

# Prosjektrapport i FY1013

## Spektroskopi



**Av Ingebjørg Berglie og  
Lene Grøterud Leer**

# 1 Abstrakt

Allerede tidlig på 1800-tallet oppdaget fysikeren og optikeren Joseph von Fraunhofer de mørke linjene i solens spektrum, seinere kalt de fraunhoferske linjene, og dette dannet grunnlaget for den astronomiske spektroskopien. Det gikk imidlertid ikke lang tid før flere vitenskapsmenn, som arbeidet innenfor andre områder, fattet interesse for dette nye fenomenet, og etter 200 års forskning har vi i dag en rekke spektroskopiske metoder som vi kan benytte i vår søken etter kunnskap om verdenen rundt oss. En felles beskrivelse av de spektroskopiske metodene er at de alle bruker elektromagnetisk stråling til å analysere et materiale, og for kjemikere er disse metodene så å si uerstøttelige i hverdagen. Selv om det nesten utelukkende er fysikere som har arbeidet med å utvikle spektroskopien til det vi kjenner den som i dag, er det er det først og fremst de fysikerne som jobber med faste stoffer og biofysikk som benytter seg av spektroskopi i det daglige arbeidet.

## 2 Innholdsfortegnelse

<u>1</u>	<u>ABSTRAKT</u> .....	2
<u>2</u>	<u>INNHOLDSFORTEGNELSE</u> .....	3
<u>3</u>	<u>INNLEDNING</u> .....	4
<u>4</u>	<u>HISTORIE</u> .....	5
<u>5</u>	<u>ELEKTROMAGNETISK STRÅLING</u> .....	8
<u>6</u>	<u>SPEKTROSKOPISKE METODER</u> .....	10
6.1	<u>Spektralanalyse</u> .....	10
6.2	<u>Massespektroskopi</u> .....	11
6.3	<u>Infrarød spektroskopi</u> .....	14
6.4	<u>Ramanspektroskopi</u> .....	16
6.5	<u>UV/Synlig spektroskopi</u> .....	18
6.6	<u>Mikrobølgespektroskopi</u> .....	18
6.7	<u>Røntgenspektroskopi</u> .....	19
6.8	<u>NMR</u> .....	21
<u>7</u>	<u>SPEKTROSKOPI I PRAKSIS</u> .....	24
7.1	<u>Studiet av verdensrommet</u> .....	24
7.2	<u>Våre spektroskopiske opplevelser</u> .....	26
<u>8</u>	<u>OPPSUMMERING</u> .....	27
<u>9</u>	<u>AVSLUTNING</u> .....	28
<u>10</u>	<u>TAKK TIL</u> .....	28
<u>11</u>	<u>LITTERATURLISTE</u> .....	29
11.1	<u>Bøker</u> .....	29
11.2	<u>Internett</u> .....	29

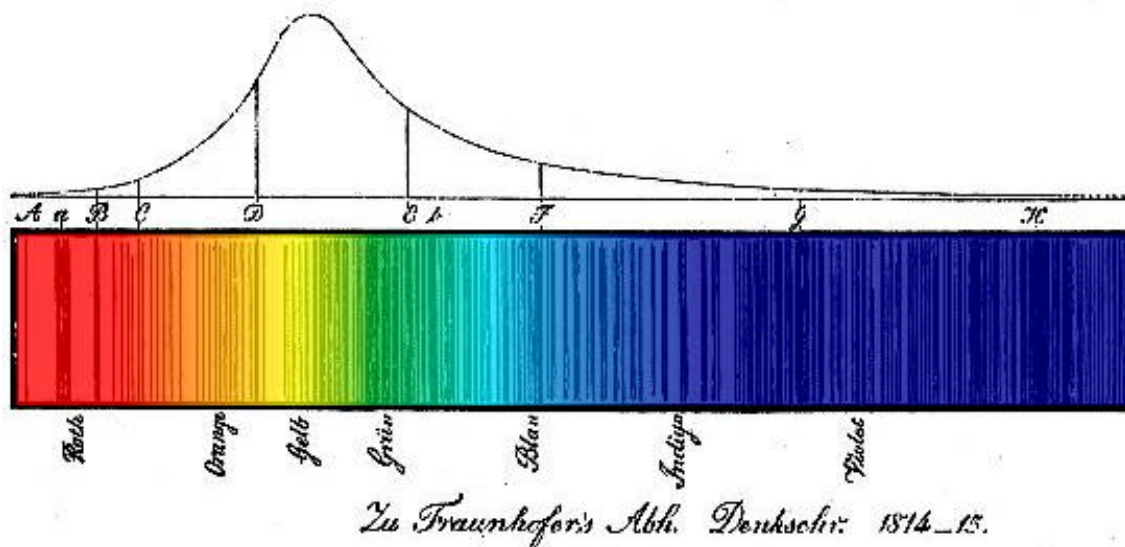
### 3 Innledning

Spektroskopi er en fellesbetegnelse for studiet av vekselvirkningene mellom elektromagnetisk stråling og materie, og de eksperimentelle dataene som de spektroskopiske studiene gir er bølgelengdene eller frekvensene til strålingen. I dette prosjektet skal vi ta for oss forskjellige spektroskopiske metoder som har hatt mye å si for nåtidens forskning innenfor fysikk, kjemi, medisin og astronomi. Opp igjennom tidene har forskere over hele verden vært på jakt etter nye metoder for å skaffe seg ny kunnskap om den verdenen vi lever i, enten det er på atomnivå eller om universet. Spektroskopi har siden tidlig på 1800-tallet hatt en sentral rolle i denne utviklingen, og metoden er fortsatt svært viktig innenfor dagens forskning. I dette prosjektet, vil vi ta for oss noen av de historiske begivenhetene som har lagt grunnlaget for den spektroskopiske utviklingen.

Siden den elektromagnetiske strålingen er avgjørende for spektroskopiske studier, skal vi i tillegg se litt nærmere på den. Vi skal også prøve å finne ut mer om bruksområdene til de forskjellige metodene, samt sette oss inn i teorien bak noen utvalgte metoder. Spektroskopi er en eksperimentell analysemetode som er svært viktig innenfor flere vitenskapelige forskningsområder, og for å få et inntrykk av nytten av de forskjellige metodene, skal vi forsøke å få til et besøk hos noen som bruker spektroskopi i det daglige arbeidet. Spektroskopi er også en svært viktig teknikk for flere ulike forskningsområder, og vi vil derfor ta en nærmere kikk på disse.

## 4 Historie [14-19]

Allerede i 1802 observerte kjemikeren og fysikeren William Hyde Wollaston (1766-1828) mørke linjer i solspekteret. Dette tolket han som mellomrom som separerte fargene i sollyset, og han fattet ikke mer interesse for disse. I 1814 gjenopplaget så den tyske fysikeren og glassliperen Joseph von Fraunhofer (1787-1826) disse linjene mens han jobbet med å undersøke de optiske egenskapene til forskjellige typer glass. Disse linjene kjenner vi i dag som fraunhoferske linjer, og det var denne oppdagelsen som la grunnlaget for spektralanalysen av stoffer i gasstilstand. Fraunhofer beskrev i alt 574 linjer i solspekteret, og de sterkeste fikk tilegnet en bokstav, fra A til Z. Han skjønte etter hvert at fargeskilleteorien til Wollaston ikke kunne være riktig, siden det ikke var en diskontinuitet i fargespekteret der de mørke linjene oppstod. Seinere oppdaget han også at spekteret fra forskjellige stjerner manglet noen av de mørke linjene som han observerte i solspekteret og motsatt. Den engelske, tyskfødte astronomen, Sir Friedrich Wilhelm Herschel (1738-1822), kom tidlig på 1800-tallet med en teori om at fraunhofer linjene enten kunne bli dannet som følge av absorpsjon av en kald gass i jordens eller solens atmosfære, og i dag vet vi at alle lysende gasser absorberer fotoner som har den samme bølglengden som de eksiterte atomene sender ut. De mørke linjene i absorpsjonsspekteret til en gass tilsvarer bølglengdene til fotonene som er absorbert, og alle stoffer har et eget spekter ved visse forutsetninger. Denne oppdagelsen revolusjonerte den klassiske fysikken siden man hittil hadde trodd at elektroner kunne absorbere en hvilken som helst energimengde, men nå viste det seg at dette ikke kunne være tilfellet.

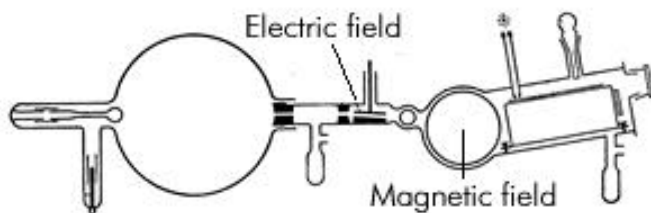


Figur 1: Fraunhoferske linjer i solspekteret [15]

Herschel hadde noen år tidligere, i år 1800, studert temperaturen til de forskjellige fargene i sollyset ved å sende lyset gjennom et glassprisme, og han oppdaget da at temperaturen til fargene økte fra den lilla til den røde delen av spekteret. Etter å ha oppdaget dette mønsteret bestemte han seg for å måle temperaturen like utenfor den røde delen av spekteret, og til hans store overraskelse hadde dette området den høyeste temperaturen av alle. Herschel gjorde så flere forsøk på denne "varmeprodukerende strålingen" og fant ut at den oppførte seg akkurat som synlig

lys. Dette var første gang det ble påvist at det finnes stråling som vi ikke kan se med øynene våre (bølgelengde utenfor området mellom 400 nm og 700 nm), og strålingen Herschel hadde oppdaget kalles i dag infrarød stråling. Infra betyr nedenfor, noe som kommer av at strålingen ligger under det synlige røde lyset. I dag brukes infrarød stråling i den infrarøde spektroskopien, samt innenfor medisin, geologi, etterforskning av kriminalsaker, brannslukking, militæret, registrering av varmetap i hus og mye mer. Senere har det blitt oppdaget flere typer usynlig stråling, blant annet radiobølger, mikrobølger, ultrafiolett stråling, røntgenstråling og gammastråling. Alle disse typene har fått fellesbetegnelsen elektromagnetisk stråling, og de kjennetegnes ved at de er bølger som forplanter seg ved lysets hastighet i rommet med en elektrisk og en magnetisk komponent. Skotten James Clerk Maxwell (1831-79) antok allerede i 1864 eksistensen av elektromagnetiske bølger da han samlet de fire ligningene (Maxwells ligninger) som beskriver hvordan elektriske og magnetiske felt oppfører seg, men den elektromagnetiske strålingen ble ikke påvist før i 1887 da den tyske fysikeren Heinrich Rudolph Hertz (1857-94) klarte å lage et apparat som kunne sende ut radiobølger. Spektroskopien har tatt i bruk flere av de elektromagnetiske strålingstypene for å analysere og gjøre avbildninger av materialer, og det arbeides fortsatt med å utvikle instrumenter som kan utnytte de resterende typene.

I løpet av 1900-tallet stod begivenhetene i kø for spektroskopien, og spektroskopiske metoder ble tatt i bruk innenfor de fleste naturvitenskapelige områder. I 1909 oppdaget den britiske fysikeren Joseph John Thomson (1856-1940), under jakten på partikkelen som fraktet positiv ladning, at alle grunnstoff hadde forskjellige ioner og til



Aston's design for the mass spectrograph.

**Figur 2: Astons første modell for spektrografen [18]**

et elektromagnetisk felt klarte å ionisere og separere atomene i neongassen. De kunne da observere en liten forskjell i massen og kom fram til at dette måtte bety at grunnstoffet neon har to forskjellige atomkjerner, kalt isotoper. Ved å undersøke en rekke andre grunnstoffer oppdaget Aston i alt 212 naturlig forekommende isotoper, og for dette arbeidet fikk han seinere nobelprisen i kjemi.

Thomson hadde tidligere laget et apparat for å bestemme massen til atomkjerner, kalt "Thomsons parabol apparat". I dette apparatet ble en partikkelstrøm (ioner) utsatt for et elektromagnetisk felt, og han kunne da se at partikkelstrømmen ble avbøyd. Han beregnet så farten til partiklene til å være lik styrken på det elektriske feltet dividert på styrken på det magnetiske feltet. Thomson kunne også beregne forholdet mellom massen og ladningen til partikkelstrømmen med apparatet sitt, ved å slå av det elektriske feltet og måle graden av avbøyning. Selv om parabolapparatet til Thomson ga en verdi for forholdet mellom massen og ladningen til partiklene i strømmen, var ikke metoden så veldig nøyaktig. Aston ville derfor prøve å lage et

hans store overraskelse hadde neon to. Sammen med den britiske fysikeren og kjemikeren Francis William Aston (1877-1945) begynte han å undersøke dette fenomenet, og prosessen førte til utviklingen av massespektrografen (massespektrometeret). Aston, som jobbet som assistent for Thomson, stod for utviklingen av dette apparatet som ved hjelp av

apparat som var mer nøyaktig, og den første forandringen han foretok var å skille det elektriske og det magnetiske feltet slik at partiklene først ble avvist av det elektriske feltet før de kom inn i det magnetiske feltet. I Thomsons modell ble partiklene beveget både til høyre og venstre, samt opp og ned av det elektromagnetiske feltet, men ved å rotere det elektriske feltet nitti grader ville partiklene bare kunne bevege seg opp og ned. Disse justeringene gjorde at hastigheten til partiklene ikke lenger hadde betydning for hvor de traff fotopapiret Aston brukte til å registrere målingene (detektorskjerm), og alle partikler med samme masse ville da treffe detektoren i samme punkt. Aston hadde laget den første massespektrografen (seinere kalt massespektrometer) til å beregne massen til atomkjerner, og han fortsatte med dette arbeidet fram til 1937 da han kunne vise fram sin endelige massespektrograf. Denne modellen var omtrent hundre ganger mer nøyaktig enn den første utgaven, og noen av endringene Aston hadde gjort var å bruke bøyde plater til å produsere det elektriske feltet, magnetfeltet var blitt mye kraftigere og spaltene til å fokusere partikkelstrømmen kunne nå justeres. I dag brukes massespektrometeret først og fremst innenfor kjemien



**Figur 3: Astons tredje og siste spektrograf [18]**

Et område hvor spektroskopien har hatt en spesielt stor betydning er innenfor astronomien, vitenskapen om verdensrommet. Dette er den eldste naturvitenskapen vi har, og den første astronomiske observasjonen ble registrert allerede 4000 f. Kr. Studiet av universet og stjernene er svært utfordrende siden disse elementene ikke er noe vi kan ta med inn på laben til observasjon, og i den forbindelse har de spektroskopiske metodene vært svært viktige. Etter at de fraunhoferske linjene i solspekteret ble oppdaget tidlig på 1800-tallet begynte flere astronomer og fysikere å studere lyset fra stjernene og sola med spektroskop, og en av disse var nordmannen Carl Frederik Fearnley (1818-1890). Han observerte sola med et spektroskop og klarte etter hvert å lage detaljerte tegninger av protuberanser eller gasskyer i solens atmosfære. Den britiske astronomen William Huggins (1824-1910) klarte i 1864 å registrere det første stjernespekteret på en fotografisk plate. Denne registreringen gjorde det mulig å bestemme stjernenes kjemiske sammensetning, siden alle grunnstoffer har et eget spekter, og hastighet. For å bestemme hastigheten ble teorien den østerrikske fysikeren Christian Andreas Doppler (1803—1853) kom fram til i 1842 tatt i bruk, den såkalte dopplereffekten. Denne sier at bølgelengden til lyset (eller lyden) fra en bevegelig kilde endres når kilden og observatøren beveger seg i forhold til hverandre, og dermed kan hastigheten til stjernene bestemmes ved å måle forskyvningen av tilhørende spektrallinjer. Spektroskopi ble seinere tatt i bruk i studiet av dobbeltstjerner og stjernenes rotasjon. Dobbeltstjerner er stjerner som står meget nær hverandre på himmelen, og disse kan da avsløres på grunn av variasjon i det tilhørende spekteret. Vitenskapsmenn kunne ved hjelp av spektralanalysen fastslå at stjernene inneholder mange av de samme grunnstoffene vi finner på jorda, men et grunnstoff, nemlig helium (det gresk ordet for sol) ble faktisk funnet i verdensrommet før det ble funnet her på jorda.

## 5 Elektromagnetisk stråling [16, 20-21]

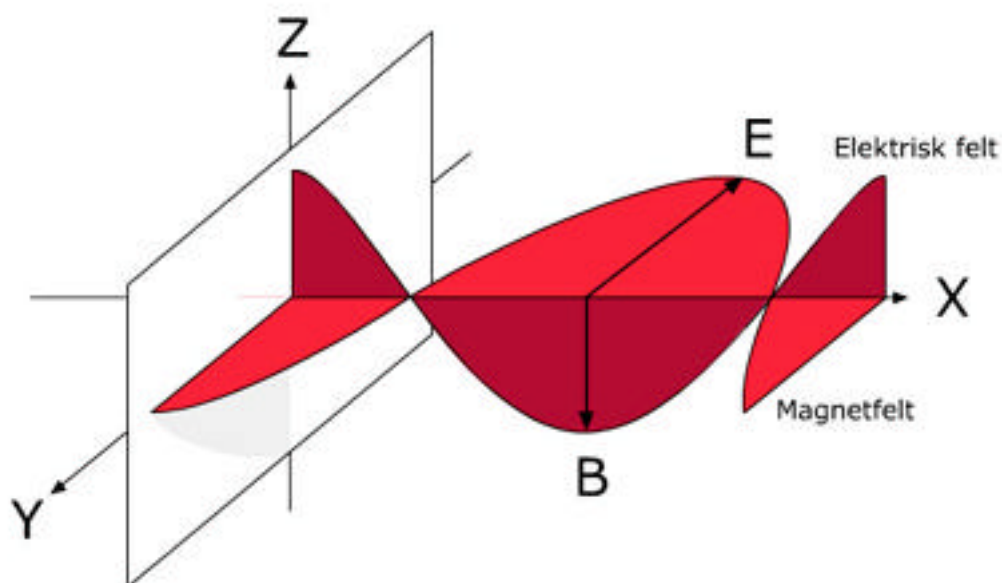
Alle spektroskopiske metoder baserer seg på det faktum at atomer kan ta opp (absorbere) eller sende ut (emittere) energi i form av elektromagnetisk stråling, og målet med metodene er å finne ut noe om det materialet som analyseres.

Elektromagnetisk stråling er i realiteten overføring av energi i form av elektromagnetiske bølger, hvor strålingen består av "energipakker" eller fotoner som hver har en energi som er avhengig av bølgelengden eller frekvensen. I vakuum eller luft gjelder følgende:

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} = h \cdot f, \text{ der } c = \lambda \cdot f \quad (1)$$

I denne ligningen er E er energien i ett foton (J), h er Plancks konstant ( $6,63 \cdot 10^{-34}$  J · s), c er lysfarten i vakuum (299 792 458 m/s),  $\lambda$  er bølgelengden (m) og f er frekvensen ( $s^{-1}$ ) til strålingen. Denne ligningen viser at jo kortere bølgelengde (eller høyere frekvens), desto mer energirik er den elektromagnetiske strålingen. Man deler den elektromagnetiske strålingen inn etter minkende bølgelengde (eller økende frekvens) (se figur 5): radar- og radiobølger, mikrobølger, infrarød stråling, synlig lys, ultrafiolett stråling, røntgenstråling og gammastråling. De forskjellige strålingstypene blir skapt på forskjellige måter, men de er alle helt frie fra kilden de kommer fra. Lange radiobølger blir for eksempel skapt som følge av elektriske svingninger i store antenner, synlig lys kommer av bevegelse mellom elektrontilstander i atomet, mens gammastråling kommer av endringer i strukturen til atomkjernen.

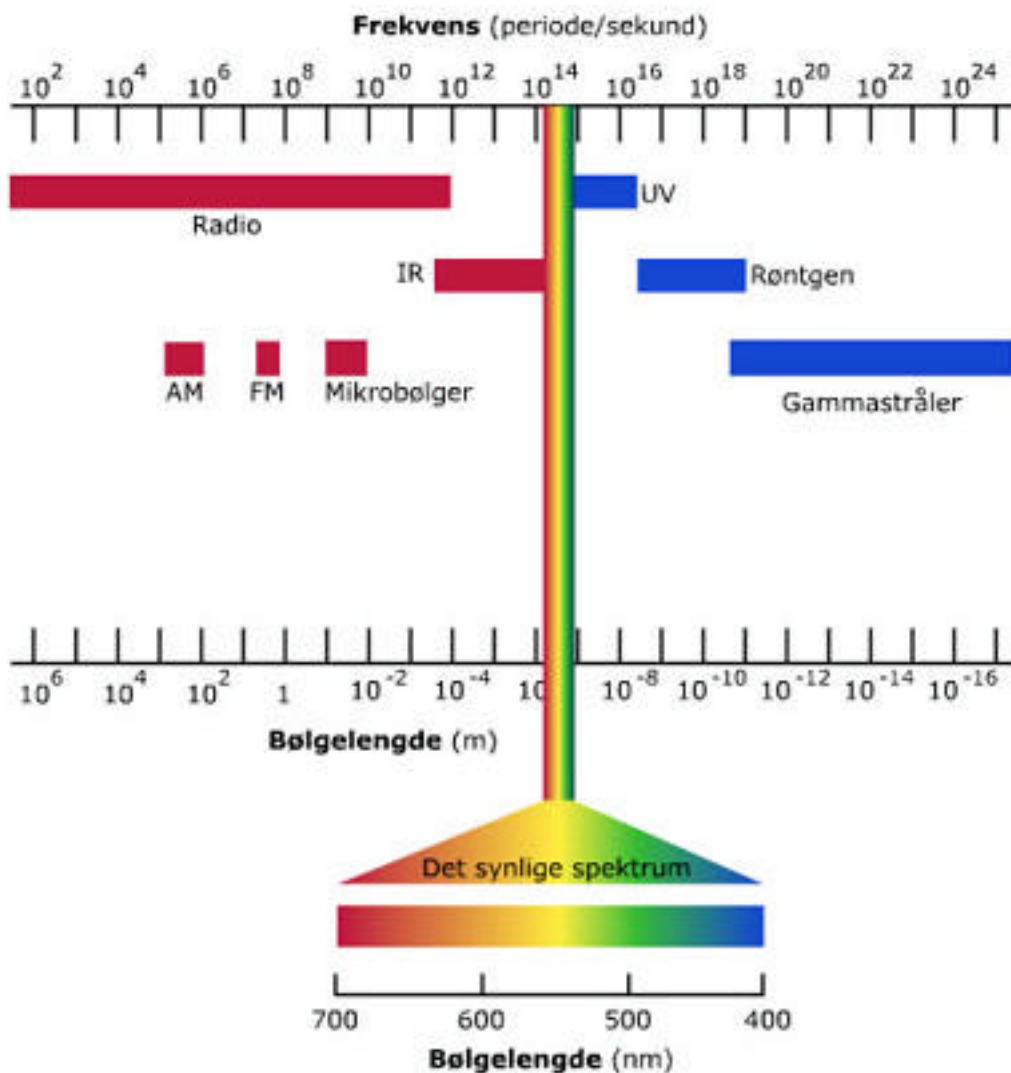
Maxwells ligninger beskriver elektromagnetismen som interaksjonen mellom oscillerende (varierende) elektriske og magnetiske felt i bevegelse. Begge disse feltene står vinkelrett på hverandre, samt på retningen til den elektromagnetiske strålingen. I de spektroskopiske metodene er det vanligvis enten den magnetiske eller den elektriske komponenten av strålingen som deltar aktivt i analyseprosessen.



Figur 4: Elektromagnetisk bølge som brer seg i positiv x-retning med hastighet lik lysets [20]



Elektromagnetisk stråling innehar både partikkel- og bølgenatur, noe som har skapt hodebry for mange vitenskapsmenn opp igjennom tidene. Partikkelnaturen ligger i at strålingen består av fotoner, som fungerer som små energipakker, mens bølgenaturen kommer av at den elektromagnetiske strålingen brer seg med lyshastigheten i vakuum. Lyshastigheten er en naturlig fartsbarriere som det, i følge kvantefysikken, er umulig å overskride, og den blir redusert når strålingen går igjennom faste stoffer og væsker. Et eksempel på dette er diamant hvor lyshastigheten er 125 000 000 m/s, altså mer enn halvert i forhold til den ideelle hastigheten for lyset. Det ligger også i bølgenaturen at elektromagnetisk stråling kan reflekteres ved hjelp av metalloverflater, at det kan oppstå interferens mellom to koherente elektromagnetiske bølger (bølger med samme frekvens og konstant eller ingen faseforskjell), samt at stråling med ulik bølgelengde spres forskjellig når det treffer på atomer eller molekyler. Sistnevnte er grunnen til at himmelen ser blå ut. Sola sender ut lys med en rekke farger, men siden blått lys har kortere bølgelengde enn alle andre farger, vil det blå lyset spres mye mer effektivt. Dette gjør at himmelen (fra bakken) ser blå ut, selv om himmelrommet egentlig er helt svart, med unntak av lyset fra sola, stjerner og lignende.



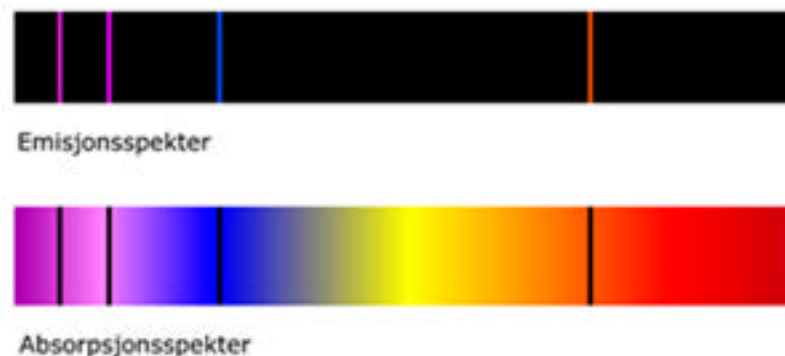
Figur 5: Det elektromagnetiske spektrum [22]

## 6 Spektroskopiske metoder

### 6.1 Spektralanalyse [22]

Spektralanalysen er den eldste av de spektroskopiske metodene, og det var oppdagelsen av de mørke linjene i solspekteret som dannet grunnlaget for denne teknikken. I dag blir spektralanalysen først og fremst brukt innen kjemi, fysikk og astronomi, men metoden har også blitt et viktig instrument for lydteknikere. Alle grunnstoffer vil under gitte omstendigheter sende ut et bestemt spekter, og siden hvert grunnstoff har forskjellige spektre kan man finne ut hva materialet som undersøkes består av ved å undersøke lyset materialet sender ut. Et spektralapparat inneholder et prisme eller et gitter som deler opp lysstrålen fordelt på bølgelengdene lyset består av, og dette gir et fargebånd eller spektrum hvor fargene kommer i samme rekkefølge som i en regnbue. Slike spektre blir vanligvis delt inn i tre grupper, henholdsvis kontinuerlige, emisjons- og absorpsjonsspektre. Kontinuerlige spektre inneholder alle bølgelengder, og er kanskje det viktigste spekteret i denne sammenhengen.

Emisjonsspektra består av bølgelengdene til lyset som kommer direkte fra lyskilden, og viser dermed hvilke bølgelengder som blir emittert (sendt ut) av materialet lyset ble sendt igjennom. En lysende gass har vanligvis et linjespektrum som emisjonsspektrum, mens et glødende, fast stoff har et kontinuerlig emisjonsspektrum. Dette betyr at glødende, faste stoffer sender ut lys med alle bølgelengder, mens lysende gasser bare sender ut lys med bestemte bølgelengder. Det motsatte av emisjonsspektrum er absorpsjonsspektrum som i stedet viser hvilke bølgelengder som er blitt absorbert (tatt opp) av materialet. En lysende gass har et absorpsjonsspektrum som ser ut som et kontinuerlig spektrum med noen mørke linjer, og disse linjene tilsvarer da linjene i emisjonsspekteret til gassen. Siden vi bare kan se lys med en bølgelengde mellom 400 og 700 nm kan vi bare se de mørke linjene i absorpsjonsspekteret som ligger mellom disse verdiene, men grunnstoffer kan også absorbere bølgelengder som ligger utenfor det synlige området, og disse trenger vi da egne analyseapparater til å bestemme. Sammenligner man spekteret til en ukjent gass med spektrene til kjente grunnstoffer målt i et laboratorium kan man med 100 % sikkerhet vite hvilke grunnstoffer den ukjente gassen består av, og siden ioner og molekyler også har karakteristiske spektra kan denne metoden også benyttes på disse.



Figur 6: Emisjons- og absorpsjonsspektra til hydrogen i den synlige delen av det elektromagnetiske spekteret [22]

## 6.2 Massespektroskopi [1, 23]

Massespektrometri er den mest nøyaktige metoden for å bestemme atom- og molekylærmasse til et stoff, og massespektrometre er svært anvendelige og blir i dag også brukt i karbondatering, radioaktive dateringsprosesser og undersøkelse av spor etter forurensing. Satellitter og romskip er også vanligvis utstyrt med massespektrometre for å kunne identifisere partikler i verdensrommet. Hovedprinsippet til alle massespektrometrene er at de på en eller annen måte separerer ionene i partikkelstrømmen basert på forholdet mellom ladningen og massen. Ionene treffer så en detektor hvor de blir registrert, og spekteret som dannes kalles da et massespektrum. Man deler vanligvis massespektrometre inn i statiske og dynamiske. I statiske massespektrometre blir et stoff i gasstilstand bombardert med en elektronstråle som har tilstrekkelig energi til å dele opp partiklene (atomer eller molekyler). Kollisjonene mellom elektronene og partiklene produserer positive ioner ved å fjerne et elektron fra hver partikkel, og disse positive ionene (masse  $m$ , ladning  $q$ ) blir så akselerert av to parallelle og motsatt ladde plater, altså et elektrisk felt. Hvis potensialforskjellen mellom de to platene er  $U$ , vil ionene forlate det elektriske feltet med en kinetisk energi gitt ved:

$$K = q \cdot U = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2)$$

For å sørge for at alle ionene som ankommer magnetfeltet hvor massesepareringen foregår har samme hastighet ( $v$ ), blir de sendt gjennom et område med et uniformt elektrisk og magnetisk felt. Det elektriske feltet ( $E$ ) lages på samme måte som i akselereringsfasen og står vinkelrett på farten til ionene, mens det magnetiske feltet ( $B_0$ ) står vinkelrett på farten til ionene og det elektriske feltet. Kraften det elektriske feltet utøver på ionene ( $qE$ ) virker i motsatt retning av kraften fra det magnetiske feltet ( $qvB_0$ ), og disse balanseres når:

$$qE = qvB_0 \quad (3)$$

Ionene med for stor hastighet i forhold til den foretrukne hastigheten vil bli separert fra ionestrømmen fordi den magnetiske kraften overskrider den elektriske, og tilsvarende vil de med for lav hastighet også separeres fra strømmen, siden den elektriske kraften er sterkere enn den magnetiske. Dermed vil alle ionene ankomme separasjonsfasen med en hastighet lik:

$$v = \frac{E}{B_0} \quad (4)$$

Når ionene ankommer magnetfeltet ( $B$ ) har de samme hastighet og ladning, og siden dette feltet står vinkelrett på farten vil ionene bli avbøyd i en sirkulær bane, før de treffer en detektorskjerm. Kraften fra magnetfeltet ( $qvB$ ) er da lik sentripetalakselerasjonen ( $mv^2/r$ ), og radiusen ( $r$ ) til banen ionene følger blir da følgende:

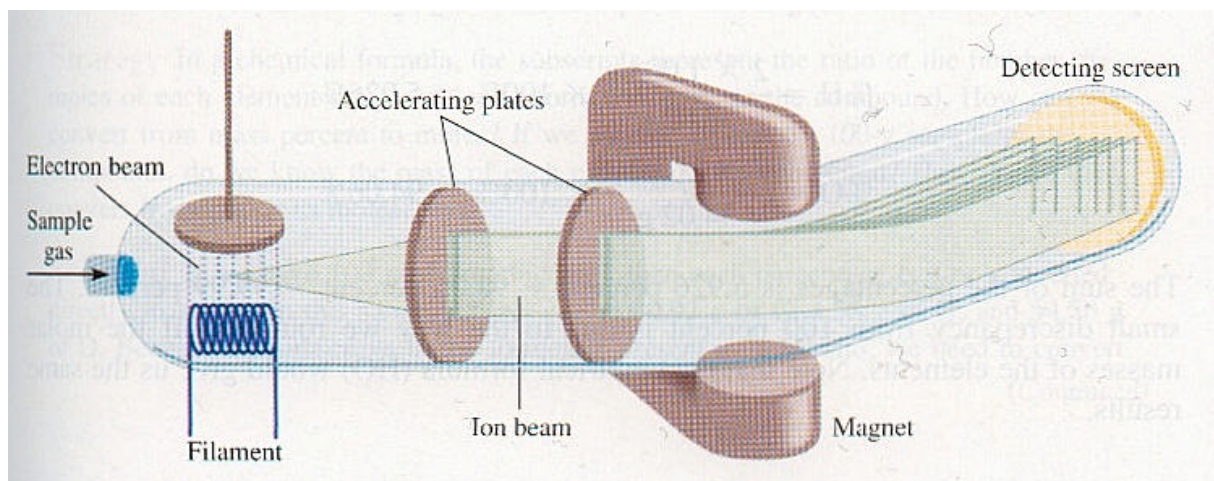
$$r = \frac{mv}{qB} \quad (5)$$

Siden radiusen til denne banen er avhengig av forholdet mellom massen og ladningen til partikkelen (altså  $q/m$ ), vil partikler med liten  $q/m$  følge en stor kurve mens partikler med stor  $q/m$  følger en liten kurve. Hvis ionestrømmen består av partikler med samme ladning kan massen til hvert ion bestemmes ved at detektorskjermen registrerer strømmen hver type ion skaper. Denne er da direkte proporsjonal med antall ioner, og dermed kan den relative mengden av de forskjellige isotopene bestemmes. Siden hastigheten til ionene er gitt ved ligning 4, kan radiusen også skrives slik:

$$r = \frac{mE}{qBB_0} \quad (6)$$

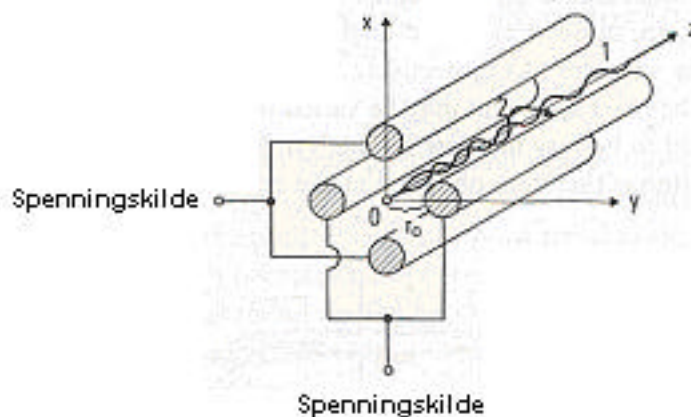
Sammenhengen mellom potensialet til det akselererende, elektriske feltet og den kinetiske energien i ligning 2 gir også et tredje uttrykk for radiusen.

$$r = \frac{1}{B} \sqrt{\frac{2mU}{q}} \quad (7)$$



Figur 7: Et statisk massespektrometer (uten hastighetsseparator) [13]

I dynamiske massespektrometre blir masseseparasjonen gjort ved at ioner blir oscillert av et elektrisk felt generert av fire sirkulære elektroder og to spenningskilder bestående av en direkte og en høyfrekvent, varierende spenning. Ionene ankommer feltet i den ene enden av elektrodeoppsettet, og bare de ionene som har en stabil oscillering, det vil si at de har en begrenset amplitude i begge retninger, vil nå detektoren i den andre enden av elektrodesystemet. Når radiusen til systemet og den direkte og den høyfrekvente spenningen er bestemt, vil stabiliteten til de oscillerende ionene bare være avhengig av forholdet mellom masse og ladning. Dette betyr at dersom alle ionene har samme ladning, er stabiliteten bare avhengig av massen til ionene, som så kan bestemmes idet ionene treffer detektoren (se figur 8, bane 1). Ioner som ikke har en stabil oscillering vil ikke nå detektoren, men i stedet treffe elektrodene og bli eliminert (se figur 8, bane 2). Denne typen massespektrometer kalles dynamiske fordi variasjon feltparameterne (direkte spenning, høyfrekvent spenning eller radius) er helt essensielt for å få til en masseseparasjon. Slike massespektrometre kan, i motsetning til statiske massespektrometre, ikke brukes til å analysere molekyler fordi sammensetningen til et molekyl også er avhengig av bindingsenergien til atomene det består av, og ikke bare massetallet.



Figur 8: Dynamisk massespektrometer [1]

## 6.3 Infrarød spektroskopi [2-3, 24-27]

Infrarød spektroskopi er en mye anvendt metode innen forskning og industri. Metoden blir mest brukt til å finne ut noe om vibrasjonstilstandene til et stoff, men også for å finne ut hvilke stoffer en prøve består av eller hvor rent et stoff er. Selv enkle organiske molekyl kan gi komplekse spekter. Molekyler blir påvirket av omgivelsene sine. I en ideell tilstand er molekylet alene i verden, men i realiteten befinner molekylet seg gjerne i en blanding av et eller annet slag, noe som gjør at vi får et lite avvik i bindingsforholdet. Selv en liten endring i disse bindingsforholdene, vil utgjøre en forandring i molekylvibrasjonene. Vi har to forskjellige typer molekylære vibrasjoner, strekking og bøying. En vibrasjon må medføre en forandring i dipolmomentet for at et molekyl skal kunne bli oppdaget med infrarødstråling. Det er dette som gjør at for eksempel karbondioksid (lineært molekyl), som har ett symmetrisk strekk, ikke alltid vil vise så mange bånd på et infrarødt spekter som man ville anta, siden et symmetrisk molekyl ikke vil medføre noe endring i dipolmomentet. Med andre ord kan vi si at en betingelse for eksitasjon av infrarød stråling er molekylær asymmetri.

Energien som blir absorbert ved en bestemt frekvens, korresponderer til frekvensen av en vibrasjonsbevegelse i en binding. Vi kan finne ut hvilke typer bindinger en forbindelse inneholder, og dermed identifisere de funksjonelle gruppene, ved å måle frekvensen der det absorberes infrarød stråling. Vi kan analysere det infrarøde spekteret ved å sammenligne det med spektrere av kjente stoff, og til denne formen for identifikasjon ser man på området der man har svært mange komplekse vibrasjoner. Dette området refereres ofte til som fingeravtrykkregionen. Flertallet av de funksjonelle gruppene har karakteristiske infrarøde absorpsjoner som er like i forskjellige molekyler. Absorpsjonsfrekvensen ( $f$ ) er avhengig av to ting, styrken på bindingen og massen av atomene i bindingen. Bølgetallet ( $\bar{\nu}$ ) øker dess sterkere bindingen er, og minker ved økende masse. Dette tallet finner vi ved å ta den inverse av bølgelengden til absorpsjonsfrekvensen ( $\lambda$ ), og vi har følgende sammenheng, der  $c$  er lysfarten og  $f$  er frekvensen:

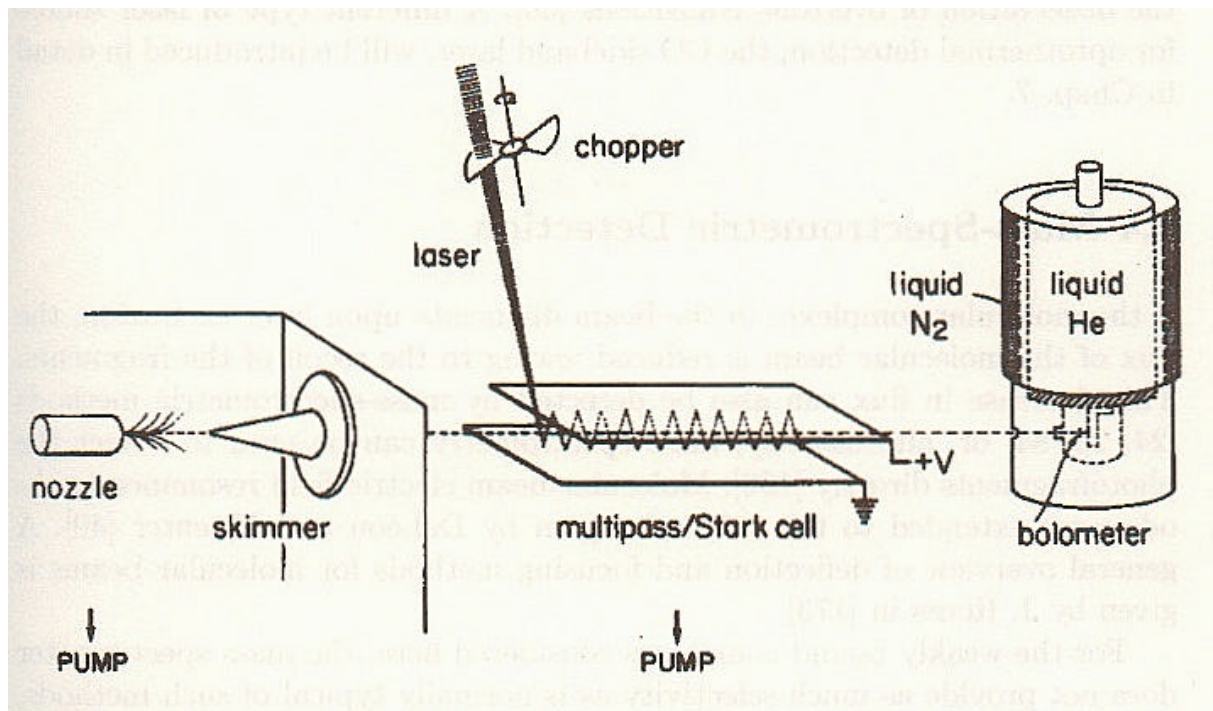
$$l = \frac{c}{f} = \frac{1}{\bar{\nu}} \quad (8)$$

Infrarød spektroskopi utføres ved å sende mange infrarøde lysbølger mot en prøve på samme tid. Endringene i lysbølgene, etter at de har blitt reflektert av eller trengt gjennom prøven, blir så målt. Deretter gjennomfører man en Fouriertransformasjon, som er en omregning fra bølgelengdeområdet til frekvensområdet. For infrarøde studier av molekylære forbindelser, benytter man seg i dag spesielt av to metoder: direkte absorpsjon spektroskopi og optotermisk bestemmelse. I direkte absorpsjon spektroskopi har vi at en laserstråle passerer gjennom molekylstrålen, og en kan da måle absorpsjonen som funksjon av frekvensen. I dag finner vi som oftest et dobbelstrålespektrometer i laboratorier, og dette instrumentet benytter stråling i det midt- og nærinfrarøde området. Optotermisk bestemmelse benytter seg derimot av termiske detektorer, ofte et bolometer. Bolometeret har en elektrisk motstand som er sterkt avhengig av temperaturen, og det kan oppdage temperaturforandringer helt ned til  $3 \cdot 10^{-8}$  K med stor nøyaktighet. Senker man temperaturen ned mot det absolutte nullpunkt (0 K), øker nøyaktigheten ytterligere. Energien fra den infrarøde



strålingen sørger for en temperaturforandring, og denne kan registreres ved at man sender strålingen mot bolometeret.

Figuren under viser hvordan et optotermisk spektroskop fungerer. Trykkforskjell mellom kammeret molekylene er plassert i og kollisjonskammeret gjør at molekylene trekker inn i kollisjonskammeret, og der blir molekylstrålen eksitert ved hjelp av en infrarød laserstråle. Molekylstrålen gjennomgår så en rekke kollisjoner med laserstrålen, og dette gir en temperaturforandring (energiforandring), som tilslutt blir registrert av bolometeret.



Figur 9: Oppsett for infrarød optotermisk spektroskopi [3]

Infrarøde frekvenser er for høye til at de kan digitaliseres, derfor må frekvensene flyttet til et frekvensområde man kan arbeide med. En slik modulering finnes for eksempel i radioer. Denne flyttingen gjøres med et interferrometer, siden det ikke er mulig å foreta denne prosessen elektronisk med så høye frekvenser. I et slikt instrument blir det infrarøde lyset kastet tilbake på seg selv ved hjelp av to speil, og dette fører til at lysbølger enten blir ødelagt eller forsterket. Vi får med andre ord det en kaller destruktiv (ødeleggende) eller konstruktiv (forsterkende) interferens.

Forskere har også funnet ut at infrarød spektroskopi kan benyttes for å bestemme hvor mye vann tørrfisk inneholder. Dette gjøres ved at man sender en stråle med infrarødt lys ned mot fisken. Fisken lyses dermed opp der strålen treffer, fordi lyset forplanter seg i vevet som om det skulle være en bunt med optisk fiber. Av lyset som kommer ut av fisken blir det gjennomført en spektralanalyse som kan fortelle oss hvor mye vann som er til stede.

## 6.4 Ramanspektroskopi [4-6, 27-31]

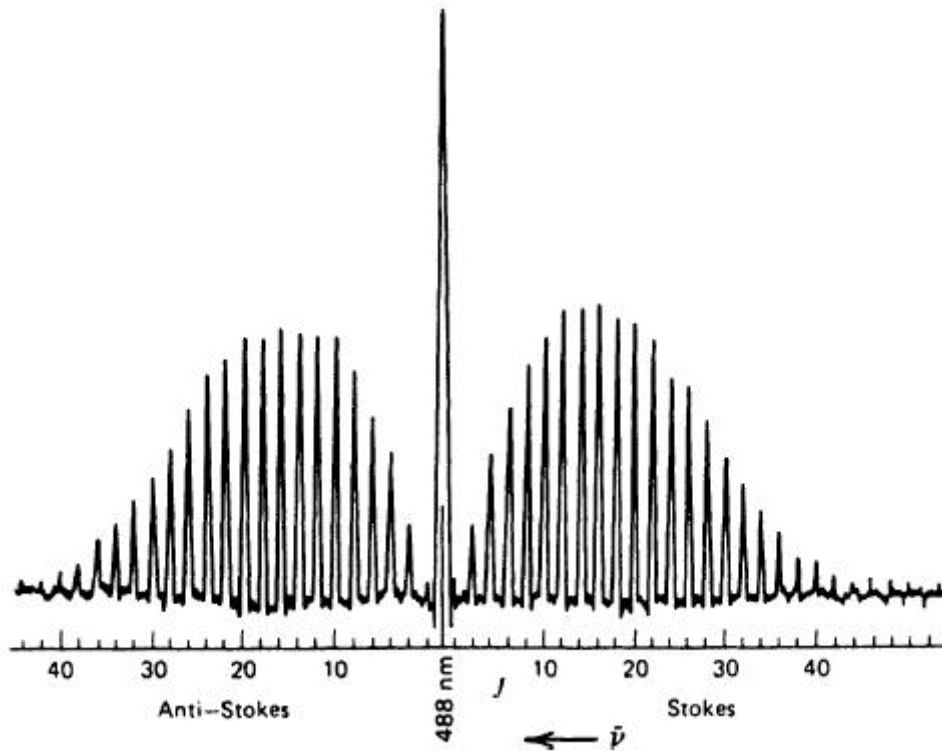
Ramanspektroskopi bygger på prinsippet om molekylær spredningseffekt, som tilsvarer uelastisk støt mellom kuler (energien er ikke bevart). Når materie blir utsatt for intens stråling med en bestemt frekvens utenfor området det klarer å absorbere, vil en del av stråling blir spredd ut i alle retninger, og dette fenomenet kalles raman-effekten. Effekten ble oppdaget i 1928 av den indiske fysikeren Chandrasekhara Venkata Raman (1888-1970), og kan beskrives som forekomsten av ekstra linjer i spekteret til monokromatisk lys (lys bestående av bare en bølgelengde), for eksempel fra en laser. I kjemi brukes ramanspektroskopi til å studere molekylvibrasjon, rotasjon, endringer i bindingsenergi og til identifisering av molekyler, mens i fysikk brukes metoden til å studere egenskapene til kondenserte stoffer, altså faste stoffer og væsker hvor vekselvirkningene mellom partiklene er sterke. Metoden er en komplementærmetode til den infrarøde spektroskopien, det vil si at de to teknikkene utfyller hverandre, og de brukes ofte sammen for å studere vibrasjonen i molekyler.

Når et molekylært system blir utsatt for stråling skjer det to ting: mesteparten av energien (fotoner med samme frekvens som systemet) blir absorbert av systemet, men en liten del av strålingen klarer ikke systemet å absorbere, og denne blir spredd ut i alle retninger med en frekvens som vanligvis er lavere enn frekvensen til den innkommende strålingen. Linjespekteret til det spredde lyset vil ha en framstående linje som svarer til den opprinnelige bølgelengden til strålingen, samt ekstra linjer på hver side, som da svarer til bølgelengdene til det utsendte lyset. Forskjellen i energi mellom de innkommende og de utsendte fotonene er lik vibrasjonsenergien til det molekylære systemet. Ramanspekteret framkommer ved å sette opp denne energidifferansen som funksjon av intensiteten til den utsendte strålingen. Siden den absorberte strålingsenergien er mye høyere enn den utsendte består oppgaven til et ramanspektrometeret i å separere disse fra hverandre. Dette gjøres ved at bølgelengdene som fører til absorpsjon blir filtrert ut ved hjelp av en monokromator. Ramanspredningen kan så registreres med en detektorskjerm, og hele prosessen skjer uten at prøven som undersøkes blir ødelagt. Når en prøve skal undersøkes med et ramanspektrometer, trenger man heller ikke gjøre noe forbehandling av prøven.

For å forstå hva som egentlig skjer i denne prosessen må vi ned på molekylnivå. Et molekyl består av atomer som igjen består av en kjerne og elektroner. Elektronene svever rundt kjernen, og de er i stand til å ta opp energi som er nøyaktig lik energiforskjellen mellom to (eventuelt flere) energitilstander. Som vi tidligere har sett består elektromagnetisk stråling av fotoner med bestemte energier, og sender man slik stråling mot et molekyl har vi tre mulige utfall. Dersom energien til fotonet som kommer inn er lik energien til fotonet som sendes ut, blir energien først absorbert og elektronet går over i en høyere energitilstand. Men siden elektroner søker lavest mulig energi, vil det raskt falle ned til nivået det var på, og da sendes det ut et foton med like stor energi som det innkommende fotonet. Dette kalles Rayleigh spredning (eller elastisk spredning) og skjer når den elektromagnetiske strålingen er i resonans med overgangsenergien til elektronet. Hvis den elektromagnetiske strålingen ikke er i resonans med overgangsenergien, og fotonenergien til den innkommende strålingen er større enn den utsendte, betyr det at en del av energien blir brukt til å endre vibrasjons-, rotasjons- eller den elektriske energien til molekylet og resten av



energien sendes ut som et foton. Denne strålingen kalles Stokes lys og er en form for ramanspredning. I motsatt tilfelle, altså når energien til den innkommende strålingen er mindre enn energien til den utsendte, endres også vibrasjons- rotasjons- eller den elektriske energien til molekylet. Det sender da ut den innkommende energien samt forskjellen mellom energitilstandene som et foton, og denne typen ramanspredning kalles anti-Stokes lys. Vi ser dermed at ramanspektroskopi ikke er avhengig av at den elektromagnetiske strålingen som brukes er i resonans med molekylets energinivåer, slik som flere av de andre spektroskopiske metodene.



Figur 10: Ramanspektrum av CO<sub>2</sub> [30]

## **6.5 UV/Synlig spektroskopi [7, 32-33]**

UV/Synlig spektroskopi er en metode som fortrinnsvis brukes i analytisk kjemi, hvor formålet er å finne konsentrasjonen til en løsning. Når stråling vekselvirker med molekyler kan det skje flere prosesser: absorpsjon, refleksjon, spredning, fluorescens/fosforescens og fotokjemiske reaksjoner (absorpsjon som fører til bryting av kjemiske bindinger). Fluorescens er når atomet stråler ut synlig lys som følge av at atomet blir eksitert av en type kortbølget stråling, og effekten opphører når den eksiterende strålingen opphører. Dersom fluorescensen fortsetter en liten stund etter at den eksiterende strålingen opphører, kaller vi det fosforescens. I UV/Synlig spektroskopi er det vanligvis absorpsjonen vi ønsker å studere. Prøven fylles i en kuvette (en liten glassbeholder) og denne plasseres så i et spektrometer. Inne i spektrometeret blir lys, i dette tilfellet UV og synlig lys, sendt gjennom prøven og mengden absorbert stråling blir målt. Forskjellige stoff vil da absorbere lys med ulike bølgelengder, og denne absorbansen er proporsjonal med konsentrasjonen til stoffet.

Elektromagnetisk stråling har en energi som avhenger av bølgelengden (eller frekvensen), og når et molekyl absorberer stråling øker energien til molekylet. For visse atomer og molekyler har fotoner med bølgelengder i UV og det synlige området av det elektromagnetiske spekteret tilstrekkelig energi til å medføre overganger mellom ulike elektrontilstander. Bølgelengden som absorberes har akkurat den energien som kreves for å flytte et elektron fra en lavere elektrontilstand til et høyere nivå.

## **6.6 Mikrobølgespektroskopi [27, 34-36]**

Mikrobølger er elektromagnetiske bølger med en bølgelengde mellom 1 mm og 100 mm, eller med andre ord lengre enn infrarødt lys og kortere enn radiobølger, og disse danner grunnlaget for mikrobølgespektroskopien. Denne teknikken brukes hovedsakelig til å undersøke molekylstruktur i kjemien, men den kan også brukes til å identifisere molekyler i verdensrommet. Utgangspunktet for mikrobølgespektroskopien er at forandringer i et molekyls rotasjonsenergi gir et spektrum som består av skarpe absorpsjons- eller emisjonslinjer. Bølgelengden til disse linjene kan bestemmes med stor nøyaktighet, og dette gjør det igjen mulig å finne hovedtreghetsmomentene til molekylet med like stor nøyaktighet. Når treghetsmomentene er bestemt kan denne informasjonen brukes til å finne den geometriske strukturen til molekylet, noe som er et av de viktigste forskningsområdene innen kjemi. Man kan også finne dipolmomenter og rotasjonsbarrierer ved hjelp av denne teknikken.

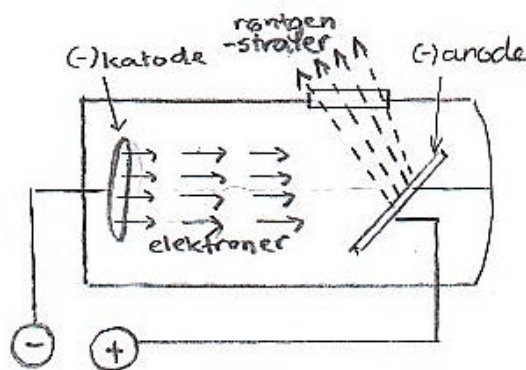
Metoden kan også brukes til å overvåke kjemiske reaksjoner ved at stoffene som skal reagere blir plassert i en beholder med en mikrobølgesender på den ene siden, og en mottaker på den andre siden. Beholderen må være av et materiale som tillater mikrobølgene å passere, eller ha vinduer som strålingen kan gå igjennom. Mikrobølgene kan da stråle ut fra senderen, gjennom prøven og registreres av mottakeren, noe som i neste omgang kan gi oss et bilde av reaksjonsprosessen.

## 6.7 Røntgenspektroskopi [8-9, 37-40]

Røntgenstråling er elektromagnetisk stråling med kort bølgelengde, kortere enn for eksempel synlig lys. Strålingen oppstår når elektron med stor energi treffer et metall, og den kjennetegnes ved at den er gjennomtrengbar, ioniserende, og den avbøyes ikke av elektriske eller magnetiske felt. Strålingen oppstår ved oppbremsing av elektroner, eller ved kvantesprang av elektroner i atomer. Røntgenspekteret består av to deler, det kontinuerlige spekteret og linjespekteret. Det er det sistnevnte som er karakteristisk for røntgenstrålingen. Linjespekteret i røntgenstrålingen ligner på linjespektra til hydrogen og andre gasser. Egenskapene til røntgenstråling gjør at den blir brukt i mange sammenhenger, og for folk flest er nok medisin og tannmedisin mest kjent. Strålingen kan også brukes i behandlingen av kreft, men dessverre kan røntgenstrålene også skade de friske cellene, og ikke bare kreftcellene. I industrien blir den brukt til å finne feil på faste stoff ved røntgendiffraksjon. Molekylstrukturen til DNA ble også fastlagt ved hjelp av røntgenstråling.

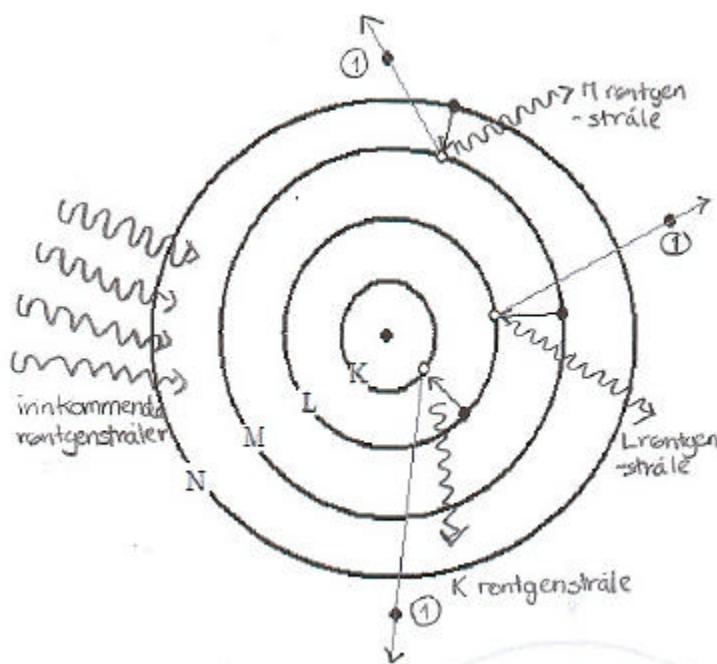
I røntgen absorpsjon spektroskopi blir et elektron eksitert til et ledig elektronnivå ved fotonabsorpsjon. Om en da måler absorpsjonskreftene som en funksjon av fotonenergien, kan en bestemme terskelenergien for en eksitasjon fra et bestemt kjernenivå til den lavest ledige tilstanden. En vanlig metode for å utføre røntgen absorpsjon spektroskopi, er å se på elektronutbyttet som en funksjon av fotonenergien. Ved røntgen fotoelektron spektroskopi finner en størrelsen til den kinetiske energien til elektronene ved hjelp av en fiksert elektronkilde som eksiterer elektron fra prøven. Dette gjør en i stand til å bestemme hvilke stoff en har i prøven, siden den kinetiske energien avhenger av bindingsenergien.

Røntgen fluorescens spektroskopi er en av de vanligste spektroskopi metodene, og den kan beskrives som en ikke nedbrytende analytisk metode som blir brukt for å finne og fastlegge konsentrasjonene til grunnstoffene (fra det 4. til det 92. atomet i periodetabellen) i et stoff, pulver eller væsker. En kan få et røntgen spekter fra den eksiterte prøven dersom den blir utsatt for stråler med tilstrekkelig kort bølgelengde. Denne metoden lønner seg særlig med høyintensitets røntgenrør, følsomme detektorer og en passende røntgen optikk. Kort oppsummert går denne metoden ut på at man sender røntgenstråler (med en energi på flere elektronvolt) mot prøven. Når strålingen sendes mot prøven, får vi en vekselvirkning mellom elektronene, og dette gjør at prøven sender ut stråling. Vi kan så registrere og analysere strålene som blir utsendt, og dette kan gi oss informasjon om hva prøven inneholder.



Figur 11: Skjematisk oppstilling av et røntgenrør

Figuren over viser en skisse av et vanlig røntgenrør. Røntgenstrålene blir dannet ved at en frigjør elektroner og akselerer dem mot en metallskive (anoden) med en energi på mange tusen elektronvolt. Når disse elektronene treffer metallskiven, får vi dannet røntgenstråling (stiplet linje).



Figur 12: Innkommende røntgenstråler slår ut elektroner, og energiforskjellen mellom det utslåtte elektronet og det som erstatter det, sendes ut som røntgenstråling.

Denne figuren skal prøve å illustrere hvordan røntgenstrålene slår ut elektroner i underskallene og danner tomrom. Dette er ikke en ønskelig tilstand for atomet, og resten av elektronene vil dermed prøve å kompensere for det utslåtte elektronet. Elektroner fra skall utenfor vil dermed fylle opp tomrommet, for at atomet skal komme tilbake til sin stabile tilstand. Siden disse elektronene ikke vil være bundet til atomet med like mye energi som elektronet som ble slått ut, vil energiforskjellen (altså forskjellen i bindingsenergien mellom skallene) sendes ut som røntgenstråler. Denne strålingen er ulik for forskjellige stoff.

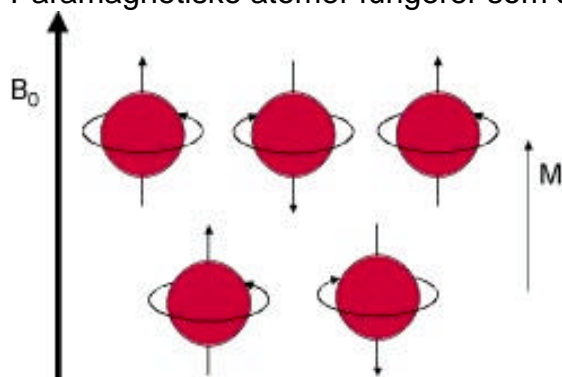
## 6.8 NMR [10-11, 41-43]

En av de mest kjente spektroskopiske metodene heter NMR, og denne forkortelsen står for "Nuclear Magnetic Resonance", som på norsk blir kjernemagnetisk resonans. Utviklingen av NMR til bruk i analyse begynte på starten på 1950-tallet, og i dag blir metoden i hovedsak brukt i studiet av molekylstruktur og –sammensetning i kjemi og for å gjøre avbildninger av kroppens organer i medisin, såkalt magnetresonanstomografi eller MR. En MR-maskin består av en stor magnet formet som en ring, flere radiosendere og –mottakere og datautstyr for å tolke signalene. I et sterkt magnetfelt vil ulike kroppsvev magnetiseres i forskjellig grad, og dermed sende ut forskjellig stråling når de påvirkes av radiobølger. Denne informasjonen blir tolket av datamaskinen som så kan gi detaljerte tredimensjonale bilder av kroppens indre organer og blodflyt. Ved å injisere kontrastmidler i kroppen kan organer med unormal blodsirkulasjon, som svulster, trange blodårer eller hjerneskaner, identifiseres siden kontrastmidlene i hovedsak vil følge blodet rundt i kroppen. Kontrastmidler inneholder paramagnetiske metall (for eksempel mangan) som øker magnetiseringsevnen til kroppsvevet, og dermed også radiostrålingen som blir sendt ut og registrert av MR-maskinen.

NMR baserer seg på at visse atomer er paramagnetiske, og de vil da innrette seg parallelt eller antiparallelt med et påtrykt magnetisk felt. Atomer er paramagnetiske hvis de inneholder netto uparede elektronspinn, eller sagt med andre ord: atomkjernen inneholder et ulikt antall protoner og/eller et ulikt antall nøytroner.

Paramagnetiske atomer fungerer som små magneter med en sør- og en nordpol, og

dette kommer av at kjernen med uparede spinn spinner rundt sin egen akse, og denne bevegelsen danner et lite magnetfelt. Det sterkeste paramagnetiske atomet er hydrogen, som bare består av et proton og et elektron. Siden forekomsten av hydrogen er stor i mange forskjellige materialer er bruken av den mest vanlig i NMR - spektroskopi, men  $^{31}\text{P}$  (fosfor-31),  $^{13}\text{C}$  (karbon-13),  $^{23}\text{Na}$  (natrium-23) og  $^{19}\text{F}$  (fluor-19) kan også brukes. Når paramagnetiske atomer ikke er utsatt for noen ytre påvirkning, har spinn en vilkårlig retning,



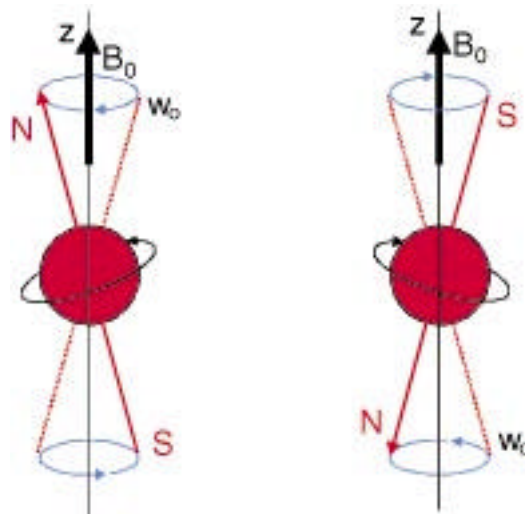
Figur 13: Innretting av paramagnetiske atomer i et påtrykt felt [43]

men dersom et sterkt magnetfelt blir skrudd på vil spinn innrette seg med eller mot det påtrykte feltet. De fleste vil imidlertid være parallelle med feltet siden den retningen gir det laveste energinivået, og dette er det foretrukne for atomer. Det påtrykte magnetfeltet fører også til at de parallelle og antiparallele atomspinnene blir tvunget til å rotere rundt det ytre feltets retning, en bevegelse som kalles precesjon. Denne bevegelsen skyldes mekaniske krefter mellom atomkjernens magnetiske moment og det ytre magnetfeltet, og rotasjonsfrekvensen til bevegelsen er gitt ved Larmors ligning:

$$\omega_0 = \gamma \cdot B_0 \quad (9)$$

Her er  $\omega_0$  lik rotasjonsfrekvensen (radianer pr sekund),  $\gamma$  er den gyromagnetiske konstanten og  $B_0$  er styrken på det ytre feltet. Den gyromagnetiske konstanten er

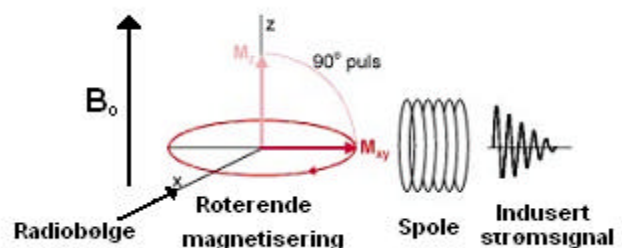
avhengig av hva slags atom man bruker i NMR-prosessen, men for det vanligste atomet, nemlig hydrogen, er denne konstanten lik 42,5781 MHz/T.



**Figur 14: Presesjonsbevegelsen til atomspinn som er henholdsvis parallellt og antiparallellt med det ytre magnetfeltet [43]**

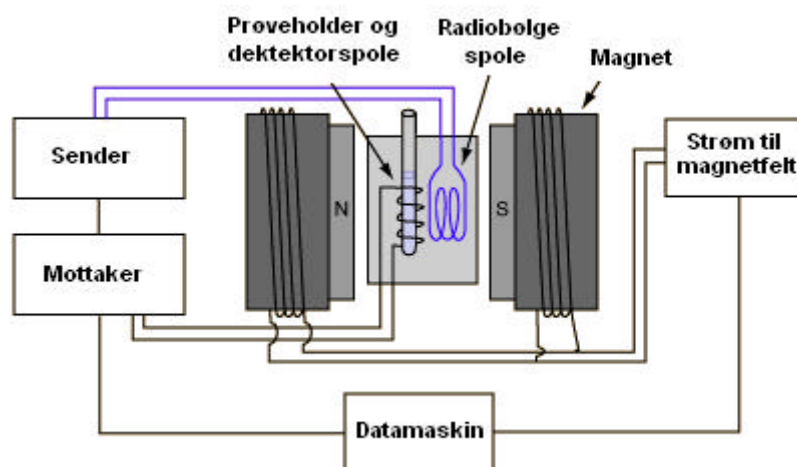
Innrettingen av atomspinn vil gi en nettomagnetisering som peker i samme retning som og er proporsjonalt med det ytre magnetfeltet. Denne netto magnetiseringen kan bestemmes ved å la den indusere en målbar strøm i en spole, og for at dette skal skje må magnetiseringen bevege seg i forhold til spolens åpning. Dette kan gjøres ved å sende elektromagnetisk stråling vinkelrett på magnetfeltet som atomspinnet lager. Radiostrålingen som benyttes har en energi som tilsvarer energiforskjellen mellom parallellt og antiparallellt atomspinn, og den sendes inn mot materialet som skal undersøkes i korte pulser.

Elektromagnetisk stråling består av en elektrisk og en magnetisk komponent som står vinkelrett på hverandre og på strålingens retning, og når atomspinn utsettes for denne strålingen vil det dreies vekk fra det påtrykte feltets retning. I NMR benyttes radiobølger med en flippvinkel på 90 grader (også kalt radiobølgens puls) til denne prosessen, og hvis man da plasserer spolens akse vinkelrett på det påtrykte feltet, vil den roterende magnetiseringen kunne indusere en strøm i spolen. Den induserte strømmen har da en styrke som er proporsjonal med styrken til netto magnetiseringen, og siden to atomer av samme grunnstoff vil oppleve et litt forskjellig magnetfelt når de befinner seg i ulike kjemiske miljø, kan denne sammenhengen blant annet brukes til å skille et hydrogenatom i et alkan (mettet hydrokarbon med enkeltbindinger mellom alle atomene, for eksempel  $\text{CH}_4$  eller  $\text{C}_2\text{H}_6$ ) fra et hydrogenatom i ei aromatisk gruppe (kjemisk forbindelse med en eller flere benzenringer, for eksempel  $\text{C}_6\text{H}_6$ ).



**Figur 15: Roterende magnetisering som induserer en strøm i spolen [43]**

For å sørge for at denne spektroskopiske metoden gir gode spektre, kreves det et sterkt, stabilt og homogent magnetfelt, og til dette trengs en magnet. I NMR er det tre forskjellige magnettyper som er aktuelle, nemlig en permanent magnet, elektromagnet eller superledende magnet. De tidligste NMR spektrometrene brukte permanente magneter til å lage magnetfeltet, men dessverre er ikke slike magneter i stand til å lage magnetfelt på mer enn ca 1,4 T, noe som er for lite for dagens bruk. Elektromagneter er mye dyrere enn permanente magneter, både i innkjøp og bruk, og de krever også god avkjøling for å sikre et stabilt felt siden det trengs en meget sterk strøm for å generere magnetfeltet (noe som fører til høy varmeutvikling på grunn av elektrisk motstand). Slike magneter kan imidlertid lage magnetfelt med en styrke på inntil 34 T, noe som er det sterkeste som noen gang er oppnådd. Det mest vanlige i dagens NMR spektrometre er superledende magneter, som egentlig er en undergruppe av elektromagnetene. Hver superledende magnet er laget for å generere et felt med en bestemt styrke, fra 6 til 18 T, og et NMR spektrometer som bruker denne magnettypen består av tre skall der det midterste består av en superledende legering (niobtinn). Det superledende materialet har ingen elektrisk motstand når det avkjøles til 4 K, og for å oppnå denne temperaturen blir området mellom det ytterste og midterste skallet fylt med flytende nitrogen og området mellom det midterste og innerste fylt med flytende helium. Så lenge temperaturen holdes på 4 K er det ingen motstand i legeringen, og hvis man kobler legeringen til en sterk spenningskilde og så deretter kobler av spenningskilden vil strømmen fortsette å gå gjennom legeringen og generere et sterkt og stabilt magnetisk felt.



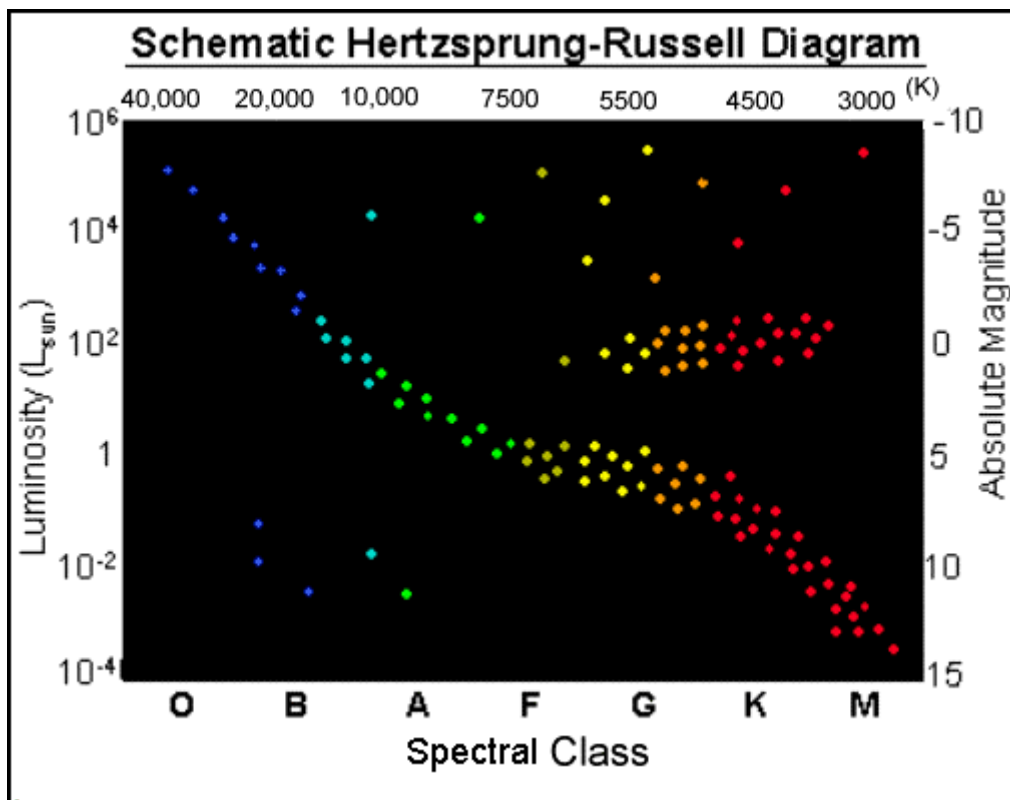
Figur 16: Enkel oppstilling for en NMR-maskin



## 7 Spektroskopi i praksis

### 7.1 Studiet av verdensrommet [12, 44-51]

Spektroskopi er en viktig forskningsmetode innenfor astronomien, og teknikken førte til oppdagelsene av flere nye grunnstoffer. Etter som spektroskopene ble forbedret, begynte man å klassifisere informasjonen disse observasjonene gav, og det ble da raskt et behov for å klassifisere observasjonene. William Huggins (1824-1910) var en av de første som begynte å sortere denne informasjonen, og han var med på å utvikle et enkelt, men samtidig viktig klassifikasjonssystem, som lenge var i bruk blant astronomer. I dag bruker man Harvard Classification (OBAFGKM), som er et system der man gir stjernene en bokstav etter forekomsten av spektrallinjer (som igjen sier noe om stjernens overflatetemperatur). Klassifiseringen går fra O til M, der de blå stjernene (O) er de varmeste og de røde stjernene (M) de kaldeste. Denne klassifiseringen lever videre i Hertzsprung-Russel diagrammet, hvor posisjonen til en stjerne er avhengig av stjernens masse og alder.



Figur 17: Et eksempel på HR-diagram [51]

Stjerner flest er består av 75 % hydrogen og 20 % helium (resterende 5 % er tyngre metaller). Helium blir til gjennom en fusjon av to hydrogenatomer, og denne kjernefysiske fusjonen er et resultat av den høye temperaturen. I varmere stjerner kan også tyngre atomer fusjonere. Vi kan bestemme sammensetningen til en stjerne ved å se på absorpsjonsspekteret til stjernen. Siden alle grunnstoffer har et eget absorpsjonsspekter kan man sammenligne stjernesppekteret med spektrene til kjente grunnstoffer, og dermed identifisere grunnstoffene stjernen består av. Det er blitt utviklet datamodeller til dette arbeidet, og disse ser både på temperaturen og



tettheten til stjernen, samt hvor sterk den observerte linjen er. Vi kan da få informasjon om mengden av de forskjellige grunnstoffene i stjernens atmosfære. Det er nettopp det faktum at stjernene har ulike temperaturer, som gjør at vi kan se forskjeller i stjernespektrene. I hver av ionisasjonstilstandene vil hvert kjemisk element i en stjerne ha en karakteristisk temperatur, der elementet mest effektivt produserer absorpsjonslinjer i sin del av spekteret. Stjernens temperatur og bevegelsesretning kan også bestemmes ved å se på absorpsjonsspekteret. Dersom bølgelengden til linjene er forskjøvet mot rødt (lengre bølgelengde), er stjernen på vei vekk fra oss, men har vi derimot en blåforskyvning, kommer den mot oss. Dette fenomenet er koblet opp mot dopplereffekten, som sier at bølgelengden endres når kilden og mottaker beveger seg i forhold til hverandre. Spektrallinjene vil også være bredere for roterende stjerner. Dette kommer av at stjernens nærmeste del vil representere den vanlige hastigheten til stjernen (i forhold til jorda), mens sidene vil ha hver sin hastighet, der den ene er litt større og den andre litt mindre enn den vanlige hastigheten. Denne forskjellen i hastighet gir de roterende stjernene bredere spektrallinjer.

I rommet mellom himmellegemene finnes det molekyler, ioner og radikaler i ørsmå konsentrasjoner. Noen steder i rommet finner vi opphopninger av molekyler, bedre kjent som tåker. Disse kan være flere lysår i diameter og har svært lavt trykk, men på grunn av sine enorme dimensjoner vil de kunne absorbere alt synlig lys fra stjernene bak tåken. Mikrobølger og infrarødt lys på sin side vil derimot ikke bli absorbert, og kan derfor slippe gjennom tåken og danne grunnlag for spektroskopiske observasjoner. Studier og observasjoner har vist at tåkene har en komplisert kjemi, og ved hjelp av mikrobølgespektroskopi har man funnet over 120 ulike molekyler i disse tåkene. Noen forskere hevder at de interstellare molekylene (interstellare betyr mellom stjernene) er opphavet til livet på jorden. Stjernesystemer med planeter, stjerner og kometer blir dannet ved at tåkene fortettes, og kometene har vist seg å inneholde de samme interstellare molekylene som tåkene. En kollisjon mellom jorden og en komet ville frigjøre tonnevis av en rekke ulike organiske molekyler, og en bedre egnet start på livsprosessen enn dette er det vanskelig å tenke seg.

## **7.2 Våre spektroskopiske opplevelser**

Da vi begynte med dette prosjektet, var noe av det første vi foretok oss å prøve og få tak i noen som bruker spektroskopi innen forskning eller som en del av det daglige arbeidet. Takket være Jon Andreas Støvneng, kom vi i kontakt med Ole Kristian Eide som for tiden er doktorstipendiat ved institutt for materialteknologi (faggruppe uorganisk kjemi på NTNU), og vi var så heldige å få lov til å besøke han på laben hans. Eide forsker til vanlig på metallocene/methylaluminoksan katalysatorer for polymerisering av olefiner, og han er en av de som bruker infrarød spektroskopi i forskningsarbeidet. Da vi besøkte han, fikk vi lov til å være med å sette på flere prøver med forskjellige kjemiske forbindelser, og selv om analyseringen ikke gikk helt som det skulle, var det veldig lærerikt! Ole Kristian Eide viste oss også hvilken informasjon vi kan få ut av spekteret det infrarøde spektroskopet gir.

Vi tok også kontakt med Sintef for å høre om det var noen der vi kunne være med for å se på hvordan de bruker spektroskopiske metoder i forskningsprosjektene sine, men dessverre var det ingen der som skulle gjennomføre analyser i perioden prosjektet vårt varte. De henviste oss imidlertid videre til medisinstudenten, Silje Alvestad (NTNU, det medisinske fakultet, nevrovitenskap) som inviterte oss ned til St. Olavs hospital for å være med å sette på en NMR-prøve. Silje Alvestad forsker på epilepsi og bruker i den forbindelse NMR til å studere rottehjernen. Dette gjøres ved at et kontrastmiddel som inneholder mangan blir injisert i rotta like før den blir avlivet, deretter dissekeres hjernen ut før prøven plasseres i en beholder med tungtvann (deuterium) og settes inn i NMR-maskinen. Forskningsavdelingen til NTNU på St. Olavs hospital har tre NMR-maskiner på henholdsvis 300 MHz (7,1 Tesla), 500 MHz (11,7 Tesla) og 600 MHz (14,1 Tesla), og vi fikk se på når maskinen på 600 MHz skulle benyttes.

## 8 Oppsummering

Spektroskopi er en fellesbetegnelse på analytiske metoder som ser på hvordan elektromagnetisk stråling vekselvirker med et stoff, og ut i fra disse resultatene kan man skaffe seg informasjon om stoffet. Ved å bruke spektroskopiske metoder i det vitenskapelige arbeidet, kan man skaffe seg kunnskap om den kjemiske sammensetningen til et stoff, massen, strukturen, vibrasjonene, rotasjonstilstandene og mye mer. Spektralanalysen omfatter studiet av emisjons- og absorpsjonsspektrene til forskjellige stoffer, og baserer seg på at alle grunnstoffer og molekyler har et unikt spekter ved gitte forutsetninger. Massespektroskopien ser på hvordan ladede partikler oppfører seg i elektriske og magnetiske felt, og denne informasjonen kan si noe om forholdet mellom massen og ladningen til partiklene som studeres. Hvis man er interessert i å finne ut noe om vibrasjonstilstandene og strukturen til molekyler, kan man bruke infrarød spektroskopi. Molekylet vil absorbere den energien som samsvarer med frekvensen til vibrasjonsbevegelsene i molekylets bindinger, og dette kan vi benytte for å finne strukturen til molekylet. I ramanspektroskopi blir stoffet som skal undersøkes utsatt for intens stråling, og noe av strålingen vil da bli spredt ut i vilkårlige retninger. Ved å studere denne spredningseffekten kan man blant annet få informasjon om molekylets vibrasjons- og rotasjonsbevegelser. Raman- og infrarød spektroskopi er såkalte komplementære metoder, det vil si at de utfyller hverandre, og ved kombinere disse kan man få svært detaljert kunnskap om det stoffet som undersøkes.

NMR benytter seg av at visse atomer er paramagnetiske, noe som fører til at de innretter seg på en bestemt måte når de blir utsatt for et magnetisk felt. Atomene får da et magnetisk dipolmoment, og ved å la dette indusere en strøm i en spole, kan man finne ut mer om prøven. Denne teknikken er flittig brukt innenfor kjemi, medisin og biologi, men også fysikere har tatt i bruk metoden, i studiet av faste stoffer. Astronomien er kanskje det vitenskapelige området som har hatt størst utbytte av den spektroskopiske utviklingen. Ved å ta i bruk de tidligere omtalte teknikkene, har man fått kunnskap om deler av verdensrommet som mennesket aldri vil nå (iallfall ikke på veldig lang tid).

## 9 Avslutning

Dette prosjektet var vært svært lærerikt, men også veldig krevende. Da vi begynte med prosjektarbeidet, visste vi ikke stort mer enn at det fantes noe som het spektralanalyse og noe som het massespektroskopi. Men etter en tur innom diverse nettsider, fant vi raskt ut at spektroskopi er mye mer enn det. Siden forkunnskapene våre på dette området ikke var de beste, måtte vi bruke mye tid på å sette oss inn i de forskjellige metodene, og det er ikke få timer som har gått med til lesing av bakgrunns- og tilleggslitteratur om emnet. Vi oppdaget fort at det ikke var så lett å finne god og oversiktlig informasjon om dette emnet, så vi var derfor nødt til å leite gjennom de bøkene vi kom over, og deretter trekke ut det som var relevant for vårt prosjekt. Siden spektroskopi først og fremst brukes innenfor kjemi og medisin, var det heller ikke så lett å finne anvendelser av de omtalte spektroskopiske metodene innenfor fysikk.

Et av målene våre med prosjektet var å se hvordan spektroskopi brukes i praksis, og takket være flere hjelpsomme personer fikk vi arrangert to besøk til folk som benytter seg av spektroskopi i det daglige arbeidet. Disse besøkene var noe av beste med hele prosjektet, og de gjorde at vi ble enda mer motiverte! Alt i alt har vi lært veldig mye i løpet av disse ukene som prosjektet har vart, og selv om det har vært veldig tidkrevende, har vi fått et mye større utbytte enn vi hadde trodd på forhånd!

## 10 Takk til

Jon Andreas Støvneng for all hjelp underveis i prosjektet, og for at han hjalp oss å komme i kontakt med Ole Kristian Eide.

Ole Kristian Eide for at vi fikk lov til å komme og se på laben hans og se hvordan infrarød spektroskopi fungerer i praksis.

Silje Alvestad som viste oss hvordan hun bruker NMR i sine forskningsprosjekter, og Øystein Risa som gav oss grundige og utfyllende forklaringer underveis i prosessen.

# 11 Litteraturliste

## 11.1 Bøker

1. *Particle beam microanalysis, Fundamentals, methods and applications*, E. Fuchs, H. Oppolzer og H. Rehme, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim i Tyskland, 1990
2. *Modern spectroscopy*, J. Michael Hollas, 4. utgave, John Wiley & Sons, England, 2004
3. *Infrared Spectroscopy of Molecular Clusters*, M. Havenith, Springer Verlag 2002
4. *Surface infrared and raman spectroscopy, methods and applicaton*, W. Suetaka, Plenum press, New York, 1995
5. *Modern techniques in applied molecular spectroscopy*, Francis M. Mirabella, John Wiley & Sons, Canada, 1998
6. *Vibrational spectroscopy spectroscopy, methods and application*, Alois Fadini og Frank-Michael Schnepel, Ellis Horwood Limited, England, 1989
7. *UV-VIS spectroscopy and its applications*, Perkampus, Springer Laboratory, Springer-Verlag 1992
8. *Photoelectron Spectroscopy of High Temperature Superconductors and Related Compounds*, Henrik Nylén, Lund 1998
9. *Rom Stoff Tid*, Jerstad, Sletbak, Auen Grimenes, J. W. Cappelens Forlag A.S., Oslo 2003
10. *A complete introduction to modern NMR spectroscopy*, Roger S. Macomber, John Wiley & Sons, Canada, 1998
11. *Fourier transforms in NMR, optical and mass spectroscopy, A user's handbook*, Alan G. Marshall og Francis R. Verdun, Elsevier science publishers, Nederland, 1990
12. *Practical amateur spectroscopi*, Stephen F. Tonkin, Springer Verlag, London Limited 2002
13. *General Chemistry*, Raymond Chang, 4. utgave, Mc-Graw-Hill, Boston, 2005

## 11.2 Internett

14. <http://www.geocities.com/CapeCanaveral/9454/overview.htm>
15. <http://chem.ch.huji.ac.il/~eugeniik/history/wollaston.html>
16. <http://www.cplex.net>
17. <http://www.observatoriemuseet.uio.no/Utstilling/astronomi.html>
18. <http://www-outreach.phy.cam.ac.uk/camphy/index.htm>
19. <http://www.plicht.de/chris/35fraunh.htm>
20. <http://romteknologi.no/books/38/4.html>
21. [http://nn.wikipedia.org/wiki/Elektromagnetisk\\_str%C3%A5ling](http://nn.wikipedia.org/wiki/Elektromagnetisk_str%C3%A5ling)
22. <http://romteknologi.no/books/38/3.html>
23. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/magnetic/maspec.html#c1>
24. [http://www.iu.hio.no/~hannet/organisk\\_kjemi/org\\_tekn/IR-spekt.htm](http://www.iu.hio.no/~hannet/organisk_kjemi/org_tekn/IR-spekt.htm)
25. <http://orgchem.colorado.edu/hndbksupport/irtutor/tutorial.html>
26. <http://www.kj.uib.no/ft-ir-norsk>
27. [http://www.kjemi.uio.no/09\\_spekt](http://www.kjemi.uio.no/09_spekt)

28. <http://www.answers.com/topic/raman-effect?hl=raman>
29. <http://www.kosi.com/raman/resources/tutorial/>
30. [http://www.chem.au.dk/~www/weeknotes/week\\_914.pdf](http://www.chem.au.dk/~www/weeknotes/week_914.pdf)
31. [http://www.kjemi.uio.no/09\\_spekt](http://www.kjemi.uio.no/09_spekt)
32. [http://www.nmas.no/Produkter/Analytisk\\_kjemi/UV-VIS\\_Spektroskopi/785/UV\\_VIS\\_teoripdf](http://www.nmas.no/Produkter/Analytisk_kjemi/UV-VIS_Spektroskopi/785/UV_VIS_teoripdf)
33. [http://www.kjemi.uio.no/09\\_spekt](http://www.kjemi.uio.no/09_spekt)
34. [http://www.spectroscopyeurope.com/Process\\_16\\_4.pdf](http://www.spectroscopyeurope.com/Process_16_4.pdf)
35. <http://folk.uio.no/haraldm/>
36. [http://www.kjemi.uio.no/09\\_spekt](http://www.kjemi.uio.no/09_spekt)
37. [http://www.dartmouth.edu/~soilchem/XAS\\_descript.htm](http://www.dartmouth.edu/~soilchem/XAS_descript.htm)
38. <http://www.kornsirkler.org/Sistenytt/Index.html>
39. <http://www.amptek.com/xrf.html>
40. [http://ion.eas.asu.edu/descript\\_xrf.htm](http://ion.eas.asu.edu/descript_xrf.htm)
41. [http://www.phys.ntnu.no/brukdef/undervisning/tfy4310\\_lab/ovinger/mbl\\_nmr.pdf](http://www.phys.ntnu.no/brukdef/undervisning/tfy4310_lab/ovinger/mbl_nmr.pdf)
42. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/nuclear/larmor.html>
43. [http://www.tidsskriftet.no/pls/lts/PA\\_LT.VisSeksjon?vp\\_SEKS\\_ID=16690](http://www.tidsskriftet.no/pls/lts/PA_LT.VisSeksjon?vp_SEKS_ID=16690)
44. [www.aftenposten.no/viten/article772189.ece](http://www.aftenposten.no/viten/article772189.ece)
45. [www.nvg.org/org/taf/publikas/klasnova.htm](http://www.nvg.org/org/taf/publikas/klasnova.htm)
46. [www.nvg.org/org/taf/tema/orion1.htm](http://www.nvg.org/org/taf/tema/orion1.htm)
47. [http://home.online.no/~taninfo/undervisning/fysikk/3fy/3fy\\_testoppgaver/stjerne\\_lys.html](http://home.online.no/~taninfo/undervisning/fysikk/3fy/3fy_testoppgaver/stjerne_lys.html)
48. [www.nvg.org/org/taf/tema/orion1.htm](http://www.nvg.org/org/taf/tema/orion1.htm)
49. [http://home.online.no/~taninfo/undervisning/fysikk/3fy/3fy\\_testoppgaver/stjerne\\_lys.html](http://home.online.no/~taninfo/undervisning/fysikk/3fy/3fy_testoppgaver/stjerne_lys.html)
50. [www.nvg.org/org/taf/publikas/klasnova.htm](http://www.nvg.org/org/taf/publikas/klasnova.htm)
51. [http://astrosun2.astro.cornell.edu/academics/courses/astro201/hr\\_diagram.htm](http://astrosun2.astro.cornell.edu/academics/courses/astro201/hr_diagram.htm)