

Molekulová spektroskopie - N402015

Zajišťuje: Ústav analytické chemie

Platnost: od 2010

Semestr: letní

Rozsah, examinační: letní s.:2/3 Z+Zk [hodiny/týden]

Body: letní s.:6

E-Kredity: letní s.:6

Anotace

Přednáška podává přehled moderních metod molekulové spektroskopie a to jak z pohledu experimentálních technik, tak i z pohledu teorie. Teorie vychází z principu kvantové mechaniky a stejný formalismus je použit pro rotační, vibrační a elektronovou spektroskopii. Kvantitativní spektroskopická analýza je odvozována na základě rovnice přenosu záření a meze platnosti Lambert-Beerova zákona jsou diskutovány. Nedílnou součástí přednášky je i aplikace teorie grup.

V kurzu jsou i části věnované přípravě vzorků pro různé typy spektroskopií a to s důrazem na rozdíly mezi vzorky s různým původem (geologické, biologické vzorky a environmentální vzorky) a také metody práce s přenosnými spektrometry v terénu a základy technik dálkové detekce molekul.

Sylabus

1. Úvod. Populace kvant. stavů. Einsteinova teorie spektrálních přechodů. Základní pojmy (spontánní a indukovaná emise, indukovaná absorpce, poločas rozpadu. Planckův zákon.
2. Rovnice přenosu záření a její speciální případy. Teoretické principy kvantitativní analýzy.
3. Teorie spektroskopického experimentu a základní principy exp. metod spektroskopie.
4. Zdroje záření, detektory, optické materiály a jiné prvky spektroskopických přístrojů. Příprava vzorků v laboratoři pro různé typy spektroskopií, příprava vzorků *in situ* (geologické, biologické vzorky a environmentální vzorky).
5. Molekulová spektroskopie, společný teoretický základ. Born-Oppenheimerova aproximace.
6. Mikrovlnná spektroskopie. Rotační spektra a struktura molekul.
7. Vibrační spektroskopie. Normální souřadnice a souřadnice symetrie.
8. Chemické aplikace IČ a Ramanovy spektroskopie. Analytické aplikace, mobilní spektrometry.
9. Aplikace teorie grup ve spektroskopii.
10. Spektroskopie NMR a ESR.
11. Principy kvantové chemie. Elektronické energetické hladiny, typy přechodů
12. Elektronické spektroskopie. Kvalitativní a kvantitativní analýza. Gamma spektrometrie. Roentgenová a γ spektrometrie při analýze geologických vzorků, měření s mobilními spektrometry.
13. Fotoelektronová spektroskopie (UPS, XPS, ESCA). Aplikace fotoelektronové spektroskopie při analýze povrchů, hornin a biomateriálů. Moesbauerova spektrometrie.
14. Pokročilé aplikace spektroskopie