

Spektroskoopia LTFY.01.014

Aineprogramm

I. Spektroskoopia üldmõisted

1. Spektroskoopia olemus ja rakendused, seosed optika ja fotoonikaga. Spektri (spektraalkarakteristika) mõiste.
2. Elektromagnetkiirgus. Elektromagnetlainete olemus ja tekkemehhanism. Harmooniline tasalaine, monokromaatne kiirgus, polarisatsioon. Kiirguse kvantteooria, footoni mõiste, seosed laine- ja kvantaspektide vahel. Haavelmüra. Spektraalmuutujad. Elektromagnetlainete skaala. Energeetilised karakteristikud ja kiirguse spektraalkoostise kirjeldamine.
3. Kiirguse neeldumine aines, Bouguer-Lambert'i seadus, neeldumiskoefitsient. Neeldumisristlõige ja Beer'i seadus. Rakendused keemilises analüüsis. Neeldumine õhukestes kiledes ja hajutavates keskkondades (Kubelka-Munk). Läbilaskvus-, peegeldus- ja neeldumisspektrite mõõtmise põhimõtted.
4. Luminestsentsi olemus ja vastandumine soojuskiirgusele. Luminestsentsi kustumise kineetika, järelhelendus, fosforesents. Fotoluminestsents ja selle spektraalkarakteristikud (kiirgus-, ergastus- ja totaalspekter). Luminestsentsi intensiivsuse ja eluea temperatuurisõltuvus. Luminestsentsi spektrite, kineetika ja kvantsaagise mõõtmise põhimõtted.
5. Spektrijoonte kuju ja laius. Spektrijoonte kvantitatiivne kirjeldamine. Spektrijoonte laienemise põhimehhanismid ja nende elementaarne analüüs (loomulik laius, pörke- ja Doppleri laienemine). Spektri mittehomogeenne laienemine tahkises ja selle rakendused. Spektrijoonte põhilised mudelprofiilid (Lorentz, Doppler, Voigt).

II. Spektraalkarakteristika ja aine ehitus

6. Aatomispektroskoopia. Vesinikusarnased (ühe-elektronilised) aatomid. Bohri teooria. Kvantteooria elemendid, kvantarvud. Vesinikuspektri peenstruktuur. Mitmeelektronilise aatomi energiatasemete klassifitseerimine (elektronkonfiguratsioon, Russell-Saundersi seos). Dipoolsiirded ja nende valikureeglid.
7. Võnkespektroskoopia. Kahe-aatomilise molekuli potentsiaalikäver, võnke- ja pöörlemisseisundid. Mitmeaatomilise molekuli võnkeseisundid, normaalvõnkumised. Infrapunane neeldumine ja selle rakendused keemilises analüüsis. Kombinatsioonhajumise nähtuse olemus ning klassikaline ja kvantmehaaniline elementaarkäsitlus. Valikureeglid. Kristallvõre võnkumised, võnkeharud, optilised ja akustilised võnkumised.
8. Kristalliliste ainete optilised omadused. Kristalli tsooniteooria: elektron perioodilises potentsiaaliväljas. Tsoonistruktuuri, elektrijuhtivuse ja optiliste omaduste seos. Elektronid, augud, eksitonid ja foononid kui kvaasiosakesed kristallis. Pooljuhtide ja dielektrikute neeldumisspektri üldised iseärasused, fundamentaalneeldumisserv, keelutsooni laiuse optiline määramine.

III. Spektroskoopia aparatuur

9. Valgusallikad. Valgusallikate liigitus spektroskoopilise eksperimendi kontekstis. Tasakaaluline kiirgus ja hõõgkehad. Gaaslahenduslambid. Valgusdiodid. Sünkrotron.

10. Laserid. Stimuleeritud kiirgus, pöördhõive ja valguse võimendamine. Laseri tööpõhimõte. Laserkiire omadused. Laserite tüübid.
11. Spektraalriistad. Spektraalseadmete liigitus ja põhikarakteristikud. Kiirguse ruumilise disperseerimise peamised meetodid (prisma, võre), vastavate spektraalseadmete ehituse põhimõtted. Difraktsioonvõre spektraalomadused. Fourier' spektromeetri tööpõhimõte.
12. Kiirgusdetektorite liigitus ja põhikarakteristikud. Fotoelektrilised detektorid: fotoelektronkordisti ja fotodiodid. Rivi- ja maatrikssensorite realiseerimise põhimõtted. CCD ja sellel põhinevad (ülitundlikud) sensorid.