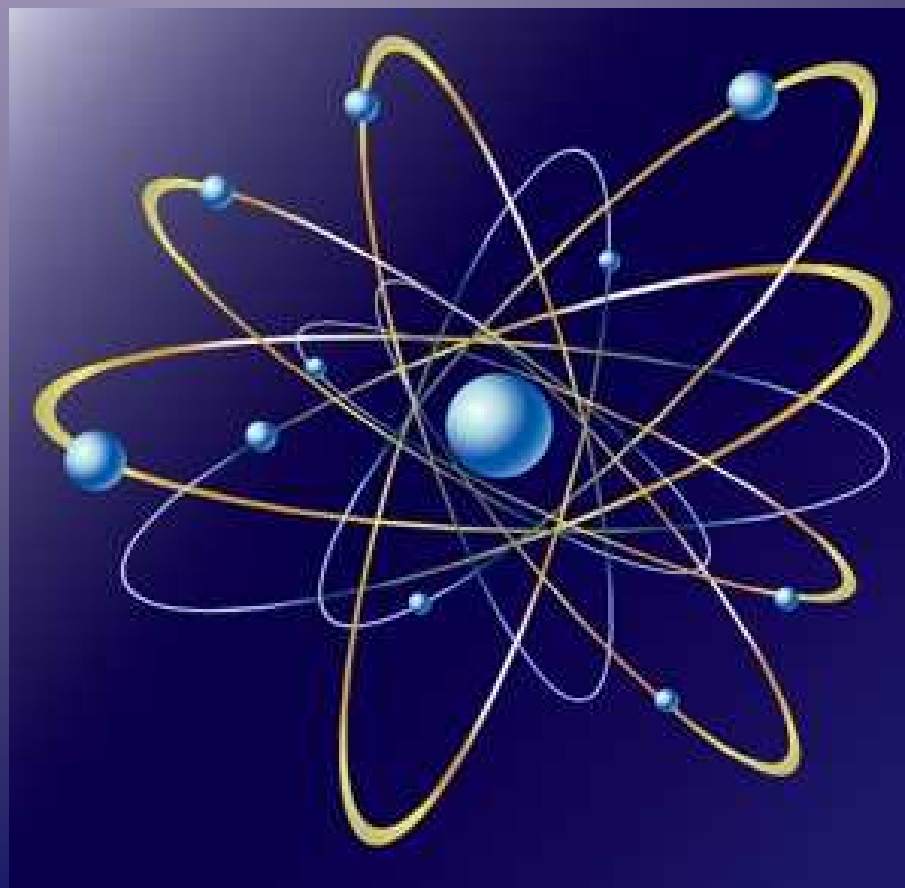


# МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ – ЧТО, КАК и ЗАЧЕМ

научно - популярный комикс для любопытствующих и начинающих

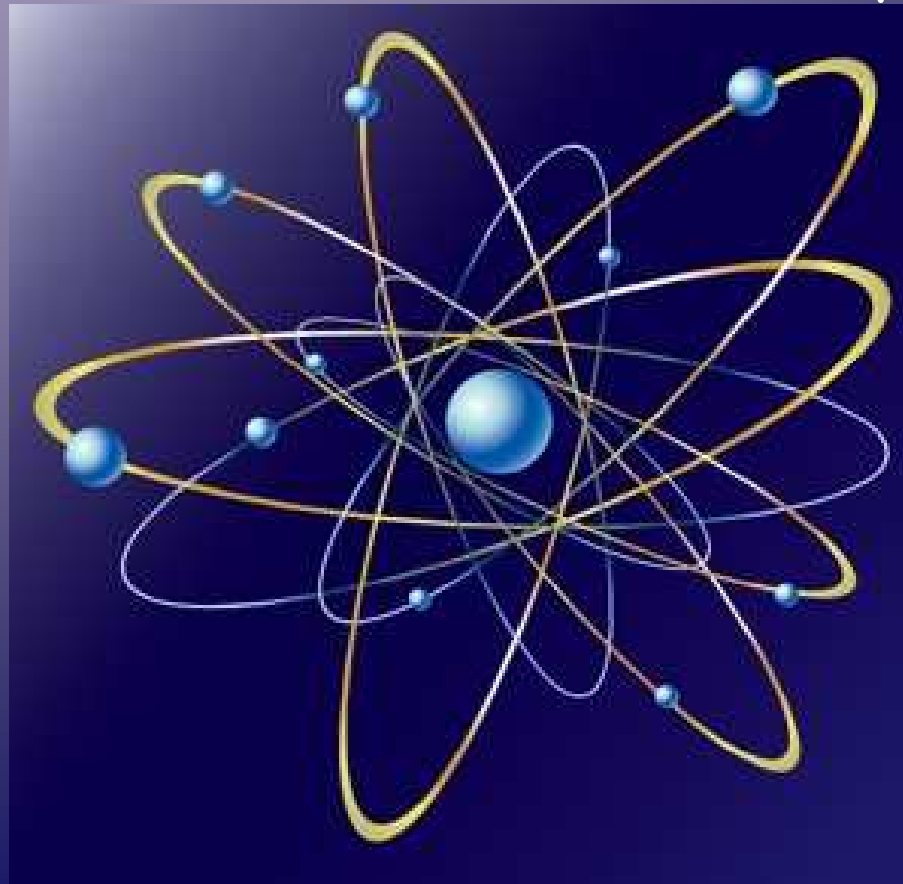


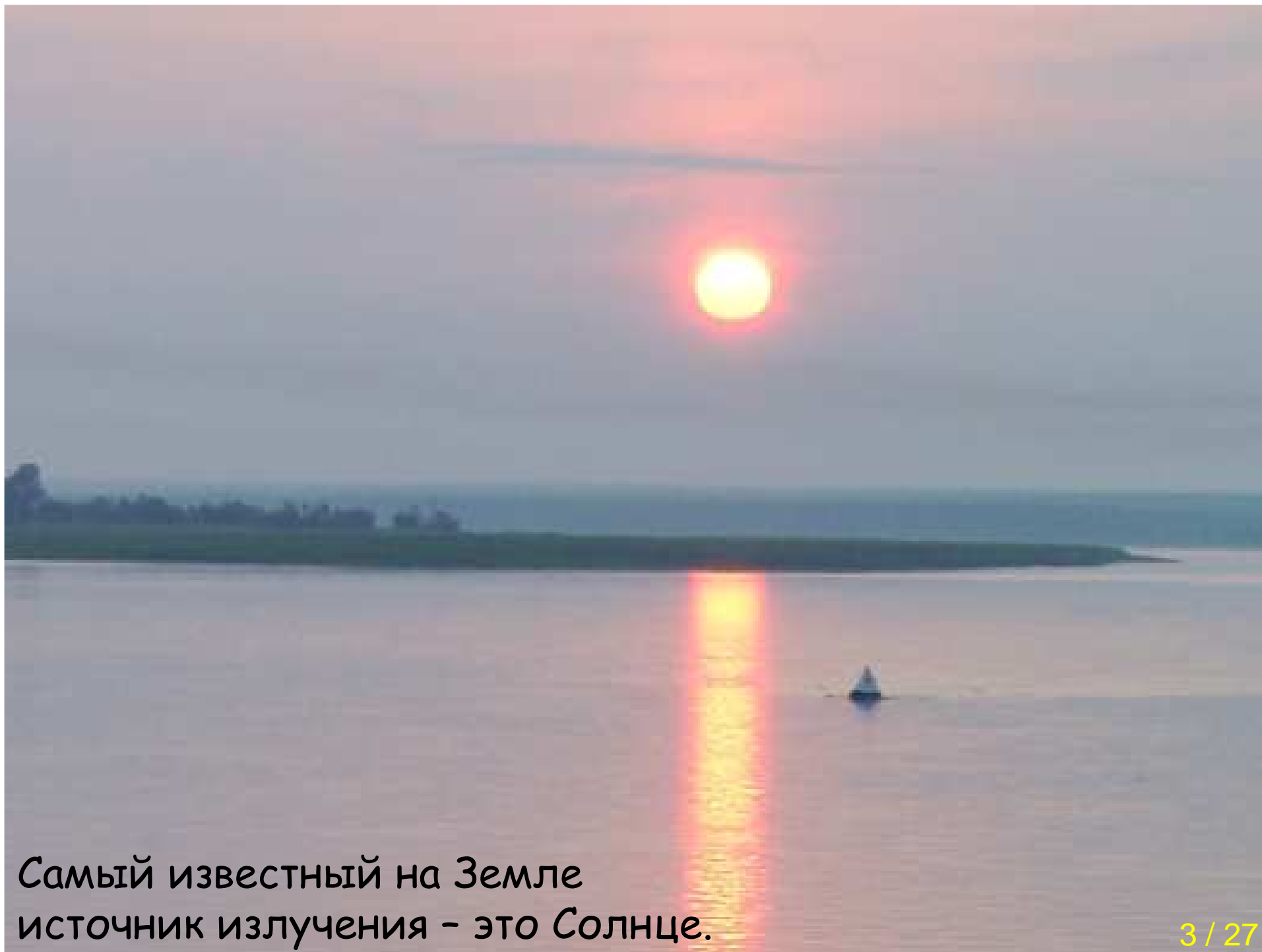
Сначала совсем немного скучных определений:

Спектроскопия – это наука, изучающая взаимодействие излучения с веществом.

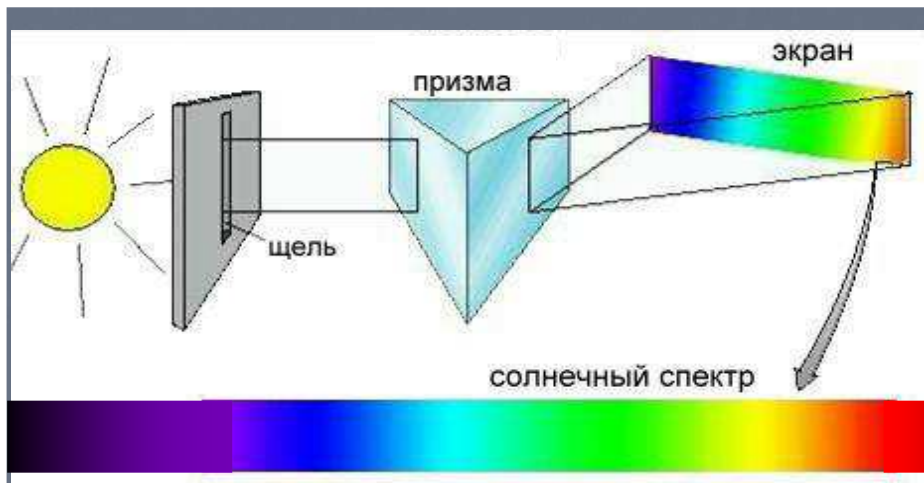
Спектр вещества – это сила этого взаимодействия в зависимости от частоты (или длины волны) излучения.

Спектр излучения – это зависимость его яркости от частоты.





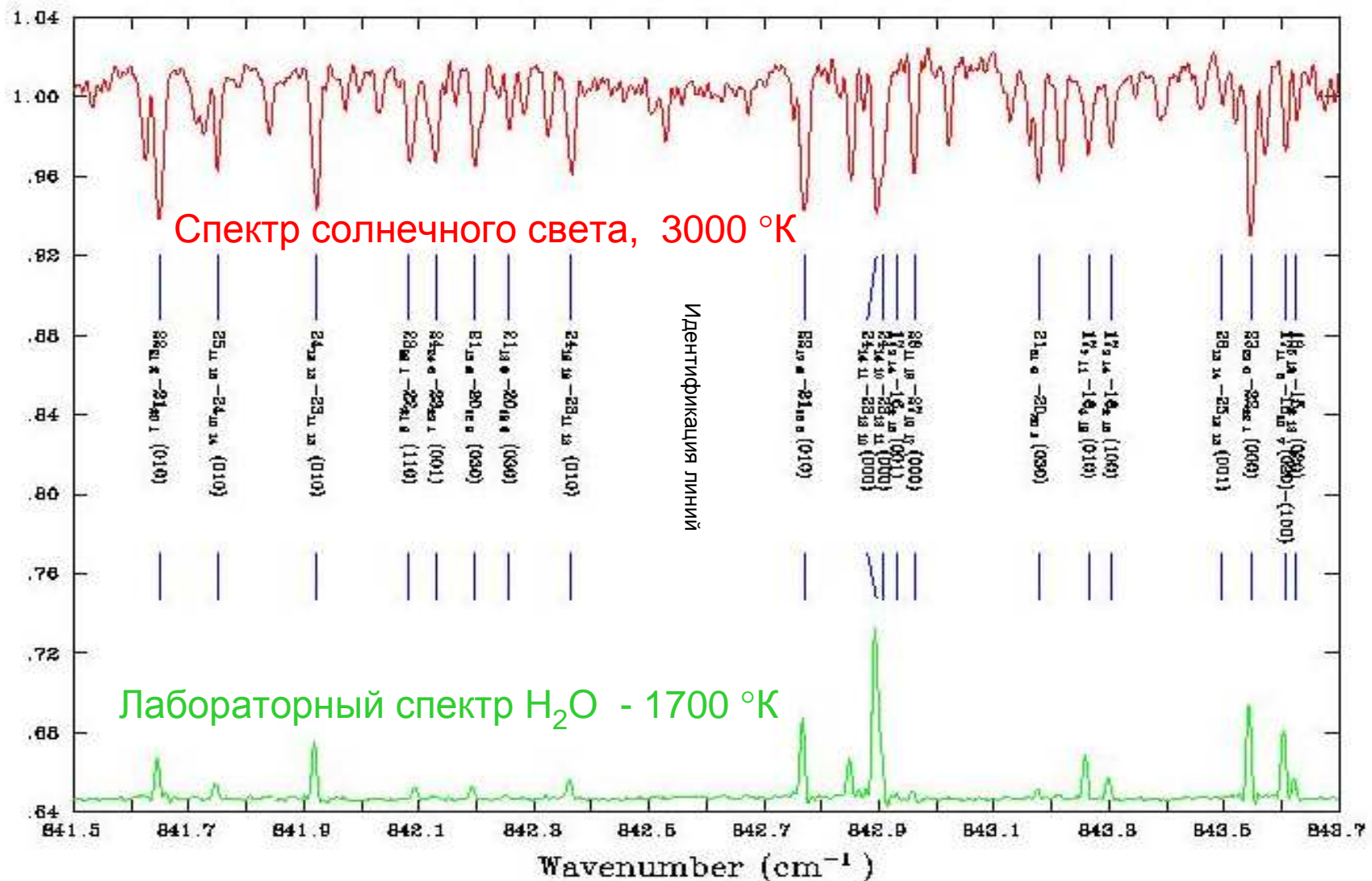
Самый известный на Земле  
источник излучения - это Солнце.



Если пропустить луч через призму,  
то на экране будет видна радуга -  
это видимая часть спектра  
солнечного излучения.



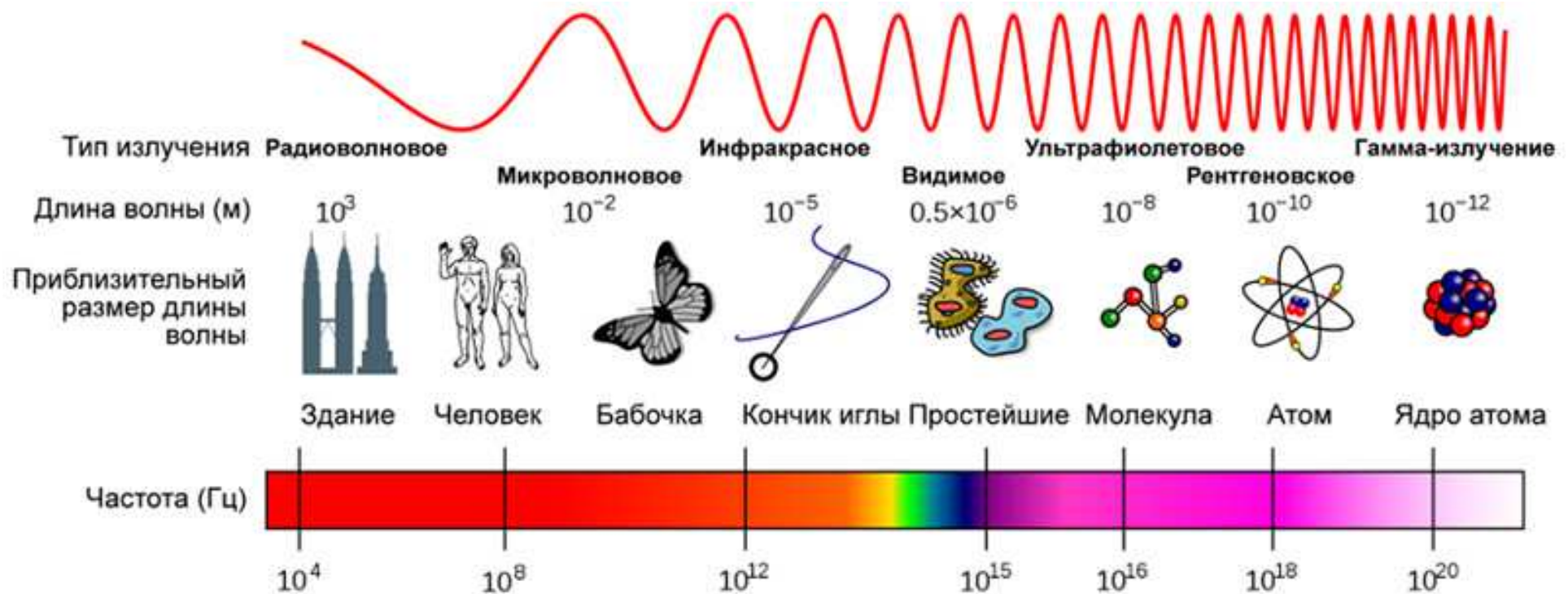
Если взглянуть на полученную радугу, то будет видно, что некоторых цветов в ней нет. Солнце излучает на всех частотах. Темные полосы означают, что на пути солнечного света есть вещество, которое поглотило часть излучения. Если взять фотоприемник, и двигать его вдоль цветных полос, то в ярких областях он будет давать большой сигнал, а в темных – маленький. В результате получится спектр в привычном для спектроскописта виде.



Маленький кусочек этого спектра показан в верхней части картинки красным цветом. Каждый пикок - это спектральная линия вещества. Все вместе они образуют спектр вещества. Сопоставление этого спектра со спектрами известных молекул позволило нам сделать вывод, что практически все пички в спектре солнечного света - это линии очень сильно разогретых (примерно до 3000 градусов) молекул воды, которые образуются в атмосфере солнца над солнечными пятнами.



# Спектр электромагнитного излучения



Видимый свет составляет лишь малую часть спектра электромагнитного излучения. Молекулы поглощают излучение разных диапазонов. При этом происходят изменения в их движении. Например, поглощение микроволнового излучения приводит к изменению скорости вращения молекулы, как целого, а инфракрасного - к возникновению колебаний атомов в молекулах. Поглощение ультрафиолетового излучения приводит к переходу электронов на более высокие орбиты. Соответственно говорят о вращательных, колебательных, электронных и других спектрах молекул.

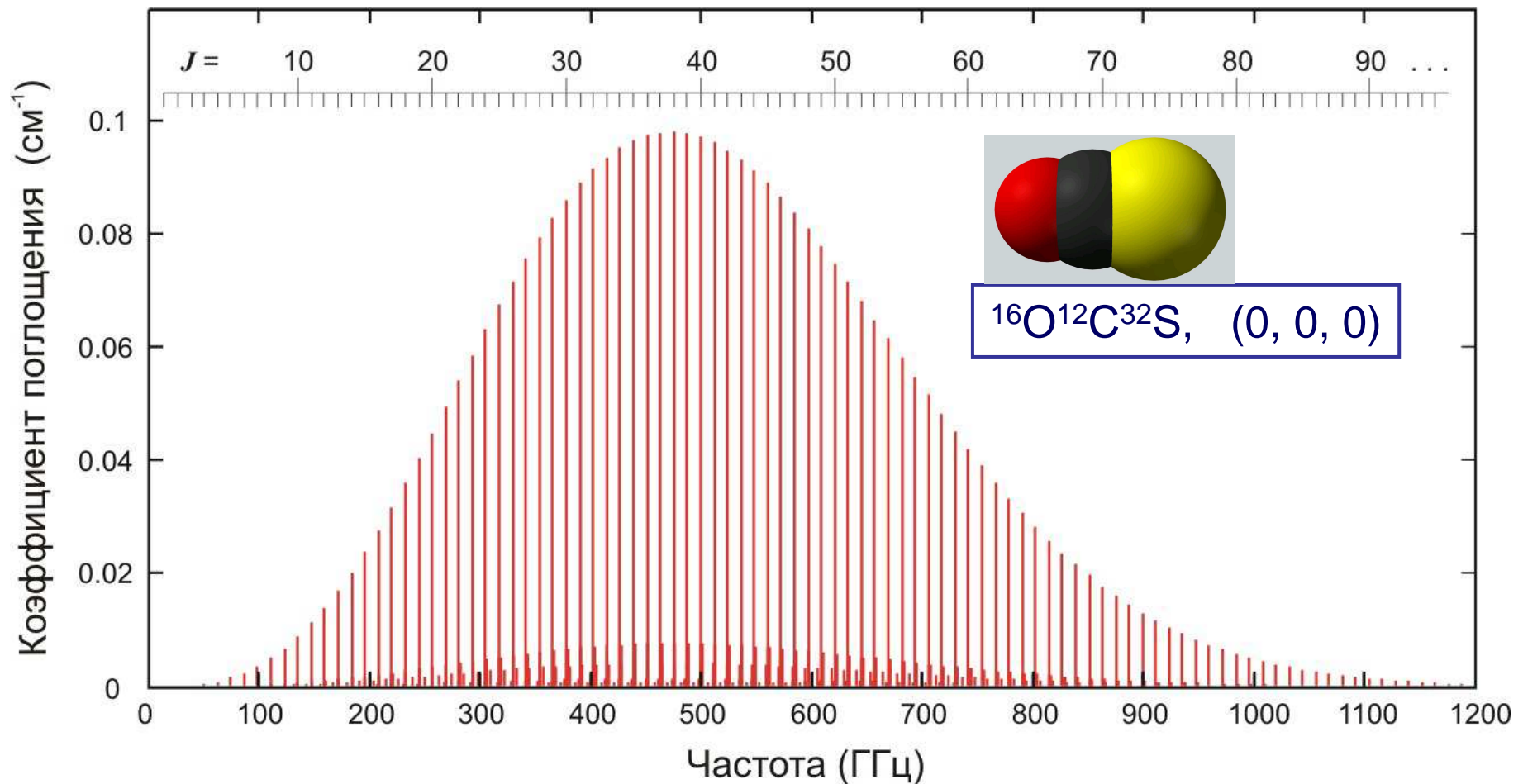


Исследовать спектр газа очень просто - надо взять источник излучения, пропустить излучение через газ, развернуть его в спектр и измерить результат...



## Пример вращательного спектра молекулы

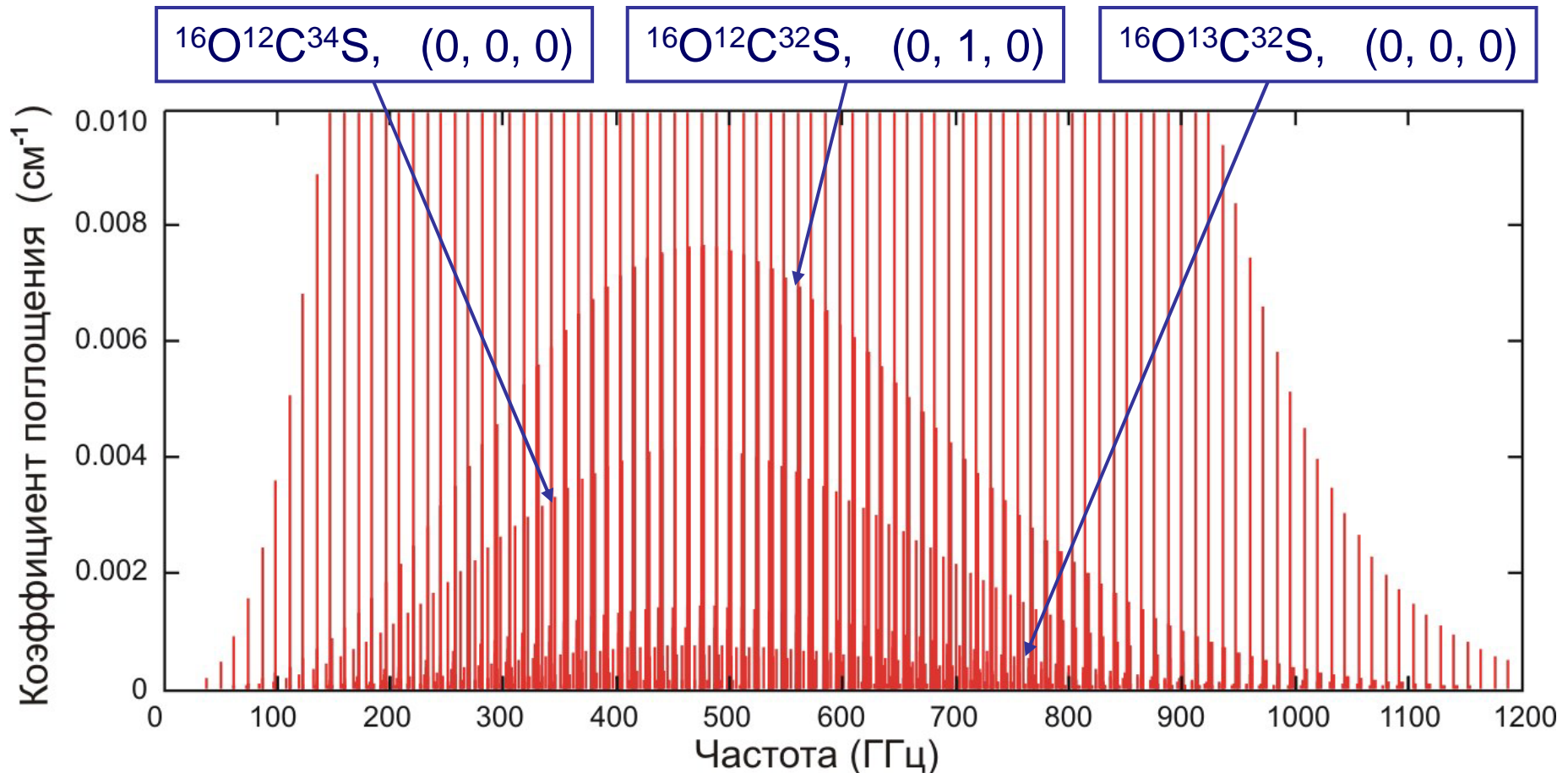
Сероокись углерода (OCS). Диаграмма спектра при комнатной температуре.



Посмотрим, например, на спектр сероокиси углерода. Ее вращательный спектр выглядит очень простым - это почти периодическая серия линий. Из этого спектроскопист может сделать вывод, что все атомы в молекуле расположены на одной оси.

## Пример вращательного спектра молекулы

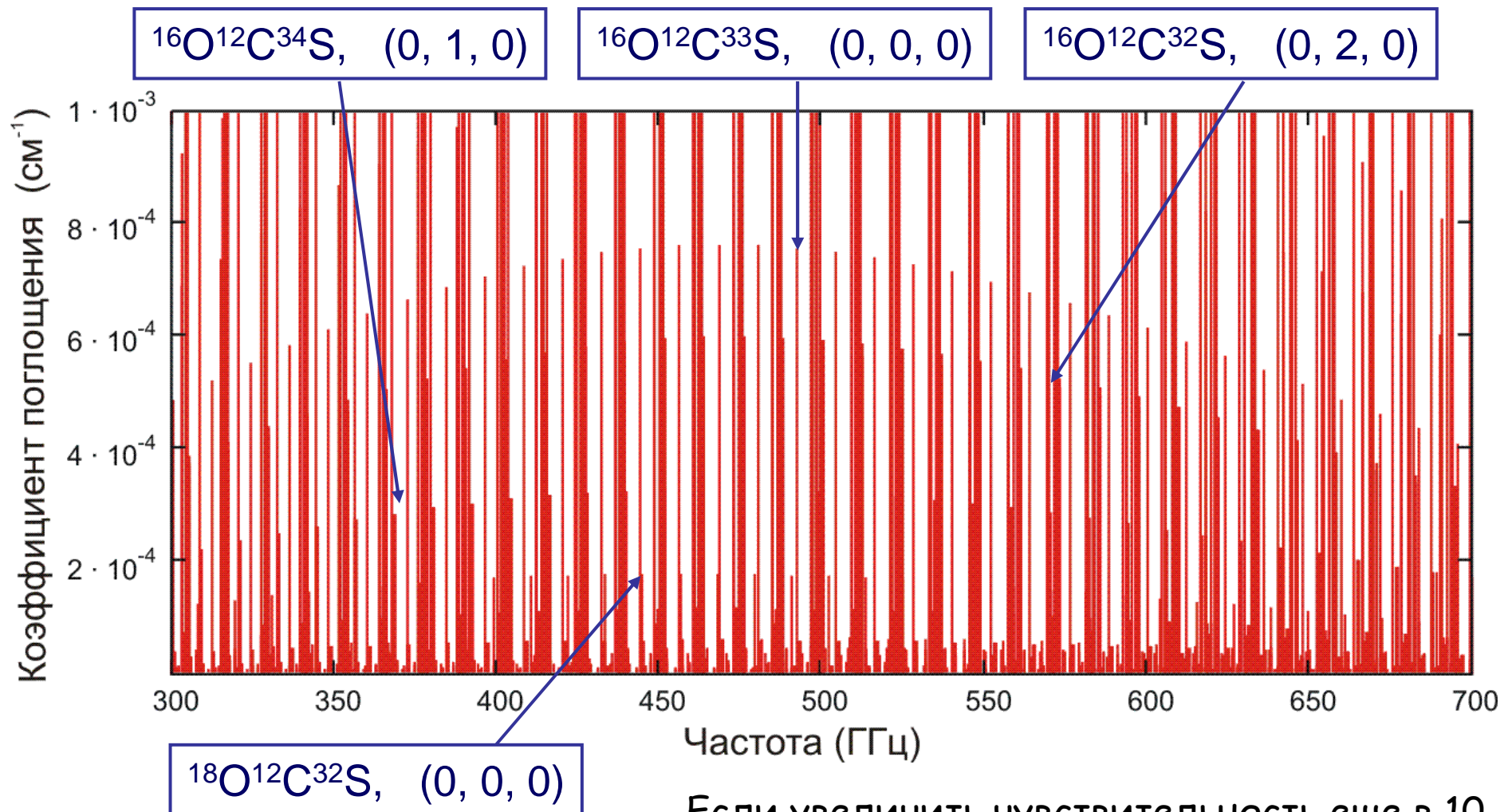
Сероокись углерода (OCS). Диаграмма спектра при комнатной температуре (фрагмент 1).



Если увеличить чувствительность спектрометра в 10 раз, то будет видно, что между сильными линиями есть более слабые линии, которые тоже складываются в похожие по форме серии. Эти линии тоже принадлежат молекулам сероокиси углерода, но с более редко встречающимися в природе изотопами атомов. А еще тут видна серия линий таких молекул в которых из-за соударений возбуждись изгибные колебания.

## Пример вращательного спектра молекулы

Сероокись углерода (OCS). Диаграмма спектра при комнатной температуре (фрагмент 2).



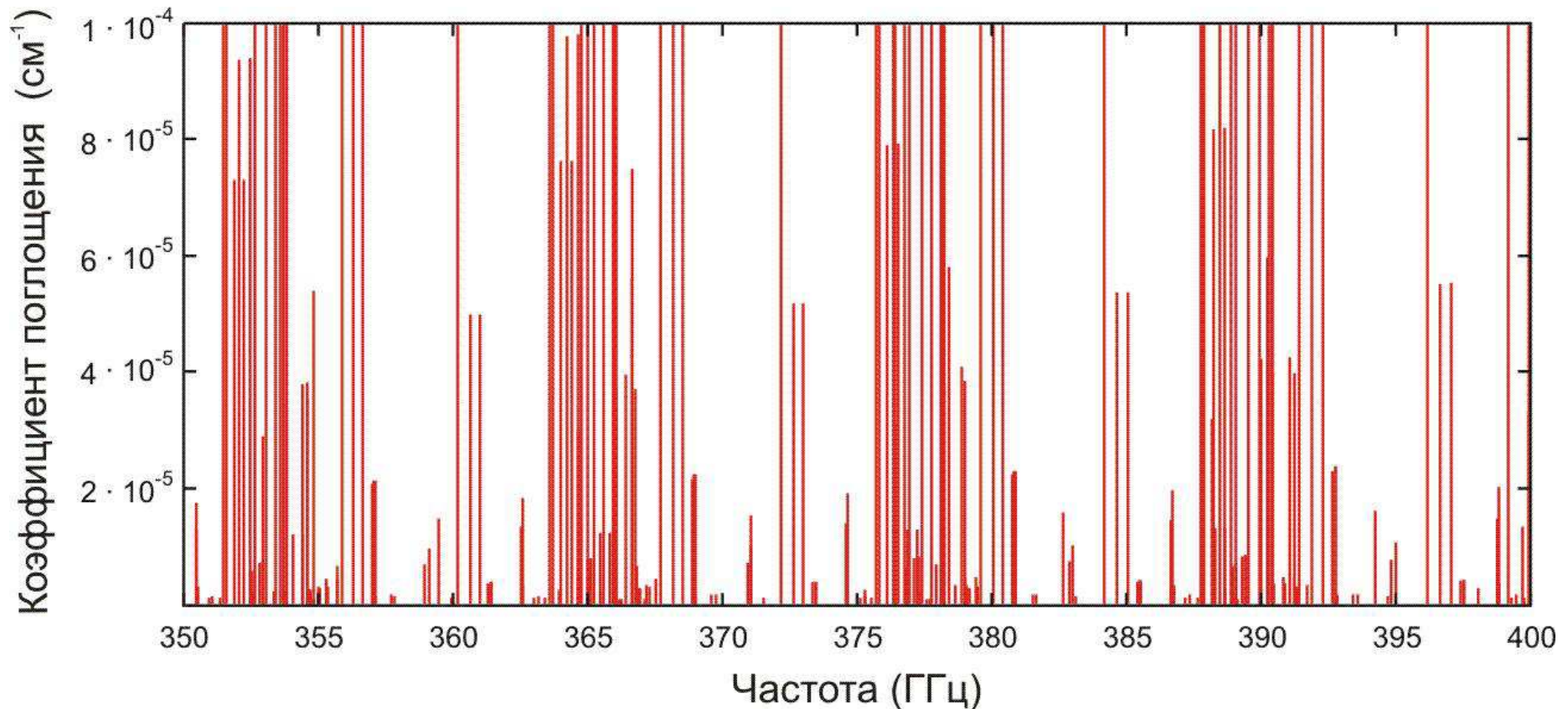
Если увеличить чувствительность еще в 10 раз, то станут видны серии линий молекул с еще более редкими изотопами и с еще более сложными колебательными движениями атомов.



## Пример вращательного спектра молекулы

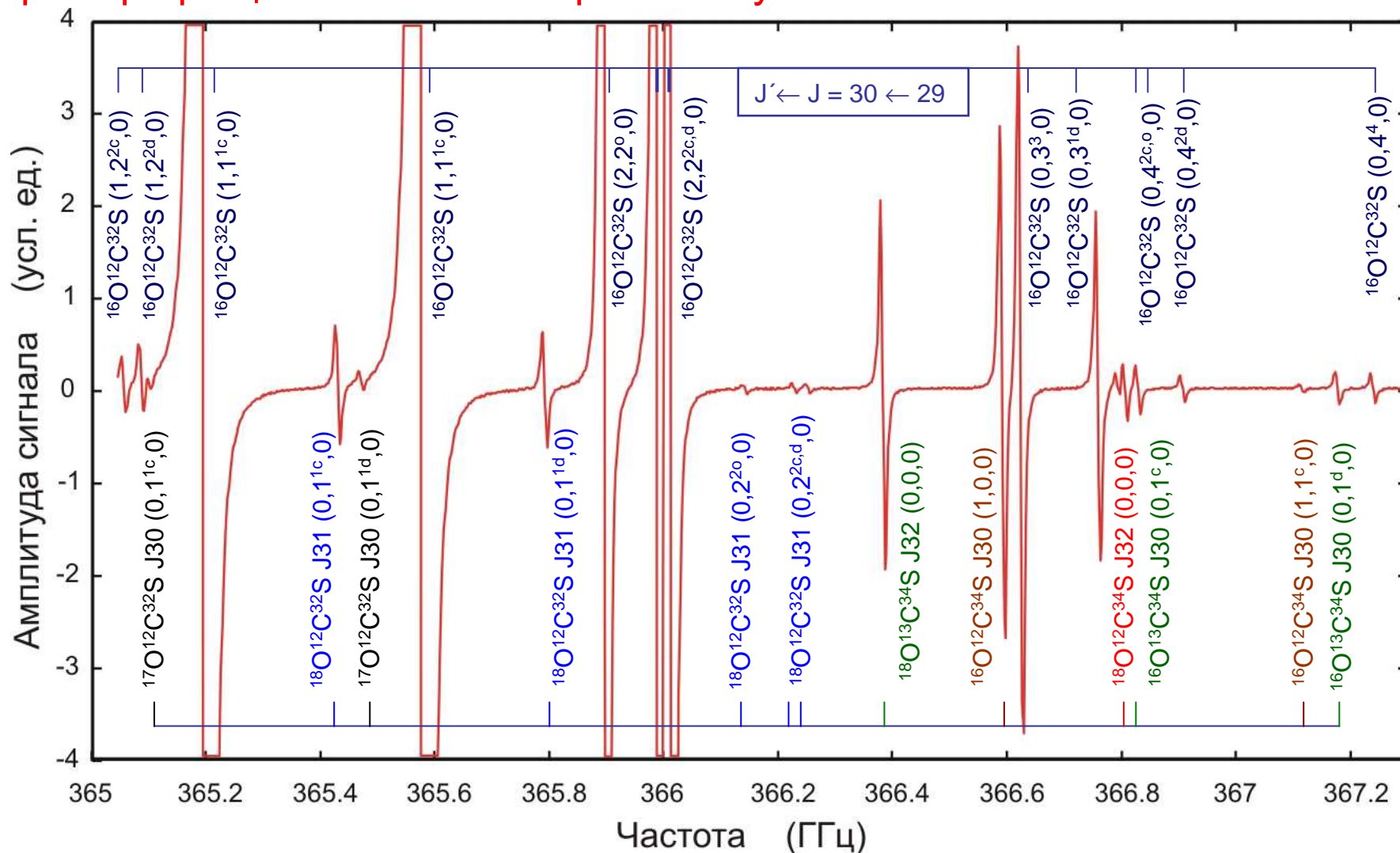
Сероокись углерода (OCS). Диаграмма спектра при комнатной температуре (фрагмент 3).

$^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{32}\text{S}$  (0,1,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$  (1,0,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{33}\text{S}$  (0,1,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  
 $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{34}\text{S}$  (0,0,0);  $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{32}\text{S}$  (0,3,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  $^{17}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (0,0,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$  (0,2,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (2,0,0);  
 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$  (0,3,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{36}\text{S}$  (0,0,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,0,0);  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0);  
 $^{18}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$  (1,1,0)...



Еще больше чувствительности - еще больше линий...

## Пример вращательного спектра молекулы

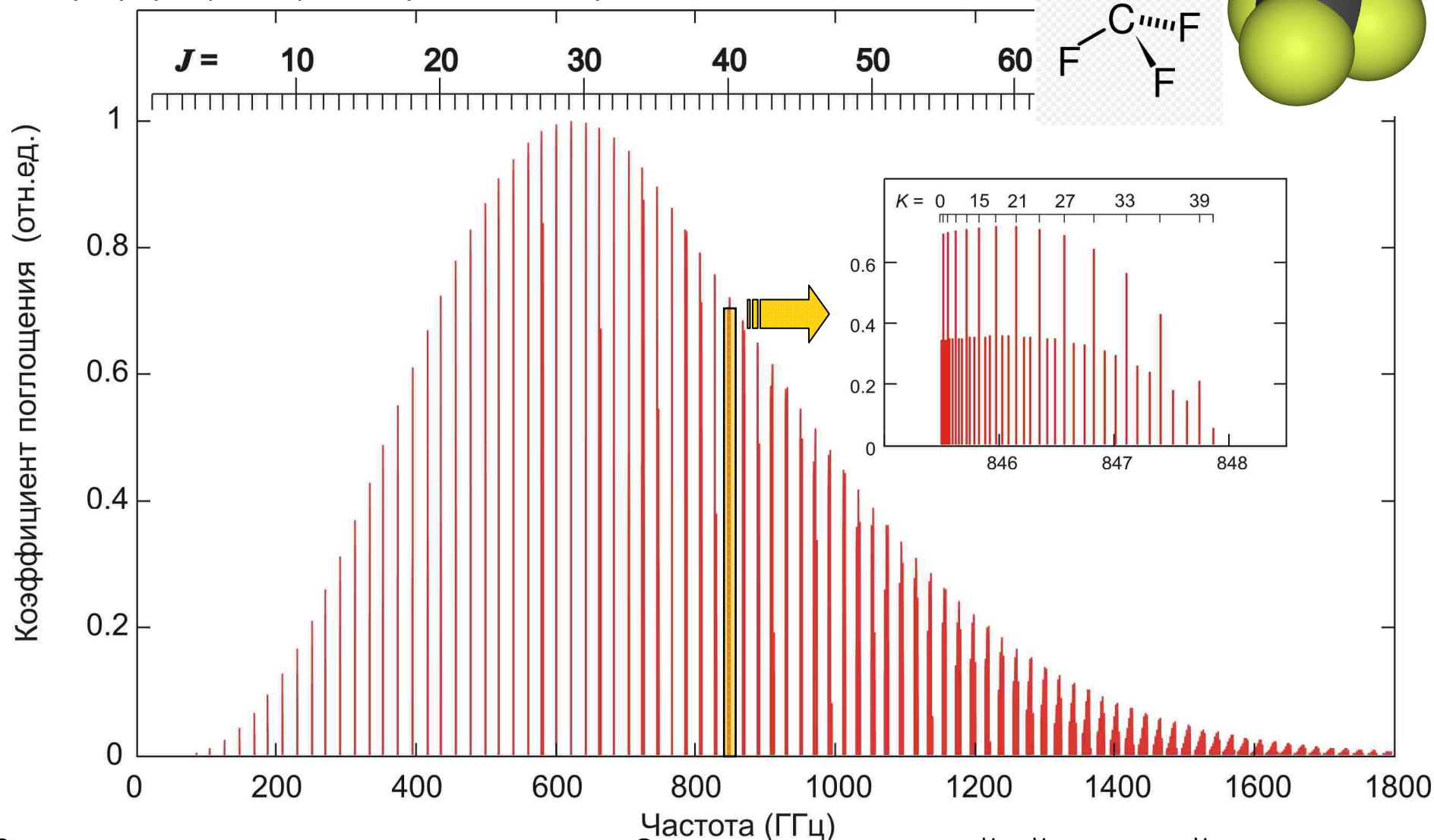


А это - экспериментальная запись маленького кусочка спектра, на котором все эти линии видны. Анализ спектра позволяет определить, как расположены атомы в молекуле, какое расстояние между ними, какие углы между связями атомов, на каких частотах могут происходить колебания атомов и многое другое. По спектру, как по отпечаткам пальцев, можно однозначно сказать какой молекуле он принадлежит.



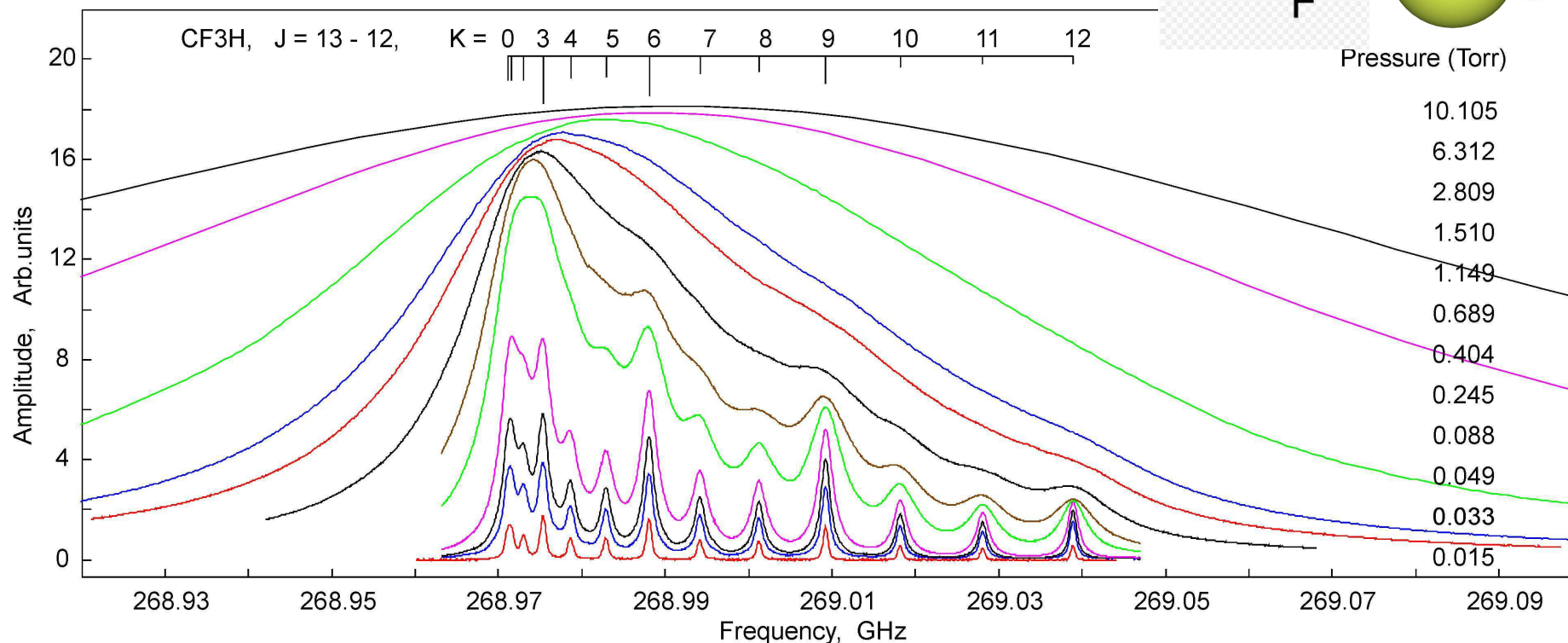
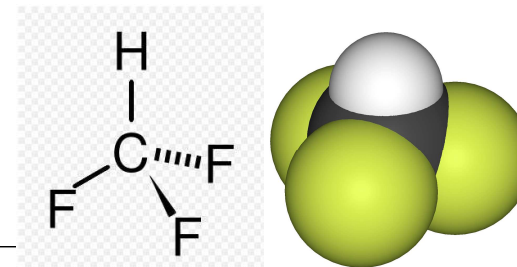
## Пример вращательного спектра молекулы

Фтороформ (CF<sub>3</sub>H). Диаграмма спектра.



Это спектр одного из фреонов - фтороформа. Он похож на спектр линейной молекулой сероокиси углерода. Но при внимательном рассмотрении видно, что каждая линия в этом спектре расщеплена на столько компонент, какой порядковый номер этой линии. Из этого спектроскописты делают вывод, что молекула является правильной приплюснутой пирамидкой.

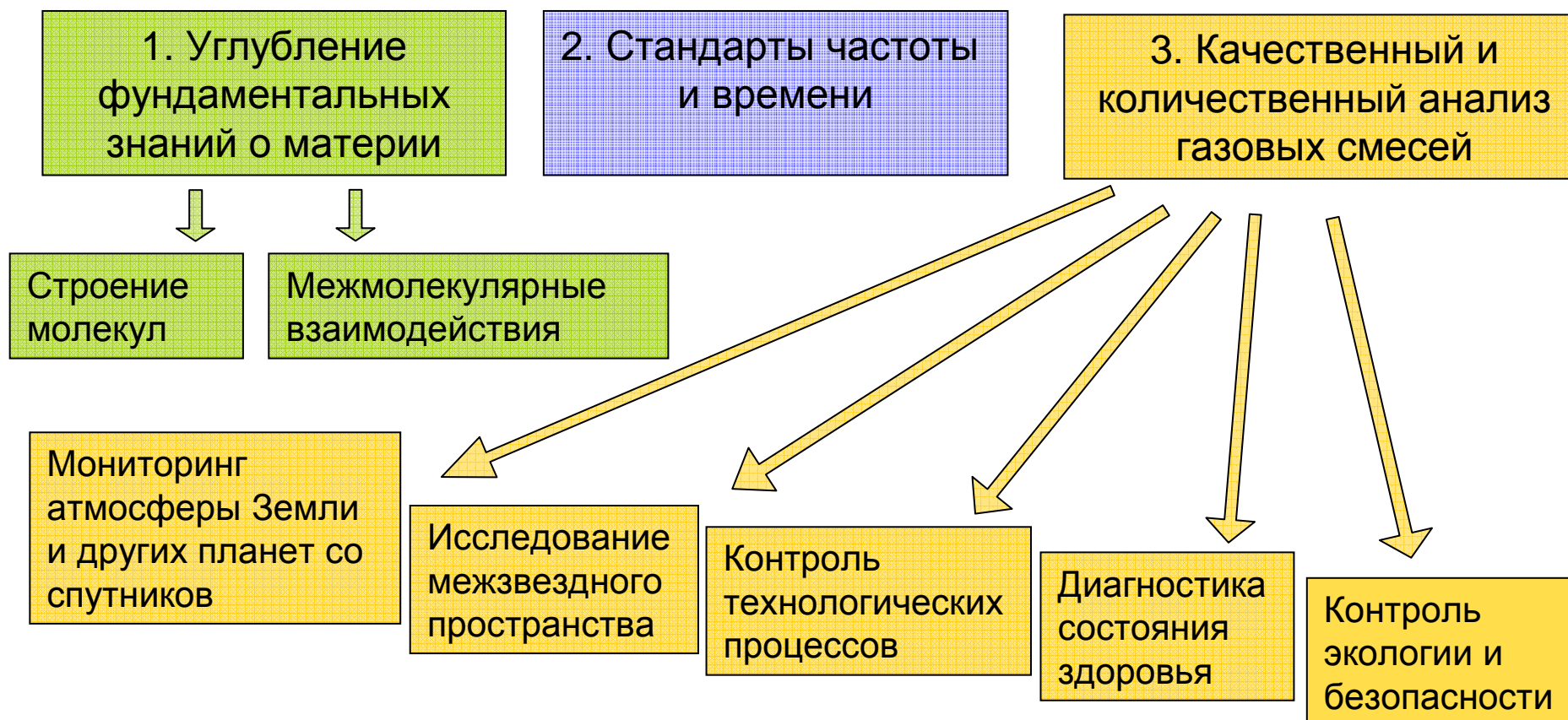
## Пример вращательного спектра молекулы Фтороформ (CF<sub>3</sub>H)



А так выглядит одна из вращательных линий фтороформа в эксперименте. При низких давлениях видны все ее компоненты, а при больших давлениях они становятся широкими из-за столкновений молекул друг с другом, характерная картинка спектра «замывается» и все компоненты сливаются в одну широкую линию. Столкновения молекул влияют на форму наблюдаемого спектра. Причем разные молекулы влияют по-разному. Это значит, что исследуя спектры можно судить и о том, как разные молекулы взаимодействуют между собой.

# Зачем это нужно?

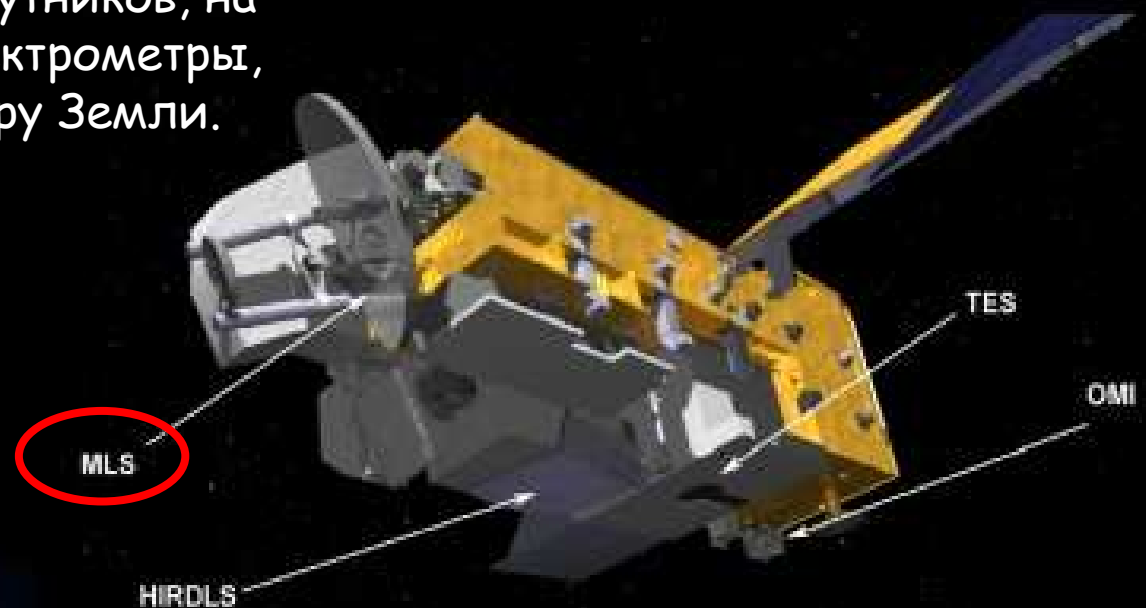
- (1) Зная газообразное вещество, можно найти его спектр и определить строение и структуру молекул, из которого оно состоит.
- (2) Стандарты частоты и времени фактически являются спектрометрами, в которых очень точно измеряется частота одной линии.
- (3) Зная спектр газа, можно найти из каких молекул он состоит.



На последующих картинках - некоторые примеры применений.

Космическая платформа AURA, запущена NASA 14 июля 2004 года.

Один из действующих спутников, на котором установлены спектрометры, анализирующие атмосферу Земли.



# The EOS MLS Instrument

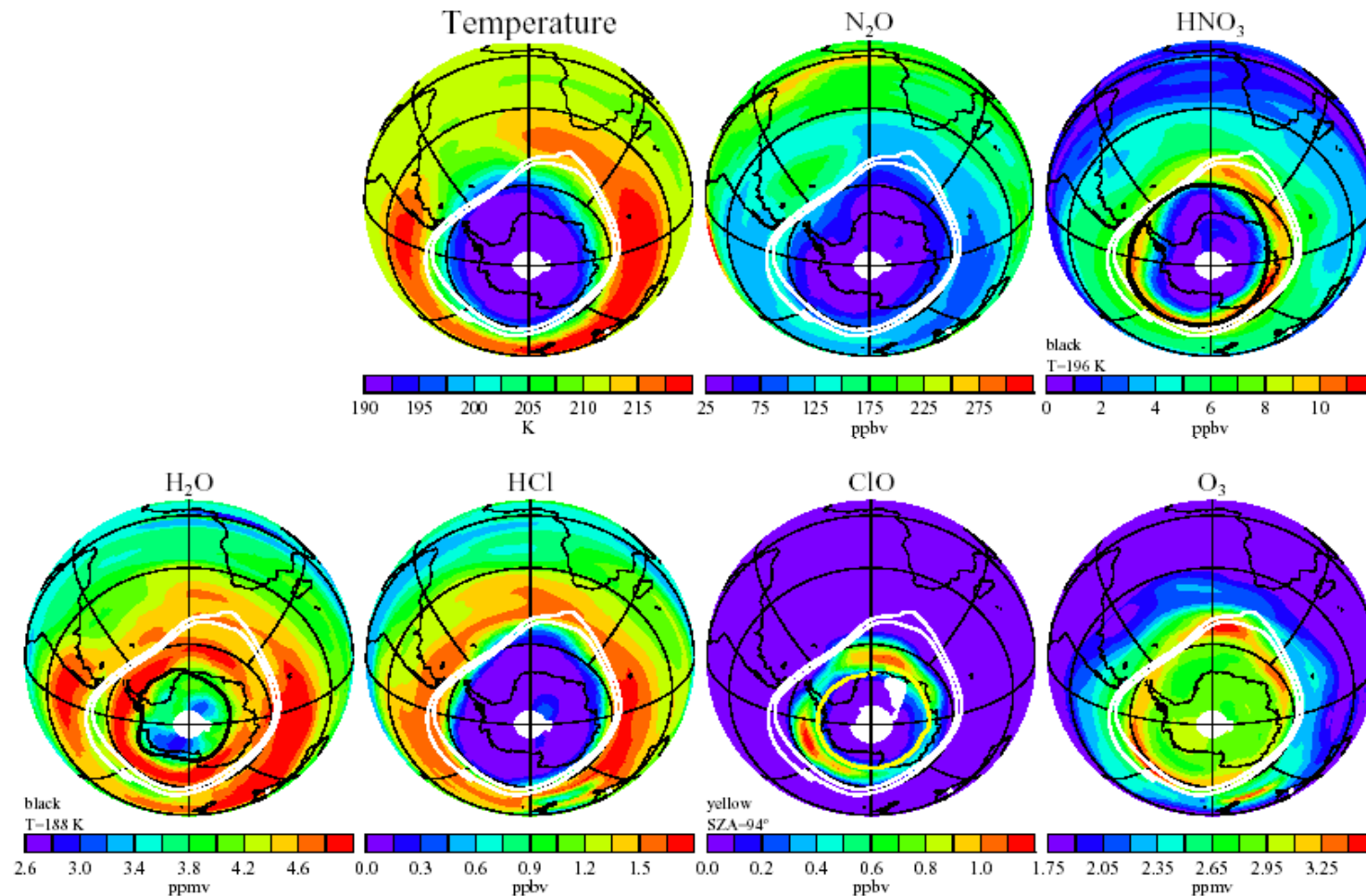
- **Heterodyne radiometers operating in 5 broad mm/submm bands**
  - 118 GHz radiometer: primarily for temperature and tangent pressure reference
  - 190 GHz radiometer: primarily for  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{HNO}_3$
  - 240 GHz radiometer: primarily for  $\text{O}_3$  and  $\text{CO}$
  - 640 GHz radiometer: primarily for  $\text{HCl}$ ,  $\text{ClO}$ ,  $\text{BrO}$ ,  $\text{HO}_2$  and  $\text{N}_2\text{O}$
  - 2.5 THz radiometer: primarily for  $\text{OH}$
- **Advanced technology**
  - Planar submm mixers
  - Integrated circuits
  - Composite materials
  - Compact gas laser for THz local oscillator and solid-state sources for GHz local oscillators
- **JPL designed and developed**
  - with many subsystems procured from industry

А это - один из спектрометров, установленных на спутнике и его основные характеристики.





### 3 Aug 04 MLS data for layer at $\Theta=490$ K ( $\sim 18$ km)



Карты распространности различных атмосферных газов и температуры воздуха, которые составляются по результатам наблюдения молекулярных линий с помощью этого спектрометра. По таким картам составляется, в частности, прогноз погоды, и ведутся наблюдения за экологией и климатическими изменениями.

## Микроволновая молекулярная спектроскопия для астрофизики

The KOSMA - Submillimeter telescope  
Gornergrat near Zermatt, Switzerland



А с помощью такого радиотелескопа - «спектрометра» можно заглянуть в глубины космоса.



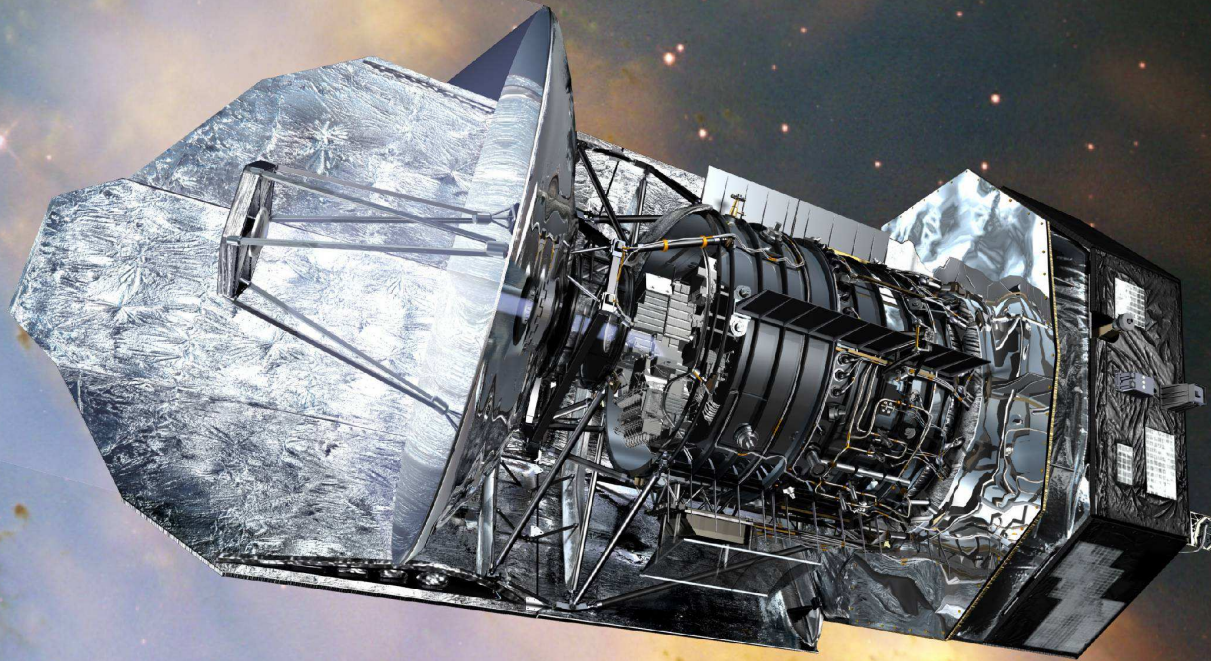


H <sub>2</sub>	HD	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> D <sup>+</sup>		
CH	CH <sup>+</sup>	C <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H	C <sub>3</sub>
CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H	c-C <sub>3</sub> H	CH <sub>4</sub>	C <sub>4</sub>
c-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> CCC	C <sub>4</sub> H	C <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>5</sub> H
H <sub>2</sub> C <sub>4</sub>	HC <sub>4</sub> H	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	C <sub>6</sub> H	HC <sub>6</sub> H	H <sub>2</sub> C <sub>6</sub>
C <sub>7</sub> H	CH <sub>3</sub> C <sub>4</sub> H	CH <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H	C <sub>8</sub> H	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	
OH	CO	CO <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> O	HCO	HCO <sup>+</sup>
HO <sup>+</sup>	C <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	HOCO <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> CO
C <sub>3</sub> O	CH <sub>2</sub> CO	HCOOH	H <sub>2</sub> COH <sup>+</sup>	CH <sub>3</sub> OH	CH <sub>2</sub> CHO
CH <sub>2</sub> CHOH	CH <sub>2</sub> CHCHO	HC <sub>2</sub> CHO	C <sub>5</sub> O	CH <sub>3</sub> CHO	c-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O
c-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O	CH <sub>3</sub> OCHO	CH <sub>2</sub> OHCHO	CH <sub>3</sub> COOH	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CHO	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO	HOCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OCH <sub>3</sub>	(CH <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub> CO?	
NH	CN	N <sub>2</sub>	NH <sub>2</sub>	HCN	HNC
N <sub>2</sub> H <sup>+</sup>	NH <sub>3</sub>	HCNH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> CN	HCCN	C <sub>3</sub> N
CH <sub>2</sub> CN	CH <sub>2</sub> NH	HC <sub>2</sub> CN	HC <sub>2</sub> NC	NH <sub>2</sub> CN	C <sub>3</sub> NH
CH <sub>3</sub> CN	CH <sub>3</sub> NC	HC <sub>3</sub> NH <sup>+</sup>	HC <sub>4</sub> N	C <sub>5</sub> N	CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>
CH <sub>2</sub> CHCN	CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub>	HC <sub>5</sub> N	CH <sub>3</sub> C <sub>3</sub> N	CH <sub>2</sub> CCHCN	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CN
HC <sub>7</sub> N	CH <sub>3</sub> C <sub>5</sub> N?	HC <sub>9</sub> N	HC <sub>11</sub> N		
NO	HNO	N <sub>2</sub> O	HNCO	NH <sub>2</sub> CHO	
SH	CS	SO	SO <sup>+</sup>	NS	SiH
SiC	SiN	SiO	SiS	HCl	NaCl
AlCl	KCl	HF	AlF	CP	PN
H <sub>2</sub> S	C <sub>2</sub> S	SO <sub>2</sub>	OCS	HCS <sup>+</sup>	c-SiC <sub>2</sub>
SiCN	SiNC	NaCN	MgCN	MgNC	AlNC
H <sub>2</sub> CS	HNCS	C <sub>3</sub> S	c-SiC <sub>3</sub>	SiH <sub>4</sub>	SiC <sub>4</sub>
CH <sub>3</sub> SH	C <sub>5</sub> S	FeO	...		

Так выглядит вселенная «глазами» радиотелескопа. Оказалось, что межзвездная среда густо заполнена разными газами. Список молекул, найденных в космосе по их спектрам постоянно расширяется.



Этот космический «спектрометр» тоже исследует межзвездную среду и ему не мешает земная атмосфера.



Космический телескоп «HERSHEL»

Исследования областей образования звезд и галактик

Запущен 14.05.2009

Размер зеркала 3.5 м.

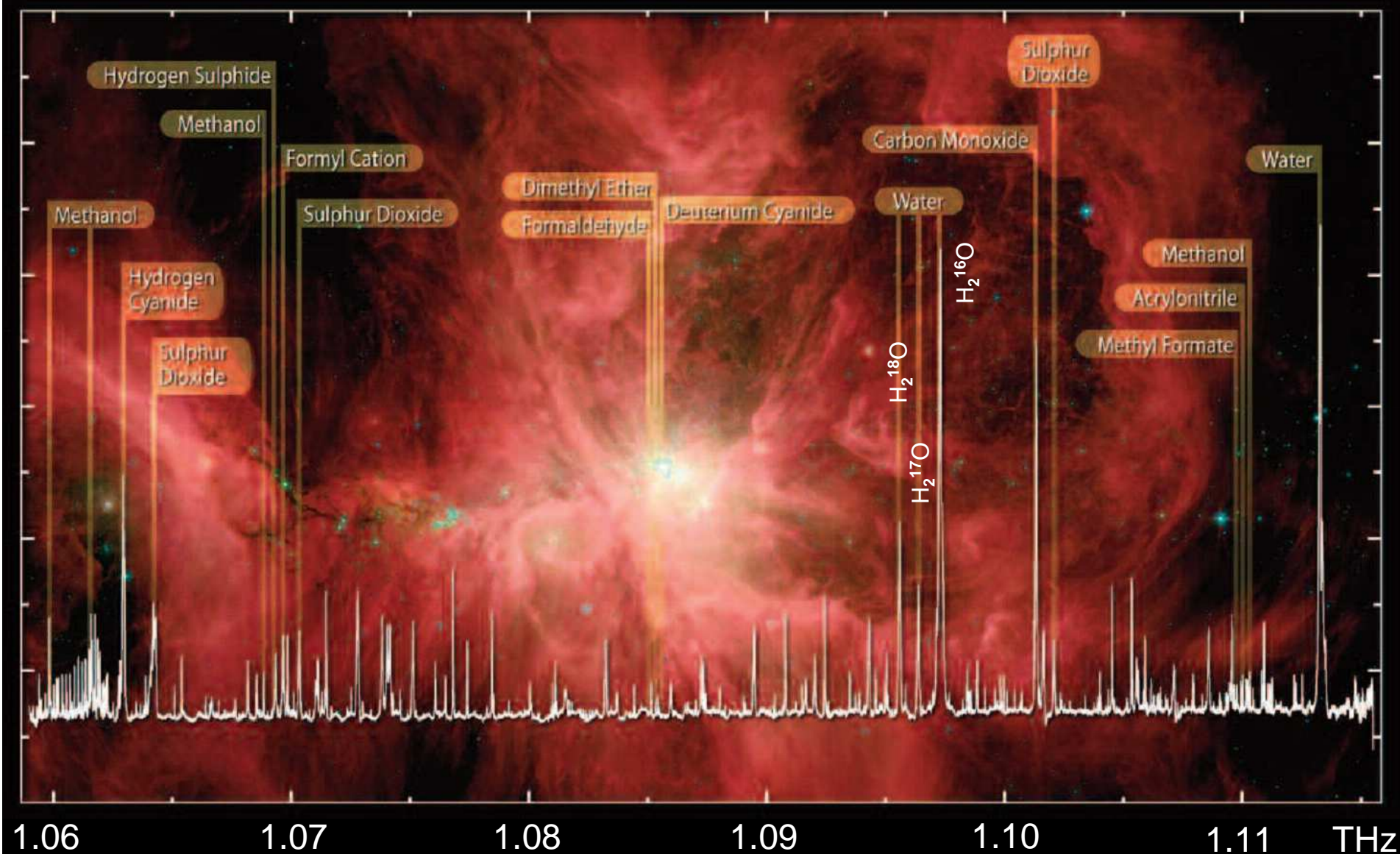
Спектрометры: HIFI: 0.48-1.25 ТГц и 1.41-1.91 ТГц

SPERE: FTS 0.45-1.55 ТГц

PACS: 1.4 – 5.9 ТГц



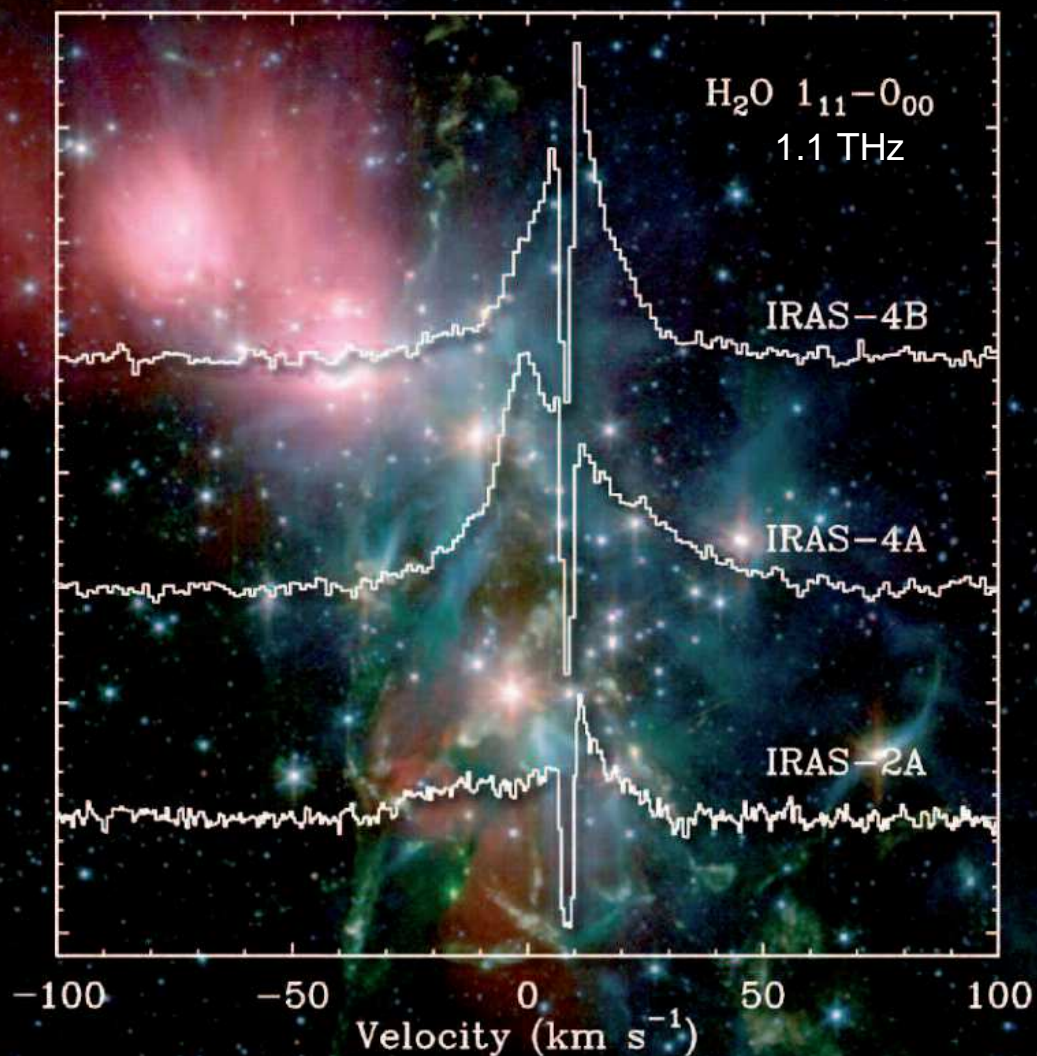
# HIFI (HERSHEL) THz spectrum of Water and organics in the Orion Nebula



Это - фотография одного из объектов наблюдения и спектр газа, наблюдаемый в направлении этого объекта.

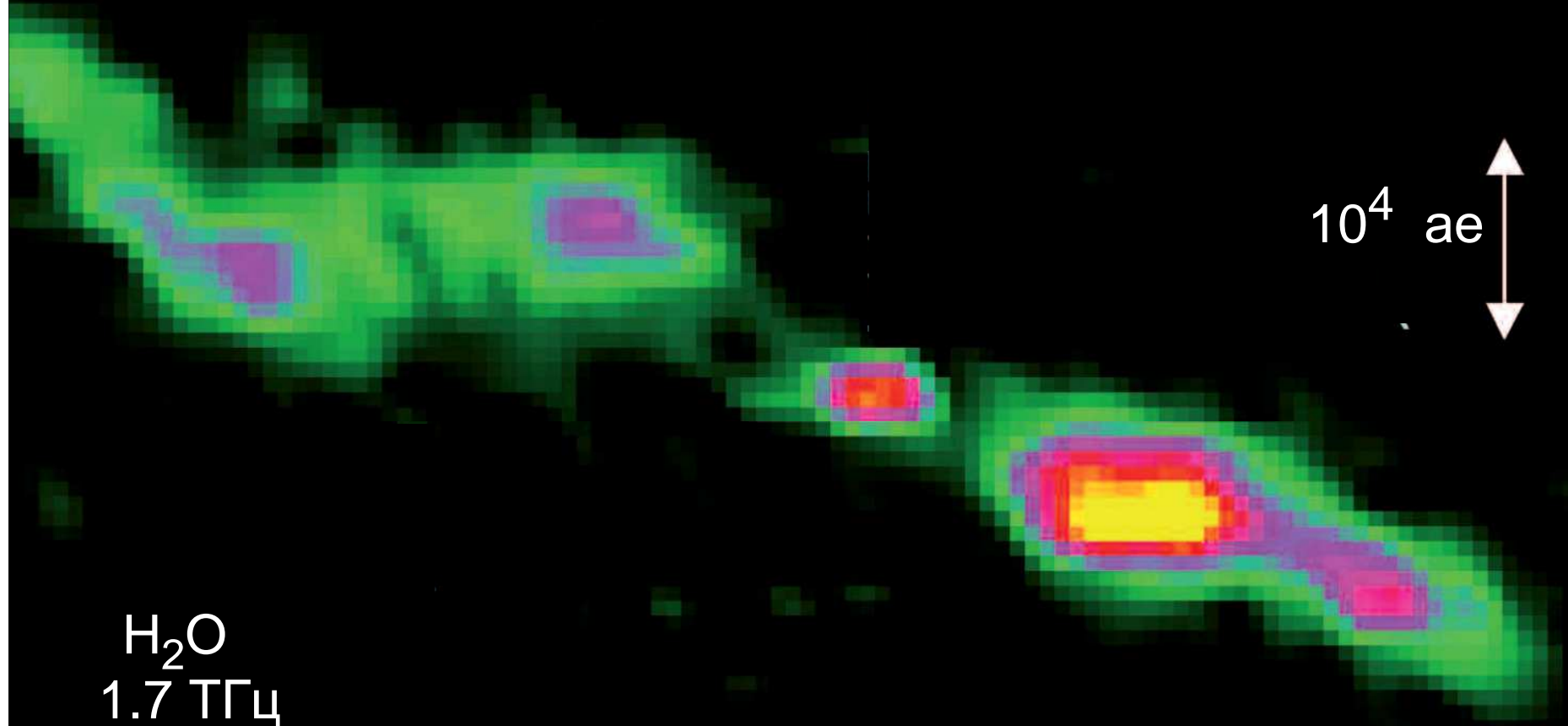


## Линия воды в области звездообразования NGC 1333



А тут - более детальная запись одной из космических линий воды. Видно, что в этом направлении есть молекулы и испускающие и поглощающие излучение, причем температура у одних и других сильно отличается.

## Распределение молекул воды в области протозвезды L1157

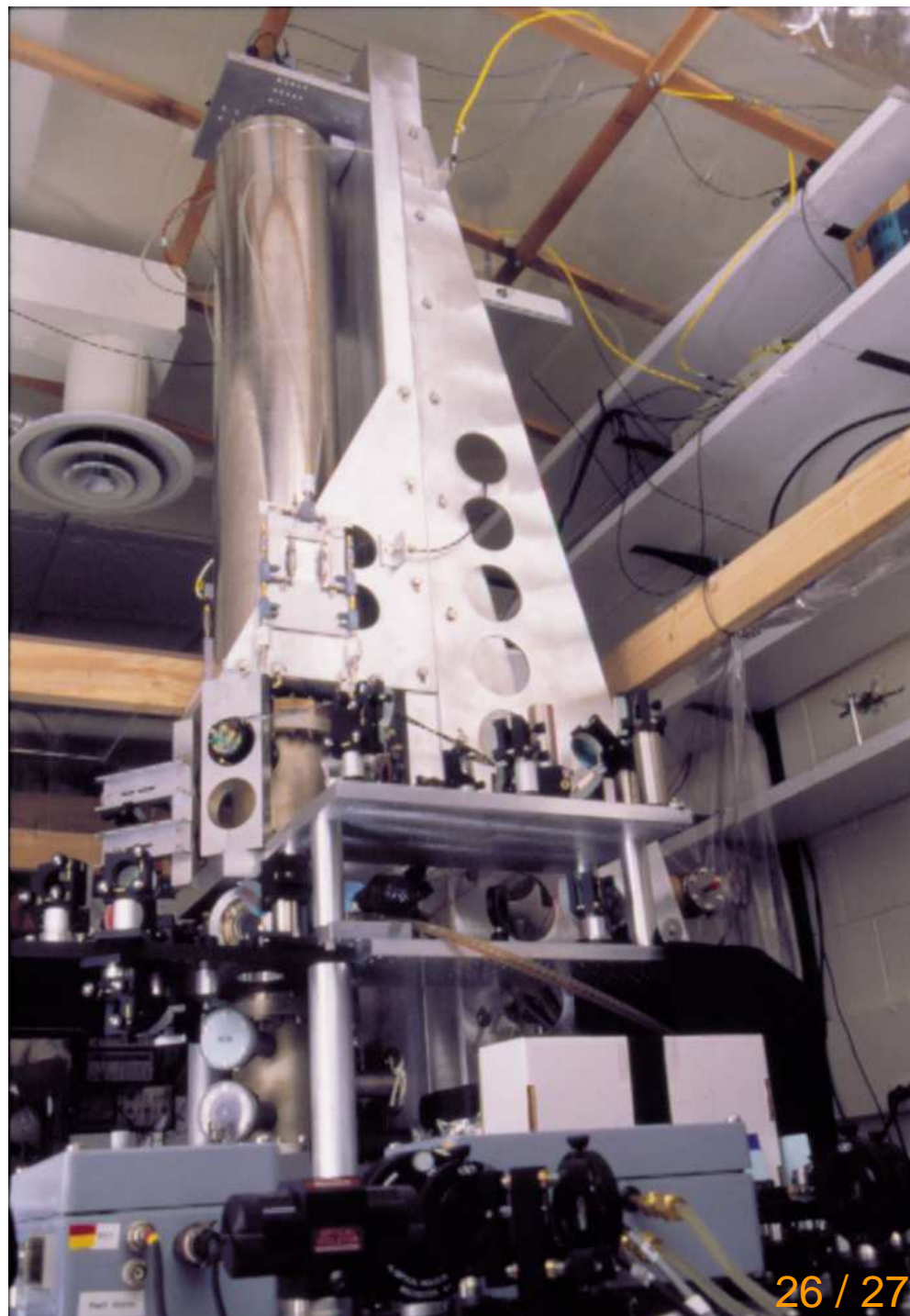


В последние десятилетия молекулярная спектроскопия стала ключом к пониманию физики, химии и динамики развития межзвездных облаков и областей звездообразования

Эта космическая карта была составлена по данным наблюдения спектральной линии. Примерно так выглядело и наше Солнце в стадии зародыша.

Цезиевый фонтанный стандарт  
частоты и времени  
NIST, USA (точность  $10^{-15}$  )

Это - главный хронометр, по которому сверяются все остальные часы человечества. 1 секунда, по которой мы живем, составляет на самом деле 9 192 631 770.0 периодов колебания электромагнитного излучения, соответствующему частоте одной из спектральных линий атома цезия-133, наблюдаемой с помощью микроволнового спектрометра. Эти «часы» могут отклониться от истинного времени на 1 секунду примерно за 30 миллионов лет.





MicroWave Spectroscopy Laboratory - Microsoft Internet Explorer

Файл Правка Вид Избранное Сервис Справка

Назад Поиск Избранное

Адрес: <http://www.mwl.sci-nnov.ru/index.html> Переход Ссылки

**MWL**  
NNovgorod

Institute of Applied Physics  
Russian Academy of Sciences

**MicroWave Spectroscopy Laboratory**

46, Uljanova St., 603950, Nizhny Novgorod, RUSSIA, Tel: (831) 4164866 Fax: (831)4363792

**Main directions of activity**

People  
Instruments  
List of publications  
About

**Main directions of activity:**

1. Development of methods and technique of microwave spectroscopy in millimeter and submillimeter wave range.
2. Studies of the molecular spectra by the experimental and theoretical methodics developed.
3. Studies of manifestations of molecular collisional interactions through lineshape,

Для того, чтобы развивались основополагающие знания о мире, а все эти приложения работали, необходимы высокоточные лабораторные исследования спектров молекул, чем мы тут и занимаемся

**Institute of Applied Physics Russian Academy of Sciences**  
Contact [webmaster](#)  
Last update 28.01.08