

Interacció llum-matèria i efecte hibernacle



Publicacions CRECIM
Col·lecció REVIR 2016



“Interacció llum-matèria i efecte hivernacle”, seqüència didàctica per a l’estudi de l’espectroscòpia. Creada per Raquel Ríos, Cristina Simarro i Oto Lusic.

Amb la col·laboració de Roser Pintó.

Maquetació i revisió: Maria Navarro i Maria Dalmases.

Es distribueix sota una llicència Creative Commons Atribució-NoComercial-SenseDerivar 4.0 Internacional.

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Totes les imatges utilitzades són pròpies o d’ús lliure

Citar com:

Ríos, R., Simarro, C. i Lusic, O. (2016). *Interacció llum-matèria i efecte hivernacle. Seqüència didàctica per a l’estudi de l’espectroscòpia*. Barcelona: Publicacions CRECIM

El projecte REVIR és un projecte del CRECIM, amb el suport de l’Obra Social “La Caixa” i la Universitat Autònoma de Barcelona.

Indicacions per al professorat

Objectius didàctics de la seqüència

La seqüència pretén que l'alumnat de 1r i 2n de Batxillerat assoleixi una major comprensió de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria. El punt de partida és un fenomen tan conegut com és l'efecte hivernacle, que porta a plantejar la pregunta: Com es pot explicar, des d'un punt de vista químic, la diferència entre els gasos que provoquen efecte hivernacle i els que no?

La primera part consisteix en un experiment en què, fent servir uns sensors de temperatura, s'explora com varia la temperatura d'alguns gasos atmosfèrics quan són irradiats amb radiació infraroja (IR) (estudi a nivell macroscòpic).

En la segona part, es fa servir una simulació per explorar els efectes de la interacció de diferents tipus de radiació electromagnètica (microones, infraroja...) amb diverses molècules (O_2 , N_2 , CO , CO_2 , H_2O ...) i veure com canvien (o no) els seus nivells vibracionals i rotacionals (estudi a nivell microscòpic).

En la tercera part, es fa servir una aplicació informàtica per visualitzar els modes normals de vibració de diferents molècules i els seus espectres d'absorció a l'IR, de manera que l'alumnat pugui establir la relació entre l'estructura molecular i l'activitat a l'IR.

Per últim, tenint en compte tots els coneixements adquirits, l'alumnat haurà de ser capaç d'identificar tres molècules amb el seu corresponent espectre IR.

Material, muntatge experimentals i eines digitals que es fan servir

El muntatge experimental que fem servir consta de:

1. Erlenmeyer de 250 ml
2. 2 Kitasatos de 250 ml
3. Àcid clorhídric 1M
4. Hidrogen carbonat de sodi
5. Sensors de temperatura o termòmetres
6. 2 taps de suro amb forat i un sense forat
7. Llum infraroja



Amb aquest muntatge experimental, podem comprovar quin és l'efecte de la radiació infraroja sobre el CO_2 a nivell macroscòpic. Per tal de esbrinar l'efecte a nivell microscòpic utilitzarem una simulació del PHET Colorado que podeu trobar al següent [link](#). Amb aquesta simulació podem veure l'efecte a nivell microscòpic de diferents tipus de llum (microones, infraroja, visible, ultraviolada). Finalment, per tal d'observar els espectres dels diferents gasos utilitzarem la base de dades [models 360](#).

Estructura de la seqüència

La seqüència es divideix en 4 parts amb una durada aproximada de 2 hores la primera part, mitja hora la segona part, una hora la tercera part i mitja hora la quarta part:

Primera part: Exploració de l'efecte hivernacle, discussió de les idees prèvies dels estudiants i disseny d'un experiment a escala de laboratori.

1. Introducció
2. Com podem reproduir l'efecte hivernacle al laboratori?

Segona part: Exploració del fenomen a nivell microscòpic i relació entre l'efecte microscòpic i macroscòpic.

3. A nivell molecular, què els passa als gasos quan els arriba llum IR?

Tercera part: Representació gràfica de l'absorció de la llum, interpretació de la informació dels espectres i identificació de gasos d'efecte hivernacle a través del espectres.

4. Quina informació podem obtenir sobre l'absorció a l'IR?

Quarta part: Aplicació de la interacció llum-matèria a la espectroscòpia.

5. Espectroscòpia IR - Aplicacions

1. Introducció

Imagina que treballes en una empresa que, per al seu funcionament, requereix de la manipulació de tres tipus de gasos diferents (CH_4 , H_2 i Ar). Després de passar una inspecció tècnica, reps un informe on se't comunica que: "Hi ha una fuga de gasos d'efecte d'hivernacle a les vostres instal·lacions". L'objectiu d'aquesta sessió és poder respondre la pregunta següent:

Com podem predir quin d'aquests tres gasos (CH_4 , H_2 , Ar) és un gas d'efecte d'hivernacle?

Completa al teu dossier:



1.a. Explica breument què és per tu l'efecte hivernacle.

Itinerari per a resoldre el problema

- Faràs un experiment per "reproduir" a escala de laboratori l'efecte hivernacle que té lloc al nostre planeta com a conseqüència de l'augment de certs gasos d'efecte d'hivernacle. En aquest experiment estudiaràs com varia la temperatura de diferents gasos quan són irradiats amb llum IR.
- Mitjançant una simulació informàtica, exploraràs de manera qualitativa quins efectes produeix la interacció de diferents tipus de llum sobre algunes de les molècules presents a l'atmosfera.
- A partir d'una aplicació informàtica, exploraràs els moviments vibracionals de diverses molècules i ho relacionaràs amb la manera com interaccionen amb la llum. Amb tota la informació recopilada, podràs respondre la pregunta plantejada al principi de la sessió.
- Per últim, veuràs com s'obté experimentalment un espectre d'absorció a l'IR i quines aplicacions pràctiques té l'espectroscòpia.

2. Com podem reproduir l'efecte hivernacle al laboratori?

Completa al teu dossier:



2.a. L'atmosfera està constituïda, majoritàriament, per oxigen i nitrogen (21% i 78% en volum, respectivament), però també hi ha altres gasos presents, com ara vapor d'aigua, argó o diòxid de carboni. Quins d'aquests gasos creus que produeixen efecte d'hivernacle? I quins creus que no ho fan?

2.b. Pensa en un possible experiment de laboratori que et permeti estudiar com es manifesta l'efecte d'hivernacle a escala macroscòpica (per exemple, amb un gas conegut com és el CO₂).

2.1. Proposta d'experiment

Us proposem un experiment en què reproduiràs l'efecte d'hivernacle a escala de laboratori. Per fer-ho, exploraràs com varia la temperatura de dos sistemes diferents quan són irradiats amb llum IR. Un d'aquests sistemes simularà l'**atmosfera "normal"** (la que tenim a la Terra) i l'altre, una atmosfera "**contaminada**" (on hi ha una quantitat major de gas d'efecte d'hivernacle):

Sistema S1: atmosfera "control"

Sistema S2: atmosfera "contaminada"

Obtenció d'una atmosfera "control" i una de "contaminada"

L'atmosfera "control" serà la mateixa que tenim nosaltres al laboratori. En canvi, per tal d'obtenir una atmosfera "contaminada", faràs que a l'interior del recipient S2 hi tingui lloc la següent reacció química:



2.2. Passos previs abans de realitzar l'experiment

Preparació del muntatge experimental

A la figura 1 es mostra el muntatge experimental que prepararàs, on mesuraràs simultàniament la temperatura dels gasos a l'interior dels dos recipients al llarg d'un temps mentre són irradiats amb llum IR.

Recipient S1: Erlenmeyer amb aire "normal".

Recipient S2: Kitasato amb aire "contaminat".

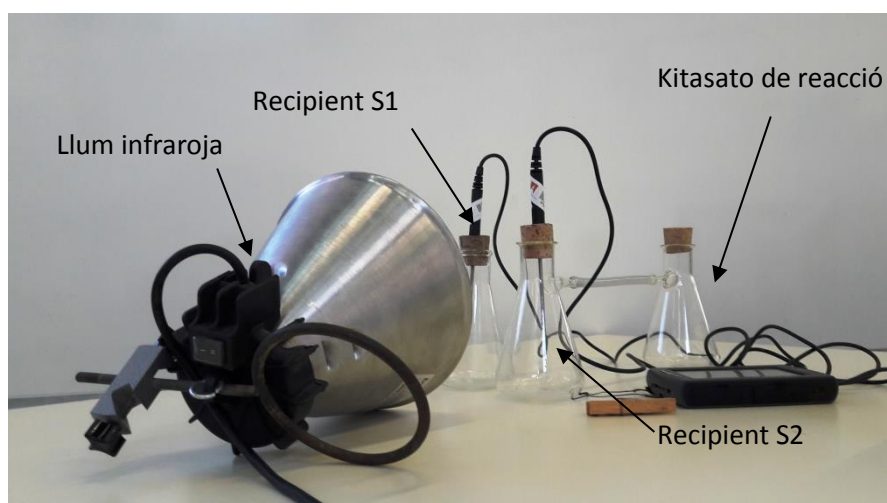


Fig.1. Esquema del muntatge experimental.

En aquest experiment ens interessa mesurar com varia la temperatura al llarg del temps en dos sistemes que tenen diferents concentracions de CO_2 i, per tant, hem de mantenir constants la resta de variables. Així doncs, per realitzar l'experiment heu de seguir els següents passos:

Preparació del muntatge experimental

- Erlenmeyer S1:** tancar amb tap de suro d'un forat (per on hi posareu un sensor de temperatura – fixar amb plastilina si és necessari).
- Kitasato de reacció:** 5,0 g de NaHCO_3 , tancar amb un tap de suro sense forat i connectar amb un tub al kitasato S2 que anirà tapat amb un tap de suro amb un forat (per on hi posareu un sensor de temperatura que es pot fixar amb plastilina si és necessari).
- Prepareu 50 ml d' HCl 1 M a la proveta.

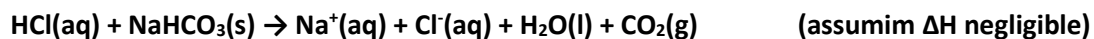
NO ABOQUEU ENCARA EL CONTINGUT DE LA PROVETA!!!

2.3. Quin efecte té la llum IR sobre la temperatura dels gasos atmosfèrics?

Completa al teu dossier:



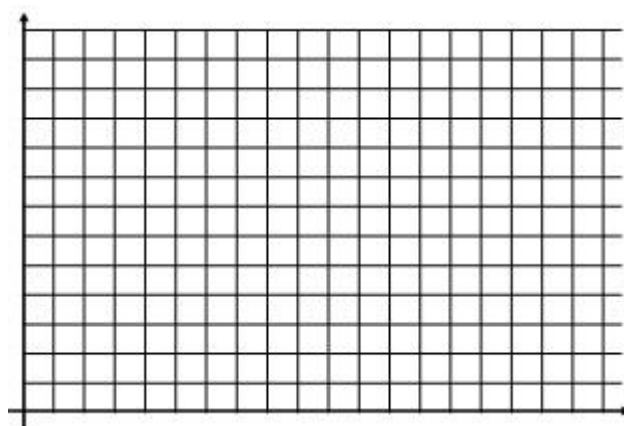
2.c. Tenint en compte que la reacció química que es produeix entre HCl i NaHCO₃ és:



Quina serà la principal diferència en la composició i en la concentració dels gasos dels dos sistemes?

2.d. A l'hora de fer el muntatge experimental, quins aspectes haureu de controlar per assegurar-vos que les variacions de temperatura en els dos sistemes són degudes únicament a la diferent concentració de gasos?

2.e. Abans de fer l'experiment, dibuixa com creus que evolucionarà la temperatura de cada recipient al llarg del temps (durant uns 10 minuts). Raona els gràfics que has dibuixat.



2.4. Mesura de la temperatura dels gasos atmosfèrics per efecte de la radiació IR



Recordeu les instruccions per realitzar l'enregistrament de dades.

Ara ja esteu a punt per realitzar l'experiment!

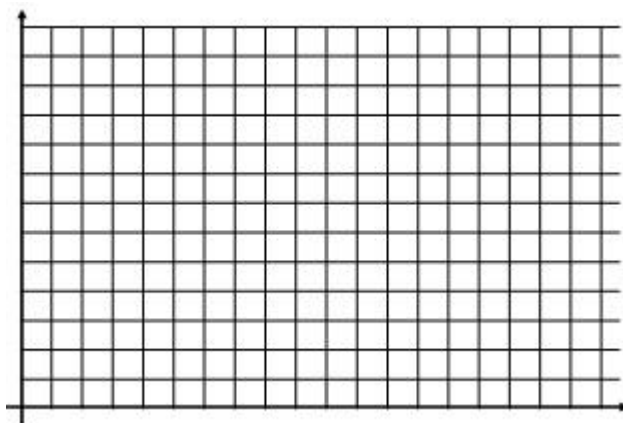
En aquest experiment prendrem una dada cada segon durant 10 minuts (600 dades)

- Aboqueu la proveta amb els 50 ml d'àcid clorhídric al kitasato de reacció. És important tornar a posar el tap de seguida ja que si no el CO_2 surt. Espereu que es difongui el CO_2 pels dos kitasatos.
- Un cop la reacció estigui finalitzada, mitjançant una pinça, tanqueu el tub que uneix els kitasatos.
- Col·loqueu el Kitasato i l'erlenmeyer davant el llum, enceneu-lo i inicieu l'enregistrament de dades.
- Un cop hagueu finalitzat l'experiment caldrà que recolliu i netegeu tot el material que heu utilitzat en l'experiència.

Completa al teu dossier:



2.f. Dibuixa a sota els gràfics obtinguts per cada recipient.



2.g. Quines diferències o semblances trobes entre les gràfiques obtingudes i les teves prediccions?

Semblances	Diferències

2.h. Segons el que has observat què vol dir doncs, que el CO₂ és un gas d'efecte d'hivernacle?

3. A nivell molecular, què els passa als gasos quan els arriba llum IR?

Per tal d'abordar aquesta pregunta és important que tinguem en compte què són els gasos i què és la llum IR:

Llum infraroja: Regió de l'espectre electromagnètic que comprèn l'interval que va des de la llum visible fins a la radiació microones.

Gas: estat de la matèria en què les molècules que el componen resten poc lligades entre elles per les forces de cohesió i sempre omple totalment i uniformement el recipient que el conté.

Què diu la ciència?

La llum IR és un tipus de radiació electromagnètica, més energètica que la microones i les ones de ràdio, però menys que la visible, la ultraviolada, els raigs X i els raigs gamma. El fet que els diferents tipus de radiació siguin més o menys energètics fa que, quan interaccionen amb la matèria, puguin produir diferents efectes (penseu, per exemple, en les ones de ràdio, en les microones o bé en els raigs X).

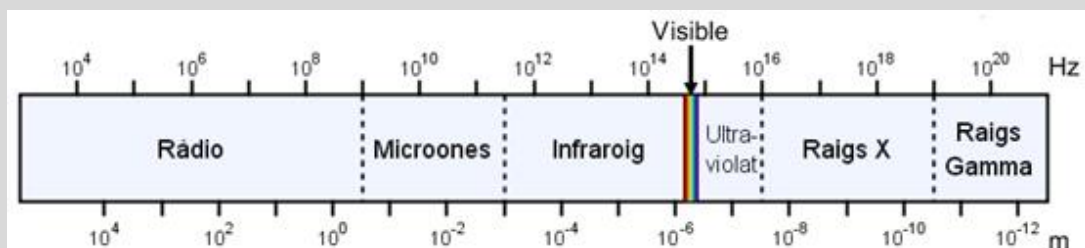
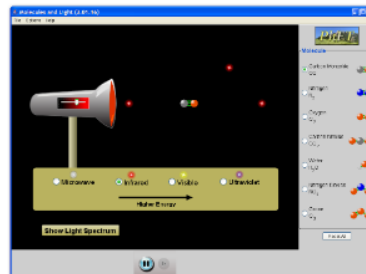


Fig.2. Esquema de l'espectre electromagnètic.

3.1. Com els afecta a les molècules l'absorció de llum IR?

A continuació, farem servir el programa de simulació “**Molècules i llum**” per explorar, de forma qualitativa, què els passa a algunes de les molècules que es troben presents a la nostra atmosfera quan són irradiades amb diferents tipus de llum.

Per començar la simulació premeu damunt la següent imatge, descarregueu l'arxiu i obriu-lo.



Podeu triar entre les **diferents molècules** al menú de la dreta, i entre els **diferents tipus de llum** al menú horitzontal. A la làmpada trobareu un lliscador amb el qual podreu **regular la intensitat de la radiació**.

A partir dels resultats que observeu, responeu les preguntes que es plantegen a continuació:

Completa al teu dossier:



3.a. Descriu breument quin és l'efecte que produeixen els següents tipus de llum sobre les molècules amb les què interaccionen:

MICROONES:

VISIBLE:

ULTRAVIOLADA:

3.b. Quan feu incidir llum IR (que és la que està relacionada amb l'efecte d'hivernacle) amb totes les molècules disponibles, quin és el comportament que s'observa? Anota-ho a la taula.

Molècula	Observacions
Monòxid de carboni CO	
Nitrogen N₂	
Oxigen O₂	
Diòxid de carboni CO₂	
Aigua H₂O	
Diòxid de nitrogen NO₂	
Ozó O₃	

3.c. Segons el que has observat a la simulació, quina relació creus que hi ha entre el comportament macroscòpic (augment de temperatura) i el que té lloc a nivell molecular?

3.2. Algunes consideracions sobre les molècules

Què diu la ciència?

L'estat energètic d'una molècula ve definit per la seva configuració electrònica i pels seus moviments de rotació i de vibració. De manera similar a com passa en els àtoms (que tenen estats energètics "discrets" per a les diferents configuracions electròniques), les energies associades a la configuració electrònica d'una molècula i als seus moviments de rotació i de vibració no poden tenir qualsevol valor sinó que estan **QUANTITZADES**.

Les transicions entre aquests "estats energètics" van acompanyades o bé d'absorció d'energia o bé d'emissió d'energia.

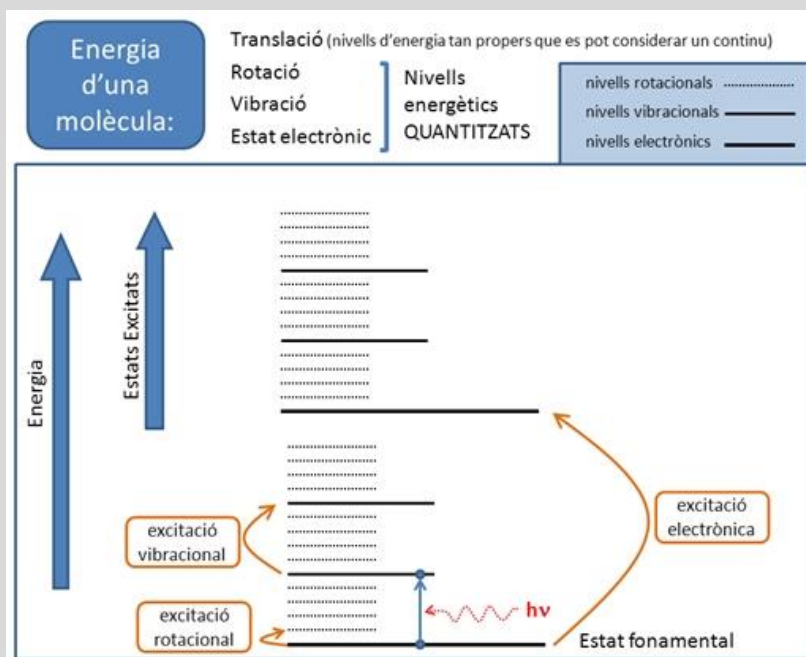


Fig. 3. Esquema dels estats energètics electrònics, rotacionals i vibracionals d'una molècula.

4. Quina informació podem obtenir sobre l'absorció a l'IR?

Arribats a aquest punt, heu pogut veure que l'absorció de llum IR es manifesta tant a escala macroscòpica com a escala molecular i que existeix una relació entre aquests dos efectes:

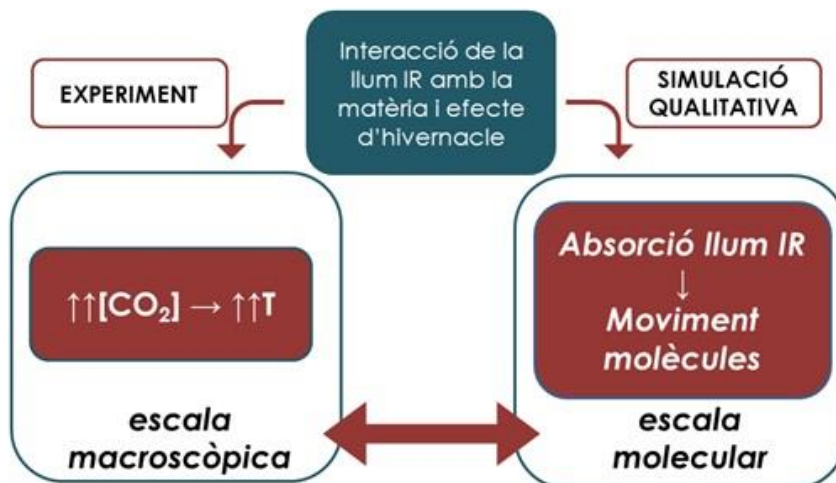


Fig. 4. Resum de la relació entre els efectes macroscòpic i molecular de la interacció entre la llum IR i la matèria.

A continuació, estudiarem amb més detall el fenomen de l'absorció de llum IR per intentar respondre la nostra pregunta inicial:

Com podem predir quin d'aquests tres gasos (CH_4 , H_2 , Ar) és un gas d'efecte d'hivernacle?

4.1. Espectres d'absorció experimentals

A nivell experimental, podem saber si un compost absorbeix radiació IR utilitzant un instrument anomenat **espectrofotòmetre** (i que es representa esquemàticament a la **figura 5**).

Quan fem incidir llum IR en una mostra (en estat líquid, sòlid o gas), pot ser que aquesta absorbeixi radiació de determinades freqüències. La llum que no és absorbida per la mostra es transmet fins que arriba a un detector que en mesura la intensitat.

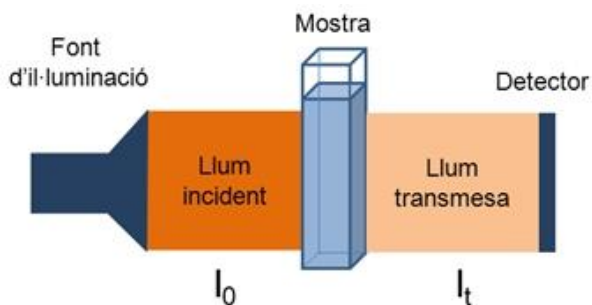


Fig. 5. Esquema d'un espectrofotòmetre d'IR.

Què diu la ciència?

La raó entre la intensitat de la llum transmesa, I_t , i la de la llum incident, I_0 , ens dóna la transmissió, T :

$$T = I_t / I_0$$

Pel que fa al paràmetre que ens indica els espectres d'absorció IR, no s'acostuma a fer servir la freqüència, n (que té unitats de Hertz o s^{-1}), sinó el nombre d'ona, $1/l$, (que té unitats de cm^{-1}), ja que totes dues magnituds són directament proporcionals:

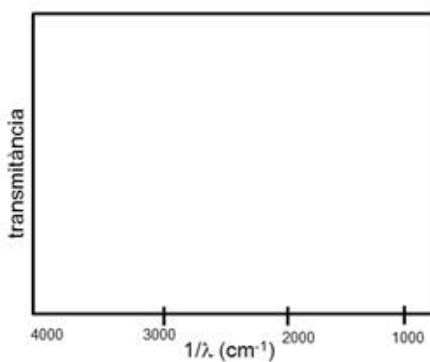
$$c = l \cdot n \rightarrow 1/l = n/c$$

Completa al teu dossier:

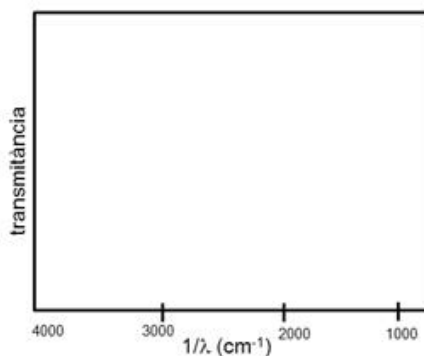


4.a. Per a una mostra que no absorbeix gens de radiació IR, quina seria la transmissió a una determinada freqüència de llum? I per a una mostra que absorbeix tota la llum incident? Quins són, doncs, els valors límit de la transmissió?

4.b. Dibuixa quin seria l'espectre d'absorció per a una mostra que no absorbeixi llum IR de cap freqüència.



4.c. Imagina que una mostra absorbeix llum a una freqüència de **2000 cm^{-1}** . Dibuixa, de manera qualitativa, quin creus que seria l'espectre que obtindríem en aquest cas.



4.d. De les molècules que hem vist a la taula de la pregunta 3b (secció 3.1), quines diries que presenten algun pic (o banda) en el seu espectre d'absorció?

4.2. Espectres d'absorció teòrics

A banda de poder enregistrar l'espectre IR d'una substància, també és possible predir-lo des d'un punt de vista teòric mitjançant una sèrie de càlculs. A continuació, fareu servir l'aplicació [Models360](#) (premeu al nom per obrir l'aplicació) per explorar els **espectres d'absorció IR teòrics** d'algunes molècules que es troben formant part dels gasos majoritaris a l'atmosfera: oxigen (O_2), nitrogen (N_2), diòxid de carboni (CO_2) i vapor d'aigua (H_2O).

Trobareu les instruccions per utilitzar aquesta simulació en el següent enllaç:

Completa al teu dossier:



4.e. Utilitzant l'aplicació Models360, completa la taula següent amb les dades que es demanen:

MOLÈCULA	Espereu trobar algun pic a l'espectre IR	Té algun pic d'absorció associat a l'espectre IR?	Vibra en les freqüències d'absorció?
O_2			
N_2			
H_2O			
CO_2			

4.f. A partir dels espectres teòrics, justifica quines de les molècules de la taula **NO** corresponen a gasos d'efecte d'hivernacle.

4.3. Resposta a la nostra pregunta inicial

Completa al teu dossier:



4.g. Fins ara ens hem centrat en alguns dels gasos que hi ha a l'atmosfera, però aquests no són els únics, sinó que n'hi ha d'altres com el metà, l'argó o l'hidrogen. A partir del que ja saps, omple la taula següent i respon la pregunta inicial:

- Com podem predir si un gas produirà efecte d'hivernacle?

Gas	Pot ser un gas d'efecte d'hivernacle?	Justificació
CH ₄		
H ₂		
Ar		

4.h. Amb el que has treballat i après durant la sessió intenta tornar a explicar què és l'efecte hivernacle.

5. Espectroscòpia IR - Aplicacions

Ja heu pogut respondre la pregunta que ens plantejàvem al començament de la sessió i, a més, heu après que existeix una relació entre l'estructura de les molècules i el fet que absorbeixin llum IR (o no).



Això té una important aplicació pràctica, ja que les posicions on apareixen les bandes a l'espectre d'absorció ens donen informació sobre l'estructura química de les molècules. Com que cada molècula té el seu espectre d'absorció característic (igual com cada persona té la seva empremta dactilar), podem emprar aquest fenomen per identificar compostos, mitjançant una tècnica anomenada **espectroscòpia IR**.

Generalment, les bandes situades a la zona de l'espectre electromagnètic IR entre 4000 i 1300 cm^{-1} són les que ens donen més informació, i estan provocades per vibracions entre únicament dos àtoms de la molècula.

A la **taula 1** es presenten les freqüències d'absorció típiques d'alguns grups funcionals, que ens poden ajudar a identificar els compostos presents en una mostra:

Freqüència d'absorció(cm^{-1})	Tipus de vibració		Freqüència d'absorció(cm^{-1})	Tipus de vibració	
3000 – 2850	C-H	Alcà (tensió)	1680 – 1600	C=C	Alquè
3100 – 3000		Alquè (tensió)	1600 i 1475		Aromàtic
1450 i 1375		-CH ₃ - (flexió)	1740 – 1720		Aldehid
1465		-CH ₂ - (flexió)	1725 – 1705		Cetona
3600 – 3200 (ampla)	O-H	Alcohol	1725 – 1700		Àcid carboxílic
1260 – 1000	C-O	Alcohol (tensió)	1750 – 1730		Èster
3500 – 3200	N-H	Amina (tensió)	1670 – 1640	Amida	
1640 – 1500		Amina (flexió)	1350 – 1100	C-N	Amina

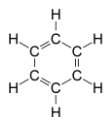
Taula 1. Freqüències vibracionals característiques de certs grups funcionals que ens permeten identificar els espectres amb les tres molècules problema (benzè, etilendiamina i metanol).

Completa al teu dossier:

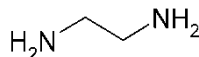


5.a. A partir d'aquestes dades, identifica les següents molècules amb els seus espectres corresponents i completa la taula 5.

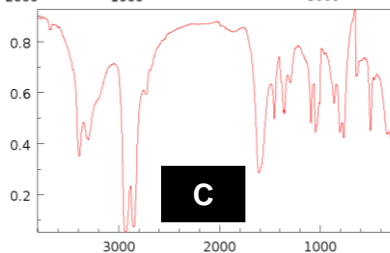
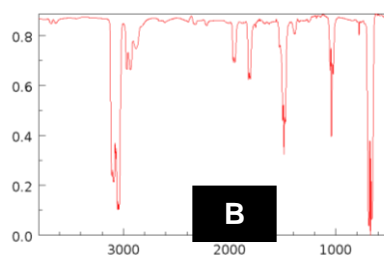
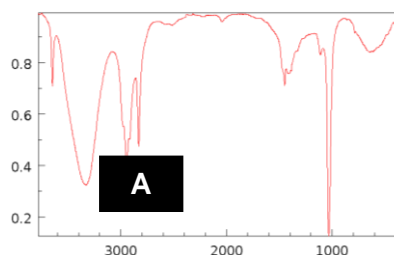
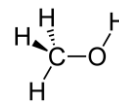
Benzè (C₆H₆)



Etilendiamina (H₂NCH₂CH₂NH₂)



Metanol (CH₃OH)



Espectre A

Bandes a l'espectre	Tipus de vibració	Molècula corresponent
3600 – 3200		
3000 – 2800		
1400 – 1300		
1200 – 1000		

Espectre B

Bandes a l'espectre	Tipus de vibració	Molècula corresponent
3200 – 3000		
1600 – 1400		

Espectre C

Bandes a l'espectre	Tipus de vibració	Molècula corresponent
3500 – 3200		
3000 – 2800		
1600 – 1500		

Revir 