Әр тақырыпта бір есеп, берілгендері, қолданылатын формулалар, қадамдық шешуі және физикалық түсіндірмесі берілген. Есептер молекулалық спектроскопия, ИҚ және Раман спектроскопиясы бойынша стандартты теориялық қатынастарға негізделген.

Негізгі тұрақтылар: $c = 2.9979 \times 10^8\ \mathrm{m\,s^{-1}}$, $h = 6.6261 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$, $N_A = 6.0221 \times 10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$, $1\ \mathrm{u} = 1.66054 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg}$.

2-тақырып. Молекула және оның энергиясы. Екі атомды молекула

Есеп 2. CO молекуласының инерция моменті және айналмалы тұрақтысы

Есеп шарты. $^{12}\mathrm{C}^{16}\mathrm{O}$ молекуласының байланыс ұзындығы $r = 112.8\ \mathrm{pm}$. Келтірілген массаны, инерция моментін және айналмалы тұрақтыны B (см$^{-1}$) есептеңіз.

Шешуі. Келтірілген масса:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{12 \cdot 16}{12 + 16}\ \mathrm{u} = 6.8571\ \mathrm{u}.$$

SI жүйесінде:

$$\mu = 6.8571(1.66054 \times 10^{-27}) = 1.139 \times 10^{-26}\ \mathrm{kg}.$$

Инерция моменті:

$$I = \mu r^2 = (1.139 \times 10^{-26})(112.8 \times 10^{-12})^2 = 1.449 \times 10^{-46}\ \mathrm{kg\,m^2}.$$

Қатты ротатор үшін айналмалы тұрақты:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I}.$$

$c = 2.9979 \times 10^{10}\ \mathrm{cm\,s^{-1}}$ деп алсақ,

$$B \approx 1.93\ \mathrm{cm^{-1}}.$$

Жауабы: $\mu = 1.139 \times 10^{-26}\ \mathrm{kg}$; $I = 1.449 \times 10^{-46}\ \mathrm{kg\,m^2}$; $B \approx 1.93\ \mathrm{cm^{-1}}$.

Түсіндірме. Айналмалы спектрден алынатын B шамасы арқылы молекуладағы ядролар арақашықтығын анықтауға болады.