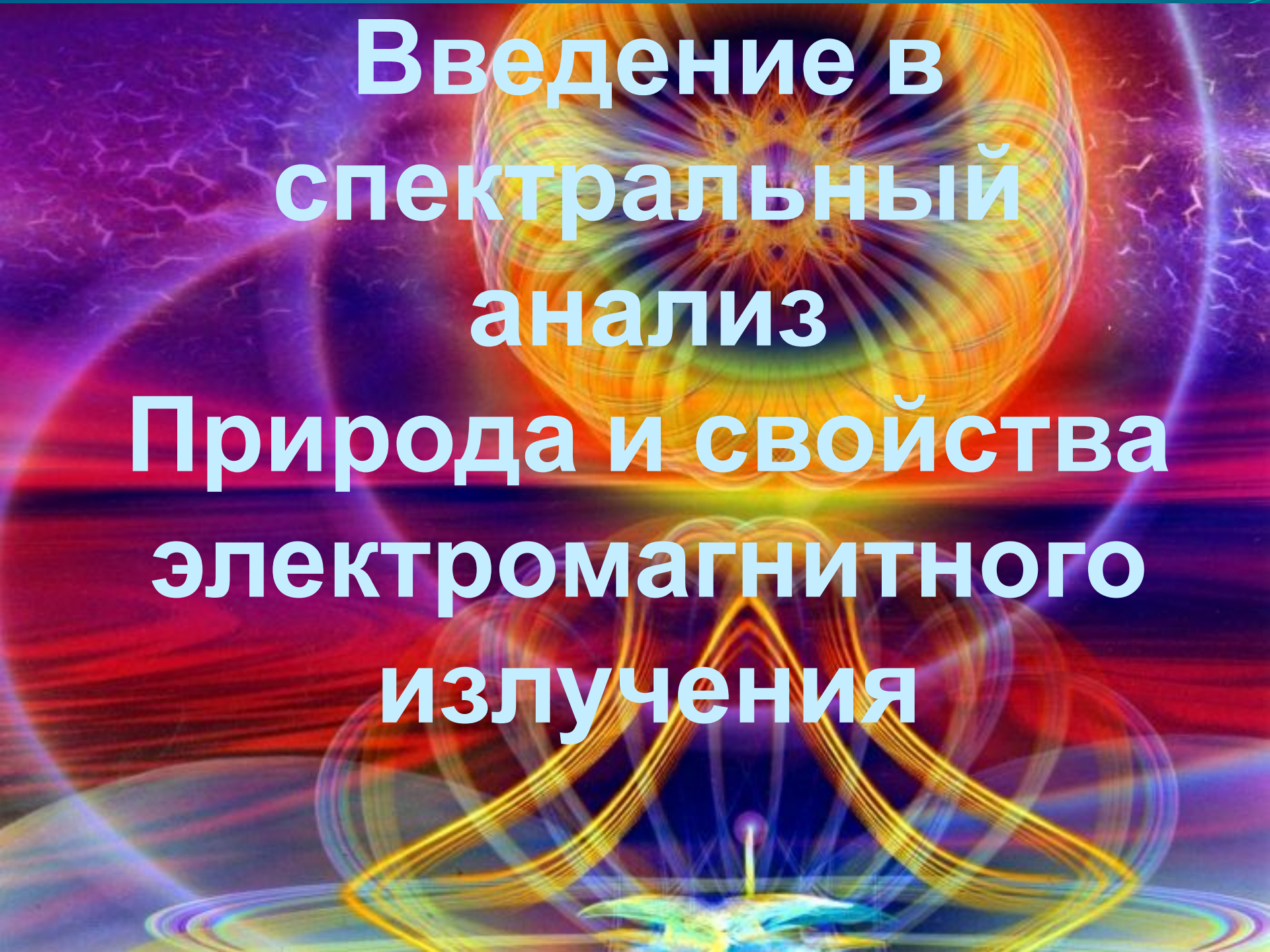




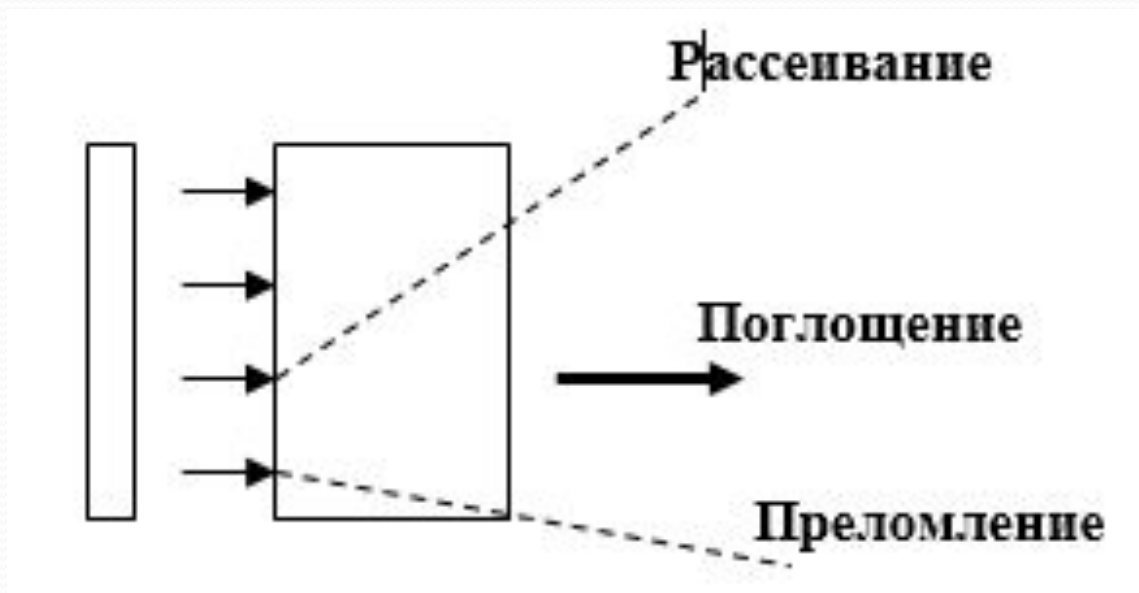
Введение в спектральный анализ

Природа и свойства электромагнитного излучения

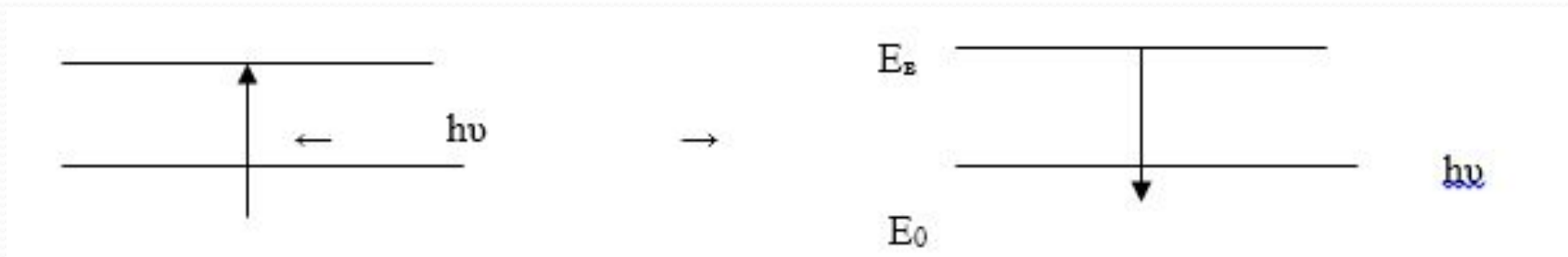
Введение в спектральный анализ

- **Спектральный анализ** – совокупность методов определения элементарного и молекулярного состава (строение веществ) по их спектрам.
- **Предмет спектрального анализа** – различные предметы и явления, возникающие при взаимодействии атомов и молекул вещества с электромагнитным излучением (чаще всего оптического диапазона).

Схема взаимодействия электромагнитного излучения с веществом



- Поглощение энергии происходит при возбуждении элементарной системы (электрон, атом, молекула), т.е. при переходе с более низкого энергетического уровня на более высокий. Иначе происходит процесс эмиссии.



- **Спектр** в переводе с латинского превращение – совокупность всех значений какой-либо величины.
- **Электромагнитный спектр** – зависимость между энергией квантов обладающих данной энергией. Или функция распределения фотонов по энергии.

Название диапазона	Процесс (тип перехода)	Длина волны (м)	Волновое число ν (см ⁻¹)	Частота излучения ν_1	Энергия фотона E	Тип спектроскопии	Применение
1. радиочастотный	Изменение ядер (е спектров)	10^{-1} - 10^{-1}	До 10^{-1}	До 10^9	10^{-6}	ЯМР (ЭПР)	радиовещание, телевидение
2. микроволновой	Изменение электронных спинов	10^{-1} - 10^{-3}	До1	До 10^{10}	10^{-5}	микроволновая спектроскопия ЭПР	В радиотехнике, в спектр. анализе
3 а) далёкий инфракрасный (ИК)	рассматривает молекулярные вращения	10^{-3} - 10^{-4}	$10 - 10^{-2}$	$10^{11} - 10^{12}$	$10^{-4} - 10^{-3}$	ИК микроскопия (абсорбционная и эмиссионная)	Оптический диапазон, который применяется для спектрального анализа.
3 б) инфракрасный	Молекулярные колебания	До 10^{-5}	10^3	$10^{13} - 10^{14}$	$10^{-2} - 10^{-1}$	абсорбционная ИК спектроскопия	То же самое
3 в) близкий инфракрасный	Молекулярные колебания	До $10^{-6} - 10^{-7}$ (400-750 нм) ф. красн.	10^4	10^{14}	10^{-1}	абсорбционная ИК спектроскопия	То же самое
4 видимый	Изменение состояния электронов (и электронной связи)	$10^{-6} - 10^{-7}$ (400 – 750 нм)				УФ, видимая, абсорбционная и эмиссионная микроскопия	
5 а) ультрафиолетовый (УФ)	Изменение состояния валентны е (и е связи)	До 10^{-7}	10^5	10^{15}	1-10	УФ, видимая, абсорбционная и эмиссионная микроскопия	
5 б) далёкий ультрафиолетовый	Изменение состояния валентных е (и е связи)	10^{-8}	10^6	$10^{16} - 10^{17}$	10^2	Абсорбционная микроскопия далёкой области.	
6 рентгеновский	Изменение состояния внутренних е т.е. внутренней оболочки	10^{-9} , 10^{-10}	10^7 , 10^8	10^{18} ,	10^3	Рентгеновская, эмиссионная, дифракционная спектроскопия	В медицине, в спектральном анализе
7 гамма лучи	Ядерные изменения	10^{-11}	10^9	10^{19}	10^4	Ядерные физические м-ды; нейтроноактивационная	Возникают при различных процессах в ядрах атома

Классификация спектральных методов анализа

- В оптическом диапазоне молекулы или атомы способны:
 1. испускать ЭМИ
 2. поглощать (абсорбция)

- Спектральный анализ
 1. Ядерный магнитный резонанс
 2. Оптическая спектроскопия
 3. Рентгеноструктурный анализ

Классификация спектральных методов анализа

- 1). Качественный анализ (по характерным линиям с определённой длиной волны, т.е. можно провести анализ и состав вещества)
- Состав
- 1. Элементарный
- 2. Изотопный
- 3. Молекулярный
-
- 2) Количественный анализ (по интенсивности или яркости линии).
- Т.о. можно определить малые и сверхмалые количества в особо чистых веществах (проводники, вещества атомной и электронной промышленности).

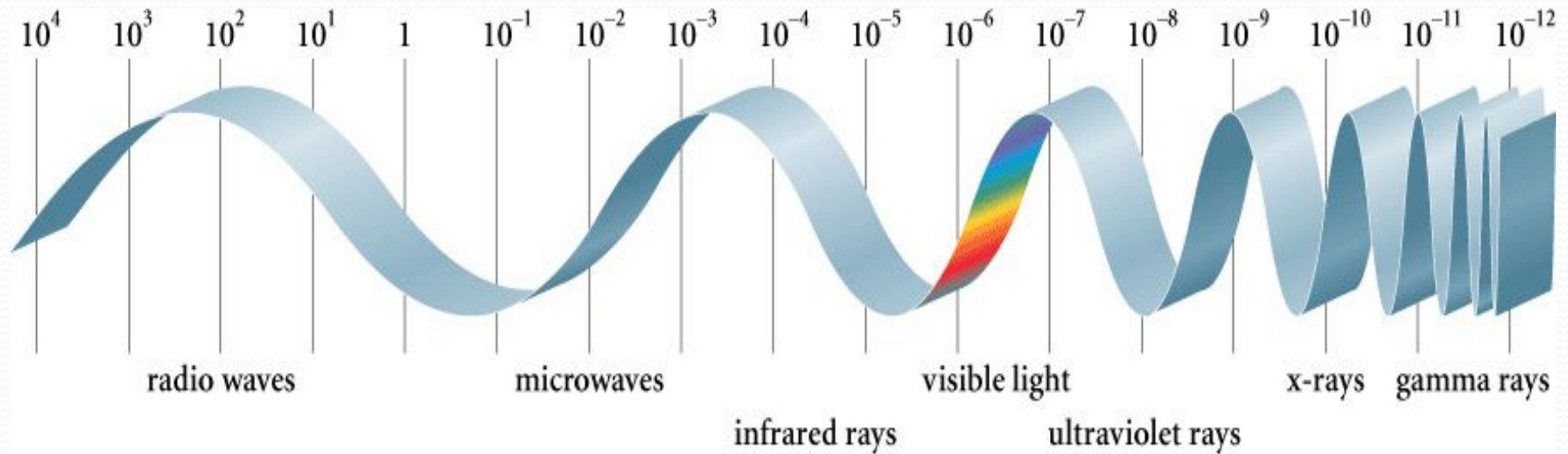
Спектры у УФ и видимой области используются:

- 1. для идентификации (качественного анализа) или установлении структуры соединений (аналогично физико-химическим свойствам);
- 2. для контроля очистки и оценки степени чистоты веществ;
- 3. атомно-спектральный анализ используется при исследовании различных объектов химии, биологии, металлургии, геологии и другие отрасли науки и промышленности;
- 4. молекулярно-спектральный анализ используется при анализе органических веществ в химической промышленности.

Достоинства спектрального анализа

- 1. Необходимо небольшое количество веществ, т.е. можно анализировать готовые изделия без их повреждения;
- 2. Высокая чувствительность метода, т.е. возможно определение микроконцентрации $10^{-4} - 10^{-6}$;
- 3. Высокая производительность, т.е. за один приём можно определить одновременно более 30 элементов;
- 4. Можно анализировать вещества в жидком, твёрдом и газообразном состоянии;
- 5. Точность метода, ошибка 1-3 %;
- 6. Низкая себестоимость (низкий расход реактивов);
- 7. Селективность (избирательность), т.е. можно определить вещество в сложной форме.

Основные характеристики электромагнитного излучения

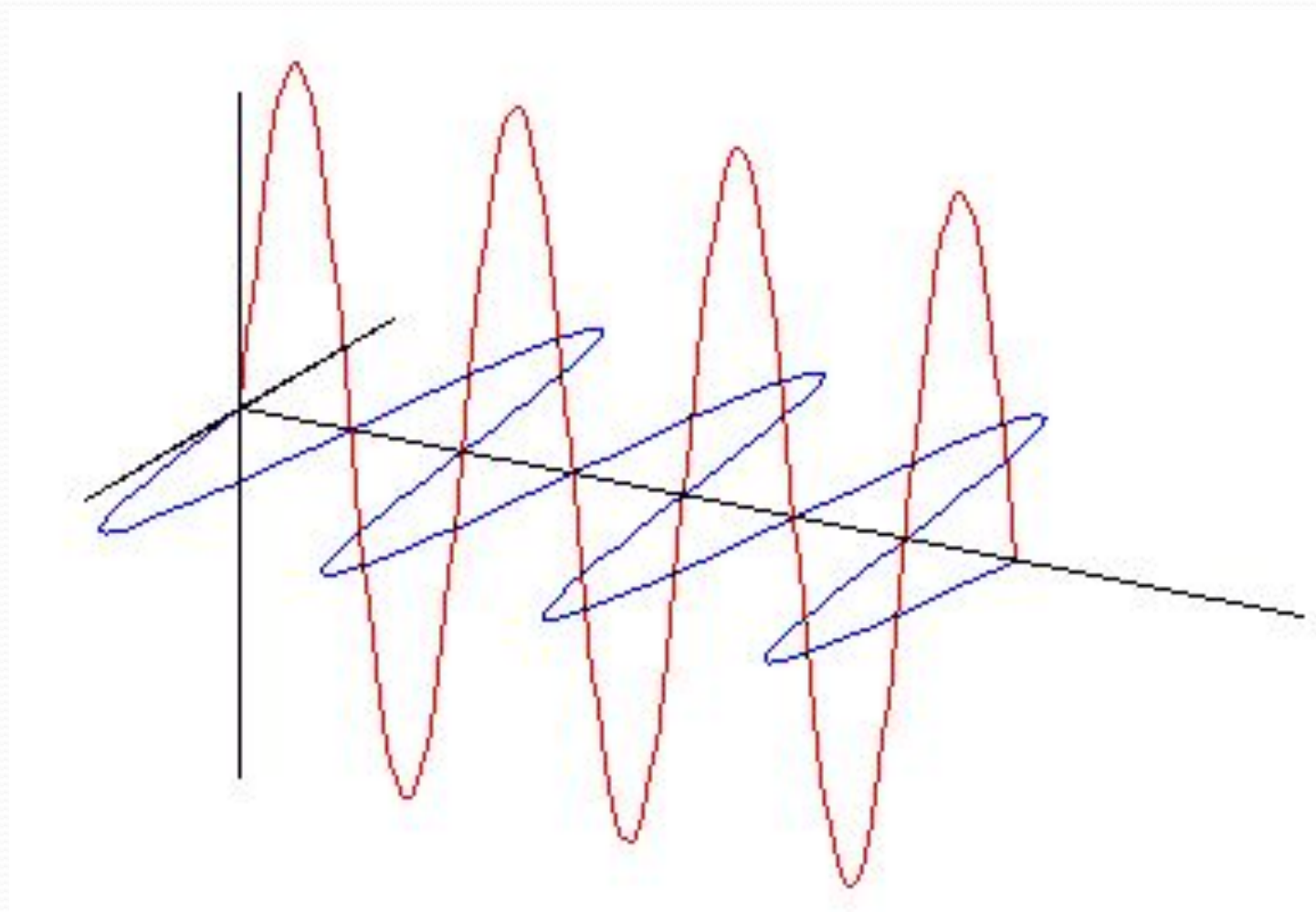


Природа излучения

- *Электромагнитное излучение (свет)* – распространение электромагнитной волны; или поток частиц (фотонов) с разной энергией.

Двойная теория света (дуализм)

- 1. Волновая (рассеивание, отражение, преломление, интерференция, дифракция)
- Волновые характеристики: частота (ν), волновое число (ν'), длина волны (λ).
- 2. Корпускулярная (атомы и молекулы могут испускать или поглощать ЭМИ);
- Квантовые характеристики: энергия E .



Основные характеристики ЭМИ

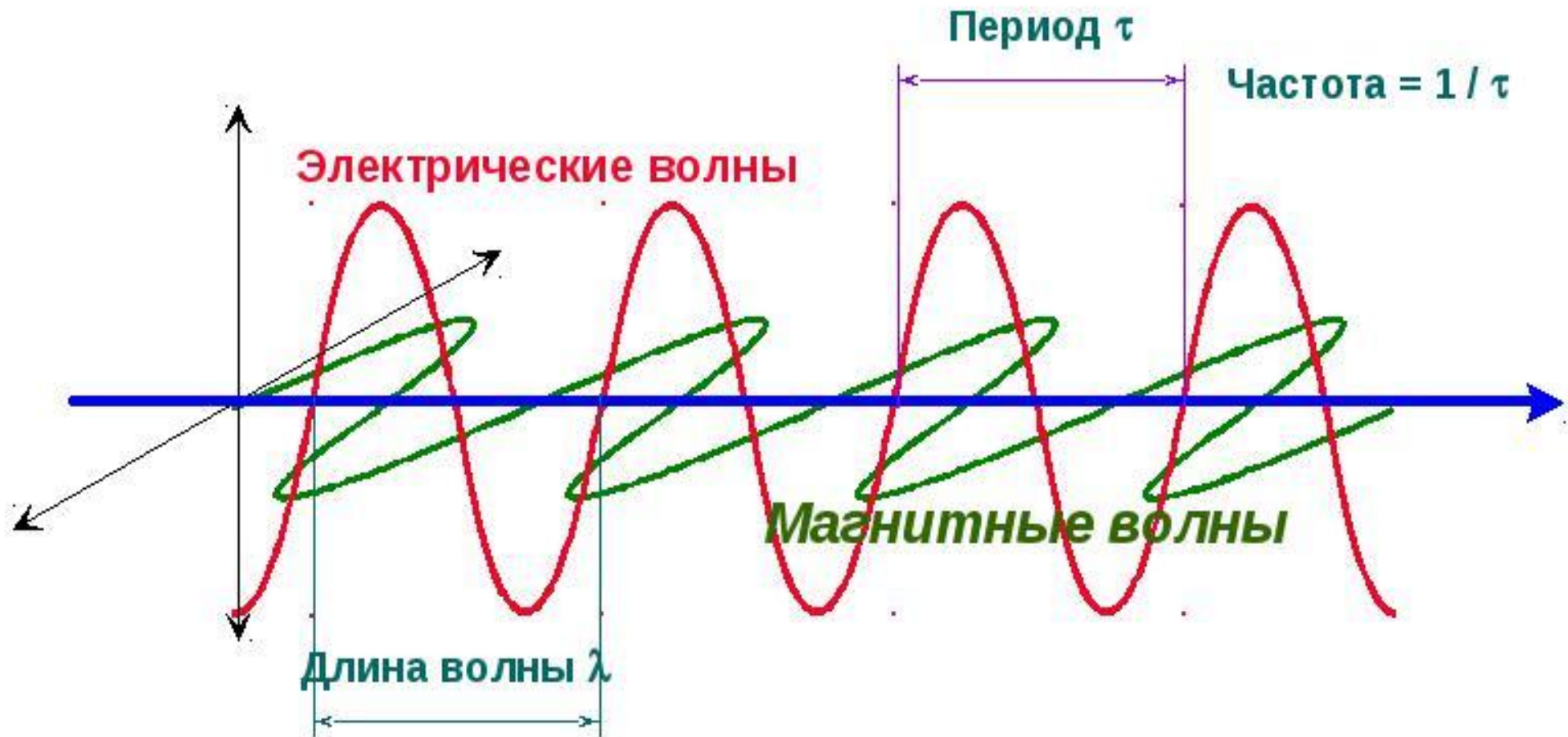
- **Частота колебаний** (ν) – число колебаний в 1 секунду;
- **Длина волны** (λ) – минимальное расстояние между точками, колеблющиеся в одинаковых фазах; или расстояние, проходимое волной за время одного полного колебания.
- **Волновое число** (ν') – число длин волн на одной единицы длины (1 см).

$$\nu = \frac{1}{\lambda}$$

- **Период** (T) – время, в течение которого совершается полный цикл напряжённости электромагнитного поля и выражается в секундах.

$$T = \frac{1}{\nu}$$

Электромагнитные волны



Уравнение электромагнитного колебания

$$E(h) = A_{E(h)} \cdot \sin(\omega t - kx - \varphi_0)$$

- $E(h)$ – напряжённость электрического или магнитного поля;
- $A_{E(h)}$ – амплитуда;
- ω – циклическая или круговая частота колебаний;
- t – время в данной точке пространства;
- k – волновой вектор;
- x – пространственная координата в данный момент времени;
- φ_0 – начальная фаза колебания;
- $\omega t - kx - \varphi_0$ – полная фаза колебания.

Уравнение Планка

$$\Delta E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = h \cdot c \cdot \nu$$

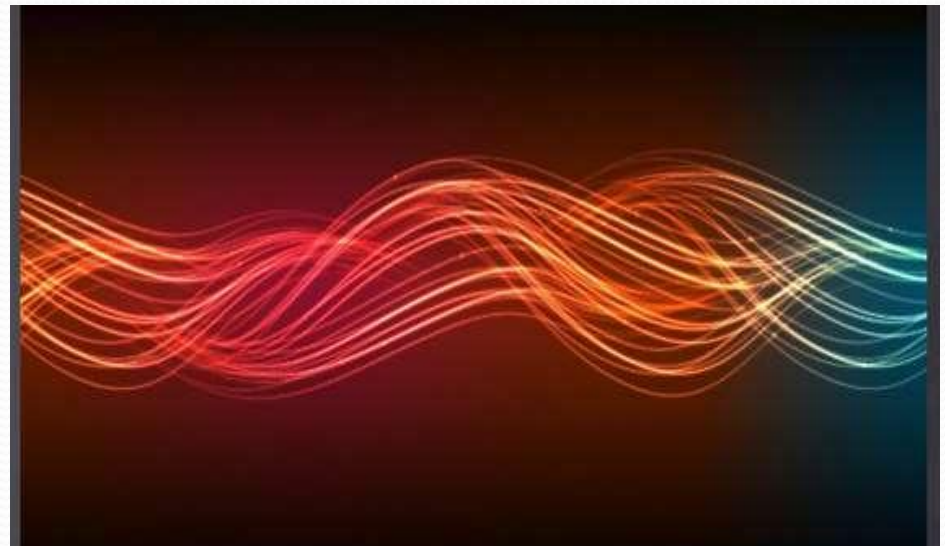
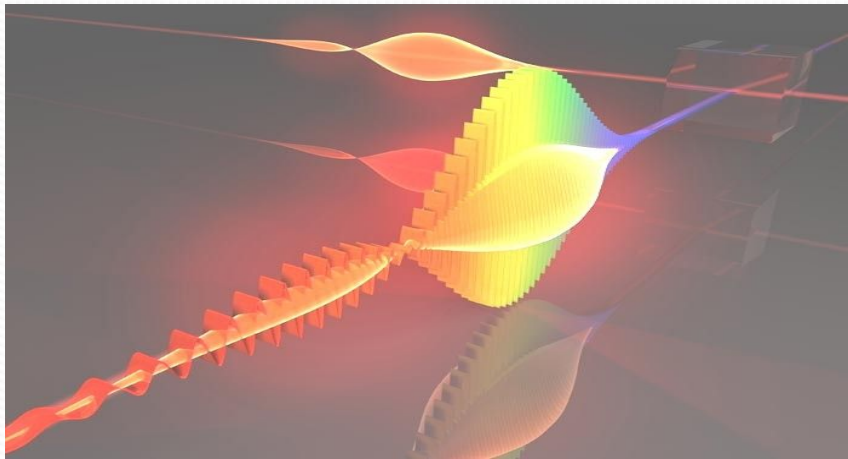
- $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка.

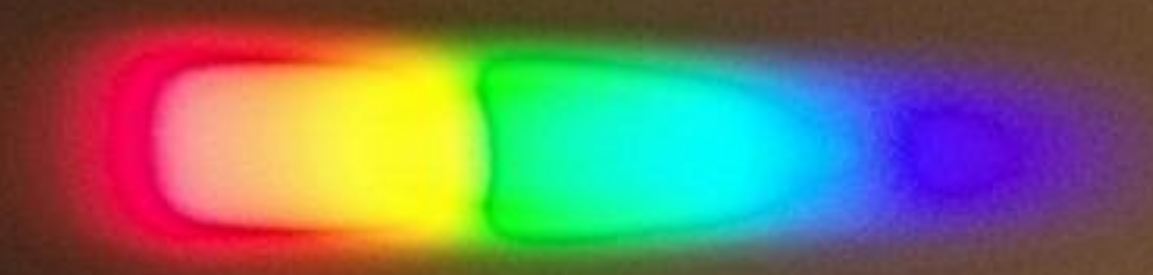
$$\Delta E = mc^2 \qquad \lambda = \frac{h}{mc}$$

- ΔE – изменение энергии элементарной системы (ядро, атом, молекула) в результате поглощения или испускания фотона с энергией $h\nu$.

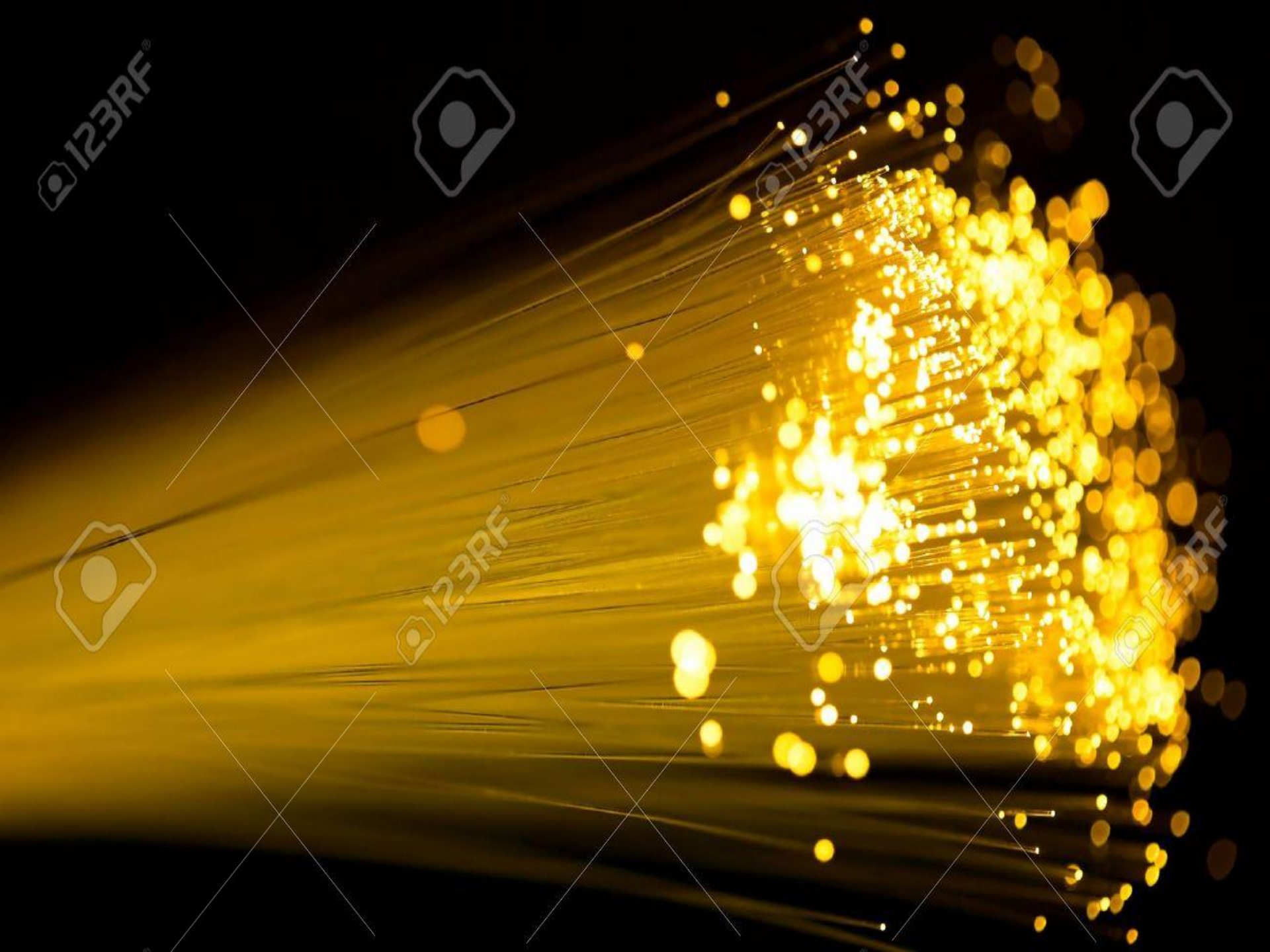
ФОТОН

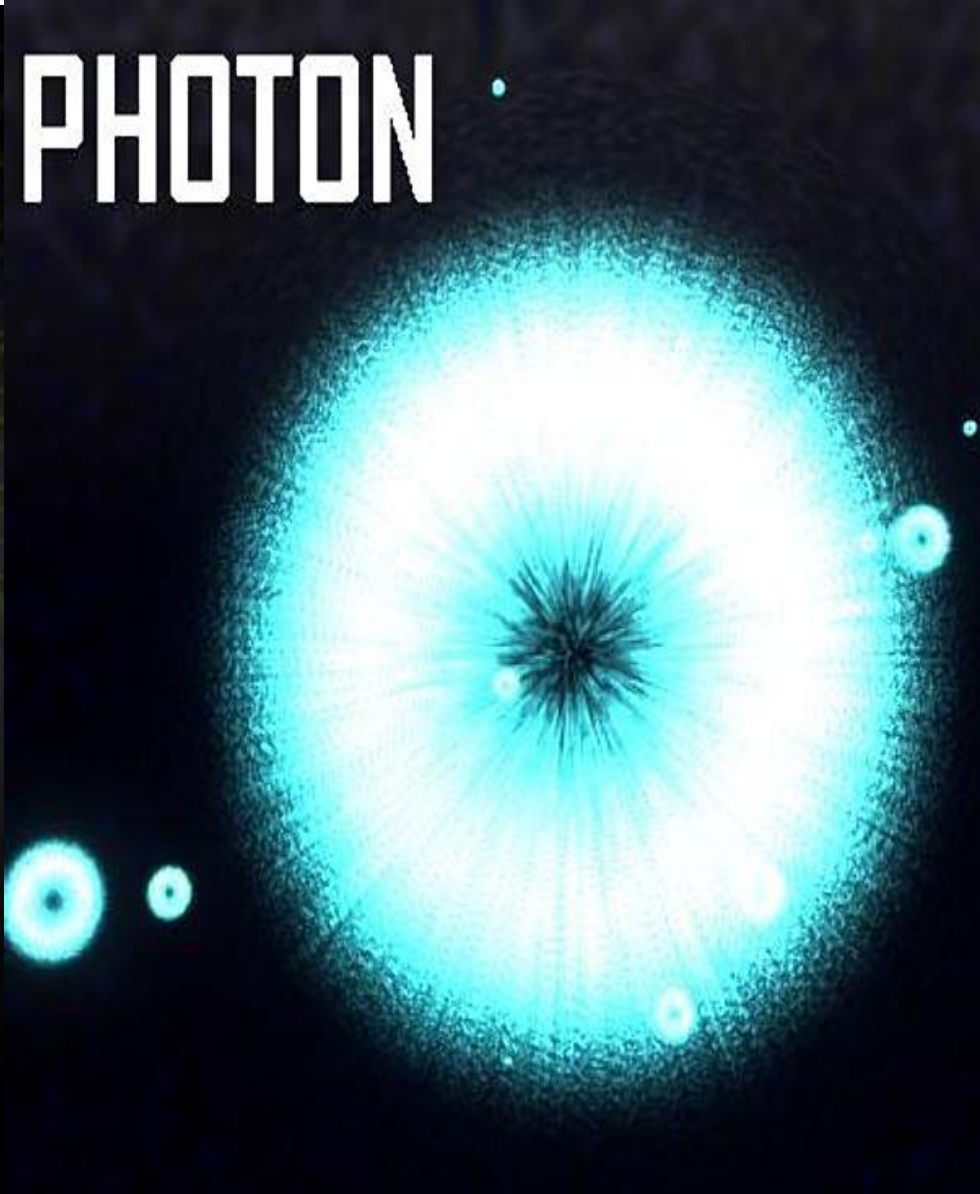
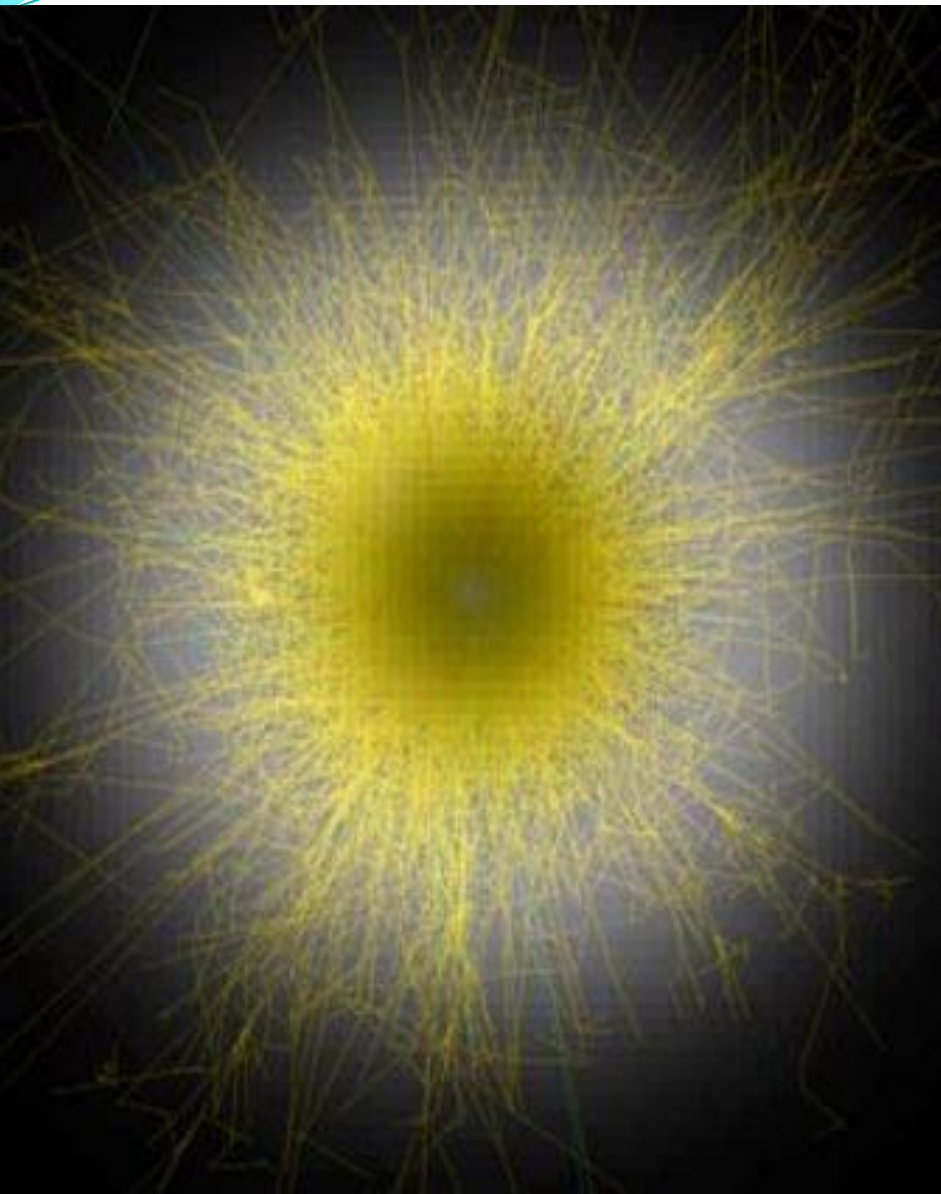
- **Фотон** (γ) – элементарная частица ЭМИ - это группа волн, которая:
- 1) распространяется как единое целое;
- 2) обладает свойствами частиц.





Фотон в нейтринном микроскопе



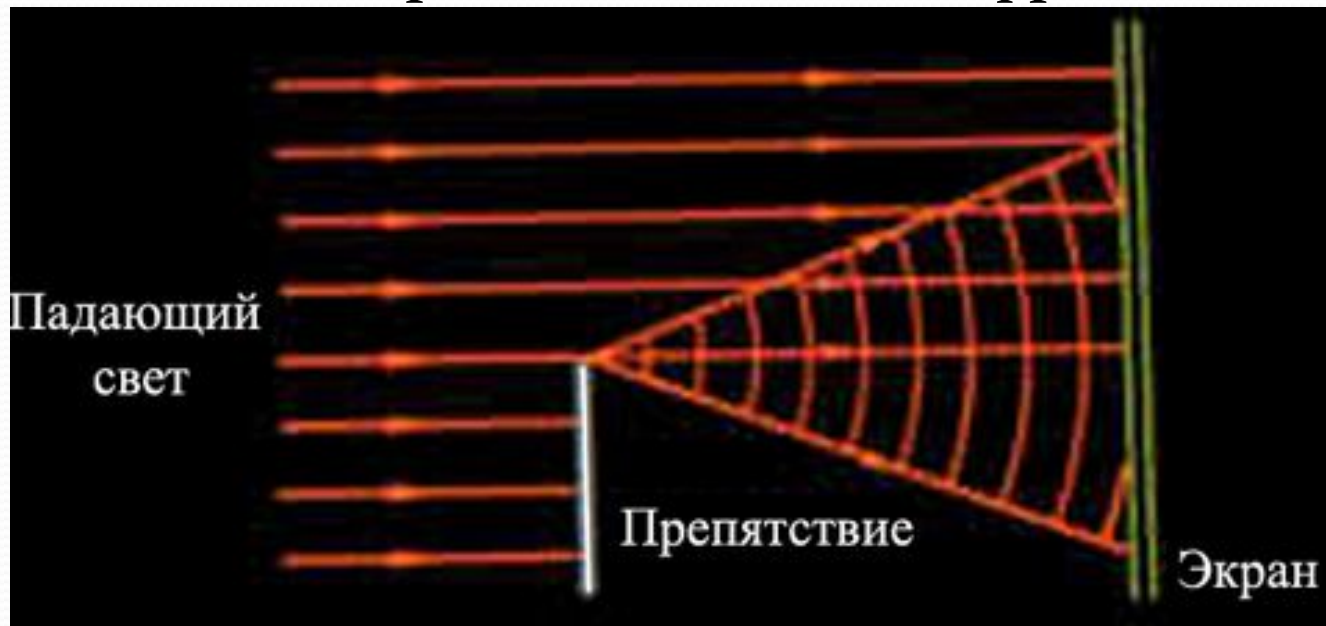


Свойства электромагнитного излучения

- 1. Свет способен распространяться прямолинейно по однородной прозрачной среде;
- 2. Свет отражается, преломляется в неоднородной среде;
- 3. Дифракция, интерференция, рассеивание.

Дифракция

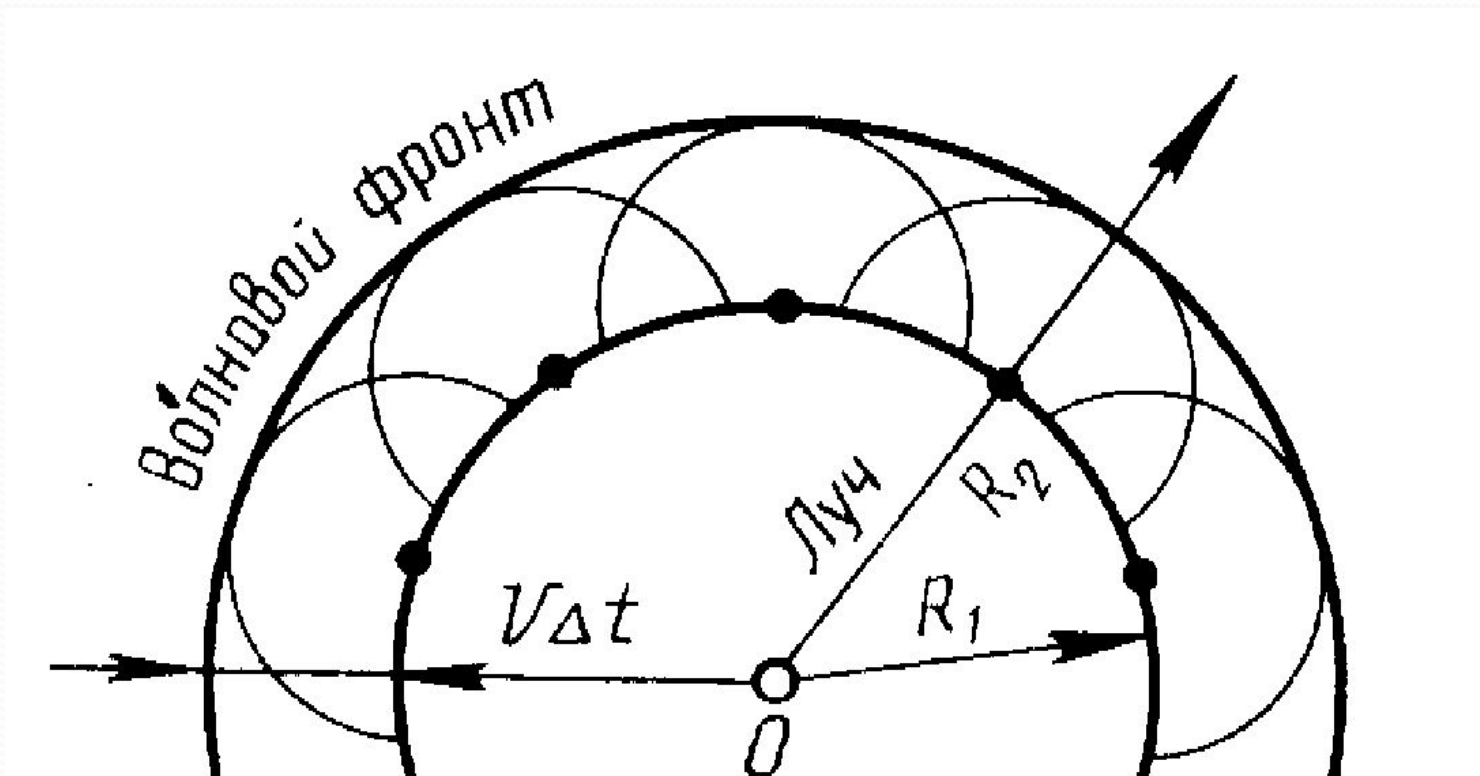
- 1. Рассеивание света при прохождении через небольшие отверстия;
- 2. Результат интерференции (суперпозиции волн) возникших вторичных волновых фронтов.



Дифракция света на узкой щели

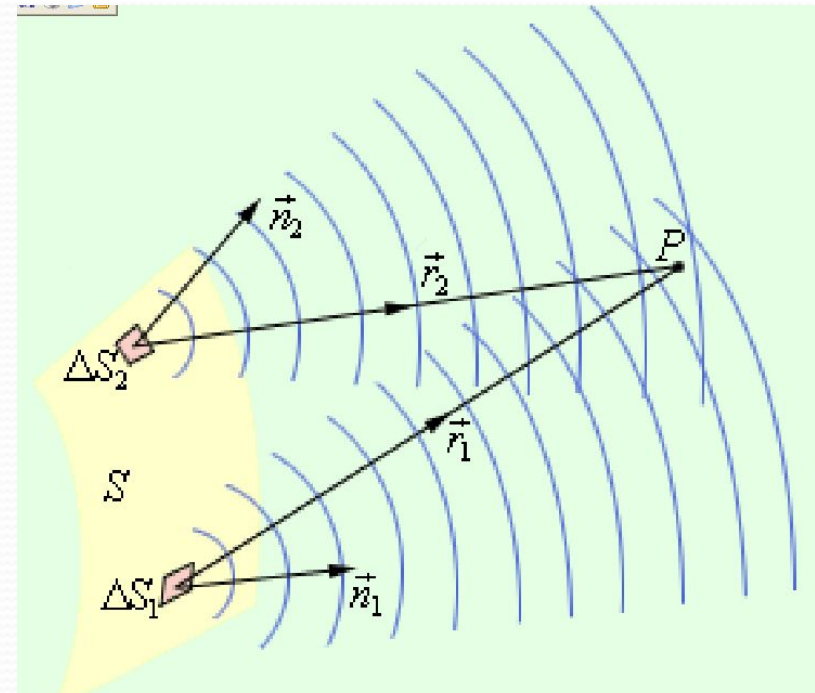


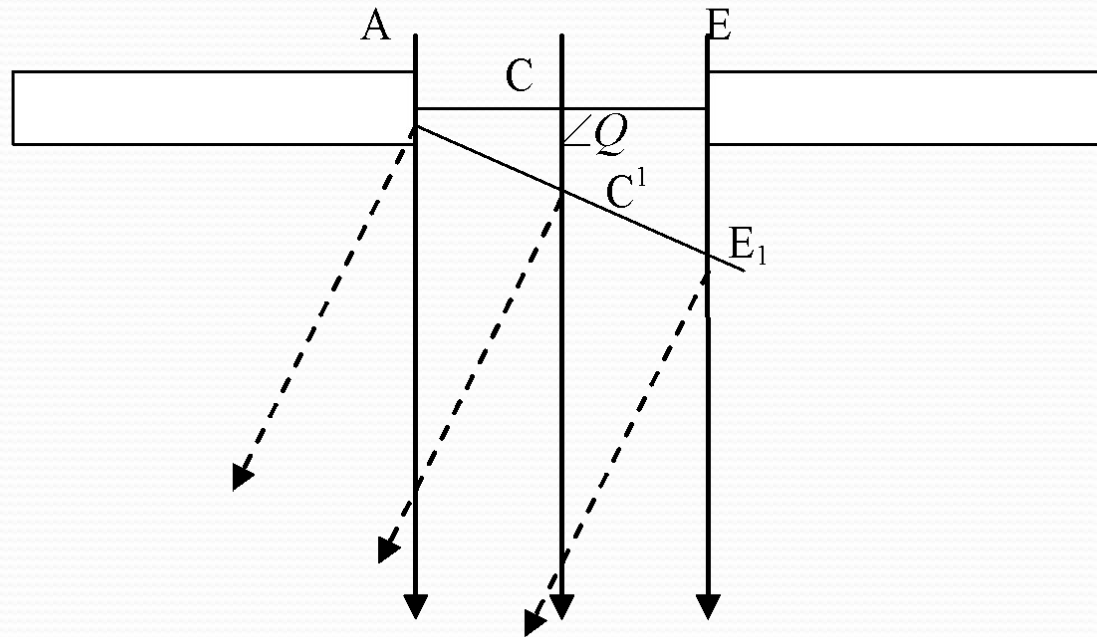
- **Принцип Гюйгенса:** каждая точка волновой поверхности (фронт волны) источник вторичных сферических волн. Фронт результирующей волны через некоторое время – это поверхность, огибающая фронты вторичных волн.



Принцип Гюйгенса-Френселя (суперпозиция).

- В точке пространства, до которых дошли колебания, становится источником волны. В поле в точке P есть суперпозиция вторичных волн, испущенным точным источником и распространённый по волновому фронту первичной волны.





В точке E' фаза колебания равна 0. В точке A фаза колебания равна 300° , в точке C фаза колебания $\phi = 180^\circ$.

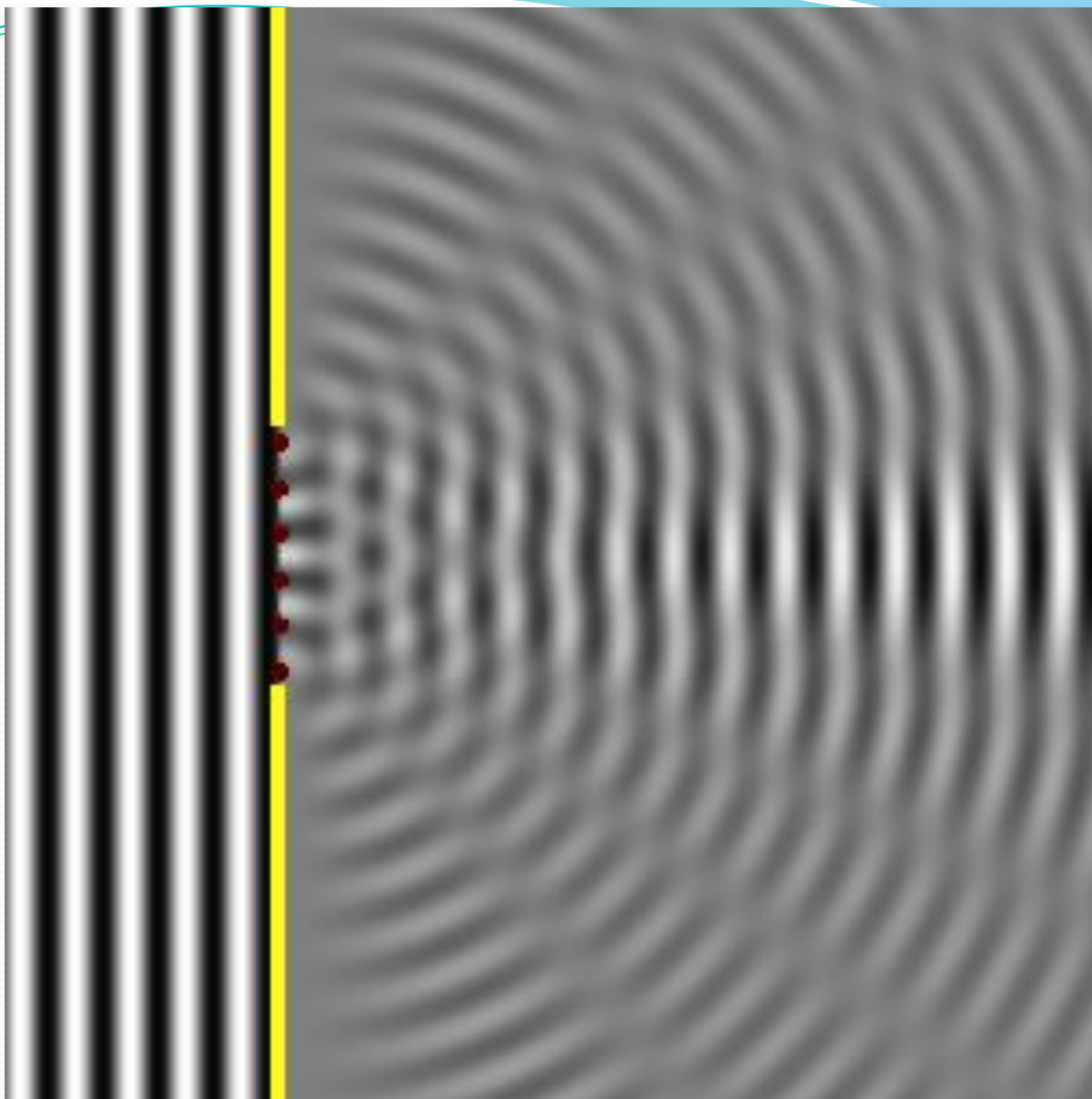
$$EE' = \lambda$$

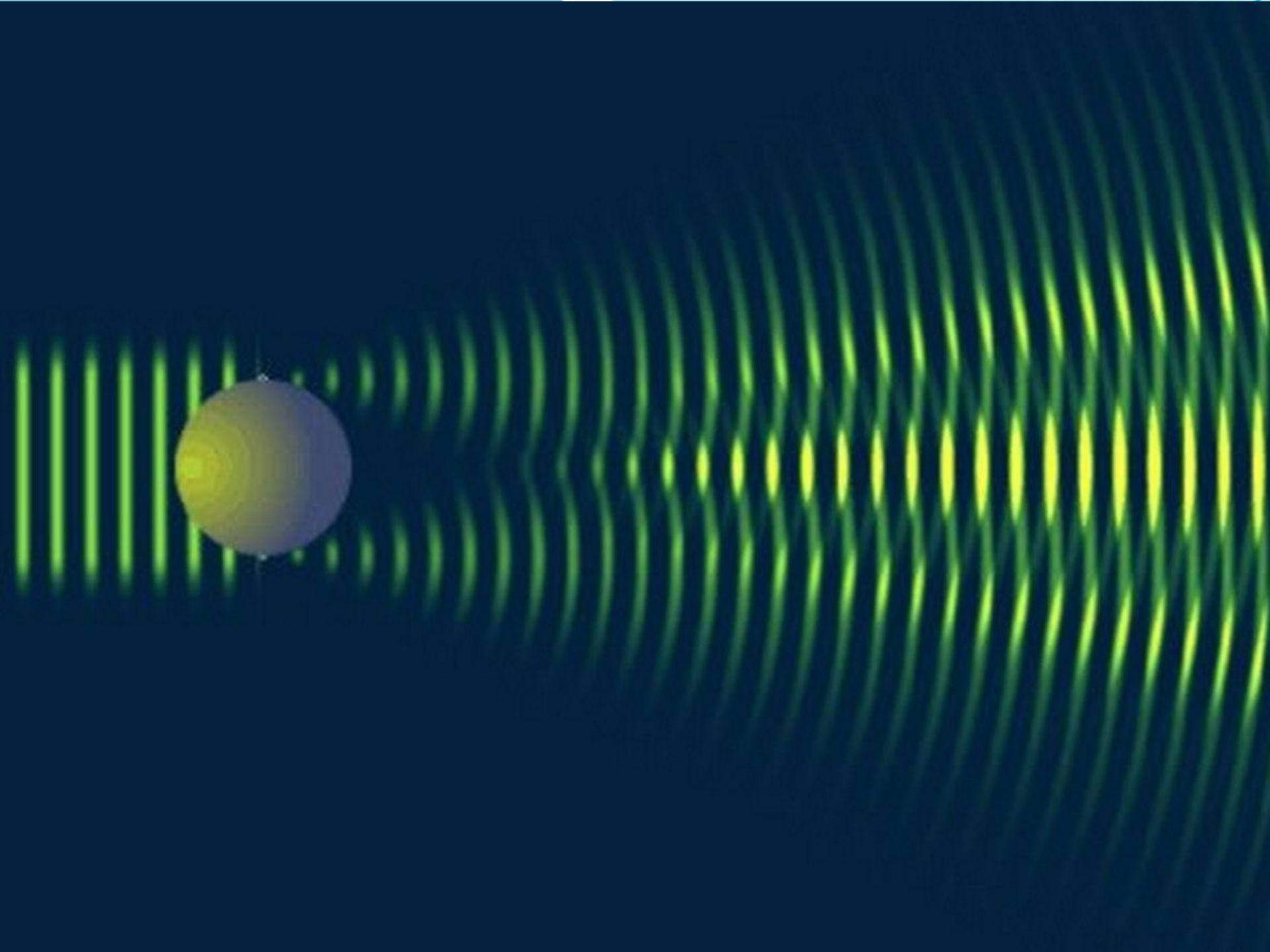
$$\frac{EE'}{AE} = \sin \theta_0$$

$AE = b$ – ширина щели

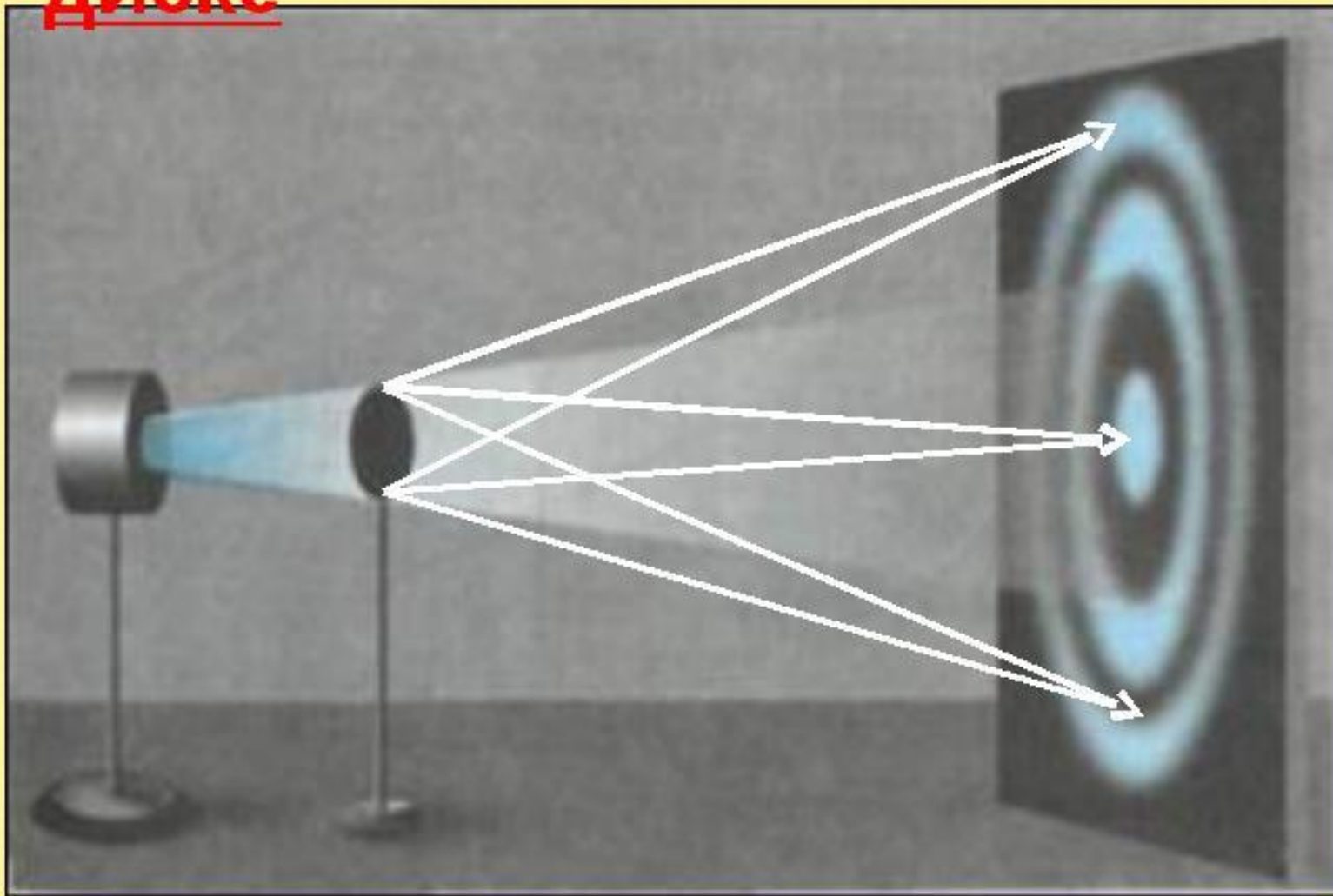
Величина дифракции ($\alpha \cdot \theta_0$) – угол внутри которого заключён основной световой пучок.

Дифракционную картину наблюдают, когда $b \approx \lambda$.





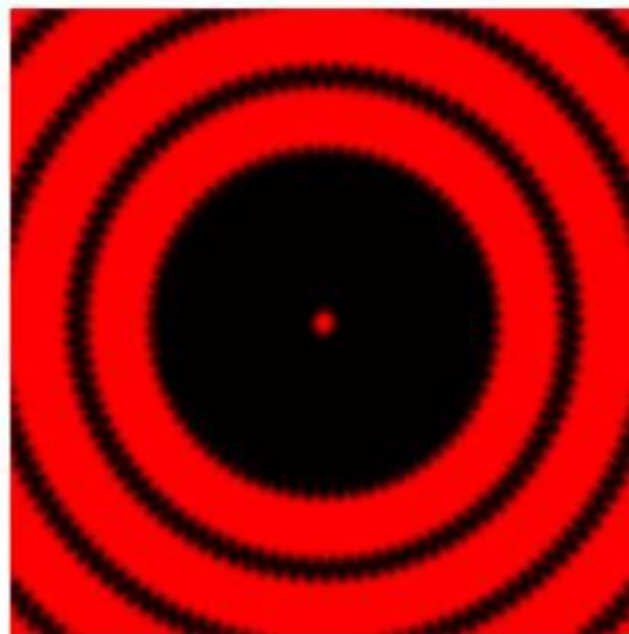
Дифракция света на круглом диске



Дифракция света



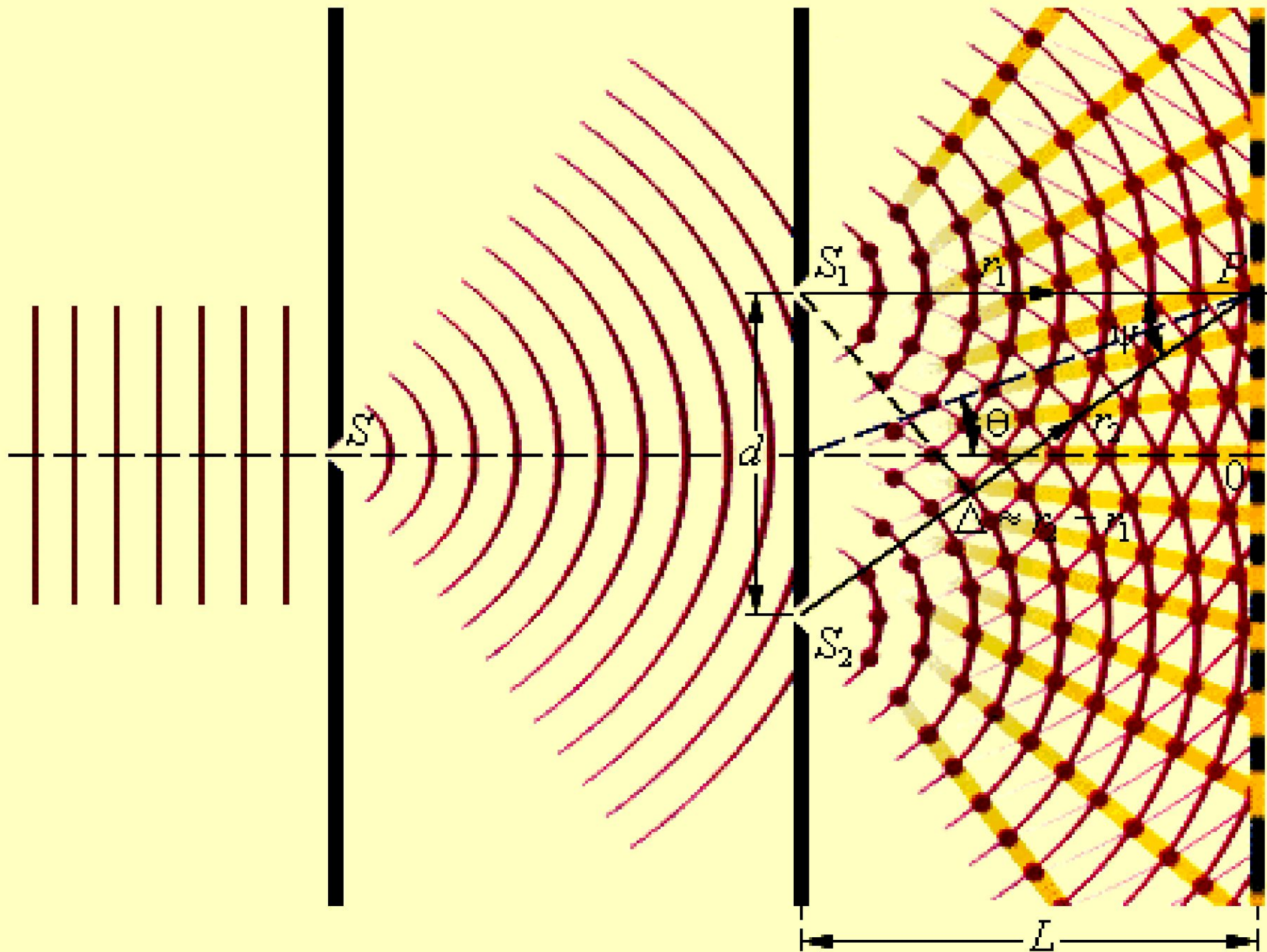
Дифракционная
картина от
круглого отверстия



Дифракционная
картина от
непрозрачного диска

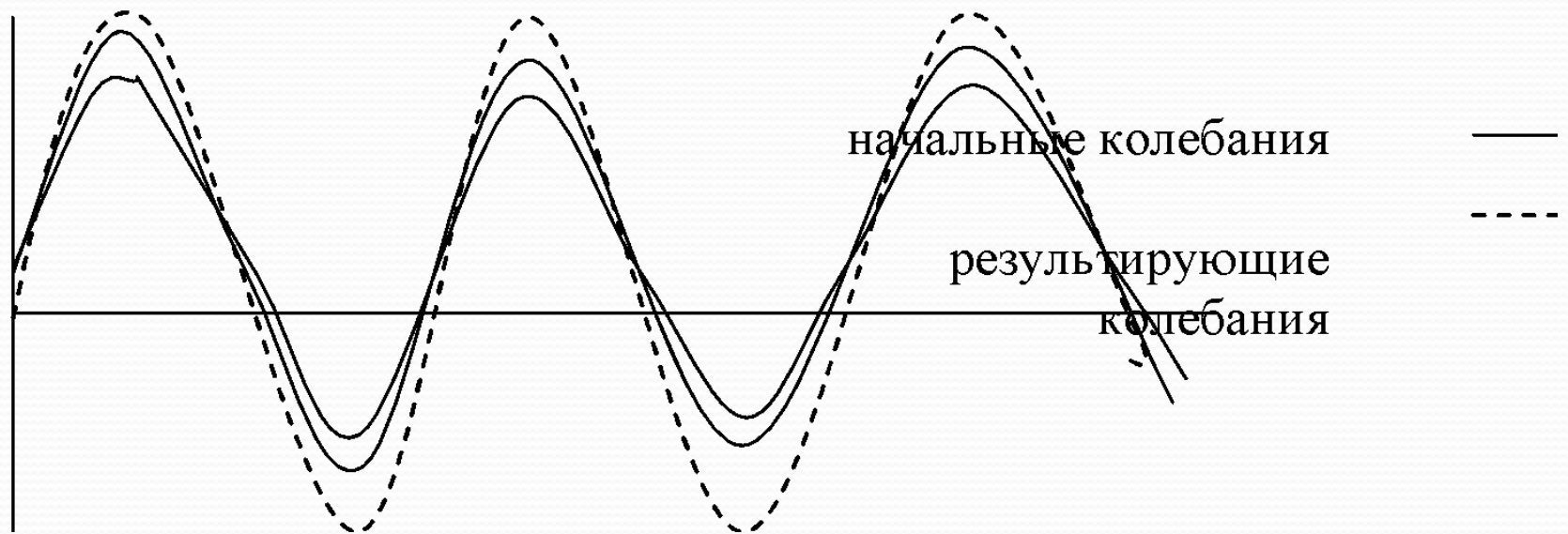
Интерференция

- Волны, которые распространяются в разных щелях в одном направлении. Имеют разные фазы, следовательно, гасят друг друга.
- Если 2 луча от источников света встречаются в одной точке пространства, то происходит *интерференция света*.
- 1. Взаимное усиление или ослабление интенсивности лучей.
- 2. Сложение двух или нескольких волн.



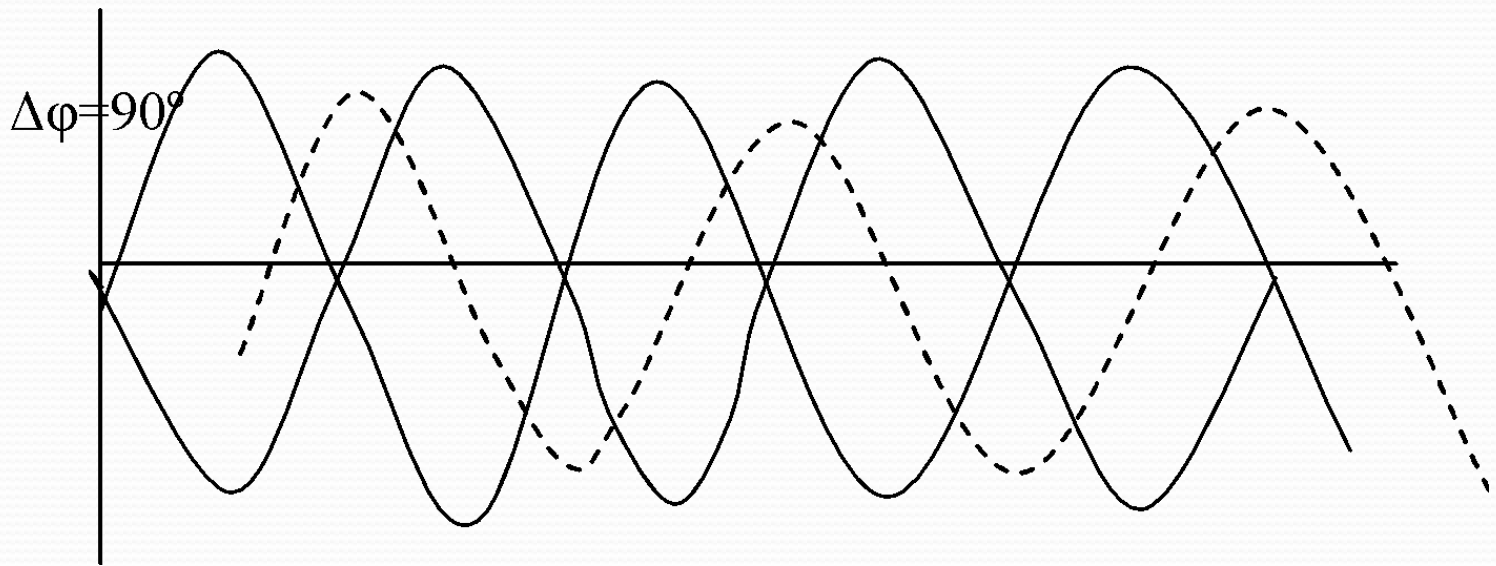
Усиление света (резонанс)

$$\Delta\varphi=0$$

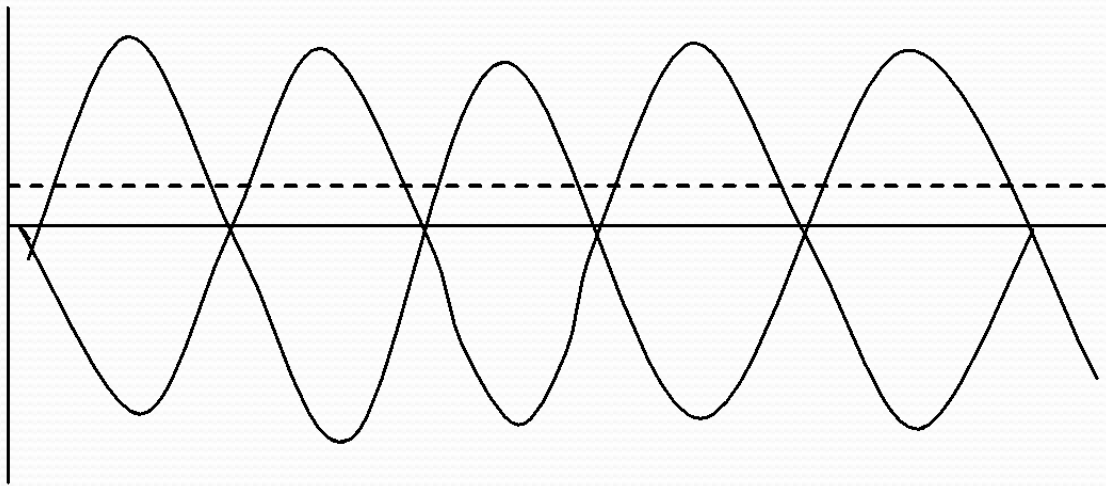


$\Delta\varphi=0$ Если разность фаз равна 0, т.е. фазы двух волн в любой точке пространства равны друг другу, следовательно, напряжённости полей складываются - возрастает амплитуда колебаний.

Диссонанс



Если $\Delta\varphi = 90$ то существует некоторая разность фаз следовательно происходит частичное гашение полей.



$$\Delta\varphi=180^\circ$$

При $\Delta\varphi = 180^\circ$ происходит полное прекращение колебаний.

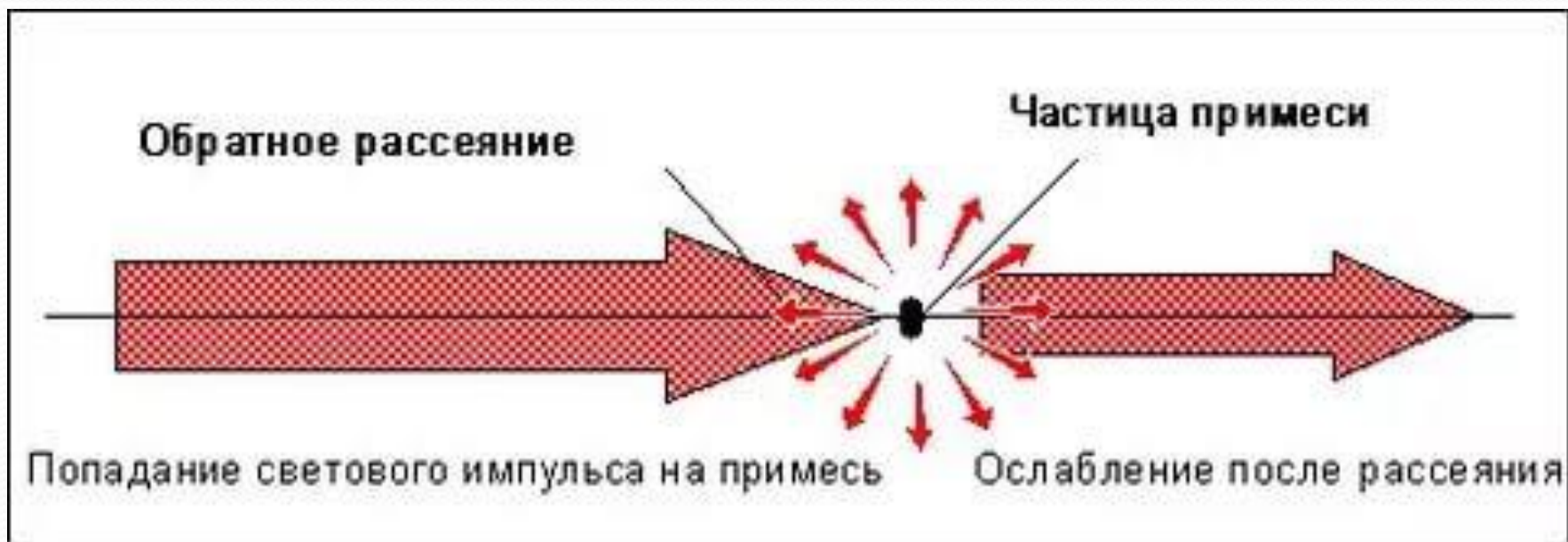
Рассеивание света

- **Рассеивание света** – явление, которое возникает на микроскопических примесях или деферентов среды (т.е. среда неоднородная). Если частица много меньше, чем длина волны то интенсивность рассеянного света обратнопропорциональна длине волны.

$$I_p = 1/\lambda^4$$

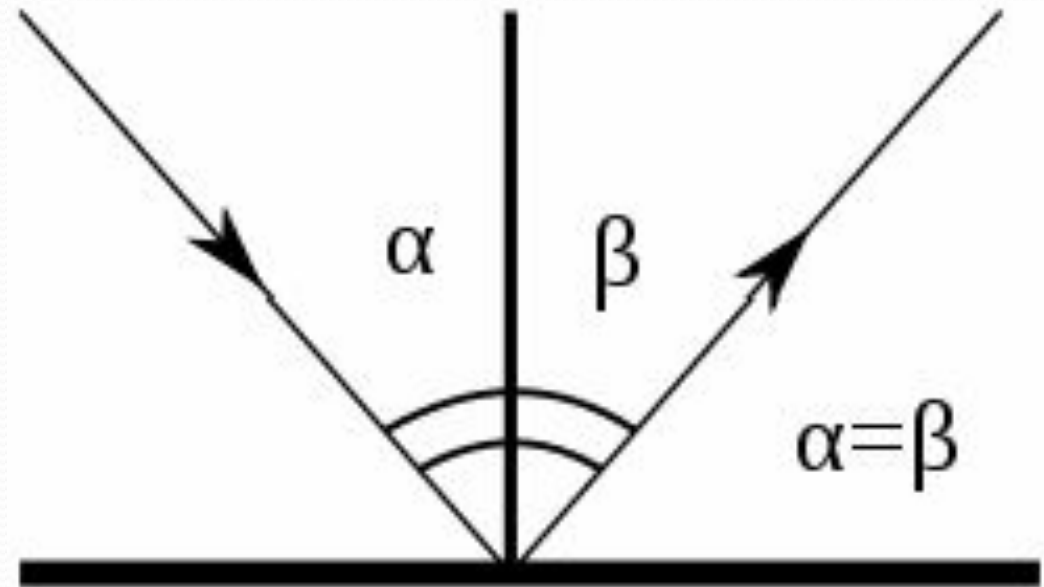
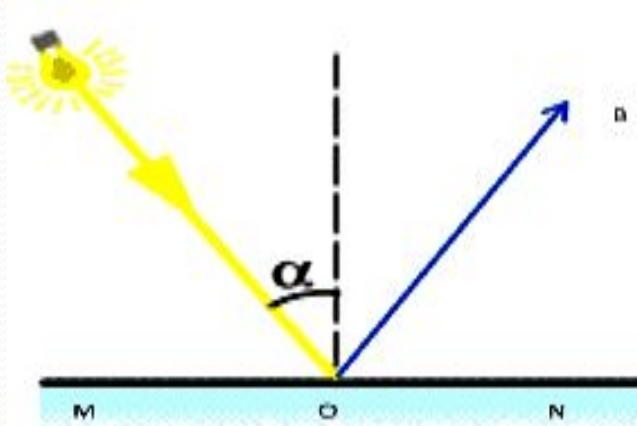
- Закон Рееля: Реле = $r \ll \lambda$





Отражение света

- **Закон отражения:** падающие и отражённые лучи лежат в одной плоскости и угол падения равен углу отражения.



Преломление света

- *Закон преломления*: падающие преломлённые лучи лежат в одной плоскости в отношениях $\sin$ угла падения к $\sin$ угла преломления падающих сред.
- Величина постоянная и называется показатель преломления.

Закон преломления света

- Закон преломления описывается формулой:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = n_{21} \quad (1)$$

где n_{21} – **относительный показатель преломления** второй среды относительно первой

