

Aplikace FTIR spektroskopie ve fyzice povrchů (RAIRS)

V rámci cyklu Experimentální metody FPP II. (NEVF132)

Viktor Johánek, KFPP MFF UK

Příprava:

Studentům bude poskytnuta přehledová literatura na téma IR spektroskopie [1-4], další informace si dohledají samostatně. Souhrnný přehled metody FTIR a příslušného technického vybavení pak bude podán před začátkem vlastního měření, nicméně je potřeba, aby byli studenti předem alespoň rámcově připraveni v následujících oblastech:

- Základy kvantové fyziky a optiky. Konkrétně: energetická struktura molekul (zejména vibrační a rotační stavy), interakce molekul s elektromagnetickým zářením (zejm. v infračervené oblasti), interference elmg. vlnění, odraz a lom elmg. záření na rozhraní dvou prostředí.
- Základní principy vibračních spektroskopií obecně. Konkrétní implementace v infračervené absorpční spektroskopii a aplikace této metody na studium vlastností povrchů.
- Základní princip fungování infračerveného absorpčního spektrometru.

Úlohy:

Tyto úlohy budou vypracovány formou psaného referátu. Případné další dílčí úlohy mohou být doplněny v průběhu experimentu v závislosti na konkrétních výsledcích.

- Popište hlavní vlastnosti naměřených spekter (především polohu a původ největších peaků). Pokuste se popsat původ jednotlivých komponent spekter na základě dostupných znalostí o studovaném systému.
- Proveďte korekci pozadí (baseline) změřených spekter. V případě potřeby (např. při překryvu peaků) odstraňte signál pocházející z absorpce v plynné fázi.
- Vyneste závislost plochy nebo intenzity vybraných absorpčních stavů na volném experimentálním parametru (typicky teplotě) – *přesné zadání bude upřesněno v závislosti na konkrétním typu právě prováděného experimentu.*

Doplňující dotazy:

Odpovědi na tyto dotazy nemusí být v referátu uvedeny přímo, stačí, když budou nějakým způsobem obsaženy v diskusi výsledků měření.

- Jakou oblast energií pokrývají metody IR spektroskopie; srovnajte s energetikou typických chemických vazeb a elektronických struktur molekul?
- Čím je specifická reflexně-absorpční IR spektroskopie oproti jiným IR metodám? Co umožňuje (a naopak neumožňuje) určit a jaké má technické požadavky na typ vzorku?
- V absorpčním spektru plynného CO lze při dostatečně vysokém rozlišení identifikovat rotační strukturu molekuly. Proč není podobná struktura vidět u povrchově adsorbovaného CO?
- Kterým parametrem lze ovlivnit rozlišení IR spektrometru?

Literatura:

1. Chabal, Y.J., *Surface Infrared-Spectroscopy*. Surface Science Reports, 1988. **8**(5-7): p. 211-357.
2. Hollins, P., *The Influence of Surface-Defects on the Infrared-Spectra of Adsorbed Species*. Surface Science Reports, 1992. **16**(2): p. 51-94.
3. Raval, R., *Probing the Nature of Molecular Chemisorption Using RAIRS*. Surface Science, 1995. **331**: p. 1-10.
4. Coates, J., *Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach*, in *Encyclopedia of Analytical Chemistry*, R.A. Meyers, Editor. 2000, John Wiley & Sons Ltd, Chichester. p. 10815–10837.