ВВЕДЕНИЕ В СПЕКТРОСКОПИЮ

А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Цель данного учебного курса

Дать начальные сведения о теоретических основах, возможностях и областях применения современных спектральных методах исследования вещества в химии.

А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Применение спектроскопии в различных науках

1. **Химия.**
2. **Физика.**
3. **Биология.**
4. **Медицина.**
5. **Материаловедение.**

А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Основные задачи, решаемые с помощью современных спектральных методов

1. Идентификация соединений – установление строения.

2. Определение качественного и количественного состава смесей неорганических и органических веществ.

3. Определение энергетических и геометрических характеристик атомов и молекул.

4. Изучение внутри- и межмолекулярных взаимодействий.

5. Исследование кинетических параметров и интермедиатов химических реакций.

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Виды спектроскопии

1. **Атомная**
2. **Молекулярная**

Атомная спектроскопия изучает энергетические переходы между электронными орбиталями атомов.

Молекулярная спектроскопия изучает энергетические переходы между электронными, колебательными, вращательными уровнями энергии молекул.

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Методы атомной спектроскопии:

1. **Атомно-абсорбционная спектроскопия**
2. **Атомно-эмисионная спектроскопия**
3. **Атомная флуоресценция**

А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Методы молекулярной спектроскопии:

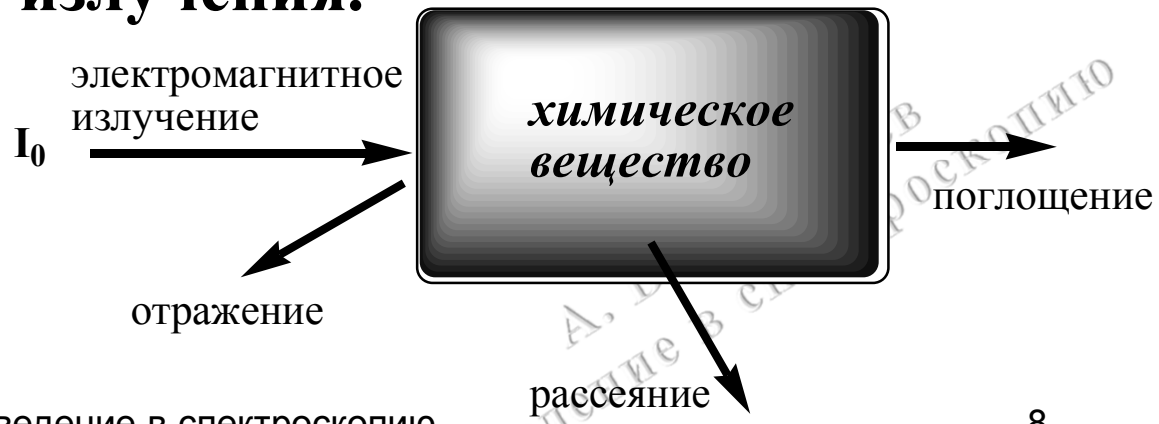
1. Электронная спектроскопия.
2. Инфракрасная спектроскопия.
3. Спектроскопия комбинационного рассеяния света.
4. Микроволновая спектроскопия.
5. Ядерный магнитный резонанс.
6. Электронный парамагнитный резонанс.
7. Масс-спектрометрия.

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Понятие о спектроскопии

Спектроскопия – физический метод исследования закономерностей взаимодействия электромагнитного излучения (света) с химическим веществом.

Такие взаимодействия могут сопровождаться поглощением, излучением или рассеянием электромагнитного излучения.



А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Взаимодействие электромагнитного колебания с химическим веществом приводит к возбуждению переходов между энергетическими уровнями вещества (атома или молекулы).

А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Спектроскопия позволяет получать сведения об энергетических стационарных состояниях атомов или молекул на основании переходов между этими состояниями.

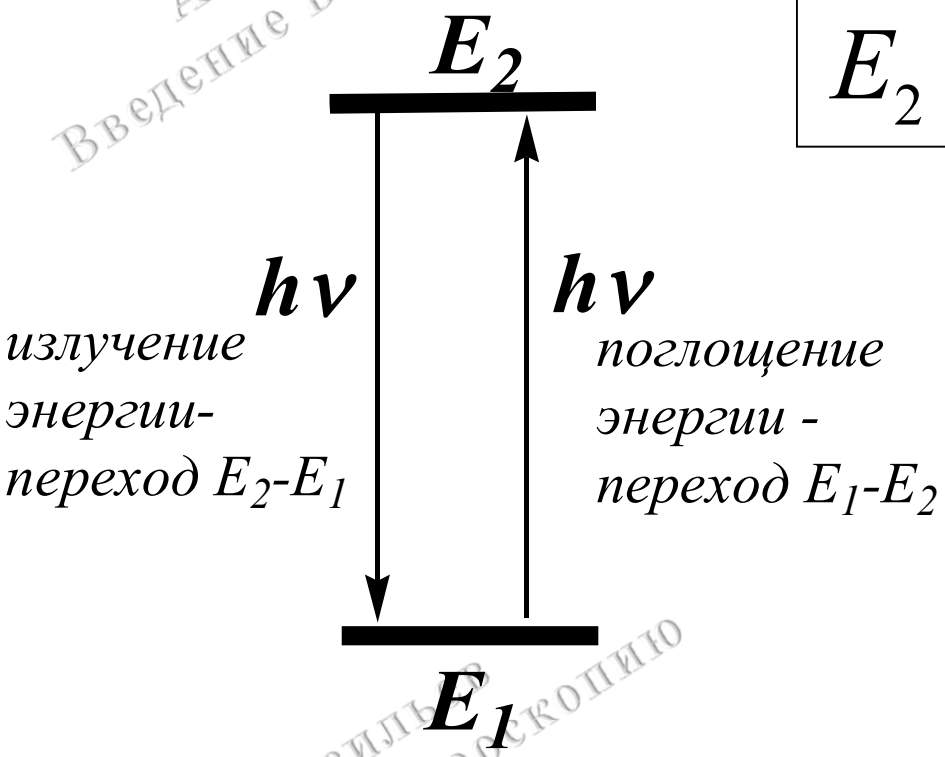
А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Взаимодействие вещества и энергии

Энергия атомов и молекул квантована, т.е. атомная или молекулярная система может существовать только в определённых *дискретных* энергетических состояниях, переход между которыми возможен только *скачкообразно*.

А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Рассмотрим в атоме или молекуле два энергетических уровня E_1 и E_2.



$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu$$

ΔE – разность энергии двух уровней;

h – постоянная Планка;

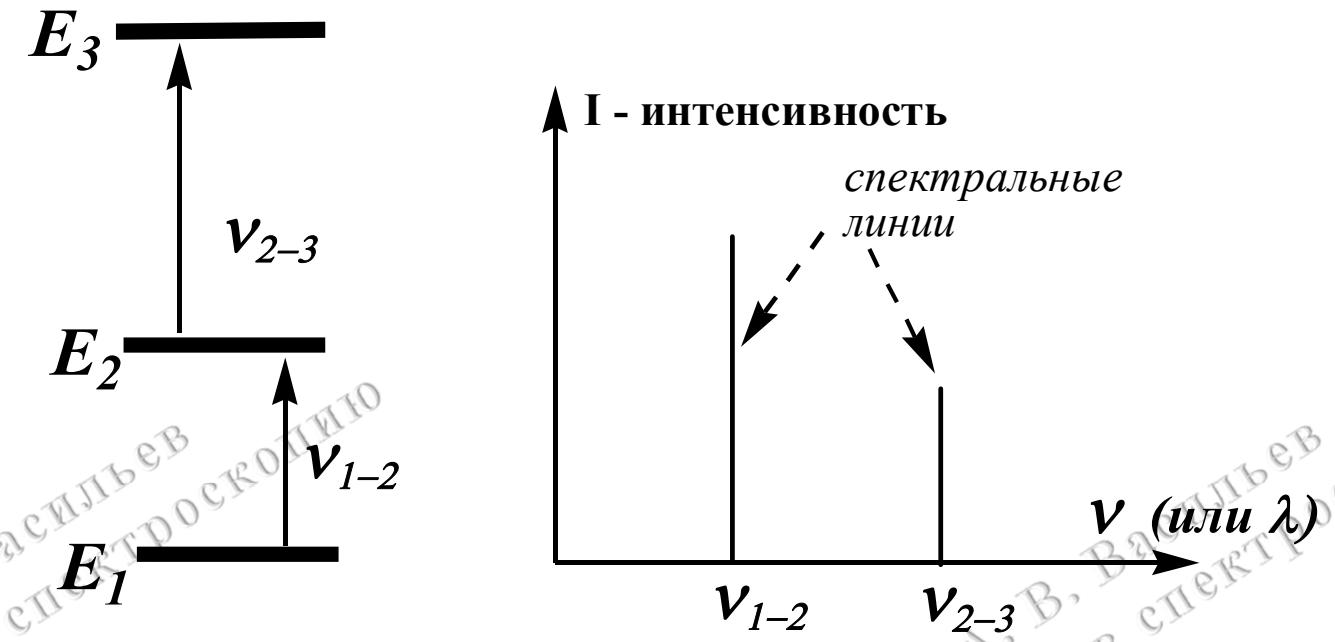
ν – частота электромагнитного излучения.

Изучая переходы между энергетическими уровнями атома или молекулы, можно составить энергетический спектр атома или молекулы.

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Определение понятия «спектр»

Спектр – зависимость интенсивности поглощения (излучения или рассеяния) электромагнитного излучения атома (молекулы) от частоты (или длины волны) излучения.



А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Связь энергии и излучения. Формула Планка

$$E = h \times \nu = \frac{h \times c}{\lambda}$$

E **– энергия, [E] = Дж;**

ν **– частота света, [ν] = c^{-1} = Гц;**

λ **– длина волны света, [λ] = м, см, нм (10^{-9}м);**

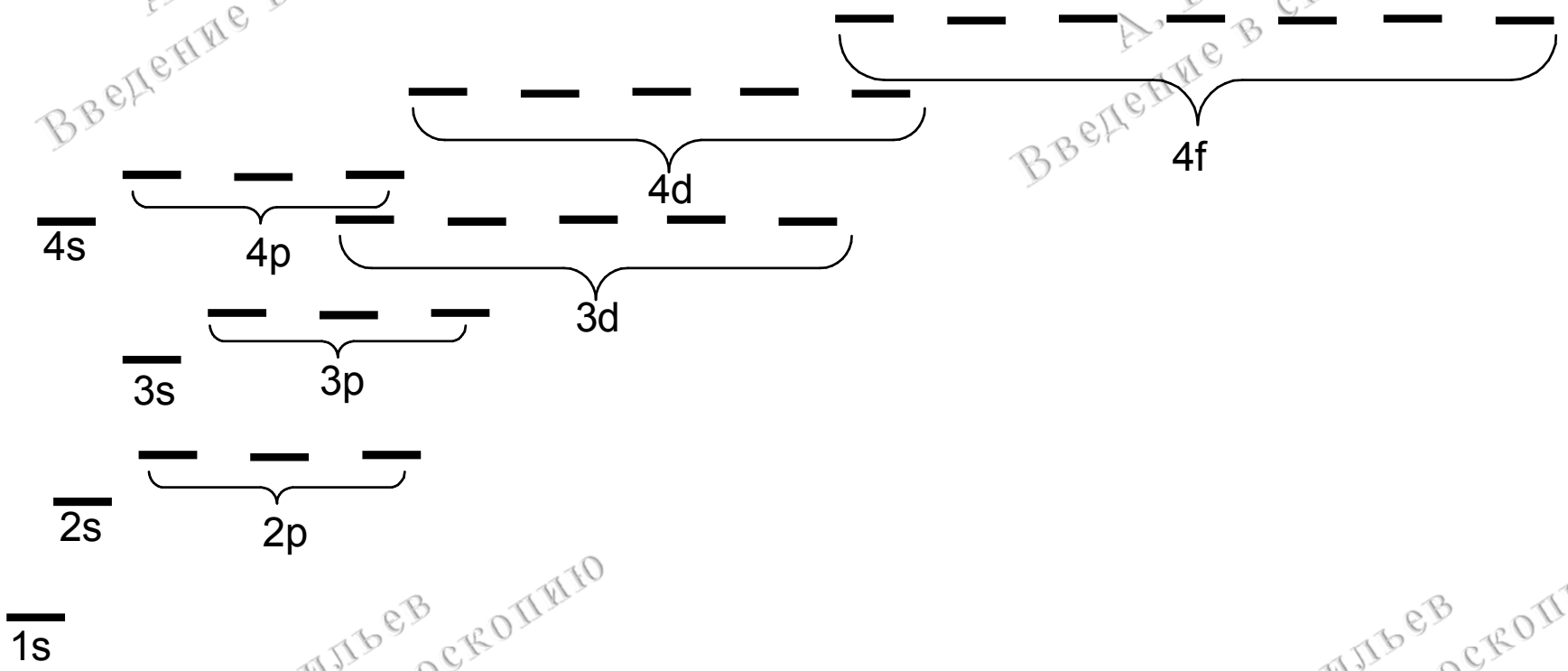
h **– постоянная Планка: 6.62×10^{-34} Дж×с;**

с – скорость света в вакууме: 3×10^{8} м/с.

Волновое число $\nu = 1/\lambda$ $см^{-1}$ (обратные см.).

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Энергетические уровни электронных орбиталей в атомах



А. В. Васильев
Введение в спектроскопию

Энергетические уровни молекул

Полная энергия молекулы:

$$E \approx E_{эл.} + E_{кол.} + E_{вр.}$$

Приближение Борна-Оппенгеймера.

$E_{эл.}$ – энергия электронного движения;

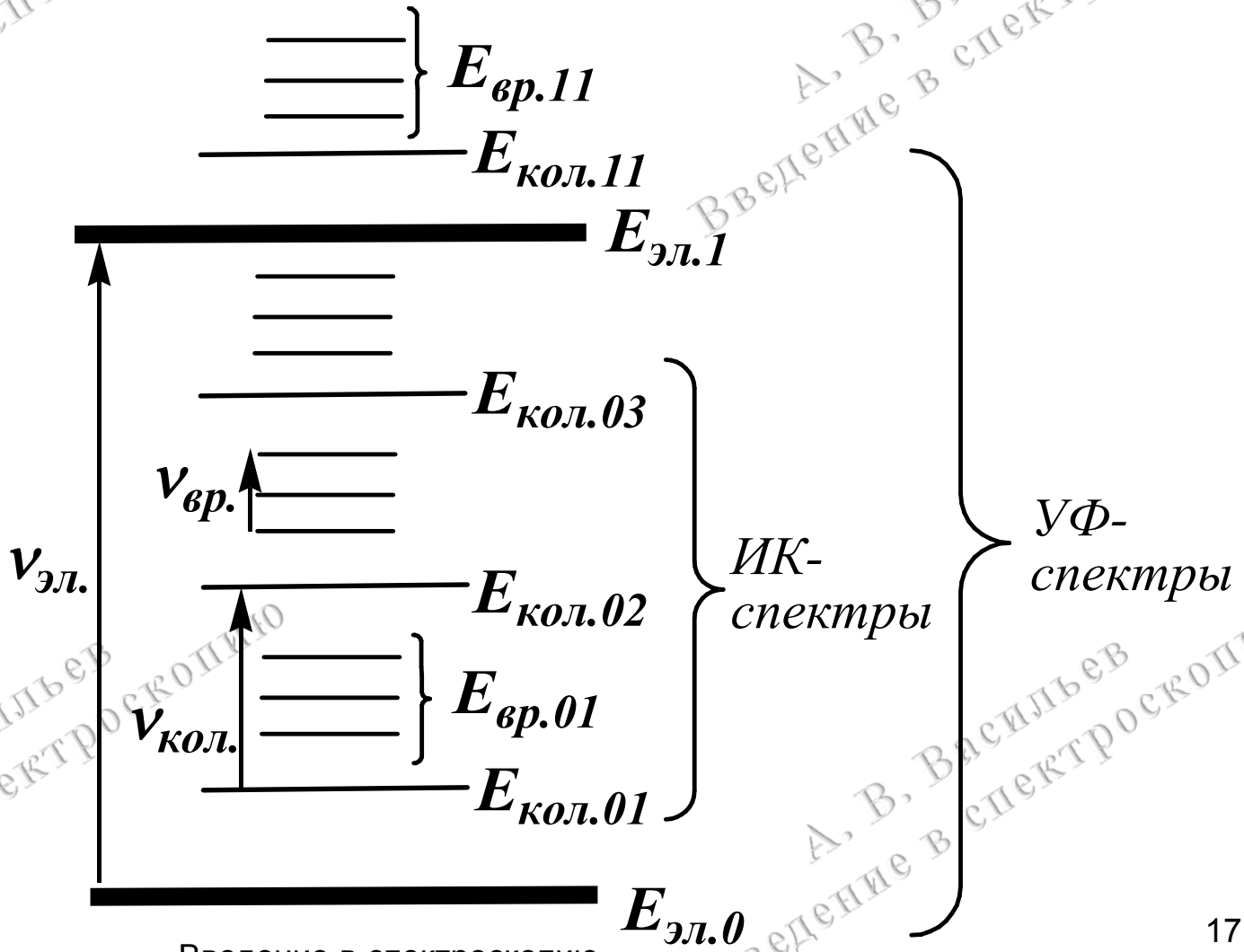
$E_{кол.}$ – энергия колебательного движения;

$E_{вр.}$ – энергия вращательного движения.

А. В. Васильев Введение в спектроскопию

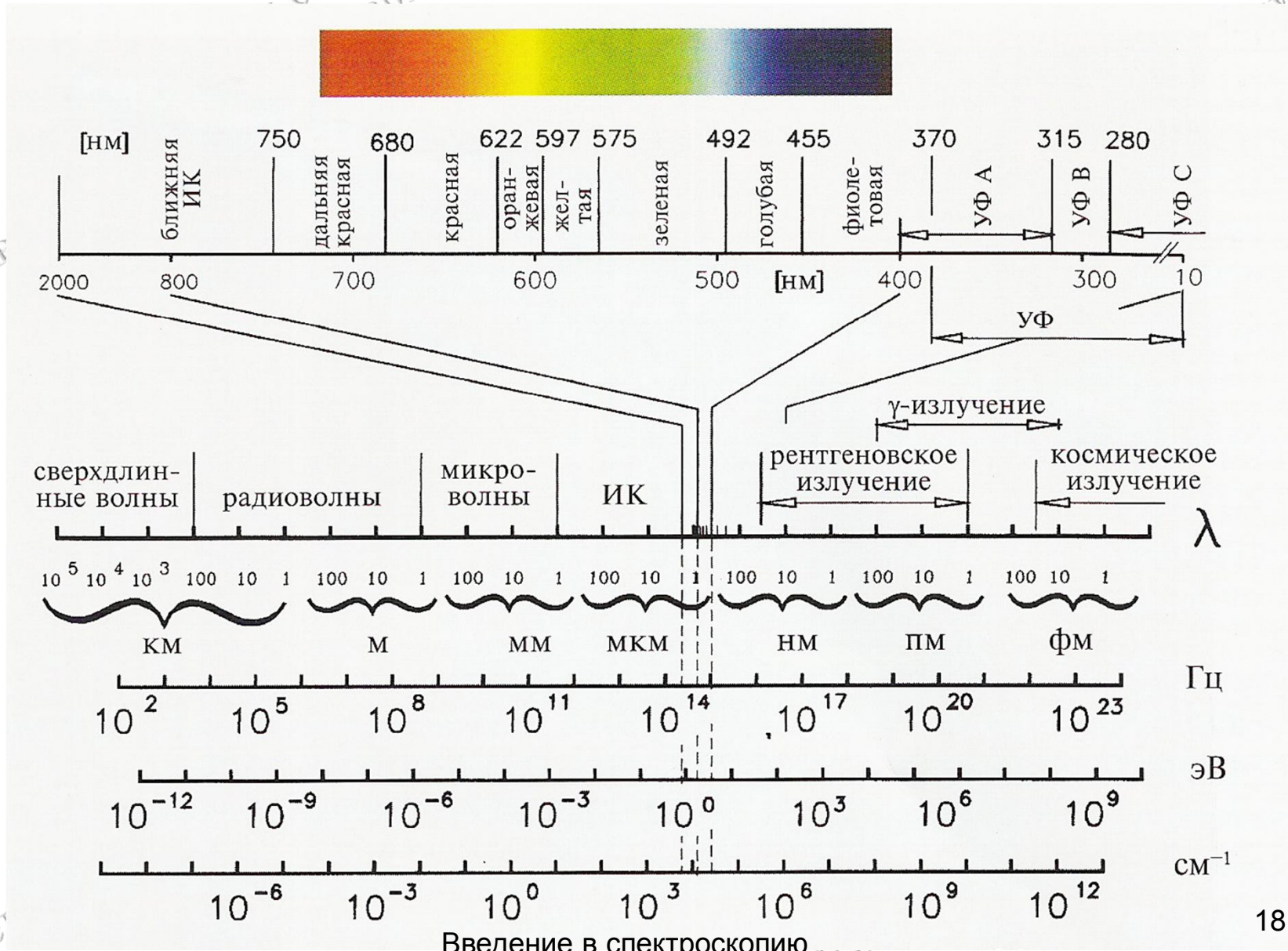
$E_{эл.} >> E_{кол.} >> E_{вр.}$

$E_{эл.} : E_{кол.} : E_{вр.} \sim 1 : 1/20 : 1/700$



А. В. Васильев Введение в спектроскопию

Шкала электромагнитных волн



Рекомендуемая литература

1. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. Москва: Техносфера, 2007.

1. Беккер Ю. Спектроскопия. Москва: Техносфера, 2009.

3. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Москва: Мир, 2003.

4. Драго Р. Физические методы в химии, в 2-х т. М.: Мир, 1981.

5. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высш. школа, 1984.

А. В. Васильев Введение в спектроскопию