

Дәріс №2. Молекула және оның энергиясы. Қысқаша мазмұны.

Екі атомды молекуланың энергиясы. Энергияның квантталуы.

Электрондық, тербелістік және айналыстық энергия. Молекуланың потенциалдық энергиясы. Потенциалдық энергияның ара қашықтыққа тәуелділігі.

Молекула туралы жалпы түсінік

Молекула - заттың химиялық қасиеттерін сақтайтын және өзара химиялық байланыс арқылы біріктірілген атомдардан тұратын ең кіші бөлшектердің бірі. Молекулалардың құрылысы, олардың атомдық құрамы және кеңістіктік орналасуы заттың физикалық және химиялық қасиеттерін анықтайды.

Молекула құрамындағы атомдар тыныштықта тұрмайды. Олар бір-біріне қатысты тербелмелі қозғалыс жасайды, ал молекула тұтас жүйе ретінде айналмалы қозғалыста болуы мүмкін. Сонымен бірге молекуладағы электрондар ядролардың маңында белгілі бір кванттық энергетикалық күйлерде орналасады. Сондықтан молекуланың энергиясын бір ғана қозғалыс түрімен сипаттау жеткіліксіз. Молекуланың энергиясы оның электрондық күйіне, атомдардың тербелмелі қозғалысына және молекуланың айналмалы қозғалысына байланысты болады.

Жалпы жағдайда молекуланың ішкі энергиясын шартты түрде үш негізгі құрамдас бөлікке бөлуге болады:

$$E = E_{эл} + E_{терб} + E_{айн}$$

мұндағы $E_{эл}$ - электрондық энергия, $E_{терб}$ - молекуланың тербелістік энергиясы, ал $E_{айн}$ - айналмалы энергия.

Бұл өрнек молекуланың энергетикалық құрылымын түсінудің бастапқы негізі болып табылады. Нақты молекулаларда бұл қозғалыстар бір-бірінен толық тәуелсіз болмайды, сондықтан олардың арасында өзара әсерлесу болуы мүмкін. Дегенмен спектроскопиялық есептерде энергияларды осылай бөлу өте ыңғайлы. Молекуланың энергетикалық күйлерін зерттеу оның құрылымы мен химиялық байланыстары туралы маңызды ақпарат береді. Әсіресе инфрақызыл спектроскопияда тербелістік энергия деңгейлерінің өзгерістері, ал комбинациялық шашырау спектроскопиясында молекуланың тербелістік және айналмалы күйлерінің өзгерістері зерттеледі.

Екі атомды молекуланың энергиясы

Екі атомды молекула екі атомнан тұратын қарапайым молекулалық жүйе болып табылады. Мұндай молекулаларға H_2 , N_2 , O_2 , CO , HCl және басқа да молекулаларды жатқызуға болады. Екі атомды молекуланың қозғалысын қарастырғанда оның екі атомы белгілі бір тепе-теңдік арақашықтықта орналасатынын ескеру қажет. Бұл арақашықтықта атомдар арасындағы тартылыс және тебілу күштері өзара теңеседі.

Атомдар арасындағы қашықтық тепе-теңдік мәнінен өзгерген кезде молекуланың потенциалдық энергиясы өзгереді. Егер атомдар бір-біріне тым жақындаса, ядролардың электростатикалық тебілуі күшейеді. Ал атомдар тым алыстаған жағдайда олардың арасындағы байланысты қамтамасыз ететін тартылыс күштері әлсірейді.

Сондықтан екі атомды молекула үшін потенциалдық энергияның атомдар арасындағы қашықтыққа тәуелділігі маңызды рөл атқарады.

Молекуланың қозғалысын сипаттау үшін оның салыстырмалы қозғалысын қарастыруға болады. Екі атомның массалары m_1 және m_2 болса, олардың салыстырмалы қозғалысына келтірілген масса қолданылады:

$$\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$$

Бұл шама екі атомнан тұратын жүйені бір бөлшектің тиімді қозғалысы ретінде қарастыруға мүмкіндік береді. Екі атомды молекуланың энергиясы электрондық, тербелістік және айналмалы қозғалыстарға байланысты болады. Сондықтан оның толық энергиясын жуық түрде:

$$E = E_{эл} + E_{терб} + E_{айн}$$

түрінде жазуға болады.

Бұл энергиялардың шамалары бір-бірінен ерекшеленеді. Электрондық энергия деңгейлерінің арақашықтығы әдетте ең үлкен болады. Тербелістік энергия деңгейлерінің арақашықтығы электрондық деңгейлерден кіші, ал айналмалы энергия деңгейлерінің арақашықтығы одан да кіші болады. Осы энергия деңгейлерінің иерархиясы молекулалық спектрлердің пайда болуын түсіндіруге мүмкіндік береді.

Молекула энергиясының квантталуы

Классикалық физика тұрғысынан молекула энергиясы кез келген мәнді қабылдай алады деп қарастырылуы мүмкін. Алайда микроскопиялық жүйелерді кванттық механика тұрғысынан зерттегенде молекуланың энергиясы үздіксіз емес, белгілі бір дискретті мәндер жиынынан тұратыны анықталады. Бұл құбылыс энергияның квантталуы деп аталады. Молекула тек белгілі бір рұқсат етілген энергетикалық күйлерде ғана бола алады:

$$E_0, E_1, E_2, E_3, \dots$$

Мұндағы E_0 - негізгі энергетикалық күйдің энергиясы, ал E_1, E_2, E_3 - жоғары энергетикалық күйлерге сәйкес келеді.

Молекула бір энергетикалық күйден екінші күйге өткен кезде энергия жұтылады немесе шығарылады. Егер молекула төменгі энергетикалық күйден жоғары энергетикалық күйге өтсе, ол сырттан энергия жұтады. Ал жоғары күйден төменгі күйге өткен кезде энергия электромагниттік сәуле түрінде шығарылуы мүмкін.

Энергия деңгейлерінің арасындағы айырмашылық:

$$\Delta E = E_2 - E_1$$

шамасымен анықталады. Егер осы энергия айырмашылығы электромагниттік сәулеленудің бір фотонының энергиясына тең болса, онда:

$$\Delta E = h\nu$$

қатынасы орындалады. Мұндағы h - Планк тұрақтысы, ν - шығарылатын немесе жұтылатын сәулеленудің жиілігі.

Осыдан сәулелену жиілігін:

$$\nu = \Delta E / h$$

түрінде анықтауға болады.

Ал электромагниттік сәулеленудің толқын ұзындығы:

$$\lambda = c / \nu$$

формуласымен анықталатындықтан, энергетикалық деңгейлердің айырмашылығы мен спектрлік сызықтың толқын ұзындығы арасында тікелей байланыс бар. Демек, молекуланың спектрін зерттеу арқылы оның энергетикалық деңгейлері туралы ақпарат алуға болады.

Электрондық энергия

Молекула құрамындағы электрондар атом ядроларының электр өрісінде қозғалады. Электрондардың орналасуы мен қозғалысы молекуланың электрондық энергиясын анықтайды. Молекуланың электрондық энергетикалық күйлері кванттық механика

заңдарына бағынады. Әрбір электрондық күй белгілі бір энергетикалық мәнмен сипатталады.

Ең төменгі электрондық энергияға сәйкес келетін күй негізгі электрондық күй деп аталады.

Молекула энергия жұтқан кезде жоғары электрондық энергетикалық күйге өтуі мүмкін.

Электрондық ауысу кезінде энергия айырмасы:

$$\Delta E_{эл} = E_{эл,2} - E_{эл,1}$$

түрінде анықталады.

Бұл энергия айырмашылығы фотон энергиясына тең болған жағдайда:

$$\Delta E_{эл} = h\nu$$

шарты орындалады.

Электрондық ауысулар көбінесе ультракүлгін және көрінетін сәулелену аймақтарында байқалады. Себебі электрондық энергетикалық деңгейлердің арақашықтығы салыстырмалы түрде үлкен. Алайда электрондық ауысу кезінде молекуланың тербелістік және айналмалы күйлері де өзгеруі мүмкін. Сондықтан молекулалық спектрлер қарапайым бір сызықтан ғана тұрмай, көптеген спектрлік сызықтар мен жолақтардан тұруы мүмкін.

Электрондық энергия молекуланың химиялық табиғатымен тығыз байланысты. Молекуладағы химиялық байланыстардың түрі мен электрондардың таралуы оның электрондық спектрінің ерекшеліктерін анықтайды.

Тербелістік энергия

Молекуладағы атомдар бір-біріне қатысты тепе-теңдік жағдайының маңында үнемі тербеліп тұрады. Бұл қозғалыс молекуланың тербелістік қозғалысы деп аталады. Екі атомды молекуланы серіппемен байланысқан екі дене тәрізді қарастыруға болады. Атомдар арасындағы байланыс оларды белгілі бір тепе-теңдік арақашықтықта ұстап тұрады. Қарапайым жуықтауда молекуланың тербелісін гармониялық осциллятор моделімен сипаттауға болады. Гармониялық осциллятордың энергия деңгейлері:

$$E_{терб} = h\nu_{терб}(v + 1/2)$$

формуласымен анықталады.

Мұндағы $\nu_{терб}$ - молекуланың тербеліс жиілігі, ал v - тербелістік кванттық сан. Оның мәндері:

$$v = 0, 1, 2, 3, \dots$$

болуы мүмкін.

Формуладағы $1/2$ мүшесі нөлдік тербеліс энергиясының бар екенін көрсетеді. Яғни молекула абсолюттік нөл температураға дейін салқындатылған жағдайда да оның тербелістік энергиясы толық нөлге тең болмайды.

Негізгі күйде $v = 0$ болғандықтан, нөлдік тербеліс энергиясы:

$$E_0 = h\nu_{терб} / 2$$

мәніне тең. Молекула бір тербелістік деңгейден келесі деңгейге ауысқанда энергия жұтылады немесе шығарылады. Идеал гармониялық осциллятор үшін көршілес деңгейлер арасындағы энергия айырмасы шамамен:

$$\Delta E_{терб} = h\nu_{терб}$$

болады.

Молекуланың нақты тербелісі идеал гармониялық тербелістен ерекшеленеді. Атомдар арасындағы байланыс толық серпімді емес болғандықтан, жоғары тербелістік

деңгейлерге көтерілген сайын деңгейлер арасындағы арақашықтық аздап өзгереді. Мұндай жағдайда ангармониялық осциллятор моделі қолданылады.

Тербелістік қозғалыстың жиілігі молекуладағы атомдардың массасына және химиялық байланыстың беріктігіне тәуелді. Химиялық байланыс неғұрлым берік болса, тербеліс жиілігі соғұрлым жоғары болады. Ал атомдардың массасы артқан сайын тербеліс жиілігі әдетте төмендейді. Осы қасиет инфрақызыл спектроскопияда ерекше маңызды. Әрбір химиялық байланыс белгілі бір тербеліс жиіліктеріне ие болғандықтан, инфрақызыл спектрдегі жұтылу жолақтары молекуланың химиялық құрылымы туралы ақпарат береді.

Айналмалы энергия

Молекула кеңістікте тұтас жүйе ретінде айналмалы қозғалыс жасай алады. Бұл қозғалыс молекуланың айналмалы энергиясын анықтайды.

Екі атомды молекуланы инерция моменті I болатын айналмалы жүйе ретінде қарастыруға болады. Оның квантталған айналмалы энергиясы:

$$E_{\text{айн}} = h^2 J(J + 1) / (8\pi^2 I)$$

формуласы арқылы анықталады.

Мұндағы J - айналмалы кванттық сан, оның мәндері:

$$J = 0, 1, 2, 3, \dots$$

болуы мүмкін.

Инерция моменті атомдардың массасына және олардың айналу осіне қатысты орналасуына байланысты. Екі атомды молекула үшін инерция моменті жуық түрде:

$$I = \mu r^2$$

өрнегімен анықталады.

Мұндағы μ - келтірілген масса, ал r - атомдар арасындағы қашықтық.

Айналмалы энергия деңгейлері бір-бірінен салыстырмалы түрде аз энергиямен ерекшеленеді. Сондықтан таза айналмалы спектрлер негізінен микротолқындық және алыс инфрақызыл аймақтарда байқалады.

Молекуланың айналмалы қозғалысын зерттеу арқылы оның геометриялық құрылымы мен атомдар арасындағы арақашықтық туралы ақпарат алуға болады.

Молекуланың толық энергиясы

Молекуланың толық ішкі энергиясын электрондық, тербелістік және айналмалы энергиялардың қосындысы ретінде жуық түрде көрсетуге болады:

$$E = E_{\text{эл}} + E_{\text{терб}} + E_{\text{айн}}$$

Бұл өрнек молекуланың әртүрлі қозғалыстарының энергетикалық үлесін бөлек қарастыруға мүмкіндік береді.

Энергия деңгейлерінің шамалары әдетте бір-бірінен едәуір ерекшеленеді. Электрондық деңгейлердің арақашықтығы ең үлкен, тербелістік деңгейлердікі одан кіші, ал айналмалы деңгейлердің арақашықтығы ең аз болады. Сондықтан электромагниттік спектрдің әртүрлі аймақтары молекуланың әртүрлі энергетикалық өзгерістерін зерттеуге мүмкіндік береді.

Электрондық ауысулар көбінесе ультракүлгін және көрінетін аймақтарда байқалады. Тербелістік ауысулар инфрақызыл аймақта маңызды орын алады.

Айналмалы ауысулар микротолқындық және алыс инфрақызыл аймақтарда зерттеледі.

Молекуладағы бұл қозғалыстар толық тәуелсіз емес. Мысалы, молекуланың тербелістік күйі өзгерген кезде оның айналымы энергия деңгейлері де өзгеруі мүмкін. Сондықтан тәжірибелік молекулалық спектрлер өте күрделі құрылымға ие болады.

Молекуланың потенциалдық энергиясы

Молекуладағы атомдардың өзара әсерлесуі оның потенциалдық энергиясын анықтайды. Екі атомды молекула жағдайында потенциалдық энергия негізінен атомдар арасындағы r қашықтыққа тәуелді болады.

Потенциалдық энергияны:

$$U = U(r)$$

түрінде көрсетуге болады.

Бұл функция атомдардың бір-біріне қатысты орналасуына байланысты олардың өзара әсерлесу энергиясының қалай өзгередігін сипаттайды. Егер екі атом бір-бірінен өте алыс орналасса, олардың өзара әсерлесуі әлсірейді және потенциалдық энергия белгілі бір шекті мәнге жақындайды. Атомдар жақындаған кезде олардың арасында тартылыс күші пайда болады. Белгілі бір қашықтықта тартылыс пен тебілу күштері теңеседі. Бұл қашықтық тепе-теңдік арақашықтығы деп аталады және r_e арқылы белгіленеді.

Тепе-теңдік жағдайында потенциалдық энергия өзінің ең төменгі мәніне ие болады:

$$U(r_e) = U_{\min}$$

Осы күй молекуланың тұрақты күйіне сәйкес келеді.

Егер атомдар r_e мәнінен алыстаса, молекуланы созу үшін энергия қажет болады және потенциалдық энергия артады. Егер атомдар r_e мәнінен жақындаса, ядролардың өзара тебілуі өте тез күшейеді. Сондықтан потенциалдық энергия да күрт өседі. Осылайша, молекуланың потенциалдық энергиясының графигі тепе-теңдік қашықтықта минимумға ие болатын қисық түрінде болады.

Потенциалдық энергияның атомдар арақашықтығына тәуелділігі

Екі атомды молекуланың потенциалдық энергиясының r арақашықтыққа тәуелділігі молекуланың тұрақтылығын түсіндіру үшін өте маңызды.

Потенциалдық энергияның ең төменгі нүктесі $r = r_e$ жағдайына сәйкес келеді. Бұл нүктеде молекула ең тұрақты күйде болады.

$r < r_e$ болған кезде атомдар бір-біріне тым жақын орналасады. Бұл жағдайда ядролардың электростатикалық тебілуі күшейіп, потенциалдық энергия тез өседі.

$r > r_e$ болған кезде атомдар бір-бірінен алыстайды. Белгілі бір шекке дейін молекуладағы тартылыс күштері басым болып, жүйенің энергиясы артады. Атомдар өте үлкен қашықтыққа кеткен кезде молекулалық байланыс әлсірейді.

Молекуланың потенциалдық энергиясын сипаттау үшін әртүрлі математикалық модельдер қолданылады. Солардың бірі - Морзе потенциалы. Ол молекулалық байланыстың нақты қасиеттерін гармониялық модельге қарағанда жақсырақ сипаттайды:

$$U(r) = D_e[1 - \exp(-a(r - r_e))]^2 - D_e$$

Мұндағы D_e - молекулалық байланыстың диссоциация энергиясына байланысты шама, r_e - тепе-теңдік арақашықтығы, a - потенциалдық қисықтың пішінін анықтайтын параметр.

Морзе потенциалының маңызды ерекшелігі - ол атомдар арасындағы қашықтық тым үлкен болған кезде потенциалдық энергияның белгілі бір шекке жақындауын және молекуланың диссоциациялану мүмкіндігін ескереді.

Гармониялық жуықтауда тепе-теңдік маңындағы потенциалдық энергияны қарапайым түрде:

$$U(r) \approx U(r_e) + 1/2 k(r - r_e)^2$$

түрінде жазуға болады.

Мұндағы k - молекулалық байланыстың күш тұрақтысы.

Егер $r - r_e$ аз болса, молекуланың тербелісін гармониялық осциллятор ретінде қарастыруға болады. Бұл жуықтау инфрақызыл спектроскопияның теориялық негіздерін түсіндіруде кеңінен қолданылады.

Потенциалдық энергия және молекуланың тербелісі

Молекуланың тербелісін потенциалдық энергия қисығымен байланыстыра отырып түсіндіруге болады. Тепе-теңдік жағдайында атомдар r_e арақашықтықта орналасады. Атомдар тепе-теңдік жағдайынан ауытқығанда қалпына келтіруші күш пайда болады. Бұл күш атомдарды қайтадан тепе-теңдік жағдайына қайтаруға тырысады.

Гармониялық жуықтауда қалпына келтіруші күш Гук заңына ұқсас:

$$F = -k(r - r_e)$$

түрінде жазылады. Мұндағы минус таңбасы күштің атомдардың тепе-теңдік жағдайынан ауытқу бағытына қарама-қарсы бағытталғанын көрсетеді.

Тербеліс жиілігі атомдардың массасына және байланыс күшіне тәуелді. Екі атомды молекула үшін гармониялық жуықтауда тербеліс жиілігі:

$$\nu_{\text{терб}} = 1/(2\pi) \sqrt{k/\mu}$$

формуласымен анықталады.

Бұл өрнек инфрақызыл спектроскопия үшін өте маңызды. Себебі химиялық байланыстың күш тұрақтысы k және атомдардың келтірілген массасы μ өзгерсе, молекуланың тербеліс жиілігі де өзгереді. Мысалы, бірдей химиялық байланыста жеңіл атомдардың тербеліс жиілігі ауыр атомдарға қарағанда жоғары болады. Осы принцип изотоптық ығысуларды зерттеуде де қолданылады.

Молекуланың энергетикалық деңгейлері және спектр

Молекула энергиясының квантталуы оның спектрінің пайда болуына себеп болады. Молекула бір энергетикалық күйден екінші энергетикалық күйге өткен кезде белгілі бір энергия мөлшері жұтылады немесе шығарылады.

Жұтылған немесе шығарылған фотон энергиясы:

$$\Delta E = h\nu$$

шартымен анықталады. Сондықтан молекуланың энергетикалық деңгейлері мен спектрдегі жолақтардың арасында тікелей байланыс бар.

Егер молекула төменгі энергетикалық күйден жоғары күйге өтсе, фотон энергиясы жұтылады. Бұл процесс инфрақызыл спектроскопияда жұтылу жолақтарының пайда болуына әкеледі. Ал қозған молекула жоғары күйден төменгі күйге өткен кезде фотон шығаруы мүмкін.

Молекулалық спектрдің күрделілігі электрондық, тербелістік және айналмалы деңгейлердің өзара орналасуымен байланысты. Бір электрондық ауысу бірнеше тербелістік ауысулармен, ал әрбір тербелістік ауысу бірнеше айналмалы ауысулармен қатар жүруі мүмкін. Сондықтан тәжірибелік молекулалық спектрлерде көптеген сызықтар немесе жолақтар байқалады.

Инфрақызыл спектроскопиямен байланысы

Инфрақызыл спектроскопияның негізінде молекуланың инфрақызыл сәулеленуді жұтуы жатыр. Молекула инфрақызыл фотонды жұтқанда оның тербелістік энергетикалық күйі өзгеруі мүмкін. Бірақ кез келген тербеліс инфрақызыл сәулеленуді міндетті түрде жұта бермейді. Инфрақызыл сәулеленумен белсенді әсерлесу үшін молекуланың тербелісі

кезінде дипольдік моменттің өзгеруі қажет. Бұл шарт молекулалық тербелістердің инфрақызыл спектрдегі көрінуін анықтайтын негізгі критерийлердің бірі болып табылады.

Әртүрлі химиялық байланыстар әртүрлі жиіліктерде тербеледі. Сондықтан инфрақызыл спектрдегі жұтылу жолақтарының орналасуы молекуланың құрамындағы функционалдық топтарды анықтауға мүмкіндік береді.

Мысалы, O–H, C–H, C=O, N–H және басқа да байланыстардың тербелістік жиіліктері бір-бірінен ерекшеленеді. Осыған байланысты олардың спектрдегі жолақтары да әртүрлі аймақтарда орналасады. Инфрақызыл спектроскопияның осы ерекшелігі заттың сапалық құрамын анықтауда және молекулалық құрылымды зерттеуде кеңінен пайдаланылады.

Комбинациялық шашырау спектроскопиясымен байланысы

Комбинациялық шашырау немесе Раман спектроскопиясында да молекуланың тербелістік энергетикалық күйлері зерттеледі. Бірақ мұнда негізгі зерттелетін құбылыс сәулеленудің жұтылуы емес, жарықтың молекуламен әсерлескеннен кейінгі шашырауы болып табылады.

Раман спектріндегі спектрлік ығысулар молекуланың энергетикалық деңгейлерінің айырмашылығымен байланысты. Сондықтан молекуланың тербелістік энергиясын білу оның Раман спектрін түсіндіру үшін де қажет. Инфрақызыл және Раман спектроскопиялары бір-бірін толықтыратын әдістер болып табылады. Кейбір молекулалық тербелістер инфрақызыл спектрде жақсы байқалса, басқа тербелістер Раман спектрінде қарқынды болуы мүмкін.

Осы себепті молекуланың электрондық, тербелістік және айналмалы энергияларын, сондай-ақ потенциалдық энергиясының құрылымын түсіну екі спектроскопиялық әдістің де теориялық негізін құрайды.

Молекула - өзара байланысқан атомдардан тұратын кванттық жүйе. Оның энергиясы үздіксіз емес, белгілі бір дискретті энергетикалық деңгейлерден тұрады.

Молекуланың ішкі энергиясын жуық түрде электрондық, тербелістік және айналмалы энергиялардың қосындысы ретінде көрсетуге болады:

$$E = E_{эл} + E_{терб} + E_{айн}$$

Электрондық энергия молекуладағы электрондардың энергетикалық күйімен анықталады. Тербелістік энергия атомдардың бір-біріне қатысты тербелмелі қозғалысымен байланысты. Ал айналмалы энергия молекуланың кеңістіктегі айналу қозғалысын сипаттайды.

Екі атомды молекуланың маңызды сипаттамаларының бірі - атомдар арасындағы тепе-теңдік арақашықтық. Бұл қашықтықта молекуланың потенциалдық энергиясы минимум мәнге ие болады.

Потенциалдық энергияның атомдар арақашықтығына тәуелділігі молекуланың тұрақтылығын, тербелісін және диссоциациялануын түсіндіруге мүмкіндік береді. Тепе-теңдік маңында молекуланы гармониялық осциллятор ретінде қарастыруға болады.

Молекуланың энергиясының квантталуы оның спектрінің пайда болуына негіз болады. Энергетикалық деңгейлер арасындағы ауысулар кезінде фотон жұтылады немесе шығарылады және олардың энергиясы:

$$\Delta E = h\nu$$

катынасымен анықталады.

Осы заңдылықтар инфрақызыл және комбинациялық шашырау спектроскопиясының теориялық негізін құрайды. Инфрақызыл спектроскопия молекулалардың тербелістік ауысуларын зерттеуге мүмкіндік берсе, Раман спектроскопиясы молекуланың тербелістік күйлері туралы қосымша ақпарат береді.

Бақылау сұрақтары

1. Молекула дегеніміз не және оның негізгі қозғалыс түрлерін атаңыз.
2. Екі атомды молекуланың толық энергиясы қандай негізгі құрамдастардан тұрады?
3. Молекула энергиясының квантталуы дегеніміз не?
4. Молекуланың электрондық энергиясы қандай физикалық процестермен байланысты?
5. Тербелістік энергия дегеніміз не?
6. Тербелістік энергияның кванттық деңгейлері қалай сипатталады?
7. Айналмалы энергияның молекула құрылымын зерттеудегі маңызы қандай?
8. Молекуланың потенциалдық энергиясы атомдар арақашықтығына қалай тәуелді?
9. Тепе-теңдік арақашықтық дегеніміз не?
10. Молекуланың потенциалдық энергиясының минимум нүктесі нені білдіреді?
11. Гармониялық осциллятор моделі молекуланың қандай қасиетін сипаттауға мүмкіндік береді?
12. Молекулалық спектрдің пайда болу механизмі қандай?
13. $\Delta E = h\nu$ теңдеуінің физикалық мағынасын түсіндіріңіз.
14. Инфрақызыл спектроскопияда молекуланың қандай энергетикалық ауысулары зерттеледі?
15. Молекуланың тербеліс жиілігі атомдардың массасы мен химиялық байланыс күшіне қалай тәуелді?
16. Инфрақызыл және Раман спектроскопиялары молекуланың энергетикалық құрылымын зерттеуде қалай толықтырады?