werden kurz die Ergebnisse vorgestellt.

Die Spektroskopie im Infraroten ist in der Forschung von großem Interesse, da wichtige Absorptionslinien vieler Moleküle in diesem Bereich liegen. Mit dieser auch Molekülspektroskopie genannten Methode, lassen sich Substanzen sehr genau zuordnen.

Das im Versuch verwendete Gerät ist ein Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer (**FTIR**), welches schnell und genau arbeitet. Im Folgenden gehen wir auf die Fourier-Transformation ein.

1.1.1. Aufbau und Funktionsweise

Die dem FTIR zugrunde liegende Technik ist die des **Michelson-Interferometers**. In Abb.5 ist dessen schematischer Aufbau dargestellt: Strahlung einer beliebigen Quelle wird gebündelt an einem sogenannten Strahlteiler (ST) in zwei gleich große Teile aufgeteilt. Das heißt 50% des Strahls gehen durch den Strahlteiler hindurch, 50% des Strahls werden unter einem 90° Winkel reflektiert.

Teilstrahlen (1) wird an einem unbeweglichen Spiegel (Sp1) reflektiert, Teilstrahl (2) an einem beweglichen (Sp2). Nachdem beide Teilstrahlen wieder am Strahlteiler transmittiert (1) und reflektiert (2) werden, **interferieren** sie am Detektor.

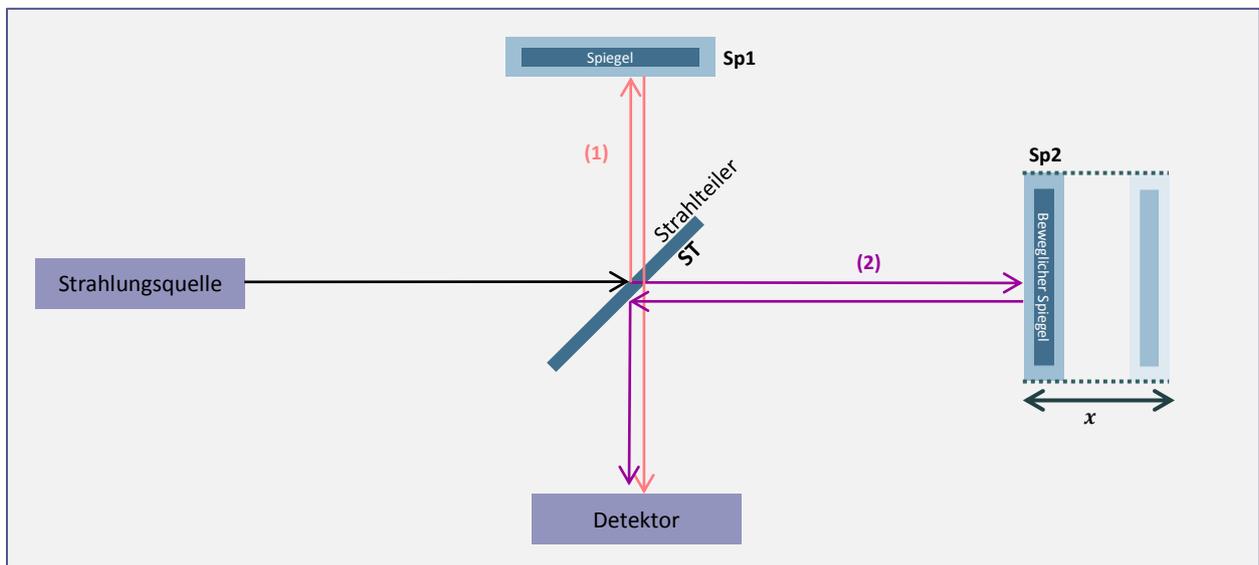


Abbildung 5: schematischer Aufbau eines Michelson-Interferometers. Licht einer beliebigen Strahlungsquelle wird an einem sogenannten Strahlteiler aufgeteilt und an Spiegel 1 und 2 (Sp1 und Sp2) reflektiert. Beide Strahlen treffen auf einem Schirm oder Detektor wieder zusammen und interferieren.

Betrachten wir zunächst den einfachsten Fall:

- Der bewegliche Spiegel Sp2 befindet sich in seiner Grundposition: beide Strahlen durchlaufen den gleichen Weg und überlagern sich **konstruktiv**. Betrachten wir Abb.6(a) sehen wir, dass die Summe der beiden Wellenzüge maximal ist.

- Der bewegliche Spiegel Sp2 wird um $\delta x = \lambda/4$ bewegt: Strahl (2) hat nun einen Gangunterschied von $\Delta x = \frac{1}{2} \lambda$, da er zweimal die Strecke δ durchlaufen muss. Beiden Strahlen überlagern sich **destruktiv**. Betrachten wir Abb.6(b) sehen wir, dass sich beide Wellenzüge auslöschen.

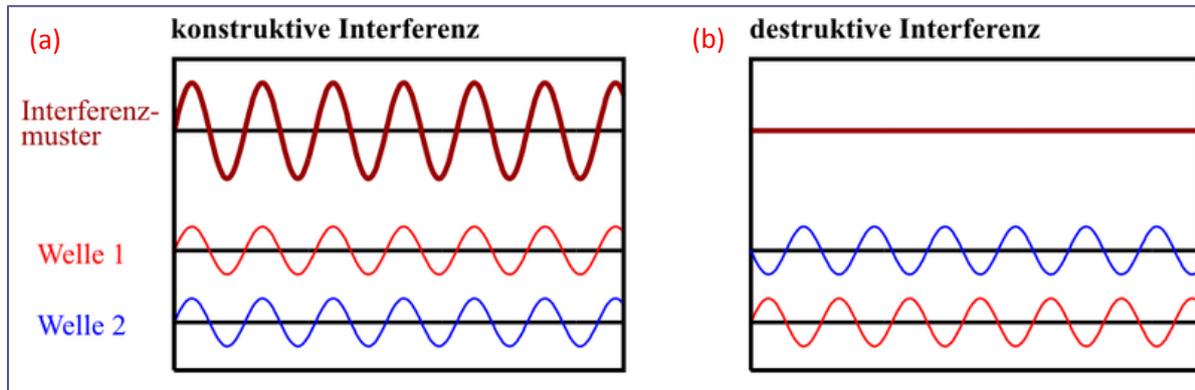


Abbildung 6: konstruktive und destruktive Interferenz²

Die Bedingung der destruktiven Interferenz gilt genau für eine Wellenlänge λ , bzw. ganzzahligen Vielfachen ($n \in \mathbb{N}$) der Spiegelposition δx und des Gangunterschieds Δx

$$\Delta x_{\text{destruktiv}} = \left(\frac{1}{2} + n\right) \lambda.$$

Konstruktive Interferenz für

$$\Delta x_{\text{konstruktiv}} = n \lambda.$$

Indem der Spiegel kontinuierlich bewegt wird, lässt sich ein **Interferogramm** in Abhängigkeit von der Spiegelposition x aufnehmen. Es besteht aus einer Folge von Minima (destruktive Interferenz) und Maxima (konstruktive Interferenz).

Dieses Beispiel gilt für den Fall, dass die Strahlungsquelle genau Licht einer Wellenlänge aussendet (monochromatische Quelle, z.B. Laser). Doch auch im Fall polychromatischer Quellen (z.B. Quecksilberdampf Lampe, Glühbirne...) gelten weiterhin die Interferenzbedingungen, wenn auch für verschiedene Spiegelpositionen. Nun kann in Abhängigkeit von der Spiegelposition und den Interferenzbedingungen auf die Wellenlänge der interferierenden Wellen rückgeschlossen werden.

Der Detektor des Michelson-Interferometers liefert Intensität des eingestrahnten Lichts in Abhängigkeit von der Änderung der Spiegelposition

$$I(\Delta x) \sim \cos(\Delta x).$$

Um ein Spektrum $I(\lambda)$ in Abhängigkeit von der Wellenlänge λ zu erhalten, muss es vorher umgerechnet werden. Dies geschieht mit Hilfe der so genannten Fourier-Transformation, weshalb diese Art der Spektroskopie Fourier-Transformations-Spektroskopie genannt wird.

² http://de.wikipedia.org/wiki/Interferenz_%28Physik%29

1.1.2. Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformation ist ein Hilfsmittel aus der Mathematik um das gemessene Spektrum $I(\Delta x)$ in Abhängigkeit von der Wellenlänge λ zu berechnen (erledigt der Computer für uns). Das Prinzip hinter der Fourier Transformation lässt sich jedoch leicht an einem Beispiel veranschaulichen:

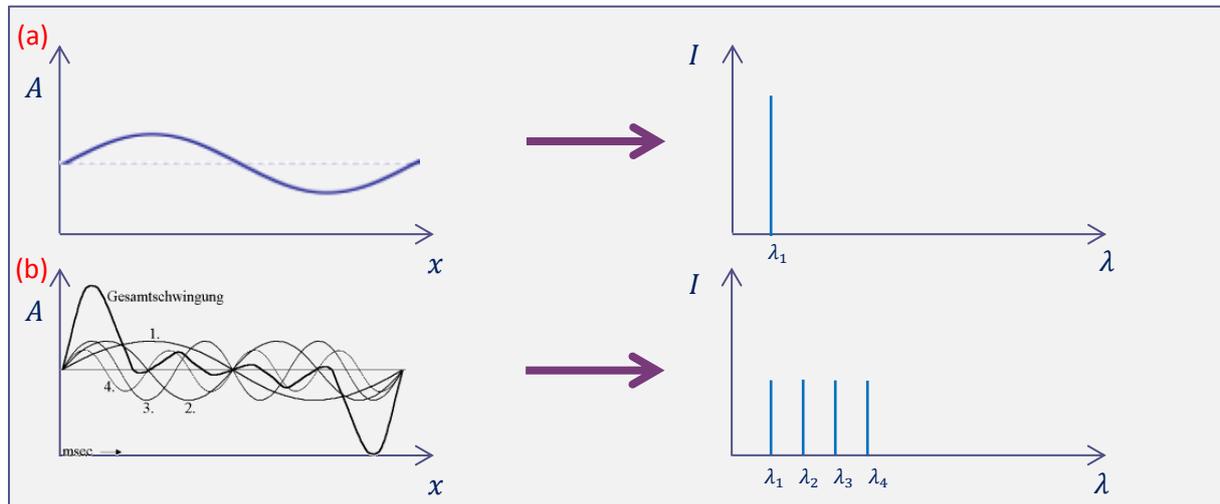


Abbildung 7: Veranschaulichung der Fourier-Transformation (Bild der Harmonischen von ³)

Betrachten wir Abb.7(a) sehen wir auf der linken Seite eine Schwingung (mit Amplitude A) und auf der rechten Seite die zugehörige Wellenlänge λ_1 (mit Intensität I). Nimmt die Amplitude der Schwingung ab, verringert sich die Intensität von λ_1 , vergrößert sich die Amplitude der Welle, nimmt die Intensität zu.

In Abb.7(b) sehen wir nun eine Überlagerung von vier Schwingungen. Die Grundschiwingung ist analog zu der in Abb.7(a) hat jedoch eine geringerer Amplitude. Rechts sehen wir die zugehörige Linie bei λ_1 mit geringerer Intensität. Schwingung (2)-(4) sind Harmonische der Schwingung (1). Die erste Harmonische (Schwingung(2)) hat die halbe Wellenlänge, die zweite Harmonische ein Drittel der Wellenlänge λ_1 und die dritte ein Viertel der Wellenlänge λ_1 usw.

Diese Umrechnung zwischen der Schwingung und den Wellenlängen ist die Fourier-Transformation. Liegt nur die Überlagerung (dicke Linie) der vier Harmonischen vor, ist das Ablesen der einzelnen Wellenlängen nicht mehr möglich, kann jedoch berechnet werden.

1.1.3. Aufgenommene Transmissionsspektren

Hier nun die im Versuchsteil aufgenommenen Transmissionsspektren. Im ersten Teil haben wir vier verschiedene weiße Stoffe untersucht und festgestellt, dass wir sie anhand ihrer Transmissionsspektrums im Infraroten unterschieden können (vgl. Abb.8).

³ <http://www.tonalemusik.de/lexikon/musik.htm>

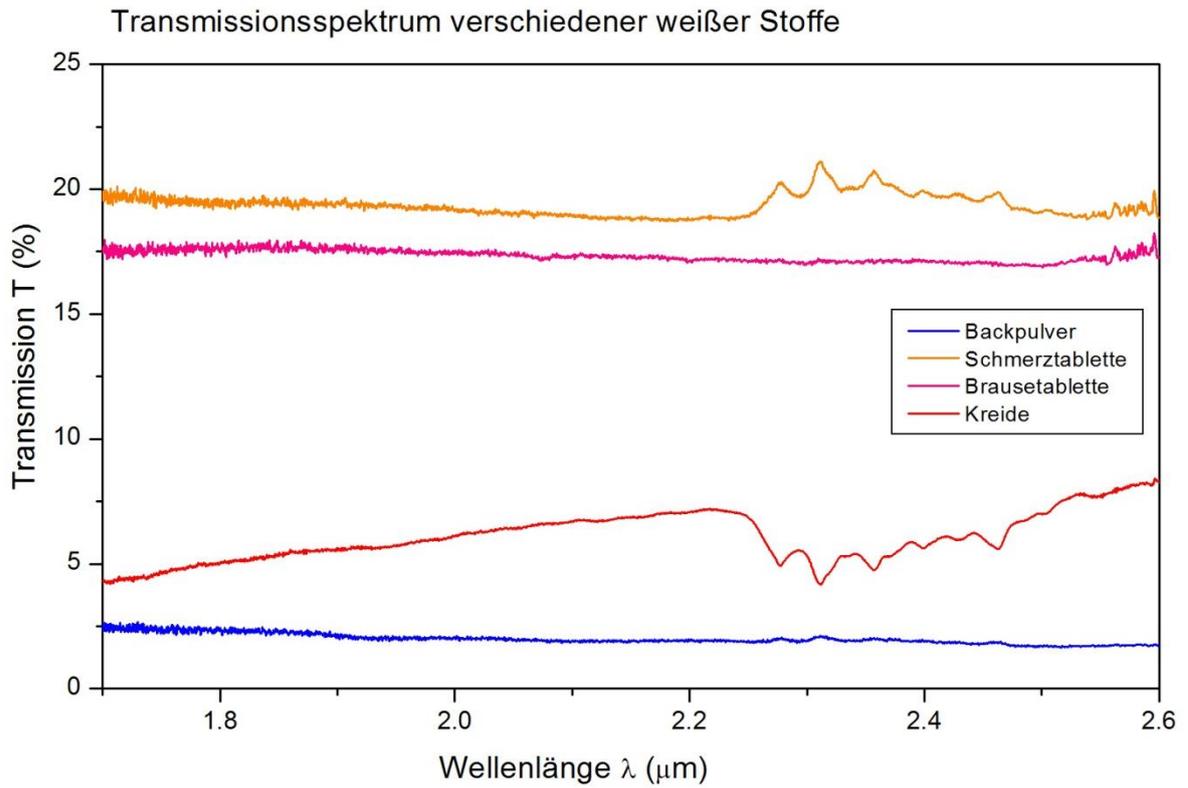


Abbildung 8: Transmissionsspektrum vier verschiedener weißer Stoffe

In Abb.9 sehen wir noch einmal die vier Spektren genauer.

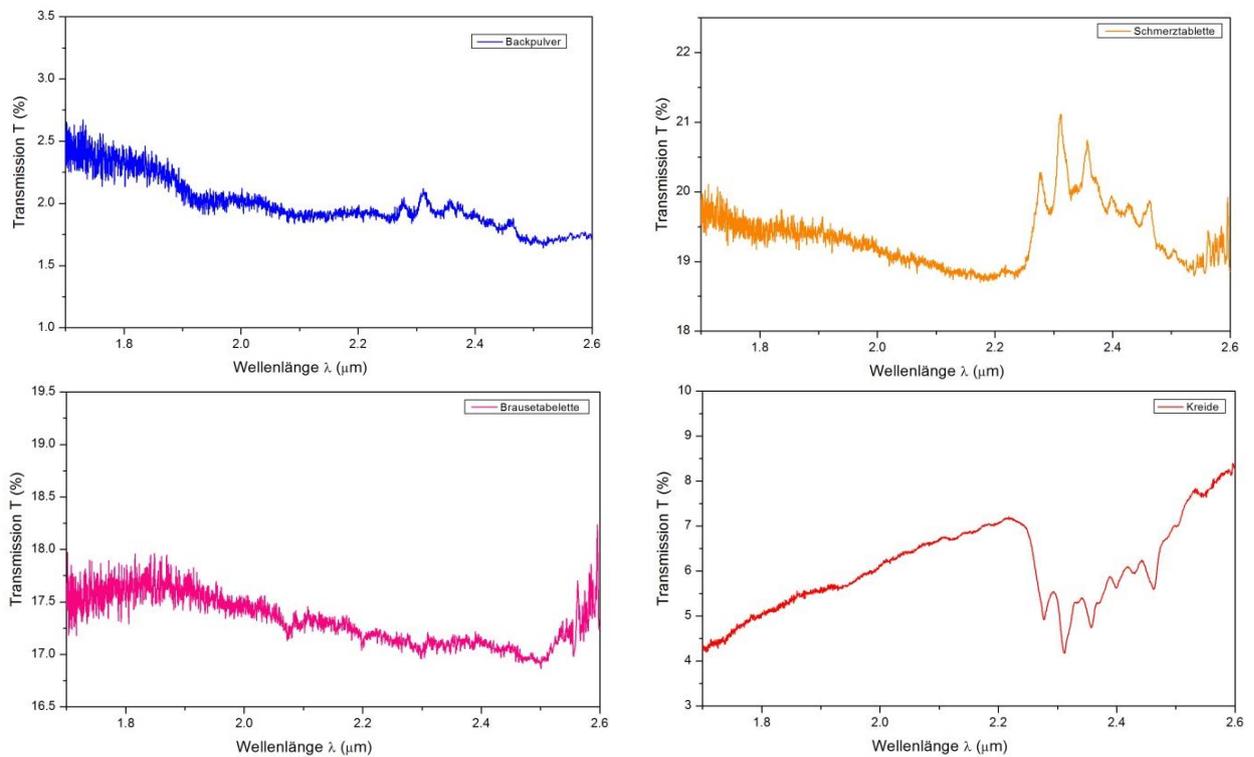


Abbildung 9: Die vier Transmissionsspektren einzeln und in genauerer Auflösung

Da eine wichtige Frage zur Erforschung des Mars ist, ob auf ihm Wasser gibt, haben wir auch den Einfluss von Wasser auf die Transmission untersucht. Dazu haben wir einmal das Spektrum von trockenem Sand und einmal von nassem Sand aufgenommen. In Abb.10 sieht man nicht nur, dass sich die Transmission verringert, da Wasser sehr gut Wärmestrahlung absorbiert, sondern auch dass sich der Verlauf des Spektrums ändert.

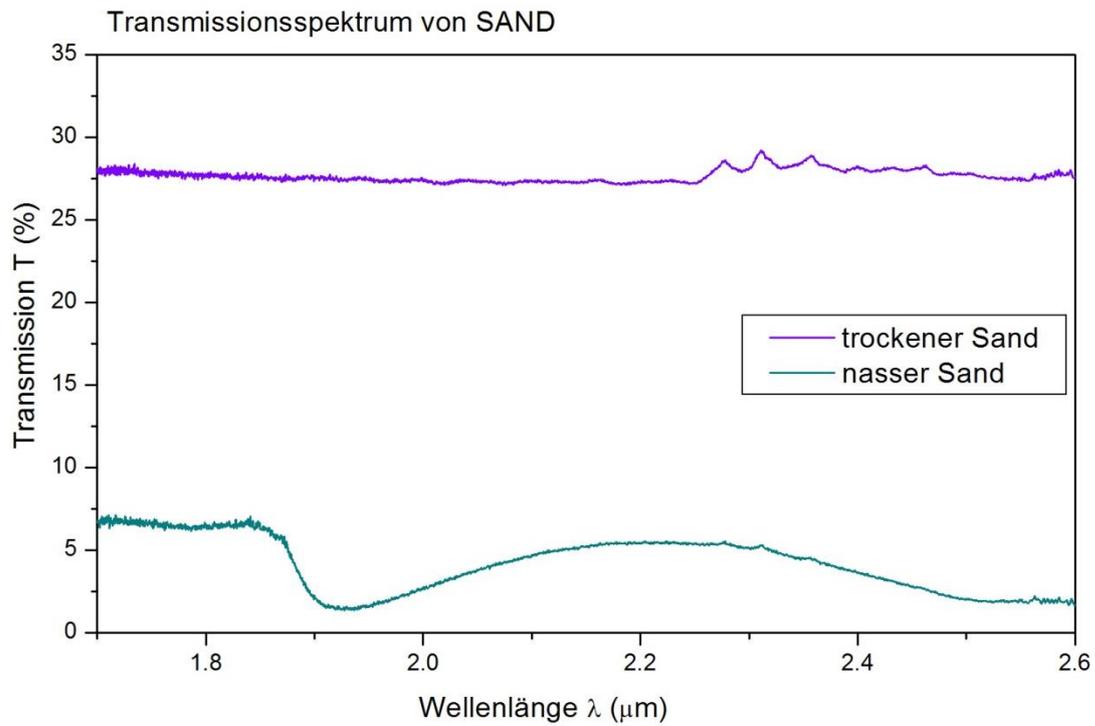


Abbildung 10: Transmissionsspektren von trockenem und nassem Sand