

Дәріс №3.

Инфрақызыл спектроскопия.

Қысқаша мазмұны. Негізгі ұғым және жалпы теориялық көзқарас. Екі атомды молекуланың тербелісі. Қарапайым гармоникалық осцилляторлар.

Инфрақызыл спектроскопия туралы жалпы түсінік

Инфрақызыл спектроскопия - заттардың инфрақызыл сәулеленуді жұтуына байланысты олардың молекулалық құрылысын, химиялық байланыстарын және молекулалардың тербелістік қозғалыстарын зерттейтін спектроскопиялық әдіс.

Молекуладағы атомдар бір-біріне қатысты тыныштықта тұрмайды. Олар химиялық байланыстардың әсерінен үздіксіз тербелістік қозғалыста болады. Бұл қозғалыстардың энергиясы квантталған, яғни молекула кез келген энергия мәнін емес, белгілі бір дискретті энергетикалық күйлерді ғана қабылдай алады. Инфрақызыл сәуле молекуламен әсерлескен кезде фотон энергиясы молекуланың екі тербелістік энергетикалық деңгейінің айырмасына тең болған жағдайда сәуле жұтылады:

$$\Delta E = E_{\text{жоғ}} - E_{\text{төмен}} = h\nu$$

мұндағы h - Планк тұрақтысы, ν - инфрақызыл сәуленің жиілігі. Электромагниттік сәулеленудің вакуумдағы жылдамдығы c болғандықтан, жиілік пен толқын ұзындығы арасында

$$c = \lambda \nu$$

байланысы орындалады. Сондықтан фотон энергиясын толқын ұзындығы арқылы да жазуға болады:

$$E = hc/\lambda.$$

Инфрақызыл спектроскопияда көбінесе толқын ұзындығынан гөрі толқын саны қолданылады. Толқын саны

$$\tilde{\nu} = 1/\lambda$$

өрнегімен анықталады және әдетте см^{-1} бірлігімен беріледі. Осыған сәйкес фотон энергиясы

$$E = hc\tilde{\nu}$$

түрінде жазылады. Инфрақызыл спектрдің маңызды ерекшелігі - оның молекулалардың тербелістік қозғалыстарымен тікелей байланысты болуы. Сондықтан ИҚ-спектрді зерттеу арқылы молекуладағы химиялық байланыстар, функционалдық топтар және олардың қоршаған ортамен өзара әсері туралы ақпарат алуға болады.

2. Инфрақызыл сәулеленудің молекулалармен өзара әсерлесуі

Молекула инфрақызыл сәулені жұтқан кезде оның энергиясы артады. Бірақ молекула энергияны кез келген мөлшерде қабылдай алмайды. Жұтылатын фотон энергиясы молекуланың бастапқы және соңғы кванттық күйлерінің энергия айырмасына сәйкес болуы қажет. Егер молекула бастапқыда ν деңгейінде болып, сәулені жұтқаннан кейін ν' деңгейіне өтсе, онда жұтылған сәуле үшін

$$h\nu = E(\nu') - E(\nu)$$

шарты орындалады.

Мұндағы ν және ν' - молекуланың тербелістік кванттық сандары.

Инфрақызыл сәуленің энергиясы электрондық ауысуларға қарағанда салыстырмалы түрде аз болғандықтан, ИҚ-спектроскопия негізінен молекулалардың тербелістік және тербеліс пен айналыстың байланысқан күйлерін зерттейді.

Молекуланың толық энергиясын жуық түрде

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

деп көрсетуге болады. Мұнда $E_{\text{эл}}$ - электрондық қозғалыс энергиясы, $E_{\text{терб}}$ - атомдардың тербелістік қозғалысына сәйкес энергия, ал $E_{\text{айн}}$ - молекуланың айналыс қозғалысының энергиясы. Инфрақызыл спектроскопияда негізгі қызығушылық $E_{\text{терб}}$ энергиясына бағытталады. Ал жоғары ажыратымдылықтағы спектрлерде тербелістік қозғалыспен қатар айналыс қозғалыстың да әсері байқалады.

3. Екі атомды молекуланың тербелістік қозғалысы

Екі атомды молекуланы ең қарапайым молекулалық жүйе ретінде қарастыруға болады. Мысалы, HCl, CO, NO сияқты молекулалар екі атомнан тұрады. Екі атомды молекулада атомдар арасындағы байланыс белгілі бір тепе-теңдік арақашықтықта болады. Бұл арақашықтықты r_e арқылы белгілейік.

Атомдар тепе-теңдік жағдайынан ауытқыған кезде оларды бастапқы жағдайына қайтаруға бағытталған күш пайда болады. Сондықтан молекуланы екі атомның арасында серпімді байланыс бар жүйе ретінде қарастыруға болады.

Егер атомдар арасындағы арақашықтық r болса, онда тепе-теңдік жағдайынан ығысу

$$x = r - r_e$$

арқылы анықталады.

$x = 0$ кезінде молекула тепе-теңдік күйінде болады.

$x > 0$ болса, атомдар арасындағы қашықтық тепе-теңдік мәнінен артады, ал $x < 0$ болған жағдайда олардың арақашықтығы азаяды. Екі атомды молекуланың тербелісін сипаттауда екі атомның массаларын бір ғана келтірілген масса арқылы өрнектеу ыңғайлы:

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

Мұнда m_1 және m_2 - молекула құрамындағы атомдардың массалары, ал μ - келтірілген масса. Бұл шама екі атомның бір-біріне қатысты тербелісін бір бөлшектің тиімді қозғалысы ретінде қарастыруға мүмкіндік береді.

4. Қарапайым гармоникалық осциллятор моделі

Молекуланың тербелістік қозғалысын бірінші жуықтауда гармоникалық осциллятор моделі арқылы сипаттауға болады. Гармоникалық жуықтауда молекуланың потенциалдық энергиясы ығысу квадратына пропорционал:

$$U(x) = 1/2 kx^2.$$

Мұндағы k - химиялық байланыстың күш тұрақтысы, $x = r - r_e$ - тепе-теңдік жағдайынан ығысу.

Бұл теңдеу серіппеге ұқсас модельді сипаттайды. Егер атомдар бір-бірінен алыстаса немесе жақындаса, жүйенің потенциалдық энергиясы артады.

Молекуладағы тербелістің классикалық жиілігі

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

өрнегімен анықталады.

Осы формуладан тербеліс жиілігі химиялық байланыстың беріктігіне және атомдардың массасына тәуелді екені көрінеді. Байланыс неғұрлым берік болса, k соғұрлым үлкен болады және тербеліс жиілігі артады. Ал атомдардың массасы артқан кезде μ өседі де, тербеліс жиілігі төмендейді. Сондықтан әртүрлі химиялық байланыстардың инфрақызыл спектрдегі жұту жолақтары әртүрлі толқын сандарына сәйкес келеді. Осы қасиет инфрақызыл спектроскопияны заттарды идентификациялауда өте пайдалы етеді.

5. Гармоникалық осциллятордың энергия деңгейлері

Классикалық механикада гармоникалық осциллятордың энергиясы үздіксіз өзгеруі мүмкін. Ал кванттық механикада молекуланың тербелістік энергиясы дискретті мәндерге ие болады.

Гармоникалық осциллятор үшін тербелістік энергия

$$E_{\text{терб}}(v) = h\nu_{\text{терб}}(v + 1/2)$$

түрінде жазылады.

Мұндағы $v = 0, 1, 2, 3, \dots$ - тербелістік кванттық сан. $v = 0$ болғанда молекула негізгі тербелістік күйде орналасады. Оның энергиясы нөлге тең емес:

$$E_0 = 1/2 h\nu_{\text{терб}}.$$

Бұл энергия нөлдік тербеліс энергиясы деп аталады.

Молекула абсолюттік тыныштық күйінде де белгілі бір тербелістік энергияға ие болады. Бұл кванттық механиканың маңызды ерекшеліктерінің бірі. Көршілес тербелістік деңгейлердің арақашықтығы гармоникалық осциллятор үшін тұрақты:

$$\Delta E = h\nu_{терб.}$$

Сондықтан гармоникалық осциллятордың энергетикалық деңгейлері бір-бірінен бірдей қашықтықта орналасады. Инфрақызыл сәуле жұтылған кезде молекула бір тербелістік деңгейден екіншісіне өтеді. Мысалы,

$$\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$$

ауысуы негізгі тербелістік ауысу деп аталады.

6. Молекуланың дипольдік моменті және оның тербеліс кезіндегі өзгеруі

Инфрақызыл сәуле молекуламен әсерлесуі үшін молекуланың электрлік дипольдік моментінің тербеліс барысында өзгеруі маңызды. Молекуланың дипольдік моментін μ арқылы белгілейік. Екі атомды гетероядролық молекулаларда, мысалы HCl немесе CO молекулаларында, атомдардың электртерістіліктері әртүрлі болғандықтан, тұрақты дипольдік момент болуы мүмкін.

Ал бірдей атомдардан тұратын гомоядролық молекулаларда, мысалы H₂, N₂, O₂, тұрақты дипольдік момент болмайды. Екі атомды молекуладағы атомдар арақашықтығы өзгерген кезде дипольдік момент те өзгеруі мүмкін. Осы өзгерісті тепе-теңдік жағдайының маңында Тейлор қатарына жіктеуге болады:

$$\mu = \mu_e + (d\mu/dx)_e x + 1/2(d^2\mu/dx^2)_e x^2 + \dots$$

Мұндағы μ_e - тепе-теңдік жағдайындағы дипольдік момент, ал туындылар молекуладағы дипольдік моменттің атомдар арақашықтығы өзгерген кезде қаншалықты өзгеретінін көрсетеді.

Егер тербеліс кезінде дипольдік момент өзгерсе, молекула инфрақызыл сәулені жұта алады. Сондықтан ИҚ-спектроскопия үшін негізгі шартты былай тұжырымдауға болады:

Молекуланың тербелісі кезінде оның дипольдік моменті өзгеруі керек.

Бұл - инфрақызыл спектроскопияның негізгі іріктеу шарты.

7. Инфрақызыл спектрдегі ауысу моменті

Кванттық механикада белгілі бір ауысудың ықтималдығын сипаттайтын маңызды шама - ауысу моменті. Төменгі және жоғарғы тербелістік күйлердің толқындық функцияларын сәйкесінше ψ_v және $\psi_{v'}$ деп белгілесек, ауысу моменті

$$R_v = \int \psi_{v'}^* \mu \psi_v dx$$

өрнегімен анықталады.

Мұндағы ψ_v және $\psi_{v'}$ - молекуланың бастапқы және соңғы тербелістік күйлеріне сәйкес толқындық функциялар, μ - дипольдік момент операторы, ал интеграл бүкіл тербелістік координата бойынша алынады.

Ауысу моментінің физикалық мағынасы өте маңызды: егер $R_v \neq 0$ болса, сәйкес ауысудың байқалу мүмкіндігі бар; ал $R_v = 0$ болса, бұл ауысу электрлік дипольдік механизм арқылы инфрақызыл спектрде байқалмайды.

Дипольдік моментті $x = r - r_e$ координатасы бойынша жіктейік:

$$\mu = \mu_e + (d\mu/dx)_e x + 1/2(d^2\mu/dx^2)_e x^2 + \dots$$

Осы өрнекті ауысу моментінің формуласына қойғанда

$$R_v = \mu_e \int \psi_{v'}^* \psi_v dx + \dots$$

$$\bullet (d\mu/dx)_e \int \psi_{v'}^* x \psi_v dx + \dots$$

өрнегі алынады.

Бір гамильтонианға сәйкес келетін әртүрлі тербелістік күйлердің толқындық функциялары өзара ортогонал болады. Сондықтан $v' \neq v$ кезінде

$$\int \psi_v' * \psi_v dx = 0.$$

Осыған байланысты бірінші тұрақты мүше ауысу моментіне үлес қоспайды және негізгі үлес дипольдік моменттің тербелістік координата бойынша туындысына байланысты болады:

$$R_v \approx (d\mu/dx)_e \int \psi_v' * x \psi_v dx.$$

Бұл нәтиже ИҚ-спектрдегі іріктеу ережесін түсінудің теориялық негізін береді.

8. Тербелістік іріктеу ережесі

Гармоникалық осциллятор үшін координата x операторы көршілес тербелістік деңгейлерді ғана байланыстырады. Сондықтан негізгі тербелістік ауысулар үшін

$$\Delta v = \pm 1$$

іріктеу ережесі алынады. Жұту процесі кезінде молекула төменгі деңгейден жоғары деңгейге өтетіндіктен,

$$\Delta v = +1$$

болады.

Ал сәуле шығару кезінде

$$\Delta v = -1$$

ауысуы орын алады.

Демек, инфрақызыл спектрдегі негізгі тербелістік ауысу

$$v = 0 \rightarrow v = 1$$

түрінде сипатталады. Гармоникалық осцилляторда барлық деңгейлердің арақашықтығы бірдей болғандықтан, негізгі ауысудың энергиясы

$$\Delta E = h\nu_{\text{терб}}$$

болады. Сәйкесінше жұтылатын инфрақызыл сәуленің жиілігі молекуланың меншікті тербеліс жиілігіне тең:

$$\nu = \nu_{\text{терб}}.$$

Толқын саны арқылы бұл шарт

$$\tilde{\nu} = \nu_{\text{терб}}/c$$

түрінде жазылады.

Алайда нақты молекулалар толық гармоникалық осциллятор болып табылмайды. Сондықтан нақты спектрлерде $\Delta v = \pm 2, \pm 3$ сияқты әлсіз обертоңдық ауысулар да белгілі жағдайларда байқалуы мүмкін. Бұл құбылыс молекуланың ангармониялығымен байланысты. Ангармониялық эффектілер келесі тақырыптарда толығырақ қарастырылады.

9. ИҚ-спектрдегі жұту жолағының интенсивтілігі

Инфрақызыл спектрде белгілі бір ауысудың болуы ғана емес, оның интенсивтілігі де маңызды. Спектрлік жолақтың интенсивтілігі ауысу моментінің квадратымен байланысты:

$$I \propto |R_v|^2.$$

Сондықтан ауысу моменті неғұрлым үлкен болса, спектрдегі сәйкес жұту жолағы соғұрлым интенсивті болады. Жоғарыда алынған өрнекке сәйкес, гармоникалық жуықтауда ауысу моментінің негізгі бөлігі

$$(d\mu/dx)_e$$

шамасына тәуелді. Демек, дипольдік моменттің тербеліс координатасы бойынша өзгеруі неғұрлым күшті болса, ИҚ-жұту жолағы да соғұрлым интенсивті болады. Бұл жерде маңызды бір айырмашылықты атап өту қажет. Іріктеу ережесі белгілі бір ауысудың принциптік түрде мүмкін немесе мүмкін еместігін көрсетеді. Ал интенсивтілік сол ауысудың спектрде қаншалықты күшті байқалатынын сипаттайды. Яғни іріктеу ережесі: «Бұл ауысу болуы мүмкін бе?» деген сұраққа жауап берсе, интенсивтілік: «Бұл ауысу спектрде қаншалықты күшті байқалады?» деген сұраққа жауап береді. Сондықтан іріктеу ережесі орындалғанымен, белгілі бір спектрлік жолақтың интенсивтілігі өте төмен болуы мүмкін.

10. Гомоядролық және гетероядролық екі атомды молекулалар

Инфрақызыл спектрді талдау кезінде молекуладағы атомдардың табиғаты маңызды. Гетероядролық екі атомды молекулаларда, мысалы HCl, CO, NO молекулаларында, атомдар әртүрлі болғандықтан, олардың арасында электрлік дипольдік момент пайда болады. Тербеліс кезінде атомдар арасындағы қашықтық өзгеріп, дипольдік момент те өзгереді. Сондықтан мұндай тербелістер инфрақызыл сәулені жұта алады.

Ал H₂, N₂, O₂ сияқты гомоядролық екі атомды молекулалардың тұрақты дипольдік моменті жоқ. Тербеліс барысында да симметрия сақталған жағдайда олардың дипольдік моментінің өзгерісі болмайды:

$$d\mu/dx = 0.$$

Сондықтан мұндай негізгі тербелістер электрлік дипольдік механизм арқылы ИҚ-спектрде белсенді болмайды. Бұл жағдай ИҚ-спектроскопия мен Раман спектроскопиясының бір-бірін толықтыратын маңызды ерекшеліктерінің бірі болып табылады.

11. Молекула температурасының спектрге әсері

Инфрақызыл спектрдің интенсивтілігі тек ауысу моментіне ғана емес, молекулалардың бастапқы энергетикалық деңгейлерде қалай орналасқанына да байланысты.

Термодинамикалық тепе-теңдікте әртүрлі энергетикалық күйлердің толтырылуы Болцман таралуына бағынады:

$$N_v/N_0 = \exp(-E_v/kT).$$

Мұнда N_v - v деңгейіндегі молекулалар саны, N_0 - негізгі деңгейдегі молекулалар саны, E_v - сәйкес тербелістік деңгейдің энергиясы, k - Больцман тұрақтысы, T - абсолюттік температура.

Температура артқан сайын жоғары энергетикалық деңгейлердегі молекулалардың саны көбейеді. Қалыпты температурада молекулалардың басым бөлігі ең төменгі тербелістік деңгейде болады. Сондықтан негізгі жұту жолағы көбінесе

$$v = 0 \rightarrow v = 1$$

ауысуына сәйкес келеді.

Температура жоғарылаған кезде $v = 1$, $v = 2$ және басқа да жоғары деңгейлерде орналасқан молекулалардың саны артады. Соның нәтижесінде жоғары деңгейлерден басталатын қосымша ауысулардың байқалу мүмкіндігі жоғарылайды.

12. «Ыстық жолақтар» ұғымы

Бастапқы күйі $v > 0$ болатын тербелістік ауысулар «ыстық жолақтар» деп аталады.

Мысалы,

$$v = 1 \rightarrow v = 2$$

немесе

$$v = 2 \rightarrow v = 3$$

ауысулары жоғары тербелістік деңгейлерден басталады. Мұндай деңгейлердің толтырылуы температураға тәуелді болғандықтан, температура жоғарылаған сайын «ыстық жолақтардың» интенсивтілігі артуы мүмкін. Бұл құбылыс молекуланың энергетикалық деңгейлерінің температураға байланысты толтырылуын тәжірибелік түрде зерттеуге мүмкіндік береді.

Гармоникалық осциллятордың идеал жағдайында деңгейлердің арақашықтығы бірдей болғандықтан, $v = 0 \rightarrow 1$ және $v = 1 \rightarrow 2$ ауысулары бірдей жиілікте болар еді. Сондықтан олар бір спектрлік жерде қабаттасуы мүмкін.

Нақты молекулаларда ангармониялық әсерлер болатындықтан, энергетикалық деңгейлердің арақашықтығы біртіндеп өзгереді. Осыған байланысты «ыстық жолақтардың» орналасуы негізгі жолақтан аздап ығысуы мүмкін.

13. Инфрақызыл спектрдегі негізгі тербелістік жолақ

Қарапайым гармоникалық модельде негізгі тербелістік ауысу

$$\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$$

болып табылады.

Бұл ауысу үшін

$$\Delta \nu = +1$$

және

$$\Delta E = h\nu_{\text{терб}}$$

шарттары орындалады.

Сондықтан ИҚ-спектрде байқалатын негізгі жолақтың орны молекуланың тербеліс жиілігімен анықталады.

Екі атомды молекула үшін

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

болғандықтан,

$$\tilde{\nu} = 1/(2\pi c) \sqrt{(k/\mu)}$$

өрнегін алуға болады. Бұл формула инфрақызыл спектроскопия үшін өте маңызды.

Ол спектрлік жолақтың орны екі негізгі молекулалық параметрге - химиялық байланыстың күш тұрақтысына k және атомдардың келтірілген массасына μ - тәуелді екенін көрсетеді. Мысалы, бірдей атомдардан құралған молекулаларда атомдардың массасы артқан сайын тербеліс жиілігі төмендейді. Ал бірдей атомдық массалар жағдайында химиялық байланыс берік болған сайын оның тербеліс жиілігі жоғарылайды. Осы заңдылықтарды пайдалана отырып, ИҚ-спектрдегі жолақтардың орналасуы арқылы молекуладағы химиялық байланыстардың сипаты туралы қорытынды жасауға болады.

14. Инфрақызыл спектроскопияның физикалық мағынасы

Инфрақызыл спектрді тек белгілі бір толқын сандарындағы жұту жолақтарының жиынтығы ретінде қарастыру жеткіліксіз. Оның әрбір жолағы молекуладағы нақты қозғалыспен байланысты. Молекуладағы атомдардың тербелістері бірнеше түрлі сипатта болуы мүмкін. Екі атомды молекулада негізгі қозғалыс - атомдар арасындағы қашықтықтың периодты өзгеруі.

Көпатомды молекулаларда жағдай күрделірек. Мұнда валенттік созылу, бұрыштық деформация, тербелістік және басқа да қалыпты тербелістер пайда болады. Олардың әрқайсысының өзіндік жиілігі бар және ИҚ-спектрде белгілі бір жұту жолағына сәйкес келуі мүмкін. Сондықтан ИҚ-спектрді молекуланың өзіндік «тербелістік саусақ ізі» ретінде қарастыруға болады. Спектрдің жолақтары молекуладағы атомдардың байланысу ерекшеліктері туралы ақпарат береді.

15. Негізгі теориялық қорытындылар

Екі атомды молекуланың инфрақызыл спектрін қарастыру барысында бірнеше негізгі нәтижеге келеміз.

Біріншіден, молекуладағы атомдардың тербелістік қозғалысы квантталған. Гармоникалық жуықтауда оның энергиясы

$$E_{\text{терб}}(\nu) = h\nu_{\text{терб}}(\nu + 1/2)$$

өрнегімен анықталады.

Екіншіден, тербеліс жиілігі

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

формуласы бойынша молекуланың күш тұрақтылығына және келтірілген массасына тәуелді.

Үшіншіден, инфрақызыл сәулені жұту үшін тербеліс барысында молекуланың дипольдік моменті өзгеруі қажет:

$$d\mu/dx \neq 0.$$

Төртіншіден, гармоникалық осциллятор үшін негізгі тербелістік іріктеу ережесі

$$\Delta v = \pm 1,$$

ал сәуле жұту кезінде

$$\Delta v = +1$$

түрінде жазылады.

Бесіншіден, спектрлік жолақтың интенсивтілігі ауысу моментінің квадратына тәуелді:

$$I \propto |R_v|^2.$$

Ал ауысу моментінің шамасы дипольдік моменттің тербеліс координатасы бойынша өзгеруімен байланысты.

Алтыншыдан, жоғары температура кезінде жоғары тербелістік деңгейлердің толтырылуы артады. Сондықтан бастапқы күйі $v > 0$ болатын «ыстық жолақтар» пайда болып, олардың интенсивтілігі температураның өсуімен артуы мүмкін.

Инфрақызыл спектроскопияның теориялық негізін молекулалардың квантталған тербелістік күйлері құрайды. Ең қарапайым модель ретінде екі атомды молекуланың гармоникалық осциллятор моделі қолданылады. Бұл модель молекуланың тербелістік энергия деңгейлерін, негізгі спектрлік ауысуларды және олардың жиілігін түсіндіруге мүмкіндік береді.

Молекула инфрақызыл сәулені жұту үшін сәуле энергиясы екі тербелістік деңгейдің энергия айырмасына сәйкес келуі керек. Сонымен бірге тербеліс кезінде молекуланың дипольдік моменті өзгеруі қажет. Осы шарт инфрақызыл спектрдің негізгі іріктеу ережесін анықтайды.

Гармоникалық жуықтауда негізгі ауысу $\Delta v = +1$ шартымен сипатталады. Спектрдегі жолақтың орны молекуланың тербеліс жиілігімен, ал интенсивтілігі ауысу моментімен анықталады. Температура жоғарылаған кезде жоғары энергетикалық деңгейлердің толтырылуы артып, қосымша «ыстық жолақтардың» пайда болуы мүмкін.

Осылайша, инфрақызыл спектр молекуланың ішкі құрылымы, химиялық байланыстары, атомдардың массалары және олардың тербелістік қозғалыстары туралы маңызды ақпарат береді. Бұл заңдылықтар келесі тақырыптарда қарастырылатын көпатомды молекулалардың тербелістері, ангармониялық эффекттер және тербелмелі-айналмалы спектрлерді түсіндірудің негізі болып табылады.

Бақылау сұрақтары

1. Инфрақызыл спектроскопия қандай физикалық құбылысқа негізделген?
2. Молекуланың толық энергиясы қандай негізгі бөліктерден тұрады?
3. Екі атомды молекуланың тербелістік қозғалысын сипаттауда келтірілген масса қандай рөл атқарады?
4. Екі атомды молекуланың келтірілген массасы қалай анықталады?
5. Гармоникалық осциллятордың потенциалдық энергиясы қандай өрнекпен сипатталады?
6. Гармоникалық осциллятордың квантталған энергия деңгейлері қалай жазылады?
7. Нөлдік тербеліс энергиясы дегеніміз не?
8. Молекуланың тербеліс жиілігі химиялық байланыстың күш тұрақтылығына қалай тәуелді?
9. Инфрақызыл сәулені жұту үшін молекуланың дипольдік моментіне қандай шарт қойылады?
10. Ауысу моменті дегеніміз не және ол нені сипаттайды?
11. Инфрақызыл спектроскопиядағы негізгі тербелістік іріктеу ережесі қандай?
12. Неліктен жұту процесінде $\Delta v = +1$ деп алынады?
13. Спектрлік жолақтың интенсивтілігі қандай физикалық шамаға тәуелді?
14. Гомоядролық және гетероядролық екі атомды молекулалардың ИҚ-активтілігі немен ерекшеленеді?
15. Болцман таралуы молекуланың инфрақызыл спектріне қалай әсер етеді?
16. «Ыстық жолақтар» дегеніміз не және олар қандай жағдайда күшейеді?
17. Ангармониялық әсерлер нақты молекуланың спектріне қандай өзгерістер енгізеді?
18. Инфрақызыл спектрдегі жолақтың орналасуы арқылы молекуланың қандай қасиеттері туралы ақпарат алуға болады?