

频率 $\nu = 1/T$

波数 $\sigma = 1/\lambda$

波速 $v = \lambda \cdot \nu$

光能量 $E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda = h \cdot c \cdot \sigma$ 普朗克公式

电势能 $E = U \cdot Q$ 电子伏特的由来

原子数目 $N = n \cdot N_A$

光谱形成 $\Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot \nu$

波谱区	γ -射线	X-射线	远紫外光	近紫外光	可见光
波长	$10^{-4} \sim 10^{-3}$ nm	$10^{-3} \sim 10$ nm	10~200nm	200~400nm	400~750nm
跃迁类型	核能级	原子内层电子		原子外层电子/分子成键电子	
波谱区	近红外光	中红外光	远红外光	微波	射频
波长	0.75~2.5 μ m	2.5~50 μ m	50~1000 μ m	0.1~100cm	1~1000 m
跃迁类型	分子振动		分子转动		电子、核自旋

例1：完成下表

光波	T(s)	ν (Hz)	λ (nm)	σ (cm ⁻¹)	E(J)	E(eV)
1					6.63×10^{-17}	
2		2×10^{14}				
3						5
4			320			

例2：钠原子吸收2.11eV的能量后跃迁至激发态，该激发态钠原子回到基态发射的特征谱线波长为多少？

光栅有关的公式

光栅方程 $d(\sin \alpha + \sin \beta) = K \lambda$

角色散率 $\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{K}{d \cos \beta}$

线色散率 $\frac{dl}{d\lambda} = \frac{d\beta}{d\lambda} \cdot f = \frac{K \cdot f}{d \cos \beta}$

倒线色散率 $\frac{d\lambda}{dl} = \frac{d}{K \cdot f}$

光栅分辨率 $R = \frac{\bar{\lambda}}{\Delta\lambda} = K \cdot N$

光谱带宽 $W = D^{-1} \cdot S$

例3: 一平面反射光栅，当入射角为 40° ，衍射角为 10° ，为了得到波长为 400nm 的一级光谱，光栅上每毫米的刻线为多少？

例4: 若光栅的宽度为 5cm ，每毫米的刻线数为 1000 条，则该光栅的一级光谱的理论分辨率是多少？一级光谱中波长为 370.036 和 370.066nm 的两条谱线能否分开？

原子吸收与发射有关的公式

玻尔兹曼方程

$$N_i = N_0 \frac{g_i}{g_0} e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

赛伯-罗马金公式

$$\lg I = b \lg c + \lg a$$

内标定量

$$\lg R = \lg I / I_0 = b \lg c + \lg A$$

黑度内标定量

$$\Delta S = S - S_0 = \gamma \lg I / I_0 = \gamma b \lg c + \gamma \lg A$$

原子吸收定量

$$A = \lg I_0 / I = k \cdot c$$

灵敏度(S)

$$S = dA / dc$$

特征浓度

$$\rho_0 = 0.0044 / S$$

特征质量

$$m_0 = \rho_0 \cdot V$$

检出限

$$c_L = \frac{3\sigma}{S}$$

例5: 在火焰温度为3000K时, Zn的 $4^1S_0 \rightarrow 4^1P_1$ 跃迁的共振线波长为213.9nm, 计算基态和激发态原子数的比值? 如果火焰温度增加至7000K, 该比值如何变化? (已知 $g_1/g_0=3$)

例6: 用石墨炉原子吸收测定5ng/mL的钙标准溶液, 进样量为10 μ L, 测定透过率为48%。另外对5ng/mL的空白溶液进行了11次测定, 其吸光度分别为0.002、0.003、0.002、0.001、0.003、0.000、-0.002、0.003、0.002、-0.001、0.002。试计算该仪器测定钙的特征浓度、浓度检出限和质量检出限。

例7: 用冷原子吸收法测定排放废水中的微量汞, 分别吸取废水10mL至6个25mL容量瓶, 分别加入0、0.5、1.0、1.5、2.0mL的0.4mg/L的Hg标准溶液后测定, 它们的吸光度分别为0.067、0.145、0.222、0.294、0.371和0.445。在相同的条件下做空白实验, 空白溶液的吸光度为0.015。计算该废水中汞的浓度。