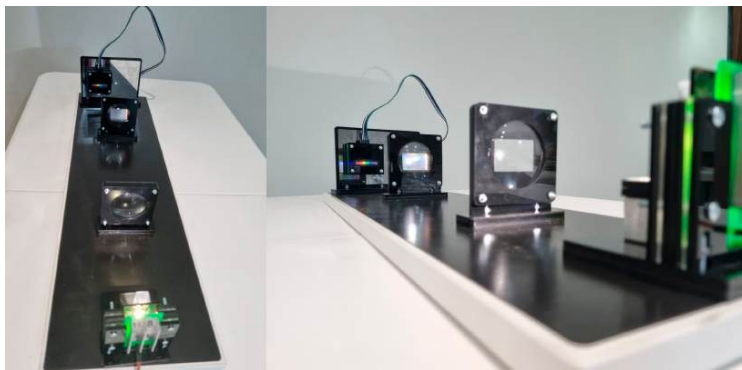
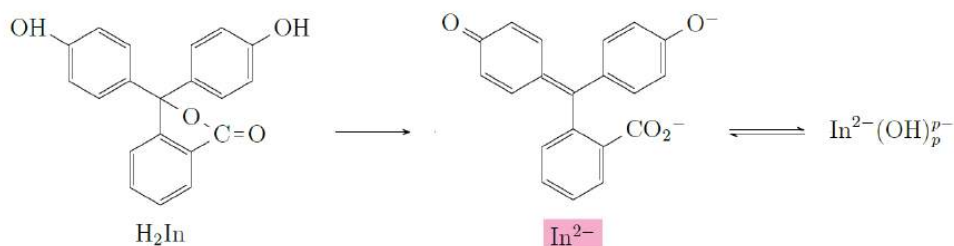


E1. 흡수 분광법과 화학 반응 속도론 — 풀이

A1. 보정을 위해 광원이 첫 번째 렌즈의 초점에, 스크린이 두 번째 렌즈의 초점에 오도록 렌즈를 설치해야 한다. 최종 장치의 사진을 아래 그림에 제시한다.



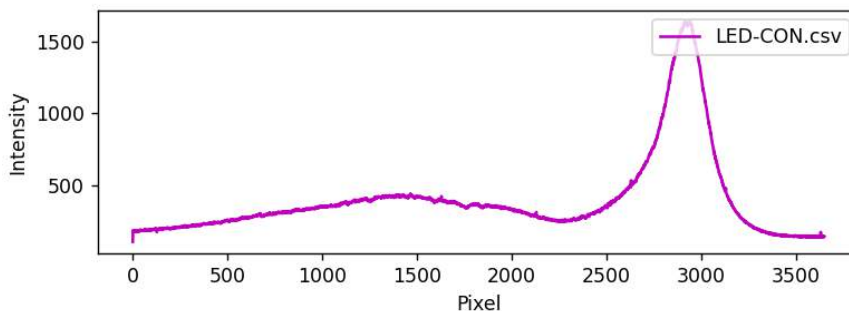
장치를 조정한 후 LED-CON의 스펙트럼을 연구할 수 있게 된다. 두 개의 1차 회절 무늬는 거울 대칭이므로 둘 중 어느 것을 사용해도 무방하다. LED-CON 스펙트럼의 전형적인 영상을 아래 그림에 제시한다. LED-CON 스펙트럼의 가장자리에서 세기가 0이 아닌 것은 외부 광원으로부터의 배경 조명이 있기 때문이다. 올림피아드 조건에서 배경 조명은 최대 1000까지 도달할 수 있었다. 이를 크게 줄이려면 과제에서 제안한 “햇빛 가리개 (Sun Screen)”를 사용할 수 있다.



LED-CON 스펙트럼의 전형적인 영상.

A2. LED-CON을 끈 후 배경 조명의 스펙트럼을 얻을 수 있다. 그 형태는 실험 조건에 따라 다르며 각 장치마다 고유하므로 여기에 제시하지 않는다.

A3. LED-CON을 LED-RGB로 교체하고 빨강, 파랑, 초록 세 색 LED 모두에 대해 스펙트럼을 측정한다. 특징적인 그래프를 아래 그림에 제시한다.



LED-RGB 세 색의 스펙트럼.

A4. 문제에서 언급했듯이 파장은 픽셀 번호에 선형으로 의존한다:

$$\lambda = k_0 N + \lambda_0$$

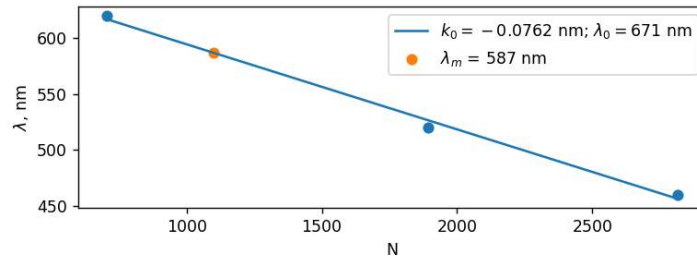
각 색의 최대 세기 값에 대응하는 픽셀 번호와 그 색의 파장을 취하면 세 점을 얻는다. 이 세 점에 대한 근사 직선을 그리면 k_0 과 λ_0 의 값을 얻는다.

비고:

1. k_0 의 값은 조립된 장치에 따라 양수일 수도 음수일 수도 있다.
2. 어떤 요소든 밀리미터 정도의 거리만큼 이동시키면 계수 k_0 과 λ_0 이 크게 바뀔 수 있다. 따라서 이동이 있으면 새 보정을 수행해야 한다.

$$k_0 = -0.0752 \text{ nm}, \quad \lambda_0 = 671 \text{ nm}$$

A5. 앞 단락의 식을 이용하면 미지의 LED-UNK 의 최대 세기 픽셀 번호에 대응하는 파장을 얻을 수 있다.



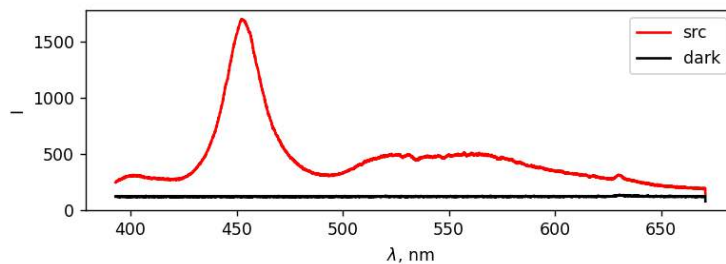
파장 λ 의 픽셀 번호 N 에 대한 선형 의존성 (보정 직선) 과 LED-UNK.

$$\lambda_{\text{max,UNK}} = 587 \text{ nm}$$

B1. IC 유체 방울의 평균 부피 $V_{d,IC}$ 를 구하려면, 주사기에서 유체를 한 방울씩 천천히 짜내면서 주사기 내부의 평균 부피 변화를 조사하면 된다. 유체 0.5 ml 당 약 100 방울이며, 이 값은 주사기마다 크게 다르다. 방울이 바늘 끝에 매달리는 현상은 표면 장력 효과와 관련되며, 그 발현은 바늘 끝의 기하학적 형태에 크게 의존한다.

$$V_{d,IC} = 5 \mu\text{l}$$

B2. 대부분의 경우 최적의 측정 매개변수는 “src” 스펙트럼이 “overflow” 를 넘지 않는 한도에서 LED-CON 의 가장 높은 전압과 가장 낮은 “Sensitivity” 이다. 물이 든 큐벳을 통과한 LED-CON 빛의 스펙트럼을 아래 그림에 제시한다.



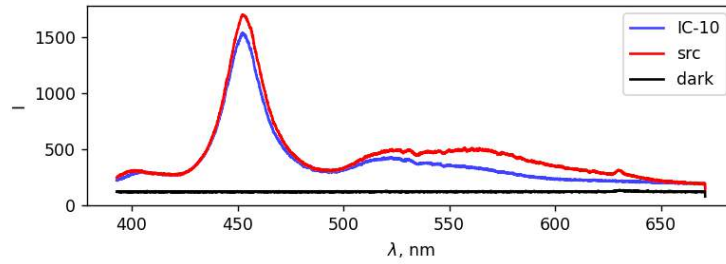
물을 통과한 LED-CON 스펙트럼 (“src” 와 “dark”).

B3. 각 파장 λ 에서 광원의 세기는 같은 파장에서 “src” 와 “dark” 세기의 차와 같다. 배경 조명을 제거한 광원 세기의 그래프를 그리면 $\beta(\lambda)$ 의존성을 연구할 수 있는 파장 범위를 어렵지 않게 얻을 수 있다.

$$\lambda \in [420 \text{ nm}; 640 \text{ nm}]$$

B4. 처음 유체의 방울을 물에 추가하면 광학 큐벳 내 IC 의 농도가 변하며, 이를 통해 유체를 통과한 빛의 세기 스펙트럼이 농도 n 에 어떻게 의존하는지 연구할 수 있다. 과제에서 언급했듯이 방울을 추가한 후에는 유체를 섞어야 한다. 가장 쉬운 방법은 뚜껑을 닫고 큐벳을 흔드는 것이다. 기포가 있으면 큐벳 벽을 손가락으로 두드려 제거할 수 있다.

얻은 스펙트럼에서 빨강 영역의 유의미한 흡수가 관찰되는데, 이는 IC 의 파란색을 설명한다.



IC 스펙트럼의 전형적인 형태 (“src” 와 “dark” 포함).

B5. 두께 dl , 단면적 S 인 물질층을 생각하자. 이 층은 $dN = nS dl$ 개의 분자를 포함한다. 기술된 흡수 메커니즘의 관점에서 각 분자는 넓이 $\sigma(\lambda)$ 의 흡수 원이므로, 이들은 전체적으로 흡수 면적 $\sigma(\lambda) dN$ 을 이룬다. 넓이 S 로 들어가는 빛의 전체 출력은 $P_\lambda = I_\lambda S$ 이다. 기술된 층을 통과한 후 빔 출력의 상대적 감소는 흡수 면적과 넓이 S 의 비와 같다:

$$\frac{dP_\lambda}{P_\lambda} = \frac{dI_\lambda}{I_\lambda} = \frac{\sigma(\lambda) dN}{S} = \sigma(\lambda) n dl.$$

$$dI_\lambda = I_\lambda \sigma(\lambda) n dl$$

B6. 표현

$$\frac{dI_\lambda}{I_\lambda} = \sigma(\lambda) n dl$$

을 적절한 한계에서 적분하면

$$\int_{I_{0,\lambda}}^{I_\lambda} \frac{dI_\lambda}{I_\lambda} = - \int_0^l n \sigma(\lambda) dl,$$

여기서 우변의 음의 부호는 dI_λ 가 빛 세기의 감소라는 사실에 대응하며, 따라서

$$\ln \frac{I_\lambda}{I_{0,\lambda}} = -n\sigma(\lambda)l \Rightarrow \sigma(\lambda) = -\frac{1}{nl} \ln \frac{I_\lambda}{I_{0,\lambda}}.$$

$$\sigma(\lambda) = -\frac{1}{nl} \ln \frac{I_\lambda}{I_{0,\lambda}}$$

B7. B6 에서 얻은 식을 이용하여 $\sigma(\lambda)$ 를 측정된 세기로 나타낸다:

$$\sigma(\lambda) = -\frac{1}{nL} \ln \left(\frac{I_{IC}(\lambda) - I_{dark}(\lambda)}{I_{src}(\lambda) - I_{dark}(\lambda)} \right),$$

여기서 n 은 광학 큐벳 안 유체 내 IC 의 농도이고, L 은 광학 셀의 안쪽 폭이다.

농도 n 이 추가된 방울 수 m 에 어떻게 의존하는지 구한다. 처음 용액에서 IC 의 질량 농도는 $\rho = 0.70 \text{ g/l}$ 이다. 처음 유체에서 인디고 카민 분자의 농도 n_0 (차원 m^{-3}) 을 구하자:

$$n_0 = \frac{N}{V} = \frac{\nu N_A}{m/\rho} = \frac{\nu N_A \rho}{m} = \frac{N_A \rho}{\mu_{\text{IC}}},$$

여기서 N 은 주어진 유체의 부피 V 안 IC 분자 수, N_A 는 아보가드로 상수, μ_{IC} 는 인디고 카민의 물질량이다. 그러면 인디고 카민 m 방울 안의 분자 수 N_m 은

$$N_m = n_0 \cdot m V_{d,\text{IC}}.$$

따라서 광학 큐벳 안에서 얻어진 유체 내 인디고 카민의 농도는 (유체 부피의 변화 $V_0 = 3.0 \text{ ml}$ 는 무시 가능)

$$n = \frac{N_m}{V_0} = \frac{N_A \rho V_{d,\text{IC}}}{V_0} \cdot m.$$

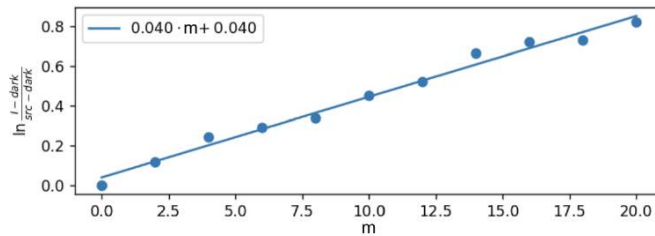
이 농도를 $\sigma(\lambda)$ 의 식에 대입하면

$$\sigma(\lambda) = -\frac{\mu_{\text{IC}}}{L N_A \rho V_{d,\text{IC}}} \cdot \frac{1}{m} \ln \left(\frac{I_{\text{IC}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}{I_{\text{src}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)} \right).$$

최종적으로 인디고 카민 방울 수에 대한 복사 세기의 선형화된 의존성은 다음과 같다:

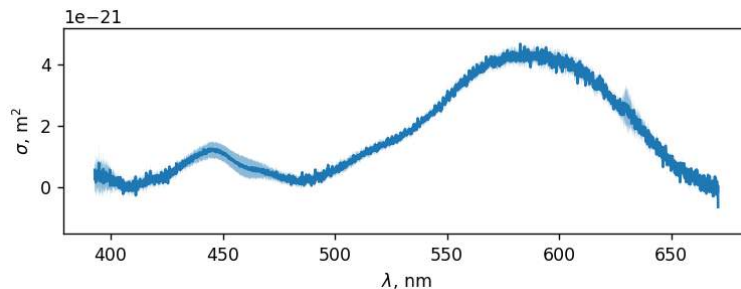
$$\ln \left(\frac{I_{\text{src}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}{I_{\text{IC}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)} \right) = \sigma(\lambda) \cdot \frac{L N_A \rho V_{d,\text{IC}}}{\mu_{\text{IC}}} \cdot m.$$

이제 받은 데이터를 처리하면 된다. 이를 위해 특정 파장을 골라 서로 다른 방울 수 m 에 대해 값 $Y_1 = \ln \left(\frac{I_{\text{src}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}{I_{\text{IC}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)} \right)$ 을 계산한다. 그런 다음 Y_1 의 m 에 대한 의존성을 작도하고 기울기 계수 κ 인 선형 회귀로 근사한다.



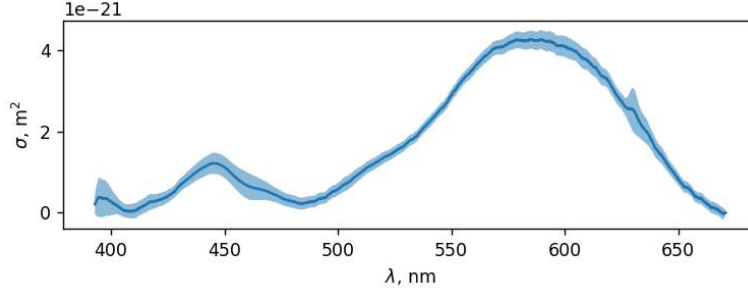
고정된 파장에서 Y_1 의 방울 수 m 에 대한 선형 의존성.

앞 식에 의해 $\kappa(\lambda) = \frac{L N_A \rho V_{d,\text{IC}}}{\mu_{\text{IC}}} \sigma(\lambda)$ 이다. B3 에서 찾은 범위의 10 가지 서로 다른 파장에 대해 이 절차를 반복하면 10 개의 서로 다른 선형 회귀를 얻으며, 그 기울기 계수를 이용해 $\sigma(\lambda)$ 의 값을 계산할 수 있다. 일반적으로 10 개의 값에 한정되지 않고 각 픽셀과 그에 대응하는 파장에 대해 $\sigma(\lambda)$ 의 값을 얻을 수 있다. 기술된 절차에 따라 계산된 모든 점에 대한 $\sigma(\lambda)$ 그래프를 아래 그림에 제시한다. 색칠된 영역의 폭은 $Y_1(m)$ 의 선형 근사의 통계적 오차이다.



모든 점에 대한 흡수 단면적 $\sigma(\lambda)$.

B8. 얻은 그래프는 최종 흡수 단면적 스펙트럼 $\sigma(\lambda)$ 의 형태를 더 잘 반영하도록 평활화해야 한다.



평활화된 흡수 단면적 $\sigma(\lambda)$.

최대 흡수 단면적의 전형적인 값은 $\sigma \sim 5 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2$ 이다. 흡수 최댓값에 대응하는 파장은 위 그래프로부터 찾을 수 있다.

$$\lambda_{\text{max,IC}} = 590 \text{ nm}$$

C1. 몰농도 $c_0 = 0.30 \text{ mol/l}$ 인 NaOH 용액을 고려하자. 유체에는 두 종류의 이온이 있다.

이온	i	Z_i	n_i
Na^+	1	1	$N_A c_0$
OH^-	2	-1	$N_A c_0$

$$J_0 = 1.8 \cdot 10^{26} \text{ m}^{-3}$$

C2. 유체 내 모든 이온의 전하수 절댓값이 1 이고, 각 종류 이온의 농도가 해당 용해 물질의 농도와 일치하므로 다음과 같이 쓸 수 있다:

$$J_0 = \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \frac{2c_1 V_{\text{NaOH}} N_A}{V_{\text{NaOH}} + V_{\text{NaCl}} + V_w} + \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \frac{c_1 V_{\text{NaCl}} N_A}{V_{\text{NaOH}} + V_{\text{NaCl}} + V_w} = N_A \cdot c_0.$$

이 식을 간단히 하면 추가해야 할 증류수의 부피를 얻는다:

$$V_w = \frac{2c_1 V_{\text{NaOH}} + c_1 V_{\text{NaCl}}}{c_0} - V_{\text{NaOH}} - V_{\text{NaCl}}$$

C3. NaCl 과 NaOH 의 농도가 모두 c_0 인 유체를 생각하면 C2 에서 얻은 관계는 다음과 같이 된다:

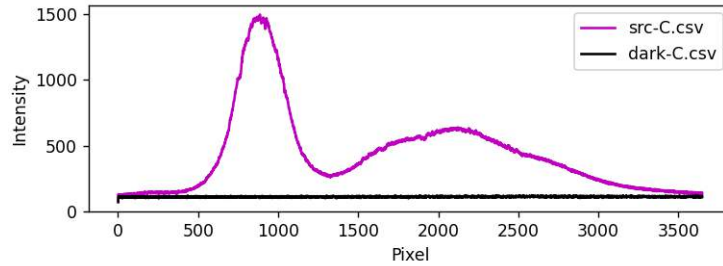
$$V_w = \frac{c_0 V_{\text{NaOH}} + c_0 V_{\text{NaCl}}}{c_0} - V_{\text{NaOH}} - V_{\text{NaCl}} = 0.$$

이 식으로부터 추가해야 할 증류수의 부피는 0 이어야 하고, 혼합물에서 NaCl 과 NaOH 의 부피 비는 임의일 수 있음을 결론지을 수 있다.

$$V_w = 0, \quad V_{\text{NaCl}}, V_{\text{NaOH}} \text{ 는 임의}$$

C4. 큐벳 재질의 흡수와 모든 종류의 반사를 고려하기 위해 큐벳을 통과한 LED-CON 빛의 스펙트럼을 얻는다. 스펙트럼이 “Overflow” 수준을 넘지 않고 그에 접근해도 특징적 형태가 변하지 않도록 감도를 설정한다. 같은 감도에서 배경 조명의 스펙트럼을 측정한다. 배경 신호의 세기는 앞 단락들에서 얻은 것과 다를 수 있다.

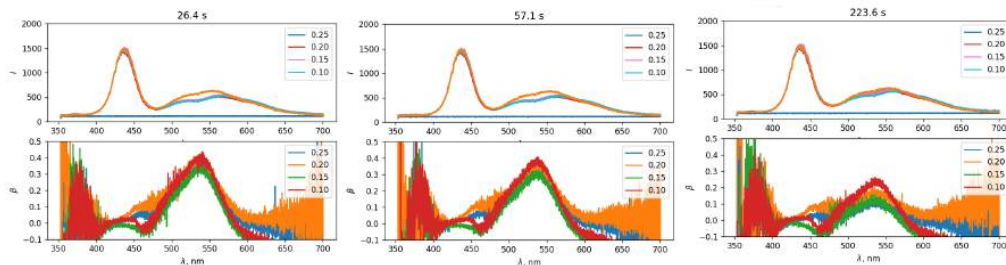
NaOH 및 NaCl 용액의 혼합물이 든 큐벳을 통과하면 광원의 빛은 세기를 잃지만 그 스펙트럼은 전형적 형태를 유지한다: 스펙트럼의 파랑 부분에 좁고 높은 봉우리, 초록-빨강 부분에 낮고 넓은 봉우리.



큐벳을 통과한 LED-CON 스펙트럼 (“src-C” 와 “dark-C”).

C5. 과제에서 요구한 대로 $(\text{OH})^-$ 이온 농도가 서로 다른 5 개 유체에 대해 시간에 따른 투과 스펙트럼의 의존성을 측정한다. 각 의존성 측정 전에 배경 조명의 세기를 측정한다. 실험 시간은 NaOH 농도에 의존하며, 농도가 감소함에 따라 증가한다.

이 파트에서 얻은 스펙트럼의 형태가 C4 에서 얻은 복사원 스펙트럼과 다른 것은 큐벳 안 유체에 흡수가 존재하기 때문이다. 흡수로 인해 파장 범위 500–600 nm 에서 투과광 세기가 크게 감소한다. 시간이 지남에 따라 페놀프탈레인 In 의 농도 감소로 인해 흡수가 감소하며, 농도가 평형 상태에 도달할 때까지 계속된다. $(\text{OH})^-$ 의 초기 농도가 클수록 평형 상태에 더 빨리 도달한다.



서로 다른 농도에 대한 시간에 따른 투과 스펙트럼.

C6. 최대 흡수가 도달되는 파장을 찾으려면 $\beta(\lambda)$ 를 그려야 한다. 작도에 사용할 데이터를 선택하자. 가장 낮은 농도의 NaOH 용액을 사용한 실험에서 얻은 스펙트럼 배열을 사용한다. 이렇게 선택하는 이유는 $(\text{OH})^-$ 이온의 농도가 항상 페놀프탈레인 농도에 비해 과량이지만, 그 과정이 순수한 NaOH 용액에서보다 훨씬 느리게 일어나기 때문이다. 이는 시간을 더 많이 주어, 반응 시작 후 흡수가 상당량 감소하기 전에 흡수를 측정할 수 있게 한다. 이 용액의 스펙트럼이 측정된 모든 시점 중, 평형 상태에 아직 도달하지 않아 흡수가 감소하지 않은 초기에 가까운 것을 선택하자.

이 데이터에 대해 배경 조명 정보를 이용하여 β 값을 계산한다:

$$\beta(\lambda) = \ln \frac{I_{\text{src}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}{I_{\text{In}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}.$$

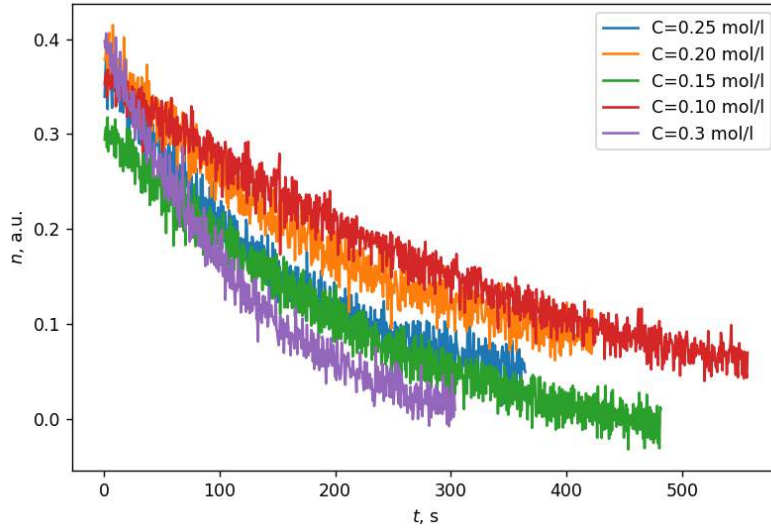
$\beta(\lambda)$ 의 의존성을 그린다. 그래프에 기반하여 $\lambda_{\text{max,In}}$ 에 대한 답을 얻는다.

$$\lambda_{\text{max,In}} = 550 \text{ nm}$$

C7. C6 에서 측정한 값 $\beta(\lambda)$ 는 $\sigma(\lambda)$ 와 농도 n 으로 나타낼 수 있다:

$$\beta(\lambda) = \sigma(\lambda)n.$$

고정된 파장에서 $\sigma(\lambda) = \text{const}$ 이므로 $n \propto \beta$ 이다. 임의의 단위로 In 의 농도를 계산할 수 있으므로, n 에 정비례하는 $\beta(\lambda)$ 를 이 임의의 단위로 사용한다. 파장 $\lambda_{\text{max,In}}$ 에 대해 연구를 수행하자. 5 개의 $(\text{OH})^-$ 이온 농도 각각에 대해 파장 $\lambda_{\text{max,In}}$ 에서 의존성 $\beta(t)$ 를 계산하고 그 그래프를 그린다. 얻은 그래프는 다음 형태이다: 포화에 도달하는 감소 의존성이며, $(\text{OH})^-$ 이온의 농도가 클수록 감소 속도가 빠르다.



서로 다른 $(\text{OH})^-$ 농도에 대한 In^{2-} 농도 n 의 시간 의존성.

C8. 농도의 함수로서 반응 속도를 연구하려면 농도의 시간 도함수를 구해야 하는데, 그 대신 β 의 시간 도함수를 사용한다 (상수 곱의 정확도로 서로 같으므로). 도함수의 수치 계산은 CCD 어레이 신호의 큰 잡음으로 인해 복잡하다. 다음과 같이 도함수를 계산하여 잡음 효과를 줄일 것을 제안한다:

$$\left. \frac{d\beta}{dt} \right|_N = \frac{\beta_{N+10} - \beta_{N-10}}{t_{N+10} - t_{N-10}}.$$

각 농도에 대해 도함수 $\frac{d\beta}{dt}$ 를 계산하고 각 실험에 대해 $r(n)$ 의존성을 임의의 단위로 (즉 $\frac{d\beta}{dt}(\beta)$) 그린다.

화학 반응의 속도론을 이론적으로 기술하자.

$$r = -\frac{dn_{\text{In}^{2-}}}{dt} = r_{\text{com}} - r_{\text{decom}}.$$

과제에서 언급했듯이 $r_{\text{com}} = \chi(n_{\text{In}^{2-}})(n_{(\text{OH})^-})^p$, $r_{\text{decom}} = \psi(n_{\text{In}^{2-}}(n_{(\text{OH})^-})^p)$ 이며, 여기서 χ 와 ψ 는 상수이다. 모든 상태의 페놀프탈레인 분자의 총수는 변하지 않으므로

$$n_{\text{In}^{2-}} + n_{\text{In}^{2-}(\text{OH})_p^-} = \text{const} = n_0.$$

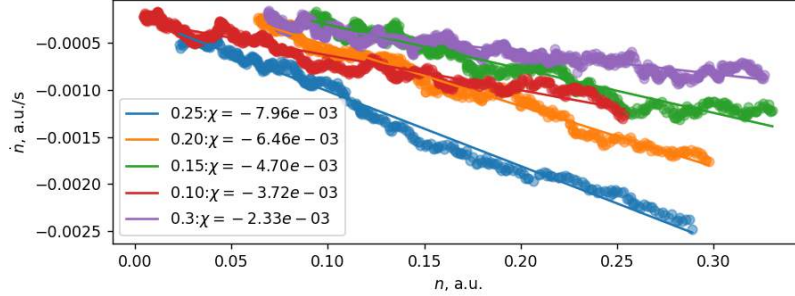
그러면 반응 속도에 대해 다음을 쓸 수 있다:

$$-\frac{dn_{\text{In}^{2-}}}{dt} = (n_{\text{In}^{2-}})(\chi(n_{(\text{OH})^-})^p + \psi) - \psi n_0.$$

표기 $-\frac{dn_{\text{In}^{2-}}}{dt} = r$, $n_{\text{In}^{2-}} = n$ 에 따라

$$r = n(\chi(n_{(\text{OH})^-})^p + \psi) - \psi n_0.$$

수산화 이온이 강한 과량으로 있으므로 $n_{(\text{OH})^-} = \text{const}$ 로 가정할 수 있다. 이 경우 의존성 $r(n)$ 은 기울기 계수 $\chi(n_{(\text{OH})^-})^p + \psi$ 인 선형으로 나타난다. 작도된 그래프는 우리가 얻은 이론적 의존성을 확인해 준다. 또한 C7 에서 얻은 의존성은 지수적이며 그 포화 출력은 조건 $r = 0$, 즉 $r_{\text{com}} = r_{\text{decom}}$ 에 대응한다.



서로 다른 농도에 대한 반응 속도 r 의 In 농도 n 에 대한 의존성.

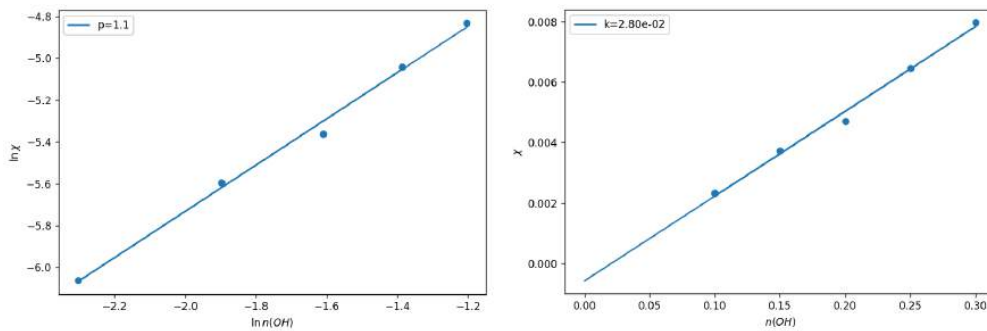
C9. 포화 조건은 $r_{\text{com}} = r_{\text{decom}}$, 즉

$$\chi(n_{\text{In}^{2-}})(n_{(\text{OH})^-})^p = \psi(n_{\text{In}^{2-}}(n_{(\text{OH})^-})^p).$$

농도가 정상 모드에 도달한 후 유체는 매우 열게 착색되는데, 이는 In^{2-} 의 최종 농도가 작음을, 즉 $n_{\text{In}^{2-}} \ll n_{\text{In}^{2-}}(n_{(\text{OH})^-})^p$ 임을 가리킨다. 이는 $\psi \ll \chi(n_{(\text{OH})^-})^p$ 를 의미한다.

C8 에서 작도한 그래프를 이용하여 기울기 계수 k 를 계산하자. $k = \chi(n_{(\text{OH})^-})^p (\psi \ll \chi(n_{(\text{OH})^-})^p$ 가정 하) 라고 가정하고 의존성 $\ln(k)(\ln(n_{(\text{OH})^-}))$ 을 그리면, 그래프의 기울기 계수로서 p 의 값을 얻는다. 그래프의 기울기 계수는 1.1 이다. p 가 명백히 정수이므로 $p = 1$ 이라고 말할 수 있다.

$\psi \ll \chi(n_{(\text{OH})^-})^p$ 가정을 확인하기 위해 k 의 $n_{(\text{OH})^-}$ 에 대한 의존성을 그릴 수 있다. 얻은 의존성이 선형이고 원점을 벗어나므로 우리의 가정이 옳다. p 는 다른 그래프를 작도하고 다른 분석 방법을 사용하여 얻는 것도 가능했음에 유의하라.



(왼쪽) $\ln(k)$ 대 $\ln(n_{(\text{OH})^-})$, (오른쪽) k 대 $n_{(\text{OH})^-}$.

$$p = 1$$

D1. 처음에 유체는 초록 또는 청록색이고, 그 후 보라로, 다음에 주황으로, 끝에 노랑으로 변한다. 보라가 나타나는 전형적인 시간은 $t_1 \in [30 \text{ s}; 90 \text{ s}]$ 이고, 주황이 나타나는 전형적인 시간은 그보다 $\Delta t \in [30 \text{ s}; 120 \text{ s}]$ 후이며, 주황에서 노랑으로의 전이는 매끄럽게 일어난다. 시약 농도가 부정확하거나 반응을 “재시작” 하면 보라로의 전이가 더 빨라진다.

색	초록/청록	노랑	빨강/주황	보라
번호	1	4	3	2
t, s	0.0	200+	60	40

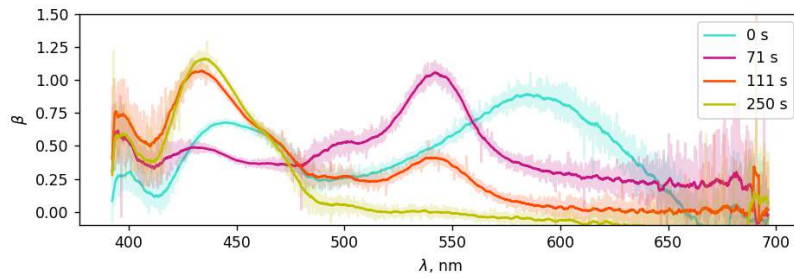
D2. 배경 신호의 세기는 앞 단락들에서 얻은 것과 다를 수 있다. NaOH 와 GI 용액의 혼합물이 든 큐벳을 통과하면 광원의 빛은 세기를 잃지만 그 스펙트럼은 전형적 형태를 유지한다: 스펙트럼의 파랑 부분에 좁고 높은 봉우리, 초록-빨강 부분에 낮고 넓은 봉우리. 봉우리의 꼭대기는 대칭적이다. 처음에 유체를 투과한 빛의 스펙트럼은 광원 스펙트럼과 유사한 형태이고, 그 후 다음 동역학이 관찰된다:

- 빨강 영역에서 세기가 매끄럽게 감소한다;
- 초록 영역에서 세기가 먼저 매끄럽게 증가하고, 그 후 급격히 감소했다가 다시 매끄럽게 증가한다;
- 파랑 영역에서 세기가 먼저 매끄럽게 증가하고 그 후 매끄럽게 감소한다.

D3. 파트 B 에서 주어진 β 의 정의에 따라,

$$L\beta(\lambda) = \ln \left(\frac{I_{\text{src}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}{I_{\text{IC}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)} \right).$$

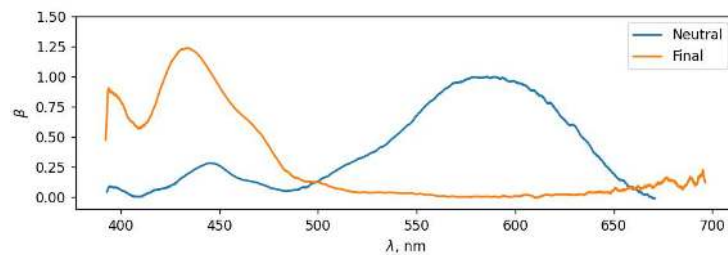
흡수 스펙트럼 그래프 $\beta(\lambda)$ 는 과제 D2 에서 기술한 스펙트럼 동역학에 대응한다.



네 가지 색이 나타나는 순간의 흡수 스펙트럼 $\beta(\lambda)$.

D4. 시점 t_1 에서 큐벳 안에는 IC 의 “중성 (neutral)” 상태, 즉 중성 매질에서 인디고 카민이 갖는 상태가 우세하다. 중성 상태의 흡수 스펙트럼 $\beta_n(\lambda)$ 는 파트 B 에서 얻었다. 시점 t_4 에서 큐벳 안 IC 의 상태는 안정되었다. 이 상태를 “최종 (finite)” 이라 하자. 그 흡수 스펙트럼 $\beta_f(\lambda)$ 는 D3 의 식으로 계산할 수 있다. $\beta_n(\lambda)$ 와 $\beta_f(\lambda)$ 를 하나의 그래프에 그리자.

이 그래프의 외피선은 D3 에서 얻은 그래프의 외피선과 $\lambda = 540 \text{ nm}$ 부근의 봉우리가 없다는 점에서만 다름에 유의하라. 따라서 IC 분자는 세 가지 상태를 거친다.



중성 (Neutral) 상태와 최종 (Final) 상태의 흡수 스펙트럼.

3 개 상태

D5. 각 시점에서 큐벳 안에는 세 상태의 IC 분자 혼합물이 있다: 중성 (n), 전이 (i), 최종 (f). 이 상태들의 농도를 $n_n(t)$, $n_i(t)$, $n_f(t)$, 해당 흡수 단면적을 $\sigma_n(\lambda)$, $\sigma_i(\lambda)$, $\sigma_f(\lambda)$ 로 표기하자. 그러면 B5에 따라

$$L\beta(\lambda, t) = \sigma_n(\lambda)n_n(t) + \sigma_i(\lambda)n_i(t) + \sigma_f(\lambda)n_f(t),$$

여기서

$$L\beta(\lambda, t) = \ln \left(\frac{I_{\text{src}}(\lambda) - I_{\text{dark}}(\lambda)}{I_{\text{IC}}(\lambda, t) - I_{\text{dark}}(\lambda)} \right).$$

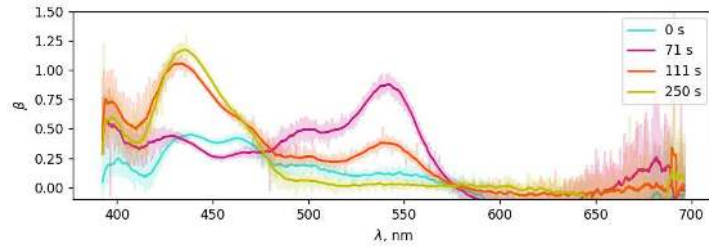
D3 에서 얻은 그래프로부터, 파장 $\lambda_n \approx 600 \text{ nm}$ 에서의 흡수는 거의 전적으로 첫 번째 상태의 인디고 카민의 존재에 기인함을 알 수 있다. 따라서 임의의 단위로 나타낸 중성 상태 IC 의 농도는 다음 식으로 계산할 수 있다:

$$n_n^*(t) = L\beta(\lambda_n, t).$$

다른 파장에서 중성 상태의 흡수 기여를 빼고 함수

$$f_i(\lambda) = L\beta(\lambda, t_i) - n_n^*(t_i) \cdot \frac{\sigma_n(\lambda)}{\sigma_n(\lambda_n)}$$

를 그린다. 여기서 $\sigma_n(\lambda)$ 는 B4 에서 얻은 흡수 단면적 스펙트럼이다.



함수 $f_i(\lambda)$.

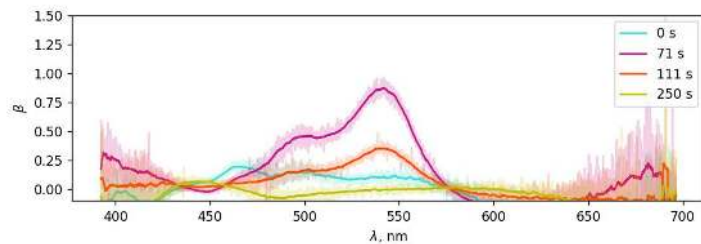
시점 t_4 에는 큐벳 안에 IC 의 최종 상태만 남는다. 따라서

$$\sigma_f(\lambda) = \frac{L\beta(\lambda, t_4)}{n_f(t_4)}.$$

이를 통해 최종 상태 IC 의 흡수 스펙트럼 기여를 뺄 수 있다. 이를 위해 함수

$$g_i(\lambda) = f_i(\lambda) - n_f^*(t_i) \cdot \frac{\beta(\lambda, t_i)}{\beta(\lambda_f, t_i)}$$

의 그래프를 그린다.



함수 $g_i(\lambda)$.

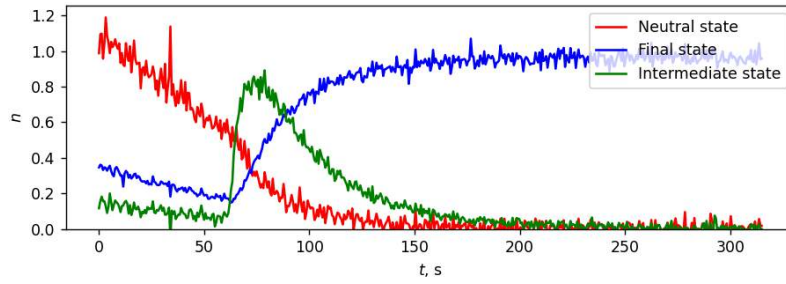
비슷한 이유로 각 상태의 농도는 다음 식으로 계산할 수 있다:

$$n_n^*(t) = L\beta(\lambda_n, t),$$

$$n_i^*(t) = L\beta(\lambda_i, t) - n_n^*(t) \cdot \frac{\sigma_n(\lambda_i)}{\sigma_n(\lambda_n)} - n_f^*(t) \cdot \frac{\beta(\lambda_i, t)}{\beta(\lambda_f, t)},$$

$$n_f^*(t) = L\beta(\lambda_f, t) - n_n^*(t) \cdot \frac{\sigma_n(\lambda_f)}{\sigma_n(\lambda_n)}.$$

각 상태의 농도의 시간 의존성 그래프를 아래 그림에 제시한다.



IC 의 세 상태 (중성, 전이, 최종) 의 농도의 시간 의존성.