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

5-тақырып. Комбинациялық шашырау спектроскопиясының негіздері

Есеп 5. Стокс және антистокс сәулелерінің толқын ұзындықтары

Есеп шарты. Раман спектрін алу үшін $\lambda_0 = 532\ \mathrm{nm}$ лазер қолданылды. Молекуланың Раман ығысуы $1000\ \mathrm{cm^{-1}}$. Стокс және антистокс сәулелерінің толқын ұзындықтарын табыңыз.

Шешуі. Лазердің толқын саны:

$$\tilde{\nu}_0 = \frac{10^7}{\lambda_0(\mathrm{nm})} = \frac{10^7}{532} = 18797\ \mathrm{cm^{-1}}.$$

Стокс үшін:

$$\tilde{\nu}_S = \tilde{\nu}_0 - 1000 = 17797\ \mathrm{cm^{-1}},$$

$$\lambda_S = \frac{10^7}{17797} = 561.9\ \mathrm{nm}.$$

Антистокс үшін:

$$\tilde{\nu}_{AS} = \tilde{\nu}_0 + 1000 = 19797\ \mathrm{cm^{-1}},$$

$$\lambda_{AS} = \frac{10^7}{19797} = 505.1\ \mathrm{nm}.$$

Жауабы: $\lambda_S \approx 561.9\ \mathrm{nm}$; $\lambda_{AS} \approx 505.1\ \mathrm{nm}$.

Түсіндірме. Стокс фотоны энергиясының бір бөлігін молекулаға береді, сондықтан оның толқын ұзындығы ұлғаяды. Антистокс фотоны молекуладан энергия алады және қысқа толқынға ығысады.