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

11-тақырып. Жақын ИҚ (NIR) спектроскопиясы

Есеп 11. O-H тербелісінің бірінші обертонын NIR аймағында бағалау

Есеп шарты. O-H созылуының негізгі жолағы шамамен $3400\ \mathrm{cm^{-1}}$. Гармоникалық жуықтауда бірінші обертонның орнын және сәйкес толқын ұзындығын бағалаңыз.

Шешуі. Бірінші обертон үшін жуық түрде:

$$\tilde{\nu}_{2\leftarrow 0} \approx 2\tilde{\nu}_{1\leftarrow 0}.$$

Сонда

$$\tilde{\nu}_{2\leftarrow 0} \approx 2(3400) = 6800\ \mathrm{cm^{-1}}.$$

Толқын ұзындығы:

$$\lambda(\mathrm{nm}) = \frac{10^7}{\tilde{\nu}(\mathrm{cm^{-1}})} = \frac{10^7}{6800} = 1471\ \mathrm{nm}.$$

Жауабы: $\tilde{\nu} \approx 6800\ \mathrm{cm^{-1}}$; $\lambda \approx 1471\ \mathrm{nm}$.

Түсіндірме. 1471 нм NIR аймағына жатады. Нақты молекулада ангармониялық әсерге байланысты обертон дәл екі еселенген жиілікте орналаспайды.