

“Утверждаю”
директор ГЕОХИ РАН
академик

Э.М.Галимов

“ ___ ” _____ 2003 года

ОПТИЧЕСКИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Составители:

Член-корр.РАН Грибов Л.А.

Д.ф.-м.н.Баранов В.И.

Основы квантовой теории структуры и спектров молекул. Постулаты Бора. Стационарные состояния. Уровни энергии. Вероятности переходов. Дипольное приближение. Дипольный момент перехода. Коэффициенты Эйнштейна. Сила осциллятора. Симметрия молекул и правила отбора.

Типы внутренних движений в молекулах. Адиабатическое приближение. Разделение электронных и ядерных движений. Вращательные, колебательные и электронные состояния. Иерархия переходов. Принцип Франка-Кондона.

Модельные представления о многоатомных молекулах. Виды молекулярных моделей: структурные формулы, геометрические фигуры и др. Спектральные отображения молекулярных моделей и типы молекулярных спектров, проявляющихся в различных спектральных диапазонах: радиодиапазоне (микроволновые спектры), далёком, среднем и близком ИК, видимом и УФ. Спектры поглощения и излучения (люминесценции). Одно и многоквантовые процессы. Причины появления спектров комбинационного рассеяния. Факторы, определяющие положения полос и линий в спектрах разного типа и их интенсивности. “Пиковые” и интегральные интенсивности.

Прямые и обратные спектральные задачи.

Закон Бугера-Ламберта-Бера. Оптическая плотность, коэффициент экстинкции. Количественный анализ чистых веществ и смесей по спектрам поглощения и люминесценции. Образцы стандартного состава (материальные эталоны). Разрешающая способность спектральных приборов, математические методы ее увеличения. Базовые линии и исключение взаимного влияния спектров отдельных компонент. Принципы количественного спектрального анализа, основанного на измерении интегральных характеристик в экспериментальных спектрах. Абсолютные интенсивности и возможность проведения количественных анализов без использования материальных эталонов. Обработка спектральных данных с помощью компьютерно-ориентированных статистических методов.

Качественный анализ индивидуальных веществ. Характеристические спектральные признаки, физическая природа их появления, характеристические интервалы и их математическое описание. Спектро-структурные корреляции. Структурно-групповой анализ состава сложных соединений, формально-логическая теория структурно-группового анализа. Проблема изомерии и пути преодоления возникающих трудностей анализа.

Понятие об информационно-поисковых и экспертных системах. Способы хранения информации в информационно-поисковых системах и особенности идентификации веществ с помощью таких систем. Базы данных. Общая идея и архитектура экспертных систем. Обратные связи в экспертных системах и проблема “фильтрации” исходных гипотез. Тандем исследователь-система. Понятие о “дружелюбии” экспертных систем. Примеры таких систем.

Изучение изомерии в сложных молекулах, роль расчетов оптических молекулярных спектров на основе современной теории.

Новые методы наблюдения спектров: синхронная спектроскопия в видимой и УФ областях, спектры Шпольского, “выжигание провалов”, тонкоструктурные электронно-колебательные спектры сверхзвуковых молекулярных струй (пучков), нано-, пико- и фемтосекундные виды спектроскопии, релаксационные эффекты и спектры с временной задержкой. Фурье-спектрометры и принципы их действия. Современные возможности наблюдения спектров комбинационного рассеяния. Понятие о “трёхмерных” спектрах КР. Анализ поверхностей методом нарушенного полного внутреннего

отражения. Лазерная внутривибрационная спектроскопия. Когерентная активная спектроскопия комбинационного рассеяния.

Лидары и дистанционные методы спектрального анализа объектов окружающей среды, оптическая интроскопия.

Рекомендуемая литература

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., 1969.
2. Грибов Л.А. Введение в молекулярную спектроскопию. М., 1976.
3. Эляшберг М.Е., Грибов Л.А., Серов В.В. Молекулярный спектральный анализ и ЭВМ. М., 1980.
4. Грибов Л.А., Баранов В.И., Зеленцов Д.Ю. Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. Теория и методы расчета. М., 1997.
5. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М., 1987.
6. Кузяков Ю.Я. Методы спектрального анализа. М., 1990.
7. Бранд Дж., Эглинтон Г. Применение спектроскопии в химии, М., 1967.
8. Гилсон Т., Хендра П. Лазерная спектроскопия КР в химии. М., 1973.
9. Лебедева В.В. Техника оптической спектроскопии. М., 1986.
10. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М., 1986.