

Закон Бугера–Ламберта–Бера

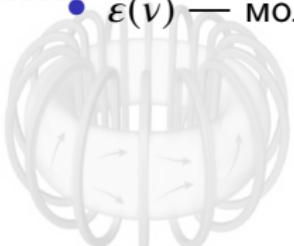
$$I(v) = I_0(v) \cdot e^{-\mu(v) \cdot l}$$

- $\mu(v)$ — коефіцієнт поглинання при частоті v [см⁻¹]
- l — довжина шляху світла в зразку (см)
- У логарифмічній формі:

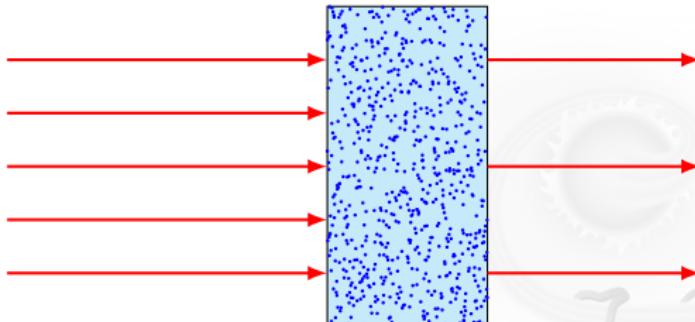
$$A(v) = \log_{10} \left(\frac{I_0}{I} \right) = \varepsilon(v) \cdot c \cdot l$$

TOKAMAK

- $\varepsilon(v)$ — молярний коефіцієнт екстинкції $\left[\frac{l}{\text{МОЛЬ}\cdot\text{СМ}} \right]$



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 v :

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

- Якщо $\mu(v) \cdot l \ll 1$, маємо:

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

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

$$dE(v) \approx I_0(v) \cdot \varepsilon(v) \cdot c \cdot l dv$$

TOKAMAK

STELLARATOR

Сумарна інтенсивність смуги

- Загальна енергія, поглинута зразком:

$$E_{\text{total}} \propto \int \varepsilon(v) dv$$

- Визначаємо інтегральну інтенсивність смуги:

$$I = \int \varepsilon(v) dv$$

- Одиниці виміру:

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

TOKAMAK

STELLARATOR

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

Теоретичне визначення $\varepsilon(v)$

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

$$\varepsilon(v) \propto |\langle \psi_f | \mu | \psi_i \rangle|^2 \cdot \delta(v - v_0)$$

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

$$\varepsilon(v) = \varepsilon_{\max} \cdot \text{profile}(v - v_0)$$

TOKAMAK

- Ширина смуги залежить від температури, колізій і розподілу геометрій

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:

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

TOKAMAK



STELLARATOR



5. Спектр формується згорткою піків із шириною згладження