

Дәріс №4

Көп атомды молекуланың тербелісі. Ангармоникалық осциллятор. Екі атомды молекуланың тербелістік айналыстық квантты өтулері. Айналыс пен тербелістің әрекеттесуі. Инфрақызыл спектроскопияның қолданылуы. Негізгі тербелістер және олардың симметриясы.

1. Көп атомды молекулалардың тербелістік қозғалысы

Алдыңғы дәрісте екі атомды молекуланың тербелістік қозғалысын қарастырдық. Екі атомды молекула үшін тербелісті бір ғана координатамен, яғни атомдар арасындағы арақашықтықтың өзгеруімен сипаттауға болады.

Көп атомды молекулаларда жағдай күрделірек. Мұндай молекуладағы әрбір атом бір мезгілде бірнеше бағытта қозғала алады және бір атомның қозғалысы басқа атомдардың қозғалысымен өзара байланысты болады. Сондықтан көп атомды молекуланың тербелісін жеке атомдардың қарапайым қозғалыстарының жиынтығы ретінде емес, бүкіл молекуланы қамтитын белгілі бір қалыпты тербелістердің қосындысы ретінде қарастырған дұрыс. Мысалы, H_2O молекуласын қарастырайық. Бұл молекулада үш атом бар. Оттек пен сутек атомдары арасындағы байланыстардың созылуы және $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ бұрышының өзгеруі әртүрлі тербелістердің пайда болуына әкеледі.

Көп атомды молекула үшін атомдардың қозғалысын серіппелермен байланысқан шарлар моделі арқылы елестетуге болады. Мұнда шарлар атомдарды, ал серіппелер химиялық байланыстарды бейнелейді. Серіппенің қатаңдығы химиялық байланыстың беріктігіне сәйкес келеді.

Молекулаға сыртқы әсер жасалған кезде атомдардың қозғалысы өте күрделі болуы мүмкін. Мысалы, бір мезгілде байланыстардың созылуы және байланыс бұрыштарының өзгеруі орын алуы ықтимал. Бірақ күрделі қозғалысты белгілі бір қарапайым қалыпты тербелістердің қосындысы ретінде көрсетуге болады.

2. Көп атомды молекуланың қалыпты тербелістерінің саны

Көп атомды молекуланың маңызды сипаттамаларының бірі - оның қалыпты тербелістерінің саны.

Егер молекула N атомнан тұрса, онда оның кеңістіктегі барлық атомдарының қозғалысын сипаттау үшін $3N$ координата қажет. Себебі әр атомның үш кеңістіктік координатасы бар: x , y және z . Алайда осы $3N$ қозғалыстың барлығы тербеліс болып саналмайды.

Молекуланың кеңістіктегі қозғалысын үш бөлікке бөлуге болады:

- молекуланың тұтас ілгерілемелі қозғалысы;
- молекуланың тұтас айналмалы қозғалысы;
- атомдардың бір-біріне қатысты тербелістік қозғалысы.

Сызықтық молекула үшін үш ілгерілемелі және екі айналмалы еркіндік дәрежесі алынып тасталады. Сондықтан оның қалыпты тербелістерінің саны

$$N_{\text{терб}} = 3N - 5$$

болады.

Ал сызықтық емес молекула үшін үш ілгерілемелі және үш айналмалы қозғалыс алынып тасталады. Сондықтан

$$N_{\text{терб}} = 3N - 6.$$

Мысалы, H_2O молекуласы сызықтық емес және $N = 3$ болғандықтан,

$$N_{\text{терб}} = 3 \cdot 3 - 6 = 3.$$

Демек, су молекуласында үш негізгі қалыпты тербеліс бар.

Олар:

1. симметриялық созылу тербелісі;
2. асимметриялық созылу тербелісі;
3. деформациялық, яғни $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ бұрышының өзгеру тербелісі.

Бұл үш тербеліс H_2O молекуласының инфрақызыл спектрінде әртүрлі спектрлік ерекшеліктердің пайда болуына себеп болады.

3. Қалыпты тербелістердің физикалық мағынасы

Қалыпты тербеліс деп молекуладағы барлық атомдар бірдей жиілікпен тербелетін және олардың фазалық қатынастары тұрақты болатын қозғалысты айтады. Әрбір қалыпты тербелістің өзінің тербеліс жиілігі болады. Молекуланың күрделі тербелістік қозғалысын осы қалыпты тербелістердің қосындысы ретінде көрсетуге болады. Мысалы, H_2O молекуласында екі $\text{O}-\text{H}$ байланысы бір уақытта созылып және қысқаруы мүмкін. Егер екі байланыс бірдей бағытта өзгерсе, бұл симметриялық созылу тербелісі болады.

Ал бір $\text{O}-\text{H}$ байланысы қысқарып жатқанда екіншісі созылса, асимметриялық созылу тербелісі пайда болады.

Үшінші жағдайда $\text{O}-\text{H}$ байланыстарының ұзындығы шамамен сақталғанымен, $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ бұрышы өзгеруі мүмкін. Бұл деформациялық немесе иілу тербелісі деп аталады.

Қалыпты тербелістерді математикалық тұрғыдан бір-бірінен тәуелсіз осцилляторлар жүйесі ретінде қарастыруға болады. Бұл тәсіл күрделі көпатомды молекулалардың спектрлерін теориялық тұрғыдан талдауды жеңілдетеді.

4. Көпатомды молекуланың гармоникалық осцилляторы

Алғашқы жуықтауда көпатомды молекуланың әрбір қалыпты тербелісін гармоникалық осциллятор ретінде қарастыруға болады.

Бір қалыпты тербелістің гармоникалық энергиясы

$$G_i(v_i) = \omega_i(v_i + 1/2)$$

түрінде жазылады.

Мұнда ω_i - i -қалыпты тербеліске сәйкес келетін тербелістік толқын саны немесе оған пропорционал энергетикалық шама, ал $v_i = 0, 1, 2, \dots$ - осы тербелістің кванттық саны.

Егер тербеліс деңгейінің еселігі, яғни дегенерациясы d_i болса, энергия өрнегін

$$G_i(v_i) = \omega_i(v_i + d_i/2)$$

түрінде көрсетуге болады.

Гармоникалық жуықтауда энергетикалық деңгейлер бірдей аралықпен орналасады. Сондықтан көршілес деңгейлер арасындағы энергия айырмасы тұрақты болып қалады.

Негізгі тербелістік ауысу үшін

$$\Delta v_i = \pm 1$$

іріктеу ережесі орындалады.

Жұту процесінде төменгі деңгейден жоғары деңгейге көшу болғандықтан,

$$\Delta v_i = +1.$$

Ал сәуле шығару кезінде

$$\Delta v_i = -1.$$

Көпатомды молекула үшін бұл ереже әрбір қалыпты тербеліске жеке қолданылады.

5. Ангармоникалық осциллятор

Нақты молекуладағы тербелістерді идеал гармоникалық осциллятормен толық сипаттау мүмкін емес. Гармоникалық модельде атомдар арасындағы күш қашықтықтың өзгеруіне сызықтық тәуелді болады және потенциалдық энергия параболалық түрде өзгереді:

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

Алайда нақты молекулада атомдар бір-біріне өте жақындағанда тебілу күштері күрт артады, ал бір-бірінен тым алыстағанда химиялық байланыс әлсіреп, тіпті үзілуі мүмкін. Сондықтан нақты потенциалдық энергия қисығы идеал параболаға сәйкес келмейді. Бұл құбылыс ангармониялық деп аталады.

Ангармониялық жағдайда тербелістік деңгейлер арасындағы арақашықтық тұрақты болмайды. Кванттық сан өскен сайын энергетикалық деңгейлер бір-біріне жақындай түседі. Нақты молекуланың тербелістік энергиясын жуықтап

$$G(v) = \omega_e(v + 1/2) - \omega_e x_e(v + 1/2)^2$$

түрінде жазуға болады. Мұнда ω_e - гармоникалық жуықтаудағы тербелістік толқын саны, ал $\omega_e x_e$ - ангармониялық түзетуді сипаттайтын шама. Бұл өрнек нақты молекуланың тербелістік спектрінде гармоникалық модельден ауытқулардың пайда болуын түсіндіреді.

6. Негізгі, обертоңдық және комбинациялық тербелістер

Гармоникалық осциллятор үшін негізгі іріктеу ережесі

$$\Delta v = \pm 1.$$

Бірақ нақты молекула ангармониялық болғандықтан, жоғары ретті ауысулар да әлсіз түрде байқалуы мүмкін.

Мысалы:

$$\Delta v = \pm 2, \pm 3, \dots$$

шамаларына сәйкес ауысулар обертоңдық ауысулар деп аталады.

Жұту кезінде

$$v = 0 \rightarrow 2$$

ауысуы бірінші обертоңға,

$$v = 0 \rightarrow 3$$

ауысуы екінші обертоңға сәйкес келеді.

Негізгі жолақтармен салыстырғанда обертоңдық жолақтардың интенсивтілігі әдетте әлсіз болады.

Көпатомды молекулаларда бір уақытта екі немесе одан да көп қалыпты тербелістер қозуы мүмкін. Мұндай жағдайда комбинациялық жолақтар пайда болады.

Мысалы, i және j тербелістері бір уақытта қозса,

$$(v_i, v_j) = (0, 0) \rightarrow (1, 1)$$

сияқты ауысу жүзеге асуы мүмкін.

Оның жиілігі жуық түрде

$$\tilde{\nu}_{\text{комб}} \approx \tilde{\nu}_i + \tilde{\nu}_j$$

арқылы анықталады.

Демек, көпатомды молекулалардың нақты спектрі тек негізгі тербелістерден ғана емес, обертоңдық және комбинациялық жолақтардан да тұруы мүмкін.

7. Екі атомды молекуланың тербелістік-айналмалы кванттық өтулері

Молекула тербеліп қана қоймай, сонымен қатар айналады. Сондықтан нақты молекуланың энергетикалық күйін тек тербелістік кванттық санмен сипаттау жеткіліксіз.

Екі атомды молекуланың энергиясын жуық түрде

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

деп жазуға болады.

Айналмалы энергия деңгейлері айналмалы кванттық сан J арқылы сипатталады.

Қатты ротатор жуықтауында

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

өрнегі қолданылады.

Мұнда I - молекуланың инерция моменті:

$$I = \mu r^2.$$

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

Тербелістік ауысу кезінде айналмалы күй де өзгеруі мүмкін. Сондықтан ИҚ-спектрде бір ғана тербелістік жолақтың орнына көптеген жақын орналасқан сызықтардан тұратын тербелістік-айналмалы құрылым байқалады.

Бұл құрылым молекуланың тербелісі мен айналысының өзара байланысынан пайда болады.

8. Тербеліс пен айналыстың өзара әрекеттесуі

Молекула тербелген кезде атомдар арасындағы қашықтық өзгереді. Ал инерция моменті

$$I = \mu r^2$$

болғандықтан, тербеліс барысында I де өзгереді. Демек, молекуланың айналымы энергиясы оның тербелістік күйіне тәуелді болады.

Осы себептен нақты молекуланың энергиясын толықтай

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

деп тәуелсіз екі бөлікке бөлу тек жуықтау болып табылады.

Тербеліс пен айналыстың өзара әрекеттесуі тербелістік-айналымы спектрдің құрылымына әсер етеді. ИҚ-спектрдің жоғары ажыратымдылығында бір тербелістік ауысу айналымы деңгейлердің көптеген ауысуларына бөлініп көрінуі мүмкін.

Негізгі айналымы іріктеу ережесі

$$\Delta J = \pm 1$$

түрінде беріледі.

Сондықтан тербелістік және айналымы кванттық сандардың өзгеруі қатар жүреді:

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

$$\Delta J = \pm 1.$$

Осының нәтижесінде спектрде бір-біріне жақын орналасқан сызықтар жүйесі қалыптасады.

9. Көпатомды молекулалардағы топтық тербелістер

Көпатомды молекуланың барлық қалыпты тербелістерін бірдей дәрежеде нақты бір байланыспен байланыстыру әрқашан мүмкін емес. Дегенмен кейбір тербелістер молекуланың белгілі бір атомдар тобына немесе функционалдық тобына өте жақын локализацияланады.

Мұндай тербелістер топтық тербелістер деп аталады.

Топтық тербелістердің маңызды ерекшелігі - олардың спектрлік жиіліктері бір молекуладан екіншісіне өткенде салыстырмалы түрде аз өзгереді.

Мысалы, О–Н байланысының созылу тербелісі көбінесе кең ауқымда 3600 см^{-1} маңында байқалады. С=О байланысының созылу тербелісі шамамен 1700 см^{-1} аймағында орналасады.

Сол сияқты С–Н байланысының созылу тербелістері шамамен $2800\text{--}3300 \text{ см}^{-1}$ аралығында байқалуы мүмкін. Бұл мәндер молекуланың нақты құрылымына, байланыс ортасына және басқа атомдардың әсеріне байланысты өзгереді. Сондықтан ИҚ-спектрдегі белгілі бір жолақтың орналасуы функционалдық топты анықтауға мүмкіндік береді.

10. Негізгі тербелістердің түрлері

Көпатомды молекулалардың тербелістерін шартты түрде екі үлкен топқа бөлуге болады:

1. валенттік немесе созылу тербелістері;
2. деформациялық немесе бұрыштық тербелістер.

Валенттік созылу тербелісі

Бұл тербеліс кезінде химиялық байланыс бойындағы атомдар арасындағы қашықтық өзгереді.

Созылу тербелістері симметриялық және асимметриялық болуы мүмкін.

Симметриялық созылуда бірнеше бірдей байланыстар бір бағытта өзгереді.

Асимметриялық созылуда бір байланыс қысқарған кезде екіншісі ұзаруы мүмкін.

Деформациялық тербеліс

Деформациялық тербеліс кезінде атомдар арасындағы байланыс ұзындығы салыстырмалы түрде аз өзгеріп, байланыстар арасындағы бұрыш өзгереді.

Көпатомды молекулаларда деформациялық тербелістердің бірнеше түрі болады.

Оларға:

- тербелмелі иілу;
- қайшылау;
- тербеліп қозғалу;
- айнала бұралу;
- тербелістік шайқалу

сияқты қозғалыстар жатады.

Бұл қозғалыстардың барлығы молекуланың кеңістіктік құрылымына байланысты болады.

11. Тербелістердің симметриясы

Молекуланың қалыпты тербелістерін сипаттауда симметрия ұғымының маңызы өте зор.

Әрбір қалыпты тербеліс кезінде молекула өзінің белгілі бір симметрия қасиеттерін сақтауы немесе өзгертуі мүмкін. Тербелістің ИҚ-спектрде байқалуы үшін тербеліс кезінде молекуланың дипольдік моменті өзгеруі қажет:

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

Мұнда Q - қалыпты тербелістің координатасы.

Егер тербеліс кезінде дипольдік момент өзгермесе,

$$d\mu/dQ = 0,$$

онда бұл тербеліс электрлік дипольдік механизм бойынша ИҚ-активті болмайды.

Ал Раман спектроскопиясында басқа шарт орындалады. Тербеліс кезінде молекуланың полярланғыштығы өзгеруі қажет:

$$d\alpha/dQ \neq 0.$$

Мұнда α - молекуланың полярланғыштығы.

Осыған байланысты бір тербеліс ИҚ спектрінде күшті байқалғанымен, Раман спектрінде әлсіз болуы немесе керісінше болуы мүмкін. Бұл ИҚ және Раман спектроскопияларының бірін-бірі толықтыратын әдістер екенін көрсетеді.

12. ИҚ-спектрдегі «саусақ ізі» аймағы

Көптомды молекулалардың ИҚ-спектрінде шамамен $1500\text{--}500\text{ см}^{-1}$ аралығында көптеген күрделі жолақтар орналасады.

Бұл аймақ көбінесе «саусақ ізі аймағы» деп аталады. Оның ерекшелігі - молекуланың бүкіл қаңқасына байланысты көптеген тербелістердің осы аймақта орналасуы. Мысалы, C—C, C—O, C—N байланыстарының созылуы, сондай-ақ көптеген деформациялық тербелістер осы аймақта байқалады. Әрбір молекуланың осы аймақтағы спектрі өзіндік ерекшелікке ие болады. Сондықтан белгісіз заттың спектрін белгілі заттың эталондық спектрімен салыстыру арқылы оны идентификациялауға болады. Ал шамамен $1500\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ аралығы көбінесе функционалдық топтардың сипаттамалық тербелістерін анықтау үшін пайдаланылады.

Мысалы:

Байланыс немесе топ Шамаменгі толқын саны, см^{-1}

O—H созылуы	3200–3600
N—H созылуы	3300–3500
C—H созылуы	2800–3300
C=O созылуы	≈1650–1750
C=C созылуы	≈1600–1700
C≡C созылуы	≈2100–2200
C≡N созылуы	≈2100–2250
C—O созылуы	≈1000–1300

Бұл мәндер тек бағдарлық мәндер болып табылады. Нақты спектрлік жолақтың орны молекуланың химиялық ортасына, байланыс күшіне, конъюгацияға, сутектік байланысқа және басқа факторларға байланысты өзгеруі мүмкін.

13. ИҚ-спектроскопияның сапалық талдауда қолданылуы

Инфрақызыл спектроскопия химиялық заттарды сапалық анықтаудың маңызды әдістерінің бірі болып табылады. Егер белгісіз заттың ИҚ-спектрі алынатын болса, алдымен жоғары жиілікті аймақтағы сипаттамалық жолақтарға назар аударылады.

Мысалы, О–Н тобының болуы шамамен $3200\text{--}3600\text{ см}^{-1}$ аймағындағы кең жолақ арқылы байқалуы мүмкін.

C=O тобының болуы шамамен 1700 см^{-1} маңындағы интенсивті жолақпен сипатталуы мүмкін. Ал кейін 1500 см^{-1} төмен орналасқан «саусақ ізі» аймағы зерттеледі. Осылайша талдау екі кезеңнен тұрады:

1. функционалдық топтарды сипаттамалық жолақтар бойынша анықтау;
2. «саусақ ізі» аймағын эталондық спектрмен салыстыру арқылы затты нақтылау.

Бұл әдіс органикалық қосылыстарды, полимерлерді, дәрілік заттарды, мұнай өнімдерін, биологиялық материалдарды және көптеген басқа заттарды зерттеуде қолданылады.

14. Молекула ортасының спектрге әсері

Топтық тербелістердің жиілігі бір молекуладан екінші молекулаға толық тұрақты болмайды. Себебі химиялық байланысқа оның қоршаған ортасы әсер етеді. Мысалы, О–Н байланысының тербелістік жиілігі бос молекулада бір мәнге жақын болса, басқа молекуламен сутектік байланыс түзілген жағдайда төменірек толқын санына ығысуы мүмкін.

Сутектік байланыс О–Н байланысын әлсіретіп, оның тербеліс жиілігін өзгертеді. Сондықтан ерітіндідегі заттың ИҚ-спектрі таза заттың спектрінен ерекшеленуі мүмкін. Бұл жағдай спектрді талдау кезінде өте маңызды. ИҚ-спектрдегі жолақтың орнына ғана емес, оның пішініне, еніне және интенсивтілігіне де назар аудару қажет.

15. ИҚ және Раман спектроскопияларының толықтырушы сипаты

Инфрақызыл және Раман спектроскопиялары молекулалардың тербелістік күйлерін зерттейді, бірақ олардың физикалық механизмдері әртүрлі. ИҚ спектроскопиясында тербеліс кезінде дипольдік моменттің өзгеруі қажет:

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

Раман спектроскопиясында молекуланың поляризацияшылдығы өзгеруі керек:

$$d\alpha/dQ \neq 0.$$

Сондықтан кейбір тербелістер ИҚ спектрінде күшті байқалып, Раман спектрінде әлсіз болуы мүмкін. Мысалы, симметриялық тербелістер көбінесе Раман спектрінде жақсы көрінеді, ал асимметриялық және диполь моментінің айтарлықтай өзгеруіне әкелетін тербелістер ИҚ спектрінде айқын байқалуы мүмкін. Екі әдісті бірге қолдану молекуланың симметриясы мен құрылымы туралы толық ақпарат алуға мүмкіндік береді.

16. Көпатомды молекуланың тербелісін спектроскопиялық зерттеудің маңызы

Көпатомды молекулалардың қалыпты тербелістерін зерттеу арқылы молекуланың:

- химиялық байланыстары;
- функционалдық топтары;
- молекулалық симметриясы;
- кеңістіктік құрылысы;
- байланыстардың салыстырмалы беріктігі;
- молекулааралық әрекеттесулері;
- сутектік байланыстары

туралы ақпарат алуға болады.

Сондықтан ИҚ-спектроскопия тек физикада ғана емес, химияда, материалтануда, фармацевтикада, биофизикада және молекулалық биологияда кеңінен қолданылады.

Қорытынды

Көпатомды молекулалардың тербелістік қозғалысы екі атомды молекулаға қарағанда күрделі болғанымен, оны қалыпты тербелістердің жиынтығы ретінде қарастыруға болады. N атомнан тұратын сызықтық молекула үшін қалыпты тербелістер саны $3N - 5$, ал сызықтық емес молекула үшін $3N - 6$ формуласы арқылы анықталады.

Әрбір қалыпты тербелістің өзіндік жиілігі және квантталған энергетикалық деңгейлері болады. Гармоникалық жуықтауда тербелістік деңгейлер бірдей аралықта орналасады және негізгі ауысу үшін $\Delta v = \pm 1$ іріктеу ережесі орындалады. Нақты молекулаларда ангармониялық әсерлер болғандықтан, энергетикалық деңгейлердің арақашықтығы тұрақты болмайды және обертондық әрі комбинациялық жолақтар пайда болуы мүмкін.

Екі атомды молекула бір уақытта тербеліп және айнала алатындықтан, оның спектрінде тербелістік-айналмалы ауысулар байқалады. Тербеліс барысында атомдар арасындағы қашықтықтың өзгеруі инерция моментінің өзгеруіне алып келеді, сондықтан тербеліс пен айналыс өзара байланысты.

Көпатомды молекулалардағы топтық тербелістер ИҚ-спектроскопияда ерекше маңызды. Белгілі бір функционалдық топтарға тән тербеліс жиіліктері молекуладағы химиялық топтарды анықтауға мүмкіндік береді. Ал төменгі толқын сандары аймағындағы күрделі спектр «саусақ ізі» ретінде затты нақты идентификациялауға мүмкіндік береді.

Осылайша инфрақызыл спектр молекуланың тербелістік қозғалыстарының өзіндік көрінісі болып табылады. Спектрдегі әрбір жолақ молекула құрылымының белгілі бір ерекшелігімен байланысты және оларды талдау арқылы заттың молекулалық құрылымы туралы маңызды ақпарат алуға болады.

Бақылау сұрақтары

1. Көпатомды молекуланың қалыпты тербелісі дегеніміз не?
2. N атомнан тұратын сызықтық молекуланың қалыпты тербелістерінің саны қалай анықталады?
3. Сызықтық емес молекуланың қалыпты тербелістерінің саны қандай формуламен анықталады?
4. H_2O молекуласында неше қалыпты тербеліс бар және олар қандай қозғалыстарға сәйкес келеді?
5. Гармоникалық осциллятор моделі молекуланың қандай қасиеттерін сипаттайды?
6. Ангармониялық осциллятордың гармоникалық осциллятордан негізгі айырмашылығы неде?
7. Ангармониялық әсерлер спектрдегі энергетикалық деңгейлерге қалай әсер етеді?
8. Негізгі тербеліс, обертоны және комбинациялық тербеліс дегеніміз не?
9. Көпатомды молекуладағы топтық тербелістердің ерекшелігі қандай?
10. Валенттік және деформациялық тербелістердің айырмашылығы неде?
11. Симметриялық және асимметриялық созылу тербелістері қалай ажыратылады?
12. Инфрақызыл спектрде тербелістің байқалуына қандай шарт қойылады?
13. ИҚ-спектроскопиядағы «саусақ ізі» аймағы дегеніміз не?
14. Тербелістік-айналмалы спектр қалай пайда болады?
15. Тербеліс пен молекуланың айналымды қозғалысы не себепті өзара әрекеттеседі?
16. ИҚ және Раман спектроскопияларындағы тербелістік активтіліктің шарттары қандай?
17. ИҚ-спектроскопия арқылы функционалдық топтарды қалай анықтауға болады?
18. Су тектік байланыс $O-H$ тербелісінің спектрлік орнына қалай әсер етеді?
19. ИҚ-спектроскопияның сапалық химиялық талдаудағы маңызы қандай?
20. Неліктен ИҚ және Раман спектроскопияларын бірге қолдану молекула құрылымын зерттеуде пайдалы?