

Determinación de la frecuencia de inversión de amoniaco con espectrometría infrarroja

Gustavo Funes*

Damián Gulich**

Experimentos Cuánticos I, Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata

Resumen

Se determinará la frecuencia de inversión del amoniaco mediante técnicas de espectrometría infrarroja, luego se ajustarán los datos a un modelo de pozo de potencial doble.

1. Introducción

El amoniaco (Fig. 1) es una molécula piramidal con base triangular. Este arreglo se debe a que el nitrógeno posee un orbital con electrones libres el cual provoca que, mediante repulsión coulombiana, los átomos de hidrógeno se ubiquen levemente hacia uno u otro lado de la molécula. Clásicamente la inversión de la molécula es imposible, sin embargo en el campo de la Mecánica Cuántica es posible que los tres hidrógenos logren un efecto túnel a través de la barrera de potencial que divide los dos modos de vibración. En principio se tendrían dos potenciales del tipo oscilador armónico, que representan las dos formas posibles de encontrar la molécula, que al sumarlos se obtiene un pozo doble en donde los niveles de energía se desdoblan, y se invierten, como se puede ver en la Fig. 4 en la página 4, donde los modos de vibración presentan dos picos definidos en la región infrarroja (aproximadamente 950 cm^{-1}). La diferencia de estos picos nos dará la clave de la inversión de la molécula, cuya frecuencia es del orden de 36 cm^{-1} . Dicha frecuencia pertenece a la región de microondas. Nuestra medición se basará en la región infrarroja, obteniendo así la frecuencia de inversión de manera indirecta. La

*gsv_f@yahoo.com.ar

**d_gulich@yahoo.com

molécula de amoniaco es de importancia trascendental en radioastronomía debido a las características de la inversión.

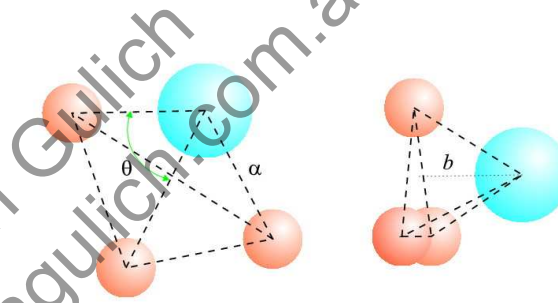


Fig. 1: Esquema de la molécula de NH_3 . El átomo de nitrógeno se representa en celeste.

Según [4] la inversión es una cuestión temporal, ya que las vibraciones son las que provocan la inversión de la molécula, así por ejemplo para otros compuestos similares al amoniaco, como el PH_3 y el AsH_3 las inversiones son menos frecuentes, y pueden tener un tiempo de inversión de años.

1.1. Modelo de pozo doble

La inversión de la molécula puede modelarse por medio de un pozo infinito, con una barrera finita en el centro. Supondremos que el nitrógeno está fijo y que los hidrógenos son los que atraviesan el plano central por efecto túnel. El modelo se reduce a un problema unidimensional de una partícula ficticia atravesando la barrera central. La masa de esta partícula está dada por la masa reducida de la molécula

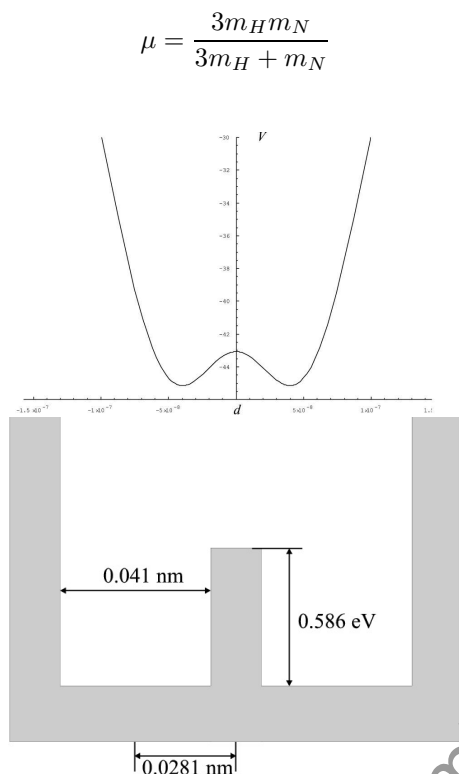


Fig. 2: Arriba: forma cualitativa del potencial. Abajo: potencial aproximado.

Dentro de los potenciales, las soluciones impares son

$$\chi(x) = A \sin \left[k \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \right]$$

si $b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2}$

$$\chi(x) = A' \sin \left[k \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \right]$$

si $b - \frac{a}{2} \leq -x \leq b + \frac{a}{2}$

Además, las soluciones pares son

$$\chi(x) = B \cos \left[k \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \right], \quad b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2}$$

$$\chi(x) = B' \cos \left[k \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \right], \quad b - \frac{a}{2} \leq -x \leq b + \frac{a}{2}$$

Donde la energía esta dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

Llamaremos con subíndice P a las soluciones pares y I a las soluciones impares. Dentro de la barrera tendremos:

$$\chi(x) = B_P \cosh \left[x \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E)} \right] + B_I \sinh \left[x \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E)} \right]$$

Y finalmente debemos unir las autofunciones y sus derivadas en los bordes de la barrera. Para la solución par tendremos

$$A_P \sin(k_P a) = B_P \cosh \left[\left(b - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E)} \right]$$

$$-A_P \cos(k_P a) k_P = B_P \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E)} \sinh \left[\left(b - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E)} \right]$$

Eliminando los coeficientes se obtienen las ecuaciones trascendentes siguientes:

$$\tan(k_P a) = -\frac{k_P}{\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E) - k_P^2}} \coth \left[\left(b - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E) - k_P^2} \right]$$

$$\tan(k_I a) = -\frac{k_I}{\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E) - k_I^2}} \tanh \left[\left(b - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E) - k_I^2} \right]$$

Mediante las cuales se obtienen, por métodos numéricos, los valores de k . El objetivo del análisis de este informe será variar los valores del pozo, como altura de la barrera y ancho del mismo para ajustar los niveles de energía con los datos experimentales.

2. Procedimiento Experimental

Se empleó un espectrógrafo interferométrico de transformada de Fourier Nicolet 560 E.S.P. con conexión a PC (Fig. 3 en la página siguiente) con fuente infrarroja, un *beam splitter* de KBr y un detector de Mercurio-Cadmio-Teluro refrigerado con aire líquido. La configuración de captura fue con una resolución de $0,5 \text{ cm}^{-1}$, 16 barridos y una apertura de 10 unidades. La muestra de NH_3 fue puesta en una cubeta cilíndrica de paredes de cuarzo, y se trabajó con su vapor a temperatura ambiente.



Fig. 3: Equipo empleado.

- [2] Quantum Mechanics I. Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloe. Wiley-Interscience.
- [3] Quantum Mechanics. Eugen Merzbacher. John Wiley & Sons.
- [4] Microwave Spectroscopy. Townes, C. V. Schawlow. Mc Graw-Hill. New York, 1955.

3. Resultados y análisis

El espectro obtenido se muestra en la Fig. 4 en la página siguiente

Para ajustar los valores del pozo, se tomaron valores a temperatura ambiente de [1] para la molécula de NH_3 (distancia N-H = $1,012\text{\AA} = \alpha$ y $\widehat{\text{H-N-H}} = 106,7^\circ = \theta$). Con estos valores se calculó la distancia desde el plano de hidrógenos hasta el nitrógeno como

$$b = \alpha \sqrt{1 - \frac{\sin^2(\theta/2)}{\cos^2(\pi/6)}} = 0,38$$

Por observación del espectro (Fig. 4 en la página siguiente) se obtuvieron los datos de la tabla 1 junto con los datos del ajuste teórico y bibliográfico. En la tabla 2 se observan los datos del pozo utilizado.

4. Conclusiones

Se observa que planteando un pozo de potencial con una barrera angosta, se logra un buen acuerdo entre los valores numéricos y experimentales.

Referencias

- [1] Handbook of Chemistry and Physics. David R. Lide (Editor). CRC Press.

| Experimental [cm ⁻¹] | Referencia [cm ⁻¹] | Pozo ajustado [cm ⁻¹] |
|-------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------------|
| 931,7 ± 0,5 | 930,7571 | 931,0144386 |
| 967,0 ± 0,5 | 966,9147 | 966,0681025 |
| 35,3 ± 0,5 | 36,0576 | 35,05366386 |

Tab. 1: Resultados.

| Parámetro | Valor |
|-----------|-------|
| a [Å] | 0,421 |
| b [Å] | 0,281 |
| V [eV] | 0,868 |

Tab. 2: Parámetros ajustados para el pozo.

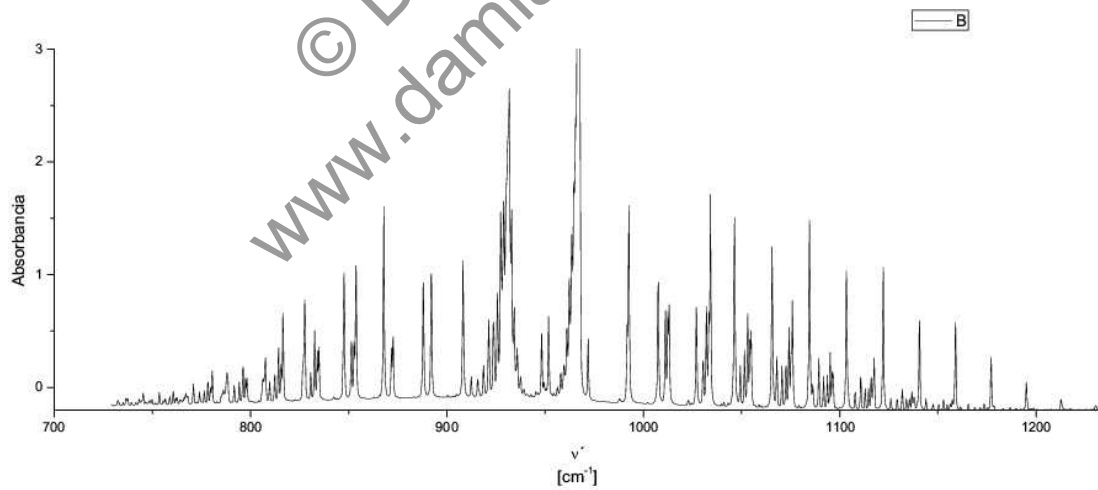


Fig. 4: Espectro capturado.