

Идентификация и количественное определение с использованием стандартного образца

Идентификация соединения по спектру комбинационного рассеяния осуществляется сравнением его спектра со спектром стандартного образца, зарегистрированных на одном и том же приборе в одних и тех же условиях. Количественное определение проводят с использованием известных количеств или концентраций стандартного образца.

Количественный анализ основан на прямо пропорциональной зависимости интенсивности (I) линий спектра числа молекул (N) в единице объема:

$$I = i \cdot k \cdot N ,$$

где i – интенсивность рассеиваемого света на одну молекулу;

k – коэффициент, зависящий от условий эксперимента, постоянная для данного прибора величина.

При количественном анализе смеси проводится последовательная регистрация спектров в одинаковых условиях и сравнение интенсивностей линий образцов, с учетом предварительной идентификации всех компонентов смеси и наличия соответствующих стандартов. Сравнение может быть осуществлено также по методу внутреннего стандарта при добавлении в анализируемую смесь определенного количества стандартного вещества.

Идентификация и количественное определение с использованием библиотек спектров

Количественное определение образца проводят также с использованием библиотек спектров сравнения и с учетом всех необходимых поправок и калибровок прибора.

Интенсивность в максимуме спектральной линии (I_0) выражают или в произвольной относительной шкале либо в условной, принимая в качестве эталона интенсивность линии образцов сравнения. Шкалу волновых чисел