

# МОЛЕКУЛЯРНЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

для специальности 1-31 04 01 Физика (по направлениям)  
(1-31 04 01-01 научно-исследовательская деятельность)

## **Общие вопросы прикладной молекулярной спектроскопии.**

*Задачи междисциплинарной аналитики.*

Типовые задачи аналитической спектроскопии. Фундаментальная и прикладная части. Элементный анализ, молекулярный анализ, структурно-групповой анализ, определение чистоты вещества, изотопный анализ. Терминология. Возможности молекулярной спектроскопии.

*Методические особенности аналитических измерений*

Выбор аналитических областей. Использование информации, содержащейся в спектре. Мешающее излучение, его природа и учет. Селективные фильтры. Проверка линейности шкалы ординат. Измерение интенсивности в спектрах испускания, использование эталонных источников. Измерение интенсивности в спектрах поглощения, закон Бугера. Область выполнимости, причины отклонений. Единицы коэффициента поглощения.

## **Спектроскопия колебаний молекул.**

*Абсорбционная спектроскопия колебаний молекул.*

Методы измерения и их применение в практике колебательных спектров поглощения жидкостей, кристаллов в областях фундаментальных частот и обертонов. Методы измерения спектров поглощения неоднородных образцов.

*Спектры комбинационного рассеяния.*

Области применения спектров комбинационного рассеяния. Прикладные аспекты анализа веществ по спектрам КР. Новые методы в спектроскопии комбинационного рассеяния.

## **Спектроскопия отражения.**

*Определение оптических постоянных вещества по спектрам отражения.*

Методы измерения при нормальном отражении, при вариации углов и/или состояния поляризации пучка. Использование уравнений связи между постоянными. Спектроскопия ослабленного внутреннего отражения. Однократное и многократное отражение. Материалы для изготовления элементов ОВО. Оптические схемы приставок ОВО и МОВО. Область применимости.

*Спектроскопия диффузного отражения.*

Методы измерения спектров поглощения неоднородных образцов - иммерсия, КВr-техника. Спектроскопия диффузного рассеяния. Относительный вклад зеркального отражения и пропускания, ослабленного поглощением.

## **Спектроскопия электронного поглощения молекул.**

*Прикладные аспекты электронной спектроскопии молекул.*

Области применения спектрофотометрии и используемые аналитические подходы. Структура молекул и электронно-колебательные спектры. Спектры поглощения и испускания молекул разной степени сложности. Типы переходов. Причины нарушения закона Бугера-Ламберта-Бера в растворах молекул..

*Применение абсорбционного анализа в химии, медицине, промышленности.*

Абсорбционный анализ ионов металлов в растворах с использованием красителей – адсорбционных индикаторов. Чувствительность и избирательность методов. Прикладные аспекты высокоселективной тонкоструктурной спектроскопии.

### **Люминесцентная спектроскопия**

*Основные закономерности люминесценции сложных органических молекул*

Спектры люминесценции. Времена и кинетика затухания. Поляризация люминесценции. Фосфоресценция и замедленная флуоресценция. Связь люминесцентных характеристик и структуры.

*Методы молекулярного люминесцентного анализа*

Собственная люминесценция. Химическое превращение детектируемых соединений в люминесцирующие. Люминесцентные индикаторы. Чувствительность флуоресцентных методов. Селективность. Эффект внутреннего фильтра, реабсорбция, вторичная люминесценция. Аппаратура для люминесцентных исследований Матрицы возбуждения – испускания. Синхронное сканирование. Применение кинетической спектроскопии. Дистанционный анализ. Волноводные системы.

*Получение информации о параметрах молекулярных систем и процессов, протекающих в них, из анализа характеристик люминесценции.*

Информация, получаемая из анализа спектров. Влияние межмолекулярных взаимодействий. Информация, извлекаемая из данных по тушению и кинетике люминесценции. Мгновенные спектры. Информация, получаемая из анализа поляризационных характеристик люминесценции. Применение переноса энергии для исследования молекулярных систем. Процессы с участием триплетных состояний. Датчики температуры. Аналитические применения фосфоресценции при комнатной температуре.

### **Новые методы и приборы для молекулярной спектроскопии.**

*Новые методы и приборы для молекулярной спектроскопии.*

Оптические сенсоры (датчики) — оптоволоконные, адсорбционные. Фотоника. Интегральные датчики. Сверхчувствительные методы.

## **Перечень основной и дополнительной литературы**

### **Основная**

1. Л.В. Левшин, А.М. Салецкий. Оптические методы исследования молекулярных систем. М.: МГУ, 1994
2. Н. Харрик. Спектроскопия внутреннего отражения. М.: Мир, 1970
3. В.А. Кизель. Отражение света. М.: Наука, 1973
4. А. Андерсон. Применение спектров комбинационного рассеяния. М.: Мир, 1977
5. Дж. Лакович. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986
6. И.Я. Берштейн, Ю.Л. Каминский. Спектрофотометрический анализ в органической химии. М.: Наука, 1986
7. К.И. Тарасов. Светосильные спектральные приборы. Л.: Машиностроение, 1982
8. А. Смит. Прикладная ИК спектроскопия. М.: Мир, 1982
9. Л.В. Левшин, А.М. Салецкий. Люминесценция и ее измерение. М., МГУ, 1989

10. С.Паркер. Фотолюминесценция растворов. М., Мир, 1972
11. И.М. Гулис, А.И. Комяк Люминесценция. Минск, БГУ, 2009

*Дополнительная*

1. Лазерная аналитическая спектроскопия. Под ред. В.С.Летохова. М., Наука, 1983
2. Лазерная спектроскопия атомов и молекул. Под ред. Г.Вальтера. М., Мир, 1979
3. В.П.Жарков, В.С Летохов. Лазерная оптоакустическая спектроскопия. М., Наука, 1984
4. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983
5. Цюлик П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976
6. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972