

Закон Бугера–Ламберта–Бера

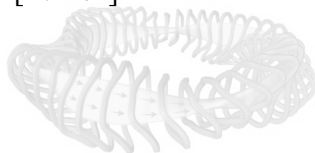
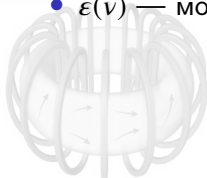
$$I(\nu) = I_0(\nu) \cdot e^{-\mu(\nu) \cdot l}$$

- $\mu(\nu)$ — коефіцієнт поглинання при частоті ν [см^{-1}]
- l — довжина шляху світла в зразку (см)
- У логарифмічній формі:

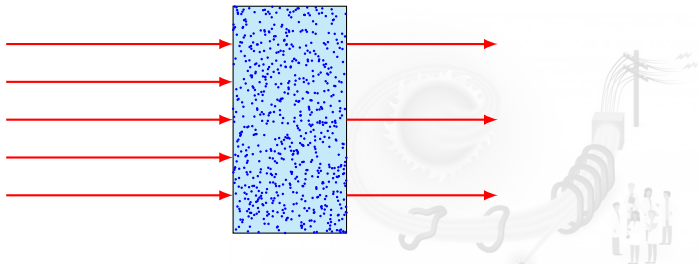
$$A(\nu) = \log_{10} \left(\frac{I_0}{I} \right) = \epsilon(\nu) \cdot c \cdot l$$

ТОКАМАК

- $\epsilon(\nu)$ — молярний коефіцієнт екстинкції $\left[\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{см}} \right]$ OR



Як досліджують ІЧ-спектри



- Джерело інфрачервоного випромінювання створює інтенсивність $I_0(\nu)$.
- Це випромінювання проходить через зразок, і на виході реєструється $I(\nu)$.
- Ослаблення сигналу на частоті ν пов'язане з поглинанням світла молекулами.
- Вимірюється відношення $\frac{I(\nu)}{I_0(\nu)}$, що несе інформацію про енергії коливальних переходів.

Енергія, що поглинається зразком

- Поглинута енергія на частоті ν :

$$dE(\nu) = [I_0(\nu) - I(\nu)] d\nu = I_0(\nu) (1 - e^{-\mu(\nu)l}) d\nu$$

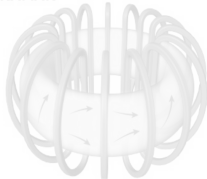
- Якщо $\mu(\nu) \cdot l \ll 1$, маємо:

$$1 - e^{-\mu(\nu)l} \approx \mu(\nu)l \Rightarrow dE(\nu) \approx I_0(\nu) \cdot \mu(\nu) \cdot l d\nu$$

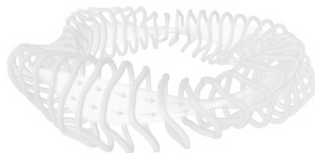
- Підставляємо $\mu(\nu) = \varepsilon(\nu) \cdot c$:

$$dE(\nu) \approx I_0(\nu) \cdot \varepsilon(\nu) \cdot c \cdot l d\nu$$

ТОКАМАК



STELLARATOR



Сумарна інтенсивність смуги

- Загальна енергія, поглинута зразком:

$$E_{\text{total}} \propto \int \varepsilon(\nu) d\nu$$

- Визначаємо інтегральну інтенсивність смуги:

$$I = \int \varepsilon(\nu) d\nu$$

- Одиниці виміру:

$$\frac{1000 \text{ см}^2}{\text{моль}} \cdot \text{см}^{-1} = \frac{0.01 \text{ км}}{\text{моль}}$$

- Це і є величина, яку порівнюють з теоретичними розрахунками.

ТОКАМАК

STELLARATOR

Теоретичне визначення $\varepsilon(\nu)$

- $\varepsilon(\nu)$ визначає ймовірність коливального переходу при частоті ν
- Пропорційна квадрату перехідного дипольного моменту:

$$\varepsilon(\nu) \propto |\langle \psi_f | \mu | \psi_i \rangle|^2 \cdot \delta(\nu - \nu_0)$$

- У реальних спектрах дельта-функція замінюється профілем (Гауссівським чи Лоренцівським):

$$\varepsilon(\nu) = \varepsilon_{\max} \cdot \text{profile}(\nu - \nu_0)$$

- Ширина смуги залежить від температури, колізій і розподілу геометрій

ТОКАМАК

STELLARATOR

Розрахунок $\varepsilon(\nu)$ у квантовій хімії

1. Оптимізується геометрія молекули
2. Обчислюються нормальні коливання (гармонічні частоти)
3. Для кожного режиму:

$$\varepsilon \propto \left| \frac{d\vec{\mu}}{dQ} \right|^2$$

— градієнт дипольного моменту по координаті нормального коливання

4. Результат дається як інтенсивність у $\frac{\text{КМ}}{\text{моль}}$ — інтеграл:

$$I = \int \varepsilon(\nu) d\nu$$

5. Спектр формується згорткою піків із шириною згладження

ТОКАМАК

STELLARATOR