

ОТНЕСЕНИЕ ПОЛОС

Обсчитывается спектр, полученный при 40°C, так как при этой температуре уже достигается достаточная плотность паров йода, но еще мала населенность колебательных уровней $V'' > 2$ основного электронного состояния. Поэтому можно считать, что в спектре присутствуют только 2 прогрессии:

$V'' = 1 \rightarrow V'$ (правая – низкочастотная)

$V'' = 0 \rightarrow V'$ (левая – высокочастотная)

см. образец спектра и описание работы, стр. 18, 19.

В этих предположениях первая справа - самая низкочастотная полоса соответствует переходу $V'' = 1 \rightarrow V' = 0$. Волновое число этой полосы $\sim 15500 \text{ см}^{-1}$. Реальный спектр при 40 ° С может начинаться с низкочастотной стороны как с полос $\nu < 15500$ (есть переходы с $V'' = 2,3$), так и с $\nu > 15500$ (если мала чувствительность спектрофотометра).

КОНКРЕТНОЕ УКАЗАНИЕ: Полоса вблизи 15500 см^{-1} соответствует переходу $V'' = 1 \rightarrow V' = 0$. Соседняя с ней в спектре слева и последующие соответствуют значениям $V'' = 1$ и $V' = 1, 2, 3$ и т.д. В области значений $V' = 19 - 25$ в спектре наблюдается наложение прогрессий $V'' = 1$ и $V'' = 0$, наиболее ярко выраженное при $V' = 22 (\pm 1 - \text{возможная ошибка начала отсчета } V')$. Полоса, соответствующая переходу $V'' = 1 \rightarrow V'$, имеет характерный двугорбый вид, причем правый максимум поглощения относится к переходу $V'' = 1 \rightarrow V' = 22$, левый – к переходу $V'' = 0 \rightarrow V' = 20$.

Разность значений V' , равная 2 для двух близлежащих полос прогрессий $V'' = 1$ и $V'' = 0$ есть следствие ангармонизма колебаний молекулы йода, заметно проявляющегося в области значений $V' \sim 20$ (см. описание стр. 19).

Далее при увеличении частоты прогрессия с $V'' = 1$ затухает, и спектр содержит только полосы, соответствующие переходам $V'' = 0 \rightarrow V'$. Значения $V' = 20, 21, 22$ и т.д. нужно проставить напротив максимумов поглощения (поглощение отсчитывается вниз!) соответствующих полос, следующих друг за другом в сторону увеличения частоты (в спектре – налево).

Отнесение полос закончено.



